

(19)日本国特許庁(JP)

(12)特許公報(B2)

(11)特許番号
特許第7446246号
(P7446246)

(45)発行日 令和6年3月8日(2024.3.8)

(24)登録日 令和6年2月29日(2024.2.29)

(51)国際特許分類

F I

C 0 7 C 67/03 (2006.01)

C 0 7 C 67/03

C 0 7 C 69/82 (2006.01)

C 0 7 C 69/82

C 0 7 B 61/00 (2006.01)

C 0 7 B 61/00

A

3 0 0

請求項の数 30 (全28頁)

| | | | |
|-------------------|-----------------------------|----------|-------------------------|
| (21)出願番号 | 特願2020-571628(P2020-571628) | (73)特許権者 | 520085648 |
| (86)(22)出願日 | 令和1年6月24日(2019.6.24) | | 9 4 4 9 7 1 0 カナダ インク . |
| (65)公表番号 | 特表2021-530446(P2021-530446 | | カナダ ジェイ 6 ワイ 1 ワイ 4 ケベッ |
| | A) | | ク州 テルボンヌ フェルナン - ポワトラ |
| (43)公表日 | 令和3年11月11日(2021.11.11) | | ・ストリート 4 8 0 |
| (86)国際出願番号 | PCT/IB2019/000816 | (74)復代理人 | 110003797 |
| (87)国際公開番号 | WO2020/002999 | | 弁理士法人清原国際特許事務所 |
| (87)国際公開日 | 令和2年1月2日(2020.1.2) | (74)代理人 | 100082072 |
| 審査請求日 | 令和4年6月21日(2022.6.21) | | 弁理士 清原 義博 |
| (31)優先権主張番号 | 62/689,597 | (72)発明者 | エッサダッド , フェアーズ |
| (32)優先日 | 平成30年6月25日(2018.6.25) | | カナダ ジェイ 6 ワイ 1 ワイ 4 ケベッ |
| (33)優先権主張国・地域又は機関 | 米国(US) | | ク州 テルボンヌ フェルナン - ポワトラ |
| | | (72)発明者 | ・ストリート 4 8 0 |
| | | | エッサダッド , アデル |
| | | | カナダ ジェイ 6 ワイ 1 ワイ 4 ケベッ |
| | | | 最終頁に続く |

(54)【発明の名称】 テレフタル酸エステル類の形成

(57)【特許請求の範囲】

【請求項 1】

テレフタレートを形成するための、ポリエチレンテレフタレート (P E T) の解重合のプロセスであって、該プロセスはポリエチレンテレフタレート (P E T) を、ナトリウムグリコキシドおよびメタノールを含む混合物に混ぜ合わせるステップを含む、プロセス。

【請求項 2】

メタノールは、ナトリウムグリコキシドの添加に先立ってポリエチレンテレフタレート (P E T) に添加されることを特徴とする、請求項 1 に記載のプロセス。

【請求項 3】

ポリエチレンテレフタレート (P E T) は、ナトリウムグリコキシドの添加に先立って 1.5 分間から 120 分間メタノールと混合されることを特徴とする、請求項 1 に記載のプロセス。

【請求項 4】

ポリエチレンテレフタレート (P E T) は、ナトリウムグリコキシドの添加に先立って 50 から 100 の温度でメタノールと混合されることを特徴とする、請求項 1 に記載のプロセス。

【請求項 5】

テレフタレートはジメチルテレフタレート (D M T) であることを特徴とする、請求項 1 に記載のプロセス。

【請求項 6】

ナトリウムグリコキシドはモノナトリウムグリコキシドであり、モノナトリウムグリコキシドは懸濁液として提供されることを特徴とする、請求項 1 に記載のプロセス。

【請求項 7】

モノナトリウムグリコキシド懸濁液は、

- (a) モノエチレングリコールを加熱するステップと、
- (b) 水酸化ナトリウムを添加し、それによってモノナトリウムグリコキシドを形成するステップと、
- (c) モノナトリウムグリコキシドを乾燥させるステップと、
- (d) 懸濁溶媒中へ乾いたモノナトリウムグリコキシドを懸濁させるステップと、
- (e) 懸濁液をエイジングするステップと、を含むプロセスによって調製されることを特徴とする、請求項 6 に記載のプロセス。

10

【請求項 8】

ステップ (a) は 70 から 100 の温度で行なわれることを特徴とする、請求項 7 に記載のプロセス。

【請求項 9】

モノナトリウムグリコキシドと懸濁溶媒との比は 0.05 : 1 から 0.5 : 1 (mol/mol) であることを特徴とする、請求項 7 に記載のプロセス。

【請求項 10】

懸濁溶媒はメタノールであることを特徴とする、請求項 7 に記載のプロセス。

【請求項 11】

懸濁液は 1 ~ 14 日間エイジングされることを特徴とする、請求項 7 に記載のプロセス。

20

【請求項 12】

ナトリウムグリコキシドとポリエチレンテレフタレート (PET) におけるエチレンテレフタレートのユニットとの比は 1 : 2 から 1 : 20 (mol/mol) であることを特徴とする、請求項 1 に記載のプロセス。

【請求項 13】

テレフタレートは少なくとも 90 mol % の収率で得られることを特徴とする、請求項 1 に記載のプロセス。

【請求項 14】

モノエチレングリコールをさらに産出することを特徴とする、請求項 1 に記載のプロセス。

30

【請求項 15】

モノエチレングリコールは少なくとも 80 mol % の収率で得られることを特徴とする、請求項 14 に記載のプロセス。

【請求項 16】

テレフタレートを形成するための、ポリエチレンテレフタレート (PET) の解重合のプロセスであって、該プロセスは、

- (i) 第 1 の混合物を産出するためにポリエチレンテレフタレート (PET) を第 1 の溶媒と混ぜ合わせるステップと、
- (ii) グリコキシドを第 1 の混合物に添加するステップと、
- (iii) 第 2 の溶媒を添加するステップと、
- (iv) 混ぜ合わせるステップと、を含み、それによってテレフタレートを形成し、前記テレフタレートはジメチルテレフタレート (DMT) である、プロセス。

40

【請求項 17】

第 1 の溶媒は、メタノール、エタノール、n - プロパノール、イソプロパノール、t - ブタノール、エチレングリコール、グリセロール、シクロヘキサン - 1, 4 - ジメタノール、フェノール、ベンジルアルコール、および、それらの任意の組み合わせから選択されることを特徴とする、請求項 16 に記載のプロセス。

【請求項 18】

50

第 1 の溶媒はメタノールであることを特徴とする、請求項 1 6 に記載のプロセス。

【請求項 1 9】

ステップ (i) は 1 5 分間から 1 2 0 分間行なわれることを特徴とする、請求項 1 6 に記載のプロセス。

【請求項 2 0】

ステップ (i) は 5 0 から 1 0 0 の温度で行なわれることを特徴とする、請求項 1 6 に記載のプロセス。

【請求項 2 1】

第 1 の溶媒の一部は第 2 の混合物を産出するためにステップ (i i) に先立って除去されることを特徴とする、請求項 1 6 に記載のプロセス。

【請求項 2 2】

第 2 の混合物は 7 0 から 1 0 0 の温度で加熱されることを特徴とする、請求項 2 1 に記載のプロセス。

【請求項 2 3】

第 2 の溶媒はメタノールであることを特徴とする、請求項 1 6 に記載のプロセス。

【請求項 2 4】

モノエチレングリコールをさらに産出することを特徴とする、請求項 1 6 に記載のプロセス。

【請求項 2 5】

テレフタレートを形成するための、ポリエチレンテレフタレート (P E T) の解重合のプロセスであって、該プロセスはポリエチレンテレフタレート (P E T) を、ナトリウムグリコキシドを含む混合物に混ぜ合わせるステップを含み、前記テレフタレートは、ジメチルテレフタレート (D M T) である、プロセス。

【請求項 2 6】

テレフタレートを形成するための、ポリエチレンテレフタレート (P E T) の解重合のプロセスであって、該プロセスはポリエチレンテレフタレート (P E T) を、モノナトリウムグリコキシドを含む混合物に混ぜ合わせるステップを含み、前記モノナトリウムグリコキシドは懸濁液として提供され、前記モノナトリウムグリコキシドの懸濁液は、

(a) モノエチレングリコールを加熱するステップと、

(b) 水酸化ナトリウムを添加し、それによってモノナトリウムグリコキシドを形成するステップと、

(c) モノナトリウムグリコキシドを乾燥させるステップと、

(d) 懸濁溶媒中へ乾いたモノナトリウムグリコキシドを懸濁させるステップと、

(e) 懸濁液をエイジングするステップと、を含むプロセスによって調製されることを特徴とする、プロセス。

【請求項 2 7】

テレフタレートを形成するための、ポリエチレンテレフタレート (P E T) の解重合のプロセスであって、該プロセスは、

(i) 第 1 の混合物を産出するためにポリエチレンテレフタレート (P E T) を第 1 の溶媒と混ぜ合わせるステップであって、前記第 1 の溶媒がメタノールである、ステップと、

(i i) グリコキシドを第 1 の混合物に添加するステップと、

(i i i) 第 2 の溶媒を添加するステップと、

(i v) 混ぜ合わせるステップと、を含み、

それによってテレフタレートを形成する、プロセス。

【請求項 2 8】

第 2 の溶媒は、メタノール、エタノール、n - プロパノール、イソプロパノール、t - ブタノール、エチレングリコール、グリセロール、シクロヘキサン - 1 , 4 - ジメタノール、フェノール、ベンジルアルコール、および、それらの任意の組み合わせから選択されることを特徴とする、請求項 2 7 に記載のプロセス。

【請求項 2 9】

10

20

30

40

50

テレフタレートを形成するための、ポリエチレンテレフタレート（PET）の解重合のプロセスであって、該プロセスは、

（i）第1の混合物を産出するためにポリエチレンテレフタレート（PET）を第1の溶媒と混ぜ合わせるステップと、

（ii）グリコキシドを第1の混合物に添加するステップと、

（iii）第2の溶媒を添加するステップであって、前記第2の溶媒はメタノールである、ステップと、

（iv）混ぜ合わせるステップと、を含み、

それによってテレフタレートを形成する、プロセス。

【請求項30】

第1の溶媒は、メタノール、エタノール、n-プロパノール、イソプロパノール、t-ブタノール、エチレングリコール、グリセロール、シクロヘキサン-1,4-ジメタノール、フェノール、ベンジルアルコール、および、それらの任意の組み合わせから選択されることを特徴とする、請求項29に記載のプロセス。

【発明の詳細な説明】

【技術分野】

【0001】

相互参照

本出願は、2018年6月25日出願の米国仮特許出願第62/689,597号の利益を主張し、その全体は引用により本明細書に組み込まれる。

【0002】

本開示は、ポリエステルからのエステル誘導体の形成、および、より具体的にはポリエチレンテレフタレート（PET）からのテレフタル酸エステル類の形成に関する。本開示は、またジメチルテレフタレート（DMT）の形成に関する。

【背景技術】

【0003】

ポリエチレンテレフタレート（PET）ボトル樹脂市場は、PET樹脂が、炭酸清涼飲料、ボトル入りの水および食品容器におけるガラスに取って代わるように、力強く成長してきた。

【0004】

ジメチルテレフタレート（DMT）は第1に、繊維、フィルム、容器プラスチックおよび特殊プラスチックに利用されるポリエチレンテレフタレート（PET）の製造において使用される。

【0005】

最大のポリエステル・セクターは繊維市場であり、そこでは衣服、シートおよびカーテン、カーペットおよび敷物などの家庭用繊維製品、および、タイヤコード、シート・ベルト、ホースおよびロープなどの工業製品を製造するために使用されている。PETフィルムは、誘電性の金属ホイル・キャパシタなどの電気に関する応用において、および、食品包装のために利用される。

【0006】

ポリエステルにおける成長はDMTの需要に転化されていない。繊維製品、および、食品と飲料の容器において使用される大半のグレードのポリエステルに関しては、DMTではなく精製されたテレフタル酸を使用するほうが経済的である。

【発明の概要】

【0007】

本明細書において、テレフタレートを形成するための、ポリエチレンテレフタレート（PET）の解重合のためのプロセスが開示され、該プロセスはポリエチレンテレフタレート（PET）を、グリコキシド（glycoside）を含む混合物に混ぜ合わせるステップを含む。

【0008】

10

20

30

40

50

プロセスのいくつかの実施形態では、混合物は溶媒をさらに含む。

【0009】

本プロセスの実施形態では、溶媒は、メタノール、エタノール、n - プロパノール、イソプロパノール、t - ブタノール、エチレングリコール、グリセロール、シクロヘキサン - 1, 4 - ジメタノール (cyclohexane - 1, 4 - dimethanol)、フェノール、ベンジルアルコール、およびそれらの任意の組み合わせから選択される。プロセスのいくつかの実施形態では、溶媒はメタノールである。

【0010】

プロセスのいくつかの実施形態では、溶媒はグリコキシドの添加に先立ってポリエチレンテレフタレート (PET) に添加される。

10

【0011】

プロセスのいくつかの実施形態では、ポリエチレンテレフタレート (PET) はグリコキシドの添加に先立って、約15分から約120分間、溶媒と混合される。プロセスのいくつかの実施形態では、ポリエチレンテレフタレート (PET) は、グリコキシドの添加に先立って、約60分間溶媒と混合される。

【0012】

プロセスのいくつかの実施形態では、ポリエチレンテレフタレート (PET) は、グリコキシドの添加に先立って、約50 から約100 の間の温度で溶媒と混合される。プロセスのいくつかの実施形態では、ポリエチレンテレフタレート (PET) は、グリコキシドの添加に先立って、約60 の温度で溶媒と混合される。

20

【0013】

プロセスのいくつかの実施形態では、テレフタレートはジメチルテレフタレート (DMT) である。

【0014】

プロセスのいくつかの実施形態では、グリコキシドはナトリウムグリコキシド (sodium glycoxide) である。プロセスのいくつかの実施形態では、グリコキシドはモノナトリウムグリコキシド (mono sodium glycoxide) である。プロセスのいくつかの実施形態では、ナトリウムグリコキシド (sodium glycoxide) は懸濁液として提供される。

【0015】

プロセスのいくつかの実施形態では、モノナトリウムグリコキシド懸濁液は、
(a) モノエチレングリコールを加熱するステップと、
(b) 水酸化ナトリウムを添加し、それによってモノナトリウムグリコキシドを形成するステップと、
(c) モノナトリウムグリコキシドを乾燥させるステップと、
(d) 懸濁溶媒中へ乾いたモノナトリウムグリコキシドを懸濁させるステップと、
(e) 懸濁液をエイジングするステップと、を含む。

30

【0016】

プロセスのいくつかの実施形態では、ステップ (a) は、約70 から約100 の間の温度で行なわれる。プロセスのいくつかの実施形態では、ステップ (a) は約90 の温度で行なわれる。

40

【0017】

プロセスのいくつかの実施形態では、懸濁溶媒に対するモノナトリウムグリコキシドの比は、約0.05 : 1から約0.51の間である。

【0018】

プロセスのいくつかの実施形態では、懸濁溶媒に対するモノナトリウムグリコキシドの比は約0.2 : 1 (mol/mol) である。

【0019】

プロセスのいくつかの実施形態では、懸濁溶媒はメタノールである。

【0020】

50

プロセスのいくつかの実施形態では、懸濁液は約 1 ~ 14 日間エイジングされる。プロセスのいくつかの実施形態では、懸濁液は約 1 ~ 7 日間エイジングされる。プロセスのいくつかの実施形態では、懸濁液は約 7 日間エイジングされる。

【0021】

プロセスのいくつかの実施形態では、ポリエチレンテレフタレート (PET) に対するグリコキシドの比は約 1 : 2 から約 1 : 20 (mol/mol) までの間である。

【0022】

プロセスのいくつかの実施形態では、ポリエチレンテレフタレート (PET) に対するグリコキシドの比は約 1 : 5 から約 1 : 20 (mol/mol) までの間である。

【0023】

プロセスのいくつかの実施形態では、ポリエチレンテレフタレート (PET) に対するグリコキシドの比は約 1 : 10 から約 1 : 20 (mol/mol) までの間である。

【0024】

プロセスのいくつかの実施形態では、ポリエチレンテレフタレート (PET) に対するグリコキシドの比は約 1 : 10 から約 1 : 15 (mol/mol) までの間である。

【0025】

プロセスのいくつかの実施形態では、テレフタレートは少なくとも約 90 mol% の収率で得られる。プロセスのいくつかの実施形態では、テレフタレートは少なくとも約 95 mol% の収率で得られる。プロセスのいくつかの実施形態では、テレフタレートは少なくとも約 99 mol% の収率で得られる。

【0026】

プロセスのいくつかの実施形態では、プロセスはモノエチレングリコールをさらに産出する。プロセスのいくつかの実施形態では、モノエチレングリコールは少なくとも約 80 mol% の収率で得られる。プロセスのいくつかの実施形態では、モノエチレングリコールは少なくとも約 85 mol% の収率で得られる。

【0027】

本明細書において、テレフタレートを形成するための、ポリエチレンテレフタレート (PET) の解重合のためのプロセスであって；該プロセスは、

(i) 第 1 の混合物を産出するためにポリエチレンテレフタレート (PET) を第 1 の溶媒と混ぜ合わせるステップと、

(ii) グリコキシドを第 1 の混合物に添加するステップと、

(iii) 第 2 の溶媒を添加するステップと、

(iv) 混ぜ合わせるステップと、

を含み、それによってテレフタレートを形成する、プロセスが開示される。

【0028】

プロセスのいくつかの実施形態では、テレフタレートはジメチルテレフタレート (DMT) である。

【0029】

プロセスのいくつかの実施形態では、第 1 の溶媒は、メタノール、エタノール、n - プロパノール、イソプロパノール、t - ブタノール、エチレングリコール、グリセロール、シクロヘキサン - 1, 4 - ジメタノール、フェノール、ベンジルアルコール、およびそれらの任意の組み合わせから選択される。プロセスのいくつかの実施形態では、第 1 の溶媒はメタノールである。

【0030】

プロセスのいくつかの実施形態では、ステップ (i) は約 15 分間から約 120 分間行なわれる。プロセスのいくつかの実施形態では、ステップ (i) は約 60 分間行なわれる。

【0031】

プロセスのいくつかの実施形態では、ステップ (i) は約 50 から約 100 の間の温度で行なわれる。プロセスのいくつかの実施形態では、ステップ (i) は約 60 の温度で行なわれる。

10

20

30

40

50

【 0 0 3 2 】

プロセスのいくつかの実施形態では、第 1 の溶媒の一部は第 2 の混合物を産出するためにステップ (i i) に先立って取り出される。

【 0 0 3 3 】

プロセスのいくつかの実施形態では、第 2 の混合物は、約 7 0 から約 1 0 0 の間の温度で加熱される。

【 0 0 3 4 】

プロセスのいくつかの実施形態では、第 2 の混合物は約 8 5 の温度で加熱される。

【 0 0 3 5 】

プロセスのいくつかの実施形態では、グリコキシドはナトリウムグリコキシドである。
プロセスのいくつかの実施形態では、グリコキシドはモノナトリウムグリコキシドである。
プロセスのいくつかの実施形態では、モノナトリウムグリコキシドは懸濁溶媒中の懸濁液として提供される。

10

【 0 0 3 6 】

プロセスのいくつかの実施形態では、モノナトリウムグリコキシド懸濁液は、
(a) モノエチレングリコールを加熱するステップと、
(b) 水酸化ナトリウムを添加し、それによってモノナトリウムグリコキシドを形成するステップと、
(c) モノナトリウムグリコキシドを乾燥させるステップと、
(d) 懸濁溶媒中に乾いたモノナトリウムグリコキシドを懸濁させるステップと、
(e) 懸濁液をエイジングするステップと、
を含む。

20

【 0 0 3 7 】

プロセスのいくつかの実施形態では、ステップ (a) は、約 7 0 から約 1 0 0 の間の温度で行なわれる。プロセスのいくつかの実施形態では、ステップ (a) は約 9 0 の温度で行なわれる。

【 0 0 3 8 】

プロセスのいくつかの実施形態では、懸濁溶媒に対するモノナトリウムグリコキシドの比は、約 0 . 0 5 : 1 から約 0 . 5 : 1 の間である。

【 0 0 3 9 】

プロセスのいくつかの実施形態では、懸濁溶媒に対するモノナトリウムグリコキシドの比は約 0 . 2 : 1 (m o l / m o l) である。

30

【 0 0 4 0 】

プロセスのいくつかの実施形態では、懸濁溶媒はメタノールである。

【 0 0 4 1 】

プロセスのいくつかの実施形態では、懸濁液は約 1 ~ 1 4 日間エイジングされる。プロセスのいくつかの実施形態では、懸濁液は約 1 ~ 7 日間エイジングされる。プロセスのいくつかの実施形態では、懸濁液は約 7 日間エイジングされる。

【 0 0 4 2 】

プロセスのいくつかの実施形態では、ポリエチレンテレフタレート (P E T) に対するグリコキシドの比は約 1 : 2 から約 1 : 2 0 (m o l / m o l) までの間である。プロセスのいくつかの実施形態では、ポリエチレンテレフタレート (P E T) に対するグリコキシドの比は約 1 : 5 から約 1 : 2 0 (m o l / m o l) までの間である。プロセスのいくつかの実施形態では、ポリエチレンテレフタレート (P E T) に対するグリコキシドの比は約 1 : 1 0 から約 1 : 2 0 (m o l / m o l) までの間である。プロセスのいくつかの実施形態では、ポリエチレンテレフタレート (P E T) に対するグリコキシドの比は約 1 : 1 0 から約 1 : 1 5 (m o l / m o l) までの間である。

40

【 0 0 4 3 】

プロセスのいくつかの実施形態では、第 2 の溶媒は、メタノール、エタノール、n - プロパノール、イソプロパノール、t - ブタノール、エチレングリコール、グリセロール、

50

シクロヘキサン - 1 , 4 - ジメタノール、フェノール、ベンジルアルコール、および、それらの任意の組み合わせから選択される。プロセスのいくつかの実施形態では、第 2 の溶媒はメタノールである。

【 0 0 4 4 】

プロセスのいくつかの実施形態では、ステップ (i v) は約 6 0 分間から約 6 0 0 分間行なわれる。プロセスのいくつかの実施形態では、ステップ (i v) は約 3 6 0 分間行なわれる。

【 0 0 4 5 】

プロセスのいくつかの実施形態では、ステップ (i v) は、約 7 0 から約 1 0 0 の間の温度で行なわれる。プロセスのいくつかの実施形態では、ステップ (i v) は約 8 5 の温度で行なわれる。

10

【 0 0 4 6 】

プロセスのいくつかの実施形態では、プロセスは、テレフタレートを濾過するステップ (v) をさらに含む。

【 0 0 4 7 】

プロセスのいくつかの実施形態では、テレフタレートは少なくとも約 9 0 m o l % の収率で得られる。プロセスのいくつかの実施形態では、テレフタレートは少なくとも約 9 5 m o l % の収率で得られる。プロセスのいくつかの実施形態では、テレフタレートは少なくとも約 9 9 m o l % の収率で得られる。

【 0 0 4 8 】

20

プロセスのいくつかの実施形態では、プロセスはモノエチレングリコールをさらに産出する。プロセスのいくつかの実施形態では、モノエチレングリコールは少なくとも約 8 0 m o l % の収率で得られる。プロセスのいくつかの実施形態では、モノエチレングリコールは少なくとも約 8 5 m o l % の収率で得られる。

【 0 0 4 9 】

モノナトリウムグリコキシド懸濁液を調製するプロセスもまた本明細書に開示され；該プロセスは、

(a) モノエチレングリコールを加熱するステップと、

(b) 水酸化ナトリウムを添加し、それによってモノナトリウムグリコキシドを形成するステップと、

30

(c) モノナトリウムグリコキシドを乾燥させるステップと、

(d) 懸濁溶媒中へ乾いたモノナトリウムグリコキシドを懸濁させるステップと、

(e) 懸濁液をエイジングするステップと、を含む。

【 0 0 5 0 】

プロセスのいくつかの実施形態では、ステップ (a) は、約 7 0 から約 1 0 0 の間の温度で行なわれる。プロセスのいくつかの実施形態では、ステップ (a) は約 9 0 の温度で行なわれる。

【 0 0 5 1 】

プロセスのいくつかの実施形態では、懸濁溶媒に対するモノナトリウムグリコキシドの比は、約 0 . 0 5 : 1 から約 0 . 5 : 1 の間である。プロセスのいくつかの実施形態では、懸濁溶媒に対するモノナトリウムグリコキシドの比は約 0 . 2 : 1 (m o l / m o l) である。

40

【 0 0 5 2 】

プロセスのいくつかの実施形態では、懸濁溶媒はメタノールである。

【 0 0 5 3 】

プロセスのいくつかの実施形態では、懸濁液は約 1 ~ 1 4 日間エイジングされる。プロセスのいくつかの実施形態では、懸濁液は約 1 ~ 7 日間エイジングされる。プロセスのいくつかの実施形態では、懸濁液は約 7 日間エイジングされる。

【 発明を実施するための形態 】

【 0 0 5 4 】

50

ジメチルテレフタレート（DMT）は、ポリエチレンテレフタレート（PET）、ポリトリメチレンテレフタレート（PTT）、およびポリブチレンテレフタレート（PBT）を含むポリエステル生産において使用される。DMTは不安定であるため、それは例えば、プラスチックボトルからのPETのリサイクルのためのいくつかのスキームにおける中間生成物である。DMTの水素添加は、ポリエステル樹脂の形成における有益なモノマーであるジオール1,4-シクロヘキサジメタノールを与える。

【0055】

DMTは多くの方法において生成されてきた。慣例通りで、かつ今でも商品価値があるのは、テレフタル酸の直接のエステル化である。あるいは、それはパラトルイル酸メチルを介してパラキシレンから酸化とメチルエステル化のステップを交互にすることにより調製される。パラキシレンおよびメタノールからのDMTの生産の方法は、主な4ステップ：酸化、エステル化、蒸留、および、結晶化、から成る。パラキシレンおよびパラトルイル酸エステルの混合物は、遷移金属触媒（Co/Mn）の存在下において空気中で酸化する。酸化によってもたらされる酸の混合物は、エステルの混合物を生成するためにメタノールでエステル化される。粗製エステル混合物は生成された重いボイラーおよび残留物をすべて取り除くために蒸留され、より軽いエステルは酸化部にリサイクルされる。その後、生のDMTはDMT異性体、残留する酸および芳香族アルデヒドを取り除くために結晶化される。

【0056】

PETリサイクルからのDMT生産における改善：パッケージングおよび繊維（カーペットおよび他の織物）産業におけるPETとPETGの使用の成長のため、PETまたはPETGからDMTを形成する方法について、効率的、低エネルギー、高収量、かつ、費用効率の方法への高いニーズがある。

【0057】

ポリエステル

本明細書において、ポリエステルをエステル誘導体に変換するためのプロセスが記載され；該プロセスはポリエステルの、グリコキシドを含む混合物に混ぜ合わせるステップを含む。

【0058】

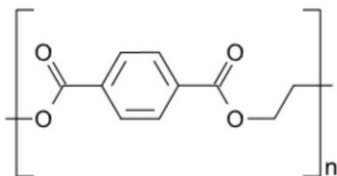
いくつかの実施形態では、ポリエステルは、ポリエチレンテレフタレート（PET）、ポリ（エチレングリコール-co-1,4-シクロヘキサジメタノールテレフタレート）（poly（ethylene glycol-co-1,4-cyclohexanedimethanol terephthalate））（PETG）ポリグリコリドまたはポリグリコール酸（PGA）、ポリ乳酸（PLA）、ポリカプロラクトン（PCL）、ポリヒドロキシブチレート（PHB）、ポリエチレンアジペート（PEA）、ポリブチレンサクシネート（PBS）、ポリ（3-ヒドロキシブチレート-co-3-ヒドロキシバレレート）（PHBV）、ポリブチレンテレフタレート（PBT）、ポリトリメチレンテレフタレート（PTT）、ポリエチレンナフタレート（PEN）、ベクトラン（登録商標）、クチン、および、それらの任意の組み合わせから選択される。

【0059】

いくつかの実施形態では、ポリエステルはポリエチレンテレフタレート（PET）である：

【0060】

【化1】



10

20

30

40

50

【 0 0 6 1 】

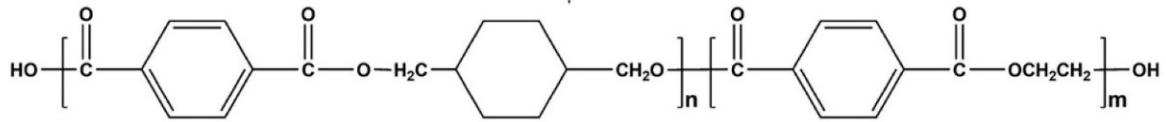
いくつかの実施形態では、ポリエステルはテレフタル酸 / エチレングリコールオリゴマーである。

【 0 0 6 2 】

いくつかの実施形態において、ポリエステルはポリ（エチレングリコール - c o - 1 , 4 - シクロヘキサジメタノールテレフタレート）（ P E T G ）である：

【 0 0 6 3 】

【化 2 】



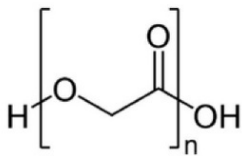
10

【 0 0 6 4 】

いくつかの実施形態では、ポリエステルはポリグリコリド、またはポリグリコール酸（ P G A ）である。

【 0 0 6 5 】

【化 3 】



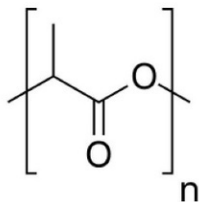
20

【 0 0 6 6 】

いくつかの実施形態では、ポリエステルはポリ乳酸（ P L A ）である。

【 0 0 6 7 】

【化 4 】



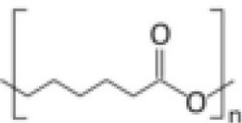
30

【 0 0 6 8 】

いくつかの実施形態では、ポリエステルはポリカプロラクトン（ P C L ）である。

【 0 0 6 9 】

【化 5 】



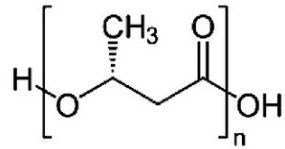
40

【 0 0 7 0 】

いくつかの実施形態では、ポリエステルはポリヒドロキシブチレート（ P H B ）である。

【 0 0 7 1 】

【化 6】



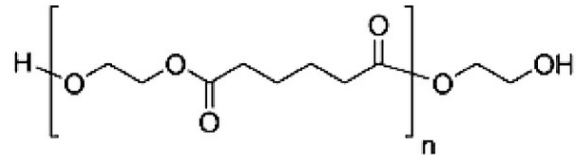
【 0 0 7 2】

いくつかの実施形態では、ポリエステルはポリエチレンジペート（PEA）である。

【 0 0 7 3】

10

【化 7】



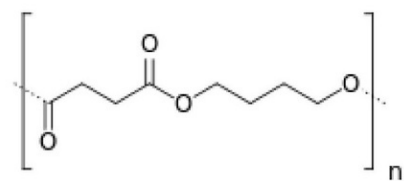
【 0 0 7 4】

いくつかの実施形態では、ポリエステルはポリブチレンサクシネート（PBS）である。

【 0 0 7 5】

20

【化 8】



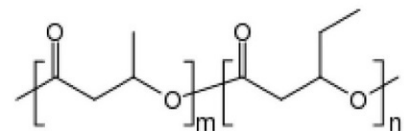
【 0 0 7 6】

いくつかの実施形態では、ポリエステルはポリ（3 - ヒドロキシブチレート - co - 3 - ヒドロキシバレレート）（PHBV）である。

30

【 0 0 7 7】

【化 9】



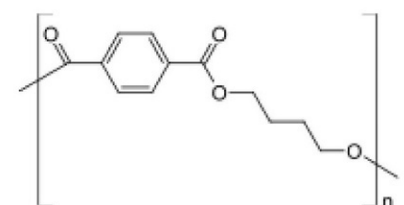
【 0 0 7 8】

いくつかの実施形態では、ポリエステルはポリブチレンテレフタレート（PBT）である。

40

【 0 0 7 9】

【化 10】



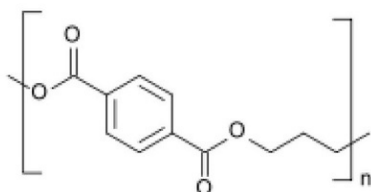
50

【 0 0 8 0 】

いくつかの実施形態では、ポリエステルはポリトリメチレンテレフタレート（ P T T ）である。

【 0 0 8 1 】

【 化 1 1 】



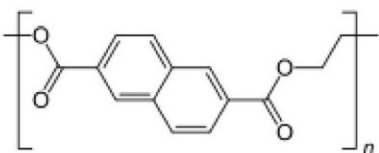
10

【 0 0 8 2 】

いくつかの実施形態では、ポリエステルはポリエチレンナフタレート（ P E N ）である。

【 0 0 8 3 】

【 化 1 2 】



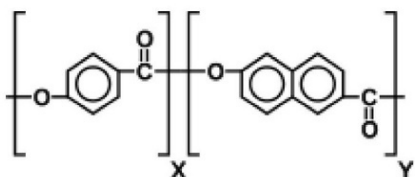
20

【 0 0 8 4 】

いくつかの実施形態では、ポリエステルはベクトラン（登録商標）である：

【 0 0 8 5 】

【 化 1 3 】



30

【 0 0 8 6 】

いくつかの実施形態において、ポリエステルはクチンである。クチンは、植物クチクラの主要構成要素である2つの蠟質ポリマーのうちの1つであり、植物の空気に触れる面全体を覆っている。クチンはオメガヒドロキシ酸およびそれらの誘導体から成り、それはエステル結合を介して連結され、ポリエステルポリマーを形成する。クチン、C 1 6 および C 1 8 ファミリーの2つの主なモノマー・ファミリーが存在する。C 1 6 ファミリーは主に16 - ヒドロキシパルミチン酸および9 , 1 6 - または1 0 , 1 6 - ジヒドロキシパルミチン酸である。C 1 8 ファミリーは主に18 - ヒドロキシオレイン酸、9 , 1 0 - エポキシ - 1 8 - ヒドロキシステアリン酸、および、9 , 1 0 , 1 8 - トリヒドロキシステアレート（ trihydroxyste arate ）から成る。トマト・クチンは16 - ヒドロキシパルミチン酸および1 0 , 1 6 - ジヒドロキシパルミチン酸から成り、ここでは1 0 - 異性体が大部分を占める。トマト・クチンはエステル交換されたポリエステルバイオポリマーである。第二級エステル類（ C - 1 0 第二級水酸基におけるエステル化 ）の著しい割合は、ポリエステル構造が著しく分岐されることを示す。

40

【 0 0 8 7 】

エステル誘導体

本明細書において、ポリエステルをエステル誘導体に変換するためのプロセスが記載され；該プロセスはポリエステルを、グリコキシドを含む混合物に混ぜ合わせるステップを

50

含む。

【 0 0 8 8 】

いくつかの実施形態では、ポリエステルはポリグリコリドまたはポリグリコール酸 (P G A) であり、および、エステル誘導体は 2 - ヒドロキシアセテート誘導体である。いくつかの実施形態では、エステル誘導体は、メチル 2 - ヒドロキシアセテートである。

【 0 0 8 9 】

いくつかの実施形態では、ポリエステルはポリ乳酸 (P L A) であり、および、エステル誘導体は 2 - ヒドロキシプロパノエート誘導体である。いくつかの実施形態では、エステル誘導体は、2 - ヒドロキシプロパン酸メチルである。

【 0 0 9 0 】

いくつかの実施形態では、ポリエステルはポリカプロラクトン (P C L) であり、および、エステル誘導体は 6 - ヒドロキシヘキサノエート誘導体である。いくつかの実施形態では、エステル誘導体はメチル 6 - ヒドロキシヘキサノエートである。

【 0 0 9 1 】

いくつかの実施形態では、ポリエステルはポリヒドロキシブチレート (P H B) であり、および、エステル誘導体はヒドロキシブチレート誘導体である。いくつかの実施形態では、エステル誘導体は、メチルヒドロキシブチレートである。

【 0 0 9 2 】

いくつかの実施形態では、ポリエステルはポリエチレンアジペート (P E A) であり、および、エステル誘導体はアジペート誘導体である。いくつかの実施形態では、エステル誘導体は、アジピン酸ジメチルである。

【 0 0 9 3 】

いくつかの実施形態では、ポリエステルはポリブチレンサクシネート (P B S) であり、および、エステル誘導体はサクシネート誘導体である。いくつかの実施形態では、エステル誘導体は、コハク酸ジメチルである。

【 0 0 9 4 】

いくつかの実施形態では、ポリエステルはポリ (3 - ヒドロキシブチレート - c o - 3 - ヒドロキシバレレート) (P H B V) であり、および、エステル誘導体は、ヒドロキシブチレート誘導体、ヒドロキシバレレート誘導体、またはその組み合わせである。いくつかの実施形態では、エステル誘導体はメチルヒドロキシブチレート、メチルヒドロキシバレレートまたはその組み合わせである。

【 0 0 9 5 】

いくつかの実施形態では、ポリエステルはポリエチレンナフタレート (P E N) であり、および、エステル誘導体はナフタレート誘導体である。いくつかの実施形態では、エステル誘導体は、ジメチルナフタレート (d i m e t h y l n a p h t h a l a t e) である。

【 0 0 9 6 】

いくつかの実施形態では、ポリエステルはベクトランであり、および、エステル誘導体は、ナフトエート (n a p h t h o a t e) 誘導体、ベンゾエート (b e n z o a t e) 誘導体またはその組み合わせである。いくつかの実施形態では、エステル誘導体はメチルヒドロキシナフトエート (m e t h y l h y d r o x y n a p h t h o a t e) またはメチルヒドロキシベンゾエート (m e t h y l h y d r o x y b e n z o a t e) である。

【 0 0 9 7 】

いくつかの実施形態では、ポリエステルはクチンであり、および、エステル誘導体はヒドロキシパルミテート (h y d r o x y p a l m i t a t e) またはジヒドロキシパルミテート (d i h y d r o x y p a l m i t a t e) 誘導体である。いくつかの実施形態では、エステル誘導体はメチルヒドロキシパルミテート (m e t h y l h y d r o x y p a l m i t a t e) またはメチルジヒドロキシパルミテート (m e t h y l d i h y d r o x y p a l m i t a t e) である。

10

20

30

40

50

【 0 0 9 8 】

いくつかの実施形態では、ポリエステルは、ポリエチレンテレフタレート (PET)、ポリ (エチレングリコール - c o - 1 , 4 - シクロヘキサジメタノールテレフタレート) (PETG)、ポリトリメチレンテレフタレート (PTT) またはポリブチレンテレフタレート (PBT)、および、エステル誘導体はテレフタレートである。いくつかの実施形態では、テレフタレートはジメチルテレフタレートである。いくつかの実施形態では、テレフタレートはテレフタル酸ジエチルである。

【 0 0 9 9 】

いくつかの実施形態では、エステル誘導体は約 1 0 % 未満の不純物 (w / w) を含む。いくつかの実施形態では、エステル誘導体は約 9 % 未満の不純物 (w / w) を含む。いくつかの実施形態では、エステル誘導体は約 8 % 未満の不純物 (w / w) を含む。いくつかの実施形態では、エステル誘導体は約 7 % 未満の不純物 (w / w) を含む。いくつかの実施形態では、エステル誘導体は約 6 % 未満の不純物 (w / w) を含む。いくつかの実施形態では、エステル誘導体は約 5 % 未満の不純物 (w / w) を含む。いくつかの実施形態では、エステル誘導体は約 4 % 未満の不純物 (w / w) を含む。いくつかの実施形態では、エステル誘導体は約 3 % 未満の不純物 (w / w) を含む。いくつかの実施形態では、エステル誘導体は約 2 % 未満の不純物 (w / w) を含む。いくつかの実施形態では、エステル誘導体は約 1 % 未満の不純物 (w / w) を含む。いくつかの実施形態では、エステル誘導体は約 0 . 5 % 未満の不純物 (w / w) を含む。いくつかの実施形態では、エステル誘導体は約 0 . 4 % 未満の不純物 (w / w) を含む。いくつかの実施形態では、エステル誘導体は約 0 . 3 % 未満の不純物 (w / w) を含む。いくつかの実施形態では、エステル誘導体は約 0 . 2 % 未満の不純物 (w / w) を含む。いくつかの実施形態では、エステル誘導体は約 0 . 1 % 未満の不純物 (w / w) を含む。

【 0 1 0 0 】

いくつかの実施形態において、エステル誘導体は、約 2 5 0 p p m 未満の何らかの金属、約 2 4 0 p p m 未満の何らかの金属、約 2 3 0 p p m 未満の何らかの金属、約 2 2 0 p p m 未満の何らかの金属、約 2 1 0 p p m 未満の何らかの金属、約 2 0 0 p p m 未満の何らかの金属、約 1 9 0 p p m 未満の何らかの金属、約 1 8 0 p p m 未満の何らかの金属、約 1 7 0 p p m 未満の何らかの金属、約 1 6 0 p p m 未満の何らかの金属、約 1 5 0 p p m 未満の何らかの金属、約 1 4 0 p p m 未満の何らかの金属、約 1 3 0 p p m 未満の何らかの金属、約 1 2 0 p p m 未満の何らかの金属、約 1 1 0 p p m 未満の何らかの金属、約 1 0 0 p p m 未満の何らかの金属、約 9 0 p p m 未満の何らかの金属、約 8 0 p p m 未満の何らかの金属、約 7 0 p p m 未満の何らかの金属、約 6 0 p p m 未満の何らかの金属、約 5 0 p p m 未満の何らかの金属、約 4 0 p p m 未満の何らかの金属、約 3 0 p p m 未満の何らかの金属、約 2 0 p p m 未満の何らかの金属、約 1 0 p p m 未満の何らかの金属、約 5 p p m 未満の何らかの金属、約 4 p p m 未満の何らかの金属、約 3 p p m 未満の何らかの金属、約 2 p p m 未満の何らかの金属、約 1 p p m 未満の何らかの金属、約 0 . 9 p p m 未満の何らかの金属、約 0 . 8 p p m 未満の何らかの金属、約 0 . 7 p p m 未満の何らかの金属、約 0 . 6 p p m 未満の何らかの金属、約 0 . 5 p p m 未満の何らかの金属、約 0 . 4 p p m 未満の何らかの金属、約 0 . 3 p p m 未満の何らかの金属、約 0 . 2 p p m 未満の何らかの金属、約 0 . 1 p p m 未満の何らかの金属、約 0 . 0 9 p p m 未満の何らかの金属、約 0 . 0 8 p p m 未満の何らかの金属、約 0 . 0 7 p p m 未満の何らかの金属、約 0 . 0 6 p p m 未満の何らかの金属、約 0 . 0 5 p p m 未満の何らかの金属、約 0 . 0 4 p p m 未満の何らかの金属、約 0 . 0 3 p p m 未満の何らかの金属、約 0 . 0 2 p p m 未満の何らかの金属、または、約 0 . 0 1 p p m 未満の何らかの金属、を含む。

【 0 1 0 1 】

いくつかの実施形態では、エステル誘導体は、約 1 0 p p m 未満のグリコキシド、約 5 p p m 未満のグリコキシド、約 4 p p m 未満のグリコキシド、約 3 p p m 未満のグリコキシド、約 2 p p m 未満のグリコキシド、約 1 p p m 未満のグリコキシド、約 0 . 9 p p m 未満のグリコキシド、約 0 . 8 p p m 未満のグリコキシド、約 0 . 7 p p m 未満のグリコ

キシド、約 0.6 ppm 未満のグリコキシド、約 0.5 ppm 未満のグリコキシド、約 0.4 ppm 未満のグリコキシド、約 0.3 ppm 未満のグリコキシド、約 0.2 ppm 未満のグリコキシド、約 0.1 ppm 未満のグリコキシド、約 0.09 ppm 未満のグリコキシド、約 0.08 ppm 未満のグリコキシド、約 0.07 ppm 未満のグリコキシド、約 0.06 ppm 未満のグリコキシド、約 0.05 ppm 未満のグリコキシド、約 0.04 ppm 未満のグリコキシド、約 0.03 ppm 未満のグリコキシド、約 0.02 ppm 未満のグリコキシド、または、約 0.01 ppm 未満のグリコキシド、を含む。

【0102】

いくつかの実施形態では、エステル誘導体は約 80 から約 99 mol % の収率で得られる。いくつかの実施形態では、エステル誘導体は約 85 から約 99 mol % の収率で得られる。いくつかの実施形態では、エステル誘導体は約 90 から約 99 mol % の収率で得られる。いくつかの実施形態では、エステル誘導体は少なくとも約 90 mol % の収率で得られる。いくつかの実施形態では、エステル誘導体は少なくとも約 95 mol % の収率で得られる。いくつかの実施形態では、エステル誘導体は少なくとも約 99 mol % の収率で得られる。

10

【0103】

いくつかの実施形態では、テレフタレートは約 80 から約 99 mol % の収率で得られる。いくつかの実施形態では、テレフタレートは約 85 から約 99 mol % の収率で得られる。いくつかの実施形態では、テレフタレートは約 90 から約 99 mol % の収率で得られる。いくつかの実施形態では、テレフタレートは少なくとも約 80 mol % の収率で得られる。いくつかの実施形態では、テレフタレートは少なくとも約 85 mol % の収率で得られる。いくつかの実施形態では、テレフタレートは少なくとも約 90 mol % の収率で得られる。いくつかの実施形態では、テレフタレートは少なくとも約 95 mol % の収率で得られる。いくつかの実施形態では、テレフタレートは少なくとも約 99 mol % の収率で得られる。

20

【0104】

グリコール

本明細書において、ポリエステルをエステル誘導体とグリコールに変換するためのプロセスが記載され；該プロセスはポリエステルを、グリコキシドを含む混合物に混ぜ合わせる工程を含む。いくつかの実施形態では、グリコールはモノエチレングリコール (MEG) (またはエチレングリコール) である。いくつかの実施形態では、グリコールはプロピレングリコールである。いくつかの実施形態では、グリコールはブチレングリコールである。

30

【0105】

いくつかの実施形態において、グリコールは約 80 から約 99 mol % の収率で得られる。いくつかの実施形態では、グリコールは約 85 から約 99 mol % の収率で得られる。いくつかの実施形態では、グリコールは約 90 から約 99 mol % の収率で得られる。いくつかの実施形態では、グリコールは少なくとも約 80 mol % の収率で得られる。いくつかの実施形態では、グリコールは少なくとも約 85 mol % の収率で得られる。いくつかの実施形態では、グリコールは少なくとも約 90 mol % の収率で得られる。いくつかの実施形態では、グリコールは少なくとも約 95 mol % の収率で得られる。

40

【0106】

グリコキシド

いくつかの実施形態では、本明細書に記載されたプロセスは、沸点が水より高いアルコールに由来するアルコキシドを含む。いくつかの実施形態では、アルコールは、モノエチレングリコール (MEG)、グリセロール、ソルビトール、1,3-プロパンジオール、またはシクロヘキサン-1,4-ジメタノールである。いくつかの実施形態では、アルコールはモノエチレングリコール (MEG) である。

【0107】

いくつかの実施形態では、本明細書に記載されたプロセスは、コスト効率の良いアルコ

50

キシドを含む。いくつかの実施形態では、本明細書に記載されたプロセスは、重量比としてナトリウムメトキシドなどの他の触媒と比較した場合にコストの削減をもたらす量のアルコキシドの使用を含む。いくつかの実施形態では、本明細書に記載されたプロセスは、重量比としてナトリウムメトキシドなどの他の触媒と比較した場合にコストの削減をもたらす量のナトリウムグリコキシドの使用を含む。いくつかの実施形態では、ここに記載されたプロセスは、メタノールとの交換を行い、結果としてナトリウムメトキシドをもたらすことができるアルコキシドを含む。

【0108】

いくつかの実施形態において、本明細書に記載されたプロセスはグリコキシドを含む。いくつかの実施形態では、本明細書に記載されたプロセスは、触媒量のグリコキシドを含む。いくつかの実施形態では、ここに記載されたプロセスは、亜化学量論量のグリコキシドを含む。

10

【0109】

本明細書において使用される「亜化学量論量」とは、使用される材料の量が化学量論量より小さいことを示すために使用される。その用語は本明細書において「触媒量」と交換可能に使用される。いくつかの実施形態において、亜化学量論量は、化学量論量の約95%以下である。いくつかの実施形態では、亜化学量論量は、化学量論量の約90%以下である。いくつかの実施形態では、亜化学量論量は、化学量論量の約85%以下である。いくつかの実施形態では、亜化学量論量は、化学量論量の約80%以下である。いくつかの実施形態では、亜化学量論量は、化学量論量の約75%以下である。いくつかの実施形態では、亜化学量論量は、化学量論量の約70%以下である。いくつかの実施形態では、亜化学量論量は、化学量論量の約65%以下である。いくつかの実施形態では、亜化学量論量は、化学量論量の約60%以下である。いくつかの実施形態では、亜化学量論量は、化学量論量の約55%以下である。いくつかの実施形態では、亜化学量論量は、化学量論量の約50%以下である。いくつかの実施形態では、亜化学量論量は、化学量論量の約45%以下である。いくつかの実施形態では、亜化学量論量は、化学量論量の約40%以下である。いくつかの実施形態では、亜化学量論量は、化学量論量の約35%以下である。いくつかの実施形態では、亜化学量論量は、化学量論量の約30%以下である。いくつかの実施形態では、亜化学量論量は、化学量論量の約25%以下である。いくつかの実施形態では、亜化学量論量は、化学量論量の約20%以下である。いくつかの実施形態では、亜化学量論量は、化学量論量の約15%以下である。いくつかの実施形態では、亜化学量論量は、化学量論量の約10%以下である。

20

30

【0110】

「化学量論量」は、本明細書において使用されるとき、使用される材料の量がポリエステルの中にあるエステル結合の数と同等であることを示すために使用される。

【0111】

いくつかの実施形態において、グリコキシドアニオンとカチオンを含むグリコキシドは、アルカリ金属グリコキシド、アルカリ土類金属グリコキシド、金属グリコキシド、アンモニウムグリコキシド(ammonium glycoxide)、および、それらの任意の組み合わせから選択される。いくつかの実施形態では、カチオンは、リチウム、ナトリウム、カリウム、マグネシウム、カルシウム、ストロンチウム、バリウム、亜鉛、アルミニウム、またはアンモニウムである。いくつかの実施形態では、グリコキシドはナトリウムグリコキシドである。いくつかの実施形態では、グリコキシドはモノナトリウムグリコキシドである。

40

【0112】

いくつかの実施形態において、グリコキシドは、アルカリ金属、アルカリ土類金属、または金属をモノエチレングリコール(MEG)に添加することによって生成される。いくつかの実施形態では、グリコキシドは水酸化ナトリウムをモノエチレングリコール(MEG)に添加することによって生成される。

【0113】

50

いくつかの実施形態では、グリコキシドは懸濁液として提供される。

【0114】

本明細書において、モノナトリウムグリコキシド懸濁液を調製するためのプロセスが開示され、該プロセスは：

- (a) モノエチレングリコールを熱するステップと、
- (b) 水酸化ナトリウムを添加してモノナトリウムグリコキシドを形成するステップと、
- (c) モノナトリウムグリコキシドを乾燥させるステップと、
- (d) 懸濁溶媒中へ乾いたモノナトリウムグリコキシドを懸濁させるステップと、
- (e) 懸濁液をエイジングするステップと、を含む。

10

【0115】

いくつかの実施形態では、懸濁溶媒はアルコールである。いくつかの実施形態では、懸濁溶媒はメタノールである。

【0116】

いくつかの実施形態では、ステップ(a)は、約70 から約100 の間の温度で行なわれる。いくつかの実施形態では、ステップ(a)は、約70 から約90 の間の温度で行なわれる。いくつかの実施形態では、ステップ(a)は、約80 から約100 の間の温度で行なわれる。いくつかの実施形態では、ステップ(a)は、約70 、約75 、約80 、約85 、約90 、約95 、または約100 の温度で行われる。いくつかの実施形態では、ステップ(a)は約90 の温度で行なわれる。

20

【0117】

いくつかの実施形態では、懸濁溶媒に対するモノナトリウムグリコキシドの比は約0.05 : 1から約0.5 : 1 (mol/mol) までの間にある。いくつかの実施形態では、懸濁溶媒に対するモノナトリウムグリコキシドの比は約0.1 : 1から約0.5 : 1 (mol/mol) までの間にある。いくつかの実施形態では、懸濁溶媒に対するモノナトリウムグリコキシドの比は約0.1 : 1から約0.3 : 1 (mol/mol) までの間にある。いくつかの実施形態では、懸濁溶媒に対するモノナトリウムグリコキシドの比は約0.05 : 1 (mol/mol)、約0.06 : 1 (mol/mol)、約0.07 : 1 (mol/mol)、約0.08 : 1 (mol/mol)、約0.09 : 1 (mol/mol)、約0.1 : 1 (mol/mol)、約0.11 : 1 (mol/mol)、約0.12 : 1 (mol/mol)、約0.13 : 1 (mol/mol)、約0.14 : 1 (mol/mol)、約0.15 : 1 (mol/mol)、約0.16 : 1 (mol/mol)、約0.17 : 1 (mol/mol)、約0.18 : 1 (mol/mol)、約0.19 : 1 (mol/mol)、約0.2 : 1 (mol/mol)、約0.21 : 1 (mol/mol)、約0.22 : 1 (mol/mol)、約0.23 : 1 (mol/mol)、約0.24 : 1 (mol/mol)、約0.25 : 1 (mol/mol)、約0.26 : 1 (mol/mol)、約0.27 : 1 (mol/mol)、約0.28 : 1 (mol/mol)、約0.29 : 1 (mol/mol)、約0.30 : 1 (mol/mol)、約0.35 : 1 (mol/mol)、約0.40 : 1 (mol/mol)、約0.45 : 1 (mol/mol)、または、約0.5 : 1 (mol/mol)、である。いくつかの実施形態では、懸濁溶媒に対するモノナトリウムグリコキシドの比は約0.2 : 1 (mol/mol) である。

30

40

【0118】

いくつかの実施形態では、ポリエチレンテレフタレート(PET)に対するグリコキシドの比は約1 : 2から約1 : 20 (mol/mol) までの間である。いくつかの実施形態では、ポリエチレンテレフタレート(PET)に対するグリコキシドの比は約1 : 2から約1 : 10 (mol/mol) までの間である。いくつかの実施形態では、ポリエチレンテレフタレート(PET)に対するグリコキシドの比は約1 : 2から約1 : 6 (mol/mol) までの間である。いくつかの実施形態では、ポリエチレンテレフタレート(PET)に対するグリコキシドの比は約1 : 5から約1 : 20 (mol/mol) までの間

50

である。いくつかの実施形態では、ポリエチレンテレフタレート（PET）に対するグリコキシドの比は約 1 : 10 から約 1 : 20（mol/mol）までの間である。いくつかの実施形態では、ポリエチレンテレフタレート（PET）に対するグリコキシドの比は約 1 : 10 から約 1 : 15（mol/mol）までの間である。いくつかの実施形態では、ポリエチレンテレフタレート（PET）に対するグリコキシドの比は、約 1 : 2（mol/mol）、約 1 : 3（mol/mol）、約 1 : 4（mol/mol）、約 1 : 5（mol/mol）、約 1 : 6（mol/mol）、約 1 : 7（mol/mol）、約 1 : 8（mol/mol）、約 1 : 9（mol/mol）、約 1 : 10（mol/mol）、約 1 : 11（mol/mol）、約 1 : 12（mol/mol）、約 1 : 13（mol/mol）、約 1 : 14（mol/mol）、約 1 : 15（mol/mol）、約 1 : 16（mol/mol）、約 1 : 17（mol/mol）、約 1 : 18（mol/mol）、約 1 : 19（mol/mol）、または、約 1 : 2（mol/mol）、である。

10

【0119】

いくつかの実施形態では、モノナトリウムグリコキシドは反応の間に形成された水を取り除くために乾燥される。いくつかの実施形態では、モノナトリウムグリコキシドは水の沸点より高い温度で乾燥される。いくつかの実施形態では、モノナトリウムグリコキシドは、約 100 から約 150 の間の温度で乾燥される。いくつかの実施形態では、モノナトリウムグリコキシドは、約 110 から約 140 の間の温度で乾燥される。いくつかの実施形態では、モノナトリウムグリコキシドは、約 120 から約 130 の間の温度で乾燥される。いくつかの実施形態では、モノナトリウムグリコキシドは、約 100、105、約 110、約 115、約 120、約 125、約 130、約 135、約 140、約 145、または約 150 の温度で乾燥される。いくつかの実施形態では、モノナトリウムグリコキシドは約 130 で乾燥される。

20

【0120】

いくつかの実施形態では、懸濁液は約 1 日から約 2 か月間エイジングされる。いくつかの実施形態では、懸濁液は約 1 ~ 14 日間エイジングされる。いくつかの実施形態では、懸濁液は約 7 ~ 14 日間エイジングされる。いくつかの実施形態では、懸濁液は約 5 ~ 8 日間エイジングされる。いくつかの実施形態では、懸濁液は約 1 ~ 7 日間エイジングされる。いくつかの実施形態では、懸濁液は、約 1 日、約 2 日、約 3 日、約 4 日、約 5 日、約 6 日、約 7 日、約 8 日、約 9 日、約 10 日、約 11 日、約 12 日、約 13 日、または、約 14 日の間、エイジングされる。いくつかの実施形態では、懸濁液は約 7 日間エイジングされる。いくつかの実施形態において、本明細書に使用される「エイジングされる」は、周囲温度および大気圧で保管されるという意味である。いくつかの実施形態では、エイジングのステップは、ナトリウムグリコキシドの分画がナトリウムメトキシドに変換することを可能にする。いくつかの実施形態では、エイジングされたグリコキシド懸濁液は、ナトリウムメトキシドを最大約 85 % まで含む。いくつかの実施形態では、エイジングされたグリコキシド懸濁液はナトリウムメトキシドを最大約 85 % まで、約 80 % まで、約 75 % まで、約 70 % まで、約 65 % まで、約 60 % まで、約 55 % まで、約 50 % まで、約 45 % まで、約 40 % まで、約 35 % まで、約 30 % まで、約 25 % まで、約 20 % まで、約 15 % まで、約 10 % まで、または約 5 % まで含む。

30

40

【0121】**解重合**

本明細書において、ポリエステルをエステル誘導体に変換するためのプロセスが記載され；該プロセスはポリエステルの、グリコキシドを含む混合物に混ぜ合わせるステップを含む。本明細書において、テレフタレートを形成するための、ポリエチレンテレフタレート（PET）の解重合のプロセスが記載され、該プロセスはポリエチレンテレフタレート（PET）を、グリコキシドを含む混合物に混ぜ合わせるステップを含む。

【0122】

いくつかの実施形態では、混合物は溶媒をさらに含む。

【0123】

50

いくつかの実施形態では、溶媒は直鎖アルコール、分岐アルコール、環状アルコール、またはそれらの任意の組み合わせを含む。いくつかの実施形態では、溶媒は、メタノール、エタノール、*n*-プロパノール、イソプロパノール、*t*-ブタノール、エチレングリコール、グリセロール、シクロヘキサン-1,4-ジメタノール、フェノール、ベンジルアルコール、および、それらの任意の組み合わせから選択される。

【0124】

いくつかの実施形態では、溶媒は直鎖C₁-C₄アルコールである。いくつかの実施形態では、溶媒は、メタノール、エタノール、プロパノール、ブタノール、またはそれらの組み合わせである。いくつかの実施形態では、溶媒は、メタノール、エタノール、プロパノール、またはそれらの組み合わせである。いくつかの実施形態では、溶媒はメタノールである。いくつかの実施形態では、アルコールはエタノールである。いくつかの実施形態では、溶媒は分岐C₃-C₄アルコールである。いくつかの実施形態では、溶媒は*t*-ブタノール、*s*-ブタノール、*i*-ブタノール、*i*-プロパノール、またはそれらの任意の組み合わせである。いくつかの実施形態では、溶媒は環状C₃-C₈アルコールである。いくつかの実施形態では、溶媒は、シクロプロパノール、シクロブタノール、シクロペンタノール、シクロヘキサノール、シクロヘプタノール、シクロヘキサン-1,4-ジメタノール、またはそれらの任意の組み合わせである。いくつかの実施形態では、溶媒はシクロヘキサン-1,4-ジメタノールである。

【0125】

いくつかの実施形態では、溶媒はポリオールである。いくつかの実施形態では、溶媒は、エチレングリコール、グリセロール、および、それらの任意の組み合わせから選択される。いくつかの実施形態では、溶媒は、フェノール、ベンジルアルコール、および、それらの任意の組み合わせから選択される。

【0126】

いくつかの実施形態では、溶媒はグリコキシドの添加に先立ってポリエチレンテレフタレート(PET)に添加される。いくつかの実施形態では、ポリエチレンテレフタレート(PET)は、グリコキシドの添加に先立って、約15分間から約120分間、溶媒と混合される。いくつかの実施形態では、ポリエチレンテレフタレート(PET)は、グリコキシドの添加に先立って、約15分間から約90分間、溶媒と混合される。いくつかの実施形態では、ポリエチレンテレフタレート(PET)は、グリコキシドの添加に先立って、約30分間から約90分間、溶媒と混合される。いくつかの実施形態では、ポリエチレンテレフタレート(PET)は、グリコキシドの添加に先立って、約45分間から約90分間、溶媒と混合される。いくつかの実施形態では、ポリエチレンテレフタレート(PET)は、グリコキシドの添加に先立って、約15分間、約20分間、約25分間、約30分間、約35分間、約40分間、約45分間、約50分間、約55分間、約60分間、約65分間、約70分間、約75分間、約80分間、約85分間、約90分間、約95分間、約100分間、約105分間、約110分間、約115分間、または、約120分間、溶媒と混合される。いくつかの実施形態では、ポリエチレンテレフタレート(PET)は、グリコキシドの添加に先立って、約60分間溶媒と混合される。

【0127】

いくつかの実施形態では、ポリエチレンテレフタレート(PET)は、グリコキシドの添加に先立って、約50 から約100 の間の温度で溶媒と混合され、および加熱される。いくつかの実施形態では、ポリエチレンテレフタレート(PET)は、グリコキシドの添加に先立って、約50 から約90 の間の温度で溶媒と混合され、および加熱される。いくつかの実施形態では、ポリエチレンテレフタレート(PET)は、グリコキシドの添加に先立って、約50 から約80 の間の温度で溶媒と混合され、および加熱される。いくつかの実施形態では、ポリエチレンテレフタレート(PET)は、グリコキシドの添加に先立って、約50 から約70 の間の温度で溶媒と混合され、および加熱される。いくつかの実施形態では、ポリエチレンテレフタレート(PET)はグリコキシドの追加に先立って溶媒と混合され、約50 、約55 、約60 、約65 、約70 、

10

20

30

40

50

約 75、約 80、約 85、約 90、約 95、または約 100 の温度まで加熱される。いくつかの実施形態では、ポリエチレンテレフタレート (PET) は、グリコキシドの添加に先立って、溶媒と混合され、約 60 の温度まで加熱される。

【0128】

本明細書において、ポリエステルをエステル誘導体に変換するためのプロセスであって；該プロセスは、

(i) 第 1 の混合物を産出するためにポリエチレンテレフタレート (PET) を第 1 の溶媒と混ぜ合わせるステップと、

(ii) グリコキシドを第 1 の混合物に添加するステップと、

(iii) 第 2 の溶媒を添加するステップと、

(iv) 混ぜ合わせるステップと、

を含み、それによってエステル誘導体を形成する、プロセスが記載される。

【0129】

また本明細書において、テレフタレートを形成するための、ポリエチレンテレフタレート (PET) の解重合のためのプロセスであって；該プロセスは、

(i) 第 1 の混合物を産出するためにポリエチレンテレフタレート (PET) を第 1 の溶媒と混ぜ合わせるステップと、

(ii) グリコキシドを第 1 の混合物に添加するステップと、

(iii) 第 2 の溶媒を添加するステップと、

(iv) 混ぜ合わせるステップと、

を含み、それによってテレフタレートを形成する、プロセスも記載される。

【0130】

いくつかの実施形態では、第 1 の溶媒は直鎖アルコール、分岐アルコール、環状アルコール、またはそれらの任意の組み合わせを含む。いくつかの実施形態において、第 1 の溶媒は、メタノール、エタノール、n-プロパノール、イソプロパノール、t-ブタノール、エチレングリコール、グリセロール、シクロヘキサン-1,4-ジメタノール、フェノール、ベンジルアルコール、および、それらの任意の組み合わせから選択される。

【0131】

いくつかの実施形態では、第 1 の溶媒は直鎖 C₁-C₄ アルコールである。いくつかの実施形態では、第 1 の溶媒は、メタノール、エタノール、プロパノール、ブタノール、またはそれらの組み合わせである。いくつかの実施形態では、第 1 の溶媒は、メタノール、エタノール、プロパノール、またはそれらの組み合わせである。いくつかの実施形態では、第 1 の溶媒はメタノールである。いくつかの実施形態では、アルコールはエタノールである。いくつかの実施形態では、第 1 の溶媒は分岐 C₃-C₄ アルコールである。いくつかの実施形態では、第 1 の溶媒は、t-ブタノール、s-ブタノール、i-ブタノール、i-プロパノール、またはそれらの任意の組み合わせである。いくつかの実施形態では、第 1 の溶媒は環状 C₃-C₈ アルコールである。いくつかの実施形態では、第 1 の溶媒は、シクロプロパノール、シクロブタノール、シクロペンタノール、シクロヘキサノール、シクロヘブタノール、シクロヘキサン-1,4-ジメタノール、またはそれらの任意の組み合わせである。いくつかの実施形態では、第 1 の溶媒はシクロヘキサン-1,4-ジメタノールである。

【0132】

いくつかの実施形態では、第 1 の溶媒はポリオールである。いくつかの実施形態では、第 1 の溶媒は、エチレングリコール、グリセロール、および、それらの任意の組み合わせから選択される。いくつかの実施形態では、第 1 の溶媒は、フェノール、ベンジルアルコール、および、それらの任意の組み合わせから選択される。

【0133】

いくつかの実施形態では、ステップ (i) は約 15 分間から約 120 分間行なわれる。いくつかの実施形態では、ステップ (i) は約 15 分間から約 90 分間行なわれる。いくつかの実施形態では、ステップ (i) は約 30 分間から約 90 分間行なわれる。いくつか

10

20

30

40

50

の実施形態では、ステップ (i) は約 45 分間から約 90 分間行なわれる。いくつかの実施形態では、ステップ (i) は、約 15 分間、約 20 分間、約 25 分間、約 30 分間、約 35 分間、約 40 分間、約 45 分間、約 50 分間、約 55 分間、約 60 分間、約 65 分間、約 70 分間、約 75 分間、約 80 分間、約 85 分間、約 90 分間、約 95 分間、約 100 分間、約 105 分間、約 110 分間、約 115 分間、または約 120 分間、行なわれる。いくつかの実施形態では、ステップ (i) は約 60 分間行なわれる。

【 0134 】

いくつかの実施形態では、ステップ (i) は、約 50 から約 100 の間の温度で行なわれる。いくつかの実施形態では、ステップ (i) は、約 50 から約 90 の間の温度で行なわれる。いくつかの実施形態では、ステップ (i) は、約 50 から約 80 の間の温度で行なわれる。いくつかの実施形態では、ステップ (i) は、約 50 から約 70 の間の温度で行なわれる。いくつかの実施形態では、約 50 、 55 、約 60 、約 65 、約 70 、約 75 、約 80 、約 85 、約 90 、約 95 、または約 100 の温度で行われる。いくつかの実施形態では、工程 (i) は約 60 の温度で行なわれる。

【 0135 】

いくつかの実施形態では、第 1 の溶媒の一部は第 2 の混合物を産出するために工程 (i i) に先立って取り除かれる。いくつかの実施形態では、第 1 の溶媒の一部の除去は、ポリエチレンテレフタレート (P E T) のフィードストック中に取り込まれた水を除去させる。いくつかの実施形態では、P E T 1 m o l 当たり、約 1 m o l から約 5 m o l の間の第 1 の溶媒が除去される。いくつかの実施形態では、P E T 1 m o l 当たり、約 1 m o l から約 3 m o l の間の第 1 の溶媒が除去される。いくつかの実施形態では、P E T 1 m o l 当たり、約 2 m o l から約 4 m o l の間の第 1 の溶媒が除去される。いくつかの実施形態において、P E T 1 m o l 当たり、約 1 m o l 、約 1.1 m o l 、約 1.2 m o l 、約 1.3 m o l 、約 1.4 m o l 、約 1.5 m o l 、約 1.6 m o l 、約 1.7 m o l 、約 1.8 m o l 、約 1.9 m o l 、約 2 m o l 、約 2.1 m o l 、約 2.2 m o l 、約 2.3 m o l 、約 2.4 m o l 、約 2.5 m o l 、約 2.6 m o l 、約 2.7 m o l 、約 2.8 m o l 、約 2.9 m o l 、約 3 m o l 、約 3.1 m o l 、約 3.2 m o l 、約 3.3 m o l 、約 3.4 m o l 、約 3.5 m o l 、約 3.6 m o l 、約 3.7 m o l 、約 3.8 m o l 、約 3.9 m o l 、約 4 m o l 、約 4.1 m o l 、約 4.2 m o l 、約 4.3 m o l 、約 4.4 m o l 、約 4.5 m o l 、約 4.6 m o l 、約 4.7 m o l 、約 4.8 m o l 、約 4.9 m o l 、または約 5 m o l の第 1 の溶媒が除去される。

【 0136 】

いくつかの実施形態では、第 2 の混合物は、約 70 と約 100 の間の温度で加熱される。いくつかの実施形態では、第 2 の混合物は、約 80 から約 100 の間の温度で加熱される。いくつかの実施形態では、第 2 の混合物は、約 70 から約 90 の間の温度で加熱される。いくつかの実施形態では、第 2 の混合物は、約 70 、約 75 、約 80 、約 85 、約 90 、約 95 、または約 100 の温度で加熱される。いくつかの実施形態では、第 2 の混合物は約 85 の温度で加熱される。

【 0137 】

いくつかの実施形態では、第 2 の溶媒は、直鎖アルコール、分岐アルコール、環状アルコール、またはそれらの任意の組み合わせを含む。いくつかの実施形態では、第 2 の溶媒は、メタノール、エタノール、n - プロパノール、イソプロパノール、t - ブタノール、エチレングリコール、グリセロール、シクロヘキサン - 1,4 - ジメタノール、フェノール、ベンジルアルコール、および、それらの任意の組み合わせから選択される。

【 0138 】

いくつかの実施形態では、第 2 の溶媒は直鎖 C₁ - C₄ アルコールである。いくつかの実施形態では、第 2 の溶媒は、メタノール、エタノール、プロパノール、ブタノール、またはそれらの組み合わせである。いくつかの実施形態では、第 2 の溶媒は、メタノール、エタノール、プロパノール、またはそれらの組み合わせである。いくつかの実施形態では

、第2の溶媒はメタノールである。いくつかの実施形態では、アルコールはエタノールである。いくつかの実施形態では、第2の溶媒は分岐C₃-C₄アルコールである。いくつかの実施形態では、第2の溶媒は、t-ブタノール、s-ブタノール、i-ブタノール、i-プロパノール、またはそれらの任意の組み合わせである。いくつかの実施形態では、第2の溶媒は環状C₃-C₈アルコールである。いくつかの実施形態では、第2の溶媒は、シクロプロパノール、シクロブタノール、シクロペンタノール、シクロヘキサノール、シクロヘプタノール、シクロヘキサン-1,4-ジメタノール、またはそれらの任意の組み合わせである。いくつかの実施形態では、第2の溶媒はシクロヘキサン-1,4-ジメタノールである。いくつかの実施形態では、第2の溶媒はポリオールである。いくつかの実施形態では、第2の溶媒は、エチレングリコール、グリセロール、および、それらの任意の組み合わせから選択される。いくつかの実施形態では、第2の溶媒は、フェノール、ベンジルアルコール、および、それらの任意の組み合わせから選択される。

10

【0139】

いくつかの実施形態では、ステップ(i v)は約60分間から約600分間行なわれる。いくつかの実施形態では、ステップ(i v)は約120分間から約600分間行なわれる。いくつかの実施形態では、ステップ(i v)は約180分間から約600分間行なわれる。いくつかの実施形態では、ステップ(i v)は約60分間から約480分間行なわれる。いくつかの実施形態では、ステップ(i v)は約180分間から約480分間行なわれる。いくつかの実施形態では、ステップ(i v)は、約60分間、90分間、120分間、180分間、240分間、300分間、360分間、420分間、480分間、540分間、または600分間、行なわれる。いくつかの実施形態では、ステップ(i v)は約360分間行なわれる。

20

【0140】

いくつかの実施形態では、ステップ(i v)は、約70 から約100 の間の温度で行なわれる。いくつかの実施形態では、ステップ(i v)は、約70 から約90 の間の温度で行なわれる。いくつかの実施形態では、ステップ(i v)は、約80 から約100 の間の温度で行なわれる。いくつかの実施形態では、ステップ(i v)は、約70 、約75 、約80 、約85 、約90 、約95 、または約100 の温度で行なわれる。いくつかの実施形態では、ステップ(i v)は約85 の温度で行なわれる。

【0141】

いくつかの実施形態では、プロセスは、テレフタレートを濾過するステップ(v)をさらに含む。

30

【0142】

いくつかの実施形態では、プロセスは、テレフタレートを蒸留するステップ(v i)をさらに含む。あるいは、いくつかの実施形態では、プロセスは、テレフタレートを昇華させるステップ(v i)をさらに含む。

【0143】

また本明細書において、テレフタレートを形成するための、ポリエチレンテレフタレート(PET)の解重合のためのプロセスであって；該プロセスは、

(i) 第1の混合物を産出するためにポリエチレンテレフタレート(PET)を第1の溶媒と混ぜ合わせるステップと、

40

(i i) グリコキシドを第1の混合物に添加するステップと、

(i i i) 第2の溶媒を添加するステップと、

(i v) 混ぜ合わせるステップと、

(v) テレフタレートを濾過するステップと、

を含み、それによってテレフタレートを単離させる、プロセスも記載される。

【0144】

また本明細書において、テレフタレートを形成するための、ポリエチレンテレフタレート(PET)の解重合のためのプロセスであって；該プロセスは、

(i) 第1の混合物を産出するためにポリエチレンテレフタレート(PET)を第1

50

の溶媒と混ぜ合わせるステップと、

(i i) グリコキシドを第 1 の混合物に添加するステップと、

(i i i) 第 2 の溶媒を添加するステップと、

(i v) 混ぜ合わせるステップと、

(v) テレフタレートを濾過するステップと、

(v i) テレフタレートを蒸留するステップと、

を含み、それによって純粋なテレフタレートを単離させる、プロセスも記載される。

【 0 1 4 5 】

また本明細書において、テレフタレートを形成するための、ポリエチレンテレフタレート (P E T) の解重合のためのプロセスであって；該プロセスは、

10

(i) 第 1 の混合物を産出するためにポリエチレンテレフタレート (P E T) を第 1 の溶媒と混ぜ合わせるステップと；

(i i) グリコキシドを第 1 の混合物に添加するステップと、

(i i i) 第 2 の溶媒を添加するステップと、

(i v) 混ぜ合わせるステップと、

(v) テレフタレートを濾過するステップと、

(v i) テレフタレートを昇華させるステップと、

を含み、それによって純粋なテレフタレートを単離させる、プロセスも記載される。

【 0 1 4 6 】

また本明細書において、テレフタレートを形成するための、ポリエチレンテレフタレート (P E T) の解重合のためのプロセスであって；該プロセスは、

20

(i) 第 1 の混合物を産出するためにポリエチレンテレフタレート (P E T) を第 1 の溶媒と混ぜ合わせるステップと、

(i i) 第 1 の混合物から第 2 の混合物を産出するために第 1 の溶媒の一部を除去するステップと、

(i i i) グリコキシドを第 2 の混合物に添加するステップと、

(i v) 第 2 の溶媒を添加するステップと、

(v) 混ぜ合わせるステップと、

を含み、それによってテレフタレートを形成する、プロセスも記載される。

【 0 1 4 7 】

30

また本明細書において、テレフタレートを形成するための、ポリエチレンテレフタレート (P E T) の解重合のためのプロセスであって；該プロセスは、

(i) 第 1 の混合物を産出するためにポリエチレンテレフタレート (P E T) を第 1 の溶媒と混ぜ合わせるステップと、

(i i) 第 1 の混合物から第 2 の混合物を産出するために第 2 の溶媒の一部を除去するステップと、

(i i i) グリコキシドを第 2 の混合物に添加するステップと、

(i v) 第 2 の溶媒を添加するステップと、

(v) 混ぜ合わせるステップと、

(v i) テレフタレートを濾過するステップと、

40

を含み、それによってテレフタレートを単離させる、プロセスも記載される。

【 0 1 4 8 】

また本明細書において、テレフタレートを形成するための、ポリエチレンテレフタレート (P E T) の解重合のためのプロセスであって；該プロセスは、

(i) 第 1 の混合物を産出するためにポリエチレンテレフタレート (P E T) を第 1 の溶媒と混ぜ合わせるステップと、

(i i) 第 1 の混合物から第 2 の混合物を産出するために第 2 の溶媒の一部を除去するステップと、

(i i i) グリコキシドを第 2 の混合物に添加するステップと、

(i v) 第 2 の溶媒を添加するステップと、

50

- (v) 混ぜ合わせるステップと、
- (v i) テレフタレートを濾過するステップと、
- (v i i) テレフタレートを蒸留するステップと、

を含み、それによって純粋なテレフタレートを単離させる、プロセスも記載される。

【 0 1 4 9 】

また本明細書において、テレフタレートを形成するための、ポリエチレンテレフタレート (P E T) の解重合のためのプロセスであって；該プロセスは、

(i) 第 1 の混合物を産出するためにポリエチレンテレフタレート (P E T) を第 1 の溶媒と混ぜ合わせるステップと、

(i i) 第 1 の混合物から第 2 の混合物を産出するために第 2 の溶媒の一部を除去するステップと、

(i i i) グリコキシドを第 2 の混合物に添加するステップと、

(i v) 第 2 の溶媒を添加するステップと、

(v) 混ぜ合わせるステップと、

(v i) テレフタレートを濾過するステップと、

(v i i) テレフタレートを昇華させるステップと、

を含み、それによって純粋なテレフタレートを単離させる、プロセスも記載される。

【 0 1 5 0 】

特定の用語

本明細書で使用されるセクションの見出しは、組織的な目的のみのためであり、記載される主題を限定するものとして解釈されるべきではない。

【 0 1 5 1 】

他に定義されない限り、本明細書で使用される全ての技術的および科学的用語は、請求の範囲の主題が属すると一般に理解されるものと同じ意味を有する。本明細書の用語に関して複数の定義がある場合、このセクションの定義が優先される。

【 0 1 5 2 】

前述の一般的な説明およびの詳細な説明は、ただ例示的および説明的なものにすぎず、請求される任意の主題を限定するものではないことを理解されたい。本出願では、単数形の使用は、特に別記されない限り、複数形を含む。明細書および添付の請求項に使用されるように、単数形「 a 」、「 a n 」および「 t h e 」は、文脈がはっきりと特に指示していない限り、複数の指示対象を含む。本出願では、「または」の使用は、特に別記されない限り、「および／または」を意味する。さらに、用語「含むこと (i n c l u d i n g) 」と同様に、「含む (i n c l u d e) 」、「含む (i n c l u d e s) 」、「および」含まれる (i n c l u d e d) 」などの他の形態の使用は、限定するものではない。

【 0 1 5 3 】

文脈が別段必要としない限り、明細書および続く請求項の全体にわたって、用語「含む (c o m p r i s e) 」、「および」含む (c o m p r i s e s) 」、「および」含むこと (c o m p r i s i n g) 」などのその変形は、開いた、包括的な意味、即ち、「限定されないが、...を含む」として解釈されるべきである。さらに、本明細書で提供される見出しは、利便性の目的のみであり、請求される本発明の範囲または意味を解釈するものではない。

【 0 1 5 4 】

本明細書および添付の請求項で使用されるように、単数形「 a 」、「 a n 」および「 t h e 」は、内容が明確に別段指示していない限り、複数の指示対象を含む。用語「または (o r) 」は、内容が明確に別段指示していない限り、「および／または」を含むその意味で一般に使用されることにも留意されたい。

【 0 1 5 5 】

本明細書で使用されるように、用語「約」または「およそ」は、与えられた値または範囲の 1 0 % 以内、好ましくは 1 0 % 以内、およびより好ましくは 5 % 以内を意味する。

【 0 1 5 6 】

10

20

30

40

50

本明細書に使用されるように、周囲温度は、典型的な、または好まれる室内（空調された）温度のための口語的表現であり、人々が一般的に慣れている温度である。その温度は、暑く感じず、冷たくも感じない大気の温度であるおよそ 21 の小さな範囲を表す。いくつかの実施形態では、周囲温度は 25 ± 5 である。いくつかの実施形態では、周囲温度は 18 である。いくつかの実施形態では、周囲温度は 19 である。いくつかの実施形態では、周囲温度は 20 である。いくつかの実施形態では、周囲温度は 21 である。いくつかの実施形態では、周囲温度は 22 である。いくつかの実施形態では、周囲温度は 23 である。いくつかの実施形態では、周囲温度は 24 である。いくつかの実施形態では、周囲温度は 25 である。いくつかの実施形態では、周囲温度は 26 である。いくつかの実施形態では、周囲温度は 27 である。いくつかの実施形態では、周囲温度は 28 である。いくつかの実施形態では、周囲温度は 29 である。いくつかの実施形態では、周囲温度は 30 である。

10

【0157】

本明細書および添付された請求項において使用されるように、解重合は、ポリマーをその出発物質へ分解する方法を指す。解重合は、本質的には重合の反対である。いくつかの実施形態では、グリコール、メタノール、または水などの使用される解重合の反応物によりそれぞれ分類される、解糖、加メタノール分解、または加水分解によって、解重合が達成される。

【0158】

ここに使用されるように、PETに言及する時、用語「mol」はモル数で、 192.17 g/mol である「PET」単位の分子量を使用して計算される。

20

【0159】

標準化学用語の定義は、Carey and Sundberg "ADVANCED ORGANIC CHEMISTRY 4TH ED" Vols. A (2000) and B (2001), Plenum Press, New Yorkを含み、これらに限定されない参考資料において見出され得る。

【0160】

実施例

以下の実施例は、開示された実施形態を例証するが、限定しないように意図される。

【0161】

30

実施例1：モノナトリウムグリコキシドの形成

溶解のステップ：

モノエチレングリコール（MEG、 2447.7 g ）を 6 L のガラス反応器に加え、そして 230 RPM で攪拌しながら 90 まで加熱した。水酸化ナトリウムを（ NaOH 、 1770.6 g 、微粒剤として）ゆっくりと添加した（非常に発熱を伴う）。 MEG/NaOH (mol/mol) は、 $1 \sim 1.2:1$ であった。水酸化ナトリウムの添加の後、混合物の温度をモニターし、および記録した。（水酸化ナトリウムがすべて溶けることを確実にするために）約 10 分間、 150 に温度を維持しながらその混合物を攪拌した（ 280 RPM ）。得られた液体をパイレックス（登録商標）のプレートに広げ、 60 分間真空オープン（ 130 および -30 インチ Hg 圧力にある）の中に置いた。真空オープンのチャンバを窒素でパージし、真空下に戻した。プレートを約 12 時間乾燥した。触媒が乾燥すると直ちに、それを真空オープンから取り出し、細かく砕き、再び真空オープン（ 130 および -30 インチ Hg 圧力にある）の中に置いた。真空オープンのチャンバを窒素でパージし、真空下に戻した。触媒を 12 時間乾燥させた。触媒が乾燥すると直ちに、それを真空オープンから取り出し、パイレックス（登録商標）のボトルに加えた。メタノールを添加し（触媒/ MeOH (mol/mol) 比は $0.18:1$ ）、および 30 分間攪拌した。その懸濁液を最大 1 週間、可燃物用キャビネット中に維持した。

40

【0162】

実施例2：ポリエチレンテレフタレートの解重合

膨潤、および、すすぎ：

50

ポリエチレンテレフタレートのフィードストック (1 0 K g) をスクレーパのあるデュアルモーション攪拌を伴うジャケット付き (密閉) 反応器に加えた。反応器を 3 分間窒素でパージした。メタノール (6 k g) を添加し、そして、結果として生じた混合物を約 6 0 で加熱し、および 6 0 r p m で約 6 0 分間攪拌した。圧力と温度を記録した。液体 (3 . 5 k g) の一部を排出した。

【 0 1 6 3 】

反応：

反応器の中央の攪拌を始動させた (1 5 5 R P M) 。スクレーパを始動させた (7 0 R P M) 。熱を約 8 5 まで上昇させた。グリコキッド懸濁液 (9 7 3 . 5 g 、 3 1 . 5 重量 % のグリコキッド) を添加し、そして、その混合物を 5 分間加熱および攪拌した。圧力と温度を記録した。さらにメタノール (3 . 8 3 k g) を添加し、結果として生じた混合物を約 3 6 0 分間 (温度に達した後) 反応させた。その後、混合物を 2 5 まで冷却した。

10

【 0 1 6 4 】

濾過：

固体を濾過し、メタノール (4 . 8 k g) で洗浄した。濾過ケーキ (ジメチルテレフタレート) の重量を測った。

【 0 1 6 5 】

蒸留：

D M T の回収：D M T と未反応物を含んでいるケーキを 1 5 0 で溶かした。その後、混合物を、薄膜、蒸留塔、または、任意の蒸発または蒸留システムにおいて、2 t o r r の真空下 1 6 0 で、または 5 0 t o r r の真空下 1 8 0 で、蒸発させるか、または蒸留した。受けるシステムが 1 5 0 で加熱される場合、D M T は固体または液体として回収された。

20

【 0 1 6 6 】

M E G の回収：M E G とメタノールを含んでいる母液を薄膜、蒸留塔、蒸発装置などの蒸発または蒸留システムに通し、メタノールの約 7 0 % を (高真空下 3 0 で) 取り除いた。その後、回収したスラリーを 3 ~ - 6 で冷まし、そして濾過した。液体を回収し、および、メタノールの残留する 3 0 % を蒸発または蒸留によって除去した。その後、残された M E G を高真空下 1 0 0 で蒸留するか、または蒸発させた。

【 0 1 6 7 】

30

異なる量の触媒を使用して D M T を産出したが、様々な触媒は下記の表に示される。例えば、

- ・ P E T モル量 (1 9 2 . 1 7 g / m o l の「 P E T 」ユニット分子量を使用して計算された) は、5 2 m o l であった；
- ・ メタノールのモル量は 2 1 8 m o l であった；
- ・ 温度は 7 0 であった；
- ・ 反応時間は 4 8 0 分間であった。

【 0 1 6 8 】

40

50

【表 1】

| 触媒 | 触媒量 (mol) | 圧力 (psi) ¹ | DMT 収率 (%) ² |
|-------------------|-----------|-----------------------|-------------------------|
| モノナトリウム グリコキシド | 9.2 | 9 | 99 |
| ナトリウムメトキシド | 9.2 | 13 | 99 |
| モノナトリウム グリコキシド | 5.5 | 8 | 99 |
| ナトリウムメトキシド | 5.5 | 10 | 98 |
| モノナトリウム グリコキシド | 3.7 | 8 | 99 |
| ナトリウムメトキシド | 3.7 | 11 | 96 |

¹ 密閉反応器中に生成された圧力
² DMT の蒸留の前

【 0 1 6 9 】

様々な触媒を使用する M E G の収率は、下記のテーブルにおいて示される：

【 0 1 7 0 】

【表 2】

| 触媒 | 触媒量 (mol) | 圧力 (psi) | MEG への 変換の収率 (%) | 生成された MEG の量 (mol) | 濾過後の 母液に おける MEG の量 (mol) | 蒸留1回 によって 回収された MEG の量 (mol) | MEG 収率 (母液中に 見出された 量に基づく) |
|-----------------|-----------|----------|---------------------|-----------------------|------------------------------------|---------------------------------------|------------------------------------|
| ナトリウム グリコキシド | 5.2 | 8 | 99 | 51.5 | 46.7 | 38.7 | 83% |
| ナトリウム メトキシド | 5.2 | 10 | 98 | 51.0 | 46.0 | 32.1 | 70% |

10

20

30

40

50

フロントページの続き

ク州 テルボンヌ フェルナン - ポワトラ・ストリート 480

審査官 吉森 晃

- (56)参考文献 特開昭48-008745(JP,A)
国際公開第2001/030729(WO,A1)
BAE, J et al. , The Characteristics of PET Micro Fiber Fabrics Decomposed dy Sodium Ethylene glycol Solution , Journal of the Korean Home Economics Association , 1998年 , Vol.36, No.8 , pp.95-104
CHO, H et al. , Hydrophilic treatment of PET [poly(ethylene terephthalate)] fabric with monosodium ethylene glycolate , Journal of the Korean Fiber Society , 1986年 , Vol.23, No.2 , pp.79-87
- (58)調査した分野 (Int.Cl. , DB名)
C07C
JSTPlus/JMEDPlus/JST7580(JDreamII)
Caplus/REGISTRY(STN)