



(12) BẢN MÔ TẢ SÁNG CHẾ THUỘC BẰNG ĐỘC QUYỀN SÁNG CHẾ

(19) Cộng hòa xã hội chủ nghĩa Việt Nam (VN)
CỤC SỞ HỮU TRÍ TUỆ

(11)



1-0028686

(51)^{2006.01} C08F 10/14; C10N 20/02; C10N 20/00; (13) B
C08F 8/04; C10M 107/10

(21) 1-2018-00497

(22) 15/06/2010

(62) 1-2011-03426

(86) PCT/US2010/038681 15/06/2010

(87) WO 2010/147993 23/12/2010

(30) 61/187,334 16/06/2009 US

(45) 25/06/2021 399

(43) 25/05/2012 290A

(73) Chevron Phillips Chemical Company LP (US)

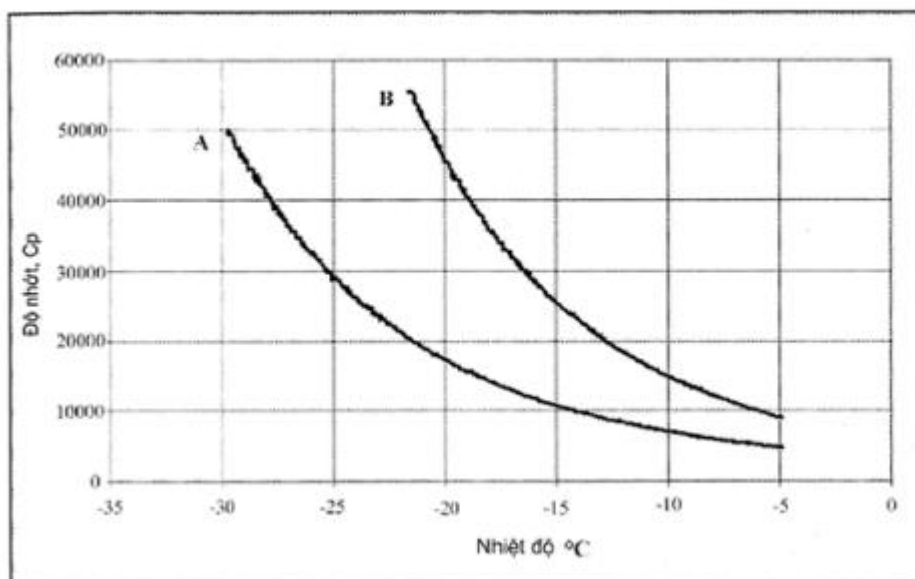
10001 Six Pines Drive The Woodlands, Texas 77380, United States of America

(72) Brooke L. SMALL (US); Kenneth D. HOPE (US); Albert P. MASINO (US); Max P. MCDANIEL (US); Richard M. BUCK (GB); William B. BEAULIEU (US); Qing YANG (CN); Eduardo J. BARALT (US); Eric J. NETEMEYER (US); Bruce KREISCHER (US).

(74) Văn phòng Luật sư Ân Nam (ANNAM IP & LAW)

(54) CHẾ PHẨM DÙNG LÀM DẦU BÔI TRƠN HOẶC CHẤT LÀM THAY ĐỔI ĐỘ NHỚT

(57) Sáng chế đề cập đến chế phẩm dùng làm dầu bôi trơn hoặc chất làm thay đổi độ nhớt có chứa polyalphaolefin, trong đó polyalphaolefin được tạo ra từ alpha olefin mạch thẳng chứa ít nhất 80 phần trăm trọng lượng là alpha olefin mạch thẳng có 8 nguyên tử cacbon.



Lĩnh vực kỹ thuật được đề cập

Sáng chế đề cập đến phương pháp oligome hóa alpha olefin xúc tác bằng metaloxen để tạo ra oligome alpha olefin và hydro hóa chúng thành polyalphaolefin có thể dùng trong dầu bôi trơn tổng hợp và chất làm thay đổi độ nhớt.

Ngoài ra, sáng chế còn đề cập đến phương pháp điều chế polyalphaolefin.

Tình trạng kỹ thuật của sáng chế

Mono-1-olefin (alpha olefin), kể cả etylen, có thể được polyme hóa bằng hệ chất xúc tác sử dụng titan, ziricon, vanadi, crom hoặc kim loại khác được tẩm trên các chất mang khác nhau, thường là với sự có mặt của chất hoạt hóa. Hệ chất xúc tác này có thể dùng cho cả quá trình polyme hóa đồng nhất etylen và quá trình copolyme hóa etylen với các comonome như propylen, 1-buten, 1-hexen, hoặc alpha olefin cao. Do tầm quan trọng trong quy trình này để điều chế nguyên liệu chức năng, vẫn tồn tại nhu cầu và không ngừng tìm kiếm để phát triển chất xúc tác polyme hóa olefin mới, phương pháp hoạt hóa chất xúc tác, và phương pháp điều chế và sử dụng chất xúc tác sẽ cung cấp hoạt tính xúc tác cao, độ chọn lọc cao, hoặc polyme mới thích hợp cho mục đích cụ thể.

Một loại hệ chất xúc tác trên cơ sở kim loại chuyển tiếp sử dụng hợp chất metaloxen, thường được tiếp xúc với chất hoạt hóa như metyl aluminoxan (MAO) để tạo ra chất xúc tác oligome hóa. Tuy nhiên, để đạt được hoạt tính oligome hóa cao cần thiết, thường cần lượng lớn metyl aluminoxan đắt tiền để tạo ra chất xúc tác metaloxen hoạt tính. Đây là một trở ngại đối với việc đưa hệ chất xúc tác metaloxen ra thị trường. Do đó, cần cải tiến hệ chất xúc tác và phương pháp điều chế chất xúc tác để tạo ra hoạt tính oligome hóa cần thiết với giá thành hợp lý. Ngoài ra, vẫn có những thách thức quan trọng trong việc phát triển chất xúc tác có thể tạo ra polyme hoặc oligome có đặc tính cần thiết mà có thể được điều chỉnh hoặc được duy trì trong phạm vi yêu cầu kỹ thuật cần thiết.

Bản chất kỹ thuật của sáng chế

Sáng chế đề xuất oligome alpha olefin, oligome alpha olefin được hydro hóa

(trong bản mô tả này còn được gọi là polyalphaolefin hoặc PAO), phương pháp điều chế oligome alpha olefin, phương pháp điều chế oligome alpha olefin được hydro hóa, hệ chất xúc tác, và phương pháp điều chế hệ chất xúc tác. Cụ thể, sáng chế đề xuất oligome alpha olefin đồng nhất (hoặc polyme đồng nhất), oligome alpha olefin đồng nhất được hydro hóa, cooligome alpha olefin (hoặc copolyme), hoặc cooligome alpha olefin được hydro hóa trong đó monome alpha olefin không bao gồm etylen. Trong quá trình thử nghiệm chất xúc tác polyme hóa olefin trên cơ sở metaloxen, đã phát hiện được rằng quá trình oligome hóa alpha olefin cao (chứa 3 và nhiều hơn 3 nguyên tử cacbon) có thể được thực hiện bằng cách sử dụng metaloxen và các thành phần xúc tác liên quan, trong đó metaloxen có thể được sử dụng cùng với chất hoạt hóa là oxit dạng rắn được xử lý hóa học bằng anion hút electron.

Quá trình oligome hóa alpha olefin có thể được thực hiện bằng cách cho alpha olefin và hệ chất xúc tác tiếp xúc với nhau, trong đó hệ chất xúc tác là hệ trên cơ sở metaloxen. Theo một khía cạnh, hệ chất xúc tác chứa metaloxen và chất hoạt hóa. Theo một khía cạnh, chất hoạt hóa là oxit dạng rắn được xử lý hóa học bằng anion hút electron. Theo một khía cạnh, chất hoạt hóa có thể là aluminoxan (ví dụ, methyl aluminoxan (MAO) hoặc methyl aluminoxan được cải biến (MMAO)). Theo một khía cạnh khác, oligome alpha olefin được hydro hóa tạo ra có thể được đặc trưng bởi chỉ số độ nhớt cao; theo cách khác, có chỉ số độ nhớt cao và điểm rót thấp. Các đặc điểm này tạo ra tính hữu ích cụ thể của PAO trong chế phẩm bôi trơn. Ngoài ra, các phương pháp được bộc lộ ở đây là phương pháp điều chỉnh độ nhớt hoặc chọn khoảng độ nhớt cần thiết bằng cách điều chỉnh một số thông số oligome hóa hoặc thông số nhất định của quy trình. Theo một khía cạnh khác nữa, sáng chế đề xuất PAO chứa các đơn vị monome có nguồn gốc từ alpha olefin, trong đó monome alpha olefin hầu như không chứa 1-dexen. Đã phát hiện được rằng PAO chứa các đơn vị monome có nguồn gốc từ alpha olefin hầu như không chứa 1-dexen không cần phải trộn với PAO chứa các đơn vị monome trên cơ sở 1-dexen để tạo ra PAO có chỉ số độ nhớt cao và điểm rót thấp. Các ưu điểm kinh tế đầu tiên của phương pháp điều chế chế phẩm bôi trơn là rõ ràng.

Theo một khía cạnh, sáng chế đề xuất phương pháp oligome hóa bao gồm các bước:

- a) cho monome alpha olefin và hệ chất xúc tác tiếp xúc với nhau, hệ chất xúc tác

này chứa ít nhất một metaloxen và oxit dạng rắn được xử lý hóa học; và

b) tạo ra sản phẩm oligome trong điều kiện oligome hóa.

Theo một khía cạnh, sáng chế đề xuất phương pháp oligome hóa bao gồm các bước:

a) cho monome alpha olefin và hệ chất xúc tác tiếp xúc với nhau, hệ chất xúc tác này chứa

1) ít nhất một metaloxen;

2) ít nhất một chất hoạt hóa thứ nhất là oxit dạng rắn được xử lý hóa học;

và

3) ít nhất một chất hoạt hóa thứ hai; và

b) tạo ra sản phẩm oligome trong điều kiện oligome hóa.

Theo một phương án, oxit dạng rắn được xử lý hóa học này có thể là silic oxit-nhôm oxit được flo hóa. Theo một phương án, chất hoạt hóa thứ hai có thể là hợp chất hữu cơ-nhôm. Ngoài ra, monome alpha olefin và hệ chất xúc tác có thể được cho tiếp xúc với nhau bằng cách cho monome alpha olefin, metaloxen, chất hoạt hóa thứ nhất, và chất hoạt hóa thứ hai tiếp xúc đồng thời. Theo cách khác, monome alpha olefin và hệ chất xúc tác có thể được cho tiếp xúc theo thứ tự bất kỳ, nhưng không giới hạn.

Theo một khía cạnh, sáng chế đề xuất polyalphaolefin có độ nhớt động ở 100°C nằm trong khoảng từ 20 mm²/s đến 1200 mm²/s (từ 20 cSt đến 1200 cSt). Theo một khía cạnh khác, sáng chế đề xuất polyalphaolefin có điểm rót thấp hơn -20°C. Theo một số phương án, sáng chế đề xuất polyalphaolefin có độ nhớt động ở 100°C nằm trong khoảng từ 20 mm²/s đến 270 mm²/s (từ 20 cSt đến 270 cSt) và điểm rót thấp hơn -30°C. Các đặc tính hữu ích khác như trọng lượng phân tử Mw, trọng lượng phân tử Mn, chỉ số đa phân tán, độ ổn định trượt, đặc tính kết tinh, mức độ đồng phân lập thể tương đối, và chỉ số Bernoulli (B) được mô tả. Theo một khía cạnh, PAO được bộc lộ ở đây có thể chủ yếu bao gồm oligome liên kết đầu với đuôi. Theo một phương án, PAO được bộc lộ ở đây có thể chứa oligome liên kết đầu với đuôi trong đó có dưới 100 lỗi cho 1000 monome alpha olefin.

Theo một khía cạnh, monome alpha olefin có thể là C₃-C₇₀ alpha olefin mạch thẳng, một mình hoặc ở dạng hỗn hợp; theo cách khác, monome này là C₄-C₂₀ alpha olefin mạch thẳng. Theo một phương án, monome alpha olefin có thể là 1-hexen, 1-

octen, 1-dexen, 1-dodexen, 1-tetradexen, hoặc hỗn hợp bất kỳ của chúng.

Sáng chế cũng đề xuất chế phẩm bôi trơn chứa polyalphaolefin được điều chế theo sáng chế. Chế phẩm bôi trơn này có thể chủ yếu bao gồm PAO có hoặc không có chất phụ gia, như chất khử hoạt tính của kim loại, chất tẩy rửa, chất phân tán, chất chống oxy hóa, và chất tương tự.

Sáng chế còn đề xuất phương pháp điều chế polyalphaolefin bao gồm các bước: a) cho monome alpha olefin tiếp xúc với hệ chất xúc tác chứa metaloxen; và b) tạo ra sản phẩm oligome trong điều kiện oligome hóa. Phương pháp điều chế polyalphaolefin có thể còn bao gồm bước tách dòng đi ra từ thiết bị phản ứng để tạo ra sản phẩm oligome nặng và hydro hóa sản phẩm oligome nặng này để thu được polyalphaolefin. Hệ chất xúc tác có thể còn bao gồm chất hoạt hóa hoặc hỗn hợp chất hoạt hóa; theo cách khác, hệ chất xúc tác có thể hầu như không chứa chất hoạt hóa. Theo một số phương án, hệ chất xúc tác có thể còn chứa chất hoạt hóa. Theo một số phương án, chất hoạt hóa có thể là alumoxan (ví dụ, metyl alumoxan hoặc metyl alumoxan được cải biến), hợp chất trialkyl nhôm, hợp chất alkyl nhôm hydrua, hợp chất alkyl nhôm halogenua, hợp chất hữu cơ-kẽm, hợp chất hữu cơ-magie, hợp chất hữu cơ-lithi, hợp chất hữu cơ-bo, hợp chất ion ion hóa, hợp chất borat, hoặc hợp chất aluminat, hoặc hỗn hợp bất kỳ của chúng.

Theo một khía cạnh, chất hoạt hóa có thể là oxit dạng rắn được xử lý hóa học bằng anion hút electron. Theo một số phương án, oxit dạng rắn được xử lý hóa học bằng anion hút electron có thể bao gồm nhôm oxit được flo hóa, nhôm oxit được clo hóa, nhôm oxit được sulfat hóa, silic oxit-nhôm oxit được flo hóa, silic oxit-nhôm oxit được clo hóa, silic oxit-ziricon oxit được flo hóa, hoặc hỗn hợp của chúng. Do đó, sáng chế bao gồm phương pháp điều chế polyalphaolefin bao gồm các bước:

- a) cho alpha olefin tiếp xúc với hệ chất xúc tác chứa:
 - metaloxen; và
 - chất hoạt hóa là oxit dạng rắn được xử lý hóa học bằng anion hút electron; và
- b) tạo ra sản phẩm oligome trong điều kiện oligome hóa.

Khi oxit dạng rắn được xử lý hóa học bằng anion hút electron được sử dụng làm chất hoạt hóa, chất này có thể được sử dụng một mình hoặc kết hợp với chất hoạt hóa

bổ sung. Ví dụ về chất hoạt hóa có thể được sử dụng kết hợp với oxit dạng rắn được xử lý hóa học bao gồm, nhưng không chỉ giới hạn ở, alumoxan (ví dụ, methyl alumoxan hoặc methyl alumoxan được cải biến), hợp chất trialkyl nhôm, hợp chất alkyl nhôm hydrua, hợp chất alkyl nhôm halogenua, hợp chất hữu cơ-kẽm, hợp chất hữu cơ-magie, hợp chất hữu cơ-lithi, hợp chất hữu cơ-bo, hợp chất ion ion hóa, hợp chất borat, hoặc hợp chất aluminat, hoặc hỗn hợp bất kỳ của chúng.

Theo một khía cạnh khác, sáng chế đề xuất phương pháp điều chế sản phẩm oligome, sản phẩm này có thể được xử lý tiếp thành polyalphaolefin, trong đó hỗn hợp bất kỳ của monome alpha olefin, metaloxen, oxit dạng rắn, anion hút electron, hoặc chất hoạt hóa bất kỳ khác có thể được cho tiếp xúc trước khi sử dụng chúng trong quá trình xúc tác. Theo khía cạnh này, bước hoặc các bước tiếp xúc trước bất kỳ có thể được thực hiện trong khoảng thời gian bất kỳ trước bước cho alpha olefin cần oligome hóa tiếp xúc với hệ chất xúc tác để khơi mào phản ứng oligome hóa alpha olefin.

Nhiều hợp chất metaloxen là thích hợp để sử dụng trong các phương pháp được bộc lộ ở đây. Thuật ngữ “metaloxen” được định nghĩa ở đây và thông thường được dự định bao gồm các hợp chất chứa ít nhất một phối tử $\eta^{x \geq 5}$ có liên kết pi. Nói chung, phối tử $\eta^{x \geq 5}$ có liên kết pi có thể là phối tử η^5 -xyclopentadienyl, η^5 -indenyl, η^5 -floreanyl, η^5 -alkadienyl, hoặc η^6 -boratabenzen. Phối tử $\eta^{x \geq 5}$ có liên kết pi còn được gọi là phối tử nhóm I trong bản mô tả này. Do đó, các hợp chất chỉ bao gồm một phối tử $\eta^{x \geq 5}$ có liên kết pi được bao hàm bởi thuật ngữ “metaloxen” như được sử dụng trong bản mô tả này. Theo một khía cạnh, kim loại của metaloxen có thể là kim loại nhóm 4, 5, hoặc 6. Metaloxen thích hợp có thể chứa kim loại được chọn từ titan, ziricon, hafni, vanadi, niobi, tantan, crom, molybden, hoặc vonfram. Nhóm thế hoặc các nhóm thế bất kỳ trên phối tử $\eta^{x \geq 5}$ có liên kết pi không làm mất hoàn toàn hoạt tính của hệ chất xúc tác tạo ra đều thuộc phạm vi của sáng chế. Metaloxen theo sáng chế cũng có thể chứa phối tử nhóm II không kể phối tử $\eta^{x \geq 5}$ có liên kết pi. Phối tử $\eta^{x \geq 5}$ không có liên kết pi có thể bao gồm phối tử monoanion thông thường chiếm một vị trí phối trí trên kim loại. Các phối tử monoanion này có thể bao gồm phối tử halogenua, hydrua, hydrocarbyl, phối tử hydrocarboxy, và phối tử aminyl.

Metaloxen thích hợp bao gồm các metaloxen chứa nhiều phối tử. Theo một số

phương án, phối tử của metaloxen chứa nhiều phối tử có thể không có liên kết cầu; theo cách khác, phối tử của metaloxen chứa nhiều phối tử có thể được liên kết bằng nhóm liên kết. Ví dụ, hợp chất metaloxen thích hợp để sử dụng trong hệ chất xúc tác bao gồm metaloxen trong đó metaloxen chứa hai phối tử nhóm I (phối tử $\eta^{\geq 5}$ có liên kết pi) được liên kết bằng nhóm liên kết. Metaloxen thích hợp khác bao gồm metaloxen trong đó phối tử nhóm I (phối tử $\eta^{\geq 5}$ có liên kết pi) có thể được liên kết bằng nhóm liên kết với phối tử nhóm II.

Sáng chế còn đề xuất hệ chất xúc tác mới để điều chế sản phẩm oligome (sản phẩm này có thể được xử lý tiếp thành polyalphaolefin), phương pháp mới điều chế hệ chất xúc tác, và phương pháp oligome hóa alpha olefin có năng suất được cải thiện, mà không cần sử dụng lượng dư lớn của chất hoạt hóa đất tiền như metylaluminoxan hoặc metylaluminoxan được cải biến.

Ngoài ra, sáng chế đề xuất phương pháp bao gồm bước cho ít nhất một monome và hệ chất xúc tác được tiếp xúc sau tiếp xúc với nhau trong điều kiện oligome hóa để tạo ra oligome. Do đó, sáng chế đề xuất phương pháp oligome hóa olefin bằng cách sử dụng hệ chất xúc tác được điều chế như mô tả ở đây.

Các phương án và khía cạnh này và phương án và khía cạnh khác về oligome alpha olefin và phương pháp oligome hóa được mô tả đầy đủ hơn trong phần mô tả chi tiết sáng chế và yêu cầu bảo hộ và phần mô tả chi tiết hơn được đưa ra ở đây.

Mô tả vắn tắt các hình vẽ

Fig.1 thể hiện đồ thị độ nhớt động Brookfield quét (cP) theo nhiệt độ (°C) của hỗn hợp polyalphaolefin của oligome 1-octen được hydro hóa theo sáng chế, có độ nhớt động ở 100°C bằng 38,8 mm²/s (38,8 cSt), so với PAO có bán trên thị trường được điều chế từ 1-dexen độ nhớt động tương đương (PAO 40). Ký hiệu mẫu: A, hỗn hợp B-2, hỗn hợp oligome 1-octen được hydro hóa có độ nhớt động ở 100°C bằng 38,8 mm²/s (38,8 cSt); B, PAO 40 có bán trên thị trường. Xem phần điều chế và đặc tính của mẫu trong Bảng 6 và 7.

Fig.2 thể hiện đồ thị độ nhớt động Brookfield quét (cP) theo nhiệt độ (°C) của hỗn hợp polyalphaolefin của oligome 1-octen được hydro hóa có độ nhớt động ở 100°C bằng 99,3 mm²/s (99,3 cSt), so với PAO có bán trên thị trường được điều chế từ 1-dexen có độ nhớt động tương đương (PAO 100). Ký hiệu mẫu: A, hỗn hợp B-3, hỗn

hợp oligome 1-octen được hydro hóa có độ nhớt động ở 100°C bằng 100 mm²/s (100 cSt); B, PAO 100 có bán trên thị trường. Xem phần điều chế và đặc tính của mẫu trong Bảng 6 và 7.

Fig.3 thể hiện kết quả phân tích trong thử nghiệm oxy hóa bình quay gia áp (Rotary Pressure Vessel Oxidation Test: RPVOT) về độ ổn định oxy hóa của oligome 1-octen được hydro hóa, được xác định theo ASTM D2272. Đồ thị thể hiện độ ổn định oxy hóa của áp suất oxy (psig) theo thời gian (phút) cho thấy độ ổn định oxy hóa tương đương của oligome 1-octen được hydro hóa được điều chế bằng cách sử dụng metaloxen và hệ chất xúc tác oxit dạng rắn được xử lý hóa học, so với PAO có bán trên thị trường. Ký hiệu mẫu: A, hỗn hợp B-2, hỗn hợp oligome 1-octen được hydro hóa có độ nhớt động ở 100°C bằng 38,8 mm²/s (38,8 cSt); B, oligome 1-octen được hydro hóa có độ nhớt động ở 100°C bằng 121 mm²/s (121 cSt) (oligome được hydro hóa ở 210°C); C, oligome 1-octen được hydro hóa có độ nhớt động ở 100°C bằng 121 mm²/s (121 cSt) (oligome được hydro hóa ở 165°C); D, PAO 40 có bán trên thị trường được điều chế từ 1-dexen; E, PAO 100 có bán trên thị trường được điều chế từ 1-dexen. Xem phần điều chế và đặc tính của mẫu trong Bảng 6 và 7.

Fig.4 thể hiện sự ảnh hưởng của metaloxen của hệ chất xúc tác oligome hóa đến độ nhớt động ở 100°C của oligome được hydro hóa được điều chế bằng cách sử dụng hệ chất xúc tác oligome hóa và quy trình được mô tả ở đây. Fig.4 thể hiện đồ thị độ nhớt động (cP) theo nhiệt độ (°C) của một loạt oligome được hydro hóa được điều chế bằng cách sử dụng các hệ chất xúc tác oligome hóa chứa metaloxen khác nhau và polyalphaolefin có bán trên thị trường có độ nhớt động bằng 40 mm²/s (40 cSt) ở 100°C. Ký hiệu mẫu: A, oligome 1-dexen được hydro hóa có độ nhớt động ở 100°C bằng 41 mm²/s (41 cSt) được điều chế bằng cách sử dụng metaloxen J (Ví dụ 8- Mẫu 5); B, oligome 1-octen được hydro hóa có độ nhớt động ở 100°C bằng 43,8 mm²/s (43,8 cSt) được điều chế bằng cách sử dụng metaloxen N (Ví dụ 8- Mẫu 6); C, oligome 1-octen được hydro hóa có độ nhớt động ở 100°C bằng 37 mm²/s (37 cSt) được điều chế bằng cách sử dụng metaloxen L (Ví dụ 8- Mẫu 7); D, PAO 40 có bán trên thị trường; E, hỗn hợp B-2, hỗn hợp oligome 1-octen được hydro hóa có độ nhớt động ở 100°C bằng 38,8 mm²/s (38,8 cSt). Xem phần điều chế và đặc tính của mẫu trong Bảng 6 và 7.

Fig.5 thể hiện sự ảnh hưởng của metaloxen của hệ chất xúc tác oligome hóa đến độ nhớt động ở 100°C của oligome được hydro hóa được điều chế bằng cách sử dụng hệ chất xúc tác oligome hóa và quy trình được mô tả ở đây. Fig.5 thể hiện đồ thị độ nhớt động (cP) theo nhiệt độ (°C) của một loạt oligome được hydro hóa bằng cách sử dụng hệ chất xúc tác oligome hóa chứa metaloxen khác nhau và polyalphaolefin có bán trên thị trường có độ nhớt động bằng 100 mm²/s (100 cSt) ở 100°C. Ký hiệu mẫu: A, oligome 1-octen được hydro hóa có độ nhớt động ở 100°C bằng 118 mm²/s (118 cSt) được điều chế bằng cách sử dụng metaloxen J (Ví dụ 8- Mẫu 10); B, oligome 1-dexen được hydro hóa có độ nhớt động ở 100°C bằng 100,5 mm²/s (100,5 cSt) được điều chế bằng cách sử dụng metaloxen J (Ví dụ 8- Mẫu 11); C, oligome 1-octen được hydro hóa có độ nhớt động ở 112,7°C bằng 43,8 mm²/s (43,8 cSt) được điều chế bằng cách sử dụng metaloxen B (Ví dụ 8- Mẫu 12); D, PAO 100 có bán trên thị trường. Xem phần điều chế và đặc tính của mẫu trong bảng 6 và 7.

Fig.6 thể hiện đường DSC của PAO được điều chế bằng cách sử dụng 1-octen theo Ví dụ 8-Mẫu 6. Đường DSC cho thấy rằng không có hiện tượng kết tinh có thể thấy rõ theo phương pháp DSC được mô tả ở đây.

Fig.7 thể hiện đường DSC của PAO được điều chế bằng cách sử dụng 1-dexen theo Ví dụ 8-Mẫu 5. Đường DSC cho thấy rằng không có hiện tượng kết tinh có thể thấy rõ theo phương pháp DSC được mô tả ở đây.

Fig.8 thể hiện đường DSC của PAO được điều chế bằng cách sử dụng 1-octen theo Ví dụ 8 - Mẫu 10. Đường DSC cho thấy rằng không có hiện tượng kết tinh có thể thấy rõ theo phương pháp DSC được mô tả ở đây.

Fig.9 thể hiện đường DSC của PAO được điều chế bằng cách sử dụng 1-dexen theo Ví dụ 8 - Mẫu 11. Đường DSC cho thấy rằng có hiện tượng kết tinh nhỏ có thể thấy rõ theo phương pháp DSC được mô tả ở đây.

Fig.10 thể hiện đường DSC của PAO được điều chế bằng cách sử dụng 1-octen theo Ví dụ 8 - Mẫu 12. Đường DSC cho thấy rằng không có hiện tượng kết tinh có thể thấy rõ theo phương pháp DSC được mô tả ở đây.

Fig.11 thể hiện đường DSC của PAO 100 có bán trên thị trường. Đường DSC cho thấy rằng có quá trình kết tinh có thể thấy rõ theo phương pháp DSC được mô tả ở đây.

Mô tả chi tiết sáng chế

Sáng chế đề xuất oligome thu được từ alpha olefin (còn được gọi là oligome alpha olefin), oligome được hydro hóa (trong bản mô tả này còn được gọi là polyalphaolefin hoặc PAO), phương pháp điều chế oligome alpha olefin, phương pháp điều chế PAO, hệ chất xúc tác, và phương pháp điều chế hệ chất xúc tác. Cụ thể, sáng chế bao gồm phương pháp oligome hóa một hoặc nhiều alpha olefin bằng cách sử dụng hệ chất xúc tác chứa metaloxen. Hệ chất xúc tác này có thể còn chứa một hoặc nhiều chất hoạt hóa. Một loại chất hoạt hóa có thể đặc biệt hữu ích là oxit dạng rắn đã được xử lý hóa học bằng anion hút electron, chất này được mô tả cụ thể ở đây. Trong bản mô tả này, oxit dạng rắn đã được xử lý hóa học bằng anion hút electron cũng có thể được gọi là oxit dạng rắn được xử lý hóa học (CTSO), superaxit dạng rắn (solid superacid: SSA), hoặc chất hoạt hóa-nền, và các thuật ngữ này được sử dụng thay đổi lẫn nhau. Chất hoạt hóa khác có thể được sử dụng cùng với metaloxen trong hệ chất xúc tác, một mình, kết hợp với SSA, hoặc trong hỗn hợp bất kỳ với ít nhất một chất hoạt hóa khác. Ví dụ, hệ chất xúc tác có thể chứa ít nhất một metaloxen, chất hoạt hóa thứ nhất, và chất hoạt hóa thứ hai. Theo một khía cạnh, chất hoạt hóa thứ nhất có thể chứa, chủ yếu bao gồm, hoặc bao gồm, oxit dạng rắn được xử lý hóa học và chất hoạt hóa thứ hai có thể chứa, chủ yếu bao gồm, hoặc bao gồm, hợp chất hữu cơ-nhôm. Theo một phương án không làm giới hạn phạm vi của sáng chế, oxit dạng rắn được xử lý hóa học có thể là silic oxit-nhôm oxit được flo hóa, và chất hoạt hóa thứ hai có thể là hợp chất trialkyl nhôm (ví dụ, trietyl nhôm và/hoặc triisobutyl nhôm).

Các quy trình oligome hóa alpha olefin dựa trên metaloxen này tạo ra oligome olefin và cuối cùng tạo ra polyalphaolefin có các đặc tính rất hữu ích. Quy trình oligome hóa alpha olefin dựa trên metaloxen cho phép thay đổi các đặc tính của oligome và PAO dựa trên hệ chất xúc tác và/hoặc điều kiện oligome hóa, ngoài các yếu tố khác được mô tả ở đây. Ví dụ, một số đặc tính của oligome 1-octen đồng nhất được điều chế theo sáng chế, và PAO được điều chế bằng cách hydro hóa oligome đồng nhất này, có thể được chọn bằng cách điều chỉnh nhiệt độ mà ở đó quá trình oligome hóa được thực hiện. Ngoài ra, việc điều chỉnh này dẫn đến việc điều chỉnh độ nhớt và điểm rót của sản phẩm để có thể điều chế được PAO có giá trị cao có độ nhớt động ở 100°C bằng 100 mm²/s (100 cSt) và/hoặc 40 mm²/s (40 cSt).

Các định nghĩa

Để xác định rõ hơn các thuật ngữ được sử dụng trong bản mô tả này, các định nghĩa sau được đưa ra. Nếu không được chỉ rõ theo cách khác, các định nghĩa sau được áp dụng cho bản mô tả này. Nếu một thuật ngữ được sử dụng trong bản mô tả này nhưng không được định nghĩa cụ thể ở đây, thì định nghĩa nêu trong tài liệu: the IUPAC Compendium of Chemical Terminology, 2nd Ed (1997) có thể được áp dụng, miễn là định nghĩa này không mâu thuẫn với phần bộc lộ bất kỳ khác hoặc định nghĩa được áp dụng ở đây, hoặc không làm cho khẳng định bất kỳ mà thuật ngữ này được áp dụng trở nên không xác định hoặc không thể xảy ra. Nếu định nghĩa hoặc cách sử dụng được đưa ra bởi tài liệu bất kỳ được viện dẫn ở đây mâu thuẫn với định nghĩa hoặc cách sử dụng được đưa ra ở đây thì sẽ áp dụng định nghĩa hoặc cách sử dụng được đưa ra ở đây.

Liên quan đến thuật ngữ hoặc cụm từ chuyển tiếp, thuật ngữ chuyển tiếp “chứa”, đồng nghĩa với thuật ngữ “kể cả” hoặc “đặc trưng bởi” là thuật ngữ bao gồm tất cả hoặc không giới hạn và không loại trừ các yếu tố hoặc bước bổ sung, không được nêu ra. Cụm từ chuyển tiếp “bao gồm” loại trừ yếu tố, bước hoặc thành phần bất kỳ không được chỉ rõ trong yêu cầu bảo hộ. Cụm từ chuyển tiếp “chủ yếu bao gồm” giới hạn phạm vi yêu cầu bảo hộ ở chất hoặc bước được chỉ rõ và chất hoặc bước không ảnh hưởng đáng kể đến đặc trưng mới và cơ bản của sáng chế. Yêu cầu bảo hộ chứa “chủ yếu bao gồm” có phạm vi nằm giữa yêu cầu bảo hộ đóng được thể hiện dưới dạng “bao gồm” và yêu cầu bảo hộ hoàn toàn mở được thể hiện dưới dạng “chứa”. Nếu không được chỉ rõ ngược lại, khi mô tả một hợp chất hoặc được phẩm “chủ yếu bao gồm” thì không được hiểu là “chứa” mà được dự định để mô tả thành phần bao gồm các chất không làm thay đổi đáng kể đến chế phẩm hoặc phương pháp mà thuật ngữ này được áp dụng. Ví dụ, nguyên liệu chủ yếu bao gồm chất A có thể bao gồm các tạp chất thường có mặt trong mẫu hợp chất hoặc chế phẩm được điều chế công nghiệp hoặc có bán trên thị trường. Nếu yêu cầu bảo hộ bao gồm các dấu hiệu và/hoặc nhóm dấu hiệu khác nhau (ví dụ, bước, nguyên liệu, và/hoặc sản phẩm, ngoài các khả năng khác), thuật ngữ chuyển tiếp chứa, chủ yếu bao gồm, và bao gồm, chỉ áp dụng cho nhóm dấu hiệu mà nó được sử dụng và có thể có các thuật ngữ hoặc cụm từ chuyển tiếp khác nhau được sử dụng với các dấu hiệu khác nhau trong một yêu cầu bảo hộ. Ví dụ, một phương pháp có thể chứa một số bước được nêu rõ (và các bước

khác không được nêu rõ) nhưng sử dụng phương pháp điều chế hệ chất xúc tác bao gồm các bước cụ thể sử dụng hệ chất xúc tác chứa các thành phần được nêu rõ và các thành phần khác không được nêu rõ. Mặc dù các chế phẩm và phương pháp được mô tả là “chứa” các thành phần hoặc bước khác nhau, chế phẩm và phương pháp này cũng có thể “chủ yếu bao gồm” hoặc “bao gồm” các thành phần hoặc bước khác nhau.

Nếu không được chỉ rõ theo cách khác, thuật ngữ ở dạng số ít được dự định bao gồm cả dạng số nhiều, ví dụ, ít nhất một. Ví dụ, “metaloxen” nghĩa là bao gồm một metaloxen, hoặc hỗn hợp của nhiều hơn một metaloxen, nếu không được chỉ rõ theo cách khác.

Nhóm của nguyên tố trong bảng được chỉ ra bằng cách sử dụng cách đánh số được đưa ra trong phiên bản bảng tuần hoàn các nguyên tố trong tài liệu: Chemical and Engineering News, 63(5), 27, 1985. Trong một số trường hợp, nhóm của nguyên tố có thể được chỉ ra bằng cách sử dụng tên thông thường được gán cho nhóm này; ví dụ, kim loại kiềm đối với các nguyên tố nhóm 1, kim loại kiềm thổ đối với các nguyên tố nhóm 2, kim loại chuyển tiếp đối với các nguyên tố nhóm 3-12, và halogen hoặc halogenua đối với các nguyên tố nhóm 17.

Đối với hợp chất cụ thể bất kỳ được bộc lộ trong bản mô tả này, cấu trúc chung hoặc tên được thể hiện còn dự định bao gồm tất cả các chất đồng phân cấu trúc, chất đồng phân cấu hình riêng, và chất đồng phân lập thể có thể xuất hiện từ tập hợp các nhóm thế cụ thể, nếu không được chỉ rõ theo cách khác. Do đó, việc đề cập chung đến một hợp chất bao gồm tất cả các chất đồng phân cấu trúc, nếu không được chỉ rõ theo cách khác; ví dụ, việc đề cập đến pentan bao gồm n-pentan, 2-metyl-butan, và 2,2-dimetylpropan. Ngoài ra, việc đề cập đến cấu trúc hoặc tên chung sẽ bao gồm tất cả các chất đồng phân đối ảnh, chất đồng phân không đối quang, và chất đồng phân dị cấu quang học khác ở dạng đồng phân đối ảnh hoặc raxemic, cũng như hỗn hợp các chất đồng phân lập thể, nếu ngữ cảnh cho phép hoặc yêu cầu. Đối với công thức hoặc tên cụ thể bất kỳ, công thức chung hoặc tên bất kỳ này còn bao gồm tất cả các chất đồng phân cấu hình riêng, chất đồng phân vùng, và chất đồng phân lập thể có thể tạo ra từ tập hợp nhóm thế cụ thể.

Theo một khía cạnh, “nhóm” hóa học có thể được định nghĩa hoặc mô tả theo cách để thu được nhóm này từ hợp chất đối chiếu hoặc hợp chất “gốc”, ví dụ, theo số

nguyên tử hydro được loại bỏ ra khỏi hợp chất gốc để tạo ra nhóm này, ngay cả khi nhóm này không thực sự được tạo ra theo cách này. Các nhóm này có thể được sử dụng dưới dạng nhóm thế hoặc được kết hợp hoặc liên kết với nguyên tử kim loại. Ví dụ, “nhóm alkyl” có thể thu được bằng cách loại bỏ một nguyên tử hydro ra khỏi alkan, trong khi “nhóm alkylen” có thể thu được bằng cách loại bỏ hai nguyên tử hydro ra khỏi alkan. Ngoài ra, thuật ngữ thông thường hơn có thể được sử dụng để chỉ các nhóm thu được bằng cách loại bỏ số lượng bất kỳ (“một hoặc nhiều”) nguyên tử hydro ra khỏi hợp chất gốc, trong ví dụ này, nhóm này có thể được mô tả là “nhóm alkan” và bao gồm “nhóm alkyl”, “nhóm alkylen” và nhóm có ba hoặc nhiều nguyên tử hydro, nếu cần tùy trường hợp, được loại bỏ ra khỏi alkan. Trong bản mô tả, việc mô tả nhóm thế, phối tử hoặc gốc hóa học khác có thể tạo thành “nhóm” cụ thể nghĩa là các quy tắc cấu trúc và liên kết hóa học đã biết rõ được áp dụng khi nhóm đã nêu được sử dụng. Ví dụ, nếu hợp chất metaloxen có công thức $(\eta\text{-}5\text{-C}_5\text{H}_5)_2\text{Zr}(\text{CH}_3)(\text{X})$ được mô tả, và nhóm X có thể là “nhóm alkyl,” “nhóm alkylen,” hoặc “nhóm alkan,” quy tắc hóa trị và liên kết thông thường được áp dụng. Khi mô tả một nhóm là “thu được từ”, hoặc “được tạo ra từ”, các thuật ngữ này được sử dụng theo nghĩa thông thường và không được dự định thể hiện phương pháp hoặc quy trình tổng hợp cụ thể bất kỳ, nếu không được chỉ rõ theo cách khác hoặc ngữ cảnh quy định khác. Thuật ngữ liên kết “eta-5” còn được ký hiệu là “ η^5 -” trong bản mô tả.

Nhiều nhóm được chỉ rõ theo nguyên tử được liên kết với kim loại hoặc liên kết với gốc hóa học khác dưới dạng nhóm thế, như “nhóm liên kết với oxy” còn được gọi là “nhóm oxy”. Ví dụ, nhóm liên kết với oxy bao gồm các nhóm như hydrocarboxy (-OR trong đó R là nhóm hydrocarbyl), alkoxit (-OR trong đó R là nhóm alkyl), aryloxit (-OAr trong đó Ar là nhóm aryl), hoặc nhóm tương tự được thế của chúng, hoạt động như phối tử hoặc nhóm thế ở vị trí đã định. Ngoài ra, nếu không được chỉ rõ theo cách khác, nhóm chứa cacbon bất kỳ không được chỉ rõ số nguyên tử cacbon có thể có 1, 2, 3, 4, 5, 6, 7, 8, 9, 10, 11, 12, 13, 14, 15, 16, 17, 18, 19, 20, 21, 22, 23, 24, 25, 26, 27, 28, 29, hoặc 30 nguyên tử cacbon, hoặc khoảng bất kỳ hoặc tổ hợp các khoảng giữa các giá trị này, nếu thích hợp. Ví dụ, nếu không được chỉ rõ theo cách khác, nhóm chứa cacbon bất kỳ có thể có từ 1 đến 30 nguyên tử cacbon, từ 1 đến 25 nguyên tử cacbon, từ 1 đến 20 nguyên tử cacbon, từ 1 đến 15 nguyên tử cacbon, từ 1 đến 10 nguyên tử cacbon, hoặc từ 1 đến 5 nguyên tử cacbon, và số nguyên tử cacbon tương

tự. Ngoài ra, các ký hiệu khác hoặc thuật ngữ xác định khác có thể được sử dụng để chỉ sự có mặt hoặc không có mặt của nhóm thế cụ thể, hóa học vùng và/hoặc hóa lập thể cụ thể, hoặc sự có mặt hoặc không có mặt của cấu trúc hoặc khung mạch nhánh.

Thuật ngữ “được thế” khi được sử dụng để mô tả một nhóm, ví dụ, khi nói đến nhóm tương tự được thế của một nhóm cụ thể, được dự định để mô tả gốc không phải hydro bất kỳ thay thế hydro trong nhóm này, và được dự định không chỉ giới hạn ở đó. Nhóm hoặc các nhóm cũng có thể được nhắc đến ở đây là “không được thế”, thuật ngữ này dùng để chỉ nhóm ban đầu trong đó gốc không phải hydro không thay thế hydro trong nhóm đó. Thuật ngữ “được thế” được dự định là không bị giới hạn và bao gồm nhóm thế vô cơ hoặc nhóm thế hữu cơ như được hiểu bởi người có hiểu biết trung bình về lĩnh vực kỹ thuật này.

Thuật ngữ “(các) oligome alpha olefin”, “(các) sản phẩm oligome alpha olefin”, “(các) sản phẩm oligome,” hoặc “(các) sản phẩm oligome hóa” và thuật ngữ tương tự được sử dụng để chỉ dime alpha olefin, trime alpha olefin, và oligome alpha olefin cao. Nói chung, thuật ngữ dime alpha olefin, trime alpha olefin, và oligome alpha olefin cao (chúng cũng có thể được gọi là dime, trime, hoặc oligome nặng tương ứng) lần lượt dùng để chỉ sản phẩm oligome hóa chứa 2, 3, hoặc 4 hoặc nhiều hơn 4 đơn vị có nguồn gốc từ monome alpha olefin. Trong dime, trime, và oligome alpha olefin cao bất kỳ, các đơn vị monome alpha olefin có thể là giống nhau hoặc khác nhau. Sản phẩm oligome kết hợp với monome dư của quá trình điều chế sản phẩm oligome và chất bất kỳ khác đi ra từ thiết bị phản ứng oligome hóa được gọi là “dòng đi ra từ thiết bị phản ứng oligome hóa,” “dòng đi ra từ thiết bị phản ứng” hoặc thuật ngữ tương tự. Thông thường, oligome alpha olefin và các thuật ngữ này được sử dụng để mô tả sản phẩm oligome chứa trong dòng đi ra từ thiết bị phản ứng, và thuật ngữ “sản phẩm oligome nặng” được sử dụng để mô tả sản phẩm oligome sau khi chưng cất. Trong mỗi trường hợp, thông tin chi tiết về ngữ cảnh và thử nghiệm liên quan đến sản phẩm đã được chưng cất hoặc không được chưng cất. Nói chung, thuật ngữ oligome alpha olefin và sản phẩm oligome nặng và thuật ngữ tương tự không được dùng để mô tả mẫu sau khi hydro hóa, trong trường hợp này polyalphaolefin (PAO) là thuật ngữ được sử dụng để xác định oligome alpha olefin được hydro hóa. Khi nói “(các) oligome alpha olefin” “(các) sản phẩm oligome alpha olefin” “(các) sản phẩm oligome,” hoặc “các sản phẩm oligome hóa” được cắt phân đoạn (ví dụ, chưng cất), “(các) oligome

alpha olefin”, “(các) sản phẩm oligome alpha olefin”, “(các) sản phẩm oligome” hoặc “các sản phẩm oligome hóa” này có thể chứa không quá 1% trọng lượng monome alpha olefin dư. Tuy nhiên, lượng monome alpha olefin dư có thể được chỉ rõ là giá trị dưới 1% trọng lượng. Ngoài ra, khi áp dụng cho oligome alpha olefin có số nguyên tử cacbon duy nhất, thuật ngữ như “oligome alpha olefin” hoặc “sản phẩm oligome” có thể được mô tả bằng cách sử dụng thuật ngữ như “oligome alpha olefin đồng nhất,” “sản phẩm oligome đồng nhất,” và thuật ngữ tương tự. Cần hiểu rằng “oligome alpha olefin đồng nhất”, “sản phẩm oligome đồng nhất” và thuật ngữ tương tự bao gồm một lượng tạp chất là alpha olefin khác, olefin khác, và các chất khác thường có mặt trong mẫu monome alpha olefin duy nhất cụ thể bất kỳ có bán trên thị trường không được loại bỏ trong quá trình sản xuất alpha olefin có số nguyên tử cacbon duy nhất.

“Sản phẩm oligome nặng” là sản phẩm thu được từ việc loại bỏ một số oligome alpha olefin thấp ra khỏi sản phẩm oligome trong dòng đi ra từ thiết bị phản ứng oligome hóa. Theo một khía cạnh, phương pháp được sử dụng để loại bỏ một số oligome alpha olefin thấp có thể là chưng cất. Theo các khía cạnh khác, phương pháp được sử dụng để loại bỏ một số oligome alpha olefin thấp có thể là làm sạch hoặc phun nước. Theo một phương án khác, quy trình loại bỏ một số oligome alpha olefin thấp có thể là chưng cất bằng cách làm sạch bằng khí. Nếu chất được chưng cất, làm sạch, hoặc phun nước còn chứa monome alpha olefin nào đó (ví dụ, dòng đi ra từ thiết bị phản ứng oligome hóa trong đó không phải toàn bộ lượng monome alpha olefin được chuyển hóa thành sản phẩm oligome), quá trình chưng cất, làm sạch, hoặc phun nước cũng có thể loại bỏ một số hoặc toàn bộ monome alpha olefin. Do đó, tùy thuộc vào phương pháp oligome hóa và phương pháp phân đoạn, sản phẩm oligome nặng này có thể chứa lượng monome alpha olefin thấp hơn lượng đã nêu (ví dụ, dưới 1% trọng lượng). Nói chung, phương pháp loại bỏ một số oligome alpha olefin thấp sẽ loại bỏ ít nhất một phần monome alpha olefin, dime, và/hoặc trime để tạo ra sản phẩm oligome nặng này. Cần lưu ý rằng nếu phương pháp này được sử dụng để loại bỏ một số oligome alpha olefin thấp, về thực chất, phương pháp này cũng có thể loại bỏ một phần oligome olefin cao, và điểm này không làm giảm mục đích loại bỏ một phần oligome alpha olefin thấp. Trong một số trường hợp, thuật ngữ oligome alpha olefin có thể được sử dụng để mô tả sản phẩm phản ứng cả trước và sau khi chưng cất, trong trường hợp này, có thể nêu chi tiết về ngưỡng và thử nghiệm để xác định sản phẩm

này đã được chưng cất hoặc không được chưng cất.

“Polyalphaolefin” (PAO) là hỗn hợp gồm oligome được hydro hóa (hoặc theo cách khác, gần như no), chứa các đơn vị có nguồn gốc từ monome alpha olefin (tức là oligome alpha olefin). Nếu không được chỉ rõ theo cách khác, PAO có thể chứa các đơn vị có nguồn gốc từ các đơn vị monome alpha olefin, các đơn vị này có thể là giống nhau (oligome alpha olefin đồng nhất được hydro hóa hoặc gần như no) hoặc có thể là khác nhau (cooligome alpha olefin được hydro hóa hoặc gần như no). Người có hiểu biết trung bình về lĩnh vực kỹ thuật này sẽ hiểu được rằng tùy thuộc vào phương pháp được sử dụng để tạo ra PAO, oligome alpha olefin thu được có thể đã gần như bão hòa. Ví dụ, phương pháp được thực hiện với sự có mặt của hydro có thể tạo ra oligome olefin, phương pháp này có thể cần hoặc không cần bước hydro hóa riêng biệt để tạo ra sản phẩm có các đặc tính cần thiết. Nói chung, monome alpha olefin được sử dụng để tạo ra polyalphaolefin có thể là monome alpha olefin bất kỳ được mô tả ở đây. Người có hiểu biết trung bình về lĩnh vực kỹ thuật này cần hiểu rằng quy trình sản xuất PAO có thể vẫn còn một lượng monome được hydro hóa trong PAO (ví dụ, dưới 1% trọng lượng) và lượng monome được hydro hóa này có thể được chỉ rõ.

Thuật ngữ “nhóm organyl” được sử dụng trong bản mô tả này theo định nghĩa của IUPAC: là nhóm thế hữu cơ, không quan tâm đến loại nhóm chức, có một hóa trị tự do ở nguyên tử cacbon. Tương tự, “nhóm organylen” dùng để chỉ nhóm hữu cơ, không quan tâm đến loại nhóm chức, thu được bằng cách loại bỏ hai nguyên tử hydro ra khỏi hợp chất hữu cơ, hoặc hai nguyên tử hydro của một nguyên tử cacbon hoặc một nguyên tử hydro của mỗi nguyên tử trong số hai nguyên tử cacbon khác nhau. “Nhóm hữu cơ” dùng để chỉ nhóm thông thường được tạo ra bằng cách loại bỏ một hoặc nhiều nguyên tử hydro ra khỏi nguyên tử cacbon của hợp chất hữu cơ. Do đó, “nhóm organyl”, “nhóm organylen” và “nhóm hữu cơ” có thể chứa (các) nhóm chức hữu cơ và/hoặc (các) nguyên tử không phải cacbon và hydro, tức là, nhóm hữu cơ có thể chứa nhóm chức và/hoặc nguyên tử ngoài cacbon và hydro. Chẳng hạn, ví dụ không làm giới hạn sáng chế về các nguyên tử không phải cacbon và hydro bao gồm halogen, oxy, nitơ, phospho, và nguyên tử tương tự. Ví dụ không làm giới hạn sáng chế về nhóm chức bao gồm ete, aldehyt, keton, este, sulfua, amin, và phosphin, v.v.. Theo một khía cạnh, (các) nguyên tử hydro được loại bỏ để tạo ra “nhóm organyl”, “nhóm organylen” hoặc “nhóm hữu cơ” có thể được gắn với nguyên tử cacbon thuộc

một nhóm chức, ví dụ, nhóm axyl ($-\text{C}(\text{O})\text{R}$), nhóm formyl ($-\text{C}(\text{O})\text{H}$), nhóm carboxy ($-\text{C}(\text{O})\text{OH}$), nhóm hydrocarboxycarbonyl ($-\text{C}(\text{O})\text{OR}$), nhóm xyano ($-\text{C}\equiv\text{N}$), nhóm carbamoyl ($-\text{C}(\text{O})\text{NH}_2$), nhóm *N*-hydrocarbylcarbamoyl ($-\text{C}(\text{O})\text{NHR}$), hoặc nhóm *N,N'*-dihydrocarbylcarbamoyl ($-\text{C}(\text{O})\text{NR}_2$), ngoài các nhóm khác. Theo một khía cạnh khác, (các) nguyên tử hydro được loại bỏ để tạo ra “nhóm organyl”, “nhóm organylen” hoặc “nhóm hữu cơ” có thể được gắn với nguyên tử cacbon không thuộc nhóm chức, và nằm cách xa, ví dụ, $-\text{CH}_2\text{C}(\text{O})\text{CH}_3$, $-\text{CH}_2\text{NR}_2$, và nhóm tương tự. “Nhóm organyl”, “nhóm organylen” hoặc “nhóm hữu cơ” có thể là nhóm béo, bao gồm cả mạch vòng và không vòng, hoặc có thể là nhóm thơm. Thuật ngữ “nhóm organyl”, “nhóm organylen” và “nhóm hữu cơ” còn bao gồm vòng chứa nguyên tử khác loại, hệ vòng chứa nguyên tử khác loại, dị vòng thơm, và hệ dị vòng thơm. “Nhóm organyl”, “nhóm organylen” và “nhóm hữu cơ” có thể là mạch thẳng hoặc mạch nhánh nếu không được chỉ rõ theo cách khác. Cuối cùng, cần lưu ý rằng định nghĩa “nhóm organyl”, “nhóm organylen” hoặc “nhóm hữu cơ” bao gồm “nhóm hydrocarbyl”, “nhóm hydrocarbylen” “nhóm hydrocacbon” tương ứng, và “nhóm alkyl,” “nhóm alkylen,” và “nhóm alkan,” tương ứng (ngoài các nhóm khác mà người có hiểu biết trung bình về lĩnh vực kỹ thuật này đã biết). Khi được liên kết với kim loại chuyển tiếp, “nhóm organyl”, “nhóm organylen” hoặc “nhóm hữu cơ” có thể còn được mô tả theo thuật ngữ thông thường η^x (eta-x), trong đó x là số nguyên tương ứng với số nguyên tử được liên kết phối trí với kim loại chuyển tiếp hoặc được cho là liên kết phối trí với kim loại chuyển tiếp, ví dụ, theo quy tắc 18 electron.

Thuật ngữ “hydrocacbon” mỗi khi được sử dụng trong bản mô tả và yêu cầu bảo hộ dùng để chỉ hợp chất chỉ chứa cacbon và hydro. Các ký hiệu khác có thể được sử dụng để chỉ sự có mặt của nhóm cụ thể trong hydrocacbon (ví dụ, hydrocacbon được halogen hóa để chỉ sự có mặt của một hoặc nhiều nguyên tử halogen thay thế số lượng tương đương của nguyên tử hydro trong hydrocacbon). Thuật ngữ “nhóm hydrocarbyl” được sử dụng ở đây theo định nghĩa của IUPAC: là nhóm có hóa trị một được tạo ra bằng cách loại bỏ nguyên tử hydro ra khỏi hydrocacbon (tức là, nhóm chỉ chứa cacbon và hydro). Ví dụ không làm giới hạn sáng chế về nhóm hydrocarbyl bao gồm etyl, phenyl, tolyl, propenyl, và nhóm tương tự. Tương tự, “nhóm hydrocarbylen” dùng để chỉ nhóm được tạo ra bằng cách loại bỏ hai nguyên tử hydro ra khỏi hydrocacbon, hoặc hai nguyên tử hydro của một nguyên tử cacbon hoặc một nguyên tử

hydro của mỗi nguyên tử trong số hai nguyên tử cacbon khác nhau. Do đó, theo thuật ngữ được sử dụng ở đây, “nhóm hydrocacbon” dùng để chỉ nhóm thường được tạo ra bằng cách loại bỏ một hoặc nhiều nguyên tử hydro (nếu cần đối với nhóm cụ thể) ra khỏi hydrocacbon. “Nhóm hydrocarbyl”, “nhóm hydrocarbylen” và “nhóm hydrocacbon” có thể là nhóm béo hoặc thơm, vòng hoặc không vòng, và/hoặc mạch thẳng hoặc mạch nhánh. “Nhóm hydrocarbyl”, “nhóm hydrocarbylen” và “nhóm hydrocacbon” có thể bao gồm vòng, hệ vòng, vòng thơm, và hệ vòng thơm, chỉ chứa cacbon và hydro. Khi được liên kết với kim loại chuyển tiếp, “nhóm hydrocarbyl”, “nhóm hydrocarbylen” và “nhóm hydrocacbon” có thể còn được mô tả theo thuật ngữ thông thường η^x (eta-x), trong đó x là số nguyên tương ứng với số nguyên tử được liên kết phối trí với kim loại chuyển tiếp hoặc được cho là liên kết phối trí với kim loại chuyển tiếp, ví dụ, theo quy tắc 18 electron. “Nhóm hydrocarbyl,” “nhóm hydrocarbylen,” và “nhóm hydrocacbon” bao gồm, ví dụ, nhóm aryl, arylen, aren, nhóm alkyl, alkylen, alkan, xycloalkyl, xycloalkylen, nhóm xycloalkan, aralkyl, aralkylen, và nhóm aralkan, tương ứng, ngoài các nhóm khác.

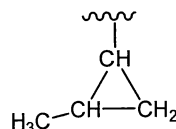
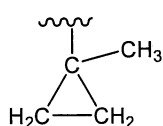
Hợp chất béo là nhóm hợp chất cacbon mạch vòng hoặc không vòng, no hoặc không no, trừ hợp chất thơm. “Nhóm béo” là nhóm thường được tạo ra bằng cách loại bỏ một hoặc nhiều nguyên tử hydro (nếu cần đối với nhóm cụ thể) ra khỏi nguyên tử cacbon của hợp chất béo. Tức là, hợp chất béo là hợp chất hữu cơ không thơm. Hợp chất béo và do đó nhóm béo có thể chứa (các) nhóm chức hữu cơ và/hoặc (các) nguyên tử không phải cacbon và hydro.

Thuật ngữ “alkan” mỗi khi được sử dụng trong bản mô tả và yêu cầu bảo hộ dùng để chỉ hợp chất hydrocacbon no. Các ký hiệu khác có thể được sử dụng để chỉ sự có mặt của nhóm cụ thể trong alkan (ví dụ, alkan được halogen hóa để chỉ sự có mặt của một hoặc nhiều nguyên tử halogen thay thế số lượng tương đương của nguyên tử hydro trong alkan). Thuật ngữ “nhóm alkyl” được sử dụng ở đây theo định nghĩa của IUPAC: là nhóm có hóa trị một được tạo ra bằng cách loại bỏ một nguyên tử hydro ra khỏi alkan. Tương tự, “nhóm alkylen” dùng để chỉ nhóm được tạo ra bằng cách loại bỏ hai nguyên tử hydro ra khỏi alkan (hoặc hai nguyên tử hydro của một nguyên tử cacbon hoặc một nguyên tử hydro của hai nguyên tử cacbon khác nhau). “Nhóm alkan” là thuật ngữ chung dùng để chỉ nhóm được tạo ra bằng cách loại bỏ một hoặc nhiều nguyên tử hydro (nếu cần đối với nhóm cụ thể) ra khỏi alkan. “Nhóm alkyl,”

“nhóm alkylen,” và “nhóm alkan” có thể là nhóm mạch vòng hoặc không vòng, và/hoặc có thể là mạch thẳng hoặc mạch nhánh nếu không được chỉ rõ theo cách khác. Nhóm alkyl bậc một, bậc hai, và bậc ba thu được bằng cách loại bỏ một nguyên tử hydro ra khỏi nguyên tử cacbon bậc một, bậc hai, bậc ba, tương ứng, của alkan. Nhóm n-alkyl thu được bằng cách loại bỏ một nguyên tử hydro ra khỏi nguyên tử cacbon cuối của alkan mạch thẳng. Nhóm RCH_2 ($\text{R} \neq \text{H}$), R_2CH ($\text{R} \neq \text{H}$), và R_3C ($\text{R} \neq \text{H}$) là nhóm alkyl bậc một, bậc hai và bậc ba tương ứng.

Xycloalkan là hydrocacbon vòng no, có hoặc không có mạch nhánh, ví dụ, xyclobutan. Các ký hiệu khác có thể được sử dụng để chỉ sự có mặt của nhóm cụ thể trong xycloalkan (ví dụ, xycloalkan được halogen hóa để chỉ sự có mặt của một hoặc nhiều nguyên tử halogen thay thế số lượng tương đương của nguyên tử hydro trong xycloalkan). Hydrocacbon vòng không no có một liên kết đôi trong vòng hoặc một liên kết ba được gọi là xycloalken và xycloalkyn tương ứng. Hydrocacbon vòng không no có nhiều hơn một liên kết bội này là xycloalkadien, xycloalkatrien, v.v.. Các ký hiệu khác có thể được sử dụng để chỉ sự có mặt của nhóm cụ thể trong xycloalken, xycloalkadien, xycloalkatrien, v.v..

Nhóm “xycloalkyl” là nhóm có hóa trị một thu được bằng cách loại bỏ nguyên tử hydro ra khỏi nguyên tử cacbon của vòng xycloalkan. Ví dụ, nhóm 1-metylxyclopropyl và nhóm 2-metylxyclopropyl được thể hiện như sau.



Tương tự, “nhóm xycloalkylen” dùng để chỉ nhóm thu được bằng cách loại bỏ hai nguyên tử hydro ra khỏi xycloalkan, ít nhất một trong số chúng là nguyên tử cacbon vòng. Do đó, “nhóm xycloalkylen” bao gồm cả nhóm thu được từ xycloalkan trong đó hai nguyên tử hydro được loại bỏ ra khỏi cùng một nguyên tử cacbon vòng, nhóm thu được từ xycloalkan trong đó hai nguyên tử hydro được loại bỏ chính thức ra khỏi hai nguyên tử cacbon khác nhau của vòng, và nhóm thu được từ xycloalkan trong đó nguyên tử hydro thứ nhất được loại bỏ ra khỏi nguyên tử cacbon vòng và nguyên tử cacbon thứ hai được loại bỏ ra khỏi nguyên tử cacbon không là nguyên tử cacbon vòng. “Nhóm xycloalkan” dùng để chỉ nhóm thường được tạo ra bằng cách loại bỏ một hoặc nhiều nguyên tử hydro (nếu cần đối với nhóm cụ thể và ít nhất một trong số

chúng là nguyên tử cacbon vòng) ra khỏi xycloalkan.

Thuật ngữ “alken” mỗi khi được sử dụng trong bản mô tả này và yêu cầu bảo hộ dùng để chỉ olefin là hydrocacbon mạch thẳng hoặc mạch nhánh có một liên kết đôi cacbon-cacbon và có công thức chung C_nH_{2n} . Alkadien dùng để chỉ olefin là hydrocacbon mạch thẳng hoặc mạch nhánh có hai liên kết đôi cacbon-cacbon và có công thức chung C_nH_{2n-2} và alkatrien dùng để chỉ olefin là hydrocacbon mạch thẳng hoặc mạch nhánh có ba liên kết đôi cacbon-cacbon và có công thức chung C_nH_{2n-4} . Alken, alkadien, và alkatrien còn có thể được xác định bằng vị trí của (các) liên kết đôi cacbon-cacbon. Các ký hiệu khác có thể được sử dụng để chỉ sự có mặt hoặc không có mặt của nhóm cụ thể trong alken, alkadien, hoặc alkatrien. Ví dụ, haloalken dùng để chỉ alken có một hoặc nhiều nguyên tử hydro được thay bằng nguyên tử halogen.

“Nhóm alkenyl” là nhóm có hóa trị một thu được từ alken bằng cách loại bỏ nguyên tử hydro ra khỏi nguyên tử cacbon bất kỳ của alken. Do đó, “nhóm alkenyl” bao gồm nhóm trong đó nguyên tử hydro được loại bỏ ra khỏi nguyên tử cacbon được lai hóa sp^2 (olefin) và nhóm trong đó nguyên tử hydro được loại bỏ ra khỏi nguyên tử cacbon bất kỳ khác. Ví dụ, và nếu không được chỉ rõ theo cách khác, nhóm 1-propenyl ($-CH=CHCH_3$), 2-propenyl $[(CH_3)C=CH_2]$, và 3-propenyl ($-CH_2CH=CH_2$) được bao hàm trong thuật ngữ “nhóm alkenyl.” Tương tự, “nhóm alkenylen” dùng để chỉ nhóm được tạo ra bằng cách loại bỏ hai nguyên tử hydro ra khỏi alken, hoặc hai nguyên tử hydro của một nguyên tử cacbon hoặc một nguyên tử hydro của hai nguyên tử cacbon khác nhau. “Nhóm alken” dùng để chỉ nhóm thường được tạo ra bằng cách loại bỏ một hoặc nhiều nguyên tử hydro (nếu cần đối với nhóm cụ thể) ra khỏi alken. Nếu nguyên tử hydro được loại bỏ ra khỏi nguyên tử cacbon tham gia vào liên kết đôi cacbon-cacbon, vùng hóa học của nguyên tử cacbon mà từ đó nguyên tử hydro được loại bỏ, và vùng hóa học của liên kết đôi cacbon-cacbon đều có thể được chỉ rõ. Các ký hiệu khác có thể được sử dụng để chỉ sự có mặt hoặc không có mặt của nhóm cụ thể trong nhóm alken. Nhóm alken cũng có thể còn được xác định bằng vị trí của liên kết đôi cacbon-cacbon.

Thuật ngữ “alkyn” mỗi khi được sử dụng trong bản mô tả này và yêu cầu bảo hộ dùng để chỉ olefin là hydrocacbon mạch thẳng hoặc mạch nhánh có một liên kết ba cacbon-cacbon và có công thức chung C_nH_{2n-2} . Alkadiyn dùng để chỉ olefin là

hydrocacbon có hai liên kết đôi cacbon-cacbon và có công thức chung C_nH_{2n-6} và alkatriyn dùng để chỉ olefin là hydrocacbon có ba liên kết đôi cacbon-cacbon và công thức chung C_nH_{2n-10} . Alkyn, alkadiyn, và alkatriyn còn có thể được xác định bằng vị trí của (các) liên kết ba cacbon-cacbon. Các ký hiệu khác có thể được sử dụng để chỉ sự có mặt hoặc không có mặt của nhóm cụ thể trong alken, alkadien, hoặc alkatrien. Ví dụ, haloalkyn dùng để chỉ alkyn có một hoặc nhiều nguyên tử hydro được thay bằng nguyên tử halogen.

“Nhóm alkynyl” là nhóm có hóa trị một thu được từ alkyn bằng cách loại bỏ nguyên tử hydro ra khỏi nguyên tử cacbon bất kỳ của alkyn. Do đó, “nhóm alkynyl” bao gồm nhóm trong đó nguyên tử hydro được loại bỏ ra khỏi nguyên tử cacbon được lai hóa sp (axetylen) và nhóm trong đó nguyên tử hydro được loại bỏ ra khỏi nguyên tử cacbon bất kỳ khác. Ví dụ, và nếu không được chỉ rõ theo cách khác, tất cả các nhóm 1-propynyl ($-C\equiv CCH_3$) và 3-propynyl ($HC\equiv CCH_2-$) đều được bao hàm trong thuật ngữ “nhóm alkynyl”. Tương tự, “nhóm alkynylen” dùng để chỉ nhóm được tạo ra bằng cách loại bỏ hai nguyên tử hydro ra khỏi alkyn, hoặc hai nguyên tử hydro của một nguyên tử cacbon nếu có thể hoặc một nguyên tử hydro của hai nguyên tử cacbon khác nhau. “Nhóm alkyn” dùng để chỉ nhóm thường được tạo ra bằng cách loại bỏ một hoặc nhiều nguyên tử hydro (nếu cần đối với nhóm cụ thể) ra khỏi alkyn. Các ký hiệu khác có thể được sử dụng để chỉ sự có mặt hoặc không có mặt của nhóm cụ thể trong nhóm alkyn. Nhóm alkyn cũng có thể còn được xác định bằng vị trí của liên kết ba cacbon-cacbon.

Thuật ngữ “olefin” mỗi khi được sử dụng trong bản mô tả này và yêu cầu bảo hộ dùng để chỉ hợp chất có ít nhất một liên kết đôi cacbon-cacbon không là một phần của vòng hoặc hệ vòng thơm. Thuật ngữ “olefin” bao gồm hợp chất béo, thơm, vòng hoặc không vòng, và/hoặc mạch thẳng hoặc mạch nhánh có ít nhất một liên kết đôi cacbon-cacbon không là một phần của vòng thơm hoặc hệ vòng thơm, nếu không được chỉ rõ theo cách khác. Bản thân thuật ngữ “olefin” không cho thấy sự có mặt hoặc không có mặt của nguyên tử khác loại và/hoặc sự có mặt hoặc không có mặt của liên kết đôi cacbon-cacbon khác, nếu không được chỉ rõ. Olefin cũng có thể còn được xác định bằng vị trí của liên kết đôi cacbon-cacbon. Cần lưu ý rằng alken, alkadien, alkatrien, xycloalken, xycloalkadien, là thành viên của nhóm olefin. Olefin này còn có thể được xác định bằng vị trí của (các) liên kết đôi cacbon-cacbon.

Thuật ngữ “alpha olefin” như được sử dụng trong bản mô tả này và yêu cầu bảo hộ dùng để chỉ olefin có liên kết đôi giữa nguyên tử cacbon thứ nhất và thứ hai của mạch bên của nguyên tử cacbon. Thuật ngữ “alpha olefin” bao gồm alpha olefin mạch thẳng hoặc mạch nhánh nếu không được chỉ rõ theo cách khác. Trong trường hợp alpha olefin mạch nhánh, mạch nhánh có thể ở vị trí 2 (vinyliden) và/hoặc vị trí 3 hoặc vị trí xa hơn so với liên kết đôi olefin. Thuật ngữ “vinyliden” mỗi khi được sử dụng trong bản mô tả và yêu cầu bảo hộ dùng để chỉ alpha olefin có mạch nhánh ở vị trí 2 so với liên kết đôi olefin. Bản thân thuật ngữ “alpha olefin” không cho thấy sự có mặt hoặc không có mặt của nguyên tử khác loại và/hoặc sự có mặt hoặc không có mặt của liên kết đôi cacbon-cacbon khác, nếu không được chỉ rõ. Thuật ngữ “hydrocacbon alpha olefin” hoặc “alpha olefin hydrocacbon” dùng để chỉ hợp chất alpha olefin chỉ chứa hydro và carbon.

Thuật ngữ “alpha olefin mạch thẳng” như được sử dụng trong bản mô tả này dùng để chỉ olefin mạch thẳng có liên kết đôi giữa nguyên tử cacbon thứ nhất và thứ hai. Bản thân thuật ngữ “alpha olefin mạch thẳng” không cho thấy sự có mặt hoặc không có mặt của nguyên tử khác loại và/hoặc sự có mặt hoặc không có mặt của các liên kết đôi cacbon-cacbon khác, nếu không được chỉ rõ. Thuật ngữ “hydrocacbon alpha olefin mạch thẳng” hoặc “alpha olefin mạch thẳng hydrocacbon” dùng để chỉ hợp chất alpha olefin mạch thẳng chỉ chứa hydro và carbon.

Thuật ngữ “alpha olefin mạch thẳng tiêu chuẩn” mỗi khi được sử dụng trong bản mô tả này và yêu cầu bảo hộ dùng để chỉ hydrocacbon mono-olefin mạch thẳng có liên kết đôi giữa nguyên tử cacbon thứ nhất và thứ hai. Cần lưu ý rằng “alpha olefin mạch thẳng tiêu chuẩn” không đồng nghĩa với “alpha olefin mạch thẳng” do thuật ngữ “alpha olefin mạch thẳng” có thể bao gồm hợp chất olefin mạch thẳng có liên kết đôi giữa nguyên tử cacbon thứ nhất và thứ hai và có nguyên tử khác loại và/hoặc liên kết đôi khác.

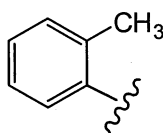
Thuật ngữ “chủ yếu bao gồm alpha olefin mạch thẳng” hoặc các biến thể của nó được sử dụng trong bản mô tả này và yêu cầu bảo hộ dùng để chỉ các sản phẩm alpha olefin mạch thẳng có bán trên thị trường. Sản phẩm alpha olefin mạch thẳng có bán trên thị trường có thể chứa các tạp chất không là alpha olefin mạch thẳng như vinyliden, olefin nội, alpha olefin mạch nhánh, parafin, và diolefin, ngoài các tạp chất

khác, các tạp chất này không được loại bỏ trong quá trình sản xuất alpha olefin mạch thẳng. Người có hiểu biết trung bình về lĩnh vực kỹ thuật này sẽ hiểu được rằng loại và lượng tạp chất cụ thể có mặt trong sản phẩm alpha olefin mạch thẳng có bán trên thị trường sẽ phụ thuộc vào nguồn sản phẩm alpha olefin mạch thẳng có bán trên thị trường. Ngoài ra, khi được áp dụng cho alpha olefin mạch thẳng có một giá trị số lượng nguyên tử cacbon, thuật ngữ “chủ yếu bao gồm alpha olefin mạch thẳng” còn bao gồm lượng nhỏ (ví dụ, dưới 5, 4, 3, 2, hoặc 1% trọng lượng) olefin có số lượng nguyên tử cacbon khác với số lượng nguyên tử cacbon đã chỉ ra của alpha olefin mạch thẳng không được loại bỏ trong quá trình sản xuất alpha olefin mạch thẳng có số nguyên tử cacbon duy nhất. Do đó, thuật ngữ “chủ yếu bao gồm alpha olefin mạch thẳng” và các biến thể của nó được dự định không làm giới hạn lượng các thành phần không là alpha olefin mạch thẳng (hoặc liên quan đến số nguyên tử cacbon thì được dự định không làm giới hạn số nguyên tử cacbon không được chỉ rõ) nghiêm ngặt hơn lượng có mặt trong sản phẩm alpha olefin mạch thẳng cụ thể có bán trên thị trường, nếu không được chỉ rõ theo cách khác. Một nguồn sản phẩm alpha olefin có bán trên thị trường là sản phẩm được sản xuất bằng quá trình oligome hóa etylen. Nguồn sản phẩm alpha olefin thứ hai có bán trên thị trường là sản phẩm được sản xuất, và tùy ý được tách từ dòng sản phẩm của quy trình Fischer-Tropsch. Một nguồn sản phẩm alpha olefin mạch thẳng có bán trên thị trường được điều chế bằng cách oligome hóa etylen có thể được sử dụng dưới dạng nguyên liệu olefin là sản phẩm của Chevron Phillips Chemical Company LP, The Woodlands, Texas, Mỹ. Các nguồn sản phẩm alpha olefin mạch thẳng có bán trên thị trường khác được điều chế bằng cách oligome hóa etylen có thể được sử dụng dưới dạng nguyên liệu olefin bao gồm oligome là sản phẩm của Inneos (Feluy, Bỉ), Shell Chemicals Corporation (Houston, Texas, Mỹ hoặc London, Vương Quốc Anh), Idemitsu Kosan (Tokyo, Nhật bản), và Mitsubishi Chemical Corporation (Tokyo, Nhật Bản), ngoài các nguồn khác. Một nguồn sản phẩm alpha olefin mạch thẳng có bán trên thị trường được sản xuất, và tùy ý tách từ dòng sản phẩm của quy trình Fisher-Tropsch bao gồm Sasol (Johannesburg, Nam Phi), ngoài các nguồn khác.

Thuật ngữ “nhóm thơm” dùng để chỉ nhóm thường được tạo ra bằng cách loại bỏ một hoặc nhiều nguyên tử hydro (nếu cần đối với nhóm cụ thể và ít nhất một trong số chúng là nguyên tử cacbon của vòng thơm) ra khỏi hợp chất thơm. Do đó, thuật ngữ

“nhóm thơm” như được sử dụng ở đây dùng để chỉ nhóm thu được bằng cách loại bỏ một hoặc nhiều nguyên tử hydro ra khỏi hợp chất thơm, tức là, hợp chất chứa hydrocacbon liên hợp vòng theo quy tắc Hückel ($4n+2$) và chứa $(4n+2)$ electron pi, trong đó n là giá trị số nguyên từ 1 đến 5. Hợp chất thơm và do đó “nhóm thơm” có thể có một vòng hoặc nhiều vòng nếu không được chỉ rõ theo cách khác. Hợp chất thơm bao gồm “aren” (hợp chất thơm hydrocacbon) và “heteroaren”, còn được gọi là “hetaren” (hợp chất thơm chứa nguyên tử khác loại thu được từ aren bằng cách thay thế một hoặc nhiều nguyên tử cacbon metin ($-C=$) bằng nguyên tử khác loại có hóa trị hai hoặc ba, theo cách giữ nguyên đặc trưng hệ electron pi liên tục của hệ thơm và số electron pi ngoài mặt phẳng phù hợp với quy tắc Hückel ($4n + 2$)). Mặc dù hợp chất aren và hợp chất heteroaren cùng không chứa các thành viên của nhóm hợp chất thơm, hợp chất có cả nhóm aren và nhóm heteroaren thường được gọi là hợp chất heteroaren. Hợp chất thơm, aren, và heteroaren có thể có một vòng hoặc nhiều vòng, nếu không được chỉ rõ theo cách khác. Ví dụ về aren bao gồm, nhưng không chỉ giới hạn ở, benzen, naphtalen, và toluen, ngoài các chất khác. Ví dụ về heteroaren bao gồm, nhưng không chỉ giới hạn ở furan, pyridin, và metylpyridin, ngoài các chất khác. Khi được liên kết với kim loại chuyển tiếp, nhóm thơm có thể còn được mô tả theo thuật ngữ thông thường η^x (eta-x), trong đó x là số nguyên tương ứng với số nguyên tử được liên kết phối trí với kim loại chuyển tiếp hoặc được cho là liên kết phối trí với kim loại chuyển tiếp, ví dụ, theo quy tắc 18 electron. Như được bộc lộ trong bản mô tả này, thuật ngữ “được thế” có thể được sử dụng để mô tả nhóm thơm trong đó gốc không là hydro bất kỳ thay thế hydro trong nhóm này, và được dự định không làm giới hạn phạm vi sáng chế.

“Nhóm aryl” là nhóm thu được từ việc loại bỏ nguyên tử hydro ra khỏi nguyên tử cacbon vòng của hydrocacbon thơm của hợp chất aren. Một ví dụ về “nhóm aryl” là *ortho*-tolyl (*o*-tolyl), cấu trúc của nhóm này được thể hiện dưới đây.

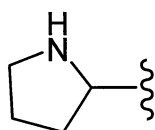


Tương tự, “nhóm arylen” dùng để chỉ nhóm được tạo ra bằng cách loại bỏ hai nguyên tử hydro (ít nhất một trong số chúng là của nguyên tử cacbon vòng của hydrocacbon thơm) ra khỏi aren. “Nhóm aren” dùng để chỉ nhóm thường được tạo ra

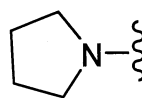
bằng cách loại bỏ một hoặc nhiều nguyên tử hydro (nếu cần đối với nhóm cụ thể và ít nhất một trong số chúng là nguyên tử cacbon vòng của hydrocacbon thơm) ra khỏi aren. Tuy nhiên, nếu một nhóm chứa cả gốc aren và heteroaren, việc xếp loại nhóm này tùy thuộc vào gốc cụ thể mà từ đó nguyên tử hydro được loại bỏ, tức là nhóm aren nếu nguyên tử hydro được loại bỏ là của nguyên tử cacbon của vòng hoặc hệ vòng hydrocacbon thơm và nhóm heteroaren nếu nguyên tử hydro được loại bỏ là của nguyên tử cacbon của dị vòng thơm hoặc hệ dị vòng thơm. Khi được liên kết với kim loại chuyển tiếp, “nhóm aryl,” “nhóm arylen,” và “nhóm aren” có thể còn được mô tả theo thuật ngữ thông thường η^x (eta-x), trong đó x là số nguyên tương ứng với số nguyên tử được liên kết phối trí với kim loại chuyển tiếp hoặc được cho là liên kết phối trí với kim loại chuyển tiếp, ví dụ, theo quy tắc 18 electron.

“Hợp chất dị vòng” là hợp chất vòng có ít nhất hai nguyên tố khác nhau làm nguyên tử của vòng. Ví dụ, hợp chất dị vòng có thể là vòng chứa cacbon và nitơ (ví dụ, tetrahydropyrol), cacbon và oxy (ví dụ, tetrahydrofuran), hoặc cacbon và lưu huỳnh (ví dụ, tetrahydrothiophen), ngoài các nguyên tố khác. Hợp chất dị vòng và nhóm dị vòng có thể là béo hoặc thơm. Khi được liên kết với kim loại chuyển tiếp, hợp chất dị vòng có thể còn được mô tả theo thuật ngữ thông thường η^x (eta-x), trong đó x là số nguyên tương ứng với số nguyên tử được liên kết phối trí với kim loại chuyển tiếp hoặc được cho là liên kết phối trí với kim loại chuyển tiếp, ví dụ, theo quy tắc 18 electron.

“Nhóm dị vòng” là nhóm có hóa trị một được tạo ra bằng cách loại bỏ nguyên tử hydro ra khỏi nguyên tử cacbon của dị vòng hoặc hệ dị vòng của hợp chất dị vòng. Bằng cách chỉ rõ nguyên tử hydro được loại bỏ ra khỏi nguyên tử cacbon của dị vòng hoặc hệ dị vòng, “nhóm dị vòng” được phân biệt với “nhóm xycloheteryl” trong đó nguyên tử hydro được loại bỏ ra khỏi nguyên tử khác loại của dị vòng hoặc hệ dị vòng. Ví dụ, nhóm pyrrolidin-2-yl được minh họa dưới đây là một ví dụ về “nhóm dị vòng” và nhóm pyrrolidin-1-yl được minh họa dưới đây là một ví dụ về “nhóm xycloheteryl”.



pyrrolidin-2-yl



pyrrolidin-1-yl

“nhóm dị vòng”

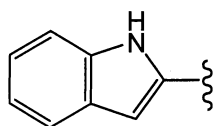
“nhóm xycloheteryl”

Tương tự, thuật ngữ “nhóm heteroxyclylen” hoặc đơn giản hơn là thuật ngữ “nhóm heteroxyclylen” dùng để chỉ nhóm được tạo ra bằng cách loại bỏ hai nguyên tử hydro ra khỏi hợp chất dị vòng, ít nhất một trong số chúng là của nguyên tử cacbon của dị vòng hoặc hệ dị vòng. Do đó, trong “nhóm heteroxyclylen”, ít nhất một nguyên tử hydro được loại bỏ ra khỏi nguyên tử cacbon của dị vòng hoặc hệ dị vòng, và nguyên tử hydro còn lại có thể được loại bỏ ra khỏi nguyên tử cacbon bất kỳ khác, bao gồm, nguyên tử cacbon của cùng một dị vòng hoặc hệ dị vòng, nguyên tử cacbon vòng của dị vòng hoặc hệ dị vòng khác nhau, hoặc nguyên tử cacbon không phải của vòng. “Nhóm dị vòng” dùng để chỉ nhóm thường được tạo ra bằng cách loại bỏ một hoặc nhiều nguyên tử hydro (nếu cần, đối với nhóm cụ thể và ít nhất một trong số chúng là nguyên tử cacbon của vòng dị vòng) ra khỏi hợp chất dị vòng. Khi được liên kết với kim loại chuyển tiếp, “nhóm heteroxyclyl”, “nhóm heteroxyclylen” và “nhóm dị vòng” có thể còn được mô tả theo thuật ngữ thông thường η^x (eta-x), trong đó x là số nguyên tương ứng với số nguyên tử được liên kết phối trí với kim loại chuyển tiếp hoặc được cho là liên kết phối trí với kim loại chuyển tiếp, ví dụ, theo quy tắc 18 electron.

“Nhóm xycloheteryl” là nhóm có hóa trị một được tạo ra bằng cách loại bỏ nguyên tử hydro ra khỏi nguyên tử khác loại của dị vòng hoặc hệ dị vòng của hợp chất dị vòng như được thể hiện trong sáng chế. Bằng cách chỉ rõ rằng nguyên tử hydro được loại bỏ ra khỏi nguyên tử khác loại của dị vòng hoặc hệ dị vòng và không phải được loại bỏ ra khỏi nguyên tử cacbon của vòng, “nhóm xycloheteryl” được phân biệt với “nhóm dị vòng” trong đó nguyên tử hydro được loại bỏ ra khỏi nguyên tử cacbon của dị vòng hoặc hệ dị vòng. Tương tự, thuật ngữ “nhóm xycloheterylen” dùng để chỉ nhóm được tạo ra bằng cách loại bỏ hai nguyên tử hydro ra khỏi hợp chất dị vòng, ít nhất một trong số chúng được loại bỏ ra khỏi nguyên tử khác loại của dị vòng hoặc hệ dị vòng của hợp chất dị vòng; nguyên tử hydro còn lại có thể được loại bỏ ra khỏi nguyên tử bất kỳ khác, ví dụ, nguyên tử cacbon trên vòng của dị vòng hoặc hệ dị vòng, nguyên tử khác loại khác của dị vòng hoặc hệ dị vòng hoặc nguyên tử không nằm trên vòng (nguyên tử cacbon hoặc nguyên tử khác loại). “Nhóm xyclohetero” dùng để chỉ nhóm thường được tạo ra bằng cách loại bỏ một hoặc nhiều nguyên tử hydro (nếu cần, đối với nhóm cụ thể và ít nhất một trong số chúng là của nguyên tử khác loại của dị

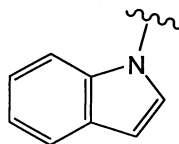
vòng hoặc hệ dị vòng) ra khỏi hợp chất dị vòng. Khi được liên kết với kim loại chuyển tiếp, “nhóm xycloheteryl,” “nhóm xycloheterylen,” và “nhóm xyclohetero” có thể còn được mô tả theo thuật ngữ thông thường η^x (eta-x), trong đó x là số nguyên tương ứng với số nguyên tử được liên kết phối trí với kim loại chuyển tiếp hoặc được cho là liên kết phối trí với kim loại chuyển tiếp, ví dụ, theo quy tắc 18 electron.

“Nhóm heteroaryl” thuộc loại “nhóm dị vòng” và là nhóm có hóa trị một được tạo ra bằng cách loại bỏ nguyên tử hydro ra khỏi nguyên tử cacbon của dị vòng thơm hoặc hệ dị vòng thơm của hợp chất heteroaren. Bằng cách chỉ rõ nguyên tử hydro được loại bỏ ra khỏi nguyên tử cacbon của vòng, “nhóm heteroaryl” được phân biệt với “nhóm arylheteryl,” trong đó nguyên tử hydro được loại bỏ ra khỏi nguyên tử khác loại của dị vòng thơm hoặc hệ dị vòng thơm. Ví dụ, nhóm indol-2-yl được minh họa dưới đây là một ví dụ về “nhóm heteroaryl,” và nhóm indol-1-yl được minh họa dưới đây là một ví dụ về “nhóm arylheteryl”.



indol-2-yl

“nhóm heteroaryl”



indol-1-yl

“nhóm arylheteryl”

Tương tự, thuật ngữ “nhóm heteroarylen” dùng để chỉ nhóm được tạo ra bằng cách loại bỏ hai nguyên tử hydro ra khỏi hợp chất heteroaren, ít nhất một trong số chúng là của nguyên tử cacbon của vòng hoặc hệ vòng heteroaren. Do đó, trong “nhóm heteroarylen,” ít nhất một nguyên tử hydro được loại bỏ ra khỏi nguyên tử cacbon của vòng hoặc hệ vòng heteroaren, và nguyên tử hydro còn lại có thể được loại bỏ ra khỏi nguyên tử cacbon bất kỳ khác, ví dụ, nguyên tử cacbon của vòng hoặc hệ vòng heteroaren, hoặc nguyên tử không thuộc vòng hoặc hệ vòng heteroaren. Thuật ngữ “nhóm heteroaren” dùng để chỉ nhóm thường được tạo ra bằng cách loại bỏ một hoặc nhiều nguyên tử hydro (nếu cần, đối với nhóm cụ thể và ít nhất một trong số chúng là nguyên tử cacbon của vòng hoặc hệ vòng heteroaren) ra khỏi hợp chất heteroaren. Khi được liên kết với kim loại chuyển tiếp, “nhóm heteroaryl,” “nhóm heteroarylen,” và “nhóm heteroaren” có thể còn được mô tả theo thuật ngữ thông thường η^x (eta-x), trong đó x là số nguyên tương ứng với số nguyên tử được liên kết phối trí với kim loại

chuyển tiếp hoặc được cho là liên kết phối trí với kim loại chuyển tiếp, ví dụ, theo quy tắc 18 electron.

“Nhóm arylheteryl” thuộc loại “nhóm xycloheteryl” và là nhóm có hóa trị một được tạo ra bằng cách loại bỏ nguyên tử hydro ra khỏi nguyên tử khác loại của dị vòng thơm hoặc hệ dị vòng thơm của hợp chất heteroaryl, như được thể hiện ở đây. Bằng cách chỉ rõ rằng nguyên tử hydro được loại bỏ ra khỏi nguyên tử khác loại của dị vòng thơm hoặc hệ dị vòng thơm và không phải được loại bỏ ra khỏi nguyên tử cacbon của dị vòng thơm hoặc hệ dị vòng thơm, “nhóm arylheteryl” được phân biệt với “nhóm heteroaryl” trong đó nguyên tử hydro được loại bỏ ra khỏi nguyên tử cacbon của dị vòng thơm hoặc hệ dị vòng thơm. Tương tự, thuật ngữ “nhóm arylheterylen” dùng để chỉ nhóm được tạo ra bằng cách loại bỏ hai nguyên tử hydro ra khỏi hợp chất heteroaryl, ít nhất một trong số chúng được loại bỏ ra khỏi nguyên tử khác loại của dị vòng thơm hoặc hệ dị vòng thơm của hợp chất heteroaryl; nguyên tử hydro còn lại có thể được loại bỏ ra khỏi nguyên tử bất kỳ khác, ví dụ, nguyên tử cacbon trên vòng của dị vòng thơm hoặc hệ dị vòng thơm, nguyên tử khác loại khác của dị vòng thơm hoặc hệ dị vòng thơm, hoặc nguyên tử không nằm trên vòng (carbon hoặc nguyên tử khác loại) ra khỏi hợp chất dị vòng thơm. Thuật ngữ “nhóm arylhetero” dùng để chỉ nhóm thường được tạo ra bằng cách loại bỏ một hoặc nhiều nguyên tử hydro (nếu cần, đối với nhóm cụ thể và ít nhất một trong số chúng là của dị vòng thơm hoặc hệ dị vòng thơm) ra khỏi nguyên tử khác loại của hợp chất heteroaren. Khi được liên kết với kim loại chuyển tiếp, “nhóm arylheteryl,” “nhóm arylheterylen,” và “nhóm arylhetero” có thể còn được mô tả theo thuật ngữ thông thường η^x (eta-x), trong đó x là số nguyên tương ứng với số nguyên tử được liên kết phối trí với kim loại chuyển tiếp hoặc được cho là liên kết phối trí với kim loại chuyển tiếp, ví dụ, theo quy tắc 18 electron.

“Nhóm organoheteryl” là nhóm có hóa trị một chứa carbon, do đó đây là nhóm hữu cơ, nhưng nhóm này có hóa trị tự do ở nguyên tử không phải nguyên tử cacbon. Do đó, nhóm organoheteryl và organyl là các nhóm bổ sung và loại trừ lẫn nhau. Nhóm organoheteryl có thể là nhóm vòng hoặc không vòng và/hoặc béo hoặc thơm, và do đó bao gồm “nhóm xycloheteryl” béo như pyrrolidin-1-yl, “nhóm arylheteryl” thơm như indol-1-yl, và nhóm không vòng như organylthio, trihydrocarbylilyl, và aryloxit, ngoài các nhóm khác. Tương tự, “nhóm organoheterylen” là nhóm có hóa trị hai chứa nguyên tử cacbon và ít nhất một nguyên tử khác loại có hai hóa trị tự do, ít nhất một

trong số chúng là của nguyên tử khác loại. “Nhóm organohetero” là nhóm thường chứa nguyên tử cacbon và ít nhất một nguyên tử khác loại có một hoặc nhiều hóa trị tự do (nếu cần, đối với nhóm cụ thể và ít nhất một trong số chúng là của nguyên tử khác loại) của hợp chất organohetero. Khi được liên kết với kim loại chuyển tiếp, “nhóm organoheteryl,” “nhóm organoheterilen,” hoặc “nhóm organohetero” có thể còn được mô tả theo thuật ngữ thông thường η^x (eta-x), trong đó x là số nguyên tương ứng với số nguyên tử được liên kết phối trí với kim loại chuyển tiếp hoặc được cho là liên kết phối trí với kim loại chuyển tiếp, ví dụ, theo quy tắc 18 electron.

“Nhóm aralkyl” là nhóm alkyl được thế aryl có hóa trị tự do ở nguyên tử cacbon không thơm, ví dụ, nhóm benzyl. Tương tự, “nhóm aralkylen” là nhóm alkylen được thế aryl có hai hóa trị tự do ở một nguyên tử cacbon không thơm duy nhất hoặc hóa trị tự do ở hai nguyên tử cacbon không thơm trong khi “nhóm aralkan” thường là nhóm alkan được thế aryl có một hoặc nhiều hóa trị tự do ở (các) nguyên tử cacbon không thơm. “Nhóm heteroaralkyl” là nhóm alkyl được thế heteroaryl có hóa trị tự do không ở nguyên tử cacbon của dị vòng thơm hoặc hệ dị vòng thơm. Tương tự, “nhóm heteroaralkylen” là nhóm alkylen được thế heteroaryl có hai hóa trị tự do ở một nguyên tử duy nhất không phải nguyên tử cacbon của dị vòng thơm hoặc hệ dị vòng thơm hoặc hóa trị tự do ở hai nguyên tử cacbon không phải của dị vòng thơm hoặc hệ dị vòng thơm trong khi “nhóm heteroaralkan” thường là nhóm alkan được thế aryl có một hoặc nhiều hóa trị tự do ở nguyên tử cacbon không của dị vòng thơm hoặc hệ dị vòng thơm.

Thuật ngữ “halogenua” có nghĩa thông thường của nó. Các ví dụ về halogenua bao gồm florua, clorua, bromua, và iodua.

“Nhóm oxy”, còn được gọi là “nhóm liên kết với oxy” là gốc hóa học có ít nhất một hóa trị tự do trên nguyên tử oxy. “Nhóm oxy” làm ví dụ bao gồm, nhưng không chỉ giới hạn ở, hydroxy (-OH), -OR, -OC(O)R, -OSiR₃, -OPR₂, -OAlR₂, -OSiR₂, -OGer₃, -OSnR₃, -OSO₂R, -OSO₂OR, -OBR₂, -OB(OR)₂, -OAlR₂, -OGaR₂, -OP(O)R₂, -OAs(O)R₂, -OAlR₂, và nhóm tương tự, kể cả các nhóm tương tự được thế của chúng. Theo một khía cạnh, mỗi nhóm R có thể độc lập là nhóm hydrocarbyl; ví dụ, mỗi nhóm R có thể độc lập là nhóm alkyl, xycloalkyl, aryl, aralkyl, alkyl được thế, xycloalkyl được thế, aryl được thế, hoặc aralkyl được thế. Trong “nhóm oxy” có nhiều

hơn một hóa trị tự do, các hóa trị tự do còn lại có thể nằm trên (các) nguyên tử không phải oxy, ví dụ, cacbon, theo quy tắc về cấu trúc và liên kết hóa học.

“Nhóm lưu huỳnh” còn được gọi là “nhóm liên kết với lưu huỳnh” là gốc hóa học có ít nhất một hóa trị tự do trên nguyên tử lưu huỳnh. “(Các) nhóm lưu huỳnh” làm ví dụ bao gồm, nhưng không chỉ giới hạn ở, -SH, -SR, -SCN, -S(O)R, -SO₂R, và nhóm tương tự, kể cả các nhóm tương tự được thế của chúng. Theo một khía cạnh, mỗi nhóm R có thể độc lập là nhóm hydrocarbyl; ví dụ, mỗi nhóm R có thể độc lập là nhóm alkyl, xycloalkyl, aryl, aralkyl, alkyl được thế, xycloalkyl được thế, aryl được thế, hoặc aralkyl được thế. Trong “nhóm lưu huỳnh” có nhiều hơn một hóa trị tự do, các hóa trị tự do còn lại có thể nằm trên (các) nguyên tử không phải lưu huỳnh, ví dụ, cacbon, theo quy tắc về cấu trúc và liên kết hóa học.

“Nhóm nitơ” còn được gọi là “nhóm liên kết với nitơ” là gốc hóa học có ít nhất một hóa trị tự do trên nguyên tử nitơ. “Các nhóm nitơ” làm ví dụ bao gồm, nhưng không chỉ giới hạn ở, nhóm aminyl (-NH₂), nhóm aminyl được thế ở N (-NRH), nhóm aminyl được thế hai lần ở N,N (-NR₂), nhóm hydrazido (-NHNH₂), nhóm hydrazido được thế ở N' (-NRNH₂), nhóm hydrazido được thế ở N² (-NHNRH), nhóm hydrazido được thế hai lần ở N²,N² (-NHNR₂), nhóm nitro (-NO₂), nhóm azido (-N₃), nhóm amidyl (-NHC(O)R), nhóm amido được thế ở N (-NRC(O)R), và nhóm tương tự, kể cả các nhóm tương tự được thế của chúng. Theo một khía cạnh, mỗi nhóm R có thể độc lập là nhóm hydrocarbyl; ví dụ, mỗi nhóm R có thể độc lập là nhóm alkyl, xycloalkyl, aryl, aralkyl, alkyl được thế, xycloalkyl được thế, aryl được thế, hoặc aralkyl được thế. Trong “nhóm nitơ” có nhiều hơn một hóa trị tự do, các hóa trị tự do còn lại có thể nằm trên (các) nguyên tử bất kỳ trong nhóm theo quy tắc về cấu trúc và liên kết hóa học, kể cả các nguyên tử không phải nitơ, ví dụ, cacbon.

“Nhóm phospho, còn được gọi là “nhóm liên kết với phospho” là gốc hóa học có ít nhất một hóa trị tự do trên nguyên tử phospho. “Nhóm phospho” làm ví dụ bao gồm, nhưng không chỉ giới hạn ở, -PH₂, -PHR, -PR₂, -P(O)R₂, -P(OR)₂, -P(O)(OR)₂, -P(NR₂)₂, -P(O)(NR₂)₂, và nhóm tương tự, kể cả các nhóm tương tự được thế của chúng. Theo một khía cạnh, mỗi nhóm R có thể độc lập là nhóm hydrocarbyl; ví dụ, mỗi nhóm R có thể độc lập là nhóm alkyl, xycloalkyl, aryl, aralkyl, alkyl được thế, xycloalkyl được thế, aryl được thế, hoặc aralkyl được thế. Trong “nhóm phospho” có

nhiều hơn một hóa trị tự do, các hóa trị tự do còn lại có thể nằm trên (các) nguyên tử bất kỳ trong nhóm theo quy tắc về cấu trúc và liên kết hóa học, kể cả các nguyên tử không là phospho, ví dụ, cacbon.

“Nhóm arsen” còn được gọi là “nhóm liên kết với arsen” là gốc hóa học có hóa trị tự do trên nguyên tử arsen. “Nhóm arsen” làm ví dụ bao gồm, $-\text{AsH}_2$, $-\text{AsHR}$, $-\text{AsR}_2$, $-\text{As(O)R}_2$, $-\text{As(OR)}_2$, $-\text{As(O)(OR)}_2$, và nhóm tương tự, kể cả các nhóm tương tự được thế của chúng. Theo một khía cạnh, mỗi nhóm R có thể độc lập là nhóm hydrocarbyl; ví dụ, mỗi nhóm R có thể độc lập là nhóm alkyl, xycloalkyl, aryl, aralkyl, alkyl được thế, xycloalkyl được thế, aryl được thế, hoặc aralkyl được thế. Trong “nhóm arsen” có nhiều hơn một hóa trị tự do, các hóa trị tự do còn lại có thể nằm trên (các) nguyên tử bất kỳ trong nhóm theo quy tắc về cấu trúc và liên kết hóa học, kể cả các nguyên tử không là phospho, ví dụ, cacbon.

“Nhóm silic” còn được gọi là “nhóm liên kết với silic,” thường là gốc hóa học có ít nhất một hóa trị tự do trên nguyên tử silic. “Nhóm silyl” là gốc hóa học có ít nhất một hóa trị tự do trên nguyên tử silic. “Nhóm silyl” làm ví dụ bao gồm, nhưng không chỉ giới hạn ở, $-\text{SiH}_3$, $-\text{SiH}_2\text{R}$, $-\text{SiHR}_2$, $-\text{SiR}_3$, $-\text{SiR}_2\text{OR}$, $-\text{SiR(OR)}_2$, $-\text{Si(OR)}_3$ và nhóm tương tự. Theo một khía cạnh, mỗi nhóm R có thể độc lập là nhóm hydrocarbyl; ví dụ, mỗi nhóm R có thể độc lập là nhóm alkyl, xycloalkyl, aryl, aralkyl, alkyl được thế, xycloalkyl được thế, aryl được thế, hoặc aralkyl được thế. Trong “nhóm silic” có nhiều hơn một hóa trị tự do, các hóa trị tự do còn lại có thể nằm trên (các) nguyên tử bất kỳ trong nhóm theo quy tắc về cấu trúc và liên kết hóa học, kể cả các nguyên tử không là silic, ví dụ, cacbon.

“Nhóm germani,” còn được gọi là hoặc “nhóm liên kết với germani,” thường là gốc hóa học có ít nhất một hóa trị tự do trên nguyên tử germani. “Nhóm germanyl” là gốc hóa học có ít nhất một hóa trị tự do trên nguyên tử germani. “Nhóm germanyl” làm ví dụ bao gồm, nhưng không chỉ giới hạn ở, $-\text{GeH}_3$, $-\text{GeH}_2\text{R}$, $-\text{GeHR}_2$, $-\text{GeR}_3$, $-\text{GeR}_2\text{OR}$, $-\text{GeR(OR)}_2$, $-\text{Ge(OR)}_3$ và nhóm tương tự. Theo một khía cạnh, mỗi nhóm R có thể độc lập là nhóm hydrocarbyl; ví dụ, mỗi nhóm R có thể độc lập là nhóm alkyl, xycloalkyl, aryl, aralkyl, alkyl được thế, xycloalkyl được thế, aryl được thế, hoặc aralkyl được thế. Trong “nhóm germani” có nhiều hơn một hóa trị tự do, các hóa trị tự do còn lại có thể nằm trên (các) nguyên tử bất kỳ trong nhóm theo quy tắc về cấu trúc

và liên kết hóa học, kể cả các nguyên tử không là germani, ví dụ, cacbon.

“Nhóm thiếc” còn được gọi là “nhóm liên kết với thiếc,” thường là gốc hóa học có ít nhất một hóa trị tự do trên nguyên tử thiếc. “Nhóm stanyl” là gốc hóa học có một hóa trị tự do trên nguyên tử thiếc. “Nhóm stanyl” làm ví dụ bao gồm, nhưng không chỉ giới hạn ở, $-\text{SnH}_3$, $-\text{SnH}_2\text{R}$, $-\text{SnHR}_2$, $-\text{SnR}_3$ và $-\text{Sn}(\text{OR})_3$. Theo một khía cạnh, mỗi nhóm R có thể độc lập là nhóm hydrocarbyl; ví dụ, mỗi nhóm R có thể độc lập là nhóm alkyl, xycloalkyl, aryl, aralkyl, alkyl được thế, xycloalkyl được thế, aryl được thế, hoặc aralkyl được thế. Trong “nhóm thiếc” có nhiều hơn một hóa trị tự do, các hóa trị tự do còn lại có thể nằm trên (các) nguyên tử bất kỳ trong nhóm theo quy tắc về cấu trúc và liên kết hóa học, kể cả các nguyên tử không là thiếc, ví dụ, cacbon.

“Nhóm chì” còn được gọi là “nhóm liên kết với chì” là gốc hóa học có hóa trị tự do trên nguyên tử chì. “Nhóm chì” làm ví dụ bao gồm, nhưng không chỉ giới hạn ở, $-\text{PbH}_3$, $-\text{PbH}_2\text{R}$, $-\text{PbHR}_2$, $-\text{PbR}_3$ và $-\text{Pb}(\text{OR})_3$. Theo một khía cạnh, mỗi nhóm R có thể độc lập là nhóm hydrocarbyl; ví dụ, mỗi nhóm R có thể độc lập là nhóm alkyl, xycloalkyl, aryl, aralkyl, alkyl được thế, xycloalkyl được thế, aryl được thế, hoặc aralkyl được thế. Trong “nhóm chì” có nhiều hơn một hóa trị tự do, các hóa trị tự do còn lại có thể nằm trên (các) nguyên tử bất kỳ trong nhóm theo quy tắc về cấu trúc và liên kết hóa học, kể cả các nguyên tử không là chì, ví dụ, cacbon.

“Nhóm bo” còn được gọi là “nhóm liên kết với bo” thường là gốc hóa học có ít nhất một hóa trị tự do trên nguyên tử bo. “Nhóm boronyl” là gốc hóa học có ít nhất một hóa trị tự do trên nguyên tử bo. “Nhóm boronyl” làm ví dụ bao gồm, nhưng không chỉ giới hạn ở, $-\text{BH}_2$, $-\text{BHR}$, $-\text{BR}_2$, $-\text{BR}(\text{OR})$, $-\text{B}(\text{OR})_2$, và nhóm tương tự. Theo một khía cạnh, mỗi nhóm R có thể độc lập là nhóm hydrocarbyl; ví dụ, mỗi nhóm R có thể độc lập là nhóm alkyl, xycloalkyl, aryl, aralkyl, alkyl được thế, xycloalkyl được thế, aryl được thế, hoặc aralkyl được thế. Trong “nhóm bo” có nhiều hơn một hóa trị tự do, các hóa trị tự do còn lại có thể nằm trên (các) nguyên tử bất kỳ trong nhóm theo quy tắc về cấu trúc và liên kết hóa học, kể cả các nguyên tử không là bo, ví dụ, cacbon.

“Nhóm nhôm” còn được gọi là “nhóm liên kết với nhôm” thường là gốc hóa học có ít nhất một hóa trị tự do trên nguyên tử nhôm. “Nhóm aluminyl” là gốc hóa học có ít nhất một hóa trị tự do trên nguyên tử nhôm. “Nhóm aluminyl” làm ví dụ bao gồm, nhưng không chỉ giới hạn ở, $-\text{AlH}_2$, $-\text{AlHR}$, $-\text{AlR}_2$, $-\text{AlR}(\text{OR})$, $-\text{Al}(\text{OR})_2$, và

nhóm tương tự. Theo một khía cạnh, mỗi nhóm R có thể độc lập là nhóm hydrocarbyl; ví dụ, mỗi nhóm R có thể độc lập là nhóm alkyl, xycloalkyl, aryl, aralkyl, alkyl được thế, xycloalkyl được thế, aryl được thế, hoặc aralkyl được thế. Trong “nhóm nhôm” có nhiều hơn một hóa trị tự do, các hóa trị tự do còn lại có thể nằm trên (các) nguyên tử bất kỳ trong nhóm theo quy tắc về cấu trúc và liên kết hóa học, kể cả các nguyên tử không là nhôm, ví dụ, cacbon.

Đối với mỗi nhóm cụ thể trong đó hóa trị tự do nằm trên nguyên tử khác loại (nguyên tử không phải cacbon), như “nhóm oxy,” “nhóm lưu huỳnh,” “nhóm nitơ,” “nhóm phospho,” “nhóm arsen,” “nhóm silic,” “nhóm germani,” “nhóm thiếc,” “nhóm chì,” “nhóm bo,” “nhóm nhôm,” và nhóm tương tự, các nhóm này có thể bao gồm gốc “R” thông thường. Trong mỗi trường hợp, R có thể độc lập là nhóm organyl; theo cách khác, nhóm hydrocarbyl; theo cách khác, nhóm alkyl; theo cách khác, nhóm béo; theo cách khác, nhóm xycloalkyl; theo cách khác, nhóm alkenyl; theo cách khác, nhóm alkynyl; theo cách khác, nhóm thơm; theo cách khác, nhóm aryl; theo cách khác, nhóm dị vòng; theo cách khác, nhóm xycloheteryl; theo cách khác, nhóm heteroaryl; theo cách khác, nhóm arylheteryl; theo cách khác, nhóm organoheteryl; theo cách khác, nhóm aralkyl; theo cách khác, nhóm heteroaralkyl hoặc theo cách khác, halogenua.

Thuật ngữ “hợp chất hữu cơ-nhôm” được sử dụng để mô tả hợp chất bất kỳ chứa liên kết nhôm-cacbon. Do đó, hợp chất hữu cơ-nhôm bao gồm, nhưng không chỉ giới hạn ở, hợp chất hydrocarbyl nhôm như trihydrocarbyl-, dihydrocarbyl-, hoặc hợp chất monohydrocarbyl nhôm; hợp chất hydrocarbyl nhôm halogenua; hợp chất hydrocarbylalumoxan; và hợp chất aluminat chứa liên kết nhôm-organyl muối như tetrakis(*p*-tolyl)aluminat.

“Hiện tượng kết tinh có thể thấy rõ” được xác định bằng cách phân tích nhiệt sử dụng nhiệt lượng kế quét vi phân (differential scanning calorimeter: DSC). “Hiện tượng kết tinh có thể thấy rõ” được xác định bằng cách sử dụng ASTM D 3418, bằng cách sử dụng hai lần quét gia nhiệt với một lần quét làm lạnh xen giữa. Khi nói tới thuật ngữ kết tinh, thuật ngữ này còn bao gồm hiện tượng nóng chảy quan sát được khi xác định bằng cách phân tích nhiệt bằng cách sử dụng nhiệt lượng kế quét vi phân (DSC). Mẫu được làm lạnh tới - 60°C và giữ ở -60°C trong 5 phút trước mỗi lần quét gia nhiệt. Lần quét gia nhiệt thứ nhất và lần quét gia nhiệt thứ hai được thực hiện với

tốc độ gia nhiệt 10°C/phút từ -60°C đến 100°C. Lần quét làm lạnh xen giữa được thực hiện với tốc độ 10°C/phút từ 100°C đến -60°C. Phân tích DSC được thực hiện bằng cách sử dụng tốc độ dòng nitơ 20 cc/phút (cm³/phút). Nhiệt độ kết tinh (nếu có) hoặc nhiệt độ nóng chảy (nếu có), và entalpy kết tinh (nếu có) hoặc entalpy nóng chảy (nếu có) được lấy làm nhiệt độ và entalpy của trạng thái chuyển tiếp kết tinh theo DSC hoặc trạng thái nóng chảy theo DSC, tương ứng, của lần quét gia nhiệt thứ hai và có thể được thể hiện bằng hiện tượng thu nhiệt hoặc tỏa nhiệt.

Thuật ngữ “superaxit dạng rắn” hoặc “SSA” là đồng nghĩa với oxit dạng rắn được xử lý hóa học bằng anion hút electron, hoặc “oxit dạng rắn được xử lý hóa học.” SSA là chất hoạt hóa dạng rắn có nguồn gốc từ oxit dạng rắn được xử lý hóa học bằng anion hút electron được đề xuất ở đây.

Thuật ngữ “gần như tinh khiết quang” được sử dụng để chỉ hỗn hợp chất đồng phân đối ảnh có lượng dư chất đồng phân đối ảnh lớn hơn hoặc bằng 99,5%.

Thuật ngữ dùng để chỉ “gần như không chứa” một alpha olefin cụ thể trong mẫu chứa alpha olefin khác, ví dụ, việc nói rằng PAO có nguồn gốc từ mẫu alpha olefin trong đó monome alpha olefin “hầu như không chứa 1-dexen,” được dự định để chỉ mẫu monome alpha olefin cần quan tâm có bán trên thị trường. Ví dụ, mẫu 1-octen và 1-dodexen có bán trên thị trường có thể bao gồm tới khoảng 1% trọng lượng 1-dexen, và mẫu 1-octen và 1-dodexen này được bao hàm với đặc trưng là mẫu này “không bao gồm lượng đáng kể 1-dexen” hoặc “hầu như không chứa 1-dexen” và thuật ngữ tương tự. Do đó, monome alpha olefin không chứa 1-dexen được sử dụng trong bản mô tả này có thể bao gồm một lượng 1-dexen được phát hiện trong alpha olefin có bán trên thị trường.

Thuật ngữ “tiếp xúc trước” được sử dụng trong bản mô tả này để mô tả hỗn hợp thứ nhất gồm các thành phần xúc tác được tiếp xúc trong khoảng thời gian thứ nhất trước khi hỗn hợp thứ nhất được sử dụng để tạo ra hỗn hợp “tiếp xúc sau” hoặc hỗn hợp thứ hai gồm các thành phần xúc tác được tiếp xúc trong khoảng thời gian thứ hai. Ví dụ, hỗn hợp tiếp xúc trước có thể mô tả hỗn hợp gồm hợp chất metaloxen, monome olefin, và hợp chất hữu cơ-nhôm, trước khi hỗn hợp này được tiếp xúc với oxit dạng rắn được xử lý hóa học và tùy ý hợp chất hữu cơ-nhôm bổ sung. Do đó, thuật ngữ “tiếp xúc trước” mô tả các thành phần được sử dụng tiếp xúc với nhau, nhưng trước khi tiếp

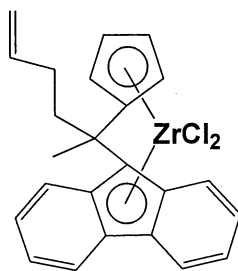
xúc với các thành phần bổ sung trong hỗn hợp thứ hai, tiếp xúc sau. Do đó, đôi khi sáng chế có thể phân biệt giữa thành phần được sử dụng để điều chế hỗn hợp tiếp xúc trước và thành phần sau khi hỗn hợp này đã được tạo ra. Ví dụ, theo sáng chế, hợp chất hữu cơ-nhôm đã tiếp xúc trước, khi nó được tiếp xúc với metaloxen và monome olefin, có thể được phản ứng để tạo ra ít nhất một hợp chất, công thức, hoặc cấu trúc khác với hợp chất hữu cơ-nhôm nhất định được sử dụng để điều chế hỗn hợp tiếp xúc trước. Trong trường hợp này, hợp chất hữu cơ-nhôm được tiếp xúc trước hoặc thành phần được mô tả chứa hợp chất hữu cơ-nhôm được sử dụng để điều chế hỗn hợp tiếp xúc trước.

Tương tự, thuật ngữ “tiếp xúc sau” được sử dụng trong bản mô tả này để mô tả hỗn hợp thứ hai gồm các thành phần xúc tác được tiếp xúc trong khoảng thời gian thứ hai, và một thành phần trong số chúng là hỗn hợp “tiếp xúc trước” hoặc hỗn hợp thứ nhất gồm các thành phần xúc tác được tiếp xúc trong khoảng thời gian thứ nhất. Ví dụ, hỗn hợp tiếp xúc sau có thể mô tả hỗn hợp gồm hợp chất metaloxen thứ nhất, hợp chất metaloxen thứ nhất, monome olefin, hợp chất hữu cơ-nhôm, và oxit dạng rắn được xử lý hóa học, được tạo ra từ việc cho hỗn hợp tiếp xúc trước chứa một phần các thành phần này tiếp xúc với các thành phần bổ sung bất kỳ được thêm vào để tạo ra hỗn hợp tiếp xúc sau. Trong ví dụ này, thành phần bổ sung được thêm vào để tạo ra hỗn hợp tiếp xúc sau là oxit dạng rắn được xử lý hóa học, và tùy ý có thể bao gồm hợp chất hữu cơ-nhôm giống hoặc khác với hợp chất hữu cơ-nhôm được sử dụng để điều chế hỗn hợp tiếp xúc trước, như được mô tả trong bản mô tả này. Do đó, đôi khi sáng chế cũng có thể phân biệt giữa thành phần được sử dụng để điều chế hỗn hợp tiếp xúc sau và thành phần này sau khi hỗn hợp đã được tạo ra.

Thuật ngữ “metaloxen” như được sử dụng trong bản mô tả này là hợp chất phối trí hữu cơ-kim loại giữa hợp chất kim loại và ít nhất một phối tử $\eta^{x \geq 5}$ có liên kết pi; ví dụ, $\eta^{x \geq 5}$ -hydrocarbyl, $\eta^{x \geq 5}$ -aren, $\eta^{x \geq 5}$ -heteroaren, $\eta^{x \geq 5}$ -dị vòng, $\eta^{x \geq 5}$ -organyl, hoặc nhóm hoặc gốc $\eta^{x \geq 5}$ -organoheteryl là nhóm thiom (ví dụ, η^5 -xycloalkadienyl) hoặc liên hợp với $(4n + 2)$ electron pi, trong đó n là giá trị số nguyên, thường bằng 1 hoặc 2 (ví dụ, η^5 -alkadienyl). Theo khía cạnh này, định nghĩa của IUPAC (IUPAC Compendium of Chemical Terminology, 2nd Edition (1997)) về “metaloxen” giới hạn hơn nhiều so với định nghĩa “metaloxen” được sử dụng ở đây; do đó, định nghĩa IUPAC về

“metalozen” không được sử dụng ở đây. Trong bản mô tả này, phối tử nêu trên có thể được gọi là phối tử nhóm I, và các hợp chất chứa ít nhất một phối tử này được gọi là metaloxen. Ví dụ, metaloxen có thể chứa ít nhất một phối tử $\eta^{\geq 5}$ có liên kết pi; ví dụ, phối tử loại η^5 -xycloalkadienyl hoặc η^5 -alkadienyl, ví dụ, phối tử η^5 -xyclopentadienyl, η^5 -indenyl, η^5 -floreanyl, η^5 -alkadienyl-, η^6 -boratabenzen, và phối tử tương tự. Do đó, metaloxen được chỉ rõ là chứa gốc $\eta^{\geq 5}$ theo thuật ngữ thông thường η^x (eta-x), trong đó x là số nguyên tương ứng với số nguyên tử được liên kết phối trí với kim loại chuyển tiếp hoặc được cho là liên kết phối trí với kim loại chuyển tiếp, ví dụ, theo quy tắc 18 electron.

Thuật ngữ “nhóm liên kết” được sử dụng để mô tả toàn bộ gốc hóa học liên kết hai nhóm (ví dụ, liên kết phối tử nhóm I với một phối tử khác trong phân tử, hoặc phối tử nhóm I khác hoặc phối tử nhóm II). “Nhóm liên kết” bao gồm “liên kết cầu” có “(các) nguyên tử liên kết cầu”. Liên kết cầu bao gồm số lượng nhỏ nhất các nguyên tử kề nhau (nguyên tử liên kết cầu) cần thiết để liên kết giữa các phối tử được liên kết (ví dụ, phối tử nhóm I và phối tử còn lại mà nó liên kết với). Nói chung, nhóm liên kết và liên kết cầu có thể chứa nguyên tử bất kỳ; ví dụ, liên kết cầu có thể chứa C, Si, Ge, Sn, hoặc hỗn hợp bất kỳ của chúng. Nhóm liên kết có thể là no, hoặc nhóm liên kết có thể là không no. Ví dụ, trong metaloxen được minh họa ở đây, “nhóm liên kết” là toàn bộ nhóm hydrocarbylen $C(CH_3)CH_2CH_2CH=CH_2$, trong khi “liên kết cầu” hoặc “nguyên tử liên kết cầu” là nguyên tử cacbon duy nhất. Do đó, chất xúc tác metaloxen được gọi là “ràng buộc hình học” thuộc phạm vi metaloxen của hỗn hợp xúc tác theo sáng chế.



Trong một số trường hợp, có thể đề cập đến “nhóm vòng.” Nếu không được chỉ rõ theo cách khác, “nhóm vòng” bao gồm nhóm thơm và nhóm béo có cấu trúc vòng, kể cả nhóm đồng vòng và nhóm dị vòng.

Oligome alpha olefin, sản phẩm oligome nặng, và polyalphaolefin- cấu trúc và đặc

tính

“Oligome alpha olefin” hoặc “sản phẩm oligome” là thuật ngữ được sử dụng để chỉ hỗn hợp dime alpha olefin, trime alpha olefin, và oligome alpha olefin cao tạo ra trong phản ứng oligome hóa. “Sản phẩm oligome nặng” dùng để chỉ sản phẩm tạo ra từ việc loại bỏ một phần oligome alpha olefin thấp và/hoặc monome ra khỏi sản phẩm oligome trong dòng đi ra từ thiết bị phản ứng oligome hóa. Ví dụ, “sản phẩm oligome nặng” có thể dùng để chỉ hỗn hợp sau khi tách gồm dime alpha olefin, trime alpha olefin, và oligome alpha olefin cao. “Polyalphaolefin” (PAO) là thuật ngữ được sử dụng để mô tả oligome alpha olefin được hydro hóa (ví dụ, sản phẩm olefin nặng được hydro hóa) hoặc gần như no. Do đó, polyalphaolefin (PAO) là hỗn hợp gồm oligome alpha olefin được hydro hóa (hoặc theo cách khác, gần như no) chứa các đơn vị có nguồn gốc từ monome alpha olefin. Oligome alpha olefin và polyalphaolefin (PAO) được điều chế theo sáng chế có thể có các đặc tính có thể được chọn trong một khoảng giá trị có thể có. Các đặc tính này có thể được thực hiện bằng cách sử dụng phương pháp và hệ chất xúc tác được bộc lộ ở đây. PAO được điều chế theo sáng chế cũng có thể có các đặc tính phụ thuộc vào lượng (ví dụ, tỷ lệ % trọng lượng) của monome alpha olefin được hydro hóa, dime alpha olefin được hydro hóa, trime được hydro hóa, và/hoặc oligome cao được hydro hóa có mặt trong PAO (hoặc theo cách khác, lượng monome alpha olefin no, dime alpha olefin no, trime no, và/hoặc oligome cao no). Do đó, thuật ngữ “được hydro hóa” như được áp dụng với monome alpha olefin, dime, và oligome cao được sử dụng ở đây dùng để chỉ oligome điều chế được (sản phẩm oligome hoặc sản phẩm oligome nặng) được hydro hóa, hoặc dưới dạng bước riêng biệt hoặc trong bước oligome hóa tới mức độ nhất định.

Nói chung, oligome alpha olefin dùng để chỉ hỗn hợp các oligome alpha olefin bao gồm dime, trime, và/hoặc oligome olefin cao (chứa 4 hoặc nhiều hơn 4 đơn vị monome alpha olefin). Monome alpha olefin được sử dụng để tạo ra dime, trime, và oligome olefin cao trong phản ứng oligome hóa, có thể là giống nhau hoặc khác nhau. Dòng đi ra từ thiết bị phản ứng oligome hóa có thể bao gồm sản phẩm oligome alpha olefin, monome alpha olefin không oligome hóa, dung môi, và/hoặc thành phần của hệ chất xúc tác, ngoài các thành phần khác. Theo một khía cạnh, dòng đi ra từ thiết bị phản ứng có thể được xử lý để tạo ra sản phẩm oligome alpha olefin có thể bao gồm toàn bộ hoặc một phần sản phẩm oligome alpha olefin và/hoặc monome alpha olefin

được sử dụng để tạo ra oligome alpha olefin. Tùy thuộc vào phương pháp được sử dụng để xử lý dòng đi ra từ thiết bị phản ứng, oligome alpha olefin có thể chứa monome alpha olefin dư (thường là dưới 1% trọng lượng - các lượng khác được mô tả ở đây và có thể được sử dụng nhưng không chỉ giới hạn ở đó). Theo khía cạnh này, oligome alpha olefin có thể được mô tả bằng (các) monome alpha olefin được sử dụng để tạo ra oligome, lượng các đơn vị monome alpha olefin được phát hiện trong oligome alpha olefin, lượng dime trong oligome alpha olefin, lượng trime được phát hiện trong oligome alpha olefin, lượng oligome cao được phát hiện trong oligome alpha olefin, Mw, Mn, độ nhớt động ở 100°C, độ nhớt động ở 40°C, chỉ số độ nhớt, điểm rót, điểm cháy, nhiệt độ bốc cháy, chỉ số bay hơi Noack, sai số trong liên kết cộng đầu với đuôi. Các đặc điểm này của oligome alpha olefin được mô tả độc lập ở đây và oligome alpha olefin có thể được mô tả bằng cách sử dụng hỗn hợp bất kỳ của monome alpha olefin được sử dụng để tạo ra oligome được mô tả ở đây, lượng các đơn vị monome alpha olefin được phát hiện trong oligome alpha olefin được mô tả ở đây, lượng dime trong oligome alpha olefin được mô tả ở đây, lượng trime được phát hiện trong oligome alpha olefin được mô tả ở đây, lượng oligome cao được phát hiện trong oligome alpha olefin được mô tả ở đây, Mw được mô tả ở đây, Mn được mô tả ở đây, độ nhớt động ở 100°C được mô tả ở đây, chỉ số độ nhớt được mô tả ở đây, điểm rót được mô tả ở đây, điểm cháy được mô tả ở đây, nhiệt độ bốc cháy được mô tả ở đây, chỉ số bay hơi Noack được mô tả ở đây, và hoặc sai số trong liên kết cộng đầu với đuôi được mô tả ở đây. Nói chung, các đặc điểm này cũng có thể áp dụng, trong tổ hợp bất kỳ và nhưng giới hạn, cho phân đoạn bất kỳ của oligome alpha olefin được mô tả ở đây (ví dụ, sản phẩm oligome nặng). Theo một số phương án, oligome alpha olefin có thể được tách (ví dụ, bằng cách chưng cất) để tạo ra sản phẩm oligome nặng. Tùy thuộc vào phương pháp tách được sử dụng, phương pháp tách này có thể loại bỏ ít nhất một phần monome alpha olefin, dime, và/hoặc trime. Ngoài ra, tùy thuộc vào phương pháp tách được sử dụng, phương pháp phân đoạn có thể không loại bỏ hết monome alpha olefin và sản phẩm oligome nặng này có thể chứa monome alpha olefin. Theo một số phương án, hàm lượng monome alpha olefin dư của oligome alpha olefin tách ra có thể là giá trị bất kỳ được đưa ra ở đây.

Theo một phương án không giới hạn phạm vi sáng chế, hỗn hợp gồm monome alpha olefin và sản phẩm oligome alpha olefin đi ra khỏi thiết bị phản ứng (tức là dòng

đi ra từ thiết bị phản ứng) có thể chứa: a) dưới 15% trọng lượng monome alpha olefin, b) dưới 20% trọng lượng dime, và c) trên 60% trọng lượng oligome cao. Theo một phương án khác, hỗn hợp gồm monome alpha olefin và sản phẩm oligome alpha olefin đi ra khỏi thiết bị phản ứng (tức là dòng đi ra từ thiết bị phản ứng) có thể chứa: a) dưới 12,5% trọng lượng monome alpha olefin, b) dưới 15% trọng lượng dime, và c) trên 65% trọng lượng oligome cao. Theo một số phương án không làm giới hạn phạm vi sáng chế, sản phẩm oligome alpha olefin có thể được tạo ra từ monome alpha olefin chủ yếu bao gồm alpha olefin mạch thẳng có 8 nguyên tử cacbon. Các phương án khác dễ dàng được thấy rõ từ bản mô tả này.

Theo một phương án không giới hạn phạm vi sáng chế, sản phẩm oligome có thể chứa a) dưới 20% trọng lượng dime, và b) trên 70% trọng lượng oligome cao và có i) độ nhớt động ở 100°C bằng ít nhất 15 mm²/s (15 cSt), và ii) chỉ số độ nhớt lớn hơn 150. Theo một phương án không làm giới hạn phạm vi sáng chế, sản phẩm oligome có thể được tạo ra từ monome alpha olefin chủ yếu bao gồm alpha olefin mạch thẳng có 8 nguyên tử cacbon và có thể chứa a) dưới 15% trọng lượng dime, và b) trên 75% trọng lượng oligome cao; và có i) độ nhớt động ở 100°C nằm trong khoảng từ 30 mm²/s đến 50 mm²/s (từ 30 cSt đến 50 cSt), và ii) chỉ số độ nhớt nằm trong khoảng từ 150 đến 260. Theo một phương án không làm giới hạn phạm vi sáng chế, sản phẩm oligome có thể được tạo ra từ monome alpha olefin chủ yếu bao gồm alpha olefin mạch thẳng có 8 nguyên tử cacbon và có thể chứa a) dưới 12% trọng lượng dime, và b) trên 75% trọng lượng oligome cao; và có i) độ nhớt động ở 100°C nằm trong khoảng từ 80 mm²/s đến 140 mm²/s (từ 80 cSt đến 140 cSt), và ii) chỉ số độ nhớt nằm trong khoảng từ 150 đến 260. Các phương án khác dễ dàng được thấy rõ từ bản mô tả này.

Theo một phương án không giới hạn phạm vi sáng chế, sản phẩm oligome thu được bằng cách tách dòng đi ra từ thiết bị phản ứng (ví dụ, sản phẩm oligome nặng, hoặc sản phẩm bất kỳ khác) có thể có hàm lượng monome alpha olefin dư nhỏ hơn 1% trọng lượng; theo cách khác, nhỏ hơn 0,8% trọng lượng; theo cách khác, nhỏ hơn 0,6% trọng lượng; theo cách khác, nhỏ hơn 0,5% trọng lượng; theo cách khác, nhỏ hơn 0,4% trọng lượng; theo cách khác, nhỏ hơn 0,3% trọng lượng; theo cách khác, nhỏ hơn 0,2% trọng lượng hoặc theo cách khác, nhỏ hơn 0,1% trọng lượng.

Theo một phương án không giới hạn phạm vi sáng chế, sản phẩm oligome nặng

có thể chứa: a) dưới 1% trọng lượng monome alpha olefin, b) dưới 3% trọng lượng dime, và c) trên 80% trọng lượng oligome cao; và có i) độ nhớt động ở 100°C ít nhất bằng 15 mm²/s (15 cSt), và ii) chỉ số độ nhớt lớn hơn 150. Theo một số phương án không làm giới hạn phạm vi sáng chế, sản phẩm oligome nặng có thể được tạo ra từ monome alpha olefin chủ yếu bao gồm alpha olefin mạch thẳng có 8 nguyên tử cacbon, sản phẩm oligome alpha olefin này chứa: a) dưới 0,5% trọng lượng monome alpha olefin, b) dưới 1,5% trọng lượng dime, và c) trên 88% trọng lượng oligome cao; và có i) độ nhớt động ở 100°C nằm trong khoảng từ 30 mm²/s đến 50 mm²/s (từ 30 cSt đến 50 cSt), và ii) chỉ số độ nhớt nằm trong khoảng từ 150 đến 260. Theo một phương án không làm giới hạn phạm vi sáng chế khác, sản phẩm oligome nặng có thể được tạo ra từ monome alpha olefin chủ yếu bao gồm alpha olefin mạch thẳng có 8 nguyên tử cacbon, sản phẩm oligome alpha olefin này chứa: a) dưới 0,4% trọng lượng monome alpha olefin, b) dưới 1,5% trọng lượng dime, và c) trên 88% trọng lượng oligome cao; và có: i) độ nhớt động ở 100°C nằm trong khoảng từ 80 mm²/s đến 140 mm²/s (từ 80 cSt đến 140 cSt), và ii) chỉ số độ nhớt nằm trong khoảng từ 150 đến 260. Các phương án khác về sản phẩm oligome nặng dễ dàng được thấy rõ từ bản mô tả này.

Theo một khía cạnh khác, PAO có thể được mô tả bằng (các) monome alpha olefin được sử dụng để tạo ra PAO, lượng các đơn vị monome alpha olefin được phát hiện trong PAO, lượng monome được hydro hóa được phát hiện trong PAO, lượng dime được hydro hóa trong PAO, lượng trime được hydro hóa được phát hiện trong PAO, lượng oligome cao được hydro hóa được phát hiện trong PAO, Mw, Mn, độ nhớt động ở 100°C, độ nhớt động ở 40°C, chỉ số độ nhớt, điểm rót, điểm cháy, nhiệt độ bốc cháy, chỉ số bay hơi Noack, kết quả thử nghiệm RPVOT, sai số trong liên kết cộng đầu với đuôi, mức độ đồng phân lập thể tương đối, chỉ số Bernoulli, số Markov, độ ổn định trượt được xác định bằng ASTM D6278-07, chỉ số đa phân tán, và/hoặc sự có mặt hoặc không có mặt của hiện tượng kết tinh có thể thấy rõ. Các đặc điểm này của PAO được mô tả độc lập ở đây và PAO có thể được mô tả bằng cách sử dụng hỗn hợp bất kỳ của monome alpha olefin được sử dụng để tạo ra PAO được mô tả ở đây, lượng các đơn vị monome alpha olefin được phát hiện trong PAO được mô tả ở đây, lượng monome được hydro hóa được phát hiện trong PAO được mô tả ở đây, lượng dime được hydro hóa trong PAO được mô tả ở đây, lượng trime được hydro hóa được phát hiện trong PAO được mô tả ở đây, lượng oligome cao được hydro hóa được phát

hiện trong PAO được mô tả ở đây, Mw được mô tả ở đây, Mn được mô tả ở đây, độ nhớt động ở 100°C được mô tả ở đây, chỉ số độ nhớt được mô tả ở đây, điểm rót được mô tả ở đây, điểm cháy được mô tả ở đây, nhiệt độ bốc cháy được mô tả ở đây, chỉ số bay hơi Noack được mô tả ở đây, kết quả thử nghiệm RPVOT, sai số trong liên kết cộng đầu với đuôi được mô tả ở đây, mức độ đồng phân lập thể tương đối được mô tả ở đây, chỉ số Bernoulli được mô tả ở đây, và/hoặc sự có mặt hoặc không có mặt của hiện tượng kết tinh có thể thấy rõ được mô tả ở đây.

Ví dụ, theo một phương án không giới hạn phạm vi sáng chế, polyalphaolefin (PAO) thu được từ quá trình hydro hóa sản phẩm oligome nặng có thể có chỉ số Bernoulli nhỏ hơn 1,65 hoặc theo cách khác, chỉ số này trong khoảng $1,1 \pm 0,4$. Theo một phương án không giới hạn phạm vi sáng chế khác, polyalphaolefin có thể không có hiện tượng kết tinh có thể thấy rõ ở nhiệt độ trên -40°C như được xác định bằng phương pháp đo nhiệt lượng bằng tia quét vi phân bằng cách sử dụng ASTM D 3418. Theo một ví dụ không giới hạn phạm vi sáng chế khác, polyalphaolefin có thể có điểm rót nằm trong khoảng từ -30°C đến -90°C, polyalphaolefin có thể có RPVOT được xác định bằng ASTM D2272 với sự có mặt của 0,5% trọng lượng chất chống oxy hóa Naugalube® APAN bằng ít nhất 2100 phút, polyalphaolefin có thể có chỉ số Bernoulli nhỏ hơn 1,65 hoặc trong khoảng $1,1 \pm 0,4$, hoặc tổ hợp bất kỳ của các đặc tính này. Các phương án khác có thể dễ dàng thấy rõ từ bản mô tả này.

Theo một khía cạnh, oligome alpha olefin, phân đoạn bất kỳ của oligome alpha olefin, và/hoặc polyalphaolefin có thể được điều chế theo phương pháp được mô tả ở đây bằng cách sử dụng monome olefin là alpha olefin; theo cách khác, monome olefin là alpha olefin mạch thẳng. Theo một phương án, monome olefin có thể chứa ít nhất 60% trọng lượng, 70% trọng lượng, 75% trọng lượng, 80% trọng lượng, 82,5% trọng lượng, 85% trọng lượng, 87,5% trọng lượng, 90% trọng lượng, 91% trọng lượng, 92% trọng lượng, 93% trọng lượng, 94% trọng lượng, 95% trọng lượng, 96% trọng lượng, 97% trọng lượng, hoặc 98% trọng lượng alpha olefin. Theo một số phương án, monome olefin có thể chứa ít nhất 60% trọng lượng, 70% trọng lượng, 75% trọng lượng, 80% trọng lượng, 82,5% trọng lượng, 85% trọng lượng, 87,5% trọng lượng, 90% trọng lượng, 91% trọng lượng, 92% trọng lượng, 93% trọng lượng, 94% trọng lượng, 95% trọng lượng, 96% trọng lượng, 97% trọng lượng, hoặc 98% trọng lượng alpha olefin mạch thẳng. Nói chung, alpha olefin của monome olefin có thể là alpha

olefin hoặc alpha olefin mạch thẳng bất kỳ (đơn chất hoặc hỗn hợp) được mô tả ở đây.

Nhiều monome alpha olefin có thể được oligome hóa theo các phương pháp được đề xuất ở đây. Ví dụ, phương pháp được mô tả ở đây có thể áp dụng cho monome alpha olefin có phân tử nhỏ như propylen và có phân tử lớn như sáp có 70 hoặc 75 nguyên tử cacbon. Theo một khía cạnh và theo phương án bất kỳ được mô tả ở đây, oligome alpha olefin, phân đoạn bất kỳ của oligome alpha olefin, và/hoặc PAO có thể được tạo ra từ monome alpha olefin chứa, hoặc chủ yếu bao gồm, C_3 - C_{70} alpha olefin; theo cách khác, C_3 - C_{40} alpha olefin; theo cách khác, C_4 - C_{20} alpha olefin; theo cách khác, C_5 - C_{18} alpha olefin; theo cách khác, C_6 - C_{16} alpha olefin hoặc theo cách khác, C_8 - C_{12} alpha olefin. Theo một phương án, oligome alpha olefin, phân đoạn bất kỳ của oligome alpha olefin, và/hoặc PAO có thể được tạo ra từ monome alpha olefin chứa, hoặc chủ yếu bao gồm, alpha olefin có 6 nguyên tử cacbon, alpha olefin có 8 nguyên tử cacbon, alpha olefin có 10 nguyên tử cacbon, alpha olefin có 12 nguyên tử cacbon, alpha olefin có 14 nguyên tử cacbon, alpha olefin có 16 nguyên tử cacbon, hoặc hỗn hợp bất kỳ của chúng; theo cách khác, alpha olefin có 8 nguyên tử cacbon, alpha olefin có 10 nguyên tử cacbon, alpha olefin có 12 nguyên tử cacbon, hoặc hỗn hợp bất kỳ của chúng; theo cách khác, alpha olefin có 6 nguyên tử cacbon; theo cách khác, alpha olefin có 8 nguyên tử cacbon; theo cách khác, alpha olefin có 10 nguyên tử cacbon; theo cách khác, alpha olefin có 12 nguyên tử cacbon; theo cách khác, alpha olefin có 14 nguyên tử cacbon; theo cách khác, alpha olefin có 16 nguyên tử cacbon hoặc theo cách khác, alpha olefin có 18 nguyên tử cacbon. Theo một khía cạnh khác và theo phương án thích hợp bất kỳ được mô tả ở đây, oligome alpha olefin, phân đoạn bất kỳ của oligome alpha olefin, và/hoặc PAO có thể được tạo ra từ monome alpha olefin chứa, hoặc chủ yếu bao gồm, C_3 - C_{70} alpha olefin mạch thẳng; theo cách khác, C_3 - C_{40} alpha olefin mạch thẳng; theo cách khác, C_4 - C_{20} alpha olefin mạch thẳng; theo cách khác, C_5 - C_{18} alpha olefin mạch thẳng; theo cách khác, C_6 - C_{16} alpha olefin mạch thẳng hoặc theo cách khác, C_8 - C_{12} alpha olefin mạch thẳng. Theo một phương án, oligome alpha olefin, phân đoạn bất kỳ của oligome alpha olefin, và/hoặc PAO có thể được tạo ra từ monome alpha olefin chứa, hoặc chủ yếu bao gồm, alpha olefin có 6 nguyên tử cacbon mạch thẳng, alpha olefin có 8 nguyên tử cacbon mạch thẳng, alpha olefin có 10 nguyên tử cacbon mạch thẳng, alpha olefin có 12 nguyên tử cacbon mạch thẳng, alpha olefin có 14 nguyên tử cacbon mạch thẳng, alpha olefin có 16 nguyên tử

cacbon mạch thẳng, hoặc hỗn hợp bất kỳ của chúng; theo cách khác, alpha olefin có 8 nguyên tử cacbon mạch thẳng, alpha olefin có 10 nguyên tử cacbon mạch thẳng, alpha olefin có 12 nguyên tử cacbon mạch thẳng, hoặc hỗn hợp bất kỳ của chúng; theo cách khác, alpha olefin có 6 nguyên tử cacbon mạch thẳng; theo cách khác, alpha olefin có 6 nguyên tử cacbon mạch thẳng; theo cách khác, alpha olefin có 8 nguyên tử cacbon mạch thẳng; theo cách khác, alpha olefin có 10 nguyên tử cacbon mạch thẳng; theo cách khác, alpha olefin có 12 nguyên tử cacbon mạch thẳng; theo cách khác, alpha olefin có 14 nguyên tử cacbon mạch thẳng; theo cách khác, alpha olefin có 16 nguyên tử cacbon mạch thẳng hoặc theo cách khác, alpha olefin có 18 nguyên tử cacbon mạch thẳng.

Theo một khía cạnh và phương án bất kỳ được mô tả ở đây, oligome alpha olefin, phân đoạn bất kỳ của oligome alpha olefin, và/hoặc PAO có thể được tạo ra từ monome alpha olefin chứa, hoặc chủ yếu bao gồm, 1-penten, 1-hexen, 1-hepten, 1-octen, 1-nonen, 1-dexen, 1-undexen, 1-dodexen, 1-tridexen, 1-tetradexen, 1-pentadexen, 1-hexadexen, 1-heptadexen, 1-octadexen, hoặc hỗn hợp bất kỳ của chúng; theo cách khác, 1-hexen, 1-hepten, 1-octen, 1-nonen, 1-dexen, 1-undexen, 1-dodexen, 1-tridexen, 1-tetradexen, 1-pentadexen, 1-hexaden, hoặc hỗn hợp bất kỳ của chúng; theo cách khác, 1-octen, 1-nonen, 1-dexen, 1-undexen, 1-dodexen, hoặc hỗn hợp bất kỳ của chúng. Theo một số phương án, oligome alpha olefin, phân đoạn bất kỳ của oligome alpha olefin, và/hoặc PAO có thể được tạo ra từ monome alpha olefin chứa, hoặc chủ yếu bao gồm, 1-hexen, 1-octen, 1-dexen, 1-dodexen, 1-tetradexen, 1-hexadexen, hoặc hỗn hợp bất kỳ của chúng; theo cách khác, 1-octen, 1-dexen, 1-dodexen, hoặc hỗn hợp bất kỳ của chúng. Theo một phương án khác, oligome alpha olefin, phân đoạn bất kỳ của oligome alpha olefin, và/hoặc PAO có thể được tạo ra từ monome alpha olefin chứa, hoặc chủ yếu bao gồm, 1-penten; theo cách khác, 1-hexen; theo cách khác, 1-hepten; theo cách khác, 1-octen; theo cách khác, 1-nonen; theo cách khác, 1-dexen; theo cách khác, 1-undexen; theo cách khác, 1-dodexen; theo cách khác, 1-tridexen; theo cách khác, 1-tetradexen; theo cách khác, 1-pentadexen; theo cách khác, 1-hexadexen; theo cách khác, 1-heptadexen hoặc theo cách khác, 1-octadexen.

Theo một khía cạnh và phương án bất kỳ được mô tả ở đây, oligome alpha olefin, phân đoạn bất kỳ của oligome alpha olefin, và/hoặc PAO có thể được tạo ra từ monome alpha olefin chứa, hoặc chủ yếu bao gồm, alpha olefin có công thức

$\text{CH}_2=\text{CH}(\text{CH}_2)_n\text{CH}_3$, trong đó n có thể là số nguyên nằm trong khoảng từ 1 đến 17; theo cách khác, có công thức $\text{CH}_2=\text{CH}(\text{CH}_2)_n\text{CH}_3$, trong đó n có thể là số nguyên nằm trong khoảng từ 2 đến 15; theo cách khác, có công thức $\text{CH}_2=\text{CH}(\text{CH}_2)_n\text{CH}_3$, trong đó n có thể là số nguyên nằm trong khoảng từ 3 đến 13; theo cách khác, có công thức $\text{CH}_2=\text{CH}(\text{CH}_2)_n\text{CH}_3$, trong đó n có thể là số nguyên nằm trong khoảng từ 5 đến 9 hoặc theo cách khác, có công thức $\text{CH}_2=\text{CH}(\text{CH}_2)_n\text{CH}_3$. Theo một số phương án, oligome alpha olefin, phân đoạn bất kỳ của oligome alpha olefin, và/hoặc PAO có thể được tạo ra từ monome alpha olefin chứa, hoặc chủ yếu bao gồm, alpha olefin có công thức $\text{CH}_2=\text{CH}(\text{CH}_2)_n\text{CH}_3$, trong đó n có thể bằng 3; theo cách khác, alpha olefin có công thức $\text{CH}_2=\text{CH}(\text{CH}_2)_n\text{CH}_3$, trong đó n có thể bằng 5; theo cách khác, alpha olefin có công thức $\text{CH}_2=\text{CH}(\text{CH}_2)_n\text{CH}_3$, trong đó n có thể bằng 7; theo cách khác, alpha olefin có công thức $\text{CH}_2=\text{CH}(\text{CH}_2)_n\text{CH}_3$, trong đó n có thể bằng 9; theo cách khác, alpha olefin có công thức $\text{CH}_2=\text{CH}(\text{CH}_2)_n\text{CH}_3$, trong đó n có thể bằng 11; theo cách khác, alpha olefin có công thức $\text{CH}_2=\text{CH}(\text{CH}_2)_n\text{CH}_3$, trong đó n có thể bằng 13 hoặc theo cách khác, alpha olefin có công thức $\text{CH}_2=\text{CH}(\text{CH}_2)_n\text{CH}_3$, trong đó n có thể bằng 15.

Theo một khía cạnh, oligome alpha olefin, phân đoạn bất kỳ của oligome alpha olefin, và/hoặc PAO có thể được điều chế theo phương pháp được mô tả ở đây bằng cách sử dụng monome olefin chứa, hoặc chủ yếu bao gồm, hỗn hợp alpha olefin hoặc theo cách khác, hỗn hợp alpha olefin mạch thẳng. Nói chung, monome olefin có thể là hỗn hợp alpha olefin bất kỳ được mô tả ở đây hoặc theo cách khác, alpha olefin mạch thẳng bất kỳ được mô tả ở đây. Theo một phương án, hỗn hợp alpha olefin có thể chứa ít nhất 50% trọng lượng, ít nhất 60% trọng lượng, 70% trọng lượng, 75% trọng lượng, 80% trọng lượng, 85% trọng lượng, 90% trọng lượng, 92,5% trọng lượng, hoặc 95% trọng lượng alpha olefin có số nguyên tử cacbon nằm trong khoảng bất kỳ được mô tả ở đây; theo cách khác, hỗn hợp bất kỳ của alpha olefin có số nguyên tử cacbon duy nhất được mô tả ở đây hoặc theo cách khác, của alpha olefin mạch thẳng bất kỳ có số nguyên tử cacbon duy nhất mạch thẳng được mô tả ở đây. Theo một số phương án không làm giới hạn phạm vi sáng chế, hỗn hợp alpha olefin mạch thẳng có thể chứa ít nhất 50% trọng lượng, ít nhất 60% trọng lượng, 70% trọng lượng, 75% trọng lượng, 80% trọng lượng, 85% trọng lượng, 90% trọng lượng, 92,5% trọng lượng, hoặc 95% trọng lượng alpha olefin mạch thẳng có số nguyên tử cacbon nằm trong khoảng bất kỳ được mô tả ở đây; theo cách khác, hỗn hợp bất kỳ của alpha olefin có số nguyên tử

cacbon duy nhất mạch thẳng được mô tả ở đây hoặc theo cách khác, alpha olefin mạch thẳng bất kỳ có số nguyên tử cacbon duy nhất được mô tả ở đây.

Theo một khía cạnh khác, oligome alpha olefin, phân đoạn bất kỳ của oligome alpha olefin, và/hoặc PAO có thể được điều chế theo phương pháp được mô tả ở đây bằng cách sử dụng monome alpha olefin chứa, hoặc chủ yếu bao gồm, hỗn hợp alpha olefin mạch thẳng. Nói chung, hỗn hợp alpha olefin có thể là hỗn hợp alpha olefin bất kỳ được mô tả ở đây. Theo một phương án, hỗn hợp alpha olefin có thể chứa ít nhất 50% trọng lượng, ít nhất 60% trọng lượng, 70% trọng lượng, 75% trọng lượng, 80% trọng lượng, 85% trọng lượng, 90% trọng lượng, 92,5% trọng lượng, hoặc 95% trọng lượng alpha olefin có số nguyên tử cacbon nằm trong khoảng bất kỳ được mô tả ở đây; theo cách khác, hỗn hợp bất kỳ của alpha olefin bất kỳ có số nguyên tử cacbon duy nhất được mô tả ở đây hoặc theo cách khác, alpha olefin bất kỳ có số nguyên tử cacbon duy nhất được mô tả ở đây. Theo một khía cạnh khác nữa, oligome alpha olefin, phân đoạn bất kỳ của oligome alpha olefin, và/hoặc PAO có thể được điều chế theo phương pháp được mô tả ở đây bằng cách sử dụng monome alpha olefin mạch thẳng chứa, hoặc chủ yếu bao gồm, hỗn hợp alpha olefin mạch thẳng. Nói chung, hỗn hợp alpha olefin mạch thẳng có thể là hỗn hợp alpha olefin mạch thẳng bất kỳ được mô tả ở đây. Theo một phương án, hỗn hợp alpha olefin mạch thẳng có thể chứa ít nhất 50% trọng lượng, ít nhất 60% trọng lượng, 70% trọng lượng, 75% trọng lượng, 80% trọng lượng, 85% trọng lượng, 90% trọng lượng, 92,5% trọng lượng, hoặc 95% trọng lượng alpha olefin mạch thẳng có số nguyên tử cacbon nằm trong khoảng bất kỳ được mô tả ở đây; theo cách khác, hỗn hợp bất kỳ của alpha olefin mạch thẳng bất kỳ có số nguyên tử cacbon duy nhất được mô tả ở đây hoặc theo cách khác, alpha olefin mạch thẳng bất kỳ có số nguyên tử cacbon duy nhất được mô tả ở đây.

Theo một ví dụ không giới hạn phạm vi sáng chế, monome olefin có thể là hỗn hợp alpha olefin chứa ít nhất 80% trọng lượng C_6 - C_{16} alpha olefin; theo cách khác, ít nhất 60% trọng lượng alpha olefin có 6 nguyên tử cacbon và alpha olefin có 14 nguyên tử cacbon; theo cách khác, ít nhất 90% trọng lượng C_8 - C_{12} alpha olefin mạch thẳng; theo cách khác, ít nhất 85% trọng lượng 1-hexen, 1-dexen, và 1-tetradexen; theo cách khác, ít nhất 75% trọng lượng 1-octen hoặc theo cách khác, ít nhất 75% trọng lượng alpha olefin mạch thẳng chủ yếu bao gồm 1-octen. Theo một số phương án không làm giới hạn phạm vi sáng chế, alpha olefin có số nguyên tử cacbon duy nhất có thể được

sử dụng trong hỗn hợp alpha olefin có thể chủ yếu bao gồm alpha olefin có 6 nguyên tử cacbon; theo cách khác, alpha olefin có 8 nguyên tử cacbon; theo cách khác, alpha olefin có 10 nguyên tử cacbon; theo cách khác, alpha olefin có 12 nguyên tử cacbon; theo cách khác, alpha olefin có 14 nguyên tử cacbon hoặc theo cách khác, alpha olefin có 16 nguyên tử cacbon. Theo các phương án không giới hạn phạm vi sáng chế khác, alpha olefin mạch thẳng có số nguyên tử cacbon duy nhất có thể được sử dụng trong hỗn hợp alpha olefin hoặc hỗn hợp alpha olefin mạch thẳng có thể chủ yếu bao gồm alpha olefin mạch thẳng có 6 nguyên tử cacbon; theo cách khác, alpha olefin mạch thẳng có 8 nguyên tử cacbon; theo cách khác, alpha olefin mạch thẳng có 10 nguyên tử cacbon; theo cách khác, alpha olefin mạch thẳng có 12 nguyên tử cacbon; theo cách khác, alpha olefin mạch thẳng có 14 nguyên tử cacbon hoặc theo cách khác, alpha olefin mạch thẳng có 16 nguyên tử cacbon. Các hỗn hợp tiềm năng khác có thể được sử dụng dưới dạng monome olefin, alpha olefin, hoặc monome alpha olefin mạch thẳng dễ dàng được thấy rõ từ bản mô tả này.

Như đã mô tả, oligome alpha olefin, phân đoạn bất kỳ của oligome alpha olefin, và/hoặc polyalphaolefin theo khía cạnh hoặc phương án bất kỳ có thể được điều chế bằng cách oligome hóa alpha olefin. Oligome alpha olefin được tạo ra trong quá trình oligome hóa chứa các đơn vị có nguồn gốc từ monome alpha olefin. Người có hiểu biết trung bình về lĩnh vực kỹ thuật này sẽ hiểu được rằng hệ chất xúc tác được sử dụng để tạo ra oligome alpha olefin có thể đồng phân hóa monome alpha olefin thành monome không là alpha olefin (ví dụ, olefin nội). Theo cách khác hoặc ngoài ra, nguyên liệu alpha olefin có thể chứa một lượng chất không phải alpha olefin. Tùy thuộc vào hệ chất xúc tác được sử dụng, monome không là alpha olefin có thể được đưa vào oligome alpha olefin (và sao cho polyalphaolefin có thể chứa các đơn vị monome alpha olefin kết hợp với các đơn vị monome olefin nội). Trong một số trường hợp, hệ chất xúc tác có thể giới hạn mức độ đồng phân hóa alpha olefin và/hoặc giới hạn lượng monome không là alpha olefin đưa vào oligome alpha olefin. Do đó, một đặc điểm của oligome alpha olefin, phân đoạn bất kỳ của oligome alpha olefin, và/hoặc polyalphaolefin có thể là tỷ lệ phần trăm của các đơn vị alpha olefin trong oligome alpha olefin, phân đoạn oligome alpha olefin và/hoặc PAO. Do đó, theo phương án bất kỳ được bộc lộ, oligome alpha olefin, phân đoạn bất kỳ của oligome alpha olefin, và/hoặc polyalphaolefin được mô tả ở đây có thể chứa ít nhất 70% đơn vị

monome alpha olefin; theo cách khác, ít nhất 75% đơn vị monome alpha olefin; theo cách khác, ít nhất 80% đơn vị monome alpha olefin; theo cách khác, ít nhất 85% đơn vị monome alpha olefin; theo cách khác, ít nhất 90% đơn vị monome alpha olefin; theo cách khác, ít nhất 95% đơn vị monome alpha olefin; theo cách khác, ít nhất 98% đơn vị monome alpha olefin hoặc theo cách khác, ít nhất 99% đơn vị monome alpha olefin. Theo một khía cạnh khác, oligome alpha olefin, phân đoạn bất kỳ của oligome alpha olefin, và/hoặc polyalphaolefin theo phương án bất kỳ có thể chủ yếu bao gồm các đơn vị monome alpha olefin. Nói chung, alpha olefin có thể là alpha olefin bất kỳ được mô tả ở đây.

Theo một khía cạnh, hỗn hợp gồm monome alpha olefin và sản phẩm oligome alpha olefin trong dòng đi ra từ thiết bị phản ứng, sản phẩm alpha olefin, hoặc phân đoạn sản phẩm oligome alpha olefin theo sáng chế có thể chứa dưới 20% trọng lượng monome alpha olefin; theo cách khác, dưới 17,5% trọng lượng monome alpha olefin; theo cách khác, dưới 15% trọng lượng monome alpha olefin; theo cách khác, dưới 12,5% trọng lượng monome alpha olefin; theo cách khác, dưới 10% trọng lượng monome alpha olefin; theo cách khác, dưới 9% trọng lượng monome alpha olefin; theo cách khác, dưới 8% trọng lượng monome alpha olefin; theo cách khác, dưới 7% trọng lượng monome alpha olefin; theo cách khác, dưới 6% trọng lượng monome alpha olefin; theo cách khác, dưới 5% trọng lượng monome alpha olefin; theo cách khác, dưới 4% trọng lượng monome alpha olefin; theo cách khác, dưới 3% trọng lượng monome alpha olefin; theo cách khác, dưới 2% trọng lượng monome alpha olefin; theo cách khác, dưới 1% trọng lượng monome alpha olefin; theo cách khác, dưới 0,8% trọng lượng monome alpha olefin; theo cách khác, dưới 0,6% trọng lượng monome alpha olefin; theo cách khác, dưới 0,5% trọng lượng monome alpha olefin; theo cách khác, dưới 0,4% trọng lượng monome alpha olefin; theo cách khác, dưới 0,3% trọng lượng monome alpha olefin; theo cách khác, dưới 0,2% trọng lượng monome alpha olefin hoặc theo cách khác, dưới 0,1% trọng lượng monome alpha olefin. Theo một số phương án, hàm lượng monome alpha olefin có thể được gọi là lượng monome alpha olefin dư (ví dụ, dòng tách đi ra từ thiết bị phản ứng hoặc oligome olefin tách ra, ngoài các chất khác) và có thể sử dụng hàm lượng monome alpha olefin bất kỳ được mô tả ở đây. Theo một khía cạnh, hỗn hợp gồm monome alpha olefin và sản phẩm oligome alpha olefin, sản phẩm alpha olefin, hoặc phân đoạn sản phẩm oligome alpha olefin theo sáng chế có thể chứa dưới 20% trọng lượng dime; theo

cách khác, dưới 19% trọng lượng dime; theo cách khác, dưới 18% trọng lượng dime; theo cách khác, dưới 17% trọng lượng dime; theo cách khác, dưới 16% trọng lượng dime; theo cách khác, dưới 15% trọng lượng dime; theo cách khác, dưới 14% trọng lượng dime; theo cách khác, dưới 13% trọng lượng dime; theo cách khác, dưới 12% trọng lượng dime; theo cách khác, dưới 11% trọng lượng dime; theo cách khác, dưới 10% trọng lượng dime; theo cách khác, dưới 9% trọng lượng dime; theo cách khác, dưới 8% trọng lượng dime; theo cách khác, dưới 7% trọng lượng dime; theo cách khác, dưới 6% trọng lượng dime; theo cách khác, dưới 5% trọng lượng dime; theo cách khác, dưới 4% trọng lượng dime; theo cách khác, dưới 3% trọng lượng dime; theo cách khác, dưới 2,5% trọng lượng dime; theo cách khác, dưới 2% trọng lượng dime; theo cách khác, dưới 1,75% trọng lượng dime; theo cách khác, dưới 1,5% trọng lượng dime; theo cách khác, dưới 1,25% trọng lượng dime; theo cách khác, dưới 1% trọng lượng dime; theo cách khác, dưới 0,9% trọng lượng dime; theo cách khác, dưới 0,8% trọng lượng dime; theo cách khác, dưới 0,7% trọng lượng dime; theo cách khác, dưới 0,6% trọng lượng dime; theo cách khác, dưới 0,5% trọng lượng dime; theo cách khác, dưới 0,4% trọng lượng dime hoặc theo cách khác, dưới 0,3% trọng lượng dime. Theo một khía cạnh khác, hỗn hợp gồm monome alpha olefin và sản phẩm oligome alpha olefin, sản phẩm alpha olefin, hoặc phân đoạn sản phẩm oligome alpha olefin theo sáng chế có thể chứa dưới 20% trọng lượng trime; theo cách khác, dưới 17,5% trọng lượng trime; theo cách khác, dưới 15% trọng lượng trime; theo cách khác, dưới 12,5% trọng lượng trime; theo cách khác, dưới 10% trọng lượng trime; theo cách khác, dưới 7,5% trọng lượng trime; theo cách khác, dưới 5% trọng lượng trime; theo cách khác, dưới 4% trọng lượng trime; theo cách khác, dưới 3% trọng lượng trime; theo cách khác, 2% trọng lượng trime; theo cách khác, dưới 1,75% trọng lượng trime; theo cách khác, dưới 1,5% trọng lượng trime; theo cách khác, dưới 1,25% trọng lượng trime; theo cách khác, dưới 1% trọng lượng trime; theo cách khác, dưới 0,9% trọng lượng trime; theo cách khác, dưới 0,8% trọng lượng trime; theo cách khác, dưới 0,7% trọng lượng trime; theo cách khác, dưới 0,6% trọng lượng trime; theo cách khác, dưới 0,5% trọng lượng trime; theo cách khác, dưới 0,4% trọng lượng trime; theo cách khác, dưới 0,3% trọng lượng trime; theo cách khác, dưới 0,2% trọng lượng trime hoặc theo cách khác, dưới 0,1% trọng lượng trime. Theo một khía cạnh khác, hỗn hợp gồm monome alpha olefin và sản phẩm oligome alpha olefin, sản phẩm alpha olefin, hoặc

phân đoạn sản phẩm oligome alpha olefin theo sáng chế có thể chứa ít nhất 50% trọng lượng oligome cao; theo cách khác, ít nhất 55% trọng lượng oligome cao; theo cách khác, ít nhất 60% trọng lượng oligome cao; theo cách khác, ít nhất 62,5% trọng lượng oligome cao; theo cách khác, ít nhất 65% trọng lượng oligome cao; theo cách khác, ít nhất 67,5% trọng lượng oligome cao; theo cách khác, ít nhất 70% trọng lượng oligome cao; theo cách khác, ít nhất 72,5% trọng lượng oligome cao; theo cách khác, ít nhất 75% trọng lượng oligome cao; theo cách khác, ít nhất 77,5% trọng lượng oligome cao; theo cách khác, ít nhất 80% trọng lượng oligome cao; ít nhất 82,5% trọng lượng oligome cao; theo cách khác, ít nhất 85% trọng lượng oligome cao; theo cách khác, ít nhất 86% trọng lượng oligome cao; theo cách khác, ít nhất 87% trọng lượng oligome cao; theo cách khác, ít nhất 88% trọng lượng oligome cao; theo cách khác, ít nhất 89% trọng lượng oligome cao; theo cách khác, ít nhất 90% trọng lượng oligome cao; theo cách khác, ít nhất 91% trọng lượng oligome cao; theo cách khác, ít nhất 92% trọng lượng oligome cao; theo cách khác, ít nhất 93% trọng lượng oligome cao; theo cách khác, ít nhất 94% trọng lượng oligome cao hoặc theo cách khác, ít nhất 95% trọng lượng oligome cao. Ngoài ra, hỗn hợp thích hợp bất kỳ của các tỷ lệ % trọng lượng oligome alpha olefin này có thể được sử dụng để mô tả phân đoạn oligome alpha olefin được đưa ra ở đây. Nói chung, tỷ lệ % trọng lượng monome alpha olefin, dime, trime, và oligome cao của hỗn hợp gồm monome alpha olefin và sản phẩm oligome alpha olefin thỏa mãn công thức: $\text{monome} + \text{dime} + \text{trime} + \text{oligome cao} = 100$. Nói chung, tỷ lệ % trọng lượng dime, trime, và oligome cao của sản phẩm alpha olefin hoặc phân đoạn sản phẩm oligome alpha olefin thỏa mãn công thức $\text{dime} + \text{trime} + \text{oligome cao} = 100$. Tuy nhiên, nếu muốn hoặc nếu cần nêu rõ, lượng monome (monome dư) có thể được chỉ rõ (ví dụ, khi nói tới dòng cắt phân đoạn đi ra từ thiết bị phản ứng, ngoài các thành phần khác) và trong trường hợp này tỷ lệ % trọng lượng monome alpha olefin, dime, trime, và oligome cao thỏa mãn công thức $\text{monome} + \text{dime} + \text{trime} + \text{oligome cao} = 100$.

Theo một khía cạnh, sản phẩm oligome nặng này có thể chứa dưới 1% trọng lượng monome alpha olefin; theo cách khác, dưới 0,8% trọng lượng monome alpha olefin; theo cách khác, dưới 0,6% trọng lượng monome alpha olefin; theo cách khác, dưới 0,5% trọng lượng monome alpha olefin; theo cách khác, dưới 0,4% trọng lượng monome alpha olefin; theo cách khác, dưới 0,3% trọng lượng monome alpha olefin; theo cách khác, dưới 0,2% trọng lượng monome alpha olefin hoặc theo cách khác, dưới 0,1% trọng lượng

monome alpha olefin. Theo một số phương án, hàm lượng monome alpha olefin của sản phẩm oligome nặng này có thể được gọi là lượng monome alpha olefin dư và có thể sử dụng lượng monome alpha olefin bất kỳ được mô tả. Theo một khía cạnh khác, sản phẩm oligome nặng hoặc phân đoạn sản phẩm oligome nặng theo sáng chế có thể chứa dưới 10% trọng lượng dime; theo cách khác, dưới 9% trọng lượng dime; theo cách khác, dưới 8% trọng lượng dime; theo cách khác, dưới 7% trọng lượng dime; theo cách khác, dưới 6% trọng lượng dime; theo cách khác, dưới 5% trọng lượng dime; theo cách khác, dưới 4,5% trọng lượng dime; theo cách khác, dưới 4% trọng lượng dime; theo cách khác, dưới 3% trọng lượng dime; theo cách khác, dưới 2,5% trọng lượng dime; theo cách khác, dưới 2% trọng lượng dime; theo cách khác, dưới 1,75% trọng lượng dime; theo cách khác, dưới 1,5% trọng lượng dime; theo cách khác, dưới 1,25% trọng lượng dime; theo cách khác, dưới 1% trọng lượng dime; theo cách khác, dưới 0,9% trọng lượng dime; theo cách khác, dưới 0,8% trọng lượng dime; theo cách khác, dưới 0,7% trọng lượng dime; theo cách khác, dưới 0,6% trọng lượng dime; theo cách khác, dưới 0,5% trọng lượng dime; theo cách khác, dưới 0,4% trọng lượng dime; theo cách khác, dưới 0,3% trọng lượng dime; theo cách khác, dưới 0,2% trọng lượng dime hoặc theo cách khác, dưới 0,1% trọng lượng dime. Theo một khía cạnh khác, sản phẩm oligome nặng hoặc phân đoạn sản phẩm oligome nặng có thể chứa dưới 20% trọng lượng trime; theo cách khác, dưới 17,5% trọng lượng trime; theo cách khác, dưới 15% trọng lượng trime; theo cách khác, dưới 12,5% trọng lượng trime; theo cách khác, dưới 10% trọng lượng trime; theo cách khác, dưới 7,5% trọng lượng trime; theo cách khác, dưới 5% trọng lượng trime; theo cách khác, dưới 4% trọng lượng trime; theo cách khác, dưới 3% trọng lượng trime; theo cách khác, 2% trọng lượng trime; theo cách khác, dưới 1,75% trọng lượng trime; theo cách khác, dưới 1,5% trọng lượng trime; theo cách khác, dưới 1,25% trọng lượng trime; theo cách khác, dưới 1% trọng lượng trime; theo cách khác, dưới 0,9% trọng lượng trime; theo cách khác, dưới 0,8% trọng lượng trime; theo cách khác, dưới 0,7% trọng lượng trime; theo cách khác, dưới 0,6% trọng lượng trime; theo cách khác, dưới 0,5% trọng lượng trime; theo cách khác, dưới 0,4% trọng lượng trime; theo cách khác, dưới 0,3% trọng lượng trime; theo cách khác, dưới 0,2% trọng lượng trime hoặc theo cách khác, dưới 0,1% trọng lượng trime. Theo một khía cạnh khác nữa, sản phẩm oligome nặng này hoặc phân đoạn sản phẩm oligome nặng này có thể chứa ít nhất 80% trọng lượng oligome cao; theo cách khác, ít

nhất 82,5% trọng lượng oligome cao; theo cách khác, ít nhất 85% trọng lượng oligome cao; theo cách khác, ít nhất 86% trọng lượng oligome cao; theo cách khác, ít nhất 87% trọng lượng oligome cao; theo cách khác, ít nhất 88% trọng lượng oligome cao; theo cách khác, ít nhất 89% trọng lượng oligome cao; theo cách khác, ít nhất 90% trọng lượng oligome cao; theo cách khác, ít nhất 91% trọng lượng oligome cao; theo cách khác, ít nhất 92% trọng lượng oligome cao; theo cách khác, ít nhất 93% trọng lượng oligome cao; theo cách khác, ít nhất 94% trọng lượng oligome cao hoặc theo cách khác, ít nhất 95% trọng lượng oligome cao. Ngoài ra, tổ hợp thích hợp bất kỳ của tỷ lệ % trọng lượng oligome nặng này có thể được sử dụng để mô tả phân đoạn oligome nặng được đưa ra ở đây. Nói chung, tỷ lệ % trọng lượng monome alpha olefin, dime, trime, và oligome cao của sản phẩm oligome nặng thoả mãn công thức $\text{monome} + \text{dime} + \text{trime} + \text{oligome cao} = 100$. Trong một số trường hợp, có thể chỉ cần nói tới thành phần oligome nặng xét về oligome và trong trường hợp này tỷ lệ % trọng lượng dime, trime, và oligome cao của sản phẩm oligome nặng này thoả mãn công thức $\text{dime} + \text{trime} + \text{oligome cao} = 100$.

Theo một khía cạnh, PAO được đề xuất theo sáng chế có thể chứa dưới 1% trọng lượng monome alpha olefin được hydro hóa; theo cách khác, dưới 0,8% trọng lượng monome alpha olefin được hydro hóa; theo cách khác, dưới 0,6% trọng lượng monome alpha olefin được hydro hóa; theo cách khác, dưới 0,5% trọng lượng monome alpha olefin được hydro hóa; theo cách khác, dưới 0,4% trọng lượng monome alpha olefin được hydro hóa; theo cách khác, dưới 0,3% trọng lượng monome alpha olefin được hydro hóa; theo cách khác, dưới 0,2% trọng lượng monome alpha olefin được hydro hóa hoặc theo cách khác, dưới 0,1% trọng lượng monome alpha olefin được hydro hóa. Theo một khía cạnh khác, PAO được điều chế theo sáng chế có thể chứa dưới 10% trọng lượng dime được hydro hóa; theo cách khác, dưới 9% trọng lượng dime được hydro hóa; theo cách khác, dưới 8% trọng lượng dime được hydro hóa; theo cách khác, dưới 7% trọng lượng dime được hydro hóa; theo cách khác, dưới 6% trọng lượng dime được hydro hóa; theo cách khác, dưới 5% trọng lượng dime được hydro hóa; theo cách khác, dưới 4% trọng lượng dime được hydro hóa; theo cách khác, dưới 4,5% trọng lượng dime được hydro hóa; theo cách khác, dưới 3,5% trọng lượng dime được hydro hóa; theo cách khác, dưới 3% trọng lượng dime được hydro hóa; dưới 2,5% trọng lượng dime được hydro hóa; theo

cách khác, dưới 2% trọng lượng dime được hydro hóa; theo cách khác, dưới 1,75% trọng lượng dime được hydro hóa; theo cách khác, dưới 1,5% trọng lượng dime được hydro hóa; theo cách khác, dưới 1,25% trọng lượng dime được hydro hóa; theo cách khác, dưới 1% trọng lượng dime được hydro hóa; theo cách khác, dưới 0,9% trọng lượng dime được hydro hóa; theo cách khác, dưới 0,8% trọng lượng dime được hydro hóa; theo cách khác, dưới 0,7% trọng lượng dime được hydro hóa; theo cách khác, dưới 0,6% trọng lượng dime được hydro hóa; theo cách khác, dưới 0,5% trọng lượng dime được hydro hóa; theo cách khác, dưới 0,4% trọng lượng dime được hydro hóa; theo cách khác, dưới 0,3% trọng lượng dime được hydro hóa; theo cách khác, dưới 0,2% trọng lượng dime được hydro hóa hoặc theo cách khác, dưới 0,1% trọng lượng dime được hydro hóa. Theo một khía cạnh khác, PAO theo sáng chế có thể chứa dưới 20% trọng lượng trime được hydro hóa; theo cách khác, dưới 17,5% trọng lượng trime được hydro hóa; theo cách khác, dưới 15% trọng lượng trime được hydro hóa; theo cách khác, dưới 12,5% trọng lượng trime được hydro hóa; theo cách khác, dưới 10% trọng lượng trime được hydro hóa; theo cách khác, dưới 7,5% trọng lượng trime được hydro hóa; theo cách khác, dưới 5% trọng lượng trime được hydro hóa; theo cách khác, dưới 4% trọng lượng trime được hydro hóa; theo cách khác, dưới 3% trọng lượng trime được hydro hóa; theo cách khác, 2% trọng lượng trime được hydro hóa; theo cách khác, dưới 1,75% trọng lượng trime được hydro hóa; theo cách khác, dưới 1,5% trọng lượng trime được hydro hóa; theo cách khác, dưới 1,25% trọng lượng trime được hydro hóa; theo cách khác, dưới 1% trọng lượng trime được hydro hóa; theo cách khác, dưới 0,9% trọng lượng trime được hydro hóa; theo cách khác, dưới 0,8% trọng lượng trime được hydro hóa; theo cách khác, dưới 0,7% trọng lượng trime được hydro hóa; theo cách khác, dưới 0,6% trọng lượng trime được hydro hóa; theo cách khác, dưới 0,5% trọng lượng trime được hydro hóa; theo cách khác, dưới 0,4% trọng lượng trime được hydro hóa; theo cách khác, dưới 0,3% trọng lượng trime được hydro hóa; theo cách khác, dưới 0,2% trọng lượng trime được hydro hóa hoặc theo cách khác, dưới 0,1% trọng lượng trime được hydro hóa. Theo một khía cạnh khác, PAO theo sáng chế có thể chứa ít nhất 80% trọng lượng oligome cao được hydro hóa; theo cách khác, ít nhất 82,5% trọng lượng oligome cao được hydro hóa; theo cách khác, ít nhất 85% trọng lượng oligome cao được hydro hóa; theo cách khác, ít nhất 86% trọng lượng oligome cao được hydro hóa; theo cách khác, ít nhất 87% trọng

lượng oligome cao được hydro hóa; theo cách khác, ít nhất 88% trọng lượng oligome cao được hydro hóa; theo cách khác, ít nhất 89% trọng lượng oligome cao được hydro hóa; theo cách khác, ít nhất 90% trọng lượng oligome cao được hydro hóa; theo cách khác, ít nhất 91% trọng lượng oligome cao được hydro hóa; theo cách khác, ít nhất 92% trọng lượng oligome cao được hydro hóa; theo cách khác, ít nhất 93% trọng lượng oligome cao được hydro hóa; theo cách khác, ít nhất 94% trọng lượng oligome cao được hydro hóa hoặc theo cách khác, ít nhất 95% trọng lượng oligome cao được hydro hóa. Ngoài ra, tổ hợp thích hợp bất kỳ của các đặc điểm này có thể được sử dụng để mô tả PAO được mô tả ở đây. Nói chung, tỷ lệ % trọng lượng monome alpha olefin được hydro hóa, dime được hydro hóa, trime được hydro hóa, và oligome cao được hydro hóa của PAO thỏa mãn công thức monome + dime + trime + oligome cao = 100. Trong một số trường hợp, có thể chỉ cần nói tới PAO xét về oligome và trong các trường hợp này, tỷ lệ % trọng lượng dime được hydro hóa, trime được hydro hóa, và oligome cao được hydro hóa của PAO thỏa mãn công thức dime + trime + oligome cao = 100. Khi nói tới PAO, monome được hydro hóa, dime được hydro hóa, trime được hydro hóa, và olefin cao được hydro hóa cũng có thể được gọi là monome no, dime no, trime no, và oligome cao no (tương ứng) và số bất kỳ liên quan đến monome được hydro hóa, dime được hydro hóa, trime được hydro hóa, và olefin cao được hydro hóa cũng có thể được áp dụng cho các chất no tương ứng.

Theo một khía cạnh, sáng chế đề xuất oligome alpha olefin, phân đoạn oligome alpha olefin, sản phẩm oligome nặng, và/hoặc PAO có thể có Mw bằng ít nhất 400; theo cách khác, ít nhất 500; theo cách khác, ít nhất 600; theo cách khác, ít nhất 700; theo cách khác, ít nhất 800; theo cách khác, ít nhất 900; theo cách khác, ít nhất 1000; theo cách khác, ít nhất 1250; theo cách khác, ít nhất 1500; theo cách khác, ít nhất 1750; theo cách khác, ít nhất 2000; theo cách khác, ít nhất 2250; theo cách khác, ít nhất 2500; theo cách khác, ít nhất 2750; theo cách khác, ít nhất 3000; theo cách khác, ít nhất 3500; theo cách khác, ít nhất 4000; theo cách khác, ít nhất 4500; theo cách khác, ít nhất 5000; theo cách khác, ít nhất 5500; theo cách khác, ít nhất 6000; theo cách khác, ít nhất 6500; theo cách khác, ít nhất 7000; theo cách khác, ít nhất 7500; theo cách khác, ít nhất 8000; theo cách khác, ít nhất 8500; theo cách khác, ít nhất 9000; theo cách khác, ít nhất 9500; theo cách khác, ít nhất 10000; theo cách khác, ít nhất 11000; theo cách khác, ít nhất 12000; theo cách khác, ít nhất 13000; theo cách khác, ít nhất 14000; theo cách khác, ít nhất 15000;

theo cách khác, ít nhất 16000; theo cách khác, ít nhất 17000; theo cách khác, ít nhất 18000; theo cách khác, ít nhất 19000; theo cách khác, ít nhất 20000; theo cách khác, ít nhất 22500; theo cách khác, ít nhất 25000 hoặc theo cách khác, ít nhất 30000. Nếu không được chỉ rõ theo cách khác, oligome alpha olefin, phân đoạn oligome alpha olefin, và/hoặc PAO theo sáng chế có thể có giới hạn trên của Mw bằng 60000; theo cách khác, 55000; theo cách khác, 50000; theo cách khác, 47500; theo cách khác, 45000; theo cách khác, 42500; theo cách khác, 40000; theo cách khác, 37500; theo cách khác, 35000; theo cách khác, 32500; theo cách khác, 30000; theo cách khác, 27500; theo cách khác, 25000; theo cách khác, 22500; theo cách khác, 20000; theo cách khác, 19000; theo cách khác, 18000; theo cách khác, 17000; theo cách khác, 16000; theo cách khác, 15000; theo cách khác, 14000; theo cách khác, 13000; theo cách khác, 12000; theo cách khác, 11000; theo cách khác, 10000; theo cách khác, 9000; theo cách khác, 8500; theo cách khác, 8000; theo cách khác, 7500; theo cách khác, 7000; theo cách khác, 6500; theo cách khác, 6000; theo cách khác, 5500; theo cách khác, 5000; theo cách khác, 4500; theo cách khác, 4000; theo cách khác, 3000; theo cách khác, 2750; theo cách khác, 2500; theo cách khác, 2000; theo cách khác, 1750; theo cách khác, 1500; theo cách khác, 1250; theo cách khác, 1000. Theo một khía cạnh, oligome alpha olefin, phân đoạn oligome alpha olefin, sản phẩm oligome nặng, và/hoặc PAO theo sáng chế có thể có Mw nằm trong khoảng từ giới hạn dưới bất kỳ của Mw của PAO được bộc lộ ở đây đến Mw tối đa bất kỳ của PAO được bộc lộ ở đây. Theo một phương án không làm giới hạn phạm vi sáng chế, oligome alpha olefin, phân đoạn oligome alpha olefin, sản phẩm oligome nặng này, và/hoặc PAO theo sáng chế có thể có Mw nằm trong khoảng từ 1500 đến 15000; theo cách khác, nằm trong khoảng từ 2000 đến 12500 hoặc theo cách khác, nằm trong khoảng từ 2500 đến 10000. Theo một số phương án không làm giới hạn phạm vi sáng chế, PAO theo sáng chế có thể có Mw nằm trong khoảng từ 2000 đến 4500; theo cách khác, nằm trong khoảng từ 2500 đến 4000 hoặc theo cách khác, nằm trong khoảng từ 2750 đến 3750. Theo các phương án không giới hạn phạm vi sáng chế khác, PAO theo sáng chế có thể có Mw nằm trong khoảng từ 3500 đến 6000; theo cách khác, nằm trong khoảng từ 4000 đến 5500; theo cách khác, nằm trong khoảng từ 4250 đến 5250.

Theo một khía cạnh, sáng chế đề xuất oligome alpha olefin, phân đoạn oligome alpha olefin, sản phẩm oligome nặng, và/hoặc PAO có thể có Mn bằng ít nhất 400; theo cách khác, ít nhất 500; theo cách khác, ít nhất 600; theo cách khác, ít nhất 700; theo cách

khác, ít nhất 800; theo cách khác, ít nhất 900; theo cách khác, ít nhất 1000; theo cách khác, ít nhất 1250; theo cách khác, ít nhất 1500; theo cách khác, ít nhất 1750; theo cách khác, ít nhất 2000; theo cách khác, ít nhất 2250; theo cách khác, ít nhất 2500; theo cách khác, ít nhất 2750; theo cách khác, ít nhất 3000; theo cách khác, ít nhất 3500; theo cách khác, ít nhất 4000; theo cách khác, ít nhất 4500; theo cách khác, ít nhất 5000; theo cách khác, ít nhất 5500; theo cách khác, ít nhất 6000; theo cách khác, ít nhất 6500; theo cách khác, ít nhất 7000; theo cách khác, ít nhất 7500; theo cách khác, ít nhất 8000; theo cách khác, ít nhất 8500; theo cách khác, ít nhất 9000; theo cách khác, ít nhất 9500; theo cách khác, ít nhất 10000; theo cách khác, ít nhất 11000; theo cách khác, ít nhất 12000; theo cách khác, ít nhất 13000; theo cách khác, ít nhất 14000; theo cách khác, ít nhất 15000; theo cách khác, ít nhất 16000; theo cách khác, ít nhất 17000; theo cách khác, ít nhất 18000; theo cách khác, ít nhất 19000; theo cách khác, ít nhất 20000; theo cách khác, ít nhất 22500; theo cách khác, ít nhất 25000 hoặc theo cách khác, ít nhất 30000. Nếu không được chỉ rõ theo cách khác, oligome alpha olefin, phân đoạn oligome alpha olefin, và/hoặc PAO theo sáng chế có thể có giới hạn trên của Mn bằng 60000; theo cách khác, 55000; theo cách khác, 50000; theo cách khác, 47500; theo cách khác, 45000; theo cách khác, 42500; theo cách khác, 40000; theo cách khác, 37500; theo cách khác, 35000; theo cách khác, 32500; theo cách khác, 30000; theo cách khác, 27500; theo cách khác, 25000; theo cách khác, 22500; theo cách khác, 20000; ; theo cách khác, 19000; theo cách khác, 18000; theo cách khác, 17000; theo cách khác, 16000; theo cách khác, 15000; ; theo cách khác, 14000; theo cách khác, 13000; theo cách khác, 12000; theo cách khác, 11000; theo cách khác, 10000; theo cách khác, 9000; theo cách khác, 8500; theo cách khác, 8000; theo cách khác, 7500; theo cách khác, 7000; theo cách khác, 6500; theo cách khác, 6000; theo cách khác, 5500; theo cách khác, 5000; theo cách khác, 4500; theo cách khác, 4000; theo cách khác, 3000; theo cách khác, 2750; theo cách khác, 2500; theo cách khác, 2000; theo cách khác, 1750; theo cách khác, 1500; theo cách khác, 1250; theo cách khác, 1000. Theo một khía cạnh, oligome alpha olefin, phân đoạn oligome alpha olefin, sản phẩm oligome nặng, và/hoặc PAO theo sáng chế có thể có Mw nằm trong khoảng từ giới hạn dưới bất kỳ của Mn của PAO được bộc lộ ở đây tới Mw tối đa bất kỳ của PAO được bộc lộ ở đây. Theo một phương án không làm giới hạn phạm vi sáng chế, oligome alpha olefin, phân đoạn oligome alpha olefin, sản phẩm oligome nặng, và/hoặc PAO theo sáng chế có thể có Mw nằm trong khoảng từ 1500 đến 15000; theo cách khác, nằm trong khoảng từ 2000 đến

12500 hoặc theo cách khác, nằm trong khoảng từ 2500 đến 10000. Theo một số phương án không làm giới hạn phạm vi sáng chế, PAO theo sáng chế có thể có Mn nằm trong khoảng từ 2000 đến 4500; theo cách khác, nằm trong khoảng từ 2500 đến 4000 hoặc theo cách khác, nằm trong khoảng từ 2750 đến 3750. Theo các phương án không làm giới hạn phạm vi sáng chế khác, PAO theo sáng chế có Mn nằm trong khoảng từ 3500 đến 6000; theo cách khác, nằm trong khoảng từ 4000 đến 5500; theo cách khác, nằm trong khoảng từ 4250 đến 5250.

Các phương pháp được mô tả ở đây có thể tạo ra oligome alpha olefin, phân đoạn oligome alpha olefin, sản phẩm oligome nặng, và/hoặc PAO có khoảng độ nhớt động nằm trong khoảng rộng ở 100°C và/hoặc 40°C. Ví dụ, có thể thu được chất có độ nhớt động ở 100°C cao hơn 1000 mm²/s (1000 cSt) bằng cách sử dụng hệ chất xúc tác và/hoặc phương pháp được đề xuất ở đây. Theo một khía cạnh, sáng chế đề xuất oligome alpha olefin, phân đoạn oligome alpha olefin, sản phẩm oligome nặng, và/hoặc PAO có thể có độ nhớt động ở 100°C bằng ít nhất 15 mm²/s (15 cSt); theo cách khác, ít nhất 20 mm²/s (20 cSt); theo cách khác, ít nhất 25 mm²/s (25 cSt); theo cách khác, ít nhất 35 mm²/s (35 cSt); theo cách khác, ít nhất 45 mm²/s (45 cSt); theo cách khác, ít nhất 55 mm²/s (55 cSt); theo cách khác, ít nhất 65 mm²/s (65 cSt); theo cách khác, ít nhất 75 mm²/s (75 cSt); theo cách khác, ít nhất 85 mm²/s (85 cSt); theo cách khác, ít nhất 95 mm²/s (95 cSt); theo cách khác, ít nhất 105 mm²/s (105 cSt); theo cách khác, ít nhất 115 mm²/s (115 cSt); theo cách khác, ít nhất 125 mm²/s (125 cSt); theo cách khác, ít nhất 135 mm²/s (135 cSt); theo cách khác, ít nhất 145 mm²/s (145 cSt); theo cách khác, ít nhất 155 mm²/s (155 cSt); theo cách khác, ít nhất 165 mm²/s (165 cSt); theo cách khác, ít nhất 175 mm²/s (175 cSt); theo cách khác, ít nhất 200 mm²/s (200 cSt); theo cách khác, ít nhất 225 mm²/s (225 cSt); theo cách khác, ít nhất 250 mm²/s (250 cSt); theo cách khác, ít nhất 270 mm²/s (270 cSt); theo cách khác, ít nhất 300 cSt (300 mm²/s); theo cách khác, ít nhất 350 mm²/s (350 cSt); theo cách khác, ít nhất 400 mm²/s (400 cSt); theo cách khác, ít nhất 500 mm²/s (500 cSt); theo cách khác, ít nhất 600 mm²/s (600 cSt); theo cách khác, ít nhất 700 mm²/s (700 cSt); theo cách khác, ít nhất 800 mm²/s (800 cSt); theo cách khác, ít nhất 900 mm²/s (900 cSt); theo cách khác, ít nhất 1000 mm²/s (1000 cSt); theo cách khác, ít nhất 1100 mm²/s (1100 cSt) hoặc theo cách khác, ít nhất 1200 mm²/s (1200 cSt). Theo một khía cạnh, sáng chế đề xuất oligome alpha olefin, phân đoạn oligome alpha olefin, sản

phẩm oligome nặng, và/hoặc PAO có thể có độ nhớt động ở 40°C bằng ít nhất 120 mm²/s (120 cSt); theo cách khác, ít nhất 130 mm²/s (130 cSt); theo cách khác, ít nhất 140 mm²/s (140 cSt); theo cách khác, ít nhất 150 mm²/s (150 cSt); theo cách khác, ít nhất 160 mm²/s (160 cSt); theo cách khác, ít nhất 170 mm²/s (170 cSt); theo cách khác, ít nhất 180 mm²/s (180 cSt); theo cách khác, ít nhất 190 mm²/s (190 cSt); theo cách khác, ít nhất 200 mm²/s (200 cSt); theo cách khác, ít nhất 225 mm²/s (225 cSt); theo cách khác, ít nhất 250 mm²/s (250 cSt); theo cách khác, ít nhất 270 mm²/s (270 cSt); theo cách khác, ít nhất 300 mm²/s (300 cSt); theo cách khác, ít nhất 350 mm²/s (350 cSt); theo cách khác, ít nhất 400 mm²/s (400 cSt); theo cách khác, ít nhất 500 mm²/s (500 cSt); theo cách khác, ít nhất 600 mm²/s (600 cSt); theo cách khác, ít nhất 700 mm²/s (700 cSt); theo cách khác, ít nhất 800 mm²/s (800 cSt); theo cách khác, ít nhất 900 mm²/s (900 cSt); theo cách khác, ít nhất 1000 mm²/s (1000 cSt); theo cách khác, ít nhất 1100 mm²/s (1100 cSt); theo cách khác, ít nhất 1200 mm²/s (1200 cSt); theo cách khác, ít nhất 1300 mm²/s (1300 cSt); theo cách khác, ít nhất 1400 mm²/s (1400 cSt); theo cách khác, ít nhất 1500 mm²/s (1500 cSt); theo cách khác, ít nhất 1600 mm²/s (1600 cSt); theo cách khác, ít nhất 1700 mm²/s (1700 cSt); theo cách khác, ít nhất 1800 mm²/s (1800 cSt); theo cách khác, ít nhất 1900 mm²/s (1900 cSt) hoặc theo cách khác, ít nhất 2000 mm²/s (2000 cSt). Theo một số phương án, oligome alpha olefin, phân đoạn oligome alpha olefin, sản phẩm oligome nặng, và/hoặc PAO có thể có độ nhớt động ở 100°C nằm trong khoảng từ 15 đến 1500, theo cách khác, từ 15 đến 1250; theo cách khác, từ 15 đến 1000; theo cách khác, từ 15 đến 750; theo cách khác, từ 15 đến 500; theo cách khác, từ 15 mm²/s đến 250 mm²/s (từ 15 cSt đến 250 cSt); theo cách khác, nằm trong khoảng từ 20 mm²/s đến 225 mm²/s (từ 20 cSt đến 225 cSt); theo cách khác, từ 25 mm²/s đến 55 mm²/s (từ 25 cSt đến 55 cSt); theo cách khác, nằm trong khoảng từ 30 mm²/s đến 50 mm²/s (từ 30 cSt đến 50 cSt); theo cách khác, nằm trong khoảng từ 32 mm²/s đến 48 mm²/s (từ 32 cSt đến 48 cSt); theo cách khác, từ 35 mm²/s đến 45 mm²/s (từ 35 cSt đến 45 cSt); theo cách khác, từ 40 mm²/s đến 80 mm²/s (từ 40 cSt đến 80 cSt); theo cách khác, từ 45 mm²/s đến 75 mm²/s (từ 45 cSt đến 75 cSt); theo cách khác, nằm trong khoảng từ 50 mm²/s đến 70 mm²/s (từ 50 cSt đến 70 cSt); theo cách khác, từ 60 mm²/s đến 100 mm²/s (từ 60 cSt đến 100 cSt); theo cách khác, từ 65 mm²/s đến 95 mm²/s (từ 65 cSt đến 95 cSt); theo cách khác, từ 70 mm²/s đến 90 mm²/s (từ 70 cSt đến 90 cSt); theo cách khác, nằm trong khoảng từ

80 mm²/s đến 140 mm²/s (từ 80 cSt đến 140 cSt); theo cách khác, nằm trong khoảng từ 80 mm²/s đến 120 mm²/s (từ 80 cSt đến 120 cSt); theo cách khác, từ 85 mm²/s đến 115 mm²/s (từ 85 cSt đến 115 cSt); theo cách khác, từ 90 mm²/s đến 110 mm²/s (từ 90 cSt đến 110 cSt); theo cách khác, từ 100 mm²/s đến 140 mm²/s (từ 100 cSt đến 140 cSt); theo cách khác, từ 105 mm²/s đến 135 mm²/s (từ 105 cSt đến 135 cSt); theo cách khác, từ 110 mm²/s đến 130 mm²/s (từ 110 cSt đến 130 cSt); theo cách khác, từ 120 mm²/s đến 180 mm²/s (từ 120 cSt đến 180 cSt); theo cách khác, từ 130 mm²/s đến 170 mm²/s (từ 130 cSt đến 170 cSt); theo cách khác, từ 140 mm²/s đến 160 mm²/s (từ 140 cSt đến 160 cSt); theo cách khác, từ 150 mm²/s đến 210 mm²/s (từ 150 cSt đến 210 cSt); theo cách khác, từ 160 mm²/s đến 200 mm²/s (từ 160 cSt đến 200 cSt); theo cách khác, từ 150 mm²/s đến 190 mm²/s (từ 150 cSt đến 190 cSt); theo cách khác, từ 180 mm²/s đến 240 mm²/s (từ 180 cSt đến 240 cSt); theo cách khác, từ 190 mm²/s đến 230 mm²/s (từ 190 cSt đến 230 cSt); theo cách khác, từ 200 mm²/s đến 220 mm²/s (từ 200 cSt đến 220 cSt); theo cách khác, từ 200 mm²/s đến 300 mm²/s (từ 200 cSt đến 300 cSt); theo cách khác, từ 220 mm²/s đến 280 mm²/s (từ 220 cSt đến 280 cSt); theo cách khác, từ 235 mm²/s đến 265 mm²/s (từ 235 cSt đến 265 cSt); theo cách khác, từ 250 mm²/s đến 350 mm²/s (từ 250 cSt đến 350 cSt); theo cách khác, từ 270 mm²/s đến 330 mm²/s (từ 270 cSt đến 330 cSt); theo cách khác, từ 285 mm²/s đến 315 mm²/s (từ 285 cSt đến 315 cSt); theo cách khác, từ 300 mm²/s đến 400 mm²/s (từ 300 cSt đến 400 cSt); theo cách khác, từ 320 mm²/s đến 380 mm²/s (từ 320 cSt đến 380 cSt); theo cách khác, từ 335 mm²/s đến 365 mm²/s (từ 335 cSt đến 365 cSt); theo cách khác, từ 350 mm²/s đến 450 mm²/s (từ 350 cSt đến 450 cSt); theo cách khác, từ 370 mm²/s đến 430 mm²/s (từ 370 cSt đến 430 cSt); theo cách khác, từ 385 mm²/s đến 415 mm²/s (từ 385 cSt đến 415 cSt); theo cách khác, từ 400 mm²/s đến 500 mm²/s (từ 400 cSt đến 500 cSt); theo cách khác, từ 420 mm²/s đến 480 mm²/s (từ 420 cSt đến 480 cSt); theo cách khác, từ 435 mm²/s đến 465 mm²/s (từ 435 cSt đến 465 cSt); theo cách khác, từ 450 mm²/s đến 550 mm²/s (từ 450 cSt đến 550 cSt); theo cách khác, từ 470 mm²/s đến 530 mm²/s (từ 470 cSt đến 530 cSt); theo cách khác, từ 485 mm²/s đến 515 mm²/s (từ 485 cSt đến 515 cSt); theo cách khác, từ 500 mm²/s đến 700 mm²/s (từ 500 cSt đến 700 cSt); theo cách khác, từ 540 mm²/s đến 660 mm²/s (từ 540 cSt đến 660 cSt); theo cách khác, từ 570 mm²/s đến 630 mm²/s (từ 570 cSt đến 630 cSt); theo cách khác, từ 600 mm²/s đến 800 mm²/s (từ 600 cSt đến 800 cSt); theo cách khác, từ 640 mm²/s đến 760 mm²/s (từ

640 cSt đến 760 cSt); theo cách khác, 670 mm²/s đến 740 mm²/s (670 cSt đến 740 cSt); theo cách khác, từ 700 mm²/s đến 900 mm²/s (từ 700 cSt đến 900 cSt); theo cách khác, từ 740 mm²/s đến 860 mm²/s (từ 740 cSt đến 860 cSt); theo cách khác, từ 770 mm²/s đến 830 mm²/s (từ 770 cSt đến 830 cSt); theo cách khác, từ 800 mm²/s đến 1000 mm²/s (từ 800 cSt đến 1000 cSt); theo cách khác, từ 840 mm²/s đến 960 mm²/s (từ 840 cSt đến 960 cSt); theo cách khác, từ 870 mm²/s đến 940 mm²/s (từ 870 cSt đến 940 cSt); theo cách khác, từ 900 mm²/s đến 1100 mm²/s (từ 900 cSt đến 1100 cSt); theo cách khác, từ 940 mm²/s đến 1060 mm²/s (từ 940 cSt đến 1060 cSt) hoặc theo cách khác, từ 970 mm²/s đến 1030 mm²/s (từ 970 cSt đến 1030 cSt). Theo một số phương án, oligome alpha olefin, phân đoạn oligome alpha olefin, sản phẩm oligome nặng, và/hoặc PAO có thể có độ nhớt động ở 40°C nằm trong khoảng từ 120 mm²/s đến 2000 mm²/s (từ 120 cSt đến 2000 cSt). Theo cách khác, và theo phương án bất kỳ được mô tả ở đây, polyalphaolefin được điều chế theo sáng chế có thể có độ nhớt động ở 40°C nằm trong khoảng từ 150 mm²/s đến 1750 mm²/s (từ 150 cSt đến 1750 cSt) hoặc theo cách khác, từ 200 mm²/s đến 1500 mm²/s (từ 200 cSt đến 1500 cSt).

Theo một khía cạnh khác nữa, sáng chế đề xuất oligome alpha olefin, phân đoạn oligome alpha olefin, sản phẩm oligome nặng, và/hoặc PAO có thể có chỉ số độ nhớt lớn hơn 150; theo cách khác, lớn hơn 155; theo cách khác, lớn hơn 160; theo cách khác, lớn hơn 165; theo cách khác, lớn hơn 170; theo cách khác, lớn hơn 175; theo cách khác, lớn hơn 180; theo cách khác, lớn hơn 185; theo cách khác, lớn hơn 190 hoặc theo cách khác, lớn hơn 200. Theo một khía cạnh khác, oligome alpha olefin, phân đoạn oligome alpha olefin, sản phẩm oligome nặng, và/hoặc PAO có thể có chỉ số độ nhớt nằm trong khoảng từ 150 đến 260; theo cách khác, từ 155 đến 245; theo cách khác, từ 160 đến 230 hoặc theo cách khác, từ 165 đến 220.

Theo một khía cạnh khác nữa, sáng chế đề xuất oligome alpha olefin, phân đoạn oligome alpha olefin, sản phẩm oligome nặng, và/hoặc PAO có thể có điểm rót thấp hơn 0°C; theo cách khác, thấp hơn -10°C; theo cách khác, thấp hơn -20°C; theo cách khác, thấp hơn -30°C; theo cách khác, thấp hơn -35°C; theo cách khác, thấp hơn -40°C; theo cách khác, thấp hơn -45°C; theo cách khác, thấp hơn -50°C hoặc theo cách khác, thấp hơn -55°C. Ngoài ra, oligome alpha olefin, phân đoạn oligome alpha olefin, sản phẩm oligome nặng, và/hoặc PAO theo sáng chế có thể có điểm rót nằm trong khoảng từ 0°C đến -100°C; theo cách khác, từ -10°C đến -95°C; theo cách khác, từ -

20°C đến -90°C; theo cách khác, từ -30°C đến -90°C; theo cách khác, từ -35°C đến -90°C; theo cách khác, từ -40°C đến -90°C; theo cách khác, từ -45°C đến -90°C; theo cách khác, từ -50°C đến -85°C hoặc theo cách khác, từ -55°C đến -80°C.

Theo một phương án, sáng chế đề xuất oligome alpha olefin, phân đoạn oligome alpha olefin, sản phẩm oligome nặng, và/hoặc PAO có thể có điểm cháy trên 200°C; theo cách khác, lớn hơn 225°C; theo cách khác, lớn hơn 250°C hoặc theo cách khác, lớn hơn 275°C. Theo một số phương án, sáng chế đề xuất oligome alpha olefin, phân đoạn oligome alpha olefin, sản phẩm oligome nặng, và/hoặc PAO có thể có nhiệt độ bốc cháy trên 200°C; theo cách khác, lớn hơn 225°C; theo cách khác, lớn hơn 250°C hoặc theo cách khác, lớn hơn 275°C. Theo một phương án khác, oligome alpha olefin, phân đoạn oligome alpha olefin, sản phẩm oligome nặng, và/hoặc PAO có thể có chỉ số bay hơi Noack dưới 8% trọng lượng; theo cách khác, dưới 8% trọng lượng; theo cách khác, dưới 7% trọng lượng; theo cách khác, dưới 6% trọng lượng; theo cách khác, dưới 5% trọng lượng; theo cách khác, dưới 4,5% trọng lượng; theo cách khác, dưới 4% trọng lượng; theo cách khác, dưới 3,5% trọng lượng; theo cách khác, dưới 3% trọng lượng; theo cách khác, dưới 2,5% trọng lượng; theo cách khác, dưới 2% trọng lượng; theo cách khác, dưới 1,5% trọng lượng hoặc theo cách khác, dưới 1% trọng lượng.

Theo một khía cạnh, phương pháp oligome hóa được mô tả ở đây có thể tạo ra oligome alpha olefin bằng cách cho monome alpha olefin phản ứng chủ yếu theo kiểu đầu lập thể liên kết đầu với đuôi. Theo một số phương án, oligome alpha olefin, phân đoạn bất kỳ của oligome alpha olefin (ví dụ, sản phẩm oligome nặng), và/hoặc PAO bao gồm, hoặc chủ yếu bao gồm, oligome có liên kết đầu với đuôi. Theo khía cạnh hoặc phương án được bộc lộ bất kỳ, oligome alpha olefin, phân đoạn bất kỳ của oligome alpha olefin, sản phẩm oligome nặng, và/hoặc PAO có thể chứa oligome có liên kết đầu với đuôi, trong đó có dưới 100 lỗi cho 1000 monome alpha olefin; theo cách khác, dưới 80 lỗi cho 1000 monome alpha olefin; theo cách khác, dưới 60 lỗi cho 1000 monome alpha olefin hoặc theo cách khác, dưới 40 lỗi cho 1000 monome alpha olefin. Nói chung, số lỗi (không phản ứng cộng đầu với đuôi) có thể được xác định bằng cường độ đỉnh tương đối trong phổ ^1H NMR hoặc ^{13}C NMR.

Polyalphaolefin được mô tả ở đây có thể có các đặc tính có lợi liên quan đến độ ổn định oxy hóa của nó. Một thử nghiệm về độ ổn định oxy hóa là thử nghiệm RPVOT

được xác định bằng ASTM D2272. Theo một khía cạnh, polyalphaolefin có thể có RPVOT được xác định bằng ASTM D2272 với sự có mặt của 0,5% trọng lượng chất chống oxy hóa Naugalube® APAN bằng ít nhất 2000 phút; theo cách khác, 2100 phút; theo cách khác, 2150 phút; theo cách khác, 2200 phút; theo cách khác, 2250 phút; theo cách khác, 2300 phút; theo cách khác, 2400 phút; theo cách khác, 2500 phút; theo cách khác, 2750 phút hoặc theo cách khác, 3000 phút.

Theo một khía cạnh khác nữa và theo phương án bất kỳ trong số các phương án được bộc lộ ở đây, sáng chế đề xuất polyalphaolefin có thể được mô tả bằng mức độ đồng phân lập thể tương đối theo tỷ lệ phần trăm của bộ ba *mr* (heterotactic), bộ ba *mm* (isotactic), và/hoặc bộ ba *rr* (syndiotactic) có mặt trong PAO. Theo một khía cạnh, PAO có thể có tỷ lệ phần trăm của bộ ba *mr* (heterotactic) nằm trong khoảng từ 20% đến 70%; theo cách khác, nằm trong khoảng từ 25% đến 65%; theo cách khác, nằm trong khoảng từ 30% đến 60%; theo cách khác, nằm trong khoảng từ 35% đến 55% hoặc theo cách khác, nằm trong khoảng từ 40% đến 50%. Theo một khía cạnh khác, PAO có thể có tỷ lệ phần trăm của bộ ba *mm* (isotactic) nằm trong khoảng từ 10% đến 55%; theo cách khác, nằm trong khoảng từ 15% đến 50%; theo cách khác, nằm trong khoảng từ 20% đến 45% hoặc theo cách khác, nằm trong khoảng từ 25% đến 45%. Theo một khía cạnh khác, PAO có thể có tỷ lệ phần trăm của bộ ba *mm* (isotactic) nằm trong khoảng từ 25% đến 60%, được xác định bằng cường độ đỉnh tương đối trong phổ ^1H NMR hoặc ^{13}C NMR; theo cách khác, tỷ lệ này nằm trong khoảng từ 30% đến 55%; theo cách khác, nằm trong khoảng từ 32% đến 50%; theo cách khác, nằm trong khoảng từ 35% đến 48% hoặc theo cách khác, nằm trong khoảng từ 38% đến 45%. Theo một khía cạnh khác, PAO có thể có tỷ lệ phần trăm của bộ ba *rr* (syndiotactic) nằm trong khoảng từ 5% đến 40%; theo cách khác, nằm trong khoảng từ 7,5 % đến 35%; theo cách khác, nằm trong khoảng từ 10% đến 30% hoặc theo cách khác, tỷ lệ này nằm trong khoảng từ 12,5% đến 25%. Theo một khía cạnh khác, PAO có thể có tỷ lệ phần trăm của bộ ba *rr* (syndiotactic) nằm trong khoảng từ 2% và 35%, được xác định bằng cường độ đỉnh tương đối trong phổ ^1H NMR hoặc ^{13}C NMR; theo cách khác, nằm trong khoảng từ 5% đến 30%; theo cách khác, nằm trong khoảng từ 8% đến 25%; theo cách khác, nằm trong khoảng từ 10% đến 20% hoặc theo cách khác, nằm trong khoảng từ 12% đến 18%. Nói chung, tỷ lệ phần trăm của các bộ ba thỏa mãn công thức bộ ba *mm* + bộ ba *mr* + bộ ba *rr* = 100. Nói chung, tỷ lệ phần trăm của bộ ba

mm, bộ ba mr và bộ ba rr có thể được xác định bằng cách sử dụng cường độ đỉnh của phổ ^1H NMR hoặc ^{13}C NMR như được mô tả trong tài liệu: Il Kim, Jia-Min Zhou and Hoeil Chung, "Higher α -Olefin Polymerization by Zr Complex", *J. of Polymer Science: Part A: Polymer Chemistry*, Vol. 38, 1687-1697 (2000).

Một thước đo hữu ích về mức độ đồng phân lập thể tương đối của oligome là chỉ số Bernoulli (B), được định nghĩa là $B = 4[mm][rr]/[mr]^2$, trong đó $[mm]$, $[rr]$, và $[mr]$ là tỷ lệ phần trăm của bộ ba isotactic, bộ ba syndiotactic, và bộ ba heterotactic tương ứng. Theo khía cạnh này và theo phương án bất kỳ trong số các phương án được bộc lộ ở đây, PAO theo sáng chế có thể có chỉ số Bernoulli nhỏ hơn 3; theo cách khác, nhỏ hơn 2,5; theo cách khác, nhỏ hơn 2; theo cách khác, nhỏ hơn 1,75; theo cách khác, nhỏ hơn 1,7; theo cách khác, nhỏ hơn 1,65; theo cách khác, nhỏ hơn 1,6; theo cách khác, nhỏ hơn 1,55; theo cách khác, nhỏ hơn 1,5; theo cách khác, nhỏ hơn 1,45; theo cách khác, nhỏ hơn 1,4; theo cách khác, nhỏ hơn 1,35; theo cách khác, nhỏ hơn 1,3; theo cách khác, nhỏ hơn 1,25; theo cách khác, nhỏ hơn 1,25 hoặc theo cách khác, nhỏ hơn 1,15. Theo một khía cạnh khác nữa, sáng chế đề xuất polyalphaolefin có thể có chỉ số Bernoulli trong khoảng $1,4 \pm 0,25$; theo cách khác, trong khoảng $1,4 \pm 0,2$; theo cách khác, trong khoảng $1,4 \pm 0,15$; theo cách khác, trong khoảng $1,4 \pm 0,10$; theo cách khác, trong khoảng $1,3 \pm 0,3$; theo cách khác, trong khoảng $1,3 \pm 0,25$; theo cách khác, trong khoảng $1,3 \pm 0,2$; theo cách khác, trong khoảng $1,3 \pm 0,15$; theo cách khác, trong khoảng $1,4 \pm 0,1$; theo cách khác, trong khoảng $1,2 \pm 0,35$; theo cách khác, trong khoảng $1,2 \pm 0,3$; theo cách khác, trong khoảng $1,2 \pm 0,25$; theo cách khác, trong khoảng $1,2 \pm 0,2$; theo cách khác, trong khoảng $1,2 \pm 0,15$; theo cách khác, trong khoảng $1,1 \pm 0,40$; theo cách khác, trong khoảng $1,1 \pm 0,3$; theo cách khác, trong khoảng $1,1 \pm 0,2$ hoặc theo cách khác, trong khoảng $1,1 \pm 0,15$. Ngoài ra, tổ hợp bất kỳ các đặc điểm riêng rẽ được mô tả ở đây có thể có mặt trong PAO được điều chế như mô tả ở đây. Ngoài ra, polyalphaolefin được bộc lộ theo phương án bất kỳ có thể có độ ổn định trượt dưới dạng mức độ giảm độ nhớt dưới 1%, được xác định theo ASTM D6278-07. Theo cách khác, polyalphaolefin được điều chế theo sáng chế cũng có thể có độ ổn định trượt dưới dạng mức độ giảm độ nhớt thấp hơn 0,75%; theo cách khác, thấp hơn 0,5 hoặc theo cách khác, thấp hơn 0,25.

Ngoài ra, polyalphaolefin được bộc lộ theo phương án bất kỳ ở đây có thể có

chỉ số đa phân tán (PDI) nằm trong khoảng từ 1,4 đến 3, được xác định từ M_n và M_w thu được từ phương pháp sắc ký thẩm gel. Theo cách khác, polyalphaolefin được điều chế theo sáng chế cũng có thể có chỉ số đa phân tán (PDI) nằm trong khoảng từ 1,5 đến 2,8; theo cách khác, chỉ số đa phân tán nằm trong khoảng từ 1,6 đến 2,6; theo cách khác, chỉ số đa phân tán nằm trong khoảng từ 1,7 đến 2,5; theo cách khác, chỉ số đa phân tán nằm trong khoảng từ 1,8 đến 2,3 hoặc theo cách khác, chỉ số đa phân tán nằm trong khoảng từ 1,9 đến 2,1.

Theo một phương án khác, PAO có thể có đặc điểm là không có hiện tượng kết tinh có thể thấy rõ. Nói chung, hiện tượng kết tinh có thể thấy rõ được xác định bằng cách phân tích nhiệt bằng cách sử dụng nhiệt lượng kế quét vi phân (DSC) như được mô tả ở đây. Theo một phương án khác nữa, PAO có thể có đặc điểm là không có hiện tượng kết tinh có thể thấy rõ ở nhiệt độ trên -40°C như được xác định bằng phương pháp đo nhiệt lượng bằng tia quét vi phân bằng cách sử dụng ASTM D 3418.

Như được mô tả ở đây, PAO có thể được mô tả bằng cách sử dụng hỗn hợp bất kỳ của monome alpha olefin được sử dụng để tạo ra PAO, lượng các đơn vị monome alpha olefin được phát hiện trong PAO, lượng monome được hydro hóa phát hiện được trong PAO, lượng dime được hydro hóa trong PAO, lượng trime được hydro hóa phát hiện được trong PAO, lượng oligome cao được hydro hóa phát hiện được trong PAO, M_w , M_n , độ nhớt động ở 100°C , độ nhớt động ở 40°C , chỉ số độ nhớt, điểm rót, kết quả thử nghiệm RPVOT, sai số trong liên kết cộng đầu với đuôi, mức độ đồng phân lập thể tương đối, chỉ số Bernoulli, độ ổn định trượt được xác định bằng ASTM D6278-07, chỉ số đa phân tán, và/hoặc sự có mặt hoặc không có mặt của hiện tượng kết tinh có thể thấy rõ. Theo một phương án không làm giới hạn phạm vi sáng chế, sáng chế đề xuất PAO được điều chế từ monome alpha olefin bao gồm $\text{C}_4\text{-C}_{20}$ alpha olefin mạch thẳng, PAO này chứa: a) dưới 1% trọng lượng monome alpha olefin được hydro hóa, b) dưới 3% trọng lượng dime được hydro hóa, và c) trên 80% trọng lượng oligome cao được hydro hóa; và có i) độ nhớt động ở 100°C bằng ít nhất $15\text{ mm}^2/\text{s}$ (15 cSt), ii) chỉ số độ nhớt lớn hơn 150, và iii) điểm rót thấp hơn 0°C . Các phương án khác của PAO dễ dàng được thấy rõ dựa trên bản mô tả này.

Theo một khía cạnh không làm giới hạn sáng chế khác, sáng chế đề xuất PAO được điều chế từ monome alpha olefin chủ yếu bao gồm alpha olefin mạch thẳng có 8

nguyên tử cacbon, PAO này chứa a) dưới 0,4% trọng lượng monome alpha olefin được hydro hóa, b) dưới 1,5% trọng lượng dime được hydro hóa, và c) trên 88% trọng lượng oligome cao được hydro hóa; và có i) độ nhớt động ở 100°C nằm trong khoảng từ 30 mm²/s đến 50 mm²/s (từ 30 cSt đến 50 cSt), ii) chỉ số độ nhớt nằm trong khoảng từ 150 đến 260, và iii) điểm rót thấp hơn -30°C. Theo một số phương án, polyalphaolefin có thể có RPVOT được xác định bằng ASTM D2272 với sự có mặt của 0,5% trọng lượng chất chống oxy hóa Naugalube® APAN bằng ít nhất 2100 phút. Theo một phương án khác, polyalphaolefin cũng có thể còn đặc trưng bởi có chỉ số Bernoulli thấp hơn 1,65 hoặc theo cách khác, trong khoảng $1,4 \pm 0,25$. Theo các phương án khác nữa, PAO này có thể được đặc trưng bởi không có hiện tượng kết tinh quan sát được khi xác định bằng phương pháp đo nhiệt lượng bằng tia quét vi phân bằng cách sử dụng ASTM D 3418. Các phương án khác của PAO dễ dàng được thấy rõ dựa trên bản mô tả này.

Theo một phương án không làm giới hạn phạm vi sáng chế khác, sáng chế đề xuất PAO được điều chế từ monome alpha olefin chủ yếu bao gồm alpha olefin mạch thẳng có 8 nguyên tử cacbon, PAO này chứa a) dưới 0,5% trọng lượng monome alpha olefin được hydro hóa, b) dưới 1% trọng lượng dime được hydro hóa, và c) trên 88% trọng lượng oligome cao được hydro hóa; và có i) độ nhớt động ở 100°C nằm trong khoảng từ 80 mm²/s đến 140 mm²/s (từ 80 cSt đến 140 cSt), ii) chỉ số độ nhớt nằm trong khoảng từ 150 đến 260, và iii) điểm rót thấp hơn -30°C. Theo một phương án, polyalphaolefin có thể có RPVOT được xác định bằng ASTM D2272 với sự có mặt của 0,5% trọng lượng chất chống oxy hóa Naugalube® APAN bằng ít nhất 2000 phút. Theo một phương án khác, polyalphaolefin có thể có chỉ số Bernoulli thấp hơn 3 hoặc theo cách khác, chỉ số này nằm trong khoảng $1,1 \pm 0,4$. Theo một phương án khác nữa, PAO có thể không có hiện tượng kết tinh quan sát được khi xác định bằng phương pháp đo nhiệt lượng bằng tia quét vi phân bằng cách sử dụng ASTM D 3418. Các phương án khác của PAO dễ dàng được thấy rõ dựa trên bản mô tả này.

Theo một phương án, oligome alpha olefin có thể là oligome alpha olefin được điều chế bằng phương pháp alpha olefin hóa sản phẩm oligome bất kỳ được mô tả ở đây. Theo một số phương án, sản phẩm oligome nặng này có thể là sản phẩm oligome nặng được điều chế bằng phương pháp điều chế sản phẩm oligome nặng bất kỳ được

mô tả ở đây. Theo một phương án khác nữa, PAO có thể là PAO được điều chế bằng phương pháp điều chế PAO bất kỳ được mô tả ở đây.

Chế phẩm bôi trơn

Sáng chế còn đề xuất các dầu bôi trơn tổng hợp mới chứa PAO như được mô tả ở đây, và/hoặc được điều chế theo phương pháp được mô tả trong bản mô tả này. PAO được mô tả ở đây và/hoặc được điều chế theo các phương pháp theo sáng chế cũng có thể dùng trong chế phẩm bôi trơn và làm chất làm thay đổi độ nhớt. PAO được mô tả ở đây và/hoặc được điều chế theo các phương pháp này có thể được sử dụng làm dầu nền duy nhất hoặc được sử dụng kết hợp với dầu nền khác (ví dụ, dầu khoáng và/hoặc polyalphaolefin khác). Chế phẩm bôi trơn sử dụng PAO được mô tả ở đây và/hoặc được điều chế theo các phương pháp theo sáng chế có thể được sử dụng kết hợp với các chất phụ gia khác nhau. Chế phẩm bôi trơn hoặc chất làm thay đổi độ nhớt có thể chủ yếu bao gồm PAO được mô tả ở đây và/hoặc được điều chế theo các phương pháp theo sáng chế mà không có chất phụ gia. Theo cách khác, chế phẩm bôi trơn hoặc chất làm thay đổi độ nhớt có thể chứa PAO bất kỳ được mô tả ở đây và/hoặc được điều chế theo các phương pháp và chất phụ gia bất kỳ được mô tả ở đây. Chất phụ gia có thể được sử dụng cùng với PAO bất kỳ được mô tả ở đây bao gồm, nhưng không chỉ giới hạn ở, chất khử hoạt tính của kim loại, chất tẩy rửa, chất phân tán, chất chống oxy hóa, và chất tương tự.

Mặc dù không muốn bị ràng buộc bởi lý thuyết, theo một số khía cạnh, PAO được điều chế theo sáng chế có thể đặc trưng bởi có chỉ số độ nhớt cao kết hợp với điểm rót tương đối thấp trong số các đặc tính khác. Các đặc tính này có thể có lợi ích cụ thể trong chế phẩm bôi trơn và là cần thiết đối với chất làm thay đổi độ nhớt. Theo khía cạnh này, PAO bất kỳ được mô tả ở đây và/hoặc PAO được điều chế theo sáng chế có thể được sử dụng làm dầu nền trong chế phẩm bôi trơn hoặc làm chất làm thay đổi độ nhớt. Theo một phương án, PAO được mô tả ở đây và/hoặc PAO được điều chế theo sáng chế có thể được sử dụng dưới dạng dầu nền duy nhất hoặc hỗn hợp với các dầu nền khác. Theo một phương án, PAO được mô tả ở đây và/hoặc PAO được điều chế theo sáng chế có thể được sử dụng kết hợp với các chất phụ gia khác nhau. Ví dụ, PAO bất kỳ được mô tả ở đây và/hoặc PAO được điều chế theo sáng chế có thể được sử dụng làm dầu nền trong chế phẩm bôi trơn hoặc chất làm thay đổi độ nhớt; theo

cách khác, được sử dụng làm dầu nền trong chế phẩm bôi trơn hoặc theo cách khác, được sử dụng làm chất làm thay đổi độ nhớt. Theo một phương án, chế phẩm bôi trơn hoặc chất làm thay đổi độ nhớt có thể chứa PAO bất kỳ được mô tả ở đây và/hoặc PAO được điều chế theo sáng chế và ít nhất một chất phụ gia. Theo một phương án, ít nhất một chất phụ gia có thể là chất khử hoạt tính kim loại, chất tẩy rửa, chất phân tán (ví dụ, chất phân tán borat hóa hoặc không borat hóa), chất cải thiện chỉ số độ nhớt, chất làm thay đổi độ nhớt, chất oxy hóa, chất ức chế ăn mòn, chất làm giảm điểm rót, chất bịt kín gây trương, chất khử nhũ tương, chất chống tạo bọt, thành phần polysulfua, dầu có độ nhớt có tác dụng bôi trơn, axit chứa phospho, muối chứa phospho, este chứa phospho, hoặc hỗn hợp bất kỳ của chúng.

Theo một số phương án, chất khử hoạt tính của kim loại có thể được sử dụng bao gồm, nhưng không chỉ giới hạn ở, các dẫn xuất của benzotriazol (“hợp chất dựa trên benzotriazol”), 1,2,4-triazol, benzimidazol, 2-alkyldithiobenzimidazol, 2-alkyldithiobenzothiazol, 2-(*N,N*-dialkyldithiocarbamoyl)benzothiazol, 2,5-bis(alkyl-dithio)-1,3,4-thiadiazol, 2,5-bis(*N,N*-dialkyldithiocarbamoyl)-1,3,4-thiadiazol, 2-alkyldithio-5-mercapto thiadiazol, và hỗn hợp bất kỳ của chúng. Ví dụ, theo một khía cạnh, chất khử hoạt tính kim loại là dẫn xuất của benzotriazol. Theo một phương án, chất khử hoạt tính kim loại là 2,5-bis(alkyl-dithio)-3,4-thiadiazol. Chất khử hoạt tính kim loại có thể được sử dụng một mình hoặc kết hợp với chất khử hoạt tính của kim loại khác trong chế phẩm bôi trơn. Các dẫn xuất hydrocarbyl của benzotriazol có thể chứa nhóm thế hydrocarbyl ở vị trí có thể thế bất kỳ của vòng, ví dụ, ở vị trí 1, 4, 5, 6, hoặc 7, hoặc tổ hợp các vị trí này đối với nhiều nhóm thế. Nhóm hydrocarbyl thường là nhóm C_1 - C_{30} hydrocarbyl; theo cách khác, là nhóm C_1 - C_{15} hydrocarbyl; theo cách khác, là nhóm C_1 - C_{10} hydrocarbyl hoặc theo cách khác, là nhóm C_1 - C_7 hydrocarbyl. Nhóm hydrocarbyl được mô tả ở đây và có thể được sử dụng không giới hạn để mô tả thêm các dẫn xuất của benzotriazol chứa nhóm hydrocarbyl. Theo một phương án, chất khử hoạt tính kim loại là tolyltriazol. Theo một khía cạnh, chất khử hoạt tính của kim loại thích hợp có thể dùng trong chế phẩm bôi trơn theo sáng chế được nêu trong đơn yêu cầu cấp patent Hoa Kỳ số 20040259743.

Theo một phương án, chất khử hoạt tính của kim loại thích hợp có thể là, nhưng không chỉ giới hạn ở, 2,5-bis(alkyl-dithio)-1,3,4-thiadiazol. Nhóm alkyl của 2,5-bis(alkyl-dithio)-1,3,4-thiadiazol có thể là nhóm C_1 - C_{30} alkyl; theo cách khác, là nhóm

C₂-C₂₅ alkyl; theo cách khác, là nhóm C₃-C₂₀ alkyl hoặc theo cách khác, là nhóm C₄-C₁₅ alkyl. Nhóm alkyl được mô tả ở đây và có thể được sử dụng không giới hạn để mô tả thêm là 2,5-bis(alkyl-dithio)-1,3,4-thiadiazol. Theo một số phương án, 2,5-bis(alkyl-dithio)-1,3,4-thiadiazol có thể là, nhưng không chỉ giới hạn ở, 2,5-bis(tert-octyldithio)-1,3,4-thiadiazol, 2,5-bis(tert-nonyldithio)-1,3,4-thiadiazol, 2,5-bis(tert-dexyldithio)-1,3,4-thiadiazol, 2,5-bis(tert-undexyldithio)-1,3,4-thiadiazol, 2,5-bis(tert-dodexyldithio)-1,3,4-thiadiazol, 2,5-bis(tert-tridexyldithio)-1,3,4-thiadiazol, 2,5-bis(tert-tetradexyldithio)-1,3,4-thiadiazol, 2,5-bis(tert-pentadexyldithio)-1,3,4-thiadiazol, 2,5-bis(tert-hexadexyldithio)-1,3,4-thiadiazol, 2,5-bis(tert-heptadexyldithio)-1,3,4-thiadiazol, 2,5-bis(tert-octadexyldithio)-1,3,4-thiadiazol, 2,5-bis(tert-nonadexyldithio)-1,3,4-thiadiazol, 2,5-bis(tert-eicosyldithio)-1,3,4-thiadiazol, và hỗn hợp của chúng. Theo một phương án khác, chất khử hoạt tính kim loại có thể là 2,5-bis(tert-nonyldithio)-1,3,4-thiadiazol. Chất khử hoạt tính kim loại có thể có mặt trong chế phẩm với lượng nằm trong khoảng từ 0,0001 đến 5% trọng lượng chế phẩm bôi trơn; theo cách khác, từ 0,0003 đến 1,5% trọng lượng chế phẩm bôi trơn; theo cách khác, từ 0,0005 đến 0,5% trọng lượng chế phẩm bôi trơn hoặc theo cách khác, từ 0,001 đến 0,2% trọng lượng chế phẩm bôi trơn. Ngoài ra, chất khử hoạt tính của kim loại thích hợp khác bao gồm, nhưng không chỉ giới hạn ở, hợp chất trên cơ sở este của axit galic. Theo một khía cạnh, ví dụ, chất khử hoạt tính kim loại có thể là benzotriazol, tolyltriazol, hoặc hỗn hợp của chúng. Theo một khía cạnh khác, chất khử hoạt tính kim loại thích hợp là IRGAMET™ 39, sản phẩm của Ciba Specialty Chemicals Corporation.

Chất tẩy rửa có thể được sử dụng trong chế phẩm bôi trơn theo sáng chế bao gồm nhưng không chỉ giới hạn ở, chất tẩy rửa chứa kim loại (hoặc chất tẩy rửa kim loại). Chất tẩy rửa kim loại có thể bao gồm muối quá bazơ hoặc muối trung tính tan trong dầu của kim loại kiềm hoặc kim loại kiềm thổ với một hoặc nhiều axit sau (hoặc hỗn hợp bất kỳ của chúng): (1) axit sulfonic, (2) axit carboxylic, (3) axit salixylic, (4) alkyl phenol, (5) alkyl phenol lưu hóa, và (6) axit phospho hữu cơ khác biệt bởi ít nhất một liên kết trực tiếp cacbon-phospho. Axit phospho hữu cơ có thể bao gồm các axit được điều chế bằng cách xử lý polyme olefin (ví dụ, polyisobutylen có trọng lượng phân tử khoảng 1000) bằng chất phospho hóa như phospho trichlorua, phospho heptasulfua, phospho pentasulfua, phospho trichlorua và lưu huỳnh, phospho trắng và

lưu huỳnh halogenua, hoặc phosphorothioic clorua. Theo một khía cạnh khác, chất tẩy rửa có thể được sử dụng trong chế phẩm bôi trơn theo sáng chế bao gồm sulfonat trung tính và quá kiềm tan trong dầu, phenat, phenat lưu hóa, thiophosphonat, salixylat, và naphtenat và carboxylat tan trong dầu khác của kim loại, cụ thể là kim loại kiềm hoặc kim loại kiềm thổ; theo cách khác, kim loại kiềm thổ hoặc theo cách khác, kim loại kiềm thổ. Theo một số phương án, kim loại có thể là lithi, natri, kali, magie, canxi, hoặc bari; theo cách khác, kim loại có thể là lithi, natri, hoặc kali; theo cách khác, kim loại có thể là magie, canxi, hoặc bari; theo cách khác, kim loại có thể là lithi; theo cách khác, kim loại là natri; theo cách khác, kim loại là kali; theo cách khác, kim loại là magie; theo cách khác, kim loại là canxi hoặc theo cách khác, kim loại là bari.

Theo một khía cạnh, chất tẩy rửa bất kỳ được sử dụng trong chế phẩm bôi trơn hoặc chế phẩm làm thay đổi độ nhớt chứa PAO bất kỳ được mô tả ở đây và/hoặc PAO được điều chế theo sáng chế có thể là chất tẩy rửa kim loại kiềm, chất tẩy rửa kim loại kiềm thổ, chất tẩy rửa quá kiềm chứa hợp chất kim loại Mg, Be, Sr, Na, Ca và K, hoặc hỗn hợp bất kỳ của chúng; theo cách khác, chất tẩy rửa là chất tẩy rửa kim loại kiềm thổ; theo cách khác, chất tẩy rửa kim loại kiềm thổ hoặc theo cách khác, chất tẩy rửa là chất tẩy rửa quá kiềm chứa hợp chất kim loại Mg, Be, Sr, Na, Ca và K. Theo một số phương án, chất tẩy rửa có thể chứa chất tẩy rửa canxi quá kiềm. Theo một số phương án, chất tẩy rửa bất kỳ được sử dụng trong chế phẩm bôi trơn hoặc chế phẩm làm thay đổi độ nhớt chứa PAO bất kỳ được mô tả ở đây và/hoặc PAO được điều chế theo sáng chế có thể là phenat, carboxylat, sulfonat, salixylat, salixarat, calixarat, saligenin, hoặc hỗn hợp bất kỳ của chúng.

Khi được sử dụng liên quan đến chất tẩy rửa kim loại, thuật ngữ “quá kiềm” được sử dụng để chỉ muối kim loại trong đó kim loại có mặt với lượng theo hệ số tỷ lệ lớn hơn gốc hữu cơ. Phương pháp điều chế muối quá kiềm thường được sử dụng bao gồm việc gia nhiệt dung dịch dầu khoáng chứa axit có lượng dư hơn lượng theo hệ số tỷ lệ của chất trung hòa kim loại như kim loại oxit, hydroxit, cacbonat, bicacbonat, hoặc sulfua, và lọc sản phẩm tạo ra. Tương tự, việc sử dụng “chất trợ xúc tác” trong bước trung hòa để đưa vào lượng dư lớn của kim loại là đã biết. Ví dụ về hợp chất có thể dùng làm chất trợ xúc tác bao gồm hợp chất phenolic (ví dụ, phenol, naphtol, alkyl phenol, thiophenol, alkylphenol lưu hóa, và sản phẩm ngưng tụ của formaldehyt với hợp chất phenolic), rượu (ví dụ, metanol, 2-propanol, octanol, 2-

etoxyetanol, dietylen glycol etyl ete, etylen glycol, rượu stearyllic, và rượu xyclohexylic), và amin (ví dụ, anilin, phenylen diamin, phenothiazin, phenyl-beta-naphtylamin, và dodexylamin). Ví dụ, một phương pháp để điều chế muối bazơ bao gồm bước trộn axit với lượng dư chất trung hòa kim loại kiềm thổ bazơ và ít nhất một chất trợ xúc tác là rượu, và cacbonat hóa hỗn hợp ở nhiệt độ cao như nhiệt độ nằm trong khoảng từ 60°C đến 200°C.

Ví dụ về chất tẩy rửa chứa kim loại thích hợp bao gồm, nhưng không chỉ giới hạn ở, muối trung tính và quá kiềm của các chất như natri sulfonat trung tính, natri sulfonat quá kiềm, natri carboxylat, natri salixylat, natri phenat, natri phenat lưu hóa, lithi sulfonat, lithi carboxylat, lithi salixylat, lithi phenat, lithi phenat lưu hóa, canxi sulfonat, canxi carboxylat, canxi salixylat, canxi phenat, canxi phenat lưu hóa, magie sulfonat, magie carboxylat, magie salixylat, magie phenat, magie phenat lưu hóa, kali sulfonat, kali carboxylat, kali salixylat, kali phenat, kali phenat lưu hóa, kẽm sulfonat, kẽm carboxylat, kẽm salixylat, kẽm phenat, và kẽm phenat lưu hóa. Ví dụ khác bao gồm muối canxi, lithi, natri, kali, và magie của olefin phospho lưu hóa thủy phân có 10 đến 2000 nguyên tử cacbon hoặc của rượu được phospho lưu hóa thủy phân và/hoặc hợp chất phenolic được thế nhóm béo có 10 đến 2000 nguyên tử cacbon. Ví dụ khác nữa bao gồm muối canxi, lithi, natri, kali, và magie của axit carboxylic béo và axit xyclocarboxylic béo được thế nhóm béo và nhiều muối kim loại kiềm và kim loại kiềm thổ tương tự khác của axit hữu cơ tan trong dầu. Hỗn hợp muối trung tính hoặc quá kiềm của hai hoặc nhiều kim loại kiềm và/hoặc kim loại kiềm thổ khác nhau có thể được sử dụng. Tương tự, muối trung tính và/hoặc quá kiềm của hỗn hợp của hai hoặc nhiều axit khác nhau cũng có thể được sử dụng.

Như đã biết, chất tẩy rửa kim loại quá kiềm thường được coi là chứa lượng quá kiềm của bazơ vô cơ, thường ở dạng hệ vi phân tán hoặc huyền phù dạng keo. Do đó, thuật ngữ “tan trong dầu” được áp dụng với chất tẩy rửa kim loại được dự định bao gồm chất tẩy rửa kim loại trong đó bazơ vô cơ có mặt không nhất thiết tan hoàn toàn hoặc tan thực sự trong dầu theo đúng nghĩa của thuật ngữ này, bởi vì chất tẩy rửa này khi được trộn vào dầu nên hoạt động giống như khi chúng được hòa tan hoàn toàn và đầy trong dầu. Nói chung, chất tẩy rửa kim loại khác nhau được nêu trên đây đôi khi được gọi là muối trung tính, kiềm, hoặc quá kiềm của axit hữu cơ chứa kim loại kiềm hoặc kim loại kiềm thổ.

Chất tẩy rửa trung tính và quá kiềm chứa kim loại và kim loại kiềm thổ tan trong dầu và phương pháp điều chế được mô tả trong các patent Hoa Kỳ số 2,001,108, 2,081,075, 2,095,538, 2,144,078, 2,163,622, 2,270,183, 2,292,205, 2,335,017, 2,399,877, 2,416,281, 2,451,345, 2,451,346, 2,485,861, 2,501,731, 2,501,732, 2,585,520, 2,671,758, 2,616,904, 2,616,905, 2,616,906, 2,616,911, 2,616,924, 2,616,925, 2,617,049, 2,695,910, 3,178,368, 3,367,867, 3,496,105, 3,629,109, 3,865,737, 3,907,691, 4,100,085, 4,129,589, 4,137,184, 4,184,740, 4,212,752, 4,617,135, 4,647,387, và 4,880,550, ngoài các patent khác.

Nếu cần, chất tẩy rửa kim loại được sử dụng trong bản mô tả này có thể là chất tẩy rửa trung tính và/hoặc quá kiềm boronat chứa kim loại kiềm thổ tan trong dầu. Phương pháp điều chế chất tẩy rửa kim loại boronat được mô tả trong các patent Hoa Kỳ số 3,480,548, 3,679,584, 3,829,381, 3,909,691, 4,965,003, và 4,965,004, ngoài các patent khác. Nói chung, chất tẩy rửa khác có thể dùng trong chế phẩm bôi trơn còn bao gồm chất tẩy rửa “lai” được tạo ra với các hệ chất hoạt động bề mặt hỗn hợp, ví dụ, phenat/salixylat, sulfonat/phenat, sulfonat/salixylat, sulfonat/phenat/salixylat, như được mô tả trong các patent Hoa Kỳ số 6,153,565, 6,281,179, 6,429,178, và 6,429,179, ngoài các patent khác.

Chất tẩy rửa có thể có mặt trong chế phẩm bôi trơn với lượng cần thiết hoặc hữu hiệu bất kỳ. Theo một khía cạnh, chế phẩm bôi trơn có thể chứa chất tẩy rửa với lượng nằm trong khoảng từ 0,01% đến 0,8% trọng lượng so với tổng trọng lượng của chế phẩm bôi trơn; theo cách khác, lượng này nằm trong khoảng từ 0,05% đến 0,6% trọng lượng so với tổng trọng lượng của chế phẩm bôi trơn; theo cách khác, lượng này nằm trong khoảng từ 0,09% đến 0,4% trọng lượng so với tổng trọng lượng của chế phẩm bôi trơn. Theo một khía cạnh, chế phẩm có thể chứa chất phụ gia với lượng nằm trong khoảng từ 0,06% đến 5% trọng lượng so với tổng trọng lượng của chế phẩm bôi trơn; theo cách khác, lượng này nằm trong khoảng từ 0,30% đến 3,6% trọng lượng so với tổng trọng lượng của chế phẩm bôi trơn; theo cách khác, lượng này nằm trong khoảng từ 0,54% đến 2,38% trọng lượng so với tổng trọng lượng của chế phẩm bôi trơn. Tuy nhiên, người có hiểu biết trung bình về lĩnh vực kỹ thuật này sẽ hiểu được rằng lượng bất kỳ có thể được sử dụng trong chế phẩm bôi trơn theo sáng chế.

Theo một khía cạnh và để làm ví dụ, chất phân tán thích hợp để sử dụng trong

chế phẩm bôi trơn theo sáng chế bao gồm, nhưng không chỉ giới hạn ở, chất phân tán không có tro chứa nitơ bazơ. Chất phân tán không có tro thích hợp, bao gồm, nhưng không chỉ giới hạn ở, hydrocarbyl succinimit, hydrocarbyl succinamit, hỗn hợp este/amit của axit succinic được thế hydrocarbyl (ví dụ, hỗn hợp được tạo ra bằng cách cho chất axyl hóa succinic được thế hydrocarbyl phản ứng từng bước một hoặc phản ứng với hỗn hợp gồm rượu và amin, và/hoặc với rượu amino), sản phẩm ngưng tụ Mannich (ví dụ, sản phẩm được tạo ra từ phenol được thế hydrocarbyl, formaldehyt và polyamin), và chất phân tán amin được tạo ra bằng cách cho halogenua béo hoặc vòng béo có trọng lượng phân tử cao phản ứng với amin (ví dụ, polyalkylen polyamin). Hỗn hợp của chất bất kỳ trong số các chất phân tán này cũng có thể được sử dụng.

Phương pháp điều chế chất phân tán này là đã biết và được phát hiện như sau. Ví dụ, succinimit và succinamit được thế hydrocarbyl và phương pháp điều chế chúng được mô tả trong các patent Hoa Kỳ số 3,018,247, 3,018,250, 3,018,291, 3,172,892, 3,185,704, 3,219,666, 3,272,746, 3,361,673, và 4,234,435, ngoài các patent khác. Este-amit hỗn hợp của axit succinic được thế hydrocarbyl được mô tả, ví dụ, trong các patent Hoa Kỳ số 3,576,743, 4,234,435, và 4,873,009, ngoài các patent khác. Chất phân tán Mannich là sản phẩm ngưng tụ của phenol được thế hydrocarbyl, formaldehyt và polyamin được mô tả, ví dụ, trong các patent Hoa Kỳ số 3,368,972, 3,413,347, 3,539,633, 3,697,574, 3,725,277, 3,725,480, 3,726,882, 3,798,247, 3,803,039, 3,985,802, 4,231,759, và 4,142,980, ngoài các patent khác. Chất phân tán amin và phương pháp điều chế chúng từ halogenua và amin béo hoặc vòng béo có trọng lượng phân tử cao được mô tả, ví dụ, trong các patent Hoa Kỳ số 3,275,554, 3,438,757, 3,454,555, và 3,565,804, ngoài các patent khác.

Theo một khía cạnh và nói chung, amin chứa nguyên tử nitơ bazơ hoặc nguyên tử nitơ bazơ và một hoặc nhiều nhóm hydroxyl, kể cả amin thuộc loại như được mô tả trong patent Hoa Kỳ số 4,235,435 có thể được sử dụng để tạo ra chất phân tán thích hợp để sử dụng ở đây. Amin này có thể là polyamin như polyalkylen polyamin, polyamin được thế hydroxy và polyoxyalkylen polyamin. Polyalkylen polyamin bao gồm dietylen triamin, trietylen tetramin, tetraetylen pentamin, pentaetylen hexamin, và dipropylen triamin. Polyetylen polyamin tinh khiết có thể được sử dụng, cũng như hỗn hợp của polyetylen polyamin mạch thẳng, mạch nhánh và mạch vòng có trung bình khoảng từ 2 đến 7 nguyên tử nitơ cho một phân tử, như từ 3 đến 5 nguyên tử nitơ cho

một phân tử. Amin được thể hydroxy bao gồm, nhưng không chỉ giới hạn ở, *N*-hydroxyalkyl-alkylen polyamin như *N*-(2-hydroxyetyl)etylen diamin, *N*-(2-hydroxyetyl)piperazin, và alkylen diamin *N*-hydroxyalkyl hóa thuộc loại như được mô tả trong patent Hoa Kỳ số 4,873,009. Polyoxyalkylen polyamin thường bao gồm polyoxyetylen và polyoxypropylen diamin và triamin có trọng lượng phân tử trung bình nằm trong khoảng từ 200 đến 2500.

Theo một khía cạnh, ít nhất một chất phân tán có thể chứa nhóm thể hydrocarbonyl như hydrocacbon olefin. Ví dụ không làm giới hạn sáng chế về hydrocacbon olefin thích hợp bao gồm isobuten. Isobutylen được sử dụng có thể là dòng chứa isobutylen được tạo ra bằng cách crackinh dòng hydrocacbon để tạo ra hỗn hợp hydrocacbon chủ yếu bao gồm hydrocacbon có 4 nguyên tử cacbon. Ví dụ, quy trình crackinh nhiệt (thiết bị crackinh dùng hơi nước) tạo ra phần cắt có 4 nguyên tử cacbon bao gồm các parafin có 4 nguyên tử cacbon và olefin có 4 nguyên tử cacbon, với thành phần chính là isobuten. Butadien và axetylen hầu như được loại bỏ ra khỏi dòng bằng kỹ thuật cắt chiết hoặc hydro hóa chọn lọc bổ sung. Dòng tạo ra được gọi là “dịch tàn dư I” và thích hợp để tổng hợp polyisobutylen (PIB) và thường có thành phần sau: 44-49% isobuten, 24-28% 1-buten, 19-21% 2-buten, 6-8% n-butan, 2-3% isobutan. Các thành phần của dòng dịch tàn dư I có thể thay đổi tùy thuộc vào điều kiện vận hành. Dòng dịch tàn dư I có thể được tinh chế để thu được sản phẩm isobuten gần như tinh khiết, tức là sản phẩm chủ yếu bao gồm isobuten.

Chất chống oxy hóa có thể được sử dụng trong chế phẩm bôi trơn theo sáng chế bao gồm, nhưng không chỉ giới hạn ở, chất chống oxy hóa trên cơ sở amin, chất chống oxy hóa trên cơ sở phenol, và chất chống oxy hóa trên cơ sở lưu huỳnh. Chất chống oxy hóa trên cơ sở amin bao gồm, nhưng không chỉ giới hạn ở, hợp chất trên cơ sở monoalkyldiphenylamin (ví dụ, monooctyldiphenylamin và monononyldiphenylamin), hợp chất trên cơ sở dialkyldiphenylamin (ví dụ, 4,4'-dibutyldiphenylamin, 4,4'-dipentyldiphenylamin, 4,4'-dihexyldiphenylamin, 4,4'-diheptyldiphenylamin, 4,4'-dioctyldiphenylamin, và 4,4'-dinonyldiphenylamin), hợp chất trên cơ sở polyalkyldiphenylamin (ví dụ, tetrabutyldiphenylamin, tetrahexyldiphenylamin, tetraoctyldiphenylamin, và tetranonyldiphenylamin), và hợp chất trên cơ sở naphtylamin (ví dụ, alpha-naphtylamin, phenyl-alpha-naphtylamin, butylphenyl-alpha-naphtylamin, pentylphenyl-alpha-naphtylamin, hexylphenyl-alpha-naphtylamin,

heptylphenyl-alpha-naphtylamin, octylphenyl-alpha-naphtylamin, và nonylphenyl-alpha-naphtylamin). Chất chống oxy hóa trên cơ sở phenol bao gồm, nhưng không chỉ giới hạn ở, hợp chất trên cơ sở monophenol (ví dụ, 2,6-di-tert-butyl-4-metylphenol và 2,6-di-tert-butyl-4-etylphenol), và hợp chất trên cơ sở diphenol (ví dụ, 4,4'-metylenbis(2,6-di-tert-butylphenol) và 2,2'-metylenbis(4-etyl-6-tert-butylphenol)). Chất chống oxy hóa trên cơ sở lưu huỳnh bao gồm, nhưng không chỉ giới hạn ở, phenothiazin, pentaerytritol-tetrakis(3-laurylthiopropionat), bis(3,5-tert-butyl-4-hydroxybenzyl)sulfua, thiodietylenbis(3-(3,5-di-tert-butyl-4-hydroxyphenyl))propionat, và 2,6-di-tert-butyl-4-(4,6-bis(octylthio)-1,3,5-triazin-2-metylaminophenol. Theo một khía cạnh, mỗi chất chống oxy hóa này có thể được sử dụng một mình hoặc trong hỗn hợp bất kỳ của hai hoặc nhiều chất.

Theo một khía cạnh, chất khử nhũ tương bất kỳ được sử dụng trong chế phẩm bôi trơn hoặc chế phẩm làm thay đổi độ nhớt chứa PAO bất kỳ được mô tả ở đây và/hoặc PAO được điều chế theo sáng chế có thể là dẫn xuất của propylen oxit, dẫn xuất của etylen oxit, rượu polyoxyalkylen, alkyl amin, rượu amino alkoxy hóa, diamin alkoxy hóa, polyamin polyetylen glycol alkoxy hóa, polyetylen oxit, polypropylen oxit, glycolic monooleat, canxi sulfonat quá kiềm, 1-(2-hydroxyetyl)-2-alkenyl imidazolin trong đó nhóm alkenyl chứa từ 8 đến 25 nguyên tử cacbon, sản phẩm của axit béo và alkylamin, dung dịch nhựa alkylphenol formaldehyt alkoxy hóa, polyglycol alkoxy hóa, hoặc hỗn hợp bất kỳ của chúng. Theo một phương án, hợp chất alkoxy hóa bất kỳ được sử dụng làm chất khử nhũ tương có thể là alkoxylat của etylen oxit, etylen oxit được thể (ví dụ, propylen oxit), polyen oxit, hoặc hỗn hợp bất kỳ của chúng.

Theo một khía cạnh, thành phần polysulfua bất kỳ được sử dụng trong chế phẩm bôi trơn hoặc chế phẩm làm thay đổi độ nhớt chứa PAO bất kỳ được mô tả ở đây và/hoặc PAO được điều chế theo sáng chế có thể là olefin sulfua, hợp chất oligome lưu huỳnh, hợp chất dialkyl trisulfua, hợp chất dialkyl tetrasulfua, thiadiazol được thể, 2-(*N,N*-dialkyldithiocarbamoyl)benzothiazol, 2,5-bis(alkyldithio)-1,3,4-thiadiazol, 2,5-bis(tert-nonyldithio)-1,3,4 thiadiazol, 2,5-bis(*N,N*-dialkyldithiocarbamoyl)-1,3,4-thiadiazol, 2-alkyldithio-5-mercapto thiadiazol, metyl este lưu hóa của axit oleic, alkylphenol lưu hóa, dipenten lưu hóa, dixyclopentadien lưu hóa, terpen lưu hóa, sản phẩm cộng Diels-Alder lưu hóa, hydrocacbon phospho lưu hóa, hoặc hỗn hợp bất kỳ

của chúng.

Theo một khía cạnh, chất ức chế bột bất kỳ được sử dụng trong chế phẩm bôi trơn hoặc chế phẩm làm thay đổi độ nhớt chứa PAO bất kỳ được mô tả ở đây và/hoặc PAO được điều chế theo sáng chế có thể là copolyme của etyl acrylat và 2-ethylhexylacrylat, polyme chứa monome vinyl axetat, polyetylen glycol, polyetylen oxit, polypropylen oxit, polyme (etylen oxit-propylen oxit), silicon của polyaxetat, silicon của dimetyl silicon, polysiloxan, polyacrylat polyetylacrylat, poly- 2-ethylhexylacrylat, polyvinylaxetat, copolyme 2-ethylhexylacrylat/etylacrylat, polydimetyl/siloxan, hoặc hỗn hợp bất kỳ của chúng.

Theo một khía cạnh, axit chứa phospho bất kỳ, muối chứa phospho, hoặc este chứa phospho được sử dụng trong chế phẩm bôi trơn hoặc chế phẩm làm thay đổi độ nhớt chứa PAO bất kỳ được mô tả ở đây và/hoặc PAO được điều chế theo sáng chế có thể là kẽm dialkyldithiophosphat, kẽm di-(amyl)dithiophosphat, kẽm di-(1,3-dimetylbutyl)dithiophosphat, kẽm di-(heptyl)dithiophosphat, kẽm di-(octyl)dithiophosphat di-(2-ethylhexyl)dithiophosphat, kẽm di-(nonyl)dithiophosphat, kẽm di-(dexyl)dithiophosphat, kẽm di-(dodexyl)dithiophosphat, kẽm di(dodexylphenyl)dithiophosphat, kẽm di-(heptylphenyl)dithiophosphat, este của axit dialkyldithiophosphoric và muối amin của nó, muối amin của phosphit, muối amin của este carboxylic chứa phospho, muối amin của ete chứa phospho, muối amin của amit chứa phospho, axit phosphoric este hóa một phần, kẽm dialkyldithiophosphat thu được từ hỗn hợp gồm rượu amylic và rượu isobutylic, kẽm dialkyldithiophosphat thu được từ hỗn hợp gồm rượu 2-ethylhexylic và rượu isopropylic, kẽm dialkyldithiophosphat thu được từ hỗn hợp gồm 4-metyl-2-pentanol và rượu isopropylic, hoặc hỗn hợp bất kỳ của chúng.

Hệ chất xúc tác và thành phần của hệ chất xúc tác

Sáng chế bao gồm hệ chất xúc tác, phương pháp điều chế hệ chất xúc tác, phương pháp oligome hóa sử dụng hệ chất xúc tác, và phương pháp điều chế polyalphaolefin bằng cách sử dụng hệ chất xúc tác. Hệ chất xúc tác theo sáng chế chứa metaloxen và chất hoạt hóa. Ví dụ, hệ chất xúc tác có thể chứa ít nhất một metaloxen và ít nhất một chất hoạt hóa; theo cách khác, hệ chất xúc tác có thể chứa ít nhất một metaloxen, ít nhất một chất hoạt hóa thứ nhất, và ít nhất một chất hoạt hóa thứ hai.

Sáng chế còn bao gồm phương pháp oligome hóa bao gồm các bước: a) cho monome alpha olefin tiếp xúc với hệ chất xúc tác chứa metaloxen, và b) tạo ra sản phẩm oligome trong điều kiện oligome hóa. Theo một phương án, phương pháp oligome hóa có thể bao gồm các bước: a) cho monome alpha olefin tiếp xúc với hệ chất xúc tác chứa metaloxen, b) tạo ra sản phẩm oligome trong điều kiện oligome hóa, và c) tách dòng đi ra từ thiết bị phản ứng chứa sản phẩm oligome để thu được sản phẩm oligome nặng. Theo một số phương án, hệ chất xúc tác có thể chứa metaloxen và chất hoạt hóa hoặc theo cách khác, hệ này chứa metaloxen và hỗn hợp chất hoạt hóa. Theo một phương án khác, hệ chất xúc tác có thể chứa metaloxen, chất hoạt hóa thứ nhất, và chất hoạt hóa thứ hai. Theo một phương án khác, hệ chất xúc tác có thể hầu như không chứa chất hoạt hóa.

Nói chung, monome alpha olefin, hệ chất xúc tác, metaloxen, chất hoạt hóa (thứ nhất, thứ hai, hoặc chất khác), sản phẩm oligome, điều kiện oligome hóa, và sản phẩm oligome nặng là các yếu tố độc lập của phương pháp oligome hóa và được mô tả độc lập ở đây. Phương pháp oligome hóa và phương pháp bất kỳ kết hợp vào phương pháp oligome hóa có thể được mô tả bằng cách sử dụng hỗn hợp bất kỳ của monome alpha olefin được mô tả ở đây, hệ chất xúc tác được mô tả ở đây, metaloxen được mô tả ở đây, chất hoạt hóa (thứ nhất, thứ hai, hoặc chất khác) được mô tả ở đây, sản phẩm oligome được mô tả ở đây, điều kiện oligome hóa được mô tả ở đây, và sản phẩm oligome nặng được mô tả ở đây.

Nếu chất hoạt hóa được sử dụng trong hệ chất xúc tác, chất hoạt hóa (thứ nhất, thứ hai, hoặc chất khác) có thể là oxit dạng rắn được xử lý hóa học bằng anion hút electron; theo cách khác, chất hoạt hóa (thứ nhất, thứ hai, hoặc chất khác) có thể là alumoxan. Theo một số phương án, hệ chất xúc tác có thể chứa metaloxen, chất hoạt hóa thứ nhất là oxit dạng rắn được xử lý hóa học bằng anion hút electron, và chất hoạt hóa thứ hai. Theo một phương án khác, hệ chất xúc tác có thể chứa metaloxen, chất hoạt hóa thứ nhất là alumoxan, và chất hoạt hóa thứ hai.

Số lượng bước tiếp xúc trước hoặc tiếp xúc sau bất kỳ có thể được sử dụng trong đó các thành phần của hệ chất xúc tác và/hoặc monome alpha olefin được chọn bất kỳ có thể được cho tiếp xúc trước và/hoặc tiếp xúc sau trước bước tạo ra sản phẩm oligome alpha olefin trong điều kiện oligome hóa. Theo khía cạnh hoặc phương án bất

kỳ của phương pháp oligome hóa được bộc lộ ở đây, có thể sử dụng hỗn hợp bất kỳ của monome alpha olefin, metaloxen, chất hoạt hóa, oxit dạng rắn, hoặc anion hút electron, hoặc chất hoạt hóa bất kỳ khác hoặc hỗn hợp chất hoạt hóa có thể được cho tiếp xúc trước trong thời gian bất kỳ trước bước cho alpha olefin tiếp xúc với hệ chất xúc tác. Mỗi thành phần có thể được sử dụng trong hệ chất xúc tác được mô tả độc lập ở đây.

Theo một khía cạnh và phương án bất kỳ được mô tả ở đây, (các) phương pháp oligome hóa được mô tả ở đây có thể được kết hợp vào phương pháp điều chế polyalphaolefin. Theo một phương án không làm giới hạn phạm vi sáng chế, phương pháp điều chế polyalphaolefin bao gồm các bước: a) cho monome alpha olefin tiếp xúc với hệ chất xúc tác chứa metaloxen, b) tạo ra sản phẩm oligome trong điều kiện oligome hóa, c) tách dòng đi ra từ thiết bị phản ứng chứa sản phẩm oligome để thu được sản phẩm oligome nặng, và d) hydro hóa sản phẩm oligome nặng này để thu được polyalphaolefin.

Metaloxen

Theo một khía cạnh, sáng chế đề xuất hệ chất xúc tác chứa metaloxen. Theo một phương án, hỗn hợp metaloxen có thể được sử dụng trong hệ chất xúc tác. Nếu nhiều metaloxen được sử dụng, metaloxen có thể được gọi ở đây là metaloxen (hoặc hợp chất metaloxen) thứ nhất và metaloxen (hoặc hợp chất metaloxen) thứ hai. Theo một khía cạnh khác, hai metaloxen khác nhau có thể được sử dụng đồng thời trong phương pháp oligome hóa để tạo ra sản phẩm alpha olefin.

Trong bản mô tả này, metaloxen được mô tả là chứa phối tử nhóm I, phối tử nhóm II, và kim loại nhóm 4, 5, hoặc 6; theo cách khác, metaloxen chứa phối tử nhóm I, phối tử nhóm II, và kim loại nhóm 4; theo cách khác, metaloxen chứa phối tử nhóm I, phối tử nhóm II, và kim loại nhóm 5 hoặc theo cách khác, metaloxen chứa phối tử nhóm I, phối tử nhóm II, và kim loại nhóm 6. Theo một khía cạnh, kim loại của metaloxen có thể là Ti, Zr, Hf, V, Nb, Ta, Cr, Mo, hoặc W. Theo một khía cạnh khác, kim loại của metaloxen có thể là titan, ziricon, hafini, vanadi, niobi, tantan, crom, molybden, hoặc vonfram; theo cách khác, kim loại của metaloxen có thể là titan, ziricon, hafini, hoặc vanadi; theo cách khác, kim loại của metaloxen có thể là titan, ziricon, hoặc hafini; theo cách khác, kim loại của metaloxen là titan; theo cách khác,

kim loại của metaloxen là ziricon; theo cách khác, kim loại của metaloxen là hafini hoặc theo cách khác, kim loại của metaloxen là vanadi.

Theo một khía cạnh, phối tử nhóm I của metaloxen là phối tử $\eta^{x \geq 5}$ có liên kết pi. Phối tử $\eta^{x \geq 5}$ có liên kết pi có thể được sử dụng làm phối tử nhóm I theo sáng chế bao gồm phối tử loại η^5 -xycloalkadienyl, chất tương tự phối tử loại η^5 -xycloalkadienyl, và phối tử loại η^5 -alkadienyl như được sử dụng trong “metaloxen hở”. Theo một phương án, metaloxen có thể được sử dụng theo khía cạnh hoặc phương án bất kỳ của sáng chế chứa ít nhất một phối tử loại η^5 -xycloalkadienyl hoặc phối tử loại η^5 -alkadienyl. Theo một số phương án, phối tử nhóm I có thể là phối tử η^5 -xyclopentadienyl, η^5 -indenyl, η^5 -floreanyl, η^5 -alkadienyl, η^6 -boratabenzen, và phối tử tương tự được thể của chúng. Các khía cạnh và phương án khác của phối tử nhóm I được mô tả ở đây và có thể được sử dụng không giới hạn để mô tả metaloxen có thể được sử dụng theo khía cạnh hoặc phương án bất kỳ được bộc lộ ở đây. Liên quan đến liên kết của phối tử không no với kim loại trong metaloxen, phối tử này có thể được chỉ rõ là chứa phối tử liên kết theo thuật ngữ thông thường η^x (eta-x), trong đó x là số nguyên tương ứng với số nguyên tử được liên kết phối trí với kim loại chuyển tiếp hoặc được cho là liên kết phối trí với kim loại chuyển tiếp, ví dụ, theo quy tắc 18 electron. Phối tử nhóm I có thể được thể hoặc không được thể.

Theo một khía cạnh khác, phối tử nhóm I có thể chứa ít nhất một dị vòng được ngưng tụ với phối tử loại η^5 -xycloalkadienyl hoặc η^5 -alkadienyl. Theo một số phương án, ví dụ, phối tử nhóm I có thể là phối tử η^5 -xyclopentadienyl, η^5 -indenyl, hoặc phối tử nhóm I tương tự, kể cả phối tử tương tự được thể của chúng, mà gốc dị vòng được ngưng tụ với. Ví dụ về gốc dị vòng ngưng tụ bao gồm, nhưng không chỉ giới hạn ở, pyrol, furan, thiophen, phosphol, imidazol, imidazolin, pyrazol, pyrazolin, oxazol, oxazolin, isoxazol, isoxazolin, thiazol, thiazolin, isothiozolin, và gốc tương tự, kể cả gốc tương tự no một phần của các vòng này.

Theo một khía cạnh, phối tử nhóm II của metaloxen là phối tử không phải phối tử liên kết $\eta^{x \geq 5}$ và là phối tử có liên kết sigma nguyên mẫu và phối tử có liên kết pi được liên kết với kim loại theo kiểu liên kết $\eta^{x < 5}$. Do đó, phối tử liên kết $\eta^{x < 5}$ bao gồm phối tử halogenua có liên kết sigma, hydrua có liên kết sigma, hydrocarbonyl có liên kết sigma (ví dụ, phối tử alkyl và alkenyl, ngoài các phối tử khác), và phối tử $\eta^{x < 5}$ “có liên

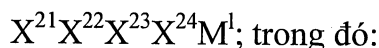
kết pi” như η^2 -alken, η^3 -allyl, η^4 -alkadienyl, và phối tử tương tự, được liên kết với kim loại theo kiểu liên kết $\eta^{x<5}$. Do đó, phối tử nhóm II của metaloxen theo sáng chế bao gồm các phối tử có liên kết sigma và một số phối tử có liên kết pi trong metaloxen không là phối tử loại η^5 -xycloalkadienyl và không là phối tử $\eta^{x\geq 5}$ có liên kết pi khác thường liên quan đến việc xác định hợp chất metaloxen. Ví dụ và các phương án khác về phối tử nhóm II được đưa ra ở đây.

Theo một khía cạnh, metaloxen có thể chứa hai phối tử nhóm I. Theo khía cạnh này, và theo phương án bất kỳ, metaloxen có thể chứa hai phối tử nhóm I, trong đó hai phối tử nhóm I được liên kết bằng nhóm liên kết hoặc theo cách khác, trong đó hai phối tử nhóm I nằm tách riêng (không nối với nhau hoặc không liên kết). Do nhóm liên kết được coi là nhóm thế trên phối tử nhóm I, phối tử nhóm I đã liên kết có thể được thế tiếp bằng nhóm thế không liên kết khác hoặc có thể không được thế, trừ nhóm liên kết. Do đó, phối tử nhóm I có thể được liên kết và được thế tiếp, được liên kết nhưng không được thế tiếp, không được liên kết nhưng được thế bằng phối tử không liên kết, hoặc không được liên kết và không được thế tiếp; theo cách khác, phối tử nhóm I có thể được liên kết và được thế tiếp; theo cách khác, phối tử nhóm I có thể được liên kết nhưng không được thế tiếp; theo cách khác, phối tử nhóm I có thể không được liên kết nhưng được thế bằng phối tử không liên kết hoặc theo cách khác, phối tử nhóm I có thể không được liên kết và không được thế tiếp. Cũng theo phương án bất kỳ, metaloxen có thể chứa phối tử nhóm I và ít nhất một phối tử nhóm II, trong đó phối tử nhóm I và phối tử nhóm II được liên kết bằng nhóm liên kết hoặc theo cách khác, phối tử nhóm I và phối tử nhóm II nằm riêng rẽ không liên kết bằng nhóm liên kết.

Theo một khía cạnh, và theo phương án bất kỳ, metaloxen có thể có công thức $X^{21}X^{22}X^{23}X^{24}M^1$. Theo khía cạnh này, X^{21} , X^{22} , X^{23} , X^{24} , và M^1 được mô tả độc lập ở đây và có thể được sử dụng trong tổ hợp bất kỳ để mô tả metaloxen có công thức $X^{21}X^{22}X^{23}X^{24}M^1$. Theo một số phương án, M^1 có thể là kim loại nhóm 4, 5, hoặc 6; theo cách khác, M^1 là kim loại nhóm 4; theo cách khác, M^1 là kim loại nhóm 5 hoặc theo cách khác, M^1 là kim loại nhóm 6. Theo một phương án khác, M^1 có thể là Ti, Zr, Hf, V, Nb, Ta, Cr, Mo, hoặc W; theo cách khác, M^1 là Ti, Zr, hoặc Hf; theo cách khác, M^1 là V, Nb, hoặc Ta; theo cách khác, M^1 là Cr, Mo, hoặc W; theo cách khác, M^1 là Ti, Zr, Hf, hoặc V; theo cách khác, M^1 là Ti, Zr, hoặc Hf; theo cách khác, M^1 là Ti; theo

cách khác, M^I là Zr; theo cách khác, M^I là Hf hoặc theo cách khác, M^I là V. Theo một phương án, X^{21} là phối tử nhóm I, X^{22} là phối tử nhóm I hoặc phối tử nhóm II, và X^3 và X^4 độc lập là phối tử nhóm II; theo cách khác, X^{21} và X^{22} độc lập là phối tử nhóm I không được liên kết bằng nhóm liên kết, và X^{23} và X^{24} độc lập là phối tử nhóm II; theo cách khác, X^{21} và X^{22} độc lập là phối tử nhóm I được liên kết bằng nhóm liên kết, và X^{23} và X^{24} độc lập là phối tử nhóm II hoặc theo cách khác, X^{21} là phối tử nhóm I và X^{22} , X^{23} , và X^{24} độc lập là nhóm hydrocarbonyl có từ 1 đến 20 nguyên tử cacbon được thế hoặc không được thế. Theo một phương án, nhóm thế bất kỳ trên X^{21} , X^{22} , X^{23} , và X^{24} có thể độc lập là halogenua, C_1 - C_{20} hydrocarboxit, nhóm C_1 - C_{20} béo, nhóm C_1 - C_{20} dị vòng, nhóm C_6 - C_{20} thơm, nhóm C_1 - C_{20} dị vòng thơm, nhóm amido, nhóm C_1 - C_{20} *N*-hydrocarbylamido, nhóm C_1 - C_{20} *N,N*-dihydrocarbylamido, nhóm C_1 - C_{20} hydrocarbylthiolat, hoặc nhóm C_3 - C_{30} trihydrocarbylsiloxy.

Theo một phương án không giới hạn phạm vi sáng chế, metaloxen có thể có công thức:



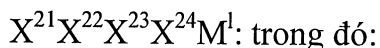
M^I được chọn từ titan, ziricon, hafni, vanadi, niobi, tantan, crom, molybden, hoặc vonfram;

X^{21} là phối tử nhóm I;

X^{22} là phối tử nhóm I hoặc phối tử nhóm II; và

X^{23} và X^{24} độc lập được chọn từ phối tử nhóm II. Theo một số phương án, X^{21} và X^{22} được liên kết bằng nhóm liên kết. Theo một phương án khác, X^{21} và X^{22} không được liên kết bằng nhóm liên kết.

Theo một số phương án không làm giới hạn phạm vi sáng chế, metaloxen có thể có công thức:

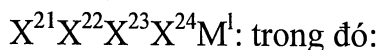


M^I độc lập được chọn từ Ti, Zr, hoặc Hf;

X^{21} và X^{22} là phối tử nhóm I được liên kết bằng nhóm liên kết; và

X^{23} và X^{24} độc lập được chọn từ phối tử nhóm II.

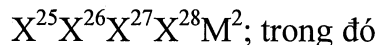
Theo các phương án không làm giới hạn phạm vi sáng chế khác, metaloxen có thể có công thức:



M^I độc lập được chọn từ Ti, Zr, hoặc Hf;

X^{21} và X^{22} là phối tử nhóm I không được liên kết bằng nhóm liên kết; và X^{23} và X^{24} độc lập được chọn từ phối tử nhóm II.

Theo một phương án không làm giới hạn phạm vi sáng chế khác, metaloxen có thể có công thức:



M^2 là Ti, Zr, Hf, hoặc V;

X^{25} là phối tử nhóm I;

X^{26} , X^{27} , và X^{28} độc lập được chọn từ nhóm hydrocarbyl có từ 1 đến 20 nguyên tử cacbon được thế hoặc không được thế; và trong đó nhóm thế bất kỳ trên X^{25} , X^{26} , X^{27} , và X^{28} có thể độc lập là halogenua, C_1 - C_{20} hydrocarboxit, nhóm C_1 - C_{20} béo, nhóm C_1 - C_{20} dị vòng, nhóm C_6 - C_{20} thơm, nhóm C_1 - C_{20} dị vòng thơm, nhóm amido, nhóm C_1 - C_{20} *N*-hydrocarbyl amido, nhóm C_1 - C_{20} *N,N*-dihydrocarbyl amido, nhóm C_1 - C_{20} hydrocarbylthiolat, và nhóm C_3 - C_{30} trihydrocarbylsiloxy.

Theo một khía cạnh, và theo phương án bất kỳ, metaloxen có thể bao gồm nhóm liên kết để nối phối tử nhóm I với phối tử khác (hoặc phối tử nhóm I khác hoặc phối tử nhóm II) trong metaloxen. Nhóm liên kết bao gồm liên kết cầu, chứa số lượng nhỏ nhất các nguyên tử kề nhau cần thiết để liên kết giữa phối tử nhóm I và phối tử còn lại mà nó liên kết với. Ví dụ, nhóm liên kết có thể chứa từ 1 đến 3 nguyên tử liên kết cầu kề nhau; theo cách khác, chứa 1 hoặc 2 nguyên tử liên kết cầu kề nhau; theo cách khác, chứa 1 nguyên tử liên kết cầu; theo cách khác, chứa 2 nguyên tử liên kết cầu kề nhau; theo cách khác, chứa 3 nguyên tử liên kết cầu. Theo một phương án, mỗi nguyên tử liên kết cầu kề nhau có thể là C, O, S, N, P, Si, Ga, Sn, hoặc Pb; theo cách khác, là C, Si, Ge, hoặc Sn; theo cách khác; là C hoặc Si; theo cách khác, là C hoặc theo cách khác, là Si. Nhóm liên kết có thể là nhóm no, hoặc nhóm liên kết có thể là nhóm không no; theo cách khác, nhóm liên kết có thể là nhóm no hoặc theo cách khác, nhóm liên kết có thể là nhóm không no.

Nhóm liên kết bao gồm, nhưng không chỉ giới hạn ở, nhóm C_1 - C_{20} hydrocarbyl, nhóm C_0 - C_{20} liên kết với nitơ, nhóm C_0 - C_{20} liên kết với phospho, nhóm C_1 - C_{20} organyl, nhóm C_0 - C_{30} liên kết với silic, nhóm C_0 - C_{20} liên kết với germani, nhóm C_0 - C_{20} liên kết với thiếc, hoặc nhóm C_0 - C_{20} liên kết với chì; theo cách khác, nhóm C_1 - C_{20} hydrocarbyl hoặc nhóm C_0 - C_{30} liên kết với silic; theo cách khác, nhóm C_1 - C_{20}

hydrocarbyl; theo cách khác, nhóm C_0-C_{20} liên kết với nitơ; theo cách khác, nhóm C_0-C_{20} liên kết với phospho; theo cách khác, nhóm C_1-C_{20} organyl; theo cách khác, nhóm C_0-C_{30} liên kết với silic; theo cách khác, nhóm C_0-C_{20} liên kết với germani; theo cách khác, nhóm C_0-C_{20} liên kết với thiếc hoặc theo cách khác, nhóm C_0-C_{20} liên kết với chì.

Nhóm liên kết theo khía cạnh hoặc phương án bất kỳ chứa nhóm liên kết, bao gồm các gốc có công thức $>CR^1R^2$, $>SiR^3R^4$, hoặc $-CR^5R^6CR^7R^8-$, trong đó R^1 , R^2 , R^3 , R^4 , R^5 , R^6 , R^7 , và R^8 độc lập được chọn từ hydro, halogenua, nhóm C_1-C_{20} hydrocarbyl, nhóm C_1-C_{20} liên kết với oxy, nhóm C_1-C_{20} liên kết với lưu huỳnh, nhóm C_0-C_{20} liên kết với nitơ, nhóm C_0-C_{20} liên kết với phospho, nhóm C_1-C_{20} organyl, nhóm C_0-C_{20} liên kết với arsen, nhóm C_0-C_{30} liên kết với silic, nhóm C_0-C_{20} liên kết với germani, hoặc nhóm C_0-C_{20} liên kết với thiếc; nhóm C_0-C_{20} liên kết với chì, nhóm C_0-C_{20} liên kết với bo, hoặc nhóm C_0-C_{20} liên kết với nhôm. Theo khía cạnh này và theo phương án bất kỳ, R^1 , R^2 , R^3 , R^4 , R^5 , R^6 , R^7 , và R^8 có thể độc lập là no hoặc không no; theo cách khác, các nhóm này là nhóm no hoặc theo cách khác, các nhóm này là nhóm không no. Theo một số phương án bao gồm nhóm liên kết, nhóm liên kết có thể có công thức $>CR^1R^2$, $>SiR^3R^4$, hoặc $-CR^5R^6CR^7R^8-$, trong đó R^1 , R^2 , R^3 , R^4 , R^5 , R^6 , R^7 , và R^8 độc lập được chọn từ hydro, halogenua, nhóm C_1-C_{20} béo no hoặc không no, hoặc nhóm C_6-C_{20} thơm; theo cách khác, nhóm C_1-C_{20} béo no; theo cách khác, R^1 , R^2 , R^3 , R^4 , R^5 , R^6 , R^7 , và R^8 có thể được chọn độc lập từ hydro, halogenua, nhóm C_1-C_{20} alkyl, nhóm C_2-C_{20} alkenyl, nhóm C_2-C_{20} alkynyl, nhóm C_6-C_{20} aryl, hoặc nhóm C_6-C_{20} thơm; theo cách khác, hydro, nhóm C_1-C_{20} alkyl, nhóm C_2-C_{20} alkenyl, hoặc nhóm C_6-C_{20} aryl hoặc theo cách khác, R^1 , R^2 , R^3 , R^4 , R^5 , R^6 , R^7 , và R^8 độc lập được chọn từ hydro, hoặc nhóm C_1-C_{20} hydrocarbyl no hoặc không no. Nhóm hydrocarbyl, béo, alkyl, alkenyl, alkynyl, aryl, và nhóm thơm được mô tả ở đây và có thể được sử dụng để mô tả R^1 , R^2 , R^3 , R^4 , R^5 , R^6 , R^7 , và/hoặc R^8 , các nhóm này có thể được sử dụng trong nhóm liên kết.

Theo một khía cạnh khác nữa và theo phương án bất kỳ, trong mỗi lần xuất hiện, phối tử nhóm I trong metaloxen có thể là phối tử η^5 -xycloalkadienyl được thế hoặc không được thế, phối tử η^5 -alkadienyl được thế hoặc không được thế, hoặc phối tử chứa η^6 -boratabenzen được thế hoặc không được thế; theo cách khác, phối tử này là phối tử xyclopentadienyl được thế hoặc không được thế, phối tử indenyl được thế hoặc

không được thế, phối tử florenyl được thế hoặc không được thế, phối tử tetrahydroindenyl được thế hoặc không được thế, phối tử tetrahydroflorenyl được thế hoặc không được thế, hoặc phối tử octahydroflorenyl được thế hoặc không được thế hoặc theo cách khác, phối tử xyclopentadienyl được thế hoặc không được thế, phối tử indenyl được thế hoặc không được thế, hoặc phối tử florenyl được thế hoặc không được thế. Ngoài ra, theo phương án bất kỳ, trong mỗi lần xuất hiện, phối tử nhóm I trong metaloxen là xyclopentadienyl được thế hoặc không được thế; theo cách khác, là indenyl được thế hoặc không được thế; theo cách khác, là florenyl được thế hoặc không được thế; theo cách khác, là tetrahydroindenyl được thế hoặc không được thế; theo cách khác, là tetrahydroflorenyl được thế hoặc không được thế hoặc theo cách khác, là octahydroflorenyl được thế hoặc không được thế. Theo cách khác, metaloxen có thể có hai phối tử nhóm I và trong mỗi lần xuất hiện, phối tử nhóm I có thể độc lập là hai nhóm xyclopentadienyl được thế hoặc không được thế, florenyl được thế hoặc không được thế và xyclopentadienyl được thế hoặc không được thế, florenyl được thế hoặc không được thế và indenyl được thế hoặc không được thế, hai nhóm florenyl được thế hoặc không được thế hoặc hai nhóm indenyl được thế hoặc không được thế. Theo cách khác, trong mỗi lần xuất hiện của phối tử nhóm I, phối tử nhóm I có thể được chọn độc lập từ xyclopentadienyl được thế hoặc không được thế, indenyl được thế hoặc không được thế, hoặc florenyl được thế hoặc không được thế.

Như được bộc lộ ở đây, phối tử nhóm I được liên kết có thể được thế tiếp bằng nhóm thế không liên kết khác hoặc có thể không được thế tiếp. Phối tử nhóm I không được liên kết có thể được thế hoặc có thể không được thế. Theo khía cạnh này, mỗi nhóm thế không liên kết trên phối tử nhóm I có thể độc lập là, nhưng không chỉ giới hạn ở, halogenua, nhóm C_1 - C_{20} hydrocarbyl, nhóm C_1 - C_{20} hydrocarboxy, nhóm C_3 - C_{20} dị vòng, nhóm C_6 - C_{20} thơm, nhóm C_3 - C_{20} dị vòng thơm, nhóm C_1 - C_{20} hydrocarbylilyl, nhóm C_2 - C_{40} dihydrocarbylilyl, nhóm C_3 - C_{60} trihydrocarbylilyl, nhóm aminyl, nhóm C_1 - C_{20} N-hydrocarbyl aminyl (đôi khi được gọi là nhóm C_1 - C_{20} N-hydrocarbyl amido), nhóm C_2 - C_{40} N,N-dihydrocarbyl aminyl (đôi khi được gọi là nhóm C_2 - C_{40} N,N-dihydrocarbyl amido), nhóm C_1 - C_{20} hydrocarbylthiolat, hoặc nhóm C_3 - C_{60} trihydrocarbylsiloxy; theo cách khác, là halogenua, nhóm C_1 - C_{20} hydrocarbyl hoặc nhóm C_1 - C_{20} hydrocarboxy; theo cách khác, là halogenua hoặc nhóm C_1 - C_{20} hydrocarbyl; theo cách khác, là halogenua hoặc nhóm C_1 - C_{20} hydrocarboxy; theo cách

khác, là nhóm C_1-C_{20} hydrocarbyl hoặc C_1-C_{20} hydrocarboxy; theo cách khác, là halogenua; theo cách khác, là nhóm C_1-C_{20} hydrocarbyl hoặc theo cách khác, là nhóm C_1-C_{20} hydrocarboxy. Theo một khía cạnh khác và phương án bất kỳ được bộc lộ ở đây, mỗi nhóm thể không liên kết trên phối tử nhóm I có thể độc lập là, nhưng không chỉ giới hạn ở, halogenua, nhóm C_1-C_{10} hydrocarbyl, nhóm C_1-C_{10} hydrocarboxy, nhóm C_3-C_{15} dị vòng, nhóm C_6-C_{15} thơm, nhóm C_3-C_{15} dị vòng thơm, nhóm C_1-C_{10} hydrocarbylilyl, nhóm C_2-C_{20} dihydrocarbylilyl, nhóm C_3-C_{30} trihydrocarbylilyl, nhóm aminyl, nhóm C_1-C_{10} N-hydrocarbyl aminyl (đôi khi được gọi là nhóm C_1-C_{10} N-hydrocarbyl amido), nhóm C_2-C_{20} N,N-dihydrocarbyl aminyl (đôi khi được gọi là nhóm C_2-C_{20} N,N-dihydrocarbyl amido), nhóm C_1-C_{10} hydrocarbylthiolat, hoặc nhóm C_3-C_{30} trihydrocarbylsiloxy; theo cách khác, là halogenua, nhóm C_1-C_{10} hydrocarbyl hoặc nhóm C_1-C_{10} hydrocarboxy; theo cách khác, là halogenua hoặc nhóm C_1-C_{10} hydrocarbyl; theo cách khác, là halogenua hoặc nhóm C_1-C_{10} hydrocarboxy; theo cách khác, là nhóm C_1-C_{10} hydrocarbyl hoặc C_1-C_{10} hydrocarboxy; theo cách khác, là halogenua; theo cách khác, là nhóm C_1-C_{10} hydrocarbyl hoặc theo cách khác, là nhóm C_1-C_{10} hydrocarboxy.

Theo một khía cạnh khác nữa và phương án bất kỳ được bộc lộ ở đây, mỗi nhóm thể không liên kết trên phối tử nhóm I có thể độc lập là, nhưng không chỉ giới hạn ở, halogenua, nhóm C_1-C_5 hydrocarbyl, nhóm C_1-C_5 hydrocarboxy, nhóm C_3-C_{10} dị vòng, nhóm C_6-C_{10} thơm, nhóm C_3-C_{10} dị vòng thơm, nhóm C_1-C_5 hydrocarbylilyl, nhóm C_2-C_{10} dihydrocarbylilyl, nhóm C_3-C_{15} trihydrocarbylilyl, nhóm aminyl, nhóm C_1-C_5 N-hydrocarbyl aminyl (đôi khi được gọi là nhóm C_1-C_5 N-hydrocarbyl amido), nhóm C_2-C_{10} N,N-dihydrocarbyl aminyl (đôi khi được gọi là nhóm C_2-C_{10} N,N-dihydrocarbyl amido), nhóm C_1-C_5 hydrocarbylthiolat, hoặc nhóm C_3-C_{15} trihydrocarbylsiloxy; theo cách khác, là halogenua, nhóm C_1-C_5 hydrocarbyl hoặc nhóm C_1-C_5 hydrocarboxy; theo cách khác, là halogenua hoặc nhóm C_1-C_5 hydrocarbyl; theo cách khác, là halogenua hoặc nhóm C_1-C_5 hydrocarboxy; theo cách khác, là nhóm C_1-C_5 hydrocarbyl hoặc C_1-C_5 hydrocarboxy; theo cách khác, là halogenua; theo cách khác, là nhóm C_1-C_5 hydrocarbyl hoặc theo cách khác, là nhóm C_1-C_5 hydrocarboxy.

Theo một phương án, mỗi nhóm thể halogenua có thể được sử dụng làm nhóm thể không liên kết trên phối tử nhóm I hoặc làm nhóm halogenua được sử dụng trong

nhóm liên kết có thể độc lập là florua, clorua, bromua, hoặc iodua. Theo một phương án, mỗi nhóm thế halogenua có thể được sử dụng làm nhóm thế không liên kết trên phối tử nhóm I hoặc dưới dạng halogenua được sử dụng trong nhóm liên kết có thể độc lập là florua; theo cách khác, là clorua; theo cách khác, là bromua hoặc theo cách khác, là iodua.

Theo một phương án, mỗi nhóm thế hydrocarbyl có thể được sử dụng làm nhóm thế không liên kết trên phối tử nhóm I, nhóm hydrocarbyl được sử dụng trong nhóm liên kết, hoặc dưới dạng nhóm hydrocarbyl trong nhóm thế không liên kết trên phối tử nhóm I (ví dụ, nhóm trihydrocarbylilyl, nhóm *N,N*-dihydrocarbyl aminyl, hoặc nhóm hydrocarbylthiolat, ngoài các nhóm khác), có thể độc lập là nhóm alkyl, nhóm alkenyl, nhóm xycloalkyl, nhóm aryl, hoặc nhóm aralkyl; theo cách khác, là nhóm alkyl hoặc nhóm alkenyl; theo cách khác, là nhóm alkyl; theo cách khác, là nhóm alkenyl; theo cách khác, là nhóm xycloalkyl; theo cách khác, là nhóm aryl hoặc theo cách khác, là nhóm aralkyl. Nói chung, các nhóm thế alkyl, alkenyl, xycloalkyl, aryl, và aralkyl có thể có số lượng nguyên tử cacbon giống như nhóm thế hydrocarbyl được bộc lộ ở đây.

Theo một phương án, mỗi nhóm thế alkyl có thể được sử dụng làm nhóm thế không liên kết trên phối tử nhóm I, nhóm alkyl được sử dụng trong nhóm liên kết, hoặc dưới dạng nhóm alkyl trong nhóm thế không liên kết trên phối tử nhóm I (ví dụ, nhóm trihydrocarbylilyl, nhóm *N,N*-dihydrocarbyl aminyl, hoặc nhóm hydrocarbylthiolat, ngoài các nhóm khác), có thể độc lập là nhóm metyl, nhóm etyl, nhóm *n*-propyl, nhóm isopropyl, nhóm *n*-butyl, nhóm *sec*-butyl, nhóm isobutyl, nhóm *tert*-butyl, nhóm *n*-pentyl, nhóm 2-pentyl, nhóm 3-pentyl, nhóm 2-metyl-1-butyl, nhóm *tert*-pentyl, nhóm 3-metyl-1-butyl, nhóm 3-metyl-2-butyl, nhóm neo-pentyl, nhóm *n*-hexyl, nhóm *n*-heptyl, hoặc nhóm *n*-octyl; theo cách khác, nhóm metyl, nhóm etyl, nhóm *n*-propyl, nhóm isopropyl, nhóm *n*-butyl, nhóm *sec*-butyl, nhóm isobutyl, nhóm *tert*-butyl, nhóm *n*-pentyl, nhóm 2-pentyl, nhóm 3-pentyl, nhóm 2-metyl-1-butyl, nhóm *tert*-pentyl, nhóm 3-metyl-1-butyl, nhóm 3-metyl-2-butyl, hoặc nhóm neo-pentyl; theo cách khác, nhóm metyl, nhóm etyl, nhóm isopropyl, nhóm *tert*-butyl, hoặc nhóm neo-pentyl; theo cách khác, nhóm metyl; theo cách khác, nhóm etyl; theo cách khác, nhóm isopropyl; theo cách khác, nhóm *tert*-butyl; theo cách khác, nhóm neo-pentyl; theo cách khác, nhóm *n*-hexyl; theo cách khác, nhóm *n*-heptyl hoặc theo

cách khác, nhóm n-octyl.

Theo phương án bất kỳ được bộc lộ ở đây, phối tử nhóm I, phối tử nhóm II, hoặc cả phối tử nhóm I và nhóm II có thể được thế bằng nhóm C₂-C₂₀ alkenyl; theo cách khác, nhóm C₃-C₁₅ alkenyl; theo cách khác, nhóm C₄-C₁₀ alkenyl hoặc theo cách khác, nhóm C₄-C₈ alkenyl. Theo cách khác, theo phương án bất kỳ được bộc lộ ở đây, nhóm thế trên nguyên tử liên kết cầu của nhóm liên kết có thể là nhóm C₂-C₂₀ alkenyl; theo cách khác, nhóm C₃-C₁₅ alkenyl; theo cách khác, nhóm C₄-C₁₀ alkenyl hoặc theo cách khác, nhóm C₄-C₈ alkenyl. Theo phương án bất kỳ trong số các phương án này, và theo một khía cạnh, nhóm alkenyl có thể bao gồm các nhóm “ ω -alkenyl”, có liên kết đôi cacbon-cacbon của chúng ở vị trí omega (ω) của gốc alkenyl, tức là, giữa hai nguyên tử cacbon đi xa nhất từ phối tử tới nhóm alkenyl được liên kết. Ví dụ về nhóm ω -alkenyl bao gồm, nhưng không chỉ giới hạn ở, nhóm có công thức $-\text{CH}_2(\text{CH}_2)_n\text{CH}=\text{CH}_2$, trong đó n có thể là số nguyên nằm trong khoảng từ 0 đến 12; theo cách khác, n là giá trị số nguyên từ 1 đến 9; theo cách khác, n là giá trị số nguyên từ 1 đến 7; theo cách khác, n là giá trị số nguyên từ 1 đến 6; theo cách khác, n là giá trị số nguyên từ 1 đến 5; theo cách khác, n là giá trị số nguyên từ 1 đến 4; theo cách khác, n là giá trị số nguyên từ 1 đến 3; theo cách khác, n là giá trị số nguyên từ 1 đến 2. Theo một khía cạnh khác và theo phương án bất kỳ, ví dụ về nhóm ω -alkenyl bao gồm, nhưng không chỉ giới hạn ở, nhóm có công thức $-\text{CH}_2(\text{CH}_2)_m\text{CH}=\text{CH}_2$, trong đó m bằng 0; theo cách khác, m bằng 1, theo cách khác, m bằng 2, theo cách khác, m bằng 3, theo cách khác, m bằng 4, theo cách khác, m bằng 5, theo cách khác, m bằng 6, theo cách khác, m bằng 7, theo cách khác, m bằng 8, theo cách khác, m bằng 9, theo cách khác, m bằng 10, theo cách khác, m bằng 11, hoặc theo cách khác, m bằng 12. Theo một phương án, nhóm thế alkenyl bất kỳ có thể được sử dụng làm nhóm thế không liên kết trên phối tử nhóm I, nhóm alkenyl được sử dụng trong nhóm liên kết, hoặc dưới dạng nhóm alkenyl trong nhóm thế không liên kết trên phối tử nhóm I (ví dụ, nhóm trihydrocarbylilyl, nhóm *N,N*-dihydrocarbyl aminyl, hoặc nhóm hydrocarbylthiolat, ngoài các nhóm khác), có thể là nhóm etenyl, nhóm propenyl, nhóm butenyl, nhóm pentenyl, nhóm hexenyl; nhóm heptenyl, hoặc nhóm octenyl; theo cách khác, nhóm propenyl, nhóm butenyl, nhóm pentenyl, nhóm hexenyl; theo cách khác, nhóm etenyl; theo cách khác, nhóm propenyl; theo cách khác, nhóm butenyl; theo cách khác, nhóm pentenyl; theo cách khác, nhóm hexenyl; theo cách khác, nhóm heptenyl hoặc theo

cách khác, nhóm octenyl.

Theo một phương án, nhóm thế xycloalkyl bất kỳ có thể được sử dụng làm nhóm thế không liên kết trên phối tử nhóm I, nhóm xycloalkyl được sử dụng trong nhóm liên kết, hoặc dưới dạng nhóm xycloalkyl trong nhóm thế không liên kết trên phối tử nhóm I (ví dụ, nhóm trihydrocarbylilyl, nhóm *N,N*-dihydrocarbyl aminyl, hoặc nhóm hydrocarbylthiolat, ngoài các nhóm khác), có thể là nhóm xyclopropyl, nhóm xyclobutyl, nhóm xyclopentyl, nhóm xyclohexyl, nhóm xycloheptyl, hoặc nhóm xyclooctyl; theo cách khác, nhóm xyclopentyl hoặc nhóm xyclohexyl; theo cách khác, nhóm xyclopropyl; theo cách khác, nhóm xyclobutyl; theo cách khác, nhóm xyclopentyl; theo cách khác, nhóm xyclohexyl; theo cách khác, nhóm xycloheptyl hoặc theo cách khác, nhóm xyclooctyl. Theo một phương án, nhóm thế aryl bất kỳ có thể được sử dụng làm nhóm thế không liên kết trên phối tử nhóm I, nhóm aryl được sử dụng trong nhóm liên kết, hoặc dưới dạng nhóm aryl trong nhóm thế không liên kết trên phối tử nhóm I (ví dụ, nhóm trihydrocarbylilyl, nhóm *N,N*-dihydrocarbyl aminyl, hoặc nhóm hydrocarbylthiolat, ngoài các nhóm khác), có thể là nhóm phenyl, nhóm tolyl, nhóm xylyl, hoặc nhóm 2,4,6-trimetylphenyl; theo cách khác, nhóm phenyl; theo cách khác, nhóm tolyl, theo cách khác, nhóm xylyl hoặc theo cách khác, nhóm 2,4,6-trimetylphenyl. Theo một phương án, nhóm thế aralkyl bất kỳ có thể được sử dụng làm nhóm thế không liên kết trên phối tử nhóm I, nhóm aralkyl được sử dụng trong nhóm liên kết, hoặc dưới dạng nhóm aralkyl trong nhóm thế không liên kết trên phối tử nhóm I (ví dụ, nhóm trihydrocarbylilyl, nhóm *N,N*-dihydrocarbyl aminyl, hoặc nhóm hydrocarbylthiolat, ngoài các nhóm khác), có thể là nhóm benzyl.

Theo một phương án, nhóm thế hydrocarboxy bất kỳ có thể được sử dụng làm nhóm thế không liên kết trên phối tử nhóm I có thể là nhóm alkoxy, nhóm aroxy, hoặc nhóm aralkoxy; theo cách khác, nhóm alkoxy; theo cách khác, nhóm aroxy hoặc theo cách khác, nhóm aralkoxy. Nói chung, nhóm thế alkoxy, aroxy, và aralkoxy có thể có số lượng nguyên tử cacbon giống như nhóm thế hydrocarboxy được bộc lộ ở đây. Theo một phương án, nhóm thế alkoxy bất kỳ có thể được sử dụng làm nhóm thế không liên kết trên phối tử nhóm I có thể là nhóm metoxy, nhóm etoxy, nhóm n-propoxy, nhóm isopropoxy, nhóm n-butoxy, nhóm sec-butoxy, nhóm isobutoxy, nhóm tert-butoxy, nhóm n-pentoxo, nhóm 2-pentoxo, nhóm 3-pentoxo, nhóm 2-metyl-1-butoxy, nhóm tert-pentoxo, nhóm 3-metyl-1-butoxy, nhóm 3-metyl-2-butoxy, hoặc

nhóm neo-pentoxy; theo cách khác, nhóm metoxy, nhóm etoxy, nhóm isopropoxy, nhóm tert-butoxy, hoặc nhóm neo-pentoxy; theo cách khác, nhóm metoxy; theo cách khác, nhóm etoxy; theo cách khác, nhóm isopropoxy; theo cách khác, nhóm tert-butoxy hoặc theo cách khác, nhóm neo-pentoxy. Theo một phương án, nhóm thế aryl bất kỳ có thể được sử dụng làm nhóm thế không liên kết trên phối tử nhóm I có thể là nhóm phenoxy, nhóm toloxy, nhóm xyloxy, hoặc nhóm 2,4,6-trimetylphenoxy; theo cách khác, nhóm phenoxy; theo cách khác, nhóm toloxy, theo cách khác, nhóm xyloxy hoặc theo cách khác, nhóm 2,4,6-trimetylphenoxy. Theo một phương án, nhóm thế aroxy bất kỳ có thể được sử dụng làm nhóm thế không liên kết trên phối tử nhóm I có thể là nhóm benzoxy.

Trong bản mô tả này, metaloxen được mô tả là chứa ít nhất một phối tử nhóm II. Theo khía cạnh này và theo phương án bất kỳ, phối tử nhóm II bao gồm phối tử có liên kết sigma và một số phối tử có liên kết pi trong metaloxen không là phối tử loại η^5 -xycloalkadienyl và không là phối tử $\eta^{x \geq 5}$ có liên kết pi khác thường liên quan đến việc xác định hợp chất metaloxen. Theo phương án bất kỳ được bộc lộ ở đây, ví dụ và các phương án khác về phối tử nhóm II bao gồm, nhưng không chỉ giới hạn ở, hydrua, halogenua, nhóm C_1 - C_{30} $\eta^{x < 5}$ -hữu cơ, nhóm C_1 - C_{30} $\eta^{x < 5}$ -hydrocacbon, nhóm C_1 - C_{30} béo, nhóm C_6 - C_{30} $\eta^{x < 5}$ thơm, nhóm C_2 - C_{30} $\eta^{x < 5}$ dị vòng, nhóm C_2 - C_{30} $\eta^{x < 5}$ xyclohetero, nhóm C_4 - C_{30} $\eta^{x < 5}$ heteroaren, nhóm C_4 - C_{30} $\eta^{x < 5}$ -arylhetero, nhóm C_1 - C_{30} $\eta^{x < 5}$ organohetero, nhóm C_5 - C_{30} heteroaralkan, nhóm C_5 - C_{20} heteroaralkan, C_5 - C_{10} heteroaralkan, nhóm C_1 - C_{30} oxy, nhóm C_1 - C_{30} lưu huỳnh, nhóm C_0 - C_{30} nitơ, nhóm C_0 - C_{30} phospho, nhóm C_0 - C_{30} arsen, nhóm C_0 - C_{30} silic, nhóm C_0 - C_{30} germani, nhóm C_0 - C_{30} thiếc, nhóm C_0 - C_{30} chì, nhóm C_0 - C_{30} bo, hoặc nhóm C_0 - C_{30} nhôm; theo cách khác, là hydrua, halogenua, nhóm C_1 - C_{20} $\eta^{x < 5}$ -hữu cơ, nhóm C_1 - C_{20} $\eta^{x < 5}$ -hydrocacbon, nhóm C_1 - C_{20} béo, nhóm C_6 - C_{20} $\eta^{x < 5}$ -thơm, nhóm C_2 - C_{20} $\eta^{x < 5}$ -dị vòng, nhóm C_2 - C_{20} $\eta^{x < 5}$ -xyclohetero, nhóm C_4 - C_{20} $\eta^{x < 5}$ -heteroaren, nhóm C_4 - C_{20} $\eta^{x < 5}$ -arylhetero, nhóm C_1 - C_{20} $\eta^{x < 5}$ -organohetero, nhóm C_5 - C_{20} hetero aralkan, nhóm C_1 - C_{20} oxy, nhóm C_1 - C_{20} lưu huỳnh, nhóm C_0 - C_{20} nitơ, nhóm C_0 - C_{20} phospho, nhóm C_0 - C_{20} arsen, nhóm C_0 - C_{20} silic, nhóm C_0 - C_{20} germani, nhóm C_0 - C_{20} thiếc, nhóm C_0 - C_{20} chì, nhóm C_0 - C_{20} bo, hoặc nhóm C_0 - C_{20} nhôm; theo cách khác, hydrua, halogenua, nhóm C_1 - C_{10} $\eta^{x < 5}$ -hữu cơ, nhóm C_1 - C_{10} $\eta^{x < 5}$ -hydrocacbon, nhóm C_1 - C_{10} béo, nhóm C_6 - C_{10} $\eta^{x < 5}$ -thơm, nhóm

C_2-C_{10} $\eta^{x<5}$ -dị vòng, nhóm C_2-C_{10} $\eta^{x<5}$ -xyclohetero, nhóm C_4-C_{10} heteroaren, nhóm C_4-C_{10} $\eta^{x<5}$ -arylhetero, nhóm C_1-C_{10} $\eta^{x<5}$ -organohetero, C_5-C_{10} heteroaralkan, nhóm C_1-C_{10} oxy, nhóm C_1-C_{10} lưu huỳnh, nhóm C_0-C_{10} nitơ, nhóm C_0-C_{10} phospho, nhóm C_0-C_{10} arsen, nhóm C_0-C_{10} silic, nhóm C_0-C_{10} germani, nhóm C_0-C_{10} thiếc, nhóm C_0-C_5 thiếc, nhóm C_0-C_{10} chì, nhóm C_0-C_{10} bo, hoặc nhóm C_0-C_{10} nhôm; theo cách khác, hydrua, halogenua, florua, nhóm C_1-C_5 $\eta^{x<5}$ -hữu cơ, nhóm C_1-C_5 $\eta^{x<5}$ -hydrocacbon, nhóm C_1-C_5 béo, nhóm C_6-C_{10} $\eta^{x<5}$ -thơm, nhóm C_6-C_{10} $\eta^{x<5}$ -aren, nhóm C_2-C_5 $\eta^{x<5}$ -dị vòng, nhóm C_2-C_5 $\eta^{x<5}$ -xyclohetero, nhóm C_4-C_5 heteroaren, nhóm C_4-C_5 $\eta^{x<5}$ -arylhetero, nhóm C_1-C_5 $\eta^{x<5}$ -organohetero, C_5-C_{10} heteroaralkan, nhóm C_1-C_5 oxy, nhóm C_1-C_5 lưu huỳnh, nhóm C_0-C_5 nitơ, nhóm C_0-C_5 phospho, nhóm C_0-C_5 arsen, nhóm C_0-C_5 silic, nhóm C_0-C_5 germani, nhóm C_0-C_5 thiếc, nhóm C_0-C_5 chì, nhóm C_0-C_5 bo, hoặc nhóm C_0-C_5 nhôm.

Theo cách khác và theo phương án bất kỳ của sáng chế, trong mỗi lần xuất hiện, phối tử nhóm II có thể độc lập là halogenua, hydrua, nhóm C_1-C_{30} $\eta^{x<5}$ -hydrocarbyl, nhóm C_1-C_{30} liên kết với oxy, nhóm C_1-C_{30} liên kết với lưu huỳnh, nhóm C_0-C_{30} liên kết với nitơ, nhóm C_0-C_{30} liên kết với phospho, nhóm C_0-C_{20} liên kết với arsen, nhóm C_1-C_{30} $\eta^{x<5}$ -organyl, nhóm C_0-C_{30} liên kết với silic, nhóm C_0-C_{30} liên kết với germani, C_0-C_{30} nhóm liên kết với thiếc, C_0-C_{30} nhóm liên kết với chì, nhóm C_0-C_{30} liên kết với bo, nhóm C_0-C_{30} liên kết với nhôm, hoặc nhóm C_0-C_{10} liên kết với nhôm; theo cách khác, là halogenua, hydrua, nhóm C_1-C_{20} $\eta^{x<5}$ -hydrocarbyl, nhóm C_1-C_{20} liên kết với oxy, nhóm C_1-C_{20} liên kết với lưu huỳnh, nhóm C_0-C_{20} liên kết với nitơ, nhóm C_0-C_{20} liên kết với phospho, nhóm C_0-C_{20} liên kết với arsen, nhóm C_1-C_{20} $\eta^{x<5}$ -organyl, nhóm C_0-C_{20} liên kết với silic, nhóm C_0-C_{20} liên kết với germani, nhóm C_0-C_{20} liên kết với thiếc, nhóm C_0-C_{20} liên kết với chì, hoặc nhóm C_0-C_{20} liên kết với nhôm; theo cách khác, là halogenua, hydrua, nhóm C_1-C_{10} $\eta^{x<5}$ -hydrocarbyl, nhóm C_1-C_{10} liên kết với oxy, nhóm C_1-C_{10} liên kết với lưu huỳnh, nhóm C_0-C_{10} liên kết với nitơ, nhóm C_0-C_{10} liên kết với phospho, nhóm C_0-C_{10} liên kết với arsen, nhóm C_1-C_{10} $\eta^{x<5}$ -organyl, nhóm C_0-C_{10} liên kết với silic, nhóm C_0-C_{10} liên kết với germani, nhóm C_0-C_{10} liên kết với thiếc, nhóm C_0-C_{10} liên kết với chì, nhóm C_0-C_{10} liên kết với bo, hoặc nhóm C_0-C_{10} liên kết với nhôm hoặc theo cách khác, halogenua, hydrua, nhóm C_1-C_5 $\eta^{x<5}$ -hydrocarbyl, nhóm C_1-C_{10} liên kết với oxy, nhóm C_1-C_{10} liên kết với lưu huỳnh, nhóm

C₀-C₁₀ liên kết với nitơ, nhóm C₀-C₁₀ liên kết với phospho, nhóm C₀-C₆ liên kết với arsen, nhóm C₁-C₅ $\eta^{x<5}$ -organyl, nhóm C₀-C₁₀ liên kết với silic, nhóm C₀-C₁₀ liên kết với germani, nhóm C₀-C₁₀ liên kết với thiếc, nhóm C₀-C₁₀ liên kết với chì, nhóm C₀-C₁₀ liên kết với bo, hoặc nhóm C₀-C₁₀ liên kết với nhôm.

Theo một khía cạnh khác và theo phương án bất kỳ được bộc lộ ở đây, phối tử nhóm II bất kỳ trong mỗi lần xuất hiện, có thể bao gồm, nhưng không chỉ giới hạn ở, halogenua, hydrua, nhóm C₁-C₂₀ $\eta^{x<5}$ -hydrocarbyl, nhóm C₁-C₂₀ liên kết với oxy, nhóm C₁-C₂₀ liên kết với lưu huỳnh, nhóm C₀-C₃₀ liên kết với nitơ, nhóm C₀-C₃₀ liên kết với phospho, nhóm C₁-C₂₀ $\eta^{x<5}$ -organyl, nhóm C₀-C₃₀ liên kết với silic, nhóm C₁-C₃₀ liên kết với germani, hoặc nhóm C₁-C₃₀ liên kết với thiếc; theo cách khác, halogenua, hydrua, nhóm C₁-C₁₀ $\eta^{x<5}$ -hydrocarbyl, nhóm C₁-C₁₀ liên kết với oxy, nhóm C₁-C₁₀ liên kết với lưu huỳnh, nhóm C₀-C₂₀ liên kết với nitơ, nhóm C₀-C₂₀ liên kết với phospho, nhóm C₁-C₁₀ $\eta^{x<5}$ -organyl, nhóm C₀-C₃₀ liên kết với silic, nhóm C₁-C₂₀ liên kết với germani, hoặc nhóm C₁-C₂₀ liên kết với thiếc hoặc theo cách khác, halogenua, hydrua, nhóm C₁-C₅ $\eta^{x<5}$ -hydrocarbyl, nhóm C₁-C₅ liên kết với oxy, nhóm C₁-C₅ liên kết với lưu huỳnh, nhóm C₀-C₁₀ liên kết với nitơ, nhóm C₀-C₁₀ liên kết với phospho, nhóm C₁-C₅ $\eta^{x<5}$ -organyl, nhóm C₀-C₁₀ liên kết với silic, nhóm C₁-C₁₀ liên kết với germani, hoặc nhóm C₁-C₁₀ liên kết với thiếc.

Theo khía cạnh khác nữa, sáng chế đề xuất rằng theo phương án bất kỳ được bộc lộ, phối tử nhóm II bất kỳ trong mỗi lần xuất hiện, có thể độc lập là halogenua, hydrua, nhóm C₁-C₂₀ $\eta^{x<5}$ -hydrocarbyl, nhóm C₁-C₂₀ liên kết với oxy, nhóm C₁-C₂₀ liên kết với lưu huỳnh, nhóm C₀-C₃₀ liên kết với nitơ, nhóm C₁-C₂₀ $\eta^{x<5}$ -organyl hoặc nhóm C₀-C₃₀ liên kết với silic; theo cách khác, halogenua, hydrua, nhóm C₁-C₁₀ $\eta^{x<5}$ -hydrocarbyl, nhóm C₁-C₁₀ liên kết với oxy, nhóm C₁-C₁₀ liên kết với lưu huỳnh, nhóm C₀-C₂₀ liên kết với nitơ, nhóm C₀-C₂₀ liên kết với phospho, nhóm C₁-C₁₀ $\eta^{x<5}$ -organyl hoặc nhóm C₀-C₂₀ liên kết với silic hoặc theo cách khác, halogenua, hydrua, nhóm C₁-C₅ $\eta^{x<5}$ -hydrocarbyl, nhóm C₁-C₅ liên kết với oxy, nhóm C₁-C₅ liên kết với lưu huỳnh, nhóm C₀-C₁₀ liên kết với phospho, nhóm C₁-C₅ $\eta^{x<5}$ -organyl hoặc nhóm C₀-C₁₀ liên kết với silic.

Theo cách khác, và theo phương án bất kỳ, trong mỗi lần xuất hiện, phối tử nhóm II có thể độc lập là halogenua, hydrua, nhóm C₁-C₂₀ hydrocarboxit (còn được

gọi là nhóm hydrocarboxy), nhóm C_1-C_{20} dị vòng, nhóm C_6-C_{20} η^1 -thơm, nhóm C_1-C_{20} η^1 -dị vòng thơm, nhóm C_1-C_{20} hydrocarbylilyl, nhóm C_1-C_{20} dihydrocarbylilyl, nhóm C_1-C_{20} trihydrocarbylilyl, nhóm aminyl, nhóm C_1-C_{20} *N*-hydrocarbyl aminyl, nhóm C_1-C_{20} *N,N*-dihydrocarbyl aminyl, nhóm C_1-C_{20} hydrocarbylthiolat, hoặc nhóm C_3-C_{30} trihydrocarbylsiloxy. Theo cách khác và trong mỗi lần xuất hiện, phối tử nhóm II có thể độc lập là halogenua, hydrua, C_1-C_{20} alkoxit, C_6-C_{20} aryloxit, nhóm C_6-C_{20} η^1 -thơm, nhóm amido, nhóm C_1-C_{20} *N*-alkyl amido, nhóm C_6-C_{20} *N*-aryl amido, nhóm C_1-C_{20} *N,N*-dialkyl amido, nhóm C_7-C_{20} *N*-alkyl-*N*-aryl amido, C_1-C_{20} alkylthiolat, C_6-C_{20} arylthiolat, C_3-C_{20} trialkyliloxy, hoặc $C_{18}-C_{30}$ triarylsiloxy.

Theo một khía cạnh khác, và theo phương án bất kỳ, trong mỗi lần xuất hiện, phối tử nhóm II có thể độc lập là halogenua, C_1-C_{20} hydrocarboxit (còn được gọi là nhóm hydrocarboxy), C_1-C_{30} hydrocarbyl, hoặc C_3-C_{20} trihydrocarbylsiloxy; theo cách khác, halogenua, C_1-C_{10} hydrocarboxit, C_1-C_{10} hydrocarbyl, hoặc C_3-C_{20} trihydrocarbylsiloxy hoặc theo cách khác, halogenua, C_1-C_5 hydrocarboxit, C_1-C_5 hydrocarbyl, hoặc C_3-C_{15} trihydrocarbylsiloxy. Theo một khía cạnh khác, và theo phương án bất kỳ, trong mỗi lần xuất hiện, phối tử nhóm II có thể độc lập là halogenua, C_1-C_{20} hydrocarboxit, hoặc C_1-C_{30} hydrocarbyl; theo cách khác, halogenua, C_1-C_{10} hydrocarboxit, hoặc C_1-C_{10} hydrocarbyl hoặc theo cách khác, halogenua, C_1-C_5 hydrocarboxit, hoặc C_1-C_5 hydrocarbyl. Theo một khía cạnh khác, và theo phương án bất kỳ, trong mỗi lần xuất hiện, phối tử nhóm II có thể độc lập là halogenua hoặc C_1-C_{20} hydrocarboxit; theo cách khác, halogenua hoặc C_1-C_{10} hydrocarboxit hoặc theo cách khác, halogenua hoặc C_1-C_5 hydrocarbyl. Theo một khía cạnh khác, trong mỗi lần xuất hiện, phối tử nhóm II có thể là halogenua.

Halogenua được bộc lộ ở đây dưới dạng nhóm thế không liên kết tiềm năng trên phối tử nhóm I hoặc dưới dạng halogenua được sử dụng trong nhóm liên kết và các nhóm halogenua này có thể được sử dụng, nhưng không giới hạn, và theo khía cạnh hoặc phương án bất kỳ, dưới dạng phối tử nhóm II. Nhóm hydrocarbyl được bộc lộ ở đây dưới dạng nhóm thế không liên kết tiềm năng trên phối tử nhóm I, nhóm hydrocarbyl được sử dụng trong nhóm liên kết, hoặc dưới dạng nhóm hydrocarbyl trong nhóm thế không liên kết trên phối tử nhóm I và các nhóm hydrocarbyl này có thể được sử dụng, nhưng không chỉ giới hạn ở đó và theo khía cạnh hoặc phương án bất kỳ, dưới dạng phối tử nhóm II. Nhóm hydrocarbyl được bộc lộ ở đây dưới dạng nhóm thế không liên kết tiềm năng trên

phối tử nhóm I và các nhóm hydrocarboxy này có thể được sử dụng, nhưng không chỉ giới hạn và theo khía cạnh hoặc phương án bất kỳ, dưới dạng phối tử nhóm II.

Nhóm aminyl được thể có thể được sử dụng theo phương án bất kỳ cần đến nhóm amit được thể có thể là nhóm *N*-hydrocarbyl aminyl hoặc nhóm *N,N*-dihydrocarbyl aminyl. Nhóm hydrocarbyl được mô tả ở đây và các nhóm hydrocarbyl này có thể được sử dụng, nhưng không chỉ giới hạn ở đó, để mô tả thêm nhóm *N*-hydrocarbyl aminyl hoặc nhóm *N,N*-dihydrocarbyl aminyl có thể được sử dụng theo các khía cạnh và phương án khác nhau được mô tả ở đây. Theo một phương án không làm giới hạn phạm vi sáng chế, nhóm *N*-hydrocarbyl aminyl có thể được sử dụng theo phương án bất kỳ cần đến nhóm *N*-hydrocarbyl aminyl bao gồm, nhưng không chỉ giới hạn ở, nhóm *N*-metyl aminyl ($-\text{NHCH}_3$), nhóm *N*-etyl aminyl ($-\text{NHCH}_2\text{CH}_3$), nhóm *N*-*n*-propyl aminyl ($-\text{NHCH}_2\text{CH}_2\text{CH}_3$), nhóm *N*-iso-propyl aminyl ($-\text{NHCH}(\text{CH}_3)_2$), nhóm *N*-*n*-butyl aminyl ($-\text{NHCH}_2\text{CH}_2\text{CH}_2\text{CH}_3$), nhóm *N*-*t*-butyl aminyl ($-\text{NHC}(\text{CH}_3)_3$), nhóm *N*-*n*-pentyl aminyl ($-\text{NHCH}_2\text{CH}_2\text{CH}_2\text{CH}_2\text{CH}_3$), nhóm *N*-neo-pentyl aminyl ($-\text{NHCH}_2\text{C}(\text{CH}_3)_3$), nhóm *N*-phenyl aminyl ($-\text{NHC}_6\text{H}_5$), nhóm *N*-tolyl aminyl ($-\text{NHC}_6\text{H}_4\text{CH}_3$), hoặc nhóm *N*-xylyl aminyl ($-\text{NHC}_6\text{H}_3(\text{CH}_3)_2$); theo cách khác, nhóm *N*-etyl aminyl; theo cách khác, nhóm *N*-propyl aminyl hoặc theo cách khác, nhóm *N*-phenyl aminyl. Nhóm *N,N*-dihydrocarbyl aminyl có thể được sử dụng theo phương án bất kỳ cần đến nhóm *N,N*-dihydrocarbyl aminyl bao gồm, nhưng không chỉ giới hạn ở, nhóm *N,N*-dimetyl aminyl ($-\text{N}(\text{CH}_3)_2$), nhóm *N,N*-dietyl aminyl ($-\text{N}(\text{CH}_2\text{CH}_3)_2$), nhóm *N,N*-di-*n*-propyl aminyl ($-\text{N}(\text{CH}_2\text{CH}_2\text{CH}_3)_2$), nhóm *N,N*-di-iso-propyl aminyl ($-\text{N}(\text{CH}(\text{CH}_3)_2)_2$), nhóm *N,N*-di-*n*-butyl aminyl ($-\text{N}(\text{CH}_2\text{CH}_2\text{CH}_2\text{CH}_3)_2$), nhóm *N,N*-di-*t*-butyl aminyl ($-\text{N}(\text{C}(\text{CH}_3)_3)_2$), nhóm *N,N*-di-*n*-pentyl aminyl ($-\text{N}(\text{CH}_2\text{CH}_2\text{CH}_2\text{CH}_2\text{CH}_3)_2$), nhóm *N,N*-di-neo-pentyl aminyl ($-\text{N}(\text{CH}_2\text{C}(\text{CH}_3)_3)_2$), nhóm *N,N*-di-phenyl aminyl ($-\text{N}(\text{C}_6\text{H}_5)_2$), nhóm *N,N*-di-tolyl aminyl ($-\text{N}(\text{C}_6\text{H}_4\text{CH}_3)_2$), hoặc nhóm *N,N*-di-xylyl aminyl ($-\text{N}(\text{C}_6\text{H}_3(\text{CH}_3)_2)_2$); theo cách khác, nhóm *N,N*-di-etyl aminyl; theo cách khác, nhóm *N,N*-di-*n*-propyl aminyl hoặc theo cách khác, nhóm *N,N*-di-phenyl aminyl. Halogenua có thể được sử dụng theo phương án bất kỳ cần đến nhóm thể halogenua hoặc nhóm bao gồm florua, clorua, bromua, hoặc iodia; theo cách khác, florua; theo cách khác, clorua hoặc theo cách khác, bromua. Theo một số phương án, nhóm thể hoặc nhóm có thể được sử dụng theo một phương án cần đến nhóm thể hoặc nhóm có thể bao gồm nhóm hydrocarbyl được

halogen hóa. Theo một phương án, nhóm hydrocarbyl được halogen hóa có thể là nhóm thơm được halogen hóa hoặc nhóm alkyl được halogen hóa; theo cách khác, nhóm thơm được halogen hóa hoặc theo cách khác, nhóm alkyl được halogen hóa. Một nhóm thơm được halogen hóa thông thường là pentaflorophenyl. Một nhóm alkyl được halogen hóa thông thường là triflometyl.

Ví dụ về nhóm thơm, trong mỗi trường hợp, bao gồm, nhưng không chỉ giới hạn ở, phenyl, naphtyl, antraxenyl, và nhóm tương tự, kể cả dẫn xuất được thế của chúng. Theo một số phương án, nhóm thơm có thể là nhóm phenyl được thế. Nhóm phenyl được thế có thể được thế ở vị trí 2, vị trí 3, vị trí 4, vị trí 2 và 4, vị trí 2 và 6, vị trí 2 và 5, vị trí 3 và 5, hoặc vị trí 2, 4, và 6; theo cách khác, vị trí 2, vị trí 4, vị trí 2 và 4, vị trí 2 và 6, hoặc vị trí 2, 4, và 6; theo cách khác, vị trí 2; theo cách khác, vị trí 3; theo cách khác, vị trí 4; theo cách khác, vị trí 2 và 4; theo cách khác, vị trí 2 và 6; theo cách khác, vị trí 3 và 5 hoặc theo cách khác, vị trí 2, 4, và 6. Nhóm thế có thể có mặt bao gồm halogenua, nhóm alkyl, nhóm alkoxy, nhóm aminyl, N-hydrocarbylaminy, và/hoặc nhóm *N,N*-dihydrocarbyl aminyl; theo cách khác, halogenua, nhóm alkyl, hoặc nhóm alkoxy; theo cách khác, halogenua hoặc nhóm alkyl; theo cách khác, halogenua hoặc nhóm alkoxy; theo cách khác, halogenua; theo cách khác, nhóm alkyl hoặc theo cách khác, nhóm alkoxy. Halogenua, nhóm alkyl, và nhóm alkoxy độc lập đã được mô tả ở đây và có thể được sử dụng, nhưng không giới hạn, dưới dạng mỗi nhóm thế độc lập. Theo một số phương án không làm giới hạn phạm vi sáng chế, nhóm thơm được thế bao gồm, nhưng không chỉ giới hạn ở, tolyl (2-, 3-, 4-, hoặc hỗn hợp của chúng), xylyl (2,3-, 2,4-, 2,5-, 3,4-, 3,5-, 2,6-, hoặc hỗn hợp của chúng), mesityl, pentaflorophenyl, C_6H_4OMe (2-, 3-, 4-, hoặc hỗn hợp của chúng), $C_6H_4NH_2$ (2-, 3-, 4-, hoặc hỗn hợp của chúng), $C_6H_4NMe_2$ (2-, 3-, 4-, hoặc hỗn hợp của chúng), $C_6H_4CF_3$ (2-, 3-, 4-, hoặc hỗn hợp của chúng), C_6H_4F , C_6H_4Cl (2-, 3-, 4-, hoặc hỗn hợp của chúng), $C_6H_3(OMe)_2$ (2,3-, 2,4-, 2,5-, 3,4-, 3,5-, 2,6-, hoặc hỗn hợp của chúng), $C_6H_3(CF_3)_2$ (2,3-, 2,4-, 2,5-, 3,4-, 3,5-, 2,6-, hoặc hỗn hợp của chúng), và nhóm tương tự, kể cả nhóm tương tự được thế nguyên tử khác loại bất kỳ của chúng như được mô tả trong phần định nghĩa. Nhóm thơm được thế khác, và hỗn hợp các nhóm thơm được thế, có thể được thấy rõ khi sử dụng bản mô tả này.

Ví dụ về hợp chất dị vòng mà nhóm nguyên tử khác loại có thể có nguồn gốc từ đó bao gồm, nhưng không chỉ giới hạn ở, aziridin, azirin, oxiran (etylen oxit), oxiren,

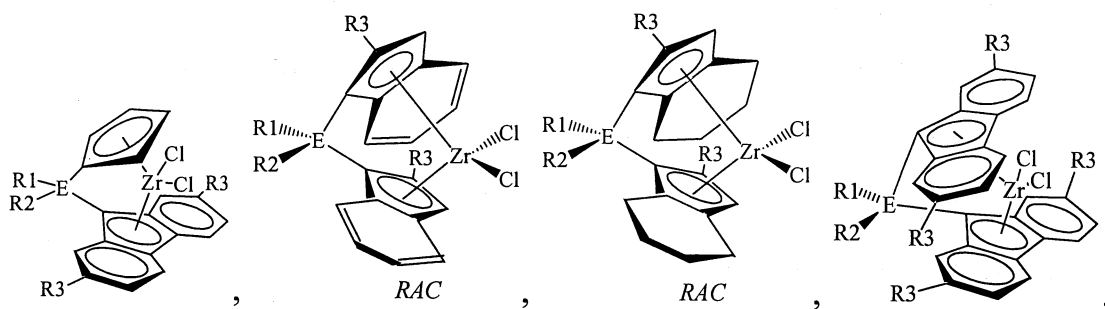
thiiran (etylen sulfua), dioxiran, azetidin, oxetan, thietan, dioxetan, dithietan, tetrahydropyrol, pyrol, tetrahydrofuran, furan, tetrahydrothiophen, thiophen, imidazolidin, pyrazol, imidazol, oxazolidin, oxazol, isoxazol, thiazolidin, thiazol, isothiazol, dioxolan, dithiolan, triazol, dithiazol, tetrazol, piperidin, pyridin, tetrahydropyran, pyran, thian, thiin, piperazin, diazin, oxazin, thiazin, dithian, dioxan, dioxin, triazin, trioxan, tetrazin, azepin, thiopin, diazepin, morpholin, quinolin, 1,2-thiazol, bixyclo[3.3.1]tetrasiloxan, và hợp chất tương tự được thế của chúng. Do đó và như có thể áp dụng cho hợp chất dị vòng cụ thể, nhóm dị vòng, nhóm heteroxyclylen, nhóm dị vòng, nhóm xycloheteryl, nhóm xycloheterylen, nhóm xyclohetero, nhóm heteroaryl, nhóm heteroarylen, nhóm heteroaren, nhóm arylheteryl, nhóm arylheterylen, nhóm arylhetero, nhóm organoheteryl, nhóm organoheterylen, hoặc nhóm organohetero có thể có nguồn gốc từ hợp chất dị vòng này và hợp chất dị vòng tương tự và hợp chất tương tự được thế của chúng. Phần mô tả thêm về các hợp chất này được đưa ra trong phần định nghĩa.

Theo một khía cạnh khác, và theo phương án bất kỳ được bộc lộ ở đây trong đó phối tử được chọn để tạo ra hoạt tính quay quang cho metaloxen, metaloxen có thể là raxemic. Theo cách khác, và theo phương án bất kỳ trong đó phối tử được chọn để tạo hoạt tính quay quang cho metaloxen, metaloxen có thể không là raxemic. Ngoài ra, và theo phương án bất kỳ trong đó phối tử được chọn để tạo hoạt tính quay quang cho metaloxen, metaloxen có thể gần như tinh khiết quang (có lượng dư chất đồng phân đối ảnh lớn hơn hoặc bằng 99,5%), hoặc không tinh khiết quang. Do đó, chất đồng phân đối ảnh bất kỳ, chất đồng phân không đối quang, epime, và chất tương tự của metaloxen được sử dụng trong phương pháp được mô tả ở đây là thuộc phạm vi sáng chế.

Theo một khía cạnh khác và theo phương án bất kỳ được bộc lộ ở đây, metaloxen có thể có công thức $(\eta^5\text{-xycloalkadienyl})M^3R_n^9X_{3-n}^9$ hoặc theo cách khác, metaloxen có công thức $(\eta^5\text{-xycloalkadienyl})_2M^3X_2^9$. Theo một phương án, M^3 có thể là kim loại bất kỳ của metaloxen được mô tả ở đây, mỗi phối tử $\eta^5\text{-xycloalkadienyl}$ có thể độc lập là phối tử $\eta^5\text{-xycloalkadienyl}$ bất kỳ được mô tả ở đây, mỗi nhóm R^9 có thể độc lập là nhóm hydrocarbyl bất kỳ được mô tả ở đây, mỗi nhóm X^9 có thể độc lập là halogenua, nhóm hydrocarbyl, nhóm hydrocarboxy bất kỳ được mô tả ở đây, và n có

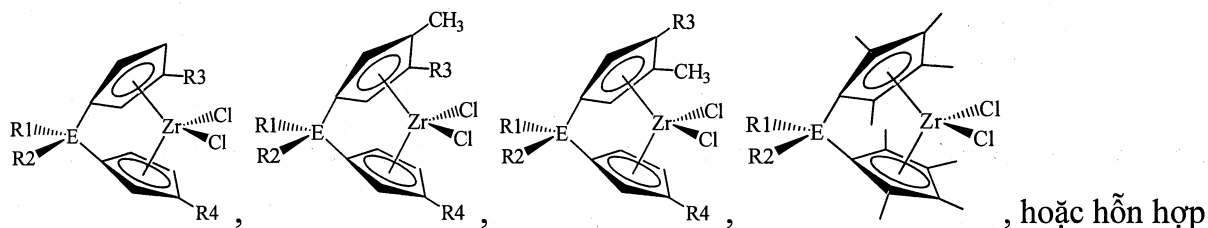
thể là số nguyên nằm trong khoảng từ 1 đến 3. Theo một số phương án không làm giới hạn phạm vi sáng chế, M^3 có thể là Ti, Zr, hoặc Hf, mỗi phối tử η^5 -xycloalkadienyl có thể là phối tử xyclopentadienyl được thế hoặc không được thế, phối tử indenyl được thế hoặc không được thế, hoặc phối tử florenyl được thế hoặc không được thế, mỗi nhóm R^9 có thể độc lập là nhóm C_1 - C_{20} alkyl, nhóm C_1 - C_{20} xycloalkyl, nhóm C_6 - C_{20} aryl, hoặc nhóm C_7 - C_{20} aralkyl được thế hoặc không được thế, mỗi nhóm X^9 có thể độc lập là halogenua, nhóm C_1 - C_{20} alkyl được thế hoặc không được thế, nhóm C_1 - C_{20} xycloalkyl được thế hoặc không được thế, nhóm C_6 - C_{20} aryl được thế hoặc không được thế, nhóm C_7 - C_{20} aralkyl được thế hoặc không được thế, nhóm C_1 - C_{20} alkoxit được thế hoặc không được thế, hoặc nhóm C_6 - C_{20} aryloxit được thế hoặc không được thế, và n có thể là số nguyên nằm trong khoảng từ 1 đến 3. Nếu metaloxen có công thức $(\eta^5\text{-xycloalkadienyl})_2M^3X^9_2$, hai phối tử $(\eta^5\text{-xycloalkadienyl})$ có thể được liên kết bằng nhóm liên kết bất kỳ được mô tả ở đây. Nếu metaloxen có công thức $(\eta^5\text{-xycloalkadienyl})M^3R^9_nX^9_{3-n}$ hoặc công thức $(\eta^5\text{-xycloalkadienyl})_2M^3X^9_2$, nhóm thế không liên kết bất kỳ trên η^5 -xycloalkadienyl, R^9 , và/hoặc X^9 có thể độc lập là nhóm thế bất kỳ được bộc lộ ở đây. Theo một số phương án, nếu metaloxen có công thức $(\eta^5\text{-xycloalkadienyl})M^3R^9_nX^9_{3-n}$ hoặc công thức $(\eta^5\text{-xycloalkadienyl})_2M^3X^9_2$, nhóm thế không liên kết bất kỳ trên η^5 -xycloalkadienyl, R^9 , và/hoặc X^9 có thể độc lập là halogenua, nhóm C_1 - C_{20} alkoxit, nhóm C_6 - C_{20} aryloxit, nhóm C_6 - C_{20} thiom, nhóm amido, nhóm C_1 - C_{20} *N*-alkyl amido, nhóm C_6 - C_{20} *N*-aryl amido, nhóm C_1 - C_{40} *N,N*-dialkyl amido, nhóm C_7 - C_{40} *N*-alkyl-*N*-aryl amido, nhóm C_1 - C_{20} alkylthiolat, nhóm C_6 - C_{20} arylthiolat, nhóm C_3 - C_{20} trialkyliloxy, hoặc nhóm C_{18} - C_{45} triarylsiloxy.

Nhiều metaloxen có thể dùng trong hệ chất xúc tác được bộc lộ ở đây và/hoặc để thực hiện các phương pháp được bộc lộ ở đây. Theo một khía cạnh và theo phương án bất kỳ được bộc lộ ở đây, metaloxen có thể có công thức:



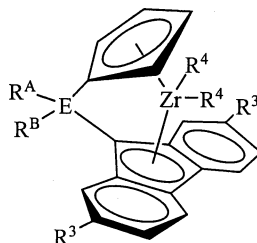
hoặc hỗn hợp bất kỳ của chúng. Theo một khía cạnh và theo phương án bất kỳ được

bộc lộ ở đây, metaloxen có công thức:



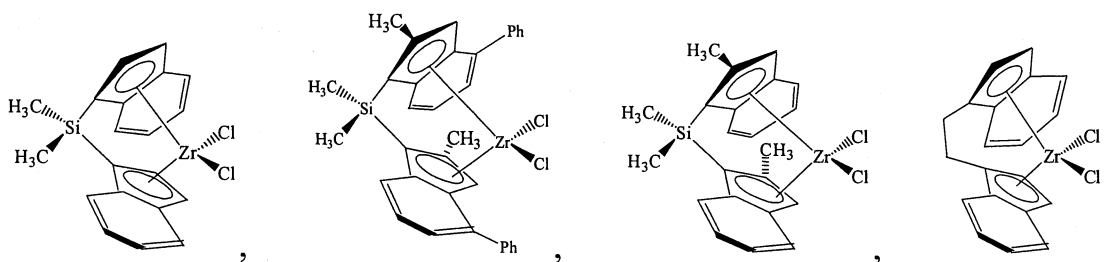
bất kỳ của chúng. Theo các khía cạnh này, E có thể là nguyên tử liên kết cầu bất kỳ được bộc lộ ở đây, và R1, R2, và R3, trong mỗi lần xuất hiện, có thể độc lập là nhóm hydrocarbyl bất kỳ được bộc lộ ở đây. Theo một số phương án không làm giới hạn phạm vi sáng chế, E có thể là C, Si, Ge, hoặc Sn, và trong mỗi lần xuất hiện, R1, R2, và R3, có thể độc lập là H hoặc nhóm C₁-C₂₀ hydrocarbyl bất kỳ được mô tả ở đây.

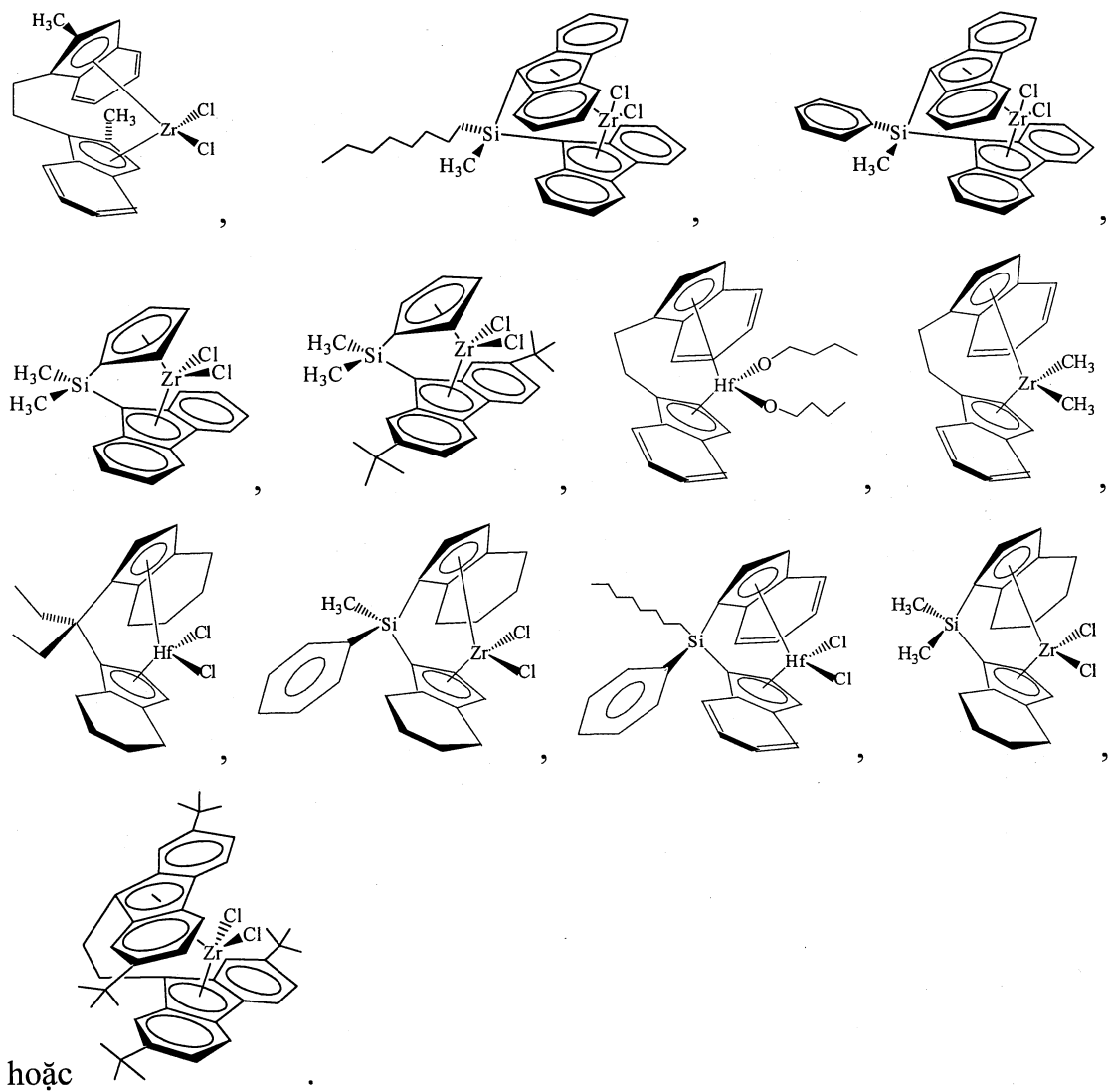
Theo một khía cạnh khác không làm giới hạn phạm vi sáng chế và theo phương án bất kỳ được bộc lộ ở đây, metaloxen có thể có công thức:



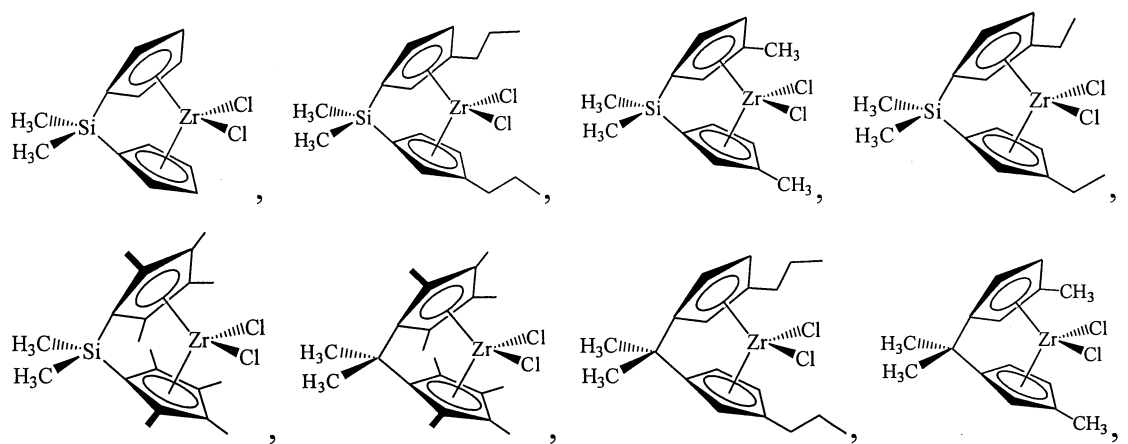
Theo khía cạnh này, E có thể là nguyên tử liên kết cầu bất kỳ được bộc lộ ở đây, R^A có thể là H hoặc nhóm hydrocarbyl bất kỳ được bộc lộ ở đây, R^B có thể là nhóm alkenyl bất kỳ được bộc lộ ở đây, R³ có thể là H hoặc nhóm hydrocarbyl bất kỳ được bộc lộ ở đây, và R⁴ có thể là H hoặc nhóm hydrocarbyl bất kỳ được bộc lộ ở đây. Theo một số phương án không làm giới hạn phạm vi sáng chế, E có thể là C, Si, Ge, hoặc Sn, R^A có thể là H hoặc nhóm C₁-C₂₀ hydrocarbyl, R^B có thể là nhóm C₃-C₁₂ alkenyl, R³ có thể là H hoặc nhóm C₁-C₁₅ hydrocarbyl và R⁴ có thể là H hoặc nhóm C₁-C₂₀ hydrocarbyl.

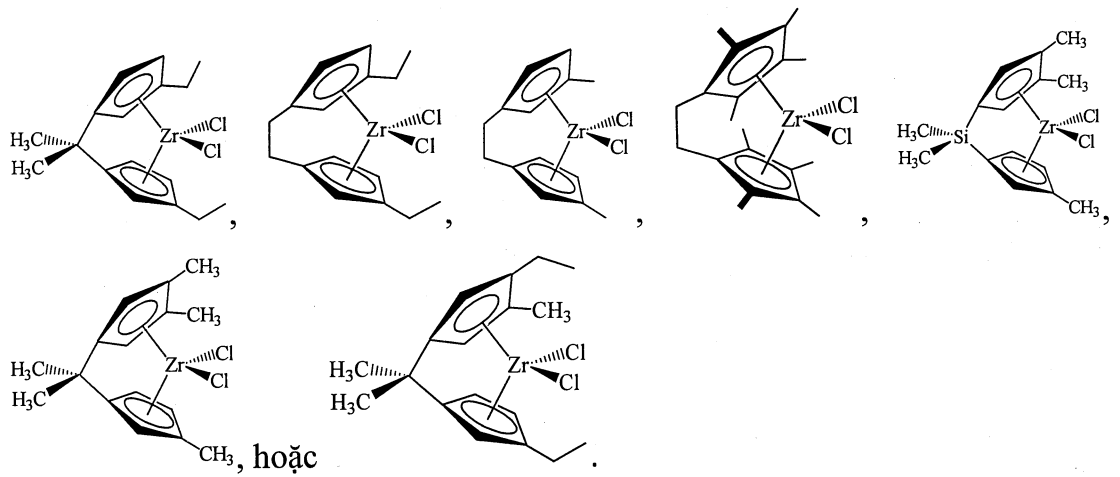
Theo một khía cạnh khác nữa và theo phương án bất kỳ được bộc lộ ở đây, metaloxen có thể chứa, chủ yếu bao gồm, hoặc bao gồm, một mình hoặc trong hỗn hợp bất kỳ có công thức:



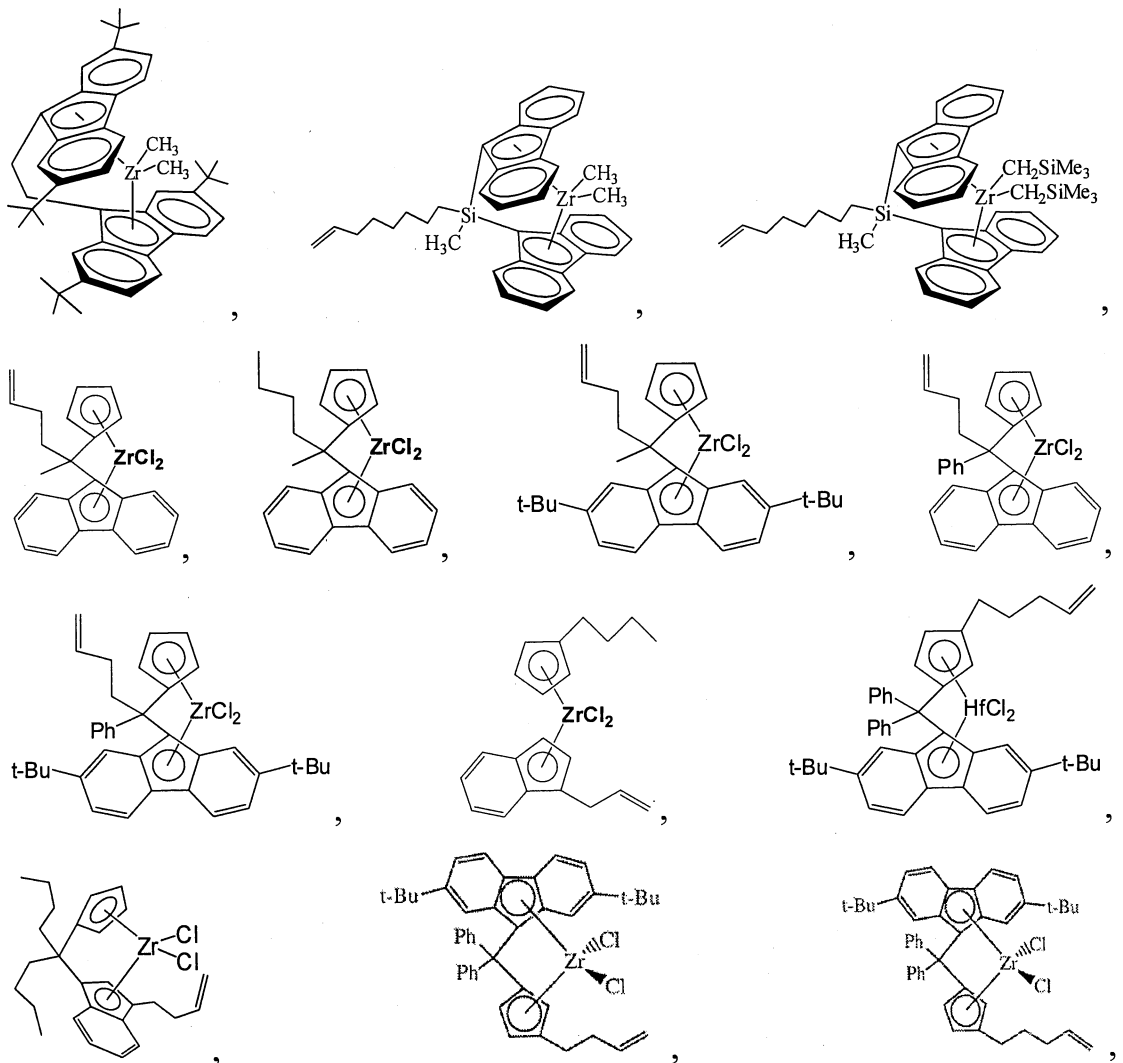


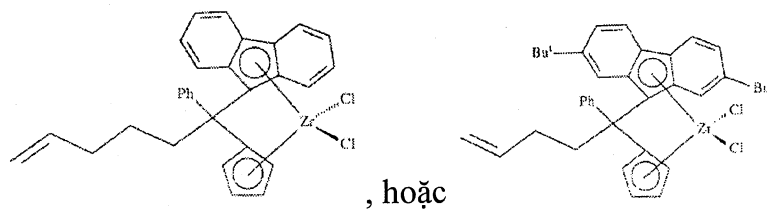
Theo một khía cạnh khác nữa và theo phương án bất kỳ được bộc lộ ở đây, metaloxen có thể chứa, chủ yếu bao gồm, hoặc bao gồm, một mình hoặc trong hỗn hợp bất kỳ có công thức:



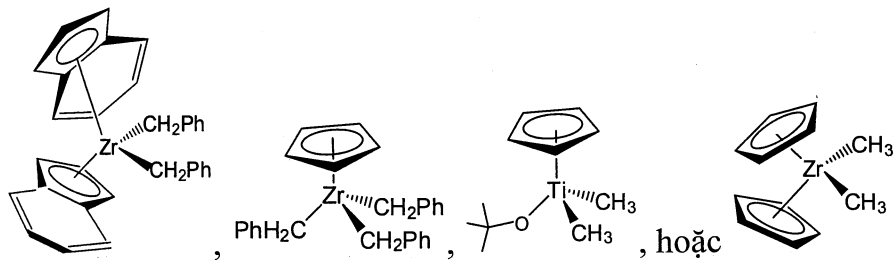


Theo một khía cạnh khác và theo phương án bất kỳ của sáng chế, metaloxen có thể chứa, chủ yếu bao gồm, hoặc bao gồm, một mình hoặc trong hỗn hợp bất kỳ có công thức:



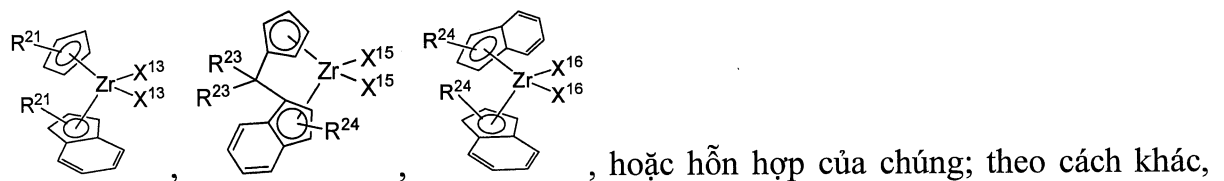


Theo một khía cạnh khác và theo phương án bất kỳ được bộc lộ ở đây, metaloxen có thể chứa, chủ yếu bao gồm, hoặc bao gồm, một mình hoặc trong hỗn hợp bất kỳ có công thức:



Theo một khía cạnh khác và theo phương án bất kỳ được bộc lộ ở đây, metaloxen

có thể chứa, chủ yếu bao gồm, hoặc bao gồm các hợp chất có công thức: ,



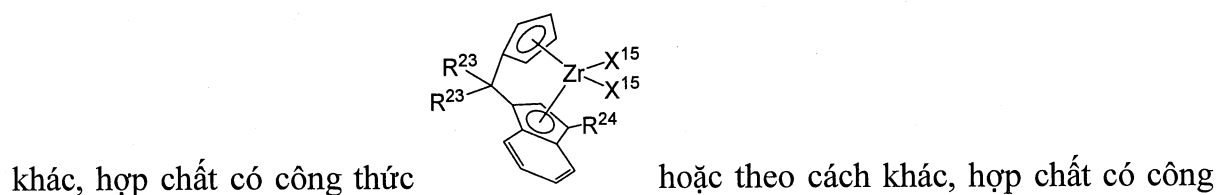
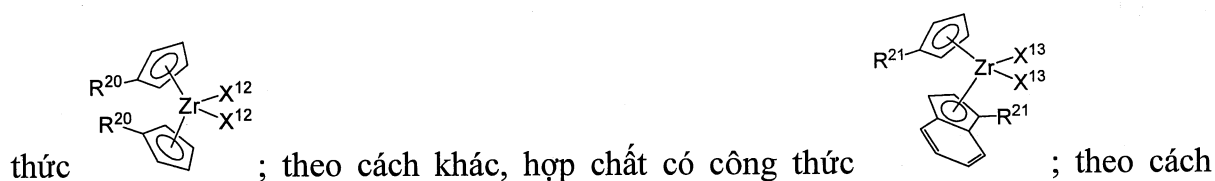
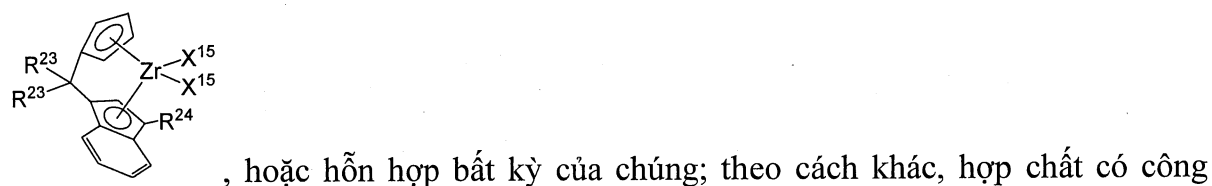
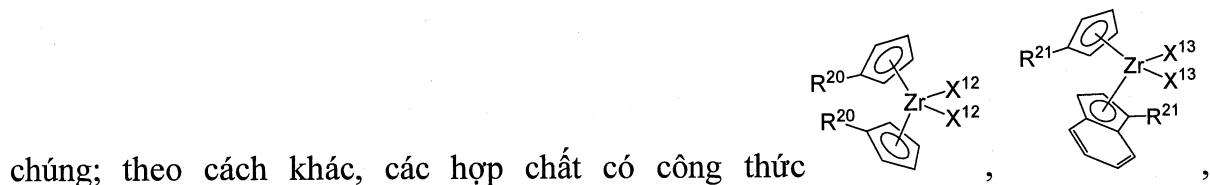
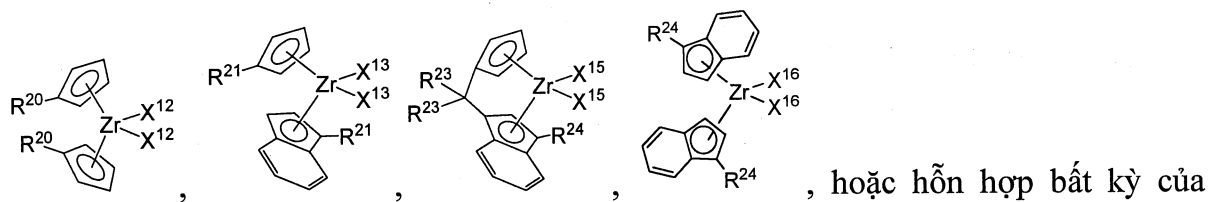
các hợp chất có công thức , , , hoặc hỗn hợp của

chúng; theo cách khác, hợp chất có công thức ; theo cách khác, hợp chất có

công thức ; theo cách khác, hợp chất có công thức hoặc theo

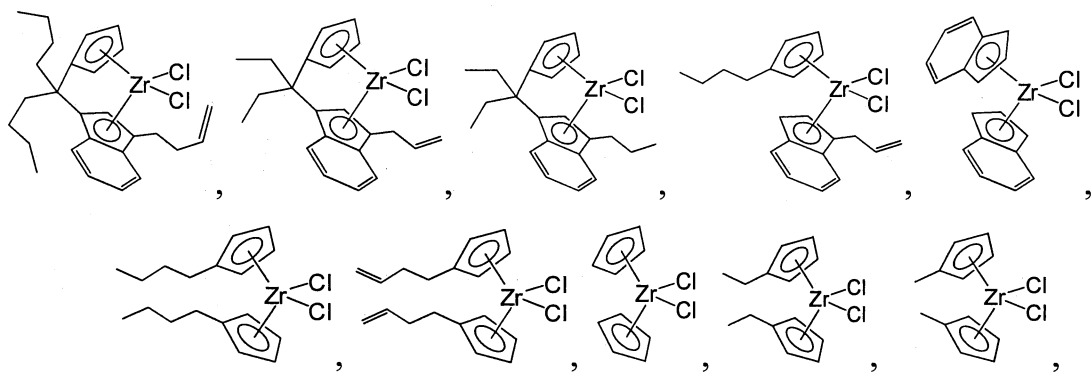
cách khác, hợp chất có công thức . Theo một khía cạnh khác nữa và theo

phương án bất kỳ được bộc lộ ở đây, metaloxen có thể chứa, chủ yếu bao gồm, hoặc bao gồm các hợp chất có công thức:

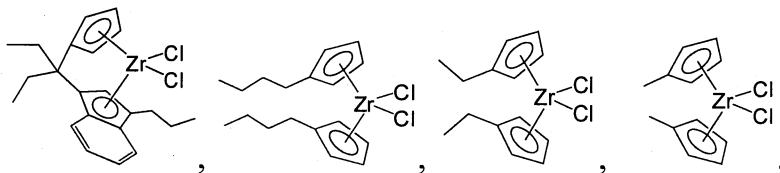


thức . Theo các khía cạnh này, mỗi nhóm R^{20} , R^{21} , R^{23} , và R^{24} có thể độc lập là hydro hoặc nhóm hydrocarbonyl bất kỳ được bộc lộ ở đây, và mỗi nhóm X^{12} , X^{13} , X^{15} , và X^{16} có thể độc lập là halogen bất kỳ được mô tả ở đây. Theo một số phương án, mỗi nhóm R^{20} , R^{21} , R^{23} , và R^{24} có thể độc lập là hydro, nhóm C_1 - C_{20} alkyl, hoặc nhóm C_1 - C_{20} alkenyl, và mỗi nhóm X^{12} , X^{13} , X^{15} , và X^{16} có thể độc lập là F, Cl, Br, hoặc I. Theo một phương án khác, mỗi nhóm R^{20} , R^{21} , và R^{23} có thể độc lập là hydro, nhóm C_1 - C_{10} alkyl, hoặc nhóm C_1 - C_{10} alkenyl, và mỗi nhóm X^{12} , X^{13} , và X^{15} có thể độc lập là Cl hoặc Br.

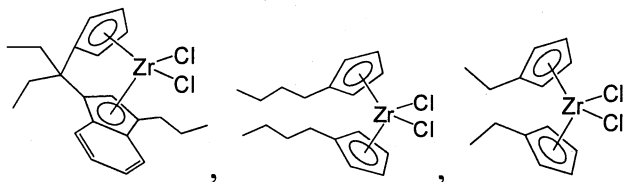
Theo một khía cạnh khác nữa và phương án bất kỳ được bộc lộ ở đây, metaloxen có thể chứa, chủ yếu bao gồm, hoặc bao gồm các hợp chất có công thức:



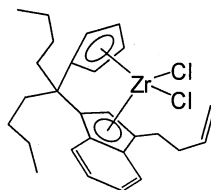
hoặc hỗn hợp bất kỳ của chúng; theo cách khác, các hợp chất có công thức



hoặc hỗn hợp bất kỳ của chúng; theo cách khác, các hợp chất có công thức

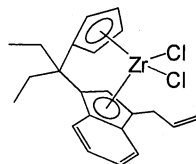


, hoặc hỗn hợp bất kỳ của chúng; theo



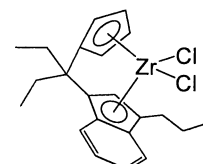
cách khác, hợp chất có công thức

; theo cách khác, hợp chất có



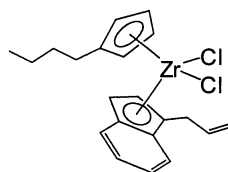
công thức

; theo cách khác, hợp chất có công thức



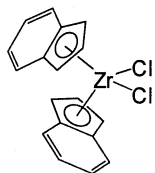
;

theo cách khác, hợp chất có công thức

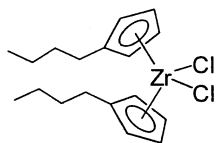


; theo cách khác, hợp

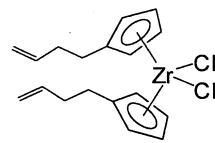
chất có công thức



; theo cách khác, hợp chất có công thức

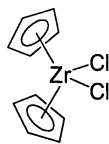


; theo cách khác, hợp chất có công thức



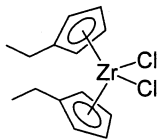
; theo

cách khác, hợp chất có công thức

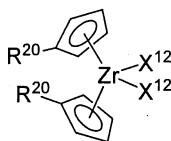


hoặc theo cách khác, hợp chất có công

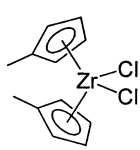
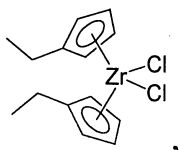
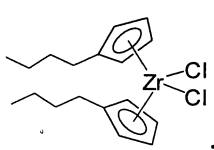
thức



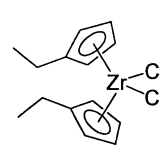
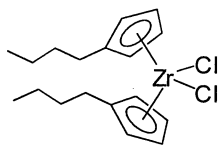
Theo một khía cạnh khác và theo phương án bất kỳ được bộc lộ ở đây, metaloxen có thể chứa, chủ yếu bao gồm, hoặc bao gồm hợp chất có công thức:



Theo một phương án, mỗi nhóm R^{20} có thể độc lập là hydro, nhóm C_1 - C_{10} alkyl, hoặc nhóm C_1 - C_{10} alkenyl, và mỗi nhóm X^{12} có thể độc lập là Cl hoặc Br. Theo một phương án khác, mỗi nhóm R^{20} có thể độc lập là nhóm C_1 - C_{10} alkyl và mỗi nhóm X^{12} có thể độc lập là Cl hoặc Br. Theo một phương án không làm giới hạn phạm vi sáng chế, metaloxen có thể chứa, chủ yếu bao gồm, hoặc bao gồm các hợp chất có công thức:



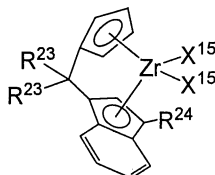
, hoặc hỗn hợp bất kỳ của chúng; theo cách



khác, các hợp chất có công thức của chúng.

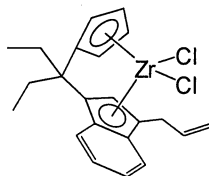
, hoặc hỗn hợp bất kỳ

Theo một khía cạnh khác nữa và phương án bất kỳ được bộc lộ ở đây, metaloxen có thể chứa, chủ yếu bao gồm, hoặc bao gồm hợp chất có công thức:

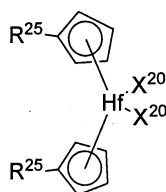


Theo một số phương án không giới hạn phạm vi sáng chế, mỗi nhóm R^{23} và R^{24} có thể độc lập là hydro, nhóm C_1 - C_{10} alkyl, hoặc nhóm C_1 - C_{10} alkenyl, và mỗi nhóm X^{15} có thể độc lập là Cl hoặc Br. Theo các phương án không làm giới hạn phạm vi sáng chế khác, mỗi nhóm R^{23} và R^{24} có thể độc lập là nhóm C_1 - C_{10} alkyl hoặc nhóm

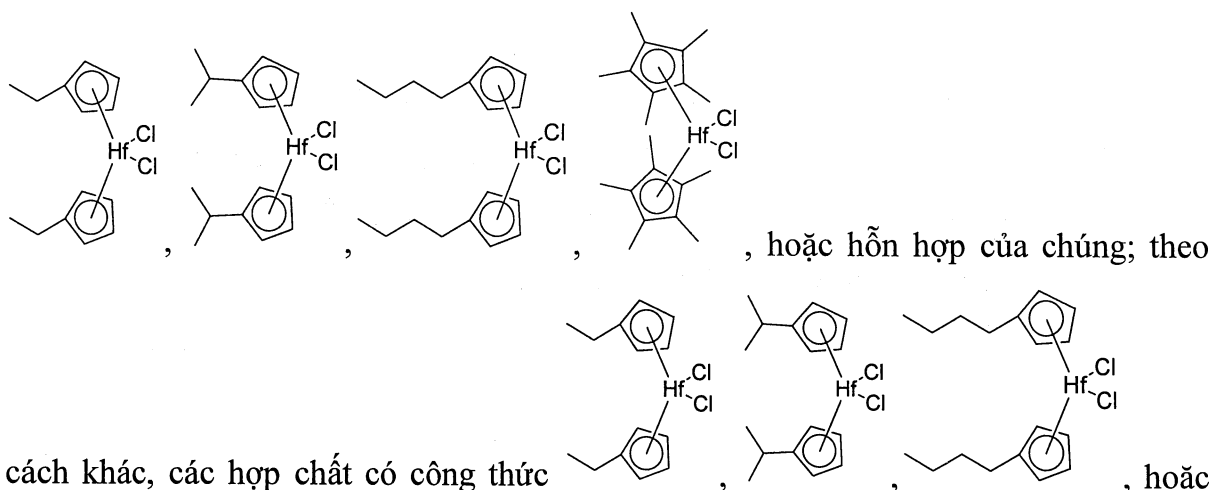
C_1 - C_{10} alkenyl, và mỗi nhóm X^{15} có thể độc lập là Cl hoặc Br. Theo một phương án không làm giới hạn phạm vi sáng chế khác, metaloxen có thể chứa, chủ yếu bao gồm, hoặc bao gồm hợp chất có công thức:



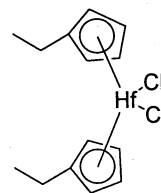
Theo một khía cạnh khác nữa và phương án bất kỳ được bộc lộ ở đây, metaloxen có thể chứa, chủ yếu bao gồm, hoặc bao gồm hợp chất có công thức:



Theo một số phương án không làm giới hạn phạm vi sáng chế, mỗi nhóm R^{25} có thể độc lập là hydro, C_1 - C_{10} nhóm alkyl, hoặc nhóm C_1 - C_{10} alkenyl, và mỗi nhóm X^{20} có thể độc lập là Cl hoặc Br. Theo các phương án không làm giới hạn phạm vi sáng chế khác, mỗi nhóm R^{25} có thể độc lập là nhóm C_1 - C_{10} alkyl hoặc nhóm C_1 - C_{10} alkenyl, và mỗi nhóm X^{20} có thể độc lập là Cl hoặc Br. Theo các phương án khác nữa không làm giới hạn phạm vi sáng chế, mỗi nhóm R^{25} có thể độc lập là nhóm C_1 - C_{10} alkyl, và mỗi nhóm X^{20} có thể độc lập là Cl hoặc Br. Theo một phương án không làm giới hạn phạm vi sáng chế khác, metaloxen có thể chứa, chủ yếu bao gồm, hoặc bao gồm các hợp chất có công thức:

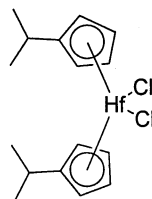


hỗn hợp của chúng; theo cách khác, hợp chất có công thức

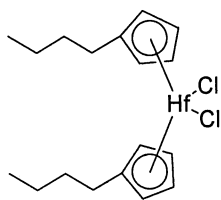


; theo cách

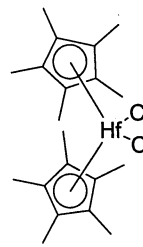
khác, hợp chất có công thức



; theo cách khác, hợp chất có công thức



hoặc theo cách khác, hợp chất có công thức



Theo một khía cạnh khác và theo phương án bất kỳ được bộc lộ ở đây, metaloxen có thể chứa, chủ yếu bao gồm, hoặc bao gồm, ở dạng đơn lẻ hoặc hỗn hợp bất kỳ của chúng:

bis(xyclopentadienyl)hafni diclorua,

bis(xyclopentadienyl)ziricon diclorua,

1,2-etandiylbis(η^5 -1-indenyl)di-n-butoxyhafni,

1,2-etandiylbis(η^5 -1-indenyl)dimethylziricon,

3,3-pentandiylbis(η^5 -4,5,6,7-tetrahydro-1-indenyl)hafni diclorua,

methylphenylsilylbis(η^5 -4,5,6,7-tetrahydro-1-indenyl)ziricon diclorua,

bis(n-butylxyclopentadienyl)di-t-butylamido hafni,

bis(n-butylxyclopentadienyl) ziricon diclorua,

bis(etylxclopentadienyl) ziricon diclorua,

bis(propylxclopentadienyl) ziricon diclorua,

dimethylsilylbis(1-indenyl) ziricon diclorua,

nonyl(phenyl)silylbis(1-indenyl) hafni diclorua,

dimethylsilylbis(η^5 -4,5,6,7-tetrahydro-1-indenyl)ziricon diclorua,

dimethylsilylbis(2-metyl-1-indenyl)ziricon diclorua,

1,2-etandiylbis(9-florenyl)ziricon diclorua,

indenyl dietoxy titan(IV) clorua,

(isopropylamidodimetylsilyl)xyclopentadienyltitan diclorua,
 bis(pentametylxyclopentadienyl)ziricon diclorua,
 bis(indenyl)ziricon diclorua,
 metyloctylsilyl bis(9-florenyl) ziricon diclorua,
 bis-[1-(*N,N*-diisopropylamino)boratabenzen]hydrido ziricon triflometylsulfonat,
 bis(xyclopentadienyl)hafini dimetyl,
 bis(xyclopentadienyl)ziricon dibenzyl,
 1,2-etandiylobis(η^5 -1-indenyl) dimetylhafini,
 1,2-etandiylobis(η^5 -1-indenyl)dimetylziricon,
 3,3-pentandiylobis(η^5 -4,5,6,7-tetrahydro-1-indenyl)hafini dimetyl,
 metylphenylsilylobis(η^5 -4,5,6,7-tetrahydro-1-indenyl)ziricon dimetyl,
 bis(1-*n*-butyl-3-metyl-xyclopentadienyl)ziricon dimetyl,
 bis(*n*-butylxyclopentadienyl)ziricon dimetyl,
 dimetylsilylobis(1-indenyl)ziricon bis(trimetylsilylmetyl),
 octyl(phenyl)silylobis(1-indenyl)hafini dimetyl,
 dimetylsilylobis(η^5 -4,5,6,7-tetrahydro-1-indenyl)ziricon dimetyl,
 dimetylsilylobis(2-metyl-1-indenyl)ziricon dibenzyl,
 1,2-etandiylobis(9-florenyl)ziricon dimetyl,
 (indenyl)trisbenzyl titan(IV),
 (isopropylamidodimetylsilyl)xyclopentadienyltitan dibenzyl,
 bis(pentametylxyclopentadienyl)ziricon dimetyl,
 bis(indenyl) ziricon dimetyl,
 metyl(octyl)silylobis(9-florenyl)ziricon dimetyl,
 bis(2,7-di-*tert*-butylflorenyl)-ethan-1,2-diyl)ziricon(IV) dimetyl,
 2-(η^5 -xyclopentadienyl)-2-(η^5 -floren-9-yl)hex-5-en ziricon(IV) diclorua,
 2-(η^5 -xyclopentadienyl)-2-(η^5 -2,7-di-*tert*-butylfloren-9-yl)hex-5-en ziricon(IV)
 diclorua,
 2-(η^5 -xyclopentadienyl)-2-(η^5 -floren-9-yl)hept-6-en ziricon(IV) diclorua,
 2-(η^5 -xyclopentadienyl)-2-(η^5 -2,7-di-*tert*-butylfloren-9-yl)hept-6-en
 ziricon(IV) diclorua,
 1-(η^5 -xyclopentadienyl)-1-(η^5 -floren-9-yl)-1-phenylpent-4-en ziricon(IV)
 diclorua,

1-(η^5 -xyclopentadienyl)-1-(η^5 -2,7-di-*tert*-butyl floren-9-yl)-1-phenylpent-4-en
ziricon(IV) diclorua,

1-(η^5 -xyclopentadienyl)-1-(η^5 -floren-9-yl)-1-phenylhex-5-en ziricon(IV)
diclorua, hoặc

1-(η^5 -xyclopentadienyl)-1-(η^5 -2,7-di-*tert*-butylfloren-9-yl)-1-phenylhex-5-en
ziricon(IV) diclorua.

Theo một khía cạnh khác và theo phương án bất kỳ được bộc lộ ở đây, metaloxen có thể chứa, chủ yếu bao gồm, bao gồm, một mình hoặc trong hỗn hợp bất kỳ, *rac*-C₂H₄(η^5 -indenyl)₂ZrCl₂, *rac*-Me₂Si(η^5 -indenyl)₂ZrCl₂, Me(octyl)Si(η^5 -florenyl)₂ZrCl₂, *rac*-Me₂Si(η^5 -2-Me-4-Ph-indenyl)₂ZrCl₂, *rac*-C₂H₄(η^5 -2-Me-indenyl)₂ZrCl₂, Me(Ph)Si(η^5 -florenyl)₂ZrCl₂, *rac*-Me₂Si(η^5 -3-n-Pr-xyclopentadienyl)₂ZrCl₂, Me₂Si(η^5 -Me₄-xyclopentadienyl)₂ZrCl₂, hoặc Me₂Si(η^5 -xyclopentadienyl)₂ZrCl₂.

Theo một khía cạnh khác và theo phương án bất kỳ được bộc lộ ở đây, metaloxen có thể chứa hai phối tử loại η^5 -xyclopentadienyl được liên kết bằng nhóm liên kết bao gồm một, hai, hoặc ba nguyên tử liên kết cầu. Theo một khía cạnh khác và theo phương án bất kỳ được bộc lộ ở đây, metaloxen có thể chứa một phối tử loại η^5 -xyclopentadienyl được liên kết bằng liên kết cầu bao gồm một, hai hoặc ba nguyên tử liên kết cầu với phối tử khác trong metaloxen không là phối tử loại η^5 -xyclopentadienyl. Mỗi liên kết cầu này có thể được thế tiếp, nếu cần. Nhóm liên kết cầu được thế hoàn toàn hoặc nguyên tử liên kết cầu được mô tả cùng với nhóm thế của chúng, không phải nhóm thế của phối tử loại xyclopentadienyl, là “nhóm liên kết.” Để ví dụ về thuật ngữ này, nhóm liên kết có thể bao gồm -CH₂CH₂- hoặc -CH(CH₃)CH(CH₃)-, cả hai nhóm này chứa liên kết cầu có hai nguyên tử cacbon. Do đó, nhóm liên kết -CH₂CH₂- thường được mô tả là nhóm liên kết không được thế, trong khi nhóm liên kết như -CH(CH₃)CH(CH₃)- thường được mô tả là nhóm liên kết được thế.

Oxit dạng rắn được xử lý hóa học

Theo một khía cạnh, sáng chế đề xuất phương pháp oligome hóa bao gồm bước (hoặc phương pháp điều chế PAO bao gồm bước) cho monome alpha olefin tiếp xúc với hệ chất xúc tác chứa metaloxen. Theo một phương án, hệ chất xúc tác có thể còn

chứa chất hoạt hóa. Theo một khía cạnh, sáng chế bao gồm hệ chất xúc tác chứa ít nhất một metaloxen và ít nhất một chất hoạt hóa. Một ví dụ về chất hoạt hóa có thể được sử dụng là oxit dạng rắn được xử lý hóa học. Thuật ngữ “oxit dạng rắn được xử lý hóa học” được sử dụng thay thế lẫn nhau với các thuật ngữ tương tự như, “oxit dạng rắn được xử lý bằng anion hút electron,” “oxit dạng rắn được xử lý,” hoặc “superaxit dạng rắn”, chất này còn được gọi là “SSA”. Mặc dù không muốn bị ràng buộc bởi lý thuyết, oxit dạng rắn được xử lý hóa học được cho là có thể dùng làm chất hoạt hóa axit-nền. Theo một khía cạnh và theo phương án bất kỳ, oxit dạng rắn được xử lý hóa học có thể được sử dụng kết hợp với hợp chất hữu cơ-nhôm hoặc chất hoạt hóa tương tự hoặc chất alkyl hóa. Theo một khía cạnh và theo phương án bất kỳ, oxit dạng rắn được xử lý hóa học có thể được sử dụng kết hợp với hợp chất hữu cơ-nhôm. Theo một khía cạnh khác và theo phương án bất kỳ, metaloxen có thể “được hoạt hóa trước” bằng cách, alkyl hóa trước khi sử dụng nó trong hệ chất xúc tác. Theo một khía cạnh và theo phương án bất kỳ, oxit dạng rắn được xử lý hóa học có thể được sử dụng làm chất hoạt hóa duy nhất. Theo một khía cạnh khác nữa và theo phương án bất kỳ, metaloxen “được hoạt hóa trước” và oxit dạng rắn được xử lý hóa học có thể được sử dụng kết hợp với một chất hoạt hóa khác hoặc theo cách khác, được sử dụng kết hợp với nhiều chất hoạt hóa khác.

Theo một khía cạnh và phương án bất kỳ của sáng chế, hệ chất xúc tác có thể chứa ít nhất một oxit dạng rắn được xử lý hóa học bao gồm ít nhất là một oxit dạng rắn được xử lý bằng ít nhất một anion hút electron, trong đó oxit dạng rắn này có thể là oxit bất kỳ có diện tích bề mặt lớn, và anion hút electron có thể bao gồm anion bất kỳ làm tăng tính axit của oxit dạng rắn so với oxit dạng rắn không được xử lý bằng ít nhất một anion hút electron.

Theo một khía cạnh khác và theo phương án bất kỳ của sáng chế, hệ chất xúc tác có thể chứa oxit dạng rắn được xử lý hóa học là oxit dạng rắn được xử lý bằng anion hút electron, trong đó:

oxit dạng rắn được chọn từ silic oxit, nhôm oxit, silic oxit-nhôm oxit, nhôm phosphat, heteropolytungstat, titan oxit, ziricon oxit, magie oxit, bo oxit, kẽm oxit, oxit hỗn hợp của chúng, hoặc hỗn hợp của chúng; và

anion hút electron được chọn từ florua, clorua, bromua, phosphat, triflat, bisulfat, sulfat, flophosphat, flosulfat, hoặc hỗn hợp bất kỳ của chúng.

Theo một khía cạnh khác và theo phương án bất kỳ của sáng chế, hệ chất xúc tác có thể chứa oxit dạng rắn được xử lý hóa học là oxit dạng rắn được xử lý bằng anion hút electron, trong đó:

oxit dạng rắn được chọn từ silic oxit, nhôm oxit, silic oxit-nhôm oxit, titan oxit, ziricon oxit, oxit hỗn hợp của chúng, hoặc hỗn hợp của chúng; và

anion hút electron được chọn từ florua, clorua, bisulfat, sulfat, hoặc hỗn hợp bất kỳ của chúng.

Theo một khía cạnh khác và theo phương án bất kỳ của sáng chế, oxit dạng rắn được xử lý hóa học có thể là nhôm oxit được flo hóa, nhôm oxit được clo hóa, nhôm oxit bromua hóa, nhôm oxit được sulfat hóa, silic oxit-nhôm oxit được flo hóa, silic oxit-nhôm oxit được clo hóa, silic oxit-nhôm oxit bromua hóa, silic oxit-nhôm oxit được sulfat hóa, silic oxit-ziricon oxit được flo hóa, silic oxit-ziricon oxit clorua hóa, silic oxit-ziricon oxit bromua hóa, silic oxit-ziricon oxit được sulfat hóa, hoặc hỗn hợp bất kỳ của chúng; theo cách khác, oxit dạng rắn được xử lý hóa học là nhôm oxit được flo hóa, nhôm oxit được clo hóa, nhôm oxit được sulfat hóa, silic oxit-nhôm oxit được flo hóa, silic oxit-nhôm oxit được clo hóa, silic oxit-nhôm oxit được sulfat hóa, silic oxit-ziricon oxit được flo hóa, silic oxit-ziricon oxit được sulfat hóa, hoặc hỗn hợp bất kỳ của chúng; theo cách khác, oxit dạng rắn được xử lý hóa học là nhôm oxit được flo hóa; theo cách khác, oxit dạng rắn được xử lý hóa học là nhôm oxit được clo hóa; theo cách khác, oxit dạng rắn được xử lý hóa học là nhôm oxit bromua hóa; theo cách khác, oxit dạng rắn được xử lý hóa học là nhôm oxit được sulfat hóa; theo cách khác, silic oxit-nhôm oxit được flo hóa; theo cách khác, oxit dạng rắn được xử lý hóa học là silic oxit-nhôm oxit được clo hóa; theo cách khác, oxit dạng rắn được xử lý hóa học là silic oxit-nhôm oxit bromua hóa; theo cách khác, oxit dạng rắn được xử lý hóa học là silic oxit-nhôm oxit được sulfat hóa; theo cách khác, oxit dạng rắn được xử lý hóa học là silic oxit-ziricon oxit được flo hóa; theo cách khác, oxit dạng rắn được xử lý hóa học là silic oxit-ziricon oxit clorua hóa; theo cách khác, oxit dạng rắn được xử lý hóa học là silic oxit-ziricon oxit bromua hóa hoặc theo cách khác, oxit dạng rắn được xử lý hóa học là silic oxit-ziricon oxit được sulfat hóa. Ngoài ra, và theo một khía cạnh khác nữa, oxit dạng rắn được xử lý hóa học có thể còn chứa kim loại hoặc ion kim loại được chọn từ kẽm, niken, vanadi, bạc, đồng, gali, thiếc, vonfram, molybden, hoặc hỗn hợp bất kỳ của chúng; theo cách khác, kim loại là kẽm, niken, vanadi, thiếc, hoặc hỗn hợp

bất kỳ của chúng; theo cách khác, kim loại là kẽm; theo cách khác, kim loại là niken; theo cách khác, kim loại là vanadi; theo cách khác, kim loại là bạc; theo cách khác, kim loại là đồng; theo cách khác, kim loại là gali; theo cách khác, kim loại là thiếc; theo cách khác, kim loại là vonfram hoặc theo cách khác, kim loại là molybden.

Theo một khía cạnh khác nữa và theo phương án bất kỳ của sáng chế, oxit dạng rắn được xử lý hóa học có thể là sản phẩm tiếp xúc của ít nhất một hợp chất oxit dạng rắn và ít nhất một nguồn anion hút electron. Hợp chất oxit dạng rắn và nguồn anion hút electron được mô tả độc lập ở đây và có thể được sử dụng trong hỗn hợp bất kỳ để mô tả thêm oxit dạng rắn được xử lý hóa học là sản phẩm tiếp xúc của ít nhất một hợp chất oxit dạng rắn và ít nhất một nguồn anion hút electron. Tức là, oxit dạng rắn được xử lý hóa học được tạo ra khi cho tiếp xúc hoặc xử lý oxit dạng rắn bằng nguồn anion hút electron. Hợp chất oxit dạng rắn và nguồn anion hút electron được mô tả độc lập ở đây và có thể được sử dụng trong hỗn hợp bất kỳ để mô tả thêm oxit dạng rắn được xử lý hóa học là sản phẩm tiếp xúc của ít nhất một hợp chất oxit dạng rắn và ít nhất một nguồn anion hút electron. Theo một khía cạnh, hợp chất oxit dạng rắn có thể chứa, chủ yếu bao gồm, hoặc bao gồm, oxit vô cơ. Không cần nung hợp chất oxit dạng rắn trước khi tiếp xúc với nguồn anion hút electron. Sản phẩm tiếp xúc có thể được nung trong khi hoặc sau khi hợp chất oxit dạng rắn được tiếp xúc với nguồn anion hút electron. Theo khía cạnh này, hợp chất oxit dạng rắn có thể được nung hoặc không được nung; theo cách khác, hợp chất oxit dạng rắn được nung hoặc theo cách khác, hợp chất oxit dạng rắn không được nung. Theo một khía cạnh khác, chất hoạt hóa-nền có thể chứa sản phẩm tiếp xúc của ít nhất một hợp chất oxit dạng rắn được nung và ít nhất một nguồn anion hút electron.

Mặc dù không muốn bị ràng buộc bởi lý thuyết, oxit dạng rắn được xử lý hóa học, còn được gọi là chất hoạt hóa-nền, có tính axit tăng so với hợp chất oxit dạng rắn không được xử lý tương ứng. Oxit dạng rắn được xử lý hóa học cũng có thể hoạt động như chất hoạt hóa chất xúc tác so với oxit dạng rắn không được xử lý tương ứng. Mặc dù oxit dạng rắn được xử lý hóa học có thể hoạt hóa metaloxen khi không có mặt chất hoạt hóa bổ sung, chất hoạt hóa bổ sung có thể được sử dụng trong hệ chất xúc tác. Ví dụ, có thể hữu ích nếu đưa hợp chất hữu cơ-nhôm vào hệ chất xúc tác cùng với metaloxen và oxit dạng rắn được xử lý hóa học. Nói chung, chức năng hoạt hóa của chất hoạt hóa-nền được thấy rõ trong hoạt tính gia tăng của hệ chất xúc tác, so với hệ

chất xúc tác chứa oxit dạng rắn không được xử lý tương ứng.

Theo một khía cạnh, oxit dạng rắn được xử lý hóa học theo sáng chế có thể chứa, chủ yếu bao gồm, hoặc bao gồm, oxit vô cơ dạng rắn, oxit hỗn hợp, hoặc hỗn hợp oxit vô cơ, được xử lý hóa học bằng thành phần hút electron, và tùy ý được xử lý bằng kim loại; theo cách khác, oxit vô cơ dạng rắn được xử lý hóa học bằng thành phần hút electron và tùy ý được xử lý bằng kim loại; theo cách khác, oxit hỗn hợp được xử lý hóa học bằng thành phần hút electron và tùy ý được xử lý bằng kim loại hoặc theo cách khác, hỗn hợp oxit vô cơ, được xử lý hóa học bằng thành phần hút electron, và tùy ý được xử lý bằng kim loại. Do đó, oxit dạng rắn theo sáng chế bao gồm oxit (ví dụ, nhôm oxit), “oxit hỗn hợp” (ví dụ, silic oxit-nhôm oxit), và tổ hợp và hỗn hợp của chúng. Oxit hỗn hợp (ví dụ, silic oxit-nhôm oxit) có thể là một pha hoặc nhiều pha với nhiều hơn một kim loại được kết hợp với oxy để tạo ra oxit dạng rắn, và vẫn thuộc phạm vi sáng chế. Oxit vô cơ dạng rắn, oxit hỗn hợp, hỗn hợp oxit vô cơ, thành phần hút electron, và kim loại tùy ý được mô tả độc lập ở đây và có thể được sử dụng trong hỗn hợp bất kỳ để mô tả thêm oxit dạng rắn được xử lý hóa học.

Theo một khía cạnh của sáng chế và theo phương án bất kỳ, oxit dạng rắn được xử lý hóa học còn có thể chứa kim loại hoặc ion kim loại. Theo một phương án, kim loại hoặc kim loại của ion kim loại có thể chứa, chủ yếu bao gồm, hoặc bao gồm, kẽm, niken, vanadi, titan, bạc, đồng, gali, thiếc, vonfram, molybden, hoặc hỗn hợp bất kỳ của chúng; theo cách khác, kim loại là kẽm, niken, vanadi, titan, hoặc thiếc, hoặc hỗn hợp bất kỳ của chúng; theo cách khác, kim loại là kẽm, niken, vanadi, thiếc, hoặc hỗn hợp bất kỳ của chúng. Theo một số phương án, kim loại hoặc kim loại của ion kim loại có thể chứa, chủ yếu bao gồm, hoặc bao gồm, kẽm; theo cách khác, kim loại là niken; theo cách khác, kim loại là vanadi; theo cách khác, kim loại là titan; theo cách khác, kim loại là bạc; theo cách khác, kim loại là đồng; theo cách khác, kim loại là gali; theo cách khác, kim loại là tin; theo cách khác, kim loại là vonfram hoặc theo cách khác, kim loại là molybden.

Theo một khía cạnh và phương án bất kỳ, oxit dạng rắn được xử lý hóa học còn chứa kim loại hoặc ion kim loại bao gồm, nhưng không chỉ giới hạn ở, nhôm oxit được clo hóa tấm kẽm, nhôm oxit được flo hóa tấm titan, nhôm oxit được flo hóa tấm kẽm, silic oxit-nhôm oxit được clo hóa tấm kẽm, silic oxit-nhôm oxit được flo hóa tấm kẽm,

nhôm oxit được sulfat hóa tấm kẽm, kẽm nhôm oxit clorua hóa, kẽm nhôm oxit florua hóa, kẽm nhôm oxit được sulfat hóa, hoặc hỗn hợp bất kỳ của chúng; theo cách khác, oxit dạng rắn được xử lý hóa học có thể là nhôm oxit được flo hóa, nhôm oxit được clo hóa, nhôm oxit được sulfat hóa, silic oxit-nhôm oxit được flo hóa, silic oxit-nhôm oxit được clo hóa, silic oxit-nhôm oxit được sulfat hóa, silic oxit-ziricon oxit được flo hóa, silic oxit-ziricon oxit được sulfat hóa, hoặc hỗn hợp bất kỳ của chúng. Theo một số phương án, oxit dạng rắn được xử lý hóa học còn chứa kim loại hoặc ion kim loại có thể chứa, chủ yếu bao gồm, hoặc bao gồm, nhôm oxit được clo hóa tấm kẽm; theo cách khác, nhôm oxit được flo hóa tấm titan; theo cách khác, nhôm oxit được flo hóa tấm kẽm; theo cách khác, silic oxit-nhôm oxit được clo hóa tấm kẽm; theo cách khác, silic oxit-nhôm oxit được flo hóa tấm kẽm; theo cách khác, nhôm oxit được sulfat hóa tấm kẽm; theo cách khác, kẽm nhôm oxit clorua hóa; theo cách khác, kẽm nhôm oxit florua hóa; theo cách khác, hoặc kẽm nhôm oxit được sulfat hóa.

Theo một khía cạnh khác và phương án bất kỳ, oxit dạng rắn được xử lý hóa học theo sáng chế có thể là oxit dạng rắn có độ xốp tương đối cao, có tính axit Lewis hoặc axit Brønsted. Oxit dạng rắn có thể được xử lý hóa học bằng thành phần hút electron, thường là anion hút electron, để tạo ra chất hoạt hóa-nền. Mặc dù không định ràng buộc bởi nhận định sau, việc xử lý oxit vô cơ bằng thành phần hút electron được cho là làm tăng tính axit của oxit. Do đó, theo một khía cạnh, chất hoạt hóa-nền có tính axit Lewis hoặc Brønsted thường có tính axit Lewis hoặc Brønsted cao hơn oxit dạng rắn không được xử lý, hoặc chất hoạt hóa-nền có số vị trí axit nhiều hơn so với oxit dạng rắn không được xử lý, hoặc cả hai tính chất này. Một phương pháp định lượng tính axit của oxit dạng rắn được xử lý và không được xử lý hóa học là so sánh hoạt tính oligome hóa của oxit được xử lý và không được xử lý trong phản ứng được xúc tác bởi axit.

Theo một khía cạnh và theo phương án bất kỳ, oxit dạng rắn được xử lý hóa học có thể chứa, chủ yếu bao gồm, hoặc bao gồm, oxit vô cơ dạng rắn chứa oxy và ít nhất một nguyên tố được chọn từ nhóm 2, 3, 4, 5, 6, 7, 8, 9, 10, 11, 12, 13, 14, hoặc 15 của bảng tuần hoàn, hoặc chứa oxy và ít nhất một nguyên tố được chọn từ các nguyên tố dãy lantanoid hoặc dãy actini; theo cách khác, oxit dạng rắn được xử lý hóa học có thể là oxit vô cơ dạng rắn chứa oxy và ít nhất một nguyên tố được chọn từ nhóm 4, 5, 6, 12, 13, hoặc 14 của bảng tuần hoàn, hoặc chứa oxy và ít nhất một nguyên tố được

chọn từ nguyên tố dãy lantanit. (Xem tài liệu: *Hawley's Condensed Chemical Dictionary*, 11th Ed., John Wiley & Sons; 1995; Cotton, F.A.; Wilkinson, G.; Murillo; C. A.; và Bochmann; M. *Advanced Inorganic Chemistry*, 6th Ed., Wiley-Interscience, 1999.) Theo một số phương án, oxit vô cơ có thể chứa oxy và ít nhất một nguyên tố được chọn từ Al, B, Be, Bi, Cd, Co, Cr, Cu, Fe, Ga, La, Mn, Mo, Ni, Sb, Si, Sn, Sr, Th, Ti, V, W, P, Y, Zn hoặc Zr; theo cách khác, oxit vô cơ có thể chứa oxy và ít nhất một nguyên tố được chọn từ Al, B, Si, Ti, P, Zn hoặc Zr.

Theo một phương án, oxit dạng rắn được sử dụng trong oxit dạng rắn được xử lý hóa học có thể bao gồm, nhưng không chỉ giới hạn ở, Al_2O_3 , B_2O_3 , BeO , Bi_2O_3 , CdO , Co_3O_4 , Cr_2O_3 , CuO , Fe_2O_3 , Ga_2O_3 , La_2O_3 , Mn_2O_3 , MoO_3 , NiO , P_2O_5 , Sb_2O_5 , SiO_2 , SnO_2 , SrO , ThO_2 , TiO_2 , V_2O_5 , WO_3 , Y_2O_3 , ZnO , ZrO_2 , oxit hỗn hợp của chúng, và hỗn hợp của chúng; theo cách khác, Al_2O_3 , B_2O_3 , SiO_2 , SnO_2 , TiO_2 , V_2O_5 , WO_3 , Y_2O_3 , ZnO , ZrO_2 , kể cả oxit hỗn hợp của chúng, và hỗn hợp của chúng; theo cách khác, Al_2O_3 , SiO_2 , TiO_2 , ZrO_2 , và oxit tương tự, kể cả oxit hỗn hợp của chúng, và hỗn hợp của chúng. Theo một số phương án, oxit dạng rắn được sử dụng trong oxit dạng rắn được xử lý hóa học có thể chứa, chủ yếu bao gồm, hoặc bao gồm, Al_2O_3 ; theo cách khác, B_2O_3 ; theo cách khác, BeO ; theo cách khác, Bi_2O_3 ; theo cách khác, CdO ; theo cách khác, Co_3O_4 ; theo cách khác, Cr_2O_3 ; theo cách khác, CuO ; theo cách khác, Fe_2O_3 ; theo cách khác, Ga_2O_3 ; theo cách khác, La_2O_3 ; theo cách khác, Mn_2O_3 ; theo cách khác, MoO_3 ; theo cách khác, NiO ; theo cách khác, P_2O_5 ; theo cách khác, Sb_2O_5 ; theo cách khác, SiO_2 ; theo cách khác, SnO_2 ; theo cách khác, SrO ; theo cách khác, ThO_2 ; theo cách khác, TiO_2 ; theo cách khác, V_2O_5 ; theo cách khác, WO_3 ; theo cách khác, Y_2O_3 ; theo cách khác, ZnO hoặc theo cách khác, ZrO_2 . Theo một phương án, oxit hỗn hợp có thể được sử dụng trong chất hoạt hóa-nền theo sáng chế bao gồm, nhưng không chỉ giới hạn ở, silic oxit-nhôm oxit, silic oxit-titan oxit, silic oxit-ziricon oxit, zeolit, khoáng sét, nhôm oxit-titan oxit, nhôm oxit-ziricon oxit, và kẽm-nhôm oxit; theo cách khác, silic oxit-nhôm oxit, silic oxit-titan oxit, silic oxit-ziricon oxit, nhôm oxit-titan oxit, nhôm oxit-ziricon oxit, và kẽm-nhôm oxit; theo cách khác, silic oxit-nhôm oxit, silic oxit-titan oxit, silic oxit-ziricon oxit, và nhôm oxit-titan oxit. Theo một số phương án, oxit hỗn hợp có thể được sử dụng trong chất hoạt hóa-nền theo sáng chế có thể chứa, chủ yếu bao gồm, hoặc bao gồm, silic oxit-nhôm oxit; theo cách khác, silic oxit-titan oxit; theo cách khác, silic oxit-ziricon oxit; theo cách khác, zeolit; theo cách khác,

khoáng sét; theo cách khác, nhôm oxit-titan oxit; theo cách khác, nhôm oxit-ziricon oxit; theo cách khác, kẽm-nhôm oxit. Theo một số phương án, nhôm silic oxit như khoáng sét, canxi nhôm silic oxit, hoặc natri nhôm silic oxit là oxit có thể được sử dụng trong chất hoạt hóa-nền theo sáng chế.

Theo một khía cạnh và phương án bất kỳ của sáng chế, oxit dạng rắn được xử lý hóa học bằng cách cho nó tiếp xúc với ít nhất một thành phần hút electron (ví dụ, nguồn anion hút electron). Ngoài ra, oxit dạng rắn có thể được xử lý hóa học bằng ion kim loại nếu cần, sau đó nung để tạo ra oxit dạng rắn được tẩm kim loại hoặc chứa kim loại được xử lý hóa học. Theo cách khác, oxit dạng rắn và nguồn anion hút electron có thể được cho tiếp xúc và nung đồng thời. Phương pháp mà nhờ đó oxit được tiếp xúc với thành phần hút electron (ví dụ, muối hoặc axit của anion hút electron), bao gồm, nhưng không chỉ giới hạn ở, tạo gel, đồng tạo gel, thấm một hợp chất vào một hợp chất khác, và phương pháp tương tự. Thông thường, sau phương pháp tiếp xúc bất kỳ, hỗn hợp tiếp xúc gồm oxit, anion hút electron, và ion kim loại, nếu có, có thể được nung.

Thành phần hút electron sử dụng để xử lý oxit có thể là thành phần bất kỳ làm tăng tính axit Lewis hoặc Brønsted của oxit dạng rắn khi xử lý. Theo một khía cạnh, thành phần hút electron có thể là anion hút electron có nguồn gốc từ muối, axit, hoặc hợp chất khác (ví dụ, hợp chất hữu cơ dễ bay hơi) có thể dùng làm nguồn hoặc tiền chất của anion này. Theo một khía cạnh, anion hút electron bao gồm, nhưng không chỉ giới hạn ở, sulfat, bisulfat, florua, clorua, bromua, iodua, flosulfat, floborat, phosphat, flophosphat, trifloaxetat, triflat, floziriconat, flotitanat, trifloaxetat, triflat, và hỗn hợp của chúng; theo cách khác, sulfat, bisulfat, florua, clorua, flosulfat, floborat, phosphat, flophosphat, trifloaxetat, triflat, floziriconat, flotitanat, và hỗn hợp của chúng; theo cách khác, florua, clorua, bisulfat, sulfat, hỗn hợp của chúng; theo cách khác, sulfat, bisulfat, và hỗn hợp của chúng; theo cách khác, florua, clorua, bromua, iodua, và hỗn hợp của chúng; theo cách khác, flosulfat, floborat, trifloaxetat, triflat, floziriconat, flotitanat, trifloaxetat, triflat, và hỗn hợp của chúng; theo cách khác, florua, clorua, hỗn hợp của chúng hoặc theo cách khác, bisulfat, sulfat, hỗn hợp của chúng. Theo một số phương án, anion hút electron có thể chứa, chủ yếu bao gồm, hoặc bao gồm, sulfat; theo cách khác, bisulfat; theo cách khác, florua; theo cách khác, clorua; theo cách khác, bromua; theo cách khác, iodua; theo cách khác, flosulfat; theo cách khác,

floborat; theo cách khác, phosphat; theo cách khác, flophosphat; theo cách khác, trifloaxetat; theo cách khác, triflat; theo cách khác, floziriconat; theo cách khác, flotitanat; theo cách khác, trifloaxetat hoặc theo cách khác, triflat. Ngoài ra, hợp chất ion hoặc không ion khác dùng làm nguồn anion hút electron này cũng có thể được sử dụng trong sáng chế.

Nếu thành phần hút electron là muối của anion hút electron, ion đối hoặc cation của muối này có thể là cation bất kỳ cho phép muối chuyển hóa lại hoặc phân hủy lại thành axit trong quá trình nung. Các yếu tố làm cho muối cụ thể thích hợp để dùng làm nguồn anion hút electron bao gồm, nhưng không chỉ giới hạn ở, độ tan của muối trong dung môi cần thiết, cation không có khả năng phản ứng bất lợi, hiệu ứng ghép cặp giữa cation và anion, đặc tính hút ẩm do cation tạo ra cho muối và tính ổn định nhiệt của anion. Theo một khía cạnh, cation thích hợp trong muối chứa anion hút electron bao gồm, nhưng không chỉ giới hạn ở, amoni, trialkyl amoni, tetraalkyl amoni, tetraalkyl phosphoni, H^+ , và $[H(OEt_2)_2]^+$; theo cách khác, cation thích hợp là amoni; theo cách khác, cation thích hợp là trialkyl amoni; theo cách khác, cation thích hợp là tetraalkyl amoni; theo cách khác, cation thích hợp là tetraalkyl phosphoni; theo cách khác, cation thích hợp là H^+ hoặc theo cách khác, cation thích hợp là $[H(OEt_2)_2]^+$.

Ngoài ra, hỗn hợp của một hoặc nhiều anion hút electron khác nhau, với tỷ lệ khác nhau, có thể được sử dụng để tạo ra tính axit đặc trưng của chất hoạt hóa-nền tới mức cần thiết. Hỗn hợp các thành phần hút electron có thể được cho tiếp xúc với oxit đồng thời hoặc riêng rẽ, và theo thứ tự bất kỳ để tạo ra tính axit cần thiết của oxit dạng rắn được xử lý hóa học. Ví dụ, theo một khía cạnh của sáng chế, hai hoặc nhiều nguồn anion hút electron được sử dụng trong hai hoặc nhiều bước tiếp xúc riêng rẽ. Một khía cạnh không làm giới hạn phạm vi sáng chế của phương pháp mà nhờ đó oxit dạng rắn được xử lý hóa học được điều chế có thể là như sau: oxit dạng rắn, hoặc hỗn hợp oxit đã chọn được tiếp xúc với nguồn anion hút electron thứ nhất để tạo ra hỗn hợp thứ nhất, sau đó, hỗn hợp thứ nhất này được nung, hỗn hợp thứ nhất đã nung được cho tiếp xúc với nguồn anion hút electron thứ hai để tạo ra hỗn hợp thứ hai, sau đó nung hỗn hợp thứ hai để tạo ra oxit dạng rắn được xử lý. Theo phương pháp này, nguồn anion hút electron thứ nhất và thứ hai thường là các hợp chất khác nhau, mặc dù chúng có thể cùng là một hợp chất.

Theo một khía cạnh của sáng chế, chất hoạt hóa oxit dạng rắn -nền (oxit dạng rắn được xử lý hóa học) có thể được điều chế bằng phương pháp bao gồm các bước:

- 1) cho hợp chất oxit dạng rắn tiếp xúc với ít nhất một nguồn hợp chất anion hút electron để tạo ra hỗn hợp thứ nhất; và
- 2) nung hỗn hợp thứ nhất để tạo ra chất hoạt hóa oxit dạng rắn-nền.

Theo một khía cạnh khác của sáng chế, chất hoạt hóa oxit dạng rắn-nền (oxit dạng rắn được xử lý hóa học) có thể được điều chế bằng phương pháp bao gồm:

- 1) cho ít nhất một hợp chất oxit dạng rắn tiếp xúc với nguồn anion hút electron thứ nhất để tạo ra hỗn hợp thứ nhất;
- 2) nung hỗn hợp thứ nhất để tạo ra hỗn hợp thứ nhất đã nung;
- 3) cho hỗn hợp thứ nhất đã nung tiếp xúc với nguồn hợp chất anion hút electron thứ hai để tạo ra hỗn hợp thứ hai; và
- 4) nung hỗn hợp thứ hai để tạo ra chất hoạt hóa oxit dạng rắn-nền.

Đôi khi, chất hoạt hóa oxit dạng rắn-nền có thể được gọi đơn giản là oxit dạng rắn được xử lý.

Theo một khía cạnh khác của sáng chế, oxit dạng rắn được xử lý hóa học có thể được điều chế hoặc được tạo ra bằng cách cho ít nhất một oxit dạng rắn tiếp xúc với ít nhất một nguồn hợp chất anion hút electron, trong đó ít nhất một hợp chất oxit dạng rắn được nung trước, trong, hoặc sau khi tiếp xúc với nguồn anion hút electron, và trong đó hầu như không có mặt aluminosilicat và borat hữu cơ. Theo một phương án, oxit dạng rắn được xử lý hóa học có thể được điều chế hoặc tạo ra bằng cách cho ít nhất một oxit dạng rắn tiếp xúc với ít nhất một nguồn hợp chất anion hút electron, trong đó ít nhất một hợp chất oxit dạng rắn được nung trước khi tiếp xúc với nguồn anion hút electron, và trong đó hầu như không có mặt aluminosilicat và borat hữu cơ; theo cách khác, bằng cách cho ít nhất một oxit dạng rắn tiếp xúc với ít nhất một nguồn hợp chất anion hút electron, trong đó ít nhất một hợp chất oxit dạng rắn được nung trong khi tiếp xúc với nguồn anion hút electron, và trong đó hầu như không có mặt aluminosilicat và borat hữu cơ hoặc theo cách khác, bằng cách cho ít nhất một oxit dạng rắn tiếp xúc với ít nhất một nguồn hợp chất anion hút electron, trong đó ít nhất một hợp chất oxit dạng rắn được nung sau khi tiếp xúc với nguồn anion hút electron, và trong đó hầu như không có mặt aluminosilicat và borat hữu cơ.

Theo một khía cạnh của sáng chế, khi oxit dạng rắn đã được xử lý và sấy khô,

oxit này có thể được nung. Nói chung, quá trình nung oxit dạng rắn được xử lý được thực hiện trong không khí; theo cách khác, trong không khí khô. Oxit dạng rắn có thể được nung ở nhiệt độ nằm trong khoảng từ 200°C đến 900°C; theo cách khác, từ 300°C đến 800°C; theo cách khác, từ 400°C đến 700°C hoặc theo cách khác, từ 350°C đến 550°C. Thời gian mà ở đó oxit dạng rắn được duy trì ở nhiệt độ nung có thể là từ 1 phút đến 100 giờ; theo cách khác, từ 1 giờ đến 50 giờ; theo cách khác, từ 3 giờ đến 20 giờ hoặc theo cách khác, từ 1 đến 10 giờ.

Ngoài ra, loại không khí thích hợp bất kỳ có thể được sử dụng trong quá trình nung. Nói chung, quá trình nung được thực hiện trong môi trường oxy hóa, như không khí. Theo cách khác, môi trường trơ, như nitơ hoặc argon, hoặc môi trường khử như hydro hoặc cacbon monoxit, có thể được sử dụng. Theo một phương án, môi trường được sử dụng để nung có thể chứa, hoặc chủ yếu bao gồm không khí, nitơ, argon, hydro, hoặc cacbon monoxit, hoặc hỗn hợp bất kỳ của chúng; theo cách khác, nitơ, argon, hydro, cacbon monoxit, hoặc hỗn hợp bất kỳ của chúng; theo cách khác, không khí; theo cách khác, nitơ; theo cách khác, argon; theo cách khác, hydro hoặc theo cách khác, cacbon monoxit.

Theo một khía cạnh khác và phương án bất kỳ của sáng chế, thành phần oxit dạng rắn được sử dụng để điều chế oxit dạng rắn được xử lý hóa học có thể có độ xốp trên 0,1 cc/g. Theo một khía cạnh khác, thành phần oxit dạng rắn có thể có độ xốp trên 0,5 cc/g; theo cách khác, trên 1,0 cc/g. Theo một khía cạnh khác nữa, thành phần oxit dạng rắn có thể có diện tích bề mặt nằm trong khoảng từ 100 đến 1000 m²/g. Theo một khía cạnh khác, thành phần oxit dạng rắn có thể có diện tích bề mặt nằm trong khoảng từ 200 đến 800 m²/g; theo cách khác, từ 250 đến 600 m²/g.

Oxit dạng rắn có thể được xử lý bằng nguồn ion halogenua, ion sulfat, hoặc hỗn hợp của chúng, và tùy ý được xử lý bằng ion kim loại, sau đó nung để thu được oxit dạng rắn được xử lý hóa học ở dạng hạt rắn. Theo một khía cạnh, oxit dạng rắn được xử lý bằng nguồn sulfat (được gọi là chất được sulfat hóa), nguồn phosphat (được gọi là chất phosphat hóa), nguồn ion iodua (được gọi là chất iodua hóa), nguồn ion bromua (được gọi là chất bromua hóa), nguồn ion clorua (được gọi là chất clorua hóa), nguồn ion florua (được gọi là chất florua hóa), hoặc hỗn hợp bất kỳ của chúng, và nung để thu được chất hoạt hóa oxit dạng rắn. Theo một khía cạnh khác, chất hoạt hóa-nền axit

hữu ích có thể chứa, chủ yếu bao gồm, hoặc bao gồm, nhôm oxit iodua hóa, nhôm oxit bromua hóa, nhôm oxit được clo hóa, nhôm oxit được flo hóa, nhôm oxit được sulfat hóa, nhôm oxit phosphat hóa, silic oxit-nhôm oxit iodua hóa, silic oxit-nhôm oxit bromua hóa, silic oxit-nhôm oxit được clo hóa, silic oxit-nhôm oxit được flo hóa, silic oxit-nhôm oxit được sulfat hóa, silic oxit-nhôm oxit phosphat hóa, silic oxit-ziricon oxit iodua hóa, silic oxit-ziricon oxit bromua hóa, silic oxit-ziricon oxit clorua hóa, silic oxit-ziricon oxit được flo hóa, silic oxit-ziricon oxit được sulfat hóa, silic oxit-ziricon oxit phosphat hóa, đất sét chống (ví dụ, montmorillonit chống) được xử lý bằng iodua, bromua, clorua, florua, sulfat, hoặc phosphat, nhôm phosphat (ví dụ, rây phân tử) được xử lý bằng iodua, bromua, clorua, florua, sulfat, hoặc phosphat, hoặc hỗn hợp bất kỳ của các chất hoạt hóa-nền axit này. Ngoài ra, chất hoạt hóa-nền bất kỳ có thể tùy ý được xử lý bằng ion kim loại, như được nêu ở đây.

Theo cách khác, chất hoạt hóa-nền axit hữu ích có thể chứa, chủ yếu bao gồm, hoặc bao gồm, nhôm oxit được clo hóa, nhôm oxit được flo hóa, nhôm oxit được sulfat hóa, nhôm oxit phosphat hóa, silic oxit-nhôm oxit được clo hóa, silic oxit-nhôm oxit được flo hóa, silic oxit-nhôm oxit được sulfat hóa, silic oxit-ziricon oxit clorua hóa, silic oxit-ziricon oxit được flo hóa, silic oxit-ziricon oxit được sulfat hóa, nhôm phosphat được xử lý bằng sulfat, florua, hoặc clorua, hoặc hỗn hợp bất kỳ của các chất hoạt hóa-nền axit này. Ngoài ra, oxit dạng rắn có thể được xử lý bằng nhiều hơn một anion hút electron, ví dụ, chất hoạt hóa-nền axit có thể là hoặc có thể chứa, chủ yếu bao gồm, hoặc bao gồm, nhôm phosphat hoặc nhôm silic oxit được xử lý bằng sulfat và florua, silic oxit-nhôm oxit được xử lý bằng florua và clorua hoặc nhôm oxit được xử lý bằng phosphat và florua.

Theo cách khác và theo một khía cạnh khác, chất hoạt hóa-nền axit hữu ích có thể chứa, chủ yếu bao gồm, hoặc bao gồm, nhôm oxit được flo hóa, nhôm oxit được sulfat hóa, silic oxit-nhôm oxit được flo hóa, silic oxit-nhôm oxit được sulfat hóa, silic oxit-ziricon oxit được flo hóa, silic oxit-ziricon oxit được sulfat hóa, hoặc nhôm oxit phosphat hóa, hoặc hỗn hợp bất kỳ của các chất hoạt hóa-nền axit này. Theo một khía cạnh khác nữa, chất hoạt hóa-nền axit hữu ích có thể chứa, chủ yếu bao gồm, hoặc bao gồm, nhôm oxit iodua hóa; theo cách khác, nhôm oxit bromua hóa; theo cách khác, nhôm oxit được clo hóa; theo cách khác, nhôm oxit được flo hóa; theo cách khác, nhôm oxit được sulfat hóa; theo cách khác, nhôm oxit phosphat hóa; theo cách khác,

silic oxit-nhôm oxit iodua hóa; theo cách khác, silic oxit-nhôm oxit bromua hóa; theo cách khác, silic oxit-nhôm oxit được clo hóa; theo cách khác, silic oxit-nhôm oxit được flo hóa; theo cách khác, silic oxit-nhôm oxit được sulfat hóa; theo cách khác, silic oxit-nhôm oxit phosphat hóa; theo cách khác, silic oxit-ziricon oxit iodua hóa; theo cách khác, silic oxit-ziricon oxit bromua hóa; theo cách khác, silic oxit-ziricon oxit clorua hóa; theo cách khác, silic oxit-ziricon oxit được flo hóa; theo cách khác, silic oxit-ziricon oxit được sulfat hóa; theo cách khác, silic oxit-ziricon oxit phosphat hóa; theo cách khác, đất sét chống (ví dụ, montmorilonit chống); theo cách khác, đất sét chống iodua hóa; theo cách khác, đất sét chống bromua hóa; theo cách khác, đất sét chống clorua hóa; theo cách khác, đất sét chống florua hóa; theo cách khác, đất sét chống được sulfat hóa; theo cách khác, đất sét chống phosphat hóa; theo cách khác, nhôm phosphat iodua hóa; theo cách khác, nhôm phosphat bromua hóa; theo cách khác, nhôm phosphat clorua hóa; theo cách khác, nhôm phosphat florua hóa; theo cách khác, nhôm phosphat được sulfat hóa; theo cách khác, nhôm phosphat phosphat hóa hoặc hỗn hợp bất kỳ của các chất hoạt hóa-nền axit này. Chất hoạt hóa-nền bất kỳ được bộc lộ ở đây có thể tùy ý được xử lý bằng ion kim loại.

Theo một khía cạnh của sáng chế, oxit dạng rắn được xử lý hóa học có thể chứa, chủ yếu bao gồm, hoặc bao gồm, oxit dạng rắn florua hóa ở dạng hạt rắn, trong đó nguồn ion florua được bổ sung vào oxit dạng rắn bằng cách xử lý bằng chất florua hóa. Theo một khía cạnh khác nữa, ion florua có thể được bổ sung vào oxit dạng rắn bằng cách tạo huyền phù đặc oxit dạng rắn trong dung môi thích hợp. Theo một phương án, dung môi có thể là rượu, nước, hoặc hỗn hợp của chúng; theo cách khác, dung môi là rượu hoặc theo cách khác, dung môi là nước. Theo một phương án, rượu thích hợp có thể là rượu có từ một đến ba nguyên tử cacbon do chúng dễ bay hơi và có sức căng bề mặt thấp. Theo một khía cạnh khác của sáng chế, oxit dạng rắn có thể được xử lý bằng chất florua hóa trong bước nung. Chất florua hóa bất kỳ có thể dùng làm nguồn florua và tiếp xúc hoàn toàn với oxit dạng rắn trong bước nung có thể được sử dụng. Theo một phương án không làm giới hạn phạm vi sáng chế, chất florua hóa có thể được sử dụng trong bản mô tả này bao gồm, nhưng không chỉ giới hạn ở, axit flohydric (HF), amoni florua (NH_4F), amoni biflorua (NH_4HF_2), amoni tetrafloroborat (NH_4BF_4), amoni silicoflorua (hexaflosilic oxit) (NH_4)₂SiF₆, amoni hexaflophosphat (NH_4PF_6), và hỗn hợp của chúng; theo cách khác, axit flohydric (HF), amoni florua

(NH_4F), amoni biflorua (NH_4HF_2), amoni tetraflorurat (NH_4BF_4), và hỗn hợp của chúng. Theo các phương án không làm giới hạn phạm vi sáng chế khác, chất được flo hóa có thể chứa, chủ yếu bao gồm, hoặc bao gồm axit flohydric (HF); theo cách khác, amoni florua (NH_4F); theo cách khác, amoni biflorua (NH_4HF_2); theo cách khác, amoni tetraflorurat (NH_4BF_4); theo cách khác, amoni silicoflorua (hexaflorsilic oxit) ($(\text{NH}_4)_2\text{SiF}_6$) hoặc theo cách khác, amoni hexaflorophosphat (NH_4PF_6). Ví dụ, amoni biflorua NH_4HF_2 có thể được sử dụng làm chất được flo hóa, do chúng dễ sử dụng và dễ kiểm.

Theo một khía cạnh khác của sáng chế, oxit dạng rắn có thể được xử lý bằng chất florua hóa trong bước nung. Chất florua hóa bất kỳ có thể tiếp xúc hoàn toàn với oxit dạng rắn trong bước nung có thể được sử dụng. Ví dụ, ngoài các chất florua hóa được mô tả ở trên, chất florua hóa hữu cơ dễ bay hơi có thể được sử dụng. Chất florua hóa hữu cơ dễ bay hơi có thể dùng theo khía cạnh này của sáng chế bao gồm, nhưng không chỉ giới hạn ở, freon, perflohexan, perflobenzen, flometan, trifloetanol, và hỗn hợp của chúng. Theo một số phương án, chất florua hóa dễ bay hơi có thể chứa, chủ yếu bao gồm, hoặc bao gồm, freon; theo cách khác, perflohexan; theo cách khác, perflobenzen; theo cách khác, flometan hoặc theo cách khác, trifloetanol. Chính khí hydro florua hoặc flo cũng có thể được sử dụng cùng với oxit dạng rắn được florua hóa trong quá trình nung. Một phương pháp thuận tiện để cho oxit dạng rắn tiếp xúc với chất được flo hóa là làm bay hơi chất florua hóa vào dòng khí được sử dụng để tạo tầng sôi oxit dạng rắn trong quá trình nung.

Tương tự, theo một khía cạnh khác của sáng chế, oxit dạng rắn được xử lý hóa học có thể chứa, chủ yếu bao gồm, hoặc bao gồm, oxit dạng rắn clorua hóa ở dạng hạt rắn, trong đó nguồn ion clorua được bổ sung vào oxit dạng rắn bằng cách xử lý bằng chất clorua hóa. Ion clorua có thể được bổ sung vào oxit dạng rắn bằng cách tạo huyền phù đặc oxit dạng rắn trong dung môi thích hợp. Theo một phương án, dung môi có thể là rượu, nước, hoặc hỗn hợp của chúng; theo cách khác, dung môi là rượu hoặc theo cách khác, dung môi là nước. Theo một phương án, rượu thích hợp có thể là rượu có từ một đến ba nguyên tử cacbon do chúng dễ bay hơi và có sức căng bề mặt thấp. Theo một khía cạnh khác của sáng chế, oxit dạng rắn có thể được xử lý bằng chất clorua hóa trong bước nung. Chất clorua hóa bất kỳ có thể dùng làm nguồn clorua và tiếp xúc hoàn toàn với oxit dạng rắn trong bước nung có thể được sử dụng. Theo một

phương án không làm giới hạn phạm vi sáng chế, chất clorua hóa hữu cơ dễ bay hơi có thể được sử dụng. Theo một số phương án, chất clorua hóa hữu cơ dễ bay hơi bao gồm, nhưng không chỉ giới hạn ở, freon chứa clorua, perclobenzen, clometan, diclometan, tricloetan, tetracloetylen, clorofom, cacbon tetraclohua, tricloetanol, hoặc hỗn hợp bất kỳ của chúng. Theo một số phương án, chất clorua hóa hữu cơ dễ bay hơi có thể chứa, chủ yếu bao gồm, hoặc bao gồm, freon chứa clorua; theo cách khác, perclobenzen; theo cách khác, clometan; theo cách khác, diclometan; theo cách khác, clorofom; theo cách khác, cacbon tetraclohua hoặc theo cách khác, tricloetanol. Chính khí hydroclorua hoặc clo cũng có thể được sử dụng cùng với oxit dạng rắn trong quá trình nung. Một phương pháp thuận tiện để cho oxit tiếp xúc với chất clorua hóa là làm bay hơi chất clorua hóa vào dòng khí được sử dụng để hóa lỏng oxit dạng rắn trong quá trình nung.

Theo một khía cạnh khác nữa, oxit dạng rắn được xử lý hóa học có thể chứa, chủ yếu bao gồm, hoặc bao gồm, oxit dạng rắn bromua hóa ở dạng hạt rắn, trong đó nguồn ion bromua được bổ sung vào oxit dạng rắn bằng cách xử lý bằng chất bromua hóa. Ion bromua có thể được bổ sung vào oxit dạng rắn bằng cách tạo huyền phù đặc oxit dạng rắn trong dung môi thích hợp. Theo một phương án, dung môi bromua hóa có thể là rượu, nước, hoặc hỗn hợp của chúng; theo cách khác, dung môi là rượu hoặc theo cách khác, dung môi là nước. Theo một phương án, rượu thích hợp có thể là rượu có từ một đến ba nguyên tử cacbon do chúng dễ bay hơi và có sức căng bề mặt thấp. Theo một khía cạnh khác của sáng chế, oxit dạng rắn có thể được xử lý bằng chất bromua hóa trong bước nung. Chất bromua hóa bất kỳ có thể dùng làm nguồn bromua và tiếp xúc hoàn toàn với oxit dạng rắn trong bước nung có thể được sử dụng. Theo một phương án không làm giới hạn phạm vi sáng chế, chất bromua hóa hữu cơ dễ bay hơi có thể được sử dụng. Theo một số phương án, chất clorua hóa hữu cơ dễ bay hơi bao gồm, nhưng không chỉ giới hạn ở, freon chứa bromua, bromometan, dibromometan, tribromoetan, tetrabromoetylen, bromoform, cacbon tetrabromua, tribromoetanol, hoặc hỗn hợp bất kỳ của chúng. Theo một số phương án, chất clorua hóa hữu cơ dễ bay hơi có thể chứa, chủ yếu bao gồm, hoặc bao gồm, freon chứa bromua; theo cách khác, bromometan; theo cách khác, dibromometan; theo cách khác, bromoform; theo cách khác, cacbon tetrabromua hoặc theo cách khác, tribromoetanol. Chính khí hydro bromua hoặc brom cũng có thể được sử dụng cùng với oxit dạng rắn

trong quá trình nung. Một phương pháp thuận tiện để cho oxit tiếp xúc với chất bromua hóa là làm bay hơi chất bromua hóa vào dòng khí được sử dụng để hóa lỏng oxit dạng rắn trong quá trình nung.

Theo một khía cạnh, lượng ion florua, ion clorua, hoặc ion bromua có mặt trước khi nung oxit dạng rắn thường nằm trong khoảng từ 2 đến 50% trọng lượng, trong đó tỷ lệ % trọng lượng được tính theo trọng lượng của oxit dạng rắn, trước khi nung. Theo một khía cạnh khác, lượng florua hoặc ion clorua có mặt trước khi nung oxit dạng rắn nằm trong khoảng từ 3 đến 25% trọng lượng; theo cách khác, từ 4 đến 20% trọng lượng. Khi được tẩm halogenua, oxit dạng rắn halogenua hóa có thể được sấy bằng phương pháp bất kỳ đã biết trong lĩnh vực này bao gồm, nhưng không chỉ giới hạn ở, lọc hút sau đó làm bay hơi, sấy trong chân không, sấy phun, và phương pháp tương tự. Theo một phương án, bước nung có thể được bắt đầu mà không cần sấy oxit dạng rắn đã tẩm.

Theo một khía cạnh, silic oxit-nhôm oxit, hoặc hỗn hợp của chúng có thể được sử dụng làm oxit dạng rắn. Silic oxit-nhôm oxit được sử dụng để điều chế silic oxit-nhôm oxit được xử lý có thể có độ xốp lớn hơn 0,5 cc/g. Theo một khía cạnh, độ xốp có thể lớn hơn 0,8 cc/g; theo cách khác, lớn hơn 1 cc/g. Ngoài ra, silic oxit-nhôm oxit có thể có diện tích bề mặt lớn hơn 100 m²/g. Theo một khía cạnh, diện tích bề mặt lớn hơn 250 m²/g; theo cách khác, lớn hơn 350 m²/g. Nói chung, silic oxit-nhôm oxit có hàm lượng nhôm oxit nằm trong khoảng từ 5 đến 95%. Theo một khía cạnh, hàm lượng nhôm oxit của silic oxit-nhôm oxit có thể nằm trong khoảng từ 5 đến 50%; theo cách khác, từ 8% đến 30%, trọng lượng nhôm oxit. Theo các khía cạnh khác nữa, thành phần oxit dạng rắn có thể chứa nhôm oxit mà không chứa silic oxit, hoặc chứa silic oxit mà không chứa nhôm oxit.

Theo một khía cạnh khác, oxit dạng rắn được xử lý hóa học có thể chứa, chủ yếu bao gồm, hoặc bao gồm, oxit dạng rắn được sulfat hóa ở dạng hạt rắn, trong đó nguồn ion sulfat được bổ sung vào oxit dạng rắn bằng cách xử lý bằng chất được sulfat hóa. Oxit dạng rắn được sulfat hóa có thể chứa sulfat và thành phần oxit dạng rắn là thành phần oxit dạng rắn bất kỳ được mô tả (ví dụ, nhôm oxit hoặc silic oxit-nhôm oxit), ở dạng hạt rắn. Oxit dạng rắn được sulfat hóa có thể còn được xử lý bằng ion kim loại, nếu cần, sao cho oxit dạng rắn được sulfat hóa đã nung có thể chứa kim loại.

Theo một khía cạnh, oxit dạng rắn được sulfat hóa có thể chứa sulfat và nhôm oxit; theo cách khác, oxit dạng rắn được sulfat hóa có thể chứa sulfat và silic oxit-nhôm oxit. Theo một khía cạnh của sáng chế, nhôm oxit được sulfat hóa được điều chế bằng phương pháp trong đó nhôm oxit hoặc silic oxit-nhôm oxit được xử lý bằng nguồn sulfat. Nguồn sulfat bất kỳ có thể tiếp xúc hoàn toàn với oxit dạng rắn có thể được sử dụng. Theo một phương án, nguồn sulfat có thể bao gồm, nhưng không chỉ giới hạn ở, axit sulfuric hoặc muối chứa sulfat (ví dụ, amoni sulfat). Theo một khía cạnh, phương pháp này có thể được thực hiện bằng cách tạo huyền phù đặc oxit dạng rắn trong dung môi thích hợp. Theo một phương án, dung môi có thể là rượu, nước, hoặc hỗn hợp của chúng; theo cách khác, dung môi là rượu hoặc theo cách khác, dung môi là nước. Theo một phương án, rượu thích hợp có thể là rượu có từ một đến ba nguyên tử cacbon do chúng dễ bay hơi và có sức căng bề mặt thấp.

Theo một khía cạnh và phương án bất kỳ của sáng chế, lượng ion sulfat có mặt trước khi nung thường nằm trong khoảng từ 0,5 phần trọng lượng đến 100 phần trọng lượng ion sulfat cho 100 phần trọng lượng oxit dạng rắn. Theo một khía cạnh khác, lượng ion sulfat có mặt trước khi nung thường nằm trong khoảng từ 1 phần trọng lượng đến 50 phần trọng lượng ion sulfat cho 100 phần trọng lượng oxit dạng rắn; theo cách khác, từ 5 phần trọng lượng đến 30 phần trọng lượng ion sulfat cho 100 phần trọng lượng oxit dạng rắn. Khi được tắm sulfat, oxit dạng rắn được sulfat hóa có thể được sấy bằng phương pháp bất kỳ đã biết trong lĩnh vực này bao gồm, nhưng không chỉ giới hạn ở, lọc hút sau đó làm bay hơi, sấy trong chân không, sấy phun, và phương pháp tương tự. Theo một phương án, bước nung có thể được bắt đầu mà không cần sấy oxit dạng rắn đã được tắm.

Theo một khía cạnh khác nữa, oxit dạng rắn được xử lý hóa học có thể chứa, chủ yếu bao gồm, hoặc bao gồm, oxit dạng rắn phosphat hóa ở dạng hạt rắn, trong đó nguồn ion phosphat được bổ sung vào oxit dạng rắn bằng cách xử lý bằng chất phosphat hóa. Oxit dạng rắn phosphat hóa có thể chứa phosphat và thành phần oxit dạng rắn bất kỳ được mô tả (ví dụ, nhôm oxit hoặc silic oxit-nhôm oxit), ở dạng hạt rắn. Oxit dạng rắn phosphat hóa có thể còn được xử lý bằng ion kim loại nếu cần sao cho oxit dạng rắn phosphat hóa đã nung có thể chứa kim loại. Theo một khía cạnh, oxit dạng rắn phosphat hóa có thể chứa phosphat và nhôm oxit; theo cách khác, chất này chứa phosphat và silic oxit-nhôm oxit. Theo một khía cạnh của sáng chế, nhôm

oxit phosphat hóa được điều chế bằng phương pháp trong đó nhôm oxit hoặc silic oxit-nhôm oxit được xử lý bằng nguồn phosphat. Nguồn phosphat bất kỳ có thể tiếp xúc hoàn toàn với oxit dạng rắn có thể được sử dụng. Theo một phương án, nguồn phosphat có thể bao gồm, nhưng không chỉ giới hạn ở, axit phosphoric, axit phosphorơ, hoặc muối chứa phosphat (ví dụ, amoni phosphat). Theo một khía cạnh, phương pháp này có thể được thực hiện bằng cách tạo huyền phù đặc oxit dạng rắn trong dung môi thích hợp. Theo một phương án, dung môi có thể là rượu, nước, hoặc hỗn hợp của chúng; theo cách khác, dung môi là rượu hoặc theo cách khác, dung môi là nước. Theo một phương án, rượu thích hợp có thể là rượu có từ một đến ba nguyên tử cacbon do chúng dễ bay hơi và có sức căng bề mặt thấp.

Theo một khía cạnh và phương án bất kỳ của sáng chế, lượng ion phosphat có mặt trước khi nung thường nằm trong khoảng từ 0,5 phần trọng lượng đến 100 phần trọng lượng ion phosphat cho 100 phần trọng lượng oxit dạng rắn. Theo một khía cạnh khác, lượng ion phosphat có mặt trước khi nung thường nằm trong khoảng từ 1 phần trọng lượng đến 50 phần trọng lượng ion phosphat cho 100 phần trọng lượng oxit dạng rắn; theo cách khác, từ 5 phần trọng lượng đến 30 phần trọng lượng ion phosphat cho 100 phần trọng lượng oxit dạng rắn. Khi được tẩm sulfat, oxit dạng rắn phosphat hóa có thể được sấy bằng phương pháp bất kỳ đã biết trong lĩnh vực này bao gồm, nhưng không chỉ giới hạn ở, lọc hút sau đó làm bay hơi, sấy trong chân không, sấy phun, và phương pháp tương tự. Theo một phương án, bước nung có thể được bắt đầu mà không cần sấy oxit dạng rắn đã được tẩm.

Ngoài việc được xử lý bằng thành phần hút electron (ví dụ, halogenua hoặc ion sulfat), oxit vô cơ dạng rắn theo sáng chế có thể tùy ý được xử lý bằng nguồn kim loại. Theo một phương án, nguồn kim loại có thể là muối kim loại hoặc hợp chất chứa kim loại. Theo một khía cạnh của sáng chế, muối kim loại của hợp chất chứa kim loại có thể được bổ sung vào hoặc được tẩm vào oxit dạng rắn ở dạng dung dịch và chuyển hóa thành kim loại có nền khi nung. Do đó, kim loại được tẩm vào oxit vô cơ dạng rắn có thể chứa, chủ yếu bao gồm, hoặc bao gồm, kẽm, titan, niken, vanadi, bạc, đồng, gali, thiếc, vonfram, molybden, hoặc hỗn hợp của chúng; theo cách khác, kẽm, titan, niken, vanadi, bạc, đồng, thiếc, hoặc hỗn hợp bất kỳ của chúng; theo cách khác, kẽm, niken, vanadi, thiếc, hoặc hỗn hợp bất kỳ của chúng. Theo một phương án, kim loại được tẩm vào oxit vô cơ dạng rắn có thể chứa, chủ yếu bao gồm, hoặc bao gồm, kẽm;

theo cách khác, titan; theo cách khác, niken; theo cách khác, vanadi; theo cách khác, bạc; theo cách khác, đồng; theo cách khác, gali; theo cách khác, thiếc; theo cách khác, vonfram hoặc theo cách khác, molybden. Theo một số phương án, kẽm có thể được sử dụng để tẩy oxit dạng rắn do nó tạo ra hoạt tính xúc tác cao và chi phí thấp. Oxit dạng rắn có thể được xử lý bằng muối kim loại hoặc hợp chất chứa kim loại trước, sau, hoặc đồng thời với khi oxit dạng rắn được xử lý bằng anion hút electron; theo cách khác, trước khi oxit dạng rắn được xử lý bằng anion hút electron; theo cách khác, sau khi oxit dạng rắn được xử lý bằng anion hút electron hoặc theo cách khác, đồng thời với khi oxit dạng rắn được xử lý bằng anion hút electron.

Ngoài ra, phương pháp bất kỳ để tẩy oxit dạng rắn bằng kim loại có thể được sử dụng. Phương pháp mà nhờ đó oxit dạng rắn được tiếp xúc với nguồn kim loại (ví dụ, muối kim loại hoặc hợp chất chứa kim loại), bao gồm, nhưng không chỉ giới hạn ở, tạo gel, đồng tạo gel, và thêm một hợp chất vào một hợp chất khác. Sau phương pháp tiếp xúc bất kỳ, hỗn hợp tiếp xúc gồm oxit dạng rắn, anion hút electron, và ion kim loại thường được nung. Theo cách khác, oxit dạng rắn, nguồn anion hút electron, và muối kim loại hoặc hợp chất chứa kim loại được cho tiếp xúc và nung đồng thời.

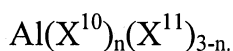
Theo một khía cạnh, metaloxen hoặc hỗn hợp metaloxen có thể được cho tiếp xúc trước với monome alpha olefin và/hoặc hợp chất hữu cơ-nhôm trong thời gian thứ nhất trước khi cho hỗn hợp này tiếp xúc với oxit dạng rắn được xử lý hóa học. Khi hỗn hợp đã tiếp xúc trước của metaloxen, monome alpha olefin, và/hoặc hợp chất hữu cơ-nhôm được tiếp xúc với oxit dạng rắn được xử lý hóa học, hỗn hợp còn chứa oxit dạng rắn được xử lý hóa học này được gọi là hỗn hợp “tiếp xúc sau”. Hỗn hợp tiếp xúc sau có thể được cho tiếp xúc tiếp trong thời gian tiếp xúc thứ hai trước khi nạp vào thiết bị phản ứng trong đó phương pháp oligome hóa sẽ được thực hiện.

Oxit dạng rắn được xử lý hóa học khác nhau và phương pháp khác nhau để điều chế oxit dạng rắn được xử lý hóa học có thể được sử dụng trong bản mô tả này đã được thông báo. Các patent Hoa Kỳ và công bố đơn yêu cầu cấp patent Hoa Kỳ sau được viện dẫn ở đây: 6,107,230, 6,165,929, 6,294,494, 6,300,271, 6,316,553, 6,355,594, 6,376,415, 6,391,816, 6,395,666, 6,524,987, 6,548,441, 6,750,302, 6,831,141, 6,936,667, 6,992,032, 7,601,665, 7,026,494, 7,148,298, 7,470,758, 7,517,939, 7,576,163, 7,294,599, 7,629,284, 7,501,372, 7,041,617, 7,226,886,

7,199,073, 7,312,283, 7,619,047, và 2010/0076167, ngoài các patent khác.

Hợp chất hữu cơ-nhôm

Theo một khía cạnh, sáng chế đề xuất phương pháp oligome hóa bao gồm bước (hoặc phương pháp điều chế PAO bao gồm bước) cho monome alpha olefin tiếp xúc với hệ chất xúc tác chứa metaloxen. Theo một phương án, hệ chất xúc tác có thể còn chứa chất hoạt hóa. Theo phương án bất kỳ được đề xuất ở đây, chất hoạt hóa có thể là oxit dạng rắn được xử lý hóa học bằng anion hút electron. Theo một khía cạnh khác của phương án bất kỳ được đề xuất ở đây, hệ chất xúc tác có thể chứa ít nhất một hợp chất hữu cơ-nhôm, ở dạng hỗn hợp với oxit dạng rắn được xử lý hóa học và/hoặc (các) chất hoạt hóa bất kỳ khác hoặc một mình. Theo một số phương án, hệ chất xúc tác có thể chứa, chủ yếu bao gồm, hoặc bao gồm metaloxen, chất hoạt hóa thứ nhất chứa oxit dạng rắn được xử lý hóa học, và chất hoạt hóa thứ hai là hợp chất hữu cơ-nhôm. Theo một khía cạnh, hợp chất hữu cơ-nhôm có thể được sử dụng trong hệ chất xúc tác theo sáng chế bao gồm, nhưng không chỉ giới hạn ở, hợp chất có công thức:



Theo một phương án, mỗi nhóm X^{10} có thể độc lập là nhóm $\text{C}_1\text{-C}_{20}$ hydrocarbyl; theo cách khác, nhóm $\text{C}_1\text{-C}_{10}$ hydrocarbyl; theo cách khác, nhóm $\text{C}_6\text{-C}_{20}$ aryl; theo cách khác, nhóm $\text{C}_6\text{-C}_{10}$ aryl; theo cách khác, nhóm $\text{C}_1\text{-C}_{20}$ alkyl; theo cách khác, nhóm $\text{C}_1\text{-C}_{10}$ alkyl hoặc theo cách khác, nhóm $\text{C}_1\text{-C}_5$ alkyl. Theo một phương án, mỗi nhóm X^{11} có thể độc lập là halogenua, hydrua, hoặc nhóm $\text{C}_1\text{-C}_{20}$ hydrocarboxit (còn được gọi là nhóm hydrocarboxy); theo cách khác, halogenua, hydrua, hoặc nhóm $\text{C}_1\text{-C}_{10}$ hydrocarboxit; theo cách khác, halogenua, hydrua, hoặc nhóm $\text{C}_6\text{-C}_{20}$ aryloxit (còn được gọi là aroxit hoặc nhóm aroxy); theo cách khác, halogenua, hydrua, hoặc nhóm $\text{C}_6\text{-C}_{10}$ aryloxit; theo cách khác, halogenua, hydrua, hoặc nhóm $\text{C}_1\text{-C}_{20}$ alkoxit (còn được gọi là nhóm alkoxo); theo cách khác, halogenua, hydrua, hoặc nhóm $\text{C}_1\text{-C}_{10}$ alkoxit; theo cách khác, halogenua, hydrua, hoặc nhóm $\text{C}_1\text{-C}_5$ alkoxit; theo cách khác, halogenua; theo cách khác, hydrua; theo cách khác, nhóm $\text{C}_1\text{-C}_{20}$ hydrocarboxit; theo cách khác, nhóm $\text{C}_1\text{-C}_{10}$ hydrocarboxit; theo cách khác, nhóm $\text{C}_6\text{-C}_{20}$ aryloxit; theo cách khác, nhóm $\text{C}_6\text{-C}_{10}$ aryloxit; theo cách khác, nhóm $\text{C}_1\text{-C}_{20}$ alkoxit; theo cách khác, nhóm $\text{C}_1\text{-C}_{10}$ alkoxit; theo cách khác, nhóm $\text{C}_1\text{-C}_5$ alkoxit. Theo một phương án, n có thể là một số (số nguyên hoặc số khác) nằm trong khoảng từ 1 đến 3; theo cách

khác, n bằng 1,5, theo cách khác n bằng 3.

Theo một phương án, mỗi nhóm alkyl của hợp chất hữu cơ-nhôm có công thức $\text{Al}(\text{X}^{10})_n(\text{X}^{11})_{3-n}$ có thể độc lập là nhóm metyl, nhóm etyl, nhóm propyl, nhóm butyl, nhóm pentyl, nhóm hexyl, nhóm heptyl, hoặc nhóm octyl; theo cách khác, nhóm metyl, nhóm etyl, nhóm butyl, nhóm hexyl, hoặc nhóm octyl. Theo một số phương án, mỗi nhóm alkyl của hợp chất hữu cơ-nhôm có công thức $\text{Al}(\text{X}^{10})_n(\text{X}^{11})_{3-n}$ có thể độc lập là nhóm metyl, nhóm etyl, nhóm n-propyl, nhóm n-butyl, nhóm iso-butyl, nhóm n-hexyl, hoặc nhóm n-octyl; theo cách khác, nhóm metyl, nhóm etyl, nhóm n-butyl, hoặc nhóm iso-butyl; theo cách khác, nhóm metyl; theo cách khác, nhóm etyl; theo cách khác, nhóm n-propyl; theo cách khác, nhóm n-butyl; theo cách khác, nhóm iso-butyl; theo cách khác, nhóm n-hexyl hoặc theo cách khác, nhóm n-octyl. Theo một phương án, mỗi nhóm aryl của hợp chất hữu cơ-nhôm có công thức $\text{Al}(\text{X}^{10})_n(\text{X}^{11})_{3-n}$ có thể độc lập là nhóm phenyl hoặc nhóm phenyl được thế; theo cách khác, nhóm phenyl hoặc theo cách khác, nhóm phenyl được thế.

Theo một phương án, mỗi nhóm halogenua của hợp chất hữu cơ-nhôm có công thức $\text{Al}(\text{X}^{10})_n(\text{X}^{11})_{3-n}$ có thể độc lập là florua, clorua, bromua, hoặc iodua. Theo một số phương án, mỗi nhóm halogenua của hợp chất hữu cơ-nhôm có công thức $\text{Al}(\text{X}^{10})_n(\text{X}^{11})_{3-n}$ có thể độc lập là florua; theo cách khác, clorua; theo cách khác, bromua hoặc theo cách khác, iodua.

Theo một phương án, mỗi nhóm alkoxit của hợp chất hữu cơ-nhôm có công thức $\text{Al}(\text{X}^{10})_n(\text{X}^{11})_{3-n}$ có thể độc lập là nhóm metoxy, nhóm etoxy, nhóm propoxy, nhóm butoxy, nhóm pentoxy, nhóm hexoxy, nhóm heptoxy, hoặc nhóm octoxy; theo cách khác, nhóm metoxy, nhóm etoxy, nhóm butoxy, nhóm hexoxy, hoặc nhóm octoxy. Theo một số phương án, nhóm alkoxy có thể độc lập là nhóm metoxy, nhóm etoxy, nhóm n-propoxy, nhóm n-butoxy, nhóm iso-butoxy, nhóm n-hexoxy, hoặc nhóm n-octoxy; theo cách khác, nhóm metoxy, nhóm etoxy, nhóm n-butoxy, hoặc nhóm iso-butoxy; theo cách khác, nhóm metoxy; theo cách khác, nhóm etoxy; theo cách khác, nhóm n-propoxy; theo cách khác, nhóm n-butoxy; theo cách khác, nhóm iso-butoxy; theo cách khác, nhóm n-hexoxy hoặc theo cách khác, nhóm n-octoxy. Theo một phương án, mỗi nhóm aryloxit của hợp chất hữu cơ-nhôm có công thức $\text{Al}(\text{X}^{10})_n(\text{X}^{11})_{3-n}$ có thể độc lập là phenoxit hoặc phenoxit được thế; theo cách khác,

phenoxit hoặc theo cách khác, phenoxit được thể.

Theo một phương án, hợp chất hữu cơ-nhôm có thể được sử dụng theo khía cạnh hoặc phương án bất kỳ của sáng chế có thể chứa, chủ yếu bao gồm, hoặc bao gồm, trialkyl nhôm, dialkyl nhôm halogenua, alkyl nhôm dihalogenua, dialkyl nhôm alkoxit, alkyl nhôm dialkoxit, dialkyl nhôm hydrua, alkyl nhôm dihydrua, và hỗn hợp của chúng. Theo một phương án khác, hợp chất hữu cơ-nhôm có thể được sử dụng theo khía cạnh hoặc phương án bất kỳ của sáng chế có thể chứa, chủ yếu bao gồm, hoặc bao gồm, trialkyl nhôm, dialkyl nhôm halogenua, alkyl nhôm dihalogenua, và hỗn hợp của chúng; theo cách khác, trialkyl nhôm; theo cách khác, dialkyl nhôm halogenua; theo cách khác, alkyl nhôm dihalogenua; theo cách khác, dialkyl nhôm alkoxit; theo cách khác, alkyl nhôm dialkoxit; theo cách khác, dialkyl nhôm hydrua hoặc theo cách khác, alkyl nhôm dihydrua. Theo các phương án khác nữa, hợp chất hữu cơ-nhôm có thể được sử dụng theo khía cạnh hoặc phương án bất kỳ của sáng chế có thể chứa, chủ yếu bao gồm, hoặc bao gồm, trialkyl nhôm, alkyl nhôm halogenua, hoặc hỗn hợp của chúng; theo cách khác, trialkyl nhôm hoặc theo cách khác, alkyl nhôm halogenua.

Theo một phương án không giới hạn phạm vi sáng chế, hợp chất trialkyl nhôm hữu ích có thể bao gồm trimetyl nhôm, trietyl nhôm, tripropyl nhôm, tributyl nhôm, trihexyl nhôm, trioctyl nhôm, hoặc hỗn hợp của chúng. Theo một số phương án không làm giới hạn phạm vi sáng chế, hợp chất trialkyl nhôm hữu ích có thể bao gồm trimetyl nhôm, trietyl nhôm, tripropyl nhôm, tri-n-butyl nhôm, tri-isobutyl nhôm, trihexyl nhôm, tri-n-octyl nhôm, hoặc hỗn hợp của chúng; theo cách khác, trietyl nhôm, tri-n-butyl nhôm, tri-isobutyl nhôm, tri-n-hexyl nhôm, tri-n-octyl nhôm, hoặc hỗn hợp của chúng; theo cách khác, trietyl nhôm, tri-n-butyl nhôm, tri-n-hexyl nhôm, tri-n-octyl nhôm, hoặc hỗn hợp của chúng. Theo các phương án không làm giới hạn phạm vi sáng chế khác, hợp chất trialkyl nhôm hữu ích có thể là trimetyl nhôm; theo cách khác, trietyl nhôm; theo cách khác, tripropyl nhôm; theo cách khác, tri-n-butyl nhôm; theo cách khác, tri-isobutyl nhôm; theo cách khác, tri-n-hexyl nhôm hoặc theo cách khác, tri-n-octyl nhôm.

Theo một phương án không làm giới hạn phạm vi sáng chế, alkyl nhôm halogenua hữu ích có thể bao gồm dietyl nhôm clorua, dietyl nhôm bromua, etyl nhôm

diclorua, etyl nhôm sesquiclorua, và hỗn hợp của chúng. Theo một số phương án không làm giới hạn phạm vi sáng chế, alkyl nhôm halogenua hữu ích có thể bao gồm dietyl nhôm clorua, etyl nhôm diclorua, etyl nhôm sesquiclorua, và hỗn hợp của chúng. Theo các phương án không làm giới hạn phạm vi sáng chế khác, alkyl nhôm halogenua hữu ích có thể là dietyl nhôm clorua; theo cách khác, dietyl nhôm bromua; theo cách khác, etyl nhôm diclorua hoặc theo cách khác, etyl nhôm sesquiclorua.

Theo một khía cạnh, sáng chế đề xuất việc cho metaloxen tiếp xúc trước với ít nhất một hợp chất hữu cơ-nhôm và monome olefin để tạo ra hỗn hợp được tiếp xúc trước, trước khi cho hỗn hợp được tiếp xúc trước này tiếp xúc với chất hoạt hóa oxit dạng rắn-nền để tạo ra chất xúc tác hoạt tính. Khi hệ chất xúc tác được điều chế theo cách này, thông thường, mặc dù không nhất thiết, một phần hợp chất hữu cơ-nhôm có thể được bổ sung vào hỗn hợp được tiếp xúc trước và một phần khác của hợp chất hữu cơ-nhôm có thể được bổ sung vào hỗn hợp tiếp xúc sau thu được khi hỗn hợp được tiếp xúc trước có thể được cho tiếp xúc với chất hoạt hóa oxit dạng rắn. Tuy nhiên, tất cả các hợp chất hữu cơ-nhôm có thể được sử dụng để điều chế hệ chất xúc tác trong bước tiếp xúc trước hoặc tiếp xúc sau. Theo cách khác, tất cả các thành phần của hệ chất xúc tác có thể được cho tiếp xúc trong một bước.

Ngoài ra, nhiều hơn một hợp chất hữu cơ-nhôm có thể được sử dụng, trong bước tiếp xúc trước hoặc tiếp xúc sau. Nếu hợp chất hữu cơ-nhôm được bổ sung theo nhiều bước, lượng hợp chất hữu cơ-nhôm được bộc lộ ở đây bao gồm tổng lượng hợp chất hữu cơ-nhôm sử dụng trong cả hỗn hợp tiếp xúc trước và tiếp xúc sau, và hợp chất hữu cơ-nhôm bổ sung bất kỳ được bổ sung vào thiết bị phản ứng oligome hóa. Do đó, tổng lượng hợp chất hữu cơ-nhôm được đưa ra, bất kể một hợp chất hữu cơ-nhôm được sử dụng, hoặc nhiều hơn một hợp chất hữu cơ-nhôm. Theo một khía cạnh khác, trietyl nhôm (TEA) hoặc triisobutyl nhôm là hợp chất hữu cơ-nhôm thông thường được sử dụng trong bản mô tả này. Theo một số phương án, hợp chất hữu cơ-nhôm có thể là trietyl nhôm hoặc theo cách khác, triisobutyl nhôm.

Theo một khía cạnh và theo phương án bất kỳ được bộc lộ ở đây trong đó hệ chất xúc tác sử dụng hợp chất hữu cơ-nhôm, tỷ lệ mol của nhôm trong hợp chất hữu cơ-nhôm với kim loại của metaloxen (Al:kim loại của metaloxen) có thể lớn hơn 0,1:1; theo cách khác, tỷ lệ này lớn hơn 1:1 hoặc theo cách khác, tỷ lệ này lớn hơn 10:1 hoặc theo

cách khác, tỷ lệ này lớn hơn 50:1. Theo một số phương án trong đó hệ chất xúc tác sử dụng hợp chất hữu cơ-nhôm, tỷ lệ mol của nhôm trong hợp chất hữu cơ-nhôm với kim loại của metaloxen (Al:kim loại của metaloxen) có thể nằm trong khoảng từ 0,1:1 đến 100000:1; theo cách khác, nằm trong khoảng từ 1:1 đến 10000:1; theo cách khác, nằm trong khoảng từ 10:1 đến 1000:1 hoặc theo cách khác, nằm trong khoảng từ 50:1 đến 500:1. Nếu metaloxen chứa một kim loại cụ thể (ví dụ, Zr), tỷ lệ mol có thể được đưa ra dưới dạng tỷ lệ mol Al:kim loại cụ thể (ví dụ, tỷ lệ mol Al:Zr).

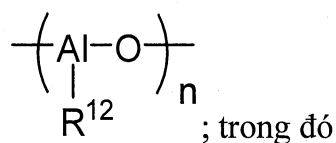
Theo một khía cạnh khác và theo phương án bất kỳ được bộc lộ ở đây trong đó hệ chất xúc tác sử dụng hợp chất hữu cơ-nhôm, tỷ lệ mol của liên kết nhôm-cacbon của hợp chất hữu cơ-nhôm với kim loại của metaloxen (liên kết Al-C:kim loại của metaloxen) có thể lớn hơn 0,1:1; theo cách khác, tỷ lệ này lớn hơn 1:1 hoặc theo cách khác, tỷ lệ này lớn hơn 10:1 hoặc theo cách khác, tỷ lệ này lớn hơn 50:1. Theo một số phương án trong đó hệ chất xúc tác sử dụng hợp chất hữu cơ-nhôm, tỷ lệ mol của liên kết nhôm-cacbon hoặc hợp chất hữu cơ-nhôm với kim loại của metaloxen (liên kết Al-C : kim loại của metaloxen) có thể nằm trong khoảng từ 0,1:1 đến 100000:1; theo cách khác, tỷ lệ này nằm trong khoảng từ 1:1 đến 10000:1; theo cách khác, tỷ lệ này nằm trong khoảng từ 10:1 đến 1000:1 hoặc theo cách khác, tỷ lệ này nằm trong khoảng từ 50:1 đến 500:1. Nếu metaloxen chứa kim loại cụ thể (ví dụ, Zr), tỷ lệ này có thể được thể hiện dưới dạng tỷ lệ liên kết Al-C:kim loại cụ thể (ví dụ, tỷ lệ mol liên kết Al-C:Zr).

Aluminoxan

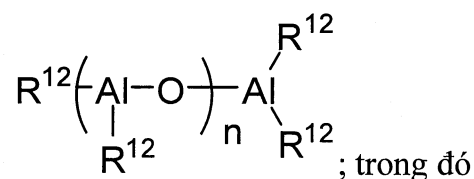
Theo một khía cạnh, sáng chế bao gồm hệ chất xúc tác chứa ít nhất một metaloxen và ít nhất một chất hoạt hóa. Sáng chế còn bao gồm phương pháp oligome hóa bao gồm bước (hoặc phương pháp điều chế PAO bao gồm bước) cho monome alpha olefin tiếp xúc với hệ chất xúc tác chứa metaloxen. Theo một phương án, hệ chất xúc tác có thể còn chứa chất hoạt hóa. Aluminoxan được gọi theo cách khác là poly(hydrocarbyl nhôm oxit), aluminoxan hữu cơ, hoặc alumoxan. Theo một khía cạnh khác của phương án bất kỳ được đề xuất ở đây, hệ chất xúc tác có thể chứa ít nhất một hợp chất aluminoxan, ở dạng hỗn hợp với oxit dạng rắn được xử lý hóa học và/hoặc (các) chất hoạt hóa bất kỳ khác hoặc một mình. Aluminoxan được mô tả ở đây và có thể được sử dụng, nhưng không chỉ giới hạn ở đó, kết hợp với oxit dạng rắn được xử lý hóa học hoặc theo cách khác, với oxit dạng rắn được xử lý hóa học và chất

hoạt hóa khác. Theo một số phương án, hệ chất xúc tác có thể chứa, chủ yếu bao gồm, hoặc bao gồm metaloxen, chất hoạt hóa thứ nhất là oxit dạng rắn được xử lý hóa học, và chất hoạt hóa thứ hai là alumoxan.

Hợp chất alumoxan có thể được sử dụng trong hệ chất xúc tác theo sáng chế bao gồm, nhưng không chỉ giới hạn ở, hợp chất oligome. Hợp chất oligome aluminoxan có thể chứa cấu trúc mạch thẳng, cấu trúc vòng, hoặc cấu trúc lồng, hoặc hỗn hợp của cả ba cấu trúc này. Aluminoxan oligome, bất kể hợp chất oligome hoặc polyme, có công thức đơn vị lặp lại:



R^{12} là nhóm alkyl mạch thẳng hoặc mạch nhánh. Aluminoxan mạch thẳng có công thức:



R^{12} là nhóm alkyl mạch thẳng hoặc mạch nhánh cũng thuộc phạm vi sáng chế. Nhóm alkyl của hợp chất hữu cơ-nhôm có công thức $\text{Al}(\text{X}^{10})_n(\text{X}^{11})_{3-n}$ đã được mô tả độc lập ở đây và các nhóm alkyl này có thể được sử dụng, nhưng không làm giới hạn, để mô tả thêm aluminoxan có công thức I. Nói chung, n trong alumoxan có thể bằng, hoặc có thể có giá trị trung bình, lớn hơn 1 hoặc theo cách khác, lớn hơn 2. Theo một phương án, n có thể nằm trong khoảng từ, hoặc có giá trị trung bình nằm trong khoảng từ 2 đến 15 hoặc theo cách khác, từ 3 đến 10.

Ngoài ra, aluminoxan cũng có thể có cấu trúc lồng có công thức $\text{R}^t_{5m+\alpha} \text{R}^b_m \alpha \text{Al}_{4m} \text{O}_{3m}$, trong đó m bằng 3 hoặc 4 và $\alpha = n_{\text{Al}(3)} - n_{\text{O}(2)} + n_{\text{O}(4)}$; trong đó $n_{\text{Al}(3)}$ là số nguyên tử nhôm có ba liên kết phối trí, $n_{\text{O}(2)}$ là số nguyên tử oxy có ba liên kết phối trí, $n_{\text{O}(4)}$ là số nguyên tử oxy có bốn liên kết phối trí, R^t là nhóm alkyl cuối, và R^b là nhóm alkyl liên kết cầu; trong đó R là alkyl mạch thẳng hoặc mạch nhánh có từ 1 đến 10 nguyên tử cacbon. Nhóm alkyl của hợp chất hữu cơ-nhôm có công thức $\text{Al}(\text{X}^{10})_n(\text{X}^{11})_{3-n}$ đã được mô tả độc lập ở đây và các nhóm alkyl này có thể được sử dụng, nhưng không chỉ giới hạn, để mô tả thêm aluminoxan có cấu trúc lồng có công

thức $R_{5m+a}^t R_{m-a}^b Al_{4m} O_{3m}$.

Theo một phương án không làm giới hạn phạm vi sáng chế, aluminoxan hữu dụng có thể bao gồm metylaluminoxan (MAO), etylaluminoxan, metylaluminoxan được cải biến (MMAO), n-propylaluminoxan, iso-propylaluminoxan, n-butylaluminoxan, sec-butylaluminoxan, iso-butylaluminoxan, t-butyl aluminoxan, 1-pentylaluminoxan, 2-pentylaluminoxan, 3-pentylaluminoxan, iso-pentylaluminoxan, neopentylaluminoxan, hoặc hỗn hợp của chúng. Theo một số phương án không làm giới hạn phạm vi sáng chế, aluminoxan hữu ích có thể bao gồm metylaluminoxan (MAO), metylaluminoxan được cải biến (MMAO), isobutyl aluminoxan, t-butyl aluminoxan, hoặc hỗn hợp của chúng. Theo các phương án không làm giới hạn phạm vi sáng chế khác, aluminoxan hữu ích có thể là metylaluminoxan (MAO); theo cách khác, etylaluminoxan; theo cách khác, metylaluminoxan được cải biến (MMAO); theo cách khác, n-propylaluminoxan; theo cách khác, iso-propylaluminoxan; theo cách khác, n-butylaluminoxan; theo cách khác, sec-butylaluminoxan; theo cách khác, iso-butylaluminoxan; theo cách khác, t-butyl aluminoxan; theo cách khác, 1-pentylaluminoxan; theo cách khác, 2-pentylaluminoxan; theo cách khác, 3-pentylaluminoxan; theo cách khác, iso-pentylaluminoxan hoặc theo cách khác, neopentylaluminoxan.

Mặc dù aluminoxan hữu cơ có các loại nhóm “R” khác nhau như R^{12} là thuộc phạm vi sáng chế, metyl aluminoxan (MAO), etyl aluminoxan, hoặc isobutyl aluminoxan cũng có thể được sử dụng làm chất hoạt hóa aluminoxan được sử dụng trong hệ chất xúc tác theo sáng chế. Các aluminoxan này được điều chế từ trimetyl nhôm, trietyl nhôm, hoặc triisobutyl nhôm, tương ứng, và đôi khi được gọi là poly(metyl nhôm oxit), poly(etyl nhôm oxit), và poly(isobutyl nhôm oxit), tương ứng. Phạm vi sáng chế còn bao gồm việc sử dụng aluminoxan kết hợp với trialkyl nhôm, như được bộc lộ trong patent Hoa Kỳ số 4,794,096.

Sáng chế dự định nhiều giá trị n trong công thức aluminoxan $(-Al(R^{12})O-)_n$ và $R^{12}(-Al(R^{12})O-)_n Al(R^{12})_2$, và tốt hơn nếu n ít nhất bằng 3. Tuy nhiên, tùy thuộc vào cách điều chế, bảo quản, và sử dụng aluminoxan hữu cơ, giá trị n có thể thay đổi trong một mẫu aluminoxan, và hỗn hợp aluminoxan hữu cơ này thuộc phạm vi phương pháp và hỗn hợp theo sáng chế.

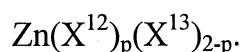
Để điều chế hệ chất xúc tác chứa aluminovan, tỷ lệ mol của nhôm trong aluminovan với kim loại của metaloxen (Al:kim loại của metaloxen) trong hệ chất xúc tác có thể lớn hơn 0,1:1; theo cách khác, tỷ lệ này lớn hơn 1:1 hoặc theo cách khác, tỷ lệ này lớn hơn 10:1 hoặc theo cách khác, tỷ lệ này lớn hơn 50:1. Theo một phương án, tỷ lệ mol của nhôm trong aluminovan với kim loại của metaloxen (Al:kim loại của metaloxen) trong hệ chất xúc tác có thể nằm trong khoảng từ 0,1:1 đến 100000:1; theo cách khác, tỷ lệ này nằm trong khoảng từ 1:1 đến 10000:1; theo cách khác, tỷ lệ này nằm trong khoảng từ 10:1 đến 1000:1 hoặc theo cách khác, tỷ lệ này nằm trong khoảng từ 50:1 đến 500:1. Nếu metaloxen chứa kim loại cụ thể (ví dụ, Zr), tỷ lệ này có thể được nêu dưới dạng tỷ lệ Al:kim loại cụ thể (ví dụ, tỷ lệ mol Al:Zr). Theo một khía cạnh, lượng aluminovan được bổ sung vào vùng oligome hóa có thể là lượng nằm trong khoảng từ 0,01 mg/l đến 1000 mg/l; theo cách khác, lượng này nằm trong khoảng từ 0,1 mg/l đến 100 mg/l hoặc theo cách khác, lượng này nằm trong khoảng từ 1 mg/l đến 50 mg/l.

Aluminovan hữu cơ có thể được điều chế bằng các phương pháp khác nhau đã biết rõ trong lĩnh vực này. Ví dụ về phương pháp điều chế aluminovan hữu cơ được bộc lộ trong các patent Hoa Kỳ số 3,242,099 và 4,808,561. Một ví dụ về cách mà aluminovan có thể được điều chế là như sau. Nước được hòa tan trong dung môi hữu cơ trơ có thể được cho phản ứng với hợp chất alkyl nhôm như AlR_3 để tạo ra hợp chất aluminovan hữu cơ cần thiết. Mặc dù không định ràng buộc bởi nhận định này, phương pháp điều chế này được cho là có thể tạo ra hỗn hợp gồm cả hợp chất aluminovan $(R-Al-O)_n$ mạch thẳng và mạch vòng, cả hai loại này đều thuộc phạm vi của sáng chế. Theo cách khác, aluminovan hữu cơ có thể được điều chế bằng cách cho hợp chất alkyl nhôm như AlR_3 phản ứng với muối hydrat hóa, như đồng sulfat hydrat hóa, trong dung môi hữu cơ trơ.

Các thành phần xúc tác khác có thể được cho tiếp xúc với aluminovan trong dung môi hầu như trơ với chất phản ứng, hợp chất trung gian, và sản phẩm của bước hoạt hóa có thể được sử dụng. Hệ chất xúc tác tạo ra theo cách này có thể được thu hồi bằng các phương pháp mà người có hiểu biết trung bình về lĩnh vực kỹ thuật này đã biết, bao gồm, nhưng không chỉ giới hạn ở, phương pháp lọc, hoặc hệ chất xúc tác có thể được đưa vào thiết bị phản ứng oligome hóa mà không được tách.

Hợp chất hữu cơ-kẽm

Như đã nêu, theo một khía cạnh, sáng chế đề xuất phương pháp oligome hóa bao gồm bước (hoặc phương pháp điều chế PAO bao gồm bước) cho monome alpha olefin tiếp xúc với hệ chất xúc tác chứa metaloxen. Theo một phương án, hệ chất xúc tác có thể còn chứa chất hoạt hóa. Theo phương án bất kỳ được đề xuất ở đây, hệ chất xúc tác có thể còn chứa chất hoạt hóa có thể là oxit dạng rắn được xử lý hóa học bằng anion hút electron. Theo một khía cạnh khác của phương án bất kỳ được đề xuất ở đây, hệ chất xúc tác có thể chứa ít nhất một hợp chất hữu cơ-kẽm, hoặc ở dạng hỗn hợp với oxit dạng rắn được xử lý hóa học và/hoặc (các) chất hoạt hóa bất kỳ khác hoặc một mình. Theo một số phương án, hệ chất xúc tác có thể chứa, chủ yếu bao gồm, hoặc bao gồm metaloxen, chất hoạt hóa thứ nhất là oxit dạng rắn được xử lý hóa học, và chất hoạt hóa thứ hai là hợp chất hữu cơ-kẽm. Theo một khía cạnh, hợp chất hữu cơ-kẽm có thể được sử dụng trong hệ chất xúc tác theo sáng chế bao gồm nhưng không chỉ giới hạn ở, hợp chất có công thức:



Theo một phương án, mỗi nhóm X^{12} có thể độc lập là nhóm $\text{C}_1\text{-C}_{20}$ hydrocarbyl; theo cách khác, nhóm $\text{C}_1\text{-C}_{10}$ hydrocarbyl; theo cách khác, nhóm $\text{C}_6\text{-C}_{20}$ aryl; theo cách khác, nhóm $\text{C}_6\text{-C}_{10}$ aryl; theo cách khác, nhóm $\text{C}_1\text{-C}_{20}$ alkyl; theo cách khác, nhóm $\text{C}_1\text{-C}_{10}$ alkyl hoặc theo cách khác, nhóm $\text{C}_1\text{-C}_5$ alkyl. Theo một phương án, mỗi nhóm X^{13} có thể độc lập là halogenua, hydrua, hoặc nhóm $\text{C}_1\text{-C}_{20}$ hydrocarboxit; theo cách khác, halogenua, hydrua, hoặc nhóm $\text{C}_1\text{-C}_{10}$ hydrocarboxit; theo cách khác, halogenua, hydrua, hoặc nhóm $\text{C}_6\text{-C}_{20}$ aryloxit; theo cách khác, halogenua, hydrua, hoặc nhóm $\text{C}_6\text{-C}_{10}$ aryloxit; theo cách khác, halogenua, hydrua, hoặc nhóm $\text{C}_1\text{-C}_{20}$ alkoxit; theo cách khác, halogenua, hydrua, hoặc nhóm $\text{C}_1\text{-C}_{10}$ alkoxit; theo cách khác, halogenua, hydrua, hoặc nhóm $\text{C}_1\text{-C}_5$ alkoxit; theo cách khác, halogenua; theo cách khác, hydrua; theo cách khác, nhóm $\text{C}_1\text{-C}_{20}$ hydrocarboxit; theo cách khác, nhóm $\text{C}_1\text{-C}_{10}$ hydrocarboxit; theo cách khác, nhóm $\text{C}_6\text{-C}_{20}$ aryloxit; theo cách khác, nhóm $\text{C}_6\text{-C}_{10}$ aryloxit; theo cách khác, nhóm $\text{C}_1\text{-C}_{20}$ alkoxit; theo cách khác, nhóm $\text{C}_1\text{-C}_{10}$ alkoxit; theo cách khác, nhóm $\text{C}_1\text{-C}_5$ alkoxit. Theo một phương án, p có thể là một số (số nguyên hoặc số khác) nằm trong khoảng từ 1 đến 2; theo cách khác, p bằng 1 hoặc theo cách khác, p bằng 2. Nhóm alkyl, nhóm aryl, alkoxit, aryloxit, và halogenua đã được mô tả độc lập ở đây là nhóm tiềm năng của X^{10} và X^{11} của hợp chất hữu cơ-nhôm

có công thức $\text{Al}(\text{X}^{10})_n(\text{X}^{11})_{3-n}$ và các nhóm alkyl, nhóm aryl, alkoxit, aryloxit, và halogenua này có thể được sử dụng không giới hạn để mô tả hợp chất hữu cơ-kẽm có công thức $\text{Zn}(\text{X}^{12})_p(\text{X}^{13})_{2-p}$ để có thể được sử dụng theo các khía cạnh và phương án được mô tả trong bản mô tả này.

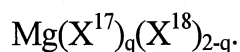
Theo một khía cạnh khác và theo phương án bất kỳ của sáng chế, hợp chất hữu cơ-kẽm hữu ích có thể chứa, chủ yếu bao gồm, hoặc bao gồm, dimetyl kẽm, dietyl kẽm, dipropyl kẽm, dibutyl kẽm, dineopentyl kẽm, di(trimetylsilyl-metyl)kẽm, hỗn hợp bất kỳ của chúng; theo cách khác, dimetyl kẽm; theo cách khác, dietyl kẽm; theo cách khác, dipropyl kẽm; theo cách khác, dibutyl kẽm; theo cách khác, dineopentyl kẽm hoặc theo cách khác, di(trimetylsilylmetyl)kẽm.

Theo một khía cạnh và theo phương án bất kỳ được bộc lộ ở đây trong đó hệ chất xúc tác sử dụng hợp chất hữu cơ-kẽm, tỷ lệ mol của hợp chất hữu cơ-kẽm với kim loại của metaloxen ($\text{Zn}:\text{kim loại của metaloxen}$) có thể lớn hơn 0,1:1; theo cách khác, tỷ lệ này lớn hơn 1:1 hoặc theo cách khác, tỷ lệ này lớn hơn 10:1 hoặc theo cách khác, tỷ lệ này lớn hơn 50:1. Theo một số phương án trong đó hệ chất xúc tác sử dụng hợp chất hữu cơ-kẽm, tỷ lệ mol của hợp chất hữu cơ-kẽm với kim loại của metaloxen ($\text{Zn}:\text{kim loại của metaloxen}$) có thể nằm trong khoảng từ 0,1:1 đến 100000:1; theo cách khác, tỷ lệ này nằm trong khoảng từ 1:1 đến 10000:1; theo cách khác, tỷ lệ này nằm trong khoảng từ 10:1 đến 1000:1 hoặc theo cách khác, tỷ lệ này nằm trong khoảng từ 50:1 đến 500:1. Nếu metaloxen chứa kim loại cụ thể (ví dụ, Zr), tỷ lệ này có thể được thể hiện dưới dạng tỷ lệ $\text{Zn}:\text{kim loại cụ thể}$ (ví dụ, tỷ lệ mol $\text{Zn}:\text{Zr}$).

Hợp chất hữu cơ-magie

Theo một khía cạnh khác, sáng chế đề xuất phương pháp oligome hóa bao gồm bước (hoặc phương pháp điều chế PAO bao gồm bước) cho monome alpha olefin tiếp xúc với hệ chất xúc tác chứa metaloxen. Theo một phương án, hệ chất xúc tác này có thể còn chứa chất hoạt hóa. Theo phương án bất kỳ được đề xuất ở đây, chất hoạt hóa có thể là oxit dạng rắn được xử lý hóa học bằng anion hút electron. Theo một khía cạnh khác của phương án bất kỳ được đề xuất ở đây, hệ chất xúc tác có thể chứa ít nhất một hợp chất hữu cơ-magie, hoặc ở dạng hỗn hợp với oxit dạng rắn được xử lý hóa học và/hoặc (các) chất hoạt hóa bất kỳ khác hoặc một mình. Theo một số phương án, hệ chất xúc tác có thể chứa, chủ yếu bao gồm, hoặc bao gồm metaloxen, chất hoạt hóa thứ nhất là oxit dạng rắn

được xử lý hóa học, và chất hoạt hóa thứ hai là hợp chất hữu cơ-magie. Theo một khía cạnh, hợp chất hữu cơ-magie có thể được sử dụng trong hệ chất xúc tác theo sáng chế bao gồm nhưng không chỉ giới hạn ở, hợp chất có công thức:



Theo một phương án, mỗi nhóm X^{17} có thể độc lập là nhóm $\text{C}_1\text{-C}_{20}$ hydrocarbyl; theo cách khác, nhóm $\text{C}_1\text{-C}_{10}$ hydrocarbyl; theo cách khác, nhóm $\text{C}_6\text{-C}_{20}$ aryl; theo cách khác, nhóm $\text{C}_6\text{-C}_{10}$ aryl; theo cách khác, nhóm $\text{C}_1\text{-C}_{20}$ alkyl; theo cách khác, nhóm $\text{C}_1\text{-C}_{10}$ alkyl hoặc theo cách khác, nhóm $\text{C}_1\text{-C}_5$ alkyl. Theo một phương án, mỗi nhóm X^{18} có thể độc lập là halogenua, hydrua, hoặc nhóm $\text{C}_1\text{-C}_{20}$ hydrocarboxit; theo cách khác, halogenua, hydrua, hoặc nhóm $\text{C}_1\text{-C}_{10}$ hydrocarboxit; theo cách khác, halogenua, hydrua, hoặc nhóm $\text{C}_6\text{-C}_{20}$ aryloxit; theo cách khác, halogenua, hydrua, hoặc nhóm $\text{C}_6\text{-C}_{10}$ aryloxit; theo cách khác, halogenua, hydrua, hoặc nhóm $\text{C}_1\text{-C}_{20}$ alkoxit; theo cách khác, halogenua, hydrua, hoặc nhóm $\text{C}_1\text{-C}_{10}$ alkoxit; theo cách khác, halogenua, hydrua, hoặc nhóm $\text{C}_1\text{-C}_5$ alkoxit; theo cách khác, halogenua; theo cách khác, hydrua; theo cách khác, nhóm $\text{C}_1\text{-C}_{20}$ hydrocarboxit; theo cách khác, nhóm $\text{C}_1\text{-C}_{10}$ hydrocarboxit; theo cách khác, nhóm $\text{C}_6\text{-C}_{20}$ aryloxit; theo cách khác, nhóm $\text{C}_6\text{-C}_{10}$ aryloxit; theo cách khác, nhóm $\text{C}_1\text{-C}_{20}$ alkoxit; theo cách khác, nhóm $\text{C}_1\text{-C}_{10}$ alkoxit; theo cách khác, nhóm $\text{C}_1\text{-C}_5$ alkoxit. Theo một phương án, q có thể là một số (số nguyên hoặc số khác) nằm trong khoảng từ 1 đến 2; theo cách khác, q bằng 1 hoặc theo cách khác, q bằng 2. Nhóm alkyl, nhóm aryl, nhóm alkoxit, nhóm aryloxit, và halogenua đã được mô tả độc lập ở đây là nhóm tiềm năng của X^{10} và X^{11} của hợp chất hữu cơ-nhôm có công thức $\text{Al}(\text{X}^{10})_n(\text{X}^{11})_{3-n}$ và các nhóm alkyl, nhóm aryl, nhóm alkoxit, nhóm aryloxit, và halogenua này có thể được sử dụng không hạn chế để mô tả hợp chất hữu cơ-magie có công thức $\text{Mg}(\text{X}^{17})_q(\text{X}^{18})_{2-q}$ có thể được sử dụng theo các khía cạnh và phương án được mô tả trong bản mô tả này. Ví dụ, hợp chất hữu cơ-magie có thể bao gồm hoặc có thể được chọn từ hợp chất dihydrocarbyl magie, chất phản ứng Grignard, và hợp chất tương tự như hợp chất alkoxymagie alkyl.

Theo một khía cạnh khác và theo phương án bất kỳ của sáng chế, hợp chất hữu cơ-magie hữu ích có thể chứa, chủ yếu bao gồm, hoặc bao gồm, dimetylmagie, dietylmagie, dipropyilmagie, dibutyilmagie, dineopentylmagie, di(trimetylsilylmetyl)magie, metyilmagie clorua, etyilmagie clorua, propyilmagie clorua, butyilmagie clorua, neopentylmagie clorua, trimetylsilylmetylmagie clorua, metyilmagie bromua, etyilmagie bromua, propyilmagie

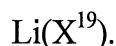
bromua, butylmagie bromua, neopentylmagie bromua, trimetylsilylmetylmagie bromua, metylmagie iodua, etylmagie iodua, propylmagie iodua, butylmagie iodua, neopentylmagie iodua, trimetylsilylmetylmagie iodua, metylmagie etoxit, etylmagie etoxit, propylmagie etoxit, butylmagie etoxit, neopentylmagie etoxit, trimetylsilylmetylmagie etoxit, metylmagie propoxit, etylmagie propoxit, propylmagie propoxit, butylmagie propoxit, neopentylmagie propoxit, trimetylsilylmetylmagie propoxit, metylmagie phenoxit, etylmagie phenoxit, propylmagie phenoxit, butylmagie phenoxit, neopentylmagie phenoxit, trimetylsilylmetylmagie phenoxit, hỗn hợp bất kỳ của chúng; theo cách khác, dimetylmagie; theo cách khác, dietylmagie; theo cách khác, dipropylmagie; theo cách khác, dibutylmagie; theo cách khác, dineopentylmagie; theo cách khác, di(trimetylsilylmetyl)magie; theo cách khác, metylmagie clorua; theo cách khác, etylmagie clorua; theo cách khác, propylmagie clorua; theo cách khác, butylmagie clorua; theo cách khác, neopentylmagie clorua; theo cách khác, trimetylsilylmetylmagie clorua; theo cách khác, metylmagie bromua; theo cách khác, etylmagie bromua; theo cách khác, propylmagie bromua; theo cách khác, butylmagie bromua; theo cách khác, neopentylmagie bromua; theo cách khác, trimetylsilylmetylmagie bromua; theo cách khác, metylmagie iodua; theo cách khác, etylmagie iodua; theo cách khác, propylmagie iodua; theo cách khác, butylmagie iodua; theo cách khác, neopentylmagie iodua; theo cách khác, trimetylsilylmetylmagie iodua; theo cách khác, metylmagie etoxit; theo cách khác, etylmagie etoxit; theo cách khác, propylmagie etoxit; theo cách khác, butylmagie etoxit; theo cách khác, neopentylmagie etoxit; theo cách khác, trimetylsilylmetylmagie etoxit; theo cách khác, metylmagie propoxit; theo cách khác, etylmagie propoxit; theo cách khác, propylmagie propoxit; theo cách khác, butylmagie propoxit; theo cách khác, neopentylmagie propoxit; theo cách khác, trimetylsilylmetylmagie propoxit; theo cách khác, metylmagie phenoxit; theo cách khác, etylmagie phenoxit; theo cách khác, propylmagie phenoxit; theo cách khác, butylmagie phenoxit; theo cách khác, neopentylmagie phenoxit hoặc theo cách khác, trimetylsilylmetylmagie phenoxit.

Theo một khía cạnh và theo phương án bất kỳ được bộc lộ ở đây trong đó hệ chất xúc tác sử dụng hợp chất hữu cơ-magie, tỷ lệ mol của hợp chất hữu cơ-magie với kim loại của metaloxen (Mg:kim loại của metaloxen) có thể lớn hơn 0,1:1; theo cách khác, tỷ lệ này lớn hơn 1:1 hoặc theo cách khác, tỷ lệ này lớn hơn 10:1 hoặc theo cách khác, tỷ lệ này lớn hơn 50:1. Theo một số phương án trong đó hệ chất xúc tác sử dụng hợp chất hữu cơ-

magie, tỷ lệ mol của hợp chất hữu cơ-magie với kim loại của metaloxen (Mg:kim loại của metaloxen) có thể nằm trong khoảng từ 0,1:1 đến 100000:1; theo cách khác, tỷ lệ này nằm trong khoảng từ 1:1 đến 10000:1; theo cách khác, tỷ lệ này nằm trong khoảng từ 10:1 đến 1000:1 hoặc theo cách khác, tỷ lệ này nằm trong khoảng từ 50:1 đến 500:1. Nếu metaloxen chứa kim loại cụ thể (ví dụ, Zr) tỷ lệ này có thể được nêu dưới dạng tỷ lệ Mg:kim loại cụ thể (ví dụ, tỷ lệ mol Mg:Zr).

Hợp chất hữu cơ-lithi

Theo một khía cạnh khác, sáng chế đề xuất phương pháp oligome hóa bao gồm bước (hoặc phương pháp điều chế PAO bao gồm bước) cho monome alpha olefin tiếp xúc với hệ chất xúc tác chứa metaloxen. Theo một phương án, hệ chất xúc tác có thể còn chứa chất hoạt hóa. Theo phương án bất kỳ được đề xuất ở đây, chất hoạt hóa có thể là oxit dạng rắn được xử lý hóa học bằng anion hút electron. Theo một khía cạnh khác của phương án bất kỳ được đề xuất ở đây, hệ chất xúc tác có thể chứa ít nhất một hợp chất hữu cơ-lithi, hoặc ở dạng hỗn hợp với oxit dạng rắn được xử lý hóa học và/hoặc (các) chất hoạt hóa bất kỳ khác hoặc một mình. Theo một số phương án, hệ chất xúc tác có thể chứa, chủ yếu bao gồm, hoặc bao gồm metaloxen, chất hoạt hóa thứ nhất là oxit dạng rắn được xử lý hóa học, và chất hoạt hóa thứ hai là hợp chất hữu cơ-lithi. Theo một khía cạnh, hợp chất hữu cơ-lithi có thể được sử dụng trong hệ chất xúc tác theo sáng chế bao gồm, nhưng không chỉ giới hạn ở, hợp chất có công thức:



Theo một phương án, X^{19} có thể là nhóm $\text{C}_1\text{-C}_{20}$ hydrocarbyl hoặc hydrua; theo cách khác, nhóm $\text{C}_1\text{-C}_{10}$ hydrocarbyl; theo cách khác, nhóm $\text{C}_6\text{-C}_{20}$ aryl; theo cách khác, nhóm $\text{C}_6\text{-C}_{10}$ aryl; theo cách khác, nhóm $\text{C}_1\text{-C}_{20}$ alkyl; theo cách khác, nhóm $\text{C}_1\text{-C}_{10}$ alkyl; theo cách khác, nhóm $\text{C}_1\text{-C}_5$ alkyl hoặc theo cách khác, hydrua. Nhóm alkyl và nhóm aryl đã được mô tả độc lập ở đây là nhóm tiềm năng của X^{10} và X^{11} của hợp chất hữu cơ-nhôm có công thức $\text{Al}(\text{X}^{10})_n(\text{X}^{11})_{3-n}$ và nhóm alkyl và nhóm aryl này có thể được sử dụng không hạn chế để mô tả hợp chất hữu cơ-lithi có công thức $\text{Li}(\text{X}^{19})$ có thể được sử dụng theo các khía cạnh và phương án được mô tả trong bản mô tả này.

Theo một khía cạnh khác và theo phương án bất kỳ của sáng chế, hợp chất hữu cơ-lithi hữu ích có thể chứa, chủ yếu bao gồm, hoặc bao gồm, metyllithi, etyllithi, propyllithi, n-butyllithi, sec-butyllithi, t-butyllithi, neopentyllithi, trimetylsilylmetyllithi, phenyllithi,

tollyllithi, xyllyllithi, benzyllithi, (dimethylphenyl)metyllithi, alyllithi, hoặc hỗn hợp của chúng. Theo một phương án, hợp chất hữu cơ-lithi có thể chứa, chủ yếu bao gồm, hoặc bao gồm, metyllithi, etyllithi, propyllithi, n-butyllithi, sec-butyllithi, t-butyllithi, hoặc hỗn hợp bất kỳ của chúng; theo cách khác, phenyllithi, tolyllithi, xyllyllithi, hoặc hỗn hợp bất kỳ của chúng. Theo một số phương án, hợp chất hữu cơ-lithi có thể chứa, chủ yếu bao gồm, hoặc bao gồm, metyllithi; theo cách khác, etyllithi; theo cách khác, propyllithi; theo cách khác, n-butyllithi; theo cách khác, sec-butyllithi; theo cách khác, t-butyllithi; theo cách khác, neopentyllithi; theo cách khác, trimetylsilylmetyllithi; theo cách khác, phenyllithi; theo cách khác, tolyllithi; theo cách khác, xyllyllithi; theo cách khác, benzyllithi; theo cách khác, (dimethylphenyl)metyllithi hoặc theo cách khác, alyllithi.

Theo một khía cạnh và theo phương án bất kỳ được bộc lộ ở đây trong đó hệ chất xúc tác sử dụng hợp chất hữu cơ-lithi, tỷ lệ mol của hợp chất hữu cơ-lithi với kim loại của metaloxen (Li:kim loại của metaloxen) có thể lớn hơn 0,1:1; theo cách khác, tỷ lệ này lớn hơn 1:1 hoặc theo cách khác, tỷ lệ này lớn hơn 10:1 hoặc theo cách khác, tỷ lệ này lớn hơn 50:1. Theo một số phương án trong đó hệ chất xúc tác sử dụng hợp chất hữu cơ-lithi, tỷ lệ mol của hợp chất hữu cơ-lithi với kim loại của metaloxen (Li:kim loại của metaloxen) có thể nằm trong khoảng từ 0,1:1 đến 100000:1; theo cách khác, tỷ lệ này nằm trong khoảng từ 1:1 đến 10000:1; theo cách khác, tỷ lệ này nằm trong khoảng từ 10:1 đến 1000:1 hoặc theo cách khác, tỷ lệ này nằm trong khoảng từ 50:1 đến 500:1. Nếu metaloxen chứa kim loại cụ thể (ví dụ, Zr) tỷ lệ này có thể được nêu dưới dạng tỷ lệ Li:kim loại cụ thể (ví dụ, tỷ lệ mol Li:Zr).

Hợp chất hữu cơ-bo

Theo một khía cạnh khác nữa, sáng chế đề xuất phương pháp oligome hóa bao gồm bước (hoặc phương pháp điều chế PAO bao gồm bước) cho monome alpha olefin tiếp xúc với hệ chất xúc tác chứa metaloxen. Theo một phương án, hệ chất xúc tác có thể còn chứa chất hoạt hóa. Theo phương án bất kỳ được đề xuất ở đây, chất hoạt hóa có thể chứa oxit dạng rắn được xử lý hóa học bằng anion hút electron. Theo một khía cạnh khác của phương án bất kỳ được đề xuất ở đây, hệ chất xúc tác có thể chứa ít nhất một hợp chất hữu cơ-bo, hoặc ở dạng hỗn hợp với oxit dạng rắn được xử lý hóa học và/hoặc (các) chất hoạt hóa bất kỳ khác hoặc một mình. Theo một số phương án, hệ chất xúc tác có thể chứa, chủ yếu bao gồm, hoặc bao gồm metaloxen, chất hoạt hóa

thứ nhất là oxit dạng rắn được xử lý hóa học, và chất hoạt hóa thứ hai là hợp chất hữu cơ-bo.

Theo một khía cạnh, hợp chất hữu cơ-bo có thể được sử dụng trong hệ chất xúc tác theo sáng chế là khác nhau. Theo một khía cạnh, hợp chất hữu cơ-bo có thể là hợp chất bo trung tính, muối borat, hoặc hỗn hợp của chúng; theo cách khác, hợp chất hữu cơ-bo trung tính hoặc theo cách khác, muối borat. Theo một khía cạnh, hợp chất hữu cơ-bo theo sáng chế có thể là hợp chất flo hữu cơ-bo, hợp chất flo hữu cơ borat, hoặc hỗn hợp của chúng; theo cách khác, hợp chất flo hữu cơ-bo hoặc theo cách khác, hợp chất flo hữu cơ borat. Hợp chất flo hữu cơ bo bất kỳ hoặc hợp chất flo hữu cơ borat đã biết trong lĩnh vực này có thể được sử dụng. Thuật ngữ hợp chất flo hữu cơ-bo có nghĩa thông thường của nó dùng để chỉ hợp chất trung tính có dạng BY_3 . Thuật ngữ hợp chất flo hữu cơ borat còn có nghĩa thông thường của nó dùng để chỉ muối monoanion của hợp chất flo hữu cơ-bo có dạng $[cation]^+[BY_4]^-$, trong đó Y là nhóm hữu cơ được flo hóa. Để thuận tiện, hợp chất flo hữu cơ bo và hợp chất flo hữu cơ borat thường được gọi chung là hợp chất hữu cơ-bo, hoặc bằng từng tên nếu ngữ cảnh yêu cầu.

Theo một phương án, hợp chất flo hữu cơ borat có thể được sử dụng làm chất hoạt hóa trong sáng chế bao gồm, nhưng không chỉ giới hạn ở, aryl borat được flo hóa như, *N,N*-dimetylanilini tetrakis(pentaflorophenyl)borat, triphenylcarbeni tetrakis(pentaflorophenyl)borat, lithi tetrakis(pentaflorophenyl)borat, *N,N*-dimetylanilini tetrakis[3,5-bis(triflometyl)phenyl]borat, triphenylcarbeni tetrakis[3,5-bis(triflometyl)phenyl]borat, và hỗn hợp của chúng; theo cách khác, *N,N*-dimetylanilini tetrakis(pentaflorophenyl)borat; theo cách khác, triphenylcarbeni tetrakis(pentaflorophenyl)borat; theo cách khác, lithi tetrakis(pentaflorophenyl)borat; theo cách khác, *N,N*-dimetylanilini tetrakis[3,5-bis(triflometyl)phenyl]borat hoặc theo cách khác, triphenylcarbeni tetrakis[3,5-bis(triflometyl)phenyl]borat. Ví dụ về hợp chất flo hữu cơ-bo có thể được sử dụng làm chất hoạt hóa trong sáng chế bao gồm, nhưng không chỉ giới hạn ở, tris(pentaflorophenyl)bo, tris[3,5-bis(triflometyl)phenyl]bo, và hỗn hợp của chúng.

Mặc dù không dự định ràng buộc bởi lý thuyết sau đây, hợp chất flo hữu cơ borat và hợp chất flo hữu cơ-bo, và hợp chất liên quan, được cho là tạo ra anion “liên kết phối trí yếu” khi kết hợp với hợp chất hữu cơ-kim loại, như được bộc lộ trong

patent Hoa Kỳ số 5,919,983.

Nói chung, lượng bất kỳ của hợp chất hữu cơ-bo có thể được sử dụng trong bản mô tả này. Theo một khía cạnh và theo phương án bất kỳ được bộc lộ ở đây, tỷ lệ mol của hợp chất hữu cơ-bo với metaloxen có thể nằm trong khoảng từ 0,001:1 đến 100,000:1. Theo cách khác, và theo phương án bất kỳ, tỷ lệ mol của hợp chất hữu cơ-bo với metaloxen có thể nằm trong khoảng từ 0,01:1 đến 10000:1; theo cách khác, tỷ lệ này nằm trong khoảng từ 0,1:1 đến 100:1; theo cách khác, tỷ lệ này nằm trong khoảng từ 0,5:1 đến 10:1 hoặc theo cách khác, tỷ lệ này nằm trong khoảng từ 0,2:1 đến 5:1. Thông thường, lượng hợp chất flo hữu cơ bo hoặc hợp chất flo hữu cơ borat được sử dụng làm chất hoạt hóa của metaloxen có thể nằm trong khoảng từ 0,5 mol đến 10 mol hợp chất hữu cơ-bo cho tổng số mol của hợp chất metaloxen được sử dụng. Theo một khía cạnh, lượng hợp chất flo hữu cơ bo hoặc hợp chất flo hữu cơ borat được sử dụng làm chất hoạt hóa của metaloxen nằm trong khoảng từ 0,8 mol đến 5 mol hợp chất hữu cơ-bo cho tổng số mol hợp chất metaloxen.

Hợp chất ion ion hóa

Theo một khía cạnh khác theo sáng chế về phương pháp oligome hóa bao gồm (hoặc phương pháp điều chế PAO bao gồm bước) cho monome alpha olefin tiếp xúc với hệ chất xúc tác chứa metaloxen. Theo một phương án, hệ chất xúc tác có thể còn chứa chất hoạt hóa. Theo phương án bất kỳ được đề xuất ở đây, chất hoạt hóa có thể là oxit dạng rắn được xử lý hóa học bằng anion hút electron. Theo một khía cạnh khác của phương án bất kỳ được đề xuất ở đây, hệ chất xúc tác có thể chứa ít nhất một hợp chất ion ion hóa, hoặc ở dạng hỗn hợp với oxit dạng rắn được xử lý hóa học và/hoặc (các) chất hoạt hóa bất kỳ khác hoặc một mình. Theo một số phương án, hệ chất xúc tác có thể chứa, chủ yếu bao gồm, hoặc bao gồm metaloxen, chất hoạt hóa thứ nhất là oxit dạng rắn được xử lý hóa học, và chất hoạt hóa thứ hai là hợp chất ion ion hóa. Ví dụ về hợp chất ion ion hóa được bộc lộ trong patent Hoa Kỳ số 5,576,259 và 5,807,938.

Hợp chất ion ion hóa là hợp chất ion có thể làm tăng hoạt tính của hệ chất xúc tác. Mặc dù không bị ràng buộc bởi lý thuyết, hợp chất ion ion hóa được cho là có thể cho phản ứng với hợp chất metaloxen và chuyển hóa nó thành hợp chất metaloxen cation hoặc hợp chất metaloxen có thể là cation mới. Ngoài ra, mặc dù không muốn bị

ràng buộc bởi lý thuyết, hợp chất ion ion hóa được cho là có thể hoạt động như hợp chất ion hóa bằng cách tách ít nhất một phần phối tử anion, có thể là phối tử nhóm II (không phải η^5 -alkadienyl) ra khỏi metaloxen. Tuy nhiên, hợp chất ion ion hóa là chất hoạt hóa bất kể nó có ion hóa metaloxen hay không, đều có tác dụng tách phối tử nhóm II theo cách để tạo ra cặp ion, làm yếu liên kết phối tử kim loại nhóm II trong metaloxen, đơn giản là phối trí với phối tử nhóm II, hoặc cơ chế bất kỳ khác mà nhờ đó quá trình hoạt hóa có thể xảy ra.

Ngoài ra, hợp chất ion ion hóa không nhất thiết cần phải hoạt hóa metaloxen. Chức năng hoạt hóa của hợp chất ion ion hóa có thể thấy rõ trong hoạt tính gia tăng của hệ chất xúc tác nói chung, so với hệ chất xúc tác không chứa hợp chất ion ion hóa bất kỳ. Hợp chất ion ion hóa cũng không cần hoạt hóa các metaloxen khác nhau ở mức độ giống nhau.

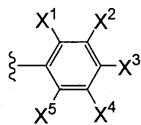
Theo một khía cạnh và theo phương án bất kỳ được bộc lộ ở đây, hợp chất ion ion hóa có thể có công thức:



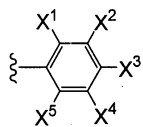
Theo một phương án, Q có thể là $[NR^A R^B R^C R^D]^+$, $[CR^E R^F R^G]^+$, $[C_7H_7]^+$, Li^+ , Na^+ , hoặc K^+ ; theo cách khác, $[NR^A R^B R^C R^D]^+$; theo cách khác, $[CR^E R^F R^G]^+$; theo cách khác, $[C_7H_7]^+$; theo cách khác, Li^+ , Na^+ , hoặc K^+ ; theo cách khác, Li^+ ; theo cách khác, Na^+ hoặc theo cách khác, K^+ . Theo một phương án, mỗi nhóm R^A , R^B , và R^C có thể độc lập là hydro, và nhóm C_1 - C_{20} hydrocarbyl; theo cách khác, hydro và nhóm C_1 - C_{10} hydrocarbyl; theo cách khác, hydro và nhóm C_1 - C_5 hydrocarbyl; theo cách khác, hydro và nhóm C_6 - C_{20} aryl; theo cách khác, hydro và nhóm C_6 - C_{15} aryl; theo cách khác, hydro và nhóm C_6 - C_{10} aryl; theo cách khác, hydro và nhóm C_1 - C_{20} alkyl; theo cách khác, hydro và nhóm C_1 - C_{10} alkyl hoặc theo cách khác, hydro và nhóm C_1 - C_5 alkyl; theo cách khác, hydro; theo cách khác, nhóm C_1 - C_{20} hydrocarbyl; theo cách khác, nhóm C_1 - C_{10} hydrocarbyl; theo cách khác, nhóm C_1 - C_5 hydrocarbyl; theo cách khác, nhóm C_6 - C_{20} aryl; theo cách khác, nhóm C_6 - C_{15} aryl; theo cách khác, nhóm C_6 - C_{10} aryl; theo cách khác, nhóm C_1 - C_{20} alkyl; theo cách khác, nhóm C_1 - C_{10} alkyl hoặc theo cách khác, nhóm C_1 - C_5 alkyl. Theo một phương án, R^D được chọn từ hydro, halogenua, và nhóm C_1 - C_{20} hydrocarbyl; theo cách khác, hydro, halogenua, và nhóm C_1 - C_{10} hydrocarbyl; theo cách khác, hydro, halogenua, và nhóm C_1 - C_5 hydrocarbyl;

theo cách khác, hydro, halogenua, và nhóm C₆-C₂₀ aryl; theo cách khác, hydro, halogenua, và nhóm C₆-C₁₅ aryl; theo cách khác, hydro, halogenua, và nhóm C₆-C₁₀ aryl; theo cách khác, hydro, halogenua, và nhóm C₁-C₂₀ alkyl; theo cách khác, hydro, halogenua, và nhóm C₁-C₁₀ alkyl hoặc theo cách khác, hydro, halogenua, và C₁-C₅ alkyl; theo cách khác, hydro; theo cách khác, halogenua; theo cách khác, nhóm C₁-C₂₀ hydrocarbyl; theo cách khác, nhóm C₁-C₁₀ hydrocarbyl; theo cách khác, nhóm C₁-C₅ hydrocarbyl; theo cách khác, nhóm C₆-C₂₀ aryl; theo cách khác, nhóm C₆-C₁₅ aryl; theo cách khác, nhóm C₆-C₁₀ aryl; theo cách khác, nhóm C₁-C₂₀ alkyl; theo cách khác, nhóm C₁-C₁₀ alkyl hoặc theo cách khác, nhóm C₁-C₅ alkyl. Theo một phương án, mỗi nhóm R^E, R^F, và R^G độc lập được chọn từ hydro, halogenua, và nhóm C₁-C₂₀ hydrocarbyl; theo cách khác, hydro, halogenua, và nhóm C₁-C₁₀ hydrocarbyl; theo cách khác, hydro, halogenua, và nhóm C₁-C₅ hydrocarbyl; theo cách khác, hydro, halogenua, và nhóm C₆-C₂₀ aryl; theo cách khác, hydro, halogenua, và nhóm C₆-C₁₅ aryl hoặc theo cách khác, hydro, halogenua, và nhóm C₆-C₁₀ aryl; theo cách khác, hydro; theo cách khác, halogenua; theo cách khác, nhóm C₁-C₂₀ hydrocarbyl; theo cách khác, nhóm C₁-C₁₀ hydrocarbyl; theo cách khác, nhóm C₁-C₅ hydrocarbyl; theo cách khác, nhóm C₆-C₂₀ aryl; theo cách khác, nhóm C₆-C₁₅ aryl hoặc theo cách khác, nhóm C₆-C₁₀ aryl. Nhóm alkyl, nhóm aryl, và halogenua đã được mô tả độc lập ở đây là nhóm tiềm năng của X¹⁰ và X¹¹ của hợp chất hữu cơ-nhôm có công thức Al(X¹⁰)_n(X¹¹)_{3-n} và nhóm alkyl, nhóm aryl, và halogenua này có thể được sử dụng không hạn chế để mô tả hợp chất ion hóa có công thức [NR^AR^BR^CR^D]⁺ hoặc [CR^ER^FR^G]⁺ có thể được sử dụng theo các khía cạnh và phương án được mô tả trong bản mô tả này.

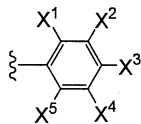
Theo một số phương án, Q có thể là trialkyl amoni hoặc dialkylarylamoni (ví dụ, dimetyl anilini); theo cách khác, triphenylcarbeni hoặc triphenylcarbeni được thế; theo cách khác, tropyli hoặc tropyli được thế; theo cách khác, trialkylamoni; theo cách khác, dialkylarylamoni (ví dụ, dimetyl anilini), theo cách khác, triphenylcarbeni hoặc theo cách khác, tropyli. Theo một phương án khác, Q có thể là tri(n-butyl)amoni, *N,N*-dimetylanilini, triphenylcarbeni, tropyli, lithi, natri, và kali; theo cách khác, tri(n-butyl)amoni và *N,N*-dimetylanilini; theo cách khác, triphenylcarbeni, tropyli hoặc theo cách khác, lithi, natri và kali. Theo một phương án, M⁴ có thể là B hoặc Al; theo cách khác, B hoặc theo cách khác, Al. Theo một phương án, Z có thể là halogenua hoặc



nhóm có công thức $\text{X}^1, \text{X}^2, \text{X}^3, \text{X}^4, \text{X}^5$; theo cách khác, halogenua hoặc theo cách khác,



Theo một phương án, $\text{X}^1, \text{X}^2, \text{X}^3, \text{X}^4$, và X^5 có thể độc lập là hydro, halogenua, nhóm $\text{C}_1\text{-C}_{20}$ hydrocarbonyl hoặc nhóm $\text{C}_1\text{-C}_{20}$ hydrocarboxit (còn được gọi ở đây là nhóm hydrocarboxy); theo cách khác, hydro, halogenua, nhóm $\text{C}_1\text{-C}_{10}$ hydrocarbonyl hoặc nhóm $\text{C}_1\text{-C}_{10}$ hydrocarboxit; theo cách khác, hydro, halogenua, nhóm $\text{C}_6\text{-C}_{20}$ aryl, hoặc nhóm $\text{C}_6\text{-C}_{20}$ aryloxit; theo cách khác, hydro, halogenua, nhóm $\text{C}_6\text{-C}_{10}$ aryl, hoặc nhóm $\text{C}_6\text{-C}_{10}$ aryloxit; theo cách khác, hydro, halogenua, nhóm $\text{C}_1\text{-C}_{20}$ alkyl, hoặc nhóm $\text{C}_1\text{-C}_{20}$ alkoxit group (còn được gọi ở đây là nhóm alkoxy); theo cách khác, hydro, halogenua, nhóm $\text{C}_1\text{-C}_{10}$ alkyl, hoặc nhóm $\text{C}_1\text{-C}_{10}$ alkoxit hoặc theo cách khác, hydro, halogenua, nhóm $\text{C}_1\text{-C}_5$ alkyl, hoặc nhóm $\text{C}_1\text{-C}_5$ alkoxit. Nhóm alkyl, nhóm aryl, nhóm alkoxit, nhóm aryloxit, và halogenua đã được mô tả độc lập ở đây là nhóm tiềm năng của X^{10} và X^{11} của hợp chất hữu cơ-nhôm có công thức $\text{Al}(\text{X}^{10})_n(\text{X}^{11})_{3-n}$ và nhóm alkyl, nhóm aryl, nhóm alkoxit, nhóm aryloxit, và halogenua này có thể được sử dụng không giới hạn để làm nhóm $\text{X}^1, \text{X}^2, \text{X}^3, \text{X}^4$, và X^5 . Theo một



số phương án, $\text{X}^1, \text{X}^2, \text{X}^3, \text{X}^4, \text{X}^5$ có thể là phenyl, p-tolyl, m-tolyl, 2,4-dimethylphenyl, 3,5-dimethylphenyl, pentafluorophenyl, và 3,5-bis(trifluoromethyl)phenyl; theo cách khác, phenyl; theo cách khác, p-tolyl; theo cách khác, m-tolyl; theo cách khác, 2,4-dimethylphenyl; theo cách khác, 3,5-dimethylphenyl; theo cách khác, pentafluorophenyl hoặc theo cách khác, 3,5-bis(trifluoromethyl)phenyl.

Ví dụ về hợp chất ion hóa bao gồm, nhưng không chỉ giới hạn ở, các hợp chất sau: tri(n-butyl)amoni tetrakis(p-tolyl)borat, tri(n-butyl)amoni tetrakis(m-tolyl)borat, tri(n-butyl)amoni tetrakis(2,4-dimethylphenyl)borat, tri(n-butyl)amoni tetrakis(3,5-dimethylphenyl)borat, tri(n-butyl)amoni tetrakis[3,5-bis(trifluoromethyl)phenyl]borat, tri(n-butyl)amoni tetrakis(pentafluorophenyl)borat, N,N-dimethylanilini tetrakis(p-tolyl)borat, N,N-dimethylanilini tetrakis(m-tolyl)borat, N,N-dimethylanilini tetrakis(2,4-dimethylphenyl)borat, N,N-dimethylanilini tetrakis(3,5-dimethylphenyl)borat, N,N-dimethylanilini tetrakis[3,5-bis(trifluoromethyl)phenyl]borat, hoặc N,N-dimethylanilini tetrakis(pentafluorophenyl)borat; theo cách khác, triphenyl-

carbeni tetrakis(p-tolyl)borat, triphenylcarbeni tetrakis(m-tolyl)borat, triphenylcarbeni tetrakis(2,4-dimetylphenyl)borat, triphenylcarbeni tetrakis(3,5-dimetylphenyl)borat, triphenylcarbeni tetrakis[3,5-bis(triflometyl)phenyl]borat, hoặc triphenylcarbeni tetrakis(pentafllophenyl)borat; theo cách khác, tropyli tetrakis(p-tolyl)borat, tropyli tetrakis(m-tolyl)borat, tropyli tetrakis(2,4-dimetylphenyl)borat, tropyli tetrakis(3,5-dimetylphenyl)borat, tropyli tetrakis[3,5-bis(triflometyl)phenyl]borat, hoặc tropyli tetrakis(pentafllophenyl)-borat; theo cách khác, lithi tetrakis(pentafllophenyl)borat, lithi tetrakis(phenyl)borat, lithi tetrakis(p-tolyl)borat, lithi tetrakis(m-tolyl)borat, lithi tetrakis(2,4-dimetylphenyl)borat, lithi tetrakis(3,5-dimetylphenyl)borat, hoặc lithi tetraflloborat; theo cách khác, natri tetrakis(pentafllophenyl)borat, natri tetrakis(phenyl)borat, natri tetrakis(p-tolyl)borat, natri tetrakis(m-tolyl)borat, natri tetrakis(2,4-dimetylphenyl)borat, natri tetrakis(3,5-dimetylphenyl)borat, hoặc natri tetraflloborat; theo cách khác, kali tetrakis(pentafllophenyl)borat, kali tetrakis(phenyl)borat, kali tetrakis(p-tolyl)borat, kali tetrakis(m-tolyl)borat, kali tetrakis(2,4-dimetylphenyl)borat, kali tetrakis(3,5-dimetylphenyl)borat, hoặc kali tetraflloborat; theo cách khác, tri(n-butyl)amoni tetrakis(p-tolyl)aluminat, tri(n-butyl)amoni tetrakis(m-tolyl)aluminat, tri(n-butyl)amoni tetrakis(2,4-dimetylphenyl)aluminat, tri(n-butyl)amoni tetrakis(3,5-dimetylphenyl)aluminat, tri(n-butyl)amoni tetrakis(pentafllophenyl)aluminat, *N,N*-dimetylanilini tetrakis(p-tolyl)aluminat, *N,N*-dimetylanilini tetrakis(m-tolyl)aluminat, *N,N*-dimetylanilini tetrakis(2,4-dimetylphenyl)aluminat, *N,N*-dimetylanilini tetrakis(3,5-dimetylphenyl)aluminat, hoặc *N,N*-dimetylanilini tetrakis(pentafllophenyl)aluminat; theo cách khác, triphenylcarbeni tetrakis(p-tolyl)aluminat, triphenylcarbeni tetrakis(m-tolyl)aluminat, triphenylcarbeni tetrakis(2,4-dimetylphenyl)aluminat, triphenylcarbeni tetrakis(3,5-dimetylphenyl)aluminat, hoặc triphenylcarbeni tetrakis(pentafllophenyl)aluminat; theo cách khác, tropyli tetrakis(p-tolyl)aluminat, tropyli tetrakis(m-tolyl)aluminat, tropyli tetrakis(2,4-dimetylphenyl)aluminat, tropyli tetrakis(3,5-dimetylphenyl)aluminat, hoặc tropyli tetrakis(pentafllophenyl)aluminat; theo cách khác, lithi tetrakis(pentafllophenyl)aluminat, lithi tetrakis(phenyl)aluminat, lithi tetrakis(p-tolyl)aluminat, lithi tetrakis(m-tolyl)aluminat, lithi tetrakis(2,4-dimetylphenyl)aluminat, lithi tetrakis(3,5-dimetylphenyl)aluminat, hoặc lithi tetraflloaluminat; theo cách khác, natri tetrakis(pentafllophenyl)aluminat, natri tetrakis(phenyl)aluminat, natri tetrakis(p-

tolyl)aluminat, natri tetrakis(m-tolyl)aluminat, natri tetrakis(2,4-dimetylphenyl)aluminat, natri tetrakis(3,5-dimetylphenyl)aluminat, hoặc natri tetrafloaluminat hoặc theo cách khác, kali tetrakis(pentaflorphenyl)aluminat, kali tetrakis(phenyl)aluminat, kali tetrakis(p-tolyl)aluminat, kali tetrakis(m-tolyl)aluminat, kali tetrakis(2,4-dimetylphenyl)aluminat, kali tetrakis (3,5-dimetylphenyl)aluminat, kali tetrafloaluminat. Theo một số phương án, hợp chất ion ion hóa có thể là tri(n-butyl)amoni tetrakis(3,5-dimetylphenyl)borat, tri(n-butyl)amoni tetrakis[3,5-bis(triflometyl)phenyl]borat, tri(n-butyl)amoni tetrakis(pentaflorphenyl)borat, *N,N*-dimetylanilini tetrakis(p-tolyl)borat, *N,N*-dimetylanilini tetrakis(m-tolyl)borat, *N,N*-dimetylanilini tetrakis[3,5-bis(triflometyl)phenyl]borat, *N,N*-dimetylanilini tetrakis(pentaflorphenyl)borat, triphenylcarbeni tetrakis(p-tolyl)borat, triphenylcarbeni tetrakis(m-tolyl)borat, triphenylcarbeni tetrakis(2,4-dimetylphenyl)borat, triphenylcarbeni tetrakis(3,5-dimetylphenyl)borat, triphenylcarbeni tetrakis[3,5-bis(triflometyl)phenyl]borat, lithi tetrakis(p-tolyl)aluminat, lithi tetrakis(m-tolyl)aluminat, lithi tetrakis(2,4-dimetylphenyl)aluminat, hoặc lithi tetrakis(3,5-dimetylphenyl)aluminat.

Theo cách khác, và theo một số phương án, hợp chất ion ion hóa có thể là tri(n-butyl)amoni tetrakis[3,5-bis(triflometyl)phenyl]borat, tri(n-butyl)amoni tetrakis(pentaflorphenyl)borat, *N,N*-dimetylanilini tetrakis[3,5-bis(triflometyl)phenyl]borat, *N,N*-dimetylanilini tetrakis(pentaflorphenyl)borat, triphenylcarbeni tetrakis[3,5-bis(triflometyl)phenyl]borat, lithi tetrakis(p-tolyl)nhôm oxit, hoặc lithi tetrakis(m-tolyl)nhôm oxit; theo cách khác, tri(n-butyl)amoni tetrakis[3,5-bis(triflometyl)phenyl]borat; theo cách khác, tri(n-butyl)amoni tetrakis(pentaflorphenyl)borat; theo cách khác, *N,N*-dimetylanilini tetrakis[3,5-bis(triflometyl)phenyl]borat; theo cách khác, *N,N*-dimetylanilini tetrakis(pentaflorphenyl)borat; theo cách khác, triphenylcarbeni tetrakis[3,5-bis(triflometyl)phenyl]borat; theo cách khác, lithi tetrakis(p-tolyl)aluminat hoặc theo cách khác, lithi tetrakis(m-tolyl)aluminat. Theo một phương án khác, hợp chất ion hóa có thể là hỗn hợp của hợp chất ion hóa bất kỳ nêu ở đây. Tuy nhiên, hợp chất ion ion hóa không chỉ giới hạn ở đó.

Theo một khía cạnh và theo phương án bất kỳ được bộc lộ ở đây, tỷ lệ mol của hợp chất ion ion hóa với metaloxen có thể nằm trong khoảng từ 0,001:1 đến 100000:1. Theo cách khác, và theo khía cạnh hoặc phương án bất kỳ, tỷ lệ mol của hợp chất ion

ion hóa với metaloxen có thể nằm trong khoảng từ 0,01:1 đến 10000:1; theo cách khác, tỷ lệ này nằm trong khoảng từ 0,1:1 đến 100:1; theo cách khác, tỷ lệ này nằm trong khoảng từ 0,5:1 đến 10:1 hoặc theo cách khác, tỷ lệ này nằm trong khoảng từ 0,2:1 đến 5:1.

Điều chế hệ chất xúc tác

Theo một khía cạnh và phương án bất kỳ của sáng chế, hệ chất xúc tác có thể chứa metaloxen và ít nhất một oxit dạng rắn được xử lý hóa học; theo cách khác, hệ chất xúc tác có thể chứa, chủ yếu bao gồm, hoặc bao gồm, metaloxen và ít nhất một aluminovan. Theo một phương án, hệ chất xúc tác, có thể chứa chủ yếu bao gồm, hoặc bao gồm, metaloxen, chất hoạt hóa thứ nhất, và chất hoạt hóa thứ hai. Chất hoạt hóa được đề xuất ở đây và có thể được sử dụng không giới hạn để làm chất hoạt hóa bất kỳ của hệ chất xúc tác được mô tả ở đây. Theo một khía cạnh và theo phương án bất kỳ được bộc lộ ở đây, hệ chất xúc tác có thể chứa, chủ yếu bao gồm, bao gồm, metaloxen, chất hoạt hóa thứ nhất chứa (hoặc chủ yếu bao gồm hoặc bao gồm) ít nhất một oxit dạng rắn được xử lý hóa học, và chất hoạt hóa thứ hai chứa (hoặc chủ yếu bao gồm hoặc bao gồm) hợp chất hữu cơ-nhôm. Chất hoạt hóa khác như ít nhất một hợp chất hữu cơ-nhôm cũng có thể được sử dụng trong hệ chất xúc tác. Theo một khía cạnh khác, sáng chế bao gồm phương pháp điều chế hệ chất xúc tác. Nói chung, hệ chất xúc tác có thể được điều chế bằng cách cho các thành phần của hệ chất xúc tác tiếp xúc theo thứ tự hoặc trình tự bất kỳ.

Theo một khía cạnh khác và phương án bất kỳ của sáng chế, hợp chất metaloxen có thể tùy ý được cho tiếp xúc trước với monome olefin, không nhất thiết là monome alpha olefin phải được oligome hóa, và hợp chất hữu cơ-nhôm trong thời gian thứ nhất trước khi cho hỗn hợp được tiếp xúc trước này tiếp xúc với oxit dạng rắn được xử lý hóa học. Theo một khía cạnh, thời gian tiếp xúc thứ nhất, thời gian tiếp xúc trước, giữa hợp chất hoặc các hợp chất metaloxen, monome olefin, và hợp chất hữu cơ-nhôm thường nằm trong khoảng từ 0,1 giờ đến 24 giờ; theo cách khác, từ 0,1 đến 1 giờ hoặc theo cách khác, từ 10 phút đến 30 phút.

Theo một khía cạnh khác nữa của sáng chế, hỗn hợp gồm hợp chất metaloxen thứ nhất, thứ hai, hoặc cả hai hợp chất metaloxen, monome olefin, và hợp chất hữu cơ-nhôm đã được cho tiếp xúc trước có thể được cho tiếp xúc với oxit dạng rắn được xử

lý hóa học. Hỗn hợp còn chứa oxit dạng rắn được xử lý hóa học được gọi là hỗn hợp tiếp xúc sau. Thông thường, hỗn hợp tiếp xúc sau có thể tùy ý được để tiếp xúc trong thời gian thứ hai, thời gian tiếp xúc sau, trước khi bắt đầu quá trình oligome hóa. Theo một khía cạnh, thời gian tiếp xúc sau giữa hỗn hợp được tiếp xúc trước và oxit dạng rắn được xử lý hóa học có thể nằm trong khoảng từ 0,1 giờ đến 24 giờ. Theo một khía cạnh khác, thời gian tiếp xúc sau có thể nằm trong khoảng từ 0,1 giờ đến 1 giờ.

Theo một khía cạnh, bước tiếp xúc trước, bước tiếp xúc sau, hoặc cả hai bước này có thể làm tăng năng suất oligome hóa so với cùng một hệ chất xúc tác được điều chế mà không có bước tiếp xúc trước hoặc tiếp xúc sau. Tuy nhiên, cả bước tiếp xúc trước lẫn bước tiếp xúc sau đều không là cần thiết đối với sáng chế.

Nếu hợp chất hữu cơ-nhôm được sử dụng kết hợp với oxit dạng rắn được xử lý hóa học, hỗn hợp tiếp xúc sau có thể được gia nhiệt ở nhiệt độ và trong thời gian đủ để cho phép hỗn hợp được tiếp xúc trước và oxit dạng rắn được xử lý hóa học hấp thụ, tẩm, hoặc tương tác, sao cho một phần các thành phần của hỗn hợp đã được tiếp xúc trước được gắn, hấp thụ, hoặc kết tủa trên đó. Ví dụ, hỗn hợp tiếp xúc sau có thể được gia nhiệt ở nhiệt độ nằm trong khoảng từ 0°F đến 150°F hoặc theo cách khác, từ 40°F đến 95°F.

Nếu hợp chất hữu cơ-nhôm được sử dụng làm chất hoạt hóa (thứ nhất, thứ hai, hoặc chất khác), tỷ lệ mol của nhôm trong chất hoạt hóa hữu cơ-nhôm với kim loại của metaloxen có thể là tỷ lệ mol cụ thể (đôi khi được đưa ra dưới dạng tỷ lệ mol Al:kim loại của metaloxen. Theo một khía cạnh, tỷ lệ mol của nhôm trong hợp chất hữu cơ-nhôm với tổng số mol của kim loại trong hợp chất metaloxen, tức là, tổng số mol kim loại của tất cả các hợp chất metaloxen kết hợp nếu nhiều hơn một metaloxen được sử dụng, có thể lớn hơn 0,1:1; theo cách khác, tỷ lệ này lớn hơn 1:1 hoặc theo cách khác, tỷ lệ này lớn hơn 10:1 hoặc theo cách khác, tỷ lệ này lớn hơn 50:1. Theo một số phương án, tỷ lệ mol của nhôm trong hợp chất hữu cơ-nhôm với tổng số mol của kim loại trong hợp chất metaloxen có thể nằm trong khoảng từ 0,1:1 đến 100000:1; theo cách khác, tỷ lệ này nằm trong khoảng từ 1:1 đến 10000:1; theo cách khác, tỷ lệ này nằm trong khoảng từ 10:1 đến 1000:1 hoặc theo cách khác, tỷ lệ này nằm trong khoảng từ 50:1 đến 500:1. Nếu metaloxen chứa kim loại cụ thể (ví dụ, Zr), tỷ lệ mol có thể được thể hiện dưới dạng tỷ lệ mol của nhôm trong chất hoạt hóa hữu cơ-nhôm với

kim loại cụ thể (ví dụ, tỷ lệ mol Al:Zr nếu zircon metaloxen được sử dụng). Tỷ lệ mol này cho thấy tỷ lệ mol của nhôm trong chất hoạt hóa hữu cơ-nhôm với tổng số mol của kim loại trong hợp chất metaloxen trong cả hỗn hợp được tiếp xúc trước và hỗn hợp tiếp xúc sau kết hợp.

Nếu bước tiếp xúc trước được sử dụng, nói chung, tỷ lệ mol của monome olefin với tổng số mol của metaloxen kết hợp trong hỗn hợp được tiếp xúc trước có thể nằm trong khoảng từ 1:10 đến 100000:1 hoặc theo cách khác, tỷ lệ này nằm trong khoảng từ 10:1 đến 1000:1.

Theo một khía cạnh khác của sáng chế, nếu hợp chất hữu cơ-nhôm được sử dụng kết hợp với oxit dạng rắn được xử lý hóa học, tỷ lệ trọng lượng của oxit dạng rắn được xử lý hóa học với hợp chất hữu cơ-nhôm có thể nằm trong khoảng từ 1:5 đến 1000:1. Theo một khía cạnh khác, tỷ lệ trọng lượng của oxit dạng rắn được xử lý hóa học với hợp chất hữu cơ-nhôm có thể nằm trong khoảng từ 1:3 đến 100:1, và theo một khía cạnh khác nữa, tỷ lệ này nằm trong khoảng từ 1:1 đến 50:1.

Theo một khía cạnh khác của sáng chế, tỷ lệ trọng lượng của oxit dạng rắn được xử lý hóa học với tổng lượng hợp chất metaloxen được sử dụng có thể nhỏ hơn 1000000:1; theo cách khác, tỷ lệ này nhỏ hơn 100.000:1; theo cách khác, tỷ lệ này nhỏ hơn 10000:1 hoặc theo cách khác, tỷ lệ này nhỏ hơn 5000:1. Theo một số phương án, tỷ lệ trọng lượng của oxit dạng rắn được xử lý hóa học với tổng lượng hợp chất metaloxen được sử dụng có thể nằm trong khoảng từ 1:1 đến 100000:1; theo cách khác, tỷ lệ này nằm trong khoảng từ 10:1 đến 10000:1; theo cách khác, tỷ lệ này nằm trong khoảng từ 50:1 đến 5000:1 hoặc theo cách khác, tỷ lệ này nằm trong khoảng từ 100:1 đến 1.000:1.

Theo một khía cạnh của sáng chế, khi sử dụng oxit dạng rắn được xử lý hóa học, thì có thể không cần sử dụng aluminovan để tạo ra hệ chất xúc tác được bộc lộ ở đây, điều này cho phép giảm chi phí sản xuất oligome. Do đó, theo một khía cạnh, phương pháp oligome hóa bao gồm bước (hoặc phương pháp điều chế PAO bao gồm bước) cho monome alpha olefin tiếp xúc với hệ chất xúc tác, có thể sử dụng hệ chất xúc tác hầu như không chứa aluminovan bổ sung. Theo một khía cạnh và theo phương án bất kỳ của sáng chế, hệ chất xúc tác có thể sử dụng hợp chất trialkyl nhôm oxit dạng rắn được xử lý hóa học khi hầu như không có aluminovan được bổ sung.

Ngoài ra, khi sử dụng oxit dạng rắn được xử lý hóa học, có thể không cần đưa hợp chất borat đất tiền hoặc $MgCl_2$ vào hệ chất xúc tác. Tuy nhiên, aluminoxan, hợp chất hữu cơ-bo, hợp chất ion ion hóa, hợp chất hữu cơ-kẽm, $MgCl_2$, hoặc hỗn hợp bất kỳ của chúng có thể được sử dụng trong hệ chất xúc tác, nếu cần. Ngoài ra, theo một khía cạnh, chất hoạt hóa như aluminoxan, hợp chất hữu cơ-bo, hợp chất ion ion hóa, hợp chất hữu cơ-kẽm, hoặc hỗn hợp bất kỳ của chúng có thể được sử dụng làm chất hoạt hóa cùng với metaloxen, khi có mặt hoặc khi không có mặt oxit dạng rắn được xử lý hóa học hoặc theo cách khác, khi có mặt hoặc khi không có mặt hợp chất hữu cơ-nhôm.

Theo một khía cạnh, hoạt tính của hệ chất xúc tác được mô tả ở đây có thể lớn hơn hoặc bằng ($\geq$) 10g oligome olefin/g metaloxen; theo cách khác, hoạt tính này lớn hơn hoặc bằng 100g oligome olefin/g metaloxen; theo cách khác, hoạt tính này lớn hơn hoặc bằng 1000g oligome olefin/g metaloxen; theo cách khác, hoạt tính này lớn hơn hoặc bằng 5000g oligome olefin/g metaloxen; theo cách khác, hoạt tính này lớn hơn hoặc bằng 10000g oligome olefin/g metaloxen; theo cách khác, hoạt tính này lớn hơn hoặc bằng 25000g oligome olefin/g metaloxen; theo cách khác, hoạt tính này lớn hơn hoặc bằng 50000g oligome olefin/g metaloxen; theo cách khác, hoạt tính này lớn hơn hoặc bằng 75000g oligome olefin/g metaloxen hoặc theo cách khác, hoạt tính này lớn hơn hoặc bằng 100000g oligome olefin/g metaloxen. Theo một phương án, hoạt tính của hệ chất xúc tác được mô tả ở đây có thể nằm trong khoảng từ 1000g oligome olefin/g metaloxen đến 1000000000g oligome olefin/g metaloxen, theo cách khác, hoạt tính này nằm trong khoảng từ 5000g oligome olefin/g metaloxen đến 750000000g oligome olefin/g metaloxen; theo cách khác, hoạt tính này nằm trong khoảng từ 10000g oligome olefin/g metaloxen đến 500000000g oligome olefin/g metaloxen; theo cách khác, hoạt tính này nằm trong khoảng từ 25000g oligome olefin/g metaloxen đến 250000000g oligome olefin/g metaloxen; theo cách khác, hoạt tính này nằm trong khoảng từ 50.000g oligome olefin/g metaloxen đến 100000000g oligome olefin/g metaloxen; theo cách khác, hoạt tính này nằm trong khoảng từ 75000g oligome olefin/g metaloxen đến 50000000g oligome olefin/g metaloxen hoặc theo cách khác, hoạt tính này nằm trong khoảng từ 100000g oligome olefin/g metaloxen đến 10000000g oligome olefin/g metaloxen.

Theo một khía cạnh, hoạt tính xúc tác của chất xúc tác theo sáng chế thường có

thể lớn hơn hoặc bằng ($\geq$) 0,1g oligome olefin cho 1g oxit dạng rắn được xử lý hóa học trên 1 giờ (viết tắt là: g oligome/g CTSO•giờ). Hoạt tính xúc tác được xác định trong điều kiện oligome hóa olefin được sử dụng. Thiết bị phản ứng bất kỳ sử dụng trong việc xác định này phải hầu như không có dấu hiệu bất kỳ của sự đóng cặn, tạo lớp phủ trên thành thiết bị hoặc dạng bám bẩn khác. Theo một khía cạnh khác, chất xúc tác theo sáng chế có thể khác biệt bởi hoạt tính lớn hơn hoặc bằng 0,5g oligome/g CTSO•giờ; theo cách khác, hoạt tính này lớn hơn hoặc bằng 0,7g oligome/g CTSO•giờ; theo cách khác, hoạt tính này lớn hơn hoặc bằng 1g oligome/g CTSO•giờ; theo cách khác, hoạt tính này lớn hơn hoặc bằng 1,5g oligome/g CTSO•giờ; theo cách khác, hoạt tính này lớn hơn hoặc bằng 2g oligome/g CTSO•giờ; theo cách khác, hoạt tính này lớn hơn hoặc bằng 2,5g oligome/g CTSO•giờ; theo cách khác, hoạt tính này lớn hơn hoặc bằng 5g oligome/g CTSO•giờ; theo cách khác, hoạt tính này lớn hơn hoặc bằng 10g oligome/g CTSO•giờ; theo cách khác, hoạt tính này lớn hơn hoặc bằng 20g oligome/g CTSO•giờ; theo cách khác, hoạt tính này lớn hơn hoặc bằng 50g oligome/g CTSO•giờ; theo cách khác, hoạt tính này lớn hơn hoặc bằng 100g oligome/g CTSO•giờ; theo cách khác, hoạt tính này lớn hơn hoặc bằng 200g oligome/g CTSO•giờ; theo cách khác, hoạt tính này lớn hơn hoặc bằng 500g oligome/g CTSO•giờ hoặc theo cách khác, hoạt tính này lớn hơn hoặc bằng 1000g oligome/g CTSO•giờ; khi được xác định trong điều kiện nhất định. Theo một khía cạnh khác, hệ chất xúc tác theo sáng chế có thể khác biệt bởi hoạt tính nằm trong khoảng từ 0,1g oligome/g CTSO•giờ đến 5000g oligome/g CTSO•giờ; theo cách khác, từ 0,25g oligome/g CTSO•giờ đến 2,500g oligome/g CTSO•giờ; theo cách khác, từ 0,5g oligome/g CTSO•giờ đến 1,000g oligome/g CTSO•giờ; theo cách khác, từ 0,75g oligome/g CTSO•giờ đến 750g oligome/g CTSO•giờ; theo cách khác, từ 1g oligome/g CTSO•giờ đến 500g oligome/g CTSO•giờ hoặc theo cách khác, từ 5g oligome/g CTSO•giờ đến 250g oligome/g CTSO•giờ; khi được xác định trong điều kiện nhất định.

Quy trình oligome hóa

Quy trình oligome hóa olefin theo sáng chế có thể được thực hiện theo cách bất kỳ đã biết trong lĩnh vực này thích hợp đối với (các) monome alpha olefin cụ thể được sử dụng trong quy trình oligome hóa. Ví dụ, quy trình oligome hóa có thể bao gồm,

nhưng không chỉ giới hạn ở, quy trình oligome hóa trong huyền phù đặc, oligome hóa trong dung dịch, và quy trình tương tự, kể cả quy trình kết hợp nhiều thiết bị phản ứng của chúng. Ví dụ, thiết bị phản ứng có khuấy có thể được sử dụng đối với quy trình gián đoạn, hoặc phản ứng có thể được thực hiện liên tục trong thiết bị phản ứng tuần hoàn hoặc trong thiết bị phản ứng có khuấy liên tục. Quy trình oligome hóa trong huyền phù đặc (còn được gọi là quy trình tạo hạt) là đã biết rõ trong lĩnh vực này và được bộc lộ, ví dụ, trong patent Hoa Kỳ số 3,248,179. Phương pháp oligome hóa khác theo sáng chế dùng cho các quy trình trong huyền phù đặc là các phương pháp sử dụng thiết bị phản ứng tuần hoàn thuộc kiểu được bộc lộ trong patent Hoa Kỳ số 3,248,179, và các phương pháp được sử dụng trong nhiều thiết bị phản ứng có khuấy nối tiếp, song song, hoặc tổ hợp của chúng, trong đó điều kiện phản ứng là khác nhau trong các thiết bị phản ứng khác nhau.

Theo một khía cạnh, quy trình oligome hóa alpha olefin theo sáng chế bao gồm bước cho ít nhất một monome alpha olefin tiếp xúc với hệ chất xúc tác để tạo ra sản phẩm oligome. Dòng đi ra từ thiết bị phản ứng oligome hóa được chứa trong thiết bị phản ứng sau quá trình oligome hóa, dòng chứa sản phẩm oligome và thường chứa một lượng monome dư (cùng với các thành phần khác – ví dụ, hệ chất xúc tác hoặc các thành phần của hệ chất xúc tác), có thể được tách để loại bỏ một số thành phần dễ bay hơi hơn ra khỏi dòng oligome hóa đi ra từ thiết bị phản ứng, để thu được sản phẩm oligome nặng. Sản phẩm oligome nặng này có thể được hydro hóa để tạo ra polyalphaolefin (PAO). Theo một số phương án không làm giới hạn phạm vi sáng chế, dòng đi ra từ thiết bị phản ứng có thể được xử lý bằng chất để khử hoạt tính của hệ phản ứng (chất khử hoạt tính) trước khi tách. Theo một phương án không làm giới hạn phạm vi sáng chế, chất khử hoạt tính có thể chứa, chủ yếu bao gồm, hoặc bao gồm, nước, rượu, hoặc hỗn hợp bất kỳ của chúng; theo cách khác, nước hoặc theo cách khác, rượu.

Một số điều kiện oligome hóa thích hợp và/hoặc cần thiết, các thành phần chất xúc tác, thứ tự tiếp xúc, monome được đề xuất ở đây, và một số dấu hiệu đặc trưng của sản phẩm oligome, sản phẩm oligome nặng, và PAO được mô tả thêm. Các ví dụ này không được dự định làm giới hạn sáng chế, mà để minh họa cách chọn các thành phần chất xúc tác có thể sử dụng và điều kiện phản ứng có thể tạo ra, và cách có thể xác định các đặc tính của sản phẩm.

Theo một khía cạnh, sáng chế đề cập đến phương pháp oligome hóa bao gồm các bước: a) cho monome alpha olefin tiếp xúc với hệ chất xúc tác, hệ chất xúc tác này chứa metaloxen, và b) tạo ra sản phẩm oligome trong điều kiện oligome hóa. Theo một khía cạnh khác, sáng chế đề cập đến phương pháp oligome hóa bao gồm các bước: a) cho monome alpha olefin tiếp xúc với hệ chất xúc tác, hệ chất xúc tác này chứa metaloxen, b) tạo ra sản phẩm oligome trong điều kiện oligome hóa, và c) tách dòng đi ra từ thiết bị phản ứng oligome hóa chứa sản phẩm oligome để thu được sản phẩm oligome nặng. Theo một khía cạnh khác, sáng chế đề cập đến phương pháp oligome hóa bao gồm các bước: a) cho monome alpha olefin tiếp xúc với hệ chất xúc tác, hệ chất xúc tác này chứa metaloxen, b) tạo ra sản phẩm oligome trong điều kiện oligome hóa, c) tách dòng đi ra từ thiết bị phản ứng oligome hóa chứa sản phẩm oligome để thu được sản phẩm oligome nặng và d) hydro hóa sản phẩm oligome nặng này để thu được polyalphaolefin. Theo một khía cạnh khác nữa, sáng chế đề cập đến phương pháp điều chế polyalphaolefin bao gồm các bước: a) cho monome alpha olefin tiếp xúc với hệ chất xúc tác, hệ chất xúc tác này chứa metaloxen, b) tạo ra sản phẩm oligome trong điều kiện oligome hóa, c) tách dòng đi ra từ thiết bị phản ứng oligome hóa chứa sản phẩm oligome để thu được sản phẩm oligome nặng, và d) hydro hóa sản phẩm oligome nặng này để thu được polyalphaolefin. Nói chung, monome alpha olefin, hệ chất xúc tác, các thành phần của hệ chất xúc tác (ví dụ, metaloxen, chất hoạt hóa, và các thành phần khác), dung môi (nếu được sử dụng), sản phẩm oligome, điều kiện oligome hóa, dòng đi ra từ thiết bị phản ứng, sản phẩm oligome nặng, điều kiện hydro hóa, và/hoặc polyalphaolefin là các yếu tố độc lập của phương pháp oligome hóa và/hoặc phương pháp điều chế polyalphaolefin được mô tả trong bản mô tả này. Các dấu hiệu này được mô tả độc lập ở đây và (các) phương pháp oligome hóa và/hoặc (các) phương pháp điều chế polyalphaolefin có thể được mô tả bằng cách sử dụng hỗn hợp bất kỳ của monome alpha olefin được mô tả ở đây, hệ chất xúc tác được mô tả ở đây, các thành phần của hệ chất xúc tác (ví dụ, metaloxen, chất hoạt hóa, và các thành phần khác) được mô tả ở đây, dung môi (nếu được sử dụng), sản phẩm oligome được mô tả ở đây, điều kiện oligome hóa được mô tả ở đây, dòng đi ra từ thiết bị phản ứng được mô tả ở đây, sản phẩm oligome nặng được mô tả ở đây, điều kiện hydro hóa được mô tả ở đây, và/hoặc polyalphaolefin được mô tả ở đây. Theo một phương án, sản phẩm oligome có thể được thu hồi. Theo một số phương án, sản phẩm oligome

nặng có thể được thu hồi. Theo một phương án khác, sản phẩm oligome nặng được hydro hóa có thể được thu hồi. Theo các phương án khác nữa, polyalphaolefin có thể được thu hồi.

Theo một phương án không làm giới hạn phạm vi sáng chế, monome alpha olefin được sử dụng trong (các) phương pháp oligome hóa hoặc (các) phương pháp điều chế polyalphaolefin có thể chứa, chủ yếu bao gồm, C₆-C₁₆ alpha olefin mạch thẳng; theo cách khác, monome này chứa hoặc chủ yếu bao gồm, alpha olefin mạch thẳng có 6 nguyên tử cacbon, alpha olefin mạch thẳng có 8 nguyên tử cacbon, alpha olefin mạch thẳng có 10 nguyên tử cacbon, alpha olefin mạch thẳng có 12 nguyên tử cacbon, alpha olefin mạch thẳng có 14 nguyên tử cacbon, hoặc hỗn hợp bất kỳ của chúng hoặc theo cách khác, alpha olefin mạch thẳng có 8 nguyên tử cacbon, alpha olefin mạch thẳng có 10 nguyên tử cacbon, alpha olefin mạch thẳng có 12 nguyên tử cacbon, hoặc hỗn hợp bất kỳ của chúng. Theo một số phương án không làm giới hạn phạm vi sáng chế, monome alpha olefin được sử dụng trong (các) phương pháp oligome hóa hoặc (các) phương pháp điều chế polyalphaolefin có thể chứa, hoặc chủ yếu bao gồm, alpha olefin mạch thẳng có 6 nguyên tử cacbon; theo cách khác, alpha olefin mạch thẳng có 8 nguyên tử cacbon; theo cách khác, alpha olefin mạch thẳng có 10 nguyên tử cacbon; theo cách khác, alpha olefin mạch thẳng có 12 nguyên tử cacbon; theo cách khác, alpha olefin mạch thẳng có 14 nguyên tử cacbon. Monome alpha olefin khác được bộc lộ ở đây và có thể được sử dụng, nhưng không chỉ giới hạn, trong các phương pháp được mô tả.

Theo một phương án không làm giới hạn phạm vi sáng chế, hệ chất xúc tác được sử dụng trong (các) phương pháp oligome hóa hoặc (các) phương pháp điều chế polyalphaolefin có thể chứa, chủ yếu bao gồm, hoặc bao gồm, metaloxen và chất hoạt hóa; theo cách khác, metaloxen, chất hoạt hóa thứ nhất, và chất hoạt hóa thứ hai. Nói chung, metaloxen và chất hoạt hóa là các yếu tố độc lập của hệ chất xúc tác. Đặc điểm của hệ chất xúc tác này được mô tả độc lập ở đây và có thể được sử dụng trong hỗn hợp bất kỳ để mô tả hệ chất xúc tác. Các hỗn hợp độc lập này, đến lượt mình, có thể được sử dụng trong (các) phương pháp oligome hóa olefin bất kỳ được mô tả ở đây và/hoặc (các) phương pháp điều chế polyalphaolefin được mô tả ở đây. Theo một khía cạnh khác, hệ chất xúc tác có thể chứa, chủ yếu bao gồm, hoặc bao gồm, metaloxen, chất hoạt hóa thứ nhất là oxit dạng rắn được xử lý hóa học, và chất hoạt hóa thứ hai.

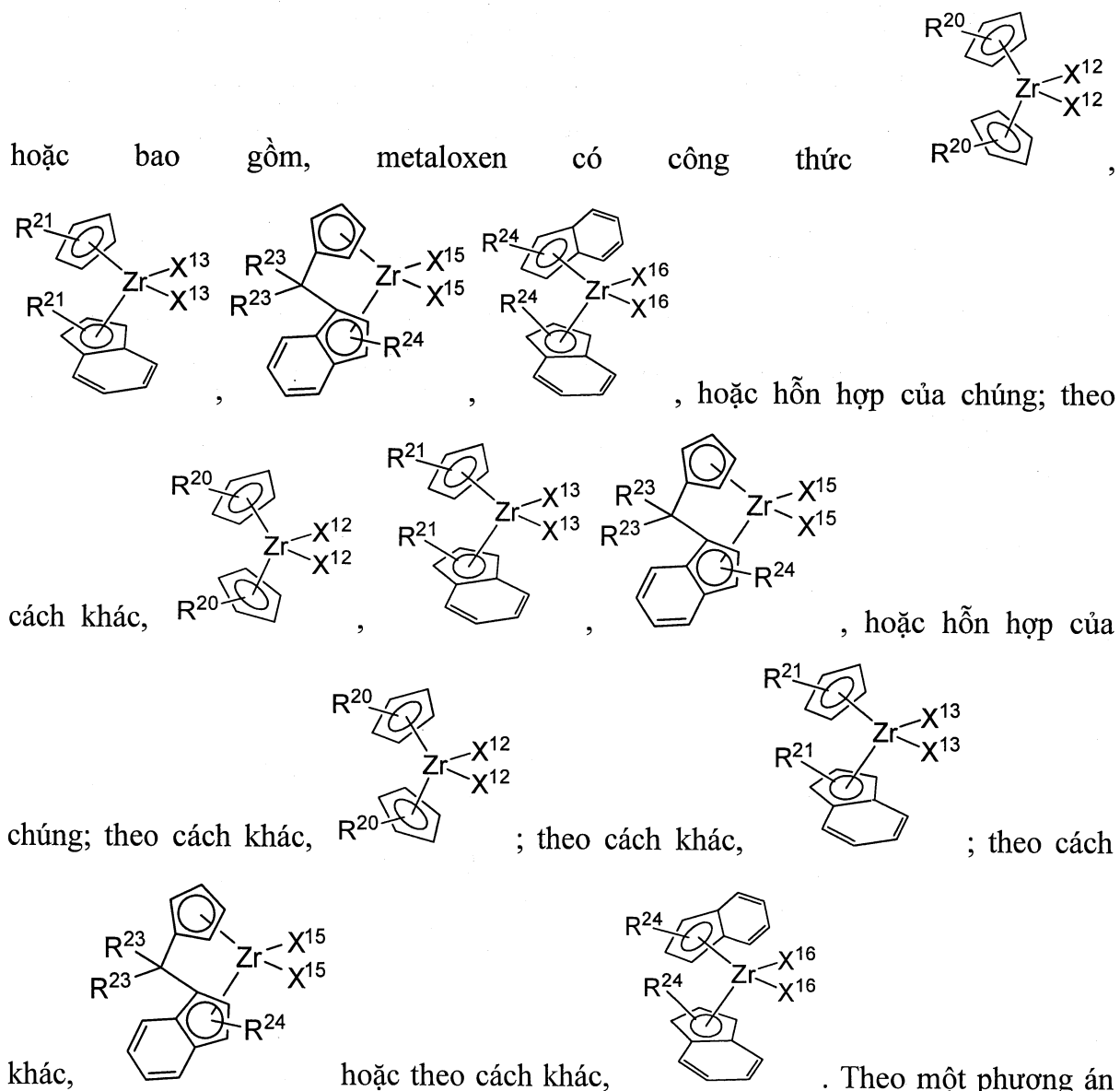
Theo một khía cạnh khác, hệ chất xúc tác được sử dụng trong (các) phương pháp oligome hóa hoặc (các) phương pháp điều chế polyalphaolefin có thể chứa, chủ yếu bao gồm, hoặc bao gồm, metaloxen, chất hoạt hóa thứ nhất là oxit dạng rắn được xử lý hóa học, và chất hoạt hóa thứ hai là hợp chất hữu cơ-nhôm. Hệ chất xúc tác khác, và/hoặc các thành phần của hệ chất xúc tác, được bộc lộ ở đây và có thể được sử dụng, nhưng không làm giới hạn, trong các phương pháp được mô tả.

Theo một phương án không giới hạn phạm vi sáng chế, chất hoạt hóa thứ nhất là oxit dạng rắn được xử lý hóa học có thể được sử dụng trong hệ chất xúc tác được sử dụng trong (các) phương pháp oligome hóa hoặc (các) phương pháp điều chế polyalphaolefin có thể chứa, chủ yếu bao gồm, hoặc bao gồm, nhôm oxit được flo hóa, nhôm oxit được clo hóa, nhôm oxit được sulfat hóa, silic oxit-nhôm oxit được flo hóa, hoặc hỗn hợp bất kỳ của chúng. Theo một phương án không làm giới hạn phạm vi sáng chế, chất hoạt hóa thứ nhất là oxit dạng rắn được xử lý hóa học có thể được sử dụng trong hệ chất xúc tác được sử dụng trong (các) phương pháp oligome hóa hoặc (các) phương pháp điều chế polyalphaolefin có thể chứa, chủ yếu bao gồm, hoặc bao gồm, nhôm oxit được flo hóa, nhôm oxit được clo hóa, nhôm oxit được sulfat hóa, silic oxit-nhôm oxit được flo hóa, và hỗn hợp bất kỳ của chúng; theo cách khác, nhôm oxit được flo hóa; theo cách khác, nhôm oxit được clo hóa; theo cách khác, nhôm oxit được sulfat hóa; theo cách khác, silic oxit-nhôm oxit được flo hóa. Oxit dạng rắn được xử lý hóa học khác được bộc lộ ở đây và có thể được sử dụng, nhưng không chỉ giới hạn, trong các phương pháp được mô tả.

Theo một phương án không làm giới hạn phạm vi sáng chế, chất hoạt hóa thứ hai là hợp chất hữu cơ-nhôm có thể được sử dụng trong hệ chất xúc tác được sử dụng trong (các) phương pháp oligome hóa hoặc (các) phương pháp điều chế polyalphaolefin có thể chứa, chủ yếu bao gồm, hoặc bao gồm hợp chất hữu cơ-nhôm có công thức $\text{Al}(\text{X}^{10})_n(\text{X}^{11})_{3-n}$ hoặc theo cách khác, chứa, chủ yếu bao gồm, hoặc bao gồm alumoxan. Theo một số phương án không làm giới hạn phạm vi sáng chế, mỗi nhóm X^{10} của hợp chất hữu cơ-nhôm có công thức $\text{Al}(\text{X}^{10})_n(\text{X}^{11})_{3-n}$ có thể độc lập là $\text{C}_1\text{-C}_{20}$ hydrocarbyl. Theo các phương án không làm giới hạn phạm vi sáng chế khác, mỗi nhóm X^{11} của hợp chất hữu cơ-nhôm có công thức $\text{Al}(\text{X}^{10})_n(\text{X}^{11})_{3-n}$ có thể độc lập là halogenua, hydrua, hoặc $\text{C}_1\text{-C}_{20}$ hydrocarboxit. Theo một số phương án không làm giới hạn phạm vi sáng chế, n của hợp chất hữu cơ-nhôm có công thức $\text{Al}(\text{X}^{10})_n(\text{X}^{11})_{3-n}$

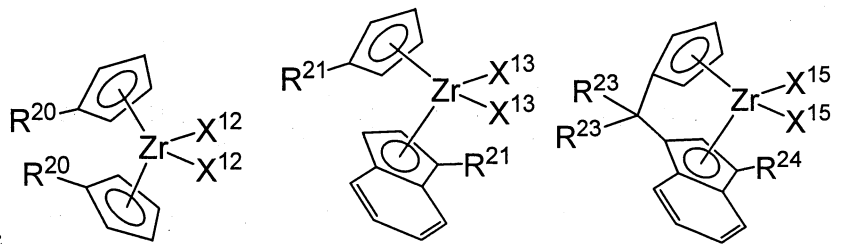
có thể là số nằm trong khoảng từ 1 đến 3. Theo các phương án không làm giới hạn phạm vi sáng chế khác, chất hoạt hóa thứ hai là hợp chất hữu cơ-nhôm có thể được sử dụng trong hệ chất xúc tác được sử dụng trong (các) phương pháp oligome hóa hoặc (các) phương pháp điều chế polyalphaolefin chứa, chủ yếu bao gồm, hoặc bao gồm trialkyl nhôm; theo cách khác, triisobutyl nhôm. Hợp chất hữu cơ-nhôm khác được bộc lộ ở đây và có thể được sử dụng, nhưng không chỉ giới hạn, trong các phương pháp được mô tả.

Theo một phương án không làm giới hạn phạm vi sáng chế, metaloxen có thể được sử dụng trong hệ chất xúc tác được sử dụng trong (các) phương pháp oligome hóa hoặc (các) phương pháp điều chế polyalphaolefin có thể chứa, chủ yếu bao gồm,

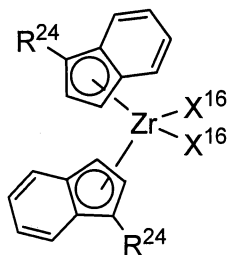


không làm giới hạn phạm vi sáng chế khác, metaloxen có thể được sử dụng trong hệ chất xúc tác được sử dụng trong (các) phương pháp oligome hóa hoặc (các) phương

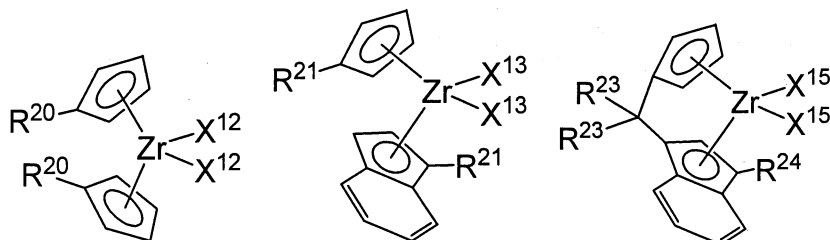
pháp điều chế polyalphaolefin có thể chứa, chủ yếu bao gồm, hoặc bao gồm,



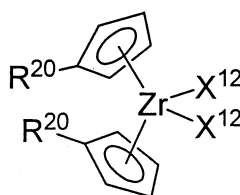
metalozen có công thức



, hoặc hỗn hợp bất kỳ của chúng; theo cách khác,

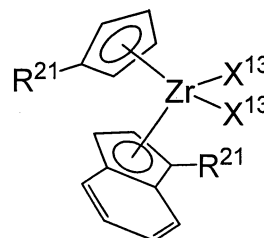


, hoặc hỗn hợp bất kỳ của

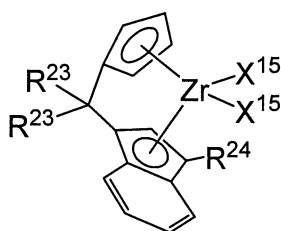


chúng; theo cách khác,

; theo cách khác,

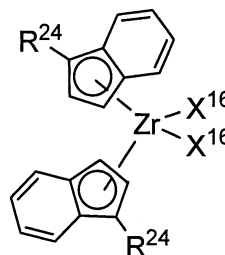


; theo



cách khác,

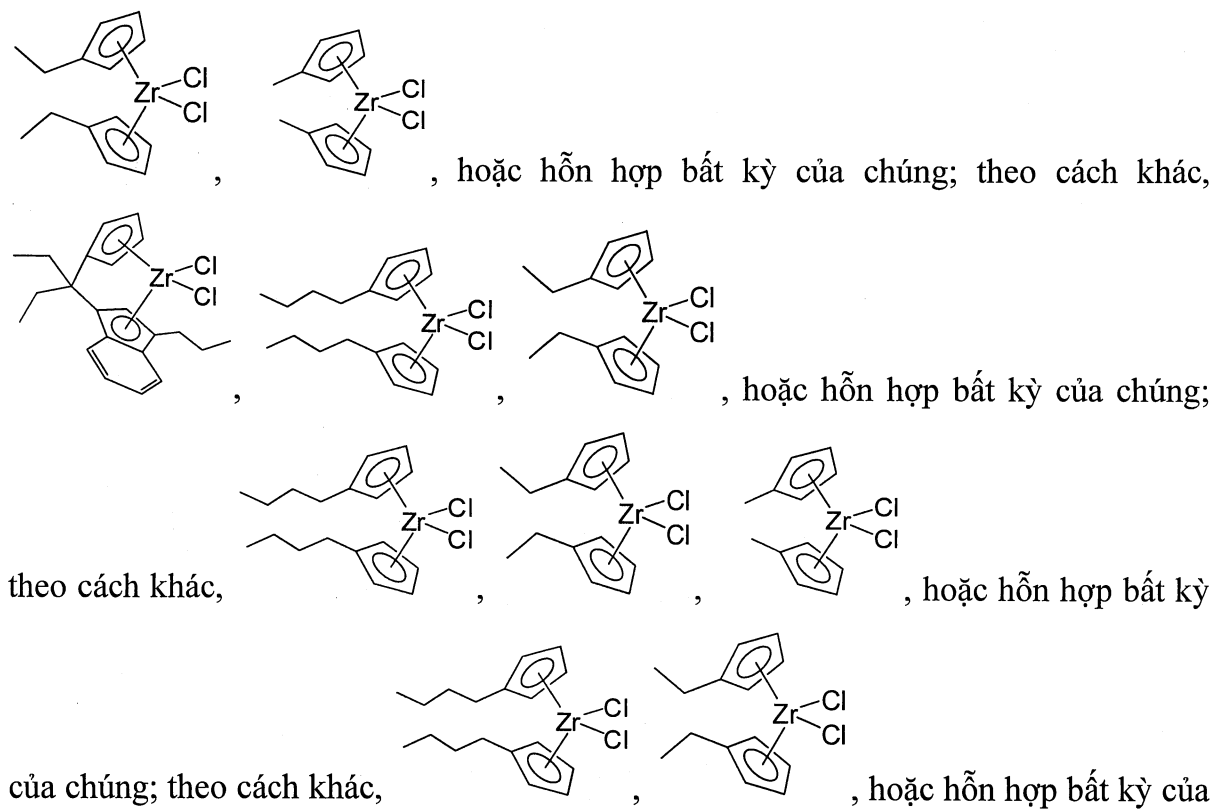
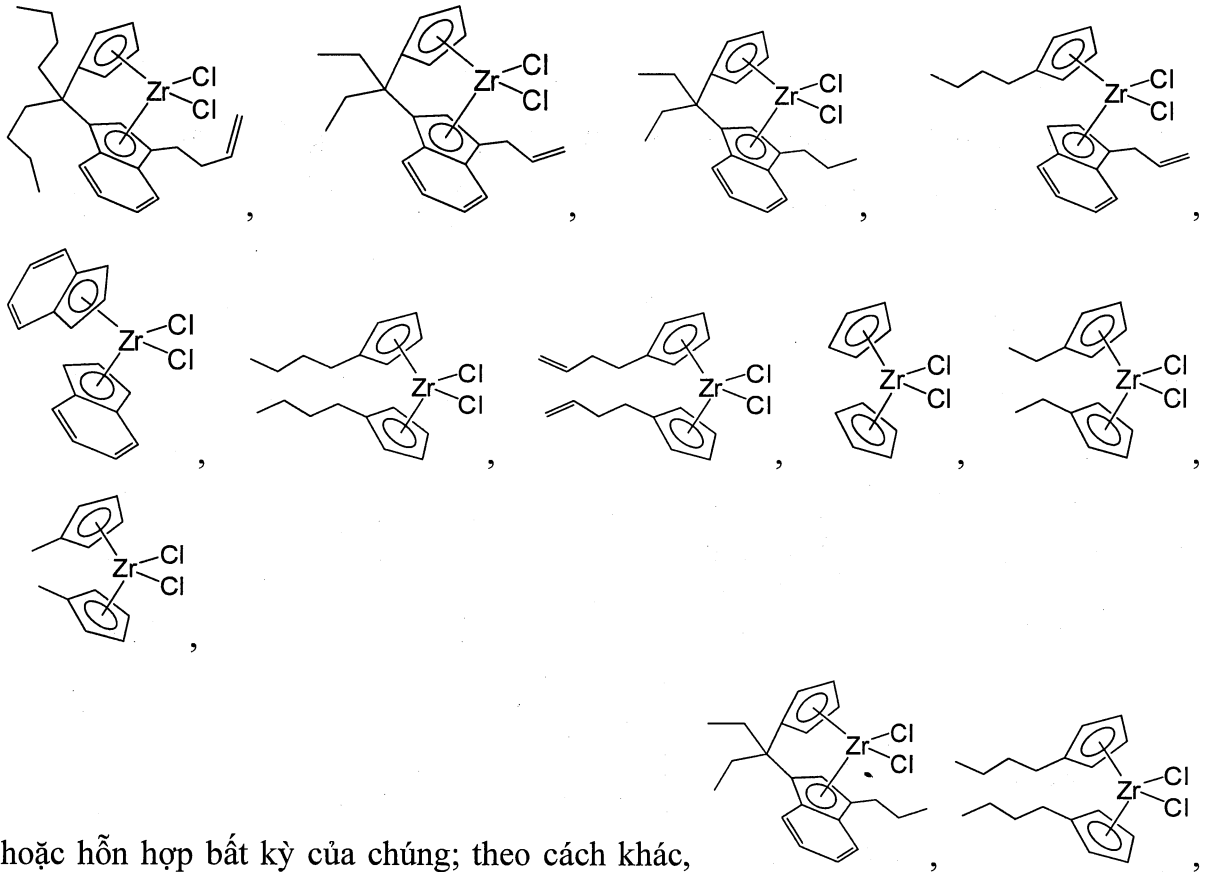
hoặc theo cách khác,

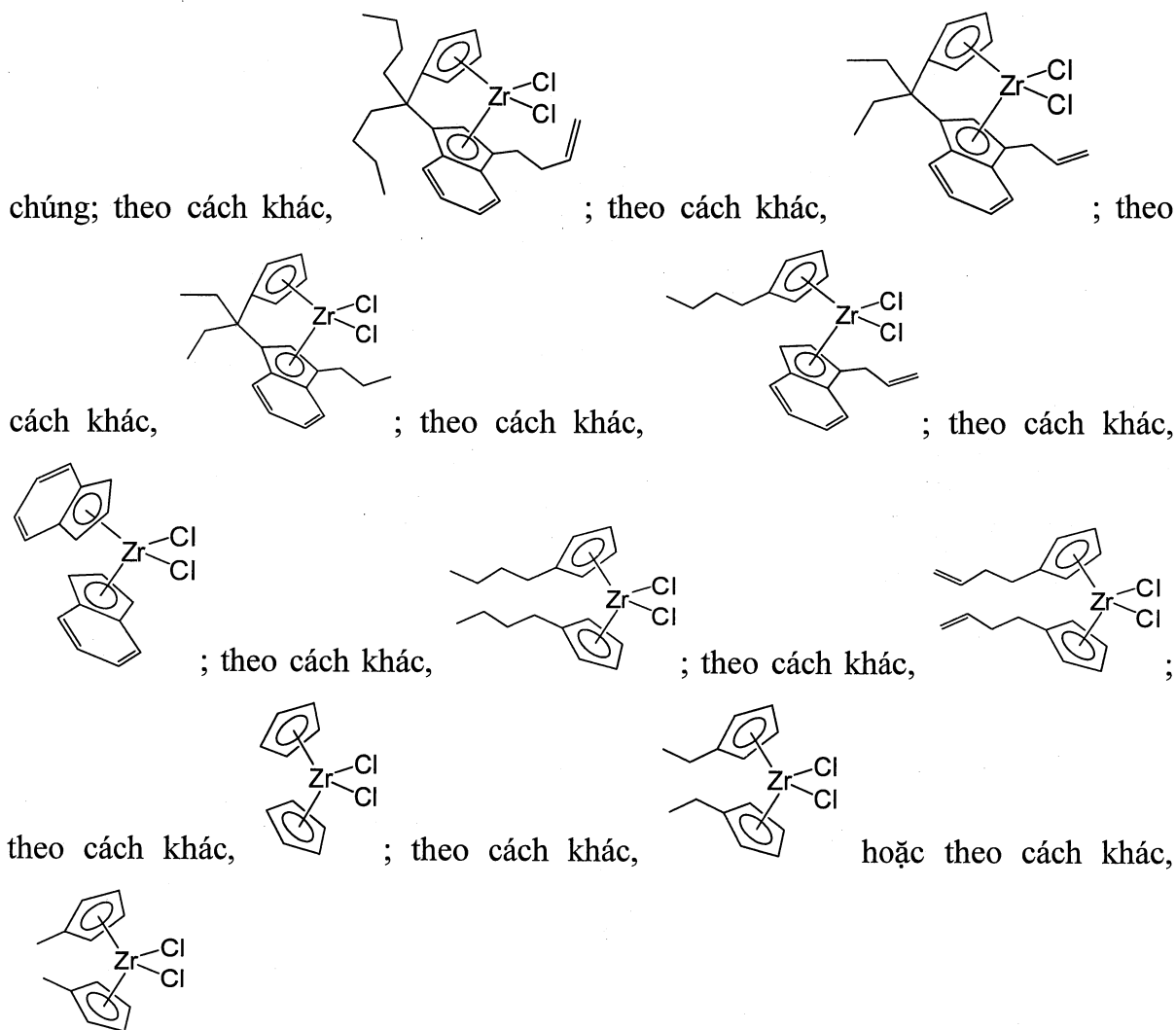


. Theo một số

phương án không làm giới hạn phạm vi sáng chế, mỗi nhóm R^{20} , R^{21} , R^{23} , và R^{24} có thể độc lập là hydro, nhóm C_1 - C_{20} alkyl, hoặc nhóm C_1 - C_{20} alkenyl; theo cách khác, hydro; theo cách khác, nhóm C_1 - C_{20} alkyl hoặc theo cách khác, nhóm C_1 - C_{20} alkenyl. Theo một số phương án không làm giới hạn phạm vi sáng chế, mỗi nhóm X^{12} , X^{13} , X^{15} , và X^{16} có thể độc lập là F, Cl, Br, hoặc I; theo cách khác, Cl hoặc Br; theo cách khác, F; theo cách khác, Cl hoặc theo cách khác, I. Theo một số phương án không làm giới hạn phạm vi sáng chế, metalozen có thể được sử dụng trong hệ chất xúc tác được sử dụng trong (các) phương pháp oligome hóa hoặc (các) phương pháp điều chế

polyalphaolefin có thể chứa, chủ yếu bao gồm, hoặc bao gồm, metaloxen có công thức





Theo một phương án không giới hạn phạm vi sáng chế trong đó hệ chất xúc tác sử dụng metaloxen, chất hoạt hóa thứ nhất, và chất hoạt hóa thứ hai, (các) phương pháp oligome hóa hoặc (các) phương pháp điều chế polyalphaolefin có thể tiếp xúc với monome alpha olefin theo thứ tự bất kỳ. Theo một số phương án không làm giới hạn phạm vi sáng chế, monome alpha olefin và hệ chất xúc tác có thể được cho tiếp xúc theo các bước: (1) cho monome alpha olefin tiếp xúc với chất hoạt hóa thứ hai để tạo ra hỗn hợp thứ nhất, (2) cho hỗn hợp thứ nhất tiếp xúc với chất hoạt hóa thứ nhất để tạo ra hỗn hợp thứ hai và (3) cho hỗn hợp thứ hai tiếp xúc với metaloxen. Theo các phương án không làm giới hạn phạm vi sáng chế khác, monome alpha olefin và hệ chất xúc tác có thể được cho tiếp xúc theo các bước: (1) cho monome alpha olefin tiếp xúc với chất hoạt hóa thứ hai để tạo ra hỗn hợp, và (2) đồng thời cho chất hoạt hóa thứ nhất và metaloxen tiếp xúc với hỗn hợp này. Theo các phương án không làm giới hạn phạm vi sáng chế khác, monome alpha olefin và hệ chất xúc tác có thể được cho tiếp xúc theo các bước: đồng thời cho monome alpha olefin, metaloxen, chất hoạt hóa thứ

nhất, và chất hoạt hóa thứ hai tiếp xúc.

Theo một phương án không làm giới hạn phạm vi sáng chế, (các) phương pháp oligome hóa hoặc (các) phương pháp điều chế polyalphaolefin có thể sử dụng tỷ lệ mol của monome alpha olefin với metaloxen lớn hơn 100:1; theo cách khác, tỷ lệ này lớn hơn 1000:1; theo cách khác, tỷ lệ này lớn hơn 10.000:1 hoặc theo cách khác, tỷ lệ này lớn hơn 50000:1. Theo một phương án không làm giới hạn phạm vi sáng chế khác, (các) phương pháp oligome hóa hoặc (các) phương pháp điều chế polyalphaolefin có thể sử dụng tỷ lệ mol của monome alpha olefin với metaloxen nằm trong khoảng từ 100:1 đến 1.000.000.000; theo cách khác, tỷ lệ này nằm trong khoảng từ 1000:1 đến 100.000.000; theo cách khác, tỷ lệ này nằm trong khoảng từ 10.000:1 đến 10.000.000 hoặc theo cách khác, tỷ lệ này nằm trong khoảng từ 50.000:1 đến 5.000.000. Tỷ lệ của monome alpha olefin khác với metaloxen được bộc lộ ở đây và có thể được sử dụng, nhưng không chỉ giới hạn, trong các phương pháp được mô tả.

Theo một phương án không giới hạn phạm vi sáng chế, (các) phương pháp oligome hóa hoặc (các) phương pháp điều chế polyalphaolefin có thể sử dụng tỷ lệ trọng lượng oxit dạng rắn được xử lý hóa học với kim loại trong metaloxen (ví dụ, Zr trong ziricon metaloxen) nhỏ hơn 1.000.000:1; theo cách khác, nhỏ hơn 100.000:1; theo cách khác, nhỏ hơn 10.000:1 hoặc theo cách khác, nhỏ hơn 5000:1. Theo một phương án không làm giới hạn phạm vi sáng chế khác, (các) phương pháp oligome hóa hoặc (các) phương pháp điều chế polyalphaolefin có thể sử dụng tỷ lệ trọng lượng oxit dạng rắn được xử lý hóa học với kim loại trong metaloxen (ví dụ, Zr trong ziricon metaloxen) nằm trong khoảng từ 1:1 đến 100.000:1; theo cách khác, tỷ lệ này nằm trong khoảng từ 10:1 đến 10.000:1; theo cách khác, tỷ lệ này nằm trong khoảng từ 50:1 đến 5.000:1 hoặc theo cách khác, tỷ lệ này nằm trong khoảng từ 100:1 đến 1.000:1. Tỷ lệ oxit dạng rắn khác được xử lý hóa học với metaloxen được bộc lộ ở đây và có thể được sử dụng, nhưng không chỉ giới hạn, trong các phương pháp được mô tả.

Theo một phương án không giới hạn phạm vi sáng chế, (các) phương pháp oligome hóa hoặc (các) phương pháp điều chế polyalphaolefin có thể sử dụng tỷ lệ mol của nhôm trong chất hoạt hóa thứ hai với kim loại trong metaloxen (ví dụ, Zr trong ziricon metaloxen) lớn hơn 0,1:1; theo cách khác, tỷ lệ này lớn hơn 1:1; theo cách khác, tỷ lệ này lớn hơn 10:1 hoặc theo cách khác, tỷ lệ này lớn hơn 50:1. Theo một phương án không làm

giới hạn phạm vi sáng chế, (các) phương pháp oligome hóa hoặc (các) phương pháp điều chế polyalphaolefin có thể sử dụng tỷ lệ mol của nhôm trong chất hoạt hóa thứ hai với kim loại trong metaloxen (ví dụ, Zr trong ziricon metaloxen) nằm trong khoảng từ 0,1:1 đến 100.000:1; theo cách khác, tỷ lệ này nằm trong khoảng từ 1:1 đến 10.000:1; theo cách khác, tỷ lệ này nằm trong khoảng từ 10:1 đến 1000:1 hoặc theo cách khác, tỷ lệ này nằm trong khoảng từ 50:1 đến 500:1. Tỷ lệ nhôm với kim loại khác trong metaloxen được bộc lộ ở đây và có thể được sử dụng, nhưng không chỉ giới hạn, trong các phương pháp được mô tả.

Theo một phương án không giới hạn phạm vi sáng chế, (các) phương pháp oligome hóa hoặc (các) phương pháp điều chế polyalphaolefin có thể sử dụng tỷ lệ mol của liên kết nhôm-alkyl trong chất hoạt hóa thứ hai với kim loại trong metaloxen (ví dụ, Zr trong ziricon metaloxen) lớn hơn 0,1:1; theo cách khác, tỷ lệ này lớn hơn 0,2:1; theo cách khác, tỷ lệ này lớn hơn 1:1; theo cách khác, tỷ lệ này lớn hơn 5:1; theo cách khác, tỷ lệ này lớn hơn 10:1; theo cách khác, tỷ lệ này lớn hơn 50:1; theo cách khác, tỷ lệ này lớn hơn 100:1; theo cách khác, tỷ lệ này lớn hơn 150:1 hoặc theo cách khác, tỷ lệ này lớn hơn 200:1. Theo một phương án không làm giới hạn phạm vi sáng chế, (các) phương pháp oligome hóa hoặc (các) phương pháp điều chế polyalphaolefin có thể sử dụng tỷ lệ mol của liên kết nhôm-alkyl trong chất hoạt hóa thứ hai với kim loại trong metaloxen (ví dụ, Zr trong ziricon metaloxen) nằm trong khoảng từ 0,1:1 đến 300,000:1; theo cách khác, tỷ lệ này nằm trong khoảng từ 1:1 đến 100.000:1; theo cách khác, tỷ lệ này nằm trong khoảng từ 10:1 đến 10.000:1; theo cách khác, tỷ lệ này nằm trong khoảng từ 20:1 đến 5000:1 hoặc theo cách khác, tỷ lệ này nằm trong khoảng từ 50:1 đến 1000:1. Các tỷ lệ liên kết nhôm-alkyl với kim loại khác trong metaloxen được bộc lộ ở đây và có thể được sử dụng, nhưng không chỉ giới hạn, trong các phương pháp được mô tả.

Theo một phương án không giới hạn phạm vi sáng chế, điều kiện oligome hóa được sử dụng trong (các) phương pháp oligome hóa hoặc (các) phương pháp điều chế polyalphaolefin khi tạo ra sản phẩm oligome có thể bao gồm nhiệt độ oligome hóa nằm trong khoảng từ 50°C đến 165°C; theo cách khác, nhiệt độ này nằm trong khoảng từ 55°C đến 160°C; theo cách khác, nhiệt độ này nằm trong khoảng từ 60°C đến 155°C; theo cách khác, nhiệt độ này nằm trong khoảng từ 65°C đến 150°C hoặc theo

cách khác, nhiệt độ này nằm trong khoảng từ 70°C đến 145°C hoặc theo cách khác, nhiệt độ này nằm trong khoảng từ 75°C đến 140°C. Theo một phương án không làm giới hạn phạm vi sáng chế, điều kiện oligome hóa được sử dụng trong (các) phương pháp oligome hóa hoặc (các) phương pháp điều chế polyalphaolefin khi tạo ra sản phẩm oligome có thể bao gồm nhiệt độ oligome hóa nằm trong khoảng từ 70°C đến 90°C; theo cách khác, nhiệt độ này nằm trong khoảng từ 90°C đến 120°C hoặc theo cách khác, nhiệt độ này nằm trong khoảng từ 110°C đến 140°C.

Theo một phương án không làm giới hạn phạm vi sáng chế, điều kiện oligome hóa được sử dụng trong (các) phương pháp oligome hóa hoặc (các) phương pháp điều chế polyalphaolefin khi tạo ra sản phẩm oligome có thể bao gồm việc thực hiện quá trình oligome hóa trong môi trường trơ. Theo một số phương án không làm giới hạn phạm vi sáng chế, môi trường trơ là môi trường hầu như không chứa oxy; theo cách khác, hầu như không chứa nước khi phản ứng bắt đầu hoặc theo cách khác, hầu như không chứa oxy và hầu như không chứa nước khi phản ứng bắt đầu. Theo một phương án, lượng nước có thể thấp hơn 100 ppm; theo cách khác, lượng nước thấp hơn 75 ppm; theo cách khác, lượng nước thấp hơn 50 ppm; theo cách khác, lượng nước thấp hơn 30 ppm; theo cách khác, lượng nước thấp hơn 25 ppm; theo cách khác, lượng nước thấp hơn 20 ppm; theo cách khác, lượng nước thấp hơn 15 ppm; theo cách khác, lượng nước thấp hơn 10 ppm; theo cách khác, lượng nước thấp hơn 5 ppm; theo cách khác, lượng nước thấp hơn 3 ppm; theo cách khác, lượng nước thấp hơn 2 ppm; theo cách khác, lượng nước thấp hơn 1 ppm hoặc theo cách khác, lượng nước thấp hơn 0,5 ppm. Theo một phương án, lượng O₂ có thể thấp hơn 100 ppm; theo cách khác, lượng O₂ thấp hơn 75 ppm; theo cách khác, lượng O₂ thấp hơn 50 ppm; theo cách khác, lượng O₂ thấp hơn 30 ppm; theo cách khác, lượng O₂ thấp hơn 25 ppm; theo cách khác, lượng O₂ thấp hơn 20 ppm; theo cách khác, lượng O₂ thấp hơn 15 ppm; theo cách khác, lượng O₂ thấp hơn 10 ppm; theo cách khác, lượng O₂ thấp hơn 5 ppm; theo cách khác, lượng O₂ thấp hơn 3 ppm; theo cách khác, lượng O₂ thấp hơn 2 ppm; theo cách khác, lượng O₂ thấp hơn 1 ppm hoặc theo cách khác, lượng O₂ thấp hơn 0,5 ppm. Theo một số phương án, môi trường trơ, có thể là nitơ khô hoặc theo cách khác, là argon khô.

Theo một phương án không làm giới hạn phạm vi sáng chế, điều kiện oligome hóa được sử dụng trong (các) phương pháp oligome hóa hoặc (các) phương pháp điều chế

polyalphaolefin khi tạo ra sản phẩm oligome có thể bao gồm việc thực hiện quá trình oligome hóa khi hầu như không có etylen. Theo một số phương án không làm giới hạn phạm vi sáng chế, điều kiện oligome hóa để tạo ra sản phẩm oligome có thể bao gồm việc thực hiện quá trình oligome hóa với áp suất riêng phần của etylen thấp hơn 10 psig (10^4 Pa); theo cách khác, áp suất này thấp hơn 7 psig; theo cách khác, áp suất này thấp hơn 5 psig; theo cách khác, áp suất này thấp hơn 4 psig; theo cách khác, áp suất này thấp hơn 3 psig; theo cách khác, áp suất này thấp hơn 2 psig hoặc theo cách khác, áp suất này thấp hơn 1 psig.

Theo một phương án không làm giới hạn phạm vi sáng chế, điều kiện oligome hóa được sử dụng trong (các) phương pháp oligome hóa hoặc (các) phương pháp điều chế polyalphaolefin khi tạo ra sản phẩm oligome có thể bao gồm việc thực hiện quá trình oligome hóa khi hầu như không có hydro. Theo một số phương án không làm giới hạn phạm vi sáng chế, điều kiện oligome hóa để tạo ra sản phẩm oligome có thể bao gồm việc thực hiện quá trình oligome hóa với áp suất riêng phần của hydro thấp hơn 10 psig; theo cách khác, áp suất này thấp hơn 7 psig; theo cách khác, áp suất này thấp hơn 5 psig; theo cách khác, áp suất này thấp hơn 4 psig; theo cách khác, áp suất này thấp hơn 3 psig; theo cách khác, áp suất này thấp hơn 2 psig hoặc theo cách khác, áp suất này thấp hơn 1 psig.

Theo một phương án không làm giới hạn phạm vi sáng chế, điều kiện oligome hóa được sử dụng trong (các) phương pháp oligome hóa hoặc (các) phương pháp điều chế polyalphaolefin khi tạo ra sản phẩm oligome có thể bao gồm việc thực hiện quá trình oligome hóa với áp suất riêng phần của hydro. Áp suất riêng phần của hydro trong phản ứng oligome hóa có thể là áp suất hydro bất kỳ không ảnh hưởng bất lợi đến phản ứng oligome hóa. Mặc dù không muốn bị ràng buộc bởi lý thuyết, hydro có thể được sử dụng trong quy trình oligome hóa để kiểm soát trọng lượng phân tử của oligome. Theo một số phương án không làm giới hạn phạm vi sáng chế, điều kiện oligome hóa để tạo ra sản phẩm oligome có thể bao gồm việc thực hiện quá trình oligome hóa với áp suất riêng phần của hydro lớn hơn hoặc bằng 5 psig; theo cách khác, áp suất này lớn hơn hoặc bằng 10 psig; theo cách khác, áp suất này lớn hơn hoặc bằng 50 psig; theo cách khác, áp suất này lớn hơn hoặc bằng 100 psig; theo cách khác, áp suất này lớn hơn hoặc bằng 200 psig; theo cách khác, áp suất này lớn hơn hoặc bằng 300 psig; theo cách khác, áp suất này lớn hơn hoặc bằng 400 psig; theo cách

khác, áp suất này lớn hơn hoặc bằng 500 psig; theo cách khác, áp suất này lớn hơn hoặc bằng 750 psig; theo cách khác, áp suất này lớn hơn hoặc bằng 1000 psig; theo cách khác, áp suất này lớn hơn hoặc bằng 1250 psig hoặc theo cách khác, áp suất này lớn hơn hoặc bằng 1500 psig. Theo các phương án không làm giới hạn phạm vi sáng chế khác, điều kiện oligome hóa được sử dụng trong (các) phương pháp oligome hóa hoặc (các) phương pháp điều chế polyalphaolefin khi tạo ra sản phẩm oligome có thể bao gồm việc thực hiện quá trình oligome hóa với áp suất riêng phần của hydro nằm trong khoảng từ 0 psig đến 2000 psig; theo cách khác, áp suất này nằm trong khoảng từ 1 psig đến 1500 psig; theo cách khác, áp suất này nằm trong khoảng từ 5 psig đến 1250 psig; theo cách khác, áp suất này nằm trong khoảng từ 10 psig đến 1000 psig; theo cách khác, áp suất này nằm trong khoảng từ 50 psig đến 750 psig; theo cách khác, áp suất này nằm trong khoảng từ 100 psig đến 500 psig; theo cách khác, áp suất này nằm trong khoảng từ 150 psig đến 400 psig hoặc theo cách khác, áp suất này nằm trong khoảng từ 200 psig đến 300 psig.

Theo một khía cạnh khác nữa của sáng chế, các đặc tính khác nhau của sản phẩm oligome có thể thu được bằng phương pháp oligome hóa được bộc lộ ở đây. Theo một phương án không làm giới hạn phạm vi sáng chế, (các) phương pháp oligome hóa hoặc (các) phương pháp điều chế polyalphaolefin có thể khác biệt bởi ít nhất 80% trọng lượng monome alpha olefin được chuyển hóa thành sản phẩm oligome; theo cách khác, ít nhất 85% trọng lượng monome alpha olefin được chuyển hóa thành sản phẩm oligome hoặc theo cách khác, ít nhất 90% trọng lượng monome alpha olefin được chuyển hóa thành sản phẩm oligome. Theo một phương án, sản phẩm oligome có thể chứa dime, trime, và oligome cao. Theo một phương án không làm giới hạn phạm vi sáng chế, (các) phương pháp oligome hóa hoặc (các) phương pháp điều chế polyalphaolefin có thể khác biệt bởi sản phẩm oligome có thể chứa ít nhất 70% trọng lượng oligome cao; theo cách khác, ít nhất 75% trọng lượng oligome cao; theo cách khác, ít nhất 77,5% trọng lượng oligome cao; theo cách khác, ít nhất 80% trọng lượng oligome cao; theo cách khác, ít nhất 82,5% trọng lượng oligome cao; theo cách khác, ít nhất 84% trọng lượng oligome cao hoặc theo cách khác, ít nhất 85% trọng lượng oligome cao.

Như được bộc lộ ở đây và theo phương án bất kỳ, phương pháp oligome hóa có thể tạo dòng đi ra từ thiết bị phản ứng oligome hóa chứa sản phẩm oligome, trong đó

phương pháp này còn bao gồm bước tách dòng đi ra từ thiết bị phản ứng oligome hóa để thu được sản phẩm oligome nặng. Theo khía cạnh này, ít nhất một phần monome alpha olefin, dime, hoặc trime có thể được loại bỏ ra khỏi dòng đi ra từ thiết bị phản ứng oligome hóa để tạo ra sản phẩm oligome nặng. Theo một phương án không làm giới hạn phạm vi sáng chế, (các) phương pháp oligome hóa hoặc (các) phương pháp điều chế polyalphaolefin có thể khác biệt bởi có sản phẩm oligome nặng chứa dưới 0,6% trọng lượng monome alpha olefin; theo cách khác, sản phẩm này chứa dưới 0,5% trọng lượng monome alpha olefin; theo cách khác, sản phẩm này chứa dưới 0,4% trọng lượng monome alpha olefin; theo cách khác, sản phẩm này chứa dưới 0,3% trọng lượng monome alpha olefin; theo cách khác, sản phẩm này chứa dưới 0,2% trọng lượng monome alpha olefin hoặc theo cách khác, sản phẩm này chứa dưới 0,1% trọng lượng monome alpha olefin. Theo một phương án không làm giới hạn phạm vi sáng chế, (các) phương pháp oligome hóa hoặc (các) phương pháp điều chế polyalphaolefin có thể khác biệt bởi có sản phẩm oligome nặng chứa dưới 2% trọng lượng dime; theo cách khác, sản phẩm này chứa dưới 1,75% trọng lượng dime; theo cách khác, sản phẩm này chứa dưới 1,5% trọng lượng dime; theo cách khác, sản phẩm này chứa dưới 1,25% trọng lượng dime; theo cách khác, sản phẩm này chứa dưới 1% trọng lượng dime; theo cách khác, sản phẩm này chứa dưới 0,9% trọng lượng dime; theo cách khác, sản phẩm này chứa dưới 0,8% trọng lượng dime; theo cách khác, sản phẩm này chứa dưới 0,7% trọng lượng dime; theo cách khác, sản phẩm này chứa dưới 0,6% trọng lượng dime; theo cách khác, sản phẩm này chứa dưới 0,5% trọng lượng dime; theo cách khác, sản phẩm này chứa dưới 0,4% trọng lượng dime hoặc theo cách khác, sản phẩm này chứa dưới 0,3% trọng lượng dime. Theo một phương án không làm giới hạn phạm vi sáng chế, (các) phương pháp oligome hóa hoặc (các) phương pháp điều chế polyalphaolefin có thể khác biệt bởi có sản phẩm oligome nặng chứa dưới 10% trọng lượng trime; theo cách khác, sản phẩm này chứa dưới 7,5% trọng lượng trime; theo cách khác, sản phẩm này chứa dưới 5% trọng lượng trime; theo cách khác, sản phẩm này chứa dưới 3% trọng lượng trime; theo cách khác, sản phẩm này chứa dưới 2% trọng lượng trime; theo cách khác, sản phẩm này chứa dưới 1,75% trọng lượng trime; theo cách khác, sản phẩm này chứa dưới 1,5% trọng lượng trime; theo cách khác, sản phẩm này chứa dưới 1,25% trọng lượng trime; theo cách khác, sản phẩm này chứa dưới 1% trọng lượng trime; theo cách khác, sản phẩm này chứa dưới

0,9% trọng lượng trime; theo cách khác, sản phẩm này chứa dưới 0,8% trọng lượng trime; theo cách khác, sản phẩm này chứa dưới 0,7% trọng lượng trime; theo cách khác, sản phẩm này chứa dưới 0,6% trọng lượng trime; theo cách khác, sản phẩm này chứa dưới 0,5% trọng lượng trime; theo cách khác, sản phẩm này chứa dưới 0,4% trọng lượng trime hoặc theo cách khác, sản phẩm này chứa dưới 0,3% trọng lượng trime. Theo một phương án không làm giới hạn phạm vi sáng chế, (các) phương pháp oligome hóa hoặc (các) phương pháp điều chế polyalphaolefin có thể khác biệt bởi có sản phẩm oligome nặng chứa ít nhất 85% trọng lượng oligome cao; theo cách khác, sản phẩm này chứa ít nhất 86% trọng lượng oligome cao; theo cách khác, sản phẩm này chứa ít nhất 87% trọng lượng oligome cao; theo cách khác, sản phẩm này chứa ít nhất 88% trọng lượng oligome cao; theo cách khác, sản phẩm này chứa ít nhất 89% trọng lượng oligome cao; theo cách khác, sản phẩm này chứa ít nhất 90% trọng lượng oligome cao; theo cách khác, sản phẩm này chứa ít nhất 91% trọng lượng oligome cao; theo cách khác, sản phẩm này chứa ít nhất 92% trọng lượng oligome cao; theo cách khác, sản phẩm này chứa ít nhất 93% trọng lượng oligome cao; theo cách khác, sản phẩm này chứa ít nhất 94% trọng lượng oligome cao hoặc theo cách khác, sản phẩm này chứa ít nhất 94% trọng lượng oligome cao. Hàm lượng monome khác, hàm lượng dime, và hàm lượng oligome cao được bộc lộ ở đây và có thể được sử dụng, nhưng không chỉ giới hạn, trong các phương pháp được mô tả.

Theo một khía cạnh, bước tách được sử dụng để loại bỏ ít nhất một phần monome, dime, và/hoặc trime ra khỏi dòng đi ra từ thiết bị phản ứng oligome hóa để tạo ra sản phẩm oligome nặng có thể là bước tách bất kỳ có thể tách ít nhất một phần monome, dime, và/hoặc trime ra khỏi dòng đi ra từ thiết bị phản ứng. Theo một phương án không làm giới hạn phạm vi sáng chế, bước tách có thể là chưng cất. Theo một phương án bước tách có thể là làm bay hơi kiểu màng lau. Theo một số phương án không làm giới hạn phạm vi sáng chế, bước chưng cất hoặc làm bay hơi kiểu màng lau có thể được thực hiện ở áp suất dưới 760 torr (10^5 Pa); theo cách khác, áp suất nhỏ hơn 600 torr; theo cách khác, áp suất nhỏ hơn 400 torr; theo cách khác, áp suất nhỏ hơn 200 torr; theo cách khác, áp suất nhỏ hơn 100 torr; theo cách khác, áp suất nhỏ hơn 75 torr; theo cách khác, áp suất nhỏ hơn 50 torr; theo cách khác, áp suất nhỏ hơn 40 torr; theo cách khác, áp suất nhỏ hơn 30 torr; theo cách khác, áp suất nhỏ hơn 20 torr; theo cách khác, áp suất nhỏ hơn 10 torr; theo cách khác, áp suất nhỏ hơn 5 torr hoặc theo

cách khác, áp suất nhỏ hơn 1 torr. Theo một phương án không làm giới hạn phạm vi sáng chế, bước chưng cất hoặc làm bay hơi kiểu màng lau có thể được thực hiện bằng cách cho khí rửa/khí trơ đi qua thiết bị chưng cất hoặc thiết bị làm bay hơi kiểm màng lau. Theo một khía cạnh, khí rửa có thể là khí trơ. Khí rửa có thể là nitơ, heli, argon, hoặc hỗn hợp của chúng; theo cách khác, khí rửa là nitơ; theo cách khác, khí rửa là heli, hoặc theo cách khác, khí rửa là argon.

Như được bộc lộ ở đây và theo phương án bất kỳ, (các) phương pháp điều chế polyalphaolefin có thể tạo ra polyalphaolefin có lượng cần thiết của monome alpha olefin được hydro hóa, dime được hydro hóa, trime được hydro hóa, và/hoặc oligome cao được hydro hóa. Theo một phương án không làm giới hạn phạm vi sáng chế, (các) phương pháp oligome hóa hoặc (các) phương pháp điều chế polyalphaolefin có thể khác biệt bởi có sản phẩm oligome nặng chứa dưới 0,6% trọng lượng monome alpha olefin được hydro hóa; theo cách khác, sản phẩm này chứa dưới 0,5% trọng lượng monome alpha olefin được hydro hóa; theo cách khác, sản phẩm này chứa dưới 0,4% trọng lượng monome alpha olefin được hydro hóa; theo cách khác, sản phẩm này chứa dưới 0,3% trọng lượng monome alpha olefin được hydro hóa; theo cách khác, sản phẩm này chứa dưới 0,2% trọng lượng monome alpha olefin được hydro hóa hoặc theo cách khác, sản phẩm này chứa dưới 0,1% trọng lượng monome alpha olefin được hydro hóa. Theo một phương án không làm giới hạn phạm vi sáng chế, (các) phương pháp oligome hóa hoặc (các) phương pháp điều chế polyalphaolefin có thể khác biệt bởi có sản phẩm oligome nặng chứa dưới 2% trọng lượng dime được hydro hóa; theo cách khác, sản phẩm này chứa dưới 1,75% trọng lượng dime được hydro hóa; theo cách khác, sản phẩm này chứa dưới 1,5% trọng lượng dime được hydro hóa; theo cách khác, sản phẩm này chứa dưới 1,25% trọng lượng dime được hydro hóa; theo cách khác, sản phẩm này chứa dưới 1% trọng lượng dime được hydro hóa; theo cách khác, sản phẩm này chứa dưới 0,9% trọng lượng dime được hydro hóa; theo cách khác, sản phẩm này chứa dưới 0,8% trọng lượng dime được hydro hóa; theo cách khác, sản phẩm này chứa dưới 0,7% trọng lượng dime được hydro hóa; theo cách khác, sản phẩm này chứa dưới 0,6% trọng lượng dime được hydro hóa; theo cách khác, sản phẩm này chứa dưới 0,5% trọng lượng dime được hydro hóa; theo cách khác, sản phẩm này chứa dưới 0,4% trọng lượng dime được hydro hóa hoặc theo cách khác, sản phẩm này chứa dưới 0,3% trọng lượng dime được hydro hóa. Theo một phương án

không làm giới hạn phạm vi sáng chế, (các) phương pháp oligome hóa hoặc (các) phương pháp điều chế polyalphaolefin có thể khác biệt bởi có sản phẩm oligome nặng chứa dưới 10% trọng lượng trime được hydro hóa; theo cách khác, sản phẩm này chứa dưới 7,5% trọng lượng trime được hydro hóa; theo cách khác, sản phẩm này chứa dưới 5% trọng lượng trime được hydro hóa; theo cách khác, sản phẩm này chứa dưới 3% trọng lượng trime được hydro hóa; sản phẩm này chứa dưới 2% trọng lượng trime được hydro hóa; theo cách khác, sản phẩm này chứa dưới 1,75% trọng lượng trime được hydro hóa; theo cách khác, sản phẩm này chứa dưới 1,5% trọng lượng trime được hydro hóa; theo cách khác, sản phẩm này chứa dưới 1,25% trọng lượng trime được hydro hóa; theo cách khác, sản phẩm này chứa dưới 1% trọng lượng trime được hydro hóa; theo cách khác, sản phẩm này chứa dưới 0,9% trọng lượng trime được hydro hóa; theo cách khác, sản phẩm này chứa dưới 0,8% trọng lượng trime được hydro hóa; theo cách khác, sản phẩm này chứa dưới 0,7% trọng lượng trime được hydro hóa; theo cách khác, sản phẩm này chứa dưới 0,6% trọng lượng trime được hydro hóa; theo cách khác, sản phẩm này chứa dưới 0,5% trọng lượng trime được hydro hóa; theo cách khác, sản phẩm này chứa dưới 0,4% trọng lượng trime được hydro hóa hoặc theo cách khác, sản phẩm này chứa dưới 0,3% trọng lượng trime được hydro hóa. Theo một phương án không làm giới hạn phạm vi sáng chế, (các) phương pháp oligome hóa hoặc (các) phương pháp điều chế polyalphaolefin có thể khác biệt bởi có sản phẩm oligome nặng chứa ít nhất 85% trọng lượng oligome cao được hydro hóa; theo cách khác, sản phẩm này chứa ít nhất 86% trọng lượng oligome cao được hydro hóa; theo cách khác, sản phẩm này chứa ít nhất 87% trọng lượng oligome cao được hydro hóa; theo cách khác, sản phẩm này chứa ít nhất 88% trọng lượng oligome cao được hydro hóa; theo cách khác, sản phẩm này chứa ít nhất 89% trọng lượng oligome cao được hydro hóa; theo cách khác, ít nhất 90% trọng lượng oligome cao được hydro hóa; theo cách khác, sản phẩm này chứa ít nhất 91% trọng lượng oligome cao được hydro hóa; theo cách khác, sản phẩm này chứa ít nhất 92% trọng lượng oligome cao được hydro hóa; theo cách khác, sản phẩm này chứa ít nhất 93% trọng lượng oligome cao được hydro hóa; theo cách khác, sản phẩm này chứa ít nhất 94% trọng lượng oligome cao được hydro hóa hoặc theo cách khác, sản phẩm này chứa ít nhất 94% trọng lượng oligome cao được hydro hóa. Hàm lượng các monome được hydro hóa khác, hàm lượng dime được hydro hóa, và hàm lượng oligome cao được

hydro hóa được bộc lộ ở đây và có thể được sử dụng, nhưng không chỉ giới hạn, trong các phương pháp được mô tả ở đây.

Theo một khía cạnh, sản phẩm oligome, sản phẩm oligome nặng, và polyalphaolefin có thể có một số đặc tính cần thiết. Theo một phương án, các đặc tính cần thiết có thể bao gồm độ nhớt động ở 100°C, chỉ số độ nhớt, điểm rót, điểm cháy, nhiệt độ bốc cháy, chỉ số bay hơi Noack, hoặc tổ hợp bất kỳ của chúng; theo cách khác, độ nhớt động ở 100°C, chỉ số độ nhớt, điểm cháy, nhiệt độ bốc cháy, hoặc tổ hợp bất kỳ của chúng; theo cách khác, độ nhớt động ở 100°C, chỉ số độ nhớt, điểm rót, hoặc tổ hợp bất kỳ của chúng; theo cách khác, điểm cháy, nhiệt độ bốc cháy, hoặc tổ hợp bất kỳ của chúng; theo cách khác, độ nhớt động ở 100°C; theo cách khác, điểm cháy; theo cách khác, nhiệt độ bốc cháy hoặc theo cách khác, chỉ số bay hơi Noack. Tổ hợp khác của các đặc tính của sản phẩm oligome nặng và/hoặc polyalphaolefin dễ dàng được thấy rõ từ bản mô tả này.

Theo một phương án không làm giới hạn phạm vi sáng chế, (các) phương pháp oligome hóa hoặc (các) phương pháp điều chế polyalphaolefin có thể khác biệt bởi việc tạo ra sản phẩm oligome nặng có độ nhớt động ở 100°C nằm trong khoảng từ 25 mm²/s đến 225 mm²/s (từ 25 cSt đến 225 cSt); theo cách khác, độ nhớt này nằm trong khoảng từ 25 mm²/s đến 55 mm²/s (từ 25 cSt đến 55 cSt); theo cách khác, độ nhớt này nằm trong khoảng từ 30 mm²/s đến 50 mm²/s (từ 30 cSt đến 50 cSt); theo cách khác, từ 32 mm²/s đến 48 mm²/s (từ 32 cSt đến 48 cSt); theo cách khác, từ 35 mm²/s đến 45 mm²/s (từ 35 cSt đến 45 cSt); theo cách khác, độ nhớt này nằm trong khoảng từ 40 mm²/s đến 80 mm²/s (từ 40 cSt đến 80 cSt); theo cách khác, độ nhớt này nằm trong khoảng từ 45 mm²/s đến 75 mm²/s (từ 45 cSt đến 75 cSt); theo cách khác, độ nhớt này nằm trong khoảng từ 50 mm²/s đến 70 mm²/s (từ 50 cSt đến 70 cSt); theo cách khác, độ nhớt này nằm trong khoảng từ 60 mm²/s đến 100 mm²/s (từ 60 cSt đến 100 cSt); theo cách khác, độ nhớt này nằm trong khoảng từ 65 mm²/s đến 95 mm²/s (từ 65 cSt đến 95 cSt); theo cách khác, độ nhớt này nằm trong khoảng từ 70 mm²/s đến 90 mm²/s (từ 70 cSt đến 90 cSt); theo cách khác, độ nhớt này nằm trong khoảng từ 80 mm²/s đến 140 mm²/s (từ 80 cSt đến 140 cSt); theo cách khác, độ nhớt này nằm trong khoảng từ 80 mm²/s đến 120 mm²/s (từ 80 cSt đến 120 cSt); theo cách khác, độ nhớt này nằm trong khoảng từ 85 mm²/s đến 115 mm²/s (từ 85 cSt đến 115 cSt); theo cách khác, độ

nhớt này nằm trong khoảng từ 90 mm²/s đến 110 mm²/s (từ 90 cSt đến 110 cSt); theo cách khác, độ nhớt này nằm trong khoảng từ 100 mm²/s đến 140 mm²/s (từ 100 cSt đến 140 cSt); theo cách khác, độ nhớt này nằm trong khoảng từ 105 mm²/s đến 135 mm²/s (từ 105 cSt đến 135 cSt); theo cách khác, độ nhớt này nằm trong khoảng từ 110 mm²/s đến 130 mm²/s (từ 110 cSt đến và 130 cSt); theo cách khác, độ nhớt này nằm trong khoảng từ 110 mm²/s đến 190 mm²/s (từ 110 cSt đến 190 cSt); theo cách khác, độ nhớt này nằm trong khoảng từ 135 mm²/s đến 175 mm²/s (từ 135 cSt đến 175 cSt) hoặc theo cách khác, độ nhớt này nằm trong khoảng từ 140 mm²/s đến 160 mm²/s (từ 140 cSt đến 160 cSt). Theo một phương án không làm giới hạn phạm vi sáng chế khác, (các) phương pháp oligome hóa hoặc (các) phương pháp điều chế polyalphaolefin có thể khác biệt bởi việc tạo ra sản phẩm oligome nặng có độ nhớt động ở 100°C nằm trong khoảng từ 200 mm²/s đến 300 mm²/s (từ 200 cSt đến 300 cSt); theo cách khác, độ nhớt này nằm trong khoảng từ 220 mm²/s đến 280 mm²/s (từ 220 cSt đến 280 cSt); theo cách khác, độ nhớt này nằm trong khoảng từ 235 mm²/s đến 265 mm²/s (từ 235 cSt đến 265 cSt); theo cách khác, độ nhớt này nằm trong khoảng từ 250 mm²/s đến 350 mm²/s (từ 250 cSt đến 350 cSt); theo cách khác, độ nhớt này nằm trong khoảng từ 270 mm²/s đến 330 mm²/s (từ 270 cSt đến 330 cSt); theo cách khác, độ nhớt này nằm trong khoảng từ 285 mm²/s đến 315 mm²/s (từ 285 cSt đến 315 cSt); theo cách khác, độ nhớt này nằm trong khoảng từ 300 mm²/s đến 400 mm²/s (từ 300 cSt đến 400 cSt); theo cách khác, độ nhớt này nằm trong khoảng từ 320 mm²/s đến 380 mm²/s (từ 320 cSt đến 380 cSt); theo cách khác, độ nhớt này nằm trong khoảng từ 335 mm²/s đến 365 mm²/s (từ 335 cSt đến 365 cSt); theo cách khác, độ nhớt này nằm trong khoảng từ 350 mm²/s đến 450 mm²/s (từ 350 cSt đến 450 cSt); theo cách khác, độ nhớt này nằm trong khoảng từ 370 mm²/s đến 430 mm²/s (từ 370 cSt đến 430 cSt); theo cách khác, độ nhớt này nằm trong khoảng từ 385 mm²/s đến 415 mm²/s (từ 385 cSt đến 415 cSt); theo cách khác, độ nhớt này nằm trong khoảng từ 400 mm²/s đến 500 mm²/s (từ 400 cSt đến 500 cSt); theo cách khác, độ nhớt này nằm trong khoảng từ 420 mm²/s đến 480 mm²/s (từ 420 cSt đến 480 cSt); theo cách khác, độ nhớt này nằm trong khoảng từ 435 mm²/s đến 465 mm²/s (từ 435 cSt đến 465 cSt); theo cách khác, độ nhớt này nằm trong khoảng từ 450 mm²/s đến 550 mm²/s (từ 450 cSt đến 550 cSt); theo cách khác, độ nhớt này nằm trong khoảng từ 470 mm²/s đến 530 mm²/s (từ 470 cSt đến 530 cSt); theo cách khác, độ nhớt này nằm trong khoảng từ 485 mm²/s đến 515 mm²/s (từ 485 cSt

đến 515 cSt); theo cách khác, độ nhớt này nằm trong khoảng từ 500 mm²/s đến 700 mm²/s (từ 500 cSt đến 700 cSt); theo cách khác, độ nhớt này nằm trong khoảng từ 540 mm²/s đến 660 mm²/s (từ 540 cSt đến 660 cSt); theo cách khác, độ nhớt này nằm trong khoảng từ 570 mm²/s đến 630 mm²/s (từ 570 cSt đến 630 cSt); theo cách khác, độ nhớt này nằm trong khoảng từ 600 mm²/s đến 800 mm²/s (từ 600 cSt đến 800 cSt); theo cách khác, độ nhớt này nằm trong khoảng từ 640 mm²/s đến 760 mm²/s (từ 640 cSt đến 760 cSt); theo cách khác, độ nhớt này nằm trong khoảng từ 670 mm²/s đến 740 mm²/s (từ 670 cSt đến 740 cSt); theo cách khác, độ nhớt này nằm trong khoảng từ 700 mm²/s đến 900 mm²/s (từ 700 cSt đến 900 cSt); theo cách khác, độ nhớt này nằm trong khoảng từ 740 mm²/s đến 860 mm²/s (từ 740 cSt đến 860 cSt); theo cách khác, độ nhớt này nằm trong khoảng từ 770 mm²/s đến 830 mm²/s (từ 770 cSt đến 830 cSt); theo cách khác, độ nhớt này nằm trong khoảng từ 800 mm²/s đến 1000 mm²/s (từ 800 cSt đến 1000 cSt); theo cách khác, độ nhớt này nằm trong khoảng từ 840 mm²/s đến 960 mm²/s (từ 840 cSt đến 960 cSt); theo cách khác, độ nhớt này nằm trong khoảng từ 870 mm²/s đến 940 mm²/s (từ 870 cSt đến 940 cSt); theo cách khác, độ nhớt này nằm trong khoảng từ 900 mm²/s đến 1100 mm²/s (từ 900 cSt đến 1100 cSt); theo cách khác, độ nhớt này nằm trong khoảng từ 940 mm²/s đến 1060 mm²/s (từ 940 cSt đến 1060 cSt) hoặc theo cách khác, độ nhớt này nằm trong khoảng từ 970 mm²/s đến 1030 mm²/s (từ 970 cSt đến 1030 cSt). Do đó, khoảng rộng của độ nhớt động có thể đạt được với các phương pháp và chất xúc tác theo sáng chế bằng cách thay đổi điều kiện oligome hóa, như người có hiểu biết trung bình về lĩnh vực kỹ thuật này đã biết rõ. Độ nhớt động ở 100°C khác của oligome nặng được bộc lộ ở đây và có thể được sử dụng, nhưng không chỉ giới hạn, trong các phương pháp được mô tả ở đây.

Theo một phương án không làm giới hạn phạm vi sáng chế khi sản phẩm oligome nặng được hydro hóa, (các) phương pháp oligome hóa hoặc (các) phương pháp điều chế polyalphaolefin có thể khác biệt bởi việc tạo ra polyalphaolefin có độ nhớt động ở 100°C nằm trong khoảng từ 25 mm²/s đến 225 mm²/s (từ 25 cSt đến 225 cSt); theo cách khác, độ nhớt này nằm trong khoảng từ 25 mm²/s đến 55 mm²/s (từ 25 cSt đến 55 cSt); theo cách khác, độ nhớt này nằm trong khoảng từ 30 mm²/s đến 50 mm²/s (từ 30 cSt đến 50 cSt); theo cách khác, độ nhớt này nằm trong khoảng từ 32 mm²/s đến 48 mm²/s (từ 32 cSt đến 48 cSt); theo cách khác, độ nhớt này nằm trong khoảng từ 35 mm²/s đến 45 mm²/s (từ 35 cSt đến 45 cSt); theo cách khác, độ nhớt này

nằm trong khoảng từ 40 mm²/s đến 80 mm²/s (từ 40 cSt đến 80 cSt); theo cách khác, độ nhớt này nằm trong khoảng từ 45 mm²/s đến 75 mm²/s (từ 45 cSt đến 75 cSt); theo cách khác, độ nhớt này nằm trong khoảng từ 50 mm²/s đến 70 mm²/s (từ 50 cSt đến 70 cSt); theo cách khác, độ nhớt này nằm trong khoảng từ 60 mm²/s đến 100 mm²/s (từ 60 cSt đến 100 cSt); theo cách khác, độ nhớt này nằm trong khoảng từ 65 mm²/s đến 95 mm²/s (từ 65 cSt đến 95 cSt); theo cách khác, độ nhớt này nằm trong khoảng từ 70 mm²/s đến 90 mm²/s (từ 70 cSt đến 90 cSt); theo cách khác, độ nhớt này nằm trong khoảng từ 80 mm²/s đến 140 mm²/s (từ 80 cSt đến 140 cSt); theo cách khác, độ nhớt này nằm trong khoảng từ 80 mm²/s đến 120 mm²/s (từ 80 cSt đến 120 cSt); theo cách khác, độ nhớt này nằm trong khoảng từ 85 mm²/s đến 115 mm²/s (từ 85 cSt đến 115 cSt); theo cách khác, độ nhớt này nằm trong khoảng từ 90 mm²/s đến 110 mm²/s (từ 90 cSt đến 110 cSt); theo cách khác, độ nhớt này nằm trong khoảng từ 100 mm²/s đến 140 mm²/s (từ 100 cSt đến 140 cSt); theo cách khác, từ 105 mm²/s đến 135 mm²/s (từ 105 cSt đến 135 cSt); theo cách khác, từ 110 mm²/s đến 130 mm²/s (từ 110 cSt đến 130 cSt); theo cách khác, độ nhớt này nằm trong khoảng từ 110 mm²/s đến 190 mm²/s (từ 110 cSt đến 190 cSt); theo cách khác, độ nhớt này nằm trong khoảng từ 135 mm²/s đến 175 mm²/s (từ 135 cSt đến 175 cSt) hoặc theo cách khác, độ nhớt này nằm trong khoảng từ 140 mm²/s đến 160 mm²/s (từ 140 cSt đến 160 cSt). Theo một phương án không làm giới hạn phạm vi sáng chế khác khi sản phẩm oligome nặng được hydro hóa, (các) phương pháp oligome hóa hoặc (các) phương pháp điều chế polyalphaolefin có thể khác biệt bởi việc tạo ra polyalphaolefin có độ nhớt động ở 100°C nằm trong khoảng từ 200 mm²/s đến 300 mm²/s (từ 200 cSt đến 300 cSt); theo cách khác, độ nhớt này nằm trong khoảng từ 220 mm²/s đến 280 mm²/s (từ 220 cSt đến 280 cSt); theo cách khác, độ nhớt này nằm trong khoảng từ 235 đến 265; theo cách khác, độ nhớt này nằm trong khoảng từ 250 mm²/s đến 350 mm²/s (từ 250 cSt đến 350 cSt); theo cách khác, độ nhớt này nằm trong khoảng từ 270 mm²/s đến 330 mm²/s (từ 270 cSt đến 330 cSt); theo cách khác, độ nhớt này nằm trong khoảng từ 285 mm²/s đến 315 mm²/s (từ 285 cSt đến 315 cSt); theo cách khác, độ nhớt này nằm trong khoảng từ 300 mm²/s đến 400 mm²/s (từ 300 cSt đến 400 cSt); theo cách khác, độ nhớt này nằm trong khoảng từ 320 mm²/s đến 380 mm²/s (từ 320 cSt đến 380 cSt); theo cách khác, độ nhớt này nằm trong khoảng từ 335 đến 365; theo cách khác, độ nhớt này nằm trong khoảng từ 350 mm²/s đến 450 mm²/s (từ 350 cSt đến 450 cSt); theo cách khác, độ nhớt này nằm trong

khoảng từ 370 mm²/s đến 430 mm²/s (từ 370 cSt đến 430 cSt); theo cách khác, độ nhớt này nằm trong khoảng từ 385 mm²/s đến 415 mm²/s (từ 385 cSt đến 415 cSt); theo cách khác, độ nhớt này nằm trong khoảng từ 400 mm²/s đến 500 mm²/s (từ 400 cSt đến 500 cSt); theo cách khác, độ nhớt này nằm trong khoảng từ 420 mm²/s đến 480 mm²/s (từ 420 cSt đến 480 cSt); theo cách khác, độ nhớt này nằm trong khoảng từ 435 mm²/s đến 465 mm²/s (từ 435 cSt đến 465 cSt); theo cách khác, độ nhớt này nằm trong khoảng từ 450 mm²/s đến 550 mm²/s (từ 450 cSt đến 550 cSt); theo cách khác, độ nhớt này nằm trong khoảng từ 470 mm²/s đến 530 mm²/s (từ 470 cSt đến 530 cSt); theo cách khác, độ nhớt này nằm trong khoảng từ 485 mm²/s đến 515 mm²/s (từ 485 cSt đến 515 cSt); theo cách khác, độ nhớt này nằm trong khoảng từ 500 mm²/s đến 700 mm²/s (từ 500 cSt đến 700 cSt); theo cách khác, độ nhớt này nằm trong khoảng từ 540 mm²/s đến 660 mm²/s (từ 540 cSt đến 660 cSt); theo cách khác, độ nhớt này nằm trong khoảng từ 570 mm²/s đến 630 mm²/s (từ 570 cSt đến 630 cSt); theo cách khác, độ nhớt này nằm trong khoảng từ 600 mm²/s đến 800 mm²/s (từ 600 cSt đến 800 cSt); theo cách khác, độ nhớt này nằm trong khoảng từ 640 mm²/s đến 760 mm²/s (từ 640 cSt đến 760 cSt); theo cách khác, độ nhớt này nằm trong khoảng từ 670 mm²/s đến 740 mm²/s (từ 670 cSt đến 740 cSt); theo cách khác, độ nhớt này nằm trong khoảng từ 700 mm²/s đến 900 mm²/s (từ 700 cSt đến 900 cSt); theo cách khác, độ nhớt này nằm trong khoảng từ 740 mm²/s đến 860 mm²/s (từ 740 cSt đến 860 cSt); theo cách khác, độ nhớt này nằm trong khoảng từ 770 mm²/s đến 830 mm²/s (từ 770 cSt đến 830 cSt); theo cách khác, độ nhớt này nằm trong khoảng từ 800 mm²/s đến 1000 mm²/s (từ 800 cSt đến 1000 cSt); theo cách khác, độ nhớt này nằm trong khoảng từ 840 mm²/s đến 960 mm²/s (từ 840 cSt đến 960 cSt); theo cách khác, độ nhớt này nằm trong khoảng từ 870 mm²/s đến 940 mm²/s (từ 870 cSt đến 940 cSt); theo cách khác, độ nhớt này nằm trong khoảng từ 900 mm²/s đến 1100 mm²/s (từ 900 cSt đến 1100 cSt); theo cách khác, độ nhớt này nằm trong khoảng từ 940 mm²/s đến 1060 mm²/s (từ 940 cSt đến 1060 cSt) hoặc theo cách khác, độ nhớt này nằm trong khoảng từ 970 mm²/s đến 1030 mm²/s (từ 970 cSt đến 1030 cSt). Do đó, khoảng rộng của độ nhớt động có thể đạt được với các phương pháp và chất xúc tác theo sáng chế bằng cách thay đổi điều kiện oligome hóa, như người có hiểu biết trung bình về lĩnh vực kỹ thuật này đã biết rõ. Độ nhớt động ở 100°C khác của polyalphaolefin được bộc lộ ở đây và có thể được sử dụng, nhưng không chỉ giới hạn, trong các phương pháp được mô tả ở đây.

Theo một phương án không làm giới hạn phạm vi sáng chế, (các) phương pháp oligome hóa hoặc (các) phương pháp điều chế polyalphaolefin có thể tạo ra sản phẩm oligome nặng và/hoặc polyalphaolefin có chỉ số độ nhớt nằm trong khoảng từ 150 đến 260; theo cách khác, từ 155 đến 245; theo cách khác, từ 160 đến 230; theo cách khác, từ 165 đến 220; theo cách khác, từ 170 đến 220 hoặc theo cách khác, từ 175 đến 220. Chỉ số độ nhớt khác của oligome nặng và polyalphaolefin được bộc lộ ở đây và có thể được sử dụng, nhưng không chỉ giới hạn, trong các phương pháp được mô tả ở đây.

Theo một phương án không giới hạn phạm vi sáng chế, (các) phương pháp oligome hóa hoặc (các) phương pháp điều chế polyalphaolefin có thể tạo ra sản phẩm oligome nặng và/hoặc polyalphaolefin có điểm rót thấp hơn 0°C; theo cách khác, thấp hơn -10°C; theo cách khác, thấp hơn -20°C; theo cách khác, thấp hơn -30°C; theo cách khác, thấp hơn -35°C; theo cách khác, thấp hơn -40°C; theo cách khác, thấp hơn -45°C; theo cách khác, thấp hơn -50°C hoặc theo cách khác, thấp hơn -55°C. Theo một phương án không làm giới hạn phạm vi sáng chế khác, (các) phương pháp oligome hóa hoặc (các) phương pháp điều chế polyalphaolefin có thể tạo ra sản phẩm oligome nặng và/hoặc polyalphaolefin có điểm rót nằm trong khoảng từ 0°C đến -100°C; theo cách khác, từ -10°C đến -95°C; theo cách khác, từ -20°C đến -90°C; theo cách khác, từ -30°C đến -90°C; theo cách khác, từ -35°C đến -90°C; theo cách khác, từ -40°C đến -90°C; theo cách khác, từ -45°C đến -90°C; theo cách khác, từ -50°C đến -85°C hoặc theo cách khác, từ -55°C đến -80°C. Điểm rót khác của oligome nặng và polyalphaolefin được bộc lộ ở đây và có thể được sử dụng, nhưng không chỉ giới hạn, trong các phương pháp được mô tả ở đây.

Theo một phương án không làm giới hạn phạm vi sáng chế, (các) phương pháp điều chế polyalphaolefin có thể tạo ra polyalphaolefin có chỉ số Bernoulli ($B (= 4[mm][rr]/[mr]^2)$) nhỏ hơn 3; theo cách khác, nhỏ hơn 2,5; theo cách khác, nhỏ hơn 2; theo cách khác, nhỏ hơn 1,75; theo cách khác, nhỏ hơn 1,7; theo cách khác, nhỏ hơn 1,65; theo cách khác, nhỏ hơn 1,6; theo cách khác, nhỏ hơn 1,55; theo cách khác, nhỏ hơn 1,5; theo cách khác, nhỏ hơn 1,45; theo cách khác, nhỏ hơn 1,4; theo cách khác, nhỏ hơn 1,35; theo cách khác, nhỏ hơn 1,3; theo cách khác, nhỏ hơn 1,25; theo cách khác, nhỏ hơn 1,25 hoặc theo cách khác, nhỏ hơn 1,15. Theo một phương án không làm giới hạn phạm vi sáng chế, (các) phương pháp điều chế polyalphaolefin có thể tạo ra polyalphaolefin có chỉ số Bernoulli ($B (= 4[mm][rr]/[mr]^2)$) trong khoảng $1,4 \pm$

0,25; theo cách khác, trong khoảng $1,4 \pm 0,2$; theo cách khác, trong khoảng $1,4 \pm 0,15$; theo cách khác, trong khoảng $1,4 \pm 0,10$; theo cách khác, trong khoảng $1,3 \pm 0,3$; theo cách khác, trong khoảng $1,3 \pm 0,25$; theo cách khác, trong khoảng $1,3 \pm 0,2$; theo cách khác, trong khoảng $1,3 \pm 0,15$; theo cách khác, trong khoảng $1,4 \pm 0,1$; theo cách khác, trong khoảng $1,2 \pm 0,35$; theo cách khác, trong khoảng $1,2 \pm 0,3$; theo cách khác, trong khoảng $1,2 \pm 0,25$; theo cách khác, trong khoảng $1,2 \pm 0,2$; theo cách khác, trong khoảng $1,2 \pm 0,15$; theo cách khác, trong khoảng $1,1 \pm 0,4$; theo cách khác, trong khoảng $1,1 \pm 0,3$; theo cách khác, trong khoảng $1,1 \pm 0,2$ hoặc theo cách khác, trong khoảng $1,1 \pm 0,15$. Chỉ số Bernoullies khác của polyalphaolefin được bộc lộ ở đây và có thể được sử dụng, nhưng không chỉ giới hạn, trong các phương pháp được mô tả ở đây.

Theo một phương án không làm giới hạn phạm vi sáng chế, (các) phương pháp oligome hóa hoặc (các) phương pháp điều chế polyalphaolefin có thể tạo ra polyalphaolefin có RPVOT được xác định bằng ASTM D2272 với sự có mặt của 0,5% trọng lượng chất chống oxy hóa Naugalube® APAN bằng ít nhất 2100 phút; theo cách khác, ít nhất 2200 phút; theo cách khác, ít nhất 2300 phút hoặc theo cách khác, ít nhất 2400 phút. Theo một phương án không làm giới hạn phạm vi sáng chế khác, (các) phương pháp oligome hóa hoặc (các) phương pháp điều chế polyalphaolefin có thể tạo ra polyalphaolefin có RPVOT được xác định bằng ASTM D2272 với sự có mặt của 0,5% trọng lượng chất chống oxy hóa Naugalube® APAN bằng ít nhất 2000 phút; theo cách khác, ít nhất 2250 phút; theo cách khác, ít nhất 2500 phút; theo cách khác, ít nhất 2750 phút hoặc theo cách khác, ít nhất 3000 phút. Giá trị RPVOT khác của polyalphaolefin được bộc lộ ở đây và có thể được sử dụng, nhưng không chỉ giới hạn, trong các phương pháp được mô tả ở đây.

Các bước oligome hóa và/hoặc hydro hóa được sử dụng trong (các) phương pháp oligome hóa hoặc (các) phương pháp điều chế polyalphaolefin theo sáng chế có thể được thực hiện khi không có mặt chất pha loãng hoặc theo cách khác, có thể được thực hiện bằng cách sử dụng chất pha loãng, hoặc dung môi. Dung môi có thể được sử dụng trong bước oligome hóa và/hoặc hydro hóa được sử dụng trong (các) phương pháp oligome hóa hoặc (các) phương pháp điều chế polyalphaolefin có thể bao gồm, nhưng không chỉ giới hạn ở, hydrocacbon béo, hydrocacbon thơm, hydrocacbon béo

được halogen hóa, hydrocacbon thơm được halogen hóa, và hỗn hợp của chúng; theo cách khác, hydrocacbon béo; theo cách khác, hydrocacbon thơm; theo cách khác, hydrocacbon béo được halogen hóa hoặc theo cách khác, hydrocacbon thơm được halogen hóa. Hydrocacbon béo có thể dùng làm dung môi bao gồm C_3 - C_{20} hydrocacbon béo; theo cách khác, C_3 - C_{15} hydrocacbon béo hoặc theo cách khác, C_4 - C_{10} hydrocacbon béo. Hydrocacbon béo có thể là mạch vòng hoặc không vòng và/hoặc có thể là mạch thẳng hoặc mạch nhánh, nếu không được chỉ rõ theo cách khác. Ví dụ không làm giới hạn về dung môi hydrocacbon béo không vòng thích hợp có thể được sử dụng một mình hoặc trong hỗn hợp bất kỳ bao gồm propan, iso-butan, butan, pentan (n-pentan hoặc hỗn hợp gồm hydrocacbon béo không vòng có 5 nguyên tử cacbon mạch thẳng hoặc mạch nhánh), hexan (n-hexan hoặc hỗn hợp gồm hydrocacbon béo không vòng có 6 nguyên tử cacbon mạch thẳng hoặc mạch nhánh), heptan (n-heptan hoặc hỗn hợp các hydrocacbon béo không vòng có 7 nguyên tử cacbon mạch thẳng hoặc mạch nhánh), octan, và hỗn hợp của chúng. Ví dụ không làm giới hạn về dung môi là hydrocacbon béo vòng thích hợp bao gồm xyclohexan, metyl xyclohexan. Hydrocacbon thơm có thể dùng làm dung môi bao gồm C_6 - C_{20} hydrocacbon thơm hoặc theo cách khác, C_6 - C_{10} hydrocacbon thơm. Ví dụ không làm giới hạn về hydrocacbon thơm thích hợp có thể được sử dụng một mình hoặc trong hỗn hợp bất kỳ bao gồm benzen, toluen, xylen (bao gồm ortho-xylen, meta-xylen, para-xylen, hoặc hỗn hợp của chúng), và etylbenzen, hoặc hỗn hợp của chúng. Hydrocacbon béo được halogen hóa có thể dùng làm dung môi bao gồm C_1 - C_{15} hydrocacbon béo được halogen hóa; theo cách khác, C_1 - C_{10} hydrocacbon béo được halogen hóa hoặc theo cách khác, C_1 - C_5 hydrocacbon béo được halogen hóa. Hydrocacbon béo được halogen hóa có thể là mạch vòng hoặc không vòng và/hoặc có thể là mạch thẳng hoặc mạch nhánh, nếu không được chỉ rõ theo cách khác. Ví dụ không làm giới hạn về hydrocacbon béo được halogen hóa thích hợp có thể được sử dụng một mình hoặc trong hỗn hợp bất kỳ bao gồm metylen clorua, clorofom, cacbon tetracloetana, dicloetan, tricloetan, và hỗn hợp của chúng. Hydrocacbon thơm được halogen hóa có thể dùng làm dung môi bao gồm C_6 - C_{20} hydrocacbon thơm được halogen hóa hoặc theo cách khác, C_6 - C_{10} hydrocacbon thơm được halogen hóa. Ví dụ không làm giới hạn về hydrocacbon thơm được halogen hóa thích hợp có thể được sử dụng một mình hoặc trong hỗn hợp bất kỳ bao gồm clobenzen, diclobenzen, và hỗn

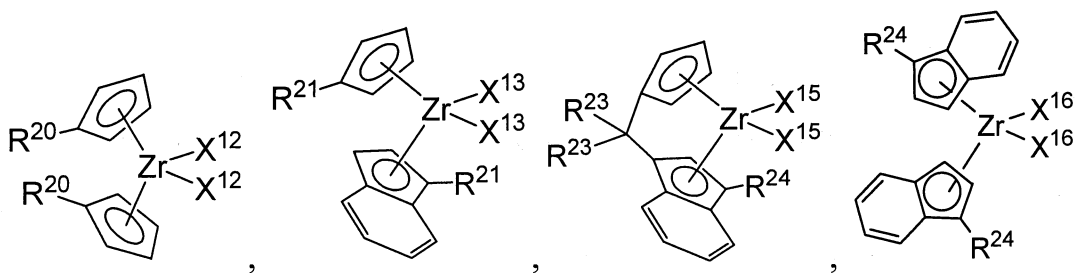
hợp của chúng.

Các phương án được chọn của phương pháp oligome hóa

Theo một khía cạnh, sáng chế đề xuất phương pháp oligome hóa bao gồm các bước:

a) cho monome alpha olefin tiếp xúc với hệ chất xúc tác, hệ chất xúc tác này chứa:

1) metaloxen có công thức:



hoặc hỗn hợp bất kỳ của chúng, trong đó:

i) mỗi nhóm R^{20} , R^{21} , R^{23} , và R^{24} độc lập là hydro, nhóm C_1 - C_{20} alkyl, hoặc nhóm C_1 - C_{20} alkenyl, và

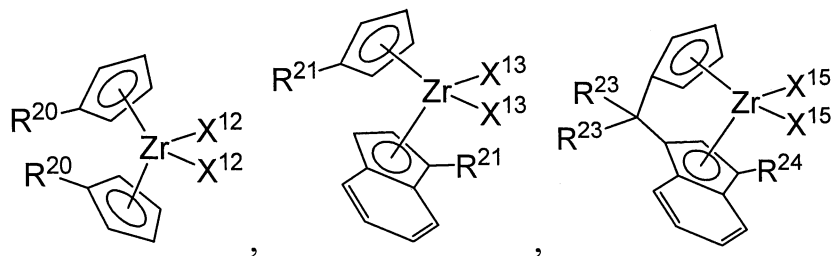
iii) mỗi nhóm X^{12} , X^{13} , X^{15} , và X^{16} độc lập là F, Cl, Br, hoặc I;

2) chất hoạt hóa thứ nhất chứa oxit dạng rắn được xử lý hóa học là nhôm oxit được flo hóa, nhôm oxit được clo hóa, nhôm oxit được sulfat hóa, silic oxit-nhôm oxit được flo hóa, hoặc hỗn hợp bất kỳ của chúng; và

3) chất hoạt hóa thứ hai là hợp chất hữu cơ-nhôm có công thức $Al(X^{10})_n(X^{11})_{3-n}$; trong đó X^{10} độc lập là C_1 - C_{20} hydrocarbonyl, X^{11} độc lập là halogenua, hydrua, hoặc C_1 - C_{20} hydrocarboxit; và n là giá trị số nằm trong khoảng từ 1 đến 3; và

b) tạo ra sản phẩm oligome trong điều kiện oligome hóa.

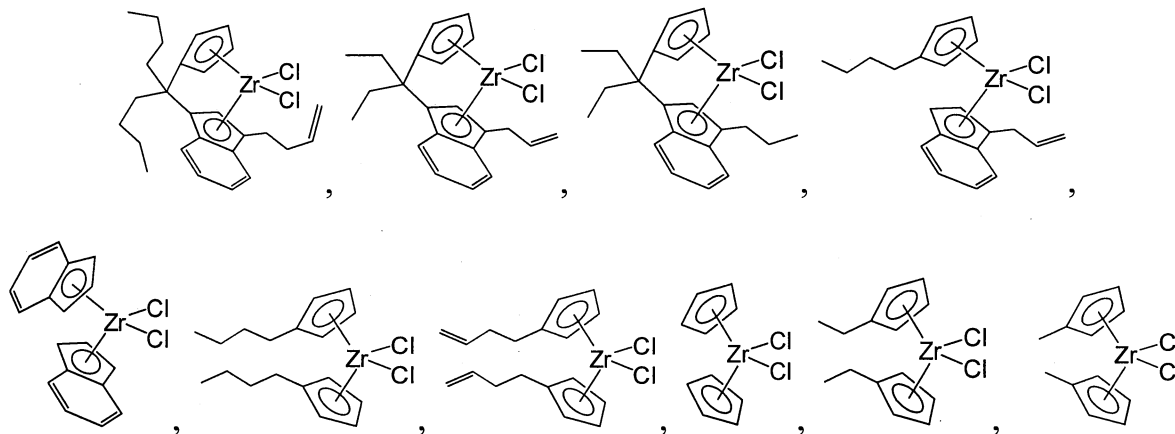
Theo một phương án không làm giới hạn phạm vi sáng chế, metaloxen có thể chứa, chủ yếu bao gồm, hoặc bao gồm:



hoặc hỗn hợp bất kỳ của chúng, trong đó:

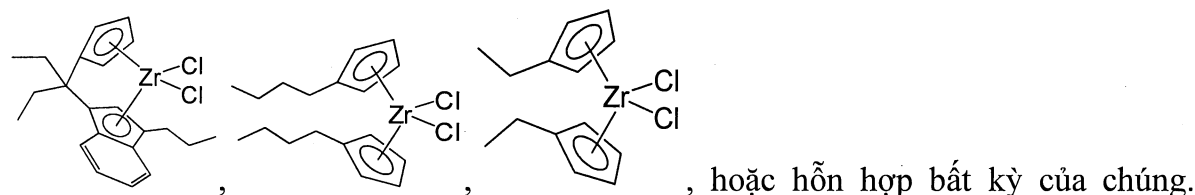
- i) mỗi nhóm R^{20} , R^{21} , và R^{23} độc lập là hydro, nhóm C_1 - C_{10} alkyl, hoặc nhóm C_1 - C_{10} alkenyl, và
- iii) mỗi nhóm X^{12} , X^{13} , và X^{15} độc lập là Cl hoặc Br.

Theo một phương án không làm giới hạn phạm vi sáng chế khác, metaloxen có thể chứa, chủ yếu bao gồm, hoặc bao gồm các hợp chất cấu trúc:



hoặc hỗn hợp bất kỳ của chúng.

Theo một phương án không làm giới hạn sáng chế khác, metaloxen có thể chứa, chủ yếu bao gồm, hoặc bao gồm các hợp chất có công thức:



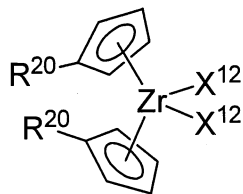
Các phương án khác của phương pháp oligome hóa và chất được điều chế bằng phương pháp oligome hóa dễ dàng được thấy rõ từ bản mô tả này.

Theo các khía cạnh khác, sáng chế đề xuất phương pháp oligome hóa bao gồm cho monome alpha olefin tiếp xúc với hệ chất xúc tác trong điều kiện oligome hóa và tạo dòng đi ra từ thiết bị phản ứng oligome hóa chứa sản phẩm oligome, phương pháp này còn bao gồm bước tách dòng đi ra từ thiết bị phản ứng oligome hóa để thu được sản phẩm oligome nặng, trong đó ít nhất một phần monome alpha olefin, dime, hoặc trime được loại bỏ ra khỏi dòng đi ra từ thiết bị phản ứng oligome hóa để tạo ra sản phẩm oligome nặng, và trong đó:

- 1) monome alpha olefin chủ yếu bao gồm alpha olefin mạch thẳng có 8 nguyên tử cacbon;

2) hệ chất xúc tác bao gồm:

i) metaloxen có công thức



trong đó

(1) mỗi nhóm R^{20} độc lập là hydro, C_1 - C_{10} nhóm alkyl, hoặc nhóm C_1 - C_{10} alkenyl, và

(2) mỗi nhóm X^{12} độc lập là Cl hoặc Br;

ii) chất hoạt hóa thứ nhất là silic oxit-nhôm oxit được flo hóa; và

iii) chất hoạt hóa thứ hai là trialkyl nhôm; và

3) nhiệt độ oligome hóa nằm trong khoảng từ 90°C đến 120°C ;

4) sản phẩm oligome nặng có độ nhớt động ở 100°C nằm trong khoảng từ $30\text{ mm}^2/\text{s}$ đến $50\text{ mm}^2/\text{s}$ (từ 30 cSt đến 50 cSt); và

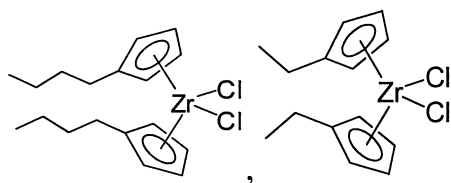
5) sản phẩm oligome nặng chứa

i) dưới 0,5% trọng lượng monome alpha olefin;

ii) dưới 1% trọng lượng dime; và

iii) ít nhất 88% trọng lượng oligome cao.

Theo một số phương án không làm giới hạn phạm vi sáng chế, metaloxen có thể chứa, chủ yếu bao gồm, hoặc bao gồm các hợp chất có công thức:



, hoặc hỗn hợp bất kỳ của chúng.

Theo một số phương án, sản phẩm oligome nặng có thể có chỉ số độ nhớt nằm trong khoảng từ 150 đến 260. Theo một phương án không làm giới hạn phạm vi sáng chế khác, sản phẩm oligome nặng được hydro hóa để thu được polyalphaolefin. Theo các phương án không làm giới hạn phạm vi sáng chế khác trong đó sản phẩm oligome nặng được hydro hóa để thu được polyalphaolefin, polyalphaolefin có thể có điểm rót nằm trong khoảng từ -30°C đến -90°C . Theo các phương án khác trong đó sản phẩm oligome nặng được hydro hóa để thu được polyalphaolefin, polyalphaolefin có thể có RPVOT được xác định bằng ASTM D2272 với sự có mặt của 0,5% trọng lượng chất

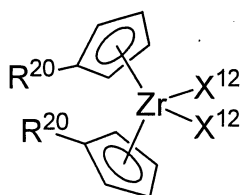
chống oxy hóa Naugalube® APAN bằng ít nhất 2100 phút. Theo các phương án không làm giới hạn phạm vi sáng chế khác trong đó sản phẩm oligome nặng được hydro hóa để thu được polyalphaolefin, polyalphaolefin có thể có chỉ số Bernoulli nhỏ hơn 1,65 hoặc theo cách khác, trong khoảng $1,4 \pm 0,25$. Theo một số phương án, polyalphaolefin có thể không có hiện tượng kết tinh có thể thấy rõ trên -40°C như được xác định bằng phương pháp đo nhiệt lượng bằng tia quét vi phân bằng cách sử dụng ASTM D 3418. Các phương án khác của phương pháp oligome hóa và chất được điều chế bằng phương pháp oligome hóa dễ dàng được thấy rõ từ bản mô tả này.

Theo một khía cạnh khác, sáng chế đề xuất phương pháp oligome hóa bao gồm bước cho monome alpha olefin tiếp xúc với hệ chất xúc tác trong điều kiện oligome hóa và tạo dòng đi ra từ thiết bị phản ứng oligome hóa chứa sản phẩm oligome, phương pháp này còn bao gồm bước tách dòng đi ra từ thiết bị phản ứng oligome hóa để thu được sản phẩm oligome nặng, trong đó ít nhất một phần monome alpha olefin, dime, hoặc trime được loại bỏ ra khỏi dòng đi ra từ thiết bị phản ứng oligome hóa để tạo ra sản phẩm oligome nặng, và trong đó:

1) monome alpha olefin chủ yếu bao gồm alpha olefin mạch thẳng có 8 nguyên tử cacbon;

2) hệ chất xúc tác chứa

i) metaloxen có công thức



, trong đó

(1) mỗi nhóm R^{20} độc lập là hydro, nhóm $\text{C}_1\text{-C}_{10}$ alkyl, hoặc nhóm $\text{C}_1\text{-C}_{10}$ alkenyl, và

(2) mỗi nhóm X^{12} độc lập là Cl hoặc Br;

ii) chất hoạt hóa thứ nhất là silic oxit-nhôm oxit được flo hóa; và

iii) chất hoạt hóa thứ hai là trialkyl nhôm;

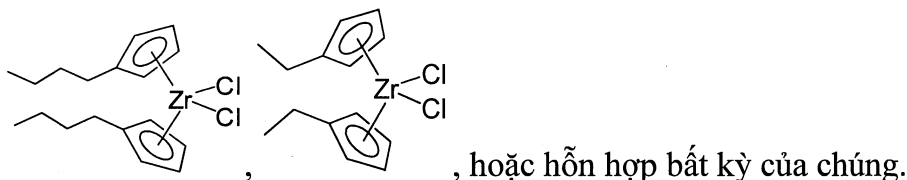
3) nhiệt độ oligome hóa nằm trong khoảng từ 70°C đến 90°C ;

4) sản phẩm oligome nặng có độ nhớt động ở 100°C nằm trong khoảng từ $80 \text{ mm}^2/\text{s}$ đến $140 \text{ mm}^2/\text{s}$ (từ 80 cSt đến 140 cSt); và

5) sản phẩm oligome nặng chứa

- i) dưới 0,5% trọng lượng monome alpha olefin;
- ii) dưới 1% trọng lượng dime; và
- iii) ít nhất 88% trọng lượng oligome cao.

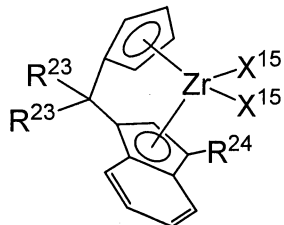
Theo một số phương án không làm giới hạn phạm vi sáng chế, metaloxen có thể chứa, chủ yếu bao gồm, hoặc bao gồm các hợp chất có công thức:



Theo một số phương án, sản phẩm oligome nặng có thể có chỉ số độ nhớt nằm trong khoảng từ 150 đến 260. Theo một phương án không làm giới hạn phạm vi sáng chế khác, sản phẩm oligome nặng được hydro hóa để thu được polyalphaolefin. Theo các phương án không làm giới hạn phạm vi sáng chế khác trong đó sản phẩm oligome nặng được hydro hóa để thu được polyalphaolefin, polyalphaolefin có thể có điểm rót nằm trong khoảng từ -30°C đến -90°C . Theo các phương án khác trong đó sản phẩm oligome nặng được hydro hóa để thu được polyalphaolefin, polyalphaolefin có thể có RPVOT được xác định bằng ASTM D2272 với sự có mặt của 0,5% trọng lượng chất chống oxy hóa Naugalube® APAN bằng ít nhất 2100 phút. Theo các phương án không làm giới hạn phạm vi sáng chế khác trong đó sản phẩm oligome nặng được hydro hóa để thu được polyalphaolefin, polyalphaolefin có thể có chỉ số Bernoulli nhỏ hơn 1,65 hoặc theo cách khác, trong khoảng $1,1 \pm 0,4$. Theo một số phương án, polyalphaolefin có thể không có hiện tượng kết tinh có thể thấy rõ trên -40°C như được xác định bằng phương pháp đo nhiệt lượng bằng tia quét vi phân bằng cách sử dụng ASTM D 3418. Các phương án khác của phương pháp oligome hóa và chất được điều chế bằng phương pháp oligome hóa dễ dàng được thấy rõ từ bản mô tả này.

Theo một khía cạnh khác, sáng chế đề xuất phương pháp oligome hóa bao gồm bước cho monome alpha olefin tiếp xúc với hệ chất xúc tác trong điều kiện oligome hóa và tạo dòng đi ra từ thiết bị phản ứng oligome hóa chứa sản phẩm oligome, phương pháp này còn bao gồm bước tách dòng đi ra từ thiết bị phản ứng oligome hóa để thu được sản phẩm oligome nặng, trong đó ít nhất một phần monome alpha olefin, dime, hoặc trime được loại bỏ ra khỏi dòng đi ra từ thiết bị phản ứng oligome hóa để tạo ra sản phẩm oligome nặng, và trong đó:

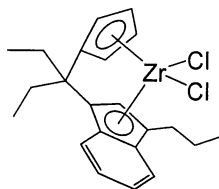
- 1) monome alpha olefin chủ yếu bao gồm alpha olefin mạch thẳng có 8 nguyên tử cacbon;
- 2) hệ chất xúc tác chứa
 - i) metaloxen có công thức



trong đó

- (1) mỗi nhóm R^{23} và R^{24} độc lập là hydro, nhóm C_1-C_{10} alkyl, hoặc nhóm C_1-C_{10} alkenyl, và
- (2) mỗi nhóm X^{15} độc lập là Cl hoặc Br;
 - ii) chất hoạt hóa thứ nhất là silic oxit-nhôm oxit được flo hóa; và
 - iii) chất hoạt hóa thứ hai là trialkyl nhôm;
- 3) nhiệt độ oligome hóa nằm trong khoảng từ 110°C đến 140°C ;
- 4) sản phẩm oligome nặng có độ nhớt động ở 100°C nằm trong khoảng từ $80\text{ mm}^2/\text{s}$ đến $140\text{ mm}^2/\text{s}$ (từ 80 cSt đến 140 cSt); và
- 5) sản phẩm oligome nặng chứa
 - i) dưới 0,4% trọng lượng monome alpha olefin;
 - ii) dưới 1,5% trọng lượng dime; và
 - iii) ít nhất 88% trọng lượng oligome cao.

Theo một số phương án không làm giới hạn phạm vi sáng chế, metaloxen có thể chứa, chủ yếu bao gồm, hoặc bao gồm hợp chất có công thức:



Theo một số phương án, sản phẩm oligome nặng có thể có chỉ số độ nhớt nằm trong khoảng từ 150 đến 260. Theo một phương án không làm giới hạn phạm vi sáng chế khác, sản phẩm oligome nặng được hydro hóa để thu được polyalphaolefin. Theo các phương án không làm giới hạn phạm vi sáng chế khác trong đó sản phẩm oligome nặng được hydro hóa để thu được polyalphaolefin, polyalphaolefin có thể có điểm rót

nằm trong khoảng từ -30°C đến -90°C . Theo các phương án khác trong đó sản phẩm oligome nặng được hydro hóa để thu được polyalphaolefin, polyalphaolefin có thể có RPVOT được xác định bằng ASTM D2272 với sự có mặt của 0,5% trọng lượng chất chống oxy hóa Naugalube® APAN bằng ít nhất 2100 phút. Theo các phương án không làm giới hạn phạm vi sáng chế khác trong đó sản phẩm oligome nặng được hydro hóa để thu được polyalphaolefin, polyalphaolefin có thể có chỉ số Bernoulli nhỏ hơn 1,65 hoặc theo cách khác, chỉ số này trong khoảng $1,1 \pm 0,4$. Theo một số phương án, polyalphaolefin có thể không có hiện tượng kết tinh có thể thấy rõ trên -40°C như được xác định bằng phương pháp đo nhiệt lượng bằng tia quét vi phân bằng cách sử dụng ASTM D 3418. Các phương án khác của phương pháp oligome hóa và chất được điều chế bằng phương pháp oligome hóa dễ dàng được thấy rõ từ bản mô tả này.

Theo một khía cạnh khác, phương pháp theo sáng chế có thể bao gồm bước trộn polyalphaolefin với ít nhất polyalphaolefin thứ hai. Theo khía cạnh này của phương pháp oligome hóa,

- a) polyalphaolefin thứ hai có thể có độ nhớt động ở 100°C khác ít nhất $10 \text{ mm}^2/\text{s}$ (10 cSt) so với polyalphaolefin;
- b) polyalphaolefin thứ hai được tạo ra bằng cách sử dụng monome khác với polyalphaolefin hoặc
- c) polyalphaolefin thứ hai có độ nhớt động ở 100°C khác ít nhất $10 \text{ mm}^2/\text{s}$ (10 cSt) so với polyalphaolefin và polyalphaolefin thứ hai được tạo ra bằng cách sử dụng monome khác với polyalphaolefin.

Thiết bị phản ứng

Nhằm mục đích của sáng chế, thuật ngữ thiết bị phản ứng oligome hóa bao gồm thiết bị phản ứng oligome hóa hoặc hệ thiết bị phản ứng oligome hóa bất kỳ đã biết trong lĩnh vực này có thể oligome hóa monome alpha olefin cụ thể để tạo ra sản phẩm oligome olefin theo sáng chế. Thiết bị phản ứng oligome hóa thích hợp cho sáng chế có thể chứa ít nhất một hệ thống nạp nguyên liệu thứ nhất, ít nhất một hệ thống nạp hệ chất xúc tác hoặc các thành phần của hệ chất xúc tác, ít nhất một hệ thống phản ứng, ít nhất một hệ thống thu hồi oligome hoặc tổ hợp thích hợp bất kỳ của chúng. Thiết bị phản ứng thích hợp theo sáng chế có thể còn bao gồm hệ thống bất kỳ trong số hoặc tổ

hợp của, hệ thống bảo quản hệ chất xúc tác, hệ thống bảo quản các thành phần của hệ chất xúc tác, hệ thống làm lạnh, hệ thống tuần hoàn lại chất pha loãng hoặc dung môi, hệ thống tuần hoàn lại monome, hoặc hệ thống điều khiển. Các thiết bị phản ứng này có thể tháo liên tục và tái tuần hoàn trực tiếp chất xúc tác, chất pha loãng, monome, và oligome. Nói chung, quy trình liên tục có thể bao gồm đưa liên tục monome alpha olefin, chất xúc tác, và chất pha loãng vào thiết bị phản ứng oligome hóa và loại bỏ liên tục ra khỏi thiết bị phản ứng huyền phù đặc chứa oligome alpha olefin, hệ chất xúc tác, và chất pha loãng hoặc dung môi.

Hệ thống thiết bị phản ứng oligome hóa theo sáng chế có thể bao gồm một loại thiết bị phản ứng cho một hệ thống hoặc hệ thống nhiều thiết bị phản ứng bao gồm hai hoặc nhiều loại thiết bị phản ứng vận hành song song hoặc nối tiếp. Hệ thống nhiều thiết bị phản ứng có thể bao gồm các thiết bị phản ứng nối với nhau để thực hiện quá trình oligome hóa, hoặc thiết bị phản ứng không nối với nhau. Monome alpha olefin có thể được oligome hóa trong một thiết bị phản ứng trong một tập hợp điều kiện phản ứng, và sau đó dòng đi ra từ thiết bị phản ứng chứa oligome alpha olefin (và có thể là hệ chất xúc tác và/hoặc monome alpha olefin không phản ứng của thiết bị phản ứng thứ nhất có thể được chuyển sang thiết bị phản ứng thứ hai để oligome hóa trong một tập hợp điều kiện khác.

Theo một khía cạnh của sáng chế, hệ thống thiết bị phản ứng oligome hóa có thể bao gồm ít nhất một thiết bị phản ứng tuần hoàn. Các thiết bị này đã biết trong lĩnh vực này và có thể bao gồm vòng tuần hoàn ngang hoặc tuần hoàn dọc. Các vòng tuần hoàn này có thể bao gồm một vòng tuần hoàn hoặc nhiều vòng tuần hoàn. Nhiều thiết bị phản ứng tuần hoàn có thể bao gồm cả vòng tuần hoàn ngang và vòng tuần hoàn dọc. Quá trình oligome hóa có thể được thực hiện bằng cách sử dụng monome alpha olefin làm chất mang lỏng, hoặc với sự có mặt của chất pha loãng hoặc dung môi hữu cơ có thể phân tán và/hoặc mang các thành phần của hệ chất xúc tác và/hoặc hệ chất xúc tác. Dung môi hữu cơ cũng có thể được sử dụng để làm giảm độ nhớt của hỗn hợp phản ứng (chứa oligome alpha olefin) và làm cho hỗn hợp phản ứng dễ chảy hoặc bơm qua thiết bị phản ứng. Dung môi được bộc lộ ở đây và có thể được sử dụng không giới hạn để phân tán và/hoặc mang hệ chất xúc tác. Monome, dung môi, các thành phần của hệ chất xúc tác và/hoặc hệ chất xúc tác, có thể được cấp liên tục vào thiết bị phản ứng tuần hoàn trong đó quá trình oligome hóa xảy ra.

Theo một khía cạnh khác nữa của sáng chế, thiết bị phản ứng oligome hóa có thể bao gồm thiết bị phản ứng kiểu ống. Thiết bị phản ứng kiểu ống có thể có nhiều vùng trong đó monome mới, hệ chất xúc tác, và/hoặc các thành phần của hệ chất xúc tác (và/hoặc các thành phần khác của phản ứng oligome hóa, ví dụ, hydro) được bổ sung. Monome có thể được đưa vào ở một vùng của thiết bị phản ứng trong khi hệ chất xúc tác, và/hoặc các thành phần chất xúc tác (và/hoặc các thành phần khác của phản ứng oligome hóa, ví dụ, hydro) có thể được đưa vào ở một vùng khác của thiết bị phản ứng. Nhiệt và áp suất có thể được sử dụng thích hợp để thu được điều kiện phản ứng oligome hóa tối ưu.

Theo một khía cạnh khác của sáng chế, thiết bị phản ứng oligome hóa có thể bao gồm thiết bị phản ứng oligome hóa trong dung dịch. Trong quá trình oligome hóa trong dung dịch, monome alpha olefin có thể được cho tiếp xúc với hệ chất xúc tác và hoặc các thành phần của hệ chất xúc tác bằng cách khuấy thích hợp hoặc phương tiện khác. Chất mang bao gồm chất pha loãng hữu cơ trơ (nếu được sử dụng) hoặc monome dư có thể được sử dụng. Nếu cần, monome có thể được cho tiếp xúc trong pha hơi với sản phẩm của phản ứng xúc tác, với sự có mặt hoặc không có mặt của chất lỏng. Vùng oligome hóa được duy trì ở nhiệt độ và áp suất sẽ tạo ra dung dịch sản phẩm oligome trong môi trường phản ứng. Có thể khuấy trong quá trình oligome hóa để thu được việc kiểm soát nhiệt độ tốt hơn và duy trì hỗn hợp oligome hóa đồng nhất trong vùng oligome hóa. Phương tiện thích hợp được sử dụng để làm tản nhiệt tỏa ra của phản ứng oligome hóa. Quá trình oligome hóa có thể được thực hiện theo cách gián đoạn, hoặc theo cách liên tục. Thiết bị phản ứng có thể bao gồm một dãy gồm ít nhất một thiết bị tách sử dụng áp suất cao và/hoặc áp suất thấp để tách oligome cần thiết.

Theo một khía cạnh khác của sáng chế, hệ thống thiết bị phản ứng oligome hóa có thể bao gồm tổ hợp hai hoặc nhiều thiết bị phản ứng. Quá trình điều chế oligome trong nhiều thiết bị phản ứng có thể bao gồm nhiều giai đoạn trong ít nhất hai thiết bị phản ứng oligome hóa riêng biệt nối với nhau bằng thiết bị chuyển có thể cho phép chuyển oligome tạo ra từ thiết bị phản ứng oligome hóa thứ nhất vào thiết bị phản ứng thứ hai. Điều kiện oligome hóa cần thiết trong một thiết bị phản ứng có thể là khác với điều kiện vận hành của thiết bị phản ứng kia. Theo cách khác, quá trình oligome hóa trong nhiều thiết bị phản ứng có thể bao gồm quá trình chuyển oligome bằng tay từ

một thiết bị phản ứng sang thiết bị phản ứng tiếp theo để oligome hóa liên tục. Thiết bị phản ứng này có thể bao gồm tổ hợp bất kỳ, bao gồm, nhưng không chỉ giới hạn ở, tổ hợp bất kỳ của một hoặc nhiều thiết bị phản ứng tuần hoàn, một hoặc nhiều thiết bị phản ứng kiểu ống, một hoặc nhiều thiết bị phản ứng trong dung dịch, một hoặc nhiều thiết bị phản ứng kiểu thùng khuấy, hoặc một hoặc nhiều thiết bị phản ứng kiểu nồi hấp.

Theo một khía cạnh, phương pháp theo sáng chế có thể bao gồm một bước tách hoặc nhiều bước tách để loại bỏ ít nhất một phần monome không phản ứng, dime, và/hoặc trime. Theo một khía cạnh, (các) bước tách được thực hiện để làm giảm lượng monome, dime, và/hoặc trime trong dòng đi ra từ thiết bị phản ứng và/hoặc sản phẩm oligome olefin. Hàm lượng monome cần thiết, dime, và/hoặc trime được mô tả ở đây và có thể được sử dụng không hạn chế để mô tả thêm (các) bước tách. (Các) bước tách cũng có thể được sử dụng để loại bỏ chất pha loãng hoặc dung môi, nếu được sử dụng, ra khỏi oligome alpha olefin.

Theo một khía cạnh khác nữa, phương pháp theo sáng chế có thể bao gồm một bước tách hoặc nhiều bước tách để thu được sản phẩm oligome alpha olefin (hoặc sản phẩm oligome), hoặc sản phẩm oligome alpha olefin để tạo ra polyalphaolefin, có một số đặc tính cần thiết nhất định. Một đặc tính cần thiết có thể đạt được bằng cách sử dụng bước hoặc các bước tách là độ nhớt động ở 100°C. Đặc tính cần thiết thứ hai có thể đạt được bằng cách sử dụng bước hoặc các bước tách để đạt được điểm cháy cần thiết. Đặc tính cần thiết thứ ba có thể đạt được bằng cách sử dụng bước hoặc các bước tách để đạt được nhiệt độ bốc cháy cần thiết. Đặc tính cần thiết thứ tư có thể đạt được bằng cách sử dụng bước hoặc các bước tách để đạt được chỉ số bay hơi Noack cần thiết. Theo một phương án, (các) bước tách có thể được sử dụng để loại bỏ oligome có trọng lượng phân tử thấp và/hoặc cao để tạo ra sản phẩm oligome alpha olefin, hoặc sản phẩm oligome alpha olefin để tạo ra polyalphaolefin, có độ nhớt động ở 100°C, điểm cháy, nhiệt độ bốc cháy, và/hoặc chỉ số bay hơi Noack cần thiết. Theo một phương án khác, (các) bước tách có thể được sử dụng để tạo ra nhiều sản phẩm oligome alpha olefin, hoặc nhiều sản phẩm oligome alpha olefin để tạo ra polyalphaolefin, có độ nhớt động ở 100°C cần thiết. Theo một phương án khác nữa, (các) bước tách có thể được sử dụng để tạo ra sản phẩm có độ nhớt động ở 100°C và điểm cháy cần thiết. Độ nhớt động ở 100°C, điểm cháy, và nhiệt độ bốc cháy cần thiết

của (các) sản phẩm oligome alpha olefin được mô tả ở đây và có thể được sử dụng không hạn chế để mô tả thêm (các) bước tách sản phẩm oligome olefin, sản phẩm oligome nặng, và/hoặc polyalphaolefin.

Theo một số phương án, chất phụ gia và chất cải biến được bổ sung vào polyalphaolefin để thu được các đặc tính hoặc tác dụng cần thiết. Bằng cách sử dụng sáng chế được mô tả ở đây, PAO có thể được sử dụng làm dầu bôi trơn hoặc dầu tổng hợp và chất tương tự có thể được tạo ra với chi phí thấp hơn trong khi vẫn duy trì hầu hết hoặc tất cả các đặc tính cần thiết của oligome được điều chế bằng chất xúc tác metaloxen.

Nếu không được chỉ rõ theo cách khác, khi một khoảng thuộc loại bất kỳ được bộc lộ hoặc yêu cầu bảo hộ, ví dụ, khoảng số lượng nguyên tử cacbon, độ nhớt, chỉ số độ nhớt, điểm rót, chỉ số Bernoulli, nhiệt độ, và thông số tương tự, dự định bộc lộ hoặc yêu cầu bảo hộ mỗi số riêng rẽ có thể có mà khoảng này có thể bao hàm, kể cả các khoảng nhỏ bất kỳ nằm trong đó. Ví dụ, khi mô tả một khoảng số lượng nguyên tử cacbon, mỗi số nguyên riêng biệt có thể có và các khoảng giữa các số nguyên thể hiện số nguyên tử chứa trong khoảng này đều được bao hàm trong khoảng này. Do đó, khi nói nhóm C_1 - C_{10} alkyl hoặc nhóm alkyl có từ 1 đến 10 nguyên tử cacbon hoặc có “tới” 10 nguyên tử cacbon, tác giả sáng chế muốn chỉ ra rằng nhóm alkyl này có thể có 1, 2, 3, 4, 5, 6, 7, 8, 9, hoặc 10 nguyên tử cacbon, và các phương pháp mô tả nhóm này là có thể thay thế lẫn nhau. Khi mô tả một khoảng kết quả đo như chỉ số độ nhớt, mỗi số có thể có của khoảng này, có thể dùng để chỉ giá trị trong khoảng này với nhiều hơn một chữ số có nghĩa có mặt trong các điểm đầu của khoảng này. Trong ví dụ này, chỉ số độ nhớt nằm trong khoảng từ 190 đến 200 bao gồm các chỉ số độ nhớt 190, 191, 192, 193, 194, 195, 196, 197, 198, 199, và 200 riêng biệt. Tác giả sáng chế dự định rằng hai phương pháp mô tả khoảng giá trị này là có thể thay thế lẫn nhau. Ngoài ra, nếu một khoảng giá trị được bộc lộ hoặc yêu cầu bảo hộ, tác giả sáng chế dự định bộc lộ từng số riêng biệt có thể có nằm trong khoảng này, tác giả sáng chế cũng dự định bộc lộ cả khoảng giá trị, và có thể thay thế cho việc bộc lộ khoảng nhỏ bất kỳ và tất cả các khoảng nhỏ và tổ hợp các khoảng nhỏ nằm trong đó. Theo khía cạnh này, việc bộc lộ nhóm C_1 - C_{10} alkyl được dự định bao gồm nhóm C_1 - C_6 alkyl, C_4 - C_8 alkyl, C_2 - C_7 alkyl, hỗn hợp nhóm C_1 - C_3 và C_5 - C_7 alkyl, v.v..

Đối với hợp chất cụ thể bất kỳ được bộc lộ ở đây, cấu trúc chung được thể hiện còn được dự định bao gồm tất cả các chất đồng phân cấu hình riêng và chất đồng phân lập thể có thể tạo ra từ tập hợp nhóm thể cụ thể, nếu không được chỉ rõ theo cách khác. Do đó, cấu trúc chung này bao gồm tất cả các chất đồng phân đối ảnh, chất đồng phân không đối quang, và chất đồng phân dị cấu quang học khác bất kể ở dạng đồng phân đối ảnh hoặc raxemic, cũng như hỗn hợp các chất đồng phân lập thể, nếu ngữ cảnh cho phép hoặc yêu cầu. Đối với công thức cụ thể bất kỳ được thể hiện, công thức chung bất kỳ được thể hiện còn bao gồm tất cả các chất đồng phân cấu hình riêng, chất đồng phân vùng, và chất đồng phân lập thể có thể tạo ra từ tập hợp nhóm thể cụ thể.

Ví dụ thực hiện sáng chế

Sáng chế được minh họa thêm bằng các ví dụ sau, các ví dụ này không được hiểu là làm giới hạn phạm vi sáng chế theo cách bất kỳ. Ngược lại, cần hiểu rằng sau khi đọc phần mô tả ở đây các khía cạnh, phương án, cải biến khác và phương án tương đương của chúng, có thể được gợi ý cho người có hiểu biết trung bình về lĩnh vực kỹ thuật này mà không đi chệch khỏi phạm vi của yêu cầu bảo hộ kèm theo.

Trong các ví dụ sau, nếu không được chỉ rõ theo cách khác, phương pháp tổng hợp và điều chế được mô tả ở đây được thực hiện trong môi trường trơ như nitơ và/hoặc argon. Dung môi được mua từ nguồn trên thị trường và thường được làm khô trước khi sử dụng. Nếu không được chỉ rõ theo cách khác, chất phản ứng được mua từ nguồn trên thị trường.

Phương pháp chung

Phương pháp chung oligome hóa alpha olefin

Nếu không được chỉ rõ theo cách khác, phương pháp chung được sử dụng để oligome hóa alpha olefin là như sau. Alpha olefin được làm sạch hoặc rửa bằng cách sử dụng dòng nitơ trong vài giờ, sau đó được làm khô trên rây phân tử 13x trong môi trường trơ. Vò gia nhiệt được sử dụng để gia nhiệt bình chứa mẫu olefin tới nhiệt độ phản ứng cần thiết và việc khuấy được sử dụng để duy trì nhiệt độ đồng nhất và trộn. Bình được nối với máy sục khí trong dầu theo kỹ thuật an toàn thông thường. Khi sử dụng thành phần alkyl nhôm, thành phần alkyl nhôm này được bổ sung vào bình trước, sau đó bổ sung toluen, olefin, hoặc dung dịch hydrocacbon khác của metaloxen

(thường là 0,5 – 10 mg/ml). Sau đó, chất hoạt hóa oxit dạng rắn được xử lý hóa học (superaxit dạng rắn) được thêm vào. Thứ tự thêm các chất phản ứng này có thể thay đổi, nhưng thành phần alkyl nhôm thường được thêm vào trước để khử hơi ẩm còn lại bất kỳ trong olefin. Việc bổ sung chất xúc tác axit dạng rắn thường dẫn tới việc không có hiện tượng phát nhiệt có thể thấy rõ, và nếu phản ứng phát nhiệt được quan sát, lượng chất xúc tác và chất hoạt hóa có thể giảm đi để làm giảm đỉnh phát nhiệt ban đầu xuống dưới 5°C. Các đỉnh phát nhiệt yếu ban đầu này sẽ thường mất đi sau vài phút, và nhiệt độ phản ứng sẽ giảm tới nhiệt độ cần thiết, ở đó nhiệt độ này được duy trì trong thời gian phản ứng. Tất cả các quy trình được thực hiện trong điều kiện môi trường trơ.

Đối với phản ứng oligome hóa alpha olefin được thực hiện trong môi trường hydro, phương pháp chung này được thực hiện trong thiết bị phản ứng Zipperclave™ là sản phẩm của Autoclave Engineers ở áp suất hydro cần thiết. Sản phẩm được tách ra bằng cách giảm nhiệt độ phản ứng, và bằng cách bổ sung vài ml nước để làm mất hoạt tính của chất xúc tác còn lại. Nếu cần và/hoặc và để dễ lọc, dung môi dễ bay hơi như n-pentan được thêm vào, và các thành phần chất xúc tác kết tủa và axit dạng rắn được loại bỏ bằng cách lọc. Kỹ thuật chưng cất chân không được sử dụng để loại bỏ các thành phần có trọng lượng phân tử thấp và để thu được sản phẩm oligome chưng cất.

Độ nhớt Brookfield

Độ nhớt Brookfield ở -8°C, -20°C, -26°C, và -40°C của oligome alpha olefin, oligome được hydro hóa, hoặc PAO có bán trên thị trường được xác định theo ASTM D5133 ở nhiệt độ đã nêu, kết quả được tính theo centipoise (cP).

Xác định trọng lượng phân tử và sự phân bố trọng lượng phân tử bằng phương pháp sắc ký thẩm gel (Gel Permeation Chromatography: GPC)

Trọng lượng phân tử trung bình thu được bằng cách sử dụng phương pháp một cột với cột Polymer Labs PL-gel MIXED-E. Cỡ hạt nạp vào cột là 3 micron, và kích thước cột là 300 mm × 7,5 mm. Bộ phát hiện chỉ số khúc xạ được sử dụng. Chất chuẩn hiệu chỉnh polystyren 4 thành phần có trọng lượng phân tử 1000, 4000, 20000, và 50000 được sử dụng, để tạo ra đường làm khớp bậc hai với các điểm hiệu chỉnh có giá trị R^2 bằng 0,998. Đường cong hiệu chỉnh này được sử dụng để thu được dữ liệu trọng lượng phân tử của các Ví dụ được nêu.

Phương pháp DSC

Phương pháp phân tích đo nhiệt lượng bằng tia quét vi phân (Differential Scanning Calorimetry: DSC) được thực hiện trên thiết bị Perkin-Elmer DSC-7, với tốc độ dòng nitơ là 20 cc/phút ($\text{cm}^3/\text{phút}$). Chương trình nhiệt độ được sử dụng là như sau:

- Giữ trong 5 phút ở -60°C ;
- Gia nhiệt từ -60°C đến 100°C ở tốc độ $10^\circ\text{C}/\text{phút}$;
- Làm lạnh từ 100°C xuống -60°C ở tốc độ $10^\circ\text{C}/\text{phút}$;
- Giữ ở -60°C trong 5 phút; và
- Gia nhiệt từ -60°C đến 100°C ở tốc độ $10^\circ\text{C}/\text{phút}$.

Độ ổn định trượt

Phương pháp chuẩn thử nghiệm độ ổn định trượt được xác định theo ASTM D6278-07. Phương pháp ASTM này đánh giá mức độ giảm độ nhớt theo % của chất lỏng chứa oligome do sự thoái hóa oligome trong thiết bị vòi phun cắt cao, trong đó sự ảnh hưởng do nhiệt hoặc oxy hóa được giảm đến mức tối thiểu.

Độ ổn định trượt KRL

Độ ổn định trượt KRL (20 giờ) của oligome alpha olefin, oligome được hydro hóa, hoặc PAO có bán trên thị trường được xác định theo DIN 51350, kết quả được thể hiện dưới dạng tỷ lệ giảm độ nhớt theo % hoặc tỷ lệ %.

Độ nhớt động

Độ nhớt động ở 100°C và độ nhớt động ở 40°C của oligome alpha olefin được xác định theo ASTM D445 hoặc D742 ở nhiệt độ 100°C và 40°C , kết quả được tính bằng centistoc (cSt).

Chỉ số độ nhớt

Chỉ số độ nhớt được xác định theo phương pháp ASTM D2270, sử dụng các Bảng được đưa ra ở đây đối với dữ liệu độ nhớt được xác định ở nhiệt độ 100°C và 40°C .

Điểm rót

Điểm rót là nhiệt độ mà ở đó mẫu bắt đầu chảy trong điều kiện được kiểm soát cẩn thận. Điểm rót được xác định như mô tả trong ASTM D 5950 hoặc D97, và kết quả được thể hiện bằng $^\circ\text{C}$. Khi dầu nền của dầu bôi trơn có điểm rót thấp, chúng cũng

có thể có các đặc tính tốt khác ở nhiệt độ thấp, như điểm đục thấp, điểm bắt kín tấm lọc ở nhiệt độ lạnh thấp, và độ nhớt khởi động bằng tay quay ở nhiệt độ thấp.

Điểm cháy

Điểm cháy được xác định bằng cách sử dụng phương pháp cốc hở Cleveland (Cleveland Open Cup: COC) theo ASTM D92, với kết quả được thể hiện bằng °C.

Nhiệt độ bốc cháy

Nhiệt độ bốc cháy được xác định bằng cách sử dụng phương pháp cốc hở Cleveland (COC) theo ASTM D92, với kết quả được thể hiện bằng °C.

Thử nghiệm về khả năng bay hơi Noack

Khả năng bay hơi Noack được xác định theo ASTM D5800 để xác định lượng tổn hao do bay hơi của oligome được hydro hóa hoặc PAO có bán trên thị trường trong điều kiện làm việc ở nhiệt độ cao, và được thể hiện bằng % trọng lượng.

Thử nghiệm về độ ổn định oxy hóa RPVOT

Độ ổn định oxy hóa RPVOT được xác định theo ASTM D2272. Phương pháp này xác định thời gian cần thiết để thu được sự giảm áp suất 25,4 psi do oxy phản ứng với mẫu oligome được hydro hóa hoặc PAO trong điều kiện nhất định, thời gian dài hơn cho thấy độ ổn định oxy hóa cao hơn. Mẫu được oxy hóa trong bình gia áp bằng thép không gỉ dưới áp suất ban đầu, với sự có mặt của 0,5% chất chống oxy hóa Naugalube® APAN (phenyl- α -naphtylamin alkyl hóa), sản phẩm của Chemtura Corporation, chất xúc tác đồng, và nước, ở nhiệt độ khoảng 150°C, theo phương pháp ASTM D2272.

Các thành phần của hệ chất xúc tác

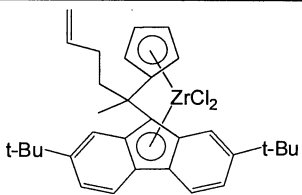
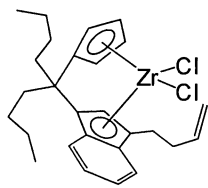
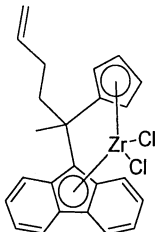
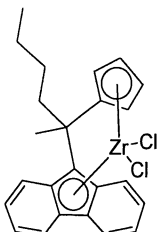
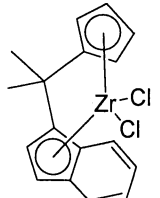
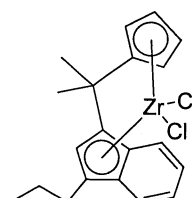
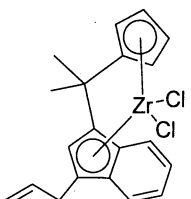
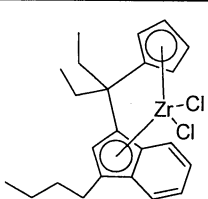
Nhiều phương pháp điều chế hợp chất metaloxen đã được thông báo có thể được sử dụng để điều chế metaloxen được bộc lộ ở đây. Ví dụ, patent Hoa Kỳ số 4,939,217, 5,191,132, 5,210,352, 5,347,026, 5,399,636, 5,401,817, 5,420,320, 5,436,305, 5,451,649, 5,496,781, 5,498,581, 5,541,272, 5,554,795, 5,563,284, 5,565,592, 5,571,880, 5,594,078, 5,631,203, 5,631,335, 5,654,454, 5,668,230, 5,705,579, và 6,509,427 mô tả các phương pháp này. Các phương pháp khác điều chế hợp chất metaloxen đã được thông báo trong các tài liệu tham khảo như: Köppl, A. Alt, H. G. J. Mol. Catal A. 2001, 165, 23; Kajigaeshi, S.; Kadowaki, T.; Nishida, A.;

Fujisaki, S. The Chemical Society of Japan, 1986, 59, 97; Alt, H. G.; Jung, M.; Kehr, G. J. Organomet. Chem. 1998, 562, 153-181; và Alt, H. G.; Jung, M. J. Organomet. Chem. 1998, 568, 87-112. Ngoài ra, các phương pháp khác để điều chế hợp chất metaloxen đã được thông báo trong tài liệu: Journal of Organometallic Chemistry, 1996, 522, 39-54. Các tài liệu sau cũng mô tả các phương pháp này: Wailes, P. C.; Coutts, R. S. P.; Weigold, H. in Organometallic Chemistry of Titan, Zirconium, và Hafnium, Academic; New York, 1974. ; Cardin, D. J.; Lappert, M. F.; và Raston, C. L.; Chemistry of Organo-Zirconium and -Hafnium Compounds; Halstead Press; New York, 1986,

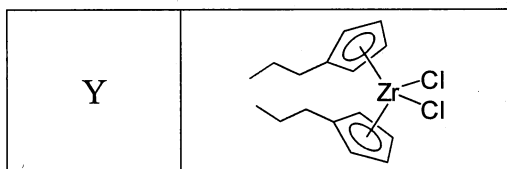
Hợp chất metaloxen sử dụng để điều chế chất xúc tác

Metaloxen được sử dụng trong các ví dụ được đưa ra trong Bảng 1, cùng với ký hiệu. Các ký hiệu này được sử dụng để chỉ metaloxen được sử dụng trong các ví dụ.

Bảng 1. Metaloxen được sử dụng trong các ví dụ

Ký hiệu metaloxen	Cấu trúc	Ký hiệu metaloxen	Cấu trúc
A		B	
C		D	
E		F	
G		H	

I		J	
K		L	
M		N	
O		P	
Q		R	
S		T	
U		V	
W		X	



Metyl alumoxan được cải biến (MMAO) sử dụng trong các ví dụ là metyl alumoxan được cải biến bằng isobutyl là sản phẩm của Akzo Nobel có bán trên thị trường có công thức $[(CH_3)_{0,7}(iso-C_4H_9)_{0,3}AlO]_n$ và được sử dụng làm dung dịch toluen.

Ví dụ 1

Điều chế chất hoạt hóa silic oxit-nhôm oxit được flo hóa-nền

Silic oxit-nhôm oxit được sử dụng để điều chế chất hoạt hóa axit silic oxit-nhôm oxit được flo hóa-nền trong ví dụ này là sản phẩm của W.R. Grace loại MS13-110, chứa 13% nhôm oxit, và có độ xốp khoảng 1,2 cc/g và diện tích bề mặt khoảng 400 m²/g. Oxit này được florua hóa bằng cách tắm tới chớm ướt bằng dung dịch chứa amoni biflorua, với lượng đủ bằng 10% trọng lượng trọng lượng silic oxit-nhôm oxit. Oxit đã tắm này được sấy trong lò chân không trong 8 giờ ở 100°C. Sau đó, mẫu silic oxit-nhôm oxit được flo hóa này được nung như sau. Khoảng 10g silic oxit-nhôm oxit được flo hóa được cho vào ống thạch anh đường kính 1,75-inch (0,04m) có đĩa thạch anh xốp ở đáy ống. Khi silic oxit-nhôm oxit được flo hóa được cho lên đĩa, không khí khô được thổi qua đĩa ở tốc độ tuyến tính khoảng 1,6 đến 1,8 ft³/giờ. Lò điện quanh ống thạch anh được sử dụng để tăng nhiệt độ của ống ở tốc độ khoảng 400°C/giờ đến nhiệt độ cuối khoảng 450°C. Ở nhiệt độ này, silic oxit-nhôm oxit được để tạo tầng sôi trong ba giờ trong không khí khô. Sau đó, silic oxit-nhôm oxit được thu hồi và bảo quản trong nitơ khô, và được sử dụng không tiếp xúc với không khí.

Ví dụ 2

Điều chế chất hoạt hóa nhôm oxit được clo hóa -nền

10mg nhôm oxit KetjenTM loại B được nung trong không khí trong 3 giờ ở 600°C. Sau bước nung này, nhiệt độ của lò được giảm xuống khoảng 400°C, và dòng nitơ được bắt đầu thổi trên lớp nhôm oxit, sau đó 1,0ml cacbon tetrachlorua được bơm vào dòng nitơ và bay hơi lên trên ra khỏi lớp nhôm oxit. Pha khí CCl₄ này được mang vào lớp nhôm và ở đó nó được phản ứng với nhôm oxit thành clorua trên bề mặt. Quá

trình này tạo ra lượng tương đương với khoảng 15,5mmol ion clorua cho 1g nhôm oxit được loại nước. Sau bước xử lý clorua hóa này, nhôm oxit tạo ra có màu trắng.

Ví dụ 3

Điều chế chất hoạt hóa nhôm oxit được flo hóa -nền

Nhôm oxit có thể được florua hóa theo cách giống như được mô tả trong Ví dụ 1 đối với silic oxit-nhôm oxit. Nhôm oxit được flo hóa có thể được nung và thu hồi và bảo quản trong nitơ khô, theo phương pháp nêu trong Ví dụ 1, và sau đó được sử dụng không tiếp xúc với không khí.

Ví dụ 4

Điều chế chất hoạt hóa nhôm oxit được sulfat hóa -nền

652g nhôm oxit KetjenTM L được tẩm tới vừa chớm ướt bằng dung dịch chứa 137g (NH₄)₂SO₄ hòa tan trong 1300ml nước. Sau đó, hỗn hợp này được cho vào lò chân không và sấy qua đêm ở nhiệt độ 110°C dưới áp suất bằng một nửa áp suất chân không và sau đó nung trong lò cách lửa ở 300°C trong 3 giờ, sau đó ở 450°C trong 3 giờ, sau đó nền hoạt hóa này được rây qua rây số 80. Sau đó, nền này được hoạt hóa trong không khí ở 550°C trong 6 giờ, sau đó oxit dạng rắn được xử lý hóa học được bảo quản trong nitơ cho đến khi sử dụng.

Ví dụ 5

Phương pháp điều chế polyalphaolefin (PAO) có độ nhớt cao bằng cách sử dụng hỗn hợp metaloxen và chất hoạt hóa MMAO

Oligome alpha olefin đồng nhất và cooligome (PAO) có độ nhớt cao được điều chế bằng cách sử dụng metaloxen khác nhau và metyl aluminoxan (MMAO) được cải biến bằng *iso*-butyl làm thành phần của hệ chất xúc tác, theo phương pháp chung sau, đối với các mẫu oligome hóa được thể hiện trong Bảng 2.

Thiết bị phản ứng ZipperclaveTM, sản phẩm của Autoclave Engineers, được sử dụng cho phản ứng oligome hóa bất kỳ cần đến hydro. Chất xúc tác nêu trong Bảng 2 được hòa tan trong một lượng nhỏ toluen trong ống NMR, sau đó ống này được bịt kín và lắp với trục khuấy của thiết bị phản ứng sạch, khô. Thiết bị phản ứng được đuổi khí, sau đó nạp dung dịch olefin/MMAO. Nạp một phần hydro, và máy khuấy của thiết bị phản ứng được bắt đầu hoạt động, dẫn đến làm vỡ ống phân tích NMR và hoạt hóa chất xúc tác. Áp suất hydro được tăng tới giá trị cần thiết, và được nạp “theo yêu cầu”

bằng cách sử dụng máy điều chỉnh TESCOM. Sản phẩm được tách bằng cách pha loãng hỗn hợp phản ứng trong pentan và lọc để loại bỏ các thành phần chất xúc tác, sau đó cách loại bỏ chất dễ bay hơi bằng cách chưng cất và/hoặc làm bay hơi để thu được PAO.

Dữ liệu trong Bảng 2 thể hiện điều kiện oligome hóa và đặc tính của oligome alpha olefin được tạo ra bằng cách sử dụng hỗn hợp metaloxen và chất hoạt hóa MMAO.

Bảng 2. Dữ liệu oligome hóa và oligome của oligome alpha olefin (PAO) được điều chế bằng cách sử dụng hỗn hợp metaloxen và chất hoạt hóa MMAO.

Ví dụ số	Chất xúc tác & lượng (mg)	MMAOTỷ lệ Al:Zr	Nguyên liệu ^A (g)	H ₂ (psig)	Ti (°C) T _{max} (°C)	Mức độ chuyển hóa (%)	Mn	Độ nhớt ở 100°C (cSt) (1 cSt = 1 mm ² /s)	Điểm rót (°C)
5A	A (7,2)	1000	C ₈ (143), C ₁₄ (155)	600	41 -	55	-	644	-29
5B	A (6,0)	1000	C ₈ (286)	600	25 51	-	M _n = 7920	986	-27
5C	A (3,0)	1000	C ₈ (143)	75	25 -	61	M _n = 7590	1372	-18
5D	A (3,0)	1000	C ₈ (143)	0	25 25	69	M _n = 9330	1119	-27
5E	B (5,7)	1000	C ₈ (286)	600	25 41	-	M _n = 7090	831	-24
5F	B (10,0)	1000	C ₈ (286)	0	25 50	91	M _n = 5290	582	-28
5G	B (8,5)	1000	C ₁₀ (286)	0	25 40	-	M _n = 9840	917	-28
5H	B (18)	1000	C ₁₂ (286)	0	25 40	-	M _n = 9480	437	-25
5I	A (6,0)	1000	1-C ₁₄ (310) 1-C ₄ (240)	600	25 103	-	M _n = 3700 M _w = 12500	529	18
5J	A (4,0)	1000	1-C ₁₄ (388) 1-C ₄ (120)	600	25 Không xác định	-	M _n = 9980 M _w = 22000	-	3
5K	C (6,3)	1000	1-C ₁₄ (310) 1-C ₄ (240)	0	75 75	-	M _n = 21200 M _w = 27300	-	-

5L	A (3,0)	1000	1-C ₁₄ (155) 1-C ₄ (120)	300	25	-	-	774	-31
5M	A (6,0)	1000	1-C ₁₄ (155) 1-C ₄ (115)	600	134	-	-	-	21
5N	A (6,0)	1000	1-C ₁₄ (155) 1-C ₄ (125)	300	98	-	-	-	6
5P	A (7,2)	1000	1-C ₁₄ (155) 1-C ₈ (143)	600	25 41	-	-	-	-6
5Q	A (6,0)	1000	1-C ₁₄ (78) 1-C ₈ (215)	600	25 50	-	-	-	6
5R	A (6,0)	1000	1-C ₁₄ (39) 1-C ₈ (250)	600	25	-	-	-	0
5S	A (6,0)	1000	1-C ₁₄ (271) 1-C ₈ (36)	600	25 55	-	M _n = 10200 M _w = 24300	469	-11
5T	A (6,0)	1000	1-C ₁₄ (271) 1-C ₈ (36)	600	25 44	-	M _n = 11700 M _w = 20500	-	-3
5U	A (6,0)	1000	1-C ₁₄ (271) 1-C ₈ (36)	1000	25 43	-	M _n = 12900 M _w = 20800	-	-9

^A C₈, 1-octen; C₁₀, 1-dexen; C₁₂, 1-dodexen; C₁₄, 1-tetradexen.

Ví dụ 6

Phương pháp điều chế polyalphaolefin (PAO) có độ nhớt cao bằng cách sử dụng hỗn hợp metaloxen và chất hoạt hóa oxit dạng rắn được xử lý hóa học (SSA)

Oligome alpha olefin đồng nhất và cooligome (PAO) có độ nhớt cao được điều chế bằng cách sử dụng metaloxen khác nhau và oxit dạng rắn được xử lý hóa học (superaxit dạng rắn, SSA) làm thành phần của hệ chất xúc tác, theo phương pháp chung sau, đối với các mẫu polyme hóa được thể hiện trong Bảng 3.

Metaloxen nêu trong Bảng 3 được hòa tan hoặc tạo huyền phù đặc trong alpha olefin, sau đó thêm TIBA (dung dịch 1M trong hexan) ở nhiệt độ trong phòng. Hỗn hợp này được khuấy ở nhiệt độ trong phòng trong thời gian khoảng 2 phút. Oxit dạng rắn được xử lý hóa học (SSA) được bổ sung vào hỗn hợp nêu trên, và hỗn hợp tạo ra được khuấy trong khoảng thời gian đã định ở nhiệt độ trong phòng, trước khi phản ứng oligome hóa được dập tắt. Phản ứng được quan sát là phát nhiệt mạnh. Trong một số trường hợp, sản phẩm tạo ra được lọc và sau đó chưng cất để loại bỏ monome không phản ứng và một số oligome nhẹ dưới dạng phần cất đỉnh thấp. Quá trình chưng cất được thực hiện ở nhiệt độ 210°C, áp suất nằm trong khoảng từ 0,1 torr đến 1 torr cho đến khi không thu hồi được thêm sản phẩm ở đỉnh thấp trong thời gian hơn một giờ.

Bảng 3. Dữ liệu oligome hóa và oligome của polyalphaolefin (PAO) được điều chế bằng cách sử dụng hỗn hợp metaloxen và chất hoạt hóa SSA.

Ví dụ số	Điều kiện oligome hóa						Tỷ lệ % dime trong sản phẩm oligome	Đặc tính của oligome đã chưng cất				Hiệu suất metaloxen (g/g)
	Metaloxen (mg)	Lượng olefin (g)	TIBA (mg)	f-SSA _A (mg)	Nhiệt độ oligo-me hóa (°C)	Thời gian oligo-me hóa (giờ)		Hiệu suất oligome (g)	Độ nhớt ở 100°C (cSt) (1 cSt = 1 mm ² /s)	Chỉ số độ nhớt	Điểm rót (°C)	
7A	B (4,0)	C ₆ (13,6)	198	250	25-28	3,5	-	12,1	-	-	-	-
7B	D (3,2)	C ₈ (14,3)	198	250	25-28	1,5	-	11,1	-	-	-	-
7C	B (3,75)	C ₈ (358)	220	260	120	o-n	-	326	124	199	-42	86900

7D	E (2,86)	C8 (358)	220	260	120	o-n	-	158	159	214	-42	55200
7E	F (3,16)	C8 (358)	220	520	120	o-n	-	290	132	200	-42	91800
7F	G (3,15)	C8 (358)	220	260	120	o-n	-	251	156	207	-38	79700
7G	H (3,13)	C8 (358)	200	450	120	o-n	4,8%	44% ^C	128	201	-41	50200
7H	I (3,04)	C8 (358)	200	450	120	o-n	3,5%	74% ^C	126	199	-45	87400
7I	J (3,00)	C8 (358)	220	260	115	o-n	-	347	136	210	-42	115000
7J	K (12,9)	C8 (358)	851	1030	100	o-n	-	177 ^D	10,3	194	-	13,700
7K	L (12,6)	C8 (358)	851	1030	90	o-n	-	316 ^D	92,9	197	-42	22000
7L	M (8,4)	C8 (358)	851	1030	90	o-n	-	102	8,9	211	-	12100

7M	N (11,3)	C8 (358)	851	1030	90	o-n	-	290	22,9	169	-60	25700
7N	O (2,30)	C8 (358)	220	788	105	o-n	18,3	96% ^C	44,7	175	-51	115000
7P	P (0,75)	C8 (358)	220	394	75	o-n	8,7	87% ^C	104	205	-44	414000
7Q	Q (2,68)	C8 (358)	220	788	110	o-n	5,2	67% ^C	61,9	186	-48	81300
7R	R (2,76)	C8 (358)	220	788	120	o-n	4,9	83% ^C	101	-	-	99400
7S	S (3,00)	C8 (358)	220	788	90	o-n	14,8	63% ^C	8,3	157	-72	54900
7T	T (2,50)	C8 (358)	220	788	110	o-n	12,6	71% ^C	42,5	181	-54	79800

^A fSSA, silic oxit-nhôm oxit được flo hóa

^B o-n – qua đếm

^C % chuyển hóa thành oligome, được xác định bằng phương pháp sắc ký

^D hiệu suất oligome không được chưng cất.

Ví dụ 7

Điều chỉnh độ nhớt và điểm rót bằng cách sử dụng nhiệt độ oligome hóa oligome đồng nhất polyalphaolefin 1-octen (PAO) bằng cách sử dụng hỗn hợp metaloxen và oxit dạng rắn được xử lý hóa học

Oligome đồng nhất 1-octen (PAO) được điều chế bằng cách sử dụng hệ chất xúc tác gồm 12,6mg metaloxen L, 1,03g silic oxit-nhôm oxit được flo hóa (f-SSA), và 850mg triisobutyl nhôm để oligome hóa 360g 1-octen trong thời gian oligome hóa 16 giờ. Thử nghiệm này cho thấy rằng việc thay đổi nhiệt độ oligome hóa tạo ra nhiều loại sản phẩm oligome đáng kể. Kết quả của thử nghiệm này được thể hiện trong Bảng 4. Các mẫu thử nghiệm này cho thấy rằng chỉ có thể sử dụng nhiệt độ để điều chỉnh độ nhớt của sản phẩm, và có thể tạo ra sản phẩm có độ nhớt 100 mm²/s (100 cSt) và/hoặc 40 mm²/s (40 cSt) bằng cách sử dụng cùng một hệ chất xúc tác.

Điểm rót của các sản phẩm PAO này là có lợi hơn sản phẩm có bán trên thị trường (ExxonMobil SpectraSyn 100), được thể hiện trong cột cuối của bảng nêu trên nhằm mục đích so sánh.

Bảng 4. Dữ liệu oligome hóa và oligome của polyalphaolefin (PAO) được điều chế bằng cách sử dụng cùng một metaloxen và chất hoạt hóa SSA ở nhiệt độ khác nhau.

Ví dụ ^{A,B}	7A	7B	7C	7D	PAO có bán trên thị trường
Nhiệt độ oligome hóa	70°C	80°C	90°C	100°C	-
Độ nhớt ở 100°C (cSt) (1 cSt = 1 mm ² /s)	157	109	72	24	100
Độ nhớt ở 40°C (cSt) (1 cSt = 1 mm ² /s)	1270	901	605	156	1240
Chỉ số độ nhớt	242	221	199	187	170
Điểm rót (°C)	-48	-48	-48	-63	-30
Hiệu suất chuyển hóa (%)	88	88	77	98	-

Ví dụ 8

Phương pháp điều chế oligome olefin trên quy mô phòng thí nghiệm

Các phương pháp chung sau được sử dụng để điều chế một số oligome olefin trên quy mô phòng thí nghiệm. Sau đó, oligome này được chưng cất và được hydro hóa để tạo ra PAO. Tùy thuộc vào chất xúc tác và điều kiện cụ thể, phương pháp chung này được sử dụng để điều chế oligome olefin, oligome này được chưng cất và được hydro hóa để thu được PAO có độ nhớt động ở 100°C gần bằng 40 mm²/s (40 cSt) và 100 mm²/s (100 cSt). Dữ liệu về metaloxen và điều kiện oligome hóa và tính chất của oligome được hydro hóa của mỗi mẫu được đưa ra trong Bảng 5. Nếu cần hoặc nếu muốn, có thể sử dụng cải biến nhỏ đối với phương pháp được nêu chi tiết trong ví dụ này. Ví dụ, một số metaloxen được bổ sung dưới dạng huyền phù đặc trong 1-octen do độ tan thấp của chúng. Mỗi thử nghiệm trong Bảng 2 có dựa vào hình vẽ thu được từ thử nghiệm này.

Phương pháp oligome hóa A

Bình nhiều cổ dung tích 18 lít lắp với vỏ gia nhiệt, máy khuấy trên đầu, và phễu nạp chất rắn được nạp silic oxit-nhôm oxit được flo hóa (f-SSA- được điều chế như mô tả ở đây). Sau đó, bình này được thổi nitơ và làm khô kỹ bằng cách rửa bằng tri-isobutyl nhôm (TIBA). Sau khi loại bỏ TIBA, olefin được nạp qua ống vào bình. Olefin được gia nhiệt tới nhiệt độ phản ứng. Sau đó, bình được nạp tri-isobutyl nhôm (TIBA), tiếp đó nạp metaloxen hòa tan trong lượng tối thiểu olefin. Toàn bộ lượng f-SSA được thêm vào, kết hợp với khuấy, dẫn tới phản ứng phát nhiệt. Hỗn hợp phản ứng được gia nhiệt (hoặc để nguội) tới nhiệt độ phản ứng cần thiết và duy trì ở nhiệt độ phản ứng cần thiết này trong thời gian phản ứng cần thiết. Khi kết thúc thời gian phản ứng, hỗn hợp phản ứng được phân tích bằng phương pháp sắc ký khí. Kết quả phân tích bằng phương pháp sắc ký khí được đưa ra trong Bảng 5. Nhôm alkyl được trung hòa bằng nước với lượng theo hệ số tỷ lệ của (ví dụ, 1 mol nước cho 1 mol liên kết alkyl nhôm – tỷ lệ nước:trialkyl nhôm bằng khoảng 3:1). Sản phẩm được lọc, chưng cất, và hydro hóa. Đặc tính của sản phẩm được hydro hóa được thể hiện trong Bảng 5.

Phương pháp oligome hóa B

Bình nhiều cổ dung tích 18 lít lắp với vỏ gia nhiệt, máy khuấy trên đầu, và

phần nạp chất rắn chứa silic oxit-nhôm oxit được flo hóa (f-SSA). Sau đó, bình này được thổi nitơ và làm khô kỹ bằng cách rửa bằng tri-isobutyl nhôm (TIBA). Sau khi loại bỏ TIBA, olefin được nạp qua ống vào bình. Olefin được gia nhiệt tới nhiệt độ phản ứng. Khi chất trong bình phản ứng đạt tới nhiệt độ phản ứng, tri-isobutyl nhôm (TIBA) được nạp vào bình phản ứng. Sau khi khuấy liên tục trong vài phút, thường là 5-30 phút, metaloxen (hòa tan trong lượng tối thiểu olefin) và f-SSA được đồng thời được bổ sung vào bình phản ứng, dẫn tới phản ứng phát nhiệt. Hỗn hợp phản ứng được gia nhiệt (hoặc để nguội) tới nhiệt độ phản ứng cần thiết và duy trì ở nhiệt độ phản ứng cần thiết này trong thời gian phản ứng cần thiết. Khi kết thúc thời gian phản ứng, hỗn hợp phản ứng được phân tích bằng phương pháp sắc ký khí. Kết quả phân tích bằng phương pháp sắc ký khí được đưa ra trong Bảng 5. Nhôm alkyl được trung hòa bằng nước với lượng theo hệ số tỷ lượng. Sản phẩm được lọc, chưng cất, và hydro hóa. Đặc tính của sản phẩm được hydro hóa được thể hiện trong Bảng 5.

Bảng 5. Dữ liệu về phương pháp oligome hóa và đặc tính của PAO có độ nhớt thấp và độ nhớt cao được điều chế theo sáng chế												
Mẫu số	1	2	3	4	5	6	7	8	9	10	11	12
Điều kiện oligome hóa olefin												
Phương pháp oligome hóa	A	B	B	B	B	B	B	B	B	B	B	B
Chất xúc tác	O	N	N	N	J	N	L	I	I	J	J	B
mg chất xúc tác	230	339	339	373	3,0	11,3	12,6	121,9	97,5	3	3	15
f-SSA, g	29,5	30,9	61,8	33,9	0,26	1,03	1,03	18,04	14,4	0,26	0,26	1,03
TIBA, g	6,4	25,5	75,5	56,1	0,22	0,85	0,85	8,02	6,4	0,22	0,22	0,85
Olefin	1-C ₈	1-C ₈	1-C ₈	1-C ₈	1-C ₁₀	1-C ₈	1-C ₈	1-C ₈	1-C ₈	1-C ₈	1-C ₁₀	1-C ₈
Nguyên liệu olefin, g	11000	10000	10000	10000	370	358	358	11000	11000	358	370	358
Nhiệt độ	95	80	80	80	135	80	100	121	121	120	120	121
Hiệu suất chuyển hóa olefin, % trọng lượng	89,0	70,0	72,0	55,0	-	-	99	73,7	57,1	-	-	98 ^A

Thành phần hỗn hợp phản ứng cuối													
Dime, % trọng lượng	14,4	-	9,0	-	-	-	-	2,1	3,3	-	-	-	-
Trime, % trọng lượng	5,4	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-
Tetrame +, % trọng lượng	69,2	-	63,0	-	-	-	-	71,6	53,8	-	-	-	-
Lượng 1-olefin trong monome không phản ứng, % trọng lượng	63,3	-	-	-	-	-	-	87,1	92,4	-	-	-	-
Dữ liệu của sản phẩm được chưng cất và được hydro hóa													
Độ nhớt động ở 100°C, cSt (1 cSt = 1 mm ² /s)	31,7	30,6	43,6	29,8	41	43,8	37	121,5	137,5	118	100,5	112,7	
Độ nhớt động ở 40°C, cSt (1 cSt = 1 mm ² /s)	249	235,4	352	226,8	289,1	360,3	-	1256	-	1140,1	863,6	-	
Điểm rót, °C	-54	-56	-54	-56	-57	-51	-	-42	-	-42	-45	-44	
Chỉ số độ nhớt, VI	170	171	181	172	197	179	187	196,5	-	205	212	210	
Trọng lượng phân tử, Mp	-	-	-	-	4379	2601	-	-	-	5916	6528	-	
Hình vẽ	2A	2A, 3	-	-	7A	7B	7C	2B	2B	8A	8B	8C	

^A Tỷ lệ % chuyển hóa thành oligome, được xác định bằng phương pháp sắc ký khí oligome không được chưng cất.

Ký hiệu viết tắt: 1-C₈, 1-octen; 1-C₁₀, 1-dexen; Mp,

Ví dụ 9

Hỗn hợp PAO

Hỗn hợp PAO có độ nhớt động ở 100°C bằng 35,0 mm²/s (35,0 cSt), 38,8 mm²/s (38,8 cSt) và 100 mm²/s (100 cSt) được điều chế bằng cách trộn PAO thu được trong các mẫu của Ví dụ 8. Các hỗn hợp PAO này được điều chế như thể hiện trong Bảng 6.

Hỗn hợp B-1 được điều chế bằng cách trộn oligome được hydro hóa của Ví dụ 8 - mẫu 2, Ví dụ 8 - Mẫu 3, và Ví dụ 8 - Mẫu 4 với lượng được chỉ ra trong Bảng 3. Hỗn hợp B-2 được điều chế để có độ nhớt động ở 100°C gần bằng 40 mm²/s (40 cSt) (thực tế là 38,8) bằng cách trộn hỗn hợp B-1 và oligome được hydro hóa của Ví dụ 8 - Mẫu 8 với lượng được chỉ ra trong Bảng 6. Hỗn hợp B-3 được điều chế để có độ nhớt động ở 100°C gần bằng 100 mm²/s (100 cSt) (thực tế là 99,3) bằng cách trộn hỗn hợp B-2 và oligome được hydro hóa của Ví dụ 8 - Mẫu 9 với lượng được chỉ ra trong Bảng 6.

Bảng 6. Hỗn hợp PAO

Hỗn hợp số	Hỗn hợp B-1	Hỗn hợp B-2	Hỗn hợp B-3
Mô tả		Hỗn hợp có độ nhớt gần bằng 40 mm ² /s (40 cSt)	Hỗn hợp có độ nhớt gần bằng 100 mm ² /s (100 cSt)
Hỗn hợp	42% trọng lượng Ví dụ 8 - Mẫu 2 38% trọng lượng Ví dụ 8 - Mẫu 3 20% trọng lượng Ví dụ 8 - Mẫu 4	92% trọng lượng hỗn hợp B-1 8% trọng lượng Ví dụ 8- Mẫu 8	74,5% trọng lượng Ví dụ 8 Mẫu 9 25,5% trọng lượng B-2
Độ nhớt ở 100°C, cSt (1 cSt = 1 mm ² /s)	35,0	38,8	99,3
Độ nhớt ở 40°C, cSt (1 cSt = 1 mm ² /s)	280,9	318,6	992,5

Điểm rót, °C	-53	-53	-42
Chỉ số độ nhớt, VI	172	173	193

Bảng 7 thể hiện đặc tính vật lý và hóa học của oligome 1-octen được hydro hóa của hỗn hợp PAO B-2 và hỗn hợp PAO B-3 nêu trong Bảng 6, và so sánh các đặc tính này với PAO 40 và PAO 100 có bán trên thị trường được điều chế từ 1-dexen.

Bảng 7. So sánh hỗn hợp PAO B2 có độ nhớt gần bằng 40 mm²/s (40 cSt) và hỗn hợp PAO B-3 có độ nhớt gần bằng 100 mm²/s (100 cSt) với PAO 40 và PAO 100 có bán trên thị trường

Đặc tính vật lý	PAO 40 có bán trên thị trường	Hỗn hợp PAO B-2	PAO 100 có bán trên thị trường	Hỗn hợp PAO B-3
Độ nhớt động ở 100°C (212°F)	40	38,8	100	99,3
Độ nhớt động ở 40°C (104°F)	395	319	1231	1014
Độ nhớt Brookfield ở -8°C (cP)	12,150	6,566	51,403	28,435
Độ nhớt Brookfield ở -20°C (cP)	45,465	20,025	Quá nhớt không đo được	Quá nhớt không đo được
Độ nhớt Brookfield ở -26°C (cP)	102,000	35,524	--	--
Chỉ số độ nhớt	147	173	167	191
Điểm rót, °C (°F)	-36	-53	-30	-42
Điểm cháy (COC), °C (°F)	281	246	283	281
Nhiệt độ bốc cháy (COC), °C (°F)	318	287	330	330
Chỉ số bay hơi	2,5	--	2,3	--

Noack, % trọng lượng				
Hiện tượng kết tinh theo DSC	không	không	có, -40°C	không
Tỷ trọng	0,850	0,838	0,853	0,845
Về bề ngoài	Trong & màu sáng	Trong & màu sáng	Trong & màu sáng	Trong & màu sáng
Mùi	NFO ^A	NFO ^A	NFO ^A	NFO ^A
RPVOT, (phút)	1976	2375	1621	2943
Mức độ đồng phân lập thể tương đối theo ¹³ C NMR (Chất xúc tác)	Cr-Si	Hệ chất xúc tác trên cơ sở metaloxen	Cr-Si	Hệ chất xúc tác trên cơ sở metaloxen
mm	29,6%	32,6%	25,1%	40,6%
mr	42,7%	45,1%	34,5%	44,9%
rr	27,7%	22,3%	40,4%	14,5%

^A Không có mùi lạ.

Như đã thấy từ dữ liệu so sánh trong bảng 7, hỗn hợp PAO B-2 và hỗn hợp PAO B-3 được điều chế từ 1-octen có độ nhớt động ở cùng một nhiệt độ thấp hơn so với PAO 40 và PAO 100 có bán trên thị trường được điều chế từ 1-dexen. Xu hướng này cũng được thể hiện ở điểm rót thấp hơn và chỉ số độ nhớt cao hơn của hỗn hợp PAO B-2 và hỗn hợp PAO B-3 được điều chế từ 1-octen so với PAO 40 và PAO 100 có bán trên thị trường được điều chế từ 1-dexen. Mặc dù hỗn hợp PAO B-2 được điều chế từ 1-octen có điểm cháy và nhiệt độ bốc cháy thấp hơn so với PAO 40 có bán trên thị trường được điều chế từ 1-dexen, hỗn hợp PAO B-3 được điều chế từ 1-octen có điểm cháy và nhiệt độ bốc cháy gần như bằng PAO 100 có bán trên thị trường được điều chế từ 1-dexen. Hỗn hợp PAO B-2 và hỗn hợp PAO B-3 được điều chế từ 1-octen có chỉ số bay hơi NOACK (ASTM D-5800) thấp hơn so với PAO 40 và PAO 100 có bán trên thị trường được điều chế từ 1-dexen. Chỉ số NOACK thấp hơn này cho thấy lượng tổn hao do bay hơi thấp hơn khi làm việc ở nhiệt độ cao, có ích hơn trong việc giảm hao hụt, giảm thoát

dầu, giảm tiêu thụ dầu, và tiết kiệm dầu của hỗn hợp PAO B-2 và hỗn hợp PAO B-3 được điều chế từ 1-octen so với PAO 40 có bán trên thị trường và 100 có độ nhớt động như nhau. Như đã bàn luận, dữ liệu RPVOT cho thấy độ ổn định oxy hóa cao hơn của hỗn hợp PAO B-2 và hỗn hợp PAO B-3 được điều chế từ 1-octen so với PAO có bán trên thị trường có cùng độ nhớt động.

Sự thay đổi độ nhớt động (cP) theo hàm số của nhiệt độ ($^{\circ}\text{C}$) của hỗn hợp PAO B-2 và hỗn hợp PAO B-3 được điều chế từ 1-octen được thử nghiệm và so sánh với PAO có bán trên thị trường có cùng độ nhớt động. Ví dụ, Fig.1 thể hiện đồ thị độ nhớt động (cP) theo nhiệt độ ($^{\circ}\text{C}$) của hỗn hợp PAO B-2 được điều chế từ 1-octen và được điều chế theo sáng chế, so với PAO 40 có bán trên thị trường có cùng độ nhớt động. Tương tự, Fig.2 thể hiện đồ thị độ nhớt động (cP) theo nhiệt độ ($^{\circ}\text{C}$) của hỗn hợp PAO B-2 được điều chế từ 1-octen và được điều chế theo sáng chế, so với PAO 100 có bán trên thị trường có cùng độ nhớt động. Dữ liệu bị hạn chế của PAO 100 có bán trên thị trường (đường A) là do đạt tới giới hạn mômen xoắn của bộ chuyển đổi âm thanh trong nhớt kế Brookfield. Trong mỗi trường hợp, hỗn hợp PAO B-2 và hỗn hợp PAO B-3 được điều chế từ 1-octen đặc trưng bởi độ nhớt động thấp hơn so với các PAO có bán trên thị trường được điều chế từ 1-dexen có cùng độ nhớt động.

Fig.3 thể hiện kết quả phân tích RPVOT (Rotary Pressure Vessel Oxidation Test) về độ ổn định oxy hóa của các PAO khác nhau, được xác định theo ASTM D2272. Đồ thị thể hiện độ ổn định oxy hóa dưới dạng áp suất oxy (psig) theo thời gian (phút) minh họa độ ổn định oxy hóa tương đương của hỗn hợp PAO B-2 và hỗn hợp PAO B-3 được điều chế từ 1-octen bằng cách sử dụng metaloxen và hệ chất xúc tác oxit dạng rắn được xử lý hóa học, so với PAO có bán trên thị trường được điều chế từ 1-dexen có cùng độ nhớt động ở 100°C . Ký hiệu mẫu: A, hỗn hợp PAO B-2; B, oligome 1-octen được hydro hóa của Ví dụ 8 - Mẫu 8, được hydro hóa ở 210°C ; C, oligome 1-octen được hydro hóa của Ví dụ 8 - Mẫu 8, được hydro hóa ở 165°C ; D, PAO 40 có bán trên thị trường; E, PAO 100 có bán trên thị trường. Các đường A so với đường D thể hiện sự khác nhau giữa PAO được điều chế bằng cách sử dụng hệ chất xúc tác và/hoặc phương pháp theo sáng chế và PAO

có bán trên thị trường có cùng độ nhớt động ở 100°C. Các đường B và C, so với đường E thể hiện sự khác nhau giữa PAO được điều chế bằng cách sử dụng hệ chất xúc tác và/hoặc phương pháp theo sáng chế và PAO có bán trên thị trường có cùng độ nhớt động ở 100°C.

Các thử nghiệm RPVOT thể hiện trên Fig.3 được thực hiện với sự có mặt của 0,5% chất chống oxy hóa Naugalube® APAN (phenyl- α -naphthylamin alkyl hóa) là nồng độ chuẩn của chất oxy hóa. Sự giảm nhanh của áp suất oxy ở phần gần như thẳng đứng của mỗi đường cong tương ứng với sự cạn kiệt chất chống oxy hóa và oxy hóa nhanh mẫu. Ngoài những điều khác, hình vẽ này thể hiện độ ổn định oxy hóa cao hơn đáng kể của PAO được điều chế bằng cách sử dụng sử dụng hệ chất xúc tác và/hoặc phương pháp theo sáng chế, so với PAO có bán trên thị trường có cùng độ nhớt động hoặc có độ nhớt động tương đương.

Fig.4 thể hiện sự ảnh hưởng của metaloxen của hệ chất xúc tác đến độ nhớt động của PAO được điều chế bằng cách sử dụng hệ chất xúc tác và/hoặc phương pháp theo sáng chế. Do đó, Fig.4 thể hiện đồ thị độ nhớt động (cP) theo nhiệt độ (°C) của một dãy PAO có độ nhớt động giống nhau ở 100°C bằng cách sử dụng các hệ chất xúc tác metaloxen khác nhau, và so sánh đặc tính độ nhớt động này với polyalphaolefin có độ nhớt động 40 mm²/s (40 cSt) có bán trên thị trường. Các mẫu trên Fig.4 là như sau: A, Ví dụ 8 - Mẫu 5; B, Ví dụ 8 - Mẫu 6; C, Ví dụ 8 - Mẫu 7; D, PAO 40 có bán trên thị trường; E, hỗn hợp PAO B-2. Xem phần điều chế và đặc tính của mẫu trong bảng 6 và 7. Tương tự, Fig.5 thể hiện đồ thị độ nhớt động (cP) theo nhiệt độ (°C) của một dãy PAO có độ nhớt động giống nhau ở 100°C được điều chế bằng cách sử dụng hệ chất xúc tác metaloxen khác nhau, và so sánh đặc tính độ nhớt động này với polyalphaolefin PAO có bán trên thị trường có độ nhớt 100 mm²/s (100 cSt). Các mẫu trên Fig.5 là như sau: A, Ví dụ 8 - Mẫu 10; B, Ví dụ 8 - Mẫu 11; C, Ví dụ 8 - Mẫu 12; D, PAO 100 có bán trên thị trường. Xem phần điều chế và đặc tính của mẫu trong bảng 6 và 7.

Ví dụ 10

Polyalphaolefin (PAO) được điều chế từ 1-hexen và/hoặc dodexen

Polyalphaolefin (PAO) và oligome olefin được điều chế từ 1-hexen và 1-

doxeden được điều chế tương tự với phương pháp chung nêu trong Ví dụ 8 và 9. Điều kiện phản ứng được chọn và đặc tính của oligome đồng nhất được đưa ra trong Bảng 8.

Bảng 8. Điều chế và đặc tính của oligome olefin 1-hexen và 1-doxeden
(không hydro hóa)

Mẫu số	10-A	10-B	10-C
Olefin	1-hexen	1-hexen	1-dodexen
Nguyên liệu olefin, ml	500	500	500
Metaloxen	K	G	C
Chất hoạt hóa	f-SSA	f-SSA	MMAO
Chất hoạt hóa, g hoặc tỷ lệ mol	2,06	0,260	Al:Zr=1000:1
TIBA, g	1,7	0,220	0
Hiệu suất (đã chưng cất), g	--	263	--
Nhiệt độ, °C	60	60	25
Nhiệt độ tối đa °C	65	--	40
Mức độ chuyển hóa thành oligome, % trọng lượng	--	78%	--
Độ nhớt động ở 100°C, cSt (1 cSt = 1 mm ² /s)	228	197,4	437
Độ nhớt động ở 40°C, cSt (1 cSt = 1 mm ² /s)	4348	3545	4445
Điểm rót, °C	-42	-24	-25
Chỉ số độ nhớt	170	168	279

Ví dụ 11

Polyalphaolefin được điều chế bằng cách sử dụng hệ chất xúc tác bis(etylxcyclopentadienyl)ziricon diclorua / f-SSA

Bình nhiều cổ có kích thước thích hợp được lắp vỏ gia nhiệt, máy khuấy

trên đầu, và phễu nạp chất rắn chứa silic oxit-nhôm oxit được flo hóa (f-SSA). Bình này được thổi nitơ và làm khô kỹ bằng cách rửa trước bằng TIBA. Sau đó, olefin được nạp vào bình qua ống. Olefin này được gia nhiệt tới nhiệt độ phản ứng. Khi chất trong bình đã đạt được nhiệt độ phản ứng cần thiết, hợp chất alkyl nhôm được nạp vào bình phản ứng. Sau khi khuấy liên tục trong vài phút, thường là 5-30 phút, bis(etylxclopentadienyl)ziricon diclorua hòa tan trong lượng tối thiểu chất phản ứng olefin được nạp vào thiết bị phản ứng ở cùng thời điểm với f-SSA thường dẫn tới hiện tượng phát nhiệt. Chất trong bình được để nguội tới nhiệt độ phản ứng cần thiết và duy trì ở nhiệt độ phản ứng qua đêm (khoảng 16 giờ) bằng cách sử dụng vỏ gia nhiệt. Sau khi hết thời gian phản ứng, nhôm alkyl được trung hòa bằng cách dập tắt phản ứng bằng nước với lượng theo hệ số tỷ lượng. Sản phẩm được lọc, chưng cất, và được hydro hóa theo phương pháp được nêu trong Ví dụ 8. Bảng 9 đưa ra thông tin liên quan đến các mẫu oligome hóa và đặc tính của oligome được hydro hóa. Cần lưu ý rằng mẫu sử dụng alumoxan MMAO cần nhiều metaloxen hơn so với quá trình oligome hóa sử dụng f-SSA làm chất hoạt hóa.

Bảng 9 – Oligome hóa olefin bằng cách sử dụng (EtCp) ₂ ZrCl ₂												
	Mẫu 1	Mẫu 2	Mẫu 3	Mẫu 4	Mẫu 5	Mẫu 6	Mẫu 7	Mẫu 8	Mẫu 9	Mẫu 10	Mẫu 11	Mẫu 12
Điều kiện oligome hóa olefin												
mg (EtCp) ₂ ZrCl ₂	0,75	0,75	0,75	0,75	0,75	0,75	0,75	0,75	0,75	0,75	0,75	2,0
mg f-SSA	394	394	394	394	394	394	394	394	394	394	394	-
mg triisobutyl nhôm	220	220	220	220	220	220	220	220	220	220	220	-
MMAO	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	1000
Tỷ lệ Al:Zr												
g nguyên liệu C6	45	107	201	-	-	-	-	-	-	-	-	-
g nguyên liệu C14	313	251	157	-	-	-	-	-	-	-	-	-
g nguyên liệu C8	-	-	-	358	358	358	358	358	358	358	-	358

g nguyên liệu C10	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-
g nguyên liệu C12	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	358	-
Tỷ lệ mol C14/C6	3,0	1,0	0,33	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-
Nhiệt độ	70	65	65	70	72	75	80	82	85	75	75	85	82	85	75	75	80	80	80
T max.	70	66	66	71	74	76	82	84	88	75	77	88	84	88	75	77	83	83	83

Dữ liệu về hỗn hợp phản ứng cuối

Chuyển hóa C6 %	83,4	79,5	85,8	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-
Chuyển hóa C14 %	68,9	65,5	77,5	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-
Tổng mức chuyển hóa %	70,6	69,7	82,1	81,4	88,9	86,8	89,5	89,6	92,0	82,5	81,3	92,0	89,6	92,0	82,5	81,3	73,0	73,0	73,0

tỷ lệ % dime tương đối	không xác định	không xác định	không xác định	7,1	7,3	8,7	11,5	10,9	16,2	9,4	không xác định	19,2
Tỷ lệ khả năng phản ứng C14/C6	0,83	0,83	0,9	-	-	-	-	-	-	-	-	-
Dữ liệu về năng suất của hệ chất xúc tác												
Năng suất (g oligome/g metaloxen)	337000	333000	392000	38900	424000	414000	427000	428000	439000	394000	388000	131000
Năng suất (g oligome /mmol metaloxen)	117000	116000	137000	135000	147000	144000	149000	149000	150000	137000	135000	45500
Đặc tính của oligome được hydro hóa												

Độ nhớt động ở 100°C (cSt) (1 cSt = 1 mm ² /s)	84,0	115,0	153	146	130	104	61,2	64	30,1	66,8	54,3	12,3
Độ nhớt động ở 40°C (cSt) (1 cSt = 1 mm ² /s)	666	1062	1894	1487	1151	965	512	556	222	498	365	75
Điểm rót (°C)	-10	-20	-34	-42	-42	-44	-47	-47	-54	-50	-26	-65
Chỉ số độ nhớt	213	210	191	210	222	205	192	189	177	211	216	162

Ví dụ 12

Phương pháp điều chế polyalphaolefin có độ nhớt động ở 100°C bằng khoảng 40cS trên quy mô sản xuất thử.

Một số mẻ oligome 1-octen được chưng cất và được hydro hóa có độ nhớt động ở 100°C bằng khoảng 40 mm²/s (40 cSt) được điều chế bằng cách sử dụng quy trình sau. Dữ liệu oligome hóa của mỗi mẻ phản ứng oligome hóa được thể hiện trong Bảng 10.

Trong môi trường nitơ khô, 1000 pao (453600g) 1-octen khô (được làm khô bằng nhôm oxit hoạt hóa AZ-300) được nạp vào thiết bị phản ứng có quy mô bán sản xuất đã được làm khô trước bằng cách cho tiếp xúc với tri-isobutyl nhôm (TIBA). Mẫu 1-octen được gia nhiệt tới nhiệt độ thấp hơn khoảng từ 5 đến 10°C so với nhiệt độ phản ứng cần thiết, kết hợp với khuấy. Thiết bị phản ứng được nạp dung dịch tri-isobutyl nhôm 10% trong hexan. Hỗn hợp này được khuấy trong 20 phút, sau đó bột silic oxit-nhôm oxit được flo hóa (f-SSA) và (η^5 -n-BuCp)₂ZrCl₂ (hợp chất H) hòa tan trong lượng tối thiểu 1-octen được bổ sung đồng thời vào hỗn hợp 1-octen/TIBA. Hiện tượng tỏa nhiệt được quan sát, sau đó hỗn hợp phản ứng được điều chỉnh tới nhiệt độ phản ứng cần thiết trong thời gian cần thiết (thường là khi mức độ chuyển hóa 1-octen thành tetrame hoặc oligome cao theo phương pháp sắc ký khí gần bằng khoảng 60%-75%). Sau thời gian này, hỗn hợp phản ứng được làm nguội đến nhiệt độ khoảng 50°C. Hỗn hợp phản ứng được chuyển sang bể khử hoạt tính chất xúc tác trong đó chất xúc tác được khử hoạt tính bằng nước, thường là khoảng 4 aoxơ (113,4g). Hỗn hợp oligome đã khử hoạt tính này được khuấy trong ít nhất một giờ khi hỗn hợp oligome được để nguội tới nhiệt độ môi trường. Hỗn hợp phản ứng đã khử hoạt tính được lọc để loại bỏ hệ chất xúc tác đã khử hoạt tính. Thông tin về phản ứng cụ thể của mỗi mẻ oligome hóa được thể hiện trong Bảng 10.

Hỗn hợp sản phẩm oligome hóa đã lọc và khử hoạt tính được chuyển sang một hoặc hai hệ thống chưng cất và chưng cất chân không để loại bỏ phần lớn lượng monome không phản ứng và dime trên đỉnh tháp. Cặn chưng cất được bảo quản trong các thùng chứa. Bảng 11 đưa ra thông tin về mỗi lần chưng cất của mẻ

phản ứng oligome hóa 1-octen.

Oligome đã chưng cất được hydro hóa bằng cách nạp lượng khác nhau của sản phẩm oligome đã chưng cất vào thiết bị phản ứng chứa khoảng 60 pao chất xúc tác niken có nền (HTC NI 500 RP, sản phẩm của Johnson Matthey). Oligome được hydro hóa ở nhiệt độ khoảng 180°C và áp suất hydro 430 psig đến 500 psig tới chỉ số brom dưới 200. Sản phẩm hydro hóa được lọc để loại bỏ chất xúc tác hydro hóa và bảo quản trong các thùng chứa. Bảng 12 đưa ra thông tin liên quan đến lượng và các mẻ oligome đã chưng cất cụ thể được sử dụng cho mỗi mẫu hydro hóa cùng với đặc tính của mẻ oligome được hydro hóa. Sơ đồ 1 thể hiện đường đi của oligome qua quá trình oligome hóa (O), chưng cất (D), và hydro hóa (H).

Bảng 10. Dữ liệu oligome hóa của oligome olefin nêu trong Ví dụ 12 trên quy mô sản xuất thử

Mẫu oligome hóa số	O-1	O-2	O-3	O-4	O-5
1-octen (pao)	1000	1000	1000	1000	1000
Triisobutyl nhôm (số pao dung dịch 10% trọng lượng)	9,3	9,2	9,25	9,2	9,35
(η^5 -n-BuCp) ₂ ZrCl ₂ (g)	5,8	5,8	5,8	5,8	5,8
f-SSA (pao)	4,1	3,92	3,88	4,1	4,0
Nhiệt độ khi bổ sung (η^5 -n-BuCp) ₂ ZrCl ₂ (°C)	101	102	100	99	100
Nhiệt độ phát nhiệt tối đa (°C)	111	111	108	110	110
Nhiệt độ oligome hóa (°C)	105	108	108	110	110
Thời gian oligome hóa (giờ)	4,75	4,5	7,2	4,0	4,7

Tổng mức độ chuyển hóa, cuối quá trình (%) [†]	74,25	74,37	73,48	72,08	69,99
Monome (%)	9,46	5,87	9,32	7,25	4,36
Dime (%)	11,86	14,16	11,84	14,59	17,99
Trime (%)	4,43	5,60	5,36	6,08	7,66

[†] Mức độ chuyển hóa là % 1-octen được chuyển hóa thành tetrame hoặc oligome cao.

Bảng 11. Dữ liệu chung các oligome 1-octen được điều chế theo Ví dụ 12

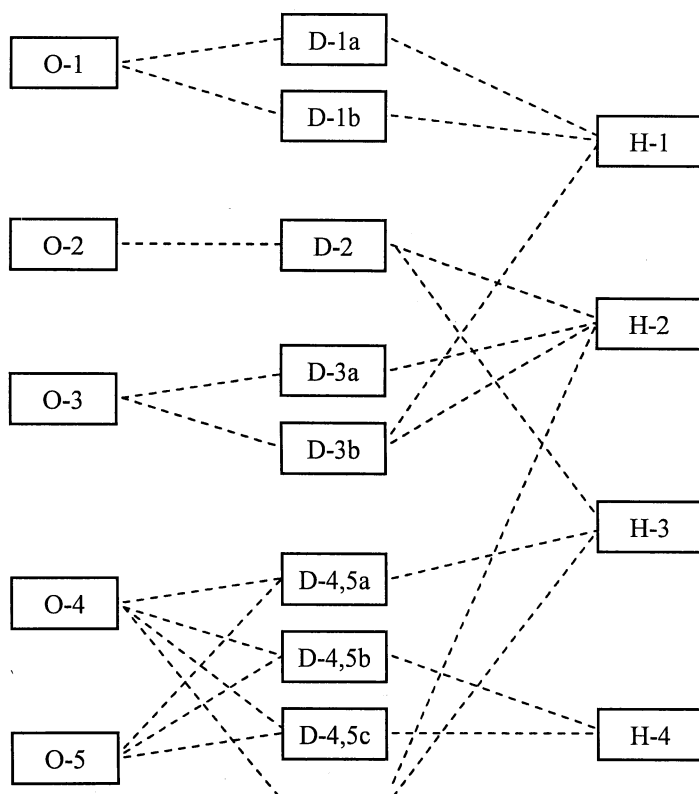
Mê chung cất số	D-1a	D-1b	D-2	D-3a	D-3b	D-4,5a	D-4,5b	D-4,5c	D-4,5d
Nguồn oligome	O-1	O-1	O-2	O-3	O-3	O-4 + O-5	O-4 + O-5	O-4 + O-5	O-4 + O-5
Monome (%)	0	0	0	0,01	0	0,50	0,61	0,35	0
Dime (%)	0,73	0,46	0,14	0,60	1,27	0,45	0,58	0,88	0,51
Trime (%)	5,04	4,34	5,75	7,29	6,36	7,26	5,16	7,05	8,55
Phần cặn chung (pao)	162,6	606,8	543	308,8	488,2	304,2	501,6	296,6	549,4
Điểm cháy (°C)	257	258	248	234	262	248	261	--	261
Nhiệt độ bốc cháy (°C)	298	299	297	291	294	278	292	--	294
Độ nhớt ở 100°C (cSt) (1 cSt = 1 mm ² /s)	44,23	44,23	37,18	34,71	36,85	30,94	34,03	32,20	32,61
Độ nhớt ở 40°C (cSt) (1 cSt = 1 mm ² /s)	381,1	380,2	307,8	279,8	304,3	243,1	277,0	--	261,1
Chỉ số độ nhớt (VI)	173	173	170	171	170	169	169	--	169

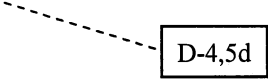
Bảng 12. Dữ liệu hydro hóa của oligome được chưng cất D-1a, D-1b, D-2, D-3a, D-3b, D-4, D-5a, D-5b, D-5c, và D-5d nêu trong Ví dụ 12

Mẫu hydro hóa số	H-1	H-2	H-3	H-4
Mẻ chưng cất Lượng nạp vào quá trình hydro hóa (pao)	D-1a (162,6) D-1b (606,8) D-3b (273,1)	D-2 (422,4) D-3a (308,0) D-3b (213,4) D-4,5d (85,0)	D-2 (116) D-4,5a (299) D-4,5d (456,8)	D-4,5b (496,2) D-4,5c (296,6)
Lượng PAO được hydro hóa PAO (pao)	861	918,2	833,4	700
Độ nhớt ở 100°C (cSt) (1 cSt = 1 mm ² /s)	42,1	36,9	33,573	34,345

Sơ đồ 1. Đường đi của mẫu qua quá trình oligome hóa (O), chưng cất (D), hydro hóa (H), và trộn (B).

Oligome hóa (O) Chưng cất (D) Hydro hóa (H)




 D-4,5d

Ví dụ 13

Phương pháp điều chế polyalphaolefin (HVPAO) có độ nhớt danh định 100 cSt ($100 \text{ mm}^2/\text{s}$) trên quy mô sản xuất thử

Một số mẻ oligome 1-octen khi được chưng cất và hydro hóa sẽ có độ nhớt động ở 100°C bằng khoảng $100 \text{ mm}^2/\text{s}$ (100 cSt) được điều chế bằng cách sử dụng phương pháp sau. Dữ liệu oligome hóa của mỗi mẻ phản ứng oligome hóa được thể hiện trong Bảng 13.

Trong môi trường nitơ khô, 1000 pao mẫu 1-octen khô (được làm khô bằng nhôm oxit hoạt hóa AZ-300) được nạp vào thiết bị phản ứng có quy mô bán sản xuất đã được làm khô trước bằng cách cho tiếp xúc với tri-isobutyl nhôm. Mẫu 1-octen được gia nhiệt tới nhiệt độ thấp hơn khoảng từ 5 đến 10°C so với nhiệt độ phản ứng cần thiết, kết hợp với khuấy. Thiết bị phản ứng được nạp dung dịch tri-isobutyl nhôm 10% (trong hexan). Hỗn hợp này được khuấy trong 20 phút, sau đó bột silic oxit-nhôm oxit được flo hóa (f-SSA) và $(\eta^5\text{-n-BuCp})_2\text{ZrCl}_2$ (hợp chất H) hòa tan trong lượng tối thiểu 1-octen được bổ sung vào hỗn hợp 1-octen-TIBA. Hiện tượng tỏa nhiệt được quan sát, sau đó hỗn hợp phản ứng được kiểm soát ở nhiệt độ phản ứng cần thiết trong thời gian phản ứng cần thiết (thông thường, khi mức độ chuyển hóa 1-octen thành tetrame hoặc oligome cao theo phương pháp sắc ký khí bằng khoảng 60%-75%). Sau thời gian này, hỗn hợp phản ứng được làm nguội đến nhiệt độ khoảng 50°C . Hỗn hợp phản ứng được chuyển sang bể khử hoạt tính chất xúc tác trong đó chất xúc tác được khử hoạt tính bằng nước, thường là khoảng 4 axơ (113,4g). Hỗn hợp này được khuấy trong ít nhất một giờ khi hỗn hợp được để nguội tới nhiệt độ môi trường. Hỗn hợp phản ứng đã khử hoạt tính được lọc để loại bỏ hệ chất xúc tác đã khử hoạt tính. Thông tin về phản ứng cụ thể trong mỗi mẻ được thể hiện trong Bảng 13.

Bảng 13. Dữ liệu oligome hóa của oligome olefin nêu trong

Ví dụ 13 trên quy mô sản xuất thử

Mẫu oligome hóa số	O-6	O-7	O-8	O-9	O-10
1-octen (pao)	1000	1000	1000	1000	1000
Triisobutyl nhôm (số pao dung dịch 10%, trọng lượng)	10,3	9,2	9,2	9,3	9,2
$(\eta^5\text{-n-BuCp})_2\text{ZrCl}_2$ (g)	5,8	5,8	5,8	5,8	5,8
f-SSA (pao)	4,06	3,84	3,88	4,02	3,52
Nhiệt độ khi bổ sung $(\eta^5\text{-n-BuCp})_2\text{ZrCl}_2$ (°C)	85	81	79	80	81
Nhiệt độ phát nhiệt tối đa (°C)	88	89	87	86	86
Nhiệt độ oligome hóa (°C)	88	85	86	85	86
Thời gian oligome hóa (giờ)	4,12	7,9	8,72	5,3	7,33
Tổng mức độ chuyển hóa, cuối quá trình (%) [†]	60,7	85,8	78,8	84,2	84,1
Monome (%)	27,4	6,2	10,0	8,9	7,3
Dime (%)	9,3	5,8	8,6	5,0	6,4
Trime (%)	2,6	2,2	2,6	1,9	2,2

[†] Mức độ chuyển hóa là % 1-octen được chuyển hóa thành tetrame hoặc oligome cao.

Hỗn hợp sản phẩm oligome hóa đã lọc và khử hoạt tính được chuyển sang một hoặc hai hệ thống chưng cất và được chưng cất chân không để loại bỏ phần lớn lượng monome không phản ứng và dime trên đỉnh tháp. Phần cặn chưng được bảo quản trong các thùng chứa. Bảng 14 đưa ra thông tin về mỗi lần chưng cất của mẻ phản ứng oligome hóa 1-octen.

Bảng 14. Dữ liệu chung cát oligome 1-octen được điều chế trong Ví dụ 13										
Mê chung cát số	D-6	D-7	D-8	D-9	D-10	D-11	D-12			
Nguồn oligome	O-6	O-7	O-8	O-6, O-7, O-8	O-9	O-10	O-9, O-10			
Monome (%)	0	0	0	0	0	0	0			
Dime (%)	0,4	0,2	0,4	0,1	0	0,8	1,5			
Trime (%)	4,7	2,2	2,3	0,9	1,4	1,8	5,4			
Phần cặn chung (pao)	334,8	480,2	533,4	335,2	563,0	584,2	589,4			
Điểm cháy (°C)	266	299	259	291	292	285	-			
Nhiệt độ bốc cháy (°C)	317	334	315	332	333	326	-			
Độ nhớt ở 100°C (cSt) (1 cSt = 1 mm ² /s)	86,08	113,5	114,4	132,92	153,78	104,62	131,77			
Độ nhớt ở 40°C (cSt) (1 cSt = 1 mm ² /s)	-	1347,7	1066,4	1451,8	1594,7	1509,3	-			
Chỉ số độ nhớt (VI)	-	205	205	221	215	201	-			

Oligome đã chưng cất được hydro hóa bằng cách nạp lượng khác nhau của sản phẩm oligome đã chưng cất vào thiết bị phản ứng chứa khoảng 60 pao chất xúc tác niken có nền (HTC NI 500 RP, sản phẩm của Johnson Matthey). Oligome được hydro hóa ở nhiệt độ khoảng 180°C và áp suất hydro nằm trong khoảng từ 420 psig đến 440 psig. Sản phẩm hydro hóa được lọc để loại bỏ chất xúc tác hydro hóa và bảo quản trong các thùng chứa. Bảng 15 đưa ra thông tin liên quan đến lượng và các mẻ oligome đã chưng cất cụ thể được sử dụng cho mỗi mẫu hydro hóa cùng với đặc tính của oligome được hydro hóa.

Bảng 15. Dữ liệu hydro hóa oligome olefin nêu trong Ví dụ 13

Mẫu hydro hóa số	H-5	H-6	H-7	H-8
Mẻ chưng cất	D-6 (332,2)	D-8 (406,0)		
Lượng nạp vào thiết bị hydro hóa (pao)	D-7 (476,2) D-8 (216,6)	D-9 (332,4) D-10 (61,6)	D-10 (499,2) D-11 (353,2)	D-11 (225,0) D-12 (585,4)
Lượng PAO được hydro hóa (pao)	882,8	900,0	852,4	810,4
Độ nhớt ở 100°C (cSt) (1 cSt = 1 mm ² /s)	115	134,9	149,5	140,4
Độ nhớt ở 40°C (cSt) (1 cSt = 1 mm ² /s)	1204	1430	1618	1504
Chỉ số độ nhớt	195	201	204	202
Điểm rót (°C)	-42	-	-	-
Điểm cháy (°C)	266	-	-	-
Nhiệt độ bốc cháy (°C)	300	-	-	-

Ví dụ 14

Trộn các PAO có độ nhớt khác nhau được điều chế từ 1-octen

Lượng oligome được hydro hóa điều chế được trong các Ví dụ 12 và 13 được trộn để tạo ra PAO có độ nhớt động ở 100°C bằng khoảng 40 mm²/s (40 cSt) hoặc 100 mm²/s (100 cSt). Bảng 16 đưa ra thông tin liên quan đến ký hiệu và lượng oligome đã hydro hóa (PAO) được trộn và đặc tính của PAO được trộn.

Bảng 16. Dữ liệu về hỗn hợp oligome 1-octen được hydro hóa điều chế được trong Ví dụ 12

Hỗn hợp số	B-4	B-5
Nguồn PAO được hydro hóa (pao)	H-1 (854,2) H-2 (715,8) H-3 (94,8) H-4 (105,6) H-5 (59,2)	B-4 (29,6) H-4 (93) H-5 (817,8)
Độ nhớt ở 100°C (cSt) (1 cSt = 1 mm ² /s)	40,1	100,6
Độ nhớt ở 40°C (cSt) (1 cSt = 1 mm ² /s)	342,3	1007
Chỉ số độ nhớt	169,7	193

Ví dụ 15

Phương pháp điều chế polyalphaolefin có độ nhớt động ở 100°C bằng khoảng 100 mm²/s (100 cSt) trên quy mô sản xuất thử

Trong môi trường nitơ khô, 994 pao mẫu 1-octen khô (được làm khô bằng nhôm oxit hoạt hóa AZ-300) được nạp vào thiết bị phản ứng gián đoạn có quy mô bán sản xuất đã được làm khô trước bằng cách cho tiếp xúc với tri-isobutyl nhôm (TIBA). Mẫu 1-octen được gia nhiệt tới 70°C, kết hợp với khuấy. Thiết bị phản ứng được nạp 4,4 pao dung dịch triisobutyl nhôm 10% trong hexan (pao TIBA) và 2,7 pao dung dịch

triisobutyl nhôm 12,6% trong hexan. Hỗn hợp này được khuấy trong 5 phút, sau đó 717g bột silic oxit-nhôm oxit được flo hóa (f-SSA) và 1,2g (η^5 -ethylCp)₂ZrCl₂ (hợp chất P) hòa tan trong lượng tối thiểu 1-octen được bổ sung đồng thời vào hỗn hợp 1-octen/TIBA. Hiện tượng tỏa nhiệt được quan sát, sau đó hỗn hợp phản ứng được điều chỉnh tới nhiệt độ 75°C trong 8,33 giờ. Hỗn hợp phản ứng được làm nguội tới khoảng 50°C. Hỗn hợp phản ứng được chuyển sang bể khử hoạt tính chất xúc tác ở đó chất xúc tác được khử hoạt tính bằng nước với lượng khoảng 4 axơ (113,4g). Hỗn hợp oligome đã khử hoạt tính này được khuấy trong ít nhất một giờ khi hỗn hợp oligome được để nguội tới nhiệt độ môi trường. Hỗn hợp phản ứng đã khử hoạt tính được lọc để loại bỏ hệ chất xúc tác đã khử hoạt tính. Phân tích GC dòng đi ra từ thiết bị phản ứng cho thấy dòng này chứa 14,1% trọng lượng monome, 7,6% trọng lượng dime, 2,3% trọng lượng trime. Do đó, mức độ chuyển hóa 1-octen thành oligome cao là 76%.

Hỗn hợp sản phẩm oligome hóa đã lọc và khử hoạt tính được chuyển sang hệ thống chưng cất và chưng cất chân không để loại bỏ phần lớn lượng monome không phản ứng và dime trên đỉnh tháp. Phần cặn chưng được bảo quản trong các thùng chứa. Phân tích GC dòng đi ra từ thiết bị phản ứng hydro hóa cho thấy rằng oligome đã chưng cất chứa 0% trọng lượng monome, 0,6% trọng lượng dime, 3,2% trọng lượng trime, và 96,2% trọng lượng oligome cao. Phân tích tiếp oligome đã chưng cất cho thấy rằng oligome đã chưng cất có độ nhớt động ở 100°C bằng 97,4 mm²/s (97,4 cSt).

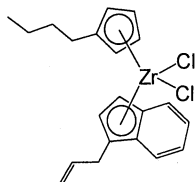
Sau đó, oligome đã chưng cất được hydro hóa bằng cách nạp 530,4 pao sản phẩm oligome đã chưng cất vào thiết bị phản ứng cùng với khoảng 80 pao chất xúc tác niken có nền (HTC NI 500 RP, sản phẩm của Johnson Matthey). Oligome được hydro hóa ở nhiệt độ khoảng 180°C và áp suất hydro 440 psig. Sản phẩm hydro hóa được lọc để loại bỏ chất xúc tác hydro hóa và bảo quản trong các thùng chứa. Phân tích oligome đã chưng cất cho thấy rằng oligome đã chưng cất có độ nhớt động ở 100°C bằng 105,3 mm²/s (105,3 cSt), độ nhớt động ở 40°C bằng 1066 mm²/s (1066 cSt), và chỉ số độ nhớt bằng 194.

Ví dụ 16

Kiểm soát độ nhớt và điểm rót của PAO bằng nhiệt độ oligome hóa oligome đồng nhất

1-octen (PAO)

Oligome đồng nhất 1-octen (PAO) được điều chế theo phương pháp chung nêu trong Ví dụ 8 hoặc 9, bằng cách sử dụng metaloxen L (được thể hiện dưới đây) kết hợp với silic oxit-nhôm oxit được flo hóa (f-SSA), bằng cách sử dụng nhiệt độ phản ứng khác nhau đối với mỗi mẫu. Kết quả của các mẫu này được thể hiện trong Bảng 17.



Hợp chất L

Mỗi mẫu oligome hóa được thực hiện bằng cách sử dụng 360g 1-octen, 12,6mg hợp chất metaloxen F, 850mg TIBAL (triisobutyl nhôm), 1,03g f-SSA dạng rắn, và thời gian chạy mẫu là 16 giờ. Bằng cách sử dụng hệ chất xúc tác metaloxen-chất hoạt hóa-nền giống nhau và chỉ thay đổi nhiệt độ oligome hóa, nhiều loại sản phẩm PAO đáng kể được tạo ra, bảng 18. Các mẫu này cho thấy rằng chỉ nhiệt độ có thể được sử dụng để điều chỉnh độ nhớt của sản phẩm PAO được điều chế bằng cách sử dụng hệ chất xúc tác metaloxen/SSA và phương pháp này, và có thể tạo ra oligome mà khi được hydro hóa có thể thu được PAO có độ nhớt 100 mm²/s (100 cSt) và/hoặc 40 mm²/s (40 cSt) mà không cần trộn. Như được thể hiện trong Bảng 17, điểm rót của sản phẩm là thấp hơn điểm rót của PAO 40 và PAO 100 có bán trên thị trường.

Bảng 17. Dữ liệu oligome hóa và oligome của polyalphaolefin (PAO) của 1-octen, bằng cách sử dụng cùng một metaloxen và chất hoạt hóa, ở nhiệt độ khác nhau.

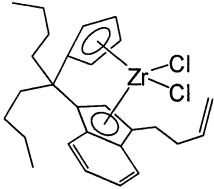
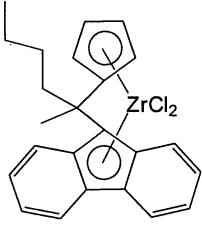
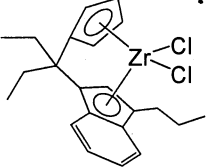
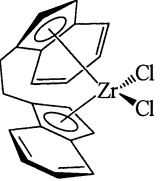
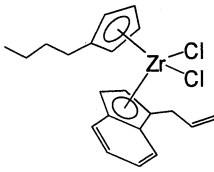
Mẫu số	1	2	3	4	PAO 100 có bán trên thị trường	PAO 40 có bán trên thị trường
Nhiệt độ oligome hóa	80°C	90°C	100°C	110°C	--	--
Độ nhớt ở 100°C, cSt (1 cSt = 1 mm ² /s)	172	93	37	10	100	39
Độ nhớt ở 40°C, cSt (1 cSt = 1 mm ² /s)	1773	873	277	150	1240	396
Chỉ số độ nhớt (VI)	217	197	175	193	170	147
Điểm rót (°C)	-42	-42	-57	-76	-30	-36
Chuyển hóa thành oligome (%)	88	77	98	98	-	-

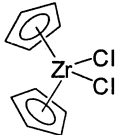
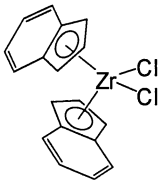
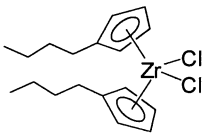
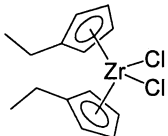
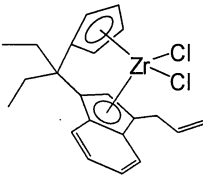
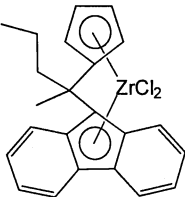
Ví dụ 17

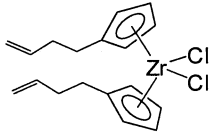
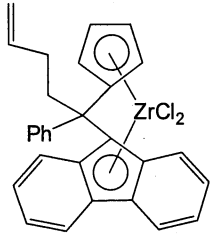
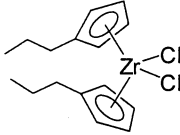
Các hệ chất xúc tác metaloxen để điều chế polyalphaolefin (PAO) theo sáng chế

Một số ví dụ đại diện khác không làm giới hạn phạm vi sáng chế về hệ chất xúc tác dựa trên metaloxen cụ thể được thể hiện trong Bảng 18. Các hỗn hợp đại diện này có thể được sử dụng theo các ví dụ thực hiện sáng chế và nói chung theo sáng chế, và được đưa ra dưới dạng các hỗn hợp không làm giới hạn phạm vi sáng chế.

Bảng 18. Ví dụ về hệ chất xúc tác dựa trên metaloxen cụ thể để điều chế PAO theo sáng chế.

Ví dụ số	Metaloxen	Chất hoạt hóa oxit dạng rắn	Chất đồng xúc tác và/hoặc nhôm alkyl ^A
17-B		silic oxit-nhôm oxit được flo hóa (f-SSA), nhôm oxit được clo hóa, hoặc nhôm oxit được sulfat hóa	TIBA, TEA, TMA, MAO, MMAO, hoặc TBA
17-D		silic oxit-nhôm oxit được flo hóa (f-SSA), nhôm oxit được clo hóa, hoặc nhôm oxit được sulfat hóa	TIBA, TEA, TMA, MAO, MMAO, hoặc TBA
17-I		silic oxit-nhôm oxit được flo hóa (f-SSA), nhôm oxit được clo hóa, hoặc nhôm oxit được sulfat hóa	TIBA, TEA, TMA, MAO, MMAO, hoặc TBA
17-J		silic oxit-nhôm oxit được flo hóa (f-SSA), nhôm oxit được clo hóa, hoặc nhôm oxit được sulfat hóa	TIBA, TEA, TMA, MAO, MMAO, hoặc TBA
17-L		silic oxit-nhôm oxit được flo hóa (f-SSA), nhôm oxit được clo hóa, hoặc nhôm oxit được sulfat hóa	TIBA, TEA, TMA, MAO, MMAO, hoặc TBA

17-M		silic oxit-nhôm oxit được flo hóa (f-SSA), nhôm oxit được clo hóa, hoặc nhôm oxit được sulfat hóa	TIBA, TEA, TMA, MAO, MMAO, hoặc TBA
17-N		silic oxit-nhôm oxit được flo hóa (f-SSA), nhôm oxit được clo hóa, hoặc nhôm oxit được sulfat hóa	TIBA, TEA, TMA, MAO, MMAO, hoặc TBA
17-O		silic oxit-nhôm oxit được flo hóa (f-SSA), nhôm oxit được clo hóa, hoặc nhôm oxit được sulfat hóa	TIBA, TEA, TMA, MAO, MMAO, hoặc TBA
17-P		silic oxit-nhôm oxit được flo hóa (f-SSA), nhôm oxit được clo hóa, hoặc nhôm oxit được sulfat hóa	TIBA, TEA, TMA, MAO, MMAO, hoặc TBA
17-U		silic oxit-nhôm oxit được flo hóa (f-SSA), nhôm oxit được clo hóa, hoặc nhôm oxit được sulfat hóa	TIBA, TEA, TMA, MAO, MMAO, hoặc TBA
17-V		silic oxit-nhôm oxit được flo hóa (f-SSA), nhôm oxit được clo hóa, hoặc nhôm oxit được sulfat hóa	TIBA, TEA, TMA, MAO, MMAO, hoặc TBA

17-W		silic oxit-nhôm oxit được flo hóa (f-SSA), nhôm oxit được clo hóa, hoặc nhôm oxit được sulfat hóa	TIBA, TEA, TMA, MAO, MMAO, hoặc TBA
17-X		silic oxit-nhôm oxit được flo hóa (f-SSA), nhôm oxit được clo hóa, hoặc nhôm oxit được sulfat hóa	TIBA, TEA, TMA, MAO, MMAO, hoặc TBA
17-Y		silic oxit-nhôm oxit được flo hóa (f-SSA), nhôm oxit được clo hóa, hoặc nhôm oxit được sulfat hóa	TIBA, TEA, TMA, MAO, MMAO, hoặc TBA

^A Ký hiệu viết tắt: TIBA, triisobutyl nhôm; TEA, trietyl nhôm; TMA, trimetyl nhôm; MAO, metylaluminoxan; MMAO, metylaluminoxan được cải biến isobutyl; TBA, tri-n-butyl nhôm.

YÊU CẦU BẢO HỘ

1. Chế phẩm có chứa polyalphaolefin, polyalphaolefin được tạo ra từ alpha olefin mạch thẳng có từ 6 đến 16 nguyên tử cacbon chứa ít nhất 80 phần trăm trọng lượng là alpha olefin mạch thẳng có 8 nguyên tử cacbon, polyalphaolefin này chứa:

- a) dưới 1% trọng lượng monome alpha olefin được hydro hóa;
 - b) dưới 3% trọng lượng dime được hydro hóa; và
 - c) trên 80% trọng lượng oligome cao được hydro hóa;
- và có

i) độ nhớt động ở 100°C ít nhất là 55 cSt (55 mm²/s);

ii) chỉ số độ nhớt lớn hơn 170;

iii) điểm rót thấp hơn -40°C; và

iv) không có hiện tượng kết tinh có thể thấy rõ như được xác định bằng phương pháp đo nhiệt lượng bằng tia quét vi phân bằng cách sử dụng ASTM D 3418.

2. Chế phẩm theo điểm 1, trong đó polyalphaolefin có chứa:

- a) dưới 0,5% trọng lượng monome alpha olefin được hydro hóa;
- b) dưới 1% trọng lượng dime được hydro hóa; và
- c) ít nhất 88% trọng lượng oligome cao được hydro hóa.

3. Chế phẩm theo điểm 1, trong đó polyalphaolefin có độ nhớt động nằm trong khoảng từ 60 cSt đến 100 cSt (60 mm²/s đến 100 mm²/s).

4. Chế phẩm theo điểm 1, trong đó polyalphaolefin có RPVOT như được xác định bằng ASTM D2272 với sự có mặt của 0,5% trọng lượng chất chống oxy hóa Naugalube® APAN ít nhất là 2000.

5. Chế phẩm theo điểm 1, trong đó alpha olefin mạch thẳng chứa ít nhất 90 phần trăm trọng lượng là alpha olefin mạch thẳng có 8 nguyên tử cacbon.

6. Chế phẩm theo điểm 5, trong đó polyalphaolefin có chứa:

- a) dưới 0,5% trọng lượng monome alpha olefin được hydro hóa;
- b) dưới 1% trọng lượng dime được hydro hóa; và
- c) ít nhất 88% trọng lượng oligome cao được hydro hóa;

và trong đó

i) độ nhớt động ở 100°C nằm trong khoảng từ 120 cSt đến 180 cSt (120 mm²/s đến 180 mm²/s);

- ii) chỉ số độ nhớt lớn hơn 170; và
- iii) điểm rót thấp hơn -40°C .

7. Chế phẩm theo điểm 5, trong đó polyalphaolefin có chứa:

- a) dưới 0,5% trọng lượng monome alpha olefin được hydro hóa;
 - b) dưới 1% trọng lượng dime được hydro hóa; và
 - c) ít nhất 88% trọng lượng oligome cao được hydro hóa; và
- và trong đó

i) độ nhớt động ở 100°C nằm trong khoảng từ 80 cSt đến 140 cSt ($80\text{ mm}^2/\text{s}$ đến $140\text{ mm}^2/\text{s}$);

- ii) chỉ số độ nhớt lớn hơn 170; và
- iii) điểm rót thấp hơn -40°C .

8. Chế phẩm theo điểm 5, trong đó polyalphaolefin có chỉ số Bernoulli nhỏ hơn 1,65.

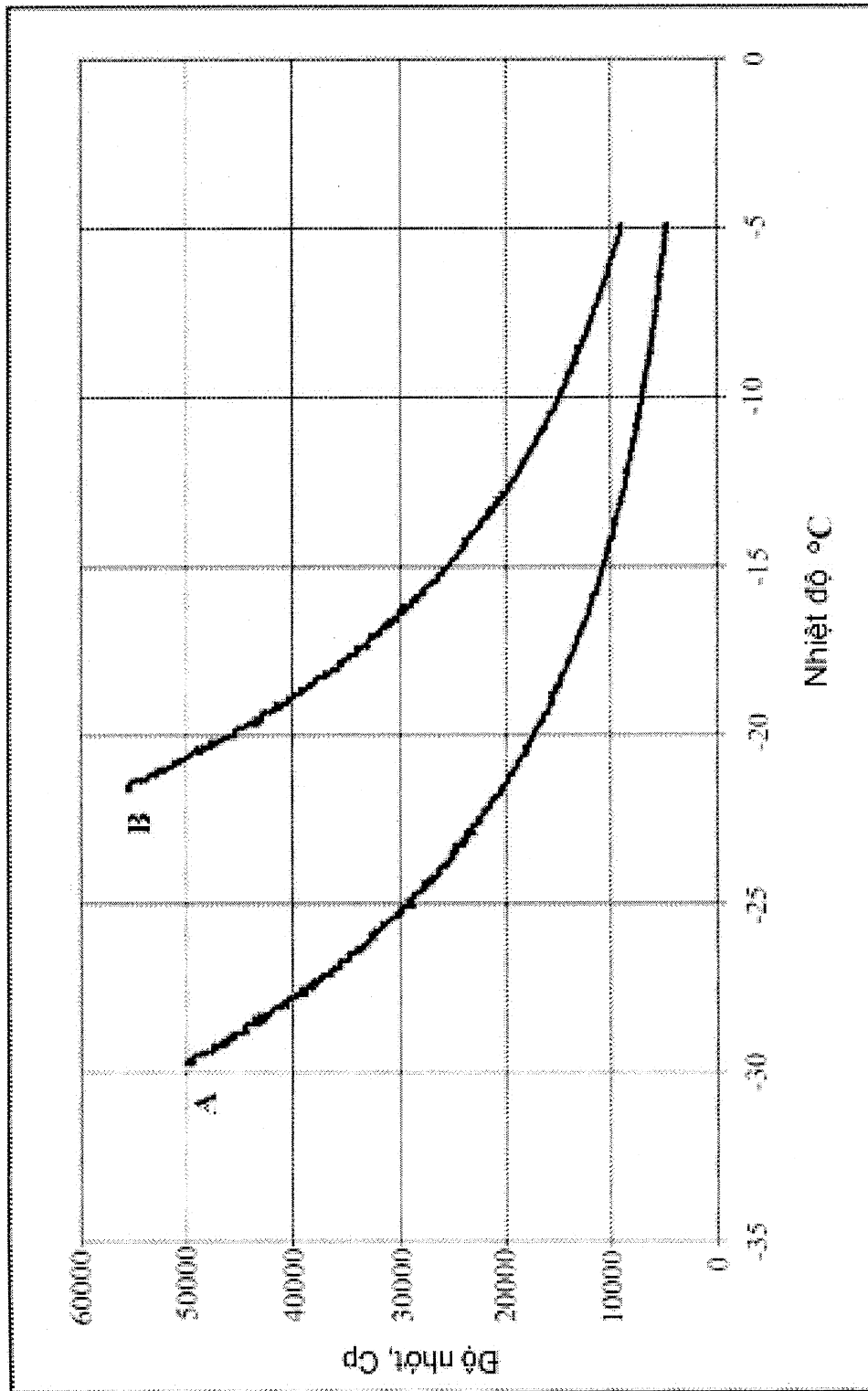


fig. 1

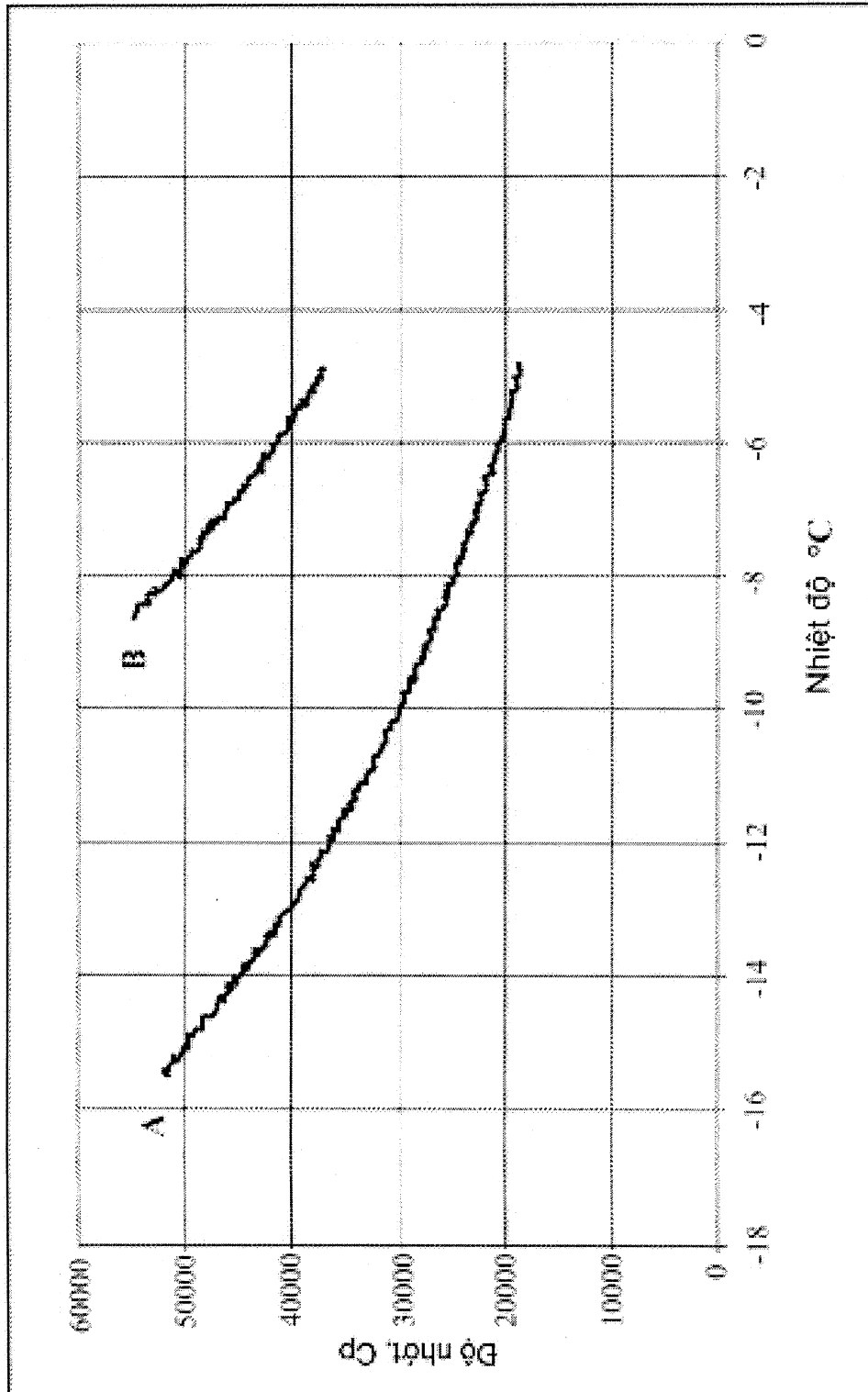


fig. 2

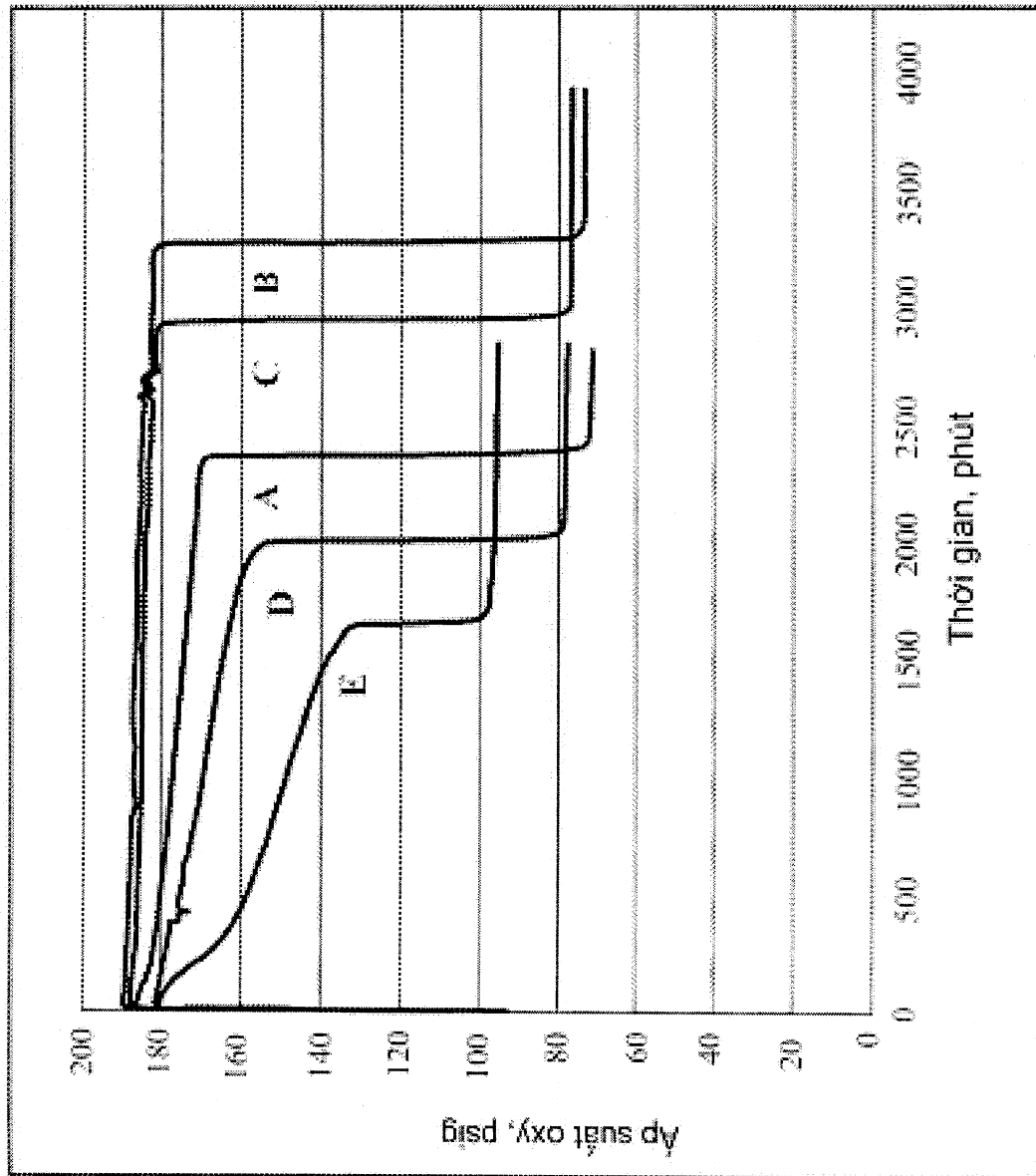


fig. 3

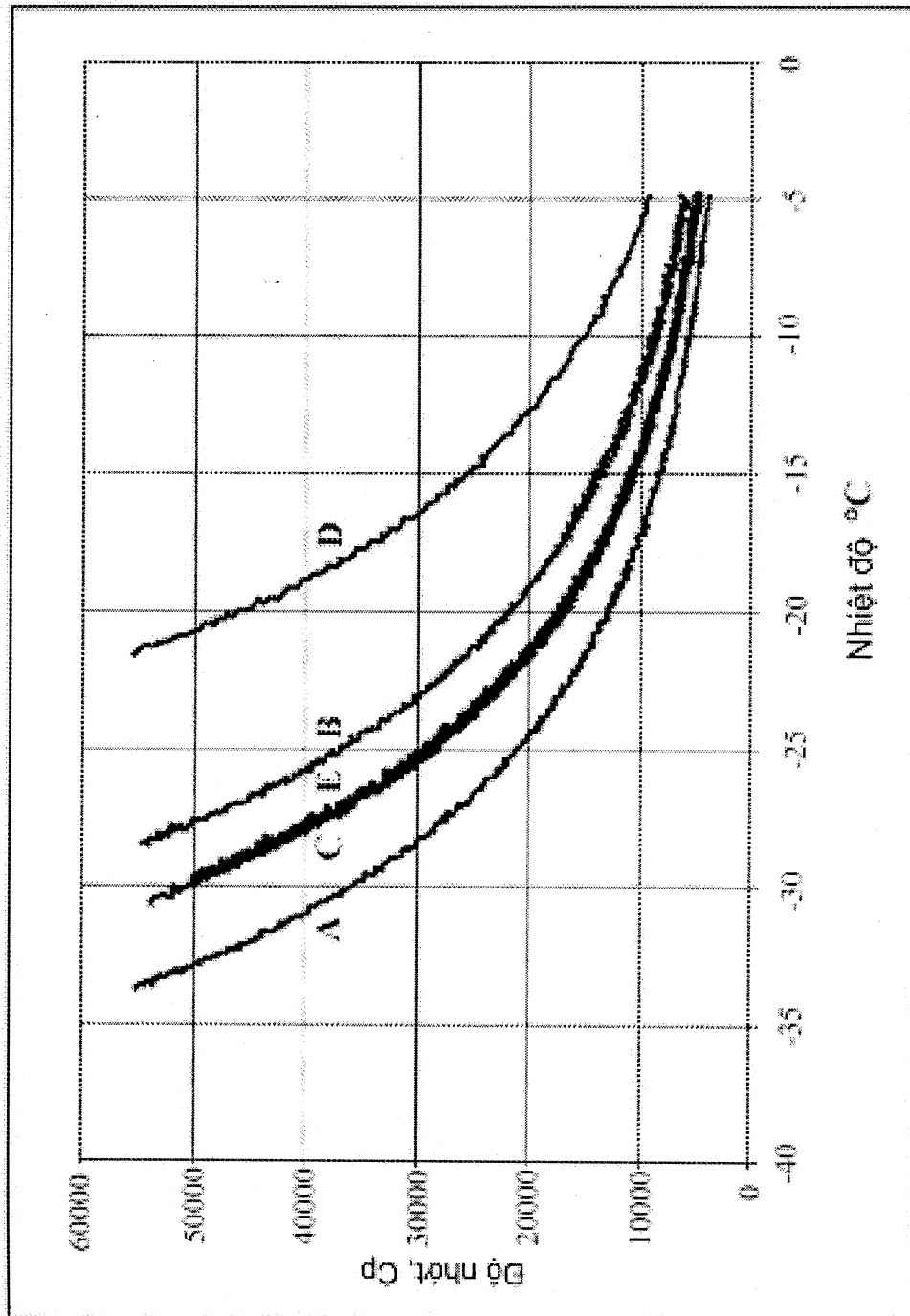


fig. 4

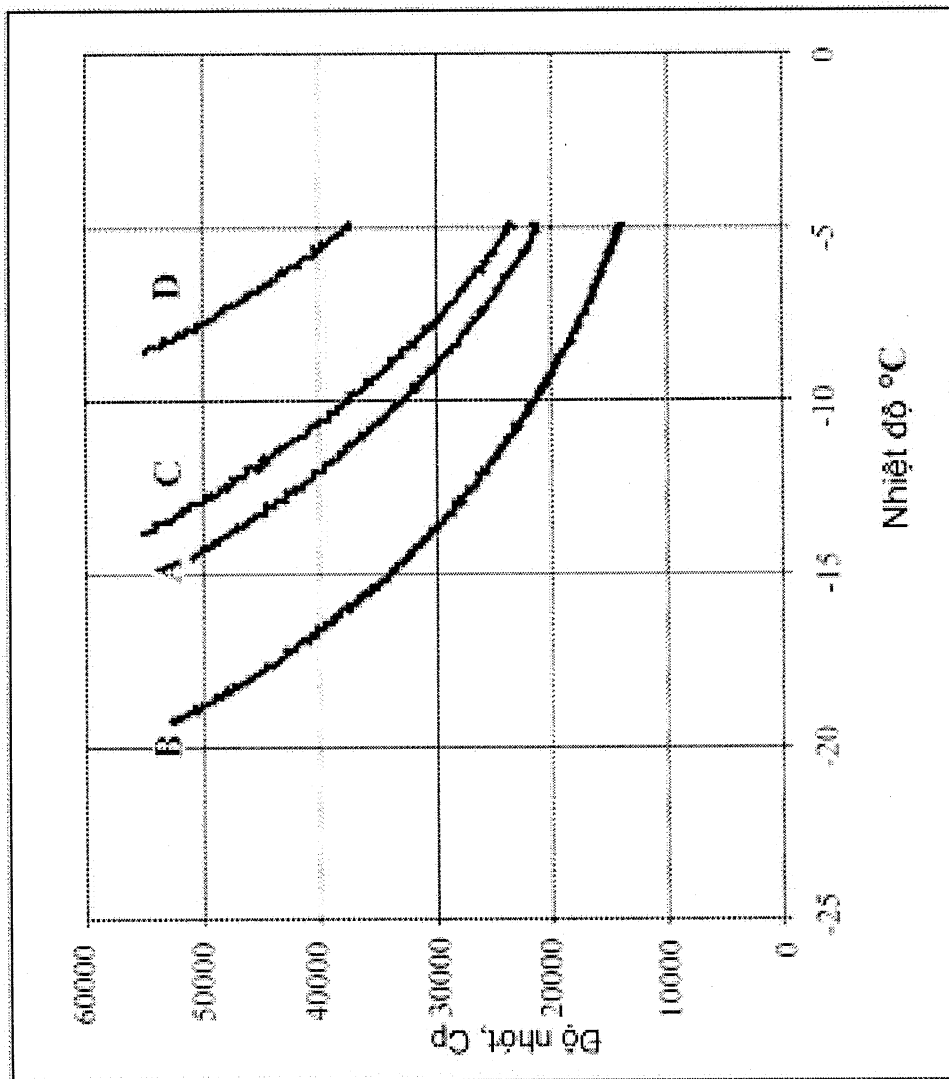


fig. 5

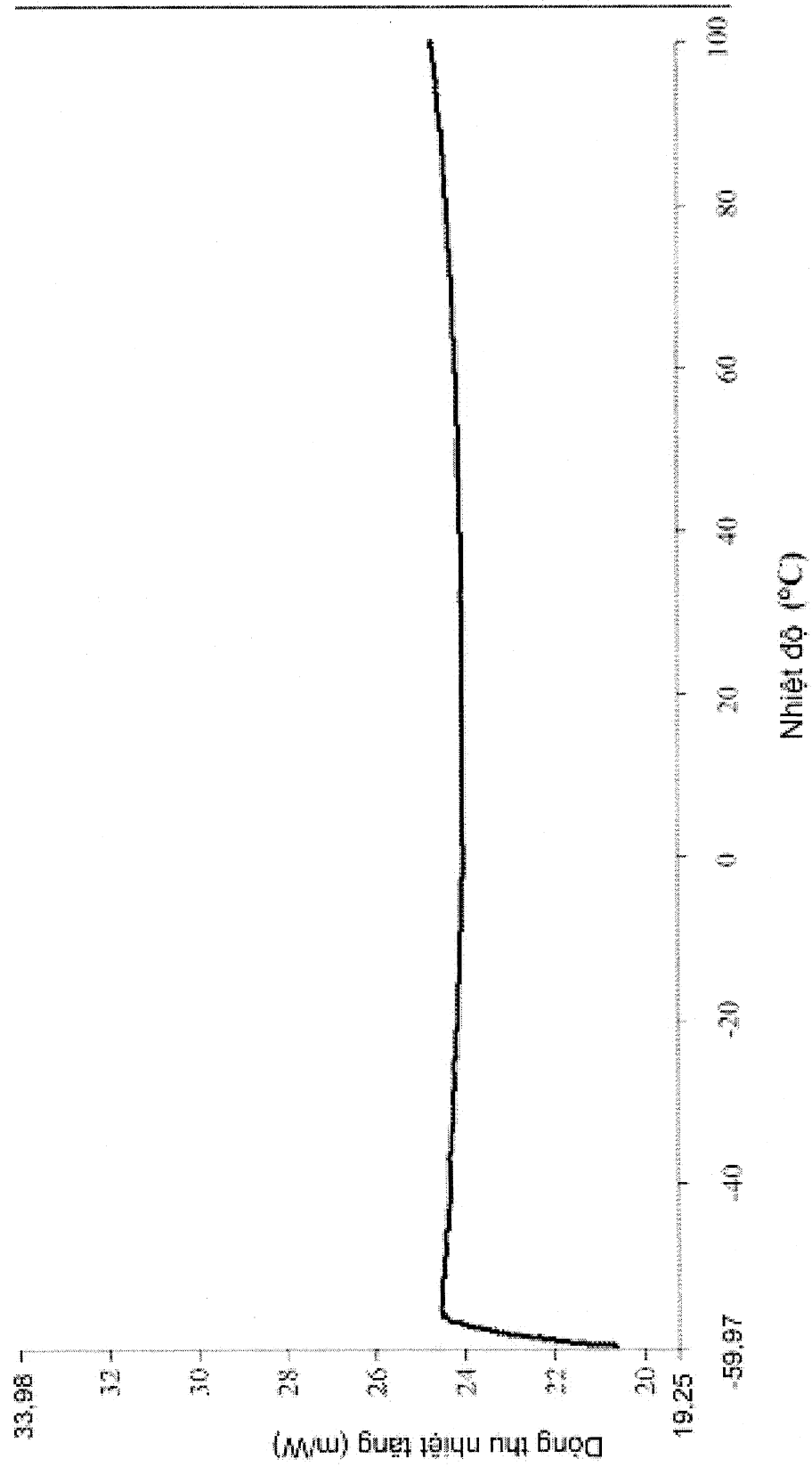


fig. 6

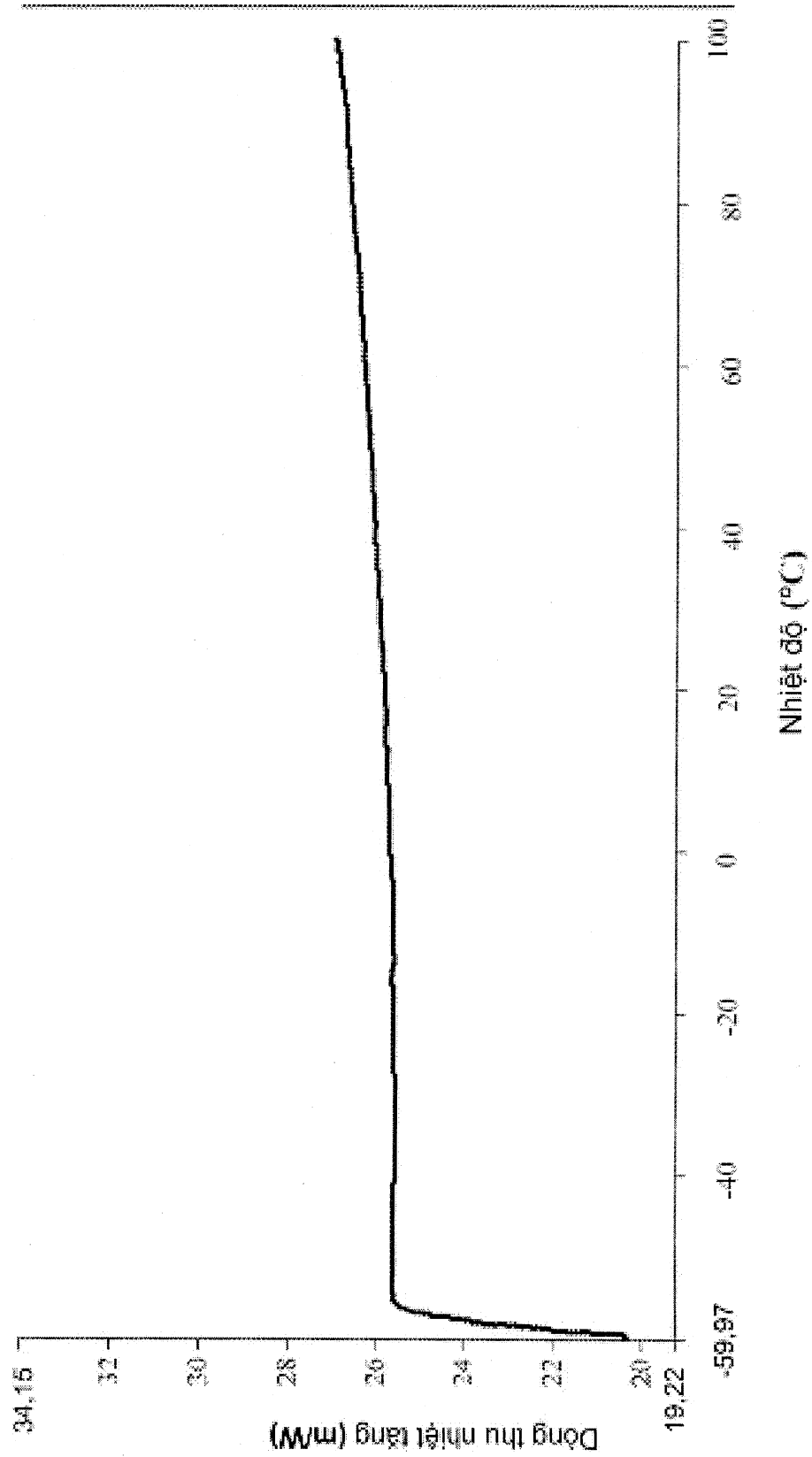


fig. 7

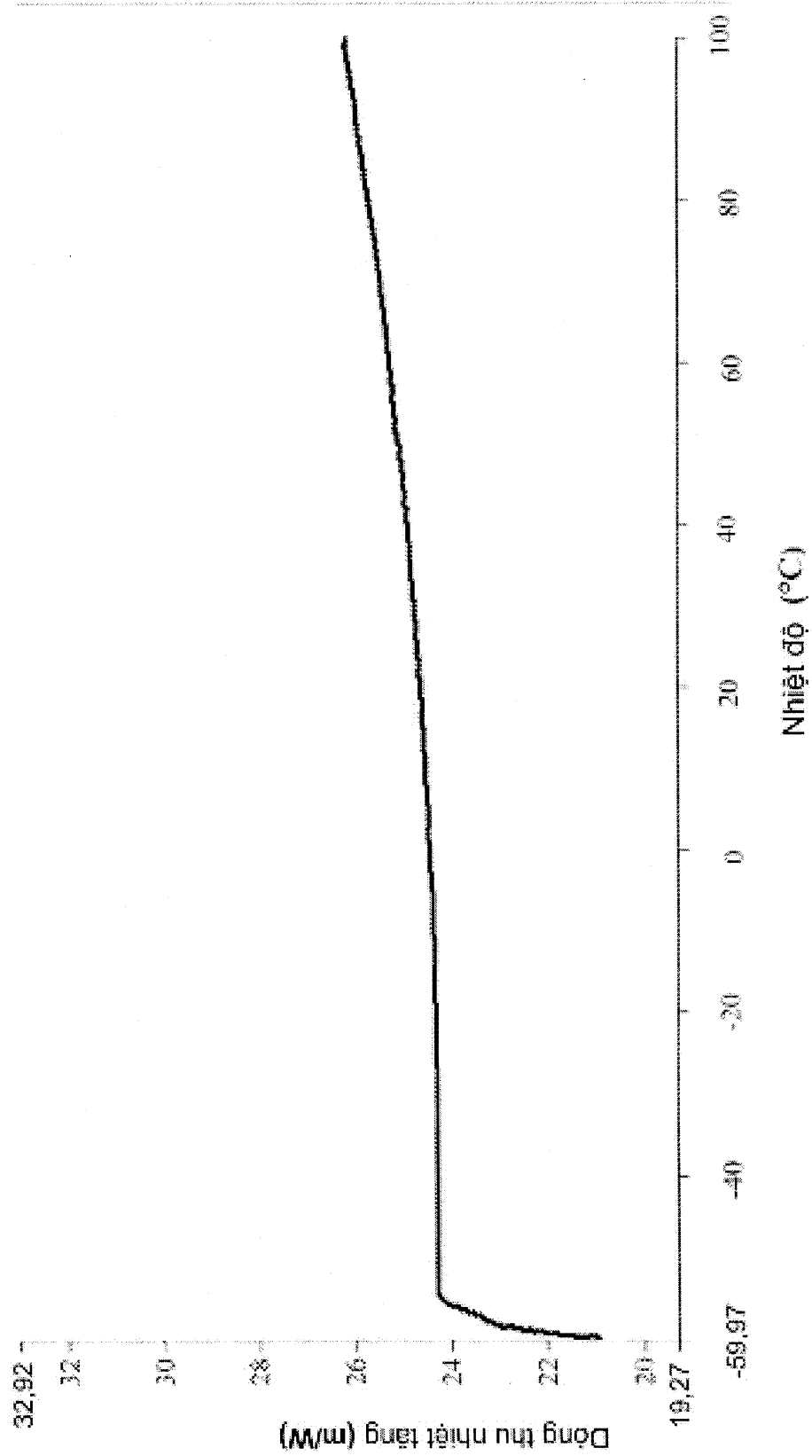


fig. 8

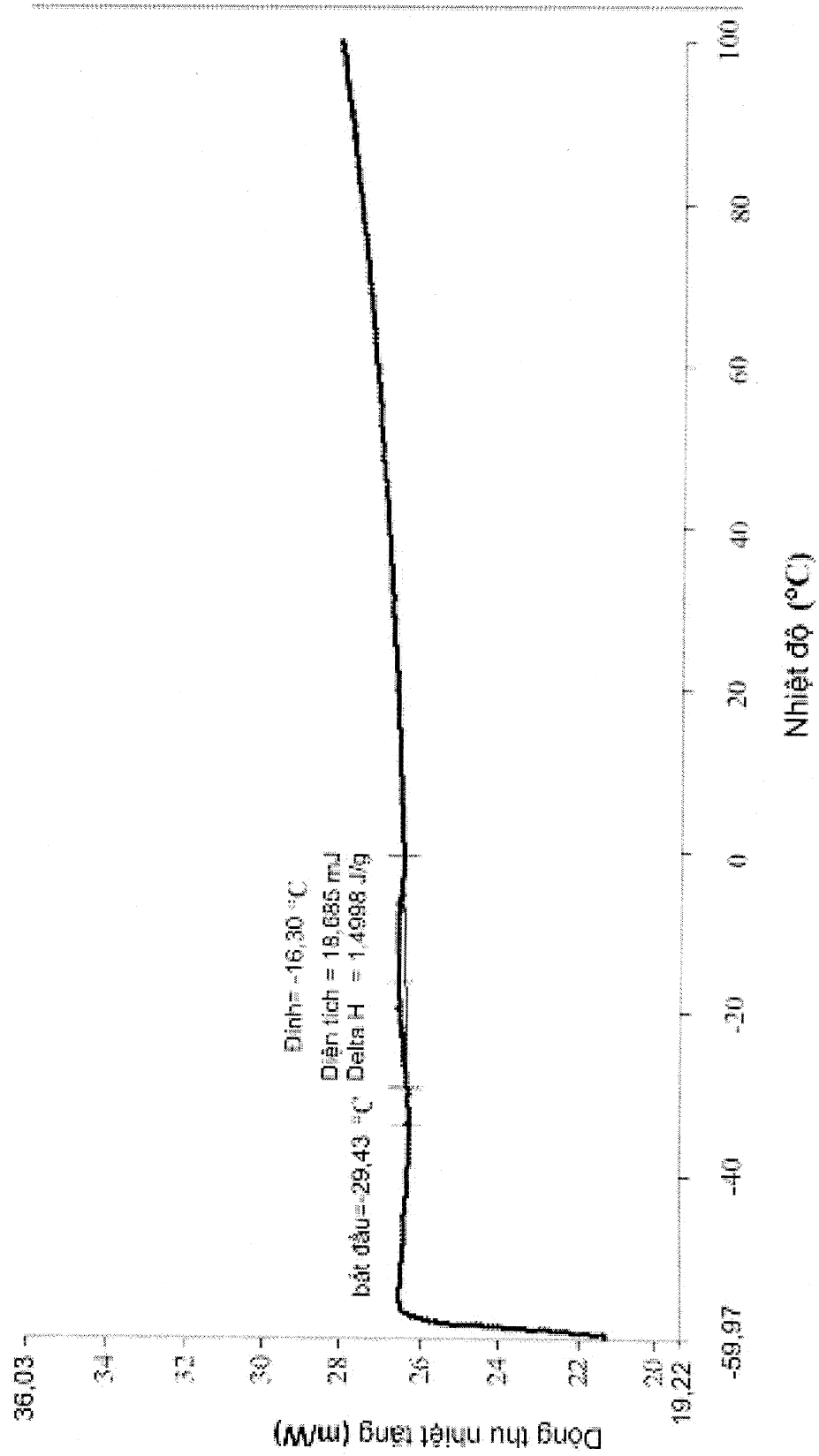


fig. 9

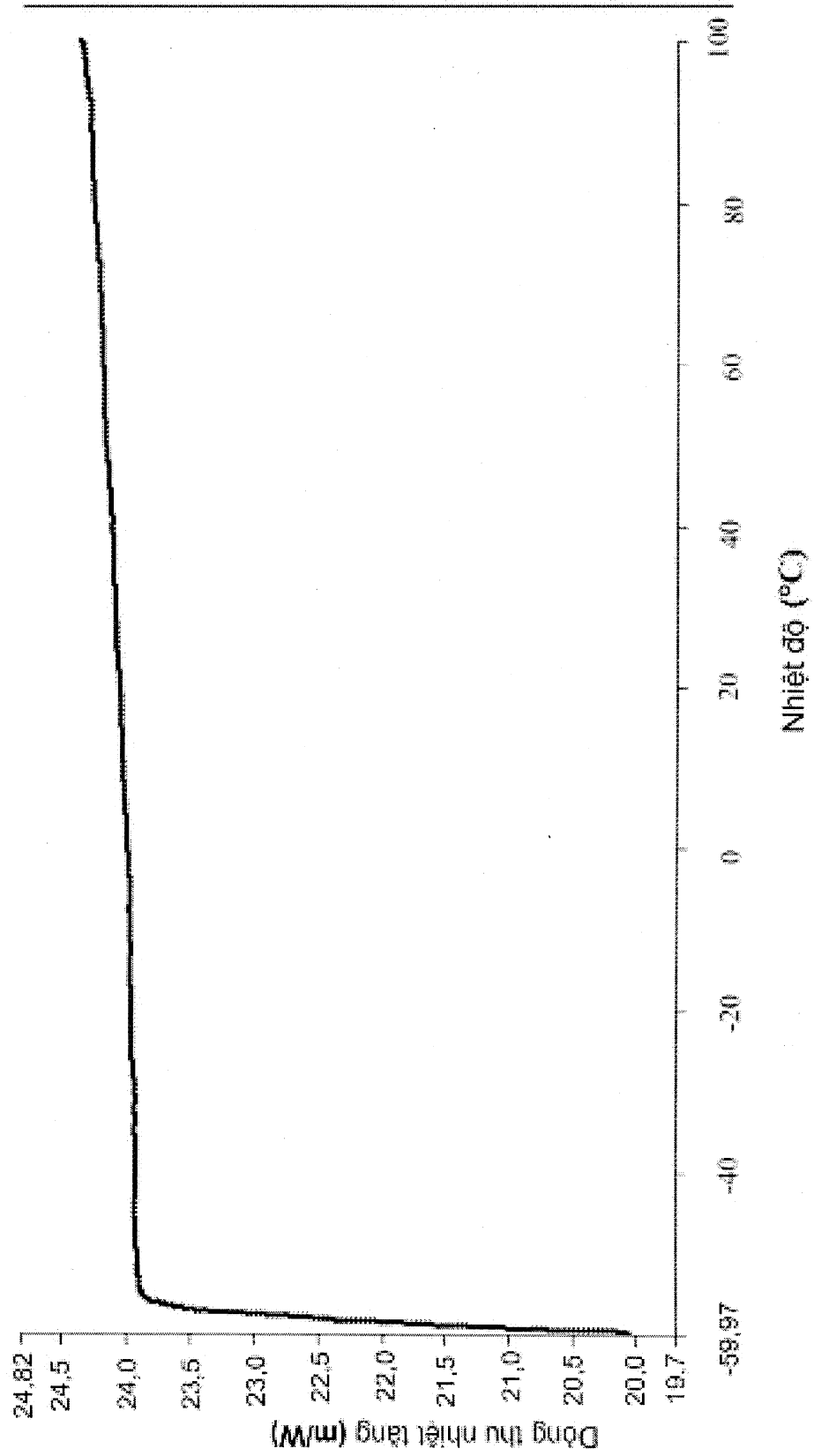


fig. 10

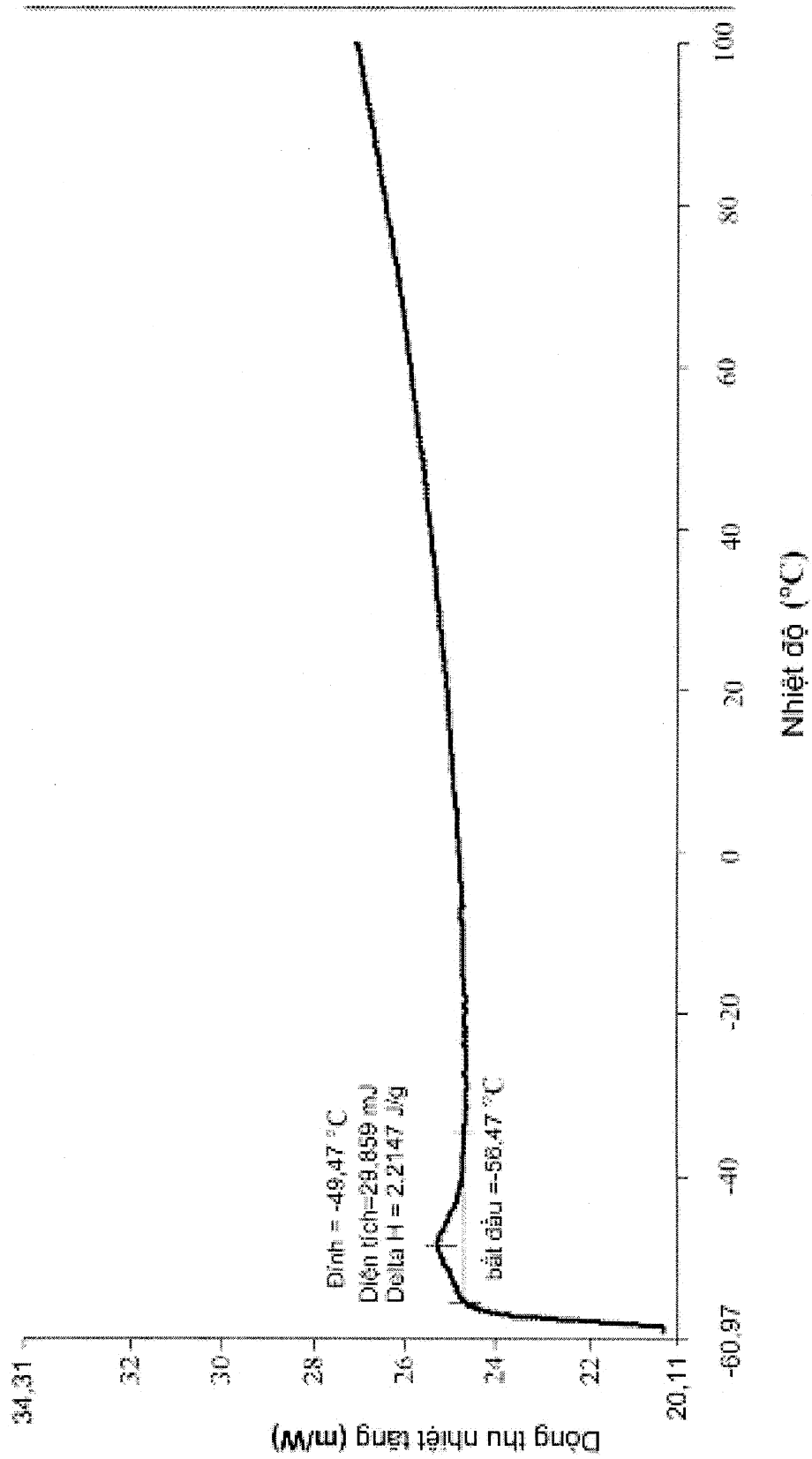


fig. 11