



(19)中華民國智慧財產局

(12)發明說明書公告本

(11)證書號數：TW I701235 B

(45)公告日：中華民國 109 (2020) 年 08 月 11 日

(21)申請案號：105104308

(22)申請日：中華民國 105 (2016) 年 02 月 15 日

(51)Int. Cl. : C07C69/82 (2006.01)

C08K5/12 (2006.01)

C08L27/06 (2006.01)

C07C67/03 (2006.01)

(30)優先權：2015/02/18 歐洲專利局

15155562.0

(71)申請人：德商贏創運營有限公司 (德國) EVONIK OPERATIONS GMBH (DE)

德國

(72)發明人：沃得 班傑明 WOLDT, BENJAMIN (DE)；柏克 弗洛瑞 BOECK, FLORIAN
SEBASTIAN (DE)；葛瑞斯 麥克 GRASS, MICHAEL (DE)；哈格 哈羅德
HAEGER, HARALD (DE)

(74)代理人：林志剛

(56)參考文獻：

CN 101679708A

US 2014/0096703A1

US 2014/0336294A1

審查人員：陳依微

申請專利範圍項數：15 項 圖式數：2 共 65 頁

(54)名稱

對苯二甲酸戊壬酯

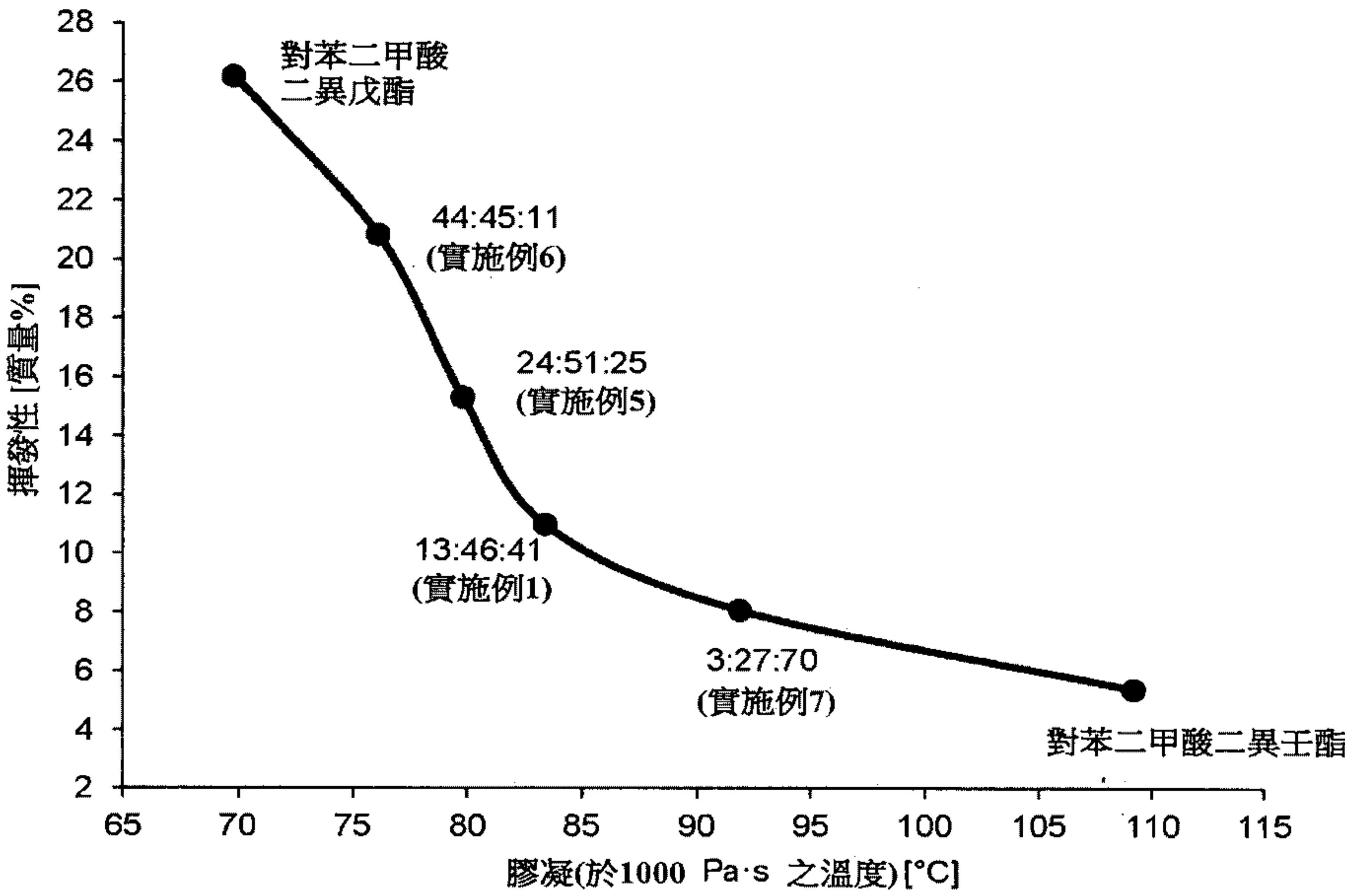
(57)摘要

包含對苯二甲酸二戊酯、對苯二甲酸二壬酯及對苯二甲酸戊壬酯之混合物可製備成該混合物中具有個別酯之預定分布，且用作塑化劑。

Mixtures comprising dipentyl terephthalate, dinonyl terephthalate and pentyl nonyl terephthalate can be prepared with a predetermined distribution of the individual esters in the mixture, and used as plasticizers.

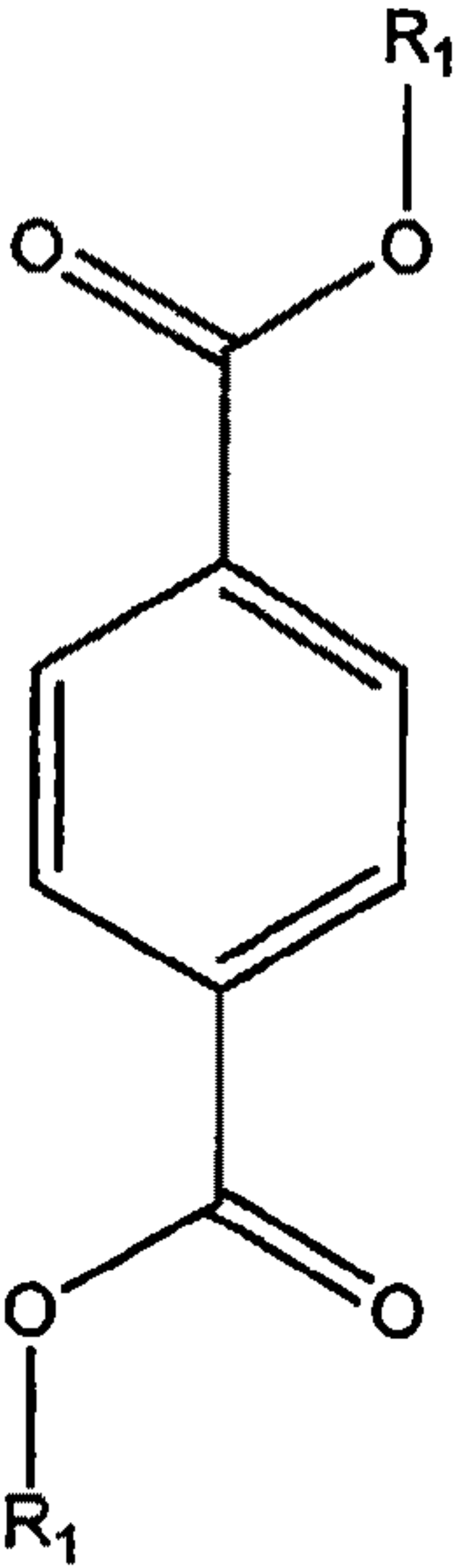
指定代表圖：

圖 1

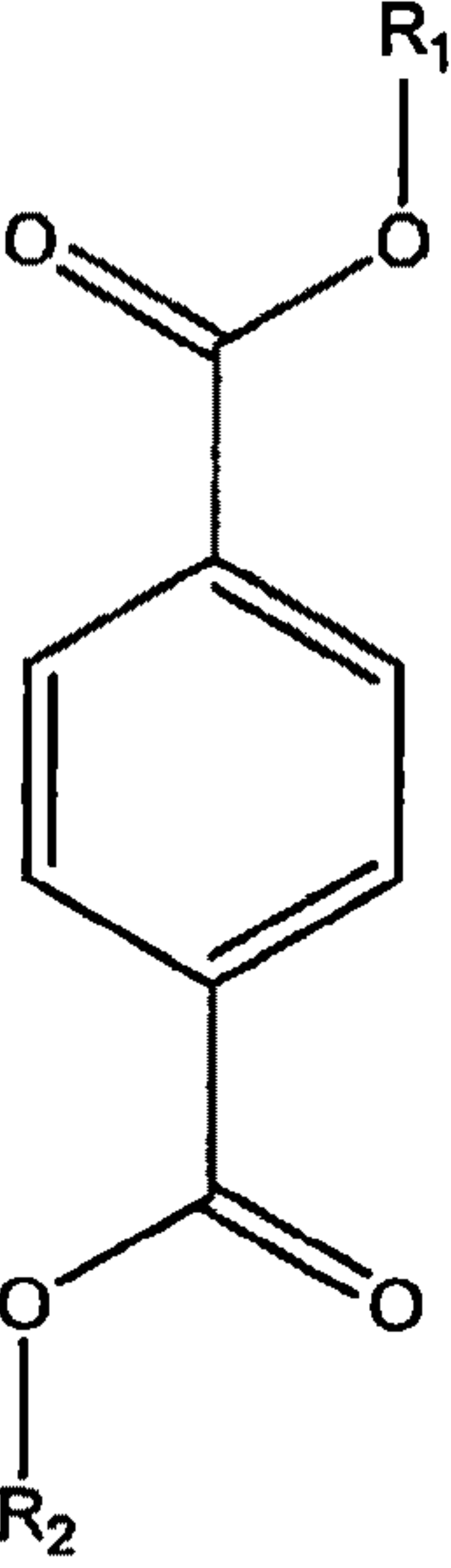


特徵化學式：

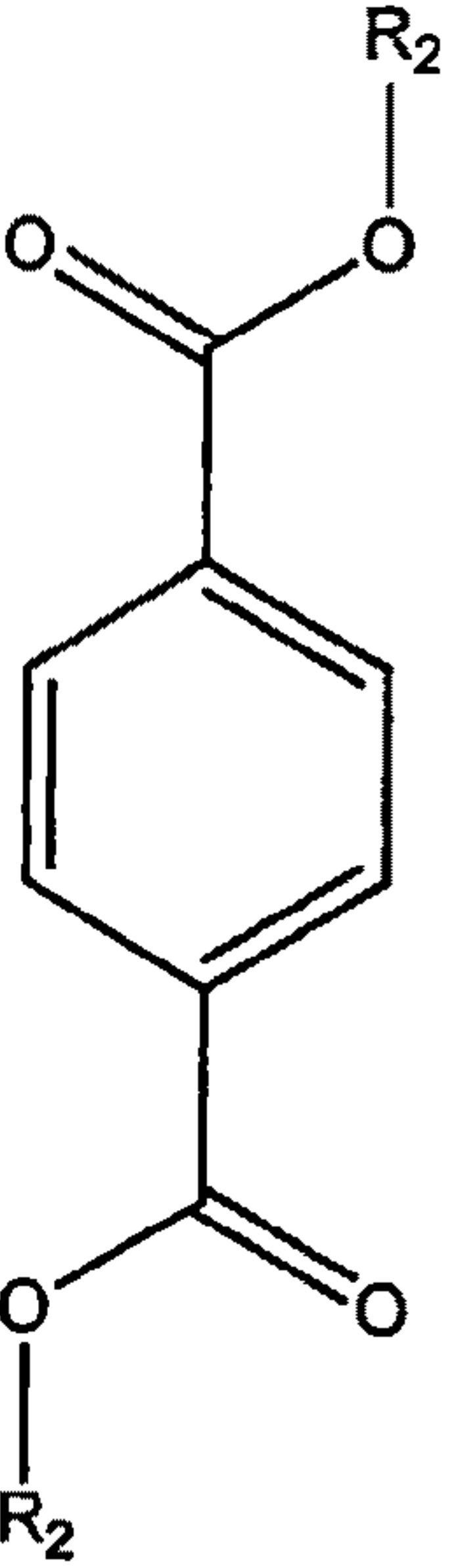
式 I、II 及 III



I



II



III

I701235 第 105104308 號

民國 107 年 12 月 26 日修正

發明摘要

公告本

※申請案號：105104308

※申請日：105 年 02 月 15 日

※IPC 分類：

【發明名稱】(中文/英文)

對苯二甲酸戊壬酯

Pentyl nonyl terephthalates

【中文】

包含對苯二甲酸二戊酯、對苯二甲酸二壬酯及對苯二甲酸戊壬酯之混合物可製備成該混合物中具有個別酯之預定分布，且用作塑化劑。

【英文】

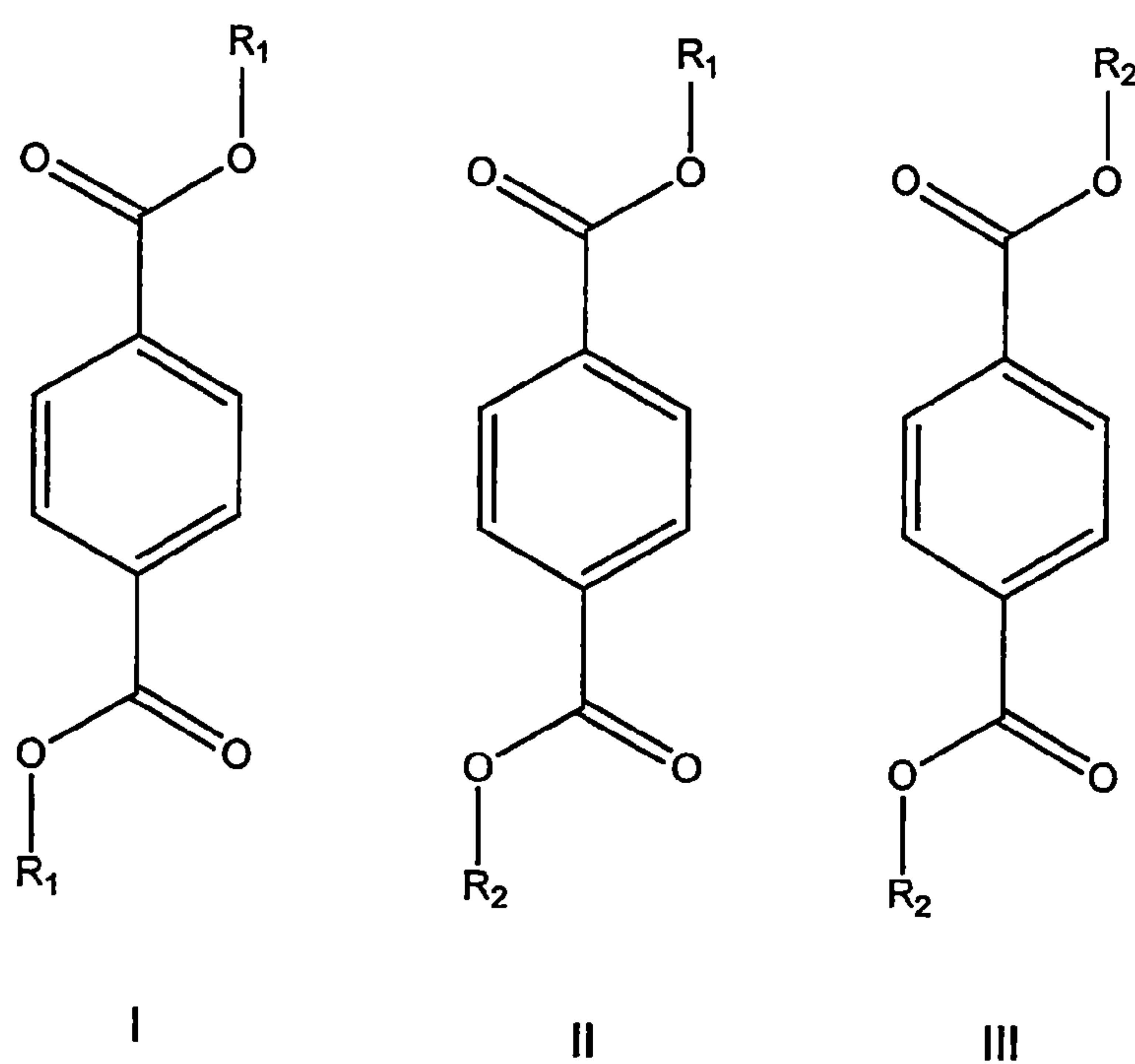
Mixtures comprising dipentyl terephthalate, dinonyl terephthalate and pentyl nonyl terephthalate can be prepared with a predetermined distribution of the individual esters in the mixture, and used as plasticizers.

【代表圖】

【本案指定代表圖】：第(1)圖。

【本代表圖之符號簡單說明】：無

【本案若有化學式時，請揭示最能顯示發明特徵的化學式】：
式 I、II 及 III



發明專利說明書

(本說明書格式、順序，請勿任意更動)

【發明名稱】(中文/英文)

對苯二甲酸戊壬酯

Pentyl nonyl terephthalates

【技術領域】

本發明關於對苯二甲酸酯之混合物、此等混合物之製備方法及作為塑化劑之用途、以及包含此等混合物之組成物。

【先前技術】

在用於聚合物之塑化劑的領域中，對苯二甲酸酯已作為苯二甲酸酯之替代或補充多年。多年來，商業上最重要的對苯二甲酸酯為對苯二甲酸二乙基己酯，其亦經常簡稱為對苯二甲酸二辛酯。包含少於或多於 8 個碳原子之醇基的對苯二甲酸酯同樣描述於先前技術中。

視該酯官能之醇基中包括的碳數等因素而定，對苯二甲酸酯具有不同性質，因此適於不同塑化劑應用的較大或較少範圍。例如，相對短鏈對苯二甲酸酯在較低溫度下比其較長鏈類似物更易於膠凝。在塑化劑中之低膠凝溫度代表在塑料溶膠處理情況中的正面性質，原因係此處理可在較低溫度進行，再者，可比在包含具有高膠凝溫度的塑化劑之塑料溶膠的處理情況下達到更高處理產出。然而，同

時，具有低分子量及因此該醇基中之碳數低的對苯二甲酸酯比其較重質類似物具有較高揮發性。塑化劑中之高揮發性是嚴重的缺點，原因在於塑性損失（plasticized loss）不只改變經塑化聚合物之性質及因而降低該產品的使用壽命，亦將塑化劑釋放至環境中。

此外，釋放塑化劑為一大問題，原因係在例如內部應用、藥品、玩具、纜線之領域中以及在汽車部門中，產品行銷需要符合管理包括從產品排出之有機化合物最大量等參數的標準，以確保消費者及環境的必要安全性。因此，例如在德國，建築產品健康評估委員會（construction products Health Evaluation Committee（AgBB））與歐洲議會同意之建築產品法規（Construction Products Regulation（No 305/2011））一致規範防止及限制內部空間中的污染物。因此，就健康觀點來看，建築產品及因此亦包括含塑化劑產品被視為只有在標準化測量方法中所排放 VOC（揮發性有機化合物）及 SVOC（半揮發性有機化合物）的限定值不過量時才適用於建築物之內部空間。根據 DIN ISO 16000-6，分類為 SVOC 之有機化合物係在非極性柱上保留範圍 > C16-C22 中者（AgBB – 來自建築產品之 VOC 的評估方案（Evaluation Scheme for VOC from construction products, 2012 status））。具有高於 VOC 及/或 SVOC 之容許排放的產品只能在額外措施（諸如例如施加清漆之排放阻擋層）防止超過最大容許排放量時使用。然而，此等額外措施限制產品中之塑化劑的調配自由

度，因此使得使用具有 SVOC 等之塑化劑更加昂貴。此外，因此等額外保護性塗層的必然結果會產生其他困難，諸如受清漆保護之含 SVOC 產品更易受刮傷或成片剝脫。

為了將塑化劑系統的性質調整成處理條件及所計畫應用，通常使用二或多種塑化劑（例如兩種具有不同醇基之對苯二甲酸二酯）之混合物作為聚合物之塑化劑。因此，文件 US 2013/0317152 A1 提出在與其他對苯二甲酸二烷酯（較佳係在醇基中具有 4 至 8 個碳原子者）的混合物中使用對苯二甲酸二異壬酯。文件 US 2013/0310473 A1 亦描述連同對苯二甲酸二壬酯亦包含對苯二甲酸二正丁酯之塑料溶膠。然而，經由使用二或多種塑化物質（亦稱為塑化劑）的混合物來形成塑化劑混合物（經常同樣簡稱為塑化劑），在特別訂定所有希望的有利性質之組合方面，迄今尚未獲得成功。例如，文件「Dibutyl terephthalates in Plasticizer and related Applications」（IP.com，公開號：IPCOM000236730D，公佈日期：13.05.2014）揭示聚合物相容性問題影響不同對苯二甲酸酯之混合物。例如，該文件中之圖 8 顯示，對苯二甲酸二辛酯只在多於 50% 之對苯二甲酸酯的混合物中具有充足聚合物相容性。因此，若含有多於 50% 之對苯二甲酸二丁酯，只有包含對苯二甲酸二辛酯及對苯二甲酸二丁酯之系統不從該聚物流出；此嚴重限制混合物組成物的變化，因此亦大幅限制可能達成的性質。

其他提出的文件不只摻合不同對苯二甲酸二酯，亦使

用兩種對苯二甲酸二酯連同相關之混合酯作為塑化劑。

因此，文件 KR 2013/0035493 A 及 US 2014/0336294 A1 提出以下問題：對苯二甲酸二丁酯雖然展現高速率之滲透至該樹脂及熔融，然而展現不當的高遷移損失，而在對苯二甲酸二乙基己酯之情況下，實質上無遷移損失，但滲透至該樹脂中及熔融花費無法接受的長時間。為了改善該等相反的性質，該等文件提出使用包含含有 C₄ 及 C₈ 醇基之混合酯的酯混合物。然而，該等酯混合物具有包括被歸類為 SVOC 組分，因此在調配物中之使用受上述限制之對苯二甲酸二丁酯的缺點。

文件 WO 2008/140177 A1 提出製備包含對苯二甲酸之 C₈ 及 C₉ 酯的酯混合物，再次亦包括該混合酯，且描述藉由該酯混合物中之個別酯的比例達到改善塑化劑製備物之處理性質的可能性。

然而，相對於該等 C₈ 及 C₉ 酯之對苯二甲酸酯混合物，根據文件 US 2014/0096703 A1，包含 C₈ 及 C₁₀ 酯之對苯二甲酸酯混合物亦具有大幅改善的性質。該文件中所提出之系統包含含有 C₈ 及 C₁₀ 醇基之混合酯，但其與聚合物之相容性不良以致於該文件本身提出將苯二甲酸酯塑化劑（苯二甲酸二丙庚酯）摻混至該對苯二甲酸酯混合物以改善相容性。

文件 US 2014/0336320 A1，連同包括 C₄ 及 C₈ 對苯二甲酸酯之系統，亦提出具有 C₈ 及 C₁₀ 醇基者。

文件 WO 2014/195055 A1 不只描述具有 C₈ 及 C₁₀ 醇

第 105104308 號

民國 107 年 12 月 26 日修正

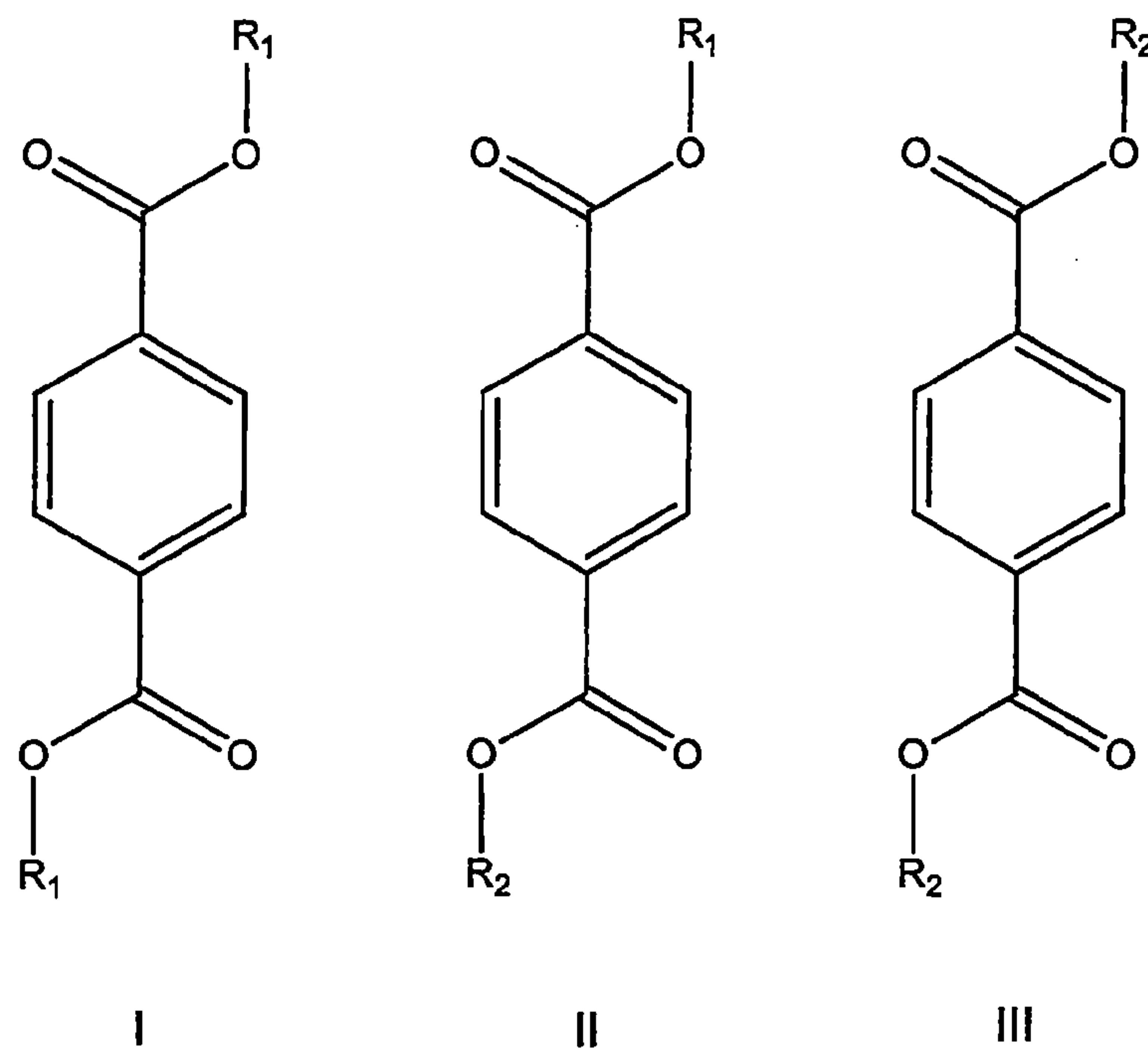
基之對苯二甲酸酯混合物，亦描述具有 C_7 及 C_9 醇基者。

【發明內容】

因此，本發明目的係克服一些及較佳係全部上述先前技術之缺點。該意圖較佳係提供用以確保調配最大自由度、不在德國或其他國際管理機構所管制的化合物定義中之塑化劑。此處該意圖較佳係提供以對苯二甲酸酯為主之塑化劑，其在揮發性及膠凝溫度方面同時具有良好性質，換言之，係在低溫膠凝且同時具有低揮發性的塑化劑。

該目的係藉由如申請專利範圍第 1 項之混合物而達成。

因此，本發明提供一種包含對苯二甲酸二酯 I、II 及 III 之混合物，



其中 R_1 為具有 5 個碳原子之烷基且 R_2 為具有 9 個碳

原子之烷基。

發明說明

基於本說明書之目的，用語「 R_1 」、「具有 5 個碳原子之烷基」、「戊基」及「 C_5 基」係同義使用。此亦適用於用語「 R_2 」、「具有 9 個碳原子之烷基」、「壬基」及「 C_9 基」。字首「異」標示出此為具有相同碳數之異構物混合物。下文描述「醇」時，例如「 C_5 醇」或「具有 5 個碳原子之醇」，該醇只能由單一異構物組成，或可包含二或多種異構物之混合物；換言之，在 C_5 醇之情況下，其可為異戊醇。

令人意外地，已發現相對於已知塑化劑組成物，根據本發明之混合物展現揮發性及膠凝溫度之性質的經改良相互作用。從圖 2 之根據本發明之混合物的膠凝溫度相對於揮發性之圖可看出，相較於其他聚合物可相容之無 SVOC 塑化劑系統，根據本發明之混合物具有較低膠凝溫度及同時具有較低揮發性，因此展現相對於該等塑化劑系統之處理及應用的經改良性質。

較佳地，在式 I、II 及 III 中， R_1 為 2-甲基丁基、3-甲基丁基及/或正戊基。更佳地，在式 I、II 及 III 中之 R_1 為異戊基，用語異戊基如前文界定，係描述二或多種異構戊基的混合物。在式 I、II 及 III 中之 R_2 較佳為壬基或正壬基。更佳地，在式 I、II 及 III 中之 R_2 為異壬基，用語異壬基如前文界定，係描述二或多種異構壬基的混合物。

較佳係其中在式 I、II 及 III 中， R_1 為 2-甲基丁基、3-甲基丁基、正戊基及/或異戊基，且 R_2 為異壬基之混合物。較佳係其中在式 I、II 及 III 中， R_2 為壬基、正壬基及/或異壬基，且 R_1 為 2-甲基丁基之混合物。此外，較佳係其中在式 I、II 及 III 中， R_2 為壬基、正壬基及/或異壬基，且 R_1 為 3-甲基丁基之混合物。另外較佳係其中在式 I、II 及 III 中， R_2 為壬基、正壬基及/或異壬基，且 R_1 為正甲基及/或異戊基。

存在於根據本發明之混合物的酯 I、II 及 III 中之異壬基較佳具有 1.0 至 2.2 之平均分支程度，原因係在此範圍內會提高根據本發明之混合物與聚合物的相容性。該平均分支程度係如文件 US 2010/305255 A1 所述般測定。

在一實施態樣中，在根據本發明之混合物中，正戊基之分率基於存在該等酯 I、II 及 III 中之戊基整體計，為至少 10 莫耳%或 20 莫耳%，較佳為至少 30 莫耳%，更佳為至少 40 莫耳%，非常佳為至少 50 莫耳%，及更特別的是至少 60 莫耳%，此可能與較低揮發性之優點有關，因此更有利於塑料溶膠之處理。在一較佳實施態樣中，正戊基之分率基於所存在之所有戊基計，係介於 10 與 90 莫耳%之間，較佳為 20 至 80 莫耳%，及更特別的是 30 至 70 莫耳%。

已發現基於該等酯 I、II 及 III 整體計包含少於 80 莫耳%，較佳為少於 70 莫耳%，及更特別的是少於 60 莫耳%之酯 III 的根據本發明之混合物有待塑化之聚合物的特

別高相容性。除了該等混合物相對於酯 I、II 及 III 含有較高分率之酯 III 的混合物之經改良相容性之外，具有少於 80 莫耳%，較佳係具有少於 70 莫耳%，及更特別佳的是具有少於 60 莫耳%之酯 III 的混合物亦具有比包含較高分率之酯 III 的混合物更低之膠凝溫度，其因此更有利於塑料溶膠的處理。

較低及因此經改良之揮發性係由基於該等酯 I、II 及 III 整體計包含少於 60 莫耳%，較佳為少於 50 莫耳%，更佳為少於 40 莫耳%，非常佳為少於 30 莫耳%，及更特別的是少於 20 莫耳%之酯 I 的根據本發明之化合物展現，且基於此原因，此等混合物同樣較佳。

當根據本發明之混合物基於該等酯 I、II 及 III 整體計較佳包含少於 40 莫耳%，及更特別的是少於 30 莫耳%之酯 III 時，存在具有特別有利膠凝溫度的該混合物。具有特別低揮發性之混合物基於該等酯 I、II 及 III 整體計較佳包含多於 30 莫耳%，及更特別的是多於 40 莫耳%之酯 III。

在本發明一實施態樣中，於各例中基於該等酯 I、II 及 III 整體計，該混合物包含至少 10 莫耳%，較佳係至少 20 莫耳%，更佳地係至少 30 莫耳%，及更特別的是至少 40 莫耳%之酯 II 及/或不多於 60 莫耳%，較佳係不多於 50 莫耳%，更佳係不多於 40 莫耳%，及更特別的是不多於 30 莫耳%之酯 II。

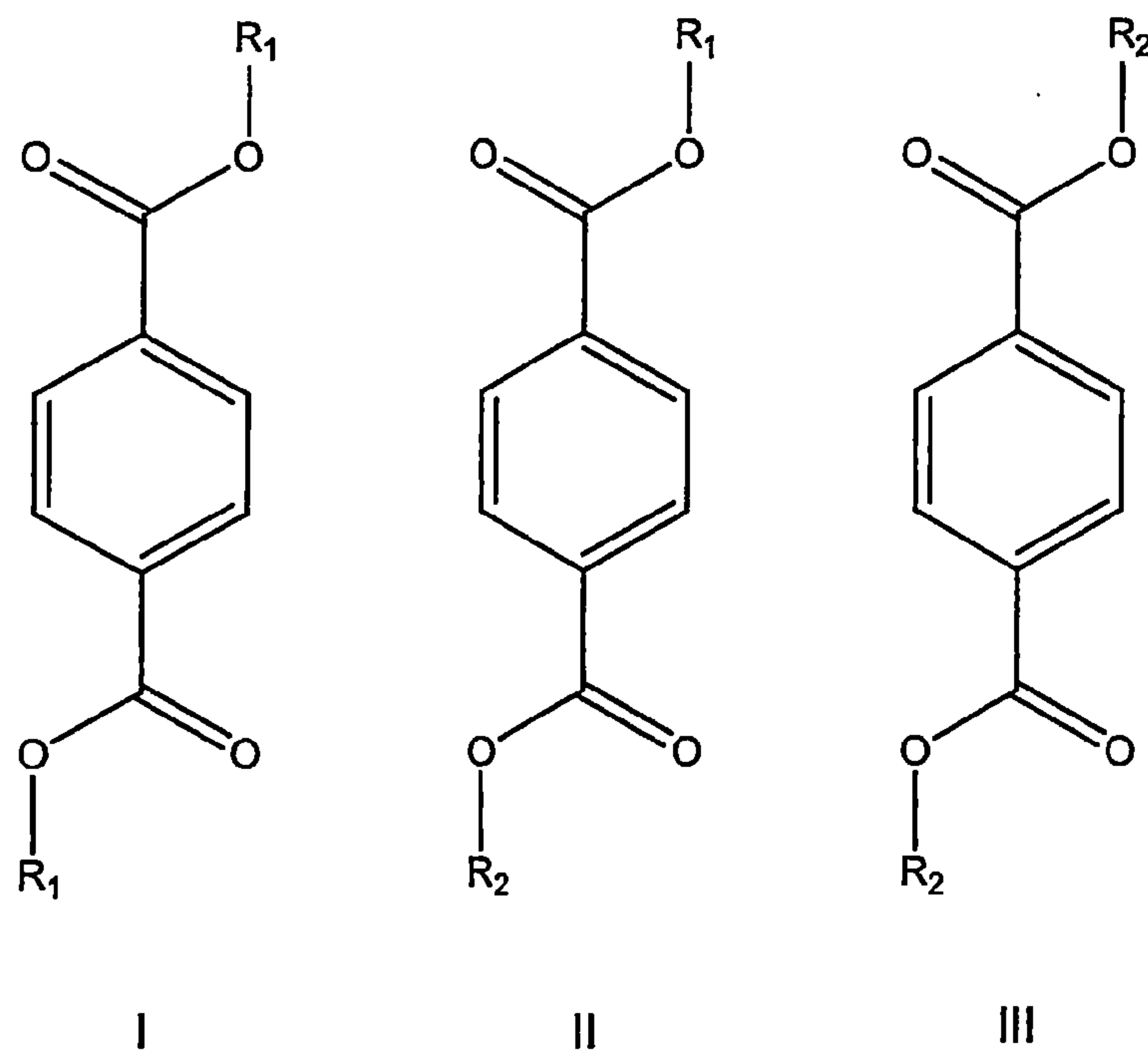
根據本發明之混合物較佳包含少於 40 重量%，更佳

第 105104308 號

民國 107 年 12 月 26 日修正

為少於 30 重量%，更佳地甚至少於 20 重量%，及更特別的是少於 10 重量%之不在酯 I、II 及 III 之定義內的組分。更特別的，根據本發明之混合物較佳包含少於 20 莫耳%，更佳為少於 10 莫耳%，及更特別的是少於 3 莫耳%之不在酯 I、II 及 III 之定義內的對苯二甲酸二酯，莫耳分率之測定考慮全體在該混合物中的對苯二甲酸二酯。

本發明之較佳主題為包含該對苯二甲酸二酯 I、II 及 III 的混合物，



其中 R_1 為 2-甲基丁基、3-甲基丁基、正戊基及/或異戊基，且 R_2 為異壬基，其基於該等酯 I、II 及 III 整體計包含少於 80 莫耳%，較佳為少於 70 莫耳%，及更特別的是少於 60 莫耳%之酯 III。

本發明另一主題係根據本發明之混合物作為聚合物的塑化劑之用途。應瞭解，已如前文闡明之本文內容中的用

語「塑化劑」意指本發明之酯混合物本身為該塑化劑，或根據本發明之混合物與其他聚合物塑化組分一起形成該塑化劑。

適用之聚合物較佳係選自由下列所組成之群組：聚氯乙烯（PVC）；以乙烯、丙烯、丁二烯、乙酸乙烯酯、丙烯酸環氧丙酯、甲基丙烯酸環氧丙酯、丙烯酸乙酯、丙烯酸丁酯或具有一至十個碳原子之分支或未分支醇的烷氧基之甲基丙烯酸酯、丙烯腈或環烯烴為主之同元聚合物或共聚物；聚偏二氯乙烯（PVDC）；聚丙烯酸酯，尤其是聚甲基丙烯酸甲酯（PMMA）、聚甲基丙烯酸烷酯（PAMA）；聚脲；矽化聚合物；氟聚合物，尤其是聚偏二氟乙烯（PVDF）、聚四氟乙烯（PTFE）；聚乙酸乙烯酯（PVAc）；聚乙烯醇（PVA）；聚乙烯縮醛，尤其是聚乙烯丁醛（PVB）；聚苯乙烯聚合物，尤其是聚苯乙烯（PS）、可膨脹聚苯乙烯（EPS）、丙烯腈-苯乙烯丙烯酸酯（ASA）、苯乙烯-丙烯腈（SAN）、丙烯腈-丁二烯-苯乙烯（ABS）、苯乙烯-順丁烯二酸酐共聚物（SMA）、苯乙烯-甲基丙烯酸共聚物；聚烯烴，尤其是聚乙烯（PE）或聚丙烯（PP）；熱塑性聚烯烴（TPO）；聚乙烯-乙酸乙烯酯（EVA）；聚碳酸酯；聚對聚對苯二甲酸伸丁酯伸乙酯（PET）；聚對聚對苯二甲酸伸丁酯伸丁酯（PBT）；聚甲醛（POM）；聚醯胺（PA）；聚乙二醇（PEG）；聚胺甲酸酯（PU）；熱塑性聚胺甲酸酯（TPU）；多硫化物（PSu）；生物聚合物，尤其是聚乳

酸（PLA）；聚羥基丁醛（polyhydroxybutyral）（PHB）；聚羥基戊酸（PHV）；聚酯；澱粉；纖維素及纖維素衍生物，尤其是硝化纖維素（NC）、乙基纖維素（EC）、乙酸纖維素（CA）；乙酸/丁酸纖維素（CAB）；橡膠；及聚矽氧。

較佳之聚合物為聚氯乙烯、氯乙烯與乙酸乙烯酯或與丙烯酸丁酯之共聚物、聚甲基丙烯酸烷酯（PAMA）、聚乙烯丁醛（PVB）、聚胺甲酸酯、多硫化物、聚乳酸（PLA）、聚羥基丁醛（PHB）及硝化纖維素。

特佳係使用本發明之酯混合物作為PVC的塑化劑。

該酯混合物較佳係用作黏著劑、密封劑、塗覆材料、塗料、油墨、塑料溶膠、發泡體、合成皮、鋪地材料（floorcovering）（例如，頂層）、屋頂膜、水下船體保護、織物塗層、纜線、線圈絕緣、軟管、擠出物件、膜、用於汽車內裝部分、用於壁覆蓋物（wallcovering）、液態油墨、玩具、接觸片（contact sheet）、食品包裝或醫療物件（例如管或血袋）中之塑化劑。

本發明另一主題係包含本發明之酯混合物以及一或多種選自由下列所組成之群組的聚合物之組成物：聚氯乙烯、氯乙烯與乙酸乙烯酯或與丙烯酸丁酯之共聚物、聚甲基丙烯酸烷酯（PAMA）、聚乙烯丁醛（PVB）、聚胺甲酸酯、多硫化物、聚乳酸（PLA）、聚羥基丁醛（PHB）及硝化纖維素。

基於100質量份聚合物計，較佳組成物包含5至

200，較佳為 10 至 150 質量份之塑化劑。

較佳係使用本發明之酯混合物作為聚氯乙烯之塑化劑，及因此特佳係包含本發明之酯混合物及 PVC 的組成物。

該聚合物較佳為懸浮液 PVC、整塊 PVC、微懸浮液 PVC 或乳液 PVC。

本發明之較佳實施態樣可不只包含本發明之酯混合物，亦包含至少一種其他聚合物塑化化合物，即，其他塑化劑。在本發明組成物之一特佳實施態樣中，其包含少於 5 質量%，及更特別係少於 0.5 質量%之含苯二甲酸酯的化合物。該等其他塑化劑較佳係選自由下列所組成之群組：己二酸酯、苯甲酸酯，實例為一苯甲酸酯或二苯甲酸二醇酯、氯化烴、檸檬酸酯、環己二羧酸酯、環氧化脂肪酸酯、環氧化植物油、環氧化丙烯酸甘油酯、呋喃二羧酸酯、磷酸酯、苯二甲酸酯（較佳為非常少量）、丁二酸酯、磺酸醯胺、磺酸酯、對苯二甲酸酯、苯三甲酸酯、或以己二酸、丁二酸或癸二酸為主之寡聚或聚合酯。特佳者為苯甲酸烷酯、己二酸二烷酯、甘油酯、檸檬酸三烷酯、醯化檸檬酸三烷酯、苯三甲酸三烷酯、二苯甲酸二醇酯、對苯二甲酸二烷酯、呋喃二羧酸之酯、二去水已醣醇（例如，異山梨醇）之二烷醯酯、及 1,2-環己二羧酸、1,3-環己二羧酸或 1,4-環己二羧酸之二烷酯。

在一實施態樣中，本發明之組成物不只包含本發明之酯混合物，亦包含基於該組成物整體質量計為少於 20 質

量%、少於 10 質量%之其他塑化劑、或無其他塑化劑。

本發明之組成物較佳不只包含聚合物或二或多種聚合物的混合物及本發明之酯混合物，亦包含一或多種來自下列之群組的添加劑：熱安定劑、填料、顏料、發泡劑、殺生物劑、UV 安定劑、光安定劑、共安定劑、抗氧化劑、黏度調節劑、除氣劑、黏著促進劑、潤滑劑及著色劑。

本發明之組成物可用於黏著劑、密封劑、塗覆材料、塗料、油墨、塑料溶膠、發泡體、合成皮、鋪地材料（例如，頂層）、屋頂膜、水下船體保護、織物塗層、纜線、線圈絕緣、軟管、擠出物件、膜、用於汽車內裝部分、用於壁覆蓋物、液態油墨、玩具、接觸片、食品包裝或醫療物件（例如管或血袋）中。

根據本發明之混合物可藉由例如酯化或轉酯化方法來製備。

製備方法 I

在本發明一實施態樣中，根據本發明之混合物係藉由對苯二甲酸或對苯二甲酸衍生物與 C_5 及 C_9 醇之醇混合物酯化而製備。

本發明之主題係藉由使用包含 R_1OH (R_1 =具有 5 個碳原子之烷基) 及 R_2OH (R_2 =具有 9 個碳原子之烷基) 的混合物將對苯二甲酸或對苯二甲酸衍生物酯化來製備本發明之酯混合物的方法。所使用之對苯二甲酸衍生物較佳為對苯二甲酸二甲酯 (DMT)。

製備方法 II

在本發明另一實施態樣中，根據本發明之混合物係藉由使酯 I 與基於其酯官能之數目計為少於 1 莫耳當量之包含 9 個碳原子的醇反應而製備。

本發明主題為製備本發明之酯混合物的方法，其中該酯 I 係與基於其酯官能之數目計為少於 1 莫耳當量的具有 9 個碳原子之醇或二或多種醇反應（簡稱：C₉ 醇）並併隨加熱，較佳係至沸騰（隨意地存在觸媒）。

此處之基團 R₁ 及 R₂ 係如稍早於前文針對根據本發明之混合物界定。特佳係 R₁ 為 2-甲基丁基、3-甲基丁基、正戊基及/或異戊基，且 R₂ 為異壬基，該混合物基於該等酯 I、II 及 III 整體計較佳係包含少於 80 莫耳%，更佳為少於 70 莫耳%，及更特別的是少於 60 莫耳%之酯 III。亦確實有根據的是該等較佳實施態樣係稍早於前文關於 R₁ 及 R₂ 之異構物分布指示。

在該製備方法 II 中，該酯 I 係與比完全置換該酯 I 內之酯官能基的所有醇基必要者少之 C₉ 醇反應。令人意外的，已確定當最初引入該酯 I 並添加 C₉ 醇時，包含非混合酯 I 及 III 以及混合酯 II 之所得酯混合物的組成可以目標明確之方式在對該 C₉ 醇之醇基的完全併入之情況產生的統計範圍內調整。反之，若酯化或轉酯化係針對使用待引入醇基之醇混合物（C₅ 醇+C₉ 醇）進行或若將 C₅ 醇添加至該酯 III，則不可能控制酯混合物組成。

因此，可能藉由製備方法 II 提供酯混合物，該酯混合物中存在預定定量分布之不同醇基，此外，其中該存在之酯的定量分布在前文指定之統計內可以目標明確之方式控制。因此，可能提供其組成展現比先前技術中所述藉由未受控制方法所製備之酯混合物與該統計所產生之酯分布更小的離差之酯混合物。

就藉由製備方法 II 所製備的根據本發明之混合物而言，所產生之統計期望值係列於表 1 者。

表1：統計期望值(製備方法II)

輸入		預期量		
酯 I [C ₅ 當量]	C ₉ 醇 [C ₉ 當量]	酯 I [莫耳%]	酯II [莫耳%]	酯III [莫耳%]
2	0.2	81	18	1
2	0.4	64	32	4
2	0.6	49	42	9
2	0.8	36	48	16
2	1.0	25	50	25
2	1.2	16	48	36
2	1.4	9	42	49
2	1.6	4	32	64
2	1.8	1	18	81

該酯混合物組成與該酯混合物中之酯從統計考量所得之定量分布的離差可藉由加總當假設該 C₉ 醇之醇基完全併入時產生的統計期望值與上述酯在酯混合物中之莫耳分率的總和總計為 100 時在該酯混合物中每一個別酯的實際莫耳分率之間的差異的所有數值來量化。

藉由製備方法 II，例如，尤其可能從 5.5 莫耳之對苯

二甲酸二異戊酯及 7.1 莫耳之異壬醇提供其中存在之酯類的莫耳分布只與該統計期望值偏差 4 點的酯混合物，且該酯混合物中之異戊基分率對應於所欲的異戊基分率至精確度 1%。

根據本發明，在製備方法 II 中，使用基於存在於該酯 I 中之酯官能之數目計為少於 1 莫耳當量之 C₉ 醇（1 莫耳當量 C₅ 當量）。該酯 I 較佳係與基於其酯官能之數目計為少於 0.98 莫耳當量，較佳係與少於 0.95 莫耳當量，及更特別的是與少於 0.90 莫耳當量之 C₉ 醇反應。亦較佳係使該酯 I 與基於其酯官能之數目計為少於 0.85 莫耳當量，較佳係與少於 0.80 莫耳當量，及更特別係少於 0.75 莫耳當量之 C₉ 醇反應。以此方式獲得的是相對於該酯 III 具有明顯更有利（即，較低）膠凝溫度，同時相對於該酯 I 展現較低因此經改良之揮發性的酯混合物。可以聚合物（例如 PVC）特別有效地處理之酯混合物係於該酯 I 係與基於其酯官能之數目計為少於 0.85 莫耳當量，較佳係與少於 0.80 莫耳當量，及更特別的是與少於 0.75 莫耳當量之 C₉ 醇反應時獲得。

較佳係該酯 I 係與基於其酯官能之數目計為多於 0.05 莫耳當量，較佳係與多於 0.10 莫耳當量，及更特別的是與多於 0.20 莫耳當量之 C₉ 醇反應。在許多情況下，該酯 I 係與基於其酯官能之數目計為多於 0.25 莫耳當量，較佳係與多於 0.30 莫耳當量，及更特別的是與多於 0.35 莫耳當量之 C₉ 醇反應。此意指可能獲得適於製造具有特別良

好貯存品質之含酯混合物及含聚合物的組成物之酯混合物。若該酯 I 係與基於其酯官能之數目計為多於 0.70 莫耳當量，較佳係與多於 0.75 莫耳當量，及更特別的是與多於 0.80 莫耳當量之 C₉ 醇反應，揮發性方面之性質可進一步改善。

本發明之較佳主題為製備本發明之酯混合物的方法，本發明之酯混合物包含酯類（對苯二甲酸二戊酯、對苯二甲酸二異壬酯及對苯二甲酸戊基異壬酯），其中該對苯二甲酸二戊酯係與基於其酯官能之數目計為少於 1 莫耳當量之異壬醇反應，並伴隨在沸點加熱。在此情況下，對苯二甲酸二戊酯較佳係與基於其酯官能之數目計為多於 0.05 莫耳當量但少於 0.98 莫耳當量，與少於 0.95 莫耳當量，與少於 0.90 莫耳當量，與少於 0.85 莫耳當量，與少於 0.80 莫耳當量，與少於 0.75 莫耳當量，與少於 0.70 莫耳當量或與少於 0.65 莫耳當量之醇（異壬醇）反應，並伴隨在沸點加熱。此處較佳係該等戊基及該等異壬基具有稍早於前文針對根據本發明之混合物闡明的異構物組成。

為了改善從製備方法 II 之反應所形成的酯混合物之組成的可控制性，在該反應期間該反應混合物較佳包含少於 0.5 莫耳當量，更佳係少於 0.1 莫耳當量，非常佳為少於 0.05 莫耳當量，及更特別的是少於 0.01 莫耳當量之醇，該醇不為 C₅ 醇且不為 C₉ 醇，該莫耳當量係基於存在該反應混合物中之所有醇整體（對應於 1 莫耳當量）計。

若本發明方法中所使用之包含酯 I 及 C₉ 醇的組分包

含少於 50 體積%，較佳為少於 35 體積%，及更特別的是少於 20 體積%，更佳為少於 10 體積%之不為酯 I 與 C₉ 醇的反應之反應物、最終產物或中間物的組分，待製備之酯混合物的所希望組成可控制至特別良好效果，且在減少的處理工作之後該方法產物直接用作塑化劑或塑化劑組分。更特別的，該方法中所使用之包含酯 I 及 C₉ 醇的組分較佳應包含少於 15 重量%，更佳為少於 10 重量%，及更特別的是少於 5 重量%之含酸基的對苯二甲酸衍生物，以免妨害轉酯化之可控制性。

可用於製備方法 II 中之溶劑為例如甲苯、二甲苯、苯、環己烷或 C₅ 醇，較佳係在各情況下基於整體反應混合物計為至多 50 體積%，更佳係至多 35 體積%，及更特別的是至多 20 體積%。然而，不為 C₅ 醇之溶劑的分率各情況下基於整體反應混合物計為低於 30 體積%，更佳為低於 15 體積%，及更特別的是低於 1 體積%。

在較佳實施態樣中，製備方法 II 使得能提供根據本發明之混合物，其中該等酯 I、II 及 III 之莫耳比與若假設 C₉ 醇基完全併入所獲得的統計測定之期望值偏差少於 15 點，較佳係少於 10 點，該點值對應於介於統計期望值與在該酯混合物中上述酯的莫耳分率總和加總為 100 之情況下該酯混合物中每一種個別酯的實際莫耳分率之間的差異的全部量之總和。

本文所闡明之製備方法 II 及製備方法 III 較佳係在一種觸媒或二或多種觸媒存在下，使用例如使用布忍斯特酸

路易斯酸或鹼作為觸媒進行。已發現特別適用之觸媒為硫酸、甲磺酸、對甲苯磺酸、金屬或其化合物。特佳之金屬觸媒的實例為錫粉末、氧化錫（II）、草酸錫（II）、鈦酸酯，諸如鈦酸四異丙酯或鈦酸四丁酯，以及鋯酯，諸如鋯四丁酯，以及甲氧化鈉及甲氧化鉀。

製備方法 II 可於技術人士已知之典型酯化設備中，在慣用製程條件下進行。該方法較佳係在 C_5 醇之沸點或高於其沸點的溫度發生，在盛行壓力下藉由蒸餾使該反應中所形成的 C_5 醇從該反應混合物移除。為了確保定量回收位於氣相中之 C_9 醇，該酯化設備較佳應配備有塔。本文內容中之用語「定量」係指基於所使用之 C_9 醇的量計為多於 80 莫耳%，較佳為多於 90 莫耳%，及更特別的是多於 95 莫耳%之範圍。

在該方法之一特佳實施態樣中，較佳藉由蒸餾，在該方法期間從該反應容器移除多於 50 莫耳%，較佳為多於 60 莫耳%，更佳為多於 70 莫耳%，非常佳為多於 80 莫耳%，較係多於 90 莫耳%，特佳係 95 莫耳%，及更特別的是多於 99 莫耳%之在該方法期間形成的 C_5 醇。

GC 層析圖較佳係在該反應期間以規律間隔製備，以供觀察該反應進程。當該 GC 層析圖顯示殘留 C_9 醇含量基於 GC 層析圖之所有酯的總面積計為少於 5.0 面積%，較佳為少於 2 面積%，更佳為少於 1.0 面積%，及更特別的是少於 0.5 面積%時，較佳係藉由冷卻及/或破壞觸媒、藉由添加水及/或鹼中止該反應。

特佳係當從該反應容器移除多於 60 莫耳%，較佳為多於 70 莫耳%，更佳為多於 80 莫耳%，較佳為多於 90 莫耳%，及更特別的是多於 95 莫耳%之在該反應期間形成的 C₅ 醇時破壞觸媒。此處之觸媒破壞較佳係反應監測例如在 GC 層析圖監測反應進程中藉由發現殘留 C₉ 醇含量基於 GC 層析圖之所有酯的總面積計為少於 5.0 面積%，較佳為少於 2.0 面積%，及更特別的是少於 1.0 面積%，而發現反應進程為 90%之後發生。

在該反應結束之後，反應混合物係以慣用方式處理。

本發明較佳主題係製備根據本發明之包含酯 I、II 及 III 的酯混合物之方法，其中使該酯 I 與基於其酯官能之數目計少於 1 莫耳當量的具有 9 個碳原子之醇或二或多種醇反應，較佳係在觸媒存在下進行，伴隨在沸點加熱，且較佳係藉由蒸餾從該反應容器移除多於 80 莫耳%，較佳為多於 90 莫耳%，及更特別的是多於 95 莫耳%在該方法期間形成之 C₅ 醇。

在該情況下，較佳地，酯 I、II 及 III 之莫耳比與當假設 C₉ 醇基完全併入時所獲得的統計測定之期望值偏差少於 15 點，較佳係少於 10 點，該點值對應於介於統計期望值與在該酯混合物中上述酯的莫耳分率總和加總為 100 之情況下該酯混合物中每一種個別酯的實際莫耳分率之間的差異的全部量之總和。

製備方法 III

在本發明另一實施態樣中，根據本發明之混合物係藉由使對苯二甲酸或對苯二甲酸衍生物與 C_5 及 C_9 醇之混合物反應而製備，其中該 C_5 醇係以過量使用，但該 C_9 醇之用量係對應於待製備的根據本發明之酯混合物中的 C_9 酯基之量。

本發明主題為製備本發明之包含對苯二甲酸酯 I、II 及 III 的酯混合物之方法，其係藉由反應對苯二甲酸或其不含酯基 $COOR$ 的衍生物（其中基團 R 之醇 ROH 在指定壓力下的沸點高於在相同壓力下之基團 R_1OH 的醇 R_1OH ）與量為 (m_1+s_1) 之 R_1OH 及量為 m_2 之 R_2OH ，該反應混合物係在沸點加熱，其中

m_1 及 m_2 對應於引入對苯二甲酸或其衍生物之醇基 OR_1 （ C_5 醇基）及 OR_2 （ C_9 醇基）的莫耳當量，且

s_1 大於 0。

在製備方法 III 中，所使用之對苯二甲酸衍生物較佳為對苯二甲酸二甲酯（DMT）。

已針對根據本發明之混合物說明，此處之 R_1 為 2-甲基丁基、3-甲基丁基及/或正戊基。更佳地，在式 I、II 及 III 中之 R_1 為異戊基，用語異戊基如前文界定，係描述二或多種異構戊基的混合物。 R_2 較佳為壬基、正壬基、或一或多種異構壬基（稱為異壬基）之混合物。在此情況下，此外，該等戊基及該等異壬基較佳具有稍早於前文針對根據本發明之混合物闡明的異構物組成。更佳地， R_1 為 2-甲基丁基、3-甲基丁基、正戊基及/或異戊基，且 R_2 為異

壬基，該混合物基於該等酯 I、II 及 III 整體計較佳係包含少於 80 莫耳%，更佳為少於 70 莫耳%，及更特別的是少於 60 莫耳%之酯 III。

在該製備方法 III 中之一實施態樣中，對苯二甲酸係經酯化以產生酯 I、II 及 III。

在該製備方法 III 中之另一實施態樣中，對苯二甲酸二酯係經轉酯化以產生酯 I、II 及 III。在該情況下，該二酯之醇 ROH 在界定壓力下的沸點低於相同壓力之 C₅ 醇。

較佳地，在製備方法 III 過程中引入對苯二甲酸或其衍生物之醇基為至少 95 莫耳%，較佳係至少 98 莫耳%，更佳為至少 99 莫耳%，及更特別的是 100 莫耳%之範圍的酯官能的一部分。

在製備方法 III 中，對苯二甲酸或其衍生物係與 C₅ 及 C₉ 醇之混合物反應。令人意外地發現，當 C₅ 醇相對於嵌入該對苯二甲酸或其衍生物之 C₅ 醇基過量使用，但所使用之 C₉ 醇對應於待嵌入之 C₉ 醇基的量時，包含非混合酯 I 及 III 以及混合酯 II 之所得酯混合物的組成可以目標明確之方式在對該 C₉ 醇基的完全併入之情況產生的統計範圍內調整。反之，若酯化或轉酯化中，相對於待嵌入之醇基使用過量的 C₅ 及 C₉ 醇混合物，或若對苯二甲酸或其衍生物係與 C₉ 醇相對於待嵌入該對苯二甲酸或其衍生物之 C₉ 醇基過量使用的 C₅ 及 C₉ 醇之混合物反應，不可能控制該酯混合物組成。

因此，可能藉由製備方法 III 提供酯混合物，該酯混

合物中含有預定定量分布之不同醇基，此外，其中該存在之酯的定量分布在前述統計範圍內可以目標明確之方式控制。因此，可能提供其組成展現比先前技術中所述藉由未受控制方法所製備之酯混合物與該統計基準所產生之酯分布更小的離差之酯混合物。

當 $x = 1$ 時，該酯混合物組成之統計期望值為表 1 所示者。

表2：統計期望值(製備方法III)

C ₅ OH 對 C ₉ OH 之輸入比 (m ₁ :m ₂)		預期量		
m ₁	m ₂	酯 I [莫耳%]	酯 II [莫耳%]	酯 III [莫耳%]
9	1	81	18	1
8	2	64	32	4
7	3	49	42	9
6	4	36	48	16
5	5	25	50	25
4	6	16	48	36
3	7	9	42	49
2	8	4	32	64
1	9	1	18	81

藉由加總 C₉ 醇基完全併入時產生的統計期望值與在該酯混合物中上述酯的莫耳分率總和加總為 100 之情況下該酯混合物中每一種個別酯的實際莫耳分率之間的差異的全部量，可能量化酯混合物組成與從統計考量所獲得的該酯混合物中之酯類的數量分布之離差。

本發明方法能目標性地提出例如 5 莫耳之對苯二甲酸二甲酯、3.5 莫耳之異戊醇及 9 莫耳之異壬醇的酯混合物，其中存在之酯類的莫耳分布與統計期望值偏差只有 6

點，且其中該酯混合物中之戊基的分率相對於目前戊基分率近至 0.3%。

較佳的，在製備方法 III 中，使用之 C_5 -及 C_9 醇對彼此的比係使 m_1 對 m_2 之比 ($m_1:m_2$) 在 1:9 至 9:1 之範圍，較佳在 2:8 至 8:2 之範圍，更佳在 3:7 至 7:3 之範圍，及更特別的是在 4:6 至 6:4 之範圍。若使用之 C_5 及 C_9 醇使 $m_1:m_2$ 比大於 1.5:8.5，較佳係大於 2:8，及更特別係大於 2.5:7.5，可獲得具有相對於酯 III 遠更有利（即，較低）之膠凝溫度，且同時相對於酯 I 具有較低因而經改良之揮發性的酯混合物。當使用之 C_5 及 C_9 醇使 $m_1:m_2$ 比大於 1.5:8.5，較佳大於 2:8，及更特別係大於 2.5:7.5 時，可獲得以聚合物（例如 PVC）特別有效處理的酯混合物。若使用之 C_5 及 C_9 醇使 $m_1:m_2$ 比小於 8:2，較佳為小於 7.5:2.5，及更特別的是小於 7:3，可獲得適於製造包含酯混合物且包含聚合物的組成物且具有良好貯存品質的酯混合物。當使用之 C_5 及 C_9 醇使 $m_1:m_2$ 比為小於 4:6，較佳為小於 3.5:6.5，及更特別的是小於 3:7 時，揮發性方面之性質變得可能進一步改善。在所有比形成中，忽視 C_5 醇之「過量」 s_1 。

超過待引入對苯二甲酸或其衍生物之醇功能量 m_1 的 C_5 醇之量 s_1 可作為製備方法 III 中的溶劑。若該方法中形成水，則該 C_5 醇之量 s_1 較佳作為水的共沸物形成物，其可作為與 C_5 醇之共沸混合物餾除。該量 s_1 較佳為小於 m_1+m_2 ，特佳為小於 $0.6 \cdot (m_1+m_2)$ ，較佳係小於 $0.5 \cdot (m_1+m_2)$ ，更

佳係小於 $0.4 \cdot (m_1 + m_2)$ ，又更佳為小於 $0.3 \cdot (m_1 + m_2)$ ，及更特別係小於 $0.25 \cdot (m_1 + m_2)$ 。若該量 s_1 大於 $0.05 \cdot (m_1 + m_2)$ ，較佳係大於 $0.10 \cdot (m_1 + m_2)$ ，更佳係大於 $0.15 \cdot (m_1 + m_2)$ ，及更特別係大於 $0.20 \cdot (m_1 + m_2)$ ，此代表製備方法 III 的較佳實施態樣。該量 s_1 較佳為小於 $(m_1 + m_2)$ ，較佳係小於 $0.6 \cdot (m_1 + m_2)$ ，更佳係小於 $0.5 \cdot (m_1 + m_2)$ ，及更特別係小於 $0.4 \cdot (m_1 + m_2)$ ，同時較佳係大於 $0.05 \cdot (m_1 + m_2)$ ，更佳係大於 $0.10 \cdot (m_1 + m_2)$ ，及更特別係大於 $0.15 \cdot (m_1 + m_2)$ 。

本發明之較佳主題為製造包含對苯二甲酸二戊酯、對苯二甲酸二異壬酯及對苯二甲酸戊基（異壬）酯的根據本發明之混合物，其係藉由反應對苯二甲酸或其不含酯基 COOR 的衍生物（具有醇 ROH 在指定壓力下的沸點高於在相同壓力下之戊醇的基團 R）與量為 $(m_1 + s_1)$ 之戊醇及量為 m_2 之異壬醇，該反應混合物係在沸點加熱，且

m_1 及 m_2 對應於引入對苯二甲酸或其衍生物之戊醇及異壬醇的莫耳當量，且

s_1 大於 0 且特別是在 0.05 至 0.60 乘 $(m_1 + m_2)$ 之範圍內。

此處較佳係該等戊基及該等異壬基具有稍早於前文針對根據本發明之混合物闡明的異構物組成。

本發明方法較佳係不使用過量 C_9 醇，而是只使用對應於待引入對苯二甲酸或其衍生物之 C_9 醇基的量，更特別的是對應於待引入作為對苯二甲酸或其衍生物之酯官能的一部分之 C_9 醇基的量之 C_9 醇。此處「不過量」意指基

於所使用之 C_9 醇的量之數目計較佳少於 0.2 莫耳當量，較佳係少於 0.1 莫耳當量，及更特別的是少於 0.05 莫耳當量不併入酯官能。因此，較佳係至少 0.8 莫耳當量，更佳為至少 0.9 莫耳當量，及更特別的是 0.95 莫耳當量之本發明方法中所使用的 C_9 醇係作為 C_9 醇基引入對苯二甲酸或其衍生物。

若本發明方法中所使用之包含對苯二甲酸或其衍生物以及 C_5 及 C_9 醇混合物的組分含有少於 50 體積%，較佳為少於 35 體積%，及更特別的是少於 20 體積%，較佳為少於 10 體積%之不為對苯二甲酸或其衍生物與 C_5 及 C_9 醇之反應中的反應物、最終產物或中間物的組分，待製造之酯混合物的所希望組成可特別有效控制，且該方法產物在較低處理工作量之後，可直接用作塑化劑或塑化劑組分。該等數量值不包括 C_5 醇的量 s_1 。然而，該量不包括不為 C_5 或 C_9 醇的任何醇。為了改善從製備方法 II 之反應所形成的酯混合物之組成的可控制性，在該反應期間該反應混合物較佳包含少於 0.5 莫耳當量，更佳係少於 0.1 莫耳當量，非常佳為少於 0.05 莫耳當量，及更特別的是少於 0.01 莫耳當量之醇，該醇不為 C_5 醇且不為 C_9 醇，該莫耳當量係基於存在該反應混合物中之所有醇整體（對應於 1 莫耳當量）計。

在較佳實施態樣中，製備方法 III 使得能提供根據本發明之混合物，其中該等酯 I、II 及 III 之莫耳比與當假設 C_9 醇基完全併入時產生的統計測定之期望值差異少於

15 點，較佳係少於 10 點，該點值對應於介於統計期望值與在該酯混合物中上述酯的莫耳分率總和加總為 100 之情況下該酯混合物中每一種個別酯的實際莫耳分率之間的差異的全部量之總和。

製備方法 III 可於技術人士已知之典型酯化設備中，在慣用製程條件下進行。該方法較佳係在 C_5 醇之沸點或高於其沸點、在水之沸點或高於其沸點及/或從 C_5 醇和水所形成之共沸物的沸點或高於其沸點的溫度發生，因此 C_5 醇之過量 s_1 可在盛行壓力下從反應混合物餾除。若該方法係在具有塔之設備中進行，從製備方法 III 所得的酯混合物之組成的控制性可獲得進一步改善。此較佳係確保在該反應期間存在於氣相中的 C_9 醇儘可能定量送返該反應容器。本文內容中的用語「定量」意指多於 80 莫耳%，較佳為多於 90 莫耳%，及更特別的是多於 95 莫耳%之範圍。

較佳係從反應空間移除該反應中形成的水。此處，較佳地，該 C_5 醇用作共沸物形成物。在本發明方法中，可隨意地使用其他共沸形成物，例如環己烷、甲苯、苯或二甲苯。

若不同時使用兩種醇 R_1OH 及 R_2OH ，而是至少部分該醇 R_1OH 係比醇 R_2OH 稍後添加至對苯二甲酸或其衍生物，實施本發明方法所需的時間可縮短。因此，較佳地，至少部分該醇 R_1OH 比該醇 R_2OH 晚與對苯二甲酸或其衍生物反應。較佳的，對苯二甲酸（或其衍生物）在沸點與

醇 R_2OH 及隨意地與觸媒一起以及與部分的 R_1OH 一起加熱，剩餘部分該醇 R_1OH 只在稍後時間點添加至該反應混合物。

在該反應期間，較佳地，以規律間隔製備 GC 層析圖，或測定酸值，以觀察該反應的進程。當所使用之對苯二甲酸或所使用之個別酸衍生物的殘餘量降至低於 GC 層析圖中之指定水準時，較佳係例如藉由冷卻及/或破壞該觸媒、藉由添加水及/或鹼而中斷該反應。若在本發明方法中使用對苯二甲酸，則較佳在該反應混合物之酸值降至每 g 反應混合物為低於 1.00 mg 之 KOH 的水準，更特別的是 0.50 mg 之 KOH 的水準之後中斷該反應。該酸值可根據 DIN EN ISO 2114 測定。若對苯二甲酸衍生物（例如對苯二甲酸二甲酯）用於本發明方法中，可能界定所使用之組分本身的量或者中間物的量（例如，在使用二甲基酯之情過下，在該反應混合物內的所有一甲基酯之量）作為反應實質上進行至完成的限制點，該測定較佳係利用 GC 進行。較佳係當在 GC 層析圖中發現所使用之對苯二甲酸或所使用之對苯二甲酸衍生物、或中間物（諸如一甲基酯）的殘餘量基於 GC 層析圖之所有酯的總面積計為少於 5.0 面積%，較佳為少於 2.0 面積%，及更特別的是少於 1.0 面積%時，藉由冷卻及/或破壞觸媒而使該反應中斷。

在製備方法 III 之一特佳實施態樣中，使用觸媒且於該反應混合物中之 C_5 醇的量降至基於整體反應混合物的體積計為少於 15 體積%，較佳為少於 10 體積%，及更特

別的是少於 5 體積%時將其破壞。較佳係該情中之 C_5 醇的量基於整體反應混合物的體積計係降至少於 3 體積%，及更特別的是少於 1 體積%，較佳係藉由蒸餾移除。在本發明方法之一特佳實施態樣中，該方法中使用觸媒且在破壞該觸媒之前，該反應混合物中之 C_5 醇的量基於該 C_5 醇的過量 s_1 計係降至少於 20 莫耳%，較佳為少於 15 莫耳%，更佳為少於 10 莫耳%，及更特別的是少於 5 莫耳%。在該情況下，觸媒破壞較佳係反應監測例如在用以監測反應進程之 GC 層析圖中藉由發現所使用之對苯二甲酸或所使用之酸衍生物、或中間物（諸如一甲基酯）的殘留量基於 GC 層析圖之所有酯的總面積計例如為少於 5.0 面積%，更特別是少於 1.0 面積%，或藉由酸值降至低於界定水準，而顯示反應進程為至少 90%時發生。藉由降低 C_5 醇之量，可更有效控制本發明用以形成與統計期望值具有特別小離差的組成之酯混合物的方法。

本發明較佳主題為製備本發明之酯混合物之方法，其係反應對苯二甲酸或其不含酯基 $COOR$ 的衍生物（其中基團 R 之醇 ROH 在指定壓力下的沸點高於在相同壓力下之基團 R_1 的醇 R_1OH ）與量為 (m_1+s_1) 之 R_1OH 及量為 m_2 之 R_2OH ，其中

- 該反應混合物係在沸點加熱，
- 該反應較佳係在例如藉由該反應混合物之酸值降至低於每 g 反應混合物為 1.00 mg 之 KOH 的水準，更特別為每 g 反應混合物為 0.50 mg 之 KOH 的水準、或藉由

在 GC 層析圖中測定該反應期間所使用之組分的殘餘量、或在該反應期間所形成且消耗之中間物的量基於 GC 層析圖之所有酯的總面積計為為少於 5.0 面積%，特別是少於 1.0 面積%，發現反應進程為至少 90%而中斷，

- 較佳係至少 0.8 莫耳當量，更佳為至少 0.9 莫耳當量，及特別的是至少 0.95 莫耳當量之本發明方法中所使用的醇 R_2OH 係作為 OR_2 基引入對苯二甲酸或其衍生物，

- 使用觸媒且在破壞該觸媒之前，在該反應混合物中 R_1OH 之量係降至基於該醇 R_1OH 的過量 s_1 計為少於 20 莫耳%，較佳為少於 15 莫耳%，更佳為少於 10 莫耳%，及更特別為少於 5 莫耳%，

- 且其中

m_1 及 m_2 對應於待引入該對苯二甲酸或其衍生物之 OR_1 及 OR_2 醇基的莫耳當量，且

s_1 大於 0，及更特別的是在 0.01 至 0.60 乘 (m_1+m_2) 之範圍內。

此處 R_2 較佳為異壬基，此外，較佳地，酯 I、II 及 III 之莫耳比與當假設異壬醇基全完併入時所獲得的統計測定之期望值的差異少於 15 點，較佳係少於 10 點，該點值對應於介於統計期望值與在該酯混合物中上述酯的莫耳分率總和加總為 100 之情況下該酯混合物中每一種個別酯的實際莫耳分率之間的差異的全部量之總和。

本發明另一主題係藉由控制酯混合物中之酯類的定量

分布而使用製備方法 II 及 III 設定該酯混合物之處理相關及/或應用相關性質。經由選擇在製備方法 II 中所使用之 C₉ 醇的量及/或經由選擇在製備方法 III 中之 m₁:m₂ 比影響塑化劑方面的特定塑化劑相關及應用相關性質的實例已於前文內容中提出。

本發明之特佳主題係使用製備方法 II 及 III，藉由控制酯混合物中之酯類的定量分布來控制含有對苯二甲酸酯混合物之塑料溶膠的膠凝溫度及/或控制含有對苯二甲酸酯混合物之試樣的揮發性。圖 1，針對具有存在之酯類的不同定量分布之酯混合物，繪製該等塑料溶膠之膠凝溫度對包含相同酯混合物之膜的相關揮發性。從該圖明顯看出根據本發明之不同混合物的產物（塑料溶膠或膜）具有彼此相異的揮發性及膠凝溫度，且技術人士能根據處理及/或應用所需之揮發性及膠凝溫度而選擇適當的酯混合物組成。此亦適用於其他性質，諸如例如酯混合物與聚合物的相容性，其可藉由包括實驗部分中所述之測試的方法測定；蕭氏硬度（Shore hardness），其描述塑化劑效率；對應塑料溶膠於貯存之後的揮發性改變；或對應塑料溶膠在水上貯存時之質量變化。因此，本發明方法技術人士以目標明確之方式製造具有所希望性質的酯混合物，原因係酯混合物中之酯類的定量分布可利用本發明方法以目標明確之方式調整。

【圖式簡單說明】

圖 1 顯示膠凝溫度相對於具有各種不同組成之酯混合物的揮發性之圖表。

圖 2 顯示膠凝溫度相對於本發明酯混合物及對照物質之揮發性的圖表。

【實施方式】

實驗部分：

醇類之沸騰範圍：

該等實例中所使用之醇或用於該等實例中所使用之酯的合成具有以下沸點範圍：

異壬醇（Evonik Industries AG，純度 > 99%）：在 1013 hPa 下為 205 至 215°C；異戊醇（正戊醇（Sigma Aldrich，純度 > 99%）和 2-甲基丁醇（Sigma Aldrich，純度 > 99%）之 1:1 莫耳比的混合物）在 1013 hPa 下為 129 至 138°C

酸值：

酸值係根據 DIN EN ISO 2114 測定。

GC 分析：

GC 分析以下列參數進行：

毛細管柱：30 m DB5；0.25 mm ID；0.25 μm 膜

載體氣體：氮

管柱壓力：80 kPa

分流：約 23.8 ml/min

烘箱溫度規劃（持續期間：51 分鐘）：50°C（1 分鐘），以 7.5°C/分鐘加熱至 350°C（保持時間 1 分鐘）

注射器：350°C

偵測器（FID）：400°C

注射體積：1.0 μ l

在樣本層析圖中之組分係使用相關酯類之對照溶解識別。接著將該樣本層析圖中之信號標準化成 100 面積%。物質之量的比以從個別信號之面積比的充分近似來測定。

純度係經由產物信號部分為該層析圖中之總面積的比例來測定。

實施例 1（發明實例）：

藉由製備方法 III 使對苯二甲酸二甲酯與異戊醇及異壬醇（13:46:41）轉酯化

對包含具有攪拌器之攪拌燒瓶、傾斜管、溫度計及 20 cm 之封部安裝蒸餾頭的 Raschig 環塔之轉酯化設備裝填對苯二甲酸二甲酯（Sigma Aldrich，純度 > 99%）（ m_b ）及醇 R_1OH （ m_1+s_1 ）和 R_2OH （ m_2 ）。藉由傾斜管以氮（6 l/h）沖洗該設備至少一小時。然後添加基於該對苯二甲酸酯之質量計為 0.25 重量%之鈦酸四正丁酯（Sigma Aldrich，純度 > 97%）。然後在沸點加熱該混合物且餾除低沸點組分。當頂部溫度急劇升高時，藉由關閉

排放塞中斷蒸餾，且使該反應保持在回流直到建立穩定沸騰溫度。在該反應期間，液相溫度曼 T^1 升高至 T^2 。在該反應期間，每小時製備 GC 層析圖。當層析圖顯示殘餘一甲基酯含量基於 GC 層析圖之所有酯的總面積計為少於 0.5 面積%時，該反應混合物中之剩餘揮發性組分就在減壓（約 1 mbar）下在液相溫度 T^3 下餾除，使殘餘醇 R_1OH 含量基於醇 R_1OH 之過量 s_1 計為少於 5 莫耳%（根據 GC）。然後在停止加熱情況下藉由在 20 mbar 引入氮而將燒瓶之內容物冷卻至約 80°C。測定該燒瓶內容物之酸值。對應於該結果，該反應介質係藉由緩慢滴加化學計量數量之鹼三次（10%濃度之 NaOH 水溶液）且在引入氮（6 l/h）的情況下在 80°C 攪拌 15 分鐘而中和。然後將該批料從周圍壓力緩慢抽空至約 1 mbar，此時將其加熱至約 120°C，且利用在恆定溫度引入氮來分離剩餘的揮發性成分。該氮流係設為使壓力不過過 20 mbar。當 GC 分析指示殘餘醇含量少於 0.025 面積%時，就停止加熱且在減壓下及引入氮之情況下冷卻至 80°C。在該溫度下，經由具有濾紙之 Büchner 漏斗過濾產物，且利用減壓將助濾劑濾餅（Perlite 型 D14）預壓至吸濾瓶中。對該濾液進行 GC 分析，以測定該產物的純度（R）及組成。

表3：實施例1之測量值及計算值(製備方法III)

R ₁ OH=異戊醇 R ₁ OH之量= R ₁ 當量之量(C ₅)	m ₁ +s ₁ = 441 g 5莫耳
R ₂ OH=異壬醇 R ₂ OH之量= R ₂ 當量之量(C ₉)	m ₂ = 720 g 5莫耳
對苯二甲酸二甲酯 量 →酯官能之量	m _b = 776 g 4莫耳 8莫耳
預期之R ₁ 官能的莫耳分率作為酯混合物中之R ₁ 及R ₂ 官能的比例(完全併入R ₂ 時)	8莫耳-5莫耳=3莫耳 對應於37.5莫耳%
比m ₁ :m ₂	3:5對應於0.375:0.625
s ₁	5莫耳-(8莫耳-5莫耳)=2莫耳
T ¹ →T ² (液相溫度起始→結束)	139℃→215℃
T ³	190℃
R(純度)	99.7%
完全併入C ₉ 之統計期望值： (C ₅ /C ₅):(C ₅ /C ₉):(C ₉ /C ₉)	14.1:46.8:39.1 (預期之C ₅ 分率：37.5%)
藉由GC分析之組成 (C ₅ /C ₅):(C ₅ /C ₉):(C ₉ /C ₉)	13.4:45.8:40.8 (C ₅ 分率：36%) 離差： 14.1-13.4 + 46.8-45.8 + 39.1-40.8 =3.4

獲得 1270 g 之經處理酯混合物 13:46:41 (C₅/C₉ TM 13:46:41) 。

實施例 2 (發明實例)：

藉由製備方法 III 使對苯二甲酸二甲酯與異戊醇及異壬醇 (1:19:81) 轉酯化

實施例 2 係如實施例 1 所述般進行。

表4：實施例2之測量值及計算值(製備方法III)

R ₁ OH=異戊醇 R ₁ OH之量= R ₁ 當量之量(C ₅)	m ₁ +s ₁ = 308.5 g 3.5莫耳
R ₂ OH=異壬醇 R ₂ OH之量= R ₂ 當量之量(C ₉)	m ₂ = 1296 g 9莫耳
對苯二甲酸二甲酯 量 →酯官能之量	m _b = 970 g 5莫耳 10莫耳
預期之R ₁ 官能的莫耳分率作為酯混合物中之R ₁ 及R ₂ 官能的比例(完全併入R ₂ 時)	10莫耳-9莫耳=1莫耳 對應於10莫耳%
比m ₁ :m ₂	0.1:0.9
s ₁	3.5莫耳-(10莫耳-9莫耳)=2.5莫耳
T ¹ →T ² (液相溫度起始→結束)	131°C→200°C
T ³	200°C
R(純度)	> 99.9%
完全併入C ₉ 之統計期望值： (C ₅ /C ₅):(C ₅ /C ₉):(C ₉ /C ₉)	1.0:18.0:81.0 (預期之C ₅ 分率：10%)
藉由GC分析之組成 (C ₅ /C ₅):(C ₅ /C ₉):(C ₉ /C ₉)	1.0:18.5:80.5 (C ₅ 分率：10.3%) 離差： 1-1 + 18.5-18.0 + 80.5-81.0 = 1

獲得 1902 g 之經處理酯混合物 -1:19:81。

實施例 3（發明實例）：

藉由製備方法 II 使對苯二甲酸二異戊酯與異壬醇
（11:45:44）轉酯化

如實施例 1 所述進行實施例 3，但以對苯二甲酸二異
戊酯（量為 m_E 之酯 I）及異壬醇（量為 m_{R2}）與所述觸媒
（以所述之觸媒量）代替所使用之反應物異戊醇、異壬醇

及對苯二甲酸二甲酯。藉由當每小時記錄之 GC 層析圖顯示殘餘異壬醇含量基於全部對苯二甲酸酯的總面積計少於 0.5 面積 % 時，就藉由冷卻中止反應，且剩餘揮發性組分係在減壓（約 1 mbar）下餾除至使殘餘異戊醇含量基於在該反應中所形成的異戊醇之量計為低於 5 莫耳 %（經由 GC 中之面積 % 計，基於含有異壬醇基之對苯二甲酸酯）的範圍。

表5：實施例3之測量值及計算值(製備方法II)

m _E (對苯二甲酸二異戊酯)	1697 g(5.5莫耳)
R ₁ 當量之量(C ₅)	11莫耳
m _{R2} (異壬醇) R ₂ OH之量= R ₂ 當量之量(C ₉)	1025 g 7.1莫耳
所使用之定量比 R ₁ 當量對R ₂ 當量(C ₅ :C ₉)	11.0:7.1對應於2.0:1.3
T ¹ →T ² (液相溫度起始→結束)	170°C→202°C
R(純度)	> 99.9%
完全併入C ₉ 之統計期望值： (C ₅ /C ₅):(C ₅ /C ₉):(C ₉ /C ₉)	12:46:42 (預期之C ₅ 分率：35%)
藉由GC分析之組成 (C ₅ /C ₅):(C ₅ /C ₉):(C ₉ /C ₉)	11:45:44 (C ₅ 分率：34%) 離差： 12-11 + 46-45 + 42-44 =4

獲得 2102 g 之經處理酯混合物 -11:45:44。

實施例 4（發明實例）：

藉由製備方法 III 使對苯二甲酸二甲酯與異戊醇及異壬醇（97:3:0）轉酯化

實施例 4 係如實施例 1 所述般進行。

表6：實施例4之測量值及計算值(製備方法III)

R ₁ OH=異戊醇 R ₁ OH之量= R ₁ 當量之量(C ₅)	m ₁ +s ₁ = 436 g 4.95莫耳
R ₂ OH=異壬醇 R ₂ OH之量= R ₂ 當量之量(C ₉)	m ₂ = 7.2 g 0.05莫耳
對苯二甲酸二甲酯 量 →酯官能之量	m _b = 388 g 2莫耳 4莫耳
預期之R ₁ 官能的莫耳分率作為酯混合物中之R ₁ 及R ₂ 官能的比例(完全併入R ₂ 時)	4莫耳-0.05莫耳=3.95莫耳 對應於10莫耳%
比m ₁ :m ₂	3.95:0.05對應於0.988:0.012
s ₁	4.95莫耳-(4莫耳-0.05莫耳)=1莫耳
T ¹ →T ² (液相溫度起始→結束)	124°C→195°C
T ³	190°C
R(純度)	99.7%
完全併入C ₉ 之統計期望值： (C ₅ /C ₅):(C ₅ /C ₉):(C ₉ /C ₉)	97.6:2.4:<0.1 (預期之C ₅ -分率：98.7%)
藉由GC分析之組成 (C ₅ /C ₅):(C ₅ /C ₉):(C ₉ /C ₉)	97:3:0 (C ₅ 分率：98.5%) 離差： 97.6-97 + 2.4-3.0 = 1.2

獲得 652 g 之經處理酯混合物 -97:3:0。

實施例 5（發明實例）：

藉由製備方法 III 使對苯二甲酸二甲酯與異戊醇及異壬醇（24:51:25）轉酯化

實施例 5 係如實施例 1 所述般進行。

表7：實施例5之測量值及計算值(製備方法III)

R ₁ OH=異戊醇 R ₁ OH之量= R ₁ 當量之量(C ₅)	m ₁ +s ₁ = 705 g 8莫耳
R ₂ OH=異壬醇 R ₂ OH之量= R ₂ 當量之量(C ₉)	m ₂ = 576 g 4莫耳
對苯二甲酸二甲酯 量 →酯官能之量	m _b = 776 g 4莫耳 8莫耳
預期之R ₁ 官能的莫耳分率作為酯混合物中之R ₁ 及 R ₂ 官能的比例 (完全併入R ₂ 時)	8莫耳-4莫耳=4莫耳 對應於50莫耳%
比m ₁ :m ₂	0.5:0.5
s ₁	8莫耳-(8莫耳-4莫耳)=4莫耳
T ¹ →T ² (液相溫度起始→結束)	123℃→174℃
T ³	180℃
R(純度)	99.9%
完全併入C ₉ 之統計期望值 (C ₅ /C ₅):(C ₅ /C ₉):(C ₉ /C ₉)	25:50:25 (預期之C ₅ 分率：50%)
藉由GC分析之組成 (C ₅ /C ₅):(C ₅ /C ₉):(C ₉ /C ₉)	24:51:25 (C ₅ 分率：49.5%) 離差： 25-24 + 51-50 + 25-25 =2

獲得 1254 g 之經處理酯混合物 -24:51:25 (C₅/C₉ TM 24:51:25) 。

實施例 6（發明實例）：

藉由製備方法 III 使對苯二甲酸二甲酯與異戊醇及異壬醇（44:45:11）轉酯化

實施例 6 係如實施例 1 所述般進行。

表8：實施例6之測量值及計算值(製備方法III)

R ₁ OH=異戊醇 R ₁ OH之量= R ₁ 當量之量(C ₅)	m ₁ +s ₁ = 846 g 9.6莫耳
R ₂ OH=異壬醇 R ₂ OH之量= R ₂ 當量之量(C ₉)	m ₂ = 346 g 2.4莫耳
對苯二甲酸二甲酯 量 →酯官能之量	m _b = 776 g 4莫耳 8莫耳
預期之R ₁ 官能的莫耳分率作為酯混合物中之R ₁ 及R ₂ 官能的比例(完全併入R ₂ 時)	8莫耳-2.4莫耳=5.6莫耳 對應於70莫耳%
比m ₁ :m ₂	5.6:2.4對應於0.7:0.3
s ₁	9.6莫耳-(8莫耳-2.4莫耳)=4莫耳
T ¹ →T ² (液相溫度起始→結束)	123°C→166°C
T ³	190°C
R(純度)	99.8%
完全併入C ₉ 之統計期望值： (C ₅ /C ₅):(C ₅ /C ₉):(C ₉ /C ₉)	49:42:9 (預期之C ₅ 分率：70%)
藉由GC分析之組成 (C ₅ /C ₅):(C ₅ /C ₉):(C ₉ /C ₉)	44:45:11 (C ₅ 分率：66.5%) 離差： 49-44 + 45-42 + 11-9 =10

獲得 1174 g 之經處理酯混合物 -44:45:11 (C₅/C₉ TM 44:45:11) 。

實施例 7 (發明實例)：

對苯二甲酸二甲酯與戊醇及異壬醇 (3:27:70) 之轉酯化

實施例 7 係如實施例 1 所述般進行。獲得之酯混合物具有藉由 GC 分析組成 (C₅/C₅) : (C₅/C₉) : (C₉/C₉) 為

3:27:70 (C₅/C₉ TM 3:27:70)。

對照本發明混合物及非本發明混合物之處理相關及應用相關性質

研究以下包含式 I、II 及 III 之對苯二甲酸酯且具有表 9 所指示之基團 R₁ 及 R₂ 的定義的混合物。

包含該混合酯之混合物（下文縮寫為「TM」）係如實施例 1 所闡述般製備，但使用對應之醇。所使用之醇如下：

乙基己醇：得自 Sigma Aldrich 之 2-乙基己醇，純度 > 99%

丁醇：得自 Sigma Aldrich 之正丁醇，純度 > 99%

丙基庚醇：得自 Evonik Industries 之 2-丙基庚醇，C₁₀ 醇含量 > 99%

十三醇：得自 Sasol 之 Marlipal O13 異十三醇，純度 > 99% C13 醇

該等混合物酯混合物（縮寫為「摻合物」）係藉由摻合個別對苯二甲酸酯而製備。使用之對苯二甲酸酯如下：

DINT：藉由對苯二甲酸二甲酯（Sigma Aldrich，純度 > 99%）與異壬醇（如實驗部分開始處所表示）轉酯化而製備；

DPT：藉由對苯二甲酸二甲酯（Sigma Aldrich，純度 > 99%）與異戊醇（如實驗部分開始處所表示）轉酯化而製備；

DEHT：Eastman 168，Eastman，酯含量> 99%；

對苯二甲酸二丁酯：對苯二甲酸二（正丁）酯，
Eastman DBT，Eastman，酯含量> 99%。

表9：所研究之對苯二甲酸混合物(以下稱為「來自表9之個別塑化劑」)

R ₁	R ₂	酯I：II：III之 莫耳比		名稱
乙基己基	乙基己基			DEHT
異壬基	異壬基			DINT
異戊基	異戊基			DPT
丁基	乙基己基	3:27:70	類似實施例 1地製備	C ₄ /C ₈ TM 3:27:70
丁基	乙基己基	11:45:24	II	C ₄ /C ₈ TM 11:45:24
丁基	乙基己基	26:50:24	II	C ₄ /C ₈ TM 26:50:24
異戊基	異壬基	3:27:70	實施例 7	C ₅ /C ₉ TM 3:27:70*
異戊基	異壬基	13:46:41	實施例 1	C ₅ /C ₉ TM 13:46:41*
異戊基	異壬基	24:51:25	實施例 5	C ₅ /C ₉ TM 24:51:25*
異戊基	異壬基	44:45:11	實施例 6	C ₅ /C ₉ TM 44:45:11*
異戊基	丙基庚基	53:40:7	類似實施例 1地製備	C ₅ /C ₁₀ TM 53:40:7
異戊基	丙基庚基	36:49:15	II	C ₅ /C ₁₀ TM 36:49:15
異戊基	丙基庚基	18:50:32	II	C ₅ /C ₁₀ TM 18:50:32
異戊基				
異戊基	十三基	49:44:7	II	C ₅ /C ₁₃ TM 49:44:7
異戊基	十三基	29:52:19	II	C ₅ /C ₁₃ TM 29:52:19
異戊基	十三基	13:51:36	II	C ₅ /C ₁₃ TM 13:51:36
乙基己基	異壬基	7:38:55	II	C ₈ /C ₉ TM 7:38:55
乙基己基	異壬基	20:46:34	II	C ₈ /C ₉ TM 20:46:34
乙基己基	異壬基	38:48:14	II	C ₈ /C ₉ TM 38:48:14
乙基己基	丙基庚基	7:38:55	II	C ₈ /C ₁₀ TM 7:38:55
乙基己基	丙基庚基	17:49:34	II	C ₈ /C ₁₀ TM 17:49:34
乙基己基	丙基庚基	35:48:17	II	C ₈ /C ₁₀ TM 35:48:17
丁基	異壬基	10:0:90	DINT與對苯二甲酸 二丁酯之混合物	C ₄ /C ₉ 摻合物 10:90
丁基	異壬基	20:0:80	II	C ₄ /C ₉ 摻合物 20:80
丁基	異壬基	40:0:60	II	C ₄ /C ₉ 摻合物 40:60
丁基	異壬基	60:0:40	II	C ₄ /C ₉ 摻合物 60:40
丁基	異壬基	80:0:20	II	C ₄ /C ₉ 摻合物 80:20
異戊基	異壬基	80:0:20	DINT與DPT之混合物	C ₅ /C ₉ 摻合物 80:20
異戊基	異壬基	60:0:40	II	C ₅ /C ₉ 摻合物 60:40
異戊基	異壬基	40:0:60	II	C ₅ /C ₉ 摻合物 40:60
異戊基	異壬基	20:0:80	II	C ₅ /C ₉ 摻合物 20:80

* 發明實例

實施例 8：

製備混合物之塑料溶膠

絕緣 PVC 塑料溶膠，其係用於例如製造鋪地材料之面塗膜。該塑料溶膠配方中之數值係以質量份計。聚合物組成物之配方係列於表 10。

表10：塑料溶膠配方

PVC (Vestolit B 7021 — Ultra；得自Vestolit)	100
來自表9之個別塑化劑	50
環氧化大豆油作為共安定劑 (Drapex 39，來自Galata)	3
基於Ca/Zn之熱安定劑(Mark CZ 149，來自Galata)	2

數值以phr計(phr=每百份樹脂之份數)

在添加之前將酯混合物加熱至 25℃。首先將液態成分然後將粉碎成分秤出至 PE 杯中。使用軟膏刮刀以手動方式攪拌該混合物至不再存在任何未濕潤的粉末。然後將該混合燒杯夾至溶解器攪拌器的夾緊裝置。在將該攪拌器浸沒於該混合物中之前，旋轉速度設為每分鐘 1800 轉。在啟動該攪拌器之後，攪拌該混合物直到該熱感應器之數位顯示器的溫度達到 30.0℃ 為止。此確使以經界定的能量輸入將塑料溶膠均質化。然後，在氣候受控制箱中使該塑料溶膠立刻均衡至 25.0℃ 以供進一步研究。

實施例 9：

塑料溶膠之膠凝溫度

塑料溶膠之膠凝特徵係使用 Physica MCR 101 以振盪模式，使用在剪應力控制下操作之平行板分析系統（PP25）檢查。將額外加熱罩連接至該系統以達到均勻熱分布及均一樣本溫度。

設定以下參數：

模式：溫度梯度

起始溫度 25°C

最終溫度 180°C

加熱/冷卻速率 5°C /分鐘

振盪頻率 4-0.1 Hz 對數斜率

頻率循環 ω : 10 1/s

測量點之數目： 63

測量點持續期間： 0.5 min

自動間隙調整 F: 0 N

恆定測量點持續期間

間隙寬度 0.5 mm

分析過程：

將刮刀用以將數克待分析之無氣泡塑料溶膠施加至該分析系統的下板。進行此步驟時，在該分析系統組裝之後，確保一些塑料溶膠可能從該分析系統滲出（在任何方向均不多於約 6 mm）。隨後將該加熱罩定位在該樣本上並開始分析。在 24 小時（於 25°C 在來自 Memmert 之溫度控制箱中貯存）後測定該塑料溶膠之所謂複數黏度與溫度

的函數關係。

被視為膠凝之度量係複數黏度顯著提高。用於比較之值因此為達到 1000 Pa·s 之塑料溶膠黏度時的溫度。

表11：在24小時之後塑料溶膠膠凝，於塑料溶膠黏度達到10³ Pa·s時的溫度°C(簡而言之，膠凝溫度)

塑化劑	膠凝溫度[°C]	塑化劑	膠凝溫度[°C]
DEHT	87.3	C ₈ /C ₉ TM 7:38:55	106.3
DINT	109.2	C ₈ /C ₉ TM 20:46:34	100.3
DPT	69.8	C ₈ /C ₉ TM 38:48:14	96.0
C ₄ /C ₈ TM 3:27:70	82.4	C ₈ /C ₁₀ TM 7:38:55	126.7
C ₄ /C ₈ TM 11:45:24	77.6	C ₈ /C ₁₀ TM 17:49:34	118.9
C ₄ /C ₈ TM 26:50:24	72.7	C ₈ /C ₁₀ TM 35:48:17	109.0
C ₅ /C ₉ TM 3:27:70*	91.9	C ₄ /C ₉ 摻合物 10:90	100.3
C ₅ /C ₉ TM 13:46:41*	83.4	C ₄ /C ₉ 摻合物 20:80	88.0
C ₅ /C ₉ TM 24:51:25*	79.8	C ₄ /C ₉ 摻合物 40:60	77.8
C ₅ /C ₉ TM 44:45:11*	76.1	C ₄ /C ₉ 摻合物 60:40	71.4
		C ₄ /C ₉ 摻合物 80:20	66.7
C ₅ /C ₁₀ TM 53:40:7	76.1		
C ₅ /C ₁₀ TM 36:49:15	80.0	C ₅ /C ₉ 摻合物 80:20	73.2
C ₅ /C ₁₀ TM 18:50:32	86.4	C ₅ /C ₉ 摻合物 60:40	76.7
		C ₅ /C ₉ 摻合物 40:60	81.8
C ₅ /C ₁₃ TM 49:44:7	79.7	C ₅ /C ₉ 摻合物 20:80	89.6
C ₅ /C ₁₃ TM 29:52:19	90.0		
C ₅ /C ₁₃ TM 13:51:36	119.1		

* 發明實例

就本發明之酯混合物，圖 1 繪製來自表 11 之塑料溶膠的膠凝溫度相對於包含相同酯混合物（來自實施例 11，表 12）之膜的相關揮發性。

實施例 10：

製造酯混合物之膜

實施例 8 中所製備之塑料溶膠每一者均經處理以產生 1 mm 厚的膜。

為此，首先將所有高光澤脫離紙（得自義大利 Sappi）修剪成 30 x 44 cm 之大小並嵌入用於 Mathis 烘箱之 LTSV 塗覆安裝的夾緊框架。隨後將該夾緊框架置於導引框架上，該 Mathis 烘箱（型號 LTF）係調整至 200°C，並在達到該溫度時，將該框架預熱 15 秒。刮刀塗覆器隨後係嵌入該夾緊工具，且刮刀間隙經由初步實驗調整以使膠凝結束後之膜厚度為 1 mm（+/- 0.05 mm）。將黏著帶安裝在紙之前緣以捕捉過量糊劑。然後將該糊劑施加在該塗覆刮刀之前，藉由拉伸該具有該塗覆刮刀的導引框架而展布在該夾緊之脫離紙上（速度為約 3 m/min）。然後移除該塗覆刮刀，並除去過量糊劑。然後將熔融輥降下並將該夾緊框架移入該烘箱。在膠凝已發生（於 200°C 2 分鐘）之後，該框架再次從該烘箱移出，且在冷卻之後從該紙移除該膜。

從受測的每一配方之膜衝孔出 3 個 10 cm² 的圓形。此外，用剪刀徑向剪該等圓形（剪 2 刀各 5 mm）。該等圓形係在乾燥器（填裝有機 KC 乾燥球）中調理半個小時然後秤重。

實施例 11：

來自實施例 10 之膜在活性碳上貯存時之質量損失

將錫罐（1 l，瘦高形）的蓋刺穿以使得能發生壓力交換。錫罐底部經 120 ml 之活性碳覆蓋。該測試中所使用之活性碳（得自 Roth 之第 774408 號）係在乾燥箱中於蒸發皿中在 $100 \pm 1^\circ\text{C}$ 事先乾燥 6 小時，且在短暫冷卻之後使用。將該第一樣本圓形置於活性碳之中間。將另外 120 ml 之活性碳放置於該樣本圓形上。該等錫罐總共分層經 480 ml 之活性碳及三個樣本圓填充。將該等錫罐之蓋放置於該等罐上且不施壓。

將經填充之錫罐貯存於 $100 \pm 1^\circ\text{C}$ 的溫度控制箱中 3 天。在貯存之後，利用分析刷從該等圓形移除活性碳，且將該等圓形貯存在乾燥器中 30 分鐘以供冷卻然後秤重。

在秤重之後，再次將該等樣本圓形與活性碳分層置入該等錫罐中。為此目的，確保該等樣本圓形再次分配至相同活性碳及相同罐。再次將該等罐置於溫度控制箱中。在總共 7 天之後，如已描述，再次秤重該等樣本。

計算各樣本圓形之質量的百分比改變，及計算每一配方 3 個圓形的平均值。

表12：在活性碳上貯存之質量損失，以質量%計(揮發性)

塑化劑	揮發性 [質量%]	塑化劑	揮發性 [質量%]
DEHT	10.4	C ₈ /C ₉ TM 7:38:55	5.3
DINT	5.4	C ₈ /C ₉ TM 20:46:34	5.9
DPT	26.2	C ₈ /C ₉ TM 38:48:14	6.9
C ₄ /C ₈ TM 3:27:70	16.1	C ₈ /C ₁₀ TM 7:38:55	3.5
C ₄ /C ₈ TM 11:45:24	19.5	C ₈ /C ₁₀ TM 17:49:34	4.8
C ₄ /C ₈ TM 26:50:24	23.7	C ₈ /C ₁₀ TM 35:48:17	5.4
C ₅ /C ₉ TM 3:27:70*	8.1	C ₄ /C ₉ 摻合物 10:90	7.2
C ₅ /C ₉ TM 13:46:41*	11.0	C ₄ /C ₉ 摻合物 20:80	10.2
C ₅ /C ₉ TM 24:51:25*	15.3	C ₄ /C ₉ 摻合物 40:60	16.2
C ₅ /C ₉ TM 44:45:11*	20.8	C ₄ /C ₉ 摻合物 60:40	22.0
		C ₄ /C ₉ 摻合物 80:20	27.1
C ₅ /C ₁₀ TM 53:40:7	22.3		
C ₅ /C ₁₀ TM 36:49:15	20.3	C ₅ /C ₉ 摻合物 80:20	24.7
C ₅ /C ₁₀ TM 18:50:32	15.5	C ₅ /C ₉ 摻合物 60:40	20.7
		C ₅ /C ₉ 摻合物 40:60	15.5
C ₅ /C ₁₃ TM 49:44:7	18.4	C ₅ /C ₉ 摻合物 20:80	10.0
C ₅ /C ₁₃ TM 29:52:19	11.8		
C ₅ /C ₁₃ TM 13:51:36	7.2		

* 發明實例

圖 1 係各種不同組成之酯混合物的膠凝溫度相對於揮發性之圖表（資料點處表示的是個別酯混合物中之對苯二甲酸二異戊酯：對苯二甲酸異戊基異壬酯：對苯二甲酸異壬酯的相關莫耳比）。

就本發明之酯混合物，圖 1 繪製來自表 11 之實施例 9 的塑料溶膠之膠凝溫度相對於包含相同酯混合物（來自表 12）的膜之相關揮發性。

圖 2 係比對本發明酯混合物及對照物質之膠凝溫度相

對於揮發性。

就包括在表 9 中的所有塑化劑系統，圖 2 顯示膠凝溫度相對於揮發性之圖表。從該圖表明顯看出，本發明酯混合物之產物（塑料溶膠/膜）相較於其他聚合物可相容之無 SVOC 塑化劑系統具有較低之膠凝溫度同時具有較低之揮發性，因此，相較於該等塑化劑系統，展現經改良之處理及應用性質。低於約 80°C 之膠凝溫度，只有對苯二甲酸二丁酯和對苯二甲酸二異壬酯之混合物比本發明混合物展現更佳的揮發性與膠凝性質之平衡。然而，該等含 C₄ 醇基之混合物受到本說明書中已闡明的限制，原因係對苯二甲酸二丁酯分類為 SVOC 組分，因此無法作為本發明混合物的可行替代品，更遑論比本發明混合物有所改善。根據圖 2，高於約 94°C 之膠凝溫度，C₈ 及 C₉ 烷基之酯混合物顯示出具有比本發明混合物更佳的揮發性與膠凝性質之平衡。然而，如以下顯示（實施例 12），C₈ 及 C₉ 烷基之酯混合物較現與聚合物之不良相容性及相對低效率（見實施例 14 關於蕭氏硬度）。

實施例 12：

藉由迴路測試（Loop Test）（根據 ASTM D3291）測定混合物與聚合物之相容性

從實施例 10 之 PVC 膜，每個樣本切出三個三角形（5 x 1 cm）。該等三角形係在背面註解。

以手將該等試樣彎曲 180°且放置於測試軌中。以頂面

方向彎曲該等膜三角形。少許空氣（約 0.5 cm）留在該等試樣之間，因此樣本不會彼此接觸。該等彎曲之三角形的末端仍相當程度顯示來自該軌。

該迴路測試軌係貯存在經調理室（空氣溫度 $22^{\circ}\text{C} \pm 1^{\circ}\text{C}$ ；大氣濕度 $50\% \pm 5\%$ ）中。

在 1、7 及 14 天之後，從該軌取出對應的三角形且以手彎曲成相反方向。將在各例中該等試樣最嚴重彎曲之點壓在一張香菸紙上，且如下經由在該香菸紙形成的點評估受測塑化劑的滲出表現：

- 0 = 無滲出
- 0.5 = 極少許滲出
- 1 = 少許滲出
- 2 = 中等滲出
- 3 = 嚴重滲出
- >3 = 非常嚴重滲出

表13：評估滲出表現

塑化劑	評估		
	1 天後	7 天後	14 天後
DEHT	0	0	0
DINT	0.5	2.5	2
DPT	0	0	0
C ₄ /C ₈ TM 3:27:70	0	0	0
C ₄ /C ₈ TM 11:45:24	0	0	0
C ₄ /C ₈ TM 26:50:24	0	0	0
C ₅ /C ₉ TM 3:27:70*	0.5	1	1
C ₅ /C ₉ TM 13:46:41*	0	0	0
C ₅ /C ₉ TM 24:51:25*	0	0	0
C ₅ /C ₉ TM 44:45:11*	0	0	0
C ₅ /C ₁₀ TM 53:40:7	0	0	0
C ₅ /C ₁₀ TM 36:49:15	0	0	0
C ₅ /C ₁₀ TM 18:50:32	0	0	0
C ₅ /C ₁₃ TM 49:44:7	0	0	0
C ₅ /C ₁₃ TM 29:52:19	0	0.5	0.5
C ₅ /C ₁₃ TM 13:51:36	0.5	0.5	1
C ₈ /C ₉ TM 7:38:55	0	1	1
C ₈ /C ₉ TM 20:46:34	0	0.5	0
C ₈ /C ₉ TM 38:48:14	0	0.5	0
C ₈ /C ₁₀ TM 7:38:55	2	2.5	2.5
C ₈ /C ₁₀ TM 17:49:34	1.5	2	2
C ₈ /C ₁₀ TM 35:48:17	1	1.5	1.5
C ₄ /C ₉ 摻合物 10:90	0	0.5	0.5
C ₄ /C ₉ 摻合物 20:80	0	0.5	0
C ₄ /C ₉ 摻合物 40:60	0	0	0
C ₄ /C ₉ 摻合物 60:40	0	0	0
C ₄ /C ₉ 摻合物 80:20	0	0	0
C ₅ /C ₉ 摻合物 80:20	0	0	0
C ₅ /C ₉ 摻合物 60:40	0	0	0
C ₅ /C ₉ 摻合物 40:60	0	0	0
C ₅ /C ₉ 摻合物 20:80	0	1	0.5

* 發明實例

表 13 中編撰之評估顯示，若存在大量長鏈鍵基，含有 C₈ 及 C₁₀ 醇基或 C₈ 及 C₉ 醇基或 C₅ 及 C₁₃ 醇基之酯混合物在 PVC 之現有情況下與聚合物的相容性差。因此，此處系統不適於以聚合物「性能定向」處理。

實施例 13：

試樣在水貯存後之質量變化

在不同周圍條件下之抗老化性為塑化劑的另一關鍵品質標準。特別是關於水之表現（吸水性及配方成分溶出）以及關於高溫之表現（配方成分之蒸發及熱老化）對於抗老化性提供深入瞭解。

若塑膠物件大量吸收水，此造成其物理性質以及其光學性質（例如渾濁）二者的變化。因此高吸水性通常是不想要的。溶出表現為配方成分在使用條件下之性能的額外標準。此特別適用於安定劑、塑化劑及/或其成分，原因在於該塑膠物件中之該等配方成分的濃度降低會同時負面影響材料性質且大幅縮減使用壽命。

為了測定耐水性，使用實施例 10 中所製造之膜。切出 3 cm 直徑的圓形膜作為測試樣本。在水中貯存之前，測試樣本係在 25℃ 於裝有乾燥劑（KC 乾燥珠，BASF SE）的乾燥器中貯存 24 小時。使用分析天平測定起始重量（初始質量）至 0.1 mg 之精確度。然後將該等試樣在填充完全去礦物質（DI）水、溫度為 30℃、水面下具有樣本固持器之振動器浴（具有「CDP」Peltier 冷卻器之

WNB 22 型；得自 Memmert GmbH）中貯存 7 天，同時持續攪動。在貯存之後，從該水浴移出該等圓形，乾燥並秤重（=7 天後的重量）。從相對於初始質量的差異計算吸水性。在最終秤重之後，該等試樣再次於在 25℃ 於裝有乾燥劑（KC 乾燥珠）的乾燥器中貯存 24 小時，然後再次秤重（最終重量=乾燥後之重量）。從相對於水貯存之前的初始質量之差異計算因水貯存造成的質量損失百分比（對應於溶出損失）。

表14：試樣在水貯存後之質量變化

塑化劑	乾燥後之 質量變化	塑化劑	乾燥後之 質量變化
DEHT	0.06	C ₈ /C ₉ TM 7:38:55	-0.06
DINT	0.07	C ₈ /C ₉ TM 20:46:34	-0.04
DPT	-0.02	C ₈ /C ₉ TM 38:48:14	-0.03
C ₄ /C ₈ TM 3:27:70	-0.02	C ₈ /C ₁₀ TM 7:38:55	0.08
C ₄ /C ₈ TM 11:45:24	-0.12	C ₈ /C ₁₀ TM 17:49:34	0.08
C ₄ /C ₈ TM 26:50:24	-0.23	C ₈ /C ₁₀ TM 35:48:17	0.06
C ₅ /C ₉ TM 3:27:70*	0.06	C ₄ /C ₉ 摻合物 10:90	-0.10
C ₅ /C ₉ TM 13:46:41*	0.03	C ₄ /C ₉ 摻合物 20:80	-0.17
C ₅ /C ₉ TM 24:51:25*	0.05	C ₄ /C ₉ 摻合物 40:60	-0.35
C ₅ /C ₉ TM 44:45:11*	0.01	C ₄ /C ₉ 摻合物 60:40	-0.49
		C ₄ /C ₉ 摻合物 80:20	-0.65
C ₅ /C ₁₀ TM 53:40:7	-0.06		
C ₅ /C ₁₀ TM 36:49:15	-0.04	C ₅ /C ₉ 摻合物 80:20	-0.04
C ₅ /C ₁₀ TM 18:50:32	-0.03	C ₅ /C ₉ 摻合物 60:40	-0.02
		C ₅ /C ₉ 摻合物 40:60	0.00
C ₅ /C ₁₃ TM 49:44:7	-0.10	C ₅ /C ₉ 摻合物 20:80	0.00
C ₅ /C ₁₃ TM 29:52:19	-0.09		
C ₅ /C ₁₃ TM 13:51:36	-0.45		

* 發明實例

表 14 中彙總之質量變化顯示含有 C₄ 醇基之酯混合物在水貯存方面展現較大的質量損失。反之，本發明混合物在試樣於水中貯存之後展現可忽視之質量變化。水貯存期間之良好抗性對於塑化劑在軟管及管子以及在戶外應用中之用途而言特別重要。

實施例 14：

測定混合物效率（經塑化 PVC 樣本之蕭氏 A 硬度）

蕭氏硬度為樣本之柔軟度的度量。在特定測量期間，標準化之針可穿入樣本愈遠，測量值愈低。在相同量之塑化劑下具有最高效率的塑化劑提供最低蕭氏硬度值。由於在實務上配方經常針對特定蕭氏硬度做調整或最佳化，因此非常有效率之塑化劑可在該配方中降至特定比例，此造成處理者之成本降低。

為了測定蕭氏硬度，將實施例 8 中所製造之塑料溶膠倒入直徑為 42 mm 之圓形黃銅澆鑄模具（初始重量：20.0 g）中。然後該糊劑在該等模具中在 200℃ 之循環乾燥箱中膠凝 30 分鐘，冷卻然後移出，在測量之前於氣候受控制箱（25℃）中貯存至少 24 小時。切片厚度為約 12 mm。

厚度測量係根據 DIN 53 505，使用得自 Zwick-Roell 之蕭氏 A 測量儀器測量；各例中該測量在 3 秒後讀出。針每一試樣在三個不同位置進行測量，並測定平均值。

表15：例於表9中之包含塑化劑的試樣之蕭氏A硬度

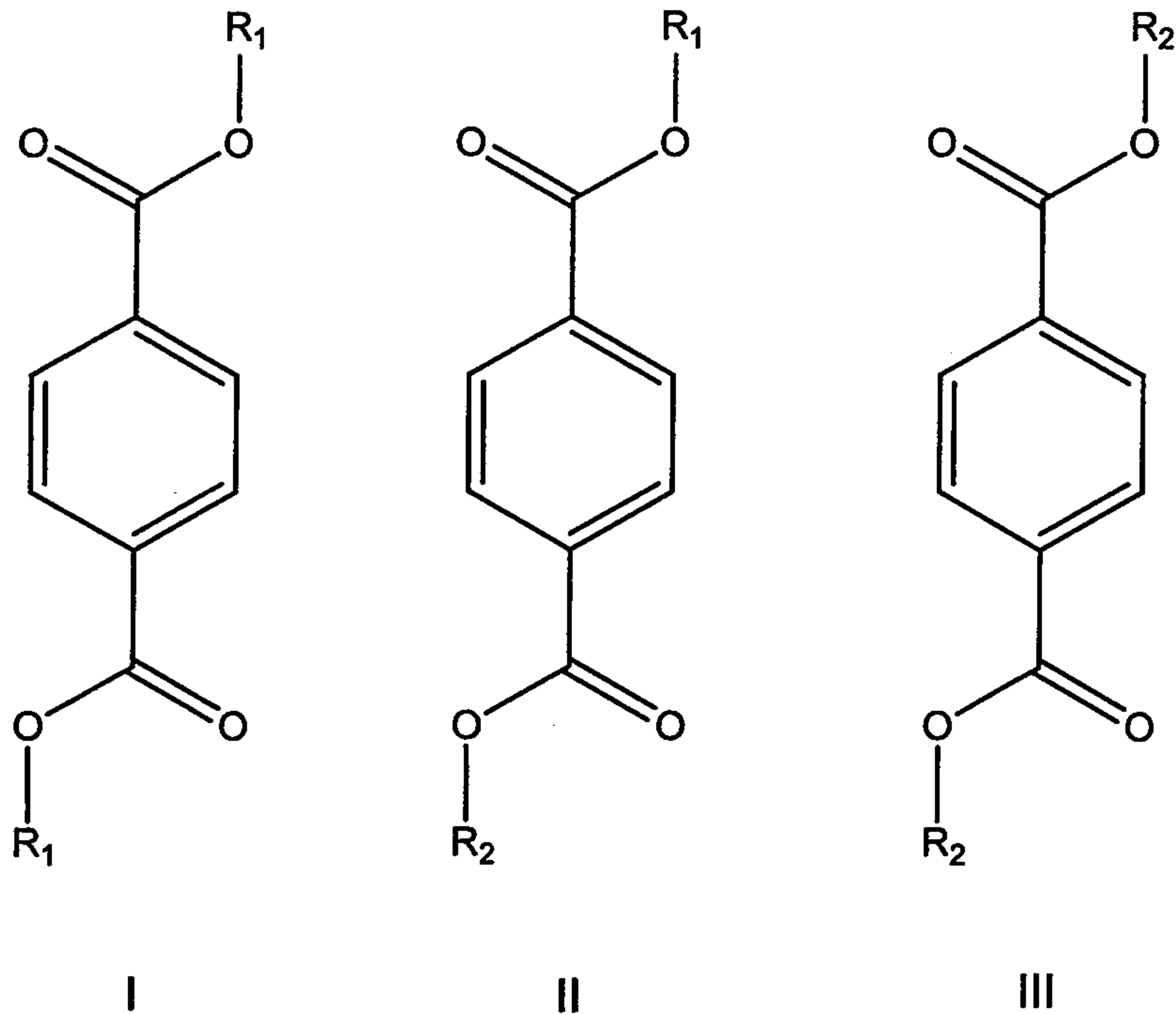
塑化劑	蕭氏A硬度	塑化劑	蕭氏A硬度
DEHT	82	C ₈ /C ₉ TM 7:38:55	87
DINT	88	C ₈ /C ₉ TM 20:46:34	86
DPT	72	C ₈ /C ₉ TM 38:48:14	85
C ₄ /C ₈ TM 3:27:70	80	C ₈ /C ₁₀ TM 7:38:55	92
C ₄ /C ₈ TM 11:45:24	77	C ₈ /C ₁₀ TM 17:49:34	90
C ₄ /C ₈ TM 26:50:24	74	C ₈ /C ₁₀ TM 35:48:17	88
C ₅ /C ₉ TM 3:27:70*	84	C ₄ /C ₉ 摻合物 10:90	85
C ₅ /C ₉ TM 13:46:41*	82	C ₄ /C ₉ 摻合物 20:80	81
C ₅ /C ₉ TM 24:51:25*	80	C ₄ /C ₉ 摻合物 40:60	77
C ₅ /C ₉ TM 44:45:11*	77	C ₄ /C ₉ 摻合物 60:40	72
		C ₄ /C ₉ 摻合物 80:20	68
C ₅ /C ₁₀ TM 53:40:7	75		
C ₅ /C ₁₀ TM 36:49:15	78	C ₅ /C ₉ 摻合物 80:20	75
C ₅ /C ₁₀ TM 18:50:32	82	C ₅ /C ₉ 摻合物 60:40	77
		C ₅ /C ₉ 摻合物 40:60	79
C ₅ /C ₁₃ TM 49:44:7	79	C ₅ /C ₉ 摻合物 20:80	83
C ₅ /C ₁₃ TM 29:52:19	85		
C ₅ /C ₁₃ TM 13:51:36	91		

* 發明實例

本發明混合物之試樣顯示比 C₈ 及 C₉ 醇基，及分別包含 C₉ 及 C₁₀ 醇基的酯混合物更低蕭氏 A 硬度因此較佳之塑化劑效率，此造成本發明混合物的較低配方成本。

申請專利範圍

1. 一種對苯二甲酸二酯 I、II 及 III 之混合物，



其中 R_1 為具有 5 個碳原子之烷基且 R_2 為具有 9 個碳原子之烷基。

2. 如申請專利範圍第 1 項之混合物，其中在該式 I、II 及 III 中， R_1 ，在各出現場合，為 2-甲基丁基、3-甲基丁基、正戊基或異戊基，且 R_2 ，在各出現場合，為壬基、正壬基或異壬基。

3. 如申請專利範圍第 1 或 2 項之混合物，其中該混合物包含基於該等酯 I、II 及 III 整體計為少於 80 莫耳%之該酯 III。

4. 如申請專利範圍第 1 或 2 項之混合物，其中該混合物包含基於該等酯 I、II 及 III 整體計為少於 60 莫耳%之該酯 I。

5. 一種如申請專利範圍第 1 至 4 項中任一項之混合物的用途，其係作為聚合物之塑化劑。

6. 如申請專利範圍第 5 項之用途，其中該混合物係用作黏著劑、密封劑、塗覆材料、塗料、油墨、塑料溶膠、發泡體、合成皮、鋪地材料（floorcovering）、屋頂膜、水下船體保護、織物塗層、纜線、線圈絕緣、軟管、擠出物件、膜、用於汽車內裝部分、用於壁覆蓋物（wallcovering）、液態油墨、玩具、接觸片（contact sheet）、食品包裝或醫療物件中之塑化劑。

7. 一種組成物，其包含如申請專利範圍第 1 至 4 項中任一項之混合物及選自由下列所組成之群組的一或多種聚合物：聚氯乙烯、氯乙烯與乙酸乙烯酯或與丙烯酸丁酯之共聚物、聚甲基丙烯酸烷酯（PAMA）、聚乙烯丁醛（PVB）、聚胺甲酸乙酯、聚硫醚、聚乳酸（PLA）、聚羥丁醛（PHB）及硝化纖維素。

8. 一種製備如申請專利範圍第 1 至 4 項中任一項之酯混合物的方法，其係藉由使用包含 R_1OH （ R_1 =具有 5 個碳原子之烷基）及 R_2OH （ R_2 =具有 9 個碳原子之烷基）的混合物將對苯二甲酸或對苯二甲酸衍生物酯化來進行。

9. 一種製備如申請專利範圍第 1 至 4 項中任一項之混合物的方法，其中該酯 I 係與基於其酯官能之數目計為少於 1 莫耳當量的具有 9 個碳原子之醇或二或多種醇反應，並伴隨加熱。

10. 如申請專利範圍第 9 項之方法，其中該酯 I 係在觸媒存在下與具有 9 個碳原子之醇或與二或多種醇反應，並伴隨加熱至沸騰，其中在該方法期間，從反應容器移除多於 80 莫耳%之在該方法過程中形成的 C₅ 醇。

11. 一種製備如申請專利範圍第 1 至 4 項中任一項之混合物的方法，藉由反應對苯二甲酸與其不含酯基 COOR 的衍生物（其中基團 R 之醇 ROH 在指定壓力下的沸點高於在相同壓力下之基團 R₁ 的醇 R₁OH）與量為（m₁+s₁）之 R₁OH 及量為 m₂ 之 R₂OH，該反應混合物係在沸點加熱，其中

m₁ 及 m₂ 對應於引入對苯二甲酸或其衍生物之醇基 OR₁（C₅ 醇基）及 OR₂（C₉ 醇基）的莫耳當量，且

s₁ 為 C₅ 醇之過量且大於 0 莫耳。

12. 如申請專利範圍第 11 項之方法，其中量 s₁ 小於（m₁+m₂）莫耳。

13. 如申請專利範圍第 11 或 12 項之方法，其中將至少 0.8 莫耳當量之所使用的醇 R₂OH 作為 OR₂ 基團引入該對苯二甲酸或其衍生物，及/或其中該方法中使用觸媒且在該觸媒被破壞之前，該反應混合物中之 C₅ 醇的量已降至基於 C₅ 醇之過量 s₁ 計為少於 20 莫耳%。

14. 如申請專利範圍第 8 至 12 項中任一項之方法，其中 R₁，在各出現場合，為 2-甲基丁基、3-甲基丁基、正戊基或異戊基，且 R₂ 為異壬基，該混合物包含基於該等酯 I、II 及 III 整體計為少於 80 莫耳%之該酯 III。

15. 一種如申請專利範圍第 9 或 11 項之製備方法的用途，其係用於藉由控制酯混合物中之該等酯類的數量分布來設定該酯混合物之處理相關及/或應用相關性質。

圖式

圖 1

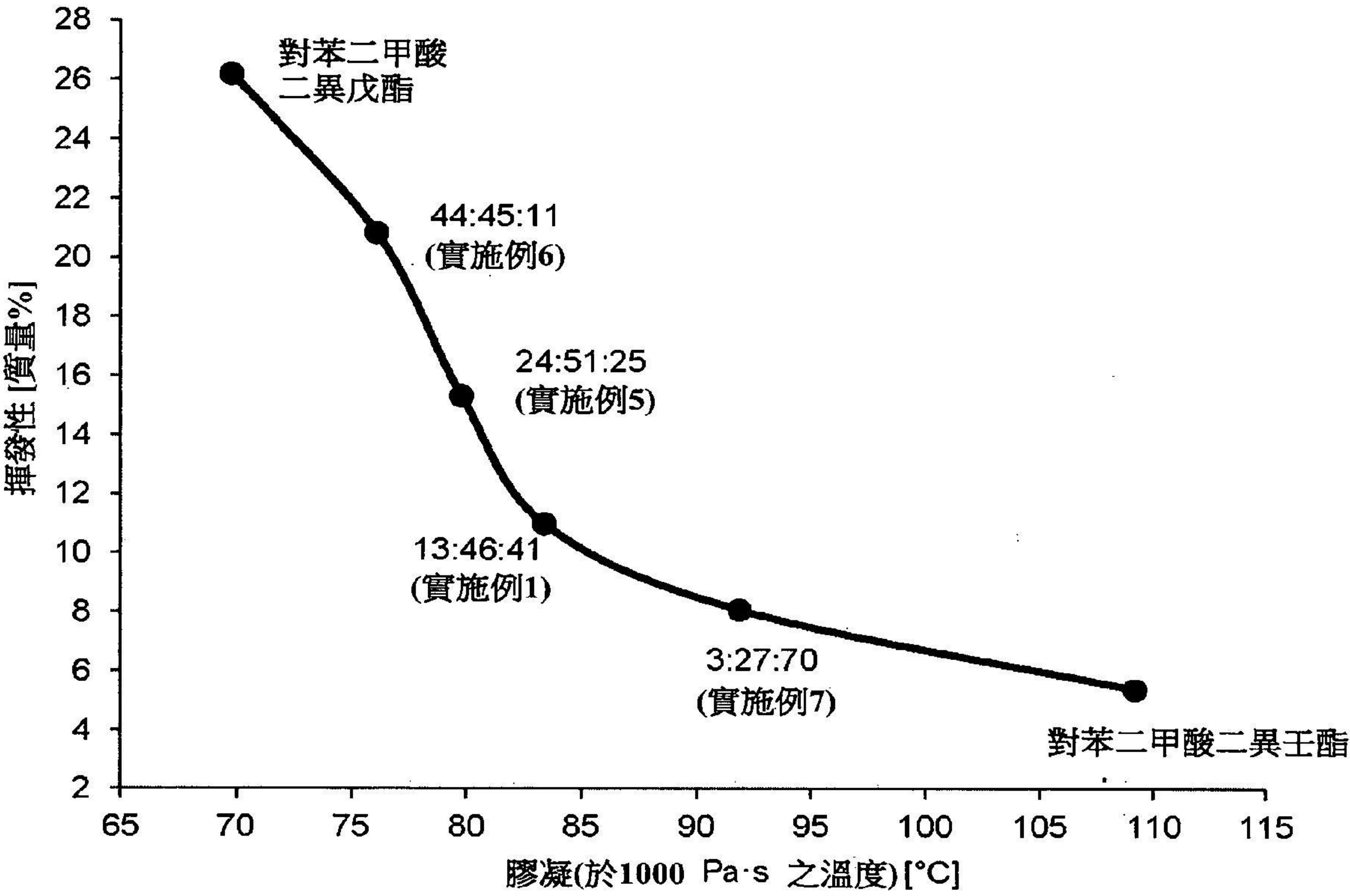


圖 2

