



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

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

(11)



1-0049369

(51)<sup>2022.01</sup> C08F 10/06; C08F 4/654

(13) B

(21) 1-2023-01179

(22) 26/08/2021

(86) PCT/JP2021/031282 26/08/2021

(87) WO 2022/045232 A1 03/03/2022

(30) 2020-142571 26/08/2020 JP

(45) 25/07/2025 448

(43) 26/06/2023 423A

(73) MITSUI CHEMICALS, INC. (JP)

5-2, Higashi-Shimbashi 1-chome, Minato-ku, Tokyo 105-7122, Japan

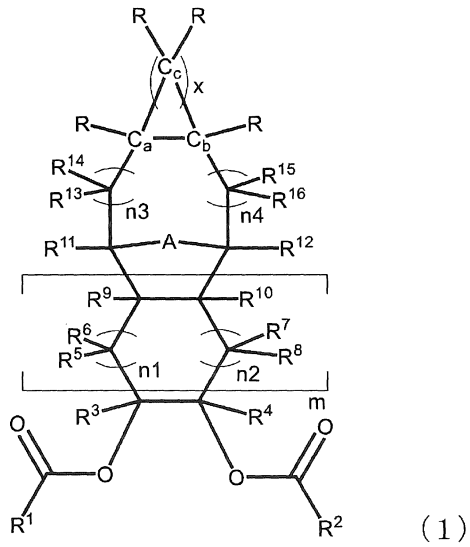
(72) KIMURA Takashi (JP); ISOGAI Makoto (JP); NAKAYAMA Yasushi (JP);  
MICHIE Kenji (JP); JINNAI Takashi (JP); YAMADA Wataru (JP); TAKANO  
Shotaro (JP); TERAOKA Hiroshi (JP); YANO Takaaki (JP); TOTANI Yoshiyuki (JP);  
MOORTHY Sunil Krzysztof (PL); NAKANO Takashi (JP).

(74) Công ty TNHH một thành viên Sở hữu trí tuệ VCCI (VCCI-IP CO.,LTD)

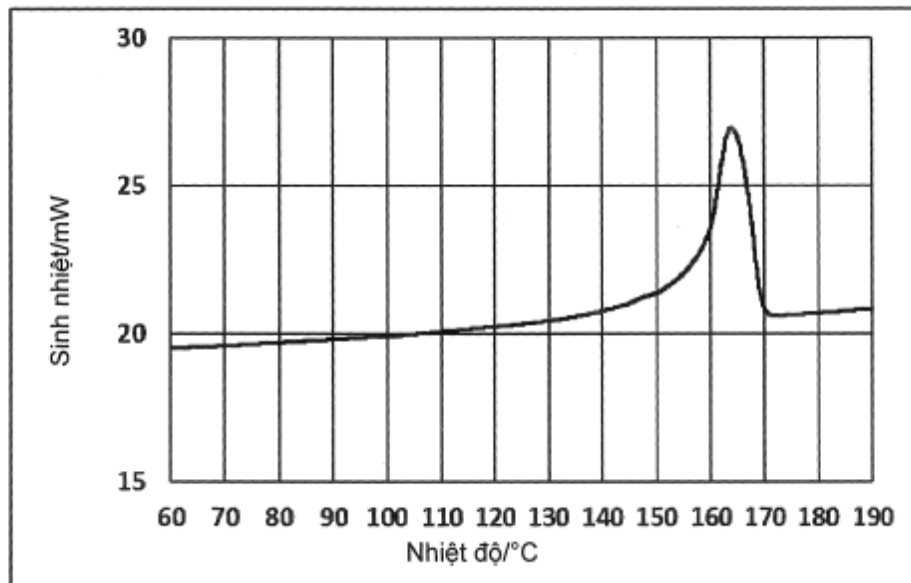
(54) THÀNH PHẦN CHẤT XÚC TÁC TITAN RẮN, CHẤT XÚC TÁC DỪNG ĐỀ  
POLYME HÓA OLEFIN, PHƯƠNG PHÁP POLYME HÓA OLEFIN VÀ  
POLYME PROPYLEN

(21) 1-2023-01179

(57) Sáng chế đề cập đến thành phần chất xúc tác titan rắn (I) chứa titan, magie, halogen, và hợp chất chứa nhóm đa este vòng (a) được thể hiện bởi công thức (1) dưới đây.



[Fig.1]



**Lĩnh vực kỹ thuật được đề cập**

[0001]

Sáng chế đề cập đến thành phần chất xúc tác titan rắn, chất xúc tác dùng để polyme hóa olefin chứa thành phần chất xúc tác titan rắn, phương pháp polyme hóa olefin liên quan đến chất xúc tác dùng để polyme hóa olefin, và polyme propylen.

**Tình trạng kỹ thuật của sáng chế**

[0002]

Cho đến nay, các chất xúc tác đã biết mà được sử dụng để sản xuất polyme olefin như là homopolyme  $\alpha$ -olefin hoặc copolyme etylen/ $\alpha$ -olefin gồm các chất xúc tác chứa hợp chất titan được mang trên magie halogenua được hoạt hóa. Dưới đây, “homopolyme hóa” và “copolyme hóa” có thể được gọi chung là “polyme hóa”.

[0003]

Chẳng hạn, các chất xúc tác chứa titan tetraclorua hoặc titan trichlorua được gọi là các chất xúc tác Ziegler-Natta, và các chất xúc tác chứa hợp chất hữu cơ kim loại và thành phần chất xúc tác titan rắn được tạo nên từ magie, titan, halogen, và chất cho điện tử được biết đến rộng rãi là các chất xúc tác dùng để polyme hóa olefin như vậy.

[0004]

Các chất xúc tác nói đến sau thể hiện hoạt tính cao trong quá trình polyme hóa các  $\alpha$ -olefin như là etylen, propylen, và 1-buten. Các polyme  $\alpha$ -olefin thu được có thể có tính đều lập thể cao.

[0005]

Trong số các chất xúc tác ở trên, được báo cáo rằng hoạt tính polyme hóa và tính lập thể đặc thù tuyệt vời được chứng minh khi chất xúc tác được tạo nên từ thành phần chất xúc tác titan rắn mang chất cho điện tử được lựa chọn từ các este axit carboxylic được thể hiện đặc trưng bởi các este axit phtalic, hợp chất nhôm-alkyl là thành phần đồng xúc tác, và hợp chất silic có ít nhất một Si-OR (trong đó R là nhóm hydrocarbon) được sử dụng đặc biệt (ví dụ, Tài liệu sáng chế 1). Ngoài các este axit phtalic, một số lượng lớn các chất cho điện tử như là các hợp chất polyete đang được nghiên cứu.

[0006]

Về nghiên cứu liên quan đến hợp chất este là chất cho điện tử, một chất xúc tác chứa este axit carboxylic có hai hoặc nhiều nhóm este (ví dụ, Tài liệu sáng chế 2) cũng được bộc lộ. Chủ đơn sáng chế này cũng báo cáo rằng hợp chất este có cấu tạo vòng cụ thể tạo ra polyolefin có phân bố trọng lượng phân tử rộng (Tài liệu sáng chế 3), theo cách rất tích cực.

[0007]

Chất xúc tác có este axit succinic được thể là chất cho điện tử được báo cáo là một chất xúc tác mà tạo ra polyolefin có phân bố trọng lượng phân tử rộng. Chủ đơn sáng chế này cũng đã báo cáo về một chất xúc tác chứa este axit polycarboxylic có cấu tạo vòng cụ thể (Tài liệu sáng chế 4).

Danh sách tài liệu trích dẫn

Tài liệu sáng chế

[0008]

Tài liệu sáng chế 1: JP57-63310A

Tài liệu sáng chế 2: JP2005-517746A

Tài liệu sáng chế 3: WO2008/010459

Tài liệu sáng chế 4: WO2006/077945

### **Bản chất kỹ thuật của sáng chế**

Vấn đề kỹ thuật

[0009]

Polypropylen (polyme propylen) là polyme của olefin có 3 nguyên tử cacbon hoặc nhiều hơn được biết có tiềm năng thể hiện tính chịu nhiệt và độ cứng có thể so sánh được với các chất dẻo kỹ thuật có mục đích thông thường trong khi có cấu tạo hydrocarbon. Polyolefin, mà là cấu tạo hydrocarbon, là vật liệu gây ra gánh nặng môi trường tương đối thấp bởi sinh ra khí độc một cách tối thiểu trong khi thiêu hủy đốt cháy hoặc tái chế nhiệt (phương pháp tái chế để thu hồi năng lượng nhiệt bằng cách đốt cháy như, ví dụ, năng lượng điện).

[0010]

Cũng đã biết rằng tính chịu nhiệt của polyme propylen phụ thuộc phần lớn vào tính đều lập thể của nó, và độ cứng bị ảnh hưởng bởi không những tính đều lập thể mà còn bởi phân bố trọng lượng phân tử. Trong khi các kỹ thuật đã phát triển mà kiểm soát tính đều lập thể đến mức độ đáng kể, mong muốn rằng với sự tiến bộ gần đây về công nghệ đúc thì các polyme có tính đều lập thể cao hơn có thể thể hiện các đặc tính vật lý ngoài mong đợi. Đồng thời việc có phân bố trọng lượng phân tử rộng hơn có thể cũng cải thiện thêm sự cân bằng đặc tính vật lý. Mặt khác, từ quan điểm về bảo vệ môi trường và kinh tế, sự phát triển các chất xúc tác thể hiện hoạt tính cao hơn được yêu cầu.

[0011]

Do đó, mục đích của sáng chế là đề xuất thành phần chất xúc tác titan rắn, chất xúc tác dùng để polyme hóa olefin, và phương pháp polyme hóa olefin mà có thể cho phép polyme olefin có tính đều lập thể cao hơn và phân bố trọng lượng phân tử tốt hơn so với các polyme thông thường sẽ được sản xuất theo cách rất tích cực.

Biện pháp giải quyết vấn đề

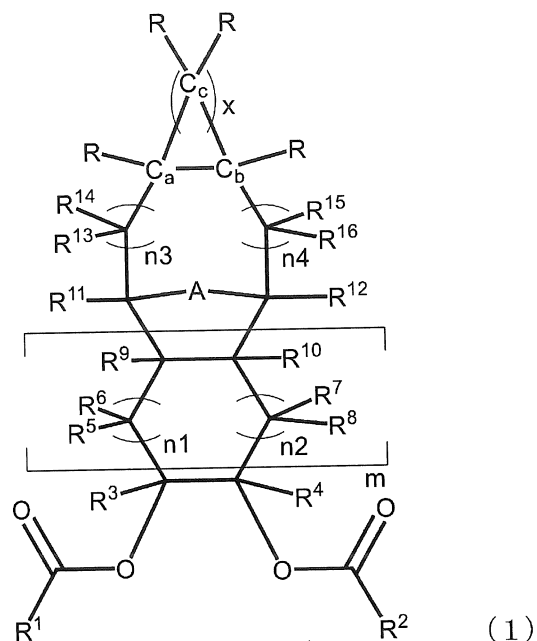
[0012]

Kết quả của việc nghiên cứu kỹ lưỡng là các tác giả sáng chế đã phát hiện ra rằng thành phần chất xúc tác titan rắn chứa hợp chất este đa hóa trị có cấu tạo vòng béo cụ thể cho phép polyme có phân bố trọng lượng phân tử rộng và tính đều lập thể rất cao được sản xuất theo cách rất tích cực, và sáng chế đã được hoàn thành. Sáng chế đề cập đến các mục [1] đến [15] dưới đây, chẳng hạn.

[0013]

[1] Thành phần chất xúc tác titan rắn (I) gồm titan, magie, halogen, và hợp chất chứa nhóm đa este vòng (a) được thể hiện bởi công thức (1) dưới đây:

[0014]



[0015]

trong đó mỗi  $n_1$  đến  $n_4$  độc lập là số nguyên từ 0 đến 2,  $m$  là 0 hoặc 1, và  $x$  là số nguyên từ 0 đến 10, với mỗi quan hệ là  $m+x \geq 1$  được đáp ứng;

$R^1$  và  $R^2$  mỗi nhóm độc lập là nhóm hydrocarbon được thế hoặc không được thế có 1 đến 20 nguyên tử cacbon;  $R^3$  đến  $R^{16}$  và  $R$  mỗi nhóm độc lập là nguyên tử hydro, nhóm hydrocarbon được thế hoặc không được thế có 1 đến 20 nguyên tử cacbon, hoặc nguyên tử halogen; nguyên tử hydro, nguyên tử cacbon, hoặc cả hai, của  $R^1$  đến  $R^{16}$  và  $R$  được thay thế tùy ý bởi ít nhất một nguyên tử được lựa chọn từ nhóm gồm có nguyên tử nitơ, nguyên tử oxy, nguyên tử phospho, nguyên tử halogen, và nguyên tử silic; và hai hoặc nhiều nhóm được lựa chọn từ  $R^3$  đến  $R^{16}$  và  $R$  được liên kết tùy ý với nhau để tạo thành vòng đơn vòng hoặc đa vòng, và các phần tử thế liền kề được liên kết trực tiếp tùy ý để tạo thành liên kết bội;

[0016]

$C_a$ ,  $C_b$ , và  $C_c$  là các nguyên tử cacbon, và trong liên kết cacbon-cacbon của cấu tạo vòng được tạo nên từ  $C_a$ ,  $C_b$ , và  $C_c$ , R được liên kết với cacbon liền kề được liên kết trực tiếp tùy ý với nhau để tạo thành liên kết bội; và

A là liên kết đơn hoặc nhóm liên kết hóa trị hai có mạch có độ dài từ 1 đến 3 nguyên tử giữa hai gốc tự do.

[0017]

[2] Thành phần chất xúc tác titan rắn (I) theo mục [1], trong đó trong công thức (1), phần trong đó hai hoặc nhiều nhóm được lựa chọn từ  $R^3$  đến  $R^{16}$  và R được liên kết với nhau để tạo thành vòng đơn vòng hoặc đa vòng là cấu tạo chứa liên kết đôi cacbon-cacbon.

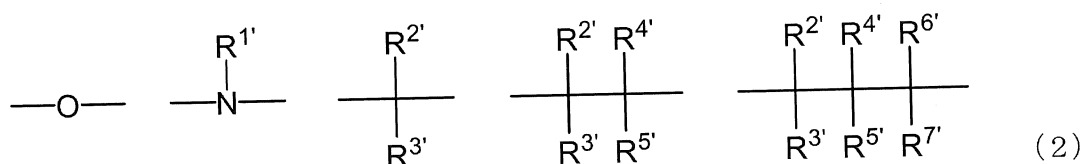
[0018]

[3] Thành phần chất xúc tác titan rắn (I) theo mục [1], trong đó trong công thức (1), phần trong đó hai hoặc nhiều nhóm được lựa chọn từ  $R^3$  đến  $R^{16}$  và R được liên kết với nhau để tạo thành vòng đơn vòng hoặc đa vòng còn chứa cấu tạo vòng đơn vòng hoặc đa vòng.

[0019]

[4] Thành phần chất xúc tác titan rắn (I) theo mục [1], trong đó A là nhóm hóa trị hai được lựa chọn từ nhóm có công thức chung (2) dưới đây:

[0020]



[0021]



trong đó  $R^1$  đến  $R^7$  mỗi nhóm độc lập là nguyên tử hydro, nhóm alkyl được thế hoặc không được thế, nhóm xycloalkyl được thế hoặc không được thế, nhóm aryl được thế hoặc không được thế, hoặc nhóm heteroaryl được thế hoặc không được thế; và  $R^2$  đến  $R^7$  được liên kết tùy ý với nhau để tạo thành vòng đơn vòng hoặc đa vòng, hoặc các phần tử thế liền kề được liên kết trực tiếp tùy ý với nhau để tạo thành liên kết bội.

[0022]

[5] Thành phần chất xúc tác titan rắn (I) theo mục [1], trong đó x là từ 2 đến 6.

[6] Thành phần chất xúc tác titan rắn (I) theo mục [1], trong đó n1 và n2 là 1.

[7] Thành phần chất xúc tác titan rắn (I) theo mục [1], trong đó n3 và n4 là 0.

[8] Thành phần chất xúc tác titan rắn (I) theo mục [1], trong đó  $R^1$  và  $R^2$  là nhóm alkyl được thế hoặc không được thế, nhóm alkenyl được thế hoặc không được thế, nhóm xycloalkyl được thế hoặc không được thế, nhóm aryl được thế hoặc không được thế, hoặc nhóm heteroaryl được thế hoặc không được thế.

[0023]

[9] Thành phần chất xúc tác titan rắn (I) theo mục [1], trong đó  $R^3$  đến  $R^{16}$  mỗi nhóm độc lập là nguyên tử hydro, nhóm alkyl được thế hoặc không được thế, nhóm alkenyl được thế hoặc không được thế, nhóm xycloalkyl được thế hoặc không được thế, nhóm xycloalkenyl được thế hoặc không được thế, nhóm alkoxy được thế hoặc không được thế, nhóm alkenyloxy được thế hoặc không được thế, nhóm xycloalkyloxy được thế hoặc không được thế, nhóm xycloalkenyloxy được thế hoặc không được thế, nhóm aryl được thế hoặc không được thế, nhóm aryloxy

được thế hoặc không được thế, nhóm heteroaryl được thế hoặc không được thế, hoặc nhóm heteroaryloxy được thế hoặc không được thế.

[0024]

[10] Thành phần chất xúc tác titan rắn (I) theo mục [1], trong đó mỗi R độc lập là nguyên tử hydro, nhóm alkyl được thế hoặc không được thế, nhóm alkenyl được thế hoặc không được thế, nhóm xycloalkyl được thế hoặc không được thế, nhóm xycloalkenyl được thế hoặc không được thế, nhóm alkoxy được thế hoặc không được thế, nhóm alkenyloxy được thế hoặc không được thế, nhóm xycloalkenyloxy được thế hoặc không được thế, nhóm aryl được thế hoặc không được thế, nhóm aryloxy được thế hoặc không được thế, nhóm heteroaryl được thế hoặc không được thế, hoặc nhóm heteroaryloxy được thế hoặc không được thế.

[0025]

[11] Chất xúc tác dùng để polyme hóa olefin, gồm: thành phần chất xúc tác titan rắn (I) theo mục [1]; và thành phần chất xúc tác hợp chất hữu cơ kim loại (II) gồm nguyên tố kim loại được lựa chọn từ Nhóm 1, Nhóm 2, và Nhóm 13 của bảng tuần hoàn.

[12] Chất xúc tác dùng để polyme hóa olefin theo mục [11], còn gồm chất cho điện tử (III).

[13] Phương pháp polyme hóa olefin, gồm polyme hóa olefin với sự có mặt của chất xúc tác dùng để polyme hóa olefin theo mục [11] hoặc [12].

[0026]

[14] Polyme propylen, có tốc độ dòng nóng chảy (MFR) được xác định dưới các điều kiện gồm nhiệt độ đo là 230°C theo tiêu chuẩn ASTM 1238, nằm trong khoảng 0,01 g/10 phút hoặc cao hơn và 1000 g/10 phút hoặc thấp hơn, và có

nhiệt độ lớn nhất ( $T_m\text{-maxv}$ ) tại đó sự hấp thụ nhiệt là không trong phân tích nhiệt quét vi sai (DSC) ở điều kiện gia nhiệt là  $10^\circ\text{C}/\text{phút}$ , là  $169,0^\circ\text{C}$  hoặc cao hơn và  $220^\circ\text{C}$  hoặc thấp hơn,

trong đó polyme propylen đáp ứng hai yêu cầu trong số các yêu cầu (p), (q), và (r) dưới đây hoặc nhiều hơn:

(p)  $M_z/M_w$  được xác định bởi sắc ký thẩm gel (GPC) là 3,50 hoặc cao hơn và 5,65 hoặc thấp hơn;

(q) chênh lệch giữa  $M_w/M_n$  và  $M_z/M_w$  được xác định bởi GPC là 8,3 hoặc thấp hơn; và

(r) hàm lượng thành phần hòa tan decan ( $C_{10}\text{sol.}$ )(%/ trọng lượng) và MFR ( $/(g/10 \text{ phút})$ ) đáp ứng biểu thức quan hệ dưới đây:

$$(C_{10}\text{sol.}) - 4/3 \times \text{Log}(\text{MFR}) \leq 2,30.$$

[0027]

[15] Polyme propylen theo mục [14], còn đáp ứng yêu cầu (s) dưới đây:

(s) nhiệt độ ( $T_m\text{-maxt}$ ) ở giao điểm của đường gốc và tiếp tuyến của đường cong thu nhiệt trong khoảng nhiệt độ không thấp hơn  $T_m$  của đồ thị thu được bởi phân tích nhiệt quét vi sai (DSC) ở điều kiện gia nhiệt là  $10^\circ\text{C}/\text{phút}$  là  $168,1^\circ\text{C}$  hoặc cao hơn và  $210^\circ\text{C}$  hoặc thấp hơn.

Hiệu quả của sáng chế

[0028]

Theo sáng chế, polyme olefin có tính đều lập thể rất cao, thể hiện các đặc tính là điểm nóng chảy cao và sự phụ thuộc trọng lượng phân tử của nhiệt nóng chảy, và có phân bố trọng lượng phân tử rộng có thể được sản xuất theo cách rất tích cực.

[0029]

Có thể mong đợi rằng việc sử dụng thành phần chất xúc tác titan rắn, chất xúc tác dùng để polyme hóa olefin, và phương pháp polyme hóa olefin của sáng chế cho phép polyme olefin không những có khả năng đúc và độ cứng mà còn có tính chịu nhiệt cao hơn được sản xuất, chẳng hạn.

### **Mô tả vắn tắt các hình vẽ**

[0030]

[Fig.1] Fig.1 là đồ thị đo DSC (các điều kiện trong khi gia nhiệt lần thứ hai) của polyme của Ví dụ 1.

[Fig.2] Fig.2 là đồ thị đo DSC (các điều kiện trong khi làm mát) của polyme của Ví dụ 1.

[Fig.3] Fig.3 là đồ thị đo DSC (các điều kiện trong khi gia nhiệt lần thứ hai) của polyme của Ví dụ 2.

[Fig.4] Fig.4 là đồ thị đo DSC (các điều kiện trong khi làm mát) của polyme của Ví dụ 2.

[Fig.5] Fig.5 là đồ thị đo DSC (các điều kiện trong khi gia nhiệt lần thứ hai) của polyme của Ví dụ so sánh 1.

[Fig.6] Fig.6 là đồ thị đo DSC (các điều kiện trong khi làm mát) của polyme của Ví dụ so sánh 1.

[Fig.7] Fig.7 là đồ thị đo DSC (các điều kiện trong khi gia nhiệt lần thứ hai) của polyme của Ví dụ so sánh 2.

[Fig.8] Fig.8 là đồ thị đo DSC (các điều kiện trong khi làm mát) của polyme của Ví dụ so sánh 2.

### **Mô tả chi tiết sáng chế**

[0031]

Dưới đây, thành phần chất xúc tác titan rắn (I), chất xúc tác dùng để polyme hóa olefin, phương pháp sản xuất polyme olefin, và polyme propylen theo sáng chế sẽ được mô tả chi tiết.

[Thành phần chất xúc tác titan rắn (I)]

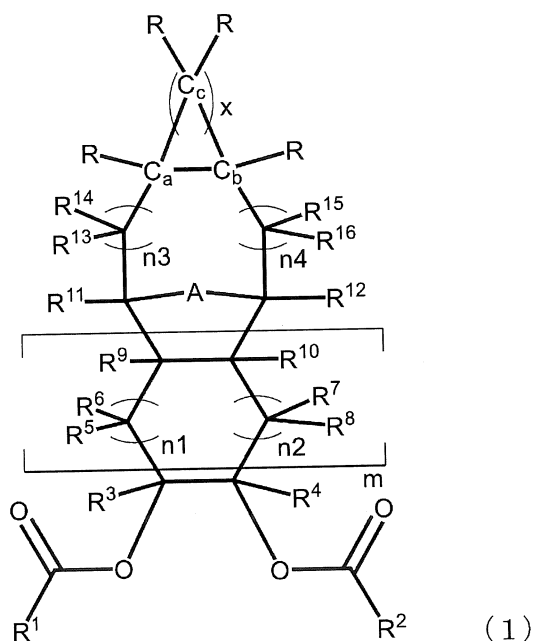
Thành phần chất xúc tác titan rắn (I) theo sáng chế chứa titan, magie, halogen, và hợp chất este đa hóa trị có cấu tạo vòng riêng (dưới đây cũng được gọi là “hợp chất chứa nhóm đa este vòng (a)”).

[0032]

<Hợp chất chứa nhóm đa este vòng (a)>

Hợp chất chứa nhóm đa este vòng (a) được thể hiện bởi công thức (1) dưới đây:

[0033]



[0034]

trong đó mỗi  $n_1$  đến  $n_4$  độc lập là số nguyên từ 0 đến 2,  $m$  là 0 hoặc 1, và  $x$  là số nguyên từ 0 đến 10, với mỗi quan hệ  $m+x \geq 1$  được đáp ứng;

[0035]

$R^1$  và  $R^2$  mỗi nhóm độc lập là nhóm hydrocarbon được thế hoặc không được thế có 1 đến 20 nguyên tử cacbon;  $R^3$  đến  $R^{16}$  và  $R$  mỗi nhóm độc lập là nguyên tử hydro, nhóm hydrocarbon được thế hoặc không được thế có 1 đến 20 nguyên tử cacbon, hoặc nguyên tử halogen; nguyên tử hydro, nguyên tử cacbon, hoặc cả hai, của  $R^1$  đến  $R^{16}$  và  $R$  được thay thế tùy ý bởi ít nhất một nguyên tử được lựa chọn từ nhóm gồm có nguyên tử nitơ, nguyên tử oxy, nguyên tử phospho, nguyên tử halogen, và nguyên tử silic; và hai hoặc nhiều nhóm được lựa chọn từ  $R^3$  đến  $R^{16}$  và  $R$  được liên kết tùy ý với nhau để tạo thành vòng đơn vòng hoặc đa vòng, và các phần tử thế liền kề được liên kết trực tiếp tùy ý để tạo thành liên kết bội;

[0036]

$C_a$ ,  $C_b$ , và  $C_c$  là các nguyên tử cacbon, và trong liên kết cacbon-cacbon của cấu tạo vòng được tạo nên từ  $C_a$ ,  $C_b$ , và  $C_c$ ,  $R$  được liên kết với cacbon liền kề được liên kết trực tiếp tùy ý với nhau để tạo thành liên kết bội; và

$A$  là liên kết đơn hoặc nhóm liên kết hóa trị hai có mạch có độ dài từ 1 đến 3 nguyên tử giữa hai gốc tự do.

[0037]

$n_1$  đến  $n_4$  được mô tả ở trên là các giá trị số liên quan đến kích thước của cấu tạo vòng, và ưu tiên là 0 đến 1, và ưu tiên là 0. Các giá trị số từ  $n_1$  đến  $n_4$  được mô tả ở trên có thể là giống nhau hoặc khác nhau, và có thể được lựa chọn theo mục đích. Đặc biệt ưu tiên là,  $n_1$  và  $n_2$  là 0. Đồng thời,  $n_3$  và  $n_4$  đặc biệt ưu tiên là 0.

[0038]

$m$  là giá trị số chủ yếu liên quan đến cấu tạo mạch của phần cấu tạo đơn vòng, và  $x$  là giá trị số liên quan đến kích thước của cấu tạo vòng của phần được gọi là đầu cuối mà ở xa các nhóm este.  $m$  là 0 hoặc 1, và ưu tiên là 0.  $x$  là 0 đến 10, và giới hạn trên được ưu tiên là 8, ưu tiên hơn là 6, và ưu tiên hơn nữa là 5. Khi giới hạn dưới của  $x$  là 0 như được mô tả ở trên, giới hạn dưới được ưu tiên là 2 khi  $x$  là số tự nhiên.

[0039]

Mối quan hệ  $m+x \geq 1$  được đáp ứng. Điều này chỉ ra rằng khi  $m$  là 0, cấu tạo vòng chứa các nguyên tử cacbon  $C_a$ ,  $C_b$ , và  $C_c$  là chủ yếu, và rằng khi  $m$  là 1, cấu tạo vòng chứa các nguyên tử cacbon  $C_a$ ,  $C_b$ , và  $C_c$  có thể không có.  $C_a$ ,  $C_b$ , và  $C_c$  tất cả là các nguyên tử cacbon, và  $a$ ,  $b$ , và  $c$  là các ký hiệu để cụ thể hóa các vị trí. Giới hạn trên của  $m+x$  ưu tiên là 10, ưu tiên hơn là 8, ưu tiên hơn nữa là 6, và đặc biệt ưu tiên là 5.

[0040]

$R^1$  và  $R^2$  mỗi nhóm độc lập là nhóm hydrocarbon được thế hoặc không được thế có 1 đến 20 nguyên tử cacbon và ưu tiên là hydrocarbon mà có nhóm aryl và ưu tiên là 6 đến 20 nguyên tử cacbon và có thể có cấu tạo chứa nguyên tử khác loại như được mô tả dưới đây.

[0041]

$R^3$  đến  $R^{16}$  và  $R$  mỗi nhóm độc lập là nguyên tử hydro, nhóm hydrocarbon được thế hoặc không được thế có 1 đến 20 nguyên tử cacbon, hoặc nguyên tử halogen.

Nguyên tử hydro, nguyên tử cacbon, hoặc cả hai trong  $R^1$  đến  $R^{16}$  và  $R$  có thể được thay thế một phần bằng ít nhất một nguyên tử được lựa chọn từ nhóm

gồm có nguyên tử nitơ, nguyên tử oxy, nguyên tử phospho, nguyên tử halogen, và nguyên tử silic. Tức là, các phương án của  $R^1$  đến  $R^{16}$  và  $R$  gồm các nhóm hydrocarbon chứa nitơ, oxy, phospho, halogen, và silic. Các nguyên tố có thể được thay thế ở một hoặc nhiều vị trí.

[0042]

Về  $R^3$  đến  $R^{16}$  và  $R$ , các phần tử thế liên kề có thể được liên kết trực tiếp để tạo thành liên kết đôi cacbon-cacbon hoặc liên kết ba. Do đó, cấu tạo vòng của công thức (1) có thể chứa cấu tạo aryl.

[0043]

$R^1$  và  $R^2$  có thể được liên kết với nhau để tạo thành cấu tạo vòng. Ngoài ra, phần tử thế được lựa chọn từ nhóm gồm có  $R^1$  và  $R^2$  và phần tử thế được lựa chọn từ nhóm gồm có  $R^3$  đến  $R^{16}$  và  $R$  có thể được liên kết với nhau để tạo thành cấu tạo vòng.

[0044]

Ít nhất một trong các phần tử thế  $R$  và  $R^3$  đến  $R^{16}$  có thể ưu tiên là phần tử thế không phải là hydro từ quan điểm về sự cân bằng giữa hoạt tính, tính đều lập thể, và các đặc tính khác. Hơn nữa, một hoặc nhiều nguyên tử cacbon mà tạo thành cấu tạo vòng có thể ưu tiên là cacbon bậc bốn.

[0045]

Các phương án của  $R^3$  đến  $R^{16}$  và  $R$  cũng gồm các phương án trong đó  $R^3$  đến  $R^{16}$  và  $R$  được liên kết với nhau để tạo thành cấu tạo vòng. Phần mà tạo thành vòng có thể có cấu tạo đơn vòng cũng như cấu tạo đa vòng. Phần mà tạo thành vòng ưu tiên là cấu tạo có cấu tạo kép và cấu tạo vòng khác. Ưu tiên hơn là, cấu tạo vòng khác là cấu tạo có liên kết đôi. Liên kết đôi ưu tiên hơn nữa là liên kết đôi cacbon-cacbon. Liên kết đôi cacbon-cacbon gồm cấu tạo thơm. Cấu tạo riêng



của phần mà tạo thành vòng là tương tự như cấu tạo riêng của A được mô tả dưới đây.

[0046]

Nhóm hydrocarbon là nhóm hydrocarbon hóa trị một có 1 đến 20 nguyên tử cacbon, ưu tiên là 1 đến 10 nguyên tử cacbon, ưu tiên hơn là 2 đến 8 nguyên tử cacbon, ưu tiên hơn nữa là 4 đến 8 nguyên tử cacbon, và đặc biệt ưu tiên là 4 đến 6 nguyên tử cacbon. Các ví dụ về nhóm hydrocarbon gồm các nhóm hydrocarbon béo, các nhóm hydrocarbon vòng béo, và các nhóm hydrocarbon thơm, như là nhóm metyl, nhóm etyl, nhóm n-propyl, nhóm isopropyl, nhóm n-butyl, nhóm isobutyl, nhóm hexyl, nhóm heptyl, nhóm octyl, nhóm 2-ethylhexyl, nhóm dexyl, nhóm dodexyl, nhóm tetradexyl, nhóm hexadexyl, nhóm octadexyl, nhóm eicosyl, nhóm xyclohexyl, nhóm aryl được thế hoặc không được thế như là nhóm phenyl, và nhóm xycloalkenyl được thế hoặc không được thế. Các nhóm hydrocarbon vòng béo và các nhóm hydrocarbon thơm có thể chứa phần tử thế. Trong số này, chẳng hạn, nhóm n-butyl, nhóm isobutyl, nhóm hexyl, nhóm octyl, và nhóm phenyl là được ưu tiên, và nhóm n-butyl, nhóm isobutyl, và nhóm phenyl là được ưu tiên hơn.

[0047]

$R^1$  đến  $R^{16}$  và R có thể là các nhóm hydrocarbon chứa nitơ, oxy, phospho, halogen, và silic. Các phần tử thế như vậy có thể được lựa chọn từ các cấu tạo đã biết. Cụ thể hơn là, các ví dụ được ưu tiên gồm nhóm chứa cấu tạo carbonyl như là nhóm este axit carboxylic, nhóm aldehyt, nhóm axetyl, hoặc nhóm oxycarbonylalkyl, nhóm alkoxy, nhóm alkoxy được thế hoặc không được thế, nhóm alkenyloxy được thế hoặc không được thế, nhóm xycloalkyloxy được thế hoặc không được thế, nhóm xycloalkenyloxy được thế hoặc không được thế,

nhóm aryloxy được thế hoặc không được thế, nhóm heteroaryl được thế hoặc không được thế, nhóm heteroaryloxy được thế hoặc không được thế, và nhóm siloxy.

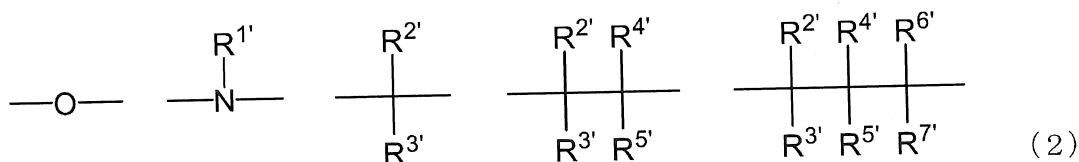
[0048]

Trong các nhóm được mô tả ở trên, R<sup>3</sup> đến R<sup>16</sup> và R ưu tiên là nguyên tử hydro, nhóm alkyl được thế hoặc không được thế, nhóm alkenyl được thế hoặc không được thế, nhóm xycloalkyl được thế hoặc không được thế, nhóm xycloalkenyl được thế hoặc không được thế, nhóm alkoxy được thế hoặc không được thế, nhóm alkenyloxy được thế hoặc không được thế, nhóm xycloalkyloxy được thế hoặc không được thế, nhóm aryl được thế hoặc không được thế, nhóm aryloxy được thế hoặc không được thế, nhóm heteroaryl được thế hoặc không được thế, hoặc nhóm heteroaryloxy được thế hoặc không được thế.

[0049]

A là liên kết đơn hoặc nhóm liên kết hóa trị hai có độ dài mạch từ 1 đến 3 nguyên tử giữa hai góc tự do. A ưu tiên là nhóm hóa trị hai được lựa chọn từ nhóm có công thức chung (2) dưới đây:

[0050]



[0051]

trong đó R<sup>1</sup> đến R<sup>7</sup> mỗi nhóm độc lập là nguyên tử hydro, nhóm alkyl được thế hoặc không được thế, nhóm xycloalkyl được thế hoặc không được thế, nhóm

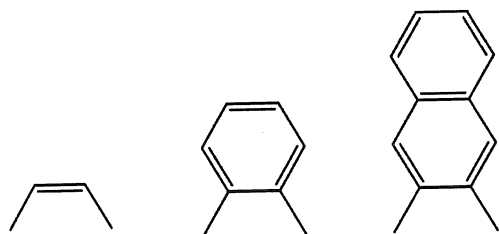
aryl được thế hoặc không được thế, hoặc nhóm heteroaryl được thế hoặc không được thế; và  $R^2$  đến  $R^7$  có thể được liên kết với nhau để tạo thành vòng đơn vòng hoặc đa vòng, hoặc các phần tử thế liền kề có thể được liên kết trực tiếp với nhau để tạo thành liên kết bội (liên kết đôi hoặc liên kết ba).

Về nguyên tử hydro, nhóm alkyl được thế hoặc không được thế, nhóm xycloalkyl được thế hoặc không được thế, nhóm aryl được thế hoặc không được thế, hoặc nhóm heteroaryl được thế hoặc không được thế, các cấu tạo có thể so sánh được với các phần tử thế khác nhau được thể hiện bởi  $R^1$  đến  $R^{16}$  và  $R$  có thể được lấy làm ví dụ.

[0052]

Như được mô tả ở trên,  $R^2$  đến  $R^7$  có thể được liên kết với nhau để tạo thành vòng đơn vòng hoặc đa vòng, hoặc các phần tử thế liền kề có thể được liên kết trực tiếp với nhau để tạo thành liên kết bội (liên kết đôi hoặc liên kết ba). Đối với liên kết bội, liên kết đôi có thể được ưu tiên, và liên kết đôi cacbon-cacbon có thể được ưu tiên hơn nữa. Các ví dụ về phần tạo vòng như vậy gồm các cấu tạo dưới đây.

[0053]



[0054]

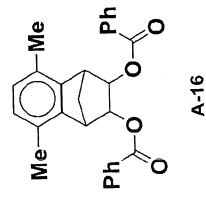
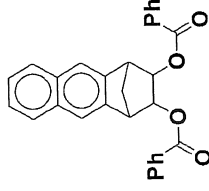
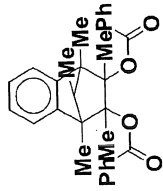
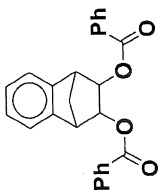
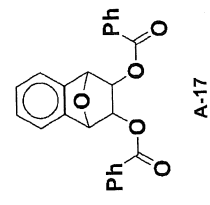
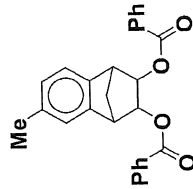
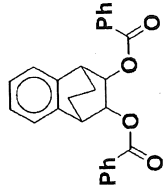
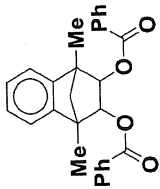
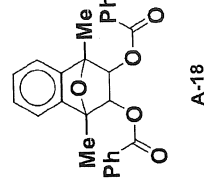
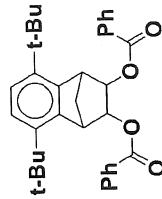
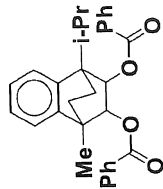
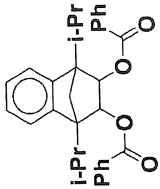
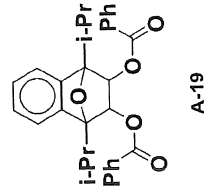
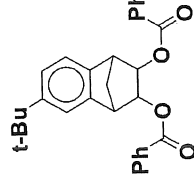
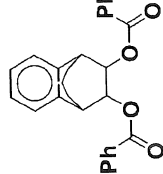
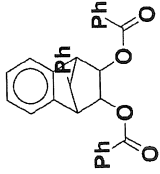
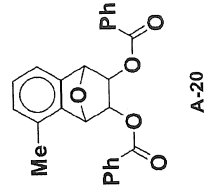
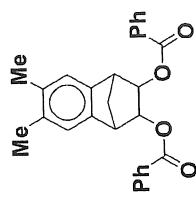
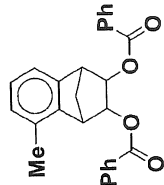
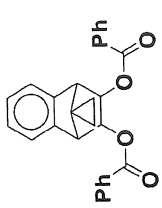
$R^1$  đến  $R^7$  có thể cũng được liên kết với  $R^1$  đến  $R^{16}$  và R để tạo thành cấu tạo vòng và, ưu tiên là, có thể được liên kết với  $R^3$  đến  $R^{16}$  và R để tạo thành cấu tạo vòng.

Các ví dụ cụ thể về bộ khung vòng chứa A ở trên gồm bộ khung norbornan và bộ khung adamantyl.

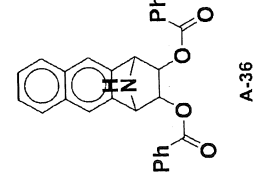
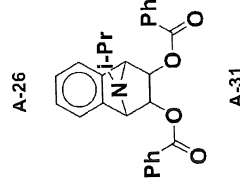
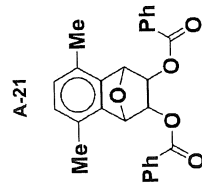
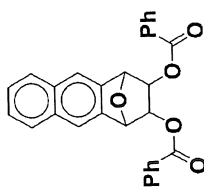
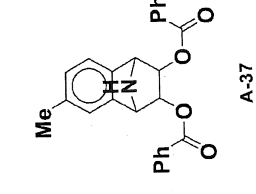
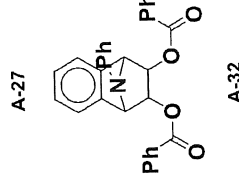
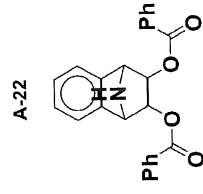
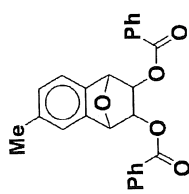
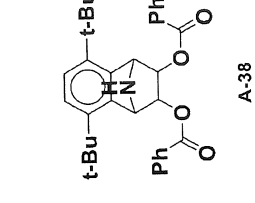
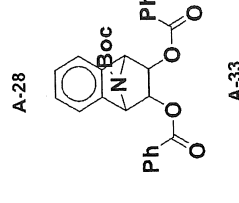
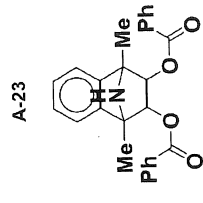
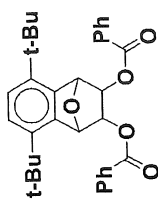
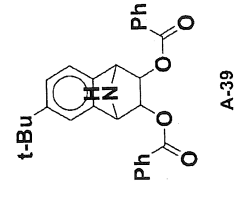
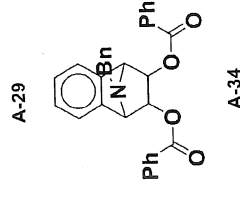
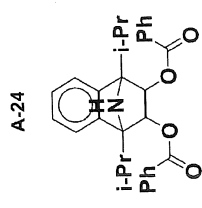
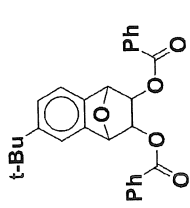
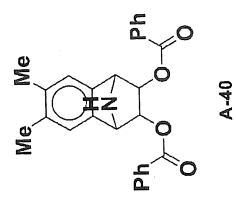
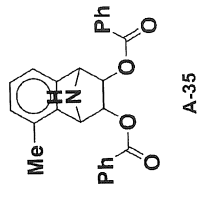
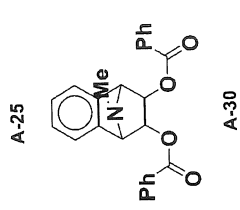
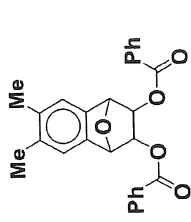
[0055]

Các ví dụ về hợp chất chứa nhóm đa este vòng (a) như vậy gồm các cấu tạo dưới đây. Một số công thức cấu tạo của các hợp chất ví dụ dưới đây có các chất đồng phân lập thể, và trong khi một số cấu tạo chất đồng phân được mô tả, thì có thể có các cấu tạo chất đồng phân khác mà không được lấy làm ví dụ.

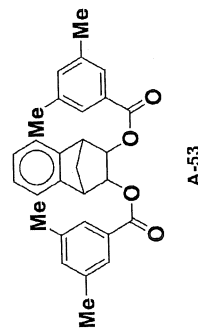
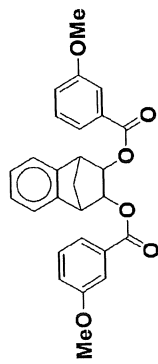
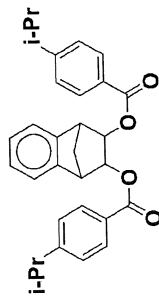
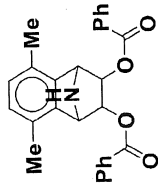
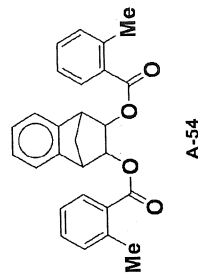
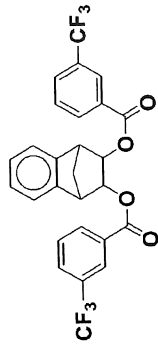
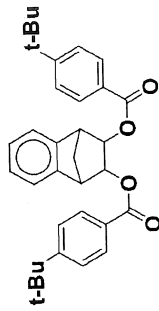
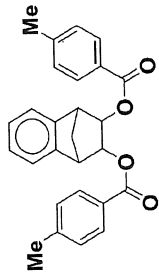
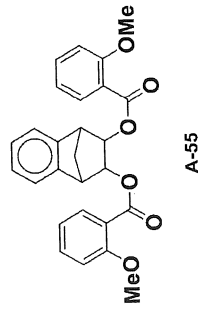
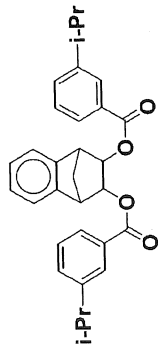
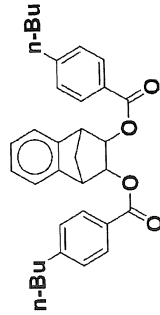
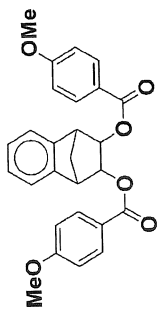
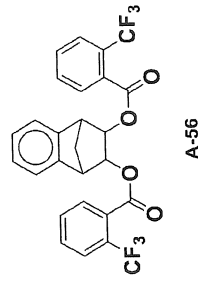
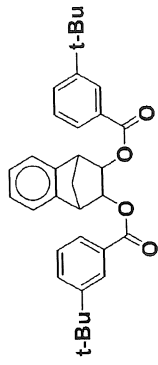
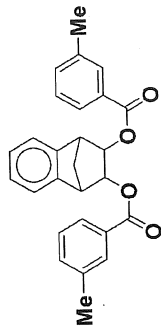
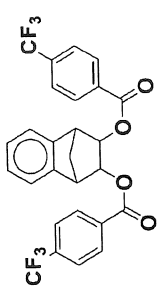
[0056]



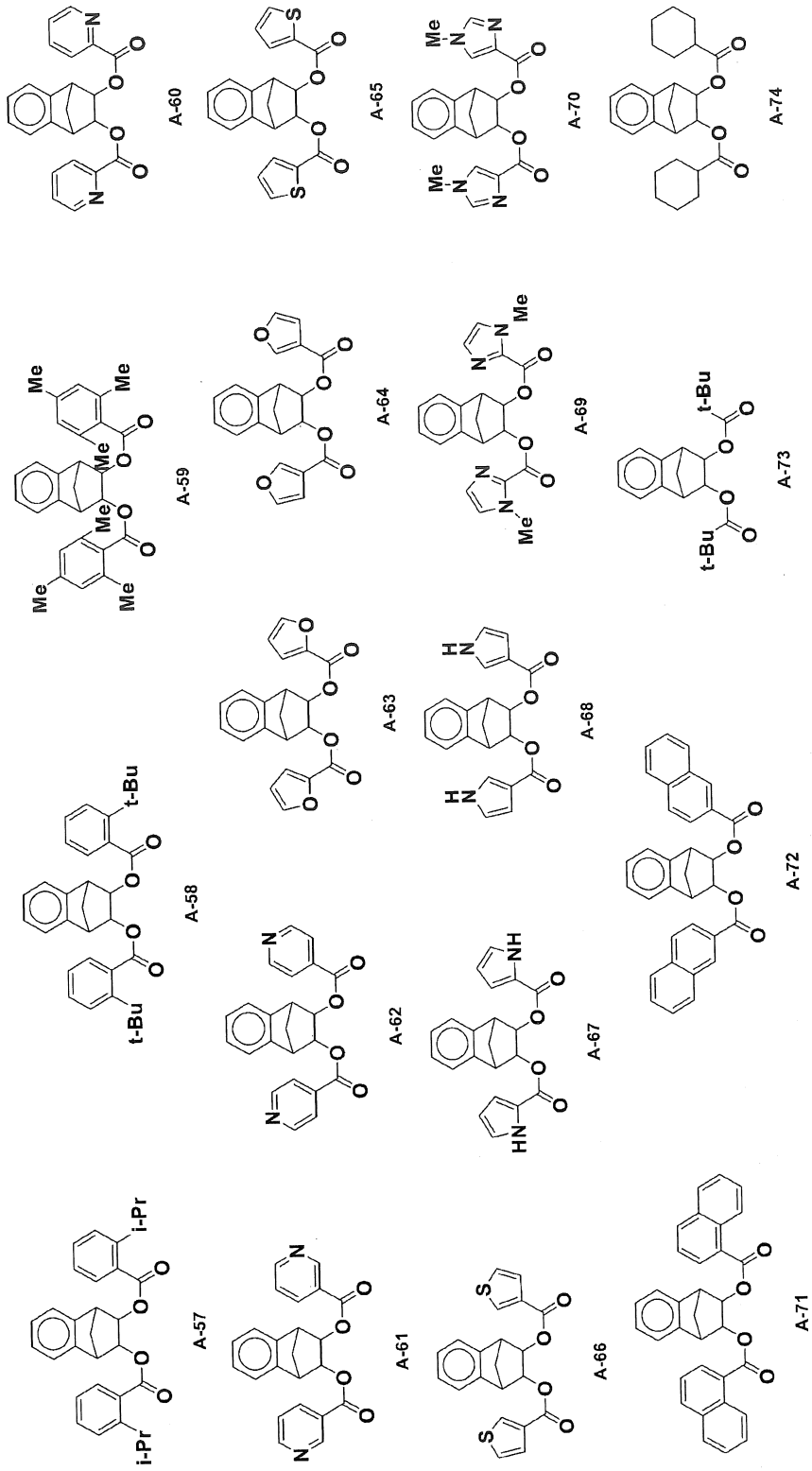
[0057]



[0058]

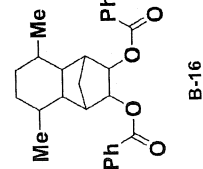
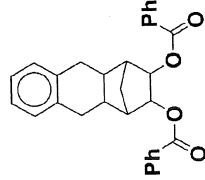
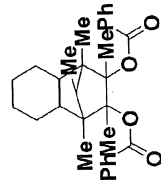
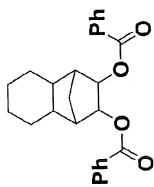
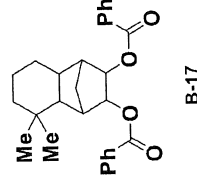
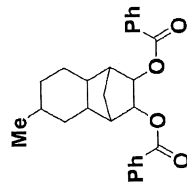
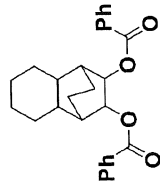
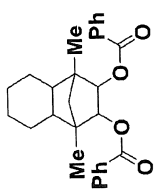
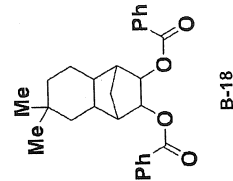
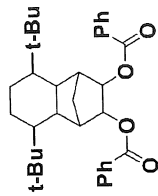
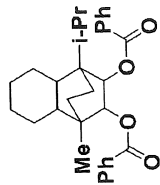
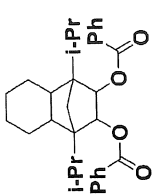
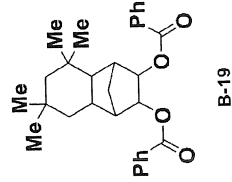
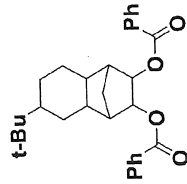
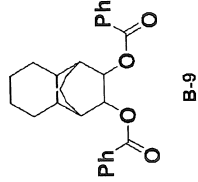
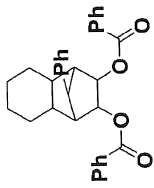
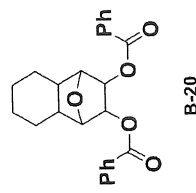
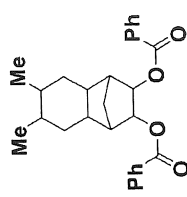
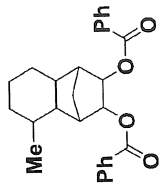
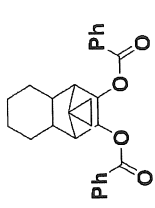


[0059]

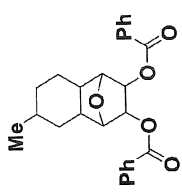


[0060]

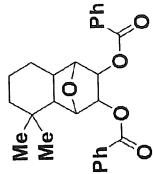




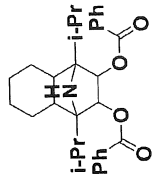
[0061]



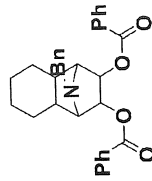
B-25



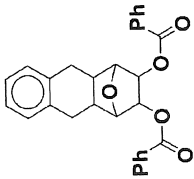
B-30



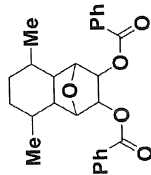
B-35



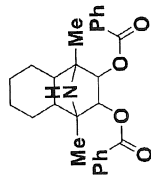
B-40



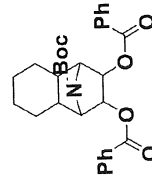
B-24



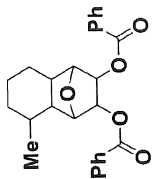
B-29



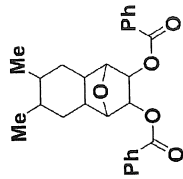
B-34



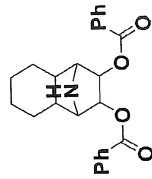
B-39



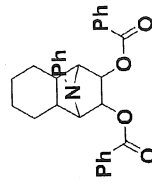
B-23



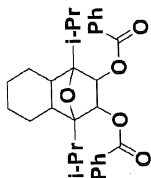
B-28



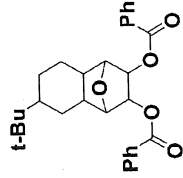
B-33



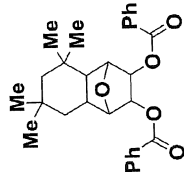
B-38



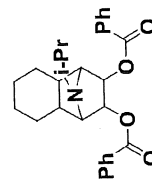
B-22



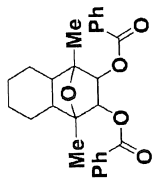
B-27



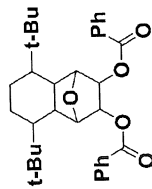
B-32



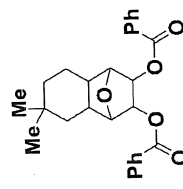
B-37



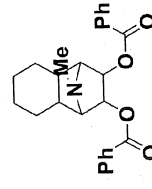
B-21



B-26

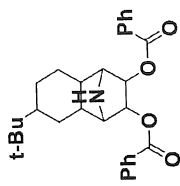


B-31

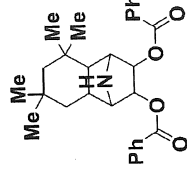


B-36

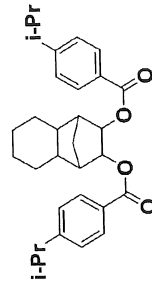
[0062]



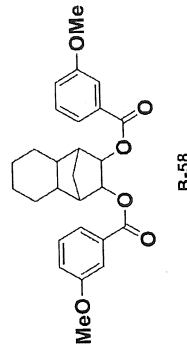
B-45



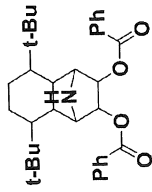
B-50



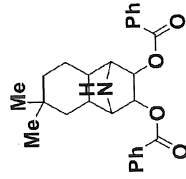
B-54



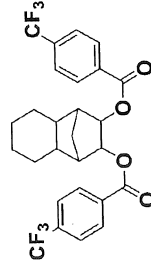
B-58



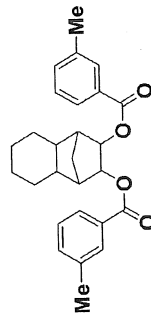
B-44



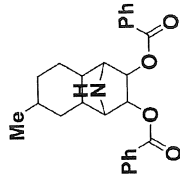
B-49



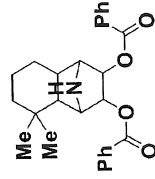
B-53



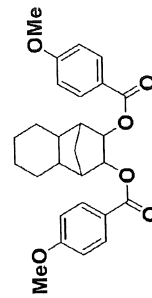
B-57



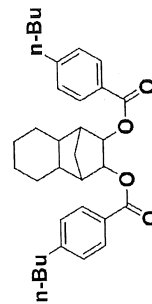
B-43



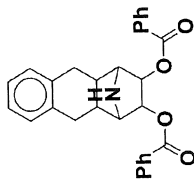
B-48



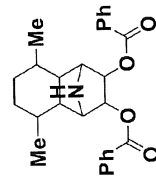
B-52



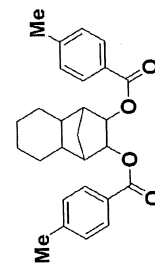
B-56



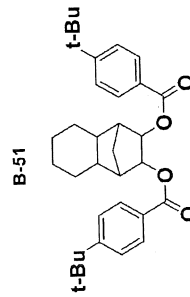
B-42



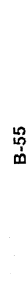
B-47



B-46

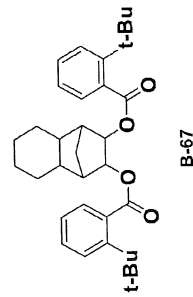
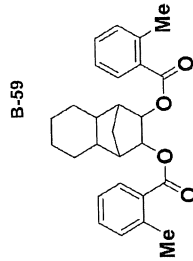
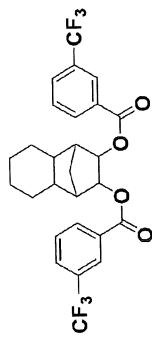
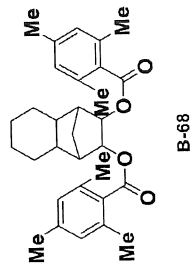
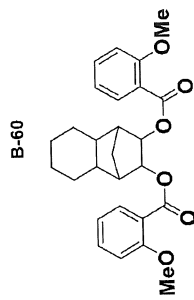
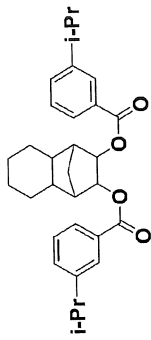
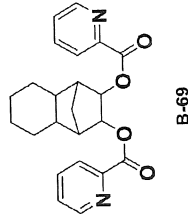
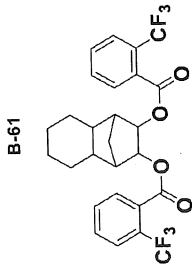
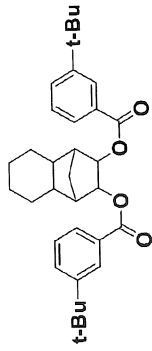
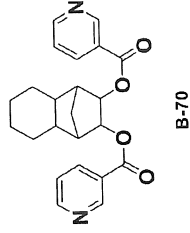
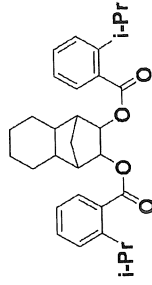
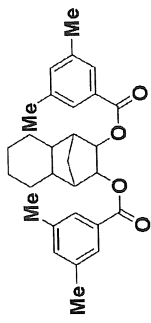


B-51

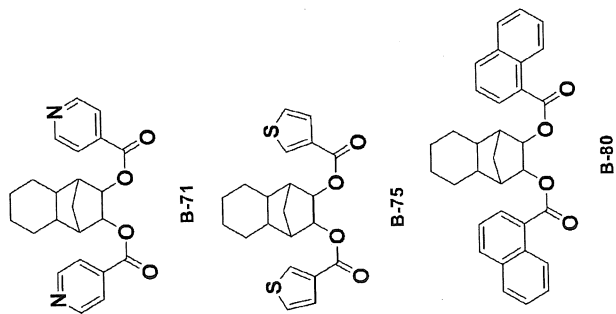
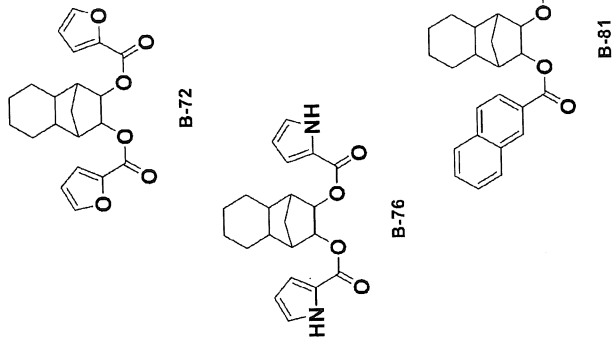
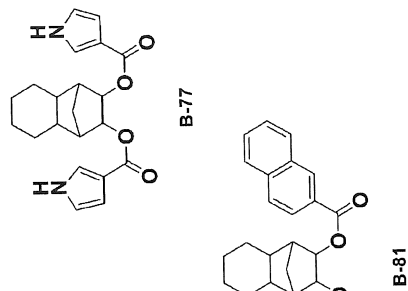
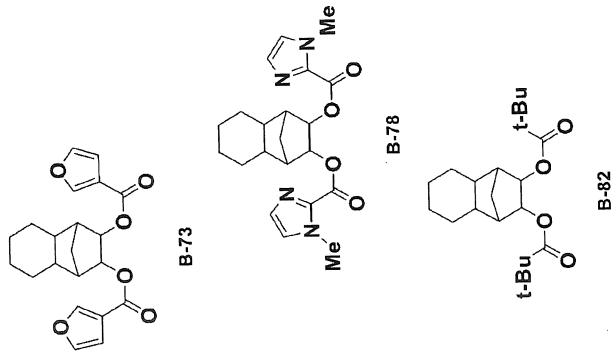
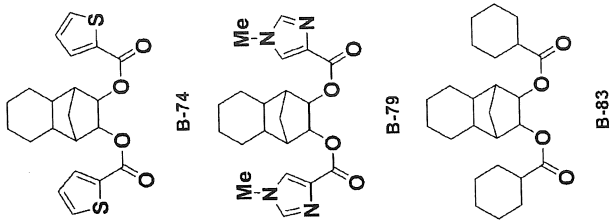


B-55

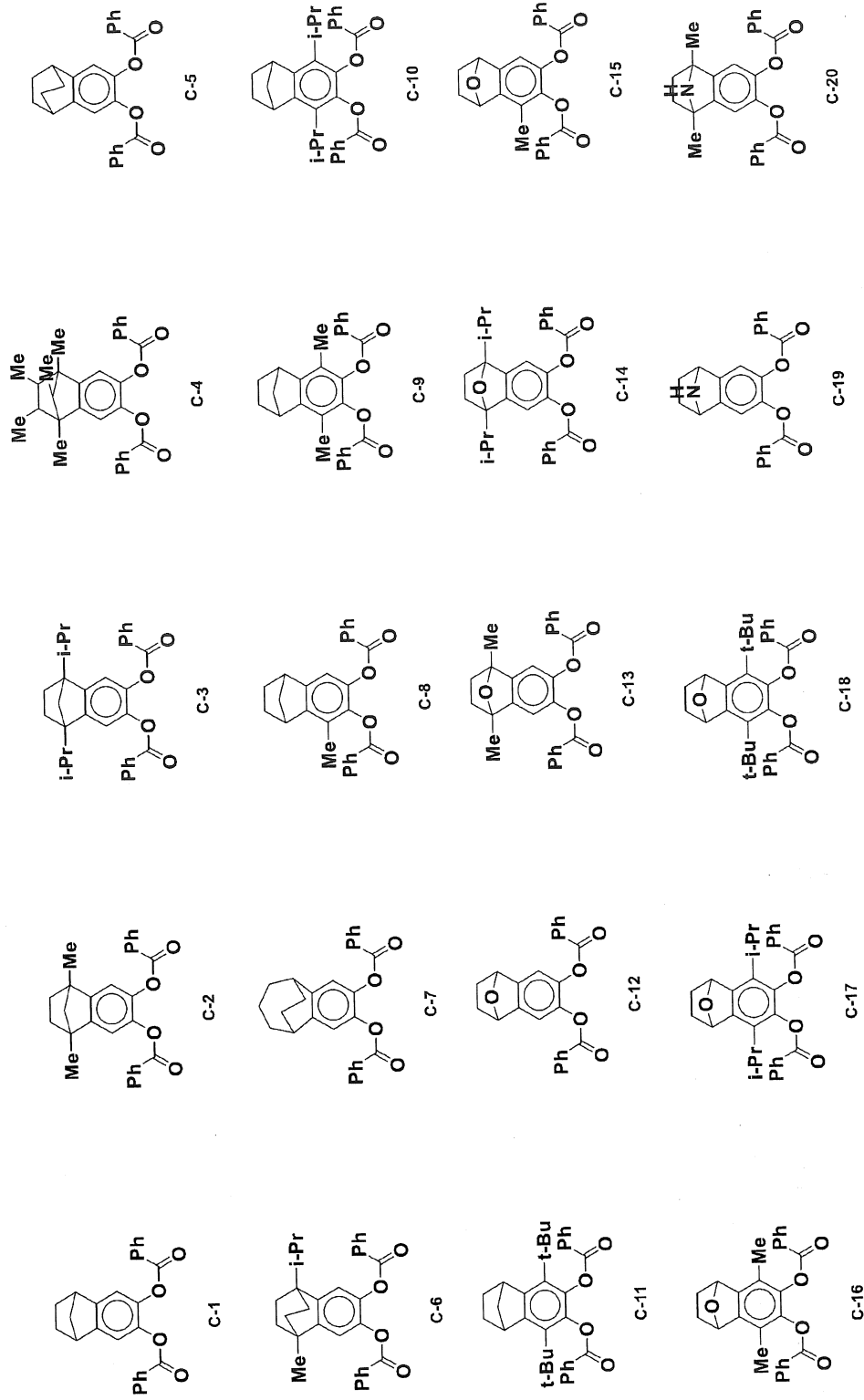
[0063]



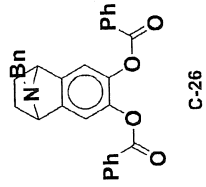
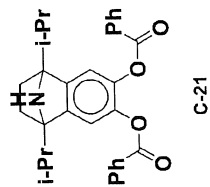
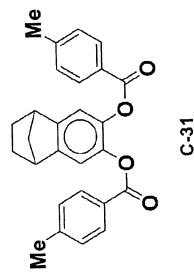
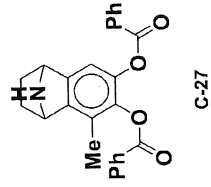
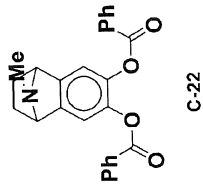
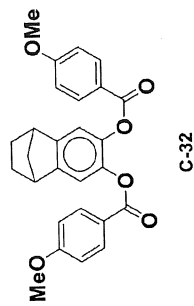
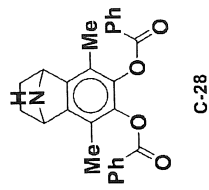
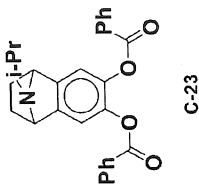
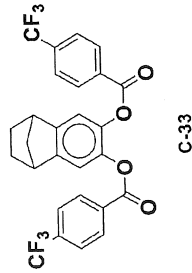
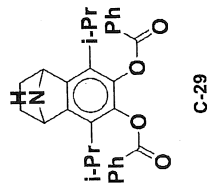
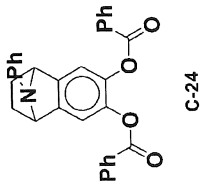
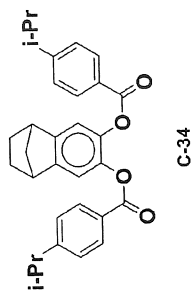
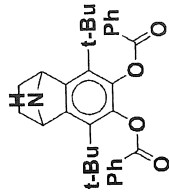
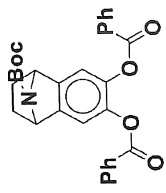
[0064]



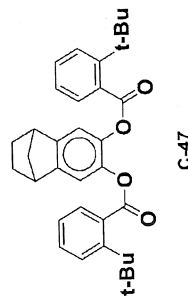
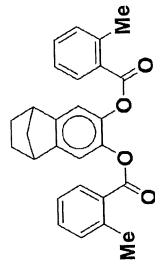
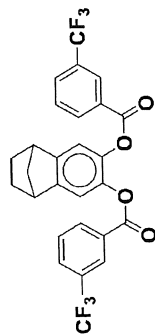
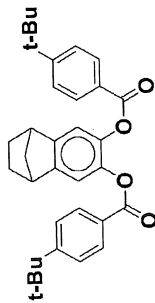
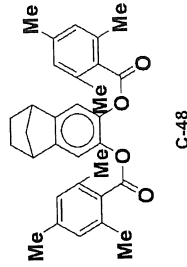
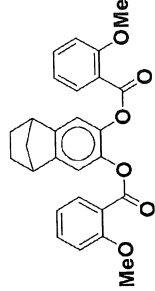
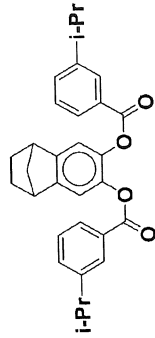
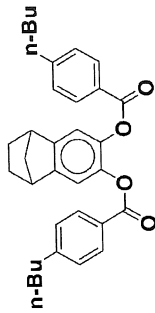
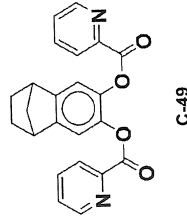
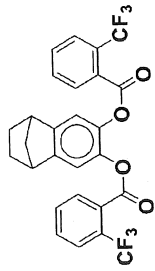
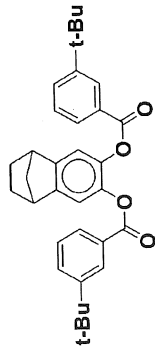
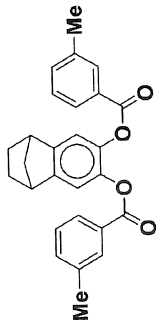
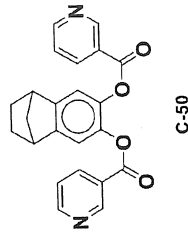
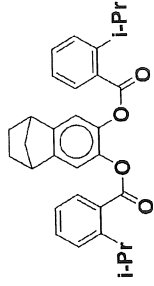
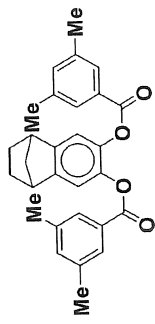
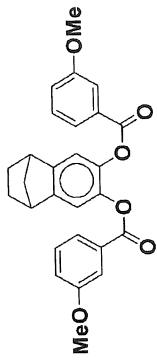
[0065]



[0066]

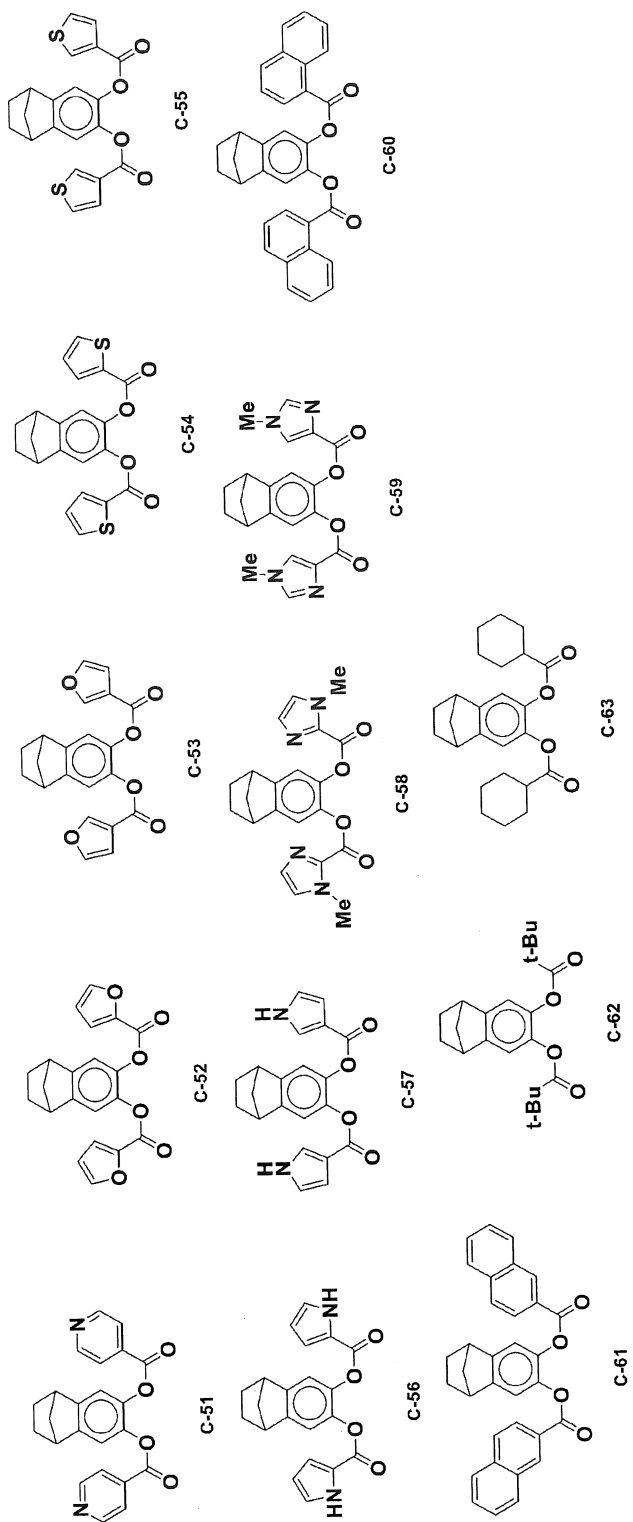


[0067]

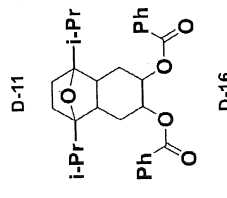
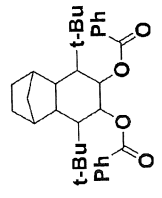
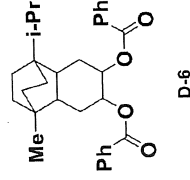
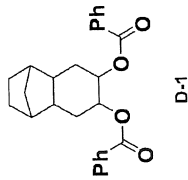
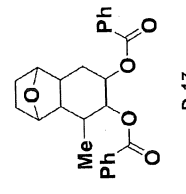
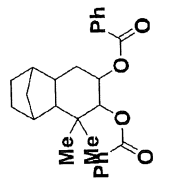
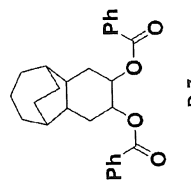
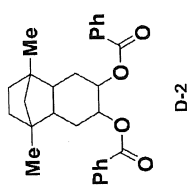
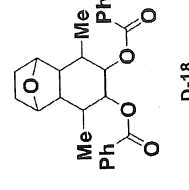
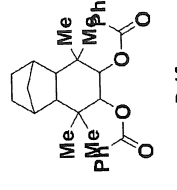
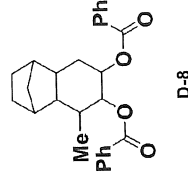
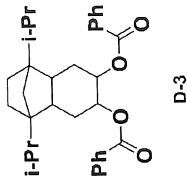
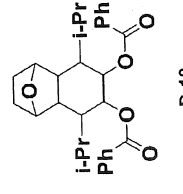
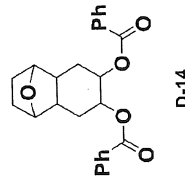
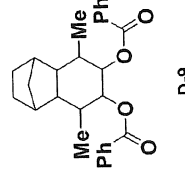
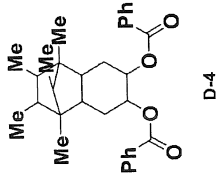
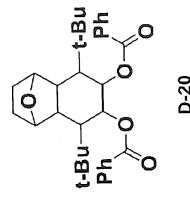
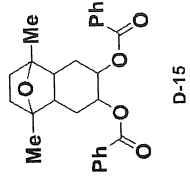
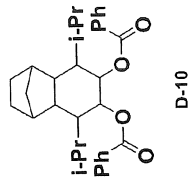
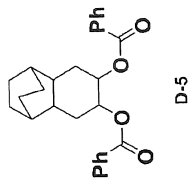


[0068]

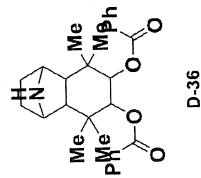
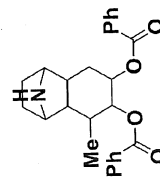
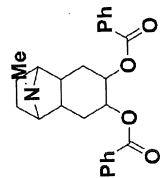
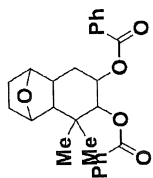
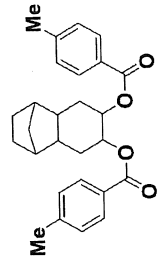
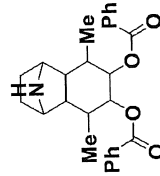
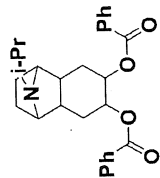
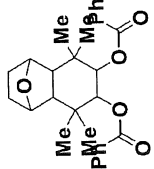
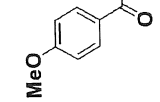
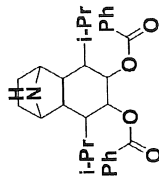
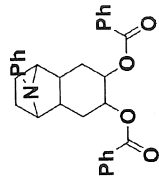
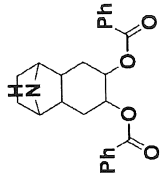
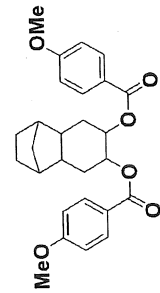
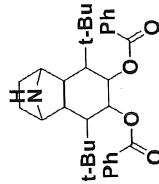
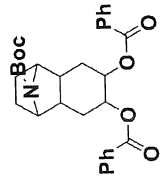
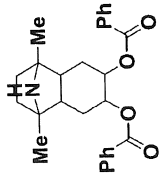
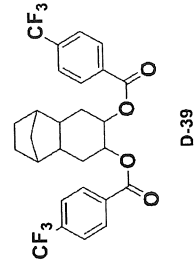
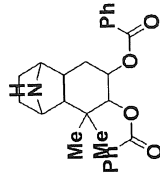
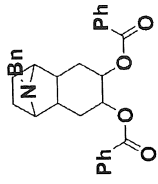
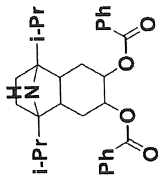




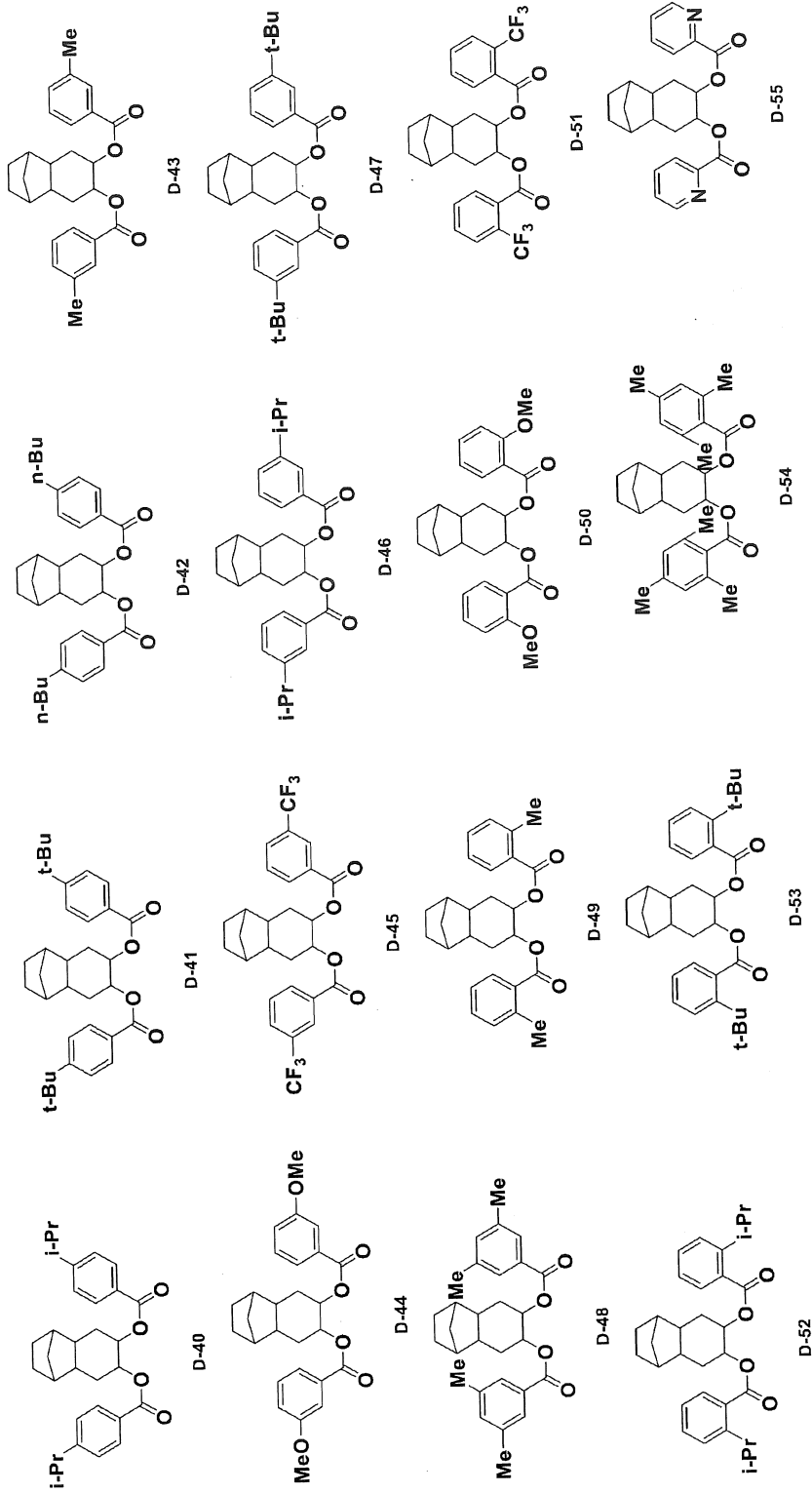
[0069]



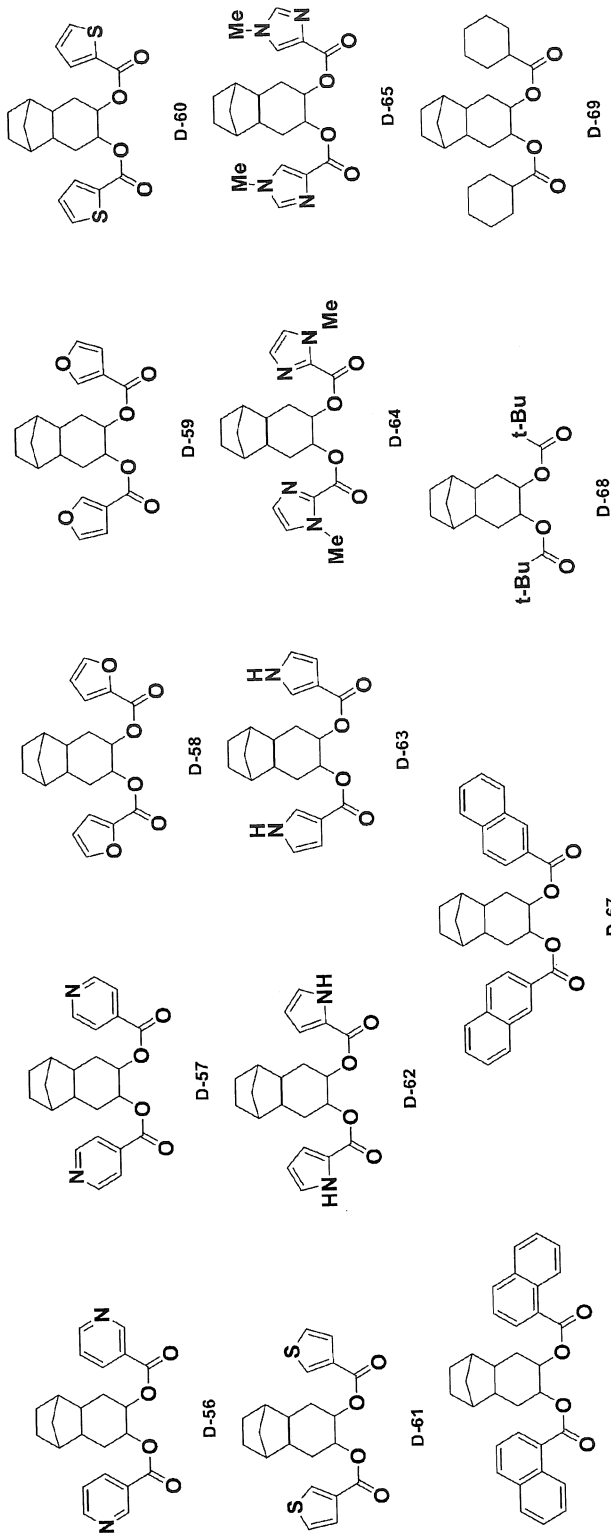
[0070]



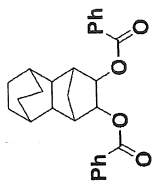
[0071]



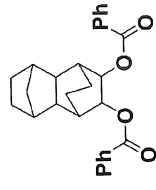
[0072]



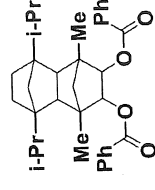
[0073]



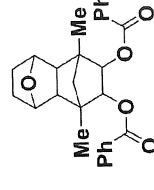
E-5



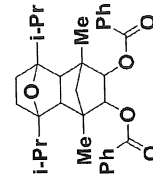
E-10



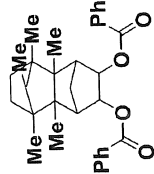
E-15



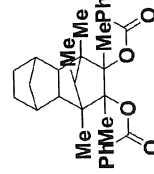
E-20



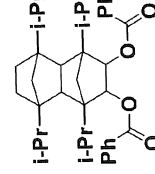
E-25



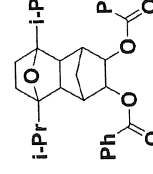
E-4



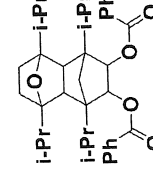
E-9



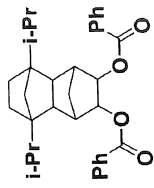
E-14



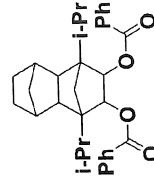
E-19



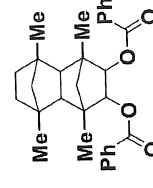
E-24



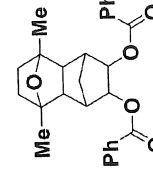
E-3



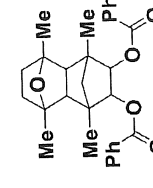
E-8



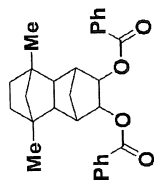
E-13



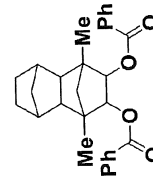
E-18



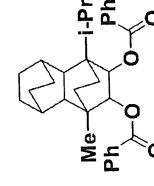
E-23



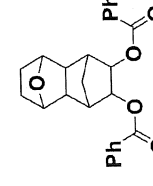
E-2



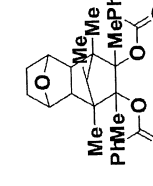
E-7



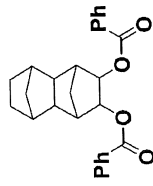
E-12



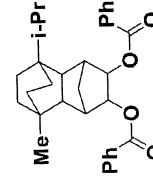
E-17



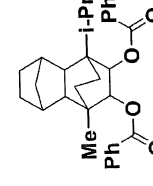
E-22



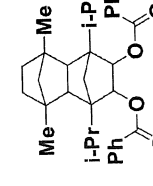
E-1



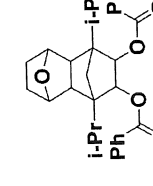
E-6



E-11

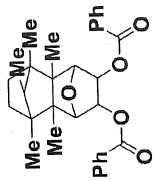


E-16

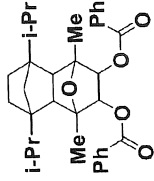


E-21

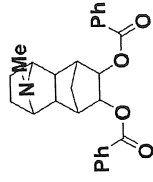
[0074]



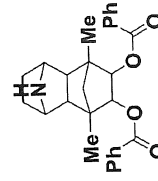
E-30



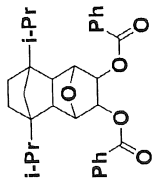
E-35



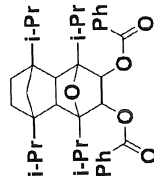
E-40



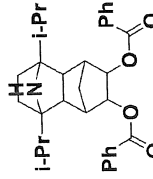
E-45



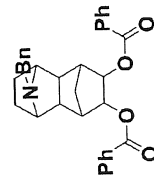
E-29



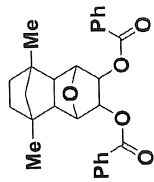
E-34



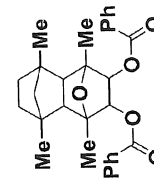
E-39



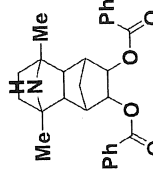
E-44



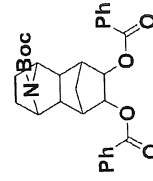
E-28



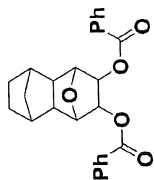
E-33



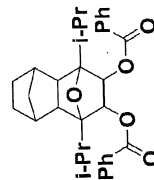
E-38



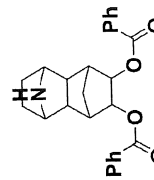
E-43



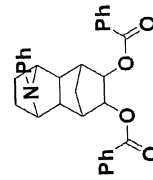
E-27



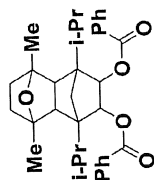
E-32



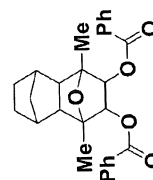
E-37



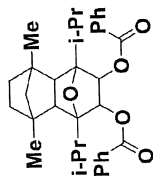
E-42



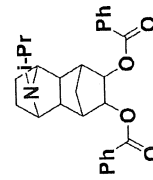
E-26



E-31

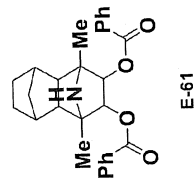
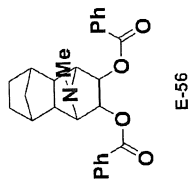
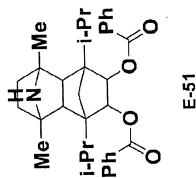
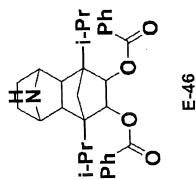
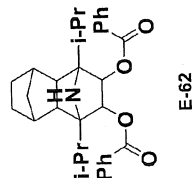
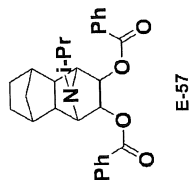
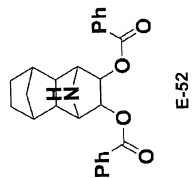
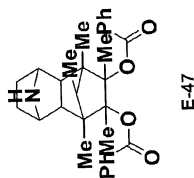
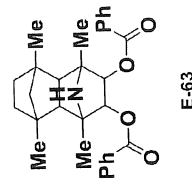
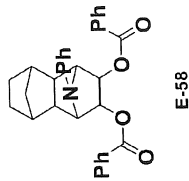
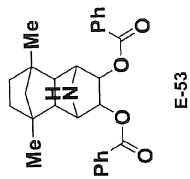
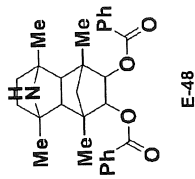
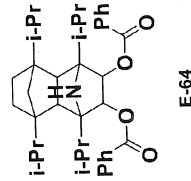
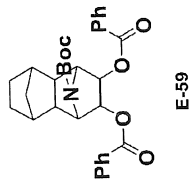
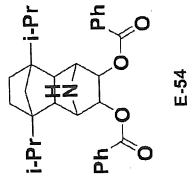
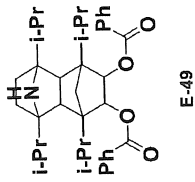
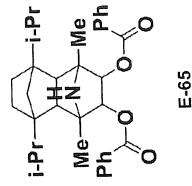
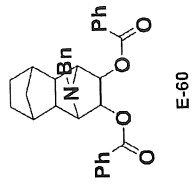
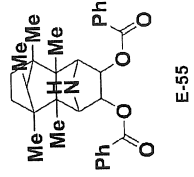
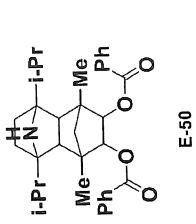


E-36



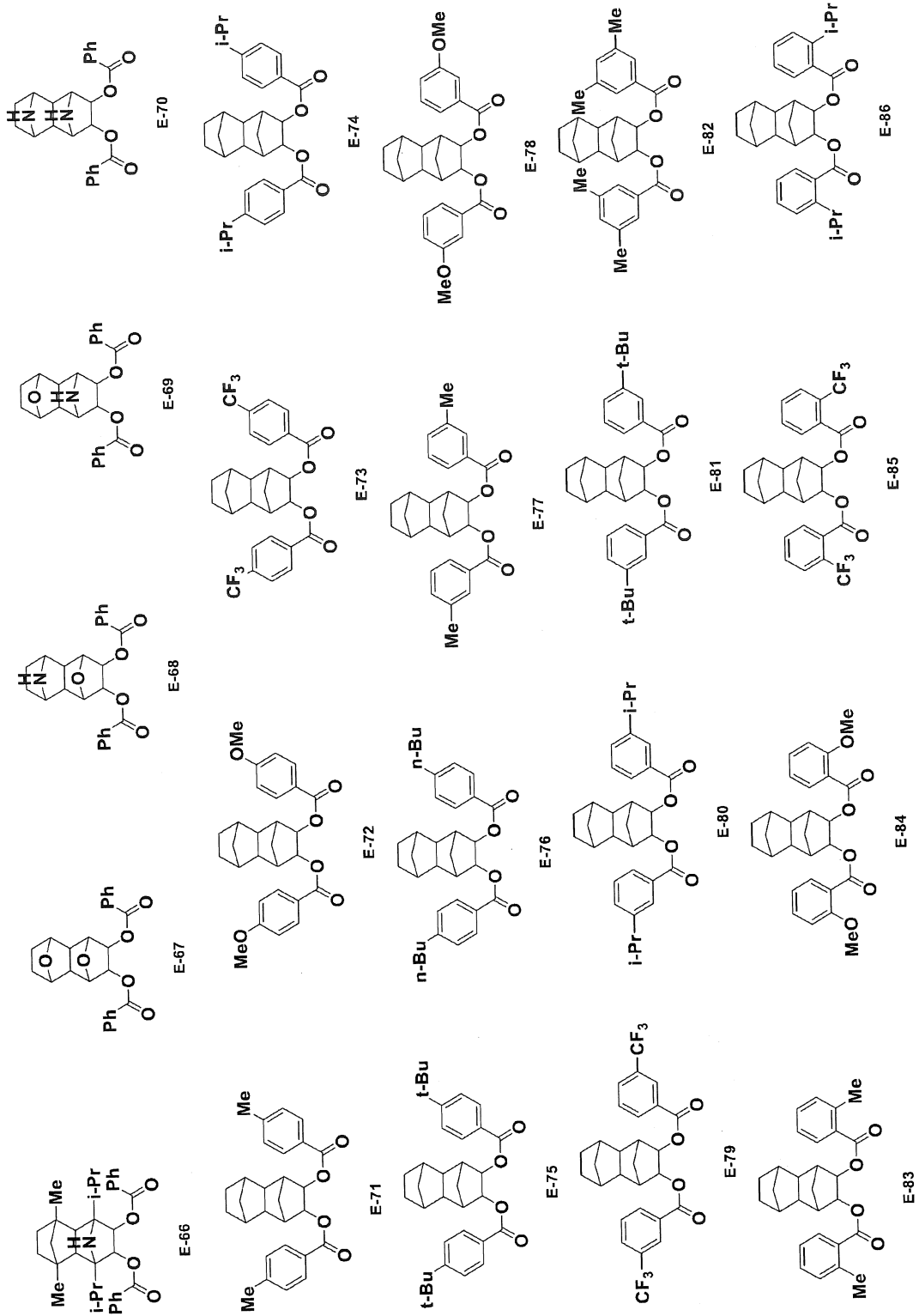
E-41

[0075]

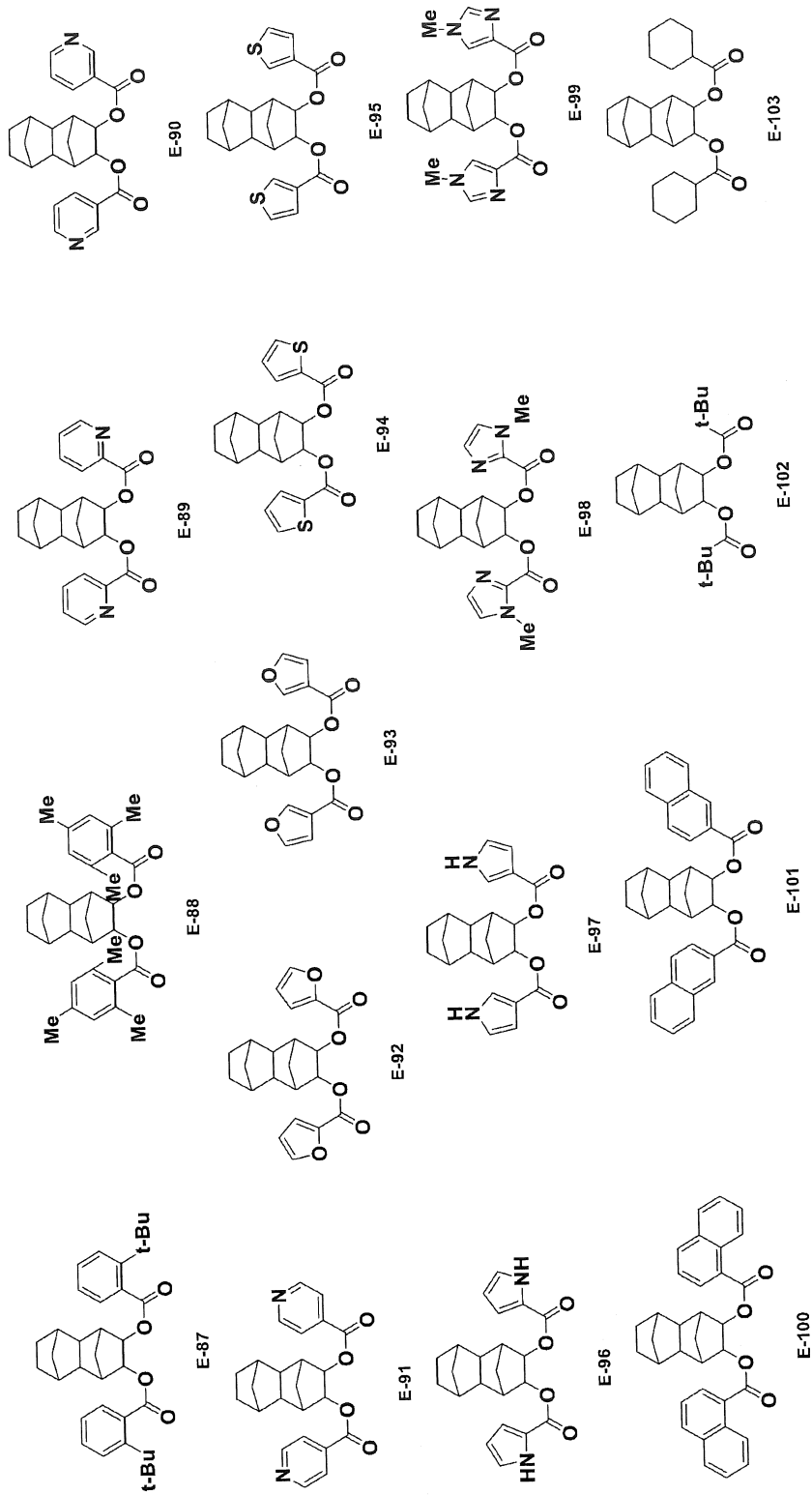


[0076]

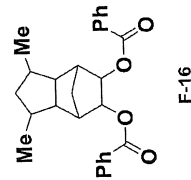
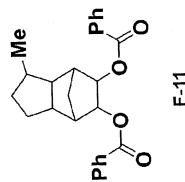
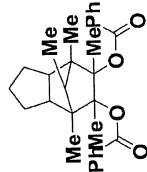
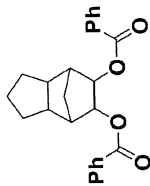
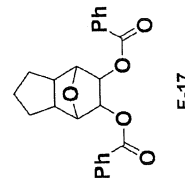
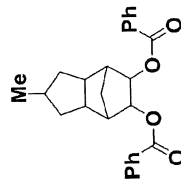
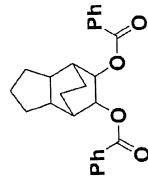
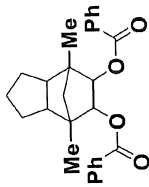
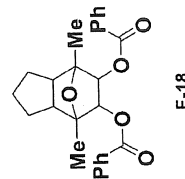
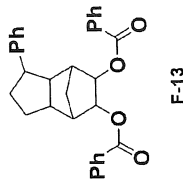
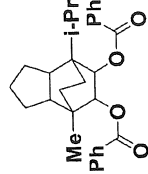
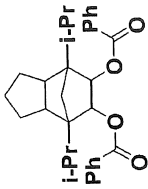
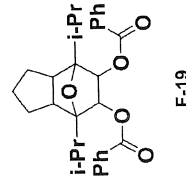
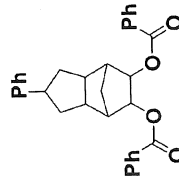
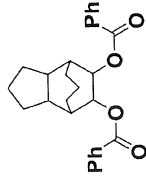
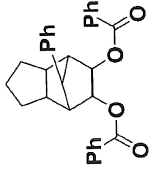
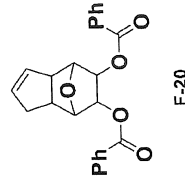
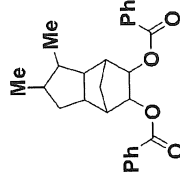
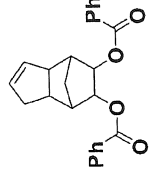
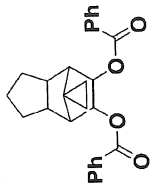




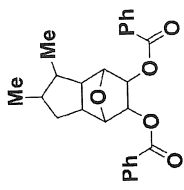
[0077]



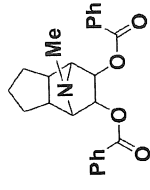
[0078]



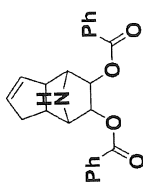
[0079]



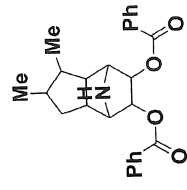
F-25



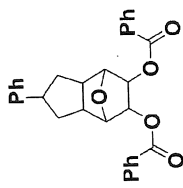
F-30



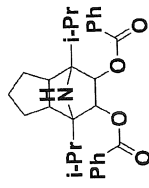
F-35



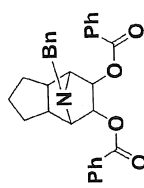
F-40



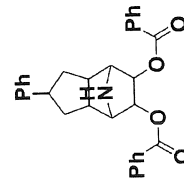
F-24



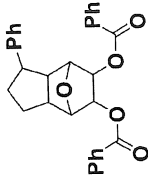
F-29



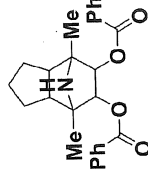
F-34



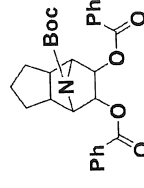
F-39



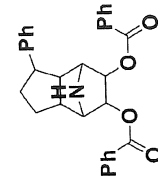
F-23



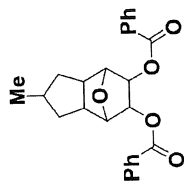
F-28



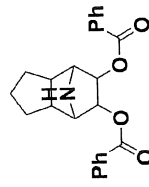
F-33



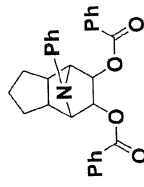
F-38



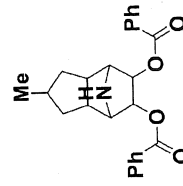
F-22



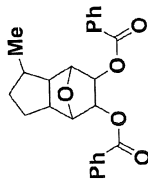
F-27



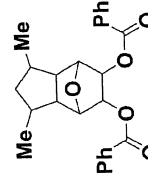
F-32



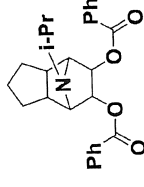
F-37



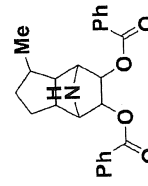
F-21



F-26

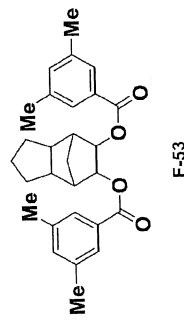
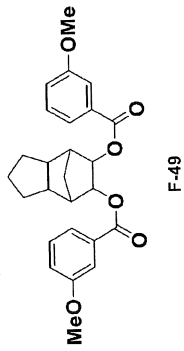
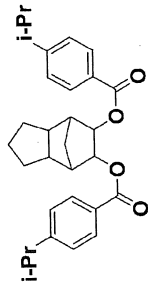
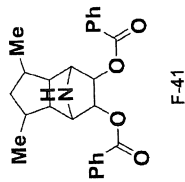
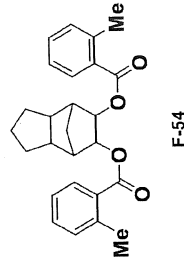
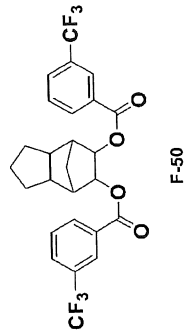
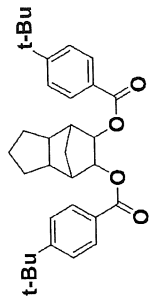
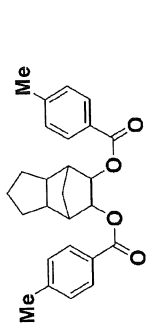
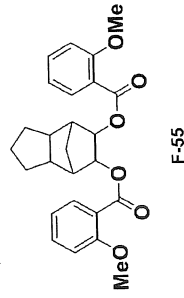
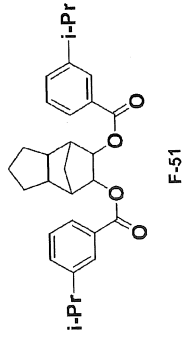
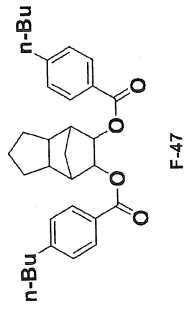
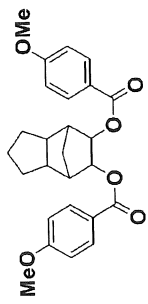
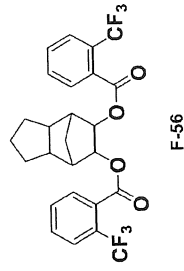
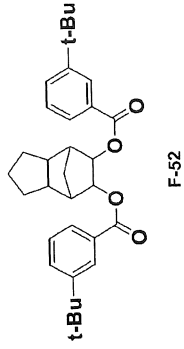
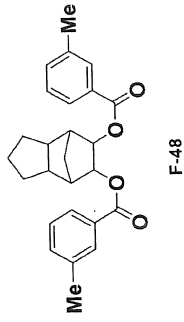
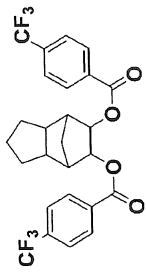


F-31

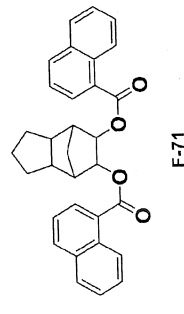
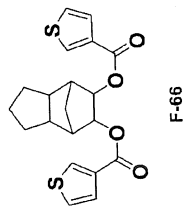
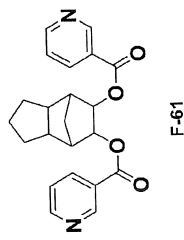
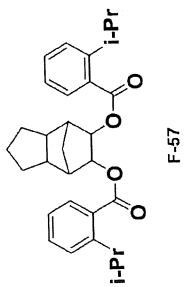
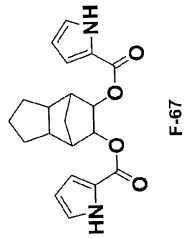
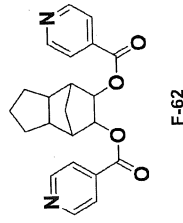
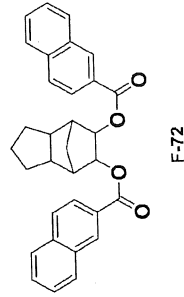
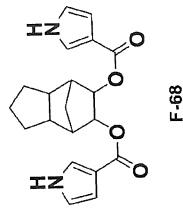
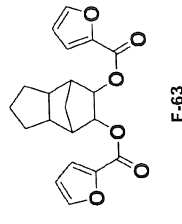
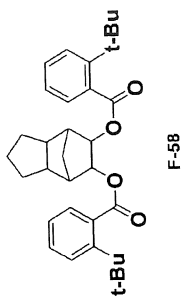
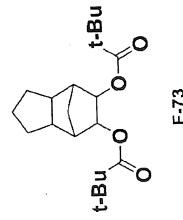
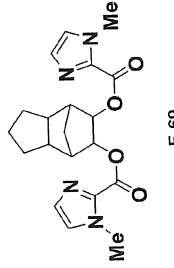
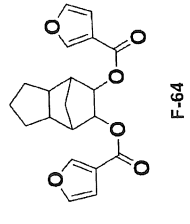
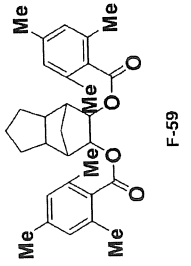
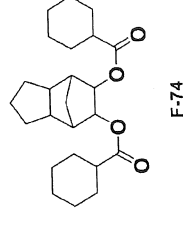
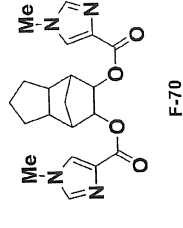
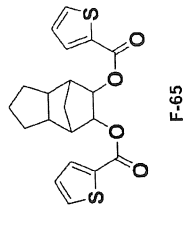
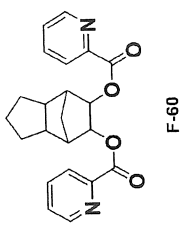


F-36

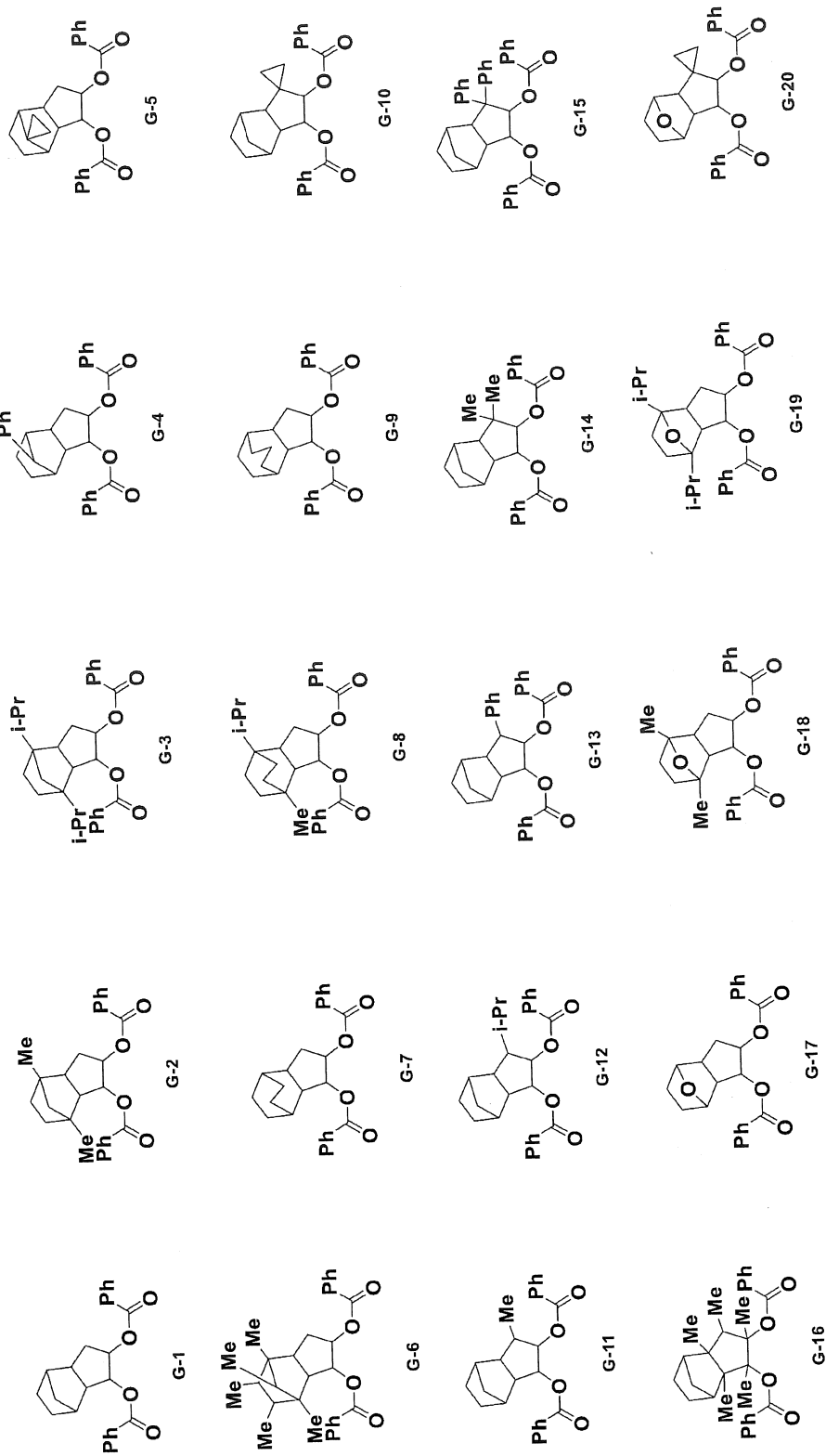
[0080]



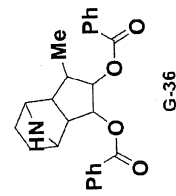
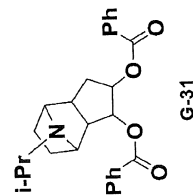
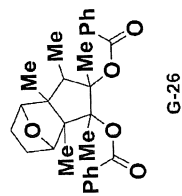
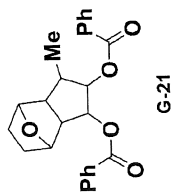
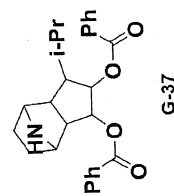
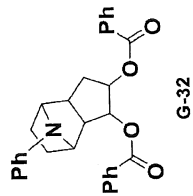
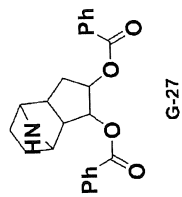
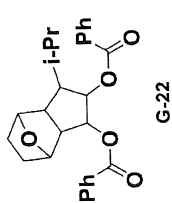
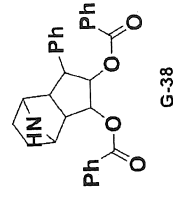
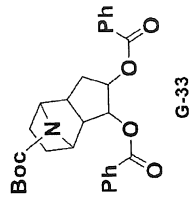
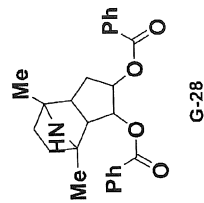
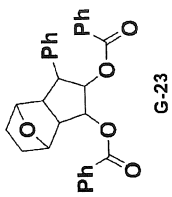
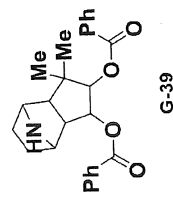
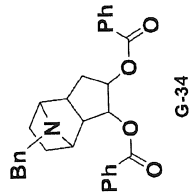
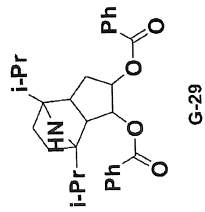
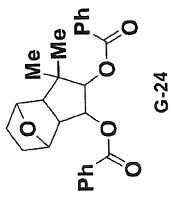
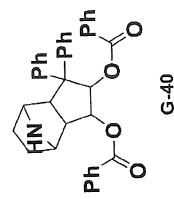
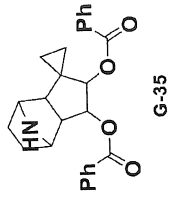
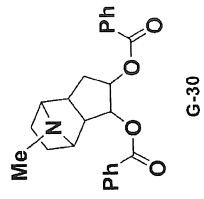
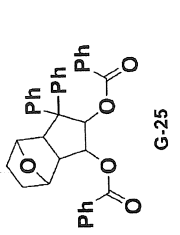
[0081]



[0082]

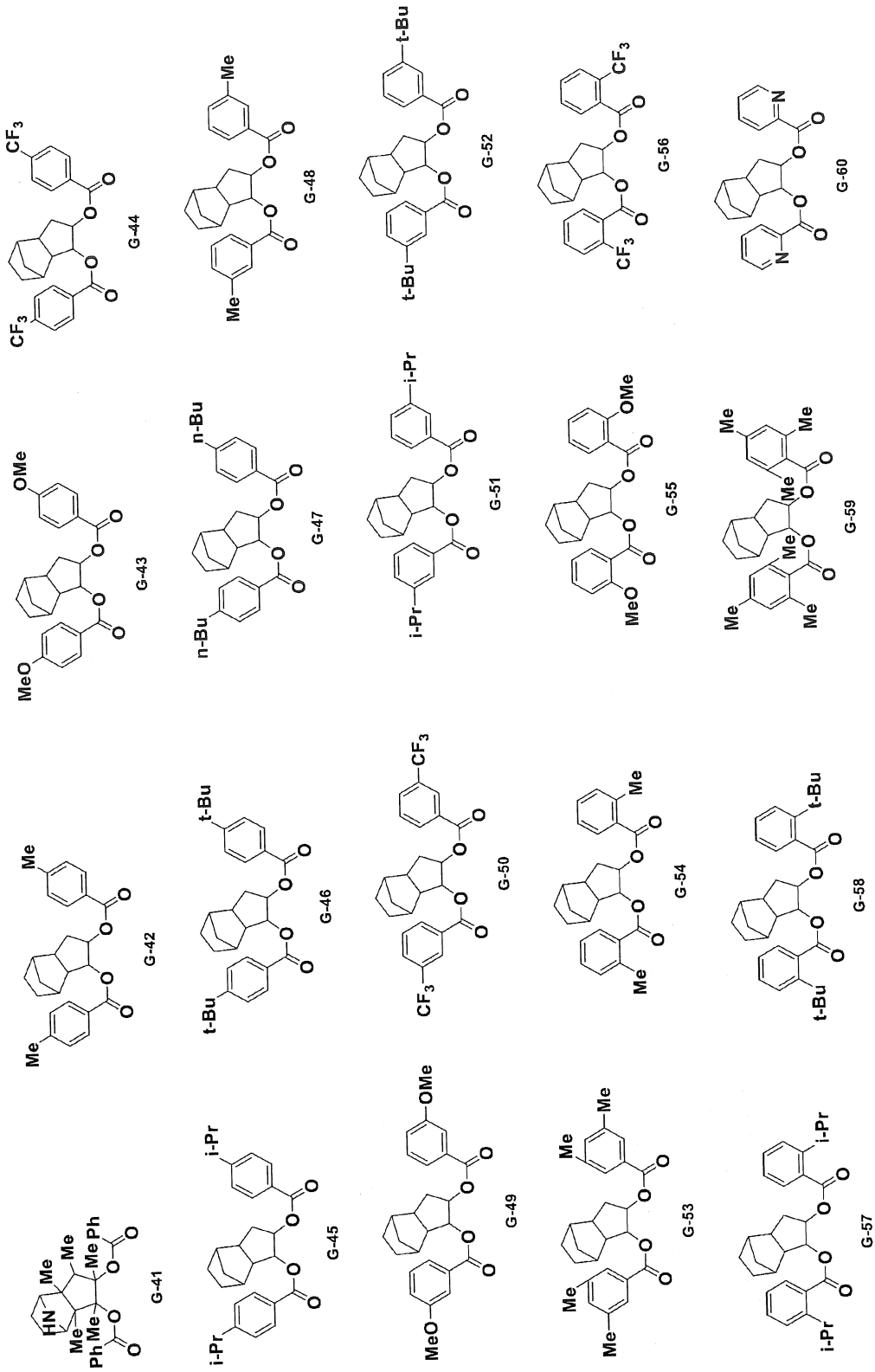


[0083]

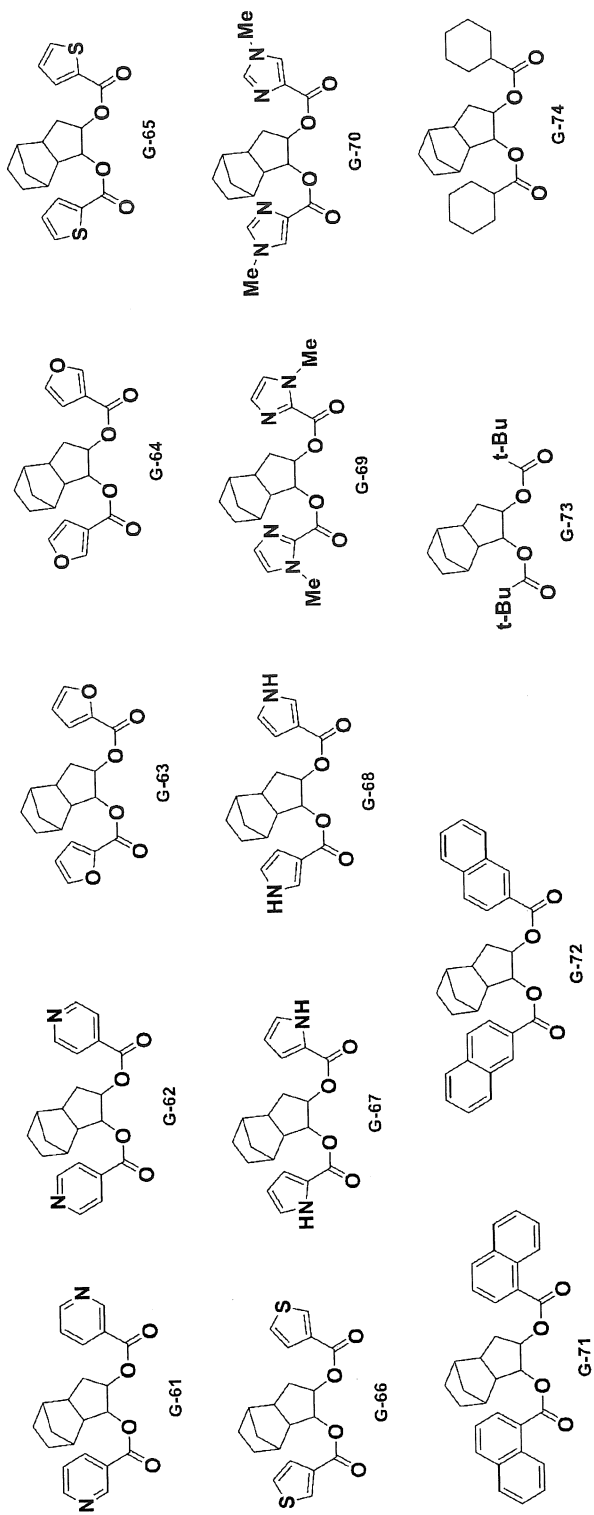


[0084]

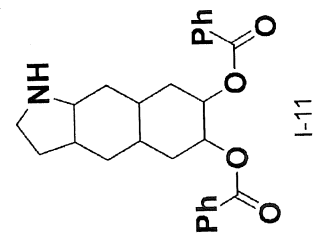
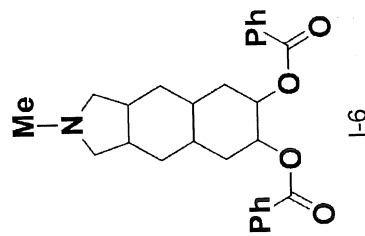
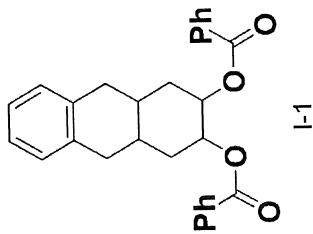
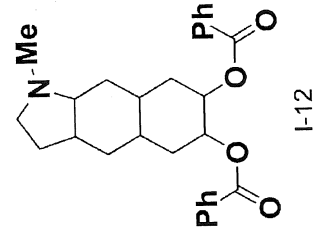
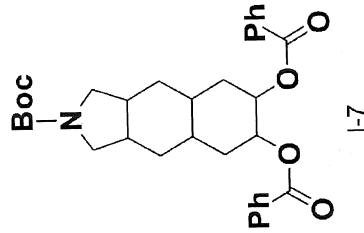
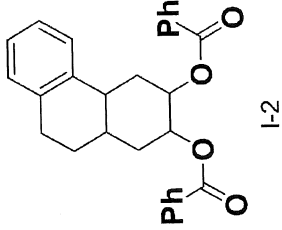
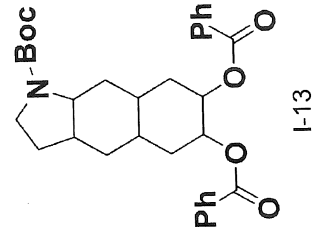
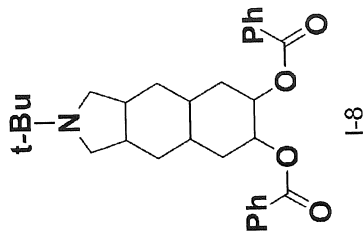
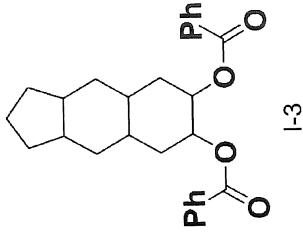
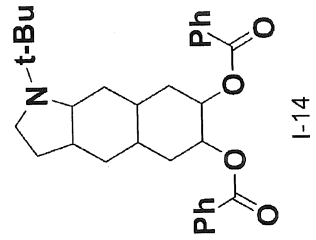
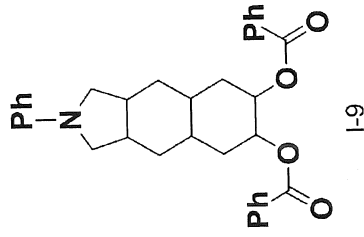
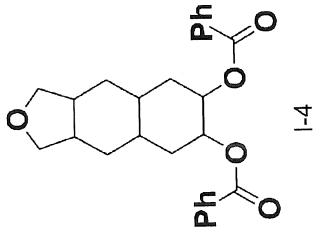
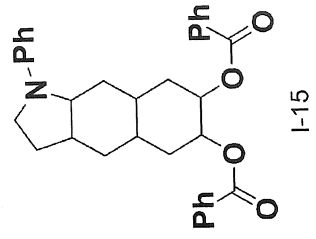
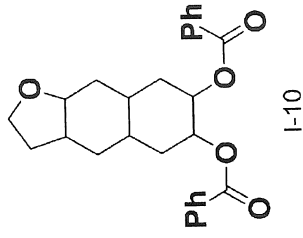
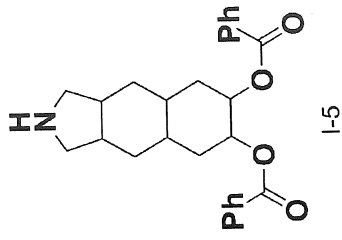




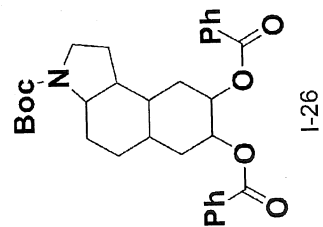
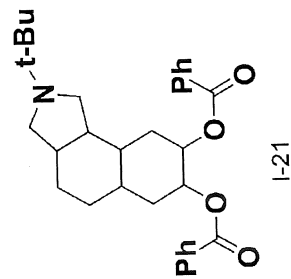
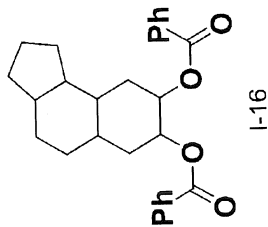
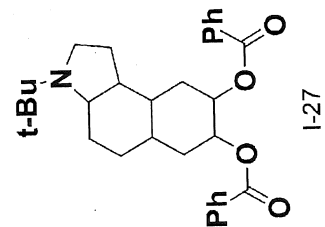
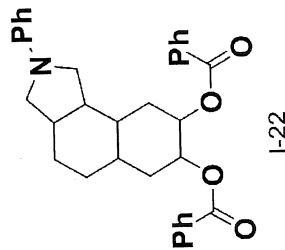
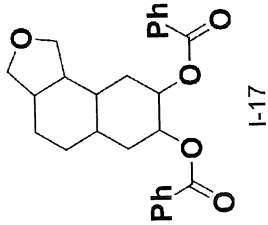
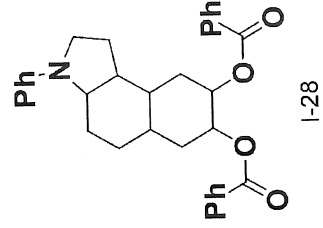
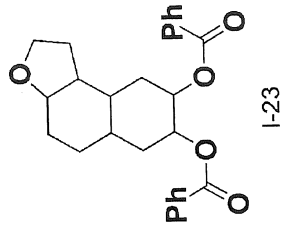
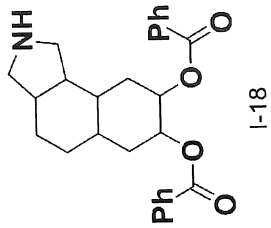
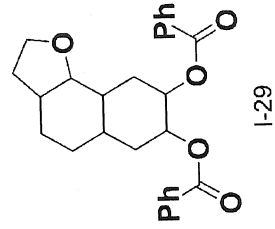
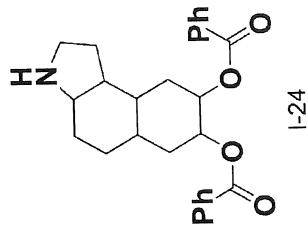
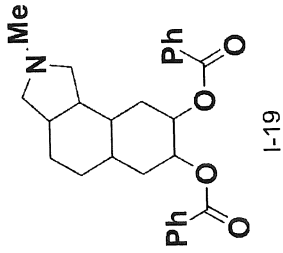
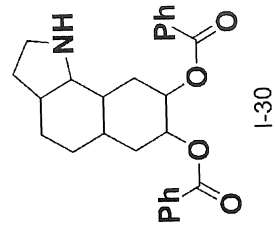
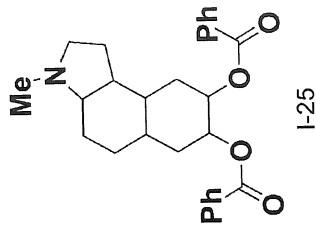
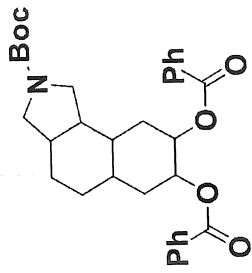
[0085]



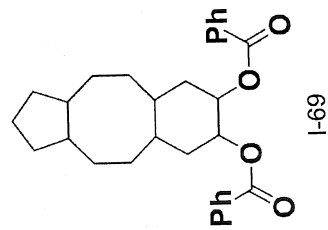
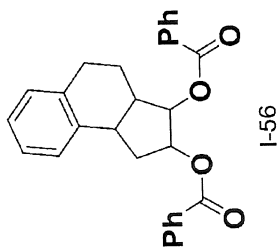
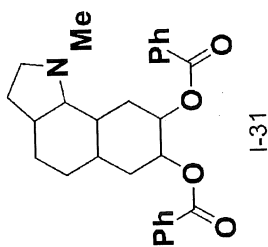
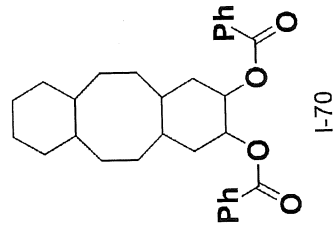
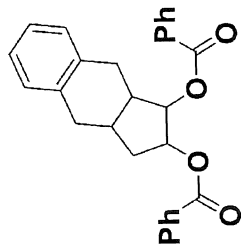
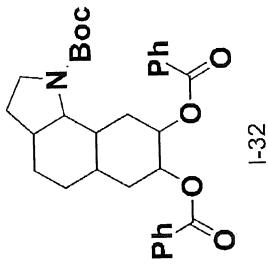
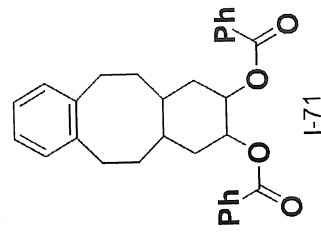
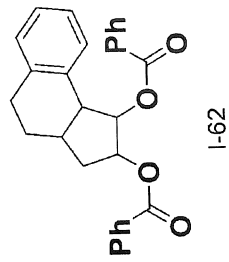
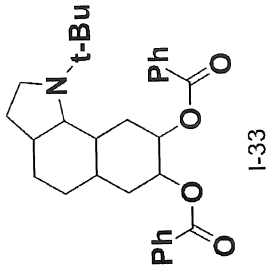
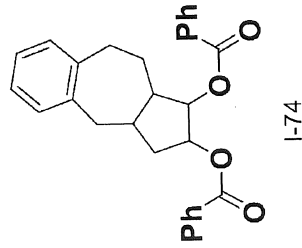
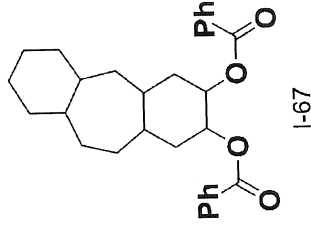
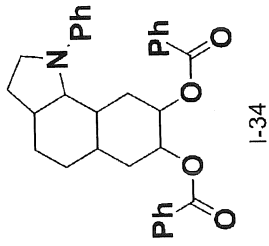
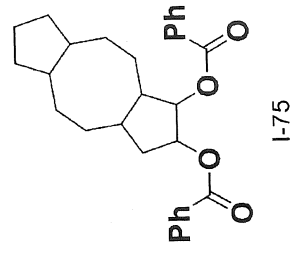
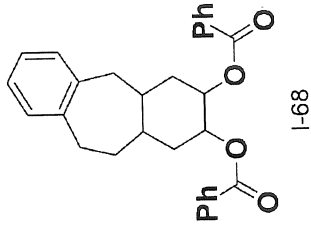
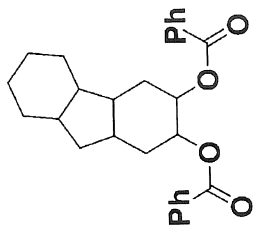
[0086]



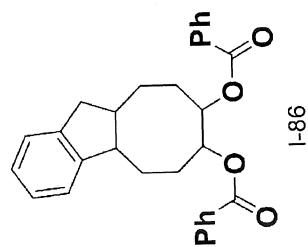
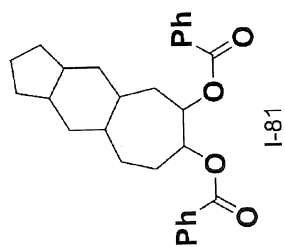
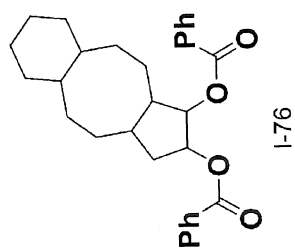
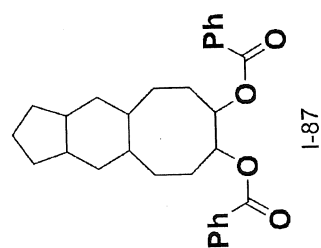
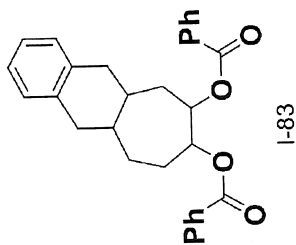
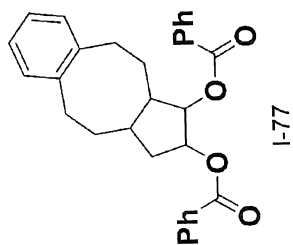
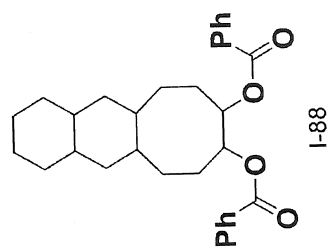
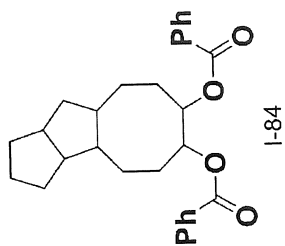
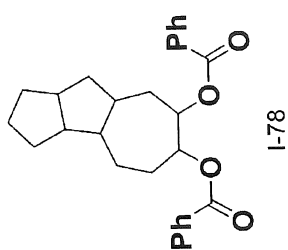
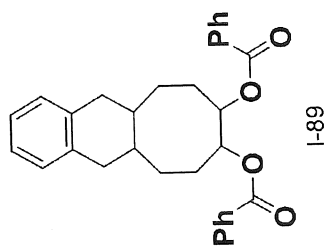
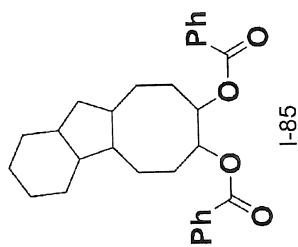
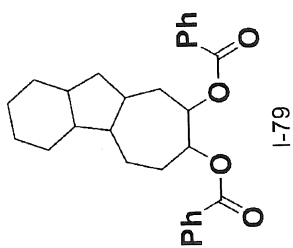
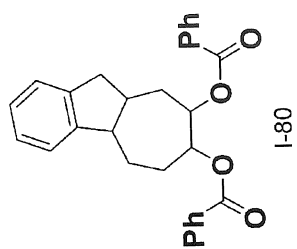
[0087]



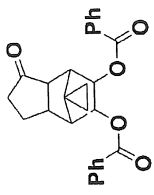
[0088]



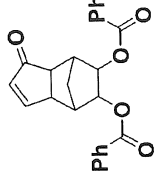
[0089]



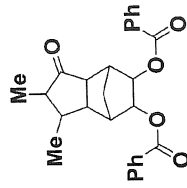
[0090]



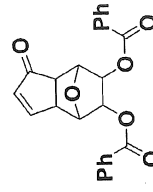
F-79



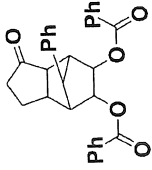
F-84



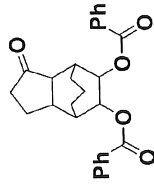
F-89



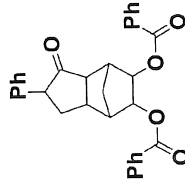
F-94



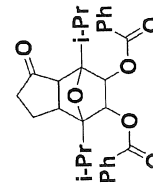
F-78



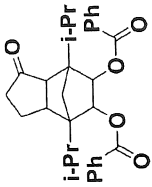
F-83



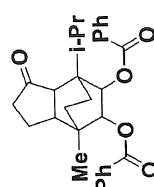
F-88



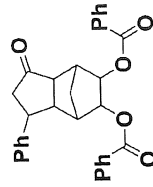
F-93



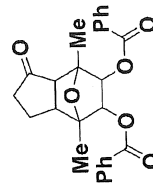
F-77



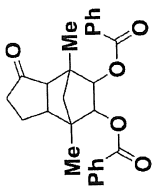
F-82



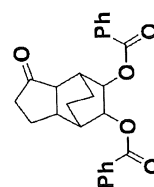
F-87



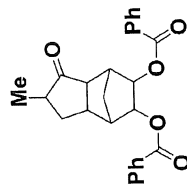
F-92



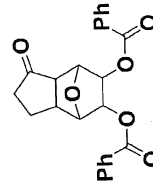
F-76



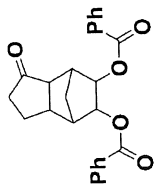
F-81



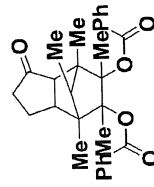
F-86



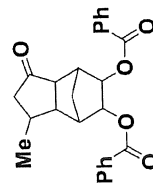
F-91



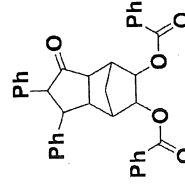
F-75



F-80

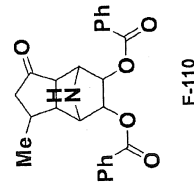
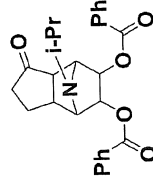
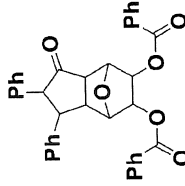
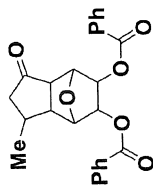
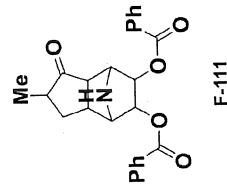
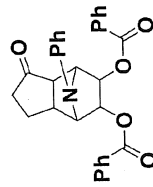
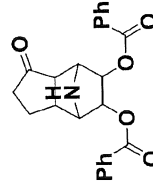
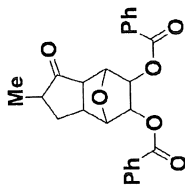
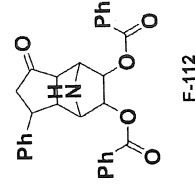
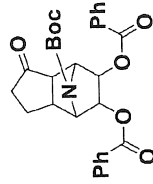
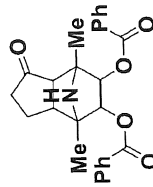
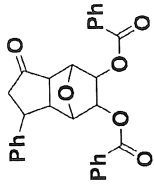
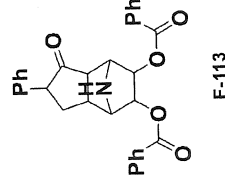
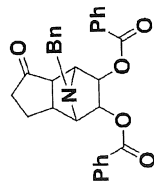
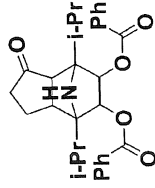
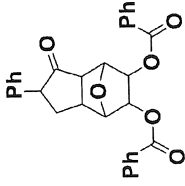
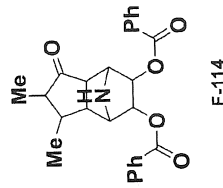
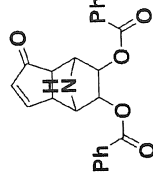
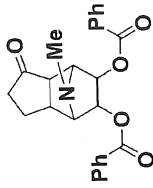
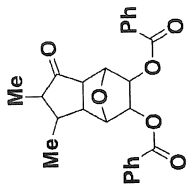


F-85



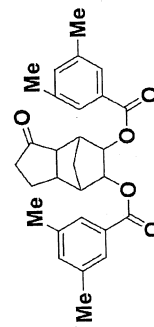
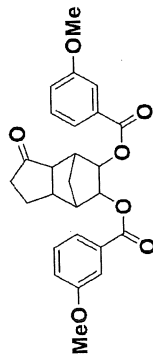
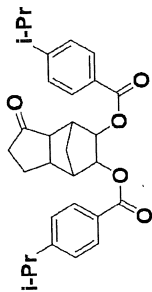
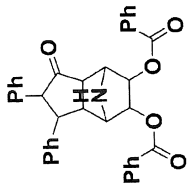
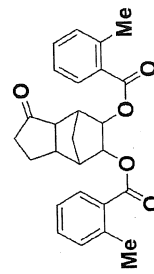
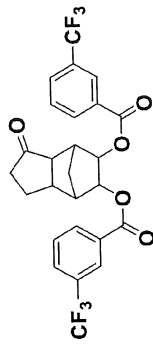
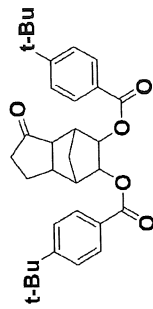
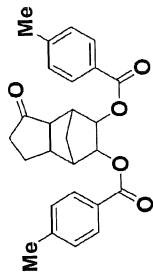
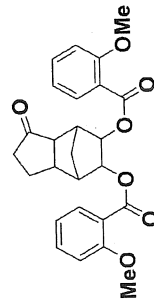
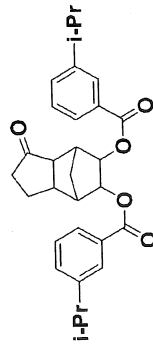
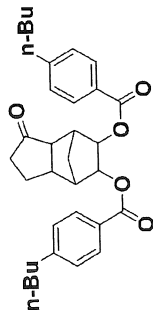
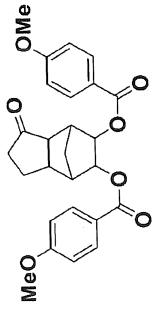
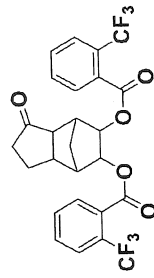
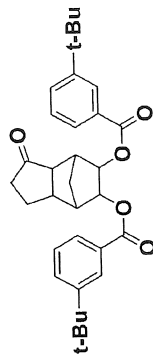
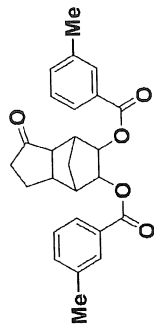
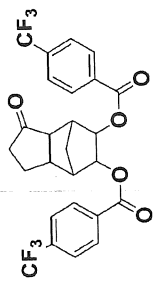
F-90

[0091]

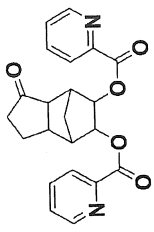


[0092]

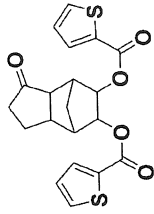




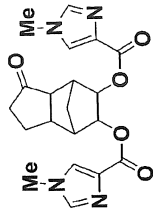
[0093]



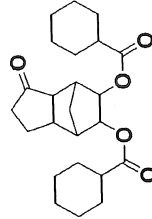
F-134



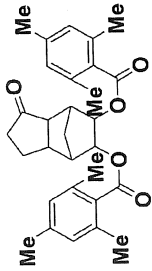
F-139



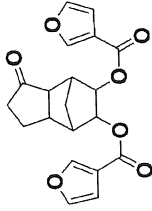
F-144



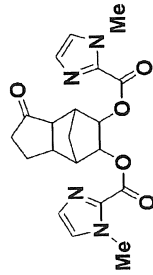
F-148



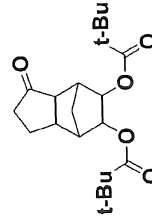
F-133



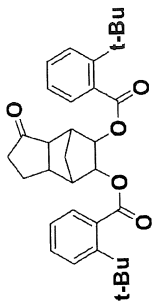
F-138



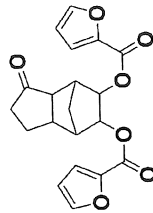
F-143



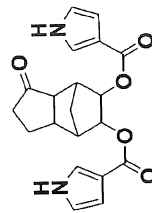
F-147



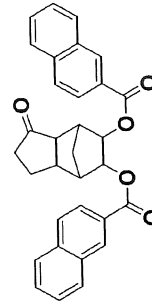
F-132



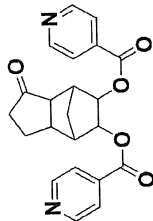
F-137



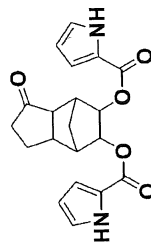
F-142



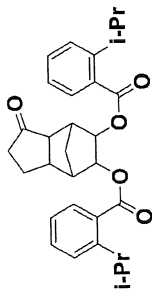
F-146



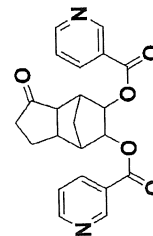
F-136



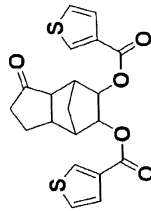
F-141



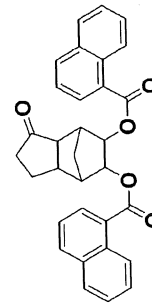
F-131



F-135

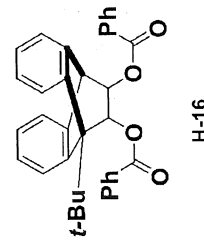
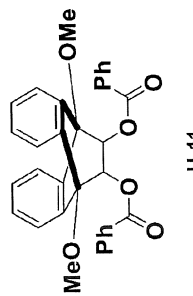
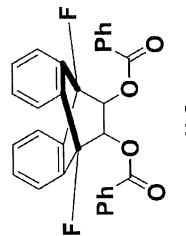
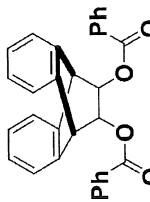
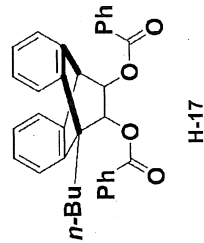
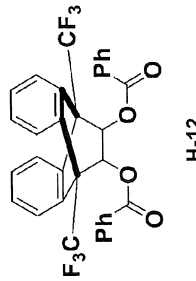
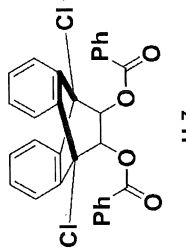
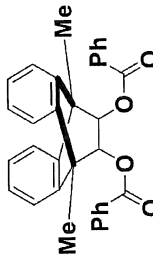
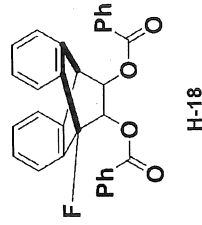
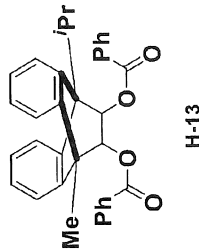
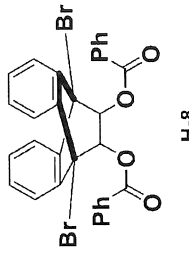
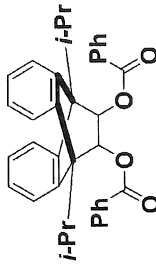
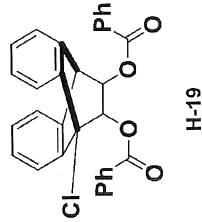
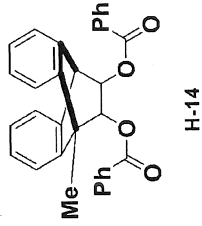
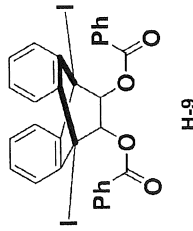
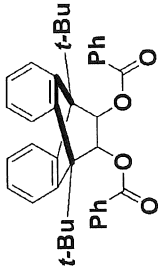
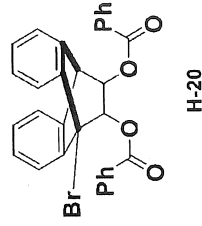
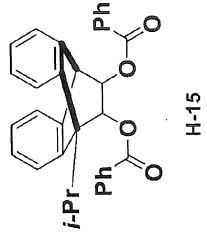
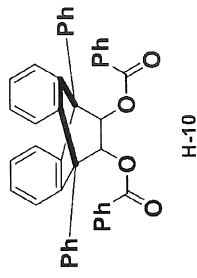
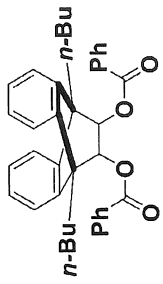


F-140

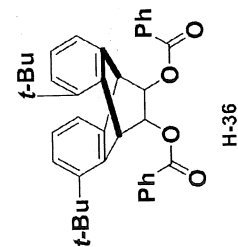
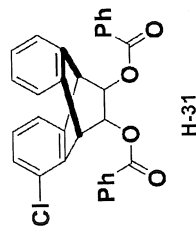
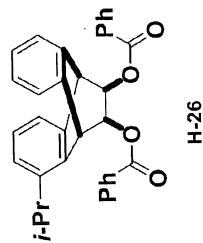
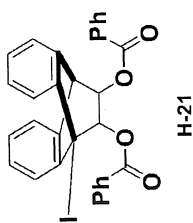
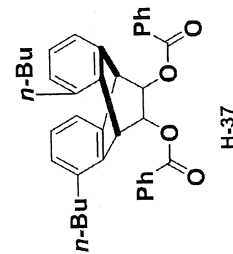
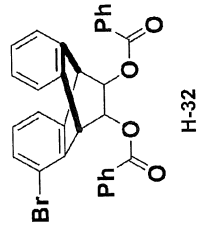
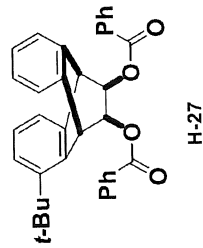
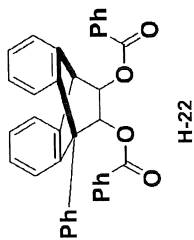
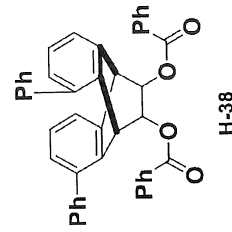
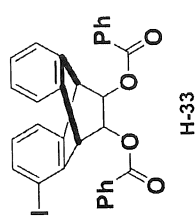
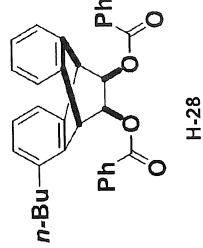
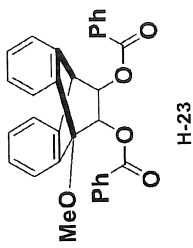
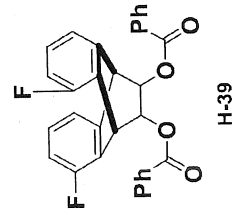
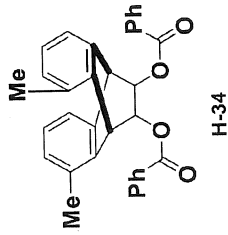
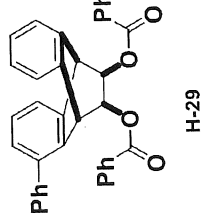
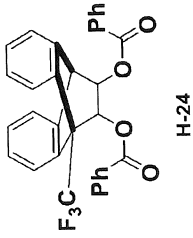
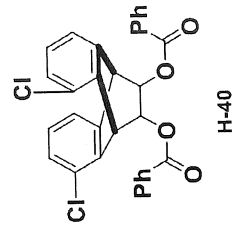
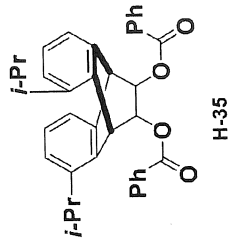
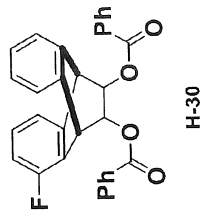
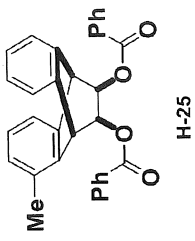


F-145

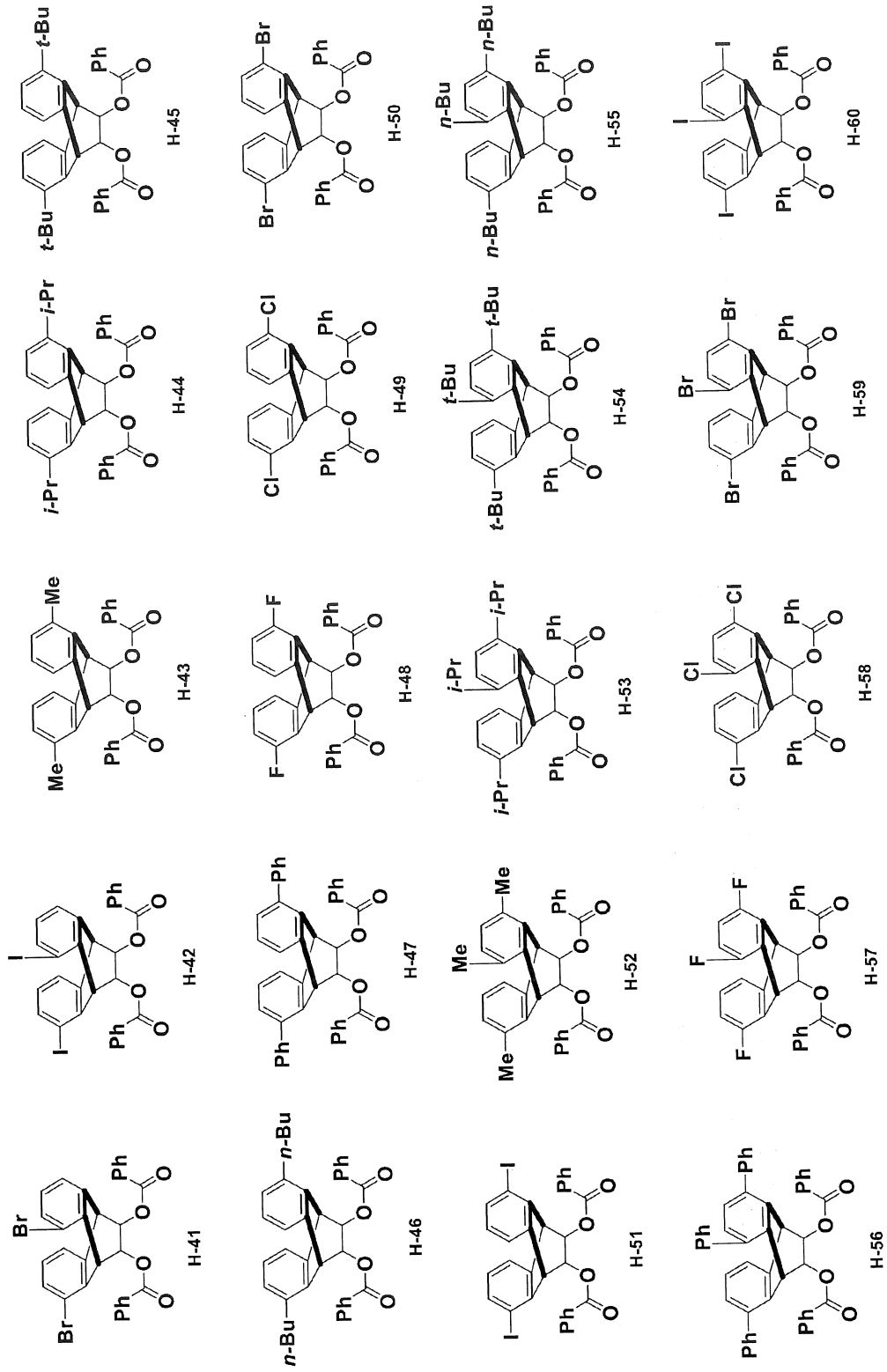
[0094]



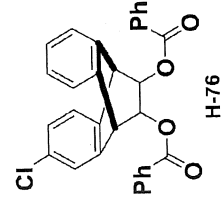
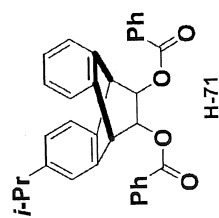
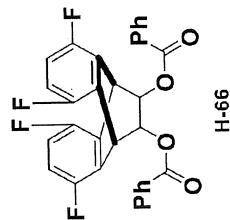
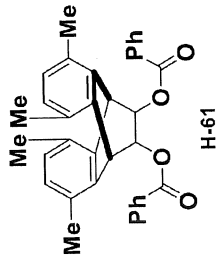
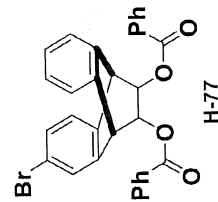
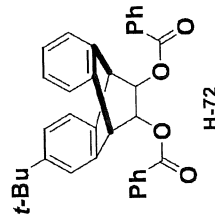
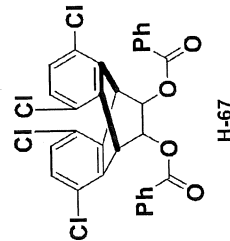
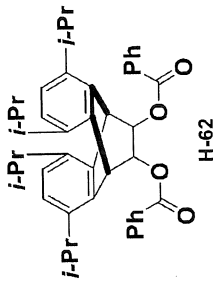
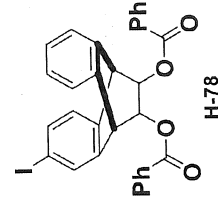
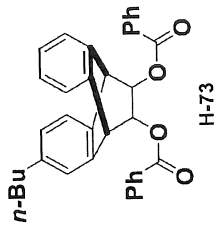
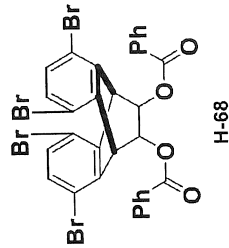
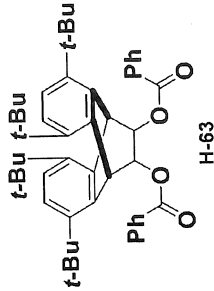
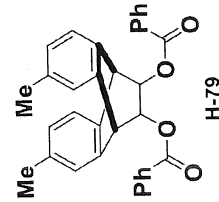
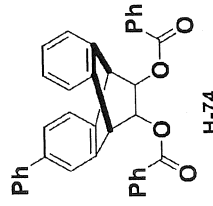
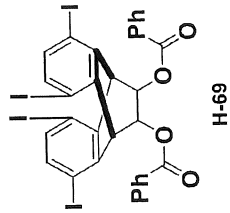
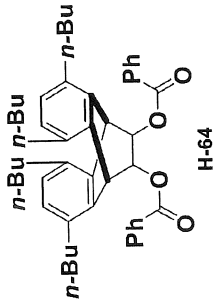
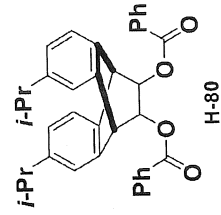
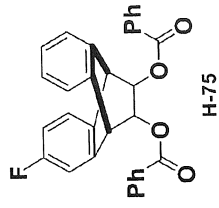
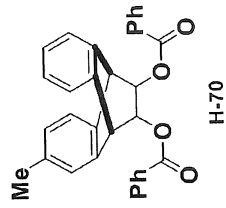
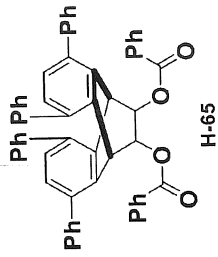
[0095]



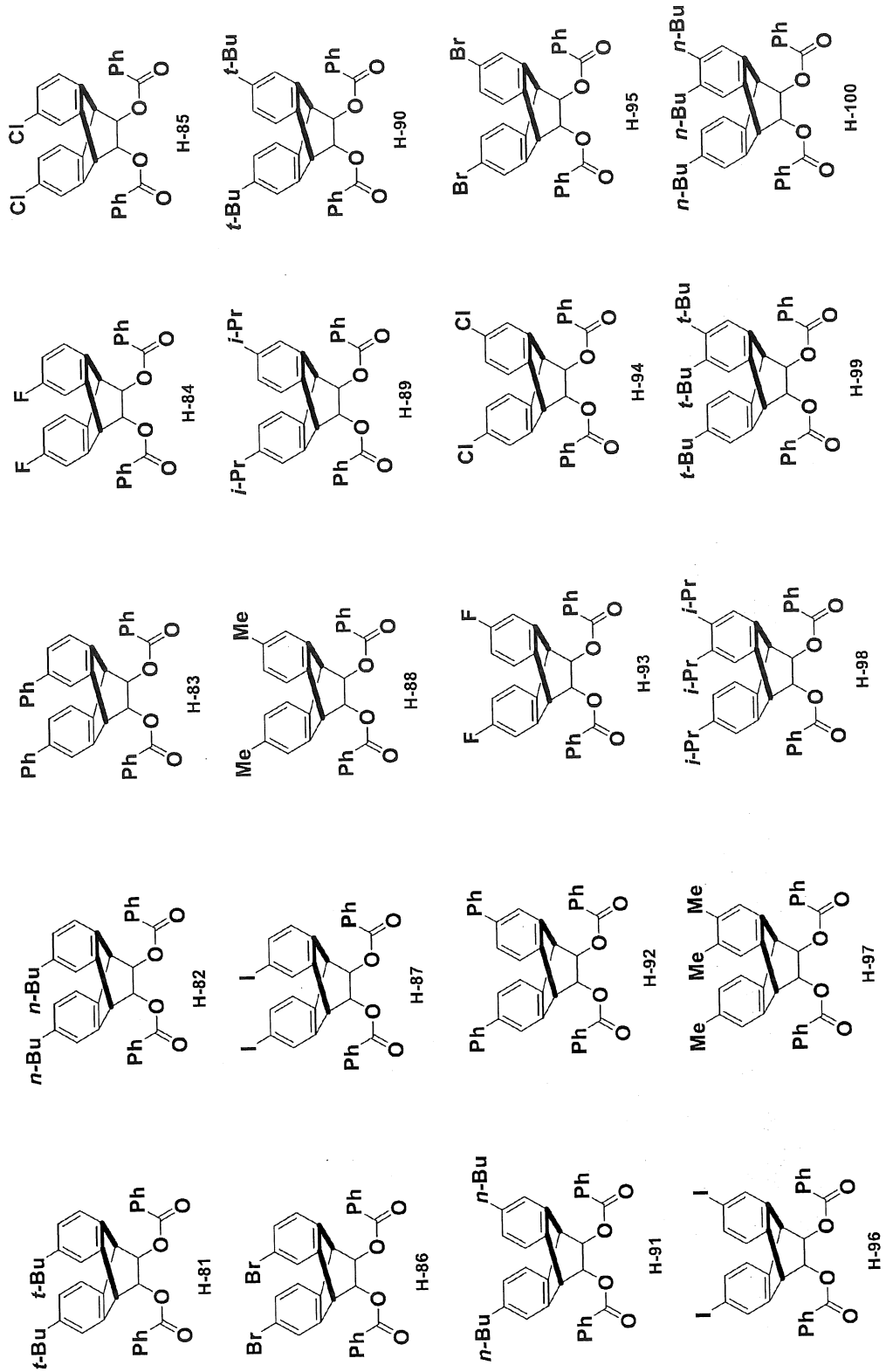
[0096]



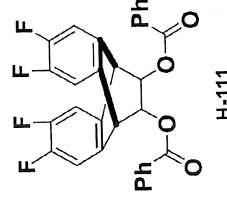
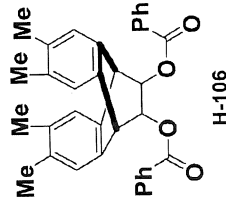
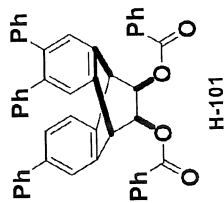
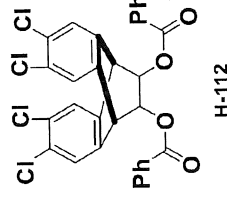
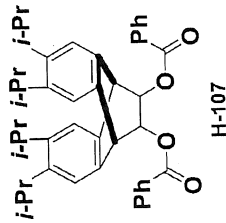
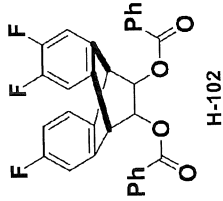
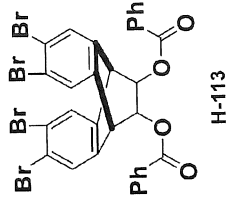
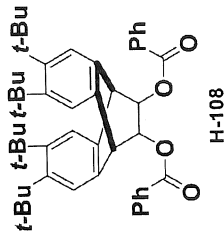
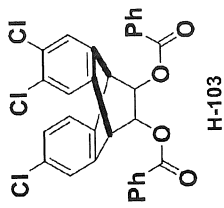
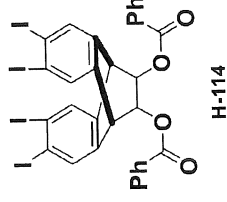
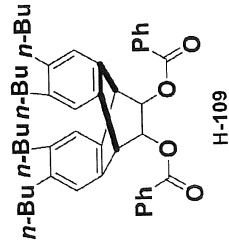
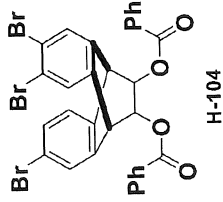
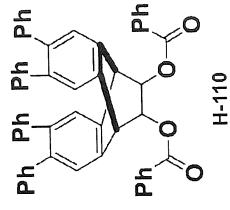
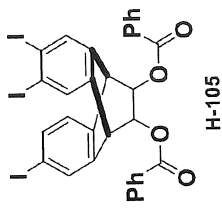
[0097]



[0098]

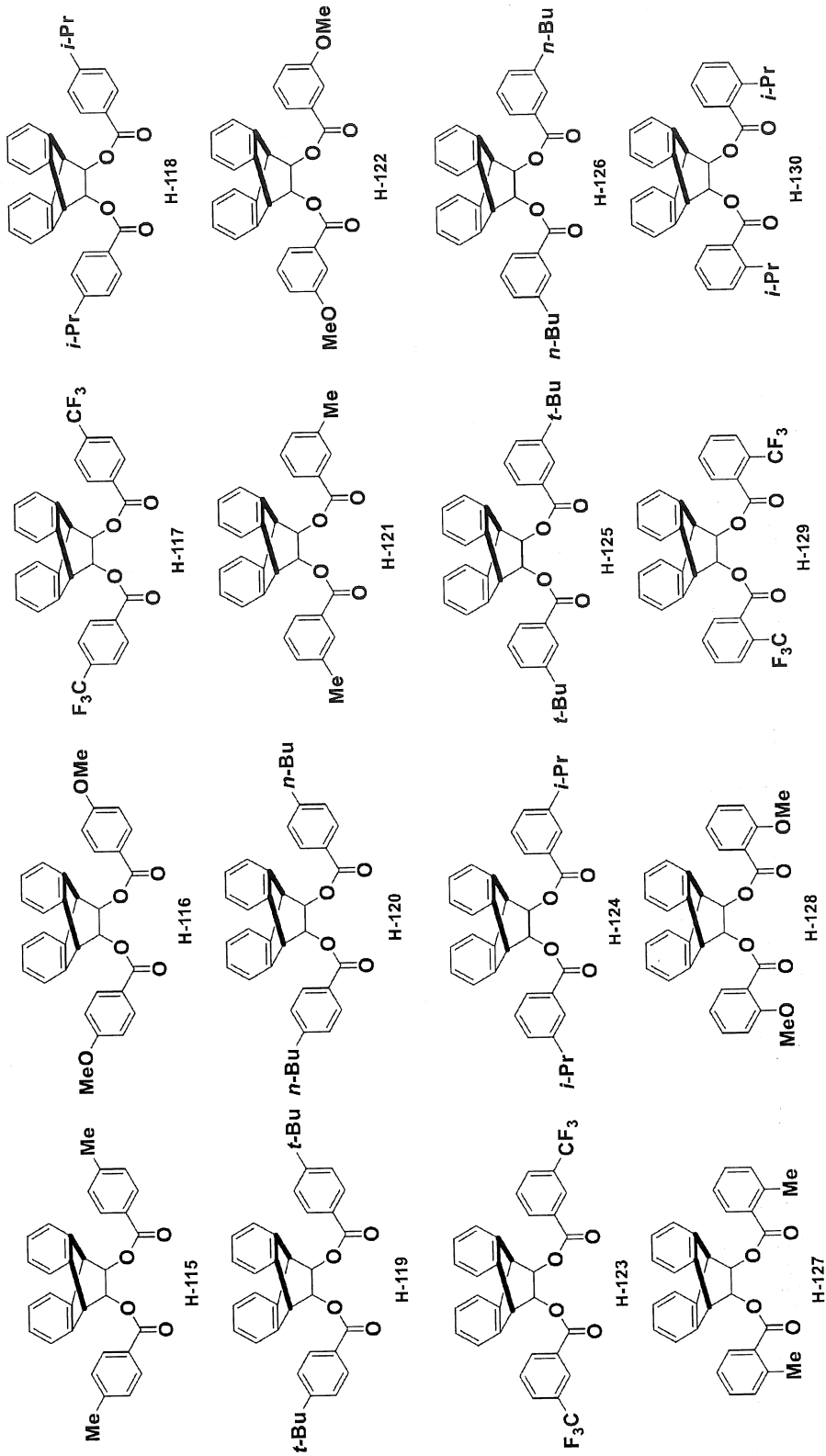


[0099]

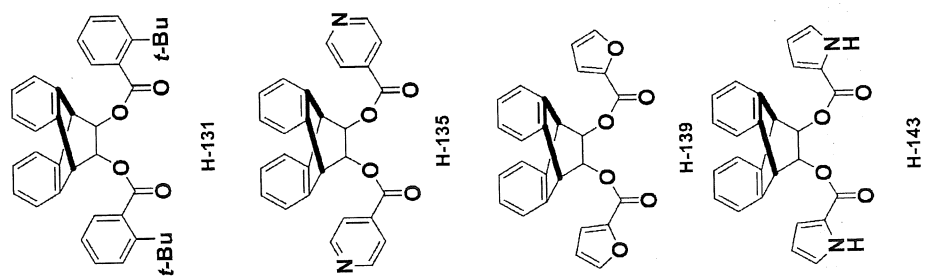
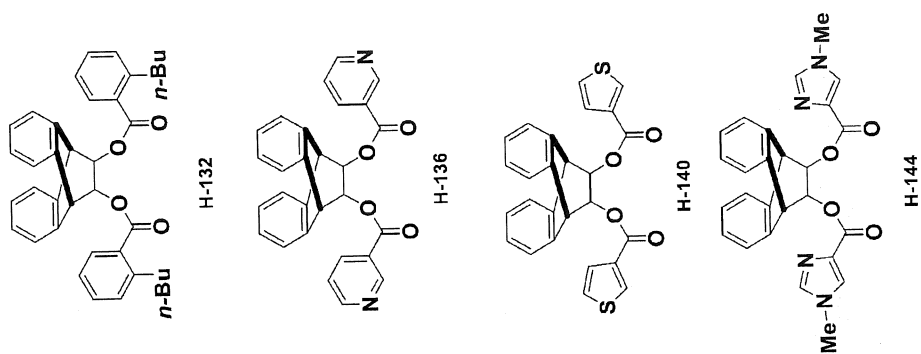
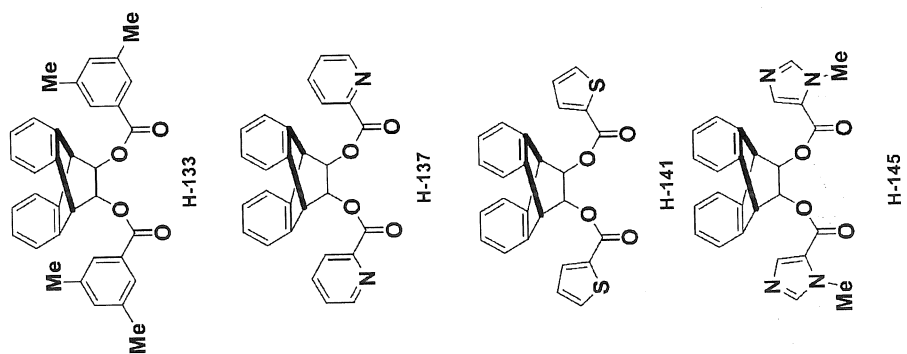
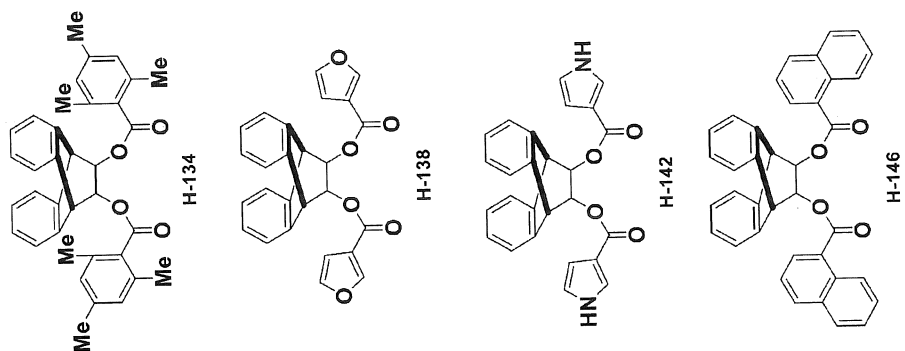


[0100]

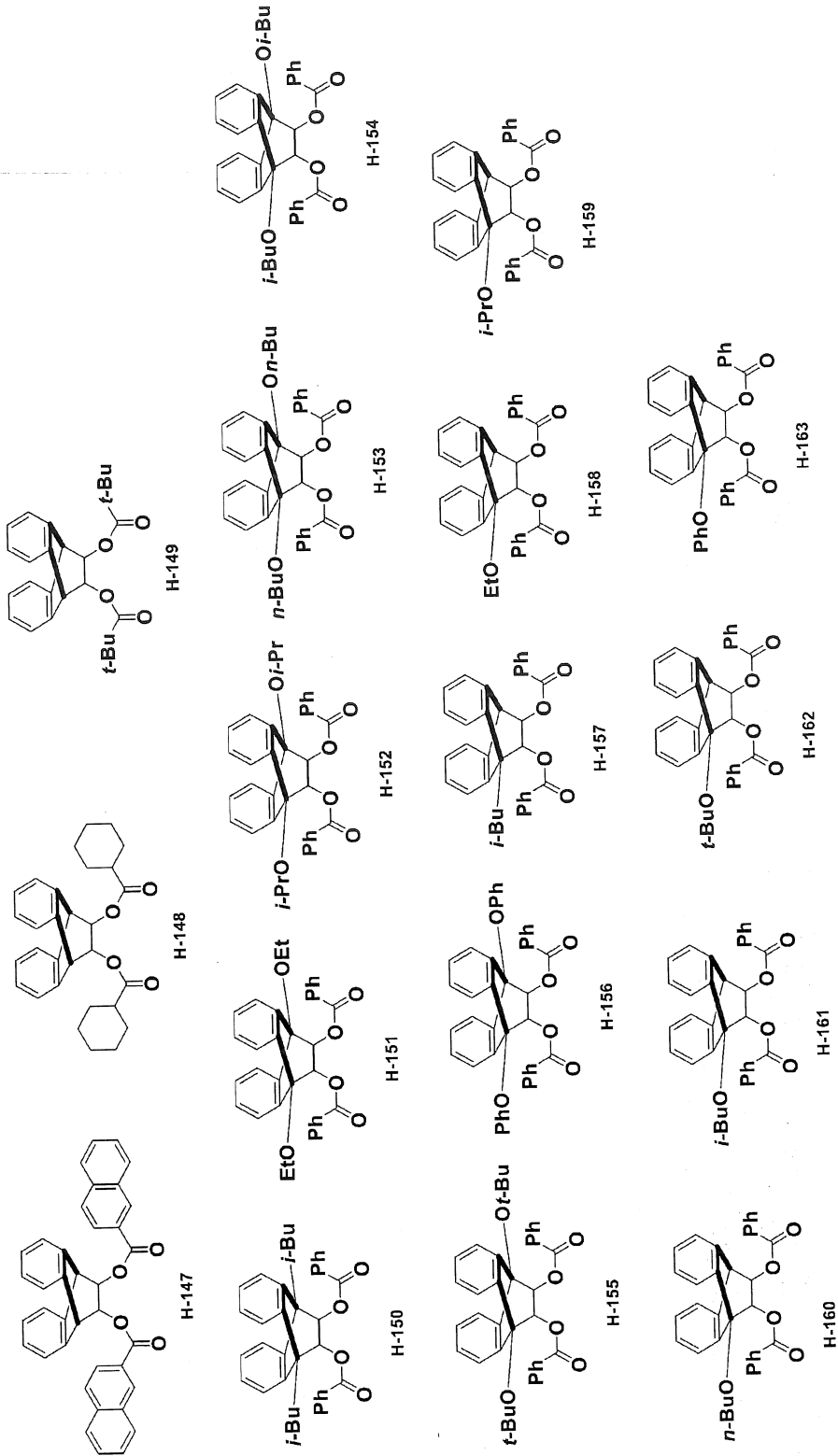


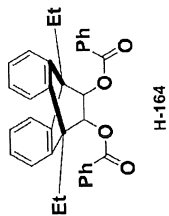
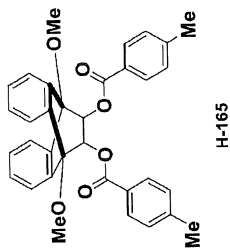
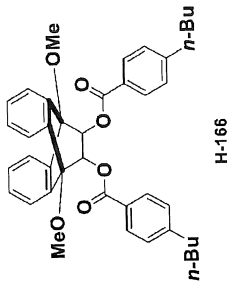
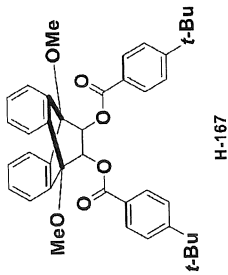
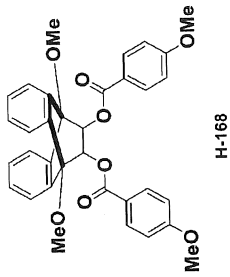


[0101]



[0102]

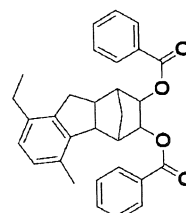
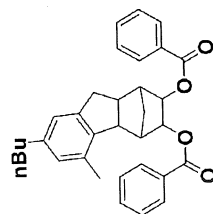
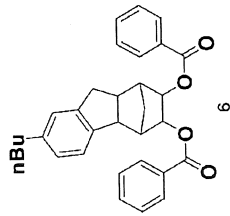
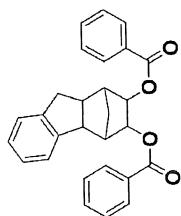
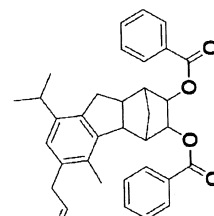
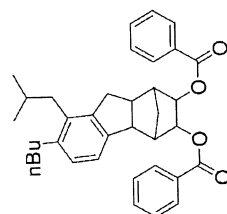
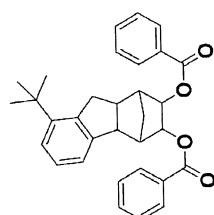
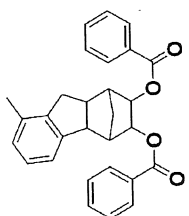
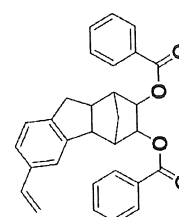
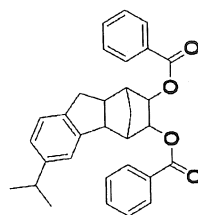
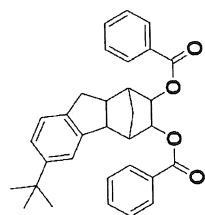
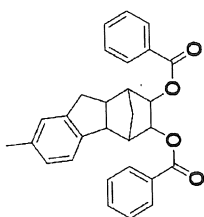
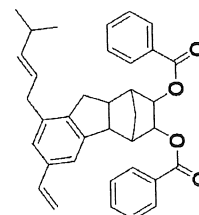
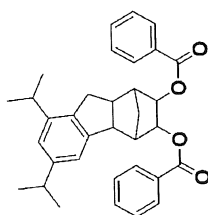
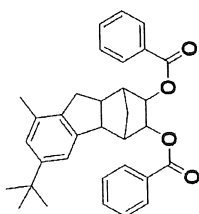
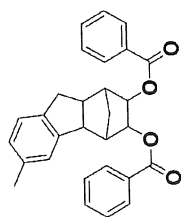
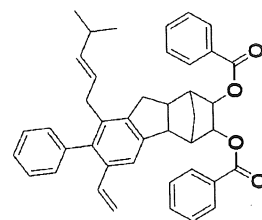
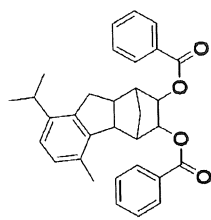
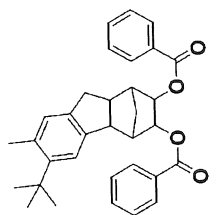
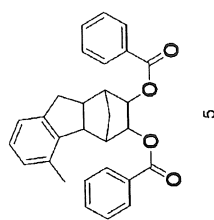




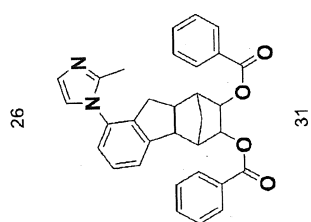
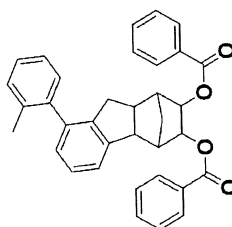
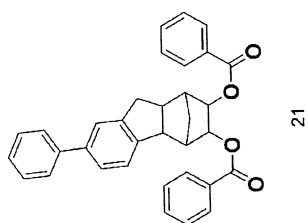
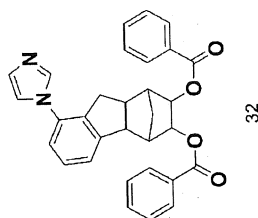
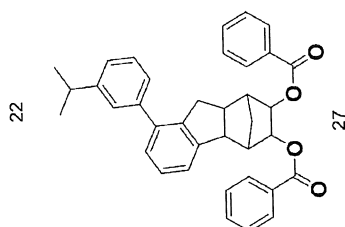
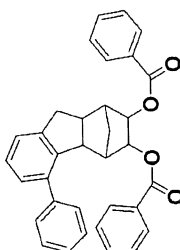
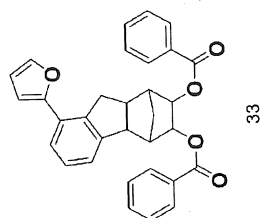
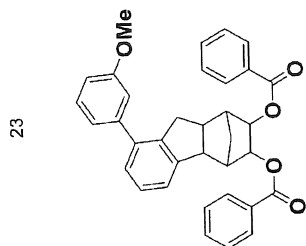
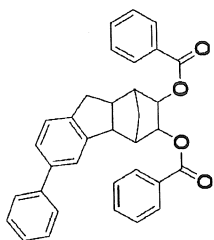
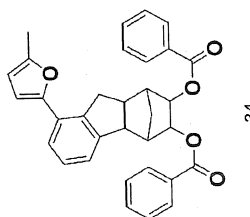
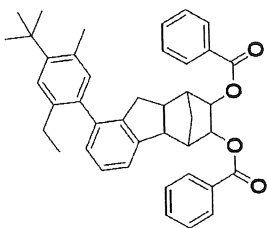
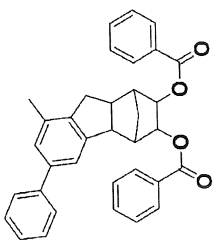
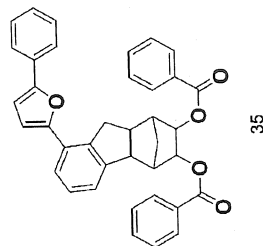
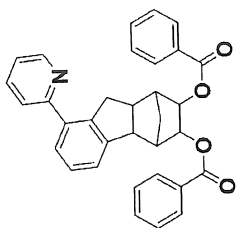
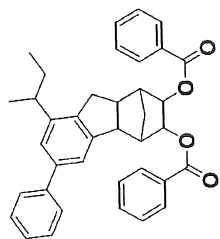
[0104]

Hơn nữa, không những các hợp chất được đề xuất ở trên mà còn cả các hợp chất của các cấu tạo có các bộ khung đa vòng riêng là các ví dụ ưu tiên.

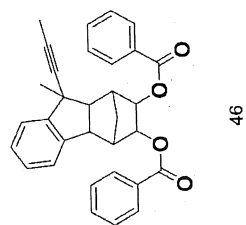
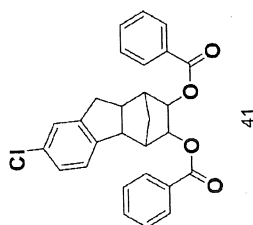
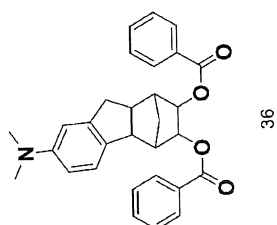
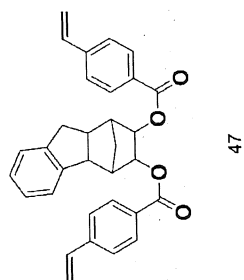
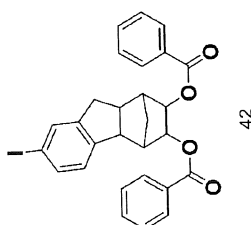
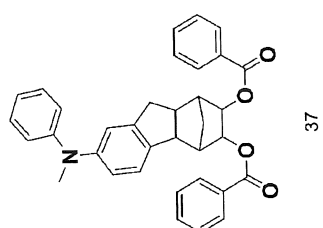
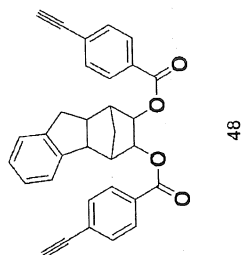
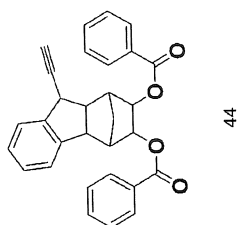
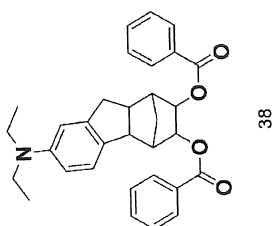
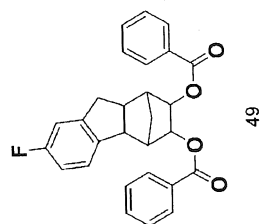
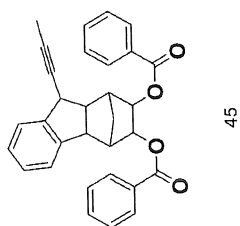
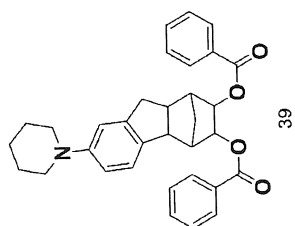
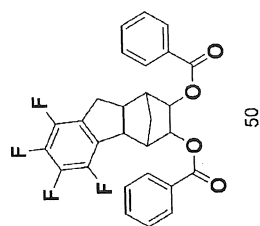
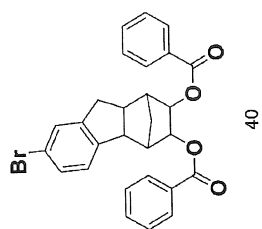
[0105]



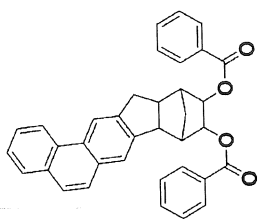
[0106]



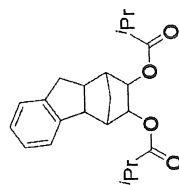
[0107]



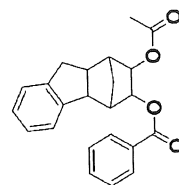
[0108]



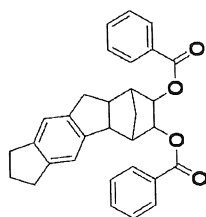
55



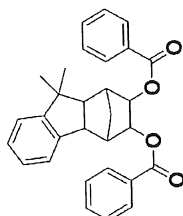
65



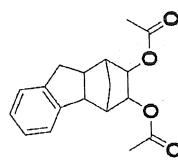
70



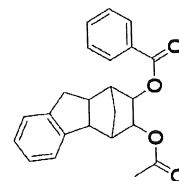
54



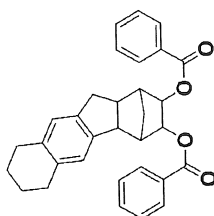
59



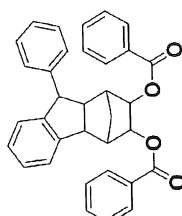
64



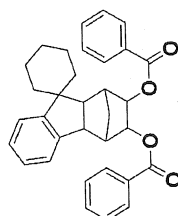
69



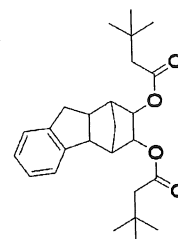
53



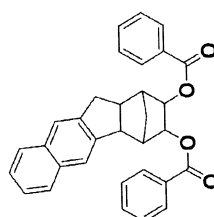
58



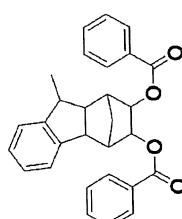
63



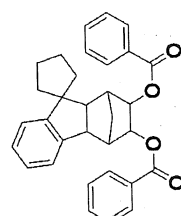
68



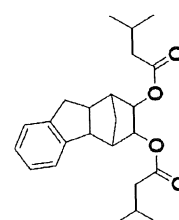
52



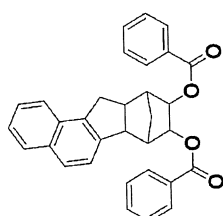
57



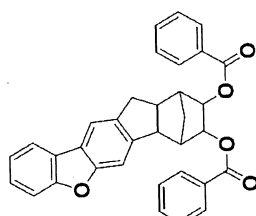
62



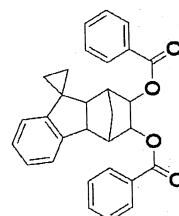
67



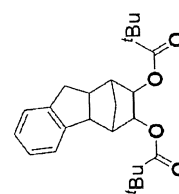
51



56



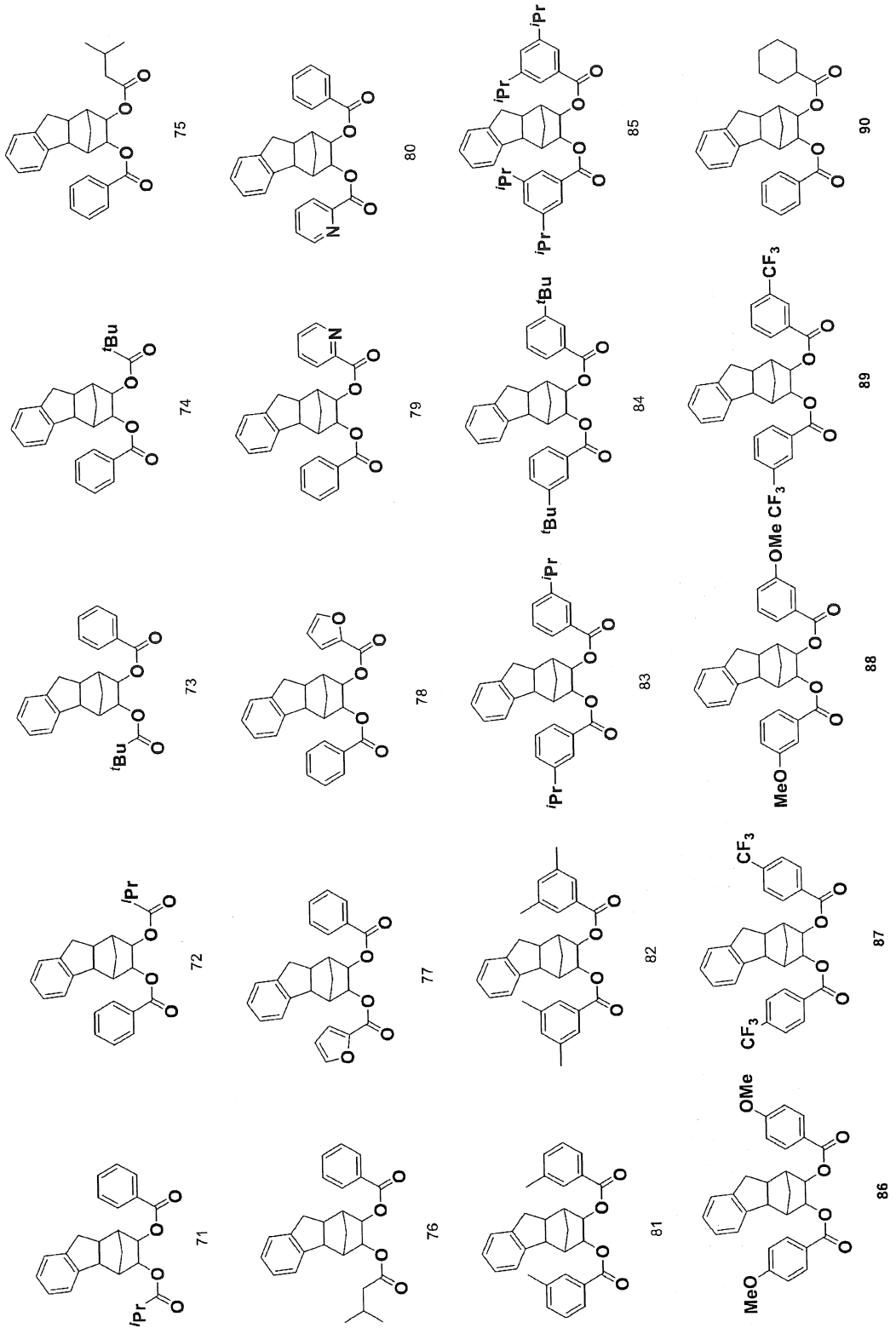
61



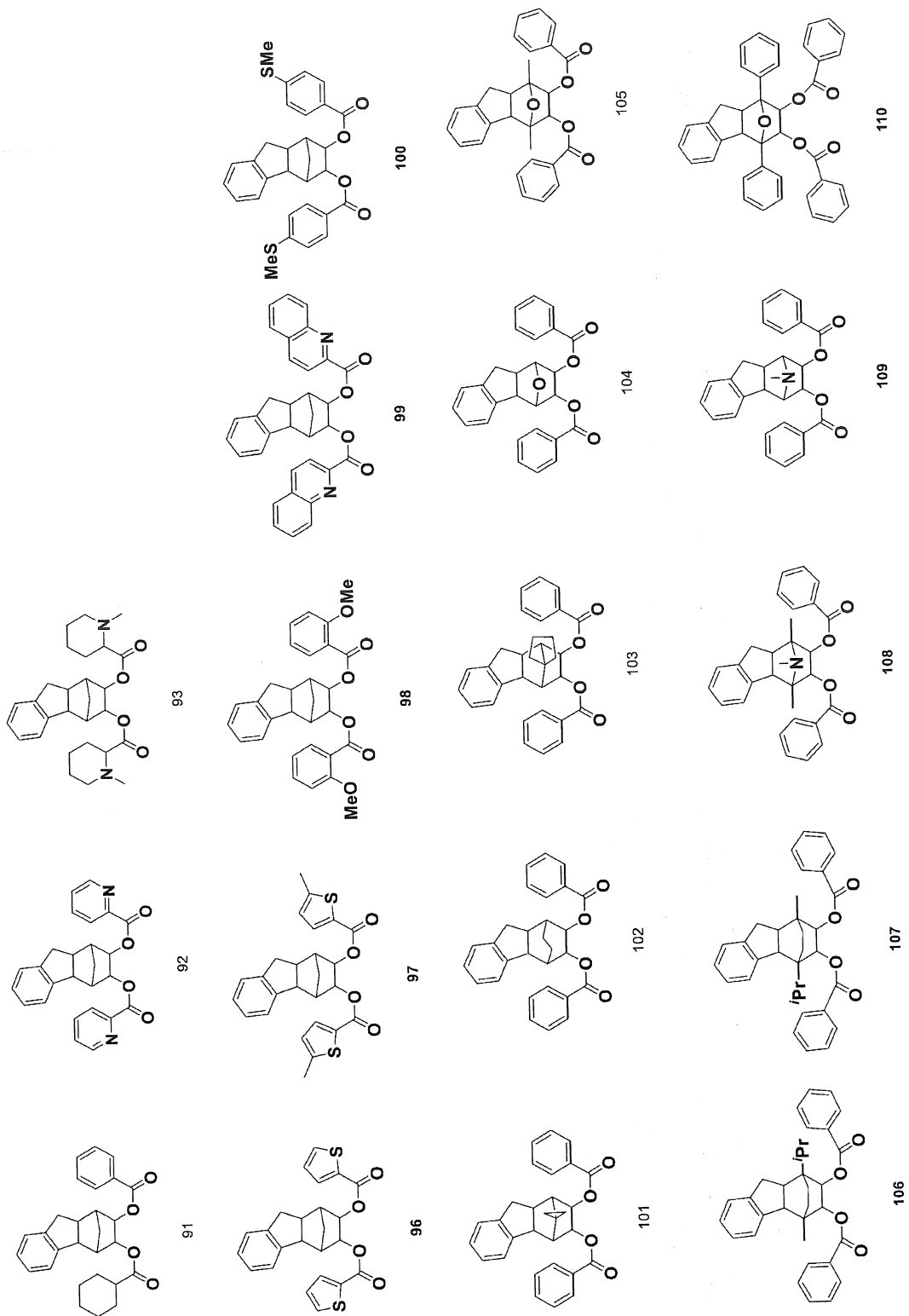
66

[0109]

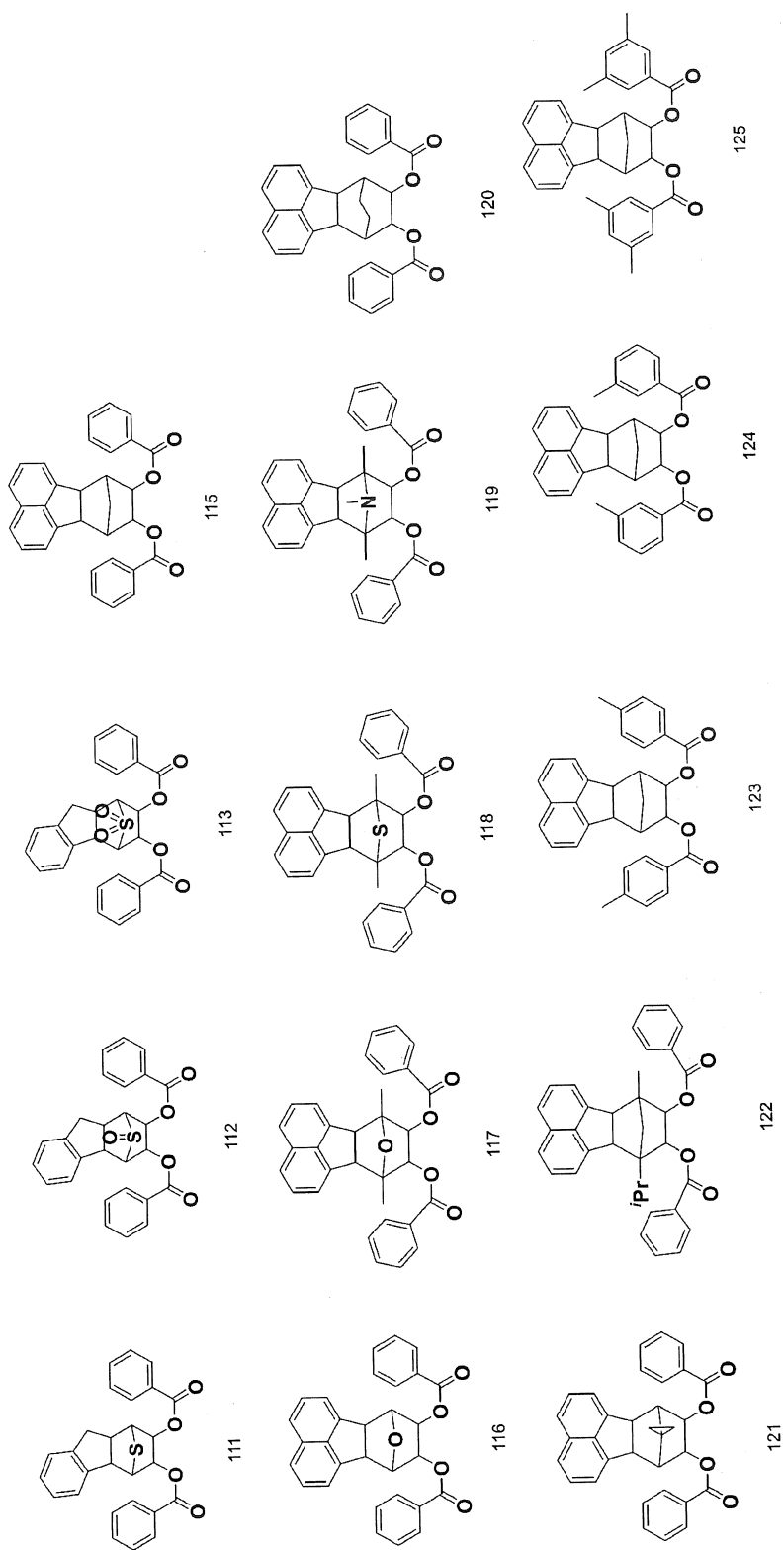




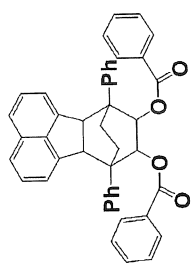
[0110]



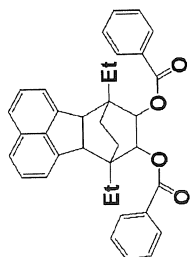
[0111]



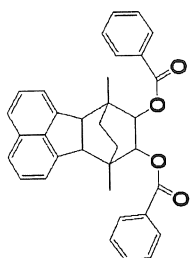
[0112]



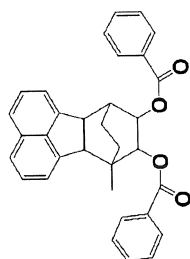
130



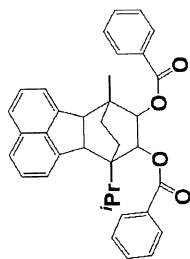
129



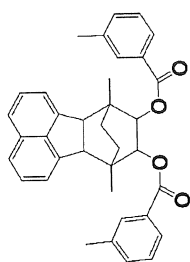
128



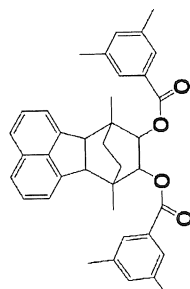
127



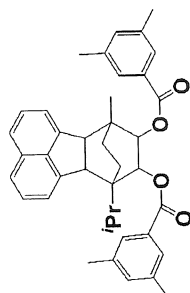
126



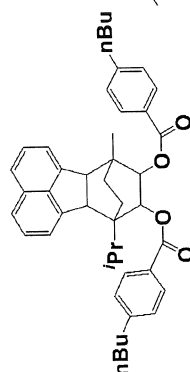
135



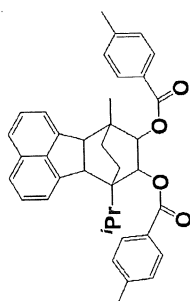
134



133

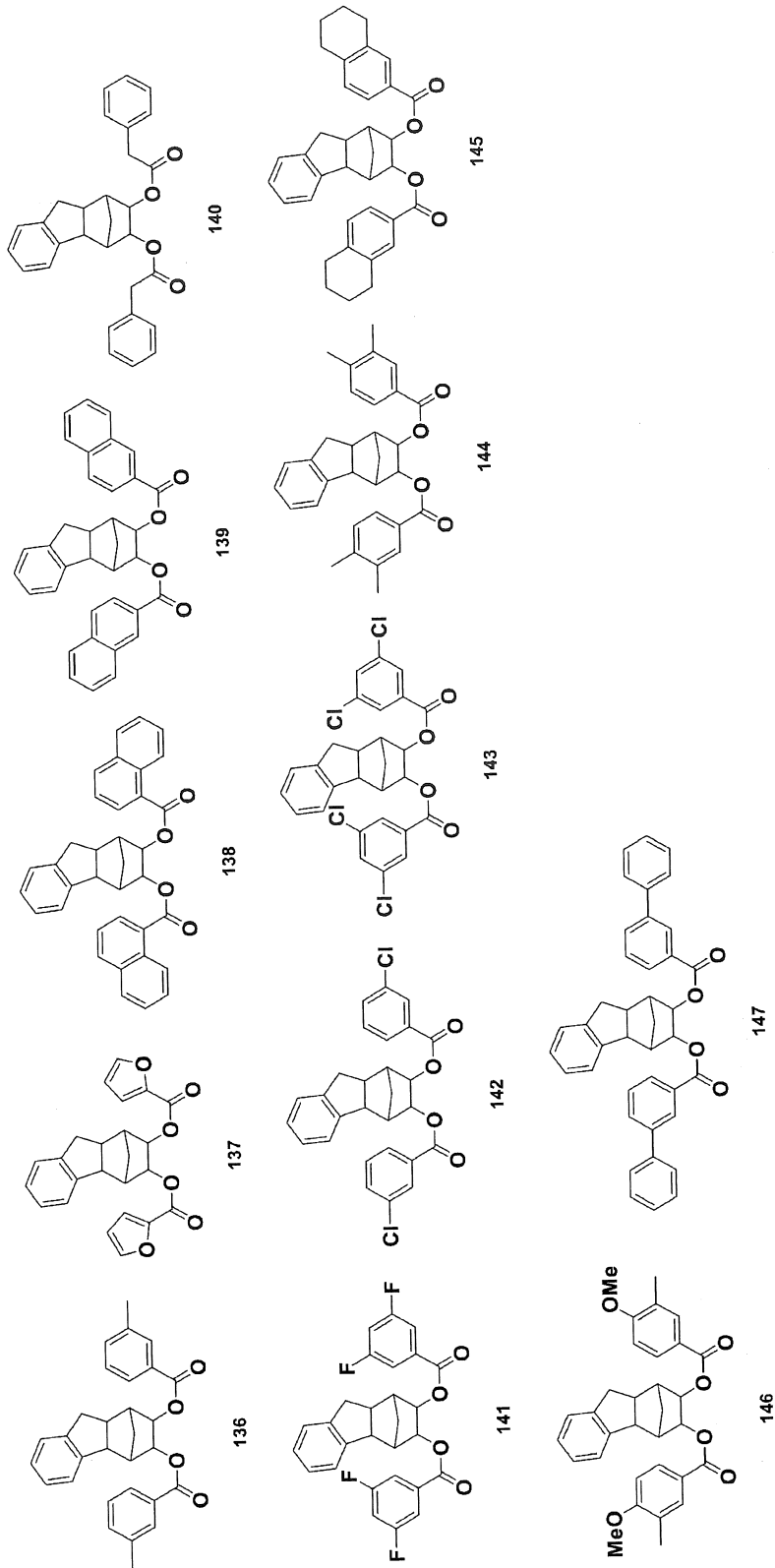


132



131

[0113]



[0114]

Trong các công thức cấu tạo được mô tả ở trên, nhóm methyl được biểu thị là “Me”, nhóm ethyl được biểu thị là “Et”, nhóm propyl được biểu thị là “Pr”, nhóm

butyl được biểu thị là “Bu”, và nhóm phenyl được biểu thị là “Ph”, và [n] là “mạch thẳng”, [i] là “mạch nhánh”, và “t” là “bậc ba”.

[0115]

Trong số các hợp chất ở trên, các hợp chất chứa liên kết đôi (gồm cấu tạo thom) trong cấu tạo vòng có thể được ưu tiên từ quan điểm về, chẳng hạn, chức năng điều chỉnh trọng lượng phân tử bởi hydro.

Cấu tạo trong đó các nguyên tử cacbon mà R<sup>3</sup> đến R<sup>16</sup> và R được liên kết vào đó gồm cacbon bậc bốn có thể là ưu tiên.

[0116]

Bộ khung cơ bản của hợp chất như vậy ưu tiên là cấu tạo trong đó ba hoặc nhiều bộ khung vòng được nối, như là antraxen. Cấu tạo vòng ưu tiên là chứa liên kết đôi. Hơn nữa, một hoặc nhiều bộ khung vòng của chúng được ưu tiên là vòng thom.

[0117]

Các hợp chất ưu tiên là có cấu tạo có phân tử thế không phải là hydro trên cacbon ở các vị trí đầu cầu. Phương án ưu tiên của phân tử thế là nhóm hydrocarbon hoặc nhóm hydrocarbon chứa nguyên tử khác loại như được mô tả ở trên. Ví dụ ưu tiên về nguyên tử khác loại trong nhóm hydrocarbon chứa nguyên tử khác loại là nguyên tố Nhóm 16 của bảng tuần hoàn, như là oxy hoặc lưu huỳnh, và oxy là được ưu tiên hơn. Nhóm hydrocarbon chứa nguyên tử khác loại ưu tiên là nhóm alkoxy. Phân tử thế như vậy có thể ưu tiên là phân tử thế cho điện tử.

[0118]

Các nguyên tử cacbon ở các vị trí đầu cầu đề cập đến các nguyên tử cacbon mà tham gia hai hoặc nhiều vòng. Chẳng hạn, cacbon mà R<sup>11</sup> và R<sup>12</sup> được liên kết

vào đó trong công thức cấu tạo của công thức (1) là cacbon ở các vị trí đầu cầu. Khi olefin được polyme hóa sử dụng thành phần chất xúc tác titan rắn chứa hợp chất như vậy của cấu tạo có các phần tử thế ở các vị trí đầu cầu là hợp chất chứa nhóm đa este vòng (a), thì có xu hướng là polyme có tốc độ dòng nóng chảy tương đối cao có khả năng thu được. Ở thời điểm này, hoạt tính polyme hóa của thành phần chất xúc tác titan rắn và tính lập thể đặc thù không có khả năng suy biến, và do đó hợp chất như vậy là được ưu tiên. Các đặc tính như vậy là ưu điểm, chẳng hạn, khi sản xuất polyme làm nguyên liệu để đúc phun.

[0119]

Trong khi lý do tại sao tính hiệu quả của cấu tạo như vậy được thể hiện hiện nay không rõ ràng, có vẻ đối với các tác giả sáng chế là tính hiệu quả có được đối với một hoặc cả hai trong số yếu tố cấu tạo mà sự có mặt của các phần tử thế gia tăng tương đối tỷ lệ cho tác dụng vị trí hoạt động của hydro chứ không phải là olefin, và yếu tố điện tử thu được từ hiệu quả phần tử thế.

[0120]

Các hợp chất có cấu tạo dieste như trên có các chất đồng phân như là dạng cis và trans có nguồn gốc từ nhóm  $\text{OCOR}^1$  và nhóm  $\text{OCOR}^2$  trong công thức (1), và bất kỳ cấu tạo nào có hiệu quả mà đáp ứng mục đích của sáng chế. Dạng cis là được ưu tiên hơn. Hàm lượng của dạng cis cao hơn có xu hướng đem lại hoạt tính cao hơn, và tính đều lập thể cao hơn của polyme thu được.

[0121]

Một trong số các hợp chất này có thể được sử dụng một mình, hoặc hai hoặc nhiều loại có thể được sử dụng kết hợp. Miễn là mục đích của sáng chế không bị ảnh hưởng, hợp chất chứa nhóm đa este vòng (a) có thể được sử dụng

kết hợp với thành phần chất xúc tác (b) và thành phần chất xúc tác (c) mà sẽ được mô tả dưới đây.

[0122]

Hợp chất chứa nhóm đa este vòng (a) có thể được tạo thành trong quá trình điều chế thành phần chất xúc tác titan rắn (I). Chẳng hạn, khi điều chế thành phần chất xúc tác titan rắn (I), bố trí bước cho, chẳng hạn, axit carboxylic anhydrit hoặc axit carboxylic halogenua tương ứng với thành phần chất xúc tác (a) về cơ bản tiếp xúc với polyol tương ứng cũng cho phép hợp chất chứa nhóm đa este vòng (a) sẽ có trong thành phần chất xúc tác titan rắn.

[0123]

Có xu hướng là phương pháp sản xuất polyme olefin của sáng chế có khả năng tạo ra polyme có phân bố trọng lượng phân tử rộng và tính đều lập thể cao theo cách rất tích cực. Trong khi lý do về việc đó hiện không rõ, nhưng được giả định là như sau.

[0124]

Hợp chất chứa nhóm đa este vòng (a) được sử dụng trong sáng chế, như được mô tả ở trên, có cấu tạo trong đó các vòng được nối, và do đó được giả định rằng hợp chất này có độ bền vững thích hợp như một hợp chất, và độ dịch chuyển cấu tạo là tương đối nhỏ. Do đó, dường như là khi hợp chất chứa nhóm đa este vòng (a) phối hợp với hợp chất titan hoặc hợp chất magie mà sẽ được mô tả dưới đây, thì nó duy trì cấu tạo ổn định, và các biến đổi về tính lập thể đặc thù và hoạt tính phản ứng polyme hóa như chất xúc tác trong phản ứng polyme hóa olefin là nhỏ. Từ các quan điểm này, dường như là polyme có tính đều lập thể cao có thể thu được theo cách rất tích cực.

[0125]



Mặt khác, trong trường hợp cấu tạo ổn định với độ dịch chuyển cấu tạo nhỏ, có nhiều bản khoản ban đầu về phân bố trọng lượng phân tử hẹp, nhưng như được thể hiện trong phần các Ví dụ dưới đây, phương pháp của sáng chế cho phép polyme có phân bố trọng lượng phân tử rộng được sản xuất. Điều này, như được giả định bởi các tác giả sáng chế, là do khả năng là, trong trường hợp hợp chất chứa nhóm đa este vòng (a), những giao động nhỏ của các cấu tạo vòng và những kết hợp của các giao động như vậy của các cấu tạo vòng tương ứng ảnh hưởng lớn đến trọng lượng phân tử của polyme thu được, và có nhiều cấu tạo vòng dẫn đến đa dạng các kết hợp của các cấu tạo chất đồng phân lập thể mà các vòng tương ứng có thể lấy (như là cấu hình riêng kiểu ghế và cấu hình riêng kiểu thuyền).

[0126]

Trong số các hợp chất ở trên, sẽ có nhiều cấu hình riêng hơn trong trường hợp các hợp chất este có cấu tạo bất đối xứng và nhiều hơn nữa trong trường hợp nhiều tương tác với hợp chất magie và hợp chất titan so với các hợp chất đối xứng, và kiểu tích cực như vậy có các vi cấu tạo khác nhau có thể được tạo ra. Đã hiểu được rằng quan điểm này là ưu điểm có thể có để thu được các phương án gồm polyme có phân bố trọng lượng phân tử rộng và polyme có tính đều lập thể cao.

[0127]

Ngoài hợp chất chứa nhóm đa este vòng (a), hợp chất magie và hợp chất titan được sử dụng trong điều chế thành phần chất xúc tác titan rắn (I) của sáng chế.

[0128]

<Hợp chất magie>

Các ví dụ cụ thể về các hợp chất magie như vậy gồm các hợp chất magie đã biết như là:

các magie halogenua như là magie clorua và magie bromua;  
 các alkoxy magie halogenua như là metoxy magie clorua, etoxy magie clorua,  
 và phenoxy magie clorua;  
 alkoxy magie như là etoxy magie, isopropoxy magie, butoxy magie, và 2-  
 etylhexoxy magie;  
 aryloxy magie như là phenoxy magie; và  
 các muối axit carboxylic của magie, như là magie stearat.

[0129]

Một trong số các hợp chất magie này có thể được sử dụng một mình, hoặc hai hoặc nhiều loại có thể được sử dụng kết hợp. Đồng thời, hợp chất magie như vậy có thể là hợp chất phức với kim loại khác, hợp chất composit, hoặc hỗn hợp với hợp chất kim loại khác.

[0130]

Trong số các hợp chất magie này, hợp chất magie chứa halogen là được ưu tiên. Cụ thể là, magie halogenua và, magie clorua được ưu tiên sử dụng. Alkoxy magie như là etoxy magie cũng được ưu tiên sử dụng. Hợp chất magie có thể là hợp chất mà có nguồn gốc từ chất khác, như là hợp chất thu được bằng cách cho hợp chất magie hữu cơ như là thuốc thử Grignard đi tiếp xúc với, chẳng hạn, titan halogenua, silic halogenua, hoặc rượu halogenua.

[0131]

<Hợp chất titan>

Các ví dụ về hợp chất titan gồm các hợp chất titan hóa trị bốn được thể hiện bởi công thức chung:



trong đó R' là nhóm hydrocarbon, X là nguyên tử halogen, và  $g$  là  $0 \leq g \leq 4$ . Các ví dụ cụ thể hơn gồm:

các titan tetrahalogenua như là  $\text{TiCl}_4$  và  $\text{TiBr}_4$ ;

các alkoxytitan trihalogenua như là  $\text{Ti}(\text{OCH}_3)\text{Cl}_3$ ,  $\text{Ti}(\text{OC}_2\text{H}_5)\text{Cl}_3$ ,  $\text{Ti}(\text{O-n-C}_4\text{H}_9)\text{Cl}_3$ ,  $\text{Ti}(\text{OC}_2\text{H}_5)\text{Br}_3$ , và  $\text{Ti}(\text{O-iso-C}_4\text{H}_9)\text{Br}_3$ ;

các alkoxytitan dihalogenua như là  $\text{Ti}(\text{OCH}_3)_2\text{Cl}_2$  và  $\text{Ti}(\text{OC}_2\text{H}_5)_2\text{Cl}_2$ ;

các alkoxytitan monohalogenua như là  $\text{Ti}(\text{OCH}_3)_3\text{Cl}$ ,  $\text{Ti}(\text{O-n-C}_4\text{H}_9)_3\text{Cl}$ , và  $\text{Ti}(\text{OC}_2\text{H}_5)_3\text{Br}$ ; và

tetraalkoxytitan như là  $\text{Ti}(\text{OCH}_3)_4$ ,  $\text{Ti}(\text{OC}_2\text{H}_5)_4$ ,  $\text{Ti}(\text{OC}_4\text{H}_9)_4$ , và  $\text{Ti}(\text{O-2-ethylhexyl})_4$ .

[0132]

Trong số này, các titan tetrahalogenua là được ưu tiên, và titan tetrachlorua là đặc biệt ưu tiên. Một trong số các hợp chất titan này có thể được sử dụng một mình, hoặc hai hoặc nhiều loại có thể được sử dụng kết hợp.

Các ví dụ về các hợp chất magie và các hợp chất titan như vậy có thể cũng gồm các hợp chất được mô tả chi tiết, chẳng hạn, trong Tài liệu sáng chế 1 và Tài liệu sáng chế 2.

[0133]

Trong quá trình điều chế thành phần chất xúc tác titan rắn (I) được sử dụng trong sáng chế, các phương pháp đã biết có thể được sử dụng mà không có giới hạn ngoại trừ rằng hợp chất chứa nhóm đa este vòng (a) được sử dụng. Các ví dụ về các phương pháp được ưu tiên cụ thể gồm các phương pháp (P-1) đến (P-4) dưới đây.

[0134]

(P-1) Phương pháp gồm cho sản phẩm cộng rắn được tạo nên từ hợp chất magie và thành phần chất xúc tác (b), hợp chất chứa nhóm đa este vòng (a), và hợp chất titan lỏng tiếp xúc với nhau ở trạng thái huyền phù với sự có mặt của dung môi hydrocarbon trơ.

[0135]

(P-2) Phương pháp gồm có sản phẩm cộng rắn được tạo nên từ hợp chất magie và thành phần chất xúc tác (b), hợp chất chứa nhóm đa este vòng (a), và hợp chất titan lỏng tiếp xúc với nhau theo các phần được phân chia.

[0136]

(P-3) Phương pháp gồm cho sản phẩm cộng rắn được tạo nên từ hợp chất magie và thành phần chất xúc tác (b), hợp chất chứa nhóm đa este vòng (a), và hợp chất titan lỏng tiếp xúc với nhau ở trạng thái huyền phù và theo các phần được phân chia với sự có mặt của dung môi hydrocarbon trơ.

[0137]

(P-4) Phương pháp gồm cho hợp chất magie lỏng được tạo nên từ hợp chất magie và thành phần chất xúc tác (b), hợp chất titan lỏng, và hợp chất chứa nhóm đa este vòng (a) tiếp xúc với nhau.

[0138]

Nhiệt độ phản ứng là nằm trong khoảng ưu tiên là từ  $-30^{\circ}\text{C}$  đến  $150^{\circ}\text{C}$ , ưu tiên hơn là từ  $-25^{\circ}\text{C}$  đến  $130^{\circ}\text{C}$ , và ưu tiên hơn nữa là từ  $-25^{\circ}\text{C}$  đến  $120^{\circ}\text{C}$ .

Sản xuất thành phần chất xúc tác titan rắn có thể cũng được tiến hành với sự có mặt của môi trường đã biết nếu cần. Các ví dụ về môi trường gồm các hydrocarbon thơm phân cực không đáng kể như là toluen và các hydrocarbon béo đã biết và các hợp chất hydrocarbon vòng béo như là heptan, octan, decan, và xyclohexan, và các ví dụ ưu tiên trong số chúng là các hydrocarbon béo.

[0139]

Khi phản ứng được tiến hành nằm trong khoảng ở trên, thì hiệu quả thu được polyme có phân bố trọng lượng phân tử rộng, hoạt tính, và tính đều lập thể của polyme thu được có thể đạt được đồng thời ở mức độ cao hơn.

[0140]

(Thành phần chất xúc tác (b))

Thành phần chất xúc tác (b) được sử dụng để tạo thành sản phẩm cộng rắn và hợp chất magie lỏng ưu tiên là hợp chất đã biết có khả năng hòa tan hợp chất magie trong khoảng nhiệt độ là từ khoảng nhiệt độ trong phòng đến 300°C, và, chẳng hạn, các rượu, các aldehyt, các amin, các axit carboxylic, và các hỗn hợp của chúng là được ưu tiên. Các ví dụ về các hợp chất này gồm các hợp chất được mô tả chi tiết trong Tài liệu sáng chế 1 và Tài liệu sáng chế 2.

[0141]

Các ví dụ cụ thể hơn về các rượu có khả năng hòa tan hợp chất magie gồm: các rượu béo như là metanol, etanol, propanol, butanol, isobutanol, etylen glycol, 2-metylpentanol, 2-etylbutanol, n-heptanol, n-octanol, 2-etylhexanol, decanol, và dodecanol;

các rượu vòng béo như là xyclohexanol và metylxyclohexanol;

các rượu thơm như là rượu benzyl và rượu metylbenzyl; và

các rượu béo có nhóm alkoxy, như là n-butyl xenlosolve.

[0142]

Các ví dụ về các axit carboxylic gồm các axit carboxylic hữu cơ có 7 nguyên tử cacbon hoặc nhiều hơn, như là axit caprylic và axit 2-etylhexanoic. Các ví dụ về các aldehyt gồm các aldehyt có 7 nguyên tử cacbon hoặc nhiều hơn, như là capric aldehyt và 2-etylhexyl aldehyt.

[0143]

Các ví dụ về các amin gồm các amin có 6 nguyên tử cacbon hoặc nhiều hơn, như là heptylamin, octylamin, nonylamin, laurylamin, và 2-ethylhexylamin.

[0144]

Các ví dụ được ưu tiên về thành phần chất xúc tác (b) là các rượu ở trên, và, chẳng hạn, etanol, propanol, butanol, isobutanol, hexanol, 2-ethylhexanol, và decanol là đặc biệt ưu tiên.

[0145]

Trong khi các lượng của hợp chất magie và thành phần chất xúc tác (b) được sử dụng khi điều chế sản phẩm cộng rắn và hợp chất magie lỏng cũng thay đổi theo, chẳng hạn, các loại và các điều kiện tiếp xúc, thì hợp chất magie được sử dụng với lượng là từ 0,1 đến 20 mol/lit và ưu tiên là từ 0,5 đến 5 mol/lit tính theo thể tích đơn vị của thành phần chất xúc tác (b). Đồng thời, môi trường mà là trợ đối với sản phẩm cộng rắn có thể được sử dụng kết hợp nếu cần. Các ví dụ được ưu tiên về môi trường gồm các hợp chất hydrocarbon đã biết như là heptan, octan, và decan.

[0146]

Trong khi tỷ lệ hợp phần của magie so với thành phần chất xúc tác (b) trong sản phẩm cộng rắn thu được và hợp chất magie lỏng nói chung không được cụ thể hóa vì tỷ lệ thay đổi theo loại hợp chất được sử dụng, thì thành phần chất xúc tác (b) trên mỗi mol của magie trong hợp chất magie là nằm trong khoảng ưu tiên là từ 2,0 mol hoặc nhiều hơn, ưu tiên hơn là 2,2 mol hoặc nhiều hơn, ưu tiên hơn nữa là 2,6 mol hoặc nhiều hơn, và đặc biệt ưu tiên là 2,7 mol hoặc nhiều hơn, và ưu tiên là 5 mol hoặc ít hơn.

[0147]

<Este axit carboxylic thơm và/hoặc hợp chất có hai hoặc nhiều liên kết ete qua nhiều nguyên tử cacbon>

Thành phần chất xúc tác titan rắn (I) của sáng chế có thể còn chứa este axit carboxylic thơm và/hoặc hợp chất có hai hoặc nhiều liên kết ete qua nhiều nguyên tử cacbon (dưới đây cũng được gọi là “thành phần chất xúc tác (c)”). Thành phần chất xúc tác (c) khi được chứa trong thành phần chất xúc tác titan rắn (I) của sáng chế có thể gia tăng hoạt tính và tính đều lập thể và rộng hơn nữa phân bố trọng lượng phân tử.

[0148]

Các este axit carboxylic thơm và các hợp chất polyete đã biết mà ưu tiên được sử dụng trong các chất xúc tác thông thường dùng để polyme hóa olefin, như là các hợp chất được mô tả trong Tài liệu sáng chế 2 và JP2001-354714A, có thể được sử dụng mà không có các giới hạn là thành phần chất xúc tác (c).

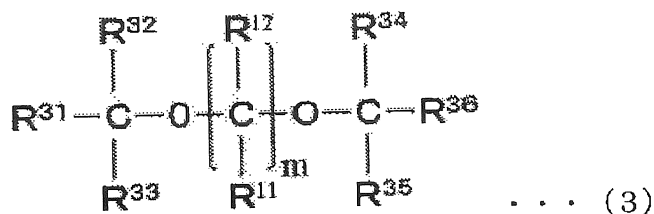
[0149]

Các ví dụ cụ thể về các este axit carboxylic thơm gồm các monoeste axit carboxylic thơm như là các este axit benzoic và các este axit toluic, và các este axit polycarboxylic thơm như là các este axit phtalic. Trong số này, các este axit polycarboxylic thơm là được ưu tiên, và các este axit phtalic là được ưu tiên hơn. Các este axit phtalic ưu tiên là các alkyl phtalat như là etyl phtalat, n-butyl phtalat, isobutyl phtalat, hexyl phtalat, và heptyl phtalat, và diisobutyl phtalat là đặc biệt ưu tiên.

[0150]

Các ví dụ cụ thể hơn về hợp chất polyete gồm các hợp chất được thể hiện bởi công thức (3) dưới đây:

[0151]



[0152]

trong đó  $m$  là số nguyên nằm trong khoảng  $1 \leq m \leq 10$  và ưu tiên hơn là số nguyên nằm trong khoảng  $3 \leq m \leq 10$ ; và  $\text{R}^{11}$ ,  $\text{R}^{12}$ , và  $\text{R}^{31}$  đến  $\text{R}^{36}$  mỗi nhóm độc lập là nguyên tử hydro hoặc phần tử thế có ít nhất một nguyên tố được lựa chọn từ carbon, hydro, oxy, flo, clo, brom, iot, nitơ, lưu huỳnh, phospho, bo, và silic.

[0153]

Khi  $m$  là 2 hoặc lớn hơn, nhiều  $\text{R}^{11}$  và  $\text{R}^{12}$  có thể là giống nhau hoặc khác nhau. Bất kỳ  $\text{R}^{11}$ ,  $\text{R}^{12}$ ,  $\text{R}^{31}$  đến  $\text{R}^{36}$ , và ưu tiên là  $\text{R}^{11}$  và  $\text{R}^{12}$ , có thể cùng tạo vòng không phải là vòng benzen.

[0154]

Các ví dụ cụ thể về các hợp chất như vậy gồm:

các dialkoxypropan được thế một lần như là 2-isopropyl-1,3-dimetoxypropan, 2-s-butyl-1,3-dimetoxypropan, và 2-cumyl-1,3-dimetoxypropan;  
 các dialkoxypropan được thế hai lần như là 2-isopropyl-2-isobutyl-1,3-dimetoxypropan, 2,2-dicyclohexyl-1,3-dimetoxypropan, 2-metyl-2-isopropyl-1,3-dimetoxypropan, 2-metyl-2-xyclohexyl-1,3-dimetoxypropan, 2-metyl-2-isobutyl-1,3-dimetoxypropan, 2,2-diisobutyl-1,3-dimetoxypropan, 2,2-bis(xyclohexylmetyl)-1,3-dimetoxypropan, 2,2-diisobutyl-1,3-dietoxypropan, 2,2-diisobutyl-1,3-dibutoxypropan, 2,2-di-s-butyl-1,3-dimetoxypropan, 2,2-dineopentyl-1,3-dimetoxypropan, 2-isopropyl-2-isopentyl-1,3-dimetoxypropan, và 2-xyclohexyl-2-xyclohexylmetyl-1,3-dimetoxypropan;



các dialkoxyalkan như là 2,3-dixyclohexyl-1,4-dietoxybutan, 2,3-dixyclohexyl-1,4-dietoxybutan, 2,3-diisopropyl-1,4-dietoxybutan, 2,4-diphenyl-1,5-dimetoxypentan, 2,5-diphenyl-1,5-dimetoxyhexan, 2,4-diisopropyl-1,5-dimetoxypentan, 2,4-diisobutyl-1,5-dimetoxypentan, và 2,4-diisoamyl-1,5-dimetoxypentan;

các trialkoxyalkan như là 2-metyl-2-metoxymetyl-1,3-dimetoxypropan, 2-xyclohexyl-2-etoxymetyl-1,3-dimetoxypropan, và 2-xyclohexyl-2-metoxymetyl-1,3-dimetoxypropan; và

các dialkoxyxycloalkan như là 2,2-diisobutyl-1,3-dimetoxy-4-xyclohexenyl, 2-isopropyl-2-isoamyl-1,3-dimetoxy-4-xyclohexenyl, 2-xyclohexyl-2-metoxymetyl-1,3-dimetoxy-4-xyclohexenyl, 2-isopropyl-2-metoxymetyl-1,3-dimetoxy-4-xyclohexenyl, 2-isobutyl-2-metoxymetyl-1,3-dimetoxy-4-xyclohexenyl, 2-xyclohexyl-2-etoxymetyl-1,3-dimetoxy-4-xyclohexenyl, 2-isopropyl-2-etoxymetyl-1,3-dimetoxy-4-xyclohexenyl, và 2-isobutyl-2-etoxymetyl-1,3-dimetoxy-4-xyclohexenyl.

[0155]

Trong số này, các 1,3-diete là được ưu tiên, và 2-isopropyl-2-isobutyl-1,3-dimetoxypropan, 2,2-diisobutyl-1,3-dimetoxypropan, 2-isopropyl-2-isopentyl-1,3-dimetoxypropan, 2,2-dixyclohexyl-1,3-dimetoxypropan, và 2,2-bis(xyclohexylmetyl) 1,3-dimetoxypropan là đặc biệt ưu tiên.

Một trong số các hợp chất này có thể được sử dụng một mình, hoặc hai hoặc nhiều loại có thể được sử dụng kết hợp.

[0156]

Hợp chất chứa nhóm đa este vòng (a), thành phần chất xúc tác (b), và thành phần chất xúc tác (c) như ở trên nói chung có thể được xem như thuộc các thành

phần mà được gọi là các chất cho điện tử bởi người có trình độ trung bình trong lĩnh vực kỹ thuật. Các thành phần chất cho điện tử được biết là thể hiện, chẳng hạn, hiệu quả gia tăng tính đều lập thể của polyme thu được, hiệu quả kiểm soát phân bố hợp phần của copolyme thu được, hiệu quả tổ hợp chất là kiểm soát hình dạng hạt và kích thước hạt của các hạt chất xúc tác, trong khi duy trì hoạt tính xúc tác cao.

[0157]

Hợp chất chứa nhóm đa este vòng (a) của sáng chế cũng được xem là thể hiện hiệu quả có khả năng kiểm soát thêm phân bố trọng lượng phân tử bởi chất cho điện tử.

Trong thành phần chất xúc tác titan rắn (I) được sử dụng trong sáng chế, halogen/titan (tỷ lệ nguyên tử) (tức là, số lượng các mol của các nguyên tử halogen/số lượng các mol của các nguyên tử titan) được mong muốn là từ 2 đến 100 và ưu tiên là từ 4 đến 90;

hợp chất chứa nhóm đa este vòng (a)/titan (tỷ lệ mol) (tức là, số lượng các mol của hợp chất chứa nhóm đa este vòng (a)/số lượng các mol của các nguyên tử titan) mong muốn là từ 0,01 đến 100 và ưu tiên là từ 0,2 đến 10; và

đối với thành phần chất xúc tác (b) và thành phần chất xúc tác (c), thành phần chất xúc tác (b)/các nguyên tử titan (tỷ lệ mol) mong muốn là từ 0 đến 100 và ưu tiên là từ 0 đến 10; và thành phần chất xúc tác (c)/các nguyên tử titan (tỷ lệ mol) mong muốn là từ 0 đến 100 và ưu tiên là từ 0 đến 10.

[0158]

Magie/titan (tỷ lệ nguyên tử) (tức là, số lượng các mol của các nguyên tử magie/số lượng các mol của các nguyên tử titan) mong muốn là từ 2 đến 100 và ưu tiên là từ 4 đến 50.

Hàm lượng của các thành phần mà có thể được chứa không phải là trong hợp chất chứa nhóm đa este vòng (a), như là thành phần chất xúc tác (b) và thành phần chất xúc tác (c), ưu tiên là 20% trọng lượng hoặc ít hơn và ưu tiên hơn là 10% trọng lượng hoặc ít hơn tính theo 100% trọng lượng của hợp chất chứa nhóm đa este vòng (a).

[0159]

Đối với các điều kiện chi tiết hơn để điều chế thành phần chất xúc tác titan rắn (I), các điều kiện được mô tả, chẳng hạn, trong tài liệu EP585869A1 (bản mô tả của Công bố đơn châu Âu số 0585869) và Tài liệu sáng chế 2 có thể ưu tiên được sử dụng ngoại trừ rằng hợp chất chứa nhóm đa este vòng (a) được sử dụng.

[0160]

[Chất xúc tác dùng để polyme hóa olefin]

Chất xúc tác dùng để polyme hóa olefin theo sáng chế chứa:  
thành phần chất xúc tác titan rắn (I) theo sáng chế, và  
thành phần chất xúc tác hợp chất hữu cơ kim loại (II) chứa nguyên tử kim loại được lựa chọn từ Nhóm 1, Nhóm 2, và Nhóm 13 của bảng tuần hoàn.

[0161]

<Thành phần chất xúc tác hợp chất hữu cơ kim loại (II)>

Hợp chất chứa kim loại Nhóm 13 như là hợp chất hữu cơ nhôm, hợp chất phức alkyl của kim loại Nhóm 1 và nhôm, hoặc hợp chất hữu cơ kim loại của kim loại Nhóm 2 có thể được sử dụng làm thành phần chất xúc tác hợp chất hữu cơ kim loại (II). Trong số này, hợp chất hữu cơ nhôm là được ưu tiên.

Các ví dụ ưu tiên cụ thể về thành phần chất xúc tác hợp chất hữu cơ kim loại (II) gồm các thành phần chất xúc tác hợp chất hữu cơ kim loại được mô tả trong các tài liệu đã biết như là EP585869A1 được nêu ở trên.

[0162]

&lt;Chất cho điện tử (III)&gt;

Chất xúc tác dùng để polyme hóa olefin của sáng chế có thể chứa, cùng với thành phần chất xúc tác hợp chất hữu cơ kim loại (II), chất cho điện tử (III) nếu cần. Chất cho điện tử (III) ưu tiên là hợp chất hữu cơ silic. Các ví dụ về hợp chất hữu cơ silic gồm các hợp chất được thể hiện bởi công thức chung (4) dưới đây:

[0163]



trong đó  $R^S$  và  $R''$  là các nhóm hydrocarbon, và  $n$  là số nguyên nằm trong khoảng  $0 < n < 4$ .

[0164]

Cụ thể là, đối với hợp chất hữu cơ silic được thể hiện bởi công thức chung (4), chẳng hạn, diisopropyldimetoxyasilan, t-butylmetyldimetoxyasilan, t-butylmetyldietyloxyasilan, t-amylmetyldietyloxyasilan, dicyclohexyldimetoxyasilan, xyclohexylmetyldimetoxyasilan, xyclohexylmetyldietyloxyasilan, vinyltrimetoxyasilan, vinyltrietyloxyasilan, t-butyltrietyloxyasilan, phenyltrietyloxyasilan, xyclohexyltrietyloxyasilan, xyclopentyltrietyloxyasilan, 2-metylxyclopentyltrietyloxyasilan, xyclopentyltrietyloxyasilan, dicyclopentylmetyloxyasilan, dicyclopentylmetyldietyloxyasilan, trixyclopentylmetyloxyasilan, dicyclopentylmetyloxyasilan, dicyclopentylmetyloxyasilan, và xyclopentylmetyloxyasilan được sử dụng.

[0165]

Trong số này, vinyltrietyloxyasilan, diphenyldimetoxyasilan, dicyclohexyldimetoxyasilan, xyclohexylmetyldimetoxyasilan, và dicyclopentylmetyloxyasilan ưu tiên là được sử dụng.

[0166]

Đồng thời, các hợp chất silan được thể hiện bởi công thức (5) dưới đây như được mô tả trong tài liệu WO2004/016662 là các ví dụ được ưu tiên về hợp chất hữu cơ silic:



trong đó  $\text{R}^a$  là nhóm hydrocarbon có 1 đến 6 nguyên tử cacbon, các ví dụ về  $\text{R}^a$  gồm các nhóm hydrocarbon béo chưa bão hòa hoặc bão hòa có 1 đến 6 nguyên tử cacbon, và các ví dụ ưu tiên đặc biệt gồm các nhóm hydrocarbon có 2 đến 6 nguyên tử cacbon. Các ví dụ cụ thể gồm nhóm methyl, nhóm ethyl, nhóm n-propyl, nhóm iso-propyl, nhóm n-butyl, nhóm iso-butyl, nhóm sec-butyl, nhóm n-pentyl, nhóm iso-pentyl, nhóm xyclopentyl, nhóm n-hexyl, và nhóm xyclohexyl, và, trong này, nhóm ethyl là được ưu tiên đặc biệt.

[0167]

Trong công thức (5),  $\text{R}^b$  là nhóm hydrocarbon có 1 đến 12 nguyên tử cacbon hoặc hydro, và các ví dụ về  $\text{R}^b$  gồm các nhóm hydrocarbon béo chưa bão hòa hoặc bão hòa có 1 đến 12 nguyên tử cacbon và hydro. Các ví dụ cụ thể gồm nguyên tử hydro, nhóm methyl, nhóm ethyl, nhóm n-propyl, nhóm iso-propyl, nhóm n-butyl, nhóm iso-butyl, nhóm sec-butyl, nhóm n-pentyl, nhóm iso-pentyl, nhóm xyclopentyl, nhóm n-hexyl, nhóm xyclohexyl, và nhóm octyl, và, trong số này, nhóm ethyl là được ưu tiên đặc biệt.

[0168]

Trong công thức (5),  $\text{R}^c$  là nhóm hydrocarbon có 1 đến 12 nguyên tử cacbon, và các ví dụ về  $\text{R}^c$  gồm các nhóm hydrocarbon béo chưa bão hòa hoặc bão hòa có 1 đến 12 nguyên tử cacbon và hydro. Các ví dụ cụ thể gồm nhóm methyl, nhóm ethyl, nhóm n-propyl, nhóm iso-propyl, nhóm n-butyl, nhóm iso-butyl, nhóm sec-

butyl, nhóm n-pentyl, nhóm iso-pentyl, nhóm xyclopentyl, nhóm n-hexyl, nhóm xyclohexyl, và nhóm octyl, và, trong số này, nhóm etyl là được ưu tiên đặc biệt.

[0169]

Các ví dụ cụ thể về hợp chất được thể hiện bởi công thức (5) ở trên gồm dimetylaminotrietoxysilan, dietylaminotrietoxysilan, dietylaminotrimetoxysilan, dietylaminotrietoxysilan, dietylaminotri n-propoxysilan, di-n-propylaminotrietoxysilan, metyl-n-propylaminotrietoxysilan, t-butylaminotrietoxysilan, etyl-n-propylaminotrietoxysilan, etyl-iso-propylaminotrietoxysilan, và metyletylaminotrietoxysilan.

[0170]

Các ví dụ khác về hợp chất hữu cơ silic gồm các hợp chất được thể hiện bởi công thức (6) dưới đây.



Trong công thức,  $R^N N$  là nhóm amino vòng, và các ví dụ về nhóm amino vòng gồm nhóm perhydroquinolino, nhóm perhydroisoquinolino, nhóm 1,2,3,4-tetrahydroquinolino, nhóm 1,2,3,4-tetrahydroisoquinolino, và nhóm octametylenimino.

[0171]

Các ví dụ cụ thể về các hợp chất được thể hiện bởi công thức (6) ở trên gồm (perhydroquinolino)triethoxysilan, (perhydroisoquinolino)triethoxysilan, (1,2,3,4-tetrahydroquinolino)triethoxysilan, (1,2,3,4-tetrahydroisoquinolino)triethoxysilan, và octametyleniminotriethoxysilan.

Hai hoặc nhiều loại trong số các hợp chất hữu cơ silic có thể được sử dụng kết hợp.

[0172]

Các ví dụ được ưu tiên về các hợp chất hữu ích khác làm chất cho điện tử (III) gồm các hợp chất polyete được mô tả làm các ví dụ về este axit carboxylic thom và/hoặc hợp chất có hai hoặc nhiều liên kết ete qua nhiều nguyên tử cacbon (thành phần chất xúc tác (c)).

[0173]

Trong số các hợp chất polyete này, các 1,3-diete là được ưu tiên, và 2-isopropyl-2-isobutyl-1,3-dimetoxypropan, 2,2-diisobutyl-1,3-dimetoxypropan, 2-isopropyl-2-isopentyl-1,3-dimetoxypropan, 2,2-dicyclohexyl-1,3-dimetoxypropan, và 2,2-bis(xyclohexylmetyl)-1,3-dimetoxypropan là đặc biệt ưu tiên.

[0174]

Một trong số các hợp chất này có thể được sử dụng một mình, và hai hoặc nhiều loại có thể được sử dụng kết hợp.

Chất xúc tác dùng để polyme hóa olefin của sáng chế có thể chứa, không phải là các thành phần được mô tả ở trên, các thành phần khác hữu ích để polyme hóa olefin nếu cần. Các ví dụ về các thành phần khác gồm các chất mang như là silic oxit, các chất chống tĩnh điện, các chất tổ hợp hạt, và các chất làm ổn định lưu trữ.

[0175]

[Phương pháp polyme hóa olefin]

Phương pháp polyme hóa olefin theo sáng chế gồm tiến hành polyme hóa olefin sử dụng chất xúc tác dùng để polyme hóa olefin của sáng chế. Ở đây, "polyme hóa" có thể gồm ý nghĩa homopolyme hóa cũng như copolyme hóa như là copolyme hóa ngẫu nhiên và copolyme hóa khối.

[0176]

Trong phương pháp polyme hóa olefin của sáng chế, polyme hóa có thể cũng được tiến hành với sự có mặt của chất xúc tác tiền polyme hóa thu được bằng cách tiền polyme hóa  $\alpha$ -olefin với sự có mặt của chất xúc tác dùng để polyme hóa olefin của sáng chế. Tiền polyme hóa này được tiến hành bằng cách tiền polyme hóa  $\alpha$ -olefin với lượng là từ 0,1 đến 1000 g, ưu tiên là từ 0,3 đến 500 g, và đặc biệt ưu tiên là từ 1 đến 200 g trên mỗi gam chất xúc tác dùng để polyme hóa olefin.

[0177]

Trong tiền polyme hóa, chất xúc tác có thể được sử dụng với nồng độ cao hơn nồng độ chất xúc tác trong hệ polyme hóa.

Nồng độ của thành phần chất xúc tác titan rắn (I) trong tiền polyme hóa, về mặt nguyên tử titan, mong muốn là nằm trong khoảng thường là khoảng từ 0,001 đến 200 mmol, ưu tiên là khoảng từ 0,01 đến 50 mmol, và đặc biệt ưu tiên là từ 0,1 đến 20 mmol trên mỗi lit môi trường lỏng.

[0178]

Là đủ khi mà lượng của thành phần chất xúc tác hợp chất hữu cơ kim loại (II) trong tiền polyme hóa là lượng sao cho từ 0,1 đến 1000 g và ưu tiên là từ 0,3 đến 500 g của polyme được sản xuất trên mỗi gam của thành phần chất xúc tác titan rắn (I), và mong muốn rằng lượng này thường là khoảng từ 0,1 đến 300 mol, ưu tiên là khoảng từ 0,5 đến 100 mol, và đặc biệt ưu tiên là từ 1 đến 50 mol trên mỗi mol của các nguyên tử titan trong thành phần chất xúc tác titan rắn (I).

[0179]

Trong tiền polyme hóa, chẳng hạn, chất cho điện tử (III) có thể cũng được sử dụng nếu cần, và, ở thời điểm này, các thành phần như vậy được sử dụng với lượng là từ 0,1 đến 50 mol, ưu tiên là từ 0,5 đến 30 mol, và ưu tiên hơn nữa là từ



1 đến 10 mol trên mỗi mol các nguyên tử titan trong thành phần chất xúc tác titan rắn (I).

[0180]

Tiền polyme hóa có thể được tiến hành dưới các điều kiện êm dịu sau khi bổ sung olefin và các thành phần chất xúc tác ở trên vào môi trường hydrocarbon trơ.

Trong trường hợp này, các ví dụ cụ thể về môi trường hydrocarbon trơ được sử dụng gồm:

các hydrocarbon béo như là propan, butan, pentan, hexan, heptan, octan, decan, dodecan, và kerosen;

các hydrocarbon vòng béo như là xycloheptan, metylxycloheptan, 4-xycloheptan, và metyl-4-xycloheptan;

các hydrocarbon thơm như là benzen, toluen, và xylen;

các hydrocarbon được halogen hóa như là etylenclorua và clobenzen; và

các hỗn hợp của chúng.

[0181]

Cụ thể là, trong số các môi trường hydrocarbon trơ này, các hydrocarbon béo ưu tiên là được sử dụng. Trong trường hợp sử dụng môi trường hydrocarbon trơ, tiền polyme hóa ưu tiên là được tiến hành theo cách từng mẻ.

[0182]

Mặt khác, tiền polyme hóa có thể cũng được tiến hành sử dụng chính bản thân olefin làm dung môi, và tiền polyme hóa có thể cũng được tiến hành ở trạng thái về cơ bản là không có dung môi. Trong trường hợp này, tiền polyme hóa ưu tiên là được tiến hành theo cách liên tục.

[0183]

Olefin được sử dụng trong tiền polyme hóa có thể là giống hoặc khác với olefin được sử dụng trong polyme hóa mà sẽ được mô tả dưới đây, và, cụ thể là, propylen được ưu tiên.

Mong muốn là, nhiệt độ trong khi tiền polyme hóa nằm trong khoảng thường là khoảng từ  $-20$  đến  $+100^{\circ}\text{C}$ , ưu tiên là khoảng từ  $-20$  đến  $+80^{\circ}\text{C}$ , và ưu tiên hơn nữa là từ  $0$  đến  $+40^{\circ}\text{C}$ .

[0184]

Tiếp theo, polyme hóa sẽ được mô tả mà được tiến hành bằng cách tiền polyme hóa được mô tả ở trên hoặc không có tiền polyme hóa.

Các ví dụ về các olefin mà sử dụng được (tức là, được polyme hóa) trong polyme hóa gồm  $\alpha$ -olefins có 3 đến 20 nguyên tử cacbon, ví dụ, các olefin thẳng như là propylen, 1-buten, 1-penten, 1-hexen, 1-octen, 1-dexen, 1-dodexen, 1-tetradexen, 1-hexadexen, 1-octadexen, và 1-eicosen, và các olefin có nhánh như là 4-metyl-1-penten, 3-metyl-1-penten, và 3-metyl-1-buten, và được ưu tiên là propylen, 1-buten, 1-penten, 4-metyl-1-penten, và 3-metyl-1-buten. Từ quan điểm là các ưu điểm của polyme có phân bố trọng lượng phân tử rộng có khả năng thể hiện trong nhựa có độ bền cao, propylen, 1-buten, 4-metyl-1-penten, và 3-metyl-1-buten là đặc biệt ưu tiên.

[0185]

Ngoài các  $\alpha$ -olefin này, cũng sử dụng được là etylen, các hợp chất vinyl thơm như là styren và allylbenzen, và các hợp chất vinyl vòng béo như là vinylxyclohexan và vinylxycloheptan. Hơn nữa, xyclopenten, xyclohepten, norbornen, tetra-xyclo-dodexen, và các hợp chất có nhiều liên kết chưa bão hòa như là các dien được liên hợp và các dien không được liên hợp, ví dụ, các dien như là isopren và butadien, có thể cũng được sử dụng làm các nguyên liệu polyme hóa

cùng với etylen và  $\alpha$ -olefin. Một trong số các hợp chất này có thể được sử dụng một mình, hoặc hai hoặc nhiều loại có thể được sử dụng kết hợp (dưới đây, các olefin được sử dụng với etylen hoặc “các  $\alpha$ -olefin có 3 đến 20 nguyên tử cacbon” cũng được gọi là “các olefin khác”).

[0186]

Các olefin và các olefin khác có thể là các hợp chất có nguồn gốc từ dầu mỏ thông thường (dầu thô) hoặc các hợp chất có nguồn gốc từ khí tự nhiên. Chúng có thể là các hợp chất mà có nguồn gốc từ, chẳng hạn, các thực vật hoang dại hoặc được trồng, và chúng thường được gọi là các nguyên liệu sinh học. Các hợp chất sinh học như vậy có xu hướng có hàm lượng  $^{14}\text{C}$  cao hơn, mà là chất đồng vị của cacbon, so với các hợp chất có nguồn gốc từ dầu mỏ hoặc khí tự nhiên. Tất nhiên là, tất cả các hợp chất chứa cacbon, như là các hydrocarbon trơ và các hợp chất este, có thể cũng là các hợp chất sinh học.

[0187]

Trong số các olefin khác, etylen và các hợp chất vinyl thơm là được ưu tiên. Ngoài tổng 100% trọng lượng của các olefin, một lượng nhỏ, ví dụ, 10% trọng lượng hoặc ít hơn và ưu tiên là 5 % trọng lượng hoặc ít hơn, của các olefin khác như là etylen có thể được sử dụng kết hợp.

[0188]

Trong sáng chế, tiền polyme hóa và polyme hóa có thể được tiến hành bằng bất kỳ phương pháp polyme hóa pha lỏng nào như là polyme hóa khối, polyme hóa dung dịch, và polyme hóa huyền phù, và các phương pháp polyme hóa pha khí.

Khi polyme hóa chọn dạng phản ứng là polyme hóa huyền phù đặc, thì hydrocarbon trơ như được sử dụng trong tiền polyme hóa được mô tả ở trên có thể

được sử dụng làm dung môi phản ứng, và olefin mà là chất lỏng ở nhiệt độ phản ứng, có thể cũng được sử dụng.

[0189]

Trong polyme hóa trong phương pháp polyme hóa của sáng chế này, thành phần chất xúc tác titan rắn (I) được sử dụng với lượng, về mặt nguyên tử titan, thường là khoảng từ 0,0001 đến 0,5 mmol và ưu tiên là khoảng từ 0,005 đến 0,1 mmol trên mỗi lit thể tích polyme hóa. Thành phần chất xúc tác hợp chất hữu cơ kim loại (II) được sử dụng với lượng thường là khoảng từ 1 đến 2000 mol, ưu tiên là khoảng từ 5 đến 500 mol, ưu tiên hơn là từ 10 đến 350 mol, ưu tiên hơn nữa là từ 30 đến 350 mol, và đặc biệt ưu tiên là từ 50 đến 350 mol trên mỗi mol của các nguyên tử titan trong các thành phần chất xúc tác tiền polyme hóa trong hệ polyme hóa. Chất cho điện tử (III), nếu được sử dụng, thì được sử dụng với lượng là từ 0,001 đến 50 mol, ưu tiên là từ 0,01 đến 30 mol, và đặc biệt ưu tiên là từ 0,05 đến 20 mol tính theo thành phần chất xúc tác hợp chất hữu cơ kim loại (II).

[0190]

Chất xúc tác dùng để polyme hóa olefin chứa thành phần chất xúc tác titan rắn của sáng chế khác biệt bởi, như được mô tả ở trên, cho phép polyme có tính đều lập thể cao thu được, và điều chỉnh lượng của chất cho điện tử (III) được sử dụng làm cho có thể thu được polyme có tính đều lập thể có thể so sánh được với tính đều lập thể của các polyme propylen đã biết và thu được polyme propylen dẻo. Tức là, chất xúc tác dùng để polyme hóa olefin của sáng chế là chất xúc tác hữu ích mà cũng cho phép các polyme propylen có phân loại mục đích chung được sản xuất.

[0191]

Việc tiến hành polyme hóa với sự có mặt của hydro làm cho có thể điều chỉnh trọng lượng phân tử của polyme thu được, và tạo ra polyme có tốc độ dòng nóng chảy cao.

Trong polyme hóa trong sáng chế, nhiệt độ polyme hóa olefin thường là khoảng từ 20 đến 200°C, ưu tiên là khoảng từ 30 đến 100°C, và ưu tiên hơn là từ 50 đến 90°C. Áp suất thường được thiết lập ở áp suất bình thường đến 10 MPa, và ưu tiên là từ 0,20 đến 5 MPa. Trong phương pháp polyme hóa của sáng chế, polyme hóa có thể được tiến hành theo bất kỳ cách nào trong số cách theo từng mẻ, bán liên tục, và liên tục. Hơn nữa, polyme hóa có thể được tiến hành ở hai hoặc nhiều giai đoạn phân chia bằng cách thay đổi các điều kiện phản ứng. Việc tiến hành polyme hóa nhiều giai đoạn như vậy cho phép phân bố trọng lượng phân tử polyme olefin sẽ được mở rộng thêm nữa.

[0192]

Polyme olefin thu được như vậy có thể là bất kỳ, chẳng hạn, homopolyme, copolyme ngẫu nhiên, và copolyme khối.

Khi polyme hóa olefin, hoặc cụ thể là polyme hóa propylen, được tiến hành sử dụng chất xúc tác dùng để polyme hóa olefin được mô tả ở trên, polyme gốc propylen tính đều lập thể cao có hàm lượng thành phần không hòa tan decan là 70% hoặc cao hơn, ưu tiên là 85% hoặc cao hơn, và đặc biệt ưu tiên là 90% hoặc cao hơn có thể thu được.

[0193]

Hơn nữa, theo phương pháp polyme hóa olefin của sáng chế, polyolefin hoặc, cụ thể là, polypropylen có phân bố trọng lượng phân tử rộng có thể thu được ngay cả khi không tiến hành polyme hóa nhiều giai đoạn, hoặc thậm chí polyme hóa có một số ít giai đoạn như là polyme hóa một giai đoạn. Cụ thể, một

đặc điểm của phương pháp polyme hóa olefin của sáng chế là, polyme olefin thường thu được mà có tỷ lệ cao hơn về các thành phần trọng lượng phân tử cao và tỷ lệ thấp hơn về các thành phần trọng lượng phân tử thấp (mà được gọi đặc biệt là các hợp chất dính) so với các polyme olefin thông thường có tốc độ dòng nóng chảy (MFR) so sánh được. Đặc điểm này có thể được xác nhận bằng đo sắc ký thấm gel (GPC) mà sẽ được mô tả dưới đây, và polyme có cả hai giá trị  $M_w/M_n$  cao và giá trị  $M_z/M_w$  cao có thể thu được.

[0194]

Polypropylen thu được sử dụng các thành phần chất xúc tác titan rắn thông thường gồm magie, titan, halogen, và chất cho điện tử nói chung có giá trị  $M_w/M_n$  là 5 hoặc thấp hơn và giá trị  $M_z/M_w$  là thấp hơn 3,5 và ưu tiên là thấp hơn 4, mà là các chỉ số về phân bố trọng lượng phân tử như được xác định bởi phép đo GPC, trong khoảng MFR là từ 1 đến 10 g/10 phút, nhưng khi phương pháp polyme hóa olefin của sáng chế được sử dụng, thì polyme olefin có giá trị  $M_w/M_n$  là từ 6 đến 30 và ưu tiên là từ 7 đến 20 có thể thu được dưới cùng các điều kiện polyme hóa. Hơn nữa, polyme olefin có giá trị  $M_z/M_w$  ưu tiên là từ 4 đến 15 và ưu tiên hơn là từ 4,5 đến 10 có thể thu được. Cụ thể là, theo phương pháp polyme hóa olefin của sáng chế, polyme có giá trị  $M_z/M_w$  cao thường thu được.

[0195]

Hiểu biết chung trong số những người có trình độ trung bình trong lĩnh vực kỹ thuật là polypropylen có giá trị  $M_w/M_n$  cao có khả năng đúc và độ cứng tuyệt vời. Mặt khác, giá trị  $M_z/M_w$  cao chỉ ra hàm lượng cao về thành phần trọng lượng phân tử cao, và được mong đợi rằng polypropylen thu được có thể có sức căng nóng chảy cao và khả năng đúc tuyệt vời.

[0196]

Việc sử dụng phương pháp polyme hóa olefin của sáng chế cho phép polyme có phân bố trọng lượng phân tử rộng thu được mà không tiến hành polyme hóa nhiều giai đoạn và như vậy, có thể là, thiết bị sản xuất polyme sẽ được đơn giản hóa. Đồng thời, việc áp dụng cho phương pháp polyme hóa nhiều giai đoạn thông thường được mong đợi cho phép thu được polyme có sức căng nóng chảy và khả năng đúc tốt hơn.

[0197]

Trong khi có các phương pháp khác để thu được polyme có phân bố trọng lượng phân tử rộng như là phương pháp liên quan đến trộn nóng chảy hoặc phối trộn nóng chảy các polyme có các trọng lượng phân tử khác nhau, các polyme thu được bởi các phương pháp như vậy có thể không có sức căng nóng chảy hoặc khả năng đúc gia tăng phù hợp dù cách thức tương đối phức tạp. Điều này có lẽ là vì các polyme có các trọng lượng phân tử khác nhau, về cơ bản, không có khả năng trộn. Mặt khác, polyme thu được bởi phương pháp polyme hóa olefin của sáng chế, vì các polyme có các trọng lượng phân tử khác nhau có các khoảng rất rộng được trộn ở mức độ chất xúc tác, tức là, mức độ nano, nên mong muốn có sức căng nóng chảy cao và khả năng đúc tuyệt vời.

[0198]

Polyme thu được bởi phương pháp polyme hóa olefin của sáng chế có tính đều lập thể cao như được mô tả ở trên. Do đó, polyme olefin thu được bởi phương pháp của sáng chế có xu hướng có điểm nóng chảy cao. Điểm nóng chảy thường được xác định bởi phương pháp phân tích nhiệt quét vi sai (DSC).

[0199]

Như được mô tả ở trên, polyme olefin, hoặc cụ thể là polyme propylen, thu được bởi phương pháp của sáng chế có xu hướng có phân bố trọng lượng phân tử rộng và cụ thể là  $M_z$  lớn, và như vậy có xu hướng có phân bố mà mở rộng về phía trọng lượng phân tử cao. Vì độ linh động phân tử của polyme olefin thay đổi theo trọng lượng phân tử, đồ thị thu được bởi phép đo DSC trong trường hợp polyme có phân bố trọng lượng phân tử rộng có thể không có hình dạng một kiểu mà là hình dạng nhiều kiểu hoặc hình dạng rộng. Tức là, vì thành phần trọng lượng phân tử siêu cao không có khả năng để kết tinh, nên hiểu rằng đồ thị có hình dạng rộng trên phía nhiệt độ thấp trong phương pháp đo DSC là có thể do thành phần trọng lượng phân tử siêu cao. Đồng thời, trong trường hợp đồ thị có sự mở rộng về phía trọng lượng phân tử thấp, thì polyme trọng lượng phân tử thấp nói chung có mức độ độ kết tinh cao, nhưng có xu hướng có lượng nhiệt nóng chảy nhỏ. Do đó,  $\Delta H$  mà được đo là nhiệt nóng chảy (lượng nhiệt kết tinh) có thể cũng có xu hướng là thấp.

[0200]

Mặt khác, đã phát hiện ra rằng đồ thị DSC của polyme propylen thu được sử dụng phương pháp của sáng chế có xu hướng thể hiện sự mở rộng tương đối nhỏ về phía nhiệt độ thấp và đồng thời  $\Delta H$  cao. Điều này là có thể vì polyme thu được bởi phương pháp của sáng chế, đặc biệt là các thành phần trong vùng trọng lượng phân tử siêu cao, có tính đều lập thể cao, và như vậy đã thể hiện xu hướng là polyme kết tinh dễ dàng, và đồ thị có sự mở rộng chút ít về phía nhiệt độ thấp.

[0201]

Polyme thu được bởi phương pháp của sáng chế thể hiện phân bố trọng lượng phân tử mà cũng có mức độ mở rộng nhất định về phía trọng lượng phân tử



thấp. Thành phần trọng lượng phân tử thấp có xu hướng có cấu tạo tinh thể yếu và điểm nóng chảy thấp do trọng lượng phân tử thấp.

Cũng hiểu rằng polyme propylen thu được bởi phương pháp của sáng chế, vì tính đều lập thể của thành phần trọng lượng phân tử thấp là cao, có thể thể hiện đồ thị DSC mà có sự mở rộng chút ít về phía nhiệt độ thấp.

[0202]

Ngoài ra, nhiều yếu tố như là khả năng thể hiện hiệu quả chất có cấu tạo nhân trong bước kết tinh có thể cũng được hiểu.

Từ các quan điểm này, hiểu rằng rằng polyme propylen thu được bởi phương pháp của sáng chế có thể có tính đều lập thể cao bất kể của khoảng trọng lượng phân tử của nó. Do đó, polyme có nhiệt nóng chảy cao và thể hiện mức độ độ kết tinh tương đối cao.

[0203]

Polyme propylen thu được bởi phương pháp của sáng chế có thể được sử dụng trong các ứng dụng khác đã biết. Cụ thể là, vì polyme propylen được mong đợi có tính chịu nhiệt và độ cứng cao, nên polyme propylen là thích hợp dùng cho, chẳng hạn, các ứng dụng vật dụng đúc phun khác nhau và, cụ thể hơn là, các bộ phận ô tô và các bộ phận thiết bị dụng cụ điện gia đình. Đồng thời, polyme propylen có thể được sử dụng trong các tấm và các màng khác nhau do phân bố trọng lượng phân tử rộng. Cụ thể là, polyme propylen là thích hợp cho, chẳng hạn, các ứng dụng chia tách trong các pin ion lithi và cả các tụ điện. Đồng thời, polyme propylen có thể được sử dụng thích hợp trong, chẳng hạn, các vật dụng đúc được dập, vật dụng đúc được cán, và các vật dụng đúc quay.

[0204]

[Polyme propylen]

Polyme propylen của sáng chế có tốc độ dòng nóng chảy (MFR) nằm trong khoảng 0,01 g/10 phút hoặc cao hơn và 1000 g/10 phút hoặc thấp hơn như được xác định dưới các điều kiện gồm nhiệt độ đo là 230°C theo tiêu chuẩn ASTM 1238.

[0205]

Giới hạn dưới được ưu tiên là 0,05 g/10 phút, ưu tiên hơn là 0,10 g/10 phút, và ưu tiên hơn nữa là 0,12 g/10 phút. Mặt khác, giới hạn trên được ưu tiên là 900 g/10 phút, ưu tiên hơn là 800 g/10 phút, và ưu tiên hơn nữa là 750 g/10 phút. Trong khoảng thấp hơn giới hạn dưới, độ lỏng nóng chảy của polyme có thể là quá thấp, dẫn đến khả năng đúc và năng suất không phù hợp. Mặt khác, trong khoảng vượt quá giới hạn trên, độ nhớt khi ở trạng thái nóng chảy có thể là quá thấp, dẫn đến khả năng giữ được hình dạng không phù hợp, và độ bền và tính chịu nhiệt không phù hợp của vật dụng đúc.

[0206]

Polyme propylen của sáng chế có xu hướng có tính chịu nhiệt cao, và thể hiện đồ thị đặc trưng trên phía nhiệt độ cao khi được đo bằng phân tích nhiệt quét vi sai (DSC). Cụ thể là, nhiệt độ lớn nhất ( $T_m\text{-max}$ ) ở đó sự hấp thụ nhiệt là không trong phân tích nhiệt quét vi sai (DSC) ở điều kiện gia nhiệt là 10°C/phút là 169,0°C hoặc cao hơn và 220°C hoặc thấp hơn. Các giá trị được xác định bởi phương pháp đo DSC và các điều kiện để xác định điểm nóng chảy ( $T_m$ ) được mô tả trong phần các Ví dụ dưới đây.

[0207]

Polyme gốc propylen của sáng chế có xu hướng có điểm nóng chảy cao, và thêm nữa có xu hướng thể hiện hình dạng hơi kéo dài về phía nhiệt độ cao hơn. Tức là, vì nó gợi ý sự có mặt của polyme mà không có khả năng hòa tan lên tới

vùng nhiệt độ cao, thì polyme có khả năng là polyme chịu nhiệt cao. Lý do để thể hiện đặc điểm như vậy, trong khi là chưa rõ ràng, được giả định bởi các tác giả sáng chế là như sau.

[0208]

Đã hiểu được rằng polyme propylen của sáng chế, như sẽ được mô tả dưới đây, có hàm lượng cao của polyme trọng lượng phân tử siêu cao, tính đều lập thể của polyme trọng lượng phân tử siêu cao là cao hơn so với của các polyme propylen thông thường, như vậy polyme propylen dễ dàng kết tinh, hoặc polyme trọng lượng phân tử siêu cao cũng có chức năng là chất làm nhân kết tinh, như vậy polyme trong vùng trọng lượng phân tử cao hơn (vùng mà sự kết tinh có xu hướng là không có khả năng do độ linh động phân tử giảm) dễ dàng kết tinh hơn so với trước, và hiện tượng liên quan đến nhiệt nóng chảy dựa trên các tinh thể cũng được quan sát trên phía nhiệt độ cao.

[0209]

Giới hạn dưới được ưu tiên của  $T_m$ -maxv là  $169,5^\circ\text{C}$ , ưu tiên hơn là  $170,0^\circ\text{C}$ , ưu tiên hơn nữa là  $170,5^\circ\text{C}$ , và đặc biệt ưu tiên là  $171,0^\circ\text{C}$ . Mặt khác, giới hạn trên được ưu tiên là  $215^\circ\text{C}$ , ưu tiên hơn là  $210^\circ\text{C}$ , ưu tiên hơn nữa là  $205^\circ\text{C}$ , và đặc biệt ưu tiên là  $200^\circ\text{C}$ .

[0210]

Về polyme propylen đáp ứng các yêu cầu ở trên, lượng nhiệt nóng chảy đối với polyme có xu hướng là lớn. Do đó, polyme propylen của sáng chế có thể được mong đợi có tính chịu nhiệt cao. Khi giới hạn dưới của  $T_m$ -maxv là thấp hơn giá trị số ở trên, polyme có thể có tính chịu nhiệt kém và, chẳng hạn, nhiệt độ biến dạng nhiệt thấp (HDT). Mặt khác, khi giới hạn dưới của  $T_m$ -maxv là cao hơn giá

trị số ở trên, nhiệt độ cao được yêu cầu để làm chảy nóng chảy, và lượng năng lượng lớn (calo) có thể được yêu cầu trong khi đúc.

[0211]

Về cơ bản là polyme propylen của sáng chế đáp ứng hai hoặc nhiều yêu cầu (p), (q), và (r) dưới đây:

(p)  $M_z/M_w$  được xác định bởi sắc ký thẩm gel (GPC) là 3,50 hoặc cao hơn và 5,65 hoặc thấp hơn;

(q) chênh lệch giữa  $M_w/M_n$  và  $M_z/M_w$  được xác định bởi GPC là 8,3 hoặc thấp hơn; và

(r) hàm lượng thành phần hòa tan trong decan (C10sol.)/(% trọng lượng) và MFR ((g/10 phút)) đáp ứng biểu thức quan hệ dưới đây:

$$(C10sol.) - 4/3 \times \text{Log}(MFR) \leq 2,30.$$

[0212]

Mỗi yêu cầu sẽ được mô tả dưới đây.

<Yêu cầu (p)>

Polyme propylen của sáng chế có  $M_z/M_w$  được xác định bởi GPC là 3,50 hoặc cao hơn và 5,65 hoặc thấp hơn.

[0213]

$M_z$  biểu thị trọng lượng phân tử trung bình Z, và  $M_w$  biểu thị trọng lượng phân tử trung bình trọng lượng. Polyme có giá trị  $M_z/M_w$  cao có thể được coi là một chỉ số có phân bố trọng lượng phân tử mà có xu hướng mở rộng về phía trọng lượng phân tử cao.  $M_z/M_w$  của các polyme gốc propylen thông thường thường thấp hơn 3,5, và ưu tiên là thấp hơn 4,0. Tức là, ngay cả các polyme propylen mà được coi là có phân bố trọng lượng phân tử rộng có phân bố trọng lượng phân tử có xu hướng mở rộng về phía trọng lượng phân tử thấp. Polyme propylen của

sáng chế có xu hướng có sự mở rộng về phía trọng lượng phân tử cao. Có thể dễ dàng mong đợi rằng hàm lượng cao như vậy của thành phần trọng lượng phân tử siêu cao có thể dẫn đến tính chịu va đập cao cao. Ngoài ra, polyme propylen của sáng chế có thể có tính chịu nhiệt cao, ví dụ, vì các lý do được mô tả liên quan đến ( $T_m$ -maxv) ở trên.

[0214]

Giới hạn dưới được ưu tiên của  $M_z/M_w$  của polyme propylen của sáng chế là 3,70, ưu tiên hơn là 3,80, ưu tiên hơn nữa là 3,90, và đặc biệt ưu tiên là 4,00. Mặt khác, giới hạn trên ưu tiên là 5,63, ưu tiên hơn là 5,62, ưu tiên hơn nữa là 5,61, và đặc biệt ưu tiên là 5,60.  $M_z/M_w$  nằm dưới giới hạn dưới có xu hướng dẫn đến hàm lượng thấp của thành phần trọng lượng phân tử siêu cao. Mặt khác, khi giới hạn trên bị vượt quá, polyme trọng lượng phân tử siêu cao có thể gây ra các vết nứt cá khi, chẳng hạn, các màng đúc thu được. Đồng thời, polyme có trọng lượng phân tử quá cao có chuyển động phân tử chậm, và như vậy có xu hướng không có khả năng để kết tinh, hoặc tức là, có xu hướng có độ kết tinh kém. Nói cách khác, tính chịu nhiệt có thể là không phù hợp. Đồng thời, có thể nó không có khả năng có chức năng là chất làm nhân kết tinh.

[0215]

<Yêu cầu (q)>

Polyme propylen của sáng chế có chênh lệch giữa  $M_w/M_n$  và  $M_z/M_w$  được xác định bởi GPC là 8,3 hoặc thấp hơn.

[0216]

Như được mô tả ở trên,  $M_w$  là trọng lượng phân tử trung bình trọng lượng, và  $M_n$  là trọng lượng phân tử trung bình số.  $M_w/M_n$  là chỉ số đã biết của phân bố

trọng lượng phân tử và, khi so sánh với  $M_z/M_w$ , có thể được coi là chỉ số mà có xu hướng thể hiện sự mở rộng của phân bố về phía trọng lượng phân tử thấp.

[0217]

Do đó, chênh lệch giữa  $M_w/M_n$  và  $M_z/M_w$  được xác định bởi GPC có thể được coi là chỉ số chỉ ra rằng cân bằng giữa sự mở rộng của phân bố trọng lượng phân tử về phía trọng lượng phân tử thấp và sự mở rộng về phía trọng lượng phân tử cao là trong khoảng thích hợp. Tức là, nó có thể được coi là chỉ ra rằng khi sự mở rộng của phân bố trọng lượng phân tử về phía trọng lượng phân tử thấp là nhỏ, sự mở rộng về phía trọng lượng phân tử cao cũng là tương đối nhỏ, và khi sự mở rộng của phân bố trọng lượng phân tử về phía trọng lượng phân tử thấp là lớn, sự mở rộng về phía trọng lượng phân tử cao cũng là tương đối lớn.

[0218]

Giới hạn trên được ưu tiên của chênh lệch này là 8,00, ưu tiên hơn là 7,90, ưu tiên hơn nữa là 7,80, và đặc biệt ưu tiên là 7,70.

Bình thường, giá trị  $M_w/M_n$  thường thể hiện giá trị số lớn hơn so với giá trị  $M_z/M_w$ , và như vậy yêu cầu (q) này được tính toán bằng biểu thức " $M_w/M_n - M_z/M_w$ ". Trong trường hợp này, giới hạn dưới được ưu tiên là 3,10, ưu tiên hơn là 3,50, ưu tiên hơn nữa là 4,00, và đặc biệt ưu tiên là 4,60.

[0219]

Mặt khác,  $M_z/M_w$  có thể thể hiện giá trị số lớn hơn  $M_w/M_n$ . Tức là, " $M_w/M_n - M_z/M_w$ " có thể thể hiện giá trị âm. Đồng thời, chênh lệch giữa hai giá trị số có thể là rất nhỏ. Trong trường hợp như vậy, giá trị tuyệt đối của " $M_w/M_n - M_z/M_w$ " ưu tiên là nằm trong khoảng 0 hoặc lớn hơn và 2,0 hoặc nhỏ hơn. Giới hạn dưới được ưu tiên hơn trong trường hợp này là 1,5, ưu tiên hơn nữa là 1,0, và đặc biệt ưu tiên là 0,5.

[0220]

Khi giới hạn dưới là ngoài khoảng số ở trên, hàm lượng của thành phần trọng lượng phân tử siêu cao là quá cao hoặc quá thấp, và như vậy, như được mô tả ở trên, có thể là trường hợp mà các vết mắt cá có khả năng được sinh ra, và, như sẽ được mô tả dưới đây, hiệu quả của thành phần trọng lượng phân tử siêu cao là chất làm nhân kết tinh không có khả năng được thể hiện.

[0221]

Ngoài ra, hàm lượng của thành phần trọng lượng phân tử thấp trở nên quá cao, có thể dẫn đến điểm nóng chảy và lượng nhiệt nóng chảy bị hạ thấp. Nói cách khác, khi “ $M_w/M_n - M_z/M_w$ ” thể hiện giá trị âm, hàm lượng của thành phần trọng lượng phân tử thấp có xu hướng là nhỏ, tính chịu nhiệt có khả năng là cao, và độ bền chịu va đập được cải thiện có thể được mong đợi.

[0222]

Khoảng được ưu tiên của giá trị  $M_w/M_n$  là 5,5 hoặc cao hơn và 13,70 hoặc thấp hơn. Giới hạn dưới được ưu tiên hơn là 5,80, ưu tiên hơn nữa là 5,90, và đặc biệt ưu tiên là 6,00. Mặt khác, giới hạn trên được ưu tiên hơn là 13,60, và ưu tiên hơn nữa là 13,50.

[0223]

$M_z$ ,  $M_w$ , và  $M_n$  trong các yêu cầu (p) và (q) là các giá trị được xác định bởi phương pháp đo GPC của phân Ví dụ được mô tả dưới đây.

[0224]

<Yêu cầu (r)>

Về polyme propylen của sáng chế, hàm lượng thành phần hòa tan trong decan ( $C_{10}sol.$ )(%/ trọng lượng) và MFR ((g/10 phút)) đáp ứng biểu thức quan hệ dưới đây:

$$(C10sol.) - 4/3 \times \text{Log}(MFR) \leq 2,30.$$

[0225]

Hàm lượng thành phần hòa tan trong decan là giá trị được tính toán bằng phương pháp đo được mô tả trong phần Ví dụ thực hiện sáng chế dưới đây. Hàm lượng thành phần hòa tan trong decan này được biết là chỉ số của tính đều lập thể của polyme olefin như là polyme propylen, và giá trị của nó có thể bị ảnh hưởng bởi trọng lượng phân tử của polyme olefin. Chẳng hạn, khi trọng lượng phân tử của polyme olefin là rất thấp, thì ngay cả polyme có tính đều cao có khả năng hòa tan trong decan. Do đó, thuật ngữ “ $4/3 \times \text{Log}(MFR)$ ” được thiết lập chủ yếu để làm giảm ảnh hưởng này của trọng lượng phân tử. Như vậy, “ $(C10sol.) - 4/3 \times \text{Log}(MFR)$ ” cũng là chỉ số của tính đều lập thể của polyme olefin. Vì giới hạn dưới của hàm lượng thành phần hòa tan trong decan là không, hiển nhiên là chỉ số “ $(C10sol.) - 4/3 \times \text{Log}(MFR)$ ” có thể cũng trở thành giá trị âm.

[0226]

Giới hạn trên được ưu tiên của giá trị “ $(C10sol.) - 4/3 \times \text{Log}(MFR)$ ” là 2,2, ưu tiên hơn là 2,1, ưu tiên hơn nữa là 2,0, và đặc biệt ưu tiên là 1,9. Khi giá trị của chỉ số này vượt quá 2,30, các lượng lớn của các sản phẩm phụ kết dính được sinh ra, và vật dụng đúc sử dụng polyme của nó có thể bị, chẳng hạn, dính, hoặc độ kết tinh của polyme của nó có thể bị suy giảm.

[0227]

Trong trường hợp polyme có phân bố trọng lượng phân tử rộng, hàm lượng của các thành phần trọng lượng phân tử thấp có thể là cao, và như vậy giá trị của yêu cầu (r) có thể có khả năng là lớn, nhưng về polyme propylen của sáng chế, có tính đều lập thể cao cũng như đáp ứng các yêu cầu (p) và (q) có thể được coi là các yếu tố mà giữ giá trị này nhỏ.



[0228]

Trong khi rõ ràng là polyme propylen của sáng chế ưu tiên là đáp ứng tất cả các yêu cầu (p), (q), và (r), thì việc đáp ứng hai trong số các yêu cầu (p), (q), và (r) có thể thường tạo ra các hiệu quả đủ đối với mục đích mà sáng chế hướng tới. Trong trường hợp này, được ưu tiên hơn là yêu cầu (q) là yêu cầu chính. Mặt khác, trong trường hợp các ứng dụng như là màng mà về bề ngoài có, chẳng hạn, các vết mắt cá ảnh hưởng nhiều đến chất lượng, thì có thể cũng ưu tiên là yêu cầu (p) là yêu cầu chính. Tức là, các yêu cầu quan trọng có thể là khác nhau theo việc ứng dụng polyme propylen của sáng chế.

[0229]

Ưu tiên là, polyme propylen của sáng chế cũng đáp ứng yêu cầu (s) dưới đây mà là tương tự các yêu cầu được xác định bởi đo DSC ở trên:

(s) nhiệt độ ( $T_m$ -maxt) ở giao điểm của đường gốc và tiếp tuyến của đường cong thu nhiệt trong khoảng nhiệt độ không thấp hơn  $T_m$  của đồ thị thu được bởi phân tích nhiệt quét vi sai (DSC) ở điều kiện gia nhiệt là  $10^\circ\text{C}/\text{phút}$  là  $168,1^\circ\text{C}$  hoặc cao hơn và  $210^\circ\text{C}$  hoặc thấp hơn.

[0230]

Yêu cầu (s) được sử dụng bởi các tác giả sáng chế là chỉ số thể hiện, chẳng hạn, rằng hiện tượng trong đó nhiệt nóng chảy có khả năng sinh ra ngay cả trong vùng nhiệt độ cao là có trong số nghĩa hơn. Nói cách khác, ý nghĩa chính của chỉ số này là giống như các yêu cầu được xác định bởi DSC, và lý do được giả định tại sao hiện tượng như vậy xảy ra cũng là tương tự.

[0231]

Giới hạn dưới được ưu tiên hơn của  $T_m$ -maxt là  $168,3^{\circ}\text{C}$ , ưu tiên hơn nữa là  $168,5^{\circ}\text{C}$ , và đặc biệt ưu tiên là  $168,7^{\circ}\text{C}$ . Mặt khác, giới hạn trên được ưu tiên hơn là  $205^{\circ}\text{C}$ , ưu tiên hơn nữa là  $200^{\circ}\text{C}$ , và đặc biệt ưu tiên là  $195^{\circ}\text{C}$ .

[0232]

Polyme propylen của sáng chế có thể cũng được tạo thành chế phẩm chứa các chất phụ gia đã biết và các polyme kết hợp. Các ví dụ về các chất phụ gia gồm các chất làm ổn định chịu nhiệt, các chất làm ổn định chịu ánh sáng, các chất hấp thụ thành phần axit, các chất trượt, các chất làm bóng, các chất tăng dính, các chất trợ đúc aid, và các chất làm nhân kết tinh. Các chất độn như là sợi thủy tinh, talc, mica, và sợi cacbon có thể cũng được sử dụng kết hợp. Ngoài ra, chất chống tĩnh điện gốc amit và gốc alkylen oxit, và các sắc tố và các chất tạo màu như là thuốc nhuộm như là muối than có thể được sử dụng.

[0233]

Các polyme khác gồm các thành phần elastome đã biết như là các copolyme olefin, các elastome dẻo nhiệt olefin, các elastome dẻo nhiệt styren, cao su tự nhiên, cao su polyen như là cao su isopren và cao su butadien, cao su butyl, và các thành phần elastome chứa các nguyên tử khác loại như là cao su clopren và cao su silicon. Chất chống mài mòn như là nhựa (met)acrylat có thể cũng được sử dụng kết hợp.

Tất nhiên là, hai hoặc nhiều loại trong số các thành phần ở trên có thể được sử dụng kết hợp.

[0234]

Polyme propylen của sáng chế có thể thu được bằng cách polyme hóa, ngoài propylen có nguồn gốc từ dầu mỏ (dầu thô) và propylen có nguồn gốc từ khí tự nhiên được nêu ở trên, tức là, propylen có nguồn gốc từ các nguyên liệu

thông thường mà được gọi là nhiên liệu hóa thạch, propylen có nguồn gốc từ các vật liệu sinh học. Khi propylen có nguồn gốc từ các vật liệu sinh học được sử dụng, hàm lượng  $^{14}\text{C}$  của polyme propylen tương ứng có xu hướng là cao hơn hàm lượng của các polyme propylen thu được sử dụng propylen có nguồn gốc từ các nguyên liệu thông thường (mà sẽ là hiển nhiên).

[0235]

Polyme propylen như vậy của sáng chế có thể được sản xuất bằng, chẳng hạn, phương pháp sản xuất polyme olefin của sáng chế được mô tả ở trên, tức là, sử dụng chất xúc tác dùng để polyme hóa olefin của sáng chế. Tất nhiên là, polyme propylen có thể được sản xuất với các chất xúc khác tác dụng để polyme hóa olefin. Các ứng dụng được ưu tiên của polyme propylen như vậy của sáng chế là giống như các ứng dụng được mô tả ở trên.

#### **Ví dụ thực hiện sáng chế**

[0236]

Sáng chế sẽ được mô tả bằng các Ví dụ dưới đây, nhưng sáng chế không bị giới hạn ở các Ví dụ này.

Trong các Ví dụ dưới đây, chẳng hạn, tỷ trọng khối, tốc độ dòng nóng chảy, lượng của thành phần hòa tan (không hòa tan) trong decan, phân bố trọng lượng phân tử, điểm nóng chảy cuối, điểm nóng chảy, nhiệt độ kết tinh, và lượng của nhiệt nóng chảy của các polyme propylen được đo bằng các phương pháp dưới đây.

[0237]

(1) Tỷ trọng khối:

Tỷ trọng khối được đo theo JIS K-6721.

(2) Tốc độ dòng nóng chảy (MFR):

Theo ASTM D1238E, nhiệt độ đo đối với polyme propylen được thiết lập ở 230°C.

[0238]

(3) Lượng của thành phần hòa tan (không hòa tan) trong decan:

Khoảng 3 g polyme propylen (được đo tới đơn vị  $10^{-4}$  g, và trọng lượng này được biểu thị là b (g) trong phương trình dưới đây), 500 ml decan, và lượng nhỏ của chất làm ổn định chịu nhiệt hòa tan trong decan được nạp vào bình đo bằng thủy tinh, và polyme propylen được hòa tan bằng cách được gia nhiệt tới 150°C trong 2 giờ trong khi được khuấy bằng thiết bị khuấy trong môi trường nitơ, tiếp sau được duy trì ở 150°C trong 2 giờ, và được làm mát từ từ tới 23°C trong 8 giờ. Chất lỏng thu được chứa các kết tủa của polyme propylen được đưa đi lọc dưới áp suất giảm qua dụng cụ lọc bằng thủy tinh chuẩn 25G-4 được sản xuất bởi Tokyo Garasu Kikai Co., Ltd. Sau đó, 100 ml phần lọc được thu hồi và được sấy dưới điều kiện áp suất giảm để tạo ra phần thành phần hòa tan trong decan, và trọng lượng của nó được cân tới đơn vị  $10^{-4}$  g (trọng lượng này được biểu thị là a (g) trong phương trình dưới đây). Sau thao tác này, lượng của thành phần hòa tan trong decan được xác định bởi phương trình dưới đây.

[0239]

$$\text{Hàm lượng thành phần hòa tan trong decan} = 100 \times (500 \times a) / (100 \times b)$$

$$\text{Hàm lượng thành phần không hòa tan trong decan} = 100 - 100 \times (500 \times a) / (100 \times b)$$

[0240]

(4) Phân bố trọng lượng phân tử:

Sắc ký thẩm gel: mẫu HLC-8321 GPC/HT được sản xuất bởi Tosoh Corporation

Bộ phát hiện: khúc xạ kế vi sai

Cột: hai cột TSKgel GMH6-HT và hai cột TSKgel GMH6-HTL được sản xuất bởi Tosoh Corporation (kích thước cột (tất cả có cùng kích thước): 7,5 mm I.D.×30 cm) được nối liên tiếp.

Môi trường pha động: o-Dichlorobenzen (chứa 0,025% dibutylhydroxytoluen (BHT) là chất chống oxy hóa)

Tốc độ chảy: 1,0 ml/phút

Nhiệt độ đo: 140°C

Phương pháp tạo đường cong hiệu chuẩn: mẫu polystyren chuẩn được sản xuất bởi Tosoh Corporation được sử dụng.

[0241]

Nồng độ mẫu: 0,1% (trọng lượng/thể tích)

Lượng dung dịch mẫu: 0,4 ml

Khoảng cách lấy mẫu: 1 giây

Phép đo được tiến hành dưới các điều kiện trên, và phổ sắc ký thu được được phân tích bởi phương pháp đã biết để tính trọng lượng phân tử trung bình trọng lượng ( $M_w$ ), trọng lượng phân tử trung bình số ( $M_n$ ), trọng lượng phân tử trung bình Z ( $M_z$ ), và giá trị  $M_w/M_n$  và giá trị  $M_z/M_w$  mà là các chỉ số của phân bố trọng lượng phân tử (MWD). Thời gian đo trên mỗi mẫu là 60 phút.

[0242]

(5) Điểm nóng chảy ( $T_m$ ) của polyme:

Điểm nóng chảy ( $T_m$ ), nhiệt độ kết tinh ( $T_c$ ), và lượng của nhiệt nóng chảy ( $\Delta H$ ) của các polyme trong sáng chế được đo bằng thiết bị đo nhiệt quét vi sai

(DSC) trong thiết bị DSC8000 được sản xuất bởi PerkinElmer Co., Ltd. Trước tiên, từ 3 đến 10 mg mẫu được hàn kín trong cốc nhôm và được gia nhiệt từ nhiệt độ trong phòng đến 200°C ở 100°C/phút. Mẫu được giữ ở 200°C trong 5 phút, và sau đó được làm mát tới 30°C ở 10°C/phút. Trong thử nghiệm làm mát này, nhiệt độ đỉnh được xem như nhiệt độ kết tinh ( $T_c$ ). Sau đó, mẫu được để nguyên trong 5 phút ở 30°C, và sau đó được gia nhiệt lần thứ hai tới 200°C ở 10°C/phút. Trong thử nghiệm gia nhiệt lần thứ hai này, nhiệt độ đỉnh được coi như điểm nóng chảy ( $T_m$ ), và lượng của nhiệt được hấp thụ được coi như lượng của nhiệt nóng chảy ( $\Delta H$ ). Đối với lượng của nhiệt nóng chảy, lượng của nhiệt được sinh ra trong làm mát (giảm nhiệt độ) cũng được biểu thị là lượng của nhiệt nóng chảy ( $\Delta H$ ).

[0243]

(6) Nhiệt độ lớn nhất ( $T_m\text{-maxv}$ ) ở đó sự hấp thụ nhiệt là không trong phân tích nhiệt quét vi sai (DSC) trong điều kiện gia nhiệt là 10°C/phút:

Trong quá trình thử nghiệm gia nhiệt lần thứ hai, nhiệt độ cao nhất ở giao điểm của đường cong thu nhiệt và đường gốc được coi là chỉ số ở trên. Có thể hiểu rằng chỉ số này được quy cho, chẳng hạn, chỉ số polyme trọng lượng phân tử siêu cao được kết tinh cao. Mạch phân tử của thành phần polyme trọng lượng phân tử siêu cao là chậm, như vậy hiểu rằng độ kết tinh của thành phần này là cao hơn, thì có khả năng hơn là đỉnh thu nhiệt được thể hiện nằm ngang ở nhiệt độ cao trong đo DSC, và do đó chỉ số này được sử dụng trong sáng chế.

[0244]

(7) Nhiệt độ ( $T_m\text{-maxt}$ ) ở giao điểm của đường gốc và tiếp tuyến của đường cong thu nhiệt trong vùng nhiệt độ không thấp hơn  $T_m$  của đồ thị thu được bởi phân tích nhiệt quét vi sai (DSC) ở điều kiện gia nhiệt là 10°C/phút:

Tiếp tuyến của đường cong thu nhiệt trong vùng nơi đỉnh thu nhiệt trong (6) không xuất hiện được tạo bởi phương pháp xử lý dữ liệu thông thường, và giao điểm của tiếp tuyến và đường gốc được coi là nhiệt độ ở trên. Độ dốc của đỉnh thu nhiệt là thoải hơn, nhiệt độ có xu hướng cao hơn. Có thể hiểu rằng hình dạng như vậy được quy chi, chẳng hạn, hàm lượng cao của thành phần trọng lượng phân tử siêu cao được kết tinh cao.

[0245]

Điểm nóng chảy cuối (T<sub>mf</sub>) của polyme trong sáng chế được đo bằng thiết bị đo nhiệt quét vi sai (DSC) trong thiết bị DSC 8000 được sản xuất bởi PerkinElmer Co., Ltd. Trước tiên, từ 3 đến 10 mg của mẫu được hàn kín trong cốc nhôm, và được gia nhiệt từ nhiệt độ trong phòng đến 240°C ở 80°C/phút. Mẫu được giữ ở 240°C trong 1 phút và sau đó được làm mát tới 0°C ở 80°C/phút. Sau khi được giữ ở 0°C trong 1 phút, mẫu được gia nhiệt tới 150°C ở 80°C/phút và được giữ trong 5 phút. Cuối cùng, mẫu được gia nhiệt tới 180°C ở 1,35°C/phút, và giao điểm giữa đường gốc và tiếp tuyến của điểm uốn trên phía nhiệt độ cao của đỉnh thu được trong thử nghiệm gia nhiệt cuối này được coi là điểm nóng chảy cuối (T<sub>mf</sub>).

[0246]

T<sub>mf</sub> có thể được coi là một thông số để đánh giá sự dễ dàng kết tinh và cấu tạo tinh thể, chẳng hạn, của polyme trong vùng trọng lượng phân tử siêu cao, mà được cho là có xu hướng khó kết tinh. Cụ thể hơn là, có thể được coi là, khi giá trị T<sub>mf</sub> này là cao hơn, thì thành phần polyme trọng lượng phân tử siêu cao có khả năng hơn để tạo thành các tinh thể mà là vững chắc và có tính chịu nhiệt cao.

[0247]

Một số công thức cấu tạo của các hợp chất được sử dụng trong các Ví dụ và các Ví dụ so sánh dưới đây có các cấu tạo đồng phân lập thể. Các công thức cấu tạo của các hợp chất được lấy làm ví dụ thể hiện các chất đồng phân chính của các hợp chất được sử dụng trong các Ví dụ và các Ví dụ so sánh.

[0248]

[Ví dụ 1]

<Điều chế thành phần chất xúc tác titan rắn [ $\alpha$ 1]>

Sau khi bình thủy tinh thể tích 1 lit được làm sạch thích hợp bằng nitơ, 85,8 g magie clorua khan, 321 g decan, và 352 g rượu 2-etylhexyl được đặt vào, và được đưa đi phản ứng gia nhiệt ở 130°C trong 3 giờ để tạo ra dung dịch đồng nhất. Sau đó, 241 g dung dịch này và 6,43 g etyl benzoat được bổ sung vào bình thủy tinh, và được trộn dưới điều kiện khuấy ở 50°C trong 1 giờ.

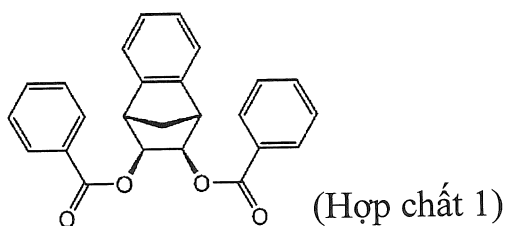
[0249]

Sau khi dung dịch đồng nhất thu được như vậy được làm mát tới nhiệt độ trong phòng, toàn bộ 38,3 ml dung dịch đồng nhất được nạp từng giọt trong 45 phút vào 100 ml titan tetracolorua được giữ ở -20°C trong khi được khuấy ở tốc độ quay là 350 rpm. Sau khi hoàn thành việc nạp, nhiệt độ của chất lỏng được trộn được nâng lên 80°C trong 3,8 giờ, và khi nhiệt độ đạt tới 80°C, 0,97 g hợp chất 1 dưới đây được bổ sung vào chất lỏng được trộn. Nhiệt độ được nâng lần nữa lên 120°C trong 40 phút, và hỗn hợp được giữ ở cùng nhiệt độ trong 35 phút trong khi được khuấy. Sau khi phản ứng được hoàn thành, phần chất rắn được thu hồi bằng lọc nóng, được tạo huyền phù lại trong 100 ml titan tetracolorua, và một lần nữa được phản ứng nhiệt ở 120°C trong 35 phút. Sau khi phản ứng được hoàn thành, phần chất rắn được thu hồi một lần nữa bằng lọc nóng và được rửa kỹ bằng decan ở 100°C và decan ở nhiệt độ trong phòng đến khi không có hợp chất titan



tự do được phát hiện trong chất lỏng rửa. Thành phần chất xúc tác titan rắn [ $\alpha$ 1] được điều chế bằng các thao tác ở trên được bảo quản là huyền phù đặc decan, và một phần của huyền phù đặc được sấy để kiểm tra hợp phần chất xúc tác. Hợp phần của thành phần chất xúc tác titan rắn [ $\alpha$ 1] như vậy thu được có 0,28% khối lượng titan, 1,7% khối lượng magie, và 0,12% khối lượng gốc rượu 2-ethylhexyl.

[0250]



[0251]

<Polyme hóa>

Sau khi 500 g propylen và 1 NL hydro ở nhiệt độ trong phòng được bổ sung vào thiết bị polyme hóa có thể tích bên trong là 2 lit, chất lỏng hỗn hợp được tạo ra bằng cách trộn 7 ml heptan, 0,5 mmol trietyl nhôm, 0,10 mmol xyclohexylmetyldimetoxyasilan, và 0,004 mmol (tính theo nguyên tử titan) thành phần chất xúc tác titan rắn [ $\alpha$ 1] ở 25°C trong 10 phút được bổ sung, và nhiệt độ bên trong thiết bị polyme hóa được nâng nhanh chóng lên 70°C. Sau khi polyme hóa ở 70°C trong 1,5 giờ, phản ứng được kết thúc bằng lượng nhỏ metanol, và propylen được làm sạch. Hơn nữa, các hạt polyme thu được sấy dưới áp suất giảm ở 80°C qua đêm. Bảng 1 và Bảng 2 thể hiện, chẳng hạn, hoạt tính, tỷ trọng khối, MFR, lượng của thành phần hòa tan trong decan,  $T_m$ ,  $T_m\text{-maxv}$ ,  $T_m\text{-maxt}$ ,  $T_mf$ , và MWD (chênh lệch giữa  $M_w/M_n$  và  $M_z/M_w$ ).

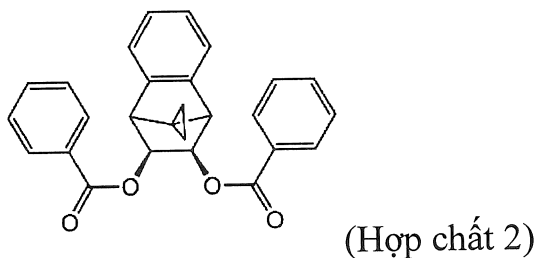
[0252]

[Ví dụ 2]

<Điều chế thành phần chất xúc tác titan rắn [ $\alpha$ 2]>

Thành phần chất xúc tác titan rắn [ $\alpha$ 2] thu được theo cách tương tự như Ví dụ 1, ngoại trừ rằng 0,91 g hợp chất 2 dưới đây được sử dụng thay cho 0,97 g hợp chất 1.

[0253]



[0254]

<Polyme hóa>

Polyme hóa propylen được tiến hành theo cách tương tự như Ví dụ 1, ngoại trừ rằng thành phần chất xúc tác titan rắn [ $\alpha$ 2] được sử dụng thay cho thành phần chất xúc tác titan rắn [ $\alpha$ 1]. Các kết quả được thể hiện trong Bảng 1 và Bảng 2.

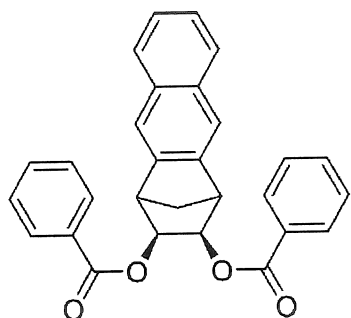
[0255]

[Ví dụ 3]

<Điều chế thành phần chất xúc tác titan rắn [ $\alpha$ 3]>

Thành phần chất xúc tác titan rắn [ $\alpha$ 3] thu được theo cách tương tự như Ví dụ 1, ngoại trừ rằng 1,10 g hợp chất 3 dưới đây được sử dụng thay cho 0,97 g hợp chất 1.

[0256]



(Hợp chất 3)

[0257]

&lt;Polyme hóa&gt;

Polyme hóa propylen được tiến hành theo cách tương tự như Ví dụ 1, ngoại trừ rằng 0,0032 mmol (tính theo nguyên tử titan) thành phần chất xúc tác titan rắn  $[\alpha 3]$  được sử dụng thay cho thành phần chất xúc tác titan rắn  $[\alpha 1]$ , lượng của triethyl nhôm được sử dụng được thay đổi từ 0,5 mmol thành 0,4 mmol, và lượng của xyclohexylmetyldimetoxy silan được sử dụng được thay đổi từ 0,10 mmol thành 0,08 mmol. Các kết quả được thể hiện trong Bảng 1 và Bảng 2.

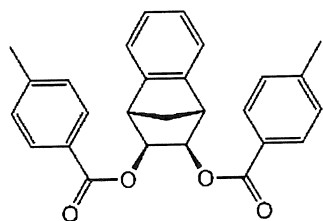
[0258]

[Ví dụ 4]

<Điều chế thành phần chất xúc tác titan rắn  $[\alpha 4]$ >

Thành phần chất xúc tác titan rắn  $[\alpha 4]$  thu được theo cách tương tự như Ví dụ 1, ngoại trừ rằng 1,19 g hợp chất 4 dưới đây được sử dụng thay cho 0,97 g hợp chất 1.

[0259]



(Hợp chất 4)

[0260]

## &lt;Polyme hóa&gt;

Polyme hóa propylen được tiến hành theo cách tương tự như Ví dụ 1, ngoại trừ rằng 0,0032 mmol (tính theo nguyên tử titan) thành phần chất xúc tác titan rắn  $[\alpha 4]$  được sử dụng thay cho thành phần chất xúc tác titan rắn  $[\alpha 1]$ , lượng của trietyl nhôm được sử dụng được thay đổi từ 0,5 mmol thành 0,4 mmol, và lượng của xyclohexylmetyldimetoxy silan được sử dụng được thay đổi từ 0,10 mmol thành 0,08 mmol. Các kết quả được thể hiện trong Bảng 1 và Bảng 2.

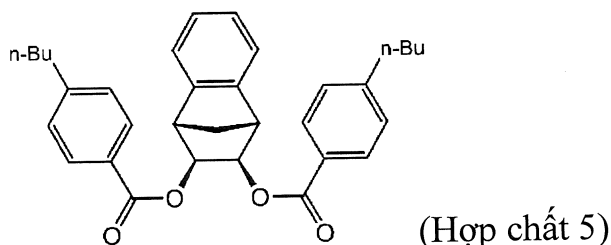
[0261]

[Ví dụ 5]

<Điều chế thành phần chất xúc tác titan rắn  $[\alpha 5]$ >

Thành phần chất xúc tác titan rắn  $[\alpha 5]$  thu được theo cách tương tự như Ví dụ 1, ngoại trừ rằng 1,11 g hợp chất 5 dưới đây được sử dụng thay cho 0,97 g hợp chất 1.

[0262]



[0263]

## &lt;Polyme hóa&gt;

Polyme hóa propylen được tiến hành theo cách tương tự như Ví dụ 1, ngoại trừ rằng 0,0032 mmol (tính theo nguyên tử titan) thành phần chất xúc tác titan rắn  $[\alpha 5]$  được sử dụng thay cho thành phần chất xúc tác titan rắn  $[\alpha 1]$ , lượng của trietyl nhôm được sử dụng được thay đổi từ 0,5 mmol thành 0,4 mmol, và lượng

của xyclohexylmetyldimetoxy silan được sử dụng được thay đổi từ 0,10 mmol thành 0,08 mmol. Các kết quả được thể hiện trong Bảng 1 và Bảng 2.

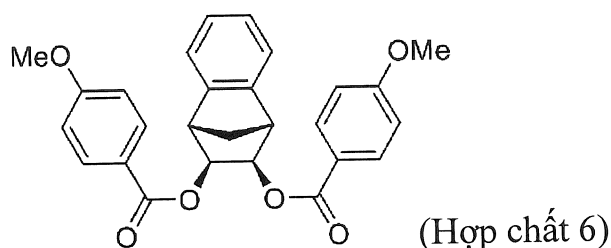
[0264]

[Ví dụ 6]

<Điều chế thành phần chất xúc tác titan rắn [ $\alpha$ 6]>

Thành phần chất xúc tác titan rắn [ $\alpha$ 6] thu được theo cách tương tự như Ví dụ 1, ngoại trừ rằng 1,12 g hợp chất 6 dưới đây được sử dụng thay cho 0,97 g hợp chất 1.

[0265]



[0266]

<Polyme hóa>

Polyme hóa propylen được tiến hành theo cách tương tự như Ví dụ 1, ngoại trừ rằng 0,0032 mmol (tính theo nguyên tử titan) thành phần chất xúc tác titan rắn [ $\alpha$ 6] được sử dụng thay cho thành phần chất xúc tác titan rắn [ $\alpha$ 1], lượng của trietyl nhôm được sử dụng được thay đổi từ 0,5 mmol thành 0,4 mmol, và lượng của xyclohexylmetyldimetoxy silan được sử dụng được thay đổi từ 0,10 mmol thành 0,08 mmol. Các kết quả được thể hiện trong Bảng 1 và Bảng 2.

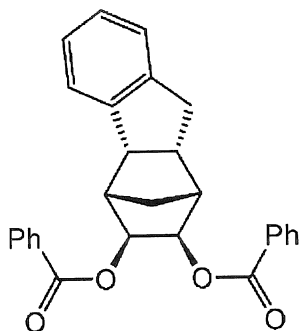
[0267]

[Ví dụ 7]

<Điều chế thành phần chất xúc tác titan rắn [ $\alpha$ 7]>

Thành phần chất xúc tác titan rắn [ $\alpha$ 7] thu được theo cách tương tự như Ví dụ 1, ngoại trừ rằng 0,91 g hợp chất 7 dưới đây được sử dụng thay cho 0,97 g hợp chất 1.

[0268]



(Hợp chất 7)

[0269]

<Polyme hóa>

Polyme hóa propylen được tiến hành theo cách tương tự như Ví dụ 1, ngoại trừ rằng 0,0032 mmol (tính theo nguyên tử titan) thành phần chất xúc tác titan rắn [ $\alpha$ 7] được sử dụng thay cho thành phần chất xúc tác titan rắn [ $\alpha$ 1], lượng của triethyl nhôm được sử dụng được thay đổi từ 0,5 mmol thành 0,4 mmol, và lượng của cyclohexylmetyldimetoxy silan được sử dụng được thay đổi từ 0,10 mmol thành 0,08 mmol. Các kết quả được thể hiện trong Bảng 1 và Bảng 2.

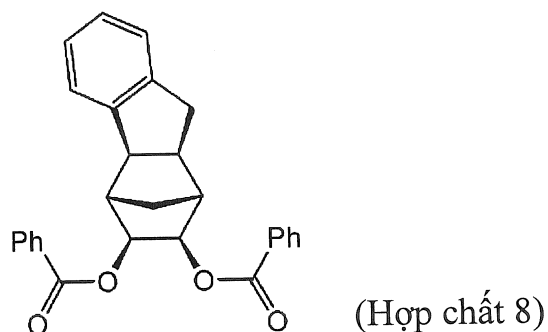
[0270]

[Ví dụ 8]

<Điều chế thành phần chất xúc tác titan rắn [ $\alpha$ 8]>

Thành phần chất xúc tác titan rắn [ $\alpha$ 8] thu được theo cách tương tự như Ví dụ 1, ngoại trừ rằng 1,07 g hợp chất 8 dưới đây được sử dụng thay cho 0,97 g hợp chất 1.

[0271]



[0272]

&lt;Polyme hóa&gt;

Polyme hóa propylen được tiến hành theo cách tương tự như Ví dụ 1, ngoại trừ rằng 0,0032 mmol (tính theo nguyên tử titan) thành phần chất xúc tác titan rắn  $[\alpha 8]$  được sử dụng thay cho thành phần chất xúc tác titan rắn  $[\alpha 1]$ , lượng của triethyl nhôm được sử dụng được thay đổi từ 0,5 mmol thành 0,4 mmol, và lượng của cyclohexylmetyldimetoxy silan được sử dụng được thay đổi từ 0,10 mmol thành 0,08 mmol. Các kết quả được thể hiện trong Bảng 1 và Bảng 2.

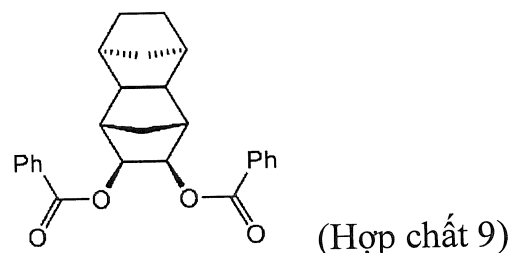
[0273]

[Ví dụ 9]

<Điều chế thành phần chất xúc tác titan rắn  $[\alpha 9]$ >

Thành phần chất xúc tác titan rắn  $[\alpha 9]$  thu được theo cách tương tự như Ví dụ 1, ngoại trừ rằng 1,13 g hợp chất 9 dưới đây được sử dụng thay cho 0,97 g hợp chất 1.

[0274]



[0275]

## &lt;Polyme hóa&gt;

Polyme hóa propylen được tiến hành theo cách tương tự như Ví dụ 1, ngoại trừ rằng 0,0032 mmol (tính theo nguyên tử titan) thành phần chất xúc tác titan rắn [ $\alpha$ 9] được sử dụng thay cho thành phần chất xúc tác titan rắn [ $\alpha$ 1], lượng của trietyl nhôm được sử dụng được thay đổi từ 0,5 mmol thành 0,4 mmol, và lượng của xyclohexylmetyldimetoxyasilan được sử dụng được thay đổi từ 0,10 mmol thành 0,08 mmol. Các kết quả được thể hiện trong Bảng 1 và Bảng 2.

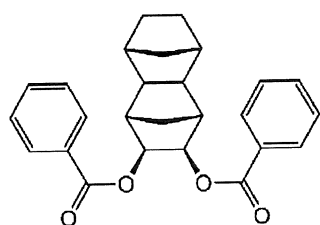
[0276]

[Ví dụ 10]

<Điều chế thành phần chất xúc tác titan rắn [ $\alpha$ 10]>

Thành phần chất xúc tác titan rắn [ $\alpha$ 10] thu được theo cách tương tự như Ví dụ 1, ngoại trừ rằng 1,13 g hợp chất 10 dưới đây được sử dụng thay cho 0,97 g hợp chất 1.

[0277]



(Hợp chất 10)

[0278]

## &lt;Polyme hóa&gt;

Polyme hóa propylen được tiến hành theo cách tương tự như Ví dụ 1, ngoại trừ rằng 0,0032 mmol (tính theo nguyên tử titan) thành phần chất xúc tác titan rắn [ $\alpha$ 10] được sử dụng thay cho thành phần chất xúc tác titan rắn [ $\alpha$ 1], lượng của trietyl nhôm được sử dụng được thay đổi từ 0,5 mmol thành 0,4 mmol, và lượng



của xyclohexylmetyldimetoxyasilan được sử dụng được thay đổi từ 0,10 mmol thành 0,08 mmol. Các kết quả được thể hiện trong Bảng 1 và Bảng 2.

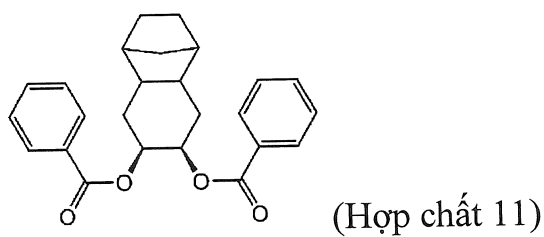
[0279]

[Ví dụ 11]

<Điều chế thành phần chất xúc tác titan rắn [ $\alpha$ 11]>

Thành phần chất xúc tác titan rắn [ $\alpha$ 11] thu được theo cách tương tự như Ví dụ 1, ngoại trừ rằng 1,07 g hợp chất 11 dưới đây được sử dụng thay cho 0,97 g hợp chất 1.

[0280]



[0281]

<Polyme hóa>

Polyme hóa propylen được tiến hành theo cách tương tự như Ví dụ 1, ngoại trừ rằng 0,0032 mmol (tính theo nguyên tử titan) thành phần chất xúc tác titan rắn [ $\alpha$ 11] được sử dụng thay cho thành phần chất xúc tác titan rắn [ $\alpha$ 1], lượng của trietyl nhôm được sử dụng được thay đổi từ 0,5 mmol thành 0,4 mmol, và lượng của xyclohexylmetyldimetoxyasilan được sử dụng được thay đổi từ 0,10 mmol thành 0,08 mmol. Các kết quả được thể hiện trong Bảng 1 và Bảng 2.

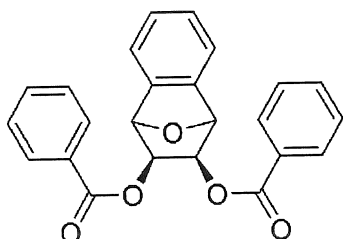
[0282]

[Ví dụ 12]

<Điều chế thành phần chất xúc tác titan rắn [ $\alpha$ 12]>

Thành phần chất xúc tác titan rắn [ $\alpha$ 12] thu được theo cách tương tự như Ví dụ 1, ngoại trừ rằng 1,85 g hợp chất 12 dưới đây được sử dụng thay cho 0,97 g hợp chất 1.

[0283]



(Hợp chất 12)

[0284]

<Polyme hóa>

Polyme hóa propylen được tiến hành theo cách tương tự như Ví dụ 1, ngoại trừ rằng 0,0032 mmol (tính theo nguyên tử titan) thành phần chất xúc tác titan rắn [ $\alpha$ 12] được sử dụng thay cho thành phần chất xúc tác titan rắn [ $\alpha$ 1], lượng của trietyl nhôm được sử dụng được thay đổi từ 0,5 mmol thành 0,4 mmol, và lượng của xyclohexylmetyldimetoxy silan được sử dụng được thay đổi từ 0,10 mmol thành 0,08 mmol. Các kết quả được thể hiện trong Bảng 1.

[0285]

[Ví dụ 13]

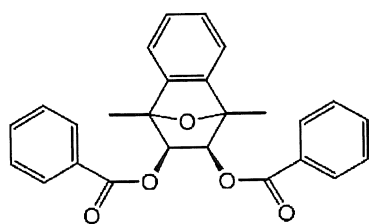
<Điều chế thành phần chất xúc tác titan rắn [ $\alpha$ 13]>

Sau khi bình thủy tinh thể tích 1 lit được làm sạch thích hợp bằng nitơ, 85,8 g magie clorua khan, 321 g decan, và 352 g rượu 2-etylhexyl được đặt vào, và được đưa đi phản ứng gia nhiệt ở 130°C trong 3 giờ để tạo ra dung dịch đồng nhất. Sau đó, 241 g dung dịch này và 6,43 g etyl benzoat được bổ sung vào bình thủy tinh, và được trộn dưới điều kiện khuấy ở 50°C trong 1 giờ.

[0286]

Sau khi dung dịch đồng nhất thu được như vậy được làm mát tới nhiệt độ trong phòng, toàn bộ 30,7 ml dung dịch đồng nhất được nạp từng giọt vào 80 ml titan tetraclorua được giữ ở  $-20^{\circ}\text{C}$  trong 45 phút trong khi được khuấy ở tốc độ quay là 350 rpm. Sau khi hoàn thành nạp, nhiệt độ của chất lỏng được trộn được nâng lên  $80^{\circ}\text{C}$  trong 3,8 giờ, và khi nhiệt độ đạt tới  $80^{\circ}\text{C}$ , 1,88 g hợp chất 13 dưới đây được bổ sung vào chất lỏng hỗn hợp. Nhiệt độ được nâng lần nữa lên  $120^{\circ}\text{C}$  trong 40 phút, và hỗn hợp được giữ ở cùng nhiệt độ trong 35 phút trong khi được khuấy. Sau khi phản ứng được hoàn thành, phần chất rắn được thu hồi bằng lọc nóng, được tạo huyền phù lại trong 80 ml titan tetraclorua, và một lần nữa được phản ứng nhiệt ở  $120^{\circ}\text{C}$  trong 35 phút. Sau khi phản ứng được hoàn thành, phần chất rắn được thu hồi một lần nữa bằng lọc nóng và được rửa kỹ bằng decan ở  $100^{\circ}\text{C}$  và decan ở nhiệt độ trong phòng đến khi không có hợp chất titan tự do được phát hiện trong chất lỏng rửa. Thành phần chất xúc tác titan rắn [ $\alpha$ 13] được điều chế bằng các thao tác ở trên được bảo quản là huyền phù đặc decan.

[0287]



(Hợp chất 13)

[0288]

&lt;Polyme hóa&gt;

Polyme hóa propylen được tiến hành theo cách tương tự như Ví dụ 1, ngoại trừ rằng 0,0032 mmol (tính theo nguyên tử titan) thành phần chất xúc tác titan rắn [ $\alpha$ 13] được sử dụng thay cho thành phần chất xúc tác titan rắn [ $\alpha$ 1], lượng của trietyl nhôm được sử dụng được thay đổi từ 0,5 mmol thành 0,4 mmol, và lượng

của xyclohexylmetyldimetoxyasilan được sử dụng được thay đổi từ 0,10 mmol thành 0,08 mmol. Các kết quả được thể hiện trong Bảng 1.

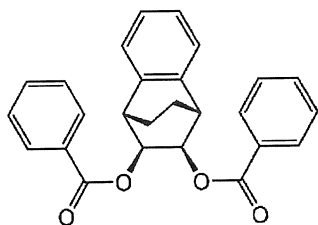
[0289]

[Ví dụ 14]

<Điều chế thành phần chất xúc tác titan rắn [ $\alpha$ 14]>

Thành phần chất xúc tác titan rắn [ $\alpha$ 14] thu được theo cách tương tự như Ví dụ 1, ngoại trừ rằng 1,01 g hợp chất 14 dưới đây được sử dụng thay cho 0,97 g hợp chất 1.

[0290]



(Hợp chất 14)

[0291]

<Polyme hóa>

Polyme hóa propylen được tiến hành theo cách tương tự như Ví dụ 1, ngoại trừ rằng 0,0032 mmol (tính theo nguyên tử titan) thành phần chất xúc tác titan rắn [ $\alpha$ 14] được sử dụng thay cho thành phần chất xúc tác titan rắn [ $\alpha$ 1], lượng của trietyl nhôm được sử dụng được thay đổi từ 0,5 mmol thành 0,4 mmol, và lượng của xyclohexylmetyldimetoxyasilan được sử dụng được thay đổi từ 0,10 mmol thành 0,08 mmol. Các kết quả được thể hiện trong Bảng 1 và Bảng 2.

[0292]

[Ví dụ 15]

<Điều chế thành phần chất xúc tác titan rắn [ $\alpha$ 15]>

Thành phần chất xúc tác titan rắn [ $\alpha$ 15] được điều chế theo cách tương tự như Ví dụ 13, ngoại trừ các thao tác dưới đây:

- \* 0,77 g hợp chất 12 được bổ sung ở 80°C thay cho hợp chất 13;
- \* nhiệt độ được nâng từ 80°C lên 100°C trong 20 phút thay cho được nâng từ 80°C lên 120°C trong 40 phút; và
- \* phần chất rắn được tạo huyền phù lại trong titan tetraclorua và được gia nhiệt ở 100°C trong 35 phút thay cho được tạo huyền phù lại trong titan tetraclorua và được gia nhiệt ở 120°C trong 35 phút.

[0293]

<Polyme hóa>

Polyme hóa propylen được tiến hành theo cách tương tự như Ví dụ 1, ngoại trừ rằng 0,0032 mmol (tính theo nguyên tử titan) thành phần chất xúc tác titan rắn [ $\alpha$ 15] được sử dụng thay cho thành phần chất xúc tác titan rắn [ $\alpha$ 1], lượng của trietyl nhôm được sử dụng được thay đổi từ 0,5 mmol thành 0,4 mmol, và lượng của cyclohexylmetyldimetoxy silan được sử dụng được thay đổi từ 0,10 mmol thành 0,08 mmol. Các kết quả được thể hiện trong Bảng 1.

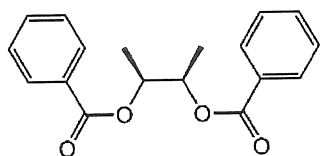
[0294]

[Ví dụ so sánh 1]

<Điều chế thành phần chất xúc tác titan rắn [ $\beta$ 1]>

Thành phần chất xúc tác titan rắn [ $\beta$ 1] thu được theo cách tương tự như Ví dụ 1, ngoại trừ rằng 1,51 g hợp chất-c1 dưới đây được sử dụng thay cho 0,97 g hợp chất 1.

[0295]



(Hợp chất c1)

[0296]

&lt;Polyme hóa&gt;

Polyme hóa propylen được tiến hành theo cách tương tự như Ví dụ 1, ngoại trừ rằng 0,0032 mmol (tính theo nguyên tử titan) thành phần chất xúc tác titan rắn  $[\beta 1]$  được sử dụng thay cho thành phần chất xúc tác titan rắn  $[\alpha 1]$ , lượng của trietyl nhôm được sử dụng được thay đổi từ 0,5 mmol thành 0,4 mmol, và lượng của xyclohexylmetyldimetoxy silan được sử dụng được thay đổi từ 0,10 mmol thành 0,08 mmol. Các kết quả được thể hiện trong Bảng 1 và Bảng 2.

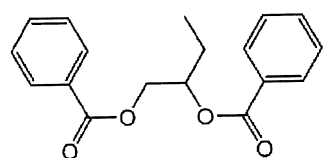
[0297]

[Ví dụ so sánh 2]

<Điều chế thành phần chất xúc tác titan rắn  $[\beta 2]$ >

Thành phần chất xúc tác titan rắn  $[\beta 2]$  thu được theo cách tương tự như Ví dụ 1, ngoại trừ rằng 1,51 g hợp chất-c2 dưới đây được sử dụng thay cho 0,97 g hợp chất 1.

[0298]



(Hợp chất c2)

[0299]

&lt;Polyme hóa&gt;

Polyme hóa propylen được tiến hành theo cách tương tự như Ví dụ 1, ngoại trừ rằng 0,0032 mmol (tính theo nguyên tử titan) thành phần chất xúc tác titan rắn  $[\beta 2]$  được sử dụng thay cho thành phần chất xúc tác titan rắn  $[\alpha 1]$ , lượng của trietyl nhôm được sử dụng được thay đổi từ 0,5 mmol thành 0,4 mmol, và lượng của xyclohexylmetyldimetoxy silan được sử dụng được thay đổi từ 0,10 mmol thành 0,08 mmol. Các kết quả được thể hiện trong Bảng 1 và Bảng 2.

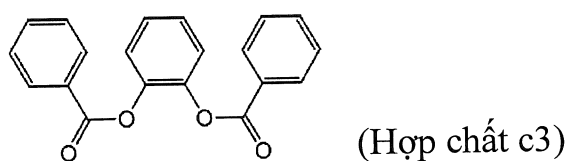
[0300]

[Ví dụ so sánh 3]

<Điều chế thành phần chất xúc tác titan rắn  $[\beta 3]$ >

Thành phần chất xúc tác titan rắn  $[\beta 3]$  thu được theo cách tương tự như Ví dụ 1, ngoại trừ rằng 1,61 g hợp chất-c3 dưới đây được sử dụng thay cho 0,97 g hợp chất 1.

[0301]



[0302]

<Polyme hóa>

Polyme hóa propylen được tiến hành theo cách tương tự như Ví dụ 1, ngoại trừ rằng 0,0032 mmol (tính theo nguyên tử titan) thành phần chất xúc tác titan rắn  $[\beta 3]$  được sử dụng thay cho thành phần chất xúc tác titan rắn  $[\alpha 1]$ , lượng của trietyl nhôm được sử dụng được thay đổi từ 0,5 mmol thành 0,4 mmol, và lượng của xyclohexylmetyldimetoxy silan được sử dụng được thay đổi từ 0,10 mmol thành 0,08 mmol. Các kết quả được thể hiện trong Bảng 1 và Bảng 2.

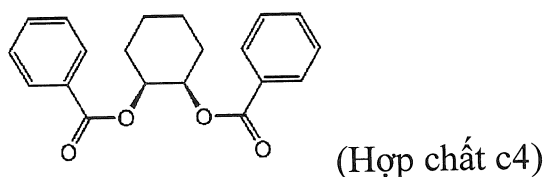
[0303]

[Ví dụ so sánh 4]

<Điều chế thành phần chất xúc tác titan rắn [ $\beta$ 4]>

Thành phần chất xúc tác titan rắn [ $\beta$ 4] thu được theo cách tương tự như Ví dụ 1, ngoại trừ rằng 1,64 g hợp chất-c4 dưới đây được sử dụng thay cho 0,97 g hợp chất 1.

[0304]



[0305]

<Polyme hóa>

Polyme hóa propylen được tiến hành theo cách tương tự như Ví dụ 1, ngoại trừ rằng 0,0032 mmol (tính theo nguyên tử titan) thành phần chất xúc tác titan rắn [ $\beta$ 4] được sử dụng thay cho thành phần chất xúc tác titan rắn [ $\alpha$ 1], lượng của trietyl nhôm được sử dụng được thay đổi từ 0,5 mmol thành 0,4 mmol, và lượng của xyclohexylmetyldimetoxysilan được sử dụng được thay đổi từ 0,10 mmol thành 0,08 mmol. Các kết quả được thể hiện trong Bảng 1 và Bảng 2.

[0306]

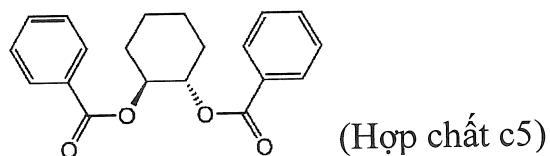
[Ví dụ so sánh 5]

<Điều chế thành phần chất xúc tác titan rắn [ $\beta$ 5]>

Thành phần chất xúc tác titan rắn [ $\beta$ 5] thu được theo cách tương tự như Ví dụ 1, ngoại trừ rằng 1,64 g hợp chất-c5 dưới đây được sử dụng thay cho 0,97 g hợp chất 1.

[0307]





[0308]

&lt;Polyme hóa&gt;

Polyme hóa propylen được tiến hành theo cách tương tự như Ví dụ 1, ngoại trừ rằng 0,0032 mmol (tính theo nguyên tử titan) thành phần chất xúc tác titan rắn  $[\beta 5]$  được sử dụng thay cho thành phần chất xúc tác titan rắn  $[\alpha 1]$ , lượng của trietyl nhôm được sử dụng được thay đổi từ 0,5 mmol thành 0,4 mmol, và lượng của xyclohexylmetyldimetoxy silan được sử dụng được thay đổi từ 0,10 mmol thành 0,08 mmol. Các kết quả được thể hiện trong Bảng 1 và Bảng 2.

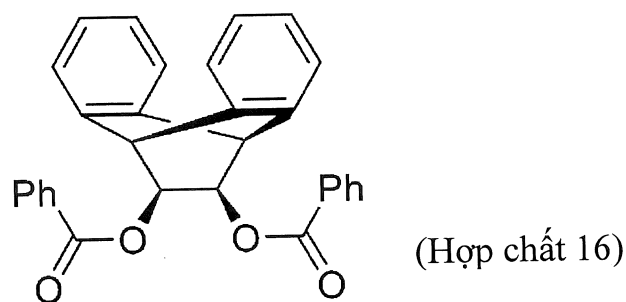
[0309]

[Ví dụ 16]

<Điều chế thành phần chất xúc tác titan rắn  $[\alpha 16]$ >

Thành phần chất xúc tác titan rắn  $[\alpha 16]$  thu được theo cách tương tự như Ví dụ 1, ngoại trừ rằng 1,13 g hợp chất 16 dưới đây được sử dụng thay cho 0,97 g hợp chất 1.

[0310]



[0311]

&lt;Polyme hóa&gt;

Polyme hóa propylen được tiến hành theo cách tương tự như Ví dụ 1, ngoại trừ rằng 0,0032 mmol (tính theo nguyên tử titan) thành phần chất xúc tác titan rắn  $[\alpha 16]$  được sử dụng thay cho thành phần chất xúc tác titan rắn  $[\alpha 1]$ , lượng của trietyl nhôm được sử dụng được thay đổi từ 0,5 mmol thành 0,4 mmol, và lượng của xyclohexylmetyldimetoxy silan được sử dụng được thay đổi từ 0,10 mmol thành 0,08 mmol. Các kết quả được thể hiện trong Bảng 1 và Bảng 2.

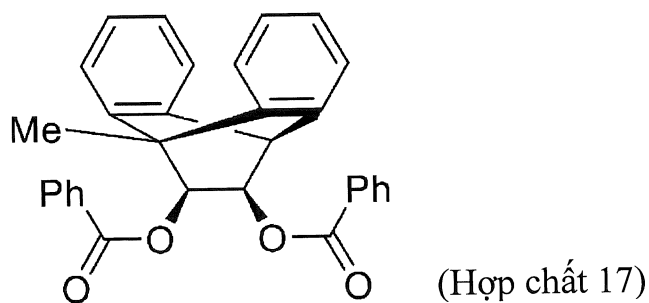
[0312]

[Ví dụ 17]

<Điều chế thành phần chất xúc tác titan rắn  $[\alpha 17]$ >

Thành phần chất xúc tác titan rắn  $[\alpha 17]$  thu được theo cách tương tự như Ví dụ 1, ngoại trừ rằng 1,16 g hợp chất 17 dưới đây được sử dụng thay cho 0,97 g hợp chất 1.

[0313]



[0314]

<Polyme hóa>

Polyme hóa propylen được tiến hành theo cách tương tự như Ví dụ 1, ngoại trừ rằng 0,0028 mmol (tính theo nguyên tử titan) thành phần chất xúc tác titan rắn  $[\alpha 17]$  được sử dụng thay cho thành phần chất xúc tác titan rắn  $[\alpha 1]$ , lượng của trietyl nhôm được sử dụng được thay đổi từ 0,5 mmol thành 0,35 mmol, và lượng

của cyclohexylmetyldimetoxy silan được sử dụng được thay đổi từ 0,10 mmol thành 0,07 mmol. Các kết quả được thể hiện trong Bảng 1 và Bảng 2.

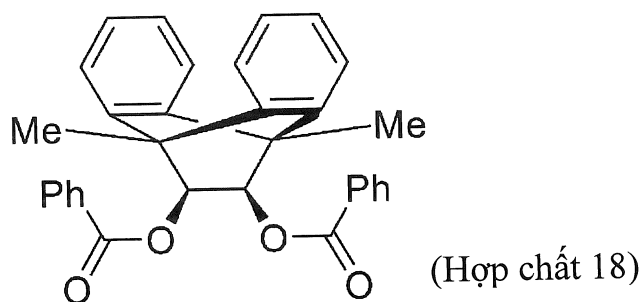
[0315]

[Ví dụ 18]

<Điều chế thành phần chất xúc tác titan rắn [ $\alpha$ 18]>

Thành phần chất xúc tác titan rắn [ $\alpha$ 18] thu được theo cách tương tự như Ví dụ 1, ngoại trừ rằng 1,20 g hợp chất 18 dưới đây được sử dụng thay cho 0,97 g hợp chất 1.

[0316]



[0317]

<Polyme hóa>

Polyme hóa propylen được tiến hành theo cách tương tự như Ví dụ 1, ngoại trừ rằng 0,0028 mmol (tính theo nguyên tử titan) thành phần chất xúc tác titan rắn [ $\alpha$ 18] được sử dụng thay cho thành phần chất xúc tác titan rắn [ $\alpha$ 1], lượng của trietyl nhôm được sử dụng được thay đổi từ 0,5 mmol thành 0,35 mmol, và lượng của cyclohexylmetyldimetoxy silan được sử dụng được thay đổi từ 0,10 mmol thành 0,07 mmol. Các kết quả được thể hiện trong Bảng 1 và Bảng 2.

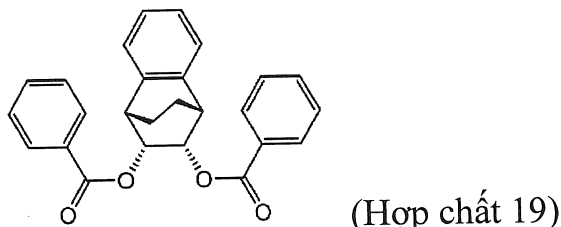
[0318]

[Ví dụ 19]

<Điều chế thành phần chất xúc tác titan rắn [ $\alpha$ 19]>

Thành phần chất xúc tác titan rắn [ $\alpha$ 19] thu được theo cách tương tự như Ví dụ 1, ngoại trừ rằng 1,01 g hợp chất 19 dưới đây được sử dụng thay cho 0,97 g hợp chất 1.

[0319]



[0320]

<Polyme hóa>

Polyme hóa propylen được tiến hành theo cách tương tự như Ví dụ 1, ngoại trừ rằng 0,0032 mmol (tính theo nguyên tử titan) thành phần chất xúc tác titan rắn [ $\alpha$ 19] được sử dụng thay cho thành phần chất xúc tác titan rắn [ $\alpha$ 1], lượng của trietyl nhôm được sử dụng được thay đổi từ 0,5 mmol thành 0,4 mmol, và lượng của xyclohexylmetyldimetoxy silan được sử dụng được thay đổi từ 0,10 mmol thành 0,08 mmol. Các kết quả được thể hiện trong Bảng 1 và Bảng 2.

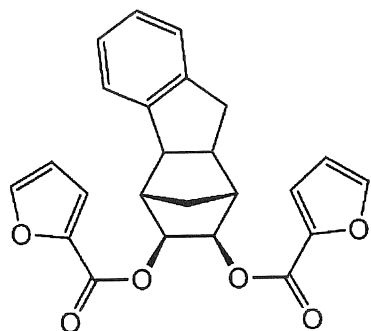
[0321]

[Ví dụ 20]

<Điều chế thành phần chất xúc tác titan rắn [ $\alpha$ 20]>

Thành phần chất xúc tác titan rắn [ $\alpha$ 20] thu được theo cách tương tự như Ví dụ 1, ngoại trừ rằng 0,86 g hợp chất 20 dưới đây được sử dụng thay cho 0,97 g hợp chất 1.

[0322]



(Hợp chất 20)

[0323]

&lt;Polyme hóa&gt;

Polyme hóa propylen được tiến hành theo cách tương tự như Ví dụ 1, ngoại trừ rằng 0,0032 mmol (tính theo nguyên tử titan) thành phần chất xúc tác titan rắn  $[\alpha 20]$  được sử dụng thay cho thành phần chất xúc tác titan rắn  $[\alpha 1]$ , lượng của trietyl nhôm được sử dụng được thay đổi từ 0,5 mmol thành 0,4 mmol, và lượng của cyclohexylmetyldimetoxy silan được sử dụng được thay đổi từ 0,10 mmol thành 0,08 mmol. Các kết quả được thể hiện trong Bảng 1 và Bảng 2.

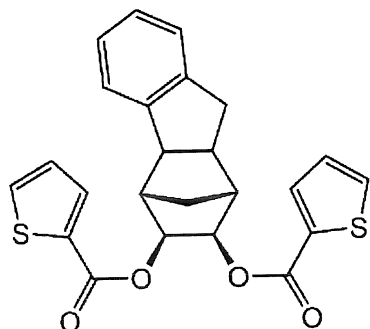
[0324]

[Ví dụ 21]

<Điều chế thành phần chất xúc tác titan rắn  $[\alpha 21]$ >

Thành phần chất xúc tác titan rắn  $[\alpha 21]$  thu được theo cách tương tự như Ví dụ 1, ngoại trừ rằng 0,93 g hợp chất 21 dưới đây được sử dụng thay cho 0,97 g hợp chất 1.

[0325]



(Hợp chất 21)

[0326]

&lt;Polyme hóa&gt;

Polyme hóa propylen được tiến hành theo cách tương tự như Ví dụ 1, ngoại trừ rằng 0,0032 mmol (tính theo nguyên tử titan) thành phần chất xúc tác titan rắn  $[\alpha 21]$  được sử dụng thay cho thành phần chất xúc tác titan rắn  $[\alpha 1]$ , lượng của trietyl nhôm được sử dụng được thay đổi từ 0,5 mmol thành 0,4 mmol, và lượng của xyclohexylmetyldimetoxy silan được sử dụng được thay đổi từ 0,10 mmol thành 0,08 mmol. Các kết quả được thể hiện trong Bảng 1 và Bảng 2.

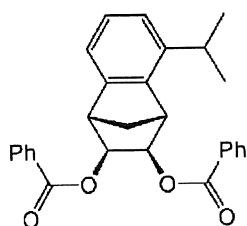
[0327]

[Ví dụ 22]

<Điều chế thành phần chất xúc tác titan rắn  $[\alpha 22]$ >

Thành phần chất xúc tác titan rắn  $[\alpha 22]$  thu được theo cách tương tự như Ví dụ 1, ngoại trừ rằng 2,16 g hợp chất 22 dưới đây được sử dụng thay cho 0,97 g hợp chất 1.

[0328]



(Hợp chất 22)

[0329]

&lt;Polyme hóa&gt;

Polyme hóa propylen được tiến hành theo cách tương tự như Ví dụ 1, ngoại trừ rằng 0,0032 mmol (tính theo nguyên tử titan) thành phần chất xúc tác titan rắn  $[\alpha 22]$  được sử dụng thay cho thành phần chất xúc tác titan rắn  $[\alpha 1]$ , lượng của trietyl nhôm được sử dụng được thay đổi từ 0,5 mmol thành 0,4 mmol, và lượng

của cyclohexylmetyldimetoxy silan được sử dụng được thay đổi từ 0,10 mmol thành 0,08 mmol. Các kết quả được thể hiện trong Bảng 1 và Bảng 2.

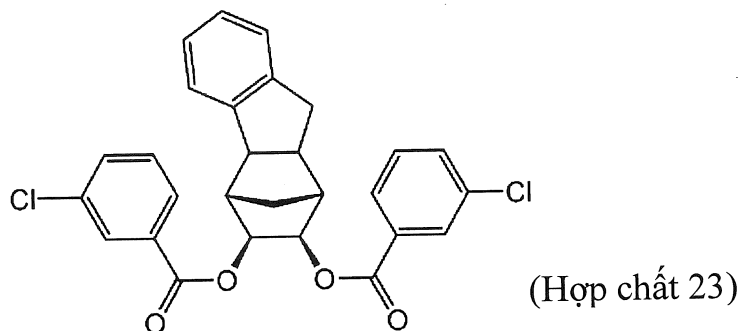
[0330]

[Ví dụ 23]

<Điều chế thành phần chất xúc tác titan rắn [ $\alpha$ 23]>

Thành phần chất xúc tác titan rắn [ $\alpha$ 23] thu được theo cách tương tự như Ví dụ 1, ngoại trừ rằng 1,05 g hợp chất 23 dưới đây được sử dụng thay cho 0,97 g hợp chất 1.

[0331]



[0332]

<Polyme hóa>

Polyme hóa propylen được tiến hành theo cách tương tự như Ví dụ 1, ngoại trừ rằng 0,0032 mmol (tính theo nguyên tử titan) thành phần chất xúc tác titan rắn [ $\alpha$ 23] được sử dụng thay cho thành phần chất xúc tác titan rắn [ $\alpha$ 1], lượng của trietyl nhôm được sử dụng được thay đổi từ 0,5 mmol thành 0,4 mmol, và lượng của cyclohexylmetyldimetoxy silan được sử dụng được thay đổi từ 0,10 mmol thành 0,08 mmol. Các kết quả được thể hiện trong Bảng 1 và Bảng 2.

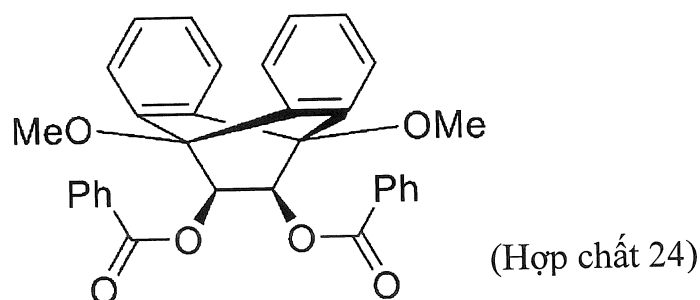
[0333]

[Ví dụ 24]

<Điều chế thành phần chất xúc tác titan rắn [ $\alpha$ 24]>

Thành phần chất xúc tác titan rắn [ $\alpha$ 24] thu được theo cách tương tự như Ví dụ 1, ngoại trừ rằng 1,28 g hợp chất 24 dưới đây được sử dụng thay cho 0,97 g hợp chất 1.

[0334]



[0335]

<Polyme hóa>

Polyme hóa propylen được tiến hành theo cách tương tự như Ví dụ 1, ngoại trừ rằng 0,0028 mmol (tính theo nguyên tử titan) thành phần chất xúc tác titan rắn [ $\alpha$ 24] được sử dụng thay cho thành phần chất xúc tác titan rắn [ $\alpha$ 1], lượng của trietyl nhôm được sử dụng được thay đổi từ 0,5 mmol thành 0,35 mmol, và lượng của xyclohexylmetyldimetoxysilan được sử dụng được thay đổi từ 0,10 mmol thành 0,07 mmol. Các kết quả được thể hiện trong Bảng 1 và Bảng 2.

[0336]

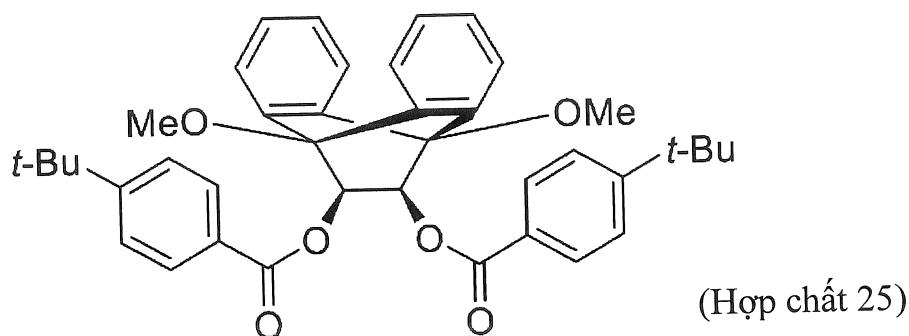
[Ví dụ 25]

<Điều chế thành phần chất xúc tác titan rắn [ $\alpha$ 25]>

Thành phần chất xúc tác titan rắn [ $\alpha$ 25] thu được theo cách tương tự như Ví dụ 1, ngoại trừ rằng 1,56 g hợp chất 25 dưới đây được sử dụng thay cho 0,97 g hợp chất 1.

[0337]





[0338]

&lt;Polyme hóa&gt;

Polyme hóa propylen được tiến hành theo cách tương tự như Ví dụ 1, ngoại trừ rằng 0,002 mmol (tính theo nguyên tử titan) thành phần chất xúc tác titan rắn  $[\alpha 25]$  được sử dụng thay cho thành phần chất xúc tác titan rắn  $[\alpha 1]$ , lượng của trietyl nhôm được sử dụng được thay đổi từ 0,5 mmol thành 0,25 mmol, và lượng của cyclohexylmetyldimetoxy silan được sử dụng được thay đổi từ 0,10 mmol thành 0,05 mmol. Các kết quả được thể hiện trong Bảng 1 và Bảng 2.

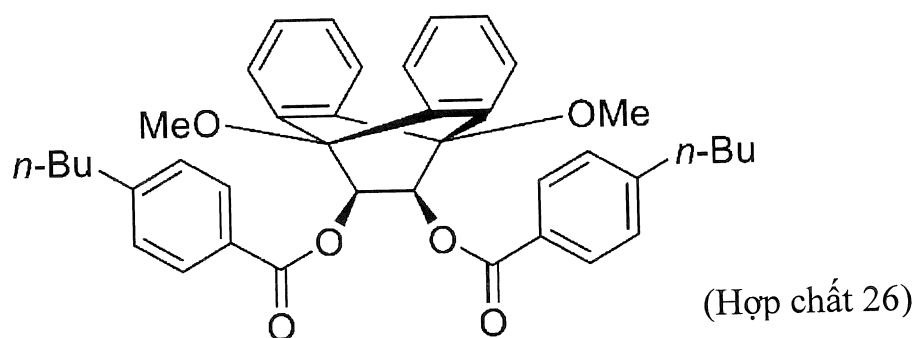
[0339]

[Ví dụ 26]

<Điều chế thành phần chất xúc tác titan rắn  $[\alpha 26]$ >

Thành phần chất xúc tác titan rắn  $[\alpha 26]$  thu được theo cách tương tự như Ví dụ 1, ngoại trừ rằng 1,56 g hợp chất 26 dưới đây được sử dụng thay cho 0,97 g hợp chất 1.

[0340]



[0341]

&lt;Polyme hóa&gt;

Polyme hóa propylen được tiến hành theo cách tương tự như Ví dụ 1, ngoại trừ rằng 0,002 mmol (tính theo nguyên tử titan) thành phần chất xúc tác titan rắn  $[\alpha 26]$  được sử dụng thay cho thành phần chất xúc tác titan rắn  $[\alpha 1]$ , lượng của trietyl nhôm được sử dụng được thay đổi từ 0,5 mmol thành 0,25 mmol, và lượng của xyclohexylmetyldimetoxy silan được sử dụng được thay đổi từ 0,10 mmol thành 0,05 mmol. Các kết quả được thể hiện trong Bảng 1 và Bảng 2.

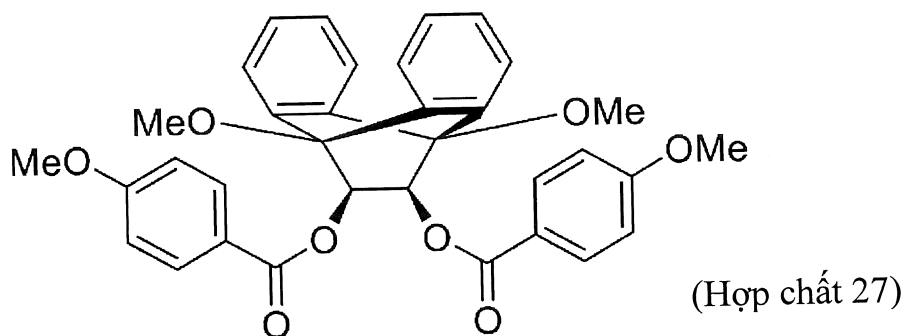
[0342]

[Ví dụ 27]

<Điều chế thành phần chất xúc tác titan rắn  $[\alpha 27]$ >

Thành phần chất xúc tác titan rắn  $[\alpha 27]$  thu được theo cách tương tự như Ví dụ 1, ngoại trừ rằng 1,43 g hợp chất 27 dưới đây được sử dụng thay cho 0,97 g hợp chất 1.

[0343]



[0344]

&lt;Polyme hóa&gt;

Polyme hóa propylen được tiến hành theo cách tương tự như Ví dụ 1, ngoại trừ rằng 0,002 mmol (tính theo nguyên tử titan) thành phần chất xúc tác titan rắn

[ $\alpha$ 27] được sử dụng thay cho thành phần chất xúc tác titan rắn [ $\alpha$ 1], lượng của trietyl nhôm được sử dụng được thay đổi từ 0,5 mmol thành 0,25 mmol, và lượng của xyclohexylmetyldimetoxyasilan được sử dụng được thay đổi từ 0,10 mmol thành 0,05 mmol. Các kết quả được thể hiện trong Bảng 1 và Bảng 2.

[0345]

[Ví dụ 28]

<Điều chế thành phần chất xúc tác titan rắn [ $\alpha$ 28]>

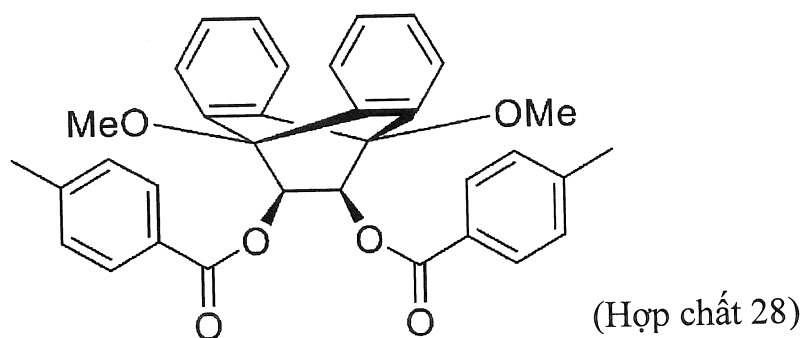
Sau khi bình thủy tinh thể tích 1 lit được làm sạch thích hợp bằng nitơ, 85,8 g magie clorua khan, 321 g decan, và 352 g rượu 2-ethylhexyl được đặt vào, và được đưa đi phản ứng gia nhiệt ở 130°C trong 3 giờ để tạo ra dung dịch đồng nhất. Sau đó, 241 g dung dịch này và 6,43 g etyl benzoat được bổ sung vào bình thủy tinh, và được trộn dưới điều kiện khuấy ở 50°C trong 1 giờ.

[0346]

Sau khi dung dịch đồng nhất thu được như vậy được làm mát tới nhiệt độ trong phòng, toàn bộ 30,7 ml dung dịch đồng nhất được nạp từng giọt vào 80 ml titan tetraclorua được giữ ở -20°C trong 45 phút trong khi được khuấy ở tốc độ quay là 350 rpm. Sau khi hoàn thành nạp, nhiệt độ của chất lỏng được trộn được nâng tới 80°C trong 3,8 giờ, và khi nhiệt độ đạt tới 80°C, 1,08 g hợp chất 28 dưới đây được bổ sung tới chất lỏng được trộn. Nhiệt độ một lần nữa được nâng lên 120°C trong 40 phút, và hỗn hợp được giữ ở cùng nhiệt độ trong 35 phút trong khi được khuấy. Sau khi phản ứng được hoàn thành, phần chất rắn được thu hồi bằng lọc nóng, được tạo huyền phù lại trong 80 ml titan tetraclorua, và được phản ứng nhiệt một lần nữa ở 120°C trong 35 phút. Sau khi phản ứng được hoàn thành, phần chất rắn được thu hồi một lần nữa bằng lọc nóng và được rửa kỹ bằng decan ở 100°C và decan ở nhiệt độ trong phòng đến khi không có hợp chất titan tự do

được phát hiện trong chất lỏng rửa. Thành phần chất xúc tác titan rắn [ $\alpha$ 28] được điều chế bằng các thao tác ở trên được bảo quản là huyền phù đặc decan.

[0347]



[0348]

<Polyme hóa>

Polyme hóa propylen được tiến hành theo cách tương tự như Ví dụ 1, ngoại trừ rằng 0,002 mmol (tính theo nguyên tử titan) thành phần chất xúc tác titan rắn [ $\alpha$ 28] được sử dụng thay cho thành phần chất xúc tác titan rắn [ $\alpha$ 1], lượng của trietyl nhôm được sử dụng được thay đổi từ 0,5 mmol thành 0,25 mmol, và lượng của cyclohexylmetyldimetoxy silan được sử dụng được thay đổi từ 0,10 mmol thành 0,05 mmol. Các kết quả được thể hiện trong Bảng 1 và Bảng 2.

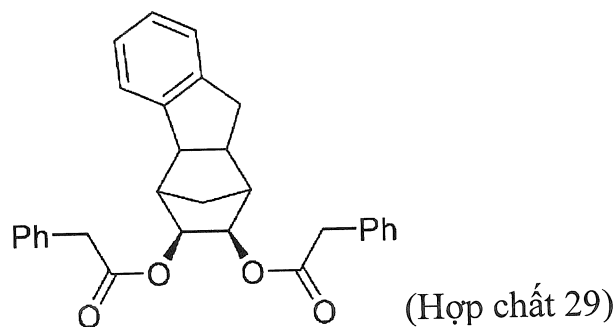
[0349]

[Ví dụ 29]

<Điều chế thành phần chất xúc tác titan rắn [ $\alpha$ 29]>

Thành phần chất xúc tác titan rắn [ $\alpha$ 29] thu được theo cách tương tự như Ví dụ 1, ngoại trừ rằng 0,97 g hợp chất 29 dưới đây được sử dụng thay cho 0,97 g hợp chất 1.

[0350]



[0351]

&lt;Polyme hóa&gt;

Polyme hóa propylen được tiến hành theo cách tương tự như Ví dụ 1, ngoại trừ rằng 0,0032 mmol (tính theo nguyên tử titan) thành phần chất xúc tác titan rắn [α29] được sử dụng thay cho thành phần chất xúc tác titan rắn [α1], lượng của trietyl nhôm được sử dụng được thay đổi từ 0,5 mmol thành 0,4 mmol, và lượng của cyclohexylmetyldimetoxy silan được sử dụng được thay đổi từ 0,10 mmol thành 0,08 mmol. Các kết quả được thể hiện trong Bảng 1 và Bảng 2.

[0352]

[Ví dụ 30]

&lt;Điều chế thành phần chất xúc tác titan rắn [α30]&gt;

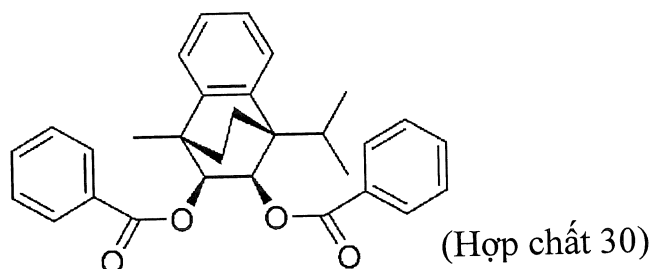
Sau khi bình thủy tinh thể tích 1 lit được làm sạch thích hợp bằng nitơ, 85,8 g magie clorua khan, 321 g decan, và 352 g rượu 2-ethylhexyl được đặt vào, và được đưa đi phản ứng gia nhiệt ở 130°C trong 3 giờ để tạo ra dung dịch đồng nhất. Sau đó, 241 g dung dịch này và 6,43 g etyl benzoat được bổ sung vào bình thủy tinh, và được trộn dưới điều kiện khuấy ở 50°C trong 1 giờ.

[0353]

Sau khi dung dịch đồng nhất thu được như vậy được làm mát tới nhiệt độ trong phòng, toàn bộ 28,7 ml dung dịch đồng nhất được nạp từng giọt vào 75 ml titan tetracolorua được giữ ở -20°C trong 45 phút trong khi được khuấy ở tốc độ

quay 350 rpm. Sau khi hoàn thành nạp, nhiệt độ của chất lỏng được trộn được nâng lên 80°C trong 3,8 giờ, và khi nhiệt độ đạt tới 80°C, 0,83 g hợp chất 30 dưới đây được bổ sung vào chất lỏng được trộn. Nhiệt độ một lần nữa được nâng lên 120°C trong 40 phút, và hỗn hợp được giữ ở cùng nhiệt độ trong 35 phút trong khi được khuấy. Sau khi phản ứng được hoàn thành, phần chất rắn được thu hồi bằng lọc nóng, được tạo huyền phù lại trong 75 ml titan tetraclorua, và được phản ứng nhiệt một lần nữa ở 120°C trong 35 phút. Sau khi phản ứng được hoàn thành, phần chất rắn được thu hồi một lần nữa bằng lọc nóng và được rửa kỹ bằng decan ở 100°C và decan ở nhiệt độ trong phòng đến khi không có hợp chất titan tự do được phát hiện trong chất lỏng rửa. Thành phần chất xúc tác titan rắn [ $\alpha$ 30] được điều chế bằng các thao tác ở trên được bảo quản là huyền phù đặc decan.

[0354]



[0355]

<Polyme hóa>

Polyme hóa propylen được tiến hành theo cách tương tự như Ví dụ 1, ngoại trừ rằng 0,0028 mmol (tính theo nguyên tử titan) thành phần chất xúc tác titan rắn [ $\alpha$ 30] được sử dụng thay cho thành phần chất xúc tác titan rắn [ $\alpha$ 1], lượng của trietyl nhôm được sử dụng được thay đổi từ 0,5 mmol thành 0,35 mmol, và lượng của xyclohexylmetyldimetyloxysilan được sử dụng được thay đổi từ 0,10 mmol thành 0,07 mmol. Các kết quả được thể hiện trong Bảng 1.

[0356]

[Ví dụ 31]

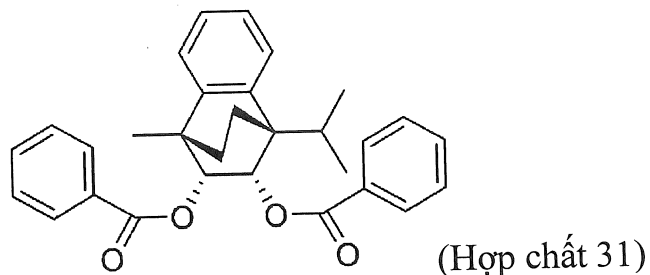
<Điều chế thành phần chất xúc tác titan rắn [ $\alpha$ 31]>

Sau khi bình thủy tinh thể tích 1 lit được làm sạch thích hợp bằng nitơ, 85,8 g magie clorua khan, 321 g decan, và 352 g rượu 2-ethylhexyl được đặt vào, và được đưa đi phản ứng gia nhiệt ở 130°C trong 3 giờ để tạo ra dung dịch đồng nhất. Sau đó, 241 g dung dịch này và 6,43 g etyl benzoat được bổ sung vào bình thủy tinh, và được trộn dưới điều kiện khuấy ở 50°C trong 1 giờ.

[0357]

Sau khi dung dịch đồng nhất thu được như vậy được làm mát tới nhiệt độ trong phòng, toàn bộ 28,7 ml dung dịch đồng nhất được nạp từng giọt vào 75 ml titan tetraclorua được giữ ở -20°C trong 45 phút trong khi được khuấy ở tốc độ quay 350 rpm. Sau khi hoàn thành nạp, nhiệt độ của chất lỏng được trộn được nâng lên 80°C trong 3,8 giờ, và khi nhiệt độ đạt tới 80°C, 0,83 g hợp chất 31 dưới đây được bổ sung vào chất lỏng được trộn. Nhiệt độ một lần nữa được nâng lên 120°C trong 40 phút, và hỗn hợp được giữ ở cùng nhiệt độ trong 35 phút trong khi được khuấy. Sau khi phản ứng được hoàn thành, phần chất rắn được thu hồi bằng lọc nóng, được tạo huyền phù lại trong 75 ml titan tetraclorua, và một lần nữa được phản ứng nhiệt ở 120°C trong 35 phút. Sau khi phản ứng được hoàn thành, phần chất rắn được thu hồi một lần nữa bằng lọc nóng và được rửa kỹ bằng decan ở 100°C và decan ở nhiệt độ trong phòng đến khi không có hợp chất titan tự do được phát hiện trong chất lỏng rửa. Thành phần chất xúc tác titan rắn [ $\alpha$ 31] được điều chế bằng các thao tác ở trên được bảo quản là huyền phù đặc decan.

[0358]



[0359]

&lt;Polyme hóa&gt;

Polyme hóa propylen được tiến hành theo cách tương tự như Ví dụ 1, ngoại trừ rằng 0,0028 mmol (tính theo nguyên tử titan) thành phần chất xúc tác titan rắn  $[\alpha 31]$  được sử dụng thay cho thành phần chất xúc tác titan rắn  $[\alpha 1]$ , lượng của trietyl nhôm được sử dụng được thay đổi từ 0,5 mmol thành 0,35 mmol, và lượng của cyclohexylmetyldimetoxy silan được sử dụng được thay đổi từ 0,10 mmol thành 0,07 mmol. Các kết quả được thể hiện trong Bảng 1 và Bảng 2.

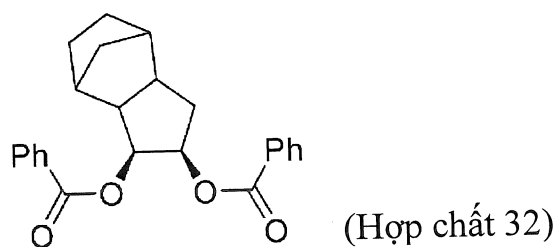
[0360]

[Ví dụ 32]

<Điều chế thành phần chất xúc tác titan rắn  $[\alpha 32]$ >

Thành phần chất xúc tác titan rắn  $[\alpha 32]$  thu được theo cách tương tự như Ví dụ 1, ngoại trừ rằng 1,33 g hợp chất 32 dưới đây được sử dụng thay cho 0,97 g hợp chất 1.

[0361]



[0362]



## &lt;Polyme hóa&gt;

Polyme hóa propylen được tiến hành theo cách tương tự như Ví dụ 1, ngoại trừ rằng 0,0028 mmol (tính theo nguyên tử titan) thành phần chất xúc tác titan rắn [ $\alpha$ 32] được sử dụng thay cho thành phần chất xúc tác titan rắn [ $\alpha$ 1], lượng của trietyl nhôm được sử dụng được thay đổi từ 0,5 mmol thành 0,35 mmol, và lượng của xyclohexylmetyldimetoxy silan được sử dụng được thay đổi từ 0,10 mmol thành 0,07 mmol. Các kết quả được thể hiện trong Bảng 1 và Bảng 2.

[0363]

[Bảng 1]

	Hoạt tính (Kg-PP/g-chất xúc tác)	Tỷ trọng khối (g/mL)	MFR (g/10 phút)	Lượng thành phần hòa tan trong decan (%)	Mn	Mw	Mz
Ví dụ 1	48,6	0,49	0,57	1,87	72.300	769.000	3.730.000
Ví dụ 2	41,5	0,48	0,74	1,75	61.200	734.000	4.050.000
Ví dụ 3	35,6	0,50	0,91	2,25	63.000	641.000	3.320.000
Ví dụ 4	41,0	0,50	0,15	0,68	87.100	1.180.000	5.290.000
Ví dụ 5	53,3	0,49	0,32	0,85	78.800	867.000	3.680.000
Ví dụ 6	48,5	0,50	0,27	1,07	79.500	898.000	3.870.000
Ví dụ 7	72,7	0,49	0,45	0,67	79.600	896.000	3.950.000
Ví dụ 8	48,5	0,50	0,55	1,05	69.100	935.000	4.930.000
Ví dụ 9	50,0	0,50	0,22	0,84	90.200	1.110.000	5.070.000
Ví dụ 10	48,6	0,50	0,19	0,98	86.000	1.080.000	4.970.000
Ví dụ 11	37,2	0,49	0,90	1,60	61.200	688.000	3.640.000
Ví dụ 12	26,1	0,46	5,05	5,43	36.400	422.000	3.020.000
Ví dụ 13	32,1	0,48	10,30	6,55	36.700	321.000	1.980.000
Ví dụ 14	41,5	0,49	0,61	2,22	57.300	751.000	3.910.000
Ví dụ 15	32,7	0,48	6,60	4,03	45.200	356.000	2.920.000
Ví dụ so sánh 1	10,8	-	23,58	9,25	31.100	226.000	1.410.000
Ví dụ so sánh 2	11,9	0,46	13,58	8,71	33.300	275.000	1.660.000
Ví dụ so sánh 3	23,1	0,46	8,20	6,32	37.400	337.000	2.340.000
Ví dụ so sánh 4	9,0	0,46	10,60	6,63	34.900	292.000	1.650.000
Ví dụ so sánh 5	6,8	-	6,90	5,97	36.900	339.000	2.110.000

Bảng 1 (tiếp theo)

	Hoạt tính (Kg-PP/ g-chất xúc tác)	Tỷ trọng khối (g/mL)	MFR (g/10 phút)	Lượng thành phần hòa tan trong decan (%)	Mn	Mw	Mz
Ví dụ 16	50,0	0,49	0,39	1,23	78.900	890.000	4.650.000
Ví dụ 17	61,5	0,49	0,67	0,72	60.400	738.000	4.060.000
Ví dụ 18	76,2	0,49	2,71	1,50	49.700	480.000	2.800.000
Ví dụ 19	35,4	0,49	1,12	3,05	55.600	678.000	3.800.000
Ví dụ 20	51,6	0,46	0,68	1,43	60.700	657.000	2.860.000
Ví dụ 21	51,6	0,49	0,68	1,53	73.200	759.000	3.780.000
Ví dụ 22	31,4	0,49	0,59	1,18	70.200	813.000	4.080.000
Ví dụ 23	65,2	0,49	0,69	1,20	68.200	679.000	3.270.000
Ví dụ 24	83,3	0,49	8,15	2,43	41.500	333.000	2.540.000
Ví dụ 25	93,8	0,47	5,66	1,55	48.200	344.000	1.610.000
Ví dụ 26	116,7	0,49	12,44	2,00	42.800	276.000	1.470.000
Ví dụ 27	100,0	0,49	9,91	2,22	47.300	285.000	1.240.000
Ví dụ 28	83,3	0,49	15,84	2,48	40.600	263.000	1.520.000
Ví dụ 29	37,8	0,47	3,49	3,80	45.800	463.000	3.330.000
Ví dụ 30	40,0	0,49	8,70	5,77	37.500	322.000	2.210.000
Ví dụ 31	68,2	0,46	3,20	1,20	50.700	427.000	2.420.000
Ví dụ 32	19,8	0,49	1,37	2,27	48.200	614.000	3.760.000

Bảng 1 (tiếp theo)

	Mw/Mn	Mz/Mw	T <sub>mf</sub> (°C)	T <sub>m</sub> <sup>1)</sup> (°C)		T <sub>c</sub> (°C)	ΔH <sup>2)</sup> (Làm mát lần thứ nhất) (J/g)	ΔH <sup>3)</sup> (Gia nhiệt lần thứ hai) (J/g)
Ví dụ 1	10,64	4,85	172,08	163,92		112,60	86,46	84,2
Ví dụ 2	11,99	5,51	172,60	162,17		112,20	89,06	79,9
Ví dụ 3	10,17	5,18	171,64	162,58		112,33	88,45	77,7
Ví dụ 4	13,57	4,48	172,38	165,02		114,85	90,56	80,1
Ví dụ 5	11	4,24	172,56	164,69		115,69	88,40	75,8
Ví dụ 6	11,3	4,3	172,60	165,00		115,00	88,61	80,9
Ví dụ 7	11,25	4,41	172,33	165,39		114,08	94,15	83,4
Ví dụ 8	13,53	5,28	172,44	163,81		111,57	88,34	82,4
Ví dụ 9	12,26	4,59	172,89	164,72		111,49	88,20	80,1
Ví dụ 10	12,52	4,62	172,46	164,80		110,74	90,94	82,1
Ví dụ 11	11,24	5,29	171,31	161,80		113,21	87,46	77,2
Ví dụ 12	11,6	7,15	170,28	158,93	164,79	110,68	80,68	68,0
Ví dụ 13	8,76	6,16	169,41	158,5	164,46	112,36	83,93	71,3
Ví dụ 14	13,1	5,21	171,94	162,93	166,43	112,27	90,01	78,3
Ví dụ 15	7,88	8,21	169,7	158,79	165,22	109,97	83,95	72,0
Ví dụ so sánh 1	7,27	6,25	169,29	156,65	163,77	111,02	79,67	70,4
Ví dụ so sánh 2	8,24	6,04	169,34	157,42	163,59	111,17	80,88	73,1
Ví dụ so sánh 3	9,01	6,94	169,79	160,85		115,61	85,11	81,1
Ví dụ so sánh 4	8,35	5,67	169,77	157,99	164,46	111,66	76,33	66,9
Ví dụ so sánh 5	9,17	6,24	169,75	158,99	164,86	113,25	82,00	70,0

Bảng 1 (tiếp theo)

	Mw/Mn	Mz/Mw	T <sub>mf</sub> (°C)	T <sub>m</sub> <sup>1)</sup> (°C)		T <sub>c</sub> (°C)	ΔH <sup>2)</sup> (Làm mát lần thứ nhất) (J/g)	ΔH <sup>3)</sup> (Gia nhiệt lần thứ hai) (J/g)
Ví dụ 16	11,27	5,23	172,14	163,42		113	99,87	83,4
Ví dụ 17	12,23	5,5	172,68	163,53		111,9	88,76	83,1
Ví dụ 18	9,66	5,83	171,06	161,72	164,15	111,15	88,02	88,7
Ví dụ 19	12,2	5,6	171,01	162,25		114,1	85,43	76,6
Ví dụ 20	10,82	4,35	171,95	163,3		116,72	88,57	83,7
Ví dụ 21	10,37	4,98	171,77	163,21		113,73	88,82	85,7
Ví dụ 22	11,58	5,02	172,66	164,05		113,82	88,6	82,0
Ví dụ 23	9,96	4,82	172,84	163,54		112,73	88,8	77,7
Ví dụ 24	8,01	7,65	170,1	160,2		112,7	96,3	98,3
Ví dụ 25	7,13	4,67	170,2	160,1		111,4	98,2	105,2
Ví dụ 26	6,44	5,33	169,6	159,0	152,0 (144,5)	111,1	95,4	92,2
Ví dụ 27	6,04	4,34	170,0	159,8		113,9	95,1	101,7
Ví dụ 28	6,49	5,78	169,4	160,6		111,0	95,6	101,1
Ví dụ 29	10,1	7,19	170,5	160,7		114,3	92,1	96,2
Ví dụ 30	8,6	6,85	172,1	162,9		115,5	106,4	112,4
Ví dụ 31	8,42	5,67	171,5	161,9		111,5	97,4	92,5
Ví dụ 32	12,74	6,12	171,5	162,9		112,9	94,6	93,2

[0364]

Trong Bảng 1, các ý nghĩa của các mục 1) đến 3) là như sau:

- 1) Bên trái: đỉnh điểm nóng chảy chính, bên phải: đỉnh điểm nóng chảy phụ
- 2) Lượng nhiệt được sinh ra trong khi làm mát trong đo DSC (chỉ số năng lượng kết tinh)
- 3) Lượng nhiệt được hấp thụ trong khi gia nhiệt lần thứ hai (10°C/phút) trong đo DSC (chỉ số nhiệt nóng chảy)

Bảng 2 dưới đây thể hiện các kết quả của thực nghiệm tương ứng với các nội dung của mục (14) của phần Biện pháp giải quyết vấn đề.

[0365]

[Bảng 2]

	MFR (g/10 phút)	Lượng thành phần hòa tan trong decan (%)	Mn	Mw	Mz	Mw/Mn	Mz/Mw
Ví dụ 1	0,57	1,87	72.300	769.000	3.730.000	10,64	4,85
Ví dụ 2	0,74	1,75	61.200	734.000	4.050.000	11,99	5,51
Ví dụ 3	0,91	2,25	63.000	641.000	3.320.000	10,17	5,18
Ví dụ 4	0,15	0,68	87.100	1.180.000	5.290.000	13,57	4,48
Ví dụ 5	0,32	0,85	78.800	867.000	3.680.000	11	4,24
Ví dụ 6	0,27	1,07	79.500	898.000	3.870.000	11,3	4,3
Ví dụ 7	0,45	0,67	79.600	896.000	3.950.000	11,25	4,41
Ví dụ 8	0,55	1,05	69.100	935.000	4.930.000	13,53	5,28
Ví dụ 9	0,22	0,84	90.200	1.110.000	5.070.000	12,26	4,59
Ví dụ 10	0,19	0,98	86.000	1.080.000	4.970.000	12,52	4,62
Ví dụ 11	0,90	1,60	61.200	688.000	3.640.000	11,24	5,29
Ví dụ 14	0,61	2,22	57.300	751.000	3.910.000	13,1	5,21
Ví dụ so sánh 1	23,58	9,25	31.100	226.000	1.410.000	7,27	6,25
Ví dụ so sánh 2	13,58	8,71	33.300	275.000	1.660.000	8,24	6,04
Ví dụ so sánh 3	8,20	6,32	37.400	337.000	2.340.000	9,01	6,94
Ví dụ so sánh 4	10,60	6,63	34.900	292.000	1.650.000	8,35	5,67
Ví dụ so sánh 5	6,90	5,97	36.900	339.000	2.110.000	9,17	6,24

Bảng 2 (tiếp theo)

	MFR (g/10 phút)	Lượng thành phần hòa tan trong decan (%)	Mn	Mw	Mz	Mw/Mn	Mz/Mw
Ví dụ 16	0,39	1,23	78.900	890.000	4.650.000	11,27	5,23
Ví dụ 17	0,67	0,72	60.400	738.000	4.060.000	12,23	5,5
Ví dụ 18	2,71	1,50	49.700	480.000	2.800.000	9,66	5,83
Ví dụ 19	1,12	3,05	55.600	678.000	3.800.000	12,2	5,6
Ví dụ 20	0,68	1,43	60.700	657.000	2.860.000	10,82	4,35
Ví dụ 21	0,68	1,53	73.200	759.000	3.780.000	10,37	4,98
Ví dụ 22	0,59	1,18	70.200	813.000	4.080.000	11,58	5,02
Ví dụ 23	0,69	1,20	68.200	679.000	3.270.000	9,96	4,82
Ví dụ 24	8,15	2,43	41.500	333.000	2.540.000	8,01	7,65
Ví dụ 25	5,66	1,55	48.200	344.000	1.610.000	7,13	4,67
Ví dụ 26	12,44	2,00	42.800	276.000	1.470.000	6,44	5,33
Ví dụ 27	9,91	2,22	47.300	285.000	1.240.000	6,04	4,34
Ví dụ 28	15,84	2,48	40.600	263.000	1.520.000	6,49	5,78
Ví dụ 31	3,20	1,20	50.700	427.000	2.420.000	8,42	5,67
Ví dụ 32	1,37	2,27	48.200	614.000	3.760.000	12,74	6,12

Bảng 2 (tiếp theo)

	$\Delta MWD^4)$	$C_{10sol.} - 4/3 \times \log(MFR)$	$T_{m-maxv}$ /°C	$T_{m-maxt}$ /°C	$T_{mf}$ (°C)
Ví dụ 1	5,79	2,20	170,9	169,5	172,08
Ví dụ 2	6,48	1,93	170,0	168,7	172,60
Ví dụ 3	4,99	2,30	170,2	169,27	171,64
Ví dụ 4	9,09	1,78	171,0	169,6	172,38
Ví dụ 5	6,76	1,51	170,5	169,2	172,56
Ví dụ 6	7,00	1,83	171,3	169,8	172,60
Ví dụ 7	6,84	1,13	171,4	169,8	172,33
Ví dụ 8	8,25	1,40	170,5	169,5	172,44
Ví dụ 9	7,67	1,72	170,7	169,7	172,89
Ví dụ 10	7,90	1,94	171,4	170,1	172,46
Ví dụ 11	5,95	1,66	169,3	168,6	171,31
Ví dụ 14	7,89	2,51	170,5	169,2	171,94
Ví dụ so sánh 1	1,02	7,42	168,6	167,3	169,29
Ví dụ so sánh 2	2,20	7,20	168,3	167,4	169,34
Ví dụ so sánh 3	2,07	5,10	170,0	168,3	169,79
Ví dụ so sánh 4	2,68	5,26	168,6	167,5	169,77
Ví dụ so sánh 5	2,93	4,85	168,1	167,6	169,75



Bảng 2 (tiếp theo)

	$\Delta MWD^4)$	$C_{10sol.} - 4/3 \times \log(MFR)$	$T_{m-maxv}$ /°C	$T_{m-maxt}$ /°C	$T_{mf}$ (°C)
Ví dụ 16	6,04	1,77	170,4	169,1	172,14
Ví dụ 17	6,73	0,95	171,4	169,7	172,68
Ví dụ 18	3,83	0,92	171,0	169,7	171,06
Ví dụ 19	6,60	2,99	169,5	168,9	171,01
Ví dụ 20	6,47	1,65	169,0	166,7	171,95
Ví dụ 21	5,39	1,76	169,5	168,1	171,77
Ví dụ 22	6,56	1,49	170,7	169,3	172,66
Ví dụ 23	5,14	1,42	171,0	169,6	172,84
Ví dụ 24	0,36	1,22	170,0	168,3	170,1
Ví dụ 25	2,46	0,55	170,0	167,7	170,2
Ví dụ 26	1,11	0,54	169,5	168,0	169,6
Ví dụ 27	1,70	0,89	169,0	168,7	170,0
Ví dụ 28	0,71	0,88	171,0	168,8	169,4
Ví dụ 31	2,75	0,53	169,5	169,4	171,5
Ví dụ 32	6,62	2,09	171,4	169,8	171,5

Bảng 2 (tiếp theo)

	T <sub>m</sub> <sup>1)</sup> (°C)		T <sub>c</sub> (°C)	ΔH <sup>2)</sup> (Làm mát lần thứ nhất) (J/g)	ΔH <sup>3)</sup> (Gia nhiệt lần thứ hai) (J/g)
Ví dụ 1	163,92		112,60	86,46	84,2
Ví dụ 2	162,17		112,20	89,06	79,9
Ví dụ 3	162,58		112,33	88,45	77,7
Ví dụ 4	165,02		114,85	90,56	80,1
Ví dụ 5	164,69		115,69	88,40	75,8
Ví dụ 6	165,00		115,00	88,61	80,9
Ví dụ 7	165,39		114,08	94,15	83,4
Ví dụ 8	163,81		111,57	88,34	82,4
Ví dụ 9	164,72		111,49	88,20	80,1
Ví dụ 10	164,80		110,74	90,94	82,1
Ví dụ 11	161,80		113,21	87,46	77,2
Ví dụ 14	162,93	166,43	112,27	90,01	78,3
Ví dụ so sánh 1	156,65	163,77	111,02	79,67	70,4
Ví dụ so sánh 2	157,42	163,59	111,17	80,88	73,1
Ví dụ so sánh 3	160,85		115,61	85,11	81,1
Ví dụ so sánh 4	157,99	164,46	111,66	76,33	66,9
Ví dụ so sánh 5	158,99	164,86	113,25	82,00	70,0

Bảng 2 (tiếp theo)

	T <sub>m</sub> <sup>1)</sup> (°C)		T <sub>c</sub> (°C)	ΔH <sup>2)</sup> (Làm mát lần thứ nhất) (J/g)	ΔH <sup>3)</sup> (Gia nhiệt lần thứ hai) (J/g)
Ví dụ 16	163,42		113	99,87	83,4
Ví dụ 17	163,53		111,9	88,76	83,1
Ví dụ 18	161,72	164,15	111,15	88,02	88,7
Ví dụ 19	162,25		114,1	85,43	76,6
Ví dụ 20	163,3		116,72	88,57	83,7
Ví dụ 21	163,21		113,73	88,82	85,7
Ví dụ 22	164,05		113,82	88,6	82,0
Ví dụ 23	163,54		112,73	88,8	77,7
Ví dụ 24	160,2		112,7	96,3	98,3
Ví dụ 25	160,1		111,4	98,2	105,2
Ví dụ 26	159,0	152,0 (144,5)	111,1	95,4	92,2
Ví dụ 27	159,8		113,9	95,1	101,7
Ví dụ 28	160,6		111,0	95,6	101,1
Ví dụ 31	161,9		111,5	97,4	92,5
Ví dụ 32	162,9		112,9	94,6	93,2

[0366]

Trong Bảng 2, các ý nghĩa của các mục 1) đến 4) là như sau:

- 1) Bên trái: đỉnh điểm nóng chảy chính, bên phải: đỉnh điểm nóng chảy phụ
- 2) Lượng nhiệt được sinh ra trong khi làm mát trong đo DSC (chỉ số năng lượng kết tinh)
- 3) Lượng nhiệt được hấp thụ trong khi gia nhiệt lần thứ hai (10°C/phút) trong đo DSC (chỉ số nhiệt nóng chảy)
- 4) Giá trị của (M<sub>w</sub>/M<sub>n</sub>)-(M<sub>z</sub>/M<sub>w</sub>)

[0367]

[Ví dụ 33]

&lt;Polyme hóa&gt;

Polyme hóa propylen được tiến hành theo cách tương tự như Ví dụ 7, ngoại trừ rằng thành phần chất xúc tác titan rắn [α7] được thay đổi từ 0,0032 mmol (tính

theo nguyên tử titan) thành 0,0024 mmol (tính theo nguyên tử titan), lượng của trietyl nhôm được sử dụng được thay đổi từ 0,4 mmol thành 0,3 mmol, và xyclohexylmetyldimetoxy silan không được sử dụng. Các kết quả là như sau.

[0368]

Hoạt tính polyme hóa: 123,1 kg/g-chất xúc tác

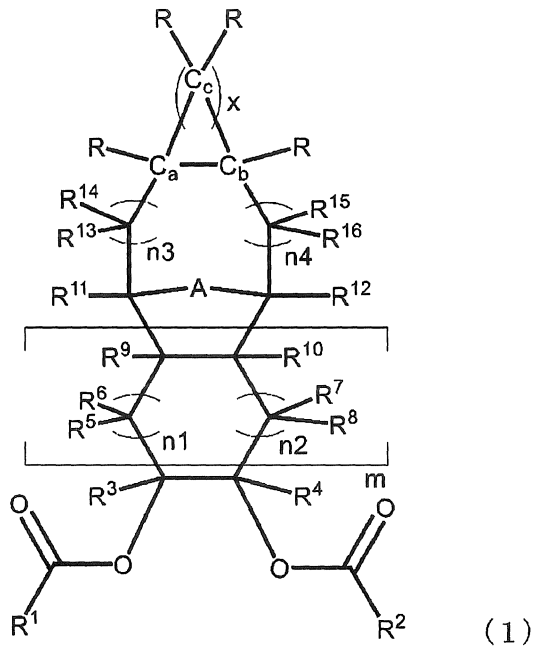
MFR: 2,4 g/10 phút

Hàm lượng thành phần hòa tan trong decan: 8,33 % trọng lượng

Như được thể hiện ở trên, có thể hiểu rằng chất xúc tác dùng để polyme hóa olefin chứa thành phần chất xúc tác titan rắn của sáng chế cũng có khả năng điều chỉnh tính đều lập thể của polyme thu được mà không làm suy biến hoạt tính polyme hóa thu được từ các điều kiện polyme hóa.

## YÊU CẦU BẢO HỘ

1. Thành phần chất xúc tác titan rắn (I) gồm titan, magie, halogen, và hợp chất chứa nhóm đa este vòng (a) được thể hiện bởi công thức (1) dưới đây:



trong đó mỗi  $n_1$  đến  $n_4$  độc lập là số nguyên từ 0 đến 2,  $m$  là 0 hoặc 1, và  $x$  là số nguyên từ 0 đến 10, với mỗi quan hệ là  $m+x \geq 1$  được đáp ứng;

mỗi  $R^1$  và  $R^2$  độc lập là nhóm hydrocarbon được thế hoặc không được thế có 1 đến 20 nguyên tử cacbon;  $R^3$  đến  $R^{16}$  và  $R$  mỗi nhóm độc lập là nguyên tử hydro, nhóm hydrocarbon được thế hoặc không được thế có 1 đến 20 nguyên tử cacbon, hoặc nguyên tử halogen; nguyên tử hydro, nguyên tử cacbon, hoặc cả hai, của  $R^1$  đến  $R^{16}$  và  $R$  được thay thế tùy ý bởi ít nhất một nguyên tử được lựa chọn từ nhóm gồm có nguyên tử nitơ, nguyên tử oxy, nguyên tử phospho, nguyên tử halogen, và nguyên tử silic; và hai hoặc nhiều nhóm được lựa chọn từ  $R^3$  đến  $R^{16}$  và  $R$  được liên kết tùy ý với nhau để tạo thành vòng đơn vòng hoặc đa vòng, và các phần tử thế liền kề được liên kết trực tiếp tùy ý để tạo thành liên kết bội;

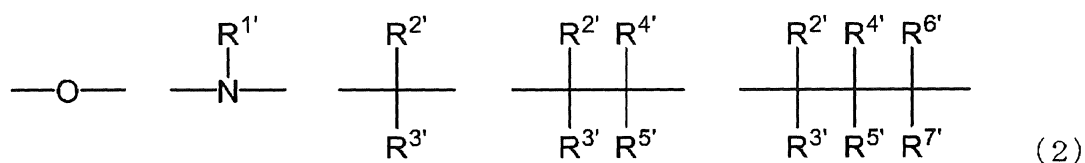
$C_a$ ,  $C_b$ , và  $C_c$  là các nguyên tử cacbon, và trong liên kết cacbon-cacbon của cấu tạo vòng được tạo nên của  $C_a$ ,  $C_b$ , và  $C_c$ , R được liên kết với cacbon liền kề được liên kết trực tiếp tùy ý với nhau để tạo thành liên kết bội; và

A là liên kết đơn hoặc nhóm liên kết hóa trị hai có mạch có độ dài là từ 1 đến 3 nguyên tử giữa hai gốc tự do.

2. Thành phần chất xúc tác titan rắn (I) theo điểm 1, trong đó trong công thức (1), phần trong đó hai hoặc nhiều nhóm được lựa chọn từ  $R^3$  đến  $R^{16}$  và R được liên kết với nhau để tạo thành vòng đơn vòng hoặc đa vòng là cấu tạo chứa liên kết đôi cacbon-cacbon.

3. Thành phần chất xúc tác titan rắn (I) theo điểm 1, trong đó trong công thức (1), phần trong đó hai hoặc nhiều nhóm được lựa chọn từ  $R^3$  đến  $R^{16}$  và R được liên kết với nhau để tạo thành vòng đơn vòng hoặc đa vòng còn chứa cấu tạo vòng đơn vòng hoặc đa vòng.

4. Thành phần chất xúc tác titan rắn (I) theo điểm 1, trong đó A là nhóm hóa trị hai được lựa chọn từ nhóm có công thức chung (2) dưới đây:



trong đó  $R^1$  đến  $R^7$  mỗi nhóm độc lập là nguyên tử hydro, nhóm alkyl được thế hoặc không được thế, nhóm xycloalkyl được thế hoặc không được thế, nhóm aryl được thế hoặc không được thế, hoặc nhóm heteroaryl được thế hoặc không được thế; và  $R^2$  đến  $R^7$  được liên kết tùy ý với nhau để tạo thành vòng đơn vòng hoặc đa vòng, hoặc các phần tử thế liền kề được liên kết trực tiếp tùy ý với nhau để tạo thành liên kết bội.

5. Thành phần chất xúc tác titan rắn (I) theo điểm 1, trong đó x là từ 2 đến 6.
6. Thành phần chất xúc tác titan rắn (I) theo điểm 1, trong đó n1 và n2 là 1.
7. Thành phần chất xúc tác titan rắn (I) theo điểm 1, trong đó n3 và n4 là 0.
8. Thành phần chất xúc tác titan rắn (I) theo điểm 1, trong đó R<sup>1</sup> và R<sup>2</sup> là nhóm alkyl được thế hoặc không được thế, nhóm alkenyl được thế hoặc không được thế, nhóm xycloalkyl được thế hoặc không được thế, nhóm aryl được thế hoặc không được thế, hoặc nhóm heteroaryl được thế hoặc không được thế.
9. Thành phần chất xúc tác titan rắn (I) theo điểm 1, trong đó R<sup>3</sup> đến R<sup>16</sup> mỗi nhóm độc lập là nguyên tử hydro, nhóm alkyl được thế hoặc không được thế, nhóm alkenyl được thế hoặc không được thế, nhóm xycloalkyl được thế hoặc không được thế, nhóm xycloalkenyl được thế hoặc không được thế, nhóm alkoxy được thế hoặc không được thế, nhóm alkenyloxy được thế hoặc không được thế, nhóm xycloalkyloxy được thế hoặc không được thế, nhóm xycloalkenyloxy được thế hoặc không được thế, nhóm aryl được thế hoặc không được thế, nhóm aryloxy được thế hoặc không được thế, nhóm heteroaryl được thế hoặc không được thế, hoặc nhóm heteroaryloxy được thế hoặc không được thế.
10. Thành phần chất xúc tác titan rắn (I) theo điểm 1, trong đó mỗi R độc lập là nguyên tử hydro, nhóm alkyl được thế hoặc không được thế, nhóm alkenyl được thế hoặc không được thế, nhóm xycloalkyl được thế hoặc không được thế, nhóm xycloalkenyl được thế hoặc không được thế, nhóm alkoxy được thế hoặc không được thế, nhóm alkenyloxy được thế hoặc không được thế, nhóm xycloalkyloxy được thế hoặc không được thế, nhóm xycloalkenyloxy được thế hoặc không được thế, nhóm aryl được thế hoặc không được thế, nhóm aryloxy được thế hoặc không được thế, nhóm heteroaryl được thế hoặc không được thế, hoặc nhóm heteroaryloxy được thế hoặc không được thế.

11. Chất xúc tác dùng để polyme hóa olefin, gồm: thành phần chất xúc tác titan rắn (I) theo điểm 1; và thành phần chất xúc tác hợp chất hữu cơ kim loại (II) gồm nguyên tố kim loại được lựa chọn từ Nhóm 1, Nhóm 2, và Nhóm 13 của bảng tuần hoàn.

12. Chất xúc tác dùng để polyme hóa olefin theo điểm 11, còn gồm chất cho điện tử (III).

13. Phương pháp polyme hóa olefin, gồm polyme hóa olefin với sự có mặt của chất xúc tác dùng để polyme hóa olefin theo điểm 11 hoặc 12.

14. Polyme propylen, có tốc độ dòng nóng chảy (MFR) được xác định dưới các điều kiện gồm nhiệt độ đo là 230°C theo tiêu chuẩn ASTM 1238, nằm trong khoảng 0,01 g/10 phút hoặc cao hơn và 1000 g/10 phút hoặc thấp hơn, và có nhiệt độ lớn nhất ( $T_m$ -maxv) ở đó sự hấp thụ nhiệt là không trong phân tích nhiệt quét vi sai (DSC) ở điều kiện gia nhiệt là 10°C/phút, là 169,0°C hoặc cao hơn và 220°C hoặc thấp hơn,

trong đó polyme propylen đáp ứng hai trong số các yêu cầu (p), (q), và (r) dưới đây hoặc nhiều hơn:

(p)  $M_z/M_w$  được xác định bởi sắc ký thẩm gel (GPC) là 3,50 hoặc cao hơn và 5,65 hoặc thấp hơn;

(q) chênh lệch giữa  $M_w/M_n$  và  $M_z/M_w$  được xác định bởi GPC là 8,3 hoặc thấp hơn; và

(r) hàm lượng thành phần hòa tan trong decan (C10sol.)/(% trọng lượng) thu được bằng phương pháp đo sau đây và MFR ((g/10 phút)) đáp ứng biểu thức quan hệ dưới đây (Log trong biểu thức quan hệ dưới đây là đối số thập phân):

$$(C10sol.) - 4/3 \times \text{Log}(MFR) \leq 2,30$$

<phương pháp đo hàm lượng thành phần hòa tan trong decan (C10sol.)>



khoảng 3 g polyme propylen được đo tới đơn vị  $10^{-4}$  g, và trọng lượng này được biểu thị là b (g), b (g) polyme propylen, 500 ml decan, và lượng nhỏ của chất làm ổn định chịu nhiệt hòa tan trong decan được nạp vào bình đo bằng thủy tinh, và polyme propylen được hòa tan bằng cách được gia nhiệt tới  $150^{\circ}\text{C}$  trong 2 giờ trong khi được khuấy bằng thiết bị khuấy trong môi trường nitơ, tiếp sau được duy trì ở  $150^{\circ}\text{C}$  trong 2 giờ, và được làm mát từ từ tới  $23^{\circ}\text{C}$  trong 8 giờ, chất lỏng thu được chứa các kết tủa của polyme propylen được đưa đi lọc dưới áp suất giảm qua dụng cụ lọc bằng thủy tinh chuẩn 25G-4, sau đó, 100 ml phần lọc được thu hồi và được sấy dưới điều kiện áp suất giảm để tạo ra phần thành phần hòa tan trong decan, và trọng lượng của nó được cân tới đơn vị  $10^{-4}$  g, và trọng lượng này được biểu thị là a (g), sau thao tác này, lượng của thành phần hòa tan trong decan được xác định bởi phương trình dưới đây:

$$\text{hàm lượng thành phần hòa tan trong decan} = 100 \times (500 \times a) / (100 \times b).$$

15. Polyme propylen theo điểm 14, còn đáp ứng yêu cầu (s) dưới đây:

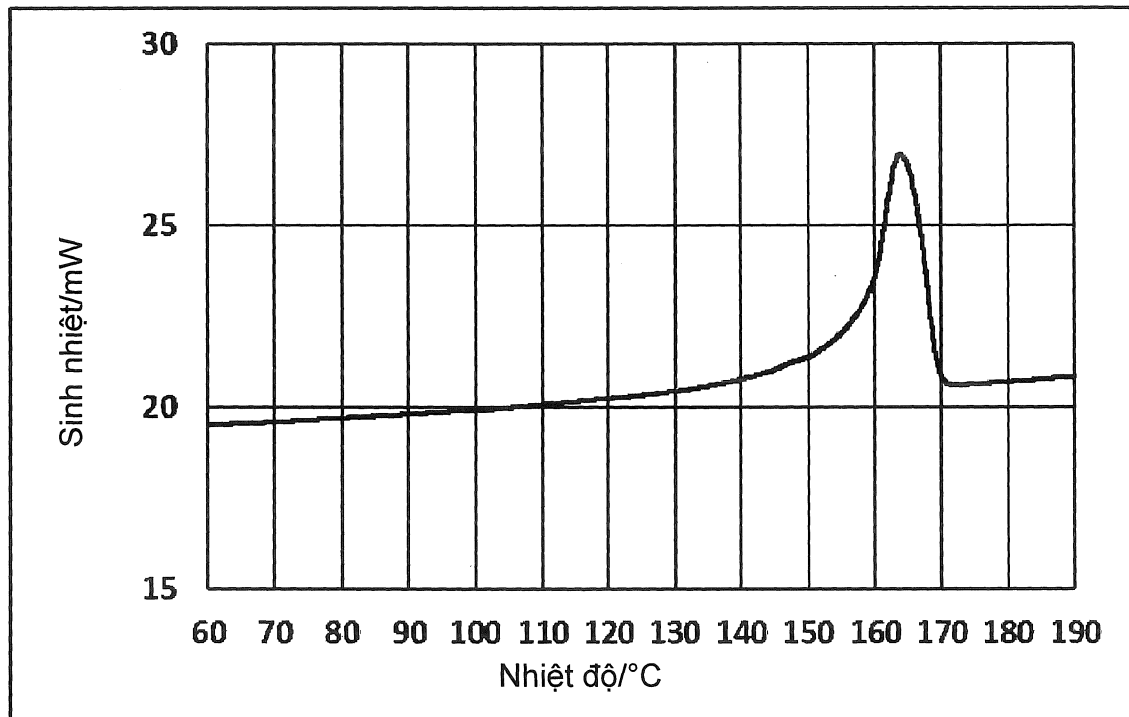
(s) nhiệt độ ( $T_m$ -maxt) ở giao điểm của đường gốc và tiếp tuyến của đường cong thu nhiệt trong khoảng nhiệt độ không thấp hơn  $T_m$  của đồ thị thu được bởi phân tích nhiệt quét vi sai (DSC) ở điều kiện gia nhiệt là  $10^{\circ}\text{C}/\text{phút}$  là  $168,1^{\circ}\text{C}$  hoặc cao hơn và  $210^{\circ}\text{C}$  hoặc thấp hơn.

16. Polyme propylen theo điểm 14 hoặc 15, trong đó polyme propylen đáp ứng tất cả các yêu cầu (p), (q) và (r).

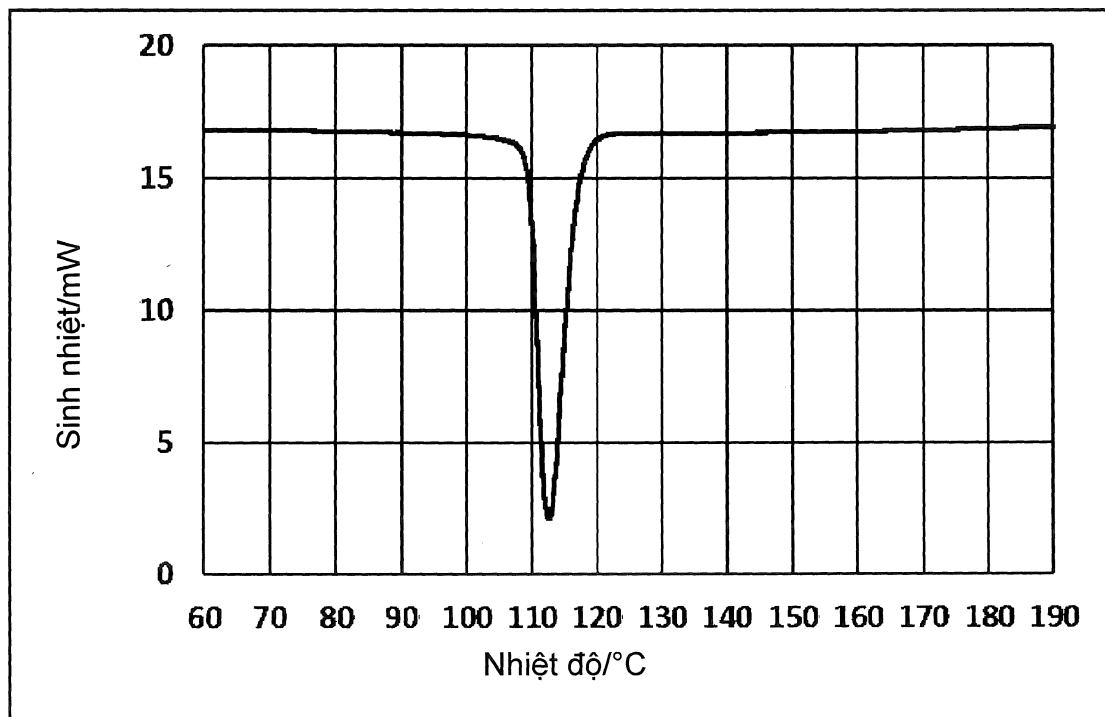
17. Polyme propylen theo điểm 16, trong đó biểu thức quan hệ của yêu cầu (r) là biểu thức sau:

$$(\text{C10sol.}) - 4/3 \times \text{Log}(\text{MFR}) \leq 2,1.$$

[Fig.1]

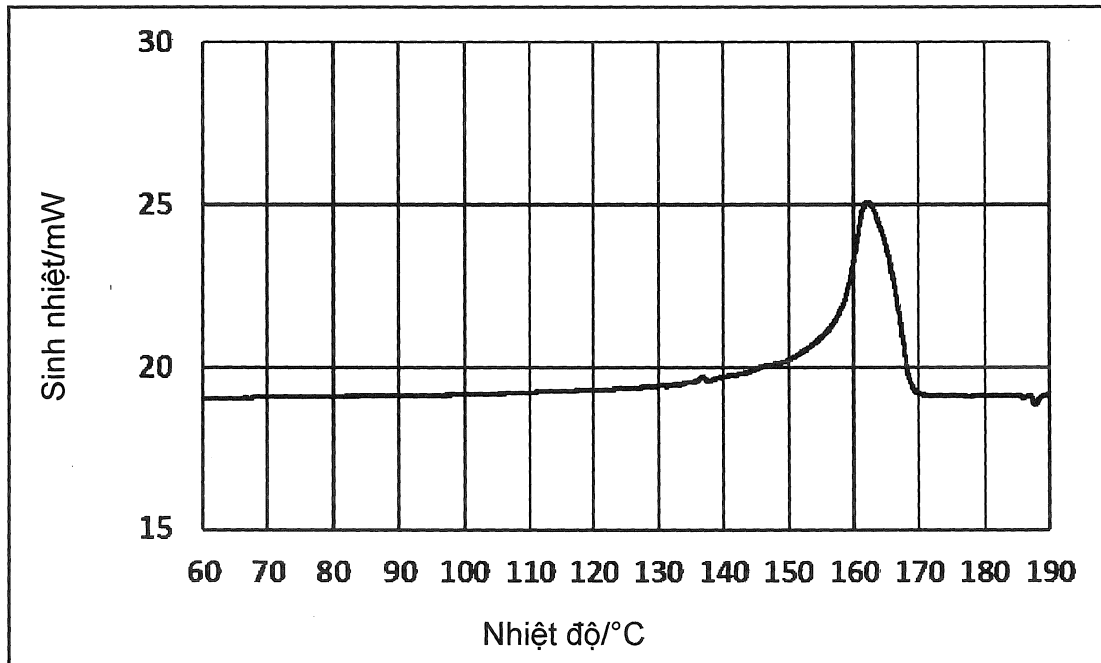


[Fig.2]

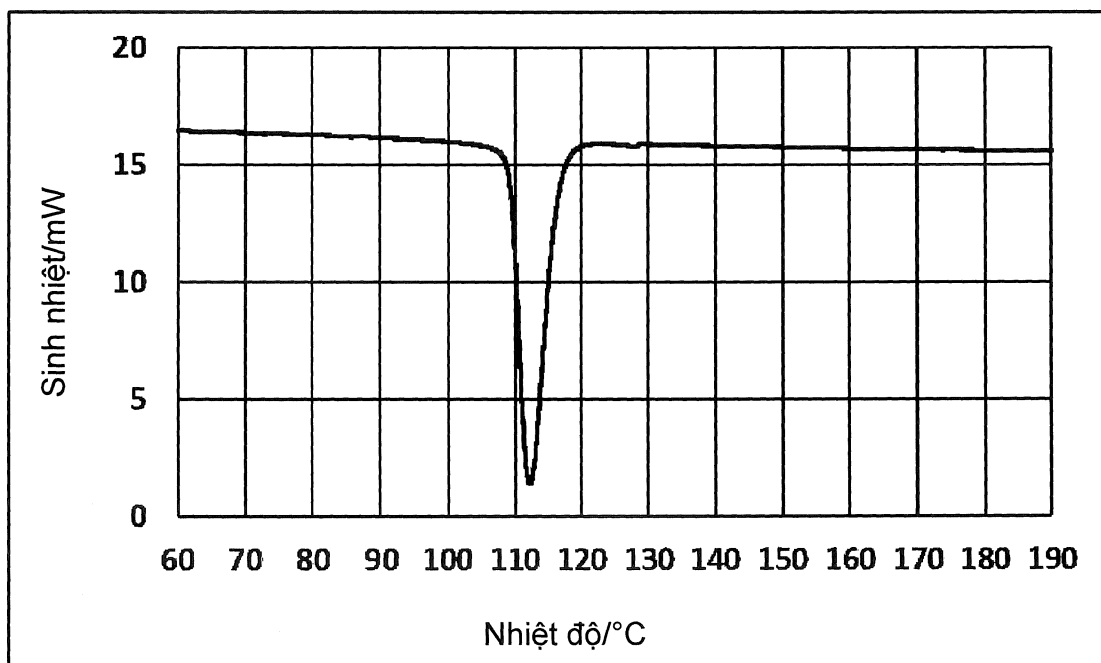


2/4

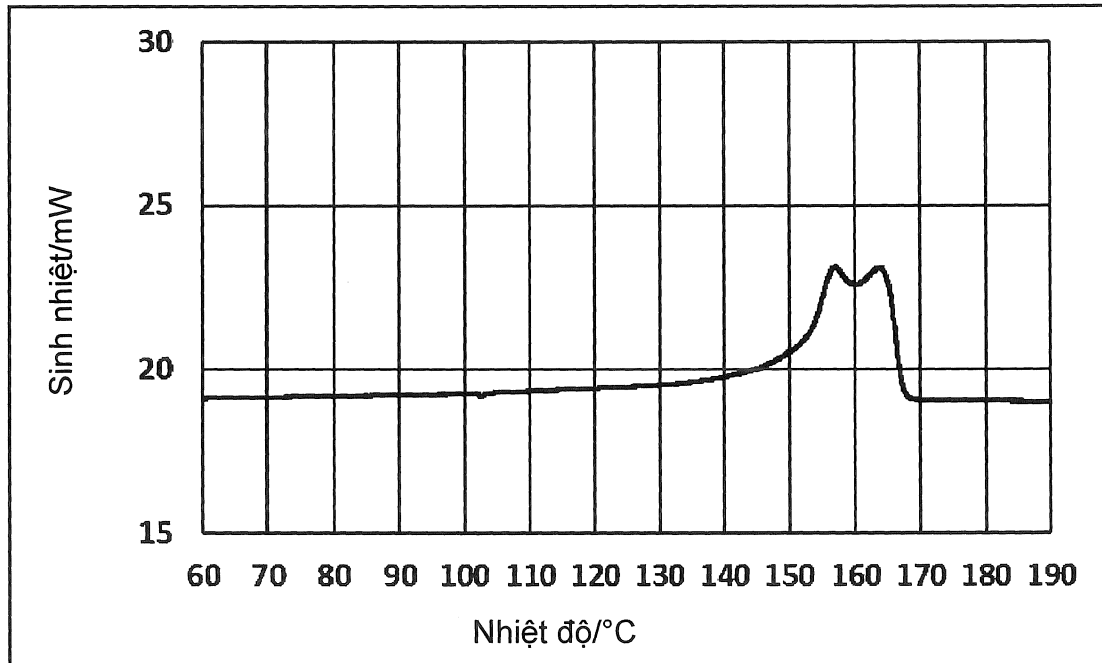
[Fig.3]



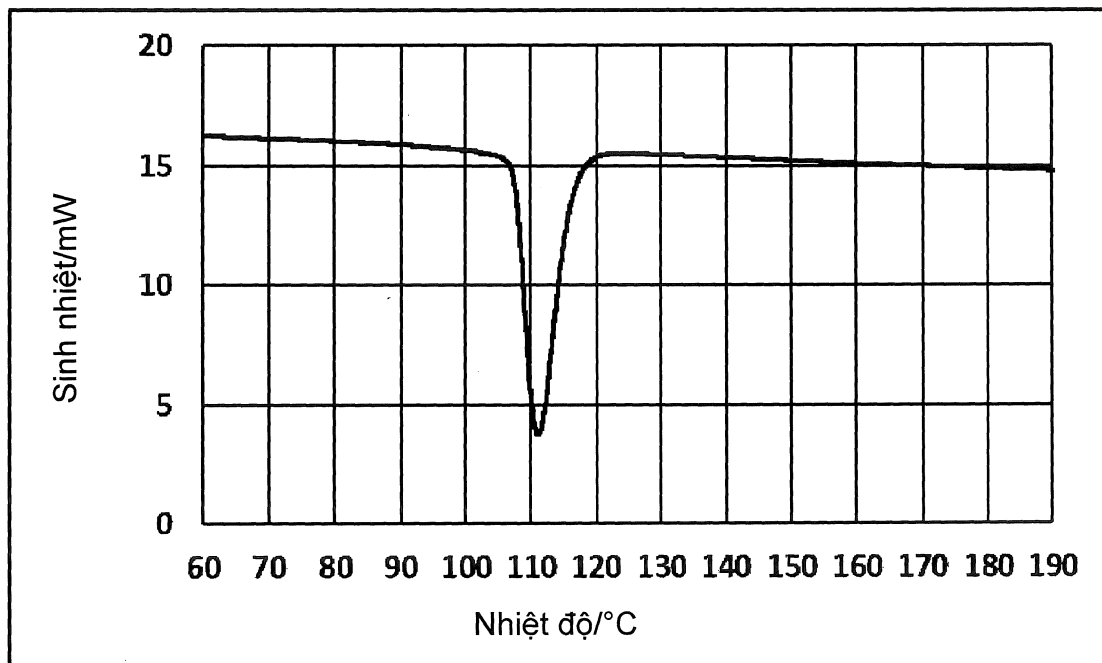
[Fig.4]



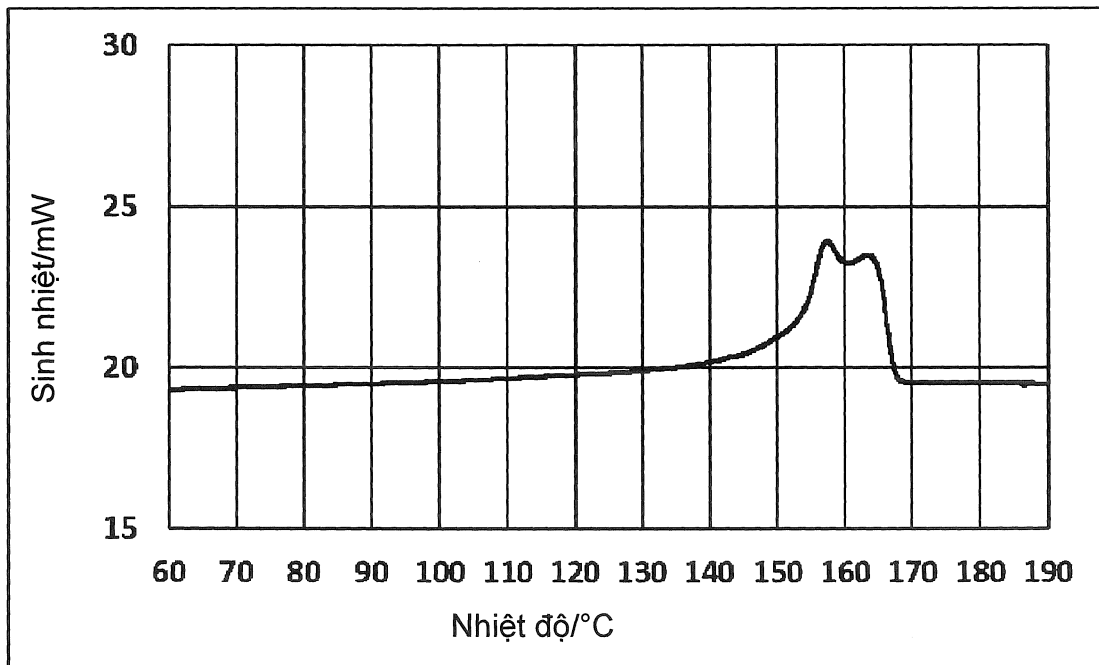
[Fig.5]



[Fig.6]



[Fig.7]



[Fig.8]

