

(19)日本国特許庁(JP)

(12)特許公報(B2)

(11)特許番号
特許第7698668号
(P7698668)

(45)発行日 令和7年6月25日(2025.6.25)

(24)登録日 令和7年6月17日(2025.6.17)

(51)国際特許分類

F I

C 0 7 C 31/125(2006.01)

C 0 7 C 31/125

請求項の数 1 (全25頁)

(21)出願番号	特願2022-565538(P2022-565538)	(73)特許権者	502141050
(86)(22)出願日	令和3年5月27日(2021.5.27)		ダウ グローバル テクノロジーズ エル
(65)公表番号	特表2023-528168(P2023-528168		エルシー
	A)		アメリカ合衆国 ミシガン州 4 8 6 7 4
(43)公表日	令和5年7月4日(2023.7.4)		, ミッドランド, エイチ エイチ ダウ
(86)国際出願番号	PCT/US2021/034439		ウェイ 2 2 1 1
(87)国際公開番号	WO2021/242971	(74)代理人	100099759
(87)国際公開日	令和3年12月2日(2021.12.2)		弁理士 青木 篤
審査請求日	令和6年5月13日(2024.5.13)	(74)代理人	100123582
(31)優先権主張番号	63/032,303		弁理士 三橋 真二
(32)優先日	令和2年5月29日(2020.5.29)	(74)代理人	100128495
(33)優先権主張国・地域又は機関	米国(US)		弁理士 出野 知
		(74)代理人	100208225
			弁理士 青木 修二郎
		(74)代理人	100144417

最終頁に続く

(54)【発明の名称】 混合 C 8 ～ C 1 8 アルコールを含む組成物及びその界面活性剤

(57)【特許請求の範囲】

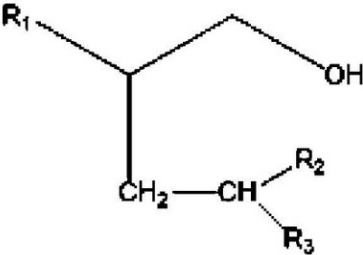
【請求項 1】

組成物であって、

A)

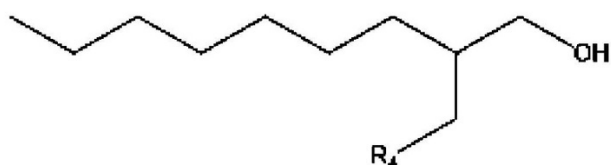
5 モル%～4 0 モル%の 2 -ヘプチルウンデカノールと、
5 モル%～4 0 モル%の 2 -エチルヘキサノールと、
1 0 モル%～4 0 モル%の構造 (1) を有するアルコール (1) であって、

【化 1】



式中、R 1 は、エチル基であり、
R 2 及び R 3 は、それぞれ独立して、水素及びアルキル基からなる群から選択され、
ただし、R 2 及び R 3 の炭素原子の総数は 7 である、アルコール (1) と、
1 0 モル%～4 0 モル%の構造 (2) を有するアルコール (2) であって、

【化 2】



式中、 R_4 は、 n -プロピル基及びイソプロピル基からなる群から選択される、アルコール（2）と、を含むか、又は、

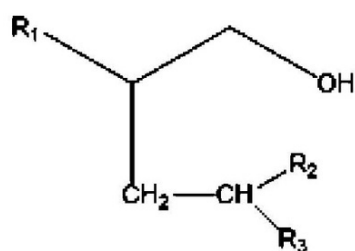
B)

5 モル % ～ 40 モル % の 2-ヘプチルウンデカノールと、

5 モル % ～ 40 モル % の 2-プロピルヘプタノールと、

10 モル % ～ 40 モル % の構造（1）を有するアルコール（1）であって、

【化 3】

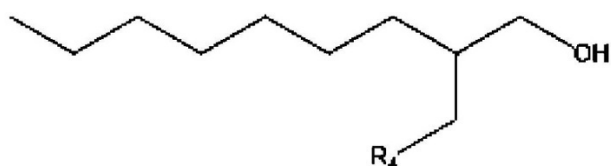


式中、 R_1 は、プロピル基であり、

R_2 及び R_3 は、それぞれ独立して、水素及びアルキル基からなる群から選択され、ただし、 R_2 及び R_3 の炭素原子の総数は 7 である、アルコール（1）と、

10 モル % ～ 40 モル % の構造（2）を有するアルコール（2）であって、

【化 4】



式中、 R_4 は、 n -ブチル基及びイソブチル基からなる群から選択される、アルコール（2）と、を含む組成物。

【発明の詳細な説明】

【背景技術】

【0001】

パージされた炭化水素種の再生利用は、大規模なポリオレフィン生成が直面している最大の課題のうちの 1 つである。例えば、エチレン／オクテンコポリマーの重合生成におけるオクテンコモノマーの転化率は、一般に非常に低く、例えば、10 ～ 20 % である。これは、オクテンの 80 ～ 90 % がポリマーに転化されることなく反応器を通過できるということを意味する。

【0002】

したがって、当該技術分野では、単なる廃棄を回避する、パージ流の炭化水素種、特にオクテン／アルカンの工業パージ流を利用するための方法についての継続的な必要性が認識されている。パージ流に存在するオクテンモノマーを利用することが更に必要とされている。加えて、生分解性が容易で、高性能な界面活性剤材料を生成するために、費用対効果の高い軽度に分岐状の洗剤範囲アルコールを開発する必要性が存在する。

【発明の概要】

【0003】

出願人は、オクテン／アルカンの工業パージ流のヒドロホルミル化によって、 C_9 アルデヒド、未反応 C_8 オレフィン、及び炭化水素溶媒の混合物が生成されることを見出した。次いで、このヒドロホルミル化生成物を、ブチルアルデヒド及び／又はバレルアルデヒドと交差アルドール反応させて、 $C_8 \sim C_{18}$ アルデヒドを生成し得る。後続の水素添加によって、これらの $C_8 \sim C_{18}$ アルデヒドは、次いで、 $C_8 \sim C_{18}$ アルコールを生成するために使用され得る。 $C_8 \sim C_{18}$ アルコールは、例えば、界面活性剤などの最終用途のための高需要の出発材料である。

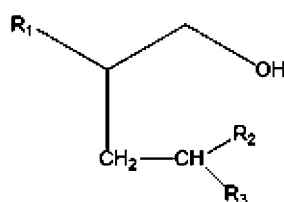
【0004】

本開示は、組成物を提供する。一実施形態では、組成物は、
 2-ヘプチルウンデカノールと、
 2-エチルヘキサノール及び2-プロピルヘプタノールからなる群から選択されるメンバーと、
 アルコール(1)とアルコール(2)との混合物と、を含み、
 アルコール(1)は、構造(1)を有し、

10

【0005】

【化1】

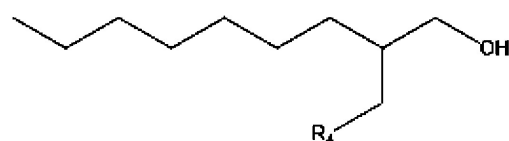


20

式中、 R_1 は、エチル基及びプロピル基からなる群から選択され、
 R_2 及び R_3 は、それぞれ独立して、水素及びアルキル基からなる群から選択され、
 ただし、 R_1 及び R_2 の炭素原子の総数は7であり、
 アルコール(2)は、構造式(2)を有し、

【0006】

【化2】



30

式中、 R_4 は、 n -プロピル基、イソプロピル基、 n -ブチル基、及びイソブチル基からなる群から選択される。

【図面の簡単な説明】

【0007】

【図1】本開示の一実施形態による、ヒドロホルミル化条件を提供するためのヒドロホルミル化反応器システムの模式図である。

40

【図2】本開示の実施形態による、スピニングバンド蒸留カラム (spinning band distillation column、S B D C) の概略図である。

【図3】本開示の一実施形態による、オーバーヘッド留出物分離の温度-時間のグラフである。

【0008】

定義

元素周期表への任意の参照は、CRC Press, Inc., 1990-1991によって出版されたものへの参照である。この表での元素群への参照は、群に番号を付けるための新しい表記法によるものである。

【0009】

50

米国特許実務の目的のために、任意の参照される特許、特許出願又は公開の内容は、特に定義の開示（具体的に本開示で提供されるいずれの定義とも矛盾しない範囲）及び当該技術分野での一般知識に関して、参照によりそれらの全体が組み込まれる（か、又はその同等の米国版がそのように参照により組み込まれる）。

【0010】

本明細書に開示される数値範囲は、下限値及び上限値を含む、下限値及び上限値のすべての値を含む。明示的な値（例えば、1又は2、若しくは3～5、若しくは6、若しくは7）を含有する範囲の場合、任意の2つの明示的な値の間のあらゆるサブ範囲が含まれる（例えば、上記の1～7の範囲には、1～2、2～6、5～7、3～7、5～6などのサブ範囲が含まれる）。

10

【0011】

別段その逆が記載されるか、文脈から暗示されるか、又は当該技術分野での慣習ではない限り、すべての部及びパーセントは、重量に基づき、すべての試験方法は、本開示の出願日時点で最新のものである。

【0012】

「アルコール」は、炭化水素基に結合したヒドロキシル基（-OH）を有する化合物である。

【0013】

「アルデヒド」は、1つの炭化水素基及び水素原子に結合したカルボニル官能基（C=O）を有する化合物である。

20

【0014】

「アルケン」は、炭素-炭素二重結合を含有する炭化水素である。

【0015】

本明細書で使用される「ブレンド」又は「ポリマーブレンド」という用語は、2つ以上のポリマーのブレンドである。そのようなブレンドは、混和性（分子レベルで相分離しない）であってもなくてもよい。そのようなブレンドは、相分離していても、していなくてもよい。このようなブレンドは、透過電子分光法、光散乱、X線散乱、及び当該技術分野において既知の他の方法から決定される、1つ以上のドメイン構成を含んでいても、いなくてもよい。

【0016】

「組成物」という用語は、組成物を含む材料の混合物、並びに組成物の材料から形成された反応生成物及び分解生成物を指す。

30

【0017】

「含む (comprising)」、「含む (including)」、「有する」という用語、及びそれらの派生語は、それが具体的に開示されているかどうかにかかわらず、任意の追加の成分、ステップ、又は手順の存在を除外することを意図しない。疑義を回避するために、「含む (comprising)」という用語の使用を通じて特許請求されるすべての組成物は、反対の記載がない限り、ポリマーであろうとなかろうと、任意の追加の添加剤、アジュバント、又は化合物を含み得る。対照的に、「から本質的になる」という用語は、操作性に必須ではないものを除き、あらゆる続く記述の範囲からあらゆる他の成分、ステップ、又は手順を除く。「からなる」という用語は、明確に描写又は列挙されていない任意の成分、ステップ、又は手順を除外する。「又は」という用語は、特に明記しない限り、列挙されたメンバーを個別に、また任意の組み合わせで指す。単数形の使用は複数形の使用を含み、その逆もまた同様である。

40

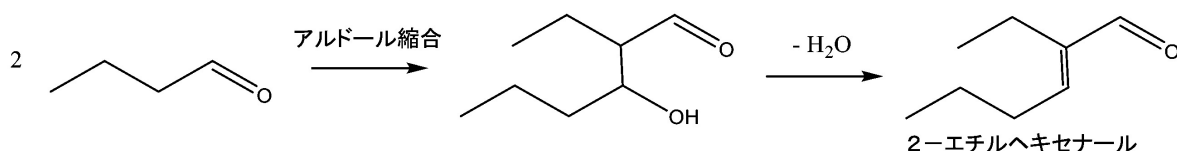
【0018】

「エナール」は、炭素-炭素二重結合を含有するアルデヒド化合物である。エナールは、アルデヒドのアルドール（又は交差アルドール）縮合、その後続く得られた中間化合物の脱水によって形成され得る。エナールの非限定的な例は、2-エチルヘキセナールであり、これは、以下に示されるようなC₄アルデヒドの自己縮合から生じる。

【0019】

50

【化3】



【0020】

「エノール」は、炭素－炭素二重結合を含有するアルコールである。エノールは、エナールの部分的水素添加によって形成され得る。

【0021】

「エチレン系ポリマー」は、（重合性モノマーの総量に基づいて）50重量パーセント（重量%）を超える重合エチレンモノマーを含有し、任意選択的に、少なくとも1つのコモノマーを含有し得るポリマーである。エチレン系ポリマーは、エチレンホモポリマー、及びエチレンコポリマー（エチレン及び1つ以上のコモノマーに由来する単位を意味する）を含む。「エチレン系ポリマー」及び「ポリエチレン」という用語は、交換可能に使用され得る。

【0022】

「炭化水素」は、水素原子及び炭素原子のみを含有する化合物である。「ヒドロカルボニル」（又は「ヒドロカルボニル基」）は、原子価（典型的には一価）を有する炭化水素である。「アルキル基」という用語は、「ヒドロカルボニル基」と互換的に称される。

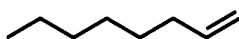
【0023】

本明細書で使用される場合、「1-オクテン」という用語は、分子式 C_8H_{16} を有する不飽和炭化水素 α -オレフィンであり、かつ不飽和がアルファ位にある。1-オクテンは、以下に示すような分子構造（A）を有する。

【0024】

【化4】

構造（A）



【0025】

本明細書で使用される場合、「オクテンの異性体」という用語は、分子式 C_8H_{16} を有する不飽和炭化水素であり、かつ不飽和（二重結合）が、アルファ位にない。言い換えれば、「オクテンの異性体」という用語は、1-オクテンを除外して任意のオクテンである。オクテンの異性体の非限定的な例としては、シス-2-オクテン、トランス-2-オクテン、シス-3-オクテン、トランス-3-オクテン及びそれらの組み合わせ並びにシス-4-オクテン、トランス-4-オクテン、分岐オクテン異性体及びそれらの組み合わせが挙げられる。

【0026】

本明細書で使用される場合、「直鎖状内部オクテン異性体」という用語は、炭素数8の鎖から構成される直鎖状不飽和炭化水素であり、不飽和（二重結合）は、アルファ位にはない。直鎖状内部オクテン異性体としては、シス-2-オクテン、トランス-2-オクテン、シス-3-オクテン、トランス-3-オクテン、シス-4-オクテン、トランス-4-オクテン、及びそれらの組み合わせが挙げられる。本明細書で使用される場合、「分岐状 C_8 オレフィン」という用語は、分子式 C_8H_{16} 及び7個以下の炭素原子の主鎖長さを有する不飽和炭化水素である。構造Aの直鎖状性質とは対照的に、分岐状 C_8 オレフィンは、主鎖に直接結合した少なくとも1つの炭化水素基を含有する。分岐状 C_8 オレフィンの非限定的な例としては、3-メチル-2-ヘプテン、3-メチル-3-ヘプテン、5-メチル-2-ヘプテン、5-メチル-3-ヘプテンなどのメチルヘプテンが挙げられる。分岐状 C_8 オレフィンの追加の非限定的な例としては、3,4-ジメチル-2-ヘキセ

10

20

30

40

50

ン、3, 4-ジメチル-3-ヘキセン、2, 3-ジメチル-3-ヘキセンなどのジメチルヘキセンが挙げられる。更なる非限定的な例としては、2-エチル-1-ヘキセンなどのエチルヘキセンが挙げられる。

【0027】

「オレフィン」は、炭素-炭素二重結合を有する不飽和脂肪族炭化水素である。

【0028】

「ポリマー」は、同一のタイプ又は異なるタイプであるかに関わらず、重合形態でポリマーを構成する複数の及び／若しくは繰り返しの「単位」又は「mer単位」を提供するモノマーを重合することによって調製される化合物である。したがって、一般的なポリマーという用語は、ただ1つのタイプのモノマーのみから調製されるポリマーを指すために通常使用されるホモポリマーという用語と、少なくとも2つのタイプのモノマーから調製されるポリマーを指すために通常使用されるコポリマーという用語と、を包含する。ポリマーはまた、例えば、ランダム、ブロックなどのすべての形態のコポリマーを包含する。「エチレン/ α -オレフィンポリマー」及び「オクテン/ α -オレフィンポリマー」という用語は、それぞれ、エチレン又はオクテンと、1つ以上の追加の重合性 α -オレフィンモノマーとを重合することから調製された上述のコポリマーを意味している。ポリマーは、多くの場合、1つ以上の特定のモノマー「で作製され」、特定のモノマー又はモノマータイプに「基づいて」、特定のモノマー含有量を「含有する」などとして言及されるが、この文脈では、「モノマー」という用語は、特定のモノマーの重合残基を指し、非重合種を指すものではないと理解されることに留意されたい。一般に、本明細書におけるポリマーは、対応するモノマーの重合形態である「単位」に基づくものとして、言及される。

【0029】

試験方法

ガスクロマトグラフィー (Gas Chromatography、GC)。

【0030】

使用済み溶媒及びヒドロホルミル化反応生成物の組成は、以下の条件を使用するガスクロマトグラフィー (GC) によって決定される。

【0031】

【表1】

計器	炎イオン化検出器を備えたAgilent Technologiesモデル7890
データシステム	Agilent OpenLab A. 02. 01
注入器入口	270°C、4mmスプリット/スプリットレスライナー、グラスウールPN 092002 使用時
カラムモード: 傾斜圧力	20psi(10分間保持)から30psi(1分保持)まで0. 5psi/分で傾斜、50psi(49分保持)まで1psi/分で傾斜
モード	分割
分割比率	150:1
注入量	1 μ L
カラム	Supelco Petrocol DH 100m $\times$ 0. 25mm i. d. $\times$ 0. 5 μ m
オープン傾斜	40°C(40分保持)から220°C(5分保持)まで10°C/分で傾斜、260°C(19分保持)まで5°C/分で傾斜、270°C(48分保持)まで5°C/分で傾斜
実行時間	140分
検出器	270°Cに設定されたFID
FID水素流	40mL/分
FID空気流	400mL/分
窒素(構成)ガス流	20mL/分

【0032】

表1(以下の実施例の項中)及び実施例の項の項Aのデータの定量は、既知の濃度で標準溶液に由来する応答係数を使用した重量パーセントに基づく。

【0033】

交差アルドール反応生成物及び粗アルコール生成物の組成は、以下の条件を使用してGC及びガスクロマトグラフィー／質量分析（Gas Chromatography/Mass Spectrometry、GC/MS）の両方によって決定される。

【0034】

【表2】

計器	炎イオン化検出器及び5973 MSDを備えたAgilent Technologiesモデル6890
データシステム	Agilent Enhanced Chemstation D. 01. 02. 16
注入器入口	250℃、4mmスプリット／スプリットレスライナー、グラスウールPN 092002 使用時
カラム	Agilent VF17-MS、30m×0. 32mm×0. 25 μm
カラムモード：一定流量	2mL／分の一定流量
モード	分割
分割比率	50：1
注入量	1 μL
カラム	Agilent VF-17MS 30m×0. 32m×0. 25um
オープン傾斜	30℃（2. 20分保持）から330℃（2分保持）まで10℃／分で傾斜
実行時間	34. 20分
検出器	250℃に設定されたFID
FID水素流	40mL／分
FID空気流	450mL／分
窒素（構成）ガス流	45mL／分
MSD供給源温度：	230℃
MSD Quad温度：	150℃
MSD Tune：	STune
MSDスキャンパラメータ：	スキャン30～500m/z
ライブラリ：	NIST MS Search 2. 0f、構築10／22／09

【0035】

実施例の項の項B～Eの定量は、FID信号からのGC面積パーセント（「GC面積」又は「GC」と互換的に称される）に基づく。ピーク同一性／成分構造の確認は、米国国立標準試験所（National Institute of Standards and Testing）ライブラリに一致する電子イオン化質量選択検出器（Electron Ionization Mass Selective Detector）信号に基づく。

【0036】

N：I比率。3個以上の炭素原子を有するオレフィンのヒドロホルミル化反応は、直鎖状及び分岐状異性体の両方の混合物を生成する。本明細書で使用される場合、「N：I比率」という用語は、直鎖状又はノルマル（N）アルデヒド異性体と分岐状又はイソアルデヒド（I）異性体との比率である。N：I比率は、ノルマルアルデヒドの濃度（重量％）をイソアルデヒドの濃度（重量％）で除算することによって計算される。各アルデヒド異性体の重量パーセント濃度は、ガスクロマトグラフィー（GC）によって決定される。

【発明を実施するための形態】

【0037】

本開示は、組成物を提供する。組成物は、2-ヘプチルウルデカノールと、2-エチルヘキサノール及び2-プロピルヘプタノールから選択されるメンバーを含む。組成物は、アルコール（1）とアルコール（2）との混合物を更に含む。アルコール（1）は、構造（1）を有し、

【0038】

10

20

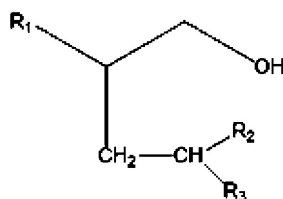
30

40

50

【化 5】

構造 (1)



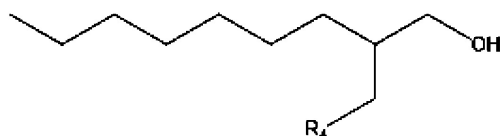
式中、 R_1 は、エチル基及びプロピル基から選択され、

R_2 及び R_3 は、それぞれ独立して、水素及びアルキル基から選択され、ただし、 R_2 及び R_3 の炭素原子の総数は 7 である。アルコール (2) は、構造 (2) を有し、

【0039】

【化 6】

構造 (2)



式中、 R_4 は、 n -プロピル基、イソプロピル基、 n -ブチル基、及びイソブチル基から選択される。

【0040】

一実施形態では、本組成物は、オクテン異性体から構成されるパージ流の反応生成物であるか、又はさもなければパージ流から誘導される。パージ流は、一連の化学反応、すなわちヒドロホルミル化反応、交差アルドール縮合反応、及び水素添加に供されて、本組成物を生成する。

【0041】

パージ流は、オクテン異性体を含む。本明細書で使用される場合、「パージ流」は、重合反応が発生した後に重合反応器を出る流出物から分離されるか、又はその他の方法で回収されるいくつかの画分のうちの 1 つである。重合反応器を出る液体流出物は、固体（粒状）ポリマー生成物を含むし、この生成物は除去される。流出物からは再循環流も除去されるが、これは更に処理され、重合反応器に戻される。パージ流は、(i) ポリマー生成物が流出物から回収された後、かつ (ii) 再循環流が流出物から分離された後、に残る流れである。パージ流は、重合反応中に利用される、オクテン異性体を含む未反応のオレフィンモノマー及び他の炭化水素を含む。パージ流は、その中に固体ポリマー生成物を含まないか、又は実質的に含まないということが理解されよう。

【0042】

一実施形態では、パージ流は、エチレンがオクテンと共重合される重合反応器からの流出物である。パージ流は、未反応のオクテン異性体及び他の炭化水素を含む。

【0043】

一実施形態では、パージ流は、次のものを含む：

(i) 20 重量%～55 重量%、又は 25 重量%～50 重量%の 1-オクテン、

(ii) 20 重量%～60 重量%の直鎖状内部オクテン異性体、

(iii) 2 重量%～8 重量%の分岐状 C_8 オレフィン、及び

(iv) 5 重量%～60 重量%の炭化水素溶媒、そこで、重量パーセントは、パージ流の総重量に基づく。成分 (i) ～ (iv) を合計すると、パージ流の 100 重量パーセントになるということが理解されよう。

【0044】

一実施形態では、パージ流は、ヒドロホルミル化反応器システムに供給される。ヒドロホルミル化反応器システムでは、ヒドロホルミル化反応は、ホルミル基 ($-CH=O$) 及び水素原子をアルケン (すなわち、オレフィン) の炭素-炭素二重結合に結合させて、アルデヒドを生成する。パージ流がオクテン異性体を含有するため、パージ流をヒドロホルミル化条件に供することによって、ノナナールから構成される反応生成物が形成される。「ノナナール」は、9個の炭素原子を含有するアルデヒドである。パージ流は、アルケン (主にオクテン異性体) とアルカンとの混合物であり、その結果、ヒドロホルミル化反応からの反応生成物は、ノナナールに加えて他の成分を含む。ヒドロホルミル化反応生成物中の他の成分の非限定的な例としては、 C_8 オレフィン、 $C_7 \sim C_9$ アルカン、及びそれらの組み合わせが挙げられる。

10

【0045】

C_4 アルデヒド、 C_5 アルデヒド、及びそれらの組み合わせ (以下、「 C_4/C_5 アルデヒド」) から選択されるアルデヒドは、ノナナールから構成される反応生成物 (以下、「ノナナール生成物」) に添加されて、混合物である混合物 A を形成する。混合物 A の交差アルドール縮合は、交差アルドール生成物を形成する。交差アルドール生成物は、アルコール、溶媒、水、及び C_8 エナール、 C_{10} エナール、 C_{13} エナール、 C_{14} エナール、 C_{18} エナールから選択される成分、並びにそれらの組み合わせから構成される。

【0046】

一実施形態では、 C_4 アルデヒドは、ノナナールから構成される反応生成物 (以下、「ノナナール生成物」) に添加されて、混合物である混合物 A 4 を形成する。混合物 A 4 の交差アルドール縮合は、交差アルドール生成物を形成する。交差アルドール生成物は、アルコール、溶媒、水、及び C_8 エナール、 C_{13} エナール、 C_{18} エナールから選択される成分、並びにそれらの組み合わせから構成される。

20

【0047】

一実施形態では、 C_5 アルデヒドは、ノナナールから構成される反応生成物 (以下、「ノナナール生成物」) に添加されて、混合物である混合物 A 5 を形成する。混合物 A 5 の交差アルドール縮合は、交差アルドール生成物を形成する。交差アルドール生成物は、アルコール、溶媒、水、及び C_{10} エナール、 C_{14} エナール、 C_{18} エナールから選択される成分、並びにそれらの組み合わせから構成される。

30

【0048】

交差アルドール生成物は、水素添加されている。交差アルドール生成物は、 C_8 エナール、 C_{10} エナール、 C_{13} エナール、 C_{14} エナール、 C_{18} エナール、及びそれらの組み合わせを含む。交差アルドール生成物の水素添加は、粗アルコール生成物を形成する。粗アルコール生成物は、 C_8 アルコール、 C_{10} アルコール、 C_{13} アルコール、 C_{14} アルコール、 C_{18} アルコール、アルカン成分、他の種、及びそれらの組み合わせから構成される。本明細書で使用される場合、「種」という用語は、アルコール、エナール、エノール、及びアルデヒドの混合物であり、そこで、種中の各アルコール、エナール、エノール、及びアルデヒドは、同じ数の炭素原子を有する。

【0049】

「 C_8 種」は、 C_8 アルコール、 C_8 エナール、 C_8 エノール、及び C_8 アルデヒドの混合物である。「 C_{10} 種」は、 C_{10} アルコール、 C_{10} エナール、 C_{10} エノール、及び C_{10} アルデヒドの混合物である。「 C_{13} 種」は、 C_{13} アルコール、 C_{10} エナール、 C_{13} エノール、及び C_{13} アルデヒドの混合物である。「 C_{14} 種」は、 C_{14} アルコール、 C_{14} エナール、 C_{14} エノール、及び C_{14} アルデヒドの混合物である。「 C_{18} 種」は、 C_{18} アルコール、 C_{18} エナール、 C_{18} エノール、及び C_{18} アルデヒドの混合物である。

40

【0050】

一実施形態では、交差アルドール生成物は、 C_8 エナール、 C_{13} エナール、 C_{18} エナール、及びそれらの組み合わせから構成される。交差アルドール生成物の水素添加は、

50

粗アルコール生成物を形成する。粗アルコール生成物は、 C_8 アルコール、 C_{13} アルコール、 C_{18} アルコール、アルカン成分、他の種、及びそれらの組み合わせから構成される。アルカン成分の粗アルコール生成物からの分離によって、 C_8 アルコール、 C_{13} アルコール、 C_{18} アルコール、及びそれらの組み合わせから構成される残留生成物が残る。

【0051】

一実施形態では、交差アルドール生成物は、 C_{10} エナール、 C_{14} エナール、 C_{18} エナール、及びそれらの組み合わせから構成される。交差アルドール生成物の水素添加は、粗アルコール生成物を形成する。粗アルコール生成物は、 C_{10} アルコール、 C_{14} アルコール、 C_{18} アルコール、アルカン成分、他の種、及びそれらの組み合わせから構成される。アルカン成分の粗アルコール生成物からの分離によって、 C_{10} アルコール、 C_{14} アルコール、 C_{18} アルコール、及びそれらの組み合わせから構成される残留生成物が残る。

10

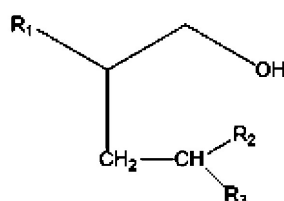
【0052】

1. 混合アルコール組成物

本組成物は、2-ヘプチルウルデカノールと、2-エチルヘキサノール及び2-プロピルヘプタノールから選択されるメンバーとを含む。組成物は、アルコール(1)とアルコール(2)との混合物を更に含む。アルコール(1)は、構造(1)を有し、

【0053】

【化7】



20

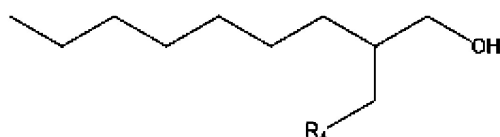
式中、 R_1 は、エチル基及びプロピル基から選択され、

R_2 及び R_3 は、それぞれ独立して、水素及びアルキル基から選択され、ただし、 R_2 及び R_3 の炭素原子の総数は7である。アルコール(2)は、構造(2)を有し、

【0054】

【化8】

構造(2)



30

式中、 R_4 は、 n -プロピル基、イソプロピル基、 n -ブチル基、及びイソブチル基から選択される。

【0055】

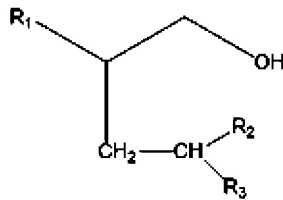
一実施形態では、組成物は、 C_8 アルコール、 C_{13} アルコール、 C_{18} アルコール、及びそれらの組み合わせから構成される残留生成物から誘導されるか、又はそうでなければ残留生成物から得られる。組成物は、2-ヘプチルウンデカノール及び2-エチルヘキサノールを含む。組成物は、アルコール(1)とアルコール(2)との混合物を更に含む。アルコール(1)は、構造(1)を有し、

40

【0056】

50

【化 9】



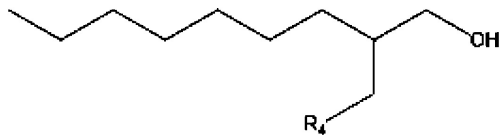
式中、 R_1 は、エチル基であり、

R_2 及び R_3 は、それぞれ独立して、水素及びアルキル基から選択され、ただし、 R_2 及び R_3 の炭素原子の総数は7である。アルコール(2)は、構造(2)を有し、

【0057】

【化 10】

構造(2)



式中、 R_4 は、 n -プロピル基及びイソプロピル基から選択される。一実施形態では、組成物は、5モル%～40モル%の2-ヘプチルウンデカノールと、5モル%～40モル%の2-エチルヘキサノールと、10モル%～40モル%のアルコール(1)と、10モル%～40モル%のアルコール(2)とを含む。

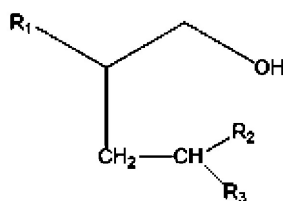
【0058】

一実施形態では、組成物は、 C_{10} アルコール、 C_{14} アルコール、 C_{18} アルコール、及びそれらの組み合わせから構成される残留生成物から誘導されるか、又はそうでなければ残留生成物から得られる。組成物は、2-ヘプチルウンデカノール及び2-プロピルヘプタノールを含む。組成物は、アルコール(1)とアルコール(2)との混合物を更に含む。アルコール(1)は、構造(1)を有し、

【0059】

【化 11】

構造(1)



式中、 R_1 は、プロピル基であり、

R_2 及び R_3 は、それぞれ独立して、水素及びアルキル基から選択され、ただし、 R_2 及び R_3 の炭素原子の総数は7である。アルコール(2)は、構造(2)を有し、

【0060】

10

20

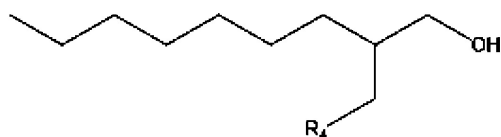
30

40

50

【化 1 2】

構造 (2)



式中、 R_4 は、 n -ブチル基及びイソブチル基から選択される。一実施形態では、組成物は、5 モル%～40 モル%の2-ヘプチルウンデカノールと、5 モル%～40 モル%の2-プロピルヘプタノールと、10 モル%～40 モル%のアルコール(1)と、10 モル%～40 モル%のアルコール(2)とを含む。

【0061】

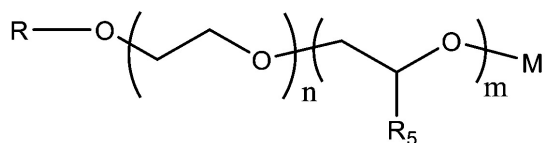
2. 界面活性剤組成物

本開示は、別の組成物、すなわち界面活性剤を提供する。本明細書で使用される場合、「界面活性剤」は、疎水性基(テール)及び親水性基(ヘッド)の両方を含有する化合物である。したがって、界面活性剤は、水不溶性成分及び水溶性成分の両方を含有する化合物である。組成物は、構造(3)を有する成分を含み、

【0062】

【化 1 3】

構造 (3)



式中、 R は、2-エチルヘキシル基、2-プロピルヘプチル基、2-エチルウンデカニル基、2-プロピルウンデカニル基、2-ブチルノナニル基、2-ペンチルノナニル基、2-ヘプチルウンデカニル基、及びそれらの組み合わせから選択され、

R_5 は、メチル基及びエチル基から選択され、

M は、水素、 SO_3^- 、 PO_3^{2-} 、及びポリグルコシドから選択され、

m は、0～30の整数であり、

n は、0～70の整数である。ポリグルコシドの酸化物単位は、ランダム構造、又はブロック構造であり得る。ポリグルコシドの酸化物単位がブロック構造である場合、ブロック構造は、異なる配置であり得る。

【0063】

一実施形態では、構造(3)を有する組成物は、2-エチルヘキシル基である R を含む。2-エチルヘキシル基は、5 モル%～40 モル%の量で存在する。

【0064】

一実施形態では、構造(3)を有する組成物は、2-プロピルヘプチル基である R を含む。2-プロピルヘプチル基は、5 モル%～40 モル%の量で存在する。

【0065】

一実施形態では、構造(3)を有する組成物は、2-エチルウンデカニル基である R を含む。2-エチルウンデカニル基は、5 モル%～40 モル%の量で存在する。

【0066】

一実施形態では、構造(3)を有する組成物は、2-プロピルウンデカニル基である R を含む。2-プロピルウンデカニル基は、5 モル%～40 モル%の量で存在する。

【0067】

一実施形態では、構造(3)を有する組成物は、2-ブチルノナニル基である R を含む。2-ブチルノナニル基は、5 モル%～40 モル%の量で存在する。

【0068】

一実施形態では、構造（3）を有する組成物は、2-ペンチルノナニル基であるRを含む。2-ペンチルノナニル基は、5モル%～40モル%の量で存在する。

【0069】

一実施形態では、構造（3）を有する組成物は、2-ヘプチルウンデカニル基であるRを含む。2-ヘプチルウンデカニル基は、5モル%～40モル%の量で存在する。

【0070】

一実施形態では、構造（3）を有する組成物は、5モル%～40モル%の2-エチルヘキシル基、10モル%～40モル%の2-エチルウンデカニル基、10モル%～40モル%の2-ブチルノナニル基、5モル%～40モル%の2-ヘプチルウンデカニル基、及びそれらの組み合わせから選択されるRを含み、

Mは、水素であり、

mは、0であり、

nは、1～70の整数である。

【0071】

一実施形態では、構造（3）を有する組成物は、5モル%～40モル%の2-エチルヘキシル基、10モル%～40モル%の2-エチルウンデカニル基、10モル%～40モル%の2-ブチルノナニル基、5モル%～40モル%の2-ヘプチルウンデカニル基、及びそれらの組み合わせから選択されるRを含み、

Mは、 SO_3^- であり、

mは、0であり、

nは、0～20の整数である。

【0072】

一実施形態では、構造（3）を有する組成物は、5モル%～40モル%の2-プロピルヘプチル基、10モル%～40モル%の2-プロピルウンデカニル基、10モル%～40モル%の2-ペンチルノナニル基、5モル%～40モル%の2-ヘプチルウンデカニル基、及びそれらの組み合わせから選択されるRを含み、

Mは、 SO_3^- であり、

mは、0であり、

nは、0～20の整数である。

【0073】

3. エトキシレート組成物

本開示は、別の水性組成物を提供する。一実施形態では、組成物は、構造（4）を有するエトキシレートを含み、

【0074】

【化14】

構造（4）



式中、Rは、2-エチルヘキシル基、2-エチルウンデカニル基、2-ブチルノナニル基、2-ヘプチルウンデカニル基、及びそれらの組み合わせから選択され、

nは1～70、又は3～40、又は3～15の整数である。

【0075】

一実施形態では、構造（4）を有する組成物は、2-エチルヘキシル基であるRを含む。2-エチルヘキシル基は、5モル%～40モル%の量で存在する。

【0076】

一実施形態では、構造（4）を有する組成物は、2-エチルウンデカニル基であるRを含む。2-エチルウンデカニル基は、10モル%～40モル%の量で存在する。

【0077】

一実施形態では、構造（４）を有する組成物は、２－ブチルノナニル基であるＲを含む。２－ブチルノナニル基は、１０モル％～４０モル％の量で存在する。

【0078】

一実施形態では、構造（４）を有する組成物は、２－ヘプチルウンデカニル基であるＲを含む。２－ヘプチルウンデカニル基は、５モル％～４０モル％の量で存在する。

【0079】

一実施形態では、組成物は、構造（４）を有するエトキシレートを含み、

【0080】

【化１５】

構造（４）



式中、Ｒは、２－プロピルヘプチル基、２－プロピルウンデカニル基、２－ペンチルノナニル基、２－ヘプチルウンデカニル基、及びそれらの組み合わせから選択され、

n は１～７０、又は３～４０、又は３～１５の整数である。

【0081】

一実施形態では、構造（４）を有する組成物は、２－プロピルヘプチル基であるＲを含む。２－プロピルヘプチル基は、５モル％～４０モル％の量で存在する。

【0082】

一実施形態では、構造（４）を有する組成物は、２－プロピルウンデカニル基であるＲを含む。２－プロピルウンデカニル基は、１０モル％～４０モル％の量で存在する。

【0083】

一実施形態では、構造（４）を有する組成物は、２－ペンチルノナニル基であるＲを含む。２－ペンチルノナニル基は、１０モル％～４０モル％の量で存在する。

【0084】

一実施形態では、構造（４）を有する組成物は、２－ヘプチルウンデカニル基であるＲを含む。２－ヘプチルウンデカニル基は、５モル％～４０モル％の量で存在する。

【0085】

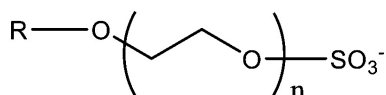
４．アルキルサルフェート組成物

本開示は、別の水性組成物を提供する。一実施形態では、組成物は、構造（５）を有するアルキルエーテルサルフェート又はアルキルサルフェートを含む。

【0086】

【化１６】

構造（５）



式中、Ｒは、２－エチルヘキシル基、２－エチルウンデカニル基、２－ブチルノナニル基、２－ヘプチルウンデカニル基、及びそれらの組み合わせから選択され、

n は０～２０、又は０、又は１～５、又は３～１５の整数である。

【0087】

一実施形態では、構造（５）を有する組成物は、２－エチルヘキシル基であるＲを含む。２－エチルヘキシル基は、５モル％～４０モル％の量で存在する。

【0088】

一実施形態では、構造（５）を有する組成物は、２－エチルウンデカニル基であるＲを含む。２－エチルウンデカニル基は、１０モル％～４０モル％の量で存在する。

10

20

30

40

50

【0089】

一実施形態では、構造（5）を有する組成物は、2-ブチルノナニル基であるRを含む。2-ブチルノナニル基は、10モル%～40モル%の量で存在する。

【0090】

一実施形態では、構造（5）を有する組成物は、2-ヘプチルウンデカニル基であるRを含む。2-ヘプチルウンデカニル基は、5モル%～40モル%の量で存在する。

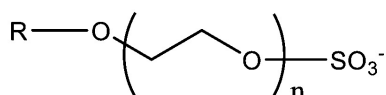
【0091】

一実施形態では、組成物は、

【0092】

【化17】

構造（5）



を含み、

式中、Rは、2-プロピルヘプチル基、2-プロピルウンデカニル基、2-ペンチルノナニル基、2-ヘプチルウンデカニル基、及びそれらの組み合わせから選択され、

nは0～20、又は0、又は1～5、又は3～15の整数である。

【0093】

一実施形態では、構造（5）を有する組成物は、2-プロピルヘプチル基であるRを含む。2-プロピルヘプチル基は、5モル%～40モル%の量で存在する。

【0094】

一実施形態では、構造（5）を有する組成物は、2-プロピルウンデカニル基であるRを含む。2-プロピルウンデカニル基は、10モル%～40モル%の量で存在する。

【0095】

一実施形態では、構造（5）を有する組成物は、2-ペンチルノナニル基であるRを含む。2-ペンチルノナニル基は、10モル%～40モル%の量で存在する。

【0096】

一実施形態では、構造（5）を有する組成物は、2-ヘプチルウンデカニル基であるRを含む。2-ヘプチルウンデカニル基は、5モル%～40モル%の量で存在する。

【0097】

限定ではなく例として、ここで、本開示のいくつかの実施形態を、以下の実施例で詳細に説明する。

【実施例】

【0098】

エチレン／オクテン重合生成プロセスから回収されたパージ流の組成を以下の表1に提供する。重量パーセントは、パージ流の総重量に基づく。

【0099】

10

20

30

40

50

【表 3】

表 1

パージ流	(重量%)
炭化水素溶媒	6.1
分岐状C ₉ オレフィン	4.8
1-オクテン	42.4
トランス-4-オクテン	2.4
トランス-3-オクテン及びシス-4-オクテン(共溶出)	9.9
シス-3-オクテン	2.0
オクタン	0.6
トランス-2-オクテン	17.0
シス-2-オクテン	14.8

10

【0100】

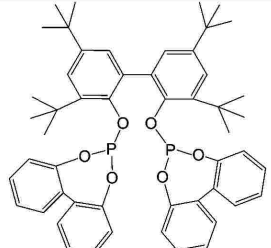
本発明の実施例 (inventive example、IE) で使用されるヒドロホルミル化触媒の配位子を以下の表 2 に提供する。

【0101】

20

【表 4】

表 2

ヒドロホルミル化触媒の配位子A
 6, 6'-[[3, 3', 5, 5'-テトラキス(1, 1-ジメチルエチル)-[1, 1'-ビフェニル]-2, 2'-ジイル]ビス(オキシ)]ビス-ジベンゾ[d, f][1, 3, 2]-ジオキサホスフェピン

30

【0102】

A. パージ流をヒドロホルミル化条件に供する

ヒドロホルミル化条件は、図 1 に示されるような反応器システム中に提供される。反応器システムは、直列に接続された 3 つの 1 リットルのステンレス鋼攪拌槽反応器 (R x 1、R x 2、R x 3) からなる。各反応器には、垂直方向に取り付けられた攪拌機と、オレフィン及び／又は合成ガスを反応器に供給するための底部付近の円筒形スパージャーが装備されている。スパージャーは、液体本体に、所望のガス流を提供するのに十分な大きさの複数の穴を含有する。各反応器は、反応器温度を制御するための方法としてシリコーン油シェルを有する。反応器 1 ~ 2 及び反応器 2 ~ 3 は、未反応ガスを移送し、アルデヒド生成物及び触媒を含有する液体溶液の一部が、反応器 1 から反応器 2 へ、かつ反応器 2 から反応器 3 へ (例えば、圧力差又はポンプによって) 流れるように、ラインを介して更に接続されている。したがって、反応器 1 の未反応オレフィンは、反応器 2 において、続いて反応器 3 において更にヒドロホルミル化される。代替の構成では、反応器 3 (R x 3) は、2 つの反応器のみが用いられるようにバイパスされ得る。

40

【0103】

各反応器はまた、反応器内で所望の液体レベルを維持するための空気圧液面制御器も含有する。反応器 1 は、オレフィン、一酸化炭素、及び水素を、スパージャーを通して導

50

入するためのラインを更に含有する同時に、構成された一酸化炭素及び水素は、反応器 1 から反応器 2 へ、かつ反応器 2 から反応器 3 へ未反応ガスも運ぶ移送ラインを介して反応器 2 及び 3 に送られる。各反応器はまた、必要に応じて、未反応ガスの制御された除去のための吹き出し口も含む。液体反応溶液の一部は、直列の最終反応器から気化器に連続的にポンプ移送され、気化器は、加熱ゾーンからなり、そこで、流動ガス（ストリップガス）の流れを利用して、揮発性成分の一部を水冷式凝縮器に掃引し、そこで、液体として生成物レシーバーに収集され得る（粗製品）。非揮発性物質は、接触領域及び分離ゾーンからなる水性抽出ゾーンを通過する。水性抽出の目的は、酸性副生成物を抽出し、それによって、米国特許第 5 7 4 1 9 4 4 号に記載されるように、ホスファイト配位子の追加の加水分解を防止することである。水性抽出後、有機非揮発性物質を再循環ラインを通して反応器 1 にポンプで戻す。

10

【0104】

ページ流を反応器 1 に導入する（図 1 の「オレフィン」は、ページ流を表す）。ページ流は、エチレン-オクテン重合生成プロセスからのものである。ページ流の組成を上記の表 1 に提供する。

【0105】

ヒドロホルミル化反応（すなわち、ページ流のヒドロホルミル化条件への曝露）は、2 つの反応器（R x 1 及び R x 2、R x 3 はバイパスされる）を使用して行われる。ロジウムジカルボニルアセチルアセトネート（394 ppm ロジウム）、配位子 A（上記の表 2）（0.7 重量%、ロジウム 1 モル当たり 2.0 モル当量の配位子 A）、テトラエチレングリコールジメチルエーテル（約 15 重量%）、及び混合 C₄ アルデヒド（約 85 重量%、C₄ アルデヒドの総重量に基づいて約 30:1 の n-ブチルアルデヒドとイソブチルアルデヒドとの比率）から構成される 2 リットルの触媒溶液を、図 1 に示される反応器システムに充填する。次いで、反応器を流動合成ガス（H₂:CO 比率=1:1）下で 70℃ に加熱する。反応器 1 及び反応器 2 の圧力は、それぞれ 244 psig 及び 220 psig に維持される。使用済み溶媒は、138 グラム/時間の速度で反応器 1 に供給される。気化器システムは、790 sLph の流量で 1:1 の合成ガスから構成されるストリップガスで操作され、気化器圧力は、101℃ の触媒温度で 7 psig に維持される。

20

【0106】

連続操作の数日後、ブチルアルデヒド及びテトラエチレングリコールジメチルエーテルは、オーバーヘッドで除去され、ノナナール、アルデヒド重質分（インサイチュアルドール縮合の副生成物）、未反応オレフィン、及び炭化水素溶媒（使用済み溶媒の一部として継続的に導入）から構成される反応プロセス流体が残る。ノナナールから構成される反応生成物（ノナナール反応生成物）は、155 グラム/時間の速度で収集される。ページ流ヒドロホルミル化反応生成物（「ノナナール生成物」と互換的に称される）の組成が以下の表 3 に示される。

30

【0107】

表 3. ノナナール生成物の組成。表 3 の重量パーセントは、ノナナール生成物の総重量に基づく。

【0108】

【表 5】

表 3 - ノナナール生成物

	重量%
C ₉ アルデヒド	64.8
未反応 C ₈ オレフィン	32.8
炭化水素溶媒	2.4
ノナナール反応生成物の N:I 比率	13.8:1 (93.2% の n-ノナナール)

40

【0109】

50

B. 交差アルドール縮合

イソプロパノール（IPA：37.5 g）、水（4.7 g）、及びNaOH（1.2 g）の溶液を、300 mLのParr反応器に充填し、窒素で3回パージし、封止する。溶液を激しく攪拌しながら60℃に加熱する。（i）C₄アルデヒド（25.2 g、0.35モル）及び（ii）ノナナル生成物（上記の表3）（38.2 g、0.175モルのn-ノナナル）の混合物を、40 mL／分の供給速度で小さなラボポンプでParr反応器に導入する。添加後、温度を1時間攪拌しながら60℃に維持し、交差アルドール縮合反応を完了し、C₈エナール、C₁₃エナール、C₁₈エナール、及び他の種から構成される交差アルドール生成物を形成する。次いで、交差アルドール生成物を40℃に冷却し、0.9当量の酢酸でクエンチする。

10

【0110】

交差アルドール生成物を分液ロートに移し、30分間分離させる。少量の水相（底相）を除去する。交差アルドール縮合反応（上記段落に記載）を3回繰り返し、混合された有機相（320.5 g）を、50℃、146 mbarのロータリーエバポレーターで濃縮する。残渣（208 g）を水（104 g）で洗浄し、有機相を3.58重量%の水含有量で残す。水の共沸除去を促進するために、追加のIPA（60 g）を有機相に添加する。混合物を、ロータリーエバポレーターで、50℃、146 mbarで2回濃縮して、交差アルドール生成物（187.8 g）を得る、交差アルドール生成物の組成を、以下の表4に示す。

20

【0111】

【表6】

表4. 交差アルドール生成物の組成。

GC面積%			
C ₈	C ₁₃	C ₁₈	水(ppm)
30.5	51.8	17.7	550

【0112】

C₄アルデヒド及び粗C₉アルデヒド生成物の転化率は、それぞれ97.2及び93.5%である。

30

【0113】

C. 交差アルドール生成物の水素添加（連続）

水素添加反応は、水素で活性化された8 mLのNi-3288で充填された3／8インチのステンレス鋼チューブの8インチ部分を含むチューブ反応器内で行われる。Ni-3288は、BASFから入手可能な60重量%のニッケル含有トリローブ押出物から構成される水素添加固定床触媒である。交差アルドール生成物（表4）を水素と混合し、水素飽和液相としてNi-3288触媒床を通してポンプ移送する。水素添加反応を、140℃、500 psig、2.2 hr⁻¹の液体時間空間速度（liquid hourly space velocity、LHSV）、600 hr⁻¹の気体時間空間速度（gas hourly space velocity、GHSV）で行い、混合アルコール／アルカン生成物を生成する。粗混合アルコール／アルカン生成物を、冷却したキャッチポットに収集する。供給物及び混合アルコール／アルカン生成物組成物を、以下の表5に示す。

40

【0114】

表5. 連続水素添加からの交差アルドール生成物（供給物）及び粗アルコール生成物。表5のデータは、連続水素添加プロセスにおけるアルデヒドのアルコールへの有効な単一パス転化率を示す。

【0115】

50

【表 7】

表 5

成分	水素添加への供給物 交差アルドール生成物(GC面積%)	粗アルコール生成物 (GC面積%)
イソプロパノール	2.69	3.01
C ₄ アルデヒド	1.50	0.32
オクテン	4.87	0.00
オクタン	0.00	4.37
C ₈ エナール	24.95	0.00
2-エチルヘキサノール	0.00	27.28
C ₉ アルデヒド	3.03	1.28
C ₁₃ エナール	15.82	1.01
C ₁₃ アルコール	0.00	16.00
C ₁₃ エナール	20.67	1.53
C ₁₃ アルコール	0.00	20.38
C ₁₈ エナール	6.76	0.66
C ₁₈ アルコール	0.68	7.32
不明物の合計	19.03	16.85

【0116】

D. C₈～C₁₈アルコール混合物の分離

表5からの粗アルコール生成物(700g)を、加熱マントルを装備した1L丸底蒸留反応釜に充填し、スピニングバンド蒸留カラムに接続する。磁気攪拌子を使用して、良好な混合及び均一な沸騰を達成する。混合アルコール／アルカン生成物から軽質画分(「軽質」は互換的には、C₁～C₇種を指す)を除去するために、カラム圧力を100mmHgに設定し、8:1の還流比率を確立する。反応釜内の液体の温度は、59.7℃(蒸留の開始)～154.9℃(軽質分除去完了)の範囲である。オーバーヘッド蒸気温度は、この同時期間中、34.4℃～56.4℃の範囲である。軽質画分(78.2g)を、オーバーヘッド留出物として収集し、残留生成物としてのC₈～C₁₈アルコール混合物(621.0g)が残る。軽質画分及びC₈～C₁₈アルコール混合物の組成を以下の表6に示す。

【0117】

【表 8】

表 6. 軽質画分及び残留混合物の組成

成分	軽質画分(面積%)	残留混合物(面積%)
イソプロパノール	17.09	0.00
混合アルカン	11.25	0.00
オクタン	53.35	0.00
C ₈ アルデヒド	1.39	0.16
2EH	12.05	26.16
C ₁₃ アルコール	0.00	18.83
C ₁₃ アルコール	0.00	22.66
C ₁₈ アルコール	0.00	11.20
不明物の合計	4.82	19.67

【0118】

E. 混合アルコール／アルカン生成物からの2EH、C₈、C₁₃、C₁₈のエトキシ

ル化反応

エトキシ化反応を、磁気駆動式インペラを装備したジャケット付きバッフル状 9 L ステンレス鋼 (stainless steel、S S) オートクレーブ反応器内で行った。各供給の前に、エチレンオキシドを、計量セル上に位置付けられた指定された供給物 (designated feed、D F) タンクに充填した。エトキシレンオキシド (Ethoxylene oxide、E O) を、130℃の反応温度で流量計を通して D F タンクから反応器に移送した。固体ペレット形態の水酸化カリウム (85%) を触媒として使用し、その後に続くカールフィッシャー滴定によって測定される水のレベルが 1000 ppm 未満になるまで脱水ステップを行った。

【0119】

2-エチルヘキサノール、2-エチルウンデカノール、2-ブチルノナノール、2-ヘプチルウンデカノールが、約 2.4 / 2.1 / 1.7 / 1 の (ガスクロマトグラフのスペクトルの積分ピーク面積による) 比率である、表 6 (上記) の残留混合物の混合 C₈ ~ C₁₈ アルコール (209.2 g)、及び水酸化カリウムペレット (1.24 g、85% の最小純度) を、あらかじめ窒素パージした 9 L 反応器に充填した。混合物を攪拌及び窒素スパージしながら 100℃ に加熱した。反応器を加圧して、次いで、7 回通気して、大気酸素を除去し、次いで、周囲温度で窒素で 16 ~ 20 psia に加圧した。触媒作用が及ぼされた脱水アルコールを攪拌しながら 130℃ に加熱し、次いで、エチレンオキシド (合計 325.6 g) を 130℃ で約 4 時間にわたって反応器に計量供給した。E O 供給が完了した後、反応器の内容物を反応温度で更に 2 時間攪拌して、未反応の酸化物 (消化物) を消費し、次いで、60℃ に冷却した。曇り点測定のための酢酸による中和のために、反応器の内容物の一部 (50 グラム) を取り出した。曇り点 (1 重量% 水溶液で測定) は、25℃ 未満であった。反応器を攪拌しながら 130℃ に加熱した。エチレンオキシド (合計 93.0 g) を、130℃ で約 4 時間にわたって反応器に計量供給した。E O 供給が完了した後、反応器の内容物を反応温度で更に 2 時間攪拌して、未反応の酸化物 (消化物) を消費し、次いで、60℃ に冷却した。1.14 g の酢酸を添加して反応を中和し、最終的なエトキシ化界面活性剤生成物を得る。曇り点 (1 重量% 水溶液中) は、82℃ と測定された。

【0120】

本開示は、本明細書に含まれる実施形態及び例示に限定されず、実施形態の一部、及び異なる実施形態の要素の組み合わせを含むそれらの実施形態の変更された形態を、以下の特許請求の範囲に該当する範囲で含むことが特に意図されている。

(態様)

(態様 1)

組成物であって、

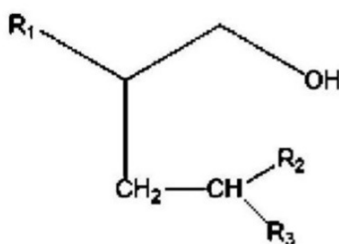
2-ヘプチルウンデカノールと、

2-エチルヘキサノール及び 2-プロピルヘプタノールからなる群から選択されるメンバーと、

アルコール (1) とアルコール (2) との混合物と、を含み、

アルコール (1) が構造 (1) を有し、

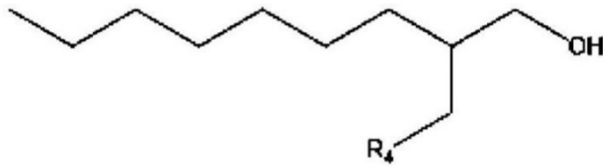
【化 1】



式中、R₁ は、エチル基及びプロピル基からなる群から選択され、

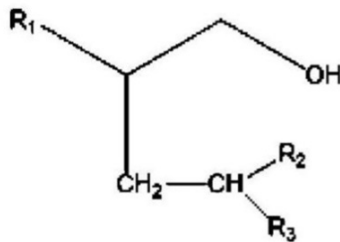
R₂ 及び R₃ は、それぞれ独立して、水素及びアルキル基からなる群から選択され、

ただし、 R_1 及び R_2 の炭素原子の総数は 7 であり、
 アルコール (2) が構造 (2) を有し、
 【化 2】

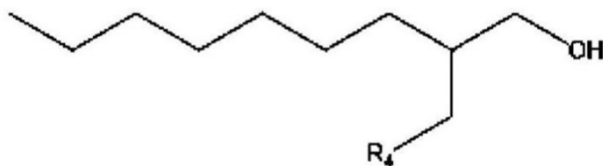


式中、 R_4 は、 n -プロピル基、イソプロピル基、 n -ブチル基、及びイソブチル基からなる群から選択される、組成物。
 (態様 2)

5 モル% ~ 40 モル% の 2-ヘプチルウンデカノールと、
 5 モル% ~ 40 モル% の 2-エチルヘキサノールと、
 10 モル% ~ 40 モル% の構造 (1) を有するアルコール (1) であって、
 【化 3】

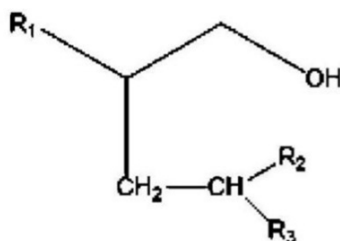


式中、 R_1 は、エチル基であり、
 R_2 及び R_3 は、それぞれ独立して、水素及びアルキル基からなる群から選択され、ただし、 R_2 及び R_3 の炭素原子の総数は 7 である、アルコール (1) と、
 10 モル% ~ 40 モル% の構造 (2) を有するアルコール (2) であって、
 【化 4】



式中、 R_4 は、 n -プロピル基及びイソプロピル基からなる群から選択される、アルコール (2) と、を含む、態様 1 に記載の組成物。
 (態様 3)

5 モル% ~ 40 モル% の 2-ヘプチルウンデカノールと、
 5 モル% ~ 40 モル% の 2-プロピルヘプタノールと、
 10 モル% ~ 40 モル% の構造 (1) を有するアルコール (1) であって、
 【化 5】



10

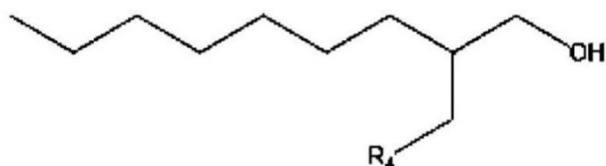
20

30

40

50

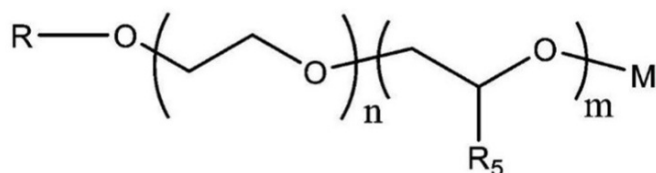
式中、 R_1 は、プロピル基であり、
 R_2 及び R_3 は、それぞれ独立して、水素及びアルキル基からなる群から選択され、
 ただし、 R_2 及び R_3 の炭素原子の総数は 7 である、アルコール (1) と、
 10 モル % ~ 40 モル % の構造 (2) を有するアルコール (2) であって、
 【化 6】



10

式中、 R_4 は、 n -ブチル基及びイソブチル基からなる群から選択される、アルコール (2) と、を含む、態様 1 に記載の組成物。
 (態様 4)
 構造 (3) の成分を含む組成物であって、
 【化 7】

構造 (3)



20

式中、 R は、2-エチルヘキシル基、2-プロピルヘプチル基、2-エチルウンデカニル基、2-プロピルウンデカニル基、2-ブチルノナニル基、2-ペンチルノナニル基、2-ヘプチルウンデカニル基、及びそれらの組み合わせからなる群から選択され、
 R_5 は、メチル基及びエチル基からなる群から選択され、
 M は、水素、 SO_3^- 、 PO_3^{2-} 、及びアルキルポリグルコシドからなる群から選択され、

30

m は、0 ~ 30 の整数であり、
 n は、0 ~ 70 の整数である、組成物。
 (態様 5)
 R が、前記 2-エチルヘキシル基であり、5 モル % ~ 40 モル % の量で存在する、態様 4 に記載の組成物。
 (態様 6)
 R が、前記 2-プロピルヘプチル基であり、5 モル % ~ 40 モル % の量で存在する、態様 4 に記載の組成物。
 (態様 7)
 R が、前記 2-エチルウンデカニル基であり、10 モル % ~ 40 モル % の量で存在する、態様 4 に記載の組成物。
 (態様 8)
 R が、前記 2-プロピルウンデカニル基であり、10 モル % ~ 40 モル % の量で存在する、態様 4 に記載の組成物。
 (態様 9)
 R が、前記 2-ブチルノナニル基であり、10 モル % ~ 40 モル % の量で存在する、態様 4 に記載の組成物。
 (態様 10)
 R が、前記 2-ペンチルノナニル基であり、10 モル % ~ 40 モル % の量で存在する、態様 4 に記載の組成物。

40

50

(態様 1 1)

R が、前記 2-ヘプチルウンデカニル基であり、5 モル%～40 モル%の量で存在する、態様 4 に記載の組成物。

(態様 1 2)

R が、5 モル%～40 モル%の前記 2-エチルヘキシル基、10 モル%～40 モル%の前記 2-エチルウンデカニル基、10 モル%～40 モル%の前記 2-ブチルノナニル基、5 モル%～40 モル%の前記 2-ヘプチルウンデカニル基、及びそれらの組み合わせからなる群から選択され、

M が、水素であり、

m が、0 であり、

n が、1～70 の整数である、態様 4 に記載の組成物。

10

(態様 1 3)

R が、5 モル%～40 モル%の前記 2-プロピルヘプチル基、10 モル%～40 モル%の前記 2-プロピルウンデカニル基、10 モル%～40 モル%の前記 2-ペンチルノナニル基、5 モル%～40 モル%の前記 2-ヘプチルウンデカニル基、及びそれらの組み合わせからなる群から選択され、

M が、水素であり、

m が、0 であり、

n が、1～70 の整数である、態様 4 に記載の組成物。

(態様 1 4)

R が、5 モル%～40 モル%の前記 2-エチルヘキシル基、10 モル%～40 モル%の前記 2-エチルウンデカニル基、10 モル%～40 モル%の前記 2-ブチルノナニル基、5 モル%～40 モル%の前記 2-ヘプチルウンデカニル基、及びそれらの組み合わせからなる群から選択され、

M が、 SO_3^- であり、

m が、0 であり、

n が、0～20 の整数である、態様 4 に記載の組成物。

20

(態様 1 5)

R が、5 モル%～40 モル%の前記 2-プロピルヘプチル基、10 モル%～40 モル%の前記 2-プロピルウンデカニル基、10 モル%～40 モル%の前記 2-ペンチルノナニル基、5 モル%～40 モル%の前記 2-ヘプチルウンデカニル基、及びそれらの組み合わせからなる群から選択され、

M が、 SO_3^- であり、

m が、0 であり、

n が、0～20 の整数である、態様 4 に記載の組成物。

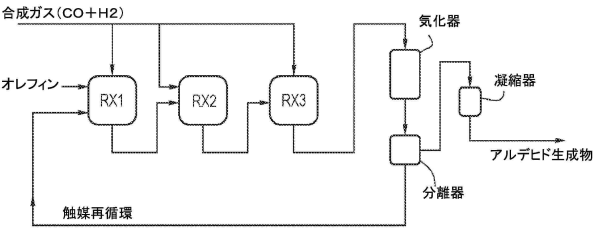
30

40

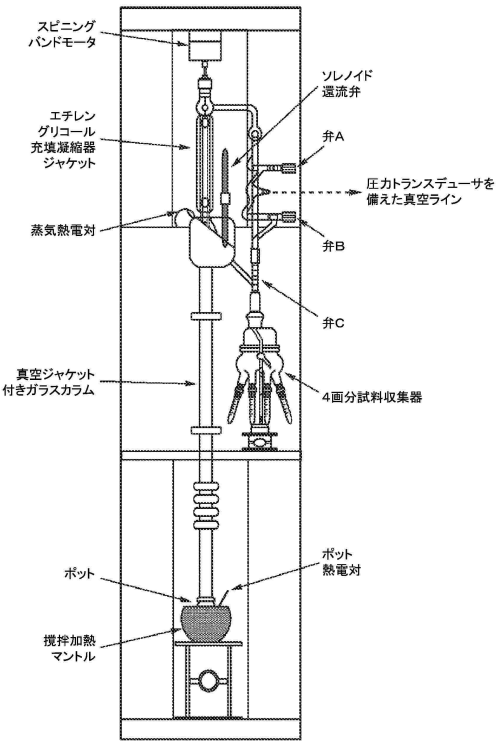
50

【図面】

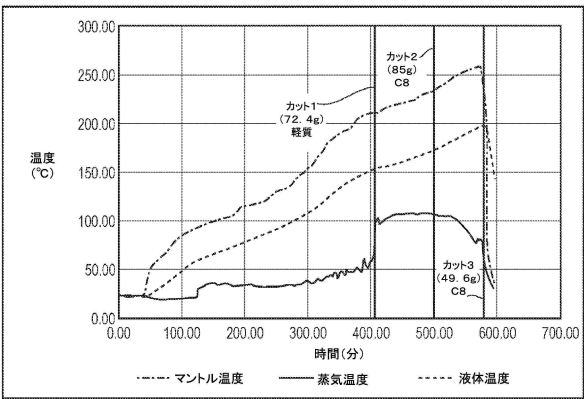
【図 1】



【図 2】



【図 3】



フロントページの続き

- 弁理士 堂垣 泰雄
(74)代理人 100147212
弁理士 小林 直樹
- (72)発明者 ユイ、ワンリン
アメリカ合衆国 テキサス州 77566 レーク ジャクソン, エイブナー ジャクソン パークウェイ 220
- (72)発明者 ブラメール、マイケル エー.
アメリカ合衆国 テキサス州 77541 フリーポート, ノース ブラズスポーツ ブールバード 2301
- (72)発明者 デマイオーターナー、サリー
アメリカ合衆国 テキサス州 77566 レーク ジャクソン, エイブナー ジャクソン パークウェイ 230, エドガー シー. ブリットン ビルディング
- (72)発明者 ク、スンユ
アメリカ合衆国 テキサス州 77566 レーク ジャクソン, エイブナー ジャクソン パークウェイ 220
- (72)発明者 フック、ブルース ディー.
アメリカ合衆国 テキサス州 77566 レーク ジャクソン, エイブナー ジャクソン パークウェイ 230
- (72)発明者 シー、ハイフォン
アメリカ合衆国 テキサス州 77566 レーク ジャクソン, エイブナー ジャクソン パークウェイ 230
- (72)発明者 ヤン、チン
アメリカ合衆国 テキサス州 77541 フリーポート, ノース ブラズスポーツ ブールバード 2301
- (72)発明者 リウ、ユイチュン
アメリカ合衆国 テキサス州 77566 レーク ジャクソン, エイブナー ジャクソン パークウェイ 230
- (72)発明者 ジョンソン、ジェフ
アメリカ合衆国 テキサス州 77541 フリーポート, ノース ブラズスポーツ ブールバード 2301
- 審査官 安孫子 由美
- (56)参考文献 特表2012-524744 (JP, A)
特表2005-528477 (JP, A)
米国特許出願公開第2005/0004404 (US, A1)
特開昭59-132928 (JP, A)
特表昭61-500784 (JP, A)
特開平10-251181 (JP, A)
特表2015-510932 (JP, A)
特開平06-279335 (JP, A)
Jan KRUPCIK et al., "Analysis of hydroformylation products of higher n-alkenes by capillary gas chromatography", Collection of Czechoslovak Chemical Communications, 1985年, Vol.50, No.8, p.1808-1818, DOI:10.1135/ccccc19851808
- (58)調査した分野 (Int.Cl., DB名)
C07C 31/125
CAplus/REGISTRY (STN)