



(19)  
Bundesrepublik Deutschland  
Deutsches Patent- und Markenamt

(10) **DE 601 22 018 T2 2007.02.15**

(12) **Übersetzung der europäischen Patentschrift**

(97) **EP 1 370 591 B1**

(21) Deutsches Aktenzeichen: **601 22 018.8**

(86) PCT-Aktenzeichen: **PCT/IL01/01029**

(96) Europäisches Aktenzeichen: **01 983 754.1**

(87) PCT-Veröffentlichungs-Nr.: **WO 2002/036638**

(86) PCT-Anmeldetag: **06.11.2001**

(87) Veröffentlichungstag

der PCT-Anmeldung: **10.05.2002**

(97) Erstveröffentlichung durch das EPA: **17.12.2003**

(97) Veröffentlichungstag

der Patenterteilung beim EPA: **02.08.2006**

(47) Veröffentlichungstag im Patentblatt: **15.02.2007**

(51) Int Cl.<sup>8</sup>: **C08F 10/00 (2006.01)**

**C07C 215/50 (2006.01)**

**C07F 7/00 (2006.01)**

(30) Unionspriorität:

**705780 06.11.2000 US**

(73) Patentinhaber:

**Ramot at Tel Aviv University Ltd., Tel Aviv, IL**

(74) Vertreter:

**derzeit kein Vertreter bestellt**

(84) Benannte Vertragsstaaten:

**AT, BE, CH, CY, DE, DK, ES, FI, FR, GB, GR, IE, IT,  
LI, LU, MC, NL, PT, SE, TR**

(72) Erfinder:

**KOL, Moshe, 52371 Ramat Gan, IL; TSHUVA, Edit,  
76289 Rehovot, IL**

(54) Bezeichnung: **AKTIVER NICHTMETALLOECEN-PRÄKATALYSATOR UND VERFAHREN ZUR TAKTISCHEN KATALYTISCHEN POLYMERISATION VON ALPHA-OLEFIN-MONOMEREN**

Anmerkung: Innerhalb von neun Monaten nach der Bekanntmachung des Hinweises auf die Erteilung des europäischen Patents kann jedermann beim Europäischen Patentamt gegen das erteilte europäische Patent Einspruch einlegen. Der Einspruch ist schriftlich einzureichen und zu begründen. Er gilt erst als eingelegt, wenn die Einspruchsgebühr entrichtet worden ist (Art. 99 (1) Europäisches Patentübereinkommen).

Die Übersetzung ist gemäß Artikel II § 3 Abs. 1 IntPatÜG 1991 vom Patentinhaber eingereicht worden. Sie wurde vom Deutschen Patent- und Markenamt inhaltlich nicht geprüft.

**Beschreibung**

## Gebiet und Hintergrund der Erfindung

**[0001]** Die vorliegende Erfindung betrifft im Allgemeinen die katalytische Polymerisation und im Besonderen die taktische katalytische Polymerisation von Alpha-Olefinmonomeren unter Verwendung eines aktiven nicht-Metallocen Präkatalysators, der einen Diamindiphenolatkomplex aufweist, und ein entsprechendes Verfahren, das den offenbarten Präkatalysator verwendet.

**[0002]** Gegenwärtig gibt es ein erhebliches Interesse in Bezug auf Verfahren und Systeme von katalytischer Polymerisation von Alpha-Olefinmonomeren, die auf einem "Präkatalysator" basieren, der ein Metall, das an einen oder mehrere Zuschauerliganden gebunden ist, aufweist, wobei der Präkatalysator in einem Flüssigphasenlösungsmittel löslich ist oder auf einer festen Oberfläche absorbiert ist und wobei der Alpha-Olefinmonomerreaktant flüssig oder in der Gasphase sein kann. Bei diesen Verfahren und Systemen wird der Präkatalysator typischerweise durch mindestens einen "Cokatalysator" aktiviert, wobei die Kombination des aktivierten Präkatalysators und des mindestens einen Cokatalysators als eine einzelne chemische Einheit oder als Komplex-"Katalysator" für die Polymerisation des Alpha-Olefinmonomers wirkt. Das Gebiet der katalytischen Polymerisation von Alpha-Olefinmonomeren ist von erheblicher industrieller Bedeutung, da mehr als 50 Millionen Tonnen von Poly(Alpha-Olefin)-Produkten, wie zum Beispiel Polyethylene und Polypropylene, jedes Jahr hergestellt werden, was Metall-basierende katalytische Verfahren und Systeme einschließt.

**[0003]** Nachstehend betrifft der Begriff "Präkatalysator" im Allgemeinen eine chemische Einheit und im Besonderen eine chemische Verbindung, die, wenn durch mindestens einen Cokatalysator aktiviert, Teil eines "Katalysator" wird, der für die katalytische Polymerisation eines Alpha-Olefinmonomers unter echten Polymerisationsreaktionsbedingungen funktionell ist. Im Allgemeinen ist ein Präkatalysator ohne die Gegenwart mindestens eines Cokatalysators für die katalytische Polymerisation eines Alpha-Olefinmonomers unwirksam und zeigt konsequenterweise im Wesentlichen keine katalytische Aktivität für die Polymerisation eines Alpha-Olefinmonomers. Wenn hier auf die katalytische Aktivität während einer Polymerisationsreaktion Bezug genommen wird, bezieht sich die Bezugnahme auf die katalytische Aktivität eines Präkatalysators und es sollte verständlich sein, dass der Präkatalysator zusammen mit mindestens einem Cokatalysator wirkt, um die katalytische Polymerisation eines Alpha-Olefinmonomers zu bewirken. Es sei jedoch angemerkt, dass es seltene Ausnahmen eines bestimmten Präkatalysators gibt, der wirkt, ohne zuerst durch einen Cokatalysator aktiviert zu werden, um die katalytische Polymerisation eines Alpha-Olefinmonomers zu bewirken. Somit fokussiert sich die vorliegende Erfindung auf einen im Vergleich zu Präkatalysatoren, die gegenwärtig für die katalytische Polymerisation von Alpha-Olefinmonomeren verwendet werden, neuen und neuartigen Präkatalysator.

**[0004]** Gegenwärtig ist eines der Hauptziele auf diesem Gebiet eine Vielzahl neuer Typen von Poly(Alpha-Olefin)-Produkten, zum Beispiel taktische Polymere, die aus Alpha-Olefinmonomeren hergestellt sind, die mehr als zwei Kohlenstoffatome aufweisen, mit gut definierten Massen- oder globalen physiochemischen Eigenschaften, wie zum Beispiel mechanische Festigkeit, Elastizität, Schmelzpunkt und chemischer Beständigkeit, herzustellen, die für die Herstellung einer Vielzahl von Endprodukten anwendbar sind. Dies kann durch Kontrollieren der Polymertaktizität und durch Polymerisieren verschiedener Arten von Alpha-Olefinmonomeren erreicht werden, um eine Vielzahl von Homopolymeren oder Co-Polymeren mit variierendem Grad an Monomereinschluss herzustellen.

**[0005]** Massen- oder globale physiochemische Eigenschaften der Polymere sind direkt mit molekularen oder lokalen physiochemischen Charakteristika der Polymereinheiten, die das Massenpolymer bilden, verbunden und sind dadurch kontrollierbar. Drei bemerkenswerte molekulare physiochemische Charakteristika sind das Molekulargewicht des Polymers, die Molekulargewichtsverteilung des Polymers und die Polymertaktizität.

**[0006]** Das Molekulargewicht des Polymers und die Molekulargewichtsverteilung des Polymers sind äußerst relevant in Bezug auf die Herstellung verschiedener Arten von Polymeren. Zum Beispiel hat Polyethylen mit ultra-hohem Molekulargewicht (UHMWPE) mit einem durchschnittlichen Molekulargewicht oberhalb 3.000.000 die höchste Abriebfestigkeit von Thermoplasten und einen geringen Reibungskoeffizienten. Im Gegensatz zur Synthese von kleinen Molekülen schließen Polymerisationsreaktionen jedoch zufällige Ereignisse ein, die durch Bildung von Polymerketten, die eher einen Bereich von Molekulargewichten als ein einzelnes Molekulargewicht haben, charakterisiert werden. Typischerweise sind Polymere besser definiert und charakterisiert in Bezug auf enge Molekulargewichtsbereiche.

**[0007]** Der akzeptierte Parameter zur Definition der Molekulargewichtsverteilung eines Polymers ist der Po-

lydispersitätsindex (PDI), welcher das massengemittelte Molekulargewicht  $M_w$ , geteilt durch das Molekulargewicht-Zahlenmittel  $M_n$  oder  $M_w/M_n$  ist. Abhängig von der tatsächlichen Anwendung weist ein katalytisches Polymerisationssystem idealerweise eine "lebende" Polymerisation auf, bei der die Initiationsgeschwindigkeit höher ist als die Geschwindigkeit der Propagation, die zu einem PDI nahe 1 führt und schließt eine einzelne katalytisch aktive Stelle ein und die Geschwindigkeit der Beendigung der Reaktionen ist vernachlässigbar, relativ zur Propagation. Dies ist in sehr wenigen Systemen für die katalytische Polymerisation von Alpha-Olefinmonomeren erreicht worden. Ein PDI von 2.0, der "nicht lebende" Polymerisation kennzeichnet, wird oft in katalytischen Systemen von Metallocen gefunden, die ebenfalls eine einzelne katalytisch aktive Stelle beinhalten. Klassische heterogene Ziegler-Natta Katalysatorsysteme führen gewöhnlich zu einem breiteren Bereich von Molekulargewichten mit einem PDI von ungefähr 5. Ein gegenwärtiger Versuch ist es, Alpha-Olefin-Polymerisationspräkatalysatoren und katalytische Systeme, die diese Präkatalysatoren beinhalten, zu entwerfen, was zu Poly(Alpha-Olefin)-Produkten mit niedrigen Werten an PDI führt.

**[0008]** Eine andere gegenwärtige Herausforderung auf dem Gebiet der katalytischen Polymerisation von Alpha-Olefinen ist es, Alpha-Olefin-Polymerisationspräkatalysatoren und katalytischen Systemen zu entwerfen, die diese Präkatalysatoren beinhalten, was zu Poly(Alpha-Olefin)-Produkten mit kontrollierbarem und klassifizierbarem Grad an Polymertaktizität führt. Polymertaktizität ist eine andere sehr wesentliche molekulare physiochemische Charakteristik eines Polymers, die die physiochemischen Masseneigenschaften eines Polymers, wie zum Beispiel eines Poly(Alpha-Olefin)-Polymers, dramatisch bestimmen und beeinflussen kann. Der Begriff "Polymertaktizität" betrifft die besondere Mikro- oder lokale Strukturkonfiguration der Substituenten auf dem Polymerrückgrad oder äquivalent die Stereoregularität der Polymerkette, ob ein Polymer zum Beispiel isotaktisch, syndiotaktisch oder ataktisch ist. Polymertaktizität wird typischerweise in Bezug auf ein Kohlenwasserstoffpolymer, das sich von der Polymerisation eines Monomers mit mehr als 2 Kohlenstoffatomen ableitet, verwendet, so dass das Polymer eine Seitenkette an jedem anderen Kohlenstoffatom des Polymerrückgrads hat. Außerdem gibt es verschiedene besondere Formen oder Arten der "Polymertaktizität" gemäß der besonderen Mikro- oder lokalen Struktur in Bezug auf die relativen Orientierungen der Seitenketten, die an das Polymerrückgrad gebunden sind.

**[0009]** Ein Polymer, bei dem alle Seitenketten sich von derselben Seite oder Ebene des Polymerrückgrads erstrecken oder herausragen, wird als ein "isotaktisches Polymer" bezeichnet, welches aus einem "isotaktischen" oder entsprechend einem "isospezifischen" Polymerisationsprozess erhalten wird. Ein Polymer, bei dem sich die Seitenketten alternierend von gegenüberliegenden Seiten des Polymerrückgrads erstrecken oder herausragen, wird als ein "syndiotaktisches Polymer" bezeichnet, das aus einem "syndiotaktischen" oder entsprechend einem "syndiospezifischen" Polymerisationsprozess erhalten wird. Ein Polymer, bei dem sich die Seitenketten zufällig von jeder Seite des Polymerrückgrads erstrecken oder hervorragen, wird als ein "ataktisches Polymer" bezeichnet, das aus einem "ataktischen" Polymerisationsprozess erhalten wird. Des Weiteren wird das Ausmaß oder der Grad einer besonderen Form oder Art an Polymertaktizität ebenfalls in Bezug auf die Polymertaktizität verwendet. Zum Beispiel kann ein Polymer als 80% isotaktisch und 20% ataktisch klassifiziert werden. Ein anderes Beispiel ist ein hemi-isotaktisches Polymer, bei dem sich jede zweite Seitenkette von derselben Seite oder Ebene des Polymerrückgrads erstreckt oder hervorragt, wohingegen der Rest der Seitenketten sich zufällig von beiden Seiten des Polymerrückgrads erstreckt oder herausragt. Typischerweise wird das Ausmaß oder der Grad an Taktizität eines Polymers oder eines Polymerisationsprozesses bestimmt, indem das Polymer oder die Produkte des Polymerisationsprozesses NMR spektroskopischen Analysen, insbesondere  $^{13}\text{C}$  NMR, unterzogen werden.

**[0010]** Ein illustratives Beispiel, das den dramatischen Einfluss zeigt, den die Polymertaktizität auf die physiochemischen Masseneigenschaften eines Polymers hat, ist die taktische Polymerisation von Propylen. Isotaktisches Polypropylen ist fest und halb transparent bei Raumtemperatur mit einem Schmelzpunkt im Bereich von 150–165°C, syndiotaktisches Polypropylen ist ein transparenter Feststoff bei Raumtemperatur mit einem Schmelzpunkt von ungefähr 145°C und ataktisches Polypropylen ist bei Raumtemperatur ein viskoses Öl.

**[0011]** Metallocen-Präkatalysatoren, die einen Metallkomplex aufweisen, der ein Metallatom, zum Beispiel aus Übergangselementen der Gruppe IV, wie zum Beispiel Titan, Zirkonium und Hafnium, beinhaltet, das an zwei Liganden der gut bekannten Cyclopentadienyl (Cp) Ligandfamilie, zum Beispiel Pentamethylcyclopentadienyl, Indenyl oder Fluorenyl, bindet, wurden während der letzten zwei Dekaden zum Zweck der katalytischen Polymerisation von Alpha-Olefinmonomeren eingeführt. Die allgemeinste Art von Metallocenpräkatalysatoren ist ein neutraler Komplex, der ein Metall im Oxidationszustand von +4, das zusätzlich zu zwei Standard Cp-Liganden an zwei anionische Liganden gebunden ist, beinhaltet, zum Beispiel Bis(cyclopentadienyl)titandichlorid, ebenfalls als Titanocendichlorid bekannt. Eine besondere Gruppe von Metallocenpräkatalysatoren ist als Ansa-Metallocenkomplexe bekannt, bei denen die zwei Cp-Liganden kovalent aneinander gebunden sind.

Eine verwandte Gruppe von Komplexen sind Präkatalysatoren mit "eingeschränkter Geometrie", die ein Metall aufweisen, das sowohl an einen einzelnen Liganden vom Cp-Typ als auch an eine zweite anionische Gruppe gebunden ist, wobei der Cp-Ligand und die zweite anionische Gruppe kovalent aneinander gebunden sind.

**[0012]** Die Verwendung von Metallocenpräkatalysatoren und Präkatalysatoren vom Metallocentyp in katalytischen Verfahren und Systemen zur Polymerisation von Alpha-Olefinmonomeren erfordert eine bessere Kontrolle des Molekulargewichts und eine engere Molekulargewichtsverteilung, was mit niedrigeren Werten des PDI verbunden ist, relativ zur klassischen Ziegler-Natta Familie von Präkatalysatoren, wie zum Beispiel Titantrichlorid, das einen Trialkylaluminium-Cokatalysator verwendet. Außerdem ist die Gruppe der Ansa-Metallocenpräkatalysatoren zur Herstellung von Polymeren mit einem kontrollierbaren und klassifizierbaren Grad an Polymertaktizität verwendbar. Metallocenpräkatalysatoren und Präkatalysatoren vom Metallocentyp, Verfahren und Systeme sind gut bekannt und im Stand der Technik beschrieben. Diese Präkatalysatoren, Verfahren und Systeme sind jedoch in vielerlei Hinsicht in Bezug auf die oben genannte Diskussion begrenzt.

**[0013]** Zuerst zeigen Präkatalysatoren vom Metallocentyp in Bezug auf die katalytische Aktivität typischerweise eine relativ moderate Aktivität zur Polymerisierung einer kleinen Vielzahl von Alpha-Olefinmonomeren. In Bezug auf Poly(Alpha-Olefin)-Produkttypen und Verschiedenheit sind Alpha-Olefinmonomere, die durch Metallocenpräkatalysatoren polymerisiert wurden, häufig kurzketziges Ethylen und Propylen, welche bereits gut beschrieben sind. Metallocenpräkatalysatoren sind in Bezug auf die Verfügbarkeit und Vielseitigkeit begrenzt. Präkatalysatoren vom Metallocentyp sind relativ schwierig zu synthetisieren, eine Tatsache, die die Möglichkeit der Entwicklung neuer Varianten von Alpha-Olefin Polymerisationspräkatalysatoren vom Metallocentyp beschränkt.

**[0014]** Aufgrund der anhaltenden Suche für neue Poly(Alpha-Olefin)-Produkte, die ausgewählte, gut definierte physiochemische Masseneigenschaften und molekulare, physiochemische Charakteristika zeigen, verbunden mit den oben genannten Beschränkungen, die mit Metallocenpräkatalysatoren verbunden sind, gibt es ein wachsendes Interesse an der Entwicklung von nicht-Metallocen Alpha-Olefin-Polymerisationspräkatalysatoren und betreffende katalytische Verfahren und Systeme. Der Hauptschwerpunkt liegt auf dem Erhalten neuer Alpha-Olefin-Polymerisationspräkatalysatoren, welche leicht erhältlich sind, eine relativ hohe Stabilität zeigen und zur verbesserten Kontrolle gegenüber industriell wichtigen Polymerparametern, wie zum Beispiel Molekulargewicht, Molekulargewichtsverteilung, Produkttypen und Vielzahl und kontrollierbare und klassifizierbare Polymertaktizität, verwendet werden können.

**[0015]** Das Prinzip der Kontrolle der Polymertaktizität durch Ligandendesign wurde zuerst für verschiedene katalytische Systeme gezeigt, die eine Gruppe von Ansa-Metallocenkomplexpräkatalysatoren aufweisen, wie von Brintzinger, H. H., et. al. in *Angew. Chem., Int. Ed. Engl.* 34, 1143, 1995 rezensiert. Die dort beschriebenen katalytischen Systeme führen gewöhnlich zu einem PDI von nicht weniger als 2.0 und leiden an den oben beschriebenen Nachteilen und Beschränkungen von Metallocensystemen.

**[0016]** Ein Beispiel eines "Halbsandwich" Präkatalysators, der einen Komplex aufweist, der einen Liganden vom Cp-Typ und einen Heteroatomdonor beinhaltet, wird von Sita, L. R., in *J. Am. Chem. Soc.* 122, 958, 2000 beschrieben. Dieses katalytische Halbmetallocen-System ist in Bezug auf Polymerisozpezifität und lebende Polymerisation von Alpha-Olefinmonomeren aktiv. Dieses System schließt jedoch das Arbeiten bei kommerziell unerwünschten Reaktionsbedingungen, wie zum Beispiel  $-10^{\circ}\text{C}$ , ein.

**[0017]** Ein nicht-Metallocen Alpha-Olefinpolymerisationskatalysesystem ist in US Patent Nr. 5,852,146 offenbart und weist einen Bis(hydroxyaromatischen Stickstoffligand)-Übergangsmetallpräkatalysator auf, der mit einem aktivierenden Methylaluminioxan (MAO) Cokatalysator arbeitet. Eine relativ hohe katalytische Aktivität von ungefähr 4.000 Gramm/(mmol-pre-cat.hr) wird nur für die Polymerisation von Ethylen berichtet. Außerdem wird MAO in großen Mengen als Cokatalysator benötigt, was im Allgemeinen beachtliche Beschränkungen in Bezug auf Kosten und Verschmutzung bewirkt. MAO, das in großen Mengen verwendet wird, ist teuer und muss sauber entsorgt werden in Bezug auf Umweltüberlegungen.

**[0018]** Lebende Polymerisation von 1-Hexen wird von Schrock, R. R., in *J. Am. Chem. Soc.* 119, 3830, 1997 beschrieben und ist in US Patent Nr. 5,889,128 offenbart. Eine der dort beschriebenen nicht-Metallocen Präkatalysatorzusammensetzungen umfasst einen Dimethylkomplex, bei dem das Metallatom zu einem dreizähligen Zuschauerligand chelatisiert ist, welcher durch einen nicht-MAO Borsalz-Cokatalysator aktiviert wird. Es werden jedoch nur ataktische Polymerprodukte von diesem System erhalten.

**[0019]** Die lebende Polymerisation von 1-Hexen wird ebenfalls von McConville, D. H., in *J. Am. Chem. Soc.*

118, 10008, 1996 beschrieben. Sie beschreiben einen aktiven nicht-Metalloen Polymerisationspräkatalysator, der die Aktivierung eines Präkatalysator mit einschließt, der einen Dimetallkomplex eines Bis(amid)-Liganden beinhaltet, mit einer nicht-MAO Bor-Lewis-Säure als Cokatalysator unter Raumtemperatur zur Herstellung ataktischer Polymere.

**[0020]** Einen anderen aktiven lebenden nicht-Metalloen 1-Hexen-Polymerisationspräkatalysator, der mit einem nicht-MAO Cokatalysator arbeitet, wird von Kim, K., in *Organometallics* 17, 3161, 1998 berichtet. Ähnlich zu den anderen Lehren ergibt das beschriebene katalytische System nur ataktische Polymere.

**[0021]** Ein nicht-Metalloen Diphenolatpräkatalysator wird von Schaverien, C. J., in *J. Am. Chem. Soc.* 117, 3008, 1995 berichtet. Die Verwendung des offenbarten Präkatalysators führt zu hoch isotaktischem Poly(1-hexen), wobei der Polymerisationsprozess jedoch nicht lebend ist.

**[0022]** Die Publikation HINSHAW C J ET AL: "Molybdenum(VI)-dioxo complexes with linear and tripodal tetradentate ligands: models for the molybdenum (VI/V) centers of the molybdenum hydroxylases and related enzymes 1. Syntheses and structures" *INORGANIC CHEMISTRY*, Vol 28, Nr. 25, 1989, Seiten 4483–4496, XP002935342 ISSN: 0020-1669 ist auf neue Mo(VI)-Dioxokomplexe als Modelle für Molybdän (VI/V) Zentren von Molybdänhydroxylasen und verwandten Enzymen fokussiert. Sie offenbart Komplexe von nur einem bestimmten Metallatom, Molybdän. Darin sind alle Molybdänkomplexe 1–5, die in Bezug auf die Tabellen I und II beschrieben sind, vom Dioxo-Typ, d.h. jeder weist zwei Sauerstoffliganden auf, die doppelt an das Molybdänatom gebunden sind. Außerdem ist das Molybdän in jedem dort beschriebenen Molybdänkomplex in demselben besonderen Oxidationszustand von VI(+6).

**[0023]** Die Publikation BANDOLI G ET AL: "Preparation and crystal and molecular structure of [N,N'-o-phenylene-bis(salicylideneiminato)UO<sub>2</sub>(EtOH)]" *JOURNAL OF THE CHEMICAL SOCIETY, SECTION D*, 1971, pages 1330–1331, XP009025789 offenbart die Synthese und die Molekülstruktur von [N,N'-o-Phenylene-bis(salicylideneiminato)UO<sub>2</sub>(EtOH)]. Dies ist ein Urankomplex, der durch einen Diamin-bis(phenolat)-Liganden charakterisiert wird.

**[0024]** Die Publikation DATABASE CROSSFIRE BEILSTEIN [Online] Beilstein Institut zur Förderung der Chemischen Wissenschaften, Frankfurt am Main, DE; 26. Februar 1991 (1991-02-26) Datenbankzugang Nr. 3869282 (BRN) XP002270891 offenbart einen Kupfermetallkomplex, der als N,N'-Bis-(2-hydroxy- $\alpha$ -ureido-benzyl)harnstoff-Kupfer(II)-Verbindung mit einem Liganden eines Harnstoffderivats bezeichnet wird. Die zwei zentralen Stickstoffe, die an die Carbonyleinheit gebunden sind, binden nicht notwendigerweise an das Metall, um einen Metallkomplex zu bilden.

**[0025]** Kürzlich offenbarten die vorliegenden Erfinder in US-A-6,333,423, eingereicht am 20. September 1999, einen Nicht-Metalloen Präkatalysator von äußerst hoher Aktivität, der einen Amindiphenolatkomplex beinhaltet, und ein entsprechendes Verfahren zur katalytischen Polymerisation von Alpha-Olefinmonomeren unter Verwendung dieses Präkatalysators. Es werden jedoch nur ataktische Polymere unter Verwendung des offenbarten Präkatalysators unter den aufgezeigten Polymerisationsbedingungen erhalten.

**[0026]** In Hinblick auf die oben diskutierten Beschränkungen für die Polymerisation von Alpha-Olefinen, gibt es somit einen Bedarf für einen Durchschnittsfachmann und wäre es äußerst vorteilhaft einen aktiven nicht-Metalloen Präkatalysator und ein entsprechendes Verfahren zur katalytischen Polymerisation von Alpha-Olefinmonomeren zu haben, der/das nicht auf die Aktivierung durch große Mengen eines Cokatalysators, wie zum Beispiel MAO, beschränkt ist und ebenfalls durch eine hohe Stabilität charakterisiert ist, schnell erhalten oder synthetisiert werden kann, und verschiedene Arten und eine Vielzahl von Poly(Alpha-Olefin)-Produkte mit einem hohen Molekulargewicht und einer niedrigen Molekulargewichtsverteilung herstellen kann und einen kontrollierbaren und klassifizierbaren Grad an Polymertaktizität hat. Außerdem gibt es einen Bedarf für einen solchen Präkatalysator und von Verfahren zur Herstellung von Alpha-Olefinpolymeren mit Ausnahme von Polyethylenen und Polypropylenen, der/das industriell einsetzbare Eigenschaften und Charakteristika hat.

#### Zusammenfassung der Erfindung

**[0027]** Die vorliegende Erfindung betrifft im Allgemeinen die katalytische Polymerisation und im Besonderen die taktische katalytische Polymerisation von Alpha-Olefinmonomeren unter Verwendung eines aktiven nicht-Metalloen Präkatalysators, der einen Diamindiphenolatkomplex aufweist. Außerdem weist die vorliegende Erfindung ein allgemeines Verfahren für die katalytische Polymerisation, einschließlich eines besonderen Verfahrens für die taktische katalytische Polymerisation von Alpha-Olefinpolymeren unter Verwendung des

offenbarten Diamindiphenolatpräkatalysators auf.

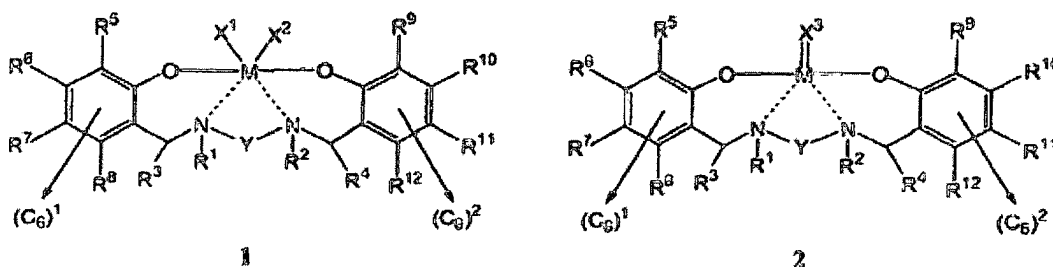
**[0028]** Es ist deshalb ein Gegenstand der vorliegenden Erfindung allgemeine Strukturen und allgemeine Formeln eines aktiven nicht-Metallocen Präkatalysators im Allgemeinen für die katalytische Polymerisation und insbesondere für die taktische katalytische Polymerisation von Alpha-Olefinpolymeren bereitzustellen.

**[0029]** Es ist weiter ein Gegenstand der vorliegenden Erfindung allgemeine Strukturen und allgemeine Formeln eines aktiven nicht-Metallocen Präkatalysators im Allgemeinen für die katalytische Polymerisation und im Besonderen für die taktische katalytische Polymerisation von Alpha-Olefinpolymeren bereitzustellen, wobei der Präkatalysator ein Diamindiphenolatkomplex ist, der die Variabilität des Metallatoms, der Liganden, der aromatischen Gruppen, der Substituenten der aromatischen Gruppe, einer verbrückenden Gruppe und von Substituenten einer verbrückenden Gruppe aufweist.

**[0030]** Es ist ein anderer Gegenstand der vorliegenden Erfindung ein Verfahren im Allgemeinen für die katalytische Polymerisation und im Besonderen für die taktische katalytische Polymerisation von Alpha-Olefinpolymeren bereitzustellen, dass die Verwendung eines aktiven Diamindiphenolatpräkatalysators aufweist, wobei der Präkatalysator die Variabilität des Metallatoms, der Liganden, der aromatischen Gruppen, der Substituenten der aromatischen Gruppe, einer verbrückenden Gruppe und von Substituenten der verbrückenden Gruppe aufweist.

**[0031]** Es ist ein anderer Gegenstand der vorliegenden Erfindung ein Verfahren für die katalytische Polymerisation einschließlich taktischer katalytischer Polymerisation von Alpha-Olefinpolymeren bereitzustellen, das die Verwendung eines aktiven Diamindiphenolatkomplexes aufweist, wobei das Polymerisationsverfahren im Wesentlichen ein lebendes System ist.

**[0032]** Somit wird gemäß der vorliegenden Erfindung eine Verbindung mit einer allgemeinen Struktur, die aus der Gruppe, die aus Struktur 1 und Struktur 2 besteht, ausgewählt wird, bereitgestellt:



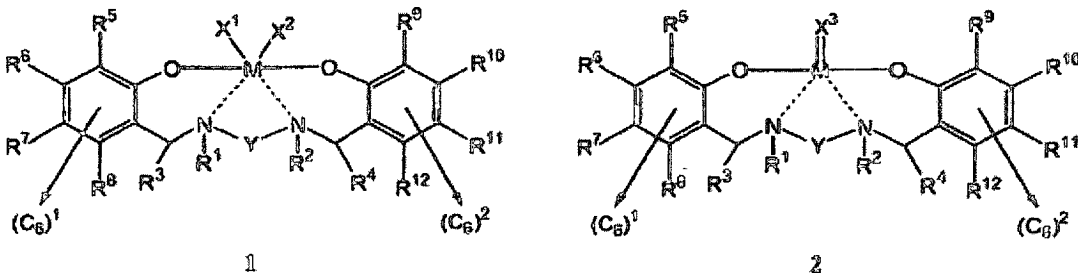
worin in jeder Struktur 1 und Struktur 2: jede einzelne durchgezogene Linie eine kovalente Bindung darstellt; jede doppelte durchgezogene Linie eine Bindung mit variierenden Graden der Kovalenz darstellt; jede gestrichelte Linie eine Bindung mit einem variierenden Grad an Kovalenz und einem variierenden Grad der Koordination darstellt; M ein Metallatom ist, das an jedes O Sauerstoffatom kovalent gebunden ist und mit variierenden Graden der Kovalenz und Koordination an jedes N Stickstoffatom gebunden ist; X<sup>1</sup> und X<sup>2</sup> jeweils ein univalenter anionischer Ligand ist, der an das Metallatom kovalent gebunden ist; X<sup>3</sup> ein einzelner anionischer Ligand ist, der an das Metallatom kovalent gebunden ist; R<sup>1</sup> und R<sup>2</sup> jeweils ein univalenter Radikal ist, der an ein unterschiedliches der N Stickstoffatome kovalent gebunden ist; R<sup>3</sup> ein univalenter Radikal ist, der an das C-Kohlenstoffatom des -CHR<sup>3</sup>- der (C<sub>6</sub>)<sup>1</sup>-CHR<sup>3</sup>-N-Verknüpfungs-Einheit kovalent gebunden ist; R<sup>4</sup> ein univalenter Radikal ist, der an das C-Kohlenstoffatom des -CHR<sup>4</sup>- der -N-CHR<sup>4</sup>-(C<sub>6</sub>)<sup>2</sup>-Verknüpfungs-Einheit kovalent gebunden ist; jedes R<sup>5</sup> bis R<sup>8</sup> ein univalenter Radikal ist, der an ein unterschiedliches der C-Kohlenstoffatome der ersten aromatischen Gruppe (C<sub>6</sub>)<sup>1</sup> kovalent gebunden ist; jedes R<sup>9</sup> bis R<sup>12</sup> ein univalenter Radikal ist, der an ein unterschiedliches der C-Kohlenstoffatome der zweiten aromatischen Gruppe (C<sub>6</sub>)<sup>2</sup> kovalent gebunden ist; und Y ein divalenter Radikal ist, der an beide der IV Stickstoffatome kovalent gebunden ist und zwischen ihnen verknüpft.

**[0033]** Gemäß eines anderen Aspekts der vorliegenden Erfindung wird eine Verbindung einer allgemeinen Formel bereitgestellt, die aus der Gruppe, die aus:  $[(OR^5R^6R^7R^8(C_6)^1(CHR^3)NR^1YNR^2(CHR^4)(C_6)^2R^9R^{10}R^{11}R^{12}O)MX^1X^2]$  und  $[(OR^5R^6R^7R^8(C_6)^1(CHR^3)NR^1YNR^2(CHR^4)(C_6)^2R^9R^{10}R^{11}R^{12}O)MX^3]$  besteht, ausgewählt wird, wobei in jeder allgemeinen Formel: M ein Metallatom ist, das an jedes O Sauerstoffatom kovalent gebunden ist und mit variierenden Graden der Kovalenz und Koordination an jedes N Stickstoffatom gebunden ist; X<sup>1</sup> und X<sup>2</sup> jeweils ein univalenter anionischer Ligand ist, der an das Metallatom kovalent gebunden ist; X<sup>3</sup> ein einzelner anionischer Ligand ist, der an das Metallatom kovalent gebunden ist; R<sup>1</sup> und R<sup>2</sup> jeweils ein univalenter Radikal ist, der an

ein unterschiedliches der N Stickstoffatome kovalent gebunden ist;  $R^3$  ein univalenter Radikal ist, der an das C-Kohlenstoffatom des  $-CHR^3-$  der  $(C_6)^1-CHR^3-N$ -Verknüpfungs-Einheit kovalent gebunden ist;  $R^4$  ein univalenter Radikal ist, der an das C-Kohlenstoffatom des  $-CHR^4-$  der  $-N-CHR^4-(C_6)^2$ -Verknüpfungs-Einheit kovalent gebunden ist; jedes  $R^5$  bis  $R^8$  ein univalenter Radikal ist, der an ein unterschiedliches der C-Kohlenstoffatome der ersten aromatischen Gruppe  $(C_6)^1$  kovalent gebunden ist; jedes  $R^9$  bis  $R^{12}$  ein univalenter Radikal ist, der an ein unterschiedliches der C-Kohlenstoffatome der zweiten aromatischen Gruppe  $(C_6)^2$  kovalent gebunden ist; und Y ein divalenter Radikal ist, der an beide der N Stickstoffatome kovalent gebunden ist und zwischen ihnen verknüpft.

**[0034]** Gemäß eines anderen Aspekts der vorliegenden Erfindung wird ein Verfahren zur katalytischen Polymerisation eines Alpha-Olefinmonomers bereitgestellt, wobei das Verfahren die Schritte umfasst:

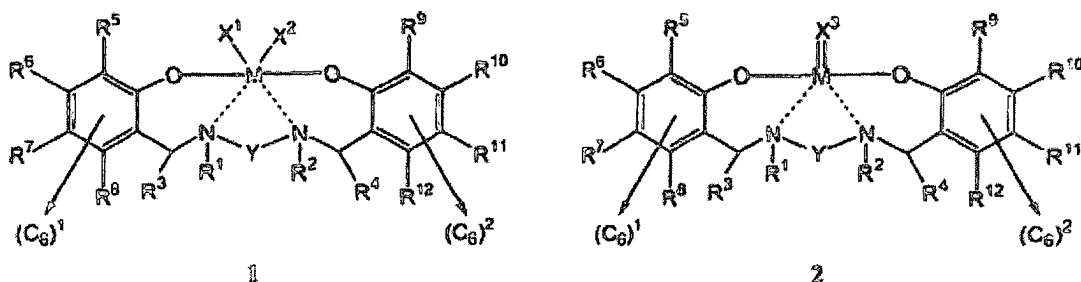
(a) Bereitstellen eines Diamindiphenolat-Präkatalysators mit einer allgemeinen Struktur, die aus der Gruppe, die aus



besteht, ausgewählt wird, wobei in jeder Struktur 1 und Struktur 2: jede einzelne durchgezogene Linie eine kovalente Bindung darstellt; jede doppelt durchgezogene Linie eine Bindung mit variierenden Graden der Kovalenz darstellt; jede gestrichelte Linie eine Bindung mit einem variierenden Grad der Kovalenz und einem variierenden Grad der Koordination darstellt; M ein Metallatom ist, das an jedes O Sauerstoffatom kovalent gebunden ist und mit variierenden Graden der Kovalenz und Koordination an jedes N Stickstoffatom gebunden ist;  $X^1$  und  $X^2$  jeweils ein univalenter anionischer Ligand ist, der an das Metallatom kovalent gebunden ist;  $X^3$  ein einzelner anionischer Ligand ist, der an das Metallatom kovalent gebunden ist;  $R^1$  und  $R^2$  jeweils ein univalenter Radikal ist, der an ein unterschiedliches der N Stickstoffatome kovalent gebunden ist;  $R^3$  ein univalenter Radikal ist, der an das C Kohlenstoffatom des  $-CHR^3-$  der  $(C_6)^1-CHR^3-N$ -Verknüpfungs-Einheit kovalent gebunden ist;  $R^4$  ein univalenter Radikal ist, der an das C Kohlenstoffatom des  $-CHR^4-$  der  $-N-CHR^4-(C_6)^2$ -Verknüpfungs-Einheit kovalent gebunden ist; jedes  $R^5$  bis  $R^8$  ein univalenter Radikal ist, der an ein unterschiedliches der C-Kohlenstoffatome der ersten aromatischen Gruppe  $(C_6)^1$  kovalent gebunden ist; jedes  $R^9$  bis  $R^{12}$  ein univalenter Radikal ist, der an ein unterschiedliches der C-Kohlenstoffatome der zweiten aromatischen Gruppe  $(C_6)^2$  kovalent gebunden ist; und Y ein divalenter Radikal ist, der an beide der N Stickstoffatome kovalent gebunden ist und zwischen ihnen verknüpft; (b) Herstellen einer ersten chemischen Einheit, die eine bestimmte Form des Präkatalysators aus Schritt (a) aufweist; (c) Bereitstellen eines Cokatalysators, der zum Aktivieren des Präkatalysators aus Schritt (a) geeignet ist; (d) Herstellen einer zweiten chemischen Einheit, die den Cokatalysator aus Schritt (c) aufweist; (e) Bilden eines katalytischen Polymerisationsreaktionssystems für die katalytische Polymerisation des Alpha-Olefinmonomers durch Mischen der ersten chemischen Einheit, die den Präkatalysator aufweist, mit der zweiten chemischen Einheit, die den Cokatalysator aufweist, mit dem zu polymerisierenden Alpha-Olefinmonomer, wobei der Cokatalysator den Präkatalysator zu einem Katalysator aktiviert, der die katalytische Polymerisation des Alpha-Olefinmonomers zum Herstellen wenigstens einer Art eines Poly(alpha-Olefin)produkts bewirkt; (f) Beenden der katalytischen Polymerisation des Alpha-Olefinmonomers; und (g) Isolieren der wenigstens einen Art des Poly(alpha-Olefin)produkts.

**[0035]** Gemäß eines anderen Aspekts der vorliegenden Erfindung wird ein Verfahren zur katalytischen Polymerisation eines Alpha-Olefinmonomers bereitgestellt, wobei das Verfahren die Schritte umfasst:

(a) Bereitstellen eines Diamindiphenolat-Katalysators mit einer allgemeinen Struktur, die aus der Gruppe, die aus



besteht, ausgewählt wird, wobei in jeder Struktur 1 und Struktur 2: jede einzelne durchgezogene Linie eine kovalente Bindung darstellt; jede doppelt durchgezogene Linie eine Bindung mit variierenden Graden der Kovalenz darstellt; jede gestrichelte Linie eine Bindung mit einem variierenden Grad der Kovalenz und einem variierenden Grad der Koordination darstellt; M ein Metallatom ist, das an jedes O Sauerstoffatom kovalent gebunden ist und mit variierenden Graden der Kovalenz und Koordination an jedes N Stickstoffatom gebunden ist;  $X^1$  und  $X^2$  jeweils ein univalenter anionischer Ligand ist, der an das Metallatom kovalent gebunden ist;  $X^3$  ein einzelner anionischer Ligand ist, der an das Metallatom kovalent gebunden ist;  $R^1$  und  $R^2$  jeweils ein univalenter Radikal ist, der an ein unterschiedliches der IV Stickstoffatome kovalent gebunden ist;  $R^3$  ein univalenter Radikal ist, der an das C Kohlenstoffatom des  $-CHR^3-$  der  $(C_6)^1-CHR^3-N$ -Verknüpfungs-Einheit kovalent gebunden ist;  $R^4$  ein univalenter Radikal ist, das an das C Kohlenstoffatom des  $-CHR^4-$  der  $-N-CHR^4-(C_6)^2$ -Verknüpfungs-Einheit kovalent gebunden ist; jedes  $R^5$  bis  $R^8$  ein univalenter Radikal ist, der an ein unterschiedliches der C Kohlenstoffatome der ersten aromatischen Gruppe  $(C_6)^1$  kovalent gebunden ist; jedes  $R^9$  bis  $R^{12}$  ein univalenter Radikal ist, der an ein unterschiedliches der C-Kohlenstoffatome der zweiten aromatischen Gruppe  $(C_6)^2$  kovalent gebunden ist; und Y ein divalenter Radikal ist, der an beide der N Stickstoffatome kovalent gebunden ist und zwischen ihnen verknüpft; (b) Herstellen einer ersten chemischen Einheit, die eine bestimmte Form des Katalysators aus Schritt (a) aufweist; (c) Bilden eines katalytischen Polymerisationsreaktionssystems für die katalytische Polymerisation des Alpha-Olefinmonomers durch Mischen der ersten chemischen Einheit, die den Katalysator aufweist, mit dem zu polymerisierenden Alpha-Olefinmonomer, wobei der Katalysator die katalytische Polymerisation des Alpha-Olefinmonomers zum Herstellen wenigstens einer Art eines Poly(alpha-Olefin)produkts bewirkt; (d) Beenden der katalytischen Polymerisation des Alpha-Olefinmonomers; und (e) Isolieren der wenigstens einen Art des Poly(alpha-Olefin)produkts.

**[0036]** Gemäß eines anderen Aspekts der vorliegenden Erfindung wird ein Verfahren für die isotaktische und lebende katalytische Polymerisation eines 1-Hexen-Monomers zur Bildung eines isotaktischen Poly(1-hexen)-Produkts bereitgestellt, wobei das Verfahren die Schritte umfasst:

(a) Bereitstellen eines Diamindiphenolat-Präkatalysators  $[(N,N'$ -Bis(3,5-di-tert-butyl-2-hydroxyphenyl)methyl)-N,N'-dimethylethylendiamin]zirkoniumdibenzyl]; (b) Herstellen einer ersten chemischen Einheit, die den Diamindiphenolat-Präkatalysator aus Schritt (a) aufweist; (c) Bereitstellen eines Bor-Lewis-Säure Cokatalysators  $[B(C_6F_5)_3]$ , der zum Aktivieren des Präkatalysators aus Schritt (a) geeignet ist; (d) Herstellen einer zweiten chemischen Einheit, die den Bor-Lewis-Säure Cokatalysator aus Schritt (c) aufweist; (e) Bilden eines isotaktischen und lebenden katalytischen Polymerisationsreaktionssystems für die isotaktische und lebende katalytische Polymerisation des 1-Hexenmonomers durch Mischen der ersten chemischen Einheit, die den Präkatalysator aufweist, mit der zweiten chemischen Einheit, die den Cokatalysator aufweist, mit dem zu polymerisierenden 1-Hexenmonomer, wobei der Cokatalysator den Präkatalysator zu einem Katalysator aktiviert, der die isotaktische und lebende katalytische Polymerisation des 1-Hexenmonomers zum Herstellen des isotaktischen Poly(1-hexen)produkts bewirkt; (f) Beenden der katalytischen Polymerisation des 1-Hexenmonomers; und (g) Isolieren des isotaktischen Poly(1-hexen)produkts.

**[0037]** Die vorliegende Erfindung führt mehrere Vorzüge in das Gebiet der katalytischen Polymerisation von Alpha-Olefinmonomeren ein, welche bis jetzt unerreichbar waren. Zum Beispiel ermöglichen bestimmte Formen des Diamindiphenolat-Präkatalysators der vorliegenden Erfindung, wenn durch einen Cokatalysator unter milden Reaktionsbedingungen aktiviert, das Erreichen einer isotaktischen (isospezifischen) Polymerisation einer Vielzahl von Alpha-Olefinmonomeren, wie zum Beispiel die Polymerisation von langkettigen Alpha-Olefinmonomeren, zum Beispiel 1-Hexen oder 1-Okten, zur Bildung einer Vielzahl von Poly(Alpha-Olefin)-Produkten, wie zum Beispiel Poly(1-hexen) oder Poly(1-okten) mit hohem Molekulargewicht und einer niedrigen Molekulargewichtsverteilung. Außerdem können diese katalytischen Systeme zusätzlich als lebend bezeichnet werden. Des Weiteren können diese isotaktischen und lebenden katalytischen Polymerisationssysteme bei praktischen kommerziellen Reaktionsbedingungen, einschließlich insbesondere dem Arbeiten bei Raumtemperatur, ausgeführt werden.

**[0038]** Der Diamindiphenolatpräkatalysator der vorliegenden Erfindung ist unter kommerziell anwendbaren

Bedingungen für Polymerisation von Alpha-Olefinmonomeren relativ stabil. Außerdem ist der Präkatalysator und verwandte Formen des Präkatalysators der vorliegenden Erfindung relativ einfach zu synthetisieren, hauptsächlich aufgrund einfacher Synthesen der entsprechenden Diamin-di(2-hydroxyarylmethyl)-Ligandprecursor aus einer Vielzahl kommerziell erhältlicher billiger Anfangsmaterialien, verglichen zu Synthesen von Präkatalysatoren vom Metallocentyp.

#### Kurze Beschreibung der Zeichnungen

**[0039]** Die Erfindung ist hier mit Bezugnahme auf die beigefügten Zeichnungen nur beispielhaft beschrieben, wobei:

**[0040]** **Fig. 1** eine Darstellung einer Röntgenstruktur eines sechsfach koordinierten Dialkyldiamindiphenolatprä-katalysators  $[(N,N'-\text{Bis}(3,5\text{-di-tert-butyl-2-hydroxyphenylmethyl)})\text{-}N,N'\text{-dimethylethylendiamin}]\text{zirkoniumdibenzyl}]$  16 ist;

**[0041]** **Fig. 2** eine Darstellung des  $^{13}\text{C}$  NMR Spektrums des isotaktischen Poly(1-hexen)-Produkts ist, dass in Übereinstimmung mit der vorliegenden Erfindung durch katalytische Polymerisation eines 1-Hexenmonomers unter Verwendung des Dialkyldiamindiphenolatprä-katalysators  $[(N,N'-\text{Bis}(3,5\text{-di-tert-butyl-2-hydroxyphenylmethyl)})\text{-}N,N'\text{-dimethylethylendiamin}]\text{zirkoniumdibenzyl}]$  16 ist;

**[0042]** **Fig. 3** eine Darstellung der Abhängigkeit des massegemittelten Molekulargewichts  $M_w$  von Poly(1-hexen) ist, das durch katalytische Polymerisation eines 1-Hexenmonomers unter Verwendung des Dialkyldiamindiphenolatprä-katalysators  $[(N,N'-\text{Bis}(3,5\text{-di-tert-butyl-2-hydroxyphenylmethyl)})\text{-}N,N'\text{-dimethylethylendiamin}]\text{zirkoniumdibenzyl}]$  16 durch Verbrauch des 1-Hexenmonomers erhalten wird;

**[0043]** **Fig. 4** eine Darstellung des  $^{13}\text{C}$  NMR Spektrums des ataktischen Poly(1-hexens) ist, dass durch katalytische Polymerisation eines 1-Hexenmonomers unter Verwendung des Dialkyldiamindiphenolatprä-katalysators  $[(N,N'-\text{Bis}(3,5\text{-dimethyl-2-hydroxyphenylmethyl)})\text{-}N,N'\text{-dimethylethylendiamin}]\text{zirkoniumdibenzyl}]$  17 erhalten wird.

#### Beschreibung der bevorzugten Ausführungsformen

**[0044]** Die vorliegende Erfindung betrifft im Allgemeinen die katalytische Polymerisation und im Besonderen die taktische katalytische Polymerisation von Alpha-Olefinmonomeren unter Verwendung eines aktiven nicht-Metalocen Präkatalysators, der einen Diamindiphenolatkomplex aufweist, und ein entsprechendes Verfahren, das den offenbarten Präkatalysator verwendet. Der Diamindiphenolatprä-katalysator der vorliegenden Erfindung ist, wenn durch einen Cokatalysator unter milden Reaktionsbedingungen aktiviert, für isotaktische (isospezifische) und lebende Polymerisation einer Vielzahl von Alpha-Olefinmonomeren aktiv. Der Diamindiphenolatprä-katalysator polymerisiert langkettige Alpha-Olefinmonomere, wie zum Beispiel 1-Hexen oder 1-Okten, zur Bildung einer Vielzahl von Poly(Alpha-Olefin)-Produkten, wie zum Beispiel Poly(1-hexen) oder Poly(1-Okten) mit einem klassifizierbaren Ausmaß oder Grad an Taktizität, hohem Molekulargewicht und niedriger Molekulargewichtsverteilung. Der Diamindiphenolatprä-katalysator ist unter kommerziell anwendbaren Bedingungen für die Polymerisation von Alpha-Olefinmonomeren relativ stabil. Außerdem ist dieser Präkatalysator relativ einfach zu synthetisieren, und ist verglichen mit Präkatalysatoren vom Metallocentyp, die momentan verwendet werden, besser erhältlich.

**[0045]** Es ist verständlich, dass die Erfindung in ihrer Anwendung in Bezug auf die Details der beispielhaften bevorzugten Ausführungsformen der chemischen Strukturen, Formeln und Verfahren, die in der folgenden Beschreibung, Zeichnungen oder Beispielen dargelegt sind, nicht beschränkt ist. Die Erfindung ist für andere Ausführungsformen geeignet oder kann auf verschiedene Art und Weisen praktiziert oder durchgeführt werden. Es sollte ebenfalls verständlich sein, dass die hier verwendete Ausdrucksweise und Terminologie zum Zweck der Beschreibung dienen und nicht als beschränkend angesehen werden sollten.

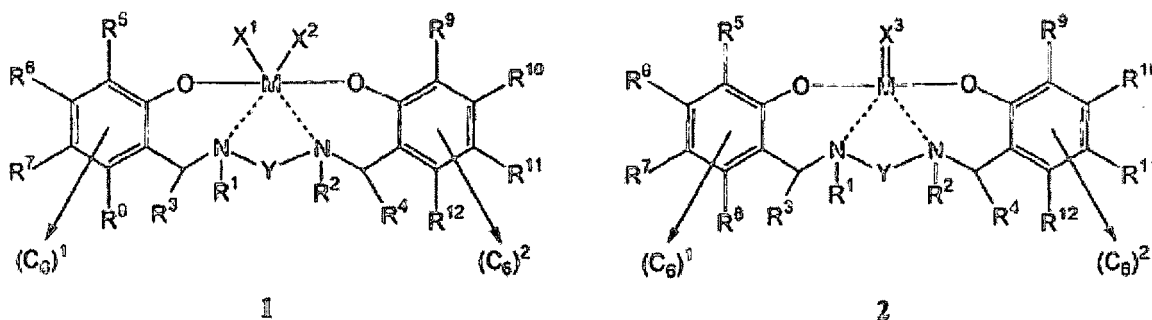
**[0046]** Der Diamindiphenolatprä-katalysator und das entsprechende Verfahren zur Verwendung dieses Präkatalysators für die katalytische Polymerisation von Alpha-Olefinmonomeren der vorliegenden Erfindung sind hier zum ersten Mal offenbart und sind nicht durch den nicht-Metalocen Präkatalysator mit äußerst großer Aktivität, der einen Amindiphenolatkomplex aufweist, und entsprechender Verfahren zur Verwendung dieses Präkatalysators für die katalytische Polymerisation von Alpha-Olefinmonomeren, wie in US-A-6,333,423, eingereicht am 20. September 1999 von Kol et al. offenbart, offensichtlich und auch nicht vorweggenommen. Außerdem ist der Diamindiphenolatprä-katalysator der vorliegenden Erfindung nicht offensichtlich und auch nicht

durch irgendeine der Amindiphenolatligandprecursor, die zuvor in US-A-6,333,423 offenbart wurden, vorweggenommen.

**[0047]** Des Weiteren sind die Diamindiphenolatligandprecursor, die für die Synthese des Präkatalysators der vorliegenden Erfindung verwendet werden, entweder neu oder sind aus dem Stand der Technik bekannt, aber werden durch neue Verfahren synthetisiert und werden nicht unter Verwendung irgendwelcher Amindiphenolatligandprecursor, die zuvor in US-A-6,333,423 offenbart wurde, synthetisiert.

#### Allgemeine Strukturen und Formeln des Diamindiphenolatpräkatalysators

**[0048]** Die bevorzugte Ausführungsform des Diamindiphenolatpräkatalysators der vorliegenden Erfindung ist entweder die allgemeine Struktur 1 oder die allgemeine Struktur 2:



wobei eine einzelne durchgezogene Linie eine kovalente Bindung darstellt, eine doppelt durchgezogene Linie eine Bindung mit variierenden Graden der Kovalenz darstellt und eine gestrichelte Linie eine koordinative Bindung zwischen den angezeigten Atomen darstellt; M ein Metallatom ist, das an jedes O Sauerstoffatom kovalent gebunden ist und koordinativ an jedes Stickstoffatom N gebunden ist, wie in den Strukturen 1 und 2 durch die gestrichelte Linie zwischen dem Metallatom M und dem Stickstoffatom N gezeigt, wobei M eine Übergangsmetallatomzusammensetzung darstellt, bevorzugt, aber nicht darauf beschränkt, ein einzelnes Übergangsmetallatom, das aus der Gruppe, die aus Zirkonium, Hafnium, Titan und einem Lanthanid besteht, ausgewählt wird; X<sup>1</sup> und X<sup>2</sup> (Struktur 1) jeweils ein univalenter anionischer Ligand ist, der an das Metallatom M kovalent gebunden ist, wie zum Beispiel ein Halogenid, ein Hydrid, ein gesättigtes oder ungesättigtes Hydrocarbyl, ein Alkoxid, ein Aryloxid, ein Dialkylamid oder ein Arylamid; X<sup>3</sup> (Struktur 2) ein einzelner univalenter oder divalenter anionischer Ligand ist, der kovalent an das Metallatom M entweder durch eine Einfachbindung oder eine Doppelbindung gebunden ist, wie zum Beispiel ein cyclometalliertes Hydrocarbyl oder ein Radikal, wie zum Beispiel ein Alkyl oder ein Alkyliden; R<sup>1</sup> und R<sup>2</sup> jeweils ein univalenter Radikal ist, der kovalent an ein unterschiedliches der beiden Stickstoffatome N gebunden ist, wie zum Beispiel Wasserstoff, Hydrocarbyl oder jeder andere univalente Radikal, wie zum Beispiel Trimethylsilyl; R<sup>3</sup> ein univalenter Radikal ist, der kovalent an das Kohlenstoffatom des -CHR<sup>3</sup>- der (C<sub>6</sub>)<sup>1</sup>-CHR<sup>3</sup>-N-Verknüpfungseinheit gebunden ist, wie zum Beispiel ein Wasserstoff, ein Hydrocarbyl oder irgendein anderer univalenter Radikal, wie zum Beispiel ein Benzyl; R<sup>4</sup> ein univalenter Radikal ist, der kovalent an das Kohlenstoffatom des -CHR<sup>4</sup>- der -N-CHR<sup>4</sup>-(C<sub>6</sub>)<sup>2</sup> Verbrückungseinheit gebunden ist, wie zum Beispiel ein Wasserstoff, ein Hydrocarbyl oder irgendein anderer univalenter Radikal, wie zum Beispiel Benzyl; R<sup>5</sup> bis R<sup>8</sup> jeweils ein univalenter Radikal ist, der kovalent an ein unterschiedliches Kohlenstoffatom in der ersten aromatischen Gruppe (C<sub>6</sub>)<sup>1</sup> gebunden ist, wie zum Beispiel ein Wasserstoff, ein Hydrocarbyl oder irgendein anderer univalenter Radikal, wie zum Beispiel ein Alkoxid; R<sup>9</sup> bis R<sup>12</sup> jeweils ein univalenter Radikal ist, der kovalent an ein unterschiedliches Kohlenstoffatom in der zweiten aromatischen Gruppe (C<sub>6</sub>)<sup>2</sup> gebunden ist, wie zum Beispiel ein Wasserstoff, ein Hydrocarbyl oder irgendein anderer univalenter Radikal, wie zum Beispiel ein Alkoxid; und Y ein divalenter Radikal ist, der kovalent an die zwei Stickstoffatome N gebunden ist und zwischen diesen verbrückt, wie zum Beispiel ein Dihydrocarbyl oder irgendein anderer divalenter Radikal, wie zum Beispiel ein Cycloalkandiyl.

**[0049]** Die allgemeinen Formeln, die den allgemeinen Strukturen 1 und 2 des Diamindiphenolatpräkatalysators der vorliegenden Erfindung entsprechen, sind wie folgt:  

$$[(OR^5R^6R^7R^8(C_6)^1(CHR^3)NR^1YNR^2(CHR^4)(C_6)^2R^9R^{10}R^{11}R^{12}O)MX^1X^2]$$
 bzw.  

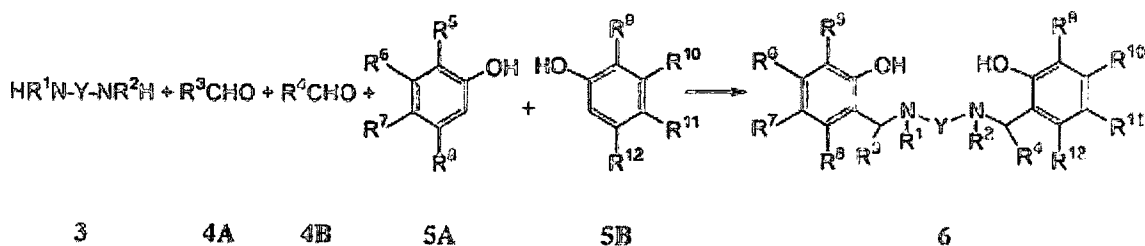
$$[(OR^5R^6R^7R^8(C_6)^1(CHR^3)NR^1YNR^2(CHR^4)(C_6)^2R^9R^{10}R^{11}R^{12}O)MX^3].$$

**[0050]** Entsprechend zu den zuvor veranschaulichten und beschriebenen allgemeinen Strukturen 1 und 2 des Präkatalysators der vorliegenden Erfindung ist M hier ein Metallatom, das kovalent an jedes Sauerstoffatom O gebunden ist und koordinativ an jedes Stickstoffatom N gebunden ist, wie in den allgemeinen Strukturen 1 und 2 durch die gestrichelte Linie zwischen dem Metallatom M und jedem Stickstoffatom N gezeigt, wobei M eine

Übergangsmetallatomzusammensetzung aufweist, bevorzugt, aber nicht darauf beschränkt, ein einzelnes Übergangsmetallatom, das aus der Gruppe, die aus Zirkonium, Hafnium, Titan und einem Lanthanid besteht, ausgewählt wird;  $X^1$  und  $X^2$  (Struktur 1) sind jeweils ein univalenter anionischer Ligand, der kovalent an das Metallatom M gebunden ist, wie zum Beispiel ein Halogenid, ein Hydrid, ein gesättigtes oder ungesättigtes Hydrocarbyl, ein Alkoxid, ein Aryloxid, ein Dialkylamid oder ein Arylamid;  $X^3$  (Struktur 2) ist ein einzelner univalenter oder ein divalenter anionischer Ligand, der kovalent an das Metallatom M entweder durch eine Einfachbindung oder eine Doppelbindung gebunden ist, wie zum Beispiel ein cyclometalliertes Hydrocarbyl oder ein Radikal, wie zum Beispiel ein Alkyl oder ein Alkylden;  $R^1$  und  $R^2$  jeweils ein univalenter Radikal ist, der kovalent an ein anderes der zwei Stickstoffatome N gebunden ist, wie zum Beispiel ein Wasserstoff, Hydrocarbyl oder irgendein anderer univalenter Radikal, wie zum Beispiel ein Trimethylsilyl;  $R^3$  ist ein univalenter Radikal, der kovalent an das Kohlenstoffatom des  $-CHR^3-$  der  $(C_6)^1-CHR^3-N$ -Verbrückungseinheit gebunden ist, wie zum Beispiel ein Wasserstoff, ein Hydrocarbyl oder irgendein anderer univalenter Radikal, wie zum Beispiel ein Benzyl;  $R^4$  ist ein univalenter Radikal, der kovalent an das Kohlenstoffatom des  $-CHR^4-$  der  $-N-CHR^4-(C_6)^2$  Verbrückungseinheit gebunden ist, wie zum Beispiel ein Wasserstoff, ein Hydrocarbyl oder irgendein anderer univalenter Radikal, wie zum Beispiel ein Benzyl;  $R^5$  bis  $R^8$  ist jeweils ein univalenter Radikal, der kovalent an ein unterschiedliches Kohlenstoffatom in der ersten aromatischen Gruppe  $(C_6)^1$  gebunden ist, wie zum Beispiel ein Wasserstoff, ein Hydrocarbyl oder irgendein anderer univalenter Radikal, wie zum Beispiel ein Alkoxid;  $R^9$  bis  $R^{12}$  ist jeweils ein univalenter Radikal, der kovalent an ein unterschiedliches Kohlenstoffatom in der zweiten aromatischen Gruppe  $(C_6)^2$  gebunden ist, wie zum Beispiel ein Wasserstoff, ein Hydrocarbyl oder irgendein anderer univalenter Radikal, wie zum Beispiel ein Alkoxid; und Y ist ein divalenter Radikal, der kovalent an die zwei Stickstoffatome N gebunden ist und diese verbrückt, wie zum Beispiel ein Dihydrocarbyl oder irgendein anderer divalenter Radikal, wie zum Beispiel ein Cycloalkandiyli.

#### Synthese eines allgemeinen Diamindi(2-yydroxarylmethyl)-Ligandprecursors

**[0051]** Die Synthese von unterschiedlichen aber verbundenen besonderen Formen des allgemeinen Ligandprecursors Diamindi(2-hydroxarylmethyl) 6, wird unten beschrieben, welcher dann für die Synthese unterschiedlicher, aber verbundener besonderer Formen des Diamindiphenolatpräkatalysators der vorliegenden Erfindung, der mit den Strukturen 1 und 2 und den davon korrespondierenden Formeln übereinstimmt, verwendet wird. Diamin 3, das aus der Gruppe, die aus einem N,N'-Di-primären Amin, einem N,N'-Di-sekundären Amin und einem N-primären-N'-sekundären Diamin besteht, ausgewählt wird, reagiert mit Aldehyden 4A und 4B und den substituierten Phenolen 5A und 5B durch eine modifizierte Mannich-Reaktion unter variablen Reaktionsbedingungen in variablen Lösungsmitteln, wie zum Beispiel Methanol und Ethanol, um verschiedene besondere Formen des allgemeinen Ligandprecursors 6 zu ergeben.



**[0052]** Die Struktur des allgemeinen Diamindi(2-hydroxarylmethyl)-Ligandprecursors 6 weist zwei Hydroxarylringe auf, wobei die Hydroxarylringe eine Vielzahl von Substituenten  $R^5$  bis  $R^{12}$  beinhalten. Die Substituenten  $R^5$  bis  $R^8$  sind jeweils ein univalenter Radikal, der an den ersten Hydroxarylring kovalent gebunden ist, wie zum Beispiel ein Wasserstoff, ein Hydrocarbyl oder irgendein anderer univalenter Radikal, wie zum Beispiel ein Alkoxid, und die Substituenten  $R^9$  bis  $R^{12}$  sind jeweils ein univalenter Radikal, der kovalent an den zweiten Hydroxarylring gebunden ist, wie zum Beispiel ein Wasserstoff, ein Hydrocarbyl oder irgendein anderer univalenter Radikal, wie zum Beispiel ein Alkoxid.

**[0053]** Die zwei Hydroxarylringe werden durch eine Verknüpfungseinheit  $-CHR^3-NR^1-Y-NR^2-CHR^4-$  verbrückt, wobei wie oben beschrieben  $R^1$  und  $R^2$  jeweils ein univalenter Radikal ist, der kovalent an eines der beiden Stickstoffatome N gebunden ist, wie zum Beispiel ein Wasserstoff, ein Hydrocarbyl oder irgendein anderer univalenter Radikal, wie zum Beispiel ein Alkoxid;  $R^3$  ein univalenter Radikal ist, der kovalent an das Kohlenstoffatom des  $-CHR^3-$  der  $(C_6)^1-CHR^3-N$  Verbrückungseinheit gebunden ist, wie zum Beispiel ein Wasserstoff, ein Hydrocarbyl oder irgendein anderer univalenter Radikal, wie zum Beispiel ein Benzyl;  $R^4$  ein univalenter Radikal ist, der kovalent an das Kohlenstoffatom des  $-CHR^4-$  der  $-N-CHR^4-(C_6)^2$  Verbrückungseinheit gebunden ist, wie zum Beispiel ein Wasserstoff, ein Hydrocarbyl oder irgendein anderer univalenter Radikal, wie zum Beispiel ein Benzyl; und Y ein divalenter Radikal ist, der kovalent an die zwei Stickstoffatome N gebunden ist und

diese verbrückt, wie zum Beispiel ein Dihydrocarbyl oder irgendein anderer divalenter Radikal, wie zum Beispiel ein Cycloalkandiyl.

**[0054]** Die Synthesen von acht beispielhaften oder besonderen Formen des allgemeinen Diamindi(2-hydroxaryl-methyl)-Ligandprecursors 6 der vorliegenden Erfindung sind hier beschrieben. Die ersten sechs beispielhaften oder besonderen Formen des allgemeinen Diamindi(2-hydroxaryl-methyl)-Ligandprecursors 6, entsprechend die besonderen Ligandprecursor 7, 8, 10, 11 und 12 und ihre entsprechenden Synthesen sind hier das erste Mal offenbart. Die letzten beiden beispielhaften oder besonderen Formen des allgemeinen Diamindi(2-hydroxaryl-methyl)-Ligandprecursors 6, entsprechend der besonderen Ligandprecursor 13 und 14, sind im Stand der Technik bekannt, aber ihre entsprechenden Synthesen sind hier das erste Mal offenbart.

Synthese des ersten beispielhaften Ligandprecursors  $[\{N,N'$ -Bis(3,5-di-tert-butyl-2-hydroxyphenylmethyl)-N,N'-dimethylethylendiamin] 7

**[0055]** Die erste beispielhafte oder besondere Form des allgemeinen Ligandprecursors 6, der spezifische Diamindi(2-hydroxaryl-methyl)-Ligandprecursor 7, hier im Anschluss als Ligandprecursor  $[\{N,N'$ -Bis(3,5-di-tert-butyl-2-hydroxyphenylmethyl)-N,N'-dimethylethylendiamin] 7 (neu) bezeichnet, leitet sich von der Umsetzung (nicht gezeigt) von N,N'-Dimethylethylendiamin als eine besondere Form eines Di-sekundären Amins 3 mit Formaldehyd als eine besondere Form von Aldehyden 4A und 4B und 2,4-Di-tert-butylphenol als eine besondere Form substituierter Phenole 5A und 5B in refluxierendem Methanol für 2 Stunden und Isolation durch Filtration ab. Der Ligandprecursor  $[\{N,N'$ -Bis(3,5-di-tert-butyl-2-hydroxyphenylmethyl)-N,N'-dimethylethylendiamin] 7 ist eine besondere Form des allgemeinen Diamindi(2-hydroxaryl-methyl)-Ligandprecursors 6, wobei  $R^1$  und  $R^2$  Methylgruppen ( $CH_3$ ) sind,  $R^3$ ,  $R^4$ ,  $R^6$ ,  $R^8$ ,  $R^{10}$  und  $R^{12}$  Wasserstoffatome sind,  $R^5$ ,  $R^7$ ,  $R^9$  und  $R^{11}$  tert-Butyl Gruppen sind und Y ein divalenter Dihydrocarbylradikal  $-CH_2CH_2-$  ist. Weitere Details der Synthese und spektroskopische Daten werden unten in Beispiel 1 bereitgestellt.

Synthese des zweiten exemplarischen Ligandprecursors  $[\{N,N'$ -Bis(3,5-dimethyl-2-hydroxyphenylmethyl)-N,N'-dimethylethylendiamin] 8

**[0056]** Die zweite beispielhafte oder besondere Form des allgemeinen Ligandprecursors 6, der spezifische Diamindi(2-hydroxaryl-methyl)-Ligandprecursor 8, hier im Anschluss als Ligandprecursor  $[\{N,N'$ -Bis(3,5-dimethyl-2-hydroxyphenylmethyl)-N,N'-dimethylethylendiamin] 8 (neu) bezeichnet, leitet sich von der Umsetzung (nicht gezeigt) von N,N'-Dimethylethylendiamin als eine besondere Form eines Di-sekundären Amins 3 mit Formaldehyd als eine besondere Form von Aldehyden 4A und 4B und 2,4-Dimethylphenol als eine besondere Form substituierter Phenole 5A und 5B in refluxierendem Methanol für 2 Stunden und Isolation durch Filtration ab. Der Ligandprecursor  $[\{N,N'$ -Bis(3,5-dimethyl-2-hydroxyphenylmethyl)-N,N'-dimethylethylendiamin] 8 ist eine besondere Form des allgemeinen Diamindi(2-hydroxaryl-methyl)-Ligandprecursors 6, wobei  $R^1$ ,  $R^2$ ,  $R^5$ ,  $R^7$ ,  $R^9$  und  $R^{11}$  Methylgruppen ( $CH_3$ ) sind,  $R^3$ ,  $R^4$ ,  $R^6$ ,  $R^8$ ,  $R^{10}$  und  $R^{12}$  Wasserstoffatome sind und Y ein divalenter Dihydrocarbylradikal  $-CH_2CH_2-$  ist. Weitere Details der Synthese und spektroskopische Daten werden unten in Beispiel 2 bereitgestellt.

Synthese des dritten exemplarischen Ligandprecursors  $[\{N,N'$ -Bis(3,5-di-tert-butyl-2-hydroxyphenylmethyl)-N,N'-dibenzylethylendiamin] 9

**[0057]** Die dritte beispielhafte oder besondere Form des allgemeinen Ligandprecursors 6, der spezifische Diamindi(2-hydroxaryl-methyl)-Ligandprecursor 9, hier im Anschluss als Ligandprecursor  $[\{N,N'$ -Bis(3,5-di-tert-butyl-2-hydroxyphenylmethyl)-N,N'-dibenzylethylendiamin] 9 (neu) bezeichnet, leitet sich von der Umsetzung (nicht gezeigt) von N,N'-Dibenzylethylendiamin als eine besondere Form eines Di-sekundären Amins 3 mit Formaldehyd als eine besondere Form von Aldehyden 4A und 4B und 2,4-Di-tert-butylphenol als eine besondere Form substituierter Phenole 5A und 5B in refluxierendem Methanol für 2 Stunden und Isolation durch Filtration nach Ausfällung unter Verwendung von Hexanlösungsmitteln ab. Der Ligandprecursor  $[\{N,N'$ -Bis(3,5-di-tert-butyl-2-hydroxyphenylmethyl)-N,N'-dibenzylethylendiamin] 9 ist eine besondere Form des allgemeinen Diamindi(2-hydroxaryl-methyl)-Ligandprecursors 6, wobei  $R^1$  und  $R^2$  Benzylgruppen ( $CH_2Ph$ ) sind,  $R^3$ ,  $R^4$ ,  $R^6$ ,  $R^8$ ,  $R^{10}$  und  $R^{12}$  Wasserstoffatome sind,  $R^5$ ,  $R^7$ ,  $R^9$  und  $R^{11}$  tert-Butyl-Gruppen sind und Y ein divalenter Dihydrocarbylradikal  $-CH_2CH_2-$  ist. Weitere Details der Synthese werden unten in Beispiel 3 bereitgestellt.

## Synthese des vierten exemplarischen Ligandprecursors [{N,N'-Bis(3,5-di-tert-butyl-2-hydroxyphenylmethyl)-N,N'-diethylethyldiamin] 10

**[0058]** Die vierte beispielhafte oder besondere Form des allgemeinen Ligandprecursors 6, der spezifische Diamindi(2-hydroxaryl-methyl)-Ligandprecursor 10, hier im Anschluss als Ligandprecursor [{N,N'-Bis(3,5-di-tert-butyl-2-hydroxyphenylmethyl)-N,N'-diethylethyldiamin] 10 (neu) bezeichnet, leitet sich von der Umsetzung (nicht gezeigt) von N,N'-Diethylethyldiamin als eine besondere Form eines Di-sekundären Amins 3 mit Formaldehyd als eine besondere Form von Aldehyden 4A und 4B und 2,4-Di-tert-butylphenol als eine besondere Form substituierter Phenole 5A und 5B in refluxierendem Methanol für 2 Stunden und Isolation durch Filtration ab. Der Ligandprecursor [{N,N'-Bis(3,5-di-tert-butyl-2-hydroxyphenylmethyl)-N,N'-diethylethyldiamin] 10 ist eine besondere Form des allgemeinen Diamindi(2-hydroxaryl-methyl)-Ligandprecursors 6, wobei R<sup>1</sup> und R<sup>2</sup> Ethylgruppen (CH<sub>2</sub>CH<sub>3</sub>) sind, R<sup>3</sup>, R<sup>4</sup>, R<sup>6</sup>, R<sup>8</sup>, R<sup>10</sup> und R<sup>12</sup> Wasserstoffatome sind, R<sup>5</sup>, R<sup>7</sup>, R<sup>9</sup> und R<sup>11</sup> tert-Butylgruppen sind und Y ein divalenter Dihydrocarbylradikal -CH<sub>2</sub>CH<sub>2</sub>- ist. Weitere Details der Synthese werden unten in Beispiel 4 bereitgestellt.

## Synthese des fünften exemplarischen Ligandprecursors [{N,N'-Bis(4,5-dimethyl-2-hydroxyphenylmethyl)-N,N'-dimethylethyldiamin] 11

**[0059]** Die fünfte beispielhafte oder besondere Form des allgemeinen Ligandprecursors 6, der spezifische Diamindi(2-hydroxaryl-methyl)-Ligandprecursor 11, hier im Anschluss als Ligandprecursor [{N,N'-Bis(4,5-dimethyl-2-hydroxyphenylmethyl)-N,N'-dimethylethyldiamin] 11 (neu) bezeichnet, leitet sich von der Umsetzung (nicht gezeigt) von N,N'-Dimethylethyldiamin als eine besondere Form eines Di-sekundären Amins 3 mit Formaldehyd als eine besondere Form von Aldehyden 4A und 4B und 3,4-Dimethylphenol als eine besondere Form substituierter Phenole 5A und 5B in refluxierendem Methanol für 2 Stunden und Isolation durch Filtration ab. Der Ligandprecursor [{N,N'-Bis(4,5-dimethyl-2-hydroxyphenylmethyl)-N,N'-dimethylethyldiamin] 11 ist eine besondere Form des allgemeinen Diamindi(2-hydroxaryl-methyl)-Ligandprecursors 6, wobei R<sup>1</sup>, R<sup>2</sup>, R<sup>6</sup>, R<sup>7</sup>, R<sup>10</sup> und R<sup>11</sup> Methylgruppen (CH<sub>3</sub>) sind, R<sup>3</sup>, R<sup>4</sup>, R<sup>5</sup>, R<sup>8</sup>, R<sup>9</sup> und R<sup>12</sup> Wasserstoffatome sind und Y ein divalenter Dihydrocarbylradikal -CH<sub>2</sub>CH<sub>2</sub>- ist. weitere Details der Synthese werden unten in Beispiel 5 bereitgestellt.

## Synthese des sechsten exemplarischen Ligandprecursors [{N,N'-Bis(3,5-di-tert-butyl-2-hydroxyphenylmethyl)-N,N'-dimethyl-1,3-propandiamin] 12

**[0060]** Die sechste beispielhafte oder besondere Form des allgemeinen Ligandprecursors 6, der spezifische Diamindi(2-hydroxaryl-methyl)-Ligandprecursor 12, hier im Anschluss als Ligandprecursor [{N,N'-Bis(3,5-di-tert-butyl-2-hydroxyphenylmethyl)-N,N'-dimethyl-1,3-propandiamin] 12 (neu) bezeichnet, leitet sich von der Umsetzung (nicht gezeigt) von N,N'-Dimethylpropan-1,3-diamin als eine besondere Form eines Di-sekundären Amins 3 mit Formaldehyd als eine besondere Form von Aldehyden 4A und 4B und 2,4-Di-tert-butylphenol als eine besondere Form substituierter Phenole 5A und 5B in refluxierendem Methanol für 12 Stunden und Isolation durch Filtration ab. Der Ligandprecursor [{N,N'-Bis(3,5-di-tert-butyl-2-hydroxyphenylmethyl)-N,N'-dimethyl-1,3-propandiamin] 12 ist eine besondere Form des allgemeinen Diamindi(2-hydroxaryl-methyl)-Ligandprecursors 6, wobei R<sup>1</sup> und R<sup>2</sup> Methylgruppen (CH<sub>3</sub>) sind, R<sup>3</sup>, R<sup>4</sup>, R<sup>6</sup>, R<sup>8</sup>, R<sup>10</sup> und R<sup>12</sup> Wasserstoffatome sind, R<sup>5</sup>, R<sup>7</sup>, R<sup>9</sup> und R<sup>11</sup> tert-Butylgruppen sind und Y ein divalenter Dihydrocarbylradikal -CH<sub>2</sub>CH<sub>2</sub>CH<sub>2</sub>- ist. Weitere Details der Synthese werden unten in Beispiel 6 bereitgestellt.

## Synthese des siebten exemplarischen Ligandprecursors [{N,N'-Bis(3,5-di-tert-butyl-2-hydroxyphenylmethyl)-ethylendiamin] 13

**[0061]** Die siebte beispielhafte oder besondere Form des allgemeinen Ligandprecursors 6, der spezifische Diamindi(2-hydroxaryl-methyl)-Ligandprecursor 13, hier im Anschluss als Ligandprecursor [{N,N'-Bis(3,5-di-tert-butyl-2-hydroxyphenylmethyl)-ethylendiamin] 13 (im Stand der Technik bekannt) bezeichnet, leitet sich von der Umsetzung (nicht gezeigt) von Ethylendiamin als eine besondere Form eines Di-primären Amins 3 mit Formaldehyd als eine besondere Form von Aldehyden 4A und 4B und 2,4-Di-tert-butylphenol als eine besondere Form substituierter Phenole 5A und 5B in refluxierendem Methanol für 2 Stunden und Isolation durch Filtration ab. Der Ligandprecursor [{N,N'-Bis(3,5-di-tert-butyl-2-hydroxyphenylmethyl)-ethylendiamin] 13 ist eine besondere Form des allgemeinen Diamindi(2-hydroxaryl-methyl)-Ligandprecursors 6, wobei R<sup>1</sup>, R<sup>2</sup>, R<sup>3</sup>, R<sup>4</sup>, R<sup>6</sup>, R<sup>8</sup>, R<sup>10</sup> und R<sup>12</sup> Wasserstoffatome sind, R<sup>5</sup>, R<sup>7</sup>, R<sup>9</sup>, und R<sup>11</sup> tert-Butylgruppen sind und Y ein divalenter Dihydrocarbylradikal -CH<sub>2</sub>CH<sub>2</sub>- ist. Weitere Details der Synthese werden unten in Beispiel 7 bereitgestellt.

Synthese des achten exemplarischen Ligandprecursors  $[(N,N'-\text{Bis}(3,5\text{-di-tert-butyl-2-hydroxyphenylmethyl)-1,3\text{-propandiamin}]$  14

**[0062]** Die achte beispielhafte oder besondere Form des allgemeinen Ligandprecursors 6, der spezifische Diamindi(2-hydroxaryl-methyl)-Ligandprecursor 14, hier im Anschluss als Ligandprecursor  $[(N,N'-\text{Bis}(3,5\text{-di-tert-butyl-2-hydroxyphenylmethyl)-1,3\text{-propandiamin}]$  14 (im Stand der Technik bekannt) bezeichnet, leitet sich von der Umsetzung (nicht gezeigt) von Propan-1,3-diamin als eine besondere Form eines Di-primären Amins 3 mit Formaldehyd als eine besondere Form von Aldehyden 4A und 4B und 2,4-Di-tert-butylphenol als eine besondere Form substituierter Phenole 5A und 5B in refluxierendem Methanol für 2 Stunden und Isolation durch Filtration ab. Der Ligandprecursor  $[(N,N'-\text{Bis}(3,5\text{-di-tert-butyl-2-hydroxyphenylmethyl)-1,3\text{-propandiamin}]$  14 ist eine besondere Form des allgemeinen Diamindi(2-hydroxaryl-methyl)-Ligandprecursors 6, wobei  $R^1, R^2, R^3, R^4, R^6, R^8, R^{10}$  und  $R^{12}$  Wasserstoffatome sind,  $R^5, R^7, R^9$ , und  $R^{11}$  tert-Butylgruppen sind und Y ein divalenter Dihydrocarbylradikal  $-\text{CH}_2\text{CH}_2\text{CH}_2-$  ist. Weitere Details der Synthese werden unten in Beispiel 8 bereitgestellt.

#### Synthese von Diamindiphenolatpräkatalysatoren

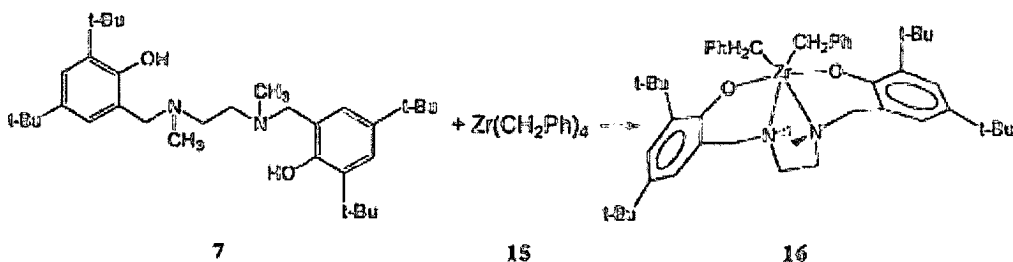
**[0063]** Der allgemeine Diamindi(2-hydroxaryl-methyl)-Ligandprecursor 6 zielt auf die Bindung an ein Metall, wie zum Beispiel eine Übergangsmetallatomzusammensetzung, bevorzugt, aber nicht darauf beschränkt, ein einzelnes Übergangsmetallatom, das aus der Gruppe, die aus Zirkonium, Hafnium, Titan und einem Lanthanid besteht, ausgewählt wird, zur Synthese unterschiedlicher besonderer Formen des Diamindiphenolatpräkatalysators 1 oder 2 in Übereinstimmung mit den obigen Beschreibungen, ab.

**[0064]** Der allgemeine Diamindi(2-hydroxaryl-methyl)-Ligandprecursor 6 reagiert unter variablen Reaktionsbedingungen mit einem Äquivalent eines Übergangsmetallkomplexes, wie zum Beispiel Zirkoniumtetra(benzyl), Zirkoniumtetrakis(dimethylamid), Hafniumtetra(chlorid), Titantetra(isopropoxid) oder ein Lanthanidkomplex, um den Diphenolatzirkoniumdibenzylkomplex, den Diphenolatzirkonium-bis(dimethylamid)komplex, den Diphenolathafniumdichloridkomplex, den Diphenolattitan-bis(isopropoxid)komplex bzw. den Diphenolatlanthanidkomplex zu ergeben. Jeder so gebildete Komplex kann direkt als ein Präkatalysator für die Polymerisation eines Alpha-Olefinmonomers verwendet werden oder kann durch chemische Umwandlung, wie zum Beispiel Umwandlung von Diamindiphenolattitan-bis(isopropoxid) in Diamindiphenolattitandichlorid unter Verwendung einer Vielzahl von Chlorierungsmitteln, wie zum Beispiel Trimethylsilylchlorid oder Triethylaminhydrochlorid, in einen Präkatalysator umgewandelt werden. Das Diamindiphenolattitandichlorid kann weiter in ein Diamindiphenolattitandialkyl unter Verwendung einer Vielzahl von Alkylierungsmitteln, wie zum Beispiel Benzylmagnesiumchlorid oder Methylmagnesiumbromid, umgewandelt werden.

**[0065]** Die Synthese von vier beispielhaften oder besonderen Formen des Diamindiphenolatpräkatalysators 1 der vorliegenden Erfindung werden hier allgemein beschrieben.

Synthese des ersten beispielhaften Präkatalysators  $[(N,N'-\text{Bis}(3,5\text{-di-tert-butyl-2-hydroxyphenylmethyl)-N,N'\text{-dimethylethylendiamin}\}\text{zirkoniumdibenzyl}]$  16

**[0066]** Der Ligandprecursor  $[(N,N'-\text{Bis}(3,5\text{-di-tert-butyl-2-hydroxyphenylmethyl)-N,N'\text{-dimethylethylendiamin}]$  7 reagiert sauber mit einem Äquivalent Zirkoniumtetra(benzyl),  $\text{Zr}(\text{CH}_2\text{Ph})_4$  15, bei  $65^\circ\text{C}$ , was den hexakoordinierten Dialkyldiamindiphenolatpräkatalysator 16 quantitativ als einen gelben kristallinen Feststoff ergibt, der ebenfalls als  $[(N,N'-\text{Bis}(3,5\text{-di-tert-butyl-2-hydroxyphenylmethyl)-N,N'\text{-dimethylethylendiamin}\}\text{zirkoniumdibenzyl}]$  16 bezeichnet wird.

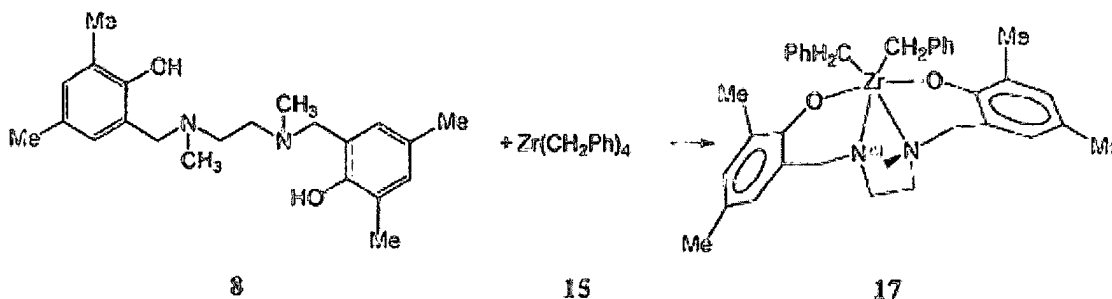


**[0067]** Die spektroskopischen Daten des Präkatalysators 16 stimmen mit einem einzelnen Stereoisomer überein, das symmetrisch verwandte Phenolatringe, symmetrisch verwandte Benzylgruppen und drei AX-Spin-systeme aufweist. Dies deutet auf einen Chelat mit  $C_2$ -Symmetrie auf der NMR Zeitskala hin. Die (Rönt-

gen)-Kristallstruktur des Präkatalysators 16, die in [Fig. 1](#) gezeigt ist, unterstützt die spektroskopischen Daten und zeigt an, dass die zwei Benzylgruppen in cis Konfiguration stehen. Weitere Details der Synthese und der spektroskopischen Daten werden unten in Beispiel 9 bereitgestellt.

Synthese des zweiten beispielhaften Präkatalysators [{N,N'-Bis(3,5-dimethyl-2-hydroxyphenylmethyl)-N,N'-dimethylethylendiamin}zirkoniumdibenzyl] 17

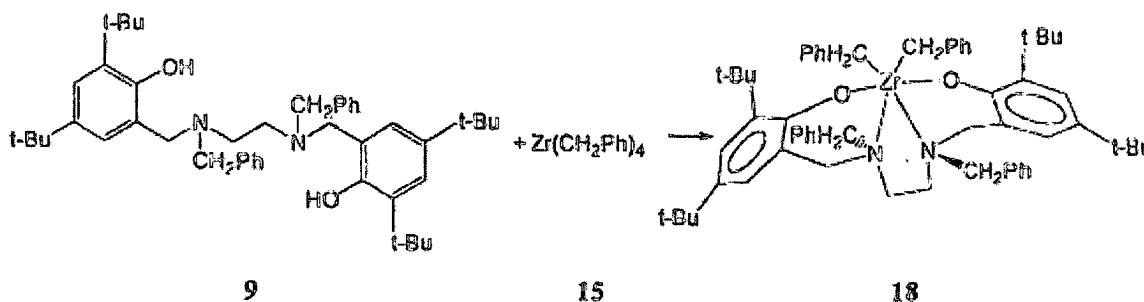
**[0068]** Der Ligandprecursor [{N,N'-Bis(3,5-dimethyl-2-hydroxyphenylmethyl)-N,N'-dimethylethylendiamin} 8 reagiert sauber mit einem Äquivalent Zirkoniumtetra(benzyl),  $Zr(CH_2Ph)_4$  15, bei 65°C, was den hexakoordinierten Dialkyldiamindiphenolatpräkatalysator 17 quantitativ als einen gelben kristallinen Feststoff ergibt, der ebenfalls als [{N,N'-Bis(3,5-dimethyl-2-hydroxyphenylmethyl)-N,N'-dimethylethylendiamin}zirkoniumdibenzyl] 17 bezeichnet wird.



**[0069]** Die spektroskopischen Daten des Präkatalysators 17 stimmen mit einem einzelnen Stereoisomer überein, das symmetrisch verwandte Phenolatringe, symmetrisch verwandte Benzylgruppen und drei AX-Spin-systeme aufweist. Dies deutet auf einen Chelat mit  $C_2$ -Symmetrie auf der NMR Zeitskala hin. Weitere Details der Synthese und der spektroskopischen Daten werden unten in Beispiel 10 bereitgestellt.

Synthese des dritten beispielhaften Präkatalysators [{N,N'-Bis(3,5-di-tert-butyl-2-hydroxyphenylmethyl)-N,N'-dibenzylethylendiamin}zirkoniumdibenzyl] 18

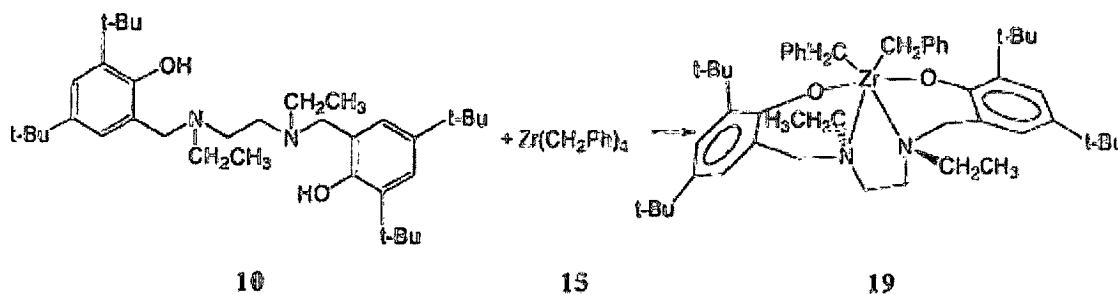
**[0070]** Der Ligandprecursor [{N,N'-Bis(3,5-di-tert-butyl-2-hydroxyphenylmethyl)-N,N'-dibenzylethylendiamin} 9 reagiert sauber mit einem Äquivalent Zirkoniumtetra(benzyl),  $Zr(CH_2Ph)_4$  15, bei 65°C, was den hexakoordinierten Dialkyldiamindiphenolatpräkatalysator 18 quantitativ als einen gelben kristallinen Feststoff ergibt, der ebenfalls als [{N,N'-Bis(3,5-di-tert-butyl-2-hydroxyphenylmethyl)-N,N'-dibenzylethylendiamin}zirkoniumdibenzyl] 18 bezeichnet wird.



**[0071]** Die spektroskopischen Daten des Präkatalysators 18 stimmen mit einem einzelnen Stereoisomer überein, das symmetrisch verwandte Phenolatringe, symmetrisch verwandte Benzylgruppen und drei AX-Spin-systeme aufweist. Dies deutet auf einen Chelat mit  $C_2$ -Symmetrie auf der NMR Zeitskala hin. Weitere Details der Synthese werden unten in Beispiel 11 bereitgestellt.

Synthese des vierten beispielhaften Präkatalysators [{N,N'-Bis(3,5-di-tert-butyl-2-hydroxyphenylmethyl)-N,N'-diethylethylendiamin}zirkoniumdibenzyl] 19

**[0072]** Der Ligandprecursor [{N,N'-Bis(3,5-di-tert-butyl-2-hydroxyphenylmethyl)-N,N'-diethylethylendiamin} 10 reagiert sauber mit einem Äquivalent Zirkoniumtetra(benzyl),  $Zr(CH_2Ph)_4$  15, bei 65°C, was den hexakoordinierten Dialkyldiamindiphenolatpräkatalysator 19 quantitativ als einen gelben kristallinen Feststoff ergibt, der ebenfalls als [{N,N'-Bis(3,5-di-tert-butyl-2-hydroxyphenylmethyl)-N,N'-diethylethylendiamin}zirkoniumdibenzyl] 19 bezeichnet wird.



**[0073]** Die spektroskopischen Daten des Präkatalysators 19 stimmen mit einem einzelnen Stereoisomer überein, das symmetrisch verwandte Phenolatringe, symmetrisch verwandte Benzylgruppen und drei AX-Spin-systeme aufweist. Dies deutet auf einen Chelat mit  $C_2$ -Symmetrie auf der NMR Zeitskala hin. Weitere Details der Synthese werden unten in Beispiel 12 bereitgestellt.

#### Verfahren für die katalytische Polymerisation von Alpha-Olefinmonomeren

**[0074]** Die bevorzugte Ausführungsform des Verfahrens zur katalytischen Polymerisation von Alpha-Olefinmonomeren gemäß der vorliegenden Erfindung wird hier allgemein in Bezug auf die Verwendung irgendeiner besonderen Form des Diamindiphenolatpräkatalysators 1 oder 2 beschrieben, die die vier beispielhaften besonderen Formen des Präkatalysators 1, wie oben beschrieben, nämlich Dialkyldiamindiphenolatpräkatalysator  $[[N,N'$ -Bis(3,5-(di-tert-butyl-2-hydroxyphenylmethyl)-N,N'-dimethylethylendiamin)zirkoniumdibenzyl] 16, Dialkyldiamindiphenolatpräkatalysator  $[[N,N'$ -Bis(3,5-dimethyl-2-hydroxyphenylmethyl)-N,N'-dimethylethylendiamin]zirkoniumdibenzyl] 17, Dialkyldiamindiphenolatpräkatalysator  $[[N,N'$ -Bis(3,5-di-tert-butyl-2-hydroxyphenylmethyl)-N,N'-dibenzylethylendiamin]zirkoniumdibenzyl] 18 oder Dialkyldiamindiphenolatpräkatalysator  $[[N,N'$ -Bis(3,5-di-tert-butyl-2-hydroxyphenylmethyl)-N,N'-diethylethylendiamin]zirkoniumdibenzyl] 19 einschließen.

**[0075]** Basierend auf der Ausführung des folgenden beschriebenen allgemeinen Verfahrens werden Details zweier beispielhafter katalytischer Polymerisationsreaktionen, der ersten isotaktischen katalytischen Polymerisation und der zweiten ataktischen katalytischen Polymerisation, die jeweils die Verwendung eines beispielhaften Alpha-Olefinmonomers, 1-Hexen, beinhalten und die die besondere Form 16 bzw. die besondere Form 17 des Diamindiphenolatpräkatalysators 1 zur Bildung eines Poly(1-hexen)-Produktes beinhalten, und die betreffenden empirischen Daten davon unten in den Beispielen 13 bzw. 14 bereitgestellt.

**[0076]** Das hier beschriebene Verfahren für die katalytische Polymerisation von Alpha-Olefinmonomeren gemäß der vorliegenden Erfindung ist allgemein auf jede Art und Größe eines chemischen Reaktors und/oder chemischen Prozesses anwendbar. Insbesondere können die folgenden Schritte des Verfahrens der vorliegenden Erfindung unter Verwendung eines chemischen Reaktors, der aus der Gruppe, die aus einem chemischen Reaktor mit kontinuierlichem Fluss, einem chemischen Batch-Reaktor und einem chemischen Plug-Flow-Reaktor besteht, ausgewählt wird, ausgeführt werden, wobei die Größe des chemischen Reaktors aus der Gruppe, die aus einem chemischen Laborreaktor in Mikromaßstab, einem chemischen Reaktor im Produkt/Prozessentwicklungsmaßstab und einem kommerziellen chemischen Reaktor im Großmaßstab besteht, ausgewählt wird. Zusätzlich können die folgenden Schritte des Verfahrens der vorliegenden Erfindung in einem chemischen Prozess ausgeführt werden, der aus der Gruppe, die aus einem chemischen Verfahren mit kontinuierlichem Fluss, einem chemischen Batch-Verfahren, einem chemischen Plug-Flow-Verfahren und einer Kombination eines chemischen Verfahrens, das eine Kombination dieser chemischen Verfahren aufweist, besteht, ausgewählt wird, wobei die Größe des chemischen Verfahrens aus der Gruppe, die aus einem chemischen Laborprozess im Mikromaßstab, einem chemischen Prozess im Produkt/Prozessentwicklungsmaßstab und einem kommerziellen chemischen Verfahren im Großmaßstab besteht, ausgewählt wird.

**[0077]** In Schritt (a) des Verfahrens zur katalytischen Polymerisation eines Alpha-Olefinmonomers wird eine besondere Form eines Diamindiphenolatpräkatalysators 1 oder 2 bereitgestellt.

**[0078]** In Schritt (b) wird eine erste chemische Einheit, die die besondere Form des Diamindiphenolatpräkatalysators 1 oder 2 von Schritt (a) aufweist, für die Verwendung in der katalytischen Polymerisation eines Alpha-Olefinmonomers hergestellt.

**[0079]** Bevorzugt wird eine Menge der besonderen Form des Diamindiphenolatpräkatalysators 1 oder 2 mit einem organischen Lösungsmittel gemischt. Jedes nicht-protische organische Lösungsmittel kann verwendet

werden, welches den Präkatalysator 1 oder 2 ohne Zersetzung suspendieren oder auflösen kann. Bevorzugter ist das organische Lösungsmittel die flüssige Form des zu polymerisierenden Alpha-Olefinmonomers, zum Beispiel ein organisches Lösungsmittel, das aus der Gruppe, die aus 1-Penten, 1-Hexen und 1-Okten besteht, ausgewählt wird. Alternativ ist das organische Lösungsmittel die flüssige Form des zu polymerisierenden Alpha-Olefinmonomers, zum Beispiel ein organisches Lösungsmittel, das aus der Gruppe, die aus 1-Penten, 1-Hexen und 1-Okten besteht, ausgewählt wird, gemischt mit mindestens einem zusätzlichen organischen Lösungsmittel, das nicht das zu polymerisierende Alpha-Olefinmonomer beinhaltet, zum Beispiel mindestens ein zusätzliches organisches Lösungsmittel, das aus der Gruppe, die aus Pentan, Heptan, Toluol, Methylenchlorid und Chlorbenzol besteht, ausgewählt wird. Alternativ ist das organische Lösungsmittel mindestens ein organisches Lösungsmittel, das nicht das zu polymerisierende Alpha-Olefinmonomer beinhaltet, zum Beispiel mindestens ein organisches Lösungsmittel, das aus der Gruppe, die aus Pentan, Heptan, Toluol, Methylenchlorid und Chlorbenzol besteht, ausgewählt wird.

**[0080]** Alternativ wird die erste chemische Einheit, die die besondere Form des Diamindiphenolatpräkatalysators 1 oder 2 wie sie unten beschrieben ist aufweist, ohne den Präkatalysator 1 oder 2 in einem Lösungsmittel vor dem nachfolgenden Schritt (e) zu suspendieren oder aufzulösen, hergestellt, zur Bildung eines katalytischen Polymerisationsreaktionssystems zur katalytischen Polymerisation des Alpha-Olefinmonomers.

**[0081]** Gewöhnlich ist ein geeigneter Cokatalysator für die Aktivierung des Präkatalysators 1 oder 2 erforderlich, um die katalytische Polymerisation des Alpha-Olefinmonomers zu bewirken, es existieren jedoch bestimmte Formen des Präkatalysators 1 oder 2, zum Beispiel Diphenolatlanthanidkomplexe, die die katalytische Polymerisation des Alpha-Olefinmonomers, wie zum Beispiel 1-Penten, 1-Hexen oder 1-Okten, ohne durch einen Cokatalysator aktiviert zu werden, bewirken können. Somit wirken in diesen katalytischen Polymerisationssystemen der Präkatalysator 1 oder 2 wirksam als ein "unabhängiger" Katalysator, wobei es keinen Bedarf zur Durchführung der folgenden Schritte (c) und (d) gibt und das Verfahren zur katalytischen Polymerisation des Alpha-Olefinmonomers geht mit dem alternativen Schritt (e), wie unten beschrieben, weiter.

**[0082]** Optional beinhaltet Schritt (b) des Weiteren das Aussetzen irgendeiner der oben beschriebenen bevorzugten oder alternativen Formen der ersten chemischen Einheit, die die besondere Form des Diamindiphenolatpräkatalysators 1 oder 2 aufweist, gegenüber der Oberfläche eines festen Trägers, wie zum Beispiel Siliziumdioxid, Aluminiumoxid oder Magnesiumoxid, um einen adsorbierten Zustand der ersten chemischen Einheit des Präkatalysators 1 oder 2 herzustellen.

**[0083]** Im Schritt (c) wird ein Cokatalysator, der für die Aktivierung einer bestimmten Form des Diamindiphenolatpräkatalysators 1 oder 2 geeignet ist, für die Verwendung bei der katalytischen Polymerisation des Alpha-Olefinmonomers bereitgestellt. Der Cokatalysator wird aus der Gruppe ausgewählt, die zum Beispiel eine Bor-Lewis-Säure, wie zum Beispiel Tris(pentafluorphenyl)bor,  $B(C_6F_5)_3$ , ein Borsalz, wie zum Beispiel N,N'-Dimethylaniliniumtetrakis(pentafluorphenyl)borat,  $[PhNH(CH_3)_2][B(C_6F_5)_4]$  und eine Aluminiumverbindung, wie zum Beispiel Methylaluminoxan (MAO) beinhaltet, aber nicht darauf beschränkt ist.

**[0084]** In Schritt (d) wird eine zweite chemische Einheit, die den ausgewählten Cokatalysator von Schritt (c) aufweist, für die Verwendung bei der katalytischen Polymerisation des Alpha-Olefinmonomers hergestellt.

**[0085]** Bevorzugt wird der ausgewählte Cokatalysator, der für die Aktivierung des Präkatalysators 1 oder 2 benötigt wird, mit einem organischen Lösungsmittel gemischt. Jedes organische Lösungsmittel kann verwendet werden, das den ausgewählten Cokatalysator ohne Zersetzung suspendieren oder auflösen kann. Bevorzugter ist das organische Lösungsmittel die flüssige Form des zu polymerisierenden Alpha-Olefinmonomers, zum Beispiel ein organisches Lösungsmittel, das aus der Gruppe, die aus 1-Penten, 1-Hexen und 1-Okten besteht, ausgewählt wird. Alternativ ist das organische Lösungsmittel die flüssige Form des zu polymerisierenden Alpha-Olefinmonomers, zum Beispiel ein organisches Lösungsmittel, das aus der Gruppe, die aus 1-Penten, 1-Hexen und 1-Okten besteht, ausgewählt wird, das mit mindestens einem zusätzlichen organischen Lösungsmittel gemischt wird, das nicht das zu polymerisierende Alpha-Olefinmonomer enthält, zum Beispiel mindestens ein zusätzliches organisches Lösungsmittel, das aus der Gruppe, die aus Pentan, Heptan, Toluol, Methylenchlorid und Chlorbenzol besteht, ausgewählt wird. Alternativ ist das organische Lösungsmittel mindestens ein organisches Lösungsmittel, das das zu polymerisierende Alpha-Olefinmonomer nicht beinhaltet, zum Beispiel mindestens ein organisches Lösungsmittel, das aus der Gruppe, die aus Pentan, Heptan, Toluol, Methylenchlorid und Chlorbenzol besteht, ausgewählt wird.

**[0086]** Alternativ wird die zweite chemische Einheit, die den ausgewählten Cokatalysator, wie er unten beschrieben ist aufweist, ohne das ausgewählte Lösungsmittel vor dem folgenden Schritt (e) in einem Lösungs-

mittel zu suspendieren oder aufzulösen zur Bildung eines katalytischen Polymerisationsreaktionssystems zur katalytischen Polymerisation des Alpha-Olefinmonomers hergestellt.

**[0087]** Optional beinhaltet Schritt (d) weiter das Aussetzen irgendeiner der oben beschriebenen bevorzugten oder alternativen Formen der zweiten chemischen Einheit, die den ausgewählten Cokatalysator aufweist, gegenüber der Oberfläche eines festen Trägers, wie zum Beispiel Siliziumdioxid, Aluminiumoxid oder Magnesiumoxid, um einen adsorbierten Zustand der zweiten chemischen Einheit des ausgewählten Cokatalysators herzustellen.

**[0088]** In Bezug auf den oben genannten Schritt (b) und Schritt (d) hängen das spezifische Lösungsmittel oder die Lösungsmittel, die für die Suspendierung oder das Auflösen des Diamindiphenolatpräkatalysators 1 oder 2 und/oder für das Suspendieren oder Auflösen des ausgewählten Cokatalysators verwendet werden, von der gewünschten Poly(Alpha-Olefin)-Produktverteilung ab, insbesondere in Bezug auf die Bildung verschiedener Homopolymere oder Co-Polymere, wobei jedes einen unterschiedlichen Grad an Alpha-Olefin-Einbettung hat. Typischerweise ist, wenn das zu polymerisierende Monomer die flüssige Phase ist, mindestens eines der für die Suspendierung oder das Auflösen des Diamindiphenolatpräkatalysators 1 oder 2 und/oder des ausgewählten Cokatalysators verwendeten Lösungsmittel das Alpha-Olefinmonomer, das als das gewünschte Poly(Alpha-Olefin)-Produkt ausgewählt wird.

**[0089]** In Schritt (e) wird ein katalytisches Polymerisationsreaktionssystem für die katalytische Polymerisation des Alpha-Olefinmonomers durch Mischen (i) der ersten chemischen Einheit, die die besondere Form des Diamindiphenolatpräkatalysators 1 oder 2 von Schritt (b) aufweist, mit (ii) der zweiten chemischen Einheit des ausgewählten Cokatalysators von Schritt (d) mit (iii) dem zu polymerisierenden Alpha-Olefinmonomer gebildet.

**[0090]** Es gibt zwei Kategorien, Kategorie (A) und Kategorie (B), zur Bildung des katalytischen Polymerisationsreaktionssystems, die das Mischen der ersten und der zweiten chemischen Einheiten mit dem Alpha-Olefinmonomer betrifft, gemäß des Vorhandenseins oder des Fehlens des zu polymerisierenden Alpha-Olefinmonomers in mindestens einer der ersten und zweiten chemischen Einheiten. Zusätzlich zum Vorhandensein oder dem Fehlen des zu polymerisierenden Alpha-Olefinmonomers wird in jedem alternativen Verfahren von Kategorie (A) und Kategorie (B) die erste chemische Einheit in einem Zustand, der aus der Gruppe, die aus einem nicht adsorbierten Zustand der ersten chemischen Einheit und einem adsorbierten Zustand der ersten chemischen Einheit besteht, ausgewählt wird, mit der zweiten chemischen Einheit in einem Zustand, der aus der Gruppe, die aus einem nicht adsorbierten Zustand der zweiten chemischen Einheit und einem adsorbierten Zustand der zweiten chemischen Einheit besteht, ausgewählt wird, gemischt.

**[0091]** In Kategorie (A), bei der das zu polymerisierende Alpha-Olefinmonomer in mindestens einer der chemischen Einheiten vorliegt, die aus der Gruppe, die aus der ersten chemischen Einheit, die den Präkatalysator 1 oder 2 aufweist, und der zweiten chemischen Einheit, die den ausgewählten Cokatalysator aufweist, besteht, ausgewählt werden, wird die erste chemische Einheit, die den Präkatalysator 1 oder 2 aufweist, mit der zweiten chemischen Einheit, die den ausgewählten Cokatalysator aufweist, gemischt.

**[0092]** Kategorie (A) zur Bildung des katalytischen Polymerisationssystems beinhaltet die folgenden fünf alternativen Verfahren zum Mischen der ersten chemischen Einheit, die den Präkatalysator 1 oder 2 aufweist, mit der zweiten chemischen Einheit, die den ausgewählten Cokatalysator aufweist: (1) Mischen der ersten chemischen Einheit, die den Präkatalysator 1 oder 2 aufweist, der in dem Alpha-Olefinmonomer suspendiert oder aufgelöst ist, in einem nicht adsorbierten Zustand oder in einem adsorbierten Zustand mit der zweiten chemischen Einheit, die den ausgewählten Cokatalysator aufweist, der in dem Alpha-Olefinmonomer suspendiert oder aufgelöst ist, in einem nicht adsorbierten Zustand oder in einem adsorbierten Zustand, (2) Mischen der ersten chemischen Einheit, die den Präkatalysator 1 oder 2 aufweist, der in dem Alpha-Olefinmonomer suspendiert oder aufgelöst ist, in einem nicht adsorbierten Zustand oder in einem adsorbierten Zustand mit der zweiten chemischen Einheit, die den ausgewählten Cokatalysator aufweist, der in einem organischen Lösungsmittel, das das Alpha-Olefinmonomer nicht beinhaltet, suspendiert oder aufgelöst ist, in einem nicht adsorbierten Zustand oder in einem adsorbierten Zustand, (3) Mischen der ersten chemischen Einheit, die den Präkatalysator 1 oder 2 aufweist, der in einem organischen Lösungsmittel, das nicht das Alpha-Olefinmonomer beinhaltet, suspendiert oder aufgelöst ist, in einem nicht adsorbierten Zustand oder in einem adsorbierten Zustand mit der zweiten chemischen Einheit, die den ausgewählten Cokatalysator aufweist, der in dem Alpha-Olefinmonomer suspendiert oder aufgelöst ist, in einem nicht adsorbierten Zustand oder in einem adsorbierten Zustand, (4) Mischen der ersten chemischen Einheit, die den Präkatalysator 1 oder 2 aufweist, der in dem Alpha-Olefinmonomer suspendiert oder aufgelöst ist, in einem nicht adsorbierten Zustand oder in einem adsorbierten Zustand mit der zweiten chemischen Einheit, die den ausgewählten Cokatalysator aufweist, der

nicht in einem organischen Lösungsmittel suspendiert oder aufgelöst ist, in einem nicht absorbierten Zustand oder in einem absorbierten Zustand und (5) Mischen der ersten chemischen Einheit, die den Präkatalysator 1 oder 2 aufweist, der nicht in einem organischen Lösungsmittel suspendiert oder aufgelöst ist, in einem nicht absorbierten Zustand oder in einem absorbierten Zustand mit der zweiten chemischen Einheit, die den ausgewählten Cokatalysator aufweist, der in dem Alpha-Olefinmonomer suspendiert oder aufgelöst ist, in einem nicht absorbierten Zustand oder in einem absorbierten Zustand.

**[0093]** In Kategorie (B), wo das zu polymerisierende Alpha-Olefinmonomer allen chemischen Einheiten fehlt, die aus der Gruppe, die aus der ersten chemischen Einheit, die den Präkatalysator 1 oder 2 aufweist, und der zweiten chemischen Einheit, die den ausgewählten Cokatalysator aufweist, besteht, ausgewählt werden, wird die erste chemische Einheit, die den Präkatalysator 1 oder 2 aufweist, mit der zweiten chemischen Einheit, die den ausgewählten Cokatalysator aufweist, gemischt, gefolgt von Mischen mit dem gewünschten oder Ziel-Alpha-Olefinmonomer, das polymerisiert werden soll.

**[0094]** Die Kategorie (B) zur Bildung des katalytischen Polymerisationssystems beinhaltet die folgenden vier alternativen Verfahren zum Mischen der ersten chemischen Einheit, die den Präkatalysator 1 oder 2 aufweist, mit der zweiten chemischen Einheit, die den ausgewählten Cokatalysator aufweist, gefolgt von Mischen mit dem Alpha-Olefinmonomer: (1) Mischen der ersten chemischen Einheit, die den Präkatalysator 1 oder 2 aufweist, die in einem organischen Lösungsmittel, das das Alpha-Olefinmonomer nicht beinhaltet, suspendiert oder aufgelöst ist, in einem nicht absorbierten Zustand oder in einem absorbierten Zustand mit der zweiten chemischen Einheit, die den ausgewählten Cokatalysator aufweist, die nicht in einem organischen Lösungsmittel suspendiert oder aufgelöst ist, in einem nicht absorbierten Zustand oder in einem absorbierten Zustand, gefolgt von Mischen mit dem Alpha-Olefinmonomer, (2) Mischen der ersten chemischen Einheit, die den Präkatalysator 1 oder 2 aufweist, die in einem organischen Lösungsmittel, das nicht das Alpha-Olefinmonomer beinhaltet, suspendiert oder aufgelöst ist, in einem nicht absorbierten Zustand oder in einem absorbierten Zustand mit der zweiten chemischen Einheit, die den ausgewählten Cokatalysator aufweist, die in einem organischen Lösungsmittel, das nicht das Alpha-Olefinmonomer beinhaltet, suspendiert oder aufgelöst ist, in einem nicht absorbierten Zustand oder in einem absorbierten Zustand, gefolgt von Mischen mit dem Alpha-Olefinmonomer, (3) Mischen der ersten chemischen Einheit, die den Präkatalysator 1 oder 2 aufweist, die nicht in einem organischen Lösungsmittel suspendiert oder aufgelöst ist, in einem nicht absorbierten Zustand oder in einem absorbierten Zustand mit der zweiten chemischen Einheit, die den ausgewählten Cokatalysator aufweist, der in einem organischen Lösungsmittel, das nicht das Alpha-Olefinmonomer beinhaltet, suspendiert oder aufgelöst ist, in einem nicht absorbierten Zustand oder in einem absorbierten Zustand, gefolgt von Mischen mit dem Alpha-Olefinmonomer, und (4) Mischen der ersten chemischen Einheit, die den Präkatalysator 1 oder 2 aufweist, die nicht in einem organischen Lösungsmittel suspendiert oder aufgelöst ist, in einem nicht absorbierten Zustand oder in einem absorbierten Zustand mit der zweiten chemischen Einheit, die den ausgewählten Cokatalysator aufweist, die nicht in einem organischen Lösungsmittel suspendiert oder aufgelöst ist, in einem nicht absorbierten Zustand oder in einem absorbierten Zustand, gefolgt von Mischen mit dem Alpha-Olefinmonomer.

**[0095]** In Kategorie (B) zur Bildung des katalytischen Polymerisationssystems gemäß den oben beschriebenen vier alternativen Verfahren ist das Alpha-Olefinmonomer entweder eine flüssige Phase oder eine Gasphase zum Mischen mit der anfänglich gebildeten Flüssigphasenmischung oder der Festphasenmischung der ersten chemischen Einheit, die den Präkatalysator 1 oder 2 aufweist, und der zweiten chemischen Einheit, die den ausgewählten Cokatalysator aufweist. Entsprechend wird das Flüssigphasen-Alpha-Olefinmonomer zu der anfänglich gebildeten Flüssigphasenmischung oder der Festphasenmischung der ersten chemischen Einheit, die den Präkatalysator 1 oder 2 aufweist, und der zweiten chemischen Einheit, die den ausgewählten Cokatalysator aufweist, hinzugegeben. Alternativ wird das Gasphasen-Alpha-Olefinmonomer in und/oder durch die anfänglich gebildete Flüssigphasenmischung oder Festphasenmischung der ersten chemischen Einheit, die den Präkatalysator 1 oder 2 aufweist, und der zweiten chemischen Einheit, die den ausgewählten Cokatalysator aufweist, hindurch geblubbert.

**[0096]** Gemäß des zuvor beschriebenen Schritt (b) gibt es besondere Formen des Präkatalysators 1 oder 2, zum Beispiel Diphenylatlanthanidkomplexe, die die katalytische Polymerisation des Alpha-Olefinmonomers bewirken können, ohne durch einen Cokatalysator aktiviert zu werden, wobei es der Herstellung der ersten chemischen Einheit, die die besondere Form des Diamindiphenolatpräkatalysators 1 oder 2 gemäß dem zuvor beschriebenen Schritt (b) aufweist, folgend keinen Bedarf zur Herstellung der zweiten chemischen Einheit, die den ausgewählten Cokatalysator aufweist, gemäß den zuvor beschriebenen Schritte (c) und (d) gibt. Somit wird im alternativen Schritt (e) ein katalytisches Polymerisationsreaktionssystem für die katalytische Polymerisation des Alpha-Olefinmonomers durch Mischen (i) der ersten chemischen Einheit, die die besondere Form

des Diamindiphenolatpräkatalysators 1 oder 2 aufweist, die in flüssiger Phase oder in flüssiger oder fester Phase in einem nicht-adsorbierten Zustand oder in einem adsorbierten Zustand suspendiert oder aufgelöst ist, ohne das Alpha-Olefinmonomer zu enthalten, gemäß dem zuvor beschriebenen Schritt (b), mit (ii) dem zu polymerisierenden Alpha-Olefinmonomer gebildet. Entsprechend wird Flüssigphasen-Alpha-Olefinmonomer zu der anfänglich hergestellten Flüssigphase oder Festphase der ersten chemischen Einheit, die den Präkatalysator 1 oder 2 in einem nicht-adsorbierten Zustand oder in einem adsorbierten Zustand aufweist, hinzugegeben. Alternativ wird das Gasphasen-Alpha-Olefinmonomer in und/oder durch die anfänglich hergestellte Flüssigphase oder Festphase der ersten chemischen Einheit, die den Präkatalysator 1 oder 2 in einem nicht adsorbierten Zustand oder in einem adsorbierten Zustand aufweist, hindurch geblubbert.

**[0097]** Unabhängig von der tatsächlichen Reihenfolge oder Sequenz des Mischens der chemischen Einheiten resultiert die Vervollständigung von Schritt (e) in der Bildung des katalytischen Polymerisationsreaktionssystems für die katalytische Polymerisation des Alpha-Olefinmonomers, einschließlich (i) der ersten chemischen Einheit, die die besondere Form des Diamindiphenolatpräkatalysators 1 oder 2 von Schritt (b) in einem nicht adsorbierten Zustand oder in einem adsorbierten Zustand aufweist, (ii) der zweiten chemischen Einheit, die den ausgewählten Cokatalysator von Schritt (d) in einem nicht adsorbierten Zustand oder in einem adsorbierten Zustand aufweist, und (iii) des zu polymerisierenden Alpha-Olefinmonomers. Alternativ resultiert die Vervollständigung von Schritt (e) in der Bildung des katalytischen Polymerisationsreaktionssystems für die katalytische Polymerisation des Alpha-Olefinmonomers, einschließlich (i) der ersten chemischen Einheit, die die besondere Form des Diamindiphenolatpräkatalysators 1 oder 2 von Schritt (b) in einem nicht adsorbierten Zustand oder in einem adsorbierten Zustand aufweist, und (ii) des zu polymerisierenden Alpha-Olefinmonomers.

**[0098]** Die Bedingungen zur Durchführung von Schritt (a) bis Schritt (e) sind bevorzugt Raumtemperatur unter Ausschluss von Feuchtigkeit und Sauerstoff, um Hydrolyse oder Oxidation entweder des Präkatalysators 1 oder 2 oder des ausgewählten Cokatalysators zu verhindern.

**[0099]** In der Praxis beinhaltet die Ausführung des Verfahrens zur katalytischen Polymerisation eines Alpha-Olefinmonomers gemäß der vorliegenden Erfindung bevorzugt die Durchführung des oben beschriebenen Schritt (e) zur Bildung eines katalytischen Polymerisationsreaktionssystems zur katalytischen Polymerisation des Alpha-Olefinmonomers durch Mischen (i) der ersten chemischen Einheit, die die besondere Form des Diamindiphenolatpräkatalysators 1 oder 2 von Schritt (b) aufweist, mit (ii) der zweiten chemischen Einheit des ausgewählten Cokatalysators von Schritt (d) mit (iii) dem Alpha-Olefinmonomer, welches polymerisiert werden soll, gemäß einem besonderen Verfahren, das aus Kategorie (A) oder Kategorie (B) ausgewählt wird.

**[0100]** Im Prinzip kann die komplexe chemische Einheit, die als Ergebnis des Mischens der ersten chemischen Einheit, die den Präkatalysators 1 oder 2 in Abwesenheit des Alpha-Olefinmonomers in einem nicht adsorbierten Zustand oder in einem adsorbierten Zustand aufweist, mit der zweiten chemischen Einheit, die den ausgewählten Cokatalysators ebenfalls in Abwesenheit des Alpha-Olefinmonomers in einem nicht adsorbierten Zustand oder in einem adsorbierten Zustand aufweist, gebildet wird, isoliert werden und so wie sie ist, kurzfristig oder langfristig, gemäß der Stabilität einer solchen komplexen chemischen Einheit ohne die komplexe chemische Einheit sofort einem Alpha-Olefinmonomer zur Bildung eines katalytischen Polymerisationsreaktionssystems zur katalytischen Polymerisation eines Alpha-Olefinmonomers auszusetzen, gehalten werden. In diesem Fall wird die komplexe chemische Einheit, die durch Aktivieren des Präkatalysators 1 oder 2 mit dem ausgewählten Cokatalysator in Abwesenheit des Alpha-Olefinmonomers als ein "aktiver" Katalysator für die katalytische Polymerisation eines Alpha-Olefinmonomers wirksam angesehen werden, so dass durch separates Hinzufügen eines Alpha-Olefinmonomers zu der komplexen chemischen Einheit ein katalytisches Polymerisationsreaktionssystem für die katalytischen Polymerisation des Alpha-Olefinmonomers in Übereinstimmung mit der zuvor beschriebenen Kategorie (B) von Schritt (e) gebildet wird.

**[0101]** In Schritt (f) wird das katalytische Polymerisationsreaktionssystem für eine Dauer im Bereich von ungefähr 5 Sekunden bis ungefähr 12 Stunden gerührt. Ausgehend von der Initiierung der Polymerisationsreaktion und einschließlich der Dauer des Rührens des Reaktionssystems kann exotherme Wärme aus dem Reaktionssystem freigesetzt werden, begleitet von einer möglichen Farbänderung des Reaktionssystems. Die katalytische Polymerisation kann bei verschiedenen Temperaturen durchgeführt werden. Externes Kühlen zum Beispiel herunter auf ungefähr 0°C kann zur Verlangsamung der katalytischen Polymerisation verwendet werden. Erwärmen, zum Beispiel auf Rückflusstemperatur, beschleunigt die Reaktion.

**[0102]** Zusätzlich wird in Schritt (f) mindestens eine andere Art und Menge eines chemischen Reagenzes zur Verbesserung der Polymerisationsreaktion zu dem katalytischen Polymerisationsreaktionssystem hinzugegeben. Zum Beispiel wird manchmal Wasserstoffgas zu dem katalytischen Polymerisationsreaktionssystem zur

Verbesserung der Kontrolle des Molekulargewichtes der resultierenden Poly(Alpha-Olefin)-Produkte hinzugeben.

**[0103]** In Schritt (g) wird die katalytische Polymerisationsreaktion durch Verwenden von Reaktionsbedingungen, die aus der Gruppe, die aus (i) Hinzufügen eines externen Quenchers, wie zum Beispiel ein protisches Lösungsmittel, (ii) vollständiger Verbrauch des Monomers und (iii) Deaktivieren des Katalysators, der zuvor gemäß dem oben geschriebenen Schritt (e) gebildet wurde, besteht, ausgewählt wird, die einen Komplex der ersten chemischen Einheit, die die besondere Form des Diamindiphenolatpräkatalysators 1 oder 2 von Schritt (b) aufweist, der mit der zweiten chemischen Einheit des ausgewählten Cokatalysators von Schritt (d) gemischt wird, beendet.

**[0104]** In Schritt (h) wird das Polymerprodukt durch das folgende Verfahren isoliert. Überschüssiger Präkatalysator 1 oder 2 und/oder der ausgewählte Cokatalysator können hydrolysiert werden. Die Isolierung des Polymerprodukts aus dem Lösungsmittel und/oder dem restlichen Alpha-Olefinmonomer in der Lösung hängt von der Löslichkeit des Polymerproduktes ab. Im Falle eines unlöslichen Polymerproduktes, zum Beispiel Polyethylen, beinhaltet das Isolierungsverfahren die Filtration und Trocknung, wohingegen im Falle eines löslichen Polymerproduktes flüchtige Spezies durch Destillation entfernt werden und das Polymerprodukt dann getrocknet wird. Verunreinigungen, wie zum Beispiel Zersetzungsprodukte des Präkatalysator 1 oder 2 und/oder des ausgewählten Cokatalysators, werden typischerweise gewaschen.

**[0105]** In Schritt (i) werden die physiochemischen Eigenschaften und Charakteristika der Poly(Alpha-Olefin)-Produkte, die durch das katalytische Polymerisationsreaktionssystem hergestellt wurden, durch verschiedene Techniken gemessen und analysiert, zum Beispiel der Schmelzpunkt, Spektroskopie, wie zum Beispiel NMR, Röntgenkristallographie, mechanische Festigkeit, wie zum Beispiel Elastizität, etc. Strukturinformation und Molekulargewichtsinformation, die die molekulare Gewichtsverteilung des Polymers betreffen, werden über den Polydispersitätsindex (PDI) ebenfalls bestimmt.

**[0106]** Um das große Potential des Diamindiphenolatpräkatalysators 1 der vorliegenden Erfindung für die taktsiche katalytische Polymerisation von Alpha-Olefinmonomeren zu veranschaulichen, werden Glanzpunkte des in den Beispielen 13 und 14 beschriebenen katalytischen Polymerisationsreaktionssystem hier bereitgestellt.

**[0107]** Der Diamindiphenolatpräkatalysator 1, in der ersten beispielhaften besonderen Form, die oben beschrieben ist, nämlich hexakoordinierter Dialkyldiamindiphenolatpräkatalysator 1  $[[N,N'$ -Bis(3,5-di-tert-butyl-2-hydroxyphenylmethyl)-N,N'-dimethylethylendiamin]zirkoniumdibenzyl] 16, wird durch Bor-Lewis-Säure,  $B(C_6F_5)_3$  in Gegenwart von wenig 1-Hexen bei Raumtemperatur unter Stickstoffgasinertatmosphäre aktiviert, wobei 1-Hexen sowohl als das zu polymerisierende Ziel-Alpha-Olefinmonomer als auch als Auflösungs- und Lösungsmittel für den Präkatalysator 16 und für den Bor-Cokatalysator fungiert.

**[0108]** Bei diesen Reaktionsbedingungen wird Poly(1-hexen) gebildet, welches interessanterweise hoch isotaktisch ist, wobei es zu einem Ausmaß oder Grad größer als 95% klassifizierbar ist, wie durch  $^{13}C$  NMR Spektrum des resultierenden Polymers, wie in [Fig. 2](#) gezeigt, abgeleitet wird. Das nach 30 min erhaltene Polymer hat ein Gewichtsmittelwert des Molekulargewichts vom  $M_w = 12.000$  Gramm/Mol und einen PDI von 1.15. Der enge PDI und die lineare Abhängigkeit des Gewichtsmittelwert des Molekulargewichts von dem Verbrauch des Monomers, die in [Fig. 3](#) gezeigt ist, zeigt, dass dieses besondere katalytische Polymerisierungssystem als lebend klassifizierbar ist.

**[0109]** In einem anderen Beispiel wird hexakoordinierter Dialkyldiamindiphenolatpräkatalysator  $[[N,N'$ -Bis(3,5-dimethyl-2-hydroxyphenylmethyl)-N,N'-dimethylethylendiamin]zirkoniumdibenzyl] 17 durch Bor-Lewis-Säure Cokatalysator,  $B(C_6F_5)_3$ , in Gegenwart von reinen 1-Hexen bei Raumtemperatur unter Stickstoffgasinertatmosphäre aktiviert, wobei erneut 1-Hexen sowohl als das zu polymerisierende Ziel-Alpha-Olefinmonomer als auch als Lösungsmittel für den Präkatalysator 17 und für den Bor-Cokatalysator fungiert. Das in diesem Falle erhaltene Polymer hat ein Gewichtsmittelwert des Molekulargewichts von  $M_w = 23.000$  Gramm/Mol und einen PDI von 1.57. Dieses Polymer ist gemäß seines  $^{13}C$  NMR Spektrums, was in [Fig. 4](#) gezeigt ist, als ataktisch klassifizierbar.

**[0110]** Die katalytische Aktivität des Diamindiphenolatpräkatalysators 1 der vorliegenden Erfindung, die teilweise veranschaulicht wird durch besondere Formen des sechsfach koordinierten Diamindiphenolatkomplexes, den Präkatalysator  $[[N,N'$ -Bis(3,5-di-tert-butyl-2-hydroxyphenylmethyl)-N,N'-dimethylethylendiamin]zirkoniumdibenzyl] 16, die unter den oben beschriebenen Reaktionsbedingungen arbeitet, ist das erste Beispiel ei-

nes nicht-Metallocen Katalysators, der sowohl isospezifische als auch lebende Polymerisation von Alpha-Olefinmonomeren erzeugt.

**[0111]** Zusätzliche Gegenstände, Vorteile und neue Merkmale der vorliegenden Erfindung werden dem Durchschnittsfachmann nach Prüfen der folgenden Beispiele, welche nicht als beschränkend anzusehen sind, offensichtlich werden. Zusätzlich finden alle verschiedenen Ausführungsformen und Aspekte der vorliegenden Erfindung, wie hier beschrieben und unten im Anspruchsteil beansprucht, experimentelle Unterstützung in den folgenden Beispielen.

**[0112]** Bezug wird nun auf die folgenden Beispiele genommen, welche zusammen mit der obigen Beschreibung die Erfindung in einer nicht beschränkenden Art und Weise veranschaulichen. Details der Synthesen von acht unterschiedlichen besonderen Formen des allgemeinen Diamindi(2-hydroxyarylmethyl)-Ligandprecursors 6 sind unten in den Beispielen 1 bis 8 bereitgestellt. Details der Synthesen und spektroskopische und Röntgenstrahlendaten der resultierenden Strukturen der entsprechenden Beispielformen des Diamindiphenolatpräkatalysators 1 der vorliegenden Erfindung sind in den Beispielen 9 bis 12 unten bereitgestellt.

**[0113]** Details der katalytischen Polymerisation eines beispielhaften Alpha-Olefinmonomers, 1-Hexen, unter Verwendung der besonderen Form 16 oder der besonderen Form 17 des Diamindiphenolatpräkatalysators 1, die der isotaktischen katalytischen Polymerisation oder der ataktischen katalytischen Polymerisation in Übereinstimmung mit dem Verfahren der vorliegenden Erfindung entsprechen, zur Bildung von isotaktischem Poly(1-hexen) bzw. ataktischen Poly(1-hexen) und die betreffenden empirischen Daten davon werden hier in den Beispielen 13 bzw. 14 bereitgestellt. Die Referenznummern der chemischen Spezies und Strukturen, die in den folgenden Beispielen auftauchen, sind denen, die in der obigen Beschreibung der bevorzugten Ausführungsformen angegeben sind, identisch.

#### Beispiel 1

Synthese des Diamindi(2-hydroxyarylmethyl)-Ligandprecursors  $[(N,N'$ -Bis(3,5-di-tert-butyl-2-hydroxyphenylmethyl)-N,N'-dimethylethylendiamin] 7.

**[0114]** Eine Mischung von 2,4-Di-tert-butylphenol (50 mmol), N,N'-Dimethylethylendiamin (25 mmol) und 37% wässrige Formaldehyd (50 mmol) wurden für 2 h in refluxierendem Methanol gerührt. Die Mischung wurde auf Raumtemperatur abgekühlt und der Feststoff wurde abfiltriert und mit Methanol gewaschen, was den Ligandprecursor 7 in 70% ergab.

Schmelzpunkt des Ligandprecursors 7 war 150–151°C.

Spektroskopische Daten des Ligandprecursors 7.  $^1\text{H NMR}$  (200 MHz,  $\text{CDCl}_3$ )  $\delta$  10.70 (s, 2H, OH), 7.20 (d,  $J = 2.3$  Hz, 2H, Ar), 6.80 (d,  $J = 2.3$  Hz, 2H, Ar), 3.66 (s, 4H, Ar- $\text{CH}_2$ -N), 2.63 (s, 4H, N- $\text{CH}_2$ ), 2.26 (s, 6H N $\text{CH}_3$ ), 1.40 (s, 18H, C( $\text{CH}_3$ ) $_3$ ), 1.27 (s, 18H, C( $\text{CH}_3$ ) $_3$ ).  $^{13}\text{C NMR}$  (50.4 MHz,  $\text{CDCl}_3$ )  $\delta$  154.2, 140.6, 135.7, 123.3, 123.0, 121.0, 62.7 (Ar- $\text{CH}_2$ -N), 53.8 (N- $\text{CH}_2$ ), 41.6 (N $\text{CH}_3$ ), 34.7 (C( $\text{CH}_3$ ) $_3$ ), 34.1 (C( $\text{CH}_3$ ) $_3$ ), 31.7 (C( $\text{CH}_3$ ) $_3$ ), 29.6 (C( $\text{CH}_3$ ) $_3$ ).

HRMS (Hochauflösende Massenspektrometrie) des Ligandprecursor 7: berechnet 524.43418 und beobachtet 524.43413.

#### Beispiel 2

Synthese des Diamindi(2-hydroxyarylmethyl)-Ligandprecursors  $[(N,N'$ -Bis(3,5-dimethyl-2-hydroxyphenylmethyl)-N,N'-dimethylethylendiamin] 8.

**[0115]** Eine Mischung von 2,4-Dimethylphenyl (50 mmol), N,N'-Dimethylethylendiamin (25 mmol) und 37% wässrige Formaldehyd (50 mmol) wurden für 2 h in refluxierendem Methanol gerührt. Die Mischung wurde auf Raumtemperatur abgekühlt und der Feststoff wurde filtriert und mit Methanol gewaschen, was den Ligandprecursor 8 in 50% ergab.

Schmelzpunkt des Ligandprecursors 8 war 120–121°C.

Spektroskopische Daten des Ligandprecursors 8.  $^1\text{H NMR}$  (200 MHz,  $\text{CDCl}_3$ )  $\delta$  10.57 (s, 2H, OH), 6.87 (s, 2H, Ar), 6.62 (s, 2H, Ar), 3.63 (s, 4H, Ar- $\text{CH}_2$ -N), 2.66 (s, 4H, N- $\text{CH}_2$ ), 2.27 (s, 6H, N $\text{CH}_3$ ), 2.22 (s, 6H,  $\text{CH}_3$ ), 2.20 (s, 6H,  $\text{CH}_3$ ).  $^{13}\text{C NMR}$  (50.4 MHz,  $\text{CDCl}_3$ )  $\delta$  153.4, 130.6, 127.5, 126.6, 124.6, 120.6, 61.8 ( $\text{CH}_2$ ), 54.1 ( $\text{CH}_2$ ), 50.1 ( $\text{CH}_3$ ), 20.4 ( $\text{CH}_3$ ), 15.5 ( $\text{CH}_3$ ).

HRMS (Hochauflösende Massenspektrometrie) des Ligandprecursors 8: berechnet 356.24638 und beobachtet 356.24642.

## Beispiel 3

Synthese des Diamindi(2-hydroxyarylmethyl)-Ligandprecursors  $[(N,N'$ -Bis(3,5-di-tert-butyl-2-hydroxyphenylmethyl)- $N,N'$ -dibenzylethylendiamin] 9.

**[0116]** Eine Mischung von 2,4-Di-tert-butylphenol (50 mmol),  $N,N'$ -Dibenzylethylendiamin (25 mmol) und 37% wässriges Formaldehyd (50 mmol) wurden für 2 h in refluxierendem Methanol gerührt. Die Mischung wurde auf Raumtemperatur abgekühlt und das resultierende Öl wurde von der wässrigen Schicht, welche verworfen wurde, getrennt und verdampft. Das Produkt wurde dann mit Hexan ausgefällt, filtriert und mit Hexan gewaschen, was den Ligandprecursor 9 in 40% ergab. Die spektroskopische Daten (nicht gezeigt) unterstützen die Bildung des Ligandprecursors 9.

## Beispiel 4

Synthese des Diamindi(2-hydroxyarylmethyl)-Ligandprecursors  $[(N,N'$ -Bis(3,5-di-tert-butyl-2-hydroxyphenylmethyl)- $N,N'$ -diethylethylendiamin] 10.

**[0117]** Eine Mischung von 2,4-Di-tert-butylphenol (50 mmol),  $N,N'$ -Diethylethylendiamin (25 mmol) und 37% wässriges Formaldehyd (50 mmol) wurden in refluxierendem Methanol für 2 h gerührt. Die Mischung wurde auf Raumtemperatur abgekühlt und der Feststoff wurde abfiltriert und mit Methanol gewaschen, was 10 zu 40% ergab. Die spektroskopischen Daten (nicht gezeigt) unterstützen die Bildung des Ligandprecursors 10.

## Beispiel 5

Synthese des Diamindi(2-hydroxyarylmethyl)-Ligandprecursors  $[(N,N'$ -Bis(4,5-dimethyl-2-hydroxyphenylmethyl)- $N,N'$ -dimethylethylendiamin] 11.

**[0118]** Eine Mischung von 3,4-Dimethylphenol (50 mmol),  $N,N'$ -Dimethylethylendiamin (25 mmol) und 37% wässriges Formaldehyd (50 mmol) wurden für 2 h in refluxierendem Methanol gerührt. Die Mischung wurde auf Raumtemperatur abgekühlt und der Feststoff wurde filtriert und mit Methanol gewaschen, was 11 zu 45% ergab. Die spektroskopischen Daten (nicht gezeigt) unterstützen die Bildung des Ligandprecursors 11.

## Beispiel 6

Synthese des Diamindi(2-hydroxyarylmethyl)-Ligandprecursors  $[(N,N'$ -Bis(3,5-di-tert-butyl-2-hydroxyphenylmethyl)- $N,N'$ -dimethyl-1,3-propandiamin] 12.

**[0119]** Eine Mischung von 2,4-Di-tert-butylphenol (50 mmol),  $N,N'$ -Dimethyl-1,3-propandiamin (25 mmol) und 37% wässriges Formaldehyd (50 mmol) wurden für 12 h in refluxierendem Methanol gerührt. Die Mischung wurde auf Raumtemperatur abgekühlt und der Feststoff wurde filtriert und mit Methanol gewaschen, was 12 zu 40% ergab. Die spektroskopischen Daten (nicht gezeigt) unterstützen die Bildung des Ligandprecursors 12.

## Beispiel 7

Synthese des Diamindi(2-hydroxyarylmethyl)-Ligandprecursors  $[(N,N'$ -Bis(3,5-di-tert-butyl-2-hydroxyphenylmethyl)ethylendiamin] 13.

**[0120]** Eine Mischung von 2,4-Di-tert-butylphenol (50 mmol), Ethylendiamin (25 mmol) und 37% wässriges Formaldehyd (50 mmol) wurden für 2 h in refluxierendem Methanol gerührt. Die Mischung wurde auf Raumtemperatur abgekühlt und der Feststoff wurde abfiltriert und mit Methanol gewaschen, was 13 zu 45% ergab. Die spektroskopischen Daten (nicht gezeigt) unterstützen die Bildung des Ligandprecursors 13.

## Beispiel 8

Synthese des Diamindi(2-hydroxyarylmethyl)-Ligandprecursors  $[(N,N'$ -Bis(3,5-di-tert-butyl-2-hydroxyphenylmethyl)-1,3-propandiamin] 14.

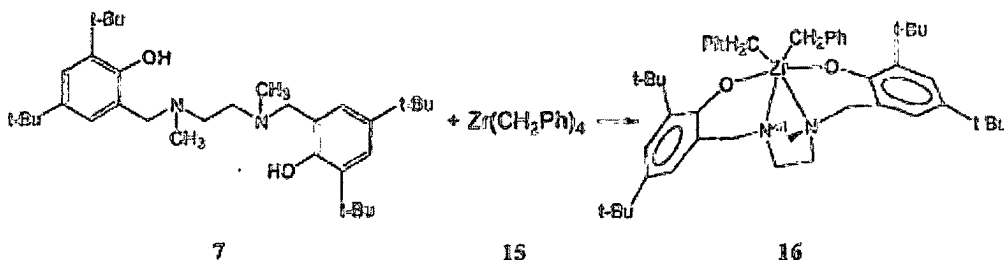
**[0121]** Eine Mischung von 2,4-Di-tert-butylphenol (50 mmol), Propan-1,3-diamin (25 mmol) und 37% wässriges Formaldehyd (50 mmol) wurden für 2 h in refluxierendem Methanol gerührt. Die Mischung wurde auf Raumtemperatur abgekühlt und der Feststoff wurde filtriert und mit Methanol gewaschen, was 14 zu 10% er-

gab. Die spektroskopischen Daten (nicht gezeigt) unterstützen die Bildung des Ligandprecursors 14.

## Beispiel 9

Synthese des Diamindiphenolatpräkatalysators  $[(N,N'$ -Bis(3,5-di-tert-butyl-2-hydroxyphenylmethyl)- $N,N'$ -dimethylethylendiamin}zirkoniumdibenzyl] 16

**[0122]** Eine Lösung des Diamindi(2-hydroxyarylmethyl)-Ligandprecursors  $[(N,N'$ -Bis(3,5-di-tert-butyl-2-hydroxyphenylmethyl)- $N,N'$ -dimethylethylendiamin] 7, wie gemäß Beispiel 1 hergestellt, (200 mg, 0.38 mmol) in Toluol (10 ml) wurden tropfenweise zu einer Lösung von Tetra(benzyl)zirkonium 15 (0.38 mmol) in Toluol (10 ml) bei Raumtemperatur unter Stickstoffgasinertatmosphäre hinzugegeben. Die Reaktionsmischung wurde dann auf 65°C erwärmt und für 2 Stunden gerührt. Das Toluol wurde aus der Reaktionsmischung unter geringem Druck entfernt, um reinen Präkatalysator 16 quantitativ als einen gelben Feststoff zu ergeben.



Spektroskopische Daten des Präkatalysators 16.  $^1\text{NMR}$  (200 MHz,  $\text{C}_6\text{D}_6$ )  $\delta$  7.62 (d,  $J = 2.4$  Hz, 2H), 7.20 (d,  $J = 7.5$  Hz, 4H), 7.04 (t,  $J = 7.4$  Hz, 4H), 6.77 (t,  $J = 7.2$  Hz, 2H), 6.76 (d,  $J = 2.2$  Hz, 2H), 3.69 (d,  $J = 13.7$  Hz, 2H,  $\text{CH}_2$  AX System 1), 2.82 (d,  $J = 10.3$ , 2H,  $\text{CH}_2$  AX System 2), 2.63 (d,  $J = 9.3$  Hz, 2H,  $\text{CH}_2$  AX System 3), 2.43 (d,  $J = 10.0$  Hz, 2H,  $\text{CH}_2$  AX System 2), 2.36 (d,  $J = 13.6$  Hz, 2H,  $\text{CH}_2$  AX System 1), 1.82 (s, 18H,  $\text{CH}_3$ ), 1.70 (s, 6H,  $\text{NCH}_3$ ), 1.34 (s, 18H,  $\text{CH}_3$ ), 0.83 (d,  $J = 9.4$  Hz, 2H,  $\text{CH}_2$  AX System 3).  $^{13}\text{C}$  NMR (126 MHz,  $\text{C}_6\text{D}_6$ )  $\delta$  157.7, 149.2, 141.9, 138.1, 129.3, 127.9, 126.1, 125.8, 125.0, 122.2, 69.6 ( $\text{CH}_2$ ), 65.0 ( $\text{CH}_2$ ), 53.5 ( $\text{CH}_3$ ), 46.3 ( $\text{CH}_2$ ), 36.4 ( $\text{C}(\text{CH}_3)_3$ ), 35.1 ( $\text{C}(\text{CH}_3)_3$ ), 32.6 ( $\text{C}(\text{CH}_3)_3$ ), 31.1 ( $\text{C}(\text{CH}_3)_3$ ).

**[0123]** Die spektroskopischen Daten des Präkatalysators 16 stimmen mit einem einzelnen Stereoisomer überein, das symmetrisch verwandte Phenolatringe, zwei symmetrisch verwandte Benzylgruppen und drei AX Spinsysteme aufweist. Dies deutet auf einen Chelat mit  $\text{C}_2$  Symmetrie auf der NMR Zeitskala hin.

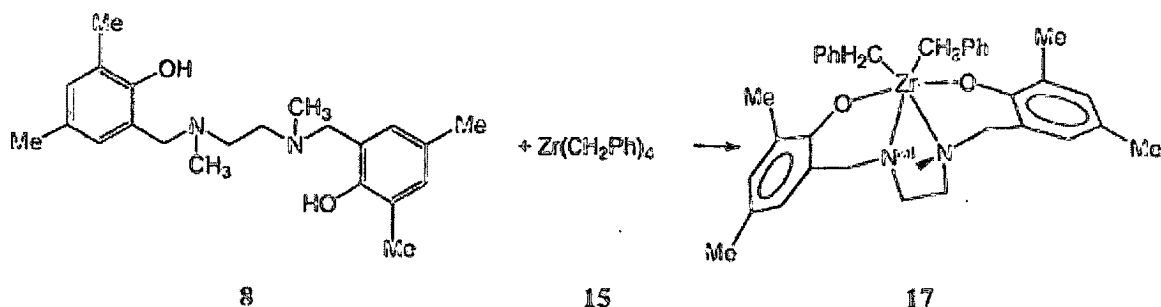
**[0124]** (Röntgen)-Kristallographische Daten für den Präkatalysator  $2(\text{C}_{48}\text{H}_{68}\text{N}_2\text{O}_2\text{Zr}) \cdot 3(\text{C}_7\text{H}_8)$  16:  $M = 1868.93$ , monokline Raumgruppe  $\text{P2}_1/\text{c}$ ,  $a = 31.0080$  (5),  $b = 11.9200$  (3),  $c = 29.7910$  (7) Å,  $\beta = 107.994$  (1)°,  $U = 10472.6$  (4) Å<sup>3</sup>,  $Z = 4$ ,  $D_c = 1.185$  g cm<sup>-3</sup>  $\mu(\text{Mo-K}\alpha) = 0.252$  mm<sup>-1</sup>,  $T = 115$  K, Enraf-Nonius Kappa-CCD, 19001 rReflexion wurde gemessen ( $R_{\text{int}} = 0.000$ ). Die Endverfeinerung konvergierte bei  $R_1 = 0.0493$  and  $wR_2 = 0.1157$  zur Beobachtung mit  $[I > 2\sigma(I)]$  und  $R_1 = 0.0852$  and  $wR_2 = 0.1323$  für alle Daten.

**[0125]** Die (Röntgen)-Kristallographischen Daten unterstützen die spektroskopischen Daten, was auf einen Komplex mit einer  $\text{C}_2$  Symmetrie hindeutet. Die Röntgenstruktur des Präkatalysators  $[(2,4\text{-Di-t-Bu-Ar-O})\text{CH}_2\text{-N}(\text{CH}_3)_2\text{-(CH}_2)_2\text{-Zr}(\text{CH}_2\text{Ph})_2$  16, in [Fig. 1](#) gezeigt, deutet auf eine Struktur hin, die einen mononuklearen Zirkoniumchelate mit einer leicht fehlgeordneten oktahedralen Geometrie, einschließlich zweier koordinativer Bindungen zwischen Zr und jedem der zwei Stickstoffatome aufweist. Die zwei Benzylgruppen sind in einer cis Konfiguration, wie für die Alpha-Olefinpolymerisationskatalyse erforderlich.

## Beispiel 10

Synthese des Diamindiphenolatpräkatalysators  $[(N,N'$ -Bis(3,5-dimethyl-2-hydroxyphenylmethyl)- $N,N'$ -dimethylethylendiamin}zirkoniumdibenzyl] 17

**[0126]** Eine Lösung des Diamindi(2-hydroxyarylmethyl)-Ligandprecursors  $[(2,4\text{-Di-Me-Ar-O})\text{CH}_2\text{-N}(\text{CH}_3)_2\text{-(CH}_2)_2$  8, wie gemäß Beispiel 2 2 synthetisiert, (135 mg, 0.38 mmol) in Toluol (10 ml) wurde tropfenweise zu einer Lösung von Tetra(benzyl)zirkonium 15 (0.38 mmol) in Toluol (10 ml) bei Raumtemperatur unter Stickstoffgasinertatmosphäre hinzugegeben. Die Reaktionsmischung wurde dann auf 65°C erwärmt und für 2 h gerührt. Das Toluol wurde aus der Reaktionsmischung unter verringertem Druck entfernt, um reinen Präkatalysator 17 quantitativ als einen gelben Feststoff zu ergeben.

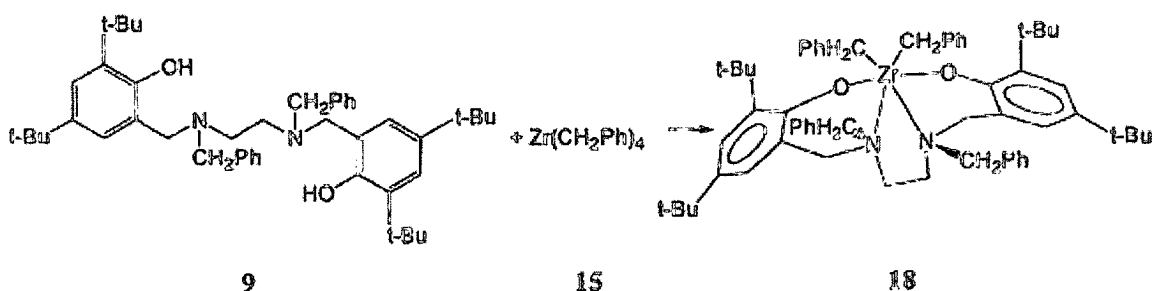


Spektroskopische Daten des Präkatalysators 17.  $^1\text{H}$  NMR (200 MHz,  $\text{C}_6\text{D}_6$ )  $\delta$  7.12 (m, 8H), 6.96 (d,  $J = 1.3$  Hz, 2H), 6.87 (t,  $J = 7.0$  Hz, 2H), 6.42 (d,  $J = 1.3$  Hz, 2H), 3.95 (d,  $J = 13.6$  Hz, 2H,  $\text{CH}_2$  AX System 1), 2.51 (d,  $J = 9.1$  Hz, 2H,  $\text{CH}_2$  AX System 2), 2.43 (s, 6H,  $\text{CH}_3$ ), 2.34 (d,  $J = 14.0$  Hz, 2H,  $\text{CH}_2$  AX System 1), 2.32 (d,  $J = 11.5$  Hz, 2H,  $\text{CH}_2$  AX System 3), 2.21 (s, 6H,  $\text{CH}_3$ ), 2.12 (d,  $J = 10.9$  Hz, 2H,  $\text{CH}_2$  AX System 3), 1.73 (s, 6H,  $\text{CH}_3$ ), 0.81 (d,  $J = 9.0$ , 2H,  $\text{CH}_2$  AX System 2).  $^{13}\text{C}$  NMR (126 MHz,  $\text{C}_6\text{D}_6$ )  $\delta$  157.0, 147.7, 132.4, 129.7, 129.3, 129.1, 127.3, 127.1, 125.2, 122.9, 69.6 ( $\text{CH}_2$ ), 64.2 ( $\text{CH}_2$ ), 63.5 ( $\text{CH}_2$ ), 53.6 ( $\text{CH}_2$ ), 45.0 ( $\text{CH}_3$ ), 21.4 ( $\text{CH}_3$ ), 17.9 ( $\text{CH}_3$ ).

## Beispiel 11

Synthese des Diamindiphenolatpräkatalysators  $[\{\text{N},\text{N}'\text{-Bis}(3,5\text{-di-tert-butyl-2-hydroxyphenylmethyl})\text{-N},\text{N}'\text{-dibenzylethylendiamin}\}\text{zirkoniumdibenzyl}]$  18.

**[0127]** Eine Lösung des Diamindi(2-hydroxyarylmethyl)-Ligandprecursors  $[(2,4\text{-Di-t-Bu-Ar-O})\text{CH}_2\text{-N}(\text{CH}_2\text{Ph})_2\text{-(CH}_2)_2]$  9, wie gemäß Beispiel 3 synthetisiert, (257 mg, 0.38 mmol) in Toluol (10 ml) wurde tropfenweise zu einer Lösung von Tetra(benzyl)zirkonium 15 (0.38 mmol) in Toluol (10 ml) bei Raumtemperatur unter Stickstoffgasinertatmosphäre hinzugegeben. Die Reaktionsmischung wurde dann auf  $65^\circ\text{C}$  erwärmt und für 2 Stunden gerührt. Das Toluol wurde aus der Reaktionsmischung unter verringertem Druck entfernt, um reinen Präkatalysator 18 quantitativ als einen gelben Feststoff zu ergeben.



**[0128]** Die spektroskopischen Daten (nicht gezeigt) unterstützen die Bildung des Präkatalysators 18.

## Beispiel 12

Synthese des Diamindiphenolatpräkatalysators  $[\{\text{N},\text{N}'\text{-Bis}(3,5\text{-di-tert-butyl-2-hydroxyphenylmethyl})\text{-N},\text{N}'\text{-diethylethylendiamin}\}\text{zirkoniumdibenzyl}]$  19.

**[0129]** Eine Lösung des Diamindi(2-hydroxyarylmethyl)-Ligandprecursors  $[(2,4\text{-Di-t-Bu-Ar-O})\text{CH}_2\text{-N}(\text{CH}_2\text{CH}_3)_2\text{-(CH}_2)_2]$  10, wie gemäß Beispiel 4 synthetisiert, (210 mg, 0.38 mmol) in Toluol (10 ml) wurde tropfenweise zu einer Lösung von Tetra(benzyl)zirkonium 15 (0.38 mmol) in Toluol (10 ml) bei Raumtemperatur unter Stickstoffgasinertatmosphäre hinzugegeben. Die Reaktionsmischung wurde dann auf  $65^\circ\text{C}$  erwärmt und für 2 Stunden gerührt. Das Toluol wurde aus der Reaktionsmischung unter verringertem Druck entfernt, um reinen Präkatalysator 19 quantitativ als einen gelben Feststoff zu ergeben.

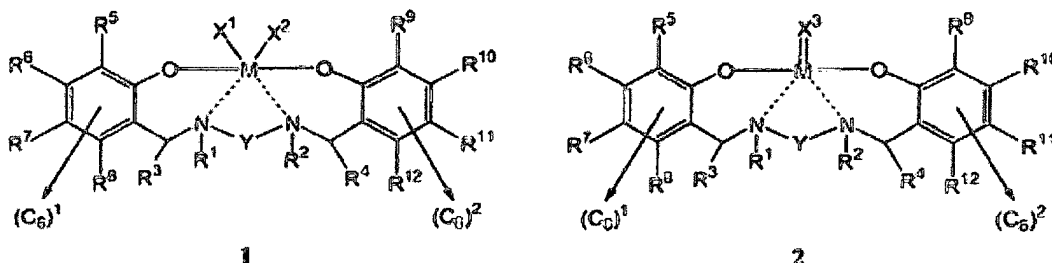
**[0130]** Die spektroskopischen Daten (nicht gezeigt) unterstützen die Bildung des Präkatalysators 19.



schrieben worden ist, ist es offensichtlich, dass viele Alternativen, Modifikationen und Variationen dem Durchschnittsfachmann offensichtlich sein werden. Entsprechend ist es beabsichtigt, all diese Alternativen, Modifikationen und Variationen, die in den breiten Umfang der angehängten Ansprüche fallen, umfasst sind.

### Patentansprüche

1. Eine Verbindung mit einer allgemeinen Struktur, ausgewählt aus der Gruppe, die aus der Struktur 1 und Struktur 2 besteht:



worin in jeder Struktur 1 und Struktur 2:

jede einzelne durchgezogene Linie eine kovalente Bindung darstellt;

jede doppelte durchgezogene Linie eine Bindung mit variierenden Graden der Kovalenz darstellt;

jede gestrichelte Linie eine Bindung mit einem variierenden Grad der Kovalenz und einem variierenden Grad der Koordination darstellt;

M ein Metallatom ist, das an jedes O Sauerstoffatom kovalent gebunden ist und mit variierenden Graden der Kovalenz und Koordination an jedes N Stickstoffatom gebunden ist;

X<sup>1</sup> und X<sup>2</sup> jeweils ein univalenter anionischer Ligand ist, der an das Metallatom kovalent gebunden ist;

X<sup>3</sup> ein einzelner anionischer Ligand ist, der an das Metallatom kovalent gebunden ist;

R<sup>1</sup> und R<sup>2</sup> jeweils ein univalentes Radikal ist, das an ein unterschiedliches der N Stickstoffatome kovalent gebunden ist;

R<sup>3</sup> ein univalentes Radikal ist, das an das C Kohlenstoffatom der -CHR<sup>3</sup>- der (C<sub>6</sub>)<sup>1</sup>-CHR<sup>3</sup>-N-Verknüpfungs-Einheit kovalent gebunden ist;

R<sup>4</sup> ein univalentes Radikal ist, das an das C Kohlenstoffatom der -N-CHR<sup>4</sup>-(C<sub>6</sub>)<sup>2</sup>-Verknüpfungs-Einheit kovalent gebunden ist;

jedes R<sup>5</sup> bis R<sup>8</sup> ein univalentes Radikal ist, das an ein unterschiedliches der C Kohlenstoffatome der ersten aromatischen Gruppe (C<sub>6</sub>)<sup>1</sup> kovalent gebunden ist;

jedes R<sup>9</sup> bis R<sup>12</sup> ein univalentes Radikal ist, das an ein unterschiedliches der C Kohlenstoffatome der zweiten aromatischen Gruppe (C<sub>6</sub>)<sup>2</sup> kovalent gebunden ist; und

Y ein divalentes Radikal ist, das an beide der N Stickstoffatome kovalent gebunden ist und zwischen ihnen verknüpft.

2. Eine Verbindung einer allgemeinen Formel, ausgewählt aus der Gruppe, die aus folgendem besteht:

$[(\text{OR}^5\text{R}^6\text{R}^7\text{R}^8(\text{C}_6)_1(\text{CHR}^3)\text{NR}^1\text{YNR}^2(\text{CHR}^4)(\text{C}_6)_2\text{R}^9\text{R}^{10}\text{R}^{11}\text{R}^{12}\text{O})\text{MX}^1\text{X}^2]$  und

$[(\text{OR}^5\text{R}^6\text{R}^7\text{R}^8(\text{C}_6)_1(\text{CHR}^3)\text{NR}^1\text{YNR}^2(\text{CHR}^4)(\text{C}_6)_2\text{R}^9\text{R}^{10}\text{R}^{11}\text{R}^{12}\text{O})\text{MX}^3]$  wobei in jeder allgemeinen Formel:

M, X<sup>1</sup>, X<sup>2</sup>, X<sup>3</sup>, R<sup>1</sup>, R<sup>2</sup>, R<sup>3</sup>, R<sup>4</sup>, R<sup>5</sup> bis R<sup>8</sup>, R<sup>9</sup> bis R<sup>12</sup> und Y die in Anspruch 1 gegebene Definition haben.

3. Die Verbindung gemäß Anspruch 1 und 2, wobei das Metallatom ein Übergangsmetallatom ist.

4. Die Verbindung aus Anspruch 1 und 2, wobei das Übergangsmetallatom aus der Gruppe ausgewählt wird, bestehend aus Zirkonium, Hafnium, Titan und einem Lanthaniden.

5. Die Verbindung gemäß Anspruch 1 und 2, wobei X<sup>1</sup> und X<sup>2</sup> jeweils aus der Gruppe ausgewählt werden, bestehend aus einem Halogenid, einem Hydrid, einem gesättigten Hydrocarbyl, einem ungesättigten Hydrocarbyl, einem Alkoxid, einem Aryloxid, einem Dialkylamid und einem Arylamid.

6. Die Verbindung gemäß Anspruch 1 und 2, wobei X<sup>3</sup> aus der Gruppe ausgewählt wird, bestehend aus einem einzelnen univalenten anionischen Liganden und einem einzelnen divalenten anionischen Liganden, der an das Metallatom über eine Bindung kovalent gebunden ist, ausgewählt aus der Gruppe, die aus einer Einzelbindung und einer Doppelbindung besteht, wobei X<sup>3</sup> aus der Gruppe ausgewählt wird, bestehend aus einem cyclometalliertem Hydrocarbyl und einem Radikal, wobei das Radikal aus der Gruppe ausgewählt wird, bestehend aus einem Alkylradikal und einem Alkyldenradikal.

7. Die Verbindung gemäß Anspruch 1 und 2, wobei R<sup>1</sup> und R<sup>2</sup> jeweils aus der Gruppe ausgewählt werden, bestehend aus einem Wasserstoffradikal, einem Hydrocarbylradikal und einem Trimethylsilylradikal.
8. Die Verbindung gemäß Anspruch 1 und 2, wobei R<sup>3</sup> und R<sup>4</sup> jeweils aus der Gruppe ausgewählt werden, bestehend aus einem Wasserstoffradikal, einem Hydrocarbylradikal und einem Benzylradikal.
9. Die Verbindung gemäß Anspruch 1 und 2, wobei R<sup>5</sup> bis R<sup>8</sup> jeweils aus der Gruppe ausgewählt werden, bestehend aus einem Wasserstoffradikal, einem Hydrocarbylradikal und einem Alkoxidadikal.
10. Die Verbindung gemäß Anspruch 1 und 2, wobei R<sup>9</sup> bis R<sup>12</sup> jeweils aus der Gruppe ausgewählt werden, bestehend aus einem Wasserstoffradikal, einem Hydrocarbylradikal und einem Alkoxidadikal.
11. Die Verbindung gemäß Anspruch 1 und 2, wobei Y aus der Gruppe ausgewählt wird, bestehend aus einem Dihydrocarbylradikal und einem Cycloalkandiyradikal.
12. Die Verbindung gemäß Anspruch 1 und 2, wobei eine bestimmte Form der allgemeinen Struktur aus der Gruppe ausgewählt wird, bestehend aus [N,N'-bis(3,5-(di-tert-butyl-2-hydroxyphenylmethyl)-N,N'-dimethylethyldiamin]zirconiumdibenzyl], [N,N'-bis(3,5-dimethyl-2-hydroxyphenylmethyl)-N,N'-dimethylethyldiamin]-zirconium-dibenzyl], [N,N'-bis(3,5-di-tert-butyl-2-hydroxyphenylmethyl)-N,N'-dibenzylethyldiamin]-zirconium-dibenzyl] und [N,N'-bis(3,5-di-tert-butyl-2-hydroxyphenylmethyl)-N,N'-diethylethyldiamin]-zirconium-dibenzyl].
13. Die Verbindung gemäß Anspruch 1 und 2, synthetisiert aus einem allgemeinen Diamin-di(2-hydroxyaryllmethyl)-Ligandprecursor, der zwei Hydroxyarylringe aufweist, wobei jeder der zwei Hydroxyarylringe eine Vielfalt von Substituenten einschließt.
14. Die Verbindung gemäß Anspruch 13, wobei bei dem allgemeinen Ligandprecursor einige der Substituenten von jedem der zwei Hydroxyarylringe jeweils ein univalentes Radikal sind, die an jeden der zwei Hydroxyarylringe kovalent gebunden sind, wobei die Substituenten aus der Gruppe ausgewählt werden, bestehend aus einem Wasserstoffradikal, einem Hydrocarbylradikal und einem Alkoxidadikal.
15. Die Verbindung gemäß Anspruch 13, wobei bei dem allgemeinen Ligandprecursor die zwei Hydroxyarylringe durch eine Verknüpfungs-Gruppe -CHR<sup>3</sup>-NR<sup>1</sup>-Y-NR<sup>2</sup>-CHR<sup>4</sup>- verbunden werden, wobei R<sup>1</sup> und R<sup>2</sup> jeweils ein univalentes Radikal sind, die an ein unterschiedliches der N Stickstoffatome kovalent gebunden sind, wobei R<sup>1</sup> und R<sup>2</sup> jeweils aus der Gruppe ausgewählt werden, bestehend aus einem Wasserstoffradikal, einem Hydrocarbylradikal und einem Trimethylsilylradikal, wobei R<sup>3</sup> ein univalentes Radikal ist, das an das C Kohlenstoffatom der -CHR<sup>3</sup>- kovalent gebunden ist, und aus der Gruppe ausgewählt wird, bestehend aus einem Wasserstoffradikal, einem Hydrocarbylradikal und einem Benzylradikal, wobei R<sup>4</sup> ein univalentes Radikal ist, das an das Kohlenstoffatom von -CHR<sup>4</sup>- kovalent gebunden ist und aus der Gruppe ausgewählt wird, bestehend aus einem Wasserstoffradikal, einem Hydrocarbylradikal und einem Benzylradikal, wobei Y ein divalent Radikal ist, das an beide der N Stickstoffatome kovalent gebunden ist und zwischen ihnen verknüpft und aus der Gruppe ausgewählt wird, bestehend aus einem Dihydrocarbylradikal und einem Cycloalkandiyradikal.
16. Die Verbindung gemäß Anspruch 11, wobei der allgemeine Ligandprecursor aus der Gruppe ausgewählt wird, bestehend aus dem Ligandprecursor [N,N'-bis(3,5-di-tert-butyl-2-hydroxyphenylmethyl)-N,N'-dimethylethyldiamin], Ligandprecursor [N,N'-bis(3,5-dimethyl-2-hydroxyphenylmethyl)-N,N'-dimethylethyldiamin], Ligandprecursor [N,N'-bis(3,5-(di-tert-butyl-2-hydroxyphenylmethyl)-N,N'-dibenzylethyldiamin], Ligandprecursor [N,N'-bis(3,5-di-tert-butyl-2-hydroxyphenylmethyl)-N,N'-diethylethyldiamin], Ligandprecursor [N,N'-bis(4,5-dimethyl-2-hydroxyphenylmethyl)-N,N'-dimethylethyldiamin], Ligandprecursor [N,N'-bis(3,5-di-tert-butyl-2-hydroxyphenylmethyl)-N,N'-dimethyl-1,3-propan-diamin], Ligandprecursor [N,N'-bis(3,5-di-tert-butyl-2-hydroxyphenylmethyl)-ethyldiamin] und dem Ligandprecursor [N,N'-bis(3,5-di-tert-butyl-2-hydroxyphenylmethyl)-1,3-propan-diamin].
17. Die Verbindung gemäß Anspruch 1 und 2, verwendet als eine Komponente für die katalytische Polymerisation eines Alphaolefinmonomers, wobei die Komponente aus der Gruppe ausgewählt wird, bestehend aus einem Präkatalysator, der durch einen Cokatalysator für die katalytische Polymerisation des Alphaolefinmonomers aktiviert wird, und einem Katalysator für die katalytische Polymerisation des Alphaolefinmonomers.
18. Die Verbindung gemäß Anspruch 1 und 2, verwendet als eine Komponente für die taktische katalytische Polymerisation eines Alphaolefinmonomers, ein katalytisches Polymerisationsreaktionssystem einschließ-

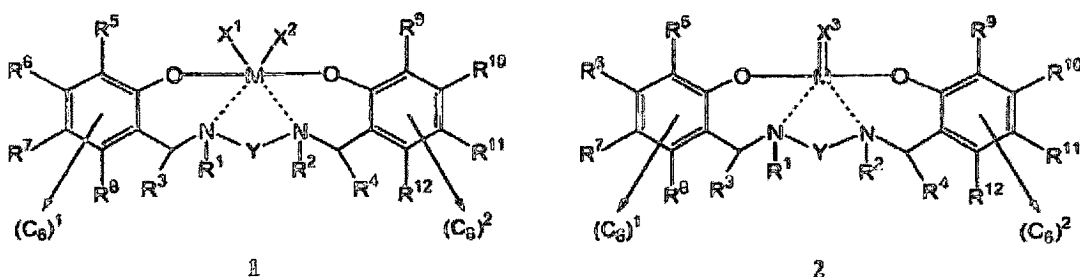
ßend, ausgewählt aus der Gruppe, die aus einem nicht-lebenden katalytischen Polymerisationsreaktionssystem und einem lebenden katalytischen Polymerisationsreaktionssystem besteht, wobei die Komponente aus der Gruppe ausgewählt wird, bestehend aus einem Präkatalysator, der durch einen Cokatalysator für die katalytische Polymerisation des Alphaolefinmonomers aktiviert wird, und einem Katalysator für die katalytische Polymerisation des Alphaolefinmonomers, zum Herstellen eines taktischen Poly(alphaolefin)produkts.

19. Die Verbindung gemäß Anspruch 1 und 2, verwendet als eine Komponente für die taktische katalytische Polymerisation eines Alphaolefinmonomers, ein katalytisches Polymerisationsreaktionssystem einschließlich, das eine Art von chemischem Reaktor aufweist, ausgewählt aus der Gruppe, die aus einem chemischen Reaktor mit kontinuierlichem Fluss, einem chemischen Batchreaktor und einem chemischen Plug-Flow-Reaktor besteht, wobei die Größe des chemischen Reaktors aus der Gruppe ausgewählt wird, bestehend aus einem chemischen Laborreaktor im Mikromaßstab, einem chemischen Reaktor im Produkt/Prozess-Entwicklungsmaßstab und einem kommerziellen chemischen Reaktor im Großmaßstab.

20. Die Verbindung gemäß Anspruch 1 und 2, verwendet als eine Komponente für die taktische katalytische Polymerisation eines Alphaolefinmonomers, ein katalytisches Polymerisationsreaktionssystem einschließlich, das eine Art von chemischem Prozess aufweist, ausgewählt aus der Gruppe, die aus einem chemischen Prozess mit kontinuierlichem Fluss, einem chemischen Batchprozess und einem chemischen Plug-Flow-Prozess besteht, wobei die Größe des chemischen Prozesses aus der Gruppe ausgewählt wird, bestehend aus einem chemischen Laborprozess im Mikromaßstab, einem chemischen Prozess im Produkt/Prozess-Entwicklungsmaßstab und einem kommerziellen chemischen Prozess im Großmaßstab.

21. Ein Verfahren zur katalytischen Polymerisation eines Alphaolefinmonomers, wobei das Verfahren die folgenden Schritte umfasst:

(a) Bereitstellen eines Diamindiphenolat-Präkatalysators mit einer allgemeinen Struktur, ausgewählt aus der Gruppe, die aus folgendem besteht:



worin in jeder Struktur 1 und Struktur 2:

jede einzelne durchgezogene Linie eine kovalente Bindung darstellt;

jede doppelte durchgezogene Linie eine Bindung mit variierenden Graden der Kovalenz darstellt;

jede gestrichelte Linie eine Bindung mit einem variierenden Grad der Kovalenz und einem variierenden Grad der Koordination darstellt;

M ein Metallatom ist, das an jedes O Sauerstoffatom kovalent gebunden ist und mit variierenden Graden der Kovalenz und Koordination an jedes N Stickstoffatom gebunden ist;

X<sup>1</sup> und X<sup>2</sup> jeweils ein univalenter anionischer Ligand ist, der an das Metallatom kovalent gebunden ist;

X<sup>3</sup> ein einzelner anionischer Ligand ist, der an das Metallatom kovalent gebunden ist;

R<sup>1</sup> und R<sup>2</sup> jeweils ein univalentes Radikal ist, das an ein unterschiedliches der N Stickstoffatome kovalent gebunden ist;

R<sup>3</sup> ein univalentes Radikal ist, das an das C Kohlenstoffatom der -CHR<sup>3</sup>- der (C<sub>6</sub>)<sup>1</sup>-CHR<sup>3</sup>-N-Verknüpfungs-Einheit kovalent gebunden ist;

R<sup>4</sup> ein univalentes Radikal ist, das an das C Kohlenstoffatom der -CHR<sup>4</sup>- der -N-CHR<sup>4</sup>-(C<sub>6</sub>)<sup>2</sup>-Verknüpfungs-Einheit kovalent gebunden ist;

jedes R<sup>5</sup> bis R<sup>8</sup> ein univalentes Radikal ist, das an ein unterschiedliches der C Kohlenstoffatome der ersten aromatischen Gruppe (C<sub>6</sub>)<sup>1</sup> kovalent gebunden ist;

jedes R<sup>9</sup> bis R<sup>12</sup> ein univalentes Radikal ist, das an ein unterschiedliches der C Kohlenstoffatome der zweiten aromatischen Gruppe (C<sub>6</sub>)<sup>2</sup> kovalent gebunden ist; und

Y ein divalentes Radikal ist, das an beide der N Stickstoffatome kovalent gebunden ist und zwischen ihnen verknüpft;

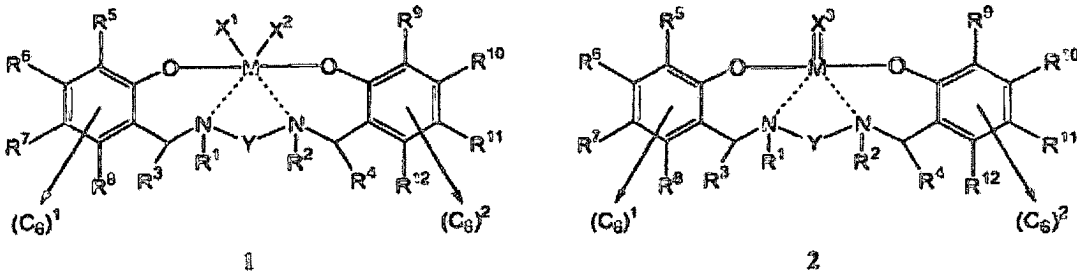
(b) Herstellen einer ersten chemischen Einheit, die eine bestimmte Form des Präkatalysators aus Schritt (a) aufweist;

(c) Bereitstellen eines Cokatalysators, der zum Aktivieren des Präkatalysators aus Schritt (a) geeignet ist;

- (d) Herstellen einer zweiten chemischen Einheit, die den Cokatalysator aus Schritt (c) aufweist;
- (e) Bilden eines katalytischen Polymerisationsreaktionssystems für die katalytische Polymerisation des Alphaolefinmonomers durch Mischen der ersten chemischen Einheit, die den Präkatalysator aufweist, mit der zweiten chemischen Einheit, die den Cokatalysator aufweist, mit dem zu polymerisierenden Alphaolefinmonomer, wobei der Cokatalysator den Präkatalysator zu einem Katalysator aktiviert, der die katalytische Polymerisation des Alphaolefinmonomers zum Herstellen wenigstens einer Art von Poly(alphaolefin)produkt bewirkt;
- (f) Beenden der katalytischen Polymerisation des Alphaolefinmonomers; und
- (g) Isolieren der wenigstens einen Art von Poly(alphaolefin)produkt.

22. Ein Verfahren zur katalytischen Polymerisation eines Alphaolefinmonomers, wobei das Verfahren die folgenden Schritte umfasst:

- (a) Bereitstellen eines Diamindiphenolat-Katalysators mit einer allgemeinen Struktur, ausgewählt aus der Gruppe, die aus folgendem besteht:



worin in jeder Struktur 1 und Struktur 2:

- jede einzelne durchgezogene Linie eine kovalente Bindung darstellt;
- jede doppelte durchgezogene Linie eine Bindung mit variierenden Graden der Kovalenz darstellt;
- jede gestrichelte Linie eine Bindung mit einem variierenden Grad der Kovalenz und einem variierenden Grad der Koordination darstellt;
- M ein Metallatom ist, das an jedes O Sauerstoffatom kovalent gebunden ist und mit variierenden Graden der Kovalenz und Koordination an jedes N Stickstoffatom gebunden ist;
- X<sup>1</sup> und X<sup>2</sup> jeweils ein univalenter anionischer Ligand ist, der an das Metallatom kovalent gebunden ist;
- X<sup>3</sup> ein einzelner anionischer Ligand ist, der an das Metallatom kovalent gebunden ist;
- R<sup>1</sup> und R<sup>2</sup> jeweils ein univalentes Radikal ist, das an ein unterschiedliches der N Stickstoffatome kovalent gebunden ist;
- R<sup>3</sup> ein univalentes Radikal ist, das an das C Kohlenstoffatom der -CHR<sup>3</sup>- der (C<sub>6</sub>)<sup>1</sup>-CHR<sup>3</sup>-N-Verknüpfungs-Einheit kovalent gebunden ist;
- R<sup>4</sup> ein univalentes Radikal ist, das an das C Kohlenstoffatom der -CHR<sup>4</sup>- der -N-CHR<sup>4</sup>-(C<sub>6</sub>)<sup>2</sup>-Verknüpfungs-Einheit kovalent gebunden ist;
- jedes R<sup>5</sup> bis R<sup>8</sup> ein univalentes Radikal ist, das an ein unterschiedliches der C Kohlenstoffatome der ersten aromatischen Gruppe (C<sub>6</sub>)<sup>1</sup> kovalent gebunden ist;
- jedes R<sup>9</sup> bis R<sup>12</sup> ein univalentes Radikal ist, das an ein unterschiedliches der C Kohlenstoffatome der zweiten aromatischen Gruppe (C<sub>6</sub>)<sup>2</sup> kovalent gebunden ist; und
- Y ein divalentes Radikal ist, das an beide der N Stickstoffatome kovalent gebunden ist und zwischen ihnen verknüpft;

- (b) Herstellen einer ersten chemischen Einheit, die eine bestimmte Form des Katalysators aus Schritt (a) aufweist;

(c) Bilden eines katalytischen Polymerisationsreaktionssystems für die katalytische Polymerisation des Alphaolefinmonomers durch Mischen der ersten chemischen Einheit, die den Katalysator aufweist, mit dem zu polymerisierenden Alphaolefinmonomer, wobei der Katalysator die katalytische Polymerisation des Alphaolefinmonomers zum Herstellen wenigstens einer Art von Poly(alphaolefin)produkt bewirkt;

- (d) Beenden der katalytischen Polymerisation des Alphaolefinmonomers; und
- (e) Isolieren der wenigstens einen Art von Poly(alphaolefin)produkt.

23. Das Verfahren gemäß Anspruch 21 oder 22, wobei das Metallatom ein Übergangsmetallatom ist.

24. Das Verfahren gemäß Anspruch 21 oder 22, wobei das Übergangsmetallatom aus der Gruppe ausgewählt wird, bestehend aus Zirkonium, Hafnium, Titan und einem Lanthanoid.

25. Das Verfahren gemäß Anspruch 21 oder 22, wobei X<sup>1</sup> und X<sup>2</sup> jeweils aus der Gruppe ausgewählt werden, bestehend aus einem Halogenid, einem Hydrid, einem gesättigten Hydrocarbyl, einem ungesättigten Hy-

drocarbyl, einem Alkoxid, einem Aryloxid, einem Dialkylamid und einem Arylamid.

26. Das Verfahren gemäß Anspruch 21 oder 22, wobei  $X^3$  aus der Gruppe ausgewählt wird, bestehend aus einem einzelnen univalenten anionischen Liganden und einem einzelnen divalenten anionischen Liganden, der an das Metallatom über eine Bindung kovalent gebunden ist, ausgewählt aus der Gruppe, die aus einer Einzelbindung und einer Doppelbindung besteht, wobei  $X^3$  aus der Gruppe ausgewählt wird, bestehend aus einem cyclometalliertem Hydrocarbyl und einem Radikal, wobei das Radikal aus der Gruppe ausgewählt wird, bestehend aus einem Alkylradikal und einem Alkyldenradikal.

27. Das Verfahren gemäß Anspruch 21 oder 22, wobei  $R^1$  und  $R^2$  jeweils aus der Gruppe ausgewählt werden, bestehend aus einem Wasserstoffradikal, einem Hydrocarbylradikal und einem Trimethylsilylradikal.

28. Das Verfahren gemäß Anspruch 21 oder 22, wobei  $R^3$  und  $R^4$  jeweils aus der Gruppe ausgewählt werden, bestehend aus einem Wasserstoffradikal, einem Hydrocarbylradikal und einem Benzylradikal.

29. Das Verfahren gemäß Anspruch 21 oder 22, wobei  $R^5$  bis  $R^8$  jeweils aus der Gruppe ausgewählt werden, bestehend aus einem Wasserstoffradikal, einem Hydrocarbylradikal und einem Alkoxidradikal.

30. Das Verfahren gemäß Anspruch 21 oder 22, wobei  $R^9$  bis  $R^{12}$  jeweils aus der Gruppe ausgewählt werden, bestehend aus einem Wasserstoffradikal, einem Hydrocarbylradikal und einem Alkoxidradikal.

31. Das Verfahren gemäß Anspruch 21 oder 22, wobei Y aus der Gruppe ausgewählt wird, bestehend aus einem Dihydrocarbylradikal und einem Cycloalkandiylradikal.

32. Das Verfahren gemäß Anspruch 21 oder 22, wobei eine bestimmte Form der allgemeinen Struktur aus der Gruppe ausgewählt wird, bestehend aus [N,N'-bis(3,5-(di-tert-butyl-2-hydroxyphenylmethyl)-N,N'-dimethylethylen-diamin)-zirconium-dibenzyl], [N,N'-bis(3,5-dimethyl-2-hydroxyphenylmethyl)-N,N'-dimethylethylen-diamin)-zirconium-dibenzyl], [N,N'-bis(3,5-di-tert-butyl-2-hydroxyphenylmethyl)-N,N'-dibenzylethylen-diamin)-zirconium-dibenzyl] und [N,N'-bis(3,5-di-tert-butyl-2-hydroxyphenylmethyl)-N,N'-diethylethylen-diamin)-zirconium-dibenzyl].

33. Das Verfahren gemäß Anspruch 21 oder 22, wobei die allgemeine Struktur aus einem allgemeinen Diamin-di(2-hydroxyarylmethyl)-Ligandprecursor synthetisiert ist, der zwei Hydroxyarylringe aufweist, wobei jeder der zwei Hydroxyarylringe eine Vielfalt von Substituenten einschließt.

34. Das Verfahren gemäß Anspruch 33, wobei der allgemeine Ligandprecursor aus der Gruppe ausgewählt wird, bestehend aus dem Ligandprecursor [N,N'-bis(3,5-di-tert-butyl-2-hydroxyphenylmethyl)-N,N'-dimethylethylen-diamin], Ligandprecursor [N,N'-bis(3,5-dimethyl-2-hydroxyphenylmethyl)-N,N'-dimethylethylen-diamin], Ligandprecursor [N,N'-bis(3,5-(di-tert-butyl-2-hydroxyphenylmethyl)-N,N'-dibenzylethylen-diamin], Ligandprecursor [N,N'-bis(3,5-di-tert-butyl-2-hydroxyphenylmethyl)-N,N'-diethylethylen-diamin], Ligandprecursor [N,N'-bis(4,5-dimethyl-2-hydroxyphenylmethyl)-N,N'-dimethylethylen-diamin], Ligandprecursor [N,N'-bis(3,5-di-tert-butyl-2-hydroxyphenylmethyl)-N,N'-dimethyl-1,3-propan-diamin], Ligandprecursor [N,N'-bis(3,5-di-tert-butyl-2-hydroxyphenylmethyl)-ethylen-diamin] und dem Ligandprecursor [N,N'-bis(3,5-di-tert-butyl-2-hydroxyphenylmethyl)-1,3-propan-diamin].

35. Das Verfahren gemäß Anspruch 21 oder 22, wobei der Schritt (b) ferner das Mischen der bestimmten Form des Diamindiphenolats mit einem organischen Lösungsmittel zum Herstellen der ersten chemischen Einheit in einer Form einschließt, ausgewählt aus der Gruppe, die aus einer Suspension und einer Lösung besteht.

36. Das Verfahren gemäß Anspruch 21 oder 22, wobei der Schritt (b) ferner das Aussetzen der ersten chemischen Einheit, die die bestimmte Form des Diamindiphenolat-Präkatalysators aufweist, gegenüber einer Oberfläche eines festen Trägers zum Herstellen einer adsorbierten Form der ersten chemischen Einheit einschließt.

37. Das Verfahren gemäß Anspruch 36, wobei der feste Träger aus der Gruppe ausgewählt wird, bestehend aus einem festen Silikatträger, einem festen Aluminiumträger und einem festen Magnesiumträger.

38. Das Verfahren gemäß Anspruch 21, wobei der Schritt (d) ferner das Mischen des Cokatalysators mit einem organischen Lösungsmittel zum Herstellen der zweiten chemischen Einheit des Cokatalysators in einer Form einschließt, ausgewählt aus der Gruppe, die aus einer Suspension und einer Lösung besteht.

39. Das Verfahren gemäß Anspruch 21, wobei der Schritt (d) ferner das Aussetzen der zweiten chemischen Einheit, die den Cokatalysator aufweist, gegenüber einer Oberfläche eines festen Trägers zum Herstellen einer adsorbierten Form der zweiten chemischen Einheit des Cokatalysators einschließt.

40. Das Verfahren gemäß Anspruch 39, wobei der feste Träger aus der Gruppe ausgewählt wird, bestehend aus einem festen Silikatträger, einem festen Aluminiumträger und einem festen Magnesiumträger.

41. Das Verfahren gemäß Anspruch 21, wobei in Schritt (c) der Cokatalysator aus der Gruppe ausgewählt wird, bestehend aus einem Bor-Lewis-sauren Cokatalysator, einem Borsalz-Cokatalysator und einem Aluminiumverbindung-Cokatalysator.

42. Das Verfahren gemäß Anspruch 21, wobei der Cokatalysator aus der Gruppe ausgewählt wird, bestehend aus dem Bor-Lewis-sauren Tris(pentafluorophenyl)bor-Cokatalysator  $[B(C_6F_5)_3]$ , dem Borsalz-Cokatalysator N,N'-dimethyl-aniliniumtetrakis(pentafluorophenyl)borat  $[PhNH(CH_3)_2](B(C_6F_5)_4)$  und dem Aluminiumverbindung-Cokatalysator Methylaluminoxan [MAO].

43. Das Verfahren gemäß Anspruch 21, wobei der Schritt (e) ferner das Hinzufügen wenigstens einer anderen Art und Menge eines chemischen Reagenz zu dem katalytischen Polymerisationsreaktionssystem zum Verbessern der katalytischen Polymerisation des Alphaolefinmonomers einschließt.

44. Das Verfahren gemäß Anspruch 21, wobei der Schritt (e) ferner das Hinzufügen von Wasserstoffgas zu dem katalytischen Polymerisationsreaktionssystem zum Verbessern der Kontrolle der Molmasse der wenigstens einen Art des Poly(alphaolefin)produkts einschließt.

45. Das Verfahren gemäß Anspruch 21, wobei der Schritt (e) des katalytischen Polymerisationsreaktionssystems ein taktisches katalytisches Polymerisationsreaktionssystem ist, ausgewählt aus der Gruppe, die aus einem nicht-lebenden taktischen katalytischen Polymerisationsreaktionssystem und einem lebenden taktischen katalytischen Polymerisationsreaktionssystem besteht.

46. Das Verfahren gemäß Anspruch 21, wobei der Schritt (e) des katalytischen Polymerisationsreaktionssystems eine Art von chemischem Reaktor aufweist, ausgewählt aus der Gruppe, die aus einem chemischem Reaktor mit kontinuierlichem Fluss, einem chemischen Batchreaktor und einem chemischen Plug-Flow-Reaktor besteht, wobei die Größe des chemischen Reaktors aus der Gruppe ausgewählt wird, bestehend aus einem chemischen Laborreaktor im Mikromaßstab, einem chemischen Reaktor im Produkt/Prozess-Entwicklungsmaßstab und einem kommerziellen chemischen Reaktor im Großmaßstab.

47. Das Verfahren gemäß Anspruch 21, wobei der Schritt (e) des katalytischen Polymerisationsreaktionssystems eine Art von chemischem Prozess aufweist, ausgewählt aus der Gruppe, die aus einem chemischem Prozess mit kontinuierlichem Fluss, einem chemischen Batchprozess und einem chemischen Plug-Flow-Prozess besteht, wobei die Größe des chemischen Prozesses aus der Gruppe ausgewählt wird, bestehend aus einem chemischen Laborprozess im Mikromaßstab, einem chemischen Prozess im Produkt/Prozess-Entwicklungsmaßstab und einem kommerziellen chemischen Prozess im Großmaßstab.

48. Das Verfahren gemäß Anspruch 22, wobei der Schritt (c) ferner das Hinzufügen wenigstens einer anderen Art und Menge eines chemischen Reagenz zu dem katalytischen Polymerisationsreaktionssystem zum Verbessern der katalytischen Polymerisation des Alphaolefinmonomers einschließt.

49. Das Verfahren gemäß Anspruch 22, wobei der Schritt (c) ferner das Hinzufügen von Wasserstoffgas zu dem katalytischen Polymerisationsreaktionssystem zum Verbessern der Kontrolle der Molmasse der wenigstens einen Art des Poly(alphaolefin)produkts einschließt.

50. Das Verfahren gemäß Anspruch 22, wobei der Schritt (c) des katalytischen Polymerisationsreaktionssystems ein taktisches katalytisches Polymerisationsreaktionssystem ist, ausgewählt aus der Gruppe, die aus einem nicht-lebenden taktischen katalytischen Polymerisationsreaktionssystem und einem lebenden taktischen katalytischen Polymerisationsreaktionssystem besteht.

51. Das Verfahren gemäß Anspruch 22, wobei der Schritt (c) des katalytischen Polymerisationsreaktionssystems eine Art von chemischem Reaktor aufweist, ausgewählt aus der Gruppe, die aus einem chemischem Reaktor mit kontinuierlichem Fluss, einem chemischen Batchreaktor und einem chemischen Plug-Flow-Reaktor besteht, wobei die Größe des chemischen Reaktors aus der Gruppe ausgewählt wird, bestehend aus einem

chemischen Laborreaktor im Mikromaßstab, einem chemischen Reaktor im Produkt/Prozess-Entwicklungsmaßstab und einem kommerziellen chemischen Reaktor im Großmaßstab.

52. Das Verfahren gemäß Anspruch 22, wobei der Schritt (c) des katalytischen Polymerisationsreaktionssystems eine Art von chemischem Prozess aufweist, ausgewählt aus der Gruppe, die aus einem chemischem Prozess mit kontinuierlichem Fluss, einem chemischen Batchprozess und einem chemischen Plug-Flow-Prozess besteht, wobei die Größe des chemischen Prozesses aus der Gruppe ausgewählt wird, bestehend aus einem chemischen Laborprozess im Mikromaßstab, einem chemischen Prozess im Produkt/Prozess-Entwicklungsmaßstab und einem kommerziellen chemischen Prozess im Großmaßstab.

53. Ein Verfahren zur isotaktischen und lebenden katalytischen Polymerisation eines 1-Hexenmonomers zum Bilden eines isotaktischen Poly(1-hexen)produkts, wobei das Verfahren die folgenden Schritte umfasst:

- (a) Bereitstellen eines Diamindiphenolat-Präkatalysators  $[\{N,N'\text{-bis}(3,5\text{-di-tert-butyl-2-hydroxyphenylmethyl})\text{-}N,N'\text{-dimethylethylen-diamin}\}\text{zirconiumdibenzyl}]$ ;
- (b) Herstellen einer ersten chemischen Einheit, die den Diamindiphenolat-Präkatalysator aus Schritt (a) aufweist;
- (c) Bereitstellen des Bor-Lewis-sauren Cokatalysators  $[B(C_6F_5)_3]$ , der zum Aktivieren des Präkatalysators aus Schritt (a) geeignet ist;
- (d) Herstellen einer zweiten chemischen Einheit, die den Bor-Lewis-sauren Cokatalysator aus Schritt (c) aufweist;
- (e) Bilden eines isotaktischen und lebenden katalytischen Polymerisationsreaktionssystems für die isotaktische und lebende katalytische Polymerisation des 1-Hexenmonomers durch Mischen der ersten chemischen Einheit, die den Präkatalysator aufweist, mit der zweiten chemischen Einheit, die den Cokatalysator aufweist, mit dem zu polymerisierenden 1-Hexenmonomer, wobei der Cokatalysator den Präkatalysator zu einem Katalysator aktiviert, der die isotaktische und lebende katalytische Polymerisation des 1-Hexenmonomers zum Herstellen des isotaktischen Poly(1-hexen)produkts bewirkt;
- (f) Beenden der katalytischen Polymerisation des 1-Hexenmonomers; und
- (g) Isolieren des isotaktischen Poly(1-hexen)produkts.

54. Das Verfahren gemäß Anspruch 53, wobei der Schritt (e) der Bildung eines isotaktischen und lebenden katalytischen Polymerisationsreaktionssystems bei Raumtemperatur durchgeführt wird.

55. Das Verfahren gemäß Anspruch 54, wobei das isotaktische Poly(1-hexen)produkt zu einem Ausmaß von etwa 95% als isotaktisch, mit einem Gewichtsmittelwert der Molmasse von etwa 12.000 Gramm/Mol und einem Polydispersitätsindex von etwa 1.15 klassifizierbar ist.

56. Das Verfahren gemäß Anspruch 54, wobei der Schritt (e) des isotaktischen und lebenden katalytischen Polymerisationsreaktionssystems eine Art von chemischem Reaktor aufweist, ausgewählt aus der Gruppe, die aus einem chemischem Reaktor mit kontinuierlichem Fluss, einem chemischen Batchreaktor und einem chemischen Plug-Flow-Reaktor besteht, wobei die Größe des chemischen Reaktors aus der Gruppe ausgewählt wird, bestehend aus einem chemischen Laborreaktor im Mikromaßstab, einem chemischen Reaktor im Produkt/Prozess-Entwicklungsmaßstab und einem kommerziellen chemischen Reaktor im Großmaßstab.

57. Das Verfahren gemäß Anspruch 54, wobei der Schritt (e) des isotaktischen und lebenden katalytischen Polymerisationsreaktionssystems eine Art von chemischem Prozess aufweist, ausgewählt aus der Gruppe, die aus einem chemischem Prozess mit kontinuierlichem Fluss, einem chemischen Batchprozess und einem chemischen Plug-Flow-Prozess besteht, wobei die Größe des chemischen Prozesses aus der Gruppe ausgewählt wird, bestehend aus einem chemischen Laborprozess im Mikromaßstab, einem chemischen Prozess im Produkt/Prozess-Entwicklungsmaßstab und einem kommerziellen chemischen Prozess im Großmaßstab.

Es folgen 4 Blatt Zeichnungen

Anhängende Zeichnungen

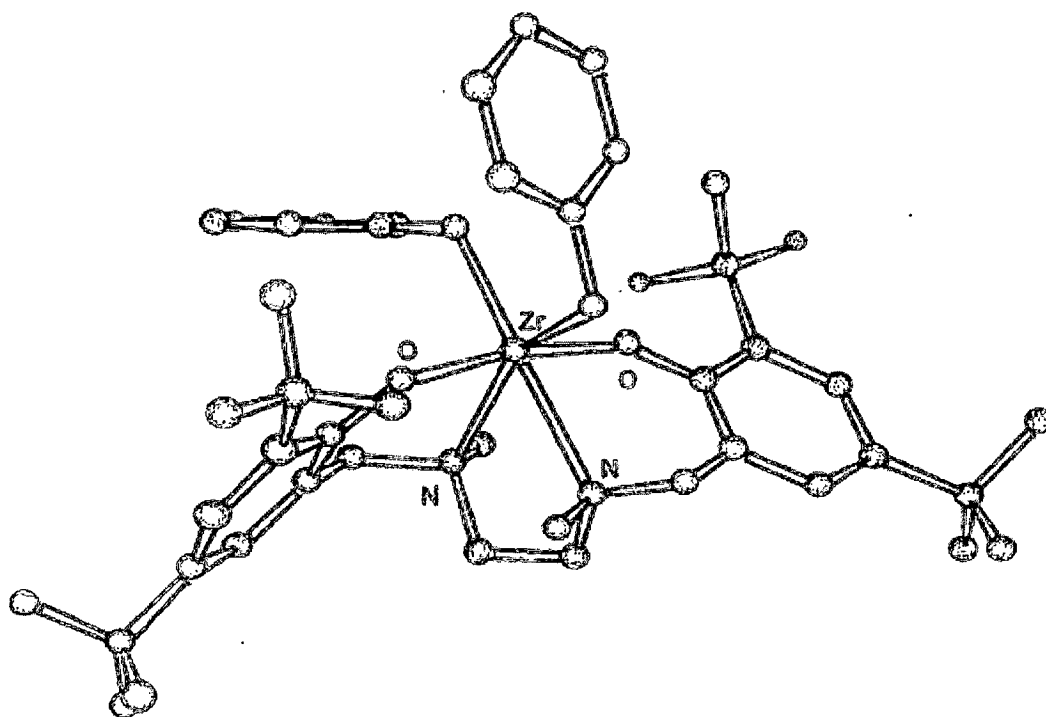


Fig. 1

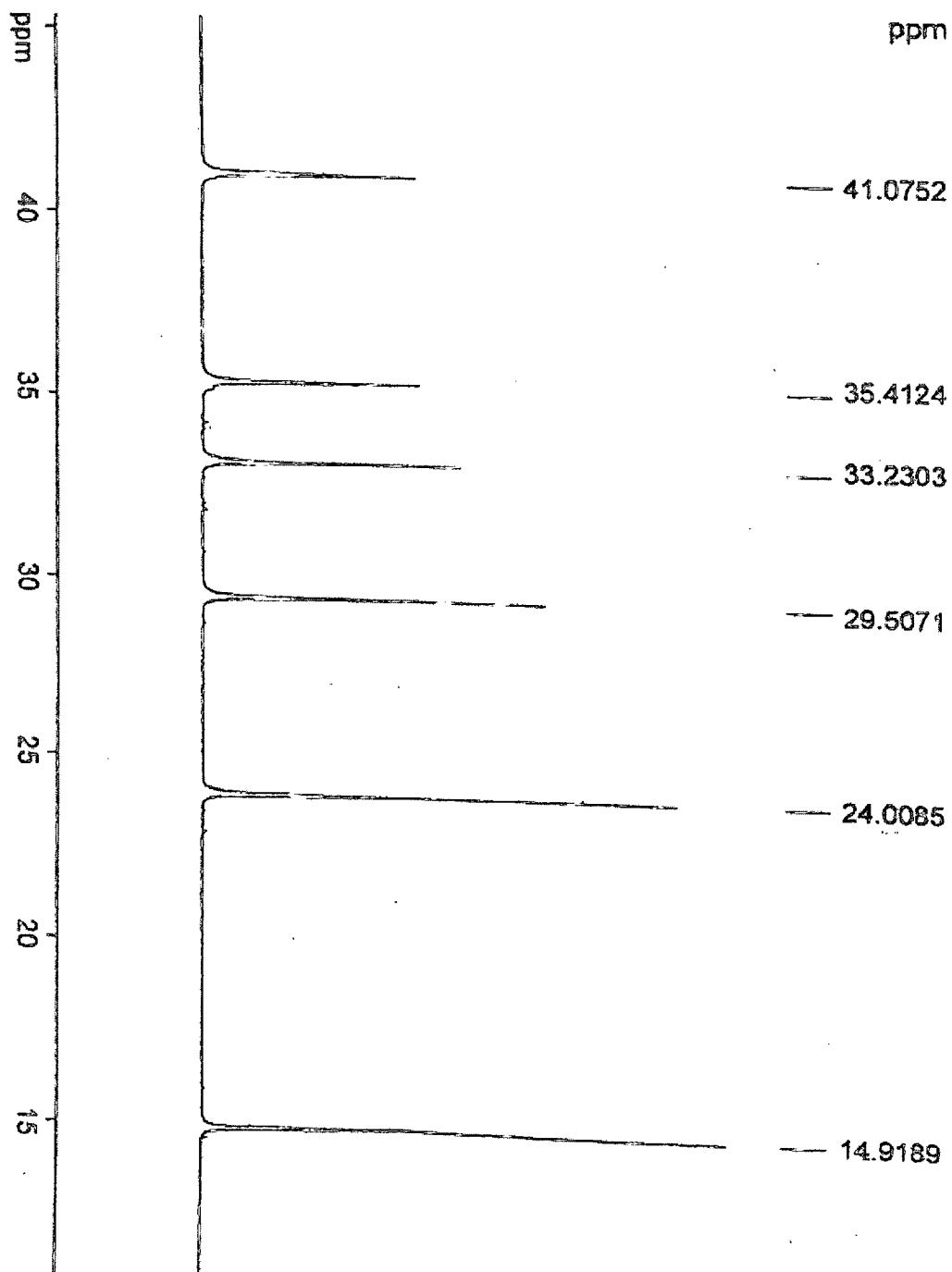


Fig. 2

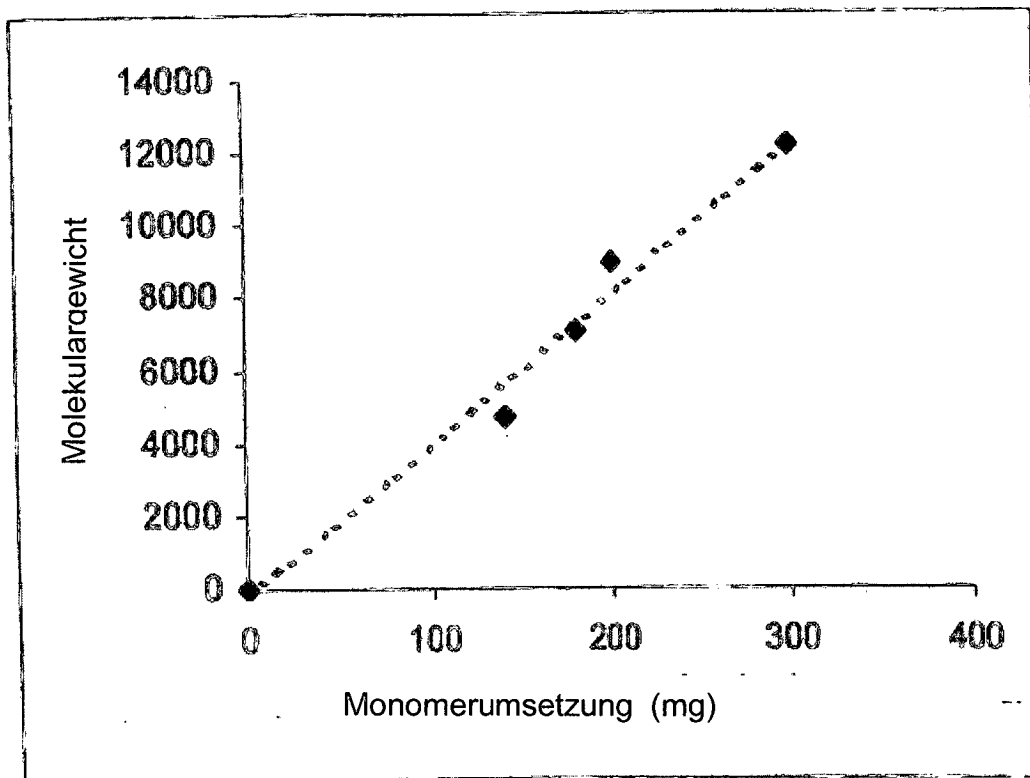


Fig. 3

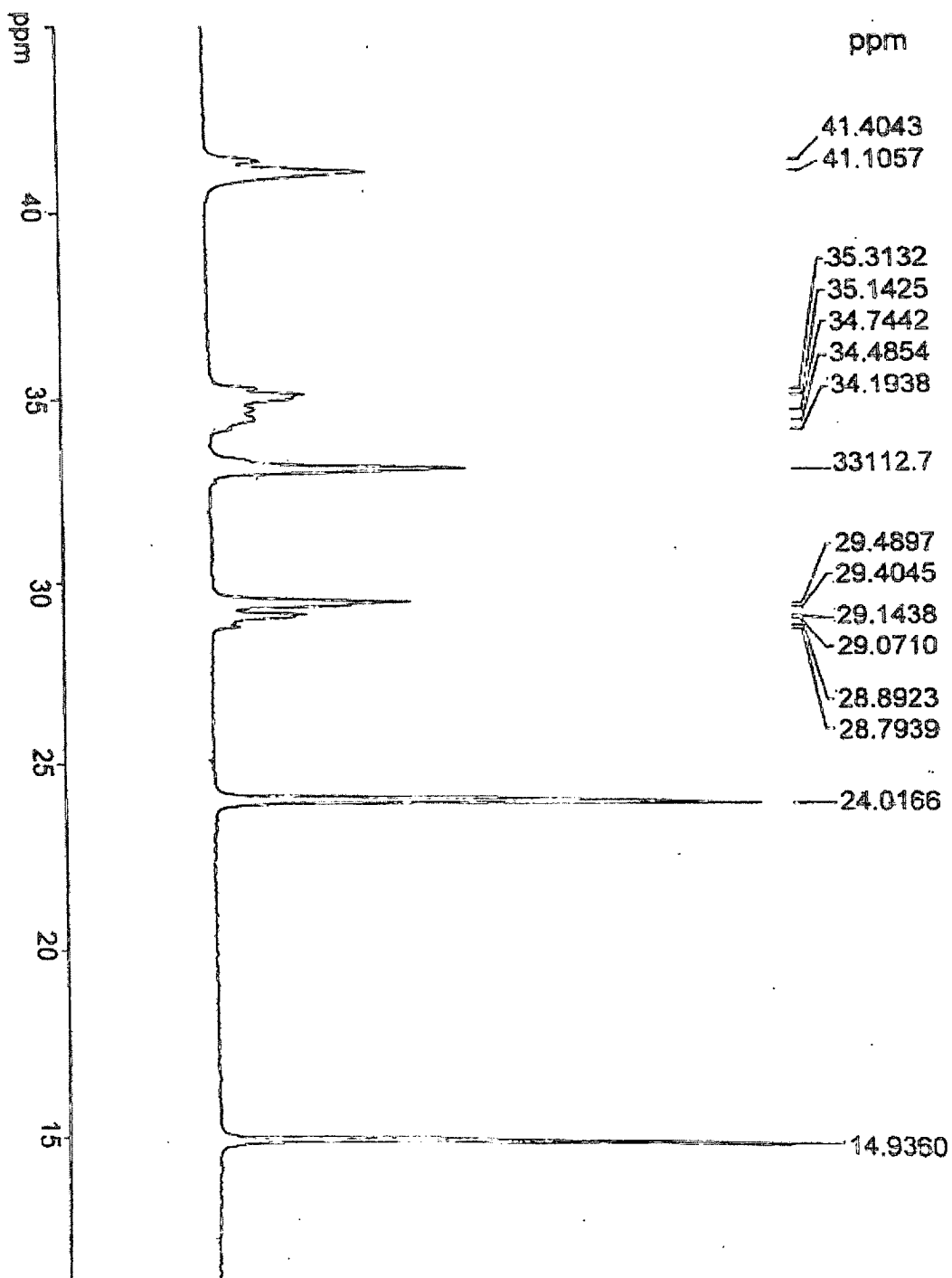


Fig. 4