

(19) 日本国特許庁 (JP)

(12) 特 許 公 報 (B2)

(11) 特許番号

特許第5890417号

(P5890417)

(45) 発行日 平成28年3月22日 (2016. 3. 22)

(24) 登録日 平成28年2月26日 (2016. 2. 26)

(51) Int. Cl.

F I

C 1 O M 107/32 (2006. 01)

C 1 O M 107/32

C 1 O M 105/32 (2006. 01)

C 1 O M 105/32

C 1 O N 20/00 (2006. 01)

C 1 O N 20:00 A

C 1 O N 20/02 (2006. 01)

C 1 O N 20:00 Z

C 1 O N 30/00 (2006. 01)

C 1 O N 20:02

請求項の数 20 (全 61 頁) 最終頁に続く

(21) 出願番号 特願2013-527064 (P2013-527064)
 (86) (22) 出願日 平成23年8月31日 (2011. 8. 31)
 (65) 公表番号 特表2013-536887 (P2013-536887A)
 (43) 公表日 平成25年9月26日 (2013. 9. 26)
 (86) 国際出願番号 PCT/US2011/001537
 (87) 国際公開番号 W02012/030395
 (87) 国際公開日 平成24年3月8日 (2012. 3. 8)
 審査請求日 平成26年8月28日 (2014. 8. 28)
 (31) 優先権主張番号 61/498, 499
 (32) 優先日 平成23年6月17日 (2011. 6. 17)
 (33) 優先権主張国 米国 (US)
 (31) 優先権主張番号 61/378, 891
 (32) 優先日 平成22年8月31日 (2010. 8. 31)
 (33) 優先権主張国 米国 (US)

(73) 特許権者 513048298
 バイオシンセティック テクノロジーズ,
 リミティド ライアビリティ カンパニー
 アメリカ合衆国, カリフォルニア 926
 14, アーバイン, パーク プラザ 2,
 スイート 200
 (74) 代理人 100099759
 弁理士 青木 篤
 (74) 代理人 100077517
 弁理士 石田 敬
 (74) 代理人 100087871
 弁理士 福本 積
 (74) 代理人 100087413
 弁理士 古賀 哲次

最終頁に続く

(54) 【発明の名称】 高粘度及び低粘度エストリド基油及び潤滑剤

(57) 【特許請求の範囲】

【請求項 1】

エストリド基油の E N を増大することによってエストリド基油の流動点を保持又は減少する方法であって、上記方法は：

初期 E N 及び初期流動点を有するエストリド基油を選択すること；及び
 エストリド基油の少なくとも一部であって、エストリド基油の初期 E N 未満の E N を示す部分を除去することと、を包含し、
 上記得られたエストリド基油が、上記エストリド基油の初期 E N より大きい E N、及び上記エストリド基油の初期流動点以下の流動点を示し、E N が、エストリド基油を含むエステル化合物のエストリド連結の平均数である、方法。

10

【請求項 2】

上記エストリド基油の少なくとも一部であって、エストリド基油の初期 E N 未満の E N を示す部分を除去することが、蒸留、クロマトグラフィー、膜分離、相分離、又はアフィニティー分離のうちの少なくとも 1 つを含む、請求項 1 に記載の方法。

【請求項 3】

上記エストリド基油の少なくとも一部であって、エストリド基油の初期 E N 未満の E N を示す部分を除去することが、蒸留を含む、請求項 1 又は 2 に記載の方法。

【請求項 4】

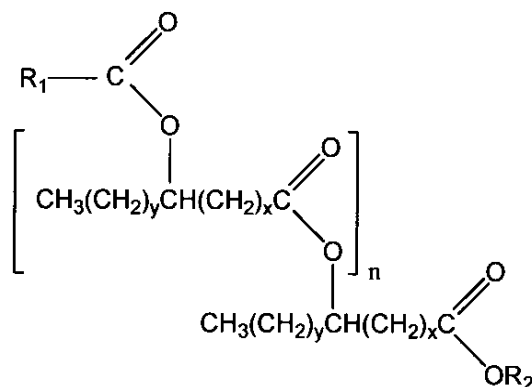
上記初期 E N 及び初期流動点を有するエストリド基油が、2 . 5 以下の初期 E N 及び - 4 0 以上の初期流動点を有する、請求項 1 ~ 3 のいずれか 1 項に記載の方法。

20

【請求項 5】

上記初期 EN 及び初期流動点を有するエストリド基油が式 III の少なくとも 1 種の化合物を含む、請求項 1 ～ 4 のいずれか 1 項に記載の方法：

【化 1】



式 III

10

式中、

x は、それぞれについて独立して、0 ～ 20 から選択される整数であり、

20

y は、それぞれについて独立して、0 ～ 20 から選択される整数であり、

n が、0 以上の整数であり、

R₁ は、必要に応じて置換されているアルキルであって、飽和又は不飽和であり、かつ分岐又は非分岐のアルキルであり、かつ

R₂ は、必要に応じて置換されているアルキルであって、飽和又は不飽和であり、かつ分岐又は非分岐のアルキルであり、

上記少なくとも 1 種の化合物の各々の脂肪酸鎖残基は独立して必要に応じて置換されている、方法。

【請求項 6】

R₂ が、分岐又は非分岐の C₁ ～ C₂₀ アルキルであって、飽和又は不飽和のアルキルである、請求項 5 に記載の方法。

30

【請求項 7】

R₂ が、分岐又は非分岐の C₆ ～ C₁₂ アルキルであって、飽和及び非置換であるアルキルから選択される、請求項 5 又は 6 に記載の方法。

【請求項 8】

R₂ が、2 - エチルヘキシルである、請求項 5 ～ 7 のいずれか 1 項に記載の方法。

【請求項 9】

R₁ が、非置換の C₇ ～ C₁₇ アルキルであって、非分岐及び飽和又は不飽和であるアルキルから選択される、請求項 5 ～ 8 のいずれか 1 項に記載の方法。

【請求項 10】

R₁ が、飽和 C₇ アルキル、飽和 C₉ アルキル、飽和 C₁₁ アルキル、飽和 C₁₃ アルキル、飽和 C₁₅ アルキル、及び飽和又は不飽和 C₁₇ アルキルであって、非置換であり、かつ非分岐のアルキルから選択される、請求項 5 ～ 9 のいずれか 1 項に記載の方法。

40

【請求項 11】

上記エストリド基油の少なくとも一部であって、エストリド基油の初期 EN 未満の EN を示す部分が 2 . 5 未満の EN を示す、請求項 1 ～ 10 のいずれか 1 項に記載の方法。

【請求項 12】

上記エストリド基油の少なくとも一部であって、エストリド基油の初期 EN 未満の EN を示す部分が 2 . 0 未満の EN を示す、請求項 1 ～ 10 のいずれか 1 項に記載の方法。

【請求項 13】

50

上記エストリド基油の少なくとも一部であって、エストリド基油の初期 E N 未満の E N を示す部分が 1 . 5 未満の E N を示す、請求項 1 ~ 1 0 のいずれか 1 項に記載の方法。

【請求項 1 4】

得られたエストリド基油の E N が 2 . 5 より大きい、請求項 1 ~ 1 3 のいずれか 1 項に記載の方法。

【請求項 1 5】

得られたエストリド基油の E N が 3 . 0 より大きい、請求項 1 ~ 1 3 のいずれか 1 項に記載の方法。

【請求項 1 6】

得られたエストリド基油の E N が 4 . 0 より大きい、請求項 1 ~ 1 3 のいずれか 1 項に記載の方法。

【請求項 1 7】

得られたエストリド基油の流動点が - 4 0 以下である、請求項 1 ~ 1 6 のいずれか 1 項に記載の方法。

【請求項 1 8】

上記初期 E N 及び初期流動点を有するエストリド基油が、2 . 0 以下の初期 E N 及び - 3 5 以上の初期流動点を有する、請求項 1 ~ 1 7 のいずれか 1 項に記載の方法。

【請求項 1 9】

上記初期 E N 及び初期流動点を有するエストリド基油が、式 I I I の 2 種以上の化合物を含む、請求項 5 ~ 1 0 のいずれか 1 項に記載の方法。

【請求項 2 0】

上記蒸留が、少なくとも 2 5 0 の温度で、2 5 ミクロン以下の絶対圧力で生じる、請求項 3 に記載の方法。

【発明の詳細な説明】

【技術分野】

【0 0 0 1】

関連出願の相互参照

本願は、3 5 U . S . C . § 1 1 9 (e) の下、2 0 1 0 年 8 月 3 1 日に出願された米国特許仮出願第 6 1 / 3 7 8 , 8 9 1 号、並びに 2 0 1 1 年 6 月 1 7 日に出願された米国特許仮出願第 6 1 / 4 9 8 , 4 9 9 号の利益を主張するものであり、これら双方ともに、全ての目的のためにそれらの全体が参照により本明細書に組み込まれるものとする。

【0 0 0 2】

連邦政府委託研究に関する声明

本発明の主題は、米国農務省 - 農業研究局共同研究開発契約 (C R A D A) 第 5 8 - 3 K 9 5 - 1 - 1 5 0 8 - M 号並びに第 5 8 - 3 K 9 5 - 6 - 1 1 4 7 号の下での支援でなされたものである。従って、政府は、本発明においてある特定の権利を有する。

【0 0 0 3】

本開示は、高粘度及び低粘度のエストリド基油原料及び潤滑剤並びにこれらを製造する方法に関する。本明細書で記載されるエストリドは、生分解性基油原料及び潤滑剤としての使用に好適であり得る。

【背景技術】

【0 0 0 4】

ポリオールエステル及びアジペートなどの合成エステル、P A O 2 などの低粘度ポリアルファオレフィン (P A O) 、及びキャノーラ油及びオレエートなどの植物油は、潤滑剤を調合するための生分解性基油原料としての工業的な使用について報告されてきた。このような基油原料は、自動車用潤滑油、工業的潤滑剤、及び潤滑グリースの生成において使用され得る。完成した潤滑剤は、典型的には、基油と、所望の粘度特性、低温挙動、酸化的安定性、腐食保護、抗乳化性及び水排除性、摩擦係数、潤滑性、摩耗保護、空気抜き、色並びに他の特性を達成することに役立つ添加剤を含む。しかしながら、生分解性は、今日の市場で利用可能である通常の添加剤を用いては改善され得ないことが一般的に認識

10

20

30

40

50

されている。環境的、経済的、及び規制関連的理由で、生分解性潤滑油、他の生分解性潤滑剤、並びに潤滑油及び／又は潤滑剤を含有する組成物を、生物起源の再生可能供給源から生成することに関心が集まっている。

【 0 0 0 5 】

エステルドは、潤滑剤及び基油原料として有用であり得るバイオベースの生分解性油の潜在供給源を呈する。熱又は酸触媒条件下でのヒマシ油脂肪酸又は12-ヒドロキシステアリン酸の単独重合、並びに粘土触媒上での高温及び高圧縮合を用いる不飽和脂肪酸からのエステルドの生成などのいくつかのエステルド合成工程が先に報告されている。リパーゼを用いる、ヒマシ油中に存在するヒドロキシ脂肪酸からのエステルドの酵素的生成に関する工程もまた報告されている。

10

【 0 0 0 6 】

米国特許第6,018,063号では、Isbellらは、酸性条件下でオレイン酸から誘導され、かつ潤滑剤基油原料として使用されるための特性を有するエステルド化合物を記載しており、ここでは、「キャッピング」脂肪酸がオレイン酸又はステアリン酸を含有する。米国特許第6,316,649号において、Cermakらは、オレイン酸から誘導され、かつC₆～C₁₄脂肪酸から誘導されたキャッピング材を有するエステルドを報告している。Cermakらによると、ステアリン酸などのより大きなキャッピング材は、キャッピング部分が一般的に流動点温度を上昇させるので、ステアリン酸の大きなパーセンテージを有するようなエステルドの特性に悪影響を及ぼす。

20

【 発明の概要 】

【 0 0 0 7 】

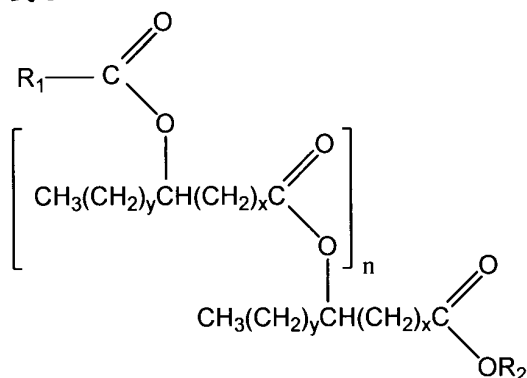
本明細書に記載されるものは、エステルド化合物、エステルド含有組成物、及びこれらの製造方法である。ある 特定の実施形態では、このような化合物及び／又は組成物は、基油及び潤滑剤として有用であり得る。

【 0 0 0 8 】

ある 特定の実施形態では、エステルドは、式 I

【 化 1 】

式 I



30

40

の少なくとも1種の化合物を含み、

式中、

xは、それぞれの事例に独立して、0、1、2、3、4、5、6、7、8、9、10、11、12、13、14、15、16、17、18、19、及び20の整数から選択され、
yは、それぞれの事例に独立して、0、1、2、3、4、5、6、7、8、9、10、11、12、13、14、15、16、17、18、19、及び20の整数から選択され、
nは、1～12から選択される整数であり、

R₁は、飽和又は不飽和の、並びに分岐又は非分岐の任意に置換されたアルキルであり、
並びに、

50

R_2 は、水素、並びに飽和又は不飽和の、及び分岐又は非分岐の任意に置換されたアルキルから選択され、

ここにおいて、上記の少なくとも 1 種の化合物の各々の脂肪酸鎖残基は、独立して任意に置換され、並びに

ここにおいて、上記組成物は、

約 4 に等しい又はそれより大きい整数から選択される EN 、40 で測定される場合の約 200 cSt に等しい又はそれより大きい動粘度、及び -40 に等しい又はそれ以下の流動点、

約 3 に等しい又はそれより大きい整数又は整数の小数部分から選択される EN 、40 で測定される場合の約 130 cSt に等しい又はそれより大きい動粘度、及び -30 に等しい又はそれ以下の流動点、

約 2 に等しい又はそれより大きい整数又は整数の小数部分から選択される EN 、40 で測定される場合の約 55 cSt に等しい又はそれより大きい動粘度、及び -25 に等しい又はそれ以下の流動点、又は

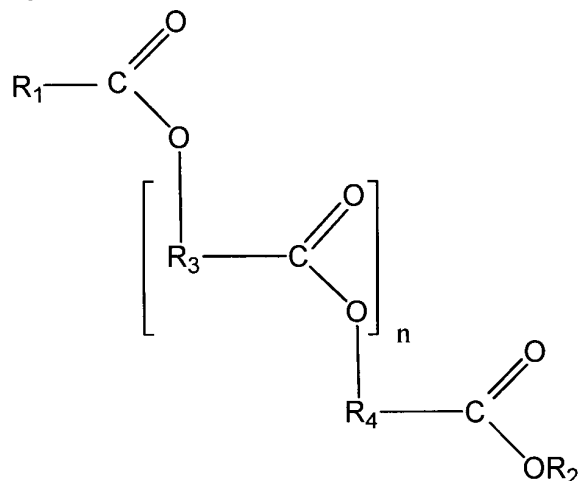
約 2 に等しい又はそれより大きい整数又は整数の少数部分から選択される EN 、40 で測定される場合の約 45 cSt に等しい又はそれより大きい動粘度、及び -25 に等しい又はそれ以下の流動点、を有する。

【0009】

ある特定の実施形態では、エストリド含有組成物は、式 I I

【化 2】

式 I I



の少なくとも 1 種の化合物を含み、

式中、

n は、0 に等しい又はそれより大きい整数であり、

R_1 は、飽和又は不飽和の、並びに分岐又は非分岐である任意に置換されたアルキルであり、

R_2 は、水素並びに飽和又は不飽和の、及び分岐又は非分岐である任意に置換されたアルキルから選択され、

R_3 及び R_4 は、それぞれの事例に独立して、飽和又は不飽和の、並びに分岐又は非分岐である任意に置換されたアルキルから選択され、

ここにおいて、上記組成物は、

約 4 に等しい又はそれより大きい整数から選択される EN 、40 で測定される場合の約 200 cSt に等しい又はそれより大きい動粘度、及び -40 に等しい又はそれ以下の流動点、

約 3 に等しい又はそれより大きい整数又は整数の小数部分から選択される EN 、40 で

測定される場合の約 130 cSt に等しい又はそれより大きい動粘度、及び -30 に等しい又はそれ以下の流動点、

約 2 に等しい又はそれより大きい整数又は整数の小数部分から選択される EN、40 で測定される場合の約 55 cSt に等しい又はそれより大きい動粘度、及び -25 に等しい又はそれ以下の流動点、又は

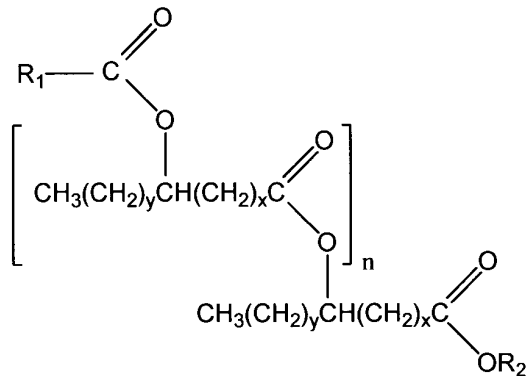
約 2 に等しい又はそれより大きい整数又は整数の小数部分から選択される EN、40 で測定される場合の約 45 cSt に等しい又はそれより大きい動粘度、及び -25 に等しい又はそれ以下の流動点、を有する。

【0010】

ある特定の実施形態では、エストリド含有組成物は、少なくとも 1 種の式 III
【化 3】

10

式 III



20

の化合物を含み、

式中、

x は、それぞれの事例に独立して、0、1、2、3、4、5、6、7、8、9、10、11、12、13、14、15、16、17、18、19、及び 20 の整数から選択され、

y は、それぞれの事例に独立して、0、1、2、3、4、5、6、7、8、9、10、11、12、13、14、15、16、17、18、19、及び 20 の整数から選択され、

30

n は、0 に等しい又はそれよりも大きい整数であり、

R₁ は、飽和又は不飽和の、並びに分岐又は非分岐の任意に置換されたアルキルであり、並びに、

R₂ は、水素、並びに飽和又は不飽和の、及び分岐又は非分岐の任意に置換されたアルキルから選択され、

ここにおいて、上記の少なくとも 1 種の化合物の各々の脂肪酸鎖残基は、独立して任意に置換され、並びに

ここにおいて、上記組成物は、

約 4 に等しい又はそれより大きい整数から選択される EN、40 で測定される場合の約 200 cSt に等しい又はそれより大きい動粘度、及び -40 に等しい又はそれ以下の流動点、

40

約 3 に等しい又はそれより大きい整数又は整数の小数部分から選択される EN、40 で測定される場合の約 130 cSt に等しい又はそれより大きい動粘度、及び -30 に等しい又はそれ以下の流動点、

約 2 に等しい又はそれより大きい整数又は整数の小数部分から選択される EN、40 で測定される場合の約 55 cSt に等しい又はそれより大きい動粘度、及び -25 に等しい又はそれ以下の流動点、又は

約 2 に等しい又はそれより大きい整数又は整数の少数部分から選択される EN、40 で測定される場合の約 45 cSt に等しい又はそれより大きい動粘度、及び -25 に等し

50

い又はそれ以下の流動点、を有する。

【発明を実施するための形態】

【0011】

本明細書で使用する、以下の語、句及び記号は、概ね下記のような意味を有するよう意図されているが、ただしそれらが使われる前後関係が別途指示する場合は対象外とする。以下の省略形及び用語は、全体を通して指示された意味を有する。

【0012】

2つの文字又は記号の間がないダッシュ(-)は、置換基に関する結合の点を示すために用いられる。例えば、 $-C(O)NH_2$ は炭素原子を通して結合されている。

【0013】

「アルコキシ」という用語は、それ自体で又は別の置換基の部分として、基-OR³¹を指し、式中R³¹は、アルキル、シクロアルキル、シクロアルキルアルキル、アリール、又はアリールアルキルであり、これらは本明細書で定義されるように、置換され得る。いくつかの実施形態では、アルコキシ基は、1~8個の炭素原子を有する。いくつかの実施形態では、アルコキシ基は、1、2、3、4、5、6、7、又は8個の炭素原子を有する。アルコキシ基の例としては、メトキシ、エトキシ、プロポキシ、ブトキシ、シクロヘキシルオキシなどが挙げられるが、これに限定されない。

【0014】

「アルキル」という用語は、それ自体で又は別の置換基の部分として、親アルカン、アルケン、又はアルキンの単一の炭素原子からの1つの水素原子の除去によって誘導された、飽和又は不飽和の、分岐の、又は非分岐の一価の炭化水素基を指す。アルキル基の例としては、メチル；エタニル、エテニル、及びエチニルなどのエチル類；プロパン-1-イル、プロパン-2-イル、プロブ-1-エン-1-イル、プロブ-1-エン-2-イル、プロブ-2-エン-1-イル(アリル)、プロブ-1-イン-1-イル、プロブ-2-イン-1-イルなどのプロピル類；ブタン-1-イル、ブタン-2-イル、2-メチル-プロパン-1-イル、2-メチル-プロパン-2-イル、ブト-1-エン-1-イル、ブト-1-エン-2-イル、2-メチル-プロブ-1-エン-1-イル、ブト-2-エン-1-イル、ブト-2-エン-2-イル、ブタ-1,3-ジエン-1-イル、ブタ-1,3-ジエン-2-イル、ブト-1-イン-1-イル、ブト-1-イン-3-イル、ブト-3-イン-1-イルなどのブチル類が挙げられるが、これに限定されない。

【0015】

特に明記されない限り、用語「アルキル」は、飽和の任意の程度又はレベルを有する基、すなわち、特異的に一重炭素-炭素結合を有する基、1つ以上の二重炭素-炭素結合を有する基、1つ以上の三重炭素-炭素結合を有する基、並びに一重、二重、及び三重炭素-炭素結合の混合を有する基を包含するよう特定の意図される。飽和の特定のレベルが意図される場合、用語「アルカニル」、「アルケニル」、及び「アルキニル」が用いられる。ある特定の実施形態では、アルキル基は、1~40個の炭素原子を含み、ある特定の実施形態では、1~22個の又は1~18個の炭素原子を含み、ある特定の実施形態では、1~16個の又は1~8個の炭素原子を含み、並びにある特定の実施形態では、1~6個の又は1~3個の炭素原子を含む。ある特定の実施形態では、アルキル基は、8~22個の炭素原子を含み、ある特定の実施形態では、8~18個の又は8~16個の炭素原子を含む。いくつかの実施形態では、アルキル基は、3~20個の又は7~17個の炭素原子を含む。いくつかの実施形態では、アルキル基は、1、2、3、4、5、6、7、8、9、10、11、12、13、14、15、16、17、18、19、20、21、又は22個の炭素原子を有する。

【0016】

「アリール」という用語は、それ自体で又は別の置換基の部分として、親芳香族環系の単一の炭素原子からの1つの水素原子の除去によって誘導された一価の芳香族炭化水素基を指す。アリールは、5及び6員の炭素環式芳香族環、例えば、ベンゼン；その中で少なくとも1つの環が炭素環式及び芳香族である二環式環系、例えば、ナフタレン、インダン

10

20

30

40

50

、及びテトラリン；並びにその中で少なくとも1つの環が炭素環式及び芳香族である三環式環系、例えばフルオレン、を包含する。アリールは、少なくとも1つの炭素環式芳香族環、シクロアルキル環、又はヘテロシクロアルキル環に融合された少なくとも1つの炭素環式芳香族環を有する多環系を包含する。例えば、アリールは、N、O、及びSから選択される1つ以上のヘテロ原子を含有する5又は7員の芳香族ヘテロシクロアルキル環に融合された、5及び6員の炭素環式芳香族環を含む。その環の1つだけが炭素環式芳香族環である、このような融合した二環式環系については、結合の点は、炭素環式芳香族環又はヘテロシクロアルキル環にあり得る。アリール基の例としては、アセアントリレン、アセナフチレン、アセフェナントリレン、アントラセン、アズレン、ベンゼン、クリセン、コロネン、フルオランテン、フルオレン、ヘキサセン、ヘキサフェン、ヘキサレン、a s - インドセン、s - インドセン、インダン、インデン、ナフタレン、オクタセン、オクタフェン、オクタレン、オバレン、ペンタ - 2, 4 - ジエン、ペンタセン、ペンタレン、ペンタフェン、ペリレン、フェナレン、フェナントレン、ピセン、プレリアデン、ピレン、ピラントレン、ルピセン、トリフェニレン、トリナフタレンなどが挙げられるが、これに限定されない。ある 特定の実施形態では、アリール基は、5 ~ 20 個の炭素原子を有し得る、ある 特定の実施形態では、5 ~ 12 個の炭素原子を有し得る。ある 特定の実施形態では、アリール基は、5、6、7、8、9、10、11、12、13、14、15、16、17、18、19、又は20 個の炭素原子を有し得る。しかしながら、アリールは、本明細書で別個に定義されるヘテロアリールを包含しないか又はそれに多少なりとも重複しない。それ故、その中で1つ以上の炭素環式芳香族環がヘテロシクロアルキル芳香族環に融合されている多環系はヘテロアリールであり、本明細書で定義されるようなアリールではない。

【0017】

「アリールアルキル」という用語は、それ自体で又は別の置換の部分として、その中で炭素原子、典型的には末端又は sp^3 炭素原子に結合された水素原子の1つが、アリール基で置き換えられている非環式アルキル基を指す。アリールアルキル基の例としては、ベンジル、2 - フェニルエタン - 1 - イル、2 - フェニルエテン - 1 - イル、ナフチルメチル、2 - ナフチルエタン - 1 - イル、2 - ナフチルエテン - 1 - イル、ナフトベンジル、2 - ナフトフェニルエタン - 1 - イルなどが挙げられるが、これに限定されない。特定のアルキル部分が意図される場合、用語アリールアルカニル、アリールアルケニル、又はアリールアルキニルが用いられる。ある 特定の実施形態では、アリールアルキル基は C_{7-30} アリールアルキル、例えばアリールアルキル基のアルカニル、アルケニル、又はアルキニル部分が C_{1-10} であり、アリール部分が C_{6-20} であり、ある 特定の実施形態では、アリールアルキル基は C_{7-20} アリールアルキル、例えばアリールアルキル基のアルカニル、アルケニル、又はアルキニル部分が C_{1-8} であり、アリール部分が C_{6-12} である。

【0018】

特に明記されない限り、エストリド「基油」及び「基油原料」は、1種以上のエストリド化合物を含む組成物を指す。エストリド「基油」又は「基油原料」は、特定の使用のための組成物に限定されるものではなく、一般に、エストリドの混合物を包含する1種以上のエストリドを含む組成物を指すことができる。エストリド基油及び基油原料はまた、エストリド以外の化合物も含む。

【0019】

「化合物」とは、本明細書の構造式 I、II、及び III により包含される化合物を指し、その構造が本明細書で開示される式の範囲内の任意の特定の化合物を含む。化合物は、それらの化学構造及び/又は化学名のいずれかによって同定され得る。化学構造及び化学名が不一致の場合、化学構造が化合物の識別の決定要因となる。本明細書に記載される化合物は、1つ以上のキラル中心及び/又は二重結合を含有する可能性があり、従って、二重結合異性体（すなわち、幾何異性体）、鏡像異性体、又はジアステレオマーなどの立体異性体として存在し得る。従って、全体的又は部分的に、相対的な配置で示される明細

書の範囲内のいずれの化学構造も、例示説明された化合物の全ての可能な鏡像異性体及び立体異性体を包含し、これらは立体異性的に純粋形（例えば、幾何異性的に純粋、鏡像異性的に純粋、又はジアステレオマー的に純粋）及び鏡像異性的及び立体異性的混合物を含む。鏡像異性的及び立体異性的混合物は、当業者に周知である分離技術又はキラル合成技術を用いて、それらの成分の鏡像異性体又は立体異性体に分解され得る。

【0020】

本開示の目的のためには、「キラル化合物」は、少なくとも1つのキラリティー中心（すなわち、少なくとも1つの不斉原子、特に少なくとも1つの不斉C原子）を有し、キラリティーの軸、キラリティーの平面又はらせん構造を有する化合物である。「アキラル化合物」とは、キラルではない化合物のことである。

10

【0021】

式I、II、及びIIIの化合物としては、式I、II、及びIIIの化合物の光学異性体、そのラセミ体、及びその他の混合物が挙げられるが、これに限定されない。このような実施形態において、単一の鏡像異性体又はジアステレオマー、すなわち、光学的に活性な形態は、不斉合成又はラセミ体の分解によって得ることができる。ラセミ体の分解は、例えば、クロマトグラフィーによって、例えばキラル高圧液体クロマトグラフィー（HPLC）カラムを用いて達成され得る。しかしながら、特に明記されない限り、式I、II、及びIIIは、異性体、ラセミ体、鏡像体、ジアステレオマー、及びそれらの他の混合物を含む、本明細書で記載される化合物の全ての不斉性変形をカバーすることが想定されるべきである。さらに、式I、II、及びIIIの化合物は、二重結合を有する化合物のZ及びE型（例えば、シス及びトランス型）を含む。式I、II、及びIIIの化合物はまた、エノール型、ケト型、及びこれらの混合物を含むいくつかの互変異性型でも存在する。従って、本明細書に示された化学構造は、例示説明された化合物の全ての可能な互変異性型を包含する。

20

【0022】

「シクロアルキル」という用語は、それ自体で又は別の置換基の部分として、飽和又は不飽和の環式アルキル基を指す。飽和の特定のレベルが意図される場合、用語「シクロアルキル」又は「シクロアルケニル」が用いられる。シクロアルキル基の例としては、シクロプロパン、シクロブタン、シクロペンタン、シクロヘキサンなどから誘導された基が挙げられるが、これに限定されない。ある特定の¹実施形態では、シクロアルキル基は、 C_{3-15} シクロアルキルであり、ある特定の²実施形態では、 C_{3-12} シクロアルキル又は C_{5-12} シクロアルキルである。ある特定の³実施形態では、シクロアルキル基は C_5 、 C_6 、 C_7 、 C_8 、 C_9 、 C_{10} 、 C_{11} 、 C_{12} 、 C_{13} 、 C_{14} 、又は C_{15} シクロアルキルである。

30

【0023】

「シクロアルキルアルキル」という用語は、それ自体で又は別の置換基の部分として、炭素原子、典型的には末端又は sp^3 炭素原子に結合された水素原子の1つが、シクロアルキル基で置き換えられている非環式アルキル基を指す。特定のアルキル部分が意図される場合、用語シクロアルキルアルカニル、シクロアルキルアルケニル、又はシクロアルキルアルキニルが用いられる。ある特定の⁴実施形態では、シクロアルキルアルキル基は、 C_{7-30} シクロアルキルアルキルであり、例えばシクロアルキルアルキル基のアルカニル、アルケニル、又はアルキニル部分が C_{1-10} であり、並びにシクロアルキル部分が C_{6-20} であり、ある特定の⁵実施形態では、シクロアルキルアルキル基は、 C_{7-20} シクロアルキルアルキルであり、例えばシクロアルキルアルキル基のアルカニル、アルケニル、又はアルキニル部分が C_{1-8} であり、並びにシクロアルキル部分が C_{4-20} 又は C_{6-12} である。

40

【0024】

「ハロゲン」という用語は、フルオロ、クロロ、ブロモ、又はヨード基を指す。

【0025】

「ヘテロアリール」という用語は、それ自体で又は別の置換基の部分として、親ヘテロ

50

芳香族環系の単一の原子からの1つの水素原子の除去によって誘導された一価のヘテロ芳香族基を指す。ヘテロアリールは、その少なくとも1つの環原子がヘテロ原子である芳香族又は非芳香族であり得る少なくとも1つの他の環に融合された、少なくとも1つの芳香族環を有する多環系を包含する。ヘテロアリールは、1つ以上の、例えば1～4個の、又はある特定の実施形態では1～3個のN、O、及びSから選択されるヘテロ原子を含有し、残りの環原子が炭素である5～7員の単環式環などの5～12員の芳香族；並びに1つ以上の、例えば1～4個の、又はある特定の実施形態では、1～3個のN、O、及びSから選択されるヘテロ原子を含有し、残りの環原子が炭素である二環式ヘテロシクロアルキル環で、少なくとも1つのヘテロ原子が芳香族環内に存在するものを包含する。例えば、ヘテロアリールは、5～7員のヘテロシクロアルキルで、芳香族環が5～7員のシクロアルキル環に融合されたものを含む。ただ1つの環だけが1つ以上のヘテロ原子を含有する、このような融合した二環式ヘテロアリール環系については、結合の点は、ヘテロ芳香族環又はシクロアルキル環にあり得る。ある特定の実施形態では、ヘテロアリール基中のN、S、及びO原子の総数が1を超える場合、ヘテロ原子は互いに隣接しない。ある特定の実施形態では、ヘテロアリール基中のN、S、及びO原子の総数は2を超えない。ある特定の実施形態では、芳香族ヘテロ環中のN、S、及びO原子の総数は1を超えない。ヘテロアリールは、本明細書で定義されたようなアリールを包含しないかそれと重複しない。

【0026】

ヘテロアリール基の例としては、アクリジン、アルシンドール、カルバゾール、β-カルボリン、クロマン、クロメン、シンノリン、フラン、イミダゾール、インダゾール、インドール、インドリン、インドリジン、イソベンゾフラン、イソクロメン、イソインドール、イソインドリン、イソキノリン、イソチアゾール、イソキサゾール、ナフチリジン、オキサジアゾール、オキサゾール、ペリミジン、フェナントリジン、フェナントロリン、フェナジン、フタラジン、プテリジン、プリン、ピラン、ピラジン、ピラゾール、ピリダジン、ピリジン、ピリミジン、ピロール、ピロリジン、キナゾリン、キノリン、キノリジン、キノキサリン、テトラゾール、チアジアゾール、チアゾール、チオフェン、トリアゾール、キサテンなどから誘導された基が挙げられるが、これに限定されない。ある特定の実施形態では、ヘテロアリール基は、5～20員のヘテロアリールであり、ある特定の実施形態では、5～12員のヘテロアリールであるか、又は5～10員のヘテロアリールである。ある特定の実施形態では、ヘテロアリール基は、5、6、7、8、9、10、11、12、13、14、15、16、17、18、19、又は20員のヘテロアリールである。ある特定の実施形態では、ヘテロアリール基は、チオフェン、ピロール、ベンゾチオフェン、ベンゾフラン、インドール、ピリジン、キノリン、イミダゾール、オキサゾール、及びピラジンから誘導されたものである。

【0027】

「ヘテロアリールアルキル」という用語は、それ自体で又は別の置換基の部分として、その中で、炭素原子、典型的には末端又は sp^3 炭素原子に結合された水素原子の1つが、ヘテロアリール基で置き換えられている非環式アルキル基を指す。特定のアルキル部分が意図される場合、用語ヘテロアリールアルカニル、ヘテロアリールアルケニル、又はヘテロアリールアルキニルが用いられる。ある特定の実施形態では、ヘテロアリールアルキル基は、6～30員のヘテロアリールアルキルであり、例えば、ヘテロアリールアルキルのアルカニル、アルケニル、又はアルキニル部分が1～10員であり、並びにヘテロアリール部分が5～20員のヘテロアリールであり、ある特定の実施形態では、6～20員のヘテロアリールアルキルであり、例えば、ヘテロアリールアルキルのアルカニル、アルケニル、又はアルキニル部分が1～8員であり、並びにヘテロアリール部分が5～12員のヘテロアリールである。

【0028】

「ヘテロシクロアルキル」という用語は、それ自体で又は別の置換基の部分として、その中で、1つ以上の炭素原子（及び任意の結合した水素原子）が、同一の又は異なるヘテロ原子で個々に置き換えられている部分的に飽和された又は不飽和の環式アルキル基を指

10

20

30

40

50

す。炭素原子（複数可）に置き換わるヘテロ原子の例としては、N、P、O、S、Siなどが挙げられるが、これに限定されない。飽和の特定なレベルが意図される場合、用語「ヘテロシクロアルカニル」又は「ヘテロシクロアルケニル」が用いられる。ヘテロシクロアルキル基の例としては、エポキシド、アジリン、チラン、イミダゾリジン、モルフォリン、ピペラジン、ピペリジン、ピラゾリジン、ピロリジン、キヌクリジンなどから誘導された基が挙げられるが、これに限定されない。

【0029】

「ヘテロシクロアルキルアルキル」という用語は、それ自体で又は別の置換基の部分として、その中で、炭素原子、典型的には末端又は sp^3 炭素原子に結合された水素原子の1つが、ヘテロシクロアルキル基で置き換えられている非環式アルキル基を指す。特定のアルキル部分が意図される場合、用語ヘテロシクロアルキルアルカニル、ヘテロシクロアルキルアルケニル、又はヘテロシクロアルキルアルキニルが用いられる。ある特定の実施形態では、ヘテロシクロアルキルアルキル基は、6 ~ 30 員のヘテロシクロアルキルアルキルであり、例えば、ヘテロシクロアルキルアルキルのアルカニル、アルケニル、又はアルキニル部分が1 ~ 10 員であり、並びにヘテロシクロアルキル部分が5 ~ 20 員のヘテロシクロアルキルであり、ある特定の実施形態では、6 ~ 20 員のヘテロシクロアルキルアルキルであり、例えば、ヘテロシクロアルキルアルキルのアルカニル、アルケニル、又はアルキニル部分が1 ~ 8 員であり、並びにヘテロシクロアルキル部分が5 ~ 12 員のヘテロシクロアルキルである。

【0030】

「混合物」という用語は、分子又は化学物質の集合形態を指す。混合物中のそれぞれの成分は、独立的して変化し得る。混合物は、一定のパーセンテージ組成の有無にかかわらず混ぜ合わされた2つ又はそれ以上の物質を含有し得るか、又はそれらから本質的になり、ここでは、各成分は、その本質的な元の特性を保持しても又は保持しなくてもよく、ここでは分子相混合が生じて生じなくてもよい。混合物において、混合物を作り上げる成分は、それらの化学構造のために互いに識別可能のままであってもそうでなくともよい。

【0031】

「親芳香族環系」という用語は、共役 π （パイ）電子系を有する不飽和の環式又は多環式環系を指す。「親芳香族環系」の用語の定義内に包含されるものは、その中で1つ以上の環が芳香族であり並びに1つ以上の環が飽和又は不飽和である、例えば、フルオレン、インダン、インデン、フェナレンなどである融合環系である。親芳香族環系の例としては、アセアントリレン、アセナフチレン、アセフェナントリレン、アントラセン、アズレン、ベンゼン、クリセン、コロネン、フルオランテン、フルオレン、ヘキサセン、ヘキサフェン、ヘキサレン、as-インダセン、s-インダセン、インダン、インデン、ナフタレン、オクタセン、オクタフェン、オクタレン、オバレン、ペンタ-2,4-ジエン、ペンタセン、ペンタレン、ペンタフェン、ペリレン、フェナレン、フェナントレン、ピセン、プレイアデン、ピレン、ピラントレン、ルピセン、トリフェニレン、トリナフタレンなどが挙げられるが、これに限定されない。

【0032】

「親ヘテロ芳香族環系」という用語は、その中で、1つ以上の炭素原子（及び任意の結合した水素原子）が、同一の又は異なるヘテロ原子で個々に置き換えられている親芳香族環系を指す。炭素原子に置き換わるヘテロ原子の例としては、N、P、O、S、Siなどが挙げられるが、これに限定されない。「親ヘテロ芳香族環系」の定義内に特定の包含されるものは、その中で1つ以上の環が芳香族であり、並びに1つ以上の環が飽和された又は不飽和である、例えばアルシンドール、ベンゾジオキサソ、ベンゾフラン、クロマン、クロメン、インドール、インドリン、キサンテンなどの融合環系である。親ヘテロ芳香族環系の例としては、アルシンドール、カルバゾール、 β -カルボリン、クロマン、クロメン、シンノリン、フラン、イミダゾール、インダゾール、インドール、インドリン、インドリジン、イソベンゾフラン、イソクロメン、イソインドール、イソインドリン、イソキノリン、イソチアゾール、イソキサゾール、ナフチリジン、オキサジアゾール、オキサ

ゾール、ペリミジン、フェナントリジン、フェナントロリン、フェナジン、フタラジン、プテリジン、プリン、ピラン、ピラジン、ピラゾール、ピリダジン、ピリジン、ピリミジン、ピロール、ピロリジン、キナゾリン、キノリン、キノリジン、キノキサリン、テトラゾール、チアジアゾール、チアゾール、チオフエン、トリアゾール、キサンテンなどが挙げられるが、これに限定されない。

【0033】

「置換型」という用語は、その中で1つ以上の水素原子が、同一又は異なる置換基（複数可）で独立して置き換えられている基を指す。置換基の例としては、限定されるものではないが、 $-R^{64}$ 、 $-R^{60}$ 、 $-O^-$ 、 $-OH$ 、 $=O$ 、 $-OR^{60}$ 、 $-SR^{60}$ 、 $-S^-$ 、 $=S$ 、 $-NR^{60}R^{61}$ 、 $=NR^{60}$ 、 $-CN$ 、 $-CF_3$ 、 $-OCN$ 、 $-SCN$ 、 $-NO$ 、 $-NO_2$ 、 $=N_2$ 、 $-N_3$ 、 $-S(O)_2O^-$ 、 $-S(O)_2OH$ 、 $-S(O)_2R^{60}$ 、 $-OS(O_2)O^-$ 、 $-OS(O)_2R^{60}$ 、 $-P(O)(O^-)_2$ 、 $-P(O)(OR^{60})(O^-)$ 、 $-OP(O)(OR^{60})(OR^{61})$ 、 $-C(O)R^{60}$ 、 $-C(S)R^{60}$ 、 $-C(O)OR^{60}$ 、 $-C(O)NR^{60}R^{61}$ 、 $-C(O)O^-$ 、 $-C(S)OR^{60}$ 、 $-NR^{62}C(O)NR^{60}R^{61}$ 、 $-NR^{62}C(S)NR^{60}R^{61}$ 、 $-NR^{62}C(NR^{63})NR^{60}R^{61}$ 、 $-C(NR^{62})NR^{60}R^{61}$ 、 $-S(O)_2$ 、 $NR^{60}R^{61}$ 、 $-NR^{63}S(O)_2R^{60}$ 、 $-NR^{63}C(O)R^{60}$ 、及び $-S(O)R^{60}$ が挙げられ、

式中、 $-R^{64}$ は独立してハロゲンであり、 R^{60} 及び R^{61} の各々は、独立して、アルキル、置換アルキル、アルコキシ、置換アルコキシ、シクロアルキル、置換シクロアルキル、ヘテロシクロアルキル、置換ヘテロシクロアルキル、アリアル、置換アリアル、ヘテロアリアル、置換ヘテロアリアル、アリアルアルキル、置換アリアルアルキル、ヘテロアリアルアルキル、又は置換ヘテロアリアルアルキルであるか、若しくは R^{60} 及び R^{61} はそれらが結合した窒素原子と共にヘテロシクロアルキル、置換ヘテロシクロアルキル、ヘテロアリアル又は置換ヘテロアリアル環を形成し、 R^{62} 及び R^{63} 、独立して、アルキル、置換アルキル、アリアル、置換アリアル、アリアルアルキル、置換アリアルアルキル、シクロアルキル、置換シクロアルキル、ヘテロシクロアルキル、置換ヘテロシクロアルキル、ヘテロアリアル、置換ヘテロアリアル、ヘテロアリアルアルキル、又は置換ヘテロアリアルアルキルであるか、若しくは R^{62} 及び R^{63} はそれらが結合した窒素原子と共に1つ以上のヘテロシクロアルキル、置換ヘテロシクロアルキル、ヘテロアリアル、又は置換ヘテロアリアル環を形成し、

式中、 R^{60} 、 R^{61} 、 R^{62} 、及び R^{63} について上記で定義されたような「置換型」置換基は、アルキル、 $-アルキル-OH$ 、 $-O-$ ハロアルキル、 $-アルキル-NH_2$ 、アルコキシ、シクロアルキル、シクロアルキルアルキル、ヘテロシクロアルキル、ヘテロシクロアルキルアルキル、アリアル、ヘテロアリアル、アリアルアルキル、ヘテロアリアルアルキル、 $-O^-$ 、 $-OH$ 、 $=O$ 、 $-O-$ アルキル、 $-O-$ アリアル、 $-O-$ ヘテロアリアルアルキル、 $-O-$ シクロアルキル、 $-O-$ ヘテロシクロアルキル、 $-SH$ 、 $-S^-$ 、 $=S$ 、 $-S-$ アルキル、 $-S-$ アリアル、 $-S-$ ヘテロアリアルアルキル、 $-S-$ シクロアルキル、 $-S-$ ヘテロシクロアルキル、 $-NH_2$ 、 $=NH$ 、 $-CN$ 、 $-CF_3$ 、 $-OCN$ 、 $-SCN$ 、 $-NO$ 、 $-NO_2$ 、 $=N_2$ 、 $-N_3$ 、 $-S(O)_2O^-$ 、 $-S(O)_2$ 、 $-S(O)_2OH$ 、 $-OS(O_2)O^-$ 、 $-SO_2$ （アルキル）、 $-SO_2$ （フェニル）、 $-SO_2$ （ハロアルキル）、 $-SO_2NH_2$ 、 $-SO_2NH$ （アルキル）、 $-SO_2NH$ （フェニル）、 $-P(O)(O^-)_2$ 、 $-P(O)(O-アルキル)(O^-)$ 、 $-OP(O)(O-アルキル)(O-アルキル)$ 、 $-CO_2H$ 、 $-C(O)O$ （アルキル）、 $-CON$ （アルキル）（アルキル）、 $-CONH$ （アルキル）、 $-CONH_2$ 、 $-C(O)$ （アルキル）、 $-C(O)$ （フェニル）、 $-C(O)$ （ハロアルキル）、 $-OC(O)$ （アルキル）、 $-N$ （アルキル）（アルキル）、 $-NH$ （アルキル）、 $-N$ （アルキル）（アルキルフェニル）、 $-NH$ （アルキルフェニル）、 $-NHC(O)$ （アルキル）、 $-NHC(O)$ （フェニル）、 $-N$ （アルキル） $C(O)$ （アルキル）、及び $-N$ （アルキル） $C(O)$ （フェニル）から独立して選択される1つ、2つ又は3つの基などの1つ以上の

10

20

30

40

50

基で置換されている。

【 0 0 3 4 】

本明細書及び添付の特許請求の範囲で使用する時、冠詞「a」、「an」、及び「the」は、1つの指示対象に明示的かつ明確に限定されない限り、複数の指示対象を包含する。

【 0 0 3 5 】

本明細の全ての数値範囲は、全ての数値並びに記載された数値の範囲内の全ての数値の範囲を包含する。

【 0 0 3 6 】

本開示は、エステル化合物、組成物及びそれらを製造する方法に関する。ある特定の実施形態では、本開示はまた、高粘度及び低粘度基油原料及び潤滑剤のための、エステル化合物、エステル化合物を含有する組成物、このような化合物の合成、並びにこのような組成物の調合に関する。ある特定の実施形態では、本開示は、酸化安定性及び流動点などの他の特性を保持又はさらに改良すると同時に、所望の粘性特性を有する生合成的エステルに関する。ある特定の実施形態では、このような特性を呈するエステル化合物の調製の新しい方法が提供されている。本開示は、このような特性を呈するある特定のエステル化合物を含有する組成物にも関する。

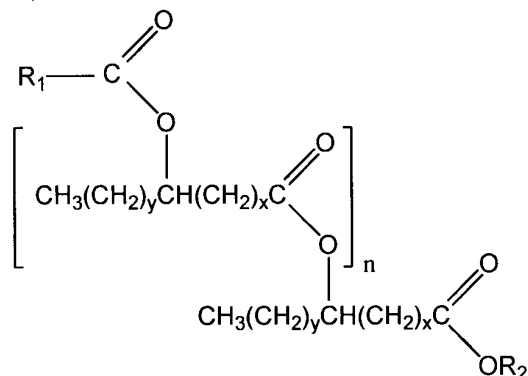
10

【 0 0 3 7 】

ある特定の実施形態では、この組成物は、式 I
【化 4】

20

式 I



30

の少なくとも1種のエステル化合物を含み、
式中、

xは、それぞれの事例に独立して、0、1、2、3、4、5、6、7、8、9、10、11、12、13、14、15、16、17、18、19、及び20の整数から選択され、

yは、それぞれの事例に独立して、0、1、2、3、4、5、6、7、8、9、10、11、12、13、14、15、16、17、18、19、及び20の整数から選択され、

nは、0～12から選択される整数であり、

R₁は、飽和又は不飽和の、並びに分岐又は非分岐の任意に置換されたアルキルであり、

並びに、

R₂は、水素、並びに飽和又は不飽和の、及び分岐又は非分岐の任意に置換されたアルキルから選択され、

ここにおいて、上記の少なくとも1種の化合物の各々の脂肪酸鎖残基は、独立して任意に置換されている。

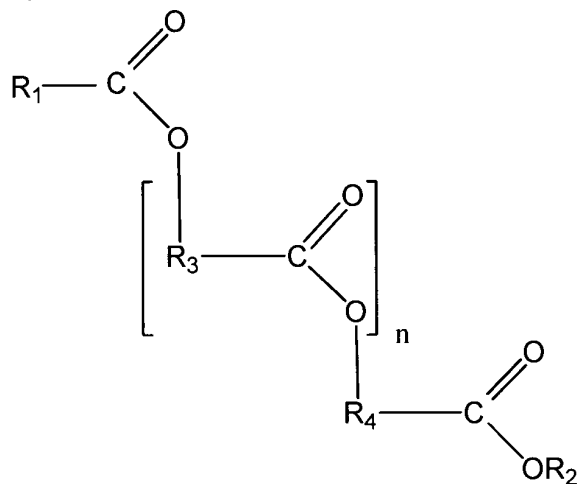
40

【 0 0 3 8 】

ある特定の実施形態では、この組成物は、式 II

【化 5】

式 I I



10

の少なくとも 1 種のエストリド化合物を含み、
 式中、

n は、0 よりも大きい又はそれに等しい整数であり、

20

R_1 は、飽和又は不飽和の、並びに分岐又は非分岐である任意に置換されたアルキルであり、

R_2 は、水素並びに飽和又は不飽和の、及び分岐又は非分岐である任意に置換されたアルキルから選択され、

R_3 及び R_4 は、それぞれの事例に独立して、飽和又は不飽和の、並びに分岐又は非分岐である任意に置換されたアルキルから選択される。

【0039】

ある特定の実施形態では、この組成物は、 R_1 が水素であるところの式 I、II、又は III の少なくとも 1 種のエストリドを含む。

【0040】

30

式 I、II、及び III のエストリド化合物に対して用いられるような用語「鎖」、又は「脂肪酸鎖」、又は「脂肪酸鎖残基」は、例えば、式 II の R_3 又は R_4 、若しくは式 I 及び III 中の $\text{CH}_3(\text{CH}_2)_y\text{CH}(\text{CH}_2)_x\text{C}(\text{O})\text{O}-$ によって表される構造のようなエストリド化合物中に組み込まれた 1 つ以上の脂肪酸残基を指す。

【0041】

各式の最上部に示されている式 I、II、及び III 中の R_1 は、それがエストリドの最上部を「キャップする」ような、「キャップ」又は「キャッピング材」と呼ばれ得るものの例である。同様に、キャッピング基は、一般式 $-\text{OC}(\text{O})-$ アルキルの有機酸残基であり得、すなわち、本明細書で定義されたような置換型又は非置換型の、飽和又は不飽和の、及び / 又は分岐又は非分岐のアルキルを有するカルボン酸、若しくは酸残基であり得る。ある特定の実施形態では、この「キャップ」又は「キャッピング基」は、脂肪酸である。ある特定の実施形態では、このキャッピング基は、サイズに関係なく、置換型又は非置換型、飽和又は不飽和、及び / 又は分岐又は非分岐である。このキャップ又はキャッピング材は、一次又はアルファ (α) 鎖とも呼ばれる。

40

【0042】

エストリドが合成される方法に応じて、このキャップ又はキャッピング基アルキルは、不飽和である得られたエストリド中の有機酸残基からのただ 1 つのアルキルであり得る。ある特定の実施形態では、飽和有機酸又は脂肪酸キャップを使用し、エストリドの全体の飽和度を増大させ、及び / 又は得られるエストリドの安定性を増大させることが望ましい。例えば、ある特定の実施形態では、当業者に利用可能な任意の好適な方法を用いて不飽

50

和キャップを水素化することによって、飽和のキャップされたエストリドをもたらす方法を提供することが望ましい場合もある。水素化は、脂肪酸原料の様々な供給源で用いられ得、これらは、一価及び/又は多価不飽和脂肪酸を含むことができる。特定の理論に拘束されるものではないが、ある特定の実施形態では、エストリドの水素化は、分子の全体の安定性を改善するために役立ち得る。しかしながら、より大きな脂肪酸キャップを有するエストリドなどの完全に水素化されたエストリドは、上昇した流動点温度を呈する場合がある。ある特定の実施形態では、より短い、飽和されたキャッピング材を用いることで、所望の流動点特性におけるいかなる損失も埋め合わせることが望ましい場合もある。

【0043】

式 I I の $R_4 C(O)O-$ 又は式 I 及び I I I の構造 $CH_3(CH_2)_yCH(CH_2)_x C(O)O-$ は、エストリドの「ベース」又は「ベース鎖残基」として働く。エストリドが合成される様式に応じて、このベース有機酸又は脂肪酸残基は、エストリドの最初の合成後に、その遊離酸形のままで残るただ1つの残基であり得る。しかしながら、ある特定の実施形態では、エストリドの特性を変更又は改善する取り組みにおいて、遊離酸は、任意の数の置換基と反応され得る。例えば、遊離酸エストリドをアルコール、グリコール、アミン、又は他の好適な反応体と反応させて、対応のエステル、アミド、又は他の反応生成物をもたらすことが望ましい場合もある。このベース又はベース鎖残基は、第三鎖又はガンマ (γ) 鎖とも呼ばれる。

【0044】

式 I I の $R_3 C(O)O-$ 又は式 I 及び I I I の構造 $CH_3(CH_2)_yCH(CH_2)_x C(O)O-$ は、キャッピング材とベース脂肪酸残基を共に結合させる結合残基である。エストリド中には任意の数の結合残基があり得、これらは、 $n = 0$ の場合を含み、エストリドは二量体型である。エストリドが調製される様式に応じて、結合残基は脂肪酸であり得、合成中には最初は不飽和形であり得る。いくつかの実施形態では、脂肪酸の不飽和の部位にてカルボカチオンを生成するために触媒が使用される場合、これに別の脂肪酸のカルボン酸基によるカルボカチオンへの求核性攻撃が続き、エストリドが形成される。いくつかの実施形態では、脂肪酸と一緒に結合する場合、不飽和の全ての部位が排除されるように一価不飽和である結合脂肪酸を有することが望ましい場合がある。結合残基(複数可)は、二次鎖又はベータ (β) 鎖とも呼ばれる。

【0045】

ある特定の実施形態では、このキャップは、アセチル基であり、結合残基(複数可)は、1つ以上の脂肪酸残基であり、並びにベース鎖残基は、脂肪酸残基である。ある特定の実施形態では、エストリド中に存在する結合残基は、互いに異なる。ある特定の実施形態では、1つ以上の結合残基は、ベース鎖残基とは異なる。

【0046】

上述したように、ある特定の実施形態では、エストリドを調製するために好適な不飽和脂肪酸としては、任意の一価又は多価不飽和脂肪酸を挙げることができる。例えば、一価不飽和脂肪酸は、好適な触媒を伴い、第2の脂肪酸の添加を可能にする単一のカルボカチオンを形成し、これによって、2つの脂肪酸間の単一の結合が形成される。好適な一価不飽和脂肪酸としては、パルミトオレイン酸(16:1)、パクセン酸(18:1)、オレイン酸(18:1)、エイコセン酸(20:1)、エルカ酸(22:1)、及びネルボン酸(24:1)を挙げることができるが、これに限定されない。さらに、ある特定の実施形態では、多価不飽和脂肪酸が、エストリドを生成するために用いられ得る。好適な多価脂肪酸としては、ヘキサデカトリエン酸(16:3)、 α -リノレン酸(18:3)、ステアリドン酸(18:4)、エイコサトリエン酸(20:3)、エイコサテトラエン酸(20:4)、エイコサペンタエン酸(20:5)、ヘネイコサペンタエン酸(21:5)、ドコサペンタエン酸(22:5)、ドコサヘキサエン酸(22:6)、テトラコサペンタエン酸(24:5)、テトラコサヘキサエン酸(24:6)、リノール酸(18:2)、 γ -リノール酸(18:3)、エイコサジエン酸(20:2)、ジホモ- γ -リノレン酸(20:3)アラキドン酸(20:4)、ドコサジエン酸(20:2)、アドレン酸

10

20

30

40

50

(2 2 : 4)、ドコサペンタエン酸 (2 2 : 5) テトラコサテトラエン酸 (2 2 : 4)、
テトラコサペンタエン酸 (2 4 : 5)、ピノレイン酸 (1 8 : 3)、ポドカルピン酸 (2
0 : 3)、ルーメン酸 (1 8 : 2) α -カレンド酸 (1 8 : 3)、 β -カレンド酸 (1 8
: 3)、ジャカル酸 (1 8 : 3)、 α -エレオステアリン酸 (1 8 : 3)、 β -エレオス
テアリン酸、カタルピン酸 (1 8 : 3)、プニカ酸 (1 8 : 3)、ルメレニン酸 (1 8 :
3)、 α -パリナリン酸 (1 8 : 4)、 β -パリナリン酸 (1 8 : 4)、及びボセオペン
タエン酸 (2 0 : 5) を挙げることができるが、これに限定されない。

【 0 0 4 7 】

本明細書に記載されるエストリド化合物を調製するための工程は、天然型又は合成型脂
肪酸供給源の使用を含んでよい。しかしながら、再生可能な生物原料から脂肪酸を供給す
ることが望ましい。生物由来の好適な出発材料としては、植物脂肪、植物油、植物ワック
ス、動物脂肪、動物油、動物ワックス、魚脂肪、魚油、魚ワックス、藻類油、及びこれら
の混合物を挙げることができる。他の潜在的脂肪酸供給源としては、廃棄及び再生された
食品グレードの油脂、遺伝子操作によって得られた脂肪、油、及びワックス、化石燃料系
材料及び所望される材料の他の供給源を挙げることができる。

【 0 0 4 8 】

いくつかの実施形態では、このエストリドは、様々な長さの脂肪酸鎖を含む。いくつか
の実施形態では、 x は、それぞれの事例に独立して、0 ~ 2 0、0 ~ 1 8、0 ~ 1 6、0
~ 1 4、1 ~ 1 2、1 ~ 1 0、2 ~ 8、6 ~ 8、又は 4 ~ 6 から選択される整数である。
いくつかの実施形態では、 x は、それぞれの事例に独立して、7 及び 8 から選択される整
数である。いくつかの実施形態では、 x は、それぞれの事例に独立して、0、1、2、3
、4、5、6、7、8、9、1 0、1 1、1 2、1 3、1 4、1 5、1 6、1 7、1 8、
1 9、及び 2 0 の整数から選択される整数である。

【 0 0 4 9 】

いくつかの実施形態では、 y は、それぞれの事例に独立して、0 ~ 2 0、0 ~ 1 8、0
~ 1 6、0 ~ 1 4、1 ~ 1 2、1 ~ 1 0、2 ~ 8、6 ~ 8、又は 4 ~ 6 から選択される整
数である。いくつかの実施形態では、 y は、それぞれの事例に独立して、7 及び 8 から選
択される整数である。いくつかの実施形態では、 y は、それぞれの事例に独立して、0、
1、2、3、4、5、6、7、8、9、1 0、1 1、1 2、1 3、1 4、1 5、1 6、1
7、1 8、1 9、及び 2 0 の整数から選択される整数である。

【 0 0 5 0 】

いくつかの実施形態では、 $x + y$ は、それぞれの鎖に独立して、0 ~ 4 0、0 ~ 2 0、
1 0 ~ 2 0、又は 1 2 ~ 1 8 から選択される整数である。いくつかの実施形態では、 $x +$
 y は、それぞれの鎖に独立して、1 3 ~ 1 5 から選択される整数である。いくつかの実施
形態では、 $x + y$ は 1 5 である。いくつかの実施形態では、 $x + y$ は、それぞれの鎖に独
立して、6、7、8、9、1 0、1 1、1 2、1 3、1 4、1 5、1 6、1 7、1 8、1
9、2 0、2 1、2 2、2 3、及び 2 4 から選択される整数である。

【 0 0 5 1 】

いくつかの実施形態では、式 I、II、又は III のエストリド化合物は、「 n 量体」
エストリドを形成するために、任意の数の脂肪酸残基を含んでもよい。例えば、このエス
トリドは、その二量体 ($n = 0$)、三量体 ($n = 1$)、四量体 ($n = 2$)、五量体 ($n =$
3)、六量体 ($n = 4$)、七量体 ($n = 5$)、八量体 ($n = 6$)、九量体 ($n = 7$)、又
は十量体 ($n = 8$) 形であってもよい。いくつかの実施形態では、 n は、0 ~ 2 0、0 ~
1 8、0 ~ 1 6、0 ~ 1 4、0 ~ 1 2、0 ~ 1 0、0 ~ 8、又は 0 ~ 6 から選択される整
数である。いくつかの実施形態では、 n は、0 ~ 4 から選択される整数である。いくつか
の実施形態では、 n は 1 であり、ここにおいて、式 I、II、又は III の上記少なくと
も 1 種の化合物は、三量体を含む。いくつかの実施形態では、 n は 1 よりも大きい。いく
つかの実施形態では、 n は、0、1、2、3、4、5、6、7、8、9、1 0、1 1、1
2、1 3、1 4、1 5、1 6、1 7、1 8、1 9、及び 2 0 の整数から選択される整数で
ある。

【 0 0 5 2 】

いくつかの実施形態では、式 I、II、又は III の R_1 は、飽和又は不飽和であり、並びに分岐又は非分岐である任意に置換されたアルキルである。いくつかの実施形態では、このアルキル基は、 $C_1 \sim C_{40}$ アルキル、 $C_1 \sim C_{22}$ アルキル又は $C_1 \sim C_{18}$ アルキルである。いくつかの実施形態では、このアルキル基は、 $C_7 \sim C_{17}$ アルキルから選択される。いくつかの実施形態では、 R_1 は、 C_7 アルキル、 C_9 アルキル、 C_{11} アルキル、 C_{13} アルキル、 C_{15} アルキル、及び C_{17} アルキルから選択される。いくつかの実施形態では、 R_1 は、 C_{13} アルキル、 C_{15} アルキル、及び C_{17} アルキルからなどの $C_{13} \sim C_{17}$ アルキルから選択される。いくつかの実施形態では、 R_1 は、 C_1 、 C_2 、 C_3 、 C_4 、 C_5 、 C_6 、 C_7 、 C_8 、 C_9 、 C_{10} 、 C_{11} 、 C_{12} 、 C_{13} 、 C_{14} 、 C_{15} 、 C_{16} 、 C_{17} 、 C_{18} 、 C_{19} 、 C_{20} 、 C_{21} 又は C_{22} アルキルである。

10

【 0 0 5 3 】

いくつかの実施形態では、式 I、II、又は III の R_2 は、飽和又は不飽和であり、並びに分岐又は非分岐である任意に置換されたアルキルである。いくつかの実施形態では、このアルキル基は、 $C_1 \sim C_{40}$ アルキル、 $C_1 \sim C_{22}$ アルキル又は $C_1 \sim C_{18}$ アルキルである。いくつかの実施形態では、このアルキル基は、 $C_7 \sim C_{17}$ アルキルから選択される。いくつかの実施形態では、 R_2 は、 C_7 アルキル、 C_9 アルキル、 C_{11} アルキル、 C_{13} アルキル、 C_{15} アルキル、及び C_{17} アルキルから選択される。いくつかの実施形態では、 R_2 は、 C_{13} アルキル、 C_{15} アルキル、及び C_{17} アルキルからなどの $C_{13} \sim C_{17}$ アルキルから選択される。いくつかの実施形態では、 R_2 は、 C_1 、 C_2 、 C_3 、 C_4 、 C_5 、 C_6 、 C_7 、 C_8 、 C_9 、 C_{10} 、 C_{11} 、 C_{12} 、 C_{13} 、 C_{14} 、 C_{15} 、 C_{16} 、 C_{17} 、 C_{18} 、 C_{19} 、 C_{20} 、 C_{21} 又は C_{22} アルキルである。

20

【 0 0 5 4 】

いくつかの実施形態では、 R_3 は、飽和又は不飽和であり、並びに分岐又は非分岐である任意に置換されたアルキルである。いくつかの実施形態では、このアルキル基は、 $C_1 \sim C_{40}$ アルキル、 $C_1 \sim C_{22}$ アルキル又は $C_1 \sim C_{18}$ アルキルである。いくつかの実施形態では、このアルキル基は、 $C_7 \sim C_{17}$ アルキルから選択される。いくつかの実施形態では、 R_3 は、 C_7 アルキル、 C_9 アルキル、 C_{11} アルキル、 C_{13} アルキル、 C_{15} アルキル、及び C_{17} アルキルから選択される。いくつかの実施形態では、 R_3 は、 C_{13} アルキル、 C_{15} アルキル、及び C_{17} アルキルからなどの $C_{13} \sim C_{17}$ アルキルから選択される。いくつかの実施形態では、 R_3 は、 C_1 、 C_2 、 C_3 、 C_4 、 C_5 、 C_6 、 C_7 、 C_8 、 C_9 、 C_{10} 、 C_{11} 、 C_{12} 、 C_{13} 、 C_{14} 、 C_{15} 、 C_{16} 、 C_{17} 、 C_{18} 、 C_{19} 、 C_{20} 、 C_{21} 又は C_{22} アルキルである。

30

【 0 0 5 5 】

いくつかの実施形態では、 R_4 は、飽和又は不飽和であり、並びに分岐又は非分岐である任意に置換されたアルキルである。いくつかの実施形態では、このアルキル基は、 $C_1 \sim C_{40}$ アルキル、 $C_1 \sim C_{22}$ アルキル又は $C_1 \sim C_{18}$ アルキルである。いくつかの実施形態では、このアルキル基は、 $C_7 \sim C_{17}$ アルキルから選択される。いくつかの実施形態では、 R_4 は、 C_7 アルキル、 C_9 アルキル、 C_{11} アルキル、 C_{13} アルキル、 C_{15} アルキル、及び C_{17} アルキルから選択される。いくつかの実施形態では、 R_4 は、 C_{13} アルキル、 C_{15} アルキル、及び C_{17} アルキルからなどの $C_{13} \sim C_{17}$ アルキルから選択される。いくつかの実施形態では、 R_4 は、 C_1 、 C_2 、 C_3 、 C_4 、 C_5 、 C_6 、 C_7 、 C_8 、 C_9 、 C_{10} 、 C_{11} 、 C_{12} 、 C_{13} 、 C_{14} 、 C_{15} 、 C_{16} 、 C_{17} 、 C_{18} 、 C_{19} 、 C_{20} 、 C_{21} 又は C_{22} アルキルである。

40

【 0 0 5 6 】

上述のように、ある特定の¹実施形態では、1種以上のエストリドの特性は、 R_1 の長さ及び/又はその飽和の程度を変更することによって操作されることが可能である。しかしながら、ある特定の²実施形態では、エストリドの特性を変化させ又はさらに改善するため

50

に、 R_1 への置換のレベルもまた変更され得る。いかなる特定の理論にも拘束されるものではないが、ある 特定の実施形態では、1つ以上のヒドロキシ基などの R_1 上の極性置換基の存在は、エストリドの粘性を増加させ得、一方では流動点を上昇させる。従って、いくつかの実施形態では、 R_1 は、非置換であるか、又はヒドロキシルではない基で任意に置換される。

【0057】

いくつかの実施形態では、エストリドは、その遊離酸型で存在し、ここでは式 I、II、又は III の R_2 は水素である。いくつかの実施形態では、 R_2 は、飽和又は不飽和であり、並びに分岐又は非分岐である任意に置換されたアルキルから選択される。ある 特定の実施形態では、 R_2 残基は、本明細書の実施例におけるアルコールによるエストリドのエステル化から誘導されたものなどの任意の所望のアルキル基を含んでよい。いくつかの実施形態では、このアルキル基は、 $C_1 \sim C_{40}$ 、 $C_1 \sim C_{22}$ 、 $C_3 \sim C_{20}$ 、 $C_1 \sim C_{18}$ 又は $C_6 \sim C_{12}$ アルキルから選択される。いくつかの実施形態では、 R_2 は、 C_3 アルキル、 C_4 アルキル、 C_8 アルキル、 C_{12} アルキル、 C_{16} アルキル、 C_{18} アルキル、及び C_{20} アルキルから選択され得る。例えば、ある 特定の実施形態では、 R_2 は、イソプロピル、イソブチル、又は 2-エチルヘキシルなどの分岐であってもよい。いくつかの実施形態では、 R_2 は、 C_{12} アルキル、 C_{16} アルキル、 C_{18} アルキル、又は C_{20} アルキルを含む分岐又は非分岐のより大きなアルキル基であってもよい。 R_2 位にてのこのような基は、Jarcoll (商標) I-18CG、I-20、I-12、I-16、I-18T、及び 85BJ を含む Newark, New Jersey の Jarcoll Industries, Inc. によって販売されるアルコールの Jarcoll (商標) 系を用いる遊離酸エストリドのエステル化から誘導され得る。場合によっては、 R_2 は、イソステアリル及びイソパルミチルなどの分岐アルキル類をもたらしためにある 特定のアルコールから供給され得る。このようなイソパルミチル及びイソステアリルアルキル基は、それぞれ C_{16} 及び C_{18} の任意の分岐の変形形態をカバーし得ることが理解されるべきである。例えば、本明細書に記載されるエストリドは、Houston, Texas の Nissan Chemical America Corporation によって販売されるイソパルミチル及びイソステアリルアルコールの Finexocol (登録商標) 系 (Finexocol (登録商標) 180、180N、及び 1600 を含む) から誘導された、 R_2 位にての高度に分岐されたイソパルミチル又はイソステアリル基を含有してもよい。いかなる特定の理論に拘束されるものではないが、実施形態では、エストリドの R_2 位での大きな、高度に分岐されたアルキル基 (例えば、イソパルミチル及びイソステアリル) は、その流動点を実質的に保持するか又はさらに低下させつつ、潤滑剤の粘性を増加させる少なくとも 1 つの方法を提供することができる。

【0058】

いくつかの実施形態では、本明細に記載される化合物は、式 I、II、及び III のエストリド化合物の 2 つ又はそれ以上の混合物を含有し得る。化合物の、混合物の、又は組成物の測定された化合物又は組成物のエストリド数 (EN) を用いることで、エストリド、エストリドの混合物、又はエストリドを含有する組成物の化学的構成を特性化することが可能である。この EN は、ベース脂肪酸に添加される脂肪酸の平均数を表わす。この EN はまた、分子当たりのエストリド結合の平均数も表わす。

【数 1】

$$EN = n + 1$$

式中、 n は二次 (β) 脂肪酸の数である。従って、単一のエストリド化合物は、整数である EN を有し、例えば、二量体、三量体、及び四量体については、

【数 2】

二量体 $EN = 1$

【数 3】

三量体 $EN = 2$

10

【数 4】

四量体 $EN = 3$

である。

【0059】

しかしながら、2種以上のエストリド化合物を含有する組成物は、整数であるか又は整数の小数部である EN を有し得る。例えば、二量体と三量体の 1 : 1 のモル比を有する組成物は、1 . 5 の EN を有し、一方、四量体と三量体の 1 : 1 のモル比を有する組成物は、2 . 5 の EN を有すると考える。

20

【0060】

いくつかの実施形態では、この組成物は、4 . 5、又は 5 . 0 も超える整数又は整数の小数部分である EN を有する 2 種以上のエストリドの混合物を含有し得る。いくつかの実施形態では、 EN は、約 1 . 0 ~ 約 5 . 0 から選択される整数又は整数の小数部分である。いくつかの実施形態では、 EN は、約 1 . 2 ~ 約 4 . 5 から選択される整数又は整数の小数部分である。いくつかの実施形態では、この EN は、1 . 0、1 . 2、1 . 4、1 . 6、1 . 8、2 . 0、2 . 2、2 . 4、2 . 6、2 . 8、3 . 0、3 . 2、3 . 4、3 . 6、3 . 8、4 . 0、4 . 2、4 . 4、4 . 6、4 . 8、5 . 0、5 . 2、5 . 4、5 . 6、及び 5 . 8 を超える数値から選択される。いくつかの実施形態では、この EN は、1 . 2、1 . 4、1 . 6、1 . 8、2 . 0、2 . 2、2 . 4、2 . 6、2 . 8、3 . 0、3 . 2、3 . 4、3 . 6、3 . 8、4 . 0、4 . 2、4 . 4、4 . 6、4 . 8、並びに 5 . 0、5 . 2、5 . 4、5 . 6、5 . 8、及び 6 . 0 未満の数値である。いくつかの実施形態では、この EN は、1、1 . 2、1 . 4、1 . 6、1 . 8、2 . 0、2 . 2、2 . 4、2 . 6、2 . 8、3 . 0、3 . 2、3 . 4、3 . 6、3 . 8、4 . 0、4 . 2、4 . 4、4 . 6、4 . 8、5 . 0、5 . 2、5 . 4、5 . 6、5 . 8、及び 6 . 0 から選択される。

30

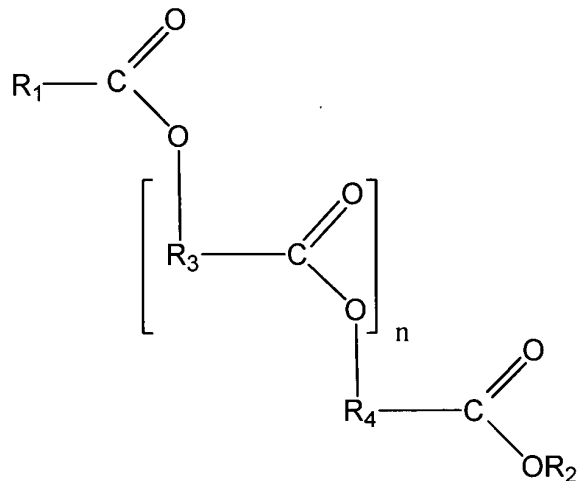
【0061】

上述したように、エストリド化合物の鎖は、独立して任意に置換され得、ここでは、1 つ以上の水素が除去されかつ本明細書で特定された置換基の 1 つ以上で置き換えられる。同様に、水素残基の 2 つ以上が除去され、シス又はトランス二重結合などの不飽和の 1 つ以上の部位を形成し得る。さらに、この鎖は、分岐の炭化水素残基を任意に含有してもよい。例えば、いくつかの実施形態では、本明細書に記載されるエストリドは、式 I I

40

【化 6】

式 I I



10

の少なくとも 1 種の化合物を含み得、

式中、

20

n は、0 に等しいか又はそれよりも大きな整数であり、

R_1 は、飽和又は不飽和の、並びに分岐又は非分岐の任意に置換されたアルキルであり、

R_2 は、水素、並びに飽和又は不飽和の、及び分岐又は非分岐の任意に置換されたアルキルから選択され、

R_3 、及び R_4 は、それぞれの事例に独立して、飽和又は不飽和の、並びに分岐又は非分岐の任意に置換されたアルキルから選択される。

【0062】

いくつかの実施形態では、 n は、1 ~ 20 から選択される整数である。いくつかの実施形態では、 n は、1 ~ 12 から選択される整数である。いくつかの実施形態では、 n は、0、1、2、3、4、5、6、7、8、9、10、11、12、13、14、15、16、17、18、19、及び 20 から選択される整数である。いくつかの実施形態では、1 つ以上の R_3 は、式 I I の化合物中の 1 つ以上の他の R_3 とは異なる。いくつかの実施形態では、1 つ以上の R_3 は、式 I I の化合物中の R_4 とは異なる。いくつかの実施形態では、式 I I の化合物が、1 種以上の多価不飽和脂肪酸から調製される場合、 R_3 及び R_4 の 1 つ以上が、不飽和の 1 つ以上の部位を有することが可能である。いくつかの実施形態では、式 I I の化合物が、1 つ以上の分岐の脂肪酸から調製される場合、 R_3 、及び R_4 の 1 つ以上が分岐であることが可能である。

30

【0063】

いくつかの実施形態では、 R_3 及び R_4 は、 $\text{CH}_3(\text{CH}_2)_y\text{CH}(\text{CH}_2)_x-$ であり得、式中 x は、それぞれの事例に独立して、0、1、2、3、4、5、6、7、8、9、10、11、12、13、14、15、16、17、18、19、及び 20 から選択される整数であり、並びに y は、それぞれの事例に独立して、0、1、2、3、4、5、6、7、8、9、10、11、12、13、14、15、16、17、18、19、及び 20 から選択される整数である。 R_3 及び R_4 の双方が $\text{CH}_3(\text{CH}_2)_y\text{CH}(\text{CH}_2)_x-$ である場合、この化合物は、式 I 及び I I I による化合物であり得る。

40

【0064】

いかなる特定の理論によって拘束されるものではないが、ある特定の実施形態では、 E_N を変更することが、流動点を実質的に保持し又はそれをさらに低下させつつ、所望の粘性特性を有するエストリドを生成する。例えば、いくつかの実施形態では、 E_N 値を増加させる際にエストリドは、低下した流動点を呈する。従って、ある特定の実施形態では、

50

10

20

30

40

50

は、このENは、約5.3～約5.7から選択される整数の小数部分である。いくつかの実施形態では、このENは、5.0、5.1、5.2、5.3、5.4、5.5、5.6、5.7、5.8、及び5.9よりも大きい数値から選択される。いくつかの実施形態では、このENは、5.1、5.2、5.3、5.4、5.5、5.6、5.7、5.8、5.9、及び6.0未満の数値から選択される。いくつかの実施形態では、このENは、約5.0、5.2、5.4、5.6、5.8、又は6.0である。

【0069】

いくつかの実施形態では、このENは、約1.0～約2.0から選択される整数又は整数の小数部分などの、1よりも大きいか又は1に等しい。いくつかの実施形態では、このENは、約1.1～約1.7から選択される整数の小数部分である。いくつかの実施形態では、このENは、約1.1～約1.5から選択される整数の小数部分である。いくつかの実施形態では、このENは、1.0、1.1、1.2、1.3、1.4、1.5、1.6、1.7、1.8、又は1.9よりも大きい数値から選択される。いくつかの実施形態では、このENは、1.2、1.3、1.4、1.5、1.6、1.7、1.8、1.9、又は2.0未満の数値から選択される。いくつかの実施形態では、このENは、約1.0、1.2、1.4、1.6、1.8、又は2.0である。いくつかの実施形態では、このENは、約1.2～約2.2から選択される整数又は整数の小数部分などの、1よりも大きいか又は1に等しい。いくつかの実施形態では、このENは、約1.4～約2.0から選択される整数又は整数の小数部分である。いくつかの実施形態では、このENは、約1.5～約1.9から選択される整数の小数部分である。いくつかの実施形態では、このENは、1.0、1.1、1.2、1.3、1.4、1.5、1.6、1.7、1.8、1.9、2.0、及び2.1よりも大きい数値から選択される。いくつかの実施形態では、このENは、1.2、1.3、1.4、1.5、1.6、1.7、1.8、1.9、2.0、2.1及び2.2未満の数値から選択される。いくつかの実施形態では、このENは、約1.0、1.2、1.4、1.6、1.8、2.0、又は2.2である。

【0070】

いくつかの実施形態では、このENは、約2.8～約3.8から選択される整数又は整数の小数部分などの、2よりも大きいか又は2に等しい。いくつかの実施形態では、このENは、約2.9～約3.5から選択される整数又は整数の小数部分である。いくつかの実施形態では、このENは、約3.0～約3.4から選択される整数の小数部分である。いくつかの実施形態では、このENは、2.0、2.1、2.2、2.4、2.5、2.6、2.7、2.8、2.9、3.0、3.1、3.4、3.5、3.6、及び3.7よりも大きい数値から選択される。いくつかの実施形態では、このENは、2.2、2.4、2.5、2.6、2.7、2.8、2.9、3.0、3.1、3.4、3.5、3.6、3.7、及び3.8未満の数値から選択される。いくつかの実施形態では、このENは、約2.0、2.2、2.4、2.6、2.8、3.0、3.2、3.4、3.6、又は3.8である。典型的には、基油原料及び潤滑剤組成物は、ある特定の潤滑性、粘性、及び/又は流動点特性を呈する。例えば、ある特定の実施形態では、この基油の好適な粘性特性は、40 で約10 cSt～約250 cSt、及び/又は100 で約3 cSt～約30 cStの範囲であり得る。いくつかの実施形態では、この化合物及び組成物は、40 で約50 cSt～約150 cSt、及び/又は100 で約10 cSt～約20 cStの範囲内の粘性を呈し得る。

【0071】

いくつかの実施形態では、エストリド化合物及び組成物は、40 で約55 cSt未満又は40 で約45 cSt未満の粘性を、及び/又は100 で約12 cSt未満又は100 で約10 cSt未満の粘性を呈し得る。いくつかの実施形態では、エストリド化合物及び組成物は、40 で約25 cSt～約55 cSt、及び/又は100 で約5 cSt～約11 cStの範囲内の粘性を呈し得る。いくつかの実施形態では、エストリド化合物及び組成物は、40 で約35 cSt～約45 cSt、及び/又は100 で約6 cSt～約10 cStの範囲内の粘性を呈し得る。いくつかの実施形態では、エストリド化合

10

20

30

40

50

物及び組成物は、40 で約38 cSt～約43 cSt、及び/又は100 で約7 cSt～約9 cStの範囲内の粘性を呈し得る。

【0072】

いくつかの実施形態では、エストリド化合物及び組成物は、40 で約120 cSt未満又は40 で約100 cSt未満の粘性を、及び/又は100 で約18 cSt未満又は100 で約17 cSt未満の粘性を呈し得る。いくつかの実施形態では、エストリド化合物及び組成物は、40 で約70 cSt～約120 cSt、及び/又は100 で約12 cSt～約18 cStの範囲内の粘性を呈し得る。いくつかの実施形態では、エストリド化合物及び組成物は、40 で約80 cSt～約100 cSt、及び/又は100 で約13 cSt～約17 cStの範囲内の粘性を呈し得る。いくつかの実施形態では、エ
10
ストリド化合物及び組成物は、40 で約85 cSt～約95 cSt、及び/又は100 で約14 cSt～約16 cStの範囲内の粘性を呈し得る。

【0073】

いくつかの実施形態では、エストリド化合物及び組成物は、40 で約180 cStより大きい又は40 で約200 cStより大きい粘性を、及び/又は100 で約20 cStより大きい又は100 で約25 cStより大きい粘性を呈し得る。いくつかの実施形態では、エストリド化合物及び組成物は、40 で約180 cSt～約230 cSt、及び/又は100 で約25 cSt～約31 cStの範囲内の粘性を呈し得る。いくつかの実施形態では、エストリド化合物及び組成物は、40 で約200 cSt～約250 cSt、及び/又は100 で約25 cSt～約35 cStの範囲内の粘性を呈し得る。い
20
くつかの実施形態では、エストリド化合物及び組成物は、40 で約210 cSt～約230 cSt、及び/又は100 で約28 cSt～約33 cStの範囲内の粘性を呈し得る。いくつかの実施形態では、エストリド化合物及び組成物は、40 で約200 cSt～約220 cSt、及び/又は100 で約26 cSt～約30 cStの範囲内の粘性を呈し得る。いくつかの実施形態では、エストリド化合物及び組成物は、40 で約205 cSt～約215 cSt、及び/又は100 で約27 cSt～約29 cStの範囲内の粘性を呈し得る。

【0074】

いくつかの実施形態では、エストリド化合物及び組成物は、40 で約45 cSt未満又は40 で約38 cSt未満の粘性を、及び/又は100 で約10 cSt未満又は100 で約9 cSt未満の粘性を呈し得る。いくつかの実施形態では、エストリド化合物及び組成物は、40 で約20 cSt～約45 cSt、及び/又は100 で約4 cSt～約10 cStの範囲内の粘性を呈し得る。いくつかの実施形態では、エストリド化合物及び組成物は、40 で約28 cSt～約38 cSt、及び/又は100 で約5 cSt～約9 cStの範囲内の粘性を呈し得る。いくつかの実施形態では、エストリド化合物及び組成物は、40 で約30 cSt～約35 cSt、及び/又は100 で約6 cSt～約8 cStの範囲内の粘性を呈し得る。
30

【0075】

いくつかの実施形態では、エストリド化合物及び組成物は、40 で約80 cSt未満又は40 で約70 cSt未満の粘性を、及び/又は100 で約14 cSt未満又は100 で約13 cSt未満の粘性を呈し得る。いくつかの実施形態では、エストリド化合物及び組成物は、40 で約50 cSt～約80 cSt、及び/又は100 で約8 cSt～約14 cStの範囲内の粘性を呈し得る。いくつかの実施形態では、エストリド化合物及び組成物は、40 で約60 cSt～約70 cSt、及び/又は100 で約9 cSt～約13 cStの範囲内の粘性を呈し得る。いくつかの実施形態では、エストリド化合物及び組成物は、40 で約63 cSt～約68 cSt、及び/又は100 で約10 cSt～約12 cStの範囲内の粘性を呈し得る。
40

【0076】

いくつかの実施形態では、エストリド化合物及び組成物は、40 で約120 cStより大きい又は40 で約130 cStより大きい粘性を、及び/又は100 で約15 cSt
50

tより大きい又は100 で約18 cStより大きい粘性を呈し得る。いくつかの実施形態では、エストリド化合物及び組成物は、40 で約120 cSt～約150 cSt、及び/又は100 で約16 cSt～約24 cStの範囲内の粘性を呈し得る。いくつかの実施形態では、エストリド化合物及び組成物は、40 で約130 cSt～約160 cSt、及び/又は100 で約17 cSt～約28 cStの範囲内の粘性を呈し得る。いくつかの実施形態では、エストリド化合物及び組成物は、40 で約130 cSt～約145 cSt、及び/又は100 で約17 cSt～約23 cStの範囲内の粘性を呈し得る。いくつかの実施形態では、エストリド化合物及び組成物は、40 で約135 cSt～約140 cSt、及び/又は100 で約19 cSt～約21 cStの範囲内の粘性を呈し得る。いくつかの実施形態では、このエストリド化合物及び組成物は、40 で、約1、2、3、4、5、6、7、8、9、10、11、12、13、14、15、16、17、18、19、20、21、22、23、24、25、26、27、28、29、30、32、34、36、38、40、42、44、46、48、50、55、60、65、70、75、80、85、90、95、100、110、120、130、140、150、160、170、180、190、200、210、220、230、240、250、260、270、280、290、300、350、又は400 cStの粘性を呈し得る。いくつかの実施形態では、このエストリド化合物及び組成物は、100 で、約1、2、3、4、5、6、7、8、9、10、11、12、13、14、15、16、17、18、19、20、21、22、23、24、25、26、27、28、29、及び30 cStの粘性を呈し得る。ある特定の実施形態では、エストリドは、所望の低温流動点特性を呈し得る。いくつかの実施形態では、エストリド化合物及び組成物は、約-25、約-35、-40、又はさらに約-50 よりも低い流動点を呈し得る。いくつかの実施形態では、このエストリド化合物及び組成物は、約-25～約-45の流動点を有する。いくつかの実施形態では、この流動点は、約-30～-40、約-34～約-38、約-30～約-45、約-35～約-45、約-34～約-42、約-38～約-42、又は36～-40の範囲内にある。いくつかの実施形態では、この流動点は、約-27～約-37、又は約-30～約-34の範囲内にある。いくつかの実施形態では、この流動点は、約-25～約-35、又は約-28～約-32の範囲内にある。いくつかの実施形態では、この流動点は、約-28～約-38、又は約-31～約-35の範囲内にある。いくつかの実施形態では、この流動点は、約-31～約-41、又は約-34～約-38の範囲内にある。いくつかの実施形態では、この流動点は、約-40～約-50、又は約-42～約-48の範囲内にある。いくつかの実施形態では、この流動点は、約-50～約-60、又は約-52～約-58の範囲内にある。いくつかの実施形態では、この流動点の上限は、約-35、約-36、約-37、約-38、約-39、約-40、約-41、約-42、約-43、約-44、又は約-45未満である。いくつかの実施形態では、この流動点の下限は、約-70、約-69、約-68、約-67、約-66、約-65、約-64、約-63、約-62、約-61、約-60、約-59、約-58、約-57、約-56、約-55、約-54、約-53、約-52、約-51、約-50、約-49、約-48、約-47、約-46、又は約-45より大きい。

【0077】

さらに、ある特定の実施形態では、このエストリドは、他の方法により調製されたエストリドと比較する場合、減少したヨウ素価（IV）を呈する。IVは、油の総不飽和度の測定値であり、エストリドの1グラム当たりのヨウ素の量（cg/g）を測定することによって決定される。ある特定の例では、より高い飽和度を有する油は、腐食物及び沈着物の生成により感受性が高い可能性があり、酸化安定度のより低いレベルを呈し得る。より高い飽和度を有する化合物は、ヨウ素が反応するより多くの不飽和の点を有し、より高いIVをもたらすと考えられる。従って、ある特定の実施形態では、油の有害な沈着物及び腐食物もまた低減すると同時に、油の酸化安定度を増加させる取り組みにおいてエストリ

10

20

30

40

50

ドのIVを減少させることが望ましい。

【0078】

いくつかの実施形態では、本明細書に記載されるエストリド化合物及び組成物は、約40cg/g未満又は約35cg/g未満のIVを有する。いくつかの実施形態では、エストリドは、約30cg/g未満又は約25cg/g未満、約20cg/g未満、約15cg/g未満、約10cg/g未満、又は約5cg/g未満のIVを有する。組成物のIVは、エストリドの不飽和度を減少させることによって低減される。これは、例えば、エストリドを合成する場合に、飽和キャッピング材の量を不飽和キャッピング材に対して増加させることによって達成され得る。或いは、ある特定の¹⁰実施形態では、不飽和キャップ部分を有するエストリドを水素化することによって低減され得る。

【0079】

いくつかの実施形態では、エストリドは、式IIの少なくとも1種の化合物を含み、式中、 R_1 、 R_3 及び R_4 の1つ以上は、飽和、及び非分岐の C_{1-7} アルキルから選択され、 n は1であり、 R_2 は、飽和又は不飽和であり並びに分岐又は非分岐である任意に置換された $C_1 \sim C_{40}$ アルキルである。

【0080】

いくつかの実施形態では、エストリドは、式IIの少なくとも1種の化合物を含み、式中、 R_1 、 R_3 及び R_4 の1つ以上は、飽和、及び非分岐の C_{1-7} アルキルから選択され、 n は2であり、 R_2 は、飽和又は不飽和であり並びに分岐又は非分岐である任意に置換された $C_1 \sim C_{40}$ アルキルである。²⁰

【0081】

いくつかの実施形態では、エストリドは、式IIの少なくとも1種の化合物を含み、式中、 R_1 、 R_3 及び R_4 の1つ以上は、飽和、及び非分岐の C_{1-7} アルキルから選択され、 n は3であり、 R_2 は、飽和又は不飽和であり並びに分岐又は非分岐である任意に置換された $C_1 \sim C_{40}$ アルキルである。

【0082】

いくつかの実施形態では、エストリドは、式IIの少なくとも1種の化合物を含み、式中、 R_1 、 R_3 及び R_4 の1つ以上は、飽和、及び非分岐の C_{1-7} アルキルから選択され、 n は4であり、 R_2 は、飽和又は不飽和であり並びに分岐又は非分岐である任意に置換された $C_1 \sim C_{40}$ アルキルである。³⁰

【0083】

いくつかの実施形態では、エストリドは、式IIの少なくとも1種の化合物を含み、式中、 R_1 、 R_3 及び R_4 の1つ以上は、飽和、及び非分岐の C_{1-7} アルキルから選択され、 n は5であり、 R_2 は、飽和又は不飽和であり並びに分岐又は非分岐である任意に置換された $C_1 \sim C_{40}$ アルキルである。

【0084】

いくつかの実施形態では、エストリドは、式IIの少なくとも1種の化合物を含み、式中、 R_1 、 R_3 及び R_4 の1つ以上は、飽和、及び非分岐の C_{1-7} アルキルから選択され、 n は6であり、 R_2 は、飽和又は不飽和であり並びに分岐又は非分岐である任意に置換された $C_1 \sim C_{40}$ アルキルである。⁴⁰

【0085】

いくつかの実施形態では、エストリドは、式IIの少なくとも1種の化合物を含み、式中、 R_1 、 R_3 及び R_4 の1つ以上は、飽和、及び非分岐の C_{1-7} アルキルから選択され、 n は7であり、 R_2 は、飽和又は不飽和であり並びに分岐又は非分岐である任意に置換された $C_1 \sim C_{40}$ アルキルである。

【0086】

いくつかの実施形態では、エストリドは、式IIの少なくとも1種の化合物を含み、式中、 R_1 、 R_3 及び R_4 の1つ以上は、飽和、及び非分岐の C_{1-7} アルキルから選択され、 n は8であり、 R_2 は、飽和又は不飽和であり並びに分岐又は非分岐である任意に置換された $C_1 \sim C_{40}$ アルキルである。⁵⁰

【0087】

いくつかの実施形態では、エストリドは、式 I I の少なくとも 1 種の化合物を含み、式中、 R_1 、 R_3 及び R_4 の 1 つ以上は、飽和、及び非分岐の C_{2-1} アルキルから選択され、 n は 1 であり、 R_2 は、飽和又は不飽和であり並びに分岐又は非分岐である任意に置換された $C_1 \sim C_{40}$ アルキルである。

【0088】

いくつかの実施形態では、エストリドは、式 I I の少なくとも 1 種の化合物を含み、式中、 R_1 、 R_3 及び R_4 の 1 つ以上は、飽和、及び非分岐の C_{2-1} アルキルから選択され、 n は 2 であり、 R_2 は、飽和又は不飽和であり並びに分岐又は非分岐である任意に置換された $C_1 \sim C_{40}$ アルキルである。

10

【0089】

いくつかの実施形態では、エストリドは、式 I I の少なくとも 1 種の化合物を含み、式中、 R_1 、 R_3 及び R_4 の 1 つ以上は、飽和、及び非分岐の C_{2-1} アルキルから選択され、 n は 3 であり、 R_2 は、飽和又は不飽和であり並びに分岐又は非分岐である任意に置換された $C_1 \sim C_{40}$ アルキルである。

【0090】

いくつかの実施形態では、エストリドは、式 I I の少なくとも 1 種の化合物を含み、式中、 R_1 、 R_3 及び R_4 の 1 つ以上は、飽和、及び非分岐の C_{2-1} アルキルから選択され、 n は 4 であり、 R_2 は、飽和又は不飽和であり並びに分岐又は非分岐である任意に置換された $C_1 \sim C_{40}$ アルキルである。

20

【0091】

いくつかの実施形態では、エストリドは、式 I I の少なくとも 1 種の化合物を含み、式中、 R_1 、 R_3 及び R_4 の 1 つ以上は、飽和、及び非分岐の C_{2-1} アルキルから選択され、 n は 5 であり、 R_2 は、飽和又は不飽和であり並びに分岐又は非分岐である任意に置換された $C_1 \sim C_{40}$ アルキルである。

【0092】

いくつかの実施形態では、エストリドは、式 I I の少なくとも 1 種の化合物を含み、式中、 R_1 、 R_3 及び R_4 の 1 つ以上は、飽和、及び非分岐の C_{2-1} アルキルから選択され、 n は 6 であり、 R_2 は、飽和又は不飽和であり並びに分岐又は非分岐である任意に置換された $C_1 \sim C_{40}$ アルキルである。

30

【0093】

いくつかの実施形態では、エストリドは、式 I I の少なくとも 1 種の化合物を含み、式中、 R_1 、 R_3 及び R_4 の 1 つ以上は、飽和、及び非分岐の C_{2-1} アルキルから選択され、 n は 7 であり、 R_2 は、飽和又は不飽和であり並びに分岐又は非分岐である任意に置換された $C_1 \sim C_{40}$ アルキルである。

【0094】

いくつかの実施形態では、エストリドは、式 I I の少なくとも 1 種の化合物を含み、式中、 R_1 、 R_3 及び R_4 の 1 つ以上は、飽和、及び非分岐の C_{2-1} アルキルから選択され、 n は 8 であり、 R_2 は、飽和又は不飽和であり並びに分岐又は非分岐である任意に置換された $C_1 \sim C_{40}$ アルキルである。

40

【0095】

いくつかの実施形態では、エストリドは、式 I I の少なくとも 1 種の化合物を含み、式中、 R_1 、 R_3 及び R_4 の 1 つ以上は、飽和、及び非分岐の C_{1-5} アルキルから選択され、 n は 1 であり、 R_2 は、飽和又は不飽和であり並びに分岐又は非分岐である任意に置換された $C_1 \sim C_{40}$ アルキルである。

【0096】

いくつかの実施形態では、エストリドは、式 I I の少なくとも 1 種の化合物を含み、式中、 R_1 、 R_3 及び R_4 の 1 つ以上は、飽和、及び非分岐の C_{1-5} アルキルから選択され、 n は 2 であり、 R_2 は、飽和又は不飽和であり並びに分岐又は非分岐である任意に置換された $C_1 \sim C_{40}$ アルキルである。

50

【0097】

いくつかの実施形態では、エストリドは、式 I I の少なくとも 1 種の化合物を含み、式中、 R_1 、 R_3 及び R_4 の 1 つ以上は、飽和、及び非分岐の C_{1-5} アルキルから選択され、 n は 3 であり、 R_2 は、飽和又は不飽和であり並びに分岐又は非分岐である任意に置換された $C_1 \sim C_{40}$ アルキルである。

【0098】

いくつかの実施形態では、エストリドは、式 I I の少なくとも 1 種の化合物を含み、式中、 R_1 、 R_3 及び R_4 の 1 つ以上は、飽和、及び非分岐の C_{1-5} アルキルから選択され、 n は 4 であり、 R_2 は、飽和又は不飽和であり並びに分岐又は非分岐である任意に置換された $C_1 \sim C_{40}$ アルキルである。

10

【0099】

いくつかの実施形態では、エストリドは、式 I I の少なくとも 1 種の化合物を含み、式中、 R_1 、 R_3 及び R_4 の 1 つ以上は、飽和、及び非分岐の C_{1-5} アルキルから選択され、 n は 5 であり、 R_2 は、飽和又は不飽和であり並びに分岐又は非分岐である任意に置換された $C_1 \sim C_{40}$ アルキルである。

【0100】

いくつかの実施形態では、エストリドは、式 I I の少なくとも 1 種の化合物を含み、式中、 R_1 、 R_3 及び R_4 の 1 つ以上は、飽和、及び非分岐の C_{1-5} アルキルから選択され、 n は 6 であり、 R_2 は、飽和又は不飽和であり並びに分岐又は非分岐である任意に置換された $C_1 \sim C_{40}$ アルキルである。

20

【0101】

いくつかの実施形態では、エストリドは、式 I I の少なくとも 1 種の化合物を含み、式中、 R_1 、 R_3 及び R_4 の 1 つ以上は、飽和、及び非分岐の C_{1-5} アルキルから選択され、 n は 7 であり、 R_2 は、飽和又は不飽和であり並びに分岐又は非分岐である任意に置換された $C_1 \sim C_{40}$ アルキルである。

【0102】

いくつかの実施形態では、エストリドは、式 I I の少なくとも 1 種の化合物を含み、式中、 R_1 、 R_3 及び R_4 の 1 つ以上は、飽和、及び非分岐の C_{1-5} アルキルから選択され、 n は 8 であり、 R_2 は、飽和又は不飽和であり並びに分岐又は非分岐である任意に置換された $C_1 \sim C_{40}$ アルキルである。

30

【0103】

いくつかの実施形態では、エストリドは、式 I I の少なくとも 1 種の化合物を含み、式中、 R_1 、 R_3 及び R_4 の 1 つ以上は、飽和、及び非分岐の C_{1-9} アルキルから選択され、 n は 1 であり、 R_2 は、飽和又は不飽和であり並びに分岐又は非分岐である任意に置換された $C_1 \sim C_{40}$ アルキルである。

【0104】

いくつかの実施形態では、エストリドは、式 I I の少なくとも 1 種の化合物を含み、式中、 R_1 、 R_3 及び R_4 の 1 つ以上は、飽和、及び非分岐の C_{1-9} アルキルから選択され、 n は 2 であり、 R_2 は、飽和又は不飽和であり並びに分岐又は非分岐である任意に置換された $C_1 \sim C_{40}$ アルキルである。

40

【0105】

いくつかの実施形態では、エストリドは、式 I I の少なくとも 1 種の化合物を含み、式中、 R_1 、 R_3 及び R_4 の 1 つ以上は、飽和、及び非分岐の C_{1-9} アルキルから選択され、 n は 3 であり、 R_2 は、飽和又は不飽和であり並びに分岐又は非分岐である任意に置換された $C_1 \sim C_{40}$ アルキルである。

【0106】

いくつかの実施形態では、エストリドは、式 I I の少なくとも 1 種の化合物を含み、式中、 R_1 、 R_3 及び R_4 の 1 つ以上は、飽和、及び非分岐の C_{1-9} アルキルから選択され、 n は 4 であり、 R_2 は、飽和又は不飽和であり並びに分岐又は非分岐である任意に置換された $C_1 \sim C_{40}$ アルキルである。

50

【0107】

いくつかの実施形態では、エストリドは、式 I I の少なくとも 1 種の化合物を含み、式中、 R_1 、 R_3 及び R_4 の 1 つ以上は、飽和 $\vee$ 非分岐の C_{1-9} アルキルから選択され、 n は 5 であり、 R_2 は、飽和又は不飽和であり並びに分岐又は非分岐である任意に置換された C_{1-40} アルキルである。

【0108】

いくつかの実施形態では、エストリドは、式 I I の少なくとも 1 種の化合物を含み、式中、 R_1 、 R_3 及び R_4 の 1 つ以上は、飽和、及び非分岐の C_{1-9} アルキルから選択され、 n は 6 であり、 R_2 は、飽和又は不飽和であり並びに分岐又は非分岐である任意に置換された C_{1-40} アルキルである。

10

【0109】

いくつかの実施形態では、エストリドは、式 I I の少なくとも 1 種の化合物を含み、式中、 R_1 、 R_3 及び R_4 の 1 つ以上は、飽和、及び非分岐の C_{1-9} アルキルから選択され、 n は 7 であり、 R_2 は、飽和又は不飽和であり並びに分岐又は非分岐である任意に置換された C_{1-40} アルキルである。

【0110】

いくつかの実施形態では、エストリドは、式 I I の少なくとも 1 種の化合物を含み、式中 R_1 、 R_3 及び R_4 の 1 つ以上は、飽和、及び非分岐の C_{1-9} アルキルから選択され、 n は、8 であり、かつ R_2 は、必要に応じて置換されている C_{1-40} アルキルであって、飽和又は不飽和、及び分岐又は非分岐であるアルキルである。

20

【0111】

本開示はさらに、式 I、I I 及び I I I によるエストリドを製する方法に関する。例えば、不飽和脂肪酸と有機酸との反応、及び得られた遊離酸エストリドのエステル化を、以下のスキーム 1 及び 2 に図示し、かつ考察している。この反応を図示するために用いられる特定の構造式は、式 I 及び I I I による化合物の合成のための式に相当する。しかし、この方法は、式 I I による化合物の合成に等しくあてはまり、ここでは、不飽和の反応部位を有する R_3 及び R_4 に対応する構造を有する化合物の使用をとまなう。

【0112】

下に図示されるように、化合物 100 は、本明細書に記載のエストリド化合物類を調製するためのベースとして機能し得る不飽和脂肪酸である。

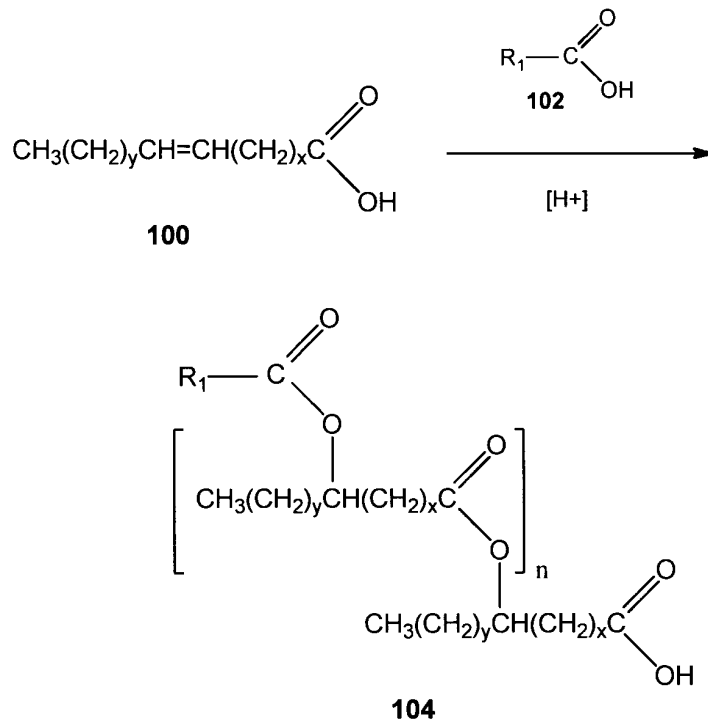
30

【0113】

スキーム 1

【化 7】

スキーム 1



【0114】

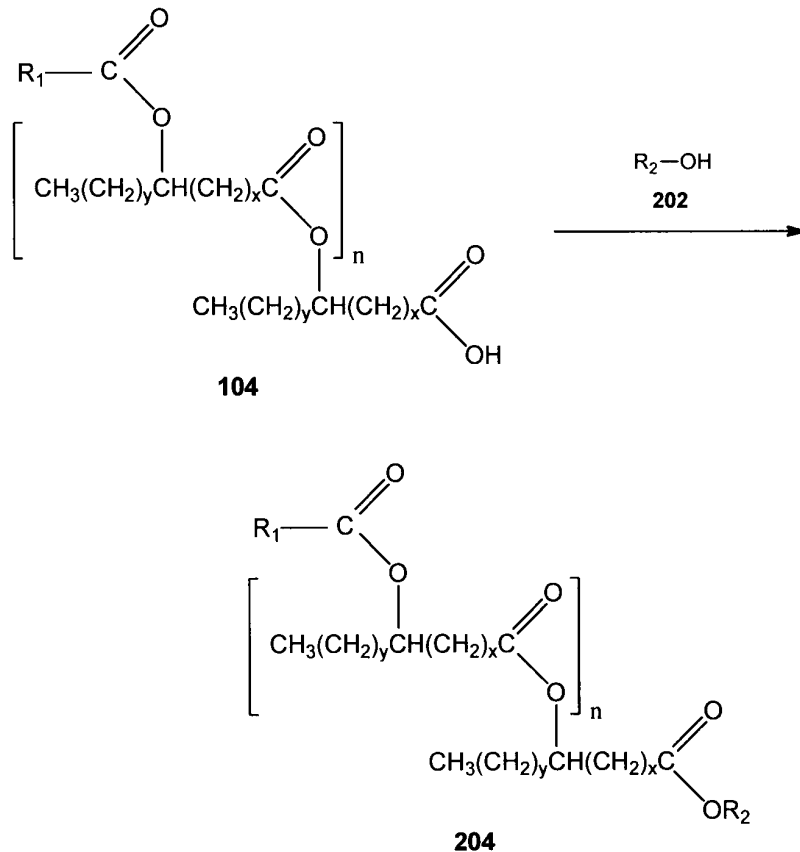
スキーム 1 では、式中、 x は、それぞれについて独立して、0 ~ 20 から選択される整数であり、 y は、独立してそれぞれについて、0 ~ 20 から選択される整数であり、 n は、1 以上の整数であり、かつ R_1 は、必要に応じて置換されているアルキルであって、飽和又は不飽和であり、かつ分岐又は非分岐のアルキルであり、不飽和脂肪酸 100 は、化合物 102 及びプロトン源由来のプロトンと組み合わせられて、遊離酸エステル 104 を形成してもよい。ある 特定の実施形態では、化合物 102 は含まれず、不飽和脂肪酸 100 は、単独で、酸性条件に曝されて、遊離酸エステル 104 を形成し得、 R_1 は、不飽和アルキル基である。ある 特定の実施形態では、化合物 102 が、反応中に含まれる場合、 R_1 は、飽和又は不飽和、及び分岐又は非分岐の 1 つ以上の必要に応じて置換されているアルキル残基であり得る。任意の適切なプロトン源が、遊離酸エステル 104 の形成を触媒するために実行され得、これには限定するものではないが、均一な酸及び / 又は強酸、例えば、塩酸、硫酸、過塩素酸、硝酸、トリフリン酸などが挙げられる。

【0115】

スキーム 2

【化 8】

スキーム 2



10

20

【0116】

同様に、スキーム 2 では、式中、 x は、独立してそれぞれについて、 $0 \sim 20$ から選択される整数であり、 y は、独立してそれぞれについて、 $0 \sim 20$ から選択される整数であり、 n は、 1 以上の整数であり、かつ R_1 及び R_2 は各々、必要に応じて置換されているアルキルであって、飽和又は不飽和であり、かつ分岐又は非分岐のアルキルであり、遊離酸エステル 104 は、当業者に公知の任意の適切な手順、例えば、アルコール 202 での酸 - 触媒還元によってエステル化して、エステル化されたエステル 204 を得てもよい。他の例示的な方法としては、 BF_3 のようなルイス酸触媒を用いる方法などの、フィッシャーのエステル化の他の種類を包含し得る。

30

【0117】

上記で考察のとおり、ある 特定の実施形態では、本明細書に記載のエステルは、生分解性潤滑剤適用のための基油原料としてそれらを有用にさせる改良された特性を有し得る。このような適用としては、限定するものではないが、クランクケース油、ギアボックス油、油圧油、掘削流体、2 サイクルエンジン油、グリースなどを挙げることができる。他の適切な用途としては、生分解性及び毒性が懸念となる海洋の適用が挙げられ得る。ある 特定の実施形態では、本明細書に記載のある 特定のエステルは非毒性の性質によって、これらのエステルはまた、美容及び食品産業における潤滑剤としての使用に適切になり得る。

40

【0118】

ある 特定の実施形態では、エステル化合物は、従来の添加物の必要性なしに、ある 特定の最終用途のための 1 つ以上の仕様に合致し得るし、又はそれを上回り得る。例えば、ある 特定の場合、高粘度の潤滑剤、例えば、 40 で約 120 cSt を超えるか、又はさらに 40 で 200 cSt を超える動粘性率を示す潤滑剤が、ギアボックス又は風力ター

50

ピンの潤滑剤のような特定の適用に望ましい場合がある。このような特性を有する先行技術の公知の潤滑剤は代表的にはまた、粘度増大に伴い流動点の増大を示し、その結果先行技術の潤滑剤は、より寒い環境でのこのような適用には適切でない場合がある。しかし、ある特定の実施形態では、本明細書に記載されるある特定の化合物の対抗する特性（例えば、ENの増大によって、オイルの流動点を維持するか、又は減少さえさせながら、より高粘度をもたらすエストリドが得られる）によって、このような専門的な適用について特に適切な高粘度のエストリドが作製され得る。

【0119】

同様に、より寒い環境における先行技術で公知の潤滑剤の使用は一般に、潤滑剤の粘度の望ましくない増大を生じ得る。従って、この適用次第で、より低温で、より低粘度のオイルを用いることが望ましい場合がある。ある特定の状況では、低粘度のオイルとしては、40 で約50 cSt未満、又はさらに40 で約40 cStの粘度を示す潤滑剤が挙げられ得る。従って、ある特定の実施形態では、本明細書に記載される低粘度のエストリドは、エンドユーザーにとって、低温での操作のための高粘度潤滑剤に適切な代替品となり得る。

10

【0120】

いくつかの実施形態では、エストリド基油原料を含む潤滑剤組成物を調製することが所望される場合がある。例えば、ある特定の実施形態では、本明細書に記載のエストリドは、ポリ α オレフィン類、合成エステル類、ポリアルキレングリコール類、鉱油類（群I、II、及びIII）、流動点降下剤、粘度調節剤、防食剤、摩耗防止剤、洗剤、分散剤、着色剤、消泡剤及び乳化破壊剤から選択される1種以上の添加剤と混合されてもよい。さらに、又は代替的には、ある特定の実施形態では、本明細書に記載のエストリドは、所望の粘度及び/又は流動点プロファイルを達成するために1つ以上の合成又は石油系のオイルと混合されてもよい。ある特定の実施形態では、本明細書に記載のある特定のエストリドはまた、ガソリンと十分混合して、その結果、燃料成分又は添加物として有用であり得る。

20

【0121】

前述の全ての実施例では、記載される化合物は、単独で、混合物として、又は他の化合物、組成物、及び/もしくは材料と組み合わせて有用であり得る。

【0122】

本明細書に記載される新規な化合物を得るための方法は、当業者に明白であり、適切な手順は、例えば、下の実施例に、及び本明細書に引用される引用文献に記載されている。

30

【実施例】

【0123】

分析的

核磁気共鳴：NMRスペクトルは、溶媒として、 CDCl_3 を用いて、300 Kで500.113 MHzの絶対周波数で、Bruker Avance 500スペクトロメーターを用いて収集した。化学的シフトは、テトラメチルシランからのppmとして報告された。エストリドの形成を示す、脂肪酸の間の二次的なエステル連結の形成は、約4.84 ppmでのピークによって、 ^1H NMRで検証した。

40

【0124】

エストリド数(Estolide Number)(EN)：ENは、GC分析によって測定した。組成物のENとは具体的には、組成物中に存在する任意のエストリド化合物のEN特徴を指すことが理解されるべきである。従って、特定のENを有するエストリド組成物はまた、他の成分、例えば、天然又は合成の添加物、他の非エストリド基油類、脂肪酸エステル類、例えば、トリグリセリド類、及び/又は脂肪酸類を含んでもよいが、本明細書において用いられるようなENとは、別段に示さない限り、エストリド組成物のエストリド画分の値を指す。

【0125】

ヨウ素価(IV)：ヨウ素価とは、オイルの総不飽和の程度の測定値である。IVは、

50

1 グラムのオイルサンプルあたりに吸収されるヨウ素のセンチグラムとして表現する。従って、オイルのヨウ素価が高いほど、そのオイルの不飽和のレベルは高い。I V は、G C 分析によって測定されても、及び / 又は評価されてもよい。ある組成物が、式 I、I I 及び I I I に示されるようなエストリド以外の不飽和化合物を含む場合、エストリドは、構成要素のエストリドのヨウ素価を測定する前に、組成物中に存在する他の不飽和化合物から分離され得る。例えば、ある組成物が、不飽和脂肪酸類又は不飽和脂肪酸類を含むトリグリセリド類を含む場合、これらは、1 種以上のエストリドについてヨウ素価を測定する前に組成物中に存在するエストリドから分離され得る。

【0126】

酸価：酸価とは、オイル中に存在する総酸の指標である。酸価は、当業者に公知の任意の適切な滴定方法によって決定され得る。例えば、酸価は、オイルの所定のサンプルを中和するために必要な K O H の量によって決定され得、従って、K O H (m g) / オイル (g) として表現され得る。

【0127】

ガスクロマトグラフィー (G C) : G C 分析を行って、エストリドのエストリド数 (E N) 及びヨウ素価 (I V) を評価した。この分析は、フレームイオン化検出器及びオートサンプラー / インジェクターを、S P - 2 3 8 0 3 0 m × 0 . 2 5 m m 内径のカラムとともに装備した A g i l e n t 6 8 9 0 N シリーズのガスクロマトグラフを用いて行った。

【0128】

分析のパラメーターは以下のとおりであった。カラム流量は、1 . 0 m L / 分で、1 4 . 9 9 p s i のヘリウムヘッド圧力 ; 5 0 : 1 のスプリット比 ; 2 0 / 分で 1 2 0 - 1 3 5 、 7 / 分で 1 3 5 - 2 6 5 、 2 6 5 で 5 分間保持、のプログラムされた傾斜 ; インジェクター及び検出器の温度は、2 5 0 に設定。

【0129】

G C による E N 及び I V の測定 : これらの分析を行うために、エストリドサンプルの脂肪酸成分を、M e O H と反応させて、脂肪酸メチルエステル類を、エストリド連結が一旦存在した部位でヒドロキシ基を後に残す方法によって形成する。脂肪酸メチルエステル類の標準は、溶出時間を確立するために最初に分析した。

【0130】

サンプル調製 : サンプルを調製するために、1 0 m g のエストリドを、0 . 5 m L の 0 . 5 M の K O H / M e O H と、バイアル中で合わせて、1 0 0 で 1 時間加熱した。これに続いて、1 . 5 m L の 1 . 0 M の H ₂ S O ₄ / M e O H を添加して、1 0 0 で 1 5 分間加熱し、次いで、室温まで冷却した。次いで、- (1) m L の H ₂ O 及び 1 m L のヘキサンをこのバイアルに添加して、得られた液相を徹底的に混合した。次いで、この層を、1 分間相分離させた。底部 H ₂ O 層を除去して、廃棄した。次いで、少量の乾燥剤 (無水 N a ₂ S O ₄) を有機層に添加して、その後有機層を 2 m L の圧着キャップバイアルに移して、分析した。

【0131】

E N 算出 : E N は、ヒドロキシ脂肪酸類のパーセントを、非ヒドロキシ脂肪酸類のパーセントで割って測定する。例えば、二量体のエストリドは、ヒドロキシ官能基を含有する脂肪酸類を半分生じ、もう半分は、ヒドロキシ官能基を欠いている。従って、E N は、5 0 % のヒドロキシ脂肪酸類を、5 0 % の非ヒドロキシ脂肪酸類で割ったものであり、これで 1 の E N 値が得られ、これは、二量体のキャッピング脂肪酸とベース脂肪酸との間の単一のエストリド連結に相当する。

【0132】

I V 算出 : ヨウ素価は、A S T M M e t h o d D 9 7 (A S T M I n t e r n a t i o n a l , C o n s h o h o c k e n , P A) に基づいて以下の式によって推定する :

【0133】

10

20

30

40

50

【数 5】

$$IV = \sum 100 \times \frac{A_f \times MW_f \times db}{MW_f}$$

A_f = サンプル中の脂肪化合物の画分

$MW_f = 253.81$ (二重結合に付加された 2 つのヨウ素原子の原子量)

db = 脂肪化合物上の二重結合の数

MW_f = 脂肪化合物の分子量

10

【0134】

本明細書に記載される例示的なエストリド化合物及び組成物の特性は、以下の実施例及び表に特定される。

【0135】

他の測定：他に記載されるものを除いて、流動点は、ASTM Method D97 - 96a によって測定し、曇り点は、ASTM Method D2500 で測定し、粘度 / 動粘性率は、ASTM Method D445 - 97 で測定し、粘度指数は、ASTM Method D2270 - 93 (1998 年再承認) で測定し、比重は、ASTM Method D4052 によって測定し、引火点は、ASTM Method D92 によって測定し、蒸発損失は、ASTM Method D5800 によって測定し、蒸気圧は、ASTM Method D5191 によって測定し、及び急性水毒性は、Organization of Economic Cooperation and Development (OECD) 203 によって測定する。

20

【実施例 1】

【0136】

酸触媒反応を、50 ガロン Pfaudler RT-Series ガラスライン (glass-lined) リアクターで行った。オレイン酸 (65 Kg, OL 700, Twin Rivers) を、このリアクターに、70% 過塩素酸 (992.3 mL, Aldrich Cat # 244252) とともに添加して、連続攪拌しながら 60 で真空中において (10 torr abs (torr))、24 時間加熱した。24 時間後、真空を解放した。2-エチルヘキサノール (29.97 Kg) を、次にこのリアクターに添加して、真空を回復した。反応は、同じ条件 (60, 10 torr abs) 下で、4 時間以上継続させた。この時点で、KOH (645.58 g) を、90% エタノール / 水 (5000 mL, 90 容積% EtOH) に溶解して、リアクターに添加して酸をクエンチした。次いで、その溶液を約 30 分間冷却させた。次いで、リアクターの内容物を、1 ミクロン (μ) フィルターを通して、アキュムレーターにポンピングして、塩を濾過除去した。次いで、水をアキュムレーターに添加して、オイルを洗浄した。2 つの液相を、約 1 時間、徹底的に混合した。次いで、この溶液を、約 30 分間相分離させた。水層を排出して、廃棄した。有機層を再度、1 μ フィルターを通してリアクターにポンピングして戻した。そのリアクターを、全てのエタノール及び水が溶液から蒸留し終わるまで、真空中 (10 torr abs) で 60 まで加熱した。次いで、このリアクターを、真空 (10 torr abs) で 100 に加熱して、その温度を、2-エチルヘキサノールが溶液から蒸留し終わるまで維持した。次に、残りの材料を、Myers 15 Centrifugal Distillation スチールを用いて、200 で、約 12 ミクロン (0.012 torr) の絶対圧力で蒸留して、全てのモノエステル物質を除去して、後にエストリドを残した (Ex. 1)。ある特定のデータを下の表 1 及び表 8 に報告する。

30

40

【実施例 2】

【0137】

50

酸触媒反応は、50ガロンPfaudler RT-Seriesガラスラインリアクターで行った。オレイン酸(50Kg, OL 700, Twin Rivers)及び丸ごとのヤシ脂肪酸(18.754Kg, TRC 110, Twin Rivers)を、このリアクターに、70%過塩素酸(1145mL, Aldrich Cat#244252)とともに添加して、連続撹拌しながら60で真空中において(10torr abs(torr))、24時間加熱した。24時間後、真空を解放した。2-エチルヘキサノール(34.58Kg)を、次にこのリアクターに添加して、真空を回復した。反応は、同じ条件(60, 10torr abs)下で、4時間以上継続させた。この時点で、KOH(744.9g)を、90%エタノール/水(5000mL、90容積% EtOH)に溶解して、リアクターに添加して酸をクエンチした。次いで、その溶液を約30分間冷却させた。次いで、リアクターの内容物を、1ミクロン(μ)フィルターを通して、アキュムレーターにポンピングして、塩を濾過除去した。次いで、水をアキュムレーターに添加して、オイルを洗浄した。2つの液相を、約1時間、徹底的に混合した。次いで、この溶液を、約30分間相分離させた。水層を排出して、廃棄した。有機層を再度、1 μ フィルターを通してリアクターにポンピングして戻した。そのリアクターを、全てのエタノール及び水が溶液から蒸留し終わるまで、真空中(10torr abs)で60まで加熱した。次いで、このリアクターを、真空(10torr abs)で100に加熱して、その温度を、2-エチルヘキサノールが溶液から蒸留し終わるまで維持した。次に、残りの材料を、Myers 15 Centrifugal Distillationスチールを用いて、200で、約12ミクロン(0.012torr)の絶対圧力で蒸留して、全てのモノエステル物質を除去して、後にエストリドを残した(Ex. 2)。ある特定のデータを下の表2及び表7に報告する。

【実施例3】

【0138】

実施例1(Ex. 1)で生成したエストリドを、Myers 15 Centrifugal Distillationスチールの蒸留条件に、約12ミクロン(0.012torr)の絶対圧力で、300で供した。これによって、低いEN平均(Ex. 3A)を有する一次蒸留物、及び高いEN平均を有する蒸留残留(Ex. 3B)が得られた。ある特定のデータを以下の表1及び8に報告する。

【0139】

【表1】

エストリド 基油原料	EN	流動点 (°C)	ヨウ素価 (cg/g)
Ex. 3A	1.35	-32	31.5
Ex. 1	2.34	-40	22.4
Ex. 3B	4.43	-40	13.8

【実施例4】

【0140】

実施例2(Ex. 2)で生成したエストリドを、Myers 15 Centrifugal Distillationスチールの蒸留条件に、約12ミクロン(0.012torr)の絶対圧力で、300で供した。これによって、低いEN平均(Ex. 4A)を有する一次蒸留物、及び高いEN平均を有する蒸留残留(Ex. 4B)が得られた。ある特定のデータを以下の表2及び7に報告する。

【0141】

【表 2】

エストリド 基油原料	EN	流動点 (°C)	ヨウ素価 (cg/g)
Ex. 4A	1.31	-30	13.8
Ex. 2	1.82	-33	13.2
Ex. 4B	3.22	-36	9.0

【実施例 5】

10

【0142】

実施例 1 に示される方法によって生成されるエストリドを、1 気圧で、約 0 ～ 約 7 1 0 の温度範囲にまたがって蒸留条件 (ASTM D - 6 3 5 2) に供して、1 0 個の異なるエストリドのカットを漸増温度で回収した。各々のカットのサンプルから蒸留した物質の量、及び各々のカットが蒸留 (及び回収) された温度を下の表 3 に報告する：

【0143】

【表 3】

カット (全体の%)	温度 (°C)
1 (1%)	416.4
2 (1%)	418.1
3 (3%)	420.7
4 (20%)	536.4
5 (25%)	553.6
6 (25%)	618.6
7 (20%)	665.7
8 (3%)	687.6
9 (1%)	700.6
10 (1%)	709.1

20

30

【実施例 6】

【0144】

実施例 2 の方法によって作製したエストリドを、1 気圧で、約 0 ～ 約 7 3 0 の温度範囲にまたがって蒸留条件 (ASTM D - 6 3 5 2) に供して、1 0 個の異なるエストリドのカットを得た。各々のカットの量、及び各々のカットが回収された温度を下の表 4 に報告する。

【0145】

【表 4】

カット (全体の%)	温度 (°C)
1 (1%)	417.7
2 (1%)	420.2
3 (3%)	472.0
4 (5%)	509.7
5 (15%)	533.7
6 (25%)	583.4
7 (25%)	636.4
8 (5%)	655.4
9 (5%)	727.0
10 (15%)	>727.0

10

【実施例 7】

【0146】

エストリド基油 4 B (実施例 4 由来) を、1 気圧で、約 0 ~ 約 730 の温度範囲にまたがって蒸留条件 (ASTM D - 6352) に供して、9 個の異なるエストリドのカットを得た。各々のカットの量、及び各々のカットが回収された温度を下の表 5 a に報告する。

20

【0147】

【表 5】

表 5 a

カット (全体の%)	温度 (°C)
1 (1%)	432.3
2 (1%)	444.0
3 (3%)	469.6
4 (5%)	521.4
5 (15%)	585.4
6 (25%)	617.1
7 (25%)	675.1
8 (5%)	729.9
9 (20%)	>729.9

30

【実施例 8】

【0148】

エストリドは、実施例 1 で用いた 2 - エチルヘキサノールエステル化アルコールを種々の他のアルコールで置き換えたことを除いて、実施例 1 に示される方法によって作製した。エステル化のために用いたアルコールとしては、下の表 5 b に特定されるものが挙げられる。得られたエストリドの特性は表 9 に示す。

40

【0149】

【表 6】

表 5 b

アルコール	構造
Jarcol (商標) I-18CG	イソオクタデカノール
Jarcol (商標) I-12	2-ブチルオクタノール
Jarcol (商標) I-20	2-オクチルドデカノール
Jarcol (商標) I-16	2-ヘキシルデカノール
Jarcol (商標) 85BJ	シス-9-オクタデセン-1-オール
Fineoxocol (登録商標) 180	
Jarcol (商標) I-18T	2-オクチルデカノール

10

20

【实施例 9】

【 0 1 5 0 】

2-エチルヘキサノールエステル化アルコールをイソブタノールで置き換えたことを除いて、実施例2に示される方法によってエストリドを作製した。得られたエストリドの特性を表9に示す。

30

【实施例 10】

【 0 1 5 1 】

2 - エチルヘキサノールエステル化アルコールを種々の他のアルコールで置き換えることを除いて、実施例 1 及び 2 に示される方法によって、式 I、II 及び III のエトリッドを調製する。エステル化のために用いるアルコールとしては、下の表 6 に特定されるものが挙げられる。用いられるエステル化アルコールは、下に列挙するアルコールを含んでおり、これは、飽和であっても不飽和であってもよく、かつ分岐であっても非分岐であってもよく、又はメチル、エチル、プロピル、イソプロピル、ブチル、イソブチル、sec-ブチル、tert-ブチル、ペンチル、イソペンチル、ネオペンチル、ヘキシル、イソヘキシル、などから選択される 1 つ以上のアルキル基で置換されて、分岐又は非分岐の残基を R₂ 位置で形成してもよい。エステル化アルコール及び R₂ 置換基の組み合わせの例を下に表 6 に示す。

40

【 0 1 5 2 】

【表 7】

表 6

アルコール	R ₂ 置換基
C ₁ アルカノール	メチル
C ₂ アルカノール	エチル
C ₃ アルカノール	n-プロピル、イソプロピル
C ₄ アルカノール	n-ブチル、イソブチル、sec-ブチル
C ₅ アルカノール	n-ペンチル、イソペンチルネオペンチル
C ₆ アルカノール	n-ヘキシル、2-メチルペンチル、 3-メチルペンチル、2, 2-ジメチルブチル、 2, 3-ジメチルブチル
C ₇ アルカノール	n-ヘプチル及び他の構造異性体
C ₈ アルカノール	n-オクチル及び他の構造異性体
C ₉ アルカノール	n-ノニル及び他の構造異性体
C ₁₀ アルカノール	n-デカニル及び他の構造異性体
C ₁₁ アルカノール	n-ウンデカニル及び他の構造異性体
C ₁₂ アルカノール	n-ドデカニル及び他の構造異性体
C ₁₃ アルカノール	n-トリデカニル及び他の構造異性体
C ₁₄ アルカノール	n-テトラデカニル及び他の構造異性体
C ₁₅ アルカノール	n-ペンタデカニル及び他の構造異性体
C ₁₆ アルカノール	n-ヘキサデカニル及び他の構造異性体
C ₁₇ アルカノール	n-ヘプタデカニル及び他の構造異性体
C ₁₈ アルカノール	n-オクタデカニル及び他の構造異性体
C ₁₉ アルカノール	n-ノナデカニル及び他の構造異性体
C ₂₀ アルカノール	n-イコサニル及び他の構造異性体
C ₂₁ アルカノール	n-ヘネイコサニル及び他の構造異性体
C ₂₂ アルカノール	n-ドコサニル及び他の構造異性体

10

20

30

【 0 1 5 3 】

【表 8】

表 7

特性	添加物	ASTM 方法	Ex. 4A	Ex. 2	Ex. 4B
色	なし	—	薄い金色	琥珀色	琥珀色
比重 (15.5℃), g/ml	なし	D 4052	該当なし (<1)	0.9046	0.9140
動粘性率 40℃ (cSt)	なし	D 445	32.5	65.4	137.3
動粘性率 100℃ (cSt)	なし	D 445	6.8	11.3	19.9
粘度指数	なし	D 2270	175	167	167
流動点 (℃)	なし	D 97	-30	-33	-36
曇り点 (℃)	なし	D 2500	-30	-32	-36
引火点 (℃)	なし	D 92	該当なし (>200)	該当なし (>250)	該当なし (>286)
蒸発損失 (NOACK), 重量%	なし	D 5800	該当なし	1.4	0.32
リード蒸気圧 (RVP), psi	なし	D 5191	≈ 0	≈ 0	≈ 0

10

20

【 0 1 5 4 】

【表 9】

表 8

特性	添加物	ASTM METHOD	Ex. 3A	Ex. 1	Ex. 3B
色	なし	—	薄い金色	琥珀色	琥珀色
比重 (15.5℃), g/ml	なし	D 4052	該当なし (<1)	0.906	該当なし (<1)
動粘性率 40℃ (cSt)	なし	D 445	40.9	91.2	211.6
動粘性率 100℃ (cSt)	なし	D 445	8.0	14.8	27.8
粘度指数	なし	D 2270	172	170	169
流動点 (℃)	なし	D 97	-32	-40	-40
曇り点 (℃)	なし	D 2500	-32	-33	-40
引火点 (℃)	なし	D 92	該当なし (>200)	286	該当なし (>286)
蒸発損失 (NOACK), 重量%	なし	D 5800	該当なし	0.8	該当なし (<0.3)
リード蒸気圧 (RVP), psi	なし	D 5191	≈ 0	≈ 0	≈ 0

30

40

【 0 1 5 5 】

【表 10】

表 9

実施例 番号	アルコール	推定EN (約)	流動点 ℃	曇り点 ℃	40℃で の粘度	100℃で の粘度	粘度指数
8	Jarcol (商標) I-18CG	2.0 - 2.6	-15	-13	103.4	16.6	174
8	Jarcol (商標) I-12	2.0 - 2.6	-39	-40	110.9	16.9	166
8	Jarcol (商標) I-20	2.0 - 2.6	-42	< -42	125.2	18.5	166
8	Jarcol (商標) I-16	2.0 - 2.6	-51	< -51	79.7	13.2	168
8	Jarcol (商標) 85BJ	2.0 - 2.6	-15	-6	123.8	19.5	179
8	Fineoxocol (登録商標) 180	2.0 - 2.6	-39	-41	174.2	21.1	143
8	Jarcol (商標) I-18T	2.0 - 2.6	-42	< -42	130.8	19.2	167
8	イソブタノール	2.0 - 2.6	-36	-36	74.1	12.6	170
9	イソブタノール	1.5 - 2.2	-36	-36	59.5	10.6	170

【実施例 11】

【0156】

種々の酸価を有する飽和及び不飽和のエストリドを、いくつかの腐食試験及び沈着試験に供した。これらの試験は、高温腐食ベンチ試験 (High Temperature Corrosion Bench Test) (HTC BT) をいくつかの金属について、ASTM D130 腐食試験、及び MHT-4 TEOST (ASTM D7097) 試験を、関連のピストン沈着について含んだ。高い酸価 (0.67 mg KOH/g) を有する、試験したエストリドを、Ex. 1 及び Ex. 4 A (下の Ex. 1 * 及び Ex. 4 A *) を生成するために実施例 1 及び 4 に示す方法を用いて産生した。低い酸価 (0.08 mg KOH/g) を有する試験したエストリドを、粗遊離酸エストリドを、作成して、精製した後に、BF₃・OEt₂ でエステル化した (0.15 当量；連続的に攪拌しながら 12 時間、真空 (10 torr abs) 中で、80 で Dean Stark トラップ中でエストリド及び 2-EH と反応；粗反応生成物を、4 × H₂O で洗浄；過剰の 2-EH を、洗浄した反応生成物を真空 (10 torr abs) 中で 1 時間 140 まで加熱することによって除去した) (下の Ex. 4 A #) 以外は、Ex. 1 及び Ex. 4 A を生成するために実施例 1 及び 4 に示す方法を用いて生成した。0 の IV を有するエストリドを、加圧水素雰囲気 (200 psig) のもとで 3 時間 75 で、炭素に包埋した 10 重量 % のパラジウムを介して水素化した (下の Ex. 4 A * H 及び Ex. 4 A # H)。この腐食試験及び沈着試験は、Dexos (商標) 添加パッケージで行った。結果は、鉱油標準に対して比較した：

【0157】

【表 1 1】

表 1 0

	標準	Ex. 1* エストリド	Ex. 4A* エストリド	Ex. 4A*H エストリド	Ex. 4A# エストリド	Ex. 4A#H エストリド
酸価 (mg KOH/g)	-	~0.7	0.67	0.67	0.08	0.08
ヨウ素価 (IV)	-	~45	16	0	16	0
HTCBT Cu	13	739	279	60	9.3	13.6
HTCBT Pd	177	11,639	1,115	804	493	243
HTCBT Sn	0	0	0	0	0	0
ASTM D130	1A	4B	3A	1B	1A	1A
MHT-4	18	61	70	48	12	9.3

10

【実施例 1 2】

【0 1 5 8】

Ex. 1 (実施例 1) で生成したエストリドの「即時的 (ready)」及び「究極的 (ultimate)」生分解性を、標準的な OECD 手順に従って試験した。OECD

20

生分解性研究の結果を、下の表 1 1 に示す：

【0 1 5 9】

【表 1 2】

表 1 1

	3 0 1 D 2 8 日 (分解%)	3 0 2 D アッセイ (分解%)
菜種油	8 6 . 9	7 8 . 9
実施例 1 基油原料	6 4 . 0	7 0 . 9

30

【実施例 1 3】

【0 1 6 0】

実施例 1 の Ex. 1 エストリドの基油原料を、急性水性毒性について OECD 203 のもとで試験した。この試験によって、エストリドは非毒性であること、5,000 mg/L 及び 50,000 mg/L の濃度範囲について死亡は報告されなかったことが示された。

【0 1 6 1】

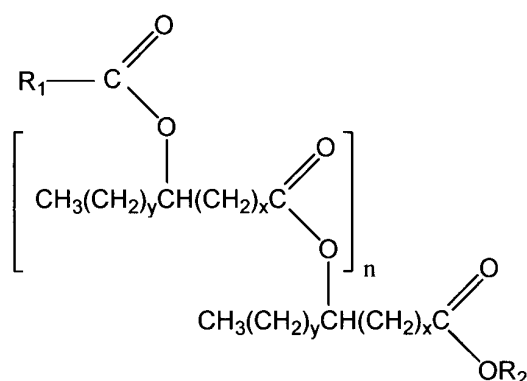
追加的な実施形態

40

付記項 1. 少なくとも 1 種のエストリド化合物を含む組成物であって、上記組成物は、4 以上の整数又は整数の少数部分から選択される EN と (ここで、この EN は、式 I による化合物中のエストリド連結の平均数である)、40 で測定した時、200 cSt 以上に相当する動粘性率と、-40 以下の流動点とを有し、上記少なくとも 1 種のエストリド化合物は、式 I の化合物であって：

【0 1 6 2】

【化 9】



式 I

式中、

x は、それぞれについて独立して、0 ~ 20 から選択される整数であり、

y は、それぞれについて独立して、0 ~ 20 から選択される整数であり、

n は、0 ~ 12 から選択される整数であり、

R₁ は、必要に応じて置換されているアルキルであって、飽和又は不飽和であり、かつ分岐又は非分岐のアルキルであり、かつ

R₂ は、必要に応じて置換されているアルキルであって、飽和又は不飽和であり、かつ分岐又は非分岐のアルキルであり、

上記少なくとも1種の化合物の各々の脂肪酸鎖残基は独立して必要に応じて置換されている、組成物。

【0163】

付記項2．請求項1に記載の組成物であって、式中

x が、それぞれについて独立して、1 ~ 10 から選択される整数であり、

y が、それぞれについて独立して、1 ~ 10 から選択される整数であり、

n が0 ~ 8 から選択される整数であり、

R₁ が、必要に応じて置換されているC₁ ~ C₂₂ アルキルであって、飽和又は不飽和であり、かつ分岐又は非分岐のアルキルであり、かつ

R₂ が、必要に応じて置換されているC₁ ~ C₂₂ アルキルであって、飽和又は不飽和であり、かつ分岐又は非分岐のアルキルであり、

各々の脂肪酸鎖残基が非置換である、組成物。

【0164】

付記項3．x + y が、各々の鎖について独立して、13 ~ 15 から選択される整数であり、かつ

n が0 ~ 6 から選択される整数である、請求項1 ~ 2のいずれか1項に記載の組成物。

【0165】

付記項4．x + y が、少なくとも1つの鎖について15である、請求項1 ~ 3のいずれか1項に記載の組成物。

【0166】

付記項5．R₂ が、分岐又は非分岐のC₁ ~ C₂₀ アルキルであって、飽和又は不飽和のアルキルである、請求項1 ~ 4のいずれか1項に記載の組成物。

【0167】

付記項6．請求項1 ~ 5のいずれか1項に記載の組成物であって、R₂ が、メチル、エチル、プロピル、ブチル、ペンチル、ヘキシル、ヘプチル、オクチル、ノニル、デカニル、ウンデカニル、ドデカニル、トリデカニル、テトラデカニル、ペンタデカニル、ヘキサ

10

20

30

40

50

デカニル、ヘプタデカニル、オクタデカニル、ノナデカニル、及びイコサニルから選択され、これらが飽和又は不飽和であり、及び分岐又は非分岐である、組成物。

【 0 1 6 8 】

付記項 7 . R_2 が、 $C_6 \sim C_{12}$ アルキルから選択される、請求項 1 ~ 6 のいずれか 1 項に記載の組成物。

【 0 1 6 9 】

付記項 8 . R_2 が、2 - エチルヘキシルである、請求項 1 ~ 7 のいずれか 1 項に記載の組成物。

【 0 1 7 0 】

付記項 9 . R_1 が、非置換の $C_7 \sim C_{17}$ アルキルであって、非分岐及び飽和又は不飽和であるアルキルから選択される、請求項 1 ~ 8 のいずれか 1 項に記載の組成物。 10

【 0 1 7 1 】

付記項 10 . R_1 が、 $C_{13} \sim C_{17}$ アルキルであって、非置換、非分岐及び飽和又は不飽和であるアルキルから選択される、請求項 1 ~ 9 のいずれか 1 項に記載の組成物。

【 0 1 7 2 】

付記項 11 . R_1 が、飽和 C_{13} アルキル、飽和 C_{15} アルキル、及び飽和又は不飽和 C_{17} アルキルであって、非置換であり、かつ非分岐のアルキルから選択される、請求項 1 ~ 10 のいずれか 1 項に記載の組成物。

【 0 1 7 3 】

付記項 12 . R_1 及び R_2 が独立して、必要に応じて置換されている $C_1 \sim C_{18}$ アルキルであって、飽和又は不飽和であり、かつ分岐又は非分岐のアルキルから選択される、請求項 1 ~ 4 のいずれか 1 項に記載の組成物。 20

【 0 1 7 4 】

付記項 13 . R_1 が、必要に応じて置換されている $C_7 \sim C_{17}$ アルキルであって、飽和又は不飽和であり、かつ分岐又は非分岐のアルキルから選択され、かつ R_2 が、必要に応じて置換されている $C_3 \sim C_{20}$ アルキルであって、飽和又は不飽和であり、かつ分岐又は非分岐のアルキルから選択される、請求項 1 ~ 4 のいずれか 1 項に記載の組成物。

【 0 1 7 5 】

付記項 14 . 上記組成物が、 $4.0 \sim 5.0$ から選択される整数又は整数の少数部分である EN を有する、請求項 1 ~ 13 のいずれか 1 項に記載の組成物。 30

【 0 1 7 6 】

付記項 15 . 上記組成物が、 $4.2 \sim 4.8$ から選択される整数の少数部分である EN を有する、請求項 1 ~ 14 のいずれか 1 項に記載の組成物。

【 0 1 7 7 】

付記項 16 . 上記組成物が、5 以上の整数又は整数の少数部分から選択される EN を有する、請求項 1 ~ 13 のいずれか 1 項に記載の組成物。

【 0 1 7 8 】

付記項 17 . 上記組成物が、 40 で $200 \text{ cSt} \sim 250 \text{ cSt}$ の動粘性率を有する、請求項 1 ~ 16 のいずれか 1 項に記載の組成物。

【 0 1 7 9 】

付記項 18 . 上記組成物が、 40 で $210 \text{ cSt} \sim 230 \text{ cSt}$ の動粘性率を有する、請求項 1 ~ 17 のいずれか 1 項に記載の組成物。 40

【 0 1 8 0 】

付記項 19 . 上記組成物が、 $-40 \sim -50$ の流動点を有する、請求項 1 ~ 18 のいずれか 1 項に記載の組成物。

【 0 1 8 1 】

付記項 20 . 上記組成物が、 $-42 \sim -48$ の流動点を有する、請求項 1 ~ 19 のいずれか 1 項に記載の組成物。

【 0 1 8 2 】

付記項 21 . 上記組成物が -50 未満の流動点を有する、請求項 1 ~ 18 のいずれか 50

1 項に記載の組成物。

【 0 1 8 3 】

付記項 2 2 . 上記組成物が - 5 0 ~ - 6 0 の流動点を有する、請求項 2 1 に記載の組成物。

【 0 1 8 4 】

付記項 2 3 . 上記組成物が - 5 2 ~ - 5 8 の流動点を有する、請求項 2 1 に記載の組成物。

【 0 1 8 5 】

付記項 2 4 . 上記組成物が、1 5 c g / g 未満のヨウ素価 (I V) を示す、請求項 1 ~ 2 3 のいずれか 1 項に記載の組成物。

【 0 1 8 6 】

付記項 2 5 . 上記組成物が、1 0 c g / g 未満のヨウ素価 (I V) を示す、請求項 1 ~ 2 4 のいずれか 1 項に記載の組成物。

【 0 1 8 7 】

付記項 2 6 . 上記組成物が、式 I の 2 種以上のエストリド化合物を含む、請求項 1 ~ 2 5 のいずれか 1 項に記載の組成物。

【 0 1 8 8 】

付記項 2 7 . 上記組成物が本質的に式 I の 2 種以上のエストリド化合物からなる、請求項 1 ~ 2 6 のいずれか 1 項に記載の組成物。

【 0 1 8 9 】

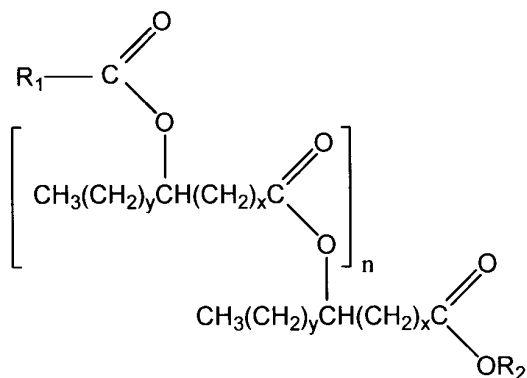
付記項 2 8 . 少なくとも 1 種のエストリド化合物を含む組成物であって、上記組成物は、3 以上の整数又は整数の少数部分から選択される E N と (ここで、この E N は、式 I に
よる化合物中のエストリド連結の平均数である)、4 0 で測定した時、1 3 0 c S t 以上

に相当する動粘性率と、- 3 0 以下の流動点を有しており、上記少なくとも 1 種のエ

ストリド化合物は、式 I の化合物であって：

【 0 1 9 0 】

【 化 1 0 】



式 I

式中、

x は、それぞれについて独立して、0 ~ 2 0 から選択される整数であり、

y は、それぞれについて独立して、0 ~ 2 0 から選択される整数であり、

n は、0 ~ 1 2 から選択される整数であり、

R₁ は、必要に応じて置換されているアルキルであって、飽和又は不飽和であり、かつ分岐又は非分岐のアルキルであり、かつ

R₂ は、必要に応じて置換されているアルキルであって、飽和又は不飽和であり、かつ分岐又は非分岐のアルキルであり、

上記組成物の各々の鎖は独立して必要に応じて置換されている、組成物。

【0191】

付記項29．請求項28に記載の組成物であって、式中

xが、それぞれについて独立して、1～10から選択される整数であり、

yが、それぞれについて独立して、1～10から選択される整数であり、

nが0～8から選択される整数であり、

R₁が、必要に応じて置換されているC₁～C₂₂アルキルであって、飽和又は不飽和であり、かつ分岐又は非分岐のアルキルであり、かつ

R₂が、必要に応じて置換されているC₁～C₂₂アルキルであって、飽和又は不飽和であり、かつ分岐又は非分岐のアルキルであり、

各々の脂肪酸鎖残基が非置換である、組成物。

10

【0192】

付記項30．x+yが、各々の鎖について独立して、13～15から選択される整数であり、かつ

nが0～6から選択される整数である、請求項28～29のいずれか1項に記載の組成物。

【0193】

付記項31．x+yが、15である、請求項28～30のいずれか1項に記載の組成物。

【0194】

付記項32．R₂が、分岐又は非分岐のC₁～C₂₀アルキルであって、飽和又は不飽和のアルキルである、請求項28～31のいずれか1項に記載の組成物。

20

【0195】

付記項33．請求項28～32のいずれか1項に記載の組成物であって、R₂が、メチル、エチル、プロピル、ブチル、ペンチル、ヘキシル、ヘプチル、オクチル、ノニル、デカニル、ウンデカニル、ドデカニル、トリデカニル、テトラデカニル、ペンタデカニル、ヘキサデカニル、ヘプタデカニル、オクタデカニル、ノナデカニル、及びイコサニルから選択され、これらが飽和又は不飽和であり、及び分岐又は非分岐である、組成物。

【0196】

付記項34．R₂が、分岐又は非分岐のC₆～C₁₂アルキルであって、飽和及び非置換であるアルキルから選択される、請求項28～33のいずれか1項に記載の組成物。

30

【0197】

付記項35．R₂が、2-エチルヘキシルである、請求項28～34のいずれか1項に記載の組成物。

【0198】

付記項36．R₁が、非置換のC₇～C₁₇アルキルであって、非分岐及び飽和又は不飽和であるアルキルから選択される、請求項28～35のいずれか1項に記載の組成物。

【0199】

付記項37．R₁が、C₁₃～C₁₇アルキルであって、非置換、非分岐及び飽和又は不飽和であるアルキルから選択される、請求項28～36のいずれか1項に記載の組成物。

40

【0200】

付記項38．R₁が、飽和C₇アルキル、飽和C₉アルキル、飽和C₁₁アルキル、飽和C₁₃アルキル、飽和C₁₅アルキル、及び飽和又は不飽和C₁₇アルキルであって、非置換であり、かつ非分岐のアルキルから選択される、請求項36に記載の組成物。

【0201】

付記項39．R₁及びR₂が独立して、必要に応じて置換されているC₁～C₁₈アルキルであって、飽和又は不飽和であり、かつ分岐又は非分岐のアルキルから選択される、請求項28～31のいずれか1項に記載の組成物。

【0202】

50

付記項 40. R_1 が、必要に応じて置換されている $C_7 \sim C_{17}$ アルキルであって、飽和又は不飽和であり、かつ分岐又は非分岐のアルキルであり、かつ R_2 が、必要に応じて置換されている $C_3 \sim C_{20}$ アルキルであって、飽和又は不飽和であり、かつ分岐又は非分岐のアルキルである、請求項 28 ~ 31 のいずれか 1 項に記載の組成物。

【0203】

付記項 41. 上記組成物が、3.0 ~ 4.0 から選択される整数又は整数の少数部分である EN を有する、請求項 28 ~ 40 のいずれか 1 項に記載の組成物。

【0204】

付記項 42. 上記組成物が、3.0 ~ 3.5 から選択される整数又は整数の少数部分である EN を有する、請求項 28 ~ 41 のいずれか 1 項に記載の組成物。

10

【0205】

付記項 43. 上記組成物が、3.5 以上の整数又は整数の少数部分から選択される EN を有する、請求項 28 ~ 40 のいずれか 1 項に記載の組成物。

【0206】

付記項 44. 上記組成物が、4 以上の整数又は整数の少数部分から選択される EN を有する、請求項 28 ~ 40 のいずれか 1 項に記載の組成物。

【0207】

付記項 45. 上記組成物が、4.0 ~ 5.0 から選択される整数又は整数の少数部分である EN を有する、請求項 28 ~ 40 のいずれか 1 項に記載の組成物。

【0208】

20

付記項 46. 上記組成物が、4.2 ~ 4.8 から選択される整数の少数部分である EN を有する、請求項 28 ~ 40 のいずれか 1 項に記載の組成物。

【0209】

付記項 47. 上記組成物が、5 以上の整数又は整数の少数部分から選択される EN を有する、請求項 28 ~ 40 のいずれか 1 項に記載の組成物。

【0210】

付記項 48. 上記組成物が、40 で 130 cst ~ 160 cst の動粘性率を有する、請求項 28 ~ 47 のいずれか 1 項に記載の組成物。

【0211】

付記項 49. 上記組成物が、40 で 130 cst ~ 145 cst の動粘性率を有する、請求項 28 ~ 48 のいずれか 1 項に記載の組成物。

30

【0212】

付記項 50. 上記組成物が、-30 ~ -40 の流動点を有する、請求項 28 ~ 49 のいずれか 1 項に記載の組成物。

【0213】

付記項 51. 上記組成物が、-34 ~ -38 の流動点を有する、請求項 28 ~ 50 のいずれか 1 項に記載の組成物。

【0214】

付記項 52. 上記組成物が -35 未満の流動点を有する、請求項 28 ~ 49 のいずれか 1 項に記載の組成物。

40

【0215】

付記項 53. 上記組成物が -35 ~ -45 の流動点を有する、請求項 28 ~ 49 のいずれか 1 項に記載の組成物。

【0216】

付記項 54. 上記組成物が -38 ~ -42 の流動点を有する、請求項 28 ~ 49 のいずれか 1 項に記載の組成物。

【0217】

付記項 55. 上記組成物が、-40 未満の流動点を有する、請求項 28 ~ 49 のいずれか 1 項に記載の組成物。

【0218】

50

付記項 56 . 上記組成物が、 - 40 ~ - 50 の流動点を有する、請求項 28 ~ 49 のいずれか 1 項に記載の組成物。

【 0 2 1 9 】

付記項 57. 上記組成物が - 42 ～ - 48 の流動点を有する、請求項 28 ～ 49 のいずれか 1 項に記載の組成物。

【 0 2 2 0 】

付記項 58 . 上記組成物が - 50 未満の流動点を有する、請求項 28 ~ 49 のいずれか 1 項に記載の組成物。

【 0 2 2 1 】

付記項 59 . 上記組成物が、 - 50 ~ - 60 の流動点を有する、請求項 28 ~ 49 のいずれか 1 項に記載の組成物。

【 0 2 2 2 】

付記項 60 . 上記組成物が - 52 ~ - 58 の流動点を有する、請求項 28 ~ 49 のいずれか 1 項に記載の組成物。

【 0 2 2 3 】

付記項 6 1 . 上記組成物が、1 0 c g / g 未満のヨウ素価 (I V) を示す、請求項 2 8 ~ 6 0 のいずれか 1 項に記載の組成物。

【 0 2 2 4 】

付記項 6 2 . 上記組成物が、式 I の 2 種以上のエストリド化合物を含む、請求項 2 8 ~ 6 1 のいずれか 1 項に記載の組成物。

【 0 2 2 5 】

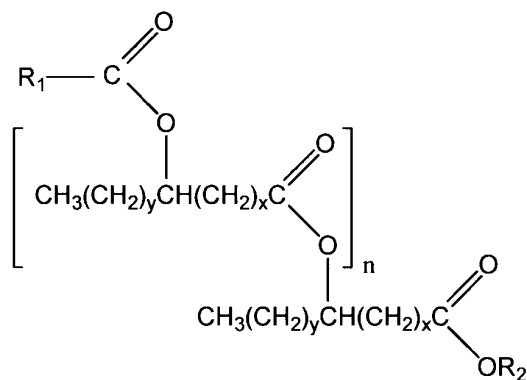
付記項 63 . 上記組成物が本質的に式 I の 2 種以上のエストリド化合物からなる、請求項 28 ~ 62 のいずれか 1 項に記載の組成物。

【 0 2 2 6 】

付記項 6 4 . 少なくとも 1 種のエストリド化合物を含む組成物であって、上記組成物は、2 以下の整数又は整数の少数部分から選択される EN と (ここで、この EN は、式 I による化合物中のエストリド連結の平均数である)、40 で測定した時、55 c S t 以下に相当する動粘性率と、- 25 以下の流動点とを有しており、上記少なくとも 1 種のエストリド化合物は、式 I の化合物であって：

【 0 2 2 7 】

【化 1 1】



式 I

式中、

x は、それぞれについて独立して、0 ~ 20 から選択される整数であり、

y は、それぞれについて独立して、 $0 \sim 20$ から選択される整数であり、

n は、 $0 \sim 12$ から選択される整数であり、

R_1 は、必要に応じて置換されているアルキルであって、飽和又は不飽和であり、かつ分岐又は非分岐のアルキルであり、かつ

R_2 は、必要に応じて置換されているアルキルであって、飽和又は不飽和であり、かつ分岐又は非分岐のアルキルであり、

上記組成物の各々の脂肪酸鎖残基は独立して必要に応じて置換されている、組成物。

【0228】

付記項65．請求項64に記載の組成物であって、式中

x が、それぞれについて独立して、1～10から選択される整数であり、

y が、それぞれについて独立して、1～10から選択される整数であり、

n が0～8から選択される整数であり、

R_1 が、必要に応じて置換されている $C_1 \sim C_{22}$ アルキルであって、飽和又は不飽和であり、かつ分岐又は非分岐のアルキルであり、かつ

R_2 が、必要に応じて置換されている $C_1 \sim C_{22}$ アルキルであって、飽和又は不飽和であり、かつ分岐又は非分岐のアルキルであり、

各鎖が非置換である、組成物。

【0229】

付記項66． $x + y$ が、各々の鎖について独立して、13～15から選択される整数であり、かつ

n が0～6から選択される整数である、請求項64～65のいずれか1項に記載の組成物。

【0230】

付記項67． $x + y$ が、15である、請求項64～66のいずれか1項に記載の組成物。

【0231】

付記項68． R_2 が、分岐又は非分岐の $C_1 \sim C_{20}$ アルキルであって、飽和又は不飽和のアルキルである、請求項64～67のいずれか1項に記載の組成物。

【0232】

付記項69．請求項64～68のいずれか1項に記載の組成物であって、 R_2 が、メチル、エチル、プロピル、ブチル、ペンチル、ヘキシル、ヘプチル、オクチル、ノニル、デカニル、ウンデカニル、ドデカニル、トリデカニル、テトラデカニル、ペンタデカニル、ヘキサデカニル、ヘプタデカニル、オクタデカニル、ノナデカニル、及びイコサニルから選択され、これらが飽和又は不飽和であり、及び分岐又は非分岐である、組成物。

【0233】

付記項70． R_2 が、 $C_6 \sim C_{12}$ アルキルから選択される、請求項64～69のいずれか1項に記載の組成物。

【0234】

付記項71． R_2 が、2-エチルヘキシルである、請求項64～70のいずれか1項に記載の組成物。

【0235】

付記項72． R_1 が、非置換の $C_7 \sim C_{17}$ アルキルであって、非分岐及び飽和又は不飽和であるアルキルから選択される、請求項64～71のいずれか1項に記載の組成物。

【0236】

付記項73． R_1 が、 $C_{13} \sim C_{17}$ アルキルであって、非置換、非分岐及び飽和又は不飽和であるアルキルから選択される、請求項64～72のいずれか1項に記載の組成物。

【0237】

付記項74． R_1 が、飽和 C_{13} アルキル、飽和 C_{15} アルキル、及び飽和又は不飽和 C_{17} アルキルであって、非置換であり、かつ非分岐のアルキルから選択される、請求項64～73のいずれか1項に記載の組成物。

【0238】

10

20

30

40

50

付記項 75. R_1 及び R_2 が独立して、必要に応じて置換されている $C_{11} \sim C_{18}$ アルキルであって、飽和又は不飽和であり、かつ分岐又は非分岐のアルキルから選択される、請求項 64 ~ 67 のいずれか 1 項に記載の組成物。

【0239】

付記項 76. R_1 が、必要に応じて置換されている $C_7 \sim C_{17}$ アルキルであって、飽和又は不飽和であり、かつ分岐又は非分岐のアルキルから選択され、かつ R_2 が、必要に応じて置換されている $C_3 \sim C_{20}$ アルキルであって、飽和又は不飽和であり、かつ分岐又は非分岐のアルキルから選択される、請求項 64 ~ 67 のいずれか 1 項に記載の組成物。

【0240】

付記項 77. 上記組成物が、1.0 ~ 2.0 から選択される整数又は整数の少数部分である EN を有する、請求項 64 ~ 76 のいずれか 1 項に記載の組成物。

【0241】

付記項 78. 上記組成物が、1.0 ~ 1.6 から選択される整数又は整数の少数部分である EN を有する、請求項 64 ~ 77 のいずれか 1 項に記載の組成物。

【0242】

付記項 79. 上記組成物が、40 で 25 cSt ~ 55 cSt の動粘性率を有する、請求項 64 ~ 78 のいずれか 1 項に記載の組成物。

【0243】

付記項 80. 上記組成物が、40 で 35 cSt ~ 45 cSt の動粘性率を有する、請求項 64 ~ 79 のいずれか 1 項に記載の組成物。

【0244】

付記項 81. 上記組成物が、-27 ~ -37 の流動点を有する、請求項 64 ~ 80 のいずれか 1 項に記載の組成物。

【0245】

付記項 82. 上記組成物が、-30 ~ -34 の流動点を有する、請求項 64 ~ 81 のいずれか 1 項に記載の組成物。

【0246】

付記項 83. 上記組成物が -50 未満の流動点を有する、請求項 64 ~ 80 のいずれか 1 項に記載の組成物。

【0247】

付記項 84. 上記組成物が -50 ~ -60 の流動点を有する、請求項 64 ~ 80 のいずれか 1 項に記載の組成物。

【0248】

付記項 85. 上記組成物が -52 ~ -58 の流動点を有する、請求項 64 ~ 80 のいずれか 1 項に記載の組成物。

【0249】

付記項 86. 上記組成物が、35 cg/g 未満のヨウ素価 (IV) を示す、請求項 64 ~ 85 のいずれか 1 項に記載の組成物。

【0250】

付記項 87. 上記組成物が、式 I の 2 種以上のエストリド化合物を含む、請求項 64 ~ 86 のいずれか 1 項に記載の組成物。

【0251】

付記項 88. 上記組成物が本質的に式 I の 2 種以上のエストリド化合物からなる、請求項 64 ~ 87 のいずれか 1 項に記載の組成物。

【0252】

付記項 89. 少なくとも 1 種のエストリド化合物を含む組成物であって、上記組成物は、2 以下の整数又は整数の少数部分から選択される EN と (ここで、この EN は、式 I による化合物中のエストリド連結の平均数である)、40 で測定した時、45 cSt 以下に相当する動粘性率と、-25 以下の流動点とを有し、上記少なくとも 1 種のエストリ

10

20

30

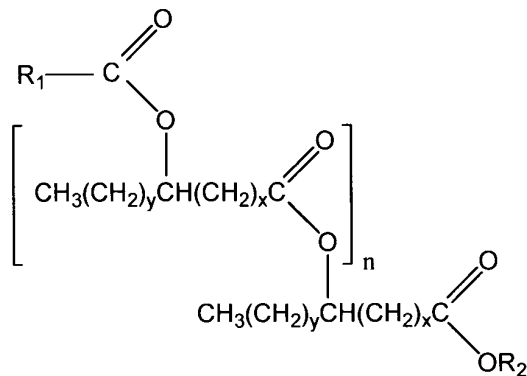
40

50

ド化合物は、式 I の化合物であって：

【 0 2 5 3 】

【 化 1 2 】



10

式 I

式中、

x は、それぞれについて独立して、0 ~ 20 から選択される整数であり、

20

y は、それぞれについて独立して、0 ~ 20 から選択される整数であり、

n は、0 ~ 12 から選択される整数であり、

R₁ は、必要に応じて置換されているアルキルであって、飽和又は不飽和であり、かつ分岐又は非分岐のアルキルであり、かつ

R₂ は、必要に応じて置換されているアルキルであって、飽和又は不飽和であり、かつ分岐又は非分岐のアルキルであり、

上記組成物の各々の脂肪酸鎖残基は独立して必要に応じて置換されている、組成物。

【 0 2 5 4 】

付記項 90 . 請求項 89 に記載の組成物であって、式中

x が、それぞれについて独立して、1 ~ 10 から選択される整数であり、

30

y が、それぞれについて独立して、1 ~ 10 から選択される整数であり、

n が 0 ~ 8 から選択される整数であり、

R₁ が、必要に応じて置換されている C₁ ~ C₂₂ アルキルであって、飽和又は不飽和であり、かつ分岐又は非分岐のアルキルであり、かつ

R₂ が、必要に応じて置換されている C₁ ~ C₂₂ アルキルであって、飽和又は不飽和であり、かつ分岐又は非分岐のアルキルであり、

各鎖が非置換である、組成物。

【 0 2 5 5 】

付記項 91 . x + y が、各々の鎖について独立して、13 ~ 15 から選択される整数であり、かつ

40

n が 0 ~ 6 から選択される整数である、請求項 89 ~ 90 のいずれか 1 項に記載の組成物。

【 0 2 5 6 】

付記項 92 . x + y が、15 である、請求項 89 ~ 91 のいずれか 1 項に記載の組成物。

【 0 2 5 7 】

付記項 93 . R₂ が、分岐又は非分岐の C₁ ~ C₂₀ アルキルであって、飽和又は不飽和のアルキルである、請求項 89 ~ 92 のいずれか 1 項に記載の組成物。

【 0 2 5 8 】

付記項 94 . 請求項 89 ~ 93 のいずれか 1 項に記載の組成物であって、R₂ が、メチ

50

ル、エチル、プロピル、ブチル、ペンチル、ヘキシル、ヘプチル、オクチル、ノニル、デカニル、ウンデカニル、ドデカニル、トリデカニル、テトラデカニル、ペンタデカニル、ヘキサデカニル、ヘプタデカニル、オクタデカニル、ノナデカニル、及びイコサニルから選択され、これら^らが飽和又は不飽和であり、及び分岐又は非分岐である、組成物。

【 0 2 5 9 】

付記項 9 5 . R_2 が、分岐又は非分岐の $C_6 \sim C_{12}$ アルキルであって、飽和及び非置換であるアルキルから選択される、請求項 8 9 ~ 9 4 のいずれか 1 項に記載の組成物。

【 0 2 6 0 】

付記項 9 6 . R_2 が、2 - エチルヘキシルである、請求項 8 9 ~ 9 5 のいずれか 1 項に記載の組成物。

10

【 0 2 6 1 】

付記項 9 7 . R_1 が、非置換の $C_7 \sim C_{17}$ アルキルであって、非分岐及び飽和又は不飽和であるアルキルから選択される、請求項 8 9 ~ 9 6 のいずれか 1 項に記載の組成物。

【 0 2 6 2 】

付記項 9 8 . R_1 が、 $C_{13} \sim C_{17}$ アルキルであって、非置換、非分岐及び飽和又は不飽和であるアルキルから選択される、請求項 8 9 ~ 9 7 のいずれか 1 項に記載の組成物。

【 0 2 6 3 】

付記項 9 9 . R_1 が、飽和 C_7 アルキル、飽和 C_9 アルキル、飽和 C_{11} アルキル、飽和 C_{13} アルキル、飽和 C_{15} アルキル、及び飽和又は不飽和 C_{17} アルキルであって、非置換であり、かつ非分岐のアルキルから選択される、請求項 9 7 に記載の組成物。

20

【 0 2 6 4 】

付記項 1 0 0 . R_1 及び R_2 が独立して、必要に応じて置換されている $C_1 \sim C_{18}$ アルキルであって、飽和又は不飽和であり、かつ分岐又は非分岐のアルキルから選択される、請求項 8 9 ~ 9 2 のいずれか 1 項に記載の組成物。

【 0 2 6 5 】

付記項 1 0 1 . R_1 が、必要に応じて置換されている $C_7 \sim C_{17}$ アルキルであって、飽和又は不飽和であり、かつ分岐又は非分岐のアルキルであり、かつ R_2 が、必要に応じて置換されている $C_3 \sim C_{20}$ アルキルであって、飽和又は不飽和であり、かつ分岐又は非分岐のアルキルである、請求項 8 9 ~ 9 2 のいずれか 1 項に記載の組成物。

30

【 0 2 6 6 】

付記項 1 0 2 . 上記組成物が、1 . 0 ~ 2 . 0 から選択される整数又は整数の少数部分である EN を有する、請求項 8 9 ~ 1 0 1 のいずれか 1 項に記載の組成物。

【 0 2 6 7 】

付記項 1 0 3 . 上記組成物が、1 . 1 ~ 1 . 7 から選択される整数又は整数の少数部分である EN を有する、請求項 8 9 ~ 1 0 2 のいずれか 1 項に記載の組成物。

【 0 2 6 8 】

付記項 1 0 4 . 上記組成物が、4 0 で 2 0 c S t ~ 4 5 c S t の動粘性率を有する、請求項 8 9 ~ 1 0 3 のいずれか 1 項に記載の組成物。

【 0 2 6 9 】

付記項 1 0 5 . 上記組成物が、4 0 で 2 8 c S t ~ 3 8 c S t の動粘性率を有する、請求項 8 9 ~ 1 0 4 のいずれか 1 項に記載の組成物。

40

【 0 2 7 0 】

付記項 1 0 6 . 上記組成物が、- 2 5 ~ - 3 5 の流動点を有する、請求項 8 9 ~ 1 0 5 のいずれか 1 項に記載の組成物。

【 0 2 7 1 】

付記項 1 0 7 . 上記組成物が、- 2 8 ~ - 3 2 の流動点を有する、請求項 8 9 ~ 1 0 6 のいずれか 1 項に記載の組成物。

【 0 2 7 2 】

付記項 1 0 8 . 上記組成物が - 5 0 未満の流動点を有する、請求項 8 9 ~ 1 0 5 のい

50

ずれか 1 項に記載の組成物。

【 0 2 7 3 】

付記項 1 0 9 . 上記組成物が - 5 0 ~ - 6 0 の流動点を有する、請求項 8 9 ~ 1 0 5 のいずれか 1 項に記載の組成物。

【 0 2 7 4 】

付記項 1 1 0 . 上記組成物が - 5 2 ~ - 5 8 の流動点を有する、請求項 8 9 ~ 1 0 5 のいずれか 1 項に記載の組成物。

【 0 2 7 5 】

付記項 1 1 1 . 上記組成物が、2 0 c g / g 未満のヨウ素価 (I V) を示す、請求項 8 9 ~ 1 1 0 のいずれか 1 項に記載の組成物。

10

【 0 2 7 6 】

付記項 1 1 2 . 上記組成物が、式 I の 2 種以上のエステル化合物を含む、請求項 8 9 ~ 1 1 1 のいずれか 1 項に記載の組成物。

【 0 2 7 7 】

付記項 1 1 3 . 上記組成物が本質的に式 I の 2 種以上のエステル化合物からなる、請求項 8 9 ~ 1 1 2 のいずれか 1 項に記載の組成物。

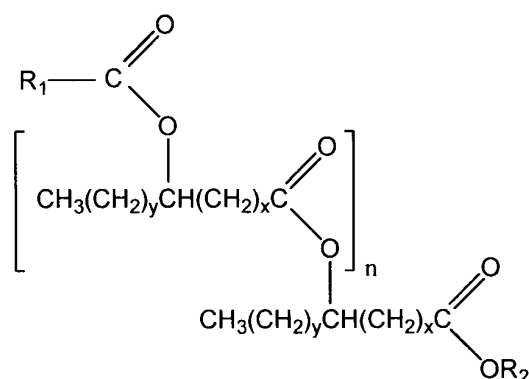
【 0 2 7 8 】

付記項 1 1 4 . 式 I I I の少なくとも 1 種のエステル化合物であって：

【 0 2 7 9 】

【 化 1 3 】

20



30

式 I I I

式中、

x は、それぞれについて独立して、0 ~ 2 0 から選択される整数であり、

y は、それぞれについて独立して、0 ~ 2 0 から選択される整数であり、

n は、0 以上の整数であり、

R₁ は、必要に応じて置換されているアルキルであって、飽和又は不飽和であり、かつ分岐又は非分岐のアルキルであり、かつ

40

R₂ は、必要に応じて置換されているアルキルであって、飽和又は不飽和であり、かつ分岐又は非分岐のアルキルであり、

上記少なくとも 1 種の化合物の各々の脂肪酸鎖残基は独立して必要に応じて置換されている、化合物。

【 0 2 8 0 】

付記項 1 1 5 . 式中、x が、それぞれについて独立して、1 ~ 1 0 から選択される整数である、請求項 1 1 4 に記載の少なくとも 1 種の化合物。

【 0 2 8 1 】

付記項 1 1 6 . 式中、y が、それぞれについて独立して、1 ~ 1 0 から選択される整数

50

である、請求項 1 1 4 及び 1 1 5 のいずれか 1 項に記載の少なくとも 1 種の化合物。

【0282】

付記項 1 1 7 . 式中、 n が 0 ~ 12 から選択される整数である、請求項 1 1 4 ~ 1 1 6 のいずれか 1 項に記載の少なくとも 1 種の化合物。

【0283】

付記項 1 1 8 . 式中、 n が 0 ~ 8 から選択される整数である、請求項 1 1 4 ~ 1 1 7 のいずれか 1 項に記載の少なくとも 1 種の化合物。

【0284】

付記項 1 1 9 . 式中、 n が 0 ~ 4 から選択される整数である、請求項 1 1 4 ~ 1 1 8 のいずれか 1 項に記載の少なくとも 1 種の化合物。

10

【0285】

付記項 1 2 0 . 式中、 R_1 が、必要に応じて置換されている $C_1 \sim C_{22}$ アルキルであって、飽和又は不飽和であり、かつ分岐又は非分岐のアルキルである、請求項 1 1 4 ~ 1 1 9 のいずれか 1 項に記載の少なくとも 1 種の化合物。

【0286】

付記項 1 2 1 . 式中、 R_2 が、必要に応じて置換されている $C_1 \sim C_{22}$ アルキルであって、飽和又は不飽和であり、かつ分岐又は非分岐のアルキルである、請求項 1 1 4 ~ 1 2 0 のいずれか 1 項に記載の少なくとも 1 種の化合物。

【0287】

付記項 1 2 2 . 式中、各々の鎖が飽和、非置換及び非分岐である、請求項 1 1 4 ~ 1 2 1 のいずれか 1 項に記載の少なくとも 1 種の化合物。

20

【0288】

付記項 1 2 3 . 式中、 $x + y$ が、各々の鎖について独立して、13 ~ 15 から選択される整数である、請求項 1 1 4 ~ 1 2 2 のいずれか 1 項に記載の少なくとも 1 種の化合物。

【0289】

付記項 1 2 4 . 式中、 $x + y$ が、15 である、請求項 1 1 4 ~ 1 2 3 のいずれか 1 項に記載の少なくとも 1 種の化合物。

【0290】

付記項 1 2 5 . 式中、 R_2 が、分岐又は非分岐の $C_1 \sim C_{20}$ アルキルであって、飽和又は不飽和であるアルキルから選択される、請求項 1 1 4 ~ 1 2 4 のいずれか 1 項に記載の少なくとも 1 種の化合物。

30

【0291】

付記項 1 2 6 . 請求項 1 1 4 ~ 1 2 5 のいずれか 1 項に記載の少なくとも 1 種の化合物であって、 R_2 が、メチル、エチル、プロピル、ブチル、ペンチル、ヘキシル、ヘプチル、オクチル、ノニル、デカニル、ウンデカニル、ドデカニル、トリデカニル、テトラデカニル、ペンタデカニル、ヘキサデカニル、ヘプタデカニル、オクタデカニル、ノナデカニル、及びイコサニルから選択され、これらが飽和又は不飽和であり、及び分岐又は非分岐である、化合物。

【0292】

付記項 1 2 7 . R_2 が、 $C_6 \sim C_{12}$ アルキルから選択される、請求項 1 1 4 ~ 1 2 6 のいずれか 1 項に記載の少なくとも 1 種の化合物。

40

【0293】

付記項 1 2 8 . R_2 が、2 - エチルヘキシルである、請求項 1 1 4 ~ 1 2 7 のいずれか 1 項に記載の少なくとも 1 種の化合物。

【0294】

付記項 1 2 9 . R_1 が、非置換の $C_7 \sim C_{17}$ アルキルであって、非分岐及び飽和又は不飽和であるアルキルから選択される、請求項 1 1 4 ~ 1 2 8 のいずれか 1 項に記載の少なくとも 1 種の化合物。

【0295】

付記項 1 3 0 . R_1 が、飽和 C_7 アルキル、飽和 C_9 アルキル、飽和 C_{11} アルキル、

50

飽和 C_{13} アルキル、飽和 C_{15} アルキル、及び飽和又は不飽和 C_{17} アルキルであって、非置換であり、かつ非分岐のアルキルから選択される、請求項 129 に記載の少なくとも 1 種の化合物。

【0296】

付記項 131 . R_1 が、 $C_{13} \sim C_{17}$ アルキルであって、非置換、非分岐及び飽和又は不飽和であるアルキルから選択される、請求項 114 ~ 129 のいずれか 1 項に記載の少なくとも 1 種の化合物。

【0297】

付記項 132 . R_1 が、飽和 C_{13} アルキル、飽和 C_{15} アルキル、及び飽和又は不飽和 C_{17} アルキルであって、非置換であり、かつ非分岐のアルキルから選択される、請求項 130 に記載の少なくとも 1 種の化合物。

10

【0298】

付記項 133 . R_1 が、必要に応じて置換されている $C_1 \sim C_{18}$ アルキルであって、飽和または又は不飽和かつ分岐又は非分岐のアルキルである、請求項 114 ~ 125 のいずれか 1 項に記載の少なくとも 1 種の化合物。

【0299】

付記項 134 . R_2 が、必要に応じて置換されている $C_1 \sim C_{18}$ アルキルであって、飽和または又は不飽和かつ分岐又は非分岐のアルキルである、請求項 114 ~ 125 のいずれか 1 項に記載の少なくとも 1 種の化合物。

【0300】

20

付記項 135 . R_1 が、必要に応じて置換されている $C_7 \sim C_{17}$ アルキルであって、飽和または又は不飽和かつ分岐又は非分岐のアルキルである、請求項 114 ~ 125 のいずれか 1 項に記載の少なくとも 1 種の化合物。

【0301】

付記項 136 . R_2 が、必要に応じて置換されている $C_3 \sim C_{20}$ アルキルであって、飽和または又は不飽和かつ分岐又は非分岐のアルキルである、請求項 114 ~ 125 のいずれか 1 項に記載の少なくとも 1 種の化合物。

【0302】

付記項 137 . 請求項 114 ~ 136 のいずれか 1 項に記載の少なくとも 1 種のエストリド化合物を含む組成物。

30

【0303】

付記項 138 . 上記組成物が 2 種以上のエストリド化合物を含む、請求項 137 に記載の組成物。

【0304】

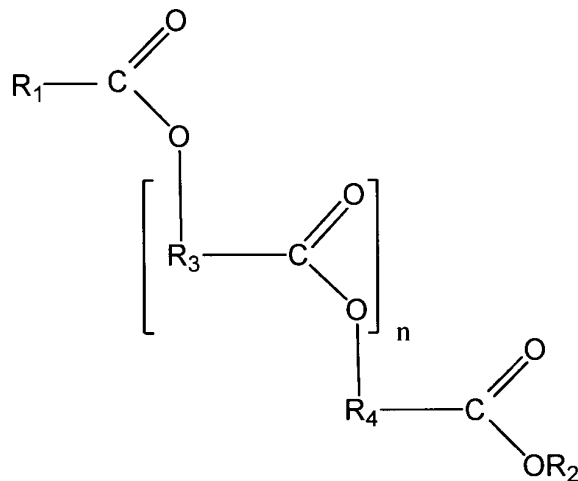
付記項 139 . 上記組成物が 2 種以上のエストリド化合物から本質的になる、請求項 137 に記載の組成物。

【0305】

付記項 140 . 式 I I の少なくとも 1 種のエストリド化合物であって：

【0306】

【化 1 4】



10

式 I I

式中、

20

n は、0 以上の整数であり、

R_1 は、必要に応じて置換されているアルキルであって、飽和又は不飽和であり、かつ分岐又は非分岐のアルキルであり、

R_2 は、水素及び必要に応じて置換されているアルキルであって、飽和又は不飽和であり、かつ分岐又は非分岐のアルキルから選択され、かつ

R_3 及び R_4 はそれぞれについて独立して、必要に応じて置換されているアルキルであって、飽和又は不飽和であり、かつ分岐又は非分岐のアルキルから選択され、

上記組成物は：

4 以上の整数から選択される EN と、40 で測定したとき 200 cSt 以上の動粘性率と、-40 以下の流動点、

30

3 以上の整数又は整数の少数部分から選択される EN と、40 で測定したとき 130 cSt 以上の動粘性率と、-30 以下の流動点、

2 以下の整数又は整数の少数部分から選択される EN と、40 で測定したとき 55 cSt 以下の動粘性率と、-25 以下の流動点、又は

2 以下の整数又は整数の少数部分から選択される EN と、40 で測定したとき 45 cSt 以下の動粘性率と、-25 以下の流動点、

を有し、

EN が、式 I I による化合物中のエステル結合の平均数である、化合物、を含む組成物。

【0307】

40

付記項 1 4 1 . 基油の EN を増大することによってエステル基油の流動点を保持又は減少する方法であって、上記方法は：

初期 EN 及び初期流動点を有するエステル基油を選択することと、

基油の少なくとも一部であって、基油の初期 EN 未満の EN を示す部分を除去することと、を包含し、

上記得られたエステル基油が、上記基油の初期 EN より大きい EN 、及び上記基油の初期流動点以下の流動点を示し、 EN が、エステル基油のエステル中のエステル結合の平均数である、方法。

【0308】

付記項 1 4 2 . 上記基油の少なくとも一部を除去することが、蒸留、クロマトグラフィ

50

一、膜分離、相分離、アフィニティー分離又はそれらの組み合わせによって達成される、請求項 1 4 1 に記載の方法。

【 0 3 0 9 】

付記項 1 4 3 . 上記蒸留が、少なくとも 2 5 0 の温度で、2 5 ミクロン以下の絶対圧力で生じる、請求項 1 4 2 に記載の方法。

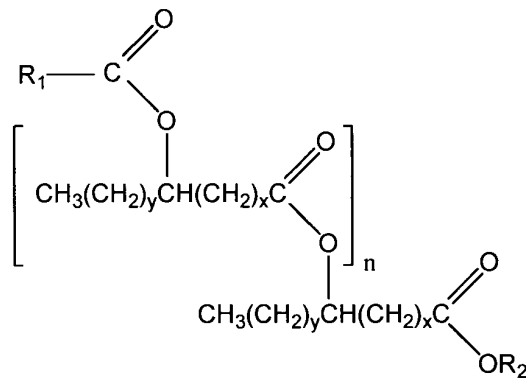
【 0 3 1 0 】

付記項 1 4 4 . 上記エストリド基油が、2 . 5 以下の初期 E N 及び - 4 0 以上の初期流動点を有する、請求項 1 4 1 ~ 1 4 3 のいずれか 1 項に記載の方法であって、上記エストリド基油が式 I の少なくとも 1 種の化合物を含み：

【 0 3 1 1 】

【 化 1 5 】

10



20

式 I

式中、

x は、それぞれについて独立して、0 ~ 2 0 から選択される整数であり、

y は、それぞれについて独立して、0 ~ 2 0 から選択される整数であり、

n は、0 ~ 1 2 から選択される整数であり、

30

R₁ は、必要に応じて置換されているアルキルであって、飽和又は不飽和であり、かつ分岐又は非分岐のアルキルであり、かつ

R₂ は、必要に応じて置換されているアルキルであって、飽和又は不飽和であり、かつ分岐又は非分岐のアルキルであり、

上記化合物の各々の脂肪酸鎖残基は独立して必要に応じて置換されている、方法。

【 0 3 1 2 】

付記項 1 4 5 . 請求項 1 4 4 に記載の方法であって、式中

x が、それぞれについて独立して、1 ~ 1 0 から選択される整数であり、

y が、それぞれについて独立して、1 ~ 1 0 から選択される整数であり、

n が 0 ~ 8 から選択される整数であり、

40

R₁ が、必要に応じて置換されている C₁ ~ C₂₂ アルキルであって、飽和又は不飽和であり、かつ分岐又は非分岐のアルキルであり、かつ

R₂ が、必要に応じて置換されている C₁ ~ C₂₂ アルキルであって、飽和又は不飽和であり、かつ分岐又は非分岐のアルキルであり、

各々の鎖が非置換である、方法。

【 0 3 1 3 】

付記項 1 4 6 . x + y が、各々の鎖について独立して、1 3 ~ 1 5 から選択される整数であり、かつ

n が 0 ~ 6 から選択される整数である、請求項 1 4 4 ~ 1 4 5 のいずれか 1 項に記載の方法。

50

【 0 3 1 4 】

付記項 1 4 7 . $x + y$ が、1 5 である、請求項 1 4 4 ~ 1 4 6 のいずれか 1 項に記載の方法。

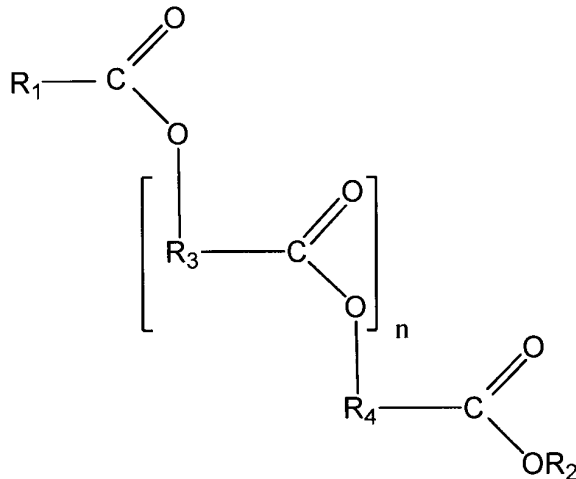
【 0 3 1 5 】

付記項 1 4 8 . 請求項 1 4 1 ~ 1 4 3 のいずれか 1 項に記載の方法であって、上記エストリド基油が、2 . 5 以下の初期 E N (ここで、この E N は式 I I による化合物におけるエストリド連結の平均数である) 及び - 4 0 以上の初期流動点を有し、上記エストリド基油が式 I I の少なくとも 1 種の化合物を含み：

【 0 3 1 6 】

【 化 1 6 】

10



20

式 I I

式中、

n は、0 以上の整数であり、

30

R_1 は、必要に応じて置換されているアルキルであって、飽和又は不飽和であり、かつ分岐又は非分岐のアルキルであり、

R_2 は、水素、及び必要に応じて置換されているアルキルであって、飽和又は不飽和であり、かつ分岐又は非分岐のアルキルから選択され、かつ

R_3 及び R_4 は、独立してそれぞれについて、必要に応じて置換されているアルキルであって、飽和又は不飽和であり、かつ分岐又は非分岐のアルキルから選択される、方法。

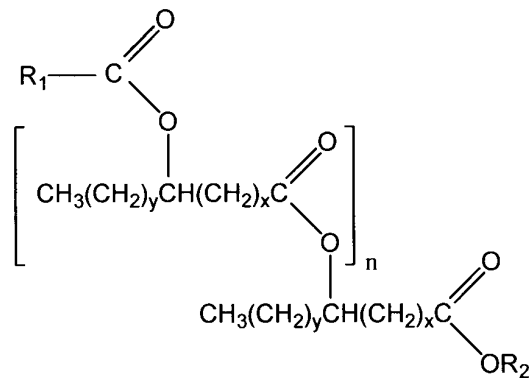
【 0 3 1 7 】

付記項 1 4 9 . 請求項 1 4 1 ~ 1 4 3 のいずれか 1 項に記載の方法であって、上記エストリド基油が、2 . 5 以下の初期 E N (ここで、この E N が式 I I I による化合物におけるエストリド連結の平均数である) 及び - 4 0 以上の初期流動点を有し、上記エストリド基油が式 I I I の少なくとも 1 種の化合物を含み：

40

【 0 3 1 8 】

【化 17】



10

式 III

式中、

x は、それぞれについて独立して、0 ~ 20 から選択される整数であり、

y は、それぞれについて独立して、0 ~ 20 から選択される整数であり、

n が、0 以上の整数であり、

20

R_1 は、必要に応じて置換されているアルキルであって、飽和又は不飽和であり、かつ分岐又は非分岐のアルキルであり、かつ

R_2 は、必要に応じて置換されているアルキルであって、飽和又は不飽和であり、かつ分岐又は非分岐のアルキルであり、

上記少なくとも 1 種の化合物の各々の脂肪酸鎖残基は独立して必要に応じて置換されている、方法。

【0319】

付記項 150 . 式中、 R_2 が、分岐又は非分岐の $\text{C}_{10} \sim \text{C}_{20}$ アルキルであって、飽和又は不飽和のアルキルである、請求項 144 ~ 149 のいずれか 1 項に記載の方法。

【0320】

30

付記項 151 . 請求項 144 ~ 150 のいずれか 1 項に記載の組成物であって、式中、 R_2 が、メチル、エチル、プロピル、ブチル、ペンチル、ヘキシル、ヘプチル、オクチル、ノニル、デカニル、ウンデカニル、ドデカニル、トリデカニル、テトラデカニル、ペンタデカニル、ヘキサデカニル、ヘプタデカニル、オクタデカニル、ノナデカニル、及びイコサニルから選択され、これらが飽和又は不飽和であり、及び分岐又は非分岐である、組成物。

【0321】

付記項 152 . R_2 が、分岐又は非分岐の $\text{C}_6 \sim \text{C}_{12}$ アルキルであって、飽和及び非置換であるアルキルから選択される、請求項 144 ~ 151 のいずれか 1 項に記載の方法

40

【0322】

付記項 153 . R_2 が、2 - エチルヘキシルである、請求項 143 ~ 152 のいずれか 1 項に記載の方法。

【0323】

付記項 154 . R_1 が、非置換の $\text{C}_7 \sim \text{C}_{17}$ アルキルであって、非分岐及び飽和又は不飽和であるアルキルから選択される、請求項 144 ~ 153 のいずれか 1 項に記載の方法。

【0324】

付記項 155 . R_1 が、飽和 C_7 アルキル、飽和 C_9 アルキル、飽和 C_{11} アルキル、飽和 C_{13} アルキル、飽和 C_{15} アルキル、及び飽和又は不飽和 C_{17} アルキルであって

50

、非置換であり、かつ非分岐のアルキルから選択される、請求項 1 4 4 ~ 1 5 4 のいずれか 1 項に記載の方法。

【 0 3 2 5 】

付記項 1 5 6 . R_1 が $C_{13} \sim C_{17}$ アルキルであって、非置換、非分岐及び飽和又は不飽和であるアルキルから選択される、請求項 1 4 4 ~ 1 5 5 のいずれか 1 項に記載の方法。

【 0 3 2 6 】

付記項 1 5 7 . R_1 が、飽和 C_{13} アルキル、飽和 C_{15} アルキル、及び飽和又は不飽和 C_{17} アルキルであって、非置換であり、かつ非分岐のアルキルから選択される、請求項 1 4 4 ~ 1 5 6 に記載の方法。

10

【 0 3 2 7 】

付記項 1 5 8 . R_1 及び R_2 が、必要に応じて置換されている $C_1 \sim C_{18}$ アルキルであって、飽和または又は不飽和かつ分岐又は非分岐のアルキルから独立して選択される、請求項 1 4 4 ~ 1 4 9 のいずれか 1 項に記載の方法。

【 0 3 2 8 】

付記項 1 5 9 . R_1 が、必要に応じて置換されている $C_1 \sim C_{17}$ アルキルであって、飽和または又は不飽和かつ分岐又は非分岐のアルキルであり、 R_2 が、必要に応じて置換されている $C_3 \sim C_{20}$ アルキルであって、飽和または又は不飽和かつ分岐又は非分岐のアルキルである、請求項 1 4 4 ~ 1 4 9 のいずれか 1 項に記載の方法。

【 0 3 2 9 】

20

付記項 1 6 0 . 上記基油の一部が 2 . 5 未満の EN を示す、請求項 1 4 4 ~ 1 5 9 のいずれか 1 項に記載の方法。

【 0 3 3 0 】

付記項 1 6 1 . 上記基油の一部が 2 . 0 未満の EN を示す、請求項 1 4 4 ~ 1 6 0 のいずれか 1 項に記載の方法。

【 0 3 3 1 】

付記項 1 6 2 . 上記基油の一部が 1 . 5 未満の EN を示す、請求項 1 4 4 ~ 1 6 1 のいずれか 1 項に記載の方法。

【 0 3 3 2 】

付記項 1 6 3 . 得られた基油の EN が 2 . 5 より大きい、請求項 1 4 4 ~ 1 6 2 のいずれか 1 項に記載の方法。

30

【 0 3 3 3 】

付記項 1 6 4 . 得られた基油の EN が 3 . 0 より大きい、請求項 1 4 4 ~ 1 6 3 のいずれか 1 項に記載の方法。

【 0 3 3 4 】

付記項 1 6 5 . 得られた基油の EN が 4 . 0 より大きい、請求項 1 4 4 ~ 1 6 4 のいずれか 1 項に記載の方法。

【 0 3 3 5 】

付記項 1 6 6 . 得られた基油の流動点が - 4 0 以下である、請求項 1 4 4 ~ 1 6 5 のいずれか 1 項に記載の方法。

40

【 0 3 3 6 】

付記項 1 6 7 . 上記エストリド基油が、2 . 0 以下の初期 EN 及び - 3 5 以上の初期流動点を有する、請求項 1 4 4 、 1 4 8 又は 1 4 9 に記載の方法。

【 0 3 3 7 】

付記項 1 6 8 . 上記基油の一部が 2 . 0 未満の EN を示す、請求項 1 4 4 、 1 4 8 又は 1 4 9 に記載の方法。

【 0 3 3 8 】

付記項 1 6 9 . 上記基油の一部が 1 . 5 未満の EN を示す、請求項 1 4 4 、 1 4 8 又は 1 4 9 に記載の方法。

【 0 3 3 9 】

50

付記項 170 . 上記得られた基油の EN が 2 . 5 より大きい、請求項 166 ~ 169 のいずれか 1 項に記載の方法。

【0340】

付記項 171 . 上記得られた基油の EN が 3 . 0 より大きい、請求項 166 ~ 169 のいずれか 1 項に記載の方法。

【0341】

付記項 172 . 上記得られた基油の流動点が - 35 以下である、請求項 166 ~ 169 のいずれか 1 項に記載の方法。

【0342】

付記項 173 . 上記基油が、式 I、II 又は III の 2 種以上のエストリド化合物を含む、請求項 144 ~ 172 のいずれか 1 項に記載の方法。 10

【0343】

付記項 174 . 上記基油が本質的に、式 I、II 又は III の 2 種以上のエストリド化合物からなる、請求項 144 ~ 172 のいずれか 1 項に記載の方法。

【0344】

付記項 175 . 請求項 1 ~ 113 のいずれか 1 項に記載の組成物であって、1 つ以上の脂肪酸鎖残基についての $x + y$ が、式 I の化合物中の 1 つ以上の他の脂肪酸鎖残基についての $x + y$ とは異なる、組成物。

【0345】

付記項 176 . 請求項 114 ~ 139 のいずれか 1 項に記載の組成物であって、1 つ以上の脂肪酸鎖残基についての $x + y$ が、式 III の化合物中の 1 つ以上の他の脂肪酸鎖残基についての $x + y$ とは異なる、組成物。 20

【0346】

付記項 177 . 請求項 176 ~ 177 のいずれか 1 項に記載の組成物であって、 $x + y$ が異なる 1 つ以上の脂肪酸鎖残基が、同じエストリド分子の脂肪酸鎖残基である、組成物。

【0347】

付記項 178 . 1 つ以上の R_3 又は R_4 の長さが、同じエストリド分子の 1 つ以上の R_3 又は R_4 とは異なる、請求項 148 に記載の組成物。

フロントページの続き

(51)Int.Cl. F I
C 1 0 N 40/25 (2006.01) C 1 0 N 30:00 Z
C 1 0 N 50/10 (2006.01) C 1 0 N 40:25
C 1 0 N 50:10

(74)代理人 100117019
弁理士 渡辺 陽一

(74)代理人 100141977
弁理士 中島 勝

(74)代理人 100166028
弁理士 北谷 賢次

(72)発明者 ジェイコブ プレッズガード
アメリカ合衆国, カリフォルニア 9 2 6 1 8 , アーバイン, オーク グレン 1 0 2 4

審査官 馬籠 朋広

(56)参考文献 特開平 1 0 - 0 3 6 8 7 0 (J P , A)
特開平 0 8 - 0 2 7 4 7 3 (J P , A)
米国特許第 0 6 0 1 8 0 6 3 (U S , A)
国際公開第 9 9 / 0 2 5 7 9 4 (W O , A 1)
米国特許第 0 5 0 1 1 6 2 9 (U S , A)
国際公開第 2 0 0 8 / 0 4 0 8 6 4 (W O , A 1)

(58)調査した分野(Int.Cl. , D B 名)
C 1 0 M 1 0 1 / 0 0 - 1 7 7 / 0 0