

(19)日本国特許庁(JP)

## (12)特許公報(B2)

(11)特許番号  
特許第7455824号  
(P7455824)

(45)発行日 令和6年3月26日(2024.3.26)

(24)登録日 令和6年3月15日(2024.3.15)

(51)国際特許分類

F I

C 0 7 C 43/13 (2006.01)

C 0 7 C 43/13

D C S P

C 0 9 K 23/42 (2022.01)

C 0 9 K 23/42

C 0 7 C 41/03 (2006.01)

C 0 7 C 41/03

請求項の数 13 (全19頁)

(21)出願番号	特願2021-522871(P2021-522871)	(73)特許権者	000000918 花王株式会社 東京都中央区日本橋茅場町1丁目14番 10号
(86)(22)出願日	令和2年5月28日(2020.5.28)	(74)代理人	110000729 弁理士法人ユニアス国際特許事務所
(86)国際出願番号	PCT/JP2020/021174	(72)発明者	亀ノ上 翔吾 和歌山県和歌山市湊1334 花王株式 会社研究所内
(87)国際公開番号	WO2020/241771	(72)発明者	溝奥 隆司 和歌山県和歌山市湊1334 花王株式 会社研究所内
(87)国際公開日	令和2年12月3日(2020.12.3)	(72)発明者	阿良田 龍哉 和歌山県和歌山市湊1334 花王株式 会社研究所内
審査請求日	令和5年3月10日(2023.3.10)		
(31)優先権主張番号	特願2019-99445(P2019-99445)		
(32)優先日	令和1年5月28日(2019.5.28)		
(33)優先権主張国・地域又は機関	日本国(JP)		

最終頁に続く

(54)【発明の名称】 化合物、及び組成物

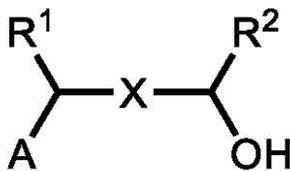
(57)【特許請求の範囲】

【請求項1】

下記化学式(1)で表される化合物。

【化1】

化学式(1):



(式中、 $R^1$ 及び $R^2$ はそれぞれ置換基を有さない炭素数1以上33以下の脂肪族炭化水素基であり、 $R^1$ と $R^2$ の合計炭素数は14以上34以下であり、 $X$ は単結合又は炭素数1以上5以下の脂肪族炭化水素基であり、 $A$ は $-O-CH_2-CH(OH)-CH_2OH$ 又は $-O-CH(-CH_2-OH)_2$ である。)

【請求項2】

前記化学式(1)で表される化合物において、 $X$ は単結合である、請求項1に記載の化合物。

【請求項3】

前記化学式(1)で表される化合物は、 $R^1$ と $R^2$ の合計炭素数が同じであり、かつ $R^1$ と $R^2$ のそれぞれの炭素数が異なる2種以上の化合物を含む、請求項1又は2に記載の化合物。

【請求項4】

前記化学式(1)で表される化合物は、 $R^1$ の炭素数が5以上かつ $R^2$ の炭素数が5以上である化合物の含有割合が、前記化学式(1)で表される化合物の合計量に対して10質量%以上90質量%以下である、請求項3に記載の化合物。

【請求項5】

前記化学式(1)で表される化合物は、Aが $-O-CH_2-CH(OH)-CH_2OH$ である化合物1、及びAが $-O-CH(-CH_2-OH)_2$ である化合物2を含有する、請求項1～4のいずれかに記載の化合物。

10

【請求項6】

前記化学式(1)で表される化合物は、前記化合物1及び前記化合物2の合計量に対する前記化合物1の含有量が、30質量%以上である、請求項5に記載の化合物。

【請求項7】

前記化学式(1)で表される化合物は、 $R^1$ と $R^2$ の合計炭素数が、14である化合物、及び16である化合物の合計含有量が、75質量%以上である、請求項1～6のいずれかに記載の化合物。

【請求項8】

前記化学式(1)で表される化合物は、融点が30以下である、請求項1～7のいずれかに記載の化合物。

20

【請求項9】

前記化学式(1)で表される化合物は、内部エポキシドとグリセリンの反応物である、請求項1～8に記載の化合物。

【請求項10】

前記内部エポキシドは、内部オレフィンの酸化物であり、前記内部オレフィンに末端オレフィンを5質量%以下含有する、請求項9に記載の化合物。

【請求項11】

請求項1～10のいずれかに記載の化合物を含有する組成物。

【請求項12】

前記化学式(1)で表される化合物の含有量が、50質量%以上である、請求項11に記載の組成物。

30

【請求項13】

さらに水を含有する、請求項11又は12に記載の組成物。

【発明の詳細な説明】

【技術分野】

【0001】

本発明は、化合物、及び当該化合物を含有する組成物に関する。

【背景技術】

【0002】

エポキシアルカンと多価アルコールとの反応によって得られるエーテルアルコールは、乳化剤、界面活性剤、及び分散剤などの原料として有用である。

40

【0003】

例えば、特許文献1では、炭素数8～20のエポキシアルカンと炭素原子1～10個及びアルコール性水酸基1～4個を有するモノ又はポリ官能性アルコールとの反応によって得られるエーテルアルコールが開示されている。

【先行技術文献】

【特許文献】

【0004】

【文献】特開昭55-105632号公報

50

## 【発明の概要】

## 【発明が解決しようとする課題】

## 【0005】

しかしながら、特許文献1のエーテルアルコールは、融点が高いため取扱い性に劣り、当該エーテルアルコールによって形成される膜は疎水性が低いという問題があることが分かった。

## 【0006】

本発明は、上記のような状況を鑑みてなされたものであり、融点が低く、疎水性の高い膜を形成することができる化合物、及び当該化合物を含有する組成物を提供する。

## 【課題を解決するための手段】

## 【0007】

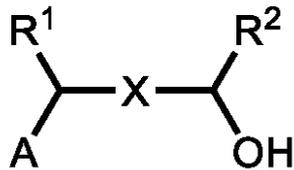
本発明者は鋭意検討を重ねた結果、特定構造の化合物により、上記課題を解決しうることを見出した。

## 【0008】

すなわち、本発明は、下記化学式(1)で表される化合物、に関する。

## 【化1】

化学式(1)：



(式中、 $R^1$ 及び $R^2$ はそれぞれ炭素数1以上33以下の脂肪族炭化水素基であり、 $R^1$ と $R^2$ の合計炭素数は14以上34以下であり、Xは単結合又は炭素数1以上5以下の脂肪族炭化水素基であり、Aは $-O-CH_2-CH(OH)-CH_2OH$ 又は $-O-CH(CH_2-OH)_2$ である。)

## 【発明の効果】

## 【0009】

本発明の前記化学式(1)で表される化合物(以下、エーテルアルコールともいう)は、炭素鎖の内部にグリセリルエーテル基と水酸基を有しており、融点が低いという特徴を有する。また、本発明のエーテルアルコールは、疎水性膜の形成性に優れている。

## 【発明を実施するための形態】

## 【0010】

以下、本発明について詳細に説明する。

## 【0011】

## &lt;エーテルアルコール&gt;

本発明のエーテルアルコールは、下記化学式(1)で表される化合物である。また、本発明のエーテルアルコールは、下記化学式(1)で表される化合物を少なくとも1種含有するものであってよい。また、本発明のエーテルアルコールは、下記化学式(1)で表される化合物の1種以上からなるものであってよい。

10

20

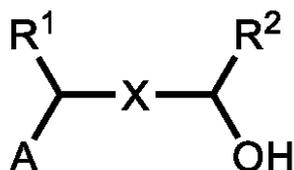
30

40

50

## 【化2】

化学式(1):



(式中、 $R^1$ 及び $R^2$ はそれぞれ炭素数1以上33以下の脂肪族炭化水素基であり、 $R^1$ と $R^2$ の合計炭素数は14以上34以下であり、 $X$ は単結合又は炭素数1以上5以下の脂肪族炭化水素基であり、 $A$ は $-O-CH_2-CH(OH)-CH_2OH$ 又は $-O-CH(-CH_2-OH)_2$ である。)

10

## 【0012】

$R^1$ 及び $R^2$ はそれぞれ炭素数1以上33以下の脂肪族炭化水素基であり、好ましくは直鎖又は分岐アルキル基(分岐鎖アルキル基ともいう)であり、より好ましくは直鎖アルキル基である。前記脂肪族炭化水素基は、本発明の効果を妨げない限り、ハロゲン基、ヒドロキシ基、ケトン基、カルボキシ基、アリール基、及びアルコキシ基等の置換基を有していてもよい。 $R^1$ 及び $R^2$ は、同じ脂肪族炭化水素基であってもよく、異なる脂肪族炭化水素基であってもよい。また、 $R^1$ 及び $R^2$ の置換基の数は、有機溶媒に対する溶解性の観点から、 $R^1$ 及び $R^2$ において合計で、好ましくは5以下、より好ましくは3以下、更に好ましくは1以下、より更に好ましくは0(すなわち置換基を有さない)である。

20

## 【0013】

$R^1$ と $R^2$ の合計炭素数は14以上34以下であり、疎水性の観点から、好ましくは16以上であり、有機溶媒に対する溶解性の観点から、好ましくは22以下、より好ましくは20以下、更に好ましくは18以下、より更に好ましくは16以下である。

## 【0014】

$X$ は単結合又は炭素数1以上5以下の脂肪族炭化水素基であり、製造効率及び製造容易性の観点から、好ましくは単結合又は炭素数1以上3以下の脂肪族炭化水素基、より好ましくは単結合又は炭素数1以上2以下の脂肪族炭化水素基、更に好ましくは単結合又は炭素数1の脂肪族炭化水素基、より更に好ましくは単結合である。

30

## 【0015】

$R^1$ と $R^2$ と $X$ の合計炭素数は14以上39以下であり、疎水性の観点から、好ましくは16以上であり、有機溶媒に対する溶解性の観点から、好ましくは31以下、より好ましくは28以下、更に好ましくは26以下、より更に好ましくは25以下、より更に好ましくは24以下、より更に好ましくは22以下、より更に好ましくは20以下、より更に好ましくは18以下、より更に好ましくは16以下である。

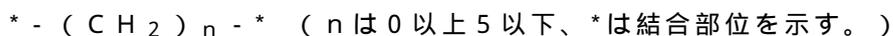
## 【0016】

$X$ が脂肪族炭化水素基である場合、製造効率及び製造容易性の観点から、好ましくは直鎖又は分岐アルキル基であり、より好ましくは直鎖アルキル基である。

40

## 【0017】

$X$ は、製造効率及び製造容易性の観点から、好ましくは、



であり、 $n$ は好ましくは0以上であり、好ましくは3以下、より好ましくは2以下、更に好ましくは1以下、より更に好ましくは0、すなわち単結合である。

## 【0018】

前記エーテルアルコールは、製造効率及び製造容易性の観点から、 $R^1$ と $R^2$ の合計炭素数が同じであり、かつ $R^1$ と $R^2$ のそれぞれの炭素数が異なる2種以上の化合物を含むことが好ましい。

## 【0019】

50

前記エーテルアルコールは、製造効率及び製造容易性の観点から、 $R^1$ と $R^2$ とXの合計炭素数が同じであり、かつ $R^1$ と $R^2$ のそれぞれの炭素数が異なる2種以上の化合物を含むことが好ましい。

【0020】

前記エーテルアルコールは、製造効率及び製造容易性の観点から、Xが単結合又は炭素数1以上3以下の脂肪族炭化水素基であり、 $R^1$ と $R^2$ の合計炭素数が同じであり、かつ $R^1$ と $R^2$ のそれぞれの炭素数が異なる2種以上の化合物を含むことがより好ましい。

【0021】

前記エーテルアルコールは、製造効率及び製造容易性の観点から、Xが単結合又は炭素数1以上3以下の脂肪族炭化水素基であり、 $R^1$ と $R^2$ とXの合計炭素数が同じであり、かつ $R^1$ と $R^2$ のそれぞれの炭素数が異なる2種以上の化合物を含むことがより好ましい。

10

【0022】

前記エーテルアルコールは、製造効率及び製造容易性の観点から、Xが単結合又は炭素数1以上2以下の脂肪族炭化水素基であり、 $R^1$ と $R^2$ の合計炭素数が同じであり、かつ $R^1$ と $R^2$ のそれぞれの炭素数が異なる2種以上の化合物を含むことが更に好ましい。

【0023】

前記エーテルアルコールは、製造効率及び製造容易性の観点から、Xが単結合又は炭素数1以上2以下の脂肪族炭化水素基であり、 $R^1$ と $R^2$ とXの合計炭素数が同じであり、かつ $R^1$ と $R^2$ のそれぞれの炭素数が異なる2種以上の化合物を含むことが更に好ましい。

【0024】

前記エーテルアルコールは、製造効率及び製造容易性の観点から、Xが単結合又は炭素数1の脂肪族炭化水素基であり、 $R^1$ と $R^2$ の合計炭素数が同じであり、かつ $R^1$ と $R^2$ のそれぞれの炭素数が異なる2種以上の化合物を含むことがより更に好ましい。

20

【0025】

前記エーテルアルコールは、製造効率及び製造容易性の観点から、Xが単結合又は炭素数1の脂肪族炭化水素基であり、 $R^1$ と $R^2$ とXの合計炭素数が同じであり、かつ $R^1$ と $R^2$ のそれぞれの炭素数が異なる2種以上の化合物を含むことがより更に好ましい。

【0026】

前記エーテルアルコールは、製造効率及び製造容易性の観点から、Xが単結合であり、 $R^1$ と $R^2$ の合計炭素数が同じであり、かつ $R^1$ と $R^2$ のそれぞれの炭素数が異なる2種以上の化合物を含むことがより更に好ましい。

30

【0027】

前記エーテルアルコールは、 $R^1$ と $R^2$ の合計炭素数が、14である化合物、及び16である化合物の合計含有量が、好ましくは75質量%以上、より好ましくは85質量%以上、更に好ましくは95質量%以上、より更に好ましくは100質量%である。

【0028】

前記エーテルアルコールが、Xが単結合であり、 $R^1$ と $R^2$ の合計炭素数が異なる2種以上の化合物を含有する場合、有機溶媒に対する溶解性の観点から、 $R^1$ と $R^2$ の合計炭素数が、14である化合物、及び16である化合物の合計含有量は、好ましくは75質量%以上、より好ましくは85質量%以上、更に好ましくは95質量%以上、より更に好ましくは99質量%以上、より更に好ましくは100質量%である。

40

【0029】

前記エーテルアルコールが、 $R^1$ と $R^2$ の合計炭素数が同じであり、かつ $R^1$ と $R^2$ のそれぞれの炭素数が異なる2種以上の化合物を含む場合、有機溶媒に対する溶解性の観点から、 $R^1$ の炭素数が5以上かつ $R^2$ の炭素数が5以上の化合物の含有割合は、好ましくは10質量%以上、より好ましくは20質量%以上、更に好ましくは30質量%以上であり、好ましくは90質量%以下、より好ましくは80質量%以下、更に好ましくは70質量%以下である。また、泡の持続性の観点から、 $R^1$ の炭素数が5以上かつ $R^2$ の炭素数が5以上の化合物の含有割合は、好ましくは30質量%以下、より好ましくは20質量%以上30質量%以下である。

50

## 【 0 0 3 0 】

前記エーテルアルコールの融点は、有機溶媒に対する溶解性の観点から、好ましくは30以下、より好ましくは20以下、更に好ましくは10以下であり、また、-200以上であってよい。

## 【 0 0 3 1 】

前記エーテルアルコールの製造方法は特に制限されず、例えば、内部オレフィンの二重結合を過酸化水素、過ギ酸、過酢酸等の過酸化物により酸化して内部エポキシドを合成し、得られた内部エポキシドにグリセリンを反応させることにより製造することができる。なお、内部オレフィンの総炭素数が一定で、異なる位置に二重結合を有する混合物の場合、前記製造方法により得られる前記エーテルアルコールは、Xが単結合であり、R<sup>1</sup>とR<sup>2</sup>の合計炭素数が同じであり、かつR<sup>1</sup>とR<sup>2</sup>のそれぞれの炭素数が異なる複数の化合物の混合物である。また、前記製造方法により得られる前記エーテルアルコールは、通常、前記Aが-O-CH<sub>2</sub>-CH(OH)-CH<sub>2</sub>OHである化合物1（以下、エーテルアルコール1ともいう）と、前記Aが-O-CH(-CH<sub>2</sub>-OH)<sub>2</sub>である化合物2（以下、エーテルアルコール2ともいう）の混合物である。前記混合物中の前記エーテルアルコール1の含有量は、前記エーテルアルコール1と前記エーテルアルコール2の合計量に対して、好ましくは1質量%以上、より好ましくは30質量%以上、更に好ましくは40質量%以上、より更に好ましくは50質量%以上であり、好ましくは99質量%以下、より好ましくは90質量%以下、更に好ましくは80質量%以下である。

## 【 0 0 3 2 】

前記エーテルアルコールの製造に用いられる内部オレフィンには、末端オレフィンを含有していてもよい。その場合、オレフィン中に含まれる末端オレフィンの含有量は、例えば、0.1質量%以上、0.2質量%以上、また、5質量%以下、3質量%以下、2質量%以下、1質量%以下、0.5質量%以下などである。

## 【 0 0 3 3 】

前記エーテルアルコールは、前記化学式(1)で表される化合物1種、或いは、前記化学式(1)で表される化合物2種以上の混合物、或いは、これらと原料オレフィンに含まれるオレフィン以外の微量成分及びその誘導体との混合物として得ることができる。

## 【 0 0 3 4 】

< 組成物 >

本発明の組成物は、少なくとも1種の前記エーテルアルコールを含有する。

## 【 0 0 3 5 】

前記組成物中の前記エーテルアルコールの総含有量は特に制限されないが、運搬や貯蔵コストを低減する観点から、好ましくは50質量%以上、より好ましくは60質量%以上、更に好ましくは70質量%以上、より更に好ましくは80質量%以上、より更に好ましくは100質量%である。

## 【 0 0 3 6 】

前記組成物が、前記エーテルアルコール1と前記エーテルアルコール2を含有する場合、前記エーテルアルコール1の含有量は、高い吸着力を得る観点から、前記エーテルアルコール1と前記エーテルアルコール2の合計量に対して、好ましくは1質量%以上、より好ましくは30質量%以上、更に好ましくは40質量%以上、より更に好ましくは50質量%以上であり、好ましくは99質量%以下、より好ましくは90質量%以下、更に好ましくは80質量%以下である。また、同様の観点から、好ましくは1~99質量%、より好ましくは30~99質量%、更に好ましくは40~90質量%、より更に好ましくは50~80質量%である。

## 【 0 0 3 7 】

前記組成物は、取扱い容易性及び保存安定性の観点から、水、溶剤、又は各種添加剤を含有してもよい。

## 【 0 0 3 8 】

本発明のエーテルアルコール又は組成物は、例えば、界面活性剤、乳化剤、分散剤、ポ

10

20

30

40

50

リマー及び樹脂などの原料、潤滑油等の油剤の添加剤、塗料添加剤、農薬添加剤、樹脂添加剤、金属表面改質剤、化粧品基材、医療用助剤、繊維用油剤、石油薬剤、加工薬剤、滑剤、可塑剤、乳化剤、分散剤、防曇剤、帯電防止剤、及び消泡剤などに用いられる。

【0039】

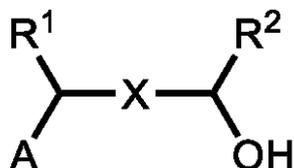
以下に、本発明及び本発明の好ましい実施態様を示す。

< 1 >

下記化学式(1)で表される化合物。

【化3】

化学式(1)：



10

(式中、 $R^1$ 及び $R^2$ はそれぞれ炭素数1以上3以下(3)の脂肪族炭化水素基であり、 $R^1$ と $R^2$ の合計炭素数は14以上34以下であり、 $X$ は単結合又は炭素数1以上5以下の脂肪族炭化水素基であり、 $A$ は $-O-CH_2-CH(OH)-CH_2OH$ 又は $-O-CH(-CH_2-OH)_2$ である。)

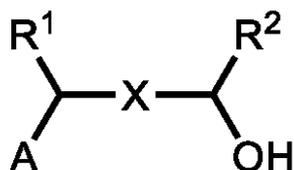
20

< 2 >

下記化学式(1)で表される化合物。

【化4】

化学式(1)：



30

(式中、 $R^1$ 及び $R^2$ はそれぞれ炭素数1以上3以下(3)の脂肪族炭化水素基であり、 $X$ は単結合又は炭素数1以上5以下の脂肪族炭化水素基であり、 $R^1$ と $R^2$ と $X$ の合計炭素数は14以上39以下であり、 $A$ は $-O-CH_2-CH(OH)-CH_2OH$ 又は $-O-CH(-CH_2-OH)_2$ である。)

< 3 >

前記 $R^1$ 及び $R^2$ は、それぞれ直鎖又は分岐アルキル基である、< 1 >又は< 2 >に記載の化合物。

< 4 >

前記 $R^1$ 及び $R^2$ は、それぞれ直鎖アルキル基である、< 1 >又は< 2 >に記載の化合物。

40

< 5 >

前記 $R^1$ 及び $R^2$ の合計炭素数は、好ましくは16以上であり、好ましくは22以下、より好ましくは20以下、更に好ましくは18以下、より更に好ましくは16以下である、< 1 > ~ < 4 >のいずれかに記載の化合物。

< 6 >

前記 $R^1$ 及び $R^2$ の合計炭素数は、好ましくは14以上22以下、より好ましくは16以上22以下である、< 1 > ~ < 4 >のいずれかに記載の化合物。

< 7 >

前記 $R^1$ 及び $R^2$ の合計炭素数は、好ましくは14以上20以下、より好ましくは16

50

以上 20 以下である、< 1 > ~ < 4 > のいずれかに記載の化合物。

< 8 >

前記 R<sup>1</sup> 及び R<sup>2</sup> の合計炭素数は、好ましくは 14 以上 18 以下、より好ましくは 16 以上 18 以下である、< 1 > ~ < 4 > のいずれかに記載の化合物。

< 9 >

前記 R<sup>1</sup> 及び R<sup>2</sup> の合計炭素数は、好ましくは 14 以上 16 以下、より好ましくは 16 である、< 1 > ~ < 4 > のいずれかに記載の化合物。

< 10 >

前記 X は、単結合又は炭素数 1 以上 3 以下の脂肪族炭化水素基である、< 1 > ~ < 9 > のいずれかに記載の化合物。

10

< 11 >

前記 X は、単結合又は炭素数 1 以上 2 以下の脂肪族炭化水素基である、< 1 > ~ < 9 > のいずれかに記載の化合物。

< 12 >

前記 X は、単結合又は炭素数 1 の脂肪族炭化水素基である、< 1 > ~ < 9 > のいずれかに記載の化合物。

< 13 >

前記 X は、単結合である、< 1 > ~ < 9 > のいずれかに記載の化合物。

< 14 >

前記 R<sup>1</sup> と R<sup>2</sup> と X の合計炭素数は、好ましくは 16 以上であり、好ましくは 31 以下、より好ましくは 28 以下、更に好ましくは 26 以下、より更に好ましくは 25 以下、より更に好ましくは 24 以下、より更に好ましくは 22 以下、より更に好ましくは 20 以下、より更に好ましくは 18 以下、より更に好ましくは 16 以下である、< 1 > ~ < 13 > のいずれかに記載の化合物。

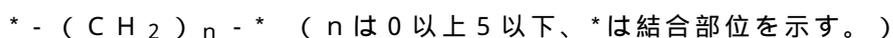
20

< 15 >

前記 X は、好ましくは直鎖又は分岐アルキル基、より好ましくは直鎖アルキル基である、< 1 > ~ < 14 > のいずれかに記載の化合物。

< 16 >

前記 X は、



30

であり、n は好ましくは 0 以上であり、好ましくは 3 以下、より好ましくは 2 以下、更に好ましくは 1 以下、より更に好ましくは 0、すなわち単結合である、< 1 > ~ < 14 > のいずれかに記載の化合物。

< 17 >

前記化学式 (1) で表される化合物は、R<sup>1</sup> と R<sup>2</sup> の合計炭素数が同じであり、かつ R<sup>1</sup> と R<sup>2</sup> のそれぞれの炭素数が異なる 2 種以上の化合物を含む、< 1 > ~ < 16 > のいずれかに記載の化合物。

< 18 >

前記化学式 (1) で表される化合物は、X が単結合又は炭素数 1 以上 3 以下の脂肪族炭化水素基であり、R<sup>1</sup> と R<sup>2</sup> の合計炭素数が同じであり、かつ R<sup>1</sup> と R<sup>2</sup> のそれぞれの炭素数が異なる 2 種以上の化合物を含む、< 1 > ~ < 16 > のいずれかに記載の化合物。

40

< 19 >

前記化学式 (1) で表される化合物は、X が単結合又は炭素数 1 以上 3 以下の脂肪族炭化水素基であり、R<sup>1</sup> と R<sup>2</sup> と X の合計炭素数が同じであり、かつ R<sup>1</sup> と R<sup>2</sup> のそれぞれの炭素数が異なる 2 種以上の化合物を含む、< 1 > ~ < 16 > のいずれかに記載の化合物。

< 20 >

前記化学式 (1) で表される化合物は、X が単結合又は炭素数 1 以上 2 以下の脂肪族炭化水素基であり、R<sup>1</sup> と R<sup>2</sup> の合計炭素数が同じであり、かつ R<sup>1</sup> と R<sup>2</sup> のそれぞれの炭素数が異なる 2 種以上の化合物を含む、< 1 > ~ < 16 > のいずれかに記載の化合物。

< 21 >

50

前記化学式(1)で表される化合物は、Xが単結合又は炭素数1以上2以下の脂肪族炭化水素基であり、 $R^1$ と $R^2$ とXの合計炭素数が同じであり、かつ $R^1$ と $R^2$ のそれぞれの炭素数が異なる2種以上の化合物を含む、 $\langle 1 \rangle \sim \langle 16 \rangle$ のいずれかに記載の化合物。

$\langle 22 \rangle$

前記化学式(1)で表される化合物は、Xが単結合又は炭素数1の脂肪族炭化水素基であり、 $R^1$ と $R^2$ の合計炭素数が同じであり、かつ $R^1$ と $R^2$ のそれぞれの炭素数が異なる2種以上の化合物を含む、 $\langle 1 \rangle \sim \langle 16 \rangle$ のいずれかに記載の化合物。

$\langle 23 \rangle$

前記化学式(1)で表される化合物は、Xが単結合又は炭素数1の脂肪族炭化水素基であり、 $R^1$ と $R^2$ とXの合計炭素数が同じであり、かつ $R^1$ と $R^2$ のそれぞれの炭素数が異なる2種以上の化合物を含む、 $\langle 1 \rangle \sim \langle 16 \rangle$ のいずれかに記載の化合物。

10

$\langle 24 \rangle$

前記化学式(1)で表される化合物は、Xが単結合であり、 $R^1$ と $R^2$ の合計炭素数が同じであり、かつ $R^1$ と $R^2$ のそれぞれの炭素数が異なる2種以上の化合物を含む、 $\langle 1 \rangle \sim \langle 16 \rangle$ のいずれかに記載の化合物。

$\langle 25 \rangle$

前記化学式(1)で表される化合物は、 $R^1$ と $R^2$ の合計炭素数が、14である化合物、及び16である化合物の合計含有量が、好ましくは75質量%以上、より好ましくは85質量%以上、更に好ましくは95質量%以上、より更に好ましくは100質量%である、 $\langle 1 \rangle \sim \langle 16 \rangle$ のいずれかに記載の化合物。

20

$\langle 26 \rangle$

前記化学式(1)で表される化合物は、Xが単結合であり、 $R^1$ と $R^2$ の合計炭素数が異なる2種以上の化合物を含有し、 $R^1$ と $R^2$ の合計炭素数が、14である化合物、及び16である化合物の合計含有量は、好ましくは75質量%以上、より好ましくは85質量%以上、更に好ましくは95質量%以上、より更に好ましくは99質量%以上、より更に好ましくは100質量%である、 $\langle 1 \rangle \sim \langle 16 \rangle$ のいずれかに記載の化合物。

$\langle 27 \rangle$

前記化学式(1)で表される化合物は、 $R^1$ と $R^2$ の合計炭素数が同じであり、かつ $R^1$ と $R^2$ のそれぞれの炭素数が異なる2種以上の化合物を含み、 $R^1$ の炭素数が5以上かつ $R^2$ の炭素数が5以上の化合物の含有割合は、好ましくは10質量%以上、より好ましくは20質量%以上、更に好ましくは30質量%以上であり、好ましくは90質量%以下、より好ましくは80質量%以下、更に好ましくは70質量%以下である、 $\langle 1 \rangle \sim \langle 24 \rangle$ のいずれかに記載の化合物。

30

$\langle 28 \rangle$

前記化学式(1)で表される化合物は、 $R^1$ と $R^2$ の合計炭素数が同じであり、かつ $R^1$ と $R^2$ のそれぞれの炭素数が異なる2種以上の化合物を含み、 $R^1$ の炭素数が5以上かつ $R^2$ の炭素数が5以上の化合物の含有割合は、10質量%以上90質量%以下である、 $\langle 1 \rangle \sim \langle 24 \rangle$ のいずれかに記載の化合物。

$\langle 29 \rangle$

前記化学式(1)で表される化合物は、 $R^1$ と $R^2$ の合計炭素数が同じであり、かつ $R^1$ と $R^2$ のそれぞれの炭素数が異なる2種以上の化合物を含み、 $R^1$ の炭素数が5以上かつ $R^2$ の炭素数が5以上の化合物の含有割合は、20質量%以上80質量%以下である、 $\langle 1 \rangle \sim \langle 24 \rangle$ のいずれかに記載の化合物。

40

$\langle 30 \rangle$

前記化学式(1)で表される化合物は、 $R^1$ と $R^2$ の合計炭素数が同じであり、かつ $R^1$ と $R^2$ のそれぞれの炭素数が異なる2種以上の化合物を含み、 $R^1$ の炭素数が5以上かつ $R^2$ の炭素数が5以上の化合物の含有割合は、30質量%以上70質量%以下である、 $\langle 1 \rangle \sim \langle 24 \rangle$ のいずれかに記載の化合物。

$\langle 31 \rangle$

前記化学式(1)で表される化合物は、 $R^1$ と $R^2$ の合計炭素数が同じであり、かつ $R^1$

50

と R<sup>2</sup> のそれぞれの炭素数が異なる 2 種以上の化合物を含み、R<sup>1</sup> の炭素数が 5 以上かつ R<sup>2</sup> の炭素数が 5 以上の化合物の含有割合は、30 質量% 以下である、< 1 > ~ < 2 4 > のいずれかに記載の化合物。

< 3 2 >

前記化学式 ( 1 ) で表される化合物は、R<sup>1</sup> と R<sup>2</sup> の合計炭素数が同じであり、かつ R<sup>1</sup> と R<sup>2</sup> のそれぞれの炭素数が異なる 2 種以上の化合物を含み、R<sup>1</sup> の炭素数が 5 以上かつ R<sup>2</sup> の炭素数が 5 以上の化合物の含有割合は、20 質量% 以上 30 質量% 以下である、< 1 > ~ < 2 4 > のいずれかに記載の化合物。

< 3 3 >

前記化学式 ( 1 ) で表される化合物の融点は、30 以下である、< 1 > ~ < 3 2 > のいずれかに記載の化合物。 10

< 3 4 >

前記化学式 ( 1 ) で表される化合物の融点は、20 以下である、< 1 > ~ < 3 2 > のいずれかに記載の化合物。

< 3 5 >

前記化学式 ( 1 ) で表される化合物の融点は、10 以下である、< 1 > ~ < 3 2 > のいずれかに記載の化合物。

< 3 6 >

前記化学式 ( 1 ) で表される化合物は、前記 A が - O - CH<sub>2</sub> - CH ( OH ) - CH<sub>2</sub> OH である化合物 1、及び前記 A が - O - CH ( - CH<sub>2</sub> - OH )<sub>2</sub> である化合物 2 を含有する、< 1 > ~ < 3 5 > のいずれかに記載の化合物。 20

< 3 7 >

前記化学式 ( 1 ) で表される化合物は、前記化合物 1 及び前記化合物 2 の合計量に対する前記化合物 1 の含有量が、好ましくは 1 質量% 以上、より好ましくは 30 質量% 以上、更に好ましくは 40 質量% 以上、より更に好ましくは 50 質量% 以上であり、好ましくは 99 質量% 以下、より好ましくは 90 質量% 以下、更に好ましくは 80 質量% 以下である、< 3 6 > に記載の化合物。

< 3 8 >

前記化学式 ( 1 ) で表される化合物は、前記化合物 1 及び前記化合物 2 の合計量に対する前記化合物 1 の含有量が、1 質量% 以上 99 質量% 以下である、< 3 6 > に記載の化合物。 30

< 3 9 >

前記化学式 ( 1 ) で表される化合物は、前記化合物 1 及び前記化合物 2 の合計量に対する前記化合物 1 の含有量が、30 質量% 以上 99 質量% 以下である、< 3 6 > に記載の化合物。

< 4 0 >

前記化学式 ( 1 ) で表される化合物は、前記化合物 1 及び前記化合物 2 の合計量に対する前記化合物 1 の含有量が、40 質量% 以上 90 質量% 以下である、< 3 6 > に記載の化合物。

< 4 1 >

前記化学式 ( 1 ) で表される化合物は、前記化合物 1 及び前記化合物 2 の合計量に対する前記化合物 1 の含有量が、50 質量% 以上 80 質量% 以下である、< 3 6 > に記載の化合物。 40

< 4 2 >

前記化学式 ( 1 ) で表される化合物の製造に用いられる内部オレフィンは、末端オレフィンを含有し、オレフィン中に含まれる末端オレフィンの含有量は、0.1 質量% 以上、又は 0.2 質量% 以上であり、また、5 質量% 以下、3 質量% 以下、2 質量% 以下、1 質量% 以下、又は 0.5 質量% 以下である、< 1 > ~ < 4 1 > のいずれかに記載の化合物。

< 4 3 >

前記化学式 ( 1 ) で表される化合物は、内部エポキシドとグリセリンの反応物である、 50

< 1 > ~ < 4 2 > のいずれかに記載の化合物。

< 4 4 >

前記内部エポキシドは、内部オレフィンの酸化物であり、前記内部オレフィン末端オレフィンを 0.5 質量% 以下含有する、< 4 3 > に記載の化合物。

< 4 5 >

< 1 > ~ < 4 4 > のいずれかに記載の化合物を含有する組成物。

< 4 6 >

前記組成物中の前記化学式 ( 1 ) で表される化合物の総含有量は、好ましくは 5 0 質量% 以上、より好ましくは 6 0 質量% 以上、更に好ましくは 7 0 質量% 以上、より更に好ましくは 8 0 質量% 以上、より更に好ましくは 1 0 0 質量% である、< 4 5 > に記載の組成物。

10

< 4 7 >

前記組成物が、前記化合物 1 と前記化合物 2 を含有し、前記化合物 1 の含有量は、前記化合物 1 と前記化合物 2 の合計量に対して、好ましくは 1 質量% 以上、より好ましくは 3 0 質量% 以上、更に好ましくは 4 0 質量% 以上、より更に好ましくは 5 0 質量% 以上であり、好ましくは 9 9 質量% 以下、より好ましくは 9 0 質量% 以下、更に好ましくは 8 0 質量% 以下である、< 4 5 > 又は < 4 6 > に記載の組成物。

< 4 8 >

前記組成物が、前記化合物 1 と前記化合物 2 を含有し、前記化合物 1 の含有量は、前記化合物 1 と前記化合物 2 の合計量に対して、好ましくは 1 ~ 9 9 質量%、より好ましくは 3 0 ~ 9 9 質量%、更に好ましくは 4 0 ~ 9 0 質量%、より更に好ましくは 5 0 ~ 8 0 質量% である、< 4 5 > 又は < 4 6 > に記載の組成物。

20

< 4 9 >

さらに水を含有する、< 4 5 > ~ < 4 8 > のいずれかに記載の組成物。

#### 【実施例】

##### 【0040】

以下、本発明について、実施例に基づき具体的に説明する。なお、表中に特に示さない限り、各成分の含有量は質量% を示す。また、各種測定方法は以下のとおりである。

##### 【0041】

< オレフィンの二重結合分布の測定方法 >

30

オレフィンの二重結合分布は、ガスクロマトグラフィー ( 以下、GC と省略 ) により測定した。具体的には、オレフィンに対しジメチルジスルフィドを反応させることでジチオ化誘導体とした後、各成分を GC で分離した。それぞれのピーク面積よりオレフィンの二重結合分布を求めた。なお、測定に使用した装置および分析条件は次の通りである。

GC 装置：商品名 HP 6 8 9 0 ( H E W L E T T P A C K A R D 社製 )

カラム：商品名 Ultra - Alloy - 1 HT キャピラリーカラム 3 0 m × 2 5 0 μ m × 0.15 μ m ( フロンティア・ラボ株式会社製 )

検出器：水素炎イオン検出器 ( F I D )

インジェクション温度：300

ディテクター温度：350

40

オープン：60 ( 0 min. ) 2 / min. 225 20 / min. 350  
350 ( 5.2 min. )

##### 【0042】

< 構造異性体の含有量比の測定方法 >

アルキルグリセリルエーテル 0.05 g、トリフルオロ酢酸無水物 0.2 g、重クロロホルム 1 g を混合し、<sup>1</sup>H - NMR にて測定を行った。測定条件は以下のとおりである。

核磁気共鳴装置：Agilent 400 - MR DD 2、アジレント・テクノロジー株式会社製

観測範囲：6410.3 Hz

データポイント：65536

50

測定モード：P r e s a t

パルス幅：45°

パルス遅延時間：10sec

積算回数：128回

【0043】

<内部オレフィンの製造>

製造例A1

(炭素数16の内部オレフィン(内部オレフィン1)の製造)

攪拌装置付きフラスコに1-ヘキサデカノール(製品名:カルコール6098、花王株式会社製)7000g(28.9モル)、固体酸触媒としてアルミナ(STREMC hemicals, Inc社)700g(原料アルコールに対して10wt%)を仕込み、攪拌下、280にて系内に窒素(7000mL/分)を流通させながら32時間反応を行った。反応終了後のアルコール転化率は100%、C16オレフィン純度は99.6%であった。得られた粗C16内部オレフィンを蒸留器に移し、136~160/4.0mmHgで蒸留することでオレフィン純度100%の内部オレフィン1を得た。得られた内部オレフィン1の二重結合分布はC1位0.2%、C2位15.8%、C3位14.5%、C4位15.7%、C5位17.3%、C6位16.5%、C7位、8位の合計が20.0%であった。

【0044】

製造例A2

(炭素数18の内部オレフィン(内部オレフィン2)の製造)

攪拌装置付き反応器に1-オクタデカノール(製品名:カルコール8098、花王株式会社製)800kg(3.0キロモル)、固体酸触媒として活性アルミナGP-20(水澤化学工業株式会社)80kg(原料アルコールに対して10wt%)を仕込み、攪拌下、280にて系内に窒素(15L/分)を流通させながら16時間反応を行った。反応終了後のアルコール転化率は100%、C18オレフィン純度は98.7%であった。得られた粗C18内部オレフィンを蒸留器に移し、163~190/4.6mmHgで蒸留することでオレフィン純度100%の内部オレフィン2を得た。得られた内部オレフィン2の二重結合分布はC1位0.3%、C2位13.3%、C3位12.6%、C4位13.9%、C5位14.8%、C6位13.7%、C7位12.6%、C8位、9位の合計が18.8%であった。

【0045】

製造例A3

(炭素数14の内部オレフィン(内部オレフィン3)の製造)

製造例A1の1-ヘキサデカノール(製品名:カルコール6098、花王株式会社製)28.9モルに代えて、1-テトラデカノール(製品名:カルコール4098、花王株式会社製)28.9モルを用いた以外は、製造例A1と同様の製造方法で、内部オレフィン3を得た。得られた内部オレフィン3の二重結合分布はC1位1.3%、C2位31.8%、C3位23.8%、C4位21.0%、C5位8.5%、C6位、7位の合計が13.6%であった。

【0046】

製造例A4

(炭素数16の内部オレフィン(内部オレフィン4)の製造)

攪拌装置付きフラスコに1-ヘキサデカノール(製品名:カルコール6098、花王株式会社製)7000g(28.9モル)、固体酸触媒としてアルミナ(STREMC hemicals, Inc社)700g(原料アルコールに対して10wt%)を仕込み、攪拌下、280にて系内に窒素(7000mL/分)を流通させながら3時間反応を行った。反応終了後のアルコール転化率は100%、C16オレフィン純度は99.6%であった。得られた粗C16内部オレフィンを蒸留器に移し、136~160/4.0mmHgで蒸留することでオレフィン純度100%の内部オレフィン4を得た。得られた

10

20

30

40

50

内部オレフィン4の二重結合分布はC1位2.2%、C2位27.0%、C3位20.5%、C4位16.4%、C5位11.8%、C6位9.9%、C7位、8位の合計が12.2%であった。

【0047】

製造例A5

(炭素数18の内部オレフィン(内部オレフィン5)の製造)

攪拌装置付き反応器に1-オクタデカノール(製品名:カルコール8098、花王株式会社製)800kg(3.0キモル)、固体酸触媒として活性アルミナGP-20(水澤化学工業株式会社)80kg(原料アルコールに対して10wt%)を仕込み、攪拌下、280にて系内に窒素(15L/分)を流通させながら10時間反応を行った。反応終了後のアルコール転化率は100%、C18オレフィン純度は98.2%であった。得られた粗C18内部オレフィンを蒸留器に移し、163~190/4.6mmHgで蒸留することでオレフィン純度100%の内部オレフィン5を得た。得られた内部オレフィン5の二重結合分布はC1位2.0%、C2位24.3%、C3位19.2%、C4位16.0%、C5位11.9%、C6位9.3%、C7位7.5%、C8位、9位の合計が9.8%であった。

10

【0048】

<内部エポキシドの製造>

製造例B1

(炭素数16の内部エポキシド(内部エポキシド1)の製造)

攪拌装置付きフラスコに製造例A1で得た内部オレフィン1(800g、3.56モル)、酢酸(和光純薬工業株式会社製)107g(1.78モル)、硫酸(和光純薬工業株式会社製)15.6g(0.15モル)、35%過酸化水素(和光純薬工業株式会社製)415.7g(4.28モル)、硫酸ナトリウム(和光純薬工業株式会社製)25.3g(0.18モル)を仕込み、50で4時間反応した。その後、70に昇温し更に2時間反応を行った。反応後、分層して水層を抽出し、油層をイオン交換水、飽和炭酸ナトリウム水溶液(和光純薬工業株式会社製)、飽和亜硫酸ナトリウム水溶液(和光純薬工業株式会社製)、1%食塩水(和光純薬工業株式会社製)にて洗浄を行いエバポレーターにて濃縮し、内部エポキシド1を820g得た。

20

【0049】

製造例B2

(炭素数18の内部エポキシド(内部エポキシド2)の製造)

攪拌装置付きフラスコに製造例A2で得た内部オレフィン2(595g、2.38モル)、酢酸(和光純薬工業株式会社製)71.7g(1.20モル)、硫酸(和光純薬工業株式会社製)9.8g(0.10モル)、35%過酸化水素(和光純薬工業株式会社製)324g(4.00モル)を仕込み、50で4時間反応した。その後、80に昇温し更に5時間反応を行った。反応後、分層して水層を抽出し、油層をイオン交換水、飽和炭酸ナトリウム水溶液(和光純薬工業株式会社製)、飽和亜硫酸ナトリウム水溶液(和光純薬工業株式会社製)、イオン交換水にて洗浄を行いエバポレーターにて濃縮し、内部エポキシド2を629g得た。

30

40

【0050】

製造例B3

(炭素数14の内部エポキシド(内部エポキシド3)の製造)

製造例A1で得た内部オレフィン1(3.56モル)に代えて、製造例A3で得た内部オレフィン3(3.56モル)を用いた以外は製造例B1と同様にして、内部エポキシド3を得た。

【0051】

製造例B4

(炭素数16の内部エポキシド(内部エポキシド4)の製造)

製造例A1で得た内部オレフィン1(3.56モル)に代えて、製造例A4で得た内部

50

オレフィン 4 ( 3 . 5 6 モル ) を用いた以外は製造例 B 1 と同様にして、内部エポキシド 4 を得た。

【 0 0 5 2 】

製造例 B 5

( 炭素数 1 8 の内部エポキシド ( 内部エポキシド 5 ) の製造 )

製造例 A 1 で得た内部オレフィン 1 ( 3 . 5 6 モル ) に代えて、製造例 A 5 で得た内部オレフィン 5 ( 3 . 5 6 モル ) を用いた以外は製造例 B 1 と同様にして、内部エポキシド 5 を得た。

【 0 0 5 3 】

< エポキシドとグリセリンの反応物 ( アルキルグリセリルエーテル、 A G E ) の製造 >

以下、アルキルグリセリルエーテルを A G E と記載する。また、A G E 1、A G E 2、A G E 3、A G E 4、A G E 5、A G E 6、A G E 7、などは、それぞれ、アルキルグリセリルエーテル 1、アルキルグリセリルエーテル 2、アルキルグリセリルエーテル 3、アルキルグリセリルエーテル 4、アルキルグリセリルエーテル 5、アルキルグリセリルエーテル 6、アルキルグリセリルエーテル 7、などを表す。

【 0 0 5 4 】

製造例 C 1

( 内部エポキシド 1 とグリセリンの反応物 ( A G E 1 ) の製造 )

攪拌装置付きフラスコにグリセリン ( 和光純薬工業株式会社製 ) 2 2 9 8 g ( 2 5 . 0 モル )、9 8 % 硫酸 ( 和光純薬工業株式会社製 ) 0 . 1 2 2 g ( 1 . 2 5 ミリモル ) を仕込み 1 3 0 に昇温した。その後、製造例 B 1 で得た内部エポキシド 1 ( 3 0 0 g、1 . 2 5 モル ) を 1 時間かけ滴下した後、1 3 0 / 8 時間反応を行った。この反応により得られた液にヘキサンを加えイオン交換水にて水洗を行った後、エバポレーターにて減圧濃縮を行い、A G E 1 を 4 0 0 g 得た。得られた A G E 1 は、前記化学式 ( 1 ) において、R<sup>1</sup> 及び R<sup>2</sup> はそれぞれ炭素数 1 ~ 1 3 のアルキル基を含み、R<sup>1</sup> と R<sup>2</sup> の合計炭素数が 1 4 であり、X が単結合であり、A が - O - C H<sub>2</sub> - C H ( O H ) - C H<sub>2</sub> O H であるエーテルアルコール 1 ( グリセリンの 1 位の水酸基とエポキシ基が反応して得られる A G E ) を 7 3 %、A が - O - C H ( - C H<sub>2</sub> - O H )<sub>2</sub> であるエーテルアルコール 2 ( グリセリンの 2 位の水酸基とエポキシ基が反応して得られる A G E ) を 2 7 % 含んでいた。

【 0 0 5 5 】

製造例 C 2

( 内部エポキシド 2 とグリセリンの反応物 ( A G E 2 ) の製造 )

製造例 B 1 で得た内部エポキシド 1 ( 1 . 2 5 モル ) に代えて、製造例 B 2 で得た内部エポキシド 2 ( 1 . 2 5 モル ) を用いた以外は、製造例 C 1 と同様の製造方法で、A G E 2 を得た。得られた A G E 2 は、前記化学式 ( 1 ) において、R<sup>1</sup> 及び R<sup>2</sup> はそれぞれ炭素数 1 ~ 1 5 のアルキル基を含み、R<sup>1</sup> と R<sup>2</sup> の合計炭素数が 1 6 であり、X が単結合であり、A が - O - C H<sub>2</sub> - C H ( O H ) - C H<sub>2</sub> O H であるエーテルアルコール 1 ( グリセリンの 1 位の水酸基とエポキシ基が反応して得られる A G E ) を 7 2 %、A が - O - C H ( - C H<sub>2</sub> - O H )<sub>2</sub> であるエーテルアルコール 2 ( グリセリンの 2 位の水酸基とエポキシ基が反応して得られる A G E ) を 2 8 % 含んでいた。

【 0 0 5 6 】

製造例 C 3

( 内部エポキシド 3 とグリセリンの反応物 ( A G E 3 ) の製造 )

製造例 B 1 で得た内部エポキシド 1 ( 1 . 2 5 モル ) に代えて、製造例 B 3 で得た内部エポキシド 3 ( 1 . 2 5 モル ) を用いた以外は、製造例 C 1 と同様の製造方法で、A G E 3 を得た。得られた A G E 3 は、前記化学式 ( 1 ) において、R<sup>1</sup> 及び R<sup>2</sup> はそれぞれ炭素数 1 ~ 1 1 のアルキル基を含み、R<sup>1</sup> と R<sup>2</sup> の合計炭素数が 1 2 であり、X が単結合であり、A が - O - C H<sub>2</sub> - C H ( O H ) - C H<sub>2</sub> O H であるエーテルアルコール 1 ( グリセリンの 1 位の水酸基とエポキシ基が反応して得られる A G E ) を 7 4 %、A が - O - C H ( - C H<sub>2</sub> - O H )<sub>2</sub> であるエーテルアルコール 2 ( グリセリンの 2 位の水酸基とエポ

10

20

30

40

50

キシ基が反応して得られるAGE)を26%含んでいた。

【0057】

製造例C4

(内部エポキシド4とグリセリンの反応物(AGE4)の製造)

製造例B1で得た内部エポキシド1(1.25モル)に代えて、製造例B4で得た内部エポキシド4(1.25モル)を用いた以外は、製造例C1と同様の製造方法で、AGE4を得た。得られたAGE4は、前記化学式(1)において、R<sup>1</sup>及びR<sup>2</sup>はそれぞれ炭素数1~13のアルキル基を含み、R<sup>1</sup>とR<sup>2</sup>の合計炭素数が14であり、Xが単結合であり、Aが-O-CH<sub>2</sub>-CH(OH)-CH<sub>2</sub>OHであるエーテルアルコール1(グリセリンの1位の水酸基とエポキシ基が反応して得られるAGE)を73%、Aが-O-CH(OH)-CH<sub>2</sub>-OH<sub>2</sub>であるエーテルアルコール2(グリセリンの2位の水酸基とエポキシ基が反応して得られるAGE)を27%含んでいた。

10

【0058】

製造例C5

(内部エポキシド5とグリセリンの反応物(AGE5)の製造)

製造例B1で得た内部エポキシド1(1.25モル)に代えて、製造例B5で得た内部エポキシド5(1.25モル)を用いた以外は、製造例C1と同様の製造方法で、AGE5を得た。得られたAGE5は、前記化学式(1)において、R<sup>1</sup>及びR<sup>2</sup>はそれぞれ炭素数1~15のアルキル基を含み、R<sup>1</sup>とR<sup>2</sup>の合計炭素数が16であり、Xが単結合であり、Aが-O-CH<sub>2</sub>-CH(OH)-CH<sub>2</sub>OHであるエーテルアルコール1(グリセリンの1位の水酸基とエポキシ基が反応して得られるAGE)を73%、Aが-O-CH(OH)-CH<sub>2</sub>-OH<sub>2</sub>であるエーテルアルコール2(グリセリンの2位の水酸基とエポキシ基が反応して得られるAGE)を27%含んでいた。

20

【0059】

製造例C6

(C16末端エポキシドとグリセリンの反応物(AGE6)の製造)

製造例B1で得た内部エポキシド1(1.25モル)に代えて、C16末端エポキシド(東京化成工業株式会社製)1.25モルを用いた以外は、製造例C1と同様の製造方法で、AGE6を得た。得られたAGE6は、グリセリンの1位の水酸基とエポキシ基が反応して得られるエーテルアルコールを50%、グリセリンの2位の水酸基とエポキシ基が反応して得られるエーテルアルコールを50%含んでいた。

30

【0060】

製造例C7

(C18末端エポキシドとグリセリンの反応物(AGE7)の製造)

製造例B1で得た内部エポキシド1(1.25モル)に代えて、C18末端エポキシド(東京化成工業株式会社製)1.25モルを用いた以外は、製造例C1と同様の製造方法で、AGE7を得た。得られたAGE7は、グリセリンの1位の水酸基とエポキシ基が反応して得られるエーテルアルコールを51%、グリセリンの2位の水酸基とエポキシ基が反応して得られるエーテルアルコールを49%含んでいた。

40

【0061】

実施例1~4、比較例1~5

製造例C1~C7で作製した各生成物を用いて、以下の測定及び評価を行った。結果を表1に示す。

<融点の測定>

高感度型示差走査熱量計(株式会社日立ハイテクサイエンス製、商品名: DSC7000X)を使用し、70μLパンに製造例C1~C7で作製した各生成物を入れ、-60から80℃まで2℃/minで昇温し、昇温時間に対する示差熱電極で検出する温度差の最大ピーク時の温度を融点とした。

【0062】

<ヘキサン溶液の調製>

50

ヘキサン 100 mL 中に、製造例 C 1 ~ C 7 で作製した各生成物 5.0 g を加え、十分に攪拌してヘキサン溶液を調製した。

<ヘキサン溶液の外観の評価>

前記方法でヘキサン溶液を調製後、25℃で1時間静置した後のヘキサン溶液の外観を目視で観察し、下記基準で評価した。

○：溶液は透明である。

×：溶液中に化合物が析出している。

【0063】

<接触角の測定>

スライドガラス(76 mm × 26 mm × 1 mm)を前記方法で調製したヘキサン溶液に10秒間浸漬した後、5 mLのヘキサンに10秒間浸漬し、120℃の熱風で10秒乾燥した。その後、スライドガラスを接触角計(協和界面科学株式会社製、DM-701)のステージに水平に設置し、設置したスライドガラス上にイオン交換水2 μLをシリンジで滴下し、5秒後に接触角を測定した。

10

なお、表1の比較例4では、前記ヘキサン溶液の代わりにヘキサンを用いて同様に測定した接触角を示す。

【0064】

<泡立ち>

100 mLのスクリュー管に、製造例 C 1 ~ C 5 で作製した各生成物 0.5 g とジブチレングリコール 10 g とイオン交換水 39.5 g とを入れ 30 秒振とう後、0 秒後及び 30 秒後に、液面からの泡の高さを測定した。

20

なお、表1の比較例5では、製造例 C 1 ~ C 5 で作製した各生成物を加えなかった以外は、前記と同様にして泡の高さを測定した。

【0065】

30

40

50

【表 1】

	製造例	化合物	R <sup>1</sup> の炭素数が5以上かつ R <sup>2</sup> の炭素数が5以上の化 合物の含有割合 (%)	融点 (°C)	ヘキサン溶液 の外観	接触角 (°)	泡高さ (mm)	
							0秒後	30秒後
実施例1	製造例C-1	AGE1	36.5	-18	○	62.0	84	8
実施例2	製造例C-2	AGE2	45.1	1	○	66.6	102	34
実施例3	製造例C-4	AGE4	22.1	-10	○	61.3	100	30
実施例4	製造例C-5	AGE5	26.6	16	○	65.2	122	70
比較例1	製造例C-3	AGE3	13.6	-57	○	34.0	0	0
比較例2	製造例C-6	AGE6	0	36	×	28.1	-	-
比較例3	製造例C-7	AGE7	0	51	×	35.1	-	-
比較例4	-	-	-	-	-	8.5	-	-
比較例5	-	-	-	-	-	-	66	0

10

20

30

40

## 【0066】

表1から、実施例1～4の生成物は、融点が低く、有機溶媒に溶けやすいことがわかる。また、実施例1～4の生成物は、水との接触角が高く、水に対して濡れにくい疎水性膜を形成していることがわかる。一方、比較例1～3の生成物は、水との接触角が低く、形成される膜の疎水性が低いことがわかる。また、比較例2及び3の生成物は、融点が高く、有機溶媒に溶けにくいことがわかる。

## 【0067】

また、表1から、実施例1～4の生成物は、泡立ちがよいことがわかる。また、実施例1と実施例3、実施例2と実施例4を、それぞれ対比すると、前記化学式(1)で表され

50

る化合物において、 $R^1$ の炭素数が5以上かつ $R^2$ の炭素数が5以上の化合物の含有割合が(20%以上)30%以下であるとより泡持ちが良いことがわかる。一方、比較例1の生成物は、泡立たないことがわかる。

【産業上の利用可能性】

【0068】

本発明の化合物及び組成物は、界面活性剤、乳化剤、分散剤、ポリマー及び樹脂などの原料、潤滑油等の油剤の添加剤、塗料添加剤、農薬添加剤、樹脂添加剤、金属表面改質剤、化粧品基材、医療用助剤、繊維用油剤、石油薬剤、加工薬剤、滑剤、可塑剤、乳化剤、分散剤、防曇剤、帯電防止剤、及び消泡剤などに有用である。

10

20

30

40

50

---

フロントページの続き

(72)発明者 木村 彰克

和歌山県和歌山市湊 1 3 3 4 花王株式会社研究所内

審査官 高橋 直子

(56)参考文献 特開昭 6 2 - 2 3 5 4 8 7 ( J P , A )

国際公開第 2 0 0 7 / 0 6 2 1 1 2 ( W O , A 2 )

特開昭 5 3 - 1 3 7 9 0 5 ( J P , A )

特開昭 5 5 - 1 0 5 6 3 2 ( J P , A )

(58)調査した分野 (Int.Cl. , D B 名)

C 0 7 C 4 3 / 1 3

C 0 9 K 2 3 / 4 2

C A p l u s / R E G I S T R Y ( S T N )