

【公報種別】特許法第17条の2の規定による補正の掲載

【部門区分】第3部門第3区分

【発行日】平成17年12月22日(2005.12.22)

【公表番号】特表2005-506404(P2005-506404A)

【公表日】平成17年3月3日(2005.3.3)

【年通号数】公開・登録公報2005-009

【出願番号】特願2003-536282(P2003-536282)

【国際特許分類第7版】

C 0 8 F 4/605

C 0 8 F 36/00

【F I】

C 0 8 F 4/605

C 0 8 F 36/00 5 1 0

【手続補正書】

【提出日】平成16年6月16日(2004.6.16)

【手続補正1】

【補正対象書類名】特許請求の範囲

【補正対象項目名】全文

【補正方法】変更

【補正の内容】

【特許請求の範囲】

【請求項1】

a)下記一般式I)及び一般式II)で表される金属錯体のうち1つ以上:

I) $M R'{}_a [N(R^1 R^2)]_b [P(R^3 R^4)]_c (OR^5)_d (SR^6)_e X_f [(R^7 N)_2 Z]_g [(R^8 P)_2 Z_1]_h [(R^9 N)_2 Z_2 (PR^{10})]_i [ER'{}_p]_q [(R^{13} N)_2 Z_2 (NR^{14} R^{15})]_r [(R^{16} P)_2 Z_2 (PR^{17} R^{18})]_s [(R^{19} N)_2 Z_2 (PR^{20} R^{21})]_t [(R^{22} P)_2 Z_2 (NR^{23} R^{24})]_u [(NR^{25} R^{26})_2 Z_2 (CR^{27} R^{28})]_v$

II) $M'{}_z \{M R'{}_a [N(R^1 R^2)]_b [P(R^3 R^4)]_c (OR^5)_d (SR^6)_e X_f [(R^7 N)_2 Z]_g [(R^8 P)_2 Z_1]_h [(R^9 N)_2 Z_2 (PR^{10})]_i [ER'{}_p]_q [(R^{13} N)_2 Z_2 (NR^{14} R^{15})]_r [(R^{16} P)_2 Z_2 (PR^{17} R^{18})]_s [(R^{19} N)_2 Z_2 (PR^{20} R^{21})]_t [(R^{22} P)_2 Z_2 (NR^{23} R^{24})]_u [(CR^{27} R^{28})_2 Z_2 (NR^{25} R^{26})]_v \} X_y$,

(式中、Mはランタニド又はバナジウムを表し、

Z、Z₁、及びZ₂は、それぞれPあるいはNから成る二基を結合させる二価の架橋形成基であり、Z、Z₁、及びZ₂は独立して、(CR¹¹₂)_j、(SiR¹²₂)_k、(CR²⁹₂)_lO(CR³⁰₂)_m、又は(SiR³¹₂)_nO(SiR³²₂)_oから選択され、R¹¹、R¹²、R²⁹、R³⁰、R³¹、R³²は独立して水素、あるいは非水素原子数が1から80の基である、ヒドロカルビル基、ハロ置換ヒドロカルビル基、又はヒドロカルビルシリル基から選択され、

R'、R¹、R²、R³、R⁴、R⁵、R⁶、R⁷、R⁸、R⁹、R¹⁰、R¹³、R¹⁴、R¹⁵、R¹⁶、R¹⁷、R¹⁸、R¹⁹、R²⁰、R²¹、R²²、R²³、R²⁴、R²⁵、R²⁶、R²⁷、R²⁸はすべて独立してR基、又は水素、あるいは非水素原子数が1から80の基である、ヒドロカルビル基、ハロ置換ヒドロカルビル基、ヒドロカルビルシリル基、又はヒドロカルビルスタンニル基から選ばれ、

[ER'{}_p]は中性ルイス塩基連結化合物であり、

Eは酸素、硫黄、窒素、又はリンであり、

R'は水素、あるいは非水素原子数が1から80の基である、ヒドロカルビル基、ハロ置換ヒドロカルビル基、ヒドロカルビルシリル基、又はヒドロカルビルスタンニル基であり、Eが酸素又は硫黄の場合のpは2であり、Eが窒素又はリンの場合のpは3であり、qは0から6の数であり、

Xはハロゲン化物(フッ化物、塩化物、臭化物、あるいはヨウ化物)であり、

M'は、第1族又は第2族の金属であり、

N、P、O、Sは元素周期表上の元素であり、

b及びcは、0、1、2、3、4、5、又は6であり、

a、d、e、fは、0、1又は2であり、

g、h、i、r、s、t、u、vは0、1、2又は3であり、

j、k、l、m、n、oは、1又は2であり、

w、y、zは1から1000までの数であり、

$a + b + c + d + e + f + g + h + i + r + s + t + u + v$ の合計は6以下であり、 $a + b + c + d + e +$

$g + h + i + r + s + t + u + v$ の合計は3、4又は5であり、

Mは酸化状態が0から+6の金属原子を表し、

金属錯体は R' 、 (OR^5) 、Xから選ばれる配位子を2種類以上含まず、またアリル配位子、ベンジル配位子、カルボキシレート配位子を含まない)で表される金属錯体のうち1つ以上と、

b) 1) トリス(ペンタフルオロフェニル)ボロン、トリス(ペンタフルオロフェニル)アルミニウム、トリス(o-ノナフルオロビフェニル)ボロン、トリス(o-ノナフルオロビフェニル)アルミニウム、トリス[3,5-ビス(トリフルオロメチル)フェニル]ボロン、トリス[3,5-ビス(トリフルオロメチル)フェニル]アルミニウムから選ばれる、フッ素化または全フッ素化トリ(アリアル)ボロンもしくはアルミニウム化合物、2) ポリマー性アルモキサン類、3) オリゴマーアルモキサン類、4) 非ポリマー性で、相溶性を有し、非配位性のイオン形成化合物(酸化条件下でのこれらの化合物の使用を含む)から選ばれる活性剤化合物のうち1つ以上と、

c) 任意選択の遷移金属ハライド化合物含有成分と、

d) 任意選択の触媒改質剤と、

e) 任意選択の1つ(又は2以上)の無機担体物質又はポリマー性担体物質を含んでなる金属錯体触媒組成物。

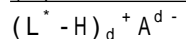
【請求項2】

1つ以上の活性剤化合物が、相溶性を有する非配位性の陰イオンのアンモニウム塩、ホスホニウム塩、オキソニウム塩、カルボニウム塩、シリリウム塩、スルホニウム塩、フェロセニウム塩である、非ポリマー性で相溶性を有し、非配位性のイオン形成化合物から成る、請求項1に記載の金属触媒組成物。

【請求項3】

活性剤化合物b)が、

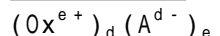
(A) 一般式：



(式中、 L^+ は中性ルイス塩基を示し、 $(L^+ - H)^+$ はブレンステッド酸を示す)

で表される活性剤化合物、若しくは

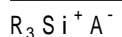
(B) 式：



(式中、 Ox^{e+} はe+の電荷を持つカチオン性酸化剤であり、dは1から3までの整数であり、eは1から3までの整数であり、 A^{d-} はd-の電荷を持つ非配位性で相溶性を有する陰イオンである)

で表される、陽イオン性酸化剤と非配位性で相溶性を有する陰イオンの塩である活性剤化合物、若しくは

(C) 式：



(式中、Rは C_{1-10} ヒドロカルビル基であり、 A^- は非配位性で、相溶性を有する-1の電荷を持つ陰イオンである)

で表される、シリリウムイオンと非配位性で相溶性を有する陰イオンの塩である活性剤化合物

からなる一群から1つ以上選択される、非ポリマー性で、相溶性を有し、非配位性のイオン形成活性剤化合物から成る、請求項1に記載の金属触媒組成物。

【請求項4】

一般式 I) 及び II) で示される金属錯体がランタニド金属を含む、先行する請求項のいずれか一項に記載の金属触媒組成物。

【請求項 5】

一般式 I) 及び II) で表される金属錯体がネオジウムを含む、請求項 4 に記載の金属錯体触媒組成物。

【請求項 6】

a、b、c、d、e、g、h、i、r、s、t、u、v のうち 1 つのみが 0 ではなく、 R^1 が R^2 と同一であり、 R^3 が R^4 と同一であり、 R^{14} が R^{15} と同一であり、 R^{25} が R^{26} と同一であり、 R^{27} が R^{28} と同一である、先行する請求項のいずれか一項に記載の金属触媒組成物。

【請求項 7】

金属錯体が、下記式：

$Nd[N(R)_2]_3$ 、 $Nd[P(R)_2]_3$ 、 $Nd[(OR)_2(NR_2)]$ 、 $Nd[(SR)_2(NR_2)]$ 、 $Nd[(OR)_2(PR_2)]$ 、 $Nd[(SR)_2(PR_2)]$ 、 $Nd[(RN)_2Z]X$ 、 $Nd[(RP)_2Z]X$ 、 $Nd[(RN)Z(PR)]X$ 、 $M'\{Nd[(RN)_2Z]_2\}$ 、 $M'\{Nd[(RP)_2Z]_2\}$ 、 $M'\{Nd[(RN)Z(PR)]_2\}$ 、 $M'\{Nd[R_2X_2]X\}$ 、 $M'\{Nd[N(R)_2]_bX_f\}X$ 、 $M'\{Nd[P(R)_2]_cX_f\}X$ 、 $M'\{Nd[(RN)_2Z]X_f\}X$ 、 $M'\{Nd[(RP)_2Z]X_f\}X$ 、 $M'\{Nd[(RN)Z(PR)]X_f\}X$ 、 $M'\{Nd[(RN)_2Z]_2\}X$ 、 $M'\{Nd[(RP)_2Z]_2\}X$ 、 $M'\{Nd[(RN)Z(PR)]_2\}X$ 、 $Nd[(RN)Z(NR^{14})_2]_3$ 、 $Nd[(RP)Z(PR^{17})_2]_3$ 、 $Nd[(RN)Z(PR^{20})_2]_3$ 、 $Nd[(RP)Z(NR^{23})_2]_3$ 、 $Nd[(CR^{27})_2Z(NR_2)]_3$

(式中、Z は、 $(CR_2)_2$ 、 $(SiR_2)_2$ 、 $(CR_2)O(CR_2)$ 、 $(SiR_2)O(SiR_2)$ 又は 1,2 二置換の芳香族環系であり、R、 R^{14} 、 R^{17} 、 R^{20} 、 R^{23} 、 R^{27} は独立して、水素、アルキル基、ベンジル基、アリール基、シリル基又はスタンニル基から選ばれ、X はフッ化物、塩化物又は臭化物であり、b 及び c は 1 又は 2 であり、f は 1 又は 2 であり、M' は Li、Na、K であり、M、R、X、Z は前述の定義の通りである)

で表される金属錯体のうちいずれか 1 つである、先行する請求項のいずれか一項に記載の金属触媒組成物。

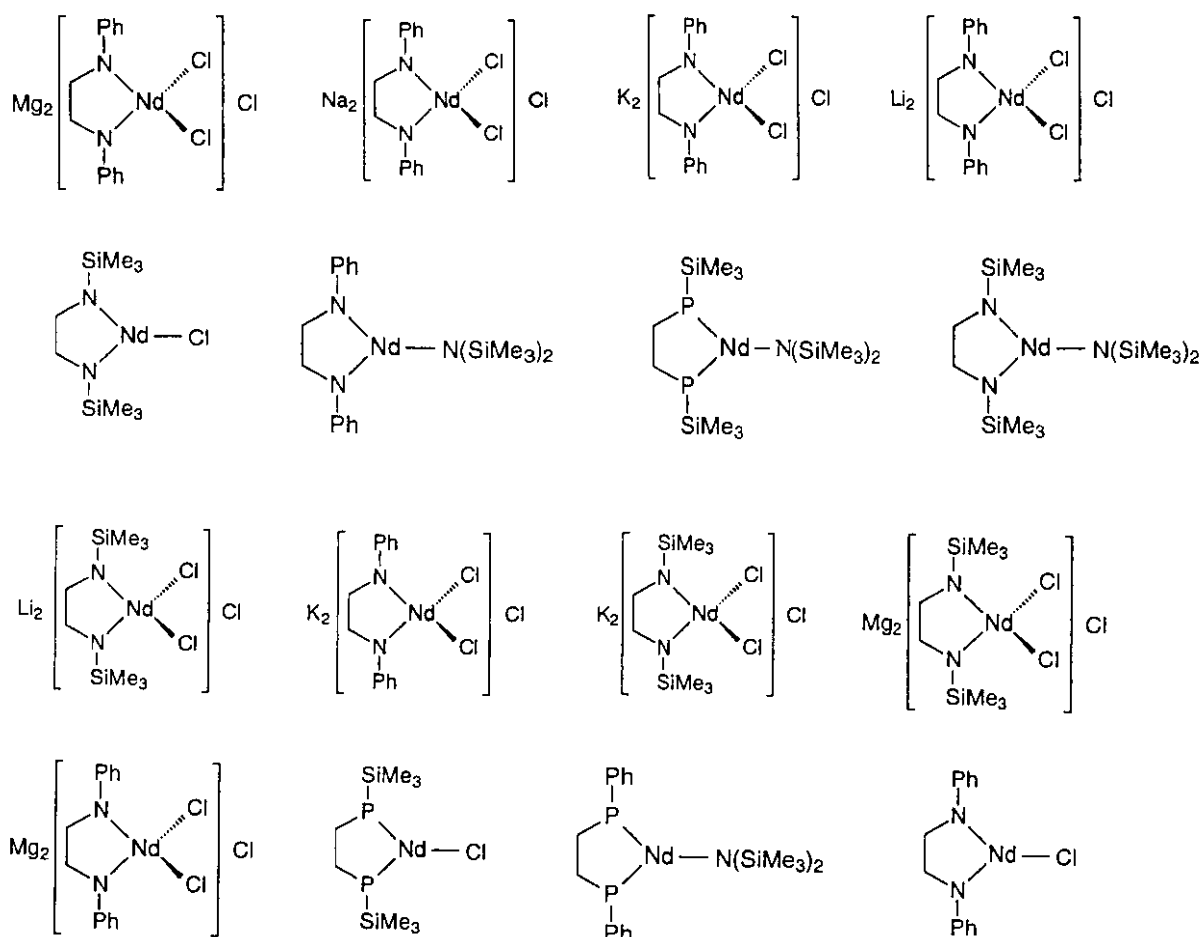
【請求項 8】

金属錯体が、下記式：

$Nd[N(SiMe_3)_2]_3$ 、 $Nd[P(SiMe_3)_2]_3$ 、 $Nd[N(SiMe_2Ph)_2]_3$ 、 $Nd[P(SiMe_2Ph)_2]_3$ 、 $Nd[N(Ph)_2]_3$ 、 $Nd[P(Ph)_2]_3$ 、 $Nd[N(SiMe_3)_2]_2F$ 、 $Nd[N(SiMe_3)_2]_2Cl$ 、 $Nd[N(SiMe_3)_2]_2Cl(THF)_n$ 、 $Nd[N(SiMe_3)_2]_2Br$ 、 $Nd[P(SiMe_3)_2]_2F$ 、 $Nd[P(SiMe_3)_2]_2Cl$ 、 $Nd[P(SiMe_3)_2]_2Br$ 、 $\{Li\{Nd[N(SiMe_3)_2]Cl_2\}Cl\}_n$ 、 $\{Li\{Nd[N(SiMe_3)_2]Cl_2\}Cl(THF)_n\}_n$ 、 $\{Na\{Nd[N(SiMe_3)_2]Cl_2\}Cl\}_n$ 、 $\{K\{Nd[N(SiMe_3)_2]Cl_2\}Cl\}_n$ 、 $\{Mg\{Nd[N(SiMe_3)_2]Cl_2\}Cl\}_n$ 、 $\{Li\{Nd[P(SiMe_3)_2]Cl_2\}Cl\}_n$ 、 $\{Na\{Nd[P(SiMe_3)_2]Cl_2\}Cl\}_n$ 、 $\{K\{Nd[P(SiMe_3)_2]Cl_2\}Cl\}_n$ 、 $\{Mg\{Nd[P(SiMe_3)_2]Cl_2\}Cl\}_n$ 、 $\{K_2\{Nd[PhN(CH_2)_2NPh]Cl_2\}Cl\}_n$ 、 $\{K_2\{Nd[PhN(CH_2)_2NPh]Cl_2\}Cl(O(CH_2CH_3)_2)_n\}_n$ 、 $\{Mg\{Nd[PhN(CH_2)_2NPh]Cl_2\}Cl\}_n$ 、 $\{Li_2\{Nd[PhN(CH_2)_2NPh]Cl_2\}Cl\}_n$ 、 $\{Na_2\{Nd[PhN(CH_2)_2NPh]Cl_2\}Cl\}_n$ 、 $\{Na_2\{Nd[PhN(CH_2)_2NPh]Cl_2\}Cl(NMe_3)_n\}_n$ 、 $\{Na_2\{Nd[Me_3SiN(CH_2)_2NSiMe_3]Cl_2\}Cl\}_n$ 、 $\{K_2\{Nd[Me_3SiN(CH_2)_2NSiMe_3]Cl_2\}Cl\}_n$ 、 $\{Mg\{Nd[Me_3SiN(CH_2)_2NSiMe_3]Cl_2\}Cl\}_n$ 、 $\{Li_2\{Nd[Me_3SiN(CH_2)_2NSiMe_3]Cl_2\}Cl\}_n$ 、 $\{K_2\{Nd[PhP(CH_2)_2PPh]Cl_2\}Cl\}_n$ 、 $\{Mg\{Nd[PhP(CH_2)_2PPh]Cl_2\}Cl\}_n$ 、 $\{Li_2\{Nd[PhP(CH_2)_2PPh]Cl_2\}Cl\}_n$ 、 $\{Na_2\{Nd[PhP(CH_2)_2PPh]Cl_2\}Cl\}_n$ 、 $\{Na_2\{Nd[Me_3SiP(CH_2)_2PSiMe_3]Cl_2\}Cl\}_n$ 、 $\{K_2\{Nd[Me_3SiP(CH_2)_2PSiMe_3]Cl_2\}Cl\}_n$ 、 $\{Mg\{Nd[Me_3SiP(CH_2)_2PSiMe_3]Cl_2\}Cl\}_n$ 、 $\{Li_2\{Nd[Me_3SiP(CH_2)_2PSiMe_3]Cl_2\}Cl\}_n$ 、 $Nd[N(Ph)_2]_2F$ 、 $Nd[N(Ph)_2]_2Cl$ 、 $Nd[N(Ph)_2]_2Cl(THF)_n$ 、 $Nd[N(Ph)_2]_2Br$ 、 $Nd[P(Ph)_2]_2F$ 、 $Nd[P(Ph)_2]_2Cl$ 、 $Nd[P(Ph)_2]_2Br$ 、 $\{Li\{Nd[N(Ph)_2]Cl_2\}Cl\}_n$ 、 $\{Na\{Nd[N(Ph)_2]Cl_2\}Cl\}_n$ 、 $\{K\{Nd[N(Ph)_2]Cl_2\}Cl\}_n$ 、 $\{Mg\{Nd[N(Ph)_2]Cl_2\}Cl\}_n$ 、 $\{Li\{Nd[P(Ph)_2]Cl_2\}Cl\}_n$ 、 $\{Na\{Nd[P(Ph)_2]Cl_2\}Cl\}_n$ 、 $\{K\{Nd[P(Ph)_2]Cl_2\}Cl\}_n$ 、 $\{Mg\{Nd[P(Ph)_2]Cl_2\}Cl\}_n$ 、 $\{K_2\{Nd[PhN(Si(CH_3)_2)_2NPh]Cl_2\}Cl\}_n$ 、 $\{Mg\{Nd[PhN(Si(CH_3)_2)_2NPh]Cl_2\}Cl\}_n$ 、 $\{Li_2\{Nd[PhN(Si(CH_3)_2)_2NPh]Cl_2\}Cl\}_n$ 、 $\{Na_2\{Nd[PhN(Si(CH_3)_2)_2NPh]Cl_2\}Cl\}_n$ 、 $\{Na_2\{Nd[Me_3SiN(Si(CH_3)_2)_2NSiMe_3]Cl_2\}Cl\}_n$ 、 $\{K_2\{Nd[Me_3SiN(Si(CH_3)_2)_2NSiMe_3]Cl_2\}Cl\}_n$ 、 $\{Mg\{Nd[Me_3SiN(Si(CH_3)_2)_2NSiMe_3]Cl_2\}Cl\}_n$ 、 $\{Li_2\{Nd[Me_3SiN(Si(CH_3)_2)_2NSiMe_3]Cl_2\}Cl\}_n$ 、 $\{K_2\{Nd[PhP(Si(CH_3)_2)_2PPh]Cl_2\}Cl\}_n$ 、 $\{Mg\{Nd[PhP(Si(CH_3)_2)_2PPh]Cl_2\}Cl\}_n$ 、 $\{Li_2\{Nd[PhP(Si(CH_3)_2)_2PPh]Cl_2\}Cl\}_n$ 、 $\{Na_2\{Nd[PhP(Si(CH_3)_2)_2PPh]Cl_2\}Cl\}_n$ 、 $K_2\{Nd[PhN(CH_2)_2NPh]_2\}Cl$ 、 $Na_2\{Nd[PhN(CH_2)_2NPh]_2\}Cl$ 、 $Li_2\{Nd[PhN(CH_2)_2NPh]_2\}Cl$

$2\}Cl$ 、 $K_2\{Nd[((CH_3)_3Si)N(CH_2)_2N(Si(CH_3)_3)]_2\}Cl$ 、 $Na_2\{Nd[((CH_3)_3Si)N(CH_2)_2N(Si(CH_3)_3)]_2\}Cl$ 、 $Li_2\{Nd[((CH_3)_3Si)N(CH_2)_2N(Si(CH_3)_3)]_2\}Cl$ 、 $Li_2\{Nd[PhN(Si(CH_3)_2)_2NPh]_2\}Cl$ 、 $Na_2\{Nd[PhN(Si(CH_3)_2)_2NPh]_2\}Cl$ 、 $Li_2\{Nd[PhN(Si(CH_3)_2)_2NPh]_2\}Cl$ 、 $K_2\{Nd[((CH_3)_3Si)N(Si(CH_3)_2)_2N(Si(CH_3)_3)]_2\}Cl$ 、 $Na_2\{Nd[((CH_3)_3Si)N(Si(CH_3)_2)_2N(Si(CH_3)_3)]_2\}Cl$ 、 $Li_2\{Nd[((CH_3)_3Si)N(Si(CH_3)_2)_2N(Si(CH_3)_3)]_2\}Cl$ 、 $K_2\{Nd[PhP(CH_2)_2PPh]_2\}Cl$ 、 $Na_2\{Nd[PhP(CH_2)_2PPh]_2\}Cl$ 、 $Li_2\{Nd[PhP(CH_2)_2PPh]_2\}Cl$ 、 $K_2\{Nd[((CH_3)_3Si)P(CH_2)_2P(Si(CH_3)_3)]_2\}Cl$ 、 $Na_2\{Nd[((CH_3)_3Si)P(CH_2)_2P(Si(CH_3)_3)]_2\}Cl$ 、 $Li_2\{Nd[((CH_3)_3Si)P(CH_2)_2P(Si(CH_3)_3)]_2\}Cl$ 、 $K_2\{Nd[PhP(Si(CH_3)_2)PPh]_2\}Cl$ 、 $Na_2\{Nd[PhP(Si(CH_3)_2)PPh]_2\}Cl$ 、 $Li_2\{Nd[PhP(Si(CH_3)_2)PPh]_2\}Cl$ 、 $K_2\{Nd[((CH_3)_3Si)P(Si(CH_3)_2)P(Si(CH_3)_3)]_2\}Cl$ 、 $Na_2\{Nd[((CH_3)_3Si)P(Si(CH_3)_2)P(Si(CH_3)_3)]_2\}Cl$ 、 $Li_2\{Nd[((CH_3)_3Si)P(Si(CH_3)_2)P(Si(CH_3)_3)]_2\}Cl$ 、 $Nd[((CH_3)_3N)(CH_2)_2(N(CH_3)_2)]_3$ 、 $Nd[(PhN)(CH_2)_2(N(CH_3)_2)]_3$ 、 $Nd[((CH_3)N)(CH_2)_2(N(CH_3)(Ph))]_3$ 、 $Nd[((CH_3)N)(CH_2)_2(N(Ph)_2)]_3$ 、 $Nd[((CH_3CH_2)N)(CH_2)_2(N(CH_3)_2)]_3$ 、 $Nd[((CH_3CH_2)N)(CH_2)_2(N(CH_3)(Ph))]_3$ 、 $Nd[((CH_3CH_2)N)(CH_2)_2(N(Ph)_2)]_3$ 、 $Nd[((CH_3)P)(CH_2)_2(P(CH_3)_2)]_3$ 、 $Nd[(PhP)(CH_2)_2(P(CH_3)_2)]_3$ 、 $Nd[((CH_3)P)(CH_2)_2(P(CH_3)(Ph))]_3$ 、 $Nd[((CH_3)P)(CH_2)_2(P(Ph)_2)]_3$ 、 $Nd[((CH_3CH_2)P)(CH_2)_2(P(CH_3)_2)]_3$ 、 $Nd[((CH_3CH_2)P)(CH_2)_2(P(CH_3)(Ph))]_3$ 、 $Nd[((CH_3CH_2)P)(CH_2)_2(P(Ph)_2)]_3$ 、 $Nd[2-((CH_3)_2N)(C_6H_4)-1-(CH_2)]_3$ 、 $Nd[2-((CH_3CH_2)_2N)(C_6H_4)-1-(CH_2)]_3$ 、 $Nd[2-((CH_3)_2CH)_2N](C_6H_4)-1-(CH_2)]_3$ 、 $Nd[(2-Ph_2N)(C_6H_4)-1-(CH_2)]_3$ 、 $Nd[2-((CH_3)(Ph)N)(C_6H_4)-1-(CH_2)]_3$ 、 $Nd[2-(((CH_3)(CH_2)_{17})(CH_3)N)(C_6H_4)-1-(CH_2)]_3$ 、 $Nd[2-((CH_3)_2N)-3-((CH_3)(CH_2)_{17})(C_6H_4)-1-(CH_2)]_3$ 、 $Nd[2-((CH_3)_2N)-4-((CH_3)(CH_2)_{17})(C_6H_4)-1-(CH_2)]_3$ 、

【化 1】



(式中、(C₆H₄)は、1,2-置換の芳香環、Meはメチル基、Phはフェニル基、THFはテトラヒドロフラン、そしてnは1から1000までの数である)

で表される金属錯体のうちいずれか1つである、先行する請求項のいずれか一項に記載の金属触媒組成物。

【請求項 9】

金属錯体が、下記金属化合物：

Na₂[PhN(CH₂)₂NPh]、Li₂[PhN(CH₂)₂NPh]、K₂[PhN(CH₂)₂NPh]、Na₂[PhP(CH₂)₂PPh]、Li₂[PhP(CH₂)₂PPh]、K₂[PhP(CH₂)₂PPh]、Mg[PhN(CH₂)₂NPh]、(MgCl)₂[PhN(CH₂)₂NPh]、Mg[PhP(CH₂)₂PPh]、Na₂[PhN(CMe₂)₂NPh]、Li₂[PhN(CMe₂)₂NPh]、K₂[PhN(CMe₂)₂NPh]、Na₂[PhP(CMe₂)₂PPh]、Li₂[PhP(CMe₂)₂PPh]、K₂[PhP(CMe₂)₂PPh]、Mg[PhN(CMe₂)₂NPh]、(MgCl)₂[PhN(CMe₂)₂NPh]、Mg[PhP(CMe₂)₂PPh]、Na₂[Me₃SiN(CH₂)₂NSiMe₃]、Li₂[Me₃SiN(CH₂)₂NSiMe₃]、K₂[Me₃SiN(CH₂)₂NSiMe₃]、Mg[Me₃SiN(CH₂)₂NSiMe₃]、(MgCl)₂[Me₃SiN(CH₂)₂NSiMe₃]、Na₂[Me₃SiP(CH₂)₂PSiMe₃]、Li₂[Me₃SiP(CH₂)₂PSiMe₃]、K₂[Me₃SiP(CH₂)₂PSiMe₃]、Mg[Me₃SiP(CH₂)₂PSiMe₃]、(MgCl)₂[Me₃SiP(CH₂)₂PSiMe₃]、Na₂[Me₃SiN(CMe₂)₂NSiMe₃]、Li₂[Me₃SiN(CMe₂)₂NSiMe₃]、K₂[Me₃SiN(CMe₂)₂NSiMe₃]、Mg[Me₃SiN(CMe₂)₂NSiMe₃]、(MgCl)₂[Me₃SiN(CMe₂)₂NSiMe₃]、Na₂[Me₃SiP(CMe₂)₂PSiMe₃]、Li₂[Me₃SiP(CMe₂)₂PSiMe₃]、K₂[Me₃SiP(CMe₂)₂PSiMe₃]、Mg[Me₃SiP(CMe₂)₂PSiMe₃]、(MgCl)₂[Me₃SiP(CMe₂)₂PSiMe₃]、Li[2-((CH₃)₂N)(C₆H₄)-1-(CH₂)₂]、Li[2-((CH₃CH₂)₂N)(C₆H₄)-1-(CH₂)₂]、Li[2-((CH₃)₂CH)₂N(C₆H₄)-1-(CH₂)₂]、Li[2-(Ph₂N)(C₆H₄)-1-(CH₂)₂]、Li[2-((CH₃)(Ph)N)(C₆H₄)-1-(CH₂)₂]、

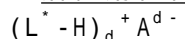
$\text{Li}[2-(((\text{CH}_3)(\text{CH}_2)_{17})(\text{CH}_3)\text{N})(\text{C}_6\text{H}_4)-1-(\text{CH}_2)]$ 、
 $\text{Li}[2-((\text{CH}_3)_2\text{N})-3-((\text{CH}_3)(\text{CH}_2)_{17})(\text{C}_6\text{H}_4)-1-(\text{CH}_2)]_{3i}$ 、
 $\text{Li}[2-((\text{CH}_3)_2\text{N})-4-((\text{CH}_3)(\text{CH}_2)_{17})(\text{C}_6\text{H}_4)-1-(\text{CH}_2)]$ 、 $\text{MgCl}[2-((\text{CH}_3)_2\text{N})(\text{C}_6\text{H}_4)-1-(\text{CH}_2)]$ 、
 $\text{MgCl}[2-((\text{CH}_3\text{CH}_2)_2\text{N})(\text{C}_6\text{H}_4)-1-(\text{CH}_2)]$ 、 $\text{MgCl}[2-((\text{CH}_3)_2\text{CH})_2\text{N}](\text{C}_6\text{H}_4)-1-(\text{CH}_2)]$ 、
 $\text{MgCl}[2-(\text{Ph}_2\text{N})(\text{C}_6\text{H}_4)-1-(\text{CH}_2)]$ 、 $\text{MgCl}[2-((\text{CH}_3)(\text{Ph})\text{N})(\text{C}_6\text{H}_4)-1-(\text{CH}_2)]$ 、
 $\text{MgCl}[2-(((\text{CH}_3)(\text{CH}_2)_{17})(\text{CH}_3)\text{N})(\text{C}_6\text{H}_4)-1-(\text{CH}_2)]$ 、
 $\text{MgCl}[2-((\text{CH}_3)_2\text{N})-3-((\text{CH}_3)(\text{CH}_2)_{17})(\text{C}_6\text{H}_4)-1-(\text{CH}_2)]_{3i}$ 、
 $\text{MgCl}[2-((\text{CH}_3)_2\text{N})-4-((\text{CH}_3)(\text{CH}_2)_{17})(\text{C}_6\text{H}_4)-1-(\text{CH}_2)]$
 のうちの1つと、ネオジムトリクロリド、ネオジムトリクロリドジメトキシエタン付加体、
 ネオジムトリクロリドトリエチルアミン付加体若しくはネオジムトリクロリドテトラヒ
 ドロフラン付加体との反応の結果生成する金属錯体である、請求項1に記載の金属触媒組
 成物。

【請求項 10】

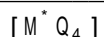
活性剤化合物が、メチルアルモキサン(MAO)、トリイソブチルアルミニウム変性メチル
 アルモキサン、イソブチルアルモキサンから成る、先行する請求項のいずれか一項に記載
 の金属触媒組成物。

【請求項 11】

活性剤化合物が、下記一般式：

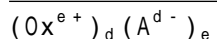


(式中、 L^+ と $(\text{L}^+-\text{H})^+$ は請求項2における定義と同じであり、Ad-は式：



に相当し、 M^+ は形式的な酸化状態が+3のほう素又はアルミニウムであり、Qは非水素原子
 数が最大20である、ヒドロカルビル基、ヒドロカルピロキシ基、フッ化ヒドロカルビル基
 、フッ化カルピロキシ基、フッ化シリルヒドロカルビル基であるが、但し複数のQがヒド
 ロカルビル基となることはない)

若しくは、下記式：



(式中、 Ox^{e+} 、d及びeは請求項2における定義と同様であり、Ad-はテトラキス(ペンタフル
 オロフェニル)ボレートである)

で表される陽イオン性酸化剤と非配位性で相溶性を有する陰イオンの塩で表される、請求
 項2から請求項9のいずれか一項に記載の金属触媒組成物。

【請求項 12】

それぞれのQがフッ化アリアル基である、請求項11に記載の金属触媒組成物。

【請求項 13】

遷移金属ハライド化合物成分c)が存在し、その金属が第3族から第10族までの金属原子
 、ランタニド金属原子、アクチニド金属原子であり、フッ素、塩素、臭素又はヨウ素原子
 から成る一群から選ばれる1つから6つのハライド原子に結合している、先行する請求項の
 いずれか一項に記載の金属触媒組成物。

【請求項 14】

遷移金属ハライド化合物成分c)が、 ScCl_3 、 TiCl_2 、 TiCl_3 、 TiCl_4 、 $\text{TiCl}_2 \cdot 2 \text{LiCl}$ 、 Zr
 Cl_2 、 $\text{ZrCl}_2 \cdot 2 \text{LiCl}$ 、 ZrCl_4 、 VCl_3 、 VCl_5 、 CrCl_2 、 CrCl_3 、 CrCl_5 、及び CrCl_6 のいずれか
 1つである、請求項13に記載の金属触媒組成物。

【請求項 15】

遷移金属ハライド化合物c)が存在し、かつ該遷移金属ハライド化合物c)が、請求項13あ
 るいは請求項14に記載の遷移金属ハライド化合物c)とルイス塩基の反応により生成する、
 請求項1から請求項12のいずれか一項に記載の金属触媒組成物。

【請求項 16】

遷移金属ハライド化合物成分c)が、請求項13若しくは請求項14に記載の遷移金属ハライ
 ド化合物c)と、n-ブチルリチウム、t-ブチルリチウム、メチルリチウム、ジエチルマグネ
 シウム、あるいはエチルマグネシウムのハロゲン化物との反応により生成する化合物を表

す、請求項15に記載の金属触媒組成物。

【請求項17】

任意の触媒調整剤d)が存在し、かつ該触媒調整剤がC1-30のヒドロカルビル置換第13族化合物又はそのハロゲン化(全ハロゲン化を含む)誘導体から選ばれる中性ルイス酸である、先行する請求項のいずれか一項に記載の金属触媒組成物。

【請求項18】

任意の触媒調整剤d)が、それぞれのヒドロカルビル基あるいはハロゲン化ヒドロカルビル基の炭素数が1から20である、(ヒドロカルビル)アルミニウム化合物およびそのハロゲン化(全ハロゲン化を含む)誘導体から選択され、該(ヒドロカルビル)アルミニウム化合物がトリアルキルアンモニウム化合物およびアルキルアンモニウムハライドから選択される、請求項17に記載の金属触媒組成物。

【請求項19】

活性剤化合物b)が、それぞれのヒドロカルビル基の炭素数が1から20であるハロゲン化トリ(ヒドロカルビル)ボロン化合物であり、触媒調整剤d)が、それぞれのアルキル基の炭素数が1から4であるトリアルキルアルミニウム化合物である、請求項17に記載の金属触媒組成物。

【請求項20】

担体物質d)が存在し、該担体物質が粘土、シリカ、木炭、グラファイト、発砲粘土、熱膨張グラファイト、カーボンブラック、層状けい酸塩又はアルミナである、先行する請求項のいずれか一項に記載の金属触媒組成物。

【請求項21】

先行する請求項のいずれか一項に記載の金属触媒組成物を使用してポリジエンを製造することを特徴とする、ポリジエンの製造工程。

【請求項22】

活性剤化合物b)と金属錯体a)の中心金属のモル比が11：10から5000：1である、請求項21に記載のポリジエンの製造工程。

【請求項23】

遷移金属ハライド化合物成分c)と金属錯体a)の中心金属のモル比が1：100から1000：1である、請求項21若しくは請求項22に記載のポリジエンの製造工程。

【請求項24】

ジオレフィンモノマーが、1,3-ブタジエン、イソプレン(2-メチル-1,3-ブタジエン)、2,3-ジメチル-1,3-ブタジエン、1,3-ペンタジエン、2,4-ヘキサジエン、1,3-ヘキサジエン、1,3-ヘプタジエン、1,3-オクタジエン、2-メチル-2,4-ペンタジエン、シクロペンタジエン、2,4-ヘキサジエン、1,3-シクロオクタジエン、ノルボルナジエンから成る一群から選ばれる、請求項21から請求項23に記載のポリジエンの製造工程。

【請求項25】

担体物質e)に対する担持金属錯体の比率が約0.5から約100,000である、請求項21から請求項24に記載のポリジエンの製造工程。

【手続補正2】

【補正対象書類名】明細書

【補正対象項目名】0091

【補正方法】変更

【補正の内容】

【0091】

本発明の金属錯体／共触媒（あるいは活性剤）の混合物の触媒作用は、任意選択的に触媒改質剤を併用することにより変化させることができる。本発明における使用に適した任意の触媒重合調整剤としては、ヒドロカルビルナトリウム、ヒドロカルビルリチウム、ヒドロカルビル亜鉛、ヒドロカルビルマグネシウムハライド、ジヒドロカルビルマグネシウム、特に、*n*-オクチルナトリウム、ブチルリチウム、ネオペンチルリチウム、メチルリチウム、エチルリチウム、ジエチル亜鉛、ジブチル亜鉛、ブチルマグネシウムクロリド、

エチルマグネシウムクロリド、オクチルマグネシウムクロリド、ジブチルマグネシウム、ジオクチルマグネシウム、ブチルオクチルマグネシウム等の、アルキルナトリウム、アルキルリチウム、アルキル亜鉛、アルキルマグネシウムハライド、ジアルキルマグネシウムが含まれる。また、本発明における使用に適した任意の触媒改質剤としては、 $C_1 \sim 30$ ヒドロカルビル置換第13族化合物、特に各ヒドロカルビル基あるいはハロゲン化ヒドロカルビル基に1個から20個の炭素を持つ（ヒドロカルビル）アルミニウム化合物あるいは（ヒドロカルビル）ボロン化合物及びそれらのハロゲン化誘導体（全ハロゲン化を含む）、さらに具体的には、トリエチルアルミニウムやトリイソブチルアルミニウム等のトリアリールアルミニウム及びトリアルキルアルミニウム化合物、ジイソブチルアルミニウムヒドリド等のアルキルアルミニウムヒドリド、ジブチルエトキシアルミニウム等のアルキルアルコキシアルミニウム化合物、そして、ジエチルアルミニウムクロリド、ジイソブチルアルミニウムクロリド、エチルオクチルアルミニウムクロリド、エチルアルミニウムセスキクロリド、エチルシクロヘキシルアルミニウムクロリド、ジシクロヘキシルアルミニウムクロリド、ジオクチルアルミニウムクロリド、トリス（ペンタフルオロフェニル）アルミニウム、及びトリス（ノナフルオロビフェニル）アルミニウム等のハロゲン化アルミニウム化合物が挙げられる。

【手続補正3】

【補正対象書類名】明細書

【補正対象項目名】0152

【補正方法】変更

【補正の内容】

【0152】

【化2】

