



(12) 发明专利申请

(10) 申请公布号 CN 104080756 A

(43) 申请公布日 2014. 10. 01

(21) 申请号 201280065422. 6

(51) Int. Cl.

(22) 申请日 2012. 11. 29

C07C 2/32 (2006. 01)

(30) 优先权数据

13/340, 780 2011. 12. 30 US

(85) PCT国际申请进入国家阶段日

2014. 06. 30

(86) PCT国际申请的申请数据

PCT/US2012/067066 2012. 11. 29

(87) PCT国际申请的公布数据

W02013/101387 EN 2013. 07. 04

(71) 申请人 切弗朗菲利浦化学公司

地址 美国德克萨斯州

(72) 发明人 B·L·斯马尔 R·如斯

(74) 专利代理机构 北京纪凯知识产权代理有限公司

公司 11245

代理人 赵蓉民 张全信

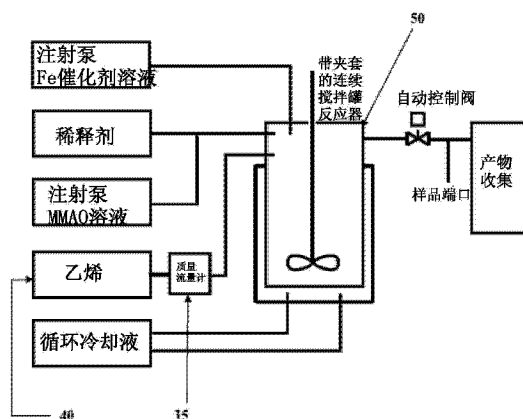
权利要求书4页 说明书86页 附图2页

(54) 发明名称

烯烃低聚方法

(57) 摘要

低聚烯烃的方法,所述方法使用催化剂体系,所述催化剂体系包括 a) 过渡金属络合物,其是络合至吡啶双亚胺配体的过渡金属化合物和 b) 烷基金属;并且通过调整 i) 反应器中过渡金属络合物的过渡金属的浓度, ii) 反应器中烷基金属的金属浓度, iii) 反应器中烷基金属的金属与过渡过渡金属络合物的金属的摩尔比,和 iv) 其任何组合控制烯烃低聚物产物分布 K 值。



1. 烯烃低聚方法,其包括:
 - a) 使烯烃和催化剂体系接触,以在连续反应器中形成烯烃低聚物产物,所述催化剂体系包括
 - i) 过渡金属络合物,其包括络合至包括吡啶双亚胺基团的配体的过渡金属化合物,和
 - ii) 烷基金属化合物;和
 - b) 通过调整选自下列的烯烃低聚参数控制所述过渡金属络合物的烯烃低聚物产物分布 K 值在从 0.5 至 0.8 的范围,
 - i) 所述连续反应器中所述过渡金属络合物的过渡金属的浓度,
 - ii) 所述连续反应器中所述烷基金属化合物的金属的浓度,
 - iii) 所述连续反应器中所述烷基金属的金属与所述过渡金属络合物的过渡金属的摩尔比,或
 - iv) 其任何组合。
2. 权利要求 1 所述的方法,其中所述过渡金属化合物包括 8-10 族卤化物、硝酸盐、硫酸盐、磷酸盐、卤酸盐、烃醇盐、羧酸盐或 β -二酮化物并且所述烷基金属化合物包括铝氧烷。
3. 权利要求 1 所述的方法,其中通过调整选自下列的烯烃低聚参数控制所述过渡金属络合物的所述烯烃低聚物产物分布 K 值,
 - i) 所述连续反应器中所述过渡金属络合物的过渡金属的浓度范围是从每千克烯烃低聚溶液 1.0×10^{-6} 至 5.0×10^{-1} 摩尔的过渡金属,
 - ii) 所述连续反应器中所述烷基金属化合物的金属的浓度范围是从每千克烯烃低聚溶液 5.0×10^{-3} 至 1.0×10^3 摩尔的金属,
 - iii) 所述连续反应器中所述烷基金属的金属与所述过渡金属络合物的过渡金属的摩尔比范围从 5 : 1 至 100,000 : 1,或
 - iv) 其任何组合。
4. 权利要求 1 所述的方法,其中所述烯烃低聚物产物在从 20°C 至 150°C 范围的温度下产生。
5. 权利要求 1 所述的方法,其中所述烯烃、所述过渡金属络合物和所述铝氧烷被同时引入所述连续反应器。
6. 权利要求 1 所述的方法,其中所述烯烃基本上由乙烯组成,所述过渡金属化合物包括卤化铁(II)或卤化钴(II),所述烷基金属化合物包括铝氧烷,所述烯烃低聚物产物在从 50°C 至 130°C 范围的温度下和从 150psig 至 2,000psig 范围的乙烯分压下产生,并且其中通过调整选自下列的烯烃低聚参数控制所述过渡金属络合物的烯烃低聚物产物分布 K 值在从 0.55 至 0.7 的范围,
 - i) 所述连续反应器中所述过渡金属络合物的过渡金属的浓度范围是从每千克烯烃低聚溶液 1.0×10^{-5} 至 1.0×10^{-2} 摩尔的过渡金属,
 - ii) 所述连续反应器中所述烷基金属化合物的金属的浓度范围是从每千克烯烃低聚溶液 5.0×10^{-2} 至 1.0×10^1 摩尔的金属,
 - iii) 所述连续反应器中所述烷基金属的金属与所述过渡金属络合物的过渡金属的摩尔比的范围从 5 : 1 至 100,000 : 1,或
 - iv) 其任何组合。

7. 烯烃低聚方法,其包括:
- a) 使烯烃和催化剂体系接触,以在连续反应器中形成烯烃低聚物产物,所述催化剂体系包括
- i) 过渡金属络合物,其包括络合至包括吡啶双亚胺基团的配体的过渡金属化合物,和
- ii) 烷基金属化合物;
- b) 从所述烯烃低聚物产物分布 K 值与选自下列的烯烃低聚参数的相关性,选择所述过渡金属络合物的烯烃低聚物产物分布 K 值在从 0.5 至 0.8 的范围,
- i) 所述连续反应器中所述过渡金属络合物的过渡金属的浓度,
- ii) 所述连续反应器中所述烷基金属化合物的金属的浓度,
- iii) 所述连续反应器中所述烷基金属的金属与所述过渡金属络合物的过渡金属的摩尔比,或
- iv) 其任何组合;和
- c) 调整选择的烯烃低聚参数以获得选择的烯烃低聚物产物分布 K 值。
8. 权利要求 7 所述的方法,其中所述过渡金属化合物包括 8-10 族卤化物、硝酸盐、硫酸盐、磷酸盐、卤酸盐、烃醇盐、羧酸盐或 β -二酮化物并且所述烷基金属化合物包括铝氧烷。
9. 权利要求 7 所述的方法,其中通过调整选自下列的烯烃低聚参数获得选择的烯烃低聚物产物分布 K 值,
- i) 所述连续反应器中所述过渡金属络合物的过渡金属的浓度范围是从每千克烯烃低聚溶液 1.0×10^{-6} 至 5.0×10^{-1} 摩尔的过渡金属,
- ii) 所述连续反应器中所述烷基金属化合物的金属的浓度范围是从每千克烯烃低聚溶液 5.0×10^{-3} 至 1.0×10^3 摩尔的金属,
- iii) 所述连续反应器中所述烷基金属的金属与所述过渡金属络合物的过渡金属的摩尔比范围从 5 : 1 至 100,000 : 1,或
- iv) 其任何组合。
10. 权利要求 7 所述的方法,其中所述烯烃低聚物产物在从 20°C 至 150°C 范围的温度下产生。
11. 权利要求 7 所述的方法,其中所述烯烃、所述过渡金属络合物和所述铝氧烷被同时引入所述连续反应器。
12. 权利要求 7 所述的方法,其中所述烯烃基本上由乙烯组成,所述过渡金属化合物包括卤化铁(II)或卤化钴(II),所述烷基金属化合物包括铝氧烷,所述烯烃低聚物产物在从 50°C 至 130°C 范围的温度下和从 150psig 至 2,000psig 范围的乙烯分压下产生,并且
- 其中所述过渡金属络合物的所述选择的烯烃低聚物产物分布 K 值范围从 0.55 至 0.7 并且通过调整选自下列的烯烃低聚参数获得,
- i) 所述连续反应器中所述过渡金属络合物的过渡金属的浓度范围是从每千克烯烃低聚溶液 1.0×10^{-5} 至 1.0×10^{-2} 摩尔的过渡金属,
- ii) 所述连续反应器中所述烷基金属化合物的金属的浓度范围是从每千克烯烃低聚溶液 5.0×10^{-2} 至 1.0×10^1 摩尔的金属,
- iii) 所述连续反应器中所述烷基金属的金属与所述过渡金属络合物的过渡金属的摩尔比范围从 5 : 1 至 100,000 : 1,或

iv) 其任何组合。

13. 烯烃低聚方法,其包括:

a) 使在存在催化剂体系的情况下在连续反应器中低聚烯烃的烯烃低聚物产物分布 K 值与烯烃低聚参数关联,所述催化剂体系包括

- 1) 络合至包括吡啶双亚胺基团的配体的过渡金属化合物,和
- 2) 烷基金属化合物

所述烯烃低聚参数选自

i) 所述连续反应器中所述过渡金属络合物的过渡金属的浓度,

ii) 所述连续反应器中所述烷基金属化合物的金属的浓度,

iii) 所述连续反应器中所述烷基金属的金属与所述过渡金属络合物的过渡金属的摩尔比,或

iv) 其任何组合;

b) 选择烯烃低聚反应器 K 值;和

c) 通过设置实现选择的烯烃低聚物分布 K 值必需的选择的烯烃低聚参数,在所述连续反应器中低聚所述烯烃,以形成所述选择的烯烃低聚物产物分布 K 值的烯烃低聚物产物。

14. 权利要求 13 所述的方法,其中所述过渡金属化合物包括 8-10 族卤化物、硝酸盐、硫酸盐、磷酸盐、卤酸盐、烃醇盐、羧酸盐或 β -二酮化物并且所述烷基金属化合物包括铝氧烷。

15. 权利要求 13 所述的方法,其中所述选择的烯烃低聚物产物分布 K 值范围从 0.5 至 0.8 并且以选自下列的烯烃低聚参数低聚所述烯烃,

i) 所述连续反应器中所述过渡金属络合物的过渡金属的浓度范围是从每千克烯烃低聚溶液 1.0×10^{-6} 至 5.0×10^{-1} 摩尔的过渡金属,

ii) 所述连续反应器中所述烷基金属化合物的金属的浓度范围是从每千克烯烃低聚溶液 5.0×10^{-3} 至 1.0×10^3 摩尔的金属,

iii) 所述连续反应器中所述烷基金属的金属与所述过渡金属络合物的过渡金属的摩尔比范围从 5 : 1 至 100,000 : 1,或

iv) 其任何组合。

16. 权利要求 13 所述的方法,其中所述烯烃低聚物产物在从 20°C 至 150°C 范围的温度下产生。

17. 权利要求 13 所述的方法,其中所述烯烃、所述过渡金属络合物和所述铝氧烷被同时引入所述连续反应器。

18. 权利要求 13 所述的方法,其中所述烯烃基本上由乙烯组成,所述过渡金属化合物包括卤化铁(II)或卤化钴(II),所述烷基金属化合物包括铝氧烷,所述烯烃低聚物产物在从 50°C 至 130°C 范围的温度下和从 150psig 至 2,000psig 范围的乙烯分压下产生,并且

其中所述过渡金属络合物的所述选择的烯烃低聚物产物分布 K 值范围从 0.55 至 0.7 并且以选自下列的烯烃低聚参数低聚所述烯烃,

i) 所述连续反应器中所述过渡金属络合物的过渡金属的浓度范围是从每千克烯烃低聚溶液 1.0×10^{-5} 至 1.0×10^{-2} 摩尔的过渡金属,

ii) 所述连续反应器中所述烷基金属化合物的金属的浓度范围是从每千克烯烃低聚溶

液 5.0×10^{-2} 至 1.0×10^1 摩尔的金属,

iii) 所述连续反应器中烷基金属的金属与过渡金属络合物的过渡金属的摩尔比范围从 5 : 1 至 100,000 : 1, 或

iv) 其任何组合。

19. 低聚方法, 其包括 a) 使烯烃和催化剂体系接触, 所述催化剂体系包括 i) 过渡金属络合物, 其包括络合至包括吡啶双亚胺基团的配体的过渡金属化合物, 和 ii) 烷基金属化合物, 和 b) 在连续反应器中在范围从 100°C 至 150°C 的温度下形成烯烃低聚物产物。

20. 权利要求 19 所述的方法, 其中所述过渡金属化合物包括 8-10 族卤化物、硝酸盐、硫酸盐、磷酸盐、卤酸盐、烃醇盐、羧酸盐或 β -二酮化物并且所述烷基金属化合物包括铝氧烷。

21. 权利要求 19 所述的方法, 其中以选自下列的烯烃低聚参数低聚所述烯烃,

i) 所述连续反应器中所述过渡金属络合物的过渡金属的浓度范围是从每千克烯烃低聚溶液 1.0×10^{-6} 至 5.0×10^{-1} 摩尔的过渡金属,

ii) 所述连续反应器中所述烷基金属化合物的金属的浓度范围是从每千克烯烃低聚溶液 5.0×10^{-3} 至 1.0×10^3 摩尔的金属,

iii) 所述连续反应器中所述烷基金属的金属与过渡金属络合物的过渡金属的摩尔比范围从 5 : 1 至 100,000 : 1, 或

iv) 其任何组合。

22. 权利要求 19 所述的方法, 其中所述烯烃低聚物产物在范围从 100°C 至 120°C 的温度下产生。

23. 权利要求 19 所述的方法, 其中所述烯烃、所述过渡金属络合物和所述铝氧烷被同时引入所述连续反应器。

24. 权利要求 19 所述的方法, 其中所述烯烃基本上由乙烯组成, 所述过渡金属化合物包括卤化铁 (II) 或卤化钴 (II), 所述烷基金属化合物包括铝氧烷, 所述烯烃低聚物产物在从 150psig 至 2,000psig 范围的乙烯分压下产生, 并且

其中以选自下列的烯烃低聚参数低聚所述烯烃,

i) 所述过渡金属络合物的过渡金属的浓度是从每千克烯烃低聚溶液 1.0×10^{-5} 至 1.0×10^{-2} 摩尔的过渡金属,

ii) 所述连续反应器中所述烷基金属化合物的金属的浓度范围是从每千克烯烃低聚溶液 5.0×10^{-2} 至 1.0×10^1 摩尔的金属,

iii) 所述连续反应器中所述烷基金属的金属与所述过渡金属络合物的过渡金属的摩尔比范围从 5 : 1 至 100,000 : 1, 或

iv) 其任何组合。

烯烃低聚方法

[0001] 相关申请的交叉引用

[0002] 不适用。

技术领域

[0003] 本公开涉及生产烯烃低聚物的方法。更具体地，本公开涉及低聚烯烃的改进方法。

背景技术

[0004] 烯烃是重要的商品。它们的许多应用包括用作制造清洁剂的中间体，作为更环境友好的精炼油的前体，作为单体，并且作为许多其他类型产物的前体。烯烃的重要子集是烯烃低聚物，并且制造烯烃低聚物的一种方法是通过其他烯烃（例如乙烯）在包括各种类型催化剂和 / 或催化剂体系的催化反应中的低聚。烯烃低聚中商业上使用的催化剂体系的例子包括烷基铝化合物、某些镍 - 膦络合物、具有路易斯酸的卤化钛（例如二乙基氯化铝）和包括含铬化合物（例如羧酸铬）、含氮的配体（例如吡咯）和烷基金属（例如烷基铝化合物）的选择性 1-己烯催化剂体系。

[0005] 数个非商用烯烃低聚催化剂体系基于吡啶双亚胺的金属络合物、具有金属络合基团的 α -二亚胺化合物的金属络合物、和使用具有二膦基氨基基团的化合物的金属络合物的选择性三聚和 / 或四聚催化剂体系。这些催化剂体系通常使用烷基铝化合物（例如铝氧烷），以活化金属络合物，用于烯烃低聚。

[0006] 烯烃低聚物（例如 α 烯烃）的应用和需求持续增加，并且相应地加剧了供应它们的竞争。因此，期望烯烃低聚的另外的新颖和改进的方法。

发明内容

[0007] 一个方面中，本申请涉及烯烃低聚方法，其包括 a) 使烯烃和催化剂体系接触，以在连续反应器中形成烯烃低聚物产物，所述催化剂体系包括 i) 过渡金属络合物和 ii) 烷基金属化合物，和 b) 通过调整烯烃低聚参数控制烯烃低聚物产物分布 K 值，所述参数选自 i) 连续反应器中过渡金属络合物的过渡金属的浓度，ii) 连续反应器中烷基金属化合物的金属的浓度，iii) 连续反应器中烷基金属的金属与过渡金属络合物的过渡金属的摩尔比，或 iv) 其任何组合。在另一方面中，本申请涉及烯烃低聚方法，其包括 a) 使烯烃和催化剂体系接触，以在连续反应器中形成烯烃低聚物产物，所述催化剂体系包括 i) 过渡金属络合物和 ii) 烷基金属化合物，b) 从烯烃低聚物产物分布 K 值与烯烃低聚参数的相关性，选择烯烃低聚物产物分布 K 值，所述参数选自 i) 连续反应器中过渡金属络合物的过渡金属的浓度，ii) 连续反应器中烷基金属化合物的金属的浓度，iii) 连续反应器中烷基金属的金属与过渡金属络合物的过渡金属的摩尔比，或 iv) 其任何组合；和 c) 调整所选择的烯烃低聚参数以获得所选择的烯烃低聚物产物分布 K 值。在仍另一方面中，本申请涉及烯烃低聚方法，其包括 a) 使在存在催化剂体系的情况下在连续反应器中低聚烯烃的烯烃低聚物产物分布 K 值与烯烃低聚参数关联，所述催化剂体系包括 i) 过渡金属络合物和 ii) 烷基金属化合物，所述

烯烃低聚参数选自 i) 连续反应器中过渡金属络合物的过渡金属的浓度, ii) 连续反应器中烷基金属化合物的金属的浓度, iii) 连续反应器中烷基金属的金属与过渡金属络合物的过渡金属的摩尔比, 或 iv) 其任何组合 ; b) 选择烯烃低聚反应器 K 值 ; 和 c) 通过设置实现所选择的烯烃低聚物分布 K 值必需的选择的烯烃低聚参数, 以所选择的烯烃低聚物产物分布 K 值在连续反应器中低聚所述烯烃, 以形成烯烃低聚物产物。在仍进一步的方面中, 本申请涉及低聚方法, 其包括 a) 使烯烃和催化剂体系接触, 所述催化剂体系包括 i) 过渡金属络合物和 ii) 烷基金属化合物, 和 b) 在连续反应器中在范围从 100°C 至 150°C 的烯烃低聚温度下形成烯烃低聚物产物。

[0008] 在一种实施方式中, 过渡金属络合物包括络合至包括吡啶双亚胺基团的配体的过渡金属化合物。在一些实施方式中, 过渡金属化合物包括 8-10 族卤化物、硝酸盐、硫酸盐、磷酸盐、卤酸盐 (halate)、烃醇盐 (hydrocarboxide)、羧酸盐或 β -二酮化物。在一些实施方式中, 烷基金属化合物包括铝氧烷。在一些实施方式中, 烯烃低聚物产物分布 K 值可被控制在从 0.5 至 0.8 的范围。在一种实施方式中, 烯烃低聚物产物分布 K 值可通过调整烯烃低聚参数控制, 所述参数选自 i) 连续反应器中过渡金属络合物的过渡金属的浓度范围是从每千克烯烃低聚溶液 1.0×10^{-6} 至 5.0×10^{-1} 摩尔的过渡金属, ii) 连续反应器中烷基金属化合物的金属的浓度范围是从每千克烯烃低聚溶液 5.0×10^{-3} 至 1.0×10^3 摩尔的金属, iii) 连续反应器中烷基金属的金属与过渡金属络合物的过渡金属的摩尔比范围从 5 : 1 至 100,000 : 1, 或 iv) 其任何组合。在一些实施方式中, 烯烃低聚物产物在从 20°C 至 150°C 范围的温度下产生。在其他实施方式中, 1) 烯烃基本上由乙烯组成, 2) 过渡金属络合物包括络合至包括吡啶双亚胺基团的配体的卤化铁 (II) 或卤化钴 (II), 3) 烷基金属化合物包括铝氧烷, 4) 烯烃低聚物产物在从 50°C 至 130°C 范围的温度下和从 150psig 至 2,000psig 范围的乙烯分压下产生, 和 5) 通过调整烯烃低聚参数, 控制过渡金属络合物的烯烃低聚物产物分布 K 值在从 0.55 至 0.7 的范围, 所述参数选自 i) 连续反应器中过渡金属络合物的过渡金属的浓度范围是从每千克烯烃低聚溶液 1.0×10^{-5} 至 1.0×10^{-2} 摩尔的过渡金属 ii) 连续反应器中烷基金属化合物的金属的浓度范围是从每千克烯烃低聚溶液 5.0×10^{-2} 至 1.0×10^1 摩尔的金属, iii) 连续反应器中烷基金属的金属与过渡金属络合物的过渡金属的摩尔比范围从 5 : 1 至 100,000 : 1, 或 iv) 其任何组合。

附图说明

[0009] 为了更完整地理解本公开及其优点, 现在与附图和具体实施方式结合参考以下简述, 其中相同的附图标记代表相同的部分。

[0010] 图 1 提供图, 其显示铝氧烷的铝浓度和乙烯低聚物产物分布 K 值之间的关系。

[0011] 图 2 提供图, 其显示铝氧烷的铝与铁络合物的铁摩尔比和乙烯低聚物产物分布之间的关系。

[0012] 图 3 提供实验烯烃低聚装置的图。

具体实施方式

[0013] 为了更清楚地定义本文使用的术语, 提供以下定义。除非另外指出, 以下定义可以应用于本公开。如果一个术语在本公开中使用, 但是在本文没有具体地定义, 那么可以应用

IUPAC Compendium of Chemical Terminology, 2nd Ed (1997) 的定义, 只要那种定义不与本文应用的任何其它公开或定义冲突, 或者使得被那种定义所应用的任何权利要求不确定或者不能够实施。在由通过引用并入本文的任何文献提供的任何定义或用法与本文提供的定义或用法冲突的方面, 以本文提供的定义或用法为主。

[0014] 使用 Chemical and Engineering News, 63 (5), 27, 1985 出版的元素周期表版本中指出的编号方案, 指示周期表中元素的所在族。在一些情况下, 可以使用分配给族的通用名指示元素的族; 例如, 1 族元素的通用名为碱金属, 2 族元素的通用名为碱土金属, 3-12 族元素的通用名为过渡金属, 以及 17 族元素的通用名为卤素。

[0015] 关于权利要求过渡性术语或短语, 过渡性术语“包括 (comprising)”——其与“包括 (including)”、“包含 (containing)”、“含有 (having)”或“特征为 (characterized by)”是同义的——是包括性的或者开放的, 而不排除另外、未列出的要素或方法步骤。过渡性短语“由……组成 (consisting of)”排除在权利要求中没有指定的任何要素、步骤或成分。过渡性短语“基本由……组成 (consisting essentially of)”限制权利要求的范围至指定的材料或步骤和不实质上影响要求保护发明的基本特征和新颖性特征 (一个或多个) 的那些。“基本由……组成”权利要求占据了以“由……组成”形式撰写的封闭式权利要求和以“包括”形式撰写的开放式权利要求之间的中间地带。若不存在相反指示, 当描述化合物或组合物“基本由……组成”时不应该解释为“包括”, 而是旨在描述包括不显著地改变该术语所应用的组合物或方法的材料的所述组分。例如, 由材料 A 组成的原料可以包括在陈述的化合物或组合物的商业生产或商业可获得样品中一般存在的杂质。当权利要求包括不同特征和 / 或特征类别 (例如, 方法步骤、原料特征和 / 或产物特征以及其它可能性), 过渡性术语包括、基本由……组成和由……组成只应用于使用其特征类别, 并且在权利要求内不同特征应用具有不同的过渡性术语或短语是可能的。例如, 方法可以包括数个陈述的步骤 (和其它未陈述的步骤), 但是使用由特定步骤组成或可选地基本由特定步骤组成的催化剂系统制备, 和 / 或利用包括陈述组分和其它未陈述组分的催化剂系统。

[0016] 虽然组合物和方法通过“包括”各个组分或步骤进行描述, 但组合物和方法也可以“基本由各个组分或步骤组成”或“由各个组分或步骤组成”。

[0017] 除非另外特定指出, 术语“一个” (a)、“一个” (a) 和“所述” (the) 旨在包括复数替代, 例如, 至少一个。例如, “三烷基铝化合物”的公开旨在包括一种三烷基铝化合物, 或多种三烷基铝化合物的混合物或组合, 除非另外指出。

[0018] 在本公开中, 术语第一、第二和第三等可用于区分类似要素的多次出现。例如方法可在方法的不同步骤中使用两种或更多种溶剂, 或可选地, 混合物中两种不同的溶剂。当需要提供区分时区分术语可以应用于本文所描述的任何要素。应理解, 区分术语的数值或字母先后并不意味着本文所描述的方法或化合物中要素的特定顺序或先后, 除非另外特定指出。

[0019] 在本公开中, 方法可具有多个步骤或可包括具有许多不同要素的特征 (例如, 催化剂体系中的组分或烯烃低聚方法中的组分等等特征)。这些步骤和 / 或要素必要时可使用系列 a), b), c) 等, i), ii), iii) 等, (a), (b), (c) 等, 和 / 或 (i), (ii), (iii) 等 (以及其他命名系列) 命名, 为每个方法步骤和 / 或要素提供命名。应理解命名系列中命名的数值或字母的先后并不意味着本文所描述的方法步骤、本文所描述的特征 (一个或多个)

和 / 或特征中要素 (一个或多个) 的具体顺序或先后, 除非另外特定指出或其他方法步骤、要素和 / 或要素特征必需。另外, 提供这些命名系列, 以区分特征中不同的方法步骤和 / 或要素并且必要时可使用, 并且在本说明书中不考虑具体步骤、要素或特征使用的命名系列, 只要命名系列一致地区分不同的特征、不同的方法步骤和 / 或特征的不同要素。

[0020] 对于本文公开的任何具体化合物, 提供的一般结构或名称也旨在包括可以产生于特定组的取代基的所有结构异构体、构象异构体和立体异构体, 除非另外指出。因此, 化合物的一般性提及包括所有的结构异构体, 除非另外清楚指出; 例如, 一般性提及戊烷包括正戊烷、2-甲基-丁烷和 2,2-二甲基丙烷, 同时一般性提及丁基包括正丁基、仲丁基、异丁基和叔丁基。另外, 如上下文允许或要求, 一般结构或名称的提及包括所有对映体、非对映体和其它光学异构体, 不论是对映体或消旋形式, 以及立体异构体的混合物。对于呈现的任何具体结构式或名称, 提供的任何通式或名称也包括可产生于具体组取代基的所有构象异构体、区域异构体和立体异构体。

[0021] 根据该基团如何形式地衍生自参比化合物或“母体”化合物描述化学“基团”, 例如, 通过从母体化合物形式地去除以生成基团的氢原子数量, 即使该基团严格地不是以这种方式合成。这些基团可以用作取代基或者配位或者键合至金属原子。作为实例, “烷基”可以形式地通过从烷烃去除一个氢原子进行衍生, 而“亚烷基”可以形式地通过从烷烃去除两个氢原子进行衍生。而且, 更上位术语可以用于包括形式地通过从母体化合物去除任何数量 (“一个或多个”) 氢原子进行衍生的各种基团, 在这个实例中其可以描述为“烷烃基团 (alkane group)”, 并且其包括“烷基”、“亚烷基”和根据情况需要从烷烃去除三个或更多个氢原子的物质。就通篇来说, 取代基、配体或其它化学部分可以组成具体“基团”的公开暗示当如描述使用该基团时, 遵循熟知的化学结构和键合规则。当描述基团为“通过... 衍生”、“由... 衍生”、“通过... 形成”或“由... 形成”时, 这些术语以形式意义使用, 并不意欲反映任何特定的合成方法或步骤, 除非另外指出或者上下文另有要求。

[0022] 当用于描述基团时, 术语“取代的”——例如当指特定基团的取代类似物时——意欲描述在那种基团中形式地取代氢的任何非氢部分, 并且意欲是非限制性的。一个基团或多个基团也可以在此称为“未取代的”或者等同的术语诸如“非取代的”, 它指在那基团内其中非氢部分不代替氢的原始基团。“取代的”意欲是非限制性的, 并且包括无机取代基或有机取代基。

[0023] 根据由 IUPAC 规定的定义在本文使用术语“有机基团”: 在碳原子具有一个自由价的有机取代基, 而不论官能团类型如何。类似地, “亚有机基团”指通过从有机化合物去除两个氢原子衍生的有机基团——从一个碳原子去除两个氢原子或者从两个不同碳原子中的每一个去除一个氢原子, 不论官能团的类型如何。“有机的基团”指通过从有机化合物的碳原子去除一个或多个氢原子形成的概括性基团。因此, “有机基团”、“亚有机基团”和“有机的基团”可以包含除碳和氢之外的有机官能团 (一个或多个) 和 / 或原子 (一个或多个), 也就是, 有机基团可以包括除了碳和氢之外的官能团和 / 或原子。例如, 除了碳和氢之外的原子的非限制性实例包括卤素、氧、氮、磷等等。官能团的非限制性实例包括醚、醛、酮、酯、硫化物、胺、磷等等。一方面, 去除以形成“有机基团”、“亚有机基团”或“有机的基团”的氢原子 (一个或多个) 可以连接至属于官能团的碳原子, 例如, 酰基 ($-\text{C}(\text{O})\text{R}$)、甲酰基 ($-\text{C}(\text{O})\text{H}$)、羧基 ($-\text{C}(\text{O})\text{OH}$)、烃羰基 (hydrocarbylcarbonyl group) ($-\text{C}(\text{O})\text{OR}$)、氰基 ($-\text{C}\equiv\text{N}$)、氨基

甲酰基 ($-\text{C}(\text{O})\text{NH}_2$)、N- 烃基氨基甲酰基 ($-\text{C}(\text{O})\text{NHR}$) 或 N, N' - 二烃基氨基甲酰基 ($-\text{C}(\text{O})\text{NR}_2$) 等等。在另一方面, 去除以形成“有机基团”、“亚有机基团”或“有机的基团”的氢原子 (一个或多个) 可以连接至不属于官能团和远离官能团的碳原子, 例如 $-\text{CH}_2\text{C}(\text{O})\text{CH}_3$ 、 $-\text{CH}_2\text{NR}_2$ 等等。“有机基团”、“亚有机基团”或“有机的基团”可以是包括环状或非环状的脂肪族的或者是芳香族的。“有机基团”、“亚有机基团”和“有机的基团”也包括含有杂原子的环、含有杂原子的环系统、杂芳香、杂芳香环系统。“有机基团”、“亚有机基团”和“有机的基团”可以是直链的或者支链的, 除非另外指定。最后, 需要说明的是, “有机基团”、“亚有机基团”或“有机的基团”定义分别包括“烃基”、“亚烃基”、“烃基团”, 以及包括“烷基”、“亚烷基”和“烷烃基团”等等作为成员。

[0024] 为了本申请的目的, 术语“由惰性官能团组成的有机基团”或该术语的变型指有机基团 (在碳原子上具有自由价), 其中官能团中存在的碳和氢之外的有机官能团 (一个或更多个) 和 / 或原子 (一个或更多个) 限于碳和氢之外的在本文限定的工艺条件下不与金属化合物络合和 / 或是惰性的那些官能团 (一个或更多个) 和 / 或原子 (一个或更多个)。因此, 术语“由惰性官能团组成的有机基团”或该术语的变型进一步限定可以存在于由惰性官能团组成的有机基团中的具体有机基团。另外, 术语“由惰性官能团组成的有机基团”可指有机基团中存在一个或更多个惰性官能团。术语“由惰性官能团组成的有机基团”或该术语的变型定义包括烃基基团作为成员 (以及其他基团)。类似地, “由惰性官能团组成的亚有机基团”指通过从由惰性官能团组成的有机化合物的一个或两个碳原子去除两个氢原子形成的有机基团并且“由惰性官能团组成的有机基团”指通过从由惰性官能团组成的有机化合物的一个或更多个碳原子去除一个或更多个氢原子形成的由惰性官能团组成的概括性有机基团。

[0025] 为了本申请的目的, “惰性官能团”是在杂原子上具有自由价的基团、其基本上不干扰本文所描述的其中具有惰性官能团的材料参与的方法和 / 或不与金属络合物的金属化合物络合。术语“不与金属化合物络合”可包括可与金属化合物络合但是在本文所描述的具体的分子中可能不与金属化合物络合的基团, 这是由于其配体中的位置关系。例如, 尽管烃氧基可与金属化合物络合, 但是位于取代的吡啶环或取代的亚胺苯基基团对位的烃氧基可以是惰性官能团, 因为单个金属化合物分子不能与双 (亚胺) 吡啶配体的三个氮原子和相同金属络合物分子中的对位烃氧基络合。因此, 具体官能团的惰性不仅仅与官能团的固有的不能络合金属化合物有关, 而且也可能与金属络合物中官能团的位置有关。基本上不干扰本文所描述的方法的惰性官能团的非限制性的例子可包括卤基 (氟基、氯基、溴基和碘基)、硝基、烃氧基 (例如烷氧基和 / 或芳氧基等) 和 / 或烃硫基基团 (例如 $\text{RS}-$) 等。

[0026] 无论什么时候在本说明书和权利要求书中使用, 术语“烃”指只包含碳和氢的化合物。其它标识词可以用于指出烃中特定基团的存在 (例如, 卤代烃指在烃中替代等同数量的氢原子的一个或多个卤素原子的存在)。术语“烃基基团”根据由 IUPAC 规定的定义在本文进行使用: 通过从烃去除一个氢原子形成的单价基团。烃基基团的非限制性的例子包括乙基、苯基、甲苯基、丙烯基等。类似地, “亚烃基基团”指从烃去除两个氢原子形成的基团——从一个碳原子去除两个氢原子或者从两个不同碳原子中的每一个去除一个氢原子。因此, 根据本文使用的术语, “烃基团”指通过从烃去除一个或多个氢原子 (根据特定基团的需要) 形成的概括性基团。“烃基基团”、“亚烃基基团”和“烃基团”可以是非环状基团或环

状基团,和 / 或可以是直链的或支链的。“烃基基团”、“亚烃基基团”和“烃基团”可以包括环、环系统、芳环和芳环系统,其仅包含碳和氢。“烃基基团”、“亚烃基基团”和“烃基团”作为实例分别包括芳基、亚芳基、芳烃基团、烷基、亚烷基、烷基团、环烷基、环亚烷基、环烷基团、芳烷基、芳亚烷基和芳烷基团以及其它基团作为成员。

[0027] 无论什么时候在本说明书和权利要求中使用,术语“烷烃”指饱和的烃化合物。其它标识词可以被用于指出烷中特定基团的存在(例如,卤代烷指在烷中替代相等数量的氢原子的一个或多个卤素原子的存在)。根据 IUPAC 规定的定义在本文使用术语“烷基”:从烷去除一个氢原子形成的单价基团。类似地,“亚烷基”指从烷去除两个氢原子形成的基团(从一个碳原子中去除两个氢原子或从两个不同碳原子去除一个氢原子)。“烷基团”是指通过从烷去除一个或多个氢原子(根据特定基团的需要)形成的基团的上位术语。“烷基”、“亚烷基”和“烷基团”可以是非环状的或环状的,和 / 或可以是直链的或支链的,除非另有指定。伯、仲、叔和季烷基分别通过从甲烷、烷的伯、仲、叔碳原子去除氢原子进行衍生。通过从直链烷烃的末端碳原子去除氢原子衍生正烷基。基团 CH_3 、 RCH_2 ($\text{R} \neq \text{H}$)、 R_2CH ($\text{R} \neq \text{H}$) 和 R_3C ($\text{R} \neq \text{H}$) 分别是伯、仲、叔和季烷基。

[0028] 环烷烃是有或没有侧链的饱和的环状烃,例如,环丁烷。具有一个或更多个内环双键或一个三键的不饱和环状烃分别称为环烯和环炔烃。具有仅仅一个、仅仅两个、仅仅三个等内环双键或三键的环烯和环炔烃可分别通过在环烯或环炔烃名字中使用术语“单”、“双”、“三”等等识别。环烯和环炔烃可进一步识别内环双键或三键的位置。

[0029] “环烷基基团”是通过从环烷烃的环碳原子去除氢原子衍生的单价基团。例如,1-甲基环丙基基团和 2-甲基环丙基基团图解如下。

[0030]



[0031] 类似地,“环亚烷基”指通过从环烷烃去除两个氢原子衍生的基团,其中至少一个是环碳。因此,“环亚烷基”包括衍生自其中两个氢原子形式上被从相同的环碳原子去除的环烷的基团、衍生自其中两个氢原子形式上被从两个不同环碳原子去除的环烷的基团和衍生自其中第一个氢原子形式上被从环碳去除和第二个氢原子形式上被从不是环碳的碳原子去除的环烷的基团。“环烷基团”指通过从环烷去除一个或多个氢原子(根据特定基团的需要且其中的至少一个是环碳)形成的概括性基团。应注意,根据本文提供的定义,一般的环烷基团(包括环烷基基团和环亚烷基)包括具有零个、一个或多于一个烃基取代基基团连接至环烷烃环碳原子(例如,甲基环丙基基团)并且是烃基团组的成员的那些。但是,当提及具有具体数量环烷烃环碳原子的环烷基团(例如,环戊烷基团或环己烷基团等)时,具有限定数量的环烷烃环碳原子的环烷基团的基本名称指未取代的环烷基团(包括没有烃基基团位于环烷基团环碳原子上)。从而,具有具体数量的环碳原子(例如,取代的环戊烷或取代的环己烷等)的取代的环烷基团指具有一个或更多个取代基基团(包括卤素、烃基基团或烃氧基以及其他取代基基团)的各自基团连接至环烷基团环碳原子。当具有限定数量的环烷烃环碳原子的取代的环烷基团是烃基团组的成员(或环烷基团一般组的成员)时,具有限定数量的环烷烃环碳原子的取代的环烷基团的每个取代基限于烃基取代基

基团。可容易辨别和选择一般的基团、具体的基团和 / 或具有具体数量的环碳原子的单独的取代的环烷基团（一个或更多个），其可用作烃基团的成员（或环烷基团的一般组的成员）。

[0032] 无论什么时候在本说明书和权利要求书中使用，术语“烯烃”指具有至少一个碳-碳双键的化合物，该碳-碳双键不是芳族环或芳族环系统的一部分。术语“烯烃”包括脂肪族和芳族、环状和环状、和 / 或直链的和支链的具有至少一个碳-碳双键的化合物，该碳-碳双键不是芳族环或环系统的一部分，除非另外清楚地指出。术语“烯烃”本身，不表明杂原子的存在或缺失，除非清楚地指出。具有仅仅一个、仅仅两个、仅仅三个等碳-碳双键的烯烃可分别通过在系统的名字中使用术语“单”、“双”、“三”等等识别。烯烃可以是进一步通过碳-碳双键（一个或更多个）的位置识别。术语“烯烃”指仅仅包含氢和碳的烯烃化合物。

[0033] 无论什么时候在本说明书和权利要求书中使用，术语“烯”指具有一个或更多个碳-碳双键的直链或支链脂肪烯烃。具有仅仅一个、仅仅两个、仅仅三个等这种多键的烯可通过在名字中使用术语“单”、“双”、“三”等等识别。例如，单烯、二烯和三烯分别指具有仅仅一个碳-碳双键（通式 C_nH_{2n} ）、仅仅两个碳-碳双键（通式 C_nH_{2n-2} ）和仅仅三个碳-碳双键（通式 C_nH_{2n-4} ）的直链或支链烯。烯可以进一步通过碳-碳双键（一个或更多个）的位置识别。其他标示可用于指示烯中具体基团的存在或缺失。例如，卤代烯指一个或更多个氢原子用卤素原子取代的烯。

[0034] 如在本说明书和权利要求书中使用的术语“ α 烯烃”指在最长的连续碳原子链的第一和第二个碳原子之间具有碳-碳双键的烯烃。术语“ α 烯烃”包括直链和支链的 α 烯烃，除非另外清楚地说明。在支链的 α 烯烃的情况下，支链可以在相对于烯属双键的 2-位（亚乙烯基）和 / 或 3-位或更高位。无论什么时候在本说明书和权利要求书中使用术语“亚乙烯基”指相对于烯属双键在 2-位具有支链的 α 烯烃。术语“ α 烯烃”本身不表明杂原子的存在或不存在和 / 或其它碳-碳双键的存在或不存在，除非清楚指出。术语“ α 烯烃”或“ α 烯烃烃”指只包含氢和碳的 α 烯烃化合物。

[0035] 如本文使用的术语“直链 α 烯烃”指在第一和第二个碳原子之间具有碳-碳双键的直链烯烃。术语“直链 α 烯烃”自身不表明杂原子的存在或不存在和 / 或其它碳-碳双键的存在或不存在，除非清楚指出。术语“直链 α 烯烃”或“直链 α 烯烃烃”指只包含氢和碳的直链 α 烯烃化合物。

[0036] 无论什么时候在说明书和权利要求书中使用术语“正 α 烯烃”指在第一和第二个碳原子之间具有碳-碳双键的直链单烯烃。需要说明的是，正 α 烯烃”与“直链 α 烯烃”不同义，因为术语“直链 α 烯烃”可以包括在第一和第二个碳原子之间具有双键和具有杂原子和 / 或另外的双键的直链烯属化合物。

[0037] 无论什么时候在说明书和权利要求书中使用，术语“基本上由正 α 烯烃（一种或多种）组成”或其变型指商业可得的正 α 烯烃产物（一种或多种）。商业可得的正 α 烯烃产物可以包括非正 α 烯烃杂质如亚乙烯基类、内烯烃、支链 α 烯烃、烷属烃和二烯烃等杂质，其在正 α 烯烃生产过程中没有被除去。将容易意识到，在商业正 α 烯烃产物中存在的杂质的成分（identity）和数量取决于商业正 α 烯烃产物的来源。因此，相比于具体的商业正 α 烯烃产物中存在的量 / 数量，术语“基本上由正 α 烯烃组成”和其变型不意

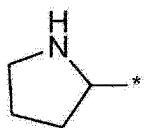
图更严格地限制所述非线性 α 烯烃组份的量 / 数量, 除非明确指出。

[0038] “有机杂基”是含碳的单价基团, 其因此是有机的, 但其在不是碳的原子处具有其自由价。因此, 有机杂基和有机基团是互补的且互相不包括的。有机杂基可以是环状的或非环状的, 和 / 或脂肪族或芳香族的, 并且因此囊括了脂肪族“环杂基团”(例如, 吡咯烷-1-基或吗啉-1-基等)、芳族“芳杂基基团”(例如, 吡咯-1-基或咪唑-1-基等) 和非环基团(例如, 有机硫代基、三烷基甲硅烷基、芳氧基或烷氧基等)。类似地, “亚有机杂基基团”是具有两个自由价的、含碳和至少一个杂原子的二价基团, 所述两个自由价的至少一个是在杂原子上。“有机杂基的基团”是来自有机杂基化合物的、具有一个或多个自由价的(根据具体基团的需要并且至少一个自由价是在杂原子上)、含碳和至少一个杂原子的概括性基团。

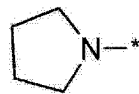
[0039] “杂环化合物”是具有至少两个不同的元素作为环成员原子的环状化合物。例如, 杂环化合物可以包括含碳和氮的环(例如, 四氢吡咯)、含碳和氧的环(例如, 四氢呋喃)、或含碳和硫的环(例如, 四氢噻吩)等等。杂环化合物和杂环基团可以是脂肪族的或芳香族的。

[0040] “杂环基团”是通过从杂环化合物的杂环环或环系统碳原子去除氢原子形成的单价基团。通过指定从杂环环或环系统碳原子去除氢原子, “杂环基团”不同于“环杂基团(cycloheteryl group)”, 在环杂基团中是从杂环环或环系统的杂原子上去除氢原子。例如, 以下所示吡咯烷-2-基基团是“杂环基团”的一个实例, 而以下所示的吡咯烷-1-基基团是“环杂基团”的一个实例。

[0041]



吡咯烷-2-基
“杂环基团”



吡咯烷-1-基
“环杂基团”

[0042] 类似地, “亚杂环基团”或更简单地“亚杂环基”, 指通过从杂环化合物去除两个氢原子形成的基团——至少一个氢原子来自杂环的环或环系统碳。因此, 在“亚杂环基团”中, 从杂环环或环系统碳原子去除至少一个氢, 并且可以从任何其它碳原子去除其它氢原子, 包括例如, 同一杂环环或环系统碳原子、不同杂环环或环系统环碳原子、或非环碳原子。“杂环的基团”指通过从杂环化合物去除一个或多个氢原子(根据具体基团的需要, 并且至少一个氢原子来自杂环环碳原子)形成的概括性基团。一般而言, 杂环化合物可以是脂肪族的或芳香族的, 除非另外指出。

[0043] “环杂基团”是如说明通过从杂环化合物的杂环环或环系统杂原子去除氢原子形成的单价基团。通过指定从杂环环或环系统的杂原子而非从环碳原子去除氢原子, “环杂基团”不同于从杂环环或环系统碳原子去除氢原子的“杂环基团”。类似地, “亚环杂基团”指通过从杂环化合物去除两个氢原子形成的基团——至少一个氢原子来自杂环化合物的杂环环或环系统杂原子; 可以从任何其它原子去除其它氢原子, 包括例如, 杂环环或环系统环碳原子、另一杂环环或环系统杂原子或非环原子(碳或杂原子)。“环杂的基团”指通过从杂环化合物去除一个或多个氢原子(根据具体基团的需要并且至少一个氢原子来自杂环

环或环系统杂原子)形成的概括性基团。

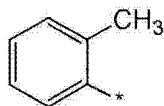
[0044] 脂肪族化合物是非环状或环状的、饱和的或不饱和的碳化合物,不包括芳族化合物。“脂肪族基”是通过从脂肪族化合物的碳原子去除一个或更多个氢原子(根据具体基团的需要)形成的概括性基团。脂肪族化合物并且因此脂肪族基可包含碳和氢之外的有机官能团(一个或更多个)和/或原子(一个或更多个)。

[0045] 芳族化合物是包含环状共轭双键系统的化合物,其遵守休克尔($4n+2$)规则和包含($4n+2$) π -电子,其中 n 是从1至5的整数。芳族化合物包括“芳烃”(烃芳族化合物)和“杂芳烃”,也称为“杂芳”(形式上通过用三价或二价杂原子取代环状共轭双键系统的一个或更多个次甲基($-C=$)碳原子而从芳烃衍生的杂芳族化合物,以维持芳族系统的连续 π -电子系统特征和对应休克尔规则($4n+2$)的多个面外 π -电子的方式)。虽然芳烃化合物和杂芳烃化合物是芳族化合物组的互相不包括的成员,但是具有芳烃基团和杂芳烃基团的化合物一般认为是杂芳烃化合物。芳族化合物、芳烃和杂芳烃可以是单环的(例如,苯、甲苯、呋喃、吡啶、甲基吡啶)或多环的,除非另外指出。除非另外指出,多环的芳族化合物、芳烃和杂芳烃包括其中芳环可以是稠合的化合物(例如萘、苯并呋喃和吲哚)、其中芳族基团可以由键分开和连接(例如联苯或4-苯基吡啶)的化合物、或其中芳族基团通过包含连接原子的基团连接(例如,联苯甲烷中的碳-亚甲基基团;氧-联苯醚;氮-三苯胺等连接基团)的化合物。如本文公开的,术语“取代的”可用于描述芳族基团、芳烃或杂芳烃,其中非氢部分形式上取代化合物中的氢,并且旨在是非限制性的。

[0046] “芳族基团”指通过从芳族化合物去除一个或更多个氢原子(根据具体基团的需要并且至少一个氢原子来自芳族环碳原子)形成的概括性基团。对于单价“芳族基团”,去除的氢原子必须来自芳族环碳。对于通过从芳族化合物去除多于一个氢原子形成的“芳族基团”,至少一个氢原子必须来自芳族环碳。另外,“芳族基团”可具有氢原子从芳族环或环系统的相同环去除(例如,亚苯-1,4-基、亚吡啶-2,3-基、亚萘-1,2-基和亚苯并呋喃-2,3-基),具有氢原子从环系统的两个不同环去除(例如,亚萘-1,8-基和亚苯并呋喃-2,7-基),或具有氢原子从两个隔开的芳环或环系统去除(例如,双(亚苯-4-基)甲烷)。

[0047] 芳烃是有或没有侧链的芳族烃(例如,苯、甲苯或二甲苯等)。“芳基基团”是从芳烃的芳族环碳形式上去除氢原子衍生的基团。应注意,芳烃可包含单个芳族环(例如,苯或甲苯),包含稠合的芳环(例如,萘或蒽),和包含一个或更多个通过键共价连接的隔开的芳环(例如,联苯)或非芳族烃基团(一个或更多个)(例如,二苯基甲烷)。“芳基基团”的一个例子是邻甲苯基(o-甲苯基),其结构显示在这里。

[0048]



[0049] 类似地,“亚芳基基团”指通过从芳烃上去除两个氢原子(其中至少一个来自芳环碳)形成的基团。“芳烃基团”指通过从芳烃上去除一个或多个氢原子(根据具体基团需要并且其中至少一个是芳环碳)形成的概括性基团。但是,如果基团包含分开的且不同的芳烃以及杂芳烃环或环系统(例如7-苯基苯并呋喃中的苯基和苯并呋喃部分),它的分类取决于氢原子被去除的具体的环或环系统,即,如果去除的氢来自芳烃环或环系统碳原子

(例如 6- 苯基苯并呋喃的苯基中的 2- 碳原子), 则是芳烃基团, 以及如果去除的氢来自杂芳环或环系统碳原子 (例如苯并呋喃基团或 6- 苯基苯并呋喃的 2- 或 7- 碳原子), 则是杂芳烃基团。应当注意, 根据本文提供的定义, 一般的芳烃基团 (包括芳基和亚芳基) 包括具有位于芳烃环或环系统碳原子上的零个、一个或不止一个烃基取代基的那些基团 (例如甲苯基或二甲苯基等), 并且是烃基团组的成员。但是, 苯基 (或亚苯基) 和 / 或萘基 (或亚萘基) 指具体的未取代的芳烃基团 (不包括位于芳烃环或环系统碳原子上的烃基)。因此, 取代的苯基或取代的萘基指具有位于芳烃环或环系统碳原子上的一个或多个取代基团 (包括卤素、烃基或烃氧基等) 的各芳烃基团。当取代的苯基和 / 或取代的萘基是烃基团组的成员 (或芳烃基团的一般组的成员) 时, 每个取代基被限制为烃基取代基团。本领域普通技术人员可容易地辨别和选择一般的苯基和 / 或萘基、具体的苯基和 / 或萘基和 / 或各取代的苯基或取代的萘基, 其可用作烃基团组的成员 (或芳烃基团的一般组的成员)。

[0050] “芳烷基基团”是芳基 - 取代的烷基基团, 其在非芳族碳原子具有自由价 (例如, 苄基或 2- 苯乙 -1- 基基团等)。类似地, “芳亚烷基”是芳基 - 取代的亚烷基, 其在单个非芳族碳原子具有两个自由价或在两个非芳族碳原子具有一个自由价, 而“芳烷基团”是概括性的芳基 - 取代的烷烃基团, 其在非芳族碳原子 (一个或更多个) 具有一个或更多个自由价。“杂芳烷基基团”是在非杂芳族环或环系统碳原子具有自由价的杂芳基 - 取代的烷基基团。类似地, “杂芳亚烷基”是杂芳基 - 取代的亚烷基, 其在单个非杂芳族环或环系统碳原子具有两个自由价或在两个非杂芳族环或环系统碳原子具有自由价, 而“杂芳烷基团”是概括性的芳基 - 取代的烷烃基团, 其在非杂芳族环或环系统碳原子 (一个或更多个) 具有一个或更多个自由价。应注意, 根据本文提供的定义, 一般的芳烷基团包括在芳烷烃芳族环或环系统碳原子具有零个、一个或多于一个烃基取代基基团并且是烃基团组的成员的那些。但是, 指定具体芳基基团 (例如, 苄基或 2- 苯基乙基基团等中的苯基) 的具体芳烷基团指具体的未取代的芳烷基团 (不包括位于芳烷烃芳族环或环系统碳原子上的烃基基团)。从而, 指定具体芳基基团的取代的芳烷基团指具有一个或更多个取代基基团 (包括卤素、烃基或烃氧基等) 的各芳烷基团。当指定具体芳基基团的取代的芳烷基团是烃基团组的成员 (或芳烷基团的一般组的成员) 时, 每个取代基限于烃基取代基基团。可容易辨别并且选择指定具体芳基基团的取代的芳烷基团, 其可用作烃基团组的成员 (或芳烷基团一般组的成员)。

[0051] “伯碳基团”、“仲碳基团”、“叔碳基团”和“季碳基团”描述当该基团连接至基础结构时产生的碳原子类型。“伯碳基团”是其中具有自由价的碳原子没有其他含碳原子基团与其连接的基团 (例如, 甲基、氯甲基等)。“仲碳基团”是其中具有自由价的碳原子具有一个且仅仅一个其他含碳原子基团与其连接的基团 (例如, 乙基、1- 氯乙 -1- 基或甲氧基甲基等)。“叔碳基团”是其中具有自由价的碳原子具有两个且仅仅两个其他含碳原子基团与其连接的基团 (例如, 异丙基、2- 氯丙 -1- 基或 1- 甲氧基乙 -1- 基等)。“季碳基团”是其中具有自由价的碳原子具有三个且仅仅三个其他含碳原子基团与其连接的基团 (例如, 叔丁基或 2- 甲氧基丙 -2- 基等)。

[0052] “卤基”具有其一般的意思; 因此, 卤基的例子包括氟基、氯基、溴基和碘基。

[0053] “有机铝化合物”用于描述包含铝 - 碳键的任何化合物。“烃基铝化合物”用于描述具有连接至铝原子的至少一个烃基基团的任何化合物。其他基团比如烃氧基基团 (hydrocarboxide group) (一个或更多个) (或烷氧基基团 (一个或更多个)) 以及卤素也

可结合化合物中的铝原子,除非另外指出;例如,三烷基铝化合物、二烷基卤化铝、烷基铝二烷氧基化合物和烷基铝氧烷(等等)都是烷基铝化合物。“烷基铝化合物”用于描述具有烷基基团连接至铝原子的任何化合物。其他基团比如烷氧基基团(一个或更多个)(或烷氧基基团(一个或更多个))和卤素也可结合化合物中的铝原子,除非另外指出;例如,三烷基铝化合物、二烷基卤化铝、烷基铝二烷氧基化合物和烷基铝氧烷(等等)都是烷基铝化合物。术语“有机铝化合物”、“烷基铝化合物”和“烷基铝化合物”也包括它们各自的包含铝-碳键的铝盐化合物,除非另外指出;例如,四(对甲苯基)铝盐等。

[0054] 在该公开中,“中性路易斯碱”意思是不是离子、可用作路易斯碱的化合物。这些化合物的例子包括醚、胺、硫醚和腈。“阳离子路易斯酸”意思是可用作路易斯酸的阳离子。这些阳离子的例子是钠和银阳离子。相对非配位(或弱配位)阴离子意思是如一般在本领域以该方式提及的那些阴离子,并且这些阴离子的配位能力是已知的并且在文献中讨论,见例如 W. Beck. 等, Chem. Rev., 88 卷 1405-1421 页 (1988), 和 S. H. Strauss, Chem. Rev., 93 卷, 927-942 页 (1993), 其二者通过引用并入本文。属于这些阴离子的是由上面定义的烷基铝化合物和 X^- 形成的那些, 包括 $R^9_3AlX^-$ 、 $R^9_2AlClX^-$ 、 $R^9AlCl_2X^-$ 和 R^9AlOX^- 。其他有用的非配位阴离子包括 BAF^- {BAF 是四 [3,5-双(三氟甲基)苯基] 硼酸盐}、 SbF_6^- 、 PF_6^- 和 BF_4^- 、三氟甲烷磺酸盐、对甲苯磺酸盐、 $(R_fSO_2)_2N^-$ (其中 R_f 是全氟烷基) 和 $(C_6F_5)_4B^-$ 。空配位位点意思是没有配体与其结合的潜在的配位位点。

[0055] 在本公开中采用有机名称的通常规则。例如,当提及取代的化合物或基团时,取代模式的提及是指,所指的基团(一个或多个)位于所指位置,并且所有其他未指定的位置是氢。例如,提及 4-取代的苯基指非氢取代基位于 4 位并且氢位于 2、3、5 和 6 位。另一例子,提及 3-取代的萘-2-基指非氢取代基位于 3 位并且氢位于 1、4、5、6、7 和 8 位。提及在除所指位置以外的位置还具有取代基的化合物或基团将使用包括或一些其他可替代的语言提及。例如,提及包括在 4 位的取代基的苯基指在 4 位具有非氢原子并且在 2、3、5 和 6 位具有氢或任何其他非氢基团的基团。

[0056] 术语“反应器流出物”和其衍生词(例如,低聚反应器流出物)一般指离开反应器的所有物质。术语“反应器流出物”和其衍生词也可以在前面放置限制正提及的反应器流出物的一部分的其它描述词。例如,当术语“反应器流出物”将指离开反应器的所有物质(例如,产物和溶剂或稀释剂等等)时,术语“烯烃反应器流出物”指包含烯烃即碳-碳双键的反应器流出物,并且术语“烯烃低聚物产物反应器流出物”指是烯烃低聚物产物的反应器流出物。

[0057] 术语“低聚”和其衍生词指这样的过程,其产生包含至少 70wt. % 的含有 2 至 30 个单体单元的产物的混合物。类似地,“低聚物”是包含 2 至 30 个单体单元的产物,而“低聚物产物”或“低聚产物”包括由“低聚”方法产生的所有产物,其包括“低聚物”和不是“低聚物”的产物(例如,包含多于 30 个单体单元的产物)。应注意,“低聚物”或“低聚产物”中的单体单元不是必须相同的。例如,使用乙烯和丙烯作为单体的“低聚”方法的“低聚物”、“低聚物产物”或“低聚产物”可以包括乙烯和 / 或丙烯单元。

[0058] 术语“具有 X 个碳原子的低聚物产物”和“ C_x 低聚物产物”或该术语的变型——其中 X 可以是任何非零正整数,指通过低聚产生的具有 X 个碳原子的材料。因此,术语“具有 X 个碳原子的低聚物产物”不包括具有 X 个碳原子、不是通过烯烃低聚产生的材料(例如溶

剂)。这些术语也可包括其他描述性词(例如,烯烃、液体和混合物等),而不背离提及低聚产生的具有X个碳原子的材料的术语的本质,并且适合另外的描述性术语。术语“烯烃低聚溶液”指包含低聚烯烃必要的所有组分并且包括烯烃低聚产生的烯烃低聚物产物的溶液。

[0059] 催化剂体系活性定义为在从全部的催化剂体系与烯烃接触时开始低聚或聚合反应头30分钟中,催化剂体系中使用的每克金属化合物(或金属络合物)的金属产生的产物的克数。可就烯烃低聚或聚合的各种产物描述催化剂体系活性。例如,在使用包括铁络合物作为金属络合物的催化剂体系的乙烯低聚过程中,可以使用的催化剂体系活性包括(g 乙烯低聚物)/(g Fe)和(总的低聚物产物)/(g Fe)等等。

[0060] 除非另外指出,术语接触、组合和“在……存在下”指接触或组合所叙述的两种或更多种组分的任何添加顺序、次序或浓度。组分的组合或接触,根据本文所描述的各种方法,可在合适的接触条件比如温度、压力、接触时间、流速等下在一个或多个接触区域发生。接触区域可以位于器皿(例如,储罐、货车、容器、混合器皿、反应器等)、一定长度的管(例如,三通、入口、注入端口或用于将组分进料管组合成公用管的集管)或用于使组分接触的任何其他合适装置中,除非另外指出。过程可以以间歇式或连续方法进行,如对于给定的实施方式适合的,除非另外指出。

[0061] 当提及接触方法时,术语“同时”、“同时接触”、“同时地接触”和它们的衍生词指其中两种或更多种叙述的化合物、混合物、流和/或组合物通过同时流入公用接头、罐、器皿或反应器等进行接触的接触方法。当提及接触方法时,术语“基本上同时”、“基本上同时接触”、“基本上同时地接触”和它们的衍生词指这样的接触方法,其中在两种或更多种叙述的化合物、混合物、流和/或组合物接触期间,两种或更多种叙述的化合物、混合物、流和/或组合物同时流入公用接头、罐、器皿或反应器。应注意,术语“基本上同时”、“基本上同时接触”、“基本上同时地接触”和它们的衍生词并不意味着两种或更多种叙述的化合物、混合物、流和/或组合物在两种或更多种叙述的化合物、混合物、流和/或组合物的每一种的整个添加过程中同时接触。术语“基本上同时”、“基本上同时接触”、“基本上同时地接触”和其衍生词包括这样的情形,其中叙述的化合物、混合物、流和/或组合物的一种(或少于全部)的流可开始进入公用接头、罐、器皿或反应器,然后其他的和/或叙述的化合物、混合物、流和/或组合物的一种(或少于全部)的流进入公用接头、罐、器皿或反应器可以在其他叙述的化合物、混合物、物料流和/或组合物之前结束、停止或中断。在本文所描述的任何实施方式或方面中,术语“同时”、“同时接触”、“同时地接触”和它们的衍生词,这些术语可以通过包括提供可同时地接触的每种叙述的化合物、混合物、流和/或组合物的量的术语修饰,指示不同程度的“基本上同时”、“基本上同时接触”、“基本上同时地接触”和它们的衍生词的情形。例如,至少20%、30%、40%、50%、60%、70%、75%、80%、85%、90%、95%的每种叙述的化合物、混合物、流和/或组合物可以“同时接触”或“同时地接触”。一般而言,可以“同时接触”或“同时地接触”的叙述的化合物、混合物、流和/或组合物的百分数可以按重量计(wt.%)、按体积计(体积%)或按摩尔计(摩尔%)。除非另外指出,“基本上同时”、“基本上同时接触”、“基本上同时地接触”的叙述的化合物、混合物、流和/或组合物和它们的衍生词应意味着至少50%的每种叙述的化合物、混合物、流和/或组合物可以“同时接触”或“同时地接触”。

[0062] 应进一步注意,提及接触方法或过程,“同时”、“同时接触”、“同时地接触”、“基本上同时接触”、“基本上同时地接触”和它们的衍生词不同于这样的方法或过程,其中一个或更多个第一材料(例如,化合物、混合物、流和/或组合物)已经存在于罐、器皿或反应器中并且一个或更多个其他化合物、混合物、流和/或组合物被添加至该罐、器皿或反应器。在该情况下,罐、器皿或反应器中的第一材料不与其他化合物、混合物、流和/或组合物和罐中的材料同时流入该罐、器皿或反应器。因此,第一材料和其他化合物、混合物、流和/或组合物不认为是与其他组分(一个或更多个)“同时接触”、“同时地接触”、“基本上同时接触”或“基本上同时地接触”。

[0063] 无论什么时候在本说明书和权利要求书中使用,涉及控制烯烃低聚依赖性参数(例如,“控制烯烃低聚物产物分布 K 值”)的任何短语中的术语“控制”指通过改变(或调整)独立的烯烃低聚方法参数,改变烯烃低聚的内部状态至不同状态(改变依赖性方法参数)。进一步,提及一个或更多个确定的独立的烯烃低聚方法参数,短语“将烯烃低聚物产物分布 K 值相关联”指确立一个或更多个确定的参数影响烯烃低聚物产物分布 K 值的值。确定的参数和 K 之间的关系/相关性是使得确定的参数的改变导致烯烃低聚物产物分布 K 值的改变。烯烃低聚物产物分布 K 值和确定的参数之间的关系可以是直接或间接原因并且不被短语“将烯烃低聚物产物分布 K 值相关联”限制。一般而言,控制依赖性烯烃低聚参数(例如,“控制烯烃低聚物产物分布 K 值”)可以通过改变(或调整)一个或更多个与独立的烯烃低聚参数相关的独立的烯烃低聚方法参数实现。

[0064] 本文公开的是烯烃低聚方法。在一种实施方式中,烯烃低聚方法可以是在一个或更多个反应器中实施的连续方法。本文中,连续方法指满足一个或更多个下列标准的方法:(a) 材料进料至反应器,同时从反应器去除产物;(b) 随着其从引入反应器的点流至从反应器去除的点,引入反应器的材料的条件是在该过程中其位置的函数;(c) 产生的产物的量是下述的函数:(i) 方法进行的持续时间和(ii) 方法的吞吐速度。在一种实施方式中,烯烃低聚方法可包括将烯烃和催化剂体系接触以形成烯烃低聚物产物。在另一实施方式中,烯烃低聚方法可包括将烯烃、过渡金属络合物和烷基金属化合物接触以形成烯烃低聚物产物。在一种实施方式中,烯烃低聚物产物可包括多于一种类型的烯烃低聚物并且烯烃低聚物产物中存在的烯烃低聚物的数量和类型可以使用本文公开的方法改变。一般而言,烯烃和催化剂体系(或过渡金属络合物和烷基金属化合物)是烯烃低聚方法的独立的要素。可以使用本文所描述的烯烃的任何方面或实施方式和本文所描述的催化剂体系的任何方面或实施方式(或过渡金属络合物的任何方面或实施方式和烷基金属化合物的任何方面或实施方式)的任何组合描述烯烃低聚方法。

[0065] 一般而言,可在烯烃低聚方法中低聚的烯烃可包括下述,或基本上由下述组成: C_2 至 C_{30} 烯烃;可选地, C_2 至 C_{16} 烯烃;或可选地, C_2 至 C_{10} 烯烃。在一种实施方式中,烯烃可以是,包括,或基本上由下述组成: α 烯烃;可选地,直链 α 烯烃;或可选地,正 α 烯烃。在一种实施方式中,烯烃可包括,或基本上由下述组成:乙烯、丙烯或其组合;可选地,乙烯;或可选地,丙烯。当烯烃低聚方法中使用的烯烃基本上由乙烯组成时,烯烃低聚方法可称为乙烯低聚方法。

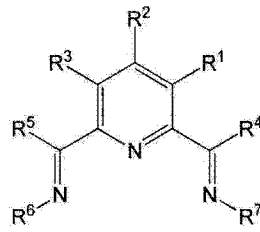
[0066] 一般而言,可用于烯烃低聚方法的催化剂体系可包括过渡金属络合物和能够抽取阴离子种类、氢负离子或烷基基团的路易斯酸;可选地,过渡金属络合物和烷基金属化合

物。在一种实施方式中,过渡金属络合物和路易斯酸是催化剂体系的独立的要素。本文独立地描述过渡金属络合物和路易斯酸并且可以使用本文所描述的过渡金属络合物的任何方面或实施方式和本文所描述的路易斯酸的任何方面或实施方式描述催化剂体系。一般而言,过渡金属络合物和烷基金属化合物是催化剂体系的独立的要素。本文独立地描述过渡金属络合物和烷基金属并且可以使用本文所描述的过渡金属络合物的任何方面或实施方式和本文所描述的烷基金属的任何方面或实施方式描述催化剂体系。

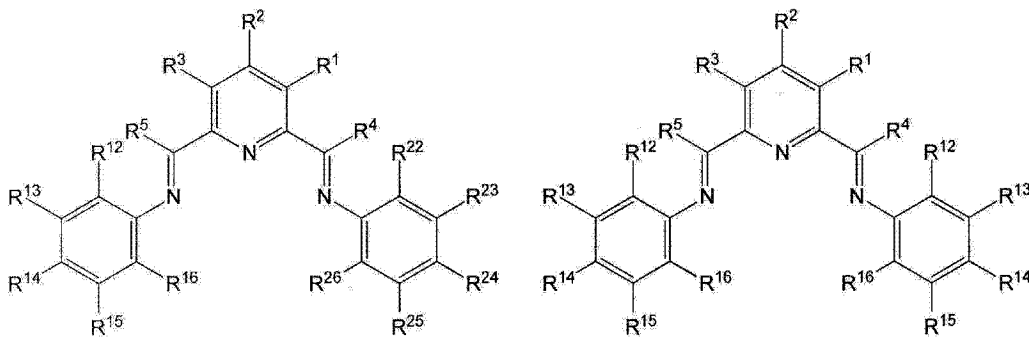
[0067] 一个方面中,过渡金属络合物可包括络合至配体的过渡金属化合物。一般而言,过渡金属化合物和配体是过渡金属络合物的独立的要素。本文独立地描述过渡金属化合物和配体。可以用本文所描述的过渡金属化合物的任何方面或实施方式和本文所描述的配体的任何方面或实施方式描述过渡金属络合物。在一些实施方式中,配体可包括吡啶双亚胺基团(一个或更多个)并且过渡金属络合物可称为络合至包括吡啶双亚胺基团的配体的过渡金属化合物。在其他实施方式中,配体可以是吡啶双亚胺配体(或化合物)并且过渡金属络合物可称为过渡金属吡啶双亚胺络合物。

[0068] 一个方面中,配体可包括吡啶双亚胺基团(也称为吡啶双亚胺配体)。在一些实施方式中,吡啶双亚胺配体可包括仅仅一个吡啶双亚胺基团;或可选地,吡啶双亚胺配体可包括仅仅两个吡啶双亚胺基团。在一种实施方式中,吡啶双亚胺配体可具有结构 PBI I、结构 PBI II、结构 PBI III、结构 BPBI I、结构 BPBI III,或其任何组合。在一些实施方式中,吡啶双亚胺配体可具有结构 PBI I、结构 PBI II、结构 PBI III,或其任何组合;或可选地,结构 BPBI I、结构 MPBI III,或其任何组合。在其他实施方式中,吡啶双亚胺配体可具有结构 PBI I;可选地,结构 PBI II;可选地,结构 PBI III;可选地,结构 BPBI I;或可选地,结构 MPBI III。结构 PBI I、结构 PBI II、结构 PBI III、结构 BPBI I 和结构 PBI III 的取代基 R^1 、 R^2 、 R^3 、 R^4 和 R^5 ;结构 PBI I 的 R^6 和 R^7 (或结构 BPBI I 的 R^6);结构 PBI II 的 R^{12} 、 R^{13} 、 R^{14} 、 R^{15} 、 R^{16} 、 R^{22} 、 R^{23} 、 R^{24} 、 R^{25} 和 R^{26} (或结构 PBI III 和结构 BPBI III 的 R^{13} 、 R^{13} 、 R^{14} 、 R^{15} 和 R^{16});和结构 BPBI I 和 BPBI III 的 L 每个是它们各自结构的独立的要素。可以使用本文所描述的取代基 R^1 、 R^2 、 R^3 、 R^4 、 R^5 、 R^6 、 R^7 、 R^{12} 、 R^{13} 、 R^{14} 、 R^{15} 、 R^{16} 、 R^{22} 、 R^{23} 、 R^{24} 、 R^{25} 和 R^{26} 的任何方面或实施方式和本文所描述的 L 的任何方面或实施方式的任何组合描述具有结构 PBI I、结构 PBI II、结构 PBI III、结构 BPBI I 和 / 或结构 BPBI III 的吡啶双亚胺配体。

[0069]



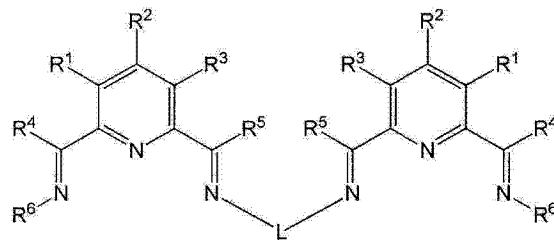
结构 PBI I



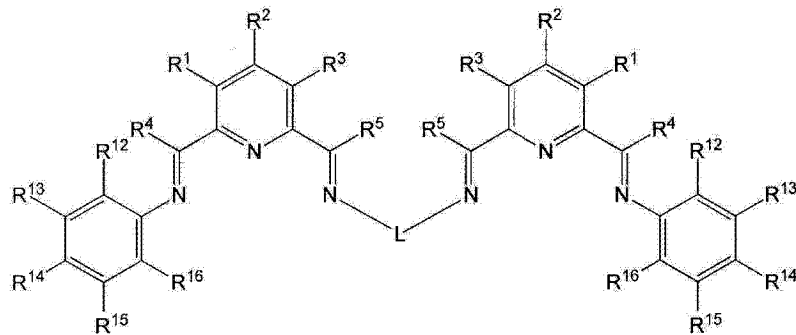
结构 PBI II

结构 PBI III

[0070]



结构 BPBI I



结构 BPBI III

[0071] 一个方面中, R^1 、 R^2 、和 R^3 独立地可以是氢、惰性官能团、或有机基团; 可选地, 氢或有机基团; 可选地, 惰性官能团或有机基团; 可选地, 氢、惰性官能团、或由惰性官能团组成的有机基团; 可选地, 氢或由惰性官能团组成的有机基团; 可选地, 惰性官能团或由惰性官能团组成的有机基团; 可选地, 氢、惰性官能团、或烃基基团; 可选地, 氢或烃基基团; 可选地, 惰性官能团或烃基基团; 可选地, 可选地, 氢或惰性官能团; 可选地, 氢; 可选地, 有机基团; 可选地, 由惰性官能团组成的有机基团; 或可选地, 烃基基团。在一个方面中, R^4 和 R^5 独

立地可以是氢或有机基团；可选地，氢和由惰性官能团组成的有机基团；可选地，氢和烷基基团；可选地，氢；可选地，有机基团；可选地，由惰性官能团组成的有机基团；或可选地，烷基基团。在一个方面中， R^6 和 R^7 独立地可以是有机杂基；可选地，有机基团；可选地，由惰性官能团组成的有机基团；或可选地，烷基基团。一个方面中， R^{12} 、 R^{13} 、 R^{14} 、 R^{15} 、 R^{16} 、 R^{22} 、 R^{23} 、 R^{24} 、 R^{25} 和 R^{26} 独立地可以是氢、惰性官能团、或有机基团；可选地，氢或有机基团；可选地，惰性官能团或有机基团；可选地，氢、惰性官能团、或由惰性官能团组成的有机基团；可选地，氢或由惰性官能团组成的有机基团；可选地，惰性官能团或由惰性官能团组成的有机基团；可选地，氢、惰性官能团、或烷基基团；可选地，氢或烷基基团；可选地，惰性官能团或烷基基团；可选地，可选地，氢或惰性官能团；可选地，氢；可选地，有机基团；可选地，由惰性官能团组成的有机基团；或可选地，烷基基团。本文独立地描述惰性官能团、有机杂基、有机基团、由惰性官能团组成的有机基团、和烷基基团。本文所描述的惰性官能团、有机杂基、有机基团、由惰性官能团组成的有机基团、和烷基基团的任何方面或实施方式可用于进一步描述具有结构 PBI I、结构 PBI II、结构 PBI III、结构 BPBI I 和 / 或结构 MPBI III 的吡啶双亚胺配体的任何方面或实施方式。

[0072] 在实施方式中，可用作非氢 R^1-R^3 、 R^4-R^5 、 R^6-R^7 、 $R^{12}-R^{16}$ 或 $R^{22}-R^{26}$ 的任何有机基团可以是 C_1 至 C_{30} 有机基团；可选地， C_1 至 C_{20} 有机基团；可选地， C_1 至 C_{15} 有机基团；可选地， C_1 至 C_{10} 有机基团；或可选地， C_1 至 C_5 有机基团。在一种实施方式中，可用作非氢 R^1-R^3 、 R^4-R^5 、 R^6-R^7 、 $R^{12}-R^{16}$ 或 $R^{22}-R^{26}$ 的任何由惰性官能团组成的有机基团可以是 C_1 至 C_{30} 由惰性官能团组成的有机基团；可选地， C_1 至 C_{20} 由惰性官能团组成的有机基团；可选地， C_1 至 C_{15} 由惰性官能团组成的有机基团；可选地， C_1 至 C_{10} 由惰性官能团组成的有机基团；或可选地， C_1 至 C_5 由惰性官能团组成的有机基团。在实施方式中，可用作非氢 R^1-R^3 、 R^4-R^5 、 R^6-R^7 、 $R^{12}-R^{16}$ 或 $R^{22}-R^{26}$ 的任何烷基基团可以是 C_1 至 C_{30} 烷基基团；可选地， C_1 至 C_{20} 烷基基团；可选地， C_1 至 C_{15} 烷基基团；可选地， C_1 至 C_{10} 烷基基团；或可选地， C_1 至 C_5 烷基基团。在一种实施方式中，可用作 R^6 和 / 或 R^7 的任何有机杂基可以是 C_1 至 C_{30} 有机杂基；可选地， C_1 至 C_{20} 有机杂基；可选地， C_1 至 C_{15} 有机杂基；可选地， C_1 至 C_{10} 有机杂基；或可选地， C_1 至有机杂基。

[0073] 一个方面中，每个非氢 R^1-R^3 、 R^4-R^5 、 R^6-R^7 、 $R^{12}-R^{16}$ 或 $R^{22}-R^{26}$ （有机基团、由惰性官能团组成的有机基团或烷基基团，这取决于其组成）独立地可以是烷基基团、取代的烷基基团、环烷基基团、取代的环烷基基团、芳基基团、取代的芳基基团、芳烷基基团或取代的芳烷基基团；可选地，烷基基团或取代的烷基基团；可选地，环烷基基团或取代的环烷基基团；可选地，芳基基团或取代的芳基基团；可选地，芳烷基基团或取代的芳烷基基团；可选地，烷基基团、环烷基基团、芳基基团或芳烷基基团；可选地，烷基基团；可选地，取代的烷基基团；可选地，环烷基基团；可选地，取代的环烷基基团；可选地，芳基基团；可选地，取代的芳基基团；可选地，芳烷基基团；或可选地，取代的芳烷基基团。一般而言，这些基团可具有与它们是成员的有机基团、由惰性官能团组成的有机基团或烷基基团相同数量的碳原子。这些基团本文独立地描述。本文所描述的这些基团的任何方面或任何实施方式可用作非氢 R^1-R^3 、 R^4-R^5 、 R^6-R^7 、 $R^{12}-R^{16}$ 和 / 或 $R^{22}-R^{26}$ ，以进一步描述具有结构 PBI I、结构 PBI II、结构 PBI III、结构 BPBI I 和 / 或结构 MPBI III 的吡啶双亚胺配体的任何方面或实施方式。从此处的描述可容易确定具体的取代的烷基基团、取代的环烷基基团、取代的芳基基团和 / 或取代的芳烷基基团是否是本文提供的说明书的有机基团、由惰性官能团组成的有机基团

和 / 或烃基基团。

[0074] 在一种实施方式中,用作非氢 R^1-R^3 、 R^4-R^5 、 R^6-R^7 、 $R^{12}-R^{16}$ 和 / 或 $R^{22}-R^{26}$ 的任何烷基基团 (取代的或未取代的) 独立地可以是 C_1 至 C_{30} 烷基基团;可选地, C_1 至 C_{20} 烷基基团;可选地, C_1 至 C_{15} 烷基基团;可选地, C_1 至 C_{10} 烷基基团;或可选地, C_1 至 C_5 烷基基团。在一些实施方式中,任何非氢 R^1-R^3 、 R^4-R^5 、 R^6-R^7 、 $R^{12}-R^{16}$ 和 / 或 $R^{22}-R^{26}$ 独立地可以是甲基、乙基、丙基、丁基、戊基、己基、庚基、辛基、壬基、癸基、十一基、十二基、十三基、十四基、十五基、十六基、十七基、十八基,或十九基;或可选地,甲基、乙基、丙基、丁基、戊基、己基、庚基、辛基、壬基或癸基。在其他实施方式中,任何非氢 R^1-R^3 、 R^4-R^5 、 R^6-R^7 、 $R^{12}-R^{16}$ 和 / 或 $R^{22}-R^{26}$ 独立地可以是甲基、乙基、正丙基、异丙基、正丁基、异丁基、仲丁基、叔丁基、正戊基、异戊基、仲戊基,或新戊基;可选地,甲基、乙基、异丙基、叔丁基或新戊基;可选地,甲基;可选地,乙基;可选地,正丙基;可选地,异丙基;可选地,叔丁基;或可选地,新戊基。在一些实施方式中,任何非氢 R^1-R^3 、 R^4-R^5 、 R^6-R^7 、 $R^{12}-R^{16}$ 和 / 或 $R^{22}-R^{26}$ 独立地可以是取代的烷基基团。可用作非氢 R^1-R^3 、 R^4-R^5 、 R^6-R^7 、 $R^{12}-R^{16}$ 和 / 或 $R^{22}-R^{26}$ 的取代的烷基基团的每个取代基独立地可以是卤基或烃氧基;可选地,卤基;或可选地,烃氧基。本文独立公开了可用作取代基的卤素和烃氧基并且可非限制地被使用以进一步描述可用作非氢 R^1-R^3 、 R^4-R^5 、 R^6-R^7 、 $R^{12}-R^{16}$ 和 / 或 $R^{22}-R^{26}$ 的取代的烷基基团。

[0075] 一个方面中,用作非氢 R^1-R^3 、 R^4-R^5 、 R^6-R^7 、 $R^{12}-R^{16}$ 和 / 或 $R^{22}-R^{26}$ 的任何环烷基基团 (取代的或未取代的) 独立地可以是 C_4 至 C_{30} 环烷基基团;可选地, C_4 至 C_{20} 环烷基基团;可选地, C_4 至 C_{15} 环烷基基团;或可选地, C_4 至 C_{10} 环烷基基团。在一种实施方式中,任何非氢 R^1-R^3 、 R^4-R^5 、 R^6-R^7 、 $R^{12}-R^{16}$ 和 / 或 $R^{22}-R^{26}$ 独立地可以是环丁基、取代的环丁基、环戊基、取代的环戊基、环己基、取代的环己基、环庚基、取代的环庚基、环辛基或取代的环辛基。在一些实施方式中,任何非氢 R^1-R^3 、 R^4-R^5 、 R^6-R^7 、 $R^{12}-R^{16}$ 和 / 或 $R^{22}-R^{26}$ 独立地可以是环戊基、取代的环戊基、环己基或取代的环己基。在其他实施方式中,任何非氢 R^1-R^3 、 R^4-R^5 、 R^6-R^7 、 $R^{12}-R^{16}$ 和 / 或 $R^{22}-R^{26}$ 独立地可以是环丁基或取代的环丁基;可选地,环戊基或取代的环戊基;可选地,环己基或取代的环己基;可选地,环庚基或取代的环庚基;或可选地,环辛基或取代的环辛基。在进一步的实施方式中,任何非氢 R^1-R^3 、 R^4-R^5 、 R^6-R^7 、 $R^{12}-R^{16}$ 和 / 或 $R^{22}-R^{26}$ 独立地可以是环戊基;可选地,取代的环戊基;环己基;或可选地,取代的环己基。本文独立公开了取代的环烷基基团的取代基并且可被使用而没有限制以进一步描述可用作非氢 R^1-R^3 、 R^4-R^5 、 R^6-R^7 、 $R^{12}-R^{16}$ 和 / 或 $R^{22}-R^{26}$ 的取代的环烷基基团。

[0076] 一个方面中,用作非氢 R^1-R^3 、 R^4-R^5 、 R^6-R^7 、 $R^{12}-R^{16}$ 和 / 或 $R^{22}-R^{26}$ 的任何芳基基团 (取代的或未取代的) 独立地可以是 C_6 至 C_{30} 芳基基团;可选地, C_6 至 C_{20} 芳基基团;可选地, C_6 至 C_{15} 芳基基团;或可选地, C_6 至 C_{10} 芳基基团。在一种实施方式中,任何非氢 R^1-R^3 、 R^4-R^5 、 R^6-R^7 、 $R^{12}-R^{16}$ 和 / 或 $R^{22}-R^{26}$ 独立地可以是苯基、取代的苯基、萘基或取代的萘基。在一些实施方式中,任何非氢 R^1-R^3 、 R^4-R^5 和 / 或 R^6-R^7 独立地可以是苯基或取代的苯基;可选地,萘基或取代的萘基;可选地,苯基或萘基;或可选地,取代的苯基或取代的萘基。在一些实施方式中,任何非氢 R^1-R^3 、 R^4-R^5 、 R^6-R^7 、 $R^{12}-R^{16}$ 和 / 或 $R^{22}-R^{26}$ 独立地可以是苯基;可选地,取代的苯基;可选地,萘基;或可选地,取代的萘基。在一些实施方式中,可用作任何非氢 R^1-R^3 、 R^4-R^5 、 R^6-R^7 、 $R^{12}-R^{16}$ 和 / 或 $R^{22}-R^{26}$ 的萘基 (取代的或未取代的) 可以是萘-1-基或萘-2-基;可选地,萘-1-基;或可选地,萘-2-基。本文独立公开了取代的苯基或取代的萘基的取代

基。可以使用这些取代基而没有限制以进一步描述可用作非氢 R^1-R^3 、 R^4-R^5 、 R^6-R^7 、 $R^{12}-R^{16}$ 和 / 或 $R^{22}-R^{26}$ 的取代的苯基或取代的萘基。在一些非限制性实施方式中, R^1-R^3 、 R^4-R^5 、 R^6-R^7 、 $R^{12}-R^{16}$ 和 / 或 $R^{22}-R^{26}$ 独立地可以是苯基、甲苯基、甲苄基或 2,4,6-三甲基苯基; 可选地, 苯基; 可选地, 甲苯基, 可选地, 甲苄基; 或可选地, 2,4,6-三甲基苯基。在一种实施方式中, 可用作 R^1-R^3 、 R^4-R^5 、 R^6-R^7 、 $R^{12}-R^{16}$ 和 / 或 $R^{22}-R^{26}$ 取代基的每个甲苯基独立地可以是 2-甲基苯基、3-甲基苯基或 4-甲基苯基; 可选地, 2-甲基苯基; 可选地, 3-甲基苯基; 或可选地, 4-甲基苯基。在一种实施方式中, 可用作 R^1-R^3 、 R^4-R^5 、 R^6-R^7 、 $R^{12}-R^{16}$ 和 / 或 $R^{22}-R^{26}$ 取代基的每个甲苄基独立地可以是 2,3-二甲基苯基、2,4-二甲基苯基、2,5-二甲基苯基、2,6-二甲基苯基、3,4-二甲基苯基或 3,5-二甲基苯基; 可选地, 2,4-二甲基苯基或 2,6-二甲基苯基; 可选地, 2,3-二甲基苯基; 可选地, 2,4-二甲基苯基; 可选地, 2,5-二甲基苯基; 可选地, 2,6-二甲基苯基; 可选地, 3,4-二甲基苯基; 或可选地, 3,5-二甲基苯基。

[0077] 一个方面中, 用作非氢 R^1-R^3 、 R^4-R^5 、 R^6-R^7 、 $R^{12}-R^{16}$ 和 / 或 $R^{22}-R^{26}$ 的任何芳烷基基团 (取代的或未取代的) 独立地可以是 C_7 至 C_{30} 芳烷基基团; 可选地, C_7 至 C_{20} 芳烷基基团; 可选地, C_7 至 C_{15} 芳烷基基团; 或可选地, C_7 至 C_{10} 芳烷基。在一种实施方式中, 任何非氢 R^1-R^3 、 R^4-R^5 、 R^6-R^7 、 $R^{12}-R^{16}$ 和 / 或 $R^{22}-R^{26}$ 独立地可以是苄基、取代的苄基、乙基苯基 (2-苯乙-1-基或 1-苯乙-1-基) 或取代的乙基苯基 (2-苯乙-1-基或 1-苯乙-1-基)。在一些实施方式中, 任何非氢 R^1-R^3 、 R^4-R^5 、 R^6-R^7 、 $R^{12}-R^{16}$ 和 / 或 $R^{22}-R^{26}$ 独立地可以是苄基或取代的苄基; 可选地, 乙基苯基或取代的乙基苯基; 可选地, 苄基或乙基苯基。在其他实施方式中, 任何非氢 R^1-R^3 、 R^4-R^5 、 R^6-R^7 、 $R^{12}-R^{16}$ 和 / 或 $R^{22}-R^{26}$ 独立地可以是苄基; 可选地, 取代的苄基; 可选地, 乙基苯基; 或可选地, 取代的乙基苯基。本文独立公开了取代的苄基或取代的乙基苯基 (2-苯乙-1-基或 1-苯乙-1-基) 的取代基。可以使用这些取代基而没有限制以进一步描述可用作非氢 R^1-R^3 、 R^4-R^5 、 R^6-R^7 、 $R^{12}-R^{16}$ 和 / 或 $R^{22}-R^{26}$ 的取代的苄基或取代的乙基苯基。

[0078] 一个方面中, 可用作非氢 R^1-R^3 、 $R^{12}-R^{16}$ 和 / 或 $R^{22}-R^{26}$ 的每个惰性官能团独立地可以是卤基、卤化的烃基基团、或烃氧基; 可选地, 卤基或卤化的烃基基团; 可选地, 卤基或烃氧基; 可选地, 卤化的烃基基团、或烃氧基; 可选地, 卤基; 可选地, 卤化的烃基基团; 或可选地, 烃氧基。在一种实施方式中, 可用作非氢 R^1-R^3 、 $R^{12}-R^{16}$ 和 / 或 $R^{22}-R^{26}$ 的每个卤化的烃基基团独立地可以是 C_1 至 C_{30} 卤化的烃基基团; 可选地, C_1 至 C_{20} 卤化的烃基基团; 可选地, C_1 至 C_{15} 卤化的烃基基团; 可选地, C_1 至 C_{10} 卤化的烃基基团; 或可选地, C_1 至 C_5 卤化的烃基基团。在一种实施方式中, 可用作非氢 R^1-R^3 、 $R^{12}-R^{16}$ 和 / 或 $R^{22}-R^{26}$ 的每个烃氧基独立地可以是 C_1 至 C_{30} 烃氧基; 可选地, C_1 至 C_{20} 烃氧基; 可选地, C_1 至 C_{15} 烃氧基; 可选地, C_1 至 C_{10} 烃氧基; 或可选地, C_1 至 C_5 烃氧基。在一种实施方式中, 可用作非氢 R^1-R^3 、 $R^{12}-R^{16}$ 和 / 或 $R^{22}-R^{26}$ 的惰性官能团独立地可以是 C_1 至 C_{30} 三烷基甲硅烷氧基基团; 可选地, C_1 至 C_{20} 三烷基甲硅烷氧基基团; 可选地, C_1 至 C_{15} 三烷基甲硅烷氧基基团; 可选地, C_1 至 C_{10} 三烷基甲硅烷氧基基团; 或可选地, C_1 至 C_5 三烷基甲硅烷氧基基团。

[0079] 一个方面中, 可用作非氢 R^1-R^3 、 $R^{12}-R^{16}$ 和 / 或 $R^{22}-R^{26}$ 的每个惰性官能团独立地可以是卤基、卤化的烷基基团、或烷氧基基团; 可选地, 卤基或卤化的烷基基团; 可选地, 卤基或烷氧基基团; 可选地, 卤化的烷基基团、或烷氧基基团; 可选地, 卤基; 可选地, 卤化的烷基基团; 或可选地, 烷氧基基团。在一种实施方式中, 可用作非氢 R^1-R^3 、 $R^{12}-R^{16}$ 和 / 或 $R^{22}-R^{26}$ 的惰性官能团独立地可以是 C_1 至 C_{30} 三烷基甲硅烷氧基基团; 可选地, C_1 至 C_{20} 三烷基甲硅

烷氧基基团；可选地， C_1 至 C_{15} 三烷基甲硅烷氧基基团；可选地， C_1 至 C_{10} 三烷基甲硅烷氧基基团；或可选地， C_1 至 C_5 三烷基甲硅烷氧基基团。卤化的烷基基团可具有与本文描述的卤化的烃基基团相同数量的碳原子。烷氧基基团可具有与本文描述的烃氧基相同数量的碳原子。三烷基甲硅烷氧基基团可具有与本文描述了三烷基甲硅烷氧基基团相同数量的碳原子。

[0080] 在一种实施方式中，可用作非氢 R^1-R^3 、 $R^{12}-R^{16}$ 和 / 或 $R^{22}-R^{26}$ （或用作本文所描述的任何一般的或具体的卤化的烃基基团的卤素）的每个卤基独立地可以是氟基、氯基、溴基或碘基。在一些实施方式中，可用作非氢 R^1-R^3 、 $R^{12}-R^{16}$ 和 / 或 $R^{22}-R^{26}$ （或用作卤化的烃基基团的卤素）的每个卤基独立地可以是氟基；可选地，氯基；可选地，溴基；或可选地，碘基。

[0081] 在一种实施方式中，用作非氢 R^1-R^3 、 $R^{12}-R^{16}$ 和 / 或 $R^{22}-R^{26}$ 的卤化的烃基基团（或烷基基团）独立地可以是其中一个或多个氢原子已经用等数量的卤素原子取代的任何烃基基团（或烷基基团）。烃基基团（或烷基基团）和卤素本文已经公开作为潜在的非氢基团，其可以用于至少 R^1-R^3 、 $R^{12}-R^{16}$ 和 / 或 $R^{22}-R^{26}$ 。可以使用这些烃基基团（或烷基基团）和卤素而没有限制以进一步描述可用作 R^1-R^3 、 $R^{12}-R^{16}$ 和 / 或 $R^{22}-R^{26}$ 的卤化的烃基基团（或卤化的烷基基团）。在一些非限制性实施方式中，可用作 R^1-R^3 、 $R^{12}-R^{16}$ 和 / 或 $R^{22}-R^{26}$ 的卤化的烷基基团可以是三氟甲基基团或五氟乙基基团；可选地，三氟甲基基团；或可选地，五氟乙基基团。

[0082] 一个方面中，每个非氢 R^1-R^3 、 $R^{12}-R^{16}$ 和 / 或 $R^{22}-R^{26}$ 独立地可以是烷氧基基团、芳氧基基团或芳烷氧基基团；可选地，烷氧基基团或芳氧基基团；可选地，烷氧基基团；可选地，芳氧基基团；或可选地，芳烷氧基基团。一般而言，这些基团可具有与可用作非氢 R^1-R^3 、 $R^{12}-R^{16}$ 和 / 或 $R^{22}-R^{26}$ 的烃氧基相同数量的碳原子，以进一步描述具有结构 PBI I、结构 PBI II、结构 PBI III、结构 BPBI I 和 / 或结构 MPBI III 的吡啶双亚胺配体的任何方面或实施方式。

[0083] 在一种实施方式中，用作非氢 R^1-R^3 、 $R^{12}-R^{16}$ 和 / 或 $R^{22}-R^{26}$ 的任何烷氧基基团独立地可以是 C_1 至 C_{30} 烷氧基基团；可选地， C_1 至 C_{20} 烷氧基基团；可选地， C_1 至 C_{15} 烷氧基基团；可选地， C_1 至 C_{10} 烷氧基基团；或可选地， C_1 至 C_5 烷氧基基团。在一些实施方式中，任何非氢 R^1-R^3 、 $R^{12}-R^{16}$ 和 / 或 $R^{22}-R^{26}$ 独立地可以是甲氧基基团、乙氧基基团、丙氧基基团、丁氧基基团、戊氧基基团、己氧基基团、庚氧基基团、辛氧基基团、壬氧基基团、癸氧基基团、十一氧基基团、十二氧基基团、十三氧基基团、十四氧基基团、十五氧基基团、十六氧基基团、十七氧基基团、十八氧基基团、或十九氧基基团；或可选地，甲氧基基团、乙氧基基团、丙氧基基团、丁氧基基团、戊氧基基团、己氧基基团、庚氧基基团、辛氧基基团、壬氧基基团、或癸氧基基团。在其他实施方式中，任何非氢 R^1-R^3 、 $R^{12}-R^{16}$ 和 / 或 $R^{22}-R^{26}$ 独立地可以是甲氧基基团、乙氧基基团、正丙氧基基团、异丙氧基基团、正丁氧基基团、异丁氧基基团、仲丁氧基基团、叔丁氧基基团、正戊氧基基团、异戊氧基基团、仲戊氧基基团、或新戊氧基基团；可选地，甲氧基基团、乙氧基基团、异丙氧基基团、叔丁氧基基团、或新戊氧基基团；可选地，甲氧基基团；可选地，乙氧基基团；可选地，正丙氧基基团；可选地，异丙氧基基团；可选地，叔丁氧基基团；或可选地，新戊氧基基团。

[0084] 一个方面中，用作非氢 R^1-R^3 、 $R^{12}-R^{16}$ 和 / 或 $R^{22}-R^{26}$ 的任何环烷氧基基团独立地可以是 C_4 至 C_{30} 环烷氧基基团；可选地， C_4 至 C_{20} 环烷氧基基团；可选地， C_4 至 C_{15} 环烷氧基基团

团;或可选地, C_4 至 C_{10} 环烷氧基基团。在一种实施方式中,任何非氢 R^1-R^3 、 $R^{12}-R^{16}$ 和 / 或 $R^{22}-R^{26}$ 独立地可以是环丁氧基基团、环戊氧基基团、环己氧基基团、环庚氧基基团、或环辛氧基基团;可选地,环戊氧基基团或环己氧基基团;可选地,环戊氧基基团;或可选地,环己氧基基团。

[0085] 一个方面中,用作非氢 R^1-R^3 、 $R^{12}-R^{16}$ 和 / 或 $R^{22}-R^{26}$ 的任何芳氧基基团独立地可以是 C_6 至 C_{30} 芳氧基基团;可选地, C_6 至 C_{20} 芳氧基基团;可选地, C_6 至 C_{15} 芳氧基基团;或可选地, C_6 至 C_{10} 芳氧基基团。在一种实施方式中,任何非氢 R^1-R^3 、 $R^{12}-R^{16}$ 和 / 或 $R^{22}-R^{26}$ 独立地可以是苯氧基基团、甲苯氧基基团、二甲苯氧基基团,或三甲基苯氧基;可选地,苯氧基基团;可选地,甲苯氧基基团;可选地,二甲苯氧基基团;或可选地,三甲基苯氧基。

[0086] 一个方面中,用作非氢 R^1-R^3 、 $R^{12}-R^{16}$ 和 / 或 $R^{22}-R^{26}$ 的任何芳烷氧基基团独立地可以是 C_7 至 C_{30} 芳烷氧基基团;可选地, C_7 至 C_{20} 芳烷氧基基团;可选地, C_7 至 C_{15} 芳烷氧基基团;或可选地, C_7 至 C_{10} 芳烷基。在一种实施方式中,任何非氢 R^1-R^3 、 R^4-R^5 、 R^6-R^7 、 $R^{12}-R^{16}$ 和 / 或 $R^{22}-R^{26}$ 独立地可以是苯甲酰氧基基团。

[0087] 一个方面中,可用作非氢 R^1-R^3 、 $R^{12}-R^{16}$ 和 / 或 $R^{22}-R^{26}$ 的每个三烷基甲硅烷氧基基团可以是三甲基甲硅烷氧基基团、三乙基甲硅烷氧基基团、三丙基甲硅烷氧基基团或三苯基甲硅烷氧基基团。在一种实施方式中,可用作非氢 R^1-R^3 、 $R^{12}-R^{16}$ 和 / 或 $R^{22}-R^{26}$ 的每个三烷基甲硅烷氧基基团可以是三甲基甲硅烷氧基基团、三乙基甲硅烷氧基基团或三丙基甲硅烷氧基基团;可选地,三甲基甲硅烷氧基基团;可选地,三乙基甲硅烷氧基基团;可选地,三丙基甲硅烷氧基基团;或可选地,三苯基甲硅烷氧基基团。

[0088] 在一种实施方式中,每个 R^6 和 / 或 R^7 独立地可以是苯基基团或取代的苯基基团;可选地,苯基基团;或可选地,取代的苯基基团。在一种实施方式中,可用作 R^6 和 / 或 R^7 的每个取代的苯基基团独立地可包括在 2- 位的取代基,在 3- 位的取代基,在 4- 位的取代基,在 2- 和 3- 位的取代基,在 2- 和 4- 位的取代基,在 2- 和 5- 位的取代基,在 2- 和 6- 位的取代基,或在 2-、4- 和 6- 位的取代基;可选地,在 2- 位的取代基,在 4- 位的取代基,在 2- 和 4- 位的取代基,在 2- 和 6- 位的取代基,或在 2-、4- 和 6- 位的取代基;可选地,在 2- 位的取代基;可选地,在 3- 位的取代基;可选地,在 4- 位的取代基;可选地,在 2- 和 3- 位的取代基;可选地,在 2- 和 4- 位的取代基;可选地,在 2- 和 5- 位的取代基;可选地,在 2- 和 6- 位的取代基或在 2-、4- 和 6- 位的取代基;可选地,在 2- 和 6- 位的取代基;或可选地,在 2-、4- 和 6- 位的取代基。在 R^6 和 R^7 独立地可以是在特定位置包括取代基的取代苯基基团的实施方式中,该取代苯基基团的剩余位置和指定的取代基位置可进一步具有与在指定位置包括取代基的具体的取代苯基基团一致的任何方面或实施方式。在一种实施方式中,可用作 R^6 和 / 或 R^7 的每个取代的苯基基团独立地可以是 2- 取代的苯基基团、3- 取代的苯基基团、4- 取代的苯基基团、2,3- 二取代的苯基基团、2,4- 二取代的苯基基团、2,5- 二取代的苯基基团、2,6- 二取代的苯基基团或 2,4,6- 三取代苯基基团;可选地,2- 取代的苯基基团、4- 取代的苯基基团、2,4- 二取代的苯基基团、2,6- 二取代的苯基基团或 2,4,6- 三取代苯基基团;可选地,2- 取代的苯基基团;可选地,4- 取代的苯基基团;可选地,2,3- 二取代的苯基基团;可选地,2,4- 二取代的苯基基团;可选地,2,5- 二取代的苯基基团;可选地,2,6- 二取代的苯基基团或 2,4,6- 三取代苯基基团;可选地,2,6- 二取代的苯基基团;可选地,2,4,6- 三取代苯基基团;或可选地,3,5- 二取代的苯基基团。一般而言,取代的苯基基

团的每个取代基可以是可用作 R^{12} 、 R^{13} 、 R^{14} 、 R^{15} 、 R^{16} 、 R^{22} 、 R^{23} 、 R^{24} 、 R^{25} 和 / 或 R^{26} 的本文所描述的任何基团。

[0089] 在一些非限制性实施方式中,可用作 R^6 和 / 或 R^7 的取代的苯基基团独立地可以是 2-氟苯基基团、2-氯苯基基团、2,6-二氟苯基基团、2,6-二氯苯基基团、3-氟-2-甲基苯基基团、4-氟-2-甲基苯基基团、2-氟-6-甲基苯基基团、2-氯-6-甲基苯基基团、2-氯-6-苯基苯基基团、(3-氯联苯-2-基基团)、2-(4-叔丁基苯基)-6-卤代苯基基团、(4'-叔丁基-3-卤代联苯-2-基基团)、2-甲基苯基基团、2-乙基苯基基团、2-异丙基苯基基团、2-叔丁基苯基基团、4-甲基苯基基团、4-乙基苯基基团、4-异丙基苯基基团、4-叔丁基苯基基团、2,3-二异丙基苯基基团、2,6-二甲基苯基基团、2,6-二乙基苯基基团、2,6-二异丙基苯基基团、2,6-二-叔丁基苯基基团、2,6-联苯苯基、3,5-二-叔丁基苯基基团、2,6-(4-叔丁基苯基)苯基基团、2,4,6-三甲基苯基基团、2-三氟甲基苯基基团、2,6-双(三氟甲基)苯基基团、2-(苯基)苯基基团(联苯-2-基基团)、2-(4-叔丁基苯基)苯基基团、(4'-叔丁基联苯-2-基基团)、1,2,3,4-四氢萘-5-基基团、2-甲氧基苯基基团、4-甲氧基苯基基团、2-三甲基甲硅烷氧基苯基基团,或 4-三甲基甲硅烷氧基苯基基团。在其他非限制性实施方式中,可用作 R^6 和 / 或 R^7 的取代的苯基基团独立地可以是 2-氟苯基基团、2-氯苯基基团、2,6-二氟苯基基团,或 2,6-二氯苯基基团;可选地,3-氟-2-甲基苯基基团、4-氟-2-甲基苯基基团、2-氟-6-甲基苯基基团,或 2-氯-6-甲基苯基基团;可选地,2-甲基苯基基团、2-乙基苯基基团、2-异丙基苯基基团、2-叔丁基苯基基团、4-甲基苯基基团、4-乙基苯基基团、4-异丙基苯基基团、4-叔丁基苯基基团、2,6-二甲基苯基基团、2,6-二乙基苯基基团、2,6-二异丙基苯基基团、2,6-二-叔丁基苯基基团,或 2,4,6-三甲基苯基基团;可选地,2-三氟甲基苯基基团或 2,6-双(三氟甲基)苯基基团;可选地,2-甲氧基苯基基团或 4-甲氧基苯基基团;或可选地,2-三甲基甲硅烷氧基苯基基团,或 4-三甲基甲硅烷氧基苯基基团。在其他非限制性实施方式中,可用作 R^6 和 / 或 R^7 的取代的苯基基团独立地可以是 2-氟苯基基团;可选地,2,6-二氟苯基基团;可选地,4-氟-2-甲基苯基基团;可选地,2-氟-6-甲基苯基基团;可选地,2-甲基苯基基团;可选地,2-乙基苯基基团;可选地,2-异丙基苯基基团;可选地,2-叔丁基苯基基团;可选地,4-甲基苯基基团;可选地,4-乙基苯基基团;可选地,4-异丙基苯基基团;可选地,4-叔丁基苯基基团;可选地,2,3-二异丙基苯基基团;可选地,2,6-二甲基苯基基团;可选地,2,6-二乙基苯基基团;可选地,2,6-二异丙基苯基基团;可选地,2,6-二-叔丁基苯基基团;可选地,2,6-联苯苯基;可选地,3,5-二-叔丁基苯基基团;可选地,2,6-(4-叔丁基苯基)苯基基团;可选地,2,4,6-三甲基苯基基团;可选地,2-三氟甲基苯基基团;可选地,2,6-双(三氟甲基)苯基基团;可选地,2-(苯基)苯基基团(联苯-2-基基团);可选地,2-(4-叔丁基苯基)苯基基团;可选地,(4'-叔丁基联苯-2-基基团);可选地,1,2,3,4-四氢萘-5-基基团;可选地,2-甲氧基苯基基团;可选地,4-甲氧基苯基基团;可选地,2-三甲基甲硅烷氧基苯基基团;或可选地,4-三甲基甲硅烷氧基苯基基团。可容易地认识到,具体的取代的苯基基团是否是 2-取代的苯基基团、4-取代的苯基基团、2,4-二取代的苯基基团、2,6-二取代的苯基基团或 2,4,6-三取代苯基基团、2,3-二甲基苯基基团、2,4-二甲基苯基基团、2,5-二甲基苯基基团

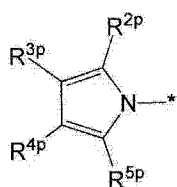
[0090] 一个方面中,可用作 R^6 和 R^7 的每个有机杂基独立地可以是氨基基团;可选地,

N- 烃基氨基基团或 N, N- 二烃基氨基基团, 或可选地, N- 烃基氨基基团 ; 或可选地, N, N- 二烃基氨基基团。一般而言, 氨基基团、N- 烃基氨基基团或 N, N- 二烃基氨基基团可具有与本文所描述的有机杂基相同数量的碳原子 (例外是 N, N- 二烃基氨基基团碳数量范围开始于 C₂)。本文独立地描述了烃基基团并且可以使用这些烃基基团 (一般的或具体的) 而没有限制, 以进一步描述可用作 R⁶ 和 R⁷ 的 N- 烃基氨基基团或 N, N- 二烃基氨基基团。

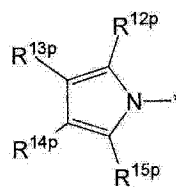
[0091] 一个方面中, R⁶ 和 R⁷ 独立地可以是 C₄ 至 C₃₀ 杂环基团 ; 可选地, C₄ 至 C₂₀ 杂环基团 ; 可选地, C₄ 至 C₁₅ 杂环基团 ; 或可选地, C₄ 至 C₁₀ 杂环基团。在一些实施方式中, R⁶ 和 R⁷ 独立地可以是 C₄ 至 C₃₀ 吡咯 -1- 基基团 ; 可选地, C₄ 至 C₂₀ 吡咯 -1- 基基团 ; 可选地, C₄ 至 C₁₅ 吡咯 -1- 基基团 ; 或可选地, C₄ 至 C₁₀ 吡咯 -1- 基基团。在一种实施方式中, R⁶ 和 R⁷ 独立地可以是吡咯 -1- 基基团或取代的吡咯 -1- 基基团 ; 可选地, 吡咯 -1- 基基团 ; 或可选地, 取代的吡咯 -1- 基基团。在 R⁶ 和 R⁷ 独立地可以是在具体位置包括取代基的取代的吡咯 -1- 基基团的实施方式中, 取代的吡咯 -1- 基的剩余位置和指定的取代基位置可进一步具有与在指定位置包括取代基的具体的取代吡咯 -1- 基基团一致的任何方面或实施方式。在一种实施方式中, 取代的吡咯 -1- 基基团可包括在 2- 位的取代基、在 2- 和 4- 位的取代基、或在 2- 和 5- 位的取代基 ; 可选地, 在 2- 位的取代基或在 2- 和 5- 位的取代基 ; 可选地, 在 2- 位的取代基 ; 可选地, 在 2- 和 4- 位的取代基 ; 或可选地, 在 2- 和 5- 位的取代基。在一种实施方式中, 取代的吡咯 -1- 基基团可以是 2- 取代的吡咯 -1- 基基团、2, 3- 二取代的吡咯 -1- 基基团、2, 4- 二取代的吡咯 -1- 基基团, 或 2, 5- 二取代的吡咯 -1- 基基团 ; 可选地, 2- 取代的吡咯 -1- 基基团或 2, 5- 二取代的吡咯 -1- 基基团 ; 可选地, 2- 取代的吡咯 -1- 基基团 ; 可选地, 2, 3- 二取代的吡咯 -1- 基基团 ; 可选地, 2, 4- 二取代的吡咯 -1- 基基团 ; 或可选地, 2, 5- 二取代的吡咯 -1- 基基团。

[0092] 在一种实施方式中, R⁶ 和 R⁷ 独立地可分别具有结构 P1 和结构 P2。

[0093]



结构 P1



结构 P2

[0094] 一般而言, R^{2p}、R^{3p}、R^{4p} 和 R^{5p} 是结构 P1 的独立的要素并且 R^{12p}、R^{13p}、R^{14p}, 和 R^{15p} 是结构 P2 的独立的要素。可以使用本文所描述的 R^{2p}、R^{3p}、R^{4p} 和 R^{5p} 的任何组合描述结构 P1 并且可以使用 R^{12p}、R^{13p}、R^{14p} 和 R^{15p} 的任何组合描述结构 P2。

[0095] 一个方面中, 结构 P1 中的每个 R^{2p}、R^{3p}、R^{4p} 和 R^{5p} 和结构 P2 中的每个 R^{12p}、R^{13p}、R^{14p} 和 R^{15p} (或取代的吡咯 -1- 基基团中的每个取代基) 可以是氢、惰性官能团或有机基团 ; 可选地, 氢或有机基团 ; 可选地, 惰性官能团或有机基团 ; 可选地, 氢、惰性官能团或由惰性官能团组成的有机基团 ; 可选地, 氢或由惰性官能团组成的有机基团 ; 可选地, 惰性官能团或由惰性官能团组成的有机基团 ; 可选地, 氢、惰性官能团或烃基基团 ; 可选地, 氢或烃基基团 ; 可选地, 惰性官能团或烃基基团 ; 可选地, 可选地, 氢或惰性官能团 ; 可选地, 氢 ; 可选地, 有机基团 ; 可选地, 由惰性官能团组成的有机基团 ; 或可选地, 烃基基团。本文独立地描述了惰性官能团、有机基团、由惰性官能团组成的有机基团和烃基基团作为具有结构 PBI I、结

构 PBI II、结构 PBI III、结构 BPBI I 和结构 MPBI III 的吡啶双亚胺配体中潜在的 R^1 、 R^2 、 R^3 、 R^{12} 、 R^{13} 、 R^{14} 、 R^{15} 、 R^{16} 、 R^{22} 、 R^{23} 、 R^{24} 、 R^{25} 和 R^{26} 基团。可以使用 R^1 、 R^2 、 R^3 、 R^{12} 、 R^{13} 、 R^{14} 、 R^{15} 、 R^{16} 、 R^{22} 、 R^{23} 、 R^{24} 、 R^{21} 和 R^{26} 基团的这些方面和实施方式而没有限制,以进一步描述 P1 中的 R^{2p} 、 R^{3p} 、 R^{4p} 和 R^{5p} 和 P2 中的每个 R^{12p} 、 R^{13p} 、 R^{14p} 和 R^{15p} (或取代的吡咯-1-基基团中的每个取代基)。

[0096] 在一种实施方式中,具有结构 P1 和 / 或结构 P2 的取代的吡咯-1-基基团可以是 2-甲基吡咯-1-基基团、2-乙基吡咯-1-基基团、2-异丙基吡咯-1-基基团、2-(4-叔丁基苯基)吡咯-1-基基团、2-苯基吡咯-1-基基团、2-(4-叔丁基苯基)吡咯-1-基基团、2,4-二甲基吡咯-1-基基团、2,5-二甲基吡咯-1-基基团、2,5-二乙基吡咯-1-基基团、2-乙基-5-甲基吡咯-1-基基团、2,5-二异丙基吡咯-1-基基团、2,5-二-叔丁基吡咯-1-基基团、2,5-联苯吡咯-1-基基团、2,5-二(4-叔丁基苯基)吡咯-1-基基团、2-甲基-5-苯基吡咯-1-基基团、2-叔丁基-5-异丙基吡咯-1-基基团、2-叔丁基-5-苯基吡咯-1-基基团、2-异丙基-5-甲基吡咯-1-基基团、2-叔丁基-4,5-二甲基吡咯-1-基基团、2-卤代-5-甲基吡咯-1-基基团、2-卤代-5-苯基吡咯-1-基基团,或 2-卤代-5-(4-叔丁基苯基)吡咯-1-基基团。在其他实施方式中,具有结构 P1 和 / 或结构 P2 的取代的吡咯-1-基基团可以是 2,5-二甲基吡咯-1-基基团、2,5-二乙基吡咯-1-基基团,或 2-乙基-5-甲基-吡咯-1-基基团;可选地,2,5-二甲基吡咯-1-基基团或 2,5-二乙基吡咯-1-基基团;可选地,2,5-二异丙基吡咯-1-基基团、2,5-二-叔丁基吡咯-1-基基团、2,5-联苯吡咯-1-基基团,或 2,5-二(4-叔丁基苯基)吡咯-1-基基团;或可选地,2,5-二异丙基吡咯-1-基基团或 2,5-二-叔丁基吡咯-1-基基团。在仍其他实施方式中,具有结构 P1 和 / 或结构 P2 的取代的吡咯-1-基基团可以是 2-甲基吡咯-1-基基团;可选地,2,4-二甲基吡咯-1-基基团;可选地,2,5-二甲基吡咯-1-基基团;可选地,2,5-二乙基吡咯-1-基基团;可选地,2-乙基-5-甲基-吡咯-1-基基团;可选地,2,5-二异丙基吡咯-1-基基团;可选地,2,5-二-叔丁基吡咯-1-基基团;可选地,2,5-联苯吡咯-1-基基团;或可选地,2,5-二(4-叔丁基苯基)吡咯-1-基基团。

[0097] 一个方面中,具有结构 BPBI I 和 / 或结构 BPBI III 的吡啶双亚胺配体的 L 可以是亚有机基团;可选地,由惰性官能团组成的亚有机基团;或可选地,亚烃基基团。在一种实施方式中,具有结构 BPBI I 和 / 或结构 BPBI III 的吡啶双亚胺配体的 L 可以是 C_1 至 C_{30} 亚有机基团;可选地, C_1 至 C_{20} 亚有机基团;可选地, C_1 至 C_{15} 亚有机基团;可选地, C_1 至 C_{10} 亚有机基团;或可选地, C_1 至 C_5 亚有机基团。在一些实施方式中,具有结构 BPBI I 和 / 或结构 BPBI III 的吡啶双亚胺配体的 L 可以是 C_1 至 C_{30} 由惰性官能团组成的亚有机基团;可选地, C_1 至 C_{20} 由惰性官能团组成的亚有机基团;可选地, C_1 至 C_{15} 由惰性官能团组成的亚有机基团;可选地, C_1 至 C_{10} 由惰性官能团组成的亚有机基团;或可选地, C_1 至 C_5 由惰性官能团组成的亚有机基团。在其他实施方式中,具有结构 BPBI I 和 / 或结构 BPBI III 的吡啶双亚胺配体的 L 可以是 C_1 至 C_{30} 亚烃基基团;可选地, C_1 至 C_{20} 亚烃基基团;可选地, C_1 至 C_{15} 亚烃基基团;可选地, C_1 至 C_{10} 亚烃基基团;或可选地, C_1 至 C_5 亚烃基基团。

[0098] 一个方面中,具有结构 BPBI I 和 / 或结构 BPBI III 的吡啶双亚胺配体的 L (亚有机基团、由惰性官能团组成的亚有机基团,或亚烃基基团,取决于其组成) 可以是亚烷基、取代的亚烷基、环亚烷基、取代的环亚烷基、亚芳基基团、取代的亚芳基基团、芳亚烷基,或取代的芳亚烷基;可选地,亚烷基、环亚烷基、亚芳基基团,或芳亚烷基;可选地,亚烷基或

取代的亚烷基；可选地，环亚烷基或取代的环亚烷基；可选地，亚芳基基团或取代的亚芳基基团；可选地，芳亚烷基，或取代的芳亚烷基；可选地，亚烷基；可选地，取代的亚烷基；可选地，环亚烷基；可选地，取代的环亚烷基；可选地，亚芳基基团；可选地，取代的亚芳基基团；可选地，芳亚烷基；或可选地，取代的芳亚烷基。一般而言，可用作具有结构 BPBI I 和 / 或结构 BPBI III 的吡啶双亚胺配体的 L 的亚烷基、取代的亚烷基、环亚烷基、取代的环亚烷基、亚芳基基团、取代的亚芳基基团、芳亚烷基和取代的芳亚烷基可具有与它们是成员的亚有机基团、由惰性官能团组成的亚有机基团，或亚烃基基团相同数量的碳原子。

[0099] 一个方面中，可用作具有结构 BPBI I 和 / 或结构 BPBI III 的吡啶双亚胺配体的 L 的亚烷基（取代的或未取代的）可以是 C_1 至 C_{40} 亚烷基（取代的或未取代的）；可选地， C_1 至 C_{20} 亚烷基（取代的或未取代的）；可选地， C_1 至 C_{10} 亚烷基（取代的或未取代的）；或可选地， C_1 至 C_5 亚烷基（取代的或未取代的）。在一种实施方式中，具有结构 BPBI I 和 / 或结构 BPBI III 的吡啶双亚胺配体的 L 可以是亚甲基基团、亚乙基基团、亚丙基基团、亚丁基基团、亚戊基基团、亚己基基团、亚庚基基团、亚辛基基团、亚壬基基团、亚癸基基团、亚十一基基团、亚十二基基团、亚十三基基团、亚十四基基团、亚十五基基团、亚十六基基团、亚十七基基团，或亚十八基基团；可选地，亚甲基基团、亚乙基基团、亚丙基基团、亚丁基基团、亚戊基基团、亚己基基团、亚庚基基团、亚辛基基团、亚壬基基团、亚癸基基团。在一些实施方式中，具有结构 BPBI I 和 / 或结构 BPBI III 的吡啶双亚胺配体的 L 可以是亚甲基基团、亚乙 -1,2- 基基团、亚丙 -1,2- 基基团、亚丙 -1,3- 基基团、亚丁 -1,2- 基基团、亚丁 -2,3- 基基团、亚丁 -1,4- 基基团、2- 甲基 - 亚丙 -1,2- 基基团、亚戊 -1,5- 基基团、亚戊 -1,4- 基基团、亚戊 -1,3- 基基团、亚戊 -2,4- 基基团、2,2- 二甲基亚丙 -1,3- 基基团、亚己 -1,6- 基基团、2- 甲基亚戊 -1,5- 基基团、2,3- 二甲基亚丁 -1,4- 基基团、2,3- 二甲基亚丁 -2,3- 基基团、1,7- 亚庚基基团、2,2' - 二甲基亚戊 -1,5- 基基团、亚辛 -1,8- 基基团、亚壬 -1,9- 基基团、2,2,4- 三甲基亚己 -1,6- 基基团、2,4,4- 三甲基亚己 -1,6- 基基团、1,10- 亚癸基基团、亚十一 -1,11- 基基团、2- 丁基 -2- 乙基亚戊 -1,5- 基基团，或 1,12- 亚十二基基团；或可选地，亚乙 -1,2- 基基团、亚丙 -1,3- 基基团、亚丁 -1,2- 基基团、亚丁 -1,4- 基基团、亚己 -1,6- 基基团、亚辛 -1,8- 基基团、1,10- 亚癸基基团，或 1,12- 亚十二基基团；可选地，亚甲基基团；可选地，亚乙 -1,2- 基基团；可选地，亚丙 -1,2- 基基团；可选地，亚丙 -1,3- 基基团；可选地，亚丁 -1,2- 基基团；可选地，亚丁 -2,3- 基基团；可选地，亚丁 -1,4- 基基团；可选地，2- 甲基亚丙 -1,2- 基基团；可选地，亚戊 -1,5- 基基团；可选地，亚戊 -1,4- 基基团；可选地，亚戊 -1,3- 基基团；可选地，亚戊 -2,4- 基基团；可选地，2,2- 二甲基亚丙 -1,3- 基基团；可选地，亚己 -1,6- 基基团；可选地，亚辛 -1,8- 基基团；可选地，1,10- 亚癸基基团；或可选地，1,12- 亚十二基基团。

[0100] 一个方面中，可用作具有结构 BPBI I 和 / 或结构 BPBI III 的吡啶双亚胺配体的 L 的环亚烷基（取代的或未取代的）可以是 C_3 - C_{40} 环烷基基团（取代的或未取代的）；可选地， C_3 - C_{20} 环烷基基团（取代的或未取代的）；可选地， C_3 - C_{15} 环烷基基团（取代的或未取代的）；或可选地， C_3 - C_{10} 环烷基基团（取代的或未取代的）。一个方面中，具有结构 BPBI I 和 / 或结构 BPBI III 的吡啶双亚胺配体的 L 可以是环亚丙基基团、取代的环亚丙基基团、环亚丁基基团、取代的环亚丁基基团、环亚戊基基团、取代的环亚戊基基团、环亚己基基团、取代的环亚己基基团、环亚庚基基团、取代的环亚庚基基团、环亚辛基基团，或取代的环亚辛基基团；或可

选地,环亚戊基基团、取代的环亚戊基基团、环亚己基基团,或取代的环亚己基基团。在一种实施方式中,具有结构BPBI I和/或结构BPBI III的吡啶双亚胺配体的L可以是环亚丙基基团或取代的环亚丙基基团;可选地,环丁基基团或取代的环丁基基团;可选地,环戊基基团或取代的环戊基基团;可选地,环己基基团或取代的环己基基团;可选地,环庚基基团或取代的环庚基基团;或可选地,环辛基基团,或取代的环辛基基团;可选地,环戊基基团;可选地,取代的环戊基基团;环己基基团;或可选地,取代的环己基基团。

[0101] 一个方面中,具有结构BPBI I和/或结构BPBI III的吡啶双亚胺配体的L可以是环亚戊-1,2-基基团、取代的环亚戊-1,2-基基团、环亚戊-1,3-基基团、取代的环亚戊-1,3-基基团、环亚己-1,2-基基团、取代的环亚己-1,2-基基团、环亚己-1,3-基基团、取代的环亚己-1,3-基基团、环亚己-1,4-基基团,或取代的环亚己-1,4-基基团。在一种实施方式中,具有结构BPBI I和/或结构BPBI III的吡啶双亚胺配体的L可以是环亚戊-1,2-基基团、取代的环亚戊-1,2-基基团、环亚戊-1,3-基基团,或取代的环亚戊-1,3-基基团;可选地,环亚己-1,2-基基团、取代的环亚己-1,2-基基团、环亚己-1,3-基基团、取代的环亚己-1,3-基基团、环亚己-1,4-基基团,或取代的环亚己-1,4-基基团;可选地,环亚戊-1,3-基基团,或取代的环亚戊-1,3-基基团;可选地,环亚己-1,3-基基团、取代的环亚己-1,3-基基团、环亚己-1,4-基基团,或取代的环亚己-1,4-基基团;可选地,环亚戊-1,3-基基团、环亚己-1,3-基基团,或环亚己-1,4-基基团;可选地,环亚戊-1,3-基基团;可选地,环亚己-1,3-基基团;或可选地,环亚己-1,4-基基团。

[0102] 在一种实施方式中,可用作具有结构BPBI I和/或结构BPBI III的吡啶双亚胺配体的L的取代的环亚戊-1,2-基基团可包括在3-位、4-位或3-和5-位;可选地,3-位或4-位;可选地,3-位;可选地,4-位;或可选地,3-和5-位的取代基。在一些实施方式中,可用作具有结构BPBI I和/或结构BPBI III的吡啶双亚胺配体的L的取代的环亚戊-1,2-基基团可以是3-取代的、4-取代的或3,5-二取代的环亚戊-1,2-基基团;可选地,3-取代的或4-取代的环亚戊-1,2-基基团;可选地,3-取代的环亚戊-1,2-基基团;可选地,4-取代的环亚戊-1,2-基基团;或可选地,3,5-二取代的环亚戊-1,2-基基团。在一种实施方式中,取代的环亚戊-1,3-基基团可包括在2-位、4-位、2-和4-位或4-和5-位;可选地,2-位或4-位;可选地,2-位;可选地,2-和4-位;或可选地,4-和5-位的取代基。在一些实施方式中,可用作具有结构BPBI I和/或结构BPBI III的吡啶双亚胺配体的L的取代的环亚戊-1,3-基基团可以是2-取代的、4-取代的、2,4-二取代的、4,5-二取代的、2,4,5-三取代的环亚戊-1,3-基基团;可选地,2-取代的或4-取代的环亚戊-1,3-基基团;可选地,2-取代的环亚戊-1,3-基基团;可选地,4-取代的环亚戊-1,3-基基团;可选地,2,4-二取代的环亚戊-1,3-基基团;可选地,4,5-二取代的环亚戊-1,3-基基团;或可选地,2,4,5-三取代的环亚戊-1,3-基基团。

[0103] 在一种实施方式中,可用作 R^2 和/或 R^4 的取代的环亚己-1,2-基基团可包括在3-位、4-位、3-和4-位、3-和5-位、或3-和6-位;可选地,3-位或4-位;可选地,3-和4-位、3-和5-位、或3-和6-位;可选地,3-位;可选地,4-位;可选地,3-和4-位;可选地,3-和5-位;或可选地,3-和6-位的取代基。在一些实施方式中,可用作 R^2 和/或 R^4 的取代的环亚己-1,2-基基团可以是3-取代的、4-取代的、3,4-二取代的、3,5-二取代的或3,6-二取代的环亚己-1,2-基基团;可选地,3-取代的或4-取代的环亚己-1,2-基基团;

可选地,3,4-二取代的、3,5-二取代的或3,6-二取代的环亚己-1,2-基基团;可选地,3-取代的环亚己-1,2-基基团;可选地,4-取代的环亚己-1,2-基基团;可选地,3,4-二取代的环亚己-1,2-基基团;可选地,3,5-二取代的环亚己-1,2-基基团;或可选地,3,6-二取代的环亚己-1,2-基基团。在一种实施方式中,取代的环亚己-1,3-基基团可包括在2-位,4-位,5-位,2-和4-位,2-和5-位,4-和6-位,或2-,4-和6-位;可选地,2-位,4-位,或5-位;可选地,2-和4-位,2-和5-位,或4-和6-位;可选地,3-位;可选地,4-位;可选地,5-位;可选地,2-和4-位;可选地,2-和5-位;可选地,4-和6-位;或可选地,2-,4-和6-位的取代基。在一些实施方式中,可用作 R^2 和/或 R^4 的取代的环亚己-1,3-基基团可以是2-取代的,4-取代的,5-取代的,2,4-二取代的,2,5-二取代的,4,6-二取代的,或2,4,6-三取代的环亚己-1,3-基基团;可选地,2-取代的,4-取代的,或5-取代的环亚己-1,3-基基团;可选地,2,4-二取代的,2,5-二取代的,4,6-二取代的环亚己-1,3-基基团;可选地,2-取代的环亚己-1,3-基基团;可选地,4-取代的环亚己-1,3-基基团;可选地,5-取代的环亚己-1,3-基基团;可选地,2,4-二取代的环亚己-1,3-基基团;可选地,2,5-二取代的环亚己-1,3-基基团;可选地,4,6-二取代的环亚己-1,3-基基团;或可选地,2,4,6-三取代的环亚己-1,3-基基团。在一种实施方式中,取代的环亚己-1,4-基基团可包括在2-位,2-和3-位,2-和5-位,2-和6-位,2-,3-和5-位,或2-,3-,5-和6-位;可选地,2-和3-位,2-和5-位,或2-和6-位;可选地,2-位;可选地,2-和3-位;可选地,2-和5-位;可选地,2-和6-位;可选地,2-,3-和5-位;或可选地,2-,3-,5-和6-位的取代基。在一些实施方式中,可用作 R^2 和/或 R^4 的取代的环亚己-1,4-基基团可以是2-取代的,2,3-二取代的,2,5-二取代的,2,6-二取代的,2,3,5-三取代的,或2,3,5,6-四取代的环亚己-1,4-基基团;可选地,2,3-二取代的,2,5-取代的,或2,6-二取代的环亚己-1,4-基基团;可选地,2-取代的环亚己-1,4-基基团;可选地,2,3-二取代的环亚己-1,4-基基团;可选地,2,5-二取代的环亚己-1,4-基基团;可选地,2,6-二取代的环亚己-1,4-基基团;可选地,2,3,5-三取代的环亚己-1,4-基基团;或可选地,2,3,5,6-四取代的环亚己-1,4-基基团。

[0104] 一个方面中,具有结构BPBI I和/或结构BPBI III的吡啶双亚胺配体的L可以是双环亚己基基团、取代的双环亚己基基团、双(环亚己基)甲烷基团、取代的双(环亚己基)甲烷基团、双(环亚己基)乙烷基团、取代的双(环亚己基)乙烷基团;可选地,双环亚己基基团或取代的双环亚己基基团;可选地,双(环亚己基)甲烷基团或取代的双(环亚己基)甲烷基团;可选地,双(环亚己基)乙烷基团或取代的双(环亚己基)乙烷基团;可选地,双(环亚己基)基团、双(环亚己基)甲烷基团,或双(环亚己基)乙烷基团;可选地,双(环亚己基)基团;可选地,双(环亚己基)甲烷基团;或可选地,双(环亚己基)甲烷基团。在一种实施方式中,具有结构BPBI I和/或结构BPBI III的吡啶双亚胺配体的L可以是双环亚己-3-基基团、取代的双环亚己-3-基基团、双环亚己-4-基基团,或取代的双环亚己-4-基基团;可选地,双环亚己-3-基基团或取代的双环亚己-3-基基团;可选地,双环亚己-4-基基团或取代的双环亚己-4-基基团;可选地,双环亚己-3-基基团或双环亚己-4-基基团;可选地,双环亚己-3-基基团;可选地,取代的双环亚己-3-基基团;可选地,双环亚己-4-基基团;或可选地,取代的双环亚己-4-基基团。在一些实施方式中,具有结构BPBI I和/或结构BPBI III的吡啶双亚胺配体的L可以是双(环亚己-3-基)甲烷基

团、取代的双(环亚己-3-基)甲烷基团、双(环亚己-4-基)甲烷基团,或取代的双(环亚己-4-基)甲烷基团;可选地,双(环亚己-3-基)甲烷基团或取代的双(环亚己-3-基)甲烷基团;可选地,双(环亚己-4-基)甲烷基团或取代的双(环亚己-4-基)甲烷基团;可选地,双(环亚己-3-基)甲烷基团,或双(环亚己-4-基)甲烷基团;可选地,双(环亚己-3-基)甲烷基团;可选地,取代的双(环亚己-3-基)甲烷基团;可选地,双(环亚己-4-基)甲烷基团;或可选地,取代的双(环亚己-4-基)甲烷基团。在其他实施方式中,具有结构 BPBI I 和 / 或结构 BPBI III 的吡啶双亚胺配体的 L 可以是双(环亚己-3-基)乙烷基团、取代的双(环亚己-3-基)乙烷基团、双(环亚己-4-基)乙烷基团,或取代的双(环亚己-4-基)乙烷基团;可选地,双(环亚己-3-基)乙烷基团,或取代的双(环亚己-3-基)乙烷基团;可选地,双(环亚己-4-基)乙烷基团或取代的双(环亚己-4-基)乙烷基团;可选地,双(环亚己-3-基)乙烷基团或双(环亚己-4-基)乙烷基团;可选地,双(环亚己-3-基)乙烷基团;可选地,取代的双(环亚己-3-基)乙烷基团;可选地,双(环亚己-4-基)乙烷基团;或可选地,取代的双(环亚己-4-基)乙烷基团。一般而言,本文公开的任何双(环亚己基)乙烷基团(取代的或未取代的)可以是双 1,1-(环亚己基)乙烷基团或双 1,2-(环亚己基)乙烷基团;可选地,双 1,1-(环亚己基)乙烷基团;或可选地,双 1,2-(环亚己基)乙烷基团。

[0105] 在一种实施方式中,可用作具有结构 BPBI I 和 / 或结构 BPBI III 的吡啶双亚胺配体的 L 的亚芳基基团(取代的或未取代的)可以是 C_6-C_{40} 亚芳基基团(取代的或未取代的);可选地, C_6-C_{20} 亚芳基基团(取代的或未取代的);可选地, C_6-C_{15} 亚芳基基团(取代的或未取代的);或可选地, C_6-C_{10} 亚芳基基团(取代的或未取代的)。在其他实施方式中,具有结构 BPBI I 和 / 或结构 BPBI III 的吡啶双亚胺配体的 L 可以是亚苯基基团、取代的亚苯基基团、亚萘基基团,或取代的亚萘基基团;可选地,亚苯基基团或取代的亚苯基基团;可选地,亚萘基基团或取代的亚萘基基团;可选地,亚苯基基团或亚萘基;可选地,亚苯基基团;可选地,取代的亚苯基基团;可选地,亚萘基基团;或可选地,取代的亚萘基基团。在一种实施方式中,具有结构 BPBI I 和 / 或结构 BPBI III 的吡啶双亚胺配体的 L 可以是亚苯-1,2-基基团、取代的亚苯-1,2-基基团、亚苯-1,3-基基团、取代的亚苯-1,3-基基团、亚苯-1,4-基基团,或取代的亚苯-1,4-基基团;可选地,亚苯-1,2-基基团或取代的亚苯-1,2-基基团;可选地,亚苯-1,3-基基团或取代的亚苯-1,3-基基团;可选地,亚苯-1,4-基基团或取代的亚苯-1,4-基基团;可选地,亚苯-1,2-基基团、亚苯-1,3-基基团,或亚苯-1,4-基基团;可选地,亚苯-1,2-基基团;可选地,取代的亚苯-1,2-基基团;可选地,亚苯-1,3-基基团;可选地,取代的亚苯-1,3-基基团;可选地,亚苯-1,4-基基团;或可选地,取代的亚苯-1,4-基基团。

[0106] 一个方面中,具有结构 BPBI I 和 / 或结构 BPBI III 的吡啶双亚胺配体的 L 可以是双亚苯基基团、取代的双亚苯基基团、双(亚苯基)甲烷基团、取代的双(亚苯基)甲烷基团、双(亚苯基)乙烷基团,或取代的双(亚苯基)乙烷基团;可选地,双亚苯基基团,或取代的双亚苯基基团;可选地,双(亚苯基)甲烷基团,或取代的双(亚苯基)甲烷基团;可选地,双(亚苯基)乙烷基团,或取代的双(亚苯基)乙烷基团;可选地,双亚苯基基团、双(亚苯基)甲烷基团,或双(亚苯基)乙烷基团;可选地,双亚苯基基团;可选地,取代的双亚苯基基团;可选地,双(亚苯基)甲烷基团;可选地,取代的双(亚苯基)甲烷基团;可

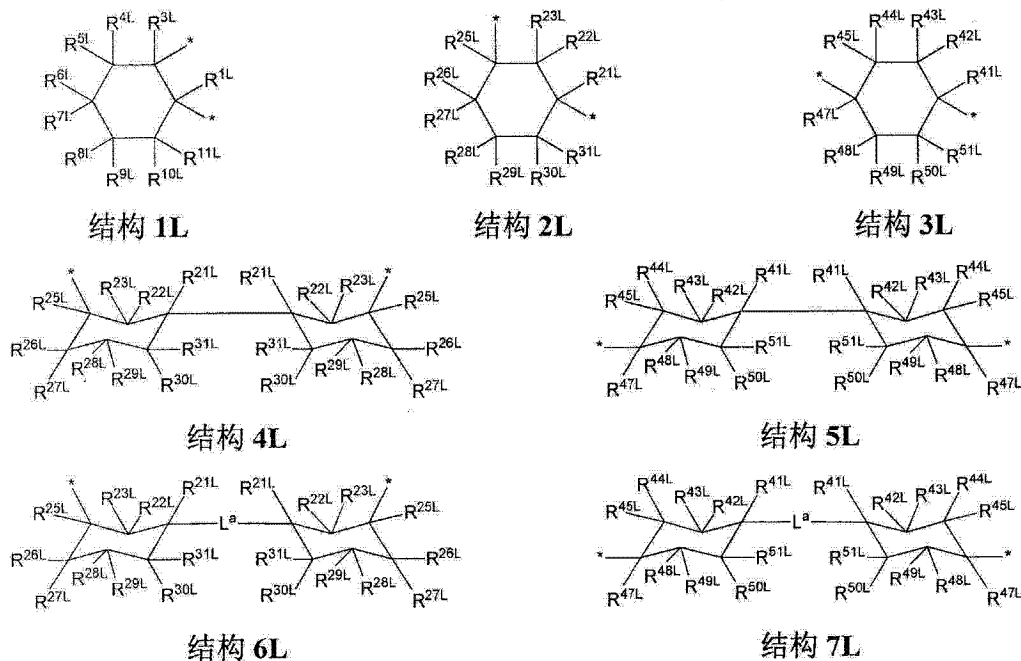
选地,双(亚苯基)乙烷基团;或可选地,取代的双(亚苯基)乙烷基团。在一种实施方式中,具有结构BPBI I和/或结构BPBI III的吡啶双亚胺配体的L可以是亚联苯-3-基基团、取代的亚联苯-3-基基团、亚联苯-4-基基团,或取代的亚联苯-4-基基团;可选地,亚联苯-3-基基团,或取代的亚联苯-3-基基团;或可选地,亚联苯-4-基基团,或取代的亚联苯-4-基基团;可选地,亚联苯-3-基基团,或亚联苯-4-基基团;可选地,亚联苯-3-基基团;可选地,取代的亚联苯-3-基基团;可选地,亚联苯-4-基基团;或可选地,取代的亚联苯-4-基基团。在一些实施方式中,具有结构BPBI I和/或结构BPBI III的吡啶双亚胺配体的L可以是双(亚苯-3-基)甲烷基团、取代的双(亚苯-3-基)甲烷基团、双(亚苯-4-基)甲烷基团,或取代的双(亚苯-4-基)甲烷基团;可选地,双(亚苯-3-基)甲烷基团或取代的双(亚苯-3-基)甲烷基团;可选地,双(亚苯-4-基)甲烷基团或取代的双(亚苯-4-基)甲烷基团;可选地,双(亚苯-3-基)甲烷基团或双(亚苯-4-基)甲烷基团;可选地,双(亚苯-3-基)甲烷基团;可选地,取代的双(亚苯-3-基)甲烷基团;可选地,双(亚苯-4-基)甲烷基团;或可选地,取代的双(亚苯-4-基)甲烷基团。在其他实施方式中,具有结构BPBI I和/或结构BPBI III的吡啶双亚胺配体的L可以是双(亚苯-3-基)乙烷基团、取代的双(亚苯-3-基)乙烷基团、双(亚苯-4-基)乙烷基团,或取代的双(亚苯-4-基)乙烷基团;可选地,双(亚苯-3-基)乙烷基团或取代的双(亚苯-3-基)乙烷基团;或可选地,双(亚苯-4-基)乙烷基团或取代的双(亚苯-4-基)乙烷基团;可选地,双(亚苯-3-基)乙烷基团或双(亚苯-4-基)乙烷基团;可选地,双(亚苯-3-基)乙烷基团;可选地,取代的双(亚苯-3-基)乙烷基团;可选地,双(亚苯-4-基)乙烷基团;或可选地,取代的双(亚苯-4-基)乙烷基团。一般而言,本文公开的任何双(亚苯基)乙烷基团(取代的或未取代的)可以是双-1,1-(亚苯基)乙烷基团或双-1,2-(亚苯基)乙烷基团;可选地,双-1,1-(亚苯基)乙烷基团;或可选地,双-1,2-(亚苯基)乙烷基团。

[0107] 一个方面中,具有结构BPBI I和/或结构BPBI III的吡啶双亚胺配体的L可以是亚芴基基团或取代的亚芴基基团;亚芴基基团;或可选地,取代的亚芴基基团。在一些实施方式中,具有结构BPBI I和/或结构BPBI III的吡啶双亚胺配体的L可以是亚芴-2,7-基基团或取代的亚芴-2,7-基基团;亚芴-2,7-基基团;或可选地,取代的亚芴-2,7-基基团。在一些实施方式中,取代的亚芴-2,7-基基团可包括在3-位的取代基或在3-和6-位的取代基;可选地,在3-位的取代基;或可选地,在3-和6-位的取代基。在其他实施方式中,取代的亚芴-2,7-基基团可以是3-取代的亚芴-2,7-基基团或3,6-二取代的亚芴-2,7-基基团;可选地,3-取代的亚芴-2,7-基基团;或可选地,3,6-二取代的亚芴-2,7-基基团。在一种实施方式中,可用作L的任何亚芴基基团(一般的或具体的)的取代基可以是卤基、羟氧基,或羟基基团;可选地,卤基或羟氧基;可选地,卤基或羟基基团;可选地,羟氧基或羟基基团;可选地,卤基;可选地,羟氧基;或可选地,羟基基团。本文独立公开了卤基取代基、羟氧基取代基基团和羟基取代基基团并且可被使用而没有限制以进一步描述可用作L的亚芴基基团。

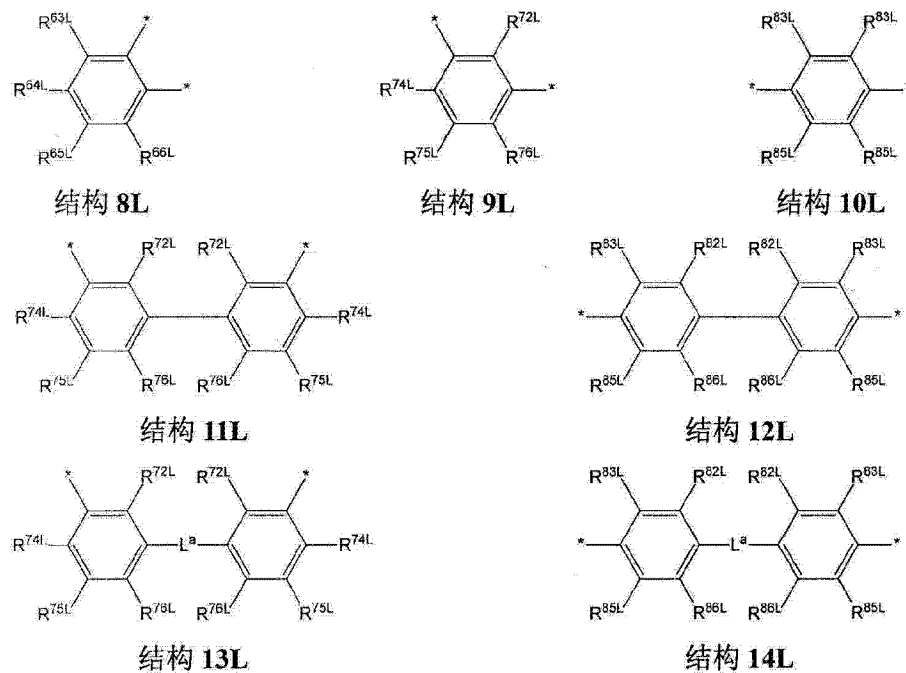
[0108] 一个方面中,具有结构BPBII和/或结构MPBI III的吡啶双亚胺配体的L可具有结构1L、2L、3L、4L、5L、6L、7L、8L、9L、10L、11L、12L、13L、和/或14L;可选地,结构1L、2L、3L、4L、5L、6L、或7L;或可选地,8L、9L、10L、11L、12L、13L、或14L。在一些实施方式中,具有

结构 BPBI I 和 / 或结构 BPBI III 的吡啶双亚胺配体的 L 可具有结构 1L、2L、或 3L ; 可选地, 结构 4L、5L、6L、或 7L ; 可选地, 结构 8L、9L、或 10L ; 或可选地, 结构 11L、12L、13L、或 14L。在其他实施方式中, 具有结构 BPBI I 和 / 或结构 BPBI III 的吡啶双亚胺配体的 L 可具有结构 2L 或 3L ; 可选地, 结构 9L 或 10L ; 可选地, 结构 4L 或 5L ; 可选地, 结构 6L 或 7L ; 或可选地, 结构 11L 或 12L ; 或可选地, 结构 13L 或 14L。在进一步的实施方式中, L¹ 可具有结构 1L ; 可选地, 结构 2L ; 可选地, 结构 3L ; 可选地, 结构 4L ; 可选地, 结构 5L ; 可选地, 结构 6L ; 可选地, 结构 7L ; 可选地, 结构 8L ; 可选地, 结构 9L ; 可选地, 结构 10L ; 可选地, 结构 11L ; 可选地, 结构 12L ; 可选地, 结构 13L ; 或可选地, 结构 14L。

[0109]



[0110]



[0111] 在一种实施方式中,结构 6L、7L、13L 或 14L 中的 L^a 或具有结构 BPBI I 和 / 或结构 BPBI III 的吡啶双亚胺配体的 L 可以是 $-(CR^lR^l)_m-$, 其中每个 R^l 独立地可以是氢、甲基、乙基、丙基、异丙基或丁基基团并且 m 可以是 1 至 5 的整数。在另一实施方式中,在 L^1 结构 6L、7L、13L 或 14L 中, L^a 可以是 $-CR^lR^l(CH_2)_nCR^lR^l-$, 其中每个 R^l 可独立地是氢、甲基、乙基、丙基、异丙基或丁基基团并且 n 可以是 0 至 3 的整数。在一些非限制性实施方式中, L^a 可以是 $-CH_2-$ 、 $-CH_2CH_2-$ 、 $-CH(CH_3)-$ 、 $-CH_2CH_2CH_2-$ 、 $-CH(CH_3)CH_2-$ 、 $-C(CH_3)_2-$ 或 $-CH_2CH_2CH_2CH_2-$ 。在其他非限制性实施方式中, L^a 可以是 $-CH_2-$ 、 $-CH_2CH_2-$ 、 $-CH_2CH_2CH_2-$ 或 $-CH(CH_3)CH_2-$; 或可选地, $-CH_2CH_2-$ 或 $-CH(CH_3)CH_2-$ 。在仍其他实施方式中,连接基团可以是 $-CH_2-$; 可选地, $-CH_2CH_2-$; 可选地, $-CH(CH_3)-$; 可选地, $-CH_2CH_2CH_2-$; 可选地, $-CH(CH_3)CH_2-$; 或可选地, $-C(CH_3)_2-$ 。在一些实施方式中,结构 6L、7L、13L 或 14L 中的 L^a 或具有结构 BPBI I 和 / 或结构 BPBI III 的吡啶双亚胺配体的 L 可以是 $-C(CF_3)_2-$ 。在仍其他实施方式中, L^a 可以是 $-O-$ 或 $-S-$; 可选地, $-O-$; 或可选地, $-S-$ 。

[0112] 一般而言,每个 $R^{1L}-R^{11L}$ 、 $R^{21L}-R^{31L}$ 、 $R^{41L}-R^{51L}$ 、 $R^{62L}-R^{66L}$ 、 $R^{72L}-R^{76L}$ 和 $R^{82L}-R^{82L}R^{85L}-R^{86L}$ (当在指示的结构中存在时) 独立地可以是氢或取代基基团。在一种实施方式中,每个非氢 $R^{1L}-R^{11L}$ 、 $R^{21L}-R^{31L}$ 、 $R^{41L}-R^{51L}$ 、 $R^{62L}-R^{66L}$ 、 $R^{72L}-R^{76L}$ 和 $R^{82L}-R^{82L}R^{85L}-R^{86L}$ 可以是卤基、羟基或烷基基团; 可选地, 卤基或羟基; 可选地, 卤基或烷基基团; 可选地, 羟基或烷基基团; 可选地, 卤基; 可选地, 羟基; 或可选地, 烷基基团。本文独立公开了卤基取代基、羟基取代基基团和烷基取代基基团并且可被使用而没有限制,以进一步描述具有结构 1L、2L、3L、4L、5L、6L、7L、8L、9L、10L、11L、12L、13L 和 / 或 14L 的 L。

[0113] 在具有结构 BPBI III 的吡啶双亚胺配体的非限制性方面中,连接至亚胺氮原子的 L 的每个碳原子可以是芳族碳原子并且这样 L 可以是其中连接至亚胺氮原子的 L 的每个碳原子可以是芳族碳原子的本文所描述的任何基团。在具有结构 BPBI III 的吡啶双亚胺配体的非限制性方面中, L 可具有结构 8L、9L、10L、11L、12L、13L、和 / 或 14L; 可选地, 结构 8L、9L、或 10L; 可选地, 结构 11L、12L、13L、或 14L; 可选地, 结构 11L 或 12L; 可选地, 结构 13L 或 14L; 可选地, 结构 8L; 可选地, 结构 9L; 可选地, 结构 10L; 可选地, 结构 11L; 可选地, 结构 12L; 可选地, 结构 13L; 或可选地, 结构 14L。

[0114] 在一种实施方式中,具有结构 BPBI I 和 / 或结构 BPBI III 的吡啶双亚胺配体的 L 可以是亚苯 -1,4- 基基团或取代的亚苯 -1,4- 基基团; 可选地, 亚苯 -1,4- 基基团; 或可选地, 取代的亚苯 -1,4- 基基团。在一些实施方式中,可用作具有结构 BPBI I 和 / 或结构 BPBI III 的吡啶双亚胺配体的 L 的取代的亚苯 -1,4- 基基团可包括在亚苯 -1,4- 基基团的 2- 位的取代基、在亚苯 -1,4- 基基团的 2- 和 3- 位的取代基,或在亚苯 -1,4- 基基团的 2- 和 6- 位的取代基; 可选地, 在亚苯 -1,4- 基基团的 2- 位的取代基; 可选地, 在亚苯 -1,4- 基基团的 2- 和 3- 位的取代基; 或可选地, 在亚苯 -1,4- 基基团的 2- 和 6- 位的取代基。在其他实施方式中,可用作具有结构 BPBI I 和 / 或结构 BPBI III 的吡啶双亚胺配体的 L 的取代的亚苯 -1,4- 基基团可以是 2- 取代的亚苯 -1,4- 基基团、2,3- 二取代的亚苯 -1,4- 基基团、2,5- 二取代的亚苯 -1,4- 基基团、2,6- 二取代的亚苯 -1,4- 基基团、2,3,5- 三取代的亚苯 -1,4- 基基团,或 2,3,5,6- 四取代的亚苯 -1,4- 基基团; 可选地, 2,3- 二取代的亚苯 -1,4- 基基团、2,5- 取代的亚苯 -1,4- 基基团,或 2,6- 二取代的亚苯 -1,4- 基基团; 可选地, 2- 取代的亚苯 -1,4- 基基团; 可选地, 2,3- 二取代的亚苯 -1,4- 基基团; 可选地, 2,5- 二取代的

亚苯-1,4-基基团;可选地,2,6-二取代的亚苯-1,4-基基团;可选地,2,3,5-三取代的亚苯-1,4-基基团;或可选地,2,3,5,6-四取代的亚苯-1,4-基基团。本文独立地描述了取代基基团并且这些取代基基团可以被使用而没有限制以进一步描述可用作具有结构 BPBI I 和 / 或结构 MPBI III 的吡啶双亚胺配体的 L 的取代的亚苯-1,4-基基团。

[0115] 在非限制性实施方式中,可用作具有结构 BPBI I 和 / 或结构 BPBI III 的吡啶双亚胺配体的 L 的取代的亚苯-1,4-基基团可以是 2-甲基亚苯-1,4-基基团、2,3-二甲基亚苯-1,4-基基团、2,5-二甲基亚苯-1,4-基基团、2,6-二甲基亚苯-1,4-基基团、2,3,5-三甲基亚苯-1,4-基基团,或 2,3,4,6-四-甲基亚苯-1,4-基基团。在其他非限制性实施方式中,可用作具有结构 BPBI I 和 / 或结构 BPBI III 的吡啶双亚胺配体的 L 的取代的亚苯-1,4-基基团可以是 2-甲基亚苯-1,4-基基团;可选地,2,3-二甲基亚苯-1,4-基基团;可选地,2,5-二甲基亚苯-1,4-基基团;可选地,2,6-二甲基亚苯-1,4-基基团;可选地,2,3,5-三甲基亚苯-1,4-基基团;或可选地,2,3,4,6-四甲基亚苯-1,4-基基团。

[0116] 在一种实施方式中,具有结构 BPBI I 和 / 或结构 BPBI III 的吡啶双亚胺配体的 L 可以是亚芴-2,7-基基团或取代的亚芴-2,7-基基团;可选地,亚芴-2,7-基基团;或可选地,取代的亚芴-2,7-基基团。在一些实施方式中,可用作具有结构 BPBI I 和 / 或结构 BPBI III 的吡啶双亚胺配体的 L 的取代的亚芴-2,7-基基团可包括在亚芴-2,7-基基团的 1- 和 6- 位的取代基,在亚芴-2,7-基基团的 1- 和 8- 位的取代基,或在亚芴-2,7-基基团的 3- 和 6- 位的取代基;可选地,在亚芴-2,7-基基团的 1- 和 6- 位的取代基;可选地,在亚芴-2,7-基基团的 1- 和 8- 位的取代基;可选地,在亚芴-2,7-基基团的 3- 和 6- 位的取代基。在其他实施方式中,可用作具有结构 BPBI I 和 / 或结构 BPBI III 的吡啶双亚胺配体的 L 的取代的亚芴-2,7-基基团可以是 1,6-二取代的亚芴-2,7-基基团,1,8-二取代的亚芴-2,7-基基团,或 3,6-二取代的亚芴-2,7-基基团;可选地,1,6-二取代的亚芴-2,7-基基团;可选地,1,8-二取代的亚芴-2,7-基基团;可选地,3,6-二取代的亚芴-2,7-基基团。本文独立地描述了取代基基团并且这些取代基基团可以被没有限制地用于进一步描述可用作具有结构 BPBI I 和 / 或结构 MPBI III 的吡啶双亚胺配体的 L 的取代的亚芴-2,7-基基团。在一些实施方式中,可用作具有结构 BPBI I 和 / 或结构 BPBI III 的吡啶双亚胺配体的 L 的取代的亚芴-2,7-基基团可以是 1-甲基亚芴-2,7-基基团、1,6-二甲基亚芴-2,7-基基团、1,8-二甲基亚芴-2,7-基基团、3-甲基亚芴-2,7-基基团或 3,6-二甲基亚芴-2,7-基基团;可选地,1-甲基亚芴-2,7-基基团、1,6-二甲基亚芴-2,7-基基团或 1,8-二甲基亚芴-2,7-基基团;可选地,3-甲基亚芴-2,7-基基团或 3,6-二甲基亚芴-2,7-基基团;可选地,1-甲基亚芴-2,7-基基团;可选地,3-甲基亚芴-2,7-基基团;可选地,1,6-二甲基亚芴-2,7-基基团;可选地,1,8-二甲基亚芴-2,7-基基团;或可选地,3,6-二甲基亚芴-2,7-基基团。

[0117] 在一种实施方式中,具有结构 BPBI I 和 / 或结构 BPBI III 的吡啶双亚胺配体的 L 可以是亚联苯-4,4'-基基团或取代的亚联苯-4,4'-基基团;可选地,亚联苯-4,4'-基基团;或可选地,取代的亚联苯-4,4'-基基团。在一些实施方式中,可用作具有结构 BPBI I 和 / 或结构 BPBI III 的吡啶双亚胺配体的 L 的取代的亚联苯-4,4'-基基团可包括在亚联苯-4-基基团的 2- 和 2'- 位的取代基,在亚联苯-4,4'-基基团的 3- 和 3'- 位的取代基,在亚联苯-4,4'-基基团的 3-、3'-、5- 和 5'- 位的取代基;可选地,

在亚联苯-4,4'-基基团的2-和2'-位的取代基;可选地,在亚联苯-4,4'-基基团的3-和3'-位的取代基;或可选地,在亚联苯-4,4'-基基团的3-,3'-,5-和5'-位的取代基。在其他实施方式中,可用作具有结构BPBI I和/或结构BPBI III的吡啶双亚胺配体的L的取代的亚联苯-4,4'-基基团可以是2,2'-二取代的亚联苯-4,4'-基基团,3,3'-二取代的亚联苯-4,4'-基基团,或3,3',5,5'-四取代的亚联苯-4,4'-基基团;可选地,2,2'-二取代的亚联苯-4,4'-基基团;可选地,3,3'-二取代的亚联苯-4,4'-基基团;或可选地,3,3',5,5'-四取代的亚联苯-4,4'-基基团。本文独立地描述了取代基基团并且这些取代基基团可以被没有限制地用于进一步描述可用作具有结构BPBI I和/或结构MPBI III的吡啶双亚胺配体的L的取代的亚联苯-4,4'-基基团。在非限制性实施方式中,可用作具有结构BPBI I和/或结构BPBI III的吡啶双亚胺配体的L的取代的亚联苯-4-基基团可以是3,3'-二甲基亚联苯-4,4'-基基团或3,3',5,5'-四甲基亚联苯-4,4'-基基团;可选地,3,3'-二甲基亚联苯-4,4'-基基团;或可选地,3,3',5,5'-四甲基亚联苯-4,4'-基基团。

[0118] 在一种实施方式中,具有结构BPBI I和/或结构BPBI III的吡啶双亚胺配体的L可以是二亚苯-3,3'-基甲烷基团、取代的二亚苯-3,3'-基甲烷基团、二亚苯-4,4'-基甲烷基团,或取代的二亚苯-4,4'-基甲烷基团;可选地,二亚苯-3,3'-基甲烷基团或取代的二亚苯-3,3'-基甲烷基团;可选地,二亚苯-4,4'-基甲烷基团或取代的二亚苯-4,4'-基甲烷基团;可选地,二亚苯-3,3'-基甲烷基团;可选地,取代的二亚苯-3,3'-基甲烷基团;可选地,二亚苯-4,4'-基甲烷基团;或可选地,取代的二亚苯-4,4'-基甲烷。在一些实施方式中,可用作具有结构BPBI I和/或结构BPBI III的吡啶双亚胺配体的L的取代的二亚苯-3,3'-基甲烷基团可包括在二亚苯-3,3'-基甲烷基团的2-和2'-位的取代基、在二亚苯-3,3'-基甲烷基团的4-和4'-位的取代基,或在二亚苯-3,3'-基甲烷基团的2-,2'-,4-和4'-位的取代基;可选地,在二亚苯-3,3'-基甲烷基团的2-和2'-位的取代基;可选地,在二亚苯-3,3'-基甲烷基团的4-和4'-位的取代基;或可选地,在二亚苯-4,4'-基甲烷基团的2-,2'-,4-和4'-位的取代基。在其他实施方式中,可用作具有结构BPBI I和/或结构BPBI III的吡啶双亚胺配体的L的取代的二亚苯-3,3'-基甲烷基团可以是2,2'-二取代的二亚苯-3,3'-基甲烷基团、4,4'-二取代的二亚苯-3,3'-基甲烷基团,或2,2',4,4'-四取代的二亚苯-3,3'-基甲烷基团;可选地,2,2'-二取代的二亚苯-3,3'-基甲烷基团;可选地,4,4'-二取代的二亚苯-3,3'-基甲烷基团;或可选地,2,2',4,4'-四取代的二亚苯-3,3'-基甲烷基团。在一些实施方式中,可用作具有结构BPBI I和/或结构BPBI III的吡啶双亚胺配体的L的取代的二亚苯-4,4'-基甲烷基团可包括在二亚苯-4,4'-基甲烷基团的2-和2'-位的取代基、在二亚苯-4,4'-基甲烷基团的3-和3'-位的取代基,或在二亚苯-4,4'-基甲烷基团的3-,3'-,5-和5'-位的取代基;可选地,在二亚苯-4,4'-基甲烷基团的2-和2'-位的取代基;可选地,在二亚苯-4,4'-基甲烷基团的3-和3'-位的取代基;可选地,在二亚苯-4,4'-基甲烷基团的3-,3'-,5-和5'-位的取代基。在其他实施方式中,可用作具有结构BPBI I和/或结构BPBI III的吡啶双亚胺配体的L的取代的二亚苯-4,4'-基甲烷基团可以是2,2'-二取代的二亚苯-4,4'-基甲烷基团、3,3'-二取代的二亚苯-4,4'-基甲烷基团,或3,3',5,5'-四取代的二亚苯-4,4'-基甲烷基团;可选地,2,2'-二取代的二亚苯-4,4'-基甲烷

基团；可选地，3,3'-二取代的二亚苯-4,4'-基甲烷基团；或可选地，3,3',5,5'-四取代的二亚苯-4,4'-基甲烷基团。本文独立地描述了取代基基团并且这些取代基基团可以被没有限制地用于进一步描述可用作具有结构 BPBII 和 / 或结构 MPBI III 的吡啶双亚胺配体的 L 的取代的二亚苯-4,4'-基甲烷基团。在一些非限制性实施方式中，可用作具有结构 BPBI I 和 / 或结构 BPBI III 的吡啶双亚胺配体的 L 的取代的二亚苯-3,3'-基甲烷基团可以是 2,2'-二甲基亚苯-3,3'-基甲烷基团或 2,2',4,4'-四甲基亚苯-3,3'-基甲烷基团；可选地，2,2'-二甲基亚苯-3,3'-基甲烷基团；或可选地，2,2',4,4'-四甲基亚苯-4,4'-基甲烷基团。在其他非限制性实施方式中，可用作具有结构 BPBI I 和 / 或结构 BPBI III 的吡啶双亚胺配体的 L 的取代的二亚苯-4,4'-基甲烷基团可以是 3,3'-二甲基亚苯-4,4'-基甲烷基团或 3,3',5,5'-四甲基亚苯-4,4'-基甲烷基团；可选地，3,3'-二甲基亚苯-4,4'-基甲烷基团；或可选地，3,3',5,5'-四甲基亚苯-4,4'-基甲烷基团。

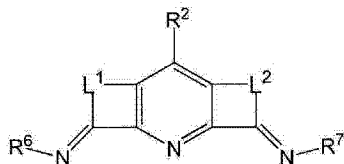
[0119] 在一种实施方式中，具有结构 BPBI I 和 / 或结构 BPBI III 的吡啶双亚胺配体的 L 可以是 1,2-二(亚苯-4-基)乙烷基团或取代的 1,2-二(亚苯-4-基)乙烷基团；可选地，1,2-二(亚苯-4-基)乙烷基团；或可选地，取代的 1,2-二(亚苯-4-基)乙烷。在一些实施方式中，可用作具有结构 BPBI I 和 / 或结构 BPBI III 的吡啶双亚胺配体的 L 的取代的 1,2-二(亚苯-4-基)乙烷基团可包括在 1,2-二(亚苯-4-基)乙烷基团的每个苯基基团 2-位的取代基、在 1,2-二(亚苯-4-基)乙烷基团的每个苯基基团 3-位的取代基，或在 1,2-二(亚苯-4-基)乙烷基团的每个苯基基团 3-和 5-位的取代基；可选地，在 1,2-二(亚苯-4-基)乙烷基团的每个苯基基团 2-位的取代基；可选地，在 1,2-二(亚苯-4-基)乙烷基团的每个苯基基团 3-位的取代基；可选地，在 1,2-二(亚苯-4-基)乙烷基团的每个苯基基团 3-和 5-位的取代基。在一些实施方式中，可用作具有结构 BPBI I 和 / 或结构 BPBI III 的吡啶双亚胺配体的 L 的取代的 1,2-二(亚苯-4-基)乙烷基团，L 可以是 1,2-二(2-取代的亚苯-4-基)乙烷基团、1,2-二(3-取代的亚苯-4-基)乙烷基团，或 1,2-二(3,5-二取代的亚苯-4-基)乙烷基团；可选地，1,2-二(2-取代的亚苯-4-基)乙烷基团；可选地，1,2-二(3-取代的亚苯-4-基)乙烷基团；或可选地，1,2-二(3,5-二取代的亚苯-4-基)乙烷基团。本文独立地描述了取代基基团并且这些取代基基团可以被没有限制地用于进一步描述可用作具有结构 BPBI I 和 / 或结构 MPBI III 的吡啶双亚胺配体的 L 的双(亚苯-4-基)乙烷基团。在一些非限制性实施方式中，可用作具有结构 BPBI I 和 / 或结构 BPBI III 的吡啶双亚胺配体的 L 的取代的 1,2-二(亚苯-4-基)乙烷基团，L 可以是 1,2-二(2-甲基亚苯-4-基)乙烷基团、1,2-二(3-甲基亚苯-4-基)乙烷基团，或 1,2-二(3,5-二甲基亚苯-4-基)乙烷基团；可选地，1,2-二(2-甲基亚苯-4-基)乙烷基团；可选地，1,2-二(3-甲基亚苯-4-基)乙烷基团；或可选地，1,2-二(3,5-二甲基亚苯-4-基)乙烷基团。

[0120] 在独立的方面中， R^1 和 R^2 、 R^2 和 R^3 、 R^1 和 R^4 和 / 或 R^3 和 R^5 在一起可形成环或环系统。在这些方面中， R^1 和 R^2 、 R^2 和 R^3 、 R^1 和 R^4 和 / 或 R^3 和 R^5 在一起可形成亚有机基团；可选地，由惰性官能团组成的亚有机基团；或亚烃基基团。本文独立公开了亚有机基团、由惰性官能团组成的亚有机基团和亚烃基基团作为潜在的 L 基团并且这些基团可以被没有限制地用于描述组合的 R^1 和 R^2 、 R^2 和 R^3 、 R^1 和 R^4 和 / 或 R^3 和 R^5 。在一些实施方式中，组合的 R^1 和 R^2 ，组合的 R^2 和 R^3 ，组合的 R^1 和 R^4 ，和 / 或组合的 R^3 和 R^5 以及形成环的吡啶双亚胺配

体的其他原子可形成芳族环（例如苯基环）。

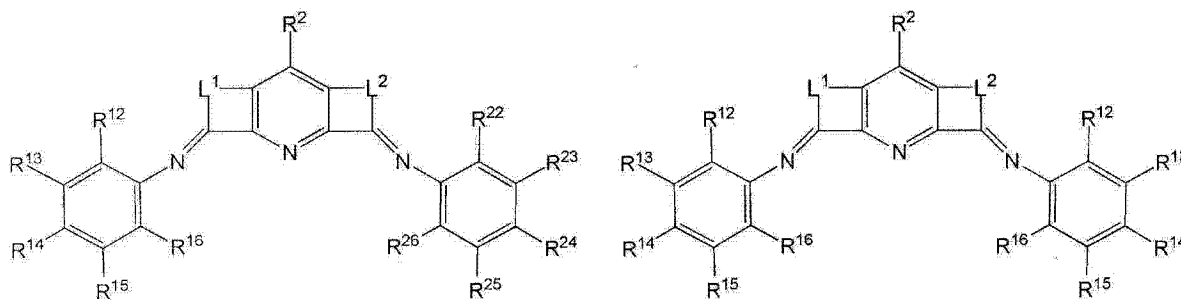
[0121] 在其中 R^1 和 R^4 以及 R^3 和 R^5 每个形成环的非限制性实施方式中，吡啶双亚胺配体可具有结构 PBI IV, 结构 PBI V, 结构 PBI VI, 结构 BPBI IV, 或结构 BPBI VI; 可选地, 结构 PBI IV, 结构 PBI V, 或结构 PBI VI; 可选地, 结构 BPBI IV 或结构 BPBI VI; 可选地, 结构 PBI V 或结构 PBI VI; 可选地, 结构 PBI IV; 可选地, 结构 PBI V; 可选地, 结构 PBI VI; 可选地, 结构 BPBI IV; 或可选地, 结构 BPBI VI。

[0122]



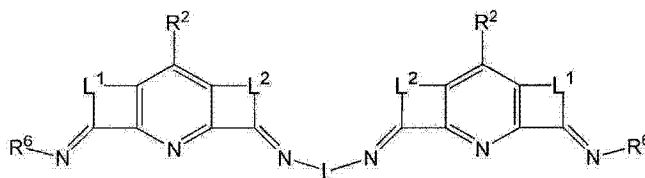
结构 PBI IV

[0123]

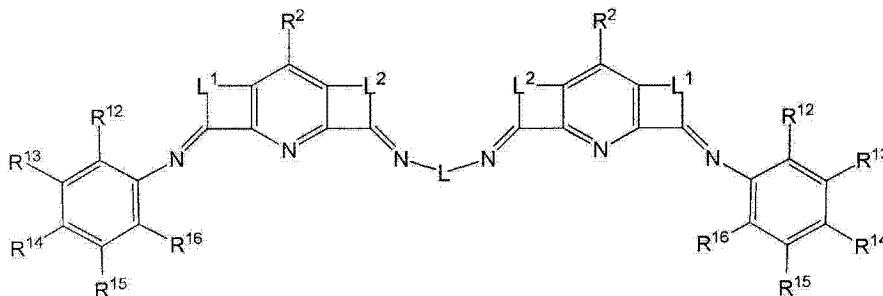


结构 PBI V

结构 PBI VI



结构 BPBI IV



结构 BPBI VI

[0124] 一般而言, R^2 、 R^6 、 R^7 、 R^{12} 、 R^{13} 、 R^{14} 、 R^{15} 、 R^{16} 、 R^{22} 、 R^{23} 、 R^{24} 、 R^{25} 、 R^{26} 、 L 、 L^1 和 L^2 是具有结构 PBI IV、结构 PBI V、结构 PBI VI、结构 BPBI IV 和 / 或结构 BPBI VI 的各自吡啶双亚胺配

体的独立的要素。本文独立地描述了具有结构 PBI IV、结构 PBI V、结构 PBI VI、结构 BPBI IV 和 / 或结构 BPBI VI 的吡啶双亚胺配体的这些要素并且可以使用这些本文独立地描述的要素的任何组合描述具有结构 PBI IV、结构 PBI V、结构 PBI VI、结构 BPBI IV 和 / 或结构 BPBI VI 的吡啶双亚胺配体。

[0125] 本文独立地描述了 R^2 、 R^6 、 R^7 、 R^{12} 、 R^{13} 、 R^{14} 、 R^{15} 、 R^{16} 、 R^{22} 、 R^{23} 、 R^{24} 、 R^{25} 和 R^{26} 作为具有结构 PBI I、结构 PBI II、结构 PBI III、结构 BPBI I 和 / 或结构 BPBI III 的吡啶双亚胺配体的基团。 R^2 、 R^{12} 、 R^{13} 、 R^{14} 、 R^{15} 、 R^{16} 、 R^{22} 、 R^{23} 、 R^{24} 、 R^{25} 和 R^{26} 的这些方面和实施方式可以被没有限制地用于进一步描述具有结构 PBI IV、结构 PBI V、结构 PBI VI、结构 BPBI IV 或结构 BPBI VI 的吡啶双亚胺配体。本文独立地描述了 L 作为具有结构 BPBI I 和 / 或结构 MPBI III 的吡啶双亚胺配体的连接基团。L 的这些方面和实施方式可以被没有限制地用于进一步描述具有结构 PBI IV 或结构 PBI VI 的吡啶双亚胺配体。

[0126] 一个方面中, L^1 可以是亚有机基团 ; 可选地, 由惰性官能团组成的亚有机基团 ; 或可选地, 亚烃基基团。一个方面中, L^2 可以是亚有机基团 ; 可选地, 由惰性官能团组成的亚有机基团 ; 或可选地, 亚烃基基团。本文独立公开了亚有机基团、由惰性官能团组成的亚有机基团和亚烃基基团作为潜在的 L 基团并且这些基团可以没有限制地被使用作为 L^1 和 / 或 L^2 。在一种实施方式中, L^1 和 L^2 可以是不同的。在其他实施方式中, L^1 和 L^2 可以是相同的。

[0127] 一个方面中, L^1 可具有结构 $-(CR^{41}R^{42})_p-$ 和 L^2 可具有结构 $-(CR^{43}R^{44})_q-$ 。一般而言, R^{41} 、 R^{42} 和 p 是具有结构 $-(CR^{41}R^{42})_p-$ 的 L^1 的独立的特征和 R^{43} 、 R^{44} 和 q 是具有结构 $-(CR^{43}R^{44})_q-$ 的 L^2 的独立的特征。从而, 具有结构 PBI IV、结构 PBI V、结构 PBI V、结构 PBI IV 和 / 或结构 PBI VI 的吡啶双亚胺配体可以使用本文所描述的 R^{41} 、本文所描述的 R^{42} 、本文所描述的 R^{43} 、本文所描述的 R^{44} 、本文所描述的 p 和本文所描述的 q 的任何组合描述。

[0128] 在一种实施方式中, 每个 R^{41} 、 R^{42} 、 R^{43} 和 R^{44} 独立地可以是氢、惰性官能团、或有机基团 ; 可选地, 氢或有机基团 ; 可选地, 惰性官能团或有机基团 ; 可选地, 氢、惰性官能团、或由惰性官能团组成的有机基团 ; 可选地, 氢或由惰性官能团组成的有机基团 ; 可选地, 惰性官能团或由惰性官能团组成的有机基团 ; 可选地, 氢、惰性官能团、或烃基基团 ; 可选地, 氢或烃基基团 ; 可选地, 惰性官能团或烃基基团 ; 可选地, 可选地, 氢或惰性官能团 ; 可选地, 氢 ; 可选地, 有机基团 ; 可选地, 由惰性官能团组成的有机基团 ; 或可选地, 烃基基团。本文所描述了惰性官能团、有机基团、由惰性官能团组成的有机基团和烃基基团作为具有结构 PBI I、结构 PBI II、结构 PBI III、结构 BPBI I 和结构 BPBI III 的吡啶双亚胺配体中潜在的 R^1 、 R^2 、 R^3 、 R^{12} 、 R^{13} 、 R^{14} 、 R^{15} 、 R^{16} 、 R^{22} 、 R^{23} 、 R^{24} 、 R^{25} 和 R^{26} 基团。 R^1 、 R^2 、 R^3 、 R^{12} 、 R^{13} 、 R^{14} 、 R^{15} 、 R^{16} 、 R^{22} 、 R^{23} 、 R^{24} 、 R^{25} 和 R^{26} 基团的这些方面和实施方式可以被没有限制地用于进一步描述具有结构 PBI IV、结构 PBI V、结构 PBI VI、结构 BPBI I 和结构 BPBI III 的吡啶双亚胺配体中的 R^{41} 、 R^{42} 、 R^{43} 和 R^{44} 。一个方面中, p 和 q 独立地可以是 1 至 5 的整数 ; 可选地, 1 至 3 的整数 ; 可选地, 2 至 3 的整数 ; 可选地, 1 ; 可选地, 2 ; 可选地, 3 ; 可选地, 4 ; 或可选地, 5。

[0129] 在一些非限制性实施方式中, 每个 R^{41} 、 R^{42} 、 R^{43} 和 R^{44} 独立地可以是氢、甲基基团、乙基基团、丙基基团、异丙基基团或丁基基团并且 p 和 q 独立地可以是 1 至 5 的整数。在另一非限制性实施方式中, 每个 R^{41} 、 R^{42} 、 R^{43} 和 R^{44} 独立地可以是氢、甲基、乙基、丙基、异丙基或丁基基团并且 n 可以是 1 至 3 的整数。在仍其它非限制性实施方式中, L^1 和 L^2 独立地可以是 $-CH_2-$ 、 $-CH_2CH_2-$ 、 $-CH_2CH_2CH_2-$ 、 $-CH(CH_3)CH_2-$ 、 $-C(CH_3)_2-$ 或 $-CH_2CH_2CH_2CH_2-$; 可选

地, $-\text{CH}_2\text{CH}_2-$ 或 $-\text{CH}_2\text{CH}_2\text{CH}_2-$; 可选地, $-\text{CH}_2\text{CH}_2-$; 或可选地, $-\text{CHCH}_2\text{CH}_2-$ 。在一种实施方式中, L^1 和 L^2 可以是不同的。在其他实施方式中, L^1 和 L^2 可以是相同的。

[0130] 在另一独立的方面中, 彼此相邻的 R^{12} 、 R^{13} 、 R^{14} 、 R^{15} 、 R^{16} 、 R^{22} 、 R^{23} 、 R^{24} 、 R^{25} 和 R^{26} 的任何两个可以结合在一起可以形成环。在这些方面中, 结合在一起的相邻的 R^{12} 、 R^{13} 、 R^{14} 、 R^{15} 、 R^{16} 、 R^{22} 、 R^{23} 、 R^{24} 、 R^{25} 和 R^{26} 可形成亚有机基团; 可选地, 由惰性官能团组成的亚有机基团; 或亚烃基基团。本文独立公开了亚有机基团、由惰性官能团组成的亚有机基团和亚烃基基团作为潜在的 L 基团并且这些基团可以被没有限制地用于描述组合的相邻的 R^{12} 、 R^{13} 、 R^{14} 、 R^{15} 、 R^{16} 、 R^{22} 、 R^{23} 、 R^{24} 、 R^{25} 和 R^{26} 。在一些实施方式中, 组合的相邻的 R^{12} 、 R^{13} 、 R^{14} 、 R^{15} 、 R^{16} 、 R^{22} 、 R^{23} 、 R^{24} 、 R^{25} 和 R^{26} 以及形成环的吡啶双亚胺配体的其他原子可形成芳族环 (例如苯基环)。

[0131] 在另一独立的方面中, R^5 和 R^{12} (或可选地, R^5 和 R^{16}) 和 / 或 R^4 和 R^{22} (或可选地, R^4 和 R^{26}) 结合在一起可形成环或环系统。在这些方面中, 结合在一起的 R^5 和 R^{12} (或可选地, R^5 和 R^{16}) 和 / 或 R^4 和 R^{22} (或可选地, R^4 和 R^{26}) 可形成亚有机基团; 可选地, 由惰性官能团组成的亚有机基团; 或可选地, 亚烃基基团。本文独立公开了亚有机基团、由惰性官能团组成的亚有机基团和亚烃基基团作为潜在的 L 基团并且这些基团可以被没有限制地用于描述组合的 R^5 和 R^{12} (或可选地, R^5 和 R^{16}) 和 / 或 R^4 和 R^{22} (或可选地, R^4 和 R^{26})。在一些实施方式中, 组合的 R^5 和 R^{12} (或可选地, R^5 和 R^{16}) 和 / 或 R^4 和 R^{22} (或可选地, R^4 和 R^{26}) 以及形成环的吡啶双亚胺配体的其他原子可形成芳族环 (例如吡啶环)。在其中组合的 R^5 和 R^{12} (或可选地, R^5 和 R^{16}) 和 / 或 R^4 和 R^{22} (或可选地, R^4 和 R^{26}) 以及形成环的吡啶双亚胺配体的其他原子可形成吡啶环的例子中, 组合的 R^5 和 R^{12} (或可选地, R^5 和 R^{16}) 和 / 或 R^4 和 R^{22} (或可选地, R^4 和 R^{26}) 可以是亚乙烯 -1, 2- 基基团或取代的亚乙烯 -1, 2- 基基团; 可选地, 亚乙烯 -1, 2- 基基团; 或可选地, 取代的亚乙烯 -1, 2- 基基团。在一种实施方式中, 可用作组合的 R^5 和 R^{12} (或可选地, R^5 和 R^{16}) 和 / 或 R^4 和 R^{22} (或可选地, R^4 和 R^{26}) 的取代的亚乙烯 -1, 2- 基基团的取代基可以是卤基、炔氧基或烃基基团; 可选地, 卤基或炔氧基; 可选地, 卤基或烃基基团; 可选地, 炔氧基或烃基基团; 可选地, 卤基; 可选地, 炔氧基; 或可选地, 烃基基团。本文独立公开了卤基取代基、炔氧基取代基基团和烃基取代基基团并且可被没有限制地用于进一步描述可用作组合的 R^5 和 R^{12} (或可选地, R^5 和 R^{16}) 和 / 或 R^4 和 R^{22} (或可选地, R^4 和 R^{26}) 的取代的亚乙烯 -1, 2- 基基团。

[0132] 在具有结构 PBI I、结构 PBI II、结构 PBI III、结构 BPBI I, 和 / 或结构 BPBI III 的吡啶双亚胺配体的非限制性实施方式中, 每个 R^1 、 R^2 和 R^3 可以是氢。在具有结构 PBI I、结构 PBI II、结构 PBI III、结构 BPBI I 和 / 或结构 BPBI III 的吡啶双亚胺配体的非限制性实施方式中, 每个 R^4 和 R^5 独立地可以是氢、甲基基团或苯基基团; 可选地, 氢或甲基基团; 可选地, 氢; 可选地, 甲基基团; 或可选地, 苯基基团。在具有结构 PBI I、结构 PBI II、结构 PBI III、结构 BPBI I 和 / 或结构 BPBI III 的吡啶双亚胺配体的一些其他非限制性实施方式中, 每个 R^1 、 R^2 和 R^3 可以是氢和每个 R^4 和 R^5 独立地可以是甲基基团。 R^1 、 R^2 和 R^3 以及 R^4 和 R^5 的其他方面和实施方式从本公开容易明白。 R^1 、 R^2 和 R^3 的方面和实施方式以及 R^4 和 R^5 的方面和实施方式的其他实施方式从本公开容易明白。在具有结构 PBI I、结构 PBI II、结构 PBI III、结构 BPBI I 和 / 或结构 BPBI III 的吡啶双亚胺配体的这些非限制性实施方式中, 其余的吡啶双亚胺配体基团可以是任何基团 (一个或更多个) 或具有本文描述的和 R^1 、 R^2 和 R^3 以及 R^4 和 R^5 相关的特征一致的任何特征。

[0133] 在具有结构 PBI IV、结构 PBI V、结构 PBI VI、结构 BPBI IV 和 / 或结构 BPBI VI 的非限制性吡啶双亚胺配体中,每个 R^2 可以是氢。在具有结构 PBI IV、结构 PBI V、结构 PBI VI、结构 BPBI IV 和 / 或结构 BPBI VI 的非限制性吡啶双亚胺配体中,每个 L^1 和 L^2 独立地可以是 $-CH_2CH_2-$ 或 $-CH_2CH_2CH_2-$; 可选地, $-CH_2CH_2-$; 或可选地, $-CH_2CH_2CH_2-$ 。 R^2 以及 L^1 和 L^2 的其他方面和实施方式从本公开是容易明白的。 R^2 的方面和实施方式以及 L^1 和 L^2 的方面和实施方式的其他实施方式从本公开是容易明白的。在具有结构 PBI IV、结构 PBI V、结构 PBI VI、结构 BPBI IV 和 / 或结构 BPBI VI 的吡啶双亚胺配体的这些非限制性实施方式中,其余的吡啶双亚胺配体基团可以是任何基团(一个或更多个)或具有本文描述的与 R^2 以及 L^1 和 L^2 相关的特征一致的任何特征。

[0134] 在具有结构 PBI II、结构 PBI III、结构 PBI V 和 / 或结构 PBI VI 的吡啶双亚胺配体的非限制性实施方式中,吡啶双亚胺配体可具有其中 R^{12} 、 R^{16} 、 R^{22} 和 R^{26} 独立地可以是氢或本文所描述的任何非氢基团的结构。在一些实施方式中,可以用于任何 R^{12} 、 R^{16} 、 R^{22} 和 / 或 R^{26} 的非氢基团可以是惰性官能团、伯碳基团、仲碳基团、叔碳基团或季碳基团; 可选地, 卤基、伯碳基团、仲碳基团、叔碳基团或季碳基团; 可选地, 伯碳基团、仲碳基团、叔碳基团或季碳基团; 可选地, 伯碳基团或仲碳基团; 可选地, 惰性官能团; 可选地, 卤基; 可选地, 伯碳基团; 可选地, 仲碳基团; 可选地, 叔碳基团; 或可选地, 季碳基团。

[0135] 在具有结构 PBI II、结构 PBI III、结构 PBI V 和 / 或 PBI VI 的吡啶双亚胺配体的非限制性实施方式中,吡啶双亚胺配体可具有下述结构: 其中 R^{12} 、 R^{16} 、 R^{22} 和 R^{26} 的至少一个可以是本文所描述的任何非氢基团并且剩余的 R^{12} 、 R^{16} 、 R^{22} 和 R^{26} 可以是氢; 可选地, 其中 R^{12} 、 R^{16} 、 R^{22} 和 R^{26} 的一个可以是本文所描述的任何非氢基团并且剩余的 R^{12} 、 R^{16} 、 R^{22} 和 R^{26} 可以是氢; 可选地, 其中 R^{12} 、 R^{16} 、 R^{22} 和 R^{26} 的两个独立地可以是本文所描述的任何非氢基团并且剩余的 R^{12} 、 R^{16} 、 R^{22} 和 R^{26} 可以是氢; 或可选地, 其中 R^{12} 、 R^{16} 、 R^{22} 和 R^{26} 的三个独立地可以是本文所描述的任何非氢基团并且剩余的 R^{12} 、 R^{16} 、 R^{22} 和 R^{26} 可以是氢。在具有结构 PBI II、结构 PBI III、结构 PBI V 和 / 或 PBI VI 的吡啶双亚胺配体的另一非限制性实施方式中,吡啶双亚胺配体可具有下述结构: 其中 R^{12} 、 R^{16} 、 R^{22} 和 R^{26} 的至少一个可以是本文所描述的任何非氢基团, 剩余的 R^{12} 、 R^{16} 、 R^{22} 和 R^{26} 可以是氢, 并且 R^{13} 、 R^{14} 、 R^{15} 、 R^{23} (如果存在)、 R^{24} (如果存在) 和 R^{25} (如果存在) 可以是氢; 可选地, 其中 R^{12} 、 R^{16} 、 R^{22} 和 R^{26} 的一个可以是本文所描述的任何非氢基团, 剩余的 R^{12} 、 R^{16} 、 R^{22} 和 R^{26} 可以是氢, 并且 R^{13} 、 R^{14} 、 R^{15} 、 R^{23} (如果存在)、 R^{24} (如果存在) 和 R^{25} (如果存在) 可以是氢; 可选地, R^{12} 、 R^{16} 、 R^{22} 和 R^{26} 的两个独立地可以是本文所描述的任何非氢基团, 剩余的 R^{12} 、 R^{16} 、 R^{22} 和 R^{26} 可以是氢, 并且 R^{13} 、 R^{14} 、 R^{15} 、 R^{23} (如果存在)、 R^{24} (如果存在) 和 R^{25} (如果存在) 可以是氢; 或可选地, R^{12} 、 R^{16} 、 R^{22} 和 R^{26} 的三个独立地可以是本文所描述的任何非氢基团, 剩余的 R^{12} 、 R^{16} 、 R^{22} 和 R^{26} 可以是氢, 并且 R^{13} 、 R^{14} 、 R^{15} 、 R^{23} (如果存在)、 R^{24} (如果存在) 和 R^{25} (如果存在) 可以是氢。在具有结构 PBI II 和 / 或结构 PBI V 的吡啶双亚胺配体的一种实施方式中,吡啶双亚胺配体可具有这样的结构, 其中 R^{12} 和 R^{16} 与 R^{22} 和 R^{26} 不同; 或可选地, 其中 R^{12} 和 R^{16} 与 R^{22} 和 R^{26} 相同。在具有结构 PBI I 或 PBI IV 的吡啶双亚胺配体的一些实施方式,吡啶双亚胺配体可具有这样的结构, 其中 R^6 和 R^7 不同(即, R^{12} 、 R^{13} 、 R^{14} 、 R^{15} 和 R^{16} 不是精确地与 R^{22} 、 R^{23} 、 R^{24} 、 R^{25} 和 R^{26} 相同); 或可选地, 其中 R^6 和 R^7 相同(即, R^{12} 、 R^{13} 、 R^{14} 、 R^{15} 和 R^{16} 精确地与 R^{22} 、 R^{23} 、 R^{24} 、 R^{25} 和 R^{26} 相同)。

[0136] 在具有结构 PBI II 和 / 或 PBI V 的吡啶双亚胺配体的非限制性实施方式,吡啶双

亚胺配体可具有这样的结构,其中 R^{12} 、 R^{16} 、 R^{22} 和 R^{26} 的一个、两个或三个独立地可以是卤基、伯碳基团(一个或更多个)或仲碳基团(一个或更多个)并且剩余的 R^{12} 、 R^{16} 、 R^{22} 和 R^{26} 可以是氢;可选地, R^{12} 、 R^{16} 、 R^{22} 和 R^{26} 的一个、两个或三个独立地可以是伯碳基团(一个或更多个)或仲碳基团(一个或更多个)并且剩余的 R^{12} 、 R^{16} 、 R^{22} 和 R^{26} 可以是氢;可选地, R^{12} 、 R^{16} 、 R^{22} 和 R^{26} 的一个独立地可以是叔碳基团(一个或更多个), R^{12} 、 R^{16} 、 R^{22} 和 R^{26} 中没有、一个或两个独立地可以是卤基、伯碳基团(一个或更多个)或仲碳基团(一个或更多个),并且剩余的 R^{12} 、 R^{16} 、 R^{22} 和 R^{26} 可以是氢;可选地, R^{12} 、 R^{16} 、 R^{22} 和 R^{26} 的一个独立地可以是叔碳基团(一个或更多个), R^{12} 、 R^{16} 、 R^{22} 和 R^{26} 中没有、一个或两个独立地可以是伯碳基团(一个或更多个)或仲碳基团(一个或更多个),并且剩余的 R^{12} 、 R^{16} 、 R^{22} 和 R^{26} 可以是氢;可选地, R^{12} 、 R^{16} 、 R^{22} 和 R^{26} 的两个独立地可以是叔碳基团(一个或更多个), R^{12} 、 R^{16} 、 R^{22} 和 R^{26} 中没有或有一个独立地可以是卤基、伯碳基团(一个或更多个)或仲碳基团(一个或更多个),并且剩余的 R^{12} 、 R^{16} 、 R^{22} 和 R^{26} 可以是氢;可选地, R^{12} 、 R^{16} 、 R^{22} 和 R^{26} 的两个独立地可以是叔碳基团(一个或更多个), R^{12} 、 R^{16} 、 R^{22} 和 R^{26} 中没有或一个独立地可以是伯碳基团(一个或更多个)或仲碳基团(一个或更多个),并且剩余的 R^{12} 、 R^{16} 、 R^{22} 和 R^{26} 可以是氢;可选地, R^{12} 、 R^{16} 、 R^{22} 和 R^{26} 的一个或两个独立地可以是叔碳基团(一个或更多个)并且剩余的 R^{12} 、 R^{16} 、 R^{22} 和 R^{26} 可以是氢;可选地, R^{12} 、 R^{16} 、 R^{22} 和 R^{26} 中没有或一个可以是伯碳基团(一个或更多个)或仲碳基团(一个或更多个), R^{12} 、 R^{16} 、 R^{22} 和 R^{26} 的一个可以是叔碳基团,并且剩余的 R^{12} 、 R^{16} 、 R^{22} 和 R^{26} 可以是氢;可选地, R^{12} 、 R^{16} 、 R^{22} 和 R^{26} 的一个可以是季碳基团并且剩余的 R^{12} 、 R^{16} 、 R^{22} 和 R^{26} 可以是氢;可选地, R^{12} 、 R^{16} 、 R^{22} 和 R^{26} 的两个可以是季碳基团并且剩余的 R^{12} 、 R^{16} 、 R^{22} 和 R^{26} 可以是氢;或可选地, R^{12} 、 R^{16} 、 R^{22} 和 R^{26} 的一个可以是季碳基团并且剩余的 R^{12} 、 R^{16} 、 R^{22} 和 R^{26} 可以是氢。

[0137] 在具有结构 PBI II 和 / 或结构 PBI V 的吡啶双亚胺配体的一些非限制性实施方式中,吡啶双亚胺配体可具有这样的结构,其中 R^{12} 和 R^{22} 独立地可以是伯碳基团(一个或更多个)或仲碳基团(一个或更多个)和 R^{16} 和 R^{26} 可以是氢;可选地, R^{12} 可以是伯碳基团、仲碳基团或叔基团、 R^{22} 可以是叔碳基团和 R^{16} 和 R^{26} 可以是氢;可选地, R^{12} 和 R^{22} 独立地可以是叔碳基团,并且剩余的 R^{16} 和 R^{26} 可以是氢;可选地, R^{12} 和 R^{22} 独立地可以是季碳基团以及 R^{16} 和 R^{26} 可以是氢;或可选地, R^{12} 和 R^{22} 独立地可以是卤素,和 R^{16} 和 R^{26} 可以是氢。在具有结构 PBI II 和 / 或结构 PBI V 的吡啶双亚胺配体的非限制性实施方式中,吡啶双亚胺配体可具有这样的结构,其中 R^{12} 和 R^{22} 独立地可以是三卤代伯基团(例如,三氟甲烷),以及 R^{16} 和 R^{26} 可以是氢。

[0138] 在具有结构 PBI II 和 / 或结构 PBI V 的吡啶双亚胺配体的一些非限制性实施方式中,吡啶双亚胺配体可具有这样的结构,其中 R^{12} 可以是惰性官能团、伯碳基团、仲碳基团或叔碳基团以及 R^{16} 、 R^{22} 和 R^{26} 独立地可以是氢或卤基; R^{12} 可以是伯碳基团或仲碳基团或叔碳基团以及 R^{16} 、 R^{22} 和 R^{26} 独立地可以是氢或卤基; R^{12} 和 R^{16} 可以是惰性官能团(一个或更多个)、伯碳基团(一个或更多个)或仲碳基团(一个或更多个)以及 R^{22} 和 R^{26} 独立地可以是氢或卤基;可选地, R^{12} 和 R^{16} 可以是伯碳基团(一个或更多个)或仲碳基团(一个或更多个)以及 R^{22} 和 R^{26} 独立地可以是氢或卤基;可选地, R^{12} 可以是惰性官能团(一个或更多个)、伯碳基团(一个或更多个)或仲碳基团(一个或更多个)、 R^{16} 可以是叔基团以及 R^{22} 和 R^{26} 独立地可以是氢或卤基;可选地, R^{12} 可以是伯碳基团或仲碳基团、 R^{16} 可以是叔基团以

及 R^{22} 和 R^{26} 独立地可以是氢或卤基 ; 可选地, R^5 和 R^{12} 可形成环, R^{16} 可以是惰性官能团、伯碳基团或仲碳基团以及 R^{22} 和 R^{26} 独立地可以是氢或卤基 ; 可选地, R^5 和 R^{12} 可形成环, R^{16} 可以是伯碳基团或仲碳基团以及 R^{22} 和 R^{26} 独立地可以是氢或卤基 ; 或可选地, R^{12} 和 R^{13} 可形成环, R^{15} 和 R^{16} 可形成环, 以及 R^{22} 和 R^{26} 独立地可以是氢或卤基。在一种实施方式中, 与 R^5 形成环的基团的 R^{12} 基团部分, 与 R^{13} 形成环的基团的 R^{12} 基团部分, 和 / 或与 R^{15} 形成环的基团的 R^{16} 基团部分可以是伯碳基团、仲碳基团或叔碳基团 ; 可选地, 伯碳基团或仲碳基团 ; 可选地, 伯碳基团 ; 可选地, 仲碳基团 ; 或可选地, 叔碳基团。

[0139] 在其中吡啶双亚胺配体具有结构 PBI II 和 / 或 PBI V 和其中 R^{12} 、 R^{16} 、 R^{22} 和 R^{26} 可具有具体特征的任何方面或任何实施方式中, 剩余的基团 (R^{13} 、 R^{14} 、 R^{15} 、 R^{23} 、 R^{24} 和 / 或 R^{25}) 可以是任何基团 (一个或多个) 或具有本文所描述的与 R^{12} 、 R^{16} 、 R^{22} 和 R^{26} 相关的特征一致的任何特征 ; 或可选地, 剩余的基团 (R^{13} 、 R^{14} 、 R^{15} 、 R^{23} 、 R^{24} 和 / 或 R^{25}) 可以是氢。一般而言, 碳基团 (无论伯、仲、叔或季) 可以是有机基团 ; 可选地, 基本上由惰性官能团组成的有机基团 ; 或可选地, 烃基基团。本文独立地描述了有机基团、基本上由惰性官能团组成的有机基团和烃基基团并且基于本公开可适当地将具体的有机基团、基本上由惰性官能团组成的有机基团或烃基基团分类为伯碳基团、仲碳基团、叔碳基团或季碳基团。

[0140] 在其中 R^6 和 R^7 是 (分别) 具有结构 P1 和结构 P2 的吡咯 -1- 基基团的具有结构 PBI I 和 / 或结构 PBI IV 的吡啶双亚胺配体的非限制性实施方式中, 吡啶双亚胺配体可具有这样的结构, 其中每个吡咯 -1- 基基团上的 R^{2p} 和 R^{5p} 独立地可以是氢或本文所描述的任何非氢基团。在一些实施方式中, 可以用于任何每个 R^{2p} 和 R^{5p} 的非氢基团独立地可以是惰性官能团、伯碳基团、仲碳基团、叔碳基团或季碳基团 ; 可选地, 卤基、伯碳基团、仲碳基团、叔碳基团或季碳基团 ; 可选地, 伯碳基团、仲碳基团、叔碳基团或季碳基团 ; 可选地, 伯碳基团或仲碳基团 ; 可选地, 惰性官能团 ; 可选地, 卤基 ; 可选地, 伯碳基团 ; 可选地, 仲碳基团 ; 可选地, 叔碳基团 ; 或可选地, 季碳基团。

[0141] 在其中 R^6 和 R^7 是 (分别) 具有结构 P1 和结构 P2 的吡咯 -1- 基基团的具有结构 PBI I 和 / 或结构 PBI IV 的吡啶双亚胺配体的非限制性实施方式中, 吡啶双亚胺配体可具有这样的结构, 其中 R^{2p} 、 R^{5p} 、 R^{12p} 和 R^{15p} 的至少一个可以是本文所描述的任何非氢基团并且剩余的 R^{2p} 、 R^{5p} 、 R^{12p} 和 R^{15p} 可以是氢 ; 可选地, 其中 R^{2p} 、 R^{5p} 、 R^{12p} 和 R^{15p} 的一个可以是本文所描述的任何非氢基团并且剩余的 R^{2p} 、 R^{5p} 、 R^{12p} 和 R^{15p} 可以是氢 ; 可选地, 其中 R^{2p} 、 R^{5p} 、 R^{12p} 和 R^{15p} 的两个独立地可以是本文所描述的任何非氢基团并且剩余的 R^{2p} 、 R^{5p} 、 R^{12p} 和 R^{15p} 可以是氢 ; 或可选地, 其中 R^{2p} 、 R^{5p} 、 R^{12p} 和 R^{15p} 的三个独立地可以是本文所描述的任何非氢基团并且剩余的 R^{2p} 、 R^{5p} 、 R^{12p} 和 R^{15p} 可以是氢。在其中 R^6 和 R^7 是 (分别) 具有结构 P1 和结构 P2 的吡咯 -1- 基基团的具有结构 PBI I 和 / 或结构 PBI IV 的吡啶双亚胺配体的另一非限制性实施方式中, 吡啶双亚胺配体可具有这样的结构, 其中 R^{2p} 、 R^{5p} 、 R^{12p} 和 R^{15p} 的至少一个可以是本文所描述的任何非氢基团, 剩余的 R^{2p} 、 R^{5p} 、 R^{12p} 和 R^{15p} 可以是氢, 和 R^{3p} 、 R^{4p} 、 R^{13p} 和 R^{14p} 可以是氢 ; 可选地, 其中 R^{2p} 、 R^{5p} 、 R^{12p} 和 R^{15p} 的一个可以是本文所描述的任何非氢基团, 剩余的 R^{2p} 、 R^{5p} 、 R^{12p} 和 R^{15p} 可以是氢, 和 R^{3p} 、 R^{4p} 、 R^{13p} 和 R^{14p} 可以是氢 ; 可选地, R^{2p} 、 R^{5p} 、 R^{12p} 和 R^{15p} 的两个独立地可以是本文所描述的任何非氢基团, 剩余的 R^{2p} 、 R^{5p} 、 R^{12p} 和 R^{15p} 可以是氢, 和 R^{3p} 、 R^{4p} 、 R^{13p} 和 R^{14p} 可以是氢 ; 或可选地, R^{2p} 、 R^{5p} 、 R^{12p} 和 R^{15p} 的三个独立地可以是本文所描述的任何非氢基团, 剩余的 R^{2p} 、 R^{5p} 、 R^{12p} 和 R^{15p} 可以是氢, 和 R^{3p} 、 R^{4p} 、 R^{13p} 和 R^{14p} 可以是氢。在其中 R^6 和

R^7 是 (分别) 具有结构 P1 和结构 P2 的吡咯 -1- 基基团的具有结构 PBI I 和 / 或结构 PBI IV 的吡啶双亚胺配体的一种实施方式中, 吡啶双亚胺配体可具有这样的结构, 其中 R^{2p} 和 R^{5p} 与 R^{12p} 和 R^{15p} 不同; 或可选地, 其中 R^{2p} 和 R^{5p} 与 R^{12p} 和 R^{15p} 相同。在其中 R^6 和 R^7 是 (分别) 具有结构 P1 和结构 P2 的吡咯 -1- 基基团的具有结构 PBI I 和 / 或结构 PBI IV 的吡啶双亚胺配体的一些实施方式中, 吡啶双亚胺配体可具有这样的结构, 其中 R^6 (吡咯 -1- 基结构 P1) 和 R^7 (吡咯 -1- 基结构 P2) 不同 (即, R^{2p} 、 R^{3p} 、 R^{4p} 和 R^{5p} 不精确与 R^{12p} 、 R^{13p} 、 R^{14p} 和 R^{15p} 相同); 或可选地, 其中 R^6 (吡咯 -1- 基结构 P1) 和 R^7 (吡咯 -1- 基结构 P2) 相同 (即, R^{2p} 、 R^{3p} 、 R^{4p} 和 R^{5p} 精确地与 R^{12p} 、 R^{13p} 、 R^{14p} 和 R^{15p} 相同)。在其中 R^6 和 R^7 是 (分别) 具有结构 P1 和结构 P2 的吡咯 -1- 基基团的具有结构 PBI I 和 / 或结构 PBI IV 的吡啶双亚胺配体的一些非限制性实施方式中, 吡啶双亚胺配体可具有具有结构 PBI II 和 / 或结构 PBI V 的吡啶双亚胺配体的任何方面或任何实施方式, 其中 R^{2p} 、 R^{3p} 、 R^{4p} 和 R^{5p} (分别) 对应 R^{12} 、 R^{13} 、 R^{15} 和 R^{16} 以及 R^{12p} 、 R^{13p} 、 R^{14p} 和 R^{15p} (分别) 对应 R^{22} 、 R^{23} 、 R^{25} 和 R^{26} 。

[0142] 在具有结构 BPBI III 和 / 或结构 BPBI VI 的吡啶双亚胺配体的其中 L 可具有结构 10L、结构 12L 和 / 或结构 14L 的非限制性实施方式中, 吡啶双亚胺配体可具有这样的结构: 其中吡啶双亚胺配体的每个吡啶双亚胺部分独立地可具有这样的结构, 其中 R^{12} 、 R^{16} 、 R^{83L} 和 R^{85L} 独立地可以是氢或本文所描述的任何非氢基团。在一些实施方式中, 可以用于任何 R^{12} 、 R^{16} 、 R^{83L} 和 / 或 R^{85L} 的非氢基团可以是惰性官能团、伯碳基团、仲碳基团、叔碳基团或季碳基团; 可选地, 卤基、伯碳基团、仲碳基团、叔碳基团或季碳基团; 可选地, 伯碳基团、仲碳基团、叔碳基团或季碳基团; 可选地, 伯碳基团或仲碳基团; 可选地, 和惰性官能团; 可选地, 卤基; 可选地, 伯碳基团; 可选地, 仲碳基团; 可选地, 叔碳基团; 或可选地, 季碳基团。

[0143] 在具有结构 BPBI III 和 / 或结构 BPBI VI 的吡啶双亚胺配体的其中 L 可具有结构 10L、结构 12L 和 / 或结构 14L 的非限制性实施方式中, 吡啶双亚胺配体可具有这样的结构: 其中吡啶双亚胺配体的每个吡啶双亚胺部分独立地可具有这样的结构, 其中 R^{12} 、 R^{16} 、 R^{83L} 和 R^{85L} 的至少一个独立地可以是本文所描述的任何非氢基团并且剩余的 R^{12} 、 R^{16} 、 R^{83L} 和 R^{85L} 可以是氢; 可选地, 其中 R^{12} 、 R^{16} 、 R^{83L} 和 R^{85L} 的一个可以是本文所描述的任何非氢基团并且剩余的 R^{12} 、 R^{16} 、 R^{83L} 和 R^{85L} 可以是氢; 可选地, 其中 R^{12} 、 R^{16} 、 R^{83L} 和 R^{85L} 的两个独立地可以是本文所描述的任何非氢基团并且剩余的 R^{12} 、 R^{16} 、 R^{83L} 和 R^{85L} 可以是氢; 或可选地, 其中 R^{12} 、 R^{16} 、 R^{83L} 和 R^{85L} 的三个独立地可以是本文所描述的任何非氢基团并且剩余的 R^{12} 、 R^{16} 、 R^{83L} 和 R^{85L} 可以是氢。在具有结构 BPBI III 和 / 或结构 BPBI VI 的吡啶双亚胺配体的其中 L 可具有结构 10L、结构 12L 和 / 或结构 14L 的另一非限制性实施方式中, 吡啶双亚胺配体可具有这样的结构: 其中吡啶双亚胺配体的每个吡啶双亚胺部分独立地可具有这样的结构, 其中 R^{12} 、 R^{16} 、 R^{83L} 和 R^{85L} 的至少一个独立地可以是本文所描述的任何非氢基团, 剩余的 R^{12} 、 R^{16} 、 R^{83L} 和 R^{85L} 可以是氢, 以及 R^{13} 、 R^{14} 、 R^{15} 、 R^{82L} (如果存在) 和 R^{86L} (如果存在) 可以是氢; 可选地, 其中 R^{12} 、 R^{16} 、 R^{83L} 和 R^{85L} 的一个可以是本文所描述的任何非氢基团, 剩余的 R^{12} 、 R^{16} 、 R^{83L} 和 R^{85L} 可以是氢, 以及 R^{13} 、 R^{14} 、 R^{15} 、 R^{82L} (如果存在) 和 R^{86L} (如果存在) 可以是氢; 可选地, R^{12} 、 R^{16} 、 R^{83L} 和 R^{85L} 的两个独立地可以是本文所描述的任何非氢基团, 剩余的 R^{12} 、 R^{16} 、 R^{83L} 和 R^{85L} 可以是氢, 以及 R^{13} 、 R^{14} 、 R^{15} 、 R^{82L} (如果存在) 和 R^{86L} (如果存在) 可以是氢; 或可选地, R^{12} 、 R^{16} 、 R^{83L} 和 R^{85L} 的三个独立地可以是本文所描述的任何非氢基团, 剩余的 R^{12} 、 R^{16} 、 R^{83L} 和 R^{85L} 可以是氢, 以及 R^{13} 、 R^{14} 、 R^{15} 、 R^{82L} (如果存在) 和 R^{86L} (如果存在) 可以是氢。

[0144] 一般而言,围绕具有结构 BPBI III 的吡啶双亚胺配体中的两个吡啶双亚胺基团的每个的 R^{12} 、 R^{16} 、 R^{83L} 和 R^{85L} 彼此是独立的。在具有结构 BPBI III 和 / 或结构 BPBI VI 的吡啶双亚胺配体的其中 L 可具有结构 10L、结构 12L 和 / 或结构 14L 的实施方式中,吡啶双亚胺配体可具有这样的结构,其中吡啶双亚胺配体的每个吡啶双亚胺部分的 R^{12} 、 R^{16} 、 R^{83L} 和 R^{85L} 可以是相同的;或可选地,其中吡啶双亚胺配体的每个吡啶双亚胺部分的 R^{12} 、 R^{16} 、 R^{83L} 和 R^{85L} 可以是不同的。在具有结构 BPBI III 或结构 BPBI VI 的吡啶双亚胺配体的其中 L 具有结构 10L、结构 12L 或结构 14L 的一些实施方式,吡啶双亚胺配体可具有这样的结构,其中 R^{12} 和 R^{16} 与 R^{83L} 和 R^{85L} 相同;或可选地,其中 R^{12} 和 R^{16} 与 R^{83L} 和 R^{85L} 不同。在具有结构 BPBI III 和 / 或结构 BPBI VI 的吡啶双亚胺配体的其中 L 可具有结构 10L、结构 12L 和 / 或结构 14L 的一些实施方式中,吡啶双亚胺配体可具有这样的结构,其中吡啶双亚胺配体的每个吡啶双亚胺部分可以是相同的;或可选地,吡啶双亚胺配体的每个吡啶双亚胺部分可以是不同的。

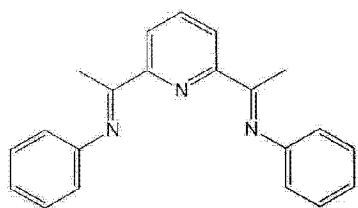
[0145] 在吡啶双亚胺配体结构 BPBI III 和 / 或结构 BPBI VI 的其中 L 可具有结构 10L、结构 12L 和 / 或结构 14L 的实施方式中,吡啶双亚胺配体可具有这样的结构:其中吡啶双亚胺配体的每个吡啶双亚胺部分独立地可具有这样的结构,其中 i) R^{12} 、 R^{16} 、 R^{83L} 和 R^{85L} 的一个可以是伯碳基团或仲碳基团, ii) 其余 R^{12} 、 R^{16} 、 R^{83L} 和 R^{85L} 中没有、有一个或两个可以是伯碳基团、仲碳基团、叔碳基团或非卤惰性官能团(或可选地,伯碳基团、仲碳基团或叔碳基团),和 iii) 没有碳基团或非卤惰性官能团的 R^{12} 、 R^{16} 、 R^{83L} 和 R^{85L} 基团可以是氢或卤基(可选地,氢或氟;或可选地,氢);可选地,其中 i) R^{12} 、 R^{16} 、 R^{83L} 和 R^{85L} 的一个可以是叔碳基团, ii) 其余的 R^{12} 、 R^{16} 、 R^{83L} 和 R^{85L} 中没有、有一个或两个可以是伯碳基团、仲碳基团、叔碳基团或非卤惰性官能团(或可选地,伯碳基团、仲碳基团或叔碳基团),和 iii) 没有碳基团或非卤惰性官能团的 R^{12} 、 R^{16} 、 R^{83L} 和 R^{85L} 基团可以是氢或卤基(可选地,氢或氟;或可选地,氢);可选地,其中 i) R^{12} 、 R^{16} 、 R^{83L} 和 R^{85L} 的一个可以是季碳基团, ii) 其余的 R^{12} 、 R^{16} 、 R^{83L} 和 R^{85L} 中没有或一个可以是叔碳基团、季碳基团或非卤惰性官能团(或可选地,叔碳基团或季碳基团),和 iii) 没有碳基团的 R^{12} 、 R^{16} 、 R^{83L} 和 R^{85L} 基团可以是氢或卤基(可选地,氢或氟;或可选地,氢)。

[0146] 在其中吡啶双亚胺配体具有结构 BPBI III 和 / 或结构 BPBI VI 的其中 L 可具有结构 10L、结构 12L 和 / 或结构 14L 和其中 R^{12} 、 R^{16} 、 R^{83L} 和 R^{85L} 可具有具体特征的任何实施方式中,其余的吡啶双亚胺配体基团可以是任何基团(一个或更多个)或具有本文所描述的与 R^{12} 、 R^{16} 、 R^{83L} 和 R^{85L} 相关的特征一致的任何特征。一般而言,碳基团(无论伯、仲、叔或季)可以是有机基团;可选地,基本上由惰性官能团组成的有机基团;或可选地,烃基基团。有机基团、基本上由惰性官能团组成的有机基团、和烃基基团在本文独立地描述和基于本公开可适当地将具体的有机基团、基本上由惰性官能团组成的有机基团、或烃基基团分类为伯碳基团、仲碳基团、叔碳基团或季碳基团。在一些实施方式中,伯碳基团、仲碳基团、叔碳基团和 / 或季碳基团可以分别是伯烃基团、仲烃基团、叔烃基团和 / 或季烃基团。

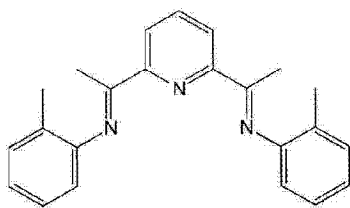
[0147] 在一种实施方式中,吡啶双亚胺配体可单独或以任何组合具有结构 1、结构 2、结构 3、结构 4、结构 5、结构 6、结构 7、结构 8、结构 9、结构 10、结构 11、结构 12、结构 13、结构 14、结构 15、结构 16、结构 17、结构 18、结构 19、结构 20、结构 21、结构 22、结构 23、结构 24、结构 25、结构 26、结构 27、结构 28、结构 29、结构 30、结构 31、结构 32、结构 33、结构 34、结

构 35、结构 36、结构 37、结构 38、结构 39、结构 40、结构 41、结构 42、结构 43、结构 44、结构 45、结构 46、结构 47、结构 48、结构 49、结构 50、结构 51、结构 52、结构 53、结构 54、结构 55、结构 56、结构 57、结构 58、结构 59、结构 60、结构 61、结构 62、结构 63、结构 64 或结构 65。

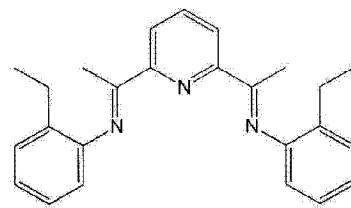
[0148]



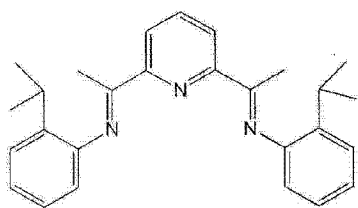
结构 1



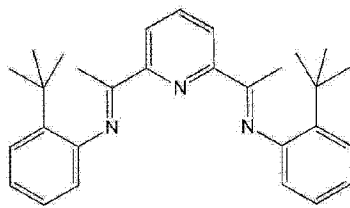
结构 2



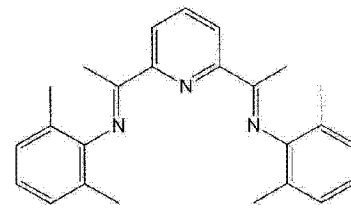
结构 3



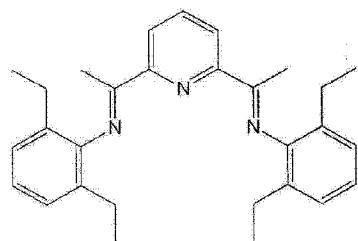
结构 4



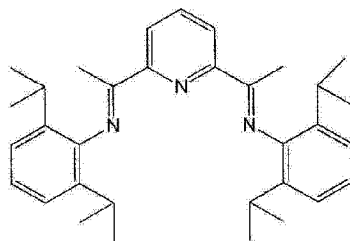
结构 5



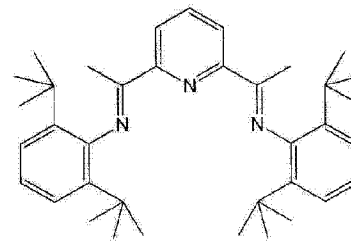
结构 6



结构 7

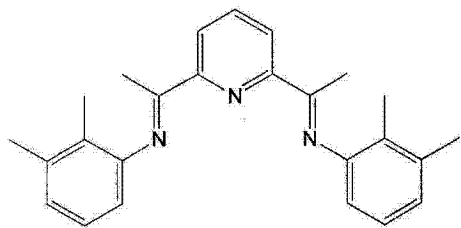


结构 8

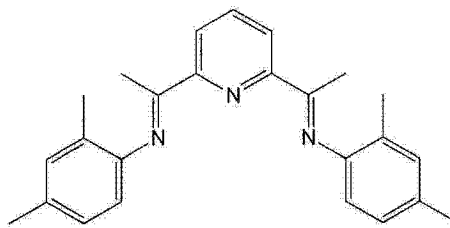


结构 9

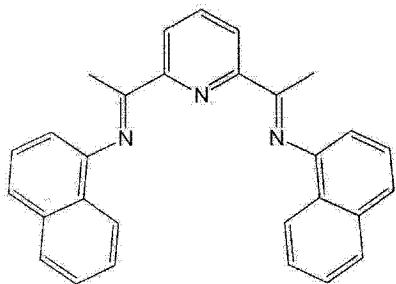
[0149]



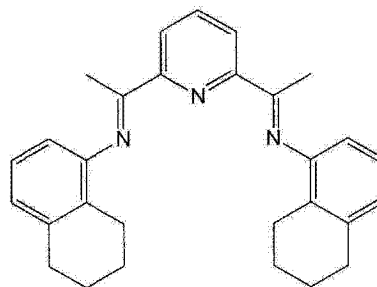
结构 10



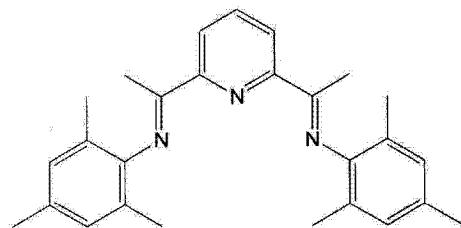
结构 11



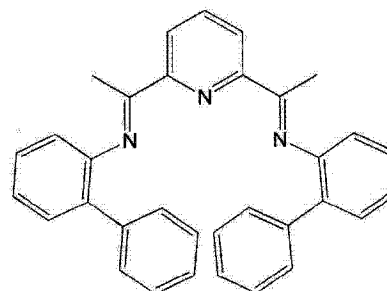
结构 12



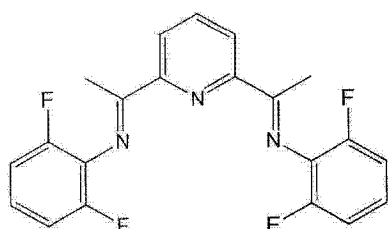
结构 13



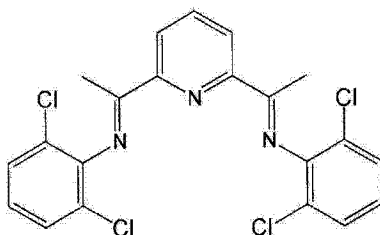
结构 14



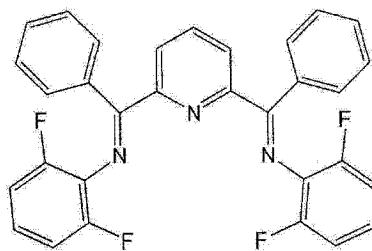
结构 15



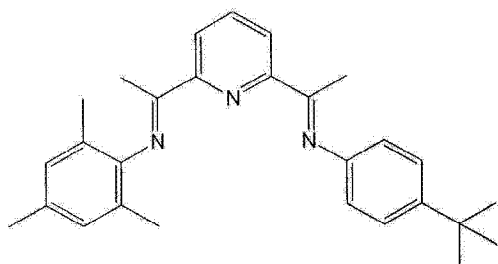
结构 16



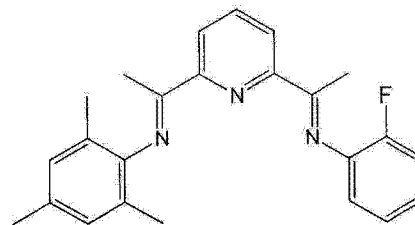
结构 17



结构 18

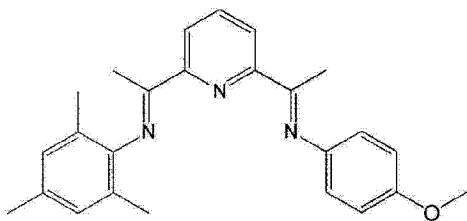


结构 19

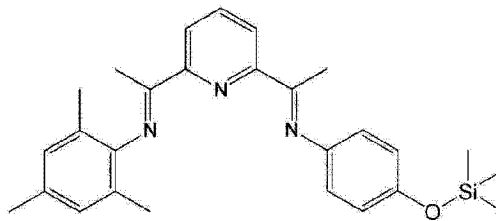


结构 20

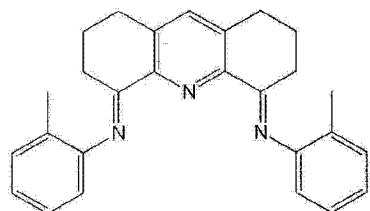
[0150]



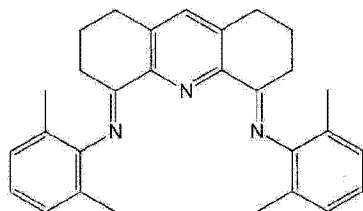
结构 21



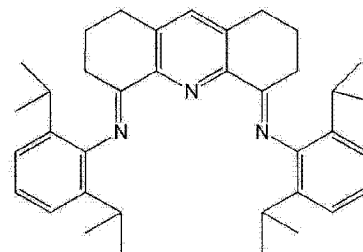
结构 22



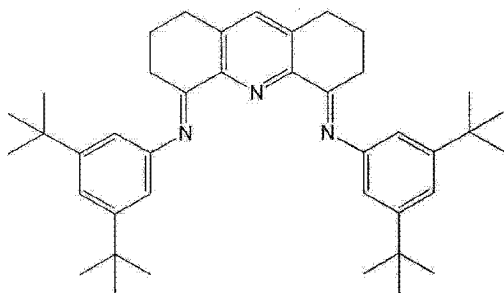
结构 23



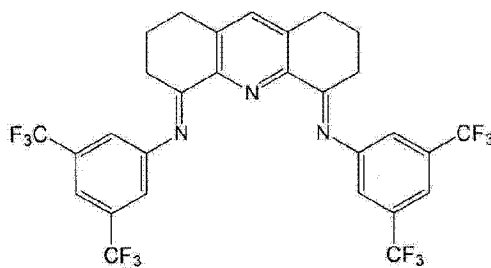
结构 24



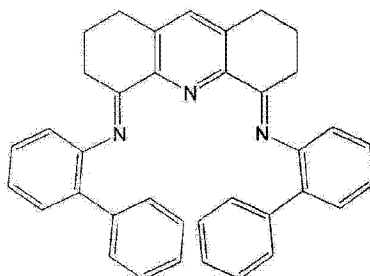
结构 25



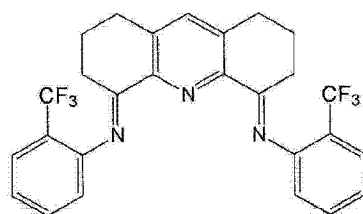
结构 26



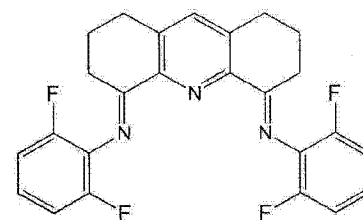
结构 27



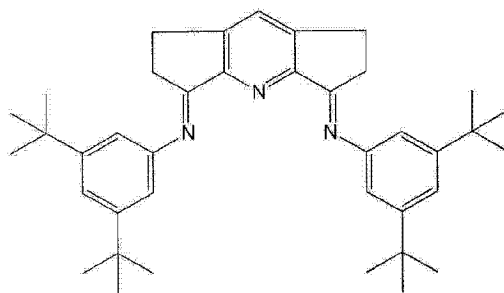
结构 28



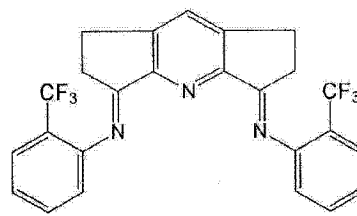
结构 29



结构 30

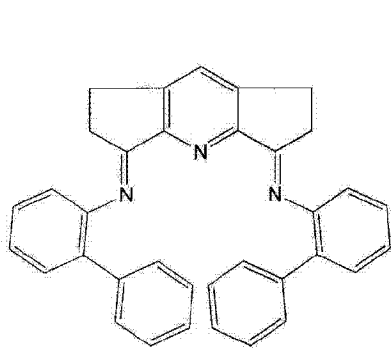


结构 31

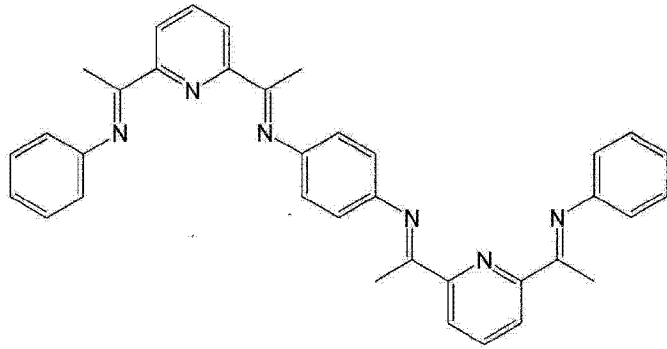


结构 32

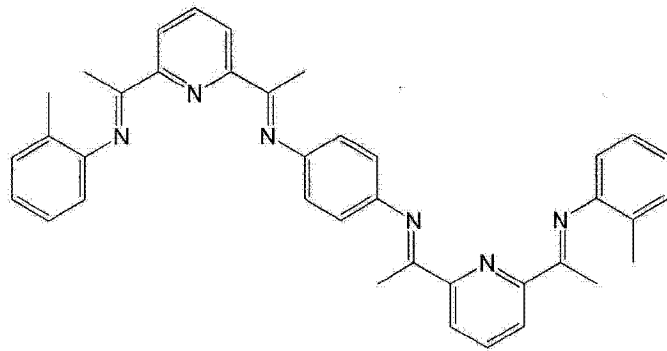
[0151]



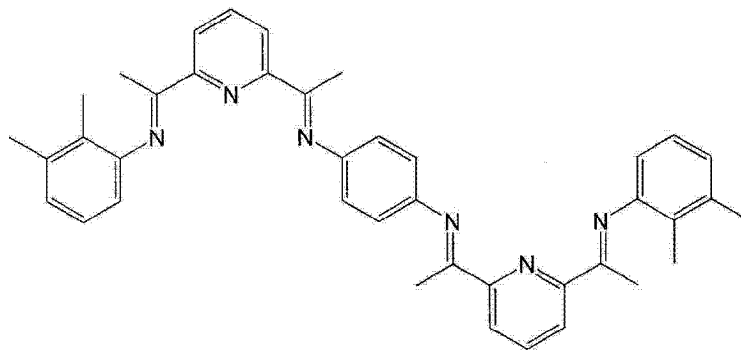
结构 33



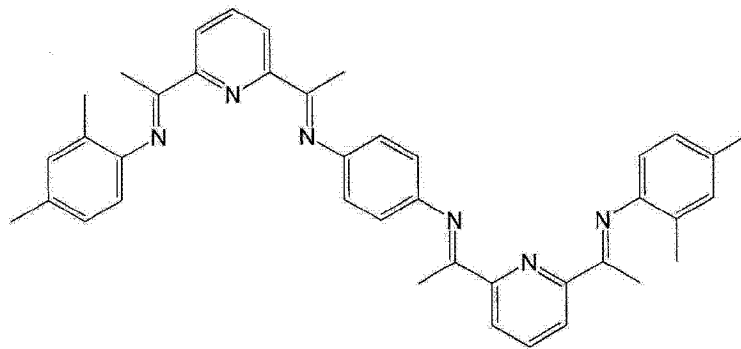
结构 34



结构 35

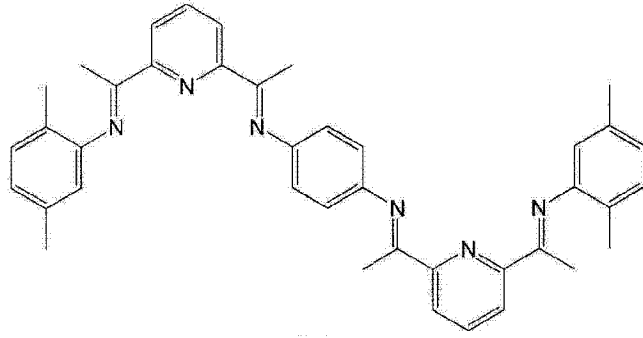


结构 36

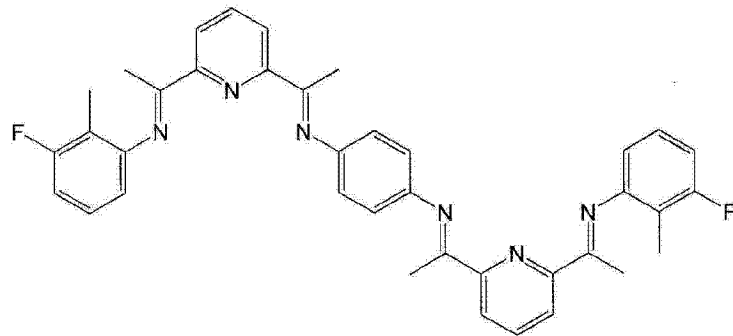


结构 37

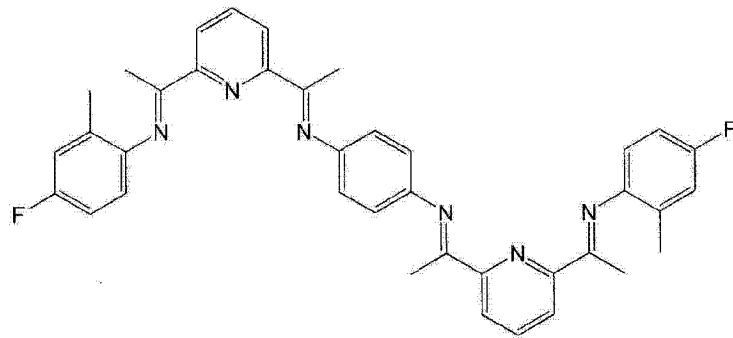
[0152]



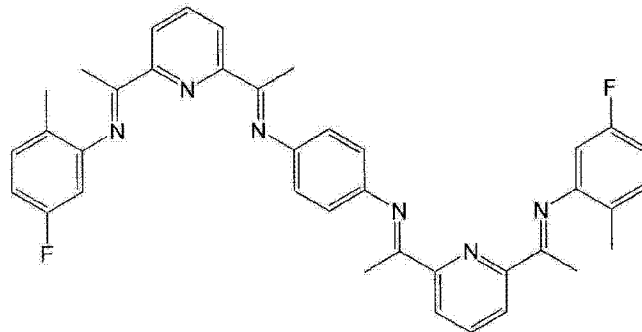
结构 38



结构 39

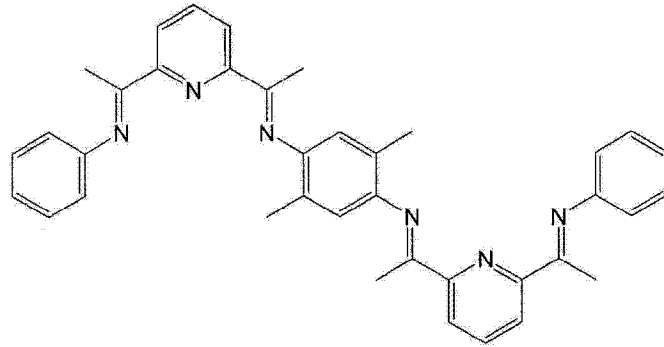


结构 40

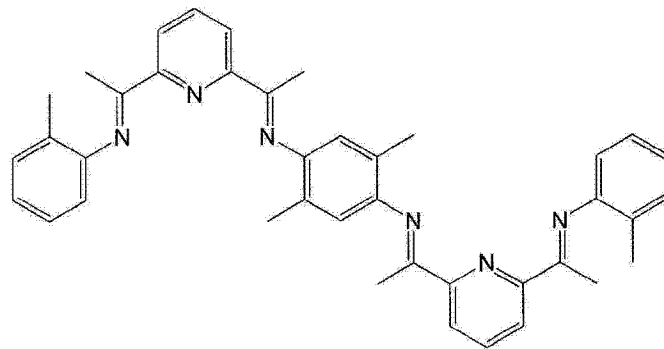


结构 41

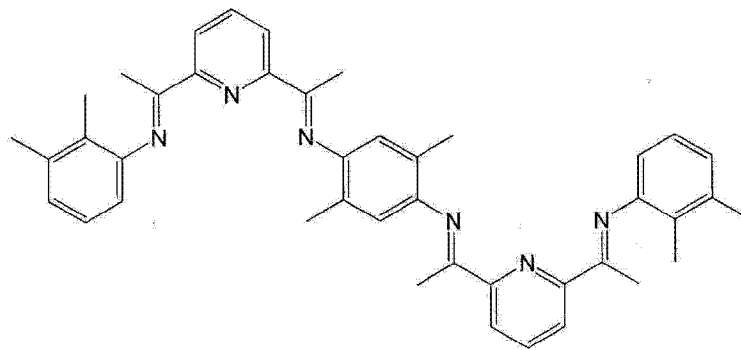
[0153]



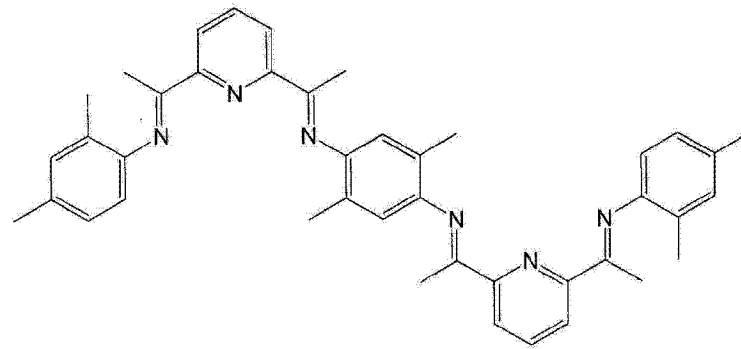
结构 42



结构 43

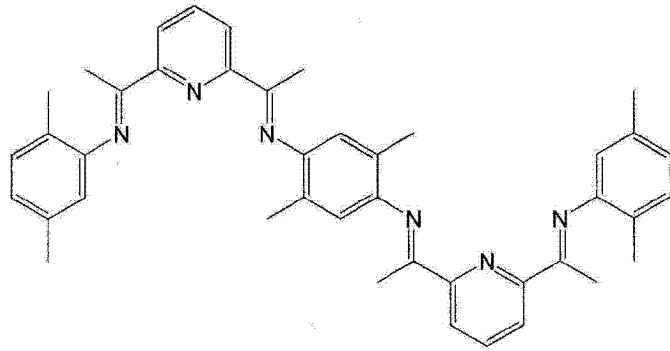


结构 44

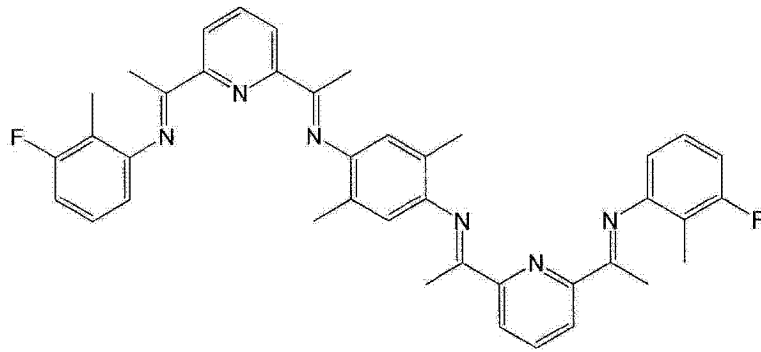


结构 45

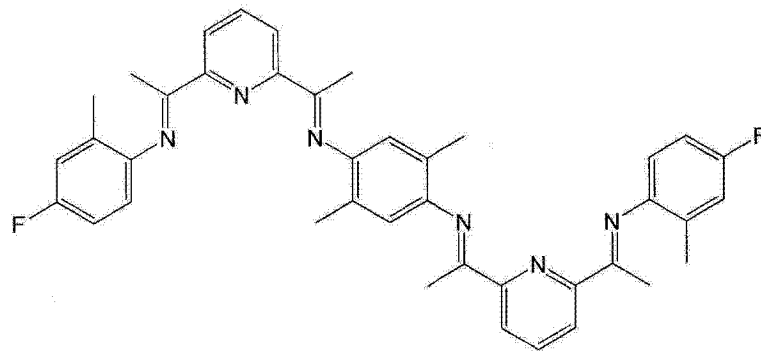
[0154]



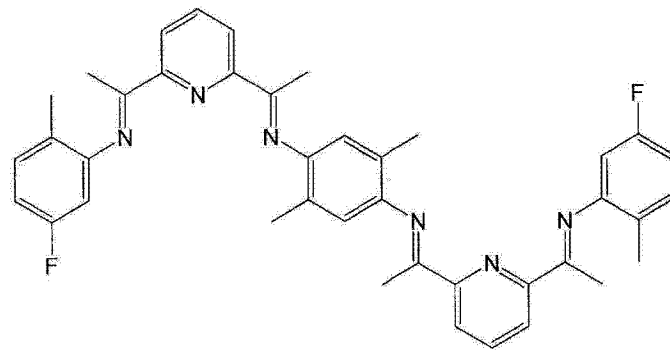
结构 46



结构 47

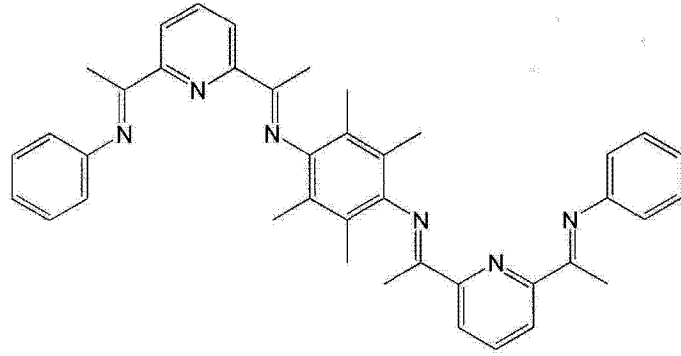


结构 48

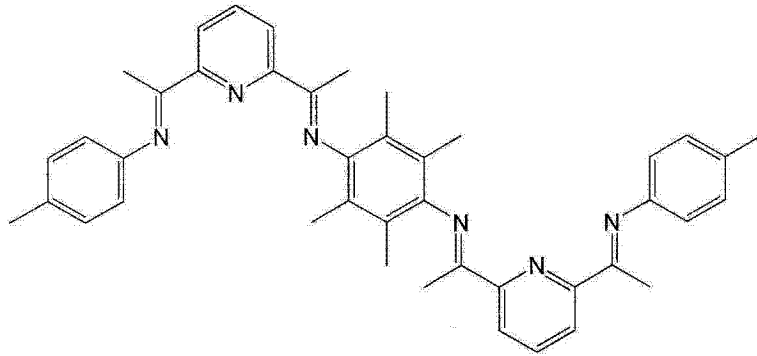


结构 49

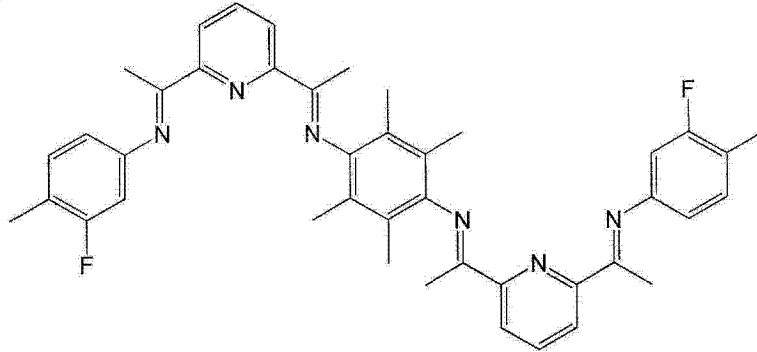
[0155]



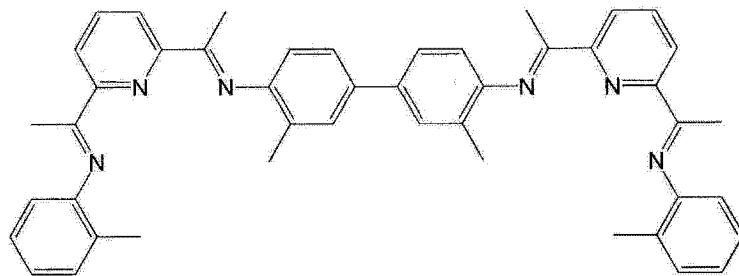
结构 50



结构 51

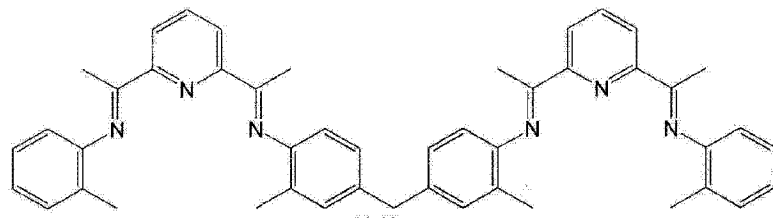


结构 52

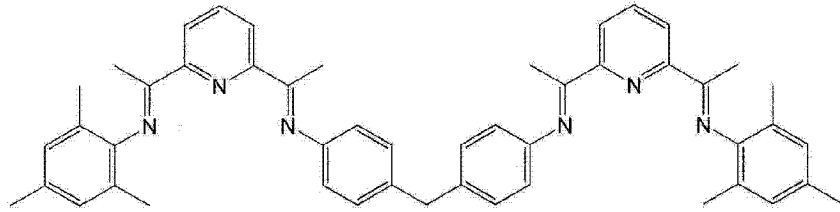


结构 53

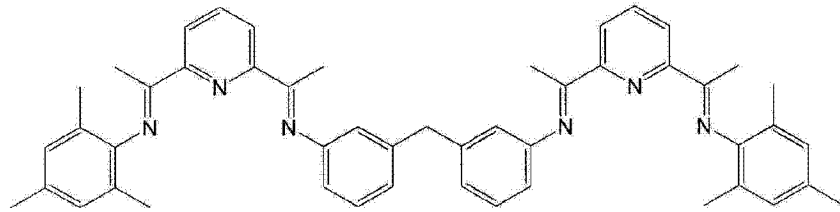
[0156]



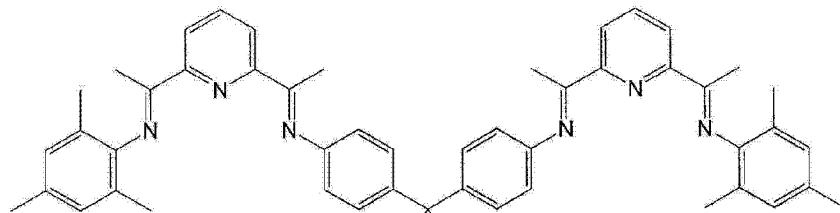
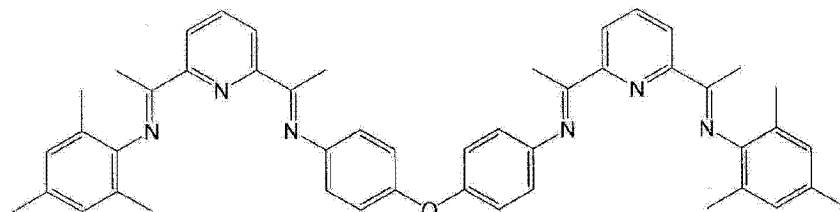
结构 54



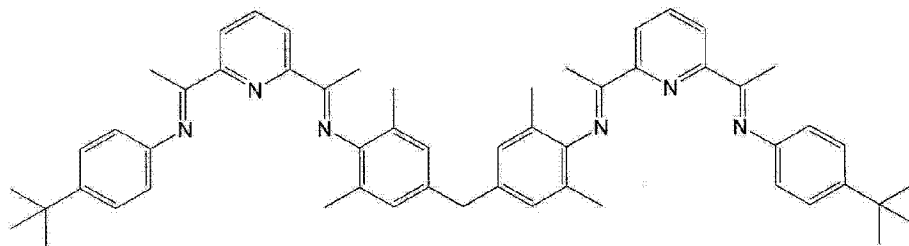
结构 55



结构 56

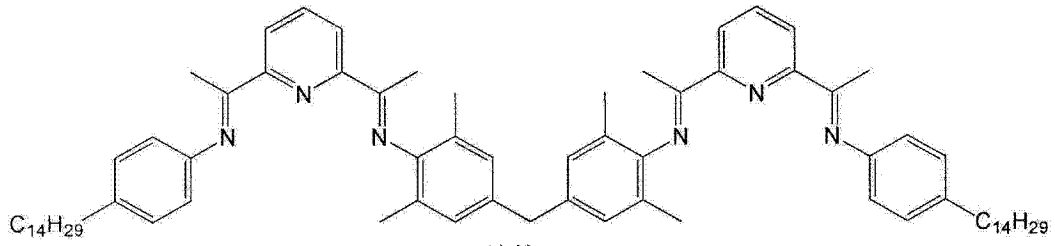
F₃C CF₃
结构 57

结构 58

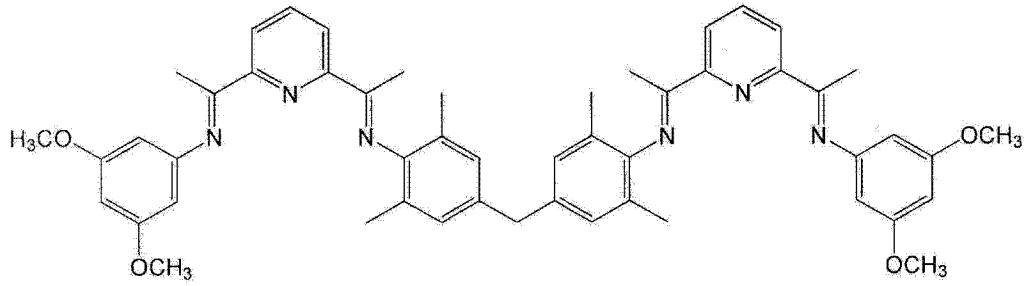


结构 59

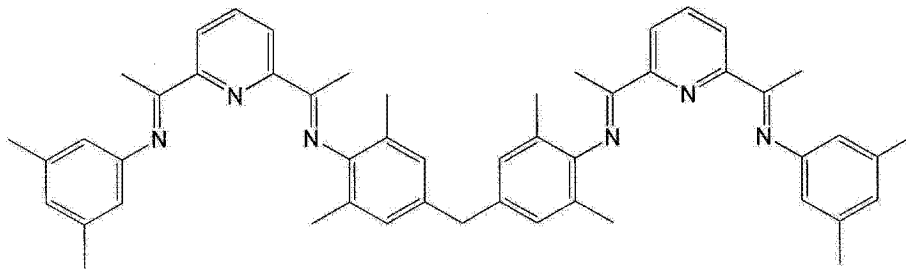
[0157]



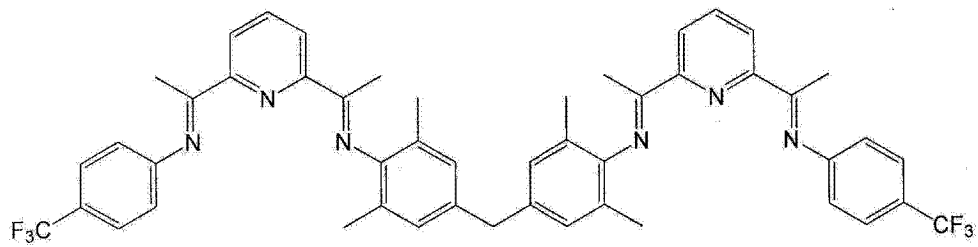
结构 60



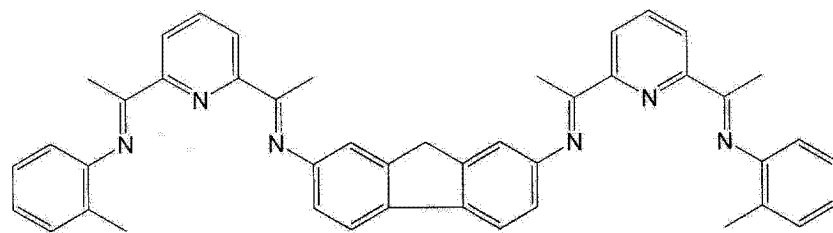
结构 61



结构 62

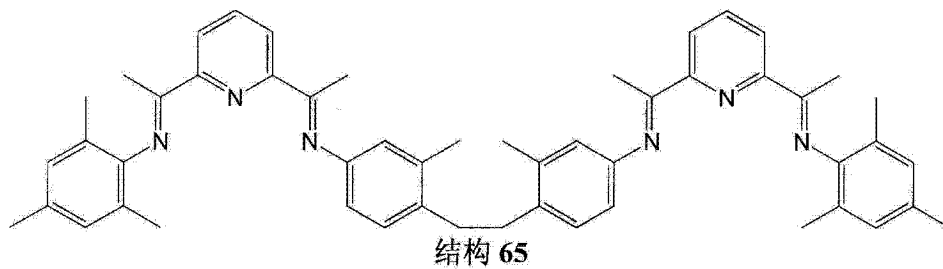


结构 63



结构 64

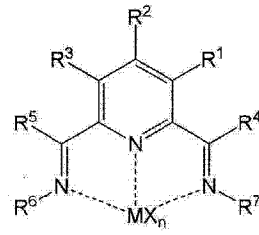
[0158]



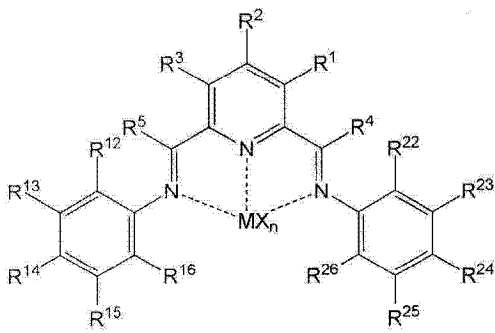
[0159] 一般而言,络合至配体的金属化合物(或本文描绘的任何金属络合物)的金属化合物可以是,包括,或基本上由具有式 MX_n 的金属化合物组成。在具有式 MX_n 的金属化合物的式中,M表示金属原子,X表示阴离子种类,和n表示阴离子种类的数量(或金属氧化态)。一般而言,金属M和阴离子配体X以及阴离子种类的数量(或金属氧化态)n是金属化合物的独立的要素并且被本文独立地描述。可以使用本文所描述的任何方面或实施方式、本文所描述的阴离子种类的任何方面或实施方式、和本文所描述的阴离子种类的数量(或金属原子氧化态)的任何方面或实施方式,描述具有式 MX_n 的金属化合物。

[0160] 一个方面中,金属化合物可络合至包括吡啶双亚胺基团的配体(吡啶双亚胺配体或吡啶双亚胺化合物)。在一些实施方式中,金属化合物可络合至包括仅仅一个吡啶双亚胺基团的吡啶双亚胺配体;或可选地,包括仅仅两个吡啶双亚胺基团的吡啶双亚胺配体。在一种实施方式中,络合至配体的金属化合物可以是,包括,或基本上由下述组成:结构MPBI I,结构MPBI II,结构MPBI III,结构BMPBI I,或结构BMPBI III;可选地,结构MPBI I,结构MPBI II,或结构MPBI III;可选地,结构BMPBI I或结构BMPBI III;可选地,结构MPBI I;可选地,结构MPBI II;可选地,结构MPBI III;可选地,结构BMPBI I;或可选地,结构BMPBI III。在其他非限制性实施方式中,络合至配体的金属化合物可以是,包括,或基本上由下述组成:结构MPBI IV,结构MPBI V,结构MPBI VI,结构BMPBI IV,或结构BMPBI VI;可选地,结构MPBI IV,结构MPBI V,或结构MPBI VI;可选地,结构BMPBI IV或结构BMPBI VI;可选地,结构MPBI V或结构MPBI VI;可选地,结构MPBI IV;可选地,结构MPBI V;可选地,结构MPBI VI;可选地,结构BMPBI IV;或可选地,结构BMPBI VI。

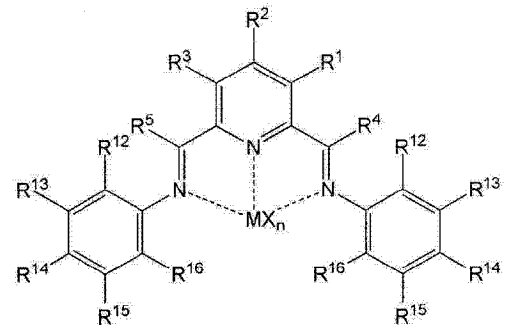
[0161]



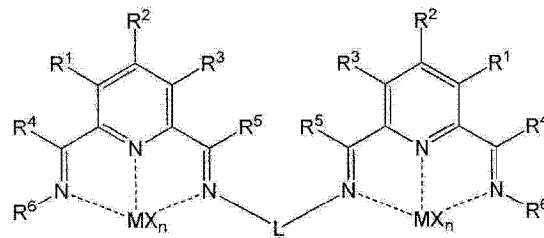
结构 MPBI I



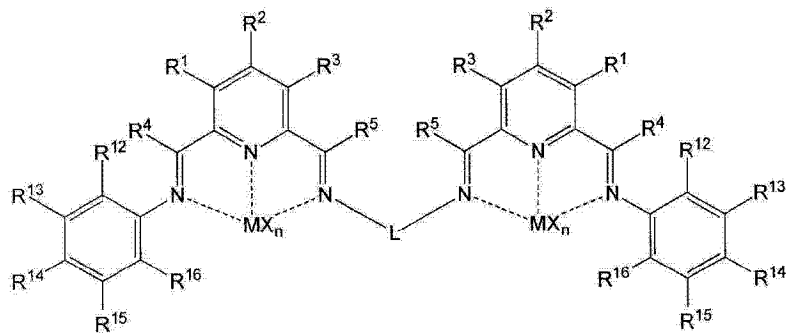
结构 MPBI II



结构 MPBI III

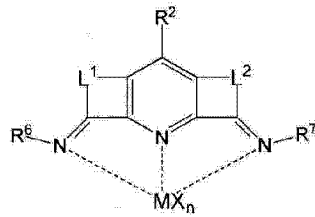


结构 BMPBI I

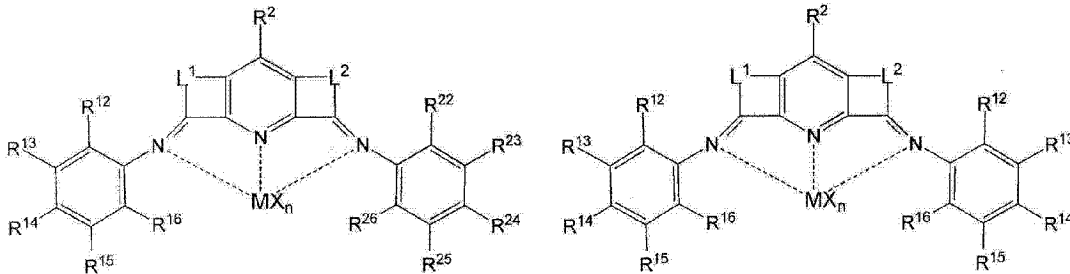


结构 BMPBI III

[0162]

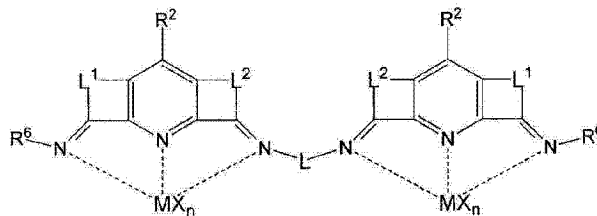


结构 MPBI IV

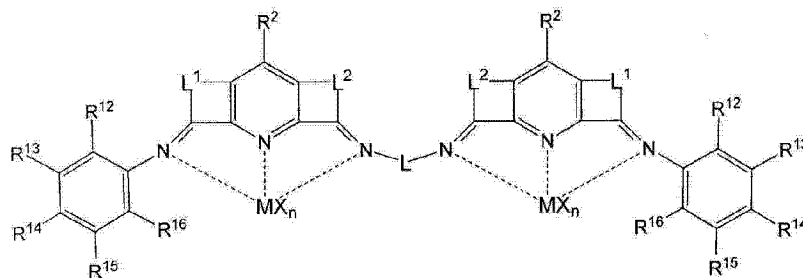


结构 MPBI V

结构 MPBI VI



结构 BMPBI IV



结构 BMPBI VI

[0163] 一般而言, R^1 、 R^2 、 R^3 、 R^4 、 R^5 、 R^6 、 R^7 、 R^{12} 、 R^{13} 、 R^{14} 、 R^{15} 、 R^{16} 、 R^{22} 、 R^{23} 、 R^{24} 、 R^{25} 、 R^{26} 、 L 、 L^1 、 L^2 和 MX_n 是它们具有结构 MPBII、结构 MPBI II、结构 MPBI III、结构 MPBI IV、结构 MPBI V、结构 MPBI VI、结构 BMPBI I、结构 BMPBI II、结构 BMPBI IV 和结构 BMPBI VI 的各自金属络合物的独立的要素。当存在于络合至吡啶双亚胺配体的金属化合物中时,具有结构 MPBI I、结构 MPBI II、结构 MPBI III、结构 MPBI IV、结构 MPBI V、结构 MPBI VI、结构 BMPBII、结构 BMPBI III、结构 BMPBI IV 和结构 BMPBI VI 的金属络合物可以使用本文所描述的 R^1 、 R^2 、 R^3 、 R^4 、 R^5 、 R^6 、 R^7 、 R^{12} 、 R^{13} 、 R^{14} 、 R^{15} 、 R^{16} 、 R^{22} 、 R^{23} 、 R^{24} 、 R^{25} 和 R^{26} 的任何方面或实施方式、本文所描述的 L 的任何方面或实施方式、本文所描述的 L^1 的任何方面或实施方式、本文所描述的 L^2 的任何方面或实施方式和本文所描述的金屬化合物 MX_n 的任何方面或实施方式(包括本文所描述的 M 的任何方面或实施方式、本文所描述的 X 的任何方面或实施方式和本文所描述的 n 的任何方面或实施方式)描述。以与络合至本文描述的各自一般配体的金属化合物 MX_n 类似的描绘方式,通过显示 MX_n 与本文提供的任何配体的连接键,可以作出络合至配体的 MX_n

的其他描绘（并且是容易明白的）。这些描绘可具有结构名称 MPBI Q1、BMPBI Q2、或 Y，其中 Q1、Q2 和 Y 表示分别具有结构 PBI Q1、结构 BPBI Q2 或结构 Y 的配体的配体名称。以与络合至本文描绘的各自一般配体的金属化合物 MX_n 类似的描绘方式，通过用本文提供的任何金属化合物替换 MX_n 和 / 或显示金属化合物与本文提供的任何配体的连接键，可以作出络合至配体的 MX_n 的进一步描绘（并且是容易明白的）。这些描绘可具有结构名称 $\text{MX}_n\text{PBI Q1}$ 、 $\text{BMX}_n\text{PBI Q2}$ 、或结构 MX_nY ，其中 MX_n 表示具体的金属化合物，以及 Q1、Q2 和 Y 表示分别具有结构 PBI Q1、结构 BPBI Q2、或结构 Y 的配体的配体名称，或本文提供的任何其他配体。

[0164] 应注意，本文描绘的一般的金属络合物结构除了吡啶双亚胺配体可进一步包括中性配体（也称为中性路易斯碱）。尽管没有显示金属络合物结构的非吡啶双亚胺的中性配体，但是应理解没有非吡啶双亚胺中性配体的金属络合物结构描绘不将金属络合物限于没有非吡啶双亚胺中性配体的那些。事实上，本文公开的任何方面和本文公开的任何实施方式中可以使用的金属络合物结构可包括非吡啶双亚胺中性配体并且本文提供的这些描绘不将金属络合物限于不包括非吡啶双亚胺中性配体的那些，无论用于描述金属络合物的语言如何。一个方面中，非吡啶双亚胺中性配体可以是，包括，或基本上由下述组成：醚、胺、硫化物、腈或其任何组合；可选地，醚；可选地，胺；可选地，硫化物；或可选地，腈。

[0165] 在一种实施方式中，可用作非吡啶双亚胺中性配体的醚可以是 C_2 至 C_{30} 醚；可选地， C_2 至 C_{20} 醚；可选地， C_2 至 C_{10} 醚；或可选地， C_2 至 C_5 醚。在一些实施方式中，可用作非吡啶双亚胺中性配体的醚可以是二烷基醚。本文公开了烷基基团（一般的和具体的）（例如，作为取代基基团等等）并且可被没有限制地用于进一步描述可用作非吡啶双亚胺中性配体的二烷基醚。一般而言，二烷基醚的每个烷基基团是彼此独立的并且可以相同；或可选地，可以是不同的。在一些实施方式中，两个烷基基团可以结合以形成环状醚，其中醚氧原子是环或环系统的一部分。在非限制性实施方式中，可以使用作为非吡啶双亚胺中性配体的醚可以是，包括，或基本上由下述组成：二甲基醚、二乙基醚、二丙基醚、二丁基醚、甲基乙基醚、甲基丙基醚、甲基丁基醚、四氢呋喃或其任何组合；或可选地，二甲基醚、二乙基醚、二丙基醚、二丁基醚、甲基乙基醚、甲基丙基醚、甲基丁基醚或其任何组合。在另一非限制性实施方式中，可以使用作为非吡啶双亚胺中性配体的醚可以是，包括，或基本上由下述组成：二甲基醚；可选地，二乙基醚；可选地，二丙基醚；可选地，二丁基醚；可选地，甲基乙基醚；可选地，甲基丙基醚；可选地，甲基丁基醚；或可选地，四氢呋喃。

[0166] 在一种实施方式中，可用作非吡啶双亚胺中性配体的胺可以是，包括，或基本上由下述组成：单烷基胺、二烷基胺，或三烷基胺，或其任何组合；可选地，单烷基胺；可选地，二烷基胺；或可选地，三烷基胺。可用作非吡啶双亚胺中性配体的单烷基胺可以是 C_1 至 C_{30} 单烷基胺；可选地， C_1 至 C_{20} 单烷基胺；可选地， C_1 至 C_{10} 单烷基胺；或可选地， C_1 至 C_5 单烷基胺。可用作非吡啶双亚胺中性配体的二烷基胺可以具有与单烷基胺相同数量的碳原子，例外是最低碳数量的二烷基胺是 C_2 。可用作非吡啶双亚胺中性配体的三烷基胺可以具有与单烷基胺相同数量的碳原子，例外是最低碳数量二烷基胺是 C_2 。本文公开了烷基基团（一般的和具体的）（例如，作为取代基基团等等）并且可被没有限制地用于进一步描述可用作非吡啶双亚胺中性配体的单烷基胺、二烷基胺和 / 或三烷基胺。一般而言，二烷基胺（和三烷基胺）的每个烷基基团彼此是独立的并且可以相同；或可选地，可以不同的。在非限制性实施方式中，可用作非吡啶双亚胺中性配体的单烷基胺可以是，包括，或基本上由下述组

成：甲基胺、乙基胺、丙基胺、丁基胺或其任何组合；可选地，甲基胺；可选地，乙基胺；可选地，丙基胺；或可选地，丁基胺。在一些实施方式中，可用作非吡啶双亚胺中性配体的二烷基胺可以是，包括，或基本上由下述组成：二甲基胺、二乙基胺、二丙基胺、二丁基胺或其任何组合；可选地，二甲基胺；可选地，二乙基胺；可选地，二丙基胺；或可选地，二丁基胺。在一些实施方式中，可用作非吡啶双亚胺中性配体的三烷基胺可以是，包括，或基本上由下述组成：三甲基胺、三乙基胺、三丙基胺、三丁基胺或其任何组合；可选地，三甲基胺；可选地，三乙基胺；可选地，三丙基胺；或可选地，三丁基胺。

[0167] 在一种实施方式中，可用作非吡啶双亚胺中性配体的硫醚可以是 C_2 至 C_{30} 硫醚；可选地， C_2 至 C_{20} 硫醚；可选地， C_2 至 C_{10} 硫醚；或可选地， C_2 至 C_5 硫醚。在一些实施方式中，可用作非吡啶双亚胺中性配体的硫醚可以是二烷基硫醚。本文公开了烷基基团（一般的和具体的）（例如，作为取代基基团等等）并且可被没有限制地用于进一步描述可用作非吡啶双亚胺中性配体的二烷基硫醚。一般而言，二烷基硫醚的每个烷基基团彼此是独立的并且可以相同；或可选地，可以是不同的。在一些实施方式中，两个烷基基团可以结合以形成环状硫醚，其中硫醚硫原子是环或环系统的一部分。在非限制性实施方式中，可用作非吡啶双亚胺中性配体的硫醚可以是，包括，或基本上由下述组成：二甲基硫醚、二乙基硫醚、二丙基硫醚、二丁基硫醚、甲基乙基硫醚、甲基丙基硫醚、甲基丁基硫醚、四氢噻吩、硫化环戊烷（thiane），或其任何组合；可选地，二甲基硫醚、二乙基硫醚、二丙基硫醚、二丁基硫醚、甲基乙基硫醚、甲基丙基硫醚、甲基丁基硫醚，或其任何组合；可选地，四氢噻吩、硫化环戊烷，或其任何组合。在另一非限制性实施方式中，可用作非吡啶双亚胺中性配体的硫醚可以是，包括，或基本上由下述组成：二甲基硫醚；可选地，二乙基硫醚；可选地，二丙基硫醚；可选地，二丁基硫醚；可选地，甲基乙基硫醚；可选地，甲基丙基硫醚；可选地，甲基丁基硫醚；可选地，四氢噻吩；或可选地，硫化环戊烷。

[0168] 在一种实施方式中，可用作中性配体的腈可以是 C_2 至 C_{30} 腈；可选地， C_2 至 C_{20} 腈；可选地， C_2 至 C_{10} 腈；或可选地， C_2 至 C_5 腈。在非限制性实施方式中，腈可以是，包括，或基本上由下述组成：乙腈、丙腈、丁腈、苄腈，或其任何组合；可选地，乙腈；可选地，丙腈；可选地，丁腈；或可选地，苄腈。

[0169] 在一种实施方式中，金属化合物（或金属络合物）的金属 M，可以是，包括，或基本上由下述组成：过渡金属。在一些实施方式中，金属化合物（或金属络合物）的金属 M 可以是，包括，或基本上由下述组成：5-10 族金属，可选地，8-10 族金属；可选地，8-9 族金属；可选地，5 族金属；可选地，6 族金属；可选地，7 族金属；可选地，8 族金属；可选地，9 族金属；或可选地，10 族金属。在其他实施方式中，金属化合物（或金属络合物）的金属 M 可以是，包括，或基本上由下述组成：钒、铬、铁、钴或其任何组合；可选地，钴、铁或其任何组合；可选地，钒；可选地，铬；可选地，铁；或可选地，钴。

[0170] 在一种实施方式中，金属化合物（或金属络合物）的金属 M 的氧化态可以是 +1、+2 或 +3；可选地，+2 或 +3；可选地，+1；可选地，+2；或可选地，+3。在一种实施方式中，金属化合物 MX_n 的 n 可以是金属 M 的氧化态。从而，阴离子配体数 X 可以是 1、2 或 3；可选地，2 或 3；可选地，1；可选地，2；或可选地，3。应注意，在一些命名中，当提及金属化合物时，金属化合物中金属（一般的或具体的）的氧化态可以通过将氧化态的罗马数字放在金属名字后面的括号中指示；例如氯化铁 (III) 和氯化铁 (II) 表示分别为 +3 和 +2 氧化态的铁的氯

化物化合物。

[0171] 在一种实施方式中,金属化合物(或金属络合物)的阴离子种类可以是任何阴离子。在一种实施方式中,金属化合物(或金属络合物)的阴离子种类可以是无机的或有机的;可选地,无机的;或可选地,有机的。独立地,金属化合物(或金属络合物)的阴离子种类可以是单阴离子种类。

[0172] 在一种实施方式中,金属化合物(或金属络合物)的每个阴离子种类独立地可以是卤根、硝酸根、硫酸根、磷酸根、卤酸根、羟醇根(hydrocarboxide)、羧酸根或 β -二酮根(β -dionate)(例如,乙酰丙酮根(acetylacetonate));可选地,卤根、硝酸根、硫酸根、磷酸根或卤酸根;可选地,羟醇根、羧酸根或 β -二酮根(例如,乙酰丙酮根);可选地,卤根;可选地,硝酸根;可选地,硫酸根;可选地,磷酸根;可选地,卤酸根;可选地,羟醇根;可选地,羧酸根;或可选地,或 β -二酮根(例如,乙酰丙酮根)。在一种实施方式中,可用作金属化合物(或金属络合物)的阴离子种类的每个卤根独立地可以是氟根、氯根、溴根或碘根;可选地,氯根,溴根或碘根;可选地,氯根或溴根;可选地,氟根;可选地,氯根;可选地,溴根;或可选地,碘根。在一种实施方式中,可用作金属化合物(或金属络合物)的阴离子种类的每个卤酸根独立地可以是氟酸根、氯酸根、溴酸根或碘酸根;可选地,氟酸根;可选地,氯酸根;可选地,溴酸根;或可选地,碘酸根。

[0173] 在一种实施方式中,可用作金属化合物(或金属络合物)的阴离子种类的每个羟醇根独立地可以是 C_1 至 C_{20} 羟醇根;可选地, C_1 至 C_{15} 羟醇根;或可选地, C_1 至 C_{10} 羟醇根。在一种实施方式中,可用作金属化合物(或金属络合物)的阴离子种类的每个羟醇根独立地可以是烷醇根、环烷醇根、芳醇根或芳烷醇根;可选地,烷醇根;可选地,环烷醇根;可选地,芳醇根;或可选地,芳烷醇根。

[0174] 一般而言,可用作金属化合物(或金属络合物)的阴离子种类的每个烷醇根独立地可具有与可用作阴离子种类(一个或更多个)的羟醇根相同数量的碳原子。在一种实施方式中,可用作金属化合物(或金属络合物)的阴离子种类的每个烷醇根独立地可以是甲醇根、乙醇根、丙醇根、丁醇根、戊醇根、己醇根、庚醇根、辛醇根、壬醇根,或癸醇根;可选地,甲醇根、乙醇根、丙醇根、丁醇根或戊醇根;可选地,甲醇根;可选地,乙醇根;可选地,丙醇根;可选地,丁醇根;可选地,戊醇根;可选地,己醇根;可选地,庚醇根;可选地,辛醇根;可选地,壬醇根;或可选地,癸醇根。在一种实施方式中,可用作金属化合物(或金属络合物)的阴离子种类的每个环烷醇根独立地可以是 C_4 至 C_{20} 环烷醇根;可选地, C_5 至 C_{15} 环烷醇根;或可选地, C_6 至 C_{10} 环烷醇根。在一种实施方式中,可用作阴离子种类的每个环烷醇根独立地可以是环戊醇根、取代的环戊醇根、环己醇根或取代的环己醇根;可选地,环戊醇根或取代的环戊醇根;可选地,环己醇根或取代的环己醇根;可选地,环戊醇根或环己醇根;可选地,环戊醇根;或可选地,环己醇根。在一种实施方式中,可用作金属化合物(或金属络合物)的阴离子种类的每个芳醇根独立地可以是 C_6 至 C_{20} 芳醇根;可选地, C_6 至 C_{15} 芳醇根;或可选地, C_6 至 C_{10} 芳醇根。在一种实施方式中,可用作金属化合物(或金属络合物)的阴离子种类的每个芳醇根独立地可以是苯酚根或取代的苯酚根;或可选地,苯酚根。在一种实施方式中,可用作金属化合物(或金属络合物)的阴离子种类的芳烷醇根可以是 C_7 至 C_{20} 芳烷醇根;可选地, C_7 至 C_{15} 芳烷醇根;或可选地, C_7 至 C_{10} 芳烷醇根。在一种实施方式中,可用作金属化合物(或金属络合物)的阴离子种类的每个芳烷醇根独立地可以是苯醇

根 (benzoxide) 或取代的苄醇根 ;或可选地,苄醇根。本文独立公开了取代基基团 (或取代基) 苯酚根并且可被没有限制地用于进一步描述可用作金属化合物 (或金属络合物) 的阴离子种类的任何一般的或具体的取代的环烷醇根、芳醇根和 / 或芳烷醇根。

[0175] 在一种实施方式中,可用作金属化合物 (或金属络合物) 的阴离子种类的每个羧酸根独立地可以是 C_2 至 C_{20} 羧酸根 ;可选地, C_3 至 C_{15} 羧酸根 ;或可选地, C_3 至 C_{10} 羧酸根。在一种实施方式中,可用作金属化合物 (或金属络合物) 的阴离子种类的每个羧酸根独立地可以是乙酸根、丙酸根、丁酸根、戊酸根、己酸根、庚酸根、辛酸根、壬酸根、癸酸根、十一酸根、十二酸根、十三酸根、十四酸根、十五酸根、十六酸根、十七酸根、或十八酸根 ;或可选地,乙酸根、丙酸根、丁酸根、戊酸根、己酸根、庚酸根、辛酸根、壬酸根或癸酸根。在一种实施方式中,可用作金属化合物 (或金属络合物) 的阴离子种类的每个羧酸根独立地可以是乙酸根、丙酸根、正丁酸根、异丁酸根、戊酸根 (正戊酸根)、新戊酸根、己酸根 (正己酸根)、正庚酸根、辛酸根 (正辛酸根)、2- 乙基己酸根、正壬酸根、癸酸根 (正癸酸根)、正十一酸根、月桂酸根 (正十二酸根)、或硬脂酸根 (正十八酸根) ;可选地,丙酸根、正丁酸根、异丁酸根、戊酸根 (正戊酸根)、新戊酸根、己酸根 (正己酸根)、正庚酸根、辛酸根 (正辛酸根)、2- 乙基己酸根、正壬酸根或癸酸根 (正癸酸根) ;可选地,乙酸根 ;可选地,丙酸根 ;可选地,正丁酸根 ;可选地,异丁酸根 ;可选地,戊酸根 (正戊酸根) ;可选地,己酸根 (正己酸根) ;可选地,辛酸根 (正辛酸根) ;可选地,2- 乙基己酸根 ;可选地,癸酸根 (正癸酸根) ;可选地,月桂酸根 (正十二酸根) ;或可选地,硬脂酸根 (正十八酸根)。在其他实施方式中,可用作金属化合物 (或金属络合物) 的阴离子种类的羧酸根独立地可以是三氟甲磺酸根。

[0176] 一个方面中,可用作金属化合物 (或金属络合物) 的阴离子种类的每个 β -二酮根基团独立地可以是 C_5 至 C_{20} β -二酮根基团 ;可选地, C_5 至 C_{15} β -二酮根基团 ;或可选地, C_5 至 C_{10} β -二酮根基团。在一种实施方式中,可用作金属化合物 (或金属络合物) 的阴离子种类的每个 β -二酮根基团独立地可以是乙酰丙酮 (可选地,2,4- 戊烷二酮)、六氟乙酰丙酮 (可选地,1,1,1,5,5,5- 六氟 -2,4- 戊烷二酮)、苯甲酰丙酮或 1,3- 联苯 -1,3- 丙烷 - 二酮 ;可选地,乙酰丙酮 ;可选地,六氟乙酰丙酮 ;可选地,苯甲酰丙酮,或可选地,1,3- 联苯 -1,3- 丙烷二酮。

[0177] 在一种实施方式中,络合至配体的金属化合物可以是,包括,或基本上由下述组成 :金属卤化物。在一些实施方式中,金属化合物可以是,包括,或基本上由下述组成 :卤化铬 (II)、卤化铬 (III)、卤化铁 (II)、卤化铁 (III)、卤化钴 (II) 或卤化钴 (III) ;可选地,卤化铬 (II) 或卤化铬 (III) ;可选地,卤化铁 (II) 或卤化铁 (III) ;或可选地,卤化钴 (II) 或卤化钴 (III)。在其他实施方式中,金属化合物可以是,包括,或基本上由下述组成 :卤化铬 (II) ;可选地,卤化铬 (III) ;可选地,卤化铁 (II) ;可选地,卤化铁 (III) ;可选地,卤化钴 (II) ;或可选地,卤化钴 (III)。

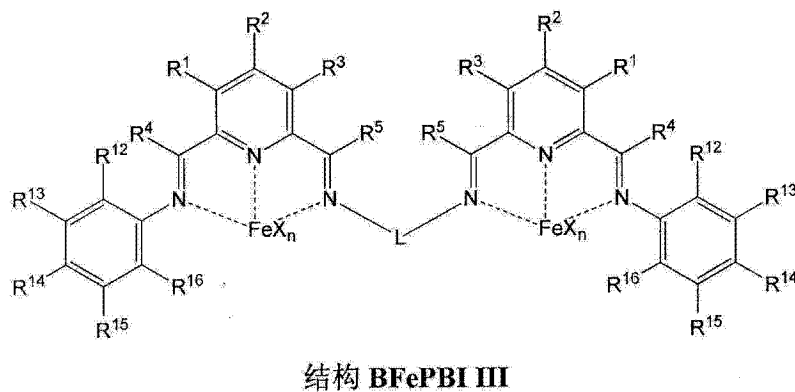
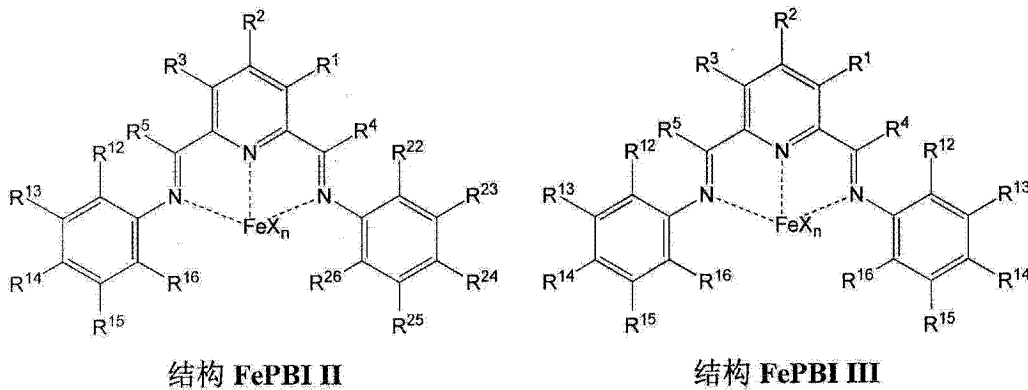
[0178] 在一种实施方式中,金属化合物 (一个或更多个) 可以是氯化铬 (II)、氯化铬 (III)、氟化铬 (II)、氟化铬 (III)、溴化铬 (II)、溴化铬 (III)、碘化铬 (II)、碘化铬 (III)、乙酸铬 (II)、乙酸铬 (III)、乙酰丙酮铬 (II)、乙酰丙酮铬 (III)、2- 乙基己酸铬 (II)、2- 乙基己酸铬 (III)、三氟甲磺酸铬 (II)、三氟甲磺酸铬 (III)、硝酸铬 (II)、硝酸铬 (III)、氯化铁 (II)、氯化铁 (III)、氟化铁 (II)、氟化铁 (III)、溴化铁 (II)、溴化铁 (III)、碘化铁 (II)、碘化铁 (III)、乙酸铁 (II)、乙酸铁 (III)、乙酰丙酮铁 (II)、乙酰丙酮铁 (III)、2- 乙

基己酸铁 (II)、2-乙基己酸铁 (III)、三氟甲磺酸铁 (II)、三氟甲磺酸铁 (III)、硝酸铁 (II)、硝酸铁 (III)、氯化钴 (II)、氯化钴 (III)、氟化钴 (II)、氟化钴 (III)、溴化钴 (II)、溴化钴 (III)、碘化钴 (II)、碘化钴 (III)、乙酸钴 (II)、乙酸钴 (III)、乙酰丙酮钴 (II)、乙酰丙酮钴 (III)、苯甲酰丙酮钴 (II)、苯甲酰丙酮钴 (III)、乙酰丙酮钴 (II)、乙酰丙酮钴 (III)、2-乙基己酸钴 (II)、2-乙基己酸钴 (III)、三氟甲磺酸钴 (II)、三氟甲磺酸钴 (III)、硝酸钴 (II)、硝酸钴 (III)、氯化钒 (III)、氯化钒 (II)、氯化钒 (III)、氯化钒 (III) 四氢呋喃络合物、碘化钒 (II)、碘化钒 (III)、乙酸锰 (II)、乙酸锰 (III)、乙酰丙酮锰 (II)、乙酰丙酮锰 (III)、溴化锰 (II)、溴化锰 (III)、氯化锰 (II)、氯化锰 (III)、氟化锰 (II)、氟化锰 (III)、碘化锰 (II)、碘化锰 (III)、或其任何组合。在一些实施方式中,金属化合物可以是氯化铬 (II)、氯化铬 (III)、乙酸铬 (II)、乙酸铬 (III)、乙酰丙酮铬 (II)、乙酰丙酮铬 (III)、氯化铁 (II)、氯化铁 (III)、乙酸铁 (II)、乙酸铁 (III)、乙酰丙酮铁 (II)、乙酰丙酮铁 (III)、氯化钴 (II)、氯化钴 (III)、乙酸钴 (II)、乙酸钴 (III)、或乙酰丙酮钴 (II)、乙酰丙酮钴 (III)、或其任何组合。在其他实施方式中,金属化合物可以是氯化铬 (II)、氯化铬 (III)、乙酰丙酮铬 (II)、乙酰丙酮铬 (III)、氯化铁 (II)、氯化铁 (III)、乙酰丙酮铁 (II)、乙酰丙酮铁 (III)、氯化钴 (II)、氯化钴 (III)、乙酸钴 (II)、乙酸钴 (III)、或乙酰丙酮钴 (II)、乙酰丙酮钴 (III)、或其任何组合。在进一步的实施方式中,金属化合物可以是氯化铬 (II);可选地,氯化铬 (II);可选地,乙酰丙酮铬 (II);可选地,乙酰丙酮铬 (III);可选地,氯化铁 (II);可选地,乙酰丙酮铁 (II);可选地,氯化钴 (II);或可选地,乙酰丙酮钴 (II)。

[0179] 以与络合至本文描述的各一般配体的金属化合物 MX_n 类似的描绘方式,通过用本文提供的任何具体的金属化合物替换 MX_n 和 / 或显示具体的金属化合物与本文提供的任何配体的连接键,可以作出络合至配体的具体金属化合物 MX_n 的描绘 (并且是容易明白的)。这些描绘可具有命名结构 MCPBI Q1、结构 BMCPBI Q2 或结构 MC Y,其中 MC 表示具体的金属化合物,Q1、Q2 和 Y 表示分别具有结构 PBI Q1、结构 BPBI Q2 或结构 Y 的配体的配体命名,或本文提供的任何其他配体。

[0180] 一个方面中,络合至配体的金属化合物可以是络合至包括吡啶双亚胺基团的配体的铁化合物。在一种实施方式中,络合至配体的金属化合物可以是络合至包括吡啶双亚胺基团的配体的铁化合物。在一些实施方式中,可络合至配体的金属化合物可以是络合至包括仅仅一个吡啶双亚胺基团的配体的铁化合物;或可选地,络合至包括仅仅两个吡啶双亚胺基团的配体的铁化合物。在一种实施方式中,络合至配体的金属化合物可以是,包括,或基本上由下述组成:结构 FePBI II、结构 FePBI III 或结构 BFePBI III;可选地,结构 FePBI II 或结构 FePBI III;可选地,结构 FePBI II;可选地,结构 FePBI III;或可选地,结构 BFePBI III。

[0181]



[0182] 一般而言, R^1 、 R^2 、 R^3 、 R^4 、 R^5 、 R^6 、 R^7 、 R^{12} 、 R^{13} 、 R^{14} 、 R^{15} 、 R^{16} 、 R^{22} 、 R^{23} 、 R^{24} 、 R^{25} 和 R^{26} 、 L 、 FeX_n 是具有结构 FePBI II、结构 FePBI III 和结构 BFePBI III 的铁络合物的独立的要素。使用本文所描述的 R^1 、 R^2 、 R^3 、 R^4 、 R^5 、 R^6 、 R^7 、 R^{12} 、 R^{13} 、 R^{14} 、 R^{15} 、 R^{16} 、 R^{22} 、 R^{23} 、 R^{24} 、 R^{25} 和 R^{26} 的任何方面或实施方式、本文所描述的 L 的任何方面或实施方式和本文所描述金属化合物 FeX_n 的任何方面或实施方式(包括本文所描述的 X 的任何方面或实施方式和本文所描述的 n 的任何方面或实施方式), 可以描述具有结构 FePBI II、结构 FePBI III 和结构 BFePBI III 的铁络合物。通过结合本文提供的任何铁化合物和本文提供的任何配体, 络合至配体的铁化合物的其他结构从本公开是容易明白的。

[0183] 应注意, 本文描述的铁络合物结构可进一步包括非吡啶双亚胺之外的中性配体。尽管没有显示铁络合物结构的非吡啶双亚胺中性配体, 但是应注意没有非吡啶双亚胺中性配体的铁络合物结构描绘不将铁络合物限于没有非吡啶双亚胺中性配体的那些。事实上, 在本文公开的任何方面和本文公开的任何实施方式中使用的铁络合物结构可包括非吡啶双亚胺中性配体并且本文提供的这些描绘并不将铁络合物限于不包括非吡啶双亚胺中性配体的那些, 无论用于描述铁络合物的语言如何。本文提供了非吡啶双亚胺中性配体(例如, 作为一般的金属络合物的非吡啶双亚胺中性配体) 并且可被没有限制地用于进一步描述铁络合物。

[0184] 在具有 BFePBI III 的铁络合物的非限制性方面中, 连接至亚胺氮原子的 L 的每个碳原子可以是芳族碳原子并且这样可以是本文所描述的任何基团, 其中连接至亚胺氮原子的 L 的每个碳原子可以是芳族碳原子。在具有结构 BFePBI III 的铁络合物的另一非限制性方面中, L 可具有结构 8L、9L、10L、11L、12L、13L、和 / 或 14L; 可选地, 结构 8L、9L、或 10L;

可选地,结构 11L、12L、13L、或 14L;可选地,结构 11L 或 12L;可选地,结构 13L 或 14L;可选地,结构 8L;可选地,结构 9L;可选地,结构 10L;可选地,结构 11L;可选地,结构 12L;可选地,结构 13L;或可选地,结构 14L。

[0185] 在具有结构 FePBI II、结构 FePBI III 或结构 BFePBI III 的铁络合物的非限制性实施方式中,每个阴离子 X 独立地可以是卤基。本文已经独立公开了可用作 X 的卤基并且可被没有限制地用于进一步描述具有结构 FePBI II、结构 FePBI III 或结构 BFePBI III 的铁络合物。以与络合至本文描绘的各一般配体的金属化合物 MX_n 类似的描绘方式,通过显示 FeX_n 与本文提供的任何配体的连接键,可以作出 FeX_n 络合至配体的其他描绘(并且是容易明白的)。通过用本文提供的任何铁化合物替换 MX_n 和/或以与络合至本文描述的任何各一般配体的金属化合物 MX_n 类似的描绘方式显示铁化合物与本文提供的任何配体的连接键,可以作出 FeX_n 络合至配体的进一步描绘(并且是容易明白的)。这些描绘可具有结构命名 FePBI Q1 或 BFePBI Q2,其中 Q1 和 Q2 分别表示具有结构 PBI Q1 或 BPBI Q2 的配体的配体命名,或本文提供的任何其他配体。

[0186] 在一些非限制性实施方式中,络合至可具有本文公开的任何结构的配体的铁化合物可以是 $FeCl_2$ 或 $FeCl_3$;可选地, $FeCl_2$;或可选地, $FeCl_3$ 。通过用 $FeCl_2$ (或 $FeCl_3$) 替换与本文提供的配体络合的金属化合物的任何描绘中的 MX_n ;或可选地,用 $FeCl_2$ (或 $FeCl_3$) 替换与本文提供的配体络合的铁化合物的任何描绘中的 FeX_n ,可以作出 $FeCl_2$ (或 $FeCl_3$) 络合至配体的其他描绘。以与本文描述的各一般配体络合的金属化合物(或一般铁化合物)类似的描绘方式,通过显示 $FeCl_2$ (或 $FeCl_3$) 与本文提供的任何配体的连接键,可以作出 $FeCl_2$ (或 $FeCl_3$) 络合至配体的进一步描绘(并且是容易明白的)。这些描绘可具有结构命名 $FeCl_2PBIQ1$ (或结构 $FeCl_3PBI Q1$)、结构 $FeCl_2PBI Q2$ (或结构 $FeCl_3PBI Q2$) 或结构 $FeCl_2Y$ (或结构 $FeCl_3Y$),其中 Q1、Q2 和 Y 表示分别具有结构 PBIQ1、结构 BPBI Q2 或结构 Y 的配体,或本文提供的任何其他配体。应注意,氯化铁络合物可进一步包括不是吡啶双亚胺配体的中性配体。尽管可能没有显示氯化铁络合物的该非吡啶双亚胺中性配体,应理解没有中性配体的氯化铁络合物描绘不将氯化铁络合物限于没有中性配体的那些。事实上,可以在本文公开的任何方面和本文公开的任何实施方式中使用的氯化铁络合物可包括非吡啶双亚胺中性配体并且本文提供的任何描绘不将氯化铁络合物限于不包括非吡啶双亚胺中性配体的那些,无论用于描述氯化铁络合物的语言如何。本文提供了非吡啶双亚胺中性配体(例如,作为一般金属络合物的非吡啶双亚胺中性配体)并且可被没有限制地用于进一步描述氯化铁络合物。

[0187] 适于本公开使用的催化剂的另外的描述可见下述美国专利和欧洲专利出版物 U. S. 5, 955, 555、U. S. 6, 103, 946、U. S. 6, 291, 733、U. S. 6, 489, 497、U. S. 6, 451, 939、U. S. 6, 455, 660、U. S. 6, 458, 739、U. S. 6, 472, 341、U. S. 6, 545, 108、U. S. 6, 559, 091、U. S. 6, 657, 026、U. S. 6, 683. 187、U. S. 6, 710, 006、U. S. 6, 911, 505、U. S. 6, 911, 506、U. S. 7, 001, 964、U. S. 7, 045, 632、U. S. 7, 056, 997、U. S. 7, 223, 893、U. S. 7, 456, 284、U. S. 7, 683, 149、U. S. 7902, 415、U. S. 7, 994, 376 和 EP1229020A1。这些文档的每一篇通过引用以它们整体并入本文。

[0188] 能够抽取阴离子种类、氢负离子或烷基基团的路易斯酸可以是中性路易斯酸,阳离子路易斯酸,或其任何组合;可选地,中性路易斯酸;或可选地,阳离子路易斯酸。在一种

实施方式中,路易斯酸可能够烷基化过渡金属络合物;或可选地,添加氢负离子阴离子至过渡金属络合物。如果路易斯酸不能够烷基化过渡金属络合物(或可选地,不能添加氢负离子阴离子至过渡金属络合物),催化剂体系可进一步包括另外的能够烷基化过渡金属络合物(或可选地,添加氢负离子阴离子至过渡金属络合物)的试剂。

[0189] 在非限制性实施方式中,中性路易斯酸可以是,包括,或基本上由下述组成:SbF₅、Ar₃B(其中Ar是芳基基团)和BF₃,或其任何组合;可选地,SbF₅;可选地,Ar₃B;或可选地,BF₃。在非限制性实施方式中,阳离子路易斯酸可以是,包括,或基本上由下述组成:NaBAF、三氟甲烷磺酸银、HBF₄或[C₆H₅NH(CH₃)₂]⁺[B(C₆F₅)₄]⁻。当另外的能够烷基化过渡金属络合物的试剂必要时,能够烷基化过渡金属络合物的试剂可以是,包括,或基本上由下述组成:烷基金属化合物。本文描述了烷基金属化合物并且可没有限制地用作能够烷基化过渡金属络合物的试剂。当能够添加氢负离子阴离子至过渡金属络合物的另外的试剂必要时,能够添加氢负离子阴离子至过渡金属络合物的试剂可以是,包括,或基本上由下述组成:氢化金属化合物。可以没有限制地用作能够添加氢负离子阴离子至过渡金属络合物的试剂的氢化金属化合物可以是,包括,或基本上由下述组成:NaBH₄、LiAlH₄、AlH₃、氢化烷基铝,或其任何组合;可选地,NaBH₄;可选地,LiAlH₄;可选地,AlH₃;或可选地,氢化烷基铝。本文描述了烷基基团(例如,作为烷基金属化合物的烷基基团)并且烷基基团可以被没有限制地用作氢化烷基铝的烷基基团。

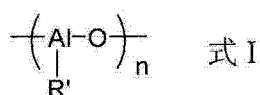
[0190] 可在本公开的催化剂体系中使用的烷基金属化合物可以是任何杂配或均配烷基金属化合物。在一种实施方式中,烷基金属可包括,基本上由下述组成,或由下述组成:非卤化物烷基金属、卤化烷基金属,或其任何组合;可选地,非卤化物烷基金属;或可选地,卤化烷基金属。

[0191] 在一种实施方式中,烷基金属化合物的金属可包括,基本上由下述组成,或由下述组成;1、2、11、12、13或14族金属;或可选地,13或14族金属;或可选地,13族金属。在一些实施方式中,烷基金属化合物(非卤化物烷基金属或卤化烷基金属)的金属可以是锂、钠、钾、铷、铯、铍、镁、钙、锶、钡、锌、镉、硼、铝、或锡;可选地,锂、钠、钾、镁、钙、锌、硼、铝、或锡;可选地,锂、钠、或钾;可选地,镁或钙;可选地,锂;可选地,钠;可选地,钾;可选地,镁;可选地,钙;可选地,锌;可选地,硼;可选地,铝;或可选地,锡。在一些实施方式中,烷基金属化合物(非卤化物烷基金属或卤化烷基金属)可包括,基本上由下述组成,或由下述组成:烷基锂化合物、烷基钠化合物、烷基镁化合物、烷基硼化合物、烷基锌化合物或烷基铝化合物。在一些实施方式中,烷基金属(非卤化物烷基金属或卤化烷基金属)可包括烷基铝化合物、基本上由烷基铝化合物组成或由烷基铝化合物组成。

[0192] 在一种实施方式中,烷基铝化合物可以是三烷基铝、卤化烷基铝、烷醇烷基铝、铝氧烷或其任何组合。在一些实施方式中,烷基铝化合物可以是三烷基铝、卤化烷基铝、铝氧烷或其任何组合;或可选地,三烷基铝、铝氧烷或其任何组合。在其他实施方式中,烷基铝化合物可以是三烷基铝;可选地,卤化烷基铝;可选地,烷醇烷基铝;或可选地,铝氧烷。

[0193] 在非限制性实施方式中,铝氧烷可具有特征在于式I的重复单元:

[0194]



[0195] 其中 R' 是直链或支链烷基基团。本文独立地描述了烷基金属化合物的烷基基团并且可被没有限制地用于进一步描述具有式 I 的铝氧烷。一般而言,式 I 的 n 大于 1;或可选地,大于 2。在一种实施方式中,n 范围可从 2 至 15;或可选地,范围从 3 至 10。

[0196] 一个方面中,本文公开的任何卤化烷基金属的每个卤根独立地可以是,包括,或基本上由下述组成:氟根、氯根、溴根或碘根;可选地,氯根、溴根或碘根。在一种实施方式中,本文公开的任何卤化烷基金属的每个卤根可以是氟根;可选地,氯根;可选地,溴根;或可选地,碘根。

[0197] 一个方面中,本文公开的任何烷基金属化合物(非卤化物烷基金属或卤化烷基金属)的每个烷基基团独立地可以是,包括,或基本上由下述组成:C₁至C₂₀烷基基团;可选地,C₁至C₁₀烷基基团;或可选地,C₁至C₆烷基基团。在一种实施方式中,本文公开的任何烷基金属化合物(非卤化物烷基金属或卤化烷基金属)的每个烷基基团(一个或更多个)独立地可以是,包括,或基本上由下述组成:甲基基团、乙基基团、丙基基团、丁基基团、戊基基团、己基基团、庚基基团或辛基基团;可选地,甲基基团、乙基基团、丁基基团、己基基团或辛基基团。在一些实施方式中,烷基基团独立地可以是,包括,或基本上由下述组成:甲基基团、乙基基团、正丙基基团、正丁基基团、异丁基基团、正己基基团或正辛基基团;可选地,甲基基团、乙基基团、正丁基基团或异丁基基团;可选地,甲基基团;可选地,乙基基团;可选地,正丙基基团;可选地,正丁基基团;可选地,异丁基基团;可选地,正己基基团;或可选地,正辛基基团。

[0198] 一个方面中,本文公开的任何烷醇烷基金属的每个烷氧基基团独立地可以是,包括,或基本上由下述组成:C₁至C₂₀烷氧基基团;可选地,C₁至C₁₀烷氧基基团;或可选地,C₁至C₆烷氧基基团。在一种实施方式中,本文公开的任何烷醇烷基金属的每个烷氧基基团独立地可以是,包括,或基本上由下述组成:甲氧基基团、乙氧基基团、丙氧基基团、丁氧基基团、戊氧基基团、己氧基基团、庚氧基基团或辛氧基基团;可选地,甲氧基基团、乙氧基基团、丁氧基基团、己氧基基团或辛氧基基团。在一些实施方式中,本文公开的任何烷醇烷基金属的每个烷氧基基团独立地可以是,包括,或基本上由下述组成:甲氧基基团、乙氧基基团、正丙氧基基团、正丁氧基基团、异丁氧基基团、正己氧基基团或正辛氧基基团;可选地,甲氧基基团、乙氧基基团、正丁氧基基团或异丁氧基基团;可选地,甲氧基基团;可选地,乙氧基基团;可选地,正丙氧基基团;可选地,正丁氧基基团;可选地,异丁氧基基团;可选地,正己氧基基团;或可选地,正辛氧基基团。

[0199] 在非限制性实施方式中,烷基金属化合物可以是,包括,或基本上由下述组成:甲基锂、正丁基锂、仲丁基锂、叔丁基锂、二乙基镁、二正丁基镁、氯化乙基镁、氯化正丁基镁和二乙基锌。

[0200] 在非限制性实施方式中,三烷基铝化合物可以是,包括,或基本上由下述组成:三甲基铝、三乙基铝、三丙基铝、三丁基铝、三己基铝、三辛基铝或其混合物。在一些非限制性实施方式中,三烷基铝化合物可以是,包括,或基本上由下述组成:三甲基铝、三乙基铝、三丙基铝、三正丁基铝、三异丁基铝、三己基铝、三正辛基铝或其混合物;可选地,三乙基铝、三正丁基铝、三异丁基铝、三己基铝、三正辛基铝或其混合物;可选地,三乙基铝、三正丁基铝、三己基铝、三正辛基铝或其混合物。在其他非限制性实施方式中,三烷基铝化合物可以是,包括,或基本上由下述组成:三甲基铝;可选地,三乙基铝;可选地,三丙基铝;可选地,三正

丁基铝 ; 可选地, 三异丁基铝 ; 可选地, 三己基铝 ; 或可选地, 三正辛基铝。

[0201] 在非限制性实施方式中, 卤化烷基铝可以是, 包括, 或基本上由下述组成 : 氯化二乙基铝、溴化二乙基铝、二氯化乙基铝、倍半氯化乙基铝, 和其混合物。在一些非限制性实施方式中, 卤化烷基铝可以是, 包括, 或基本上由下述组成 : 氯化二乙基铝、二氯化乙基铝、倍半氯化乙基铝, 和其混合物。在其他非限制性实施方式中, 卤化烷基铝可以是, 包括, 或基本上由下述组成 : 氯化二乙基铝 ; 可选地, 溴化二乙基铝 ; 可选地, 二氯化乙基铝 ; 或可选地, 倍半氯化乙基铝。

[0202] 在非限制性实施方式中, 铝氧烷可以是, 包括, 或基本上由下述组成 : 甲基铝氧烷 (MAO)、乙基铝氧烷、改性的甲基铝氧烷 (MMAO)、正丙基铝氧烷、异丙基铝氧烷、正丁基铝氧烷、仲丁基铝氧烷、异丁基铝氧烷、叔丁基铝氧烷、1- 戊基铝氧烷、2- 戊基铝氧烷、3- 戊基铝氧烷、异戊基铝氧烷、新戊基铝氧烷, 或其混合物。在一些非限制性实施方式中, 铝氧烷可以是, 包括, 或基本上由下述组成 : 甲基铝氧烷 (MAO)、改性的甲基铝氧烷 (MMAO)、异丁基铝氧烷、叔丁基铝氧烷, 或其混合物。在其他非限制性实施方式中, 铝氧烷可以是, 包括, 或基本上由下述组成 : 甲基铝氧烷 (MAO) ; 可选地, 乙基铝氧烷 ; 可选地, 改性的甲基铝氧烷 (MMAO) ; 可选地, 正丙基铝氧烷 ; 可选地, 异丙基铝氧烷 ; 可选地, 正丁基铝氧烷 ; 可选地, 仲丁基铝氧烷 ; 可选地, 异丁基铝氧烷 ; 可选地, 叔丁基铝氧烷 ; 可选地, 1- 戊基铝氧烷 ; 可选地, 2- 戊基铝氧烷 ; 可选地, 3- 戊基铝氧烷 ; 可选地, 异戊基铝氧烷 ; 或可选地, 新戊基铝氧烷。

[0203] 一个方面中, 烷基金属化合物和过渡金属络合物可以以可形成活性催化剂体系的任何比组合。在一种实施方式中, 烷基金属化合物的金属与过渡金属络合物的金属的最小摩尔比可大于或等于 5 : 1 ; 可选地, 大于或等于 10 : 1 ; 可选地, 大于或等于 25 : 1 ; 可选地, 大于或等于 50 : 1 ; 可选地, 大于或等于 100 : 1 ; 可选地, 大于或等于 150 : 1 ; 或可选地, 大于或等于 200 : 1。在一种实施方式中, 烷基金属化合物的金属与过渡金属络合物的金属的最大摩尔比可以是 100,000 : 1 ; 可选地, 50,000 : 1 ; 可选地, 25,000 : 1 ; 可选地, 10,000 : 1 ; 可选地, 5,000 : 1 ; 可选地, 2,500 : 1 ; 可选地, 2,000 : 1 ; 可选地, 1,500 : 1 ; 可选地, 1,250 : 1 ; 可选地, 1,250 : 1 ; 或可选地, 1,000 : 1。在一种实施方式中, 烷基金属化合物的金属与过渡金属络合物的金属的最小摩尔比范围可从本文公开的烷基金属化合物的金属与过渡金属络合物的金属的任何最小摩尔比至本文公开的烷基金属化合物的金属与过渡金属络合物的金属的任何最大摩尔比。在一些非限制性实施方式中, 烷基金属化合物的金属与过渡金属络合物的金属的摩尔比范围可从 5 : 1 至 100,000 : 1 ; 可选地, 范围从 10 : 1 至 50,000 : 1 ; 可选地, 范围从 25 : 1 至 10,000 : 1 ; 可选地, 范围从 50 : 1 至 5,000 : 1 ; 或可选地, 范围从 100 : 1 至 2,500 : 1 ; 或可选地, 范围从 100 : 1 至 1,500 : 1。其他的烷基金属化合物的金属与过渡金属络合物的金属的摩尔比从本公开是容易明白的。

[0204] 当使用具有具体金属的烷基金属化合物和具有具体过渡金属的过渡金属络合物时, 烷基金属的金属与过渡金属络合物的金属的摩尔比可以叙述为烷基金属化合物的具体金属与过渡过渡金属络合物的具体金属的摩尔比。例如, 当烷基金属化合物是烷基铝化合物 (例如, 三烷基铝、卤化烷基铝、烷醇烷基铝和 / 或铝氧烷) 并且过渡金属络合物是络合至包括吡啶双亚胺基团的配体的铁化合物时, 烷基金属化合物的金属与过渡金属

化合物的金属的比可以是铝与铁的摩尔比。在一些实施方式中,铝与铁的最小摩尔比可大于或等于 5 : 1 ;可选地,大于或等于 10 : 1 ;可选地,大于或等于 25 : 1 ;可选地,大于或等于 50 : 1 ;可选地,大于或等于 100 : 1 ;可选地,大于或等于 150 : 1 ;或可选地,大于或等于 200 : 1。在一种实施方式中,铝与铁的最大摩尔比可以是 100,000 : 1 ;可选地,50,000 : 1 ;可选地,25,000 : 1 ;可选地,10,000 : 1 ;可选地,5,000 : 1,可选地,2,500 : 1 ;可选地,2,000 : 1 ;可选地,1,500 : 1 ;可选地,1,250 : 1 ;可选地,1,250 : 1 ;或可选地,1,000 : 1。在一种实施方式中,铝与铁的摩尔比范围可从本文公开的铝与铁的任何最小摩尔比至本文公开的铝与铁的任何最大摩尔比。在一些非限制性实施方式中,铝与铁的摩尔比范围可从 5 : 1 至 100,000 : 1 ;可选地,范围从 10 : 1 至 50,000 : 1 ;可选地,范围从 25 : 1 至 10,000 : 1 ;可选地,范围从 50 : 1 至 5,000 : 1 ;或可选地,范围从 100 : 1 至 2,500 : 1 ;或可选地,范围从 100 : 1 至 1,500 : 1。铝与铁的其他摩尔比从本公开是容易明白的。其他的烷基金属化合物的具体金属与过渡金属络合物的具体金属的摩尔比从本公开是容易明白的。

[0205] 一个方面中,本公开涉及烯烃低聚方法。在一种实施方式中,烯烃低聚方法可包括将烯烃和催化剂体系接触以形成烯烃低聚物产物,所述催化剂体系包括 i) 过渡金属络合物,其包括络合至配体的过渡金属化合物和 ii) 烷基金属化合物 ;可选地,烯烃低聚方法可包括将烯烃和催化剂体系接触以形成烯烃低聚物产物,所述催化剂体系包括 i) 过渡金属络合物,其包括络合至配体的过渡金属化合物和 ii) 能够抽取阴离子种类、氢负离子或烷基基团的路易斯酸 (或路易斯酸和能够烷基化过渡金属络合物和 / 或添加氢负离子阴离子至过渡金属络合物的试剂) ;可选地,烯烃低聚方法可包括将烯烃、氢和催化剂体系接触以形成烯烃低聚物产物,所述催化剂体系包括 i) 过渡金属络合物,其包括过渡金属化合物和 ii) 烷基金属化合物 ;或可选地,烯烃低聚方法可包括将烯烃、氢和催化剂体系接触以形成烯烃低聚物产物,所述催化剂体系包括 i) 过渡金属络合物,其包括过渡金属化合物和 ii) 能够抽取阴离子种类、氢负离子或烷基基团的路易斯酸 (或路易斯酸和能够烷基化过渡金属络合物和 / 或添加氢负离子阴离子至过渡金属络合物的试剂)。在一些实施方式中,烯烃低聚方法可包括 :a) 将过渡金属络合物和烷基金属接触以形成催化剂体系 ;和 b) 将催化剂体系和烯烃接触以形成烯烃低聚物产物 ;可选地, a) 将过渡金属络合物和能够抽取阴离子种类、氢负离子或烷基基团的路易斯酸 (或路易斯酸和能够烷基化过渡金属络合物和 / 或添加氢负离子阴离子至过渡金属络合物的试剂) 接触以形成催化剂体系 ;和 b) 将催化剂体系、烯烃和氢接触以形成烯烃低聚物产物 ;或可选地, a) 将过渡金属络合物和能够抽取阴离子种类、氢负离子或烷基基团的路易斯酸 (或路易斯酸和能够烷基化过渡金属络合物和 / 或添加氢负离子阴离子至过渡金属络合物的试剂) 接触以形成催化剂体系 ;和 b) 将催化剂体系、烯烃和氢接触以形成烯烃低聚物产物。在其他实施方式中,烯烃低聚方法可包括将 a) 烯烃、b) 过渡金属络合物和 c) 烷基金属化合物接触以形成烯烃低聚物产物 ;可选地,烯烃低聚方法可包括将 a) 烯烃、b) 过渡金属络合物和 c) 能够抽取阴离子种类、氢负离子或烷基基团的路易斯酸 (或路易斯酸和能够烷基化过渡金属络合物和 / 或添加氢负离子阴离子至过渡金属络合物的试剂) 接触以形成烯烃低聚物产物 ;可选地,烯烃低聚方法可包括将 a) 烯烃, b) 过渡金属络合物, c) 烷基金属化合物,和 d) 氢

接触,以产生烯烃低聚物产物;或可选地,烯烃低聚方法可包括将 a) 烯烃, b) 过渡金属络合物, c) 能够抽取阴离子种类、氢负离子或烷基基团的路易斯酸(或路易斯酸和能够烷基化过渡金属络合物和/或添加氢负离子阴离子至过渡金属络合物的试剂),和 d) 氢接触,以产生烯烃低聚物产物。

[0206] 在一种实施方式中,烯烃低聚物产物可以在能够形成烯烃低聚物产物的条件下形成。在一种实施方式中,烯烃低聚物产物可以在烯烃低聚反应器中形成。在一些实施方式中,催化剂体系可以在溶剂存在的情况下制备;或可选地,催化剂体系可以与溶剂接触然后与烯烃(或烯烃和氢)接触。在另一实施方式中,稀释剂(烯烃低聚稀释剂)也可与烯烃和催化剂体系接触;可选地,与烯烃、过渡金属络合物和烷基金属化合物接触;可选地,过渡金属络合物和能够抽取阴离子种类、氢负离子或烷基基团的路易斯酸(或路易斯酸和能够烷基化过渡金属络合物和/或添加氢负离子阴离子至过渡金属络合物的试剂);可选地,烯烃、催化剂体系和氢;可选地,烯烃、氢、过渡金属络合物和烷基金属化合物;或可选地,烯烃、氢、过渡金属络合物和能够抽取阴离子种类、氢负离子或烷基基团的路易斯酸(或路易斯酸和能够烷基化过渡金属络合物和/或添加氢负离子阴离子至过渡金属络合物的试剂)。

[0207] 一般而言,烯烃、催化剂体系(可选地,烯烃、过渡金属络合物和烷基金属化合物;或可选地,烯烃、过渡金属络合物和能够抽取阴离子种类、氢负离子或烷基基团的路易斯酸(或路易斯酸和能够烷基化过渡金属络合物和/或添加氢负离子阴离子至过渡金属络合物的试剂))、烯烃低聚物产物、能够生产烯烃低聚物产物的条件、任何溶剂、烯烃低聚稀释剂和烯烃低聚反应器等特征以及其他烯烃低聚特征是烯烃低聚方法的独立的要素并且被本文独立地描述。可以使用如下的任何组合描述烯烃低聚方法:本文所描述的烯烃的任何方面或实施方式,和本文所描述的催化剂体系的任何方面或实施方式(可选地,本文所描述的过渡金属络合物的任何方面或实施方式,和本文所描述的烷基金属化合物的任何方面或实施方式;或可选地,能够抽取阴离子种类、氢负离子或烷基基团的路易斯酸的任何方面或实施方式(或路易斯酸的任何方面或实施方式和能够烷基化过渡金属络合物和/或添加氢负离子阴离子至过渡金属络合物的试剂的任何方面或实施方式)),本文所描述的烯烃低聚物产物的任何方面或实施方式,本文所描述的溶剂的任何方面或实施方式,本文所描述的烯烃低聚稀释剂的任何方面或实施方式,本文所描述的烯烃低聚方法的任何方面或实施方式,和本文所描述的任何其他烯烃低聚反应特征的任何方面或实施方式。

[0208] 一般而言,烯烃和催化剂体系可以任何方式接触;可选地,烯烃、过渡金属络合物和烷基金属化合物可以任何方式接触;或可选地,烯烃、过渡金属络合物和能够抽取阴离子种类、氢负离子或烷基基团的路易斯酸(或路易斯酸和能够烷基化过渡金属络合物和/或添加氢负离子阴离子至过渡金属络合物的试剂)可以任何方式接触。本文使用烷基金属化合物阐释了烯烃低聚的组分的接触方法。通过将能够抽取阴离子种类、氢负离子或烷基基团的路易斯酸(或路易斯酸和能够烷基化过渡金属络合物和/或添加氢负离子阴离子至过渡金属络合物的试剂)替换烷基金属化合物,这些方法可以适于使用能够抽取阴离子种类、氢负离子或烷基基团的路易斯酸(或路易斯酸和能够烷基化过渡金属络合物和/或添加氢负离子阴离子至过渡金属络合物的试剂)的催化剂体系。

[0209] 一个方面中,催化剂体系组分(即,过渡金属络合物和烷基金属化合物)可被接

触,然后该催化剂体系与烯烃接触。在一些实施方式中,烯烃低聚方法可包括其中烯烃和催化剂体系可同时(或基本上同时)引入烯烃低聚反应器的步骤;或可选地,包括其中烯烃和催化剂体系在烯烃低聚反应器之外接触并且然后引入烯烃低聚反应器的步骤。在其中烯烃和催化剂体系在烯烃反应器之外接触的一种实施方式中,烯烃可以添加至催化剂体系;可选地,催化剂体系可以添加至烯烃;或可选地,烯烃和催化剂体系可在烯烃低聚反应器之外同时地接触(或基本上同时地接触)并且然后引入烯烃低聚反应器。在仍其他实施方式中,烯烃可被引入烯烃低聚反应器并且然后催化剂体系引入烯烃低聚反应器。在进一步的实施方式中,催化剂体系可被引入烯烃低聚反应器并且然后烯烃被引入烯烃低聚反应器。

[0210] 在一些实施方式中,催化剂体系可以是进一步包括溶剂的组合物(例如,催化剂体系组合物)的一部分。在其他实施方式中,烯烃可以是进一步包括溶剂的组合物(例如,烯烃组合物)的一部分。在一种实施方式中,溶剂可以是烯烃低聚稀释剂;或可选地,溶剂可以与烯烃低聚稀释剂不同。在其中催化剂体系和烯烃是进一步包括溶剂的单独组合物的一部分的实施方式中,可在催化剂体系组合物中使用的溶剂可以与可以在烯烃组合物中使用的溶剂相同;或可选地,可以在催化剂体系组合物中使用的溶剂可以与可以在烯烃组合物中使用的溶剂不同。

[0211] 一个方面中,烯烃低聚物产物可以在烯烃低聚稀释剂的存在下形成。在使用烯烃低聚稀释剂的实施方式中,烯烃低聚稀释剂可与烯烃和催化剂体系同时(或基本上同时)引入烯烃低聚反应器;或可选地,烯烃低聚稀释剂可与烯烃、过渡金属络合物和烷基金属化合物同时(或基本上同时)引入烯烃低聚反应器。在其他实施方式中,烯烃低聚稀释剂(或部分烯烃低聚稀释剂)可与催化剂体系接触,以形成催化剂体系组合物,其包括,或基本上由下述组成:催化剂体系和烯烃低聚稀释剂,并且然后将催化剂体系组合物和烯烃同时引入烯烃低聚反应器;或可选地,烯烃低聚稀释剂(或部分烯烃低聚稀释剂)可接触烯烃以形成烯烃组合物,其包括,或基本上由下述组成:烯烃和烯烃低聚稀释剂,并且然后将烯烃组合物和催化剂体系同时引入烯烃低聚反应器;或可选地, i) 烯烃低聚稀释剂(或部分烯烃低聚稀释剂)可接触催化剂体系以形成催化剂体系组合物,其包括,或基本上由下述组成:催化剂体系和烯烃低聚稀释剂, ii) 部分烯烃低聚稀释剂可接触烯烃以形成烯烃组合物,其包括,或基本上由下述组成:烯烃和烯烃低聚稀释剂,并且然后将烯烃组合物和催化剂体系同时引入烯烃低聚反应器,和 iii) 催化剂体系组合物和烯烃组合物可被引入烯烃低聚反应器。当部分烯烃低聚稀释剂接触催化剂体系和/或烯烃以分别形成催化剂体系组合物和/或烯烃组合物时,任何剩余的部分烯烃低聚溶剂可以任何方式被引入烯烃低聚反应器(例如,与其他组分同时,在引入其他组分之前,或在添加其他组分之后)。

[0212] 一个方面中,烯烃低聚方法可包括其中烯烃、过渡金属络合物和烷基金属化合物可同时(或基本上同时)引入烯烃低聚反应器的步骤。在另一方面中,烯烃低聚方法可包括其中烯烃、过渡金属络合物和烷基金属化合物可同时(或基本上同时)在烯烃低聚反应器之外接触并且然后引入烯烃低聚反应器的步骤。

[0213] 一个方面中,烯烃低聚方法可包括这样的步骤,其中烷基金属化合物和包括 i) 烯烃和 ii) 过渡金属络合物的混合物(或可选地,包括或基本上由 i) 烯烃, ii) 过渡金属络合物,和 iii) 烯烃低聚稀释剂组成的混合物)可同时(或基本上同时)引入烯烃低聚反应器;或可选地,包括这样的步骤,其中烷基金属化合物和包括 i) 烯烃和 ii) 过渡金属络合物

的混合物（或可选地，包括或基本上由 i) 烯烃，ii) 过渡金属络合物，和 iii) 烯烃低聚稀释剂组成的混合物）在烯烃低聚反应器之外接触并且然后引入烯烃低聚反应器。在其中烷基金属化合物和混合物在烯烃低聚反应器之外接触的一些实施方式中，烷基金属化合物可以添加至包括 i) 烯烃和 ii) 过渡金属络合物的混合物（或可选地，包括或基本上由 i) 烯烃，ii) 过渡金属络合物，和 iii) 烯烃低聚稀释剂组成的混合物）；可选地，包括 i) 烯烃和 ii) 过渡金属络合物的混合物（或可选地，包括或基本上由 i) 烯烃，ii) 过渡金属络合物，和 iii) 烯烃低聚稀释剂组成的混合物）可以添加至烷基金属化合物；或可选地，烷基金属化合物和包括 i) 烯烃和 ii) 过渡金属络合物的混合物（或可选地包括或基本上由 i) 烯烃，ii) 过渡金属络合物，和 iii) 烯烃低聚稀释剂组成的混合物）可同时地接触（或基本上同时地接触）。在一种实施方式中，可通过如下制备包括烯烃和过渡金属络合物的混合物：添加烯烃至过渡金属络合物；可选地，添加过渡金属络合物至烯烃；或可选地，烯烃和过渡金属络合物可同时地（或基本上同时）接触。

[0214] 在一种实施方式中，烯烃低聚方法可包括这样的步骤，其中过渡金属络合物和包括 i) 烯烃和 ii) 烷基金属化合物的混合物（或可选地，包括或基本上由 i) 烯烃，ii) 烷基金属化合物，和 iii) 烯烃低聚稀释剂组成的混合物）可同时（或基本上同时）引入烯烃低聚反应器；或可选地，包括这样的步骤，其中过渡金属络合物和混合物可在烯烃低聚反应器之外接触，并且然后引入烯烃低聚反应器，所述混合物包括 i) 烯烃和 ii) 烷基金属化合物（或可选地，混合物包括或基本上由下述组成，i) 烯烃，ii) 烷基金属化合物，和 iii) 烯烃低聚稀释剂）。在其中过渡金属络合物和混合物在烯烃低聚反应器之外接触的一些实施方式中，过渡金属络合物可以添加至包括 i) 烯烃和 ii) 烷基金属化合物的混合物（或可选地，包括或基本上由 i) 烯烃，ii) 烷基金属化合物，和 iii) 烯烃低聚稀释剂组成的混合物）；可选地，包括 i) 烯烃和 ii) 烷基金属化合物的混合物（或可选地，包括或基本上由 i) 烯烃、ii) 烷基金属化合物和 iii) 烯烃低聚稀释剂组成的混合物）可以添加至过渡金属络合物；或可选地，过渡金属络合物和包括 i) 烯烃和 ii) 烷基金属化合物的混合物（或可选地，包括或基本上由 i) 烯烃，ii) 烷基金属化合物和 iii) 烯烃低聚稀释剂组成的混合物）可同时地接触（或基本上同时地接触）。在一种实施方式中，可以通过如下制备包括烯烃和烷基金属化合物的混合物：添加烯烃至烷基金属化合物；可选地，添加烷基金属化合物至烯烃；或可选地，烯烃和烷基金属化合物可同时地（或基本上同时）接触。

[0215] 在仍另一方面中，过渡金属络合物和烷基金属化合物可在存在烯烃的情况下彼此接触。在一种实施方式中，过渡金属络合物和烷基金属化合物可同时（或基本上同时）接触烯烃；或可选地，过渡金属络合物、烷基金属化合物和烯烃可同时（或基本上同时）接触。在一些实施方式中，包括过渡金属络合物和烯烃的混合物可接触（以本文所描述的任何方式）烷基金属化合物。在仍其他实施方式中，包括烷基金属化合物和烯烃的混合物可接触（以本文所描述的任何方式）过渡金属络合物。

[0216] 在一种实施方式中，烯烃低聚稀释剂可同时（或基本上同时）与烯烃和催化剂体系（或可选地，烯烃、过渡金属络合物和烷基金属化合物）一起引入烯烃低聚反应器。在其他实施方式中，烯烃低聚稀释剂（或部分烯烃低聚稀释剂）可接触催化剂体系和 / 或烯烃以分别形成包括（或基本上由下述组成）催化剂体系和烯烃低聚稀释剂的催化剂体系组合物和 / 或包括烯烃和烯烃低聚反应溶剂的烯烃组合物。当使用烯烃组合物和 / 或催化剂体

系组合物时,烯烴组合物、催化剂体系组合物和任何剩余的烯烴低聚稀释剂(如果存在)可以本文所描述的将烯烴、催化剂体系和烯烴低聚稀释剂(如果存在)接触的任何方法接触,其中烯烴组合物替换烯烴、催化剂体系组合物替换催化剂体系。

[0217] 在其中烯烴低聚物产物可以在烯烴低聚稀释剂的存在下形成的一种实施方式中,烯烴、过渡金属络合物、烷基金属化合物和烯烴低聚稀释剂可同时引入烯烴低聚反应器;或可选地,烯烴、过渡金属络合物、烷基金属化合物和烯烴低聚稀释剂可在烯烴低聚反应器之外接触(以本文所描述的任何方式)并且然后引入烯烴低聚反应器。在一些实施方式中,烯烴、过渡金属络合物和烷基金属可以引入(以本文所描述的任何方式)包含低聚稀释剂的烯烴低聚反应器。在其他实施方式中,部分烯烴低聚稀释剂可接触烯烴、过渡金属络合物和/或烷基金属化合物以分别形成包括(或基本上由下述组成)烯烴和烯烴低聚稀释剂的烯烴组合物、包括(或基本上由下述组成)过渡金属络合物和烯烴低聚稀释剂的过渡金属络合物组合物,和/或包括(或基本上由下述组成)烷基金属化合物和烯烴低聚稀释剂的烷基金属化合物组合物。当使用烯烴组合物、过渡金属络合物组合物和/或烷基金属化合物组合物时,烯烴组合物、过渡金属络合物组合物和/或烷基金属化合物组合物和任何剩余的烯烴低聚反应溶剂(如果存在)可以本文为接触烯烴、过渡金属络合物、烷基金属化合物,和烯烴低聚稀释剂(如果存在)所描述的任何方法接触,其中烯烴组合物替换烯烴、过渡金属络合物组合物替换过渡金属络合物和/或烷基金属化合物组合物替换烷基金属化合物。

[0218] 在一种实施方式中,与催化剂体系、包括催化剂体系(或基本上由其组成)的混合物(或组合物)、包括过渡金属络合物(或基本上由其组成)的混合物(或组合物)、包括烷基金属(或基本上由其组成)的混合物(或组合物)、包括过渡金属络合物和烷基金属(或基本上由其组成)的混合物(或组合物)、包括烯烴(或基本上由其组成)的混合物(或组合物)或使用本文所描述的溶剂的任何其他混合物(或组合物)一起使用的溶剂可以是烴、卤化烴或其任何组合;可选地,烴;或可选地,卤化烴。在一些实施方式中,与催化剂体系、包括催化剂体系(或基本上由其组成)的混合物(或组合物)、包括过渡金属络合物(或基本上由其组成)的混合物(或组合物)、包括烷基金属(或基本上由其组成)的混合物(或组合物)、包括过渡金属络合物和烷基金属(或基本上由其组成)的混合物(或组合物)、包括烯烴(或基本上由其组成)的混合物(或组合物)或使用本文所描述的溶剂的任何其他混合物(或组合物)一起使用的溶剂可以是脂肪烴、卤化的脂肪烴、芳族烴、卤化的芳族化合物,或其任何组合;可选地,脂肪烴、卤化的脂肪烴,或其任何组合;可选地,芳族烴、卤化的芳族化合物,或其任何组合;可选地,脂肪烴;可选地,卤化的脂肪烴;可选地,芳族烴;或可选地,卤化的芳族化合物。本文描述了可用作溶剂(或作为稀释剂)的一般的和具体的烴、卤化的烴、脂肪烴、卤化的脂肪烴、芳族烴和卤化的芳族化合物并且可被没有限制地用于进一步描述本文所描述的烯烴低聚方法(一种或多种)。

[0219] 在一种实施方式中,烯烴低聚稀释剂可以是烴、卤化烴,或其任何组合;可选地,烴;或可选地,卤化烴。在一些实施方式中,烯烴低聚稀释剂可以是脂肪烴、卤化的脂肪烴、芳族烴、卤化的芳族,或其任何组合;可选地,脂肪烴、卤化的脂肪烴,或其任何组合;可选地,芳族烴、卤化的芳族化合物,或其任何组合;可选地,脂肪烴;可选地,卤化的脂肪烴;可选地,芳族烴;或可选地,卤化的芳族化合物。本文描述了可用作稀释剂(或溶剂)的一般

的和具体的烃、卤化烃、脂肪烃、卤化的脂肪烃、芳族烃和卤化的芳族化合物并且可被没有限制地用作烯烃低聚稀释剂,以进一步描述本文所描述的烯烃低聚方法(一种或多种)。在一些实施方式中,烯烃低聚稀释剂可以是,可包括,或可基本上由下述组成:烯。在一些实施方式中,可用作烯烃低聚稀释剂的烯可以是,包括,或基本上由下述组成: C_4 至 C_{20} 烯;可选地, C_4 至 C_{12} 烯;可选地, C_{12} 至 C_{18} 烯。在一些实施方式中,可用作烯烃低聚稀释剂的烯可以是,包括,或基本上由下述组成: α 烯烃;或可选地,正 α 烯烃。在一些非限制性实施方式中,可用作烯烃低聚稀释剂的烯可以是,包括,或基本上由下述组成:1-丁烯、1-己烯、1-辛烯、1-癸烯、1-十二烯、1-十四烯、1-十六烯、1-十八烯,或其任何组合;可选地,1-丁烯、1-己烯、1-辛烯、1-癸烯、1-十二烯,或其任何组合;可选地,1-十二烯、1-十四烯、1-十六烯、1-十八烯,或其任何组合;可选地,1-丁烯;可选地,1-己烯;可选地,1-辛烯;可选地,1-癸烯;可选地,1-十二烯;可选地,1-十四烯;可选地,1-十六烯;或可选地,1-十八烯。

[0220] 一个方面中,烯烃低聚物产物可以在一个或多个烯烃低聚反应器中形成。在一些实施方式中,烯烃低聚物产物可以在下述中形成:间歇式烯烃低聚反应器,连续烯烃低聚反应器,或其任何组合;可选地,间歇式烯烃低聚反应器;或可选地,连续烯烃低聚反应器。在一种实施方式中,其中可以形成烯烃低聚物产物的连续烯烃低聚反应器可包括,或可以是下述:环管反应器、活塞流反应器、连续搅拌罐反应器(CSTR),或其任何组合;可选地,环管反应器或连续搅拌罐反应器;可选地,环管反应器;可选地,活塞流反应器;或可选地,连续搅拌罐反应器(CSTR)。在其中烯烃低聚物产物在多于一个烯烃低聚反应器中形成的一种实施方式中,每个烯烃低聚反应器可独立地是本文所描述的任何烯烃低聚反应器,并且烯烃低聚反应器可布置为串联的、平行的,或其任何组合;可选地,串联的;或可选地,平行的。

[0221] 应注意,当使用多个烯烃低聚反应器时,每个反应器可以是彼此独立的(无论它们是否以串联或平行操作)。因此,对于每个反应器,接触模式(如果需要)、能够生产烯烃低聚物产物的条件、其他烯烃低聚参数、烯烃低聚反应器参数可以不同。具体而言,当多个烯烃低聚反应器串联使用时,可以操作每个烯烃低聚反应器以实现不同目标。例如,第一烯烃低聚反应器可以被操作以 i) 将烯烃和催化剂体系(或烯烃、过渡金属络合物和烷基金属化合物)接触和 ii) 在能够生产烯烃低聚物产物的第一组条件下启动烯烃低聚物产物的生产至一些烯烃中间转化,并且将第一烯烃低聚反应器的流出物转移至第二烯烃低聚反应器,第二烯烃低聚反应器操作为在能够生产烯烃低聚物产物的第二组条件下实现期望的烯烃转化(有或没有另外的烯烃和/或催化剂体系(或另外的烯烃、过渡金属络合物和/或烷基金属化合物))。

[0222] 一个方面中,烯烃低聚物产物可以在能够生产烯烃低聚物产物的条件下形成。在一种实施方式中,能够生产烯烃低聚物产物的条件可单独或以任何组合包括烯烃低聚温度、烯烃低聚压力(或可选地,烯烃压力或烯烃分压)或烯烃低聚时间;可选地,烯烃低聚温度,或烯烃低聚时间;可选地,烯烃低聚温度;可选地,烯烃低聚压力(或可选地,烯烃压力或烯烃分压);或可选地,烯烃低聚时间。应注意,烯烃低聚温度、烯烃低聚压力和/或烯烃低聚时间的选择可以受许多因素的影响,比如过渡金属络合物稳定性、助催化剂成分、催化剂体系活性、期望的烯烃低聚物产物分布 K 值和/或期望的产物纯度等因素。

[0223] 应注意,当用于烯烃低聚方法的烯烃基本上由乙烯组成时,烯烃低聚可称为乙烯

低聚方法并且在使用词烯烃的烯烃低聚方法的任何特征中乙烯可替换烯烃。在一些非限制性例子中, 烯烃低聚物产物可称为乙烯低聚物产物, 烯烃低聚条件可称为乙烯低聚条件, 烯烃低聚温度可称为乙烯低聚温度, 烯烃低聚时间可称为乙烯低聚时间, 和烯烃低聚反应器可称为乙烯低聚反应器。当烯烃基本上由乙烯组成时, 其他烯烃低聚方法特征从本公开是容易明白的并且可称为适当的乙烯低聚特征而没有限制。

[0224] 一般而言, 烯烃低聚物产物可以在适于烯烃低聚的任何温度下生产。在一种实施方式中, 能够生产烯烃低聚物产物的条件可包括下述最小低聚温度 (或包括至少为下述的低聚温度): -100°C ; 可选地, -50°C ; 可选地, -25°C ; 可选地, 0°C ; 可选地, 20°C ; 可选地, 30°C ; 可选地, 40°C ; 可选地, 50°C ; 可选地, 60°C ; 可选地, 70°C ; 可选地, 80°C ; 可选地, 85°C ; 可选地, 90°C ; 可选地, 95°C ; 或可选地, 100°C 。在一种实施方式中, 能够生产烯烃低聚物产物的条件可包括下述最大低聚温度 (或包括小于或等于下述的低聚温度): 300°C ; 可选地, 200°C ; 可选地, 150°C ; 可选地, 140°C ; 可选地, 130°C ; 可选地, 120°C ; 可选地, 115°C ; 可选地, 110°C ; 可选地, 105°C ; 可选地, 100°C ; 可选地, 95°C ; 或可选地。在一种实施方式中, 能够生产烯烃低聚物产物的条件可包括从本文公开的任何最小烯烃低聚温度至本文公开的任何最大烯烃低聚温度的烯烃低聚温度范围。在非限制性实施方式中, 能够生产烯烃低聚物产物的条件可包括下述烯烃低聚温度范围: -100°C 至 300°C ; 可选地, 0°C 至 200°C ; 可选地, 20°C 至 150°C ; 可选地, 30°C 至 100°C ; 可选地, 40°C 至 95°C ; 可选地, 80°C 至 150°C ; 可选地, 90°C 至 140°C ; 可选地, 95°C 至 130°C ; 可选地, 95°C 至 120°C ; 可选地, 100°C 至 150°C ; 可选地, 100°C 至 140°C ; 可选地, 100°C 至 130°C ; 可选地, 100°C 至 120°C ; 可选地, 100°C 至 120°C ; 或可选地, 100°C 至 115°C 。其他烯烃低聚温度范围从本公开是容易明白的。

[0225] 一般而言, 烯烃低聚物产物可以在适于烯烃低聚的任何压力产生。在一种实施方式中, 烯烃低聚物产物可以在下述烯烃低聚压力下产生: 大于或等于 0psig (0KPa); 可选地, 大于或等于 50psig (344KPa); 可选地, 大于或等于 100psig (689KPa); 或可选地, 大于或等于 150psig (1.0MPa)。在其他实施方式中, 烯烃低聚物产物可以在下述烯烃低聚压力范围下产生: 从 0psig (0KPa) 至 $5,000\text{psig}$ (34.5MPa); 可选地, 50psig (344KPa) 至 $4,000\text{psig}$ (27.6MPa); 可选地, 100psig (689KPa) 至 $3,000\text{psig}$ (20.9MPa); 或可选地, 150psig (1.0MPa) 至 $2,000\text{psig}$ (13.8MPa)。在其中在能够生产烯烃低聚物产物的条件下烯烃可以是气体的实施方式中, 烯烃低聚压力可以是烯烃压力。当烯烃基本上由乙烯组成, 烯烃低聚物产物 (或乙烯低聚物产物) 可以在下述烯烃低聚压力 (乙烯低聚压力) 下产生: 大于或等于 0psig (0KPa); 可选地, 大于或等于 50psig (344KPa); 可选地, 大于或等于 100psig (689KPa); 或可选地, 大于或等于 150psig (1.0MPa)。在其他实施方式中, 烯烃低聚物产物 (或乙烯低聚物产物) 可以在下述烯烃低聚压力 (乙烯低聚压力) 范围产生: 从 0psig (0KPa) 至 $5,000\text{psig}$ (34.5MPa); 可选地, 50psig (344KPa) 至 $4,000\text{psig}$ (27.6MPa); 可选地, 100psig (689KPa) 至 $3,000\text{psig}$ (20.9MPa); 或可选地, 150psig (1.0MPa) 至 $2,000\text{psig}$ (13.8MPa)。在其中在能够生产烯烃低聚物产物的条件下可以是气体的烯烃 (例如, 当形成乙烯低聚物产物时的乙烯) 和 / 或惰性气体和 / 或其他气体 (例如, 氢) 可形成烯烃低聚压力的部分的一些情况下, 之前叙述的可以是能够生产烯烃低聚物产物 (例如, 乙烯低聚物产物) 的条件的烯烃低聚压力 (例如乙烯低聚压力) 可以是烯烃分压 (例如乙烯分压)。在其中烯烃提供所有或部分的烯烃低聚压力的情况下, 随着烯烃消耗烯烃低聚压

力可下降。在该情况下,可以添加另外的烯烃(例如乙烯)和/或惰性气体,以保持烯烃低聚压力(例如,乙烯低聚压力)。在一些实施方式中,可以以保持烯烃低聚压力(例如,乙烯低聚压力)的速度添加另外的烯烃(例如,乙烯)。在其他实施方式中,烯烃低聚压力可以允许下降,而不添加任何另外的烯烃和/或惰性气体。

[0226] 在其中使用氢的实施方式中,能够生产烯烃低聚物产物的条件可包括氢分压。一般而言,当使用氢时,可以以产生期望效果的任何量添加氢。在其中使用氢的一些实施方式中,能够生产烯烃低聚物产物的条件可包括下述的氢分压:大于或等于 1psig(kPa);可选地,大于或等于 5psig(34kPa);可选地,大于或等于 10psig(69kPa);或可选地,大于或等于 15psig(100kPa)。在其中使用氢的其他实施方式中,能够生产烯烃低聚物产物的条件可包括下述的氢分压范围:从 1psig(6.9kPa)至 500psig(3.5MPa);可选地,5psig(34kPa)至 400psig(2.8MPa);可选地,10psig(69kPa)至 300psig(2.1MPa);或可选地,15psig(100kPa)至 200psig(1.4MPa)。

[0227] 一般而言,可以使用产生期望量的烯烃低聚物产物;可选地,期望的烯烃转化率;或可选地,期望的催化剂体系(或过渡金属络合物)产率的任何烯烃低聚时间(可选地,烯烃和催化剂体系接触时间;可选地,烯烃、过渡金属络合物和烷基金属化合物接触时间;或可选地,烯烃、过渡金属络合物和能够抽取阴离子种类、氢负离子或烷基基团的路易斯酸(或路易斯酸和能够烷基化过渡金属络合物和/或添加氢负离子阴离子至过渡金属络合物的试剂)的接触时间)产生烯烃低聚物产物。在一种实施方式中,能够生产烯烃低聚物产物的条件可包括最小低聚时间(可选地,烯烃和催化剂体系最小接触时间;可选地,烯烃、过渡金属络合物和烷基金属化合物最小接触时间;或可选地,烯烃、过渡金属络合物和能够抽取阴离子种类、氢负离子或烷基基团的路易斯酸(或路易斯酸和能够烷基化过渡金属络合物和/或添加氢负离子阴离子至过渡金属络合物的试剂)最小接触时间)为 1 分钟;可选地,5 分钟;可选地,10 分钟;或可选地,15 分钟。在一种实施方式中,能够生产烯烃低聚物产物的条件可包括最大低聚反应时间(可选地,烯烃和催化剂体系最大接触时间;可选地,烯烃、过渡金属络合物和烷基金属化合物最大接触时间;或可选地,烯烃、过渡金属络合物,和能够抽取阴离子种类、氢负离子或烷基基团的路易斯酸(或路易斯酸和能够烷基化过渡金属络合物和/或添加氢负离子阴离子至过渡金属络合物的试剂)最大接触时间)小于或等于 6 小时;可选地,4 小时;可选地,2 小时;或可选地,1.5 小时。在非限制性实施方式中,能够生产烯烃低聚物产物的条件可包括烯烃低聚时间(可选地,烯烃和催化剂体系接触时间;可选地,烯烃、过渡金属络合物和烷基金属化合物接触时间;或可选地,烯烃、过渡金属络合物和能够抽取阴离子种类、氢负离子或烷基基团的路易斯酸(或路易斯酸和能够烷基化过渡金属络合物和/或添加氢负离子阴离子至过渡金属络合物的试剂)接触时间)范围从 1 分钟至 6 小时;可选地,从 10 分钟至 4 小时;可选地,15 分钟至 2 小时。其他烯烃低聚时间范围(可选地,烯烃和催化剂体系接触时间范围;可选地,烯烃、过渡金属络合物和烷基金属化合物接触时间范围;或可选地,烯烃、过渡金属络合物和能够抽取阴离子种类、氢负离子或烷基基团的路易斯酸(或路易斯酸和能够烷基化过渡金属络合物和/或添加氢负离子阴离子至过渡金属络合物的试剂)接触时间范围)从本公开是容易明白的。应注意,在一些烯烃低聚反应器设计中,烯烃低聚时间(可选地,烯烃和催化剂体系接触时间;可选地,烯烃、过渡金属络合物和烷基金属化合物接触时间;或可选地,烯烃、过渡金属络合物和

能够抽取阴离子种类、氢负离子或烷基基团的路易斯酸（或路易斯酸和能够烷基化过渡金属络合物和 / 或添加氢负离子阴离子至过渡金属络合物的试剂）接触时间）可改变（例如，环管反应器）。在这些情况下，烯烃低聚时间（可选地，烯烃和催化剂体系接触时间；可选地，烯烃、过渡金属络合物和烷基金属化合物接触时间；或可选地，烯烃、过渡金属络合物和能够抽取阴离子种类、氢负离子或烷基基团的路易斯酸（或路易斯酸和能够烷基化过渡金属络合物和 / 或添加氢负离子阴离子至过渡金属络合物的试剂）接触时间）可称为平均。平均烯烃低聚时间（可选地，平均烯烃和催化剂体系接触时间；可选地，平均烯烃、过渡金属络合物和烷基金属化合物接触时间；或可选地，烯烃、过渡金属络合物和能够抽取阴离子种类、氢负离子或烷基基团的路易斯酸（或路易斯酸和能够烷基化过渡金属络合物和 / 或添加氢负离子阴离子至过渡金属络合物的试剂）的平均接触时间）可以是平均最小、平均最大、具有任何最小、最大的平均范围，或本文所述的烯烃低聚时间范围（可选地，烯烃和催化剂体系接触时间；可选地，烯烃、过渡金属络合物和烷基金属化合物接触时间；或可选地，烯烃、过渡金属络合物和能够抽取阴离子种类、氢负离子或烷基基团的路易斯酸（或路易斯酸和能够烷基化过渡金属络合物和 / 或添加氢负离子阴离子至过渡金属络合物的试剂）接触时间）。应注意，当烯烃低聚物产物在两个或更多个串联操作的烯烃低聚反应器中生产时，烯烃低聚时间指横跨全部串联的反应器而不是串联的单个反应器的烯烃低聚时间。

[0228] 在一个方面中，烯烃低聚方法可以操作为获得至烯烃低聚物产物的任何期望的烯烃转化率。一般而言，烯烃转化率可以是提供期望的催化剂体系（或过渡过渡金属络合物的金属）产率、产物纯度和 / 或方法经济性等因素的任何。在一些实施方式中，最小烯烃转化率可以是至少 20wt. %；可选地，至少 30wt. %；可选地，至少 40wt. %；可选地，至少 45wt. %；可选地，至少 50wt. %；可选地，至少 55wt. %；或可选地，至少 60wt. %。在一些实施方式中，最大烯烃转化率可以是 99wt. %；可选地，95wt. %；可选地，90wt. %；可选地，85wt. %；可选地，80wt. %；可选地，75wt. %；可选地，70wt. %；或可选地，65wt. %。在其他实施方式中，烯烃转化率范围可从本文提供的任何最小烯烃转化率至本文提供的任何最大烯烃转化率。例如，在一些非限制性实施方式中，烯烃转化率范围可从 30wt. % 至 99wt. %；可选地，30wt. % 至 90wt. %；可选地，40wt. % 至 90wt. %；可选地，45wt. % 至 80wt. %；可选地，45wt. % 至 75wt. %；或可选地，45wt. % 至 70wt. %。其他烯烃转化率范围从本公开是容易明白的。应注意，当烯烃低聚物产物在串联操作的两个或更多个烯烃低聚反应器中产生时，烯烃转化率指横跨全部串联反应器而不是串联的单个反应器的烯烃转化率。在其中烯烃低聚在连续反应器中实施的一些实施方式中，烯烃转化率（本文所描述的任何）可以是单程烯烃转化率。当烯烃基本上由乙烯组成时，烯烃转化率（本文所描述的任何）可以是乙烯转化率。

[0229] 一个方面中，烯烃低聚方法的催化剂体系产率可以是提供期望的烯烃低聚物产物的任何催化剂体系产率。在一种实施方式中，最小催化剂体系产率可以是 1×10^3 g 烯烃低聚物产物 / mmol 过渡过渡金属络合物的金属；可选地， 5×10^3 g 烯烃低聚物产物 / mmol 过渡过渡金属络合物的金属；可选地， 1×10^4 g 烯烃低聚物产物 / mmol 过渡过渡金属络合物的金属；可选地， 5×10^4 g 烯烃低聚物产物 / mmol 过渡过渡金属络合物的金属；可选地， 1×10^5 g 烯烃低聚物产物 / mmol 过渡过渡金属络合物的金属；或可选地， 5×10^3 g 烯烃低聚物

产物 /mmol 过渡过渡金属络合物的金属。在一种实施方式中,最大催化剂体系产率可以是 1×10^8 g 烯烃低聚物产物 /mmol 过渡过渡金属络合物的金属;可选地, 5×10^7 g 烯烃低聚物产物 /mmol 过渡过渡金属络合物的金属;可选地, 1×10^7 g 烯烃低聚物产物 /mmol 过渡过渡金属络合物的金属;可选地, 5×10^6 g 烯烃低聚物产物 /mmol 过渡过渡金属络合物的金属;或可选地, 1×10^6 g 烯烃低聚物产物 /mmol 过渡过渡金属络合物的金属。在一些实施方式中,催化剂体系产率范围可从本文所描述的任何最小催化剂体系产率至本文所描述的任何最大催化剂体系产率。例如,在一些非限制性实施方式中,催化剂体系产率范围可从 1×10^3 至 1×10^8 g 烯烃低聚物产物 /mmol 过渡过渡金属络合物的金属;可选地, 5×10^3 至 5×10^7 g 烯烃低聚物产物 /mmol 过渡过渡金属络合物的金属;可选地, 5×10^4 至 5×10^7 g 烯烃低聚物产物 /mmol 过渡过渡金属络合物的金属;或可选地, 1×10^5 至 1×10^7 g 烯烃低聚物产物 /mmol 过渡过渡金属络合物的金属。其他催化剂体系产率从本公开是容易明白的。当使用具体的过渡金属络合物的过渡金属时,可以使用该具体的过渡金属提供催化剂体系产率;例如当使用铁过渡金属络合物时,可以以单位 g 数烯烃低聚物产物 /mmol Fe 提供催化剂体系产率。

[0230] 在其中烯烃基本上由乙烯组成的一个方面中,低聚方法可以对直链 α 烯烃;或可选地,对正 α 烯烃高选择性产生 α 烯烃产物。在其中烯烃基本上由乙烯组成的一些实施方式中,低聚方法可产生这样的反应器流出物,其中 C_6 烯烃低聚物产物的 1-己烯含量为至少 98.5wt.%;可选地,至少 98.75wt.%;可选地,至少 99.0wt.%;或可选地,至少 99.25wt.%. 在其中烯烃基本上由乙烯组成的其他实施方式中,低聚方法可产生这样的反应器流出物,其中 C_8 烯烃低聚物产物的 1-辛烯含量为至少 98wt.%;可选地,至少 98.25wt.%;可选地,至少 98.5wt.%;可选地,至少 98.75wt.%;或可选地,至少 99.0wt.%. 在其中烯烃基本上由乙烯组成的仍其他实施方式中,低聚方法可产生这样的反应器流出物,其中 C_{10} 烯烃低聚物产物的 1-癸烯含量为至少 97.5wt.%;可选地,至少 97.75wt.%;可选地,至少 98wt.%;可选地,至少 98.25wt.%;或可选地,至少 98.5wt.%. 在其中烯烃基本上由乙烯组成的仍其他实施方式中,低聚方法可产生这样的反应器流出物,其中 C_{12} 烯烃低聚物产物的 1-十二烯含量为至少 96.5wt.%;可选地,至少 97wt.%;可选地,至少 97.5wt.%;可选地,至少 97.75wt.%;或可选地,至少 98.0wt.%. 在其中烯烃基本上由乙烯组成的仍其他实施方式中,低聚方法可产生这样的反应器流出物,其中低聚物产物可包括下述的任何组合:本文所描述的任何 C_6 烯烃低聚物产物 1-己烯含量,本文所描述的任何 C_8 烯烃低聚物产物 1-辛烯含量,本文所描述的任何 C_{10} 烯烃低聚物产物 1-癸烯含量,和 / 或本文所描述的任何 C_8 烯烃低聚物产物 1-辛烯含量。在其中烯烃基本上由乙烯组成的一些非限制性例子中,低聚方法可产生这样的反应器流出物,其具有 C_6 烯烃低聚物产物 1-己烯含量为至少 99wt.% 和 C_{12} 烯烃低聚物产物 1-十二烯含量为至少 97.5wt.%;可选地, C_8 烯烃低聚物产物 1-辛烯含量为至少 98.5wt.% 和 C_{12} 烯烃低聚物产物 1-十二烯辛烯含量为至少 97.5wt.%;或可选地, C_6 烯烃低聚物产物 1-己烯含量为至少 99wt.%, C_8 烯烃低聚物产物 1-辛烯含量为至少 98.5wt.%, C_{10} 烯烃低聚物产物 1-癸烯含量为至少 98wt.%, 和 C_{12} 烯烃低聚物产物 1-十二烯含量为至少 97.5wt.%. 烯烃低聚物 1-烯含量的其他组合从本公开是容易明白的。

[0231] 对于许多烯烃低聚,已经确定,对于使用具体的催化剂体系的烯烃低聚的烯烃低聚物产物分布 K 值(也称为 Schulz-Flory 链生长因子等术语)可以受烯烃低聚所使用的

催化剂体系的组分的成分和温度的影响。现在已经出人意料地发现,使用包括或基本上由下述组成的催化剂体系:包括络合至包括吡啶双亚胺基团的配体的过渡金属化合物的过渡金属络合物,在烯烃低聚温度下烯烃低聚的烯烃低聚物产物分布 K 值除了催化剂体系组分的成分之外还可以受到其他烯烃低聚参数的影响。例如,现在已经出人意料地发现,使用包括或基本上由包括络合至包括吡啶双亚胺基团的配体的过渡金属化合物的过渡金属络合物组成的催化剂体系的烯烃低聚的烯烃低聚物产物分布 K 值可以受下述的影响:i) 反应器中过渡金属络合物的过渡金属的浓度,ii) 反应器中烷基金属化合物的金属的浓度,和 / 或 iii) 反应器中烷基金属的金属与过渡金属络合物的过渡金属的摩尔比。当反应器是连续反应器时,这些特征可以就连续反应器进行叙述。

[0232] 一个方面中,烯烃低聚方法——其包括将烯烃和催化剂体系接触(可选地,将烯烃、过渡金属络合物和烷基金属化合物接触;或可选地,将烯烃、过渡金属络合物和能够抽取阴离子种类、氢负离子或烷基基团的路易斯酸(或路易斯酸和能够烷基化过渡金属络合物和 / 或添加氢负离子阴离子至过渡金属络合物的试剂)接触),或可选地将烯烃、氢和催化剂体系接触(可选地将烯烃、氢过渡金属络合物和烷基金属化合物接触;或可选地将烯烃、氢、过渡金属络合物和能够抽取阴离子种类、氢负离子或烷基基团的路易斯酸(或路易斯酸和能够烷基化过渡金属络合物和 / 或添加氢负离子阴离子至过渡金属络合物的试剂)接触),以形成烯烃低聚物产物——也可包括控制烯烃低聚物产物分布 K 值;或可选地,通过调整烯烃低聚参数控制烯烃低聚物产物分布 K 值。在另一方面中,烯烃低聚方法——其包括将烯烃和催化剂体系接触(可选地,将烯烃、过渡金属络合物和烷基金属化合物接触;或可选地,将烯烃、过渡金属络合物和能够抽取阴离子种类、氢负离子或烷基基团的路易斯酸(或路易斯酸和能够烷基化过渡金属络合物和 / 或添加氢负离子阴离子至过渡金属络合物的试剂)接触),或可选地将烯烃、氢和催化剂体系接触(可选地将烯烃、氢过渡金属络合物和烷基金属化合物接触;或可选地将烯烃、氢、过渡金属络合物和能够抽取阴离子种类、氢负离子或烷基基团的路易斯酸(或路易斯酸和能够烷基化过渡金属络合物和 / 或添加氢负离子阴离子至过渡金属络合物的试剂)接触),以形成烯烃低聚物产物——也可包括选择烯烃低聚物产物分布 K 值和调整烯烃低聚参数以获得所选择的烯烃低聚物产物分布 K 值。在仍另一方面中,烯烃低聚方法——其包括将烯烃和催化剂体系接触(可选地,将烯烃、过渡金属络合物和烷基金属化合物接触;或可选地,将烯烃、过渡金属络合物和能够抽取阴离子种类、氢负离子或烷基基团的路易斯酸(或路易斯酸和能够烷基化过渡金属络合物和 / 或添加氢负离子阴离子至过渡金属络合物的试剂)接触),或可选地将烯烃、氢和催化剂体系接触(可选地将烯烃、氢过渡金属络合物和烷基金属化合物接触;或可选地将烯烃、氢、过渡金属络合物和能够抽取阴离子种类、氢负离子或烷基基团的路易斯酸(或路易斯酸和能够烷基化过渡金属络合物和 / 或添加氢负离子阴离子至过渡金属络合物的试剂)接触),以形成烯烃低聚物产物——也可包括使烯烃低聚物产物分布与烯烃低聚参数关联;可选地,使烯烃低聚物产物分布与烯烃低聚参数相关并且通过设置实现所选择的烯烃低聚物产物分布 K 值必需的烯烃低聚参数选择烯烃低聚物产物分布 K 值并且在所选择的烯烃低聚物产物分布 K 值下低聚烯烃。

[0233] 在一种实施方式中,可与烯烃低聚物产物分布 K 值相关联、调整、调整以控制烯烃低聚物产物分布 K 值或调整以获得所选择的烯烃低聚物产物分布 K 值的烯烃低聚参数可选

自 i) 反应器中过渡金属络合物的过渡金属的浓度, ii) 反应器中烷基金属的金属的浓度, iii) 反应器中烷基金属的金属与过渡金属络合物的过渡金属的摩尔比, 和 iv) 其任何组合。在其他实施方式中, 可与烯烃低聚物产物分布 K 值相关联、调整、调整以控制烯烃低聚物产物分布 K 值或调整以获得所选择的烯烃低聚物产物分布 K 值的烯烃低聚参数可以是反应器中过渡金属络合物的过渡金属的浓度; 可选地, 反应器中烷基金属的金属的浓度; 可选地, 反应器中烷基金属的金属与过渡金属络合物的过渡金属的摩尔比; 可选地, i) 反应器中过渡金属络合物的过渡金属的浓度和 ii) 反应器中烷基金属的金属的浓度; 可选地, i) 反应器中过渡金属络合物的过渡金属的浓度和 ii) 反应器中烷基金属的金属与过渡金属络合物的过渡金属的摩尔比; 可选地, i) 反应器中烷基金属的金属的浓度和 ii) 反应器中烷基金属的金属与过渡金属络合物的过渡金属的摩尔比; 或可选地, i) 反应器中过渡金属络合物的过渡金属的浓度, ii) 反应器中烷基金属的金属浓度, 和 iii) 反应器中烷基金属的金属与过渡金属络合物的过渡金属的摩尔比。

[0234] 应注意, 温度也可影响烯烃低聚物产物分布 K 值与 i) 反应器中过渡金属络合物的过渡金属的浓度, ii) 反应器中烷基金属的金属的浓度, 和 / 或 iii) 反应器中烷基金属的金属与过渡金属络合物的过渡金属的摩尔比的任何关联应将温度保持为常数。但是, 在恒定温度下的多个关联可以与 i) 反应器中过渡金属络合物的过渡金属的浓度, ii) 反应器中烷基金属的金属的浓度和 / 或 iii) 烷基金属的金属与过渡金属络合物的过渡金属的摩尔比进行, 以进一步关联温度对烯烃低聚物产物分布 K 值的影响。可选地, 可进行烯烃低聚物产物分布 K 值与温度和 i) 反应器中过渡金属络合物的过渡金属的浓度, ii) 反应器中烷基金属的金属的浓度, 和 / 或 iii) 反应器中烷基金属的金属与过渡金属络合物的过渡金属的摩尔比的关联。就烯烃低聚方法而言, 应注意, 调整 i) 反应器中过渡金属络合物的过渡金属的浓度, ii) 反应器中烷基金属的金属的浓度和 / 或 iii) 反应器中烷基金属的金属与过渡金属络合物的过渡金属的摩尔比的一个或更多个不排除也调整温度的可能性以实现进一步的烯烃低聚目标 (例如, 改进的产物纯度, 或改进的工艺温度控制, 改进的催化剂体系稳定性, 或改进的催化剂体系产率等特征)。在一些实施方式中, 调整选自 i) 反应器中过渡金属络合物的过渡金属的浓度, ii) 反应器中烷基金属的金属的浓度, iii) 反应器中烷基金属的金属与过渡金属络合物的过渡金属的摩尔比和 iv) 其任何组合的烯烃低聚参数, 同时保持可影响 K 值的烯烃低聚的其他参数恒定。

[0235] 一般而言, 烯烃低聚物产物分布 K 值、反应器中过渡金属络合物的过渡金属的浓度、反应器中烷基金属的金属的浓度和反应器中烷基金属的金属与过渡金属络合物的过渡金属的摩尔比是本文所描述的任何烯烃低聚方法的独立的要素。从而, 可以使用本文所描述的任何烯烃低聚物产物分布 K 值 (或值范围)、本文所描述的任何的反应器中过渡金属络合物的过渡金属的浓度、本文所描述的任何的反应器中烷基金属的金属的浓度和本文所描述的任何的反应器中烷基金属的金属与过渡金属络合物的过渡金属的摩尔比进一步描述烯烃低聚方法。

[0236] 在实施方式中, 烯烃低聚物产物分布 K 值可具有最小值为 (或可以是至少) 0.4; 可选地, 0.45; 可选地, 0.5; 可选地, 0.55; 可选地, 0.6; 可选地, 0.65; 可选地, 0.7; 可选地, 0.75; 或可选地, 0.8。在一种实施方式中, 烯烃低聚物产物分布 K 值可具有最大值为 0.9; 可选地, 0.85; 可选地, 0.8; 可选地, 0.75; 可选地, 0.7; 或可选地, 0.6; 或可选地。在

一种实施方式中, 烯烃低聚物产物分布 K 值可具有从本文公开的任何最小烯烃低聚物产物分布 K 值至本文公开的任何最大烯烃低聚物产物分布 K 值的范围。例如, 在一些非限制性实施方式中, 烯烃低聚物产物分布 K 值范围可从 0.4 至 0.9; 可选地, 从 0.4 至 0.8; 可选地, 从 0.5 至 0.8; 可选地, 从 0.5 至 0.7; 可选地, 从 0.55 至 0.7。其他烯烃低聚物产物分布 K 值范围从本公开是容易明白的。

[0237] 烯烃低聚物产物分布 K 值 (有时称为 Schulz-Flory 链生长因子 K) 可以被定义为等式: $K = X_{q+1}/X_q$ 其中 X_{q+1} 是产生的具有 $q+1$ 个烯烃单元的烯烃低聚物产物的摩尔数和 X_q 是产生的具有 q 个烯烃单元的烯烃低聚物产物的摩尔数)。一般而言, 烯烃低聚物产物分布 K 值可以使用烯烃低聚物产物的单体单元数差 1 的任何两个烯烃低聚物确定。但是, 可理解, 产物分离和分析可导致使用具体的烯烃低聚物确定的烯烃低聚物产物分布的不精确 (例如, 产物分离期间气态产物和 / 或固体产物的不完整回收)。本领域普通技术人员将认识到这种问题并且能够选择确定烯烃低聚物产物分布 K 值所基于的合适的低聚物。

[0238] 在一种实施方式中, 烯烃低聚物产物分布 K 值可以使用包含四个和五个烯烃单元; 可选地, 五个和六个烯烃单元; 可选地, 六个和七个烯烃单元; 或可选地, 七个和八个烯烃单元的烯烃低聚物产物确定。在其中烯烃是乙烯的一些实施方式中, 烯烃低聚物产物分布 K 值可以使用 C_8 和 C_{10} 烯烃低聚物产物; 可选地, 使用 C_{10} 和 C_{12} 烯烃低聚物产物; 可选地, 使用 C_{12} 和 C_{14} 烯烃低聚物产物; 或可选地, C_{14} 和 C_{16} 烯烃低聚物产物确定。在一种实施方式中, 烯烃低聚物产物分布 K 值可以是使用本文描述的不同相邻对产生的烯烃低聚物的任何两种或更多种烯烃低聚物产物分布 K 值的平均。在一些实施方式中, 烯烃低聚物产物分布 K 值可以是本文所描述的任何两个烯烃低聚物产物分布 K 值; 可选地, 本文所描述的任何三个烯烃低聚物产物分布 K 值; 或可选地, 本文所描述的任何三个烯烃低聚物产物分布 K 值的平均。

[0239] 一个方面中, 反应器中过渡金属络合物的过渡金属的浓度可具有有益于产生期望的烯烃低聚物产物和 / 或烯烃低聚物产物分布的任何值。在一些实施方式中, 反应器中过渡金属络合物的过渡金属的最小浓度可以是每千克烯烃低聚溶液 1.0×10^{-6} 摩尔的过渡金属; 可选地, 每千克烯烃低聚溶液 5.0×10^{-6} 摩尔的过渡金属; 可选地, 每千克烯烃低聚溶液 1.0×10^{-5} 摩尔的过渡金属; 可选地, 每千克烯烃低聚溶液 5.0×10^{-5} 摩尔的过渡金属; 可选地, 每千克烯烃低聚溶液 1.0×10^{-4} 摩尔的过渡金属; 可选地, 每千克烯烃低聚溶液 5.0×10^{-4} 摩尔的过渡金属; 可选地, 每千克烯烃低聚溶液 1.0×10^{-3} 摩尔的过渡金属; 或可选地, 每千克烯烃低聚溶液 5.0×10^{-3} 摩尔的过渡金属。在一些实施方式中, 反应器中过渡金属络合物的过渡金属的最大浓度可以是每千克烯烃低聚溶液 5.0×10^{-1} 摩尔的过渡金属; 可选地, 每千克烯烃低聚溶液 1.0×10^{-1} 摩尔的过渡金属; 可选地, 每千克烯烃低聚溶液 5.0×10^{-2} 摩尔的过渡金属; 可选地, 每千克烯烃低聚溶液 1.0×10^{-2} 摩尔的过渡金属; 可选地, 每千克烯烃低聚溶液 5.0×10^{-3} 摩尔的过渡金属; 可选地, 每千克烯烃低聚溶液 1.0×10^{-3} 摩尔的过渡金属; 可选地, 每千克烯烃低聚溶液 5.0×10^{-4} 摩尔的过渡金属; 或可选地, 每千克烯烃低聚溶液 1.0×10^{-4} 摩尔的过渡金属。在其他实施方式中, 反应器中过渡金属络合物的过渡金属的浓度范围可从本文提供的反应器中过渡金属络合物的过渡金属的任何最小浓度至本文提供的反应器中过渡金属络合物的过渡金属的任何最大浓度。例如, 在一些非限制性实施方式中, 反应器中过渡金属络合物的过渡金属的浓度范围

可从每千克烯烃低聚溶液 1.0×10^{-6} 至 5.0×10^{-1} 摩尔的过渡金属；可选地，每千克烯烃低聚溶液 1.0×10^{-5} 至 1.0×10^{-1} 摩尔的过渡金属；可选地，每千克烯烃低聚溶液 5.0×10^{-5} 至 5.0×10^{-2} 摩尔的过渡金属；或可选地，每千克烯烃低聚溶液 1.0×10^{-5} 至 1.0×10^{-2} 摩尔的过渡金属。反应器中过渡金属络合物的过渡金属的其他浓度从本公开是容易明白的。当使用具体的过渡金属络合物的过渡金属时，可使用该具体的过渡金属提供反应器中过渡金属络合物的过渡金属的浓度；例如当使用铁过渡金属络合物时，可以以每千克烯烃低聚溶液的 Fe 摩尔为单位，提供反应器中过渡金属络合物的过渡金属的浓度。

[0240] 一个方面中，反应器中烷基金属化合物的金属的浓度可具有有益于产生期望的烯烃低聚物产物和 / 或烯烃低聚物产物分布的任何值。在一些实施方式中，反应器中烷基金属化合物的最小金属浓度可以是每千克烯烃低聚溶液 1.0×10^{-3} 摩尔的金属；可选地，每千克烯烃低聚溶液 5.0×10^{-3} 摩尔的金属；可选地，每千克烯烃低聚溶液 1.0×10^{-2} 摩尔的金属；可选地，每千克烯烃低聚溶液 5.0×10^{-2} 摩尔的金属；可选地，每千克烯烃低聚溶液 1.0×10^{-1} 摩尔的金属；可选地，每千克烯烃低聚溶液 5.0×10^{-1} 摩尔的金属；可选地，每千克烯烃低聚溶液 1.0×10^0 摩尔的金属；或可选地，每千克烯烃低聚溶液 5.0×10^0 摩尔的金属。在一些实施方式中，反应器中烷基金属化合物的最大金属浓度可以是每千克烯烃低聚溶液 1.0×10^3 摩尔的金属；可选地，每千克烯烃低聚溶液 5.0×10^2 摩尔的金属；可选地，每千克烯烃低聚溶液 1.0×10^2 摩尔的金属；可选地，每千克烯烃低聚溶液 5.0×10^1 摩尔的金属；可选地，每千克烯烃低聚溶液 1.0×10^1 摩尔的金属；可选地，每千克烯烃低聚溶液 5.0×10^0 摩尔的金属；或可选地，每千克烯烃低聚溶液 1.0×10^0 摩尔的金属。在其他实施方式中，反应器中烷基金属化合物浓度的范围可从本文提供的反应器中任何最小烷基金属化合物浓度至本文提供的反应器任何最大烷基金属化合物浓度。例如，在一些非限制性实施方式中，反应器中烷基金属化合物的金属浓度范围可从每千克烯烃低聚溶液 5.0×10^{-3} 至 1.0×10^3 摩尔的金属；可选地，每千克烯烃低聚溶液 1.0×10^{-3} 至 5.0×10^2 摩尔的金属；可选地，每千克烯烃低聚溶液 5.0×10^{-2} 至 1.0×10^1 摩尔的金属；或可选地，每千克烯烃低聚溶液 1.0×10^{-1} 至 5.0×10^0 摩尔的金属。反应器中烷基金属化合物的其他金属浓度从本公开是容易明白的。当使用具体的烷基金属化合物的金属时，可以使用该具体的金属提供反应器中烷基金属化合物的金属浓度；例如当使用烷基铝化合物时，可以以每千克烯烃低聚溶液 Al 的摩尔数为单位提供反应器中烷基金属化合物的金属浓度。

[0241] 一个方面中，反应器中烷基金属的金属与过渡金属络合物的过渡金属的摩尔比可具有有益于产生期望的烯烃低聚物产物和 / 或烯烃低聚物产物分布的任何值。本文独立地描述了催化剂体系的烷基金属的金属与过渡金属络合物的过渡金属的摩尔比。这些独立地描述的烷基金属的金属与过渡金属络合物的过渡金属的摩尔比可以被没有限制地用于进一步描述本文所描述的烯烃低聚方法。当使用具体的烷基金属化合物的金属和具体的过渡金属络合物的过渡金属时，烷基金属化合物的金属与过渡金属络合物的过渡金属的摩尔比可以使用该具体的烷基金属化合物的金属和过渡金属化合物的过渡金属提供；例如当使用烷基铝化合物和铁络合物时，烷基金属化合物的金属与过渡金属络合物的过渡金属的摩尔比可以被提供为 Al : Fe 摩尔比。

[0242] 已经进一步出人意料地发现，当烯烃低聚在连续反应器中进行时，烯烃低聚物产物可以在比当烯烃低聚在间歇式反应器中实施时可能更高的温度下形成。在一种实施方式

中, 烯烃低聚方法可包括 a) 将烯烃和催化剂体系接触, 该催化剂体系包括 i) 过渡金属络合物, 其包括络合至包括吡啶双亚胺基团的配体的过渡金属化合物, 和 ii) 烷基金属化合物, 和 b) 在连续反应器中在至少 95°C 的任何烯烃低聚温度下形成烯烃低聚物产物。在其他实施方式中, 烯烃低聚物产物可以在连续反应器中在本文所描述的任何烯烃低聚温度下或在本文与至少 95°C 的温度一起描述的烯烃低聚温度范围下形成。本文独立地描述了烯烃低聚方法的其他方面和实施方式并且可没有限制地用于进一步描述在连续反应器中进行的烯烃低聚反应, 其中烯烃低聚物产物在至少 95°C 的烯烃低聚温度 (或具有至少 95°C 温度的烯烃低聚温度范围) 生产。

[0243] 在一种实施方式中, 烯烃低聚反应可以使用连续反应器进行, 其中烯烃的浓度 (随着低聚时间或平均低聚时间) 在反应器中任何点的改变可以小于 1wt. %、0.8wt. %、0.7wt. %、0.6wt. %、0.5wt. %、小于 0.4wt. %、小于 0.3wt. %、小于 0.2wt. %、或小于 0.1wt. %。

[0244] 可以采用任何合适的方法或技术保持烯烃浓度的变化在公开的范围。在一种实施方式中, 通过使用一个或更多个包括配置来在烯烃的低聚期间提供另外量的烯烃至反应器的注入端口的反应器, 可将烯烃浓度的改变保持在公开的范围。该注入端口可以与一个或更多个控制器流体连通, 控制器除了控制注入端口的操作, 还用于监测在低聚过程期间存在的与烯烃浓度相关的反应的一个或更多个条件。在一种实施方式中, 控制器可探测接近但是不超过本文公开的烯烃浓度变化的烯烃浓度变化。然后控制器可执行一个或更多个命令, 以确保烯烃浓度保持在本文公开的浓度变化内。例如并且参考图 3, 在乙烯低聚过程中, 乙烯可以通过可以与控制器 15 流体连通的注入端口 40 引入连续搅拌罐反应器 50。当探测乙烯浓度接近超过本文公开的浓度变化的值时, 控制器可执行一个或更多个功能以引入另外量的乙烯至反应器并且使得保持乙烯浓度在公开的浓度变化内。

[0245] 在可选的实施方式中, 可以通过使用一个或更多个包括多个遍布反应器布置的可用于将另外量的烯烃引入连续过程的使得保持烯烃浓度在公开变化内的注入端口的反应器, 将烯烃浓度的改变保持在公开的范围。

[0246] 本文所描述的方法可使用一个或更多个溶剂和 / 或稀释剂。可用于本公开方面的溶剂和 / 或稀释剂包括但不限于水、烃、卤化的烃、醚、碳酸酯、酯、酮、醛、醇、腈和其组合。在一些实施方式中, 本发明的方面可要求极性溶剂 (和 / 或稀释剂)。可以使用的极性溶剂 (和 / 或稀释剂) 包括, 但不限于水、醚、碳酸酯、酯、酮、醛、醇、腈和其混合物; 可选地, 醚、碳酸酯、酯、酮、醛、醇、腈和其混合物; 可选地, 醚; 可选地, 碳酸酯; 可选地, 酯; 可选地, 酮; 可选地, 醛; 可选地, 醇; 或可选地, 腈。在一些实施方式中, 本发明的方面可要求非质子极性溶剂 (和 / 或稀释剂)。可以使用的非质子极性溶剂 (和 / 或稀释剂) 包括但不限于醚、酯、酮、醛、腈和其混合物; 可选地, 酯、腈和其混合物; 可选地, 酯、酮、醛和其混合物; 可选地, 醚; 可选地, 酯; 可选地, 酮; 可选地, 醛; 或可选地, 腈。在其他实施方式中, 本公开的方面可要求非极性溶剂 (和 / 或稀释剂)。非极性溶剂 (和 / 或稀释剂) 包括但不限于烃、卤化烃或其混合物; 可选地, 烃; 或可选地, 卤化烃。在另一实施方式中, 本公开的方面可要求基本上不与烷基金属反应的溶剂 (和 / 或稀释剂)。不与烷基金属反应的溶剂 (和 / 或稀释剂) 包括但不限于醚、烃和其混合物; 可选地, 醚; 或可选地, 烃。

[0247] 烃和卤化的烃可包括,例如,脂肪烃、芳族烃、石油馏出物、卤化的脂肪烃、卤化的芳族烃,或其组合;可选地,脂肪烃、芳族烃、卤化的脂肪烃、卤化的芳族烃,和其组合;可选地,脂肪烃;可选地,芳族烃;可选地,卤化的脂肪烃;或可选地,卤化的芳族烃。可用作溶剂(和/或稀释剂)的脂肪烃包括 C_3 至 C_{20} 脂肪烃;可选地, C_4 至 C_{15} 脂肪烃;或可选地, C_5 至 C_{10} 脂肪烃。脂肪烃可以是环状的或非环的和/或可以是直链的或支链的,除非另外指出。可以单独或组合使用的合适的非环脂肪烃溶剂(和/或稀释剂)的非限制性例子包括丙烷、异丁烷、正丁烷、丁烷(正丁烷或直链和支链 C_4 非环脂肪烃的混合物)、戊烷(正戊烷或直链和支链 C_5 非环脂肪烃的混合物)、己烷(正己烷或直链和支链 C_6 非环脂肪烃的混合物)、庚烷(正庚烷或直链和支链 C_7 非环脂肪烃的混合物)、辛烷(正辛烷或直链和支链 C_8 非环脂肪烃的混合物),和其组合;可选地,异丁烷、正丁烷、丁烷(正丁烷或直链和支链 C_4 非环脂肪烃的混合物)、戊烷(正戊烷或直链和支链 C_5 非环脂肪烃的混合物)、己烷(正己烷或直链和支链 C_6 非环脂肪烃的混合物)、庚烷(正庚烷或直链和支链 C_7 非环脂肪烃的混合物)、辛烷(正辛烷或直链和支链 C_8 非环脂肪烃的混合物),和其组合;可选地,异丁烷、正丁烷、丁烷(正丁烷或直链和支链 C_4 非环脂肪烃的混合物)、戊烷(正戊烷或直链和支链 C_5 非环脂肪烃的混合物)、庚烷(正庚烷或直链和支链 C_7 非环脂肪烃的混合物)、辛烷(正辛烷或直链和支链 C_8 非环脂肪烃的混合物),和其组合;可选地,丙烷;可选地,异丁烷;可选地,正丁烷;可选地,丁烷(正丁烷或直链和支链 C_4 非环脂肪烃的混合物);可选地,戊烷(正戊烷或直链和支链 C_5 非环脂肪烃的混合物);可选地,己烷(正己烷或直链和支链 C_6 非环脂肪烃的混合物);可选地,庚烷(正庚烷或直链和支链 C_7 非环脂肪烃的混合物);或可选地,辛烷(正辛烷或直链和支链 C_8 非环脂肪烃的混合物)。合适的环状脂肪烃溶剂(和/或稀释剂)的非限制性的例子包括环己烷、甲基环己烷;可选地,环己烷;或可选地,甲基环己烷。可用作溶剂(和/或稀释剂)的芳族烃包括 C_6 至 C_{20} 芳族烃;或可选地, C_6 至 C_{10} 芳族烃。可以单独或组合使用的合适的芳族烃的非限制性的例子包括苯、甲苯、二甲苯(包括邻二甲苯、间二甲苯、对二甲苯或其混合物)和乙基苯,或其组合;可选地,苯;可选地,甲苯;可选地,二甲苯(包括邻二甲苯、间二甲苯、对二甲苯或其混合物);或可选地,乙基苯。

[0248] 可用作溶剂(和/或稀释剂)的卤化的脂肪烃包括 C_1 至 C_{15} 卤化的脂肪烃;可选地, C_1 至 C_{10} 卤化的脂肪烃;或可选地, C_1 至 C_5 卤化的脂肪烃。卤化的脂肪烃可以是环状的或非环的和/或可以是直链的或支链的,除非另外指出。可以使用的合适的卤化的脂肪烃的非限制性例子包括二氯甲烷、氯仿、四氯化碳、二氯乙烷、三氯乙烷,和其组合;可选地,二氯甲烷、氯仿、二氯乙烷、三氯乙烷,和其组合;可选地,二氯甲烷;可选地,氯仿;可选地,四氯化碳;可选地,二氯乙烷;或可选地,三氯乙烷。可用作溶剂(和/或稀释剂)的卤化的芳族烃包括 C_6 至 C_{20} 卤化的芳族烃;或可选地, C_6 至 C_{10} 卤化的芳族烃。合适的卤化的芳族烃的非限制性例子包括氯苯、二氯苯和其组合;可选地,氯苯和二氯苯。

[0249] 可用作溶剂(和/或稀释剂)的醚、碳酸酯、酯、酮、醛或醇包括 C_2 至 C_{20} 醚、碳酸酯、酯、酮、醛或醇;可选地, C_2 至 C_{10} 醚、碳酸酯、酯、酮、醛或醇;或可选地, C_2 至 C_5 醚、碳酸酯、酯、酮、醛或醇。合适的醚溶剂(和/或稀释剂)可以是环状的或非环的。可用作溶剂(和/或稀释剂)的合适的醚的非限制性的例子包括二甲基醚、二乙基醚、甲基乙基醚、乙二醇的单醚或二醚(例如,二甲基乙二醇醚)、呋喃、取代的呋喃、二氢呋喃、取代的二氢呋喃、四氢呋喃(THF)、取代的四氢呋喃、四氢吡喃、取代的四氢吡喃、1,3-二噁烷、取代的1,3-二

噁烷、1,4-二噁烷、取代的1,4-二噁烷或其混合物。在一种实施方式中,取代的咪喃、取代的二氢咪喃、取代的四氢咪喃、取代的四氢吡喃、取代的1,3-二噁烷或取代的1,4-二噁烷的每个取代基可以是C₁至C₅烷基基团。本文公开了C₁至C₅烷基取代基基团并且可被没有限制地用于进一步描述取代的四氢咪喃、二氢咪喃、咪喃、1,3-二噁烷或1,4-二噁烷溶剂(和/或稀释剂)。可用作溶剂(和/或稀释剂)的合适的碳酸酯的非限制性例子包括碳酸亚乙酯、碳酸亚丙酯、碳酸二乙酯、碳酸二乙酯、碳酸甘油酯和其组合。可用作溶剂(和/或稀释剂)的合适的酯的非限制性例子包括乙酸乙酯、乙酸丙酯、乙酸丁酯、异丁酸异丁酯、乳酸甲酯、乳酸乙酯,和其组合。可用作(和/或稀释剂)的合适的酮的非限制性例子包括丙酮、乙基甲基酮、甲基异丁基酮和其组合。可用作溶剂(和/或稀释剂)的合适的醇的非限制性例子包括甲醇、乙醇、丙醇、异丙醇、正丁醇、异丁醇、戊醇、己醇、庚醇、辛醇、苯甲醇、苯酚、环己醇等,或其组合。

[0250] 本文所描述的各个方面和实施方式提及非氢取代基比如卤素(或卤基、卤根)、烃基、烃氧基、烷基和/或烷氧基取代基等。要求取代基的任何方面或任何实施方式的非氢取代基可以是卤基、C₁至C₁₀烃基基团、C₁至C₁₀卤化的烃基基团、C₁至C₁₀烃氧基或C₁至C₂₀三烷基甲硅烷氧基基团;可选地,卤基、C₁至C₁₀烃基基团或C₁至C₁₀烃氧基;可选地,卤基或C₁至C₁₀烃基基团;可选地,卤基或C₁至C₁₀烃氧基;可选地,C₁至C₁₀烃基基团或C₁至C₁₀烃氧基;可选地,卤基;可选地,C₁至C₁₀烃基基团;可选地,C₁至C₁₀卤化的烃基基团;可选地,C₁至C₁₀烃氧基;或可选地,C₁至C₂₀三烷基甲硅烷氧基基团。在其他实施方式中,要求取代基的任何方面或任何实施方式的非氢取代基可以是卤基、C₁至C₅烃基基团、C₁至C₅卤化的烃基基团、C₁至C₅烃氧基或C₁至C₁₀三烷基甲硅烷氧基基团;可选地,卤基、C₁至C₅烃基基团或C₁至C₅烃氧基;可选地,卤基或C₁至C₅烃基基团;可选地,卤基或C₁至C₅烃氧基;可选地,C₁至C₅烃基基团或C₁至C₅烃氧基;可选地,卤基;可选地,C₁至C₅烃基基团;可选地,C₁至C₅卤化的烃基基团;可选地,C₁至C₅烃氧基;或可选地,C₁至C₁₀三烷基甲硅烷氧基基团。

[0251] 在一种实施方式中,要求取代基的任何方面或任何实施方式的任何卤基取代基可以是氟基、氯基、溴基或碘基;可选地,氟基或氯基。在一些实施方式中,要求取代基的任何方面或任何实施方式的任何卤基取代基可以是氟基;可选地,氯基;可选地,溴基;或可选地,碘基。

[0252] 在一种实施方式中,任何烃基取代基可以是烷基基团、芳基基团,或芳烷基基团;可选地,烷基基团;可选地,芳基基团;或可选地,芳烷基基团。一般而言,烷基取代基基团(一个或多个)、芳基取代基基团(一个或多个)和/或芳烷基取代基基团(一个或多个)可具有本文公开的烃基取代基基团的相同数量的碳原子。在一种实施方式中,要求取代基的任何方面或任何实施方式的任何烷基取代基可以是甲基基团、乙基基团、正丙基基团、异丙基基团、正丁基基团、仲丁基基团、异丁基基团、叔丁基基团、正戊基基团、2-戊基基团、3-戊基基团、2-甲基-1-丁基基团、叔戊基基团、3-甲基-1-丁基基团、3-甲基-2-丁基基团或新-戊基基团;可选地,甲基基团、乙基基团、异丙基基团、叔丁基基团或新-戊基基团;可选地,甲基基团;可选地,乙基基团;可选地,异丙基基团;可选地,叔丁基基团;或可选地,新-戊基基团。在一种实施方式中,要求取代基的任何方面或任何实施方式的任何

芳基取代基可以是苯基基团、甲苯基基团、甲苄基基团或 2,4,6-三甲基苯基基团;可选地,苯基基团;可选地,甲苯基基团;可选地,甲苄基基团;可选地,2,4,6-三甲基苯基基团;或可选地,叔丁基苯基基团(例如,4-叔丁基苯基基团等)。在一种实施方式中,可用作芳基取代基的每个甲苯基基团独立地可以是 2-甲基苯基基团、3-甲基苯基基团或 4-甲基苯基基团;可选地,2-甲基苯基基团;可选地,3-甲基苯基基团;或可选地,4-甲基苯基基团。在一种实施方式中,可用作芳基取代基的每个二甲苯基基团独立地可以是 2,3-二甲苯基基团、2,4-二甲苯基基团、2,5-二甲苯基基团、2,6-二甲苯基基团、3,4-二甲苯基基团或 3,5-二甲苯基基团;可选地,2,4-二甲苯基基团或 2,6-二甲苯基基团;可选地,2,3-二甲苯基基团;可选地,2,4-二甲苯基基团;可选地,2,5-二甲苯基基团;可选地,2,6-二甲苯基基团;可选地,3,4-二甲苯基基团;或可选地,3,5-二甲苯基基团。在一种实施方式中,要求取代基的任何方面或任何实施方式的任何芳烷基取代基可以是苄基或乙基苯基基团(2-苯乙-1-基或 1-苯乙-1-基);可选地,苄基;可选地,乙基苯基基团;可选地,2-苯乙-1-基基团;或可选地,1-苯乙-1-基基团。

[0253] 在一种实施方式中,任何卤化的烃基取代基可以是卤化的烷基基团、卤化的芳基基团,或卤化的芳烷基基团;可选地,卤化的烷基基团;可选地,卤化的芳基基团;或可选地,卤化的芳烷基基团。一般而言,卤化的烷基取代基基团(一个或多个)、卤化的芳基取代基基团(一个或多个)和/或卤化的芳烷基取代基基团(一个或多个)可具有本文公开的卤化的烃基取代基基团的相同数量的碳原子。可以使用本文所描述的烷基、芳基或芳烷基取代基和本文所描述的卤基取代基的任何组合描述卤化的烷基取代基基团(一个或多个)、卤化的芳基取代基基团(一个或多个)和/或卤化的芳烷基取代基基团(一个或多个)。在一些实施方式中,要求取代基的任何方面或任何实施方式的任何卤化的烃基取代基可以是三氟甲基基团。

[0254] 在一种实施方式中,要求取代基的任何方面或任何实施方式的任何烃氧基取代基可以是烷氧基基团、芳氧基基团,或芳烷氧基基团;可选地,烷氧基基团;可选地,芳氧基基团;或可选地,芳烷氧基基团。一般而言,烷氧基取代基基团(一个或多个)、芳氧基取代基基团(一个或多个)和/或芳烷氧基取代基基团(一个或多个)可具有本文公开的烃氧基取代基基团的相同数量的碳原子。在一种实施方式中,要求取代基的任何方面或任何实施方式的任何烷氧基取代基可以是甲氧基基团、乙氧基基团、正丙氧基基团、异丙氧基基团、正丁氧基基团、仲丁氧基基团、异丁氧基基团、叔丁氧基基团、正戊氧基基团、2-戊氧基基团、3-戊氧基基团、2-甲基-1-丁氧基基团、叔戊氧基基团、3-甲基-1-丁氧基基团、3-甲基-2-丁氧基基团或新-戊氧基基团;可选地,甲氧基基团、乙氧基基团、异丙氧基基团、叔丁氧基基团,或新-戊氧基基团;可选地,甲氧基基团;可选地,乙氧基基团;可选地,异丙氧基基团;可选地,叔丁氧基基团;或可选地,新-戊氧基基团。在一种实施方式中,要求取代基的任何方面或任何实施方式的任何芳氧基取代基可以是苯氧基基团、甲苯氧基基团、二甲苯氧基基团,或 2,4,6-三甲基苯氧基基团;可选地,苯氧基基团;可选地,甲苯氧基基团;可选地,二甲苯氧基基团;或可选地,2,4,6-三甲基苯氧基基团。在一种实施方式中,要求取代基的任何方面或任何实施方式的任何芳烷氧基取代基可以是苯甲酰氧基基团。

[0255] 在一种实施方式中,任何三烷基甲硅烷氧基取代基的每个烃基基团独立地可以是本文所描述的任何烃基取代基(例如,本文所描述的任何一般的或具体的烷基基团、芳基

基团,或芳烷基基团)。在一些实施方式中,每个三烷基甲硅烷氧基取代基独立地可以是三烷基甲硅烷氧基基团或三芳基甲硅烷氧基基团;可选地,三烷基甲硅烷氧基基团;或可选地,三芳基甲硅烷氧基基团。在一些实施方式中,每个三烷基甲硅烷氧基取代基独立地可以是三甲基甲硅烷氧基基团、三乙基甲硅烷氧基基团、三丙基甲硅烷氧基基团,或三苯基甲硅烷氧基基团;可选地,三甲基甲硅烷氧基基团、三乙基甲硅烷氧基基团,或三丙基甲硅烷氧基基团;或可选地,三甲基甲硅烷氧基基团或三苯基甲硅烷氧基基团;可选地,三甲基甲硅烷氧基基团;可选地,三乙基甲硅烷氧基基团;可选地,三丙基甲硅烷氧基基团;或可选地,三苯基甲硅烷氧基基团。

[0256] 为了从本申请提交任何美国国家阶段的目的,在本公开中提到的所有出版物和专利通过引用以它们的整体并入本文,用于描述和公开那些出版物中描述的可能结合本公开方法使用的构造和方法。提供上面和遍及本文讨论的任何出版物和专利仅仅是因为它们的公开在本申请的申请日之前。本文没有什么可被解释为承认本发明人无权占先于现有发明的公开。

[0257] 除非另外指出,当公开或要求保护任何类型的范围时,例如,碳原子数量、摩尔比、温度等等的范围,它意欲单独公开或要求保护这种范围可能合理包括的每个可能数,包括其中包括的任何亚范围。例如,当描述碳原子数量的范围时,范围包括的原子的整数之间的每个可能的单个整数和范围被包括在其中。因此,通过公开 C_1 至 C_{10} 烷基或具有 1 至 10 个碳原子或“多至”10 个碳原子的烷基,申请人意欲陈述该烷基可以具有 1、2、3、4、5、6、7、8、9 或 10 个碳原子,并且描述这种基团的这些方法是可互换的。当描述测量的范围诸如摩尔比时,这种范围可能合理包括的每个可能的数值例如可以指范围内的具有一个有效数字大于在范围的端值中存在的值。在该实例中,在 1.03 : 1 和 1.12 : 1 之间的摩尔比独立地包括 1.03 : 1、1.04 : 1、1.05 : 1、1.06 : 1、1.07 : 1、1.08 : 1、1.09 : 1、1.10 : 1、1.11 : 1 和 1.12 : 1 的摩尔比。申请人的意图是描述范围的这两种方法是可互换的。而且,当范围的值被公开或要求保护时,该申请人意图反映这种范围可能合理包括的单独地每个可能的值,申请人也意欲反映范围的公开,并且与公开的任何和所有的子范围和其中包括的亚范围的组合是可互换的。在该方面,申请人 C_1 至 C_{10} 烷基的公开意欲字面上包括 C_1 至 C_6 烷基、 C_4 至 C_8 烷基、 C_2 至 C_7 烷基、 C_1 至 C_3 和 C_5 至 C_7 烷基的组合等等。当描述其中范围的端点具有有效数字的不同数字的范围时,例如,1 : 1 至 1.2 : 1 的摩尔比,这种范围可能合理包括的每个可能数字例如可以指该范围内的值——其具有大于具有最大数字的有效数字(在这种情况下是 1.2 : 1) 的范围的端点中存在的数字。在该实例中,1 : 1 至 1.2 : 1 的摩尔比独立地包括所有都相对于 1 的 1.01、1.02、1.03、1.04、1.05、1.06、1.07、1.08、1.09、1.10、1.11、1.12、1.13、1.14、1.15、1.16、1.17、1.18、1.19 和 1.20 的摩尔比,和任何以及所有的子范围和其中包括的子范围的组合。相应地,申请人保留限制出 (provisoout) 或排除任何这种组的任何单独成员的权利,包括任何子范围或者该组内子范围的组合,如果由于任何原因,申请人选择要求保护小于本公开的完全量度的话,例如以应对申请人在提交该申请时没有意识到的对比文献。

[0258] 在美国专利和商标局的任何申请中,本申请的摘要被提供用于满足 37C.F.R. § 1.72 的要求和在 7C.F.R. § 1.72(b) 中说明的目的“使得美国专利和商标局以及公众一般能够根据粗略查阅快速地确定技术公开的性质和主旨”。因此,本申请的摘要不意欲

用于解释权利要求的范围或者限制本文公开的主题的范围。而且,在本文可以被应用的任何标题也不意欲用于解释权利要求的范围或者限制本文公开的主题的范围。描述另外指出为解释或预言性实施例的过去式的任何使用不意欲反映该解释或语言性实施例已经实际完成。

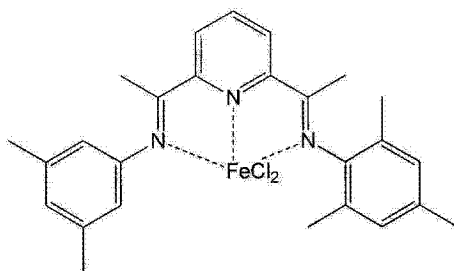
[0259] 本公开通过以下实施例进一步说明,其不被以任何方式解释为强加限制于其范围。相反地,应该清楚地理解,可以对其各种其它的方面、实施方式、改型和等同物采取手段,在阅读本文的描述之后,这是本领域普通技术人员可以自己想到的而不偏离本发明的精神或者所附权利要求的范围。

[0260] 给出下面实施例提供的数据和描述,以显示公开的化合物、催化剂体系和烯烃低聚和 / 或烯烃聚合方法的具体的方面和实施方式,并且表明其许多实践和优势。作为本文所描述的一些方面和实施方式的更详细说明给出实施例并且不旨在以任何方式限制本公开或权利要求。

[0261] 实施例

[0262] 所有操作在无氧和无湿气环境下进行。在 13x 分子筛上干燥溶剂,并且使用在线脱氧和除湿床纯化乙烯。MMAO3A 购买自 Akzo Nobel。使用图 3 显示的装置,使用根据文献(例如 US6,710,006)中描述的方法制备的络合物 1,进行乙烯低聚。

[0263]



[0264] 制备 Fe 催化剂和 MMAO 助催化剂溶液,并且在惰性条件下转移至图 3 显示的适当的注射泵中。将环己烷稀释剂从循环干燥床转移至按比例的比例稀释剂储器。形成用于保持正确反应器温度的在适当温度下的冷却液流。从稀释剂储器连续泵送稀释剂至反应器,并且一旦反应器充满并且达到运行压力 (1200psig),开启乙烯、催化剂和助催化剂流。在所有实验中,通过使用自动控制阀将反应器压力保持在 1200psig。一旦在反应器中建立稳定状态条件,分析样品的表 1 中显示的性质。表 1 的注释提供关于反应器条件更多的细节。一旦到达稳定的状态 (“出线 (line-out)”) 条件,至少分析三个样品,然后改变反应条件。

[0265] 表 1 中的数据显示,乙烯低聚物产物分布 K 值可通过调整下述乙烯低聚参数控制,比如 i) 连续反应器中铁络合物的铁浓度;ii) 连续反应器中铝氧烷的铝浓度;iii) 连续反应器中铝氧烷的铝与铁络合物的铁的摩尔比;或 iv) 这些乙烯低聚参数的任何组合。

[0266] 图 1 提供显示在铝氧烷的铝与铁络合物的铁的摩尔比为大概 1000 下,连续反应器中铝氧烷的铝浓度和乙烯低聚物产物分布 K 值之间的关系的图。该图显示,乙烯低聚物产物分布 K 值可通过调整使用包括 Fe 吡啶双亚胺络合物的催化剂体系的乙烯低聚的连续反应器中铝氧烷的铝浓度进行控制。

[0267] 图 2 提供显示在铝氧烷的铝浓度范围从 26ppm 至 30ppm 时,连续反应器中铝氧烷的铝与铁络合物的铁的摩尔比和乙烯低聚物产物分布之间的关系的图。该图显示,乙烯低

聚物产物分布 K 值可通过调整使用包括 Fe 吡啶双亚胺络合物的催化剂体系的乙烯低聚的连续反应器中铝氧烷的铝与铁络合物的铁的摩尔比进行控制。

[0268]

表 1 - 乙烯烯炔低聚试验

号	络合物 1 溶液 ^{a,b}			MMAO 3A 溶液 ^c		Al:Fe 摩尔比	g dil/h ^d	g C ₂ /h ^e	原料中 C ₂ Wt.%	原料中 Al ppm	反应器 WHSV (kg/L-h)	温度 (°C)	C ₂ 浓度 (wt.%)	K 值 (C ₁₂ /C ₁₀)	产率 (g/mmol Fe)
	mg Fe 络合物/h	g Fe 络合物溶液/h	μmol Fe/L-h	g MMAO 溶液/h	mmol Al/L-h										
1	0.60	3.18	3.44	3.42	3.44	1000	410	310	42.7	38.3	2.42	108	74	0.59	222,518
2	0.30	1.59	1.72	1.71	1.72	1000	451	370	44.9	16.9	2.75	105	71	0.66	509,638
3	0.61	3.18	3.49	3.42	3.44	984	389	420	51.5	34.2	2.72	111	66	0.58	264,476
4	0.61	3.18	3.49	3.08	3.10	886	389	420	51.5	30.8	2.72	112	66	0.59	264,476
5	0.61	3.18	3.49	2.74	2.75	787	389	420	51.5	27.3	2.72	112	61	0.62	244,440
6	0.50	10.71	2.86	3.08	2.86	1000	364	420	52.6	29.1	2.66	112	61	0.64	298,217
7	0.67	5.35	3.84	3.08	2.88	750	364	420	53.0	29.4	2.64	107	61	0.60	222,550
8	1.00	3.56	5.73	3.08	2.86	500	364	420	53.1	29.3	2.64	104	60	0.59	146,664
9	2.00	2.68	11.45	3.08	2.86	250	364	420	53.2	29.4	2.63	99	52	0.58	63,554
10	0.80	4.17	4.58	2.46	2.29	500	364	330	47.1	26.5	2.34	107	76	0.60	182,457
11	0.40	2.09	2.29	2.46	2.29	1000	364	330	47.2	26.6	2.33	109	60	0.66	288,090

^a 在二氯甲烷中制备络合物 1 溶液至浓度为 0.25 mg 铁络合物/ml 二氯甲烷。

^b 计算基于假设每分子 Fe 络合物一当量 THF 的重量。

^c MMAO 3A 溶液制备为在庚烷中~0.7 wt.% Al。

^d 稀释剂是环己烷。

^e 通过科氏力质量流量计测量乙烯流

^f 温度、流速、WHSV、乙烯低聚物分布 K 值、乙烯低聚产率和乙烯转化率测定为反应器稳定状态条件下取的至少 3 个读数的平均。

^g WHSV = 每 L 反应器体积每小时的总反应器进料 kg。

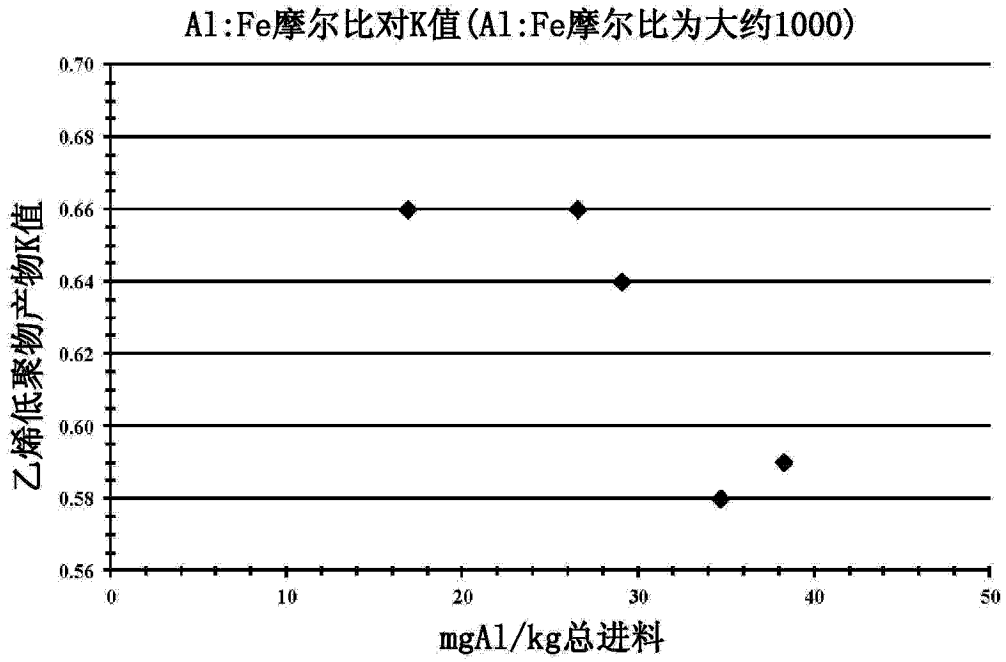


图 1

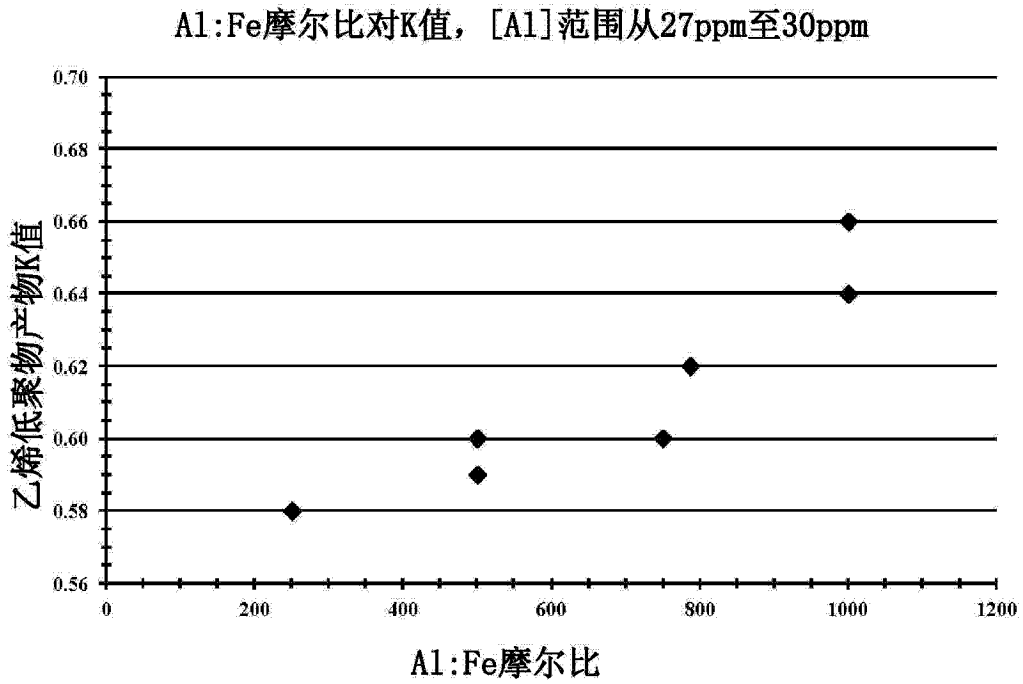


图 2

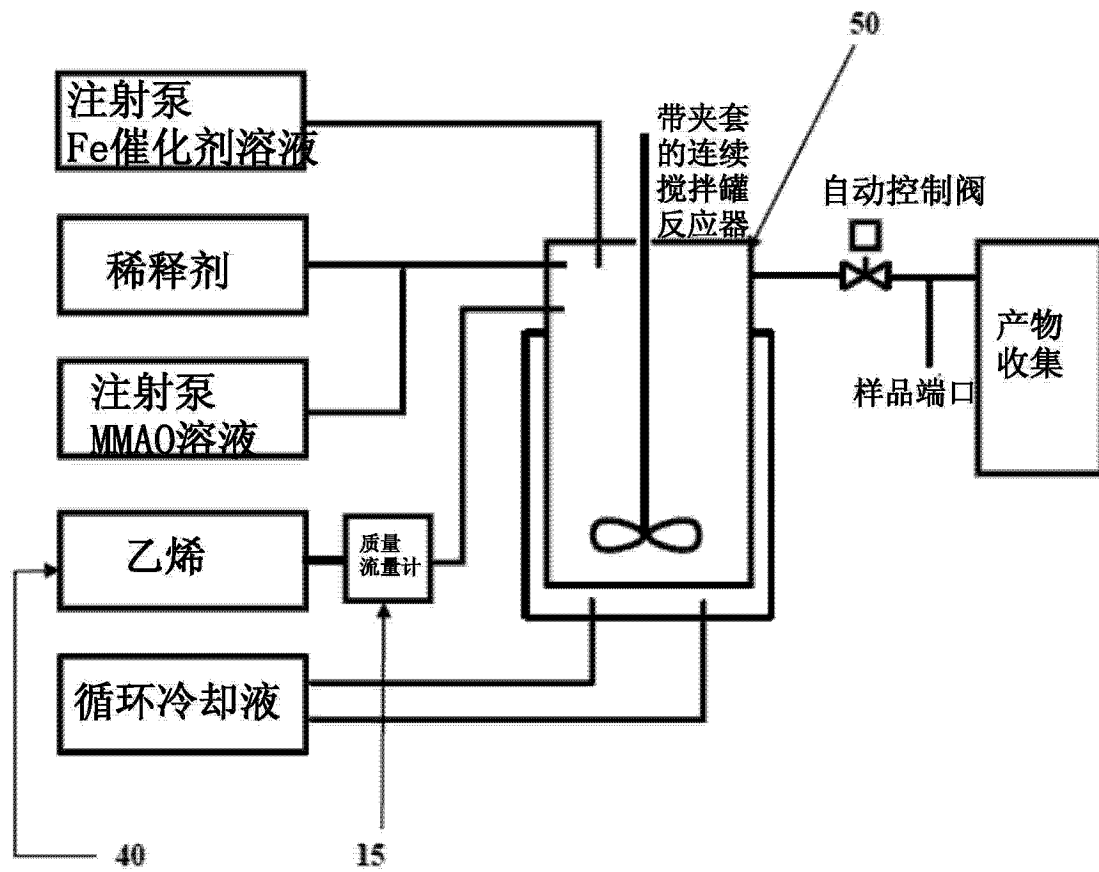


图 3