

(19) 日本国特許庁(JP)

(12) 公開特許公報(A)

(11) 特許出願公開番号

特開2017-75327

(P2017-75327A)

(43) 公開日 平成29年4月20日(2017.4.20)

(51) Int.Cl.	F I	テーマコード (参考)
C 1 O M 169/04 (2006.01)	C 1 O M 169/04	4 H 1 0 4
C 1 O M 105/38 (2006.01)	C 1 O M 105/38	
C 1 O M 133/12 (2006.01)	C 1 O M 133/12	
C 1 O M 129/10 (2006.01)	C 1 O M 129/10	
C 1 O M 101/02 (2006.01)	C 1 O M 101/02	

審査請求 有 請求項の数 1 O L 外国語出願 (全 73 頁) 最終頁に続く

(21) 出願番号	特願2016-234749 (P2016-234749)	(71) 出願人	513048298
(22) 出願日	平成28年12月2日 (2016.12.2)		
(62) 分割の表示	特願2014-515847 (P2014-515847) の分割		
原出願日	平成24年5月30日 (2012.5.30)		
(31) 優先権主張番号	61/498,499	(74) 代理人	100099759
(32) 優先日	平成23年6月17日 (2011.6.17)		弁理士 青木 篤
(33) 優先権主張国	米国 (US)	(74) 代理人	100077517
(31) 優先権主張番号	61/569,046		弁理士 石田 敬
(32) 優先日	平成23年12月9日 (2011.12.9)	(74) 代理人	100087413
(33) 優先権主張国	米国 (US)		弁理士 古賀 哲次
(31) 優先権主張番号	61/643,072	(74) 代理人	100146466
(32) 優先日	平成24年5月4日 (2012.5.4)		弁理士 高橋 正俊
(33) 優先権主張国	米国 (US)		

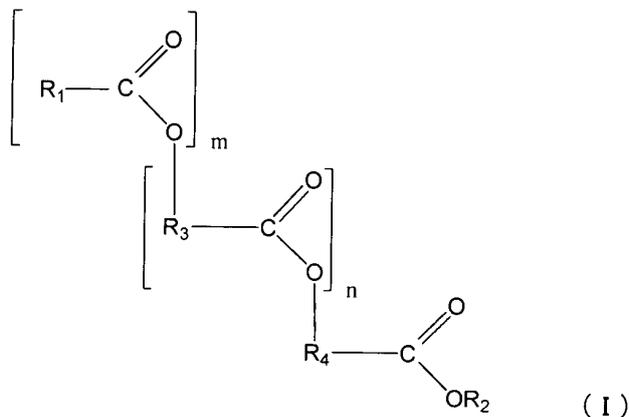
最終頁に続く

(54) 【発明の名称】 高い酸化安定性を示すエストリド組成物

(57) 【要約】 (修正有)

【課題】 酸化安定性が高いエストリド組成物の提供。

【解決手段】 酸化安定性が高いエストリド組成物を提供し、当該組成物は式 (I) で表されるエストリド基油およびアミン抗酸化剤含む組成物。



10

【選択図】 なし

20

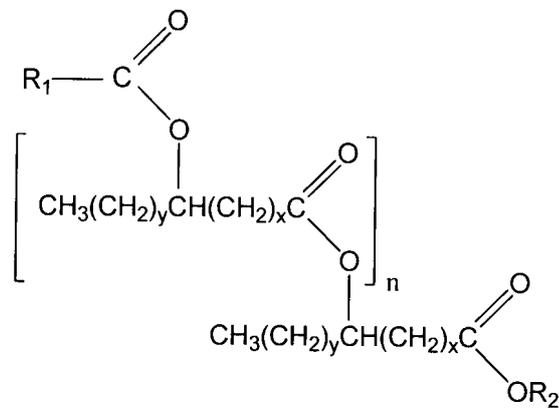
【特許請求の範囲】

【請求項 1】

エステル基油および少なくとも1つのアミン抗酸化剤との組み合わせを含む組成物であって、当該組み合わせはASTM法2272-11を使用する回転圧力容器酸化試験で試験したときに、少なくとも1000分の時間を有し、

エステル基油は式Iの化合物から選択される少なくとも1つのエステル化合物を含み、

【化1】



式 I

ここで、

xはそれぞれ、独立して0～20から選択される整数であり、

yはそれぞれ、独立して0～20から選択される整数であり、

nは0より大きいまたは等しい整数であり、

R₁は飽和または不飽和の、および分岐または非分岐の置換されてもよいアルキルであり、

R₂は飽和または不飽和の、および分岐または非分岐の置換されてもよいアルキルであり、

少なくとも1つの前記化合物の脂肪酸鎖残基のそれぞれが、独立して置換されてもよい、組成物。

【請求項 2】

請求項1の組成物であって、

xはそれぞれ、独立して1～10から選択される整数であり、

yはそれぞれ、独立して1～10から選択される整数であり、

nは0～8から選択される整数であり、

R₁は飽和または不飽和の、および分岐または非分岐の置換されてもよいC₁～C₂₂アルキルであり、

R₂は飽和または不飽和の、および分岐または非分岐の置換されてもよいC₁～C₂₂アルキルであり、

脂肪酸鎖残基のそれぞれが置換されていない、組成物。

【請求項 3】

x + yは、各鎖について、独立して13～15から選択される整数であり、および

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

【請求項 4】

R₂は飽和または不飽和の、および分岐または非分岐の非置換アルキルである、請求項

10

20

30

40

50

1 ~ 3 のいずれか 1 項に記載の組成物。

【請求項 5】

R_2 は飽和または不飽和の分岐または非分岐の $C_1 \sim C_{20}$ アルキルである、請求項 1 ~ 4 のいずれか 1 項に記載の組成物。

【請求項 6】

R_2 はメチル、エチル、プロピル、ブチル、ペンチル、ヘキシル、ヘプチル、オクチル、ノニル、デカニル、ウンデカニル、ドデカニル、トリデカニル、テトラデカニル、ペンタデカニル、ヘキサデカニル、ヘプタデカニル、オクタデカニル、ノナデカニル、およびイコサニルから選択され、それらは飽和または不飽和および分岐または非分岐である、請求項 5 に記載の組成物。

10

【請求項 7】

R_2 は $C_6 \sim C_{12}$ アルキルから選択される、請求項 5 に記載の組成物。

【請求項 8】

R_1 は、飽和または不飽和の分岐または非分岐の $C_1 \sim C_{20}$ アルキルである、請求項 1 ~ 7 のいずれか 1 項に記載の組成物。

【請求項 9】

R_1 はメチル、エチル、プロピル、ブチル、ペンチル、ヘキシル、ヘプチル、オクチル、ノニル、デカニル、ウンデカニル、ドデカニル、トリデカニル、テトラデカニル、ペンタデカニル、ヘキサデカニル、ヘプタデカニル、オクタデカニル、ノナデカニル、およびイコサニルから選択され、それらは飽和または不飽和および分岐または非分岐である、請求項 8 に記載の組成物。

20

【請求項 10】

組成物は、2 以下の整数または整数の分数から選択される EN を有し、 EN は式 I に記載の化合物の平均の結合数である、請求項 1 ~ 9 のいずれか 1 項に記載の組成物。

【請求項 11】

前記エストリド基油の動粘度が 40 で測定したときに、55 cSt 以下の請求項 1 ~ 10 のいずれか 1 項に記載の組成物。

【請求項 12】

前記エストリド基油の流動点が -25 以下の請求項 1 ~ 11 のいずれか 1 項に記載の組成物。

30

【請求項 13】

前記組み合わせが ASTM 法 2272-11 を使用する回転圧力容器酸化試験で試験したときに、少なくとも 1200 分の時間を有する、請求項 1 ~ 12 のいずれか 1 項に記載の組成物。

【請求項 14】

前記組み合わせが ASTM 法 2272-11 を使用する回転圧力容器酸化試験で試験したときに、少なくとも 1400 分の時間を有する、請求項 1 ~ 12 のいずれか 1 項に記載の組成物。

【請求項 15】

少なくとも 1 つのアミン抗酸化剤が 1 つ以上のジアルールアミン抗酸化剤から選択される、請求項 1 ~ 14 のいずれか 1 項に記載の組成物。

40

【請求項 16】

少なくとも 1 つのアミン抗酸化剤が 1 つ以上のジフェニルアミン抗酸化剤から選択される、請求項 15 に記載の組成物。

【請求項 17】

少なくとも 1 つのアミン抗酸化剤が 1 つ以上のアルキル化ジフェニルアミン抗酸化剤から選択される、請求項 16 に記載の組成物。

【請求項 18】

少なくとも 1 つのアミン抗酸化剤がノニル化ジフェニルアミン、オクチル化ジフェニルアミン、およびブチル化ジフェニルアミンから選択される、請求項 17 に記載の組成物。

50

【請求項 19】

前記組み合わせが少なくとも1つのフェノール系抗酸化剤をさらに含む、請求項1～18のいずれか1項に記載の組成物。

【請求項 20】

エステル基油の酸価が0.1 mg KOH / g 以下の請求項1～19のいずれか1項に記載の組成物。

【請求項 21】

前記組成物がグループIの油、グループIIの油、グループIIIの油、ポリアルファオレフィン、ポリアルキレングリコール、または油溶性ポリアルキレングリコールの1つ以上から選択される少なくとも1つの潤滑油をさらに含む、請求項1～20のいずれか1項に記載の組成物。

10

【請求項 22】

前記組成物が抗菌剤、極圧剤、低温流動性調整剤、摩擦調整剤、粘度調整剤、流動点降下剤、金属キレート剤、金属不活性化剤、消泡剤、または抗乳化剤の1つ以上から選択される少なくとも1つの添加剤をさらに含む、請求項1～21のいずれか1項に記載の組成物。

【請求項 23】

エステル基油および少なくとも1つのアミン抗酸化剤との組み合わせが組成物の少なくとも50重量%である請求項1～22のいずれか1項に記載の組成物。

【請求項 24】

前記組成物がエステル基油および少なくとも1つのアミン抗酸化剤との組み合わせから本質的に成る、請求項1～18のいずれか1項に記載の組成物。

20

【請求項 25】

少なくとも1つのアミン抗酸化剤が前記組み合わせの0.01～5重量%である、請求項1～24のいずれか1項に記載の組成物。

【請求項 26】

前記組成物が以下を含む、請求項1～25のいずれか1項に記載の組成物

50～70重量%のエステル基油、

25～49.99重量%の潤滑油、および

0.01～5重量%の少なくとも1つのアミン抗酸化剤。

30

【請求項 27】

組成物の酸価が0.1 mg KOH / g 以下である、請求項1～26のいずれか1項に記載の組成物。

【請求項 28】

組成物が脂肪酸を実質的に含まない、請求項1～27のいずれか1項に記載の組成物。

【請求項 29】

前記組成物が作動液、乗用車のモーターオイル、またはクランクケース油を含む、請求項1～28のいずれか1項に記載の組成物。

【請求項 30】

以下を含む、エステル基油の酸化安定性を向上させる方法

エステル基油を選択すること、

エステル基油の酸価を減少させ、低酸エステル基油を提供すること、および

該低酸エステル基油を少なくとも1つの抗酸化剤と組み合わせること。

40

【請求項 31】

エステル基油の酸価を減少させ、低酸エステル基油を提供することが、当該エステル基油を少なくとも1つの酸低減剤と接触させることを含む、請求項30に記載の方法。

【請求項 32】

少なくとも1つの酸低減剤が活性炭、ケイ酸マグネシウム、酸化アルミニウム、二酸化ケイ素、ゼオライト、塩基性樹脂、およびアニオン交換樹脂の1つ以上から選択される、

50

請求項 3 1 に記載の方法。

【請求項 3 3】

少なくとも抗酸化剤がアミン抗酸化剤である、請求項 3 0 ~ 3 2 のいずれか 1 項に記載の方法。

【請求項 3 4】

低酸エステル基油の酸価が 0 . 5 m g K O H / g 以下である、請求項 3 0 ~ 3 3 のいずれか 1 項に記載の方法。

【請求項 3 5】

低酸エステル基油の酸価が 0 . 1 m g K O H / g 以下である、請求項 3 4 に記載の方法。

10

【請求項 3 6】

低酸エステル基油と少なくとも 1 つの抗酸化剤との組み合わせが、A S T M 法 2 2 7 2 - 1 1 を使用する回転圧力容器酸化試験で試験したときに、少なくとも 5 0 0 分の時間を有する、請求項 3 0 ~ 3 5 のいずれか 1 項に記載の方法。

【請求項 3 7】

低酸エステル基油と少なくとも 1 つの抗酸化剤との組み合わせが、A S T M 法 2 2 7 2 - 1 1 を使用する回転圧力容器酸化試験で試験したときに、少なくとも 1 0 0 0 分の時間を有する、請求項 3 0 ~ 3 6 のいずれか 1 項に記載の方法。

【発明の詳細な説明】

【技術分野】

20

【0 0 0 1】

関連出願の相互参照

本出願は米国特許法第 1 1 9 (e) 条の下、2 0 1 1 年 6 月 1 7 日に提出した米国仮出願第 6 1 / 4 9 8 , 4 9 9 号、2 0 1 1 年 1 2 月 9 日に提出した米国仮出願第 6 1 / 5 6 9 , 0 4 6 号、および 2 0 1 2 年 5 月 4 日に提出した米国仮出願第 6 1 / 6 4 3 , 0 7 2 号の利益を主張するものであり、その全体があらゆる目的について参照により本明細書に組み込まれる。

【0 0 0 2】

本開示は 1 つ以上のエステル化合物を含み、高い酸化安定性を示す潤滑組成物および当該組成物の作製方法に関する。

30

【背景技術】

【0 0 0 3】

トリグリセリド類等の脂肪エステル類についての様々な市販使用が記述されている。潤滑剤として使用すると、例えば、脂肪エステル類は石油をベースとする潤滑剤に代わりうる生分解性のものを提供することができる。しかしながら、自然発生の脂肪エステル類は、加水分解安定性および / または酸化安定性を含む 1 つ以上の領域が典型的に欠けている。

【発明の概要】

【0 0 0 4】

本明細書では高い酸化安定性を示すエステル組成物並びに当該組成物の作製および使用方法を記載する。

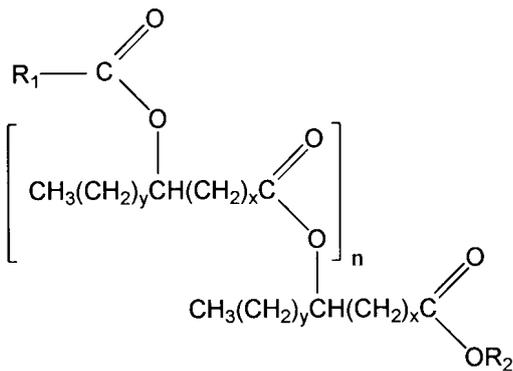
40

【0 0 0 5】

ある実施形態では、組成物は式 I のエステル化合物を少なくとも 1 つ含み、

【0 0 0 6】

【化 1】



10

式 I

【0007】

ここで、

xはそれぞれ、独立して0、1、2、3、4、5、6、7、8、9、10、11、12、13、14、15、16、17、18、19、および20から選択される整数であり、
yはそれぞれ、独立して0、1、2、3、4、5、6、7、8、9、10、11、12、13、14、15、16、17、18、19、および20から選択される整数であり、
nは0、1、2、3、4、5、6、7、8、9、10、11、および12から選択される整数であり、

20

R₁は飽和または不飽和の、および分岐または非分岐の置換されてもよいアルキルであり、および

R₂は水素並びに飽和または不飽和の、および分岐または非分岐の置換されてもよいアルキルであり、

少なくとも1つの当該化合物の脂肪酸鎖の残基はそれぞれ、独立して置換されてもよい

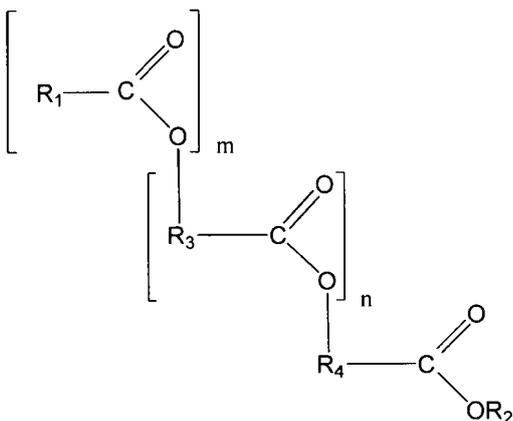
30

【0008】

ある実施形態では、組成物は式 I I のエステル化合物を少なくとも1つ含み、

【0009】

【化 2】



40

式 II

50

【0010】

ここで、

mは1に等しいまたはそれより大きい整数であり、

nは0に等しいまたはそれより大きい整数であり、

R₁はそれぞれ、独立して飽和または不飽和の、および分岐または非分岐の置換されてもよいアルキルであり、

R₂は水素並びに飽和または不飽和の、および分岐または非分岐の置換されてもよいアルキルから選択され、および

R₃およびR₄はそれぞれ、独立して飽和または不飽和の、および分岐または非分岐の置換されてもよいアルキルから選択される。

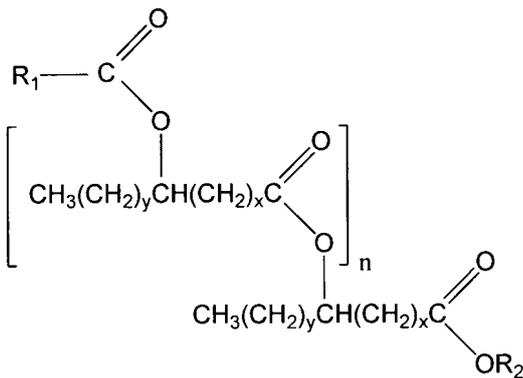
10

【0011】

ある実施形態では、組成物は式IIIのエストリド化合物を少なくとも1つ含み、

【0012】

【化3】



20

式 III

【0013】

ここで、

xはそれぞれ、独立して0、1、2、3、4、5、6、7、8、9、10、11、12、13、14、15、16、17、18、19、および20から選択される整数であり、

yはそれぞれ、独立して0、1、2、3、4、5、6、7、8、9、10、11、12、13、14、15、16、17、18、19、および20から選択される整数であり、

nは0に等しいまたはそれより大きい整数であり、

R₁は飽和または不飽和の、および分岐または非分岐の置換されてもよいアルキルであり、

R₂は水素並びに飽和または不飽和の、および分岐または非分岐の置換されてもよいアルキルから選択され、

40

少なくとも1つの当該化合物の脂肪酸鎖の残基はそれぞれ、独立して置換されてもよい。

【発明を実施するための形態】

【0014】

本明細書に記載のエストリド組成物は、その他の潤滑剤および/またはエストリドを含有する組成物に比べ、優れた酸化安定性を示し得る。例示的な組成物として、限定されないが、冷却剤、耐火性および/または非燃焼性の液体、変圧器用の液等の誘電性流体、グリース、掘削液、クランクケース油、作動液、乗用車のモーターオイル、2および4ストローク潤滑剤、金属加工油剤、食品機器用潤滑剤、冷凍機器用の液 (refrigerating fluid)、圧縮機用の液、および可塑化コンパウンド (plasticizer)

50

zed composition) が挙げられる。

【0015】

潤滑剤および潤滑液組成物の使用はこのような液体、化合物、および/または組成物を環境中に分散させ得る。一般的な潤滑組成物および添加剤に使用される石油基油は、典型的に生分解性がなく、毒になる可能性がある。本開示は、1つ以上のエストリドを含む基油を含む部分的または完全に生分解性の基油を含む組成物の調製および使用を提供する。

【0016】

ある実施形態では、潤滑剤および/または1つ以上のエストリドから成る組成物は、部分的若しくは完全に生分解性であり、環境へのリスクを少なくする。ある実施形態では、潤滑剤および/または組成物は、劣化および濃縮性試験についての経済協力開発機構(OECD)によって定められたガイドラインを満たす。OECDは有機化合物の「易生分解性(ready biodegradability)」を定めるためにいくつかの試験を使用してもよいことを示した。OECD 301Dによる好氣的易生分解性は、廃水処理施設から播種された微生物と共に、好氣的水環境を模擬する閉じられた好気性マイクロコスモス内のCO₂に対する試験試料のミネラル化を測定する。OECD 301Dは廃棄物を受けるとされる最も好気性環境の代表であると考えられる。好氣的「究極生分解性」はOECD 302Dによって定めることができる。OECD 302Dの下では、微生物は前インキュベーション期間中の試験材料の生分解性に前順応され、比較的濃度の高い微生物および豊かなミネラル塩培地である密封された容器の中でインキュベートされる。OECD 302Dは、「易生分解性」アッセイよりストリンジェントでない条件であっても、試験材料が完全に生分解的であるかどうかを究極的に判定する。

10

20

【0017】

本明細書に使用されるとき、以下の単語、フレーズおよびシンボルは、それらが使用される文脈が他に示す範囲を除いて、以下に示す通りの意味を持つことを意図する。以下の短縮語および用語は全体にわたって以下の意味を示す。

【0018】

2つの文字またはシンボルの間にないダッシュ(「-」)は置換基の結合点を示すために使用される。例えば、-C(O)NH₂は炭素原子によって結合される。

【0019】

「アルコキシ」そのものまたはもう1つ別の置換基の部分としての「アルコキシ」は基-O R³¹を意味し、R³¹はアルキル、シクロアルキル、シクロアルキルアルキル、アリール、またはアリールアルキルであり、本明細書に定義されるように置換される可能性がある。いくつかの実施形態では、アルコキシ基には1~8個の炭素原子がある。いくつかの実施形態では、アルコキシ基には1、2、3、4、5、6、7、または8個の炭素原子がある。アルコキシ基の例として、限定されないが、メトキシ、エトキシ、プロポキシ、ブトキシ、シクロヘキシルオキシ等が挙げられる。

30

【0020】

「アルキル」そのものまたはもう1つ別の置換基の部分としての「アルキル」は、飽和または不飽和、分岐または親アルカン、アルケン、若しくはアルキンの単一の炭素原子から1つの水素原子を取り除くことによって生じる直鎖の一価の炭化水素基を意味する。アルキル基の例として、限定されないが、エタニル、エテニル、およびエチニル等のエチル類；プロパン-1-イル、プロパン-2-イル、プロブ-1-エン-1-イル、プロブ-1-エン-2-イル、プロブ-2-エン-1-イル(アリル)、プロブ-1-イン-1-イル、プロブ-2-イン-1-イル等のプロピル類；ブタン-1-イル、ブタン-2-イル、2-メチル-プロパン-1-イル、2-メチル-プロパン-2-イル、プト-1-エン-1-イル、プト-1-エン-2-イル、2-メチル-プロブ-1-エン-1-イル、プト-2-エン-1-イル、プト-2-エン-2-イル、ブタ-1,3-ジエン-1-イル、ブタ-1,3-ジエン-2-イル、プト-1-イン-1-イル、プト-1-イン-3-イル、プト-3-イン-1-イル等のブチル類が挙げられる。

40

【0021】

他に示すものがない限り、用語「アルキル」は任意の程度またはレベルの飽和を有する

50

基を含むことを具体的に意図し、いわゆるまったくの炭素 炭素の単結合を有する基、1つ以上の炭素 炭素の二重結合を有する基、1つ以上の炭素 炭素の三重結合を有する基、および炭素 炭素の単結合、二重結合、三重結合の混合を有する基である。特定のレベルの飽和を意図するとき、用語「アルカニル」、「アルケニル」、および「アルキニル」が使用される。ある実施形態では、アルキル基は1~40個の炭素原子、ある実施形態では、1~22個または1~18個の炭素原子、ある実施形態では、1~16個または1~8個の炭素原子、並びにある実施形態では、1~6個または1~3個の炭素原子を含む。ある実施形態では、アルキル基は8~22個の炭素原子、ある実施形態では、8~18個または8~16個の炭素原子を含む。いくつかの実施形態では、アルキル基は3~20または7~17個の炭素を含む。いくつかの実施形態では、アルキル基は1、2、3、4、5、6、7、8、9、10、11、12、13、14、15、16、17、18、19、20、21、または22個の炭素原子を含む。

【0022】

「アリール」そのものまたはもう1つ別の置換基の部分としての「アリール」は親芳香族環系の単一の炭素原子から1つの水素原子を除去することによって生じる一価の芳香族炭化水素基を意味する。アリールは5および6員の炭素環式芳香族環を包含し、例えば、ベンゼン、少なくとも1つの環が炭素環式および芳香族である二環式系（例えば、ナフタレン、インダン、およびテトラリン）、並びに少なくとも1つの環が炭素環式および芳香族である三環式（例えばフルオレン）がある。アリールは、少なくとも1つの炭素環式芳香族環と縮合された少なくとも1つの炭素環式芳香族環、シクロアルキル環、またはヘテロシクロアルキル環を有する複数の環を包含する。例えば、アリールは、N、O、およびSから選ばれる1つ以上のヘテロ原子を含む5~7員の非芳香族ヘテロシクロアルキル環と縮合された5および6員の炭素環式芳香族環を含む。環のうちたった1つが炭素環式芳香族環であるこのような縮合、二環式系について、結合点が炭素環式芳香族環またはヘテロシクロアルキル環であってもよい。アリール基の例として、制限されないが、アセアントリレン、アセナフチレン、アセフェナントリレン、アントラセン、アズレン、ベンゼン、クリセン、コロネン、フルオランテン、フルオレン、ヘキサセン、ヘキサフェン、ヘキサレン、a s-インダセン、s-インダセン、インダン、インデン、ナフタレン、オクタセン、オクタフェン、オクタレン、オバレン、ペンタ-2,4-ジエン、ペンタセン、ペンタレン、ペンタフェン、ペリレン、フェナレン、フェナントレン、ピセン、プレリアデン、ピレン、ピラントレン、ルピセン、トリフェニレン、トリナフタレン等に由来する基が挙げられる。ある実施形態では、アリール基は5~20個の炭素原子を含むことができ、ある実施形態では、5~12個の炭素原子を含むことができる。ある実施形態では、アリール基は5、6、7、8、9、10、11、12、13、14、15、16、17、18、19、または20個の炭素原子を含むことができる。しかしながら、アリールは本明細書に別に定義されるヘテロアリールといかなる方法であっても包含したり、重なることはない。そのため1つ以上の炭素環式芳香族環がヘテロシクロアルキル芳香族環と縮合される複数の環系はヘテロアリールであり、本明細書に定義されるようにアリールではない。

【0023】

「アリールアルキル」そのものまたはもう1つ別の置換基の部分としての「アリールアルキル」は、炭素原子、典型的には末端または sp^3 炭素原子と結合された水素原子の1つがアリール基と置換される非環式アルキル基を意味する。アリールアルキル基の例として、限定されないが、ベンジル、2-フェニルエタン-1-イル、2-フェニルエテン-1-イル、ナフチルメチル、2-ナフチルエタン-1-イル、2-ナフチルエテン-1-イル、ナフトベンジル、2-ナフトフェニルエタン-1-イル等が挙げられる。特定のアルキル部分が意図される場合、命名法アリールアルカニル、アリールアルケニル、またはアリールアルキニルが使用される。ある実施形態では、アリールアルキル基は C_{7-30} アリールアルキルであり、例えばアリールアルキル基のアルカニル、アルケニル、またはアルキニル部分は C_{1-10} であり、アリール部分は C_{6-20} であり、およびある実施形態では、アリールアルキル基は C_{7-20} アリールアルキルであり、例えばアリールアルキル基のアルカニル、アルケニ

10

20

30

40

50

ル、またはアルキニル部分は C_{1-8} であり、アリール部分は C_{6-12} である。

【0024】

エステル「基油」および「素材 (base stock)」は、他に示すものがない限り、1つ以上のエステル化合物を含むいかなる組成物も意味する。エステル「基油」または「素材」は、具体的な使用のための組成物に限定されないこと、エステルの混合物を含む1つ以上のエステルを含む組成物を一般に意味してもよいことは理解されたい。エステル基油および素材はエステル以外の化合物を含むこともできる。

【0025】

「抗酸化剤」は、このような他の物質を含む組成物（例えば潤滑剤の調合物）に使用されるとき、もう1つ別の物質（例えばエステル化合物等の基油）中の酸化反応を阻害し、予防し、低下させ、または改善することのできる物質を意味する。「抗酸化剤」の例は脱酸素剤である。

10

【0026】

「化合物」は式 I、II、および III によって包含される化合物を意味し、その構造が本明細書に開示の式内のあらゆる特定の化合物を含む。化合物は化学構造および/または化学名のどちらかによって識別され得る。化学構造と化学名が一致しないとき、化学構造のほうを化合物を識別する決定要素とする。本明細書に記載の化合物は1つ以上のキラル中心および/または二重結合を含んでいてもよく、二重結合異性体（いわゆる幾何異性体）、エナンチオマー、若しくはジアステレオマー等の立体異性体として存在してもよい。したがって、本明細書に記述の範囲内のいかなる化学構造も、全体または部分的に、相対配置と共に、立体異性体的に純粋な形（例えば、幾何学的に純粋、エナンチオマー的に純粋またはジアステレオマー的に純粋）およびエナンチオマーと立体異性体の混合物を含む説明される化合物のエナンチオマーおよびジアステレオマーの可能性のあるものは残らず包含する。エナンチオマーと立体異性体の混合物は、当業者によく知られている分離手技またはキラル合成手技を使用して、要素であるエナンチオマーまたは立体異性体に分解されてもよい。

20

【0027】

本開示の目的のために、「キラル化合物」は、キラリティー（いわゆる少なくとも1つの非対称性原子、具体的には少なくとも1つの非対称 C 原子）の少なくとも1つの中心を有し、キラリティーの軸、キラリティーの面または螺旋構造を有する化合物である。「非キラル化合物」はキラルでない化合物である。

30

【0028】

式 I、II、および III の化合物は、限定されないが、式 I、II、および III の化合物の光学異性体、ラセミ体、およびその他の混合物である。このような実施形態では、単一のエナンチオマーまたはジアステレオマー、いわゆる光学的に活性の形式は、非対称な合成またはラセミ体の分解によって得ることができる。ラセミ体の分解は、例えばキラル高圧液体クロマトグラフィー (HPLC) カラムを使用してクロマトグラフィーによって達成されてもよい。しかしながら、他に記載されない限り、式 I、II、および III は本明細書に記載の化合物の非対称変異形をすべて含み、異性体、ラセミ体、エナンチオマー、ジアステレオマーおよびその他の混合物を網羅する。さらに、式 I、II、および III の化合物は二重結合の化合物の Z-および E-形態（例えば、シス-、トランス-形態）を含む。式 I、II、および III の化合物は、エノール型、ケト型、およびその混合物を含むいくつかの互変異性型の中に存在してもよい。したがって、本明細書に記述の化学構造は、説明される化合物のあらゆる互変異性型の可能性のあるものは残らず包含する。

40

【0029】

「シクロアルキル」そのものまたはもう1つ別の置換基の部分としての「シクロアルキル」は飽和または不飽和環式アルキル基を意味する。飽和の特定のレベルが意図される場合、命名法「シクロアルカニル」または「シクロアルケニル」が使用される。シクロアルキル基の例として限定されないが、シクロプロパン、シクロブタン、シクロペンタン、シ

50

クロヘキサン等に由来する基が挙げられる。ある実施形態では、シクロアルキル基は C_{3-15} シクロアルキルであり、ある実施形態では、 C_{3-12} シクロアルキルまたは C_{5-12} シクロアルキルである。ある実施形態では、シクロアルキル基は C_5 、 C_6 、 C_7 、 C_8 、 C_9 、 C_{10} 、 C_{11} 、 C_{12} 、 C_{13} 、 C_{14} 、または C_{15} シクロアルキルである。

【0030】

「シクロアルキルアルキル」そのものまたはもう1つ別の置換基の部分としての「シクロアルキルアルキル」は、炭素原子、典型的には末端または sp^3 炭素原子に結合される水素原子の1つがシクロアルキル基に置換される非環式アルキル基を意味する。特定のアルキル部分が意図される場合、命名法シクロアルキルアルカニル、シクロアルキルアルケニル、またはシクロアルキルアルキニルが使用される。ある実施形態では、シクロアルキルアルキル基は C_{7-30} シクロアルキルアルキルであり、例えば、シクロアルキルアルキル基のアルカニル、アルケニル、またはアルキニル部分が C_{1-10} であり、シクロアルキル部分は C_{6-20} であり、ある実施形態では、シクロアルキルアルキル基は C_{7-20} シクロアルキルアルキルであり、例えば、シクロアルキルアルキル基のアルカニル、アルケニル、またはアルキニル部分は C_{1-8} あり、シクロアルキル部分は C_{4-20} または C_{6-12} である。

10

【0031】

「ハロゲン」はフルオロ、クロロ、プロモ、またはヨード基を意味する。

【0032】

「ヘテロアリアル」そのものまたはもう1つ別の置換基の部分としての「ヘテロアリアル」は親ヘテロ芳香族環系の単一の原子から水素原子を除去することによって生じる一価ヘテロ芳香族基を意味する。ヘテロアリアルは少なくとも1つのその他の環に縮合された少なくとも1つの芳香族環を有する複数の環系を包含し、少なくとも1つの環原子がヘテロ原子である芳香族または非芳香族であってもよい。ヘテロアリアルは、残りの環原子が炭素でありながら、N、O、およびSから選ばれる1つ以上の、例えば1~4個、またはある実施形態では1~3個のヘテロ原子を含む5~7員、単環式環等の5~12員の芳香族を包含し、および残りの環原子が炭素でありながら、1つ以上、例えば、1~4個、またはある実施形態では1~3個のヘテロ原子を含むN、O、およびSから選ばれる二環式ヘテロシクロアルキルを包含し、並びに少なくとも1つのヘテロ原子が芳香族環内に存在する。例えば、ヘテロアリアルは5~7員のシクロアルキル環に縮合される5~7員のヘテロシクロアルキル、芳香族環を含む。このような縮合される、環のうちたった1つが1つ以上のヘテロ原子を含む二環式ヘテロアリアル環系について、結合点は芳香族環またはシクロアルキル環にあってもよい。ある実施形態では、ヘテロアリアル基内のN、S、およびO原子の総数が1を超えるとき、ヘテロ原子は互いに隣接しない。ある実施形態では、ヘテロアリアル基内のN、S、およびO原子の総数は2より多くない。ある実施形態では、芳香族ヘテロ環内のN、S、およびO原子の総数は1より多くない。ヘテロアリアルは本明細書に定義されるようにアリアルを包含したり、重なったりしない。

20

30

【0033】

ヘテロアリアル基の例として、限定されないが、アクリジン、アルシンドール、カルバゾール、 β -カルボリン、クロマン、クロメン、シンノリン、フラン、イミダゾール、インダゾール、インドール、インドリン、インドリジン、イソベンゾフラン、イソクロメン、イソインドール、イソインドリン、イソキノリン、イソチアゾール、イソオキサゾール、ナフチリジン、オキサジアゾール、オキサゾール、ペリミジン、フェナントリジン、フェナントロリン、フェナジン、フタラジン、プテリジン、プリン、ピラン、ピラジン、ピラゾール、ピリダジン、ピリジン、ピリミジン、ピロール、ピロリジン、キナゾリン、キノリン、キノリジン、キノキサリン、テトラゾール、チアジアゾール、チアゾール、チオフェン、トリアゾール、キサンテン等に由来する基が挙げられる。ある実施形態では、ヘテロアリアル基は5~20員のヘテロアリアルであり、ある実施形態では、5~12員のヘテロアリアルであり、または5~10員のヘテロアリアルである。ある実施形態では、ヘテロアリアル基は5-、6-、7-、8-、9-、10-、11-、12-、13-、14-、15-、16-、17-、18-、19-、または20-員のヘテロアリアルである。ある実施形

40

50

態では、ヘテロアリアル基はチオフエン、ピロール、ベンゾチオフエン、ベンゾフラン、インドール、ピリジン、キノリン、イミダゾール、オキサゾール、およびピラジンに由来する基である。

【0034】

「ヘテロアリアルアルキル」そのものまたはもう1つ別の置換基の部分としての「ヘテロアリアルアルキル」は炭素原子、典型的には末端または sp^3 炭素原子に結合される水素原子の1つがヘテロアリアル基に置換される非環式アルキル基を意味する。特定のアルキル部分が意図される場合、命名法ヘテロアリアルアルカニル、ヘテロアリアルアルケニル、またはヘテロアリアルアルキニルが使用される。ある実施形態では、ヘテロアリアルアルキル基は6～30員のヘテロアリアルアルキルであり、例えば、ヘテロアリアルアルキルのアルカニル、アルケニル、またはアルキニル部分は1～10員であり、ヘテロアリアル部分は5～20員のヘテロアリアルであり、ある実施形態では、6～20員のヘテロアリアルであり、例えば、ヘテロアリアルアルキルのアルカニル、アルケニル、またはアルキニル部分は1～8員であり、ヘテロアリアル部分は5～12員のヘテロアリアルである。

10

【0035】

「ヘテロシクロアルキル」そのものまたはもう1つ別の置換基の部分としての「ヘテロシクロアルキル」は、1つ以上の炭素原子（および関連する任意の水素原子）が独立して同じまたは異なるヘテロ原子に置換される部分飽和または不飽和環式アルキル基を意味する。炭素原子（複数可）を置換するヘテロ原子の例として、限定されないが、N、P、O、S、Si等が挙げられる。具体的なレベルの飽和を意図するとき、命名法「ヘテロシクロアルカニル」または「ヘテロシクロアルケニル」が使用される。ヘテロシクロアルキル基の例として、限定されないがエポキシド類、アジリン類、チラン類、イミダゾリジン、モルホリン、ピペラジン、ピペリジン、ピラゾリジン、ピロリジン、キヌクリジン等に由来する基が挙げられる。

20

【0036】

「ヘテロシクロアルキルアルキル」そのものまたはもう1つ別の置換基の部分としての「ヘテロシクロアルキルアルキル」は、炭素原子、典型的には末端または sp^3 炭素原子に結合される水素原子の1つがヘテロシクロアルキル基に置換される非環式アルキル基を意味する。特定のアルキル部分が意図される場合、命名法ヘテロシクロアルキルアルカニル、ヘテロシクロアルキルアルケニル、またはヘテロシクロアルキルアルキニルが使用される。ある実施形態では、ヘテロシクロアルキルアルキル基は6～30員のヘテロシクロアルキルアルキルであり、例えば、ヘテロシクロアルキルアルキルのアルカニル、アルケニル、またはアルキニル部分は1～10員であり、ヘテロシクロアルキル部分は5～20員のヘテロシクロアルキルであり、ある実施形態では、6～20員のヘテロシクロアルキルアルキル、例えば、ヘテロシクロアルキルアルキルのアルカニル、アルケニル、またはアルキニル部分は1～8員であり、ヘテロシクロアルキル部分は5～12員のヘテロシクロアルキルである。

30

【0037】

「混合物」は分子または化学物質の集合を意味する。混合物中の各成分は独立して異なる可能性がある。混合物は一定の百分組成である、または、そうではない混ぜ合わさった2つ以上の物質を含む、または、それから本質的に成ってもよく、各成分は本質的な元の特性を持っていても、持っていないともよく、分子相の混合が起こっていても、起こっていないともよい。混合物中に、混合物を構成する成分が、それらの化学的構造によって互いに区別できても、できなくともよい。

40

【0038】

「親芳香族環系」は、共役電子系を有する不飽和環式または多環式環系を意味する。環の1つ以上が芳香族であり、環の1つ以上が、例えばフルオレン、インダン、インデン、フェナレン等の飽和または不飽和である縮合環系が、「親芳香族環系」の定義に含まれる。親芳香族環系の例として、限定されないが、アセアントリレン、アセナフチレン、ア

50

セフェナントリレン、アントラセン、アズレン、ベンゼン、クリセン、コロネン、フルオランテン、フルオレン、ヘキサセン、ヘキサフェン、ヘキサレン、*a s*-インダセン、*s*-インダセン、インダン、インデン、ナフタレン、オクタセン、オクタフェン、オクタレン、オパレン、ペンタ-2, 4-ジエン、ペンタセン、ペンタレン、ペンタフェン、ペリレン、フェナレン、フェナントレン、ピセン、プレリアデン、ピレン、ピラントレン、ルピセン、トリフェニレン、トリナフタレン等が挙げられる。

【0039】

「親ヘテロ芳香族環系」は1つ以上の炭素原子（および関連する任意の水素原子）が独立して同じまたは異なるヘテロ原子に置換される親芳香族環系を意味する。炭素原子を置換するヘテロ原子の例として、限定されないが、N、P、O、S、Si等が挙げられる。具体的には、環の1つ以上が芳香族であり、および環の1つ以上が、例えば、アルシンドール、ベンゾジオキサン、ベンゾフラン、クロマン、クロメン、インドール、インドリン、キサンテン等の飽和または不飽和である縮合環系が、「親ヘテロ芳香族環系」の定義に含まれる。親ヘテロ芳香族環系の例として、限定されないが、アルシンドール、カルバゾール、 β -カルボリン、クロマン、クロメン、シンノリン、フラン、イミダゾール、インダゾール、インドール、インドリン、インドリジン、イソベンゾフラン、イソクロメン、イソインドール、イソインドリン、イソキノリン、イソチアゾール、イソオキサゾール、ナフチリジン、オキサジアゾール、オキサゾール、ペリミジン、フェナントリジン、フェナントロリン、フェナジン、フタラジン、プテリジン、プリン、ピラン、ピラジン、ピラゾール、ピリダジン、ピリジン、ピリミジン、ピロール、ピロリジン、キナゾリン、キノリン、キノリジン、キノキサリン、テトラゾール、チアジアゾール、チアゾール、チオフェン、トリアゾール、キサンテン等が挙げられる。

【0040】

「置換される」は1つ以上の水素原子が同じまたは異なる置換基（複数可）に独立して置換される基を意味する。置換基の例として、限定されないが、 $-R^{64}$ 、 $-R^{60}$ 、 $-O^-$ 、 $-OH$ 、 $=O$ 、 $-OR^{60}$ 、 $-SR^{60}$ 、 $-S^-$ 、 $=S$ 、 $-NR^{60}R^{61}$ 、 $=NR^{60}$ 、 $-CN$ 、 $-CF_3$ 、 $-OCN$ 、 $-SCN$ 、 $-NO$ 、 $-NO_2$ 、 $=N_2$ 、 $-N_3$ 、 $-S(O)_2O^-$ 、 $-S(O)_2OH$ 、 $-S(O)_2R^{60}$ 、 $-OS(O_2)O^-$ 、 $-OS(O)_2R^{60}$ 、 $-P(O)(O^-)_2$ 、 $-P(O)(OR^{60})(O^-)$ 、 $-OP(O)(OR^{60})(OR^{61})$ 、 $-C(O)R^{60}$ 、 $-C(S)R^{60}$ 、 $-C(O)OR^{60}$ 、 $-C(O)NR^{60}R^{61}$ 、 $-C(O)O^-$ 、 $-C(S)OR^{60}$ 、 $-NR^{62}C(O)NR^{60}R^{61}$ 、 $-NR^{62}C(S)NR^{60}R^{61}$ 、 $-NR^{62}C(NR^{63})NR^{60}R^{61}$ 、 $-C(NR^{62})NR^{60}R^{61}$ 、 $-S(O)_2$ 、 $NR^{60}R^{61}$ 、 $-NR^{63}S(O)_2R^{60}$ 、 $-NR^{63}C(O)R^{60}$ 、および $-S(O)R^{60}$ が挙げられ、

$-R^{64}$ のそれぞれは独立してハロゲンであり、 R^{60} および R^{61} のそれぞれは独立してアルキル、置換アルキル、アルコキシ、置換アルコキシ、シクロアルキル、置換シクロアルキル、ヘテロシクロアルキル、置換ヘテロシクロアルキル、アリール、置換アリール、ヘテロアリール、置換ヘテロアリール、アリールアルキル、置換アリールアルキル、ヘテロアリールアルキル、若しくは置換ヘテロアリールアルキルであり、または R^{60} および R^{61} は、それらが結合される窒素原子と一緒に、ヘテロシクロアルキル、置換ヘテロシクロアルキル、ヘテロアリール、若しくは置換ヘテロアリール環を形成し、 R^{62} および R^{63} は独立してアルキル、置換アルキル、アリール、置換アリール、アリールアルキル、置換アリールアルキル、シクロアルキル、置換シクロアルキル、ヘテロシクロアルキル、置換ヘテロシクロアルキル、ヘテロアリール、置換ヘテロアリール、ヘテロアリールアルキル、若しくは置換ヘテロアリールアルキルであり、 R^{62} および R^{63} はそれらが結合される原子と一緒に、1つ以上のヘテロシクロアルキル、置換ヘテロシクロアルキル、ヘテロアリール、若しくは置換ヘテロアリール環を形成し、

「置換される」置換基は R^{60} 、 R^{61} 、 R^{62} 、および R^{63} について上に定義されるように、以下から独立して選択される1、2、または3個等の1つ以上の基に置換される。アルキル、 $-アルキル-OH$ 、 $-O-$ ハロアルキル、 $-アルキル-NH_2$ 、アルコキシ、シクロアルキル、シクロアルキルアルキル、ヘテロシクロアルキル、ヘテロシクロアルキルアルキ

10

20

30

40

50

ル、アリアル、ヘテロアリアル、アリアルアルキル、ヘテロアリアルアルキル、 $-O^-$ 、 $-OH$ 、 $=O$ 、 $-O$ -アルキル、 $-O$ -アリアル、 $-O$ -ヘテロアリアルアルキル、 $-O$ -シクロアルキル、 $-O$ -ヘテロシクロアルキル、 $-SH$ 、 $-S^-$ 、 $=S$ 、 $-S$ -アルキル、 $-S$ -アリアル、 $-S$ -ヘテロアリアルアルキル、 $-S$ -シクロアルキル、 $-S$ -ヘテロシクロアルキル、 $-NH_2$ 、 $=NH$ 、 $-CN$ 、 $-CF_3$ 、 $-OCN$ 、 $-SCN$ 、 $-NO$ 、 $-NO_2$ 、 $=N_2$ 、 $-N_3$ 、 $-S(O)_2O^-$ 、 $-S(O)_2$ 、 $-S(O)_2OH$ 、 $-OS(O)_2O^-$ 、 $-SO_2$ (アルキル)、 $-SO_2$ (フェニル)、 $-SO_2$ (ハロアルキル)、 $-SO_2NH_2$ 、 $-SO_2NH$ (アルキル)、 $-SO_2NH$ (フェニル)、 $-P(O)(O^-)_2$ 、 $-P(O)(O$ -アルキル) (O^-) 、 $-OP(O)(O$ -アルキル) $(O$ -アルキル)、 $-CO_2H$ 、 $-C(O)O$ (アルキル)、 $-CON$ (アルキル)(アルキル)、 $-CONH$ (アルキル)、 $-CONH_2$ 、 $-C(O)$ (アルキル)、 $-C(O)$ (フェニル)、 $-C(O)$ (ハロアルキル)、 $-OC(O)$ (アルキル)、 $-N$ (アルキル)(アルキル)、 $-NH$ (アルキル)、 $-N$ (アルキル)(アルキルフェニル)、 $-NH$ (アルキルフェニル)、 $-NHC(O)$ (アルキル)、 $-NHC(O)$ (フェニル)、 $-N$ (アルキル) $C(O)$ (アルキル)、および $-N$ (アルキル) $C(O)$ (フェニル)。

【0041】

本明細書および添付の請求項に使用されるように、冠詞「a」、「an」、および「the」は1つの指示対象に明示的および明解に限定しない限り、複数の指示対象を含む。

【0042】

本明細書の数値の範囲は、全数値および記述される数値の範囲内の全数値を含む。

【0043】

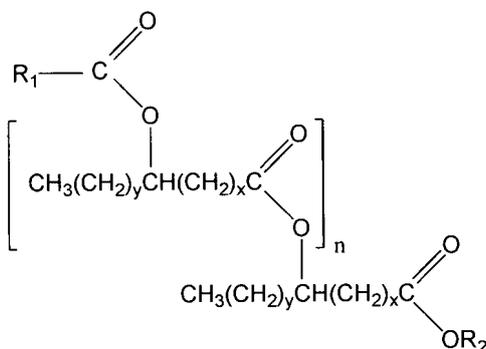
本開示はエストリド化合物、組成物、同化合物の作製方法に関する。ある実施形態ではまた、本開示はエストリド化合物、エストリド化合物を含む組成物、当該化合物の合成、および当該組成物の製剤に関する。ある実施形態では、本開示は酸化安定性および流動点等のその他の特性を保持するまたは向上させもする一方で、所望の粘度特性を有する生合成のエストリド類に関する。ある実施形態では、このような特性を示すエストリド化合物を調製する新しい方法を提供する。本開示はまた、あるエストリド化合物を含む潤滑剤に関する。

【0044】

ある実施形態では、組成物は式Iのエストリド化合物を少なくとも1つ含み、

【0045】

【化4】



式 I

【0046】

xはそれぞれ、独立して0、1、2、3、4、5、6、7、8、9、10、11、12、13、14、15、16、17、18、19、および20から選択される整数であり、

、

y は独立して 0、1、2、3、4、5、6、7、8、9、10、11、12、13、14、15、16、17、18、19、および 20 から選択される整数であり、

n は 0、1、2、3、4、5、6、7、8、9、10、11、および 12 から選択される整数であり、

R₁ は飽和または不飽和の、および分岐または非分岐の置換されてもよいアルキルであり、および

R₂ は水素および飽和または不飽和の、および分岐または非分岐の置換されてもよいアルキルから選択され、

少なくとも 1 つの当該化合物の脂肪酸鎖の残基のそれぞれが、独立して置換されてもよい。

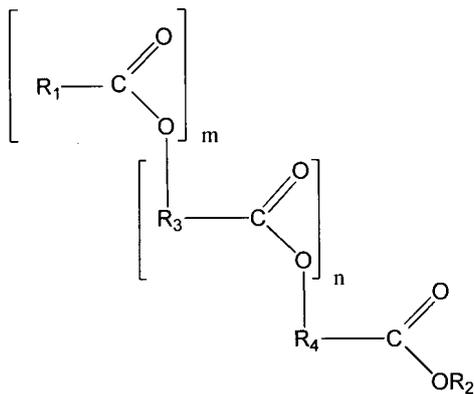
10

【0047】

ある実施形態では、組成物は式 I I のエストリド化合物を少なくとも 1 つ含み、

【0048】

【化 5】



20

式 II

【0049】

m は 1 より大きい、または、それに等しい整数であり、

n は 0 より大きい、または、それに等しい整数であり、

R₁ はそれぞれ、独立して飽和または不飽和の、および分岐または非分岐の置換されてもよいアルキルであり、

R₂ は水素および飽和または不飽和の、および分岐または非分岐の置換されてもよいアルキルから選択され、

R₃ および R₄ はそれぞれ、独立して飽和または不飽和の、および分岐または非分岐の置換されてもよいアルキルから選択される。

30

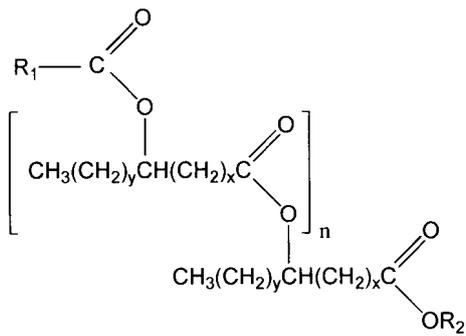
【0050】

ある実施形態では、組成物は式 I I I のエストリド化合物を少なくとも 1 つ含み、

40

【0051】

【化 6】



式 III

10

【0052】

x はそれぞれ、独立して 0 ~ 20 から選択される整数であり、

y はそれぞれ、独立して 0 ~ 20 から選択される整数であり、

n は 0 より大きい、または、それに等しい整数であり、

R₁ は飽和または不飽和の、および分岐または非分岐の置換されてもよいアルキルであり、

20

R₂ は水素および飽和または不飽和の、および分岐または非分岐の置換されてもよいアルキルから選択され、

少なくとも 1 つの当該化合物の脂肪酸鎖の残基のそれぞれが、独立して置換されてもよい。

【0053】

ある実施形態では、組成物は、R₁ が水素である式 I、II、または III の少なくとも 1 つのエストリド化合物を含む。

【0054】

用語「鎖」または「脂肪酸鎖」または「脂肪酸鎖の残基」は、式 I、II、および III のエストリド化合物に関して使用するとき、エストリド化合物に組み込まれる 1 つ以上の脂肪酸の残基を意味し、例えば、式 II の R₃ 若しくは R₄、または式 I および III の CH₃(CH₂)_yCH(CH₂)_xC(O)O- によって表される構造である。

30

【0055】

表される各式の頂部の式 I、II、および III の R₁ は、エストリドの頂部を「キャップする」ように、「キャップ」または「キャッピング材料」を意味してもよいものである。同様に、キャッピング基は一般式 -OC(O)-アルキル、いわゆる置換若しくは非置換の、飽和若しくは不飽和の、および / または本明細書に記載の分岐若しくは非分岐のアルキルのカルボン酸、またはギ酸残基の有機酸残基であってもよい。ある実施形態では、「キャップ」または「キャッピング基」は脂肪酸である。ある実施形態では、キャッピング基は、大きさに関係なく、置換若しくは非置換の、飽和若しくは不飽和の、および / または分岐若しくは非分岐である。キャップまたはキャッピング材料は、主鎖またはアルファ()鎖としても意味されてもよい。

40

【0056】

エストリドが合成される様式に依存して、キャップまたはキャッピング基アルキルは、得られる不飽和のエストリド中の有機酸残基からのアルキルだけであってもよい。ある実施形態では、エストリドの全体的な飽和を高め、および / または得られるエストリドの安定性を高めるために、飽和有機または脂肪酸キャップを使用することが望まれ得る。例えば、ある実施形態では、当業者が利用できる任意の適切な方法を使用して、不飽和のキャップを水素化することによって飽和されキャップされたエストリドを提供する方法を提供

50

することが望まれ得る。水素化は一および/または多不飽和脂肪酸を含んでもよい脂肪酸フィードストックの様々な資源と共に使用されてもよい。いかなる具体的な理論に縛られることなく、エステルを水素化することが分子の全体的な安定性を向上することを助け得る。しかしながら、もっと大きい脂肪酸キャップの付いたエステル等の完全に水素化されたエステルは、流動点を増加し得る。ある実施形態では、もっと短い飽和キャッピング材料を使用することによって、所望の流動点の特徴のいかなる損失も相殺することが望まれ得る。

【0057】

式 I I の $R_4C(O)O$ -または式 I および I I I の構造 $CH_3(CH_2)_yCH(CH_2)_x C(O)O$ -はエステルの「塩基」または「塩基鎖残基」として機能する。エステルが合成される様式に依存して、塩基有機酸または脂肪酸残基は、エステルが最初に合成された後に遊離酸の形式に保持される残基だけであってもよい。しかしながら、ある実施形態では、エステルの特性を変えるまたは向上させるために、遊離酸を任意の数の置換基と反応させてもよい。例えば、遊離酸エステルをアルコール類、グリコール類、アミン類、またはその他の適切な反応物質と反応させ、対応するエステル、アミドまたはその他の反応生成物を提供することが望まれ得る。塩基または塩基鎖残基は三級またはガンマ()鎖として意味されてもよい。

10

【0058】

式 I I の $R_3C(O)O$ -または式 I および I I I の構造 $CH_3(CH_2)_yCH(CH_2)_x C(O)O$ -はキャッピング材料および塩基脂肪酸残基と一緒に結合する結合残基である。 $n = 0$ およびエステルが二量体の形にあるときを含んで、エステル内に任意の数の結合残基があってもよい。エステルが調製される様式に依存して、結合残基は脂肪酸であっても、合成中に不飽和形式に最初はあってもよい。いくつかの実施形態では、触媒を使用し、不飽和の脂肪酸部位にカルボカチオンを産生し、次にもう1つ別の脂肪酸のカルボン酸基によるカルボカチオンに求核攻撃をするときに、エステルが形成される。いくつかの実施形態では、脂肪酸と一緒に結合するときに、不飽和の全部位が除去されるように、一不飽和される結合脂肪酸を持つことが望まれ得る。結合残基(複数可)は2級またはベータ()鎖として意味されてもよい。

20

【0059】

ある実施形態では、キャップはアセチル基であり、結合残基(複数可)は1つ以上の脂肪酸残基であり、塩基鎖残基は脂肪酸残基である。ある実施形態では、エステルに存在する結合残基は互いに異なる。ある実施形態では、1つ以上の結合残基は塩基鎖残基と異なる。

30

【0060】

上述のように、ある実施形態では、適切な不飽和脂肪酸は、エステルを調製するために任意の一または多不飽和脂肪酸を含んでもよい。例えば、一不飽和脂肪酸は、適切な触媒と一緒に、第2の脂肪酸を加えることのできる単一のカルボカチオンを形成し、それによって2つの脂肪酸の間に単一の結合が形成される。適切な一不飽和脂肪酸として、限定されないが、パルミトオレイン酸(16:1)、パクセン酸(18:1)、オレイン酸(18:1)、エイコセン酸(20:1)、エルシン酸(22:1)、およびネルボン酸(24:1)が挙げられる。さらに、ある実施形態では、多不飽和脂肪酸を使用してエステルを作成してもよい。適切な多不飽和脂肪酸として、限定されないが、ヘキサデカトリエン酸(16:3)、アルファ-リノレン酸(18:3)、ステアリドン酸(18:4)、エイコサトリエン酸(20:3)、エイコサテトラエン酸(20:4)、エイコサペンタエン酸(20:5)、ヘンエイコサペンタエン酸(21:5)、ドコサペンタエン酸(22:5)、ドコサヘキサエン酸(22:6)、テトラコサペンタエン酸(24:5)、テトラコサヘキサエン酸(24:6)、リノール酸(18:2)、ガンマ-リノール酸(18:3)、エイコサジエン酸(20:2)、ジホモ-ガンマ-リノレン酸(20:3)、アラキドン酸(20:4)、ドコサジエン酸(20:2)、アドレン酸(22:4)、ドコサペンタエン酸(22:5)、テトラコサテトラエン酸(22:4)、テトラコサペン

40

50

タエン酸(24:5)、ピノレン酸(18:3)、ポドカルプ酸(20:3)、ルメン酸(18:2)、アルファ-カレンド酸(18:3)、ベータ-カレンド酸(18:3)、ジャカル酸(18:3)、エレオステアリン酸(18:3)、ベータ-エレオステアリン(18:3)、カタルプ酸(18:3)、プニカ酸(18:3)、ルメレン酸(18:3)、アルファ-パリナル酸(18:4)、ベータ-パリナル酸(18:4)、およびボッセオペンタエン酸(20:5)が挙げられる。ある実施形態では、ヒドロキシ脂肪酸は、1つの脂肪酸のカルボン酸官能性を第2の脂肪酸のヒドロキシ官能性と反応させることによって、重合化または単一重合体化されてもよい。例示的なヒドロキシル脂肪酸として、限定されないが、リシノール酸、6-ヒドロキシステアリン酸、9,10-ジヒドロキシステアリン酸、12-ヒドロキシステアリン酸、および14-ヒドロキシステアリン酸が挙げられる。

10

【0061】

本明細書に記載のエストリド化合物を調製するための方法は、天然または合成脂肪酸源を使用することを含む。しかしながら、再生可能な生物学的フィードストックから脂肪酸を得ることが望まれ得る。例えば、適切な生物学起源の出発材料として、限定されないが、植物性油脂、植物性油、植物性ワックス、動物性油脂、動物性油、動物性ワックス、魚類性油脂、魚類性油、魚類性ワックス、藻類油および2つ以上の混合物が挙げられる。その他の可能性としてある脂肪酸源として、限定されないが、廃棄およびリサイクルされた植物級の油脂および油、遺伝子工学によって得られる油脂、油、およびワックス、化石燃料をベースとする材料が挙げられ、その他の材料源が望まれる。

20

【0062】

いくつかの実施形態では、化合物は様々な長さの鎖残基を含む。いくつかの実施形態では、 x はそれぞれ、独立して0~20、0~18、0~16、0~14、1~12、1~10、2~8、6~8、または4~6から選択される整数である。いくつかの実施形態では、 x はそれぞれ、独立して7~8から選択される整数である。いくつかの実施形態では、 x はそれぞれ、独立して0、1、2、3、4、5、6、7、8、9、10、11、12、13、14、15、16、17、18、19、および20から選択される整数である。ある実施形態では、少なくとも1つの鎖残基について、 x は7~8から選択される整数である。

30

【0063】

いくつかの実施形態では、 y はそれぞれ、独立して0~20、0~18、0~16、0~14、1~12、1~10、2~8、6~8、または4~6から選択される整数である。いくつかの実施形態では、 y はそれぞれ、独立して7~8から選択される整数である。いくつかの実施形態では、 y はそれぞれ、独立して0、1、2、3、4、5、6、7、8、9、10、11、12、13、14、15、16、17、18、19、および20から選択される。ある実施形態では、少なくとも1つの鎖残基について、 y は7~8から選択される整数である。いくつかの実施形態では、少なくとも1つの鎖残基について、 y は0~6または1および2から選択される整数である。ある実施形態では、 y はそれぞれ、独立して1~6または1および2から選択される整数である。

40

【0064】

いくつかの実施形態では、 $x+y$ は各鎖について、独立して0~40、0~20、10~20、または12~18から選択される整数である。いくつかの実施形態では、 $x+y$ は各鎖について、独立して13~15から選択される整数である。いくつかの実施形態では、 $x+y$ は15である。いくつかの実施形態では、 $x+y$ は各鎖について、独立して6、7、8、9、10、11、12、13、14、15、16、17、18、19、20、21、22、23、および24から選択される整数である。

【0065】

いくつかの実施形態では、式I、II、またはIIIのエストリド化合物は任意の数の脂肪酸残基を含んで、「 n 量体」エストリドを形成してもよい。例えば、エストリドは二量体($n=0$)、三量体($n=1$)、四量体($n=2$)、五量体($n=3$)、六量体(n

50

= 4)、七量体 (n = 5)、八量体 (n = 6)、九量体 (n = 7)、または十量体 (n = 8) 形式にあってもよい。いくつかの実施形態では、n は 0 ~ 20、0 ~ 18、0 ~ 16、0 ~ 14、0 ~ 12、0 ~ 10、0 ~ 8、または 0 ~ 6 から選択される整数である。いくつかの実施形態では、n は 0 ~ 4 から選択される整数である。いくつかの実施形態では、n は 0 または 0 より大きい。いくつかの実施形態では、n は 1 であり、式 I、II、または III の当該化合物の少なくとも 1 つは三量体を含む。いくつかの実施形態では、n は 1 より大きい。いくつかの実施形態では、n は 0、1、2、3、4、5、6、7、8、9、10、11、12、13、14、15、16、17、18、19、および 20 から選択される整数である。

【0066】

いくつかの実施形態では、式 I、II、または III の R₁ は飽和または不飽和の、および分岐または非分岐の置換されてもよいアルキルであってもよい。いくつかの実施形態では、アルキル基は C₁ ~ C₄₀ アルキル、C₁ ~ C₂₂ アルキルまたは C₁ ~ C₁₈ アルキルである。いくつかの実施形態では、アルキル基は C₇ ~ C₁₇ アルキルから選択される。いくつかの実施形態では、R₁ は C₇ アルキル、C₉ アルキル、C₁₁ アルキル、C₁₃ アルキル、C₁₅ アルキル、および C₁₇ アルキルから選択される。いくつかの実施形態では、R₁ は C₃ アルキル、C₅ アルキル、および C₇ アルキル等の C₃ ~ C₇ アルキルから選択される。いくつかの実施形態では、R₁ は C₁、C₂、C₃、C₄、C₅、C₆、C₇、C₈、C₉、C₁₀、C₁₁、C₁₂、C₁₃、C₁₄、C₁₅、C₁₆、C₁₇、C₁₈、C₁₉、C₂₀、C₂₁、または C₂₂ アルキルである。

【0067】

いくつかの実施形態では、式 I、II、または III の R₂ は飽和または不飽和の、および分岐または非分岐の置換されてもよいアルキルであってもよい。いくつかの実施形態では、アルキル基は C₁ ~ C₄₀ アルキル、C₁ ~ C₂₂ アルキルまたは C₁ ~ C₁₈ アルキルである。いくつかの実施形態では、アルキル基は C₇ ~ C₁₇ アルキルから選択される。いくつかの実施形態では、R₂ は C₇ アルキル、C₉ アルキル、C₁₁ アルキル、C₁₃ アルキル、C₁₅ アルキルおよび C₁₇ アルキルから選択される。いくつかの実施形態では、R₂ は C₃ アルキル、C₅ アルキル、および C₇ アルキル等の C₃ ~ C₇ アルキルから選択される。いくつかの実施形態では、R₂ は C₁、C₂、C₃、C₄、C₅、C₆、C₇、C₈、C₉、C₁₀、C₁₁、C₁₂、C₁₃、C₁₄、C₁₅、C₁₆、C₁₇、C₁₈、C₁₉、C₂₀、C₂₁、または C₂₂ アルキルである。

【0068】

いくつかの実施形態では、R₃ は飽和または不飽和の、および分岐または非分岐の置換されてもよいアルキルであってもよい。いくつかの実施形態では、アルキル基は C₁ ~ C₄₀ アルキル、C₁ ~ C₂₂ アルキルまたは C₁ ~ C₁₈ アルキルである。いくつかの実施形態では、アルキル基は C₇ ~ C₁₇ アルキルから選択される。いくつかの実施形態では、R₃ は C₇ アルキル、C₉ アルキル、C₁₁ アルキル、C₁₃ アルキル、C₁₅ アルキル、および C₁₇ アルキルから選択される。いくつかの実施形態では、R₃ は C₃ アルキル、C₅ アルキル、および C₇ アルキル等の C₃ ~ C₇ アルキルから選択される。いくつかの実施形態では、R₃ は C₁、C₂、C₃、C₄、C₅、C₆、C₇、C₈、C₉、C₁₀、C₁₁、C₁₂、C₁₃、C₁₄、C₁₅、C₁₆、C₁₇、C₁₈、C₁₉、C₂₀、C₂₁、または C₂₂ アルキルである。

【0069】

いくつかの実施形態では、R₄ は飽和または不飽和の、および分岐または非分岐の置換されてもよいアルキルであってもよい。いくつかの実施形態では、アルキル基は C₁ ~ C₄₀ アルキル、C₁ ~ C₂₂ アルキルまたは C₁ ~ C₁₈ アルキルである。いくつかの実施形態では、アルキル基は C₇ ~ C₁₇ アルキルから選択される。いくつかの実施形態では、R₄ は C₇ アルキル、C₉ アルキル、C₁₁ アルキル、C₁₃ アルキル、C₁₅ アルキル、および C₁₇ アルキルから選択される。いくつかの実施形態では、R₄ は C₃ アルキル、C₅ アルキル、および C₇ アルキル等の C₃ ~ C₇ アルキルから選択される。いくつかの実施形態では、R₄ は C₁、C₂、C₃、C₄、C₅、C₆、C₇、C₈、C₉、C₁₀、C₁₁、C₁₂、C₁₃、C₁₄、C

10

20

30

40

50

15、 C_{16} 、 C_{17} 、 C_{18} 、 C_{19} 、 C_{20} 、 C_{21} 、または C_{22} アルキルである。

【0070】

上述のように、ある実施形態では、 R_1 の長さおよび/または飽和の程度を変えることによって1つ以上のエストリドの特性を操作することが可能であり得る。しかしながら、ある実施形態では、 R_1 の置換のレベルを変えて、エストリドの特性を変化させるまたは向上させることもでき得る。いかなる具体的な理論に縛られることなく、ある実施形態では、1つ以上のヒドロキシ基等の R_1 の極性置換基の存在が、流動点を増加させる一方で、エストリドの粘度を増加させ得ることが考えられる。したがって、いくつかの実施形態では、 R_1 はヒドロキシルでない基に非置換または置換されてもよい。

【0071】

いくつかの実施形態では、エストリドは遊離酸形式にあり、式I、II、またはIIIの R_2 は水素である。いくつかの実施形態では、 R_2 は飽和または不飽和の、および分岐または非分岐の置換されてもよいアルキルから選択される。ある実施形態では、 R_2 残基は、本明細書に識別されるアルコール類でエストリドをエステル化することに由来する基等の任意の所望のアルキル基を含んでいてもよい。いくつかの実施形態では、アルキル基は $C_1 \sim C_{40}$ 、 $C_1 \sim C_{22}$ 、 $C_3 \sim C_{20}$ 、 $C_1 \sim C_{18}$ 、または $C_6 \sim C_{12}$ アルキルから選択される。いくつかの実施形態では、 R_2 は C_3 アルキル、 C_4 アルキル、 C_8 アルキル、 C_{12} アルキル、 C_{16} アルキル、 C_{18} アルキル、および C_{20} アルキルから選択されてもよい。例えば、ある実施形態では、 R_2 はイソプロピル、イソブチル、または2-エチルヘキシル等に分岐されてもよい。いくつかの実施形態では、 R_2 は C_{12} アルキル、 C_{16} アルキル、 C_{18} アルキル、または C_{20} アルキルを含む分岐または非分岐のもっと大きいアルキル基であってもよい。 R_2 位のこのような基は、Jarcol (商標) I-18CG、I-20、I-12、I-16、I-18T、および85BJを含むJarchem Industries社 (ニューアーク、ニュージャージー州) によって市販されているアルコール類のJarcol (商標) ラインを使用して遊離酸エストリドのエステル化に由来してもよい。いくつかの場合では、 R_2 はあるアルコール類を源にして、イソステアリールおよびイソパルミチル等の分岐アルキルを提供してもよい。このようなイソパルミチルおよびイソステアリールが C_{16} および C_{18} の任意の分岐のバリエーションを網羅し得ることが理解されたい。例えば、本明細書に記載のエストリド類は、Fineoxocol (登録商標) 180、180N、および1600を含むNissan Chemical America Corporation (ニューストン、テキサス州) によって市販されているイソパルミチルおよびイソステアリールアルコール類のFineoxocol (登録商標) ラインに由来する R_2 位の高分岐イソパルミチルまたはイソステアリール基を含んでいてもよい。いかなる具体的な理論に縛られることなく、ある実施形態では、エストリド類の R_2 位の大きく、高分岐のアルキル基 (例えばイソパルミチルおよびイソステアリール) が、流動点を実質的に保持し、または減少させもする一方で、エストリドを含有する組成物の粘度を高める少なくとも1つの方法を提供することができる。

【0072】

いくつかの実施形態では、本明細書に記載される化合物は式I、II、およびIIIの2つ以上のエストリド化合物の混合物を含んでいてもよい。化合物若しくは組成物の化合物、混合物または組成物の測定されたエストリド数 (EN) を使用することによって、エストリド、エストリドの混合物、またはエストリドを含む組成物の化学的構造を特徴付けることが可能である。ENは塩基脂肪酸に加えられる脂肪酸の平均数を表す。ENはまた、分子ごとのエストリド結合の平均数も表す。

$$EN = n + 1$$

n は二級ベータ () 脂肪酸の数である。したがって、単一のエストリド化合物は、例えば二量体、三量体、および四量体についての整数であるENを持つ。

$$\text{二量体 } EN = 1$$

$$\text{三量体 } EN = 2$$

$$\text{四量体 } EN = 3$$

10

20

30

40

50

【0073】

しかしながら、2つ以上のエストリド化合物を含む組成物は整数または一部分の整数であるENを持つ。例えば、二量体と三量体の分子比が1:1である組成物のENは1.5であり、一方では、四量体と三量体の分子比が1:1である組成物のENは2.5である。

【0074】

いくつかの実施形態では、組成物は、4.5または5.0より大きい整数または整数の分数であるENを持つ2つ以上のエストリドの混合物を含んでいてもよい。いくつかの実施形態では、ENは約1.0および約5.0から選択される整数または整数の分数であってもよい。いくつかの実施形態では、ENは約1.2および約4.5から選択される整数または整数の分数である。いくつかの実施形態では、ENは1.0、1.2、1.4、1.6、1.8、2.0、2.2、2.4、2.6、2.8、3.0、3.2、3.4、3.6、3.8、4.0、4.2、4.4、4.6、4.8、5.0、5.2、5.4、5.6および5.8より大きい値から選択される。いくつかの実施形態では、ENは1.2、1.4、1.6、1.8、2.0、2.2、2.4、2.6、2.8、3.0、3.2、3.4、3.6、3.8、4.0、4.2、4.4、4.6、4.8、並びに5.0、5.2、5.4、5.6、5.8、および6.0より小さい値から選択される。いくつかの実施形態では、ENは1、1.2、1.4、1.6、1.8、2.0、2.2、2.4、2.6、2.8、3.0、3.2、3.4、3.6、3.8、4.0、4.2、4.4、4.6、4.8、5.0、5.2、5.4、5.6、5.8、および6.0から選択される。

10

20

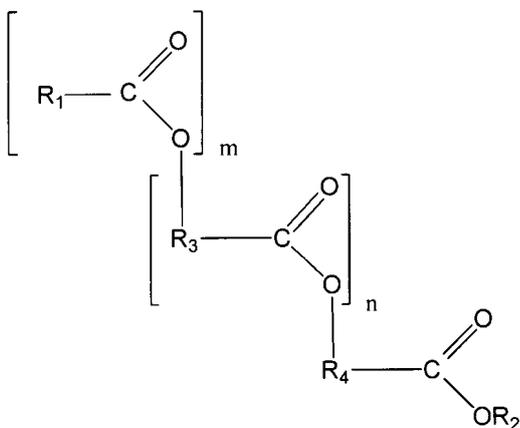
【0075】

上述のように、エストリド化合物の鎖は独立して置換されていてもよく、1つ以上の水素が除去され、本明細書に識別される置換基の1つ以上に置換されることは理解されたい。同様に、水素の残基の2つ以上が除去され、シスまたはトランス二重結合等の不飽和の1つ以上の部位を提供してもよい。さらに、鎖は分岐炭化水素の残基を含んでいてもよい。例えば、いくつかの実施形態では、本明細書に記載されるエストリドは式IIの化合物を少なくとも1つ含んでいてもよい。

【0076】

【化7】

30



40

式II

【0077】

mは1に等しい、またはそれより大きい整数であり、

nは0に等しい、またはそれより大きい整数であり、

R₁はそれぞれ、独立して飽和または不飽和の、および分岐または非分岐の置換されて

50

もよいアルキルであり、

R_2 は水素および飽和または不飽和の、および分岐または非分岐の置換されてもよいアルキルから選択され、および

R_3 および R_4 はそれぞれ、独立して飽和または不飽和の、および分岐または非分岐の置換されてもよいアルキルから選択される。

【0078】

ある実施形態では、 m は1である。いくつかの実施形態では、 m は2、3、4、および5から選択される整数である。いくつかの実施形態では、 n は1、2、3、4、5、6、7、8、9、10、11、および12から選択される整数である。いくつかの実施形態では、1つ以上の R_3 は式IIの化合物の1つ以上のその他の R_3 と異なる。いくつかの実施形態では、1つ以上の R_3 は式IIの化合物の R_4 と異なる。いくつかの実施形態では、式IIの化合物が1つ以上の多不飽和脂肪酸から調製されるならば、 R_3 および R_4 の1つ以上は不飽和の1つ以上の部位を持つ可能性がある。いくつかの実施形態では、式IIの化合物が1つ以上の分岐脂肪酸から調製されるならば、 R_3 および R_4 の1つ以上は分岐される可能性がある。

10

【0079】

いくつかの実施形態では、 R_3 および R_4 は $CH_3(CH_2)_yCH(CH_2)_x$ -であってもよく、 x はそれぞれ、独立して0、1、2、3、4、5、6、7、8、9、10、11、12、13、14、15、16、17、18、19、および20から選択される整数であり、 y はそれぞれ、独立して0、1、2、3、4、5、6、7、8、9、10、11、12、13、14、15、16、17、18、19、および20から選択される整数である。 R_3 と R_4 の両方が $CH_3(CH_2)_yCH(CH_2)_x$ -である場合、化合物は式IおよびIIに記載の化合物であってもよい。

20

【0080】

いかなる具体的な理論に縛られることなく、ある実施形態では、ENを変えることが、流動点を実質的に保持するまたは減少する一方で、所望の粘度特性を持つエストリド含有組成物を産生する。例えばいくつかの実施形態では、エストリドはEN値が増加させると流動点が減少する。したがって、ある実施形態では、基油のENを増加させることによってエストリド基油の流動点を保持するまたは減少させるための方法を提供し、または基油のENを増加させることによってエストリド基油を含む組成物の流動点を保持するまたは減少させるための方法を提供する。いくつかの実施形態では、方法には以下を含む。最初のENおよび最初の流動点を持つエストリド基油を選択し、少なくとも一部の基油を除去し、当該部分のENは最初のENより小さく、得られるエストリド基油のENは基油の最初のENより大きく、および流動点は基油の最初の流動点以下である。いくつかの実施形態では、選択されるエストリド基油は、少なくとも1つの第2の不飽和脂肪酸および/または飽和脂肪酸で少なくとも1つの第1の不飽和脂肪酸をオリゴマー形成することによって、調製される。いくつかの実施形態では、基油の少なくとも一部分または2つ以上のエストリド化合物を含む組成物の除去は、蒸留、クロマトグラフィー、膜分離、相分離、アフィニティー分離、および溶媒抽出の少なくとも1つを使用することによって達成される。いくつかの実施形態では、蒸留は、2つ以上のエストリド化合物を含むエストリド基油または組成物をEN値が独立して異なる様々な「カット」に分離するのに適した温度および/または圧で行われる。いくつかの実施形態では、これは、基油または2つ以上のエストリド化合物を含む組成物を少なくとも約250の温度および約25ミクロン以下の絶対圧に供することによって達成され得る。いくつかの実施形態では、蒸留は約250～約310の温度範囲、および約10ミクロン～約25ミクロンの絶対圧の範囲で行われる。

30

40

【0081】

いくつかの実施形態では、エストリド化合物および組成物は、約1.0～約2.0から選択される整数または整数の分数等の1より大きいまたは等しいENを示す。いくつかの実施形態では、ENは約1.0～約1.6から選択される整数または整数の分数である。

50

いくつかの実施形態では、ENは約1.1～約1.5から選択される整数または整数の分数である。いくつかの実施形態では、ENは1.0、1.1、1.2、1.3、1.4、1.5、1.6、1.7、1.8、および1.9より大きい値から選択される。いくつかの実施形態では、ENは1.1、1.2、1.3、1.4、1.5、1.6、1.7、1.8、1.9、および2.0より小さい値から選択される。

【0082】

いくつかの実施形態では、ENは約1.8～約2.8から選択される整数または整数の分数等の1.5より大きいまたは等しい。いくつかの実施形態では、ENは約2.0～約2.6から選択される整数または整数の分数である。いくつかの実施形態では、ENは約2.1～約2.5から選択される整数または整数の分数である。いくつかの実施形態では、ENは1.8、1.9、2.0、2.1、2.2、2.3、2.4、2.5、2.6、および2.7より大きい値から選択される。いくつかの実施形態では、ENは1.9、2.0、2.1、2.2、2.3、2.4、2.5、2.6、2.7、および2.8より小さい値から選択される。いくつかの実施形態では、ENは約1.8、2.0、2.2、2.4、2.6、または2.8である。

10

【0083】

いくつかの実施形態では、ENは約4.0～約5.0から選択される整数または整数の分数等の4より大きいまたは等しい。いくつかの実施形態では、ENは約4.2～約4.8から選択される整数の分数である。いくつかの実施形態では、ENは約4.3～約4.7から選択される整数の分数である。いくつかの実施形態では、ENは4.0、4.1、4.2、4.3、4.4、4.5、4.6、4.7、4.8、および4.9より大きい値から選択される。いくつかの実施形態では、ENは4.1、4.2、4.3、4.4、4.5、4.6、4.7、4.8、4.9、および5.0より小さい値から選択される。いくつかの実施形態では、ENは約4.0、4.2、4.4、4.6、4.8、または5.0である。

20

【0084】

いくつかの実施形態では、ENは約5.0～約6.0から選択される整数または整数の分数等の約5より大きいまたは等しい。いくつかの実施形態では、ENは約5.2～約5.8から選択される整数の分数である。いくつかの実施形態では、ENは約5.3～約5.7から選択される整数の分数である。いくつかの実施形態では、ENは5.0、5.1、5.2、5.3、5.4、5.5、5.6、5.7、5.8、および5.9より大きい値から選択される。いくつかの実施形態では、ENは5.1、5.2、5.3、5.4、5.5、5.6、5.7、5.8、5.9および6.0より小さい値から選択される。いくつかの実施形態では、ENは約5.0、5.2、5.4、5.6、5.8、または6.0である。

30

【0085】

いくつかの実施形態では、ENは約1.0～約2.0から選択される整数または整数の分数等の1より大きいまたは等しい。いくつかの実施形態では、ENは約1.1～約1.7から選択される整数の分数である。いくつかの実施形態では、ENは約1.1～約1.5から選択される整数の分数である。いくつかの実施形態では、ENは1.0、1.1、1.2、1.3、1.4、1.5、1.6、1.7、1.8、または1.9より大きい値から選択される。いくつかの実施形態では、ENは1.2、1.3、1.4、1.5、1.6、1.7、1.8、1.9、または2.0より小さい値から選択される。いくつかの実施形態では、ENは約1.0、1.2、1.4、1.6、1.8、または2.0である。いくつかの実施形態では、ENは約1.2～約2.2から選択される整数または整数の分数等の1より大きいまたは等しい。いくつかの実施形態では、ENは約1.4～約2.0から選択される整数または整数の分数である。いくつかの実施形態では、ENは約1.5～約1.9から選択される整数または整数の分数である。いくつかの実施形態では、ENは1.0、1.1、1.2、1.3、1.4、1.5、1.6、1.7、1.8、1.9、2.0、および2.1より大きい値から選択される。いくつかの実施形態では、EN

40

50

は 1.2、1.3、1.4、1.5、1.6、1.7、1.8、1.9、2.0、2.1、および 2.2 より小さい値から選択される。いくつかの実施形態では、EN は約 1.0、1.2、1.4、1.6、1.8、2.0、または 2.2 である。

【0086】

いくつかの実施形態では、EN は約 2.8 ~ 約 3.8 から選択される整数または整数の分数等の 2 より大きいまたは等しい。いくつかの実施形態では、EN は約 2.9 ~ 約 3.5 から選択される整数または整数の分数である。いくつかの実施形態では、EN は約 3.0 ~ 約 3.4 から選択される整数または整数の分数である。いくつかの実施形態では、EN は 2.0、2.1、2.2、2.4、2.5、2.6、2.7、2.8、2.9、3.0、3.1、3.4、3.5、3.6、および 3.7 より大きい値から選択される。いくつかの実施形態では、EN は 2.2、2.3、2.4、2.5、2.6、2.7、2.8、2.9、3.0、3.1、3.2、3.3、3.4、3.5、3.6、3.7、および 3.8 より小さい値から選択される。いくつかの実施形態では、EN は約 2.0、2.2、2.4、2.6、2.8、3.0、3.2、3.4、3.6、または 3.8 である。

10

【0087】

典型的に素材およびエステルドを含有する組成物はある潤滑性、粘度、および / または流動点の特徴を示す。例えば、ある実施形態では、基油、化合物および組成物の粘度は 40 で約 10 cSt ~ 約 250 cSt の範囲にあってもよく、および / または 100 では約 3 cSt ~ 約 30 cSt の範囲にあってもよい。いくつかの実施形態では、基油、化合物および組成物の粘度は 40 で約 50 cSt ~ 約 150 cSt の範囲内にあってもよく、および / または 100 では約 10 cSt ~ 約 20 cSt の範囲内にあってもよい。

20

【0088】

いくつかの実施形態では、エステルド化合物および組成物の粘度は 40 では約 55 cSt より小さくてもよく、または 40 では約 45 cSt より小さくてもよく、および / または 100 では約 12 cSt より小さくてもよく、または 100 では約 10 cSt より小さくてもよい。いくつかの実施形態では、エステルド化合物および組成物の粘度は、40 では約 25 cSt ~ 約 55 cSt の範囲内にあってもよく、および / または 100 では約 5 cSt ~ 約 11 cSt の範囲内にあってもよい。いくつかの実施形態では、エステルド化合物および組成物の粘度は、40 では約 35 cSt ~ 約 45 cSt の範囲内にあってもよく、および / または 100 では約 6 cSt ~ 約 10 cSt の範囲内にあってもよい。いくつかの実施形態では、エステルド化合物および組成物の粘度は、40 では約 38 cSt ~ 約 43 cSt の範囲内にあってもよく、100 では約 7 cSt ~ 約 9 cSt の範囲内にあってもよい。

30

【0089】

いくつかの実施形態では、エステルド化合物および組成物の粘度は 40 では約 120 cSt より小さくてもよく、または 40 では約 100 cSt より小さくてもよく、および / または 100 では約 18 cSt より小さくてもよく、または 100 では約 17 cSt より小さくてもよい。いくつかの実施形態では、エステルド化合物および組成物の粘度は 40 では約 70 cSt ~ 約 120 cSt の範囲内にあってもよく、および / または 100 では約 12 cSt ~ 約 18 cSt の範囲内にあってもよい。いくつかの実施形態では、エステルド化合物および組成物の粘度は 40 では約 80 cSt ~ 約 100 cSt の範囲内にあってもよく、および / または 100 では約 13 cSt ~ 約 17 cSt の範囲内にあってもよい。いくつかの実施形態では、エステルド化合物および組成物の粘度は 40 では約 85 cSt ~ 約 95 cSt の範囲内にあってもよく、および / または 100 では約 14 cSt ~ 約 16 cSt の範囲内にあってもよい。

40

【0090】

エステルド化合物および組成物の粘度は 40 では約 180 cSt より大きくてもよく、または 40 では約 200 cSt より大きくてもよく、および / または 100 では約 20 cSt より大きくてもよく、または 100 では約 25 cSt より大きくてもよい。いくつかの実施形態では、エステルド化合物および組成物の粘度は 40 では約 180 c

50

いくつかの実施形態では、エストリド化合物および組成物の粘度は40 では1、2、3、4、5、6、7、8、9、10、11、12、13、14、15、16、17、18、19、20、21、22、23、24、25、26、27、28、29、30、32、34、36、38、40、42、44、46、48、50、55、60、65、70、75、80、85、90、95、100、110、120、130、140、150、160、170、180、190、200、210、220、230、240、250、260、270、280、290、300、350、または400 c S t であってもよい。いくつかの実施形態では、エストリド化合物および組成物の粘度は100 では1、2、3、4、5、6、7、8、9、10、11、12、13、14、15、16、17、18、19、20、21、22、23、24、25、26、27、28、29、および30 c S t であってもよい。

10

【0094】

いくつかの実施形態では、エストリド化合物および組成物の粘度は0 では約200、250、300、350、400、450、500、または550 c S t より小さくてもよい。いくつかの実施形態では、エストリド化合物および組成物の粘度は0 では約200 c S t ~ 約250 c S t の範囲にあってもよい。いくつかの実施形態では、エストリド化合物および組成物の粘度は0 では約250 c S t ~ 約300 c S t の範囲にあってもよい。いくつかの実施形態では、エストリド化合物および組成物の粘度は0 では約300 c S t ~ 約350 c S t の範囲にあってもよい。いくつかの実施形態では、エストリド化合物および組成物の粘度は0 では約350 c S t ~ 約400 c S t の範囲にあってもよい。いくつかの実施形態では、エストリド化合物および組成物の粘度は0 では約400 c S t ~ 約450 c S t の範囲にあってもよい。いくつかの実施形態では、エストリド化合物および組成物の粘度は0 では約450 c S t ~ 約500 c S t の範囲にあってもよい。いくつかの実施形態では、エストリド化合物および組成物の粘度は0 では約500 c S t ~ 約550 c S t の範囲にあってもよい。いくつかの実施形態では、エストリド化合物および組成物の粘度は0 では約100、125、150、175、200、225、250、275、300、325、350、375、400、425、450、475、500、525、または550 c S t であってもよい。

20

【0095】

いくつかの実施形態では、エストリド化合物および組成物は所望の低温の流動点の特性を示してもよい。いくつかの実施形態では、エストリド化合物および組成物の流動点は約-20、約-25、約-35、-40、またはさらに約-50 より低くてもよい。いくつかの実施形態では、エストリド化合物および組成物の流動点は約-25 ~ 約-45 である。いくつかの実施形態では、流動点は約-30 ~ 約-40、約-34 ~ 約-38、約-30 ~ 約-45、-35 ~ 約-45、34 ~ 約-42、約-38 ~ 約-42、または約36 ~ 約-40 の範囲内に低下する。いくつかの実施形態では、流動点は約-27 ~ 約-37、または約-30 ~ 約-34 の範囲内に低下する。いくつかの実施形態では、流動点は約-25 ~ 約-35、または約-28 ~ 約-32 の範囲内に低下する。いくつかの実施形態では、流動点は約-28 ~ 約-38、または約-31 ~ 約-35 の範囲内に低下する。いくつかの実施形態では、流動点は約-31 ~ 約-41、または約-34 ~ 約-38 の範囲内に低下する。いくつかの実施形態では、流動点は約-40 ~ 約-50、または約-42 ~ 約-48 の範囲内に低下する。いくつかの実施形態では、流動点は約-50 ~ 約-60、または約-52 ~ 約-58 の範囲内に低下する。いくつかの実施形態では、流動点の上限は約-35、約-36、約-37、約-38、約-39、約-40、約-41、約-42、約-43、約-44、または約-45 より低い。いくつかの実施形態では、流動点の下限は約-70、約-69、約-68、約-67、約-66、約-65、約-64、約-63、約-62、約-61、約-60、約-59、約-58、約-57、約-56、-55、約-54、約-53、約-52、-51、約-50、約-49、約-48、約-47、約-46、または約-45 より高い。

30

40

50

【0096】

さらに、ある実施形態では、エステルは他の方法によって調製されたエステルと比べてヨウ素価（IV）が減少していてもよい。IVは油の全体的な不飽和の程度の測定値であり、エステルのグラムあたりのヨウ素の量（cg/g）によって測定される。ある例では、不飽和の程度が高い油のほうが腐食性または沈着をもっと産生しやすく、酸化安定性のレベルがもっと低いかもしれない。不飽和の程度がもっと高い化合物には反応するヨウ素について不飽和点がもっとあり、IVがもっと高くなる。したがって、ある実施形態では、油の酸化安定性を高めるためにエステルのIVを減少させることが望ましく、一方で有害な油の沈着物および腐食性を減少することにもなる。

【0097】

いくつかの実施形態では、本明細書に記載のエステル化合物および組成物のIVは約40cg/gより少なくまたは約35cg/gより少ない。いくつかの実施形態では、エステルのIVは約30cg/gより少なく、約25cg/gより少なく、約20cg/gより少なく、約15cg/gより少なく、約10cg/gより少なく、または約5cg/gより少ない。いくつかの実施形態では、エステルのIVは約0cg/gである。エステルの不飽和の程度を低下させることによって、組成物のIVを減少させてもよい。このことは例えば、エステルを合成するときに不飽和のキャッピング材料に比べて飽和されたキャッピング材料の量を増加させることによって達成されてもよい。あるいは、ある実施形態では、不飽和のキャップを有するエステルを水素化することによってIVを減少させてもよい。

【0098】

ある実施形態では、組成物は潤滑組成物である。ある実施形態では、組成物はエステル基油を含み、エステル基油は少なくとも1つのエステル化合物を含む。ある実施形態では、組成物はエステル基油と少なくとも1つの抗酸化剤との組み合わせを含む。その他に示されない限り、エステル基油と少なくとも1つの抗酸化剤の「組み合わせ」の特性の指標はエステル基油と少なくとも1つの抗酸化剤の混合物の特性を具体的には意味し、全体的な組成物に存在していてもよいその他のいかなる成分も存在しない。ある実施形態では、組成物の1つ以上の特性は、エステル基油と少なくとも1つの抗酸化剤との組み合わせの特性に類似しているまたは、実質的に同じである。

【0099】

ある実施形態では、組成物の動粘度は組成物に含まれるエステル基油についての動粘度と本質的に同じである。ある実施形態では、組成物の動粘度は、組成物に含まれるエステル基油の動粘度の約1%または約2%内にある。ある実施形態では、組成物の動粘度は、組成物に含まれるエステル基油の動粘度の0.2%、0.4%、0.6%、0.8%、1.0%、1.2%、1.4%、1.6%、1.8%、または2%内にある。ある実施形態では、組成物の動粘度は、100で約15cSt以下である。ある実施形態では、組成物の動粘度は、40で約50cSt以下である。ある実施形態では、組成物の動粘度は、0で約500cSt以下である。

【0100】

ある実施形態では、エステル基油の総酸価は約0.5、0.4、0.3、0.2、またはさらに0.1mgKOH/g以下である。ある実施形態では、エステル基油の総酸価は約0.05~約0.1mgKOH/g等の約0.1mgKOH/gより小さい。ある実施形態では、エステル基油の総酸価は約0.05mgKOH/g以下である。ある実施形態では、エステル基油の総酸価は約0.02~約0.06mgKOH/gである。ある実施形態では、エステル基油の総酸価は約0、0.01、0.02、0.03、0.04、0.05、0.06、0.07、0.08、0.09、または0.1mgKOH/gである。ある実施形態では、組成物の総酸価は、組成物に含まれるエステル基油の総酸価と本質的に同じである。

【0101】

ある実施形態では、本明細書に記載の組成物はエステル基油を含む、または、から本

10

20

30

40

50

質的に成り、当該基油は式 I、II および / または III の少なくとも 1 つの化合物を含む。ある実施形態では、組成物はさらに少なくとも 1 つの添加剤を含み、少なくとも 1 つの添加剤は抗酸化剤、抗菌剤、極圧剤、摩擦調整剤、流動点降下剤、金属キレート剤、金属不活性化剤、消泡剤、または抗乳化剤の 1 つ以上から選択されてもよい。ある実施形態では、組成物はエストリド基油および少なくとも 1 つの抗酸化剤を含む、または、から本質的に成る。ある実施形態では、組成物はさらに少なくとも 1 つの潤滑油を含む。ある実施形態では、潤滑油はエストリド基油ではない。ある実施形態では、潤滑油はグループ I の油、グループ II の油、グループ III の油、ポリアルファオレフィン、ポリオールエステル、ポリアルキレングリコール、および油溶性ポリアルキレングリコールから選択される。

10

【0102】

ある実施形態では、組成物はエストリド基油と少なくとも 1 つの添加剤との組み合わせを含む、または、から本質的に成る。ある実施形態では、少なくとも 1 つの添加剤は抗酸化剤である。ある実施形態では、少なくとも 1 つの抗酸化剤はフェノール系抗酸化剤、アミン抗酸化剤、および有機金属系抗酸化剤から選択される。ある実施形態では、少なくとも 1 つの抗酸化剤はフェノール系抗酸化剤である。ある実施形態では、少なくとも 1 つの抗酸化剤はヒンダードフェノール系抗酸化剤である。ある実施形態では、少なくとも 1 つの抗酸化剤はジアリールアミン、ベンジルアミン、またはポリアミン等のアミン抗酸化剤である。ある実施形態では、少なくとも 1 つの抗酸化剤はアルキル化ジフェニルアミン抗酸化剤等のジアリールアミン抗酸化剤である。ある実施形態では、少なくとも 1 つの抗酸化剤はフェニル- -ナフチルアミンまたはアルキル化フェニル- -ナフチルアミンである。ある実施形態では、少なくとも 1 つの抗酸化剤は抗酸化剤パッケージを含む。ある実施形態では、抗酸化剤パッケージは、ヒンダードフェノール系抗酸化剤およびアルキル化ジフェニルアミン抗酸化剤の組み合わせ等の 1 つ以上のフェノール系抗酸化剤および 1 つ以上のアミン抗酸化剤を含む。例示的な抗酸化剤として、限定されないが、ジチオリン酸亜鉛 (ZDDP)、ブチルヒドロキシアニソール (BHA)、2,6-ジテルチアリ-ブチルパラクレゾール (DBPC)、--第三級ブチルヒドロキノン (TBHQ)、テトラヒドロブチロフェノン (THBP)、ヒドロキノン、ピロガロール、没食子酸プロピル、フェノチアジン、および 1 つ以上のコフェロールが挙げられる。その他の例示的な抗酸化剤として、限定されないが、ヒドロキシルアミン、アミン N-酸化物、オキシム、およびニトロンが挙げられる。ある実施形態では、少なくとも 1 つの抗酸化剤はジチオカルバミド酸エステルである。ある実施形態では、ジチオカルバミド酸エステルは、例えば、ジチオカルバミン酸ジアミル亜鉛 (ZDDC) 等の金属ジアルキルジチオカルバマートである。ある実施形態では、ジチオカルバミン酸ジアミル亜鉛は、ジチオカルバミン酸ジアルキルアンチモン (ADDC) 等の 1 つ以上の極圧剤と相乗効果があってもよい。

20

30

【0103】

ある実施形態では、少なくとも 1 つの抗酸化剤はアミン抗酸化剤である。ある実施形態では、少なくとも 1 つの抗酸化剤は、ノニル化ジフェニルアミンおよびオクチル化ノニル化ジフェニルアミンから選択されるアルキル化ジフェニルアミンである。ある実施形態では、少なくとも 1 つの抗酸化剤は、N,N'-ジイソプロピル-p-フェニレンジアミン、N,N'-ジ-sec-ブチル-p-フェニレンジアミン、N,N'-ビス(1,4-ジメチルペンチル)-p-フェニレンジアミン、N,N'-ビス(1-エチル-3-メチルペンチル)-p-フェニレンジアミン、N,N'-ビス(1-メチルヘブチル)-p-フェニレンジアミン、N,N'-ジシクロヘキシル-p-フェニレンジアミン、N,N'-ジフェニル-p-フェニレンジアミン、N,N'-ビス(2-ナフチル)-p-フェニレンジアミン、N-イソプロピル-N'-フェニル-p-フェニレンジアミン、N-(1,3-ジメチルアミノ-ブチル)-N'-フェニル-p-フェニレンジアミン、N-(1-メチルヘブチル)-N'-フェニル-p-フェニレンジアミン、N-シクロヘキシル-N'-フェニル-p-フェニレンジアミン、4-(p-トルエンスルファモイル)ジフェニルアミン、N,N'-ジメチルアミノ-N,N'-ジ-sec-ブチル-p-フェニレンジアミン、ジフェニルアミン、N-アリルジフェニルアミン、4-イソプロポキ

40

50

シジフェニルアミン、N-フェニル-1-ナフチルアミン、N-フェニル-2-ナフチルアミン、
 オクチル化ジフェニルアミン、例えば、p, p'-ジ-tert-オクチルジフェニルアミン、
 4-n-ブチルアミノフェノール、4-ブチリルアミノフェノール、4-ノナノイルアミ
 ノフェノール、4-ドデカノイルアミノフェノール、4-オクタデカノイルアミノフェノ
 ール、ビス(4-メトキシフェニル)アミン、2, 6-ジ-tert-ブチル-4-ジメチルアミ
 ノメチルフェノール、2, 4'-ジアミノジフェニルメタン、4, 4'-ジアミノジフェニル
 メタン、N, N, N', N'-テトラメチル-4, 4'-ジアミノジフェニルメタン、1, 2-
 ビス[(2-メチル-フェニル)アミノ]エタン、1, 2-ビス(フェニルアミノ)プロパ
 ン、(o-トリル)ピグアニド、ビス[4-(1', 3'-ジメチルアミノブチル)フェニル
]アミン、tert-オクチル化N-フェニル-1-ナフチルアミン、モノ-およびジアルキ
 ル化tert-ブチル/tert-オクチルジフェニルアミン、モノ-およびジアルキル化
 イソプロピル/イソヘキシルジフェニルアミン、モノ-およびジアルキル化tert-ブチ
 ルジフェニルアミン、モノ-およびジアルキル化ノニルジフェニルアミン、モノ-およ
 びジアルキル化オクチル/ブチルジフェニルアミン、2, 3-ジヒドロ-3, 3-ジメチルアミ
 ノ-4H-1, 4-ベンゾチアジン、フェノチアジン、N-アリルフェノチアジン、N, N,
 N', N'-テトラフェニル-1, 4-ジアミノプト-2-エン、N, N-ビス(2, 2, 6, 6-
 -テトラメチルピペリド-4-イル-ヘキサメチレン)ジアミン、ビス(2, 2, 6, 6-テト
 ラメチルピペリド-4-イル)セバシン酸、2, 2, 6, 6-テトラメチルピペリドイン-4
 -オンおよび2, 2, 6, 6-テトラメチルピペリドイン-4-オールから選択される。

10

20

30

40

50

【0104】

ある実施形態では、少なくとも1つの抗酸化剤では、アルキル化モノフェノールである。
 ある実施形態では、少なくとも1つの抗酸化剤はアルキル化ジフェノールである。ある
 実施形態では、少なくとも1つの抗酸化剤はアルキリデンビスフェノールである。ある実
 施形態では、少なくとも1つの抗酸化剤は2, 6-ジ-tert-ブチルフェノール、4,
 4'-メチレン-ビス(2, 6-ジ-tert-ブチルフェノール)、4, 4'-ビス(2, 6-
 ジ-tert-ブチルフェノール)、4, 4'-ビス(2-メチル-6-tert-ブチルフェ
 ノール)、2, 2'-メチレン-ビス(4-メチル-6-tert-ブチルフェノール)、4, 4'
 -ブチリデン-ビス(3-メチル-6-tert-ブチルフェノール)、4, 4'-イソプロピリ
 デン-ビス(2, 6-ジ-tert-ブチルフェノール)、2, 2'-メチレン-ビス(4-メチ
 ル-6-ノニルフェノール)、2, 2'-イソブチリデン-ビス(4, 6-ジメチルフェノール)
 、2, 2'-メチレン-ビス(4-メチル-6-シクロヘキシルフェノール)、2, 2'-メチ
 レンビス(6-tert-ブチル-4-エチルフェノール)、2, 2'-メチレンビス[4-メ
 チル-6-(-メチルシクロヘキシル)フェノール]、2, 2'-メチレンビス(4-メチル
 -6-シクロヘキシルフェノール)、2, 2'-メチレンビス(4, 6-ジ-tert-ブチル
 フェノール)、2, 2'-エチリデンビス(4, 6-ジ-tert-ブチルフェノール)、2,
 2'-エチリデンビス(6-tert-ブチル-4-イソブチルフェノール)、2, 2'-メチ
 レンビス[6-(-メチルベンジル)-4-ノニルフェノール]、2, 2'-メチレンビス[
 6-(, -ジメチルアミノベンジル)-4-ノニルフェノール]、4, 4'-メチレンビス
 (6-tert-ブチル-2-メチルフェノール)、1, 1-ビス(5-tert-ブチル-4-
 ヒドロキシ-2-メチルフェニル)ブタン、2, 6-ビス(3-tert-ブチル-5-メチル-
 2-ヒドロキシベンジル)-4-メチルフェノール、1, 1, 3-トリス(5-tert-ブチ
 ル-4-ヒドロキシ-2-メチルフェニル)ブタン、1, 1-ビス(5-tert-ブチル-4-
 ヒドロキシ-2-メチル-フェニル)-3-n-ドデシルメルカプトブタン、エチレングリコ
 ールビス[3, 3-ビス(3'-tert-ブチル-4'-ヒドロキシフェニル)酪酸]、ビス(
 3-tert-ブチル-4-ヒドロキシ-5-メチル-フェニル)ジシクロペンタジエン、ビス
 [2-(3'-tert-ブチル-2'-ヒドロキシ-5'-メチルベンジル)-6-tert-ブチ
 ル-4-メチルフェニル]テレフタル酸、1, 1-ビス-(3, 5-ジメチルアミノ-2-ヒド
 ロキシフェニル)ブタン、2, 2-ビス-(3, 5-ジ-tert-ブチル-4-ヒドロキシフ
 ェニル)プロパン、2, 2-ビス-(5-tert-ブチル-4-ヒドロキシ-2-メチルフェ
 ニル)-4-n-ドデシルメルカプトブタン、1, 1, 5, 5-テトラ-(5-tert-ブチル-

4-ヒドロキシ-2-メチルフェニル)ペンタン、2,6-ジ-tert-ブチル-4-メチルフェノール(ブチル化ヒドロキシトルエン(BHT))、2,6-ジ-tert-ブチル-4-エチルフェノール、2,4-ジメチルアミノ-6-tert-ブチルフェノール、2,6-ジ-tert-ブチル-N,N'-ジメチルアミノ-p-クレゾール、2,6-ジ-tert-4-(N,N'-ジメチルアミノメチルフェノール)、ヘブチル3-(3',5'-ジ-ブチル-4'-ヒドロキシフェニル)プロピオン酸、オクチル3-(3',5'-ジ-ブチル-4'-ヒドロキシフェニル)プロピオン酸、ノニル3-(3',5'-ジ-ブチル-4'-ヒドロキシフェニル)プロピオン酸、オクタデシル3-(3',5'-ジ-ブチル-4'-ヒドロキシフェニル)プロピオン酸、2-tert-ブチル-4,6-ジメチルフェノール、2,6-ジ-tert-ブチル-4-n-ブチルフェノール、2,6-ジ-tert-ブチル-4-イソブチルフェノール、2,6-ジシクロペンチル-4-メチルフェノール、2-(1-メチルシクロヘキシル)-4,6-ジメチルフェノール、2,6-ジオクタデシル-4-メチルフェノール、2,4,6-トリシクロヘキシルフェノール、2,6-ジ-tert-ブチル-4-メトキシメチルフェノール、2,6-ジ-ノニル-4-メチルフェノール、2,4-ジメチルアミノ-6-(1'-メチルウンデク-1'-yl)フェノール、2,4-ジメチルアミノ-6-(1'-メチルヘプタデク-1'-イル)フェノール、および2,4-ジメチルアミノ-6-(1'-メチルトリデク-1'-イル)フェノールから選択される。

10

20

30

40

50

【0105】

ある実施形態では、少なくとも1つの抗酸化剤はアルキルチオメチルフェノールおよびヒドロキシル化チオジフェニルエーテルから選択される。ある実施形態では、少なくとも1つの抗酸化剤は4,4'-チオビス(2-メチル-6-tert-ブチルフェノール)、2,2'-チオビス(4-メチル-6-tert-ブチルフェノール)、ビス(3-メチル-4-ヒドロキシ-5-tert-ブチルベンジル)-スルフィド、チオジエチレン-ビス-(3,5-ジ-tert-ブチル-4-ヒドロキシヒドロケイ皮酸)、テトラキス-(メチレン-(3,5-ジ-tert-ブチル-4-ヒドロケイ皮酸))メタン、ビス(3,5-ジ-tert-ブチル-4-ヒドロキシベンジル)-スルフィド、2,4-ジオクチルチオメチル-6-tert-ブチルフェノール、2,4-ジオクチルチオメチル-6-メチルフェノール、2,4-ジオクチルチオメチル-6-エチルフェノール、2,6-ジドデシルチオメチル-4-ノニルフェノール、2,2'-チオビス(4-オクチルフェノール)、4,4'-チオビス(6-tert-ブチル-3-メチルフェノール)、4,4'-チオビス-(3,6-ジ-sec-アミルフェノール)、および4,4'-ビス-(2,6-ジメチルアミノ-4-ヒドロキシフェニル)ジスルフィドから選択される。

【0106】

ある実施形態では、少なくとも1つの抗酸化剤はヒドロキノンおよびアルキル化ヒドロキノンから選択される。ある実施形態では、少なくとも1つの抗酸化剤は2,6-ジ-tert-ブチル-4-メトキシフェノール、2,5-ジ-tert-ブチルヒドロキノン、2,5-ジ-tert-アミルヒドロキノン、2,6-ジフェニル-4-オクタデシルオキシフェノール、2,6-ジ-tert-ブチルヒドロキノン、2,5-ジ-tert-ブチル-4-ヒドロキシアニソール、3,5-ジ-tert-ブチル-4-ヒドロキシアニソール、3,5-ジ-tert-ブチル-4-ヒドロキシフェニルステアリン酸塩、およびビス-(3,5-ジ-tert-ブチル-4-ヒドロキシフェニル)アジピン酸から選択される。

【0107】

ある実施形態では、少なくとも1つの抗酸化剤はO-,N-およびS-ベンジル化合物から選択される。ある実施形態では、少なくとも1つの抗酸化剤は3,5,3',5'-テトラ-tert-ブチル-4,4'-ジヒドロキシジベンジルエーテル、オクタデシル-4-ヒドロキシ-3,5-ジメチルアミノベンジルメルカプト酢酸、トリス-(3,5-ジ-tert-ブチル-4-ヒドロキシベンジル)アミン、ビス(4-tert-ブチル-3-ヒドロキシ-2,6-ジメチルアミノベンジル)ジチオールテレフタル酸、ビス(3,5-ジ-tert-ブチル-4-ヒドロキシベンジル)スルフィド、およびイソオクチル-3,5-ジ-tert-ブチル-4-ヒドロキシベンジルメルカプト酢酸から選択される。

【0108】

ある実施形態では、少なくとも1つの抗酸化剤はヒドロキシベンジル化マロン酸塩から選択される。ある実施形態では、少なくとも1つの抗酸化剤はジオクタデシル-2, 2-ビス-(3, 5-ジ-tert-ブチル-4-ヒドロキシベンジル)-マロン酸塩、ジ-オクタデシル-2-(3-tert-ブチル-4-ヒドロキシ-5-メチルベンジル)-マロン酸塩、ジ-ドデシルメルカプトエチル-2, 2-ビス-(3, 5-ジ-tert-ブチル-4-ヒドロキシベンジル)マロン酸塩、およびビス[4-(1, 1, 3, 3-テトラメチルブチル)フェニル]-2, 2-ビス(3, 5-ジ-tert-ブチル-4-ヒドロキシベンジル)マロン酸塩から選択される。

【0109】

ある実施形態では、少なくとも1つの抗酸化剤はトリアジン化合物から選択される。ある実施形態では、少なくとも1つの抗酸化剤は2, 4-ビス(オクチルメルカプト)-6-(3, 5-ジ-tert-ブチル-4-ヒドロキシアニリノ)-1, 3, 5-トリアジン、2-オクチルメルカプト-4, 6-ビス(3, 5-ジ-tert-ブチル-4-ヒドロキシアニリノ)-1, 3, 5-トリアジン、2-オクチルメルカプト-4, 6-ビス(3, 5-ジ-tert-ブチル-4-ヒドロキシフェノキシ)-1, 3, 5-トリアジン、2, 4, 6-トリス(3, 5-ジ-tert-ブチル-4-ヒドロキシフェノキシ)-1, 2, 3-トリアジン、1, 3, 5-トリス(3, 5-ジ-tert-ブチル-4-ヒドロキシベンジル)イソシアヌル酸、1, 3, 5-トリス(4-tert-ブチル-3-ヒドロキシ-2, 6-ジメチルアミノベンジル)2, 4, 6-トリス(3, 5-ジ-tert-ブチル-4-ヒドロキシフェニルエチル)-1, 3, 5-トリアジン、1, 3, 5-トリス(3, 5-ジ-tert-ブチル-4-ヒドロキシフェニルプロピオニル)-ヘキサヒドロ-1, 3, 5-トリアジン、および1, 3, 5-トリス(3, 5-ジシクロヘキシル-4-ヒドロキシベンジル)イソシアヌル酸から選択される。

【0110】

ある実施形態では、少なくとも1つの抗酸化剤は芳香族ヒドロキシベンジル化合物から選択される。ある実施形態では、少なくとも1つの抗酸化剤は1, 3, 5-トリス-(3, 5-ジ-tert-ブチル-4-ヒドロキシベンジル)-2, 4, 6-トリメチルベンゼン、1, 4-ビス(3, 5-ジ-tert-ブチル-4-ヒドロキシベンジル)-2, 3, 5, 6-テトラメチルベンゼン、および2, 4, 6-トリス(3, 5-ジ-tert-ブチル-4-ヒドロキシベンジル)フェノールから選択される。ある実施形態では、少なくとも1つの抗酸化剤はベンジルホスホン酸から選択される。ある実施形態では、少なくとも1つの抗酸化剤はジメチルアミノ-2, 5-ジ-tert-ブチル-4-ヒドロキシベンジルホスホン酸、ジエチル-3, 5-ジ-tert-ブチル-4-ヒドロキシベンジルホスホン酸、ジオクタデシル3, 5-ジ-tert-ブチル-4-ヒドロキシ3-メチルベンジルホスホン酸、および3, 5-ジ-tert-ブチル-4-ヒドロキシベンジルホスホン酸のモノエチルエステルのカルシウム塩から選択される。ある実施形態では、少なくとも1つの抗酸化剤はアシルアミノフェノールから選択される。ある実施形態では、少なくとも1つの抗酸化剤は4-ヒドロキシラウルアニリド、4-ヒドロキシステアルアニリド、およびオクチルN-(3, 5-ジ-tert-ブチル-4-ヒドロキシフェニル)カルバミン酸から選択される。

【0111】

ある実施形態では、少なくとも1つの抗酸化剤は、メタノール、エタノール、オクタデカノール、1, 6-ヘキサンジオール、1, 9-ノナンジオール、エチレングリコール、1, 2-プロパンジオール、ネオペンチルグリコール、チオジエチレングリコール、ジエチレングリコール、トリエチレングリコール、ペンタエリトール、トリス(ヒドロキシエチル)イソシアヌル酸、N, N'-ビス(ヒドロキシエチル)オキサミド、3-チアウンデカノール、3-チアペンタデカノール、トリメチルヘキサンジオール、トリメチロールプロパン、または4-ヒドロキシメチル-1-ホスファ-2, 6, 7-トリオキサビシクロ[2.2.2]オクタン等の一価または多価アルコールの[3-(3, 5-ジ-tert-ブチル-4-ヒドロキシフェニル)プロピオン酸]のエステル類から選択される。ある実施形態で

10

20

30

40

50

は、少なくとも1つの抗酸化剤は、メタノール、エタノール、オクタデカノール、1,6-ヘキサンジオール、1,9-ノナンジオール、エチレングリコール、1,2-プロパンジオール、ネオペンチルグリコール、チオジエチレングリコール、ジエチレングリコール、トリエチレングリコール、ペンタエリトリール、トリス(ヒドロキシエチル)イソシアヌル酸、N,N'-ビス(ヒドロキシエチル)オキサミド、3-チアウンデカノール、3-チアペンタデカノール、トリメチルヘキサンジオール、トリメチロールプロパン、または4-ヒドロキシメチル-1-ホスファ-2,6,7-トリオキサビシクロ[2.2.2]オクタン等の一価または多価アルコールの(5-tert-ブチル-4-ヒドロキシ-3-メチルフェニル)プロピオン酸のエステル類から選択される。ある実施形態では、少なくとも1つの抗酸化剤は、メタノール、エタノール、オクタデカノール、1,6-ヘキサンジオール、1,9-ノナンジオール、エチレングリコール、1,2-プロパンジオール、ネオペンチルグリコール、チオジエチレングリコール、ジエチレングリコール、トリエチレングリコール、ペンタエリトリール、トリス(ヒドロキシエチル)イソシアヌル酸、N,N'-ビス(ヒドロキシエチル)オキサミド、3-チアウンデカノール、3-チアペンタデカノール、トリメチルヘキサンジオール、トリメチロールプロパン、および4-ヒドロキシメチル-1-ホスファ-2,6,7-トリオキサビシクロ[2.2.2]オクタン等の一価または多価アルコールの1,3-(3,5-ジシクロヘキシル-4-ヒドロキシフェニル)プロピオン酸のエステル類から選択される。ある実施形態では、少なくとも1つの抗酸化剤は、メタノール、エタノール、オクタデカノール、1,6-ヘキサンジオール、1,9-ノナンジオール、エチレングリコール、1,2-プロパンジオール、ネオペンチルグリコール、チオジエチレングリコール、ジエチレングリコール、トリエチレングリコール、ペンタエリトリール、トリス(ヒドロキシエチル)イソシアヌル酸、N,N'-ビス(ヒドロキシエチル)オキサミド、3-チアウンデカノール、3-チアペンタデカノール、トリメチルヘキサンジオール、トリメチロールプロパン、および4-ヒドロキシメチル-1-ホスファ-2,6,7-トリオキサシクロ[2.2.2]オクタン等の一価または多価アルコールの3,5-ジ-tert-ブチル-4-ヒドロキシフェニル酢酸のエステル類から選択される。

10

20

30

40

50

【0112】

適切な抗酸化剤のその他の例示的で非限定的な例として、N,N'-ビス(3,5-ジ-tert-ブチル-4-ヒドロキシフェニルプロピオニル)ヘキサメチレンジアミン、N,N'-ビス(3,5-ジ-tert-ブチル-4-ヒドロキシフェニルプロピオニル)トリメチレンジアミン、およびN,N'-ビス(3,5-ジ-tert-ブチル-4-ヒドロキシフェニルプロピオニル)ヒドラジン等の(3,5-ジ-tert-ブチル-4-ヒドロキシフェニル)プロピオン酸のアミド類等の窒素が挙げられる。適切な抗酸化剤の非限定的な例としてさらに、脂肪族または芳香族亜リン酸塩、チオジプロピオン酸またはチオ二酢酸のエステル類、またはジチオカルバミン酸またはジチオリン酸、2,2,12,12-テトラメチル-5,9-ジヒドロキシ-3,7,1-トリチアミドカンおよび2,2,15,15-テトラメチル-5,12-ジヒドロキシ-3,7,10,14-テトラチアヘキサデカンの塩類が挙げられる。

【0113】

その他の例示的な抗酸化剤の例として、限定されないが、以下の商業の商品名で市販されているものが挙げられる。Irganox(登録商標)L06、Irganox(登録商標)L55、Irganox(登録商標)L57、Irganox(登録商標)L115、Irganox(登録商標)L118、Irganox(登録商標)L134、Irganox(登録商標)L135、Irganox(登録商標)L150、Irganox(登録商標)1010、Irganox(登録商標)1035、Irgalube(登録商標)F20、Na-Lube(登録商標)AO130、Naugalube(登録商標)438L、Na-Lube(登録商標)AO142、Na-Lube(登録商標)AO210、Na-Lube(登録商標)AO242、Vanlube(登録商標)NA、Vanlube(登録商標)SL、Ethanox(登録商標)4701、Ethanox(登録商標)376、Ethanox(登録商標)4716、Ethanox(登録商標)

) 4783、Ethanox (登録商標) 4702、Ethanox (登録商標) 4710、Ethanox (登録商標) 4782J、Ethanox (登録商標) 4727J、Ethanox (登録商標) 4703、およびEthanox (登録商標) 5057等のVanlube (登録商標) (R.T. Vanderbilt社)、Na-Lube (登録商標) (King Industries)、Irganox (登録商標) (BASF)、Irgalube (登録商標) (BASF)、Ethanox (登録商標) (Albermarle)、およびNaugalube (登録商標) (Chemtura)。

【0114】

ある実施形態では、少なくとも1つの抗酸化剤は約0.01%～約5%等の組み合わせまたは全体の組成物の約0～約5重量%を含む。ある実施形態では、少なくとも1つの抗酸化剤は約0.1～約3重量%等の組み合わせまたは全体の組成物の約0～約3重量%を含む。ある実施形態では、少なくとも1つの抗酸化剤は、組み合わせまたは全体の組成物の約0.2、0.4、0.6、0.8、1.0、1.2、1.4、1.6、1.8、2.0、2.2、2.4、2.6、2.8、または3.0重量%の量で存在する。ある実施形態では、少なくとも1つの抗酸化剤は、組み合わせまたは全体の組成物の約1、2、3、4、5、6、7、8、9、10、11、12、13、14、15、16、17、18、19、または20重量%の量で存在する。ある実施形態では、油の酸化安定性は当業者に知られているAOM (メタンの嫌氣的酸化) またはOSI (酸化安定性指数) 法によって測定されてもよい。

10

【0115】

ある実施形態では、組成物はさらに少なくとも1つの極圧剤を含む。ある実施形態では、少なくとも1つの極圧剤は亜リン極圧剤である。ある実施形態では、亜リン極圧剤はリン酸エステル、酸性リン酸エステル、リン酸のアミン塩、酸性リン酸エステルのアミン塩、アミンリン酸塩、塩素化リン酸エステル、亜リン酸エステル、ホスホリル化カルボン酸化合物、ホスホロチオエート、および亜リン酸含有の化合物の金属塩から選択される1つ以上の化合物を含む。ある実施形態では、少なくとも1つの極圧剤はリン酸エステル、酸性リン酸エステル、酸性リン酸エステルのアミン塩、塩素化リン酸エステル、および亜リン酸エステルから選択される1つ以上の化合物を含む。ある実施形態では、少なくとも1つの極圧剤は、アルカノールまたはポリエーテルタイプのアルコールに由来するリン酸および/または亜リン酸から調製される亜リン酸含有のエステルを含む。

20

30

【0116】

例示的なリン酸エステルとして、限定されないが、トリプロピルリン酸塩、トリブチルリン酸塩、トリペンチルリン酸塩、トリヘキシルリン酸塩、トリヘプチルリン酸塩、トリオクチルリン酸塩、トリノニルリン酸塩、トリデシルリン酸塩、トリウンデシルリン酸塩、トリドデシルリン酸塩、トリトリデシルリン酸塩、トリテトラデシルリン酸塩、トリペンタデシルリン酸塩、トリヘキサデシルリン酸塩、トリヘプタデシルリン酸塩、トリオクタデシルリン酸塩、トリオレイルリン酸塩、トリフェニルリン酸塩、トリクレシルリン酸塩、トリキシレニルリン酸塩、クレシルジフェニルリン酸塩、およびキシリルジフェニルリン酸塩が挙げられる。

【0117】

例示的なリン酸エステルとして、限定されないが、モノプロピルリン酸塩、モノブチルリン酸塩、モノペンチルリン酸塩、モノヘキシルリン酸塩、モノヘプチルリン酸塩、モノオクチルリン酸塩、モノノニルリン酸塩、モノデシルリン酸塩、モノウンデシルリン酸塩、モノドデシルリン酸塩、モノトリデシルリン酸塩、モノテトラデシルリン酸塩、モノペンタデシルリン酸塩、モノヘキサデシルリン酸塩、モノヘプタデシルリン酸塩、モノオクタデシルリン酸塩およびモノオレイルリン酸塩、およびリン酸ジアルキルエステル等のリン酸モノアルキルエステルおよびジブチルリン酸塩、ジペンチルリン酸塩、ジヘキシルリン酸塩、ジヘプチルリン酸塩、ジオクチルリン酸塩、ジノニルリン酸塩、ジデシルリン酸塩、ジウンデシルリン酸塩、ジドデシルリン酸塩、ジトリデシルリン酸塩、ジテトラデシルリン酸塩、ジペンタデシ

40

50

ル酸リン酸塩、ジヘキサデシル酸リン酸塩、ジヘプタデシル酸リン酸塩、ジオクタデシル酸リン酸塩およびジオレイル酸リン酸塩等のリン酸ジ(アルキル)アリアルエステルが挙げられる。

【0118】

例示的な酸性リン酸エステルアミン塩の例として、限定されないが、メチルアミン、エチルアミン、プロピルアミン、ブチルアミン、ペンチルアミン、ヘキシルアミン、ヘプチルアミン、オクチルアミン、ジメチルアミノアミン、ジエチルアミン、ジプロピルアミン、ジブチルアミン、ジペンチルアミン、ジヘキシルアミン、ジヘプチルアミン、ジオクチルアミン、トリメチルアミン、トリエチルアミン、トリプロピルアミン、トリブチルアミン、トリペンチルアミン、トリヘキシルアミン、トリヘプチルアミン、トリオクチルアミン等の上述の例示的なアミンの酸性リン酸エステルが挙げられる。

10

【0119】

例示的な塩素化酸性リン酸エステルの例として、限定されないが、トリスジクロロプロピルリン酸塩、トリスクロロエチルリン酸塩、トリスクロロフェニルリン酸塩、およびポリオキシアルキレンビス[ジ(クロロアルキル)]リン酸塩が挙げられる。

【0120】

例示的な亜リン酸エステルの例として、限定されないが、ジブチル亜リン酸塩、ジペンチル亜リン酸塩、ジヘキシル亜リン酸塩、ジヘプチル亜リン酸塩、ジオクチル亜リン酸塩、ジノニル亜リン酸塩、ジデシル亜リン酸塩、ジウンデシル亜リン酸塩、ジドデシル亜リン酸塩、ジオレイル亜リン酸塩、ジフェニル亜リン酸塩、ジクレシル亜リン酸塩、トリブチル亜リン酸塩、トリペンチル亜リン酸塩、トリヘキシル亜リン酸塩、トリヘプチル亜リン酸塩、トリオクチル亜リン酸塩、トリノニル亜リン酸塩、トリデシル亜リン酸塩、トリウンデシル亜リン酸塩、トリドデシル亜リン酸塩、トリオレイル亜リン酸塩、トリフェニル亜リン酸塩、およびトリクレシル亜リン酸塩が挙げられる。

20

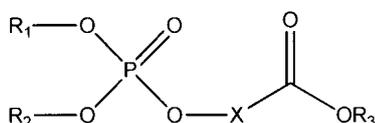
【0121】

例示的な亜リン酸含有のカルボン酸として、限定されないが、式Aに示される化合物が挙げられる。

【0122】

【化8】

30



式A

【0123】

Xはアルキレン残基であり、R₁、R₂、およびR₃は独立して、水素、置換されてもよいアルキル、置換されてもよいシクロアルキル、置換されてもよいシクロアルキルアルキル、置換されてもよいアリアル、置換されてもよいアリアルアルキル、置換されてもよいヘテロアリアル、置換されてもよいヘテロアリアルアルキル、置換されてもよいヘテロシクロアルキル、および置換されてもよいヘテロシクロアルキルアルキルから選択される。

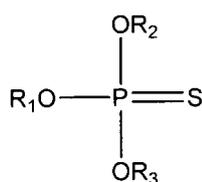
40

【0124】

例示的なホスフォロチオネート化合物として、限定されないが、式Bに示される化合物が挙げられる。

【0125】

【化 9】



式B

10

【0126】

R₁、R₂、およびR₃は独立して、水素、置換されてもよいアルキル、置換されてもよいシクロアルキル、置換されてもよいシクロアルキルアルキル、置換されてもよいアリール、置換されてもよいアリールアルキル、置換されてもよいヘテロアリール、置換されてもよいヘテロアリールアルキル、置換されてもよいヘテロシクロアルキル、および置換されてもよいヘテロシクロアルキルアルキルから選択される。

【0127】

例示的な垂リン酸を含有する化合物のアミン塩として、限定されないが、アルキルアミンまたはリン酸のアルカノールアミン塩、ブチルアミンリン酸塩、プロパノールアミンリン酸塩、およびトリエタノール、モノエタノール、ジブチル、ジメチルアミノ、およびモノイソプロパノールアミンリン酸塩が挙げられる。

20

【0128】

例示的な垂リン酸を含有する化合物の金属塩として、限定されないが、本明細書に記載の垂リン酸化合物の金属塩が挙げられる。ある実施形態では、垂リン酸化合物の金属塩は、垂リン酸化合物の酸性の水素の一部または全体を金属塩基で中和することによって調製される。例示的な金属塩基として、限定されないが、金属酸化物、金属水酸化物、金属炭酸塩、および金属塩化物があり、当該金属はリチウム、ナトリウム、カリウム、ポタジウム、およびセシウム等のアルカリ金属、カルシウム、マグネシウム、およびバリウム等のアルカリ土類金属、並びに亜鉛、銅、鉄、鉛、ニッケル、銀、およびマンガン等の重金属から選択される。

30

【0129】

ある実施形態では、少なくとも1つの極圧剤は1つ以上の硫黄化合物から選択される。ある実施形態では、少なくとも1つの極圧剤はベンジルジスルフィド、ビス-(クロロベンジル)ジスルフィド、ジブチルテトラスルフィド、硫化油および脂肪、硫化グリセリド酸油、硫化脂肪酸、硫化エステル、硫化オレフィン、ジヒドロカルビル(ポリ)スルフィド、チアジアゾール化合物、アルキルチオカルバモイル化合物、アルキルチオカルバミン酸化合物、チオテルペン化合物、ジアルキルチオジプロピオン酸化合物、硫化鉱油、亜鉛ジチオカルバミド酸エステル化合物およびモリブデンジチオカルバミド酸エステル、硫化アルキルフェノール、硫化ジペンテン、硫化テルペン、および硫化ディールスアルダー付加物等のスルフィドおよびポリスルフィドから選択される1つ以上の化合物を含む。その他の例示的な硫化化合物として、限定されないが、垂リン酸スルフィドとテルペンまたはメチルオレイン酸塩の反応生成物等のリン硫化(phosphosulfurized)炭化水素が挙げられる。

40

【0130】

例示的なジヒドロカルビル(ポリ)スルフィドとして、限定されないが、ジベンジルポリスルフィド、ジニルポリスルフィド、ジドデシルポリスルフィド、ジブチルポリスルフィド、ジオクチルポリスルフィド、ジフェニルポリスルフィド、およびジシクロヘキシルポリスルフィドが挙げられる。例示的なチアジアゾール化合物として、限定されないが、2,5-ビス(n-ヘキシルジチオ)-1,3,4-チアジアゾール、2,5-ビス(n-オ

50

クチルジチオ)-1, 3, 4-チアジアゾール、2, 5-ビス(n-ノニルジチオ)-1, 3, 4-チアジアゾール、2, 5-ビス(1, 1, 3, 3-テトラメチルブチルジチオ)-1, 3, 4-チアジアゾール、3, 5-ビス(n-ヘキシルジチオ)-1, 2, 4-チアジアゾール、3, 5-ビス(n-オクチルジチオ)-1, 2, 4-チアジアゾール、3, 5-ビス(n-ノニルジチオ)-1, 2, 4-チアジアゾール、3, 5-ビス(1, 1, 3, 3-テトラメチルブチルジチオ)-1, 2, 4-チアジアゾール、4, 5-ビス(n-ヘキシルジチオ)-1, 2, 3-チアジアゾール、4, 5-ビス(n-オクチルジチオ)-1, 2, 3-チアジアゾール、4, 5-ビス(n-ノニルジチオ)-1, 2, 3-チアジアゾール、および4, 5-ビス(1, 1, 3, 3-テトラメチルブチルジチオ)-1, 2, 3-チアジアゾール等の1, 3, 4-チアジアゾール、1, 2, 4-チアジアゾール、および1, 4, 5-チアジアゾールが挙げられる。

10

【0131】

例示的なアルキルチオカルバモイル化合物として、限定されないが、ビス(ジメチルアミノチオカルバモイル)モノスルフィド、ビス(ジブチルチオカルバモイル)モノスルフィド、ビス(ジメチルアミノチオカルバモイル)ジスルフィド、ビス(ジブチルチオカルバモイル)ジスルフィド、ビス(ジアミルチオカルバモイル)ジスルフィド、およびビス(ジオクチルチオカルバモイル)ジスルフィドが挙げられる。例示的なアルキルチオカルバミド酸塩として、限定されないが、メチレンビス(ジブチルジチオカルバミド酸エステル)およびメチレンビス[ジ(2-エチルヘキシル)ジチオカルバミド酸エステル]が挙げられる。例示的なチオテルペン化合物として、限定されないが、亜鉛ペンタスルフィドとピネンの反応生成物が挙げられる。例示的なジアルキルチオジプロピオン酸として、限定されないが、チオジプロピオン酸ジラウリルおよびジストアリアルチオジプロピオナートが挙げられる。

20

【0132】

ある実施形態では、少なくとも1つの極圧剤は組成物の約0~約25重量%の量で存在する。ある実施形態では、少なくとも1つの極圧剤は組成物の約0~約20、約0~約15、約0~約10、約0~約8、約0~約6、約0~約4、または約0~約2重量%の量で存在する。ある実施形態では、少なくとも1つの極圧剤は約0.1~約3重量%等の組成物の約0~約5重量%の量で存在する。ある実施形態では、少なくとも1つの極圧剤は組成物の約1、2、3、4、5、6、7、8、9、10、11、12、13、14、15、16、17、18、19、または20重量%の量で存在する。ある実施形態では、少なくとも1つの極圧剤は組成物の0.2、0.4、0.6、0.8、1.0、1.2、1.4、1.6、1.8、2.0、2.2、2.4、2.6、2.8、または3.0重量%の量で存在する。

30

【0133】

ある実施形態では、組成物は少なくとも1つの消泡剤を含む。例示的な消泡剤として、限定されないが、ジメチルアミノシリコンおよびフルオロシリコン等のシリコン類、その重合体、ポリメタクリレート、およびペルフルオロアルキルエーテル等のポリアクリル酸塩が挙げられる。ある実施形態では、少なくとも1つの消泡剤は組成物の約0~約25重量%の量で存在する。ある実施形態では、少なくとも1つの消泡剤は組成物の約0~約20、約0~約15、約0~約10、約0~約8、約0~約6、約0~約4、または約0~約2重量%の量で存在する。ある実施形態では、少なくとも1つの消泡剤は組成物の約0.1~約3重量%等の組成物の約0~約5重量%の量で存在する。ある実施形態では、少なくとも1つの消泡剤は組成物の約1、2、3、4、5、6、7、8、9、10、11、12、13、14、15、16、17、18、19、または20重量%の量で存在する。ある実施形態では、少なくとも1つの消泡剤は組成物の約0.2、0.4、0.6、0.8、1.0、1.2、1.4、1.6、1.8、2.0、2.2、2.4、2.6、2.8、または3.0重量%の量で存在する。

40

【0134】

ある実施形態では、組成物は少なくとも1つの抗乳化剤をさらに含む。ある実施形態で

50

は、少なくとも1つの抗乳化剤は、アルキル-ナフタレンスルホン酸塩またはアルキルベンゼンスルホン酸塩等の陰イオン界面活性剤である。ある実施形態では、少なくとも1つの抗乳化剤は、非イオン性である。ある実施形態では、少なくとも1つの抗乳化剤は、非イオン性アルコキシ化アルキルフェノールレジン、酸化ポリエチレン、酸化ポリプロピレン、酸化エチレンのブロック共重合体、または酸化プロピレン等の酸化アルキレンの重合体、油性の酸のエステル、およびポリオキシエチレンソルビタンである。その他の例示的な抗乳化剤として、限定されないが、グリセロール、フェノール、ホルムアルデヒドレジン、ソロキサソ、ポリアミン、およびポリオール等の酸化プロピレンまたは酸化エチレンおよびイニシエータのブロック共重合体が挙げられる。ある実施形態では、重合体は約20～約50%の酸化エチレンを含む。分子量が少ない材料、例えば、アルカリ金属またはジアルキルナフタレンスルホン酸塩のアルカリ土類金属塩は特定の応用でも役に立ち得る。ある実施形態では、少なくとも1つの抗乳化剤は組成物の約0.01重量%～約10重量%、約0.05重量%～約5重量%、または約0.1重量%～約3重量%で存在してもよい。ある実施形態では、少なくとも1つの抗乳化剤は組成物の約1、2、3、4、5、6、7、8、9、または10重量%の量で存在する。ある実施形態では、少なくとも1つの抗乳化剤は組成物の約0.2、0.4、0.6、0.8、1.0、1.2、1.4、1.6、1.8、2.0、2.2、2.4、2.6、2.8、または3.0重量%の量で存在する。

10

【0135】

ある実施形態では、少なくとも1つの添加剤は少なくとも1つの抗菌剤を含む。ある実施形態では、少なくとも1つの抗菌剤は微生物の増殖を抑制する。ある実施形態では、少なくとも1つの抗菌剤は、組成物と適合する任意の抗微生物物質を組成物に混合してもよい。ある実施形態では、抗酸化剤として役に立つ化合物を抗微生物物質として使用してもよい。例えば、ある実施形態では、BHA等のフェノール系抗酸化剤は1つ以上のバクテリア、カビ、ウイルス、および原生動物に対して、いくつかの作用を示す。ある実施形態では、少なくとも1つの抗酸化剤をソルビン酸カリウム、ソルビン酸、およびモノグリセリドから選択される少なくとも1つの抗菌剤と加えてもよい。その他の例示的な抗菌剤として、限定されないが、ビタミンEおよびパルミチン酸アスコルビル、4-(2-ニトロブチル)モルホリン、4,4'-(2-エチル-2-ニトロトリメチレン)ジモルホリンおよびメチレンジモルホリン等のモルホリンベースの化合物が挙げられ、Bioban P-1 487 (商標)、Bioban CS-1135 (商標)、およびKaython (商標) EDC 1.5 (Dow Chemical社によって販売)の名称で市販され使用してもよい。その他の例示的な抗菌剤として、限定されないが、Busan (登録商標) 77 (Buckman Lab Laboratories社、メンフィス、テネシー州によって販売)の名称で販売されている材料、二塩化ポリ(オキシ-1,2-エタンジイル(ジメチルアミノイミノ))-1,2-エタンジイル(ジメチルアミノイミノ))-1,2-エタンジイルを含むものが挙げられる。

20

30

【0136】

ある実施形態では、少なくとも1つの添加剤は少なくとも1つの金属キレート剤および/または少なくとも1つの金属不活性化剤を含む。銅のような金属が存在し得るため、ある実施形態では、組成物は少なくとも1つの金属不活性化剤を含んでいてもよい。例示的な金属不活性化剤として、限定されないが、銅および銅合金不活性化剤等の黄色の金属不活性化剤がある。例示的な金属不活性化剤として、限定されないが、4-または5-アルキルベンゾトリアゾール(例えば、トリアゾール)、4,5,6,7-テトラヒドロベンゾトリアゾールおよび5,5'-メチレンビスベンゾトリアゾール等のベンゾトリアゾールおよびその誘導体、1-[ビス(2-エチルヘキシル)アミノメチル]トリアゾールおよび1-[ビス(2-エチルヘキシル)アミノメチル]ベンゾトリアゾール等のベンゾトリアゾールのマンニッヒ塩基またはトリアゾール、並びに1-(ノニルオキシメチル)ベンゾトリアゾール、1-(1-プトキシエチル)ベンゾトリアゾールおよび1-(1-シクロヘキシルオキシブチル)トリアゾール等のアルコキシアルキルベンゾトリアゾールが挙げられる。

40

50

さらに非限定的な例として、3-アルキル（またはアリール）-1, 2, 4-トリアゾール等の1, 2, 4-トリアゾールおよびその誘導体、並びに1-[ビス(2-エチルヘキシル)アミノメチル]-1, 2, 4-トリアゾール等の1, 2, 4-トリアゾールのマンニヒ塩基、1-(1-ブトキシエチル)-1, 2, 4-トリアゾールおよびアシル化3-アミノ-1, 2, 4-トリアゾール等のアルコキシアルキル-1, 2, 4-トリアゾール、4, 4'-メチレンビス(2-ウンデシル-5-メチルイミダゾール)並びにビス[(N-メチル)イミダゾール-2-yl]カルピノールオクチルエーテル等のイミダゾール誘導体が挙げられる。ある実施形態では、少なくとも1つの金属不活性化剤は、2-メルカプトベンゾチアゾール、2, 5-ジメルカプト-1, 3, 4-チアジアゾールおよびその誘導体、並びに3, 5-ビス[ジ(2-エチルヘキシル)アミノメチル]-1, 3, 4-チアジアゾリン-2-オンから

10
10

選択される。その他の例示的な金属不活性化剤として、サリチリデンプロピレンジアミン、サリチルアミノグアニジンおよびその塩等のアミノ化合物がある。例示的な金属不活性化剤はK-Corr（登録商標）100およびK-Corr（登録商標）NF-200を含む商品名K-Corr（登録商標）(King Industries社)で利用できるものが含まれる。

【0137】

ある実施形態では、組成物は、約0.1重量%~約0.5重量%等の約1重量%以下の量の少なくとも1つの金属不活性化剤を含む。ある実施形態では、組成物は組成物の約0.1、0.2、0.3、0.4、0.5、0.6、0.7、0.8、0.9、または1.0重量%の量の少なくとも1つの金属不活性化剤を含む。ある実施形態では、組成物はアミンおよびフェノール系抗酸化剤および/またはトリアゾール金属不活性化剤の組み合わせ等の添加剤の組み合わせを含む。例示的な組み合わせとして、限定されないが、Irganox（登録商標）L-57抗酸化剤、Irganox（登録商標）L-109抗酸化剤、およびIrgamet（登録商標）-30金属不活性化剤が挙げられ、それぞれCiba-Geigy社（現在BASF）から市販されている。

20
20

【0138】

ある実施形態では、特定の金属不活性化剤パッケージ等の1つ以上の追加の添加剤が、脂肪酸または脂肪酸誘導体若しくは前駆体を含んでいてもよく、組成物の酸価（例えば、総酸数）を増加させてもよい。いかなる具体的な理論にも縛られることはないが、ある実施形態では、組成物の酸価を増加させることが製剤の酸化安定性を低下することになり得ると考えられる。したがって、ある実施形態では、組成物は、遊離脂肪酸等の脂肪酸要素が実質的になく、および/または酸価が小さい。

30
30

【0139】

ある実施形態では、エストリド組成物を調製する方法を記載し、当該方法はエストリド基油を選択し、エストリド基油の酸価を減少させ、低酸のエストリド基油を提供し、および低酸のエストリド基油を少なくとも1つの抗酸化剤と化合することを含む。ある実施形態では、エストリド基油の酸価を減少させ、低酸のエストリド基油を提供することは、当該エストリド基油を少なくとも1つの酸低減剤と接触することを含む。ある実施形態では、少なくとも1つの酸低減剤は例えば、活性炭、ケイ酸マグネシウム（例えば、Magnesol（登録商標））、酸化アルミニウム（例えばアルミナ）、二酸化ケイ素、ゼオライト、塩基性樹脂、およびアニオン交換樹脂の1つ以上等の任意の適切な剤から選択される。ある実施形態では、少なくとも1つのエストリド基油の酸価を約0.1mg KOH/gまたはそれより小さい本明細書に記載のレベルにまで減少させる。ある実施形態では、低酸のエストリド基油と少なくとも1つの抗酸化剤との組み合わせは、ASTM法2272-11を使用する回転圧力容器酸化試験で試験したときに、その他のエストリド基油について本明細書に記載される時間とほぼ同じ時間（約1000時間またはそれ以上）を有する。

40
40

【0140】

ある実施形態では、組成物はさらに少なくとも1つの摩擦調整剤を含む。ある実施形態では、少なくとも1つの摩擦調整剤はアミン-、イミド-、アミド-、および脂肪酸タイプ

50
50

の摩擦調整剤から選択され、それぞれが6～30個の炭素原子を持つ直鎖アルキル基等の6～30個の炭素原子を持つ少なくとも1つのアルキル基を含んでいてもよい。例示的なアミンタイプの摩擦調整剤として、限定されないが、直鎖脂肪族モノアミン、脂肪族アルカノールアミン、および脂肪族ポリアミン等の直鎖または分岐アミン、並びに脂肪族アミンのアルキルエネ酸化物付加物が挙げられる。例示的なイミドタイプの摩擦調整剤として、限定されないが、6～30個または8～18個の炭素原子の炭化水素基を有する基等の1つまたは2つの直鎖または分岐炭化水素基を有するモノ-および/またはビス-スクシンイミド等のスクシンイミドタイプの摩擦調整剤、並びに当該スクシンイミドを1～20個の炭素原子を有するもの等のホウ酸、リン酸、カルボン酸から選択される1つ以上の化合物と反応させることによって、生成されるスクシンイミドが修飾された化合物、並びに硫黄を含有する化合物が挙げられる。例示的なアミドタイプの摩擦調整剤として、限定されないが、直鎖または分岐脂肪酸(7～31個の炭素原子を有するものを含む)およびアンモニアのアミド、脂肪族モノアミン、または脂肪族ポリアミンが挙げられる。

【0141】

ある実施形態では、少なくとも1つの摩擦調整剤は直鎖または分岐鎖脂肪酸、脂肪酸および脂肪族一価脂肪酸または脂肪族多価アルコール等の脂肪酸エステル、当該脂肪酸(マグネシウムおよびカルシウム塩)のアルカリ土類金属塩並びに当該脂肪酸等の亜鉛塩が挙げられる。ある実施形態では、摩擦調整剤は約0.03～約3.0重量%等の組成物の約0.01～約5.0重量%で存在する。ある実施形態では、少なくとも1つの摩擦調整剤は組成物の約0.2、0.4、0.6、0.8、1.0、1.2、1.4、1.6、1.8、2.0、2.2、2.4、2.6、2.8、または3.0重量%の量で存在する。

【0142】

ある実施形態では、組成物はさらに少なくとも1つの粘度調整剤を含む。ある実施形態では、少なくとも1つの粘度調整剤は潤滑油に高温および低温の操作性を提供し、高温では剪断安定性を保持し、一方では低温では適用可能な粘度または流動性を提供する。ある実施形態では、少なくとも1つの粘度調整剤はポリエステル類等の高分子量の炭化水素ポリマー類から選択される1つ以上の化合物を含む。ある実施形態では、少なくとも1つの粘度調整剤は誘導体化され、分散性の特性を加える等のその他の特性または機能を含む。例示的な粘度調整剤として、限定されないが、ポリブテン、ポリイソブチレン(PIB)、エチレンおよびプロピレン共重合体、ポリメタクリレート、メタクリル酸塩共重合体、不飽和ジカルボン酸およびビニール化合物の共重合体、スチレンおよびアクリルエステルのインターポリマー、およびスチレン/イソプレン、スチレン/ブタジエン、およびイソプレン/ブタジエンの部分的に水素化された共重合体、並びにブタジエンおよびイソプレンの部分的に水素化されたホモポリマーが挙げられる。

【0143】

ある実施形態では、組成物は少なくとも1つのポリブテン重合体を含む。ある実施形態では、少なくとも1つのポリブテン重合体はポリ-n-ブテンおよびポリイソブチレンの混合物を含み、C₄オレフィンの重合から生じ、通常は平均的な分子量の数は約300～1500であり、またはポリイソブチレンまたはポリブテンの平均的な分子量の数は約400～1300である。ある実施形態では、ポリブテンおよび/またはポリイソブチレンの平均的な分子量(MW)は約950である。MWはゲル浸透クロマトグラフィーによって測定されてもよい。100%のポリイソブチレンまたは100%のポリ-n-ブテンを含む重合体は、本開示の範囲内および用語「ポリブテン重合体」の意味に落ち着くことを理解されたい。例示的なポリイソブチレンとして、「PIB S1054」があり、そのMWは約950であり、Infineum USA社(リンデン、ニュージャージー州)によって販売されている。

【0144】

ある実施形態では、少なくとも1つのポリブテン重合体はポリブテンおよびポリイソブチレンを含み、ブテン(シスおよびトランス)イソブチレンと

1重量%のブタジエンの混合物を秤量した約6重量%～約50重量%のイソブチレンで

10

20

30

40

50

構成されるC₄オレフィン精製ストリーム(C₄ olefin refinery stream)によって調製される。例えば、少なくとも1つのポリブテン重合体が6~45重量%のイソブチレン、25~35重量%の飽和ブテンおよび15~50重量%の1-および2-ブテンで構成されるC₄ストリームからのルイス酸触媒によって調製されてもよい。ある実施形態では、組成物は少なくとも1つの粘度調整剤の約0重量%~約60重量%または約0重量%~約40重量%等の約0重量%~約80重量%を含む。ある実施形態では、少なくとも1つの粘度調整剤は組成物の約1重量%~約30重量%、約1重量%~約25重量%、または約5重量%~約20重量%の量で存在する。ある実施形態では、少なくとも1つの粘度調整剤は組成物の約0.5、1、1.5、2、2.5、3、3.5、4、4.5、5、5.5、6、6.5、7、7.5、8、8.5、9、9.5、10、11、12、13、14、15、16、17、18、19、20、21、22、23、24、25、30、35、40、45、50、55、60、65、70、75、または80重量%で存在する。

10

【0145】

ある実施形態では、組成物はさらに少なくとも1つの流動点降下剤を含む。例示的な流動点降下剤として、限定されないが、商品名Viscoplex(登録商標)でRohmax社(フィラデルフィア、ペンシルバニア州)から市販されているもの等の(meth)アクリル酸塩を含む酢酸ビニルオリゴマーおよびポリマーおよび/またはアクリルオリゴマーおよびポリマーが挙げられる。ある実施形態では、少なくとも1つの流動点降下剤はViscoplex(登録商標)10-310等の分子量が約200,000のアルキルメタクリル酸塩である。その他の適切な流動点降下剤は、商品名PD-551でFunctional Products社(マケドニア、オハイオ州)から利用できるメタクリル酸塩を含んでいてもよい。ある実施形態では、少なくとも1つの流動点降下剤は約0.2重量%~約3重量%、または約0.4重量%~約2重量%等の約0重量%~約5重量%の組成物に存在する。ある実施形態では、少なくとも1つの我々が使用する流動点降下剤は組成物の約1、2、3、4、または5重量%の量で存在する。ある実施形態では、少なくとも1つの流動点降下剤は組成物の約0.2、0.4、0.6、0.8、1.0、1.2、1.4、1.6、1.8、2.0、2.2、2.4、2.6、2.8、または3.0重量%の量で存在する。

20

【0146】

ある実施形態では、組成物は少なくとも1つの着色剤を含む。ある実施形態では、少なくとも1つの着色剤は染料および顔料から選択される。ある実施形態では、食物添加物のような市販されているあらゆる周知の染料および顔料を使用することができる。ある実施形態では、染料および顔料は油溶性の染料および顔料から選択されてもよい。ある実施形態では、少なくとも1つの着色剤は約1ppmより小さい少量で組成物に存在する。

30

【0147】

ある実施形態では、組成物はエストリド基油を含む。ある実施形態では、組成物はエストリド基油と少なくとも1つの抗酸化剤との組み合わせを含む。ある実施形態では、組成物および/または組み合わせはASTM法2272-11を使用する回転圧力容器酸化試験で試験したときに、時間が少なくとも200分かかかる。ある実施形態では、組成物および/または組み合わせはASTM法2272-11を使用する回転圧力容器酸化試験で試験したときに、時間が少なくとも300分かかかる。ある実施形態では、組成物および/または組み合わせはASTM法2272-11を使用する回転圧力容器酸化試験で試験したときに、時間が少なくとも400分かかかる。ある実施形態では、組成物および/または組み合わせはASTM法2272-11を使用する回転圧力容器酸化試験で試験したときに、時間が少なくとも420、440、460、または480分もかかる。ある実施形態では、組成物および/または組み合わせはASTM法2272-11を使用する回転圧力容器酸化試験で試験したときに、時間が少なくとも500、520、540、560、580、600、620、640、660、680、700、720、740、760、780、800、820、840、860、880、900、920、940、960、また

40

50

は 980 分かかる。ある実施形態では、組成物および/または組み合わせは ASTM 法 272-11 を使用する回転圧力容器酸化試験で試験したときに、時間が 1000、1100、1200、1300、1400、または 1500 分もかかる。

【0148】

ある実施形態では、組成物および/または組み合わせの酸化開始の温度は、動的 O₂ 条件下で非等温加圧示差走査熱量計によって測定するときに少なくとも 200 である。ある実施形態では、組成物および/または組み合わせの酸化開始の温度は動的 O₂ 条件下で非等温加圧示差走査熱量計によって測定するときに少なくとも 205、210、215、220、225、230、235、240、245、250、255、260、265、270、275、280、285、290、295、300、305、310、315、320、または 325 にもなる。

10

【0149】

ある実施形態では、組成物は、ポリアルファオレフィン (PAO)、ポリオールエステル、ポリアルキレングリコール (PAG)、油性ポリアルキレングリコール (OSP)、鉱油 (グループ I、II、および III)、植物および動物ベースの油 (例えば、モノ、ジ-、およびトリグリセリド) 等の合成エステル、並びに脂肪酸エステルから選択される少なくとも 1 つのエストリド基油および少なくとも 1 つの他の基油の共混合を含む。ある実施形態では、組成物は少なくとも 1 つのエストリド基油および少なくとも 1 つの OSP を含む。ある実施形態では、OSP はアルコールを混合したブチレンオキシドとプロピレンオキシドのフィードと反応させることから調製される。ある実施形態では、アルコールは 1 つ以上の C₈ ~ C₂₀ アルコール類から選択される。ある実施形態では、ブチレンオキシドとプロピレンオキシドの比は約 3 : 1 ~ 約 1 : 3 である。ある実施形態では、少なくとも 1 つの OSP は高まった加水分解安定性をエストリド含有組成物に提供してもよい。例示的な OSP として、限定されないが、Dow 社による商品名 UCON (商標) で販売されているものがある。

20

【0150】

本開示はさらに式 I、II、および III に記載のエストリドを作成する方法に関する。実施例の方法によって、不飽和脂肪酸を有機酸に反応させることおよび得られる遊離酸エストリドをエステル化することを以下のスキーム 1 および 2 に、説明し検討する。反応物を説明するために使用される具体的な式は式 I および III に記載の化合物の合成に対応する。しかしながら、不飽和の反応部位と共に R₃ および R₄ に対応する構造を有する化合物を使用して、式 II に記載の化合物の合成に方法を等しく適用する。

30

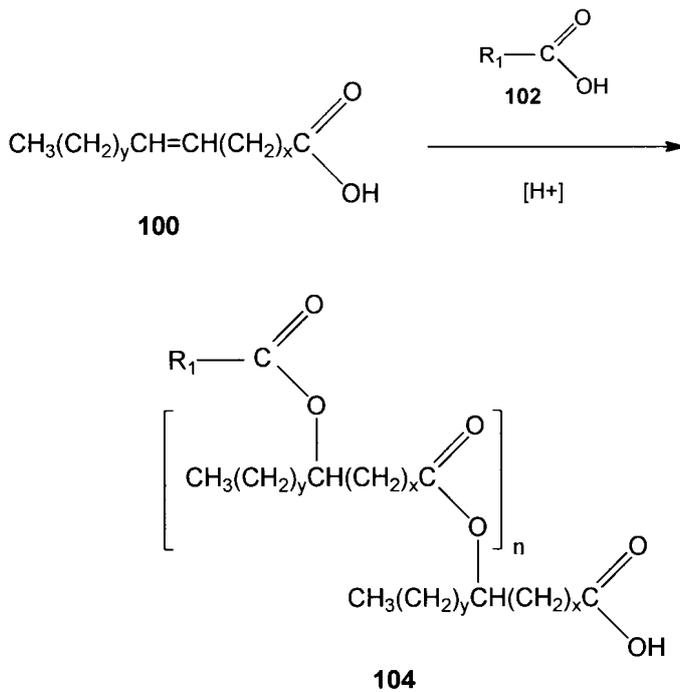
【0151】

以下に説明されるように、化合物 100 は本明細書に記載のエストリド化合物を調製するための基本として提供してもよい不飽和脂肪酸を示す。

スキーム 1

【0152】

【化 1 0】



10

20

【0 1 5 3】

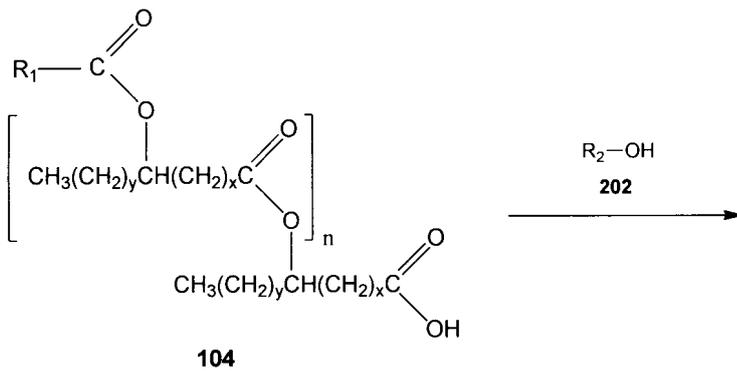
スキーム 1 にて、 x はそれぞれ、独立して 0 ~ 20 から選択される整数であり、 y はそれぞれ、独立して 0 ~ 20 から選択される整数であり、 n は 1 より大きいまたは等しい整数であり、 R_1 は飽和または不飽和の、分岐または非分岐の置換されてもよいアルキルであり、不飽和脂肪酸 100 は化合物 102 および陽子源からの陽子と結合し、遊離酸エステル 104 を形成してもよい。ある実施形態では、化合物 102 は含まれず、不飽和脂肪酸 100 は酸性条件に単独で曝露され、遊離酸エステル 104 を形成してもよく、 R_1 であれば不飽和アルキル基を示すだろう。ある実施形態では、化合物 102 が反応に含まれるならば、 R_1 は飽和または不飽和のおよび分岐または非分岐の 1 つ以上の置換されてもよいアルキル残基を示してもよい。いかなる適切なプロトン源も組み込まれて遊離酸エステル 104 の形成を触媒してもよく、限定されないが、同種の酸類および/または塩酸のような強酸、硫酸、過塩素酸、硝酸、トリフリン酸等が挙げられる。

30

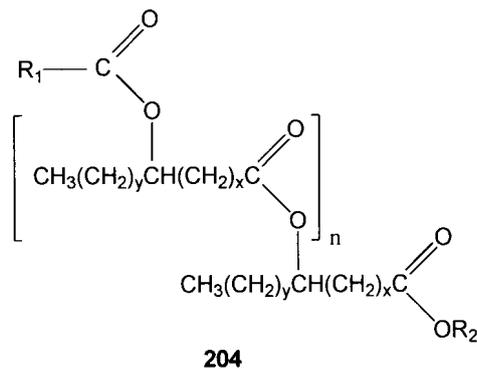
スキーム 2

【0 1 5 4】

【化 1 1】



10



20

【 0 1 5 5】

同様に、スキーム 2 にて、 x はそれぞれ、独立して 0 ~ 20 から選択される整数であり、 y はそれぞれ、独立して 0 ~ 20 から選択される整数であり、 n は 1 より大きいまたは等しい整数であり、 R_1 および R_2 はそれぞれ飽和または不飽和の、分岐または非分岐の置換されてもよいアルキルであり、遊離酸エステル 104 は、エステル化されたエステル 204 を得るために、アルコール 202 で酸触媒還元等の当業者に周知の任意の適切な方法によってエステル化されてもよい。その他の例示的な方法として、 BF_3 等のルイス酸触媒を使用する方法等の他のタイプのフィッシャーエステル合成反応を挙げてもよい。

30

【 0 1 5 6】

以下の全実施例では、記載の化合物は単独、混合、またはその他の化合物、組成物、および / または材料と組み合わせても役に立つ。

【 0 1 5 7】

本明細書に記載の新規化合物を得る方法は当業者に明白であり、適切な手順は例えば、以下の実施例および本明細書に記載の参考文献に記述される。

【実施例】

40

【 0 1 5 8】

分析方法

【 0 1 5 9】

核磁気共鳴： $CDCl_3$ を溶媒として使用して絶対周波数が 300 K で 500 . 113 MHz の Bruker Avance 500 分光計を使用して、NMR スペクトルを集めた。化学シフトをテトラメチルシランから百万分の一として報告した。脂肪酸の間の二級のエステル結合の形成をエストリドの形成を指示しながら、ピークが約 4 . 84 ppm の 1H NMR で確かめた。

【 0 1 6 0】

エストリド数 (EN) : EN を GC 分析によって測定した。組成物の EN は特に組成物

50

に存在する任意のエストリド化合物の EN の特徴を意味することを理解されたい。したがって、具体的な EN を有するエストリド組成物はまた、天然または合成添加剤、その他の非エストリド基油、脂肪酸エステル、例えばトリグリセリド類および / または脂肪酸類を含んでいてもよいが、本明細書に使用される EN は、他に指示されない限り、エストリド組成物のエストリド画分についての値を意味する。

【 0 1 6 1 】

ヨウ素価 (I V) : ヨウ素価は油の総不飽和の程度の測定値である。 I V は油試料の 1 グラムあたりに吸収されるヨウ素のセンチグラムの用語で表される。そのため、油のヨウ素価が高いほど油の不飽和のレベルが高い。 I V は G C 分析によって測定および / または推定されてもよい。組成物が式 I、 I I、および I I I に記載のエストリドより不飽和化合物を含む場合、エストリドを組成物に存在するその他の不飽和化合物から分離してから成分たるエストリドのヨウ素価を測定する。例えば、組成物が不飽和脂肪酸または不飽和脂肪酸を含むトリグリセリドを含むならば、組成物に存在するエストリドから分子され、1 つ以上のエストリドについてのヨウ素価を測定することができる。

10

【 0 1 6 2 】

酸価 : 酸価は油に存在する総酸の測定値である。酸価は当業者に周知の任意の滴定法によって測定されてもよい。例えば、酸価は油の所与の試料を中和するために必要とされる K O H の量によって特定されてもよく、よって油の m g K O H / g で表されてもよい。

【 0 1 6 3 】

ガスクロマトグラフィー (G C) : G C 分析を実施し、エストリドのエストリド数 (E N) およびヨウ素価 (I V) を評価する。当該解析は水素炎イオン化型分析計および S P - 2 3 8 0 3 0 m x 0 . 2 5 m m (内径) カラムに加えてオートサンブラ / インジェクタを装備した A g i l e n t 6 8 9 0 N シリーズガスクロマトグラフを使用して実施される。

20

【 0 1 6 4 】

分析のパラメータは以下の通りである。 1 4 . 9 9 p s i のヘリウム頭部圧力で 1 . 0 m L / 分のカラムフロー。 5 0 : 1 の分割比。 2 0 / 分で 1 2 0 ~ 1 3 5 、 7 / 分で 1 3 5 ~ 2 6 5 、 2 6 5 で 5 分間保持されるようにプログラムされたランプ。 2 5 0 に設定されたインジェクタおよび検出温度。

【 0 1 6 5 】

G C による E N および I V の測定 : これらの分析を行うために、エストリド試料の脂肪酸の要素を M e O H と反応させ、エストリド結合がかつて存在していた部位のヒドロキシ基を残す方法によって脂肪酸メチルエステル類を形成する。脂肪酸メチルエステル類の標準を最初に分析し、溶出時間を確立する。

30

【 0 1 6 6 】

試料の調製 : 試料を調製するために、 1 0 m g のエストリドをバイアル中 0 . 5 m L の 0 . 5 M K O H / M e O H と結合し、 1 0 0 で 1 時間加熱した。次に、 1 . 5 m L の 1 . 0 M H ₂ S O ₄ / M e O H を加え、 1 0 0 で 1 5 分間加熱し、その後、室温まで冷却した。 1 m L の H ₂ O および 1 m L のヘキサンをバイアルに加え、得られる液相をじっくり混合した。層を 1 分間相分離した。底部の H ₂ O 層を除去し捨てた。少量の乾燥剤 (無水 N a ₂ S O ₄) を有機層に加え、その後、有機層を 2 m L のクランプキャップバイアルに移し、分析した。

40

【 0 1 6 7 】

E N の計算 : ヒドロキシ脂肪酸の百分率を非ヒドロキシ脂肪酸の百分率で割ったものとして E N を測定した。例として、二量体エストリドはヒドロキシ官能基を含む脂肪酸の半分であり、ヒドロキシル官能基を欠いた残り半分である。そのため、 E N は 5 0 % のヒドロキシ脂肪酸を 5 0 % の非ヒドロキシ脂肪酸で割ったものとなり、 E N 値 1 は、キャップしている脂肪酸と二量体の塩基脂肪酸との間の単一のエストリド結合に対応する。

【 0 1 6 8 】

I V の計算 : ヨウ素価は A S T M 法 D 9 7 (A S T M I n t e r n a t i o n a l 社

50

、コンショホッケン、ペンシルバニア州)に基づく以下の等式によって推定される。

【数 1】

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

【0169】

A_f = 試料中の脂肪化合物の画分

MW_i = 253.81、二重結合に加えられた2つのヨウ素原子の原子量

db = 脂肪化合物上の二重結合の数

MW_f = 脂肪化合物の分子量

10

【0170】

本明細書に記載の例示的なエストリド化合物および組成物の特性を以下の実施例および表に識別した。

【0171】

その他の計測値：他に記載されることを除いて、流動点はASTM法D97-96aによって測定され、曇点はASTM法D2500によって測定され、粘度/動粘度はASTM法D445-97によって測定され、粘度係数はASTM法D2270-93(1998年に再承認)によって測定され、特定の重力はASTM法D4052によって測定され、発火点および引火点はASTM法D92によって測定され、蒸発損失はASTM法D5800によって測定され、蒸気圧はASTM法D5191によって測定され、回転圧力容器酸化試験はASTM法2272-11によって測定され、および急性水性毒性は経済協力開発機構(OECD)203によって測定された。

20

【0172】

実施例1

【0173】

酸性触媒反応を50ガロンのPfaudler RTシリーズのガラスライニング反応装置(glass-lined reactor)中で行った。オレイン酸(65Kg、OL700、Twin Rivers)を70%の過塩素酸(992.3mL、Aldrichカタログ番号244252)と共に反応装置に加え、連続してかき混ぜながら、真空下(10torr abs(絶対圧Torr; 1torr = ~1mmHg))で24時間、60 に加熱した。24時間後、真空を放出した。2-エチルヘキサノール(29.97Kg)を反応装置に加え、真空を元に戻した。反応物を4時間以上、同じ条件(60、10torr abs)にし続けた。その時間、KOH(645.58g)を90%のエタノール/水(5000mL、容量で90%のEtOH)に溶解し、反応装置に加え、酸をクエンチした。溶液を約30分間放冷した。反応装置の内容物をアキュムレーターに1ミクロン(μ)のフィルターに通して吸い上げ、塩を濾去した。水をその後アキュムレーターに加え、油を洗浄した。2つの液相を約1時間完全に一緒に混ぜ合わせた。溶液を約30分間相分離した。水層を排出し、処分した。有機層を1 μ のフィルターによって反応装置に再度吸い上げた。エタノールおよび水がすべて溶液から蒸留しなくなるまで、反応装置を真空下(絶対圧10torr)で60 に加熱した。反応装置を真空下(10torr abs)で100 に加熱し、2-エチルヘキサノールが溶液から蒸留しなくなるまで、当該温度を維持した。残りの材料を、約12ミクロン(0.012torr)の絶対圧下200 で、マイヤーズ15遠心分離蒸留(Myers 15 Centrifugal Distillation)を使用して蒸留し、エストリド(実施例1)に残っている一価エステル材料を残らず除去した。データを以下表1および8に報告する。

30

40

【0174】

実施例2

50

【0175】

酸性触媒反応を50ガロンのPfaudler RTシリーズのガラスライニング反応装置(glass-lined reactor)中に行った。オレイン酸(50Kg、OL 700、Twin Rivers)およびホールカットのココナッツ脂肪酸(18.754Kg、TRC 110、Twin Rivers)を反応装置に70%の過塩素酸(1145mL、Aldrich カタログ番号244252)と一緒に加え、連続してかき混ぜながら、真空下(10 torr abs)で24時間、60 に加熱した。24時間後、真空を放出した。2-エチルヘキサノール(34.58Kg)反応装置に加え、真空を元に戻した。反応物を4時間以上、同じ条件(60、10 torr abs)にし続けた。その時間、KOH(744.9g)を90%のエタノール/水(5000mL、容量で90%のEtOH)に溶解し、反応装置に加え、酸をクエンチした。溶液を約30分間放冷した。反応装置の内容物をアキュムレーターに1ミクロン(μ)のフィルターに通して吸い上げ、塩を濾去した。水をその後アキュムレーターに加え、油を洗浄した。2つの液相を約1時間完全に一緒に混ぜ合わせた。溶液を約30分間相分離した。水層を排出し、処分した。有機層を1 μ のフィルターによって反応装置に再度吸い上げた。エタノールおよび水がすべて溶液から蒸留しなくなるまで、反応装置を真空下(絶対圧10 torr)で60 に加熱した。反応装置を真空下(10 torr abs)で100 に加熱し、2-エチルヘキサノールが溶液から蒸留しなくなるまで、当該温度を維持した。残りの材料を、約12ミクロン(0.012 torr)の絶対圧下200 で、マイヤーズ15遠心分離蒸留(Myers 15 Centrifugal Distillation)を使用して蒸留し、エストリド(実施例2)に残っている一価エステル材料を残らず除去した。データを以下表2および7に報告する。

10

20

30

【0176】

実施例3

【0177】

実施例1(例1)で発生されたエストリドをマイヤーズ15遠心分離蒸留(Myers 15 Centrifugal Distillation)の蒸留条件に、約12ミクロン(0.012 torr)の絶対圧下で、300 で供した。このことにより、最初の蒸留物はEN平均がもっと低く(例3A)、蒸留残渣はEN平均がもっと高かった(例3B)。データを以下表1および8に報告する。

30

【0178】

【表1】

エストリド素材	EN	流動点 (°C)	ヨウ素価 (cg/g)
例3A	1.35	-32	31.5
例1	2.34	-40	22.4
例3B	4.43	-40	13.8

40

【0179】

実施例4

【0180】

実施例2(例2)で発生されたエストリドをマイヤーズ15遠心分離蒸留(Myers 15 Centrifugal Distillation)の蒸留条件に、約12ミクロン(0.012 torr)の絶対圧下で、300 で供した。このことにより、最初の蒸留物はEN平均がもっと低く(例4A)、蒸留残渣はEN平均がもっと高かった(例4B)。データを以下表2および7に報告する。

【0181】

50

【表 2】

エストリド素材	EN	流動点 (°C)	ヨウ素価 (cg/g)
例4A	1.31	-30	13.8
例2	1.82	-33	13.2
例4B	3.22	-36	9.0

10

【0182】

実施例 5

【0183】

実施例 1 に記載の方法によって產生されるエストリドを、温度範囲が約 0 ~ 約 710 で、1 atm (気圧) で蒸留条件 (ASTM D-6352) に供し、高い温度で 10 個の異なるエストリドのカットを回収した。各カットの試料から蒸留された材料の量および蒸留された (回収された) 各カットの温度を以下表 3 に報告する。

【0184】

【表 3】

20

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

30

【0185】

実施例 6

【0186】

実施例 2 に記載の方法によって產生されるエストリドを、温度範囲が約 0 ~ 約 730 で、1 atm で蒸留条件 (ASTM D-6352) に供し、10 個の異なるエストリドのカットを回収した。各カットの試料から蒸留された材料の量および蒸留され回収された各カットの温度を以下表 4 に報告する。

40

【0187】

【表 4】

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

10

【0188】

実施例 7

【0189】

エストリド基油 4 B (実施例 4 より) を、温度範囲が約 0 ~ 約 730 で、1 a t m で蒸留条件 (A S T M D - 6 3 5 2) に供し、9 個の異なるエストリドカットを回収した。各カットの試料から蒸留された材料の量および蒸留され回収された各カットの温度を以下表 5 a に報告する。

20

【0190】

【表 5】

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

30

【0191】

実施例 8

【0192】

実施例 1 に使用される 2 - エチルヘキサノールエステル化アルコールを様々なその他のアルコール類に置き換えたことを除き、実施例 1 に記載の方法にしたがってエストリドを作成した。エステル化のために使用するアルコール類を以下表 5 b に識別した。得られるエストリドの特性を表 9 に記載する。

40

【0193】

【表 6】

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

10

20

【 0 1 9 4 】

実施例 9

【 0 1 9 5 】

2-エチルヘキサノールエステル化アルコールをブタノールに置き換えたことを除き、実施例 2 に記載の方法にしたがってエストリドを作成した。得られるエストリドの特性を表 9 に記載する。

【 0 1 9 6 】

実施例 10

30

【 0 1 9 7 】

2-エチルヘキサノールエステル化アルコールを様々なその他のアルコール類に置き換えたことを除き、式 I、II、および III のエストリドを実施例 1 および 2 に記載の方法にしたがって調製する。エステル化に使用されるアルコール類を以下表 6 に識別した。以下に列挙されたものを含む使用されるエステル化アルコール類は飽和または不飽和の、分岐または非分岐の、またはメチル、エチル、プロピル、イソプロピル、ブチル、イソブチル、sec-ブチル、tert-ブチル、ペンチル、イソペンチル、ネオペンチル、ヘキシル、イソヘキシル等から選択される 1 つ以上のアルキル基に置換され、R₂ 位で分岐または非分岐残基を形成してもよい。エステル化アルコール類と R₂ 置換基の組み合わせの例を以下表 6 に記載する。

40

【 0 1 9 8 】

【表 7】

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

10

20

30

【 0 1 9 9 】

【表 8】

特性	添加剤	ASTM法	例4A	例2	例4B
色	なし	-	白金色	琥珀色	琥珀色
比重(15.5℃)、g/ml	なし	D 4052	0.897	0.904	0.912
40℃、cStでの動粘度	なし	D 445	32.5	65.4	137.3
100℃、cStでの動粘度	なし	D 445	6.8	11.3	19.9
粘度係数	なし	D 2270	175	167	167
流動点、℃	なし	D 97	-30	-33	-36
曇点、℃	なし	D 2500	-30	-32	-36
引火点、℃	なし	D 92	278	264	284
発火点、℃	なし	D 92	300	300	320
蒸発損失(NOACK)、重量%	なし	D 5800	1.9	1.4	0.32
リード蒸気圧(RVP)、psi	なし	D 5191	≈ 0	≈ 0	≈ 0

40

【 0 2 0 0 】

【表 9】

特性	添加剤	ASTM法	例3A	例1	例3B
色	なし	-	白金色	琥珀色	琥珀色
比重(15.5°C)、g/ml	なし	D 4052	0.897	0.906	0.917
40°C、cStでの動粘度	なし	D 445	40.9	91.2	211.6
100°C、cStでの動粘度	なし	D 445	8.0	14.8	27.8
粘度係数	なし	D 2270	172	170	169
流動点、°C	なし	D 97	-32	-40	-40
曇点、°C	なし	D 2500	-32	-33	-40
引火点、°C	なし	D 92	278	286	306
発火点、°C	なし	D 92	300	302	316
蒸発損失(NOACK)、重量%	なし	D 5800	1.4	0.8	0.3
リード蒸気圧(RVP)、psi	なし	D 5191	≈ 0	≈ 0	≈ 0

【0201】

【表 10】

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

【0202】

実施例 11

【0203】

様々な酸価を有する飽和および不飽和エステルにいくつかの腐食および沈着試験を行った。これらの試験は、いくつかの金属について高温腐食ベンチ試験 (HTCBT)、ASTM D 130 腐食試験、およびピストン沈着物を相関するための MHT-4 TEOST (ASTM D 7097) が挙げられる。酸価の高い (0.67 mg KOH/g) 試験されるエステルは、例 1 および例 4 A (以下例 1* および例 4 A*) を産生するための実施例 1 および 4 に記載される方法を使用して産生する。酸価の低い (0.08 mg KOH/g) 試験されるエステルは、例 1 および例 4 A を産生するための実施例 1 および 4 に記載される方法を使用して産生するが、ただし、粗の遊離酸エステルをワークアップし、連続してかき混ぜながら、 $\text{BF}_3 \cdot \text{OEt}_2$ (0.15 当量; ディーンスタークトラップ中、真空下 80 で 12 時間エステルおよび 2-EH と反応 (10 torr abs) でエステル化する前に精製し、粗反応生成物 H_2O で 4 回洗浄し、洗浄した反応生成物を真空下 (10 torr abs) で 1 時間 140 に加熱することによって、過剰な 2-EH を除去する (以下例 4 A #)。IV が 0 のエステルを炭素が組み込まれた 10

重量%のパラジウムによって、圧力のかかった水素雰囲気(200psig)下で、75で3時間水素化した(以下例4A*Hおよび例4A#H)。腐食および沈着試験をDexos(商標)添加剤パッケージで実施した。結果を鉱油標準と比較した。

【0204】

【表11】

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

10

20

【0205】

実施例12

【0206】

実施例1で産生されるエストリドの「易」および「究極」生分解性を標準OECDの方法にしたがって試験した。OECD生分解性の結果を以下表11に記載する。

【0207】

【表12】

	301D 第28日目 (分解される割合%)	302D アッセイ (分解される割合%)
カノーラ油	86.9	78.9
実施例1の素材	64.0	70.9

30

40

【0208】

実施例13

【0209】

例1のエストリド素材(実施例1より)を急性水性毒性についてのOECD203下で試験した。試験は、濃度範囲が5,000mg/L~50,000mg/Lである場合には死亡がないことが報告されたため、エストリドには毒性がないことを示した。

【0210】

実施例14

【0211】

反応を最初に41.25Kgのオレイン酸および27.50Kgのホールカットのココナッツ脂肪酸で負荷することを除き、エストリドを実施例2に記載の方法にしたがって調製した。得られるエストリドの特性を以下表12に記載する。

【0212】

実施例15

【0213】

実施例14で産生されたエストリドを約12ミクロン(0.012torr)の絶対圧

50

下300 で、マイヤーズ15遠心分離蒸留 (Myers 15 Centrifugal Distillation) の蒸留条件下に供した。これにより、粘度がもっと低い最初の蒸留物 (例15A)、および粘度がもっと高い蒸留物の残渣 (例15B) となった。得られるエストリドの特性を以下表12に記載する。

【0214】

【表13】

エストリド素材	EN	酸価 (mg KOH/g)
例15A	1.31	>0.5
例14	1.86	>0.5
例15B	2.94	>0.5

10

【0215】

実施例16

【0216】

エストリドを実施例14および15に記載の方法にしたがって調製し、例14、例15A、および例15Bのエストリド生成物を提供し、次に塩基アニオン交換樹脂洗浄に供し、エストリドの酸価を低くし、別々にエストリド生成物 (1当量) のそれぞれを、30ガロンの (羽根車が装備された) スレンレス鋼反応装置に10重量%のAmberlite (商標) IRA-402樹脂と一緒に加えた。混合物を4~6時間混ぜ合わせ、羽根車の先端速度を約1200ft/分とほぼ同じに操作した。混ぜ合わせた後、エストリド/樹脂混合物を濾過し、回収した樹脂を取って置いた。得られる低酸のエストリドの特性を以下表13に記載し、例14*、例15A*、および例15B*と標識される。

20

【0217】

実施例17

【0218】

エストリドを実施例15に記載の方法にしたがって調製した。得られる例15Aのエストリドを次に、炭素が組み込まれた10重量%のパラジウムによって、圧力のかかった水素雰囲気下で、75 で3時間水素化した。(例17)。水素化された例17エストリドを、実施例16に記載の方法にしたがって、塩基アニオン交換樹脂洗浄に供し、低酸のエストリドを提供した。(例17*)。得られる低酸の例17*のエストリドの特性を以下表13に記載する。

30

【0219】

【表 1 4】

特性	添加剤	ASTM法	例15A*	例17*	例14*	例15B*
色	なし	-	白金色	白金色	琥珀色	琥珀色
比重(15.5°C)、g/ml	なし	D 4052	0.897	0.897	-	0.912
40°C、cStでの動的粘度	なし	D 445	35.3	35.3	52.3	137.3
100°C、cStでの動的粘度	なし	D 445	7.2	7.2	9.6	19.9
粘度係数	なし	D 2270	172	172	170	167
ヨウ素価	なし	(GC、推定)	13	0	12	7
流動点、°C	なし	D 97	-30	-21	-36	-36
曇点、°C	なし	D 2500	-27	-16	-29	-33
引火点、°C	なし	D 92	280	280	280	284
発火点、°C	なし	D 92	300	300	300	320
蒸発損失(NOACK)、重量%	なし	D 5800	1.9	1.9	-	1.1
銅腐食	なし	D 130	1A	1A	1A	1A
酸価、mg KOH/g	なし	D 664	<0.10	<0.10	<0.10	<0.10

10

20

【0 2 2 0】

実施例 1 8

【0 2 2 1】

エストリドを上述の方法にしたがって調製した。様々な抗酸化剤および抗酸化剤を含有する添加剤パッケージを得られるエストリドに加えた。エストリド基油中の抗酸化剤および/または添加剤パッケージの溶解に影響を与える必要がある場合に、加熱し攪拌した。得られる調合されたエストリドの酸化安定性に回転圧力容器酸化安定性試験(RPVOT)-ASTM 2272-11を150で行った。様々な製剤の結果を、いくつかの非エストリド基油製剤についての比較試験の結果と共に、以下表 1 4 に記載する。

【0 2 2 2】

30

【表 15 - 1】

製剤 番号	基油 (重量%)	フェノール系抗酸化剤 [商品名] (重量%)	アミン抗酸化剤 [商品名] (重量%)	RPVOT ASTM 2272-11 (分)
1	例17* エストリド (100)	--	--	28
2	例17* エストリド (99.5)	2,6-ジ- <i>t</i> -ブチルフェノール [Na-Lube(登録商標)A0-210] (0.5)	--	432
3	例17* エストリド (99)	2,6-ジ- <i>t</i> -ブチルフェノール [Na-Lube(登録商標)A0-210] (1)	--	521
4	例17* エストリド (99.5)	--	ノニル化ジフェニルアミン [Na-Lube(登録商標)A0-130] (0.5)	1245
5	例17* エストリド (99)	--	ノニル化ジフェニルアミン [Na-Lube(登録商標)A0-130] (1)	1194
6	例17* エストリド (99.5)	2,6-ジ- <i>t</i> -ブチルフェノール [Na-Lube(登録商標)A0-210] (0.25)	ノニル化ジフェニルアミン [Na-Lube(登録商標)A0-130] (0.25)	1268
7	例17* エストリド (99.25)	2,6-ジ- <i>t</i> -ブチルフェノール [Na-Lube(登録商標)A0-210] (0.375)	ノニル化ジフェニルアミン [Na-Lube(登録商標)A0-130] (0.375)	1423
8	例17* エストリド (99)	2,6-ジ- <i>t</i> -ブチルフェノール [Na-Lube(登録商標)A0-210] (0.5)	ノニル化ジフェニルアミン [Na-Lube(登録商標)A0-130] (0.5)	1464
9	例17* エストリド (98.75)	2,6-ジ- <i>t</i> -ブチルフェノール [Na-Lube(登録商標)A0-210] (0.625)	ノニル化ジフェニルアミン [Na-Lube(登録商標)A0-130] (0.625)	1460
10	例17* エストリド (98)	2,6-ジ- <i>t</i> -ブチルフェノール [Na-Lube(登録商標)A0-210] (1)	ノニル化ジフェニルアミン [Na-Lube(登録商標)A0-130] (1)	1231
11	例17* エストリド (99)	アルキル3-(3',5'-ジ- <i>t</i> -ブチル -4'-ヒドロキシフェニル) プロピオン塩酸 [Na-Lube(登録商標)A0-242] (0.5)	ノニル化ジフェニルアミン [Na-Lube(登録商標)A0-130] (0.5)	1310
12	例17* エストリド (98)	アルキル3-(3',5'-ジ- <i>t</i> -ブチル -4'-ヒドロキシフェニル) プロピオン塩酸 [Na-Lube(登録商標)A0-242] (1)	ノニル化ジフェニルアミン [Na-Lube(登録商標)A0-130] (1)	965
13	例17* エストリド (98.2)	[Na-Lube(登録商標)BL-1208添加剤パッケージ] (1.8) (44重量%の添加剤パッケージには1:1w/wの2,6-ジ- <i>t</i> -ブチル フェノールおよびノニル化ジフェニルアミンが含まれる)		1012

10

20

30

40

【 0 2 2 3 】

【表 15 - 2】

製剤 番号	基油 (重量%)	フェノール系抗酸化剤 [商品名] (重量%)	アミン抗酸化剤 [商品名] (重量%)	RPVOT ASTM 2272-11 (分)
14	例17* エストリド (99.2)	[Na-Lube(登録商標)BL-1208添加剤パッケージ] (0.8) (44重量%の添加剤パッケージには1:1w/wの2,6-ジ-tert-ブチル フェノールおよびノニル化ジフェニルアミンが含まれる)		1292
15	例14* エストリド (99)	2,6-ジ-tert-ブチルフェノール [Na-Lube(登録商標)A0-210] (0.5)	ノニル化ジフェニルアミン [Na-Lube(登録商標)A0-130] (0.5)	368
16	例15A* エストリド (98.2)	[Na-Lube(登録商標)BL-1208添加剤パッケージ] (1.8) (44重量%の添加剤パッケージには1:1w/wの2,6-ジ-tert-ブチル フェノールおよびノニル化ジフェニルアミンが含まれる)		687
17	例15A* エストリド (99)	2,6-ジ-tert-ブチルフェノール [Na-Lube(登録商標)A0-210] (0.5)	ノニル化ジフェニルアミン [Na-Lube(登録商標)A0-130] (0.5)	574
18	例15B* エストリド (99)	2,6-ジ-tert-ブチルフェノール [Na-Lube(登録商標)A0-210] (0.5)	ノニル化ジフェニルアミン [Na-Lube(登録商標)A0-130] (0.5)	190
19	Bunge 高オレイン酸 カノーラ油 (100)	--	--	15
20	Bunge 高オレイン酸 カノーラ油 (99.5)	2,6-ジ-tert-ブチルフェノール [Na-Lube(登録商標)A0-210] (0.25)	ノニル化ジフェニルアミン [Na-Lube(登録商標)A0-130] (0.25)	38
21	Bunge 高オレイン酸 カノーラ油 (99)	2,6-ジ-tert-ブチルフェノール [Na-Lube(登録商標)A0-210] (0.5)	ノニル化ジフェニルアミン [Na-Lube(登録商標)A0-130] (0.5)	52
22	Bunge 高オレイン酸 カノーラ油 (98)	2,6-ジ-tert-ブチルフェノール [Na-Lube(登録商標)A0-210] (1)	ノニル化ジフェニルアミン [Na-Lube(登録商標)A0-130] (1)	68
23	グループ I SN 250、 7.1 cSt (100)	--	--	27
24	グループ I SN 250、 7.1 cSt (99.5)	2,6-ジ-tert-ブチルフェノール [Na-Lube(登録商標)A0-210] (0.25)	ノニル化ジフェニルアミン [Na-Lube(登録商標)A0-130] (0.25)	420
25	グループ I SN 250、 7.1 cSt (99)	2,6-ジ-tert-ブチルフェノール [Na-Lube(登録商標)A0-210] (0.5)	ノニル化ジフェニルアミン [Na-Lube(登録商標)A0-130] (0.5)	458

10

20

30

40

【 0 2 2 4 】

【表 15 - 3】

製剤 番号	基油 (重量%)	フェノール系抗酸化剤 [商品名] (重量%)	アミン抗酸化剤 [商品名] (重量%)	RPVOT ASTM 2272-11 (分)
26	グループ I SN 250、 7.1 cSt (98)	2,6-ジ- <i>t</i> -ブチルフェノール [Na-Lube(登録商標)A0-210] (1)	ノニル化ジフェニルアミン [Na-Lube(登録商標)A0-130] (1)	434
27	グループ II Chevron 220R 6.6 cSt (100)	--	--	43
28	グループ II Chevron 220R 6.6 cSt (99.5)	2,6-ジ- <i>t</i> -ブチルフェノール [Na-Lube(登録商標)A0-210] (0.25)	ノニル化ジフェニルアミン [Na-Lube(登録商標)A0-130] (0.25)	436
29	グループ II Chevron 220R 6.6 cSt (99)	2,6-ジ- <i>t</i> -ブチルフェノール [Na-Lube(登録商標)A0-210] (0.5)	ノニル化ジフェニルアミン [Na-Lube(登録商標)A0-130] (0.5)	444
30	グループ II Chevron 220R 6.6 cSt (98)	2,6-ジ- <i>t</i> -ブチルフェノール [Na-Lube(登録商標)A0-210] (1)	ノニル化ジフェニルアミン [Na-Lube(登録商標)A0-130] (1)	786
31	グループ II Chevron 220R 6.6 cSt (99.3)	[Na-Lube(登録商標)BL-1208添加剤パッケージ] (0.7) (44重量%の添加剤パッケージには1:1 w/wの2,6-ジ- <i>t</i> -ブチル フェノールおよびノニル化ジフェニルアミンが含まれる)		243
32	グループ III 7.2 cSt (100)	--	--	82
33	グループ III 7.2 cSt (99.5)	2,6-ジ- <i>t</i> -ブチルフェノール [Na-Lube(登録商標)A0-210] (0.25)	ノニル化ジフェニルアミン [Na-Lube(登録商標)A0-130] (0.25)	604
34	グループ III 7.2 cSt (99)	2,6-ジ- <i>t</i> -ブチルフェノール [Na-Lube(登録商標)A0-210] (0.5)	ノニル化ジフェニルアミン [Na-Lube(登録商標)A0-130] (0.5)	836
35	グループ III 7.2 cSt (98)	2,6-ジ- <i>t</i> -ブチルフェノール [Na-Lube(登録商標)A0-210] (1)	ノニル化ジフェニルアミン [Na-Lube(登録商標)A0-130] (1)	1787
36	PAO 4 cSt (100)	--	--	20
37	PAO 4 cSt (99.5)	2,6-ジ- <i>t</i> -ブチルフェノール [Na-Lube(登録商標)A0-210] (0.25)	ノニル化ジフェニルアミン [Na-Lube(登録商標)A0-130] (0.25)	868
38	PAO 4 cSt (99)	2,6-ジ- <i>t</i> -ブチルフェノール [Na-Lube(登録商標)A0-210] (0.5)	ノニル化ジフェニルアミン [Na-Lube(登録商標)A0-130] (0.5)	1698

10

20

30

40

【表 15 - 4】

製剤 番号	基油 (重量%)	フェノール系抗酸化剤 [商品名] (重量%)	アミン抗酸化剤 [商品名] (重量%)	RPVOT ASTM 2272-11 (分)
39	PAO 4 cSt (98)	2,6-ジ- <i>t</i> -ブチルフェノール [Na-Lube(登録商標)A0-210] (1)	ノニル化ジフェニルアミン [Na-Lube(登録商標)A0-130] (1)	1452
40	PAO 7 cSt (99)	2,6-ジ- <i>t</i> -ブチルフェノール [Na-Lube(登録商標)A0-210] (0.5)	ノニル化ジフェニルアミン [Na-Lube(登録商標)A0-130] (0.5)	1996
41	PAO 7 cSt (99.3)	[Na-Lube(登録商標)BL-1208添加剤パッケージ] (0.7) (44重量%の添加剤パッケージには1:1w/wの2,6-ジ- <i>t</i> -ブチル フェノールおよびノニル化ジフェニルアミンが含まれる)		1801
42	FormulaShell (登録商標) 10W-30 "Clean Engine Formula"	製剤、オフシェルフモーター油 (添加剤パッケージの成分および濃度は特性されない)		130
43	Mobil 15W-30 "Advanced Full Synthetic"	製剤、オフシェルフモーター油 (添加剤パッケージの成分および濃度は特性されない)		192
44	例17* エストリド (98)	2,6-ジ- <i>t</i> -ブチルフェノール [Na-Lube(登録商標)A0-210] (0.5) ノニル化ジフェニルアミン [Na-Lube(登録商標)A0-130] (0.5) エステル/アミド/カルボン酸さび止め [K-Corr(登録商標)100] (1)		736

【0226】

実施例19

【0227】

エストリドを上述の方法にしたがって調製した。様々な抗酸化剤および抗酸化剤を含有する添加剤パッケージを得られるエストリドに加えた。エストリド基油中の抗酸化剤および/または添加剤パッケージの溶解に影響を与える必要がある場合に、加熱し攪拌した。得られる調合されたエストリドの酸化安定性に修正P-DSC試験を行い、酸化開始温度(OT)を動的O₂条件下(例えばDunn、"Effect of antioxidants on the oxidative stability of methyl soyate (biodiesel)", Fuel Process. Tech., 86:1071-85(2005))を参照のこと、なお、あらゆる目的について、当該文献は参照に本明細書にその全体が組み込まれる)で非等温加圧示差走査熱量測定(P-DSC)によって側制した。様々な製剤についての結果を、いくつかの非エストリド基油製剤についての比較試験の結果と共に、以下表15に記載する。

【0228】

10

20

30

40

【表 16 - 1】

製剤 番号	基油 (重量%)	抗酸化剤 [商品名] (重量%)	3回実施後の P-DSC平均OT (°C)
1	例15A* エストリド (100)	-	208
2	例15A* エストリド (99)	BHA (1)	227
3	例15A* エストリド (99)	TBHQ (1)	219
4	例15A* エストリド (99)	没食子酸プロピル (1)	231
5	例15A* エストリド (99)	BHT (1)	221
6	例15A* エストリド (99)	ピロガロール(1)	235
7	例15A* エストリド (99)	α -トコフェロール (1)	212
8	例15A* エストリド (99)	アルキル化ジフェニルアミン [Vanlube(登録商標)NA] (1)	230
9	例15A* エストリド (99)	オクチル化ジフェニルアミン [Vanlube(登録商標)SL] (1)	238
10	例15A* エストリド (99)	[Lubrizol(登録商標)7652A添加剤パッケージ](1) (添加剤パッケージには20-29.9重量%のブチル化フェノール、 および0.1-0.9重量%のジフェニルアミンが含まれる。)	229
11	例15A* エストリド (99)	[Elco(登録商標)148P] (1)	210
12	例15A* エストリド (99)	[Elco(登録商標)8101] (1)	225
13	例15A* エストリド (99)	[Elco(登録商標)160] (1)	212
14	例15A* エストリド (99)	亜鉛ジアルキルジチオリン酸塩 [Elco(登録商標)108] (1)	219
15	例15A* エストリド (99)	亜鉛ジアルキルジチオリン酸塩 [Elco(登録商標)103] (1)	214
16	例15A* エストリド (99)	オクチル化/ブチル化ジフェニルアミン [Irganox(登録商標)57] (1)	241

10

20

30

40

【 0 2 2 9 】

【表 16 - 2】

製剤番号	基油 (重量%)	抗酸化剤 [商品名] (重量%)	3回実施後の P-DSC平均OT (°C)
17	例15A* エストリド (99)	アルキル 3-(3', 5' -ジ- <i>t</i> -ブチル-4' -ヒドロキシフェニル) プロピオンサ酸塩 [Na-Lube(登録商標)A0-242] (1)	219
18	例15A* エストリド (99)	[Na-Lube(登録商標)BL-1208 添加剤パッケージ] (1) (44重量%の添加剤パッケージには1:1w/wの2, 6-ジ- <i>t</i> -ブチル フェノールおよびノニル化ジフェニルアミンが含まれる)	232
19	例15A* エストリド (99)	[Irgalube(登録商標)F 20] (1)	219
20	例15A* エストリド (99)	C ₇ -C ₉ 分岐アルキル 3-(3', 5' -ジ- <i>t</i> -ブチル-4' -ヒドロキシ フェニル)プロピオンサ酸塩 [Irganox(登録商標)L-135] (1)	219
21	例15A* エストリド (99)	オクチル化/ブチル化ジフェニルアミン [Na-Lube(登録商標)A0-142] (1)	236
22	例15A* エストリド (99)	オクチル化 フェニル- α -ナフチルアミン [Irganox(登録商標)L-06] (1)	245
23	例15A* エストリド (99)	[Irganox(登録商標)L-150添加剤パッケージ] (1) (添加剤パッケージには70重量%のオクチル化/ブチル化ジフェ ニルアミン、15重量%のチオジエチレン-ビス-(3, 5-ジ- <i>t</i> -ブチ ル-4-ヒドロキシヒドロケイ皮酸)、および15重量%テトラキス -(メチレン-(3, 5-ジ- <i>t</i> -ブチル-4-ヒドロケイ皮酸))メタンが含ま れる。)	239
24	例15A* エストリド (99)	チオジエチレン-ビス-(3, 5-ジ- <i>t</i> -ブチル-4-ヒドロキシ ヒドロケイ皮酸) [Irganox(登録商標)L-115] (1)	213
25	例15A* エストリド (99)	2, 6-ジ- <i>t</i> -ブチルフェノール [Na-Lube(登録商標)A0-210] (0.5) ノニル化ジフェニルアミン [Na-Lube(登録商標)A0-130] (0.5)	TBD
26	例17* エストリド (99)	2, 6-ジ- <i>t</i> -ブチルフェノール [Na-Lube(登録商標)A0-210] (0.5) ノニル化ジフェニルアミン [Na-Lube(登録商標)A0-130] (0.5)	TBD
27	Valvoline 5W-30	製剤、オフシエルフモーター油 (添加剤パッケージの成分および濃度は特性されない)	246

* TBD=特定されている

【0230】

実施例 20

【0231】

エストリドを上述の方法にしたがって調製した。様々な抗酸化剤を得られるエストリド

10

20

30

40

50

に加えた。エストリド基油中の抗酸化剤および/または添加剤パッケージの溶解に影響を与える必要がある場合に、加熱し攪拌した。得られる調合されたエストリドの酸化安定性に非等温加圧示差走査熱量測定 (P-DSC) 試験を様々な温度で行い、酸化誘導時間 (OIT) を分で報告した。様々な製剤の結果を以下表 16 に記載する。

【0232】

【表17】

製剤番号	基油 (重量 %)	抗酸化剤 [商品名] (重量 %)	温度、℃	OIT、分
1	例17*エストリド (100)	-	180	13
2	例17*エストリド (99)	2,6-ジ-tert-ブチルフェノール [Na-Lube (登録商標) A0-210] (0.5) ノニル化ジフェニルアミン [Na-Lube (登録商標) A0-130] (0.5)	180	89
3	例15A*エストリド (99)	2,6-ジ-tert-ブチルフェノール [Na-Lube (登録商標) A0-210] (0.5) ノニル化ジフェニルアミン [Na-Lube (登録商標) A0-130] (0.5)	180	42
4	例17*エストリド (99)	2,6-ジ-tert-ブチルフェノール [Na-Lube (登録商標) A0-210] (0.5) ノニル化ジフェニルアミン [Na-Lube (登録商標) A0-130] (0.5)	155	>120
5	例15A*エストリド (99)	2,6-ジ-tert-ブチルフェノール [Na-Lube (登録商標) A0-210] (0.5) ノニル化ジフェニルアミン [Na-Lube (登録商標) A0-130] (0.5)	155	>120

10

20

30

【0233】

追加の実施形態

40

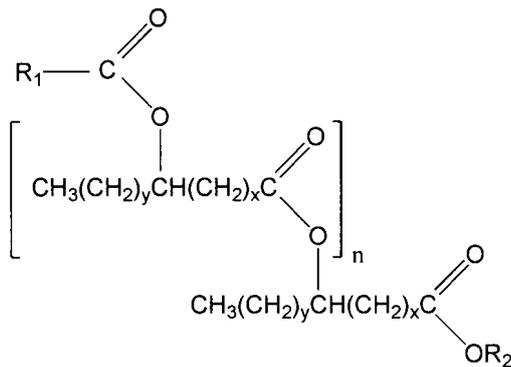
【0234】

1. エストリド基油および少なくとも1つの抗酸化剤との組み合わせを含む組成物であり、その組み合わせはASTM法2272-11を使用する回転圧力容器酸化試験で試験したときに、少なくとも500分の時間を有し、

エストリド基油は式Iの化合物から選択される少なくとも1つのエストリドを含み、

【0235】

【化 1 2】



10

式 I

【 0 2 3 6】

x はそれぞれ独立して、0 ~ 20 から選択される整数であり、

y はそれぞれ独立して、0 ~ 20 から選択される整数であり、

n は 0 より大きいまたは等しい整数であり、

20

R₁ は飽和または不飽和の、および分岐または非分岐の置換されてもよいアルキルであり、

R₂ は飽和または不飽和の、分岐または非分岐の置換されてもよいアルキルであり、少なくとも 1 つの当該化合物の各脂肪酸鎖残基は独立して置換されてもよい。

【 0 2 3 7】

2 . 請求項 1 に記載の組成物であって、

x はそれぞれ独立して 1 ~ 10 から選択される整数であり、

y はそれぞれ独立して 1 ~ 10 から選択される整数であり、

n は 0 ~ 8 から選択される整数であり、

R₁ は飽和または不飽和の、および分岐または非分岐の置換されてもよい C₁ ~ C₂₂ アルキルであり、

30

R₂ は飽和または不飽和の、および分岐または非分岐の置換されてもよい C₁ ~ C₂₂ アルキルであり、

各脂肪酸鎖残基は置換されていない。

【 0 2 3 8】

3 . 請求項 1 および 2 に記載の組成物であって、

x + y は各鎖について独立して 13 ~ 15 から選択される整数であり、および

n は 0 ~ 6 から選択される整数である。

【 0 2 3 9】

4 . 請求項 1 ~ 3 のいずれか 1 項に記載の組成物であって、R₂ は飽和または不飽和の、および分岐または非分岐の置換されてもよいアルキルである。

40

【 0 2 4 0】

5 . 請求項 1 ~ 4 のいずれか 1 項に記載の組成物であって、R₂ は飽和または不飽和の分岐または非分岐 C₁ ~ C₂₀ アルキルである。

【 0 2 4 1】

6 . 請求項 5 に記載の組成物であって、R₂ はメチル、エチル、プロピル、ブチル、ペンチル、ヘキシル、ヘプチル、オクチル、ノニル、デカニル、ウンデカニル、ドデカニル、トリデカニル、テトラデカニル、ペンタデカニル、ヘキサデカニル、ヘプタデカニル、オクタデカニル、ノナデカニル、およびイコサニルから選択され、飽和または不飽和の、および分岐または非分岐である。

50

【0242】

7. 請求項5に記載の組成物であって、 R_2 は $C_6 \sim C_{12}$ アルキルから選択される。

【0243】

8. 請求項7に記載の組成物であって、 R_2 は2-エチルヘキシルである。

【0244】

9. 請求項1～8のいずれか1項に記載の組成物であって、 R_1 は飽和または不飽和の分岐または非分岐 $C_1 \sim C_{20}$ アルキルである。

【0245】

10. 請求項9に記載の組成物であって、 R_1 はメチル、エチル、プロピル、ブチル、ペンチル、ヘキシル、ヘプチル、オクチル、ノニル、デカニル、ウンデカニル、ドデカニル、トリデカニル、テトラデカニル、ペンタデカニル、ヘキサデカニル、ヘプタデカニル、オクタデカニル、ノナデカニル、およびイコサニルから選択され、飽和または不飽和の、および分岐または非分岐である。

10

【0246】

11. 請求項9に記載の組成物であって、 R_1 は非分岐および飽和または不飽和の非置換の $C_7 \sim C_{17}$ アルキルである。

【0247】

12. 請求項11に記載の組成物であって、 R_1 は非置換、非分岐、および飽和または不飽和の $C_{13} \sim C_{17}$ アルキルである。

【0248】

13. 請求項11に記載の組成物であって、 R_1 は飽和 C_7 アルキル、飽和 C_9 アルキル、飽和 C_{11} アルキル、飽和 C_{13} アルキル、飽和 C_{15} アルキル、および飽和または不飽和 C_{17} アルキルから選択され、非置換および非分岐である。

20

【0249】

14. 請求項12に記載の組成物であって、 R_1 は飽和 C_{13} アルキル、飽和 C_{15} アルキル、および飽和または不飽和 C_{17} アルキルから選択され、非置換および非分岐である。

【0250】

15. 請求項1～5のいずれか1項に記載の組成物であって、 R_1 および R_2 は独立して、飽和または不飽和の、および分岐または非分岐の置換されてもよい $C_1 \sim C_{18}$ アルキルである。

30

【0251】

16. 請求項1～5のいずれか1項に記載の組成物であって、 R_1 は飽和または不飽和の、および分岐または非分岐の置換されてもよい $C_7 \sim C_{17}$ アルキルから選択され、 R_2 は飽和または不飽和の、および分岐または非分岐の置換されてもよい $C_3 \sim C_{20}$ アルキルである。

【0252】

17. 請求項1～16のいずれか1項に記載の組成物であって、前記組成物は4に等しいまたはそれより大きい整数または整数の分数から選択される EN を有し、 EN は式Iに記載の化合物の結合の平均数である。

【0253】

18. 請求項17に記載の組成物であって、前記組成物は4～5から選択される整数または整数の分数である EN であり、 EN は式Iに記載の化合物の結合の平均数である。

40

【0254】

19. 請求項17に記載の組成物であって、前記組成物は4.2～4.8から選択される整数の分数であり、 EN は式Iに記載の化合物の結合の平均数である。

【0255】

20. 請求項1～16のいずれか1項に記載の組成物であって、前記組成物には5に等しいまたはそれより大きい整数または整数の分数から選択される EN があり、 EN は式Iに記載の化合物の結合の平均数である。

【0256】

50

21. 請求項17～20のいずれか1項に記載の組成物であって、前記エストリド基油の動粘度が40 で測定したときに200 c S tに等しいまたはそれより大きい。

【0257】

22. 請求項21に記載の組成物であって、前記エストリド基油の動粘度が40 で200 c S t～250 c S tである。

【0258】

23. 請求項21に記載の組成物であって、前記エストリド基油の動粘度が40 で210 c S t～230 c S tである。

【0259】

24. 請求項17～23のいずれか1項に記載の組成物であって、前記エストリド基油の流動点が-40 に等しいまたはそれより小さい。

10

【0260】

25. 請求項24に記載の組成物であって、前記エストリド基油の流動点が-40 ～ -50 である。

【0261】

26. 請求項24に記載の組成物であって、前記エストリド基油の流動点が-42 ～ -48 である。

【0262】

27. 請求項24に記載の組成物であって、前記エストリド基油の流動点が-50 より小さい。

20

【0263】

28. 請求項27に記載の組成物であって、前記エストリド基油の流動点が-50 ～ -60 である。

【0264】

29. 請求項27に記載の組成物であって、前記エストリド基油の流動点が-52 ～ -58 である。

【0265】

30. 請求項1～16のいずれか1項に記載の組成物であって、前記組成物には3に等しいまたはそれより大きい整数または整数の分数から選択されるENがあり、ENは式Iに記載の化合物の結合の平均数である。

30

【0266】

31. 請求項30に記載の組成物であって、前記組成物には3～4から選択される整数または整数の分数であるENがあり、ENは式Iに記載の化合物の結合の平均数である。

【0267】

32. 請求項30に記載の組成物であって、前記組成物には3～3.5から選択される整数または整数の分数であるENがあり、ENは式Iに記載の化合物の結合の平均数である。

【0268】

33. 請求項30に記載の組成物であって、前記組成物には3.5に等しいまたはそれより大きい整数または整数の分数から選択されるENがあり、ENは式Iに記載の化合物の結合の平均数である。

40

【0269】

34. 請求項30に記載の組成物であって、前記組成物には4に等しいまたはそれより大きい整数または整数の分数から選択されるENがあり、ENは式Iに記載の化合物の結合の平均数である。

【0270】

35. 請求項30に記載の組成物であって、前記組成物には4～5から選択される整数または整数の分数であるENがあり、ENは式Iに記載の化合物の結合の平均数である。

【0271】

36. 請求項30に記載の組成物であって、前記組成物には4.2～4.8から選択さ

50

れる整数または整数の分数である $E N$ があり、 $E N$ は式 I に記載の化合物の結合の平均数である。

【0272】

37. 請求項30のいずれか1項に記載の組成物であって、前記組成物には5に等しいまたはそれより大きい整数または整数の分数から選択される $E N$ があり、 $E N$ は式 I に記載の化合物の結合の平均数である。

【0273】

38. 請求項30～37のいずれか1項に記載の組成物であって、前記エストリド基油の動粘度が40 で測定したときに130 cStに等しいまたはそれより大きい。

【0274】

39. 請求項38に記載の組成物であって、前記エストリド基油の動粘度が40 で130 cSt～160 cStである。

【0275】

40. 請求項38に記載の組成物であって、前記エストリド基油の動粘度が40 で130 cSt～145 cStである。

【0276】

41. 請求項30～40のいずれか1項に記載の組成物であって、前記エストリド基油の流動点が-30 に等しいまたはそれより低い。

【0277】

42. 請求項41に記載の組成物であって、前記エストリド基油の流動点が-30 ～ -40 である。

【0278】

43. 請求項41に記載の組成物であって、前記エストリド基油の流動点が-34 ～ -38 である。

【0279】

44. 請求項41に記載の組成物であって、前記エストリド基油の流動点が-35 より低い。

【0280】

45. 請求項41に記載の組成物であって、前記エストリド基油の流動点が-35 ～ -45 である。

【0281】

46. 請求項41に記載の組成物であって、前記エストリド基油の流動点が-38 ～ -42 である。

【0282】

47. 請求項41に記載の組成物であって、前記エストリド基油の流動点が-40 より低い。

【0283】

48. 請求項41に記載の組成物であって、前記エストリド基油の流動点が-40 ～ -50 である。

【0284】

49. 請求項41に記載の組成物であって、前記エストリド基油の流動点が-42 ～ -48 である。

【0285】

50. 請求項41に記載の組成物であって、前記エストリド基油の流動点が-50 より低い。

【0286】

51. 請求項41に記載の組成物であって、前記エストリド基油の流動点が-50 ～ -60 である。

【0287】

52. 請求項41に記載の組成物であって、前記エストリド基油の流動点が-52 ～ -

10

20

30

40

50

58 である。

【0288】

53．請求項1～16のいずれか1項に記載の組成物であって、前記組成物には2以下の整数または整数の分数から選択されるENがあり、ENは式Iに記載の化合物の結合の平均数である。

【0289】

54．請求項53に記載の組成物であって、前記組成物には1～2から選択される整数または整数の分数のENがあり、ENは式Iに記載の化合物の結合の平均数である。

【0290】

55．請求項53に記載の組成物であって、前記組成物には1～1.6から選択される整数または整数の分数のENがあり、ENは式Iに記載の化合物の結合の平均数である。

10

【0291】

56．請求項53～55のいずれか1項に記載の組成物であって、前記エストリド基油の動粘度は40で測定したときに55cStに等しいまたはそれより小さい。

【0292】

57．請求項56に記載の組成物であって、前記エストリド基油の動粘度は40で25cSt～55cStである。

【0293】

58．請求項56に記載の組成物であって、前記エストリド基油の動粘度は40で35cSt～45cStである。

20

【0294】

59．請求項53～58に記載の組成物であって、前記エストリド基油の流動点は-25以下である。

【0295】

60．請求項59に記載の組成物であって、前記エストリド基油の流動点は-27～-37である。

【0296】

61．請求項59に記載の組成物であって、前記エストリド基油の流動点は-30～-34である。

【0297】

62．請求項59に記載の組成物であって、前記エストリド基油の流動点は-50より低い。

30

【0298】

63．請求項59に記載の組成物であって、前記エストリド基油の流動点は-50～-60である。

【0299】

64．請求項59に記載の組成物であって、前記エストリド基油の流動点は-52～-58である。

【0300】

65．請求項1～16のいずれか1項に記載の組成物であって、前記組成物には2以下の整数または整数の分数から選択されるENがあり、ENは式Iに記載の化合物の結合の平均数である。

40

【0301】

66．請求項65に記載の組成物であって、前記組成物には1～2から選択される整数または整数の分数であるENがあり、ENは式Iに記載の化合物の結合の平均数である。

【0302】

67．請求項65に記載の組成物であって、該組成物は1.1～1.7から選択される整数の分数であるENであり、ENは式Iに記載の化合物の結合の平均数である。

【0303】

68．請求項65～67のいずれか1項に記載の組成物であって、当該エストリド基油

50

の動粘度は40 で測定したときに45 c S t以下である。

【0304】

69. 請求項68に記載の組成物であって、当該エストリド基油の動粘度は40 で20 c S t ~ 45 c S tである。

【0305】

70. 請求68に記載の組成物であって、当該エストリド基油の動粘度は40 で28 c S t ~ 38 c S tである。

【0306】

71. 請求項65 ~ 70のいずれか1項に記載の組成物であって、当該エストリド基油の流動点は-25 に等しいまたはそれより低い。

10

【0307】

72. 請求項71に記載の組成物であって、当該エストリド基油の流動点は-25 ~ -35 である。

【0308】

73. 請求項71に記載の組成物であって、当該エストリド基油の流動点は-28 ~ -32 である。

【0309】

74. 請求項71に記載の組成物であって、当該エストリド基油の流動点は-50 より低い。

【0310】

75. 請求項71に記載の組成物であって、当該エストリド基油の流動点は-50 ~ -60 である。

20

【0311】

76. 請求項71に記載の組成物であって、当該エストリド基油の流動点は-52 ~ -58 である。

【0312】

77. 請求項1 ~ 76のいずれか1項に記載の組成物であって、当該組み合わせはA S T M法2272-11を使用する回転圧力容器酸化試験で試験したときに、少なくとも600分を有する。

【0313】

78. 請求項77に記載の組成物であって、当該組み合わせはA S T M法2272-11を使用する回転圧力容器酸化試験で試験したときに、少なくとも700分を有する。

30

【0314】

79. 請求項77に記載の組成物であって、当該組み合わせはA S T M法2272-11を使用する回転圧力容器酸化試験で試験したときに、少なくとも800分を有する。

【0315】

80. 請求項77に記載の組成物であって、当該組み合わせはA S T M法2272-11を使用する回転圧力容器酸化試験で試験したときに、少なくとも900分を有する。

【0316】

81. 請求項77に記載の組成物であって、当該組み合わせはA S T M法2272-11を使用する回転圧力容器酸化試験で試験したときに、少なくとも1000分を有する。

40

【0317】

82. 請求項77に記載の組成物であって、当該組み合わせはA S T M法2272-11を使用する回転圧力容器酸化試験で試験したときに、少なくとも1100分を有する。

【0318】

83. 請求項77に記載の組成物であって、当該組み合わせはA S T M法2272-11を使用する回転圧力容器酸化試験で試験したときに、少なくとも1200分を有する。

【0319】

84. 請求項77に記載の組成物であって、当該組み合わせはA S T M法2272-11を使用する回転圧力容器酸化試験で試験したときに、少なくとも1300分を有する。

50

【0320】

85. 請求項77に記載の組成物であって、当該組み合わせはASTM法2272-1を使用する回転圧力容器酸化試験で試験したときに、少なくとも1400分を有する。

【0321】

86. 請求項1～85のいずれか1項に記載の組成物であって、少なくとも1つの抗酸化剤が1つ以上のフェノール系抗酸化剤またはアミン抗酸化剤から選択される。

【0322】

87. 請求項86に記載の組成物であって、少なくとも1つの抗酸化剤が1つ以上のヒンダードフェノール系抗酸化剤から選択される。

【0323】

88. 請求項86に記載の組成物であって、少なくとも1つの抗酸化剤が1つ以上のジアルキルアミン抗酸化剤から選択される。

【0324】

89. 請求項88に記載の組成物であって、少なくとも1つの抗酸化剤が1つ以上のジフェニルアミン抗酸化剤から選択される。

【0325】

90. 請求項89に記載の組成物であって、少なくとも1つの抗酸化剤が1つ以上のアルキル化ジフェニルアミン抗酸化剤から選択される。

【0326】

91. 請求項90に記載の組成物であって、少なくとも1つの抗酸化剤がノニル化ジフェニルアミン、オクチル化ジフェニルアミン、およびブチル化ジフェニルアミンの1つ以上から選択される。

【0327】

92. 請求項88に記載の組成物であって、少なくとも1つの抗酸化剤がフェニル-ナフチルアミンおよびアルキル化フェニル-ナフチルアミンの1つ以上から選択される。

【0328】

93. 請求項86に記載の組成物であって、少なくとも1つの抗酸化剤が少なくとも1つのフェノール系抗酸化剤および少なくとも1つのアミン抗酸化剤を含む。

【0329】

94. 請求項93に記載の組成物であって、少なくとも1つの抗酸化剤が少なくとも1つのヒンダードフェノール系抗酸化剤および少なくとも1つのアルキル化ジフェニルアミン抗酸化剤を含む。

【0330】

95. 請求項1～94のいずれか1項に記載の組成物であって、エストリド基油の酸価が0.5 mg KOH/gに等しいまたはそれより小さい。

【0331】

96. 請求項95に記載の組成物であって、エストリド基油の酸価が0.4 mg KOH/gに等しいまたはそれより小さい。

【0332】

97. 請求項95に記載の組成物であって、エストリド基油の酸価が0.3 mg KOH/gに等しいまたはそれより小さい。

【0333】

98. 請求項95に記載の組成物であって、エストリド基油の酸価が0.2 mg KOH/gに等しいまたはそれより小さい。

【0334】

99. 請求項95に記載の組成物であって、エストリド基油の酸価が0.1 mg KOH/gに等しいまたはそれより小さい。

【0335】

100. 請求項1～99のいずれか1項に記載の組成物であって、前記組成物がさらに

10

20

30

40

50

、グループ I 油、グループ II 油、グループ III 油、ポリアルファオレフィン、ポリアルキレングリコール、および油溶性ポリアルキレングリコールから選択される潤滑油を含む。

【0336】

101. 請求項 1 ~ 100 のいずれか 1 項に記載の組成物であって、当該組成物はさらに、抗菌剤、極圧剤、低温流動性調整剤、摩擦調整剤、粘度調整剤、流動点降下剤、金属キレート剤、金属不活性化剤、消泡剤、および抗乳化剤の 1 つ以上から選択される少なくとも 1 つの添加剤を含む。

【0337】

102. 請求項 1 ~ 101 のいずれか 1 項に記載の組成物であって、エストリド基油と少なくとも 1 つの抗酸化剤との組み合わせは、組成物の少なくとも 50 重量%を含む。

10

【0338】

103. 請求項 102 に記載の組成物であって、エストリド基油と少なくとも 1 つの抗酸化剤との組み合わせは、組成物の少なくとも 70 重量%を含む。

【0339】

104. 請求項 102 に記載の組成物であって、エストリド基油と少なくとも 1 つの抗酸化剤との組み合わせは、組成物の少なくとも 80 重量%を含む。

【0340】

105. 請求項 102 に記載の組成物であって、エストリド基油と少なくとも 1 つの抗酸化剤との組み合わせは、組成物の 50 ~ 90 重量%を含む。

20

【0341】

106. 請求項 102 に記載の組成物であって、エストリド基油と少なくとも 1 つの抗酸化剤との組み合わせは、組成物の少なくとも 80 ~ 90 重量%を含む。

【0342】

107. 請求項 102 に記載の組成物であって、エストリド基油と少なくとも 1 つの抗酸化剤との組み合わせは、組成物の少なくとも 90 重量%を含む。

【0343】

108. 請求項 102 に記載の組成物であって、エストリド基油と少なくとも 1 つの抗酸化剤の組み合わせは、組成物の 85 ~ 99 重量%を含む。

【0344】

109. 請求項 1 ~ 99 のいずれか 1 項に記載の組成物であって、前記組成物がエストリド基油と少なくとも 1 つの抗酸化剤との組み合わせから本質的に成る。

30

【0345】

110. 請求項 1 ~ 109 のいずれか 1 項に記載の組成物であって、前記組成物は組み合わせの 0.01 ~ 5 重量%を含む。

【0346】

111. 請求項 110 に記載の組成物であって、前記組成物は組み合わせの 0.1 ~ 3 重量%を含む。

【0347】

112. 請求項 1 ~ 109 のいずれか 1 項に記載の組成物であって、前記組成物は組み合わせの 0.01 ~ 5 重量%を含む。

40

【0348】

113. 請求項 112 のいずれか 1 項に記載の組成物であって、少なくとも 1 つの前記抗酸化剤は組成物の 0.1 ~ 3 重量%である。

【0349】

114. 請求項 1 ~ 108 のいずれか 1 項に記載の組成物であって、前記組成物は以下を含む

50 ~ 70 重量%のエストリド基油、
25 ~ 49.99 重量%の潤滑油、および
0.01 ~ 5 重量%の少なくとも 1 つの抗酸化剤。

50

- 【0350】
115．請求項1～114のいずれか1項に記載の組成物であって、組成物の酸価は0.5 mg KOH / g 以下である。
- 【0351】
116．請求項115に記載の組成物であって、組成物の酸価は0.4 mg KOH / g 以下である。
- 【0352】
117．請求項115に記載の組成物であって、組成物の酸価は0.3 mg KOH / g 以下である。
- 【0353】
118．請求項115に記載の組成物であって、組成物の酸価は0.2 mg KOH / g 以下である。 10
- 【0354】
119．請求項115に記載の組成物であって、組成物の酸価は0.1 mg KOH / g 以下である。
- 【0355】
120．請求項1～119のいずれか1項に記載の組成物であって、前記組成物は脂肪酸が実質的にない。
- 【0356】
121．請求項1～120のいずれか1項に記載の組成物であって、前記組成物は作動液、乗用車のモーターオイル、またはクランクケース油を含む。 20
- 【0357】
122．請求項1～121のいずれか1項に記載の組成物であって、 R_1 は飽和されている。
- 【0358】
123．請求項1～122のいずれか1項に記載の組成物であって、 R_2 は飽和されている。
- 【0359】
124．エステル基油の酸化安定性を向上させる方法であって、当該方法は以下を含む 30
- エステル基油を選択すること、
エステル基油の酸価を減少させ、低酸エステル基油を提供すること、
および
低酸エステル基油を少なくとも1つの抗酸化剤と組み合わせること。
- 【0360】
125．請求項124に記載の方法であって、エステル基油の酸価を減少させ、低酸エステル基油を提供することは、前記エステル基油を少なくとも1つの酸低減剤と接触させることを含む。
- 【0361】
126．請求項125に記載の方法であって、少なくとも1つの酸低減剤は活性炭、ケイ酸マグネシウム、酸化アルミニウム、二酸化ケイ素、ゼオライト、塩基性樹脂、およびアニオン交換樹脂から選択される。 40
- 【0362】
127．請求項124～126のいずれか1項に記載の方法であって、少なくとも1つの抗酸化剤はアミン抗酸化剤である。
- 【0363】
128．請求項124～127のいずれか1項に記載の方法であって、低酸エステル基油の酸価は0.5 mg KOH / g に等しいまたはそれより小さい。
- 【0364】
129．請求項128に記載の方法であって、低酸エステル基油の酸価は0.5 mg 50

KOH / g に等しいまたはそれより小さい。

【0365】

130. 請求項124～129のいずれか1項に記載の方法であって、低酸エステル基油と少なくとも1つの抗酸化剤はASTM法2272-11を使用する回転圧力容器酸化試験で試験したときに、少なくとも500分の時間を有する。

【0366】

131. 請求項124～130のいずれか1項に記載の方法であって、低酸エステル基油と少なくとも1つの抗酸化剤はASTM法2272-11を使用する回転圧力容器酸化試験で試験したときに、少なくとも1000分の時間を有する。

【手続補正書】

【提出日】平成28年12月28日(2016.12.28)

【手続補正1】

【補正対象書類名】特許請求の範囲

【補正対象項目名】全文

【補正方法】変更

【補正の内容】

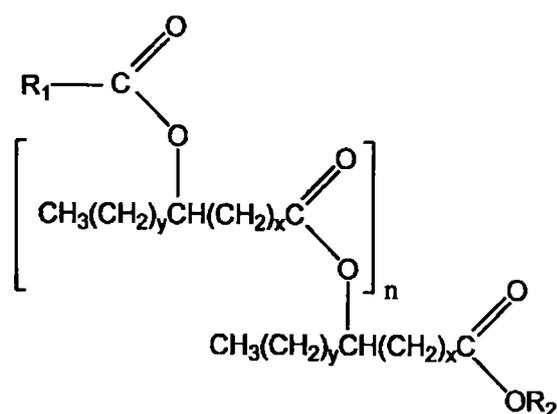
【特許請求の範囲】

【請求項1】

エステル基油および少なくとも1つのアミン抗酸化剤との組み合わせを含む組成物であって、当該組み合わせはASTM法2272-11を使用する回転圧力容器酸化試験で試験したときに、少なくとも1000分の時間を有し、

該エステル基油は、0.5 mg KOH / g 以下の酸価を有し、式Iの化合物から選択される少なくとも1つのエステル化合物を含み、

【化1】



式 I

ここで、

xはそれぞれ、独立して0～20から選択される整数であり、

yはそれぞれ、独立して0～20から選択される整数であり、

nは0より大きいまたは等しい整数であり、

R1は飽和の、および分岐または非分岐の置換されてもよいアルキルであり、

R2は飽和の、および分岐または非分岐の置換されてもよいアルキルであり、

少なくとも1つの前記化合物の脂肪酸鎖残基のそれぞれが、独立して置換されてもよい、組成物。

フロントページの続き

(51) Int.Cl.		F I		テーマコード(参考)
C 1 0 M 107/02	(2006.01)	C 1 0 M	107/02	
C 1 0 M 107/34	(2006.01)	C 1 0 M	107/34	
C 1 0 M 141/06	(2006.01)	C 1 0 M	141/06	
C 1 0 N 20/00	(2006.01)	C 1 0 N	20:00	Z
C 1 0 N 20/02	(2006.01)	C 1 0 N	20:02	
C 1 0 N 30/10	(2006.01)	C 1 0 N	30:10	
C 1 0 N 40/08	(2006.01)	C 1 0 N	40:08	
C 1 0 N 40/25	(2006.01)	C 1 0 N	40:25	

(74)代理人 100128495

弁理士 出野 知

(74)代理人 100173107

弁理士 胡田 尚則

(74)代理人 100191444

弁理士 明石 尚久

(72)発明者 ジェイコブ ブレズガード

アメリカ合衆国, カリフォルニア 9 2 6 1 8, アーバイン, オーク グレン 1 0 2 4

(72)発明者 トラビス トンプソン

アメリカ合衆国, カリフォルニア 9 2 8 0 7, アナハイム, イースト バジャ ドライブ 6 1
1 0

(72)発明者 ジェレミー フォレスト

アメリカ合衆国, カリフォルニア 9 2 7 8 0, タスティン, ウエスト ファースト ストリート
3 4 5

F ターム(参考) 4H104 BA02A BA07A BB05C BB34A BB41A BE07C CB14A DA02A EA01Z EA02A

EA22A LA05 PA05 PA41

【外国語明細書】

2017075327000001.pdf