(19) 대한민국특허청(KR)
(12) 공개특허공보(A)

(11) 공개번호 10-2024-0165353
(43) 공개일자 2024년11월22일

(51) 국제특허분류(Int. Cl.)
C07F 17/00 (2006.01) *B01J 31/14* (2006.01)
B01J 31/18 (2006.01) *C07F 9/535* (2006.01)
C08F 10/02 (2006.01) *C08F 110/02* (2006.01)
C08F 2/38 (2006.01) *C08F 210/14* (2006.01)
C08F 210/16 (2006.01) *C08F 4/659* (2006.01)
C08F 4/6592 (2006.01)
(52) CPC특허분류
C07F 17/00 (2013.01)
B01J 31/143 (2013.01)
(21) 출원번호 10-2024-7031335
(22) 출원일자(국제) 2023년03월21일
심사청구일자 없음
(85) 번역문제출일자 2024년09월20일
(86) 국제출원번호 PCT/IB2023/052757
(87) 국제공개번호 WO 2023/187552
국제공개일자 2023년10월05일
(30) 우선권주장
63/322,409 2022년03월22일 미국(US)
63/344,881 2022년05월23일 미국(US)

(71) 출원인
노바 케미컬즈 (인터내셔널) 소시에테 아노님
스위스연방공화국 프리부르크 1700 애브뉴 드 라 가르 14
(72) 발명자
판 쳉
캐나다 앨버타 티3케이 6에이치8 캘거리 파나마운트 마노르 노스웨스트 132
카터 찰스
캐나다 앨버타 티3에이 6엘7 캘거리 히든 크릭 로드 노스웨스트 142
(뒷면에 계속)
(74) 대리인
특허법인차

전체 청구항 수 : 총 193 항

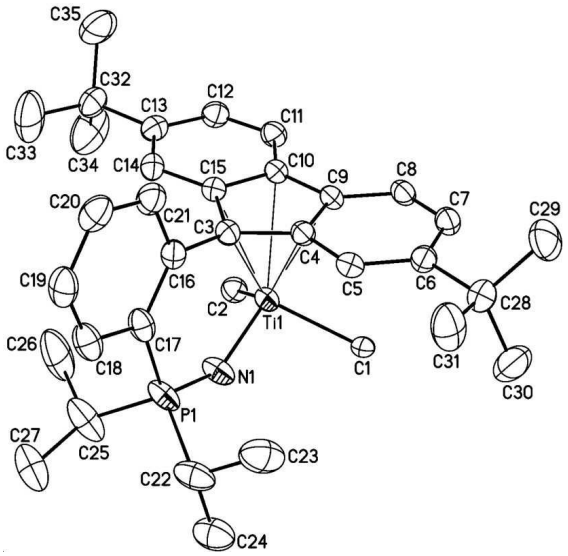
(54) 발명의 명칭 **유기금속 복합체, 올레핀 중합 촉매 시스템 및 중합 공정**

(57) 요 약

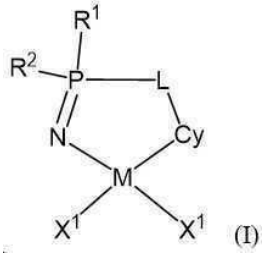
올레핀 중합 촉매 시스템의 일부를 형성할 수 있는 예비중합 촉매로서 유용한 유기금속 복합체가 기술된다. 촉매

(뒷면에 계속)

대 표 도 - 도3



시스템은 에틸렌의 중합에, 선택적으로 하나 이상의 C_{3-12} 알파-올레핀 공단량체와 함께 사용될 수 있다. 유기금속 복합체는 다음 화학식 I로 광범위하게 표현된다:



(I)

여기서, L은 Cy와 P를 연결하는 원자의 근접한 사슬을 함유하는 가교 기로서, 여기서 근접한 사슬은 2개 또는 3개의 원자를 함유하고, Cy는 사이클로펜타디에닐형 리간드이다. 올레핀 중합 촉매 시스템은 고온의 용액상 중합 공정에서 알파-올레핀과 에틸렌을 중합하는 데 효과적이며, 고분자량 및 높은 알파-올레핀 혼입도를 갖는 에틸렌 공중합체를 생성한다. 예비금속화 화합물, 금속화 공정 및 유기금속 복합체를 제조하는 합성 방법뿐만 아니라 중합 공정도 기술된다.

(52) CPC특허분류
C07F 9/5355 (2013.01)
C08F 10/02 (2013.01)
C08F 110/02 (2013.01)
C08F 2/38 (2013.01)
C08F 210/14 (2013.01)
C08F 210/16 (2013.01)
C08F 4/65908 (2013.01)
C08F 4/65912 (2013.01)
C08F 4/6592 (2013.01)

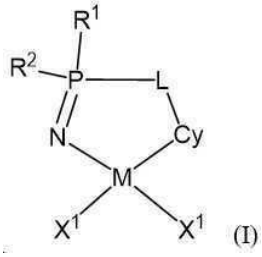
(72) 발명자
모리슨 대릴
캐나다 앨버타 티2엠 3엑스8 캘거리 22에이 스트리트 노스웨스트 2421
가오 시아올리앙
캐나다 앨버타 티3엘 2엔7 캘거리 블레이저 에스테이츠 릿지 78
괴텔 제임스 티
캐나다 앨버타 티2케이 2엔8 캘거리 놀란 로드 노스웨스트 5028
크루즈-밀레트 데이지
캐나다 앨버타 티2엘 2엘5 캘거리 37번 스트리트 노스웨스트 4501 에이302
치우 프레데릭
캐나다 앨버타 티3이 0비1 캘거리 17번 애비뉴 사우스웨스트 2909 704

명 세 서

청구범위

청구항 1

화학식 I로 표현되는 유기금속 복합체:



(I)

여기서,

M은 Ti, Zr 또는 Hf이고;

R^1 및 R^2는 각각 독립적으로 수소 및 R^X로 이루어진 군 중에서 선택되거나; 또는 R^1 및 R^2는 이들이 부착된 P 원자와 함께, 비치환되거나, 또는 할로겐 원자, C_{1-20} 알킬 기, C_{1-20} 알콕시 기, C_{7-20} 알킬아릴 기, C_{7-20} 아릴알킬 기, C_{6-20} 아릴 기, C_{6-20} 아릴옥시 기, C_{7-20} 알킬아릴옥시 기, 및 C_{7-20} 아릴알킬옥시 기로 이루어진 군 중에서 선택되는 하나 이상의 치환체에 의해 추가로 치환되는 3-10원 헤테로환형 기를 형성하며;

각 R^X는 할로겐 원자; 하이드로카르빌 기가 비치환되거나, 또는 하나 이상의 할로겐 원자, C_{1-20} 알킬 기, C_{1-20} 알콕시 기, C_{7-20} 알킬아릴 기, C_{7-20} 아릴알킬 기, C_{6-20} 아릴 기, C_{6-20} 아릴옥시 기, C_{7-20} 알킬아릴옥시 기, 및/또는 C_{7-20} 아릴알킬옥시 기에 의해 추가로 치환되는 C_{1-30} 하이드로카르빌 기; 화학식 $-NR'_2$의 아미도 기; 화학식 $-Si(R^a)_3$의 실릴 기; 화학식 $-Ge(R^a)_3$의 게르마닐 기; 및 화학식 $-N=P(R^b)(R^c)(R^d)$의 포스핀이민 기로 이루어진 군 중에서 독립적으로 선택되고; 여기서 각 R'는 수소, C_{1-20} 알킬 기, 및 C_{6-20} 아릴 기로 이루어지는 군 중에서 독립적으로 선택되고; 각 R^a는 수소, C_{1-8} 알킬 기, C_{1-8} 알콕시 기, C_{6-20} 아릴옥시 기 및 C_{6-20} 아릴 기로 이루어진 군 중에서 독립적으로 선택되고; R^b, R^c, R^d는 각각 독립적으로 C_{1-20} 알킬 기이며;

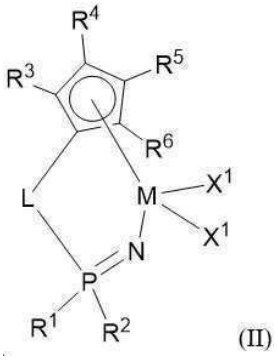
각 X^1은 활성화 가능한 리간드이고;

Cy는 L에 공유 결합되고 η-결합을 통해 M에 배위된 사이클로펜타디에닐형 리간드이고; 그리고

L은 Cy와 P를 연결하는 원자의 근접한 사슬을 함유하는 가교 기로서, 여기서 근접한 사슬은 2개 또는 3개의 원자를 함유함.

청구항 2

제1항에 있어서, 화학식 II로 표현되는, 유기금속 복합체:



(II)

여기서, R^3, R^4, R^5 및 R^6은 각각 독립적으로 다음으로 이루어진 군 중에서 선택되고:

할로겐;

수소;

C_{1-30} 하이드로카르빌 기로서, 여기서 하이드로카르빌 기는 비치환되거나, 또는 할로겐 원자, C_{1-20} 알킬 기, C_{1-20} 알콕시 기, C_{7-20} 알킬아릴 기, C_{7-20} 아릴알킬 기, C_{6-20} 아릴 기, C_{6-20} 아릴옥시 기, C_{7-20} 알킬아릴옥시 기, 및 C_{7-20} 아릴알킬옥시 기로 이루어지는 군 중에서 선택되는 하나 이상의 치환체에 의해 추가로 치환되는 C_{1-30} 하이드로카르빌 기;

헤테로원자 함유 C_{1-30} 하이드로카르빌 기로서, 여기서 헤테로원자 함유 하이드로카르빌 기는 비치환되거나, 또는 할로겐 원자, C_{1-20} 알킬 기, C_{1-20} 알콕시 기, C_{7-20} 알킬아릴 기, C_{7-20} 아릴알킬 기, C_{6-20} 아릴 기, C_{6-20} 아릴옥시 기, C_{7-20} 알킬아릴옥시 기, 및 C_{7-20} 아릴알킬옥시 기로 이루어지는 군 중에서 선택되는 하나 이상의 치환체에 의해 추가로 치환되는 헤테로원자 함유 C_{1-30} 하이드로카르빌 기;

옥시 기, -OR';

아미도 기, $-NR'_2$;

포스피도 기, $-PR'_2$;

티올레이트 기, -SR';

화학식 $-Si(R^a)_3$의 실릴 기; 및

화학식 $-Ge(R^a)_3$의 게르마닐 기;

여기서, R^3, R^4, R^5 및 R^6 중 2개의 인접한 기는 선택적으로 결합되어 환형 하이드로카르빌 기 또는 환형 헤테로원자 함유 하이드로카르빌 기를 형성할 수 있고, 상기 환형 하이드로카르빌 기 또는 환형 헤테로원자 함유 하이드로카르빌 기는 비치환되거나, 또는 할로겐 원자, C_{1-20} 알킬 기, C_{1-20} 알콕시 기, C_{7-20} 알킬아릴 기, C_{7-20} 아릴알킬 기, C_{6-20} 아릴 기, C_{6-20} 아릴옥시 기, C_{7-20} 알킬아릴옥시 기, C_{7-20} 아릴알킬옥시 기, 화학식 $-NR'_2$의 아미도 기, 화학식 $-PR'_2$의 포스피도 기, 화학식 -SR'의 티올레이트 기, 화학식 $-Si(R^a)_3$의 실릴 기, 및 화학식 $-Ge(R^a)_3$의 게르마닐 기로 이루어지는 군 중에서 선택되는 하나 이상의 치환체에 의해 추가로 치환되고;

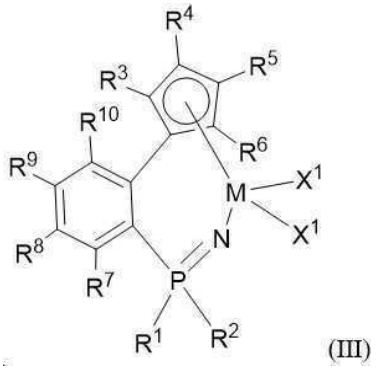
여기서 각 R'는 수소, C_{1-20} 알킬 기, 및 C_{6-20} 아릴 기로 이루어지는 군 중에서 독립적으로 선택되고;

여기서 각 R^a는 수소, C_{1-8} 알킬 기, C_{1-8} 알콕시 기, C_{6-20} 아릴옥시 기 및 C_{6-20} 아릴 기로 이루어지는 군 중에서

독립적으로 선택됨.

청구항 3

제2항에 있어서, 화학식 III으로 표현되는, 유기금속 복합체:



(III)

여기서, R^7, R^8, R^9, 및 R^{10}은 각각 독립적으로 다음으로 이루어진 군 중에서 선택되고:

할로겐;

수소;

C_{1-30} 하이드로카르빌 기로서, 여기서 하이드로카르빌 기는 비치환되거나, 또는 할로겐 원자, C_{1-20} 알킬 기, C_{1-20} 알콕시 기, C_{7-20} 알킬아릴 기, C_{7-20} 아릴알킬 기, C_{6-20} 아릴 기, C_{6-20} 아릴옥시 기, C_{7-20} 알킬아릴옥시 기, 및 C_{7-20} 아릴알킬옥시 기로 이루어지는 군 중에서 선택되는 하나 이상의 치환체에 의해 추가로 치환되는 C_{1-30} 하이드로카르빌 기;

헤테로원자 함유 C_{1-30} 하이드로카르빌 기로서, 여기서 헤테로원자 함유 하이드로카르빌 기는 비치환되거나, 또는 할로겐 원자, C_{1-20} 알킬 기, C_{1-20} 알콕시 기, C_{7-20} 알킬아릴 기, C_{7-20} 아릴알킬 기, C_{6-20} 아릴 기, C_{6-20} 아릴옥시 기, C_{7-20} 알킬아릴옥시 기, 및 C_{7-20} 아릴알킬옥시 기로 이루어지는 군 중에서 선택되는 하나 이상의 치환체에 의해 추가로 치환되는 헤테로원자 함유 C_{1-30} 하이드로카르빌 기;

옥시 기, -OR';

아미도 기, $-NR'_2$;

포스피도 기, $-PR'_2$;

티올레이트 기, -SR';

화학식 $-Si(R^a)_3$의 실릴 기; 및

화학식 $-Ge(R^a)_3$의 게르마닐 기;

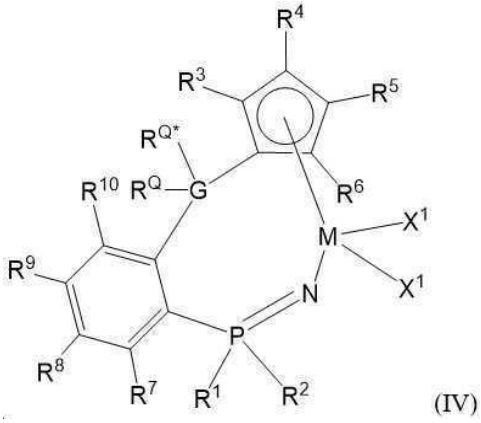
여기서, R^7, R^8, R^9, 및 R^{10} 중 2개의 인접한 기는 선택적으로 결합되어 환형 하이드로카르빌 기 또는 환형 헤테로원자 함유 하이드로카르빌 기를 형성할 수 있고, 상기 환형 하이드로카르빌 기 또는 환형 헤테로원자 함유 하이드로카르빌 기는 비치환되거나, 또는 할로겐 원자, C_{1-20} 알킬 기, C_{1-20} 알콕시 기, C_{7-20} 알킬아릴 기, C_{7-20} 아릴알킬 기, C_{6-20} 아릴 기, C_{6-20} 아릴옥시 기, C_{7-20} 알킬아릴옥시 기, C_{7-20} 아릴알킬옥시 기, 화학식 $-NR'_2$의 아미도 기, 화학식 $-PR'_2$의 포스피도 기, 화학식 -SR'의 티올레이트 기, 화학식 $-Si(R^a)_3$의 실릴 기, 및 화학식 $-Ge(R^a)_3$의 게르마닐 기로 이루어지는 군 중에서 선택되는 하나 이상의 치환체에 의해 추가로 치환되고;

여기서 각 R'는 수소, C_{1-20} 알킬 기, 및 C_{6-20} 아릴 기로 이루어지는 군 중에서 독립적으로 선택되고;

여기서 각 R^a는 수소, C_{1-8} 알킬 기, C_{1-8} 알콕시 기, C_{6-20} 아릴옥시 기 및 C_{6-20} 아릴 기로 이루어지는 군 중에서 독립적으로 선택됨.

청구항 4

제2항에 있어서, 화학식 IV로 표현되는, 유기금속 복합체:



(IV)

여기서, G는 C 또는 Si이고;

여기서, R^Q 및 R^{Q*}는 각각 독립적으로 다음으로 이루어진 군 중에서 선택되며:

할로겐;

수소;

C_{1-30} 하이드로카르빌 기로서, 여기서 하이드로카르빌 기는 비치환되거나, 또는 할로겐 원자, C_{1-20} 알킬 기, C_{1-20} 알콕시 기, C_{7-20} 알킬아릴 기, C_{7-20} 아릴알킬 기, C_{6-20} 아릴 기, C_{6-20} 아릴옥시 기, C_{7-20} 알킬아릴옥시 기, 및 C_{7-20} 아릴알킬옥시 기로 이루어지는 군 중에서 선택되는 하나 이상의 치환체에 의해 추가로 치환되는 C_{1-30} 하이드로카르빌 기;

헤테로원자 함유 C_{1-30} 하이드로카르빌 기로서, 여기서 헤테로원자 함유 하이드로카르빌 기는 비치환되거나, 또는 할로겐 원자, C_{1-20} 알킬 기, C_{1-20} 알콕시 기, C_{7-20} 알킬아릴 기, C_{7-20} 아릴알킬 기, C_{6-20} 아릴 기, C_{6-20} 아릴옥시 기, C_{7-20} 알킬아릴옥시 기, 및 C_{7-20} 아릴알킬옥시 기로 이루어지는 군 중에서 선택되는 하나 이상의 치환체에 의해 추가로 치환되는 헤테로원자 함유 C_{1-30} 하이드로카르빌 기;

여기서, R^Q 및 R^{Q*} 기는 선택적으로 결합되어 환형 하이드로카르빌 기 또는 환형 헤테로원자 함유 하이드로카르빌 기를 형성할 수 있고, 상기 환형 하이드로카르빌 기 또는 환형 헤테로원자 함유 하이드로카르빌 기는 비치환되거나, 또는 할로겐 원자, C_{1-20} 알킬 기, C_{1-20} 알콕시 기, C_{7-20} 알킬아릴 기, C_{7-20} 아릴알킬 기, C_{6-20} 아릴 기, C_{6-20} 아릴옥시 기, C_{7-20} 알킬아릴옥시 기, C_{7-20} 아릴알킬옥시 기, 화학식 $-NR'_2$의 아미도 기, 화학식 $-PR'_2$의 포스피도 기, 화학식 $-SR'$의 티올레이트 기, 화학식 $-Si(R^a)_3$의 실릴 기, 및 화학식 $-Ge(R^a)_3$의 게르마닐 기로 이루어지는 군 중에서 선택되는 하나 이상의 치환체에 의해 추가로 치환되며;

여기서, R^7, R^8, R^9, 및 R^{10}은 각각 독립적으로 다음으로 이루어진 군 중에서 선택되고:

할로겐;

수소;

C_{1-30} 하이드로카르빌 기로서, 여기서 하이드로카르빌 기는 비치환되거나, 또는 할로겐 원자, C_{1-20} 알킬 기, C_{1-20} 알콕시 기, C_{7-20} 알킬아릴 기, C_{7-20} 아릴알킬 기, C_{6-20} 아릴 기, C_{6-20} 아릴옥시 기, C_{7-20} 알킬아릴옥시 기, 및 C_{7-

$_{20}$ 아릴알킬옥시 기로 이루어지는 군 중에서 선택되는 하나 이상의 치환체에 의해 추가로 치환되는, C_{1-30} 하이드로카르빌 기;

헤테로원자 함유 C_{1-30} 하이드로카르빌 기로서, 여기서 헤테로원자 함유 하이드로카르빌 기는 비치환되거나, 또는 할로겐 원자, C_{1-20} 알킬 기, C_{1-20} 알콕시 기, C_{7-20} 알킬아릴 기, C_{7-20} 아릴알킬 기, C_{6-20} 아릴 기, C_{6-20} 아릴옥시 기, C_{7-20} 알킬아릴옥시 기, 및 C_{7-20} 아릴알킬옥시 기로 이루어지는 군 중에서 선택되는 하나 이상의 치환체에 의해 추가로 치환되는, 헤테로원자 함유 C_{1-30} 하이드로카르빌 기;

옥시 기, -OR';

아미도 기, $-NR'_2$;

포스피도 기, $-PR'_2$;

티올레이트 기, -SR';

화학식 $-Si(R^a)_3$의 실릴 기; 및

화학식 $-Ge(R^a)_3$의 게르마닐 기;

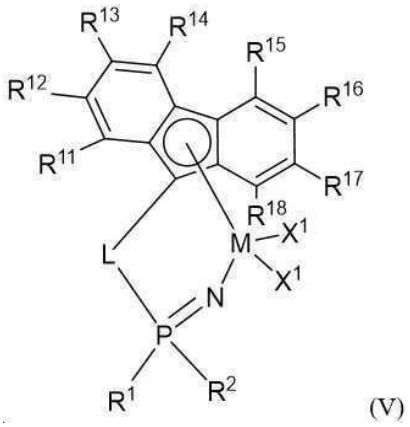
여기서, R^7, R^8, R^9, 및 R^{10} 중 2개의 인접한 기는 선택적으로 결합되어 환형 하이드로카르빌 기 또는 환형 헤테로원자 함유 하이드로카르빌 기를 형성할 수 있고, 상기 환형 하이드로카르빌 기 또는 환형 헤테로원자 함유 하이드로카르빌 기는 비치환되거나, 또는 할로겐 원자, C_{1-20} 알킬 기, C_{1-20} 알콕시 기, C_{7-20} 알킬아릴 기, C_{7-20} 아릴알킬 기, C_{6-20} 아릴 기, C_{6-20} 아릴옥시 기, C_{7-20} 알킬아릴옥시 기, C_{7-20} 아릴알킬옥시 기, 화학식 $-NR'_2$의 아미도 기, 화학식 $-PR'_2$의 포스피도 기, 화학식 -SR'의 티올레이트 기, 화학식 $-Si(R^a)_3$의 실릴 기, 및 화학식 $-Ge(R^a)_3$의 게르마닐 기로 이루어지는 군 중에서 선택되는 하나 이상의 치환체에 의해 추가로 치환되고;

여기서 각 R'는 수소, C_{1-20} 알킬 기, 및 C_{6-20} 아릴 기로 이루어지는 군 중에서 독립적으로 선택되고;

여기서 각 R^a는 수소, C_{1-8} 알킬 기, C_{1-8} 알콕시 기, C_{6-20} 아릴옥시 기 및 C_{6-20} 아릴 기로 이루어지는 군 중에서 독립적으로 선택됨.

청구항 5

제1항에 있어서, 화학식 V로 표현되는, 유기금속 복합체:



(V)

여기서, R^{11}, R^{12}, R^{13}, R^{14}, R^{15}, R^{16}, R^{17}, R^{18}은 각각 독립적으로 다음으로 이루어진 군 중에서 선택되고:

할로겐;

수소;

C_{1-30} 하이드로카르빌 기로서, 여기서 하이드로카르빌 기는 비치환되거나, 또는 할로겐 원자, C_{1-20} 알킬 기, C_{1-20} 알콕시 기, C_{7-20} 알킬아릴 기, C_{7-20} 아릴알킬 기, C_{6-20} 아릴 기, C_{6-20} 아릴옥시 기, C_{7-20} 알킬아릴옥시 기, 및 C_{7-20} 아릴알킬옥시 기로 이루어지는 군 중에서 선택되는 하나 이상의 치환체에 의해 추가로 치환되는, C_{1-30} 하이드로카르빌 기;

헤테로원자 함유 C_{1-30} 하이드로카르빌 기로서, 여기서 헤테로원자 함유 하이드로카르빌 기는 비치환되거나, 또는 할로겐 원자, C_{1-20} 알킬 기, C_{1-20} 알콕시 기, C_{7-20} 알킬아릴 기, C_{7-20} 아릴알킬 기, C_{6-20} 아릴 기, C_{6-20} 아릴옥시 기, C_{7-20} 알킬아릴옥시 기, 및 C_{7-20} 아릴알킬옥시 기로 이루어지는 군 중에서 선택되는 하나 이상의 치환체에 의해 추가로 치환되는, 헤테로원자 함유 C_{1-30} 하이드로카르빌 기;

옥시 기, -OR';

아미도 기, $-NR'_2$;

포스피도 기, $-PR'_2$;

티올레이트 기, -SR';

화학식 $-Si(R^a)_3$의 실릴 기; 및

화학식 $-Ge(R^a)_3$의 게르마닐 기;

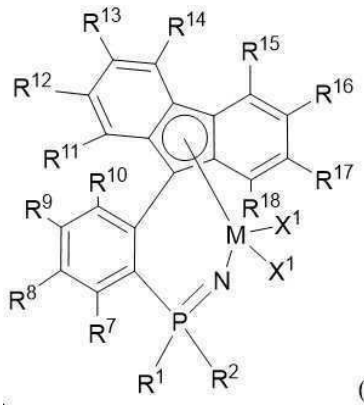
여기서, R^{11}, R^{12}, R^{13}, R^{14}, R^{15}, R^{16}, R^{17}, R^{18} 중 2개의 인접한 기는 선택적으로 결합되어 환형 하이드로카르빌 기 또는 환형 헤테로원자 함유 하이드로카르빌 기를 형성할 수 있고, 상기 환형 하이드로카르빌 기 또는 환형 헤테로원자 함유 하이드로카르빌 기는 비치환되거나, 또는 할로겐 원자, C_{1-20} 알킬 기, C_{1-20} 알콕시 기, C_{7-20} 알킬아릴 기, C_{7-20} 아릴알킬 기, C_{6-20} 아릴 기, C_{6-20} 아릴옥시 기, C_{7-20} 알킬아릴옥시 기, C_{7-20} 아릴알킬옥시 기, 화학식 $-NR'_2$의 아미도 기, 화학식 $-PR'_2$의 포스피도 기, 화학식 -SR'의 티올레이트 기, 화학식 $-Si(R^a)_3$의 실릴 기, 및 화학식 $-Ge(R^a)_3$의 게르마닐 기로 이루어지는 군 중에서 선택되는 하나 이상의 치환체에 의해 추가로 치환되고;

여기서 각 R'는 수소, C_{1-20} 알킬 기, 및 C_{6-20} 아릴 기로 이루어지는 군 중에서 독립적으로 선택되고;

여기서 각 R^a는 수소, C_{1-8} 알킬 기, C_{1-8} 알콕시 기, C_{6-20} 아릴옥시 기 및 C_{6-20} 아릴 기로 이루어지는 군 중에서 독립적으로 선택됨.

청구항 6

제5항에 있어서, 화학식 VI으로 표현되는, 유기금속 복합체:



(VI)

여기서, R^7, R^8, R^9, 및 R^{10}은 각각 독립적으로 다음으로 이루어진 군 중에서 선택되고:

할로겐;

수소;

C_{1-30} 하이드로카르빌 기로서, 여기서 하이드로카르빌 기는 비치환되거나, 또는 할로겐 원자, C_{1-20} 알킬 기, C_{1-20} 알콕시 기, C_{7-20} 알킬아릴 기, C_{7-20} 아릴알킬 기, C_{6-20} 아릴 기, C_{6-20} 아릴옥시 기, C_{7-20} 알킬아릴옥시 기, 및 C_{7-20} 아릴알킬옥시 기로 이루어지는 군 중에서 선택되는 하나 이상의 치환체에 의해 추가로 치환되는, C_{1-30} 하이드로카르빌 기;

헤테로원자 함유 C_{1-30} 하이드로카르빌 기로서, 여기서 헤테로원자 함유 하이드로카르빌 기는 비치환되거나, 또는 할로겐 원자, C_{1-20} 알킬 기, C_{1-20} 알콕시 기, C_{7-20} 알킬아릴 기, C_{7-20} 아릴알킬 기, C_{6-20} 아릴 기, C_{6-20} 아릴옥시 기, C_{7-20} 알킬아릴옥시 기, 및 C_{7-20} 아릴알킬옥시 기로 이루어지는 군 중에서 선택되는 하나 이상의 치환체에 의해 추가로 치환되는, 헤테로원자 함유 C_{1-30} 하이드로카르빌 기;

옥시 기, -OR';

아미도 기, $-NR'_2$;

포스피도 기, $-PR'_2$;

티올레이트 기, -SR';

화학식 $-Si(R^a)_3$의 실릴 기; 및

화학식 $-Ge(R^a)_3$의 게르마닐 기;

여기서, R^7, R^8, R^9, 및 R^{10} 중 2개의 인접한 기는 선택적으로 결합되어 환형 하이드로카르빌 기 또는 환형 헤테로원자 함유 하이드로카르빌 기를 형성할 수 있고, 상기 환형 하이드로카르빌 기 또는 환형 헤테로원자 함유 하이드로카르빌 기는 비치환되거나, 또는 할로겐 원자, C_{1-20} 알킬 기, C_{1-20} 알콕시 기, C_{7-20} 알킬아릴 기, C_{7-20} 아릴알킬 기, C_{6-20} 아릴 기, C_{6-20} 아릴옥시 기, C_{7-20} 알킬아릴옥시 기, C_{7-20} 아릴알킬옥시 기, 화학식 $-NR'_2$의 아미도 기, 화학식 $-PR'_2$의 포스피도 기, 화학식 -SR'의 티올레이트 기, 화학식 $-Si(R^a)_3$의 실릴 기, 및 화학식 $-Ge(R^a)_3$의 게르마닐 기로 이루어지는 군 중에서 선택되는 하나 이상의 치환체에 의해 추가로 치환되고;

여기서 각 R'는 수소, C_{1-20} 알킬 기, 및 C_{6-20} 아릴 기로 이루어지는 군 중에서 독립적으로 선택되고;

여기서 각 R^a는 수소, C_{1-8} 알킬 기, C_{1-8} 알콕시 기, C_{6-20} 아릴옥시 기 및 C_{6-20} 아릴 기로 이루어지는 군 중에서 독립적으로 선택됨.

청구항 7

제6항에 있어서, M이 Ti인, 유기금속 복합체.

청구항 8

제6항에 있어서, R^7, R^8, R^9, 및 R^{10}이 각각 수소인, 유기금속 복합체.

청구항 9

제6항에 있어서, R^1 및 R^2가 각각 독립적으로 비치환된 C_{1-30} 하이드로카르빌 기인, 유기금속 복합체.

청구항 10

제9항에 있어서, R^1 및 R^2가 각각 독립적으로 이소프로필, 사이클로헥실 및 *tert*-부틸로 이루어지는 군 중에서 선택되는, 유기금속 복합체.

청구항 11

제6항에 있어서, R^{12} 및 R^{17}이 각각 독립적으로 비치환된 C_{1-30} 하이드로카르빌 기이고, R^{11}, R^{13}, R^{14}, R^{15}, R^{16}, 및 R^{18}이 각각 수소인, 유기금속 복합체.

청구항 12

제11항에 있어서, R^{12} 및 R^{17}이 각각 *tert*-부틸 기인, 유기금속 복합체.

청구항 13

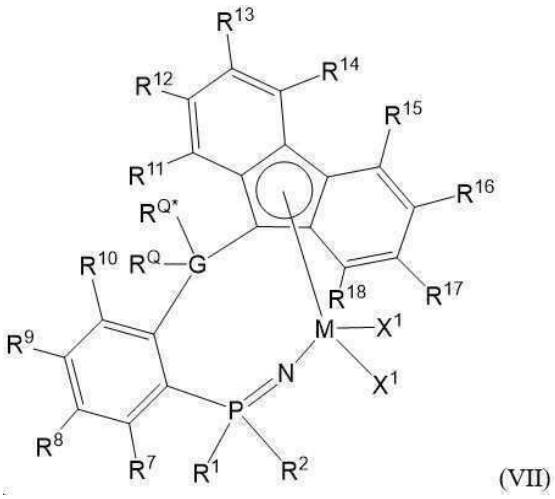
제6항에 있어서, 각 X^1이 C_{1-6} 알킬 기, C_{7-10} 아릴알킬 기, 및 할로겐으로 이루어지는 군 중에서 독립적으로 선택되는, 유기금속 복합체.

청구항 14

제13항에 있어서, 각 X^1이 메틸 기 및 Cl로 이루어지는 군 중에서 독립적으로 선택되는, 유기금속 복합체.

청구항 15

제5항에 있어서, 화학식 VII로 표현되는, 유기금속 복합체:



(VII)

여기서, G는 C 또는 Si이고;

여기서, R^{Q} 및 R^{Q*}는 각각 독립적으로 다음으로 이루어진 군 중에서 선택되며:

할로겐;

수소;

C_{1-30} 하이드로카르빌 기로서, 여기서 하이드로카르빌 기는 비치환되거나, 또는 할로겐 원자, C_{1-20} 알킬 기, C_{1-20} 알콕시 기, C_{7-20} 알킬아릴 기, C_{7-20} 아릴알킬 기, C_{6-20} 아릴 기, C_{6-20} 아릴옥시 기, C_{7-20} 알킬아릴옥시 기, 및 C_{7-20} 아릴알킬옥시 기로 이루어지는 군 중에서 선택되는 하나 이상의 치환체에 의해 추가로 치환되는 C_{1-30} 하이드로카르빌 기;

헤테로원자 함유 C_{1-30} 하이드로카르빌 기로서, 여기서 헤테로원자 함유 하이드로카르빌 기는 비치환되거나, 또는 할로겐 원자, C_{1-20} 알킬 기, C_{1-20} 알콕시 기, C_{7-20} 알킬아릴 기, C_{7-20} 아릴알킬 기, C_{6-20} 아릴 기, C_{6-20} 아릴옥시 기, C_{7-20} 알킬아릴옥시 기, 및 C_{7-20} 아릴알킬옥시 기로 이루어지는 군 중에서 선택되는 하나 이상의 치환체에 의해 추가로 치환되는 헤테로원자 함유 C_{1-30} 하이드로카르빌 기;

여기서, R^{Q} 및 R^{Q*} 기는 선택적으로 결합되어 환형 하이드로카르빌 기 또는 환형 헤테로원자 함유 하이드로카르빌 기를 형성할 수 있고, 상기 환형 하이드로카르빌 기 또는 환형 헤테로원자 함유 하이드로카르빌 기는 비치환되거나, 또는 할로겐 원자, C_{1-20} 알킬 기, C_{1-20} 알콕시 기, C_{7-20} 알킬아릴 기, C_{7-20} 아릴알킬 기, C_{6-20} 아릴 기, C_{6-20} 아릴옥시 기, C_{7-20} 알킬아릴옥시 기, C_{7-20} 아릴알킬옥시 기, 화학식 $-NR'_2$의 아미도 기; 화학식 $-PR'_2$의 포스피도 기, 화학식 -SR'의 티올레이트 기, 화학식 $-Si(R^{a})_3$의 실릴 기, 및 화학식 $-Ge(R^{a})_3$의 게르마닐 기로 이루어지는 군 중에서 선택되는 하나 이상의 치환체에 의해 추가로 치환되며;

여기서, R^{7}, R^{8}, R^{9}, 및 R^{10}은 각각 독립적으로 다음으로 이루어진 군 중에서 선택되고:

할로겐;

수소;

C_{1-30} 하이드로카르빌 기로서, 여기서 하이드로카르빌 기는 비치환되거나, 또는 할로겐 원자, C_{1-20} 알킬 기, C_{1-20} 알콕시 기, C_{7-20} 알킬아릴 기, C_{7-20} 아릴알킬 기, C_{6-20} 아릴 기, C_{6-20} 아릴옥시 기, C_{7-20} 알킬아릴옥시 기, 및 C_{7-20} 아릴알킬옥시 기로 이루어지는 군 중에서 선택되는 하나 이상의 치환체에 의해 추가로 치환되는, C_{1-30} 하이드

로카르빌 기;

헤테로원자 함유 C_{1-30} 하이드로카르빌 기로서, 여기서 헤테로원자 함유 하이드로카르빌 기는 비치환되거나, 또는 할로겐 원자, C_{1-20} 알킬 기, C_{1-20} 알콕시 기, C_{7-20} 알킬아릴 기, C_{7-20} 아릴알킬 기, C_{6-20} 아릴 기, C_{6-20} 아릴옥시 기, C_{7-20} 알킬아릴옥시 기, 및 C_{7-20} 아릴알킬옥시 기로 이루어지는 군 중에서 선택되는 하나 이상의 치환체에 의해 추가로 치환되는, 헤테로원자 함유 C_{1-30} 하이드로카르빌 기;

옥시 기, -OR';

아미도 기, $-NR'_2$;

포스피도 기, $-PR'_2$;

티올레이트 기, -SR';

화학식 $-Si(R^a)_3$의 실릴 기; 및

화학식 $-Ge(R^a)_3$의 게르마닐 기;

여기서, R^7, R^8, R^9, 및 R^{10} 중 2개의 인접한 기는 선택적으로 결합되어 환형 하이드로카르빌 기 또는 환형 헤테로원자 함유 하이드로카르빌 기를 형성할 수 있고, 상기 환형 하이드로카르빌 기 또는 환형 헤테로원자 함유 하이드로카르빌 기는 비치환되거나, 또는 할로겐 원자, C_{1-20} 알킬 기, C_{1-20} 알콕시 기, C_{7-20} 알킬아릴 기, C_{7-20} 아릴알킬 기, C_{6-20} 아릴 기, C_{6-20} 아릴옥시 기, C_{7-20} 알킬아릴옥시 기, C_{7-20} 아릴알킬옥시 기, 화학식 $-NR'_2$의 아미도 기, 화학식 $-PR'_2$의 포스피도 기, 화학식 -SR'의 티올레이트 기, 화학식 $-Si(R^a)_3$의 실릴 기, 및 화학식 $-Ge(R^a)_3$의 게르마닐 기로 이루어지는 군 중에서 선택되는 하나 이상의 치환체에 의해 추가로 치환되고;

여기서 각 R'는 수소, C_{1-20} 알킬 기, 및 C_{6-20} 아릴 기로 이루어지는 군 중에서 독립적으로 선택되고;

여기서 각 R^a는 수소, C_{1-8} 알킬 기, C_{1-8} 알콕시 기, C_{6-20} 아릴옥시 기 및 C_{6-20} 아릴 기로 이루어지는 군 중에서 독립적으로 선택됨.

청구항 16

제15항에 있어서, M이 Ti인, 유기금속 복합체.

청구항 17

제15항에 있어서, R^7, R^8, R^9, 및 R^{10}이 각각 수소인, 유기금속 복합체.

청구항 18

제15항에 있어서, R^1 및 R^2가 각각 독립적으로 비치환된 C_{1-30} 하이드로카르빌 기인, 유기금속 복합체.

청구항 19

제18항에 있어서, R^1 및 R^2가 각각 독립적으로 이소프로필, 사이클로헥실 및 *tert*-부틸로 이루어지는 군 중에서 선택되는, 유기금속 복합체.

청구항 20

제15항에 있어서, R^{12} 및 R^{17}이 각각 독립적으로 비치환된 C_{1-30} 하이드로카르빌 기이고, R^{11}, R^{13}, R^{14}, R^{15}, R^{16}, 및 R^{18}은 각각 수소인, 유기금속 복합체.

청구항 21

제20항에 있어서, R^{12} 및 R^{17}이 각각 *tert*-부틸 기인, 유기금속 복합체.

청구항 22

제15항에 있어서, G가 탄소인, 유기금속 복합체.

청구항 23

제22항에 있어서, R^{Q} 및 R^{Q*} 기가 각각 독립적으로 수소, C_{1-20} 알킬 기, 및 C_{6-20} 아릴 기로 이루어지는 군 중에서 선택되는, 유기금속 복합체.

청구항 24

제22항에 있어서, R^{Q}가 수소이고, R^{Q*}가 C_{1-8} 알킬 기인, 유기금속 복합체.

청구항 25

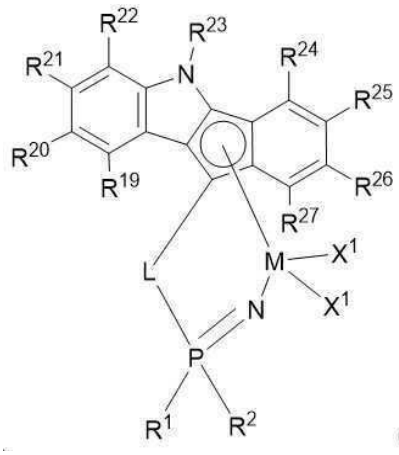
제15항에 있어서, 각 X^{1}이 독립적으로 C_{1-6} 알킬 기, C_{7-10} 아릴알킬 기, 및 할로겐으로 이루어지는 군 중에서 선택되는, 유기금속 복합체.

청구항 26

제25항에 있어서, 각 X^{1}이 독립적으로 메틸 기 및 Cl로 이루어지는 군 중에서 선택되는, 유기금속 복합체.

청구항 27

제1항에 있어서, 화학식 VIII로 표현되는, 유기금속 복합체:



(VIII)

여기서, R^{23}은 다음으로 이루어진 군 중에서 선택되며:

수소;

C_{1-30} 하이드로카르빌 기로서, 여기서 하이드로카르빌 기는 비치환되거나, 또는 할로겐 원자, C_{1-20} 알킬 기, C_{1-20} 알콕시 기, C_{7-20} 알킬아릴 기, C_{7-20} 아릴알킬 기, C_{6-20} 아릴 기, C_{6-20} 아릴옥시 기, C_{7-20} 알킬아릴옥시 기, 및 C_{7-20} 아릴알킬옥시 기로 이루어지는 군 중에서 선택되는 하나 이상의 치환체에 의해 추가로 치환되는 C_{1-30} 하이드로카르빌 기;

헤테로원자 함유 C_{1-30} 하이드로카르빌 기로서, 여기서 헤테로원자 함유 하이드로카르빌 기는 비치환되거나, 또는 할로겐 원자, C_{1-20} 알킬 기, C_{1-20} 알콕시 기, C_{7-20} 알킬아릴 기, C_{7-20} 아릴알킬 기, C_{6-20} 아릴 기, C_{6-20} 아릴옥시

기, C_{7-20} 알킬아릴옥시 기, 및 C_{7-20} 아릴알킬옥시 기로 이루어지는 군 중에서 선택되는 하나 이상의 치환체에 의해 추가로 치환되는 헤테로원자 함유 C_{1-30} 하이드로카르빌 기;

여기서, R^{19}, R^{20}, R^{21}, R^{22}, R^{24}, R^{25}, R^{26}, 및 R^{27}은 각각 독립적으로 다음으로 이루어진 군 중에서 선택되고:

할로겐;

수소;

C_{1-30} 하이드로카르빌 기로서, 여기서 하이드로카르빌 기는 비치환되거나, 또는 할로겐 원자, C_{1-20} 알킬 기, C_{1-20} 알콕시 기, C_{7-20} 알킬아릴 기, C_{7-20} 아릴알킬 기, C_{6-20} 아릴 기, C_{6-20} 아릴옥시 기, C_{7-20} 알킬아릴옥시 기, 및 C_{7-20} 아릴알킬옥시 기로 이루어지는 군 중에서 선택되는 하나 이상의 치환체에 의해 추가로 치환되는, C_{1-30} 하이드로카르빌 기;

헤테로원자 함유 C_{1-30} 하이드로카르빌 기로서, 여기서 헤테로원자 함유 하이드로카르빌 기는 비치환되거나, 또는 할로겐 원자, C_{1-20} 알킬 기, C_{1-20} 알콕시 기, C_{7-20} 알킬아릴 기, C_{7-20} 아릴알킬 기, C_{6-20} 아릴 기, C_{6-20} 아릴옥시 기, C_{7-20} 알킬아릴옥시 기, 및 C_{7-20} 아릴알킬옥시 기로 이루어지는 군 중에서 선택되는 하나 이상의 치환체에 의해 추가로 치환되는, 헤테로원자 함유 C_{1-30} 하이드로카르빌 기;

옥시 기, -OR';

아미도 기, $-NR'_2$;

포스피도 기, $-PR'_2$;

티올레이트 기, -SR';

화학식 $-Si(R^a)_3$의 실릴 기; 및

화학식 $-Ge(R^a)_3$의 게르마닐 기;

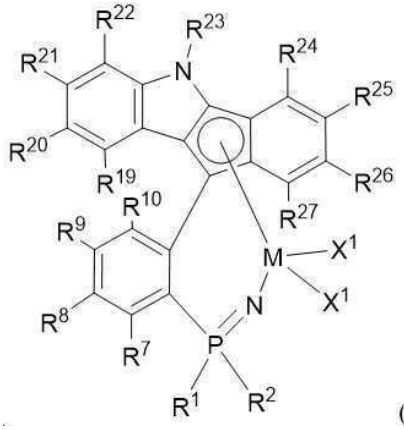
여기서, R^{19}, R^{20}, R^{21}, R^{22}, R^{24}, R^{25}, R^{26}, 및 R^{27} 중 2개의 인접한 기는 선택적으로 결합되어 환형 하이드로카르빌 기 또는 환형 헤테로원자 함유 하이드로카르빌 기를 형성할 수 있고, 상기 환형 하이드로카르빌 기 또는 환형 헤테로원자 함유 하이드로카르빌 기는 비치환되거나, 또는 할로겐 원자, C_{1-20} 알킬 기, C_{1-20} 알콕시 기, C_{7-20} 알킬아릴 기, C_{7-20} 아릴알킬 기, C_{6-20} 아릴 기, C_{6-20} 아릴옥시 기, C_{7-20} 알킬아릴옥시 기, C_{7-20} 아릴알킬옥시 기, 화학식 $-NR'_2$의 아미도 기, 화학식 $-PR'_2$의 포스피도 기, 화학식 -SR'의 티올레이트 기, 화학식 $-Si(R^a)_3$의 실릴 기, 및 화학식 $-Ge(R^a)_3$의 게르마닐 기로 이루어지는 군 중에서 선택되는 하나 이상의 치환체에 의해 추가로 치환되고;

여기서 각 R'는 수소, C_{1-20} 알킬 기, 및 C_{6-20} 아릴 기로 이루어지는 군 중에서 독립적으로 선택되고;

여기서 각 R^a는 수소, C_{1-8} 알킬 기, C_{1-8} 알콕시 기, C_{6-20} 아릴옥시 기 및 C_{6-20} 아릴 기로 이루어지는 군 중에서 독립적으로 선택됨.

청구항 28

제27항에 있어서, 화학식 IX로 표현되는, 유기금속 복합체:



(IX)

여기서, R^7, R^8, R^9 및 R^{10}은 각각 독립적으로 다음으로 이루어진 군 중에서 선택되며:

할로겐;

수소;

C_{1-30} 하이드로카르빌 기로서, 여기서 하이드로카르빌 기는 비치환되거나, 또는 할로겐 원자, C_{1-20} 알킬 기, C_{1-20} 알콕시 기, C_{7-20} 알킬아릴 기, C_{7-20} 아릴알킬 기, C_{6-20} 아릴 기, C_{6-20} 아릴옥시 기, C_{7-20} 알킬아릴옥시 기, 및 C_{7-20} 아릴알킬옥시 기로 이루어지는 군 중에서 선택되는 하나 이상의 치환체에 의해 추가로 치환되는 C_{1-30} 하이드로카르빌 기;

헤테로원자 함유 C_{1-30} 하이드로카르빌 기로서, 여기서 헤테로원자 함유 하이드로카르빌 기는 비치환되거나, 또는 할로겐 원자, C_{1-20} 알킬 기, C_{1-20} 알콕시 기, C_{7-20} 알킬아릴 기, C_{7-20} 아릴알킬 기, C_{6-20} 아릴 기, C_{6-20} 아릴옥시 기, C_{7-20} 알킬아릴옥시 기, 및 C_{7-20} 아릴알킬옥시 기로 이루어지는 군 중에서 선택되는 하나 이상의 치환체에 의해 추가로 치환되는 헤테로원자 함유 C_{1-30} 하이드로카르빌 기;

옥시 기, -OR';

아미도 기, $-NR'_2$;

포스피도 기, $-PR'_2$;

티올레이트 기, -SR';

화학식 $-Si(R^a)_3$의 실릴 기; 및

화학식 $-Ge(R^a)_3$의 게르마닐 기;

여기서, R^7, R^8, R^9, 및 R^{10} 중 2개의 인접한 기는 선택적으로 결합되어 환형 하이드로카르빌 기 또는 환형 헤테로원자 함유 하이드로카르빌 기를 형성할 수 있고, 상기 환형 하이드로카르빌 기 또는 환형 헤테로원자 함유 하이드로카르빌 기는 비치환되거나, 또는 할로겐 원자, C_{1-20} 알킬 기, C_{1-20} 알콕시 기, C_{7-20} 알킬아릴 기, C_{7-20} 아릴알킬 기, C_{6-20} 아릴 기, C_{6-20} 아릴옥시 기, C_{7-20} 알킬아릴옥시 기, C_{7-20} 아릴알킬옥시 기, 화학식 $-NR'_2$의 아미도 기, 화학식 $-PR'_2$의 포스피도 기, 화학식 -SR'의 티올레이트 기, 화학식 $-Si(R^a)_3$의 실릴 기, 및 화학식 $-Ge(R^a)_3$의 게르마닐 기로 이루어지는 군 중에서 선택되는 하나 이상의 치환체에 의해 추가로 치환되고;

여기서 각 R'는 수소, C_{1-20} 알킬 기, 및 C_{6-20} 아릴 기로 이루어지는 군 중에서 독립적으로 선택되고;

여기서 각 R^a는 수소, C_{1-8} 알킬 기, C_{1-8} 알콕시 기, C_{6-20} 아릴옥시 기 및 C_{6-20} 아릴 기로 이루어지는 군 중에서 독립적으로 선택됨.

청구항 29

제28항에 있어서, M이 Ti인, 유기금속 복합체.

청구항 30

제28항에 있어서, R^7, R^8, R^9, 및 R^{10}이 각각 수소인, 유기금속 복합체.

청구항 31

제28항에 있어서, R^1 및 R^2가 각각 독립적으로 비치환된 C_{1-30} 하이드로카르빌 기인, 유기금속 복합체.

청구항 32

제31항에 있어서, R^1 및 R^2가 각각 독립적으로 이소프로필, 사이클로헥실 및 *tert*-부틸로 이루어지는 군 중에서 선택되는, 유기금속 복합체.

청구항 33

제28항에 있어서, R^{23}이 비치환된 C_{1-30} 하이드로카르빌 기인, 유기금속 복합체.

청구항 34

제33항에 있어서, R^{23}이 C_{1-8} 알킬 기인, 유기금속 복합체.

청구항 35

제28항에 있어서, R^{20}이 비치환된 C_{1-30} 하이드로카르빌 기인, 유기금속 복합체.

청구항 36

제35항에 있어서, R^{20}이 C_{1-8} 알킬 기인, 유기금속 복합체.

청구항 37

제28항에 있어서, R^{20}이 비치환된 C_{1-30} 하이드로카르빌 기이고, R^{19}, R^{21}, R^{22}, R^{24}, R^{25}, R^{26}, 및 R^{27}이 각각 수소인, 유기금속 복합체.

청구항 38

제37항에 있어서, R^{20}이 C_{1-8} 알킬 기인, 유기금속 복합체.

청구항 39

제28항에 있어서, 각 X^1이 C_{1-6} 알킬 기, C_{7-10} 아릴알킬 기, 및 할로겐으로 이루어지는 군 중에서 독립적으로 선택되는, 유기금속 복합체.

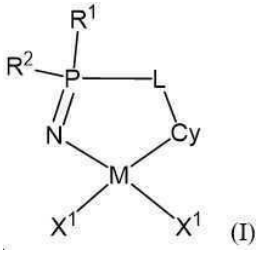
청구항 40

제39항에 있어서, 각 X^1이 메틸 기 및 Cl로 이루어지는 군 중에서 독립적으로 선택되는, 유기금속 복합체.

청구항 41

다음을 포함하는 올레핀 중합 촉매 시스템:

i) 화학식 I로 표현되는 유기금속 복합체;



(I)

여기서,

M은 Ti, Zr 또는 Hf이고;

R^1 및 R^2는 각각 독립적으로 수소 및 R^X로 이루어진 군 중에서 선택되거나; 또는 R^1 및 R^2는 이들이 부착된 P 원자와 함께, 비치환되거나, 또는 할로겐 원자, C_{1-20} 알킬 기, C_{1-20} 알콕시 기, C_{7-20} 알킬아릴 기, C_{7-20} 아릴알킬 기, C_{6-20} 아릴 기, C_{6-20} 아릴옥시 기, C_{7-20} 알킬아릴옥시 기, 및 C_{7-20} 아릴알킬옥시 기로 이루어진 군 중에서 선택되는 하나 이상의 치환체에 의해 추가로 치환되는 3-10원 헤테로환형 기를 형성하며;

각 R^X는 할로겐 원자; 하이드로카르빌 기가 비치환되거나, 또는 하나 이상의 할로겐 원자, C_{1-20} 알킬 기, C_{1-20} 알콕시 기, C_{7-20} 알킬아릴 기, C_{7-20} 아릴알킬 기, C_{6-20} 아릴 기, C_{6-20} 아릴옥시 기, C_{7-20} 알킬아릴옥시 기, 및/또는 C_{7-20} 아릴알킬옥시 기에 의해 추가로 치환되는 C_{1-30} 하이드로카르빌 기; 화학식 $-NR'_2$의 아미도 기; 화학식 $-Si(R^a)_3$의 실릴 기; 화학식 $-Ge(R^a)_3$의 게르마닐 기; 및 화학식 $-N=P(R^b)(R^c)(R^d)$의 포스핀이민 기로 이루어진 군 중에서 독립적으로 선택되고; 여기서 각 R'는 수소, C_{1-20} 알킬 기, 및 C_{6-20} 아릴 기로 이루어지는 군 중에서 독립적으로 선택되고; 각 R^a는 수소, C_{1-8} 알킬 기, C_{1-8} 알콕시 기, C_{6-20} 아릴옥시 기 및 C_{6-20} 아릴 기로 이루어진 군 중에서 독립적으로 선택되고; R^b, R^c, R^d는 각각 독립적으로 C_{1-20} 알킬 기이며;

각 X^1은 활성화 가능한 리간드이고;

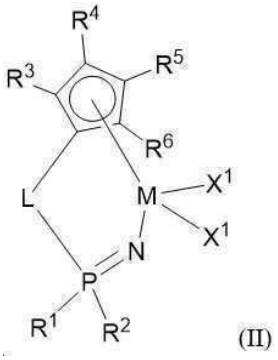
Cy는 L에 공유 결합되고 η-결합을 통해 M에 배위된 사이클로펜타디에닐형 리간드이고; 그리고

L은 Cy와 P를 연결하는 원자의 근접한 사슬을 함유하는 가교 기로서, 여기서 근접한 사슬은 2개 또는 3개의 원자를 함유함; 및

ii) 촉매 활성화제.

청구항 42

제41항에 있어서, 상기 유기금속 복합체가 화학식 II로 표현되는, 올레핀 중합 촉매 시스템:



(II)

여기서, R^3, R^4, R^5 및 R^6은 각각 독립적으로 다음으로 이루어진 군 중에서 선택되고:

할로겐;

수소;

C_{1-30} 하이드로카르빌 기로서, 여기서 하이드로카르빌 기는 비치환되거나, 또는 할로겐 원자, C_{1-20} 알킬 기, C_{1-20} 알콕시 기, C_{7-20} 알킬아릴 기, C_{7-20} 아릴알킬 기, C_{6-20} 아릴 기, C_{6-20} 아릴옥시 기, C_{7-20} 알킬아릴옥시 기, 및 C_{7-20} 아릴알킬옥시 기로 이루어지는 군 중에서 선택되는 하나 이상의 치환체에 의해 추가로 치환되는 C_{1-30} 하이드로카르빌 기;

헤테로원자 함유 C_{1-30} 하이드로카르빌 기로서, 여기서 헤테로원자 함유 하이드로카르빌 기는 비치환되거나, 또는 할로겐 원자, C_{1-20} 알킬 기, C_{1-20} 알콕시 기, C_{7-20} 알킬아릴 기, C_{7-20} 아릴알킬 기, C_{6-20} 아릴 기, C_{6-20} 아릴옥시 기, C_{7-20} 알킬아릴옥시 기, 및 C_{7-20} 아릴알킬옥시 기로 이루어지는 군 중에서 선택되는 하나 이상의 치환체에 의해 추가로 치환되는 헤테로원자 함유 C_{1-30} 하이드로카르빌 기;

옥시 기, -OR';

아미도 기, $-NR'_2$;

포스피도 기, $-PR'_2$;

티올레이트 기, -SR';

화학식 $-Si(R^a)_3$의 실릴 기; 및

화학식 $-Ge(R^a)_3$의 게르마닐 기;

여기서, R^3, R^4, R^5 및 R^6 중 2개의 인접한 기는 선택적으로 결합되어 환형 하이드로카르빌 기 또는 환형 헤테로원자 함유 하이드로카르빌 기를 형성할 수 있고, 상기 환형 하이드로카르빌 기 또는 환형 헤테로원자 함유 하이드로카르빌 기는 비치환되거나, 또는 할로겐 원자, C_{1-20} 알킬 기, C_{1-20} 알콕시 기, C_{7-20} 알킬아릴 기, C_{7-20} 아릴알킬 기, C_{6-20} 아릴 기, C_{6-20} 아릴옥시 기, C_{7-20} 알킬아릴옥시 기, C_{7-20} 아릴알킬옥시 기, 화학식 $-NR'_2$의 아미도 기, 화학식 $-PR'_2$의 포스피도 기, 화학식 -SR'의 티올레이트 기, 화학식 $-Si(R^a)_3$의 실릴 기, 및 화학식 $-Ge(R^a)_3$의 게르마닐 기로 이루어지는 군 중에서 선택되는 하나 이상의 치환체에 의해 추가로 치환되고;

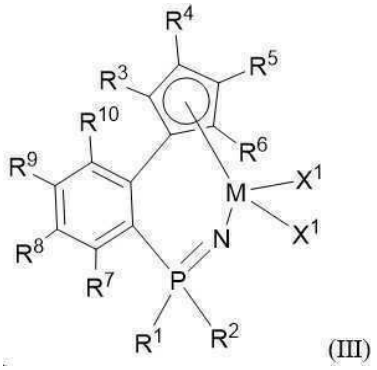
여기서 각 R'는 수소, C_{1-20} 알킬 기, 및 C_{6-20} 아릴 기로 이루어지는 군 중에서 독립적으로 선택되고;

여기서 각 R^a는 수소, C_{1-8} 알킬 기, C_{1-8} 알콕시 기, C_{6-20} 아릴옥시 기 및 C_{6-20} 아릴 기로 이루어지는 군 중에서

독립적으로 선택됨.

청구항 43

제42항에 있어서, 상기 유기금속 복합체가 화학식 III으로 표현되는, 올레핀 중합 촉매 시스템:



(III)

여기서, R^7, R^8, R^9, 및 R^{10}은 각각 독립적으로 다음으로 이루어진 군 중에서 선택되고:

할로겐;

수소;

C_{1-30} 하이드로카르빌 기로서, 여기서 하이드로카르빌 기는 비치환되거나, 또는 할로겐 원자, C_{1-20} 알킬 기, C_{1-20} 알콕시 기, C_{7-20} 알킬아릴 기, C_{7-20} 아릴알킬 기, C_{6-20} 아릴 기, C_{6-20} 아릴옥시 기, C_{7-20} 알킬아릴옥시 기, 및 C_{7-20} 아릴알킬옥시 기로 이루어지는 군 중에서 선택되는 하나 이상의 치환체에 의해 추가로 치환되는 C_{1-30} 하이드로카르빌 기;

헤테로원자 함유 C_{1-30} 하이드로카르빌 기로서, 여기서 헤테로원자 함유 하이드로카르빌 기는 비치환되거나, 또는 할로겐 원자, C_{1-20} 알킬 기, C_{1-20} 알콕시 기, C_{7-20} 알킬아릴 기, C_{7-20} 아릴알킬 기, C_{6-20} 아릴 기, C_{6-20} 아릴옥시 기, C_{7-20} 알킬아릴옥시 기, 및 C_{7-20} 아릴알킬옥시 기로 이루어지는 군 중에서 선택되는 하나 이상의 치환체에 의해 추가로 치환되는 헤테로원자 함유 C_{1-30} 하이드로카르빌 기;

옥시 기, -OR';

아미도 기, $-NR'_2$;

포스피도 기, $-PR'_2$;

티올레이트 기, -SR';

화학식 $-Si(R^a)_3$의 실릴 기; 및

화학식 $-Ge(R^a)_3$의 게르마닐 기;

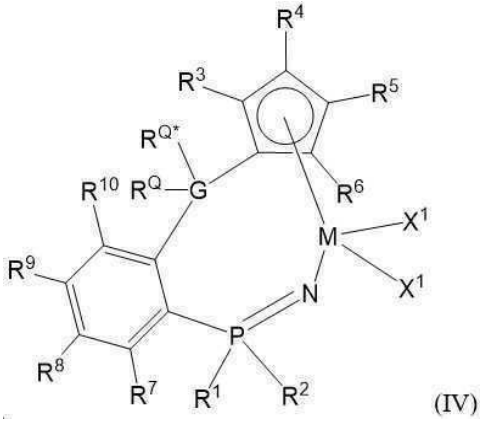
여기서, R^7, R^8, R^9, 및 R^{10} 중 2개의 인접한 기는 선택적으로 결합되어 환형 하이드로카르빌 기 또는 환형 헤테로원자 함유 하이드로카르빌 기를 형성할 수 있고, 상기 환형 하이드로카르빌 기 또는 환형 헤테로원자 함유 하이드로카르빌 기는 비치환되거나, 또는 할로겐 원자, C_{1-20} 알킬 기, C_{1-20} 알콕시 기, C_{7-20} 알킬아릴 기, C_{7-20} 아릴알킬 기, C_{6-20} 아릴 기, C_{6-20} 아릴옥시 기, C_{7-20} 알킬아릴옥시 기, C_{7-20} 아릴알킬옥시 기, 화학식 $-NR'_2$의 아미도 기, 화학식 $-PR'_2$의 포스피도 기, 화학식 -SR'의 티올레이트 기, 화학식 $-Si(R^a)_3$의 실릴 기, 및 화학식 $-Ge(R^a)_3$의 게르마닐 기로 이루어지는 군 중에서 선택되는 하나 이상의 치환체에 의해 추가로 치환되고;

여기서 각 R'는 수소, C_{1-20} 알킬 기, 및 C_{6-20} 아릴 기로 이루어지는 군 중에서 독립적으로 선택되고;

여기서 각 R^a는 수소, C_{1-8} 알킬 기, C_{1-8} 알콕시 기, C_{6-20} 아릴옥시 기 및 C_{6-20} 아릴 기로 이루어지는 군 중에서 독립적으로 선택됨.

청구항 44

제42항에 있어서, 상기 유기금속 복합체가 화학식 IV로 표현되는, 올레핀 중합 촉매 시스템:



(IV)

여기서, G는 C 또는 Si이고;

여기서, R^Q 및 R^{Q*}는 각각 독립적으로 다음으로 이루어진 군 중에서 선택되며:

할로겐;

수소;

C_{1-30} 하이드로카르빌 기로서, 여기서 하이드로카르빌 기는 비치환되거나, 또는 할로겐 원자, C_{1-20} 알킬 기, C_{1-20} 알콕시 기, C_{7-20} 알킬아릴 기, C_{7-20} 아릴알킬 기, C_{6-20} 아릴 기, C_{6-20} 아릴옥시 기, C_{7-20} 알킬아릴옥시 기, 및 C_{7-20} 아릴알킬옥시 기로 이루어지는 군 중에서 선택되는 하나 이상의 치환체에 의해 추가로 치환되는 C_{1-30} 하이드로카르빌 기;

헤테로원자 함유 C_{1-30} 하이드로카르빌 기로서, 여기서 헤테로원자 함유 하이드로카르빌 기는 비치환되거나, 또는 할로겐 원자, C_{1-20} 알킬 기, C_{1-20} 알콕시 기, C_{7-20} 알킬아릴 기, C_{7-20} 아릴알킬 기, C_{6-20} 아릴 기, C_{6-20} 아릴옥시 기, C_{7-20} 알킬아릴옥시 기, 및 C_{7-20} 아릴알킬옥시 기로 이루어지는 군 중에서 선택되는 하나 이상의 치환체에 의해 추가로 치환되는 헤테로원자 함유 C_{1-30} 하이드로카르빌 기;

여기서, R^Q 및 R^{Q*} 기는 선택적으로 결합되어 환형 하이드로카르빌 기 또는 환형 헤테로원자 함유 하이드로카르빌 기를 형성할 수 있고, 상기 환형 하이드로카르빌 기 또는 환형 헤테로원자 함유 하이드로카르빌 기는 비치환되거나, 또는 할로겐 원자, C_{1-20} 알킬 기, C_{1-20} 알콕시 기, C_{7-20} 알킬아릴 기, C_{7-20} 아릴알킬 기, C_{6-20} 아릴 기, C_{6-20} 아릴옥시 기, C_{7-20} 알킬아릴옥시 기, C_{7-20} 아릴알킬옥시 기, 화학식 $-NR'_2$의 아미도 기, 화학식 $-PR'_2$의 포스피도 기, 화학식 $-SR'$의 티올레이트 기, 화학식 $-Si(R^a)_3$의 실릴 기, 및 화학식 $-Ge(R^a)_3$의 게르마닐 기로 이루어지는 군 중에서 선택되는 하나 이상의 치환체에 의해 추가로 치환되며;

여기서, R^7, R^8, R^9, 및 R^{10}은 각각 독립적으로 다음으로 이루어진 군 중에서 선택되고:

할로겐;

수소;

C_{1-30} 하이드로카르빌 기로서, 여기서 하이드로카르빌 기는 비치환되거나, 또는 할로겐 원자, C_{1-20} 알킬 기, C_{1-20} 알콕시 기, C_{7-20} 알킬아릴 기, C_{7-20} 아릴알킬 기, C_{6-20} 아릴 기, C_{6-20} 아릴옥시 기, C_{7-20} 알킬아릴옥시 기, 및 C_{7-}

$_{20}$ 아릴알킬옥시 기로 이루어지는 군 중에서 선택되는 하나 이상의 치환체에 의해 추가로 치환되는, C_{1-30} 하이드로카르빌 기;

헤테로원자 함유 C_{1-30} 하이드로카르빌 기로서, 여기서 헤테로원자 함유 하이드로카르빌 기는 비치환되거나, 또는 할로겐 원자, C_{1-20} 알킬 기, C_{1-20} 알콕시 기, C_{7-20} 알킬아릴 기, C_{7-20} 아릴알킬 기, C_{6-20} 아릴 기, C_{6-20} 아릴옥시 기, C_{7-20} 알킬아릴옥시 기, 및 C_{7-20} 아릴알킬옥시 기로 이루어지는 군 중에서 선택되는 하나 이상의 치환체에 의해 추가로 치환되는, 헤테로원자 함유 C_{1-30} 하이드로카르빌 기;

옥시 기, -OR';

아미도 기, $-NR'_2$;

포스피도 기, $-PR'_2$;

티올레이트 기, -SR';

화학식 $-Si(R^a)_3$의 실릴 기; 및

화학식 $-Ge(R^a)_3$의 게르마닐 기;

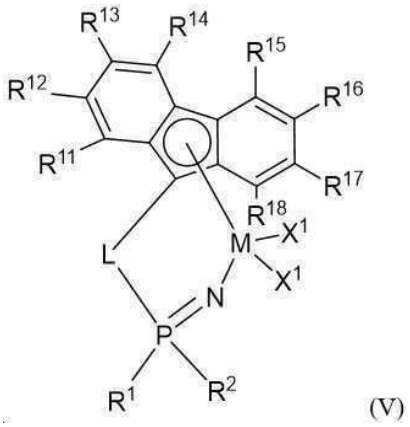
여기서, R^7, R^8, R^9, 및 R^{10} 중 2개의 인접한 기는 선택적으로 결합되어 환형 하이드로카르빌 기 또는 환형 헤테로원자 함유 하이드로카르빌 기를 형성할 수 있고, 상기 환형 하이드로카르빌 기 또는 환형 헤테로원자 함유 하이드로카르빌 기는 비치환되거나, 또는 할로겐 원자, C_{1-20} 알킬 기, C_{1-20} 알콕시 기, C_{7-20} 알킬아릴 기, C_{7-20} 아릴알킬 기, C_{6-20} 아릴 기, C_{6-20} 아릴옥시 기, C_{7-20} 알킬아릴옥시 기, C_{7-20} 아릴알킬옥시 기, 화학식 $-NR'_2$의 아미도 기, 화학식 $-PR'_2$의 포스피도 기, 화학식 -SR'의 티올레이트 기, 화학식 $-Si(R^a)_3$의 실릴 기, 및 화학식 $-Ge(R^a)_3$의 게르마닐 기로 이루어지는 군 중에서 선택되는 하나 이상의 치환체에 의해 추가로 치환되고;

여기서 각 R'는 수소, C_{1-20} 알킬 기, 및 C_{6-20} 아릴 기로 이루어지는 군 중에서 독립적으로 선택되고;

여기서 각 R^a는 수소, C_{1-8} 알킬 기, C_{1-8} 알콕시 기, C_{6-20} 아릴옥시 기 및 C_{6-20} 아릴 기로 이루어지는 군 중에서 독립적으로 선택됨.

청구항 45

제41항에 있어서, 상기 유기금속 복합체가 화학식 V로 표현되는, 올레핀 중합 촉매 시스템:



(V)

여기서, R^{11}, R^{12}, R^{13}, R^{14}, R^{15}, R^{16}, R^{17}, R^{18}은 각각 독립적으로 다음으로 이루어진 군 중에서 선택되고:

할로겐;

수소;

C_{1-30} 하이드로카르빌 기로서, 여기서 하이드로카르빌 기는 비치환되거나, 또는 할로겐 원자, C_{1-20} 알킬 기, C_{1-20} 알콕시 기, C_{7-20} 알킬아릴 기, C_{7-20} 아릴알킬 기, C_{6-20} 아릴 기, C_{6-20} 아릴옥시 기, C_{7-20} 알킬아릴옥시 기, 및 C_{7-20} 아릴알킬옥시 기로 이루어지는 군 중에서 선택되는 하나 이상의 치환체에 의해 추가로 치환되는, C_{1-30} 하이드로카르빌 기;

헤테로원자 함유 C_{1-30} 하이드로카르빌 기로서, 여기서 헤테로원자 함유 하이드로카르빌 기는 비치환되거나, 또는 할로겐 원자, C_{1-20} 알킬 기, C_{1-20} 알콕시 기, C_{7-20} 알킬아릴 기, C_{7-20} 아릴알킬 기, C_{6-20} 아릴 기, C_{6-20} 아릴옥시 기, C_{7-20} 알킬아릴옥시 기, 및 C_{7-20} 아릴알킬옥시 기로 이루어지는 군 중에서 선택되는 하나 이상의 치환체에 의해 추가로 치환되는, 헤테로원자 함유 C_{1-30} 하이드로카르빌 기;

옥시 기, -OR';

아미도 기, $-NR'_2$;

포스피도 기, $-PR'_2$;

티올레이트 기, -SR';

화학식 $-Si(R^a)_3$의 실릴 기; 및

화학식 $-Ge(R^a)_3$의 게르마닐 기;

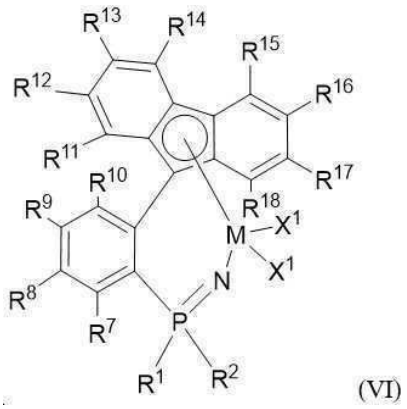
여기서, R^{11}, R^{12}, R^{13}, R^{14}, R^{15}, R^{16}, R^{17}, R^{18} 중 2개의 인접한 기는 선택적으로 결합되어 환형 하이드로카르빌 기 또는 환형 헤테로원자 함유 하이드로카르빌 기를 형성할 수 있고, 상기 환형 하이드로카르빌 기 또는 환형 헤테로원자 함유 하이드로카르빌 기는 비치환되거나, 또는 할로겐 원자, C_{1-20} 알킬 기, C_{1-20} 알콕시 기, C_{7-20} 알킬아릴 기, C_{7-20} 아릴알킬 기, C_{6-20} 아릴 기, C_{6-20} 아릴옥시 기, C_{7-20} 알킬아릴옥시 기, C_{7-20} 아릴알킬옥시 기, 화학식 $-NR'_2$의 아미도 기, 화학식 $-PR'_2$의 포스피도 기, 화학식 -SR'의 티올레이트 기, 화학식 $-Si(R^a)_3$의 실릴 기, 및 화학식 $-Ge(R^a)_3$의 게르마닐 기로 이루어지는 군 중에서 선택되는 하나 이상의 치환체에 의해 추가로 치환되고;

여기서 각 R'는 수소, C_{1-20} 알킬 기, 및 C_{6-20} 아릴 기로 이루어지는 군 중에서 독립적으로 선택되고;

여기서 각 R^a는 수소, C_{1-8} 알킬 기, C_{1-8} 알콕시 기, C_{6-20} 아릴옥시 기 및 C_{6-20} 아릴 기로 이루어지는 군 중에서 독립적으로 선택됨.

청구항 46

제45항에 있어서, 상기 유기금속 복합체가 화학식 VI으로 표현되는, 올레핀 중합 촉매 시스템:



(VI)

여기서, R^7, R^8, R^9, 및 R^{10}은 각각 독립적으로 다음으로 이루어진 군 중에서 선택되고:

할로겐;

수소;

C_{1-30} 하이드로카르빌 기로서, 여기서 하이드로카르빌 기는 비치환되거나, 또는 할로겐 원자, C_{1-20} 알킬 기, C_{1-20} 알콕시 기, C_{7-20} 알킬아릴 기, C_{7-20} 아릴알킬 기, C_{6-20} 아릴 기, C_{6-20} 아릴옥시 기, C_{7-20} 알킬아릴옥시 기, 및 C_{7-20} 아릴알킬옥시 기로 이루어지는 군 중에서 선택되는 하나 이상의 치환체에 의해 추가로 치환되는, C_{1-30} 하이드로카르빌 기;

헤테로원자 함유 C_{1-30} 하이드로카르빌 기로서, 여기서 헤테로원자 함유 하이드로카르빌 기는 비치환되거나, 또는 할로겐 원자, C_{1-20} 알킬 기, C_{1-20} 알콕시 기, C_{7-20} 알킬아릴 기, C_{7-20} 아릴알킬 기, C_{6-20} 아릴 기, C_{6-20} 아릴옥시 기, C_{7-20} 알킬아릴옥시 기, 및 C_{7-20} 아릴알킬옥시 기로 이루어지는 군 중에서 선택되는 하나 이상의 치환체에 의해 추가로 치환되는, 헤테로원자 함유 C_{1-30} 하이드로카르빌 기;

옥시 기, -OR';

아미도 기, $-NR'_2$;

포스피도 기, $-PR'_2$;

티올레이트 기, -SR';

화학식 $-Si(R^a)_3$의 실릴 기; 및

화학식 $-Ge(R^a)_3$의 게르마닐 기;

여기서, R^7, R^8, R^9, 및 R^{10} 중 2개의 인접한 기는 선택적으로 결합되어 환형 하이드로카르빌 기 또는 환형 헤테로원자 함유 하이드로카르빌 기를 형성할 수 있고, 상기 환형 하이드로카르빌 기 또는 환형 헤테로원자 함유 하이드로카르빌 기는 비치환되거나, 또는 할로겐 원자, C_{1-20} 알킬 기, C_{1-20} 알콕시 기, C_{7-20} 알킬아릴 기, C_{7-20} 아릴알킬 기, C_{6-20} 아릴 기, C_{6-20} 아릴옥시 기, C_{7-20} 알킬아릴옥시 기, C_{7-20} 아릴알킬옥시 기, 화학식 $-NR'_2$의 아미도 기, 화학식 $-PR'_2$의 포스피도 기, 화학식 -SR'의 티올레이트 기, 화학식 $-Si(R^a)_3$의 실릴 기, 및 화학식 $-Ge(R^a)_3$의 게르마닐 기로 이루어지는 군 중에서 선택되는 하나 이상의 치환체에 의해 추가로 치환되고;

여기서 각 R'는 수소, C_{1-20} 알킬 기, 및 C_{6-20} 아릴 기로 이루어지는 군 중에서 독립적으로 선택되고;

여기서 각 R^a는 수소, C_{1-8} 알킬 기, C_{1-8} 알콕시 기, C_{6-20} 아릴옥시 기 및 C_{6-20} 아릴 기로 이루어지는 군 중에서 독립적으로 선택됨.

청구항 47

제46항에 있어서, M이 Ti인, 올레핀 중합 촉매 시스템.

청구항 48

제46항에 있어서, R^7, R^8, R^9, 및 R^{10}이 각각 수소인, 올레핀 중합 촉매 시스템.

청구항 49

제46항에 있어서, R^1 및 R^2가 각각 독립적으로 비치환된 C_{1-30} 하이드로카르빌 기인, 올레핀 중합 촉매 시스템.

청구항 50

제49항에 있어서, R^1 및 R^2가 각각 독립적으로 이소프로필, 사이클로헥실 및 *tert*-부틸로 이루어지는 군 중에서 선택되는, 올레핀 중합 촉매 시스템.

청구항 51

제46항에 있어서, R^{12} 및 R^{17}이 각각 독립적으로 비치환된 C_{1-30} 하이드로카르빌 기이고, R^{11}, R^{13}, R^{14}, R^{15}, R^{16}, 및 R^{18}은 각각 수소인, 올레핀 중합 촉매 시스템.

청구항 52

제51항에 있어서, R^{12} 및 R^{17}이 각각 *tert*-부틸 기인, 올레핀 중합 촉매 시스템.

청구항 53

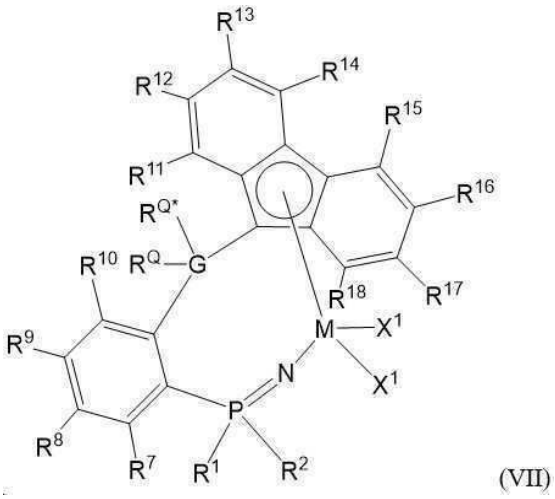
제46항에 있어서, 각 X^1이 독립적으로, C_{1-6} 알킬 기, C_{7-10} 아릴알킬 기, 및 할로겐으로 이루어지는 군 중에서 선택되는, 올레핀 중합 촉매 시스템.

청구항 54

제53항에 있어서, 각 X^1이 독립적으로 메틸 기 및 Cl로 이루어지는 군 중에서 선택되는, 올레핀 중합 촉매 시스템.

청구항 55

제45항에 있어서, 상기 유기금속 복합체가 화학식 VII로 표현되는, 올레핀 중합 촉매 시스템:



(VII)

여기서, G는 C 또는 Si이고;

여기서, R^{Q} 및 R^{Q*}는 각각 독립적으로 다음으로 이루어진 군 중에서 선택되며:

할로겐;

수소;

C_{1-30} 하이드로카르빌 기로서, 여기서 하이드로카르빌 기는 비치환되거나, 또는 할로겐 원자, C_{1-20} 알킬 기, C_{1-20} 알콕시 기, C_{7-20} 알킬아릴 기, C_{7-20} 아릴알킬 기, C_{6-20} 아릴 기, C_{6-20} 아릴옥시 기, C_{7-20} 알킬아릴옥시 기, 및 C_{7-20} 아릴알킬옥시 기로 이루어지는 군 중에서 선택되는 하나 이상의 치환체에 의해 추가로 치환되는 C_{1-30} 하이드로카르빌 기;

헤테로원자 함유 C_{1-30} 하이드로카르빌 기로서, 여기서 헤테로원자 함유 하이드로카르빌 기는 비치환되거나, 또는 할로겐 원자, C_{1-20} 알킬 기, C_{1-20} 알콕시 기, C_{7-20} 알킬아릴 기, C_{7-20} 아릴알킬 기, C_{6-20} 아릴 기, C_{6-20} 아릴옥시 기, C_{7-20} 알킬아릴옥시 기, 및 C_{7-20} 아릴알킬옥시 기로 이루어지는 군 중에서 선택되는 하나 이상의 치환체에 의해 추가로 치환되는 헤테로원자 함유 C_{1-30} 하이드로카르빌 기;

여기서, R^{Q} 및 R^{Q*} 기는 선택적으로 결합되어 환형 하이드로카르빌 기 또는 환형 헤테로원자 함유 하이드로카르빌 기를 형성할 수 있고, 상기 환형 하이드로카르빌 기 또는 환형 헤테로원자 함유 하이드로카르빌 기는 비치환되거나, 또는 할로겐 원자, C_{1-20} 알킬 기, C_{1-20} 알콕시 기, C_{7-20} 알킬아릴 기, C_{7-20} 아릴알킬 기, C_{6-20} 아릴 기, C_{6-20} 아릴옥시 기, C_{7-20} 알킬아릴옥시 기, C_{7-20} 아릴알킬옥시 기, 화학식 $-NR'_2$의 아미도 기, 화학식 $-PR'_2$의 포스피도 기, 화학식 $-SR'$의 티올레이트 기, 화학식 $-Si(R^{a})_3$의 실릴 기, 및 화학식 $-Ge(R^{a})_3$의 게르마닐 기로 이루어지는 군 중에서 선택되는 하나 이상의 치환체에 의해 추가로 치환되며;

여기서, R^{7}, R^{8}, R^{9}, 및 R^{10}은 각각 독립적으로 다음으로 이루어진 군 중에서 선택되고:

할로겐;

수소;

C_{1-30} 하이드로카르빌 기로서, 여기서 하이드로카르빌 기는 비치환되거나, 또는 할로겐 원자, C_{1-20} 알킬 기, C_{1-20} 알콕시 기, C_{7-20} 알킬아릴 기, C_{7-20} 아릴알킬 기, C_{6-20} 아릴 기, C_{6-20} 아릴옥시 기, C_{7-20} 알킬아릴옥시 기, 및 C_{7-20} 아릴알킬옥시 기로 이루어지는 군 중에서 선택되는 하나 이상의 치환체에 의해 추가로 치환되는, C_{1-30} 하이드

로카르빌 기;

헤테로원자 함유 C_{1-30} 하이드로카르빌 기로서, 여기서 헤테로원자 함유 하이드로카르빌 기는 비치환되거나, 또는 할로겐 원자, C_{1-20} 알킬 기, C_{1-20} 알콕시 기, C_{7-20} 알킬아릴 기, C_{7-20} 아릴알킬 기, C_{6-20} 아릴 기, C_{6-20} 아릴옥시 기, C_{7-20} 알킬아릴옥시 기, 및 C_{7-20} 아릴알킬옥시 기로 이루어지는 군 중에서 선택되는 하나 이상의 치환체에 의해 추가로 치환되는, 헤테로원자 함유 C_{1-30} 하이드로카르빌 기;

옥시 기, -OR';

아미도 기, $-NR'_2$;

포스피도 기, $-PR'_2$;

티올레이트 기, -SR';

화학식 $-Si(R^a)_3$의 실릴 기; 및

화학식 $-Ge(R^a)_3$의 게르마닐 기;

여기서, R^7, R^8, R^9, 및 R^{10} 중 2개의 인접한 기는 선택적으로 결합되어 환형 하이드로카르빌 기 또는 환형 헤테로원자 함유 하이드로카르빌 기를 형성할 수 있고, 상기 환형 하이드로카르빌 기 또는 환형 헤테로원자 함유 하이드로카르빌 기는 비치환되거나, 또는 할로겐 원자, C_{1-20} 알킬 기, C_{1-20} 알콕시 기, C_{7-20} 알킬아릴 기, C_{7-20} 아릴알킬 기, C_{6-20} 아릴 기, C_{6-20} 아릴옥시 기, C_{7-20} 알킬아릴옥시 기, C_{7-20} 아릴알킬옥시 기, 화학식 $-NR'_2$의 아미도 기, 화학식 $-PR'_2$의 포스피도 기, 화학식 -SR'의 티올레이트 기, 화학식 $-Si(R^a)_3$의 실릴 기, 및 화학식 $-Ge(R^a)_3$의 게르마닐 기로 이루어지는 군 중에서 선택되는 하나 이상의 치환체에 의해 추가로 치환되고;

여기서 각 R'는 수소, C_{1-20} 알킬 기, 및 C_{6-20} 아릴 기로 이루어지는 군 중에서 독립적으로 선택되고;

여기서 각 R^a는 수소, C_{1-8} 알킬 기, C_{1-8} 알콕시 기, C_{6-20} 아릴옥시 기 및 C_{6-20} 아릴 기로 이루어지는 군 중에서 독립적으로 선택됨.

청구항 56

제55항에 있어서, M이 Ti인, 올레핀 중합 촉매 시스템.

청구항 57

제55항에 있어서, R^7, R^8, R^9, 및 R^{10}이 각각 수소인, 올레핀 중합 촉매 시스템.

청구항 58

제55항에 있어서, R^1 및 R^2가 각각 독립적으로 비치환된 C_{1-30} 하이드로카르빌 기인, 올레핀 중합 촉매 시스템.

청구항 59

제58항에 있어서, R^1 및 R^2가 각각 독립적으로 이소프로필, 사이클로헥실 및 *tert*-부틸로 이루어지는 군 중에서 선택되는, 올레핀 중합 촉매 시스템.

청구항 60

제55항에 있어서, R^{12} 및 R^{17}이 각각 독립적으로 비치환된 C_{1-30} 하이드로카르빌 기이고, R^{11}, R^{13}, R^{14}, R^{15}, R^{16}, 및 R^{18}이 각각 수소인, 올레핀 중합 촉매 시스템.

청구항 61

제60항에 있어서, R^{12} 및 R^{17}이 각각 *tert*-부틸 기인, 올레핀 중합 촉매 시스템.

청구항 62

제55항에 있어서, G가 탄소인, 올레핀 중합 촉매 시스템.

청구항 63

제62항에 있어서, R^{Q} 및 R^{Q*}가 각각 독립적으로 수소, C_{1-20} 알킬 기, 및 C_{6-20} 아릴 기로 이루어지는 군 중에서 선택되는, 올레핀 중합 촉매 시스템.

청구항 64

제62항에 있어서, R^{Q}가 수소이고, R^{Q*}가 C_{1-8} 알킬 기인, 올레핀 중합 촉매 시스템.

청구항 65

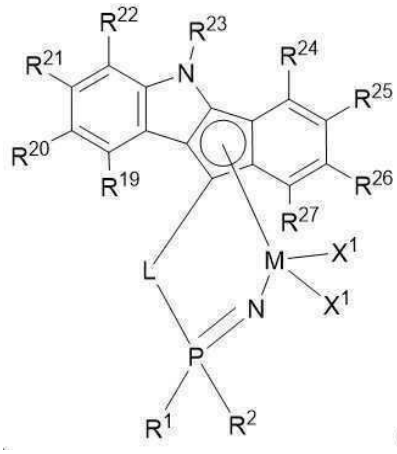
제55항에 있어서, 각 X^{1}이 독립적으로 C_{1-6} 알킬 기, C_{7-10} 아릴알킬 기, 및 할로겐으로 이루어지는 군 중에서 선택되는, 올레핀 중합 촉매 시스템.

청구항 66

제65항에 있어서, 각 X^{1}이 독립적으로 메틸 기 및 Cl로 이루어지는 군 중에서 선택되는, 올레핀 중합 촉매 시스템.

청구항 67

제41항에 있어서, 상기 유기금속 복합체가 화학식 VIII로 표현되는 것인, 올레핀 중합 촉매 시스템:



(VIII)

여기서, R^{23}은 다음으로 이루어진 군 중에서 선택되며:

수소;

C_{1-30} 하이드로카르빌 기로서, 여기서 하이드로카르빌 기는 비치환되거나, 또는 할로겐 원자, C_{1-20} 알킬 기, C_{1-20} 알콕시 기, C_{7-20} 알킬아릴 기, C_{7-20} 아릴알킬 기, C_{6-20} 아릴 기, C_{6-20} 아릴옥시 기, C_{7-20} 알킬아릴옥시 기, 및 C_{7-20} 아릴알킬옥시 기로 이루어지는 군 중에서 선택되는 하나 이상의 치환체에 의해 추가로 치환되는 C_{1-30} 하이드로카르빌 기;

헤테로원자 함유 C_{1-30} 하이드로카르빌 기로서, 여기서 헤테로원자 함유 하이드로카르빌 기는 비치환되거나, 또는

할로겐 원자, C_{1-20} 알킬 기, C_{1-20} 알콕시 기, C_{7-20} 알킬아릴 기, C_{7-20} 아릴알킬 기, C_{6-20} 아릴 기, C_{6-20} 아릴옥시 기, C_{7-20} 알킬아릴옥시 기, 및 C_{7-20} 아릴알킬옥시 기로 이루어지는 군 중에서 선택되는 하나 이상의 치환체에 의해 추가로 치환되는 헤테로원자 함유 C_{1-30} 하이드로카르빌 기;

여기서, R^{19}, R^{20}, R^{21}, R^{22}, R^{24}, R^{25}, R^{26}, 및 R^{27}은 각각 독립적으로 다음으로 이루어진 군 중에서 선택되고:

할로겐;

수소;

C_{1-30} 하이드로카르빌 기로서, 여기서 하이드로카르빌 기는 비치환되거나, 또는 할로겐 원자, C_{1-20} 알킬 기, C_{1-20} 알콕시 기, C_{7-20} 알킬아릴 기, C_{7-20} 아릴알킬 기, C_{6-20} 아릴 기, C_{6-20} 아릴옥시 기, C_{7-20} 알킬아릴옥시 기, 및 C_{7-20} 아릴알킬옥시 기로 이루어지는 군 중에서 선택되는 하나 이상의 치환체에 의해 추가로 치환되는, C_{1-30} 하이드로카르빌 기;

헤테로원자 함유 C_{1-30} 하이드로카르빌 기로서, 여기서 헤테로원자 함유 하이드로카르빌 기는 비치환되거나, 또는 할로겐 원자, C_{1-20} 알킬 기, C_{1-20} 알콕시 기, C_{7-20} 알킬아릴 기, C_{7-20} 아릴알킬 기, C_{6-20} 아릴 기, C_{6-20} 아릴옥시 기, C_{7-20} 알킬아릴옥시 기, 및 C_{7-20} 아릴알킬옥시 기로 이루어지는 군 중에서 선택되는 하나 이상의 치환체에 의해 추가로 치환되는, 헤테로원자 함유 C_{1-30} 하이드로카르빌 기;

옥시 기, -OR';

아미도 기, $-NR'_2$;

포스피도 기, $-PR'_2$;

티올레이트 기, -SR';

화학식 $-Si(R^a)_3$의 실릴 기; 및

화학식 $-Ge(R^a)_3$의 게르마닐 기;

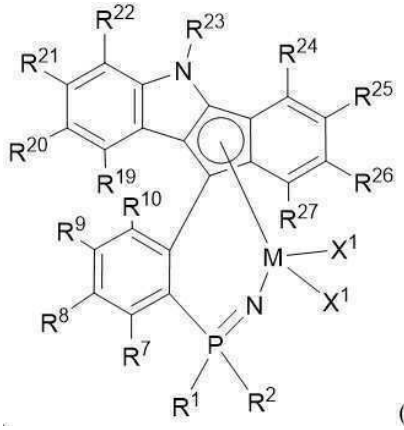
여기서, R^{19}, R^{20}, R^{21}, R^{22}, R^{24}, R^{25}, R^{26}, 및 R^{27} 중 2개의 인접한 기는 선택적으로 결합되어 환형 하이드로카르빌 기 또는 환형 헤테로원자 함유 하이드로카르빌 기를 형성할 수 있고, 상기 환형 하이드로카르빌 기 또는 환형 헤테로원자 함유 하이드로카르빌 기는 비치환되거나, 또는 할로겐 원자, C_{1-20} 알킬 기, C_{1-20} 알콕시 기, C_{7-20} 알킬아릴 기, C_{7-20} 아릴알킬 기, C_{6-20} 아릴 기, C_{6-20} 아릴옥시 기, C_{7-20} 알킬아릴옥시 기, C_{7-20} 아릴알킬옥시 기, 화학식 $-NR'_2$의 아미도 기, 화학식 $-PR'_2$의 포스피도 기, 화학식 -SR'의 티올레이트 기, 화학식 $-Si(R^a)_3$의 실릴 기, 및 화학식 $-Ge(R^a)_3$의 게르마닐 기로 이루어지는 군 중에서 선택되는 하나 이상의 치환체에 의해 추가로 치환되고;

여기서 각 R'는 수소, C_{1-20} 알킬 기, 및 C_{6-20} 아릴 기로 이루어지는 군 중에서 독립적으로 선택되고;

여기서 각 R^a는 수소, C_{1-8} 알킬 기, C_{1-8} 알콕시 기, C_{6-20} 아릴옥시 기 및 C_{6-20} 아릴 기로 이루어지는 군 중에서 독립적으로 선택됨.

청구항 68

제67항에 있어서, 상기 유기금속 복합체가 화학식 IX로 표현되는, 올레핀 중합 촉매 시스템:



(IX)

여기서, R^7, R^8, R^9 및 R^{10}은 각각 독립적으로 다음으로 이루어진 군 중에서 선택되며:

할로겐;

수소;

C_{1-30} 하이드로카르빌 기로서, 여기서 하이드로카르빌 기는 비치환되거나, 또는 할로겐 원자, C_{1-20} 알킬 기, C_{1-20} 알콕시 기, C_{7-20} 알킬아릴 기, C_{7-20} 아릴알킬 기, C_{6-20} 아릴 기, C_{6-20} 아릴옥시 기, C_{7-20} 알킬아릴옥시 기, 및 C_{7-20} 아릴알킬옥시 기로 이루어지는 군 중에서 선택되는 하나 이상의 치환체에 의해 추가로 치환되는 C_{1-30} 하이드로카르빌 기;

헤테로원자 함유 C_{1-30} 하이드로카르빌 기로서, 여기서 헤테로원자 함유 하이드로카르빌 기는 비치환되거나, 또는 할로겐 원자, C_{1-20} 알킬 기, C_{1-20} 알콕시 기, C_{7-20} 알킬아릴 기, C_{7-20} 아릴알킬 기, C_{6-20} 아릴 기, C_{6-20} 아릴옥시 기, C_{7-20} 알킬아릴옥시 기, 및 C_{7-20} 아릴알킬옥시 기로 이루어지는 군 중에서 선택되는 하나 이상의 치환체에 의해 추가로 치환되는 헤테로원자 함유 C_{1-30} 하이드로카르빌 기;

옥시 기, -OR';

아미도 기, $-NR'_2$;

포스피도 기, $-PR'_2$;

티올레이트 기, -SR';

화학식 $-Si(R^a)_3$의 실릴 기; 및

화학식 $-Ge(R^a)_3$의 게르마닐 기;

여기서, R^7, R^8, R^9, 및 R^{10} 중 2개의 인접한 기는 선택적으로 결합되어 환형 하이드로카르빌 기 또는 환형 헤테로원자 함유 하이드로카르빌 기를 형성할 수 있고, 상기 환형 하이드로카르빌 기 또는 환형 헤테로원자 함유 하이드로카르빌 기는 비치환되거나, 또는 할로겐 원자, C_{1-20} 알킬 기, C_{1-20} 알콕시 기, C_{7-20} 알킬아릴 기, C_{7-20} 아릴알킬 기, C_{6-20} 아릴 기, C_{6-20} 아릴옥시 기, C_{7-20} 알킬아릴옥시 기, C_{7-20} 아릴알킬옥시 기, 화학식 $-NR'_2$의 아미도 기, 화학식 $-PR'_2$의 포스피도 기, 화학식 -SR'의 티올레이트 기, 화학식 $-Si(R^a)_3$의 실릴 기, 및 화학식 $-Ge(R^a)_3$의 게르마닐 기로 이루어지는 군 중에서 선택되는 하나 이상의 치환체에 의해 추가로 치환되고;

여기서 각 R'는 수소, C_{1-20} 알킬 기, 및 C_{6-20} 아릴 기로 이루어지는 군 중에서 독립적으로 선택되고;

여기서 각 R^a는 수소, C_{1-8} 알킬 기, C_{1-8} 알콕시 기, C_{6-20} 아릴옥시 기 및 C_{6-20} 아릴 기로 이루어지는 군 중에서 독립적으로 선택됨.

청구항 69

제68항에 있어서, M이 Ti인, 올레핀 중합 촉매 시스템.

청구항 70

제68항에 있어서, R^7, R^8, R^9, 및 R^{10}이 각각 수소인, 올레핀 중합 촉매 시스템.

청구항 71

제68항에 있어서, R^1 및 R^2가 각각 독립적으로 비치환된 C_{1-30} 하이드로카르빌 기인, 올레핀 중합 촉매 시스템.

청구항 72

제71항에 있어서, R^1 및 R^2가 각각 독립적으로 이소프로필, 사이클로헥실 및 *tert*-부틸로 이루어지는 군 중에서 선택되는, 올레핀 중합 촉매 시스템.

청구항 73

제68항에 있어서, R^{23}이 비치환된 C_{1-30} 하이드로카르빌 기인, 올레핀 중합 촉매 시스템.

청구항 74

제73항에 있어서, R^{23}이 C_{1-8} 알킬 기인, 올레핀 중합 촉매 시스템.

청구항 75

제68항에 있어서, R^{20}이 비치환된 C_{1-30} 하이드로카르빌 기인, 올레핀 중합 촉매 시스템.

청구항 76

제75항에 있어서, R^{20}이 비치환된 C_{1-8} 알킬 기인, 올레핀 중합 촉매 시스템.

청구항 77

제68항에 있어서, R^{20}이 비치환된 C_{1-30} 하이드로카르빌 기이고, R^{19}, R^{21}, R^{22}, R^{24}, R^{25}, R^{26}, 및 R^{27}이 각각 수소인, 올레핀 중합 촉매 시스템.

청구항 78

제77항에 있어서, R^{20}이 C_{1-8} 알킬 기인, 올레핀 중합 촉매 시스템.

청구항 79

제68항에 있어서, 각 X^1이 C_{1-6} 알킬 기, C_{7-10} 아릴알킬 기, 및 할로겐으로 이루어지는 군 중에서 독립적으로 선택되는, 올레핀 중합 촉매 시스템.

청구항 80

제79항에 있어서, 각 X^1이 메틸 기 및 Cl로 이루어지는 군 중에서 독립적으로 선택되는, 올레핀 중합 촉매 시스

템.

청구항 81

제41항 내지 제80항 중 어느 한 항에 있어서, 상기 촉매 활성화제가 알킬알루미녹산 공촉매, 유기알루미늄 화합물, 붕소계 촉매 활성화제, 및 이들의 혼합물로 이루어지는 군 중에서 선택되는, 올레핀 중합 촉매 시스템.

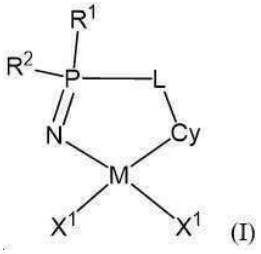
청구항 82

제81항에 있어서, 상기 붕소계 촉매 활성화제가 [(수소화된 탈로우 알킬)$_2$(Me)NH][B(C_6F_5)$_4$]; N,N-디메틸아닐리늄 테트라키스(펜타플루오로페닐) 붕산염 ("[Me_2NHPh][B(C_6F_5)$_4$]"); 및 트리페닐메틸륨 테트라키스(펜타플루오로페닐) 붕산염 ("[Ph_3C][B(C_6F_5)$_4$]")으로 이루어지는 군 중에서 선택되는, 올레핀 중합 촉매 시스템.

청구항 83

다음을 포함하는 올레핀 중합 촉매 시스템의 존재 하에, 에틸렌을 선택적으로 하나 이상의 C_3-C_{12} 알파-올레핀과 중합시키는 것을 포함하는 중합 공정:

i) 화학식 I로 표현되는 유기금속 복합체;



(I)

여기서,

M은 Ti, Zr 또는 Hf이고;

R^1 및 R^2는 각각 독립적으로 수소 및 R^X로 이루어진 군 중에서 선택되거나; 또는 R^1 및 R^2는 이들이 부착된 P 원자와 함께, 비치환되거나, 또는 할로겐 원자, C_{1-20} 알킬 기, C_{1-20} 알콕시 기, C_{7-20} 알킬아릴 기, C_{7-20} 아릴알킬 기, C_{6-20} 아릴 기, C_{6-20} 아릴옥시 기, C_{7-20} 알킬아릴옥시 기, 및 C_{7-20} 아릴알킬옥시 기로 이루어진 군 중에서 선택되는 하나 이상의 치환체에 의해 추가로 치환되는 3-10원 헤테로환형 기를 형성하며;

각 R^X는 할로겐 원자; 하이드로카르빌 기가 비치환되거나, 또는 하나 이상의 할로겐 원자, C_{1-20} 알킬 기, C_{1-20} 알콕시 기, C_{7-20} 알킬아릴 기, C_{7-20} 아릴알킬 기, C_{6-20} 아릴 기, C_{6-20} 아릴옥시 기, C_{7-20} 알킬아릴옥시 기, 및/또는 C_{7-20} 아릴알킬옥시 기에 의해 추가로 치환되는 C_{1-30} 하이드로카르빌 기; 화학식 $-NR'_2$의 아미도 기; 화학식 $-Si(R^a)_3$의 실릴 기; 화학식 $-Ge(R^a)_3$의 게르마닐 기; 및 화학식 $-N=P(R^b)(R^c)(R^d)$의 포스핀이민 기로 이루어진 군 중에서 독립적으로 선택되고; 여기서 각 R'는 수소, C_{1-20} 알킬 기, 및 C_{6-20} 아릴 기로 이루어지는 군 중에서 독립적으로 선택되고; 각 R^a는 수소, C_{1-8} 알킬 기, C_{1-8} 알콕시 기, C_{6-20} 아릴옥시 기 및 C_{6-20} 아릴 기로 이루어진 군 중에서 독립적으로 선택되고; R^b, R^c, R^d는 각각 독립적으로 C_{1-20} 알킬 기이며;

각 X^1은 활성화 가능한 리간드이고;

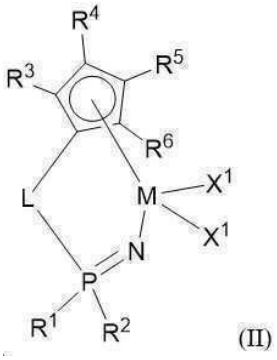
Cy는 L에 공유 결합되고 η-결합을 통해 M에 배위된 사이클로펜타디에닐형 리간드이고; 그리고

L은 Cy와 P를 연결하는 원자의 근접한 사슬을 함유하는 가교 기로서, 여기서 근접한 사슬은 2개 또는 3개의 원자를 함유함; 및

ii) 촉매 활성화제.

청구항 84

제83항에 있어서, 상기 유기금속 복합체가 화학식 II로 표현되는, 중합 공정:



(II)

R^3, R^4, R^5 및 R^6은 각각 독립적으로 다음으로 이루어진 군 중에서 선택되고:

할로겐;

수소;

C_{1-30} 하이드로카르빌 기로서, 여기서 하이드로카르빌 기는 비치환되거나, 또는 할로겐 원자, C_{1-20} 알킬 기, C_{1-20} 알콕시 기, C_{7-20} 알킬아릴 기, C_{7-20} 아릴알킬 기, C_{6-20} 아릴 기, C_{6-20} 아릴옥시 기, C_{7-20} 알킬아릴옥시 기, 및 C_{7-20} 아릴알킬옥시 기로 이루어지는 군 중에서 선택되는 하나 이상의 치환체에 의해 추가로 치환되는 C_{1-30} 하이드로카르빌 기;

헤테로원자 함유 C_{1-30} 하이드로카르빌 기로서, 여기서 헤테로원자 함유 하이드로카르빌 기는 비치환되거나, 또는 할로겐 원자, C_{1-20} 알킬 기, C_{1-20} 알콕시 기, C_{7-20} 알킬아릴 기, C_{7-20} 아릴알킬 기, C_{6-20} 아릴 기, C_{6-20} 아릴옥시 기, C_{7-20} 알킬아릴옥시 기, 및 C_{7-20} 아릴알킬옥시 기로 이루어지는 군 중에서 선택되는 하나 이상의 치환체에 의해 추가로 치환되는 헤테로원자 함유 C_{1-30} 하이드로카르빌 기;

옥시 기, -OR';

아미도 기, $-NR'_2$;

포스피도 기, $-PR'_2$;

티올레이트 기, -SR';

화학식 $-Si(R^a)_3$의 실릴 기; 및

화학식 $-Ge(R^a)_3$의 게르마닐 기;

여기서, R^3, R^4, R^5 및 R^6 중 2개의 인접한 기는 선택적으로 결합되어 환형 하이드로카르빌 기 또는 환형 헤테로원자 함유 하이드로카르빌 기를 형성할 수 있고, 상기 환형 하이드로카르빌 기 또는 환형 헤테로원자 함유 하이드로카르빌 기는 비치환되거나, 또는 할로겐 원자, C_{1-20} 알킬 기, C_{1-20} 알콕시 기, C_{7-20} 알킬아릴 기, C_{7-20} 아릴알킬 기, C_{6-20} 아릴 기, C_{6-20} 아릴옥시 기, C_{7-20} 알킬아릴옥시 기, C_{7-20} 아릴알킬옥시 기, 화학식 $-NR'_2$의 아미도 기, 화학식 $-PR'_2$의 포스피도 기, 화학식 -SR'의 티올레이트 기, 화학식 $-Si(R^a)_3$의 실릴 기, 및 화학식 $-Ge(R^a)_3$의 게르마닐 기로 이루어지는 군 중에서 선택되는 하나 이상의 치환체에 의해 추가로 치환되고;

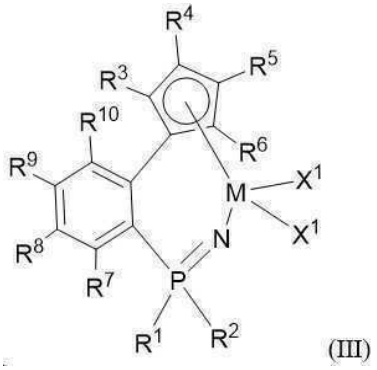
여기서 각 R'는 수소, C_{1-20} 알킬 기, 및 C_{6-20} 아릴 기로 이루어지는 군 중에서 독립적으로 선택되고;

여기서 각 R^a는 수소, C_{1-8} 알킬 기, C_{1-8} 알콕시 기, C_{6-20} 아릴옥시 기 및 C_{6-20} 아릴 기로 이루어지는 군 중에서

독립적으로 선택됨.

청구항 85

제84항에 있어서, 상기 유기금속 복합체가 화학식 III으로 표현되는, 중합 공정:



(III)

여기서, R^7, R^8, R^9, 및 R^{10}은 각각 독립적으로 다음으로 이루어진 군 중에서 선택되고:

할로겐;

수소;

C_{1-30} 하이드로카르빌 기로서, 여기서 하이드로카르빌 기는 비치환되거나, 또는 할로겐 원자, C_{1-20} 알킬 기, C_{1-20} 알콕시 기, C_{7-20} 알킬아릴 기, C_{7-20} 아릴알킬 기, C_{6-20} 아릴 기, C_{6-20} 아릴옥시 기, C_{7-20} 알킬아릴옥시 기, 및 C_{7-20} 아릴알킬옥시 기로 이루어지는 군 중에서 선택되는 하나 이상의 치환체에 의해 추가로 치환되는 C_{1-30} 하이드로카르빌 기;

헤테로원자 함유 C_{1-30} 하이드로카르빌 기로서, 여기서 헤테로원자 함유 하이드로카르빌 기는 비치환되거나, 또는 할로겐 원자, C_{1-20} 알킬 기, C_{1-20} 알콕시 기, C_{7-20} 알킬아릴 기, C_{7-20} 아릴알킬 기, C_{6-20} 아릴 기, C_{6-20} 아릴옥시 기, C_{7-20} 알킬아릴옥시 기, 및 C_{7-20} 아릴알킬옥시 기로 이루어지는 군 중에서 선택되는 하나 이상의 치환체에 의해 추가로 치환되는 헤테로원자 함유 C_{1-30} 하이드로카르빌 기;

옥시 기, -OR';

아미도 기, $-NR'_2$;

포스피도 기, $-PR'_2$;

티올레이트 기, -SR';

화학식 $-Si(R^a)_3$의 실릴 기; 및

화학식 $-Ge(R^a)_3$의 게르마닐 기;

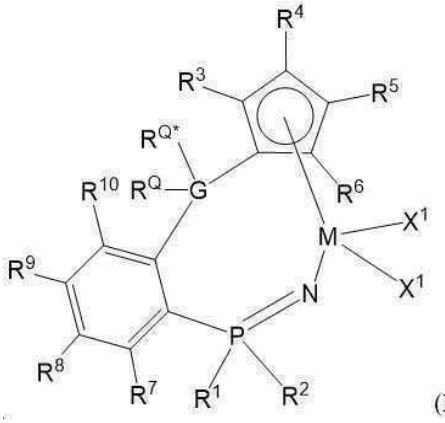
여기서, R^7, R^8, R^9, 및 R^{10} 중 2개의 인접한 기는 선택적으로 결합되어 환형 하이드로카르빌 기 또는 환형 헤테로원자 함유 하이드로카르빌 기를 형성할 수 있고, 상기 환형 하이드로카르빌 기 또는 환형 헤테로원자 함유 하이드로카르빌 기는 비치환되거나, 또는 할로겐 원자, C_{1-20} 알킬 기, C_{1-20} 알콕시 기, C_{7-20} 알킬아릴 기, C_{7-20} 아릴알킬 기, C_{6-20} 아릴 기, C_{6-20} 아릴옥시 기, C_{7-20} 알킬아릴옥시 기, C_{7-20} 아릴알킬옥시 기, 화학식 $-NR'_2$의 아미도 기, 화학식 $-PR'_2$의 포스피도 기, 화학식 -SR'의 티올레이트 기, 화학식 $-Si(R^a)_3$의 실릴 기, 및 화학식 $-Ge(R^a)_3$의 게르마닐 기로 이루어지는 군 중에서 선택되는 하나 이상의 치환체에 의해 추가로 치환되고;

여기서 각 R'는 수소, C_{1-20} 알킬 기, 및 C_{6-20} 아릴 기로 이루어지는 군 중에서 독립적으로 선택되고;

여기서 각 R^a는 수소, C_{1-8} 알킬 기, C_{1-8} 알콕시 기, C_{6-20} 아릴옥시 기 및 C_{6-20} 아릴 기로 이루어지는 군 중에서 독립적으로 선택됨.

청구항 86

제84항에 있어서, 상기 유기금속 복합체가 화학식 IV로 표현되는, 중합 공정:



(IV)

여기서, G는 C 또는 Si이고;

여기서, R^Q 및 R^{Q*}는 각각 독립적으로 다음으로 이루어진 군 중에서 선택되며:

할로겐;

수소;

C_{1-30} 하이드로카르빌 기로서, 여기서 하이드로카르빌 기는 비치환되거나, 또는 할로겐 원자, C_{1-20} 알킬 기, C_{1-20} 알콕시 기, C_{7-20} 알킬아릴 기, C_{7-20} 아릴알킬 기, C_{6-20} 아릴 기, C_{6-20} 아릴옥시 기, C_{7-20} 알킬아릴옥시 기, 및 C_{7-20} 아릴알킬옥시 기로 이루어지는 군 중에서 선택되는 하나 이상의 치환체에 의해 추가로 치환되는 C_{1-30} 하이드로카르빌 기;

헤테로원자 함유 C_{1-30} 하이드로카르빌 기로서, 여기서 헤테로원자 함유 하이드로카르빌 기는 비치환되거나, 또는 할로겐 원자, C_{1-20} 알킬 기, C_{1-20} 알콕시 기, C_{7-20} 알킬아릴 기, C_{7-20} 아릴알킬 기, C_{6-20} 아릴 기, C_{6-20} 아릴옥시 기, C_{7-20} 알킬아릴옥시 기, 및 C_{7-20} 아릴알킬옥시 기로 이루어지는 군 중에서 선택되는 하나 이상의 치환체에 의해 추가로 치환되는 헤테로원자 함유 C_{1-30} 하이드로카르빌 기;

여기서, R^Q 및 R^{Q*} 기는 선택적으로 결합되어 환형 하이드로카르빌 기 또는 환형 헤테로원자 함유 하이드로카르빌 기를 형성할 수 있고, 상기 환형 하이드로카르빌 기 또는 환형 헤테로원자 함유 하이드로카르빌 기는 비치환되거나, 또는 할로겐 원자, C_{1-20} 알킬 기, C_{1-20} 알콕시 기, C_{7-20} 알킬아릴 기, C_{7-20} 아릴알킬 기, C_{6-20} 아릴 기, C_{6-20} 아릴옥시 기, C_{7-20} 알킬아릴옥시 기, C_{7-20} 아릴알킬옥시 기, 화학식 $-NR'_2$의 아미도 기; 화학식 $-PR'_2$의 포스피도 기, 화학식 $-SR'$의 티올레이트 기, 화학식 $-Si(R^a)_3$의 실릴 기, 및 화학식 $-Ge(R^a)_3$의 게르마닐 기로 이루어지는 군 중에서 선택되는 하나 이상의 치환체에 의해 추가로 치환되며;

여기서, R^7, R^8, R^9, 및 R^{10}은 각각 독립적으로 다음으로 이루어진 군 중에서 선택되고:

할로겐;

수소;

C_{1-30} 하이드로카르빌 기로서, 여기서 하이드로카르빌 기는 비치환되거나, 또는 할로겐 원자, C_{1-20} 알킬 기, C_{1-20} 알콕시 기, C_{7-20} 알킬아릴 기, C_{7-20} 아릴알킬 기, C_{6-20} 아릴 기, C_{6-20} 아릴옥시 기, C_{7-20} 알킬아릴옥시 기, 및 C_{7-}

$_{20}$ 아릴알킬옥시 기로 이루어지는 군 중에서 선택되는 하나 이상의 치환체에 의해 추가로 치환되는, C_{1-30} 하이드로카르빌 기;

헤테로원자 함유 C_{1-30} 하이드로카르빌 기로서, 여기서 헤테로원자 함유 하이드로카르빌 기는 비치환되거나, 또는 할로겐 원자, C_{1-20} 알킬 기, C_{1-20} 알콕시 기, C_{7-20} 알킬아릴 기, C_{7-20} 아릴알킬 기, C_{6-20} 아릴 기, C_{6-20} 아릴옥시 기, C_{7-20} 알킬아릴옥시 기, 및 C_{7-20} 아릴알킬옥시 기로 이루어지는 군 중에서 선택되는 하나 이상의 치환체에 의해 추가로 치환되는, 헤테로원자 함유 C_{1-30} 하이드로카르빌 기;

옥시 기, -OR';

아미도 기, $-NR'_2$;

포스피도 기, $-PR'_2$;

티올레이트 기, -SR';

화학식 $-Si(R^a)_3$의 실릴 기; 및

화학식 $-Ge(R^a)_3$의 게르마닐 기;

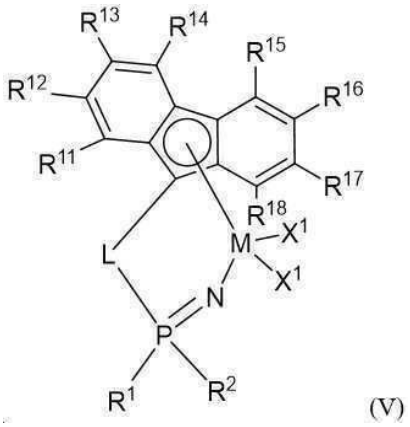
여기서, R^7, R^8, R^9, 및 R^{10} 중 2개의 인접한 기는 선택적으로 결합되어 환형 하이드로카르빌 기 또는 환형 헤테로원자 함유 하이드로카르빌 기를 형성할 수 있고, 상기 환형 하이드로카르빌 기 또는 환형 헤테로원자 함유 하이드로카르빌 기는 비치환되거나, 또는 할로겐 원자, C_{1-20} 알킬 기, C_{1-20} 알콕시 기, C_{7-20} 알킬아릴 기, C_{7-20} 아릴알킬 기, C_{6-20} 아릴 기, C_{6-20} 아릴옥시 기, C_{7-20} 알킬아릴옥시 기, C_{7-20} 아릴알킬옥시 기, 화학식 $-NR'_2$의 아미도 기, 화학식 $-PR'_2$의 포스피도 기, 화학식 -SR'의 티올레이트 기, 화학식 $-Si(R^a)_3$의 실릴 기, 및 화학식 $-Ge(R^a)_3$의 게르마닐 기로 이루어지는 군 중에서 선택되는 하나 이상의 치환체에 의해 추가로 치환되고;

여기서 각 R'는 수소, C_{1-20} 알킬 기, 및 C_{6-20} 아릴 기로 이루어지는 군 중에서 독립적으로 선택되고;

여기서 각 R^a는 수소, C_{1-8} 알킬 기, C_{1-8} 알콕시 기, C_{6-20} 아릴옥시 기 및 C_{6-20} 아릴 기로 이루어지는 군 중에서 독립적으로 선택됨.

청구항 87

제83항에 있어서, 상기 유기금속 복합체가 화학식 V로 표현되는, 중합 공정:



(V)

여기서, R^{11}, R^{12}, R^{13}, R^{14}, R^{15}, R^{16}, R^{17}, R^{18}은 각각 독립적으로 다음으로 이루어진 군 중에서 선택되고:

할로겐;

수소;

C_{1-30} 하이드로카르빌 기로서, 여기서 하이드로카르빌 기는 비치환되거나, 또는 할로겐 원자, C_{1-20} 알킬 기, C_{1-20} 알콕시 기, C_{7-20} 알킬아릴 기, C_{7-20} 아릴알킬 기, C_{6-20} 아릴 기, C_{6-20} 아릴옥시 기, C_{7-20} 알킬아릴옥시 기, 및 C_{7-20} 아릴알킬옥시 기로 이루어지는 군 중에서 선택되는 하나 이상의 치환체에 의해 추가로 치환되는, C_{1-30} 하이드로카르빌 기;

헤테로원자 함유 C_{1-30} 하이드로카르빌 기로서, 여기서 헤테로원자 함유 하이드로카르빌 기는 비치환되거나, 또는 할로겐 원자, C_{1-20} 알킬 기, C_{1-20} 알콕시 기, C_{7-20} 알킬아릴 기, C_{7-20} 아릴알킬 기, C_{6-20} 아릴 기, C_{6-20} 아릴옥시 기, C_{7-20} 알킬아릴옥시 기, 및 C_{7-20} 아릴알킬옥시 기로 이루어지는 군 중에서 선택되는 하나 이상의 치환체에 의해 추가로 치환되는, 헤테로원자 함유 C_{1-30} 하이드로카르빌 기;

옥시 기, -OR';

아미도 기, $-NR'_2$;

포스피도 기, $-PR'_2$;

티올레이트 기, -SR';

화학식 $-Si(R^a)_3$의 실릴 기; 및

화학식 $-Ge(R^a)_3$의 게르마닐 기;

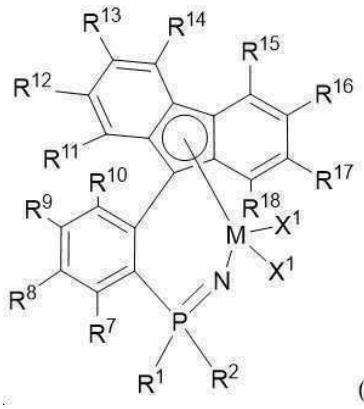
여기서, R^{11}, R^{12}, R^{13}, R^{14}, R^{15}, R^{16}, R^{17}, R^{18} 중 2개의 인접한 기는 선택적으로 결합되어 환형 하이드로카르빌 기 또는 환형 헤테로원자 함유 하이드로카르빌 기를 형성할 수 있고, 상기 환형 하이드로카르빌 기 또는 환형 헤테로원자 함유 하이드로카르빌 기는 비치환되거나, 또는 할로겐 원자, C_{1-20} 알킬 기, C_{1-20} 알콕시 기, C_{7-20} 알킬아릴 기, C_{7-20} 아릴알킬 기, C_{6-20} 아릴 기, C_{6-20} 아릴옥시 기, C_{7-20} 알킬아릴옥시 기, C_{7-20} 아릴알킬옥시 기, 화학식 $-NR'_2$의 아미도 기, 화학식 $-PR'_2$의 포스피도 기, 화학식 -SR'의 티올레이트 기, 화학식 $-Si(R^a)_3$의 실릴 기, 및 화학식 $-Ge(R^a)_3$의 게르마닐 기로 이루어지는 군 중에서 선택되는 하나 이상의 치환체에 의해 추가로 치환되고;

여기서 각 R'는 수소, C_{1-20} 알킬 기, 및 C_{6-20} 아릴 기로 이루어지는 군 중에서 독립적으로 선택되고;

여기서 각 R^a는 수소, C_{1-8} 알킬 기, C_{1-8} 알콕시 기, C_{6-20} 아릴옥시 기 및 C_{6-20} 아릴 기로 이루어지는 군 중에서 독립적으로 선택됨.

청구항 88

제87항에 있어서, 상기 유기금속 복합체가 화학식 VI으로 표현되는, 중합 공정:



(VI)

여기서, R^7, R^8, R^9, 및 R^{10}은 각각 독립적으로 다음으로 이루어진 군 중에서 선택되고:

할로겐;

수소;

C_{1-30} 하이드로카르빌 기로서, 여기서 하이드로카르빌 기는 비치환되거나, 또는 할로겐 원자, C_{1-20} 알킬 기, C_{1-20} 알콕시 기, C_{7-20} 알킬아릴 기, C_{7-20} 아릴알킬 기, C_{6-20} 아릴 기, C_{6-20} 아릴옥시 기, C_{7-20} 알킬아릴옥시 기, 및 C_{7-20} 아릴알킬옥시 기로 이루어지는 군 중에서 선택되는 하나 이상의 치환체에 의해 추가로 치환되는, C_{1-30} 하이드로카르빌 기;

헤테로원자 함유 C_{1-30} 하이드로카르빌 기로서, 여기서 헤테로원자 함유 하이드로카르빌 기는 비치환되거나, 또는 할로겐 원자, C_{1-20} 알킬 기, C_{1-20} 알콕시 기, C_{7-20} 알킬아릴 기, C_{7-20} 아릴알킬 기, C_{6-20} 아릴 기, C_{6-20} 아릴옥시 기, C_{7-20} 알킬아릴옥시 기, 및 C_{7-20} 아릴알킬옥시 기로 이루어지는 군 중에서 선택되는 하나 이상의 치환체에 의해 추가로 치환되는, 헤테로원자 함유 C_{1-30} 하이드로카르빌 기;

옥시 기, -OR';

아미도 기, $-NR'_2$;

포스피도 기, $-PR'_2$;

티올레이트 기, -SR';

화학식 $-Si(R^a)_3$의 실릴 기; 및

화학식 $-Ge(R^a)_3$의 게르마닐 기;

여기서, R^7, R^8, R^9, 및 R^{10} 중 2개의 인접한 기는 선택적으로 결합되어 환형 하이드로카르빌 기 또는 환형 헤테로원자 함유 하이드로카르빌 기를 형성할 수 있고, 상기 환형 하이드로카르빌 기 또는 환형 헤테로원자 함유 하이드로카르빌 기는 비치환되거나, 또는 할로겐 원자, C_{1-20} 알킬 기, C_{1-20} 알콕시 기, C_{7-20} 알킬아릴 기, C_{7-20} 아릴알킬 기, C_{6-20} 아릴 기, C_{6-20} 아릴옥시 기, C_{7-20} 알킬아릴옥시 기, C_{7-20} 아릴알킬옥시 기, 화학식 $-NR'_2$의 아미도 기, 화학식 $-PR'_2$의 포스피도 기, 화학식 -SR'의 티올레이트 기, 화학식 $-Si(R^a)_3$의 실릴 기, 및 화학식 $-Ge(R^a)_3$의 게르마닐 기로 이루어지는 군 중에서 선택되는 하나 이상의 치환체에 의해 추가로 치환되고;

여기서 각 R'는 수소, C_{1-20} 알킬 기, 및 C_{6-20} 아릴 기로 이루어지는 군 중에서 독립적으로 선택되고;

여기서 각 R^a는 수소, C_{1-8} 알킬 기, C_{1-8} 알콕시 기, C_{6-20} 아릴옥시 기 및 C_{6-20} 아릴 기로 이루어지는 군 중에서 독립적으로 선택됨.

청구항 89

제88항에 있어서, M이 Ti인, 중합 공정.

청구항 90

제88항에 있어서, R^7, R^8, R^9, 및 R^{10}이 각각 수소인, 중합 공정.

청구항 91

제88항에 있어서, R^1 및 R^2가 각각 독립적으로 비치환된 C_{1-30} 하이드로카르빌 기인, 중합 공정.

청구항 92

제91항에 있어서, R^1 및 R^2가 각각 독립적으로 이소프로필, 사이클로헥실 및 *tert*-부틸로 이루어지는 군 중에서 선택되는, 중합 공정.

청구항 93

제88항에 있어서, R^{12} 및 R^{17}이 각각 독립적으로 비치환된 C_{1-30} 하이드로카르빌 기이고, R^{11}, R^{13}, R^{14}, R^{15}, R^{16}, 및 R^{18}이 각각 수소인, 중합 공정.

청구항 94

제93항에 있어서, R^{12} 및 R^{17}이 각각 *tert*-부틸 기인, 중합 공정.

청구항 95

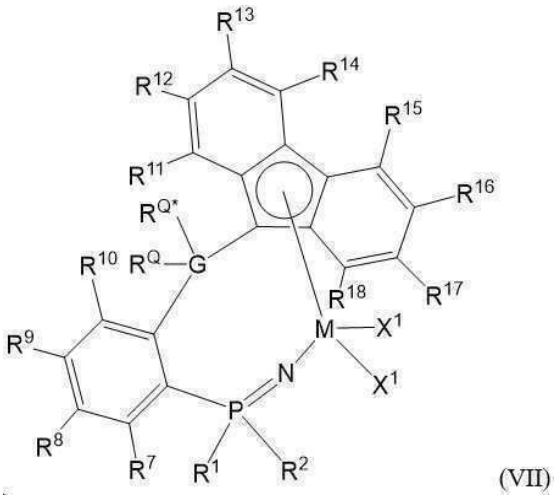
제88항에 있어서, 각 X^1이 독립적으로, C_{1-6} 알킬 기, C_{7-10} 아릴알킬 기, 및 할로겐으로 이루어지는 군 중에서 선택되는, 중합 공정.

청구항 96

제95항에 있어서, 각 X^1이 독립적으로 메틸 기 및 Cl로 이루어지는 군 중에서 선택되는, 중합 공정.

청구항 97

제87항에 있어서, 상기 유기금속 복합체가 화학식 VII로 표현되는, 중합 공정:



(VII)

여기서, G는 C 또는 Si이고;

여기서, R^{Q} 및 R^{Q*}는 각각 독립적으로 다음으로 이루어진 군 중에서 선택되며:

할로겐;

수소;

C_{1-30} 하이드로카르빌 기로서, 여기서 하이드로카르빌 기는 비치환되거나, 또는 할로겐 원자, C_{1-20} 알킬 기, C_{1-20} 알콕시 기, C_{7-20} 알킬아릴 기, C_{7-20} 아릴알킬 기, C_{6-20} 아릴 기, C_{6-20} 아릴옥시 기, C_{7-20} 알킬아릴옥시 기, 및 C_{7-20} 아릴알킬옥시 기로 이루어지는 군 중에서 선택되는 하나 이상의 치환체에 의해 추가로 치환되는 C_{1-30} 하이드로카르빌 기;

헤테로원자 함유 C_{1-30} 하이드로카르빌 기로서, 여기서 헤테로원자 함유 하이드로카르빌 기는 비치환되거나, 또는 할로겐 원자, C_{1-20} 알킬 기, C_{1-20} 알콕시 기, C_{7-20} 알킬아릴 기, C_{7-20} 아릴알킬 기, C_{6-20} 아릴 기, C_{6-20} 아릴옥시 기, C_{7-20} 알킬아릴옥시 기, 및 C_{7-20} 아릴알킬옥시 기로 이루어지는 군 중에서 선택되는 하나 이상의 치환체에 의해 추가로 치환되는 헤테로원자 함유 C_{1-30} 하이드로카르빌 기;

여기서, R^{Q} 및 R^{Q*} 기는 선택적으로 결합되어 환형 하이드로카르빌 기 또는 환형 헤테로원자 함유 하이드로카르빌 기를 형성할 수 있고, 상기 환형 하이드로카르빌 기 또는 환형 헤테로원자 함유 하이드로카르빌 기는 비치환되거나, 또는 할로겐 원자, C_{1-20} 알킬 기, C_{1-20} 알콕시 기, C_{7-20} 알킬아릴 기, C_{7-20} 아릴알킬 기, C_{6-20} 아릴 기, C_{6-20} 아릴옥시 기, C_{7-20} 알킬아릴옥시 기, C_{7-20} 아릴알킬옥시 기, 화학식 $-NR'_2$의 아미도 기, 화학식 $-PR'_2$의 포스피도 기, 화학식 $-SR'$의 티올레이트 기, 화학식 $-Si(R^{a})_3$의 실릴 기, 및 화학식 $-Ge(R^{a})_3$의 게르마닐 기로 이루어지는 군 중에서 선택되는 하나 이상의 치환체에 의해 추가로 치환되며;

여기서, R^{7}, R^{8}, R^{9}, 및 R^{10}은 각각 독립적으로 다음으로 이루어진 군 중에서 선택되고:

할로겐;

수소;

C_{1-30} 하이드로카르빌 기로서, 여기서 하이드로카르빌 기는 비치환되거나, 또는 할로겐 원자, C_{1-20} 알킬 기, C_{1-20} 알콕시 기, C_{7-20} 알킬아릴 기, C_{7-20} 아릴알킬 기, C_{6-20} 아릴 기, C_{6-20} 아릴옥시 기, C_{7-20} 알킬아릴옥시 기, 및 C_{7-20} 아릴알킬옥시 기로 이루어지는 군 중에서 선택되는 하나 이상의 치환체에 의해 추가로 치환되는, C_{1-30} 하이드

로카르빌 기;

헤테로원자 함유 C_{1-30} 하이드로카르빌 기로서, 여기서 헤테로원자 함유 하이드로카르빌 기는 비치환되거나, 또는 할로겐 원자, C_{1-20} 알킬 기, C_{1-20} 알콕시 기, C_{7-20} 알킬아릴 기, C_{7-20} 아릴알킬 기, C_{6-20} 아릴 기, C_{6-20} 아릴옥시 기, C_{7-20} 알킬아릴옥시 기, 및 C_{7-20} 아릴알킬옥시 기로 이루어지는 군 중에서 선택되는 하나 이상의 치환체에 의해 추가로 치환되는, 헤테로원자 함유 C_{1-30} 하이드로카르빌 기;

옥시 기, -OR';

아미도 기, $-NR'_2$;

포스피도 기, $-PR'_2$;

티올레이트 기, -SR';

화학식 $-Si(R^a)_3$의 실릴 기; 및

화학식 $-Ge(R^a)_3$의 게르마닐 기;

여기서, R^7, R^8, R^9, 및 R^{10} 중 2개의 인접한 기는 선택적으로 결합되어 환형 하이드로카르빌 기 또는 환형 헤테로원자 함유 하이드로카르빌 기를 형성할 수 있고, 상기 환형 하이드로카르빌 기 또는 환형 헤테로원자 함유 하이드로카르빌 기는 비치환되거나, 또는 할로겐 원자, C_{1-20} 알킬 기, C_{1-20} 알콕시 기, C_{7-20} 알킬아릴 기, C_{7-20} 아릴알킬 기, C_{6-20} 아릴 기, C_{6-20} 아릴옥시 기, C_{7-20} 알킬아릴옥시 기, C_{7-20} 아릴알킬옥시 기, 화학식 $-NR'_2$의 아미도 기, 화학식 $-PR'_2$의 포스피도 기, 화학식 -SR'의 티올레이트 기, 화학식 $-Si(R^a)_3$의 실릴 기, 및 화학식 $-Ge(R^a)_3$의 게르마닐 기로 이루어지는 군 중에서 선택되는 하나 이상의 치환체에 의해 추가로 치환되고;

여기서 각 R'는 수소, C_{1-20} 알킬 기, 및 C_{6-20} 아릴 기로 이루어지는 군 중에서 독립적으로 선택되고;

여기서 각 R^a는 수소, C_{1-8} 알킬 기, C_{1-8} 알콕시 기, C_{6-20} 아릴옥시 기 및 C_{6-20} 아릴 기로 이루어지는 군 중에서 독립적으로 선택됨.

청구항 98

제97항에 있어서, M이 Ti인, 중합 공정.

청구항 99

제97항에 있어서, R^7, R^8, R^9, 및 R^{10}이 각각 수소인, 중합 공정.

청구항 100

제97항에 있어서, R^1 및 R^2가 각각 독립적으로 비치환된 C_{1-30} 하이드로카르빌 기인, 중합 공정.

청구항 101

제100항에 있어서, R^1 및 R^2가 각각 독립적으로 이소프로필, 사이클로헥실 및 *tert*-부틸로 이루어지는 군 중에서 선택되는, 중합 공정.

청구항 102

제97항에 있어서, R^{12} 및 R^{17}이 각각 독립적으로 비치환된 C_{1-30} 하이드로카르빌 기이고, R^{11}, R^{13}, R^{14}, R^{15}, R^{16}, 및 R^{18}은 각각 수소인, 중합 공정.

청구항 103

제102항에 있어서, R^{12} 및 R^{17}이 각각 *tert*-부틸 기인, 중합 공정.

청구항 104

제97항에 있어서, G가 탄소인, 중합 공정.

청구항 105

제104항에 있어서, R^{Q} 및 R^{Q*}가 각각 독립적으로 수소, C_{1-20} 알킬 기, 및 C_{6-20} 아릴 기로 이루어지는 군 중에서 선택되는, 중합 공정.

청구항 106

제104항에 있어서, R^{Q}가 수소이고, R^{Q*}가 C_{1-8} 알킬 기인, 중합 공정.

청구항 107

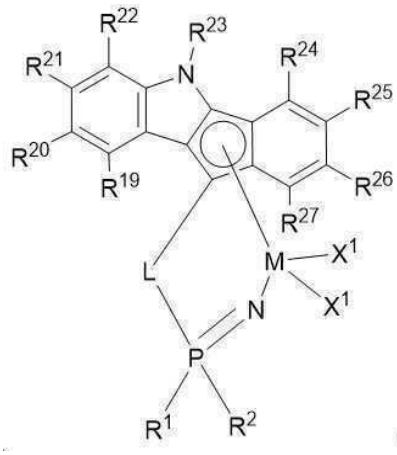
제97항에 있어서, 각 X^{1}이 독립적으로 C_{1-6} 알킬 기, C_{7-10} 아릴알킬 기, 및 할로겐으로 이루어지는 군 중에서 선택되는, 중합 공정.

청구항 108

제107항에 있어서, 각 X^{1}이 독립적으로 메틸 기 및 Cl로 이루어지는 군 중에서 선택되는, 중합 공정.

청구항 109

제83항에 있어서, 상기 유기금속 복합체가 화학식 VIII로 표현되는 것인, 중합 공정:



(VIII)

여기서, R^{23}은 다음으로 이루어진 군 중에서 선택되며:

수소;

C_{1-30} 하이드로카르빌 기로서, 여기서 하이드로카르빌 기는 비치환되거나, 또는 할로겐 원자, C_{1-20} 알킬 기, C_{1-20} 알콕시 기, C_{7-20} 알킬아릴 기, C_{7-20} 아릴알킬 기, C_{6-20} 아릴 기, C_{6-20} 아릴옥시 기, C_{7-20} 알킬아릴옥시 기, 및 C_{7-20} 아릴알킬옥시 기로 이루어지는 군 중에서 선택되는 하나 이상의 치환체에 의해 추가로 치환되는 C_{1-30} 하이드로카르빌 기;

헤테로원자 함유 C_{1-30} 하이드로카르빌 기로서, 여기서 헤테로원자 함유 하이드로카르빌 기는 비치환되거나, 또는 할로겐 원자, C_{1-20} 알킬 기, C_{1-20} 알콕시 기, C_{7-20} 알킬아릴 기, C_{7-20} 아릴알킬 기, C_{6-20} 아릴 기, C_{6-20} 아릴옥시

기, C_{7-20} 알킬아릴옥시 기, 및 C_{7-20} 아릴알킬옥시 기로 이루어지는 군 중에서 선택되는 하나 이상의 치환체에 의해 추가로 치환되는 헤테로원자 함유 C_{1-30} 하이드로카르빌 기;

여기서, R^{19}, R^{20}, R^{21}, R^{22}, R^{24}, R^{25}, R^{26}, 및 R^{27}은 각각 독립적으로 다음으로 이루어진 군 중에서 선택되고:

할로겐;

수소;

C_{1-30} 하이드로카르빌 기로서, 여기서 하이드로카르빌 기는 비치환되거나, 또는 할로겐 원자, C_{1-20} 알킬 기, C_{1-20} 알콕시 기, C_{7-20} 알킬아릴 기, C_{7-20} 아릴알킬 기, C_{6-20} 아릴 기, C_{6-20} 아릴옥시 기, C_{7-20} 알킬아릴옥시 기, 및 C_{7-20} 아릴알킬옥시 기로 이루어지는 군 중에서 선택되는 하나 이상의 치환체에 의해 추가로 치환되는, C_{1-30} 하이드로카르빌 기;

헤테로원자 함유 C_{1-30} 하이드로카르빌 기로서, 여기서 헤테로원자 함유 하이드로카르빌 기는 비치환되거나, 또는 할로겐 원자, C_{1-20} 알킬 기, C_{1-20} 알콕시 기, C_{7-20} 알킬아릴 기, C_{7-20} 아릴알킬 기, C_{6-20} 아릴 기, C_{6-20} 아릴옥시 기, C_{7-20} 알킬아릴옥시 기, 및 C_{7-20} 아릴알킬옥시 기로 이루어지는 군 중에서 선택되는 하나 이상의 치환체에 의해 추가로 치환되는, 헤테로원자 함유 C_{1-30} 하이드로카르빌 기;

옥시 기, -OR';

아미도 기, $-NR'_2$;

포스피도 기, $-PR'_2$;

티올레이트 기, -SR';

화학식 $-Si(R^a)_3$의 실릴 기; 및

화학식 $-Ge(R^a)_3$의 게르마닐 기;

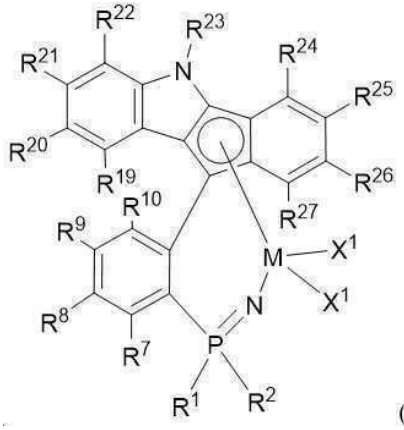
여기서, R^{19}, R^{20}, R^{21}, R^{22}, R^{24}, R^{25}, R^{26}, 및 R^{27} 중 2개의 인접한 기는 선택적으로 결합되어 환형 하이드로카르빌 기 또는 환형 헤테로원자 함유 하이드로카르빌 기를 형성할 수 있고, 상기 환형 하이드로카르빌 기 또는 환형 헤테로원자 함유 하이드로카르빌 기는 비치환되거나, 또는 할로겐 원자, C_{1-20} 알킬 기, C_{1-20} 알콕시 기, C_{7-20} 알킬아릴 기, C_{7-20} 아릴알킬 기, C_{6-20} 아릴 기, C_{6-20} 아릴옥시 기, C_{7-20} 알킬아릴옥시 기, C_{7-20} 아릴알킬옥시 기, 화학식 $-NR'_2$의 아미도 기, 화학식 $-PR'_2$의 포스피도 기, 화학식 -SR'의 티올레이트 기, 화학식 $-Si(R^a)_3$의 실릴 기, 및 화학식 $-Ge(R^a)_3$의 게르마닐 기로 이루어지는 군 중에서 선택되는 하나 이상의 치환체에 의해 추가로 치환되고;

여기서 각 R'는 수소, C_{1-20} 알킬 기, 및 C_{6-20} 아릴 기로 이루어지는 군 중에서 독립적으로 선택되고;

여기서 각 R^a는 수소, C_{1-8} 알킬 기, C_{1-8} 알콕시 기, C_{6-20} 아릴옥시 기 및 C_{6-20} 아릴 기로 이루어지는 군 중에서 독립적으로 선택됨.

청구항 110

제109항에 있어서, 상기 유기금속 복합체가 화학식 IX로 표현되는, 중합 공정:



(IX)

여기서, R^7, R^8, R^9 및 R^{10}은 각각 독립적으로 다음으로 이루어진 군 중에서 선택되며:

할로겐;

수소;

C_{1-30} 하이드로카르빌 기로서, 여기서 하이드로카르빌 기는 비치환되거나, 또는 할로겐 원자, C_{1-20} 알킬 기, C_{1-20} 알콕시 기, C_{7-20} 알킬아릴 기, C_{7-20} 아릴알킬 기, C_{6-20} 아릴 기, C_{6-20} 아릴옥시 기, C_{7-20} 알킬아릴옥시 기, 및 C_{7-20} 아릴알킬옥시 기로 이루어지는 군 중에서 선택되는 하나 이상의 치환체에 의해 추가로 치환되는 C_{1-30} 하이드로카르빌 기;

헤테로원자 함유 C_{1-30} 하이드로카르빌 기로서, 여기서 헤테로원자 함유 하이드로카르빌 기는 비치환되거나, 또는 할로겐 원자, C_{1-20} 알킬 기, C_{1-20} 알콕시 기, C_{7-20} 알킬아릴 기, C_{7-20} 아릴알킬 기, C_{6-20} 아릴 기, C_{6-20} 아릴옥시 기, C_{7-20} 알킬아릴옥시 기, 및 C_{7-20} 아릴알킬옥시 기로 이루어지는 군 중에서 선택되는 하나 이상의 치환체에 의해 추가로 치환되는 헤테로원자 함유 C_{1-30} 하이드로카르빌 기;

옥시 기, -OR';

아미도 기, $-NR'_2$;

포스피도 기, $-PR'_2$;

티올레이트 기, -SR';

화학식 $-Si(R^a)_3$의 실릴 기; 및

화학식 $-Ge(R^a)_3$의 게르마닐 기;

여기서, R^7, R^8, R^9, 및 R^{10} 중 2개의 인접한 기는 선택적으로 결합되어 환형 하이드로카르빌 기 또는 환형 헤테로원자 함유 하이드로카르빌 기를 형성할 수 있고, 상기 환형 하이드로카르빌 기 또는 환형 헤테로원자 함유 하이드로카르빌 기는 비치환되거나, 또는 할로겐 원자, C_{1-20} 알킬 기, C_{1-20} 알콕시 기, C_{7-20} 알킬아릴 기, C_{7-20} 아릴알킬 기, C_{6-20} 아릴 기, C_{6-20} 아릴옥시 기, C_{7-20} 알킬아릴옥시 기, C_{7-20} 아릴알킬옥시 기, 화학식 $-NR'_2$의 아미도 기, 화학식 $-PR'_2$의 포스피도 기, 화학식 -SR'의 티올레이트 기, 화학식 $-Si(R^a)_3$의 실릴 기, 및 화학식 $-Ge(R^a)_3$의 게르마닐 기로 이루어지는 군 중에서 선택되는 하나 이상의 치환체에 의해 추가로 치환되고;

여기서 각 R'는 수소, C_{1-20} 알킬 기, 및 C_{6-20} 아릴 기로 이루어지는 군 중에서 독립적으로 선택되고;

여기서 각 R^a는 수소, C_{1-8} 알킬 기, C_{1-8} 알콕시 기, C_{6-20} 아릴옥시 기 및 C_{6-20} 아릴 기로 이루어지는 군 중에서 독립적으로 선택됨.

청구항 111

제110항에 있어서, M이 Ti인, 중합 공정.

청구항 112

제110항에 있어서, R^7, R^8, R^9, 및 R^{10}이 각각 수소인, 중합 공정.

청구항 113

제110항에 있어서, R^1 및 R^2가 각각 독립적으로 비치환된 C_{1-30} 하이드로카르빌 기인, 중합 공정.

청구항 114

제113항에 있어서, R^1 및 R^2가 각각 독립적으로 이소프로필, 사이클로헥실 및 *tert*-부틸로 이루어지는 군 중에서 선택되는, 중합 공정.

청구항 115

제110항에 있어서, R^{23}이 비치환된 C_{1-30} 하이드로카르빌 기인, 중합 공정.

청구항 116

제115항에 있어서, R^{23}이 C_{1-8} 알킬 기인, 중합 공정.

청구항 117

제110항에 있어서, R^{20}이 비치환된 C_{1-30} 하이드로카르빌 기인, 중합 공정.

청구항 118

제117항에 있어서, R^{20}이 비치환된 C_{1-8} 알킬 기인, 중합 공정.

청구항 119

제110항에 있어서, R^{20}이 비치환된 C_{1-30} 하이드로카르빌 기이고, R^{19}, R^{21}, R^{22}, R^{24}, R^{25}, R^{26}, 및 R^{27}이 각각 수소인, 중합 공정.

청구항 120

제119항에 있어서, R^{20}이 C_{1-8} 알킬 기인, 중합 공정.

청구항 121

제110항에 있어서, 각 X^1이 C_{1-6} 알킬 기, C_{7-10} 아릴알킬 기, 및 할로겐으로 이루어지는 군 중에서 독립적으로 선택되는, 중합 공정.

청구항 122

제121항에 있어서, 각 X^1이 메틸 기 및 Cl로 이루어지는 군 중에서 독립적으로 선택되는, 중합 공정.

청구항 123

제83항 내지 제122항 중 어느 한 항에 있어서, 상기 촉매 활성화제가 알킬알루미녹산 공촉매, 유기알루미늄 화합물, 붕소계 촉매 활성화제, 및 이들의 혼합물로 이루어지는 군 중에서 선택되는, 중합 공정.

청구항 124

제123항에 있어서, 상기 붕소계 촉매 활성화제가 [(수소화된 탈로우 알킬)$_2$(Me)NH][B(C_6F_5)$_4$]; N,N-디메틸아닐리늄 테트라키스(펜타플루오로페닐) 붕산염 ("[Me_2NHPh][B(C_6F_5)$_4$]"); 및 트리페닐메틸륨 테트라키스(펜타플루오로페닐) 붕산염 ("[Ph_3C][B(C_6F_5)$_4$]")으로 이루어지는 군 중에서 선택되는, 중합 공정.

청구항 125

제83항 내지 제124항 중 어느 한 항에 있어서, 상기 하나 이상의 C_3-C_{12} 알파-올레핀이 1-부텐, 1-헥센, 및 1-옥텐으로 이루어지는 군 중에서 선택되는 하나 이상의 알파-올레핀을 포함하는, 중합 공정.

청구항 126

제83항 내지 제124항 중 어느 한 항에 있어서, 상기 공정이 에틸렌을 1-옥텐과 중합시키는 것을 포함하는, 중합 공정.

청구항 127

제83항 내지 제126항 중 어느 한 항에 있어서, 상기 공정이 용매에서 수행되는 용액 상 중합 공정인, 중합 공정.

청구항 128

제127항에 있어서, 상기 용액 상 중합 공정이 적어도 160℃의 온도에서 수행되는, 중합 공정.

청구항 129

제83항 내지 제126항 중 어느 한 항에 있어서, 상기 중합 공정이 용매에서 수행되는 연속 용액 상 중합 공정인, 중합 공정.

청구항 130

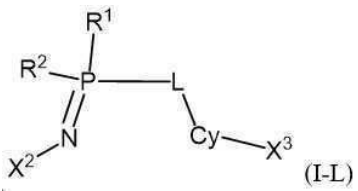
제129항에 있어서, 상기 연속 용액 상 중합 공정이 적어도 하나의 연속 교반 탱크 반응기에서 수행되는, 중합 공정.

청구항 131

제129항 또는 제130항에 있어서, 상기 연속 용액 상 중합 공정이 적어도 160℃의 온도에서 수행되는, 중합 공정.

청구항 132

화학식 I-L로 표현되는 예비금속화 화합물:



(I-L)

여기서,

R^1 및 R^2는 각각 독립적으로 수소 및 R^X로 이루어진 군 중에서 선택되거나; 또는 R^1 및 R^2는 이들이 부착된 P 원자와 함께, 비치환되거나, 또는 할로겐 원자, C_{1-20} 알킬 기, C_{1-20} 알콕시 기, C_{7-20} 알킬아릴 기, C_{7-20} 아릴알킬 기, C_{6-20} 아릴 기, C_{6-20} 아릴옥시 기, C_{7-20} 알킬아릴옥시 기, 및 C_{7-20} 아릴알킬옥시 기로 이루어진 군 중에서 선택되는 하나 이상의 치환체에 의해 추가로 치환되는 3-10원 헤테로환형 기를 형성하며;

각 R^X는 할로겐 원자; 하이드로카르빌 기가 비치환되거나, 또는 하나 이상의 할로겐 원자, C_{1-20} 알킬 기, C_{1-20} 알콕시 기, C_{7-20} 알킬아릴 기, C_{7-20} 아릴알킬 기, C_{6-20} 아릴 기, C_{6-20} 아릴옥시 기, C_{7-20} 알킬아릴옥시 기, 및/또는 C_{7-20} 아릴알킬옥시 기에 의해 추가로 치환되는 C_{1-30} 하이드로카르빌 기; 화학식 $-NR'_2$의 아미도 기; 화학식 $-Si(R^a)_3$의 실릴 기; 화학식 $-Ge(R^a)_3$의 게르마닐 기; 및 화학식 $-N=P(R^b)(R^c)(R^d)$의 포스핀이민 기로 이루어진 군 중에서 독립적으로 선택되고; 여기서 각 R'는 수소, C_{1-20} 알킬 기, 및 C_{6-20} 아릴 기로 이루어지는 군 중에서 독립적으로 선택되고; 각 R^a는 수소, C_{1-8} 알킬 기, C_{1-8} 알콕시 기, C_{6-20} 아릴옥시 기 및 C_{6-20} 아릴 기로 이루어진 군 중에서 독립적으로 선택되고; R^b, R^c, R^d는 각각 독립적으로 C_{1-20} 알킬 기이며;

Cy는 사이클로펜타디에닐형 모이어티이고 L 및 X^3에 공유 결합되고,

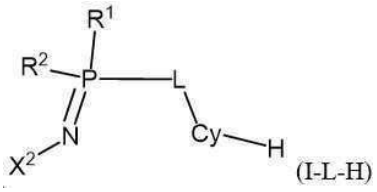
X^2는 수소, 또는 화학식 $-Si(R^e)_3$의 실릴 기이고,

X^3은 수소, 또는 화학식 $-Si(R^e)_3$의 실릴 기, 또는 화학식 $Sn(R^e)_3$의 주석 기이며; 여기서, 각 R^e는 수소, C_{1-8} 알킬 기, C_{1-8} 알콕시 기, C_{6-20} 아릴옥시 기, 및 C_{6-20} 아릴 기로 이루어지는 군 중에서 독립적으로 선택되고; 그리고

L은 Cy와 P를 연결하는 원자의 근접한 사슬을 함유하는 가교 기로서, 여기서 근접한 사슬은 2개 또는 3개의 원자를 함유함.

청구항 133

화학식 I-L-H로 표현되는 예비금속화 화합물:



(I-L-H)

여기서,

R^1 및 R^2는 각각 독립적으로 수소 및 R^X로 이루어진 군 중에서 선택되거나; 또는 R^1 및 R^2는 이들이 부착된 P 원자와 함께, 비치환되거나, 또는 할로겐 원자, C_{1-20} 알킬 기, C_{1-20} 알콕시 기, C_{7-20} 알킬아릴 기, C_{7-20} 아릴알킬 기, C_{6-20} 아릴 기, C_{6-20} 아릴옥시 기, C_{7-20} 알킬아릴옥시 기, 및 C_{7-20} 아릴알킬옥시 기로 이루어진 군 중에서 선택되는 하나 이상의 치환체에 의해 추가로 치환되는 3-10원 헤테로환형 기를 형성하며;

각 R^X는 할로겐 원자; 하이드로카르빌 기가 비치환되거나, 또는 하나 이상의 할로겐 원자, C_{1-20} 알킬 기, C_{1-20} 알콕시 기, C_{7-20} 알킬아릴 기, C_{7-20} 아릴알킬 기, C_{6-20} 아릴 기, C_{6-20} 아릴옥시 기, C_{7-20} 알킬아릴옥시 기, 및/또는 C_{7-20} 아릴알킬옥시 기에 의해 추가로 치환되는 C_{1-30} 하이드로카르빌 기; 화학식 $-NR'_2$의 아미도 기; 화학식 $-Si(R^a)_3$의 실릴 기; 화학식 $-Ge(R^a)_3$의 게르마닐 기; 및 화학식 $-N=P(R^b)(R^c)(R^d)$의 포스핀이민 기로 이루어진 군 중에서 독립적으로 선택되고; 여기서 각 R'는 수소, C_{1-20} 알킬 기, 및 C_{6-20} 아릴 기로 이루어지는 군 중에서 독립적으로 선택되고; 각 R^a는 수소, C_{1-8} 알킬 기, C_{1-8} 알콕시 기, C_{6-20} 아릴옥시 기 및 C_{6-20} 아릴 기로 이루어진

군 중에서 독립적으로 선택되고; R^b, R^c, R^d는 각각 독립적으로 C_{1-20} 알킬 기이며;

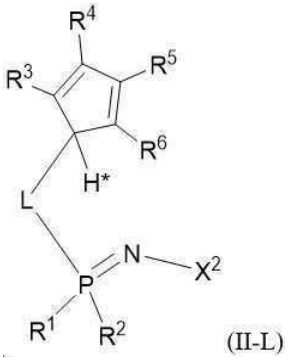
X^2는 수소, 또는 화학식 $-Si(R^e)_3$의 실릴 기이고, 여기서 각 R^e는 수소, C_{1-8} 알킬 기, C_{1-8} 알콕시 기, C_{6-20} 아릴옥시 기 및 C_{6-20} 아릴 기로 이루어지는 군 중에서 독립적으로 선택되고;

Cy는 사이클로펜타디에닐형 모이어티이고 L 및 H에 공유 결합되고; 그리고

L은 Cy와 P를 연결하는 원자의 근접한 사슬을 함유하는 가교 기로서, 여기서 근접한 사슬은 2개 또는 3개의 원자를 함유함.

청구항 134

제133항에 있어서, 상기 예비금속화 화합물이 화학식 II-L로 표현되거나, 또는 사이클로펜타디에닐 고리 내에서 수소 H^*의 이동에 의해 입수 가능한 화학식 II-L의 이중 결합 이성질체인, 예비금속화 화합물:



(II-L)

여기서, R^3, R^4, R^5 및 R^6은 각각 독립적으로 다음으로 이루어진 군 중에서 선택되고:

할로겐;

수소;

C_{1-30} 하이드로카르빌 기로서, 여기서 하이드로카르빌 기는 비치환되거나, 또는 할로겐 원자, C_{1-20} 알킬 기, C_{1-20} 알콕시 기, C_{7-20} 알킬아릴 기, C_{7-20} 아릴알킬 기, C_{6-20} 아릴 기, C_{6-20} 아릴옥시 기, C_{7-20} 알킬아릴옥시 기, 및 C_{7-20} 아릴알킬옥시 기로 이루어지는 군 중에서 선택되는 하나 이상의 치환체에 의해 추가로 치환되는 C_{1-30} 하이드로카르빌 기;

헤테로원자 함유 C_{1-30} 하이드로카르빌 기로서, 여기서 헤테로원자 함유 하이드로카르빌 기는 비치환되거나, 또는 할로겐 원자, C_{1-20} 알킬 기, C_{1-20} 알콕시 기, C_{7-20} 알킬아릴 기, C_{7-20} 아릴알킬 기, C_{6-20} 아릴 기, C_{6-20} 아릴옥시 기, C_{7-20} 알킬아릴옥시 기, 및 C_{7-20} 아릴알킬옥시 기로 이루어지는 군 중에서 선택되는 하나 이상의 치환체에 의해 추가로 치환되는 헤테로원자 함유 C_{1-30} 하이드로카르빌 기;

옥시 기, $-OR'$;

아미도 기, $-NR'_2$;

포스피도 기, $-PR'_2$;

티올레이트 기, $-SR'$;

화학식 $-Si(R^a)_3$의 실릴 기; 및

화학식 $-Ge(R^a)_3$의 게르마닐 기;

여기서, R^3, R^4, R^5 및 R^6 중 2개의 인접한 기는 선택적으로 결합되어 환형 하이드로카르빌 기 또는 환형 헤테로

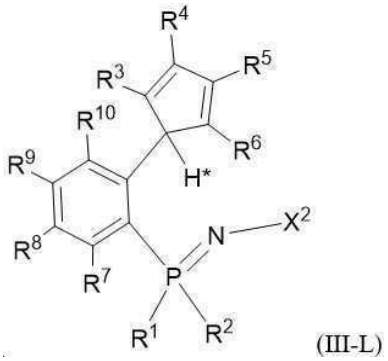
원자 함유 하이드로카르빌 기를 형성할 수 있고, 상기 환형 하이드로카르빌 기 또는 환형 헤테로원자 함유 하이드로카르빌 기는 비치환되거나, 또는 할로겐 원자, C_{1-20} 알킬 기, C_{1-20} 알콕시 기, C_{7-20} 알킬아릴 기, C_{7-20} 아릴알킬 기, C_{6-20} 아릴 기, C_{6-20} 아릴옥시 기, C_{7-20} 알킬아릴옥시 기, C_{7-20} 아릴알킬옥시 기, 화학식 $-NR'_2$의 아미도 기, 화학식 $-PR'_2$의 포스피도 기, 화학식 $-SR'$의 티올레이트 기, 화학식 $-Si(R^a)_3$의 실릴 기, 및 화학식 $-Ge(R^a)_3$의 게르마닐 기로 이루어지는 군 중에서 선택되는 하나 이상의 치환체에 의해 추가로 치환되고;

여기서 각 R'는 수소, C_{1-20} 알킬 기, 및 C_{6-20} 아릴 기로 이루어지는 군 중에서 독립적으로 선택되고;

여기서 각 R^a는 수소, C_{1-8} 알킬 기, C_{1-8} 알콕시 기, C_{6-20} 아릴옥시 기 및 C_{6-20} 아릴 기로 이루어지는 군 중에서 독립적으로 선택됨.

청구항 135

제134항에 있어서, 상기 예비금속화 화합물이 화학식 III-L로 표현되거나, 또는 사이클로펜타디에닐 고리 내에서 수소 H^*의 이동에 의해 입수 가능한 화학식 III-L의 이중 결합 이성질체인, 예비금속화 화합물:



(III-L)

여기서, R^7, R^8, R^9, 및 R^{10}은 각각 독립적으로 다음으로 이루어진 군 중에서 선택되고:

할로겐;

수소;

C_{1-30} 하이드로카르빌 기로서, 여기서 하이드로카르빌 기는 비치환되거나, 또는 할로겐 원자, C_{1-20} 알킬 기, C_{1-20} 알콕시 기, C_{7-20} 알킬아릴 기, C_{7-20} 아릴알킬 기, C_{6-20} 아릴 기, C_{6-20} 아릴옥시 기, C_{7-20} 알킬아릴옥시 기, 및 C_{7-20} 아릴알킬옥시 기로 이루어지는 군 중에서 선택되는 하나 이상의 치환체에 의해 추가로 치환되는 C_{1-30} 하이드로카르빌 기;

헤테로원자 함유 C_{1-30} 하이드로카르빌 기로서, 여기서 헤테로원자 함유 하이드로카르빌 기는 비치환되거나, 또는 할로겐 원자, C_{1-20} 알킬 기, C_{1-20} 알콕시 기, C_{7-20} 알킬아릴 기, C_{7-20} 아릴알킬 기, C_{6-20} 아릴 기, C_{6-20} 아릴옥시 기, C_{7-20} 알킬아릴옥시 기, 및 C_{7-20} 아릴알킬옥시 기로 이루어지는 군 중에서 선택되는 하나 이상의 치환체에 의해 추가로 치환되는 헤테로원자 함유 C_{1-30} 하이드로카르빌 기;

옥시 기, $-OR'$;

아미도 기, $-NR'_2$;

포스피도 기, $-PR'_2$;

티올레이트 기, $-SR'$;

화학식 $-Si(R^a)_3$의 실릴 기; 및

화학식 -Ge(R^a)$_3$의 게르마닐 기;

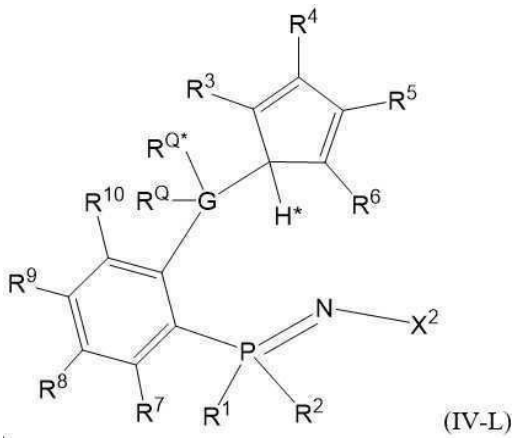
여기서, R^7, R^8, R^9, 및 R^{10} 중 2개의 인접한 기는 선택적으로 결합되어 환형 하이드로카르빌 기 또는 환형 헤테로원자 함유 하이드로카르빌 기를 형성할 수 있고, 상기 환형 하이드로카르빌 기 또는 환형 헤테로원자 함유 하이드로카르빌 기는 비치환되거나, 또는 할로겐 원자, C_{1-20} 알킬 기, C_{1-20} 알콕시 기, C_{7-20} 알킬아릴 기, C_{7-20} 아릴알킬 기, C_{6-20} 아릴 기, C_{6-20} 아릴옥시 기, C_{7-20} 알킬아릴옥시 기, C_{7-20} 아릴알킬옥시 기, 화학식 -NR'$_2$의 아미도 기, 화학식 -PR'$_2$의 포스피도 기, 화학식 -SR'의 티올레이트 기, 화학식 -Si(R^a)$_3$의 실릴 기, 및 화학식 -Ge(R^a)$_3$의 게르마닐 기로 이루어지는 군 중에서 선택되는 하나 이상의 치환체에 의해 추가로 치환되고;

여기서 각 R'는 수소, C_{1-20} 알킬 기, 및 C_{6-20} 아릴 기로 이루어지는 군 중에서 독립적으로 선택되고;

여기서 각 R^a는 수소, C_{1-8} 알킬 기, C_{1-8} 알콕시 기, C_{6-20} 아릴옥시 기 및 C_{6-20} 아릴 기로 이루어지는 군 중에서 독립적으로 선택됨.

청구항 136

제134항에 있어서, 상기 예비금속화 화합물이 화학식 IV-L로 표현되거나, 또는 사이클로펜타디에닐 고리 내에서 수소 H^*의 이동에 의해 입수 가능한 화학식 IV-L의 이중 결합 이성질체인, 예비금속화 화합물:



(IV-L)

여기서, G는 C 또는 Si이고;

여기서, R^Q 및 R^{Q*}는 각각 독립적으로 다음으로 이루어진 군 중에서 선택되며:

할로겐;

수소;

C_{1-30} 하이드로카르빌 기로서, 여기서 하이드로카르빌 기는 비치환되거나, 또는 할로겐 원자, C_{1-20} 알킬 기, C_{1-20} 알콕시 기, C_{7-20} 알킬아릴 기, C_{7-20} 아릴알킬 기, C_{6-20} 아릴 기, C_{6-20} 아릴옥시 기, C_{7-20} 알킬아릴옥시 기, 및 C_{7-20} 아릴알킬옥시 기로 이루어지는 군 중에서 선택되는 하나 이상의 치환체에 의해 추가로 치환되는 C_{1-30} 하이드로카르빌 기;

헤테로원자 함유 C_{1-30} 하이드로카르빌 기로서, 여기서 헤테로원자 함유 하이드로카르빌 기는 비치환되거나, 또는 할로겐 원자, C_{1-20} 알킬 기, C_{1-20} 알콕시 기, C_{7-20} 알킬아릴 기, C_{7-20} 아릴알킬 기, C_{6-20} 아릴 기, C_{6-20} 아릴옥시 기, C_{7-20} 알킬아릴옥시 기, 및 C_{7-20} 아릴알킬옥시 기로 이루어지는 군 중에서 선택되는 하나 이상의 치환체에 의해 추가로 치환되는 헤테로원자 함유 C_{1-30} 하이드로카르빌 기;

여기서, R^Q 및 R^{Q*} 기는 선택적으로 결합되어 환형 하이드로카르빌 기 또는 환형 헤테로원자 함유 하이드로카르

빌 기를 형성할 수 있고, 상기 환형 하이드로카르빌 기 또는 환형 헤테로원자 함유 하이드로카르빌 기는 비치환되거나, 또는 할로겐 원자, C_{1-20} 알킬 기, C_{1-20} 알콕시 기, C_{7-20} 알킬아릴 기, C_{7-20} 아릴알킬 기, C_{6-20} 아릴 기, C_{6-20} 아릴옥시 기, C_{7-20} 알킬아릴옥시 기, C_{7-20} 아릴알킬옥시 기, 화학식 $-NR'_2$의 아미도 기, 화학식 $-PR'_2$의 포스피도 기, 화학식 -SR'의 티올레이트 기, 화학식 $-Si(R^a)_3$의 실릴 기, 및 화학식 $-Ge(R^a)_3$의 게르마닐 기로 이루어지는 군 중에서 선택되는 하나 이상의 치환체에 의해 추가로 치환되며;

여기서, R^7, R^8, R^9, 및 R^{10}은 각각 독립적으로 다음으로 이루어진 군 중에서 선택되고:

할로겐;

수소;

C_{1-30} 하이드로카르빌 기로서, 여기서 하이드로카르빌 기는 비치환되거나, 또는 할로겐 원자, C_{1-20} 알킬 기, C_{1-20} 알콕시 기, C_{7-20} 알킬아릴 기, C_{7-20} 아릴알킬 기, C_{6-20} 아릴 기, C_{6-20} 아릴옥시 기, C_{7-20} 알킬아릴옥시 기, 및 C_{7-20} 아릴알킬옥시 기로 이루어지는 군 중에서 선택되는 하나 이상의 치환체에 의해 추가로 치환되는, C_{1-30} 하이드로카르빌 기;

헤테로원자 함유 C_{1-30} 하이드로카르빌 기로서, 여기서 헤테로원자 함유 하이드로카르빌 기는 비치환되거나, 또는 할로겐 원자, C_{1-20} 알킬 기, C_{1-20} 알콕시 기, C_{7-20} 알킬아릴 기, C_{7-20} 아릴알킬 기, C_{6-20} 아릴 기, C_{6-20} 아릴옥시 기, C_{7-20} 알킬아릴옥시 기, 및 C_{7-20} 아릴알킬옥시 기로 이루어지는 군 중에서 선택되는 하나 이상의 치환체에 의해 추가로 치환되는, 헤테로원자 함유 C_{1-30} 하이드로카르빌 기;

옥시 기, -OR';

아미도 기, $-NR'_2$;

포스피도 기, $-PR'_2$;

티올레이트 기, -SR';

화학식 $-Si(R^a)_3$의 실릴 기; 및

화학식 $-Ge(R^a)_3$의 게르마닐 기;

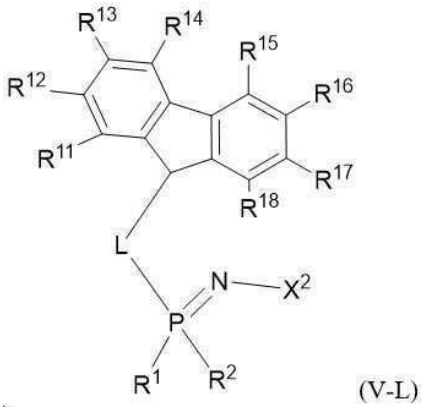
여기서, R^7, R^8, R^9, 및 R^{10} 중 2개의 인접한 기는 선택적으로 결합되어 환형 하이드로카르빌 기 또는 환형 헤테로원자 함유 하이드로카르빌 기를 형성할 수 있고, 상기 환형 하이드로카르빌 기 또는 환형 헤테로원자 함유 하이드로카르빌 기는 비치환되거나, 또는 할로겐 원자, C_{1-20} 알킬 기, C_{1-20} 알콕시 기, C_{7-20} 알킬아릴 기, C_{7-20} 아릴알킬 기, C_{6-20} 아릴 기, C_{6-20} 아릴옥시 기, C_{7-20} 알킬아릴옥시 기, C_{7-20} 아릴알킬옥시 기, 화학식 $-NR'_2$의 아미도 기, 화학식 $-PR'_2$의 포스피도 기, 화학식 -SR'의 티올레이트 기, 화학식 $-Si(R^a)_3$의 실릴 기, 및 화학식 $-Ge(R^a)_3$의 게르마닐 기로 이루어지는 군 중에서 선택되는 하나 이상의 치환체에 의해 추가로 치환되고;

여기서 각 R'는 수소, C_{1-20} 알킬 기, 및 C_{6-20} 아릴 기로 이루어지는 군 중에서 독립적으로 선택되고; 그리고

여기서 각 R^a는 수소, C_{1-8} 알킬 기, C_{1-8} 알콕시 기, C_{6-20} 아릴옥시 기 및 C_{6-20} 아릴 기로 이루어지는 군 중에서 독립적으로 선택됨.

청구항 137

제133항에 있어서, 상기 예비금속화 화합물이 화학식 V-L로 표현되는, 예비금속화 화합물:



(V-L)

여기서, R^{11}, R^{12}, R^{13}, R^{14}, R^{15}, R^{16}, R^{17}, R^{18}은 각각 독립적으로 다음으로 이루어진 군 중에서 선택되고:

할로겐;

수소;

C_{1-30} 하이드로카르빌 기로서, 여기서 하이드로카르빌 기는 비치환되거나, 또는 할로겐 원자, C_{1-20} 알킬 기, C_{1-20} 알콕시 기, C_{7-20} 알킬아릴 기, C_{7-20} 아릴알킬 기, C_{6-20} 아릴 기, C_{6-20} 아릴옥시 기, C_{7-20} 알킬아릴옥시 기, 및 C_{7-20} 아릴알킬옥시 기로 이루어지는 군 중에서 선택되는 하나 이상의 치환체에 의해 추가로 치환되는, C_{1-30} 하이드로카르빌 기;

헤테로원자 함유 C_{1-30} 하이드로카르빌 기로서, 여기서 헤테로원자 함유 하이드로카르빌 기는 비치환되거나, 또는 할로겐 원자, C_{1-20} 알킬 기, C_{1-20} 알콕시 기, C_{7-20} 알킬아릴 기, C_{7-20} 아릴알킬 기, C_{6-20} 아릴 기, C_{6-20} 아릴옥시 기, C_{7-20} 알킬아릴옥시 기, 및 C_{7-20} 아릴알킬옥시 기로 이루어지는 군 중에서 선택되는 하나 이상의 치환체에 의해 추가로 치환되는, 헤테로원자 함유 C_{1-30} 하이드로카르빌 기;

옥시 기, -OR';

아미도 기, $-NR'_2$;

포스피도 기, $-PR'_2$;

티올레이트 기, -SR';

화학식 $-Si(R^a)_3$의 실릴 기; 및

화학식 $-Ge(R^a)_3$의 게르마닐 기;

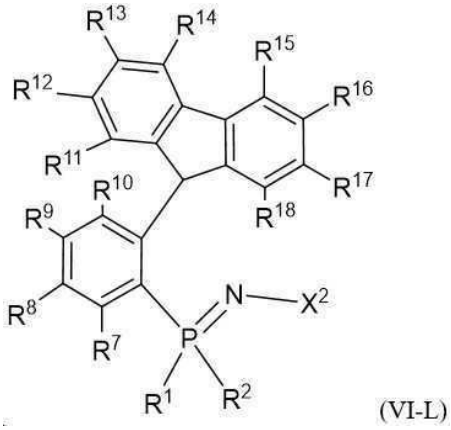
여기서, R^{11}, R^{12}, R^{13}, R^{14}, R^{15}, R^{16}, R^{17}, R^{18} 중 2개의 인접한 기는 선택적으로 결합되어 환형 하이드로카르빌 기 또는 환형 헤테로원자 함유 하이드로카르빌 기를 형성할 수 있고, 상기 환형 하이드로카르빌 기 또는 환형 헤테로원자 함유 하이드로카르빌 기는 비치환되거나, 또는 할로겐 원자, C_{1-20} 알킬 기, C_{1-20} 알콕시 기, C_{7-20} 알킬아릴 기, C_{7-20} 아릴알킬 기, C_{6-20} 아릴 기, C_{6-20} 아릴옥시 기, C_{7-20} 알킬아릴옥시 기, C_{7-20} 아릴알킬옥시 기, $-NR'_2$의 아미도 기, 화학식 $-PR'_2$의 포스피도 기, 화학식 -SR'의 티올레이트 기, 화학식 $-Si(R^a)_3$의 실릴 기, 및 화학식 $-Ge(R^a)_3$의 게르마닐 기로 이루어지는 군 중에서 선택되는 하나 이상의 치환체에 의해 추가로 치환되고;

여기서 각 R'는 수소, C_{1-20} 알킬 기, 및 C_{6-20} 아릴 기로 이루어지는 군 중에서 독립적으로 선택되고;

여기서 각 R^a는 수소, C_{1-8} 알킬 기, C_{1-8} 알콕시 기, C_{6-20} 아릴옥시 기 및 C_{6-20} 아릴 기로 이루어지는 군 중에서 독립적으로 선택됨.

청구항 138

제137항에 있어서, 상기 예비금속화 화합물이 화학식 VI-L로 표현되는, 예비금속화 화합물:



(VI-L)

여기서, R^7, R^8, R^9, 및 R^{10}은 각각 독립적으로 다음으로 이루어진 군 중에서 선택되고:

할로겐;

수소;

C_{1-30} 하이드로카르빌 기로서, 여기서 하이드로카르빌 기는 비치환되거나, 또는 할로겐 원자, C_{1-20} 알킬 기, C_{1-20} 알콕시 기, C_{7-20} 알킬아릴 기, C_{7-20} 아릴알킬 기, C_{6-20} 아릴 기, C_{6-20} 아릴옥시 기, C_{7-20} 알킬아릴옥시 기, 및 C_{7-20} 아릴알킬옥시 기로 이루어지는 군 중에서 선택되는 하나 이상의 치환체에 의해 추가로 치환되는, C_{1-30} 하이드로카르빌 기;

헤테로원자 함유 C_{1-30} 하이드로카르빌 기로서, 여기서 헤테로원자 함유 하이드로카르빌 기는 비치환되거나, 또는 할로겐 원자, C_{1-20} 알킬 기, C_{1-20} 알콕시 기, C_{7-20} 알킬아릴 기, C_{7-20} 아릴알킬 기, C_{6-20} 아릴 기, C_{6-20} 아릴옥시 기, C_{7-20} 알킬아릴옥시 기, 및 C_{7-20} 아릴알킬옥시 기로 이루어지는 군 중에서 선택되는 하나 이상의 치환체에 의해 추가로 치환되는, 헤테로원자 함유 C_{1-30} 하이드로카르빌 기;

옥시 기, -OR';

아미도 기, $-NR'_2$;

포스피도 기, $-PR'_2$;

티올레이트 기, -SR';

화학식 $-Si(R^a)_3$의 실릴 기; 및

화학식 $-Ge(R^a)_3$의 게르마닐 기;

여기서, R^7, R^8, R^9, 및 R^{10} 중 2개의 인접한 기는 선택적으로 결합되어 환형 하이드로카르빌 기 또는 환형 헤테로원자 함유 하이드로카르빌 기를 형성할 수 있고, 상기 환형 하이드로카르빌 기 또는 환형 헤테로원자 함유 하이드로카르빌 기는 비치환되거나, 또는 할로겐 원자, C_{1-20} 알킬 기, C_{1-20} 알콕시 기, C_{7-20} 알킬아릴 기, C_{7-20} 아릴알킬 기, C_{6-20} 아릴 기, C_{6-20} 아릴옥시 기, C_{7-20} 알킬아릴옥시 기, C_{7-20} 아릴알킬옥시 기, 화학식 $-NR'_2$의 아미

도 기, 화학식 $-PR'_2$의 포스피도 기, 화학식 -SR'의 티올레이트 기, 화학식 $-Si(R^a)_3$의 실릴 기, 및 화학식 $-Ge(R^a)_3$의 게르마닐 기로 이루어지는 군 중에서 선택되는 하나 이상의 치환체에 의해 추가로 치환되고;

여기서 각 R'는 수소, C_{1-20} 알킬 기, 및 C_{6-20} 아릴 기로 이루어지는 군 중에서 독립적으로 선택되고;

여기서 각 R^a는 수소, C_{1-8} 알킬 기, C_{1-8} 알콕시 기, C_{6-20} 아릴옥시 기 및 C_{6-20} 아릴 기로 이루어지는 군 중에서 독립적으로 선택됨.

청구항 139

제138항에 있어서, R^7, R^8, R^9, 및 R^{10}은 각각 수소인, 예비금속화 화합물.

청구항 140

제138항에 있어서, R^1 및 R^2가 각각 독립적으로 비치환된 C_{1-30} 하이드로카르빌 기인, 예비금속화 화합물.

청구항 141

제140항에 있어서, R^1 및 R^2가 각각 독립적으로 이소프로필, 사이클로헥실 및 *tert*-부틸로 이루어지는 군 중에서 선택되는, 예비금속화 화합물.

청구항 142

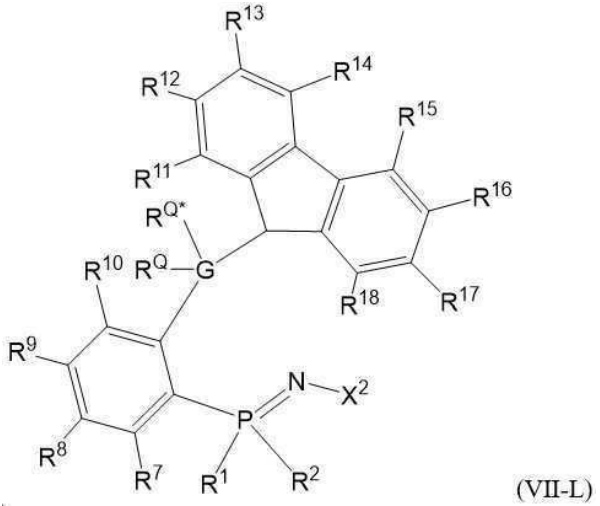
제138항에 있어서, R^{12} 및 R^{17}이 각각 독립적으로 비치환된 C_{1-30} 하이드로카르빌 기이고, R^{11}, R^{13}, R^{14}, R^{15}, R^{16}, 및 R^{18}이 각각 수소인, 예비금속화 화합물.

청구항 143

제142항에 있어서, R^{12} 및 R^{17}이 각각 *tert*-부틸 기인, 예비금속화 화합물.

청구항 144

제137항에 있어서, 상기 예비금속화 화합물이 화학식 VII-L로 표현되는, 예비금속화 화합물:



(VII-L)

여기서, G는 C 또는 Si이고;

여기서, R^Q 및 R^{Q*}는 각각 독립적으로 다음으로 이루어진 군 중에서 선택되며:

할로겐;

수소;

C_{1-30} 하이드로카르빌 기로서, 여기서 하이드로카르빌 기는 비치환되거나, 또는 할로겐 원자, C_{1-20} 알킬 기, C_{1-20} 알콕시 기, C_{7-20} 알킬아릴 기, C_{7-20} 아릴알킬 기, C_{6-20} 아릴 기, C_{6-20} 아릴옥시 기, C_{7-20} 알킬아릴옥시 기, 및 C_{7-20} 아릴알킬옥시 기로 이루어지는 군 중에서 선택되는 하나 이상의 치환체에 의해 추가로 치환되는 C_{1-30} 하이드로카르빌 기;

헤테로원자 함유 C_{1-30} 하이드로카르빌 기로서, 여기서 헤테로원자 함유 하이드로카르빌 기는 비치환되거나, 또는 할로겐 원자, C_{1-20} 알킬 기, C_{1-20} 알콕시 기, C_{7-20} 알킬아릴 기, C_{7-20} 아릴알킬 기, C_{6-20} 아릴 기, C_{6-20} 아릴옥시 기, C_{7-20} 알킬아릴옥시 기, 및 C_{7-20} 아릴알킬옥시 기로 이루어지는 군 중에서 선택되는 하나 이상의 치환체에 의해 추가로 치환되는 헤테로원자 함유 C_{1-30} 하이드로카르빌 기;

여기서, R^{Q} 및 R^{Q*} 기는 선택적으로 결합되어 환형 하이드로카르빌 기 또는 환형 헤테로원자 함유 하이드로카르빌 기를 형성할 수 있고, 상기 환형 하이드로카르빌 기 또는 환형 헤테로원자 함유 하이드로카르빌 기는 비치환되거나, 또는 할로겐 원자, C_{1-20} 알킬 기, C_{1-20} 알콕시 기, C_{7-20} 알킬아릴 기, C_{7-20} 아릴알킬 기, C_{6-20} 아릴 기, C_{6-20} 아릴옥시 기, C_{7-20} 알킬아릴옥시 기, C_{7-20} 아릴알킬옥시 기, 화학식 $-NR'_2$의 아미도 기, 화학식 $-PR'_2$의 포스피도 기, 화학식 -SR'의 티올레이트 기, 화학식 $-Si(R^{a})_3$의 실릴 기, 및 화학식 $-Ge(R^{a})_3$의 게르마닐 기로 이루어지는 군 중에서 선택되는 하나 이상의 치환체에 의해 추가로 치환되며;

여기서, R^{7}, R^{8}, R^{9}, 및 R^{10}은 각각 독립적으로 다음으로 이루어진 군 중에서 선택되고:

할로겐;

수소;

C_{1-30} 하이드로카르빌 기로서, 여기서 하이드로카르빌 기는 비치환되거나, 또는 할로겐 원자, C_{1-20} 알킬 기, C_{1-20} 알콕시 기, C_{7-20} 알킬아릴 기, C_{7-20} 아릴알킬 기, C_{6-20} 아릴 기, C_{6-20} 아릴옥시 기, C_{7-20} 알킬아릴옥시 기, 및 C_{7-20} 아릴알킬옥시 기로 이루어지는 군 중에서 선택되는 하나 이상의 치환체에 의해 추가로 치환되는, C_{1-30} 하이드로카르빌 기;

헤테로원자 함유 C_{1-30} 하이드로카르빌 기로서, 여기서 헤테로원자 함유 하이드로카르빌 기는 비치환되거나, 또는 할로겐 원자, C_{1-20} 알킬 기, C_{1-20} 알콕시 기, C_{7-20} 알킬아릴 기, C_{7-20} 아릴알킬 기, C_{6-20} 아릴 기, C_{6-20} 아릴옥시 기, C_{7-20} 알킬아릴옥시 기, 및 C_{7-20} 아릴알킬옥시 기로 이루어지는 군 중에서 선택되는 하나 이상의 치환체에 의해 추가로 치환되는, 헤테로원자 함유 C_{1-30} 하이드로카르빌 기;

옥시 기, -OR';

아미도 기, $-NR'_2$;

포스피도 기, $-PR'_2$;

티올레이트 기, -SR';

화학식 $-Si(R^{a})_3$의 실릴 기; 및

화학식 $-Ge(R^{a})_3$의 게르마닐 기;

여기서, R^{7}, R^{8}, R^{9}, 및 R^{10} 중 2개의 인접한 기는 선택적으로 결합되어 환형 하이드로카르빌 기 또는 환형 헤테로원자 함유 하이드로카르빌 기를 형성할 수 있고, 상기 환형 하이드로카르빌 기 또는 환형 헤테로원자 함유 하이드로카르빌 기는 비치환되거나, 또는 할로겐 원자, C_{1-20} 알킬 기, C_{1-20} 알콕시 기, C_{7-20} 알킬아릴 기, C_{7-20} 아릴알킬 기, C_{6-20} 아릴 기, C_{6-20} 아릴옥시 기, C_{7-20} 알킬아릴옥시 기, C_{7-20} 아릴알킬옥시 기, 화학식 $-NR'_2$의 아미

도 기, 화학식 $-PR'_2$의 포스피도 기, 화학식 -SR'의 티올레이트 기, 화학식 $-Si(R^a)_3$의 실릴 기, 및 화학식 $-Ge(R^a)_3$의 게르마닐 기로 이루어지는 군 중에서 선택되는 하나 이상의 치환체에 의해 추가로 치환되고;

여기서 각 R'는 수소, C_{1-20} 알킬 기, 및 C_{6-20} 아릴 기로 이루어지는 군 중에서 독립적으로 선택되고;

여기서 각 R^a는 수소, C_{1-8} 알킬 기, C_{1-8} 알콕시 기, C_{6-20} 아릴옥시 기 및 C_{6-20} 아릴 기로 이루어지는 군 중에서 독립적으로 선택됨.

청구항 145

제144항에 있어서, R^7, R^8, R^9 및 R^{10}이 각각 수소인, 예비금속화 화합물.

청구항 146

제144항에 있어서, R^1 및 R^2가 각각 독립적으로 비치환된 C_{1-30} 하이드로카르빌 기인, 예비금속화 화합물.

청구항 147

제146항에 있어서, R^1 및 R^2가 각각 독립적으로 이소프로필, 사이클로헥실 및 *tert*-부틸로 이루어지는 군 중에서 선택되는, 예비금속화 화합물.

청구항 148

제144항에 있어서, R^{12} 및 R^{17}이 각각 독립적으로 비치환된 C_{1-30} 하이드로카르빌 기이고, R^{11}, R^{13}, R^{14}, R^{15}, R^{16} 및 R^{18}이 각각 수소인, 예비금속화 화합물.

청구항 149

제148항에 있어서, R^{12} 및 R^{17}이 각각 *tert*-부틸 기인, 예비금속화 화합물.

청구항 150

제144항에 있어서, G가 탄소인, 예비금속화 화합물.

청구항 151

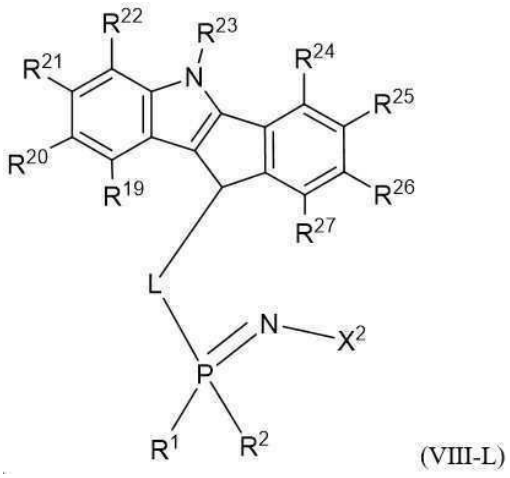
제150항에 있어서, R^Q 및 R^{Q*}가 각각 독립적으로 수소, C_{1-20} 알킬 기 및 C_{6-20} 아릴 기로 이루어지는 군 중에서 선택되는, 예비금속화 화합물.

청구항 152

제150항에 있어서, R^Q가 수소이고, R^{Q*}가 C_{1-8} 알킬 기인, 예비금속화 화합물.

청구항 153

제133항에 있어서, 상기 예비금속화 화합물이 화학식 VIII-L로 표현되는 것인, 예비금속화 화합물:



(VIII-L)

여기서, R^{23}은 다음으로 이루어진 군 중에서 선택되며:

수소;

C_{1-30} 하이드로카르빌 기로서, 여기서 하이드로카르빌 기는 비치환되거나, 또는 할로겐 원자, C_{1-20} 알킬 기, C_{1-20} 알콕시 기, C_{7-20} 알킬아릴 기, C_{7-20} 아릴알킬 기, C_{6-20} 아릴 기, C_{6-20} 아릴옥시 기, C_{7-20} 알킬아릴옥시 기, 및 C_{7-20} 아릴알킬옥시 기로 이루어지는 군 중에서 선택되는 하나 이상의 치환체에 의해 추가로 치환되는 C_{1-30} 하이드로카르빌 기;

헤테로원자 함유 C_{1-30} 하이드로카르빌 기로서, 여기서 헤테로원자 함유 하이드로카르빌 기는 비치환되거나, 또는 할로겐 원자, C_{1-20} 알킬 기, C_{1-20} 알콕시 기, C_{7-20} 알킬아릴 기, C_{7-20} 아릴알킬 기, C_{6-20} 아릴 기, C_{6-20} 아릴옥시 기, C_{7-20} 알킬아릴옥시 기, 및 C_{7-20} 아릴알킬옥시 기로 이루어지는 군 중에서 선택되는 하나 이상의 치환체에 의해 추가로 치환되는 헤테로원자 함유 C_{1-30} 하이드로카르빌 기;

여기서, R^{19}, R^{20}, R^{21}, R^{22}, R^{24}, R^{25}, R^{26}, 및 R^{27}은 각각 독립적으로 다음으로 이루어진 군 중에서 선택되고:

할로겐;

수소;

C_{1-30} 하이드로카르빌 기로서, 여기서 하이드로카르빌 기는 비치환되거나, 또는 할로겐 원자, C_{1-20} 알킬 기, C_{1-20} 알콕시 기, C_{7-20} 알킬아릴 기, C_{7-20} 아릴알킬 기, C_{6-20} 아릴 기, C_{6-20} 아릴옥시 기, C_{7-20} 알킬아릴옥시 기, 및 C_{7-20} 아릴알킬옥시 기로 이루어지는 군 중에서 선택되는 하나 이상의 치환체에 의해 추가로 치환되는, C_{1-30} 하이드로카르빌 기;

헤테로원자 함유 C_{1-30} 하이드로카르빌 기로서, 여기서 헤테로원자 함유 하이드로카르빌 기는 비치환되거나, 또는 할로겐 원자, C_{1-20} 알킬 기, C_{1-20} 알콕시 기, C_{7-20} 알킬아릴 기, C_{7-20} 아릴알킬 기, C_{6-20} 아릴 기, C_{6-20} 아릴옥시 기, C_{7-20} 알킬아릴옥시 기, 및 C_{7-20} 아릴알킬옥시 기로 이루어지는 군 중에서 선택되는 하나 이상의 치환체에 의해 추가로 치환되는, 헤테로원자 함유 C_{1-30} 하이드로카르빌 기;

옥시 기, -OR';

아미도 기, $-NR'_2$;

포스피도 기, $-PR'_2$;

티올레이트 기, -SR';

화학식 $-Si(R^a)_3$의 실릴 기; 및

화학식 $-Ge(R^a)_3$의 게르마닐 기;

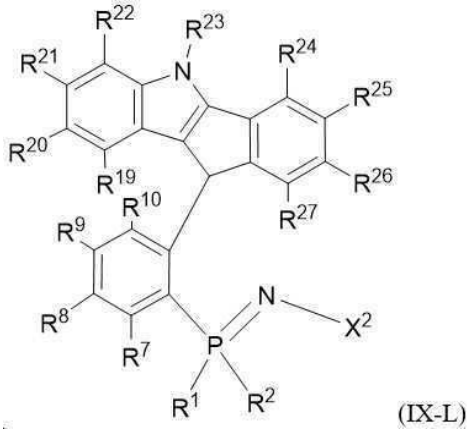
여기서, R^{19}, R^{20}, R^{21}, R^{22}, R^{24}, R^{25}, R^{26}, 및 R^{27} 중 2개의 인접한 기는 선택적으로 결합되어 환형 하이드로카르빌 기 또는 환형 헤테로원자 함유 하이드로카르빌 기를 형성할 수 있고, 상기 환형 하이드로카르빌 기 또는 환형 헤테로원자 함유 하이드로카르빌 기는 비치환되거나, 또는 할로겐 원자, C_{1-20} 알킬 기, C_{1-20} 알콕시 기, C_{7-20} 알킬아릴 기, C_{7-20} 아릴알킬 기, C_{6-20} 아릴 기, C_{6-20} 아릴옥시 기, C_{7-20} 알킬아릴옥시 기, C_{7-20} 아릴알킬옥시 기, 화학식 $-NR'_2$의 아미도 기, 화학식 $-PR'_2$의 포스피도 기, 화학식 -SR'의 티올레이트 기, 화학식 $-Si(R^a)_3$의 실릴 기, 및 화학식 $-Ge(R^a)_3$의 게르마닐 기로 이루어지는 군 중에서 선택되는 하나 이상의 치환체에 의해 추가로 치환되고;

여기서 각 R'는 수소, C_{1-20} 알킬 기, 및 C_{6-20} 아릴 기로 이루어지는 군 중에서 독립적으로 선택되고;

여기서 각 R^a는 수소, C_{1-8} 알킬 기, C_{1-8} 알콕시 기, C_{6-20} 아릴옥시 기 및 C_{6-20} 아릴 기로 이루어지는 군 중에서 독립적으로 선택됨.

청구항 154

제153항에 있어서, 상기 예비금속화 화합물이 화학식 IX-L로 표현되는 것인, 예비금속화 화합물:



(IX-L)

여기서, R^7, R^8, R^9, 및 R^{10}은 각각 독립적으로 다음으로 이루어진 군 중에서 선택되고:

할로겐;

수소;

C_{1-30} 하이드로카르빌 기로서, 여기서 하이드로카르빌 기는 비치환되거나, 또는 할로겐 원자, C_{1-20} 알킬 기, C_{1-20} 알콕시 기, C_{7-20} 알킬아릴 기, C_{7-20} 아릴알킬 기, C_{6-20} 아릴 기, C_{6-20} 아릴옥시 기, C_{7-20} 알킬아릴옥시 기, 및 C_{7-20} 아릴알킬옥시 기로 이루어지는 군 중에서 선택되는 하나 이상의 치환체에 의해 추가로 치환되는, C_{1-30} 하이드로카르빌 기;

헤테로원자 함유 C_{1-30} 하이드로카르빌 기로서, 여기서 헤테로원자 함유 하이드로카르빌 기는 비치환되거나, 또는 할로겐 원자, C_{1-20} 알킬 기, C_{1-20} 알콕시 기, C_{7-20} 알킬아릴 기, C_{7-20} 아릴알킬 기, C_{6-20} 아릴 기, C_{6-20} 아릴옥시 기, C_{7-20} 알킬아릴옥시 기, 및 C_{7-20} 아릴알킬옥시 기로 이루어지는 군 중에서 선택되는 하나 이상의 치환체에 의해 추가로 치환되는, 헤테로원자 함유 C_{1-30} 하이드로카르빌 기;

옥시 기, -OR';

아미도 기, $-NR'_2$;

포스피도 기, $-PR'_2$;

티올레이트 기, -SR';

화학식 $-Si(R^a)_3$의 실릴 기; 및

화학식 $-Ge(R^a)_3$의 게르마닐 기;

여기서, R^7, R^8, R^9, 및 R^{10} 중 2개의 인접한 기는 선택적으로 결합되어 환형 하이드로카르빌 기 또는 환형 헤테로원자 함유 하이드로카르빌 기를 형성할 수 있고, 상기 환형 하이드로카르빌 기 또는 환형 헤테로원자 함유 하이드로카르빌 기는 비치환되거나, 또는 할로겐 원자, C_{1-20} 알킬 기, C_{1-20} 알콕시 기, C_{7-20} 알킬아릴 기, C_{7-20} 아릴알킬 기, C_{6-20} 아릴 기, C_{6-20} 아릴옥시 기, C_{7-20} 알킬아릴옥시 기, C_{7-20} 아릴알킬옥시 기, 화학식 $-NR'_2$의 아미도 기, 화학식 $-PR'_2$의 포스피도 기, 화학식 -SR'의 티올레이트 기, 화학식 $-Si(R^a)_3$의 실릴 기, 및 화학식 $-Ge(R^a)_3$의 게르마닐 기로 이루어지는 군 중에서 선택되는 하나 이상의 치환체에 의해 추가로 치환되고;

여기서 각 R'는 수소, C_{1-20} 알킬 기, 및 C_{6-20} 아릴 기로 이루어지는 군 중에서 독립적으로 선택되고;

여기서 각 R^a는 수소, C_{1-8} 알킬 기, C_{1-8} 알콕시 기, C_{6-20} 아릴옥시 기 및 C_{6-20} 아릴 기로 이루어지는 군 중에서 독립적으로 선택됨.

청구항 155

제154항에 있어서, R^7, R^8, R^9 및 R^{10}이 각각 수소인, 예비금속화 화합물.

청구항 156

제154항에 있어서, R^1 및 R^2가 각각 독립적으로 비치환된 C_{1-30} 하이드로카르빌 기인, 예비금속화 화합물.

청구항 157

제156항에 있어서, R^1 및 R^2가 각각 독립적으로 이소프로필, 사이클로헥실 및 *tert*-부틸로 이루어지는 군 중에서 선택되는, 예비금속화 화합물.

청구항 158

제154항에 있어서, R^{23}이 비치환된 C_{1-30} 하이드로카르빌 기인, 예비금속화 화합물.

청구항 159

제158항에 있어서, R^{23}이 C_{1-8} 알킬 기인, 예비금속화 화합물.

청구항 160

제154항에 있어서, R^{20}이 비치환된 C_{1-30} 하이드로카르빌 기인, 예비금속화 화합물.

청구항 161

제160항에 있어서, R^{20}이 비치환된 C_{1-8} 알킬 기인, 예비금속화 화합물.

청구항 162

제154항에 있어서, R^{20}이 비치환된 C_{1-30} 하이드로카르빌 기이고, R^{19}, R^{21}, R^{22}, R^{24}, R^{25}, R^{26}, 및 R^{27}이 각각 수소인, 예비금속화 화합물.

청구항 163

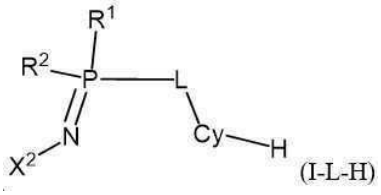
제162항에 있어서, R^{20}이 C_{1-8} 알킬 기인, 예비금속화 화합물.

청구항 164

제133항 내지 제163항 중 어느 한 항에 있어서, X^2가 수소 또는 트리메틸실릴 기, $-SiMe_3$인, 예비금속화 화합물.

청구항 165

화학식 I-L-H로 표현되는 화합물을 화학식 MX^*_4를 갖는 4족 전이 금속 화합물과 반응시키는 것을 포함하는, 유기금속 복합체를 제조하는 공정:



(I-L-H)

여기서,

M은 Ti, Zr 또는 Hf이고;

R^1 및 R^2는 각각 독립적으로 수소 및 R^X로 이루어진 군 중에서 선택되거나; 또는 R^1 및 R^2는 이들이 부착된 P 원자와 함께, 비치환되거나, 또는 할로겐 원자, C_{1-20} 알킬 기, C_{1-20} 알콕시 기, C_{7-20} 알킬아릴 기, C_{7-20} 아릴알킬 기, C_{6-20} 아릴 기, C_{6-20} 아릴옥시 기, C_{7-20} 알킬아릴옥시 기, 및 C_{7-20} 아릴알킬옥시 기로 이루어진 군 중에서 선택되는 하나 이상의 치환체에 의해 추가로 치환되는 3-10원 헤테로환형 기를 형성하며;

각 R^X는 할로겐 원자; 하이드로카르빌 기가 비치환되거나, 또는 하나 이상의 할로겐 원자, C_{1-20} 알킬 기, C_{1-20} 알콕시 기, C_{7-20} 알킬아릴 기, C_{7-20} 아릴알킬 기, C_{6-20} 아릴 기, C_{6-20} 아릴옥시 기, C_{7-20} 알킬아릴옥시 기, 및/또는 C_{7-20} 아릴알킬옥시 기에 의해 추가로 치환되는 C_{1-30} 하이드로카르빌 기; 화학식 $-NR'_2$의 아미도 기; 화학식 $-Si(R^a)_3$의 실릴 기; 화학식 $-Ge(R^a)_3$의 게르마닐 기; 및 화학식 $-N=P(R^b)(R^c)(R^d)$의 포스핀이민 기로 이루어진 군 중에서 독립적으로 선택되고; 여기서 각 R'는 수소, C_{1-20} 알킬 기, 및 C_{6-20} 아릴 기로 이루어지는 군 중에서 독립적으로 선택되고; 각 R^a는 수소, C_{1-8} 알킬 기, C_{1-8} 알콕시 기, C_{6-20} 아릴옥시 기 및 C_{6-20} 아릴 기로 이루어진 군 중에서 독립적으로 선택되고; R^b, R^c, R^d는 각각 독립적으로 C_{1-20} 알킬 기이며;

X^2는 화학식 $-Si(R^e)_3$의 실릴 기이고, 여기서 각 R^e는 수소, C_{1-8} 알킬 기, C_{1-8} 알콕시 기, C_{6-20} 아릴옥시 기 및 C_{6-20} 아릴 기로 이루어지는 군 중에서 독립적으로 선택되고;

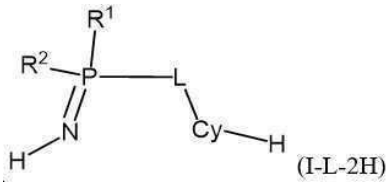
Cy는 사이클로펜타디에닐형 모이어티이고, L 및 H에 공유 결합되며; 그리고

L은 Cy와 P를 연결하는 원자의 근접한 사슬을 함유하는 가교 기로서, 여기서 근접한 사슬은 2개 또는 3개의 원자를 함유하고; 그리고

각 X^*는 할로겐, 수소, 화학식 $-NR^{\epsilon}_2$의 아미도 기, C_{1-20} 알킬 기, C_{1-20} 알콕시 기, C_{7-20} 알킬아릴 기, C_{7-20} 아릴알킬 기, C_{6-20} 아릴 기, C_{6-20} 아릴옥사이드 기, C_{7-20} 알킬아릴옥시 기, 및 C_{7-20} 아릴알킬옥시 기로 이루어지는 군 중에서 독립적으로 선택되고; 여기서 각 R^{ϵ}는 수소, C_{1-20} 알킬 기, 및 C_{6-20} 아릴 기로 이루어지는 군 중에서 독립적으로 선택됨.

청구항 166

화학식 I-L-2H로 표현되는 화합물을 염기와 반응시킨 뒤 화학식 MX^*_4를 갖는 4족 전이 금속 화합물과 반응시키는 것을 포함하는, 유기금속 복합체를 제조하는 공정:



(I-L-2H)

여기서,

M은 Ti, Zr 또는 Hf이고;

R^1 및 R^2는 각각 독립적으로 수소 및 R^X로 이루어진 군 중에서 선택되거나; 또는 R^1 및 R^2는 이들이 부착된 P 원자와 함께, 비치환되거나, 또는 할로겐 원자, C_{1-20} 알킬 기, C_{1-20} 알콕시 기, C_{7-20} 알킬아릴 기, C_{7-20} 아릴알킬 기, C_{6-20} 아릴 기, C_{6-20} 아릴옥시 기, C_{7-20} 알킬아릴옥시 기, 및 C_{7-20} 아릴알킬옥시 기로 이루어진 군 중에서 선택되는 하나 이상의 치환체에 의해 추가로 치환되는 3-10원 헤테로환형 기를 형성하며;

각 R^X는 할로겐 원자; 하이드로카르빌 기가 비치환되거나, 또는 하나 이상의 할로겐 원자, C_{1-20} 알킬 기, C_{1-20} 알콕시 기, C_{7-20} 알킬아릴 기, C_{7-20} 아릴알킬 기, C_{6-20} 아릴 기, C_{6-20} 아릴옥시 기, C_{7-20} 알킬아릴옥시 기, 및/또는 C_{7-20} 아릴알킬옥시 기에 의해 추가로 치환되는 C_{1-30} 하이드로카르빌 기; 화학식 $-NR'_2$의 아미도 기; 화학식 $-Si(R^a)_3$의 실릴 기; 화학식 $-Ge(R^a)_3$의 게르마닐 기; 및 화학식 $-N=P(R^b)(R^c)(R^d)$의 포스핀이민 기로 이루어진 군 중에서 독립적으로 선택되고; 여기서 각 R'는 수소, C_{1-20} 알킬 기, 및 C_{6-20} 아릴 기로 이루어지는 군 중에서 독립적으로 선택되고; 각 R^a는 수소, C_{1-8} 알킬 기, C_{1-8} 알콕시 기, C_{6-20} 아릴옥시 기 및 C_{6-20} 아릴 기로 이루어진 군 중에서 독립적으로 선택되고; R^b, R^c, R^d는 각각 독립적으로 C_{1-20} 알킬 기이며;

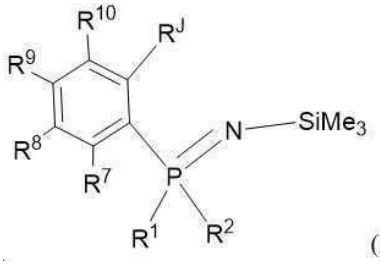
Cy는 사이클로펜타디에닐형 모이어티이고 L 및 H에 공유 결합되며; 그리고

L은 Cy와 P를 연결하는 원자의 근접한 사슬을 함유하는 가교 기로서, 여기서 근접한 사슬은 2개 또는 3개의 원자를 함유하고; 그리고

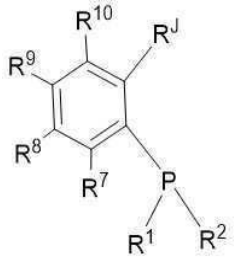
각 X^*는 할로겐, 수소, 화학식 $-NR^{\epsilon}_2$의 아미도 기, C_{1-20} 알킬 기, C_{1-20} 알콕시 기, C_{7-20} 알킬아릴 기, C_{7-20} 아릴알킬 기, C_{6-20} 아릴 기, C_{6-20} 아릴옥사이드 기, C_{7-20} 알킬아릴옥시 기, 및 C_{7-20} 아릴알킬옥시 기로 이루어지는 군 중에서 독립적으로 선택되고; 여기서 각 R^{ϵ}는 수소, C_{1-20} 알킬 기, 및 C_{6-20} 아릴 기로 이루어지는 군 중에서 독립적으로 선택됨.

청구항 167

화학식 I-P-TMS로 표현되는 화합물을 제조하는 방법으로서, 상기 방법은 화학식 I-P로 표현되는 포스핀 화합물을 헥사클로로에탄, Cl_3C-CCl_3; 및 헥사메틸디실라잔, $[(CH_3)_3Si]_2NH$와 조합하는 것을 포함하는 방법:



(I-P-TMS)



(I-P)

여기서, R^J는 다음으로 이루어지는 군 중에서 선택되고:

하이드로카르빌 기로서, 여기서 하이드로카르빌 기는 비치환되거나, 또는 할로겐 원자, C_{1-20} 알킬 기, C_{1-20} 알콕시 기, C_{7-20} 알킬아릴 기, C_{7-20} 아릴알킬 기, C_{6-20} 아릴 기, C_{6-20} 아릴옥시 기, C_{7-20} 알킬아릴옥시 기, 및 C_{7-20} 아릴알킬옥시 기, 화학식 $-NR'_2$의 아미도 기, 화학식 $-PR'_2$의 포스피도 기, 화학식 -SR'의 티올레이트 기, 화학식 $-Si(R^a)_3$의 실릴 기, 및 화학식 $-Ge(R^a)_3$의 게르마닐 기로 이루어지는 군 중에서 선택되는 하나 이상의 치환체에 의해 추가로 치환되는, 하이드로카르빌 기;

헤테로원자 함유 하이드로카르빌 기로서, 여기서 헤테로원자 함유 하이드로카르빌 기는 비치환되거나, 또는 할로겐 원자, C_{1-20} 알킬 기, C_{1-20} 알콕시 기, C_{7-20} 알킬아릴 기, C_{7-20} 아릴알킬 기, C_{6-20} 아릴 기, C_{6-20} 아릴옥시 기, C_{7-20} 알킬아릴옥시 기, 및 C_{7-20} 아릴알킬옥시 기, 화학식 $-NR'_2$의 아미도 기, 화학식 $-PR'_2$의 포스피도 기, 화학식 -SR'의 티올레이트 기, 화학식 $-Si(R^a)_3$의 실릴 기, 및 화학식 $-Ge(R^a)_3$의 게르마닐 기로 이루어지는 군 중에서 선택되는 하나 이상의 치환체에 의해 추가로 치환되는, 헤테로원자 함유 하이드로카르빌 기;

여기서, R^1 및 R^2는 각각 독립적으로 하이드로카르빌 기가 비치환되거나, 또는 하나 이상의 할로겐 원자, C_{1-20} 알킬 기, C_{1-20} 알콕시 기, C_{7-20} 알킬아릴 기, C_{7-20} 아릴알킬 기, C_{6-20} 아릴 기, C_{6-20} 아릴옥시 기, C_{7-20} 알킬아릴옥시 기, 및/또는 C_{7-20} 아릴알킬옥시 기에 의해 추가로 치환되는 C_{1-30} 하이드로카르빌 기 중에서 선택되고;

여기서, R^7, R^8, R^9, 및 R^{10}은 각각 독립적으로 다음으로 이루어진 군 중에서 선택되고:

할로겐;

수소;

C_{1-30} 하이드로카르빌 기로서, 여기서 하이드로카르빌 기는 비치환되거나, 또는 할로겐 원자, C_{1-20} 알킬 기, C_{1-20} 알콕시 기, C_{7-20} 알킬아릴 기, C_{7-20} 아릴알킬 기, C_{6-20} 아릴 기, C_{6-20} 아릴옥시 기, C_{7-20} 알킬아릴옥시 기, 및 C_{7-20} 아릴알킬옥시 기로 이루어지는 군 중에서 선택되는 하나 이상의 치환체에 의해 추가로 치환되는, C_{1-30} 하이드로카르빌 기;

헤테로원자 함유 C_{1-30} 하이드로카르빌 기로서, 여기서 헤테로원자 함유 하이드로카르빌 기는 비치환되거나, 또는 할로겐 원자, C_{1-20} 알킬 기, C_{1-20} 알콕시 기, C_{7-20} 알킬아릴 기, C_{7-20} 아릴알킬 기, C_{6-20} 아릴 기, C_{6-20} 아릴옥시 기, C_{7-20} 알킬아릴옥시 기, 및 C_{7-20} 아릴알킬옥시 기로 이루어지는 군 중에서 선택되는 하나 이상의 치환체에 의해 추가로 치환되는, 헤테로원자 함유 C_{1-30} 하이드로카르빌 기;

옥시 기, -OR';

아미도 기, $-NR'_2$;

포스피도 기 $-PR'_2$;

티올레이트 기 SR';

화학식 $-Si(R^a)_3$의 실릴 기; 및

화학식 $-Ge(R^a)_3$의 게르마닐 기;

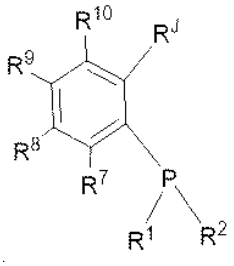
여기서, R^7, R^8, R^9, 및 R^{10} 중 2개의 인접한 기는 선택적으로 결합되어 환형 하이드로카르빌 기 또는 환형 헤테로원자 함유 하이드로카르빌 기를 형성할 수 있고, 상기 환형 하이드로카르빌 기 또는 환형 헤테로원자 함유 하이드로카르빌 기는 비치환되거나, 또는 할로겐 원자, C_{1-20} 알킬 기, C_{1-20} 알콕시 기, C_{7-20} 알킬아릴 기, C_{7-20} 아릴알킬 기, C_{6-20} 아릴 기, C_{6-20} 아릴옥시 기, C_{7-20} 알킬아릴옥시 기, C_{7-20} 아릴알킬옥시 기, 아미도 기 $-NR'_2$, 포스피도 기 $-PR'_2$, 티올레이트 기 -SR', 화학식 $-Si(R^a)_3$의 실릴 기, 및 화학식 $-Ge(R^a)_3$의 게르마닐 기로 이루어지는 군 중에서 선택되는 하나 이상의 치환체에 의해 추가로 치환되고;

여기서 각 R'는 수소, C_{1-20} 알킬 기, 및 C_{6-20} 아릴 기로 이루어지는 군 중에서 독립적으로 선택되고;

여기서 각 R^a는 수소, C_{1-8} 알킬 기, C_{1-8} 알콕시 기, C_{6-20} 아릴옥시 기 및 C_{6-20} 아릴 기로 이루어지는 군 중에서 독립적으로 선택됨.

청구항 168

제167항에 있어서, 상기 방법이 화학식 I-P로 표현되는 포스핀 화합물을 헥사클로로에탄 Cl_3C-CCl_3과 조합하는, 제1 반응 단계 (i); 및



(I-P)

상기 제1 반응 단계에서 형성된 반응 생성물과 헥사메틸디실라잔 $[(CH_3)_3Si]_2NH$을 조합하는 제2 반응 단계 (ii)를 포함하는 방법.

청구항 169

제167항에 있어서, 상기 포스핀 화합물 (I-P) 및 상기 헥사클로로에탄 Cl_3C-CCl_3이 약 1:1의 몰 비로 조합되는, 방법.

청구항 170

제168항에 있어서, 상기 헥사메틸디실라잔 $[(CH_3)_3Si]_2NH$의 몰 과량이 상기 제1 반응 단계에서 형성된 반응 생성물과 조합되는, 방법.

청구항 171

제167항에 있어서, 상기 포스핀 화합물 (I-P)에 대한 헥사메틸디실라잔 $[(CH_3)_3Si]_2NH$의 몰 비가 1.0 초과인, 방

법.

청구항 172

제167항에 있어서, 상기 포스핀 화합물 (I-P), 상기 헥사클로로에탄 Cl_3C-CCl_3; 및 상기 헥사메틸디실라잔 $[(CH_3)_3Si]_2NH$가 극성 용매에서 조합되는, 방법.

청구항 173

제172항에 있어서, 상기 극성 용매가 디클로로메탄, 1,2-디클로로에탄, 아세토니트릴 및 테트라하이드로푸란으로 이루어지는 군 중에서 선택되는, 방법.

청구항 174

제168항에 있어서, 상기 단계 (i) 및 (ii)가 단일 반응 용기에서 수행되는, 방법.

청구항 175

제167항에 있어서, R^1 및 R^2가 1차 알킬 기, 2차 알킬 기, 3차 알킬 기, 및 아릴 기로 이루어지는 군 중에서 독립적으로 선택되는, 방법.

청구항 176

제175항에 있어서, R^1 및 R^2가 2차 알킬 기인, 방법.

청구항 177

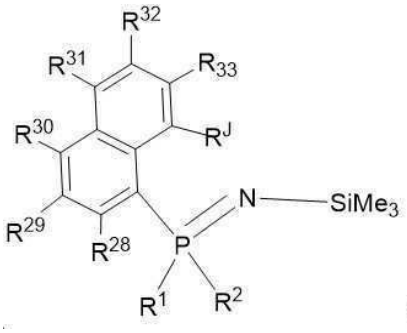
제175항에 있어서, R^1 및 R^2가 3차 알킬 기인, 방법.

청구항 178

제167항에 있어서, R^7, R^8, R^9 및 R^{10}이 각각 수소인, 방법.

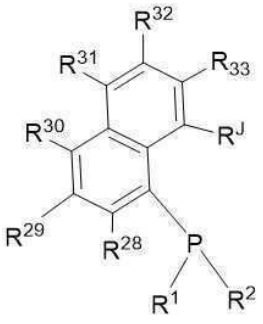
청구항 179

화학식 II-P-TMS로 표현되는 화합물을 제조하는 방법으로서:



(II-P-TMS)

상기 방법이 화학식 II-P로 표현되는 포스핀 화합물을 헥사클로로에탄 Cl_3C-CCl_3; 및 헥사메틸디실라잔 $[(CH_3)_3Si]_2NH$와 조합하는 것을 포함하는, 방법:



(II-P)

여기서, R^J는 다음으로 이루어지는 군 중에서 선택되고:

하이드로카르빌 기로서, 여기서 하이드로카르빌 기는 비치환되거나, 또는 할로겐 원자, C_{1-20} 알킬 기, C_{1-20} 알콕시 기, C_{7-20} 알킬아릴 기, C_{7-20} 아릴알킬 기, C_{6-20} 아릴 기, C_{6-20} 아릴옥시 기, C_{7-20} 알킬아릴옥시 기, C_{7-20} 아릴알킬옥시 기, 화학식 $-NR'_2$의 아미도 기, 화학식 $-PR'_2$의 포스피도 기, 화학식 -SR'의 티올레이트 기, 화학식 $-Si(R^a)_3$의 실릴 기, 및 화학식 $-Ge(R^a)_3$의 게르마닐 기로 이루어지는 군 중에서 선택되는 하나 이상의 치환체에 의해 추가로 치환되는, 하이드로카르빌 기;

헤테로원자 함유 하이드로카르빌 기로서, 여기서 헤테로원자 함유 하이드로카르빌 기는 비치환되거나, 또는 할로겐 원자, C_{1-20} 알킬 기, C_{1-20} 알콕시 기, C_{7-20} 알킬아릴 기, C_{7-20} 아릴알킬 기, C_{6-20} 아릴 기, C_{6-20} 아릴옥시 기, C_{7-20} 알킬아릴옥시 기, 및 C_{7-20} 아릴알킬옥시 기, 화학식 $-NR'_2$의 아미도 기, 화학식 $-PR'_2$의 포스피도 기, 화학식 -SR'의 티올레이트 기, 화학식 $-Si(R^a)_3$의 실릴 기, 및 화학식 $-Ge(R^a)_3$의 게르마닐 기로 이루어지는 군 중에서 선택되는 하나 이상의 치환체에 의해 추가로 치환되는, 헤테로원자 함유 하이드로카르빌 기;

여기서, R^1 및 R^2는 각각 독립적으로 하이드로카르빌 기가 비치환되거나, 또는 하나 이상의 할로겐 원자, C_{1-20} 알킬 기, C_{1-20} 알콕시 기, C_{7-20} 알킬아릴 기, C_{7-20} 아릴알킬 기, C_{6-20} 아릴 기, C_{6-20} 아릴옥시 기, C_{7-20} 알킬아릴옥시 기, 및/또는 C_{7-20} 아릴알킬옥시 기에 의해 추가로 치환되는 C_{1-30} 하이드로카르빌 기 중에서 선택되고;

여기서, R^{28}, R^{29}, R^{30}, R^{31}, R^{32} 및 R^{33}은 각각 독립적으로 다음으로 이루어진 군 중에서 선택되고:

할로겐;

수소;

C_{1-30} 하이드로카르빌 기로서, 여기서 하이드로카르빌 기는 비치환되거나, 또는 할로겐 원자, C_{1-20} 알킬 기, C_{1-20} 알콕시 기, C_{7-20} 알킬아릴 기, C_{7-20} 아릴알킬 기, C_{6-20} 아릴 기, C_{6-20} 아릴옥시 기, C_{7-20} 알킬아릴옥시 기, 및 C_{7-20} 아릴알킬옥시 기로 이루어지는 군 중에서 선택되는 하나 이상의 치환체에 의해 추가로 치환되는, C_{1-30} 하이드로카르빌 기;

헤테로원자 함유 C_{1-30} 하이드로카르빌 기로서, 여기서 헤테로원자 함유 하이드로카르빌 기는 비치환되거나, 또는 할로겐 원자, C_{1-20} 알킬 기, C_{1-20} 알콕시 기, C_{7-20} 알킬아릴 기, C_{7-20} 아릴알킬 기, C_{6-20} 아릴 기, C_{6-20} 아릴옥시 기, C_{7-20} 알킬아릴옥시 기, 및 C_{7-20} 아릴알킬옥시 기로 이루어지는 군 중에서 선택되는 하나 이상의 치환체에 의해 추가로 치환되는, 헤테로원자 함유 C_{1-30} 하이드로카르빌 기;

옥시 기, -OR';

아미도 기, $-NR'_2$;

포스피도 기 $-PR'_2$;

티올레이트 기 SR';

화학식 $-Si(R^a)_3$의 실릴 기; 및

화학식 $-Ge(R^a)_3$의 게르마닐 기;

여기서, R^{28}, R^{29}, R^{30}, R^{31}, R^{32} 및 R^{33} 중 2개의 인접한 기는 선택적으로 결합되어 환형 하이드로카르빌 기 또는 환형 헤테로원자 함유 하이드로카르빌 기를 형성할 수 있고, 상기 환형 하이드로카르빌 기 또는 환형 헤테로원자 함유 하이드로카르빌 기는 비치환되거나, 또는 할로겐 원자, C_{1-20} 알킬 기, C_{1-20} 알콕시 기, C_{7-20} 알킬아릴 기, C_{7-20} 아릴알킬 기, C_{6-20} 아릴 기, C_{6-20} 아릴옥시 기, C_{7-20} 알킬아릴옥시 기, C_{7-20} 아릴알킬옥시 기, 화학식 $-NR'_2$의 아미도 기, 화학식 $-PR'_2$의 포스피도 기, 화학식 $-SR'$의 티올레이트 기, 화학식 $-Si(R^a)_3$의 실릴 기, 및 화학식 $-Ge(R^a)_3$의 게르마닐 기로 이루어지는 군 중에서 선택되는 하나 이상의 치환체에 의해 추가로 치환되고;

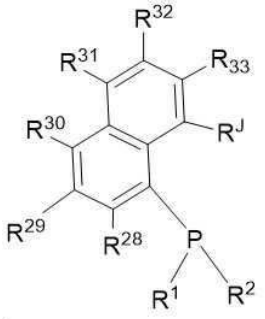
여기서 각 R'는 수소, C_{1-20} 알킬 기, 및 C_{6-20} 아릴 기로 이루어지는 군 중에서 독립적으로 선택되고; 그리고

여기서 각 R^a는 수소, C_{1-8} 알킬 기, C_{1-8} 알콕시 기, C_{6-20} 아릴옥시 기 및 C_{6-20} 아릴 기로 이루어지는 군 중에서 독립적으로 선택됨.

청구항 180

제179항에 있어서, 상기 방법이

화학식 II-P로 표현되는 포스핀 화합물을 헥사클로로에탄 Cl_3C-CCl_3과 조합하는, 제1 반응 단계 (i);



(II-P); 및

상기 제1 반응 단계에서 형성된 반응 생성물과 헥사메틸디실라잔 $[(CH_3)_3Si]_2NH$를 조합하는 제2 반응 단계 (ii)

를 포함하는 방법.

청구항 181

제179항에 있어서, 상기 포스핀 화합물 (II-P) 및 상기 헥사클로로에탄 Cl_3C-CCl_3이 약 1:1의 몰 비로 조합되는, 방법.

청구항 182

제180항에 있어서, 상기 헥사메틸디실라잔 $[(CH_3)_3Si]_2NH$의 몰 과량이 상기 제1 반응 단계에서 형성된 반응 생성물과 조합되는, 방법.

청구항 183

제179항에 있어서, 상기 포스핀 화합물 (II-P)에 대한 상기 헥사메틸디실라잔 $[(CH_3)_3Si]_2NH$의 몰 비가 1.0 초과인, 방법.

청구항 184

제179항에 있어서, 상기 포스핀 화합물 (II-P), 상기 헥사클로로에탄 Cl_3C-CCl_3; 및 상기 헥사메틸디실라잔 $[(CH_3)_3Si]_2NH$가 극성 용매에서 조합되는, 방법.

청구항 185

제184항에 있어서, 상기 극성 용매가 디클로로메탄, 1,2-디클로로에탄, 아세토니트릴 및 테트라하이드로푸란으로 이루어지는 군 중에서 선택되는, 방법.

청구항 186

제180항에 있어서, 상기 단계 (i) 및 (ii)가 단일 반응 용기에서 수행되는, 방법.

청구항 187

제179항에 있어서, R^1 및 R^2가 1차 알킬 기, 2차 알킬 기, 3차 알킬 기, 및 아릴 기로 이루어지는 군 중에서 독립적으로 선택되는, 방법.

청구항 188

제187항에 있어서, R^1 및 R^2가 2차 알킬 기인, 방법.

청구항 189

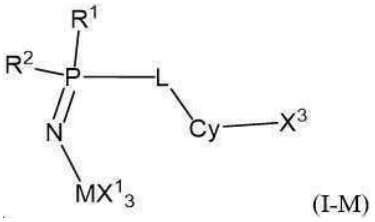
제187항에 있어서, R^1 및 R^2가 3차 알킬 기인, 방법.

청구항 190

제179항에 있어서, R^{28}, R^{29}, R^{30}, R^{31}, R^{32} 및 R^{33}이 각각 수소인, 방법.

청구항 191

화학식 I-M으로 표현되는 유기금속 복합체:



(I-M)

여기서,

M은 Ti, Zr 또는 Hf이고;

R^1 및 R^2는 각각 독립적으로 수소 및 R^X로 이루어진 군 중에서 선택되거나; 또는 R^1 및 R^2는 이들이 부착된 P 원자와 함께, 비치환되거나, 또는 할로겐 원자, C_{1-20} 알킬 기, C_{1-20} 알콕시 기, C_{7-20} 알킬아릴 기, C_{7-20} 아릴알킬 기, C_{6-20} 아릴 기, C_{6-20} 아릴옥시 기, C_{7-20} 알킬아릴옥시 기, 및 C_{7-20} 아릴알킬옥시 기로 이루어진 군 중에서 선택되는 하나 이상의 치환체에 의해 추가로 치환되는 3-10원 헤테로환형 기를 형성하며;

각 R^X는 할로겐 원자; 하이드로카르빌 기가 비치환되거나, 또는 하나 이상의 할로겐 원자, C_{1-20} 알킬 기, C_{1-20} 알콕시 기, C_{7-20} 알킬아릴 기, C_{7-20} 아릴알킬 기, C_{6-20} 아릴 기, C_{6-20} 아릴옥시 기, C_{7-20} 알킬아릴옥시 기, 및/또는 C_{7-20} 아릴알킬옥시 기에 의해 추가로 치환되는 C_{1-30} 하이드로카르빌 기; 화학식 $-NR'_2$의 아미도 기; 화학식 $-Si(R^a)_3$의 실릴 기; 화학식 $-Ge(R^a)_3$의 게르마닐 기; 및 화학식 $-N=P(R^b)(R^c)(R^d)$의 포스핀이민 기로 이루어진

군 중에서 독립적으로 선택되고; 여기서 각 R'는 수소, C_{1-20} 알킬 기, 및 C_{6-20} 아릴 기로 이루어지는 군 중에서 독립적으로 선택되고; 각 R^a는 수소, C_{1-8} 알킬 기, C_{1-8} 알콕시 기, C_{6-20} 아릴옥시 기 및 C_{6-20} 아릴 기로 이루어진 군 중에서 독립적으로 선택되고; R^b, R^c, R^d는 각각 독립적으로 C_{1-20} 알킬 기이며;

Cy는 사이클로펜타디에닐형 모이어티이고 L 및 X^3에 공유 결합되며,

각 X^1은 활성화 가능한 리간드이고;

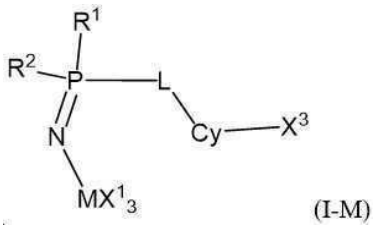
X^3은 수소, 또는 화학식 $-Si(R^e)_3$의 실릴 기, 또는 화학식 $Sn(R^e)_3$의 주석 기이며; 여기서, 각 R^e는 수소, C_{1-8} 알킬 기, C_{1-8} 알콕시 기, C_{6-20} 아릴옥시 기, 및 C_{6-20} 아릴 기로 이루어지는 군 중에서 독립적으로 선택되고; 그리고

L은 Cy와 P를 연결하는 원자의 근접한 사슬을 함유하는 가교 기로서, 여기서 근접한 사슬은 2개 또는 3개의 원자를 함유함.

청구항 192

다음을 포함하는 올레핀 중합 촉매 시스템:

i) 화학식 I-M으로 표현되는 유기금속 복합체:



(I-M)

여기서,

M은 Ti, Zr 또는 Hf이고;

R^1 및 R^2는 각각 독립적으로 수소 및 R^X로 이루어진 군 중에서 선택되거나; 또는 R^1 및 R^2는 이들이 부착된 P 원자와 함께, 비치환되거나, 또는 할로겐 원자, C_{1-20} 알킬 기, C_{1-20} 알콕시 기, C_{7-20} 알킬아릴 기, C_{7-20} 아릴알킬 기, C_{6-20} 아릴 기, C_{6-20} 아릴옥시 기, C_{7-20} 알킬아릴옥시 기, 및 C_{7-20} 아릴알킬옥시 기로 이루어진 군 중에서 선택되는 하나 이상의 치환체에 의해 추가로 치환되는 3-10원 헤테로환형 기를 형성하며;

각 R^X는 할로겐 원자; 하이드로카르빌 기가 비치환되거나, 또는 하나 이상의 할로겐 원자, C_{1-20} 알킬 기, C_{1-20} 알콕시 기, C_{7-20} 알킬아릴 기, C_{7-20} 아릴알킬 기, C_{6-20} 아릴 기, C_{6-20} 아릴옥시 기, C_{7-20} 알킬아릴옥시 기, 및/또는 C_{7-20} 아릴알킬옥시 기에 의해 추가로 치환되는 C_{1-30} 하이드로카르빌 기; 화학식 $-NR'_2$의 아미도 기; 화학식 $-Si(R^a)_3$의 실릴 기; 화학식 $-Ge(R^a)_3$의 게르마닐 기; 및 화학식 $-N=P(R^b)(R^c)(R^d)$의 포스핀이민 기로 이루어진 군 중에서 독립적으로 선택되고; 여기서 각 R'는 수소, C_{1-20} 알킬 기, 및 C_{6-20} 아릴 기로 이루어지는 군 중에서 독립적으로 선택되고; 각 R^a는 수소, C_{1-8} 알킬 기, C_{1-8} 알콕시 기, C_{6-20} 아릴옥시 기 및 C_{6-20} 아릴 기로 이루어진 군 중에서 독립적으로 선택되고; R^b, R^c, R^d는 각각 독립적으로 C_{1-20} 알킬 기이며;

Cy는 사이클로펜타디에닐형 모이어티이고 L 및 X^3에 공유 결합되며,

각 X^1은 활성화 가능한 리간드이고;

X^3은 수소, 또는 화학식 $-Si(R^e)_3$의 실릴 기, 또는 화학식 $Sn(R^e)_3$의 주석 기이며; 여기서, 각 R^e는 수소, C_{1-8} 알킬 기, C_{1-8} 알콕시 기, C_{6-20} 아릴옥시 기, 및 C_{6-20} 아릴 기로 이루어지는 군 중에서 독립적으로 선택되고; 그리고

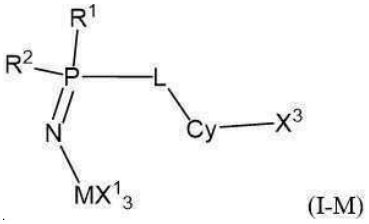
L은 Cy와 P를 연결하는 원자의 근접한 사슬을 함유하는 가교 기로서, 여기서 근접한 사슬은 2개 또는 3개의 원자를 함유함; 및

ii) 촉매 활성화제.

청구항 193

다음을 포함하는 올레핀 중합 촉매 시스템의 존재 하에 에틸렌을 선택적으로 하나 이상의 C_3-C_{12} 알파-올레핀과 중합시키는 것을 포함하는 중합 공정:

i) 화학식 I-M으로 표현되는 유기금속 복합체:



(I-M)

여기서,

M은 Ti, Zr 또는 Hf이고;

R^1 및 R^2는 각각 독립적으로 수소 및 R^X로 이루어진 군 중에서 선택되거나; 또는 R^1 및 R^2는 이들이 부착된 P 원자와 함께, 비치환되거나, 또는 할로겐 원자, C_{1-20} 알킬 기, C_{1-20} 알콕시 기, C_{7-20} 알킬아릴 기, C_{7-20} 아릴알킬 기, C_{6-20} 아릴 기, C_{6-20} 아릴옥시 기, C_{7-20} 알킬아릴옥시 기, 및 C_{7-20} 아릴알킬옥시 기로 이루어진 군 중에서 선택되는 하나 이상의 치환체에 의해 추가로 치환되는 3-10원 헤테로환형 기를 형성하며;

각 R^X는 할로겐 원자; 하이드로카르빌 기가 비치환되거나, 또는 하나 이상의 할로겐 원자, C_{1-20} 알킬 기, C_{1-20} 알콕시 기, C_{7-20} 알킬아릴 기, C_{7-20} 아릴알킬 기, C_{6-20} 아릴 기, C_{6-20} 아릴옥시 기, C_{7-20} 알킬아릴옥시 기, 및/또는 C_{7-20} 아릴알킬옥시 기에 의해 추가로 치환되는 C_{1-30} 하이드로카르빌 기; 화학식 $-NR'_2$의 아미도 기; 화학식 $-Si(R^a)_3$의 실릴 기; 화학식 $-Ge(R^a)_3$의 게르마닐 기; 및 화학식 $-N=P(R^b)(R^c)(R^d)$의 포스핀이민 기로 이루어진 군 중에서 독립적으로 선택되고; 여기서 각 R'는 수소, C_{1-20} 알킬 기, 및 C_{6-20} 아릴 기로 이루어지는 군 중에서 독립적으로 선택되고; 각 R^a는 수소, C_{1-8} 알킬 기, C_{1-8} 알콕시 기, C_{6-20} 아릴옥시 기 및 C_{6-20} 아릴 기로 이루어진 군 중에서 독립적으로 선택되고; R^b, R^c, R^d는 각각 독립적으로 C_{1-20} 알킬 기이며;

Cy는 사이클로펜타디에닐형 모이어티이고 L 및 X^3에 공유 결합되며,

각 X^1은 활성화 가능한 리간드이고;

X^3은 수소, 또는 화학식 $-Si(R^e)_3$의 실릴 기, 또는 화학식 $Sn(R^e)_3$의 주석 기이며; 여기서, 각 R^e는 수소, C_{1-8} 알킬 기, C_{1-8} 알콕시 기, C_{6-20} 아릴옥시 기, 및 C_{6-20} 아릴 기로 이루어지는 군 중에서 독립적으로 선택되고; 그리고

L은 Cy와 P를 연결하는 원자의 근접한 사슬을 함유하는 가교 기로서, 여기서 근접한 사슬은 2개 또는 3개의 원자를 함유함; 및

ii) 촉매 활성화제.

발명의 설명

기 술 분 야

[0001] 올레핀 중합 촉매 시스템 내에서 사용될 수 있는 유기금속 복합체가 제공된다. 유기금속 복합체를 함유하는 올레핀 중합 촉매 시스템은 에틸렌의 중합에, 선택적으로 하나 이상의 알파-올레핀과 함께 사용될 수 있다.

배 경 기 술

[0002] 올레핀의 중합을 수행하기 위해 매우 다양한 단일 부위 촉매가 개발되었다. 예를 들어, 포스핀이민 리간드를 함유하는 올레핀 중합 촉매는 알려져 있다. 사이클로펜타디에닐형 리간드를 갖는 중합 촉매, 소위 "하프 샌드위치" 복합체도 알려져 있다.

[0003] 미국 특허 제6,063,879호는 모노사이클로펜타디에닐 리간드와 포스핀이민 리간드를 함유하는 IV족 금속 복합체를 기술한다. 이 복합체는 에틸렌 및 선택적으로 하나 이상의 지방족 또는 방향족 하이드로카르빌 C_{2-20} 모노- 또는 디-올레핀의 중합에 유용한 것으로 기술되어 있다.

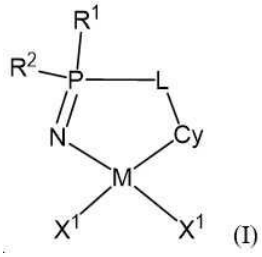
[0004] 용액상 올레핀 중합과 같은 고온 올레핀 중합 공정에 사용하기 위해 단일 부위 촉매의 성능을 향상시키고자 하는 요구는 계속되고 있다. 중합 동안 더 높은 반응 온도는 에너지 소모를 줄이기 때문에 더 높은 온도에서 작동하는 촉매가 바람직하다.

[0005] 따라서, 더 높은 열적 안정성이 있는 단일 부위 촉매를 제공하는 것이 바람직할 것이다.

발명의 내용

[0006] 이제 본 발명자들은 높은 활성을 갖고 높은 전환 효율로 고분자량의 폴리에틸렌을 생성하는 올레핀 중합 촉매 시스템에 사용될 수 있는 유기금속 복합체(또한 본원에서는 "예비중합 촉매"라고도 지칭됨)에 대해 보고한다. 올레핀 중합 촉매 시스템은 고온의 용액상 중합 공정에서 에틸렌을 알파-올레핀과 중합시키는 데 효과적이며, 고분자량 및 높은 알파-올레핀 혼입도를 갖는 에틸렌 공중합체를 생성한다.

[0007] 본 개시내용의 실시양태는 화학식 I로 표현되는 유기금속 복합체이다:

[0008] 

(I)

[0009] 여기서,

[0010] M은 Ti, Zr 또는 Hf이고;

[0011] R^1 및 R^2는 각각 독립적으로 수소 및 R^X로 이루어진 군 중에서 선택되거나; 또는 R^1 및 R^2는 이들이 부착된 P 원자와 함께, 비치환되거나, 또는 할로겐 원자, C_{1-20} 알킬 기, C_{1-20} 알콕시 기, C_{7-20} 알킬아릴 기, C_{7-20} 아릴알킬 기, C_{6-20} 아릴 기, C_{6-20} 아릴옥시 기, C_{7-20} 알킬아릴옥시 기, 및 C_{7-20} 아릴알킬옥시 기로 이루어진 군 중에서 선택되는 하나 이상의 치환체에 의해 추가로 치환되는 3-10원 헤테로환형 기를 형성하며;

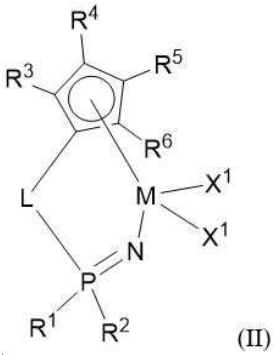
[0012] 각 R^X는 할로겐 원자; 하이드로카르빌 기가 비치환되거나, 또는 하나 이상의 할로겐 원자, C_{1-20} 알킬 기, C_{1-20} 알콕시 기, C_{7-20} 알킬아릴 기, C_{7-20} 아릴알킬 기, C_{6-20} 아릴 기, C_{6-20} 아릴옥시 기, C_{7-20} 알킬아릴옥시 기, 및/또는 C_{7-20} 아릴알킬옥시 기에 의해 추가로 치환되는 C_{1-30} 하이드로카르빌 기; 화학식 $-NR'_2$의 아미도 기; 화학식 $-Si(R^a)_3$의 실릴 기; 화학식 $-Ge(R^a)_3$의 게르마닐 기; 및 화학식 $-N=P(R^b)(R^c)(R^d)$의 포스핀이민 기로 이루어진 군 중에서 독립적으로 선택되고; 여기서 각 R'는 수소, C_{1-20} 알킬 기, 및 C_{6-20} 아릴 기로 이루어지는 군 중에서 독립적으로 선택되고; 각 R^a는 수소, C_{1-8} 알킬 기, C_{1-8} 알콕시 기, C_{6-20} 아릴옥시 기 및 C_{6-20} 아릴 기로 이루어진 군 중에서 독립적으로 선택되고; R^b, R^c, R^d는 각각 독립적으로 C_{1-20} 알킬 기이며;

[0013] 각 X^1은 활성화 가능한 리간드이고;

[0014] Cy는 L에 공유 결합되고 η-결합을 통해 M에 배위된 사이클로펜타디에닐형 리간드이고; 그리고

[0015] L은 Cy와 P를 연결하는 원자의 근접한 사슬을 함유하는 가교 기로서, 여기서 근접한 사슬은 2개 또는 3개의 원자를 함유한다.

[0016] 본 개시내용의 실시양태는 화학식 II로 표현되는 유기금속 복합체이다:

[0017] 

(II)

[0018] 여기서,

[0019] M은 Ti, Zr 또는 Hf이고;

[0020] R^1 및 R^2는 각각 독립적으로 수소 및 R^X로 이루어진 군 중에서 선택되거나; 또는 R^1 및 R^2는 이들이 부착된 P 원자와 함께, 비치환되거나, 또는 할로겐 원자, C_{1-20} 알킬 기, C_{1-20} 알콕시 기, C_{7-20} 알킬아릴 기, C_{7-20} 아릴알킬 기, C_{6-20} 아릴 기, C_{6-20} 아릴옥시 기, C_{7-20} 알킬아릴옥시 기, 및 C_{7-20} 아릴알킬옥시 기로 이루어진 군 중에서 선택되는 하나 이상의 치환체에 의해 추가로 치환되는 3-10원 헤테로환형 기를 형성하며;

[0021] 각 R^X는 할로겐 원자; 하이드로카르빌 기가 비치환되거나, 또는 하나 이상의 할로겐 원자, C_{1-20} 알킬 기, C_{1-20} 알콕시 기, C_{7-20} 알킬아릴 기, C_{7-20} 아릴알킬 기, C_{6-20} 아릴 기, C_{6-20} 아릴옥시 기, C_{7-20} 알킬아릴옥시 기, 및/또는 C_{7-20} 아릴알킬옥시 기에 의해 추가로 치환되는 C_{1-30} 하이드로카르빌 기; 화학식 $-NR'_2$의 아미도 기; 화학식 $-Si(R^a)_3$의 실릴 기; 화학식 $-Ge(R^a)_3$의 게르마닐 기; 및 화학식 $-N=P(R^b)(R^c)(R^d)$의 포스핀이민 기로 이루어진 군 중에서 독립적으로 선택되고;

[0022] 여기서, R^3, R^4, R^5 및 R^6은 각각 독립적으로 다음으로 이루어진 군 중에서 선택되고:

[0023] 할로겐;

[0024] 수소;

[0025] C_{1-30} 하이드로카르빌 기로서, 여기서 하이드로카르빌 기는 비치환되거나, 또는 할로겐 원자, C_{1-20} 알킬 기, C_{1-20} 알콕시 기, C_{7-20} 알킬아릴 기, C_{7-20} 아릴알킬 기, C_{6-20} 아릴 기, C_{6-20} 아릴옥시 기, C_{7-20} 알킬아릴옥시 기, 및 C_{7-20} 아릴알킬옥시 기로 이루어지는 군 중에서 선택되는 하나 이상의 치환체에 의해 추가로 치환되는 C_{1-30} 하이드로카르빌 기;

[0026] 헤테로원자 함유 C_{1-30} 하이드로카르빌 기로서, 여기서 헤테로원자 함유 하이드로카르빌 기는 비치환되거나, 또는 할로겐 원자, C_{1-20} 알킬 기, C_{1-20} 알콕시 기, C_{7-20} 알킬아릴 기, C_{7-20} 아릴알킬 기, C_{6-20} 아릴 기, C_{6-20} 아릴옥시 기, C_{7-20} 알킬아릴옥시 기, 및 C_{7-20} 아릴알킬옥시 기로 이루어지는 군 중에서 선택되는 하나 이상의 치환체에 의해 추가로 치환되는 헤테로원자 함유 C_{1-30} 하이드로카르빌 기;

[0027] 옥시 기, -OR';

[0028] 아미도 기, $-NR'_2$;

[0029] 포스피도 기, $-PR'_2$;

[0030] 티올레이트 기, -SR';

[0031] 화학식 $-Si(R^a)_3$의 실릴 기; 및

[0032] 화학식 $-Ge(R^a)_3$의 게르마닐 기;

[0033] 여기서, R^3, R^4, R^5 및 R^6 중 2개의 인접한 기는 선택적으로 결합되어 환형 하이드로카르빌 기 또는 환형 헤테로원자 함유 하이드로카르빌 기를 형성할 수 있고, 이 환형 하이드로카르빌 기 또는 환형 헤테로원자 함유 하이드로카르빌 기는 비치환되거나, 또는 할로겐 원자, C_{1-20} 알킬 기, C_{1-20} 알콕시 기, C_{7-20} 알킬아릴 기, C_{7-20} 아릴알킬 기, C_{6-20} 아릴 기, C_{6-20} 아릴옥시 기, C_{7-20} 알킬아릴옥시 기, C_{7-20} 아릴알킬옥시 기, 화학식 $-NR'_2$의 아미도 기, 화학식 $-PR'_2$의 포스피도 기, 화학식 -SR'의 티올레이트 기, 화학식 $-Si(R^a)_3$의 실릴 기, 및 화학식 $-Ge(R^a)_3$의 게르마닐 기로 이루어지는 군 중에서 선택되는 하나 이상의 치환체에 의해 추가로 치환되고;

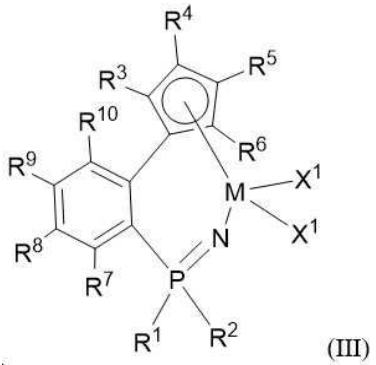
[0034] 여기서 각 R'는 수소, C_{1-20} 알킬 기, 및 C_{6-20} 아릴 기로 이루어지는 군 중에서 독립적으로 선택되고;

[0035] 여기서 각 R^a는 수소, C_{1-8} 알킬 기, C_{1-8} 알콕시 기, C_{6-20} 아릴옥시 기 및 C_{6-20} 아릴 기로 이루어지는 군 중에서 독립적으로 선택되고; 그리고 R^b, R^c, R^d는 각각 독립적으로 C_{1-20} 알킬 기이며;

[0036] 각 X^1은 활성화 가능한 리간드이고; 그리고

[0037] L은 Cy와 P를 연결하는 원자의 근접한 사슬을 함유하는 가교 기로서, 여기서 근접한 사슬은 2개 또는 3개의 원자를 함유한다.

[0038] 본 개시내용의 실시양태는 화학식 III으로 표현되는 유기금속 복합체이다:

[0039] 

(III)

[0040] 여기서, M은 Ti, Zr 또는 Hf이고;

[0041] 여기서, R^1 및 R^2는 각각 독립적으로 수소 및 R^X로 이루어진 군 중에서 선택되거나; 또는 R^1 및 R^2는 이들이 부착된 P 원자와 함께, 비치환되거나, 또는 할로겐 원자, C_{1-20} 알킬 기, C_{1-20} 알콕시 기, C_{7-20} 알킬아릴 기, C_{7-20} 아릴알킬 기, C_{6-20} 아릴 기, C_{6-20} 아릴옥시 기, C_{7-20} 알킬아릴옥시 기, 및 C_{7-20} 아릴알킬옥시 기로 이루어진 군 중에서 선택되는 하나 이상의 치환체에 의해 추가로 치환되는 3-10원 헤테로환형 기를 형성하며;

[0042] 각 R^X는 할로겐 원자; 하이드로카르빌 기가 비치환되거나, 또는 하나 이상의 할로겐 원자, C_{1-20} 알킬 기, C_{1-20} 알콕시 기, C_{7-20} 알킬아릴 기, C_{7-20} 아릴알킬 기, C_{6-20} 아릴 기, C_{6-20} 아릴옥시 기, C_{7-20} 알킬아릴옥시 기, 및/또는 C_{7-20} 아릴알킬옥시 기에 의해 추가로 치환되는 C_{1-30} 하이드로카르빌 기; 화학식 $-NR'_2$의 아미도 기; 화학식 $-Si(R^a)_3$의 실릴 기; 화학식 $-Ge(R^a)_3$의 게르마닐 기; 및 화학식 $-N=P(R^b)(R^c)(R^d)$의 포스핀이민 기로 이루어진 군 중에서 독립적으로 선택되고;

[0043] 여기서, R^3, R^4, R^5, R^6, R^7, R^8, R^9, 및 R^{10}은 각각 독립적으로 다음으로 이루어진 군 중에서 선택되고:

[0044] 할로겐;

[0045] 수소;

[0046] C_{1-30} 하이드로카르빌 기로서, 여기서 하이드로카르빌 기는 비치환되거나, 또는 할로겐 원자, C_{1-20} 알킬 기, C_{1-20} 알콕시 기, C_{7-20} 알킬아릴 기, C_{7-20} 아릴알킬 기, C_{6-20} 아릴 기, C_{6-20} 아릴옥시 기, C_{7-20} 알킬아릴옥시 기, 및 C_{7-20} 아릴알킬옥시 기로 이루어지는 군 중에서 선택되는 하나 이상의 치환체에 의해 추가로 치환되는 C_{1-30} 하이드로카르빌 기;

[0047] 헤테로원자 함유 C_{1-30} 하이드로카르빌 기로서, 여기서 헤테로원자 함유 하이드로카르빌 기는 비치환되거나, 또는 할로겐 원자, C_{1-20} 알킬 기, C_{1-20} 알콕시 기, C_{7-20} 알킬아릴 기, C_{7-20} 아릴알킬 기, C_{6-20} 아릴 기, C_{6-20} 아릴옥시 기, C_{7-20} 알킬아릴옥시 기, 및 C_{7-20} 아릴알킬옥시 기로 이루어지는 군 중에서 선택되는 하나 이상의 치환체에 의해 추가로 치환되는 헤테로원자 함유 C_{1-30} 하이드로카르빌 기;

[0048] 옥시 기, -OR';

[0049] 아미도 기, $-NR'_2$;

[0050] 포스피도 기, $-PR'_2$;

[0051] 티올레이트 기, -SR';

[0052] 화학식 $-Si(R^a)_3$의 실릴 기; 및

[0053] 화학식 $-Ge(R^a)_3$의 게르마닐 기;

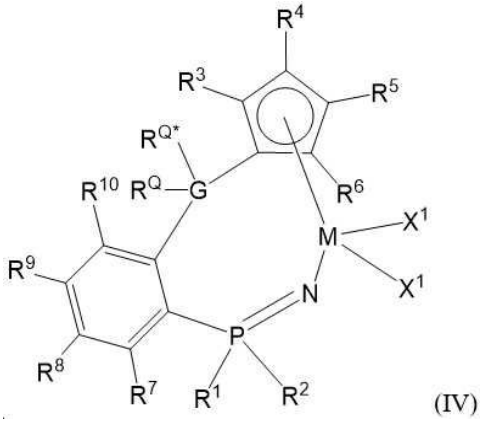
[0054] 여기서, R^3, R^4, R^5, R^6, R^7, R^8, R^9, 및 R^{10} 중 2개의 인접한 기는 선택적으로 결합되어 환형 하이드로카르빌 기 또는 환형 헤테로원자 함유 하이드로카르빌 기를 형성할 수 있고, 이 환형 하이드로카르빌 기 또는 환형 헤테로원자 함유 하이드로카르빌 기는 비치환되거나, 또는 할로겐 원자, C_{1-20} 알킬 기, C_{1-20} 알콕시 기, C_{7-20} 알킬아릴 기, C_{7-20} 아릴알킬 기, C_{6-20} 아릴 기, C_{6-20} 아릴옥시 기, C_{7-20} 알킬아릴옥시 기, C_{7-20} 아릴알킬옥시 기, 화학식 $-NR'_2$의 아미도 기, 화학식 $-PR'_2$의 포스피도 기, 화학식 -SR'의 티올레이트 기, 화학식 $-Si(R^a)_3$의 실릴 기, 및 화학식 $-Ge(R^a)_3$의 게르마닐 기로 이루어지는 군 중에서 선택되는 하나 이상의 치환체에 의해 추가로 치환되고;

[0055] 여기서 각 R'는 수소, C_{1-20} 알킬 기, 및 C_{6-20} 아릴 기로 이루어지는 군 중에서 독립적으로 선택되고;

[0056] 여기서 각 R^a는 수소, C_{1-8} 알킬 기, C_{1-8} 알콕시 기, C_{6-20} 아릴옥시 기 및 C_{6-20} 아릴 기로 이루어지는 군 중에서 독립적으로 선택되고; 그리고 R^b, R^c, R^d는 각각 독립적으로 C_{1-20} 알킬 기이며;

[0057] 여기서 각 X^1은 활성화 가능한 리간드이다.

[0058] 본 개시내용의 실시양태는 화학식 IV로 표현되는 유기금속 복합체이다:

[0059] 

(IV)

[0060] 여기서, M은 Ti, Zr 또는 Hf이고;

[0061] 여기서, R^1 및 R^2는 각각 독립적으로 수소 및 R^X로 이루어진 군 중에서 선택되거나; 또는 R^1 및 R^2는 이들이 부착된 P 원자와 함께, 비치환되거나, 또는 할로겐 원자, C_{1-20} 알킬 기, C_{1-20} 알콕시 기, C_{7-20} 알킬아릴 기, C_{7-20} 아릴알킬 기, C_{6-20} 아릴 기, C_{6-20} 아릴옥시 기, C_{7-20} 알킬아릴옥시 기, 및 C_{7-20} 아릴알킬옥시 기로 이루어진 군 중에서 선택되는 하나 이상의 치환체에 의해 추가로 치환되는 3-10원 헤테로환형 기를 형성하며;

[0062] 각 R^X는 할로겐 원자; 하이드로카르빌 기가 비치환되거나, 또는 하나 이상의 할로겐 원자, C_{1-20} 알킬 기, C_{1-20} 알콕시 기, C_{7-20} 알킬아릴 기, C_{7-20} 아릴알킬 기, C_{6-20} 아릴 기, C_{6-20} 아릴옥시 기, C_{7-20} 알킬아릴옥시 기, 및/또는 C_{7-20} 아릴알킬옥시 기에 의해 추가로 치환되는 C_{1-30} 하이드로카르빌 기; 화학식 $-NR'_2$의 아미도 기; 화학식 $-Si(R^a)_3$의 실릴 기; 화학식 $-Ge(R^a)_3$의 게르마닐 기; 및 화학식 $-N=P(R^b)(R^c)(R^d)$의 포스핀이민 기로 이루어진 군 중에서 독립적으로 선택되고;

[0063] 여기서, G는 C 또는 Si이고;

[0064] 여기서, R^Q 및 R^{Q*}는 각각 독립적으로 다음으로 이루어진 군 중에서 선택되며:

[0065] 할로겐;

[0066] 수소;

[0067] C_{1-30} 하이드로카르빌 기로서, 여기서 하이드로카르빌 기는 비치환되거나, 또는 할로겐 원자, C_{1-20} 알킬 기, C_{1-20} 알콕시 기, C_{7-20} 알킬아릴 기, C_{7-20} 아릴알킬 기, C_{6-20} 아릴 기, C_{6-20} 아릴옥시 기, C_{7-20} 알킬아릴옥시 기, 및 C_{7-20} 아릴알킬옥시 기로 이루어지는 군 중에서 선택되는 하나 이상의 치환체에 의해 추가로 치환되는 C_{1-30} 하이드로카르빌 기;

[0068] 헤테로원자 함유 C_{1-30} 하이드로카르빌 기로서, 여기서 헤테로원자 함유 하이드로카르빌 기는 비치환되거나, 또는 할로겐 원자, C_{1-20} 알킬 기, C_{1-20} 알콕시 기, C_{7-20} 알킬아릴 기, C_{7-20} 아릴알킬 기, C_{6-20} 아릴 기, C_{6-20} 아릴옥시 기, C_{7-20} 알킬아릴옥시 기, 및 C_{7-20} 아릴알킬옥시 기로 이루어지는 군 중에서 선택되는 하나 이상의 치환체에 의해 추가로 치환되는 헤테로원자 함유 C_{1-30} 하이드로카르빌 기;

[0069] 여기서, R^Q 및 R^{Q*} 기는 선택적으로 결합되어 환형 하이드로카르빌 기 또는 환형 헤테로원자 함유 하이드로카르빌 기를 형성할 수 있고, 이 환형 하이드로카르빌 기 또는 환형 헤테로원자 함유 하이드로카르빌 기는 비치환되거나, 또는 할로겐 원자, C_{1-20} 알킬 기, C_{1-20} 알콕시 기, C_{7-20} 알킬아릴 기, C_{7-20} 아릴알킬 기, C_{6-20} 아릴 기, C_{6-20} 아릴옥시 기, C_{7-20} 알킬아릴옥시 기, C_{7-20} 아릴알킬옥시 기, 화학식 $-NR'_2$의 아미도 기; 화학식 $-PR'_2$의 포스피도 기, 화학식 -SR'의 티올레이트 기, 화학식 $-Si(R^a)_3$의 실릴 기, 및 화학식 $-Ge(R^a)_3$의 게르마닐 기로 이루

어지는 군 중에서 선택되는 하나 이상의 치환체에 의해 추가로 치환되며;

[0070] 여기서, R^3, R^4, R^5, R^6, R^7, R^8, R^9, 및 R^{10}은 각각 독립적으로 다음으로 이루어진 군 중에서 선택되고:

[0071] 할로겐;

[0072] 수소;

[0073] C_{1-30} 하이드로카르빌 기로서, 여기서 하이드로카르빌 기는 비치환되거나, 또는 할로겐 원자, C_{1-20} 알킬 기, C_{1-20} 알콕시 기, C_{7-20} 알킬아릴 기, C_{7-20} 아릴알킬 기, C_{6-20} 아릴 기, C_{6-20} 아릴옥시 기, C_{7-20} 알킬아릴옥시 기, 및 C_{7-20} 아릴알킬옥시 기로 이루어지는 군 중에서 선택되는 하나 이상의 치환체에 의해 추가로 치환되는, C_{1-30} 하이드로카르빌 기;

[0074] 헤테로원자 함유 C_{1-30} 하이드로카르빌 기로서, 여기서 헤테로원자 함유 하이드로카르빌 기는 비치환되거나, 또는 할로겐 원자, C_{1-20} 알킬 기, C_{1-20} 알콕시 기, C_{7-20} 알킬아릴 기, C_{7-20} 아릴알킬 기, C_{6-20} 아릴 기, C_{6-20} 아릴옥시 기, C_{7-20} 알킬아릴옥시 기, 및 C_{7-20} 아릴알킬옥시 기로 이루어지는 군 중에서 선택되는 하나 이상의 치환체에 의해 추가로 치환되는, 헤테로원자 함유 C_{1-30} 하이드로카르빌 기;

[0075] 옥시 기, -OR';

[0076] 아미도 기, $-NR'_2$;

[0077] 포스피도 기, $-PR'_2$;

[0078] 티올레이트 기, -SR';

[0079] 화학식 $-Si(R^a)_3$의 실릴 기; 및

[0080] 화학식 $-Ge(R^a)_3$의 게르마닐 기;

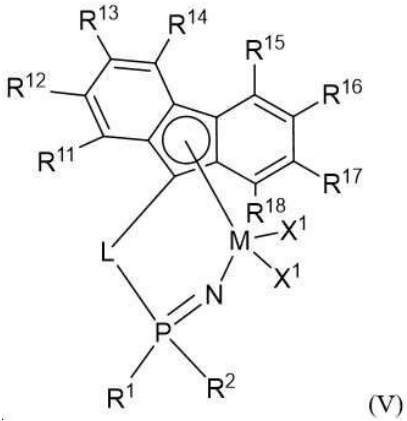
[0081] 여기서, R^3, R^4, R^5, R^6, R^7, R^8, R^9, 및 R^{10} 중 2개의 인접한 기는 선택적으로 결합되어 환형 하이드로카르빌 기 또는 환형 헤테로원자 함유 하이드로카르빌 기를 형성할 수 있고, 이 환형 하이드로카르빌 기 또는 환형 헤테로원자 함유 하이드로카르빌 기는 비치환되거나, 또는 할로겐 원자, C_{1-20} 알킬 기, C_{1-20} 알콕시 기, C_{7-20} 알킬아릴 기, C_{7-20} 아릴알킬 기, C_{6-20} 아릴 기, C_{6-20} 아릴옥시 기, C_{7-20} 알킬아릴옥시 기, C_{7-20} 아릴알킬옥시 기, 화학식 $-NR'_2$의 아미도 기, 화학식 $-PR'_2$의 포스피도 기, 화학식 -SR'의 티올레이트 기, 화학식 $-Si(R^a)_3$의 실릴 기, 및 화학식 $-Ge(R^a)_3$의 게르마닐 기로 이루어지는 군 중에서 선택되는 하나 이상의 치환체에 의해 추가로 치환되고;

[0082] 여기서 각 R'는 수소, C_{1-20} 알킬 기, 및 C_{6-20} 아릴 기로 이루어지는 군 중에서 독립적으로 선택되고;

[0083] 여기서 각 R^a는 수소, C_{1-8} 알킬 기, C_{1-8} 알콕시 기, C_{6-20} 아릴옥시 기 및 C_{6-20} 아릴 기로 이루어지는 군 중에서 독립적으로 선택되고; 그리고 R^b, R^c, R^d는 각각 독립적으로 C_{1-20} 알킬 기이며;

[0084] 여기서 각 X^1은 활성화 가능한 리간드이다.

[0085] 본 개시내용의 실시양태는 화학식 V로 표현되는 유기금속 복합체이다:

[0086] 
(V)

[0087] 여기서, M은 Ti, Zr 또는 Hf이고;

[0088] 여기서, R^1 및 R^2는 각각 독립적으로 수소 및 R^X로 이루어진 군 중에서 선택되거나; 또는 R^1 및 R^2는 이들이 부착된 P 원자와 함께, 비치환되거나, 또는 할로겐 원자, C_{1-20} 알킬 기, C_{1-20} 알콕시 기, C_{7-20} 알킬아릴 기, C_{7-20} 아릴알킬 기, C_{6-20} 아릴 기, C_{6-20} 아릴옥시 기, C_{7-20} 알킬아릴옥시 기, 및 C_{7-20} 아릴알킬옥시 기로 이루어진 군 중에서 선택되는 하나 이상의 치환체에 의해 추가로 치환되는 3-10원 헤테로환형 기를 형성하며;

[0089] 각 R^X는 할로겐 원자; 하이드로카르빌 기가 비치환되거나, 또는 하나 이상의 할로겐 원자, C_{1-20} 알킬 기, C_{1-20} 알콕시 기, C_{7-20} 알킬아릴 기, C_{7-20} 아릴알킬 기, C_{6-20} 아릴 기, C_{6-20} 아릴옥시 기, C_{7-20} 알킬아릴옥시 기, 및/또는 C_{7-20} 아릴알킬옥시 기에 의해 추가로 치환되는 C_{1-30} 하이드로카르빌 기; 화학식 $-NR'_2$의 아미도 기; 화학식 $-Si(R^a)_3$의 실릴 기; 화학식 $-Ge(R^a)_3$의 게르마닐 기; 및 화학식 $-N=P(R^b)(R^c)(R^d)$의 포스핀이민 기로 이루어진 군 중에서 독립적으로 선택되고;

[0090] 여기서, R^{11}, R^{12}, R^{13}, R^{14}, R^{15}, R^{16}, R^{17}, R^{18}은 각각 독립적으로 다음으로 이루어진 군 중에서 선택되고:

[0091] 할로겐;

[0092] 수소;

[0093] C_{1-30} 하이드로카르빌 기로서, 여기서 하이드로카르빌 기는 비치환되거나, 또는 할로겐 원자, C_{1-20} 알킬 기, C_{1-20} 알콕시 기, C_{7-20} 알킬아릴 기, C_{7-20} 아릴알킬 기, C_{6-20} 아릴 기, C_{6-20} 아릴옥시 기, C_{7-20} 알킬아릴옥시 기, 및 C_{7-20} 아릴알킬옥시 기로 이루어지는 군 중에서 선택되는 하나 이상의 치환체에 의해 추가로 치환되는, C_{1-30} 하이드로카르빌 기;

[0094] 헤테로원자 함유 C_{1-30} 하이드로카르빌 기로서, 여기서 헤테로원자 함유 하이드로카르빌 기는 비치환되거나, 또는 할로겐 원자, C_{1-20} 알킬 기, C_{1-20} 알콕시 기, C_{7-20} 알킬아릴 기, C_{7-20} 아릴알킬 기, C_{6-20} 아릴 기, C_{6-20} 아릴옥시 기, C_{7-20} 알킬아릴옥시 기, 및 C_{7-20} 아릴알킬옥시 기로 이루어지는 군 중에서 선택되는 하나 이상의 치환체에 의해 추가로 치환되는, 헤테로원자 함유 C_{1-30} 하이드로카르빌 기;

[0095] 옥시 기, $-OR'$;

[0096] 아미도 기, $-NR'_2$;

[0097] 포스피도 기, $-PR'_2$;

[0098] 티올레이트 기, $-SR'$;

[0099] 화학식 $-Si(R^a)_3$의 실릴 기; 및

[0100] 화학식 $-Ge(R^a)_3$의 게르마닐 기;

[0101] 여기서, R^{11}, R^{12}, R^{13}, R^{14}, R^{15}, R^{16}, R^{17}, R^{18} 중 2개의 인접한 기는 선택적으로 결합되어 환형 하이드로카르빌 기 또는 환형 헤테로원자 함유 하이드로카르빌 기를 형성할 수 있고, 이 환형 하이드로카르빌 기 또는 환형 헤테로원자 함유 하이드로카르빌 기는 비치환되거나, 또는 할로겐 원자, C_{1-20} 알킬 기, C_{1-20} 알콕시 기, C_{7-20} 알킬아릴 기, C_{7-20} 아릴알킬 기, C_{6-20} 아릴 기, C_{6-20} 아릴옥시 기, C_{7-20} 알킬아릴옥시 기, C_{7-20} 아릴알킬옥시 기, 화학식 $-NR'_2$의 아미도 기, 화학식 $-PR'_2$의 포스피도 기, 화학식 $-SR'$의 티올레이트 기, 화학식 $-Si(R^a)_3$의 실릴 기, 및 화학식 $-Ge(R^a)_3$의 게르마닐 기로 이루어지는 군 중에서 선택되는 하나 이상의 치환체에 의해 추가로 치환되고;

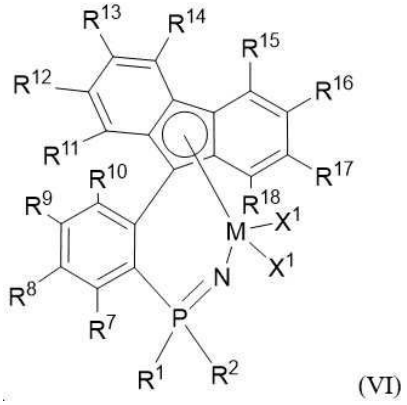
[0102] 여기서 각 R'는 수소, C_{1-20} 알킬 기, 및 C_{6-20} 아릴 기로 이루어지는 군 중에서 독립적으로 선택되고;

[0103] 여기서 각 R^a는 수소, C_{1-8} 알킬 기, C_{1-8} 알콕시 기, C_{6-20} 아릴옥시 기 및 C_{6-20} 아릴 기로 이루어지는 군 중에서 독립적으로 선택되고; 그리고 R^b, R^c, R^d는 각각 독립적으로 C_{1-20} 알킬 기이며;

[0104] 여기서 각 X^1은 활성화 가능한 리간드이고; 그리고

[0105] L은 Cy와 P를 연결하는 원자의 근접한 사슬을 함유하는 가교 기로서, 여기서 근접한 사슬은 2개 또는 3개의 원자를 함유한다.

[0106] 본 개시내용의 실시양태는 화학식 VI으로 표현되는 유기금속 복합체이다:

[0107] 

(VI)

[0108] 여기서, M은 Ti, Zr 또는 Hf이고;

[0109] 여기서, R^1 및 R^2는 각각 독립적으로 수소 및 R^X로 이루어진 군 중에서 선택되거나; 또는 R^1 및 R^2는 이들이 부착된 P 원자와 함께, 비치환되거나, 또는 할로겐 원자, C_{1-20} 알킬 기, C_{1-20} 알콕시 기, C_{7-20} 알킬아릴 기, C_{7-20} 아릴알킬 기, C_{6-20} 아릴 기, C_{6-20} 아릴옥시 기, C_{7-20} 알킬아릴옥시 기, 및 C_{7-20} 아릴알킬옥시 기로 이루어진 군 중에서 선택되는 하나 이상의 치환체에 의해 추가로 치환되는 3-10원 헤테로환형 기를 형성하며;

[0110] 각 R^X는 할로겐 원자; 하이드로카르빌 기가 비치환되거나, 또는 하나 이상의 할로겐 원자, C_{1-20} 알킬 기, C_{1-20} 알콕시 기, C_{7-20} 알킬아릴 기, C_{7-20} 아릴알킬 기, C_{6-20} 아릴 기, C_{6-20} 아릴옥시 기, C_{7-20} 알킬아릴옥시 기, 및/또는 C_{7-20} 아릴알킬옥시 기에 의해 추가로 치환되는 C_{1-30} 하이드로카르빌 기; 화학식 $-NR'_2$의 아미도 기; 화학식 $-Si(R^a)_3$의 실릴 기; 화학식 $-Ge(R^a)_3$의 게르마닐 기; 및 화학식 $-N=P(R^b)(R^c)(R^d)$의 포스핀이민 기로 이루어진 군 중에서 독립적으로 선택되고;

[0111] 여기서, R^7, R^8, R^9, R^{10}, R^{11}, R^{12}, R^{13}, R^{14}, R^{15}, R^{16}, R^{17} 및 R^{18}은 각각 독립적으로 다음으로 이루어진 군 중에서 선택되고:

[0112] 할로겐;

[0113] 수소;

[0114] C_{1-30} 하이드로카르빌 기로서, 여기서 하이드로카르빌 기는 비치환되거나, 또는 할로겐 원자, C_{1-20} 알킬 기, C_{1-20} 알콕시 기, C_{7-20} 알킬아릴 기, C_{7-20} 아릴알킬 기, C_{6-20} 아릴 기, C_{6-20} 아릴옥시 기, C_{7-20} 알킬아릴옥시 기, 및 C_{7-20} 아릴알킬옥시 기로 이루어지는 군 중에서 선택되는 하나 이상의 치환체에 의해 추가로 치환되는, C_{1-30} 하이드로카르빌 기;

[0115] 헤테로원자 함유 C_{1-30} 하이드로카르빌 기로서, 여기서 헤테로원자 함유 하이드로카르빌 기는 비치환되거나, 또는 할로겐 원자, C_{1-20} 알킬 기, C_{1-20} 알콕시 기, C_{7-20} 알킬아릴 기, C_{7-20} 아릴알킬 기, C_{6-20} 아릴 기, C_{6-20} 아릴옥시 기, C_{7-20} 알킬아릴옥시 기, 및 C_{7-20} 아릴알킬옥시 기로 이루어지는 군 중에서 선택되는 하나 이상의 치환체에 의해 추가로 치환되는, 헤테로원자 함유 C_{1-30} 하이드로카르빌 기;

[0116] 옥시 기, -OR';

[0117] 아미도 기, $-NR'_2$;

[0118] 포스피도 기, $-PR'_2$;

[0119] 티올레이트 기, -SR';

[0120] 화학식 $-Si(R^a)_3$의 실릴 기; 및

[0121] 화학식 $-Ge(R^a)_3$의 게르마닐 기;

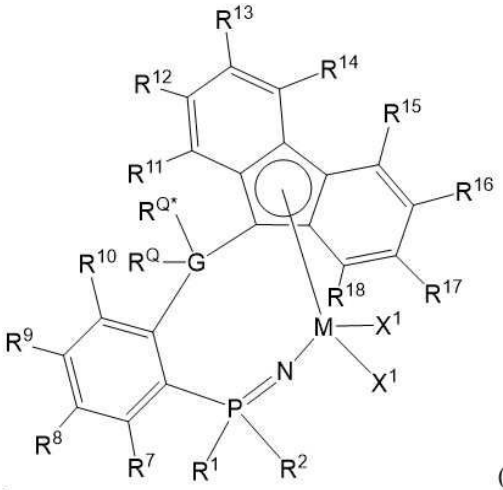
[0122] 여기서, R^7, R^8, R^9, R^{10}, R^{11}, R^{12}, R^{13}, R^{14}, R^{15}, R^{16}, R^{17} 및 R^{18} 중 2개의 인접한 기는 선택적으로 결합되어 환형 하이드로카르빌 기 또는 환형 헤테로원자 함유 하이드로카르빌 기를 형성할 수 있고, 이 환형 하이드로카르빌 기 또는 환형 헤테로원자 함유 하이드로카르빌 기는 비치환되거나, 또는 할로겐 원자, C_{1-20} 알킬 기, C_{1-20} 알콕시 기, C_{7-20} 알킬아릴 기, C_{7-20} 아릴알킬 기, C_{6-20} 아릴 기, C_{6-20} 아릴옥시 기, C_{7-20} 알킬아릴옥시 기, C_{7-20} 아릴알킬옥시 기, 화학식 $-NR'_2$의 아미도 기, 화학식 $-PR'_2$의 포스피도 기, 화학식 -SR'의 티올레이트 기, 화학식 $-Si(R^a)_3$의 실릴 기, 및 화학식 $-Ge(R^a)_3$의 게르마닐 기로 이루어지는 군 중에서 선택되는 하나 이상의 치환체에 의해 추가로 치환되고;

[0123] 여기서 각 R'는 수소, C_{1-20} 알킬 기, 및 C_{6-20} 아릴 기로 이루어지는 군 중에서 독립적으로 선택되고;

[0124] 여기서 각 R^a는 수소, C_{1-8} 알킬 기, C_{1-8} 알콕시 기, C_{6-20} 아릴옥시 기 및 C_{6-20} 아릴 기로 이루어지는 군 중에서 독립적으로 선택되고; 그리고 R^b, R^c, R^d는 각각 독립적으로 C_{1-20} 알킬 기이며; 그리고

[0125] 각 X^1은 활성화 가능한 리간드이다.

[0126] 본 개시내용의 실시양태는 화학식 VII로 표현되는 유기금속 복합체이다:

[0127] 
(VII)

[0128] 여기서, M은 Ti, Zr 또는 Hf이고;

[0129] 여기서, R^1 및 R^2는 각각 독립적으로 수소 및 R^X로 이루어진 군 중에서 선택되거나; 또는 R^1 및 R^2는 이들이 부착된 P 원자와 함께, 비치환되거나, 또는 할로겐 원자, C_{1-20} 알킬 기, C_{1-20} 알콕시 기, C_{7-20} 알킬아릴 기, C_{7-20} 아릴알킬 기, C_{6-20} 아릴 기, C_{6-20} 아릴옥시 기, C_{7-20} 알킬아릴옥시 기, 및 C_{7-20} 아릴알킬옥시 기로 이루어진 군 중에서 선택되는 하나 이상의 치환체에 의해 추가로 치환되는 3-10원 헤테로환형 기를 형성하며;

[0130] 각 R^X는 할로겐 원자; 하이드로카르빌 기가 비치환되거나, 또는 하나 이상의 할로겐 원자, C_{1-20} 알킬 기, C_{1-20} 알콕시 기, C_{7-20} 알킬아릴 기, C_{7-20} 아릴알킬 기, C_{6-20} 아릴 기, C_{6-20} 아릴옥시 기, C_{7-20} 알킬아릴옥시 기, 및/또는 C_{7-20} 아릴알킬옥시 기에 의해 추가로 치환되는 C_{1-30} 하이드로카르빌 기; 화학식 $-NR'_2$의 아미도 기; 화학식 $-Si(R^a)_3$의 실릴 기; 화학식 $-Ge(R^a)_3$의 게르마닐 기; 및 화학식 $-N=P(R^b)(R^c)(R^d)$의 포스핀이민 기로 이루어진 군 중에서 독립적으로 선택되고;

[0131] 여기서, G는 C 또는 Si이고;

[0132] 여기서, R^Q 및 R^{Q*}는 각각 독립적으로 다음으로 이루어진 군 중에서 선택되며:

[0133] 할로겐;

[0134] 수소;

[0135] C_{1-30} 하이드로카르빌 기로서, 여기서 하이드로카르빌 기는 비치환되거나, 또는 할로겐 원자, C_{1-20} 알킬 기, C_{1-20} 알콕시 기, C_{7-20} 알킬아릴 기, C_{7-20} 아릴알킬 기, C_{6-20} 아릴 기, C_{6-20} 아릴옥시 기, C_{7-20} 알킬아릴옥시 기, 및 C_{7-20} 아릴알킬옥시 기로 이루어지는 군 중에서 선택되는 하나 이상의 치환체에 의해 추가로 치환되는 C_{1-30} 하이드로카르빌 기;

[0136] 헤테로원자 함유 C_{1-30} 하이드로카르빌 기로서, 여기서 헤테로원자 함유 하이드로카르빌 기는 비치환되거나, 또는 할로겐 원자, C_{1-20} 알킬 기, C_{1-20} 알콕시 기, C_{7-20} 알킬아릴 기, C_{7-20} 아릴알킬 기, C_{6-20} 아릴 기, C_{6-20} 아릴옥시 기, C_{7-20} 알킬아릴옥시 기, 및 C_{7-20} 아릴알킬옥시 기로 이루어지는 군 중에서 선택되는 하나 이상의 치환체에 의해 추가로 치환되는 헤테로원자 함유 C_{1-30} 하이드로카르빌 기;

[0137] 여기서, R^Q 및 R^{Q*} 기는 선택적으로 결합되어 환형 하이드로카르빌 기 또는 환형 헤테로원자 함유 하이드로카르빌 기를 형성할 수 있고, 이 환형 하이드로카르빌 기 또는 환형 헤테로원자 함유 하이드로카르빌 기는 비치환되거나, 또는 할로겐 원자, C_{1-20} 알킬 기, C_{1-20} 알콕시 기, C_{7-20} 알킬아릴 기, C_{7-20} 아릴알킬 기, C_{6-20} 아릴 기, C_{6-20} 아릴옥시 기, C_{7-20} 알킬아릴옥시 기, C_{7-20} 아릴알킬옥시 기, 화학식 $-NR'_2$의 아미도 기; 화학식 $-PR'_2$의 포스

피도 기, 화학식 -SR'의 티올레이트 기, 화학식 $-Si(R^a)_3$의 실릴 기, 및 화학식 $-Ge(R^a)_3$의 게르마닐 기로 이루어지는 군 중에서 선택되는 하나 이상의 치환체에 의해 추가로 치환되며;

[0138] 여기서, R^7, R^8, R^9, R^{10}, R^{11}, R^{12}, R^{13}, R^{14}, R^{15}, R^{16}, R^{17} 및 R^{18}은 각각 독립적으로 다음으로 이루어진 군 중에서 선택되고:

[0139] 할로겐;

[0140] 수소;

[0141] C_{1-30} 하이드로카르빌 기로서, 여기서 하이드로카르빌 기는 비치환되거나, 또는 할로겐 원자, C_{1-20} 알킬 기, C_{1-20} 알콕시 기, C_{7-20} 알킬아릴 기, C_{7-20} 아릴알킬 기, C_{6-20} 아릴 기, C_{6-20} 아릴옥시 기, C_{7-20} 알킬아릴옥시 기, 및 C_{7-20} 아릴알킬옥시 기로 이루어지는 군 중에서 선택되는 하나 이상의 치환체에 의해 추가로 치환되는, C_{1-30} 하이드로카르빌 기;

[0142] 헤테로원자 함유 C_{1-30} 하이드로카르빌 기로서, 여기서 헤테로원자 함유 하이드로카르빌 기는 비치환되거나, 또는 할로겐 원자, C_{1-20} 알킬 기, C_{1-20} 알콕시 기, C_{7-20} 알킬아릴 기, C_{7-20} 아릴알킬 기, C_{6-20} 아릴 기, C_{6-20} 아릴옥시 기, C_{7-20} 알킬아릴옥시 기, 및 C_{7-20} 아릴알킬옥시 기로 이루어지는 군 중에서 선택되는 하나 이상의 치환체에 의해 추가로 치환되는, 헤테로원자 함유 C_{1-30} 하이드로카르빌 기;

[0143] 옥시 기, -OR';

[0144] 아미도 기, $-NR'_2$;

[0145] 포스피도 기, $-PR'_2$;

[0146] 티올레이트 기, -SR';

[0147] 화학식 $-Si(R^a)_3$의 실릴 기; 및

[0148] 화학식 $-Ge(R^a)_3$의 게르마닐 기;

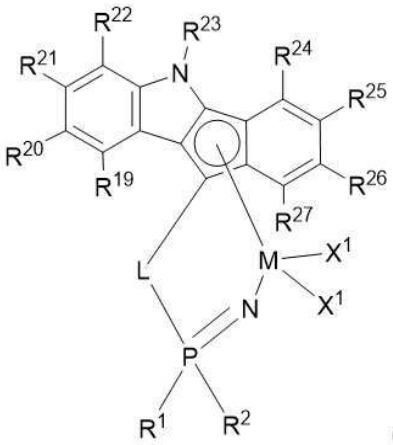
[0149] 여기서, R^7, R^8, R^9, R^{10}, R^{11}, R^{12}, R^{13}, R^{14}, R^{15}, R^{16}, R^{17} 및 R^{18} 중 2개의 인접한 기는 선택적으로 결합되어 환형 하이드로카르빌 기 또는 환형 헤테로원자 함유 하이드로카르빌 기를 형성할 수 있고, 이 환형 하이드로카르빌 기 또는 환형 헤테로원자 함유 하이드로카르빌 기는 비치환되거나, 또는 할로겐 원자, C_{1-20} 알킬 기, C_{1-20} 알콕시 기, C_{7-20} 알킬아릴 기, C_{7-20} 아릴알킬 기, C_{6-20} 아릴 기, C_{6-20} 아릴옥시 기, C_{7-20} 알킬아릴옥시 기, C_{7-20} 아릴알킬옥시 기, 화학식 $-NR'_2$의 아미도 기, 화학식 $-PR'_2$의 포스피도 기, 화학식 -SR'의 티올레이트 기, 화학식 $-Si(R^a)_3$의 실릴 기, 및 화학식 $-Ge(R^a)_3$의 게르마닐 기로 이루어지는 군 중에서 선택되는 하나 이상의 치환체에 의해 추가로 치환되고;

[0150] 여기서 각 R'는 수소, C_{1-20} 알킬 기, 및 C_{6-20} 아릴 기로 이루어지는 군 중에서 독립적으로 선택되고;

[0151] 여기서 각 R^a는 수소, C_{1-8} 알킬 기, C_{1-8} 알콕시 기, C_{6-20} 아릴옥시 기 및 C_{6-20} 아릴 기로 이루어지는 군 중에서 독립적으로 선택되고; 그리고 R^b, R^c, R^d는 각각 독립적으로 C_{1-20} 알킬 기이며; 그리고

[0152] 각 X^1은 활성화 가능한 리간드이다.

[0153] 본 개시내용의 실시양태는 화학식 VIII로 표현되는 유기금속 복합체이다:



(VIII)

[0154]

[0155] 여기서, M은 Ti, Zr 또는 Hf이고;

[0156] 여기서, R^1 및 R^2는 각각 독립적으로 수소 및 R^X로 이루어진 군 중에서 선택되거나; 또는 R^1 및 R^2는 이들이 부착된 P 원자와 함께, 비치환되거나, 또는 할로겐 원자, C_{1-20} 알킬 기, C_{1-20} 알콕시 기, C_{7-20} 알킬아릴 기, C_{7-20} 아릴알킬 기, C_{6-20} 아릴 기, C_{6-20} 아릴옥시 기, C_{7-20} 알킬아릴옥시 기, 및 C_{7-20} 아릴알킬옥시 기로 이루어진 군 중에서 선택되는 하나 이상의 치환체에 의해 추가로 치환되는 3-10원 헤테로환형 기를 형성하며;

[0157] 각 R^X는 할로겐 원자; 하이드로카르빌 기가 비치환되거나, 또는 하나 이상의 할로겐 원자, C_{1-20} 알킬 기, C_{1-20} 알콕시 기, C_{7-20} 알킬아릴 기, C_{7-20} 아릴알킬 기, C_{6-20} 아릴 기, C_{6-20} 아릴옥시 기, C_{7-20} 알킬아릴옥시 기, 및/또는 C_{7-20} 아릴알킬옥시 기에 의해 추가로 치환되는 C_{1-30} 하이드로카르빌 기; 화학식 $-NR'_2$의 아미도 기; 화학식 $-Si(R^a)_3$의 실릴 기; 화학식 $-Ge(R^a)_3$의 게르마닐 기; 및 화학식 $-N=P(R^b)(R^c)(R^d)$의 포스핀이민 기로 이루어진 군 중에서 독립적으로 선택되고;

[0158] 여기서, R^{23}은 다음으로 이루어진 군 중에서 선택되며:

[0159] 수소;

[0160] C_{1-30} 하이드로카르빌 기로서, 여기서 하이드로카르빌 기는 비치환되거나, 또는 할로겐 원자, C_{1-20} 알킬 기, C_{1-20} 알콕시 기, C_{7-20} 알킬아릴 기, C_{7-20} 아릴알킬 기, C_{6-20} 아릴 기, C_{6-20} 아릴옥시 기, C_{7-20} 알킬아릴옥시 기, 및 C_{7-20} 아릴알킬옥시 기로 이루어지는 군 중에서 선택되는 하나 이상의 치환체에 의해 추가로 치환되는 C_{1-30} 하이드로카르빌 기;

[0161] 헤테로원자 함유 C_{1-30} 하이드로카르빌 기로서, 여기서 헤테로원자 함유 하이드로카르빌 기는 비치환되거나, 또는 할로겐 원자, C_{1-20} 알킬 기, C_{1-20} 알콕시 기, C_{7-20} 알킬아릴 기, C_{7-20} 아릴알킬 기, C_{6-20} 아릴 기, C_{6-20} 아릴옥시 기, C_{7-20} 알킬아릴옥시 기, 및 C_{7-20} 아릴알킬옥시 기로 이루어지는 군 중에서 선택되는 하나 이상의 치환체에 의해 추가로 치환되는 헤테로원자 함유 C_{1-30} 하이드로카르빌 기;

[0162] 여기서, R^{19}, R^{20}, R^{21}, R^{22}, R^{24}, R^{25}, R^{26}, 및 R^{27}은 각각 독립적으로 다음으로 이루어진 군 중에서 선택되고:

[0163] 할로겐;

[0164] 수소;

[0165] C_{1-30} 하이드로카르빌 기로서, 여기서 하이드로카르빌 기는 비치환되거나, 또는 할로겐 원자, C_{1-20} 알킬 기, C_{1-20} 알콕시 기, C_{7-20} 알킬아릴 기, C_{7-20} 아릴알킬 기, C_{6-20} 아릴 기, C_{6-20} 아릴옥시 기, C_{7-20} 알킬아릴옥시 기, 및 C_{7-20} 아릴알킬옥시 기로 이루어지는 군 중에서 선택되는 하나 이상의 치환체에 의해 추가로 치환되는, C_{1-30} 하이드

로카르빌 기;

[0166] 헤테로원자 함유 C_{1-30} 하이드로카르빌 기로서, 여기서 헤테로원자 함유 하이드로카르빌 기는 비치환되거나, 또는 할로겐 원자, C_{1-20} 알킬 기, C_{1-20} 알콕시 기, C_{7-20} 알킬아릴 기, C_{7-20} 아릴알킬 기, C_{6-20} 아릴 기, C_{6-20} 아릴옥시 기, C_{7-20} 알킬아릴옥시 기, 및 C_{7-20} 아릴알킬옥시 기로 이루어지는 군 중에서 선택되는 하나 이상의 치환체에 의해 추가로 치환되는, 헤테로원자 함유 C_{1-30} 하이드로카르빌 기;

[0167] 옥시 기, -OR';

[0168] 아미도 기, $-NR'_2$;

[0169] 포스피도 기, $-PR'_2$;

[0170] 티올레이트 기, -SR';

[0171] 화학식 $-Si(R^a)_3$의 실릴 기; 및

[0172] 화학식 $-Ge(R^a)_3$의 게르마닐 기;

[0173] 여기서, R^{19}, R^{20}, R^{21}, R^{22}, R^{24}, R^{25}, R^{26}, 및 R^{27} 중 2개의 인접한 기는 선택적으로 결합되어 환형 하이드로카르빌 기 또는 환형 헤테로원자 함유 하이드로카르빌 기를 형성할 수 있고, 이 환형 하이드로카르빌 기 또는 환형 헤테로원자 함유 하이드로카르빌 기는 비치환되거나, 또는 할로겐 원자, C_{1-20} 알킬 기, C_{1-20} 알콕시 기, C_{7-20} 알킬아릴 기, C_{7-20} 아릴알킬 기, C_{6-20} 아릴 기, C_{6-20} 아릴옥시 기, C_{7-20} 알킬아릴옥시 기, C_{7-20} 아릴알킬옥시 기, 화학식 $-NR'_2$의 아미도 기, 화학식 $-PR'_2$의 포스피도 기, 화학식 -SR'의 티올레이트 기, 화학식 $-Si(R^a)_3$의 실릴 기, 및 화학식 $-Ge(R^a)_3$의 게르마닐 기로 이루어지는 군 중에서 선택되는 하나 이상의 치환체에 의해 추가로 치환되고;

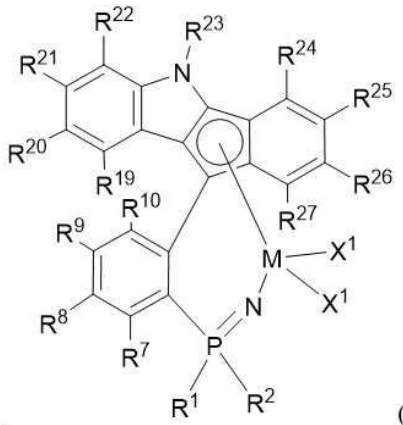
[0174] 여기서 각 R'는 수소, C_{1-20} 알킬 기, 및 C_{6-20} 아릴 기로 이루어지는 군 중에서 독립적으로 선택되고;

[0175] 여기서 각 R^a는 수소, C_{1-8} 알킬 기, C_{1-8} 알콕시 기, C_{6-20} 아릴옥시 기 및 C_{6-20} 아릴 기로 이루어지는 군 중에서 독립적으로 선택되고; 그리고 R^b, R^c, R^d는 각각 독립적으로 C_{1-20} 알킬 기이며;

[0176] 각 X^1은 활성화 가능한 리간드이고; 그리고

[0177] L은 Cy와 P를 연결하는 원자의 근접한 사슬을 함유하는 가교 기로서, 여기서 근접한 사슬은 2개 또는 3개의 원자를 함유한다.

[0178] 본 개시내용의 실시양태는 화학식 IX로 표현되는 유기금속 복합체이다:



[0179] (IX)

[0180] 여기서, M은 Ti, Zr 또는 Hf이고;

[0181] 여기서, R^1 및 R^2는 각각 독립적으로 수소 및 R^X로 이루어진 군 중에서 선택되거나; 또는 R^1 및 R^2는 이들이 부착된 P 원자와 함께, 비치환되거나, 또는 할로겐 원자, C_{1-20} 알킬 기, C_{1-20} 알콕시 기, C_{7-20} 알킬아릴 기, C_{7-20} 아릴알킬 기, C_{6-20} 아릴 기, C_{6-20} 아릴옥시 기, C_{7-20} 알킬아릴옥시 기, 및 C_{7-20} 아릴알킬옥시 기로 이루어진 군 중에서 선택되는 하나 이상의 치환체에 의해 추가로 치환되는 3-10원 헤테로환형 기를 형성하며;

[0182] 각 R^X는 할로겐 원자; 하이드로카르빌 기가 비치환되거나, 또는 하나 이상의 할로겐 원자, C_{1-20} 알킬 기, C_{1-20} 알콕시 기, C_{7-20} 알킬아릴 기, C_{7-20} 아릴알킬 기, C_{6-20} 아릴 기, C_{6-20} 아릴옥시 기, C_{7-20} 알킬아릴옥시 기, 및/또는 C_{7-20} 아릴알킬옥시 기에 의해 추가로 치환되는 C_{1-30} 하이드로카르빌 기; 화학식 $-NR'_2$의 아미도 기; 화학식 $-Si(R^a)_3$의 실릴 기; 화학식 $-Ge(R^a)_3$의 게르마닐 기; 및 화학식 $-N=P(R^b)(R^c)(R^d)$의 포스핀이민 기로 이루어진 군 중에서 독립적으로 선택되고;

[0183] 여기서, R^{23}은 다음으로 이루어진 군 중에서 선택되며:

[0184] 할로겐;

[0185] 수소;

[0186] C_{1-30} 하이드로카르빌 기로서, 여기서 하이드로카르빌 기는 비치환되거나, 또는 할로겐 원자, C_{1-20} 알킬 기, C_{1-20} 알콕시 기, C_{7-20} 알킬아릴 기, C_{7-20} 아릴알킬 기, C_{6-20} 아릴 기, C_{6-20} 아릴옥시 기, C_{7-20} 알킬아릴옥시 기, 및 C_{7-20} 아릴알킬옥시 기로 이루어지는 군 중에서 선택되는 하나 이상의 치환체에 의해 추가로 치환되는 C_{1-30} 하이드로카르빌 기;

[0187] 헤테로원자 함유 C_{1-30} 하이드로카르빌 기로서, 여기서 헤테로원자 함유 하이드로카르빌 기는 비치환되거나, 또는 할로겐 원자, C_{1-20} 알킬 기, C_{1-20} 알콕시 기, C_{7-20} 알킬아릴 기, C_{7-20} 아릴알킬 기, C_{6-20} 아릴 기, C_{6-20} 아릴옥시 기, C_{7-20} 알킬아릴옥시 기, 및 C_{7-20} 아릴알킬옥시 기로 이루어지는 군 중에서 선택되는 하나 이상의 치환체에 의해 추가로 치환되는 헤테로원자 함유 C_{1-30} 하이드로카르빌 기;

[0188] 여기서, R^7, R^8, R^9, R^{10}, R^{19}, R^{20}, R^{21}, R^{22}, R^{24}, R^{25}, R^{26}, 및 R^{27}은 각각 독립적으로 다음으로 이루어진 군 중에서 선택되고:

[0189] 할로겐;

[0190] 수소;

[0191] C_{1-30} 하이드로카르빌 기로서, 여기서 하이드로카르빌 기는 비치환되거나, 또는 할로겐 원자, C_{1-20} 알킬 기, C_{1-20} 알콕시 기, C_{7-20} 알킬아릴 기, C_{7-20} 아릴알킬 기, C_{6-20} 아릴 기, C_{6-20} 아릴옥시 기, C_{7-20} 알킬아릴옥시 기, 및 C_{7-20} 아릴알킬옥시 기로 이루어지는 군 중에서 선택되는 하나 이상의 치환체에 의해 추가로 치환되는 C_{1-30} 하이드로카르빌 기;

[0192] 헤테로원자 함유 C_{1-30} 하이드로카르빌 기로서, 여기서 헤테로원자 함유 하이드로카르빌 기는 비치환되거나, 또는 할로겐 원자, C_{1-20} 알킬 기, C_{1-20} 알콕시 기, C_{7-20} 알킬아릴 기, C_{7-20} 아릴알킬 기, C_{6-20} 아릴 기, C_{6-20} 아릴옥시 기, C_{7-20} 알킬아릴옥시 기, 및 C_{7-20} 아릴알킬옥시 기로 이루어지는 군 중에서 선택되는 하나 이상의 치환체에 의해 추가로 치환되는 헤테로원자 함유 C_{1-30} 하이드로카르빌 기;

[0193] 옥시 기, $-OR'$;

[0194] 아미도 기, $-NR'_2$;

[0195] 포스피도 기, $-PR'_2$;

[0196] 티올레이트 기, $-SR'$;

[0197] 화학식 $-Si(R^a)_3$의 실릴 기; 및

[0198] 화학식 $-Ge(R^a)_3$의 게르마닐 기;

[0199] 여기서, R^7, R^8, R^9, R^{10}, R^{19}, R^{20}, R^{21}, R^{22}, R^{24}, R^{25}, R^{26}, 및 R^{27} 중 2개의 인접한 기는 선택적으로 결합되어 환형 하이드로카르빌 기 또는 환형 헤테로원자 함유 하이드로카르빌 기를 형성할 수 있고, 이 환형 하이드로카르빌 기 또는 환형 헤테로원자 함유 하이드로카르빌 기는 비치환되거나, 또는 할로겐 원자, C_{1-20} 알킬 기, C_{1-20} 알콕시 기, C_{7-20} 알킬아릴 기, C_{7-20} 아릴알킬 기, C_{6-20} 아릴 기, C_{6-20} 아릴옥시 기, C_{7-20} 알킬아릴옥시 기, C_{7-20} 아릴알킬옥시 기, 화학식 $-NR'_2$의 아미도 기, 화학식 $-PR'_2$의 포스피도 기, 화학식 $-SR'$의 티올레이트 기, 화학식 $-Si(R^a)_3$의 실릴 기, 및 화학식 $-Ge(R^a)_3$의 게르마닐 기로 이루어지는 군 중에서 선택되는 하나 이상의 치환체에 의해 추가로 치환되고;

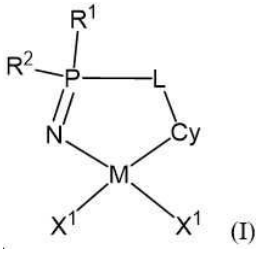
[0200] 여기서 각 R'는 수소, C_{1-20} 알킬 기, 및 C_{6-20} 아릴 기로 이루어지는 군 중에서 독립적으로 선택되고;

[0201] 여기서 각 R^a는 수소, C_{1-8} 알킬 기, C_{1-8} 알콕시 기, C_{6-20} 아릴옥시 기 및 C_{6-20} 아릴 기로 이루어지는 군 중에서 독립적으로 선택되고; 그리고 R^b, R^c, R^d는 각각 독립적으로 C_{1-20} 알킬 기이며; 그리고

[0202] 각 X^1은 활성화 가능한 리간드이다.

[0203] 한 실시양태는 다음을 포함하는 올레핀 중합 촉매 시스템이다:

[0204] i) 화학식 I로 표현되는 유기금속 복합체;

[0205] 

(I)

[0206] 여기서,

[0207] M은 Ti, Zr 또는 Hf이고;

[0208] R^1 및 R^2는 각각 독립적으로 수소 및 R^X로 이루어진 군 중에서 선택되거나; 또는 R^1 및 R^2는 이들이 부착된 P 원자와 함께, 비치환되거나, 또는 할로겐 원자, C_{1-20} 알킬 기, C_{1-20} 알콕시 기, C_{7-20} 알킬아릴 기, C_{7-20} 아릴알킬 기, C_{6-20} 아릴 기, C_{6-20} 아릴옥시 기, C_{7-20} 알킬아릴옥시 기, 및 C_{7-20} 아릴알킬옥시 기로 이루어진 군 중에서 선택되는 하나 이상의 치환체에 의해 추가로 치환되는 3-10원 헤테로환형 기를 형성하며;

[0209] 각 R^X는 할로겐 원자; 하이드로카르빌 기가 비치환되거나, 또는 하나 이상의 할로겐 원자, C_{1-20} 알킬 기, C_{1-20} 알콕시 기, C_{7-20} 알킬아릴 기, C_{7-20} 아릴알킬 기, C_{6-20} 아릴 기, C_{6-20} 아릴옥시 기, C_{7-20} 알킬아릴옥시 기, 및/또는 C_{7-20} 아릴알킬옥시 기에 의해 추가로 치환되는 C_{1-30} 하이드로카르빌 기; 화학식 $-NR'_2$의 아미도 기; 화학식 $-Si(R^a)_3$의 실릴 기; 화학식 $-Ge(R^a)_3$의 게르마닐 기; 및 화학식 $-N=P(R^b)(R^c)(R^d)$의 포스핀이민 기로 이루어진 군 중에서 독립적으로 선택되고; 여기서 각 R'는 수소, C_{1-20} 알킬 기, 및 C_{6-20} 아릴 기로 이루어지는 군 중에서 독립적으로 선택되고; 각 R^a는 수소, C_{1-8} 알킬 기, C_{1-8} 알콕시 기, C_{6-20} 아릴옥시 기 및 C_{6-20} 아릴 기로 이루어진

군 중에서 독립적으로 선택되고; R^b, R^c, R^d는 각각 독립적으로 C_{1-20} 알킬 기이며;

[0210] 각 X^1은 활성화 가능한 리간드이고;

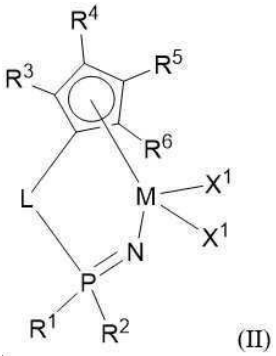
[0211] Cy는 L에 공유 결합되고 η-결합을 통해 M에 배위된 사이클로펜타디에닐형 리간드이고; 그리고

[0212] L은 Cy와 P를 연결하는 원자의 근접한 사슬을 함유하는 가교 기로서, 여기서 근접한 사슬은 2개 또는 3개의 원자를 함유함; 및

[0213] ii) 촉매 활성화제.

[0214] 한 실시양태는 다음을 포함하는 올레핀 중합 촉매 시스템이다:

[0215] i) 화학식 II로 표현되는 유기금속 복합체;

[0216] 

(II)

[0217] 여기서,

[0218] M은 Ti, Zr 또는 Hf이고;

[0219] R^1 및 R^2는 각각 독립적으로 수소 및 R^X로 이루어진 군 중에서 선택되거나; 또는 R^1 및 R^2는 이들이 부착된 P 원자와 함께, 비치환되거나, 또는 할로겐 원자, C_{1-20} 알킬 기, C_{1-20} 알콕시 기, C_{7-20} 알킬아릴 기, C_{7-20} 아릴알킬 기, C_{6-20} 아릴 기, C_{6-20} 아릴옥시 기, C_{7-20} 알킬아릴옥시 기, 및 C_{7-20} 아릴알킬옥시 기로 이루어진 군 중에서 선택되는 하나 이상의 치환체에 의해 추가로 치환되는 3-10원 헤테로환형 기를 형성하며;

[0220] 각 R^X는 할로겐 원자; 하이드로카르빌 기가 비치환되거나, 또는 하나 이상의 할로겐 원자, C_{1-20} 알킬 기, C_{1-20} 알콕시 기, C_{7-20} 알킬아릴 기, C_{7-20} 아릴알킬 기, C_{6-20} 아릴 기, C_{6-20} 아릴옥시 기, C_{7-20} 알킬아릴옥시 기, 및/또는 C_{7-20} 아릴알킬옥시 기에 의해 추가로 치환되는 C_{1-30} 하이드로카르빌 기; 화학식 $-NR'_2$의 아미도 기; 화학식 $-Si(R^a)_3$의 실릴 기; 화학식 $-Ge(R^a)_3$의 게르마닐 기; 및 화학식 $-N=P(R^b)(R^c)(R^d)$의 포스핀이민 기로 이루어진 군 중에서 독립적으로 선택되고;

[0221] 여기서, R^3, R^4, R^5 및 R^6은 각각 독립적으로 다음으로 이루어진 군 중에서 선택되고:

[0222] 할로겐;

[0223] 수소;

[0224] C_{1-30} 하이드로카르빌 기로서, 여기서 하이드로카르빌 기는 비치환되거나, 또는 할로겐 원자, C_{1-20} 알킬 기, C_{1-20} 알콕시 기, C_{7-20} 알킬아릴 기, C_{7-20} 아릴알킬 기, C_{6-20} 아릴 기, C_{6-20} 아릴옥시 기, C_{7-20} 알킬아릴옥시 기, 및 C_{7-20} 아릴알킬옥시 기로 이루어지는 군 중에서 선택되는 하나 이상의 치환체에 의해 추가로 치환되는 C_{1-30} 하이드로카르빌 기;

[0225] 헤테로원자 함유 C_{1-30} 하이드로카르빌 기로서, 여기서 헤테로원자 함유 하이드로카르빌 기는 비치환되거나, 또는 할로겐 원자, C_{1-20} 알킬 기, C_{1-20} 알콕시 기, C_{7-20} 알킬아릴 기, C_{7-20} 아릴알킬 기, C_{6-20} 아릴 기, C_{6-20} 아릴옥시 기, C_{7-20} 알킬아릴옥시 기, 및 C_{7-20} 아릴알킬옥시 기로 이루어지는 군 중에서 선택되는 하나 이상의 치환체에 의

해 추가로 치환되는 헤테로원자 함유 C_{1-30} 하이드로카르빌 기;

[0226] 옥시 기, -OR';

[0227] 아미도 기, $-NR'_2$;

[0228] 포스피도 기, $-PR'_2$;

[0229] 티올레이트 기, -SR';

[0230] 화학식 $-Si(R^a)_3$의 실릴 기; 및

[0231] 화학식 $-Ge(R^a)_3$의 게르마닐 기;

[0232] 여기서, R^3, R^4, R^5 및 R^6 중 2개의 인접한 기는 선택적으로 결합되어 환형 하이드로카르빌 기 또는 환형 헤테로원자 함유 하이드로카르빌 기를 형성할 수 있고, 이 환형 하이드로카르빌 기 또는 환형 헤테로원자 함유 하이드로카르빌 기는 비치환되거나, 또는 할로겐 원자, C_{1-20} 알킬 기, C_{1-20} 알콕시 기, C_{7-20} 알킬아릴 기, C_{7-20} 아릴알킬 기, C_{6-20} 아릴 기, C_{6-20} 아릴옥시 기, C_{7-20} 알킬아릴옥시 기, C_{7-20} 아릴알킬옥시 기, 화학식 $-NR'_2$의 아미도 기, 화학식 $-PR'_2$의 포스피도 기, 화학식 -SR'의 티올레이트 기, 화학식 $-Si(R^a)_3$의 실릴 기, 및 화학식 $-Ge(R^a)_3$의 게르마닐 기로 이루어지는 군 중에서 선택되는 하나 이상의 치환체에 의해 추가로 치환되고;

[0233] 여기서 각 R'는 수소, C_{1-20} 알킬 기, 및 C_{6-20} 아릴 기로 이루어지는 군 중에서 독립적으로 선택되고;

[0234] 여기서 각 R^a는 수소, C_{1-8} 알킬 기, C_{1-8} 알콕시 기, C_{6-20} 아릴옥시 기 및 C_{6-20} 아릴 기로 이루어지는 군 중에서 독립적으로 선택되고; 그리고 R^b, R^c, R^d는 각각 독립적으로 C_{1-20} 알킬 기이며;

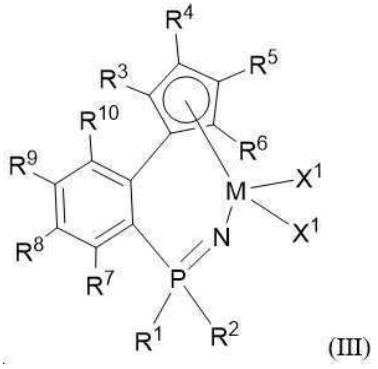
[0235] 각 X^1은 활성화 가능한 리간드이고; 그리고

[0236] L은 Cy와 P를 연결하는 원자의 근접한 사슬을 함유하는 가교 기로서, 여기서 근접한 사슬은 2개 또는 3개의 원자를 함유함; 및

[0237] ii) 촉매 활성화제.

[0238] 한 실시양태는 다음을 포함하는 올레핀 중합 촉매 시스템이다:

[0239] i) 화학식 III으로 표현되는 유기금속 복합체:

[0240] 

(III)

[0241] 여기서, M은 Ti, Zr 또는 Hf이고;

[0242] 여기서, R^1 및 R^2는 각각 독립적으로 수소 및 R^X로 이루어진 군 중에서 선택되거나; 또는 R^1 및 R^2는 이들이 부착된 P 원자와 함께, 비치환되거나, 또는 할로겐 원자, C_{1-20} 알킬 기, C_{1-20} 알콕시 기, C_{7-20} 알킬아릴 기, C_{7-20} 아릴알킬 기, C_{6-20} 아릴 기, C_{6-20} 아릴옥시 기, C_{7-20} 알킬아릴옥시 기, 및 C_{7-20} 아릴알킬옥시 기로 이루어진 군 중

에서 선택되는 하나 이상의 치환체에 의해 추가로 치환되는 3-10원 헤테로환형 기를 형성하며;

[0243] 각 R^X는 할로겐 원자; 하이드로카르빌 기가 비치환되거나, 또는 하나 이상의 할로겐 원자, C_{1-20} 알킬 기, C_{1-20} 알콕시 기, C_{7-20} 알킬아릴 기, C_{7-20} 아릴알킬 기, C_{6-20} 아릴 기, C_{6-20} 아릴옥시 기, C_{7-20} 알킬아릴옥시 기, 및/또는 C_{7-20} 아릴알킬옥시 기에 의해 추가로 치환되는 C_{1-30} 하이드로카르빌 기; 화학식 $-NR'_2$의 아미도 기; 화학식 $-Si(R^a)_3$의 실릴 기; 화학식 $-Ge(R^a)_3$의 게르마닐 기; 및 화학식 $-N=P(R^b)(R^c)(R^d)$의 포스핀이민 기로 이루어진 군 중에서 독립적으로 선택되고;

[0244] 여기서, R^3, R^4, R^5, R^6, R^7, R^8, R^9, 및 R^{10}은 각각 독립적으로 다음으로 이루어진 군 중에서 선택되고:

[0245] 할로겐;

[0246] 수소;

[0247] C_{1-30} 하이드로카르빌 기로서, 여기서 하이드로카르빌 기는 비치환되거나, 또는 할로겐 원자, C_{1-20} 알킬 기, C_{1-20} 알콕시 기, C_{7-20} 알킬아릴 기, C_{7-20} 아릴알킬 기, C_{6-20} 아릴 기, C_{6-20} 아릴옥시 기, C_{7-20} 알킬아릴옥시 기, 및 C_{7-20} 아릴알킬옥시 기로 이루어지는 군 중에서 선택되는 하나 이상의 치환체에 의해 추가로 치환되는 C_{1-30} 하이드로카르빌 기;

[0248] 헤테로원자 함유 C_{1-30} 하이드로카르빌 기로서, 여기서 헤테로원자 함유 하이드로카르빌 기는 비치환되거나, 또는 할로겐 원자, C_{1-20} 알킬 기, C_{1-20} 알콕시 기, C_{7-20} 알킬아릴 기, C_{7-20} 아릴알킬 기, C_{6-20} 아릴 기, C_{6-20} 아릴옥시 기, C_{7-20} 알킬아릴옥시 기, 및 C_{7-20} 아릴알킬옥시 기로 이루어지는 군 중에서 선택되는 하나 이상의 치환체에 의해 추가로 치환되는 헤테로원자 함유 C_{1-30} 하이드로카르빌 기;

[0249] 옥시 기, $-OR'$;

[0250] 아미도 기, $-NR'_2$;

[0251] 포스피도 기, $-PR'_2$;

[0252] 티올레이트 기, $-SR'$;

[0253] 화학식 $-Si(R^a)_3$의 실릴 기; 및

[0254] 화학식 $-Ge(R^a)_3$의 게르마닐 기;

[0255] 여기서, R^3, R^4, R^5, R^6, R^7, R^8, R^9, 및 R^{10} 중 2개의 인접한 기는 선택적으로 결합되어 환형 하이드로카르빌 기 또는 환형 헤테로원자 함유 하이드로카르빌 기를 형성할 수 있고, 이 환형 하이드로카르빌 기 또는 환형 헤테로원자 함유 하이드로카르빌 기는 비치환되거나, 또는 할로겐 원자, C_{1-20} 알킬 기, C_{1-20} 알콕시 기, C_{7-20} 알킬아릴 기, C_{7-20} 아릴알킬 기, C_{6-20} 아릴 기, C_{6-20} 아릴옥시 기, C_{7-20} 알킬아릴옥시 기, C_{7-20} 아릴알킬옥시 기, 화학식 $-NR'_2$의 아미도 기, 화학식 $-PR'_2$의 포스피도 기, 화학식 $-SR'$의 티올레이트 기, 화학식 $-Si(R^a)_3$의 실릴 기, 및 화학식 $-Ge(R^a)_3$의 게르마닐 기로 이루어지는 군 중에서 선택되는 하나 이상의 치환체에 의해 추가로 치환되고;

[0256] 여기서 각 R'는 수소, C_{1-20} 알킬 기, 및 C_{6-20} 아릴 기로 이루어지는 군 중에서 독립적으로 선택되고;

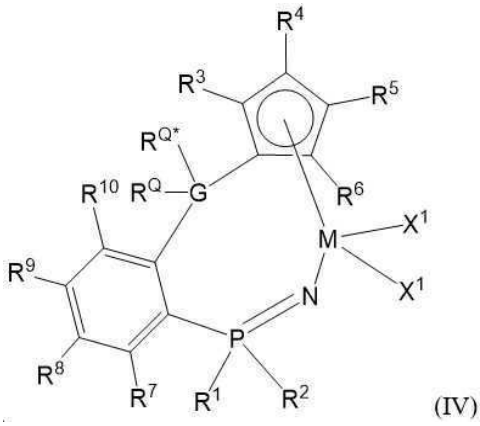
[0257] 여기서 각 R^a는 수소, C_{1-8} 알킬 기, C_{1-8} 알콕시 기, C_{6-20} 아릴옥시 기 및 C_{6-20} 아릴 기로 이루어지는 군 중에서 독립적으로 선택되고; 그리고 R^b, R^c, R^d는 각각 독립적으로 C_{1-20} 알킬 기이며;

[0258] 여기서 각 X^1은 활성화 가능한 리간드임; 및

[0259] ii) 촉매 활성화제.

[0260] 한 실시양태는 다음을 포함하는 올레핀 중합 촉매 시스템이다:

[0261] i) 화학식 IV로 표현되는 유기금속 복합체:

[0262] 

(IV)

[0263] 여기서, M은 Ti, Zr 또는 Hf이고;

[0264] 여기서, R^1 및 R^2는 각각 독립적으로 수소 및 R^X로 이루어진 군 중에서 선택되거나; 또는 R^1 및 R^2는 이들이 부착된 P 원자와 함께, 비치환되거나, 또는 할로겐 원자, C_{1-20} 알킬 기, C_{1-20} 알콕시 기, C_{7-20} 알킬아릴 기, C_{7-20} 아릴알킬 기, C_{6-20} 아릴 기, C_{6-20} 아릴옥시 기, C_{7-20} 알킬아릴옥시 기, 및 C_{7-20} 아릴알킬옥시 기로 이루어진 군 중에서 선택되는 하나 이상의 치환체에 의해 추가로 치환되는 3-10원 헤테로환형 기를 형성하며;

[0265] 각 R^X는 할로겐 원자; 하이드로카르빌 기가 비치환되거나, 또는 하나 이상의 할로겐 원자, C_{1-20} 알킬 기, C_{1-20} 알콕시 기, C_{7-20} 알킬아릴 기, C_{7-20} 아릴알킬 기, C_{6-20} 아릴 기, C_{6-20} 아릴옥시 기, C_{7-20} 알킬아릴옥시 기, 및/또는 C_{7-20} 아릴알킬옥시 기에 의해 추가로 치환되는 C_{1-30} 하이드로카르빌 기; 화학식 $-NR'_2$의 아미도 기; 화학식 $-Si(R^a)_3$의 실릴 기; 화학식 $-Ge(R^a)_3$의 게르마닐 기; 및 화학식 $-N=P(R^b)(R^c)(R^d)$의 포스핀이민 기로 이루어진 군 중에서 독립적으로 선택되고;

[0266] 여기서, G는 C 또는 Si이고;

[0267] 여기서, R^Q 및 R^{Q*}는 각각 독립적으로 다음으로 이루어진 군 중에서 선택되며:

[0268] 할로겐;

[0269] 수소;

[0270] C_{1-30} 하이드로카르빌 기로서, 여기서 하이드로카르빌 기는 비치환되거나, 또는 할로겐 원자, C_{1-20} 알킬 기, C_{1-20} 알콕시 기, C_{7-20} 알킬아릴 기, C_{7-20} 아릴알킬 기, C_{6-20} 아릴 기, C_{6-20} 아릴옥시 기, C_{7-20} 알킬아릴옥시 기, 및 C_{7-20} 아릴알킬옥시 기로 이루어지는 군 중에서 선택되는 하나 이상의 치환체에 의해 추가로 치환되는 C_{1-30} 하이드로카르빌 기;

[0271] 헤테로원자 함유 C_{1-30} 하이드로카르빌 기로서, 여기서 헤테로원자 함유 하이드로카르빌 기는 비치환되거나, 또는 할로겐 원자, C_{1-20} 알킬 기, C_{1-20} 알콕시 기, C_{7-20} 알킬아릴 기, C_{7-20} 아릴알킬 기, C_{6-20} 아릴 기, C_{6-20} 아릴옥시 기, C_{7-20} 알킬아릴옥시 기, 및 C_{7-20} 아릴알킬옥시 기로 이루어지는 군 중에서 선택되는 하나 이상의 치환체에 의해 추가로 치환되는 헤테로원자 함유 C_{1-30} 하이드로카르빌 기;

[0272] 여기서, R^Q 및 R^{Q*} 기는 선택적으로 결합되어 환형 하이드로카르빌 기 또는 환형 헤테로원자 함유 하이드로카르빌 기를 형성할 수 있고, 이 환형 하이드로카르빌 기 또는 환형 헤테로원자 함유 하이드로카르빌 기는 비치환되거나, 또는 할로겐 원자, C_{1-20} 알킬 기, C_{1-20} 알콕시 기, C_{7-20} 알킬아릴 기, C_{7-20} 아릴알킬 기, C_{6-20} 아릴 기, C_{6-}

$_{20}$ 아릴옥시 기, C_{7-20} 알킬아릴옥시 기, C_{7-20} 아릴알킬옥시 기, 화학식 $-NR'_2$의 아미도 기; 화학식 $-PR'_2$의 포스피도 기, 화학식 -SR'의 티올레이트 기, 화학식 $-Si(R^a)_3$의 실릴 기, 및 화학식 $-Ge(R^a)_3$의 게르마닐 기로 이루어지는 군 중에서 선택되는 하나 이상의 치환체에 의해 추가로 치환되며;

[0273] 여기서, R^3, R^4, R^5, R^6, R^7, R^8, R^9, 및 R^{10}은 각각 독립적으로 다음으로 이루어진 군 중에서 선택되고:

[0274] 할로겐;

[0275] 수소;

[0276] C_{1-30} 하이드로카르빌 기로서, 여기서 하이드로카르빌 기는 비치환되거나, 또는 할로겐 원자, C_{1-20} 알킬 기, C_{1-20} 알콕시 기, C_{7-20} 알킬아릴 기, C_{7-20} 아릴알킬 기, C_{6-20} 아릴 기, C_{6-20} 아릴옥시 기, C_{7-20} 알킬아릴옥시 기, 및 C_{7-20} 아릴알킬옥시 기로 이루어지는 군 중에서 선택되는 하나 이상의 치환체에 의해 추가로 치환되는, C_{1-30} 하이드로카르빌 기;

[0277] 헤테로원자 함유 C_{1-30} 하이드로카르빌 기로서, 여기서 헤테로원자 함유 하이드로카르빌 기는 비치환되거나, 또는 할로겐 원자, C_{1-20} 알킬 기, C_{1-20} 알콕시 기, C_{7-20} 알킬아릴 기, C_{7-20} 아릴알킬 기, C_{6-20} 아릴 기, C_{6-20} 아릴옥시 기, C_{7-20} 알킬아릴옥시 기, 및 C_{7-20} 아릴알킬옥시 기로 이루어지는 군 중에서 선택되는 하나 이상의 치환체에 의해 추가로 치환되는, 헤테로원자 함유 C_{1-30} 하이드로카르빌 기;

[0278] 옥시 기, -OR';

[0279] 아미도 기, $-NR'_2$;

[0280] 포스피도 기, $-PR'_2$;

[0281] 티올레이트 기, -SR';

[0282] 화학식 $-Si(R^a)_3$의 실릴 기; 및

[0283] 화학식 $-Ge(R^a)_3$의 게르마닐 기;

[0284] 여기서, R^3, R^4, R^5, R^6, R^7, R^8, R^9, 및 R^{10} 중 2개의 인접한 기는 선택적으로 결합되어 환형 하이드로카르빌 기 또는 환형 헤테로원자 함유 하이드로카르빌 기를 형성할 수 있고, 이 환형 하이드로카르빌 기 또는 환형 헤테로원자 함유 하이드로카르빌 기는 비치환되거나, 또는 할로겐 원자, C_{1-20} 알킬 기, C_{1-20} 알콕시 기, C_{7-20} 알킬아릴 기, C_{7-20} 아릴알킬 기, C_{6-20} 아릴 기, C_{6-20} 아릴옥시 기, C_{7-20} 알킬아릴옥시 기, C_{7-20} 아릴알킬옥시 기, 화학식 $-NR'_2$의 아미도 기, 화학식 $-PR'_2$의 포스피도 기, 화학식 -SR'의 티올레이트 기, 화학식 $-Si(R^a)_3$의 실릴 기, 및 화학식 $-Ge(R^a)_3$의 게르마닐 기로 이루어지는 군 중에서 선택되는 하나 이상의 치환체에 의해 추가로 치환되고;

[0285] 여기서 각 R'는 수소, C_{1-20} 알킬 기, 및 C_{6-20} 아릴 기로 이루어지는 군 중에서 독립적으로 선택되고;

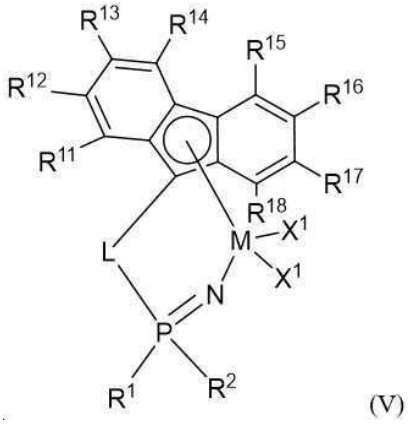
[0286] 여기서 각 R^a는 수소, C_{1-8} 알킬 기, C_{1-8} 알콕시 기, C_{6-20} 아릴옥시 기 및 C_{6-20} 아릴 기로 이루어지는 군 중에서 독립적으로 선택되고; 그리고 R^b, R^c, R^d는 각각 독립적으로 C_{1-20} 알킬 기이며;

[0287] 여기서 각 X^1은 활성화 가능한 리간드임; 및

[0288] ii) 촉매 활성화제.

[0289] 한 실시양태는 다음을 포함하는 올레핀 중합 촉매 시스템이다:

[0290] i) 화학식 V로 표현되는 유기금속 복합체:

[0291] 

(V)

[0292] 여기서, M은 Ti, Zr 또는 Hf이고;

[0293] 여기서, R^1 및 R^2는 각각 독립적으로 수소 및 R^X로 이루어진 군 중에서 선택되거나; 또는 R^1 및 R^2는 이들이 부착된 P 원자와 함께, 비치환되거나, 또는 할로겐 원자, C_{1-20} 알킬 기, C_{1-20} 알콕시 기, C_{7-20} 알킬아릴 기, C_{7-20} 아릴알킬 기, C_{6-20} 아릴 기, C_{6-20} 아릴옥시 기, C_{7-20} 알킬아릴옥시 기, 및 C_{7-20} 아릴알킬옥시 기로 이루어진 군 중에서 선택되는 하나 이상의 치환체에 의해 추가로 치환되는 3-10원 헤테로환형 기를 형성하며;

[0294] 각 R^X는 할로겐 원자; 하이드로카르빌 기가 비치환되거나, 또는 하나 이상의 할로겐 원자, C_{1-20} 알킬 기, C_{1-20} 알콕시 기, C_{7-20} 알킬아릴 기, C_{7-20} 아릴알킬 기, C_{6-20} 아릴 기, C_{6-20} 아릴옥시 기, C_{7-20} 알킬아릴옥시 기, 및/또는 C_{7-20} 아릴알킬옥시 기에 의해 추가로 치환되는 C_{1-30} 하이드로카르빌 기; 화학식 $-NR'_2$의 아미도 기; 화학식 $-Si(R^a)_3$의 실릴 기; 화학식 $-Ge(R^a)_3$의 게르마닐 기; 및 화학식 $-N=P(R^b)(R^c)(R^d)$의 포스핀이민 기로 이루어진 군 중에서 독립적으로 선택되고;

[0295] 여기서, R^{11}, R^{12}, R^{13}, R^{14}, R^{15}, R^{16}, R^{17}, R^{18}은 각각 독립적으로 다음으로 이루어진 군 중에서 선택되고:

[0296] 할로겐;

[0297] 수소;

[0298] C_{1-30} 하이드로카르빌 기로서, 여기서 하이드로카르빌 기는 비치환되거나, 또는 할로겐 원자, C_{1-20} 알킬 기, C_{1-20} 알콕시 기, C_{7-20} 알킬아릴 기, C_{7-20} 아릴알킬 기, C_{6-20} 아릴 기, C_{6-20} 아릴옥시 기, C_{7-20} 알킬아릴옥시 기, 및 C_{7-20} 아릴알킬옥시 기로 이루어지는 군 중에서 선택되는 하나 이상의 치환체에 의해 추가로 치환되는, C_{1-30} 하이드로카르빌 기;

[0299] 헤테로원자 함유 C_{1-30} 하이드로카르빌 기로서, 여기서 헤테로원자 함유 하이드로카르빌 기는 비치환되거나, 또는 할로겐 원자, C_{1-20} 알킬 기, C_{1-20} 알콕시 기, C_{7-20} 알킬아릴 기, C_{7-20} 아릴알킬 기, C_{6-20} 아릴 기, C_{6-20} 아릴옥시 기, C_{7-20} 알킬아릴옥시 기, 및 C_{7-20} 아릴알킬옥시 기로 이루어지는 군 중에서 선택되는 하나 이상의 치환체에 의해 추가로 치환되는, 헤테로원자 함유 C_{1-30} 하이드로카르빌 기;

[0300] 옥시 기, -OR';

[0301] 아미도 기, $-NR'_2$;

[0302] 포스피도 기, $-PR'_2$;

[0303] 티올레이트 기, -SR';

[0304] 화학식 $-Si(R^a)_3$의 실릴 기; 및

[0305] 화학식 $-Ge(R^a)_3$의 게르마닐 기;

[0306] 여기서, R^{11}, R^{12}, R^{13}, R^{14}, R^{15}, R^{16}, R^{17}, R^{18} 중 2개의 인접한 기는 선택적으로 결합되어 환형 하이드로카르빌 기 또는 환형 헤테로원자 함유 하이드로카르빌 기를 형성할 수 있고, 이 환형 하이드로카르빌 기 또는 환형 헤테로원자 함유 하이드로카르빌 기는 비치환되거나, 또는 할로겐 원자, C_{1-20} 알킬 기, C_{1-20} 알콕시 기, C_{7-20} 알킬아릴 기, C_{7-20} 아릴알킬 기, C_{6-20} 아릴 기, C_{6-20} 아릴옥시 기, C_{7-20} 알킬아릴옥시 기, C_{7-20} 아릴알킬옥시 기, 화학식 $-NR'_2$의 아미도 기, 화학식 $-PR'_2$의 포스피도 기, 화학식 $-SR'$의 티올레이트 기, 화학식 $-Si(R^a)_3$의 실릴 기, 및 화학식 $-Ge(R^a)_3$의 게르마닐 기로 이루어지는 군 중에서 선택되는 하나 이상의 치환체에 의해 추가로 치환되고;

[0307] 여기서 각 R'는 수소, C_{1-20} 알킬 기, 및 C_{6-20} 아릴 기로 이루어지는 군 중에서 독립적으로 선택되고;

[0308] 여기서 각 R^a는 수소, C_{1-8} 알킬 기, C_{1-8} 알콕시 기, C_{6-20} 아릴옥시 기 및 C_{6-20} 아릴 기로 이루어지는 군 중에서 독립적으로 선택되고; 그리고 R^b, R^c, R^d는 각각 독립적으로 C_{1-20} 알킬 기이며;

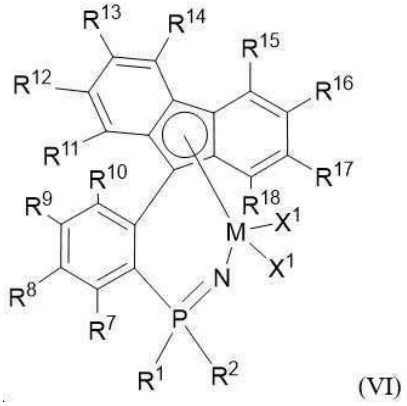
[0309] 각 X^1은 활성화 가능한 리간드이고; 그리고

[0310] L은 Cy와 P를 연결하는 원자의 근접한 사슬을 함유하는 가교 기로서, 여기서 근접한 사슬은 2개 또는 3개의 원자를 함유함; 및

[0311] ii) 촉매 활성화제.

[0312] 한 실시양태는 다음을 포함하는 올레핀 중합 촉매 시스템이다:

[0313] i) 화학식 VI으로 표현되는 유기금속 복합체:

[0314] 

(VI)

[0315] 여기서, M은 Ti, Zr 또는 Hf이고;

[0316] 여기서, R^1 및 R^2는 각각 독립적으로 수소 및 R^X로 이루어진 군 중에서 선택되거나; 또는 R^1 및 R^2는 이들이 부착된 P 원자와 함께, 비치환되거나, 또는 할로겐 원자, C_{1-20} 알킬 기, C_{1-20} 알콕시 기, C_{7-20} 알킬아릴 기, C_{7-20} 아릴알킬 기, C_{6-20} 아릴 기, C_{6-20} 아릴옥시 기, C_{7-20} 알킬아릴옥시 기, 및 C_{7-20} 아릴알킬옥시 기로 이루어진 군 중에서 선택되는 하나 이상의 치환체에 의해 추가로 치환되는 3-10원 헤테로환형 기를 형성하며;

[0317] 각 R^X는 할로겐 원자; 하이드로카르빌 기가 비치환되거나, 또는 하나 이상의 할로겐 원자, C_{1-20} 알킬 기, C_{1-20} 알콕시 기, C_{7-20} 알킬아릴 기, C_{7-20} 아릴알킬 기, C_{6-20} 아릴 기, C_{6-20} 아릴옥시 기, C_{7-20} 알킬아릴옥시 기, 및/또는 C_{7-20} 아릴알킬옥시 기에 의해 추가로 치환되는 C_{1-30} 하이드로카르빌 기; 화학식 $-NR'_2$의 아미도 기; 화학식 $-Si(R^a)_3$의 실릴 기; 화학식 $-Ge(R^a)_3$의 게르마닐 기; 및 화학식 $-N=P(R^b)(R^c)(R^d)$의 포스핀이민 기로 이루어진 군 중에서 독립적으로 선택되고;

[0318] 여기서, R^7, R^8, R^9, R^{10}, R^{11}, R^{12}, R^{13}, R^{14}, R^{15}, R^{16}, R^{17} 및 R^{18}은 각각 독립적으로 다음으로 이루어진 군 중에서 선택되고:

[0319] 할로겐;

[0320] 수소;

[0321] C_{1-30} 하이드로카르빌 기로서, 여기서 하이드로카르빌 기는 비치환되거나, 또는 할로겐 원자, C_{1-20} 알킬 기, C_{1-20} 알콕시 기, C_{7-20} 알킬아릴 기, C_{7-20} 아릴알킬 기, C_{6-20} 아릴 기, C_{6-20} 아릴옥시 기, C_{7-20} 알킬아릴옥시 기, 및 C_{7-20} 아릴알킬옥시 기로 이루어지는 군 중에서 선택되는 하나 이상의 치환체에 의해 추가로 치환되는, C_{1-30} 하이드로카르빌 기;

[0322] 헤테로원자 함유 C_{1-30} 하이드로카르빌 기로서, 여기서 헤테로원자 함유 하이드로카르빌 기는 비치환되거나, 또는 할로겐 원자, C_{1-20} 알킬 기, C_{1-20} 알콕시 기, C_{7-20} 알킬아릴 기, C_{7-20} 아릴알킬 기, C_{6-20} 아릴 기, C_{6-20} 아릴옥시 기, C_{7-20} 알킬아릴옥시 기, 및 C_{7-20} 아릴알킬옥시 기로 이루어지는 군 중에서 선택되는 하나 이상의 치환체에 의해 추가로 치환되는, 헤테로원자 함유 C_{1-30} 하이드로카르빌 기;

[0323] 옥시 기, -OR';

[0324] 아미도 기, $-NR'_2$;

[0325] 포스피도 기, $-PR'_2$;

[0326] 티올레이트 기, -SR';

[0327] 화학식 $-Si(R^a)_3$의 실릴 기; 및

[0328] 화학식 $-Ge(R^a)_3$의 게르마닐 기;

[0329] 여기서, R^7, R^8, R^9, R^{10}, R^{11}, R^{12}, R^{13}, R^{14}, R^{15}, R^{16}, R^{17} 및 R^{18} 중 2개의 인접한 기는 선택적으로 결합되어 환형 하이드로카르빌 기 또는 환형 헤테로원자 함유 하이드로카르빌 기를 형성할 수 있고, 이 환형 하이드로카르빌 기 또는 환형 헤테로원자 함유 하이드로카르빌 기는 비치환되거나, 또는 할로겐 원자, C_{1-20} 알킬 기, C_{1-20} 알콕시 기, C_{7-20} 알킬아릴 기, C_{7-20} 아릴알킬 기, C_{6-20} 아릴 기, C_{6-20} 아릴옥시 기, C_{7-20} 알킬아릴옥시 기, C_{7-20} 아릴알킬옥시 기, 화학식 $-NR'_2$의 아미도 기, 화학식 $-PR'_2$의 포스피도 기, 화학식 -SR'의 티올레이트 기, 화학식 $-Si(R^a)_3$의 실릴 기, 및 화학식 $-Ge(R^a)_3$의 게르마닐 기로 이루어지는 군 중에서 선택되는 하나 이상의 치환체에 의해 추가로 치환되고;

[0330] 여기서 각 R'는 수소, C_{1-20} 알킬 기, 및 C_{6-20} 아릴 기로 이루어지는 군 중에서 독립적으로 선택되고;

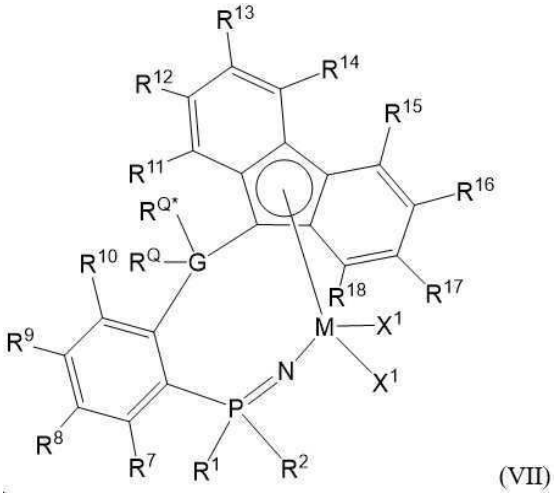
[0331] 여기서 각 R^a는 수소, C_{1-8} 알킬 기, C_{1-8} 알콕시 기, C_{6-20} 아릴옥시 기 및 C_{6-20} 아릴 기로 이루어지는 군 중에서 독립적으로 선택되고; 그리고 R^b, R^c, R^d는 각각 독립적으로 C_{1-20} 알킬 기이며; 그리고

[0332] 각 X^1은 활성화 가능한 리간드임; 및

[0333] ii) 촉매 활성화제.

[0334] 한 실시양태는 다음을 포함하는 올레핀 중합 촉매 시스템이다:

[0335] i) 화학식 VII로 표현되는 유기금속 복합체:

[0336] 
(VII)

[0337] 여기서, M은 Ti, Zr 또는 Hf이고;

[0338] 여기서, R^1 및 R^2는 각각 독립적으로 수소 및 R^X로 이루어진 군 중에서 선택되거나; 또는 R^1 및 R^2는 이들이 부착된 P 원자와 함께, 비치환되거나, 또는 할로겐 원자, C_{1-20} 알킬 기, C_{1-20} 알콕시 기, C_{7-20} 알킬아릴 기, C_{7-20} 아릴알킬 기, C_{6-20} 아릴 기, C_{6-20} 아릴옥시 기, C_{7-20} 알킬아릴옥시 기, 및 C_{7-20} 아릴알킬옥시 기로 이루어진 군 중에서 선택되는 하나 이상의 치환체에 의해 추가로 치환되는 3-10원 헤테로환형 기를 형성하며;

[0339] 각 R^X는 할로겐 원자; 하이드로카르빌 기가 비치환되거나, 또는 하나 이상의 할로겐 원자, C_{1-20} 알킬 기, C_{1-20} 알콕시 기, C_{7-20} 알킬아릴 기, C_{7-20} 아릴알킬 기, C_{6-20} 아릴 기, C_{6-20} 아릴옥시 기, C_{7-20} 알킬아릴옥시 기, 및/또는 C_{7-20} 아릴알킬옥시 기에 의해 추가로 치환되는 C_{1-30} 하이드로카르빌 기; 화학식 $-NR'_2$의 아미도 기; 화학식 $-Si(R^a)_3$의 실릴 기; 화학식 $-Ge(R^a)_3$의 게르마닐 기; 및 화학식 $-N=P(R^b)(R^c)(R^d)$의 포스핀이민 기로 이루어진 군 중에서 독립적으로 선택되고;

[0340] 여기서, G는 C 또는 Si이고;

[0341] 여기서, R^Q 및 R^{Q*}는 각각 독립적으로 다음으로 이루어진 군 중에서 선택되며:

[0342] 할로겐;

[0343] 수소;

[0344] C_{1-30} 하이드로카르빌 기로서, 여기서 하이드로카르빌 기는 비치환되거나, 또는 할로겐 원자, C_{1-20} 알킬 기, C_{1-20} 알콕시 기, C_{7-20} 알킬아릴 기, C_{7-20} 아릴알킬 기, C_{6-20} 아릴 기, C_{6-20} 아릴옥시 기, C_{7-20} 알킬아릴옥시 기, 및 C_{7-20} 아릴알킬옥시 기로 이루어지는 군 중에서 선택되는 하나 이상의 치환체에 의해 추가로 치환되는 C_{1-30} 하이드로카르빌 기;

[0345] 헤테로원자 함유 C_{1-30} 하이드로카르빌 기로서, 여기서 헤테로원자 함유 하이드로카르빌 기는 비치환되거나, 또는 할로겐 원자, C_{1-20} 알킬 기, C_{1-20} 알콕시 기, C_{7-20} 알킬아릴 기, C_{7-20} 아릴알킬 기, C_{6-20} 아릴 기, C_{6-20} 아릴옥시 기, C_{7-20} 알킬아릴옥시 기, 및 C_{7-20} 아릴알킬옥시 기로 이루어지는 군 중에서 선택되는 하나 이상의 치환체에 의해 추가로 치환되는 헤테로원자 함유 C_{1-30} 하이드로카르빌 기;

[0346] 여기서, R^Q 및 R^{Q*} 기는 선택적으로 결합되어 환형 하이드로카르빌 기 또는 환형 헤테로원자 함유 하이드로카르빌 기를 형성할 수 있고, 이 환형 하이드로카르빌 기 또는 환형 헤테로원자 함유 하이드로카르빌 기는 비치환되거나, 또는 할로겐 원자, C_{1-20} 알킬 기, C_{1-20} 알콕시 기, C_{7-20} 알킬아릴 기, C_{7-20} 아릴알킬 기, C_{6-20} 아릴 기, C_{6-20} 아릴옥시 기, C_{7-20} 알킬아릴옥시 기, C_{7-20} 아릴알킬옥시 기, 화학식 $-NR'_2$의 아미도 기; 화학식 $-PR'_2$의 포스

피도 기, 화학식 -SR'의 티올레이트 기, 화학식 $-Si(R^a)_3$의 실릴 기, 및 화학식 $-Ge(R^a)_3$의 게르마닐 기로 이루어지는 군 중에서 선택되는 하나 이상의 치환체에 의해 추가로 치환되며;

[0347] 여기서, R^7, R^8, R^9, R^{10}, R^{11}, R^{12}, R^{13}, R^{14}, R^{15}, R^{16}, R^{17} 및 R^{18}은 각각 독립적으로 다음으로 이루어진 군 중에서 선택되고:

[0348] 할로겐;

[0349] 수소;

[0350] C_{1-30} 하이드로카르빌 기로서, 여기서 하이드로카르빌 기는 비치환되거나, 또는 할로겐 원자, C_{1-20} 알킬 기, C_{1-20} 알콕시 기, C_{7-20} 알킬아릴 기, C_{7-20} 아릴알킬 기, C_{6-20} 아릴 기, C_{6-20} 아릴옥시 기, C_{7-20} 알킬아릴옥시 기, 및 C_{7-20} 아릴알킬옥시 기로 이루어지는 군 중에서 선택되는 하나 이상의 치환체에 의해 추가로 치환되는, C_{1-30} 하이드로카르빌 기;

[0351] 헤테로원자 함유 C_{1-30} 하이드로카르빌 기로서, 여기서 헤테로원자 함유 하이드로카르빌 기는 비치환되거나, 또는 할로겐 원자, C_{1-20} 알킬 기, C_{1-20} 알콕시 기, C_{7-20} 알킬아릴 기, C_{7-20} 아릴알킬 기, C_{6-20} 아릴 기, C_{6-20} 아릴옥시 기, C_{7-20} 알킬아릴옥시 기, 및 C_{7-20} 아릴알킬옥시 기로 이루어지는 군 중에서 선택되는 하나 이상의 치환체에 의해 추가로 치환되는, 헤테로원자 함유 C_{1-30} 하이드로카르빌 기;

[0352] 옥시 기, -OR';

[0353] 아미도 기, $-NR'_2$;

[0354] 포스피도 기, $-PR'_2$;

[0355] 티올레이트 기, -SR';

[0356] 화학식 $-Si(R^a)_3$의 실릴 기; 및

[0357] 화학식 $-Ge(R^a)_3$의 게르마닐 기;

[0358] 여기서, R^7, R^8, R^9, R^{10}, R^{11}, R^{12}, R^{13}, R^{14}, R^{15}, R^{16}, R^{17} 및 R^{18} 중 2개의 인접한 기는 선택적으로 결합되어 환형 하이드로카르빌 기 또는 환형 헤테로원자 함유 하이드로카르빌 기를 형성할 수 있고, 이 환형 하이드로카르빌 기 또는 환형 헤테로원자 함유 하이드로카르빌 기는 비치환되거나, 또는 할로겐 원자, C_{1-20} 알킬 기, C_{1-20} 알콕시 기, C_{7-20} 알킬아릴 기, C_{7-20} 아릴알킬 기, C_{6-20} 아릴 기, C_{6-20} 아릴옥시 기, C_{7-20} 알킬아릴옥시 기, C_{7-20} 아릴알킬옥시 기, 화학식 $-NR'_2$의 아미도 기, 화학식 $-PR'_2$의 포스피도 기, 화학식 -SR'의 티올레이트 기, 화학식 $-Si(R^a)_3$의 실릴 기, 및 화학식 $-Ge(R^a)_3$의 게르마닐 기로 이루어지는 군 중에서 선택되는 하나 이상의 치환체에 의해 추가로 치환되고;

[0359] 여기서 각 R'는 수소, C_{1-20} 알킬 기, 및 C_{6-20} 아릴 기로 이루어지는 군 중에서 독립적으로 선택되고;

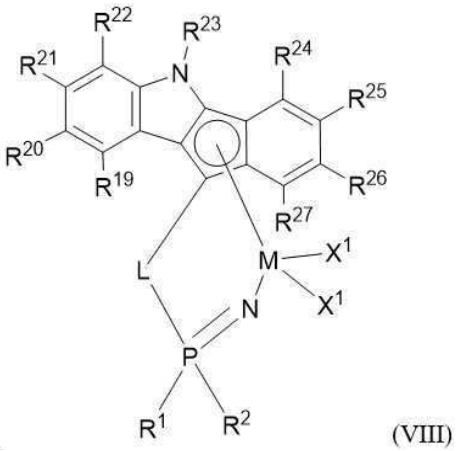
[0360] 여기서 각 R^a는 수소, C_{1-8} 알킬 기, C_{1-8} 알콕시 기, C_{6-20} 아릴옥시 기 및 C_{6-20} 아릴 기로 이루어지는 군 중에서 독립적으로 선택되고; 그리고 R^b, R^c, R^d는 각각 독립적으로 C_{1-20} 알킬 기이며; 그리고

[0361] 각 X^1은 활성화 가능한 리간드임; 및

[0362] ii) 촉매 활성화제.

[0363] 한 실시양태는 다음을 포함하는 올레핀 중합 촉매 시스템이다:

[0364] i) 화학식 VIII로 표현되는 유기금속 복합체:

[0365] 

(VIII)

[0366] 여기서, M은 Ti, Zr 또는 Hf이고;

[0367] 여기서, R^1 및 R^2는 각각 독립적으로 수소 및 R^X로 이루어진 군 중에서 선택되거나; 또는 R^1 및 R^2는 이들이 부착된 P 원자와 함께, 비치환되거나, 또는 할로겐 원자, C_{1-20} 알킬 기, C_{1-20} 알콕시 기, C_{7-20} 알킬아릴 기, C_{7-20} 아릴알킬 기, C_{6-20} 아릴 기, C_{6-20} 아릴옥시 기, C_{7-20} 알킬아릴옥시 기, 및 C_{7-20} 아릴알킬옥시 기로 이루어진 군 중에서 선택되는 하나 이상의 치환체에 의해 추가로 치환되는 3-10원 헤테로환형 기를 형성하며;

[0368] 각 R^X는 할로겐 원자; 하이드로카르빌 기가 비치환되거나, 또는 하나 이상의 할로겐 원자, C_{1-20} 알킬 기, C_{1-20} 알콕시 기, C_{7-20} 알킬아릴 기, C_{7-20} 아릴알킬 기, C_{6-20} 아릴 기, C_{6-20} 아릴옥시 기, C_{7-20} 알킬아릴옥시 기, 및/또는 C_{7-20} 아릴알킬옥시 기에 의해 추가로 치환되는 C_{1-30} 하이드로카르빌 기; 화학식 $-NR'_2$의 아미도 기; 화학식 $-Si(R^a)_3$의 실릴 기; 화학식 $-Ge(R^a)_3$의 게르마닐 기; 및 화학식 $-N=P(R^b)(R^c)(R^d)$의 포스핀이민 기로 이루어진 군 중에서 독립적으로 선택되고;

[0369] 여기서, R^{23}은 다음으로 이루어진 군 중에서 선택되며:

[0370] 수소;

[0371] C_{1-30} 하이드로카르빌 기로서, 여기서 하이드로카르빌 기는 비치환되거나, 또는 할로겐 원자, C_{1-20} 알킬 기, C_{1-20} 알콕시 기, C_{7-20} 알킬아릴 기, C_{7-20} 아릴알킬 기, C_{6-20} 아릴 기, C_{6-20} 아릴옥시 기, C_{7-20} 알킬아릴옥시 기, 및 C_{7-20} 아릴알킬옥시 기로 이루어지는 군 중에서 선택되는 하나 이상의 치환체에 의해 추가로 치환되는 C_{1-30} 하이드로카르빌 기;

[0372] 헤테로원자 함유 C_{1-30} 하이드로카르빌 기로서, 여기서 헤테로원자 함유 하이드로카르빌 기는 비치환되거나, 또는 할로겐 원자, C_{1-20} 알킬 기, C_{1-20} 알콕시 기, C_{7-20} 알킬아릴 기, C_{7-20} 아릴알킬 기, C_{6-20} 아릴 기, C_{6-20} 아릴옥시 기, C_{7-20} 알킬아릴옥시 기, 및 C_{7-20} 아릴알킬옥시 기로 이루어지는 군 중에서 선택되는 하나 이상의 치환체에 의해 추가로 치환되는 헤테로원자 함유 C_{1-30} 하이드로카르빌 기;

[0373] 여기서, R^{19}, R^{20}, R^{21}, R^{22}, R^{24}, R^{25}, R^{26}, 및 R^{27}은 각각 독립적으로 다음으로 이루어진 군 중에서 선택되고:

[0374] 할로겐;

[0375] 수소;

[0376] C_{1-30} 하이드로카르빌 기로서, 여기서 하이드로카르빌 기는 비치환되거나, 또는 할로겐 원자, C_{1-20} 알킬 기, C_{1-20} 알콕시 기, C_{7-20} 알킬아릴 기, C_{7-20} 아릴알킬 기, C_{6-20} 아릴 기, C_{6-20} 아릴옥시 기, C_{7-20} 알킬아릴옥시 기, 및 C_{7-20} 아릴알킬옥시 기로 이루어지는 군 중에서 선택되는 하나 이상의 치환체에 의해 추가로 치환되는, C_{1-30} 하이드

로카르빌 기;

[0377] 헤테로원자 함유 C_{1-30} 하이드로카르빌 기로서, 여기서 헤테로원자 함유 하이드로카르빌 기는 비치환되거나, 또는 할로겐 원자, C_{1-20} 알킬 기, C_{1-20} 알콕시 기, C_{7-20} 알킬아릴 기, C_{7-20} 아릴알킬 기, C_{6-20} 아릴 기, C_{6-20} 아릴옥시 기, C_{7-20} 알킬아릴옥시 기, 및 C_{7-20} 아릴알킬옥시 기로 이루어지는 군 중에서 선택되는 하나 이상의 치환체에 의해 추가로 치환되는, 헤테로원자 함유 C_{1-30} 하이드로카르빌 기;

[0378] 옥시 기, -OR';

[0379] 아미도 기, $-NR'_2$;

[0380] 포스피도 기, $-PR'_2$;

[0381] 티올레이트 기, -SR';

[0382] 화학식 $-Si(R^a)_3$의 실릴 기; 및

[0383] 화학식 $-Ge(R^a)_3$의 게르마닐 기;

[0384] 여기서, R^{19}, R^{20}, R^{21}, R^{22}, R^{24}, R^{25}, R^{26}, 및 R^{27} 중 2개의 인접한 기는 선택적으로 결합되어 환형 하이드로카르빌 기 또는 환형 헤테로원자 함유 하이드로카르빌 기를 형성할 수 있고, 이 환형 하이드로카르빌 기 또는 환형 헤테로원자 함유 하이드로카르빌 기는 비치환되거나, 또는 할로겐 원자, C_{1-20} 알킬 기, C_{1-20} 알콕시 기, C_{7-20} 알킬아릴 기, C_{7-20} 아릴알킬 기, C_{6-20} 아릴 기, C_{6-20} 아릴옥시 기, C_{7-20} 알킬아릴옥시 기, C_{7-20} 아릴알킬옥시 기, 화학식 $-NR'_2$의 아미도 기, 화학식 $-PR'_2$의 포스피도 기, 화학식 -SR'의 티올레이트 기, 화학식 $-Si(R^a)_3$의 실릴 기, 및 화학식 $-Ge(R^a)_3$의 게르마닐 기로 이루어지는 군 중에서 선택되는 하나 이상의 치환체에 의해 추가로 치환되고;

[0385] 여기서 각 R'는 수소, C_{1-20} 알킬 기, 및 C_{6-20} 아릴 기로 이루어지는 군 중에서 독립적으로 선택되고;

[0386] 여기서 각 R^a는 수소, C_{1-8} 알킬 기, C_{1-8} 알콕시 기, C_{6-20} 아릴옥시 기 및 C_{6-20} 아릴 기로 이루어지는 군 중에서 독립적으로 선택되고; 그리고 R^b, R^c, R^d는 각각 독립적으로 C_{1-20} 알킬 기이며;

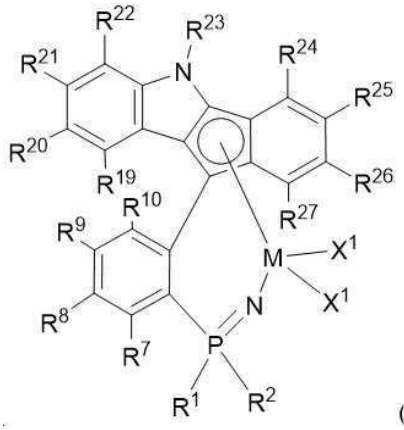
[0387] 각 X^1은 활성화 가능한 리간드이고; 그리고

[0388] L은 Cy와 P를 연결하는 원자의 근접한 사슬을 함유하는 가교 기로서, 여기서 근접한 사슬은 2개 또는 3개의 원자를 함유함; 및

[0389] ii) 촉매 활성화제.

[0390] 한 실시양태는 다음을 포함하는 올레핀 중합 촉매 시스템이다:

[0391] i) 화학식 IX로 표현되는 유기금속 복합체:



(IX)

[0392]

[0393] 여기서, M은 Ti, Zr 또는 Hf이고;

[0394] 여기서, R^1 및 R^2는 각각 독립적으로 수소 및 R^X로 이루어진 군 중에서 선택되거나; 또는 R^1 및 R^2는 이들이 부착된 P 원자와 함께, 비치환되거나, 또는 할로겐 원자, C_{1-20} 알킬 기, C_{1-20} 알콕시 기, C_{7-20} 알킬아릴 기, C_{7-20} 아릴알킬 기, C_{6-20} 아릴 기, C_{6-20} 아릴옥시 기, C_{7-20} 알킬아릴옥시 기, 및 C_{7-20} 아릴알킬옥시 기로 이루어진 군 중에서 선택되는 하나 이상의 치환체에 의해 추가로 치환되는 3-10원 헤테로환형 기를 형성하며;

[0395] 각 R^X는 할로겐 원자; 하이드로카르빌 기가 비치환되거나, 또는 하나 이상의 할로겐 원자, C_{1-20} 알킬 기, C_{1-20} 알콕시 기, C_{7-20} 알킬아릴 기, C_{7-20} 아릴알킬 기, C_{6-20} 아릴 기, C_{6-20} 아릴옥시 기, C_{7-20} 알킬아릴옥시 기, 및/또는 C_{7-20} 아릴알킬옥시 기에 의해 추가로 치환되는 C_{1-30} 하이드로카르빌 기; 화학식 $-NR'_2$의 아미도 기; 화학식 $-Si(R^a)_3$의 실릴 기; 화학식 $-Ge(R^a)_3$의 게르마닐 기; 및 화학식 $-N=P(R^b)(R^c)(R^d)$의 포스핀이민 기로 이루어진 군 중에서 독립적으로 선택되고;

[0396] 여기서, R^{23}은 다음으로 이루어진 군 중에서 선택되며:

[0397] 수소;

[0398] C_{1-30} 하이드로카르빌 기로서, 여기서 하이드로카르빌 기는 비치환되거나, 또는 할로겐 원자, C_{1-20} 알킬 기, C_{1-20} 알콕시 기, C_{7-20} 알킬아릴 기, C_{7-20} 아릴알킬 기, C_{6-20} 아릴 기, C_{6-20} 아릴옥시 기, C_{7-20} 알킬아릴옥시 기, 및 C_{7-20} 아릴알킬옥시 기로 이루어지는 군 중에서 선택되는 하나 이상의 치환체에 의해 추가로 치환되는 C_{1-30} 하이드로카르빌 기;

[0399] 헤테로원자 함유 C_{1-30} 하이드로카르빌 기로서, 여기서 헤테로원자 함유 하이드로카르빌 기는 비치환되거나, 또는 할로겐 원자, C_{1-20} 알킬 기, C_{1-20} 알콕시 기, C_{7-20} 알킬아릴 기, C_{7-20} 아릴알킬 기, C_{6-20} 아릴 기, C_{6-20} 아릴옥시 기, C_{7-20} 알킬아릴옥시 기, 및 C_{7-20} 아릴알킬옥시 기로 이루어지는 군 중에서 선택되는 하나 이상의 치환체에 의해 추가로 치환되는 헤테로원자 함유 C_{1-30} 하이드로카르빌 기;

[0400] 여기서, R^7, R^8, R^9, R^{10}, R^{19}, R^{20}, R^{21}, R^{22}, R^{24}, R^{25}, R^{26}, 및 R^{27}은 각각 독립적으로 다음으로 이루어진 군 중에서 선택되고:

[0401] 할로겐;

[0402] 수소;

[0403] C_{1-30} 하이드로카르빌 기로서, 여기서 하이드로카르빌 기는 비치환되거나, 또는 할로겐 원자, C_{1-20} 알킬 기, C_{1-20} 알콕시 기, C_{7-20} 알킬아릴 기, C_{7-20} 아릴알킬 기, C_{6-20} 아릴 기, C_{6-20} 아릴옥시 기, C_{7-20} 알킬아릴옥시 기, 및 C_{7-20} 아릴알킬옥시 기로 이루어지는 군 중에서 선택되는 하나 이상의 치환체에 의해 추가로 치환되는, C_{1-30} 하이드

로카르빌 기;

[0404] 헤테로원자 함유 C_{1-30} 하이드로카르빌 기로서, 여기서 헤테로원자 함유 하이드로카르빌 기는 비치환되거나, 또는 할로겐 원자, C_{1-20} 알킬 기, C_{1-20} 알콕시 기, C_{7-20} 알킬아릴 기, C_{7-20} 아릴알킬 기, C_{6-20} 아릴 기, C_{6-20} 아릴옥시 기, C_{7-20} 알킬아릴옥시 기, 및 C_{7-20} 아릴알킬옥시 기로 이루어지는 군 중에서 선택되는 하나 이상의 치환체에 의해 추가로 치환되는, 헤테로원자 함유 C_{1-30} 하이드로카르빌 기;

[0405] 옥시 기, -OR';

[0406] 아미도 기, $-NR'_2$;

[0407] 포스피도 기, $-PR'_2$;

[0408] 티올레이트 기, -SR';

[0409] 화학식 $-Si(R^a)_3$의 실릴 기; 및

[0410] 화학식 $-Ge(R^a)_3$의 게르마닐 기;

[0411] 여기서, R^7, R^8, R^9, R^{10}, R^{19}, R^{20}, R^{21}, R^{22}, R^{24}, R^{25}, R^{26}, 및 R^{27} 중 2개의 인접한 기는 선택적으로 결합되어 환형 하이드로카르빌 기 또는 환형 헤테로원자 함유 하이드로카르빌 기를 형성할 수 있고, 이 환형 하이드로카르빌 기 또는 환형 헤테로원자 함유 하이드로카르빌 기는 비치환되거나, 또는 할로겐 원자, C_{1-20} 알킬 기, C_{1-20} 알콕시 기, C_{7-20} 알킬아릴 기, C_{7-20} 아릴알킬 기, C_{6-20} 아릴 기, C_{6-20} 아릴옥시 기, C_{7-20} 알킬아릴옥시 기, C_{7-20} 아릴알킬옥시 기, 화학식 $-NR'_2$의 아미도 기, 화학식 $-PR'_2$의 포스피도 기, 화학식 -SR'의 티올레이트 기, 화학식 $-Si(R^a)_3$의 실릴 기, 및 화학식 $-Ge(R^a)_3$의 게르마닐 기로 이루어지는 군 중에서 선택되는 하나 이상의 치환체에 의해 추가로 치환되고;

[0412] 여기서 각 R'는 수소, C_{1-20} 알킬 기, 및 C_{6-20} 아릴 기로 이루어지는 군 중에서 독립적으로 선택되고;

[0413] 여기서 각 R^a는 수소, C_{1-8} 알킬 기, C_{1-8} 알콕시 기, C_{6-20} 아릴옥시 기 및 C_{6-20} 아릴 기로 이루어지는 군 중에서 독립적으로 선택되고; 그리고 R^b, R^c, R^d는 각각 독립적으로 C_{1-20} 알킬 기이며; 그리고

[0414] 각 X^1은 활성화 가능한 리간드임; 및

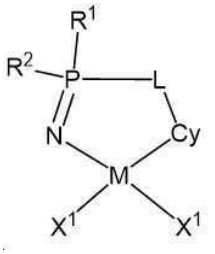
[0415] ii) 촉매 활성화제.

[0416] 본 개시내용의 실시양태에서, 촉매 활성화제는 알킬알루미녹산 공촉매, 유기알루미늄 화합물, 붕소계 촉매 활성화제, 및 이들의 혼합물로 이루어지는 군 중에서 선택되는 촉매 활성화제를 포함한다.

[0417] 본 개시내용의 실시양태에서, 붕소계 촉매 활성화제는 [(수소화된 탈로우 알킬)$_2$(Me)NH][$B(C_6F_5)_4$]; N,N-디메틸아닐리늄 테트라키스(펜타플루오로페닐) 붕산염("[Me_2NHPh][$B(C_6F_5)_4$]"); 및 트리페닐메틸륨 테트라키스(펜타플루오로페닐) 붕산염 ("[Ph_3C][$B(C_6F_5)_4$]")으로 이루어지는 군 중에서 선택된다.

[0418] 본 개시내용의 실시양태는 다음을 포함하는 올레핀 중합 촉매 시스템의 존재 하에 에틸렌을 선택적으로 하나 이상의 C_3-C_{12} 알파-올레핀과 함께 중합시키는 것을 포함하는 중합 공정이다:

[0419] i) 화학식 I로 표현되는 유기금속 복합체;

[0420] 

(I)

[0421] 여기서,

[0422] M은 Ti, Zr 또는 Hf이고;

[0423] R^1 및 R^2는 각각 독립적으로 수소 및 R^X로 이루어진 군 중에서 선택되거나; 또는 R^1 및 R^2는 이들이 부착된 P 원자와 함께, 비치환되거나, 또는 할로겐 원자, C_{1-20} 알킬 기, C_{1-20} 알콕시 기, C_{7-20} 알킬아릴 기, C_{7-20} 아릴알킬 기, C_{6-20} 아릴 기, C_{6-20} 아릴옥시 기, C_{7-20} 알킬아릴옥시 기, 및 C_{7-20} 아릴알킬옥시 기로 이루어진 군 중에서 선택되는 하나 이상의 치환체에 의해 추가로 치환되는 3-10원 헤테로환형 기를 형성하며;

[0424] 각 R^X는 할로겐 원자; 하이드로카르빌 기가 비치환되거나, 또는 하나 이상의 할로겐 원자, C_{1-20} 알킬 기, C_{1-20} 알콕시 기, C_{7-20} 알킬아릴 기, C_{7-20} 아릴알킬 기, C_{6-20} 아릴 기, C_{6-20} 아릴옥시 기, C_{7-20} 알킬아릴옥시 기, 및/또는 C_{7-20} 아릴알킬옥시 기에 의해 추가로 치환되는 C_{1-30} 하이드로카르빌 기; 화학식 $-NR'_2$의 아미도 기; 화학식 $-Si(R^a)_3$의 실릴 기; 화학식 $-Ge(R^a)_3$의 게르마닐 기; 및 화학식 $-N=P(R^b)(R^c)(R^d)$의 포스핀이민 기로 이루어진 군 중에서 독립적으로 선택되고; 여기서 각 R'는 수소, C_{1-20} 알킬 기, 및 C_{6-20} 아릴 기로 이루어지는 군 중에서 독립적으로 선택되고; 각 R^a는 수소, C_{1-8} 알킬 기, C_{1-8} 알콕시 기, C_{6-20} 아릴옥시 기 및 C_{6-20} 아릴 기로 이루어진 군 중에서 독립적으로 선택되고; R^b, R^c, R^d는 각각 독립적으로 C_{1-20} 알킬 기이며;

[0425] 각 X^1은 활성화 가능한 리간드이고;

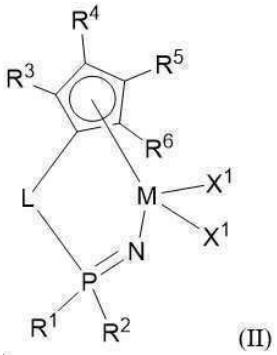
[0426] Cy는 L에 공유 결합되고 η-결합을 통해 M에 배위된 사이클로펜타디에닐형 리간드이고; 그리고

[0427] L은 Cy와 P를 연결하는 원자의 근접한 사슬을 함유하는 가교 기로서, 여기서 근접한 사슬은 2개 또는 3개의 원자를 함유함; 및

[0428] ii) 촉매 활성화제.

[0429] 본 개시내용의 실시양태는 다음을 포함하는 올레핀 중합 촉매 시스템의 존재 하에 에틸렌을 선택적으로 하나 이상의 C_3-C_{12} 알파-올레핀과 함께 중합시키는 것을 포함하는 중합 공정이다:

[0430] i) 화학식 II로 표현되는 유기금속 복합체;

[0431] 

(II)

[0432] 여기서,

[0433] M은 Ti, Zr 또는 Hf이고;

[0434] R^1 및 R^2는 각각 독립적으로 수소 및 R^X로 이루어진 군 중에서 선택되거나; 또는 R^1 및 R^2는 이들이 부착된 P 원자와 함께, 비치환되거나, 또는 할로겐 원자, C_{1-20} 알킬 기, C_{1-20} 알콕시 기, C_{7-20} 알킬아릴 기, C_{7-20} 아릴알킬 기, C_{6-20} 아릴 기, C_{6-20} 아릴옥시 기, C_{7-20} 알킬아릴옥시 기, 및 C_{7-20} 아릴알킬옥시 기로 이루어진 군 중에서 선택되는 하나 이상의 치환체에 의해 추가로 치환되는 3-10원 헤테로환형 기를 형성하며;

[0435] 각 R^X는 할로겐 원자; 하이드로카르빌 기가 비치환되거나, 또는 하나 이상의 할로겐 원자, C_{1-20} 알킬 기, C_{1-20} 알콕시 기, C_{7-20} 알킬아릴 기, C_{7-20} 아릴알킬 기, C_{6-20} 아릴 기, C_{6-20} 아릴옥시 기, C_{7-20} 알킬아릴옥시 기, 및/또는 C_{7-20} 아릴알킬옥시 기에 의해 추가로 치환되는 C_{1-30} 하이드로카르빌 기; 화학식 $-NR'_2$의 아미도 기; 화학식 $-Si(R^a)_3$의 실릴 기; 화학식 $-Ge(R^a)_3$의 게르마닐 기; 및 화학식 $-N=P(R^b)(R^c)(R^d)$의 포스핀이민 기로 이루어진 군 중에서 독립적으로 선택되고;

[0436] 여기서, R^3, R^4, R^5 및 R^6은 각각 독립적으로 다음으로 이루어진 군 중에서 선택되고:

[0437] 할로겐;

[0438] 수소;

[0439] C_{1-30} 하이드로카르빌 기로서, 여기서 하이드로카르빌 기는 비치환되거나, 또는 할로겐 원자, C_{1-20} 알킬 기, C_{1-20} 알콕시 기, C_{7-20} 알킬아릴 기, C_{7-20} 아릴알킬 기, C_{6-20} 아릴 기, C_{6-20} 아릴옥시 기, C_{7-20} 알킬아릴옥시 기, 및 C_{7-20} 아릴알킬옥시 기로 이루어지는 군 중에서 선택되는 하나 이상의 치환체에 의해 추가로 치환되는 C_{1-30} 하이드로카르빌 기;

[0440] 헤테로원자 함유 C_{1-30} 하이드로카르빌 기로서, 여기서 헤테로원자 함유 하이드로카르빌 기는 비치환되거나, 또는 할로겐 원자, C_{1-20} 알킬 기, C_{1-20} 알콕시 기, C_{7-20} 알킬아릴 기, C_{7-20} 아릴알킬 기, C_{6-20} 아릴 기, C_{6-20} 아릴옥시 기, C_{7-20} 알킬아릴옥시 기, 및 C_{7-20} 아릴알킬옥시 기로 이루어지는 군 중에서 선택되는 하나 이상의 치환체에 의해 추가로 치환되는 헤테로원자 함유 C_{1-30} 하이드로카르빌 기;

[0441] 옥시 기, -OR';

[0442] 아미도 기, $-NR'_2$;

[0443] 포스피도 기, $-PR'_2$;

[0444] 티올레이트 기, -SR';

[0445] 화학식 $-Si(R^a)_3$의 실릴 기; 및

[0446] 화학식 $-Ge(R^a)_3$의 게르마닐 기;

[0447] 여기서, R^3, R^4, R^5 및 R^6 중 2개의 인접한 기는 선택적으로 결합되어 환형 하이드로카르빌 기 또는 환형 헤테로원자 함유 하이드로카르빌 기를 형성할 수 있고, 이 환형 하이드로카르빌 기 또는 환형 헤테로원자 함유 하이드로카르빌 기는 비치환되거나, 또는 할로겐 원자, C_{1-20} 알킬 기, C_{1-20} 알콕시 기, C_{7-20} 알킬아릴 기, C_{7-20} 아릴알킬 기, C_{6-20} 아릴 기, C_{6-20} 아릴옥시 기, C_{7-20} 알킬아릴옥시 기, C_{7-20} 아릴알킬옥시 기, 화학식 $-NR'_2$의 아미도 기, 화학식 $-PR'_2$의 포스피도 기, 화학식 -SR'의 티올레이트 기, 화학식 $-Si(R^a)_3$의 실릴 기, 및 화학식 $-Ge(R^a)_3$의 게르마닐 기로 이루어지는 군 중에서 선택되는 하나 이상의 치환체에 의해 추가로 치환되고;

[0448] 여기서 각 R'는 수소, C_{1-20} 알킬 기, 및 C_{6-20} 아릴 기로 이루어지는 군 중에서 독립적으로 선택되고;

[0449] 여기서 각 R^a는 수소, C_{1-8} 알킬 기, C_{1-8} 알콕시 기, C_{6-20} 아릴옥시 기 및 C_{6-20} 아릴 기로 이루어지는 군 중에서 독립적으로 선택되고; 그리고 R^b, R^c, R^d는 각각 독립적으로 C_{1-20} 알킬 기이며;

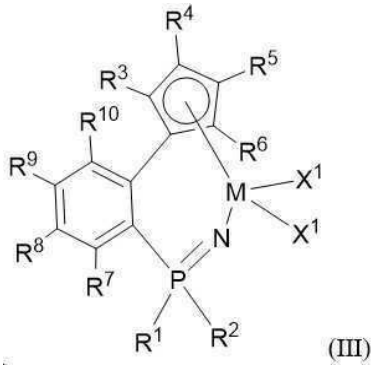
[0450] 각 X^1은 활성화 가능한 리간드이고; 그리고

[0451] L은 Cy와 P를 연결하는 원자의 근접한 사슬을 함유하는 가교 기로서, 여기서 근접한 사슬은 2개 또는 3개의 원자를 함유함; 및

[0452] ii) 촉매 활성화제.

[0453] 본 개시내용의 실시양태는 다음을 포함하는 올레핀 중합 촉매 시스템의 존재 하에 에틸렌을 선택적으로 하나 이상의 C_3-C_{12} 알파-올레핀과 함께 중합시키는 것을 포함하는 중합 공정이다:

[0454] i) 화학식 III으로 표현되는 유기금속 복합체:

[0455] 

(III)

[0456] 여기서, M은 Ti, Zr 또는 Hf이고;

[0457] 여기서, R^1 및 R^2는 각각 독립적으로 수소 및 R^X로 이루어진 군 중에서 선택되거나; 또는 R^1 및 R^2는 이들이 부착된 P 원자와 함께, 비치환되거나, 또는 할로겐 원자, C_{1-20} 알킬 기, C_{1-20} 알콕시 기, C_{7-20} 알킬아릴 기, C_{7-20} 아릴알킬 기, C_{6-20} 아릴 기, C_{6-20} 아릴옥시 기, C_{7-20} 알킬아릴옥시 기, 및 C_{7-20} 아릴알킬옥시 기로 이루어진 군 중에서 선택되는 하나 이상의 치환체에 의해 추가로 치환되는 3-10원 헤테로환형 기를 형성하며;

[0458] 각 R^X는 할로겐 원자; 하이드로카르빌 기가 비치환되거나, 또는 하나 이상의 할로겐 원자, C_{1-20} 알킬 기, C_{1-20} 알콕시 기, C_{7-20} 알킬아릴 기, C_{7-20} 아릴알킬 기, C_{6-20} 아릴 기, C_{6-20} 아릴옥시 기, C_{7-20} 알킬아릴옥시 기, 및/또는 C_{7-20} 아릴알킬옥시 기에 의해 추가로 치환되는 C_{1-30} 하이드로카르빌 기; 화학식 $-NR'_2$의 아미도 기; 화학식 $-Si(R^a)_3$의 실릴 기; 화학식 $-Ge(R^a)_3$의 게르마닐 기; 및 화학식 $-N=P(R^b)(R^c)(R^d)$의 포스핀이민 기로 이루어진 군 중에서 독립적으로 선택되고;

[0459] 여기서, R^3, R^4, R^5, R^6, R^7, R^8, R^9, 및 R^{10}은 각각 독립적으로 다음으로 이루어진 군 중에서 선택되고:

[0460] 할로겐;

[0461] 수소;

[0462] C_{1-30} 하이드로카르빌 기로서, 여기서 하이드로카르빌 기는 비치환되거나, 또는 할로겐 원자, C_{1-20} 알킬 기, C_{1-20} 알콕시 기, C_{7-20} 알킬아릴 기, C_{7-20} 아릴알킬 기, C_{6-20} 아릴 기, C_{6-20} 아릴옥시 기, C_{7-20} 알킬아릴옥시 기, 및 C_{7-20} 아릴알킬옥시 기로 이루어지는 군 중에서 선택되는 하나 이상의 치환체에 의해 추가로 치환되는 C_{1-30} 하이드로카르빌 기;

[0463] 헤테로원자 함유 C_{1-30} 하이드로카르빌 기로서, 여기서 헤테로원자 함유 하이드로카르빌 기는 비치환되거나, 또는 할로겐 원자, C_{1-20} 알킬 기, C_{1-20} 알콕시 기, C_{7-20} 알킬아릴 기, C_{7-20} 아릴알킬 기, C_{6-20} 아릴 기, C_{6-20} 아릴옥시

기, C_{7-20} 알킬아릴옥시 기, 및 C_{7-20} 아릴알킬옥시 기로 이루어지는 군 중에서 선택되는 하나 이상의 치환체에 의해 추가로 치환되는 헤테로원자 함유 C_{1-30} 하이드로카르빌 기;

[0464] 옥시 기, -OR';

[0465] 아미도 기, $-NR'_2$;

[0466] 포스피도 기, $-PR'_2$;

[0467] 티올레이트 기, -SR';

[0468] 화학식 $-Si(R^a)_3$의 실릴 기; 및

[0469] 화학식 $-Ge(R^a)_3$의 게르마닐 기;

[0470] 여기서, R^3, R^4, R^5, R^6, R^7, R^8, R^9, 및 R^{10} 중 2개의 인접한 기는 선택적으로 결합되어 환형 하이드로카르빌 기 또는 환형 헤테로원자 함유 하이드로카르빌 기를 형성할 수 있고, 이 환형 하이드로카르빌 기 또는 환형 헤테로원자 함유 하이드로카르빌 기는 비치환되거나, 또는 할로겐 원자, C_{1-20} 알킬 기, C_{1-20} 알콕시 기, C_{7-20} 알킬아릴 기, C_{7-20} 아릴알킬 기, C_{6-20} 아릴 기, C_{6-20} 아릴옥시 기, C_{7-20} 알킬아릴옥시 기, C_{7-20} 아릴알킬옥시 기, 화학식 $-NR'_2$의 아미도 기, 화학식 $-PR'_2$의 포스피도 기, 화학식 -SR'의 티올레이트 기, 화학식 $-Si(R^a)_3$의 실릴 기, 및 화학식 $-Ge(R^a)_3$의 게르마닐 기로 이루어지는 군 중에서 선택되는 하나 이상의 치환체에 의해 추가로 치환되고;

[0471] 여기서 각 R'는 수소, C_{1-20} 알킬 기, 및 C_{6-20} 아릴 기로 이루어지는 군 중에서 독립적으로 선택되고;

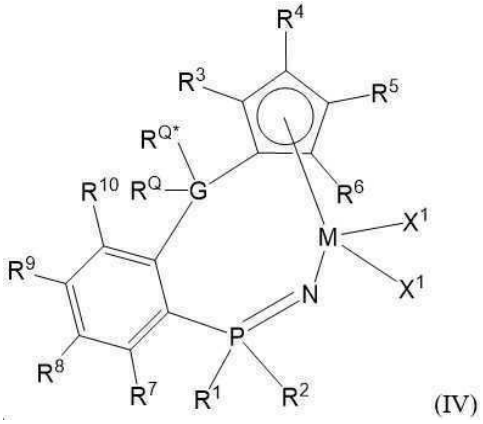
[0472] 여기서 각 R^a는 수소, C_{1-8} 알킬 기, C_{1-8} 알콕시 기, C_{6-20} 아릴옥시 기 및 C_{6-20} 아릴 기로 이루어지는 군 중에서 독립적으로 선택되고; 그리고 R^b, R^c, R^d는 각각 독립적으로 C_{1-20} 알킬 기이며;

[0473] 여기서 각 X^1은 활성화 가능한 리간드임; 및

[0474] ii) 촉매 활성화제.

[0475] 본 개시내용의 실시양태는 다음을 포함하는 올레핀 중합 촉매 시스템의 존재 하에 에틸렌을 선택적으로 하나 이상의 C_3-C_{12} 알파-올레핀과 함께 중합시키는 것을 포함하는 중합 공정이다:

[0476] i) 화학식 IV로 표현되는 유기금속 복합체:

[0477] 

(IV)

[0478] 여기서, M은 Ti, Zr 또는 Hf이고;

[0479] 여기서, R^1 및 R^2는 각각 독립적으로 수소 및 R^X로 이루어진 군 중에서 선택되거나; 또는 R^1 및 R^2는 이들이 부착된 P 원자와 함께, 비치환되거나, 또는 할로겐 원자, C_{1-20} 알킬 기, C_{1-20} 알콕시 기, C_{7-20} 알킬아릴 기, C_{7-20} 아

릴알킬 기, C_{6-20} 아릴 기, C_{6-20} 아릴옥시 기, C_{7-20} 알킬아릴옥시 기, 및 C_{7-20} 아릴알킬옥시 기로 이루어진 군 중에서 선택되는 하나 이상의 치환체에 의해 추가로 치환되는 3-10원 헤테로환형 기를 형성하며;

[0480] 각 R^X는 할로겐 원자; 하이드로카르빌 기가 비치환되거나, 또는 하나 이상의 할로겐 원자, C_{1-20} 알킬 기, C_{1-20} 알콕시 기, C_{7-20} 알킬아릴 기, C_{7-20} 아릴알킬 기, C_{6-20} 아릴 기, C_{6-20} 아릴옥시 기, C_{7-20} 알킬아릴옥시 기, 및/또는 C_{7-20} 아릴알킬옥시 기에 의해 추가로 치환되는 C_{1-30} 하이드로카르빌 기; 화학식 $-NR'_2$의 아미도 기; 화학식 $-Si(R^a)_3$의 실릴 기; 화학식 $-Ge(R^a)_3$의 게르마닐 기; 및 화학식 $-N=P(R^b)(R^c)(R^d)$의 포스핀이민 기로 이루어진 군 중에서 독립적으로 선택되고;

[0481] 여기서, G는 C 또는 Si이고;

[0482] 여기서, R^Q 및 R^{Q*}는 각각 독립적으로 다음으로 이루어진 군 중에서 선택되며:

[0483] 할로겐;

[0484] 수소;

[0485] C_{1-30} 하이드로카르빌 기로서, 여기서 하이드로카르빌 기는 비치환되거나, 또는 할로겐 원자, C_{1-20} 알킬 기, C_{1-20} 알콕시 기, C_{7-20} 알킬아릴 기, C_{7-20} 아릴알킬 기, C_{6-20} 아릴 기, C_{6-20} 아릴옥시 기, C_{7-20} 알킬아릴옥시 기, 및 C_{7-20} 아릴알킬옥시 기로 이루어지는 군 중에서 선택되는 하나 이상의 치환체에 의해 추가로 치환되는 C_{1-30} 하이드로카르빌 기;

[0486] 헤테로원자 함유 C_{1-30} 하이드로카르빌 기로서, 여기서 헤테로원자 함유 하이드로카르빌 기는 비치환되거나, 또는 할로겐 원자, C_{1-20} 알킬 기, C_{1-20} 알콕시 기, C_{7-20} 알킬아릴 기, C_{7-20} 아릴알킬 기, C_{6-20} 아릴 기, C_{6-20} 아릴옥시 기, C_{7-20} 알킬아릴옥시 기, 및 C_{7-20} 아릴알킬옥시 기로 이루어지는 군 중에서 선택되는 하나 이상의 치환체에 의해 추가로 치환되는 헤테로원자 함유 C_{1-30} 하이드로카르빌 기;

[0487] 여기서, R^Q 및 R^{Q*} 기는 선택적으로 결합되어 환형 하이드로카르빌 기 또는 환형 헤테로원자 함유 하이드로카르빌 기를 형성할 수 있고, 이 환형 하이드로카르빌 기 또는 환형 헤테로원자 함유 하이드로카르빌 기는 비치환되거나, 또는 할로겐 원자, C_{1-20} 알킬 기, C_{1-20} 알콕시 기, C_{7-20} 알킬아릴 기, C_{7-20} 아릴알킬 기, C_{6-20} 아릴 기, C_{6-20} 아릴옥시 기, C_{7-20} 알킬아릴옥시 기, C_{7-20} 아릴알킬옥시 기, 화학식 $-NR'_2$의 아미도 기; 화학식 $-PR'_2$의 포스피도 기, 화학식 $-SR'$의 티올레이트 기, 화학식 $-Si(R^a)_3$의 실릴 기, 및 화학식 $-Ge(R^a)_3$의 게르마닐 기로 이루어지는 군 중에서 선택되는 하나 이상의 치환체에 의해 추가로 치환되며;

[0488] 여기서, R^3, R^4, R^5, R^6, R^7, R^8, R^9, 및 R^{10}은 각각 독립적으로 다음으로 이루어진 군 중에서 선택되고:

[0489] 할로겐;

[0490] 수소;

[0491] C_{1-30} 하이드로카르빌 기로서, 여기서 하이드로카르빌 기는 비치환되거나, 또는 할로겐 원자, C_{1-20} 알킬 기, C_{1-20} 알콕시 기, C_{7-20} 알킬아릴 기, C_{7-20} 아릴알킬 기, C_{6-20} 아릴 기, C_{6-20} 아릴옥시 기, C_{7-20} 알킬아릴옥시 기, 및 C_{7-20} 아릴알킬옥시 기로 이루어지는 군 중에서 선택되는 하나 이상의 치환체에 의해 추가로 치환되는, C_{1-30} 하이드로카르빌 기;

[0492] 헤테로원자 함유 C_{1-30} 하이드로카르빌 기로서, 여기서 헤테로원자 함유 하이드로카르빌 기는 비치환되거나, 또는 할로겐 원자, C_{1-20} 알킬 기, C_{1-20} 알콕시 기, C_{7-20} 알킬아릴 기, C_{7-20} 아릴알킬 기, C_{6-20} 아릴 기, C_{6-20} 아릴옥시 기, C_{7-20} 알킬아릴옥시 기, 및 C_{7-20} 아릴알킬옥시 기로 이루어지는 군 중에서 선택되는 하나 이상의 치환체에 의해 추가로 치환되는, 헤테로원자 함유 C_{1-30} 하이드로카르빌 기;

[0493] 옥시 기, -OR';

[0494] 아미도 기, $-NR'_2$;

[0495] 포스피도 기, $-PR'_2$;

[0496] 티올레이트 기, -SR';

[0497] 화학식 $-Si(R^a)_3$의 실릴 기; 및

[0498] 화학식 $-Ge(R^a)_3$의 게르마닐 기;

[0499] 여기서, R^3, R^4, R^5, R^6, R^7, R^8, R^9, 및 R^{10} 중 2개의 인접한 기는 선택적으로 결합되어 환형 하이드로카르빌 기 또는 환형 헤테로원자 함유 하이드로카르빌 기를 형성할 수 있고, 이 환형 하이드로카르빌 기 또는 환형 헤테로원자 함유 하이드로카르빌 기는 비치환되거나, 또는 할로겐 원자, C_{1-20} 알킬 기, C_{1-20} 알콕시 기, C_{7-20} 알킬아릴 기, C_{7-20} 아릴알킬 기, C_{6-20} 아릴 기, C_{6-20} 아릴옥시 기, C_{7-20} 알킬아릴옥시 기, C_{7-20} 아릴알킬옥시 기, 화학식 $-NR'_2$의 아미도 기, 화학식 $-PR'_2$의 포스피도 기, 화학식 -SR'의 티올레이트 기, 화학식 $-Si(R^a)_3$의 실릴 기, 및 화학식 $-Ge(R^a)_3$의 게르마닐 기로 이루어지는 군 중에서 선택되는 하나 이상의 치환체에 의해 추가로 치환되고;

[0500] 여기서 각 R'는 수소, C_{1-20} 알킬 기, 및 C_{6-20} 아릴 기로 이루어지는 군 중에서 독립적으로 선택되고;

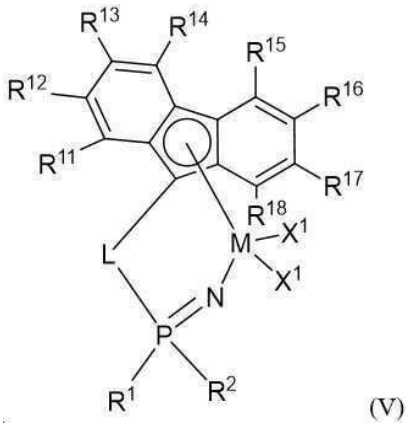
[0501] 여기서 각 R^a는 수소, C_{1-8} 알킬 기, C_{1-8} 알콕시 기, C_{6-20} 아릴옥시 기 및 C_{6-20} 아릴 기로 이루어지는 군 중에서 독립적으로 선택되고; 그리고 R^b, R^c, R^d는 각각 독립적으로 C_{1-20} 알킬 기이며;

[0502] 여기서 각 X^1은 활성화 가능한 리간드임; 및

[0503] ii) 촉매 활성화제.

[0504] 본 개시내용의 실시양태는 다음을 포함하는 올레핀 중합 촉매 시스템의 존재 하에 에틸렌을 선택적으로 하나 이상의 C_3-C_{12} 알파-올레핀과 함께 중합시키는 것을 포함하는 중합 공정이다:

[0505] i) 화학식 V로 표현되는 유기금속 복합체:

[0506] 

(V)

[0507] 여기서, M은 Ti, Zr 또는 Hf이고;

[0508] 여기서, R^1 및 R^2는 각각 독립적으로 수소 및 R^X로 이루어진 군 중에서 선택되거나; 또는 R^1 및 R^2는 이들이 부착된 P 원자와 함께, 비치환되거나, 또는 할로겐 원자, C_{1-20} 알킬 기, C_{1-20} 알콕시 기, C_{7-20} 알킬아릴 기, C_{7-20} 아릴알킬 기, C_{6-20} 아릴 기, C_{6-20} 아릴옥시 기, C_{7-20} 알킬아릴옥시 기, 및 C_{7-20} 아릴알킬옥시 기로 이루어진 군 중에서 선택되는 하나 이상의 치환체에 의해 추가로 치환되는 3-10원 헤테로환형 기를 형성하며;

[0509] 각 R^X는 할로겐 원자; 하이드로카르빌 기가 비치환되거나, 또는 하나 이상의 할로겐 원자, C_{1-20} 알킬 기, C_{1-20} 알콕시 기, C_{7-20} 알킬아릴 기, C_{7-20} 아릴알킬 기, C_{6-20} 아릴 기, C_{6-20} 아릴옥시 기, C_{7-20} 알킬아릴옥시 기, 및/또는 C_{7-20} 아릴알킬옥시 기에 의해 추가로 치환되는 C_{1-30} 하이드로카르빌 기; 화학식 $-NR'_2$의 아미도 기; 화학식 $-Si(R^a)_3$의 실릴 기; 화학식 $-Ge(R^a)_3$의 게르마닐 기; 및 화학식 $-N=P(R^b)(R^c)(R^d)$의 포스핀이민 기로 이루어진 군 중에서 독립적으로 선택되고;

[0510] 여기서, R^{11}, R^{12}, R^{13}, R^{14}, R^{15}, R^{16}, R^{17}, R^{18}은 각각 독립적으로 다음으로 이루어진 군 중에서 선택되고:

[0511] 할로겐;

[0512] 수소;

[0513] C_{1-30} 하이드로카르빌 기로서, 여기서 하이드로카르빌 기는 비치환되거나, 또는 할로겐 원자, C_{1-20} 알킬 기, C_{1-20} 알콕시 기, C_{7-20} 알킬아릴 기, C_{7-20} 아릴알킬 기, C_{6-20} 아릴 기, C_{6-20} 아릴옥시 기, C_{7-20} 알킬아릴옥시 기, 및 C_{7-20} 아릴알킬옥시 기로 이루어지는 군 중에서 선택되는 하나 이상의 치환체에 의해 추가로 치환되는, C_{1-30} 하이드로카르빌 기;

[0514] 헤테로원자 함유 C_{1-30} 하이드로카르빌 기로서, 여기서 헤테로원자 함유 하이드로카르빌 기는 비치환되거나, 또는 할로겐 원자, C_{1-20} 알킬 기, C_{1-20} 알콕시 기, C_{7-20} 알킬아릴 기, C_{7-20} 아릴알킬 기, C_{6-20} 아릴 기, C_{6-20} 아릴옥시 기, C_{7-20} 알킬아릴옥시 기, 및 C_{7-20} 아릴알킬옥시 기로 이루어지는 군 중에서 선택되는 하나 이상의 치환체에 의해 추가로 치환되는, 헤테로원자 함유 C_{1-30} 하이드로카르빌 기;

[0515] 옥시 기, $-OR'$;

[0516] 아미도 기, $-NR'_2$;

[0517] 포스피도 기, $-PR'_2$;

[0518] 티올레이트 기, $-SR'$;

[0519] 화학식 $-Si(R^a)_3$의 실릴 기; 및

[0520] 화학식 $-Ge(R^a)_3$의 게르마닐 기;

[0521] 여기서, R^{11}, R^{12}, R^{13}, R^{14}, R^{15}, R^{16}, R^{17}, R^{18} 중 2개의 인접한 기는 선택적으로 결합되어 환형 하이드로카르빌 기 또는 환형 헤테로원자 함유 하이드로카르빌 기를 형성할 수 있고, 이 환형 하이드로카르빌 기 또는 환형 헤테로원자 함유 하이드로카르빌 기는 비치환되거나, 또는 할로겐 원자, C_{1-20} 알킬 기, C_{1-20} 알콕시 기, C_{7-20} 알킬아릴 기, C_{7-20} 아릴알킬 기, C_{6-20} 아릴 기, C_{6-20} 아릴옥시 기, C_{7-20} 알킬아릴옥시 기, C_{7-20} 아릴알킬옥시 기, 화학식 $-NR'_2$의 아미도 기, 화학식 $-PR'_2$의 포스피도 기, 화학식 $-SR'$의 티올레이트 기, 화학식 $-Si(R^a)_3$의 실릴 기, 및 화학식 $-Ge(R^a)_3$의 게르마닐 기로 이루어지는 군 중에서 선택되는 하나 이상의 치환체에 의해 추가로 치환되고;

[0522] 여기서 각 R'는 수소, C_{1-20} 알킬 기, 및 C_{6-20} 아릴 기로 이루어지는 군 중에서 독립적으로 선택되고;

[0523] 여기서 각 R^a는 수소, C_{1-8} 알킬 기, C_{1-8} 알콕시 기, C_{6-20} 아릴옥시 기 및 C_{6-20} 아릴 기로 이루어지는 군 중에서 독립적으로 선택되고; 그리고 R^b, R^c, R^d는 각각 독립적으로 C_{1-20} 알킬 기이며;

[0524] 각 X^1은 활성화 가능한 리간드이고; 그리고

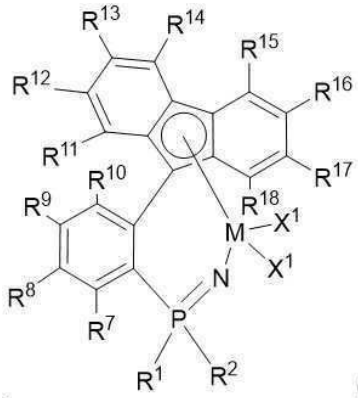
[0525] L은 Cy와 P를 연결하는 원자의 근접한 사슬을 함유하는 가교 기로서, 여기서 근접한 사슬은 2개 또는 3개의 원

자를 함유함; 및

[0526] ii) 촉매 활성화제.

[0527] 본 개시내용의 실시양태는 다음을 포함하는 올레핀 중합 촉매 시스템의 존재 하에 에틸렌을 선택적으로 하나 이상의 C_3-C_{12} 알파-올레핀과 함께 중합시키는 것을 포함하는 중합 공정이다:

[0528] i) 화학식 VI으로 표현되는 유기금속 복합체:



(VI)

[0529]

[0530] 여기서, M은 Ti, Zr 또는 Hf이고;

[0531] 여기서, R^1 및 R^2는 각각 독립적으로 수소 및 R^X로 이루어진 군 중에서 선택되거나; 또는 R^1 및 R^2는 이들이 부착된 P 원자와 함께, 비치환되거나, 또는 할로겐 원자, C_{1-20} 알킬 기, C_{1-20} 알콕시 기, C_{7-20} 알킬아릴 기, C_{7-20} 아릴알킬 기, C_{6-20} 아릴 기, C_{6-20} 아릴옥시 기, C_{7-20} 알킬아릴옥시 기, 및 C_{7-20} 아릴알킬옥시 기로 이루어진 군 중에서 선택되는 하나 이상의 치환체에 의해 추가로 치환되는 3-10원 헤테로환형 기를 형성하며;

[0532] 각 R^X는 할로겐 원자; 하이드로카르빌 기가 비치환되거나, 또는 하나 이상의 할로겐 원자, C_{1-20} 알킬 기, C_{1-20} 알콕시 기, C_{7-20} 알킬아릴 기, C_{7-20} 아릴알킬 기, C_{6-20} 아릴 기, C_{6-20} 아릴옥시 기, C_{7-20} 알킬아릴옥시 기, 및/또는 C_{7-20} 아릴알킬옥시 기에 의해 추가로 치환되는 C_{1-30} 하이드로카르빌 기; 화학식 $-NR'_2$의 아미도 기; 화학식 $-Si(R^a)_3$의 실릴 기; 화학식 $-Ge(R^a)_3$의 게르마닐 기; 및 화학식 $-N=P(R^b)(R^c)(R^d)$의 포스핀이민 기로 이루어진 군 중에서 독립적으로 선택되고;

[0533] 여기서, R^7, R^8, R^9, R^{10}, R^{11}, R^{12}, R^{13}, R^{14}, R^{15}, R^{16}, R^{17} 및 R^{18}은 각각 독립적으로 다음으로 이루어진 군 중에서 선택되고:

[0534] 할로겐;

[0535] 수소;

[0536] C_{1-30} 하이드로카르빌 기로서, 여기서 하이드로카르빌 기는 비치환되거나, 또는 할로겐 원자, C_{1-20} 알킬 기, C_{1-20} 알콕시 기, C_{7-20} 알킬아릴 기, C_{7-20} 아릴알킬 기, C_{6-20} 아릴 기, C_{6-20} 아릴옥시 기, C_{7-20} 알킬아릴옥시 기, 및 C_{7-20} 아릴알킬옥시 기로 이루어지는 군 중에서 선택되는 하나 이상의 치환체에 의해 추가로 치환되는, C_{1-30} 하이드로카르빌 기;

[0537] 헤테로원자 함유 C_{1-30} 하이드로카르빌 기로서, 여기서 헤테로원자 함유 하이드로카르빌 기는 비치환되거나, 또는 할로겐 원자, C_{1-20} 알킬 기, C_{1-20} 알콕시 기, C_{7-20} 알킬아릴 기, C_{7-20} 아릴알킬 기, C_{6-20} 아릴 기, C_{6-20} 아릴옥시 기, C_{7-20} 알킬아릴옥시 기, 및 C_{7-20} 아릴알킬옥시 기로 이루어지는 군 중에서 선택되는 하나 이상의 치환체에 의해 추가로 치환되는, 헤테로원자 함유 C_{1-30} 하이드로카르빌 기;

[0538] 옥시 기, -OR';

[0539] 아미도 기, $-NR'_2$;

[0540] 포스피도 기, $-PR'_2$;

[0541] 티올레이트 기, -SR';

[0542] 화학식 $-Si(R^a)_3$의 실릴 기; 및

[0543] 화학식 $-Ge(R^a)_3$의 게르마닐 기;

[0544] 여기서, R^7, R^8, R^9, R^{10}, R^{11}, R^{12}, R^{13}, R^{14}, R^{15}, R^{16}, R^{17} 및 R^{18} 중 2개의 인접한 기는 선택적으로 결합되어 환형 하이드로카르빌 기 또는 환형 헤테로원자 함유 하이드로카르빌 기를 형성할 수 있고, 이 환형 하이드로카르빌 기 또는 환형 헤테로원자 함유 하이드로카르빌 기는 비치환되거나, 또는 할로겐 원자, C_{1-20} 알킬 기, C_{1-20} 알콕시 기, C_{7-20} 알킬아릴 기, C_{7-20} 아릴알킬 기, C_{6-20} 아릴 기, C_{6-20} 아릴옥시 기, C_{7-20} 알킬아릴옥시 기, C_{7-20} 아릴알킬옥시 기, 화학식 $-NR'_2$의 아미도 기, 화학식 $-PR'_2$의 포스피도 기, 화학식 -SR'의 티올레이트 기, 화학식 $-Si(R^a)_3$의 실릴 기, 및 화학식 $-Ge(R^a)_3$의 게르마닐 기로 이루어지는 군 중에서 선택되는 하나 이상의 치환체에 의해 추가로 치환되고;

[0545] 여기서 각 R'는 수소, C_{1-20} 알킬 기, 및 C_{6-20} 아릴 기로 이루어지는 군 중에서 독립적으로 선택되고;

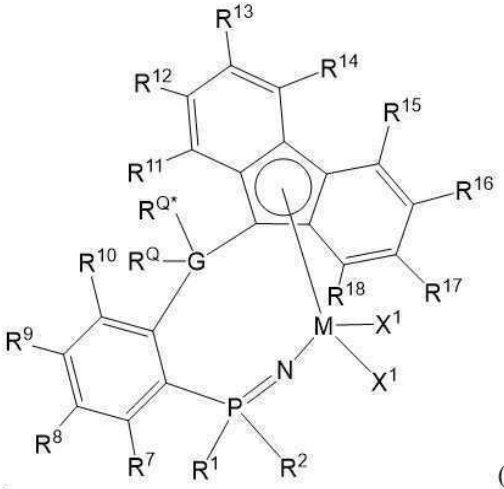
[0546] 여기서 각 R^a는 수소, C_{1-8} 알킬 기, C_{1-8} 알콕시 기, C_{6-20} 아릴옥시 기 및 C_{6-20} 아릴 기로 이루어지는 군 중에서 독립적으로 선택되고; 그리고 R^b, R^c, R^d는 각각 독립적으로 C_{1-20} 알킬 기이며; 그리고

[0547] 각 X^1은 활성화 가능한 리간드임; 및

[0548] ii) 촉매 활성화제.

[0549] 본 개시내용의 실시양태는 다음을 포함하는 올레핀 중합 촉매 시스템의 존재 하에 에틸렌을 선택적으로 하나 이상의 C_3-C_{12} 알파-올레핀과 함께 중합시키는 것을 포함하는 중합 공정이다:

[0550] i) 화학식 VII로 표현되는 유기금속 복합체:



(VII)

[0551]

[0552] 여기서, M은 Ti, Zr 또는 Hf이고;

[0553] 여기서, R^1 및 R^2는 각각 독립적으로 수소 및 R^X로 이루어진 군 중에서 선택되거나; 또는 R^1 및 R^2는 이들이 부착된 P 원자와 함께, 비치환되거나, 또는 할로겐 원자, C_{1-20} 알킬 기, C_{1-20} 알콕시 기, C_{7-20} 알킬아릴 기, C_{7-20} 아릴알킬 기, C_{6-20} 아릴 기, C_{6-20} 아릴옥시 기, C_{7-20} 알킬아릴옥시 기, 및 C_{7-20} 아릴알킬옥시 기로 이루어진 군 중

에서 선택되는 하나 이상의 치환체에 의해 추가로 치환되는 3-10원 헤테로환형 기를 형성하며;

[0554] 각 R^X는 할로겐 원자; 하이드로카르빌 기가 비치환되거나, 또는 하나 이상의 할로겐 원자, C_{1-20} 알킬 기, C_{1-20} 알콕시 기, C_{7-20} 알킬아릴 기, C_{7-20} 아릴알킬 기, C_{6-20} 아릴 기, C_{6-20} 아릴옥시 기, C_{7-20} 알킬아릴옥시 기, 및/또는 C_{7-20} 아릴알킬옥시 기에 의해 추가로 치환되는 C_{1-30} 하이드로카르빌 기; 화학식 $-NR'_2$의 아미도 기; 화학식 $-Si(R^a)_3$의 실릴 기; 화학식 $-Ge(R^a)_3$의 게르마닐 기; 및 화학식 $-N=P(R^b)(R^c)(R^d)$의 포스핀이민 기로 이루어진 군 중에서 독립적으로 선택되고;

[0555] 여기서, G는 C 또는 Si이고;

[0556] 여기서, R^Q 및 R^{Q*}는 각각 독립적으로 다음으로 이루어진 군 중에서 선택되며:

[0557] 할로겐;

[0558] 수소;

[0559] C_{1-30} 하이드로카르빌 기로서, 여기서 하이드로카르빌 기는 비치환되거나, 또는 할로겐 원자, C_{1-20} 알킬 기, C_{1-20} 알콕시 기, C_{7-20} 알킬아릴 기, C_{7-20} 아릴알킬 기, C_{6-20} 아릴 기, C_{6-20} 아릴옥시 기, C_{7-20} 알킬아릴옥시 기, 및 C_{7-20} 아릴알킬옥시 기로 이루어지는 군 중에서 선택되는 하나 이상의 치환체에 의해 추가로 치환되는 C_{1-30} 하이드로카르빌 기;

[0560] 헤테로원자 함유 C_{1-30} 하이드로카르빌 기로서, 여기서 헤테로원자 함유 하이드로카르빌 기는 비치환되거나, 또는 할로겐 원자, C_{1-20} 알킬 기, C_{1-20} 알콕시 기, C_{7-20} 알킬아릴 기, C_{7-20} 아릴알킬 기, C_{6-20} 아릴 기, C_{6-20} 아릴옥시 기, C_{7-20} 알킬아릴옥시 기, 및 C_{7-20} 아릴알킬옥시 기로 이루어지는 군 중에서 선택되는 하나 이상의 치환체에 의해 추가로 치환되는 헤테로원자 함유 C_{1-30} 하이드로카르빌 기;

[0561] 여기서, R^Q 및 R^{Q*} 기는 선택적으로 결합되어 환형 하이드로카르빌 기 또는 환형 헤테로원자 함유 하이드로카르빌 기를 형성할 수 있고, 이 환형 하이드로카르빌 기 또는 환형 헤테로원자 함유 하이드로카르빌 기는 비치환되거나, 또는 할로겐 원자, C_{1-20} 알킬 기, C_{1-20} 알콕시 기, C_{7-20} 알킬아릴 기, C_{7-20} 아릴알킬 기, C_{6-20} 아릴 기, C_{6-20} 아릴옥시 기, C_{7-20} 알킬아릴옥시 기, C_{7-20} 아릴알킬옥시 기, 화학식 $-NR'_2$의 아미도 기; 화학식 $-PR'_2$의 포스피도 기, 화학식 $-SR'$의 티올레이트 기, 화학식 $-Si(R^a)_3$의 실릴 기, 및 화학식 $-Ge(R^a)_3$의 게르마닐 기로 이루어지는 군 중에서 선택되는 하나 이상의 치환체에 의해 추가로 치환되며;

[0562] 여기서, R^7, R^8, R^9, R^{10}, R^{11}, R^{12}, R^{13}, R^{14}, R^{15}, R^{16}, R^{17} 및 R^{18}은 각각 독립적으로 다음으로 이루어진 군 중에서 선택되고:

[0563] 할로겐;

[0564] 수소;

[0565] C_{1-30} 하이드로카르빌 기로서, 여기서 하이드로카르빌 기는 비치환되거나, 또는 할로겐 원자, C_{1-20} 알킬 기, C_{1-20} 알콕시 기, C_{7-20} 알킬아릴 기, C_{7-20} 아릴알킬 기, C_{6-20} 아릴 기, C_{6-20} 아릴옥시 기, C_{7-20} 알킬아릴옥시 기, 및 C_{7-20} 아릴알킬옥시 기로 이루어지는 군 중에서 선택되는 하나 이상의 치환체에 의해 추가로 치환되는, C_{1-30} 하이드로카르빌 기;

[0566] 헤테로원자 함유 C_{1-30} 하이드로카르빌 기로서, 여기서 헤테로원자 함유 하이드로카르빌 기는 비치환되거나, 또는 할로겐 원자, C_{1-20} 알킬 기, C_{1-20} 알콕시 기, C_{7-20} 알킬아릴 기, C_{7-20} 아릴알킬 기, C_{6-20} 아릴 기, C_{6-20} 아릴옥시 기, C_{7-20} 알킬아릴옥시 기, 및 C_{7-20} 아릴알킬옥시 기로 이루어지는 군 중에서 선택되는 하나 이상의 치환체에 의해 추가로 치환되는, 헤테로원자 함유 C_{1-30} 하이드로카르빌 기;

[0567] 옥시 기, -OR';

[0568] 아미도 기, $-NR'_2$;

[0569] 포스피도 기, $-PR'_2$;

[0570] 티올레이트 기, -SR';

[0571] 화학식 $-Si(R^a)_3$의 실릴 기; 및

[0572] 화학식 $-Ge(R^a)_3$의 게르마닐 기;

[0573] 여기서, R^7, R^8, R^9, R^{10}, R^{11}, R^{12}, R^{13}, R^{14}, R^{15}, R^{16}, R^{17} 및 R^{18} 중 2개의 인접한 기는 선택적으로 결합되어 환형 하이드로카르빌 기 또는 환형 헤테로원자 함유 하이드로카르빌 기를 형성할 수 있고, 이 환형 하이드로카르빌 기 또는 환형 헤테로원자 함유 하이드로카르빌 기는 비치환되거나, 또는 할로겐 원자, C_{1-20} 알킬 기, C_{1-20} 알콕시 기, C_{7-20} 알킬아릴 기, C_{7-20} 아릴알킬 기, C_{6-20} 아릴 기, C_{6-20} 아릴옥시 기, C_{7-20} 알킬아릴옥시 기, C_{7-20} 아릴알킬옥시 기, 화학식 $-NR'_2$의 아미도 기, 화학식 $-PR'_2$의 포스피도 기, 화학식 -SR'의 티올레이트 기, 화학식 $-Si(R^a)_3$의 실릴 기, 및 화학식 $-Ge(R^a)_3$의 게르마닐 기로 이루어지는 군 중에서 선택되는 하나 이상의 치환체에 의해 추가로 치환되고;

[0574] 여기서 각 R'는 수소, C_{1-20} 알킬 기, 및 C_{6-20} 아릴 기로 이루어지는 군 중에서 독립적으로 선택되고;

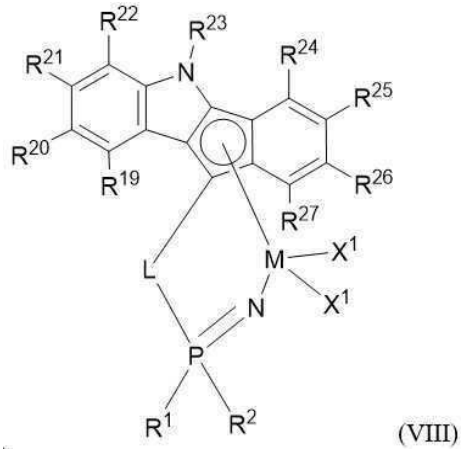
[0575] 여기서 각 R^a는 수소, C_{1-8} 알킬 기, C_{1-8} 알콕시 기, C_{6-20} 아릴옥시 기 및 C_{6-20} 아릴 기로 이루어지는 군 중에서 독립적으로 선택되고; 그리고 R^b, R^c, R^d는 각각 독립적으로 C_{1-20} 알킬 기이며; 그리고

[0576] 각 X^1은 활성화 가능한 리간드임; 및

[0577] ii) 촉매 활성화제.

[0578] 본 개시내용의 실시양태는 다음을 포함하는 올레핀 중합 촉매 시스템의 존재 하에 에틸렌을 선택적으로 하나 이상의 C_3-C_{12} 알파-올레핀과 함께 중합시키는 것을 포함하는 중합 공정이다:

[0579] i) 화학식 VIII로 표현되는 유기금속 복합체:

[0580] 

(VIII)

[0581] 여기서, M은 Ti, Zr 또는 Hf이고;

[0582] 여기서, R^1 및 R^2는 각각 독립적으로 수소 및 R^X로 이루어진 군 중에서 선택되거나; 또는 R^1 및 R^2는 이들이 부착된 P 원자와 함께, 비치환되거나, 또는 할로겐 원자, C_{1-20} 알킬 기, C_{1-20} 알콕시 기, C_{7-20} 알킬아릴 기, C_{7-20} 아릴알킬 기, C_{6-20} 아릴 기, C_{6-20} 아릴옥시 기, C_{7-20} 알킬아릴옥시 기, 및 C_{7-20} 아릴알킬옥시 기로 이루어진 군 중에서 선택되는 하나 이상의 치환체에 의해 추가로 치환되는 3-10원 헤테로환형 기를 형성하며;

[0583] 각 R^X는 할로겐 원자; 하이드로카르빌 기가 비치환되거나, 또는 하나 이상의 할로겐 원자, C_{1-20} 알킬 기, C_{1-20} 알콕시 기, C_{7-20} 알킬아릴 기, C_{7-20} 아릴알킬 기, C_{6-20} 아릴 기, C_{6-20} 아릴옥시 기, C_{7-20} 알킬아릴옥시 기, 및/또는 C_{7-20} 아릴알킬옥시 기에 의해 추가로 치환되는 C_{1-30} 하이드로카르빌 기; 화학식 $-NR'_2$의 아미도 기; 화학식 $-Si(R^a)_3$의 실릴 기; 화학식 $-Ge(R^a)_3$의 게르마닐 기; 및 화학식 $-N=P(R^b)(R^c)(R^d)$의 포스핀이민 기로 이루어진 군 중에서 독립적으로 선택되고;

[0584] 여기서, R^{23}은 다음으로 이루어진 군 중에서 선택되며:

[0585] 수소;

[0586] C_{1-30} 하이드로카르빌 기로서, 여기서 하이드로카르빌 기는 비치환되거나, 또는 할로겐 원자, C_{1-20} 알킬 기, C_{1-20} 알콕시 기, C_{7-20} 알킬아릴 기, C_{7-20} 아릴알킬 기, C_{6-20} 아릴 기, C_{6-20} 아릴옥시 기, C_{7-20} 알킬아릴옥시 기, 및 C_{7-20} 아릴알킬옥시 기로 이루어지는 군 중에서 선택되는 하나 이상의 치환체에 의해 추가로 치환되는 C_{1-30} 하이드로카르빌 기;

[0587] 헤테로원자 함유 C_{1-30} 하이드로카르빌 기로서, 여기서 헤테로원자 함유 하이드로카르빌 기는 비치환되거나, 또는 할로겐 원자, C_{1-20} 알킬 기, C_{1-20} 알콕시 기, C_{7-20} 알킬아릴 기, C_{7-20} 아릴알킬 기, C_{6-20} 아릴 기, C_{6-20} 아릴옥시 기, C_{7-20} 알킬아릴옥시 기, 및 C_{7-20} 아릴알킬옥시 기로 이루어지는 군 중에서 선택되는 하나 이상의 치환체에 의해 추가로 치환되는 헤테로원자 함유 C_{1-30} 하이드로카르빌 기;

[0588] 여기서, R^{19}, R^{20}, R^{21}, R^{22}, R^{24}, R^{25}, R^{26}, 및 R^{27}은 각각 독립적으로 다음으로 이루어진 군 중에서 선택되고:

[0589] 할로겐;

[0590] 수소;

[0591] C_{1-30} 하이드로카르빌 기로서, 여기서 하이드로카르빌 기는 비치환되거나, 또는 할로겐 원자, C_{1-20} 알킬 기, C_{1-20} 알콕시 기, C_{7-20} 알킬아릴 기, C_{7-20} 아릴알킬 기, C_{6-20} 아릴 기, C_{6-20} 아릴옥시 기, C_{7-20} 알킬아릴옥시 기, 및 C_{7-20} 아릴알킬옥시 기로 이루어지는 군 중에서 선택되는 하나 이상의 치환체에 의해 추가로 치환되는, C_{1-30} 하이드로카르빌 기;

[0592] 헤테로원자 함유 C_{1-30} 하이드로카르빌 기로서, 여기서 헤테로원자 함유 하이드로카르빌 기는 비치환되거나, 또는 할로겐 원자, C_{1-20} 알킬 기, C_{1-20} 알콕시 기, C_{7-20} 알킬아릴 기, C_{7-20} 아릴알킬 기, C_{6-20} 아릴 기, C_{6-20} 아릴옥시 기, C_{7-20} 알킬아릴옥시 기, 및 C_{7-20} 아릴알킬옥시 기로 이루어지는 군 중에서 선택되는 하나 이상의 치환체에 의해 추가로 치환되는, 헤테로원자 함유 C_{1-30} 하이드로카르빌 기;

[0593] 옥시 기, $-OR'$;

[0594] 아미도 기, $-NR'_2$;

[0595] 포스피도 기, $-PR'_2$;

[0596] 티올레이트 기, $-SR'$;

[0597] 화학식 $-Si(R^a)_3$의 실릴 기; 및

[0598] 화학식 $-Ge(R^a)_3$의 게르마닐 기;

[0599] 여기서, R^{19}, R^{20}, R^{21}, R^{22}, R^{24}, R^{25}, R^{26}, 및 R^{27} 중 2개의 인접한 기는 선택적으로 결합되어 환형 하이드로카르빌 기 또는 환형 헤테로원자 함유 하이드로카르빌 기를 형성할 수 있고, 이 환형 하이드로카르빌 기 또는 환형 헤테로원자 함유 하이드로카르빌 기는 비치환되거나, 또는 할로겐 원자, C_{1-20} 알킬 기, C_{1-20} 알콕시 기, C_{7-20} 알

킬아릴 기, C_{7-20} 아릴알킬 기, C_{6-20} 아릴 기, C_{6-20} 아릴옥시 기, C_{7-20} 알킬아릴옥시 기, C_{7-20} 아릴알킬옥시 기, 화학식 $-NR'_2$의 아미도 기, 화학식 $-PR'_2$의 포스피도 기, 화학식 $-SR'$의 티올레이트 기, 화학식 $-Si(R^a)_3$의 실릴 기, 및 화학식 $-Ge(R^a)_3$의 게르마닐 기로 이루어지는 군 중에서 선택되는 하나 이상의 치환체에 의해 추가로 치환되고;

[0600] 여기서 각 R'는 수소, C_{1-20} 알킬 기, 및 C_{6-20} 아릴 기로 이루어지는 군 중에서 독립적으로 선택되고;

[0601] 여기서 각 R^a는 수소, C_{1-8} 알킬 기, C_{1-8} 알콕시 기, C_{6-20} 아릴옥시 기 및 C_{6-20} 아릴 기로 이루어지는 군 중에서 독립적으로 선택되고; 그리고 R^b, R^c, R^d는 각각 독립적으로 C_{1-20} 알킬 기이며;

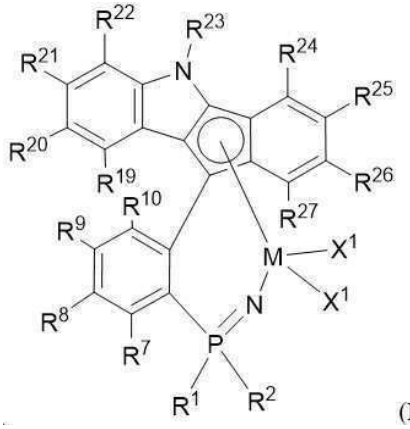
[0602] 각 X^1은 활성화 가능한 리간드이고; 그리고

[0603] L은 Cy와 P를 연결하는 원자의 근접한 사슬을 함유하는 가교 기로서, 여기서 근접한 사슬은 2개 또는 3개의 원자를 함유함; 및

[0604] ii) 촉매 활성화제.

[0605] 본 개시내용의 실시양태는 다음을 포함하는 올레핀 중합 촉매 시스템의 존재 하에 에틸렌을 선택적으로 하나 이상의 C_3-C_{12} 알파-올레핀과 함께 중합시키는 것을 포함하는 중합 공정이다:

[0606] i) 화학식 IX로 표현되는 유기금속 복합체:



[0607] (IX)

[0608] 여기서, M은 Ti, Zr 또는 Hf이고;

[0609] 여기서, R^1 및 R^2는 각각 독립적으로 수소 및 R^X로 이루어진 군 중에서 선택되거나; 또는 R^1 및 R^2는 이들이 부착된 P 원자와 함께, 비치환되거나, 또는 할로겐 원자, C_{1-20} 알킬 기, C_{1-20} 알콕시 기, C_{7-20} 알킬아릴 기, C_{7-20} 아릴알킬 기, C_{6-20} 아릴 기, C_{6-20} 아릴옥시 기, C_{7-20} 알킬아릴옥시 기, 및 C_{7-20} 아릴알킬옥시 기로 이루어진 군 중에서 선택되는 하나 이상의 치환체에 의해 추가로 치환되는 3-10원 헤테로환형 기를 형성하며;

[0610] 각 R^X는 할로겐 원자; 하이드로카르빌 기가 비치환되거나, 또는 하나 이상의 할로겐 원자, C_{1-20} 알킬 기, C_{1-20} 알콕시 기, C_{7-20} 알킬아릴 기, C_{7-20} 아릴알킬 기, C_{6-20} 아릴 기, C_{6-20} 아릴옥시 기, C_{7-20} 알킬아릴옥시 기, 및/또는 C_{7-20} 아릴알킬옥시 기에 의해 추가로 치환되는 C_{1-30} 하이드로카르빌 기; 화학식 $-NR'_2$의 아미도 기; 화학식 $-Si(R^a)_3$의 실릴 기; 화학식 $-Ge(R^a)_3$의 게르마닐 기; 및 화학식 $-N=P(R^b)(R^c)(R^d)$의 포스핀이민 기로 이루어진 군 중에서 독립적으로 선택되고;

[0611] 여기서, R^{23}은 다음으로 이루어진 군 중에서 선택되며:

[0612] 수소;

[0613] C_{1-30} 하이드로카르빌 기로서, 여기서 하이드로카르빌 기는 비치환되거나, 또는 할로겐 원자, C_{1-20} 알킬 기, C_{1-20} 알콕시 기, C_{7-20} 알킬아릴 기, C_{7-20} 아릴알킬 기, C_{6-20} 아릴 기, C_{6-20} 아릴옥시 기, C_{7-20} 알킬아릴옥시 기, 및 C_{7-20} 아릴알킬옥시 기로 이루어지는 군 중에서 선택되는 하나 이상의 치환체에 의해 추가로 치환되는 C_{1-30} 하이드로카르빌 기;

[0614] 헤테로원자 함유 C_{1-30} 하이드로카르빌 기로서, 여기서 헤테로원자 함유 하이드로카르빌 기는 비치환되거나, 또는 할로겐 원자, C_{1-20} 알킬 기, C_{1-20} 알콕시 기, C_{7-20} 알킬아릴 기, C_{7-20} 아릴알킬 기, C_{6-20} 아릴 기, C_{6-20} 아릴옥시 기, C_{7-20} 알킬아릴옥시 기, 및 C_{7-20} 아릴알킬옥시 기로 이루어지는 군 중에서 선택되는 하나 이상의 치환체에 의해 추가로 치환되는 헤테로원자 함유 C_{1-30} 하이드로카르빌 기;

[0615] 여기서, R^7, R^8, R^9, R^{10}, R^{19}, R^{20}, R^{21}, R^{22}, R^{24}, R^{25}, R^{26}, 및 R^{27}은 각각 독립적으로 다음으로 이루어진 군 중에서 선택되고:

[0616] 할로겐;

[0617] 수소;

[0618] C_{1-30} 하이드로카르빌 기로서, 여기서 하이드로카르빌 기는 비치환되거나, 또는 할로겐 원자, C_{1-20} 알킬 기, C_{1-20} 알콕시 기, C_{7-20} 알킬아릴 기, C_{7-20} 아릴알킬 기, C_{6-20} 아릴 기, C_{6-20} 아릴옥시 기, C_{7-20} 알킬아릴옥시 기, 및 C_{7-20} 아릴알킬옥시 기로 이루어지는 군 중에서 선택되는 하나 이상의 치환체에 의해 추가로 치환되는, C_{1-30} 하이드로카르빌 기;

[0619] 헤테로원자 함유 C_{1-30} 하이드로카르빌 기로서, 여기서 헤테로원자 함유 하이드로카르빌 기는 비치환되거나, 또는 할로겐 원자, C_{1-20} 알킬 기, C_{1-20} 알콕시 기, C_{7-20} 알킬아릴 기, C_{7-20} 아릴알킬 기, C_{6-20} 아릴 기, C_{6-20} 아릴옥시 기, C_{7-20} 알킬아릴옥시 기, 및 C_{7-20} 아릴알킬옥시 기로 이루어지는 군 중에서 선택되는 하나 이상의 치환체에 의해 추가로 치환되는, 헤테로원자 함유 C_{1-30} 하이드로카르빌 기;

[0620] 옥시 기, -OR';

[0621] 아미도 기, $-NR'_2$;

[0622] 포스피도 기, $-PR'_2$;

[0623] 티올레이트 기, -SR';

[0624] 화학식 $-Si(R^a)_3$의 실릴 기; 및

[0625] 화학식 $-Ge(R^a)_3$의 게르마닐 기;

[0626] 여기서, R^7, R^8, R^9, R^{10}, R^{19}, R^{20}, R^{21}, R^{22}, R^{24}, R^{25}, R^{26}, 및 R^{27} 중 2개의 인접한 기는 선택적으로 결합되어 환형 하이드로카르빌 기 또는 환형 헤테로원자 함유 하이드로카르빌 기를 형성할 수 있고, 이 환형 하이드로카르빌 기 또는 환형 헤테로원자 함유 하이드로카르빌 기는 비치환되거나, 또는 할로겐 원자, C_{1-20} 알킬 기, C_{1-20} 알콕시 기, C_{7-20} 알킬아릴 기, C_{7-20} 아릴알킬 기, C_{6-20} 아릴 기, C_{6-20} 아릴옥시 기, C_{7-20} 알킬아릴옥시 기, C_{7-20} 아릴알킬옥시 기, 화학식 $-NR'_2$의 아미도 기, 화학식 $-PR'_2$의 포스피도 기, 화학식 -SR'의 티올레이트 기, 화학식 $-Si(R^a)_3$의 실릴 기, 및 화학식 $-Ge(R^a)_3$의 게르마닐 기로 이루어지는 군 중에서 선택되는 하나 이상의 치환체에 의해 추가로 치환되고;

[0627] 여기서 각 R'는 수소, C_{1-20} 알킬 기, 및 C_{6-20} 아릴 기로 이루어지는 군 중에서 독립적으로 선택되고;

[0628] 여기서 각 R^a는 수소, C_{1-8} 알킬 기, C_{1-8} 알콕시 기, C_{6-20} 아릴옥시 기 및 C_{6-20} 아릴 기로 이루어지는 군 중에서

독립적으로 선택되고; 그리고 R^b, R^c, R^d는 각각 독립적으로 C_{1-20} 알킬 기이며; 그리고

[0629] 각 X^1은 활성화 가능한 리간드임; 및

[0630] ii) 촉매 활성화제.

[0631] 한 실시양태에서, 하나 이상의 C_3-C_{12} 알파-올레핀은 프로필렌, 1-부텐, 1-헥센 및 1-옥텐으로 이루어진 군 중에서 선택되는 하나 이상의 알파-올레핀을 포함한다.

[0632] 한 실시양태에서, 하나 이상의 C_3-C_{12} 알파-올레핀은 1-부텐, 1-헥센 및 1-옥텐으로 이루어진 군 중에서 선택되는 하나 이상의 알파-올레핀을 포함한다.

[0633] 한 실시양태에서, 중합 공정은 에틸렌을 1-옥텐과 중합시키는 것을 포함한다.

[0634] 한 실시양태에서, 중합 공정은 용매에서 수행되는 용액상 중합 공정이다.

[0635] 한 실시양태에서, 용액상 중합 공정은 적어도 140℃의 온도에서 수행된다.

[0636] 한 실시양태에서, 용액상 중합 공정은 적어도 160℃의 온도에서 수행된다.

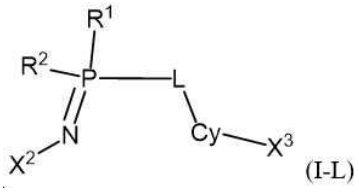
[0637] 한 실시양태에서, 중합 공정은 용매에서 수행되는 연속 용액상 중합 공정이다.

[0638] 한 실시양태에서, 연속 용액상 중합 공정은 적어도 하나의 연속 교반 탱크 반응기에서 수행된다.

[0639] 한 실시양태에서, 연속 용액상 중합 공정은 적어도 하나의 연속 교반 탱크 반응기에서 적어도 140℃의 온도에서 수행된다.

[0640] 한 실시양태에서, 연속 용액상 중합 공정은 적어도 하나의 연속 교반 탱크 반응기에서 적어도 160℃의 온도에서 수행된다.

[0641] 본 개시내용의 실시양태는 화학식 I-L로 표현되는 화합물이다:

[0642] 

(I-L)

[0643] 여기서,

[0644] R^1 및 R^2는 각각 독립적으로 수소 및 R^X로 이루어진 군 중에서 선택되거나; 또는 R^1 및 R^2는 이들이 부착된 P 원자와 함께, 비치환되거나, 또는 할로겐 원자, C_{1-20} 알킬 기, C_{1-20} 알콕시 기, C_{7-20} 알킬아릴 기, C_{7-20} 아릴알킬 기, C_{6-20} 아릴 기, C_{6-20} 아릴옥시 기, C_{7-20} 알킬아릴옥시 기, 및 C_{7-20} 아릴알킬옥시 기로 이루어진 군 중에서 선택되는 하나 이상의 치환체에 의해 추가로 치환되는 3-10원 헤테로환형 기를 형성하며;

[0645] 각 R^X는 할로겐 원자; 하이드로카르빌 기가 비치환되거나, 또는 하나 이상의 할로겐 원자, C_{1-20} 알킬 기, C_{1-20} 알콕시 기, C_{7-20} 알킬아릴 기, C_{7-20} 아릴알킬 기, C_{6-20} 아릴 기, C_{6-20} 아릴옥시 기, C_{7-20} 알킬아릴옥시 기, 및/또는 C_{7-20} 아릴알킬옥시 기에 의해 추가로 치환되는 C_{1-30} 하이드로카르빌 기; 화학식 $-NR'_2$의 아미도 기; 화학식 $-Si(R^a)_3$의 실릴 기; 화학식 $-Ge(R^a)_3$의 게르마닐 기; 및 화학식 $-N=P(R^b)(R^c)(R^d)$의 포스핀이민 기로 이루어진 군 중에서 독립적으로 선택되고; 여기서 각 R'는 수소, C_{1-20} 알킬 기, 및 C_{6-20} 아릴 기로 이루어지는 군 중에서 독립적으로 선택되고; 각 R^a는 수소, C_{1-8} 알킬 기, C_{1-8} 알콕시 기, C_{6-20} 아릴옥시 기 및 C_{6-20} 아릴 기로 이루어진 군 중에서 독립적으로 선택되고; R^b, R^c, R^d는 각각 독립적으로 C_{1-20} 알킬 기이며;

[0646] 각 X^1은 활성화 가능한 리간드이고;

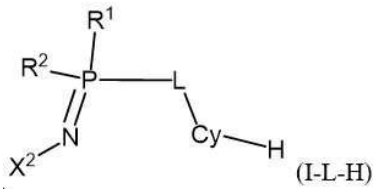
[0647] Cy는 사이클로펜타디에닐형 모이어티이고 L 및 X^3에 공유 결합되고,

[0648] X^2는 수소, 또는 화학식 $-Si(R^e)_3$의 실릴 기이고,

[0649] X^3은 수소, 또는 화학식 $-Si(R^e)_3$의 실릴 기, 또는 화학식 $Sn(R^e)_3$의 주석 기이며; 여기서, 각 R^e는 수소, C_{1-8} 알킬 기, C_{1-8} 알콕시 기, C_{6-20} 아릴옥시 기, 및 C_{6-20} 아릴 기로 이루어지는 군 중에서 독립적으로 선택되고; 그리고

[0650] L은 Cy와 P를 연결하는 원자의 근접한 사슬을 함유하는 가교 기로서, 여기서 근접한 사슬은 2개 또는 3개의 원자를 함유한다.

[0651] 본 개시내용의 실시양태는 화학식 I-L-H로 표현되는 화합물이다:

[0652] 

(I-L-H)

[0653] 여기서,

[0654] R^1 및 R^2는 각각 독립적으로 수소 및 R^X로 이루어진 군 중에서 선택되거나; 또는 R^1 및 R^2는 이들이 부착된 P 원자와 함께, 비치환되거나, 또는 할로겐 원자, C_{1-20} 알킬 기, C_{1-20} 알콕시 기, C_{7-20} 알킬아릴 기, C_{7-20} 아릴알킬 기, C_{6-20} 아릴 기, C_{6-20} 아릴옥시 기, C_{7-20} 알킬아릴옥시 기, 및 C_{7-20} 아릴알킬옥시 기로 이루어진 군 중에서 선택되는 하나 이상의 치환체에 의해 추가로 치환되는 3-10원 헤테로환형 기를 형성하며;

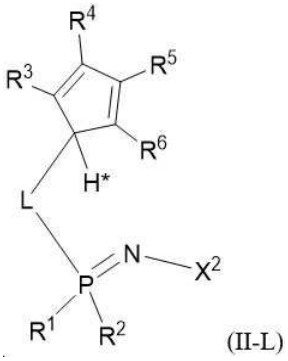
[0655] 각 R^X는 할로겐 원자; 하이드로카르빌 기가 비치환되거나, 또는 하나 이상의 할로겐 원자, C_{1-20} 알킬 기, C_{1-20} 알콕시 기, C_{7-20} 알킬아릴 기, C_{7-20} 아릴알킬 기, C_{6-20} 아릴 기, C_{6-20} 아릴옥시 기, C_{7-20} 알킬아릴옥시 기, 및/또는 C_{7-20} 아릴알킬옥시 기에 의해 추가로 치환되는 C_{1-30} 하이드로카르빌 기; 화학식 $-NR'_2$의 아미도 기; 화학식 $-Si(R^a)_3$의 실릴 기; 화학식 $-Ge(R^a)_3$의 게르마닐 기; 및 화학식 $-N=P(R^b)(R^c)(R^d)$의 포스핀이민 기로 이루어진 군 중에서 독립적으로 선택되고; 여기서 각 R'는 수소, C_{1-20} 알킬 기, 및 C_{6-20} 아릴 기로 이루어지는 군 중에서 독립적으로 선택되고; 각 R^a는 수소, C_{1-8} 알킬 기, C_{1-8} 알콕시 기, C_{6-20} 아릴옥시 기 및 C_{6-20} 아릴 기로 이루어진 군 중에서 독립적으로 선택되고; R^b, R^c, R^d는 각각 독립적으로 C_{1-20} 알킬 기이며;

[0656] X^2는 수소, 또는 화학식 $-Si(R^e)_3$의 실릴 기이고, 여기서 각 R^e는 수소, C_{1-8} 알킬 기, C_{1-8} 알콕시 기, C_{6-20} 아릴옥시 기 및 C_{6-20} 아릴 기로 이루어지는 군 중에서 독립적으로 선택되고;

[0657] Cy는 사이클로펜타디에닐형 모이어티이고 L 및 H에 공유 결합되고; 그리고

[0658] L은 Cy와 P를 연결하는 원자의 근접한 사슬을 함유하는 가교 기로서, 여기서 근접한 사슬은 2개 또는 3개의 원자를 함유한다.

[0659] 본 개시내용의 실시양태는 화학식 II-L로 표현되는 화합물, 또는 사이클로펜타디에닐 고리 내에서 수소 H^*의 이동에 의해 입수 가능한 화학식 II-L의 이중 결합 이성질체이다:

[0660] 

(II-L)

[0661] 여기서, R^1 및 R^2는 각각 독립적으로 수소 및 R^X로 이루어진 군 중에서 선택되거나; 또는 R^1 및 R^2는 이들이 부착된 P 원자와 함께, 비치환되거나, 또는 할로겐 원자, C_{1-20} 알킬 기, C_{1-20} 알콕시 기, C_{7-20} 알킬아릴 기, C_{7-20} 아릴알킬 기, C_{6-20} 아릴 기, C_{6-20} 아릴옥시 기, C_{7-20} 알킬아릴옥시 기, 및 C_{7-20} 아릴알킬옥시 기로 이루어진 군 중에서 선택되는 하나 이상의 치환체에 의해 추가로 치환되는 3-10원 헤테로환형 기를 형성하며;

[0662] 각 R^X는 할로겐 원자; 하이드로카르빌 기가 비치환되거나, 또는 하나 이상의 할로겐 원자, C_{1-20} 알킬 기, C_{1-20} 알콕시 기, C_{7-20} 알킬아릴 기, C_{7-20} 아릴알킬 기, C_{6-20} 아릴 기, C_{6-20} 아릴옥시 기, C_{7-20} 알킬아릴옥시 기, 및/또는 C_{7-20} 아릴알킬옥시 기에 의해 추가로 치환되는 C_{1-30} 하이드로카르빌 기; 화학식 $-NR'_2$의 아미도 기; 화학식 $-Si(R^a)_3$의 실릴 기; 화학식 $-Ge(R^a)_3$의 게르마닐 기; 및 화학식 $-N=P(R^b)(R^c)(R^d)$의 포스핀이민 기로 이루어진 군 중에서 독립적으로 선택되고;

[0663] 여기서, R^3, R^4, R^5 및 R^6은 각각 독립적으로 다음으로 이루어진 군 중에서 선택되고:

[0664] 할로겐;

[0665] 수소;

[0666] C_{1-30} 하이드로카르빌 기로서, 여기서 하이드로카르빌 기는 비치환되거나, 또는 할로겐 원자, C_{1-20} 알킬 기, C_{1-20} 알콕시 기, C_{7-20} 알킬아릴 기, C_{7-20} 아릴알킬 기, C_{6-20} 아릴 기, C_{6-20} 아릴옥시 기, C_{7-20} 알킬아릴옥시 기, 및 C_{7-20} 아릴알킬옥시 기로 이루어지는 군 중에서 선택되는 하나 이상의 치환체에 의해 추가로 치환되는 C_{1-30} 하이드로카르빌 기;

[0667] 헤테로원자 함유 C_{1-30} 하이드로카르빌 기로서, 여기서 헤테로원자 함유 하이드로카르빌 기는 비치환되거나, 또는 할로겐 원자, C_{1-20} 알킬 기, C_{1-20} 알콕시 기, C_{7-20} 알킬아릴 기, C_{7-20} 아릴알킬 기, C_{6-20} 아릴 기, C_{6-20} 아릴옥시 기, C_{7-20} 알킬아릴옥시 기, 및 C_{7-20} 아릴알킬옥시 기로 이루어지는 군 중에서 선택되는 하나 이상의 치환체에 의해 추가로 치환되는 헤테로원자 함유 C_{1-30} 하이드로카르빌 기;

[0668] 옥시 기, $-OR'$;

[0669] 아미도 기, $-NR'_2$;

[0670] 포스피도 기, $-PR'_2$;

[0671] 티올레이트 기, $-SR'$;

[0672] 화학식 $-Si(R^a)_3$의 실릴 기; 및

[0673] 화학식 $-Ge(R^a)_3$의 게르마닐 기;

[0674] 여기서, R^3, R^4, R^5 및 R^6 중 2개의 인접한 기는 선택적으로 결합되어 환형 하이드로카르빌 기 또는 환형 헤테로원자 함유 하이드로카르빌 기를 형성할 수 있고, 이 환형 하이드로카르빌 기 또는 환형 헤테로원자 함유 하이드

로카르빌 기는 비치환되거나, 또는 할로겐 원자, C_{1-20} 알킬 기, C_{1-20} 알콕시 기, C_{7-20} 알킬아릴 기, C_{7-20} 아릴알킬 기, C_{6-20} 아릴 기, C_{6-20} 아릴옥시 기, C_{7-20} 알킬아릴옥시 기, C_{7-20} 아릴알킬옥시 기, 화학식 $-NR'_2$의 아미도 기, 화학식 $-PR'_2$의 포스피도 기, 화학식 $-SR'$의 티올레이트 기, 화학식 $-Si(R^a)_3$의 실릴 기, 및 화학식 $-Ge(R^a)_3$의 게르마닐 기로 이루어지는 군 중에서 선택되는 하나 이상의 치환체에 의해 추가로 치환되고;

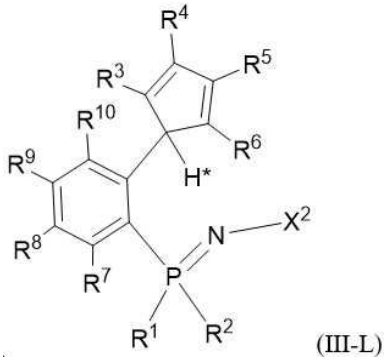
[0675] 여기서 각 R'는 수소, C_{1-20} 알킬 기, 및 C_{6-20} 아릴 기로 이루어지는 군 중에서 독립적으로 선택되고;

[0676] 여기서 각 R^a는 수소, C_{1-8} 알킬 기, C_{1-8} 알콕시 기, C_{6-20} 아릴옥시 기 및 C_{6-20} 아릴 기로 이루어지는 군 중에서 독립적으로 선택되고; 그리고 R^b, R^c, R^d는 각각 독립적으로 C_{1-20} 알킬 기이며;

[0677] X^2는 수소, 또는 화학식 $-Si(R^e)_3$의 실릴 기이고, 여기서 각 R^e는 수소, C_{1-8} 알킬 기, C_{1-8} 알콕시 기, C_{6-20} 아릴옥시 기 및 C_{6-20} 아릴 기로 이루어지는 군 중에서 독립적으로 선택되고; 그리고

[0678] L은 Cy와 P를 연결하는 원자의 근접한 사슬을 함유하는 가교 기로서, 여기서 근접한 사슬은 2개 또는 3개의 원자를 함유한다.

[0679] 본 개시내용의 실시양태는 화학식 III-L로 표현되는 화합물, 또는 사이클로펜타디에닐 고리 내에서 수소 H^*의 이동에 의해 입수 가능한 화학식 III-L의 이중 결합 이성질체이다:

[0680] 

(III-L)

[0681] 여기서, R^1 및 R^2는 각각 독립적으로 수소 및 R^X로 이루어진 군 중에서 선택되거나; 또는 R^1 및 R^2는 이들이 부착된 P 원자와 함께, 비치환되거나, 또는 할로겐 원자, C_{1-20} 알킬 기, C_{1-20} 알콕시 기, C_{7-20} 알킬아릴 기, C_{7-20} 아릴알킬 기, C_{6-20} 아릴 기, C_{6-20} 아릴옥시 기, C_{7-20} 알킬아릴옥시 기, 및 C_{7-20} 아릴알킬옥시 기로 이루어진 군 중에서 선택되는 하나 이상의 치환체에 의해 추가로 치환되는 3-10원 헤테로환형 기를 형성하며;

[0682] 각 R^X는 할로겐 원자; 하이드로카르빌 기가 비치환되거나, 또는 하나 이상의 할로겐 원자, C_{1-20} 알킬 기, C_{1-20} 알콕시 기, C_{7-20} 알킬아릴 기, C_{7-20} 아릴알킬 기, C_{6-20} 아릴 기, C_{6-20} 아릴옥시 기, C_{7-20} 알킬아릴옥시 기, 및/또는 C_{7-20} 아릴알킬옥시 기에 의해 추가로 치환되는 C_{1-30} 하이드로카르빌 기; 화학식 $-NR'_2$의 아미도 기; 화학식 $-Si(R^a)_3$의 실릴 기; 화학식 $-Ge(R^a)_3$의 게르마닐 기; 및 화학식 $-N=P(R^b)(R^c)(R^d)$의 포스핀이민 기로 이루어진 군 중에서 독립적으로 선택되고;

[0683] 여기서, R^3, R^4, R^5, R^6, R^7, R^8, R^9, 및 R^{10}은 각각 독립적으로 다음으로 이루어진 군 중에서 선택되고:

[0684] 할로겐;

[0685] 수소;

[0686] C_{1-30} 하이드로카르빌 기로서, 여기서 하이드로카르빌 기는 비치환되거나, 또는 할로겐 원자, C_{1-20} 알킬 기, C_{1-20} 알콕시 기, C_{7-20} 알킬아릴 기, C_{7-20} 아릴알킬 기, C_{6-20} 아릴 기, C_{6-20} 아릴옥시 기, C_{7-20} 알킬아릴옥시 기, 및 C_{7-}

$_{20}$ 아릴알킬옥시 기로 이루어지는 군 중에서 선택되는 하나 이상의 치환체에 의해 추가로 치환되는 C_{1-30} 하이드로카르빌 기;

[0687] 헤테로원자 함유 C_{1-30} 하이드로카르빌 기로서, 여기서 헤테로원자 함유 하이드로카르빌 기는 비치환되거나, 또는 할로겐 원자, C_{1-20} 알킬 기, C_{1-20} 알콕시 기, C_{7-20} 알킬아릴 기, C_{7-20} 아릴알킬 기, C_{6-20} 아릴 기, C_{6-20} 아릴옥시 기, C_{7-20} 알킬아릴옥시 기, 및 C_{7-20} 아릴알킬옥시 기로 이루어지는 군 중에서 선택되는 하나 이상의 치환체에 의해 추가로 치환되는 헤테로원자 함유 C_{1-30} 하이드로카르빌 기;

[0688] 옥시 기, -OR';

[0689] 아미도 기, $-NR'_2$;

[0690] 포스피도 기, $-PR'_2$;

[0691] 티올레이트 기, -SR';

[0692] 화학식 $-Si(R^a)_3$의 실릴 기; 및

[0693] 화학식 $-Ge(R^a)_3$의 게르마닐 기;

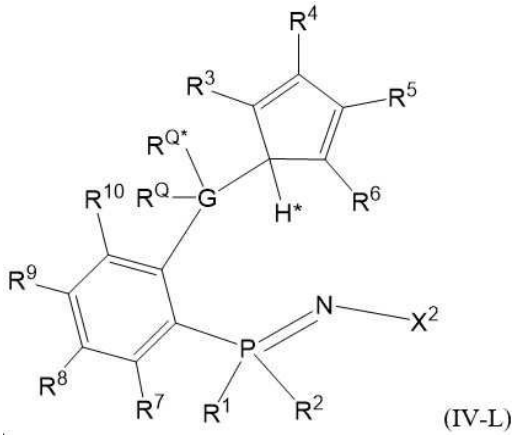
[0694] 여기서, R^3, R^4, R^5, R^6, R^7, R^8, R^9, 및 R^{10} 중 2개의 인접한 기는 선택적으로 결합되어 환형 하이드로카르빌 기 또는 환형 헤테로원자 함유 하이드로카르빌 기를 형성할 수 있고, 이 환형 하이드로카르빌 기 또는 환형 헤테로원자 함유 하이드로카르빌 기는 비치환되거나, 또는 할로겐 원자, C_{1-20} 알킬 기, C_{1-20} 알콕시 기, C_{7-20} 알킬아릴 기, C_{7-20} 아릴알킬 기, C_{6-20} 아릴 기, C_{6-20} 아릴옥시 기, C_{7-20} 알킬아릴옥시 기, C_{7-20} 아릴알킬옥시 기, 화학식 $-NR'_2$의 아미도 기, 화학식 $-PR'_2$의 포스피도 기, 화학식 -SR'의 티올레이트 기, 화학식 $-Si(R^a)_3$의 실릴 기, 및 화학식 $-Ge(R^a)_3$의 게르마닐 기로 이루어지는 군 중에서 선택되는 하나 이상의 치환체에 의해 추가로 치환되고;

[0695] 여기서 각 R'는 수소, C_{1-20} 알킬 기, 및 C_{6-20} 아릴 기로 이루어지는 군 중에서 독립적으로 선택되고;

[0696] 여기서 각 R^a는 수소, C_{1-8} 알킬 기, C_{1-8} 알콕시 기, C_{6-20} 아릴옥시 기 및 C_{6-20} 아릴 기로 이루어지는 군 중에서 독립적으로 선택되고; 그리고 R^b, R^c, R^d는 각각 독립적으로 C_{1-20} 알킬 기이며; 그리고

[0697] X^2는 수소, 또는 화학식 $-Si(R^e)_3$의 실릴 기이고, 여기서 각 R^e는 수소, C_{1-8} 알킬 기, C_{1-8} 알콕시 기, C_{6-20} 아릴옥시 기 및 C_{6-20} 아릴 기로 이루어지는 군 중에서 독립적으로 선택된다.

[0698] 본 개시내용의 실시양태는 화학식 IV-L로 표현되는 화합물이다:

[0699] 

(IV-L)

[0700] 여기서, R^1 및 R^2는 각각 독립적으로 수소 및 R^X로 이루어진 군 중에서 선택되거나; 또는 R^1 및 R^2는 이들이 부착

된 P 원자와 함께, 비치환되거나, 또는 할로겐 원자, C_{1-20} 알킬 기, C_{1-20} 알콕시 기, C_{7-20} 알킬아릴 기, C_{7-20} 아릴알킬 기, C_{6-20} 아릴 기, C_{6-20} 아릴옥시 기, C_{7-20} 알킬아릴옥시 기, 및 C_{7-20} 아릴알킬옥시 기로 이루어진 군 중에서 선택되는 하나 이상의 치환체에 의해 추가로 치환되는 3-10원 헤테로환형 기를 형성하며;

[0701] 각 R^X는 할로겐 원자; 하이드로카르빌 기가 비치환되거나, 또는 하나 이상의 할로겐 원자, C_{1-20} 알킬 기, C_{1-20} 알콕시 기, C_{7-20} 알킬아릴 기, C_{7-20} 아릴알킬 기, C_{6-20} 아릴 기, C_{6-20} 아릴옥시 기, C_{7-20} 알킬아릴옥시 기, 및/또는 C_{7-20} 아릴알킬옥시 기에 의해 추가로 치환되는 C_{1-30} 하이드로카르빌 기; 화학식 $-NR'_2$의 아미도 기; 화학식 $-Si(R^a)_3$의 실릴 기; 화학식 $-Ge(R^a)_3$의 게르마닐 기; 및 화학식 $-N=P(R^b)(R^c)(R^d)$의 포스핀이민 기로 이루어진 군 중에서 독립적으로 선택되고;

[0702] 여기서, G는 C 또는 Si이고;

[0703] 여기서, R^Q 및 R^{Q*}는 각각 독립적으로 다음으로 이루어진 군 중에서 선택되며:

[0704] 할로겐;

[0705] 수소;

[0706] C_{1-30} 하이드로카르빌 기로서, 여기서 하이드로카르빌 기는 비치환되거나, 또는 할로겐 원자, C_{1-20} 알킬 기, C_{1-20} 알콕시 기, C_{7-20} 알킬아릴 기, C_{7-20} 아릴알킬 기, C_{6-20} 아릴 기, C_{6-20} 아릴옥시 기, C_{7-20} 알킬아릴옥시 기, 및 C_{7-20} 아릴알킬옥시 기로 이루어지는 군 중에서 선택되는 하나 이상의 치환체에 의해 추가로 치환되는 C_{1-30} 하이드로카르빌 기;

[0707] 헤테로원자 함유 C_{1-30} 하이드로카르빌 기로서, 여기서 헤테로원자 함유 하이드로카르빌 기는 비치환되거나, 또는 할로겐 원자, C_{1-20} 알킬 기, C_{1-20} 알콕시 기, C_{7-20} 알킬아릴 기, C_{7-20} 아릴알킬 기, C_{6-20} 아릴 기, C_{6-20} 아릴옥시 기, C_{7-20} 알킬아릴옥시 기, 및 C_{7-20} 아릴알킬옥시 기로 이루어지는 군 중에서 선택되는 하나 이상의 치환체에 의해 추가로 치환되는 헤테로원자 함유 C_{1-30} 하이드로카르빌 기;

[0708] 여기서, R^Q 및 R^{Q*} 기는 선택적으로 결합되어 환형 하이드로카르빌 기 또는 환형 헤테로원자 함유 하이드로카르빌 기를 형성할 수 있고, 이 환형 하이드로카르빌 기 또는 환형 헤테로원자 함유 하이드로카르빌 기는 비치환되거나, 또는 할로겐 원자, C_{1-20} 알킬 기, C_{1-20} 알콕시 기, C_{7-20} 알킬아릴 기, C_{7-20} 아릴알킬 기, C_{6-20} 아릴 기, C_{6-20} 아릴옥시 기, C_{7-20} 알킬아릴옥시 기, C_{7-20} 아릴알킬옥시 기, 화학식 $-NR'_2$의 아미도 기; 화학식 $-PR'_2$의 포스피도 기, 화학식 $-SR'$의 티올레이트 기, 화학식 $-Si(R^a)_3$의 실릴 기, 및 화학식 $-Ge(R^a)_3$의 게르마닐 기로 이루어지는 군 중에서 선택되는 하나 이상의 치환체에 의해 추가로 치환되며;

[0709] 여기서, R^3, R^4, R^5, R^6, R^7, R^8, R^9, 및 R^{10}은 각각 독립적으로 다음으로 이루어진 군 중에서 선택되고:

[0710] 할로겐;

[0711] 수소;

[0712] C_{1-30} 하이드로카르빌 기로서, 여기서 하이드로카르빌 기는 비치환되거나, 또는 할로겐 원자, C_{1-20} 알킬 기, C_{1-20} 알콕시 기, C_{7-20} 알킬아릴 기, C_{7-20} 아릴알킬 기, C_{6-20} 아릴 기, C_{6-20} 아릴옥시 기, C_{7-20} 알킬아릴옥시 기, 및 C_{7-20} 아릴알킬옥시 기로 이루어지는 군 중에서 선택되는 하나 이상의 치환체에 의해 추가로 치환되는, C_{1-30} 하이드로카르빌 기;

[0713] 헤테로원자 함유 C_{1-30} 하이드로카르빌 기로서, 여기서 헤테로원자 함유 하이드로카르빌 기는 비치환되거나, 또는 할로겐 원자, C_{1-20} 알킬 기, C_{1-20} 알콕시 기, C_{7-20} 알킬아릴 기, C_{7-20} 아릴알킬 기, C_{6-20} 아릴 기, C_{6-20} 아릴옥시 기, C_{7-20} 알킬아릴옥시 기, 및 C_{7-20} 아릴알킬옥시 기로 이루어지는 군 중에서 선택되는 하나 이상의 치환체에 의해 추가로 치환되는, 헤테로원자 함유 C_{1-30} 하이드로카르빌 기;

[0714] 옥시 기, -OR';

[0715] 아미도 기, $-NR'_2$;

[0716] 포스피도 기, $-PR'_2$;

[0717] 티올레이트 기, -SR';

[0718] 화학식 $-Si(R^a)_3$의 실릴 기; 및

[0719] 화학식 $-Ge(R^a)_3$의 게르마닐 기;

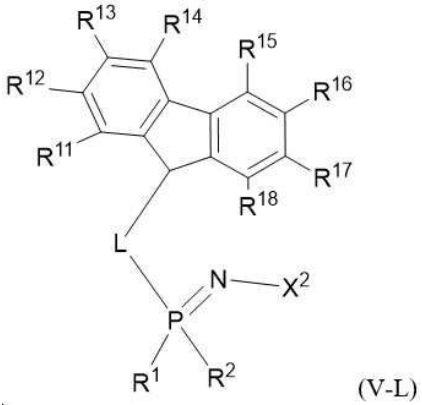
[0720] 여기서, R^3, R^4, R^5, R^6, R^7, R^8, R^9, 및 R^{10} 중 2개의 인접한 기는 선택적으로 결합되어 환형 하이드로카르빌 기 또는 환형 헤테로원자 함유 하이드로카르빌 기를 형성할 수 있고, 이 환형 하이드로카르빌 기 또는 환형 헤테로원자 함유 하이드로카르빌 기는 비치환되거나, 또는 할로겐 원자, C_{1-20} 알킬 기, C_{1-20} 알콕시 기, C_{7-20} 알킬아릴 기, C_{7-20} 아릴알킬 기, C_{6-20} 아릴 기, C_{6-20} 아릴옥시 기, C_{7-20} 알킬아릴옥시 기, C_{7-20} 아릴알킬옥시 기, 화학식 $-NR'_2$의 아미도 기, 화학식 $-PR'_2$의 포스피도 기, 화학식 -SR'의 티올레이트 기, 화학식 $-Si(R^a)_3$의 실릴 기, 및 화학식 $-Ge(R^a)_3$의 게르마닐 기로 이루어지는 군 중에서 선택되는 하나 이상의 치환체에 의해 추가로 치환되고;

[0721] 여기서 각 R'는 수소, C_{1-20} 알킬 기, 및 C_{6-20} 아릴 기로 이루어지는 군 중에서 독립적으로 선택되고; 그리고

[0722] 여기서 각 R^a는 수소, C_{1-8} 알킬 기, C_{1-8} 알콕시 기, C_{6-20} 아릴옥시 기 및 C_{6-20} 아릴 기로 이루어지는 군 중에서 독립적으로 선택되고; 그리고 R^b, R^c, R^d는 각각 독립적으로 C_{1-20} 알킬 기이며; 그리고

[0723] X^2는 수소, 또는 화학식 $-Si(R^e)_3$의 실릴 기이고, 여기서 각 R^e는 수소, C_{1-8} 알킬 기, C_{1-8} 알콕시 기, C_{6-20} 아릴옥시 기 및 C_{6-20} 아릴 기로 이루어지는 군 중에서 독립적으로 선택된다.

[0724] 본 개시내용의 실시양태는 화학식 V-L로 표현되는 화합물이다:

[0725] 

(V-L)

[0726] 여기서, R^1 및 R^2는 각각 독립적으로 수소 및 R^X로 이루어진 군 중에서 선택되거나; 또는 R^1 및 R^2는 이들이 부착된 P 원자와 함께, 비치환되거나, 또는 할로겐 원자, C_{1-20} 알킬 기, C_{1-20} 알콕시 기, C_{7-20} 알킬아릴 기, C_{7-20} 아릴알킬 기, C_{6-20} 아릴 기, C_{6-20} 아릴옥시 기, C_{7-20} 알킬아릴옥시 기, 및 C_{7-20} 아릴알킬옥시 기로 이루어진 군 중에서 선택되는 하나 이상의 치환체에 의해 추가로 치환되는 3-10원 헤테로환형 기를 형성하며;

[0727] 각 R^X는 할로겐 원자; 하이드로카르빌 기가 비치환되거나, 또는 하나 이상의 할로겐 원자, C_{1-20} 알킬 기, C_{1-20} 알콕시 기, C_{7-20} 알킬아릴 기, C_{7-20} 아릴알킬 기, C_{6-20} 아릴 기, C_{6-20} 아릴옥시 기, C_{7-20} 알킬아릴옥시 기, 및/또는 C_{7-20} 아릴알킬옥시 기에 의해 추가로 치환되는 C_{1-30} 하이드로카르빌 기; 화학식 $-NR'_2$의 아미도 기; 화학식

$-Si(R^a)_3$의 실릴 기; 화학식 $-Ge(R^a)_3$의 게르마닐 기; 및 화학식 $-N=P(R^b)(R^c)(R^d)$의 포스핀이민 기로 이루어진 군 중에서 독립적으로 선택되고;

[0728] 여기서, R^{11}, R^{12}, R^{13}, R^{14}, R^{15}, R^{16}, R^{17}, R^{18}은 각각 독립적으로 다음으로 이루어진 군 중에서 선택되고:

[0729] 할로겐;

[0730] 수소;

[0731] C_{1-30} 하이드로카르빌 기로서, 여기서 하이드로카르빌 기는 비치환되거나, 또는 할로겐 원자, C_{1-20} 알킬 기, C_{1-20} 알콕시 기, C_{7-20} 알킬아릴 기, C_{7-20} 아릴알킬 기, C_{6-20} 아릴 기, C_{6-20} 아릴옥시 기, C_{7-20} 알킬아릴옥시 기, 및 C_{7-20} 아릴알킬옥시 기로 이루어지는 군 중에서 선택되는 하나 이상의 치환체에 의해 추가로 치환되는, C_{1-30} 하이드로카르빌 기;

[0732] 헤테로원자 함유 C_{1-30} 하이드로카르빌 기로서, 여기서 헤테로원자 함유 하이드로카르빌 기는 비치환되거나, 또는 할로겐 원자, C_{1-20} 알킬 기, C_{1-20} 알콕시 기, C_{7-20} 알킬아릴 기, C_{7-20} 아릴알킬 기, C_{6-20} 아릴 기, C_{6-20} 아릴옥시 기, C_{7-20} 알킬아릴옥시 기, 및 C_{7-20} 아릴알킬옥시 기로 이루어지는 군 중에서 선택되는 하나 이상의 치환체에 의해 추가로 치환되는, 헤테로원자 함유 C_{1-30} 하이드로카르빌 기;

[0733] 옥시 기, -OR';

[0734] 아미도 기, $-NR'_2$;

[0735] 포스피도 기, $-PR'_2$;

[0736] 티올레이트 기, -SR';

[0737] 화학식 $-Si(R^a)_3$의 실릴 기; 및

[0738] 화학식 $-Ge(R^a)_3$의 게르마닐 기;

[0739] 여기서, R^{11}, R^{12}, R^{13}, R^{14}, R^{15}, R^{16}, R^{17}, R^{18} 중 2개의 인접한 기는 선택적으로 결합되어 환형 하이드로카르빌 기 또는 환형 헤테로원자 함유 하이드로카르빌 기를 형성할 수 있고, 이 환형 하이드로카르빌 기 또는 환형 헤테로원자 함유 하이드로카르빌 기는 비치환되거나, 또는 할로겐 원자, C_{1-20} 알킬 기, C_{1-20} 알콕시 기, C_{7-20} 알킬아릴 기, C_{7-20} 아릴알킬 기, C_{6-20} 아릴 기, C_{6-20} 아릴옥시 기, C_{7-20} 알킬아릴옥시 기, C_{7-20} 아릴알킬옥시 기, 화학식 $-NR'_2$의 아미도 기, 화학식 $-PR'_2$의 포스피도 기, 화학식 -SR'의 티올레이트 기, 화학식 $-Si(R^a)_3$의 실릴 기, 및 화학식 $-Ge(R^a)_3$의 게르마닐 기로 이루어지는 군 중에서 선택되는 하나 이상의 치환체에 의해 추가로 치환되고;

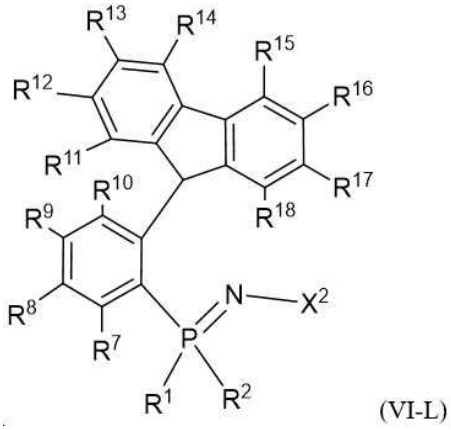
[0740] 여기서 각 R'는 수소, C_{1-20} 알킬 기, 및 C_{6-20} 아릴 기로 이루어지는 군 중에서 독립적으로 선택되고;

[0741] 여기서 각 R^a는 수소, C_{1-8} 알킬 기, C_{1-8} 알콕시 기, C_{6-20} 아릴옥시 기 및 C_{6-20} 아릴 기로 이루어지는 군 중에서 독립적으로 선택되고; 그리고 R^b, R^c, R^d는 각각 독립적으로 C_{1-20} 알킬 기이며; 그리고

[0742] X^2는 수소, 또는 화학식 $-Si(R^e)_3$의 실릴 기이고, 여기서 각 R^e는 수소, C_{1-8} 알킬 기, C_{1-8} 알콕시 기, C_{6-20} 아릴옥시 기 및 C_{6-20} 아릴 기로 이루어지는 군 중에서 독립적으로 선택되고; 그리고

[0743] L은 Cy와 P를 연결하는 원자의 근접한 사슬을 함유하는 가교 기로서, 여기서 근접한 사슬은 2개 또는 3개의 원자를 함유한다.

[0744] 본 개시내용의 실시양태는 화학식 VI-L로 표현되는 화합물이다:

[0745] 

(VI-L)

[0746] 여기서, R^1 및 R^2는 각각 독립적으로 수소 및 R^X로 이루어진 군 중에서 선택되거나; 또는 R^1 및 R^2는 이들이 부착된 P 원자와 함께, 비치환되거나, 또는 할로겐 원자, C_{1-20} 알킬 기, C_{1-20} 알콕시 기, C_{7-20} 알킬아릴 기, C_{7-20} 아릴알킬 기, C_{6-20} 아릴 기, C_{6-20} 아릴옥시 기, C_{7-20} 알킬아릴옥시 기, 및 C_{7-20} 아릴알킬옥시 기로 이루어진 군 중에서 선택되는 하나 이상의 치환체에 의해 추가로 치환되는 3-10원 헤테로환형 기를 형성하며;

[0747] 각 R^X는 할로겐 원자; 하이드로카르빌 기가 비치환되거나, 또는 하나 이상의 할로겐 원자, C_{1-20} 알킬 기, C_{1-20} 알콕시 기, C_{7-20} 알킬아릴 기, C_{7-20} 아릴알킬 기, C_{6-20} 아릴 기, C_{6-20} 아릴옥시 기, C_{7-20} 알킬아릴옥시 기, 및/또는 C_{7-20} 아릴알킬옥시 기에 의해 추가로 치환되는 C_{1-30} 하이드로카르빌 기; 화학식 $-NR'_2$의 아미도 기; 화학식 $-Si(R^a)_3$의 실릴 기; 화학식 $-Ge(R^a)_3$의 게르마닐 기; 및 화학식 $-N=P(R^b)(R^c)(R^d)$의 포스핀이민 기로 이루어진 군 중에서 독립적으로 선택되고;

[0748] 여기서, R^7, R^8, R^9, R^{10}, R^{11}, R^{12}, R^{13}, R^{14}, R^{15}, R^{16}, R^{17} 및 R^{18}은 각각 독립적으로 다음으로 이루어진 군 중에서 선택되고:

[0749] 할로겐;

[0750] 수소;

[0751] C_{1-30} 하이드로카르빌 기로서, 여기서 하이드로카르빌 기는 비치환되거나, 또는 할로겐 원자, C_{1-20} 알킬 기, C_{1-20} 알콕시 기, C_{7-20} 알킬아릴 기, C_{7-20} 아릴알킬 기, C_{6-20} 아릴 기, C_{6-20} 아릴옥시 기, C_{7-20} 알킬아릴옥시 기, 및 C_{7-20} 아릴알킬옥시 기로 이루어지는 군 중에서 선택되는 하나 이상의 치환체에 의해 추가로 치환되는, C_{1-30} 하이드로카르빌 기;

[0752] 헤테로원자 함유 C_{1-30} 하이드로카르빌 기로서, 여기서 헤테로원자 함유 하이드로카르빌 기는 비치환되거나, 또는 할로겐 원자, C_{1-20} 알킬 기, C_{1-20} 알콕시 기, C_{7-20} 알킬아릴 기, C_{7-20} 아릴알킬 기, C_{6-20} 아릴 기, C_{6-20} 아릴옥시 기, C_{7-20} 알킬아릴옥시 기, 및 C_{7-20} 아릴알킬옥시 기로 이루어지는 군 중에서 선택되는 하나 이상의 치환체에 의해 추가로 치환되는, 헤테로원자 함유 C_{1-30} 하이드로카르빌 기;

[0753] 옥시 기, $-OR'$;

[0754] 아미도 기, $-NR'_2$;

[0755] 포스피도 기, $-PR'_2$;

[0756] 티올레이트 기, $-SR'$;

[0757] 화학식 $-Si(R^a)_3$의 실릴 기; 및

[0758] 화학식 $-Ge(R^a)_3$의 게르마닐 기;

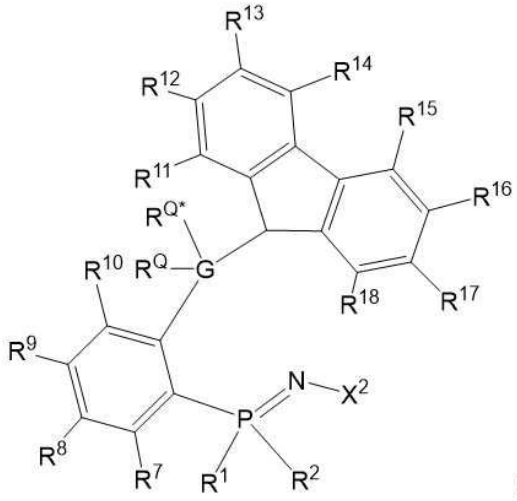
[0759] 여기서, R^7, R^8, R^9, R^{10}, R^{11}, R^{12}, R^{13}, R^{14}, R^{15}, R^{16}, R^{17} 및 R^{18} 중 2개의 인접한 기는 선택적으로 결합되어 환형 하이드로카르빌 기 또는 환형 헤테로원자 함유 하이드로카르빌 기를 형성할 수 있고, 이 환형 하이드로카르빌 기 또는 환형 헤테로원자 함유 하이드로카르빌 기는 비치환되거나, 또는 할로겐 원자, C_{1-20} 알킬 기, C_{1-20} 알콕시 기, C_{7-20} 알킬아릴 기, C_{7-20} 아릴알킬 기, C_{6-20} 아릴 기, C_{6-20} 아릴옥시 기, C_{7-20} 알킬아릴옥시 기, C_{7-20} 아릴알킬옥시 기, 화학식 $-NR'_2$의 아미도 기, 화학식 $-PR'_2$의 포스피도 기, 화학식 $-SR'$의 티올레이트 기, 화학식 $-Si(R^a)_3$의 실릴 기, 및 화학식 $-Ge(R^a)_3$의 게르마닐 기로 이루어지는 군 중에서 선택되는 하나 이상의 치환체에 의해 추가로 치환되고;

[0760] 여기서 각 R'는 수소, C_{1-20} 알킬 기, 및 C_{6-20} 아릴 기로 이루어지는 군 중에서 독립적으로 선택되고;

[0761] 여기서 각 R^a는 수소, C_{1-8} 알킬 기, C_{1-8} 알콕시 기, C_{6-20} 아릴옥시 기 및 C_{6-20} 아릴 기로 이루어지는 군 중에서 독립적으로 선택되고; 그리고 R^b, R^c, R^d는 각각 독립적으로 C_{1-20} 알킬 기이며; 그리고

[0762] X^2는 수소, 또는 화학식 $-Si(R^e)_3$의 실릴 기이고, 여기서 각 R^e는 수소, C_{1-8} 알킬 기, C_{1-8} 알콕시 기, C_{6-20} 아릴옥시 기 및 C_{6-20} 아릴 기로 이루어지는 군 중에서 독립적으로 선택된다.

[0763] 본 개시내용의 실시양태는 화학식 VII-L로 표현되는 화합물이다:

[0764] 

(VII-L)

[0765] 여기서, R^1 및 R^2는 각각 독립적으로 수소 및 R^X로 이루어진 군 중에서 선택되거나; 또는 R^1 및 R^2는 이들이 부착된 P 원자와 함께, 비치환되거나, 또는 할로겐 원자, C_{1-20} 알킬 기, C_{1-20} 알콕시 기, C_{7-20} 알킬아릴 기, C_{7-20} 아릴알킬 기, C_{6-20} 아릴 기, C_{6-20} 아릴옥시 기, C_{7-20} 알킬아릴옥시 기, 및 C_{7-20} 아릴알킬옥시 기로 이루어진 군 중에서 선택되는 하나 이상의 치환체에 의해 추가로 치환되는 3-10원 헤테로환형 기를 형성하며;

[0766] 각 R^X는 할로겐 원자; 하이드로카르빌 기가 비치환되거나, 또는 하나 이상의 할로겐 원자, C_{1-20} 알킬 기, C_{1-20} 알콕시 기, C_{7-20} 알킬아릴 기, C_{7-20} 아릴알킬 기, C_{6-20} 아릴 기, C_{6-20} 아릴옥시 기, C_{7-20} 알킬아릴옥시 기, 및/또는 C_{7-20} 아릴알킬옥시 기에 의해 추가로 치환되는 C_{1-30} 하이드로카르빌 기; 화학식 $-NR'_2$의 아미도 기; 화학식 $-Si(R^a)_3$의 실릴 기; 화학식 $-Ge(R^a)_3$의 게르마닐 기; 및 화학식 $-N=P(R^b)(R^c)(R^d)$의 포스핀이민 기로 이루어진 군 중에서 독립적으로 선택되고;

[0767] 여기서, G는 C 또는 Si이고;

[0768] 여기서, R^{Q} 및 R^{Q*}는 각각 독립적으로 다음으로 이루어진 군 중에서 선택되며:

[0769] 할로겐;

[0770] 수소;

[0771] C_{1-30} 하이드로카르빌 기로서, 여기서 하이드로카르빌 기는 비치환되거나, 또는 할로겐 원자, C_{1-20} 알킬 기, C_{1-20} 알콕시 기, C_{7-20} 알킬아릴 기, C_{7-20} 아릴알킬 기, C_{6-20} 아릴 기, C_{6-20} 아릴옥시 기, C_{7-20} 알킬아릴옥시 기, 및 C_{7-20} 아릴알킬옥시 기로 이루어지는 군 중에서 선택되는 하나 이상의 치환체에 의해 추가로 치환되는 C_{1-30} 하이드로카르빌 기;

[0772] 헤테로원자 함유 C_{1-30} 하이드로카르빌 기로서, 여기서 헤테로원자 함유 하이드로카르빌 기는 비치환되거나, 또는 할로겐 원자, C_{1-20} 알킬 기, C_{1-20} 알콕시 기, C_{7-20} 알킬아릴 기, C_{7-20} 아릴알킬 기, C_{6-20} 아릴 기, C_{6-20} 아릴옥시 기, C_{7-20} 알킬아릴옥시 기, 및 C_{7-20} 아릴알킬옥시 기로 이루어지는 군 중에서 선택되는 하나 이상의 치환체에 의해 추가로 치환되는 헤테로원자 함유 C_{1-30} 하이드로카르빌 기;

[0773] 여기서, R^{Q} 및 R^{Q*} 기는 선택적으로 결합되어 환형 하이드로카르빌 기 또는 환형 헤테로원자 함유 하이드로카르빌 기를 형성할 수 있고, 이 환형 하이드로카르빌 기 또는 환형 헤테로원자 함유 하이드로카르빌 기는 비치환되거나, 또는 할로겐 원자, C_{1-20} 알킬 기, C_{1-20} 알콕시 기, C_{7-20} 알킬아릴 기, C_{7-20} 아릴알킬 기, C_{6-20} 아릴 기, C_{6-20} 아릴옥시 기, C_{7-20} 알킬아릴옥시 기, C_{7-20} 아릴알킬옥시 기, 화학식 $-NR'_2$의 아미도 기; 화학식 $-PR'_2$의 포스피도 기, 화학식 -SR'의 티올레이트 기, 화학식 $-Si(R^{a})_3$의 실릴 기, 및 화학식 $-Ge(R^{a})_3$의 게르마닐 기로 이루어지는 군 중에서 선택되는 하나 이상의 치환체에 의해 추가로 치환되며;

[0774] 여기서, R^{7}, R^{8}, R^{9}, R^{10}, R^{11}, R^{12}, R^{13}, R^{14}, R^{15}, R^{16}, R^{17} 및 R^{18}은 각각 독립적으로 다음으로 이루어진 군 중에서 선택되고:

[0775] 할로겐;

[0776] 수소;

[0777] C_{1-30} 하이드로카르빌 기로서, 여기서 하이드로카르빌 기는 비치환되거나, 또는 할로겐 원자, C_{1-20} 알킬 기, C_{1-20} 알콕시 기, C_{7-20} 알킬아릴 기, C_{7-20} 아릴알킬 기, C_{6-20} 아릴 기, C_{6-20} 아릴옥시 기, C_{7-20} 알킬아릴옥시 기, 및 C_{7-20} 아릴알킬옥시 기로 이루어지는 군 중에서 선택되는 하나 이상의 치환체에 의해 추가로 치환되는, C_{1-30} 하이드로카르빌 기;

[0778] 헤테로원자 함유 C_{1-30} 하이드로카르빌 기로서, 여기서 헤테로원자 함유 하이드로카르빌 기는 비치환되거나, 또는 할로겐 원자, C_{1-20} 알킬 기, C_{1-20} 알콕시 기, C_{7-20} 알킬아릴 기, C_{7-20} 아릴알킬 기, C_{6-20} 아릴 기, C_{6-20} 아릴옥시 기, C_{7-20} 알킬아릴옥시 기, 및 C_{7-20} 아릴알킬옥시 기로 이루어지는 군 중에서 선택되는 하나 이상의 치환체에 의해 추가로 치환되는, 헤테로원자 함유 C_{1-30} 하이드로카르빌 기;

[0779] 옥시 기, -OR';

[0780] 아미도 기, $-NR'_2$;

[0781] 포스피도 기, $-PR'_2$;

[0782] 티올레이트 기, -SR';

[0783] 화학식 $-Si(R^{a})_3$의 실릴 기; 및

[0784] 화학식 $-Ge(R^{a})_3$의 게르마닐 기;

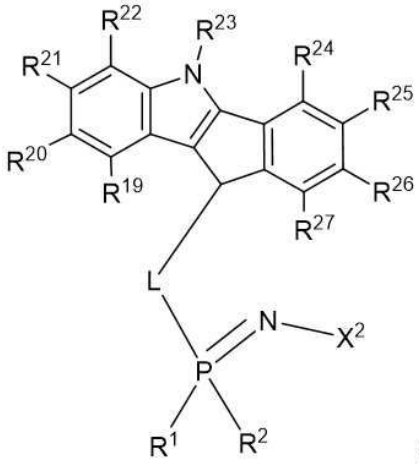
[0785] 여기서, R^7, R^8, R^9, R^{10}, R^{11}, R^{12}, R^{13}, R^{14}, R^{15}, R^{16}, R^{17} 및 R^{18} 중 2개의 인접한 기는 선택적으로 결합되어 환형 하이드로카르빌 기 또는 환형 헤테로원자 함유 하이드로카르빌 기를 형성할 수 있고, 이 환형 하이드로카르빌 기 또는 환형 헤테로원자 함유 하이드로카르빌 기는 비치환되거나, 또는 할로겐 원자, C_{1-20} 알킬 기, C_{1-20} 알콕시 기, C_{7-20} 알킬아릴 기, C_{7-20} 아릴알킬 기, C_{6-20} 아릴 기, C_{6-20} 아릴옥시 기, C_{7-20} 알킬아릴옥시 기, C_{7-20} 아릴알킬옥시 기, 화학식 $-NR'_2$의 아미도 기, 화학식 $-PR'_2$의 포스피도 기, 화학식 $-SR'$의 티올레이트 기, 화학식 $-Si(R^a)_3$의 실릴 기, 및 화학식 $-Ge(R^a)_3$의 게르마닐 기로 이루어지는 군 중에서 선택되는 하나 이상의 치환체에 의해 추가로 치환되고;

[0786] 여기서 각 R'는 수소, C_{1-20} 알킬 기, 및 C_{6-20} 아릴 기로 이루어지는 군 중에서 독립적으로 선택되고;

[0787] 여기서 각 R^a는 수소, C_{1-8} 알킬 기, C_{1-8} 알콕시 기, C_{6-20} 아릴옥시 기 및 C_{6-20} 아릴 기로 이루어지는 군 중에서 독립적으로 선택되고; 그리고 R^b, R^c, R^d는 각각 독립적으로 C_{1-20} 알킬 기이며; 그리고

[0788] X^2는 수소, 또는 화학식 $-Si(R^e)_3$의 실릴 기이고, 여기서 각 R^e는 수소, C_{1-8} 알킬 기, C_{1-8} 알콕시 기, C_{6-20} 아릴옥시 기 및 C_{6-20} 아릴 기로 이루어지는 군 중에서 독립적으로 선택된다.

[0789] 본 개시내용의 실시양태는 화학식 VIII-L로 표현되는 화합물이다:

[0790] 

(VIII-L)

[0791] 여기서, R^1 및 R^2는 각각 독립적으로 수소 및 R^X로 이루어진 군 중에서 선택되거나; 또는 R^1 및 R^2는 이들이 부착된 P 원자와 함께, 비치환되거나, 또는 할로겐 원자, C_{1-20} 알킬 기, C_{1-20} 알콕시 기, C_{7-20} 알킬아릴 기, C_{7-20} 아릴알킬 기, C_{6-20} 아릴 기, C_{6-20} 아릴옥시 기, C_{7-20} 알킬아릴옥시 기, 및 C_{7-20} 아릴알킬옥시 기로 이루어진 군 중에서 선택되는 하나 이상의 치환체에 의해 추가로 치환되는 3-10원 헤테로환형 기를 형성하며;

[0792] 각 R^X는 할로겐 원자; 하이드로카르빌 기가 비치환되거나, 또는 하나 이상의 할로겐 원자, C_{1-20} 알킬 기, C_{1-20} 알콕시 기, C_{7-20} 알킬아릴 기, C_{7-20} 아릴알킬 기, C_{6-20} 아릴 기, C_{6-20} 아릴옥시 기, C_{7-20} 알킬아릴옥시 기, 및/또는 C_{7-20} 아릴알킬옥시 기에 의해 추가로 치환되는 C_{1-30} 하이드로카르빌 기; 화학식 $-NR'_2$의 아미도 기; 화학식 $-Si(R^a)_3$의 실릴 기; 화학식 $-Ge(R^a)_3$의 게르마닐 기; 및 화학식 $-N=P(R^b)(R^c)(R^d)$의 포스핀이민 기로 이루어진 군 중에서 독립적으로 선택되고;

[0793] 여기서, R^{23}은 다음으로 이루어진 군 중에서 선택되며:

[0794] 수소;

[0795] C_{1-30} 하이드로카르빌 기로서, 여기서 하이드로카르빌 기는 비치환되거나, 또는 할로겐 원자, C_{1-20} 알킬 기, C_{1-20} 알콕시 기, C_{7-20} 알킬아릴 기, C_{7-20} 아릴알킬 기, C_{6-20} 아릴 기, C_{6-20} 아릴옥시 기, C_{7-20} 알킬아릴옥시 기, 및 C_{7-}

$_{20}$ 아릴알킬옥시 기로 이루어지는 군 중에서 선택되는 하나 이상의 치환체에 의해 추가로 치환되는 C_{1-30} 하이드로카르빌 기;

[0796] 헤테로원자 함유 C_{1-30} 하이드로카르빌 기로서, 여기서 헤테로원자 함유 하이드로카르빌 기는 비치환되거나, 또는 할로겐 원자, C_{1-20} 알킬 기, C_{1-20} 알콕시 기, C_{7-20} 알킬아릴 기, C_{7-20} 아릴알킬 기, C_{6-20} 아릴 기, C_{6-20} 아릴옥시 기, C_{7-20} 알킬아릴옥시 기, 및 C_{7-20} 아릴알킬옥시 기로 이루어지는 군 중에서 선택되는 하나 이상의 치환체에 의해 추가로 치환되는 헤테로원자 함유 C_{1-30} 하이드로카르빌 기;

[0797] 여기서, R^{19}, R^{20}, R^{21}, R^{22}, R^{24}, R^{25}, R^{26}, 및 R^{27}은 각각 독립적으로 다음으로 이루어진 군 중에서 선택되고:

[0798] 할로겐;

[0799] 수소;

[0800] C_{1-30} 하이드로카르빌 기로서, 여기서 하이드로카르빌 기는 비치환되거나, 또는 할로겐 원자, C_{1-20} 알킬 기, C_{1-20} 알콕시 기, C_{7-20} 알킬아릴 기, C_{7-20} 아릴알킬 기, C_{6-20} 아릴 기, C_{6-20} 아릴옥시 기, C_{7-20} 알킬아릴옥시 기, 및 C_{7-20} 아릴알킬옥시 기로 이루어지는 군 중에서 선택되는 하나 이상의 치환체에 의해 추가로 치환되는, C_{1-30} 하이드로카르빌 기;

[0801] 헤테로원자 함유 C_{1-30} 하이드로카르빌 기로서, 여기서 헤테로원자 함유 하이드로카르빌 기는 비치환되거나, 또는 할로겐 원자, C_{1-20} 알킬 기, C_{1-20} 알콕시 기, C_{7-20} 알킬아릴 기, C_{7-20} 아릴알킬 기, C_{6-20} 아릴 기, C_{6-20} 아릴옥시 기, C_{7-20} 알킬아릴옥시 기, 및 C_{7-20} 아릴알킬옥시 기로 이루어지는 군 중에서 선택되는 하나 이상의 치환체에 의해 추가로 치환되는, 헤테로원자 함유 C_{1-30} 하이드로카르빌 기;

[0802] 옥시 기, -OR';

[0803] 아미도 기, $-NR'_2$;

[0804] 포스피도 기, $-PR'_2$;

[0805] 티올레이트 기, -SR';

[0806] 화학식 $-Si(R^a)_3$의 실릴 기; 및

[0807] 화학식 $-Ge(R^a)_3$의 게르마닐 기;

[0808] 여기서, R^{19}, R^{20}, R^{21}, R^{22}, R^{24}, R^{25}, R^{26}, 및 R^{27} 중 2개의 인접한 기는 선택적으로 결합되어 환형 하이드로카르빌 기 또는 환형 헤테로원자 함유 하이드로카르빌 기를 형성할 수 있고, 이 환형 하이드로카르빌 기 또는 환형 헤테로원자 함유 하이드로카르빌 기는 비치환되거나, 또는 할로겐 원자, C_{1-20} 알킬 기, C_{1-20} 알콕시 기, C_{7-20} 알킬아릴 기, C_{7-20} 아릴알킬 기, C_{6-20} 아릴 기, C_{6-20} 아릴옥시 기, C_{7-20} 알킬아릴옥시 기, C_{7-20} 아릴알킬옥시 기, 화학식 $-NR'_2$의 아미도 기, 화학식 $-PR'_2$의 포스피도 기, 화학식 -SR'의 티올레이트 기, 화학식 $-Si(R^a)_3$의 실릴 기, 및 화학식 $-Ge(R^a)_3$의 게르마닐 기로 이루어지는 군 중에서 선택되는 하나 이상의 치환체에 의해 추가로 치환되고;

[0809] 여기서 각 R'는 수소, C_{1-20} 알킬 기, 및 C_{6-20} 아릴 기로 이루어지는 군 중에서 독립적으로 선택되고;

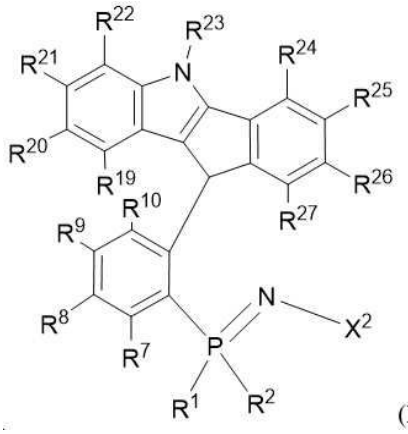
[0810] 여기서 각 R^a는 수소, C_{1-8} 알킬 기, C_{1-8} 알콕시 기, C_{6-20} 아릴옥시 기 및 C_{6-20} 아릴 기로 이루어지는 군 중에서 독립적으로 선택되고; 그리고 R^b, R^c, R^d는 각각 독립적으로 C_{1-20} 알킬 기이며;

[0811] X^2는 수소, 또는 화학식 $-Si(R^e)_3$의 실릴 기이고, 여기서 각 R^e는 수소, C_{1-8} 알킬 기, C_{1-8} 알콕시 기, C_{6-20} 아릴옥

시 기 및 C_{6-20} 아릴 기로 이루어지는 군 중에서 독립적으로 선택되고; 그리고

[0812] L은 Cy와 P를 연결하는 원자의 근접한 사슬을 함유하는 가교 기로서, 여기서 근접한 사슬은 2개 또는 3개의 원자를 함유한다.

[0813] 본 개시내용의 실시양태는 화학식 IX-L로 표현되는 화합물이다:

[0814] 
(IX-L)

[0815] 여기서, R^1 및 R^2는 각각 독립적으로 수소 및 R^X로 이루어진 군 중에서 선택되거나; 또는 R^1 및 R^2는 이들이 부착된 P 원자와 함께, 비치환되거나, 또는 할로겐 원자, C_{1-20} 알킬 기, C_{1-20} 알콕시 기, C_{7-20} 알킬아릴 기, C_{7-20} 아릴알킬 기, C_{6-20} 아릴 기, C_{6-20} 아릴옥시 기, C_{7-20} 알킬아릴옥시 기, 및 C_{7-20} 아릴알킬옥시 기로 이루어진 군 중에서 선택되는 하나 이상의 치환체에 의해 추가로 치환되는 3-10원 헤테로환형 기를 형성하며;

[0816] 각 R^X는 할로겐 원자; 하이드로카르빌 기가 비치환되거나, 또는 하나 이상의 할로겐 원자, C_{1-20} 알킬 기, C_{1-20} 알콕시 기, C_{7-20} 알킬아릴 기, C_{7-20} 아릴알킬 기, C_{6-20} 아릴 기, C_{6-20} 아릴옥시 기, C_{7-20} 알킬아릴옥시 기, 및/또는 C_{7-20} 아릴알킬옥시 기에 의해 추가로 치환되는 C_{1-30} 하이드로카르빌 기; 화학식 $-NR'_2$의 아미도 기; 화학식 $-Si(R^a)_3$의 실릴 기; 화학식 $-Ge(R^a)_3$의 게르마닐 기; 및 화학식 $-N=P(R^b)(R^c)(R^d)$의 포스핀이민 기로 이루어진 군 중에서 독립적으로 선택되고;

[0817] 여기서, R^{23}은 다음으로 이루어진 군 중에서 선택되며:

[0818] 수소;

[0819] C_{1-30} 하이드로카르빌 기로서, 여기서 하이드로카르빌 기는 비치환되거나, 또는 할로겐 원자, C_{1-20} 알킬 기, C_{1-20} 알콕시 기, C_{7-20} 알킬아릴 기, C_{7-20} 아릴알킬 기, C_{6-20} 아릴 기, C_{6-20} 아릴옥시 기, C_{7-20} 알킬아릴옥시 기, 및 C_{7-20} 아릴알킬옥시 기로 이루어지는 군 중에서 선택되는 하나 이상의 치환체에 의해 추가로 치환되는 C_{1-30} 하이드로카르빌 기;

[0820] 헤테로원자 함유 C_{1-30} 하이드로카르빌 기로서, 여기서 헤테로원자 함유 하이드로카르빌 기는 비치환되거나, 또는 할로겐 원자, C_{1-20} 알킬 기, C_{1-20} 알콕시 기, C_{7-20} 알킬아릴 기, C_{7-20} 아릴알킬 기, C_{6-20} 아릴 기, C_{6-20} 아릴옥시 기, C_{7-20} 알킬아릴옥시 기, 및 C_{7-20} 아릴알킬옥시 기로 이루어지는 군 중에서 선택되는 하나 이상의 치환체에 의해 추가로 치환되는 헤테로원자 함유 C_{1-30} 하이드로카르빌 기;

[0821] 여기서, R^7, R^8, R^9, R^{10}, R^{19}, R^{20}, R^{21}, R^{22}, R^{24}, R^{25}, R^{26}, 및 R^{27}은 각각 독립적으로 다음으로 이루어진 군 중에서 선택되고:

[0822] 할로겐;

[0823] 수소;

[0824] C_{1-30} 하이드로카르빌 기로서, 여기서 하이드로카르빌 기는 비치환되거나, 또는 할로겐 원자, C_{1-20} 알킬 기, C_{1-20}

알콕시 기, C_{7-20} 알킬아릴 기, C_{7-20} 아릴알킬 기, C_{6-20} 아릴 기, C_{6-20} 아릴옥시 기, C_{7-20} 알킬아릴옥시 기, 및 C_{7-20} 아릴알킬옥시 기로 이루어지는 군 중에서 선택되는 하나 이상의 치환체에 의해 추가로 치환되는, C_{1-30} 하이드로카르빌 기;

[0825] 헤테로원자 함유 C_{1-30} 하이드로카르빌 기로서, 여기서 헤테로원자 함유 하이드로카르빌 기는 비치환되거나, 또는 할로겐 원자, C_{1-20} 알킬 기, C_{1-20} 알콕시 기, C_{7-20} 알킬아릴 기, C_{7-20} 아릴알킬 기, C_{6-20} 아릴 기, C_{6-20} 아릴옥시 기, C_{7-20} 알킬아릴옥시 기, 및 C_{7-20} 아릴알킬옥시 기로 이루어지는 군 중에서 선택되는 하나 이상의 치환체에 의해 추가로 치환되는, 헤테로원자 함유 C_{1-30} 하이드로카르빌 기;

[0826] 옥시 기, -OR';

[0827] 아미도 기, $-NR'_2$;

[0828] 포스피도 기, $-PR'_2$;

[0829] 티올레이트 기, -SR';

[0830] 화학식 $-Si(R^a)_3$의 실릴 기; 및

[0831] 화학식 $-Ge(R^a)_3$의 게르마닐 기;

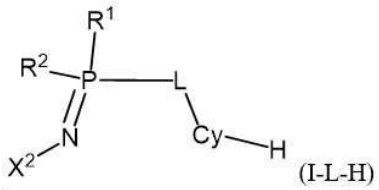
[0832] 여기서, R^7, R^8, R^9, R^{10}, R^{19}, R^{20}, R^{21}, R^{22}, R^{24}, R^{25}, R^{26}, 및 R^{27} 중 2개의 인접한 기는 선택적으로 결합되어 환형 하이드로카르빌 기 또는 환형 헤테로원자 함유 하이드로카르빌 기를 형성할 수 있고, 이 환형 하이드로카르빌 기 또는 환형 헤테로원자 함유 하이드로카르빌 기는 비치환되거나, 또는 할로겐 원자, C_{1-20} 알킬 기, C_{1-20} 알콕시 기, C_{7-20} 알킬아릴 기, C_{7-20} 아릴알킬 기, C_{6-20} 아릴 기, C_{6-20} 아릴옥시 기, C_{7-20} 알킬아릴옥시 기, C_{7-20} 아릴알킬옥시 기, 화학식 $-NR'_2$의 아미도 기, 화학식 $-PR'_2$의 포스피도 기, 화학식 -SR'의 티올레이트 기, 화학식 $-Si(R^a)_3$의 실릴 기, 및 화학식 $-Ge(R^a)_3$의 게르마닐 기로 이루어지는 군 중에서 선택되는 하나 이상의 치환체에 의해 추가로 치환되고;

[0833] 여기서 각 R'는 수소, C_{1-20} 알킬 기, 및 C_{6-20} 아릴 기로 이루어지는 군 중에서 독립적으로 선택되고;

[0834] 여기서 각 R^a는 수소, C_{1-8} 알킬 기, C_{1-8} 알콕시 기, C_{6-20} 아릴옥시 기 및 C_{6-20} 아릴 기로 이루어지는 군 중에서 독립적으로 선택되고; 그리고 R^b, R^c, R^d는 각각 독립적으로 C_{1-20} 알킬 기이며; 그리고

[0835] X^2는 수소, 또는 화학식 $-Si(R^e)_3$의 실릴 기이고, 여기서 각 R^e는 수소, C_{1-8} 알킬 기, C_{1-8} 알콕시 기, C_{6-20} 아릴옥시 기 및 C_{6-20} 아릴 기로 이루어지는 군 중에서 독립적으로 선택된다.

[0836] 한 실시양태는 유기금속 복합체를 제조하는 공정으로, 여기서 공정은 화학식 I-L-H로 표현되는 화합물을 화학식 MX^*_4를 갖는 4족 전이 금속 화합물과 반응시키는 것을 포함한다:

[0837] 

(I-L-H)

[0838] 여기서,

[0839] M은 Ti, Zr 또는 Hf이고;

[0840] R^1 및 R^2는 각각 독립적으로 수소 및 R^X로 이루어진 군 중에서 선택되거나; 또는 R^1 및 R^2는 이들이 부착된 P 원자와 함께, 비치환되거나, 또는 할로겐 원자, C_{1-20} 알킬 기, C_{1-20} 알콕시 기, C_{7-20} 알킬아릴 기, C_{7-20} 아릴알킬 기, C_{6-20} 아릴 기, C_{6-20} 아릴옥시 기, C_{7-20} 알킬아릴옥시 기, 및 C_{7-20} 아릴알킬옥시 기로 이루어진 군 중에서 선택되는 하나 이상의 치환체에 의해 추가로 치환되는 3-10원 헤테로환형 기를 형성하며;

[0841] 각 R^X는 할로겐 원자; 하이드로카르빌 기가 비치환되거나, 또는 하나 이상의 할로겐 원자, C_{1-20} 알킬 기, C_{1-20} 알콕시 기, C_{7-20} 알킬아릴 기, C_{7-20} 아릴알킬 기, C_{6-20} 아릴 기, C_{6-20} 아릴옥시 기, C_{7-20} 알킬아릴옥시 기, 및/또는 C_{7-20} 아릴알킬옥시 기에 의해 추가로 치환되는 C_{1-30} 하이드로카르빌 기; 화학식 $-NR'_2$의 아미도 기; 화학식 $-Si(R^a)_3$의 실릴 기; 화학식 $-Ge(R^a)_3$의 게르마닐 기; 및 화학식 $-N=P(R^b)(R^c)(R^d)$의 포스핀이민 기로 이루어진 군 중에서 독립적으로 선택되고; 여기서 각 R'는 수소, C_{1-20} 알킬 기, 및 C_{6-20} 아릴 기로 이루어지는 군 중에서 독립적으로 선택되고; 각 R^a는 수소, C_{1-8} 알킬 기, C_{1-8} 알콕시 기, C_{6-20} 아릴옥시 기 및 C_{6-20} 아릴 기로 이루어진 군 중에서 독립적으로 선택되고; R^b, R^c, R^d는 각각 독립적으로 C_{1-20} 알킬 기이며;

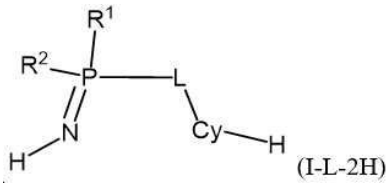
[0842] X^2는 화학식 $-Si(R^e)_3$의 실릴 기이고, 여기서 각 R^e는 수소, C_{1-8} 알킬 기, C_{1-8} 알콕시 기, C_{6-20} 아릴옥시 기 및 C_{6-20} 아릴 기로 이루어지는 군 중에서 독립적으로 선택되고;

[0843] Cy는 사이클로펜타디에닐형 모이어티이고 L 및 H에 공유 결합되며; 그리고

[0844] L은 Cy와 P를 연결하는 원자의 근접한 사슬을 함유하는 가교 기로서, 여기서 근접한 사슬은 2개 또는 3개의 원자를 함유하고; 그리고

[0845] 각 X^*는 할로겐, 수소, 화학식 $-NR^{\epsilon}_2$의 아미도 기, C_{1-20} 알킬 기, C_{1-20} 알콕시 기, C_{7-20} 알킬아릴 기, C_{7-20} 아릴알킬 기, C_{6-20} 아릴 기, C_{6-20} 아릴옥사이드 기, C_{7-20} 알킬아릴옥시 기, 및 C_{7-20} 아릴알킬옥시 기로 이루어지는 군 중에서 독립적으로 선택되고; 여기서 각 R^{ϵ}는 수소, C_{1-20} 알킬 기, 및 C_{6-20} 아릴 기로 이루어지는 군 중에서 독립적으로 선택된다.

[0846] 본 개시내용의 실시양태는 유기금속 복합체를 제조하는 공정으로, 여기서 공정은 화학식 I-L-2H로 표현되는 화합물을 염기와 반응시킨 뒤 화학식 MX^*_4를 갖는 4족 전이 금속 화합물과 반응시키는 것을 포함한다:

[0847] 

(I-L-2H)

[0848] 여기서,

[0849] M은 Ti, Zr 또는 Hf이고;

[0850] R^1 및 R^2는 각각 독립적으로 수소 및 R^X로 이루어진 군 중에서 선택되거나; 또는 R^1 및 R^2는 이들이 부착된 P 원자와 함께, 비치환되거나, 또는 할로겐 원자, C_{1-20} 알킬 기, C_{1-20} 알콕시 기, C_{7-20} 알킬아릴 기, C_{7-20} 아릴알킬 기, C_{6-20} 아릴 기, C_{6-20} 아릴옥시 기, C_{7-20} 알킬아릴옥시 기, 및 C_{7-20} 아릴알킬옥시 기로 이루어진 군 중에서 선택되는 하나 이상의 치환체에 의해 추가로 치환되는 3-10원 헤테로환형 기를 형성하며;

[0851] 각 R^X는 할로겐 원자; 하이드로카르빌 기가 비치환되거나, 또는 하나 이상의 할로겐 원자, C_{1-20} 알킬 기, C_{1-20} 알콕시 기, C_{7-20} 알킬아릴 기, C_{7-20} 아릴알킬 기, C_{6-20} 아릴 기, C_{6-20} 아릴옥시 기, C_{7-20} 알킬아릴옥시 기, 및/또는 C_{7-20} 아릴알킬옥시 기에 의해 추가로 치환되는 C_{1-30} 하이드로카르빌 기; 화학식 $-NR'_2$의 아미도 기; 화학식

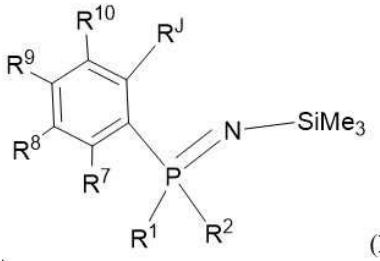
$-Si(R^a)_3$의 실릴 기; 화학식 $-Ge(R^a)_3$의 게르마닐 기; 및 화학식 $-N=P(R^b)(R^c)(R^d)$의 포스핀이민 기로 이루어진 군 중에서 독립적으로 선택되고; 여기서 각 R'는 수소, C_{1-20} 알킬 기, 및 C_{6-20} 아릴 기로 이루어지는 군 중에서 독립적으로 선택되고; 각 R^a는 수소, C_{1-8} 알킬 기, C_{1-8} 알콕시 기, C_{6-20} 아릴옥시 기 및 C_{6-20} 아릴 기로 이루어진 군 중에서 독립적으로 선택되고; R^b, R^c, R^d는 각각 독립적으로 C_{1-20} 알킬 기이며;

[0852] Cy는 사이클로펜타디에닐형 모이어티이고 L 및 H에 공유 결합되며; 그리고

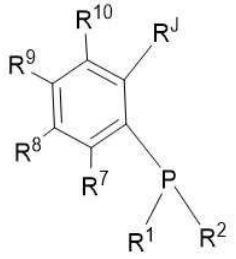
[0853] L은 Cy와 P를 연결하는 원자의 근접한 사슬을 함유하는 가교 기로서, 여기서 근접한 사슬은 2개 또는 3개의 원자를 함유하고; 그리고

[0854] 각 X^*는 할로겐, 수소, 화학식 $-NR^{\epsilon}_2$의 아미도 기, C_{1-20} 알킬 기, C_{1-20} 알콕시 기, C_{7-20} 알킬아릴 기, C_{7-20} 아릴알킬 기, C_{6-20} 아릴 기, C_{6-20} 아릴옥사이드 기, C_{7-20} 알킬아릴옥시 기, 및 C_{7-20} 아릴알킬옥시 기로 이루어지는 군 중에서 독립적으로 선택되고; 여기서 각 R^{ϵ}는 수소, C_{1-20} 알킬 기, 및 C_{6-20} 아릴 기로 이루어지는 군 중에서 독립적으로 선택된다.

[0855] 본 개시내용의 실시양태는 화학식 I-P-TMS로 표현되는 화합물을 제조하는 방법으로, 이 방법은 화학식 I-P로 표현되는 포스핀 화합물을 헥사클로로에탄, Cl_3C-CCl_3; 및 헥사메틸디실라잔, $[(CH_3)_3Si]_2NH$와 조합하는 것을 포함한다:

[0856] 

(I-P-TMS)

[0857] 

(I-P)

[0858] 여기서, R^J는 다음으로 이루어지는 군 중에서 선택되고:

[0859] 하이드로카르빌 기로서, 여기서 하이드로카르빌 기는 비치환되거나, 또는 할로겐 원자, C_{1-20} 알킬 기, C_{1-20} 알콕시 기, C_{7-20} 알킬아릴 기, C_{7-20} 아릴알킬 기, C_{6-20} 아릴 기, C_{6-20} 아릴옥시 기, C_{7-20} 알킬아릴옥시 기, C_{7-20} 아릴알킬옥시 기, 화학식 $-NR'_2$의 아미도 기; 화학식 $-PR'_2$의 포스피도 기, 화학식 -SR'의 티올레이트 기, 화학식 $-Si(R^a)_3$의 실릴 기, 및 화학식 $-Ge(R^a)_3$의 게르마닐 기로 이루어지는 군 중에서 선택되는 하나 이상의 치환체에 의해 추가로 치환되는, 하이드로카르빌 기;

[0860] 헤테로원자 함유 하이드로카르빌 기로서, 여기서 헤테로원자 함유 하이드로카르빌 기는 비치환되거나, 또는 할로겐 원자, C_{1-20} 알킬 기, C_{1-20} 알콕시 기, C_{7-20} 알킬아릴 기, C_{7-20} 아릴알킬 기, C_{6-20} 아릴 기, C_{6-20} 아릴옥시 기, C_{7-20} 알킬아릴옥시 기, C_{7-20} 아릴알킬옥시 기, 화학식 $-NR'_2$의 아미도 기; 화학식 $-PR'_2$의 포스피도 기, 화학식 -SR'의 티올레이트 기, 화학식 $-Si(R^a)_3$의 실릴 기, 및 화학식 $-Ge(R^a)_3$의 게르마닐 기로 이루어지는 군 중에서 선택되는 하나 이상의 치환체에 의해 추가로 치환되는, 헤테로원자 함유 하이드로카르빌 기;

[0861] 여기서, R^1 및 R^2는 각각 독립적으로 하이드로카르빌 기가 비치환되거나, 또는 하나 이상의 할로겐 원자, C_{1-20} 알킬 기, C_{1-20} 알콕시 기, C_{7-20} 알킬아릴 기, C_{7-20} 아릴알킬 기, C_{6-20} 아릴 기, C_{6-20} 아릴옥시 기, C_{7-20} 알킬아릴옥시 기, 및/또는 C_{7-20} 아릴알킬옥시 기에 의해 추가로 치환되는 C_{1-30} 하이드로카르빌 기 중에서 선택되고;

[0862] 여기서, R^7, R^8, R^9, 및 R^{10}은 각각 독립적으로 다음으로 이루어진 군 중에서 선택되고:

[0863] 할로겐;

[0864] 수소;

[0865] C_{1-30} 하이드로카르빌 기로서, 여기서 하이드로카르빌 기는 비치환되거나, 또는 할로겐 원자, C_{1-20} 알킬 기, C_{1-20} 알콕시 기, C_{7-20} 알킬아릴 기, C_{7-20} 아릴알킬 기, C_{6-20} 아릴 기, C_{6-20} 아릴옥시 기, C_{7-20} 알킬아릴옥시 기, 및 C_{7-20} 아릴알킬옥시 기로 이루어지는 군 중에서 선택되는 하나 이상의 치환체에 의해 추가로 치환되는, C_{1-30} 하이드로카르빌 기;

[0866] 헤테로원자 함유 C_{1-30} 하이드로카르빌 기로서, 여기서 헤테로원자 함유 하이드로카르빌 기는 비치환되거나, 또는 할로겐 원자, C_{1-20} 알킬 기, C_{1-20} 알콕시 기, C_{7-20} 알킬아릴 기, C_{7-20} 아릴알킬 기, C_{6-20} 아릴 기, C_{6-20} 아릴옥시 기, C_{7-20} 알킬아릴옥시 기, 및 C_{7-20} 아릴알킬옥시 기로 이루어지는 군 중에서 선택되는 하나 이상의 치환체에 의해 추가로 치환되는, 헤테로원자 함유 C_{1-30} 하이드로카르빌 기;

[0867] 옥시 기, -OR';

[0868] 아미도 기, $-NR'_2$;

[0869] 포스피도 기, $-PR'_2$;

[0870] 티올레이트 기, -SR';

[0871] 화학식 $-Si(R^a)_3$의 실릴 기; 및

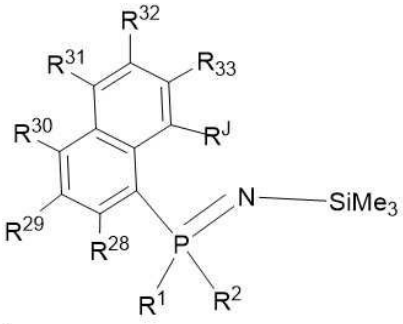
[0872] 화학식 $-Ge(R^a)_3$의 게르마닐 기;

[0873] 여기서, R^7, R^8, R^9, 및 R^{10} 중 2개의 인접한 기는 선택적으로 결합되어 환형 하이드로카르빌 기 또는 환형 헤테로원자 함유 하이드로카르빌 기를 형성할 수 있고, 이 환형 하이드로카르빌 기 또는 환형 헤테로원자 함유 하이드로카르빌 기는 비치환되거나, 또는 할로겐 원자, C_{1-20} 알킬 기, C_{1-20} 알콕시 기, C_{7-20} 알킬아릴 기, C_{7-20} 아릴알킬 기, C_{6-20} 아릴 기, C_{6-20} 아릴옥시 기, C_{7-20} 알킬아릴옥시 기, C_{7-20} 아릴알킬옥시 기, 아미도 기 $-NR'_2$, 포스피도 기 $-PR'_2$, 티올레이트 기 -SR', 화학식 $-Si(R^a)_3$의 실릴 기, 및 화학식 $-Ge(R^a)_3$의 게르마닐 기로 이루어지는 군 중에서 선택되는 하나 이상의 치환체에 의해 추가로 치환되고;

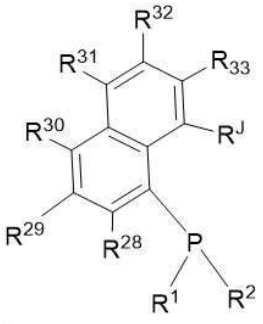
[0874] 여기서 각 R'는 수소, C_{1-20} 알킬 기, 및 C_{6-20} 아릴 기로 이루어지는 군 중에서 독립적으로 선택되고;

[0875] 여기서 각 R^a는 수소, C_{1-8} 알킬 기, C_{1-8} 알콕시 기, C_{6-20} 아릴옥시 기 및 C_{6-20} 아릴 기로 이루어지는 군 중에서 독립적으로 선택된다.

[0876] 본 개시내용의 실시양태는 화학식 II-P-TMS로 표현되는 화합물을 제조하는 방법으로서, 이 방법은 화학식 II-P로 표현되는 포스핀 화합물을 헥사클로로에탄, Cl_3C-CCl_3; 및 헥사메틸디실라잔, $[(CH_3)_3Si]_2NH$와 조합하는 것을 포함한다:

[0877] 

(II-P-TMS)

[0878] 

(II-P)

[0879] 여기서, R^J는 다음으로 이루어지는 군 중에서 선택되고:

[0880] 하이드로카르빌 기로서, 여기서 하이드로카르빌 기는 비치환되거나, 또는 할로겐 원자, C_{1-20} 알킬 기, C_{1-20} 알콕시 기, C_{7-20} 알킬아릴 기, C_{7-20} 아릴알킬 기, C_{6-20} 아릴 기, C_{6-20} 아릴옥시 기, C_{7-20} 알킬아릴옥시 기, C_{7-20} 아릴알킬옥시 기, 화학식 $-NR'_2$의 아미도 기; 화학식 $-PR'_2$의 포스피도 기, 화학식 $-SR'$의 티올레이트 기, 화학식 $-Si(R^a)_3$의 실릴 기, 및 화학식 $-Ge(R^a)_3$의 게르마닐 기로 이루어지는 군 중에서 선택되는 하나 이상의 치환체에 의해 추가로 치환되는, 하이드로카르빌 기;

[0881] 헤테로원자 함유 하이드로카르빌 기로서, 여기서 헤테로원자 함유 하이드로카르빌 기는 비치환되거나, 또는 할로겐 원자, C_{1-20} 알킬 기, C_{1-20} 알콕시 기, C_{7-20} 알킬아릴 기, C_{7-20} 아릴알킬 기, C_{6-20} 아릴 기, C_{6-20} 아릴옥시 기, C_{7-20} 알킬아릴옥시 기, 및 C_{7-20} 아릴알킬옥시 기, 화학식 $-NR'_2$의 아미도 기; 화학식 $-PR'_2$의 포스피도 기, 화학식 $-SR'$의 티올레이트 기, 화학식 $-Si(R^a)_3$의 실릴 기, 및 화학식 $-Ge(R^a)_3$의 게르마닐 기로 이루어지는 군 중에서 선택되는 하나 이상의 치환체에 의해 추가로 치환되는, 헤테로원자 함유 하이드로카르빌 기;

[0882] 여기서, R^1 및 R^2는 각각 독립적으로 하이드로카르빌 기가 비치환되거나, 또는 하나 이상의 할로겐 원자, C_{1-20} 알킬 기, C_{1-20} 알콕시 기, C_{7-20} 알킬아릴 기, C_{7-20} 아릴알킬 기, C_{6-20} 아릴 기, C_{6-20} 아릴옥시 기, C_{7-20} 알킬아릴옥시 기, 및/또는 C_{7-20} 아릴알킬옥시 기에 의해 추가로 치환되는 C_{1-30} 하이드로카르빌 기 중에서 선택되고;

[0883] 여기서, R^{28}, R^{29}, R^{30}, R^{31}, R^{32} 및 R^{33}은 각각 독립적으로 다음으로 이루어진 군 중에서 선택되고:

[0884] 할로겐;

[0885] 수소;

[0886] C_{1-30} 하이드로카르빌 기로서, 여기서 하이드로카르빌 기는 비치환되거나, 또는 할로겐 원자, C_{1-20} 알킬 기, C_{1-20} 알콕시 기, C_{7-20} 알킬아릴 기, C_{7-20} 아릴알킬 기, C_{6-20} 아릴 기, C_{6-20} 아릴옥시 기, C_{7-20} 알킬아릴옥시 기, 및 C_{7-20} 아릴알킬옥시 기로 이루어지는 군 중에서 선택되는 하나 이상의 치환체에 의해 추가로 치환되는, C_{1-30} 하이드로카르빌 기;

[0887] 헤테로원자 함유 C_{1-30} 하이드로카르빌 기로서, 여기서 헤테로원자 함유 하이드로카르빌 기는 비치환되거나, 또는

할로겐 원자, C_{1-20} 알킬 기, C_{1-20} 알콕시 기, C_{7-20} 알킬아릴 기, C_{7-20} 아릴알킬 기, C_{6-20} 아릴 기, C_{6-20} 아릴옥시 기, C_{7-20} 알킬아릴옥시 기, 및 C_{7-20} 아릴알킬옥시 기로 이루어지는 군 중에서 선택되는 하나 이상의 치환체에 의해 추가로 치환되는, 헤테로원자 함유 C_{1-30} 하이드로카르빌 기;

[0888] 옥시 기, -OR';

[0889] 아미도 기, $-NR'_2$;

[0890] 포스피도 기, $-PR'_2$;

[0891] 티올레이트 기, -SR';

[0892] 화학식 $-Si(R^a)_3$의 실릴 기; 및

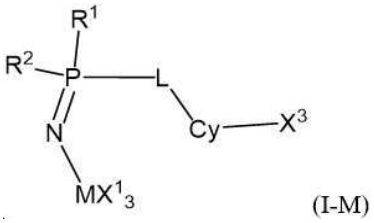
[0893] 화학식 $-Ge(R^a)_3$의 게르마닐 기;

[0894] 여기서, R^{28}, R^{29}, R^{30}, R^{31}, R^{32} 및 R^{33} 중 2개의 인접한 기는 선택적으로 결합되어 환형 하이드로카르빌 기 또는 환형 헤테로원자 함유 하이드로카르빌 기를 형성할 수 있고, 이 환형 하이드로카르빌 기 또는 환형 헤테로원자 함유 하이드로카르빌 기는 비치환되거나, 또는 할로겐 원자, C_{1-20} 알킬 기, C_{1-20} 알콕시 기, C_{7-20} 알킬아릴 기, C_{7-20} 아릴알킬 기, C_{6-20} 아릴 기, C_{6-20} 아릴옥시 기, C_{7-20} 알킬아릴옥시 기, C_{7-20} 아릴알킬옥시 기, 화학식 $-NR'_2$의 아미도 기, 화학식 $-PR'_2$의 포스피도 기, 화학식 -SR'의 티올레이트 기, 화학식 $-Si(R^a)_3$의 실릴 기, 및 화학식 $-Ge(R^a)_3$의 게르마닐 기로 이루어지는 군 중에서 선택되는 하나 이상의 치환체에 의해 추가로 치환되고;

[0895] 여기서 각 R'는 수소, C_{1-20} 알킬 기, 및 C_{6-20} 아릴 기로 이루어지는 군 중에서 독립적으로 선택되고;

[0896] 여기서 각 R^a는 수소, C_{1-8} 알킬 기, C_{1-8} 알콕시 기, C_{6-20} 아릴옥시 기 및 C_{6-20} 아릴 기로 이루어지는 군 중에서 독립적으로 선택된다.

[0897] 본 개시내용의 실시양태는 화학식 I-M으로 표현되는 유기금속 복합체이다:

[0898] 

(I-M)

[0899] 여기서,

[0900] M은 Ti, Zr 또는 Hf이고;

[0901] R^1 및 R^2는 각각 독립적으로 수소 및 R^X로 이루어진 군 중에서 선택되거나; 또는 R^1 및 R^2는 이들이 부착된 P 원자와 함께, 비치환되거나, 또는 할로겐 원자, C_{1-20} 알킬 기, C_{1-20} 알콕시 기, C_{7-20} 알킬아릴 기, C_{7-20} 아릴알킬 기, C_{6-20} 아릴 기, C_{6-20} 아릴옥시 기, C_{7-20} 알킬아릴옥시 기, 및 C_{7-20} 아릴알킬옥시 기로 이루어진 군 중에서 선택되는 하나 이상의 치환체에 의해 추가로 치환되는 3-10원 헤테로환형 기를 형성하며;

[0902] 각 R^X는 할로겐 원자; 하이드로카르빌 기가 비치환되거나, 또는 하나 이상의 할로겐 원자, C_{1-20} 알킬 기, C_{1-20} 알콕시 기, C_{7-20} 알킬아릴 기, C_{7-20} 아릴알킬 기, C_{6-20} 아릴 기, C_{6-20} 아릴옥시 기, C_{7-20} 알킬아릴옥시 기, 및/또는 C_{7-20} 아릴알킬옥시 기에 의해 추가로 치환되는 C_{1-30} 하이드로카르빌 기; 화학식 $-NR'_2$의 아미도 기; 화학식 $-Si(R^a)_3$의 실릴 기; 화학식 $-Ge(R^a)_3$의 게르마닐 기; 및 화학식 $-N=P(R^b)(R^c)(R^d)$의 포스핀이민 기로 이루어진

군 중에서 독립적으로 선택되고; 여기서 각 R'는 수소, C_{1-20} 알킬 기, 및 C_{6-20} 아릴 기로 이루어지는 군 중에서 독립적으로 선택되고; 각 R^a는 수소, C_{1-8} 알킬 기, C_{1-8} 알콕시 기, C_{6-20} 아릴옥시 기 및 C_{6-20} 아릴 기로 이루어진 군 중에서 독립적으로 선택되고; R^b, R^c, R^d는 각각 독립적으로 C_{1-20} 알킬 기이며;

[0903] Cy는 사이클로펜타디에닐형 모이어티이고 L 및 X^3에 공유 결합되며,

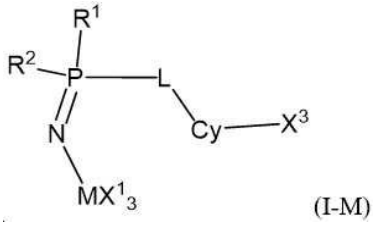
[0904] 각 X^1은 활성화 가능한 리간드이고;

[0905] X^3은 수소, 또는 화학식 $-Si(R^e)_3$의 실릴 기, 또는 화학식 $Sn(R^e)_3$의 주석 기이며; 여기서, 각 R^e는 수소, C_{1-8} 알킬 기, C_{1-8} 알콕시 기, C_{6-20} 아릴옥시 기, 및 C_{6-20} 아릴 기로 이루어지는 군 중에서 독립적으로 선택되고; 그리고

[0906] L은 Cy와 P를 연결하는 원자의 근접한 사슬을 함유하는 가교 기로서, 여기서 근접한 사슬은 2개 또는 3개의 원자를 함유한다.

[0907] 본 개시내용의 실시양태는 다음을 포함하는 올레핀 중합 촉매 시스템이다:

[0908] i) 화학식 I-M으로 표현되는 유기금속 복합체:

[0909] 

(I-M)

[0910] 여기서,

[0911] M은 Ti, Zr 또는 Hf이고;

[0912] R^1 및 R^2는 각각 독립적으로 수소 및 R^X로 이루어진 군 중에서 선택되거나; 또는 R^1 및 R^2는 이들이 부착된 P 원자와 함께, 비치환되거나, 또는 할로겐 원자, C_{1-20} 알킬 기, C_{1-20} 알콕시 기, C_{7-20} 알킬아릴 기, C_{7-20} 아릴알킬 기, C_{6-20} 아릴 기, C_{6-20} 아릴옥시 기, C_{7-20} 알킬아릴옥시 기, 및 C_{7-20} 아릴알킬옥시 기로 이루어진 군 중에서 선택되는 하나 이상의 치환체에 의해 추가로 치환되는 3-10원 헤테로환형 기를 형성하며;

[0913] 각 R^X는 할로겐 원자; 하이드로카르빌 기가 비치환되거나, 또는 하나 이상의 할로겐 원자, C_{1-20} 알킬 기, C_{1-20} 알콕시 기, C_{7-20} 알킬아릴 기, C_{7-20} 아릴알킬 기, C_{6-20} 아릴 기, C_{6-20} 아릴옥시 기, C_{7-20} 알킬아릴옥시 기, 및/또는 C_{7-20} 아릴알킬옥시 기에 의해 추가로 치환되는 C_{1-30} 하이드로카르빌 기; 화학식 $-NR'_2$의 아미도 기; 화학식 $-Si(R^a)_3$의 실릴 기; 화학식 $-Ge(R^a)_3$의 게르마닐 기; 및 화학식 $-N=P(R^b)(R^c)(R^d)$의 포스핀이민 기로 이루어진 군 중에서 독립적으로 선택되고; 여기서 각 R'는 수소, C_{1-20} 알킬 기, 및 C_{6-20} 아릴 기로 이루어지는 군 중에서 독립적으로 선택되고; 각 R^a는 수소, C_{1-8} 알킬 기, C_{1-8} 알콕시 기, C_{6-20} 아릴옥시 기 및 C_{6-20} 아릴 기로 이루어진 군 중에서 독립적으로 선택되고; R^b, R^c, R^d는 각각 독립적으로 C_{1-20} 알킬 기이며;

[0914] Cy는 사이클로펜타디에닐형 모이어티이고 L 및 X^3에 공유 결합되며,

[0915] 각 X^1은 활성화 가능한 리간드이고;

[0916] X^3은 수소, 또는 화학식 $-Si(R^e)_3$의 실릴 기, 또는 화학식 $Sn(R^e)_3$의 주석 기이며; 여기서, 각 R^e는 수소, C_{1-8} 알킬 기, C_{1-8} 알콕시 기, C_{6-20} 아릴옥시 기, 및 C_{6-20} 아릴 기로 이루어지는 군 중에서 독립적으로 선택되고; 그리고

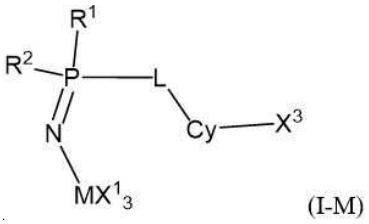
[0917] L은 Cy와 P를 연결하는 원자의 근접한 사슬을 함유하는 가교 기로서, 여기서 근접한 사슬은 2개 또는 3개의 원

자를 함유함; 및

[0918] ii) 촉매 활성화제.

[0919] 본 개시내용의 실시양태는 다음을 포함하는 올레핀 중합 촉매 시스템의 존재 하에 에틸렌을 선택적으로 하나 이상의 C_3-C_{12} 알파-올레핀과 중합시키는 것을 포함하는 중합 공정이다:

[0920] i) 화학식 I-M으로 표현되는 유기금속 복합체:

[0921] 

(I-M)

[0922] 여기서,

[0923] M은 Ti, Zr 또는 Hf이고;

[0924] R^1 및 R^2는 각각 독립적으로 수소 및 R^X로 이루어진 군 중에서 선택되거나; 또는 R^1 및 R^2는 이들이 부착된 P 원자와 함께, 비치환되거나, 또는 할로겐 원자, C_{1-20} 알킬 기, C_{1-20} 알콕시 기, C_{7-20} 알킬아릴 기, C_{7-20} 아릴알킬 기, C_{6-20} 아릴 기, C_{6-20} 아릴옥시 기, C_{7-20} 알킬아릴옥시 기, 및 C_{7-20} 아릴알킬옥시 기로 이루어진 군 중에서 선택되는 하나 이상의 치환체에 의해 추가로 치환되는 3-10원 헤테로환형 기를 형성하며;

[0925] 각 R^X는 할로겐 원자; 하이드로카르빌 기가 비치환되거나, 또는 하나 이상의 할로겐 원자, C_{1-20} 알킬 기, C_{1-20} 알콕시 기, C_{7-20} 알킬아릴 기, C_{7-20} 아릴알킬 기, C_{6-20} 아릴 기, C_{6-20} 아릴옥시 기, C_{7-20} 알킬아릴옥시 기, 및/또는 C_{7-20} 아릴알킬옥시 기에 의해 추가로 치환되는 C_{1-30} 하이드로카르빌 기; 화학식 $-NR'_2$의 아미도 기; 화학식 $-Si(R^a)_3$의 실릴 기; 화학식 $-Ge(R^a)_3$의 게르마닐 기; 및 화학식 $-N=P(R^b)(R^c)(R^d)$의 포스핀이민 기로 이루어진 군 중에서 독립적으로 선택되고; 여기서 각 R'는 수소, C_{1-20} 알킬 기, 및 C_{6-20} 아릴 기로 이루어지는 군 중에서 독립적으로 선택되고; 각 R^a는 수소, C_{1-8} 알킬 기, C_{1-8} 알콕시 기, C_{6-20} 아릴옥시 기 및 C_{6-20} 아릴 기로 이루어진 군 중에서 독립적으로 선택되고; R^b, R^c, R^d는 각각 독립적으로 C_{1-20} 알킬 기이며;

[0926] Cy는 사이클로펜타디에닐형 모이어티이고 L 및 X^3에 공유 결합되며,

[0927] 각 X^1은 활성화 가능한 리간드이고;

[0928] X^3은 수소, 또는 화학식 $-Si(R^e)_3$의 실릴 기, 또는 화학식 $Sn(R^e)_3$의 주석 기이며; 여기서, 각 R^e는 수소, C_{1-8} 알킬 기, C_{1-8} 알콕시 기, C_{6-20} 아릴옥시 기, 및 C_{6-20} 아릴 기로 이루어지는 군 중에서 독립적으로 선택되고; 그리고

[0929] L은 Cy와 P를 연결하는 원자의 근접한 사슬을 함유하는 가교 기로서, 여기서 근접한 사슬은 2개 또는 3개의 원자를 함유함; 및

[0930] ii) 촉매 활성화제.

도면의 간단한 설명

[0931] 도 1은 본 개시내용의 유기금속 복합체인 복합체 1의 오크 리지 열적 타원체 플롯(Oak Ridge Thermal Ellipsoid Plot)(ORTEP)을 보여준다. ORTEP는 X-선 회절에 의해 결정된 본 개시내용의 유기금속 복합체의 분자 구조의 표현이다.

도 2는 본 개시내용의 유기금속 복합체인 복합체 2의 오크 리지 열적 타원체 플롯(ORTEP)을 보여준다. ORTEP는 X-선 회절에 의해 결정된 본 개시내용의 유기금속 복합*의 분자 구조의 표현이다.

도 3은 본 개시내용의 유기금속 복합체인 복합체 3의 오크 리지 열적 타원체 플롯(ORTEP)을 보여준다. ORTEP는 X-선 회절에 의해 결정된 본 개시내용의 유기금속 복합*의 분자 구조의 표현이다.

도 4는 본 개시내용의 유기금속 복합체인 복합체 10의 오크 리지 열적 타원체 플롯(ORTEP)을 보여준다. ORTEP는 X-선 회절에 의해 결정된 본 개시내용의 유기금속 복합*의 분자 구조의 표현이다.

발명을 실시하기 위한 구체적인 내용

[0932] 본원에 사용된 바와 같이, 용어 "단량체"는 화학적으로 반응하여 그 자체 또는 다른 단량체와 화학적으로 결합되어 중합체를 형성할 수 있는 소분자를 지칭한다.

[0933] 본원에 사용된 바와 같이, 용어 "α-올레핀" 또는 "알파-올레핀"은 사슬의 한쪽 끝에 이중 결합이 있는 3 내지 20개의 탄소 원자를 함유하는 선형 탄화수소 사슬을 갖는 단량체를 기술하기 위해 사용되며; 동등한 용어는 "선형 α-올레핀"이다. 본원에 사용된 바와 같이, 용어 "폴리에틸렌" 또는 "에틸렌 중합체"는 에틸렌 단량체와 선택적으로 하나 이상의 추가 단량체로부터 생성된 거대분자를 지칭하며; 에틸렌 중합체를 만드는 데 사용된 특정 촉매 또는 특정 공정에 상관하지 않는다. 폴리에틸렌 기술에서 하나 이상의 추가적인 단량체는 "공단량체(들)"라 불리며 종종 α-올레핀을 포함한다. 용어 "단일중합체"는 한 가지 유형의 단량체만을 함유하는 중합체를 지칭한다. "에틸렌 단일중합체"는 중합 가능한 단량체로서 에틸렌만을 사용하여 제조된다. "공중합체"라는 용어는 2가지 유형 이상의 단량체를 함유하는 중합체를 지칭한다. "에틸렌 공중합체"는 에틸렌과 하나 이상의 다른 유형의 중합 가능한 단량체를 사용하여 제조된다. 일반적인 폴리에틸렌으로는 고밀도 폴리에틸렌(HDPE), 중밀도 폴리에틸렌(MDPE), 선형 저밀도 폴리에틸렌(LLDPE), 극저밀도(very low density) 폴리에틸렌(VLDPE), 초저밀도(ultralow density) 폴리에틸렌(ULDPE), 플라스토머 및 엘라스토머를 포함한다. 폴리에틸렌이라는 용어는 또한 에틸렌 외에도 2가지 이상의 공단량체를 포함할 수 있는 폴리에틸렌 삼원공중합체를 포함한다. 폴리에틸렌이라는 용어는 또한 상기에 기술된 폴리에틸렌의 조합 또는 블렌드도 포함한다.

[0934] 본원에 사용된 바와 같이, 용어 "하이드로카르빌", "하이드로카르빌 라디칼" 또는 "하이드로카르빌 기"는 적어도 하나의 수소 원자가 부족한, 수소와 탄소를 포함하는 선형, 분지형, 환형, 비환형, 지방족, 올레핀(즉, 이중 결합 불포화를 가짐), 아세틸렌(즉, 삼중 결합 불포화를 가짐) 및 아릴(방향족) 기를 지칭한다. 따라서, 관련 기술분야의 기술자는 "하이드로카르빌 기"가 비제한적인 예의 제공을 통해, 1차, 2차(예를 들어, 사이클로알킬기) 또는 3차 알킬 기일 수 있는 알킬 기; 알케닐 기; 알키닐 기; 및 아릴 기를 포함한다는 것을 이해할 것이다. 용어 "환형 하이드로카르빌 기"는 용어 "하이드로카르빌 기"의 하위집합이며, 구체적으로 적어도 하나의 환형 모이어티를 포함하고 이들에 존재하는 하나 이상의 방향족 고리 및/또는 하나 이상의 비방향족 고리를 가질 수 있는 하이드로카르빌 기를 의미한다. 용어 "비환형 하이드로카르빌 기"는 용어 "하이드로카르빌 기"의 하위 집합이며, 구체적으로 이들에 존재하는 방향족 또는 비방향족 고리 구조와 같은 환형 모이어티를 갖지 않는 하이드로카르빌 기를 의미한다.

[0935] 본원에 사용된 바와 같이, 용어 "헤테로원자"는 탄소에 결합될 수 있는, 탄소 및 수소 외에 다른 임의의 원자를 포함한다. 용어 "헤테로원자 함유" 또는 "헤테로원자 함유 하이드로카르빌 기"는 수소 원자를 포함하지 않는 하나 이상의 비탄소 원자가 하이드로카르빌 기에 존재한다는 것을 의미한다. 헤테로원자 함유 하이드로카르빌 기에 존재할 수 있는 비탄소 원자(및 비수소 원자)의 일부 비제한적 예는 N, O, S, P 및 Si뿐만 아니라 예를 들어 F 및/또는 Br과 같은 할라이드, 뿐만 아니라 Sn과 같은 금속이다. 헤테로원자 함유 하이드로카르빌 기의 일부 비제한적 예로는, 예를 들어 아릴옥시 기, 알콕시 기, 알킬아릴옥시 기, 아릴알킬옥시, 실릴 기, 및 실록시 기를 포함한다. 헤테로원자 함유 하이드로카르빌 기의 추가 비제한적 예로는 일반적으로, 예를 들어 이민, 아민 모이어티, 산화물 모이어티, 포스핀 모이어티, 에테르, 케톤, 헤테로환형 화합물, 옥사졸린, 티오에테르 등을 포함한다. 용어 "환형 헤테로원자 함유 하이드로카르빌 기"는 용어 "헤테로원자 함유 하이드로카르빌 기"의 하위집합이고, 구체적으로 적어도 하나의 환형 모이어티를 포함하고, 이들에 존재하는 하나 이상의 방향족 고리, 및/또는 하나 이상의 비방향족 고리를 가질 수 있는 하이드로카르빌 기를 함유하는 헤테로원자를 의미한다. 용어 "비환형 헤테로원자 함유 하이드로카르빌 기"는 용어 "헤테로원자 함유 하이드로카르빌 기"의 하위집합이고, 구체적으로 이들에 존재하는 방향족 또는 비방향족 고리 구조와 같이 환형 모이어티를 갖지 않는 헤테로원자 함유 하이드로카르빌 기를 의미한다.

[0936] 본 개시내용의 실시양태에서, 하이드로카르빌 기를 함유하는 헤테로원자는 붕소, 알루미늄, 규소, 게르마늄, 질소, 인, 산소 및 황으로 이루어지는 군 중에서 선택되는 1 내지 3개의 원자를 함유하는 하이드로카르빌 기이다.

[0937] 본 개시내용의 실시양태에서, 환형 헤테로원자 함유 하이드로카르빌 기는 붕소, 알루미늄, 규소, 게르마늄, 질

소, 인, 산소 및 황으로 이루어지는 군 중에서 선택되는 1 내지 3개의 원자를 함유하는 환형 하이드로카르빌 기이다.

[0938] 용어 "헤테로환형 기"는 용어 "환형 헤테로원자 함유 하이드로카르빌 기"의 하위집합이고, 구체적으로 고리 구조 내에 예를 들어 붕소, 알루미늄, 규소, 게르마늄, 질소, 인, 산소 및 황으로 이루어지는 군 중에서 선택되는 적어도 하나의 헤테로원자를 추가로 포함하는 탄소 백본을 갖는 고리 시스템을 지칭한다.

[0939] 본원에 사용된 바와 같이, "알킬 라디칼" 또는 "알킬 기"는 하나의 수소 기가 부족한 선형, 분지형 및 환형 파라핀 기를 포함하고; 비제한적 예로는 메틸($-CH_3$) 및 에틸($-CH_2CH_3$) 기를 포함한다. 용어 "알케닐 라디칼" 또는 "알케닐 기"는 하나의 수소 기가 부족한 적어도 하나의 탄소-탄소 이중 결합을 함유하는 선형, 분지형 및 환형 탄화수소를 지칭한다. 용어 "알키닐 라디칼" 또는 "알키닐 기"는 하나의 수소 기가 부족한 적어도 하나의 탄소-탄소 삼중 결합을 함유하는 선형, 분지형 및 환형 탄화수소를 지칭한다.

[0940] 본원에 사용된 바와 같이, 용어 "아릴 라디칼" 또는 "아릴 기"는 페닐, 나프틸, 피리딜 및 분자에 방향족 고리 구조를 갖는 다른 기를 포함하고; 비제한적 예로는 나프탈렌, 페난트렌 및 안트라센을 포함한다.

[0941] "아릴알킬"은 "알킬 기"의 하위집합이고, 아릴 기가 매달려 있는 알킬 기이며; 비제한적인 예로는 벤질, 펜에틸 및 톨릴메틸을 포함한다. "알킬아릴" 기는 "아릴 기"의 하위집합이고 하나 이상의 알킬 기가 매달려 있는 아릴 기이며; 비제한적 예로는 톨릴, 자일릴, 메시틸 및 쿠밀을 포함한다.

[0942] "알콕시 기"는 알킬 기가 매달려 있는 옥시 기이며; 예를 들어 메톡시 기, 에톡시 기, 이소프로폭시 기 등을 포함한다. "아릴알킬옥시 기"는 아릴알킬 기가 매달려 있는 옥시 기이다(명확성을 위해, 알킬 모이어티는 옥시 모이어티에 결합되고 아릴 기는 알킬 모이어티에 결합된다).

[0943] "아릴옥시" 기는 아릴 기가 매달려 있는 옥시 기이고; 그리고 예를 들어 페녹시 기 등을 포함한다. "알킬아릴옥시 기"는 알킬아릴 기가 매달려 있는 옥시 기이다(명확성을 위해, 아릴 모이어티는 옥시 모이어티에 결합되고 알킬 기는 아릴 모이어티에 결합된다).

[0944] 본 개시내용에서, 하이드로카르빌 기 또는 헤테로원자 함유 하이드로카르빌 기(또는 이들 기의 하위집합, 예컨대 알킬 기, 알콕시 기, 아릴 기, 아릴옥시 기 등)는 비치환되거나 또는 치환되는 것으로서 더 구체적으로 정의될 수 있다. 본원에 사용된 바와 같이, 용어 "비치환된"은 수소 기가 비치환된이란 용어로 지칭되는 분자 기에 결합된다는 것을 의미한다. 용어 "치환된"은 이 용어로 지칭된 기가 이 기 내의 임의의 위치에 있는 하나 이상의 수소 기를 대체하는 하나 이상의 모이어티를 보유한다는 것을 의미하며; 모이어티의 비제한적 예로는 할로겐 기(F, Cl, Br), 알킬 기, 알킬아릴 기, 아릴알킬 기, 알콕시 기, 아릴 기, 아릴옥시 기, 아미도 기, 실릴 기 또는 게르마닐 기, 하이드록실 기, 카르보닐 기, 카르복실 기, 아민 기, 포스핀 기, 페닐 기, 나프틸 기, C_1 내지 C_{10} 알킬 기, C_2 내지 C_{10} 알케닐 기, 및 이들의 조합을 포함한다.

[0945] 옥시 기는 관련 기술분야의 기술자에게 잘 알려져 있으며, 각 R' 기가 수소 또는 하이드로카르빌 기 또는 헤테로원자 함유 하이드로카르빌인 경우 화학식 -OR'로 표현될 수 있다. 옥시 기에서 R' 기는 치환되거나 비치환될 수 있다(하이드로카르빌 기 또는 헤테로원자 함유 하이드로카르빌 기인 경우).

[0946] 아미도 기는 관련 기술분야의 기술자에게 잘 알려져 있으며, 각 R' 기가 수소 또는 하이드로카르빌 기 또는 헤테로원자 함유 하이드로카르빌 기인 경우 화학식 $-NR'_2$로 표현될 수 있다. 아미도 기에서 각 R' 기는 치환되거나 비치환될 수 있다(하이드로카르빌 기 또는 헤테로원자 함유 하이드로카르빌 기인 경우).

[0947] 포스피도 기는 관련 기술분야의 기술자에게 잘 알려져 있고, 각 R' 기가 수소 또는 하이드로카르빌 기 또는 헤테로원자 함유 하이드로카르빌 기인 경우 화학식 $-PR'_2$로 표현될 수 있다. 포스피도 기에서 각 R' 기는 치환되거나 비치환될 수 있다(하이드로카르빌 기 또는 헤테로원자 함유 하이드로카르빌 기인 경우).

[0948] 티올레이트 기는 관련 기술분야의 기술자에게 잘 알려져 있으며, 각 R' 기가 수소 또는 하이드로카르빌 기 또는 헤테로원자 함유 하이드로카르빌 기인 경우 화학식 -SR'로 표현될 수 있다. 티올레이트 기에서 R' 기는 치환되거나 비치환될 수 있다(하이드로카르빌 기 또는 헤테로원자 함유 하이드로카르빌 기인 경우).

[0949] 본 개시내용의 실시양태에서, 임의의 하이드로카르빌 기 및/또는 임의의 헤테로원자 함유 하이드로카르빌 기는 비치환되거나 치환될 수 있다.

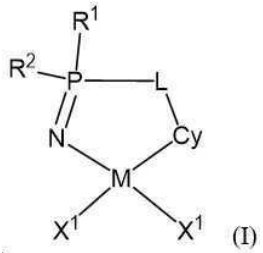
[0950] 본원에 기술된 유기금속 복합체는 올레핀으로부터 중합체를 제공하기 위해 하나 이상의 공촉매 또는 촉매 활성

화제 종에 의한 활성화를 필요로 한다. 따라서, 비활성화된 중합 촉매 또는 유기금속 복합체는 "예비중합 촉매"라고 기술될 수 있다.

[0951] 유기금속 복합체("예비중합 촉매")

[0952] 본 개시내용에 사용된 유기금속 복합체 또는 예비중합 촉매는 일반적으로 소위 "단일 부위 촉매"로 간주될 수 있지만, 용어 "단일 부위 촉매"는 이 중합 촉매를 지글러-나타 촉매 또는 크롬계 촉매와 같은 전통적인 다중 부위 중합 촉매로 간주되는 중합 촉매와 구별하기 위해 본원에 사용된다. 관련 기술분야의 기술자는, 예를 들어 메탈로센 촉매, 구속된 기하구조 촉매 및 포스핀이민 촉매가 모두 일반적으로 "단일 부위 촉매"로 간주되지만, 이러한 "단일 부위 촉매" 각각은 특정 조건 하에서 다중 부위 촉매 거동으로 간주될 수 있는 것을 나타낼 수도 있음을 이해할 것이다. 이는 본 개시내용에서 사용되는 예비중합 촉매의 경우에도 마찬가지이고, 따라서 용어 "단일 부위 촉매"는 다중 부위 거동의 측면을 입증할 수도 있는 예비중합 촉매를 배제하려는 것은 아니다.

[0953] 본 개시내용의 실시양태는 화학식 I로 표현되는 유기금속 복합체이다:

[0954] 

(I)

[0955] 여기서,

[0956] M은 Ti, Zr 또는 Hf이고;

[0957] R^1 및 R^2는 각각 독립적으로 수소 및 R^X로 이루어진 군 중에서 선택되거나; 또는 R^1 및 R^2는 이들이 부착된 P 원자와 함께, 비치환되거나, 또는 할로겐 원자, C_{1-20} 알킬 기, C_{1-20} 알콕시 기, C_{7-20} 알킬아릴 기, C_{7-20} 아릴알킬 기, C_{6-20} 아릴 기, C_{6-20} 아릴옥시 기, C_{7-20} 알킬아릴옥시 기, 및 C_{7-20} 아릴알킬옥시 기로 이루어진 군 중에서 선택되는 하나 이상의 치환체에 의해 추가로 치환되는 3-10원 헤테로환형 기를 형성하며;

[0958] 각 R^X는 할로겐 원자; 하이드로카르빌 기가 비치환되거나, 또는 하나 이상의 할로겐 원자, C_{1-20} 알킬 기, C_{1-20} 알콕시 기, C_{7-20} 알킬아릴 기, C_{7-20} 아릴알킬 기, C_{6-20} 아릴 기, C_{6-20} 아릴옥시 기, C_{7-20} 알킬아릴옥시 기, 및/또는 C_{7-20} 아릴알킬옥시 기에 의해 추가로 치환되는 C_{1-30} 하이드로카르빌 기; 화학식 $-NR'_2$의 아미도 기; 화학식 $-Si(R^a)_3$의 실릴 기; 화학식 $-Ge(R^a)_3$의 게르마닐 기; 및 화학식 $-N=P(R^b)(R^c)(R^d)$의 포스핀이민 기로 이루어진 군 중에서 독립적으로 선택되고; 여기서 각 R'는 수소, C_{1-20} 알킬 기, 및 C_{6-20} 아릴 기로 이루어지는 군 중에서 독립적으로 선택되고; 각 R^a는 수소, C_{1-8} 알킬 기, C_{1-8} 알콕시 기, C_{6-20} 아릴옥시 기 및 C_{6-20} 아릴 기로 이루어진 군 중에서 독립적으로 선택되고; R^b, R^c, R^d는 각각 독립적으로 C_{1-20} 알킬 기이며;

[0959] 각 X^1은 활성화 가능한 리간드이고;

[0960] Cy는 L에 공유 결합되고 η-결합을 통해 M에 배위된 사이클로펜타디에닐형 리간드이고; 그리고

[0961] L은 Cy와 P를 연결하는 원자의 근접한 사슬을 함유하는 가교 기로서, 여기서 근접한 사슬은 2개 또는 3개의 원자를 함유한다.

[0962] 문구 "원자의 근접한 사슬"이란, 지칭되는 원자가 순서대로 함께 결합되고, 한쪽 끝은 P에, 다른 쪽 끝은 Cy에 결합되는 것을 지칭한다.

[0963] 일부 실시양태에서, R^1 및 R^2는 각각 독립적으로 할로겐 원자; 하이드로카르빌 기가 비치환되거나, 또는 하나 이상의 할로겐 원자, C_{1-20} 알킬 기, C_{1-20} 알콕시 기, C_{7-20} 알킬아릴 기, C_{7-20} 아릴알킬 기, C_{6-20} 아릴 기, C_{6-20} 아릴옥시 기, C_{7-20} 알킬아릴옥시 기, 및/또는 C_{7-20} 아릴알킬옥시 기에 의해 추가로 치환되는 C_{1-30} 하이드로카르빌

기; 화학식 $-NR'_2$의 아미도 기; 화학식 $-Si(R^a)_3$의 실릴 기; 화학식 $-Ge(R^a)_3$의 게르마닐 기; 및 화학식 $-N=P(R^b)(R^c)(R^d)$의 포스핀이민 기로 이루어진 군 중에서 선택되고; 여기서 각 R'는 수소, C_{1-20} 알킬 기, 및 C_{6-20} 아릴 기로 이루어지는 군 중에서 독립적으로 선택되고; 여기서 각 R^a는 수소, C_{1-8} 알킬 기, C_{1-8} 알콕시 기, C_{6-20} 아릴옥시 기 및 C_{6-20} 아릴 기로 이루어지는 군 중에서 독립적으로 선택되고; 그리고 R^b, R^c, R^d는 각각 독립적으로 C_{1-20} 알킬 기이다.

[0964] 일부 실시양태에서, R^1 및 R^2는 각각 독립적으로 할로겐 원자; 하이드로카르빌 기가 비치환되거나, 또는 하나 이상의 할로겐 원자, C_{1-20} 알킬 기, C_{1-20} 알콕시 기, C_{7-20} 알킬아릴 기, C_{7-20} 아릴알킬 기, C_{6-20} 아릴 기, C_{6-20} 아릴옥시 기, C_{7-20} 알킬아릴옥시 기, 및/또는 C_{7-20} 아릴알킬옥시 기에 의해 추가로 치환되는 C_{1-30} 하이드로카르빌 기로 이루어지는 군 중에서 선택된다.

[0965] 일부 실시양태에서, R^1 및 R^2는 각각 독립적으로 하이드로카르빌 기가 비치환되거나, 또는 하나 이상의 할로겐 원자, C_{1-20} 알킬 기, C_{1-20} 알콕시 기, C_{7-20} 알킬아릴 기, C_{7-20} 아릴알킬 기, C_{6-20} 아릴 기, C_{6-20} 아릴옥시 기, C_{7-20} 알킬아릴옥시 기, 및/또는 C_{7-20} 아릴알킬옥시 기에 의해 추가로 치환되는 C_{1-30} 하이드로카르빌 기이다.

[0966] 일부 실시양태에서, R^1 및 R^2는 각각 독립적으로 비치환된 C_{1-30} 하이드로카르빌 기이다.

[0967] 일부 실시양태에서, R^1 및 R^2는 각각 독립적으로 비치환된 C_{1-20} 하이드로카르빌 기이다.

[0968] 일부 실시양태에서, R^1 및 R^2는 각각 독립적으로 비치환된 C_{1-12} 하이드로카르빌 기이다.

[0969] 일부 실시양태에서, R^1 및 R^2는 각각 독립적으로 C_{1-20} 알킬 기이다.

[0970] 일부 실시양태에서, R^1 및 R^2는 각각 독립적으로 C_{1-12} 알킬 기이다.

[0971] 일부 실시양태에서, R^1 및 R^2는 각각 독립적으로 C_{1-9} 알킬 기이다.

[0972] 일부 실시양태에서, R^1 및 R^2는 각각 독립적으로 분지형 C_{3-8} 알킬 기이다.

[0973] 일부 실시양태에서, R^1 및 R^2는 각각 독립적으로 C_{6-20} 아릴 기이다.

[0974] 일부 실시양태에서, R^1 및 R^2는 동일하다.

[0975] 일부 실시양태에서, R^1 및 R^2는 각각 독립적으로 이소프로필, 사이클로헥실 및 *tert*-부틸로 이루어지는 군 중에서 선택된다.

[0976] 일부 실시양태에서, R^1 및 R^2는 각각 이소프로필 기이다.

[0977] 일부 실시양태에서, R^1 및 R^2는 각각 사이클로헥실 기이다.

[0978] 일부 실시양태에서, R^1 및 R^2는 각각 *tert*-부틸 기이다.

[0979] 일부 실시양태에서, 각 R'는 C_{1-8} 알킬 기이다.

[0980] 일부 실시양태에서, 각 R'는 C_{6-20} 아릴 기이다.

[0981] 일부 실시양태에서, 각 R'는 메틸 기이다.

[0982] 일부 실시양태에서, 각 R'는 페닐 기이다.

[0983] 일부 실시양태에서, 각 R^a는 C_{1-8} 알킬 기이다.

[0984] 일부 실시양태에서, 각 R^a는 C_{6-20} 아릴 기이다.

[0985] 일부 실시양태에서, 각 R^a는 메틸 기이다.

[0986] 일부 실시양태에서, 각 R^a는 에틸 기이다.

[0987] 일부 실시양태에서, 각 R^a는 페닐 기이다.

[0988] 일부 실시양태에서, 각각의 R^b, R^c, R^d는 C_{1-12} 알킬 기이다.

[0989] 일부 실시양태에서, 각각의 R^b, R^c, R^d는 C_{1-9} 알킬 기이다.

[0990] 일부 실시양태에서, 각각의 R^b, R^c, R^d는 C_{1-6} 알킬 기이다.

[0991] 일부 실시양태에서, 각각의 R^b, R^c, R^d는 분지형 C_{3-8} 알킬 기이다.

[0992] 일부 실시양태에서, 각각의 R^b, R^c, R^d는 이소프로필 기이다.

[0993] 일부 실시양태에서, 각각의 R^b, R^c, R^d는 사이클로헥실 기이다.

[0994] 일부 실시양태에서, 각각의 R^b, R^c, R^d는 *tert*-부틸 기이다.

[0995] 일부 실시양태에서, R^1 및 R^2는 이들이 부착된 P 원자와 함께, 비치환되거나 또는 할로겐 원자, C_{1-20} 알킬 기, C_{1-20} 알콕시 기, C_{7-20} 알킬아릴 기, C_{7-20} 아릴알킬 기, C_{6-20} 아릴 기, C_{6-20} 아릴옥시 기, C_{7-20} 알킬아릴옥시 기, 및 C_{7-20} 아릴알킬옥시 기로 이루어지는 군 중에서 선택되는 하나 이상의 치환체에 의해 추가로 치환되는 3-10원 헤테로환형 기를 함께 형성한다.

[0996] 일부 실시양태에서, R^1 및 R^2는 이들이 함께 부착된 P 원자와 함께, 비치환되거나 또는 할로겐 원자, C_{1-20} 알킬 기, C_{1-20} 알콕시 기, C_{7-20} 알킬아릴 기, C_{7-20} 아릴알킬 기, C_{6-20} 아릴 기, C_{6-20} 아릴옥시 기, C_{7-20} 알킬아릴옥시 기, 및 C_{7-20} 아릴알킬옥시 기로 이루어지는 군 중에서 선택되는 하나 이상의 치환체에 의해 추가로 치환되는 4-6원 헤테로환형 기를 함께 형성한다.

[0997] 일부 실시양태에서, R^1 및 R^2는 이들이 함께 부착된 P 원자와 함께 비치환되거나 또는 할로겐 원자, C_{1-20} 알킬 기, C_{1-20} 알콕시 기, C_{7-20} 알킬아릴 기, C_{7-20} 아릴알킬 기, C_{6-20} 아릴 기, C_{6-20} 아릴옥시 기, C_{7-20} 알킬아릴옥시 기, 및 C_{7-20} 아릴알킬옥시 기로 이루어지는 군 중에서 선택되는 하나 이상의 치환체에 의해 추가로 치환되는 5-6원 헤테로환형 기를 형성한다.

[0998] 각 X^1은 독립적으로 활성화 가능한 리간드이다. 각 X^1은 동일하거나 상이할 수 있다. 일부 실시양태에서, 각 X^1은 동일하다.

[0999] 용어 "활성화 가능한 리간드"는 올레핀 중합을 용이하게 하기 위해, 촉매 활성화제 및/또는 공촉매에 의해 활성화될 수 있는 리간드를 지칭한다. 활성화 가능한 리간드 X^1은 양성자분해 반응을 통해 금속 중심 M에서 절단될 수 있거나, 또는 적합한 산성 또는 친전자성 촉매 활성화제 화합물(또한 "공촉매" 화합물이라고도 함) 각각에 의해 금속 중심 M으로부터 추출될 수 있으며, 이들의 예는 이하에 기술된다. 활성화 가능한 리간드 X^1은 또한 금속 중심 M에서 절단되거나 추출되는 다른 리간드로 전환될 수 있다(예: 할로겐화물은 알킬 기로 전환될 수 있음). 임의의 단일 이론으로 얽매려는 것은 아니지만, 양성자분해 또는 추출 반응은 올레핀을 중합시킬 수 있는 활성 "양이온성" 금속 중심을 생성한다.

[1000] 일부 실시양태에서, 각 X^1은 수소 원자; 할로겐 원자; C_{1-10} 하이드로카르빌 기; C_{1-10} 알콕시 기; C_{6-10} 아릴 옥사이드 기, 이들 각각에서 상기 하이드로카르빌, 알콕시, 및 아릴 옥사이드 기는 비치환되거나, 할로겐 원자, C_{1-8} 알킬 기, C_{1-8} 알콕시 기, C_{6-10} 아릴 또는 아릴옥시 기에 의해 추가로 치환될 수 있음; 비치환되거나(즉, $-NH_2$) 또는 최대 2개의 C_{1-8} 알킬 기에 의해 치환되는 아미도 기(즉, $-NR'_2$, 여기서 각 R' = C_{1-8} 알킬); 및 비치환되거나(즉, $-PH_2$) 또는 최대 2개의 C_{1-8} 알킬 기에 의해 치환되는 포스피도 기(즉, $-PR'_2$, 여기서 각 R' = C_{1-8} 알킬)로 이루어지는 군 중에서 독립적으로 선택된다.

[1001] 일부 실시양태에서, 각 X^1은 할로겐, 수소, 화학식 $-NR^{€}_2$의 아미도 기, C_{1-20} 알킬 기, C_{1-20} 알콕시 기, C_{7-20} 알킬아릴 기, C_{7-20} 아릴알킬 기, C_{6-20} 아릴 기, C_{6-20} 아릴옥사이드 기, C_{7-20} 알킬아릴옥시 기, 및 C_{7-20} 아릴알킬옥시 기로 이루어진 군 중에서 독립적으로 선택되고; 여기서 각 $R^{€}$는 수소, C_{1-20} 알킬 기, 및 C_{6-20} 아릴 기로 이루어지는 군 중에서 독립적으로 선택된다.

[1002] 일부 실시양태에서, 2개의 활성화 가능한 X^1 리간드는 또한 서로 연결될 수 있고, 예를 들어 치환된 또는 비치환된 디엔 리간드 (즉, 1,3-디엔); 또는 탈국재화된 헤테로원자 함유 기, 예컨대 아세테이트 기를 형성할 수 있다.

[1003] 본 개시내용의 실시양태에서, 각 X^1은 할라이드 원자, C_{1-4} 알킬 기 및 벤질 기로 이루어지는 군 중에서 독립적으로 선택된다.

[1004] 본 개시내용의 실시양태에서, 각각 X^1은 C_{1-6} 알킬 기, C_{7-10} 아릴알킬 기, 및 할로겐으로 이루어지는 군 중에서 독립적으로 선택된다.

[1005] 일부 실시양태에서 각 X^1은 비치환된 C_{1-6} 알킬 및 할로겐 중에서 독립적으로 선택된다.

[1006] 실시양태에서, 각 X^1은 할로겐 원자(예를 들어, 염화물), 또는 하이드로카르빌 기(예를 들어, 메틸 기, 벤질 기)이다.

[1007] 실시양태에서, 각 X^1은 벤질 기이다.

[1008] 실시양태에서, 각 X^1은 $-CH_2C_6F_5$ 기 (즉, 펜타플루오로벤질 기)이다.

[1009] 실시양태에서, 각 X^1은 메틸이다.

[1010] 일부 실시양태에서, 각 X^1은 독립적으로 메틸 또는 Cl이다.

[1011] 일부 실시양태에서, 각 X^1은 할로겐이다.

[1012] 일부 실시양태에서, 각 X^1은 Cl이다.

[1013] 일부 실시양태에서, M은 Ti이다.

[1014] 일부 실시양태에서, M은 Hf이다.

[1015] 일부 실시양태에서, M은 Zr이다.

[1016] 본 개시내용에 사용된 바와 같이, "Cy"는 5원 탄소 고리를 지칭하고 탈국재화된 π-결합을 통해, 또는 일부 경우에는 σ-결합을 통해 금속 중심에 배위할 수 있는 사이클로펜타디에닐 모이어티를 구조 내에 함유하는 "사이클로펜타디에닐형 리간드"를 나타낸다.

[1017] 일부 실시양태에서, "Cy"는 고리 내에 탈국재화된 π-결합을 갖는(예를 들어, 방향족성) 5원 탄소 고리를 지칭하고 금속 중심에 배위할 수 있는 사이클로펜타디에닐 모이어티를 구조 내에 함유하는 "사이클로펜타디에닐형 리간드"를 나타낸다.

[1018] 본 개시내용에서, 사이클로펜타디에닐형 리간드, Cy는 L에 공유 결합하고 M에 η(또는 에타-) 결합을 통해 배위한다. 관련 기술자는 η-결합이 리간드의 합토성(hapticity)을 의미하고 전형적으로 η^5-결합에 의한 금속 중심 M에 대한 Cy 리간드의 배위를 지칭하지만, η^3-결합 및 η^1-결합도 일부 경우에 사이클로펜타디에닐형 리간드의 본질에 따라 가능하다.

[1019] 일부 실시양태에서, 사이클로펜타디에닐형 리간드, Cy는 L에 공유 결합하고 η^5-결합 또는 η^3-결합, 또는 η^1-결합을 통해 M에 배위한다.

[1020] 일부 실시양태에서, 사이클로펜타디에닐형 리간드, Cy는 L에 공유 결합하고 η^5-결합 또는 η^3-결합을 통해 M에 배위한다.

[1021] 일부 실시양태에서, 사이클로펜타디에닐형 리간드, Cy는 L에 공유 결합하고 η^5-결합 또는 η^1-결합을 통해 M에 배위한다.

[1022] 일부 실시양태에서, 사이클로펜타디에닐형 리간드, Cy는 L에 공유 결합하고 η^5-결합을 통해 M에 배위한다.

[1023] 일부 실시양태에서, 사이클로펜타디에닐형 리간드, Cy는 L에 공유 결합하고 η^3-결합을 통해 M에 배위한다.

[1024] 일부 실시양태에서, 사이클로펜타디에닐형 리간드, Cy는 L에 공유 결합하고 η^1-결합을 통해 M에 배위한다.

[1025] 본원에 사용된 바와 같이, 용어 "사이클로펜타디에닐형 리간드"는 에타-5(또는 일부 경우 에타-3, 또는 일부 경우 에타-1) 결합을 통해 금속에 결합하는 적어도 하나의 5-탄소 고리를 함유하는 리간드를 포함하는 것을 의미한다. 따라서, 용어 "사이클로펜타디에닐형 리간드"는, 예를 들어 비치환된 사이클로펜타디에닐, 단일 또는 다중 치환된 사이클로펜타디에닐, 비치환된 인데닐, 단일 또는 다중 치환된 인데닐, 비치환된 플루오레닐 및 단일 또는 다중 치환된 플루오레닐을 포함한다. 인데닐 및 플루오레닐 리간드의 수소화된 버전은 또한 에타-5(또는 일부 경우 에타-3, 또는 일부 경우 에타-1) 결합을 통해 금속에 결합하는 5-탄소 고리가 온전하게 남아 있는 한, 본 개시내용에 사용되는 것으로 고려된다.

[1026] 본 개시내용의 실시양태에서, 사이클로펜타디에닐 리간드, 인데닐 리간드(또는 이의 수소화된 버전) 및 플루오레닐 리간드(또는 이의 수소화된 버전)에 대한 치환체는 하이드로카르빌 기가 비치환되거나 또는 예를 들어 할로겐(예컨대, 펜타플루오로벤질 기, $-CH_2C_6F_5$에 대한 경우), C_{1-20} 알콕시 기, C_{6-20} 아릴 기, C_{6-20} 아릴옥시 기(이들 각각은 예를 들어 할로겐에 의해 추가로 치환될 수 있음)에 의해 추가로 치환될 수 있는 C_{1-30} 하이드로카르빌 기; 비치환되거나 또는 최대 2개의 C_{1-8} 알킬 기에 의해 치환되는 아미도 기; 비치환되거나 또는 최대 2개의 C_{1-8} 알킬 기에 의해 치환되는 포스피도 기; 각 R^a가 수소, C_{1-8} 알킬 기, C_{1-8} 알콕시 기, C_{6-20} 아릴옥시 기 및 C_{6-20} 아릴 기로 이루어지는 군 중에서 독립적으로 선택되는 화학식 $-Si(R^a)_3$의 실릴 기; 및 R^a가 바로 위에 정의된 바와 같은 화학식 $-Ge(R^a)_3$의 게르마닐 기로 이루어지는 군 중에서 선택될 수 있다.

[1027] 일부 실시양태에서, Cy는 헤테로원자 치환된 사이클로펜타디에닐형 리간드, 및 헤테로원자 함유 사이클로펜타디에닐형 리간드로 이루어지는 군 중에서 선택된다.

[1028] 일부 실시양태에서, Cy는 치환된 또는 비치환된 인데노[1,2-*b*]인돌릴 및 인데노[2,1-*b*]인돌릴 리간드로 이루어지는 군 중에서 선택된다.

[1029] 일부 실시양태에서, Cy는 비치환된 또는 치환된 사이클로펜타디에닐 리간드; 비치환된 또는 치환된 사이클로펜테노페난트릴 리간드 및 이의 수소화된 버전; 비치환되거나 치환된 인데닐 리간드 및 이의 수소화된 버전; 비치환되거나 또는 치환된 플루오레닐 리간드 및 이의 수소화된 버전; 비치환되거나 치환된 옥타하이드로플루오레닐 리간드; 및 비치환되거나 치환된 아줄레닐 리간드로 이루어지는 군 중에서 선택된다.

[1030] 일부 실시양태에서, Cy는 비치환되거나 또는 다음으로 이루어지는 군 중에서 독립적으로 선택되는 최대 4개의 치환체에 의해 치환되는 사이클로펜타디에닐 리간드이다:

[1031] 할로겐;

[1032] 수소;

[1033] C_{1-30} 하이드로카르빌 기로서, 여기서 하이드로카르빌 기는 비치환되거나, 또는 할로겐 원자, C_{1-20} 알킬 기, C_{1-20} 알콕시 기, C_{7-20} 알킬아릴 기, C_{7-20} 아릴알킬 기, C_{6-20} 아릴 기, C_{6-20} 아릴옥시 기, C_{7-20} 알킬아릴옥시 기, 및 C_{7-20} 아릴알킬옥시 기로 이루어지는 군 중에서 선택되는 하나 이상의 치환체에 의해 추가로 치환되는 C_{1-30} 하이드로카르빌 기;

[1034] 헤테로원자 함유 C_{1-30} 하이드로카르빌 기로서, 여기서 헤테로원자 함유 하이드로카르빌 기는 비치환되거나, 또는 할로겐 원자, C_{1-20} 알킬 기, C_{1-20} 알콕시 기, C_{7-20} 알킬아릴 기, C_{7-20} 아릴알킬 기, C_{6-20} 아릴 기, C_{6-20} 아릴옥시 기, C_{7-20} 알킬아릴옥시 기, 및 C_{7-20} 아릴알킬옥시 기로 이루어지는 군 중에서 선택되는 하나 이상의 치환체에 의해 추가로 치환되는 헤테로원자 함유 C_{1-30} 하이드로카르빌 기;

[1035] 옥시 기, -OR';

[1036] 아미도 기, $-NR'_2$;

[1037] 포스피도 기, $-PR'_2$;

[1038] 티올레이트 기, -SR';

[1039] 화학식 $-Si(R^a)_3$의 실릴 기; 및

[1040] 화학식 $-Ge(R^a)_3$의 게르마닐 기;

[1041] 여기서, 사이클로펜타디에닐 리간드 상의 2개의 인접한 치환체는 선택적으로 결합되어 환형 하이드로카르빌 기 또는 환형 헤테로원자 함유 하이드로카르빌 기를 형성할 수 있고, 이 환형 하이드로카르빌 기 또는 환형 헤테로원자 함유 하이드로카르빌 기는 비치환되거나, 또는 할로겐 원자, C_{1-20} 알킬 기, C_{1-20} 알콕시 기, C_{7-20} 알킬아릴 기, C_{7-20} 아릴알킬 기, C_{6-20} 아릴 기, C_{6-20} 아릴옥시 기, C_{7-20} 알킬아릴옥시 기, C_{7-20} 아릴알킬옥시 기, 화학식 $-NR'_2$의 아미도 기, 화학식 $-PR'_2$의 포스피도 기, 화학식 -SR'의 티올레이트 기, 화학식 $-Si(R^a)_3$의 실릴 기, 및 화학식 $-Ge(R^a)_3$의 게르마닐 기로 이루어지는 군 중에서 선택되는 하나 이상의 치환체에 의해 추가로 치환되고;

[1042] 여기서 각 R'는 수소, C_{1-20} 알킬 기, 및 C_{6-20} 아릴 기로 이루어지는 군 중에서 독립적으로 선택되고;

[1043] 여기서 각 R^a는 수소, C_{1-8} 알킬 기, C_{1-8} 알콕시 기, C_{6-20} 아릴옥시 기 및 C_{6-20} 아릴 기로 이루어지는 군 중에서 독립적으로 선택된다.

[1044] 일부 실시양태에서, Cy는 비치환되거나 또는 다음으로 이루어지는 군 중에서 독립적으로 선택되는 최대 6개의 치환체에 의해 치환되는 인데닐 리간드이다:

[1045] 할로겐;

[1046] 수소;

[1047] C_{1-30} 하이드로카르빌 기로서, 여기서 하이드로카르빌 기는 비치환되거나, 또는 할로겐 원자, C_{1-20} 알킬 기, C_{1-20} 알콕시 기, C_{7-20} 알킬아릴 기, C_{7-20} 아릴알킬 기, C_{6-20} 아릴 기, C_{6-20} 아릴옥시 기, C_{7-20} 알킬아릴옥시 기, 및 C_{7-20} 아릴알킬옥시 기로 이루어지는 군 중에서 선택되는 하나 이상의 치환체에 의해 추가로 치환되는 C_{1-30} 하이드로카르빌 기;

[1048] 헤테로원자 함유 C_{1-30} 하이드로카르빌 기로서, 여기서 헤테로원자 함유 하이드로카르빌 기는 비치환되거나, 또는 할로겐 원자, C_{1-20} 알킬 기, C_{1-20} 알콕시 기, C_{7-20} 알킬아릴 기, C_{7-20} 아릴알킬 기, C_{6-20} 아릴 기, C_{6-20} 아릴옥시 기, C_{7-20} 알킬아릴옥시 기, 및 C_{7-20} 아릴알킬옥시 기로 이루어지는 군 중에서 선택되는 하나 이상의 치환체에 의

해 추가로 치환되는 헤테로원자 함유 C_{1-30} 하이드로카르빌 기;

[1049] 옥시 기, -OR';

[1050] 아미도 기, $-NR'_2$;

[1051] 포스피도 기, $-PR'_2$;

[1052] 티올레이트 기, -SR';

[1053] 화학식 $-Si(R^a)_3$의 실릴 기; 및

[1054] 화학식 $-Ge(R^a)_3$의 게르마닐 기;

[1055] 여기서, 인데닐 리간드 상의 2개의 인접한 치환체는 선택적으로 결합되어 환형 하이드로카르빌 기 또는 환형 헤테로원자 함유 하이드로카르빌 기를 형성할 수 있고, 이 환형 하이드로카르빌 기 또는 환형 헤테로원자 함유 하이드로카르빌 기는 비치환되거나, 또는 할로겐 원자, C_{1-20} 알킬 기, C_{1-20} 알콕시 기, C_{7-20} 알킬아릴 기, C_{7-20} 아릴알킬 기, C_{6-20} 아릴 기, C_{6-20} 아릴옥시 기, C_{7-20} 알킬아릴옥시 기, C_{7-20} 아릴알킬옥시 기, 화학식 $-NR'_2$의 아미도 기, 화학식 $-PR'_2$의 포스피도 기, 화학식 -SR'의 티올레이트 기, 화학식 $-Si(R^a)_3$의 실릴 기, 및 화학식 $-Ge(R^a)_3$의 게르마닐 기로 이루어지는 군 중에서 선택되는 하나 이상의 치환체에 의해 추가로 치환되고;

[1056] 여기서 각 R'는 수소, C_{1-20} 알킬 기, 및 C_{6-20} 아릴 기로 이루어지는 군 중에서 독립적으로 선택되고;

[1057] 여기서 각 R^a는 수소, C_{1-8} 알킬 기, C_{1-8} 알콕시 기, C_{6-20} 아릴옥시 기 및 C_{6-20} 아릴 기로 이루어지는 군 중에서 독립적으로 선택된다.

[1058] 일부 실시양태에서, Cy는 비치환되거나 또는 다음으로 이루어지는 군 중에서 독립적으로 선택되는 최대 8개의 치환체에 의해 치환되는 플루오레닐 리간드이다:

[1059] 할로겐;

[1060] 수소;

[1061] C_{1-30} 하이드로카르빌 기로서, 여기서 하이드로카르빌 기는 비치환되거나, 또는 할로겐 원자, C_{1-20} 알킬 기, C_{1-20} 알콕시 기, C_{7-20} 알킬아릴 기, C_{7-20} 아릴알킬 기, C_{6-20} 아릴 기, C_{6-20} 아릴옥시 기, C_{7-20} 알킬아릴옥시 기, 및 C_{7-20} 아릴알킬옥시 기로 이루어지는 군 중에서 선택되는 하나 이상의 치환체에 의해 추가로 치환되는 C_{1-30} 하이드로카르빌 기;

[1062] 헤테로원자 함유 C_{1-30} 하이드로카르빌 기로서, 여기서 헤테로원자 함유 하이드로카르빌 기는 비치환되거나, 또는 할로겐 원자, C_{1-20} 알킬 기, C_{1-20} 알콕시 기, C_{7-20} 알킬아릴 기, C_{7-20} 아릴알킬 기, C_{6-20} 아릴 기, C_{6-20} 아릴옥시 기, C_{7-20} 알킬아릴옥시 기, 및 C_{7-20} 아릴알킬옥시 기로 이루어지는 군 중에서 선택되는 하나 이상의 치환체에 의해 추가로 치환되는 헤테로원자 함유 C_{1-30} 하이드로카르빌 기;

[1063] 옥시 기, -OR';

[1064] 아미도 기, $-NR'_2$;

[1065] 포스피도 기, $-PR'_2$;

[1066] 티올레이트 기, -SR';

[1067] 화학식 $-Si(R^a)_3$의 실릴 기; 및

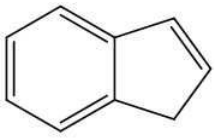
[1068] 화학식 $-Ge(R^a)_3$의 게르마닐 기;

[1069] 여기서, 플루오레닐 리간드 상의 2개의 인접한 치환체는 선택적으로 결합되어 환형 하이드로카르빌 기 또는 환형 헤테로원자 함유 하이드로카르빌 기를 형성할 수 있고, 이 환형 하이드로카르빌 기 또는 환형 헤테로원자 함유 하이드로카르빌 기는 비치환되거나, 또는 할로겐 원자, C_{1-20} 알킬 기, C_{1-20} 알콕시 기, C_{7-20} 알킬아릴 기, C_{7-20} 아릴알킬 기, C_{6-20} 아릴 기, C_{6-20} 아릴옥시 기, C_{7-20} 알킬아릴옥시 기, C_{7-20} 아릴알킬옥시 기, 화학식 $-NR'_2$의 아미도 기, 화학식 $-PR'_2$의 포스피도 기, 화학식 $-SR'$의 티올레이트 기, 화학식 $-Si(R^a)_3$의 실릴 기, 및 화학식 $-Ge(R^a)_3$의 게르마닐 기로 이루어지는 군 중에서 선택되는 하나 이상의 치환체에 의해 추가로 치환되고;

[1070] 여기서 각 R'는 수소, C_{1-20} 알킬 기, 및 C_{6-20} 아릴 기로 이루어지는 군 중에서 독립적으로 선택되고; 그리고

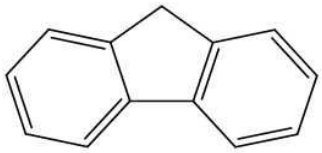
[1071] 여기서 각 R^a는 수소, C_{1-8} 알킬 기, C_{1-8} 알콕시 기, C_{6-20} 아릴옥시 기 및 C_{6-20} 아릴 기로 이루어지는 군 중에서 독립적으로 선택된다.

[1072] 관련 기술분야의 기술자는 인데닐 기가 화합물 인덴에서 유래된 하이드로카르빌 기임을 이해한다:



[1073] 인덴

[1074] 관련 기술분야의 기술자는 플루오레닐 기가 화합물 플루오렌에서 유래된 하이드로카르빌 기임을 이해한다:



[1075] 플루오렌

[1076] 사이클로펜타디에닐처럼, 인데닐 또는 플루오레닐 기는 탈양성자화 후, η^5-결합(또는 일부 경우, η^3-결합, 또는 일부 경우, η^1-결합)에 의해 금속 중심에 배위할 수 있다.

[1077] 일부 실시양태에서, Cy는 비치환된 또는 치환된 인데닐 리간드이다.

[1078] 일부 실시양태에서, Cy는 비치환된 인데닐 리간드이다.

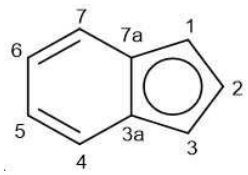
[1079] 일부 실시양태에서, Cy는 치환된 인데닐 리간드이다.

[1080] 일부 실시양태에서, Cy는 비치환된 또는 치환된 플루오레닐 리간드이다.

[1081] 일부 실시양태에서, Cy는 비치환된 플루오레닐 리간드이다.

[1082] 일부 실시양태에서, Cy는 치환된 플루오레닐 리간드이다.

[1083] 일부 실시양태에서, Cy는 1번 위치 또는 2번 위치에서 L 기에 부착된 비치환된 인데닐 리간드이고, 인데닐 고리 상의 위치는 다음과 같이 번호가 매겨진다:

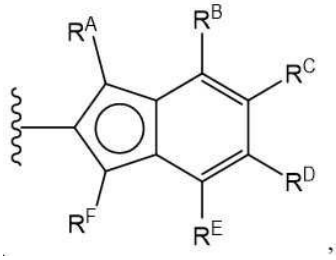


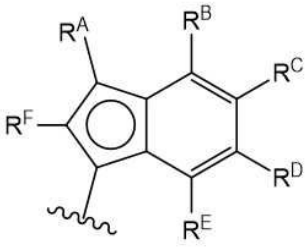
[1084]

[1085] 일부 실시양태에서, Cy는 1번 위치에서 L 기에 부착된 비치환된 인데닐 리간드이다.

[1086] 일부 실시양태에서, Cy는 2번 위치에서 L 기에 부착된 비치환된 인데닐 리간드이다.

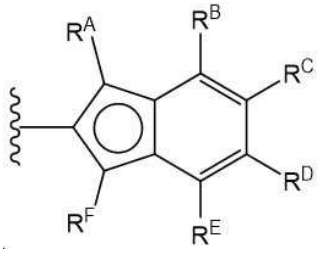
[1087] 일부 실시양태에서, Cy는 다음 화학식인 것이다:

[1088] 

, 또는 

[1089] 여기서, 는 L에 대한 부착 지점을 나타내고, 각 R^A, R^B, R^C, R^D, R^E 및 R^F는 H, C_{1-12} 하이드로카르빌 기 및 C_{1-12} 헤테로원자 함유 하이드로카르빌 기 중에서 독립적으로 선택된다. 일부 실시양태에서, 각 R^A, R^B, R^C, R^D, R^E 및 R^F는 독립적으로 H 및 비치환된 C_{1-6} 알킬 기 중에서 선택된다. 일부 실시양태에서, 각 R^A, R^B, R^C, R^D, R^E 및 R^F는 H이다. 일부 실시양태에서, R^B, R^C, R^D 및 R^E 중 2개의 인접한 기는 결합되어 고리를 형성한다.

[1090] 일부 실시양태에서, Cy는 다음 화학식인 것이다:

[1091] 

[1092] 여기서, 는 L에 대한 부착 지점을 나타내고, 각 R^A, R^B, R^C, R^D, R^E 및 R^F는 H, C_{1-12} 하이드로카르빌 기 및 C_{1-12} 헤테로원자 함유 하이드로카르빌 기 중에서 독립적으로 선택된다. 일부 실시양태에서, 각 R^A, R^B, R^C, R^D, R^E 및 R^F는 독립적으로 H 및 비치환된 C_{1-6} 알킬 기 중에서 독립적으로 선택된다. 일부 실시양태에서, 각 R^A, R^B, R^C, R^D, R^E 및 R^F는 H이다. 일부 실시양태에서, R^B, R^C, R^D 및 R^E 중 2개의 인접한 기는 결합되어 고리를 형성한다.

[1093] 일부 실시양태에서, L은 Cy와 P를 연결하는 원자의 근접한 사슬을 함유하는 가교 기로서, 여기서 근접한 사슬은 3개의 원자를 함유한다. 일부 실시양태에서, L은 Cy와 P를 연결하는 원자의 근접한 사슬을 함유하는 가교 기로서, 여기서 근접한 사슬은 2개의 원자를 함유한다. 문구 "원자의 근접한 사슬"이란, 지칭되는 원자가 순서대로 함께 결합되어, 한쪽 끝은 P에, 그리고 다른 끝은 Cy에 결합된 것을 의미한다.

[1094] 일부 실시양태에서, L은 적어도 하나의 환형 하이드로카르빌 기 또는 적어도 하나의 환형 헤테로원자 함유 하이드로카르빌 기를 함유하는 가교 기이다.

[1095] 일부 실시양태에서, L은 적어도 하나의 사이클로알킬렌, 헤테로사이클로알킬렌, 아릴렌 또는 헤테로아릴렌 기를 함유하는 가교 기이다. 용어 "사이클로알킬렌"은 사이클로지방족 고리를 함유하는 2가 기를 지칭한다. 용어 "헤테로사이클로알킬렌"은 헤테로사이클로지방족 고리를 함유하는 2가 기를 지칭한다. 용어 "아릴렌"은 방향족 고리를 함유하는 2가 기를 지칭한다. 용어 "헤테로아릴렌"은 헤테로방향족 고리를 함유하는 2가 기를 지칭한다.

[1096] 일부 실시양태에서, L은 적어도 하나의 아릴렌 또는 헤테로아릴렌 기를 함유하는 가교 기이다.

[1097] 일부 실시양태에서, L은 적어도 하나의 사이클로알킬렌, 또는 헤테로사이클로알킬렌 기를 함유하는 가교 기이다.

[1098] 일부 실시양태에서, L은 탄소 원자, 수소 원자 및 헤테로원자 중에서 선택되는 1 내지 50개의 원자를 포함하고 적어도 하나의 페닐렌 기를 함유하는 가교 기이다.

[1099] 일부 실시양태에서, L은 적어도 하나의 아릴렌 기를 함유하는 가교 기이다. 일부 실시양태에서, L은 적어도 하

나의 페닐렌 기를 함유하는 가교 기이다.

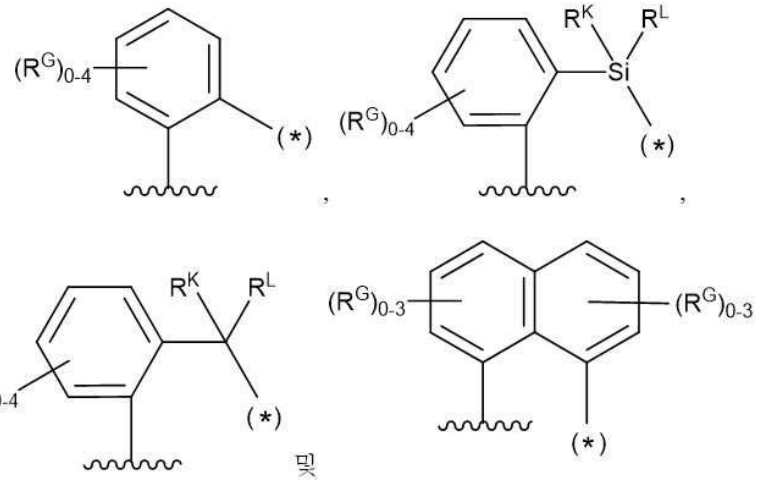
[1100] 일부 실시양태에서, L은 탄소 원자, 수소 원자 및 헤테로원자 중에서 선택되는 1 내지 50개의 원자를 포함하는 가교 기이고 적어도 하나의 아릴렌 또는 헤테로아릴렌 기를 함유한다. 일부 실시양태에서, L은 탄소 원자, 수소 원자 및 헤테로원자 중에서 선택되는 1 내지 50개의 원자를 포함하는 가교 기이고 적어도 하나의 아릴렌 기를 함유한다. 일부 실시양태에서, L은 탄소 원자, 수소 원자 및 헤테로원자 중에서 선택되는 1 내지 50개의 원자를 포함하는 가교 기이고 적어도 하나의 페닐렌 기를 함유한다. 일부 실시양태에서, L은 탄소 원자 및 수소 원자 중에서 선택되는 1 내지 50개의 원자를 포함하는 가교 기이고 적어도 하나의 페닐렌 기를 함유한다.

[1101] L 내의 아릴렌 또는 헤테로아릴렌 기는 P에 직접 또는 간접적으로 공유 결합될 수 있다. L 내의 아릴렌 또는 헤테로아릴렌 기는 P에 직접 공유 결합될 수 있다(즉, P에서부터 아릴렌 또는 헤테로아릴렌 기의 고리 원자까지의 공유 결합일 수 있음). 대안적으로, L 내의 아릴렌 또는 헤테로아릴렌 기는 P에 간접적으로 공유 결합될 수 있다(즉, 아릴렌 또는 헤테로아릴렌 기의 고리 원자와 P 사이에는 추가 2가 기가 있을 수 있음). 추가 2가 기는 하이드로카르빌렌 기, 예를 들어 알킬렌 기 또는 알케닐렌 기일 수 있고, 또는 하나 이상의 헤테로원자를 함유하는 2가 기일 수 있다.

[1102] L 내의 아릴렌 또는 헤테로아릴렌 기는 Cy에 직접 또는 간접적으로 공유 결합될 수 있다. L 내의 아릴렌 또는 헤테로아릴렌 기는 Cy에 직접적으로 공유 결합될 수 있다(즉, Cy에서부터 아릴렌 또는 헤테로아릴렌 기의 고리 원자에 공유 결합될 수 있음). 대안적으로, L 내의 아릴렌 또는 헤테로아릴렌 기는 Cy에 간접적으로 공유 결합될 수 있다(즉, 아릴렌 또는 헤테로아릴렌 기의 고리 원자와 Cy 사이에는 추가 2가 기가 있을 수 있음). 추가 2가 기는 하이드로카르빌렌 기, 예를 들어 알킬렌 기 또는 알케닐렌 기일 수 있고, 또는 하나 이상의 헤테로원자를 함유하는 2가 기일 수 있다.

[1103] 일부 실시양태에서, L은 Cy와 P를 연결하는 원자의 근접한 사슬을 함유하는 가교 기이고, 여기서 페닐렌 기의 인접한 탄소 원자는 원자의 근접한 사슬의 일부를 형성한다.

[1104] 일부 실시양태에서, L은 다음 중에서 선택된다:



[1105] 및

[1106] 여기서, ~~~~ 는 P에 대한 부착 지점을 나타내고, (*)는 Cy에 대한 부착 지점을 나타내며; 여기서 각 R^G는 다음으로 이루어지는 군 중에서 독립적으로 선택된다:

[1107] 할로겐;

[1108] C_{1-30} 하이드로카르빌 기로서, 여기서 하이드로카르빌 기는 비치환되거나, 또는 할로겐 원자, C_{1-20} 알킬 기, C_{1-20} 알콕시 기, C_{7-20} 알킬아릴 기, C_{7-20} 아릴알킬 기, C_{6-20} 아릴 기, C_{6-20} 아릴옥시 기, C_{7-20} 알킬아릴옥시 기, 및 C_{7-20} 아릴알킬옥시 기로 이루어지는 군 중에서 선택되는 하나 이상의 치환체에 의해 추가로 치환되는, C_{1-30} 하이드로카르빌 기;

[1109] 헤테로원자 함유 C_{1-30} 하이드로카르빌 기로서, 여기서 헤테로원자 함유 하이드로카르빌 기는 비치환되거나, 또는 할로겐 원자, C_{1-20} 알킬 기, C_{1-20} 알콕시 기, C_{7-20} 알킬아릴 기, C_{7-20} 아릴알킬 기, C_{6-20} 아릴 기, C_{6-20} 아릴옥시

기, C_{7-20} 알킬아릴옥시 기, 및 C_{7-20} 아릴알킬옥시 기로 이루어지는 군 중에서 선택되는 하나 이상의 치환체에 의해 추가로 치환되는, 헤테로원자 함유 C_{1-30} 하이드로카르빌 기;

[1110] 옥시 기, -OR';

[1111] 아미도 기, $-NR'_2$;

[1112] 포스피도 기, $-PR'_2$;

[1113] 티올레이트 기, -SR';

[1114] 화학식 $-Si(R^a)_3$의 실릴 기; 및

[1115] 화학식 $-Ge(R^a)_3$의 게르마닐 기;

[1116] 여기서, 2개의 인접한 R^G 기는 선택적으로 결합되어 환형 하이드로카르빌 기 또는 환형 헤테로원자 함유 하이드로카르빌 기를 형성할 수 있고, 이 환형 하이드로카르빌 기 또는 환형 헤테로원자 함유 하이드로카르빌 기는 비치환되거나, 또는 할로겐 원자, C_{1-20} 알킬 기, C_{1-20} 알콕시 기, C_{7-20} 알킬아릴 기, C_{7-20} 아릴알킬 기, C_{6-20} 아릴 기, C_{6-20} 아릴옥시 기, C_{7-20} 알킬아릴옥시 기, C_{7-20} 아릴알킬옥시 기, 화학식 $-NR'_2$의 아미도 기, 화학식 $-PR'_2$의 포스피도 기, 화학식 -SR'의 티올레이트 기, 화학식 $-Si(R^a)_3$의 실릴 기, 및 화학식 $-Ge(R^a)_3$의 게르마닐 기로 이루어지는 군 중에서 선택되는 하나 이상의 치환체에 의해 추가로 치환되고;

[1117] 여기서 각 R^K 및 R^L은 각각 독립적으로 다음으로 이루어지는 군 중에서 선택되고:

[1118] 할로겐;

[1119] 수소;

[1120] C_{1-30} 하이드로카르빌 기로서, 여기서 하이드로카르빌 기는 비치환되거나, 또는 할로겐 원자, C_{1-20} 알킬 기, C_{1-20} 알콕시 기, C_{7-20} 알킬아릴 기, C_{7-20} 아릴알킬 기, C_{6-20} 아릴 기, C_{6-20} 아릴옥시 기, C_{7-20} 알킬아릴옥시 기, 및 C_{7-20} 아릴알킬옥시 기로 이루어지는 군 중에서 선택되는 하나 이상의 치환체에 의해 추가로 치환되는, C_{1-30} 하이드로카르빌 기;

[1121] 헤테로원자 함유 C_{1-30} 하이드로카르빌 기로서, 여기서 헤테로원자 함유 하이드로카르빌 기는 비치환되거나, 또는 할로겐 원자, C_{1-20} 알킬 기, C_{1-20} 알콕시 기, C_{7-20} 알킬아릴 기, C_{7-20} 아릴알킬 기, C_{6-20} 아릴 기, C_{6-20} 아릴옥시 기, C_{7-20} 알킬아릴옥시 기, 및 C_{7-20} 아릴알킬옥시 기로 이루어지는 군 중에서 선택되는 하나 이상의 치환체에 의해 추가로 치환되는, 헤테로원자 함유 C_{1-30} 하이드로카르빌 기;

[1122] 여기서, R^K 및 R^L 기는 선택적으로 결합되어 환형 하이드로카르빌 기 또는 환형 헤테로원자 함유 하이드로카르빌 기를 형성할 수 있고, 이 환형 하이드로카르빌 기 또는 환형 헤테로원자 함유 하이드로카르빌 기는 비치환되거나, 또는 할로겐 원자, C_{1-20} 알킬 기, C_{1-20} 알콕시 기, C_{7-20} 알킬아릴 기, C_{7-20} 아릴알킬 기, C_{6-20} 아릴 기, C_{6-20} 아릴옥시 기, C_{7-20} 알킬아릴옥시 기, C_{7-20} 아릴알킬옥시 기, 화학식 $-NR'_2$의 아미도 기, 화학식 $-PR'_2$의 포스피도 기, 화학식 -SR'의 티올레이트 기, 화학식 $-Si(R^a)_3$의 실릴 기 및 화학식 $-Ge(R^a)_3$의 게르마닐 기로 이루어지는 군 중에서 선택되는 하나 이상의 치환체에 의해 추가로 치환되며;

[1123] 여기서 각 R'는 수소, C_{1-20} 알킬 기, 및 C_{6-20} 아릴 기로 이루어지는 군 중에서 독립적으로 선택되고; 그리고

[1124] 각 R^a는 수소, C_{1-8} 알킬 기, C_{1-8} 알콕시 기, C_{6-20} 아릴옥시 기, 및 C_{6-20} 아릴 기로 이루어지는 군 중에서 독립적으로 선택된다.

[1125] 실시양태에서 각 R^G는 할로겐 및 비치환된 C_{1-12} 알킬 중에서 독립적으로 선택된다.

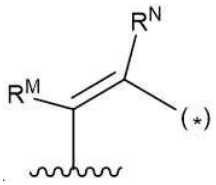
[1126] 일부 실시양태에서 R^G는 존재하지 않는다(페닐렌 기 또는 나프탈렌 기가 비치환됨).

[1127] 실시양태에서 R^K 및 R^L은 각각 독립적으로 수소, 비치환된 C_{1-12} 알킬 기, 및 비치환되거나 또는 치환된 C_{6-20} 아릴 기 중에서 선택된다.

[1128] 실시양태에서 R^K 및 R^L은 각각 독립적으로 비치환된 C_{1-12} 알킬 기, 및 비치환된 또는 치환된 C_{6-20} 아릴 기 중에서 선택된다.

[1129] 일부 실시양태에서 R^K 및 R^L은 각각 수소이다.

[1130] 일부 실시양태에서 L은 다음 화학식인 것이다:

[1131] 

[1132] 여기서, R^M 및 R^N은 각각 독립적으로 다음으로 이루어진 군 중에서 선택된다:

[1133] 할로겐;

[1134] 수소;

[1135] C_{1-30} 하이드로카르빌 기로서, 여기서 하이드로카르빌 기는 비치환되거나, 또는 할로겐 원자, C_{1-20} 알킬 기, C_{1-20} 알콕시 기, C_{7-20} 알킬아릴 기, C_{7-20} 아릴알킬 기, C_{6-20} 아릴 기, C_{6-20} 아릴옥시 기, C_{7-20} 알킬아릴옥시 기, 및 C_{7-20} 아릴알킬옥시 기로 이루어지는 군 중에서 선택되는 하나 이상의 치환체에 의해 추가로 치환되는, C_{1-30} 하이드로카르빌 기;

[1136] 헤테로원자 함유 C_{1-30} 하이드로카르빌 기로서, 여기서 헤테로원자 함유 하이드로카르빌 기는 비치환되거나, 또는 할로겐 원자, C_{1-20} 알킬 기, C_{1-20} 알콕시 기, C_{7-20} 알킬아릴 기, C_{7-20} 아릴알킬 기, C_{6-20} 아릴 기, C_{6-20} 아릴옥시 기, C_{7-20} 알킬아릴옥시 기, 및 C_{7-20} 아릴알킬옥시 기로 이루어지는 군 중에서 선택되는 하나 이상의 치환체에 의해 추가로 치환되는, 헤테로원자 함유 C_{1-30} 하이드로카르빌 기;

[1137] 옥시 기, -OR';

[1138] 아미도 기, $-NR'_2$;

[1139] 포스피도 기, $-PR'_2$;

[1140] 티올레이트 기, -SR';

[1141] 화학식 $-Si(R^a)_3$의 실릴 기; 및

[1142] 화학식 $-Ge(R^a)_3$의 게르마닐 기;

[1143] 여기서, 2개의 인접한 R^M 및 R^N은 선택적으로 결합되어 환형 하이드로카르빌 기 또는 환형 헤테로원자 함유 하이드로카르빌 기를 형성할 수 있고, 이 환형 하이드로카르빌 기 또는 환형 헤테로원자 함유 하이드로카르빌 기는 비치환되거나, 또는 할로겐 원자, C_{1-20} 알킬 기, C_{1-20} 알콕시 기, C_{7-20} 알킬아릴 기, C_{7-20} 아릴알킬 기, C_{6-20} 아릴 기, C_{6-20} 아릴옥시 기, C_{7-20} 알킬아릴옥시 기, C_{7-20} 아릴알킬옥시 기, 화학식 $-NR'_2$의 아미도 기, 화학식 $-PR'_2$의 포스피도 기, 화학식 -SR'의 티올레이트 기, 화학식 $-Si(R^a)_3$의 실릴 기, 및 화학식 $-Ge(R^a)_3$의 게르마닐 기로 이루어지는 군 중에서 선택되는 하나 이상의 치환체에 의해 추가로 치환되고;

[1144] 여기서 각 R'는 수소, C_{1-20} 알킬 기, 및 C_{6-20} 아릴 기로 이루어지는 군 중에서 독립적으로 선택되고; 그리고

[1145] 각 R^a는 수소, C_{1-8} 알킬 기, C_{1-8} 알콕시 기, C_{6-20} 아릴옥시 기, 및 C_{6-20} 아릴 기로 이루어지는 군 중에서 독립적으로 선택되고;

[1146] 여기서, 〰 는 P에 대한 부착 지점을 나타내고, (*)는 Cy에 대한 부착 지점을 나타낸다.

[1147] 일부 실시양태에서, R^M 및 R^N은 각각 독립적으로 할로겐, 수소, C_{1-30} 알킬 기, C_{1-30} 알콕시 기, C_{7-30} 알킬아릴 기, C_{7-30} 아릴알킬 기, C_{6-30} 아릴 기, C_{6-30} 아릴옥사이드 기, C_{7-30} 알킬아릴옥시 기, 및 C_{7-30} 아릴알킬옥시 기로 이루어진 군 중에서 선택된다.

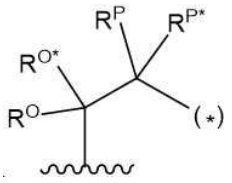
[1148] 일부 실시양태에서, R^M 및 R^N은 각각 독립적으로 할로겐, 수소, C_{1-20} 알킬 기, C_{1-20} 알콕시 기, C_{7-20} 알킬아릴 기, C_{7-20} 아릴알킬 기, C_{6-20} 아릴 기, C_{6-20} 아릴옥사이드 기, C_{7-20} 알킬아릴옥시 기, 및 C_{7-20} 아릴알킬옥시 기로 이루어진 군 중에서 선택된다.

[1149] 일부 실시양태에서, R^M 및 R^N 기는 결합되어 환형 하이드로카르빌 기를 형성한다.

[1150] 일부 실시양태에서, R^M 및 R^N 기는 결합되어 페닐렌 기를 형성하고, 이 페닐렌 기는 비치환되거나, 또는 할로겐 원자, C_{1-20} 알킬 기, C_{1-20} 알콕시 기, C_{7-20} 알킬아릴 기, C_{7-20} 아릴알킬 기, C_{6-20} 아릴 기, C_{6-20} 아릴옥시 기, C_{7-20} 알킬아릴옥시 기, C_{7-20} 아릴알킬옥시 기, 아미도 기, $-NR'_2$, 포스피도 기, $-PR'_2$, 티올레이트 기, -SR', 화학식 $-Si(R^a)_3$의 실릴 기, 및 화학식 $-Ge(R^a)_3$의 게르마닐 기로 이루어지는 군 중에서 선택되는 하나 이상의 치환체에 의해 추가로 치환되며; 여기서 각 R'는 수소, C_{1-20} 알킬 기, 및 C_{6-20} 아릴 기로 이루어지는 군 중에서 독립적으로 선택되고; 그리고 각 R^a는 수소, C_{1-8} 알킬 기, C_{1-8} 알콕시 기, C_{6-20} 아릴옥시 기 및 C_{6-20} 아릴 기로 이루어지는 군 중에서 독립적으로 선택된다.

[1151] 일부 실시양태에서, R^M 및 R^N 기는 결합되어 추가로 치환되지 않는 페닐렌 기를 형성한다.

[1152] 일부 실시양태에서 L은 다음 화학식인 것이다:

[1153] 

[1154] 여기서, R^O, R^{O*}, R^P 및 R^{P*}는 각각 독립적으로 다음으로 이루어지는 군 중에서 선택된다:

[1155] 할로겐;

[1156] 수소;

[1157] C_{1-30} 하이드로카르빌 기로서, 여기서 하이드로카르빌 기는 비치환되거나, 또는 할로겐 원자, C_{1-20} 알킬 기, C_{1-20} 알콕시 기, C_{7-20} 알킬아릴 기, C_{7-20} 아릴알킬 기, C_{6-20} 아릴 기, C_{6-20} 아릴옥시 기, C_{7-20} 알킬아릴옥시 기, 및 C_{7-20} 아릴알킬옥시 기로 이루어지는 군 중에서 선택되는 하나 이상의 치환체에 의해 추가로 치환되는, C_{1-30} 하이드로카르빌 기;

[1158] 헤테로원자 함유 C_{1-30} 하이드로카르빌 기로서, 여기서 헤테로원자 함유 하이드로카르빌 기는 비치환되거나, 또는 할로겐 원자, C_{1-20} 알킬 기, C_{1-20} 알콕시 기, C_{7-20} 알킬아릴 기, C_{7-20} 아릴알킬 기, C_{6-20} 아릴 기, C_{6-20} 아릴옥시 기, C_{7-20} 알킬아릴옥시 기, 및 C_{7-20} 아릴알킬옥시 기로 이루어지는 군 중에서 선택되는 하나 이상의 치환체에 의

해 추가로 치환되는, 헤테로원자 함유 C_{1-30} 하이드로카르빌 기;

[1159] 옥시 기, -OR';

[1160] 아미도 기, $-NR'_2$;

[1161] 포스피도 기, $-PR'_2$;

[1162] 티올레이트 기, -SR';

[1163] 화학식 $-Si(R^a)_3$의 실릴 기; 및

[1164] 화학식 $-Ge(R^a)_3$의 게르마닐 기;

[1165] 여기서, R^O, R^{O*}, R^P, R^{P*} 중 2개의 기는 선택적으로 결합되어 환형 하이드로카르빌 기 또는 환형 헤테로원자 함유 하이드로카르빌 기를 형성할 수 있고, 이 환형 하이드로카르빌 기 또는 환형 헤테로원자 함유 하이드로카르빌 기는 비치환되거나, 또는 할로겐 원자, C_{1-20} 알킬 기, C_{1-20} 알콕시 기, C_{7-20} 알킬아릴 기, C_{7-20} 아릴알킬 기, C_{6-20} 아릴 기, C_{6-20} 아릴옥시 기, C_{7-20} 알킬아릴옥시 기, C_{7-20} 아릴알킬옥시 기, 화학식 $-NR'_2$의 아미도 기, 화학식 $-PR'_2$의 포스피도 기, 화학식 -SR'의 티올레이트 기, 화학식 $-Si(R^a)_3$의 실릴 기, 및 화학식 $-Ge(R^a)_3$의 게르마닐 기로 이루어지는 군 중에서 선택되는 하나 이상의 치환체에 의해 추가로 치환되고;

[1166] 여기서 각 R'는 수소, C_{1-20} 알킬 기, 및 C_{6-20} 아릴 기로 이루어지는 군 중에서 독립적으로 선택되고; 그리고

[1167] 각 R^a는 수소, C_{1-8} 알킬 기, C_{1-8} 알콕시 기, C_{6-20} 아릴옥시 기, 및 C_{6-20} 아릴 기로 이루어지는 군 중에서 독립적으로 선택되고;

[1168] 여기서, 〰 는 P에 대한 부착 지점을 나타내고, (*)는 Cy에 대한 부착 지점을 나타낸다.

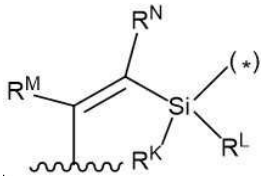
[1169] 일부 실시양태에서, R^O, R^{O*}, R^P, R^{P*}는 각각 독립적으로 할로겐, 수소, C_{1-30} 알킬 기, C_{1-30} 알콕시 기, C_{7-30} 알킬아릴 기, C_{7-30} 아릴알킬 기, C_{6-30} 아릴 기, C_{6-30} 아릴옥사이드 기, C_{7-30} 알킬아릴옥시 기, 및 C_{7-30} 아릴알킬옥시 기로 이루어진 군 중에서 선택된다.

[1170] 일부 실시양태에서, R^O, R^{O*}, R^P, R^{P*}는 각각 독립적으로 할로겐, 수소, C_{1-20} 알킬 기, C_{1-20} 알콕시 기, C_{7-20} 알킬아릴 기, C_{7-20} 아릴알킬 기, C_{6-20} 아릴 기, C_{6-20} 아릴옥사이드 기, C_{7-20} 알킬아릴옥시 기, 및 C_{7-20} 아릴알킬옥시 기로 이루어진 군 중에서 선택된다.

[1171] 일부 실시양태에서, 하나의 R^O 기 및 하나의 R^P 기는 결합되어 환형 하이드로카르빌 기를 형성한다.

[1172] 일부 실시양태에서, 하나의 R^O 기 및 하나의 R^P 기는 결합되어 사이클로헥실 기를 형성한다.

[1173] 일부 실시양태에서, L은 다음 화학식인 것이다:

[1174] 

[1175] 여기서, R^K 및 R^L은 각각 독립적으로 수소, 비치환된 C_{1-12} 알킬 기, 및 비치환된 또는 치환된 C_{6-20} 아릴 기로부터 선택되고;

[1176] R^M 및 R^N은 각각 독립적으로 다음으로 이루어지는 군 중에서 선택된다:

[1177] 할로겐;

[1178] 수소;

[1179] C_{1-30} 하이드로카르빌 기로서, 여기서 하이드로카르빌 기는 비치환되거나, 또는 할로겐 원자, C_{1-20} 알킬 기, C_{1-20} 알콕시 기, C_{7-20} 알킬아릴 기, C_{7-20} 아릴알킬 기, C_{6-20} 아릴 기, C_{6-20} 아릴옥시 기, C_{7-20} 알킬아릴옥시 기, 및 C_{7-20} 아릴알킬옥시 기로 이루어지는 군 중에서 선택되는 하나 이상의 치환체에 의해 추가로 치환되는, C_{1-30} 하이드로카르빌 기;

[1180] 헤테로원자 함유 C_{1-30} 하이드로카르빌 기로서, 여기서 헤테로원자 함유 하이드로카르빌 기는 비치환되거나, 또는 할로겐 원자, C_{1-20} 알킬 기, C_{1-20} 알콕시 기, C_{7-20} 알킬아릴 기, C_{7-20} 아릴알킬 기, C_{6-20} 아릴 기, C_{6-20} 아릴옥시 기, C_{7-20} 알킬아릴옥시 기, 및 C_{7-20} 아릴알킬옥시 기로 이루어지는 군 중에서 선택되는 하나 이상의 치환체에 의해 추가로 치환되는, 헤테로원자 함유 C_{1-30} 하이드로카르빌 기;

[1181] 옥시 기, -OR';

[1182] 아미도 기, $-NR'_2$;

[1183] 포스피도 기, $-PR'_2$;

[1184] 티올레이트 기, -SR';

[1185] 화학식 $-Si(R^a)_3$의 실릴 기; 및

[1186] 화학식 $-Ge(R^a)_3$의 게르마닐 기;

[1187] 여기서, R^M 및 R^N 중 2개의 인접한 기는 선택적으로 결합되어 환형 하이드로카르빌 기 또는 환형 헤테로원자 함유 하이드로카르빌 기를 형성할 수 있고, 이 환형 하이드로카르빌 기 또는 환형 헤테로원자 함유 하이드로카르빌 기는 비치환되거나, 또는 할로겐 원자, C_{1-20} 알킬 기, C_{1-20} 알콕시 기, C_{7-20} 알킬아릴 기, C_{7-20} 아릴알킬 기, C_{6-20} 아릴 기, C_{6-20} 아릴옥시 기, C_{7-20} 알킬아릴옥시 기, C_{7-20} 아릴알킬옥시 기, 화학식 $-NR'_2$의 아미도 기, 화학식 $-PR'_2$의 포스피도 기, 화학식 -SR'의 티올레이트 기, 화학식 $-Si(R^a)_3$의 실릴 기, 및 화학식 $-Ge(R^a)_3$의 게르마닐 기로 이루어지는 군 중에서 선택되는 하나 이상의 치환체에 의해 추가로 치환되고;

[1188] 여기서 각 R'는 수소, C_{1-20} 알킬 기, 및 C_{6-20} 아릴 기로 이루어지는 군 중에서 독립적으로 선택되고; 그리고

[1189] 각 R^a는 수소, C_{1-8} 알킬 기, C_{1-8} 알콕시 기, C_{6-20} 아릴옥시 기, 및 C_{6-20} 아릴 기로 이루어지는 군 중에서 독립적으로 선택되고;

[1190] 여기서, ~~~~ 는 P에 대한 부착 지점을 나타내고, (*)는 Cy에 대한 부착 지점을 나타낸다.

[1191] 일부 실시양태에서, R^M 및 R^N은 각각 독립적으로 할로겐, 수소, C_{1-30} 알킬 기, C_{1-30} 알콕시 기, C_{7-30} 알킬아릴 기, C_{7-30} 아릴알킬 기, C_{6-30} 아릴 기, C_{6-30} 아릴옥사이드 기, C_{7-30} 알킬아릴옥시 기, 및 C_{7-30} 아릴알킬옥시 기로 이루어진 군 중에서 선택된다.

[1192] 일부 실시양태에서, R^M 및 R^N은 각각 독립적으로 할로겐, 수소, C_{1-20} 알킬 기, C_{1-20} 알콕시 기, C_{7-20} 알킬아릴 기, C_{7-20} 아릴알킬 기, C_{6-20} 아릴 기, C_{6-20} 아릴옥사이드 기, C_{7-20} 알킬아릴옥시 기, 및 C_{7-20} 아릴알킬옥시 기로 이루어진 군 중에서 선택된다.

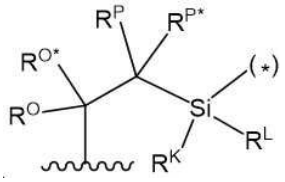
[1193] 일부 실시양태에서, R^M 및 R^N 기는 결합되어 환형 하이드로카르빌 기를 형성한다.

[1194] 일부 실시양태에서, R^M 및 R^N 기는 결합되어 페닐렌 기를 형성하고, 이 페닐렌 기는 비치환되거나, 또는 할로겐

원자, C_{1-20} 알킬 기, C_{1-20} 알콕시 기, C_{7-20} 알킬아릴 기, C_{7-20} 아릴알킬 기, C_{6-20} 아릴 기, C_{6-20} 아릴옥시 기, C_{7-20} 알킬아릴옥시 기, C_{7-20} 아릴알킬옥시 기, 아미도 기 $-NR'_2$, 포스피도 기 $-PR'_2$, 티올레이트 기 $-SR'$, 화학식 $-Si(R^a)_3$의 실릴 기, 및 화학식 $-Ge(R^a)_3$의 게르마닐 기로 이루어지는 군 중에서 선택되는 하나 이상의 치환체에 의해 추가로 치환되며; 여기서 각 R'는 수소, C_{1-20} 알킬 기, 및 C_{6-20} 아릴 기로 이루어지는 군 중에서 독립적으로 선택되고; 그리고 각 R^a는 수소, C_{1-8} 알킬 기, C_{1-8} 알콕시 기, C_{6-20} 아릴옥시 기, 및 C_{6-20} 아릴 기로 이루어지는 군 중에서 독립적으로 선택된다.

[1195] 일부 실시양태에서, R^M 및 R^N 기는 결합되어 추가로 치환되지 않는 페닐렌 기를 형성한다.

[1196] 일부 실시양태에서, L은 다음 화학식인 것이다:

[1197] 

[1198] 여기서, R^K 및 R^L은 각각 독립적으로 수소, 비치환된 C_{1-12} 알킬 기, 및 비치환되거나 또는 치환된 C_{6-20} 아릴 기로부터 선택되고;

[1199] 여기서, R^O, R^{O*}, R^P 및 R^{P*}은 각각 독립적으로 다음으로 이루어지는 군 중에서 선택되며:

[1200] 할로겐;

[1201] 수소;

[1202] C_{1-30} 하이드로카르빌 기로서, 여기서 하이드로카르빌 기는 비치환되거나, 또는 할로겐 원자, C_{1-20} 알킬 기, C_{1-20} 알콕시 기, C_{7-20} 알킬아릴 기, C_{7-20} 아릴알킬 기, C_{6-20} 아릴 기, C_{6-20} 아릴옥시 기, C_{7-20} 알킬아릴옥시 기, 및 C_{7-20} 아릴알킬옥시 기로 이루어지는 군 중에서 선택되는 하나 이상의 치환체에 의해 추가로 치환되는, C_{1-30} 하이드로카르빌 기;

[1203] 헤테로원자 함유 C_{1-30} 하이드로카르빌 기로서, 여기서 헤테로원자 함유 하이드로카르빌 기는 비치환되거나, 또는 할로겐 원자, C_{1-20} 알킬 기, C_{1-20} 알콕시 기, C_{7-20} 알킬아릴 기, C_{7-20} 아릴알킬 기, C_{6-20} 아릴 기, C_{6-20} 아릴옥시 기, C_{7-20} 알킬아릴옥시 기, 및 C_{7-20} 아릴알킬옥시 기로 이루어지는 군 중에서 선택되는 하나 이상의 치환체에 의해 추가로 치환되는, 헤테로원자 함유 C_{1-30} 하이드로카르빌 기;

[1204] 옥시 기, $-OR'$;

[1205] 아미도 기, $-NR'_2$;

[1206] 포스피도 기, $-PR'_2$;

[1207] 티올레이트 기, $-SR'$;

[1208] 화학식 $-Si(R^a)_3$의 실릴 기; 및

[1209] 화학식 $-Ge(R^a)_3$의 게르마닐 기;

[1210] 여기서, R^O, R^{O*}, R^P, R^{P*} 중 2개의 기는 선택적으로 결합되어 환형 하이드로카르빌 기 또는 환형 헤테로원자 함유 하이드로카르빌 기를 형성할 수 있고, 이 환형 하이드로카르빌 기 또는 환형 헤테로원자 함유 하이드로카르빌 기는 비치환되거나, 또는 할로겐 원자, C_{1-20} 알킬 기, C_{1-20} 알콕시 기, C_{7-20} 알킬아릴 기, C_{7-20} 아릴알킬 기, C_{6-}

$_{20}$ 아릴 기, C_{6-20} 아릴옥시 기, C_{7-20} 알킬아릴옥시 기, C_{7-20} 아릴알킬옥시 기, 화학식 $-NR'_2$의 아미도 기, 화학식 $-PR'_2$의 포스피도 기, 화학식 $-SR'$의 티올레이트 기, 화학식 $-Si(R^a)_3$의 실릴 기, 및 화학식 $-Ge(R^a)_3$의 게르마닐 기로 이루어지는 군 중에서 선택되는 하나 이상의 치환체에 의해 추가로 치환되고;

[1211] 여기서 각 R'는 수소, C_{1-20} 알킬 기, 및 C_{6-20} 아릴 기로 이루어지는 군 중에서 독립적으로 선택되고; 그리고

[1212] 각 R^a는 수소, C_{1-8} 알킬 기, C_{1-8} 알콕시 기, C_{6-20} 아릴옥시 기, 및 C_{6-20} 아릴 기로 이루어지는 군 중에서 독립적으로 선택되고;

[1213] 여기서, ~~~~는 P에 대한 부착 지점을 나타내고, (*)는 Cy에 대한 부착 지점을 나타낸다.

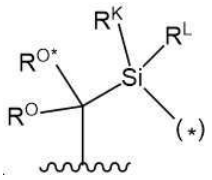
[1214] 일부 실시양태에서, R^0, R^{0*}, R^P 및 R^{P*}는 각각 독립적으로 할로겐, 수소, C_{1-30} 알킬 기, C_{1-30} 알콕시 기, C_{7-30} 알킬아릴 기, C_{7-30} 아릴알킬 기, C_{6-30} 아릴 기, C_{6-30} 아릴옥사이드 기, C_{7-30} 알킬아릴옥시 기, 및 C_{7-30} 아릴알킬옥시 기로 이루어진 군 중에서 선택된다.

[1215] 일부 실시양태에서, R^0, R^{0*}, R^P 및 R^{P*}는 각각 독립적으로 할로겐, 수소, C_{1-20} 알킬 기, C_{1-20} 알콕시 기, C_{7-20} 알킬아릴 기, C_{7-20} 아릴알킬 기, C_{6-20} 아릴 기, C_{6-20} 아릴옥사이드 기, C_{7-20} 알킬아릴옥시 기, 및 C_{7-20} 아릴알킬옥시 기로 이루어진 군 중에서 선택된다.

[1216] 일부 실시양태에서, 하나의 R^0 기 및 하나의 R^P 기는 결합되어 환형 하이드로카르빌 기를 형성한다.

[1217] 일부 실시양태에서, 하나의 R^0 기 및 하나의 R^P 기는 결합되어 사이클로헥실 기를 형성한다.

[1218] 일부 실시양태에서, L은 다음 화학식인 것이다:

[1219] 

[1220] 여기서, R^K 및 R^L은 각각 독립적으로 수소, 비치환된 C_{1-12} 알킬 기, 및 비치환된 또는 치환된 C_{6-20} 아릴 기로부터 선택되고;

[1221] 여기서, R^0, 및 R^{0*}는 각각 독립적으로 다음으로 이루어지는 군 중에서 선택된다:

[1222] 할로겐;

[1223] 수소;

[1224] C_{1-30} 하이드로카르빌 기로서, 여기서 하이드로카르빌 기는 비치환되거나, 또는 할로겐 원자, C_{1-20} 알킬 기, C_{1-20} 알콕시 기, C_{7-20} 알킬아릴 기, C_{7-20} 아릴알킬 기, C_{6-20} 아릴 기, C_{6-20} 아릴옥시 기, C_{7-20} 알킬아릴옥시 기, 및 C_{7-20} 아릴알킬옥시 기로 이루어지는 군 중에서 선택되는 하나 이상의 치환체에 의해 추가로 치환되는, C_{1-30} 하이드로카르빌 기;

[1225] 헤테로원자 함유 C_{1-30} 하이드로카르빌 기로서, 여기서 헤테로원자 함유 하이드로카르빌 기는 비치환되거나, 또는 할로겐 원자, C_{1-20} 알킬 기, C_{1-20} 알콕시 기, C_{7-20} 알킬아릴 기, C_{7-20} 아릴알킬 기, C_{6-20} 아릴 기, C_{6-20} 아릴옥시 기, C_{7-20} 알킬아릴옥시 기, 및 C_{7-20} 아릴알킬옥시 기로 이루어지는 군 중에서 선택되는 하나 이상의 치환체에 의해 추가로 치환되는, 헤테로원자 함유 C_{1-30} 하이드로카르빌 기;

[1226] 옥시 기, $-OR'$;

[1227] 아미도 기, $-NR'_2$;

[1228] 포스피도 기, $-PR'_2$;

[1229] 티올레이트 기, -SR';

[1230] 화학식 $-Si(R^a)_3$의 실릴 기; 및

[1231] 화학식 $-Ge(R^a)_3$의 게르마닐 기;

[1232] 여기서, R^O, 및 R^{O*} 중 2개의 기는 선택적으로 결합되어 환형 하이드로카르빌 기 또는 환형 헤테로원자 함유 하이드로카르빌 기를 형성할 수 있고, 이 환형 하이드로카르빌 기 또는 환형 헤테로원자 함유 하이드로카르빌 기는 비치환되거나, 또는 할로겐 원자, C_{1-20} 알킬 기, C_{1-20} 알콕시 기, C_{7-20} 알킬아릴 기, C_{7-20} 아릴알킬 기, C_{6-20} 아릴 기, C_{6-20} 아릴옥시 기, C_{7-20} 알킬아릴옥시 기, C_{7-20} 아릴알킬옥시 기, 화학식 $-NR'_2$의 아미도 기, 화학식 $-PR'_2$의 포스피도 기, 화학식 -SR'의 티올레이트 기, 화학식 $-Si(R^a)_3$의 실릴 기, 및 화학식 $-Ge(R^a)_3$의 게르마닐 기로 이루어지는 군 중에서 선택되는 하나 이상의 치환체에 의해 추가로 치환되고;

[1233] 여기서 각 R'는 수소, C_{1-20} 알킬 기, 및 C_{6-20} 아릴 기로 이루어지는 군 중에서 독립적으로 선택되고; 그리고

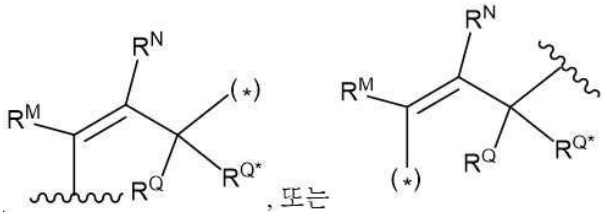
[1234] 각 R^a는 수소, C_{1-8} 알킬 기, C_{1-8} 알콕시 기, C_{6-20} 아릴옥시 기, 및 C_{6-20} 아릴 기로 이루어지는 군 중에서 독립적으로 선택되고;

[1235] 여기서, 〰 는 P에 대한 부착 지점을 나타내고, (*)는 Cy에 대한 부착 지점을 나타낸다.

[1236] 일부 실시양태에서, R^O 및 R^{O*}는 각각 독립적으로 할로겐, 수소, C_{1-30} 알킬 기, C_{1-30} 알콕시 기, C_{7-30} 알킬아릴 기, C_{7-30} 아릴알킬 기, C_{6-30} 아릴 기, C_{6-30} 아릴옥사이드 기, C_{7-30} 알킬아릴옥시 기, 및 C_{7-30} 아릴알킬옥시 기로 이루어진 군 중에서 선택된다.

[1237] 일부 실시양태에서, R^O 및 R^{O*}는 각각 독립적으로 할로겐, 수소, C_{1-20} 알킬 기, C_{1-20} 알콕시 기, C_{7-20} 알킬아릴 기, C_{7-20} 아릴알킬 기, C_{6-20} 아릴 기, C_{6-20} 아릴옥사이드 기, C_{7-20} 알킬아릴옥시 기, 및 C_{7-20} 아릴알킬옥시 기로 이루어진 군 중에서 선택된다.

[1238] 일부 실시양태에서, L은 다음 화학식인 것이다:

[1239] 

[1240] 여기서, R^M, R^N, R^O, 및 R^{O*}는 각각 독립적으로 다음으로 이루어지는 군 중에서 선택된다:

[1241] 할로겐;

[1242] 수소;

[1243] C_{1-30} 하이드로카르빌 기로서, 여기서 하이드로카르빌 기는 비치환되거나, 또는 할로겐 원자, C_{1-20} 알킬 기, C_{1-20} 알콕시 기, C_{7-20} 알킬아릴 기, C_{7-20} 아릴알킬 기, C_{6-20} 아릴 기, C_{6-20} 아릴옥시 기, C_{7-20} 알킬아릴옥시 기, 및 C_{7-20} 아릴알킬옥시 기로 이루어지는 군 중에서 선택되는 하나 이상의 치환체에 의해 추가로 치환되는, C_{1-30} 하이드로카르빌 기;

[1244] 헤테로원자 함유 C_{1-30} 하이드로카르빌 기로서, 여기서 헤테로원자 함유 하이드로카르빌 기는 비치환되거나, 또는 할로겐 원자, C_{1-20} 알킬 기, C_{1-20} 알콕시 기, C_{7-20} 알킬아릴 기, C_{7-20} 아릴알킬 기, C_{6-20} 아릴 기, C_{6-20} 아릴옥시 기, C_{7-20} 알킬아릴옥시 기, 및 C_{7-20} 아릴알킬옥시 기로 이루어지는 군 중에서 선택되는 하나 이상의 치환체에 의해 추가로 치환되는, 헤테로원자 함유 C_{1-30} 하이드로카르빌 기;

[1245] 옥시 기, -OR';

[1246] 아미도 기, $-NR'_2$;

[1247] 포스피도 기, $-PR'_2$;

[1248] 티올레이트 기, -SR';

[1249] 화학식 $-Si(R^a)_3$의 실릴 기; 및

[1250] 화학식 $-Ge(R^a)_3$의 게르마닐 기;

[1251] 여기서, R^M 및 R^N 중 2개의 인접한 기는 선택적으로 결합되어 환형 하이드로카르빌 기 또는 환형 헤테로원자 함유 하이드로카르빌 기를 형성할 수 있고, 이 환형 하이드로카르빌 기 또는 환형 헤테로원자 함유 하이드로카르빌 기는 비치환되거나, 또는 할로겐 원자, C_{1-20} 알킬 기, C_{1-20} 알콕시 기, C_{7-20} 알킬아릴 기, C_{7-20} 아릴알킬 기, C_{6-20} 아릴 기, C_{6-20} 아릴옥시 기, C_{7-20} 알킬아릴옥시 기, C_{7-20} 아릴알킬옥시 기, 화학식 $-NR'_2$의 아미도 기, 화학식 $-PR'_2$의 포스피도 기, 화학식 -SR'의 티올레이트 기, 화학식 $-Si(R^a)_3$의 실릴 기, 및 화학식 $-Ge(R^a)_3$의 게르마닐 기로 이루어지는 군 중에서 선택되는 하나 이상의 치환체에 의해 추가로 치환되고;

[1252] 여기서, R^Q 및 R^{Q*} 중 2개의 기는 선택적으로 결합되어 환형 하이드로카르빌 기 또는 환형 헤테로원자 함유 하이드로카르빌 기를 형성할 수 있고, 이 환형 하이드로카르빌 기 또는 환형 헤테로원자 함유 하이드로카르빌 기는 비치환되거나, 또는 할로겐 원자, C_{1-20} 알킬 기, C_{1-20} 알콕시 기, C_{7-20} 알킬아릴 기, C_{7-20} 아릴알킬 기, C_{6-20} 아릴 기, C_{6-20} 아릴옥시 기, C_{7-20} 알킬아릴옥시 기, C_{7-20} 아릴알킬옥시 기, 화학식 $-NR'_2$의 아미도 기, 화학식 $-PR'_2$의 포스피도 기, 화학식 -SR'의 티올레이트 기, 화학식 $-Si(R^a)_3$의 실릴 기, 및 화학식 $-Ge(R^a)_3$의 게르마닐 기로 이루어지는 군 중에서 선택되는 하나 이상의 치환체에 의해 추가로 치환되고;

[1253] 여기서 각 R'는 수소, C_{1-20} 알킬 기, 및 C_{6-20} 아릴 기로 이루어지는 군 중에서 독립적으로 선택되고; 그리고

[1254] 각 R^a는 수소, C_{1-8} 알킬 기, C_{1-8} 알콕시 기, C_{6-20} 아릴옥시 기, 및 C_{6-20} 아릴 기로 이루어지는 군 중에서 독립적으로 선택되고;

[1255] 여기서, 는 P에 대한 부착 지점을 나타내고, (*)는 Cy에 대한 부착 지점을 나타낸다.

[1256] 일부 실시양태에서, R^M 및 R^N은 각각 독립적으로 할로겐, 수소, C_{1-30} 알킬 기, C_{1-30} 알콕시 기, C_{7-30} 알킬아릴 기, C_{7-30} 아릴알킬 기, C_{6-30} 아릴 기, C_{6-30} 아릴옥사이드 기, C_{7-30} 알킬아릴옥시 기, 및 C_{7-30} 아릴알킬옥시 기로 이루어진 군 중에서 선택된다.

[1257] 일부 실시양태에서, R^M 및 R^N은 각각 독립적으로 할로겐, 수소, C_{1-20} 알킬 기, C_{1-20} 알콕시 기, C_{7-20} 알킬아릴 기, C_{7-20} 아릴알킬 기, C_{6-20} 아릴 기, C_{6-20} 아릴옥사이드 기, C_{7-20} 알킬아릴옥시 기, 및 C_{7-20} 아릴알킬옥시 기로 이루어진 군 중에서 선택된다.

[1258] 일부 실시양태에서, R^M 및 R^N 기는 결합되어 환형 하이드로카르빌 기를 형성한다.

[1259] 일부 실시양태에서, R^M 및 R^N 기는 결합되어 페닐렌 기를 형성하고, 이 페닐렌 기는 비치환되거나, 또는 할로겐

원자, C_{1-20} 알킬 기, C_{1-20} 알콕시 기, C_{7-20} 알킬아릴 기, C_{7-20} 아릴알킬 기, C_{6-20} 아릴 기, C_{6-20} 아릴옥시 기, C_{7-20} 알킬아릴옥시 기, C_{7-20} 아릴알킬옥시 기, 아미도 기 $-NR'_2$, 포스피도 기 $-PR'_2$, 티올레이트 기 $-SR'$, 화학식 $-Si(R^a)_3$의 실릴 기, 및 화학식 $-Ge(R^a)_3$의 게르마닐 기로 이루어지는 군 중에서 선택되는 하나 이상의 치환체에 의해 추가로 치환되고; 여기서, 각 R'는 수소, C_{1-20} 알킬 기, 및 C_{6-20} 아릴 기로 이루어지는 군 중에서 독립적으로 선택되고; 그리고 여기서 각 R^a는 수소, C_{1-8} 알킬 기, C_{1-8} 알콕시 기, C_{6-20} 아릴옥시 기 및 C_{6-20} 아릴 기로 이루어지는 군 중에서 독립적으로 선택된다.

[1260] 일부 실시양태에서, R^M 및 R^N 기는 결합되어 추가로 치환되지 않는 페닐렌 기를 형성한다.

[1261] 일부 실시양태에서, R^Q 및 R^{Q*}는 각각 독립적으로 할로겐, 수소, C_{1-30} 알킬 기, C_{1-30} 알콕시 기, C_{7-30} 알킬아릴 기, C_{7-30} 아릴알킬 기, C_{6-30} 아릴 기, C_{6-30} 아릴옥사이드 기, C_{7-30} 알킬아릴옥시 기, 및 C_{7-30} 아릴알킬옥시 기로 이루어지는 군 중에서 선택된다.

[1262] 일부 실시양태에서, R^Q 및 R^{Q*}는 각각 독립적으로 할로겐, 수소, C_{1-20} 알킬 기, C_{1-20} 알콕시 기, C_{7-20} 알킬아릴 기, C_{7-20} 아릴알킬 기, C_{6-20} 아릴 기, C_{6-20} 아릴옥사이드 기, C_{7-20} 알킬아릴옥시 기, 및 C_{7-20} 아릴알킬옥시 기로 이루어지는 군 중에서 선택된다.

[1263] 실시양태에서, 실릴 기는 화학식 $-Si(R^a)_3$을 가지며, 여기서 R^a 기는 수소 원자, C_{1-8} 알킬 또는 알콕시 기, C_{6-10} 아릴 기, 및 C_{6-10} 아릴옥시 기 중에서 독립적으로 선택된다.

[1264] 실시양태에서, 실릴 기는 화학식 $-Si(R^a)_3$을 가지며, 여기서 R^a 기는 C_{1-8} 알킬 또는 알콕시 기, C_{6-10} 아릴 기, 및 C_{6-10} 아릴옥시 기 중에서 독립적으로 선택된다.

[1265] 본 개시내용의 일부 실시양태에서, 옥시 기는 화학식 $-OR'$를 가지며, 여기서 R' 기는 수소 원자, C_{1-10} 알킬 기, 및 C_{6-10} 아릴 기로 이루어지는 군 중에서 선택된다.

[1266] 본 개시내용의 일부 실시양태에서, 옥시 기는 화학식 $-OR'$를 가지며, 여기서 R' 기는 C_{1-10} 알킬 기, 및 C_{6-10} 아릴 기로 이루어지는 군 중에서 선택된다.

[1267] 본 개시내용의 일부 실시양태에서, 아미도 기는 화학식 $-NR'_2$를 가지며, 여기서 R' 기는 수소 원자, C_{1-10} 알킬 기, C_{6-10} 아릴 기로 이루어지는 군 중에서 독립적으로 선택된다.

[1268] 본 개시내용의 일부 실시양태에서, 아미도 기는 화학식 $-NR'_2$를 가지며, 여기서 R' 기는 C_{1-10} 알킬 기, 및 C_{6-10} 아릴 기로 이루어지는 군 중에서 독립적으로 선택된다.

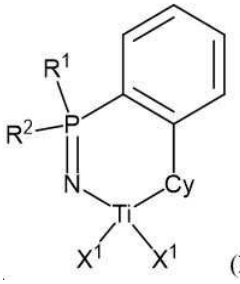
[1269] 본 개시내용의 일부 실시양태에서, 포스피도 기는 화학식 $-PR'_2$를 가지며, 여기서 R' 기는 수소 원자, C_{1-10} 알킬 기, 및 C_{6-10} 아릴 기로 이루어지는 군 중에서 독립적으로 선택된다.

[1270] 본 개시내용의 일부 실시양태에서, 포스피도 기는 화학식 $-PR'_2$를 가지며, 여기서 R' 기는 C_{1-10} 알킬 기, 및 C_{6-10} 아릴 기로 이루어지는 군 중에서 독립적으로 선택된다.

[1271] 본 개시내용의 일부 실시양태에서, 티올레이트 기는 화학식 $-SR'$를 가지며, 여기서 R' 기는 수소 원자, C_{1-10} 알킬 기, 및 C_{6-10} 아릴 기로 이루어지는 군 중에서 선택된다.

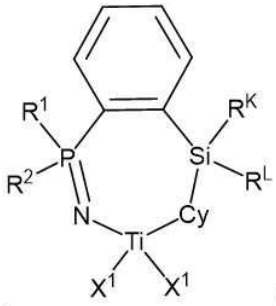
[1272] 본 개시내용의 일부 실시양태에서, 티올레이트 기는 화학식 $-SR'$를 가지며, 여기서 R' 기는 C_{1-10} 알킬 기, 및 C_{6-10} 아릴 기로 이루어지는 군 중에서 선택된다.

[1273] 본 개시내용의 실시양태에서, 화학식 I의 유기금속 복합체는 화학식 IA로 표현되는 유기금속 복합체이다:

[1274] 
(IA)

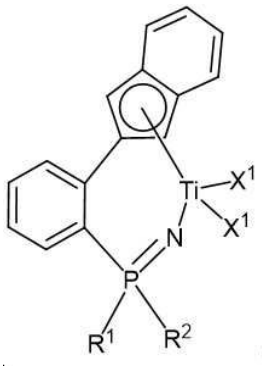
[1275] 여기서, R^1, R^2, X^1 및 Cy는 화학식 I에 대해 상기에 정의된 바와 같다.

[1276] 본 개시내용의 실시양태에서, 화학식 I의 유기금속 복합체는 화학식 IB로 표현되는 유기금속 복합체이다:

[1277] 
(IB)

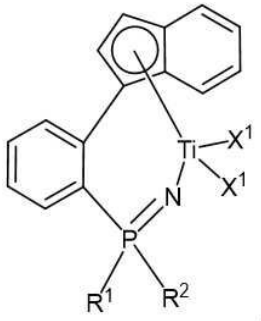
[1278] 여기서, R^1, R^2, R^K, R^L, X^1 및 Cy는 화학식 I에 대해 상기에 정의된 바와 같다.

[1279] 본 개시내용의 실시양태에서, 화학식 I의 유기금속 복합체는 화학식 IC로 표현되는 유기금속 복합체이다:

[1280] 
(IC)

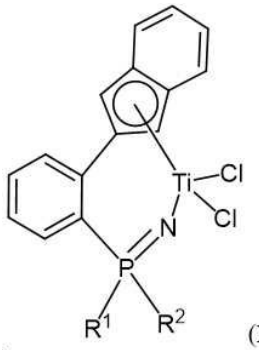
[1281] 여기서 각각의 R^1, R^2 및 X^1은 화학식 I에 대해 상기에 정의된 바와 같다.

[1282] 본 개시내용의 실시양태에서, 화학식 I의 유기금속 복합체는 화학식 IC^*로 표현되는 유기금속 복합체이다:

[1283] 
(IC*)

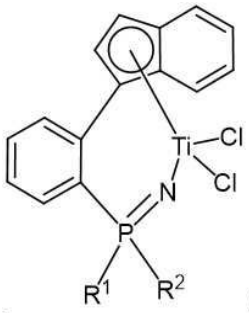
[1284] 여기서 각각의 R^1, R^2 및 X^1은 화학식 I에 대해 상기에 정의된 바와 같다.

[1285] 본 개시내용의 실시양태에서, 화학식 I의 유기금속 복합체는 화학식 ID로 표현되는 유기금속 복합체이다:

[1286]  (ID)

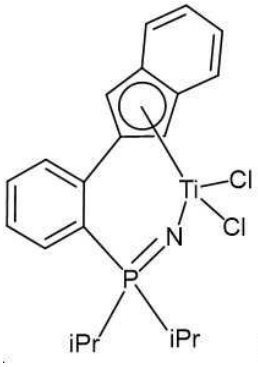
[1287] 여기서, R^1 및 R^2는 화학식 I에 대해 상기에 정의된 바와 같다.

[1288] 본 개시내용의 실시양태에서, 화학식 I의 유기금속 복합체는 화학식 ID^*로 표현되는 유기금속 복합체이다:

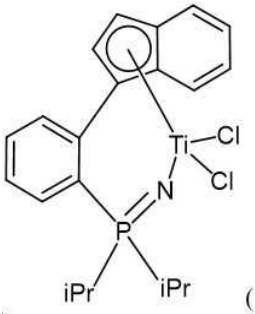
[1289]  (ID*)

[1290] 여기서, R^1 및 R^2는 화학식 I에 대해 상기에 정의된 바와 같다.

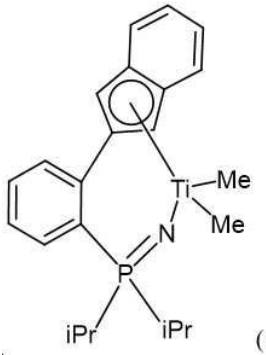
[1291] 본 개시내용의 실시양태에서, 화학식 I의 유기금속 복합체는 화학식 IE로 표현되는 유기금속 복합체이다:

[1292]  (1E).

[1293] 본 개시내용의 실시양태에서, 화학식 I의 유기금속 복합체는 화학식 IE^*로 표현되는 유기금속 복합체이다:

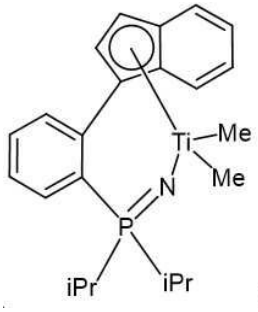
[1294]  (1E*)

[1295] 본 개시내용의 실시양태에서, 화학식 I의 유기금속 복합체는 화학식 IF로 표현되는 유기금속 복합체이다:

[1296] 

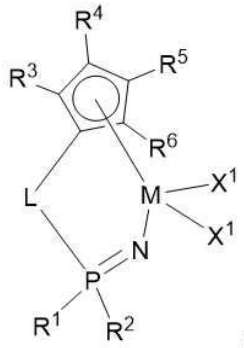
(1F).

[1297] 본 개시내용의 실시양태에서, 화학식 I의 유기금속 복합체는 화학식 IF*로 표현되는 유기금속 복합체이다:

[1298] 

(1F*)

[1299] 본 개시내용의 실시양태에서, 화학식 I의 유기금속 복합체는 화학식 II로 표현되는 유기금속 복합체이다:

[1300] 

(II)

[1301] 여기서, M, R^1, R^2, X^1 및 L은 화학식 I에 대해 상기에 정의된 바와 같고; 그리고

[1302] 여기서, R^3, R^4, R^5 및 R^6은 각각 독립적으로 다음으로 이루어지는 군 중에서 선택된다:

[1303] 할로겐;

[1304] 수소;

[1305] C_{1-30} 하이드로카르빌 기로서, 여기서 하이드로카르빌 기는 비치환되거나, 또는 할로겐 원자, C_{1-20} 알킬 기, C_{1-20} 알콕시 기, C_{7-20} 알킬아릴 기, C_{7-20} 아릴알킬 기, C_{6-20} 아릴 기, C_{6-20} 아릴옥시 기, C_{7-20} 알킬아릴옥시 기, 및 C_{7-20} 아릴알킬옥시 기로 이루어지는 군 중에서 선택되는 하나 이상의 치환체에 의해 추가로 치환되는, C_{1-30} 하이드로카르빌 기;

[1306] 헤테로원자 함유 C_{1-30} 하이드로카르빌 기로서, 여기서 헤테로원자 함유 하이드로카르빌 기는 비치환되거나, 또는 할로겐 원자, C_{1-20} 알킬 기, C_{1-20} 알콕시 기, C_{7-20} 알킬아릴 기, C_{7-20} 아릴알킬 기, C_{6-20} 아릴 기, C_{6-20} 아릴옥시 기, C_{7-20} 알킬아릴옥시 기, 및 C_{7-20} 아릴알킬옥시 기로 이루어지는 군 중에서 선택되는 하나 이상의 치환체에 의해 추가로 치환되는, 헤테로원자 함유 C_{1-30} 하이드로카르빌 기;

[1307] 옥시 기, -OR';

[1308] 아미도 기, $-NR'_2$;

[1309] 포스피도 기, $-PR'_2$;

[1310] 티올레이트 기, -SR';

[1311] 화학식 $-Si(R^a)_3$의 실릴 기; 및

[1312] 화학식 $-Ge(R^a)_3$의 게르마닐 기;

[1313] 여기서, R^3, R^4, R^5 및 R^6 중 2개의 인접한 기는 선택적으로 결합되어 환형 하이드로카르빌 기 또는 환형 헤테로원자 함유 하이드로카르빌 기를 형성할 수 있고, 이 환형 하이드로카르빌 기 또는 환형 헤테로원자 함유 하이드로카르빌 기는 비치환되거나, 또는 할로겐 원자, C_{1-20} 알킬 기, C_{1-20} 알콕시 기, C_{7-20} 알킬아릴 기, C_{7-20} 아릴알킬 기, C_{6-20} 아릴 기, C_{6-20} 아릴옥시 기, C_{7-20} 알킬아릴옥시 기, C_{7-20} 아릴알킬옥시 기, 화학식 $-NR'_2$의 아미도 기, 화학식 $-PR'_2$의 포스피도 기, 화학식 -SR'의 티올레이트 기, 화학식 $-Si(R^a)_3$의 실릴 기, 및 화학식 $-Ge(R^a)_3$의 게르마닐 기로 이루어지는 군 중에서 선택되는 하나 이상의 치환체에 의해 추가로 치환되고;

[1314] 여기서 각 R'는 수소, C_{1-20} 알킬 기, 및 C_{6-20} 아릴 기로 이루어지는 군 중에서 독립적으로 선택되고; 그리고

[1315] 각 R^a는 수소, C_{1-8} 알킬 기, C_{1-8} 알콕시 기, C_{6-20} 아릴옥시 기, 및 C_{6-20} 아릴 기로 이루어지는 군 중에서 독립적으로 선택된다.

[1316] 일부 실시양태에서, R^3, R^4, R^5 및 R^6은 각각 독립적으로 할로겐; 수소; 및 C_{1-30} 하이드로카르빌 기로서, 여기서 하이드로카르빌 기는 비치환되거나, 또는 할로겐 원자, C_{1-20} 알킬 기, C_{1-20} 알콕시 기, C_{7-20} 알킬아릴 기, C_{7-20} 아릴알킬 기, C_{6-20} 아릴 기, C_{6-20} 아릴옥시 기, C_{7-20} 알킬아릴옥시 기, 및 C_{7-20} 아릴알킬옥시 기로 이루어지는 군 중에서 선택되는 하나 이상의 치환체에 의해 추가로 치환되는, C_{1-30} 하이드로카르빌 기; 및 헤테로원자 함유 C_{1-30} 하이드로카르빌 기로서, 여기서 헤테로원자 함유 하이드로카르빌 기는 비치환되거나, 또는 할로겐 원자, C_{1-20} 알킬 기, C_{1-20} 알콕시 기, C_{7-20} 알킬아릴 기, C_{7-20} 아릴알킬 기, C_{6-20} 아릴 기, C_{6-20} 아릴옥시 기, C_{7-20} 알킬아릴옥시 기, 및 C_{7-20} 아릴알킬옥시 기로 이루어지는 군 중에서 선택되는 하나 이상의 치환체에 의해 추가로 치환되는, 헤테로원자 함유 C_{1-30} 하이드로카르빌 기로 이루어지는 군 중에서 선택되고; 여기서, R^3, R^4, R^5 및 R^6 중 2개의 인접한 기는 선택적으로 결합되어 환형 하이드로카르빌 기 또는 환형 헤테로원자 함유 하이드로카르빌 기를 형성할 수 있고, 이 환형 하이드로카르빌 기 또는 환형 헤테로원자 함유 하이드로카르빌 기는 비치환되거나, 또는 할로겐 원자, C_{1-20} 알킬 기, C_{1-20} 알콕시 기, C_{7-20} 알킬아릴 기, C_{7-20} 아릴알킬 기, C_{6-20} 아릴 기, C_{6-20} 아릴옥시 기, C_{7-20} 알킬아릴옥시 기, C_{7-20} 아릴알킬옥시 기, 아미도 기 $-NR'_2$, 포스피도 기 $-PR'_2$, 티올레이트 기 -SR', 화학식 $-Si(R^a)_3$의 실릴 기, 및 화학식 $-Ge(R^a)_3$의 게르마닐 기로 이루어지는 군 중에서 선택되는 하나 이상의 치환체에 의해 추가로 치환되고; 여기서 각 R'는 수소, C_{1-20} 알킬 기, 및 C_{6-20} 아릴 기로 이루어지는 군 중에서 독립적으로 선택되고; 그리고 각 R^a는 수소, C_{1-8} 알킬 기, C_{1-8} 알콕시 기, C_{6-20} 아릴옥시 기, 및 C_{6-20} 아릴 기로 이루어지는 군 중에서 독립적으로 선택된다.

[1317] 일부 실시양태에서, R^3, R^4, R^5 및 R^6은 각각 독립적으로 할로겐; 수소; 및 C_{1-30} 하이드로카르빌 기로서, 여기서 하이드로카르빌 기는 비치환되거나, 또는 할로겐 원자, C_{1-20} 알킬 기, C_{1-20} 알콕시 기, C_{7-20} 알킬아릴 기, C_{7-20} 아릴알킬 기, C_{6-20} 아릴 기, C_{6-20} 아릴옥시 기, C_{7-20} 알킬아릴옥시 기, 및 C_{7-20} 아릴알킬옥시 기로 이루어지는 군 중에서 선택되는 하나 이상의 치환체에 의해 추가로 치환되는, C_{1-30} 하이드로카르빌 기로 이루어지는 군 중에서

선택되고; 여기서, R^3, R^4, R^5 및 R^6 중 2개의 인접한 기는 선택적으로 결합되어 환형 하이드로카르빌 기를 형성할 수 있고, 이 환형 하이드로카르빌 기는 비치환되거나, 또는 할로겐 원자, C_{1-20} 알킬 기, C_{1-20} 알콕시 기, C_{7-20} 알킬아릴 기, C_{7-20} 아릴알킬 기, C_{6-20} 아릴 기, C_{6-20} 아릴옥시 기, C_{7-20} 알킬아릴옥시 기, C_{7-20} 아릴알킬옥시 기, 아미도 기, $-NR'_2$, 포스피도 기, $-PR'_2$, 티올레이트 기 -SR', 화학식 $-Si(R^a)_3$의 실릴 기, 및 화학식 $-Ge(R^a)_3$의 게르마닐 기로 이루어지는 군 중에서 선택되는 하나 이상의 치환체에 의해 추가로 치환되고; 여기서 각 R'는 수소, C_{1-20} 알킬 기, 및 C_{6-20} 아릴 기로 이루어지는 군 중에서 독립적으로 선택되고; 그리고 각 R^a는 수소, C_{1-8} 알킬 기, C_{1-8} 알콕시 기, C_{6-20} 아릴옥시 기, 및 C_{6-20} 아릴 기로 이루어지는 군 중에서 독립적으로 선택된다.

[1318] 일부 실시양태에서, R^3, R^4, R^5 및 R^6은 각각 독립적으로 할로겐; 수소; 및 헤테로원자 함유 C_{1-30} 하이드로카르빌 기로서, 여기서 헤테로원자 함유 하이드로카르빌 기는 비치환되거나, 또는 할로겐 원자, C_{1-20} 알킬 기, C_{1-20} 알콕시 기, C_{7-20} 알킬아릴 기, C_{7-20} 아릴알킬 기, C_{6-20} 아릴 기, C_{6-20} 아릴옥시 기, C_{7-20} 알킬아릴옥시 기, 및 C_{7-20} 아릴알킬옥시 기로 이루어지는 군 중에서 선택되는 하나 이상의 치환체에 의해 추가로 치환되는, 헤테로원자 함유 C_{1-30} 하이드로카르빌 기로 이루어지는 군 중에서 선택되고; 여기서, R^3, R^4, R^5 및 R^6 중 2개의 인접한 기는 선택적으로 결합되어 환형 헤테로원자 함유 하이드로카르빌 기를 형성할 수 있고, 이 환형 헤테로원자 함유 하이드로카르빌 기는 비치환되거나, 또는 할로겐 원자, C_{1-20} 알킬 기, C_{1-20} 알콕시 기, C_{7-20} 알킬아릴 기, C_{7-20} 아릴알킬 기, C_{6-20} 아릴 기, C_{6-20} 아릴옥시 기, C_{7-20} 알킬아릴옥시 기, C_{7-20} 아릴알킬옥시 기, 아미도 기, $-NR'_2$, 포스피도 기, $-PR'_2$, 티올레이트 기 -SR', 화학식 $-Si(R^a)_3$의 실릴 기, 및 화학식 $-Ge(R^a)_3$의 게르마닐 기로 이루어지는 군 중에서 선택되는 하나 이상의 치환체에 의해 추가로 치환되고; 여기서 각 R'는 수소, C_{1-20} 알킬 기, 및 C_{6-20} 아릴 기로 이루어지는 군 중에서 독립적으로 선택되고; 그리고 각 R^a는 수소, C_{1-8} 알킬 기, C_{1-8} 알콕시 기, C_{6-20} 아릴옥시 기, 및 C_{6-20} 아릴 기로 이루어지는 군 중에서 독립적으로 선택된다.

[1319] 일부 실시양태에서, R^3, R^4, R^5 및 R^6은 각각 독립적으로 할로겐, 수소, C_{1-30} 알킬 기, C_{1-30} 알콕시 기, C_{7-30} 알킬아릴 기, C_{7-30} 아릴알킬 기, C_{6-30} 아릴 기, C_{6-30} 아릴옥사이드 기, C_{7-30} 알킬아릴옥시 기, 및 C_{7-30} 아릴알킬옥시 기로 이루어지는 군 중에서 선택된다.

[1320] 일부 실시양태에서, R^3, R^4, R^5 및 R^6은 각각 독립적으로 할로겐, 수소, C_{1-20} 알킬 기, C_{1-20} 알콕시 기, C_{7-20} 알킬아릴 기, C_{7-20} 아릴알킬 기, C_{6-20} 아릴 기, C_{6-20} 아릴옥사이드 기, C_{7-20} 알킬아릴옥시 기, 및 C_{7-20} 아릴알킬옥시 기로 이루어지는 군 중에서 선택된다.

[1321] 일부 실시양태에서, R^3, R^4, R^5 및 R^6은 각각 독립적으로 할로겐, 수소, 및 C_{1-30} 하이드로카르빌 기로 이루어지는 군 중에서 선택되고, 여기서 하이드로카르빌 기는 비치환되거나 또는 하나 이상의 할로겐 원자에 의해 추가로 치환된다.

[1322] 일부 실시양태에서, R^3, R^4, R^5 및 R^6은 각각 독립적으로 할로겐, 수소, 및 C_{1-30} 헤테로원자 함유 하이드로카르빌 기로 이루어지는 군 중에서 선택되고, 여기서 헤테로원자 함유 하이드로카르빌 기는 비치환되거나 또는 하나 이상의 할로겐 원자에 의해 추가로 치환된다.

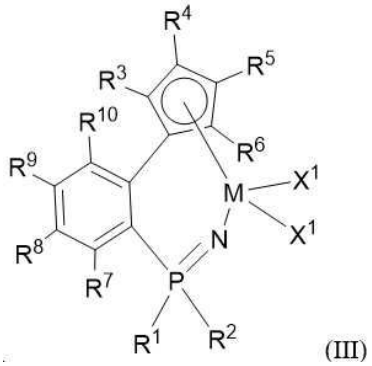
[1323] 일부 실시양태에서, R^3, R^4, R^5 및 R^6은 각각 독립적으로 수소 및 C_{1-30} 하이드로카르빌 기로 이루어지는 군 중에서 선택되고, 여기서 하이드로카르빌 기는 비치환되거나 또는 하나 이상의 할로겐 원자에 의해 추가로 치환된다.

[1324] 일부 실시양태에서, R^3, R^4, R^5 및 R^6은 각각 독립적으로 수소 및 C_{1-30} 헤테로원자 함유 하이드로카르빌 기로 이

루어지는 군 중에서 선택되고, 여기서 헤테로원자 함유 하이드로카르빌 기는 비치환되거나 또는 하나 이상의 할로겐 원자에 의해 추가로 치환된다.

[1325] 일부 실시양태에서, R^3, R^4, R^5 및 R^6은 각각 수소이다.

[1326] 본 개시내용의 실시양태에서, 화학식 II의 유기금속 복합체는 화학식 III으로 표현되는 유기금속 복합체이다:

[1327] 

(III)

[1328] 여기서, M, R^1, R^2, R^3, R^4, R^5, R^6, 및 X^1는 화학식 I 및 II에 대해 상기에 정의된 바와 같고; 그리고

[1329] 여기서, R^7, R^8, R^9 및 R^{10}는 각각 독립적으로 다음으로 이루어지는 군 중에서 선택되며:

[1330] 할로겐;

[1331] 수소;

[1332] C_{1-30} 하이드로카르빌 기로서, 여기서 하이드로카르빌 기는 비치환되거나, 또는 할로겐 원자, C_{1-20} 알킬 기, C_{1-20} 알콕시 기, C_{7-20} 알킬아릴 기, C_{7-20} 아릴알킬 기, C_{6-20} 아릴 기, C_{6-20} 아릴옥시 기, C_{7-20} 알킬아릴옥시 기, 및 C_{7-20} 아릴알킬옥시 기로 이루어지는 군 중에서 선택되는 하나 이상의 치환체에 의해 추가로 치환되는, C_{1-30} 하이드로카르빌 기;

[1333] 헤테로원자 함유 C_{1-30} 하이드로카르빌 기로서, 여기서 헤테로원자 함유 하이드로카르빌 기는 비치환되거나, 또는 할로겐 원자, C_{1-20} 알킬 기, C_{1-20} 알콕시 기, C_{7-20} 알킬아릴 기, C_{7-20} 아릴알킬 기, C_{6-20} 아릴 기, C_{6-20} 아릴옥시 기, C_{7-20} 알킬아릴옥시 기, 및 C_{7-20} 아릴알킬옥시 기로 이루어지는 군 중에서 선택되는 하나 이상의 치환체에 의해 추가로 치환되는, 헤테로원자 함유 C_{1-30} 하이드로카르빌 기;

[1334] 옥시 기, -OR';

[1335] 아미도 기, $-NR'_2$;

[1336] 포스피도 기, $-PR'_2$;

[1337] 티올레이트 기, -SR';

[1338] 화학식 $-Si(R^a)_3$의 실릴 기; 및

[1339] 화학식 $-Ge(R^a)_3$의 게르마닐 기;

[1340] 여기서, R^7, R^8, R^9 및 R^{10} 중 2개의 인접한 기는 선택적으로 결합되어 환형 하이드로카르빌 기 또는 환형 헤테로원자 함유 하이드로카르빌 기를 형성할 수 있고, 이 환형 하이드로카르빌 기 또는 환형 헤테로원자 함유 하이드로카르빌 기는 비치환되거나, 또는 할로겐 원자, C_{1-20} 알킬 기, C_{1-20} 알콕시 기, C_{7-20} 알킬아릴 기, C_{7-20} 아릴알킬 기, C_{6-20} 아릴 기, C_{6-20} 아릴옥시 기, C_{7-20} 알킬아릴옥시 기, C_{7-20} 아릴알킬옥시 기, 화학식 $-NR'_2$의 아미도 기, 화학식 $-PR'_2$의 포스피도 기, 화학식 -SR'의 티올레이트 기, 화학식 $-Si(R^a)_3$의 실릴 기, 및 화학식

$-Ge(R^a)_3$의 게르마닐 기로 이루어지는 군 중에서 선택되는 하나 이상의 치환체에 의해 추가로 치환되고;

[1341] 여기서 각 R'는 수소, C_{1-20} 알킬 기, 및 C_{6-20} 아릴 기로 이루어지는 군 중에서 독립적으로 선택되고; 그리고

[1342] 각 R^a는 수소, C_{1-8} 알킬 기, C_{1-8} 알콕시 기, C_{6-20} 아릴옥시 기, 및 C_{6-20} 아릴 기로 이루어지는 군 중에서 독립적으로 선택된다.

[1343] 일부 실시양태에서, R^7, R^8, R^9 및 R^{10}은 각각 독립적으로 할로겐; 수소; C_{1-30} 하이드로카르빌 기로서, 여기서 하이드로카르빌 기는 비치환되거나, 또는 할로겐 원자, C_{1-20} 알킬 기, C_{1-20} 알콕시 기, C_{7-20} 알킬아릴 기, C_{7-20} 아릴알킬 기, C_{6-20} 아릴 기, C_{6-20} 아릴옥시 기, C_{7-20} 알킬아릴옥시 기, 및 C_{7-20} 아릴알킬옥시 기로 이루어지는 군 중에서 선택되는 하나 이상의 치환체에 의해 추가로 치환되는, C_{1-30} 하이드로카르빌 기; 및 헤테로원자 함유 C_{1-30} 하이드로카르빌 기로서, 여기서 헤테로원자 함유 하이드로카르빌 기는 비치환되거나, 또는 할로겐 원자, C_{1-20} 알킬 기, C_{1-20} 알콕시 기, C_{7-20} 알킬아릴 기, C_{7-20} 아릴알킬 기, C_{6-20} 아릴 기, C_{6-20} 아릴옥시 기, C_{7-20} 알킬아릴옥시 기, 및 C_{7-20} 아릴알킬옥시 기로 이루어지는 군 중에서 선택되는 하나 이상의 치환체에 의해 추가로 치환되는, 헤테로원자 함유 C_{1-30} 하이드로카르빌 기로 이루어지는 군 중에서 선택되고; 여기서, R^7, R^8, R^9 및 R^{10} 중 2개의 인접한 기는 선택적으로 결합되어 환형 하이드로카르빌 기 또는 환형 헤테로원자 함유 하이드로카르빌 기를 형성할 수 있고, 이 환형 하이드로카르빌 기 또는 환형 헤테로원자 함유 하이드로카르빌 기는 비치환되거나, 또는 할로겐 원자, C_{1-20} 알킬 기, C_{1-20} 알콕시 기, C_{7-20} 알킬아릴 기, C_{7-20} 아릴알킬 기, C_{6-20} 아릴 기, C_{6-20} 아릴옥시 기, C_{7-20} 알킬아릴옥시 기, C_{7-20} 아릴알킬옥시 기, 아미도 기 $-NR'_2$, 포스피도 기 $-PR'_2$, 티올레이트 기 -SR', 화학식 $-Si(R^a)_3$의 실릴 기, 및 화학식 $-Ge(R^a)_3$의 게르마닐 기로 이루어지는 군 중에서 선택되는 하나 이상의 치환체에 의해 추가로 치환되고; 여기서 각 R'는 수소, C_{1-20} 알킬 기, 및 C_{6-20} 아릴 기로 이루어지는 군 중에서 독립적으로 선택되고; 그리고 각 R^a는 수소, C_{1-8} 알킬 기, C_{1-8} 알콕시 기, C_{6-20} 아릴옥시 기, 및 C_{6-20} 아릴 기로 이루어지는 군 중에서 독립적으로 선택된다.

[1344] 일부 실시양태에서, R^7, R^8, R^9 및 R^{10}은 각각 독립적으로 할로겐; 수소; 및 C_{1-30} 하이드로카르빌 기로서, 여기서 하이드로카르빌 기는 비치환되거나, 또는 할로겐 원자, C_{1-20} 알킬 기, C_{1-20} 알콕시 기, C_{7-20} 알킬아릴 기, C_{7-20} 아릴알킬 기, C_{6-20} 아릴 기, C_{6-20} 아릴옥시 기, C_{7-20} 알킬아릴옥시 기, 및 C_{7-20} 아릴알킬옥시 기로 이루어지는 군 중에서 선택되는 하나 이상의 치환체에 의해 추가로 치환되는, C_{1-30} 하이드로카르빌 기로 이루어지는 군 중에서 선택되고; 여기서, R^7, R^8, R^9 및 R^{10} 중 2개의 인접한 기는 선택적으로 결합되어 환형 하이드로카르빌 기를 형성할 수 있고, 이 환형 하이드로카르빌 기는 비치환되거나, 또는 할로겐 원자, C_{1-20} 알킬 기, C_{1-20} 알콕시 기, C_{7-20} 알킬아릴 기, C_{7-20} 아릴알킬 기, C_{6-20} 아릴 기, C_{6-20} 아릴옥시 기, C_{7-20} 알킬아릴옥시 기, C_{7-20} 아릴알킬옥시 기, 아미도 기, $-NR'_2$, 포스피도 기, $-PR'_2$, 티올레이트 기 -SR', 화학식 $-Si(R^a)_3$의 실릴 기, 및 화학식 $-Ge(R^a)_3$의 게르마닐 기로 이루어지는 군 중에서 선택되는 하나 이상의 치환체에 의해 추가로 치환되고; 여기서 각 R'는 수소, C_{1-20} 알킬 기, 및 C_{6-20} 아릴 기로 이루어지는 군 중에서 독립적으로 선택되고; 그리고 각 R^a는 수소, C_{1-8} 알킬 기, C_{1-8} 알콕시 기, C_{6-20} 아릴옥시 기, 및 C_{6-20} 아릴 기로 이루어지는 군 중에서 독립적으로 선택된다.

[1345] 일부 실시양태에서, R^7, R^8, R^9 및 R^{10}은 각각 독립적으로 할로겐; 수소; 및 헤테로원자 함유 C_{1-30} 하이드로카르빌 기로서, 여기서 헤테로원자 함유 하이드로카르빌 기는 비치환되거나, 또는 할로겐 원자, C_{1-20} 알킬 기, C_{1-20} 알콕시 기, C_{7-20} 알킬아릴 기, C_{7-20} 아릴알킬 기, C_{6-20} 아릴 기, C_{6-20} 아릴옥시 기, C_{7-20} 알킬아릴옥시 기, 및 C_{7-20} 아릴알킬옥시 기로 이루어지는 군 중에서 선택되는 하나 이상의 치환체에 의해 추가로 치환되는, 헤테로원자 함

유 C_{1-30} 하이드로카르빌 기로 이루어지는 군 중에서 선택되고; 여기서, R^7, R^8, R^9 및 R^{10} 중 2개의 인접한 기는 선택적으로 결합되어 환형 헤테로원자 함유 하이드로카르빌 기를 형성할 수 있고, 이 환형 헤테로원자 함유 하이드로카르빌 기는 비치환되거나, 또는 할로겐 원자, C_{1-20} 알킬 기, C_{1-20} 알콕시 기, C_{7-20} 알킬아릴 기, C_{7-20} 아릴알킬 기, C_{6-20} 아릴 기, C_{6-20} 아릴옥시 기, C_{7-20} 알킬아릴옥시 기, C_{7-20} 아릴알킬옥시 기, 아미도 기, $-NR'_2$, 포스피도 기, $-PR'_2$, 티올레이트 기 $-SR'$, 화학식 $-Si(R^a)_3$의 실릴 기, 및 화학식 $-Ge(R^a)_3$의 게르마닐 기로 이루어지는 군 중에서 선택되는 하나 이상의 치환체에 의해 추가로 치환되고; 여기서 각 R'는 수소, C_{1-20} 알킬 기, 및 C_{6-20} 아릴 기로 이루어지는 군 중에서 독립적으로 선택되고; 그리고 각 R^a는 수소, C_{1-8} 알킬 기, C_{1-8} 알콕시 기, C_{6-20} 아릴옥시 기, 및 C_{6-20} 아릴 기로 이루어지는 군 중에서 독립적으로 선택된다.

[1346] 일부 실시양태에서, R^7, R^8, R^9 및 R^{10}은 각각 독립적으로 할로겐, 수소, C_{1-30} 알킬 기, C_{1-30} 알콕시 기, C_{7-30} 알킬아릴 기, C_{7-30} 아릴알킬 기, C_{6-30} 아릴 기, C_{6-30} 아릴옥사이드 기, C_{7-30} 알킬아릴옥시 기, 및 C_{7-30} 아릴알킬옥시 기로 이루어지는 군 중에서 선택된다.

[1347] 일부 실시양태에서, R^7, R^8, R^9 및 R^{10}은 각각 독립적으로 할로겐, 수소, C_{1-20} 알킬 기, C_{1-20} 알콕시 기, C_{7-20} 알킬아릴 기, C_{7-20} 아릴알킬 기, C_{6-20} 아릴 기, C_{6-20} 아릴옥사이드 기, C_{7-20} 알킬아릴옥시 기, 및 C_{7-20} 아릴알킬옥시 기로 이루어지는 군 중에서 선택된다.

[1348] 일부 실시양태에서, R^7, R^8, R^9 및 R^{10}은 각각 독립적으로 할로겐, 수소, 및 C_{1-30} 하이드로카르빌 기로 이루어지는 군 중에서 선택되고, 여기서 하이드로카르빌 기는 비치환되거나 또는 하나 이상의 할로겐 원자에 의해 추가로 치환된다.

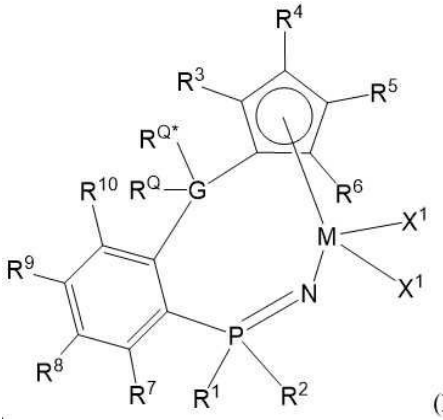
[1349] 일부 실시양태에서, R^7, R^8, R^9 및 R^{10}은 각각 독립적으로 할로겐, 수소, 및 C_{1-30} 헤테로원자 함유 하이드로카르빌 기로 이루어지는 군 중에서 선택되고, 여기서 헤테로원자 함유 하이드로카르빌 기는 비치환되거나 또는 하나 이상의 할로겐 원자에 의해 추가로 치환된다.

[1350] 일부 실시양태에서, R^7, R^8, R^9 및 R^{10}은 각각 독립적으로 수소 및 C_{1-30} 하이드로카르빌 기로 이루어지는 군 중에서 선택되고, 여기서 하이드로카르빌 기는 비치환되거나 또는 하나 이상의 할로겐 원자에 의해 추가로 치환된다.

[1351] 일부 실시양태에서, R^7, R^8, R^9 및 R^{10}은 각각 독립적으로 수소 및 C_{1-30} 헤테로원자 함유 하이드로카르빌 기로 이루어지는 군 중에서 선택되고, 여기서 헤테로원자 함유 하이드로카르빌 기는 비치환되거나 또는 하나 이상의 할로겐 원자에 의해 추가로 치환된다.

[1352] 일부 실시양태에서, R^7, R^8, R^9 및 R^{10}은 각각 수소이다.

[1353] 본 개시내용의 실시양태에서, 화학식 II의 유기금속 복합체는 화학식 IV로 표현되는 유기금속 복합체이다:



[1354] (IV)

[1355] 여기서, M, R^1, R^2, R^3, R^4, R^5, R^6, 및 X^1은 화학식 I 및 II에 대해 상기에 정의된 바와 같고; 그리고

[1356] 여기서, G는 14족 원소이며;

[1357] 여기서, R^Q 및 R^{Q*}는 각각 독립적으로 다음으로 이루어지는 군 중에서 선택되며:

[1358] 할로겐;

[1359] 수소;

[1360] C_{1-30} 하이드로카르빌 기로서, 여기서 하이드로카르빌 기는 비치환되거나, 또는 할로겐 원자, C_{1-20} 알킬 기, C_{1-20} 알콕시 기, C_{7-20} 알킬아릴 기, C_{7-20} 아릴알킬 기, C_{6-20} 아릴 기, C_{6-20} 아릴옥시 기, C_{7-20} 알킬아릴옥시 기, 및 C_{7-20} 아릴알킬옥시 기로 이루어지는 군 중에서 선택되는 하나 이상의 치환체에 의해 추가로 치환되는, C_{1-30} 하이드로카르빌 기;

[1361] 헤테로원자 함유 C_{1-30} 하이드로카르빌 기로서, 여기서 헤테로원자 함유 하이드로카르빌 기는 비치환되거나, 또는 할로겐 원자, C_{1-20} 알킬 기, C_{1-20} 알콕시 기, C_{7-20} 알킬아릴 기, C_{7-20} 아릴알킬 기, C_{6-20} 아릴 기, C_{6-20} 아릴옥시 기, C_{7-20} 알킬아릴옥시 기, 및 C_{7-20} 아릴알킬옥시 기로 이루어지는 군 중에서 선택되는 하나 이상의 치환체에 의해 추가로 치환되는, 헤테로원자 함유 C_{1-30} 하이드로카르빌 기;

[1362] 여기서 R^Q 및 R^{Q*} 기는 선택적으로 결합되어 환형 하이드로카르빌 기 또는 환형 헤테로원자 함유 하이드로카르빌 기를 형성할 수 있고, 이 환형 하이드로카르빌 기 또는 환형 헤테로원자 함유 하이드로카르빌 기는 비치환되거나, 또는 할로겐 원자, C_{1-20} 알킬 기, C_{1-20} 알콕시 기, C_{7-20} 알킬아릴 기, C_{7-20} 아릴알킬 기, C_{6-20} 아릴 기, C_{6-20} 아릴옥시 기, C_{7-20} 알킬아릴옥시 기, C_{7-20} 아릴알킬옥시 기, 화학식 $-NR'_2$의 아미도 기, 화학식 $-PR'_2$의 포스피도 기, 화학식 -SR'의 티올레이트 기, 화학식 $-Si(R^a)_3$의 실릴 기, 및 화학식 $-Ge(R^a)_3$의 게르마닐 기로 이루어지는 군 중에서 선택되는 하나 이상의 치환체에 의해 추가로 치환되고;

[1363] 여기서, R^7, R^8, R^9 및 R^{10}은 각각 독립적으로 다음으로 이루어지는 군 중에서 선택되고:

[1364] 할로겐;

[1365] 수소;

[1366] C_{1-30} 하이드로카르빌 기로서, 여기서 하이드로카르빌 기는 비치환되거나, 또는 할로겐 원자, C_{1-20} 알킬 기, C_{1-20} 알콕시 기, C_{7-20} 알킬아릴 기, C_{7-20} 아릴알킬 기, C_{6-20} 아릴 기, C_{6-20} 아릴옥시 기, C_{7-20} 알킬아릴옥시 기, 및 C_{7-20} 아릴알킬옥시 기로 이루어지는 군 중에서 선택되는 하나 이상의 치환체에 의해 추가로 치환되는, C_{1-30} 하이드로카르빌 기;

[1367] 헤테로원자 함유 C_{1-30} 하이드로카르빌 기로서, 여기서 헤테로원자 함유 하이드로카르빌 기는 비치환되거나, 또는

할로겐 원자, C_{1-20} 알킬 기, C_{1-20} 알콕시 기, C_{7-20} 알킬아릴 기, C_{7-20} 아릴알킬 기, C_{6-20} 아릴 기, C_{6-20} 아릴옥시 기, C_{7-20} 알킬아릴옥시 기, 및 C_{7-20} 아릴알킬옥시 기로 이루어지는 군 중에서 선택되는 하나 이상의 치환체에 의해 추가로 치환되는, 헤테로원자 함유 C_{1-30} 하이드로카르빌 기;

[1368] 옥시 기, -OR';

[1369] 아미도 기, $-NR'_2$;

[1370] 포스피도 기, $-PR'_2$;

[1371] 티올레이트 기, -SR';

[1372] 화학식 $-Si(R^a)_3$의 실릴 기; 및

[1373] 화학식 $-Ge(R^a)_3$의 게르마닐 기;

[1374] 여기서, R^7, R^8, R^9 및 R^{10} 중 2개의 인접한 기는 선택적으로 결합되어 환형 하이드로카르빌 기 또는 환형 헤테로원자 함유 하이드로카르빌 기를 형성할 수 있고, 이 환형 하이드로카르빌 기 또는 환형 헤테로원자 함유 하이드로카르빌 기는 비치환되거나, 또는 할로겐 원자, C_{1-20} 알킬 기, C_{1-20} 알콕시 기, C_{7-20} 알킬아릴 기, C_{7-20} 아릴알킬 기, C_{6-20} 아릴 기, C_{6-20} 아릴옥시 기, C_{7-20} 알킬아릴옥시 기, C_{7-20} 아릴알킬옥시 기, 화학식 $-NR'_2$의 아미도 기, 화학식 $-PR'_2$의 포스피도 기, 화학식 -SR'의 티올레이트 기, 화학식 $-Si(R^a)_3$의 실릴 기, 및 화학식 $-Ge(R^a)_3$의 게르마닐 기로 이루어지는 군 중에서 선택되는 하나 이상의 치환체에 의해 추가로 치환되고;

[1375] 여기서 각 R'는 수소, C_{1-20} 알킬 기, 및 C_{6-20} 아릴 기로 이루어지는 군 중에서 독립적으로 선택되고; 그리고

[1376] 각 R^a는 수소, C_{1-8} 알킬 기, C_{1-8} 알콕시 기, C_{6-20} 아릴옥시 기, 및 C_{6-20} 아릴 기로 이루어지는 군 중에서 독립적으로 선택된다.

[1377] 일부 실시양태에서 G는 탄소, C, 또는 규소, Si, 또는 게르마늄, Ge이다.

[1378] 일부 실시양태에서 G는 탄소, C, 또는 규소, Si이다.

[1379] 일부 실시양태에서 G는 탄소, C이다.

[1380] 일부 실시양태에서 G는 규소, Si이다.

[1381] 일부 실시양태에서 G는 게르마늄, Ge이다.

[1382] 일부 실시양태에서, R^Q 및 R^{Q*}는 각각 독립적으로 할로겐, 수소, C_{1-30} 알킬 기, C_{1-30} 알콕시 기, C_{7-30} 알킬아릴 기, C_{7-30} 아릴알킬 기, C_{6-30} 아릴 기, C_{6-30} 아릴옥사이드 기, C_{7-30} 알킬아릴옥시 기, 및 C_{7-30} 아릴알킬옥시 기로 이루어지는 군 중에서 선택된다.

[1383] 일부 실시양태에서, R^Q 및 R^{Q*}는 각각 독립적으로 할로겐, 수소, C_{1-20} 알킬 기, C_{1-20} 알콕시 기, C_{7-20} 알킬아릴 기, C_{7-20} 아릴알킬 기, C_{6-20} 아릴 기, C_{6-20} 아릴옥사이드 기, C_{7-20} 알킬아릴옥시 기, 및 C_{7-20} 아릴알킬옥시 기로 이루어지는 군 중에서 선택된다.

[1384] 일부 실시양태에서, R^Q 및 R^{Q*}는 각각 독립적으로 수소, C_{1-20} 알킬 기 및 C_{6-20} 아릴 기로 이루어지는 군 중에서 선택된다.

[1385] 실시양태에서, R^Q 및 R^{Q*}는 각각 독립적으로 C_{1-8} 알킬 기이다.

[1386] 실시양태에서, R^Q 및 R^{Q*}는 각각 독립적으로 C_{6-20} 아릴 기이다.

[1387] 실시양태에서, R^{Q}는 수소이고 R^{Q*}는 C_{1-8} 알킬 기이다.

[1388] 실시양태에서, R^{Q}는 수소이고 R^{Q*}는 C_{6-20} 아릴 기이다.

[1389] 실시양태에서, R^{Q}는 수소이고 R^{Q*}는 메틸 기이다.

[1390] 실시양태에서, R^{Q}는 수소이고 R^{Q*}는 페닐 기이다.

[1391] 실시양태에서, R^{Q} 및 R^{Q*}는 각각 수소이다.

[1392] 일부 실시양태에서, R^{7}, R^{8}, R^{9} 및 R^{10}은 각각 독립적으로 할로겐; 수소; C_{1-30} 하이드로카르빌 기로서, 여기서 하이드로카르빌 기는 비치환되거나, 또는 할로겐 원자, C_{1-20} 알킬 기, C_{1-20} 알콕시 기, C_{7-20} 알킬아릴 기, C_{7-20} 아릴알킬 기, C_{6-20} 아릴 기, C_{6-20} 아릴옥시 기, C_{7-20} 알킬아릴옥시 기, 및 C_{7-20} 아릴알킬옥시 기로 이루어지는 군 중에서 선택되는 하나 이상의 치환체에 의해 추가로 치환되는, C_{1-30} 하이드로카르빌 기; 및 헤테로원자 함유 C_{1-30} 하이드로카르빌 기로서, 여기서 헤테로원자 함유 하이드로카르빌 기는 비치환되거나, 또는 할로겐 원자, C_{1-20} 알킬 기, C_{1-20} 알콕시 기, C_{7-20} 알킬아릴 기, C_{7-20} 아릴알킬 기, C_{6-20} 아릴 기, C_{6-20} 아릴옥시 기, C_{7-20} 알킬아릴옥시 기, 및 C_{7-20} 아릴알킬옥시 기로 이루어지는 군 중에서 선택되는 하나 이상의 치환체에 의해 추가로 치환되는, 헤테로원자 함유 C_{1-30} 하이드로카르빌 기로 이루어지는 군 중에서 선택되고; 여기서, R^{7}, R^{8}, R^{9} 및 R^{10} 중 2개의 인접한 기는 선택적으로 결합되어 환형 하이드로카르빌 기 또는 환형 헤테로원자 함유 하이드로카르빌 기를 형성할 수 있고, 이 환형 하이드로카르빌 기 또는 환형 헤테로원자 함유 하이드로카르빌 기는 비치환되거나, 또는 할로겐 원자, C_{1-20} 알킬 기, C_{1-20} 알콕시 기, C_{7-20} 알킬아릴 기, C_{7-20} 아릴알킬 기, C_{6-20} 아릴 기, C_{6-20} 아릴옥시 기, C_{7-20} 알킬아릴옥시 기, C_{7-20} 아릴알킬옥시 기, 아미도 기 $-NR'_2$, 포스피도 기 $-PR'_2$, 티올레이트 기 $-SR'$, 화학식 $-Si(R^{a})_3$의 실릴 기, 및 화학식 $-Ge(R^{a})_3$의 게르마닐 기로 이루어지는 군 중에서 선택되는 하나 이상의 치환체에 의해 추가로 치환되고; 여기서 각 R'는 수소, C_{1-20} 알킬 기, 및 C_{6-20} 아릴 기로 이루어지는 군 중에서 독립적으로 선택되고; 그리고 각 R^{a}는 수소, C_{1-8} 알킬 기, C_{1-8} 알콕시 기, C_{6-20} 아릴옥시 기, 및 C_{6-20} 아릴 기로 이루어지는 군 중에서 독립적으로 선택된다.

[1393] 일부 실시양태에서, R^{7}, R^{8}, R^{9} 및 R^{10}은 각각 독립적으로 할로겐; 수소; 및 C_{1-30} 하이드로카르빌 기로서, 여기서 하이드로카르빌 기는 비치환되거나, 또는 할로겐 원자, C_{1-20} 알킬 기, C_{1-20} 알콕시 기, C_{7-20} 알킬아릴 기, C_{7-20} 아릴알킬 기, C_{6-20} 아릴 기, C_{6-20} 아릴옥시 기, C_{7-20} 알킬아릴옥시 기, 및 C_{7-20} 아릴알킬옥시 기로 이루어지는 군 중에서 선택되는 하나 이상의 치환체에 의해 추가로 치환되는, C_{1-30} 하이드로카르빌 기로 이루어지는 군 중에서 선택되고; 여기서, R^{7}, R^{8}, R^{9} 및 R^{10} 중 2개의 인접한 기는 선택적으로 결합되어 환형 하이드로카르빌 기를 형성할 수 있고, 이 환형 하이드로카르빌 기는 비치환되거나, 또는 할로겐 원자, C_{1-20} 알킬 기, C_{1-20} 알콕시 기, C_{7-20} 알킬아릴 기, C_{7-20} 아릴알킬 기, C_{6-20} 아릴 기, C_{6-20} 아릴옥시 기, C_{7-20} 알킬아릴옥시 기, C_{7-20} 아릴알킬옥시 기, 아미도 기, $-NR'_2$, 포스피도 기, $-PR'_2$, 티올레이트 기 $-SR'$, 화학식 $-Si(R^{a})_3$의 실릴 기, 및 화학식 $-Ge(R^{a})_3$의 게르마닐 기로 이루어지는 군 중에서 선택되는 하나 이상의 치환체에 의해 추가로 치환되고; 여기서 각 R'는 수소, C_{1-20} 알킬 기, 및 C_{6-20} 아릴 기로 이루어지는 군 중에서 독립적으로 선택되고; 그리고 각 R^{a}는 수소, C_{1-8} 알킬 기, C_{1-8} 알콕시 기, C_{6-20} 아릴옥시 기, 및 C_{6-20} 아릴 기로 이루어지는 군 중에서 독립적으로 선택된다.

[1394] 일부 실시양태에서, R^{7}, R^{8}, R^{9} 및 R^{10}은 각각 독립적으로 할로겐; 수소; 및 헤테로원자 함유 C_{1-30} 하이드로카르빌 기로서, 여기서 헤테로원자 함유 하이드로카르빌 기는 비치환되거나, 또는 할로겐 원자, C_{1-20} 알킬 기, C_{1-20} 알

콕시 기, C_{7-20} 알킬아릴 기, C_{7-20} 아릴알킬 기, C_{6-20} 아릴 기, C_{6-20} 아릴옥시 기, C_{7-20} 알킬아릴옥시 기, 및 C_{7-20} 아릴알킬옥시 기로 이루어지는 군 중에서 선택되는 하나 이상의 치환체에 의해 추가로 치환되는, 헤테로원자 함유 C_{1-30} 하이드로카르빌 기로 이루어지는 군 중에서 선택되고; 여기서, R^7, R^8, R^9 및 R^{10} 중 2개의 인접한 기는 선택적으로 결합되어 환형 헤테로원자 함유 하이드로카르빌 기를 형성할 수 있고, 이 환형 헤테로원자 함유 하이드로카르빌 기는 비치환되거나, 또는 할로겐 원자, C_{1-20} 알킬 기, C_{1-20} 알콕시 기, C_{7-20} 알킬아릴 기, C_{7-20} 아릴알킬 기, C_{6-20} 아릴 기, C_{6-20} 아릴옥시 기, C_{7-20} 알킬아릴옥시 기, C_{7-20} 아릴알킬옥시 기, 아미도 기, $-NR'_2$, 포스피도 기, $-PR'_2$, 티올레이트 기 $-SR'$, 화학식 $-Si(R^a)_3$의 실릴 기, 및 화학식 $-Ge(R^a)_3$의 게르마닐 기로 이루어지는 군 중에서 선택되는 하나 이상의 치환체에 의해 추가로 치환되고; 여기서 각 R'는 수소, C_{1-20} 알킬 기, 및 C_{6-20} 아릴 기로 이루어지는 군 중에서 독립적으로 선택되고; 그리고 각 R^a는 수소, C_{1-8} 알킬 기, C_{1-8} 알콕시 기, C_{6-20} 아릴옥시 기, 및 C_{6-20} 아릴 기로 이루어지는 군 중에서 독립적으로 선택된다.

[1395] 일부 실시양태에서, R^7, R^8, R^9 및 R^{10}은 각각 독립적으로 할로겐, 수소, C_{1-30} 알킬 기, C_{1-30} 알콕시 기, C_{7-30} 알킬아릴 기, C_{7-30} 아릴알킬 기, C_{6-30} 아릴 기, C_{6-30} 아릴옥사이드 기, C_{7-30} 알킬아릴옥시 기, 및 C_{7-30} 아릴알킬옥시 기로 이루어지는 군 중에서 선택된다.

[1396] 일부 실시양태에서, R^7, R^8, R^9 및 R^{10}은 각각 독립적으로 할로겐, 수소, C_{1-20} 알킬 기, C_{1-20} 알콕시 기, C_{7-20} 알킬아릴 기, C_{7-20} 아릴알킬 기, C_{6-20} 아릴 기, C_{6-20} 아릴옥사이드 기, C_{7-20} 알킬아릴옥시 기, 및 C_{7-20} 아릴알킬옥시 기로 이루어지는 군 중에서 선택된다.

[1397] 일부 실시양태에서, R^7, R^8, R^9 및 R^{10}은 각각 독립적으로 할로겐, 수소, 및 C_{1-30} 하이드로카르빌 기로 이루어지는 군 중에서 선택되고, 여기서 하이드로카르빌 기는 비치환되거나 또는 하나 이상의 할로겐 원자에 의해 추가로 치환된다.

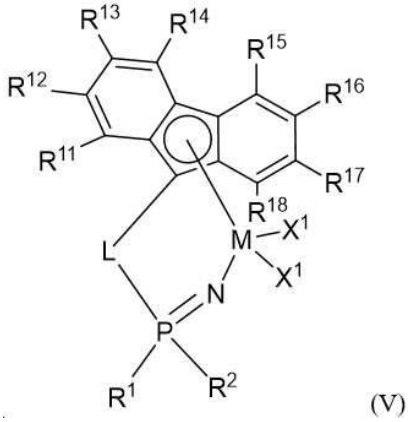
[1398] 일부 실시양태에서, R^7, R^8, R^9 및 R^{10}은 각각 독립적으로 할로겐, 수소, 및 C_{1-30} 헤테로원자 함유 하이드로카르빌 기로 이루어지는 군 중에서 선택되고, 여기서 헤테로원자 함유 하이드로카르빌 기는 비치환되거나 또는 하나 이상의 할로겐 원자에 의해 추가로 치환된다.

[1399] 일부 실시양태에서, R^7, R^8, R^9 및 R^{10}은 각각 독립적으로 수소 및 C_{1-30} 하이드로카르빌 기로 이루어지는 군 중에서 선택되고, 여기서 하이드로카르빌 기는 비치환되거나 또는 하나 이상의 할로겐 원자에 의해 추가로 치환된다.

[1400] 일부 실시양태에서, R^7, R^8, R^9 및 R^{10}은 각각 독립적으로 수소 및 C_{1-30} 헤테로원자 함유 하이드로카르빌 기로 이루어지는 군 중에서 선택되고, 여기서 헤테로원자 함유 하이드로카르빌 기는 비치환되거나 또는 하나 이상의 할로겐 원자에 의해 추가로 치환된다.

[1401] 일부 실시양태에서, R^7, R^8, R^9 및 R^{10}은 각각 수소이다.

[1402] 본 개시내용의 실시양태에서, 화학식 I의 유기금속 복합체는 화학식 V로 표현되는 유기금속 복합체이다:

[1403] 
(V)

[1404] 여기서, M, R^1, R^2, X^1 및 L은 화학식 I에 대해 상기에 정의된 바와 같고; 그리고

[1405] 여기서, R^{11}, R^{12}, R^{13}, R^{14}, R^{15}, R^{16}, R^{17}, R^{18}은 각각 독립적으로 다음으로 이루어지는 군 중에서 선택되며:

[1406] 할로겐;

[1407] 수소;

[1408] C_{1-30} 하이드로카르빌 기로서, 여기서 하이드로카르빌 기는 비치환되거나, 또는 할로겐 원자, C_{1-20} 알킬 기, C_{1-20} 알콕시 기, C_{7-20} 알킬아릴 기, C_{7-20} 아릴알킬 기, C_{6-20} 아릴 기, C_{6-20} 아릴옥시 기, C_{7-20} 알킬아릴옥시 기, 및 C_{7-20} 아릴알킬옥시 기로 이루어지는 군 중에서 선택되는 하나 이상의 치환체에 의해 추가로 치환되는, C_{1-30} 하이드로카르빌 기;

[1409] 헤테로원자 함유 C_{1-30} 하이드로카르빌 기로서, 여기서 헤테로원자 함유 하이드로카르빌 기는 비치환되거나, 또는 할로겐 원자, C_{1-20} 알킬 기, C_{1-20} 알콕시 기, C_{7-20} 알킬아릴 기, C_{7-20} 아릴알킬 기, C_{6-20} 아릴 기, C_{6-20} 아릴옥시 기, C_{7-20} 알킬아릴옥시 기, 및 C_{7-20} 아릴알킬옥시 기로 이루어지는 군 중에서 선택되는 하나 이상의 치환체에 의해 추가로 치환되는, 헤테로원자 함유 C_{1-30} 하이드로카르빌 기;

[1410] 옥시 기, -OR';

[1411] 아미도 기, $-NR'_2$;

[1412] 포스피도 기, $-PR'_2$;

[1413] 티올레이트 기, -SR';

[1414] 화학식 $-Si(R^a)_3$의 실릴 기; 및

[1415] 화학식 $-Ge(R^a)_3$의 게르마닐 기;

[1416] 여기서, R^{11}, R^{12}, R^{13}, R^{14}, R^{15}, R^{16}, R^{17}, R^{18} 중 2개의 인접한 기는 선택적으로 결합되어 환형 하이드로카르빌 기 또는 환형 헤테로원자 함유 하이드로카르빌 기를 형성할 수 있고, 이 환형 하이드로카르빌 기 또는 환형 헤테로원자 함유 하이드로카르빌 기는 비치환되거나, 또는 할로겐 원자, C_{1-20} 알킬 기, C_{1-20} 알콕시 기, C_{7-20} 알킬아릴 기, C_{7-20} 아릴알킬 기, C_{6-20} 아릴 기, C_{6-20} 아릴옥시 기, C_{7-20} 알킬아릴옥시 기, C_{7-20} 아릴알킬옥시 기, 화학식 $-NR'_2$의 아미도 기, 화학식 $-PR'_2$의 포스피도 기, 화학식 -SR'의 티올레이트 기, 화학식 $-Si(R^a)_3$의 실릴 기, 및 화학식 $-Ge(R^a)_3$의 게르마닐 기로 이루어지는 군 중에서 선택되는 하나 이상의 치환체에 의해 추가로 치환되고;

[1417] 여기서 각 R'는 수소, C_{1-20} 알킬 기, 및 C_{6-20} 아릴 기로 이루어지는 군 중에서 독립적으로 선택되고; 그리고

[1418] 각 R^a는 수소, C_{1-8} 알킬 기, C_{1-8} 알콕시 기, C_{6-20} 아릴옥시 기, 및 C_{6-20} 아릴 기로 이루어지는 군 중에서 독립적으로 선택된다.

[1419] 일부 실시양태에서, R^{11}, R^{12}, R^{13}, R^{14}, R^{15}, R^{16}, R^{17}, R^{18}은 각각 독립적으로 할로겐; 수소; C_{1-30} 하이드로카르빌 기로서, 여기서 하이드로카르빌 기는 비치환되거나, 또는 할로겐 원자, C_{1-20} 알킬 기, C_{1-20} 알콕시 기, C_{7-20} 알킬아릴 기, C_{7-20} 아릴알킬 기, C_{6-20} 아릴 기, C_{6-20} 아릴옥시 기, C_{7-20} 알킬아릴옥시 기, 및 C_{7-20} 아릴알킬옥시 기로 이루어지는 군 중에서 선택되는 하나 이상의 치환체에 의해 추가로 치환되는, C_{1-30} 하이드로카르빌 기; 및 헤테로원자 함유 C_{1-30} 하이드로카르빌 기로서, 여기서 헤테로원자 함유 하이드로카르빌 기는 비치환되거나, 또는 할로겐 원자, C_{1-20} 알킬 기, C_{1-20} 알콕시 기, C_{7-20} 알킬아릴 기, C_{7-20} 아릴알킬 기, C_{6-20} 아릴 기, C_{6-20} 아릴옥시 기, C_{7-20} 알킬아릴옥시 기, 및 C_{7-20} 아릴알킬옥시 기로 이루어지는 군 중에서 선택되는 하나 이상의 치환체에 의해 추가로 치환되는, 헤테로원자 함유 C_{1-30} 하이드로카르빌 기로 이루어지는 군 중에서 선택되고; 여기서, R^{11}, R^{12}, R^{13}, R^{14}, R^{15}, R^{16}, R^{17}, R^{18} 중 2개의 인접한 기는 선택적으로 결합되어 환형 하이드로카르빌 기 또는 환형 헤테로원자 함유 하이드로카르빌 기를 형성할 수 있고, 이 환형 하이드로카르빌 기 또는 환형 헤테로원자 함유 하이드로카르빌 기는 비치환되거나, 또는 할로겐 원자, C_{1-20} 알킬 기, C_{1-20} 알콕시 기, C_{7-20} 알킬아릴 기, C_{7-20} 아릴알킬 기, C_{6-20} 아릴 기, C_{6-20} 아릴옥시 기, C_{7-20} 알킬아릴옥시 기, C_{7-20} 아릴알킬옥시 기, 아미도 기 $-NR'_2$, 포스피도 기 $-PR'_2$, 티올레이트 기 $-SR'$, 화학식 $-Si(R^a)_3$의 실릴 기, 및 화학식 $-Ge(R^a)_3$의 게르마닐 기로 이루어지는 군 중에서 선택되는 하나 이상의 치환체에 의해 추가로 치환되고; 여기서 각 R'는 수소, C_{1-20} 알킬 기, 및 C_{6-20} 아릴 기로 이루어지는 군 중에서 독립적으로 선택되고; 그리고 각 R^a는 수소, C_{1-8} 알킬 기, C_{1-8} 알콕시 기, C_{6-20} 아릴옥시 기, 및 C_{6-20} 아릴 기로 이루어지는 군 중에서 독립적으로 선택된다.

[1420] 일부 실시양태에서, R^{11}, R^{12}, R^{13}, R^{14}, R^{15}, R^{16}, R^{17}, 및 R^{18}은 각각 독립적으로 할로겐; 수소; 및 C_{1-30} 하이드로카르빌 기로서, 여기서 하이드로카르빌 기는 비치환되거나, 또는 할로겐 원자, C_{1-20} 알킬 기, C_{1-20} 알콕시 기, C_{7-20} 알킬아릴 기, C_{7-20} 아릴알킬 기, C_{6-20} 아릴 기, C_{6-20} 아릴옥시 기, C_{7-20} 알킬아릴옥시 기, 및 C_{7-20} 아릴알킬옥시 기로 이루어지는 군 중에서 선택되는 하나 이상의 치환체에 의해 추가로 치환되는, C_{1-30} 하이드로카르빌 기로 이루어지는 군 중에서 선택되고; 여기서, R^{11}, R^{12}, R^{13}, R^{14}, R^{15}, R^{16}, R^{17}, 및 R^{18} 중 2개의 인접한 기는 선택적으로 결합되어 환형 하이드로카르빌 기를 형성할 수 있고, 이 환형 하이드로카르빌 기는 비치환되거나, 또는 할로겐 원자, C_{1-20} 알킬 기, C_{1-20} 알콕시 기, C_{7-20} 알킬아릴 기, C_{7-20} 아릴알킬 기, C_{6-20} 아릴 기, C_{6-20} 아릴옥시 기, C_{7-20} 알킬아릴옥시 기, C_{7-20} 아릴알킬옥시 기, 아미도 기, $-NR'_2$, 포스피도 기, $-PR'_2$, 티올레이트 기 $-SR'$, 화학식 $-Si(R^a)_3$의 실릴 기, 및 화학식 $-Ge(R^a)_3$의 게르마닐 기로 이루어지는 군 중에서 선택되는 하나 이상의 치환체에 의해 추가로 치환되고; 여기서 각 R'는 수소, C_{1-20} 알킬 기, 및 C_{6-20} 아릴 기로 이루어지는 군 중에서 독립적으로 선택되고; 그리고 각 R^a는 수소, C_{1-8} 알킬 기, C_{1-8} 알콕시 기, C_{6-20} 아릴옥시 기, 및 C_{6-20} 아릴 기로 이루어지는 군 중에서 독립적으로 선택된다.

[1421] 일부 실시양태에서, R^{11}, R^{12}, R^{13}, R^{14}, R^{15}, R^{16}, R^{17}, 및 R^{18}은 각각 독립적으로 할로겐; 수소; 및 헤테로원자 함유 C_{1-30} 하이드로카르빌 기로서, 여기서 헤테로원자 함유 하이드로카르빌 기는 비치환되거나, 또는 할로겐 원자, C_{1-20} 알킬 기, C_{1-20} 알콕시 기, C_{7-20} 알킬아릴 기, C_{7-20} 아릴알킬 기, C_{6-20} 아릴 기, C_{6-20} 아릴옥시 기, C_{7-20} 알킬아릴옥시 기, 및 C_{7-20} 아릴알킬옥시 기로 이루어지는 군 중에서 선택되는 하나 이상의 치환체에 의해 추가로 치환되는, 헤테로원자 함유 C_{1-30} 하이드로카르빌 기로 이루어지는 군 중에서 선택되고; 여기서, R^{11}, R^{12}, R^{13}, R^{14}, R^{15}, R^{16}, R^{17}, 및 R^{18} 중 2개의 인접한 기는 선택적으로 결합되어 환형 헤테로원자 함유 하이드로카르빌 기를 형성할 수 있고, 이 환형 헤테로원자 함유 하이드로카르빌 기는 비치환되거나, 또는 할로겐 원자, C_{1-20} 알킬 기,

C_{1-20} 알콕시 기, C_{7-20} 알킬아릴 기, C_{7-20} 아릴알킬 기, C_{6-20} 아릴 기, C_{6-20} 아릴옥시 기, C_{7-20} 알킬아릴옥시 기, C_{7-20} 아릴알킬옥시 기, 아미도 기, $-NR'_2$, 포스피도 기, $-PR'_2$, 티올레이트 기 $-SR'$, 화학식 $-Si(R^a)_3$의 실릴 기, 및 화학식 $-Ge(R^a)_3$의 게르마닐 기로 이루어지는 군 중에서 선택되는 하나 이상의 치환체에 의해 추가로 치환되고; 여기서 각 R'는 수소, C_{1-20} 알킬 기, 및 C_{6-20} 아릴 기로 이루어지는 군 중에서 독립적으로 선택되고; 그리고 각 R^a는 수소, C_{1-8} 알킬 기, C_{1-8} 알콕시 기, C_{6-20} 아릴옥시 기, 및 C_{6-20} 아릴 기로 이루어지는 군 중에서 독립적으로 선택된다.

[1422] 일부 실시양태에서, R^{11}, R^{12}, R^{13}, R^{14}, R^{15}, R^{16}, R^{17}, R^{18}은 각각 독립적으로 할로겐, 수소, C_{1-30} 알킬 기, C_{1-30} 알콕시 기, C_{7-30} 알킬아릴 기, C_{7-30} 아릴알킬 기, C_{6-30} 아릴 기, C_{6-30} 아릴옥사이드 기, C_{7-30} 알킬아릴옥시 기, 및 C_{7-30} 아릴알킬옥시 기로 이루어지는 군 중에서 선택된다.

[1423] 일부 실시양태에서, R^{11}, R^{12}, R^{13}, R^{14}, R^{15}, R^{16}, R^{17}, R^{18}은 각각 독립적으로 할로겐, 수소, C_{1-20} 알킬 기, C_{1-20} 알콕시 기, C_{7-20} 알킬아릴 기, C_{7-20} 아릴알킬 기, C_{6-20} 아릴 기, C_{6-20} 아릴옥사이드 기, C_{7-20} 알킬아릴옥시 기, 및 C_{7-20} 아릴알킬옥시 기로 이루어지는 군 중에서 선택된다.

[1424] 일부 실시양태에서, R^{11}, R^{12}, R^{13}, R^{14}, R^{15}, R^{16}, R^{17}, R^{18}은 각각 독립적으로 할로겐, 수소, 및 C_{1-30} 하이드로카르빌 기로 이루어지는 군 중에서 선택되고, 여기서 하이드로카르빌 기는 비치환되거나 또는 하나 이상의 할로겐 원자에 의해 추가로 치환된다.

[1425] 일부 실시양태에서, R^{11}, R^{12}, R^{13}, R^{14}, R^{15}, R^{16}, R^{17}, R^{18}은 각각 독립적으로 할로겐, 수소, 및 C_{1-30} 헤테로원자 함유 하이드로카르빌 기로 이루어지는 군 중에서 선택되고, 여기서 헤테로원자 함유 하이드로카르빌 기는 비치환되거나 또는 하나 이상의 할로겐 원자에 의해 추가로 치환된다.

[1426] 일부 실시양태에서, R^{11}, R^{12}, R^{13}, R^{14}, R^{15}, R^{16}, R^{17}, R^{18}은 각각 독립적으로 수소 및 C_{1-30} 하이드로카르빌 기로 이루어지는 군 중에서 선택되고, 여기서 하이드로카르빌 기는 비치환되거나 또는 하나 이상의 할로겐 원자에 의해 추가로 치환된다.

[1427] 일부 실시양태에서, R^{11}, R^{12}, R^{13}, R^{14}, R^{15}, R^{16}, R^{17}, R^{18}은 각각 독립적으로 수소 및 C_{1-30} 헤테로원자 함유 하이드로카르빌 기로 이루어지는 군 중에서 선택되고, 여기서 헤테로원자 함유 하이드로카르빌 기는 비치환되거나 또는 하나 이상의 할로겐 원자에 의해 추가로 치환된다.

[1428] 일부 실시양태에서, R^{12} 및 R^{17}은 각각 독립적으로 비치환된 C_{1-30} 하이드로카르빌 기이다.

[1429] 일부 실시양태에서, R^{13} 및 R^{16}은 각각 독립적으로 비치환된 C_{1-30} 하이드로카르빌 기이다.

[1430] 일부 실시양태에서, R^{12} 및 R^{17}은 C_{1-20} 알킬 기이다.

[1431] 일부 실시양태에서, R^{13} 및 R^{16}은 C_{1-20} 알킬 기이다.

[1432] 일부 실시양태에서, R^{12} 및 R^{17}은 C_{6-20} 아릴 기이다.

[1433] 일부 실시양태에서, R^{13} 및 R^{16}은 C_{6-20} 아릴 기이다.

[1434] 일부 실시양태에서, R^{12} 및 R^{17}은 *tert*-부틸 기이다.

[1435] 일부 실시양태에서, R^{13} 및 R^{16}은 *tert*-부틸 기이다.

[1436] 일부 실시양태에서, R^{11}, R^{13}, R^{14}, R^{15}, R^{16} 및 R^{18}은 각각 수소이다.

[1437] 일부 실시양태에서, R^{11}, R^{12}, R^{14}, R^{15}, R^{17} 및 R^{18}은 각각 수소이다.

[1438] 일부 실시양태에서, R^{11}, R^{12}, R^{13}, R^{14}, R^{15}, R^{16}, R^{17} 및 R^{18}은 각각 수소이다.

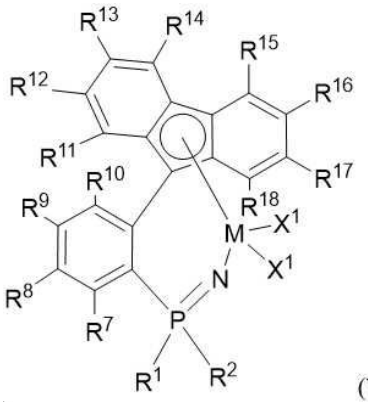
[1439] 일부 실시양태에서, R^{11}, R^{13}, R^{14}, R^{15}, R^{16} 및 R^{18}은 각각 수소이고, 그리고 R^{12} 및 R^{17}은 각각 독립적으로 비치환된 C_{1-30} 하이드로카르빌 기이다.

[1440] 일부 실시양태에서, R^{11}, R^{13}, R^{14}, R^{15}, R^{16} 및 R^{18}은 각각 수소이고, 그리고 R^{12} 및 R^{17}은 각각 *tert*-부틸 기이다.

[1441] 일부 실시양태에서, R^{11}, R^{12}, R^{14}, R^{15}, R^{17} 및 R^{18}은 각각 수소이고, 그리고 R^{13} 및 R^{16}은 각각 독립적으로 비치환된 C_{1-30} 하이드로카르빌 기이다.

[1442] 일부 실시양태에서, R^{11}, R^{12}, R^{14}, R^{15}, R^{17} 및 R^{18}은 각각 수소이고, 그리고 R^{13} 및 R^{16}은 각각 *tert*-부틸 기이다.

[1443] 본 개시내용의 실시양태에서, 화학식 V의 유기금속 복합체는 화학식 VI으로 표현되는 유기금속 복합체이다:

[1444] 

(VI)

[1445] 여기서, M, R^1, R^2, R^{11}, R^{12}, R^{13}, R^{14}, R^{15}, R^{16}, R^{17}, R^{18}, 및 X^1은 화학식 I 및 V에서 상기 정의된 바와 같고; 그리고

[1446] 여기서, R^7, R^8, R^9 및 R^{10}은 각각 독립적으로 다음으로 이루어지는 군 중에서 선택되며:

[1447] 할로겐;

[1448] 수소;

[1449] C_{1-30} 하이드로카르빌 기로서, 여기서 하이드로카르빌 기는 비치환되거나, 또는 할로겐 원자, C_{1-20} 알킬 기, C_{1-20} 알콕시 기, C_{7-20} 알킬아릴 기, C_{7-20} 아릴알킬 기, C_{6-20} 아릴 기, C_{6-20} 아릴옥시 기, C_{7-20} 알킬아릴옥시 기, 및 C_{7-20} 아릴알킬옥시 기로 이루어지는 군 중에서 선택되는 하나 이상의 치환체에 의해 추가로 치환되는, C_{1-30} 하이드로카르빌 기;

[1450] 헤테로원자 함유 C_{1-30} 하이드로카르빌 기로서, 여기서 헤테로원자 함유 하이드로카르빌 기는 비치환되거나, 또는 할로겐 원자, C_{1-20} 알킬 기, C_{1-20} 알콕시 기, C_{7-20} 알킬아릴 기, C_{7-20} 아릴알킬 기, C_{6-20} 아릴 기, C_{6-20} 아릴옥시 기, C_{7-20} 알킬아릴옥시 기, 및 C_{7-20} 아릴알킬옥시 기로 이루어지는 군 중에서 선택되는 하나 이상의 치환체에 의해 추가로 치환되는, 헤테로원자 함유 C_{1-30} 하이드로카르빌 기;

[1451] 옥시 기, -OR';

[1452] 아미도 기, $-NR'_2$;

[1453] 포스피도 기, $-PR'_2$;

[1454] 티올레이트 기, -SR';

[1455] 화학식 $-Si(R^a)_3$의 실릴 기; 및

[1456] 화학식 $-Ge(R^a)_3$의 게르마닐 기;

[1457] 여기서, R^7, R^8, R^9 및 R^{10} 중 2개의 인접한 기는 선택적으로 결합되어 환형 하이드로카르빌 기 또는 환형 헤테로원자 함유 하이드로카르빌 기를 형성할 수 있고, 이 환형 하이드로카르빌 기 또는 환형 헤테로원자 함유 하이드로카르빌 기는 비치환되거나, 또는 할로겐 원자, C_{1-20} 알킬 기, C_{1-20} 알콕시 기, C_{7-20} 알킬아릴 기, C_{7-20} 아릴알킬 기, C_{6-20} 아릴 기, C_{6-20} 아릴옥시 기, C_{7-20} 알킬아릴옥시 기, C_{7-20} 아릴알킬옥시 기, 화학식 $-NR'_2$의 아미도 기, 화학식 $-PR'_2$의 포스피도 기, 화학식 -SR'의 티올레이트 기, 화학식 $-Si(R^a)_3$의 실릴 기, 및 화학식 $-Ge(R^a)_3$의 게르마닐 기로 이루어지는 군 중에서 선택되는 하나 이상의 치환체에 의해 추가로 치환되고;

[1458] 여기서 각 R'는 수소, C_{1-20} 알킬 기, 및 C_{6-20} 아릴 기로 이루어지는 군 중에서 독립적으로 선택되고; 그리고

[1459] 각 R^a는 수소, C_{1-8} 알킬 기, C_{1-8} 알콕시 기, C_{6-20} 아릴옥시 기, 및 C_{6-20} 아릴 기로 이루어지는 군 중에서 독립적으로 선택된다.

[1460] 일부 실시양태에서, R^7, R^8, R^9 및 R^{10}은 각각 독립적으로 할로겐; 수소; C_{1-30} 하이드로카르빌 기로서, 여기서 하이드로카르빌 기는 비치환되거나, 또는 할로겐 원자, C_{1-20} 알킬 기, C_{1-20} 알콕시 기, C_{7-20} 알킬아릴 기, C_{7-20} 아릴알킬 기, C_{6-20} 아릴 기, C_{6-20} 아릴옥시 기, C_{7-20} 알킬아릴옥시 기, 및 C_{7-20} 아릴알킬옥시 기로 이루어지는 군 중에서 선택되는 하나 이상의 치환체에 의해 추가로 치환되는, C_{1-30} 하이드로카르빌 기; 및 헤테로원자 함유 C_{1-30} 하이드로카르빌 기로서, 여기서 헤테로원자 함유 하이드로카르빌 기는 비치환되거나, 또는 할로겐 원자, C_{1-20} 알킬 기, C_{1-20} 알콕시 기, C_{7-20} 알킬아릴 기, C_{7-20} 아릴알킬 기, C_{6-20} 아릴 기, C_{6-20} 아릴옥시 기, C_{7-20} 알킬아릴옥시 기, 및 C_{7-20} 아릴알킬옥시 기로 이루어지는 군 중에서 선택되는 하나 이상의 치환체에 의해 추가로 치환되는, 헤테로원자 함유 C_{1-30} 하이드로카르빌 기로 이루어지는 군 중에서 선택되고; 여기서, R^7, R^8, R^9 및 R^{10} 중 2개의 인접한 기는 선택적으로 결합되어 환형 하이드로카르빌 기 또는 환형 헤테로원자 함유 하이드로카르빌 기를 형성할 수 있고, 이 환형 하이드로카르빌 기 또는 환형 헤테로원자 함유 하이드로카르빌 기는 비치환되거나, 또는 할로겐 원자, C_{1-20} 알킬 기, C_{1-20} 알콕시 기, C_{7-20} 알킬아릴 기, C_{7-20} 아릴알킬 기, C_{6-20} 아릴 기, C_{6-20} 아릴옥시 기, C_{7-20} 알킬아릴옥시 기, C_{7-20} 아릴알킬옥시 기, 아미도 기 $-NR'_2$, 포스피도 기 $-PR'_2$, 티올레이트 기 -SR', 화학식 $-Si(R^a)_3$의 실릴 기, 및 화학식 $-Ge(R^a)_3$의 게르마닐 기로 이루어지는 군 중에서 선택되는 하나 이상의 치환체에 의해 추가로 치환되고; 여기서 각 R'는 수소, C_{1-20} 알킬 기, 및 C_{6-20} 아릴 기로 이루어지는 군 중에서 독립적으로 선택되고; 그리고 각 R^a는 수소, C_{1-8} 알킬 기, C_{1-8} 알콕시 기, C_{6-20} 아릴옥시 기, 및 C_{6-20} 아릴 기로 이루어지는 군 중에서 독립적으로 선택된다.

[1461] 일부 실시양태에서, R^7, R^8, R^9 및 R^{10}은 각각 독립적으로 할로겐; 수소; 및 C_{1-30} 하이드로카르빌 기로서, 여기서 하이드로카르빌 기는 비치환되거나, 또는 할로겐 원자, C_{1-20} 알킬 기, C_{1-20} 알콕시 기, C_{7-20} 알킬아릴 기, C_{7-20} 아릴알킬 기, C_{6-20} 아릴 기, C_{6-20} 아릴옥시 기, C_{7-20} 알킬아릴옥시 기, 및 C_{7-20} 아릴알킬옥시 기로 이루어지는 군 중에서 선택되는 하나 이상의 치환체에 의해 추가로 치환되는, C_{1-30} 하이드로카르빌 기로 이루어지는 군 중에서 선택되고; 여기서, R^7, R^8, R^9 및 R^{10} 중 2개의 인접한 기는 선택적으로 결합되어 환형 하이드로카르빌 기를 형성할 수 있고, 이 환형 하이드로카르빌 기는 비치환되거나, 또는 할로겐 원자, C_{1-20} 알킬 기, C_{1-20} 알콕시 기, C_{7-20} 알킬아릴 기, C_{7-20} 아릴알킬 기, C_{6-20} 아릴 기, C_{6-20} 아릴옥시 기, C_{7-20} 알킬아릴옥시 기, C_{7-20} 아릴알킬옥시

기, 아미도 기, $-NR'_2$, 포스피도 기, $-PR'_2$, 티올레이트 기 -SR', 화학식 $-Si(R^a)_3$의 실릴 기, 및 화학식 $-Ge(R^a)_3$의 게르마닐 기로 이루어지는 군 중에서 선택되는 하나 이상의 치환체에 의해 추가로 치환되고; 여기서 각 R'는 수소, C_{1-20} 알킬 기, 및 C_{6-20} 아릴 기로 이루어지는 군 중에서 독립적으로 선택되고; 그리고 각 R^a는 수소, C_{1-8} 알킬 기, C_{1-8} 알콕시 기, C_{6-20} 아릴옥시 기, 및 C_{6-20} 아릴 기로 이루어지는 군 중에서 독립적으로 선택된다.

[1462] 일부 실시양태에서, R^7, R^8, R^9 및 R^{10}은 각각 독립적으로 할로겐; 수소; 및 헤테로원자 함유 C_{1-30} 하이드로카르빌 기로서, 여기서 헤테로원자 함유 하이드로카르빌 기는 비치환되거나, 또는 할로겐 원자, C_{1-20} 알킬 기, C_{1-20} 알콕시 기, C_{7-20} 알킬아릴 기, C_{7-20} 아릴알킬 기, C_{6-20} 아릴 기, C_{6-20} 아릴옥시 기, C_{7-20} 알킬아릴옥시 기, 및 C_{7-20} 아릴알킬옥시 기로 이루어지는 군 중에서 선택되는 하나 이상의 치환체에 의해 추가로 치환되는, 헤테로원자 함유 C_{1-30} 하이드로카르빌 기로 이루어지는 군 중에서 선택되고; 여기서, R^7, R^8, R^9 및 R^{10} 중 2개의 인접한 기는 선택적으로 결합되어 환형 헤테로원자 함유 하이드로카르빌 기를 형성할 수 있고, 이 환형 헤테로원자 함유 하이드로카르빌 기는 비치환되거나, 또는 할로겐 원자, C_{1-20} 알킬 기, C_{1-20} 알콕시 기, C_{7-20} 알킬아릴 기, C_{7-20} 아릴알킬 기, C_{6-20} 아릴 기, C_{6-20} 아릴옥시 기, C_{7-20} 알킬아릴옥시 기, C_{7-20} 아릴알킬옥시 기, 아미도 기 $-NR'_2$, 포스피도 기 $-PR'_2$, 티올레이트 기 -SR', 화학식 $-Si(R^a)_3$의 실릴 기, 및 화학식 $-Ge(R^a)_3$의 게르마닐 기로 이루어지는 군 중에서 선택되는 하나 이상의 치환체에 의해 추가로 치환되고; 여기서 각 R'는 수소, C_{1-20} 알킬 기, 및 C_{6-20} 아릴 기로 이루어지는 군 중에서 독립적으로 선택되고; 그리고 각 R^a는 수소, C_{1-8} 알킬 기, C_{1-8} 알콕시 기, C_{6-20} 아릴옥시 기, 및 C_{6-20} 아릴 기로 이루어지는 군 중에서 독립적으로 선택된다.

[1463] 일부 실시양태에서, R^7, R^8, R^9 및 R^{10}은 각각 독립적으로 할로겐, 수소, C_{1-30} 알킬 기, C_{1-30} 알콕시 기, C_{7-30} 알킬아릴 기, C_{7-30} 아릴알킬 기, C_{6-30} 아릴 기, C_{6-30} 아릴옥사이드 기, C_{7-30} 알킬아릴옥시 기, 및 C_{7-30} 아릴알킬옥시 기로 이루어지는 군 중에서 선택된다.

[1464] 일부 실시양태에서, R^7, R^8, R^9 및 R^{10}은 각각 독립적으로 할로겐, 수소, C_{1-20} 알킬 기, C_{1-20} 알콕시 기, C_{7-20} 알킬아릴 기, C_{7-20} 아릴알킬 기, C_{6-20} 아릴 기, C_{6-20} 아릴옥사이드 기, C_{7-20} 알킬아릴옥시 기, 및 C_{7-20} 아릴알킬옥시 기로 이루어지는 군 중에서 선택된다.

[1465] 일부 실시양태에서, R^7, R^8, R^9 및 R^{10}은 각각 독립적으로 할로겐, 수소, 및 C_{1-30} 하이드로카르빌 기로 이루어지는 군 중에서 선택되고, 여기서 하이드로카르빌 기는 비치환되거나 또는 하나 이상의 할로겐 원자에 의해 추가로 치환된다.

[1466] 일부 실시양태에서, R^7, R^8, R^9 및 R^{10}은 각각 독립적으로 할로겐, 수소, 및 C_{1-30} 헤테로원자 함유 하이드로카르빌 기로 이루어지는 군 중에서 선택되고, 여기서 헤테로원자 함유 하이드로카르빌 기는 비치환되거나 또는 하나 이상의 할로겐 원자에 의해 추가로 치환된다.

[1467] 일부 실시양태에서, R^7, R^8, R^9 및 R^{10}은 각각 독립적으로 수소 및 C_{1-30} 하이드로카르빌 기로 이루어지는 군 중에서 선택되고, 여기서 하이드로카르빌 기는 비치환되거나 또는 하나 이상의 할로겐 원자에 의해 추가로 치환된다.

[1468] 일부 실시양태에서, R^7, R^8, R^9 및 R^{10}은 각각 독립적으로 수소 및 C_{1-30} 헤테로원자 함유 하이드로카르빌 기로 이루어지는 군 중에서 선택되고, 여기서 헤테로원자 함유 하이드로카르빌 기는 비치환되거나 또는 하나 이상의 할로겐 원자에 의해 추가로 치환된다.

[1469] 일부 실시양태에서, R^7, R^8, R^9 및 R^{10}은 각각 수소이다.

[1470] 일부 실시양태에서, R^7, R^8, R^9 및 R^{10}은 각각 수소이고; 그리고 R^{11}, R^{12}, R^{13}, R^{14}, R^{15}, R^{16}, R^{17}, R^{18}은 각각 독립적으로 할로겐, 수소, C_{1-30} 알킬 기, 및 C_{6-30} 아릴 기로 이루어지는 군 중에서 선택된다.

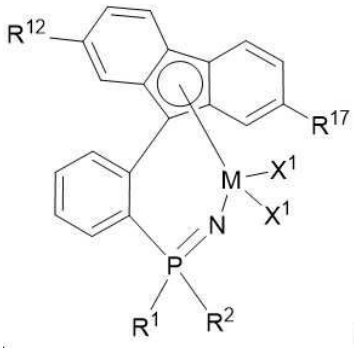
[1471] 일부 실시양태에서, R^7, R^8, R^9 및 R^{10}은 각각 수소이고; R^{11}, R^{13}, R^{14}, R^{15}, R^{16} 및 R^{18}은 각각 수소이고, 그리고 R^{12} 및 R^{17}은 각각 독립적으로 C_{1-20} 알킬 기 또는 C_{6-20} 아릴 기이다.

[1472] 일부 실시양태에서, R^7, R^8, R^9 및 R^{10}은 각각 수소이고; R^{11}, R^{13}, R^{14}, R^{15}, R^{16} 및 R^{18}은 각각 수소이고, 그리고 R^{12} 및 R^{17}은 각각 *tert*-부틸 기이다.

[1473] 일부 실시양태에서, R^7, R^8, R^9 및 R^{10}은 각각 수소이고; R^{11}, R^{12}, R^{14}, R^{15}, R^{17} 및 R^{18}은 각각 수소이고, 그리고 R^{13} 및 R^{16}은 각각 독립적으로 C_{1-20} 알킬 기 또는 C_{6-20} 아릴 기이다.

[1474] 일부 실시양태에서, R^7, R^8, R^9 및 R^{10}은 각각 수소이고; R^{11}, R^{12}, R^{14}, R^{15}, R^{17} 및 R^{18}은 각각 수소이고, 그리고 R^{13} 및 R^{16}은 각각 *tert*-부틸 기이다.

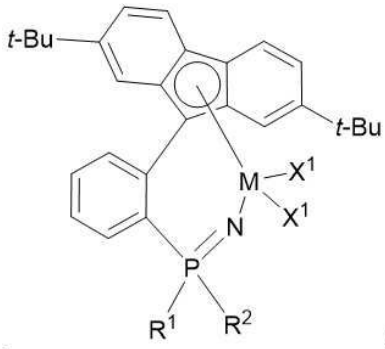
[1475] 본 개시내용의 실시양태에서, 화학식 VI의 유기금속 복합체는 화학식 VIa로 표현되는 유기금속 복합체이다:

[1476] 

(VIa)

[1477] 여기서, M, R^1, R^2, R^{12}, R^{17} 및 X^1은 화학식 I 및 V에서 상기 정의된 바와 같다.

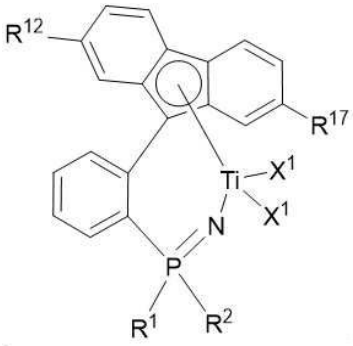
[1478] 본 개시내용의 실시양태에서, 화학식 VI의 유기금속 복합체는 화학식 VIb로 표현되는 유기금속 복합체이다:

[1479] 

(IVb)

[1480] 여기서, M, R^1, R^2 및 X^1은 화학식 I에서 상기 정의된 바와 같다.

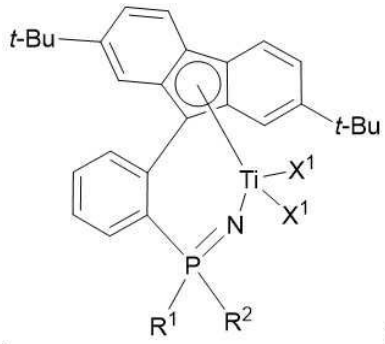
[1481] 본 개시내용의 실시양태에서, 화학식 VI의 유기금속 복합체는 화학식 IVc로 표현되는 유기금속 복합체이다:



[1482] (IVc)

[1483] 여기서, R^1, R^2, R^{12}, R^{17} 및 X^1은 화학식 I 및 V에서 상기 정의된 바와 같다.

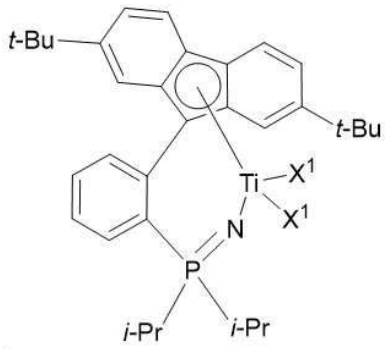
[1484] 본 개시내용의 실시양태에서, 화학식 VI의 유기금속 복합체는 화학식 VId로 표현되는 유기금속 복합체이다:



[1485] (VId)

[1486] 여기서, R^1, R^2 및 X^1은 화학식 I에서 상기 정의된 바와 같다.

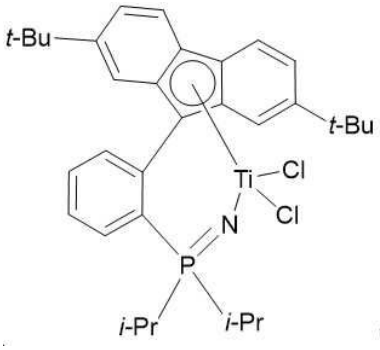
[1487] 본 개시내용의 실시양태에서, 화학식 VI의 유기금속 복합체는 화학식 VIe로 표현되는 유기금속 복합체이다:



[1488] (VIe)

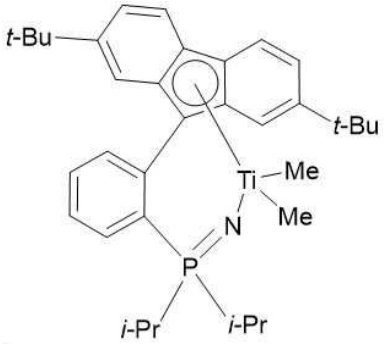
[1489] 여기서, X^1은 화학식 I에서 상기 정의된 바와 같다.

[1490] 본 개시내용의 실시양태에서, 화학식 VI의 유기금속 복합체는 화학식 VIf로 표현되는 유기금속 복합체이다:



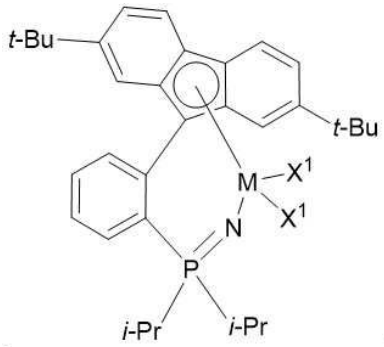
[1491] (VIf).

[1492] 본 개시내용의 실시양태에서, 화학식 VI의 유기금속 복합체는 화학식 VIg로 표현되는 유기금속 복합체이다:



[1493] (VIg).

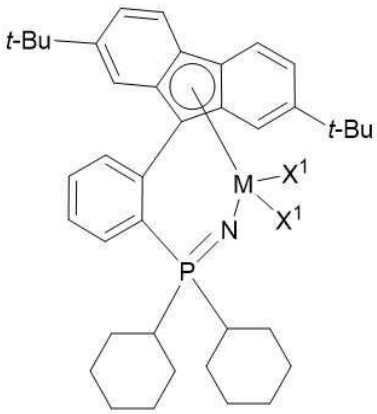
[1494] 본 개시내용의 실시양태에서, 화학식 VI의 유기금속 복합체는 화학식 VIh로 표현되는 유기금속 복합체이다:



[1495] (VIh)

[1496] 여기서, M 및 X^1은 화학식 I에서 상기 정의된 바와 같다.

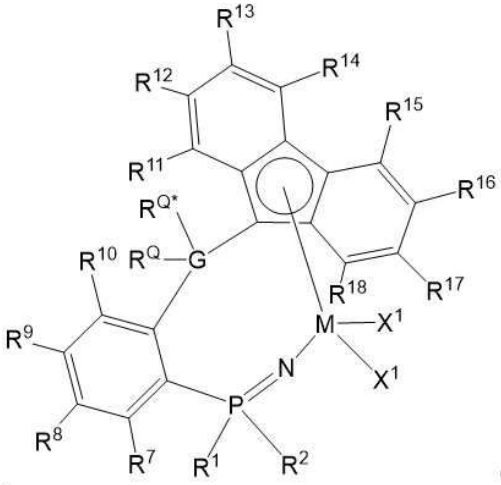
[1497] 본 개시내용의 실시양태에서, 화학식 VI의 유기금속 복합체는 화학식 VIi로 표현되는 유기금속 복합체이다:



[1498] (VIi)

[1499] 여기서, M 및 X^1은 화학식 I에서 상기 정의된 바와 같다.

[1500] 본 개시내용의 실시양태에서, 화학식 V의 유기금속 복합체는 화학식 VII로 표현되는 유기금속 복합체이다:

[1501] 

(VII)

[1502] 여기서, M, R^1, R^2, R^{11}, R^{12}, R^{13}, R^{14}, R^{15}, R^{16}, R^{17}, R^{18}, 및 X^1은 화학식 I 및 V에 대해 상기에 정의된 바와 같고; 그리고

[1503] 여기서, G는 14족 원소이며;

[1504] 여기서, R^Q 및 R^{Q*}는 각각 독립적으로 다음으로 이루어지는 군 중에서 선택되고:

[1505] 할로겐;

[1506] 수소;

[1507] C_{1-30} 하이드로카르빌 기로서, 여기서 하이드로카르빌 기는 비치환되거나, 또는 할로겐 원자, C_{1-20} 알킬 기, C_{1-20} 알콕시 기, C_{7-20} 알킬아릴 기, C_{7-20} 아릴알킬 기, C_{6-20} 아릴 기, C_{6-20} 아릴옥시 기, C_{7-20} 알킬아릴옥시 기, 및 C_{7-20} 아릴알킬옥시 기로 이루어지는 군 중에서 선택되는 하나 이상의 치환체에 의해 추가로 치환되는, C_{1-30} 하이드로카르빌 기;

[1508] 헤테로원자 함유 C_{1-30} 하이드로카르빌 기로서, 여기서 헤테로원자 함유 하이드로카르빌 기는 비치환되거나, 또는 할로겐 원자, C_{1-20} 알킬 기, C_{1-20} 알콕시 기, C_{7-20} 알킬아릴 기, C_{7-20} 아릴알킬 기, C_{6-20} 아릴 기, C_{6-20} 아릴옥시 기, C_{7-20} 알킬아릴옥시 기, 및 C_{7-20} 아릴알킬옥시 기로 이루어지는 군 중에서 선택되는 하나 이상의 치환체에 의해 추가로 치환되는, 헤테로원자 함유 C_{1-30} 하이드로카르빌 기;

[1509] 여기서, R^Q 및 R^{Q*}의 기는 선택적으로 결합되어 환형 하이드로카르빌 기 또는 환형 헤테로원자 함유 하이드로카르빌 기를 형성할 수 있고, 이 환형 하이드로카르빌 기 또는 환형 헤테로원자 함유 하이드로카르빌 기는 비치환되거나, 또는 할로겐 원자, C_{1-20} 알킬 기, C_{1-20} 알콕시 기, C_{7-20} 알킬아릴 기, C_{7-20} 아릴알킬 기, C_{6-20} 아릴 기, C_{6-20} 아릴옥시 기, C_{7-20} 알킬아릴옥시 기, C_{7-20} 아릴알킬옥시 기, 화학식 $-NR'_2$의 아미도 기, 화학식 $-PR'_2$의 포스피도 기, 화학식 $-SR'$의 티올레이트 기, 화학식 $-Si(R^a)_3$의 실릴 기, 및 화학식 $-Ge(R^a)_3$의 게르마닐 기로 이루어지는 군 중에서 선택되는 하나 이상의 치환체에 의해 추가로 치환되고;

[1510] 여기서, R^7, R^8, R^9 및 R^{10}은 각각 독립적으로 다음으로 이루어지는 군 중에서 선택되며:

[1511] 할로겐;

[1512] 수소;

[1513] C_{1-30} 하이드로카르빌 기로서, 여기서 하이드로카르빌 기는 비치환되거나, 또는 할로겐 원자, C_{1-20} 알킬 기, C_{1-20} 알콕시 기, C_{7-20} 알킬아릴 기, C_{7-20} 아릴알킬 기, C_{6-20} 아릴 기, C_{6-20} 아릴옥시 기, C_{7-20} 알킬아릴옥시 기, 및 C_{7-20} 아릴알킬옥시 기로 이루어지는 군 중에서 선택되는 하나 이상의 치환체에 의해 추가로 치환되는, C_{1-30} 하이드

로카르빌 기;

[1514] 헤테로원자 함유 C_{1-30} 하이드로카르빌 기로서, 여기서 헤테로원자 함유 하이드로카르빌 기는 비치환되거나, 또는 할로겐 원자, C_{1-20} 알킬 기, C_{1-20} 알콕시 기, C_{7-20} 알킬아릴 기, C_{7-20} 아릴알킬 기, C_{6-20} 아릴 기, C_{6-20} 아릴옥시 기, C_{7-20} 알킬아릴옥시 기, 및 C_{7-20} 아릴알킬옥시 기로 이루어지는 군 중에서 선택되는 하나 이상의 치환체에 의해 추가로 치환되는, 헤테로원자 함유 C_{1-30} 하이드로카르빌 기;

[1515] 옥시 기, -OR';

[1516] 아미도 기, $-NR'_2$;

[1517] 포스피도 기, $-PR'_2$;

[1518] 티올레이트 기, -SR';

[1519] 화학식 $-Si(R^a)_3$의 실릴 기; 및

[1520] 화학식 $-Ge(R^a)_3$의 게르마닐 기;

[1521] 여기서, R^7, R^8, R^9 및 R^{10} 중 2개의 인접한 기는 선택적으로 결합되어 환형 하이드로카르빌 기 또는 환형 헤테로원자 함유 하이드로카르빌 기를 형성할 수 있고, 이 환형 하이드로카르빌 기 또는 환형 헤테로원자 함유 하이드로카르빌 기는 비치환되거나, 또는 할로겐 원자, C_{1-20} 알킬 기, C_{1-20} 알콕시 기, C_{7-20} 알킬아릴 기, C_{7-20} 아릴알킬 기, C_{6-20} 아릴 기, C_{6-20} 아릴옥시 기, C_{7-20} 알킬아릴옥시 기, C_{7-20} 아릴알킬옥시 기, 화학식 $-NR'_2$의 아미도 기, 화학식 $-PR'_2$의 포스피도 기, 화학식 -SR'의 티올레이트 기, 화학식 $-Si(R^a)_3$의 실릴 기, 및 화학식 $-Ge(R^a)_3$의 게르마닐 기로 이루어지는 군 중에서 선택되는 하나 이상의 치환체에 의해 추가로 치환되고;

[1522] 여기서 각 R'는 수소, C_{1-20} 알킬 기, 및 C_{6-20} 아릴 기로 이루어지는 군 중에서 독립적으로 선택되고; 그리고

[1523] 각 R^a는 수소, C_{1-8} 알킬 기, C_{1-8} 알콕시 기, C_{6-20} 아릴옥시 기, 및 C_{6-20} 아릴 기로 이루어지는 군 중에서 독립적으로 선택된다.

[1524] 일부 실시양태에서 G는 탄소, C, 또는 규소, Si, 또는 게르마늄, Ge이다.

[1525] 일부 실시양태에서 G는 탄소, C, 또는 규소, Si이다.

[1526] 일부 실시양태에서 G는 탄소, C이다.

[1527] 일부 실시양태에서 G는 규소, Si이다.

[1528] 일부 실시양태에서 G는 게르마늄, Ge이다.

[1529] 일부 실시양태에서, R^Q 및 R^{Q*}는 각각 독립적으로 할로겐, 수소, C_{1-30} 알킬 기, C_{1-30} 알콕시 기, C_{7-30} 알킬아릴 기, C_{7-30} 아릴알킬 기, C_{6-30} 아릴 기, C_{6-30} 아릴옥사이드 기, C_{7-30} 알킬아릴옥시 기, 및 C_{7-30} 아릴알킬옥시 기로 이루어지는 군 중에서 선택된다.

[1530] 일부 실시양태에서, R^Q 및 R^{Q*}는 각각 독립적으로 할로겐, 수소, C_{1-20} 알킬 기, C_{1-20} 알콕시 기, C_{7-20} 알킬아릴 기, C_{7-20} 아릴알킬 기, C_{6-20} 아릴 기, C_{6-20} 아릴옥사이드 기, C_{7-20} 알킬아릴옥시 기, 및 C_{7-20} 아릴알킬옥시 기로 이루어지는 군 중에서 선택된다.

[1531] 일부 실시양태에서, R^Q 및 R^{Q*}는 각각 독립적으로 수소, C_{1-20} 알킬 기 및 C_{6-20} 아릴 기로 이루어지는 군 중에서 선택된다.

[1532] 실시양태에서, R^{Q} 및 R^{Q*}는 각각 독립적으로 C_{1-8} 알킬 기이다.

[1533] 실시양태에서, R^{Q} 및 R^{Q*}는 각각 독립적으로 C_{6-20} 아릴 기이다.

[1534] 실시양태에서, R^{Q}는 수소이고 R^{Q*}는 C_{1-8} 알킬 기이다.

[1535] 실시양태에서, R^{Q}는 수소이고 R^{Q*}는 C_{6-20} 아릴 기이다.

[1536] 실시양태에서, R^{Q}는 수소이고 R^{Q*}는 메틸 기이다.

[1537] 실시양태에서, R^{Q}는 수소이고 R^{Q*}는 페닐 기이다.

[1538] 실시양태에서, R^{Q} 및 R^{Q*}는 각각 수소이다.

[1539] 일부 실시양태에서, R^{7}, R^{8}, R^{9} 및 R^{10}은 각각 독립적으로 할로겐; 수소; C_{1-30} 하이드로카르빌 기로서, 여기서 하이드로카르빌 기는 비치환되거나, 또는 할로겐 원자, C_{1-20} 알킬 기, C_{1-20} 알콕시 기, C_{7-20} 알킬아릴 기, C_{7-20} 아릴알킬 기, C_{6-20} 아릴 기, C_{6-20} 아릴옥시 기, C_{7-20} 알킬아릴옥시 기, 및 C_{7-20} 아릴알킬옥시 기로 이루어지는 군 중에서 선택되는 하나 이상의 치환체에 의해 추가로 치환되는, C_{1-30} 하이드로카르빌 기; 및 헤테로원자 함유 C_{1-30} 하이드로카르빌 기로서, 여기서 헤테로원자 함유 하이드로카르빌 기는 비치환되거나, 또는 할로겐 원자, C_{1-20} 알킬 기, C_{1-20} 알콕시 기, C_{7-20} 알킬아릴 기, C_{7-20} 아릴알킬 기, C_{6-20} 아릴 기, C_{6-20} 아릴옥시 기, C_{7-20} 알킬아릴옥시 기, 및 C_{7-20} 아릴알킬옥시 기로 이루어지는 군 중에서 선택되는 하나 이상의 치환체에 의해 추가로 치환되는, 헤테로원자 함유 C_{1-30} 하이드로카르빌 기로 이루어지는 군 중에서 선택되고; 여기서, R^{7}, R^{8}, R^{9} 및 R^{10} 중 2개의 인접한 기는 선택적으로 결합되어 환형 하이드로카르빌 기 또는 환형 헤테로원자 함유 하이드로카르빌 기를 형성할 수 있고, 이 환형 하이드로카르빌 기 또는 환형 헤테로원자 함유 하이드로카르빌 기는 비치환되거나, 또는 할로겐 원자, C_{1-20} 알킬 기, C_{1-20} 알콕시 기, C_{7-20} 알킬아릴 기, C_{7-20} 아릴알킬 기, C_{6-20} 아릴 기, C_{6-20} 아릴옥시 기, C_{7-20} 알킬아릴옥시 기, C_{7-20} 아릴알킬옥시 기, 아미도 기 $-NR'_2$, 포스피도 기 $-PR'_2$, 티올레이트 기 $-SR'$, 화학식 $-Si(R^{a})_3$의 실릴 기, 및 화학식 $-Ge(R^{a})_3$의 게르마닐 기로 이루어지는 군 중에서 선택되는 하나 이상의 치환체에 의해 추가로 치환되고; 여기서 각 R'는 수소, C_{1-20} 알킬 기, 및 C_{6-20} 아릴 기로 이루어지는 군 중에서 독립적으로 선택되고; 그리고 각 R^{a}는 수소, C_{1-8} 알킬 기, C_{1-8} 알콕시 기, C_{6-20} 아릴옥시 기, 및 C_{6-20} 아릴 기로 이루어지는 군 중에서 독립적으로 선택된다.

[1540] 일부 실시양태에서, R^{7}, R^{8}, R^{9} 및 R^{10}은 각각 독립적으로 할로겐; 수소; 및 C_{1-30} 하이드로카르빌 기로서, 여기서 하이드로카르빌 기는 비치환되거나, 또는 할로겐 원자, C_{1-20} 알킬 기, C_{1-20} 알콕시 기, C_{7-20} 알킬아릴 기, C_{7-20} 아릴알킬 기, C_{6-20} 아릴 기, C_{6-20} 아릴옥시 기, C_{7-20} 알킬아릴옥시 기, 및 C_{7-20} 아릴알킬옥시 기로 이루어지는 군 중에서 선택되는 하나 이상의 치환체에 의해 추가로 치환되는, C_{1-30} 하이드로카르빌 기로 이루어지는 군 중에서 선택되고; 여기서, R^{7}, R^{8}, R^{9} 및 R^{10} 중 2개의 인접한 기는 선택적으로 결합되어 환형 하이드로카르빌 기를 형성할 수 있고, 이 환형 하이드로카르빌 기는 비치환되거나, 또는 할로겐 원자, C_{1-20} 알킬 기, C_{1-20} 알콕시 기, C_{7-20} 알킬아릴 기, C_{7-20} 아릴알킬 기, C_{6-20} 아릴 기, C_{6-20} 아릴옥시 기, C_{7-20} 알킬아릴옥시 기, C_{7-20} 아릴알킬옥시 기, 아미도 기, $-NR'_2$, 포스피도 기, $-PR'_2$, 티올레이트 기 $-SR'$, 화학식 $-Si(R^{a})_3$의 실릴 기, 및 화학식 $-Ge(R^{a})_3$의 게르마닐 기로 이루어지는 군 중에서 선택되는 하나 이상의 치환체에 의해 추가로 치환되고; 여기서 각 R'는 수소, C_{1-20} 알킬 기, 및 C_{6-20} 아릴 기로 이루어지는 군 중에서 독립적으로 선택되고; 그리고 각 R^{a}는 수소, C_{1-8} 알킬 기, C_{1-8} 알콕시 기, C_{6-20} 아릴옥시 기, 및 C_{6-20} 아릴 기로 이루어지는 군 중에서 독립적으로 선택된

다.

[1541] 일부 실시양태에서, R^7, R^8, R^9 및 R^{10}은 각각 독립적으로 할로겐; 수소; 및 헤테로원자 함유 C_{1-30} 하이드로카르빌 기로서, 여기서 헤테로원자 함유 하이드로카르빌 기는 비치환되거나, 또는 할로겐 원자, C_{1-20} 알킬 기, C_{1-20} 알콕시 기, C_{7-20} 알킬아릴 기, C_{7-20} 아릴알킬 기, C_{6-20} 아릴 기, C_{6-20} 아릴옥시 기, C_{7-20} 알킬아릴옥시 기, 및 C_{7-20} 아릴알킬옥시 기로 이루어지는 군 중에서 선택되는 하나 이상의 치환체에 의해 추가로 치환되는, 헤테로원자 함유 C_{1-30} 하이드로카르빌 기로 이루어지는 군 중에서 선택되고; 여기서, R^7, R^8, R^9 및 R^{10} 중 2개의 인접한 기는 선택적으로 결합되어 환형 헤테로원자 함유 하이드로카르빌 기를 형성할 수 있고, 이 환형 헤테로원자 함유 하이드로카르빌 기는 비치환되거나, 또는 할로겐 원자, C_{1-20} 알킬 기, C_{1-20} 알콕시 기, C_{7-20} 알킬아릴 기, C_{7-20} 아릴알킬 기, C_{6-20} 아릴 기, C_{6-20} 아릴옥시 기, C_{7-20} 알킬아릴옥시 기, C_{7-20} 아릴알킬옥시 기, 아미도 기, $-NR'_2$, 포스피도 기, $-PR'_2$, 티올레이트 기 $-SR'$, 화학식 $-Si(R^a)_3$의 실릴 기, 및 화학식 $-Ge(R^a)_3$의 게르마닐 기로 이루어지는 군 중에서 선택되는 하나 이상의 치환체에 의해 추가로 치환되고; 여기서 각 R'는 수소, C_{1-20} 알킬 기, 및 C_{6-20} 아릴 기로 이루어지는 군 중에서 독립적으로 선택되고; 그리고 각 R^a는 수소, C_{1-8} 알킬 기, C_{1-8} 알콕시 기, C_{6-20} 아릴옥시 기, 및 C_{6-20} 아릴 기로 이루어지는 군 중에서 독립적으로 선택된다.

[1542] 일부 실시양태에서, R^7, R^8, R^9 및 R^{10}은 각각 독립적으로 할로겐, 수소, C_{1-30} 알킬 기, C_{1-30} 알콕시 기, C_{7-30} 알킬아릴 기, C_{7-30} 아릴알킬 기, C_{6-30} 아릴 기, C_{6-30} 아릴옥사이드 기, C_{7-30} 알킬아릴옥시 기, 및 C_{7-30} 아릴알킬옥시 기로 이루어지는 군 중에서 선택된다.

[1543] 일부 실시양태에서, R^7, R^8, R^9 및 R^{10}은 각각 독립적으로 할로겐, 수소, C_{1-20} 알킬 기, C_{1-20} 알콕시 기, C_{7-20} 알킬아릴 기, C_{7-20} 아릴알킬 기, C_{6-20} 아릴 기, C_{6-20} 아릴옥사이드 기, C_{7-20} 알킬아릴옥시 기, 및 C_{7-20} 아릴알킬옥시 기로 이루어지는 군 중에서 선택된다.

[1544] 일부 실시양태에서, R^7, R^8, R^9 및 R^{10}은 각각 독립적으로 할로겐, 수소, 및 C_{1-30} 하이드로카르빌 기로 이루어지는 군 중에서 선택되고, 여기서 하이드로카르빌 기는 비치환되거나 또는 하나 이상의 할로겐 원자에 의해 추가로 치환된다.

[1545] 일부 실시양태에서, R^7, R^8, R^9 및 R^{10}은 각각 독립적으로 할로겐, 수소, 및 C_{1-30} 헤테로원자 함유 하이드로카르빌 기로 이루어지는 군 중에서 선택되고, 여기서 헤테로원자 함유 하이드로카르빌 기는 비치환되거나 또는 하나 이상의 할로겐 원자에 의해 추가로 치환된다.

[1546] 일부 실시양태에서, R^7, R^8, R^9 및 R^{10}은 각각 독립적으로 수소 및 C_{1-30} 하이드로카르빌 기로 이루어지는 군 중에서 선택되고, 여기서 하이드로카르빌 기는 비치환되거나 또는 하나 이상의 할로겐 원자에 의해 추가로 치환된다.

[1547] 일부 실시양태에서, R^7, R^8, R^9 및 R^{10}은 각각 독립적으로 수소 및 C_{1-30} 헤테로원자 함유 하이드로카르빌 기로 이루어지는 군 중에서 선택되고, 여기서 헤테로원자 함유 하이드로카르빌 기는 비치환되거나 또는 하나 이상의 할로겐 원자에 의해 추가로 치환된다.

[1548] 일부 실시양태에서, R^7, R^8, R^9 및 R^{10}은 각각 수소이다.

[1549] 일부 실시양태에서, R^7, R^8, R^9 및 R^{10}은 각각 수소이고; 그리고 R^{11}, R^{12}, R^{13}, R^{14}, R^{15}, R^{16}, R^{17}, R^{18}은 각각 독립적으로 할로겐, 수소, C_{1-30} 알킬 기, 및 C_{6-30} 아릴 기로 이루어지는 군 중에서 선택된다.

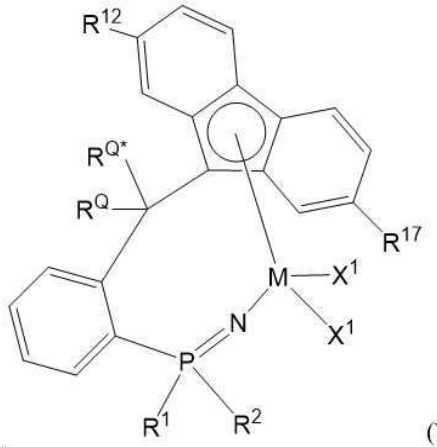
[1550] 일부 실시양태에서, R^7, R^8, R^9 및 R^{10}은 각각 수소이고; R^{11}, R^{13}, R^{14}, R^{15}, R^{16} 및 R^{18}은 각각 수소이고, 그리고 R^{12} 및 R^{17}은 각각 독립적으로 C_{1-20} 알킬 기 또는 C_{6-20} 아릴 기이다.

[1551] 일부 실시양태에서, R^7, R^8, R^9 및 R^{10}은 각각 수소이고; R^{11}, R^{13}, R^{14}, R^{15}, R^{16} 및 R^{18}은 각각 수소이고, 그리고 R^{12} 및 R^{17}은 각각 *tert*-부틸 기이다.

[1552] 일부 실시양태에서, R^7, R^8, R^9 및 R^{10}은 각각 수소이고; R^{11}, R^{12}, R^{14}, R^{15}, R^{17} 및 R^{18}은 각각 수소이고, 그리고 R^{13} 및 R^{16}은 각각 독립적으로 C_{1-20} 알킬 기 또는 C_{6-20} 아릴 기이다.

[1553] 일부 실시양태에서, R^7, R^8, R^9 및 R^{10}은 각각 수소이고; R^{11}, R^{12}, R^{14}, R^{15}, R^{17} 및 R^{18}은 각각 수소이고, 그리고 R^{13} 및 R^{16}은 각각 *tert*-부틸 기이다.

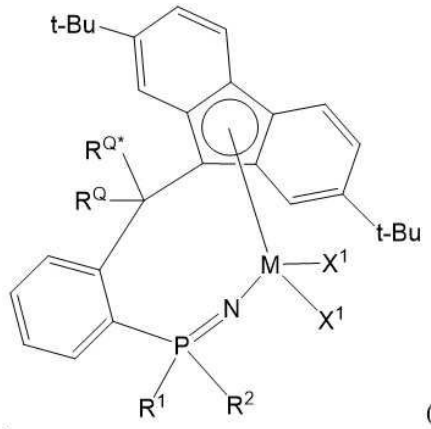
[1554] 본 개시내용의 실시양태에서, 화학식 VII의 유기금속 복합체는 화학식 VIIa로 표현되는 유기금속 복합체이다:

[1555] 

(VIIa)

[1556] 여기서, M, R^1, R^2, R^Q, R^{Q*}, R^{12}, R^{17} 및 X^1은 화학식 I, V 및 VII에서 상기 정의된 바와 같다.

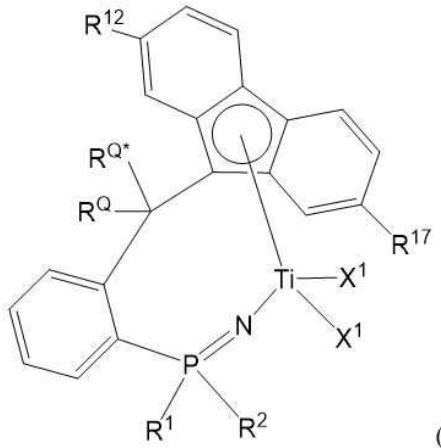
[1557] 본 개시내용의 실시양태에서, 화학식 VII의 유기금속 복합체는 화학식 VIIb로 표현되는 유기금속 복합체이다:

[1558] 

(VIIb)

[1559] 여기서, M, R^1, R^2, R^Q, R^{Q*} 및 X^1은 화학식 I 및 VII에서 상기 정의된 바와 같다.

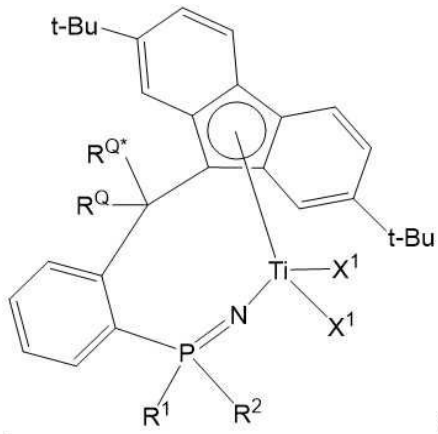
[1560] 본 개시내용의 실시양태에서, 화학식 VII의 유기금속 복합체는 화학식 VIIc로 표현되는 유기금속 복합체이다:



[1561] (VIIc)

[1562] 여기서, R^1, R^2, R^Q, R^{Q*}, R^{12}, R^{17} 및 X^1은 화학식 I, V 및 VII에서 상기 정의된 바와 같다.

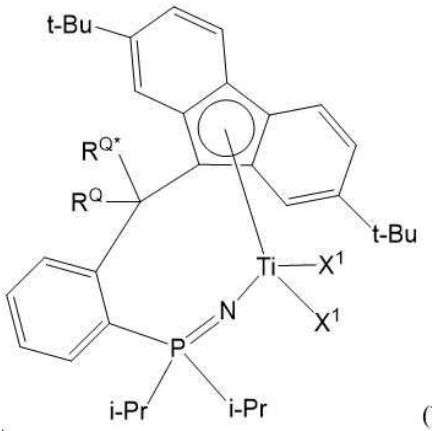
[1563] 본 개시내용의 실시양태에서, 화학식 VII의 유기금속 복합체는 화학식 VIId로 표현되는 유기금속 복합체이다:



[1564] (VIId)

[1565] 여기서, R^1, R^2, R^Q, R^{Q*} 및 X^1은 화학식 I 및 VII에서 상기 정의된 바와 같다.

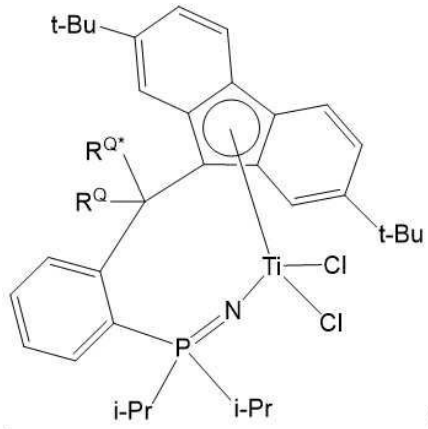
[1566] 본 개시내용의 실시양태에서, 화학식 VII의 유기금속 복합체는 화학식 VIIe로 표현되는 유기금속 복합체이다:



[1567] (VIIe)

[1568] 여기서, R^Q, R^{Q*} 및 X^1은 화학식 I 및 VII에서 상기 정의된 바와 같다.

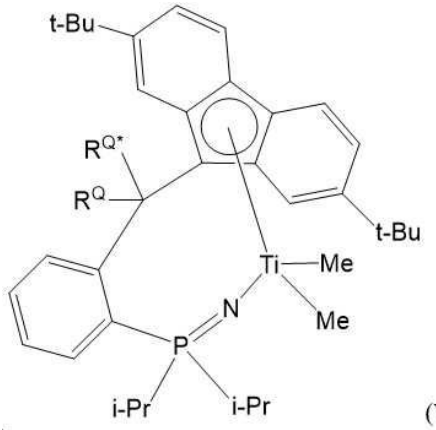
[1569] 본 개시내용의 실시양태에서, 화학식 VII의 유기금속 복합체는 화학식 VIIf로 표현되는 유기금속 복합체이다:



[1570] (VIIf).

[1571] 여기서, R^Q 및 R^{Q*}는 화학식 VII에서 상기 정의된 바와 같다.

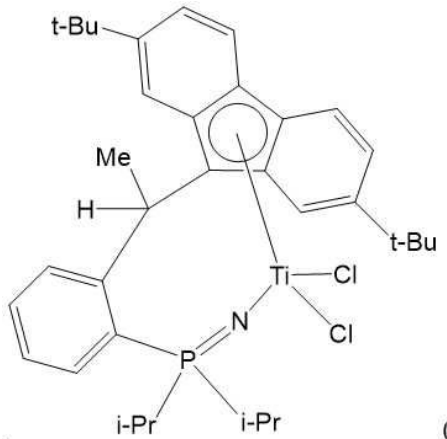
[1572] 본 개시내용의 실시양태에서, 화학식 VII의 유기금속 복합체는 화학식 VIIg로 표현되는 유기금속 복합체이다:



[1573] (VIIg)

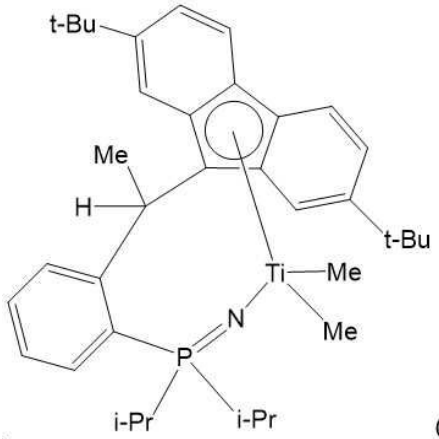
[1574] 여기서, R^Q 및 R^{Q*}는 화학식 VII에서 상기 정의된 바와 같다.

[1575] 본 개시내용의 실시양태에서, 화학식 VII의 유기금속 복합체는 화학식 VIIh로 표현되는 유기금속 복합체이다:



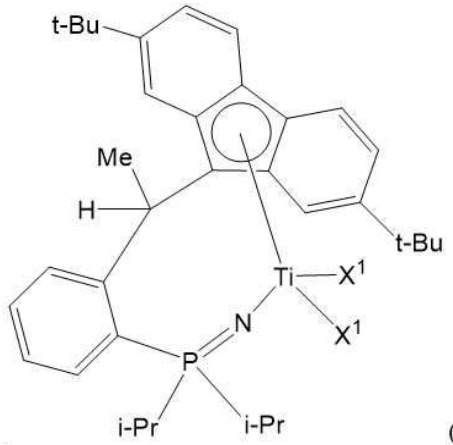
[1576] (VIIh).

[1577] 본 개시내용의 실시양태에서, 화학식 VII의 유기금속 복합체는 화학식 VIIi로 표현되는 유기금속 복합체이다:



[1578] (VIIi).

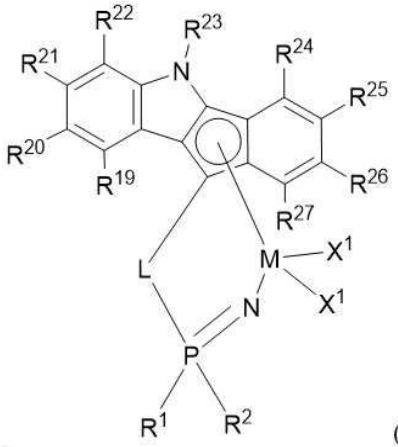
[1579] 본 개시내용의 실시양태에서, 화학식 VII의 유기금속 복합체는 화학식 VIIj로 표현되는 유기금속 복합체이다:



[1580] (VIIj)

[1581] 여기서, X^1은 화학식 I에서 상기 정의된 바와 같다.

[1582] 본 개시내용의 실시양태에서, 화학식 I의 유기금속 복합체는 화학식 VIII로 표현되는 유기금속 복합체이다:



[1583] (VIII)

[1584] 여기서, M, R^1, R^2, X^1 및 L은 화학식 I에서 상기 정의된 바와 같고; 그리고

[1585] 여기서, R^{23}은 다음으로 이루어지는 군 중에서 선택되고:

[1586] 수소;

[1587] C_{1-30} 하이드로카르빌 기로서, 여기서 하이드로카르빌 기는 비치환되거나, 또는 할로겐 원자, C_{1-20} 알킬 기, C_{1-20}

알콕시 기, C_{7-20} 알킬아릴 기, C_{7-20} 아릴알킬 기, C_{6-20} 아릴 기, C_{6-20} 아릴옥시 기, C_{7-20} 알킬아릴옥시 기, 및 C_{7-20} 아릴알킬옥시 기로 이루어지는 군 중에서 선택되는 하나 이상의 치환체에 의해 추가로 치환되는, C_{1-30} 하이드로카르빌 기; 및

[1588] 헤테로원자 함유 C_{1-30} 하이드로카르빌 기로서, 여기서 헤테로원자 함유 하이드로카르빌 기는 비치환되거나, 또는 할로겐 원자, C_{1-20} 알킬 기, C_{1-20} 알콕시 기, C_{7-20} 알킬아릴 기, C_{7-20} 아릴알킬 기, C_{6-20} 아릴 기, C_{6-20} 아릴옥시 기, C_{7-20} 알킬아릴옥시 기, 및 C_{7-20} 아릴알킬옥시 기로 이루어지는 군 중에서 선택되는 하나 이상의 치환체에 의해 추가로 치환되는, 헤테로원자 함유 C_{1-30} 하이드로카르빌 기;

[1589] 여기서, R^{19}, R^{20}, R^{21}, R^{22}, R^{24}, R^{25}, R^{26}, 및 R^{27}은 각각 독립적으로 다음으로 이루어지는 군 중에서 선택되고:

[1590] 할로겐;

[1591] 수소;

[1592] C_{1-30} 하이드로카르빌 기로서, 여기서 하이드로카르빌 기는 비치환되거나, 또는 할로겐 원자, C_{1-20} 알킬 기, C_{1-20} 알콕시 기, C_{7-20} 알킬아릴 기, C_{7-20} 아릴알킬 기, C_{6-20} 아릴 기, C_{6-20} 아릴옥시 기, C_{7-20} 알킬아릴옥시 기, 및 C_{7-20} 아릴알킬옥시 기로 이루어지는 군 중에서 선택되는 하나 이상의 치환체에 의해 추가로 치환되는, C_{1-30} 하이드로카르빌 기;

[1593] 헤테로원자 함유 C_{1-30} 하이드로카르빌 기로서, 여기서 헤테로원자 함유 하이드로카르빌 기는 비치환되거나, 또는 할로겐 원자, C_{1-20} 알킬 기, C_{1-20} 알콕시 기, C_{7-20} 알킬아릴 기, C_{7-20} 아릴알킬 기, C_{6-20} 아릴 기, C_{6-20} 아릴옥시 기, C_{7-20} 알킬아릴옥시 기, 및 C_{7-20} 아릴알킬옥시 기로 이루어지는 군 중에서 선택되는 하나 이상의 치환체에 의해 추가로 치환되는, 헤테로원자 함유 C_{1-30} 하이드로카르빌 기;

[1594] 옥시 기, -OR';

[1595] 아미도 기, $-NR'_2$;

[1596] 포스피도 기, $-PR'_2$;

[1597] 티올레이트 기, -SR';

[1598] 화학식 $-Si(R^a)_3$의 실릴 기; 및

[1599] 화학식 $-Ge(R^a)_3$의 게르마닐 기;

[1600] 여기서, R^{19}, R^{20}, R^{21}, R^{22}, R^{24}, R^{25}, R^{26}, 및 R^{27} 중 2개의 인접한 기는 선택적으로 결합되어 환형 하이드로카르빌 기 또는 환형 헤테로원자 함유 하이드로카르빌 기를 형성할 수 있고, 이 환형 하이드로카르빌 기 또는 환형 헤테로원자 함유 하이드로카르빌 기는 비치환되거나, 또는 할로겐 원자, C_{1-20} 알킬 기, C_{1-20} 알콕시 기, C_{7-20} 알킬아릴 기, C_{7-20} 아릴알킬 기, C_{6-20} 아릴 기, C_{6-20} 아릴옥시 기, C_{7-20} 알킬아릴옥시 기, C_{7-20} 아릴알킬옥시 기, 화학식 $-NR'_2$의 아미도 기, 화학식 $-PR'_2$의 포스피도 기, 화학식 -SR'의 티올레이트 기, 화학식 $-Si(R^a)_3$의 실릴 기, 및 화학식 $-Ge(R^a)_3$의 게르마닐 기로 이루어지는 군 중에서 선택되는 하나 이상의 치환체에 의해 추가로 치환되고;

[1601] 여기서 각 R'는 수소, C_{1-20} 알킬 기, 및 C_{6-20} 아릴 기로 이루어지는 군 중에서 독립적으로 선택되고; 그리고

[1602] 각 R^a는 수소, C_{1-8} 알킬 기, C_{1-8} 알콕시 기, C_{6-20} 아릴옥시 기, 및 C_{6-20} 아릴 기로 이루어지는 군 중에서 독립적으로 선택된다.

[1603] 일부 실시양태에서, R^{23}은 하이드로카르빌 기가 비치환되거나, 또는 할로겐 원자, C_{1-20} 알킬 기, C_{1-20} 알콕시 기,

C_{7-20} 알킬아릴 기, C_{7-20} 아릴알킬 기, C_{6-20} 아릴 기, C_{6-20} 아릴옥시 기, C_{7-20} 알킬아릴옥시 기, 및 C_{7-20} 아릴알킬옥시 기로 이루어지는 군 중에서 선택되는 하나 이상의 치환체에 의해 추가로 치환되는, C_{1-30} 하이드로카르빌 기로 이루어지는 군 중에서 선택된다.

[1604] 일부 실시양태에서, R^{23}은 헤테로원자 함유 하이드로카르빌 기가 비치환되거나, 또는 할로겐 원자, C_{1-20} 알킬 기, C_{1-20} 알콕시 기, C_{7-20} 알킬아릴 기, C_{7-20} 아릴알킬 기, C_{6-20} 아릴 기, C_{6-20} 아릴옥시 기, C_{7-20} 알킬아릴옥시 기, 및 C_{7-20} 아릴알킬옥시 기로 이루어지는 군 중에서 선택되는 하나 이상의 치환체에 의해 추가로 치환되는, 헤테로원자 함유 C_{1-30} 하이드로카르빌 기로 이루어지는 군 중에서 선택된다.

[1605] 일부 실시양태에서, R^{19}, R^{20}, R^{21}, R^{22}, R^{24}, R^{25}, R^{26}, 및 R^{27}은 각각 독립적으로 할로겐; 수소; C_{1-30} 하이드로카르빌 기로서, 여기서 하이드로카르빌 기는 비치환되거나, 또는 할로겐 원자, C_{1-20} 알킬 기, C_{1-20} 알콕시 기, C_{7-20} 알킬아릴 기, C_{7-20} 아릴알킬 기, C_{6-20} 아릴 기, C_{6-20} 아릴옥시 기, C_{7-20} 알킬아릴옥시 기, 및 C_{7-20} 아릴알킬옥시 기로 이루어지는 군 중에서 선택되는 하나 이상의 치환체에 의해 추가로 치환되는, C_{1-30} 하이드로카르빌 기; 및 헤테로원자 함유 C_{1-30} 하이드로카르빌 기로서, 여기서 헤테로원자 함유 하이드로카르빌 기는 비치환되거나, 또는 할로겐 원자, C_{1-20} 알킬 기, C_{1-20} 알콕시 기, C_{7-20} 알킬아릴 기, C_{7-20} 아릴알킬 기, C_{6-20} 아릴 기, C_{6-20} 아릴옥시 기, C_{7-20} 알킬아릴옥시 기, 및 C_{7-20} 아릴알킬옥시 기로 이루어지는 군 중에서 선택되는 하나 이상의 치환체에 의해 추가로 치환되는, 헤테로원자 함유 C_{1-30} 하이드로카르빌 기로 이루어지는 군 중에서 선택되고; 여기서, R^{19}, R^{20}, R^{21}, R^{22}, R^{24}, R^{25}, R^{26}, 및 R^{27} 중 2개의 인접한 기는 선택적으로 결합되어 환형 하이드로카르빌 기 또는 환형 헤테로원자 함유 하이드로카르빌 기를 형성할 수 있고, 이 환형 하이드로카르빌 기 또는 환형 헤테로원자 함유 하이드로카르빌 기는 비치환되거나, 또는 할로겐 원자, C_{1-20} 알킬 기, C_{1-20} 알콕시 기, C_{7-20} 알킬아릴 기, C_{7-20} 아릴알킬 기, C_{6-20} 아릴 기, C_{6-20} 아릴옥시 기, C_{7-20} 알킬아릴옥시 기, C_{7-20} 아릴알킬옥시 기, 아미도 기 $-NR'_2$, 포스피도 기 $-PR'_2$, 티올레이트 기 $-SR'$, 화학식 $-Si(R^a)_3$의 실릴 기, 및 화학식 $-Ge(R^a)_3$의 게르마닐 기로 이루어지는 군 중에서 선택되는 하나 이상의 치환체에 의해 추가로 치환되고; 여기서 각 R'는 수소, C_{1-20} 알킬 기, 및 C_{6-20} 아릴 기로 이루어지는 군 중에서 독립적으로 선택되고; 그리고 각 R^a는 수소, C_{1-8} 알킬 기, C_{1-8} 알콕시 기, C_{6-20} 아릴옥시 기, 및 C_{6-20} 아릴 기로 이루어지는 군 중에서 독립적으로 선택된다.

[1606] 일부 실시양태에서, R^{19}, R^{20}, R^{21}, R^{22}, R^{24}, R^{25}, R^{26}, 및 R^{27}은 각각 독립적으로 할로겐; 수소; 및 C_{1-30} 하이드로카르빌 기로서, 여기서 하이드로카르빌 기는 비치환되거나, 또는 할로겐 원자, C_{1-20} 알킬 기, C_{1-20} 알콕시 기, C_{7-20} 알킬아릴 기, C_{7-20} 아릴알킬 기, C_{6-20} 아릴 기, C_{6-20} 아릴옥시 기, C_{7-20} 알킬아릴옥시 기, 및 C_{7-20} 아릴알킬옥시 기로 이루어지는 군 중에서 선택되는 하나 이상의 치환체에 의해 추가로 치환되는, C_{1-30} 하이드로카르빌 기로 이루어지는 군 중에서 선택되고; 여기서, R^{19}, R^{20}, R^{21}, R^{22}, R^{24}, R^{25}, R^{26}, 및 R^{27} 중 2개의 인접한 기는 선택적으로 결합되어 환형 하이드로카르빌 기를 형성할 수 있고, 이 환형 하이드로카르빌 기는 비치환되거나, 또는 할로겐 원자, C_{1-20} 알킬 기, C_{1-20} 알콕시 기, C_{7-20} 알킬아릴 기, C_{7-20} 아릴알킬 기, C_{6-20} 아릴 기, C_{6-20} 아릴옥시 기, C_{7-20} 알킬아릴옥시 기, C_{7-20} 아릴알킬옥시 기, 아미도 기, $-NR'_2$, 포스피도 기, $-PR'_2$, 티올레이트 기 $-SR'$, 화학식 $-Si(R^a)_3$의 실릴 기, 및 화학식 $-Ge(R^a)_3$의 게르마닐 기로 이루어지는 군 중에서 선택되는 하나 이상의 치환체에 의해 추가로 치환되고; 여기서 각 R'는 수소, C_{1-20} 알킬 기, 및 C_{6-20} 아릴 기로 이루어지는 군 중에서 독립적으로 선택되고; 그리고 각 R^a는 수소, C_{1-8} 알킬 기, C_{1-8} 알콕시 기, C_{6-20} 아릴옥시 기, 및 C_{6-20} 아릴 기로 이루어지는 군 중에서 독립적으로 선택된다.

[1607] 일부 실시양태에서, R^{19}, R^{20}, R^{21}, R^{22}, R^{24}, R^{25}, R^{26}, 및 R^{27}은 각각 독립적으로 할로겐; 수소; 및 헤테로원자 함유 C_{1-30} 하이드로카르빌 기로서, 여기서 헤테로원자 함유 하이드로카르빌 기는 비치환되거나, 또는 할로겐 원자,

C_{1-20} 알킬 기, C_{1-20} 알콕시 기, C_{7-20} 알킬아릴 기, C_{7-20} 아릴알킬 기, C_{6-20} 아릴 기, C_{6-20} 아릴옥시 기, C_{7-20} 알킬아릴옥시 기, 및 C_{7-20} 아릴알킬옥시 기로 이루어지는 군 중에서 선택되는 하나 이상의 치환체에 의해 추가로 치환되는, 헤테로원자 함유 C_{1-30} 하이드로카르빌 기로 이루어지는 군 중에서 선택되고; 여기서, R^{19}, R^{20}, R^{21}, R^{22}, R^{24}, R^{25}, R^{26}, 및 R^{27} 중 2개의 인접한 기는 선택적으로 결합되어 환형 헤테로원자 함유 하이드로카르빌 기를 형성할 수 있고, 이 환형 헤테로원자 함유 하이드로카르빌 기는 비치환되거나, 또는 할로겐 원자, C_{1-20} 알킬 기, C_{1-20} 알콕시 기, C_{7-20} 알킬아릴 기, C_{7-20} 아릴알킬 기, C_{6-20} 아릴 기, C_{6-20} 아릴옥시 기, C_{7-20} 알킬아릴옥시 기, C_{7-20} 아릴알킬옥시 기, 아미도 기, $-NR'_2$, 포스피도 기, $-PR'_2$, 티올레이트 기 $-SR'$, 화학식 $-Si(R^a)_3$의 실릴 기, 및 화학식 $-Ge(R^a)_3$의 게르마닐 기로 이루어지는 군 중에서 선택되는 하나 이상의 치환체에 의해 추가로 치환되고; 여기서 각 R'는 수소, C_{1-20} 알킬 기, 및 C_{6-20} 아릴 기로 이루어지는 군 중에서 독립적으로 선택되고; 그리고 각 R^a는 수소, C_{1-8} 알킬 기, C_{1-8} 알콕시 기, C_{6-20} 아릴옥시 기, 및 C_{6-20} 아릴 기로 이루어지는 군 중에서 독립적으로 선택된다.

[1608] 일부 실시양태에서, R^{19}, R^{20}, R^{21}, R^{22}, R^{24}, R^{25}, R^{26}, 및 R^{27}은 각각 독립적으로 할로겐, 수소, C_{1-30} 알킬 기, C_{1-30} 알콕시 기, C_{7-30} 알킬아릴 기, C_{7-30} 아릴알킬 기, C_{6-30} 아릴 기, C_{6-30} 아릴옥사이드 기, C_{7-30} 알킬아릴옥시 기, 및 C_{7-30} 아릴알킬옥시 기로 이루어지는 군 중에서 선택된다.

[1609] 일부 실시양태에서, R^{19}, R^{20}, R^{21}, R^{22}, R^{24}, R^{25}, R^{26}, 및 R^{27}은 각각 독립적으로 할로겐, 수소, C_{1-20} 알킬 기, C_{1-20} 알콕시 기, C_{7-20} 알킬아릴 기, C_{7-20} 아릴알킬 기, C_{6-20} 아릴 기, C_{6-20} 아릴옥사이드 기, C_{7-20} 알킬아릴옥시 기, 및 C_{7-20} 아릴알킬옥시 기로 이루어지는 군 중에서 선택된다.

[1610] 일부 실시양태에서, R^{19}, R^{20}, R^{21}, R^{22}, R^{24}, R^{25}, R^{26}, 및 R^{27}은 각각 독립적으로 할로겐, 수소, 및 C_{1-30} 하이드로카르빌 기로 이루어지는 군 중에서 선택되고, 여기서 하이드로카르빌 기는 비치환되거나 또는 하나 이상의 할로겐 원자에 의해 추가로 치환된다.

[1611] 일부 실시양태에서, R^{19}, R^{20}, R^{21}, R^{22}, R^{24}, R^{25}, R^{26}, 및 R^{27}은 각각 독립적으로 할로겐, 수소, 및 C_{1-30} 헤테로원자 함유 하이드로카르빌 기로 이루어지는 군 중에서 선택되고, 여기서 헤테로원자 함유 하이드로카르빌 기는 비치환되거나 또는 하나 이상의 할로겐 원자에 의해 추가로 치환된다.

[1612] 일부 실시양태에서, R^{19}, R^{20}, R^{21}, R^{22}, R^{24}, R^{25}, R^{26}, 및 R^{27}은 각각 독립적으로 수소 및 C_{1-30} 하이드로카르빌 기로 이루어지는 군 중에서 선택되고, 여기서 하이드로카르빌 기는 비치환되거나 또는 하나 이상의 할로겐 원자에 의해 추가로 치환된다.

[1613] 일부 실시양태에서, R^{19}, R^{20}, R^{21}, R^{22}, R^{24}, R^{25}, R^{26}, 및 R^{27}은 각각 독립적으로 수소 및 C_{1-30} 헤테로원자 함유 하이드로카르빌 기로 이루어지는 군 중에서 선택되고, 여기서 헤테로원자 함유 하이드로카르빌 기는 비치환되거나 또는 하나 이상의 할로겐 원자에 의해 추가로 치환된다.

[1614] 일부 실시양태에서, R^{20}은 비치환된 C_{1-30} 하이드로카르빌 기이다.

[1615] 일부 실시양태에서, R^{20}은 C_{1-8} 알킬 기이다.

[1616] 일부 실시양태에서, R^{19}, R^{21}, R^{22}, R^{24}, R^{25}, R^{26}, 및 R^{27}은 각각 수소이다.

[1617] 일부 실시양태에서, R^{19}, R^{20}, R^{21}, R^{22}, R^{24}, R^{25}, R^{26}, 및 R^{27}은 각각 수소이다.

[1618] 일부 실시양태에서, R^{20}은 비치환된 C_{1-30} 하이드로카르빌 기이고, 그리고 R^{19}, R^{21}, R^{22}, R^{24}, R^{25}, R^{26}, 및 R^{27}은 각

각 수소이다.

[1619] 일부 실시양태에서, R^{20}은 C_{1-8} 알킬 기이고, 그리고 R^{19}, R^{21}, R^{22}, R^{24}, R^{25}, R^{26}, 및 R^{27}은 각각 수소이다.

[1620] 일부 실시양태에서, R^{20}은 메틸 기이다.

[1621] 일부 실시양태에서, R^{20}은 페닐 기이다.

[1622] 일부 실시양태에서, R^{23}은 수소, C_{1-30} 알킬 기, 및 C_{6-20} 아릴 기로 이루어지는 군 중에서 선택된다.

[1623] 일부 실시양태에서, R^{23}은 C_{1-30} 알킬 기, 및 C_{6-20} 아릴 기로 이루어지는 군 중에서 선택된다.

[1624] 일부 실시양태에서, R^{23}은 비치환된 C_{1-30} 하이드로카르빌 기이다.

[1625] 일부 실시양태에서, R^{23}은 C_{1-8} 알킬 기이다.

[1626] 일부 실시양태에서, R^{23}은 메틸 기이다.

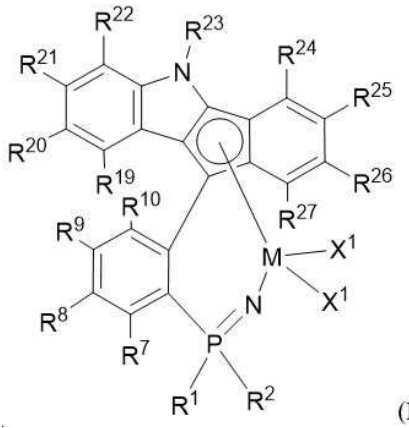
[1627] 일부 실시양태에서, R^{23}은 페닐 기이다.

[1628] 일부 실시양태에서, R^{20} 및 R^{23}은 각각 독립적으로 비치환된 C_{1-30} 하이드로카르빌 기이고, 그리고 R^{19}, R^{21}, R^{22}, R^{24}, R^{25}, R^{26}, 및 R^{27}은 각각 수소이다.

[1629] 일부 실시양태에서, R^{20} 및 R^{23}은 각각 독립적으로 C_{1-8} 알킬 기이고, 그리고 R^{19}, R^{21}, R^{22}, R^{24}, R^{25}, R^{26}, 및 R^{27}은 각각 수소이다.

[1630] 일부 실시양태에서, R^{20} 및 R^{23}은 각각 메틸 기이고, 그리고 R^{19}, R^{21}, R^{22}, R^{24}, R^{25}, R^{26}, 및 R^{27}은 각각 수소이다.

[1631] 본 개시내용의 실시양태에서, 화학식 VIII의 유기금속 복합체는 화학식 IX로 표현되는 유기금속 복합체이다:

[1632] 

(IX)

[1633] 여기서, M, R^1, R^2, R^{19}, R^{20}, R^{21}, R^{22}, R^{23}, R^{24}, R^{25}, R^{26}, R^{27} 및 X^1은 화학식 I 및 VIII에서 상기에 정의된 바와 같고; 그리고

[1634] 여기서, R^7, R^8, R^9 및 R^{10}은 각각 독립적으로 다음으로 이루어지는 군 중에서 선택되며:

[1635] 할로겐;

[1636] 수소;

[1637] C_{1-30} 하이드로카르빌 기로서, 여기서 하이드로카르빌 기는 비치환되거나, 또는 할로겐 원자, C_{1-20} 알킬 기, C_{1-20} 알콕시 기, C_{7-20} 알킬아릴 기, C_{7-20} 아릴알킬 기, C_{6-20} 아릴 기, C_{6-20} 아릴옥시 기, C_{7-20} 알킬아릴옥시 기, 및 C_{7-}

$_{20}$ 아릴알킬옥시 기로 이루어지는 군 중에서 선택되는 하나 이상의 치환체에 의해 추가로 치환되는, C_{1-30} 하이드로카르빌 기;

[1638] 헤테로원자 함유 C_{1-30} 하이드로카르빌 기로서, 여기서 헤테로원자 함유 하이드로카르빌 기는 비치환되거나, 또는 할로겐 원자, C_{1-20} 알킬 기, C_{1-20} 알콕시 기, C_{7-20} 알킬아릴 기, C_{7-20} 아릴알킬 기, C_{6-20} 아릴 기, C_{6-20} 아릴옥시 기, C_{7-20} 알킬아릴옥시 기, 및 C_{7-20} 아릴알킬옥시 기로 이루어지는 군 중에서 선택되는 하나 이상의 치환체에 의해 추가로 치환되는, 헤테로원자 함유 C_{1-30} 하이드로카르빌 기;

[1639] 옥시 기, -OR';

[1640] 아미도 기, $-NR'_2$;

[1641] 포스피도 기, $-PR'_2$;

[1642] 티올레이트 기, -SR';

[1643] 화학식 $-Si(R^a)_3$의 실릴 기; 및

[1644] 화학식 $-Ge(R^a)_3$의 게르마닐 기;

[1645] 여기서, R^7, R^8, R^9 및 R^{10} 중 2개의 인접한 기는 선택적으로 결합되어 환형 하이드로카르빌 기 또는 환형 헤테로원자 함유 하이드로카르빌 기를 형성할 수 있고, 이 환형 하이드로카르빌 기 또는 환형 헤테로원자 함유 하이드로카르빌 기는 비치환되거나, 또는 할로겐 원자, C_{1-20} 알킬 기, C_{1-20} 알콕시 기, C_{7-20} 알킬아릴 기, C_{7-20} 아릴알킬 기, C_{6-20} 아릴 기, C_{6-20} 아릴옥시 기, C_{7-20} 알킬아릴옥시 기, C_{7-20} 아릴알킬옥시 기, 화학식 $-NR'_2$의 아미도 기, 화학식 $-PR'_2$의 포스피도 기, 화학식 -SR'의 티올레이트 기, 화학식 $-Si(R^a)_3$의 실릴 기, 및 화학식 $-Ge(R^a)_3$의 게르마닐 기로 이루어지는 군 중에서 선택되는 하나 이상의 치환체에 의해 추가로 치환되고;

[1646] 여기서 각 R'는 수소, C_{1-20} 알킬 기, 및 C_{6-20} 아릴 기로 이루어지는 군 중에서 독립적으로 선택되고; 그리고

[1647] 각 R^a는 수소, C_{1-8} 알킬 기, C_{1-8} 알콕시 기, C_{6-20} 아릴옥시 기, 및 C_{6-20} 아릴 기로 이루어지는 군 중에서 독립적으로 선택된다.

[1648] 일부 실시양태에서, R^7, R^8, R^9 및 R^{10}은 각각 독립적으로 할로겐; 수소; C_{1-30} 하이드로카르빌 기로서, 여기서 하이드로카르빌 기는 비치환되거나, 또는 할로겐 원자, C_{1-20} 알킬 기, C_{1-20} 알콕시 기, C_{7-20} 알킬아릴 기, C_{7-20} 아릴알킬 기, C_{6-20} 아릴 기, C_{6-20} 아릴옥시 기, C_{7-20} 알킬아릴옥시 기, 및 C_{7-20} 아릴알킬옥시 기로 이루어지는 군 중에서 선택되는 하나 이상의 치환체에 의해 추가로 치환되는, C_{1-30} 하이드로카르빌 기; 및 헤테로원자 함유 C_{1-30} 하이드로카르빌 기로서, 여기서 헤테로원자 함유 하이드로카르빌 기는 비치환되거나, 또는 할로겐 원자, C_{1-20} 알킬 기, C_{1-20} 알콕시 기, C_{7-20} 알킬아릴 기, C_{7-20} 아릴알킬 기, C_{6-20} 아릴 기, C_{6-20} 아릴옥시 기, C_{7-20} 알킬아릴옥시 기, 및 C_{7-20} 아릴알킬옥시 기로 이루어지는 군 중에서 선택되는 하나 이상의 치환체에 의해 추가로 치환되는, 헤테로원자 함유 C_{1-30} 하이드로카르빌 기로 이루어지는 군 중에서 선택되고; 여기서, R^7, R^8, R^9 및 R^{10} 중 2개의 인접한 기는 선택적으로 결합되어 환형 하이드로카르빌 기 또는 환형 헤테로원자 함유 하이드로카르빌 기를 형성할 수 있고, 이 환형 하이드로카르빌 기 또는 환형 헤테로원자 함유 하이드로카르빌 기는 비치환되거나, 또는 할로겐 원자, C_{1-20} 알킬 기, C_{1-20} 알콕시 기, C_{7-20} 알킬아릴 기, C_{7-20} 아릴알킬 기, C_{6-20} 아릴 기, C_{6-20} 아릴옥시 기, C_{7-20} 알킬아릴옥시 기, C_{7-20} 아릴알킬옥시 기, 아미도 기 $-NR'_2$, 포스피도 기 $-PR'_2$, 티올레이트 기 -SR', 화학식 $-Si(R^a)_3$의 실릴 기, 및 화학식 $-Ge(R^a)_3$의 게르마닐 기로 이루어지는 군 중에서 선택되는 하나 이상의 치환체에 의해 추가로 치환되고; 여기서 각 R'는 수소, C_{1-20} 알킬 기, 및 C_{6-20} 아릴 기로 이루어지는 군 중

에서 독립적으로 선택되고; 그리고 각 R^a는 수소, C_{1-8} 알킬 기, C_{1-8} 알콕시 기, C_{6-20} 아릴옥시 기, 및 C_{6-20} 아릴 기로 이루어지는 군 중에서 독립적으로 선택된다.

[1649] 일부 실시양태에서, R^7, R^8, R^9 및 R^{10}은 각각 독립적으로 할로겐; 수소; 및 C_{1-30} 하이드로카르빌 기로서, 여기서 하이드로카르빌 기는 비치환되거나, 또는 할로겐 원자, C_{1-20} 알킬 기, C_{1-20} 알콕시 기, C_{7-20} 알킬아릴 기, C_{7-20} 아릴알킬 기, C_{6-20} 아릴 기, C_{6-20} 아릴옥시 기, C_{7-20} 알킬아릴옥시 기, 및 C_{7-20} 아릴알킬옥시 기로 이루어지는 군 중에서 선택되는 하나 이상의 치환체에 의해 추가로 치환되는, C_{1-30} 하이드로카르빌 기로 이루어지는 군 중에서 선택되고; 여기서, R^7, R^8, R^9 및 R^{10} 중 2개의 인접한 기는 선택적으로 결합되어 환형 하이드로카르빌 기를 형성할 수 있고, 이 환형 하이드로카르빌 기는 비치환되거나, 또는 할로겐 원자, C_{1-20} 알킬 기, C_{1-20} 알콕시 기, C_{7-20} 알킬아릴 기, C_{7-20} 아릴알킬 기, C_{6-20} 아릴 기, C_{6-20} 아릴옥시 기, C_{7-20} 알킬아릴옥시 기, C_{7-20} 아릴알킬옥시 기, 아미도 기, $-NR'_2$, 포스피도 기, $-PR'_2$, 티올레이트 기 $-SR'$, 화학식 $-Si(R^a)_3$의 실릴 기, 및 화학식 $-Ge(R^a)_3$의 게르마닐 기로 이루어지는 군 중에서 선택되는 하나 이상의 치환체에 의해 추가로 치환되고; 여기서 각 R'는 수소, C_{1-20} 알킬 기, 및 C_{6-20} 아릴 기로 이루어지는 군 중에서 독립적으로 선택되고; 그리고 각 R^a는 수소, C_{1-8} 알킬 기, C_{1-8} 알콕시 기, C_{6-20} 아릴옥시 기, 및 C_{6-20} 아릴 기로 이루어지는 군 중에서 독립적으로 선택된다.

[1650] 일부 실시양태에서, R^7, R^8, R^9 및 R^{10}은 각각 독립적으로 할로겐; 수소; 및 헤테로원자 함유 C_{1-30} 하이드로카르빌 기로서, 여기서 헤테로원자 함유 하이드로카르빌 기는 비치환되거나, 또는 할로겐 원자, C_{1-20} 알킬 기, C_{1-20} 알콕시 기, C_{7-20} 알킬아릴 기, C_{7-20} 아릴알킬 기, C_{6-20} 아릴 기, C_{6-20} 아릴옥시 기, C_{7-20} 알킬아릴옥시 기, 및 C_{7-20} 아릴알킬옥시 기로 이루어지는 군 중에서 선택되는 하나 이상의 치환체에 의해 추가로 치환되는, 헤테로원자 함유 C_{1-30} 하이드로카르빌 기로 이루어지는 군 중에서 선택되고; 여기서, R^7, R^8, R^9 및 R^{10} 중 2개의 인접한 기는 선택적으로 결합되어 환형 헤테로원자 함유 하이드로카르빌 기를 형성할 수 있고, 이 환형 헤테로원자 함유 하이드로카르빌 기는 비치환되거나, 또는 할로겐 원자, C_{1-20} 알킬 기, C_{1-20} 알콕시 기, C_{7-20} 알킬아릴 기, C_{7-20} 아릴알킬 기, C_{6-20} 아릴 기, C_{6-20} 아릴옥시 기, C_{7-20} 알킬아릴옥시 기, C_{7-20} 아릴알킬옥시 기, 아미도 기, $-NR'_2$, 포스피도 기, $-PR'_2$, 티올레이트 기 $-SR'$, 화학식 $-Si(R^a)_3$의 실릴 기, 및 화학식 $-Ge(R^a)_3$의 게르마닐 기로 이루어지는 군 중에서 선택되는 하나 이상의 치환체에 의해 추가로 치환되고; 여기서 각 R'는 수소, C_{1-20} 알킬 기, 및 C_{6-20} 아릴 기로 이루어지는 군 중에서 독립적으로 선택되고; 그리고 각 R^a는 수소, C_{1-8} 알킬 기, C_{1-8} 알콕시 기, C_{6-20} 아릴옥시 기, 및 C_{6-20} 아릴 기로 이루어지는 군 중에서 독립적으로 선택된다.

[1651] 일부 실시양태에서, R^7, R^8, R^9 및 R^{10}은 각각 독립적으로 할로겐, 수소, C_{1-30} 알킬 기, C_{1-30} 알콕시 기, C_{7-30} 알킬아릴 기, C_{7-30} 아릴알킬 기, C_{6-30} 아릴 기, C_{6-30} 아릴옥사이드 기, C_{7-30} 알킬아릴옥시 기, 및 C_{7-30} 아릴알킬옥시 기로 이루어지는 군 중에서 선택된다.

[1652] 일부 실시양태에서, R^7, R^8, R^9 및 R^{10}은 각각 독립적으로 할로겐, 수소, C_{1-20} 알킬 기, C_{1-20} 알콕시 기, C_{7-20} 알킬아릴 기, C_{7-20} 아릴알킬 기, C_{6-20} 아릴 기, C_{6-20} 아릴옥사이드 기, C_{7-20} 알킬아릴옥시 기, 및 C_{7-20} 아릴알킬옥시 기로 이루어지는 군 중에서 선택된다.

[1653] 일부 실시양태에서, R^7, R^8, R^9 및 R^{10}은 각각 독립적으로 할로겐, 수소, 및 C_{1-30} 하이드로카르빌 기로 이루어지는 군 중에서 선택되고, 여기서 하이드로카르빌 기는 비치환되거나 또는 하나 이상의 할로겐 원자에 의해 추가로 치환된다.

[1654] 일부 실시양태에서, R^7, R^8, R^9 및 R^{10}은 각각 독립적으로 할로겐, 수소, 및 C_{1-30} 헤테로원자 함유 하이드로카르빌

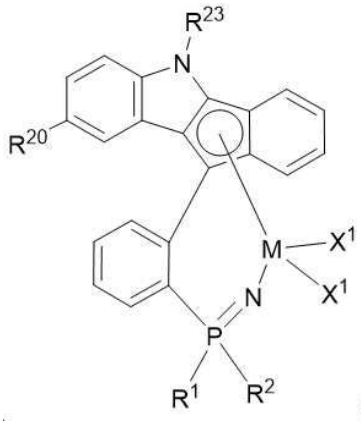
기로 이루어지는 군 중에서 선택되고, 여기서 헤테로원자 함유 하이드로카르빌 기는 비치환되거나 또는 하나 이상의 할로겐 원자에 의해 추가로 치환된다.

[1655] 일부 실시양태에서, R^7, R^8, R^9 및 R^{10}은 각각 독립적으로 수소 및 C_{1-30} 하이드로카르빌 기로 이루어지는 군 중에서 선택되고, 여기서 하이드로카르빌 기는 비치환되거나 또는 하나 이상의 할로겐 원자에 의해 추가로 치환된다.

[1656] 일부 실시양태에서, R^7, R^8, R^9 및 R^{10}은 각각 독립적으로 수소 및 C_{1-30} 헤테로원자 함유 하이드로카르빌 기로 이루어지는 군 중에서 선택되고, 여기서 헤테로원자 함유 하이드로카르빌 기는 비치환되거나 또는 하나 이상의 할로겐 원자에 의해 추가로 치환된다.

[1657] 일부 실시양태에서, R^7, R^8, R^9 및 R^{10}은 각각 수소이다.

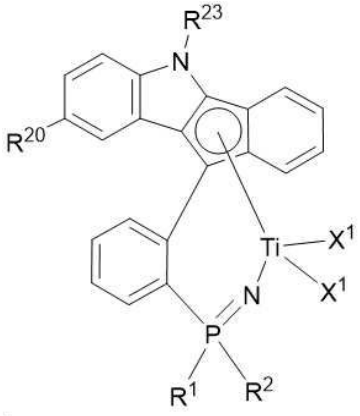
[1658] 본 개시내용의 실시양태에서, 화학식 IX의 유기금속 복합체는 화학식 IXa로 표현되는 유기금속 복합체이다:

[1659] 

(IXa)

[1660] 여기서, M, R^1, R^2, R^{20}, R^{23} 및 X^1은 화학식 I 및 VIII에 대해 상기에 정의된 바와 같다.

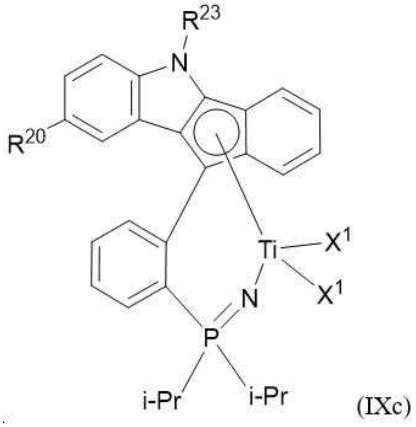
[1661] 본 개시내용의 실시양태에서, 화학식 IX의 유기금속 복합체는 화학식 IXa로 표현되는 유기금속 복합체이다:

[1662] 

(IXb)

[1663] 여기서, R^1, R^2, R^{20}, R^{23} 및 X^1은 화학식 I 및 VIII에 대해 상기에 정의된 바와 같다.

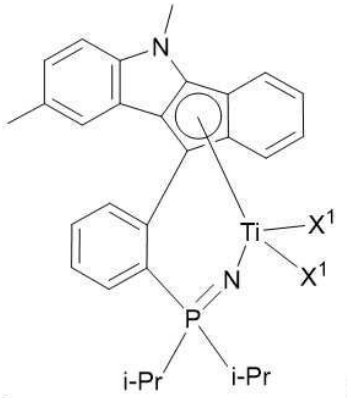
[1664] 본 개시내용의 실시양태에서, 화학식 IX의 유기금속 복합체는 화학식 IXc로 표현되는 유기금속 복합체이다:

[1665] 

(IXc)

[1666] 여기서, R^{20}, R^{23} 및 X^1은 화학식 I 및 VIII에 대해 상기에 정의된 바와 같다.

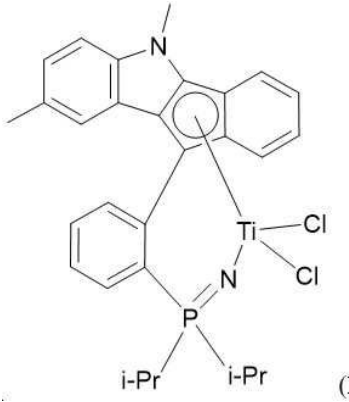
[1667] 본 개시내용의 실시양태에서, 화학식 IX의 유기금속 복합체는 화학식 IXd로 표현되는 유기금속 복합체이다:

[1668] 

(IXd)

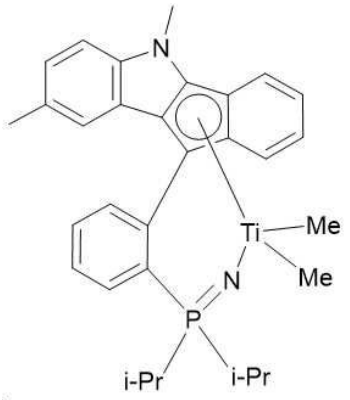
[1669] 여기서, X^1은 화학식 I에 대해 상기에 정의된 바와 같다.

[1670] 본 개시내용의 실시양태에서, 화학식 IX의 유기금속 복합체는 화학식 IXe로 표현되는 유기금속 복합체이다:

[1671] 

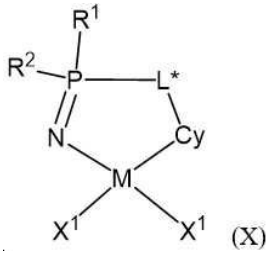
(IXe).

[1672] 본 개시내용의 실시양태에서, 화학식 IX의 유기금속 복합체는 화학식 IXf로 표현되는 유기금속 복합체이다:



[1673] (IXf).

[1674] 본 개시내용의 실시양태에서, 유기금속 복합체는 화학식 X로 표현된다:



[1675] (X)

[1676] 여기서, M, R^1, R^2, Cy 및 X^1은 화학식 I에 대해 상기에 정의된 바와 같고; 그리고

[1677] L^*은 적어도 하나의 사이클로알킬렌, 헤테로사이클로알킬렌, 아릴렌 또는 헤테로아릴렌 기를 함유하는 가교 기이다.

[1678] 용어 "사이클로알킬렌"은 사이클로지방족 고리를 함유하는 2가 기를 지칭한다. 용어 "헤테로사이클로알킬렌"은 헤테로사이클로지방족 고리를 함유하는 2가 기를 지칭한다. 용어 "아릴렌"은 방향족 고리를 함유하는 2가 기를 지칭한다. 용어 "헤테로아릴렌"은 헤테로방향족 고리를 함유하는 2가 기를 지칭한다.

[1679] 일부 실시양태에서, L^*은 적어도 하나의 아릴렌 또는 헤테로아릴렌 기를 함유하는 가교 기이다.

[1680] 일부 실시양태에서, L^*은 적어도 하나의 아릴렌 기를 함유하는 가교 기이다. 일부 실시양태에서, L^*은 적어도 하나의 페닐렌 기를 함유하는 가교 기이다.

[1681] 일부 실시양태에서, L^*은 탄소 원자, 수소 원자 및 헤테로 원자 중에서 선택되는 1-50개 원자를 포함하고 적어도 하나의 아릴렌 또는 헤테로아릴렌 기를 함유하는 가교 기이다. 일부 실시양태에서, L^*은 탄소 원자, 수소 원자 및 헤테로 원자 중에서 선택되는 1-50개 원자를 포함하고 적어도 하나의 아릴렌 기를 함유하는 가교 기이다. 일부 실시양태에서, L^*은 탄소 원자, 수소 원자 및 헤테로 원자 중에서 선택되는 1-50개 원자를 포함하고 적어도 하나의 페닐렌 기를 함유하는 가교 기이다. 일부 실시양태에서, L^*은 탄소 원자 및 수소 원자 중에서 선택되는 1-50개 원자를 포함하고 적어도 하나의 페닐렌 기를 함유하는 가교 기이다.

[1682] L^* 내의 아릴렌 또는 헤테로아릴렌 기는 P에 직접 또는 간접적으로 공유 결합될 수 있다. L^* 내의 아릴렌 또는 헤테로아릴렌 기는 P에 직접 공유 결합될 수 있다(즉, P부터 아릴렌 또는 헤테로아릴렌 기의 고리 원자까지 공유 결합이 있을 수 있음). 대안적으로, L 내의 아릴렌 또는 헤테로아릴렌 기는 P에 간접적으로 공유 결합될 수 있다(즉, P와 아릴렌 또는 헤테로아릴렌 기의 고리 원자 사이에 추가 2가 기가 있을 수 있음). 추가 2가 기는 하이드로카르빌렌 기, 예를 들어 알킬렌 기 또는 알케닐렌 기일 수 있거나, 또는 하나 이상의 헤테로원자를 함유하는 2가 기일 수 있다.

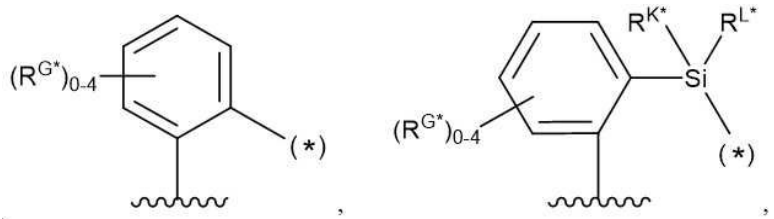
[1683] L^* 내의 아릴렌 또는 헤테로아릴렌 기는 Cy에 직접 또는 간접적으로 공유 결합될 수 있다. L^* 내의 아릴렌 또는

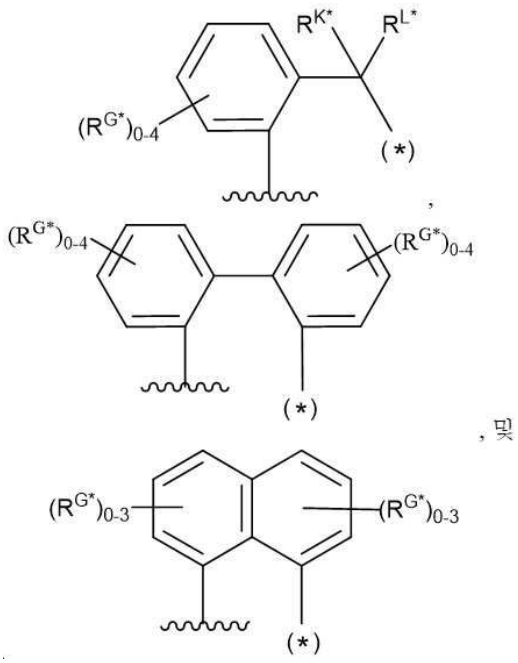
헤테로아릴렌 기는 Cy에 직접 공유 결합될 수 있다(즉, P부터 아릴렌 또는 헤테로아릴렌 기의 고리 원자까지 공유 결합이 있을 수 있음). 대안적으로, L 내의 아릴렌 또는 헤테로아릴렌 기는 Cy에 간접적으로 공유 결합될 수 있다(즉, Cy와 아릴렌 또는 헤테로아릴렌 기의 고리 원자 사이에 추가 2가 기가 있을 수 있음). 추가 2가 기는 하이드로카르빌렌 기, 예를 들어 알킬렌 기 또는 알케닐렌 기일 수 있거나, 또는 하나 이상의 헤테로원자를 함유하는 2가 기일 수 있다.

[1684] 일부 실시양태에서, L^*은 P를 Cy와 연결하는 원자의 근접한 사슬을 함유하고, 여기서 근접한 사슬은 4개 이하의 원자를 함유한다. 일부 실시양태에서, L^*은 P를 Cy와 연결하는 원자의 근접한 사슬을 함유하고, 여기서 근접한 사슬은 3개 이하의 원자를 함유한다. 일부 실시양태에서, L^*은 P를 Cy와 연결하는 원자의 근접한 사슬을 함유하고, 여기서 근접한 사슬은 3개 원자를 함유한다. 일부 실시양태에서, L^*은 P를 Cy와 연결하는 원자의 근접한 사슬을 함유하고, 여기서 근접한 사슬은 2개 원자를 함유한다.

[1685] 일부 실시양태에서, L^*은 P를 Cy와 연결하는 원자의 근접한 사슬을 함유하고, 여기서 페닐렌 기의 2개의 오르토 탄소 원자는 원자의 근접한 사슬의 일부를 형성한다.

[1686] 일부 실시양태에서, L^*은 다음 중에서 선택된다:

[1687] 

[1688] 

[1689] 여기서, ~~~~는 P에 대한 부착 지점을 나타내고, (*)는 Cy에 대한 부착 지점을 나타내며; 각 R^G는 할로겐 및 비치환된 C_{1-12} 알킬 중에서 독립적으로 선택되고; 그리고 R^{K*} 및 R^{L*}은 각각 독립적으로 수소, 비치환된 C_{1-12} 알킬 기, 및 비치환된 또는 치환된 C_{6-20} 아릴 기 중에서 선택된다.

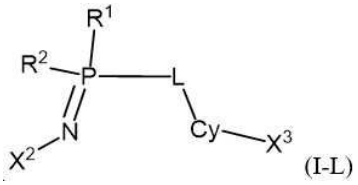
[1690] 실시양태에서 R^{K*} 및 R^{L*}은 각각 독립적으로 비치환된 C_{1-12} 알킬 기, 및 비치환된 또는 치환된 C_{6-20} 아릴 기 중에서 선택된다.

[1691] 일부 실시양태에서 R^{G*}는 존재하지 않는다(페닐렌 기, 또는 바이페닐렌 기, 또는 나프탈렌 기는 비치환된 것임).

[1692] 일부 실시양태에서 R^{K*} 및 R^{L*}은 각각 수소이다.

[1693] 예비금속화 화합물

[1694] 본 개시내용의 실시양태는 화학식 I-L로 표현되는 예비금속화 화합물이다:

[1695] 

(I-L)

[1696] 여기서, R^1 및 R^2는 각각 독립적으로 수소 및 R^X로 이루어지는 군 중에서 선택되거나; 또는 R^1 및 R^2는 이들이 부착된 P 원자와 함께, 비치환되거나 또는 할로겐 원자, C_{1-20} 알킬 기, C_{1-20} 알콕시 기, C_{7-20} 알킬아릴 기, C_{7-20} 아릴알킬 기, C_{6-20} 아릴 기, C_{6-20} 아릴옥시 기, C_{7-20} 알킬아릴옥시 기, 및 C_{7-20} 아릴알킬옥시 기로 이루어지는 군 중에서 선택되는 하나 이상의 치환체에 의해 추가로 치환되는 3-10원 헤테로환형 기를 형성하고;

[1697] 각 R^X는 할로겐 원자; 하이드로카르빌 기가 비치환되거나, 또는 하나 이상의 할로겐 원자, C_{1-20} 알킬 기, C_{1-20} 알콕시 기, C_{7-20} 알킬아릴 기, C_{7-20} 아릴알킬 기, C_{6-20} 아릴 기, C_{6-20} 아릴옥시 기, C_{7-20} 알킬아릴옥시 기, 및/또는 C_{7-20} 아릴알킬옥시 기에 의해 추가로 치환되는 C_{1-30} 하이드로카르빌 기; 화학식 $-NR'_2$의 아미도 기; 화학식 $-Si(R^a)_3$의 실릴 기; 화학식 $-Ge(R^a)_3$의 게르마닐 기; 및 화학식 $-N=P(R^b)(R^c)(R^d)$의 포스핀이민 기로 이루어진 군 중에서 선택되고; 여기서 각 R'는 수소, C_{1-20} 알킬 기, 및 C_{6-20} 아릴 기로 이루어지는 군 중에서 독립적으로 선택되고; 여기서 각 R^a는 수소, C_{1-8} 알킬 기, C_{1-8} 알콕시 기, C_{6-20} 아릴옥시 기 및 C_{6-20} 아릴 기로 이루어지는 군 중에서 독립적으로 선택되고; 그리고 R^b, R^c, R^d는 각각 독립적으로 C_{1-20} 알킬 기이고;

[1698] Cy는 사이클로펜타디에닐형 모이어티이고, L 및 X^3에 공유 결합되고;

[1699] X^2는 수소, 또는 화학식 $-Si(R^e)_3$의 실릴 기이고;

[1700] X^3은 수소, 또는 화학식 $-Si(R^e)_3$의 실릴 기 또는 화학식 $Sn(R^e)_3$의 주석 기이며; 여기서 각 R^e는 수소, C_{1-8} 알킬 기, C_{1-8} 알콕시 기, C_{6-20} 아릴옥시 기, 및 C_{6-20} 아릴 기로 이루어지는 군 중에서 독립적으로 선택되고; 그리고

[1701] L은 P를 Cy와 연결하는 원자의 근접한 사슬을 함유하는 가교 기이고,

[1702] 여기서, 근접한 사슬은 2개 또는 3개 원자를 함유한다.

[1703] 일부 실시양태에서, X^2는 수소이다.

[1704] 일부 실시양태에서, X^2는 화학식 $-Si(R^e)_3$의 실릴 기이고, 여기서 각 R^e는 수소, C_{1-8} 알킬 기, C_{1-8} 알콕시 기, C_{6-20} 아릴옥시 기 및 C_{6-20} 아릴 기로 이루어지는 군 중에서 독립적으로 선택된다.

[1705] 일부 실시양태에서, X^2는 $-Si(Me)_3$이다.

[1706] 일부 실시양태에서, X^3은 수소이다.

[1707] 일부 실시양태에서, X^3은 화학식 $-Si(R^e)_3$의 실릴 기, 여기서 각 R^e는 수소, C_{1-8} 알킬 기, C_{1-8} 알콕시 기, C_{6-20} 아릴옥시 기 및 C_{6-20} 아릴 기로 이루어지는 군 중에서 독립적으로 선택된다.

[1708] 일부 실시양태에서, X^3은 $-Si(Me)_3$이다.

[1709] 일부 실시양태에서, R^1 및 R^2는 각각 독립적으로 할로겐 원자; 하이드로카르빌 기가 비치환되거나, 또는 하나 이상의 할로겐 원자, C_{1-20} 알킬 기, C_{1-20} 알콕시 기, C_{7-20} 알킬아릴 기, C_{7-20} 아릴알킬 기, C_{6-20} 아릴 기, C_{6-20} 아릴옥시 기, C_{7-20} 알킬아릴옥시 기, 및/또는 C_{7-20} 아릴알킬옥시 기에 의해 추가로 치환되는 C_{1-30} 하이드로카르빌 기; 화학식 $-NR'_2$의 아미도 기; 화학식 $-Si(R^a)_3$의 실릴 기; 화학식 $-Ge(R^a)_3$의 게르마닐 기; 및 화학식 $-N=P(R^b)(R^c)(R^d)$의 포스핀이민 기로 이루어진 군 중에서 선택되고; 여기서 각 R'는 수소, C_{1-20} 알킬 기, 및 C_{6-20} 아릴 기로 이루어지는 군 중에서 독립적으로 선택되고; 여기서 각 R^a는 수소, C_{1-8} 알킬 기, C_{1-8} 알콕시 기, C_{6-20} 아릴옥시 기 및 C_{6-20} 아릴 기로 이루어지는 군 중에서 독립적으로 선택되고; 그리고 R^b, R^c, R^d는 각각 독립적으로 C_{1-20} 알킬 기이다.

[1710] 일부 실시양태에서, R^1 및 R^2는 각각 독립적으로 할로겐 원자; 하이드로카르빌 기가 비치환되거나, 또는 하나 이상의 할로겐 원자, C_{1-20} 알킬 기, C_{1-20} 알콕시 기, C_{7-20} 알킬아릴 기, C_{7-20} 아릴알킬 기, C_{6-20} 아릴 기, C_{6-20} 아릴옥시 기, C_{7-20} 알킬아릴옥시 기, 및/또는 C_{7-20} 아릴알킬옥시 기 중 하나 이상에 의해 추가로 치환되는 C_{1-30} 하이드로카르빌 기로 이루어지는 군 중에서 선택된다.

[1711] 일부 실시양태에서, R^1 및 R^2는 각각 C_{1-30} 하이드로카르빌 기이고, 여기서 하이드로카르빌 기는 비치환되거나, 또는 하나 이상의 할로겐 원자, C_{1-20} 알킬 기, C_{1-20} 알콕시 기, C_{7-20} 알킬아릴 기, C_{7-20} 아릴알킬 기, C_{6-20} 아릴 기, C_{6-20} 아릴옥시 기, C_{7-20} 알킬아릴옥시 기, 및/또는 C_{7-20} 아릴알킬옥시 기 중 하나 이상에 의해 추가로 치환된다.

[1712] 일부 실시양태에서, R^1 및 R^2는 각각 독립적으로 비치환된 C_{1-30} 하이드로카르빌 기이다.

[1713] 일부 실시양태에서, R^1 및 R^2는 각각 독립적으로 비치환된 C_{1-20} 하이드로카르빌 기이다.

[1714] 일부 실시양태에서, R^1 및 R^2는 각각 독립적으로 비치환된 C_{1-12} 하이드로카르빌 기이다.

[1715] 일부 실시양태에서, R^1 및 R^2는 각각 독립적으로 C_{1-20} 알킬 기이다.

[1716] 일부 실시양태에서, R^1 및 R^2는 각각 독립적으로 C_{1-12} 알킬 기이다.

[1717] 일부 실시양태에서, R^1 및 R^2는 각각 독립적으로 C_{1-9} 알킬 기이다.

[1718] 일부 실시양태에서, R^1 및 R^2는 각각 독립적으로 분지형 C_{3-8} 알킬 기이다.

[1719] 일부 실시양태에서, R^1 및 R^2는 각각 독립적으로 C_{6-20} 아릴 기이다.

[1720] 일부 실시양태에서, R^1 및 R^2는 동일하다.

[1721] 일부 실시양태에서, R^1 및 R^2는 각각 독립적으로 이소프로필, 사이클로헥실 및 *tert*-부틸로 이루어지는 군 중에서 선택된다.

[1722] 일부 실시양태에서, R^1 및 R^2는 각각 이소프로필 기이다.

[1723] 일부 실시양태에서, R^1 및 R^2는 각각 사이클로헥실 기이다.

[1724] 일부 실시양태에서, R^1 및 R^2는 각각 *tert*-부틸 기이다.

[1725] 일부 실시양태에서, 각 R'는 C_{1-8} 알킬 기이다.

[1726] 일부 실시양태에서, 각 R'는 C_{6-20} 아릴 기이다.

[1727] 일부 실시양태에서, 각 R'는 메틸 기이다.

[1728] 일부 실시양태에서, 각 R'는 페닐 기이다.

[1729] 일부 실시양태에서, 각 R^a는 C_{1-8} 알킬 기이다.

[1730] 일부 실시양태에서, 각 R^a는 C_{6-20} 아릴 기이다.

[1731] 일부 실시양태에서, 각 R^a는 메틸 기이다.

[1732] 일부 실시양태에서, 각 R^a는 에틸 기이다.

[1733] 일부 실시양태에서, 각 R^a는 페닐 기이다.

[1734] 일부 실시양태에서, 각각의 R^b, R^c, R^d는 C_{1-12} 알킬 기이다.

[1735] 일부 실시양태에서, 각각의 R^b, R^c, R^d는 C_{1-9} 알킬 기이다.

[1736] 일부 실시양태에서, 각각의 R^b, R^c, R^d는 C_{1-6} 알킬 기이다.

[1737] 일부 실시양태에서, 각각의 R^b, R^c, R^d는 분지형 C_{3-8} 알킬 기이다.

[1738] 일부 실시양태에서, 각각의 R^b, R^c, R^d는 이소프로필 기이다.

[1739] 일부 실시양태에서, 각각의 R^b, R^c, R^d는 사이클로헥실 기이다.

[1740] 일부 실시양태에서, 각각의 R^b, R^c, R^d는 *tert*-부틸 기이다.

[1741] 일부 실시양태에서, R^1 및 R^2는 이들이 함께 부착된 P 원자와 함께, 비치환되거나, 또는 할로겐 원자, C_{1-20} 알킬 기, C_{1-20} 알콕시 기, C_{7-20} 알킬아릴 기, C_{7-20} 아릴알킬 기, C_{6-20} 아릴 기, C_{6-20} 아릴옥시 기, C_{7-20} 알킬아릴옥시 기, 및 C_{7-20} 아릴알킬옥시 기로 이루어지는 군 중에서 선택되는 하나 이상의 치환체에 의해 추가로 치환되는 3-10원 헤테로환형 기를 형성한다.

[1742] 일부 실시양태에서, R^1 및 R^2는 이들이 함께 부착된 P 원자와 함께, 비치환되거나, 또는 할로겐 원자, C_{1-20} 알킬 기, C_{1-20} 알콕시 기, C_{7-20} 알킬아릴 기, C_{7-20} 아릴알킬 기, C_{6-20} 아릴 기, C_{6-20} 아릴옥시 기, C_{7-20} 알킬아릴옥시 기, 및 C_{7-20} 아릴알킬옥시 기로 이루어지는 군 중에서 선택되는 하나 이상의 치환체에 의해 추가로 치환되는 4-6원 헤테로환형 기를 형성한다.

[1743] 일부 실시양태에서, R^1 및 R^2는 이들이 함께 부착된 P 원자와 함께, 비치환되거나, 또는 할로겐 원자, C_{1-20} 알킬 기, C_{1-20} 알콕시 기, C_{7-20} 알킬아릴 기, C_{7-20} 아릴알킬 기, C_{6-20} 아릴 기, C_{6-20} 아릴옥시 기, C_{7-20} 알킬아릴옥시 기, 및 C_{7-20} 아릴알킬옥시 기로 이루어지는 군 중에서 선택되는 하나 이상의 치환체에 의해 추가로 치환되는 5-6원 헤테로환형 기를 형성한다.

[1744] 예비금속화 화합물, 또는 비금속화 모이어티를 지칭할 때, 본 개시내용에 사용된 바와 같이, Cy는 "사이클로펜타디에닐형 모이어티"이고, Cy-H는 사이클로펜타디에닐형 리간드의 양성자화된 형태를 나타낸다. 이로 인해, Cy-H는 탈양성화되어 고리 내에 탈국재화된 π-결합(예를 들어, 방향족성)을 갖는 5원 탄소 고리를 형성할 수 있는 사이클로펜타디엔 고리 구조를 함유하고 사이클로펜타디에닐형 리간드로서 전이 금속 중심에 배위할 수 있는 예비금속화 모이어티를 나타낸다.

[1745] 예비금속화 화합물, 또는 비금속화 모이어티를 지칭할 때, 본 개시내용에 사용된 바와 같이, Cy는 "사이클로펜

타디에닐형 모이어티"이고, Cy-Si(R^e)$_3$은 사이클로펜타디에닐형 리간드의 실릴화된 형태를 나타낸다. 이로 인해, Cy-Si(R^e)$_3$은 탈실릴화되어 고리 내에 탈국재화된 π-결합(예를 들어, 방향족성)을 갖는 5원 탄소 고리를 형성할 수 있는 사이클로펜타디엔 고리 구조를 함유하고 사이클로펜타디에닐형 리간드로서 전이 금속 중심에 배위할 수 있는 예비금속화 모이어티를 나타낸다.

[1746] 예비금속화 화합물, 또는 비금속화 모이어티를 지칭할 때, 본 개시내용에 사용된 바와 같이, Cy는 "사이클로펜타디에닐형 모이어티"이고, Cy-Sn(R^e)$_3$은 사이클로펜타디에닐형 리간드의 주석화된 형태를 나타낸다. 이로 인해, Cy-Sn(R^e)$_3$은 탈주석화되어 고리 내에 탈국재화된 π-결합(예를 들어, 방향족성)을 갖는 5원 탄소 고리를 형성할 수 있는 사이클로펜타디엔 고리 구조(예를 들어, 방향족성)를 함유하고 사이클로펜타디에닐형 리간드로서 전이 금속 중심에 배위할 수 있는 예비금속화 모이어티를 나타낸다.

[1747] 따라서, 용어 "사이클로펜타디에닐형 모이어티"는, 예를 들어 비치환된 사이클로펜타디에닐, 단일 또는 다중 치환된 사이클로펜타디에닐, 비치환된 인데닐, 단일 또는 다중 치환된 인데닐, 비치환된 플루오레닐 및 단일 또는 다중 치환된 플루오레닐을 포함한다. 인데닐 및 플루오레닐 모이어티의 수소화된 버전도 본 개시내용에 사용하기 위해 고려된다.

[1748] 본 개시내용의 실시양태에서, 사이클로펜타디에닐 모이어티, 인데닐 모이어티(또는 이의 수소화된 버전) 및 플루오레닐 모이어티(또는 이의 수소화된 버전)에 대한 치환체는 하이드로카르빌 기가 비치환될 수 있거나, 또는 예를 들어 할로겐(예컨대 펜타플루오로벤질 기, -$CH_2C_6F_5$의 경우), C_{1-20} 알콕시 기, C_{6-20} 아릴 기, C_{6-20} 아릴옥시 기(이들 각각은 예를 들어 할로겐에 의해 추가로 치환될 수 있음)로 추가로 치환될 수 있는 C_{1-30} 하이드로카르빌 기; 비치환되거나 또는 최대 2개의 C_{1-8} 알킬 기에 의해 치환되는 아미도 기; 비치환되거나 또는 최대 2개의 C_{1-8} 알킬 기에 의해 치환되는 포스피도 기; 화학식 -Si(R^a)$_3$의 실릴 기로서, 여기서 각 R^a는 수소, C_{1-8} 알킬 기, 및 C_{6-10} 아릴 기로 이루어지는 군 중에서 독립적으로 선택되는 실릴 기; 및 화학식 -Ge(R^a)$_3$의 게르마닐 기로서, 여기서 R^a는 바로 위에 정의된 바와 같은 것인 게르마닐 기로 이루어지는 군 중에서 선택될 수 있다.

[1749] 일부 실시양태에서, Cy는 헤테로원자 치환된 사이클로펜타디에닐형 모이어티, 및 헤테로원자 함유 사이클로펜타디에닐형 모이어티로 이루어진 군 중에서 선택된다.

[1750] 일부 실시양태에서, Cy는 치환된 또는 비치환된 인데노[1,2-b]인돌릴 및 인데노[2,1-b]인돌릴 모이어티로 이루어진 군 중에서 선택된다.

[1751] 일부 실시양태에서, Cy는 비치환된 또는 치환된 사이클로펜타디에닐 모이어티; 비치환된 또는 치환된 사이클로펜테노페난트릴 모이어티 및 이들의 수소화된 버전; 비치환된 또는 치환된 인데닐 모이어티 및 이들의 수소화된 버전; 비치환된 또는 치환된 플루오레닐 모이어티 및 이들의 수소화된 버전; 비치환된 또는 치환된 옥타하이드로플루오레닐 모이어티; 및 비치환된 또는 치환된 아줄레닐 리간드로 이루어진 군 중에서 선택된다.

[1752] 일부 실시양태에서, Cy는 비치환되거나, 또는 다음으로 이루어진 군 중에서 독립적으로 선택되는 최대 4개의 치환체에 의해 치환된 사이클로펜타디에닐 모이어티이다:

[1753] 할로겐;

[1754] 수소;

[1755] C_{1-30} 하이드로카르빌 기로서, 여기서 하이드로카르빌 기는 비치환되거나, 또는 할로겐 원자, C_{1-20} 알킬 기, C_{1-20} 알콕시 기, C_{7-20} 알킬아릴 기, C_{7-20} 아릴알킬 기, C_{6-20} 아릴 기, C_{6-20} 아릴옥시 기, C_{7-20} 알킬아릴옥시 기, 및 C_{7-20} 아릴알킬옥시 기로 이루어지는 군 중에서 선택되는 하나 이상의 치환체에 의해 추가로 치환되는, C_{1-30} 하이드로카르빌 기;

[1756] 헤테로원자 함유 C_{1-30} 하이드로카르빌 기로서, 여기서 헤테로원자 함유 하이드로카르빌 기는 비치환되거나, 또는 할로겐 원자, C_{1-20} 알킬 기, C_{1-20} 알콕시 기, C_{7-20} 알킬아릴 기, C_{7-20} 아릴알킬 기, C_{6-20} 아릴 기, C_{6-20} 아릴옥시 기, C_{7-20} 알킬아릴옥시 기, 및 C_{7-20} 아릴알킬옥시 기로 이루어지는 군 중에서 선택되는 하나 이상의 치환체에 의

해 추가로 치환되는, 헤테로원자 함유 C_{1-30} 하이드로카르빌 기;

[1757] 옥시 기, -OR';

[1758] 아미도 기, $-NR'_2$;

[1759] 포스피도 기, $-PR'_2$;

[1760] 티올레이트 기, -SR';

[1761] 화학식 $-Si(R^a)_3$의 실릴 기; 및

[1762] 화학식 $-Ge(R^a)_3$의 게르마닐 기;

[1763] 여기서, 사이클로펜타디에닐 모이어티 상의 2개의 인접한 치환체는 선택적으로 결합되어 환형 하이드로카르빌 기 또는 환형 헤테로원자 함유 하이드로카르빌 기를 형성할 수 있고, 이 환형 하이드로카르빌 기 또는 환형 헤테로원자 함유 하이드로카르빌 기는 비치환되거나, 또는 할로겐 원자, C_{1-20} 알킬 기, C_{1-20} 알콕시 기, C_{7-20} 알킬아릴 기, C_{7-20} 아릴알킬 기, C_{6-20} 아릴 기, C_{6-20} 아릴옥시 기, C_{7-20} 알킬아릴옥시 기, C_{7-20} 아릴알킬옥시 기, 화학식 $-NR'_2$의 아미도 기, 화학식 $-PR'_2$의 포스피도 기, 화학식 -SR'의 티올레이트 기, 화학식 $-Si(R^a)_3$의 실릴 기, 및 화학식 $-Ge(R^a)_3$의 게르마닐 기로 이루어지는 군 중에서 선택되는 하나 이상의 치환체에 의해 추가로 치환되고;

[1764] 여기서 각 R'는 수소, C_{1-20} 알킬 기, 및 C_{6-20} 아릴 기로 이루어지는 군 중에서 독립적으로 선택되고; 그리고

[1765] 각 R^a는 수소, C_{1-8} 알킬 기, C_{1-8} 알콕시 기, C_{6-20} 아릴옥시 기, 및 C_{6-20} 아릴 기로 이루어지는 군 중에서 독립적으로 선택된다.

[1766] 일부 실시양태에서, Cy는 비치환되거나, 또는 다음으로 이루어진 군 중에서 독립적으로 선택되는 최대 6개의 치환체에 의해 치환된 인데닐 모이어티이다:

[1767] 할로겐;

[1768] 수소;

[1769] C_{1-30} 하이드로카르빌 기로서, 여기서 하이드로카르빌 기는 비치환되거나, 또는 할로겐 원자, C_{1-20} 알킬 기, C_{1-20} 알콕시 기, C_{7-20} 알킬아릴 기, C_{7-20} 아릴알킬 기, C_{6-20} 아릴 기, C_{6-20} 아릴옥시 기, C_{7-20} 알킬아릴옥시 기, 및 C_{7-20} 아릴알킬옥시 기로 이루어지는 군 중에서 선택되는 하나 이상의 치환체에 의해 추가로 치환되는, C_{1-30} 하이드로카르빌 기;

[1770] 헤테로원자 함유 C_{1-30} 하이드로카르빌 기로서, 여기서 헤테로원자 함유 하이드로카르빌 기는 비치환되거나, 또는 할로겐 원자, C_{1-20} 알킬 기, C_{1-20} 알콕시 기, C_{7-20} 알킬아릴 기, C_{7-20} 아릴알킬 기, C_{6-20} 아릴 기, C_{6-20} 아릴옥시 기, C_{7-20} 알킬아릴옥시 기, 및 C_{7-20} 아릴알킬옥시 기로 이루어지는 군 중에서 선택되는 하나 이상의 치환체에 의해 추가로 치환되는, 헤테로원자 함유 C_{1-30} 하이드로카르빌 기;

[1771] 옥시 기, -OR';

[1772] 아미도 기, $-NR'_2$;

[1773] 포스피도 기, $-PR'_2$;

[1774] 티올레이트 기, -SR';

[1775] 화학식 $-Si(R^a)_3$의 실릴 기; 및

[1776] 화학식 $-Ge(R^a)_3$의 게르마닐 기;

[1777] 여기서, 인데닐 모이어티 상의 2개의 인접한 치환체는 선택적으로 결합되어 환형 하이드로카르빌 기 또는 환형 헤테로원자 함유 하이드로카르빌 기를 형성할 수 있고, 이 환형 하이드로카르빌 기 또는 환형 헤테로원자 함유 하이드로카르빌 기는 비치환되거나, 또는 할로겐 원자, C_{1-20} 알킬 기, C_{1-20} 알콕시 기, C_{7-20} 알킬아릴 기, C_{7-20} 아릴알킬 기, C_{6-20} 아릴 기, C_{6-20} 아릴옥시 기, C_{7-20} 알킬아릴옥시 기, C_{7-20} 아릴알킬옥시 기, 화학식 $-NR'_2$의 아미도 기, 화학식 $-PR'_2$의 포스피도 기, 화학식 -SR'의 티올레이트 기, 화학식 $-Si(R^a)_3$의 실릴 기, 및 화학식 $-Ge(R^a)_3$의 게르마닐 기로 이루어지는 군 중에서 선택되는 하나 이상의 치환체에 의해 추가로 치환되고;

[1778] 여기서 각 R'는 수소, C_{1-20} 알킬 기, 및 C_{6-20} 아릴 기로 이루어지는 군 중에서 독립적으로 선택되고; 그리고

[1779] 각 R^a는 수소, C_{1-8} 알킬 기, C_{1-8} 알콕시 기, C_{6-20} 아릴옥시 기, 및 C_{6-20} 아릴 기로 이루어지는 군 중에서 독립적으로 선택된다.

[1780] 일부 실시양태에서, Cy는 비치환되거나, 또는 다음으로 이루어진 군 중에서 독립적으로 선택되는 최대 8개의 치환체에 의해 치환된 플루오레닐 모이어티이다:

[1781] 할로겐;

[1782] 수소;

[1783] C_{1-30} 하이드로카르빌 기로서, 여기서 하이드로카르빌 기는 비치환되거나, 또는 할로겐 원자, C_{1-20} 알킬 기, C_{1-20} 알콕시 기, C_{7-20} 알킬아릴 기, C_{7-20} 아릴알킬 기, C_{6-20} 아릴 기, C_{6-20} 아릴옥시 기, C_{7-20} 알킬아릴옥시 기, 및 C_{7-20} 아릴알킬옥시 기로 이루어지는 군 중에서 선택되는 하나 이상의 치환체에 의해 추가로 치환되는, C_{1-30} 하이드로카르빌 기;

[1784] 헤테로원자 함유 C_{1-30} 하이드로카르빌 기로서, 여기서 헤테로원자 함유 하이드로카르빌 기는 비치환되거나, 또는 할로겐 원자, C_{1-20} 알킬 기, C_{1-20} 알콕시 기, C_{7-20} 알킬아릴 기, C_{7-20} 아릴알킬 기, C_{6-20} 아릴 기, C_{6-20} 아릴옥시 기, C_{7-20} 알킬아릴옥시 기, 및 C_{7-20} 아릴알킬옥시 기로 이루어지는 군 중에서 선택되는 하나 이상의 치환체에 의해 추가로 치환되는, 헤테로원자 함유 C_{1-30} 하이드로카르빌 기;

[1785] 옥시 기, -OR';

[1786] 아미도 기, $-NR'_2$;

[1787] 포스피도 기, $-PR'_2$;

[1788] 티올레이트 기, -SR';

[1789] 화학식 $-Si(R^a)_3$의 실릴 기; 및

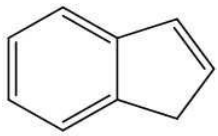
[1790] 화학식 $-Ge(R^a)_3$의 게르마닐 기;

[1791] 여기서, 플루오레닐 모이어티 상의 2개의 인접한 치환체는 선택적으로 결합되어 환형 하이드로카르빌 기 또는 환형 헤테로원자 함유 하이드로카르빌 기를 형성할 수 있고, 이 환형 하이드로카르빌 기 또는 환형 헤테로원자 함유 하이드로카르빌 기는 비치환되거나, 또는 할로겐 원자, C_{1-20} 알킬 기, C_{1-20} 알콕시 기, C_{7-20} 알킬아릴 기, C_{7-20} 아릴알킬 기, C_{6-20} 아릴 기, C_{6-20} 아릴옥시 기, C_{7-20} 알킬아릴옥시 기, C_{7-20} 아릴알킬옥시 기, 화학식 $-NR'_2$의 아미도 기, 화학식 $-PR'_2$의 포스피도 기, 화학식 -SR'의 티올레이트 기, 화학식 $-Si(R^a)_3$의 실릴 기, 및 화학식 $-Ge(R^a)_3$의 게르마닐 기로 이루어지는 군 중에서 선택되는 하나 이상의 치환체에 의해 추가로 치환되고;

[1792] 여기서 각 R'는 수소, C_{1-20} 알킬 기, 및 C_{6-20} 아릴 기로 이루어지는 군 중에서 독립적으로 선택되고; 그리고

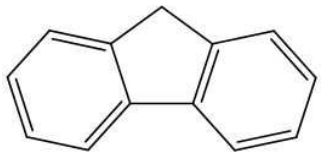
[1793] 각 R^a는 수소, C_{1-8} 알킬 기, C_{1-8} 알콕시 기, C_{6-20} 아릴옥시 기, 및 C_{6-20} 아릴 기로 이루어지는 군 중에서 독립적으로 선택된다.

[1794] 관련 기술분야의 기술자는 인데닐 모이어티가 화합물 인덴으로부터 유래되는 하이드로카르빌 기임을 이해한다:

[1795] 

인덴

[1796] 관련 기술분야의 기술자는 플루오레닐 모이어티가 화합물 플루오렌으로부터 유래되는 하이드로카르빌 기임을 이해한다:

[1797] 

플루오렌

[1798] 사이클로펜타디에닐처럼, 인데닐, 또는 플루오레닐 하이드로카르빌 모이어티는 탈양성자화 후 η^5-결합(또는 일부 경우, η^3-결합, 또는 일부 경우, η^1-결합)에 의해 금속 중심에 배위할 수 있다.

[1799] 일부 실시양태에서, Cy는 비치환된 또는 치환된 인데닐 모이어티이다.

[1800] 일부 실시양태에서, Cy는 비치환된 인데닐 모이어티이다.

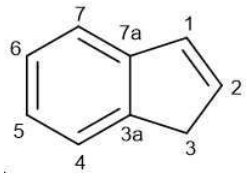
[1801] 일부 실시양태에서, Cy는 치환된 인데닐 모이어티이다.

[1802] 일부 실시양태에서, Cy는 비치환된 또는 치환된 플루오레닐 모이어티이다.

[1803] 일부 실시양태에서, Cy는 비치환된 플루오레닐 모이어티이다.

[1804] 일부 실시양태에서, Cy는 치환된 플루오레닐 모이어티이다.

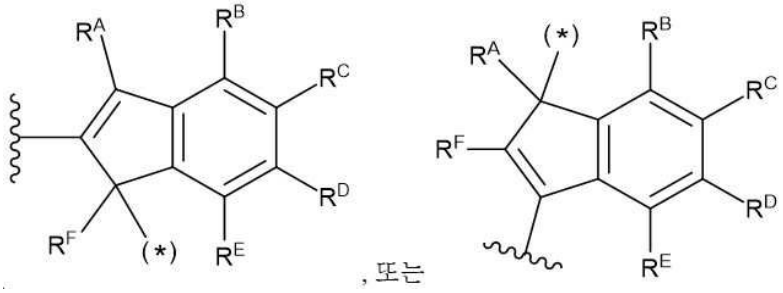
[1805] 일부 실시양태에서, Cy는 1번 위치 또는 2번 위치에서 L 기에 부착된 비치환된 인데닐 모이어티이고, 여기서, 인데닐 고리 상의 위치는 다음과 같이 번호가 매겨진다:

[1806] 

[1807] 일부 실시양태에서, Cy는 1번 위치에서 L 기에 부착된 비치환된 인데닐 모이어티이다.

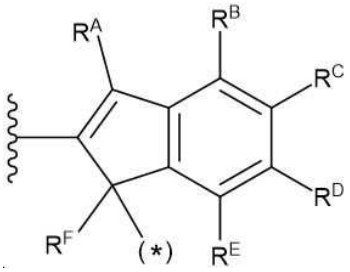
[1808] 일부 실시양태에서, Cy는 2번 위치에서 L 기에 부착된 비치환된 인데닐 모이어티이다.

[1809] 일부 실시양태에서, Cy는 이들의 이중 결합 이성질체를 포함하는, 다음 화학식인 것이다:

[1810] 

[1811] 여기서, 는 L에 대한 부착 지점을 나타내고, (*)는 X^3에 대한 부착 지점을 나타내며; 각 R^A, R^B, R^C, R^D, R^E 및 R^F는 H, C_{1-12} 하이드로카르빌 및 C_{1-12} 헤테로원자 함유 하이드로카르빌 중에서 독립적으로 선택된다. 일부 실시양태에서, 각 R^A, R^B, R^C, R^D, R^E 및 R^F는 독립적으로 H 및 비치환된 C_{1-6} 알킬 중에서 선택된다. 일부 실시양태에서, 각 R^A, R^B, R^C, R^D, R^E 및 R^F는 H이다. 일부 실시양태에서, R^B, R^C, R^D 및 R^E 중 2개의 인접한 기는 결합되어 고리를 형성한다.

[1812] 일부 실시양태에서, Cy는 이의 이중 결합 이성질체를 포함하는 다음 화학식인 것이다:

[1813] 

[1814] 여기서, 는 L에 대한 부착 지점을 나타내고, (*)는 X^3에 대한 부착 지점을 나타내며; 각 R^A, R^B, R^C, R^D, R^E 및 R^F는 H, C_{1-12} 하이드로카르빌 및 C_{1-12} 헤테로원자 함유 하이드로카르빌 중에서 독립적으로 선택된다. 일부 실시양태에서, 각 R^A, R^B, R^C, R^D, R^E 및 R^F는 독립적으로 H 및 비치환된 C_{1-6} 알킬 중에서 선택된다. 일부 실시양태에서, 각 R^A, R^B, R^C, R^D, R^E 및 R^F는 H이다. 일부 실시양태에서, R^B, R^C, R^D 및 R^E 중 2개의 인접한 기는 결합되어 고리를 형성한다.

[1815] 일부 실시양태에서, L은 P를 Cy와 연결하는 원자의 근접한 사슬을 함유하는 가교 기이며, 여기서 근접한 사슬은 3개의 원자를 함유한다. 일부 실시양태에서, L은 P를 Cy와 연결하는 원자의 근접한 사슬을 함유하는 가교 기이고, 여기서 근접한 사슬은 2개의 원자를 함유한다. 문구 "원자의 근접한 사슬"이란 지칭되는 원자가 순서대로 함께 결합되고, 한쪽 끝은 P에, 그리고 다른 쪽 끝은 Cy에 결합되는 것을 의미한다.

[1816] 일부 실시양태에서, L은 적어도 하나의 환형 하이드로카르빌 기 또는 적어도 하나의 환형 헤테로원자 함유 하이드로카르빌 기를 함유하는 가교 기이다.

[1817] 일부 실시양태에서, L은 적어도 하나의 사이클로알킬렌, 헤테로사이클로알킬렌, 아릴렌 또는 헤테로아릴렌 기를 함유하는 가교 기이다. 용어 "사이클로알킬렌"은 사이클로지방족 고리를 함유하는 2가 기를 지칭한다. 용어 "헤테로사이클로알킬렌"은 헤테로사이클로지방족 고리를 함유하는 2가 기를 지칭한다. 용어 "아릴렌"은 방향족 고리를 함유하는 2가 기를 지칭한다. 용어 "헤테로아릴렌"은 헤테로방향족 고리를 함유하는 2가 기를 지칭한다.

[1818] 일부 실시양태에서, L은 적어도 하나의 아릴렌 또는 헤테로아릴렌 기를 함유하는 가교 기이다.

[1819] 일부 실시양태에서, L은 적어도 하나의 사이클로알킬렌, 또는 헤테로사이클로알킬렌 기를 함유하는 가교 기이다.

[1820] 일부 실시양태에서, L은 탄소 원자, 수소 원자 및 헤테로 원자 중에서 선택되는 1-50개 원자를 포함하고 적어도

하나의 페닐렌 기를 함유하는 가교 기이다.

[1821] 일부 실시양태에서, L은 적어도 하나의 아릴렌 기를 함유하는 가교 기이다. 일부 실시양태에서, L은 적어도 하나의 페닐렌 기를 함유하는 가교 기이다.

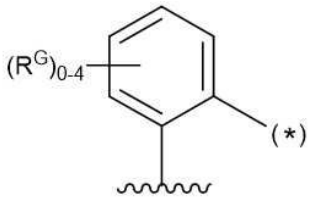
[1822] 일부 실시양태에서, L은 탄소 원자, 수소 원자 및 헤테로원자 중에서 선택되는 1-50개 원자를 포함하는 가교 기이고 적어도 하나의 아릴렌 또는 헤테로아릴렌 기를 함유한다. 일부 실시양태에서, L은 탄소 원자, 수소 원자 및 헤테로원자 중에서 선택되는 1-50개 원자를 포함하는 가교 기이고 적어도 하나의 아릴렌 기를 함유한다. 일부 실시양태에서, L은 탄소 원자, 수소 원자 및 헤테로원자 중에서 선택되는 1-50개 원자를 포함하는 가교 기이고 적어도 하나의 페닐렌 기를 함유한다. 일부 실시양태에서, L은 탄소 원자 및 수소 원자 중에서 선택되는 1-50개 원자를 포함하고, 적어도 하나의 페닐렌 기를 함유하는 가교 기이다.

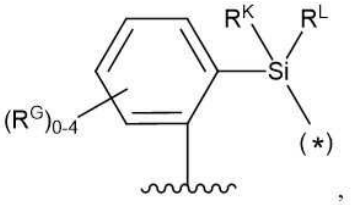
[1823] L 내의 아릴렌 또는 헤테로아릴렌 기는 P에 직접 또는 간접적으로 공유 결합될 수 있다. L 내의 아릴렌 또는 헤테로아릴렌 기는 P에 직접 공유 결합될 수 있고, 즉, P부터 아릴렌 또는 헤테로아릴렌 기의 고리 원자까지 공유 결합이 있을 수 있다. 대안적으로, L 내의 아릴렌 또는 헤테로아릴렌 기는 P에 간접적으로 공유 결합될 수 있고, 즉, P와 아릴렌 또는 헤테로아릴렌 기의 고리 원자 사이에 추가 2가 기가 있을 수 있다. 추가 2가 기는 하이드로카르빌렌 기, 예를 들어 알킬렌 기 또는 알케닐렌 기일 수 있거나, 또는 하나 이상의 헤테로원자를 함유하는 2가 기일 수 있다.

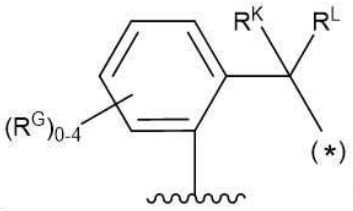
[1824] L 내의 아릴렌 또는 헤테로아릴렌 기는 Cy에 직접 또는 간접적으로 공유 결합될 수 있다. L 내의 아릴렌 또는 헤테로아릴렌 기는 Cy에 직접 공유 결합될 수 있고, 즉, Cy부터 아릴렌 또는 헤테로아릴렌 기의 고리 원자까지 공유 결합이 있을 수 있다. 대안적으로, L 내의 아릴렌 또는 헤테로아릴렌 기는 Cy에 간접적으로 공유 결합될 수 있고, 즉, Cy와 아릴렌 또는 헤테로아릴렌 기의 고리 원자 사이에 추가 2가 기가 있을 수 있다. 추가 2가 기는 하이드로카르빌렌 기, 예를 들어 알킬렌 기 또는 알케닐렌 기일 수 있거나, 또는 하나 이상의 헤테로원자를 함유하는 2가 기일 수 있다.

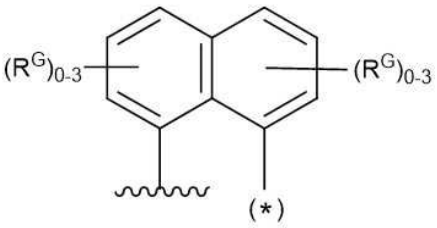
[1825] 일부 실시양태에서, L은 P를 Cy와 연결하는 원자의 근접한 사슬을 함유하는 가교 기이고, 여기서 페닐렌 기의 인접한 탄소 원자는 원자의 근접한 사슬의 일부를 형성한다.

[1826] 일부 실시양태에서, L은 다음 중에서 선택된다:



,


,




및

[1827]

[1828] 여기서, ~~~~ 는 P에 대한 부착 지점을 나타내고, (*)는 Cy에 대한 부착 지점을 나타내며; 여기서 각 R^G는 다음으로 이루어지는 군 중에서 독립적으로 선택된다:

[1829] 할로겐;

[1830] C_{1-30} 하이드로카르빌 기로서, 여기서 하이드로카르빌 기는 비치환되거나, 또는 할로겐 원자, C_{1-20} 알킬 기, C_{1-20} 알콕시 기, C_{7-20} 알킬아릴 기, C_{7-20} 아릴알킬 기, C_{6-20} 아릴 기, C_{6-20} 아릴옥시 기, C_{7-20} 알킬아릴옥시 기, 및 C_{7-20} 아릴알킬옥시 기로 이루어지는 군 중에서 선택되는 하나 이상의 치환체에 의해 추가로 치환되는, C_{1-30} 하이드로카르빌 기;

[1831] 헤테로원자 함유 C_{1-30} 하이드로카르빌 기로서, 여기서 헤테로원자 함유 하이드로카르빌 기는 비치환되거나, 또는

할로겐 원자, C_{1-20} 알킬 기, C_{1-20} 알콕시 기, C_{7-20} 알킬아릴 기, C_{7-20} 아릴알킬 기, C_{6-20} 아릴 기, C_{6-20} 아릴옥시 기, C_{7-20} 알킬아릴옥시 기, 및 C_{7-20} 아릴알킬옥시 기로 이루어지는 군 중에서 선택되는 하나 이상의 치환체에 의해 추가로 치환되는, 헤테로원자 함유 C_{1-30} 하이드로카르빌 기;

[1832] 옥시 기, -OR';

[1833] 아미도 기, $-NR'_2$;

[1834] 포스피도 기, $-PR'_2$;

[1835] 티올레이트 기, -SR';

[1836] 화학식 $-Si(R^a)_3$의 실릴 기; 및

[1837] 화학식 $-Ge(R^a)_3$의 게르마닐 기;

[1838] 여기서, 2개의 인접한 R^G 기는 선택적으로 결합되어 환형 하이드로카르빌 기 또는 환형 헤테로원자 함유 하이드로카르빌 기를 형성할 수 있고, 이 환형 하이드로카르빌 기 또는 환형 헤테로원자 함유 하이드로카르빌 기는 비치환되거나, 또는 할로겐 원자, C_{1-20} 알킬 기, C_{1-20} 알콕시 기, C_{7-20} 알킬아릴 기, C_{7-20} 아릴알킬 기, C_{6-20} 아릴 기, C_{6-20} 아릴옥시 기, C_{7-20} 알킬아릴옥시 기, C_{7-20} 아릴알킬옥시 기, 화학식 $-NR'_2$의 아미도 기, 화학식 $-PR'_2$의 포스피도 기, 화학식 -SR'의 티올레이트 기, 화학식 $-Si(R^a)_3$의 실릴 기, 및 화학식 $-Ge(R^a)_3$의 게르마닐 기로 이루어지는 군 중에서 선택되는 하나 이상의 치환체에 의해 추가로 치환되고;

[1839] 여기서, R^K 및 R^L은 각각 독립적으로 다음으로 이루어지는 군 중에서 선택되고:

[1840] 할로겐;

[1841] 수소;

[1842] C_{1-30} 하이드로카르빌 기로서, 여기서 하이드로카르빌 기는 비치환되거나, 또는 할로겐 원자, C_{1-20} 알킬 기, C_{1-20} 알콕시 기, C_{7-20} 알킬아릴 기, C_{7-20} 아릴알킬 기, C_{6-20} 아릴 기, C_{6-20} 아릴옥시 기, C_{7-20} 알킬아릴옥시 기, 및 C_{7-20} 아릴알킬옥시 기로 이루어지는 군 중에서 선택되는 하나 이상의 치환체에 의해 추가로 치환되는, C_{1-30} 하이드로카르빌 기;

[1843] 헤테로원자 함유 C_{1-30} 하이드로카르빌 기로서, 여기서 헤테로원자 함유 하이드로카르빌 기는 비치환되거나, 또는 할로겐 원자, C_{1-20} 알킬 기, C_{1-20} 알콕시 기, C_{7-20} 알킬아릴 기, C_{7-20} 아릴알킬 기, C_{6-20} 아릴 기, C_{6-20} 아릴옥시 기, C_{7-20} 알킬아릴옥시 기, 및 C_{7-20} 아릴알킬옥시 기로 이루어지는 군 중에서 선택되는 하나 이상의 치환체에 의해 추가로 치환되는, 헤테로원자 함유 C_{1-30} 하이드로카르빌 기;

[1844] 여기서 R^K 및 R^L 기는 선택적으로 결합되어 환형 하이드로카르빌 기 또는 환형 헤테로원자 함유 하이드로카르빌 기를 형성할 수 있고, 이 환형 하이드로카르빌 기 또는 환형 헤테로원자 함유 하이드로카르빌 기는 비치환되거나, 또는 할로겐 원자, C_{1-20} 알킬 기, C_{1-20} 알콕시 기, C_{7-20} 알킬아릴 기, C_{7-20} 아릴알킬 기, C_{6-20} 아릴 기, C_{6-20} 아릴옥시 기, C_{7-20} 알킬아릴옥시 기, C_{7-20} 아릴알킬옥시 기, 화학식 $-NR'_2$의 아미도 기, 화학식 $-PR'_2$의 포스피도 기, 화학식 -SR'의 티올레이트 기, 화학식 $-Si(R^a)_3$의 실릴 기 및 화학식 $-Ge(R^a)_3$의 게르마닐 기로 이루어지는 군 중에서 선택되는 하나 이상의 치환체에 의해 추가로 치환되며;

[1845] 여기서 각 R'는 수소, C_{1-20} 알킬 기, 및 C_{6-20} 아릴 기로 이루어지는 군 중에서 독립적으로 선택되고; 그리고

[1846] 각 R^a는 수소, C_{1-8} 알킬 기, C_{1-8} 알콕시 기, C_{6-20} 아릴옥시 기, 및 C_{6-20} 아릴 기로 이루어지는 군 중에서 독립적으로 선택된다.

[1847] 실시양태에서 각 R^G는 할로겐 및 비치환된 C_{1-12} 알킬 중에서 독립적으로 선택된다.

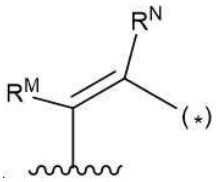
[1848] 일부 실시양태에서 R^G는 존재하지 않는다(페닐렌 기 또는 나프탈렌 기가 비치환됨).

[1849] 실시양태에서 R^K 및 R^L은 각각 독립적으로 수소, 비치환된 C_{1-12} 알킬 기, 및 비치환되거나 또는 치환된 C_{6-20} 아릴 기 중에서 선택된다.

[1850] 실시양태에서 R^K 및 R^L은 각각 독립적으로 선택된 비치환된 C_{1-12} 알킬 기, 및 비치환된 또는 치환된 C_{6-20} 아릴 기이다.

[1851] 일부 실시양태에서 R^K 및 R^L은 각각 수소이다.

[1852] 일부 실시양태에서 L은 다음 화학식인 것이다:

[1853] 

[1854] 여기서, R^M 및 R^N은 각각 독립적으로 다음으로 이루어진 군 중에서 선택된다:

[1855] 할로겐;

[1856] 수소;

[1857] C_{1-30} 하이드로카르빌 기로서, 여기서 하이드로카르빌 기는 비치환되거나, 또는 할로겐 원자, C_{1-20} 알킬 기, C_{1-20} 알콕시 기, C_{7-20} 알킬아릴 기, C_{7-20} 아릴알킬 기, C_{6-20} 아릴 기, C_{6-20} 아릴옥시 기, C_{7-20} 알킬아릴옥시 기, 및 C_{7-20} 아릴알킬옥시 기로 이루어지는 군 중에서 선택되는 하나 이상의 치환체에 의해 추가로 치환되는, C_{1-30} 하이드로카르빌 기;

[1858] 헤테로원자 함유 C_{1-30} 하이드로카르빌 기로서, 여기서 헤테로원자 함유 하이드로카르빌 기는 비치환되거나, 또는 할로겐 원자, C_{1-20} 알킬 기, C_{1-20} 알콕시 기, C_{7-20} 알킬아릴 기, C_{7-20} 아릴알킬 기, C_{6-20} 아릴 기, C_{6-20} 아릴옥시 기, C_{7-20} 알킬아릴옥시 기, 및 C_{7-20} 아릴알킬옥시 기로 이루어지는 군 중에서 선택되는 하나 이상의 치환체에 의해 추가로 치환되는, 헤테로원자 함유 C_{1-30} 하이드로카르빌 기;

[1859] 옥시 기, -OR';

[1860] 아미도 기, $-NR'_2$;

[1861] 포스피도 기, $-PR'_2$;

[1862] 티올레이트 기, -SR';

[1863] 화학식 $-Si(R^a)_3$의 실릴 기; 및

[1864] 화학식 $-Ge(R^a)_3$의 게르마닐 기;

[1865] 여기서, R^M 및 R^N의 2개의 인접한 기는 선택적으로 결합되어 환형 하이드로카르빌 기 또는 환형 헤테로원자 함유 하이드로카르빌 기를 형성할 수 있고, 이 환형 하이드로카르빌 기 또는 환형 헤테로원자 함유 하이드로카르빌 기는 비치환되거나, 또는 할로겐 원자, C_{1-20} 알킬 기, C_{1-20} 알콕시 기, C_{7-20} 알킬아릴 기, C_{7-20} 아릴알킬 기, C_{6-20} 아릴 기, C_{6-20} 아릴옥시 기, C_{7-20} 알킬아릴옥시 기, C_{7-20} 아릴알킬옥시 기, 화학식 $-NR'_2$의 아미도 기, 화학식 $-PR'_2$의 포스피도 기, 화학식 -SR'의 티올레이트 기, 화학식 $-Si(R^a)_3$의 실릴 기, 및 화학식 $-Ge(R^a)_3$의 게르마

닐 기로 이루어지는 군 중에서 선택되는 하나 이상의 치환체에 의해 추가로 치환되고;

[1866] 여기서 각 R'는 수소, C_{1-20} 알킬 기, 및 C_{6-20} 아릴 기로 이루어지는 군 중에서 독립적으로 선택되고; 그리고

[1867] 각 R^a는 수소, C_{1-8} 알킬 기, C_{1-8} 알콕시 기, C_{6-20} 아릴옥시 기, 및 C_{6-20} 아릴 기로 이루어지는 군 중에서 독립적으로 선택되고;

[1868] 여기서, 는 P에 대한 부착 지점을 나타내고, (*)는 Cy에 대한 부착 지점을 나타낸다.

[1869] 일부 실시양태에서, R^M 및 R^N은 각각 독립적으로 할로겐, 수소, C_{1-30} 알킬 기, C_{1-30} 알콕시 기, C_{7-30} 알킬아릴 기, C_{7-30} 아릴알킬 기, C_{6-30} 아릴 기, C_{6-30} 아릴옥사이드 기, C_{7-30} 알킬아릴옥시 기, 및 C_{7-30} 아릴알킬옥시 기로 이루어진 군 중에서 선택된다.

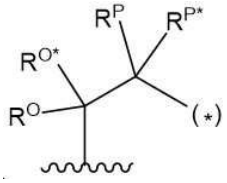
[1870] 일부 실시양태에서, R^M 및 R^N은 각각 독립적으로 할로겐, 수소, C_{1-20} 알킬 기, C_{1-20} 알콕시 기, C_{7-20} 알킬아릴 기, C_{7-20} 아릴알킬 기, C_{6-20} 아릴 기, C_{6-20} 아릴옥사이드 기, C_{7-20} 알킬아릴옥시 기, 및 C_{7-20} 아릴알킬옥시 기로 이루어진 군 중에서 선택된다.

[1871] 일부 실시양태에서, R^M 및 R^N 기는 결합되어 환형 하이드로카르빌 기를 형성한다.

[1872] 일부 실시양태에서, R^M 및 R^N 기는 결합되어 페닐렌 기를 형성하고, 이 페닐렌 기는 비치환되거나, 또는 할로겐 원자, C_{1-20} 알킬 기, C_{1-20} 알콕시 기, C_{7-20} 알킬아릴 기, C_{7-20} 아릴알킬 기, C_{6-20} 아릴 기, C_{6-20} 아릴옥시 기, C_{7-20} 알킬아릴옥시 기, C_{7-20} 아릴알킬옥시 기, 아미도 기, $-NR'_2$, 포스피도 기, $-PR'_2$, 티올레이트 기, -SR', 화학식 $-Si(R^a)_3$의 실릴 기, 및 화학식 $-Ge(R^a)_3$의 게르마닐 기로 이루어지는 군 중에서 선택되는 하나 이상의 치환체에 의해 추가로 치환되며; 여기서 각 R'는 수소, C_{1-20} 알킬 기, 및 C_{6-20} 아릴 기로 이루어지는 군 중에서 독립적으로 선택되고; 그리고 각 R^a는 수소, C_{1-8} 알킬 기, C_{1-8} 알콕시 기, C_{6-20} 아릴옥시 기 및 C_{6-20} 아릴 기로 이루어지는 군 중에서 독립적으로 선택된다.

[1873] 일부 실시양태에서, R^M 및 R^N 기는 결합되어 추가로 치환되지 않는 페닐렌 기를 형성한다.

[1874] 일부 실시양태에서 L은 다음 화학식인 것이다:

[1875] 

[1876] 여기서, R^O, R^{O*}, R^P 및 R^{P*}는 각각 독립적으로 다음으로 이루어지는 군 중에서 선택된다:

[1877] 할로겐;

[1878] 수소;

[1879] C_{1-30} 하이드로카르빌 기로서, 여기서 하이드로카르빌 기는 비치환되거나, 또는 할로겐 원자, C_{1-20} 알킬 기, C_{1-20} 알콕시 기, C_{7-20} 알킬아릴 기, C_{7-20} 아릴알킬 기, C_{6-20} 아릴 기, C_{6-20} 아릴옥시 기, C_{7-20} 알킬아릴옥시 기, 및 C_{7-20} 아릴알킬옥시 기로 이루어지는 군 중에서 선택되는 하나 이상의 치환체에 의해 추가로 치환되는, C_{1-30} 하이드로카르빌 기;

[1880] 헤테로원자 함유 C_{1-30} 하이드로카르빌 기로서, 여기서 헤테로원자 함유 하이드로카르빌 기는 비치환되거나, 또는 할로겐 원자, C_{1-20} 알킬 기, C_{1-20} 알콕시 기, C_{7-20} 알킬아릴 기, C_{7-20} 아릴알킬 기, C_{6-20} 아릴 기, C_{6-20} 아릴옥시

기, C_{7-20} 알킬아릴옥시 기, 및 C_{7-20} 아릴알킬옥시 기로 이루어지는 군 중에서 선택되는 하나 이상의 치환체에 의해 추가로 치환되는, 헤테로원자 함유 C_{1-30} 하이드로카르빌 기;

[1881] 옥시 기, -OR';

[1882] 아미도 기, $-NR'_2$;

[1883] 포스피도 기, $-PR'_2$;

[1884] 티올레이트 기, -SR';

[1885] 화학식 $-Si(R^a)_3$의 실릴 기; 및

[1886] 화학식 $-Ge(R^a)_3$의 게르마닐 기;

[1887] 여기서, R^0, R^{0*}, R^P, R^{P*} 중 2개의 기는 선택적으로 결합되어 환형 하이드로카르빌 기 또는 환형 헤테로원자 함유 하이드로카르빌 기를 형성할 수 있고, 이 환형 하이드로카르빌 기 또는 환형 헤테로원자 함유 하이드로카르빌 기는 비치환되거나, 또는 할로겐 원자, C_{1-20} 알킬 기, C_{1-20} 알콕시 기, C_{7-20} 알킬아릴 기, C_{7-20} 아릴알킬 기, C_{6-20} 아릴 기, C_{6-20} 아릴옥시 기, C_{7-20} 알킬아릴옥시 기, C_{7-20} 아릴알킬옥시 기, 화학식 $-NR'_2$의 아미도 기, 화학식 $-PR'_2$의 포스피도 기, 화학식 -SR'의 티올레이트 기, 화학식 $-Si(R^a)_3$의 실릴 기, 및 화학식 $-Ge(R^a)_3$의 게르마닐 기로 이루어지는 군 중에서 선택되는 하나 이상의 치환체에 의해 추가로 치환되고;

[1888] 여기서 각 R'는 수소, C_{1-20} 알킬 기, 및 C_{6-20} 아릴 기로 이루어지는 군 중에서 독립적으로 선택되고; 그리고

[1889] 각 R^a는 수소, C_{1-8} 알킬 기, C_{1-8} 알콕시 기, C_{6-20} 아릴옥시 기, 및 C_{6-20} 아릴 기로 이루어지는 군 중에서 독립적으로 선택되고;

[1890] 여기서, ~~~~ 는 P에 대한 부착 지점을 나타내고, (*)는 Cy에 대한 부착 지점을 나타낸다.

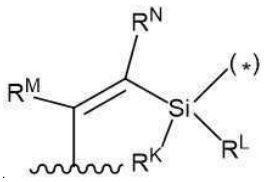
[1891] 일부 실시양태에서, R^0, R^{0*}, R^P, 및 R^{P*}는 각각 독립적으로 할로겐, 수소, C_{1-30} 알킬 기, C_{1-30} 알콕시 기, C_{7-30} 알킬아릴 기, C_{7-30} 아릴알킬 기, C_{6-30} 아릴 기, C_{6-30} 아릴옥사이드 기, C_{7-30} 알킬아릴옥시 기, 및 C_{7-30} 아릴알킬옥시 기로 이루어진 군 중에서 선택된다.

[1892] 일부 실시양태에서, R^0, R^{0*}, R^P, 및 R^{P*}는 각각 독립적으로 할로겐, 수소, C_{1-20} 알킬 기, C_{1-20} 알콕시 기, C_{7-20} 알킬아릴 기, C_{7-20} 아릴알킬 기, C_{6-20} 아릴 기, C_{6-20} 아릴옥사이드 기, C_{7-20} 알킬아릴옥시 기, 및 C_{7-20} 아릴알킬옥시 기로 이루어진 군 중에서 선택된다.

[1893] 일부 실시양태에서, 하나의 R^0 기 및 하나의 R^P 기는 결합되어 환형 하이드로카르빌 기를 형성한다.

[1894] 일부 실시양태에서, 하나의 R^0 기 및 하나의 R^P 기는 결합되어 사이클로헥실 기를 형성한다.

[1895] 일부 실시양태에서, L은 다음 화학식인 것이다:

[1896] 

[1897] 여기서, R^K 및 R^L은 각각 독립적으로 수소, 비치환된 C_{1-12} 알킬 기, 및 비치환된 또는 치환된 C_{6-20} 아릴 기로부터 선택되고;

[1898] R^M 및 R^N은 각각 독립적으로 다음으로 이루어지는 군 중에서 선택되며:

[1899] 할로겐;

[1900] 수소;

[1901] C_{1-30} 하이드로카르빌 기로서, 여기서 하이드로카르빌 기는 비치환되거나, 또는 할로겐 원자, C_{1-20} 알킬 기, C_{1-20} 알콕시 기, C_{7-20} 알킬아릴 기, C_{7-20} 아릴알킬 기, C_{6-20} 아릴 기, C_{6-20} 아릴옥시 기, C_{7-20} 알킬아릴옥시 기, 및 C_{7-20} 아릴알킬옥시 기로 이루어지는 군 중에서 선택되는 하나 이상의 치환체에 의해 추가로 치환되는, C_{1-30} 하이드로카르빌 기;

[1902] 헤테로원자 함유 C_{1-30} 하이드로카르빌 기로서, 여기서 헤테로원자 함유 하이드로카르빌 기는 비치환되거나, 또는 할로겐 원자, C_{1-20} 알킬 기, C_{1-20} 알콕시 기, C_{7-20} 알킬아릴 기, C_{7-20} 아릴알킬 기, C_{6-20} 아릴 기, C_{6-20} 아릴옥시 기, C_{7-20} 알킬아릴옥시 기, 및 C_{7-20} 아릴알킬옥시 기로 이루어지는 군 중에서 선택되는 하나 이상의 치환체에 의해 추가로 치환되는, 헤테로원자 함유 C_{1-30} 하이드로카르빌 기;

[1903] 옥시 기, -OR';

[1904] 아미도 기, $-NR'_2$;

[1905] 포스피도 기, $-PR'_2$;

[1906] 티올레이트 기, -SR';

[1907] 화학식 $-Si(R^a)_3$의 실릴 기; 및

[1908] 화학식 $-Ge(R^a)_3$의 게르마닐 기;

[1909] 여기서, R^M 및 R^N 중 2개의 인접한 기는 선택적으로 결합되어 환형 하이드로카르빌 기 또는 환형 헤테로원자 함유 하이드로카르빌 기를 형성할 수 있고, 이 환형 하이드로카르빌 기 또는 환형 헤테로원자 함유 하이드로카르빌 기는 비치환되거나, 또는 할로겐 원자, C_{1-20} 알킬 기, C_{1-20} 알콕시 기, C_{7-20} 알킬아릴 기, C_{7-20} 아릴알킬 기, C_{6-20} 아릴 기, C_{6-20} 아릴옥시 기, C_{7-20} 알킬아릴옥시 기, C_{7-20} 아릴알킬옥시 기, 화학식 $-NR'_2$의 아미도 기, 화학식 $-PR'_2$의 포스피도 기, 화학식 -SR'의 티올레이트, 화학식 $-Si(R^a)_3$의 실릴 기, 및 화학식 $-Ge(R^a)_3$의 게르마닐 기로 이루어지는 군 중에서 선택되는 하나 이상의 치환체에 의해 추가로 치환되고;

[1910] 여기서 각 R'는 수소, C_{1-20} 알킬 기, 및 C_{6-20} 아릴 기로 이루어지는 군 중에서 독립적으로 선택되고; 그리고

[1911] 각 R^a는 수소, C_{1-8} 알킬 기, C_{1-8} 알콕시 기, C_{6-20} 아릴옥시 기, 및 C_{6-20} 아릴 기로 이루어지는 군 중에서 독립적으로 선택되고;

[1912] 여기서, 는 P에 대한 부착 지점을 나타내고, (*)는 Cy에 대한 부착 지점을 나타낸다.

[1913] 일부 실시양태에서, R^M 및 R^N은 각각 독립적으로 할로겐, 수소, C_{1-30} 알킬 기, C_{1-30} 알콕시 기, C_{7-30} 알킬아릴 기, C_{7-30} 아릴알킬 기, C_{6-30} 아릴 기, C_{6-30} 아릴옥사이드 기, C_{7-30} 알킬아릴옥시 기, 및 C_{7-30} 아릴알킬옥시 기로 이루어진 군 중에서 선택된다.

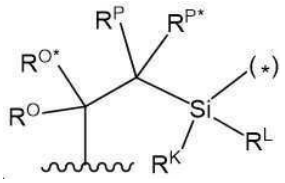
[1914] 일부 실시양태에서, R^M 및 R^N은 각각 독립적으로 할로겐, 수소, C_{1-20} 알킬 기, C_{1-20} 알콕시 기, C_{7-20} 알킬아릴 기, C_{7-20} 아릴알킬 기, C_{6-20} 아릴 기, C_{6-20} 아릴옥사이드 기, C_{7-20} 알킬아릴옥시 기, 및 C_{7-20} 아릴알킬옥시 기로 이루어진 군 중에서 선택된다.

[1915] 일부 실시양태에서, R^M 및 R^N 기는 결합되어 환형 하이드로카르빌 기를 형성한다.

[1916] 일부 실시양태에서, R^M 및 R^N 기는 결합되어 페닐렌 기를 형성하고, 이 페닐렌 기는 비치환되거나, 또는 할로겐 원자, C_{1-20} 알킬 기, C_{1-20} 알콕시 기, C_{7-20} 알킬아릴 기, C_{7-20} 아릴알킬 기, C_{6-20} 아릴 기, C_{6-20} 아릴옥시 기, C_{7-20} 알킬아릴옥시 기, C_{7-20} 아릴알킬옥시 기, 아미도 기 $-NR'_2$, 포스피도 기 $-PR'_2$, 티올레이트 기 $-SR'$, 화학식 $-Si(R^a)_3$의 실릴 기, 및 화학식 $-Ge(R^a)_3$의 게르마닐 기로 이루어지는 군 중에서 선택되는 하나 이상의 치환체에 의해 추가로 치환되고; 여기서 각 R'는 수소, C_{1-20} 알킬 기, 및 C_{6-20} 아릴 기로 이루어지는 군 중에서 독립적으로 선택되고; 그리고 여기서 각 R^a는 수소, C_{1-8} 알킬 기, C_{1-8} 알콕시 기, C_{6-20} 아릴옥시 기 및 C_{6-20} 아릴 기로 이루어지는 군 중에서 독립적으로 선택된다.

[1917] 일부 실시양태에서, R^M 및 R^N 기는 결합되어 추가로 치환되지 않는 페닐렌 기를 형성한다.

[1918] 일부 실시양태에서, L은 다음 화학식인 것이다:

[1919] 

[1920] 여기서, R^K 및 R^L은 각각 독립적으로 수소, 비치환된 C_{1-12} 알킬 기, 및 비치환된 또는 치환된 C_{6-20} 아릴 기로부터 선택되고;

[1921] 여기서, R^O, R^{O*}, R^P 및 R^{P*}은 각각 독립적으로 다음으로 이루어지는 군 중에서 선택된다:

[1922] 할로겐;

[1923] 수소;

[1924] C_{1-30} 하이드로카르빌 기로서, 여기서 하이드로카르빌 기는 비치환되거나, 또는 할로겐 원자, C_{1-20} 알킬 기, C_{1-20} 알콕시 기, C_{7-20} 알킬아릴 기, C_{7-20} 아릴알킬 기, C_{6-20} 아릴 기, C_{6-20} 아릴옥시 기, C_{7-20} 알킬아릴옥시 기, 및 C_{7-20} 아릴알킬옥시 기로 이루어지는 군 중에서 선택되는 하나 이상의 치환체에 의해 추가로 치환되는, C_{1-30} 하이드로카르빌 기;

[1925] 헤테로원자 함유 C_{1-30} 하이드로카르빌 기로서, 여기서 헤테로원자 함유 하이드로카르빌 기는 비치환되거나, 또는 할로겐 원자, C_{1-20} 알킬 기, C_{1-20} 알콕시 기, C_{7-20} 알킬아릴 기, C_{7-20} 아릴알킬 기, C_{6-20} 아릴 기, C_{6-20} 아릴옥시 기, C_{7-20} 알킬아릴옥시 기, 및 C_{7-20} 아릴알킬옥시 기로 이루어지는 군 중에서 선택되는 하나 이상의 치환체에 의해 추가로 치환되는, 헤테로원자 함유 C_{1-30} 하이드로카르빌 기;

[1926] 옥시 기, $-OR'$;

[1927] 아미도 기, $-NR'_2$;

[1928] 포스피도 기, $-PR'_2$;

[1929] 티올레이트 기, $-SR'$;

[1930] 화학식 $-Si(R^a)_3$의 실릴 기; 및

[1931] 화학식 $-Ge(R^a)_3$의 게르마닐 기;

[1932] 여기서, R^O, R^{O*}, R^P, R^{P*} 중 2개의 기는 선택적으로 결합되어 환형 하이드로카르빌 기 또는 환형 헤테로원자 함유 하이드로카르빌 기를 형성할 수 있고, 이 환형 하이드로카르빌 기 또는 환형 헤테로원자 함유 하이드로카르빌

기는 비치환되거나, 또는 할로겐 원자, C_{1-20} 알킬 기, C_{1-20} 알콕시 기, C_{7-20} 알킬아릴 기, C_{7-20} 아릴알킬 기, C_{6-20} 아릴 기, C_{6-20} 아릴옥시 기, C_{7-20} 알킬아릴옥시 기, C_{7-20} 아릴알킬옥시 기, 화학식 $-NR'_2$의 아미도 기, 화학식 $-PR'_2$의 포스피도 기, 화학식 $-SR'$의 티올레이트 기, 화학식 $-Si(R^a)_3$의 실릴 기, 및 화학식 $-Ge(R^a)_3$의 게르마닐 기로 이루어지는 군 중에서 선택되는 하나 이상의 치환체에 의해 추가로 치환되고;

[1933] 여기서 각 R'는 수소, C_{1-20} 알킬 기, 및 C_{6-20} 아릴 기로 이루어지는 군 중에서 독립적으로 선택되고; 그리고

[1934] 각 R^a는 수소, C_{1-8} 알킬 기, C_{1-8} 알콕시 기, C_{6-20} 아릴옥시 기, 및 C_{6-20} 아릴 기로 이루어지는 군 중에서 독립적으로 선택되고;

[1935] 여기서, 는 P에 대한 부착 지점을 나타내고, (*)는 Cy에 대한 부착 지점을 나타낸다.

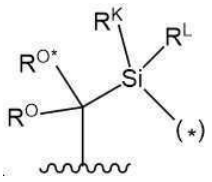
[1936] 일부 실시양태에서, R^0, R^{0*}, R^P 및 R^{P*}는 각각 독립적으로 할로겐, 수소, C_{1-30} 알킬 기, C_{1-30} 알콕시 기, C_{7-30} 알킬아릴 기, C_{7-30} 아릴알킬 기, C_{6-30} 아릴 기, C_{6-30} 아릴옥사이드 기, C_{7-30} 알킬아릴옥시 기, 및 C_{7-30} 아릴알킬옥시 기로 이루어진 군 중에서 선택된다.

[1937] 일부 실시양태에서, R^0, R^{0*}, R^P 및 R^{P*}는 각각 독립적으로 할로겐, 수소, C_{1-20} 알킬 기, C_{1-20} 알콕시 기, C_{7-20} 알킬아릴 기, C_{7-20} 아릴알킬 기, C_{6-20} 아릴 기, C_{6-20} 아릴옥사이드 기, C_{7-20} 알킬아릴옥시 기, 및 C_{7-20} 아릴알킬옥시 기로 이루어진 군 중에서 선택된다.

[1938] 일부 실시양태에서, 하나의 R^0 기 및 하나의 R^P는 결합되어 환형 하이드로카르빌 기를 형성한다.

[1939] 일부 실시양태에서, 하나의 R^0 기 및 하나의 R^P는 결합되어 사이클로헥실 기를 형성한다.

[1940] 일부 실시양태에서, L은 다음 화학식인 것이다:

[1941] 

[1942] 여기서, R^K 및 R^L은 각각 독립적으로 수소, 비치환된 C_{1-12} 알킬 기, 및 비치환된 또는 치환된 C_{6-20} 아릴 기로부터 선택되고;

[1943] 여기서, R^0, 및 R^{0*}는 각각 독립적으로 다음으로 이루어지는 군 중에서 선택되며:

[1944] 할로겐;

[1945] 수소;

[1946] C_{1-30} 하이드로카르빌 기로서, 여기서 하이드로카르빌 기는 비치환되거나, 또는 할로겐 원자, C_{1-20} 알킬 기, C_{1-20} 알콕시 기, C_{7-20} 알킬아릴 기, C_{7-20} 아릴알킬 기, C_{6-20} 아릴 기, C_{6-20} 아릴옥시 기, C_{7-20} 알킬아릴옥시 기, 및 C_{7-20} 아릴알킬옥시 기로 이루어지는 군 중에서 선택되는 하나 이상의 치환체에 의해 추가로 치환되는, C_{1-30} 하이드로카르빌 기;

[1947] 헤테로원자 함유 C_{1-30} 하이드로카르빌 기로서, 여기서 헤테로원자 함유 하이드로카르빌 기는 비치환되거나, 또는 할로겐 원자, C_{1-20} 알킬 기, C_{1-20} 알콕시 기, C_{7-20} 알킬아릴 기, C_{7-20} 아릴알킬 기, C_{6-20} 아릴 기, C_{6-20} 아릴옥시 기, C_{7-20} 알킬아릴옥시 기, 및 C_{7-20} 아릴알킬옥시 기로 이루어지는 군 중에서 선택되는 하나 이상의 치환체에 의해 추가로 치환되는, 헤테로원자 함유 C_{1-30} 하이드로카르빌 기;

[1948] 옥시 기, $-OR'$;

[1949] 아미도 기, $-NR'_2$;

[1950] 포스피도 기, $-PR'_2$;

[1951] 티올레이트 기, $-SR'$;

[1952] 화학식 $-Si(R^a)_3$의 실릴 기; 및

[1953] 화학식 $-Ge(R^a)_3$의 게르마닐 기;

[1954] 여기서, R^O, 및 R^{O*} 중 2개의 기는 선택적으로 결합되어 환형 하이드로카르빌 기 또는 환형 헤테로원자 함유 하이드로카르빌 기를 형성할 수 있고, 이 환형 하이드로카르빌 기 또는 환형 헤테로원자 함유 하이드로카르빌 기는 비치환되거나, 또는 할로겐 원자, C_{1-20} 알킬 기, C_{1-20} 알콕시 기, C_{7-20} 알킬아릴 기, C_{7-20} 아릴알킬 기, C_{6-20} 아릴 기, C_{6-20} 아릴옥시 기, C_{7-20} 알킬아릴옥시 기, C_{7-20} 아릴알킬옥시 기, 화학식 $-NR'_2$의 아미도 기, 화학식 $-PR'_2$의 포스피도 기, 화학식 $-SR'$의 티올레이트 기, 화학식 $-Si(R^a)_3$의 실릴 기, 및 화학식 $-Ge(R^a)_3$의 게르마닐 기로 이루어지는 군 중에서 선택되는 하나 이상의 치환체에 의해 추가로 치환되고;

[1955] 여기서 각 R'는 수소, C_{1-20} 알킬 기, 및 C_{6-20} 아릴 기로 이루어지는 군 중에서 독립적으로 선택되고; 그리고

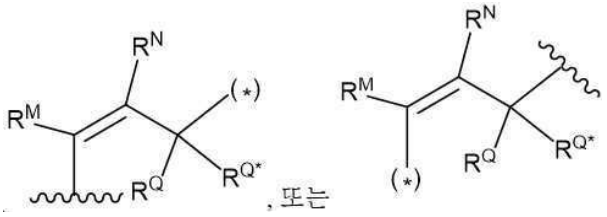
[1956] 각 R^a는 수소, C_{1-8} 알킬 기, C_{1-8} 알콕시 기, C_{6-20} 아릴옥시 기, 및 C_{6-20} 아릴 기로 이루어지는 군 중에서 독립적으로 선택되고;

[1957] 여기서, 〰 는 P에 대한 부착 지점을 나타내고, (*)는 Cy에 대한 부착 지점을 나타낸다.

[1958] 일부 실시양태에서, R^O 및 R^{O*}는 각각 독립적으로 할로겐, 수소, C_{1-30} 알킬 기, C_{1-30} 알콕시 기, C_{7-30} 알킬아릴 기, C_{7-30} 아릴알킬 기, C_{6-30} 아릴 기, C_{6-30} 아릴옥사이드 기, C_{7-30} 알킬아릴옥시 기, 및 C_{7-30} 아릴알킬옥시 기로 이루어진 군 중에서 선택된다.

[1959] 일부 실시양태에서, R^O 및 R^{O*}는 각각 독립적으로 할로겐, 수소, C_{1-20} 알킬 기, C_{1-20} 알콕시 기, C_{7-20} 알킬아릴 기, C_{7-20} 아릴알킬 기, C_{6-20} 아릴 기, C_{6-20} 아릴옥사이드 기, C_{7-20} 알킬아릴옥시 기, 및 C_{7-20} 아릴알킬옥시 기로 이루어진 군 중에서 선택된다.

[1960] 일부 실시양태에서, L은 다음 화학식인 것이다:

[1961] 

[1962] 여기서, R^M, R^N, R^Q, 및 R^{Q*}는 각각 독립적으로 다음으로 이루어지는 군 중에서 선택된다:

[1963] 할로겐;

[1964] 수소;

[1965] C_{1-30} 하이드로카르빌 기로서, 여기서 하이드로카르빌 기는 비치환되거나, 또는 할로겐 원자, C_{1-20} 알킬 기, C_{1-20} 알콕시 기, C_{7-20} 알킬아릴 기, C_{7-20} 아릴알킬 기, C_{6-20} 아릴 기, C_{6-20} 아릴옥시 기, C_{7-20} 알킬아릴옥시 기, 및 C_{7-20} 아릴알킬옥시 기로 이루어지는 군 중에서 선택되는 하나 이상의 치환체에 의해 추가로 치환되는, C_{1-30} 하이드로카르빌 기;

[1966] 헤테로원자 함유 C_{1-30} 하이드로카르빌 기로서, 여기서 헤테로원자 함유 하이드로카르빌 기는 비치환되거나, 또는 할로겐 원자, C_{1-20} 알킬 기, C_{1-20} 알콕시 기, C_{7-20} 알킬아릴 기, C_{7-20} 아릴알킬 기, C_{6-20} 아릴 기, C_{6-20} 아릴옥시 기, C_{7-20} 알킬아릴옥시 기, 및 C_{7-20} 아릴알킬옥시 기로 이루어지는 군 중에서 선택되는 하나 이상의 치환체에 의해 추가로 치환되는, 헤테로원자 함유 C_{1-30} 하이드로카르빌 기;

[1967] 옥시 기, -OR';

[1968] 아미도 기, $-NR'_2$;

[1969] 포스피도 기, $-PR'_2$;

[1970] 티올레이트 기, -SR';

[1971] 화학식 $-Si(R^a)_3$의 실릴 기; 및

[1972] 화학식 $-Ge(R^a)_3$의 게르마닐 기;

[1973] 여기서, R^M 및 R^N 중 2개의 인접한 기는 선택적으로 결합되어 환형 하이드로카르빌 기 또는 환형 헤테로원자 함유 하이드로카르빌 기를 형성할 수 있고, 이 환형 하이드로카르빌 기 또는 환형 헤테로원자 함유 하이드로카르빌 기는 비치환되거나, 또는 할로겐 원자, C_{1-20} 알킬 기, C_{1-20} 알콕시 기, C_{7-20} 알킬아릴 기, C_{7-20} 아릴알킬 기, C_{6-20} 아릴 기, C_{6-20} 아릴옥시 기, C_{7-20} 알킬아릴옥시 기, C_{7-20} 아릴알킬옥시 기, 화학식 $-NR'_2$의 아미도 기, 화학식 $-PR'_2$의 포스피도 기, 화학식 -SR'의 티올레이트 기, 화학식 $-Si(R^a)_3$의 실릴 기, 및 화학식 $-Ge(R^a)_3$의 게르마닐 기로 이루어지는 군 중에서 선택되는 하나 이상의 치환체에 의해 추가로 치환되고;

[1974] 여기서, R^Q 및 R^{Q*} 중 2개의 기는 선택적으로 결합되어 환형 하이드로카르빌 기 또는 환형 헤테로원자 함유 하이드로카르빌 기를 형성할 수 있고, 이 환형 하이드로카르빌 기 또는 환형 헤테로원자 함유 하이드로카르빌 기는 비치환되거나, 또는 할로겐 원자, C_{1-20} 알킬 기, C_{1-20} 알콕시 기, C_{7-20} 알킬아릴 기, C_{7-20} 아릴알킬 기, C_{6-20} 아릴 기, C_{6-20} 아릴옥시 기, C_{7-20} 알킬아릴옥시 기, C_{7-20} 아릴알킬옥시 기, 화학식 $-NR'_2$의 아미도 기, 화학식 $-PR'_2$의 포스피도 기, 화학식 -SR'의 티올레이트 기, 화학식 $-Si(R^a)_3$의 실릴 기, 및 화학식 $-Ge(R^a)_3$의 게르마닐 기로 이루어지는 군 중에서 선택되는 하나 이상의 치환체에 의해 추가로 치환되고;

[1975] 여기서 각 R'는 수소, C_{1-20} 알킬 기, 및 C_{6-20} 아릴 기로 이루어지는 군 중에서 독립적으로 선택되고; 그리고

[1976] 각 R^a는 수소, C_{1-8} 알킬 기, C_{1-8} 알콕시 기, C_{6-20} 아릴옥시 기, 및 C_{6-20} 아릴 기로 이루어지는 군 중에서 독립적으로 선택되고;

[1977] 여기서, 는 P에 대한 부착 지점을 나타내고, (*)는 Cy에 대한 부착 지점을 나타낸다.

[1978] 일부 실시양태에서, R^M 및 R^N은 각각 독립적으로 할로겐, 수소, C_{1-30} 알킬 기, C_{1-30} 알콕시 기, C_{7-30} 알킬아릴 기, C_{7-30} 아릴알킬 기, C_{6-30} 아릴 기, C_{6-30} 아릴옥사이드 기, C_{7-30} 알킬아릴옥시 기, 및 C_{7-30} 아릴알킬옥시 기로 이루어진 군 중에서 선택된다.

[1979] 일부 실시양태에서, R^M 및 R^N은 각각 독립적으로 할로겐, 수소, C_{1-20} 알킬 기, C_{1-20} 알콕시 기, C_{7-20} 알킬아릴 기, C_{7-20} 아릴알킬 기, C_{6-20} 아릴 기, C_{6-20} 아릴옥사이드 기, C_{7-20} 알킬아릴옥시 기, 및 C_{7-20} 아릴알킬옥시 기로 이루어진 군 중에서 선택된다.

[1980] 일부 실시양태에서, R^M 및 R^N 기는 결합되어 환형 하이드로카르빌 기를 형성한다.

[1981] 일부 실시양태에서, R^M 및 R^N 기는 결합되어 페닐렌 기를 형성하고, 이 페닐렌 기는 비치환되거나, 또는 할로겐

원자, C_{1-20} 알킬 기, C_{1-20} 알콕시 기, C_{7-20} 알킬아릴 기, C_{7-20} 아릴알킬 기, C_{6-20} 아릴 기, C_{6-20} 아릴옥시 기, C_{7-20} 알킬아릴옥시 기, C_{7-20} 아릴알킬옥시 기, 아미도 기 $-NR'_2$, 포스피도 기 $-PR'_2$, 티올레이트 기 $-SR'$, 화학식 $-Si(R^a)_3$의 실릴 기, 및 화학식 $-Ge(R^a)_3$의 게르마닐 기로 이루어지는 군 중에서 선택되는 하나 이상의 치환체에 의해 추가로 치환되고; 여기서 R'는 수소, C_{1-20} 알킬 기, 및 C_{6-20} 아릴 기로 이루어지는 군 중에서 독립적으로 선택되고; 그리고 여기서 각 R^a는 수소, C_{1-8} 알킬 기, C_{1-8} 알콕시 기, C_{6-20} 아릴옥시 기 및 C_{6-20} 아릴 기로 이루어지는 군 중에서 독립적으로 선택된다.

[1982] 일부 실시양태에서, R^M 및 R^N 기는 결합되어 추가로 치환되지 않는 페닐렌 기를 형성한다.

[1983] 일부 실시양태에서, R^Q 및 R^{Q*}는 각각 독립적으로 할로겐, 수소, C_{1-30} 알킬 기, C_{1-30} 알콕시 기, C_{7-30} 알킬아릴 기, C_{7-30} 아릴알킬 기, C_{6-30} 아릴 기, C_{6-30} 아릴옥사이드 기, C_{7-30} 알킬아릴옥시 기, 및 C_{7-30} 아릴알킬옥시 기로 이루어지는 군 중에서 선택된다.

[1984] 일부 실시양태에서, R^Q 및 R^{Q*}는 각각 독립적으로 할로겐, 수소, C_{1-20} 알킬 기, C_{1-20} 알콕시 기, C_{7-20} 알킬아릴 기, C_{7-20} 아릴알킬 기, C_{6-20} 아릴 기, C_{6-20} 아릴옥사이드 기, C_{7-20} 알킬아릴옥시 기, 및 C_{7-20} 아릴알킬옥시 기로 이루어지는 군 중에서 선택된다.

[1985] 실시양태에서, 실릴 기는 화학식 $-Si(R^a)_3$을 가지며, 여기서 R^a 기는 수소 원자, C_{1-8} 알킬 또는 알콕시 기, C_{6-10} 아릴 기, 및 C_{6-10} 아릴옥시 기 중에서 독립적으로 선택된다.

[1986] 실시양태에서, 실릴 기는 화학식 $-Si(R^a)_3$을 가지며, 여기서 R^a 기는 C_{1-8} 알킬 또는 알콕시 기, C_{6-10} 아릴 기, 및 C_{6-10} 아릴옥시 기 중에서 독립적으로 선택된다.

[1987] 본 개시내용의 일부 실시양태에서, 옥시 기는 화학식 $-OR'$를 가지며, 여기서 R' 기는 수소 원자, C_{1-10} 알킬 기, 및 C_{6-10} 아릴 기로 이루어지는 군 중에서 선택된다.

[1988] 본 개시내용의 일부 실시양태에서, 옥시 기는 화학식 $-OR'$를 가지며, 여기서, R' 기는 C_{1-10} 알킬 기, 및 C_{6-10} 아릴 기로 이루어지는 군 중에서 선택된다.

[1989] 본 개시내용의 일부 실시양태에서, 아미도 기는 화학식 $-NR'_2$를 가지며, 여기서, R' 기는 수소 원자, C_{1-10} 알킬 기, C_{6-10} 아릴 기로 이루어지는 군 중에서 독립적으로 선택된다.

[1990] 본 개시내용의 일부 실시양태에서, 아미도 기는 화학식 $-NR'_2$를 가지며, 여기서, R' 기는 C_{1-10} 알킬 기, 및 C_{6-10} 아릴 기로 이루어지는 군 중에서 독립적으로 선택된다.

[1991] 본 개시내용의 일부 실시양태에서, 포스피도 기는 화학식 $-PR'_2$를 가지며, 여기서, R' 기는 수소 원자, C_{1-10} 알킬 기, 및 C_{6-10} 아릴 기로 이루어지는 군 중에서 독립적으로 선택된다.

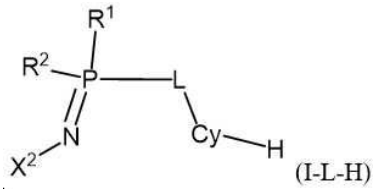
[1992] 본 개시내용의 일부 실시양태에서, 포스피도 기는 화학식 $-PR'_2$를 가지며, 여기서, R' 기는 C_{1-10} 알킬 기, 및 C_{6-10} 아릴 기로 이루어지는 군 중에서 독립적으로 선택된다.

[1993] 본 개시내용의 일부 실시양태에서, 티올레이트 기는 화학식 $-SR'$를 가지며, 여기서, R' 기는 수소 원자, C_{1-10} 알킬 기, 및 C_{6-10} 아릴 기로 이루어지는 군 중에서 선택된다.

[1994] 본 개시내용의 일부 실시양태에서, 티올레이트 기는 화학식 $-SR'$를 가지며, 여기서, R' 기는 C_{1-10} 알킬 기, 및 C_{6-10} 아릴 기로 이루어지는 군 중에서 선택된다.

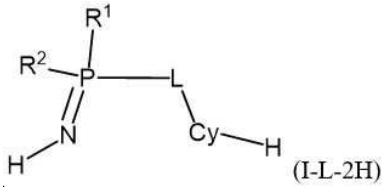
[1995] 본 개시내용의 실시양태에서, 화학식 I-L의 예비금속화 화합물은 화학식 I-L-H로 표현되는 예비금속화 화합물이

다:

[1996] 
(I-L-H)

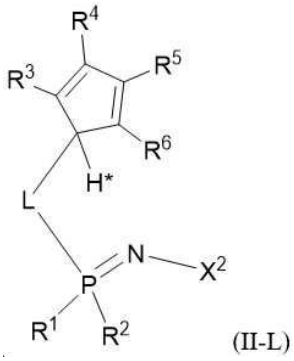
[1997] 여기서, R^1, R^2, L, Cy, 및 X^2는 화학식 I-L에 대해 상기에 정의된 바와 같다.

[1998] 본 개시내용의 실시양태에서, 화학식 I-L의 예비금속화 화합물은 화학식 I-L-2H로 표현되는 예비금속화 화합물이다:

[1999] 
(I-L-2H)

[2000] 여기서, R^1, R^2, L, 및 Cy는 화학식 I-L에 대해 상기에 정의된 바와 같다.

[2001] 본 개시내용의 실시양태에서, 화학식 I-L의 예비금속화 화합물은 화학식 II-L로 표현되는 예비금속화 화합물, 또는 사이클로펜타디에닐 고리 내의 수소, H^*의 이동에 의해 입수 가능한 화학식 II-L의 이중 결합 이성질체이다:

[2002] 
(II-L)

[2003] 여기서, R^1, R^2, L 및 X^2는 화학식 I-L에 대해 상기에 정의된 바와 같고; 그리고

[2004] 여기서, R^3, R^4, R^5 및 R^6은 각각 독립적으로 다음으로 이루어지는 군 중에서 선택된다:

[2005] 할로겐;

[2006] 수소;

[2007] C_{1-30} 하이드로카르빌 기로서, 여기서 하이드로카르빌 기는 비치환되거나, 또는 할로겐 원자, C_{1-20} 알킬 기, C_{1-20} 알콕시 기, C_{7-20} 알킬아릴 기, C_{7-20} 아릴알킬 기, C_{6-20} 아릴 기, C_{6-20} 아릴옥시 기, C_{7-20} 알킬아릴옥시 기, 및 C_{7-20} 아릴알킬옥시 기로 이루어지는 군 중에서 선택되는 하나 이상의 치환체에 의해 추가로 치환되는, C_{1-30} 하이드로카르빌 기;

[2008] 헤테로원자 함유 C_{1-30} 하이드로카르빌 기로서, 여기서 헤테로원자 함유 하이드로카르빌 기는 비치환되거나, 또는 할로겐 원자, C_{1-20} 알킬 기, C_{1-20} 알콕시 기, C_{7-20} 알킬아릴 기, C_{7-20} 아릴알킬 기, C_{6-20} 아릴 기, C_{6-20} 아릴옥시 기, C_{7-20} 알킬아릴옥시 기, 및 C_{7-20} 아릴알킬옥시 기로 이루어지는 군 중에서 선택되는 하나 이상의 치환체에 의해 추가로 치환되는, 헤테로원자 함유 C_{1-30} 하이드로카르빌 기;

[2009] 옥시 기, -OR';

[2010] 아미도 기, $-NR'_2$;

[2011] 포스피도 기, $-PR'_2$;

[2012] 티올레이트 기, -SR';

[2013] 화학식 $-Si(R^a)_3$의 실릴 기; 및

[2014] 화학식 $-Ge(R^a)_3$의 게르마닐 기;

[2015] 여기서, R^3, R^4, R^5 및 R^6 중 2개의 인접한 기는 선택적으로 결합되어 환형 하이드로카르빌 기 또는 환형 헤테로원자 함유 하이드로카르빌 기를 형성할 수 있고, 이 환형 하이드로카르빌 기 또는 환형 헤테로원자 함유 하이드로카르빌 기는 비치환되거나, 또는 할로겐 원자, C_{1-20} 알킬 기, C_{1-20} 알콕시 기, C_{7-20} 알킬아릴 기, C_{7-20} 아릴알킬 기, C_{6-20} 아릴 기, C_{6-20} 아릴옥시 기, C_{7-20} 알킬아릴옥시 기, C_{7-20} 아릴알킬옥시 기, 화학식 $-NR'_2$의 아미도 기, 화학식 $-PR'_2$의 포스피도 기, 화학식 -SR'의 티올레이트 기, 화학식 $-Si(R^a)_3$의 실릴 기, 및 화학식 $-Ge(R^a)_3$의 게르마닐 기로 이루어지는 군 중에서 선택되는 하나 이상의 치환체에 의해 추가로 치환되고;

[2016] 여기서 각 R'는 수소, C_{1-20} 알킬 기, 및 C_{6-20} 아릴 기로 이루어지는 군 중에서 독립적으로 선택되고; 그리고

[2017] 각 R^a는 수소, C_{1-8} 알킬 기, C_{1-8} 알콕시 기, C_{6-20} 아릴옥시 기, 및 C_{6-20} 아릴 기로 이루어지는 군 중에서 독립적으로 선택된다.

[2018] 일부 실시양태에서, R^3, R^4, R^5 및 R^6은 각각 독립적으로 할로겐; 수소; 및 C_{1-30} 하이드로카르빌 기로서, 여기서 하이드로카르빌 기는 비치환되거나, 또는 할로겐 원자, C_{1-20} 알킬 기, C_{1-20} 알콕시 기, C_{7-20} 알킬아릴 기, C_{7-20} 아릴알킬 기, C_{6-20} 아릴 기, C_{6-20} 아릴옥시 기, C_{7-20} 알킬아릴옥시 기, 및 C_{7-20} 아릴알킬옥시 기로 이루어지는 군 중에서 선택되는 하나 이상의 치환체에 의해 추가로 치환되는, C_{1-30} 하이드로카르빌 기; 및 헤테로원자 함유 C_{1-30} 하이드로카르빌 기로서, 여기서 헤테로원자 함유 하이드로카르빌 기는 비치환되거나, 또는 할로겐 원자, C_{1-20} 알킬 기, C_{1-20} 알콕시 기, C_{7-20} 알킬아릴 기, C_{7-20} 아릴알킬 기, C_{6-20} 아릴 기, C_{6-20} 아릴옥시 기, C_{7-20} 알킬아릴옥시 기, 및 C_{7-20} 아릴알킬옥시 기로 이루어지는 군 중에서 선택되는 하나 이상의 치환체에 의해 추가로 치환되는, 헤테로원자 함유 C_{1-30} 하이드로카르빌 기로 이루어지는 군 중에서 선택되고; 여기서, R^3, R^4, R^5 및 R^6 중 2개의 인접한 기는 선택적으로 결합되어 환형 하이드로카르빌 기 또는 환형 헤테로원자 함유 하이드로카르빌 기를 형성할 수 있고, 이 환형 하이드로카르빌 기 또는 환형 헤테로원자 함유 하이드로카르빌 기는 비치환되거나, 또는 할로겐 원자, C_{1-20} 알킬 기, C_{1-20} 알콕시 기, C_{7-20} 알킬아릴 기, C_{7-20} 아릴알킬 기, C_{6-20} 아릴 기, C_{6-20} 아릴옥시 기, C_{7-20} 알킬아릴옥시 기, C_{7-20} 아릴알킬옥시 기, 아미도 기 $-NR'_2$, 포스피도 기 $-PR'_2$, 티올레이트 기 -SR', 화학식 $-Si(R^a)_3$의 실릴 기, 및 화학식 $-Ge(R^a)_3$의 게르마닐 기로 이루어지는 군 중에서 선택되는 하나 이상의 치환체에 의해 추가로 치환되고; 여기서 각 R'는 수소, C_{1-20} 알킬 기, 및 C_{6-20} 아릴 기로 이루어지는 군 중에서 독립적으로 선택되고; 그리고 각 R^a는 수소, C_{1-8} 알킬 기, C_{1-8} 알콕시 기, C_{6-20} 아릴옥시 기, 및 C_{6-20} 아릴 기로 이루어지는 군 중에서 독립적으로 선택된다.

[2019] 일부 실시양태에서, R^3, R^4, R^5 및 R^6은 각각 독립적으로 할로겐; 수소; 및 C_{1-30} 하이드로카르빌 기로서, 여기서 하이드로카르빌 기는 비치환되거나, 또는 할로겐 원자, C_{1-20} 알킬 기, C_{1-20} 알콕시 기, C_{7-20} 알킬아릴 기, C_{7-20} 아릴알킬 기, C_{6-20} 아릴 기, C_{6-20} 아릴옥시 기, C_{7-20} 알킬아릴옥시 기, 및 C_{7-20} 아릴알킬옥시 기로 이루어지는 군 중에서 선택되는 하나 이상의 치환체에 의해 추가로 치환되는, C_{1-30} 하이드로카르빌 기로 이루어지는 군 중에서

선택되고; 여기서, R^3, R^4, R^5 및 R^6 중 2개의 인접한 기는 선택적으로 결합되어 환형 하이드로카르빌 기를 형성할 수 있고, 이 환형 하이드로카르빌 기는 비치환되거나, 또는 할로겐 원자, C_{1-20} 알킬 기, C_{1-20} 알콕시 기, C_{7-20} 알킬아릴 기, C_{7-20} 아릴알킬 기, C_{6-20} 아릴 기, C_{6-20} 아릴옥시 기, C_{7-20} 알킬아릴옥시 기, C_{7-20} 아릴알킬옥시 기, 아미도 기, $-NR'_2$, 포스피도 기, $-PR'_2$, 티올레이트 기 $-SR'$, 화학식 $-Si(R^a)_3$의 실릴 기, 및 화학식 $-Ge(R^a)_3$의 게르마닐 기로 이루어지는 군 중에서 선택되는 하나 이상의 치환체에 의해 추가로 치환되고; 여기서 각 R'는 수소, C_{1-20} 알킬 기, 및 C_{6-20} 아릴 기로 이루어지는 군 중에서 독립적으로 선택되고; 그리고 각 R^a는 수소, C_{1-8} 알킬 기, C_{1-8} 알콕시 기, C_{6-20} 아릴옥시 기, 및 C_{6-20} 아릴 기로 이루어지는 군 중에서 독립적으로 선택된다.

[2020] 일부 실시양태에서, R^3, R^4, R^5 및 R^6은 각각 독립적으로 할로겐; 수소; 및 헤테로원자 함유 C_{1-30} 하이드로카르빌 기로서, 여기서 헤테로원자 함유 하이드로카르빌 기는 비치환되거나, 또는 할로겐 원자, C_{1-20} 알킬 기, C_{1-20} 알콕시 기, C_{7-20} 알킬아릴 기, C_{7-20} 아릴알킬 기, C_{6-20} 아릴 기, C_{6-20} 아릴옥시 기, C_{7-20} 알킬아릴옥시 기, 및 C_{7-20} 아릴알킬옥시 기로 이루어지는 군 중에서 선택되는 하나 이상의 치환체에 의해 추가로 치환되는, 헤테로원자 함유 C_{1-30} 하이드로카르빌 기로 이루어지는 군 중에서 선택되고; 여기서, R^3, R^4, R^5 및 R^6 중 2개의 인접한 기는 선택적으로 결합되어 환형 헤테로원자 함유 하이드로카르빌 기를 형성할 수 있고, 이 환형 헤테로원자 함유 하이드로카르빌 기는 비치환되거나, 또는 할로겐 원자, C_{1-20} 알킬 기, C_{1-20} 알콕시 기, C_{7-20} 알킬아릴 기, C_{7-20} 아릴알킬 기, C_{6-20} 아릴 기, C_{6-20} 아릴옥시 기, C_{7-20} 알킬아릴옥시 기, C_{7-20} 아릴알킬옥시 기, 아미도 기 $-NR'_2$, 포스피도 기 $-PR'_2$, 티올레이트 기 $-SR'$, 화학식 $-Si(R^a)_3$의 실릴 기, 및 화학식 $-Ge(R^a)_3$의 게르마닐 기로 이루어지는 군 중에서 선택되는 하나 이상의 치환체에 의해 추가로 치환되고; 여기서 각 R'는 수소, C_{1-20} 알킬 기, 및 C_{6-20} 아릴 기로 이루어지는 군 중에서 독립적으로 선택되고; 그리고 각 R^a는 수소, C_{1-8} 알킬 기, C_{1-8} 알콕시 기, C_{6-20} 아릴옥시 기, 및 C_{6-20} 아릴 기로 이루어지는 군 중에서 독립적으로 선택된다.

[2021] 일부 실시양태에서, R^3, R^4, R^5 및 R^6은 각각 독립적으로 할로겐, 수소, C_{1-30} 알킬 기, C_{1-30} 알콕시 기, C_{7-30} 알킬아릴 기, C_{7-30} 아릴알킬 기, C_{6-30} 아릴 기, C_{6-30} 아릴옥사이드 기, C_{7-30} 알킬아릴옥시 기, 및 C_{7-30} 아릴알킬옥시 기로 이루어지는 군 중에서 선택된다.

[2022] 일부 실시양태에서, R^3, R^4, R^5 및 R^6은 각각 독립적으로 할로겐, 수소, C_{1-20} 알킬 기, C_{1-20} 알콕시 기, C_{7-20} 알킬아릴 기, C_{7-20} 아릴알킬 기, C_{6-20} 아릴 기, C_{6-20} 아릴옥사이드 기, C_{7-20} 알킬아릴옥시 기, 및 C_{7-20} 아릴알킬옥시 기로 이루어지는 군 중에서 선택된다.

[2023] 일부 실시양태에서, R^3, R^4, R^5 및 R^6은 각각 독립적으로 할로겐, 수소, 및 C_{1-30} 하이드로카르빌 기로 이루어지는 군 중에서 선택되고, 여기서 하이드로카르빌 기는 비치환되거나 또는 하나 이상의 할로겐 원자에 의해 추가로 치환된다.

[2024] 일부 실시양태에서, R^3, R^4, R^5 및 R^6은 각각 독립적으로 할로겐, 수소, 및 C_{1-30} 헤테로원자 함유 하이드로카르빌 기로 이루어지는 군 중에서 선택되고, 여기서 헤테로원자 함유 하이드로카르빌 기는 비치환되거나 또는 하나 이상의 할로겐 원자에 의해 추가로 치환된다.

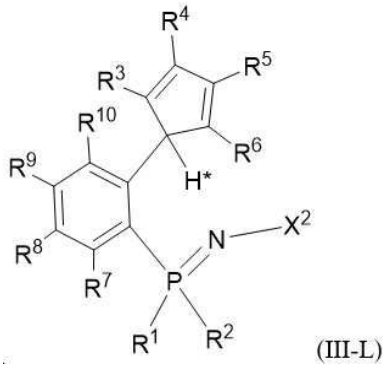
[2025] 일부 실시양태에서, R^3, R^4, R^5 및 R^6은 각각 독립적으로 수소 및 C_{1-30} 하이드로카르빌 기로 이루어지는 군 중에서 선택되고, 여기서 하이드로카르빌 기는 비치환되거나 또는 하나 이상의 할로겐 원자에 의해 추가로 치환된다.

[2026] 일부 실시양태에서, R^3, R^4, R^5 및 R^6은 각각 독립적으로 수소 및 C_{1-30} 헤테로원자 함유 하이드로카르빌 기로 이

루어지는 군 중에서 선택되고, 여기서 헤테로원자 함유 하이드로카르빌 기는 비치환되거나 또는 하나 이상의 할로겐 원자에 의해 추가로 치환된다.

[2027] 일부 실시양태에서, R^3, R^4, R^5 및 R^6은 각각 수소이다.

[2028] 본 개시내용의 실시양태에서, 화학식 II-L의 예비금속화 화합물은 화학식 III-L로 표현되는 예비금속화 화합물 또는 사이클로펜타디에닐 고리 내의 수소, H^*의 이동에 의해 입수 가능한 화학식 III-L의 이중 결합 이성질체이다:

[2029] 

(III-L)

[2030] 여기서, R^1, R^2, R^3, R^4, R^5, R^6, 및 X^2는 화학식 I-L 및 II-L에 대해 상기에 정의된 바와 같고;

[2031] 여기서, R^7, R^8, R^9 및 R^{10}은 각각 독립적으로 다음으로 이루어지는 군 중에서 선택되고:

[2032] 할로겐;

[2033] 수소;

[2034] C_{1-30} 하이드로카르빌 기로서, 여기서 하이드로카르빌 기는 비치환되거나, 또는 할로겐 원자, C_{1-20} 알킬 기, C_{1-20} 알콕시 기, C_{7-20} 알킬아릴 기, C_{7-20} 아릴알킬 기, C_{6-20} 아릴 기, C_{6-20} 아릴옥시 기, C_{7-20} 알킬아릴옥시 기, 및 C_{7-20} 아릴알킬옥시 기로 이루어지는 군 중에서 선택되는 하나 이상의 치환체에 의해 추가로 치환되는, C_{1-30} 하이드로카르빌 기;

[2035] 헤테로원자 함유 C_{1-30} 하이드로카르빌 기로서, 여기서 헤테로원자 함유 하이드로카르빌 기는 비치환되거나, 또는 할로겐 원자, C_{1-20} 알킬 기, C_{1-20} 알콕시 기, C_{7-20} 알킬아릴 기, C_{7-20} 아릴알킬 기, C_{6-20} 아릴 기, C_{6-20} 아릴옥시 기, C_{7-20} 알킬아릴옥시 기, 및 C_{7-20} 아릴알킬옥시 기로 이루어지는 군 중에서 선택되는 하나 이상의 치환체에 의해 추가로 치환되는, 헤테로원자 함유 C_{1-30} 하이드로카르빌 기;

[2036] 옥시 기, -OR';

[2037] 아미도 기, $-NR'_2$;

[2038] 포스피도 기, $-PR'_2$;

[2039] 티올레이트 기, -SR';

[2040] 화학식 $-Si(R^a)_3$의 실릴 기; 및

[2041] 화학식 $-Ge(R^a)_3$의 게르마닐 기;

[2042] 여기서, R^7, R^8, R^9 및 R^{10} 중 2개의 인접한 기는 선택적으로 결합되어 환형 하이드로카르빌 기 또는 환형 헤테로원자 함유 하이드로카르빌 기를 형성할 수 있고, 이 환형 하이드로카르빌 기 또는 환형 헤테로원자 함유 하이드로카르빌 기는 비치환되거나, 또는 할로겐 원자, C_{1-20} 알킬 기, C_{1-20} 알콕시 기, C_{7-20} 알킬아릴 기, C_{7-20} 아릴알킬 기, C_{6-20} 아릴 기, C_{6-20} 아릴옥시 기, C_{7-20} 알킬아릴옥시 기, C_{7-20} 아릴알킬옥시 기, 화학식 $-NR'_2$의 아미도

기, 화학식 $-PR'_2$의 포스피도 기, 화학식 -SR'의 티올레이트 기, 화학식 $-Si(R^a)_3$의 실릴 기, 및 화학식 $-Ge(R^a)_3$의 게르마닐 기로 이루어지는 군 중에서 선택되는 하나 이상의 치환체에 의해 추가로 치환되고;

[2043] 여기서 각 R'는 수소, C_{1-20} 알킬 기, 및 C_{6-20} 아릴 기로 이루어지는 군 중에서 독립적으로 선택되고; 그리고

[2044] 각 R^a는 수소, C_{1-8} 알킬 기, C_{1-8} 알콕시 기, C_{6-20} 아릴옥시 기, 및 C_{6-20} 아릴 기로 이루어지는 군 중에서 독립적으로 선택된다.

[2045] 일부 실시양태에서, R^7, R^8, R^9 및 R^{10}은 각각 독립적으로 할로겐; 수소; C_{1-30} 하이드로카르빌 기로서, 여기서 하이드로카르빌 기는 비치환되거나, 또는 할로겐 원자, C_{1-20} 알킬 기, C_{1-20} 알콕시 기, C_{7-20} 알킬아릴 기, C_{7-20} 아릴알킬 기, C_{6-20} 아릴 기, C_{6-20} 아릴옥시 기, C_{7-20} 알킬아릴옥시 기, 및 C_{7-20} 아릴알킬옥시 기로 이루어지는 군 중에서 선택되는 하나 이상의 치환체에 의해 추가로 치환되는, C_{1-30} 하이드로카르빌 기; 및 헤테로원자 함유 C_{1-30} 하이드로카르빌 기로서, 여기서 헤테로원자 함유 하이드로카르빌 기는 비치환되거나, 또는 할로겐 원자, C_{1-20} 알킬 기, C_{1-20} 알콕시 기, C_{7-20} 알킬아릴 기, C_{7-20} 아릴알킬 기, C_{6-20} 아릴 기, C_{6-20} 아릴옥시 기, C_{7-20} 알킬아릴옥시 기, 및 C_{7-20} 아릴알킬옥시 기로 이루어지는 군 중에서 선택되는 하나 이상의 치환체에 의해 추가로 치환되는, 헤테로원자 함유 C_{1-30} 하이드로카르빌 기로 이루어지는 군 중에서 선택되고; 여기서, R^7, R^8, R^9 및 R^{10} 중 2개의 인접한 기는 선택적으로 결합되어 환형 하이드로카르빌 기 또는 환형 헤테로원자 함유 하이드로카르빌 기를 형성할 수 있고, 이 환형 하이드로카르빌 기 또는 환형 헤테로원자 함유 하이드로카르빌 기는 비치환되거나, 또는 할로겐 원자, C_{1-20} 알킬 기, C_{1-20} 알콕시 기, C_{7-20} 알킬아릴 기, C_{7-20} 아릴알킬 기, C_{6-20} 아릴 기, C_{6-20} 아릴옥시 기, C_{7-20} 알킬아릴옥시 기, C_{7-20} 아릴알킬옥시 기, 아미도 기 $-NR'_2$, 포스피도 기 $-PR'_2$, 티올레이트 기 -SR', 화학식 $-Si(R^a)_3$의 실릴 기, 및 화학식 $-Ge(R^a)_3$의 게르마닐 기로 이루어지는 군 중에서 선택되는 하나 이상의 치환체에 의해 추가로 치환되고; 여기서 각 R'는 수소, C_{1-20} 알킬 기, 및 C_{6-20} 아릴 기로 이루어지는 군 중에서 독립적으로 선택되고; 그리고 각 R^a는 수소, C_{1-8} 알킬 기, C_{1-8} 알콕시 기, C_{6-20} 아릴옥시 기, 및 C_{6-20} 아릴 기로 이루어지는 군 중에서 독립적으로 선택된다.

[2046] 일부 실시양태에서, R^7, R^8, R^9 및 R^{10}은 각각 독립적으로 할로겐; 수소; 및 C_{1-30} 하이드로카르빌 기로서, 여기서 하이드로카르빌 기는 비치환되거나, 또는 할로겐 원자, C_{1-20} 알킬 기, C_{1-20} 알콕시 기, C_{7-20} 알킬아릴 기, C_{7-20} 아릴알킬 기, C_{6-20} 아릴 기, C_{6-20} 아릴옥시 기, C_{7-20} 알킬아릴옥시 기, 및 C_{7-20} 아릴알킬옥시 기로 이루어지는 군 중에서 선택되는 하나 이상의 치환체에 의해 추가로 치환되는, C_{1-30} 하이드로카르빌 기로 이루어지는 군 중에서 선택되고; 여기서, R^7, R^8, R^9 및 R^{10} 중 2개의 인접한 기는 선택적으로 결합되어 환형 하이드로카르빌 기를 형성할 수 있고, 이 환형 하이드로카르빌 기는 비치환되거나, 또는 할로겐 원자, C_{1-20} 알킬 기, C_{1-20} 알콕시 기, C_{7-20} 알킬아릴 기, C_{7-20} 아릴알킬 기, C_{6-20} 아릴 기, C_{6-20} 아릴옥시 기, C_{7-20} 알킬아릴옥시 기, C_{7-20} 아릴알킬옥시 기, 아미도 기 $-NR'_2$, 포스피도 기 $-PR'_2$, 티올레이트 기 -SR', 화학식 $-Si(R^a)_3$의 실릴 기, 및 화학식 $-Ge(R^a)_3$의 게르마닐 기로 이루어지는 군 중에서 선택되는 하나 이상의 치환체에 의해 추가로 치환되고; 여기서 각 R'는 수소, C_{1-20} 알킬 기, 및 C_{6-20} 아릴 기로 이루어지는 군 중에서 독립적으로 선택되고; 그리고 각 R^a는 수소, C_{1-8} 알킬 기, C_{1-8} 알콕시 기, C_{6-20} 아릴옥시 기, 및 C_{6-20} 아릴 기로 이루어지는 군 중에서 독립적으로 선택된다.

[2047] 일부 실시양태에서, R^7, R^8, R^9 및 R^{10}은 각각 독립적으로 할로겐; 수소; 및 헤테로원자 함유 C_{1-30} 하이드로카르빌 기로서, 여기서 헤테로원자 함유 하이드로카르빌 기는 비치환되거나, 또는 할로겐 원자, C_{1-20} 알킬 기, C_{1-20} 알콕시 기, C_{7-20} 알킬아릴 기, C_{7-20} 아릴알킬 기, C_{6-20} 아릴 기, C_{6-20} 아릴옥시 기, C_{7-20} 알킬아릴옥시 기, 및 C_{7-20} 아릴알킬옥시 기로 이루어지는 군 중에서 선택되는 하나 이상의 치환체에 의해 추가로 치환되는, 헤테로원자 함

유 C_{1-30} 하이드로카르빌 기로 이루어지는 군 중에서 선택되고; 여기서, R^7, R^8, R^9 및 R^{10} 중 2개의 인접한 기는 선택적으로 결합되어 환형 헤테로원자 함유 하이드로카르빌 기를 형성할 수 있고, 이 환형 헤테로원자 함유 하이드로카르빌 기는 비치환되거나, 또는 할로겐 원자, C_{1-20} 알킬 기, C_{1-20} 알콕시 기, C_{7-20} 알킬아릴 기, C_{7-20} 아릴알킬 기, C_{6-20} 아릴 기, C_{6-20} 아릴옥시 기, C_{7-20} 알킬아릴옥시 기, C_{7-20} 아릴알킬옥시 기, 아미도 기 $-NR'_2$, 포스피도 기 $-PR'_2$, 티올레이트 기 $-SR'$, 화학식 $-Si(R^a)_3$의 실릴 기, 및 화학식 $-Ge(R^a)_3$의 게르마닐 기로 이루어지는 군 중에서 선택되는 하나 이상의 치환체에 의해 추가로 치환되고; 여기서 각 R'는 수소, C_{1-20} 알킬 기, 및 C_{6-20} 아릴 기로 이루어지는 군 중에서 독립적으로 선택되고; 그리고 각 R^a는 수소, C_{1-8} 알킬 기, C_{1-8} 알콕시 기, C_{6-20} 아릴옥시 기, 및 C_{6-20} 아릴 기로 이루어지는 군 중에서 독립적으로 선택된다.

[2048] 일부 실시양태에서, R^7, R^8, R^9 및 R^{10}은 각각 독립적으로 할로겐, 수소, C_{1-30} 알킬 기, C_{1-30} 알콕시 기, C_{7-30} 알킬아릴 기, C_{7-30} 아릴알킬 기, C_{6-30} 아릴 기, C_{6-30} 아릴옥사이드 기, C_{7-30} 알킬아릴옥시 기, 및 C_{7-30} 아릴알킬옥시 기로 이루어지는 군 중에서 선택된다.

[2049] 일부 실시양태에서, R^7, R^8, R^9 및 R^{10}은 각각 독립적으로 할로겐, 수소, C_{1-20} 알킬 기, C_{1-20} 알콕시 기, C_{7-20} 알킬아릴 기, C_{7-20} 아릴알킬 기, C_{6-20} 아릴 기, C_{6-20} 아릴옥사이드 기, C_{7-20} 알킬아릴옥시 기, 및 C_{7-20} 아릴알킬옥시 기로 이루어지는 군 중에서 선택된다.

[2050] 일부 실시양태에서, R^7, R^8, R^9 및 R^{10}은 각각 독립적으로 할로겐, 수소, 및 C_{1-30} 하이드로카르빌 기로 이루어지는 군 중에서 선택되고, 여기서 하이드로카르빌 기는 비치환되거나 또는 하나 이상의 할로겐 원자에 의해 추가로 치환된다.

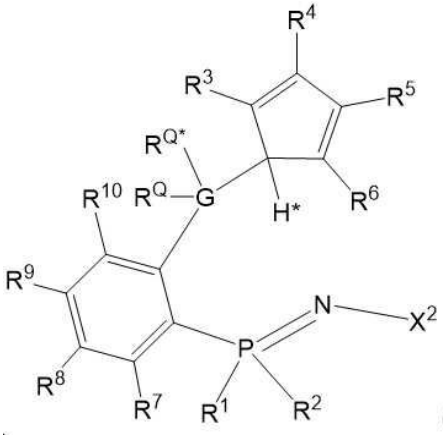
[2051] 일부 실시양태에서, R^7, R^8, R^9 및 R^{10}은 각각 독립적으로 할로겐, 수소, 및 C_{1-30} 헤테로원자 함유 하이드로카르빌 기로 이루어지는 군 중에서 선택되고, 여기서 헤테로원자 함유 하이드로카르빌 기는 비치환되거나 또는 하나 이상의 할로겐 원자에 의해 추가로 치환된다.

[2052] 일부 실시양태에서, R^7, R^8, R^9 및 R^{10}은 각각 독립적으로 수소 및 C_{1-30} 하이드로카르빌 기로 이루어지는 군 중에서 선택되고, 여기서 하이드로카르빌 기는 비치환되거나 또는 하나 이상의 할로겐 원자에 의해 추가로 치환된다.

[2053] 일부 실시양태에서, R^7, R^8, R^9 및 R^{10}은 각각 독립적으로 수소 및 C_{1-30} 헤테로원자 함유 하이드로카르빌 기로 이루어지는 군 중에서 선택되고, 여기서 헤테로원자 함유 하이드로카르빌 기는 비치환되거나 또는 하나 이상의 할로겐 원자에 의해 추가로 치환된다.

[2054] 일부 실시양태에서, R^7, R^8, R^9 및 R^{10}은 각각 수소이다.

[2055] 본 개시내용의 실시양태에서, 화학식 II-L의 예비금속화 화합물은 화학식 IV-L로 표현되는 예비금속화 화합물 또는 사이클로펜타디에닐 고리 내의 수소, H^*의 이동에 의해 입수 가능한 화학식 IV-L의 이중 결합 이성질체이다:

[2056] 

(IV-L)

[2057] 여기서, R^1, R^2, R^3, R^4, R^5, R^6, 및 X^2는 화학식 I-L 및 II-L에 대해 상기에 정의된 바와 같고;

[2058] 여기서, G는 14족 원소이며;

[2059] 여기서, R^Q 및 R^{Q*}는 각각 독립적으로 다음으로 이루어지는 군 중에서 선택되고:

[2060] 할로겐;

[2061] 수소;

[2062] C_{1-30} 하이드로카르빌 기로서, 여기서 하이드로카르빌 기는 비치환되거나, 또는 할로겐 원자, C_{1-20} 알킬 기, C_{1-20} 알콕시 기, C_{7-20} 알킬아릴 기, C_{7-20} 아릴알킬 기, C_{6-20} 아릴 기, C_{6-20} 아릴옥시 기, C_{7-20} 알킬아릴옥시 기, 및 C_{7-20} 아릴알킬옥시 기로 이루어지는 군 중에서 선택되는 하나 이상의 치환체에 의해 추가로 치환되는, C_{1-30} 하이드로카르빌 기;

[2063] 헤테로원자 함유 C_{1-30} 하이드로카르빌 기로서, 여기서 헤테로원자 함유 하이드로카르빌 기는 비치환되거나, 또는 할로겐 원자, C_{1-20} 알킬 기, C_{1-20} 알콕시 기, C_{7-20} 알킬아릴 기, C_{7-20} 아릴알킬 기, C_{6-20} 아릴 기, C_{6-20} 아릴옥시 기, C_{7-20} 알킬아릴옥시 기, 및 C_{7-20} 아릴알킬옥시 기로 이루어지는 군 중에서 선택되는 하나 이상의 치환체에 의해 추가로 치환되는, 헤테로원자 함유 C_{1-30} 하이드로카르빌 기;

[2064] 여기서, R^Q 및 R^{Q*}의 기는 선택적으로 결합되어 환형 하이드로카르빌 기 또는 환형 헤테로원자 함유 하이드로카르빌 기를 형성할 수 있고, 이 환형 하이드로카르빌 기 또는 환형 헤테로원자 함유 하이드로카르빌 기는 비치환되거나, 또는 할로겐 원자, C_{1-20} 알킬 기, C_{1-20} 알콕시 기, C_{7-20} 알킬아릴 기, C_{7-20} 아릴알킬 기, C_{6-20} 아릴 기, C_{6-20} 아릴옥시 기, C_{7-20} 알킬아릴옥시 기, C_{7-20} 아릴알킬옥시 기, 화학식 $-NR'_2$의 아미도 기, 화학식 $-PR'_2$의 포스피도 기, 화학식 $-SR'$의 티올레이트 기, 화학식 $-Si(R^a)_3$의 실릴 기, 및 화학식 $-Ge(R^a)_3$의 게르마닐 기로 이루어지는 군 중에서 선택되는 하나 이상의 치환체에 의해 추가로 치환되고;

[2065] 여기서, R^7, R^8, R^9 및 R^{10}은 각각 독립적으로 다음으로 이루어지는 군 중에서 선택되며:

[2066] 할로겐;

[2067] 수소;

[2068] C_{1-30} 하이드로카르빌 기로서, 여기서 하이드로카르빌 기는 비치환되거나, 또는 할로겐 원자, C_{1-20} 알킬 기, C_{1-20} 알콕시 기, C_{7-20} 알킬아릴 기, C_{7-20} 아릴알킬 기, C_{6-20} 아릴 기, C_{6-20} 아릴옥시 기, C_{7-20} 알킬아릴옥시 기, 및 C_{7-20} 아릴알킬옥시 기로 이루어지는 군 중에서 선택되는 하나 이상의 치환체에 의해 추가로 치환되는, C_{1-30} 하이드로카르빌 기;

[2069] 헤테로원자 함유 C_{1-30} 하이드로카르빌 기로서, 여기서 헤테로원자 함유 하이드로카르빌 기는 비치환되거나, 또는

할로겐 원자, C_{1-20} 알킬 기, C_{1-20} 알콕시 기, C_{7-20} 알킬아릴 기, C_{7-20} 아릴알킬 기, C_{6-20} 아릴 기, C_{6-20} 아릴옥시 기, C_{7-20} 알킬아릴옥시 기, 및 C_{7-20} 아릴알킬옥시 기로 이루어지는 군 중에서 선택되는 하나 이상의 치환체에 의해 추가로 치환되는, 헤테로원자 함유 C_{1-30} 하이드로카르빌 기;

[2070] 옥시 기, -OR';

[2071] 아미도 기, $-NR'_2$;

[2072] 포스피도 기, $-PR'_2$;

[2073] 티올레이트 기, -SR';

[2074] 화학식 $-Si(R^a)_3$의 실릴 기; 및

[2075] 화학식 $-Ge(R^a)_3$의 게르마닐 기;

[2076] 여기서, R^7, R^8, R^9 및 R^{10} 중 2개의 인접한 기는 선택적으로 결합되어 환형 하이드로카르빌 기 또는 환형 헤테로원자 함유 하이드로카르빌 기를 형성할 수 있고, 이 환형 하이드로카르빌 기 또는 환형 헤테로원자 함유 하이드로카르빌 기는 비치환되거나, 또는 할로겐 원자, C_{1-20} 알킬 기, C_{1-20} 알콕시 기, C_{7-20} 알킬아릴 기, C_{7-20} 아릴알킬 기, C_{6-20} 아릴 기, C_{6-20} 아릴옥시 기, C_{7-20} 알킬아릴옥시 기, C_{7-20} 아릴알킬옥시 기, 화학식 $-NR'_2$의 아미도 기, 화학식 $-PR'_2$의 포스피도 기, 화학식 -SR'의 티올레이트 기, 화학식 $-Si(R^a)_3$의 실릴 기, 및 화학식 $-Ge(R^a)_3$의 게르마닐 기로 이루어지는 군 중에서 선택되는 하나 이상의 치환체에 의해 추가로 치환되고;

[2077] 여기서 각 R'는 수소, C_{1-20} 알킬 기, 및 C_{6-20} 아릴 기로 이루어지는 군 중에서 독립적으로 선택되고; 그리고

[2078] 각 R^a는 수소, C_{1-8} 알킬 기, C_{1-8} 알콕시 기, C_{6-20} 아릴옥시 기, 및 C_{6-20} 아릴 기로 이루어지는 군 중에서 독립적으로 선택된다.

[2079] 일부 실시양태에서 G는 탄소, C, 또는 규소, Si, 또는 게르마늄, Ge이다.

[2080] 일부 실시양태에서 G는 탄소, C, 또는 규소, Si이다.

[2081] 일부 실시양태에서 G는 탄소, C이다.

[2082] 일부 실시양태에서 G는 규소, Si이다.

[2083] 일부 실시양태에서 G는 게르마늄, Ge이다.

[2084] 일부 실시양태에서, R^Q 및 R^{Q*}는 각각 독립적으로 할로겐, 수소, C_{1-30} 알킬 기, C_{1-30} 알콕시 기, C_{7-30} 알킬아릴 기, C_{7-30} 아릴알킬 기, C_{6-30} 아릴 기, C_{6-30} 아릴옥사이드 기, C_{7-30} 알킬아릴옥시 기, 및 C_{7-30} 아릴알킬옥시 기로 이루어지는 군 중에서 선택된다.

[2085] 일부 실시양태에서, R^Q 및 R^{Q*}는 각각 독립적으로 할로겐, 수소, C_{1-20} 알킬 기, C_{1-20} 알콕시 기, C_{7-20} 알킬아릴 기, C_{7-20} 아릴알킬 기, C_{6-20} 아릴 기, C_{6-20} 아릴옥사이드 기, C_{7-20} 알킬아릴옥시 기, 및 C_{7-20} 아릴알킬옥시 기로 이루어지는 군 중에서 선택된다.

[2086] 일부 실시양태에서, R^Q 및 R^{Q*}는 각각 독립적으로 수소, C_{1-20} 알킬 기 및 C_{6-20} 아릴 기로 이루어지는 군 중에서 선택된다.

[2087] 실시양태에서, R^Q 및 R^{Q*}는 각각 독립적으로 C_{1-8} 알킬 기이다.

[2088] 실시양태에서, R^Q 및 R^{Q*}는 각각 독립적으로 C_{6-20} 아릴 기이다.

[2089] 실시양태에서, R^{Q}는 수소이고 R^{Q*}는 C_{1-8} 알킬 기이다.

[2090] 실시양태에서, R^{Q}는 수소이고 R^{Q*}는 C_{6-20} 아릴 기이다.

[2091] 실시양태에서, R^{Q}는 수소이고 R^{Q*}는 메틸 기이다.

[2092] 실시양태에서, R^{Q}는 수소이고 R^{Q*}는 페닐 기이다.

[2093] 실시양태에서, R^{Q} 및 R^{Q*}는 각각 수소이다.

[2094] 일부 실시양태에서, R^{7}, R^{8}, R^{9} 및 R^{10}은 각각 독립적으로 할로겐; 수소; C_{1-30} 하이드로카르빌 기로서, 여기서 하이드로카르빌 기는 비치환되거나, 또는 할로겐 원자, C_{1-20} 알킬 기, C_{1-20} 알콕시 기, C_{7-20} 알킬아릴 기, C_{7-20} 아릴알킬 기, C_{6-20} 아릴 기, C_{6-20} 아릴옥시 기, C_{7-20} 알킬아릴옥시 기, 및 C_{7-20} 아릴알킬옥시 기로 이루어지는 군 중에서 선택되는 하나 이상의 치환체에 의해 추가로 치환되는, C_{1-30} 하이드로카르빌 기; 및 헤테로원자 함유 C_{1-30} 하이드로카르빌 기로서, 여기서 헤테로원자 함유 하이드로카르빌 기는 비치환되거나, 또는 할로겐 원자, C_{1-20} 알킬 기, C_{1-20} 알콕시 기, C_{7-20} 알킬아릴 기, C_{7-20} 아릴알킬 기, C_{6-20} 아릴 기, C_{6-20} 아릴옥시 기, C_{7-20} 알킬아릴옥시 기, 및 C_{7-20} 아릴알킬옥시 기로 이루어지는 군 중에서 선택되는 하나 이상의 치환체에 의해 추가로 치환되는, 헤테로원자 함유 C_{1-30} 하이드로카르빌 기로 이루어지는 군 중에서 선택되고; 여기서, R^{7}, R^{8}, R^{9} 및 R^{10} 중 2개의 인접한 기는 선택적으로 결합되어 환형 하이드로카르빌 기 또는 환형 헤테로원자 함유 하이드로카르빌 기를 형성할 수 있고, 이 환형 하이드로카르빌 기 또는 환형 헤테로원자 함유 하이드로카르빌 기는 비치환되거나, 또는 할로겐 원자, C_{1-20} 알킬 기, C_{1-20} 알콕시 기, C_{7-20} 알킬아릴 기, C_{7-20} 아릴알킬 기, C_{6-20} 아릴 기, C_{6-20} 아릴옥시 기, C_{7-20} 알킬아릴옥시 기, C_{7-20} 아릴알킬옥시 기, 아미도 기 $-NR'_2$, 포스피도 기 $-PR'_2$, 티올레이트 기 $-SR'$, 화학식 $-Si(R^{a})_3$의 실릴 기, 및 화학식 $-Ge(R^{a})_3$의 게르마닐 기로 이루어지는 군 중에서 선택되는 하나 이상의 치환체에 의해 추가로 치환되고; 여기서 각 R'는 수소, C_{1-20} 알킬 기, 및 C_{6-20} 아릴 기로 이루어지는 군 중에서 독립적으로 선택되고; 그리고 각 R^{a}는 수소, C_{1-8} 알킬 기, C_{1-8} 알콕시 기, C_{6-20} 아릴옥시 기, 및 C_{6-20} 아릴 기로 이루어지는 군 중에서 독립적으로 선택된다.

[2095] 일부 실시양태에서, R^{7}, R^{8}, R^{9} 및 R^{10}은 각각 독립적으로 할로겐; 수소; 및 C_{1-30} 하이드로카르빌 기로서, 여기서 하이드로카르빌 기는 비치환되거나, 또는 할로겐 원자, C_{1-20} 알킬 기, C_{1-20} 알콕시 기, C_{7-20} 알킬아릴 기, C_{7-20} 아릴알킬 기, C_{6-20} 아릴 기, C_{6-20} 아릴옥시 기, C_{7-20} 알킬아릴옥시 기, 및 C_{7-20} 아릴알킬옥시 기로 이루어지는 군 중에서 선택되는 하나 이상의 치환체에 의해 추가로 치환되는, C_{1-30} 하이드로카르빌 기로 이루어지는 군 중에서 선택되고; 여기서, R^{7}, R^{8}, R^{9} 및 R^{10} 중 2개의 인접한 기는 선택적으로 결합되어 환형 하이드로카르빌 기를 형성할 수 있고, 이 환형 하이드로카르빌 기는 비치환되거나, 또는 할로겐 원자, C_{1-20} 알킬 기, C_{1-20} 알콕시 기, C_{7-20} 알킬아릴 기, C_{7-20} 아릴알킬 기, C_{6-20} 아릴 기, C_{6-20} 아릴옥시 기, C_{7-20} 알킬아릴옥시 기, C_{7-20} 아릴알킬옥시 기, 아미도 기 $-NR'_2$, 포스피도 기 $-PR'_2$, 티올레이트 기 $-SR'$, 화학식 $-Si(R^{a})_3$의 실릴 기, 및 화학식 $-Ge(R^{a})_3$의 게르마닐 기로 이루어지는 군 중에서 선택되는 하나 이상의 치환체에 의해 추가로 치환되고; 여기서 각 R'는 수소, C_{1-20} 알킬 기, 및 C_{6-20} 아릴 기로 이루어지는 군 중에서 독립적으로 선택되고; 그리고 각 R^{a}는 수소, C_{1-8} 알킬 기, C_{1-8} 알콕시 기, C_{6-20} 아릴옥시 기, 및 C_{6-20} 아릴 기로 이루어지는 군 중에서 독립적으로 선택된다.

[2096] 일부 실시양태에서, R^{7}, R^{8}, R^{9} 및 R^{10}은 각각 독립적으로 할로겐; 수소; 및 헤테로원자 함유 C_{1-30} 하이드로카르빌 기로서, 여기서 헤테로원자 함유 하이드로카르빌 기는 비치환되거나, 또는 할로겐 원자, C_{1-20} 알킬 기, C_{1-20} 알콕시 기, C_{7-20} 알킬아릴 기, C_{7-20} 아릴알킬 기, C_{6-20} 아릴 기, C_{6-20} 아릴옥시 기, C_{7-20} 알킬아릴옥시 기, 및 C_{7-20}

아릴알킬옥시 기로 이루어지는 군 중에서 선택되는 하나 이상의 치환체에 의해 추가로 치환되는, 헤테로원자 함유 C_{1-30} 하이드로카르빌 기로 이루어지는 군 중에서 선택되고; 여기서, R^7, R^8, R^9 및 R^{10} 중 2개의 인접한 기는 선택적으로 결합되어 환형 헤테로원자 함유 하이드로카르빌 기를 형성할 수 있고, 이 환형 헤테로원자 함유 하이드로카르빌 기는 비치환되거나, 또는 할로겐 원자, C_{1-20} 알킬 기, C_{1-20} 알콕시 기, C_{7-20} 알킬아릴 기, C_{7-20} 아릴알킬 기, C_{6-20} 아릴 기, C_{6-20} 아릴옥시 기, C_{7-20} 알킬아릴옥시 기, C_{7-20} 아릴알킬옥시 기, 아미도 기 $-NR'_2$, 포스피도 기 $-PR'_2$, 티올레이트 기 $-SR'$, 화학식 $-Si(R^a)_3$의 실릴 기, 및 화학식 $-Ge(R^a)_3$의 게르마닐 기로 이루어지는 군 중에서 선택되는 하나 이상의 치환체에 의해 추가로 치환되고; 여기서 각 R'는 수소, C_{1-20} 알킬 기, 및 C_{6-20} 아릴 기로 이루어지는 군 중에서 독립적으로 선택되고; 그리고 각 R^a는 수소, C_{1-8} 알킬 기, C_{1-8} 알콕시 기, C_{6-20} 아릴옥시 기, 및 C_{6-20} 아릴 기로 이루어지는 군 중에서 독립적으로 선택된다.

[2097] 일부 실시양태에서, R^7, R^8, R^9 및 R^{10}은 각각 독립적으로 할로겐, 수소, C_{1-30} 알킬 기, C_{1-30} 알콕시 기, C_{7-30} 알킬아릴 기, C_{7-30} 아릴알킬 기, C_{6-30} 아릴 기, C_{6-30} 아릴옥사이드 기, C_{7-30} 알킬아릴옥시 기, 및 C_{7-30} 아릴알킬옥시 기로 이루어지는 군 중에서 선택된다.

[2098] 일부 실시양태에서, R^7, R^8, R^9 및 R^{10}은 각각 독립적으로 할로겐, 수소, C_{1-20} 알킬 기, C_{1-20} 알콕시 기, C_{7-20} 알킬아릴 기, C_{7-20} 아릴알킬 기, C_{6-20} 아릴 기, C_{6-20} 아릴옥사이드 기, C_{7-20} 알킬아릴옥시 기, 및 C_{7-20} 아릴알킬옥시 기로 이루어지는 군 중에서 선택된다.

[2099] 일부 실시양태에서, R^7, R^8, R^9 및 R^{10}은 각각 독립적으로 할로겐, 수소, 및 C_{1-30} 하이드로카르빌 기로 이루어지는 군 중에서 선택되고, 여기서 하이드로카르빌 기는 비치환되거나 또는 하나 이상의 할로겐 원자에 의해 추가로 치환된다.

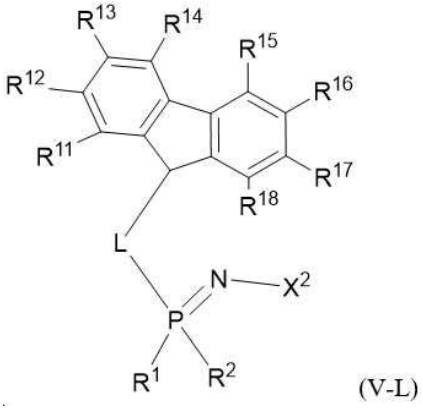
[2100] 일부 실시양태에서, R^7, R^8, R^9 및 R^{10}은 각각 독립적으로 할로겐, 수소, 및 C_{1-30} 헤테로원자 함유 하이드로카르빌 기로 이루어지는 군 중에서 선택되고, 여기서 헤테로원자 함유 하이드로카르빌 기는 비치환되거나 또는 하나 이상의 할로겐 원자에 의해 추가로 치환된다.

[2101] 일부 실시양태에서, R^7, R^8, R^9 및 R^{10}은 각각 독립적으로 수소 및 C_{1-30} 하이드로카르빌 기로 이루어지는 군 중에서 선택되고, 여기서 하이드로카르빌 기는 비치환되거나 또는 하나 이상의 할로겐 원자에 의해 추가로 치환된다.

[2102] 일부 실시양태에서, R^7, R^8, R^9 및 R^{10}은 각각 독립적으로 수소 및 C_{1-30} 헤테로원자 함유 하이드로카르빌 기로 이루어지는 군 중에서 선택되고, 여기서 헤테로원자 함유 하이드로카르빌 기는 비치환되거나 또는 하나 이상의 할로겐 원자에 의해 추가로 치환된다.

[2103] 일부 실시양태에서, R^7, R^8, R^9 및 R^{10}은 각각 수소이다.

[2104] 본 개시내용의 실시양태에서, 화학식 I-L의 예비금속화 화합물은 화학식 V-L로 표현되는 예비금속화 화합물이다:

[2105] 

(V-L)

[2106] 여기서, R^1, R^2, L 및 X^2는 화학식 I-L에 대해 상기에 정의된 바와 같고;

[2107] 여기서, R^{11}, R^{12}, R^{13}, R^{14}, R^{15}, R^{16}, R^{17}, R^{18}은 각각 독립적으로 다음으로 이루어지는 군 중에서 선택되고:

[2108] 할로겐;

[2109] 수소;

[2110] C_{1-30} 하이드로카르빌 기로서, 여기서 하이드로카르빌 기는 비치환되거나, 또는 할로겐 원자, C_{1-20} 알킬 기, C_{1-20} 알콕시 기, C_{7-20} 알킬아릴 기, C_{7-20} 아릴알킬 기, C_{6-20} 아릴 기, C_{6-20} 아릴옥시 기, C_{7-20} 알킬아릴옥시 기, 및 C_{7-20} 아릴알킬옥시 기로 이루어지는 군 중에서 선택되는 하나 이상의 치환체에 의해 추가로 치환되는, C_{1-30} 하이드로카르빌 기;

[2111] 헤테로원자 함유 C_{1-30} 하이드로카르빌 기로서, 여기서 헤테로원자 함유 하이드로카르빌 기는 비치환되거나, 또는 할로겐 원자, C_{1-20} 알킬 기, C_{1-20} 알콕시 기, C_{7-20} 알킬아릴 기, C_{7-20} 아릴알킬 기, C_{6-20} 아릴 기, C_{6-20} 아릴옥시 기, C_{7-20} 알킬아릴옥시 기, 및 C_{7-20} 아릴알킬옥시 기로 이루어지는 군 중에서 선택되는 하나 이상의 치환체에 의해 추가로 치환되는, 헤테로원자 함유 C_{1-30} 하이드로카르빌 기;

[2112] 옥시 기, -OR';

[2113] 아미도 기, $-NR'_2$;

[2114] 포스피도 기, $-PR'_2$;

[2115] 티올레이트 기, -SR';

[2116] 화학식 $-Si(R^a)_3$의 실릴 기; 및

[2117] 화학식 $-Ge(R^a)_3$의 게르마닐 기;

[2118] 여기서, R^{11}, R^{12}, R^{13}, R^{14}, R^{15}, R^{16}, R^{17}, R^{18} 중 2개의 인접한 기는 선택적으로 결합되어 환형 하이드로카르빌 기 또는 환형 헤테로원자 함유 하이드로카르빌 기를 형성할 수 있고, 이 환형 하이드로카르빌 기 또는 환형 헤테로원자 함유 하이드로카르빌 기는 비치환되거나, 또는 할로겐 원자, C_{1-20} 알킬 기, C_{1-20} 알콕시 기, C_{7-20} 알킬아릴 기, C_{7-20} 아릴알킬 기, C_{6-20} 아릴 기, C_{6-20} 아릴옥시 기, C_{7-20} 알킬아릴옥시 기, C_{7-20} 아릴알킬옥시 기, 화학식 $-NR'_2$의 아미도 기, 화학식 $-PR'_2$의 포스피도 기, 화학식 -SR'의 티올레이트 기, 화학식 $-Si(R^a)_3$의 실릴 기, 및 화학식 $-Ge(R^a)_3$의 게르마닐 기로 이루어지는 군 중에서 선택되는 하나 이상의 치환체에 의해 추가로 치환되고;

[2119] 여기서 각 R'는 수소, C_{1-20} 알킬 기, 및 C_{6-20} 아릴 기로 이루어지는 군 중에서 독립적으로 선택되고; 그리고

[2120] 각 R^a는 수소, C_{1-8} 알킬 기, C_{1-8} 알콕시 기, C_{6-20} 아릴옥시 기, 및 C_{6-20} 아릴 기로 이루어지는 군 중에서 독립적으

로 선택된다.

[2121] 일부 실시양태에서, R^{11}, R^{12}, R^{13}, R^{14}, R^{15}, R^{16}, R^{17}, R^{18}은 각각 독립적으로 할로겐; 수소; C_{1-30} 하이드로카르빌 기로서, 여기서 하이드로카르빌 기는 비치환되거나, 또는 할로겐 원자, C_{1-20} 알킬 기, C_{1-20} 알콕시 기, C_{7-20} 알킬아릴 기, C_{7-20} 아릴알킬 기, C_{6-20} 아릴 기, C_{6-20} 아릴옥시 기, C_{7-20} 알킬아릴옥시 기, 및 C_{7-20} 아릴알킬옥시 기로 이루어지는 군 중에서 선택되는 하나 이상의 치환체에 의해 추가로 치환되는, C_{1-30} 하이드로카르빌 기; 및 헤테로원자 함유 C_{1-30} 하이드로카르빌 기로서, 여기서 헤테로원자 함유 하이드로카르빌 기는 비치환되거나, 또는 할로겐 원자, C_{1-20} 알킬 기, C_{1-20} 알콕시 기, C_{7-20} 알킬아릴 기, C_{7-20} 아릴알킬 기, C_{6-20} 아릴 기, C_{6-20} 아릴옥시 기, C_{7-20} 알킬아릴옥시 기, 및 C_{7-20} 아릴알킬옥시 기로 이루어지는 군 중에서 선택되는 하나 이상의 치환체에 의해 추가로 치환되는, 헤테로원자 함유 C_{1-30} 하이드로카르빌 기로 이루어지는 군 중에서 선택되고; 여기서, R^{11}, R^{12}, R^{13}, R^{14}, R^{15}, R^{16}, R^{17}, R^{18} 중 2개의 인접한 기는 선택적으로 결합되어 환형 하이드로카르빌 기 또는 환형 헤테로원자 함유 하이드로카르빌 기를 형성할 수 있고, 이 환형 하이드로카르빌 기 또는 환형 헤테로원자 함유 하이드로카르빌 기는 비치환되거나, 또는 할로겐 원자, C_{1-20} 알킬 기, C_{1-20} 알콕시 기, C_{7-20} 알킬아릴 기, C_{7-20} 아릴알킬 기, C_{6-20} 아릴 기, C_{6-20} 아릴옥시 기, C_{7-20} 알킬아릴옥시 기, C_{7-20} 아릴알킬옥시 기, 아미도 기 $-NR'_2$, 포스피도 기 $-PR'_2$, 티올레이트 기 $-SR'$, 화학식 $-Si(R^a)_3$의 실릴 기, 및 화학식 $-Ge(R^a)_3$의 게르마닐 기로 이루어지는 군 중에서 선택되는 하나 이상의 치환체에 의해 추가로 치환되고; 여기서 각 R'는 수소, C_{1-20} 알킬 기, 및 C_{6-20} 아릴 기로 이루어지는 군 중에서 독립적으로 선택되고; 그리고 각 R^a는 수소, C_{1-8} 알킬 기, C_{1-8} 알콕시 기, C_{6-20} 아릴옥시 기, 및 C_{6-20} 아릴 기로 이루어지는 군 중에서 독립적으로 선택된다.

[2122] 일부 실시양태에서, R^{11}, R^{12}, R^{13}, R^{14}, R^{15}, R^{16}, R^{17}, 및 R^{18}은 각각 독립적으로 할로겐; 수소; 및 C_{1-30} 하이드로카르빌 기로서, 여기서 하이드로카르빌 기는 비치환되거나, 또는 할로겐 원자, C_{1-20} 알킬 기, C_{1-20} 알콕시 기, C_{7-20} 알킬아릴 기, C_{7-20} 아릴알킬 기, C_{6-20} 아릴 기, C_{6-20} 아릴옥시 기, C_{7-20} 알킬아릴옥시 기, 및 C_{7-20} 아릴알킬옥시 기로 이루어지는 군 중에서 선택되는 하나 이상의 치환체에 의해 추가로 치환되는, C_{1-30} 하이드로카르빌 기로 이루어지는 군 중에서 선택되고; 여기서, R^{11}, R^{12}, R^{13}, R^{14}, R^{15}, R^{16}, R^{17}, 및 R^{18} 중 2개의 인접한 기는 선택적으로 결합되어 환형 하이드로카르빌 기를 형성할 수 있고, 이 환형 하이드로카르빌 기는 비치환되거나, 또는 할로겐 원자, C_{1-20} 알킬 기, C_{1-20} 알콕시 기, C_{7-20} 알킬아릴 기, C_{7-20} 아릴알킬 기, C_{6-20} 아릴 기, C_{6-20} 아릴옥시 기, C_{7-20} 알킬아릴옥시 기, C_{7-20} 아릴알킬옥시 기, 아미도 기, $-NR'_2$, 포스피도 기, $-PR'_2$, 티올레이트 기 $-SR'$, 화학식 $-Si(R^a)_3$의 실릴 기, 및 화학식 $-Ge(R^a)_3$의 게르마닐 기로 이루어지는 군 중에서 선택되는 하나 이상의 치환체에 의해 추가로 치환되고; 여기서 각 R'는 수소, C_{1-20} 알킬 기, 및 C_{6-20} 아릴 기로 이루어지는 군 중에서 독립적으로 선택되고; 그리고 각 R^a는 수소, C_{1-8} 알킬 기, C_{1-8} 알콕시 기, C_{6-20} 아릴옥시 기, 및 C_{6-20} 아릴 기로 이루어지는 군 중에서 독립적으로 선택된다.

[2123] 일부 실시양태에서, R^{11}, R^{12}, R^{13}, R^{14}, R^{15}, R^{16}, R^{17}, 및 R^{18}은 각각 독립적으로 할로겐; 수소; 및 헤테로원자 함유 C_{1-30} 하이드로카르빌 기로서, 여기서 헤테로원자 함유 하이드로카르빌 기는 비치환되거나, 또는 할로겐 원자, C_{1-20} 알킬 기, C_{1-20} 알콕시 기, C_{7-20} 알킬아릴 기, C_{7-20} 아릴알킬 기, C_{6-20} 아릴 기, C_{6-20} 아릴옥시 기, C_{7-20} 알킬아릴옥시 기, 및 C_{7-20} 아릴알킬옥시 기로 이루어지는 군 중에서 선택되는 하나 이상의 치환체에 의해 추가로 치환되는, 헤테로원자 함유 C_{1-30} 하이드로카르빌 기로 이루어지는 군 중에서 선택되고; 여기서, R^{11}, R^{12}, R^{13}, R^{14}, R^{15}, R^{16}, R^{17}, 및 R^{18} 중 2개의 인접한 기는 선택적으로 결합되어 환형 헤테로원자 함유 하이드로카르빌 기를 형성할 수 있고, 이 환형 헤테로원자 함유 하이드로카르빌 기는 비치환되거나, 또는 할로겐 원자, C_{1-20} 알킬 기, C_{1-20} 알콕시 기, C_{7-20} 알킬아릴 기, C_{7-20} 아릴알킬 기, C_{6-20} 아릴 기, C_{6-20} 아릴옥시 기, C_{7-20} 알킬아릴옥시 기,

C_{7-20} 아릴알킬옥시 기, 아미도 기, $-NR'_2$, 포스피도 기, $-PR'_2$, 티올레이트 기 $-SR'$, 화학식 $-Si(R^a)_3$의 실릴 기, 및 화학식 $-Ge(R^a)_3$의 게르마닐 기로 이루어지는 군 중에서 선택되는 하나 이상의 치환체에 의해 추가로 치환되고; 여기서 각 R'는 수소, C_{1-20} 알킬 기, 및 C_{6-20} 아릴 기로 이루어지는 군 중에서 독립적으로 선택되고; 그리고 각 R^a는 수소, C_{1-8} 알킬 기, C_{1-8} 알콕시 기, C_{6-20} 아릴옥시 기, 및 C_{6-20} 아릴 기로 이루어지는 군 중에서 독립적으로 선택된다.

[2124] 일부 실시양태에서, R^{11}, R^{12}, R^{13}, R^{14}, R^{15}, R^{16}, R^{17}, R^{18}은 각각 독립적으로 할로겐, 수소, C_{1-30} 알킬 기, C_{1-30} 알콕시 기, C_{7-30} 알킬아릴 기, C_{7-30} 아릴알킬 기, C_{6-30} 아릴 기, C_{6-30} 아릴옥사이드 기, C_{7-30} 알킬아릴옥시 기, 및 C_{7-30} 아릴알킬옥시 기로 이루어지는 군 중에서 선택된다.

[2125] 일부 실시양태에서, R^{11}, R^{12}, R^{13}, R^{14}, R^{15}, R^{16}, R^{17}, R^{18}은 각각 독립적으로 할로겐, 수소, C_{1-20} 알킬 기, C_{1-20} 알콕시 기, C_{7-20} 알킬아릴 기, C_{7-20} 아릴알킬 기, C_{6-20} 아릴 기, C_{6-20} 아릴옥사이드 기, C_{7-20} 알킬아릴옥시 기, 및 C_{7-20} 아릴알킬옥시 기로 이루어지는 군 중에서 선택된다.

[2126] 일부 실시양태에서, R^{11}, R^{12}, R^{13}, R^{14}, R^{15}, R^{16}, R^{17}, R^{18}은 각각 독립적으로 할로겐, 수소, 및 C_{1-30} 하이드로카르빌 기로 이루어지는 군 중에서 선택되고, 여기서 하이드로카르빌 기는 비치환되거나 또는 하나 이상의 할로겐 원자에 의해 추가로 치환된다.

[2127] 일부 실시양태에서, R^{11}, R^{12}, R^{13}, R^{14}, R^{15}, R^{16}, R^{17}, R^{18}은 각각 독립적으로 할로겐, 수소, 및 C_{1-30} 헤테로원자 함유 하이드로카르빌 기로 이루어지는 군 중에서 선택되고, 여기서 헤테로원자 함유 하이드로카르빌 기는 비치환되거나 또는 하나 이상의 할로겐 원자에 의해 추가로 치환된다.

[2128] 일부 실시양태에서, R^{11}, R^{12}, R^{13}, R^{14}, R^{15}, R^{16}, R^{17}, R^{18}은 각각 독립적으로 수소 및 C_{1-30} 하이드로카르빌 기로 이루어지는 군 중에서 선택되고, 여기서 하이드로카르빌 기는 비치환되거나 또는 하나 이상의 할로겐 원자에 의해 추가로 치환된다.

[2129] 일부 실시양태에서, R^{11}, R^{12}, R^{13}, R^{14}, R^{15}, R^{16}, R^{17}, R^{18}은 각각 독립적으로 수소 및 C_{1-30} 헤테로원자 함유 하이드로카르빌 기로 이루어지는 군 중에서 선택되고, 여기서 헤테로원자 함유 하이드로카르빌 기는 비치환되거나 또는 하나 이상의 할로겐 원자에 의해 추가로 치환된다.

[2130] 일부 실시양태에서, R^{12} 및 R^{17}은 각각 독립적으로 비치환된 C_{1-30} 하이드로카르빌 기이다.

[2131] 일부 실시양태에서, R^{13} 및 R^{16}은 각각 독립적으로 비치환된 C_{1-30} 하이드로카르빌 기이다.

[2132] 일부 실시양태에서, R^{12} 및 R^{17}은 C_{1-20} 알킬 기이다.

[2133] 일부 실시양태에서, R^{13} 및 R^{16}은 C_{1-20} 알킬 기이다.

[2134] 일부 실시양태에서, R^{12} 및 R^{17}은 C_{6-20} 아릴 기이다.

[2135] 일부 실시양태에서, R^{13} 및 R^{16}은 C_{6-20} 아릴 기이다.

[2136] 일부 실시양태에서, R^{12} 및 R^{17}은 *tert*-부틸 기이다.

[2137] 일부 실시양태에서, R^{13} 및 R^{16}은 *tert*-부틸 기이다.

[2138] 일부 실시양태에서, R^{11}, R^{12}, R^{13}, R^{14}, R^{15}, R^{16} 및 R^{18}은 각각 수소이다.

[2139] 일부 실시양태에서, R^{11}, R^{13}, R^{14}, R^{15}, R^{16} 및 R^{18}은 각각 수소이다.

[2140] 일부 실시양태에서, R^{11}, R^{12}, R^{14}, R^{15}, R^{17} 및 R^{18}은 각각 수소이다.

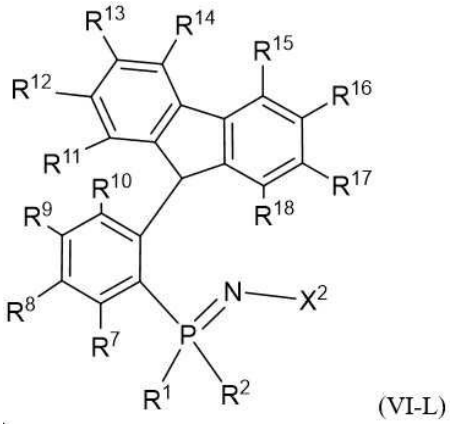
[2141] 일부 실시양태에서, R^{11}, R^{13}, R^{14}, R^{15}, R^{16} 및 R^{18}은 각각 수소이고, 그리고 R^{12} 및 R^{17}은 각각 독립적으로 비치환된 C_{1-30} 하이드로카르빌 기이다.

[2142] 일부 실시양태에서, R^{11}, R^{13}, R^{14}, R^{15}, R^{16} 및 R^{18}은 각각 수소이고, 그리고 R^{12} 및 R^{17}은 각각 *tert*-부틸 기이다.

[2143] 일부 실시양태에서, R^{11}, R^{12}, R^{14}, R^{15}, R^{17} 및 R^{18}은 각각 수소이고, 그리고 R^{13} 및 R^{16}은 각각 독립적으로 비치환된 C_{1-30} 하이드로카르빌 기이다.

[2144] 일부 실시양태에서, R^{11}, R^{12}, R^{14}, R^{15}, R^{17} 및 R^{18}은 각각 수소이고, 그리고 R^{13} 및 R^{16}은 각각 *tert*-부틸 기이다.

[2145] 본 개시내용의 실시양태에서, 화학식 V-L의 예비금속화 화합물은 화학식 VI-L로 표현되는 예비금속화 화합물이다:

[2146] 

(VI-L)

[2147] 여기서, R^{1}, R^{2}, R^{11}, R^{12}, R^{13}, R^{14}, R^{15}, R^{16}, R^{17}, R^{18}, 및 X^{2}는 화학식 I-L 및 V-L에 대해 상기 정의된 바와 같고; 그리고

[2148] 여기서, R^{7}, R^{8}, R^{9} 및 R^{10}은 각각 독립적으로 다음으로 이루어지는 군 중에서 선택되고:

[2149] 할로겐;

[2150] 수소;

[2151] C_{1-30} 하이드로카르빌 기로서, 여기서 하이드로카르빌 기는 비치환되거나, 또는 할로겐 원자, C_{1-20} 알킬 기, C_{1-20} 알콕시 기, C_{7-20} 알킬아릴 기, C_{7-20} 아릴알킬 기, C_{6-20} 아릴 기, C_{6-20} 아릴옥시 기, C_{7-20} 알킬아릴옥시 기, 및 C_{7-20} 아릴알킬옥시 기로 이루어지는 군 중에서 선택되는 하나 이상의 치환체에 의해 추가로 치환되는, C_{1-30} 하이드로카르빌 기;

[2152] 헤테로원자 함유 C_{1-30} 하이드로카르빌 기로서, 여기서 헤테로원자 함유 하이드로카르빌 기는 비치환되거나, 또는 할로겐 원자, C_{1-20} 알킬 기, C_{1-20} 알콕시 기, C_{7-20} 알킬아릴 기, C_{7-20} 아릴알킬 기, C_{6-20} 아릴 기, C_{6-20} 아릴옥시 기, C_{7-20} 알킬아릴옥시 기, 및 C_{7-20} 아릴알킬옥시 기로 이루어지는 군 중에서 선택되는 하나 이상의 치환체에 의해 추가로 치환되는, 헤테로원자 함유 C_{1-30} 하이드로카르빌 기;

[2153] 옥시 기, -OR';

[2154] 아미도 기, $-NR'_2$;

[2155] 포스피도 기, $-PR'_2$;

[2156] 티올레이트 기, -SR';

[2157] 화학식 $-Si(R^a)_3$의 실릴 기; 및

[2158] 화학식 $-Ge(R^a)_3$의 게르마닐 기;

[2159] 여기서, R^7, R^8, R^9 및 R^{10} 중 2개의 인접한 기는 선택적으로 결합되어 환형 하이드로카르빌 기 또는 환형 헤테로원자 함유 하이드로카르빌 기를 형성할 수 있고, 이 환형 하이드로카르빌 기 또는 환형 헤테로원자 함유 하이드로카르빌 기는 비치환되거나, 또는 할로겐 원자, C_{1-20} 알킬 기, C_{1-20} 알콕시 기, C_{7-20} 알킬아릴 기, C_{7-20} 아릴알킬 기, C_{6-20} 아릴 기, C_{6-20} 아릴옥시 기, C_{7-20} 알킬아릴옥시 기, C_{7-20} 아릴알킬옥시 기, 화학식 $-NR'_2$의 아미도 기, 화학식 $-PR'_2$의 포스피도 기, 화학식 -SR'의 티올레이트 기, 화학식 $-Si(R^a)_3$의 실릴 기, 및 화학식 $-Ge(R^a)_3$의 게르마닐 기로 이루어지는 군 중에서 선택되는 하나 이상의 치환체에 의해 추가로 치환되고;

[2160] 여기서 각 R'는 수소, C_{1-20} 알킬 기, 및 C_{6-20} 아릴 기로 이루어지는 군 중에서 독립적으로 선택되고; 그리고

[2161] 각 R^a는 수소, C_{1-8} 알킬 기, C_{1-8} 알콕시 기, C_{6-20} 아릴옥시 기, 및 C_{6-20} 아릴 기로 이루어지는 군 중에서 독립적으로 선택된다.

[2162] 일부 실시양태에서, R^7, R^8, R^9 및 R^{10}은 각각 독립적으로 할로겐; 수소; C_{1-30} 하이드로카르빌 기로서, 여기서 하이드로카르빌 기는 비치환되거나, 또는 할로겐 원자, C_{1-20} 알킬 기, C_{1-20} 알콕시 기, C_{7-20} 알킬아릴 기, C_{7-20} 아릴알킬 기, C_{6-20} 아릴 기, C_{6-20} 아릴옥시 기, C_{7-20} 알킬아릴옥시 기, 및 C_{7-20} 아릴알킬옥시 기로 이루어지는 군 중에서 선택되는 하나 이상의 치환체에 의해 추가로 치환되는, C_{1-30} 하이드로카르빌 기; 및 헤테로원자 함유 C_{1-30} 하이드로카르빌 기로서, 여기서 헤테로원자 함유 하이드로카르빌 기는 비치환되거나, 또는 할로겐 원자, C_{1-20} 알킬 기, C_{1-20} 알콕시 기, C_{7-20} 알킬아릴 기, C_{7-20} 아릴알킬 기, C_{6-20} 아릴 기, C_{6-20} 아릴옥시 기, C_{7-20} 알킬아릴옥시 기, 및 C_{7-20} 아릴알킬옥시 기로 이루어지는 군 중에서 선택되는 하나 이상의 치환체에 의해 추가로 치환되는, 헤테로원자 함유 C_{1-30} 하이드로카르빌 기로 이루어지는 군 중에서 선택되고; 여기서, R^7, R^8, R^9 및 R^{10} 중 2개의 인접한 기는 선택적으로 결합되어 환형 하이드로카르빌 기 또는 환형 헤테로원자 함유 하이드로카르빌 기를 형성할 수 있고, 이 환형 하이드로카르빌 기 또는 환형 헤테로원자 함유 하이드로카르빌 기는 비치환되거나, 또는 할로겐 원자, C_{1-20} 알킬 기, C_{1-20} 알콕시 기, C_{7-20} 알킬아릴 기, C_{7-20} 아릴알킬 기, C_{6-20} 아릴 기, C_{6-20} 아릴옥시 기, C_{7-20} 알킬아릴옥시 기, C_{7-20} 아릴알킬옥시 기, 아미도 기 $-NR'_2$, 포스피도 기 $-PR'_2$, 티올레이트 기 -SR', 화학식 $-Si(R^a)_3$의 실릴 기, 및 화학식 $-Ge(R^a)_3$의 게르마닐 기로 이루어지는 군 중에서 선택되는 하나 이상의 치환체에 의해 추가로 치환되고; 여기서 각 R'는 수소, C_{1-20} 알킬 기, 및 C_{6-20} 아릴 기로 이루어지는 군 중에서 독립적으로 선택되고; 그리고 각 R^a는 수소, C_{1-8} 알킬 기, C_{1-8} 알콕시 기, C_{6-20} 아릴옥시 기, 및 C_{6-20} 아릴 기로 이루어지는 군 중에서 독립적으로 선택된다.

[2163] 일부 실시양태에서, R^7, R^8, R^9 및 R^{10}은 각각 독립적으로 할로겐; 수소; 및 C_{1-30} 하이드로카르빌 기로서, 여기서 하이드로카르빌 기는 비치환되거나, 또는 할로겐 원자, C_{1-20} 알킬 기, C_{1-20} 알콕시 기, C_{7-20} 알킬아릴 기, C_{7-20} 아릴알킬 기, C_{6-20} 아릴 기, C_{6-20} 아릴옥시 기, C_{7-20} 알킬아릴옥시 기, 및 C_{7-20} 아릴알킬옥시 기로 이루어지는 군 중에서 선택되는 하나 이상의 치환체에 의해 추가로 치환되는, C_{1-30} 하이드로카르빌 기로 이루어지는 군 중에서 선택되고; 여기서, R^7, R^8, R^9 및 R^{10} 중 2개의 인접한 기는 선택적으로 결합되어 환형 하이드로카르빌 기를 형성할 수 있고, 이 환형 하이드로카르빌 기는 비치환되거나, 또는 할로겐 원자, C_{1-20} 알킬 기, C_{1-20} 알콕시 기, C_{7-20} 알킬아릴 기, C_{7-20} 아릴알킬 기, C_{6-20} 아릴 기, C_{6-20} 아릴옥시 기, C_{7-20} 알킬아릴옥시 기, C_{7-20} 아릴알킬옥시

기, 아미도 기, $-NR'_2$, 포스피도 기, $-PR'_2$, 티올레이트 기 $-SR'$, 화학식 $-Si(R^a)_3$의 실릴 기, 및 화학식 $-Ge(R^a)_3$의 게르마닐 기로 이루어지는 군 중에서 선택되는 하나 이상의 치환체에 의해 추가로 치환되고; 여기서 각 R'는 수소, C_{1-20} 알킬 기, 및 C_{6-20} 아릴 기로 이루어지는 군 중에서 독립적으로 선택되고; 그리고 각 R^a는 수소, C_{1-8} 알킬 기, C_{1-8} 알콕시 기, C_{6-20} 아릴옥시 기, 및 C_{6-20} 아릴 기로 이루어지는 군 중에서 독립적으로 선택된다.

[2164] 일부 실시양태에서, R^7, R^8, R^9 및 R^{10}은 각각 독립적으로 할로겐; 수소; 및 헤테로원자 함유 C_{1-30} 하이드로카르빌 기로서, 여기서 헤테로원자 함유 하이드로카르빌 기는 비치환되거나, 또는 할로겐 원자, C_{1-20} 알킬 기, C_{1-20} 알콕시 기, C_{7-20} 알킬아릴 기, C_{7-20} 아릴알킬 기, C_{6-20} 아릴 기, C_{6-20} 아릴옥시 기, C_{7-20} 알킬아릴옥시 기, 및 C_{7-20} 아릴알킬옥시 기로 이루어지는 군 중에서 선택되는 하나 이상의 치환체에 의해 추가로 치환되는, 헤테로원자 함유 C_{1-30} 하이드로카르빌 기로 이루어지는 군 중에서 선택되고; 여기서, R^7, R^8, R^9 및 R^{10} 중 2개의 인접한 기는 선택적으로 결합되어 환형 헤테로원자 함유 하이드로카르빌 기를 형성할 수 있고, 이 환형 헤테로원자 함유 하이드로카르빌 기는 비치환되거나, 또는 할로겐 원자, C_{1-20} 알킬 기, C_{1-20} 알콕시 기, C_{7-20} 알킬아릴 기, C_{7-20} 아릴알킬 기, C_{6-20} 아릴 기, C_{6-20} 아릴옥시 기, C_{7-20} 알킬아릴옥시 기, C_{7-20} 아릴알킬옥시 기, 아미도 기, $-NR'_2$, 포스피도 기, $-PR'_2$, 티올레이트 기 $-SR'$, 화학식 $-Si(R^a)_3$의 실릴 기, 및 화학식 $-Ge(R^a)_3$의 게르마닐 기로 이루어지는 군 중에서 선택되는 하나 이상의 치환체에 의해 추가로 치환되고; 여기서 각 R'는 수소, C_{1-20} 알킬 기, 및 C_{6-20} 아릴 기로 이루어지는 군 중에서 독립적으로 선택되고; 그리고 각 R^a는 수소, C_{1-8} 알킬 기, C_{1-8} 알콕시 기, C_{6-20} 아릴옥시 기, 및 C_{6-20} 아릴 기로 이루어지는 군 중에서 독립적으로 선택된다.

[2165] 일부 실시양태에서, R^7, R^8, R^9 및 R^{10}은 각각 독립적으로 할로겐, 수소, C_{1-30} 알킬 기, C_{1-30} 알콕시 기, C_{7-30} 알킬아릴 기, C_{7-30} 아릴알킬 기, C_{6-30} 아릴 기, C_{6-30} 아릴옥사이드 기, C_{7-30} 알킬아릴옥시 기, 및 C_{7-30} 아릴알킬옥시 기로 이루어지는 군 중에서 선택된다.

[2166] 일부 실시양태에서, R^7, R^8, R^9 및 R^{10}은 각각 독립적으로 할로겐, 수소, C_{1-20} 알킬 기, C_{1-20} 알콕시 기, C_{7-20} 알킬아릴 기, C_{7-20} 아릴알킬 기, C_{6-20} 아릴 기, C_{6-20} 아릴옥사이드 기, C_{7-20} 알킬아릴옥시 기, 및 C_{7-20} 아릴알킬옥시 기로 이루어지는 군 중에서 선택된다.

[2167] 일부 실시양태에서, R^7, R^8, R^9 및 R^{10}은 각각 독립적으로 할로겐, 수소, 및 C_{1-30} 하이드로카르빌 기로 이루어지는 군 중에서 선택되고, 여기서 하이드로카르빌 기는 비치환되거나 또는 하나 이상의 할로겐 원자에 의해 추가로 치환된다.

[2168] 일부 실시양태에서, R^7, R^8, R^9 및 R^{10}은 각각 독립적으로 할로겐, 수소, 및 C_{1-30} 헤테로원자 함유 하이드로카르빌 기로 이루어지는 군 중에서 선택되고, 여기서 헤테로원자 함유 하이드로카르빌 기는 비치환되거나 또는 하나 이상의 할로겐 원자에 의해 추가로 치환된다.

[2169] 일부 실시양태에서, R^7, R^8, R^9 및 R^{10}은 각각 독립적으로 수소 및 C_{1-30} 하이드로카르빌 기로 이루어지는 군 중에서 선택되고, 여기서 하이드로카르빌 기는 비치환되거나 또는 하나 이상의 할로겐 원자에 의해 추가로 치환된다.

[2170] 일부 실시양태에서, R^7, R^8, R^9 및 R^{10}은 각각 독립적으로 수소 및 C_{1-30} 헤테로원자 함유 하이드로카르빌 기로 이루어지는 군 중에서 선택되고, 여기서 헤테로원자 함유 하이드로카르빌 기는 비치환되거나 또는 하나 이상의 할로겐 원자에 의해 추가로 치환된다.

[2171] 일부 실시양태에서, R^7, R^8, R^9 및 R^{10}은 각각 수소이다.

[2172] 일부 실시양태에서, R^7, R^8, R^9 및 R^{10}은 각각 수소이고; 그리고 R^{11}, R^{12}, R^{13}, R^{14}, R^{15}, R^{16}, R^{17}, R^{18}은 각각 독립적으로 할로겐, 수소, C_{1-30} 알킬 기, 및 C_{6-30} 아릴 기로 이루어지는 군 중에서 선택된다.

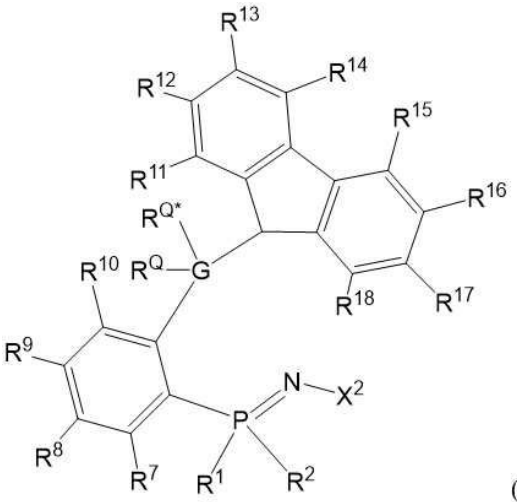
[2173] 일부 실시양태에서, R^7, R^8, R^9 및 R^{10}은 각각 수소이고; R^{11}, R^{13}, R^{14}, R^{15}, R^{16} 및 R^{18}은 각각 수소이고, 그리고 R^{12} 및 R^{17}은 각각 독립적으로 C_{1-20} 알킬 기 또는 C_{6-20} 아릴 기이다.

[2174] 일부 실시양태에서, R^7, R^8, R^9 및 R^{10}은 각각 수소이고; R^{11}, R^{13}, R^{14}, R^{15}, R^{16} 및 R^{18}은 각각 수소이고, 그리고 R^{12} 및 R^{17}은 각각 *tert*-부틸 기이다.

[2175] 일부 실시양태에서, R^7, R^8, R^9 및 R^{10}은 각각 수소이고; R^{11}, R^{12}, R^{14}, R^{15}, R^{17} 및 R^{18}은 각각 수소이고, 그리고 R^{13} 및 R^{16}은 각각 독립적으로 C_{1-20} 알킬 기 또는 C_{6-20} 아릴 기이다.

[2176] 일부 실시양태에서, R^7, R^8, R^9 및 R^{10}은 각각 수소이고; R^{11}, R^{12}, R^{14}, R^{15}, R^{17} 및 R^{18}은 각각 수소이고, 그리고 R^{13} 및 R^{16}은 각각 *tert*-부틸 기이다.

[2177] 본 개시내용의 실시양태에서, 화학식 V-L의 예비금속화 화합물은 화학식 VII-L로 표현되는 예비금속화 화합물이다:

[2178] 

(VII-L)

[2179] 여기서, R^1, R^2, R^{11}, R^{12}, R^{13}, R^{14}, R^{15}, R^{16}, R^{17}, R^{18}, 및 X^2는 화학식 I-L 및 V-L에 대해 상기에 정의된 바와 같고;

[2180] 여기서, G는 14족 원소이며;

[2181] 여기서, R^Q 및 R^{Q*}는 각각 독립적으로 다음으로 이루어지는 군 중에서 선택되고:

[2182] 할로겐;

[2183] 수소;

[2184] C_{1-30} 하이드로카르빌 기로서, 여기서 하이드로카르빌 기는 비치환되거나, 또는 할로겐 원자, C_{1-20} 알킬 기, C_{1-20} 알콕시 기, C_{7-20} 알킬아릴 기, C_{7-20} 아릴알킬 기, C_{6-20} 아릴 기, C_{6-20} 아릴옥시 기, C_{7-20} 알킬아릴옥시 기, 및 C_{7-20} 아릴알킬옥시 기로 이루어지는 군 중에서 선택되는 하나 이상의 치환체에 의해 추가로 치환되는, C_{1-30} 하이드로카르빌 기;

[2185] 헤테로원자 함유 C_{1-30} 하이드로카르빌 기로서, 여기서 헤테로원자 함유 하이드로카르빌 기는 비치환되거나, 또는 할로겐 원자, C_{1-20} 알킬 기, C_{1-20} 알콕시 기, C_{7-20} 알킬아릴 기, C_{7-20} 아릴알킬 기, C_{6-20} 아릴 기, C_{6-20} 아릴옥시 기, C_{7-20} 알킬아릴옥시 기, 및 C_{7-20} 아릴알킬옥시 기로 이루어지는 군 중에서 선택되는 하나 이상의 치환체에 의

해 추가로 치환되는, 헤테로원자 함유 C_{1-30} 하이드로카르빌 기;

[2186] 여기서, R^{Q} 및 R^{Q*}의 기는 선택적으로 결합되어 환형 하이드로카르빌 기 또는 환형 헤테로원자 함유 하이드로카르빌 기를 형성할 수 있고, 이 환형 하이드로카르빌 기 또는 환형 헤테로원자 함유 하이드로카르빌 기는 비치환되거나, 또는 할로겐 원자, C_{1-20} 알킬 기, C_{1-20} 알콕시 기, C_{7-20} 알킬아릴 기, C_{7-20} 아릴알킬 기, C_{6-20} 아릴 기, C_{6-20} 아릴옥시 기, C_{7-20} 알킬아릴옥시 기, C_{7-20} 아릴알킬옥시 기, 화학식 $-NR'_2$의 아미도 기, 화학식 $-PR'_2$의 포스피도 기, 화학식 -SR'의 티올레이트 기, 화학식 $-Si(R^a)_3$의 실릴 기, 및 화학식 $-Ge(R^a)_3$의 게르마닐 기로 이루어지는 군 중에서 선택되는 하나 이상의 치환체에 의해 추가로 치환되고;

[2187] 여기서, R^7, R^8, R^9 및 R^{10}은 각각 독립적으로 다음으로 이루어지는 군 중에서 선택되며:

[2188] 할로겐;

[2189] 수소;

[2190] C_{1-30} 하이드로카르빌 기로서, 여기서 하이드로카르빌 기는 비치환되거나, 또는 할로겐 원자, C_{1-20} 알킬 기, C_{1-20} 알콕시 기, C_{7-20} 알킬아릴 기, C_{7-20} 아릴알킬 기, C_{6-20} 아릴 기, C_{6-20} 아릴옥시 기, C_{7-20} 알킬아릴옥시 기, 및 C_{7-20} 아릴알킬옥시 기로 이루어지는 군 중에서 선택되는 하나 이상의 치환체에 의해 추가로 치환되는, C_{1-30} 하이드로카르빌 기;

[2191] 헤테로원자 함유 C_{1-30} 하이드로카르빌 기로서, 여기서 헤테로원자 함유 하이드로카르빌 기는 비치환되거나, 또는 할로겐 원자, C_{1-20} 알킬 기, C_{1-20} 알콕시 기, C_{7-20} 알킬아릴 기, C_{7-20} 아릴알킬 기, C_{6-20} 아릴 기, C_{6-20} 아릴옥시 기, C_{7-20} 알킬아릴옥시 기, 및 C_{7-20} 아릴알킬옥시 기로 이루어지는 군 중에서 선택되는 하나 이상의 치환체에 의해 추가로 치환되는, 헤테로원자 함유 C_{1-30} 하이드로카르빌 기;

[2192] 옥시 기, -OR';

[2193] 아미도 기, $-NR'_2$;

[2194] 포스피도 기, $-PR'_2$;

[2195] 티올레이트 기, -SR';

[2196] 화학식 $-Si(R^a)_3$의 실릴 기; 및

[2197] 화학식 $-Ge(R^a)_3$의 게르마닐 기;

[2198] 여기서, R^7, R^8, R^9 및 R^{10} 중 2개의 인접한 기는 선택적으로 결합되어 환형 하이드로카르빌 기 또는 환형 헤테로원자 함유 하이드로카르빌 기를 형성할 수 있고, 이 환형 하이드로카르빌 기 또는 환형 헤테로원자 함유 하이드로카르빌 기는 비치환되거나, 또는 할로겐 원자, C_{1-20} 알킬 기, C_{1-20} 알콕시 기, C_{7-20} 알킬아릴 기, C_{7-20} 아릴알킬 기, C_{6-20} 아릴 기, C_{6-20} 아릴옥시 기, C_{7-20} 알킬아릴옥시 기, C_{7-20} 아릴알킬옥시 기, 화학식 $-NR'_2$의 아미도 기, 화학식 $-PR'_2$의 포스피도 기, 화학식 -SR'의 티올레이트 기, 화학식 $-Si(R^a)_3$의 실릴 기, 및 화학식 $-Ge(R^a)_3$의 게르마닐 기로 이루어지는 군 중에서 선택되는 하나 이상의 치환체에 의해 추가로 치환되고;

[2199] 여기서 각 R'는 수소, C_{1-20} 알킬 기, 및 C_{6-20} 아릴 기로 이루어지는 군 중에서 독립적으로 선택되고; 그리고

[2200] 각 R^a는 수소, C_{1-8} 알킬 기, C_{1-8} 알콕시 기, C_{6-20} 아릴옥시 기, 및 C_{6-20} 아릴 기로 이루어지는 군 중에서 독립적으로 선택된다.

[2201] 일부 실시양태에서 G는 탄소, C, 또는 규소, Si, 또는 게르마늄, Ge이다.

[2202] 일부 실시양태에서 G는 탄소, C, 또는 규소, Si이다.

[2203] 일부 실시양태에서 G는 탄소, C이다.

[2204] 일부 실시양태에서 G는 규소, Si이다.

[2205] 일부 실시양태에서 G는 게르마늄, Ge이다.

[2206] 일부 실시양태에서, R^{Q} 및 R^{Q*}는 각각 독립적으로 할로겐, 수소, C_{1-30} 알킬 기, C_{1-30} 알콕시 기, C_{7-30} 알킬아릴 기, C_{7-30} 아릴알킬 기, C_{6-30} 아릴 기, C_{6-30} 아릴옥사이드 기, C_{7-30} 알킬아릴옥시 기, 및 C_{7-30} 아릴알킬옥시 기로 이루어지는 군 중에서 선택된다.

[2207] 일부 실시양태에서, R^{Q} 및 R^{Q*}는 각각 독립적으로 할로겐, 수소, C_{1-20} 알킬 기, C_{1-20} 알콕시 기, C_{7-20} 알킬아릴 기, C_{7-20} 아릴알킬 기, C_{6-20} 아릴 기, C_{6-20} 아릴옥사이드 기, C_{7-20} 알킬아릴옥시 기, 및 C_{7-20} 아릴알킬옥시 기로 이루어지는 군 중에서 선택된다.

[2208] 일부 실시양태에서, R^{Q} 및 R^{Q*}는 각각 독립적으로 수소, C_{1-20} 알킬 기 및 C_{6-20} 아릴 기로 이루어지는 군 중에서 선택된다.

[2209] 실시양태에서, R^{Q} 및 R^{Q*}는 각각 독립적으로 C_{1-8} 알킬 기이다.

[2210] 실시양태에서, R^{Q} 및 R^{Q*}는 각각 독립적으로 C_{6-20} 아릴 기이다.

[2211] 실시양태에서, R^{Q}는 수소이고 R^{Q*}는 C_{1-8} 알킬 기이다.

[2212] 실시양태에서, R^{Q}는 수소이고 R^{Q*}는 C_{6-20} 아릴 기이다.

[2213] 실시양태에서, R^{Q}는 수소이고 R^{Q*}는 메틸 기이다.

[2214] 실시양태에서, R^{Q}는 수소이고 R^{Q*}는 페닐 기이다.

[2215] 실시양태에서, R^{Q} 및 R^{Q*}는 각각 수소이다.

[2216] 일부 실시양태에서, R^{7}, R^{8}, R^{9} 및 R^{10}은 각각 독립적으로 할로겐; 수소; C_{1-30} 하이드로카르빌 기로서, 여기서 하이드로카르빌 기는 비치환되거나, 또는 할로겐 원자, C_{1-20} 알킬 기, C_{1-20} 알콕시 기, C_{7-20} 알킬아릴 기, C_{7-20} 아릴알킬 기, C_{6-20} 아릴 기, C_{6-20} 아릴옥시 기, C_{7-20} 알킬아릴옥시 기, 및 C_{7-20} 아릴알킬옥시 기로 이루어지는 군 중에서 선택되는 하나 이상의 치환체에 의해 추가로 치환되는, C_{1-30} 하이드로카르빌 기; 및 헤테로원자 함유 C_{1-30} 하이드로카르빌 기로서, 여기서 헤테로원자 함유 하이드로카르빌 기는 비치환되거나, 또는 할로겐 원자, C_{1-20} 알킬 기, C_{1-20} 알콕시 기, C_{7-20} 알킬아릴 기, C_{7-20} 아릴알킬 기, C_{6-20} 아릴 기, C_{6-20} 아릴옥시 기, C_{7-20} 알킬아릴옥시 기, 및 C_{7-20} 아릴알킬옥시 기로 이루어지는 군 중에서 선택되는 하나 이상의 치환체에 의해 추가로 치환되는, 헤테로원자 함유 C_{1-30} 하이드로카르빌 기로 이루어지는 군 중에서 선택되고; 여기서, R^{7}, R^{8}, R^{9} 및 R^{10} 중 2개의 인접한 기는 선택적으로 결합되어 환형 하이드로카르빌 기 또는 환형 헤테로원자 함유 하이드로카르빌 기를 형성할 수 있고, 이 환형 하이드로카르빌 기 또는 환형 헤테로원자 함유 하이드로카르빌 기는 비치환되거나, 또는 할로겐 원자, C_{1-20} 알킬 기, C_{1-20} 알콕시 기, C_{7-20} 알킬아릴 기, C_{7-20} 아릴알킬 기, C_{6-20} 아릴 기, C_{6-20} 아릴옥시 기, C_{7-20} 알킬아릴옥시 기, C_{7-20} 아릴알킬옥시 기, 아미도 기 $-NR'_2$, 포스피도 기 $-PR'_2$, 티올레이트 기 $-SR'$, 화학식 $-Si(R^a)_3$의 실릴 기, 및 화학식 $-Ge(R^a)_3$의 게르마닐 기로 이루어지는 군 중에서 선택되는 하나 이상의 치환체에 의해 추가로 치환되고; 여기서 각 R'는 수소, C_{1-20} 알킬 기, 및 C_{6-20} 아릴 기로 이루어지는 군 중에서 독립적으로 선택되고; 그리고 각 R^a는 수소, C_{1-8} 알킬 기, C_{1-8} 알콕시 기, C_{6-20} 아릴옥시 기, 및 C_{6-20} 아릴

기로 이루어지는 군 중에서 독립적으로 선택된다.

[2217] 일부 실시양태에서, R^7, R^8, R^9 및 R^{10}은 각각 독립적으로 할로겐; 수소; 및 C_{1-30} 하이드로카르빌 기로서, 여기서 하이드로카르빌 기는 비치환되거나, 또는 할로겐 원자, C_{1-20} 알킬 기, C_{1-20} 알콕시 기, C_{7-20} 알킬아릴 기, C_{7-20} 아릴알킬 기, C_{6-20} 아릴 기, C_{6-20} 아릴옥시 기, C_{7-20} 알킬아릴옥시 기, 및 C_{7-20} 아릴알킬옥시 기로 이루어지는 군 중에서 선택되는 하나 이상의 치환체에 의해 추가로 치환되는, C_{1-30} 하이드로카르빌 기로 이루어지는 군 중에서 선택되고; 여기서, R^7, R^8, R^9 및 R^{10} 중 2개의 인접한 기는 선택적으로 결합되어 환형 하이드로카르빌 기를 형성할 수 있고, 이 환형 하이드로카르빌 기는 비치환되거나, 또는 할로겐 원자, C_{1-20} 알킬 기, C_{1-20} 알콕시 기, C_{7-20} 알킬아릴 기, C_{7-20} 아릴알킬 기, C_{6-20} 아릴 기, C_{6-20} 아릴옥시 기, C_{7-20} 알킬아릴옥시 기, C_{7-20} 아릴알킬옥시 기, 아미도 기 $-NR'_2$, 포스피도 기 $-PR'_2$, 티올레이트 기 $-SR'$, 화학식 $-Si(R^a)_3$의 실릴 기, 및 화학식 $-Ge(R^a)_3$의 게르마닐 기로 이루어지는 군 중에서 선택되는 하나 이상의 치환체에 의해 추가로 치환되고; 여기서 각 R'는 수소, C_{1-20} 알킬 기, 및 C_{6-20} 아릴 기로 이루어지는 군 중에서 독립적으로 선택되고; 그리고 각 R^a는 수소, C_{1-8} 알킬 기, C_{1-8} 알콕시 기, C_{6-20} 아릴옥시 기, 및 C_{6-20} 아릴 기로 이루어지는 군 중에서 독립적으로 선택된다.

[2218] 일부 실시양태에서, R^7, R^8, R^9 및 R^{10}은 각각 독립적으로 할로겐; 수소; 및 헤테로원자 함유 C_{1-30} 하이드로카르빌 기로서, 여기서 헤테로원자 함유 하이드로카르빌 기는 비치환되거나, 또는 할로겐 원자, C_{1-20} 알킬 기, C_{1-20} 알콕시 기, C_{7-20} 알킬아릴 기, C_{7-20} 아릴알킬 기, C_{6-20} 아릴 기, C_{6-20} 아릴옥시 기, C_{7-20} 알킬아릴옥시 기, 및 C_{7-20} 아릴알킬옥시 기로 이루어지는 군 중에서 선택되는 하나 이상의 치환체에 의해 추가로 치환되는, 헤테로원자 함유 C_{1-30} 하이드로카르빌 기로 이루어지는 군 중에서 선택되고; 여기서, R^7, R^8, R^9 및 R^{10} 중 2개의 인접한 기는 선택적으로 결합되어 환형 헤테로원자 함유 하이드로카르빌 기를 형성할 수 있고, 이 환형 헤테로원자 함유 하이드로카르빌 기는 비치환되거나, 또는 할로겐 원자, C_{1-20} 알킬 기, C_{1-20} 알콕시 기, C_{7-20} 알킬아릴 기, C_{7-20} 아릴알킬 기, C_{6-20} 아릴 기, C_{6-20} 아릴옥시 기, C_{7-20} 알킬아릴옥시 기, C_{7-20} 아릴알킬옥시 기, 아미도 기 $-NR'_2$, 포스피도 기 $-PR'_2$, 티올레이트 기 $-SR'$, 화학식 $-Si(R^a)_3$의 실릴 기, 및 화학식 $-Ge(R^a)_3$의 게르마닐 기로 이루어지는 군 중에서 선택되는 하나 이상의 치환체에 의해 추가로 치환되고; 여기서 각 R'는 수소, C_{1-20} 알킬 기, 및 C_{6-20} 아릴 기로 이루어지는 군 중에서 독립적으로 선택되고; 그리고 각 R^a는 수소, C_{1-8} 알킬 기, C_{1-8} 알콕시 기, C_{6-20} 아릴옥시 기, 및 C_{6-20} 아릴 기로 이루어지는 군 중에서 독립적으로 선택된다.

[2219] 일부 실시양태에서, R^7, R^8, R^9 및 R^{10}은 각각 독립적으로 할로겐, 수소, C_{1-30} 알킬 기, C_{1-30} 알콕시 기, C_{7-30} 알킬아릴 기, C_{7-30} 아릴알킬 기, C_{6-30} 아릴 기, C_{6-30} 아릴옥사이드 기, C_{7-30} 알킬아릴옥시 기, 및 C_{7-30} 아릴알킬옥시 기로 이루어지는 군 중에서 선택된다.

[2220] 일부 실시양태에서, R^7, R^8, R^9 및 R^{10}은 각각 독립적으로 할로겐, 수소, C_{1-20} 알킬 기, C_{1-20} 알콕시 기, C_{7-20} 알킬아릴 기, C_{7-20} 아릴알킬 기, C_{6-20} 아릴 기, C_{6-20} 아릴옥사이드 기, C_{7-20} 알킬아릴옥시 기, 및 C_{7-20} 아릴알킬옥시 기로 이루어지는 군 중에서 선택된다.

[2221] 일부 실시양태에서, R^7, R^8, R^9 및 R^{10}은 각각 독립적으로 할로겐, 수소, 및 C_{1-30} 하이드로카르빌 기로 이루어지는 군 중에서 선택되고, 여기서 하이드로카르빌 기는 비치환되거나 또는 하나 이상의 할로겐 원자에 의해 추가로 치환된다.

[2222] 일부 실시양태에서, R^7, R^8, R^9 및 R^{10}은 각각 독립적으로 할로겐, 수소, 및 C_{1-30} 헤테로원자 함유 하이드로카르빌 기로 이루어지는 군 중에서 선택되고, 여기서 헤테로원자 함유 하이드로카르빌 기는 비치환되거나 또는 하나 이상의 할로겐 원자에 의해 추가로 치환된다.

[2223] 일부 실시양태에서, R^7, R^8, R^9 및 R^{10}은 각각 독립적으로 수소 및 C_{1-30} 하이드로카르빌 기로 이루어지는 군 중에서 선택되고, 여기서 하이드로카르빌 기는 비치환되거나 또는 하나 이상의 할로겐 원자에 의해 추가로 치환된다.

[2224] 일부 실시양태에서, R^7, R^8, R^9 및 R^{10}은 각각 독립적으로 수소 및 C_{1-30} 헤테로원자 함유 하이드로카르빌 기로 이루어지는 군 중에서 선택되고, 여기서 헤테로원자 함유 하이드로카르빌 기는 비치환되거나 또는 하나 이상의 할로겐 원자에 의해 추가로 치환된다.

[2225] 일부 실시양태에서, R^7, R^8, R^9 및 R^{10}은 각각 수소이다.

[2226] 일부 실시양태에서, R^7, R^8, R^9 및 R^{10}은 각각 수소이고; 그리고 R^{11}, R^{12}, R^{13}, R^{14}, R^{15}, R^{16}, R^{17}, R^{18}은 각각 독립적으로 할로겐, 수소, C_{1-30} 알킬 기, 및 C_{6-30} 아릴 기로 이루어지는 군 중에서 선택된다.

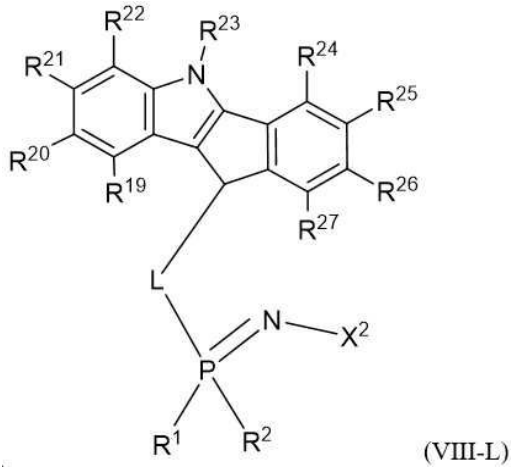
[2227] 일부 실시양태에서, R^7, R^8, R^9 및 R^{10}은 각각 수소이고; R^{11}, R^{13}, R^{14}, R^{15}, R^{16} 및 R^{18}은 각각 수소이고, 그리고 R^{12} 및 R^{17}은 각각 독립적으로 C_{1-20} 알킬 기 또는 C_{6-20} 아릴 기이다.

[2228] 일부 실시양태에서, R^7, R^8, R^9 및 R^{10}은 각각 수소이고; R^{11}, R^{13}, R^{14}, R^{15}, R^{16} 및 R^{18}은 각각 수소이고, 그리고 R^{12} 및 R^{17}은 각각 *tert*-부틸 기이다.

[2229] 일부 실시양태에서, R^7, R^8, R^9 및 R^{10}은 각각 수소이고; R^{11}, R^{12}, R^{14}, R^{15}, R^{17} 및 R^{18}은 각각 수소이고, 그리고 R^{13} 및 R^{16}은 각각 독립적으로 C_{1-20} 알킬 기 또는 C_{6-20} 아릴 기이다.

[2230] 일부 실시양태에서, R^7, R^8, R^9 및 R^{10}은 각각 수소이고; R^{11}, R^{12}, R^{14}, R^{15}, R^{17} 및 R^{18}은 각각 수소이고, 그리고 R^{13} 및 R^{16}은 각각 *tert*-부틸 기이다.

[2231] 본 개시내용의 실시양태에서, 화학식 I-L의 예비금속화 화합물은 화학식 VIII-L로 표현되는 예비금속화 화합물이다:

[2232] 

(VIII-L)

[2233] 여기서, R^1, R^2, L 및 X^2는 화학식 I-L에 대해 상기에 정의된 바와 같고; 그리고

[2234] 여기서, R^{23}은 다음으로 이루어지는 군 중에서 선택되고:

[2235] 수소;

[2236] C_{1-30} 하이드로카르빌 기로서, 여기서 하이드로카르빌 기는 비치환되거나, 또는 할로겐 원자, C_{1-20} 알킬 기, C_{1-20} 알콕시 기, C_{7-20} 알킬아릴 기, C_{7-20} 아릴알킬 기, C_{6-20} 아릴 기, C_{6-20} 아릴옥시 기, C_{7-20} 알킬아릴옥시 기, 및 C_{7-20} 아릴알킬옥시 기로 이루어지는 군 중에서 선택되는 하나 이상의 치환체에 의해 추가로 치환되는, C_{1-30} 하이드

로카르빌 기;

[2237] 헤테로원자 함유 C_{1-30} 하이드로카르빌 기로서, 여기서 헤테로원자 함유 하이드로카르빌 기는 비치환되거나, 또는 할로겐 원자, C_{1-20} 알킬 기, C_{1-20} 알콕시 기, C_{7-20} 알킬아릴 기, C_{7-20} 아릴알킬 기, C_{6-20} 아릴 기, C_{6-20} 아릴옥시 기, C_{7-20} 알킬아릴옥시 기, 및 C_{7-20} 아릴알킬옥시 기로 이루어지는 군 중에서 선택되는 하나 이상의 치환체에 의해 추가로 치환되는, 헤테로원자 함유 C_{1-30} 하이드로카르빌 기;

[2238] 여기서, R^{19}, R^{20}, R^{21}, R^{22}, R^{24}, R^{25}, R^{26}, 및 R^{27}은 각각 독립적으로 다음으로 이루어지는 군 중에서 선택되고:

[2239] 할로겐;

[2240] 수소;

[2241] C_{1-30} 하이드로카르빌 기로서, 여기서 하이드로카르빌 기는 비치환되거나, 또는 할로겐 원자, C_{1-20} 알킬 기, C_{1-20} 알콕시 기, C_{7-20} 알킬아릴 기, C_{7-20} 아릴알킬 기, C_{6-20} 아릴 기, C_{6-20} 아릴옥시 기, C_{7-20} 알킬아릴옥시 기, 및 C_{7-20} 아릴알킬옥시 기로 이루어지는 군 중에서 선택되는 하나 이상의 치환체에 의해 추가로 치환되는, C_{1-30} 하이드로카르빌 기;

[2242] 헤테로원자 함유 C_{1-30} 하이드로카르빌 기로서, 여기서 헤테로원자 함유 하이드로카르빌 기는 비치환되거나, 또는 할로겐 원자, C_{1-20} 알킬 기, C_{1-20} 알콕시 기, C_{7-20} 알킬아릴 기, C_{7-20} 아릴알킬 기, C_{6-20} 아릴 기, C_{6-20} 아릴옥시 기, C_{7-20} 알킬아릴옥시 기, 및 C_{7-20} 아릴알킬옥시 기로 이루어지는 군 중에서 선택되는 하나 이상의 치환체에 의해 추가로 치환되는, 헤테로원자 함유 C_{1-30} 하이드로카르빌 기;

[2243] 옥시 기, -OR';

[2244] 아미도 기, $-NR'_2$;

[2245] 포스피도 기, $-PR'_2$;

[2246] 티올레이트 기, -SR';

[2247] 화학식 $-Si(R^a)_3$의 실릴 기; 및

[2248] 화학식 $-Ge(R^a)_3$의 게르마닐 기;

[2249] 여기서, R^{19}, R^{20}, R^{21}, R^{22}, R^{24}, R^{25}, R^{26}, 및 R^{27} 중 2개의 인접한 기는 선택적으로 결합되어 환형 하이드로카르빌 기 또는 환형 헤테로원자 함유 하이드로카르빌 기를 형성할 수 있고, 이 환형 하이드로카르빌 기 또는 환형 헤테로원자 함유 하이드로카르빌 기는 비치환되거나, 또는 할로겐 원자, C_{1-20} 알킬 기, C_{1-20} 알콕시 기, C_{7-20} 알킬아릴 기, C_{7-20} 아릴알킬 기, C_{6-20} 아릴 기, C_{6-20} 아릴옥시 기, C_{7-20} 알킬아릴옥시 기, C_{7-20} 아릴알킬옥시 기, 화학식 $-NR'_2$의 아미도 기, 화학식 $-PR'_2$의 포스피도 기, 화학식 -SR'의 티올레이트 기, 화학식 $-Si(R^a)_3$의 실릴 기, 및 화학식 $-Ge(R^a)_3$의 게르마닐 기로 이루어지는 군 중에서 선택되는 하나 이상의 치환체에 의해 추가로 치환되고;

[2250] 여기서 각 R'는 수소, C_{1-20} 알킬 기, 및 C_{6-20} 아릴 기로 이루어지는 군 중에서 독립적으로 선택되고; 그리고

[2251] 각 R^a는 수소, C_{1-8} 알킬 기, C_{1-8} 알콕시 기, C_{6-20} 아릴옥시 기, 및 C_{6-20} 아릴 기로 이루어지는 군 중에서 독립적으로 선택된다.

[2252] 일부 실시양태에서, R^{23}은 하이드로카르빌 기가 비치환되거나, 또는 할로겐 원자, C_{1-20} 알킬 기, C_{1-20} 알콕시 기, C_{7-20} 알킬아릴 기, C_{7-20} 아릴알킬 기, C_{6-20} 아릴 기, C_{6-20} 아릴옥시 기, C_{7-20} 알킬아릴옥시 기, 및 C_{7-20} 아릴알킬옥시 기로 이루어지는 군 중에서 선택되는 하나 이상의 치환체에 의해 추가로 치환되는, C_{1-30} 하이드로카르빌 기

로 이루어지는 군 중에서 선택된다.

[2253] 일부 실시양태에서, R^{23}은 헤테로원자 함유 하이드로카르빌 기가 비치환되거나, 또는 할로겐 원자, C_{1-20} 알킬 기, C_{1-20} 알콕시 기, C_{7-20} 알킬아릴 기, C_{7-20} 아릴알킬 기, C_{6-20} 아릴 기, C_{6-20} 아릴옥시 기, C_{7-20} 알킬아릴옥시 기, 및 C_{7-20} 아릴알킬옥시 기로 이루어지는 군 중에서 선택되는 하나 이상의 치환체에 의해 추가로 치환되는, 헤테로원자 함유 C_{1-30} 하이드로카르빌 기로 이루어지는 군 중에서 선택된다.

[2254] 일부 실시양태에서, R^{19}, R^{20}, R^{21}, R^{22}, R^{24}, R^{25}, R^{26}, 및 R^{27}은 각각 독립적으로 할로겐; 수소; C_{1-30} 하이드로카르빌 기로서, 여기서 하이드로카르빌 기는 비치환되거나, 또는 할로겐 원자, C_{1-20} 알킬 기, C_{1-20} 알콕시 기, C_{7-20} 알킬아릴 기, C_{7-20} 아릴알킬 기, C_{6-20} 아릴 기, C_{6-20} 아릴옥시 기, C_{7-20} 알킬아릴옥시 기, 및 C_{7-20} 아릴알킬옥시 기로 이루어지는 군 중에서 선택되는 하나 이상의 치환체에 의해 추가로 치환되는, C_{1-30} 하이드로카르빌 기; 및 헤테로원자 함유 C_{1-30} 하이드로카르빌 기로서, 여기서 헤테로원자 함유 하이드로카르빌 기는 비치환되거나, 또는 할로겐 원자, C_{1-20} 알킬 기, C_{1-20} 알콕시 기, C_{7-20} 알킬아릴 기, C_{7-20} 아릴알킬 기, C_{6-20} 아릴 기, C_{6-20} 아릴옥시 기, C_{7-20} 알킬아릴옥시 기, 및 C_{7-20} 아릴알킬옥시 기로 이루어지는 군 중에서 선택되는 하나 이상의 치환체에 의해 추가로 치환되는, 헤테로원자 함유 C_{1-30} 하이드로카르빌 기로 이루어지는 군 중에서 선택되고; 여기서, R^{19}, R^{20}, R^{21}, R^{22}, R^{24}, R^{25}, R^{26}, 및 R^{27} 중 2개의 인접한 기는 선택적으로 결합되어 환형 하이드로카르빌 기 또는 환형 헤테로원자 함유 하이드로카르빌 기를 형성할 수 있고, 이 환형 하이드로카르빌 기 또는 환형 헤테로원자 함유 하이드로카르빌 기는 비치환되거나, 또는 할로겐 원자, C_{1-20} 알킬 기, C_{1-20} 알콕시 기, C_{7-20} 알킬아릴 기, C_{7-20} 아릴알킬 기, C_{6-20} 아릴 기, C_{6-20} 아릴옥시 기, C_{7-20} 알킬아릴옥시 기, C_{7-20} 아릴알킬옥시 기, 아미도 기 $-NR'_2$, 포스피도 기 $-PR'_2$, 티올레이트 기 $-SR'$, 화학식 $-Si(R^a)_3$의 실릴 기, 및 화학식 $-Ge(R^a)_3$의 게르마닐 기로 이루어지는 군 중에서 선택되는 하나 이상의 치환체에 의해 추가로 치환되고; 여기서 각 R'는 수소, C_{1-20} 알킬 기, 및 C_{6-20} 아릴 기로 이루어지는 군 중에서 독립적으로 선택되고; 그리고 각 R^a는 수소, C_{1-8} 알킬 기, C_{1-8} 알콕시 기, C_{6-20} 아릴옥시 기, 및 C_{6-20} 아릴 기로 이루어지는 군 중에서 독립적으로 선택된다.

[2255] 일부 실시양태에서, R^{19}, R^{20}, R^{21}, R^{22}, R^{24}, R^{25}, R^{26}, 및 R^{27}은 각각 독립적으로 할로겐; 수소; 및 C_{1-30} 하이드로카르빌 기로서, 여기서 하이드로카르빌 기는 비치환되거나, 또는 할로겐 원자, C_{1-20} 알킬 기, C_{1-20} 알콕시 기, C_{7-20} 알킬아릴 기, C_{7-20} 아릴알킬 기, C_{6-20} 아릴 기, C_{6-20} 아릴옥시 기, C_{7-20} 알킬아릴옥시 기, 및 C_{7-20} 아릴알킬옥시 기로 이루어지는 군 중에서 선택되는 하나 이상의 치환체에 의해 추가로 치환되는, C_{1-30} 하이드로카르빌 기로 이루어지는 군 중에서 선택되고; 여기서, R^{19}, R^{20}, R^{21}, R^{22}, R^{24}, R^{25}, R^{26}, 및 R^{27} 중 2개의 인접한 기는 선택적으로 결합되어 환형 하이드로카르빌 기를 형성할 수 있고, 이 환형 하이드로카르빌 기는 비치환되거나, 또는 할로겐 원자, C_{1-20} 알킬 기, C_{1-20} 알콕시 기, C_{7-20} 알킬아릴 기, C_{7-20} 아릴알킬 기, C_{6-20} 아릴 기, C_{6-20} 아릴옥시 기, C_{7-20} 알킬아릴옥시 기, C_{7-20} 아릴알킬옥시 기, 아미도 기, $-NR'_2$, 포스피도 기, $-PR'_2$, 티올레이트 기 $-SR'$, 화학식 $-Si(R^a)_3$의 실릴 기, 및 화학식 $-Ge(R^a)_3$의 게르마닐 기로 이루어지는 군 중에서 선택되는 하나 이상의 치환체에 의해 추가로 치환되고; 여기서 각 R'는 수소, C_{1-20} 알킬 기, 및 C_{6-20} 아릴 기로 이루어지는 군 중에서 독립적으로 선택되고; 그리고 각 R^a는 수소, C_{1-8} 알킬 기, C_{1-8} 알콕시 기, C_{6-20} 아릴옥시 기, 및 C_{6-20} 아릴 기로 이루어지는 군 중에서 독립적으로 선택된다.

[2256] 일부 실시양태에서, R^{19}, R^{20}, R^{21}, R^{22}, R^{24}, R^{25}, R^{26}, 및 R^{27}은 각각 독립적으로 할로겐; 수소; 및 헤테로원자 함유 C_{1-30} 하이드로카르빌 기로서, 여기서 헤테로원자 함유 하이드로카르빌 기는 비치환되거나, 또는 할로겐 원자, C_{1-20} 알킬 기, C_{1-20} 알콕시 기, C_{7-20} 알킬아릴 기, C_{7-20} 아릴알킬 기, C_{6-20} 아릴 기, C_{6-20} 아릴옥시 기, C_{7-20} 알킬아릴옥시 기, 및 C_{7-20} 아릴알킬옥시 기로 이루어지는 군 중에서 선택되는 하나 이상의 치환체에 의해 추가로 치

환되는, 헤테로원자 함유 C_{1-30} 하이드로카르빌 기로 이루어지는 군 중에서 선택되고; 여기서, R^{19}, R^{20}, R^{21}, R^{22}, R^{24}, R^{25}, R^{26}, 및 R^{27} 중 2개의 인접한 기는 선택적으로 결합되어 환형 헤테로원자 함유 하이드로카르빌 기를 형성할 수 있고, 이 환형 헤테로원자 함유 하이드로카르빌 기는 비치환되거나, 또는 할로겐 원자, C_{1-20} 알킬 기, C_{1-20} 알콕시 기, C_{7-20} 알킬아릴 기, C_{7-20} 아릴알킬 기, C_{6-20} 아릴 기, C_{6-20} 아릴옥시 기, C_{7-20} 알킬아릴옥시 기, C_{7-20} 아릴알킬옥시 기, 아미도 기, $-NR'_2$, 포스피도 기, $-PR'_2$, 티올레이트 기 $-SR'$, 화학식 $-Si(R^a)_3$의 실릴 기, 및 화학식 $-Ge(R^a)_3$의 게르마닐 기로 이루어지는 군 중에서 선택되는 하나 이상의 치환체에 의해 추가로 치환되고; 여기서 각 R'는 수소, C_{1-20} 알킬 기, 및 C_{6-20} 아릴 기로 이루어지는 군 중에서 독립적으로 선택되고; 그리고 각 R^a는 수소, C_{1-8} 알킬 기, C_{1-8} 알콕시 기, C_{6-20} 아릴옥시 기, 및 C_{6-20} 아릴 기로 이루어지는 군 중에서 독립적으로 선택된다.

[2257] 일부 실시양태에서, R^{19}, R^{20}, R^{21}, R^{22}, R^{24}, R^{25}, R^{26}, 및 R^{27}은 각각 독립적으로 할로겐, 수소, C_{1-30} 알킬 기, C_{1-30} 알콕시 기, C_{7-30} 알킬아릴 기, C_{7-30} 아릴알킬 기, C_{6-30} 아릴 기, C_{6-30} 아릴옥사이드 기, C_{7-30} 알킬아릴옥시 기, 및 C_{7-30} 아릴알킬옥시 기로 이루어지는 군 중에서 선택된다.

[2258] 일부 실시양태에서, R^{19}, R^{20}, R^{21}, R^{22}, R^{24}, R^{25}, R^{26}, 및 R^{27}은 각각 독립적으로 할로겐, 수소, C_{1-20} 알킬 기, C_{1-20} 알콕시 기, C_{7-20} 알킬아릴 기, C_{7-20} 아릴알킬 기, C_{6-20} 아릴 기, C_{6-20} 아릴옥사이드 기, C_{7-20} 알킬아릴옥시 기, 및 C_{7-20} 아릴알킬옥시 기로 이루어지는 군 중에서 선택된다.

[2259] 일부 실시양태에서, R^{19}, R^{20}, R^{21}, R^{22}, R^{24}, R^{25}, R^{26}, 및 R^{27}은 각각 독립적으로 할로겐, 수소, 및 C_{1-30} 하이드로카르빌 기로 이루어지는 군 중에서 선택되고, 여기서 하이드로카르빌 기는 비치환되거나 또는 하나 이상의 할로겐 원자에 의해 추가로 치환된다.

[2260] 일부 실시양태에서, R^{19}, R^{20}, R^{21}, R^{22}, R^{24}, R^{25}, R^{26}, 및 R^{27}은 각각 독립적으로 할로겐, 수소, 및 C_{1-30} 헤테로원자 함유 하이드로카르빌 기로 이루어지는 군 중에서 선택되고, 여기서 헤테로원자 함유 하이드로카르빌 기는 비치환되거나 또는 하나 이상의 할로겐 원자에 의해 추가로 치환된다.

[2261] 일부 실시양태에서, R^{19}, R^{20}, R^{21}, R^{22}, R^{24}, R^{25}, R^{26}, 및 R^{27}은 각각 독립적으로 수소 및 C_{1-30} 하이드로카르빌 기로 이루어지는 군 중에서 선택되고, 여기서 하이드로카르빌 기는 비치환되거나 또는 하나 이상의 할로겐 원자에 의해 추가로 치환된다.

[2262] 일부 실시양태에서, R^{19}, R^{20}, R^{21}, R^{22}, R^{24}, R^{25}, R^{26}, 및 R^{27}은 각각 독립적으로 수소 및 C_{1-30} 헤테로원자 함유 하이드로카르빌 기로 이루어지는 군 중에서 선택되고, 여기서 헤테로원자 함유 하이드로카르빌 기는 비치환되거나 또는 하나 이상의 할로겐 원자에 의해 추가로 치환된다.

[2263] 일부 실시양태에서, R^{20}은 비치환된 C_{1-30} 하이드로카르빌 기이다.

[2264] 일부 실시양태에서, R^{20}은 C_{1-8} 알킬 기이다.

[2265] 일부 실시양태에서, R^{19}, R^{20}, R^{21}, R^{22}, R^{24}, R^{25}, R^{26}, 및 R^{27}은 각각 수소이다.

[2266] 일부 실시양태에서, R^{20}은 비치환된 C_{1-30} 하이드로카르빌 기이고, 그리고 R^{19}, R^{21}, R^{22}, R^{24}, R^{25}, R^{26}, 및 R^{27}은 각각 수소이다.

[2267] 일부 실시양태에서, R^{20}은 C_{1-8} 알킬 기이고, 그리고 R^{19}, R^{21}, R^{22}, R^{24}, R^{25}, R^{26}, 및 R^{27}은 각각 수소이다.

[2268] 일부 실시양태에서, R^{20}은 메틸 기이다.

[2269] 일부 실시양태에서, R^{20}은 페닐 기이다.

[2270] 일부 실시양태에서, R^{23}은 수소, C_{1-30} 알킬 기, 및 C_{6-20} 아릴 기로 이루어지는 군 중에서 선택된다.

[2271] 일부 실시양태에서, R^{23}은 C_{1-30} 알킬 기, 및 C_{6-20} 아릴 기로 이루어지는 군 중에서 선택된다.

[2272] 일부 실시양태에서, R^{23}은 비치환된 C_{1-30} 하이드로카르빌 기이다.

[2273] 일부 실시양태에서, R^{23}은 C_{1-8} 알킬 기이다.

[2274] 일부 실시양태에서, R^{23}은 메틸 기이다.

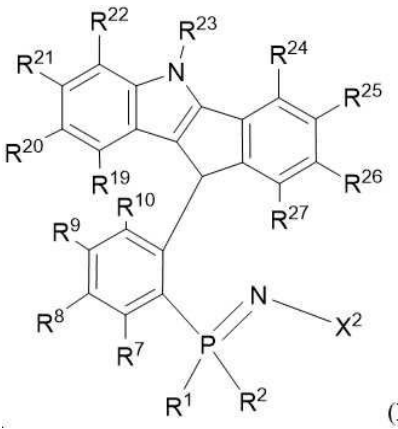
[2275] 일부 실시양태에서, R^{23}은 페닐 기이다.

[2276] 일부 실시양태에서, R^{20} 및 R^{23}은 각각 독립적으로 비치환된 C_{1-30} 하이드로카르빌 기이고; 그리고 R^{19}, R^{21}, R^{22}, R^{24}, R^{25}, R^{26}, 및 R^{27}은 각각 수소이다.

[2277] 일부 실시양태에서, R^{20} 및 R^{23}은 각각 독립적으로 C_{1-8} 알킬 기이고, 그리고 R^{19}, R^{21}, R^{22}, R^{24}, R^{25}, R^{26}, 및 R^{27}은 각각 수소이다.

[2278] 일부 실시양태에서, R^{20} 및 R^{23}은 각각 메틸 기이고; 그리고 R^{19}, R^{21}, R^{22}, R^{24}, R^{25}, R^{26}, 및 R^{27}은 각각 수소이다.

[2279] 본 개시내용의 실시양태에서, 화학식 VIII-L의 예비금속화 화합물은 화학식 IX-L로 표현되는 예비금속화 화합물이다:

[2280] 

(IX-L)

[2281] 여기서, R^{1}, R^{2}, R^{19}, R^{20}, R^{21}, R^{22}, R^{23}, R^{24}, R^{25}, R^{26}, R^{27} 및 X^{2}는 화학식 I-L 및 VIII-L에 대해 상기에 정의된 바와 같고; 그리고

[2282] 여기서, R^{7}, R^{8}, R^{9} 및 R^{10}은 각각 독립적으로 다음으로 이루어지는 군 중에서 선택된다:

[2283] 할로겐;

[2284] 수소;

[2285] C_{1-30} 하이드로카르빌 기로서, 여기서 하이드로카르빌 기는 비치환되거나, 또는 할로겐 원자, C_{1-20} 알킬 기, C_{1-20} 알콕시 기, C_{7-20} 알킬아릴 기, C_{7-20} 아릴알킬 기, C_{6-20} 아릴 기, C_{6-20} 아릴옥시 기, C_{7-20} 알킬아릴옥시 기, 및 C_{7-20} 아릴알킬옥시 기로 이루어지는 군 중에서 선택되는 하나 이상의 치환체에 의해 추가로 치환되는, C_{1-30} 하이드로카르빌 기;

[2286] 헤테로원자 함유 C_{1-30} 하이드로카르빌 기로서, 여기서 헤테로원자 함유 하이드로카르빌 기는 비치환되거나, 또는

할로겐 원자, C_{1-20} 알킬 기, C_{1-20} 알콕시 기, C_{7-20} 알킬아릴 기, C_{7-20} 아릴알킬 기, C_{6-20} 아릴 기, C_{6-20} 아릴옥시 기, C_{7-20} 알킬아릴옥시 기, 및 C_{7-20} 아릴알킬옥시 기로 이루어지는 군 중에서 선택되는 하나 이상의 치환체에 의해 추가로 치환되는, 헤테로원자 함유 C_{1-30} 하이드로카르빌 기;

[2287] 옥시 기, -OR';

[2288] 아미도 기, $-NR'_2$;

[2289] 포스피도 기, $-PR'_2$;

[2290] 티올레이트 기, -SR';

[2291] 화학식 $-Si(R^a)_3$의 실릴 기; 및

[2292] 화학식 $-Ge(R^a)_3$의 게르마닐 기;

[2293] 여기서, R^7, R^8, R^9 및 R^{10} 중 2개의 인접한 기는 선택적으로 결합되어 환형 하이드로카르빌 기 또는 환형 헤테로원자 함유 하이드로카르빌 기를 형성할 수 있고, 이 환형 하이드로카르빌 기 또는 환형 헤테로원자 함유 하이드로카르빌 기는 비치환되거나, 또는 할로겐 원자, C_{1-20} 알킬 기, C_{1-20} 알콕시 기, C_{7-20} 알킬아릴 기, C_{7-20} 아릴알킬 기, C_{6-20} 아릴 기, C_{6-20} 아릴옥시 기, C_{7-20} 알킬아릴옥시 기, C_{7-20} 아릴알킬옥시 기, 화학식 $-NR'_2$의 아미도 기, 화학식 $-PR'_2$의 포스피도 기, 화학식 -SR'의 티올레이트 기, 화학식 $-Si(R^a)_3$의 실릴 기, 및 화학식 $-Ge(R^a)_3$의 게르마닐 기로 이루어지는 군 중에서 선택되는 하나 이상의 치환체에 의해 추가로 치환되고;

[2294] 여기서 각 R'는 수소, C_{1-20} 알킬 기, 및 C_{6-20} 아릴 기로 이루어지는 군 중에서 독립적으로 선택되고; 그리고

[2295] 각 R^a는 수소, C_{1-8} 알킬 기, C_{1-8} 알콕시 기, C_{6-20} 아릴옥시 기, 및 C_{6-20} 아릴 기로 이루어지는 군 중에서 독립적으로 선택된다.

[2296] 일부 실시양태에서, R^7, R^8, R^9 및 R^{10}은 각각 독립적으로 할로겐; 수소; C_{1-30} 하이드로카르빌 기로서, 여기서 하이드로카르빌 기는 비치환되거나, 또는 할로겐 원자, C_{1-20} 알킬 기, C_{1-20} 알콕시 기, C_{7-20} 알킬아릴 기, C_{7-20} 아릴알킬 기, C_{6-20} 아릴 기, C_{6-20} 아릴옥시 기, C_{7-20} 알킬아릴옥시 기, 및 C_{7-20} 아릴알킬옥시 기로 이루어지는 군 중에서 선택되는 하나 이상의 치환체에 의해 추가로 치환되는, C_{1-30} 하이드로카르빌 기; 및 헤테로원자 함유 C_{1-30} 하이드로카르빌 기로서, 여기서 헤테로원자 함유 하이드로카르빌 기는 비치환되거나, 또는 할로겐 원자, C_{1-20} 알킬 기, C_{1-20} 알콕시 기, C_{7-20} 알킬아릴 기, C_{7-20} 아릴알킬 기, C_{6-20} 아릴 기, C_{6-20} 아릴옥시 기, C_{7-20} 알킬아릴옥시 기, 및 C_{7-20} 아릴알킬옥시 기로 이루어지는 군 중에서 선택되는 하나 이상의 치환체에 의해 추가로 치환되는, 헤테로원자 함유 C_{1-30} 하이드로카르빌 기로 이루어지는 군 중에서 선택되고; 여기서, R^7, R^8, R^9 및 R^{10} 중 2개의 인접한 기는 선택적으로 결합되어 환형 하이드로카르빌 기 또는 환형 헤테로원자 함유 하이드로카르빌 기를 형성할 수 있고, 이 환형 하이드로카르빌 기 또는 환형 헤테로원자 함유 하이드로카르빌 기는 비치환되거나, 또는 할로겐 원자, C_{1-20} 알킬 기, C_{1-20} 알콕시 기, C_{7-20} 알킬아릴 기, C_{7-20} 아릴알킬 기, C_{6-20} 아릴 기, C_{6-20} 아릴옥시 기, C_{7-20} 알킬아릴옥시 기, C_{7-20} 아릴알킬옥시 기, 아미도 기 $-NR'_2$, 포스피도 기 $-PR'_2$, 티올레이트 기 -SR', 화학식 $-Si(R^a)_3$의 실릴 기, 및 화학식 $-Ge(R^a)_3$의 게르마닐 기로 이루어지는 군 중에서 선택되는 하나 이상의 치환체에 의해 추가로 치환되고; 여기서 각 R'는 수소, C_{1-20} 알킬 기, 및 C_{6-20} 아릴 기로 이루어지는 군 중에서 독립적으로 선택되고; 그리고 각 R^a는 수소, C_{1-8} 알킬 기, C_{1-8} 알콕시 기, C_{6-20} 아릴옥시 기, 및 C_{6-20} 아릴 기로 이루어지는 군 중에서 독립적으로 선택된다.

[2297] 일부 실시양태에서, R^7, R^8, R^9 및 R^{10}은 각각 독립적으로 할로겐; 수소; 및 C_{1-30} 하이드로카르빌 기로서, 여기서

하이드로카르빌 기는 비치환되거나, 또는 할로겐 원자, C_{1-20} 알킬 기, C_{1-20} 알콕시 기, C_{7-20} 알킬아릴 기, C_{7-20} 아릴알킬 기, C_{6-20} 아릴 기, C_{6-20} 아릴옥시 기, C_{7-20} 알킬아릴옥시 기, 및 C_{7-20} 아릴알킬옥시 기로 이루어지는 군 중에서 선택되는 하나 이상의 치환체에 의해 추가로 치환되는, C_{1-30} 하이드로카르빌 기로 이루어지는 군 중에서 선택되고; 여기서, R^7, R^8, R^9 및 R^{10} 중 2개의 인접한 기는 선택적으로 결합되어 환형 하이드로카르빌 기를 형성할 수 있고, 이 환형 하이드로카르빌 기는 비치환되거나, 또는 할로겐 원자, C_{1-20} 알킬 기, C_{1-20} 알콕시 기, C_{7-20} 알킬아릴 기, C_{7-20} 아릴알킬 기, C_{6-20} 아릴 기, C_{6-20} 아릴옥시 기, C_{7-20} 알킬아릴옥시 기, C_{7-20} 아릴알킬옥시 기, 아미도 기, $-NR'_2$, 포스피도 기, $-PR'_2$, 티올레이트 기 -SR', 화학식 $-Si(R^a)_3$의 실릴 기, 및 화학식 $-Ge(R^a)_3$의 게르마닐 기로 이루어지는 군 중에서 선택되는 하나 이상의 치환체에 의해 추가로 치환되고; 여기서 각 R'는 수소, C_{1-20} 알킬 기, 및 C_{6-20} 아릴 기로 이루어지는 군 중에서 독립적으로 선택되고; 그리고 각 R^a는 수소, C_{1-8} 알킬 기, C_{1-8} 알콕시 기, C_{6-20} 아릴옥시 기, 및 C_{6-20} 아릴 기로 이루어지는 군 중에서 독립적으로 선택된다.

[2298] 일부 실시양태에서, R^7, R^8, R^9 및 R^{10}은 각각 독립적으로 할로겐; 수소; 및 헤테로원자 함유 C_{1-30} 하이드로카르빌 기로서, 여기서 헤테로원자 함유 하이드로카르빌 기는 비치환되거나, 또는 할로겐 원자, C_{1-20} 알킬 기, C_{1-20} 알콕시 기, C_{7-20} 알킬아릴 기, C_{7-20} 아릴알킬 기, C_{6-20} 아릴 기, C_{6-20} 아릴옥시 기, C_{7-20} 알킬아릴옥시 기, 및 C_{7-20} 아릴알킬옥시 기로 이루어지는 군 중에서 선택되는 하나 이상의 치환체에 의해 추가로 치환되는, 헤테로원자 함유 C_{1-30} 하이드로카르빌 기로 이루어지는 군 중에서 선택되고; 여기서, R^7, R^8, R^9 및 R^{10} 중 2개의 인접한 기는 선택적으로 결합되어 환형 헤테로원자 함유 하이드로카르빌 기를 형성할 수 있고, 이 환형 헤테로원자 함유 하이드로카르빌 기는 비치환되거나, 또는 할로겐 원자, C_{1-20} 알킬 기, C_{1-20} 알콕시 기, C_{7-20} 알킬아릴 기, C_{7-20} 아릴알킬 기, C_{6-20} 아릴 기, C_{6-20} 아릴옥시 기, C_{7-20} 알킬아릴옥시 기, C_{7-20} 아릴알킬옥시 기, 아미도 기, $-NR'_2$, 포스피도 기, $-PR'_2$, 티올레이트 기 -SR', 화학식 $-Si(R^a)_3$의 실릴 기, 및 화학식 $-Ge(R^a)_3$의 게르마닐 기로 이루어지는 군 중에서 선택되는 하나 이상의 치환체에 의해 추가로 치환되고; 여기서 각 R'는 수소, C_{1-20} 알킬 기, 및 C_{6-20} 아릴 기로 이루어지는 군 중에서 독립적으로 선택되고; 그리고 각 R^a는 수소, C_{1-8} 알킬 기, C_{1-8} 알콕시 기, C_{6-20} 아릴옥시 기, 및 C_{6-20} 아릴 기로 이루어지는 군 중에서 독립적으로 선택된다.

[2299] 일부 실시양태에서, R^7, R^8, R^9 및 R^{10}은 각각 독립적으로 할로겐, 수소, C_{1-30} 알킬 기, C_{1-30} 알콕시 기, C_{7-30} 알킬아릴 기, C_{7-30} 아릴알킬 기, C_{6-30} 아릴 기, C_{6-30} 아릴옥사이드 기, C_{7-30} 알킬아릴옥시 기, 및 C_{7-30} 아릴알킬옥시 기로 이루어지는 군 중에서 선택된다.

[2300] 일부 실시양태에서, R^7, R^8, R^9 및 R^{10}은 각각 독립적으로 할로겐, 수소, C_{1-20} 알킬 기, C_{1-20} 알콕시 기, C_{7-20} 알킬아릴 기, C_{7-20} 아릴알킬 기, C_{6-20} 아릴 기, C_{6-20} 아릴옥사이드 기, C_{7-20} 알킬아릴옥시 기, 및 C_{7-20} 아릴알킬옥시 기로 이루어지는 군 중에서 선택된다.

[2301] 일부 실시양태에서, R^7, R^8, R^9 및 R^{10}은 각각 독립적으로 할로겐, 수소, 및 C_{1-30} 하이드로카르빌 기로 이루어지는 군 중에서 선택되고, 여기서 하이드로카르빌 기는 비치환되거나 또는 하나 이상의 할로겐 원자에 의해 추가로 치환된다.

[2302] 일부 실시양태에서, R^7, R^8, R^9 및 R^{10}은 각각 독립적으로 할로겐, 수소, 및 C_{1-30} 헤테로원자 함유 하이드로카르빌 기로 이루어지는 군 중에서 선택되고, 여기서 헤테로원자 함유 하이드로카르빌 기는 비치환되거나 또는 하나 이상의 할로겐 원자에 의해 추가로 치환된다.

[2303] 일부 실시양태에서, R^7, R^8, R^9 및 R^{10}은 각각 독립적으로 수소 및 C_{1-30} 하이드로카르빌 기로 이루어지는 군 중에서 선택되고, 여기서 하이드로카르빌 기는 비치환되거나 또는 하나 이상의 할로겐 원자에 의해 추가로

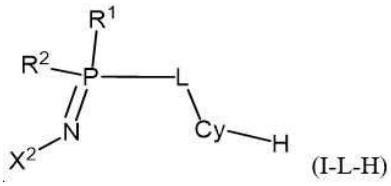
치환된다.

[2304] 일부 실시양태에서, R^7, R^8, R^9 및 R^{10}은 각각 독립적으로 수소 및 C_{1-30} 헤테로원자 함유 하이드로카르빌 기로 이루어지는 군 중에서 선택되고, 여기서 헤테로원자 함유 하이드로카르빌 기는 비치환되거나 또는 하나 이상의 할로겐 원자에 의해 추가로 치환된다.

[2305] 일부 실시양태에서, R^7, R^8, R^9 및 R^{10}은 각각 수소이다.

[2306] 금속화 반응

[2307] 본 개시내용의 실시양태는 유기금속 복합체(예비중합 촉매)를 제조하는 공정이며, 여기서 공정은 화학식 I-L-H로 표현되는 화합물을 화학식 MX^*_4를 갖는 4족 전이 금속 화합물과 반응시키는 것을 포함한다:

[2308] 

(I-L-H)

[2309] 여기서,

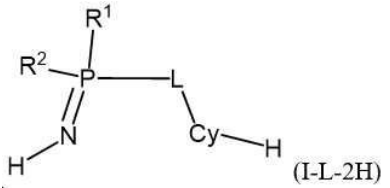
[2310] M은 Ti, Zr, 또는 Hf이고;

[2311] 각 X^*는 할로겐, 수소, 화학식 $-NR^{\epsilon}_2$의 아미도 기, C_{1-20} 알킬 기, C_{1-20} 알콕시 기, C_{7-20} 알킬아릴 기, C_{7-20} 아릴알킬 기, C_{6-20} 아릴 기, C_{6-20} 아릴옥사이드 기, C_{7-20} 알킬아릴옥시 기, 및 C_{7-20} 아릴알킬옥시 기로 이루어지는 군 중에서 독립적으로 선택되고; 여기서 각 R^{ϵ}는 수소, C_{1-20} 알킬 기, 및 C_{6-20} 아릴 기로 이루어지는 군 중에서 독립적으로 선택되고;

[2312] X^2는 화학식 $-Si(R^e)_3$의 실릴 기이고, 여기서 각 R^e는 수소, C_{1-8} 알킬 기, C_{1-8} 알콕시 기, C_{6-20} 아릴옥시 기 및 C_{6-20} 아릴 기로 이루어지는 군 중에서 독립적으로 선택되고; 그리고

[2313] 여기서, R^1, R^2, L, 및 Cy는 화학식 I-L에 대해 상기에 정의된 바와 같다.

[2314] 본 개시내용의 실시양태는 유기금속 복합체(예비중합 촉매)를 제조하는 공정이며, 여기서 공정은 화학식 I-L-2H로 표현되는 화합물을 염기와 반응시킨 뒤, 화학식 MX^*_4를 갖는 4족 전이 금속 화합물과 반응시키는 것을 포함한다:

[2315] 

(I-L-2H)

[2316] 여기서,

[2317] M은 Ti, Zr, 또는 Hf이고;

[2318] 각 X^*는 할로겐, 수소, 화학식 $-NR^{\epsilon}_2$의 아미도 기, C_{1-20} 알킬 기, C_{1-20} 알콕시 기, C_{7-20} 알킬아릴 기, C_{7-20} 아릴알킬 기, C_{6-20} 아릴 기, C_{6-20} 아릴옥사이드 기, C_{7-20} 알킬아릴옥시 기, 및 C_{7-20} 아릴알킬옥시 기로 이루어지는 군 중에서 독립적으로 선택되고; 여기서 각 R^{ϵ}는 수소, C_{1-20} 알킬 기, 및 C_{6-20} 아릴 기로 이루어지는 군 중에서 독립적으로 선택되고;

[2319] 여기서, R^1, R^2, L, 및 Cy는 화학식 I-L에 대해 상기 정의된 바와 같다.

[2320] 실시양태에서, 각 X^*은 할로겐이다.

[2321] 실시양태에서, 각 X^*은 염화물이다.

[2322] 실시양태에서, 각 R^c는 메틸이다.

[2323] 실시양태에서, M은 Ti이다.

[2324] 실시양태에서, M은 Hf이다.

[2325] 일부 실시양태에서, MX^*_4는 $TiCl_4$이다.

[2326] 일부 실시양태에서, MX^*_4는 $Ti(NMe_2)Cl_2$이다.

[2327] 일부 실시양태에서, MX^*_4는 $Ti(NMe_2)_4$이다.

[2328] 일부 실시양태에서, 각 X^*는 할로겐 원자, 및 화학식 $-NR^{\epsilon}_2$를 갖는 아미도 기로 이루어지는 군 중에서 독립적으로 선택되고, 여기서 각 R^{ϵ} 기는 수소 원자, C_{1-10} 알킬 기, 및 C_{6-10} 아릴 기로 이루어지는 군 중에서 독립적으로 선택된다.

[2329] 일부 실시양태에서, 각 X^*는 염화물 원자, 및 화학식 $-NR^{\epsilon}_2$를 갖는 아미도 기로 이루어지는 군 중에서 독립적으로 선택되고, 여기서 각 R^{ϵ} 기는 수소 원자, C_{1-10} 알킬 기, 및 C_{6-10} 아릴 기로 이루어지는 군 중에서 독립적으로 선택된다.

[2330] 일부 실시양태에서 각 X^*는 염화물 및 디메틸 아미도 기, $-NMe_2$로 이루어지는 군 중에서 독립적으로 선택된다.

[2331] 실시양태에서, 각 X^*는 디메틸 아미도 기, $-NMe_2$이다.

[2332] 실시양태에서, X^2는 트리메틸실릴 기, $-SiMe_3$이다.

[2333] 본 개시내용의 실시양태에서, 금속화 반응(유기금속 복합체의 생산을 위한)에 사용될 수 있는 염기로는 유기 알칼리 금속 화합물, 예컨대 예를 들어 유기리튬 화합물, 예컨대 메틸 리튬, 에틸 리튬, n-부틸 리튬, sec-부틸 리튬, tert-부틸 리튬, 리튬 트리메틸실릴아세틸라이드, 리튬 아세틸라이드, 트리메틸실릴메틸 리튬, 비닐 리튬, 페닐 리튬 및 알릴 리튬을 포함한다.

[2334] 실시양태에서, 사용된 염기의 양은 화학식 I-L-2H를 갖는 화합물 1 몰당 염기 0.5 내지 5 몰의 범위일 수 있다. 추가 실시양태에서, 사용된 염기의 양은 화학식 I-L-2H를 갖는 화합물 1 몰당 염기 1.0 내지 3.0 몰의 범위, 또는 화학식 I-L-2H를 갖는 화합물 1 몰당 염기 1.5 내지 2.5 몰의 범위, 또는 화학식 I-L-2H를 갖는 화합물 1 몰당 염기 1.8 내지 2.3 몰의 범위, 또는 화학식 I-L-2H를 갖는 화합물 1 몰당 염기 약 2 몰일 수 있다.

[2335] 일부 실시양태에서, 염기는 아민 화합물과 조합으로 사용될 수 있다. 이러한 아민 화합물로는 메틸아민, 에틸아민, n-프로필아민, 이소프로필아민, n-부틸아민, tert-부틸아민, n-옥틸아민, n-데실아민, 아닐린 및 에틸렌디아민과 같은 1차 아민 화합물, 디메틸아민, 디에틸아민, 디-n-프로필아민, 디-n-부틸아민, 디-tert-부틸아민, 디-n-옥틸아민, 디-n-데실아민, 피롤리딘, 헥사메틸디실라잔 및 디페닐아민과 같은 2차 아민 화합물, 및 트리메틸아민, 트리에틸아민, 트리-n-프로필아민, 트리-n-부틸아민, 디이소프로필에틸아민, 트리-n-옥틸아민, 트리-n-데실아민, 트리페닐아민, N,N-디메틸아닐린, N,N,N',N'-테트라메틸에틸렌디아민, N-메틸피롤리딘 및 4-디메틸아미노피리딘과 같은 3차 아민 화합물을 포함한다.

[2336] 이러한 아민 화합물의 사용된 양은 본 개시내용의 실시양태에서 염기 1 몰당 아민 화합물 10 몰 이하, 0.5 내지 10 몰, 또는 1 내지 3 몰 범위이다.

[2337] 금속화 반응은 일반적으로 불활성 용매에서 수행된다. 실시양태에서, 이러한 용매는 비양성자성 용매, 예를 들

어 벤젠 또는 톨루엔과 같은 방향족 탄화수소 용매, 헥산 또는 헵탄과 같은 지방족 탄화수소 용매, 디에틸 에테르, 테트라하이드로푸란 또는 1,4-디옥산과 같은 에테르 용매, 헥사메틸포스포릭 아미드 또는 디메틸포름아미드와 같은 아미드 용매, 아세토니트릴, 디클로로메탄, 1,2-디클로로에탄, 프로피오니트릴, 아세톤, 디에틸 케톤, 메틸 이소부틸 케톤 및 사이클로헥사논과 같은 극성 용매, 및 클로로벤젠 또는 디클로로벤젠과 같은 할로겐화된 용매를 포함한다. 실시양태에서, 이들 용매는 단독으로 또는 이들 중 2개 이상의 혼합물로서 사용될 수 있다.

[2338] 금속화 반응은 일반적으로 화학식 I-L-H를 갖는 화합물과 화학식 MX^*_4를 갖는 4족 전이 금속 화합물을 용매에 첨가함으로써 수행될 수 있으며, 다양한 화합물 첨가 순서가 본 개시내용의 다양한 실시양태에 사용하기 위해 고려된다. 일부 실시양태에서, 화학식 I-L-H를 갖는 화합물 및 화학식 MX^*_4를 갖는 4족 전이 금속 화합물은 동시에 첨가될 수 있다.

[2339] 금속화 반응은 일반적으로 화학식 I-L-2H를 갖는 화합물과 염기를 용매에 첨가한 다음 화학식 MX^*_4를 갖는 4족 전이 금속 화합물을 첨가하여 수행할 수 있지만, 다른 화합물 첨가 순서도 본 개시내용의 다양한 실시양태에 사용하기 위해 고려된다. 일부 실시양태에 있어서, 화학식 I-L-2H를 갖는 화합물 및 염기를 용매에 첨가한 후 침전될 수 있는 고체는 반응 시스템에서 제거한 다음 상기 기술된 것과 동일한 용매에 첨가할 수 있고, 그 다음 화학식 MX^*_4를 갖는 4족 전이 금속 화합물이 여기에 첨가될 수 있다. 일부 실시양태에서, 화학식 I-L-2H를 갖는 화합물, 염기 및 화학식 MX^*_4를 갖는 4족 전이 금속 화합물은 동시에 첨가될 수 있다.

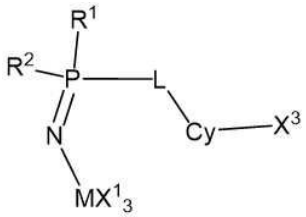
[2340] 실시양태에서, 유기금속 복합체는 이와 같이 수득된 반응 혼합물로부터, 통상적인 방법을 사용하여, 예컨대 생성된 침전물을 여과해 내거나, 또는 진공 하에서 용매를 제거함으로써, 생성물로서 유기금속 복합체를 제공할 수 있고, 이는 선택적으로 용매를 사용하여 세척할 수 있다.

[2341] 유기금속 복합체 전구체

[2342] 본 개시내용의 일부 실시양태에서, 이론으로 얽매려고 하는 것은 아니지만, 화학식 I 내지 IX로 표현되는 유기금속 복합체는 X^3의 상실을 용이하게 하는 하나 이상의 시약뿐만 아니라 하나의 활성화 가능한 X^1 리간드의 존재하에 화학식 I-M(아래에 제시됨)으로 표현되는 유기금속 복합체로부터 동일계에서 형성될 수 있어, 사이클로펜타디에닐형 모이어티가 사이클로펜타디에닐형 리간드로서 금속 중심 M에 대해 η-결합을 통해 배위될 수 있다.

[2343] X^3의 상실을 용이하게 할 수 있는 시약은 본 개시내용의 일부 실시양태에서 이하에 기술되는 바와 같은 촉매 활성화제 및 공촉매이며, 붕소계 활성화제, 알킬알루미녹산 공촉매 및 유기알루미늄 화합물을 포함한다.

[2344] 따라서, 본 개시내용의 추가 실시양태에서, 예비중합 촉매는 화학식 I-M으로 표현되는 유기금속 복합체이다:



(I-M)

[2345]

[2346] 여기서, M, R^1, R^2, L, 및 X^1은 화학식 I에 대해 상기 정의된 바와 같고; Cy 및 X^3은 화학식 I-L에 대해 상기 정의된 바와 같다.

[2347] 본 개시내용의 실시양태에서, X^3은 수소이다.

[2348] 올레핀 중합 촉매 시스템

[2349] 올레핀 중합 촉매 시스템에서, 유기금속 복합체(예비중합 촉매)는 올레핀 중합을 위한 활성 중합 촉매를 형성하기 위해 촉매 활성화제와 조합으로 사용된다. 이론으로 얽매려는 것은 아니지만, 촉매 활성화제는 예비중합 촉매의 금속 중심에서 활성화 가능한 리간드를 제거하는 방식(예를 들어, 양성자분해 또는 친전자성 추출)으로 활성 "양이온성" 금속 중심을 생성한다.

[2350] 예비중합 촉매를 활성화하는 데 사용되는 촉매 활성화제(또한 "공촉매"로 알려짐)는 관련 기술분야의 기술자에게 알려진 임의의 적합한 촉매 활성화제(또는 공촉매)일 수 있으며, 여기에는 붕소계 활성화제를 포함하는 소위 이온성 활성화제; 알킬알루미녹산; 및 유기알루미늄 화합물로 이루어지는 군 중에서 선택되는 하나 이상의 활성화제가 포함된다.

[2351] 촉매 활성화제는 선택적으로 알킬화제와 함께 사용될 수 있으며, 이는 또한 관련 기술분야에 잘 알려져 있으며, 알킬알루미녹산 화합물, 유기알루미늄 화합물 및 디알킬 아연 화합물을 포함한다.

[2352] "이온 활성화제"로도 알려진 붕소계 촉매 활성화제는 관련 기술분야의 기술자에게 잘 알려져 있다. 촉매 활성화제 또는 공촉매로도 작용할 수 있는 알킬알루미녹산도 관련 기술분야의 기술자에게 잘 알려져 있다.

[2353] 이론으로 얽매려는 것은 아니지만, 알킬알루미녹산과 같은 알루미늄계 종 및 유기알루미늄 화합물은 그 자체로는 촉매 활성화제 및/또는 알킬화제 및/또는 스캐빈징 화합물(예: 유기금속 복합체의 중합 활성에 부정적인 영향을 미치고 중합 반응기에 존재할 수 있는 종과 반응함)로서 작용할 수 있다.

[2354] 본 개시내용의 한 실시양태에서, 유기금속 복합체(예비중합 촉매) 외에 올레핀 중합 촉매 시스템은 적어도 하나의 붕소계 촉매 활성화제를 포함한다.

[2355] 본 개시내용의 한 실시양태에서, 유기금속 복합체(예비중합 촉매) 외에 올레핀 중합 촉매 시스템은 적어도 하나의 붕소계 촉매 활성화제, 및 적어도 하나의 알킬알루미녹산 공촉매를 포함한다.

[2356] 본 개시내용의 일부 실시양태에서, 올레핀 중합 촉매 시스템은 추가적으로 공촉매로서 유기알루미늄 화합물을 포함할 수 있다.

[2357] 본 개시내용의 일부 실시양태에서, 올레핀 중합 촉매 시스템은 추가적으로 방해된 페놀 화합물을 포함할 수 있다.

[2358] 이론으로 얽매려는 것은 아니지만, 본 개시내용에 사용되는 알킬알루미녹산은 화학식 $R_2Al^1O(RAl^1O)_mAl^1R_2$의 복합 알루미늄 화합물이며, 여기서 각 R은 C_{1-20} 하이드로카르빌 기로 이루어지는 군 중에서 독립적으로 선택되고, m은 3 내지 50이다.

[2359] 본 개시내용의 실시양태에서, 알킬알루미녹산의 R은 메틸 기이고 m은 10 내지 40이다.

[2360] 알킬알루미녹산은 전형적으로 유기금속 복합체(예, 예비중합 촉매) 내 4족 전이 금속의 양에 비해 상당한 몰 과량으로 사용된다. 실시양태에서, Al^1:4족 전이 금속 몰 비는 약 5:1 내지 약 10,000:1, 또는 약 10:1 내지 약 1000:1, 또는 약 30:1 내지 약 500:1일 수 있다.

[2361] 관련 기술분야의 기술자는 유기금속 복합체 내 4족 전이 금속에 상대적인 사용된 알킬알루미녹산의 양을 중합 공정에 존재하는 불순물을 제거(또는 적정)하기 위해 최적화할 수 있다는 것을 알 것이다. 일부 실시양태에서, Al^1:4족 전이 금속 몰비는 올레핀 중합 촉매 시스템 활성을 최대화하도록 최적화되며 약 0.1:1 내지 100:1 초과 또는 100:1보다 더 높은 범위일 수 있다.

[2362] 본 개시내용의 실시양태에서, 알킬알루미녹산 공촉매는 메틸알루미녹산(MAO)이다.

[2363] 본 개시내용의 실시양태에서, 알킬알루미녹산 공촉매는 변형된 메틸알루미녹산(MMAO)이다.

[2364] 알킬알루미녹산은 촉매 알킬화제, 촉매 활성화제, 및 스캐빈저로서 여러 역할을 할 수 있다는 것은 관련 기술분야에 잘 알려져 있다. 따라서, 알킬알루미녹산 활성화제는 종종 할로겐과 같은 활성화 가능한 리간드와 조합으로 사용된다.

[2365] 붕소계 촉매 활성화제(일부 실시양태에서는 "이온성 활성화제"라고도 알려져 있음)는 다음으로 이루어지는 군 중에서 선택될 수 있다: (i) 화학식 $[R^{34}]^+$ $[B(R^{35})_4]^-$의 화합물, 여기서 B는 붕소 원자이고, R^{34}는 환형 C_{5-7} 방향족 양이온 또는 트리페닐 메틸 양이온이고, 각 R^{35}는 비치환되거나 또는 불소 원자, 비치환되거나 불소 원자로 치환되는 C_{1-4} 알킬 또는 알콕시 기로 이루어지는 군 중에서 선택되는 3 내지 5개의 치환체에 의해 치환되는 페닐 기; 및 각 R^*이 수소 원자 및 C_{1-4} 알킬 기로 이루어지는 군 중에서 독립적으로 선택되는 화학식 --Si--

$(R^{*})_3$의 실릴 기로 이루어지는 군 중에서 독립적으로 선택됨; 및 (ii) 화학식 $[(R^{36})_tZH]^+$ $[B(R^{35})_4]^-$의 화합물, 여기서 B는 붕소 원자이고, H는 수소 원자이며, Z는 질소 원자 또는 인 원자이고, t는 2 또는 3이고, R^{36}은 C_{1-30} 알킬 기, 비치환되거나 또는 최대 3개의 C_{1-4} 알킬 기에 의해 치환되는 페닐 기로 이루어지는 군 중에서 선택되고, 또는 하나의 R^{36}은 질소 원자와 함께 취해진 경우 아닐리늄 기를 형성할 수 있고, R^{35}는 상기에 정의된 바와 같음; 및 (iii) R^{35}가 상기에 정의된 바와 같은 화학식 $B(R^{35})_3$의 화합물, 및 이의 부가물, 예를 들어 하이드로실란 $-B(C_6F_5)_3$.

[2366] 일부 실시양태에서, 상기 화합물에서 바람직하게는 R^{35}는 펜타플루오로페닐 기이고, R^{34}는 트리페닐메틸 양이온이고, Z는 질소 원자이고 R^{36}은 C_{1-4} 알킬 기이거나, 또는 질소 원자와 하나의 R^{36}이 함께 취해진 경우 아닐리늄 기(예, 2개의 C_{1-4} 알킬 기와 같은 2개의 R^{36} 기에 의해 치환되는, $PhR^{36}_2NH^+$)를 형성한다.

[2367] 단일 부위 촉매(예: 예비중합 촉매)를 이온화할 수 있고 본 개시내용의 실시양태에 사용될 수 있는 붕소계 촉매 활성화제 화합물의 예는 다음을 포함한다: 트리에틸암모늄 테트라(페닐)붕소, 트리프로필암모늄 테트라(페닐)붕소, 트리(n-부틸)암모늄 테트라(페닐)붕소, 트리메틸암모늄 테트라(p-톨릴)붕소, 트리메틸암모늄 테트라(o-톨릴)붕소, 트리부틸암모늄 테트라키스(펜타플루오로페닐)붕소, 트리프로필암모늄 테트라키스(o,p-디메틸페닐)붕소, 트리부틸암모늄 테트라키스(m,m-디메틸페닐)붕소, 트리부틸암모늄 테트라키스(p-트리플루오로메틸페닐)붕소, 트리부틸암모늄 테트라키스(펜타플루오로페닐)붕소, 트리(n-부틸)암모늄 테트라(o-톨릴)붕소, N,N-디메틸아닐리늄 테트라(페닐)붕소, N,N-디에틸아닐리늄 테트라(페닐)붕소, N,N-디에틸아닐리늄 테트라(페닐)n-부틸붕소, N,N-2,4,6-펜타메틸아닐리늄 테트라(페닐)붕소, 디-(이소프로필)암모늄 테트라키스(펜타플루오로페닐)붕소, 디사이클로헥실암모늄 테트라(페닐)붕소, 트리페닐포스포늄 테트라(페닐)붕소, 트리(메틸페닐)포스포늄 테트라(페닐)붕소, 트리(디메틸페닐)포스포늄 테트라(페닐)붕소, 트로필륨 테트라키스(펜타플루오로페닐) 붕산염, 트리페닐메틸륨 테트라키스펜타플루오로페닐 붕산염, 벤젠(디아조늄) 테트라키스(펜타플루오로페닐)붕산염, 트로필륨페닐트리스-(펜타플루오로페닐)붕산염, 트리페닐메틸륨페닐트리스(펜타플루오로페닐) 붕산염, 벤젠(디아조늄)페닐트리스(펜타플루오로페닐) 붕산염, 트로필륨 테트라키스(2,3,5,6-테트라플루오로페닐) 붕산염, 트리페닐메틸륨 테트라키스(2,3,5,6-테트라플루오로페닐) 붕산염, 벤젠(디아조늄) 테트라키스(3,4,5-트리플루오로페닐) 붕산염, 트로필륨 테트라키스(3,4,5-트리플루오로페닐) 붕산염, 벤젠(디아조늄)테트라키스(3,4,5-트리플루오로페닐) 붕산염, 트로필륨 테트라키스(1,2,2-트리플루오로에테닐) 붕산염, 트리페닐메틸륨 테트라키스(1,2,2-트리플루오로에테닐) 붕산염, 벤젠(디아조늄) 테트라키스(1,2,2-트리플루오로에테닐) 붕산염, 트로필륨 테트라키스(2,3,4,5-테트라플루오로페닐) 붕산염, 트리페닐메틸륨 테트라키스(2,3,4,5-테트라플루오로페닐) 붕산염, 및 벤젠(디아조늄) 테트라키스(2,3,4,5-테트라플루오로페닐) 붕산염.

[2368] 단일 부위 촉매(예: 예비중합 촉매)를 이온화할 수 있고 본 개시내용의 실시양태에서 사용될 수 있는 붕소계 촉매 활성화제 화합물의 추가 구체적인 예는 미국 특허 제5,919,983호, 제6,121,185호, 제10,730,964호 및 제11,041,031호에 개시되어 있다. 붕소계 촉매 활성화제, $[(수소화된\ 탈로우\ 알킬)_2(Me)NH][B(C_6F_5)4]$는 "비스(수소화된 탈로우 알킬) 메틸암모늄 테트라키스(펜타플루오로페닐)붕산염"으로도 알려져 있으며, 다음 화학식을 갖는다:$[(C_{18-22}H_{37-45})_2(Me)NH][B(C_6F_5)_4]$.

[2369] 본 개시내용의 실시양태에서, 붕소계 촉매 활성화제는 $[(수소화된\ 탈로우\ 알킬)_2(Me)NH][B(C_6F_5)_4$; 및/또는 N,N-디메틸아닐리늄 테트라키스(펜타플루오로페닐) 붕산염 ("$[Me_2NHPh][B(C_6F_5)_4]$"); 및/또는 트리페닐메틸륨 테트라키스(펜타플루오로페닐) 붕산염 ("$[Ph_3C][B(C_6F_5)_4]$"); 및/또는 트리스(펜타플루오로페닐) 붕소를 포함한다.

[2370] 본 개시내용의 실시양태에서, 붕소계 촉매 활성화제는 $[(수소화된\ 탈로우\ 알킬)_2(Me)NH][B(C_6F_5)_4$; 또는 N,N-디메틸아닐리늄 테트라키스(펜타플루오로페닐) 붕산염 ("$[Me_2NHPh][B(C_6F_5)_4]$"), 또는 트리페닐메틸륨 테트라키스(펜타플루오로페닐) 붕산염 ("$[Ph_3C][B(C_6F_5)_4]$"), 또는 트리스(펜타플루오로페닐) 붕소를 포함한다.

[2371] 본 개시내용의 실시양태에서, 붕소계 촉매 활성화제는 N,N-디메틸아닐리늄 테트라키스(펜타플루오로페닐) 붕산염 ("$[Me_2NHPh][B(C_6F_5)_4]$"), 및/또는 트리페닐메틸륨 테트라키스(펜타플루오로페닐) 붕산염

("[Ph_3C][$B(C_6F_5)_4$]"), 및/또는 트리스(펜타플루오로페닐) 붕소를 포함한다.

[2372] 본 개시내용의 실시양태에서, 붕소계 촉매 활성화제는 N,N-디메틸아닐리늄 테트라키스(펜타플루오로페닐) 붕산염 ("[Me_2NHPh][$B(C_6F_5)_4$]"), 또는 트리페닐메틸륨 테트라키스(펜타플루오로페닐) 붕산염 ("[Ph_3C][$B(C_6F_5)_4$]"), 또는 트리스(펜타플루오로페닐) 붕소를 포함한다.

[2373] 본 개시내용의 실시양태에서, 붕소계 촉매 활성화제는 [(수소화된 탈로우 알킬)$_2$(Me)NH][$B(C_6F_5)_4$; N,N-디메틸아닐리늄 테트라키스(펜타플루오로페닐) 붕산염 ("[Me_2NHPh][$B(C_6F_5)_4$]"), 및 트리페닐메틸륨 테트라키스(펜타플루오로페닐) 붕산염 ("[Ph_3C][$B(C_6F_5)_4$]")으로 이루어지는 군 중에서 선택되는 이온성 활성화제를 포함한다.

[2374] 본 개시내용의 실시양태에서, 붕소계 촉매 활성화제는 N,N-디메틸아닐리늄 테트라키스(펜타플루오로페닐) 붕산염 ("[Me_2NHPh][$B(C_6F_5)_4$]")이다.

[2375] 본 개시내용의 실시양태에서, 붕소계 촉매 활성화제는 트리페닐메틸륨 테트라키스(펜타플루오로페닐) 붕산염 ("[Ph_3C][$B(C_6F_5)_4$]")이다.

[2376] 본 개시내용의 실시양태에서, 붕소계 촉매 활성화제는 [(수소화된 탈로우 알킬)$_2$(Me)NH][$B(C_6F_5)_4$이다.

[2377] 본 개시내용의 실시양태에서, 붕소계 촉매 활성화제는 트리하이드로카르빌암모늄 테트라키스(펜타플루오로페닐) 붕산염 ([R^Z_3NH][$B(C_6F_5)_4$]을 포함하고, 여기서 각 R^Z는 독립적으로 C_{1-40} 분지형 알킬 기, C_{1-40} 선형 알킬 기, 또는 C_{6-30} 아릴 기이고, 여기서 분지형 알킬 기, 선형 알킬 기, 또는 아릴 기 각각은 비치환되거나, 또는 하나 이상의 할로겐, C_{1-30} 알킬 기, C_{6-20} 아릴 기, C_{6-20} 아릴옥사이드 기, C_{7-20} 알킬아릴옥시 기, 및/또는 C_{7-20} 아릴알킬옥시 기에 의해 추가로 치환된다.

[2378] 실시양태에서, 붕소계 촉매 활성화제는 약 1:0.5 내지 약 1:10, 또는 약 1:1 내지 약 1:6일 4족 전이 금속(예를 들어, 예비중합 촉매 중 티타늄 또는 하프늄) 대 붕소의 몰 비를 제공하는 양으로 사용될 수 있다.

[2379] 선택적으로, 본 개시내용의 실시양태에서, 올레핀 중합 촉매 시스템은 다음 화학식으로 정의되는 유기알루미늄 화합물을 추가로 포함할 수 있다:

[2380] $Al(R^{37})_m(OR^{38})_n(X^¥)_p$

[2381] 여기서, R^{37} 및 R^{38}은 각각 독립적으로 C_1 내지 C_{20} 하이드로카르빌 기이고; $X^¥$은 할라이드이며; $m + n + p = 3$; 및 $m \geq 1$이다.

[2382] 본 개시내용의 실시양태에서, 사용된 유기알루미늄 화합물은 다음 화학식으로 정의된다:

[2383] $Al(R^{37})_x(OR^{38})_y$

[2384] 여기서, x는 1 내지 3, $x + y = 3$이고, R^{37}은 C_1 내지 C_{10} 하이드로카르빌 기이며, 그리고 R^{38}은 알킬 또는 아릴 기이다.

[2385] 본 개시내용의 실시양태에서, 사용된 유기알루미늄 화합물은 다음 화학식으로 정의된다:

[2386] $Al(R^{37})_3$

[2387] 여기서, R^{37}은 C_1 내지 C_{20} 하이드로카르빌 기이다.

[2388] 본 개시내용의 실시양태에서, 사용된 유기알루미늄 화합물은 다음 화학식으로 정의된다:

[2389] $Al(R^{37})_3$

[2390] 여기서, R^{37}은 C_{6-20} 아릴 기이고, 여기서 아릴 기는 비치환되거나, 또는 하나 이상의 불소에 의해 치환된다.

[2391] 특정 실시양태에서, 유기알루미늄 화합물은 트리에틸알루미늄, 트리이소부틸 알루미늄, 트리-n-옥틸알루미늄 및 디에틸 알루미늄 에톡사이드를 포함한다.

[2392] 선택적으로, 본 개시내용의 실시양태에서, 올레핀 중합 촉매 시스템은 다음 화학식으로 정의되는 디알킬 아연 화합물을 추가로 포함할 수 있다:

[2393] $Zn(R^{39})_2$

[2394] 여기서 각 R^{39}는 독립적으로 C_1 내지 C_{20} 알킬 기이다.

[2395] 선택적으로, 본 개시내용의 실시양태에서, 올레핀 중합 촉매 시스템은 방해된 페놀 화합물을 추가로 포함할 수 있다.

[2396] 본 개시내용의 실시양태에서, 방해된 페놀 화합물은 유기금속 복합체(예비중합 촉매), 및 알킬알루미녹산 공촉매와 조합으로 사용되어 올레핀 중합 촉매 시스템을 제공한다. 본 개시내용의 실시양태에서, 방해된 페놀 화합물은 유기금속 복합* (예비중합 촉매), 알킬알루미녹산 공촉매 및 유기알루미늄 화합물과 조합으로 사용되어 올레핀 중합 촉매 시스템을 제공한다. 본 개시내용의 실시양태에서, 방해된 페놀 화합물은 유기금속 복합체 (예비중합 촉매), 붕소계 촉매 활성화제 및 알킬알루미녹산 공촉매와 조합으로 사용되어 올레핀 중합 촉매 시스템을 제공한다. 본 개시내용의 실시양태에서, 방해된 페놀 화합물은 유기금속 복합* (예비중합 촉매), 붕소계 촉매 활성화제, 알킬알루미녹산 공촉매 및 유기알루미늄 화합물과 조합으로 사용되어 올레핀 중합 촉매 시스템을 제공한다. 본 개시내용의 실시양태에서, 방해된 페놀 화합물은 유기금속 복합체 (예비중합 촉매), 붕소계 촉매 활성화제, 알킬알루미녹산 공촉매, 유기알루미늄 화합물 및 디알킬 아연 화합물과 조합으로 사용되어 올레핀 중합 촉매 시스템을 제공한다.

[2397] 일반적으로, 방해된 페놀 화합물 (또는 "입체 방해된" 페놀 화합물)은 입체적 벌키 하이드로카르빌 기와 같은 하나 이상의 벌키 치환체를 갖는 페놀이고, 이의 비제한적 예로는 tert-부틸 기 및 1-아다만틸 기이다.

[2398] 본 개시내용의 실시양태에서, 방해된 페놀 화합물은 하이드록시 기에 결합된 탄소 원자에 인접한 탄소 원자 중 적어도 하나 또는 둘 모두에 입체적 벌키 하이드로카르빌 기를 가질 것이다(예를 들어, 벌키 하이드로카르빌 기는 방해된 페놀 모이어티의 2번 및 6번 위치 중 하나 또는 둘 모두에 위치함).

[2399] 본 개시내용의 실시양태에서, 방해된 페놀 화합물은 2,6-디하이드로카르빌 기 치환된 방해된 페놀 모이어티를 포함한다.

[2400] 본 개시내용의 실시양태에서, 방해된 페놀 화합물은 2,6-디하이드로카르빌 기 치환된 방해된 페놀 모이어티를 포함하고, 여기서 모이어티는 추가로 3번, 4번 및 5번 위치 중 하나 이상에서 하이드로카르빌 기 또는 헤테로원자 함유 하이드로카르빌 기에 의해 선택적으로 치환된다.

[2401] 본 개시내용의 실시양태에서 이용될 수 있는 방해된 페놀 화합물의 비제한적인 예로는 부틸화된 페놀계 산화방지제, 부틸화된 하이드록시톨루엔; 2,6-디-3차부틸-4-에틸 페놀("BHEB"); 4,4'-메틸렌비스(2,6-디-3차-부틸페닐); 1,3,5-트리메틸-2,4,6-트리스(3,5-디-tert-부틸-4-하이드록시벤질)벤젠 및 옥타데실-3-(3',5'-디-tert-부틸-4'-하이드록시페닐) 프로피오네이트를 포함한다.

[2402] 실시양태에서, 방해된 페놀 화합물은 알킬알루미녹산 공촉매의 알루미늄 대 방해된 페놀 화합물의 몰 비(즉, Al^1:방해된 페놀 화합물의 비)를 약 1:1 내지 약 10:1, 또는 약 2:1 내지 약 5:1로 제공하는 양으로 존재한다.

[2403] 선택적으로, 실시양태에서, 방해된 페놀 화합물은 올레핀 중합 촉매 시스템(예, 예비중합 촉매)의 하나 이상의 다른 성분과 알킬알루미녹산 또는 유기알루미늄 화합물이 접촉하기 전에 알킬알루미녹산 공촉매에 첨가되거나, 또는 유기알루미늄 화합물에 첨가된다.

[2404] 본 개시내용의 실시양태는 i) 상기와 같이 기술된 유기금속 복합체(예비중합 촉매); 및 ii) 촉매 활성화제를 포함하는 올레핀 중합 촉매 시스템이다.

[2405] 본 개시내용의 실시양태는 i) 상기와 같이 기술된 유기금속 복합체(예비중합 촉매); 및 ii) 알킬알루미녹산 공촉매, 유기알루미늄 화합물, 붕소계 촉매 활성화제, 및 이들의 혼합물로 이루어지는 군 중에서 선택되는 촉매 활성화제를 포함하는 올레핀 중합 촉매 시스템이다.

[2406] 본 개시내용의 실시양태는 i) 상기와 같이 기술된 유기금속 복합체(예비중합 촉매); 및 ii) 붕소계 촉매 활성화

제를 포함하는 촉매 활성화제를 포함하는 올레핀 중합 촉매 시스템이다.

[2407] 본 개시내용의 실시양태는 i) 상기와 같이 기술된 유기금속 복합체(예비중합 촉매); 및 ii) 알킬알루미녹산 공촉매를 포함하는 촉매 활성화제를 포함하는 올레핀 중합 촉매 시스템이다.

[2408] 본 개시내용의 실시양태는 i) 상기와 같이 기술된 유기금속 복합체(예비중합 촉매); 및 ii) 유기알루미늄 화합물을 포함하는 촉매 활성화제를 포함하는 올레핀 중합 촉매 시스템이다.

[2409] 본 개시내용의 실시양태는 i) 상기와 같이 기술된 유기금속 복합체(예비중합 촉매); 및 ii) 붕소계 촉매 활성화제; 및 알킬알루미녹산 공촉매를 포함하는 촉매 활성화제를 포함하는 올레핀 중합 촉매 시스템이다.

[2410] 본 개시내용의 실시양태는 i) 상기와 같이 기술된 유기금속 복합체(예비중합 촉매); 및 ii) 붕소계 촉매 활성화제; 및 유기알루미늄 화합물을 포함하는 촉매 활성화제를 포함하는 올레핀 중합 촉매 시스템이다.

[2411] 본 개시내용의 실시양태는 i) 상기와 같이 기술된 유기금속 복합체(예비중합 촉매); 및 ii) 붕소계 촉매 활성화제, 알킬알루미녹산 공촉매, 및 유기알루미늄 화합물을 포함하는 촉매 활성화제를 포함하는 올레핀 중합 촉매 시스템이다.

[2412] 본 개시내용의 실시양태는 i) 상기와 같이 기술된 유기금속 복합체(예비중합 촉매); ii) 붕소계 촉매 활성화제를 포함하는 촉매 활성화제; 및 iii) 디알킬아연 화합물을 포함하는 올레핀 중합 촉매 시스템이다.

[2413] 본 개시내용의 실시양태는 i) 상기와 같이 기술된 유기금속 복합체(예비중합 촉매); ii) 붕소계 촉매 활성화제, 및 알킬알루미녹산 공촉매를 포함하는 촉매 활성화제; 및 iii) 디알킬아연 화합물을 포함하는 올레핀 중합 촉매 시스템이다.

[2414] 본 개시내용의 실시양태는 i) 상기와 같이 기술된 유기금속 복합체(예비중합 촉매); ii) 붕소계 촉매 활성화제, 알킬알루미녹산 공촉매, 및 유기알루미늄 화합물을 포함하는 촉매 활성화제; 및 iii) 디알킬아연 화합물을 포함하는 올레핀 중합 촉매 시스템이다.

[2415] 본 개시내용의 실시양태는 i) 상기와 같이 기술된 유기금속 복합체(예비중합 촉매); ii) 붕소계 촉매 활성화제, 및 알킬알루미녹산 공촉매를 포함하는 촉매 활성화제; 및 iii) 방해된 페놀 화합물을 포함하는 올레핀 중합 촉매 시스템이다.

[2416] 본 개시내용의 실시양태는 i) 상기와 같이 기술된 유기금속 복합체(예비중합 촉매); ii) 붕소계 촉매 활성화제, 알킬알루미녹산 공촉매, 및 유기알루미늄 화합물을 포함하는 촉매 활성화제; 및 iii) 방해된 페놀 화합물을 포함하는 올레핀 중합 촉매 시스템이다.

[2417] 본 개시내용의 실시양태는 i) 상기와 같이 기술된 유기금속 복합체(예비중합 촉매); ii) 붕소계 촉매 활성화제, 알킬알루미녹산 공촉매를 포함하는 촉매 활성화제; iii) 디알킬아연 화합물; 및 iv) 방해된 페놀 화합물을 포함하는 올레핀 중합 촉매 시스템이다.

[2418] 본 개시내용의 실시양태는 i) 상기와 같이 기술된 유기금속 복합체(예비중합 촉매); ii) 붕소계 촉매 활성화제, 알킬알루미녹산 공촉매, 및 유기알루미늄 화합물을 포함하는 촉매 활성화제; iii) 디알킬아연 화합물; 및 iv) 방해된 페놀 화합물을 포함하는 올레핀 중합 촉매 시스템이다.

[2419] 본 개시내용의 실시양태는 i) 상기와 같이 기술된 유기금속 복합체(예비중합 촉매); ii) 알킬알루미녹산 공촉매를 포함하는 촉매 활성화제; 및 iii) 방해된 페놀 화합물을 포함하는 올레핀 중합 촉매 시스템이다.

[2420] 본 개시내용의 실시양태는 i) 상기와 같이 기술된 유기금속 복합체(예비중합 촉매); ii) 알킬알루미녹산 공촉매, 및 유기알루미늄 화합물을 포함하는 촉매 활성화제; 및 iii) 방해된 페놀 화합물을 포함하는 올레핀 중합 촉매 시스템이다.

[2421] 중합 공정

[2422] 본 개시내용의 실시양태는 에틸렌을 상기 기술된 바와 같은 올레핀 중합 촉매 시스템의 존재 하에 선택적으로 하나 이상의 알파-올레핀과 중합시키는 것을 포함하는 중합 공정이다.

[2423] 본 개시내용의 실시양태는 에틸렌을 상기 기술된 바와 같은 올레핀 중합 촉매 시스템의 존재 하에 선택적으로 하나 이상의 C_3-C_{12} 알파-올레핀과 중합시키는 것을 포함하는 중합 공정이다.

[2424] 본 개시내용의 대안적 실시양태는 상기 기술된 바와 같은 올레핀 중합 촉매 시스템의 존재 하에 하나 이상의 알

파-올레핀을 중합시키는 것을 포함하는 중합 공정이다.

[2425] 본 개시내용의 대안적 실시양태는 상기 기술된 바와 같은 올레핀 중합 촉매 시스템의 존재 하에 프로필렌과 같은 하나 이상의 C_3-C_{12} 알파 올레핀을 중합시키는 것을 포함하는 중합 공정이다.

[2426] 본 개시내용의 올레핀 중합 촉매 시스템은 임의의 통상적인 올레핀 중합 공정, 예컨대 기체상 중합, 슬러리상 중합 또는 용액상 중합에 사용될 수 있다. 실시양태에서, "불균일화된" 촉매 시스템의 사용은 기체상 및 슬러리상 중합에서 사용하기에 바람직한 반면, 균일 촉매는 용액상 중합에서 사용하기에 바람직하다. 불균일화된 촉매 시스템은 예비중합 촉매, 또는 올레핀 중합 촉매 시스템의 성분을 실리카 지지체와 같은 지지체 상에 담지시켜 형성될 수 있다. 실리카 지지체 물질뿐만 아니라 적합한 대안적인 지지체 물질은 관련 기술분야의 기술자에게 잘 알려져 있다.

[2427] 본 개시내용의 실시양태에서, 중합 공정은 에틸렌을 선택적으로 하나 이상의 C_3-C_{12} 알파-올레핀과 중합시키는 것을 포함한다.

[2428] 본 개시내용의 실시양태에서, 중합 공정은 에틸렌을 프로필렌, 1-부텐, 1-펜텐, 1-헥센, 1-옥텐, 1-데센 및 이들의 혼합물로 이루어지는 군 중에서 선택되는 하나 이상의 알파-올레핀과 중합시키는 것을 포함한다.

[2429] 본 개시내용의 실시양태에서, 중합 공정은 에틸렌을 1-부텐, 1-헥센, 1-옥텐 및 이들의 혼합물로 이루어지는 군 중에서 선택되는 하나 이상의 알파-올레핀과 중합시키는 것을 포함한다.

[2430] 본 개시내용의 실시양태에서, 중합 공정은 에틸렌을 1-부텐, 1-헥센, 및 1-옥텐으로 이루어지는 군 중에서 선택되는 하나 이상의 알파-올레핀과 중합시키는 것을 포함한다.

[2431] 본 개시내용의 실시양태에서, 중합 공정은 에틸렌을 1-옥텐과 중합시키는 것을 포함한다.

[2432] 기체상 중합이 이용될 때, 다양한 실시양태에서, 이용된 압력은 1 내지 1000 psi, 또는 50 내지 400 psi, 또는 100 내지 300 psi의 범위일 수 있고; 한편 다양한 실시양태에서, 사용된 온도는 30℃ 내지 130℃, 또는 65℃ 내지 110℃의 범위일 수 있다. 교반 층 또는 유동 층 기체상 반응기 시스템은 기체상 중합 공정을 위해 본 개시내용의 실시양태에서 사용될 수 있다. 이러한 기체상 공정은 문헌(예를 들어, 미국 특허 제4,543,399호, 제4,588,790호, 제5,028,670호, 제5,317,036호, 제5,352,749호, 제5,405,922호, 제5,436,304호, 제5,453,471호, 제5,462,999호, 제5,616,661호 및 제5,668,228호 참조)에 널리 기술되어 있다. 하나 이상의 반응기가 사용될 수 있고 서로 직렬로 구성될 수 있다.

[2433] 일반적으로, 유동 층 기체상 중합 반응기는 단량체(예, 에틸렌), 공단량체(예, 알파-올레핀) 및 적어도 부분적으로 기체성인 다른 선택적 성분의 흐름에 의해 유동화되는, 중합체 입자 및 촉매 입자(예, 불균질화된 올레핀 중합 촉매 시스템 입자 또는 불균질화된 올레핀 중합 촉매 시스템 성분 입자)의 "층"을 이용한다. 열은 층을 통해 흐르는 단량체(및 공단량체)의 중합 엔탈피에 의해 생성된다. 미반응 단량체, 공단량체 및 다른 선택적인 기체성 성분은 유동 층에서 배출되고 냉각 시스템과 접촉되어 이 열을 제거한다. 단량체, 공단량체 및 선택적인 다른 성분(예컨대, 응축성 액체)을 포함하는 냉각된 기체 스트림은 그 다음 이전 통과에서 중합된 것을 대체하기 위한 "보충" 단량체(및 공단량체)와 함께, 중합 구역을 통해 재순환된다. 동시에, 중합체 생성물은 반응기로부터 인출된다. 관련 기술분야의 기술자라면 이해할 수 있듯이, 중합 층의 "유동화" 본성은 반응 열을 균일하게 분포/혼합하는 데 도움을 주어 국재화된 온도 구배의 형성을 최소화한다.

[2434] 중합은 실질적으로 촉매 독이 없는 상태에서 일반적으로 수행된다. 유기알루미늄 화합물과 같은 화합물은 촉매 활성을 증가시키기 위해 독에 대한 스캐빈징제로서 이용될 수 있다. 스캐빈징제의 일부 특정한 비제한적 예는 트리이소부틸알루미늄과 같은 알루미늄 알킬을 포함하는 금속 알킬이다. 원하는 폴리올레핀을 형성하는 데 있어서 중합 촉매의 작동을 방해하지 않는 한, 통상적인 보조제가 공정에 포함될 수 있다. 예를 들어, 수소 또는 금속 또는 비금속 수소화물(예: 수소화실릴)이 공정에서 사슬 전달제로서 사용될 수 있다. 실시양태에서, 수소는 총 단량체 공급물 1몰당 수소 최대 약 10몰의 양으로 사용될 수 있다.

[2435] 슬러리 상 중합 공정에 대한 자세한 설명은 특허 문헌에 널리 보고되어 있다. "입자 형태 중합"으로도 알려진, 중합체가 용해되는 온도보다 낮게 온도가 유지되는 슬러리 상 중합 공정은 미국 특허 제3,248,179호에 기술되어 있다. 슬러리 공정은 루프 반응기를 사용하는 공정 및 단일 교반 반응기를 활용하는 공정, 또는 복수의 루프 및/또는 교반 반응기를 직렬, 병렬 및 이들의 조합으로 활용하는 공정을 포함한다. 슬러리 상 중합 공정의 비제한적 예로는 연속 루프 또는 교반 탱크 공정을 포함한다. 슬러리 상 중합 공정의 추가 예는 예를 들어 미국 특허

제4,613,484호에 기술되어 있다.

[2436] 슬러리 중합 공정은 희석제, 일반적으로 탄화수소 희석제, 예컨대 알칸(이소알칸 포함), 방향족 또는 사이클로알칸 희석제의 존재 하에 수행된다. 실시양태에서, 희석제는 또한 에틸렌과의 공중합에 사용되는 알파-올레핀 공단량체일 수 있다. 알칸 희석제는 프로판, 부탄(즉, 노르말 부탄 및/또는 이소부탄), 펜탄, 헥산, 헵탄 및 옥탄을 포함한다. 단량체 및 공단량체는 희석제에 용해성(또는 혼화성)일 수 있지만, 중합체는 그렇지 않다(중합 조건 하에). 한 실시양태에서, 중합 온도는 약 5℃ 내지 약 200℃일 수 있다. 추가 실시양태에서, 중합 온도는 약 120℃ 미만, 또는 약 10℃ 내지 약 110℃이다. 슬러리 상 중합 반응 온도는 중합체(예: 에틸렌 공중합체)가 고체 입자 형태로 생성되도록 선택된다. 반응 압력은 희석제 및 반응 온도의 선택에 의해 영향을 받는다. 예를 들어, 실시양태에서, 압력은 이소부탄이 희석제로 사용될 때 15 내지 45 기압(약 220 내지 660 psi 또는 약 1500 내지 약 4600 kPa)에서부터, 프로판이 사용될 때 약 2배인 30 내지 90 기압(약 440 내지 1300 psi 또는 약 3000 내지 9100 kPa)까지의 범위일 수 있다(예를 들어, 미국 특허 제5,684,097호 참조). 슬러리 상 중합 공정의 압력은 일반적으로 중합 가능한 단량체 및 공단량체(들)(예: 에틸렌 및 선택적으로 하나 이상의 알파-올레핀)의 적어도 일부를 액체상으로 유지하기에 충분히 높게 유지된다.

[2437] 한 실시양태에서, 슬러리상 중합 반응은 내부 교반기(예: 임펠러)를 갖는 재킷형 폐쇄 루프 반응기에서 수행되며, 이는 추가로 적어도 하나의 침강 레그를 함유한다. 올레핀 중합 촉매 시스템 성분(불활성 지지체에 매달려 있거나 매달려 있지 않음), 단량체/공단량체 및 희석제는 적절한 경우 액체 또는 현탁액으로서 슬러리상 중합 반응기에 공급될 수 있다. 슬러리는 루프 반응기를 통해 순환하고, 재킷은 반응기의 온도를 제어하는 데 사용된다. 일련의 렛다운(let-down) 밸브를 통해 슬러리는 침강 레그로 들어간 다음, 희석제와 미반응 단량체/공단량체를 플래시하기 위해 압력이 렛다운되고, 일반적으로 사이클론에서 생성물 중합체가 회수된다. 희석제와 미반응 단량체/공단량체는 회수되어 반응기로 다시 재순환된다.

[2438] 본 개시내용의 실시양태에서, 중합 공정은 용매에서 수행되는 용액상 중합 공정이다.

[2439] 본 개시내용의 실시양태에서, 중합 공정은 용매에서 수행되는 연속 용액상 중합 공정이다.

[2440] 에틸렌의 단일중합 또는 에틸렌과 하나 이상의 알파-올레핀의 공중합을 위한 용액 중합 공정은 관련 기술분야에 잘 알려져 있다(예를 들어, 미국 특허 제6,372,864호 및 제6,777,509호 참조). 이러한 공정은 불활성 탄화수소 용매, 전형적으로 비치환되거나 C_{1-4} 알킬 기에 의해 치환될 수 있는 C_{5-12} 탄화수소, 예컨대 펜탄, 메틸펜탄, 헥산, 헵탄, 옥탄, 사이클로헥산, 메틸사이클로헥산 및 수소화 나프타의 존재 하에 수행되는 다양한 실시양태에 있다. 상업적으로 이용 가능하고 본 개시내용의 실시양태에 사용될 수 있는 적합한 용매의 예는 "Isopar E"(Exxon Chemical Co.의 C_{8-12} 지방족 용매)이다.

[2441] 통상적인 용액상 공정에서의 중합 온도는 약 80℃ 내지 약 300℃일 수 있다. 본 개시내용의 실시양태에서 용액상 중합 공정의 중합 온도는 약 120℃ 내지 약 250℃이다. 추가 실시양태에서, 용액상 중합 공정은 적어도 140℃, 또는 적어도 160℃, 또는 적어도 170℃, 또는 적어도 180℃, 또는 적어도 190℃의 온도에서 수행된다. 추가 실시양태에서, 용액상 중합 공정에서의 중합 온도는 약 120℃ 내지 약 330℃, 또는 약 130℃ 내지 약 320℃, 또는 약 140℃ 내지 약 320℃, 또는 약 150℃ 내지 약 320℃, 또는 약 160℃ 내지 약 320℃, 또는 약 140℃ 내지 약 300℃, 또는 약 150℃ 내지 약 300℃, 또는 약 160℃ 내지 약 300℃, 또는 약 140℃ 내지 약 280℃, 또는 약 150℃ 내지 약 280℃ 또는 약 160℃ 내지 약 280℃, 또는 약 140℃ 내지 약 260℃, 또는 약 150℃ 내지 약 260℃ 또는 약 160℃ 내지 약 260℃, 또는 약 140℃ 내지 약 240℃, 또는 약 150℃ 내지 약 240℃, 또는 약 160℃ 내지 약 240℃, 또는 약 140℃ 내지 약 220℃, 또는 약 150℃ 내지 약 220℃, 또는 약 160℃ 내지 약 220℃일 수 있다.

[2442] 용액상 중합 공정 내의 중합 압력은 "중간 압력 공정"일 수 있으며, 이는 반응기 내 압력이 약 6,000 psi(약 42,000 킬로파스칼 또는 kPa) 미만임을 의미한다. 본 개시내용의 실시양태에서, 용액상 중합 공정 내의 중합 압력은 약 10,000 내지 약 40,000 kPa, 또는 약 14,000 내지 약 22,000 kPa(즉, 약 2,000 psi 내지 약 3,000 psi)일 수 있다.

[2443] 에틸렌과 공중합하기에 적합한 공단량체로는 C_{3-20} 알파-올레핀(모노- 및 디-올레핀 포함)을 포함한다. 본 개시내용의 실시양태에서 에틸렌과 공중합될 수 있는 공단량체의 일부 비제한적인 예로는 비치환되거나 또는 최대 2개의 C_{1-6} 알킬 기에 의해 치환되는 C_{3-12} 알파-올레핀; 비치환되거나 또는 C_{1-4} 알킬 기로 이루어지는 군 중에서 선택되는 최대 2개의 치환체에 의해 치환되는 C_{8-12} 비닐 방향족 단량체; 및 비치환되거나 또는 C_{1-4} 알킬 기에 의해

치환되는 C_{4-12} 직쇄 또는 환형 디올레핀을 포함한다. 이러한 알파-올레핀의 예시적인 비제한적 예는 프로필렌, 1-부텐, 1-펜텐, 1-헥센, 1-옥텐 및 1-데센, 스티렌, 알파 메틸 스티렌, 및 구속된 고리 환형 올레핀, 예컨대 사이클로부텐, 사이클로펜텐, 디사이클로펜타디엔 노르보르넨, 알킬-치환된 노르보르넨, 알케닐-치환된 노르보르넨 등(예, 5-메틸렌-2-노르보르넨, 5-에틸리덴-2-노르보르넨, 및 비사이클로-(2,2,1)-헵타-2,5-디엔) 중 하나 이상이다.

[2444] 본 개시내용의 실시양태에서, 용액 상 중합 공정은 프로필렌, 1-부텐, 1-펜텐, 1-헥센, 1-옥텐, 1-데센 및 이들의 혼합물로 이루어지는 군 중에서 선택되는 하나 이상의 알파-올레핀과 에틸렌을 중합시키는 것을 포함한다.

[2445] 본 개시내용의 실시양태에서, 용액 상 중합 공정은 1-부텐, 1-헥센, 1-옥텐, 및 이들의 혼합물로 이루어지는 군 중에서 선택되는 하나 이상의 알파-올레핀과 에틸렌을 중합시키는 것을 포함한다.

[2446] 본 개시내용의 실시양태에서, 용액 상 중합 공정은 1-부텐, 1-헥센, 및 1-옥텐으로 이루어지는 군 중에서 선택되는 하나 이상의 알파-올레핀과 에틸렌을 중합시키는 것을 포함한다.

[2447] 본 개시내용의 실시양태에서, 용액 상 중합 공정은 1-옥텐과 에틸렌을 중합시키는 것을 포함한다.

[2448] 용액 중합에서, 단량체 및 선택적인 공단량체(들)는 반응기에 공급되기 전에 용매에 용해/분산된다(또는 기체성 단량체(또는 공단량체)의 경우, 단량체(또는 공단량체)는 중합 반응 혼합물에서 용해할 수 있도록 반응기에 공급될 수 있음). 혼합 전에, 용매, 단량체 및 선택적인 공단량체는 물, 산소 또는 금속 불순물과 같은 잠재적인 촉매 독을 제거하기 위해 일반적으로 정제된다. 공급원료 정제는 관련 기술분야에 잘 알려진 표준 관행, 예컨대 분자체, 알루미나 층 및 산소 제거 촉매의 사용을 이용할 수 있으며, 이들 모두는 중합성 단량체의 정제에 유용한 것으로 알려져 있다. 용매 자체 역시(예, 메틸 펜탄, 사이클로헥산, 헥산 또는 톨루엔) 잠재적인 촉매 독을 제거하기 위해 유사한 방식으로 처리될 수 있다.

[2449] 공급원료 단량체, 공단량체 또는 다른 용액 공정 성분(예, 용매)은 용액상 중합 반응기에 공급하기 전에 가열되거나 냉각될 수 있다.

[2450] 본 개시내용의 실시양태에서, 올레핀 중합 촉매 시스템 성분(예, 유기금속 복합* 및 촉매 활성화제, 및 선택적으로 방해된 페놀)은 중합 반응에 사용되는 용매에 예비혼합될 수 있거나, 또는 이들은 별도의 스트림으로서 중합 반응기에 공급될 수 있다. 일부 실시양태에서, 예비혼합은 중합 반응 구역(예, 중합 반응기)으로 들어가기 전에 올레핀 중합 촉매 시스템 성분에 반응 시간을 제공하는 것이 바람직할 수 있다. 이러한 "인라인 혼합" 기술의 예는 예컨대 미국 특허 제5,589,555호와 같은 다수의 특허에 기술되어 있다.

[2451] 본 개시내용의 실시양태에서, 용액 상 중합 공정은 연속 공정이다. 용어 "연속 공정"이란 중합 공정 흐름(예, 용매, 에틸렌, 선택적인 알파-올레핀 공단량체, 올레핀 중합 촉매 시스템 성분 등)이 중합 구역(예, 중합 반응기)으로 연속적으로 공급되어, 여기서 중합체(예, 에틸렌 단일중합체 또는 에틸렌 공중합체)가 형성되고 이로부터 중합체가 공정 흐름 유출물 스트림을 통해 연속적으로 제거된다는 것을 의미한다.

[2452] 본 개시내용의 실시양태에서, 용액 상 중합 공정은 적어도 하나의 연속 교반 탱크 반응기("CSTR")에서 수행된다.

[2453] 본 개시내용의 실시양태에서, 용액 상 중합 공정은 서로 직렬 또는 병렬로 배열된 적어도 2개의 중합 반응기에서 수행된다.

[2454] 본 개시내용의 실시양태에서, 용액 상 중합 공정은 서로 직렬 또는 병렬로 배열된 적어도 3개의 중합 반응기에서 수행된다.

[2455] 본 개시내용의 실시양태에서, 용액 상 중합 공정은 적어도 2개의 순차적으로 배열된 연속 교반 탱크 반응기에서 수행된다(여기서 공정 흐름은 제1 상류 CSTR로부터 제2 하류 CSTR로 전달됨).

[2456] 본 개시내용의 실시양태에서, 용액 상 중합 공정은 서로 병렬로 배열되는 적어도 2개의 연속 교반 탱크 반응기에서 수행된다(여기서 공정 흐름은 제1 CSTR 및 제2 CSTR 각각으로부터 전달된 후 조합됨).

[2457] 일부 실시양태에서, 연속 용액 상 중합 공정은 평균 반응기 온도가 약 100℃ 내지 약 140℃인 제1 교반 탱크 중합 반응기, 및 평균 온도가 제1 반응기의 평균 반응기 온도보다 적어도 약 10℃ 또는 적어도 약 20℃ 더 높은 제2 교반 탱크 중합 반응기를 포함한다.

[2458] 일부 실시양태에서, 연속 용액 상 중합 공정은 평균 반응기 온도가 약 100℃ 내지 약 160℃인 제1 교반 탱크 중

합 반응기, 및 평균 온도가 제1 반응기의 평균 반응기 온도보다 적어도 약 10℃ 또는 적어도 약 20℃ 더 높은 제2 교반 탱크 중합 반응기를 포함한다.

[2459] 본 개시내용의 실시양태에서, 용액 상 중합 공정은 적어도 하나의 관형 반응기에서 수행된다.

[2460] 본 개시내용의 실시양태에서, 용액 상 중합 공정은 순차적으로 또는 병렬로 배열된 2개의 연속 교반 탱크 반응기 및 제2 연속 교반 탱크 반응기(순차적 배열)로부터 또는 제1 및 제2 연속 교반 탱크 반응기(병렬 배열)의 조합으로부터의 공정 흐름을 수용하는 관형 반응기에서 수행된다.

[2461] 본 개시내용의 실시양태에서, 용액 상 중합 공정은 2개의 순차적으로 배열된 연속 교반 탱크 반응기, 및 제2 연속 교반 탱크 반응기로부터의 공정 흐름을 수용하는 관형 반응기에서 수행된다.

[2462] 일반적으로 용액 상 중합 공정에서, 반응기는 반응물의 철저한 혼합을 달성하는 조건 하에 작동되고, 반응기 내 올레핀 중합 촉매(예, 활성화된 단일 부위 촉매 복합체)의 체류 시간(또는 대안적으로 "저장 시간")은 반응기의 설계 및 용량에 따라 달라질 것이다.

[2463] 실시양태에서, 주어진 반응기에서 올레핀 중합 촉매(예, 활성화된 단일 부위 촉매 복합체)의 체류 시간은 몇 초 내지 약 20분일 것이다. 추가 실시양태에서, 주어진 반응기에서 올레핀 중합 촉매(예, 활성화된 단일 부위 촉매 복합체)의 체류 시간은 약 10분 미만, 또는 약 5분 미만, 또는 약 3분 미만일 것이다.

[2464] 본 개시내용의 실시양태에서, CSTR 반응기로 공급된 에틸렌의 적어도 60 중량%(wt%)는 올레핀 중합 촉매 시스템에 의해 에틸렌 단일중합체 또는 에틸렌 공중합체로 중합된다. 추가 실시양태에서, CSTR 반응기로 공급된 에틸렌의 적어도 70 wt%, 또는 적어도 80 wt%, 또는 적어도 85 wt%, 또는 적어도 90 wt%, 또는 적어도 95 wt%는 올레핀 중합 촉매 시스템에 의해 에틸렌 단일중합체 또는 에틸렌 공중합체로 중합된다.

[2465] 하나보다 많은 CSTR이 이용되는 경우, 올레핀 중합 촉매 시스템 성분은 각 반응기에서 높은 중합체 생산 속도를 유지하기 위해 각각의 CSTR(들)에 첨가될 수 있다.

[2466] 하나보다 많은 CSTR이 이용되는 경우, 각각의 CSTR에 사용된 올레핀 중합 촉매는 동일한 유형의 중합 촉매를 기반으로 한 것일 수 있거나, 또는 서로 다른 유형의 중합 촉매를 기반으로 하여 제조된 것일 수 있다.

[2467] 본 개시내용의 실시양태에서, 동일한 유형의 올레핀 중합 촉매는 2개 이상의 CSTR 반응기의 각 CSTR에 사용된다.

[2468] 한 실시양태에서, 하나의 올레핀 중합 촉매가 단일 부위 촉매(예, 본 개시내용에 따라 기술된 올레핀 중합 촉매 시스템)이고 하나의 올레핀 중합 촉매가 지글러-나타 촉매인 혼합 촉매 시스템이 사용되며, 여기서 단일 부위 촉매는 제1 CSTR에 이용되고 지글러-나타 촉매는 제2 CSTR에 이용되며, 여기서 반응기들은 순차적으로 또는 병렬로 배열된다.

[2469] 용어 "관형 반응기"는 이의 통상적인 의미; 즉 단일 관을 전하기 위한 것이며, CSTR과 달리 일반적으로 임펠러, 교반기 등을 사용하여 진탕되지 않는다. 실시양태에서, 관형 반응기는 적어도 10/1의 길이/직경(L/D) 비를 가질 것이다. 실시양태에서, 관형 반응기는 단열적으로 작동된다. 일반적인 비제한적 설명을 통해, 그리고 이론으로 얽매려는 것은 아니지만, 관형 반응기에서는 중합 반응이 진행할수록 단량체(예, 에틸렌) 및/또는 공단량체(예, 알파-올레핀)가 점차 소비되고 용액 온도가 관의 길이를 따라 증가한다(이는 중합체 용액으로부터 미반응 공단량체를 분리하는 효율을 개선시킬 수 있음). 실시양태에서, 관형 반응기의 길이를 따른 온도 증가는 약 3℃ 초과일 수 있다. 실시양태에서, 관형 반응기는 CSTR의 하류에 위치하고, 관형 반응기로부터의 배출 온도는 CSTR로부터의 배출 온도보다 적어도 약 3℃ 초과일 수 있다(그리고 이로부터의 공정 흐름은 관형 반응기로 공급됨).

[2470] 실시양태에서, 관형 반응기는 추가적인 중합 촉매 시스템 성분, 예컨대 단일 부위 예비중합 촉매, 지글러-나타 촉매 성분, 촉매 활성화제, 공촉매, 및 방해된 페놀 화합물의 첨가를 위한, 또는 단량체, 공단량체, 수소 등의 첨가를 위한 공급물 포트를 가질 수 있다. 대안적인 실시양태에서, 추가적인 중합 촉매 성분은 관형 반응기에 첨가되지 않는다.

[2471] 한 실시양태에서, 적어도 하나의 CSTR과 조합으로 사용된 관형 반응기의 총 부피는 적어도 하나의 CSTR의 부피의 적어도 약 10 부피 백분율(vol%), 또는 적어도 하나의 CSTR의 약 30 vol% 내지 약 200 vol%이다(명확함을 위해, 적어도 하나의 CSTR의 부피가 1000 리터인 경우, 관형 반응기의 부피는 적어도 약 100 리터, 또는 약 300 내지 2000 리터임).

[2472] 실시양태에서, 반응기 시스템을 떠난 즉시, 비반응성 성분은 제거될 수 있고(그리고 선택적으로 회수됨), 결과

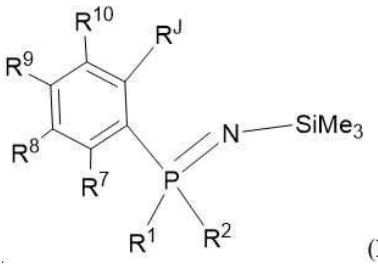
적으로 생성된 중합체(예, 에틸렌 공중합체 또는 에틸렌 단일중합체)는 통상적인 방식(예, 탈휘발화 공정을 사용하여)으로 마무리될 수 있다. 한 실시양태에서, 2단계 탈휘발화 공정이 중합 공정 용매로부터 중합체 조성물을 회수하기 위해 이용될 수 있다. 본 개시내용의 실시양태에 사용될 수 있는 적합한 탈휘발화 공정은 미국 특허 제9,963,529호; 제10,538,654호 및 제10,626,256호에 기술되어 있다.

[2473] 교대성 포스핀 산화 방법

[2474] 본 개시내용의 실시양태는 오르토 치환된 페닐 기를 갖는 포스핀 화합물을 산화하는 방법이다.

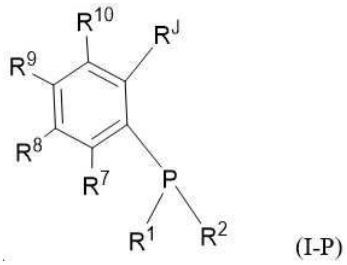
[2475] 본 개시내용의 실시양태는 치환된 아릴 기를 갖는 포스핀 화합물을 산화하는 방법이다.

[2476] 본 개시내용의 실시양태는 화학식 I-P-TMS로 표현되는 화합물을 제조하는 방법이며:

[2477] 
(I-P-TMS)

[2478] 이 방법은 다음을 포함한다:

[2479] 화학식 I-P로 표현되는 포스핀 화합물을 헥사클로로에탄 $Cl_3C\text{-}CCl_3$; 및 헥사메틸디실라잔 $[(CH_3)_3Si]_2NH$와 조합하는 단계:

[2480] 
(I-P)

[2481] 여기서, R^J는 다음으로 이루어지는 군 중에서 선택되고:

[2482] 하이드로카르빌 기로서, 여기서 하이드로카르빌 기는 비치환되거나, 또는 할로겐 원자, C_{1-20} 알킬 기, C_{1-20} 알콕시 기, C_{7-20} 알킬아릴 기, C_{7-20} 아릴알킬 기, C_{6-20} 아릴 기, C_{6-20} 아릴옥시 기, C_{7-20} 알킬아릴옥시 기, 및 C_{7-20} 아릴알킬옥시 기, 화학식 $-NR'_2$의 아미도 기, 화학식 $-PR'_2$의 포스피도 기, 화학식 -SR'의 티올레이트 기, 화학식 $-Si(R^a)_3$의 실릴 기, 및 화학식 $-Ge(R^a)_3$의 게르마닐 기로 이루어지는 군 중에서 선택되는 하나 이상의 치환체에 의해 추가로 치환되는 하이드로카르빌 기;

[2483] 헤테로원자 함유 하이드로카르빌 기로서, 여기서 헤테로원자 함유 하이드로카르빌 기는 비치환되거나, 또는 할로겐 원자, C_{1-20} 알킬 기, C_{1-20} 알콕시 기, C_{7-20} 알킬아릴 기, C_{7-20} 아릴알킬 기, C_{6-20} 아릴 기, C_{6-20} 아릴옥시 기, C_{7-20} 알킬아릴옥시 기, 및 C_{7-20} 아릴알킬옥시 기, 화학식 $-NR'_2$의 아미도 기, 화학식 $-PR'_2$의 포스피도 기, 화학식 -SR'의 티올레이트 기, 화학식 $-Si(R^a)_3$의 실릴 기, 및 화학식 $-Ge(R^a)_3$의 게르마닐 기로 이루어지는 군 중에서 선택되는 하나 이상의 치환체에 의해 추가로 치환되는 헤테로원자 함유 하이드로카르빌 기;

[2484] 여기서, R^1 및 R^2는 각각 독립적으로 하이드로카르빌 기가 비치환되거나, 또는 하나 이상의 할로겐 원자, C_{1-20} 알킬 기, C_{1-20} 알콕시 기, C_{7-20} 알킬아릴 기, C_{7-20} 아릴알킬 기, C_{6-20} 아릴 기, C_{6-20} 아릴옥시 기, C_{7-20} 알킬아릴옥시 기, 및/또는 C_{7-20} 아릴알킬옥시 기에 의해 추가로 치환되는 C_{1-30} 하이드로카르빌 기이고;

[2485] 여기서, R^7, R^8, R^9 및 R^{10}은 각각 독립적으로 다음으로 이루어진 군 중에서 선택되고:

[2486] 할로겐;

[2487] 수소;

[2488] C_{1-30} 하이드로카르빌 기로서, 여기서 하이드로카르빌 기는 비치환되거나, 또는 할로겐 원자, C_{1-20} 알킬 기, C_{1-20} 알콕시 기, C_{7-20} 알킬아릴 기, C_{7-20} 아릴알킬 기, C_{6-20} 아릴 기, C_{6-20} 아릴옥시 기, C_{7-20} 알킬아릴옥시 기, 및 C_{7-20} 아릴알킬옥시 기로 이루어지는 군 중에서 선택되는 하나 이상의 치환체에 의해 추가로 치환되는 C_{1-30} 하이드로카르빌 기;

[2489] 헤테로원자 함유 C_{1-30} 하이드로카르빌 기로서, 여기서 헤테로원자 함유 하이드로카르빌 기는 비치환되거나, 또는 할로겐 원자, C_{1-20} 알킬 기, C_{1-20} 알콕시 기, C_{7-20} 알킬아릴 기, C_{7-20} 아릴알킬 기, C_{6-20} 아릴 기, C_{6-20} 아릴옥시 기, C_{7-20} 알킬아릴옥시 기, 및 C_{7-20} 아릴알킬옥시 기로 이루어지는 군 중에서 선택되는 하나 이상의 치환체에 의해 추가로 치환되는 헤테로원자 함유 C_{1-30} 하이드로카르빌 기;

[2490] 옥시 기, -OR';

[2491] 아미도 기, $-NR'_2$;

[2492] 포스피도 기, $-PR'_2$;

[2493] 티올레이트 기, -SR';

[2494] 화학식 $-Si(R^a)_3$의 실릴 기; 및

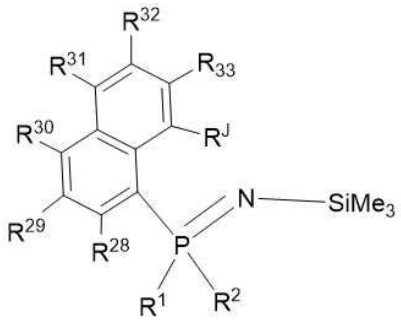
[2495] 화학식 $-Ge(R^a)_3$의 게르마닐 기;

[2496] 여기서, R^7, R^8, R^9 및 R^{10} 중 2개의 인접한 기는 선택적으로 결합되어 환형 하이드로카르빌 기 또는 환형 헤테로원자 함유 하이드로카르빌 기를 형성할 수 있고, 이 환형 하이드로카르빌 기 또는 환형 헤테로원자 함유 하이드로카르빌 기는 비치환되거나, 또는 할로겐 원자, C_{1-20} 알킬 기, C_{1-20} 알콕시 기, C_{7-20} 알킬아릴 기, C_{7-20} 아릴알킬 기, C_{6-20} 아릴 기, C_{6-20} 아릴옥시 기, C_{7-20} 알킬아릴옥시 기, C_{7-20} 아릴알킬옥시 기, 아미도 기 $-NR'_2$, 포스피도 기 $-PR'_2$, 티올레이트 기 -SR', 화학식 $-Si(R^a)_3$의 실릴 기, 및 화학식 $-Ge(R^a)_3$의 게르마닐 기로 이루어지는 군 중에서 선택되는 하나 이상의 치환체에 의해 추가로 치환되고;

[2497] 여기서 각 R'는 수소, C_{1-20} 알킬 기, 및 C_{6-20} 아릴 기로 이루어지는 군 중에서 독립적으로 선택되고;

[2498] 여기서 각 R^a는 수소, C_{1-8} 알킬 기, C_{1-8} 알콕시 기, C_{6-20} 아릴옥시 기 및 C_{6-20} 아릴 기로 이루어지는 군 중에서 독립적으로 선택된다.

[2499] 본 개시내용의 실시양태는 화학식 II-P-TMS로 표현되는 화합물을 제조하는 방법이며:

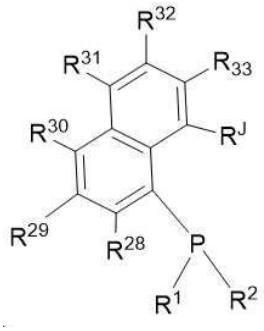
[2500] 

(II-P-TMS)

[2501] 이 방법은 다음을 포함한다:

[2502] 화학식 II-P로 표현되는 포스핀 화합물을 헥사클로로에탄 Cl_3C-CCl_3; 및 헥사메틸디실라잔 $[(CH_3)_3Si]_2NH$와 조합

하는 단계:

[2503] 

(II-P)

[2504] 여기서, R^J는 다음으로 이루어지는 군 중에서 선택된다:

[2505] 하이드로카르빌 기로서, 여기서 하이드로카르빌 기는 비치환되거나, 또는 할로겐 원자, C_{1-20} 알킬 기, C_{1-20} 알콕시 기, C_{7-20} 알킬아릴 기, C_{7-20} 아릴알킬 기, C_{6-20} 아릴 기, C_{6-20} 아릴옥시 기, C_{7-20} 알킬아릴옥시 기, 및 C_{7-20} 아릴알킬옥시 기, 화학식 $-NR'_2$의 아미도 기, 화학식 $-PR'_2$의 포스피도 기, 화학식 $-SR'$의 티올레이트 기, 화학식 $-Si(R^a)_3$의 실릴 기, 및 화학식 $-Ge(R^a)_3$의 게르마닐 기로 이루어지는 군 중에서 선택되는 하나 이상의 치환체에 의해 추가로 치환되는 하이드로카르빌 기;

[2506] 헤테로원자 함유 하이드로카르빌 기로서, 여기서 헤테로원자 함유 하이드로카르빌 기는 비치환되거나, 또는 할로겐 원자, C_{1-20} 알킬 기, C_{1-20} 알콕시 기, C_{7-20} 알킬아릴 기, C_{7-20} 아릴알킬 기, C_{6-20} 아릴 기, C_{6-20} 아릴옥시 기, C_{7-20} 알킬아릴옥시 기, 및 C_{7-20} 아릴알킬옥시, 화학식 $-NR'_2$의 아미도 기, 화학식 $-PR'_2$의 포스피도 기, 화학식 $-SR'$의 티올레이트 기, 화학식 $-Si(R^a)_3$의 실릴 기, 및 화학식 $-Ge(R^a)_3$의 게르마닐로 이루어지는 군 중에서 선택되는 하나 이상의 치환체에 의해 추가로 치환되는 헤테로원자 함유 하이드로카르빌 기;

[2507] 여기서, R^1 및 R^2는 각각 독립적으로 하이드로카르빌 기가 비치환되거나, 또는 하나 이상의 할로겐 원자, C_{1-20} 알킬 기, C_{1-20} 알콕시 기, C_{7-20} 알킬아릴 기, C_{7-20} 아릴알킬 기, C_{6-20} 아릴 기, C_{6-20} 아릴옥시 기, C_{7-20} 알킬아릴옥시 기, 및/또는 C_{7-20} 아릴알킬옥시 기에 의해 추가로 치환되는 C_{1-30} 하이드로카르빌 기로부터 선택되고;

[2508] 여기서, R^{28}, R^{29}, R^{30}, R^{31}, R^{32} 및 R^{33}은 각각 독립적으로 다음으로 이루어진 군 중에서 선택되고:

[2509] 할로겐;

[2510] 수소;

[2511] C_{1-30} 하이드로카르빌 기로서, 여기서 하이드로카르빌 기는 비치환되거나, 또는 할로겐 원자, C_{1-20} 알킬 기, C_{1-20} 알콕시 기, C_{7-20} 알킬아릴 기, C_{7-20} 아릴알킬 기, C_{6-20} 아릴 기, C_{6-20} 아릴옥시 기, C_{7-20} 알킬아릴옥시 기, 및 C_{7-20} 아릴알킬옥시 기로 이루어지는 군 중에서 선택되는 하나 이상의 치환체에 의해 추가로 치환되는 C_{1-30} 하이드로카르빌 기;

[2512] 헤테로원자 함유 C_{1-30} 하이드로카르빌 기로서, 여기서 헤테로원자 함유 하이드로카르빌 기는 비치환되거나, 또는 할로겐 원자, C_{1-20} 알킬 기, C_{1-20} 알콕시 기, C_{7-20} 알킬아릴 기, C_{7-20} 아릴알킬 기, C_{6-20} 아릴 기, C_{6-20} 아릴옥시 기, C_{7-20} 알킬아릴옥시 기, 및 C_{7-20} 아릴알킬옥시 기로 이루어지는 군 중에서 선택되는 하나 이상의 치환체에 의해 추가로 치환되는 헤테로원자 함유 C_{1-30} 하이드로카르빌 기;

[2513] 옥시 기, $-OR'$;

[2514] 아미도 기, $-NR'_2$;

[2515] 포스피도 기 $-PR'_2$;

[2516] 티올레이트 기 SR';

[2517] 화학식 $-Si(R^a)_3$의 실릴 기; 및

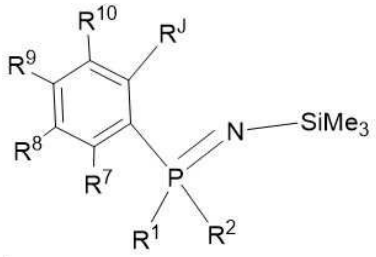
[2518] 화학식 $-Ge(R^a)_3$의 게르마닐 기;

[2519] 여기서, R^{28}, R^{29}, R^{30}, R^{31}, R^{32} 및 R^{33} 중 2개의 인접한 기는 선택적으로 결합되어 환형 하이드로카르빌 기 또는 환형 헤테로원자 함유 하이드로카르빌 기를 형성할 수 있고, 이 환형 하이드로카르빌 기 또는 환형 헤테로원자 함유 하이드로카르빌 기는 비치환되거나, 또는 할로겐 원자, C_{1-20} 알킬 기, C_{1-20} 알콕시 기, C_{7-20} 알킬아릴 기, C_{7-20} 아릴알킬 기, C_{6-20} 아릴 기, C_{6-20} 아릴옥시 기, C_{7-20} 알킬아릴옥시 기, C_{7-20} 아릴알킬옥시 기, 아미도 기 $-NR'_2$, 포스피도 기 $-PR'_2$, 티올레이트 기 -SR', 화학식 $-Si(R^a)_3$의 실릴 기, 및 화학식 $-Ge(R^a)_3$의 게르마닐 기로 이루어지는 군 중에서 선택되는 하나 이상의 치환체에 의해 추가로 치환되고;

[2520] 여기서 각 R'는 수소, C_{1-20} 알킬 기, 및 C_{6-20} 아릴 기로 이루어지는 군 중에서 독립적으로 선택되고;

[2521] 여기서 각 R^a는 수소, C_{1-8} 알킬 기, C_{1-8} 알콕시 기, C_{6-20} 아릴옥시 기 및 C_{6-20} 아릴 기로 이루어지는 군 중에서 독립적으로 선택된다.

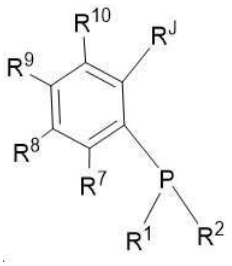
[2522] 본 개시내용의 실시양태는 화학식 I-P-TMS로 표현되는 화합물을 제조하는 방법이며:

[2523] 

(I-P-TMS)

[2524] 이 방법은 다음을 포함한다:

[2525] 화학식 I-P로 표현되는 포스핀 화합물을 Cl_2, Br_2, 및 헥사클로로에탄 Cl_3C-CCl_3으로 이루어지는 군 중에서 선택되는 염화물 또는 브롬화물의 공급원과 조합하는 제1 반응 단계 (i):

[2526] 

(I-P); 및

[2527] 제1 반응 단계에서 형성된 반응 생성물과 헥사메틸디실라잔 $[(CH_3)_3Si]_2NH$를 조합하는 제2 반응 단계 (ii):

[2528] 여기서, R^J는 다음으로 이루어지는 군 중에서 선택되고:

[2529] 하이드로카르빌 기로서, 여기서 하이드로카르빌 기는 비치환되거나, 또는 할로겐 원자, C_{1-20} 알킬 기, C_{1-20} 알콕시 기, C_{7-20} 알킬아릴 기, C_{7-20} 아릴알킬 기, C_{6-20} 아릴 기, C_{6-20} 아릴옥시 기, C_{7-20} 알킬아릴옥시 기, C_{7-20} 아릴알킬옥시 기, 화학식 $-NR'_2$의 아미도 기, 화학식 $-PR'_2$의 포스피도 기, 화학식 -SR'의 티올레이트 기, 화학식 $-Si(R^a)_3$의 실릴 기, 및 화학식 $-Ge(R^a)_3$의 게르마닐 기로 이루어지는 군 중에서 선택되는 하나 이상의 치환체에 의해 추가로 치환되는 하이드로카르빌 기;

[2530] 헤테로원자 함유 하이드로카르빌 기로서, 여기서 헤테로원자 함유 하이드로카르빌 기는 비치환되거나, 또는 할

로겐 원자, C_{1-20} 알킬 기, C_{1-20} 알콕시 기, C_{7-20} 알킬아릴 기, C_{7-20} 아릴알킬 기, C_{6-20} 아릴 기, C_{6-20} 아릴옥시 기, C_{7-20} 알킬아릴옥시 기, C_{7-20} 아릴알킬옥시, 화학식 $-NR'_2$의 아미도 기, 화학식 $-PR'_2$의 포스피도 기, 화학식 -SR'의 티올레이트 기, 화학식 $-Si(R^a)_3$의 실릴 기, 및 화학식 $-Ge(R^a)_3$의 게르마닐 기로 이루어지는 군 중에서 선택되는 하나 이상의 치환체에 의해 추가로 치환되는 헤테로원자 함유 하이드로카르빌 기;

[2531] 여기서, R^1 및 R^2는 각각 독립적으로 하이드로카르빌 기가 비치환되거나, 또는 하나 이상의 할로겐 원자, C_{1-20} 알킬 기, C_{1-20} 알콕시 기, C_{7-20} 알킬아릴 기, C_{7-20} 아릴알킬 기, C_{6-20} 아릴 기, C_{6-20} 아릴옥시 기, C_{7-20} 알킬아릴옥시 기, 및/또는 C_{7-20} 아릴알킬옥시 기에 의해 추가로 치환되는 C_{1-30} 하이드로카르빌 기 중에서 선택되고;

[2532] 여기서, R^7, R^8, R^9 및 R^{10}은 각각 독립적으로 다음으로 이루어진 군 중에서 선택되며:

[2533] 할로겐;

[2534] 수소;

[2535] C_{1-30} 하이드로카르빌 기로서, 여기서 하이드로카르빌 기는 비치환되거나, 또는 할로겐 원자, C_{1-20} 알킬 기, C_{1-20} 알콕시 기, C_{7-20} 알킬아릴 기, C_{7-20} 아릴알킬 기, C_{6-20} 아릴 기, C_{6-20} 아릴옥시 기, C_{7-20} 알킬아릴옥시 기, 및 C_{7-20} 아릴알킬옥시 기로 이루어지는 군 중에서 선택되는 하나 이상의 치환체에 의해 추가로 치환되는 C_{1-30} 하이드로카르빌 기;

[2536] 헤테로원자 함유 C_{1-30} 하이드로카르빌 기로서, 여기서 헤테로원자 함유 하이드로카르빌 기는 비치환되거나, 또는 할로겐 원자, C_{1-20} 알킬 기, C_{1-20} 알콕시 기, C_{7-20} 알킬아릴 기, C_{7-20} 아릴알킬 기, C_{6-20} 아릴 기, C_{6-20} 아릴옥시 기, C_{7-20} 알킬아릴옥시 기, 및 C_{7-20} 아릴알킬옥시 기로 이루어지는 군 중에서 선택되는 하나 이상의 치환체에 의해 추가로 치환되는 헤테로원자 함유 C_{1-30} 하이드로카르빌 기;

[2537] 옥시 기, -OR';

[2538] 아미도 기, $-NR'_2$;

[2539] 포스피도 기, $-PR'_2$;

[2540] 티올레이트 기, -SR';

[2541] 화학식 $-Si(R^a)_3$의 실릴 기; 및

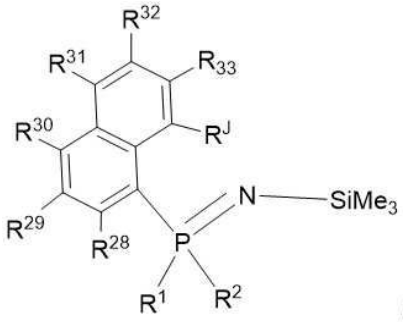
[2542] 화학식 $-Ge(R^a)_3$의 게르마닐 기;

[2543] 여기서, R^7, R^8, R^9 및 R^{10} 중 2개의 인접한 기는 선택적으로 결합되어 환형 하이드로카르빌 기 또는 환형 헤테로원자 함유 하이드로카르빌 기를 형성할 수 있고, 이 환형 하이드로카르빌 기 또는 환형 헤테로원자 함유 하이드로카르빌 기는 비치환되거나, 또는 할로겐 원자, C_{1-20} 알킬 기, C_{1-20} 알콕시 기, C_{7-20} 알킬아릴 기, C_{7-20} 아릴알킬 기, C_{6-20} 아릴 기, C_{6-20} 아릴옥시 기, C_{7-20} 알킬아릴옥시 기, C_{7-20} 아릴알킬옥시 기, 아미도 기 $-NR'_2$, 포스피도 기 $-PR'_2$, 티올레이트 기 -SR', 화학식 $-Si(R^a)_3$의 실릴 기, 및 화학식 $-Ge(R^a)_3$의 게르마닐 기로 이루어지는 군 중에서 선택되는 하나 이상의 치환체에 의해 추가로 치환되고;

[2544] 여기서 각 R'는 수소, C_{1-20} 알킬 기, 및 C_{6-20} 아릴 기로 이루어지는 군 중에서 독립적으로 선택되고;

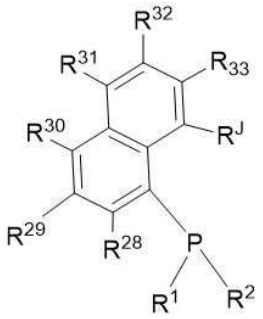
[2545] 여기서 각 R^a는 수소, C_{1-8} 알킬 기, C_{1-8} 알콕시 기, C_{6-20} 아릴옥시 기 및 C_{6-20} 아릴 기로 이루어지는 군 중에서 독립적으로 선택된다.

[2546] 본 개시내용의 실시양태는 화학식 II-P-TMS로 표현되는 화합물을 제조하는 방법이며:

[2547]  (II-P-TMS)

[2548] 이 방법은 다음을 포함한다:

[2549] 화학식 II-P로 표현되는 포스핀 화합물을 Cl_2, Br_2, 및 헥사클로로에탄 Cl_3C-CCl_3으로 이루어지는 군 중에서 선택되는 염화물 또는 브롬화물의 공급원과 조합하는 제1 반응 단계 (i):

[2550]  (II-P); 및

[2551] 제1 반응 단계에서 형성된 반응 생성물과 헥사메틸디실라잔 $[(CH_3)_3Si]_2NH$를 조합하는 제2 반응 단계 (ii):

[2552] 여기서, R^J는 다음으로 이루어지는 군 중에서 선택되고:

[2553] 하이드로카르빌 기로서, 여기서 하이드로카르빌 기는 비치환되거나, 또는 할로겐 원자, C_{1-20} 알킬 기, C_{1-20} 알콕시 기, C_{7-20} 알킬아릴 기, C_{7-20} 아릴알킬 기, C_{6-20} 아릴 기, C_{6-20} 아릴옥시 기, C_{7-20} 알킬아릴옥시 기, C_{7-20} 아릴알킬옥시 기, 화학식 $-NR'_2$의 아미도 기, 화학식 $-PR'_2$의 포스피도 기, 화학식 $-SR'$의 티올레이트 기, 화학식 $-Si(R^a)_3$의 실릴 기, 및 화학식 $-Ge(R^a)_3$의 게르마닐 기로 이루어지는 군 중에서 선택되는 하나 이상의 치환체에 의해 추가로 치환되는 하이드로카르빌 기; 및

[2554] 헤테로원자 함유 하이드로카르빌 기로서, 여기서 헤테로원자 함유 하이드로카르빌 기는 비치환되거나, 또는 할로겐 원자, C_{1-20} 알킬 기, C_{1-20} 알콕시 기, C_{7-20} 알킬아릴 기, C_{7-20} 아릴알킬 기, C_{6-20} 아릴 기, C_{6-20} 아릴옥시 기, C_{7-20} 알킬아릴옥시 기, C_{7-20} 아릴알킬옥시, 화학식 $-NR'_2$의 아미도 기, 화학식 $-PR'_2$의 포스피도 기, 화학식 $-SR'$의 티올레이트 기, 화학식 $-Si(R^a)_3$의 실릴 기, 및 화학식 $-Ge(R^a)_3$의 게르마닐 기로 이루어지는 군 중에서 선택되는 하나 이상의 치환체에 의해 추가로 치환되는 헤테로원자 함유 하이드로카르빌 기;

[2555] 여기서, R^1 및 R^2는 각각 독립적으로 하이드로카르빌 기가 비치환되거나, 또는 하나 이상의 할로겐 원자, C_{1-20} 알킬 기, C_{1-20} 알콕시 기, C_{7-20} 알킬아릴 기, C_{7-20} 아릴알킬 기, C_{6-20} 아릴 기, C_{6-20} 아릴옥시 기, C_{7-20} 알킬아릴옥시 기, 및/또는 C_{7-20} 아릴알킬옥시 기에 의해 추가로 치환되는 C_{1-30} 하이드로카르빌 기로부터 선택되고;

[2556] 여기서, R^{28}, R^{29}, R^{30}, R^{31}, R^{32} 및 R^{33}은 각각 독립적으로 다음으로 이루어진 군 중에서 선택되고:

[2557] 할로겐;

[2558] 수소;

[2559] C_{1-30} 하이드로카르빌 기로서, 여기서 하이드로카르빌 기는 비치환되거나, 또는 할로겐 원자, C_{1-20} 알킬 기, C_{1-20} 알콕시 기, C_{7-20} 알킬아릴 기, C_{7-20} 아릴알킬 기, C_{6-20} 아릴 기, C_{6-20} 아릴옥시 기, C_{7-20} 알킬아릴옥시 기, 및 C_{7-20} 아릴알킬옥시 기로 이루어지는 군 중에서 선택되는 하나 이상의 치환체에 의해 추가로 치환되는 C_{1-30} 하이드로카르빌 기;

[2560] 헤테로원자 함유 C_{1-30} 하이드로카르빌 기로서, 여기서 헤테로원자 함유 하이드로카르빌 기는 비치환되거나, 또는 할로겐 원자, C_{1-20} 알킬 기, C_{1-20} 알콕시 기, C_{7-20} 알킬아릴 기, C_{7-20} 아릴알킬 기, C_{6-20} 아릴 기, C_{6-20} 아릴옥시 기, C_{7-20} 알킬아릴옥시 기, 및 C_{7-20} 아릴알킬옥시 기로 이루어지는 군 중에서 선택되는 하나 이상의 치환체에 의해 추가로 치환되는 헤테로원자 함유 C_{1-30} 하이드로카르빌 기;

[2561] 옥시 기, -OR';

[2562] 아미도 기, $-NR'_2$;

[2563] 포스피도 기 $-PR'_2$;

[2564] 티올레이트 기 SR';

[2565] 화학식 $-Si(R^a)_3$의 실릴 기; 및

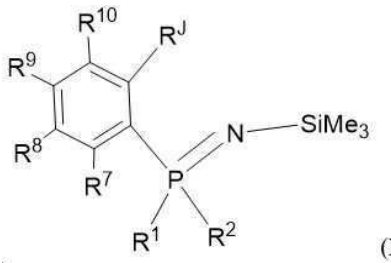
[2566] 화학식 $-Ge(R^a)_3$의 게르마닐 기;

[2567] 여기서, R^{28}, R^{29}, R^{30}, R^{31}, R^{32} 및 R^{33} 중 2개의 인접한 기는 선택적으로 결합되어 환형 하이드로카르빌 기 또는 환형 헤테로원자 함유 하이드로카르빌 기를 형성할 수 있고, 이 환형 하이드로카르빌 기 또는 환형 헤테로원자 함유 하이드로카르빌 기는 비치환되거나, 또는 할로겐 원자, C_{1-20} 알킬 기, C_{1-20} 알콕시 기, C_{7-20} 알킬아릴 기, C_{7-20} 아릴알킬 기, C_{6-20} 아릴 기, C_{6-20} 아릴옥시 기, C_{7-20} 알킬아릴옥시 기, C_{7-20} 아릴알킬옥시 기, 아미도 기 $-NR'_2$, 포스피도 기 $-PR'_2$, 티올레이트 기 -SR', 화학식 $-Si(R^a)_3$의 실릴 기, 및 화학식 $-Ge(R^a)_3$의 게르마닐 기로 이루어지는 군 중에서 선택되는 하나 이상의 치환체에 의해 추가로 치환되고;

[2568] 여기서 각 R'는 수소, C_{1-20} 알킬 기, 및 C_{6-20} 아릴 기로 이루어지는 군 중에서 독립적으로 선택되고;

[2569] 여기서 각 R^a는 수소, C_{1-8} 알킬 기, C_{1-8} 알콕시 기, C_{6-20} 아릴옥시 기 및 C_{6-20} 아릴 기로 이루어지는 군 중에서 독립적으로 선택된다.

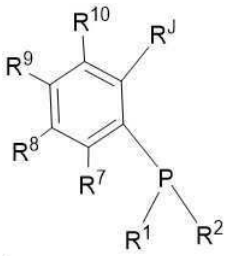
[2570] 본 개시내용의 실시양태는 화학식 I-P-TMS로 표현되는 화합물을 제조하는 방법이며:

[2571] 

(I-P-TMS)

[2572] 이 방법은 다음을 포함한다:

[2573] 화학식 I-P로 표현되는 포스핀 화합물을 헥사클로로에탄 Cl_3C-CCl_3과 조합하는 제1 반응 단계 (i):

[2574]  (I-P); 및

[2575] 제1 반응 단계에서 형성된 반응 생성물과 헥사메틸디실라잔 $[(CH_3)_3Si]_2NH$를 조합하는 제2 반응 단계 (ii):

[2576] 여기서, R^J는 다음으로 이루어지는 군 중에서 선택되고:

[2577] 하이드로카르빌 기로서, 여기서 하이드로카르빌 기는 비치환되거나, 또는 할로겐 원자, C_{1-20} 알킬 기, C_{1-20} 알콕시 기, C_{7-20} 알킬아릴 기, C_{7-20} 아릴알킬 기, C_{6-20} 아릴 기, C_{6-20} 아릴옥시 기, C_{7-20} 알킬아릴옥시 기, C_{7-20} 아릴알킬옥시 기, 화학식 $-NR'_2$의 아미도 기, 화학식 $-PR'_2$의 포스피도 기, 화학식 $-SR'$의 티올레이트 기, 화학식 $-Si(R^a)_3$의 실릴 기, 및 화학식 $-Ge(R^a)_3$의 게르마닐 기로 이루어지는 군 중에서 선택되는 하나 이상의 치환체에 의해 추가로 치환되는 하이드로카르빌 기; 및

[2578] 헤테로원자 함유 하이드로카르빌 기로서, 여기서 헤테로원자 함유 하이드로카르빌 기는 비치환되거나, 또는 할로겐 원자, C_{1-20} 알킬 기, C_{1-20} 알콕시 기, C_{7-20} 알킬아릴 기, C_{7-20} 아릴알킬 기, C_{6-20} 아릴 기, C_{6-20} 아릴옥시 기, C_{7-20} 알킬아릴옥시 기, C_{7-20} 아릴알킬옥시, 화학식 $-NR'_2$의 아미도 기, 화학식 $-PR'_2$의 포스피도 기, 화학식 $-SR'$의 티올레이트 기, 화학식 $-Si(R^a)_3$의 실릴 기, 및 화학식 $-Ge(R^a)_3$의 게르마닐 기로 이루어지는 군 중에서 선택되는 하나 이상의 치환체에 의해 추가로 치환되는 헤테로원자 함유 하이드로카르빌 기;

[2579] 여기서, R^1 및 R^2는 각각 독립적으로 하이드로카르빌 기가 비치환되거나, 또는 하나 이상의 할로겐 원자, C_{1-20} 알킬 기, C_{1-20} 알콕시 기, C_{7-20} 알킬아릴 기, C_{7-20} 아릴알킬 기, C_{6-20} 아릴 기, C_{6-20} 아릴옥시 기, C_{7-20} 알킬아릴옥시 기, 및/또는 C_{7-20} 아릴알킬옥시 기에 의해 추가로 치환되는 C_{1-30} 하이드로카르빌 기 중에서 선택되고;

[2580] 여기서, R^7, R^8, R^9 및 R^{10}은 각각 독립적으로 다음으로 이루어진 군 중에서 선택되고:

[2581] 할로겐;

[2582] 수소;

[2583] C_{1-30} 하이드로카르빌 기로서, 여기서 하이드로카르빌 기는 비치환되거나, 또는 할로겐 원자, C_{1-20} 알킬 기, C_{1-20} 알콕시 기, C_{7-20} 알킬아릴 기, C_{7-20} 아릴알킬 기, C_{6-20} 아릴 기, C_{6-20} 아릴옥시 기, C_{7-20} 알킬아릴옥시 기, 및 C_{7-20} 아릴알킬옥시 기로 이루어지는 군 중에서 선택되는 하나 이상의 치환체에 의해 추가로 치환되는 C_{1-30} 하이드로카르빌 기;

[2584] 헤테로원자 함유 C_{1-30} 하이드로카르빌 기로서, 여기서 헤테로원자 함유 하이드로카르빌 기는 비치환되거나, 또는 할로겐 원자, C_{1-20} 알킬 기, C_{1-20} 알콕시 기, C_{7-20} 알킬아릴 기, C_{7-20} 아릴알킬 기, C_{6-20} 아릴 기, C_{6-20} 아릴옥시 기, C_{7-20} 알킬아릴옥시 기, 및 C_{7-20} 아릴알킬옥시 기로 이루어지는 군 중에서 선택되는 하나 이상의 치환체에 의해 추가로 치환되는 헤테로원자 함유 C_{1-30} 하이드로카르빌 기;

[2585] 옥시 기, $-OR'$;

[2586] 아미도 기, $-NR'_2$;

[2587] 포스피도 기 $-PR'_2$;

[2588] 티올레이트 기 SR';

[2589] 화학식 $-Si(R^a)_3$의 실릴 기; 및

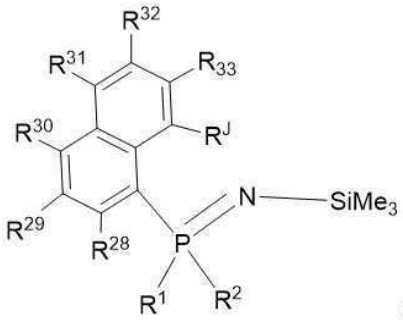
[2590] 화학식 $-Ge(R^a)_3$의 게르마닐 기;

[2591] 여기서, R^7, R^8, R^9 및 R^{10} 중 2개의 인접한 기는 선택적으로 결합되어 환형 하이드로카르빌 기 또는 환형 헤테로원자 함유 하이드로카르빌 기를 형성할 수 있고, 이 환형 하이드로카르빌 기 또는 환형 헤테로원자 함유 하이드로카르빌 기는 비치환되거나, 또는 할로겐 원자, C_{1-20} 알킬 기, C_{1-20} 알콕시 기, C_{7-20} 알킬아릴 기, C_{7-20} 아릴알킬 기, C_{6-20} 아릴 기, C_{6-20} 아릴옥시 기, C_{7-20} 알킬아릴옥시 기, C_{7-20} 아릴알킬옥시 기, 아미도 기 $-NR'_2$, 포스피도 기 $-PR'_2$, 티올레이트 기 $-SR'$, 화학식 $-Si(R^a)_3$의 실릴 기, 및 화학식 $-Ge(R^a)_3$의 게르마닐 기로 이루어지는 군 중에서 선택되는 하나 이상의 치환체에 의해 추가로 치환되고;

[2592] 여기서 각 R'는 수소, C_{1-20} 알킬 기, 및 C_{6-20} 아릴 기로 이루어지는 군 중에서 독립적으로 선택되고;

[2593] 여기서 각 R^a는 수소, C_{1-8} 알킬 기, C_{1-8} 알콕시 기, C_{6-20} 아릴옥시 기 및 C_{6-20} 아릴 기로 이루어지는 군 중에서 독립적으로 선택된다.

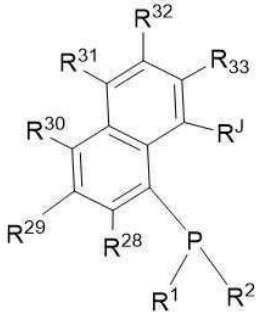
[2594] 본 개시내용의 실시양태는 화학식 II-P-TMS로 표현되는 화합물을 제조하는 방법이며:

[2595] 

(II-P-TMS)

[2596] 이 방법은 다음을 포함한다:

[2597] 화학식 II-P로 표현되는 포스핀 화합물을 헥사클로로에탄 Cl_3C-CCl_3과 조합하는 제1 반응 단계 (i):

[2598] 

(II-P); 및

[2599] 제1 반응 단계에서 형성된 반응 생성물과 헥사메틸디실라잔 $[(CH_3)_3Si]_2NH$를 조합하는 제2 반응 단계 (ii):

[2600] 여기서, R^J는 다음으로 이루어지는 군 중에서 선택되고:

[2601] 하이드로카르빌 기로서, 여기서 하이드로카르빌 기는 비치환되거나, 또는 할로겐 원자, C_{1-20} 알킬 기, C_{1-20} 알콕시 기, C_{7-20} 알킬아릴 기, C_{7-20} 아릴알킬 기, C_{6-20} 아릴 기, C_{6-20} 아릴옥시 기, C_{7-20} 알킬아릴옥시 기, C_{7-20} 아릴알킬옥시 기, 화학식 $-NR'_2$의 아미도 기, 화학식 $-PR'_2$의 포스피도 기, 화학식 $-SR'$의 티올레이트 기, 화학식 $-Si(R^a)_3$의 실릴 기, 및 화학식 $-Ge(R^a)_3$의 게르마닐 기로 이루어지는 군 중에서 선택되는 하나 이상의 치환체에 의해 추가로 치환되는 하이드로카르빌 기;

[2602] 헤테로원자 함유 하이드로카르빌 기로서, 여기서 헤테로원자 함유 하이드로카르빌 기는 비치환되거나, 또는 할로겐 원자, C_{1-20} 알킬 기, C_{1-20} 알콕시 기, C_{7-20} 알킬아릴 기, C_{7-20} 아릴알킬 기, C_{6-20} 아릴 기, C_{6-20} 아릴옥시 기, C_{7-20} 알킬아릴옥시 기, C_{7-20} 아릴알킬옥시, 화학식 $-NR'_2$의 아미도 기, 화학식 $-PR'_2$의 포스피도 기, 화학식 $-SR'$의 티올레이트 기, 화학식 $-Si(R^a)_3$의 실릴 기, 및 화학식 $-Ge(R^a)_3$의 게르마닐 기로 이루어지는 군 중에서 선택되는 하나 이상의 치환체에 의해 추가로 치환되는 헤테로원자 함유 하이드로카르빌 기;

[2603] 여기서, R^1 및 R^2는 각각 독립적으로 하이드로카르빌 기가 비치환되거나, 또는 하나 이상의 할로겐 원자, C_{1-20} 알킬 기, C_{1-20} 알콕시 기, C_{7-20} 알킬아릴 기, C_{7-20} 아릴알킬 기, C_{6-20} 아릴 기, C_{6-20} 아릴옥시 기, C_{7-20} 알킬아릴옥시 기, 및/또는 C_{7-20} 아릴알킬옥시 기에 의해 추가로 치환되는 C_{1-30} 하이드로카르빌 기로부터 선택되고;

[2604] 여기서, R^{28}, R^{29}, R^{30}, R^{31}, R^{32} 및 R^{33}은 각각 독립적으로 다음으로 이루어진 군 중에서 선택되고:

[2605] 할로겐;

[2606] 수소;

[2607] C_{1-30} 하이드로카르빌 기로서, 여기서 하이드로카르빌 기는 비치환되거나, 또는 할로겐 원자, C_{1-20} 알킬 기, C_{1-20} 알콕시 기, C_{7-20} 알킬아릴 기, C_{7-20} 아릴알킬 기, C_{6-20} 아릴 기, C_{6-20} 아릴옥시 기, C_{7-20} 알킬아릴옥시 기, 및 C_{7-20} 아릴알킬옥시 기로 이루어지는 군 중에서 선택되는 하나 이상의 치환체에 의해 추가로 치환되는 C_{1-30} 하이드로카르빌 기;

[2608] 헤테로원자 함유 C_{1-30} 하이드로카르빌 기로서, 여기서 헤테로원자 함유 하이드로카르빌 기는 비치환되거나, 또는 할로겐 원자, C_{1-20} 알킬 기, C_{1-20} 알콕시 기, C_{7-20} 알킬아릴 기, C_{7-20} 아릴알킬 기, C_{6-20} 아릴 기, C_{6-20} 아릴옥시 기, C_{7-20} 알킬아릴옥시 기, 및 C_{7-20} 아릴알킬옥시 기로 이루어지는 군 중에서 선택되는 하나 이상의 치환체에 의해 추가로 치환되는 헤테로원자 함유 C_{1-30} 하이드로카르빌 기;

[2609] 옥시 기, $-OR'$;

[2610] 아미도 기, $-NR'_2$;

[2611] 포스피도 기 $-PR'_2$;

[2612] 티올레이트 기 SR';

[2613] 화학식 $-Si(R^a)_3$의 실릴 기; 및

[2614] 화학식 $-Ge(R^a)_3$의 게르마닐 기;

[2615] 여기서, R^{28}, R^{29}, R^{30}, R^{31}, R^{32} 및 R^{33} 중 2개의 인접한 기는 선택적으로 결합되어 환형 하이드로카르빌 기 또는 환형 헤테로원자 함유 하이드로카르빌 기를 형성할 수 있고, 이 환형 하이드로카르빌 기 또는 환형 헤테로원자 함유 하이드로카르빌 기는 비치환되거나, 또는 할로겐 원자, C_{1-20} 알킬 기, C_{1-20} 알콕시 기, C_{7-20} 알킬아릴 기, C_{7-20} 아릴알킬 기, C_{6-20} 아릴 기, C_{6-20} 아릴옥시 기, C_{7-20} 알킬아릴옥시 기, C_{7-20} 아릴알킬옥시 기, 아미도 기 $-NR'_2$, 포스피도 기 $-PR'_2$, 티올레이트 기 $-SR'$, 화학식 $-Si(R^a)_3$의 실릴 기, 및 화학식 $-Ge(R^a)_3$의 게르마닐 기로 이루어지는 군 중에서 선택되는 하나 이상의 치환체에 의해 추가로 치환되고;

[2616] 여기서 각 R'는 수소, C_{1-20} 알킬 기, 및 C_{6-20} 아릴 기로 이루어지는 군 중에서 독립적으로 선택되고;

[2617] 여기서 각 R^a는 수소, C_{1-8} 알킬 기, C_{1-8} 알콕시 기, C_{6-20} 아릴옥시 기 및 C_{6-20} 아릴 기로 이루어지는 군 중에서 독립적으로 선택된다.

[2618] 실시양태에서, 포스핀 화합물, I-P 및 헥사클로로에탄, Cl_3C-CCl_3은 약 1:1의 몰 비로 조합된다.

[2619] 실시양태에서, 포스핀 화합물, II-P 및 헥사클로로에탄, Cl_3C-CCl_3은 약 1:1의 몰 비로 조합된다.

[2620] 실시양태에서, 헥사메틸디실라잔, $[(CH_3)_3Si]_2NH$의 몰 과량은 포스핀 화합물 I-P를 사용할 때 제1 반응 단계 (i)에서 형성된 반응 생성물과 조합된다.

[2621] 실시양태에서, 헥사메틸디실라잔, $[(CH_3)_3Si]_2NH$의 몰 과량은 포스핀 화합물 II-P를 사용할 때 제1 반응 단계 (i)에서 형성된 반응 생성물과 조합된다.

[2622] 실시양태에서, 포스핀 화합물 I-P에 대한 헥사메틸디실라잔, $[(CH_3)_3Si]_2NH$의 몰 비는 1.0 초과, 또는 1.5 이상, 또는 2.0 이상, 또는 2.5 이상, 또는 3.0 이상, 또는 3.5 이상, 또는 4.0 이상, 또는 4.5 이상, 또는 5.0 이상, 또는 약 1.5 내지 약 5.0, 또는 약 1.5 내지 약 4.5, 또는 약 1.5 내지 약 4.0, 또는 약 2.0 내지 약 4.0, 또는 약 2.5 내지 약 3.5이다.

[2623] 실시양태에서, 포스핀 화합물 II-P에 대한 헥사메틸디실라잔, $[(CH_3)_3Si]_2NH$의 몰 비는 1.0 초과, 또는 1.5 이상, 또는 2.0 이상, 또는 2.5 이상, 또는 3.0 이상, 또는 3.5 이상, 또는 4.0 이상, 또는 4.5 이상, 또는 5.0 이상, 또는 약 1.5 내지 약 5.0, 또는 약 1.5 내지 약 4.5, 또는 약 1.5 내지 약 4.0, 또는 약 2.0 내지 약 4.0, 또는 약 2.5 내지 약 3.5이다.

[2624] 실시양태에서, 포스핀 화합물 I-P를 사용할 때 제1 반응 단계 (i)에서 형성된 반응 생성물에 대한 헥사메틸디실라잔, $[(CH_3)_3Si]_2NH$의 몰 비는 1.0 초과, 또는 1.5 이상, 또는 2.0 이상, 또는 2.5 이상, 또는 3.0 이상, 또는 3.5 이상, 또는 4.0 이상, 또는 4.5 이상, 또는 5.0 이상, 또는 약 1.5 내지 약 5.0, 또는 약 1.5 내지 약 4.5, 또는 약 1.5 내지 약 4.0, 또는 약 2.0 내지 약 4.0, 또는 약 2.5 내지 약 3.5이다.

[2625] 실시양태에서, 포스핀 화합물 II-P를 사용할 때 제1 반응 단계 (i)에서 형성된 반응 생성물에 대한 헥사메틸디실라잔, $[(CH_3)_3Si]_2NH$의 몰 비는 1.0 초과, 또는 1.5 이상, 또는 2.0 이상, 또는 2.5 이상, 또는 3.0 이상, 또는 3.5 이상, 또는 4.0 이상, 또는 4.5 이상, 또는 5.0 이상, 또는 약 1.5 내지 약 5.0, 또는 약 1.5 내지 약 4.5, 또는 약 1.5 내지 약 4.0, 또는 약 2.0 내지 약 4.0, 또는 약 2.5 내지 약 3.5이다.

[2626] 실시양태에서, 포스핀 화합물, (I-P), 헥사클로로에탄, Cl_3C-CCl_3; 및 헥사메틸디실라잔, $[(CH_3)_3Si]_2NH$는 극성 용매에서 조합된다.

[2627] 실시양태에서, 포스핀 화합물, (II-P), 헥사클로로에탄, Cl_3C-CCl_3; 및 헥사메틸디실라잔, $[(CH_3)_3Si]_2NH$는 극성 용매에서 조합된다.

[2628] 실시양태에서, 단계 (i) 및 (ii)는 각각 극성 반응 용매에서 수행된다.

[2629] 본 개시내용의 실시양태에서, 극성 반응 용매는 디클로로메탄, 1,2-디클로로에탄, 디에틸 아세테이트, 피리딘, 아세톤, 디메틸포름아미드, 디메틸 술폭사이드, 아세토니트릴, 테트라하이드로푸란 및 이들의 혼합물로 이루어지는 군 중에서 선택된다.

[2630] 본 개시내용의 실시양태에서, 극성 반응 용매는 디클로로메탄, 1,2-디클로로에탄, 아세트니트릴, 테트라하이드로푸란 및 이들의 혼합물로 이루어지는 군 중에서 선택된다.

[2631] 본 개시내용의 실시양태에서, 극성 반응 용매는 디클로로메탄, 1,2-디클로로에탄 및 이들의 혼합물로 이루어지는 군 중에서 선택된다.

[2632] 실시양태에서, 제1 반응 단계 (i)의 생성물은 제2 반응기 단계 (ii)를 수행하기 전에 반응 용매에서 단리되지 않는다.

[2633] 실시양태에서, 단계 (i) 및 (ii)는 단일 반응 용기에서 둘 모두가 수행된다.

[2634] 실시양태에서, 단계 (i) 및 (ii)는 단일 반응 용기에서 둘 모두가 수행되고, 제1 반응 단계 (i)의 생성물은 제2 반응기 단계 (ii)를 수행하기 전에 반응 용매로부터 단리되지 않는다.

[2635] 본 개시내용의 실시양태에서, 포스핀 화합물, (I-P), 또는 포스핀 화합물, (II-P); 헥사클로로에탄, Cl_3C-CCl_3;

및 헥사메틸디실라잔, $[(CH_3)_3Si]_2NH$는 주변 온도에서 조합된다.

[2636] 실시양태에서, 단계 (i) 및 (ii)는 각각 주변 온도에서 수행된다.

[2637] 실시양태에서, 화학식 I-P-TMS 또는 II-P-TMS로 표현되는 화합물은 여과, 추출, 침전, 결정화, 재결정화, 진공하에 용매 제거, 용매 또는 희석제로의 세척 등뿐만 아니라 이들의 조합과 같은 통상적인 방법을 사용하여 반응 혼합물로부터 수득될 수 있다.

[2638] 실시양태에서, 브뢴스테드 염기는 포스핀 화합물, (I-P), 또는 포스핀 화합물, (II-P); 헥사클로로에탄, Cl_3C-CCl_3; 및 헥사메틸디실라잔, $[(CH_3)_3Si]_2NH$의 조합에 의해 형성된 반응 생성물에 첨가되어, 화학식 I-P-TMS 또는 II-P-TMS로 표현되는 화합물을 제공한다.

[2639] 실시양태에서, 브뢴스테드 염기는 제2 반응 단계 (ii)에서 형성된 반응 생성물에 첨가되어 화학식 I-P-TMS 또는 II-P-TMS로 표현되는 화합물을 제공한다.

[2640] 일부 실시양태에서, 브뢴스테드 염기는 아미도 염 화합물일 수 있다. 이러한 아미도 염 화합물은 예를 들어 $[((CH_3)_3Si)_2N]K$를 포함한다.

[2641] 일부 실시양태에서, 브뢴스테드 염기는 아민 화합물일 수 있다. 이러한 아민 화합물은 메틸아민, 에틸아민, n-프로필아민, 이소프로필아민, n-부틸아민, tert-부틸아민, n-옥틸아민, n-데실아민, 아닐린 및 에틸렌디아민과 같은 1차 아민 화합물, 디메틸아민, 디에틸아민, 디-n-프로필아민, 디-n-부틸아민, 디-tert-부틸아민, 디-n-옥틸아민, 디-n-데실아민, 피롤리딘, 헥사메틸디실라잔 및 디페닐아민과 같은 2차 아민 화합물, 및 트리메틸아민, 트리에틸아민, 트리-n-프로필아민, 트리-n-부틸아민, 디이소프로필에틸아민, 트리-n-옥틸아민, 트리-n-데실아민, 트리페닐아민, N,N-디메틸아닐린, N,N,N',N'-테트라메틸에틸렌디아민, N-메틸피롤리딘 및 4-디메틸아미노피리딘과 같은 3차 아민 화합물을 포함한다.

[2642] 실시양태에서, R^1 및 R^2는 각각 독립적으로 비치환된 C_{1-30} 하이드로카르빌 기이다.

[2643] 실시양태에서, R^1 및 R^2는 1차 알킬 기, 2차 알킬 기, 3차 알킬 기, 및 아릴 기로 이루어지는 군 중에서 독립적으로 선택된다.

[2644] 실시양태에서, R^1 및 R^2는 2차 알킬 기이다.

[2645] 실시양태에서, R^1 및 R^2는 3차 알킬 기이다.

[2646] 실시양태에서, R^1 및 R^2는 이소프로필, 사이클로헥실 및 *tert*-부틸로 이루어지는 군 중에서 각각 독립적으로 선택된다.

[2647] 실시양태에서, R^1 및 R^2는 이소프로필 및 사이클로헥실로 이루어지는 군 중에서 각각 독립적으로 선택된다.

[2648] 일부 실시양태에서, R^7, R^8, R^9 및 R^{10}은 각각 독립적으로 할로겐, 수소, C_{1-30} 알킬 기, C_{1-30} 알콕시 기, C_{7-30} 알킬아릴 기, C_{7-30} 아릴알킬 기, C_{6-30} 아릴 기, C_{6-30} 아릴옥사이드 기, C_{7-30} 알킬아릴옥시 기, 및 C_{7-30} 아릴알킬옥시 기로 이루어지는 군 중에서 선택된다.

[2649] 일부 실시양태에서, R^7, R^8, R^9 및 R^{10}은 각각 독립적으로 할로겐, 수소, C_{1-20} 알킬 기, C_{1-20} 알콕시 기, C_{7-20} 알킬아릴 기, C_{7-20} 아릴알킬 기, C_{6-20} 아릴 기, C_{6-20} 아릴옥사이드 기, C_{7-20} 알킬아릴옥시 기, 및 C_{7-20} 아릴알킬옥시 기로 이루어지는 군 중에서 선택된다.

[2650] 일부 실시양태에서, R^7, R^8, R^9 및 R^{10}은 각각 독립적으로 할로겐, 수소, 및 C_{1-30} 하이드로카르빌 기로 이루어지는 군 중에서 선택되고, 여기서 하이드로카르빌 기는 비치환되거나, 또는 하나 이상의 할로겐 원자에 의해 추가로 치환된다.

[2651] 일부 실시양태에서, R^7, R^8, R^9 및 R^{10}은 각각 독립적으로 할로겐, 수소, 및 C_{1-30} 헤테로원자 함유 하이드로카르빌

기로 이루어지는 군 중에서 선택되고, 여기서 헤테로원자 함유 하이드로카르빌 기는 비치환되거나 또는 하나 이상의 할로겐 원자에 의해 추가로 치환된다.

[2652] 일부 실시양태에서, R^7, R^8, R^9 및 R^{10}은 각각 독립적으로 수소 및 C_{1-30} 하이드로카르빌 기로 이루어지는 군 중에서 선택되고, 여기서 하이드로카르빌 기는 비치환되거나, 또는 하나 이상의 할로겐 원자에 의해 추가로 치환된다.

[2653] 일부 실시양태에서, R^7, R^8, R^9 및 R^{10}은 각각 독립적으로 수소 및 C_{1-30} 헤테로원자 함유 하이드로카르빌 기로 이루어지는 군 중에서 선택되고, 여기서 헤테로원자 함유 하이드로카르빌 기는 비치환되거나, 또는 하나 이상의 할로겐 원자에 의해 추가로 치환된다.

[2654] 실시양태에서, R^7, R^8, R^9 및 R^{10}은 각각 수소이다.

[2655] 일부 실시양태에서, R^{28}, R^{29}, R^{30}, R^{31}, R^{32} 및 R^{33}은 각각 독립적으로 할로겐, 수소, C_{1-30} 알킬 기, C_{1-30} 알콕시 기, C_{7-30} 알킬아릴 기, C_{7-30} 아릴알킬 기, C_{6-30} 아릴 기, C_{6-30} 아릴옥사이드 기, C_{7-30} 알킬아릴옥시 기, 및 C_{7-30} 아릴알킬옥시 기로 이루어지는 군 중에서 선택된다.

[2656] 일부 실시양태에서, R^7, R^8, R^9 및 R^{10}은 각각 독립적으로 할로겐, 수소, C_{1-20} 알킬 기, C_{1-20} 알콕시 기, C_{7-20} 알킬아릴 기, C_{7-20} 아릴알킬 기, C_{6-20} 아릴 기, C_{6-20} 아릴옥사이드 기, C_{7-20} 알킬아릴옥시 기, 및 C_{7-20} 아릴알킬옥시 기로 이루어지는 군 중에서 선택된다.

[2657] 일부 실시양태에서, R^{28}, R^{29}, R^{30}, R^{31}, R^{32} 및 R^{33}은 각각 독립적으로 할로겐, 수소, 및 C_{1-30} 하이드로카르빌 기로 이루어지는 군 중에서 선택되고, 여기서 하이드로카르빌 기는 비치환되거나, 또는 하나 이상의 할로겐 원자에 의해 추가로 치환된다.

[2658] 일부 실시양태에서, R^{28}, R^{29}, R^{30}, R^{31}, R^{32} 및 R^{33}은 각각 독립적으로 할로겐, 수소, 및 C_{1-30} 헤테로원자 함유 하이드로카르빌 기로 이루어지는 군 중에서 선택되고, 여기서 헤테로원자 함유 하이드로카르빌 기는 비치환되거나, 또는 하나 이상의 할로겐 원자에 의해 추가로 치환된다.

[2659] 일부 실시양태에서, R^{28}, R^{29}, R^{30}, R^{31}, R^{32} 및 R^{33}은 각각 독립적으로 수소 및 C_{1-30} 하이드로카르빌 기로 이루어지는 군 중에서 선택되고, 여기서 하이드로카르빌 기는 비치환되거나, 또는 하나 이상의 할로겐 원자에 의해 추가로 치환된다.

[2660] 일부 실시양태에서, R^{28}, R^{29}, R^{30}, R^{31}, R^{32} 및 R^{33}은 각각 독립적으로 수소 및 C_{1-30} 헤테로원자 함유 하이드로카르빌 기로 이루어지는 군 중에서 선택되고, 여기서 헤테로원자 함유 하이드로카르빌 기는 비치환되거나, 또는 하나 이상의 할로겐 원자에 의해 추가로 치환된다.

[2661] 실시양태에서, R^{28}, R^{29}, R^{30}, R^{31}, R^{32} 및 R^{33}은 각각 수소이다.

[2662] 다음 실시예는 본 개시내용의 선택된 실시양태를 예시하기 위한 목적으로 제시된 것이며; 제시된 실시예는 제시된 청구항을 제한하지 않는 것으로 이해되어야 한다.

[2663] 실시예

[2664] 일반

[2665] 일반 실험 방법

[2666] 공기 및/또는 습기에 민감한 화합물을 수반하는 모든 반응은 표준 Schlenk 기술을 사용하여 질소 하에서 또는 불활성 분위기 글러브 박스에서 수행했다; 반응 용매는 Pangborn 등(Pangborn, A. B. G.; Grubbs, R. H.; Rosen, R. K.; Timmers, F. J. *Organometallics* **1996**, *15*, 1518)에 의해 기술된 시스템을 사용하여 정제한 다음 불활성 분위기 글러브 박스에서 활성화된 분자 체 위에 보관했다. 공기 및 습기에 안정적인 반응을 위한 용매는 VWR에서 구입했고, 받은 그대로 사용했다. 중수소화된 용매는 CIL에서 구입했고, 활성화된 13x 분자 체 위

에 보관했다. 셀라이트는 Sigma-Aldrich에서 구입하여 오븐 건조한 후 수분에 민감한 화학물질과 함께 사용하기 위해 글러브 박스에 보관했다. 불화세슘(CsF)은 Sigma-Aldrich에서 구입하여 사용 전 진공 하에 150℃에서 건조했다. 테트라키스(디메틸아미도)티타늄(IV) ($Ti(NMe_2)_4$)는 Strem Chemicals에서 구입하여 받은 그대로 사용했다. MMAO-7(Isopar-E 중 7 wt% 용액), 디에틸알루미늄 에톡사이드(DEAL-E; 헵탄 중 25 wt%), 트리에틸알루미늄(TEAL; 헵탄 중 25 wt%), 트리이소부틸알루미늄(TIBAL; 헥산 중 25 wt% 용액)은 Nouryon에서 구입하여 받은 그대로 사용했다. 본원에서 TB로 약칭되는 트리페닐카르베늄 테트라키스(펜타플루오로페닐) 붕산염, $(Ph_3C)[B(C_6F_5)_4]$은 Albemarle Corp.에서 구입하여 받은 그대로 사용했다. 본원에서 AB로 약칭되는 디(수소화 탈로우)메틸암모늄('Armeenium') 테트라키스(펜타플루오로페닐) 붕산염(메틸사이클로헥산 중 11.0 wt%)은 Boulder Scientific에서 구입했다. 다른 모든 시약은 Sigma-Aldrich에서 구입하여 받은 그대로 사용했다.

[2667] $Ti(NMe_2)_2Cl_2$는 문헌[Wan g, C.; Erker, G.; Kehr, G.; Wedeking, K.; Frohlich, R. *Organometallics* **2005**, *24*, 4760]의 절차에 따라 제조했다.

[2668] $PPh(i\text{-}Pr)_2$는 문헌[Bontemps, S.; Sircoglou, M.; Bouhadir, G; Puschmann, H.; Howard, J. A. K.; Dyer, P. W.; Miqueu, K.; Bourissou, D. *Chemistry - A European Journal* **2008**, 14(2), 731]의 절차에 따라 제조했다.

[2669] 2-인데닐 보론산은 문헌[Ijpeij, E. G.; Beijer, F. H.; Arts, H. J.; Newton, C.; de Vries, J. G.; Gruter, G. M. *J. Org. Chem.* **2002**, 67, 169]의 절차에 따라 제조했다.

[2670] 2-브로모페닐-디이소프로필포스핀은 문헌[DeMott, J.; Gu, W.; McCulloch, B. J.; Herbert, D. E.; Goshert, M. D.; Walensky, J. R.; Zhou, J.; Ozerov, O. V. *Organometallics* **2015**, *34*, 16, 3930]의 절차에 따라 제조했다.

[2671] 인데닐리튬은 문헌[Ker, V.; Lam, P.; Jian g, Y.; Hoang, P.; Carter, C.; Morrison, D. US20140100343 A1, **2014**]의 절차에 따라 제조했다.

[2672] 트리-*tert*-부틸포스핀이민 티타늄 삼염화물($t\text{-}Bu_3PNTiCl_3$)은 문헌[Gao, X.; He, Zhiwei. CA2820501 A1, **2014**]의 절차에 따라 제조했다.

[2673] NMR 스펙트럼은 Bruker 400 MHz 분광계 (^1H에 대해 400.1 MHz, ^{31}P에 대해 162 MHz)에서 기록되었다. 단결정 X선 회절은 Bruker PLATFORM/APEX II CCD 회절계에서 수행되었다. X선 회절 연구에 관한 추가적인 실험 세부사항은 표 1 내지 4에 편집했다.

[2674] 연속 용액 공중합 실험에 대한 분자량(GPC-RI M_w, M_n 및 M_z, g/mol) 및 분자량 분포(GPC-RI M_w/M_n) 데이터는 통상적인 크기 배제 (겔 투과) 크로마토그래피(SEC, 또는 GPC)를 사용하여 수득했다. 따라서, 중합체 샘플 용액(1 내지 2 mg/ mL)은 중합체를 1,2,4-트리클로로벤젠(TCB)에서 가열하고 오븐에서 150℃에서 4시간 동안 휠에서 회전시켜 제조했다. 산화방지제인 2,6-디-tert-부틸-4-메틸페놀(BHT)을 혼합물에 첨가하여 중합체를 산화 분해로부터 안정화시켰다. BHT 농도는 250 ppm이었다. 샘플 용액은 4개의 Shodex 컬럼(HT803, HT804, HT805 및 HT806)이 장착된 PL 220 고온 크로마토그래피 단위에서 이동상으로서 TCB를 1.0 mL/분의 유속으로 사용하여 140℃에서 크로마토그래피했고, 농도 검출기로서 시차 굴절률(DRI)을 사용했다. SEC 컬럼을 산화 분해로부터 보호하기 위해 이동상에 BHT를 250 ppm 농도로 첨가했다. 샘플 주입량은 200 μL였다. SEC 원시 데이터는 Cirrus GPC 소프트웨어로 처리했다. SEC 컬럼은 좁은 분포 폴리스티렌 표준물질로 보정했다. 폴리스티렌 분자량은 ASTM 표준 테스트 방법 D6474에 기술된 바와 같이 Mark-Houwink 방정식을 사용하여 폴리에틸렌 분자량으로 전환시켰다.

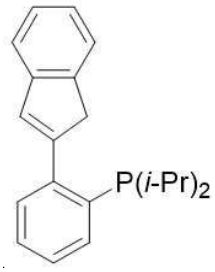
[2675] 일부 경우에, 다른 GPC 기기를 사용하여 연속 용액 공중합 실험에서 생성된 공중합체에 대한 중량 평균 분자량(GPC-IR4 M_w)이 제공된다. 이들은 중합체 M_w를 빠르게 결정하기 위해 3개의 GPC 컬럼이 장착된 Polymer Char GPC-IR4 기기를 사용하여 분석했다. 따라서, 중합체 샘플(5 내지 7 mg)을 샘플 바이알에 칭량하여 넣고 자동 샘플러에 부하했다. 바이알에 6 mL의 1,2,4-트리클로로벤젠(TCB)을 채우고 160분 동안 흔들면서 160℃로 가열했다. 2,6-디-*tert*-부틸-4-메틸페놀(BHT)을 TCB에 250 ppm의 농도로 첨가하여 산화 분해로부터 중합체를 안정화했다. 샘플 용액은 3개의 GPC 컬럼(예: PL Mixed B)이 장착된 Polymer Char GPC-IR4 크로마토그래피 단위에서 140℃에서 이동상으로서 TCB를 1.0 mL/분의 유속으로 사용하여 크로마토그래피했고, 농도 검출기로서 적외선 IR4을 사용했다. SEC 컬럼을 산화 분해로부터 보호하기 위해 이동상에 BHT를 250 ppm의 농도로 첨가했다. 샘플 주입량은 200 μL였다. SEC 원시 데이터는 Microsoft Excel 매크로를 사용하여 처리했다. SEC 컬럼은 좁은

분포 폴리스티렌 표준물질로 보정했다. 폴리스티렌 분자량은 ASTM 표준 테스트 방법 D6474에 기술된 바와 같이, Mark-Houwink 방정식을 사용하여 폴리에틸렌 분자량으로 전환시켰다.

[2676] FTIR 분지 빈도(CH_3/1000C로 보고됨)는 ASTM 표준 테스트 방법 D6645에 기술된 바와 같은 방법을 사용하여 Thermo-Nicolet 750 Magna-IR 분광계에서 중합체 플라크로부터 결정되었다. 중합체 플라크는 ASTM 표준 테스트 방법 D1928(현재 D4703으로 대체됨)을 기반으로 한 압축 성형 장치(Wabash-Genesis Series 프레스)를 사용하여 제조한다.

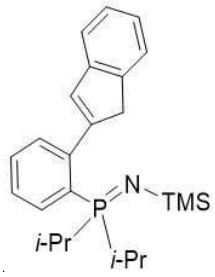
[2677] 합성 방법 및 결정학적 실험 데이터

[2678] 화합물 1a

[2679] 

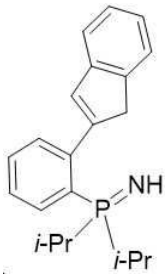
[2680] 2-인데닐보론산(4 g, 14.64 mmol), 2-브로모페닐-디이소프로필포스핀(2.6 g, 16.25 mmol), $Pd(PPh_3)_4$(0.85 g, 0.74 mmol), Cs_2CO_3(9.5 g, 29.16 mmol), 및 1,4-디옥산(200 mL)을 합하여 100℃에서 3일간 가열했다. 휘발성 물질은 진공 하에 제거하고 잔류물은 헵탄(3×80 mL)으로 추출한 다음, 셀라이트 패드를 통해 여과했다. 휘발성 물질은 진공 하에 제거하고 생성된 황색 액체는 Kugelrohr 증류 기구를 통한 증류를 통해 정제했다. 수율: 3.2 g, 71%. ^{1}H NMR (CD_2Cl_2): δ 7.57 (m, 1H), 7.46 (m, 1H), 7.39 (dt, *J* = 7.5 및 0.8 Hz, 1H), 7.35 (m, 3H), 7.27 (m, 1H), 7.17 (dt, *J* = 7.4 및 1.2 Hz, 1H), 6.81 (dt, *J* = 0.7 및 0.7 Hz, 1H), 3.91(s, 2H), 2.08 (m, 2H), 1.07 (dd, *J* = 7.8 및 7.0 Hz, 6H), 0.91 (q, *J* =6.9 및 5.0 Hz, 6H). ^{31}P{^{1}H} NMR (CD_2Cl_2): δ -2.6.

[2681] 화합물 1b

[2682] 

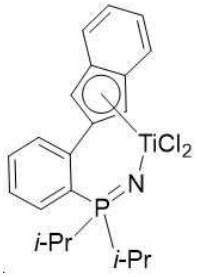
[2683] 화합물 1a(2.5 g, 8.11 mmol)의 톨루엔 용액(10 mL)에 아지도트리메틸실란(2.63 g, 22.81 mmol)을 첨가했다. 혼합물을 3일 동안 100℃에서 가열했다. 휘발성 물질은 진공 하에 제거하고 결과적으로 생성된 짙은 녹색 오일은 추가 정제 없이 사용했다. ^{1}H NMR (CD_2Cl_2): δ 8.06 (m, 1H), 7.48 (d, *J* = 8.0 Hz, 1H), 7.42 (m, 3H), 7.30 (t, *J* = 7.4 Hz, 1H), 7.21 (m, 2H), 6.70 (br. s, 1H), 3.74 (s, 2H), 1.94 (m, 2H), 1.12 (dd, *J* = 8.8 및 6.8 Hz, 6H), 0.87 (dd, *J* = 9.2 및 7.1 Hz, 6H), 0.02 (s, 9H). ^{31}P{^{1}H} NMR (CD_2Cl_2): δ 23.6.

[2684] 화합물 1c

[2685] 

[2686] 화합물 1b(6.8 g, 17.19 mmol), CsF(2.87 g, 18.89 mmol), MeOH(5 mL) 및 THF(60 mL)를 혼합하고 60℃에서 밤새 가열했다. 휘발성 물질은 진공 하에 제거하고 잔류물은 톨루엔(3×50 mL)으로 추출하고 셀라이트 패드를 통해 여과했다. 휘발성 물질은 진공 하에 제거하고 결과적으로 생성된 짙은 붉은색 오일은 추가 정제 없이 사용했다. 주요(원하는) 생성물에 상응하는 NMR 분광 데이터가 나열된다. ^{1}H NMR (CD_2Cl_2): δ 7.76 (m, 1H), 7.65 (m, 2H), 7.56 (m, 1H), 7.45 (m, 4H), 7.25 (m, 3H), 3.91 (s, 2H), 2.14 (m, 2H), 1.16 (m, 6H), 0.95 (m, 6H). ^{31}P{^{1}H} NMR (CD_2Cl_2): δ 43.04.

[2687] 복합체 1

[2688] 

[2689] 미정제 화합물 1c(상기에서 수득된 것, 3.13 g, 9.68 mmol)의 THF 용액(50 mL)에 *n*-BuLi(6 mL, 9.6 mmol, 헥산 중 1.6 M) 용액을 첨가했다. 반응물은 주변 온도에서 2시간 동안 교반하고, 수득한 용액을 $Ti(NMe_2)_2Cl_2$(2.0 g, 9.67 mmol)의 THF 용액(50 mL)에 -78℃에서 천천히 적가했다. 반응물을 주변 온도로 가온하고 밤새 교반했고, 모든 휘발성 물질은 진공 하에 제거했다. 잔류물은 톨루엔(3×50 mL)으로 추출하고 셀라이트 패드를 통해 여과했다. 합친 여과액에 클로로트리메틸실란(4.2 g, 38.66 mmol)을 첨가했다. 수득한 혼합물은 90℃에서 밤새 가열했다. 용액은 진공 하에 농축하고, 잔류물은 톨루엔(20 mL)으로부터 재결정하여 짙은 녹색 고체를 제공했다. 수율: 1.8 g, 43%. ^{1}H NMR (CD_2Cl_2): δ 7.66 (m, 1H), 7.62 (m, 3H), 7.58 (m, 1H), 7.51 (m, 1H), 7.32 (m, 2H), 6.35 (s, 2H), 2.33 (m, 2H), 1.25 (dd, *J* = 9.9 및 7.0 Hz, 6H), 1.16 (dd, *J* = 10.0 및 7.2, 6H). ^{31}P{^{1}H} NMR (CD_2Cl_2): δ 32.9.

[2690] 복합체 1의 배위 구는 단결정 X선 결정학으로 확인했다(표 1의 세부사항 참조). 복합체 1의 ORTEP 다이어그램은 도 1에 제공된다.

표 1

표 1

복합체 1의 결정학적 실험 세부사항

A. 결정 데이터	
화학식	$C_{21}H_{24}Cl_2NPTi$
화학식량	440.18
결정 색 및 성질 [a]	*녹색 블록*
결정 치수 (mm)	0.52 × 0.16 × 0.11
결정계	*단사정계*
공간 군	$P2_1/c$ (14 번)
단위 셀 매개변수 [b]	
a (Å)	11.4405(11)
b (Å)	11.4763(11)
c (Å)	16.1858(16)
β (deg)	96.7161(15)
V (Å^3)	2110.5(4)
Z	4
ρ계산치 (g cm^{-3})	1.385
μ (mm^{-1})	0.740
B. 데이터 수집 및 정제 조건	
회절계	Bruker PLATFORM/APEX II CCD [c]
방사선 (λ [Å])	흑연-단일크롬화된 Mo Kα (0.71073)
온도 (°C)	-80
스캔 유형	ω 스캔 (0.3°) (20 초 노출)
데이터 수집 2θ 한계 (deg)	58.36
수집된 총 데이터	32944 (-15 ≤ h ≤ 15, -15 ≤ k ≤ 15, -22 ≤ l ≤ 22)
독립 반사	5712 (R_{int} = 0.0281)
관찰된 반사 수 (*NO*)	4962 [$F_o^2 \geq 2\sigma(F_o^2)$]
구조 솔루션 방법	내재적 위상조정 (*SHELXT-2014* [d])
정제 방법	F^2 에 대한 전체 행렬 최소 자승법 (*SHELXL–2018* [e])
흡수 교정 방법	가우스 적분 (페이스-인덱스화됨)
투과 계수 범위	0.9502–0.7227
데이터/제약/매개변수	5712 / 0 / 235
적합도 (*S*) [f] [모든 데이터]	1.058
최종 R 지수 [g]	
R_1 [$F_o^2 \geq 2\sigma(F_o^2)$]	0.0334
wR_2 [모든 데이터]	0.0926
최대 차이 피크 및 홀	0.570 및 -0.523 e Å^{-3}

표 1 에 대한 주석:
[a] 톨루엔/헵탄/펜탄/디클로로메탄 용액에서 재결정하여 수득함.
[b] 5.04 ° < 2θ < 58.24 °로 하여 9962 반사의 최소 자승 정제로부터 수득함.
[c] 회절계 작동, 데이터 수집, 데이터 축소 및 흡수 교정에 대한 프로그램은 Bruker 에 의해 공급된 것임.

[2691]

[d] Sheldrick, G. M. *ActCrystallogr.* **2015**, *A71*, 3–8. (*SHELXT-2014*)
[e] Sheldrick, G. M. *ActCrystallogr.* **2015**, *C71*, 3–8. (*SHELXL-2018/3*)
[f] $S = [\Sigma w(F_o^2 - F_c^2)2/(n-p)]^{1/2}$ (n = 데이터 수; p = 변동된 매개변수 수; $w = [s^2(F_o^2) + (0.0446P)^2 + 0.9554P]^{-1}$ 여기서 $P = [\text{Max}(F_o^2, 0) + 2F_c^2]/3$).
[g] $R_1 = \Sigma||F_o| - |F_c||/\Sigma|F_o|$; $wR_2 = [\Sigma w(F_o^2 - F_c^2)^2/\Sigma w(F_o^4)]^{1/2}$.

[2692]

[2693] 화합물 2a

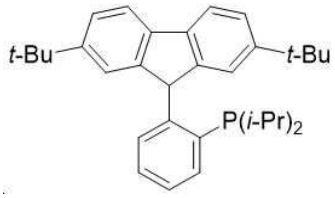


[2694]

[2695] 2,7-디-*tert*-부틸플루오렌(8.5 g, 30.52 mmol)의 THF 용액(60 mL)에 *n*-BuLi(19.1 mL, 30.56 mmol, 헥산 중 1.6

M) 용액을 주변 온도에서 천천히 첨가했다. 반응물을 2시간 동안 교반한 후, 무수 $ZnCl_2$(6.3 g, 46.23 mmol)를 고체로서 첨가했다. 혼합물을 밤새 교반한 다음, 혼합물에 1,2-디보로모벤젠(7.2 g, 30.52 mmol), $Pd(PPh_3)_4$(1.76 g, 1.52 mmol) 및 추가 THF(100 mL)를 첨가했다. 반응물을 4일 동안 환류 가열했다. 주변 온도로 냉각한 후, 반응물을 NH_4Cl 포화 수용액(200 mL)으로 켄칭시키고 톨루엔(3×150 mL)으로 추출했다. 합친 유기 층을 염수(150 mL) 및 물(200 mL)로 세척했다. 결과적으로 생성된 유기 층을 무수 Na_2SO_4로 건조하고 여과했다. 여과액의 휘발성 물질을 진공 하에서 제거하고 잔류물을 비등 헵탄(3×150 mL)으로 추출하고 셀라이트 패드를 통해 여과했다. 헵탄 용액을 약 20 mL로 농축했다. 모든 고체를 가열하여 용액에 용해한 후, 결과적으로 생성된 용액을 주변 온도에 두었다. 결과적으로 생성된 흰색 고체 침전물을 여과로 단리하고 진공 하에서 건조했다. 수율: 7.0 g, 53%. ^{1}H NMR (CD_2Cl_2): δ 7.71 (m, 3H), 7.43 (m, 4H), 7.07 (m, 2H), 6.46 (m, 1H), 5.71 (s, 1H), 1.30 (s, 18H).

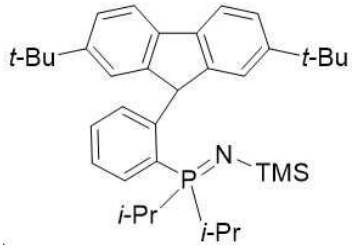
[2696] 화합물 2b



[2697]

[2698] 화합물 2a(4.5 g, 10.38 mmol)를 THF(100 mL)와 Et_2O(100 mL)의 혼합물에 용해했다. 용액을 액체 N_2/EtOH 배쓰로 -115℃±5℃로 냉각했다. 용액에 n-BuLi(6.5 mL, 10.4 mmol, 헥산 중 1.6 M) 용액을 교반하면서 30분에 걸쳐 적가했다. 냉각 배쓰의 온도는 2시간에 걸쳐 -115℃±5℃로 유지했다. -115℃의 반응 혼합물에 순수한 클로로디이소프로필포스핀(1.59 g, 10.42 mmol)을 적가했다. 반응 혼합물을 밤새 교반하면서 천천히 주변 온도로 가온시켰다. 휘발성 물질을 진공 하에 제거하고 잔류물을 톨루엔(3×50 mL)으로 추출하고 셀라이트 패드를 통해 여과했다. 합쳐진 여과액의 용매를 진공 하에서 제거한 후, 생성물을 비등 헵탄(15 mL)에서 재결정했다. 수율: 3.0 g, 61%. ^{1}H NMR (CD_2Cl_2): δ 7.70 (d, J = 8.0 Hz, 2H), 7.60 (dt, J =7.8 및 1.7 Hz, 1H), 7.40 (ddd, J = 8.1, 1.7, 및 0.6 Hz, 2H), 7.26 (t, J = 0.7 Hz 2H), 7.22 (td, J = 7.4 및 1.3 Hz, 1H), 7.05 (td, J = 8.1 및 1.1Hz, 1H), 6.52 (d, J = 12.6 Hz, 1H), 6.36 (ddd, J = 7.8, 4.0, 및 1.3 Hz, 1H), 2.30 (m, 2H), 1.29 (m, 6H), 1.26 (s, 18H), 1.13 (dd, J = 11.5 및 6.7 Hz, 6H). ^{31}P{^{1}H} NMR (CD_2Cl_2): δ -6.0.

[2699] 화합물 2c, 합성 경로 A



[2700]

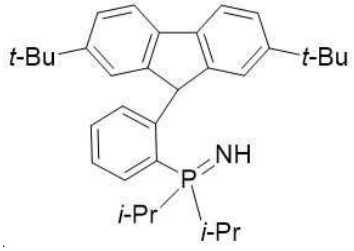
[2701] 화합물 2b(6.0 g, 12.75 mmol), 아지도트리메틸실란(5.0 mL, 4.4 g, 38 mmol) 및 톨루엔(40 mL)을 혼합하고 5일 동안 100℃에서 가열했다. 반응물을 주변 온도로 냉각한 후 모든 휘발성 물질을 진공 하에서 제거했다. 생성물을 고순도 및 정량적 수율로 수득했고 추가 정제 없이 사용했다. ^{1}H NMR (CD_2Cl_2): δ 7.68 (d, 3H), 7.42 (m, 1H), 7.38 (m, 2H), 7.33 (s, br, 2H), 7.19 (m, 2H), 6.36 (m, 1H), 2.46 (m, 2H), 1.32 (dd, 6H), 1.27 (s, 18 H), 1.20 (dd, H), -0.22 (s, 9H). ^{31}P NMR (CD_2Cl_2): δ 24.3. ^{1}H NMR (톨루엔-d_8): 7.94-7.77 (br. m, 1H), 7.71 (d, J = 8 Hz, 2H), 7.55 (s, 2H), 7.36 (dd, J = 8 및 2 Hz, 2H), 6.81(t, J = 7 Hz, 1H), 6.64 (t, J = 7 Hz, 1H), 6.50 (dd, J = 8 및 4 Hz, 1H), 2.15-2.01 (m, 2H), 1.28 (s, 18H), 1.25 (dd, J = 16 및 7 Hz, 6H), 1.08 (dd, J = 16 및 7 Hz, 6H), 0.07 (s, 9H). ^{31}P{^{1}H} NMR (톨루엔-d_8): δ 22.9.

[2702] 화합물 2c, 합성 경로 B

[2703] 100 mL 바이알에 있는 CH_2Cl_2(30 ml) 중 화합물 2b(4.71 g, 10 mmol)의 용액에 헥사클로로에탄(2.37 g, 10 mmol)의 CH_2Cl_2 용액(25 ml)을 천천히 첨가했다. 헥사클로로에탄 용액이 담긴 바이알을 CH_2Cl_2 일부(3×2 ml)로 헹구고 헹군 용액을 반응 바이알에 첨가했다. 주변 온도에서 20분간 교반한 후, 순수한 $HN(SiMe_3)_2$(4.8 g, 30 mmol)를 첨가했다. 약 10분 후에 흰색 침전물이 형성되기 시작했고, 혼합물을 주변 온도에서 3시간 더 교반했다. 톨루엔(12 ml)을 첨가하고, 혼합물을 펌핑하여 건조했다(참고: 비등점이 더 높은 용매인 톨루엔을 첨가하여 테트라클로로에틸렌 부산물과 과량의 $HN(SiMe_3)_2$의 제거를 용이하게 했다). 잔류물을 펜탄(~60 mL)으로 20분간 교반하면서 분쇄하고, 여과하여 고체를 단리하고, 고체를 펜탄 일부(3×5 mL)로 추가로 헹구었다. 생성물이 결정화하기 시작했을 때, 펜탄 여과액을 ~10 mL의 부피까지 진공 하에 농축했다. 남아 있는 용매를 진공 하에 제거하여 생성물을 무색 결정질 고체로서 제공했다. 수율: 5.55 g, 99%. 합성 경로 B에 의해 수득된 화합물 2c의 NMR 스펙트럼은 합성 경로 A에 의해 수득된 화합물 2c의 NMR 스펙트럼과 동일했다.

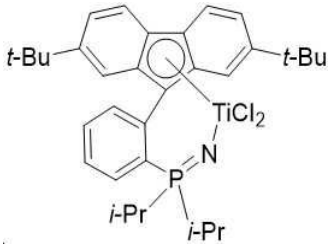
[2704] 관련 기술분야의 기술자는 합성 경로 B가 합성 경로 A에 비해, 예를 들어 화합물 2c와 같은 포스핀이민 화합물로 가는 더 쉬운 경로를 제공할 수 있음을 인식할 것이다. 합성 경로 A는 트리메틸실릴아자이드(Me_3SiN_3)와의 반응, 환류 온도, 및 포스핀이민 화합물(예, 화합물 2c)로 포스핀 화합물(예: 화합물 2b)의 산화를 달성하기 위한 수 일을 필요로 하는 반면, 합성 경로 B는 주변 온도에서 덜 위험한 시약을 사용하여 더 짧은 반응 시간으로 수행될 수 있다.

[2705] 화합물 2d

[2706] 

[2707] 합성 경로 A 또는 B에 의해 수득된 화합물 2c(4.15 g, 7.44 mmol), CsF(1.4 g, 9.22 mmol), THF(30 mL) 및 MeOH(20 mL)를 합치고, 교반된 혼합물을 60℃에서 밤새 가열했다. 반응물을 주변 온도로 냉각하고, 모든 휘발성 물질을 진공 하에 제거한 후, 잔류물을 뜨거운 톨루엔(3×50 mL)으로 추출하고 셀라이트 패드를 통해 여과했다. 합친 여과액의 용매를 진공 하에 제거하고, 수득한 고체를 비등 헵탄(20 mL)에 용해했다. 주변 온도에서 밤새 보관한 후, 흰색 침전물이 형성되었다. 모액을 따라낸 후, 흰색 고체로서의 생성물을 펜탄(3×10 mL)으로 세척하고 진공 하에 건조했다. 수율: 3.0 g, 83%. ^{1}H NMR (CD_2Cl_2): δ 7.70 (d, J = 8.0 Hz, 3H), 7.50 (t, J = 9.2 Hz, 1H), 7.40 (dd, J = 8.1 및 1.9 Hz, 2H), 7.24 (m, 3H), 7.14 (m, 1H), 6.41 (m, 1H), 2.56 (m, 2H), 1.35 (dd, J = 15.0 및 6.9 Hz, 6H), 1.26 (s, 18H), 1.23 (m, 6H). ^{31}P{^{1}H} NMR (CD_2Cl_2): δ 44.7.

[2708] 복합체 2

[2709] 

[2710] n-BuLi(8 mL, 12.8 mmol, 헥산 중 1.6 M) 용액을 -78℃에서 화합물 2d(3.1 g, 6.38 mmol)의 톨루엔 용액(100 mL)에 적가했다. n-BuLi을 첨가한 후, 냉각 배쓰를 제거하고, 반응물을 주변 온도로 가온한 후, 2시간 동안 교반했다. 수득된 붉은색 용액을 다시 -78℃로 냉각시키고, $Ti(NMe_2)_2Cl_2$(1.32 g, 6.38 mmol)의 톨루엔 용액(40 mL)을 천천히 첨가했다. 반응물을 주변 온도로 가온한 후, 밤새 교반했다. 모든 휘발성 물질을 진공 하에서 제거한 후, 잔류물을 톨루엔(3×50 mL)으로 추출하고, 셀라이트 패드를 통해 여과했다. 합친 여과액에 클로로트리

메틸실란(7.0 g, 64.4 mmol)을 첨가했다. 혼합물을 90℃에서 가열하고 3일 동안 교반했다. 모든 휘발성 물질을 진공 하에서 제거한 후, 수득한 짙은 붉은색 고체를 뜨거운 톨루엔(3×30 mL)으로 세척하고 진공 하에서 건조했다. 수율: 2.5 g, 63%. ^{1}H NMR (CD_2Cl_2): δ 7.95 (dd, J = 8.9 및 0.8 Hz, 2H), 7.80-7.64 (m, 4H), 7.59 (dd, J = 9.0 및 1.8 Hz, 2H), 6.92 (m, 2H), 2.34 (m, 2H), 1.23 (s, 18H), 1.21 (m, 6H), 1.17 (m, 6H). ^{31}P{^{1}H} NMR (CD_2Cl_2): δ 33.0.

[2711] 복합체 2의 배위 구는 단결정 X선 결정학에 의해 확인했다(표 2의 세부사항 참조). 복합체 2의 ORTEP 다이어그램은 도 2에 제공된다.

표 2

표 2

복합체 2의 결정학적 실험 세부사항

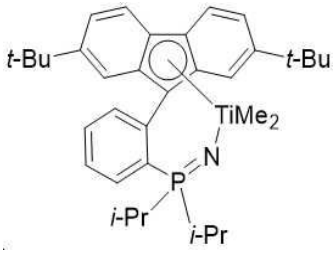
A. 결정 데이터	
화학식	$C_{34}H_{43}Cl_5NPTi$ ($C_{33}H_{42}Cl_2NPTi$•$CHCl_3$)
화학식량	721.81
결정 색 및 성질 [a]	주황색 플레이트
결정 치수(mm)	0.24 × 0.20 × 0.06
결정계	단사정계
공간 군	$P2_1/c$ (14 번)
단위 셀 매개변수 [b]	
a (Å)	13.141(3)
b (Å)	17.973(3)
c (Å)	16.466(3)
β (deg)	111.645(3)
V (Å^3)	3614.7(12)
Z	4
ρ계산치 (g cm^{-3})	1.326
μ (mm^{-1})	0.675
B. 데이터 수집 및 정제 조건	
회절계	Bruker PLATFORM/APEX II CCD [c]
방사선 (λ [Å])	흑연-단일크롬화된 Mo Kα (0.71073)
온도 (°C)	-80
스캔 유형	ω 스캔 (0.3°) (30 초 노출)
데이터수집 2θ 한계 (deg)	52.85
수집된 총 데이터	36843 (-16 ≤ h ≤ 16, -22 ≤ k ≤ 22, -20 ≤ l ≤ 20)
독립 반사	7411 (R_{int} = 0.0726)
관찰된 반사 수 (NO)	5263 [$F_o^2 \geq 2\sigma(F_o^2)$]
구조 솔루션 방법	내재적 위상조정 (*SHELXT-2014* [d])
정제 방법	F^2에 대한 전체 행렬 최소 자승법 (*SHELXL–2018* [e])
흡수 교정 방법	가우스 적분 (페이스-인덱스화됨)
투과 계수 범위	1.0000–0.8717
데이터/제약/매개변수	7411 / 52 [f] / 439
적합도 (S) [g] [모든 데이터]	1.041
최종 R 지수 [h]	
R_1 [$F_o^2 \geq 2\sigma(F_o^2)$]	0.0493
wR_2 [모든 데이터]	0.1348
최대 차이 피크 및 홀	0.528 및 -0.624 e Å^{-3}
표 2에 대한 주석:	
[a] 펜탄/톨루엔/디클로로메탄/사이클로헥산/클로로포름 용액에서 재결정하여 수득함.	
(NMR 관 A 로부터 수득된 결정)	
[b] 5.14 ° < 2□ < 46.70 °로 하여 5775 반사의 최소 자승 정제로부터 수득함.	

[2712]

[c] 회절계 작동, 데이터 수집, 데이터 축소 및 흡수 교정에 대한 프로그램은 Bruker에 의해 공급된 것임.
[d] Sheldrick, G. M. *ActCrystallogr.* **2015**, *A71*, 3–8. (*SHELXT-2014*)
[e] Sheldrick, G. M. *ActCrystallogr.* **2015**, *C71*, 3–8. (*SHELXL-2018/3*)
[f] 무질서한 tert-부틸 기(탄소 원자 C28, C29, C30, C31, C29A, C30A 및 C31A) 내의 C-C 거리는 *SHELXL* **SADI** 명령어를 사용하여 거의 같도록 제약되었다. C13-C32 및 C13-C32A 거리는 **SADI**를 사용하여 거의 같도록 제약되었다. 강성 결합 제약은 **RIGU** 명령어를 사용하여 다른 무질서한 *tert*-부틸 기의 탄소 원자의 이방성 변위 매개변수에 적용되었다.
[g] $S = [\Sigma w(F_o^2 - F_c^2)2/(n-p)]^{1/2}$ (n = 데이터 수; p = 변동된 매개변수 수; $w = [s^2(F_o^2) + (0.0558P)^2 + 2.0267P]^{-1}$ 여기서 $P = [\mathrm{Max}(F_o^2, 0) + 2F_c^2]/3$).
[h] $R1 = \Sigma||F_o| - |F_c||/\Sigma|F_o|$; $wR2 = [\Sigma w(F_o^2 - F_c^2)^2/\Sigma w(F_o^4)]^{1/2}$.

[2713]

[2714] 복합체 3



[2715]

[2716] 복합체 2(2.5 g, 4.05 mmol) 및 브롬화 메틸마그네슘 용액(5.4 mL, 16.2 mmol, Et_2O에 3M)을 톨루엔(150 mL)에서 합치고 혼합물을 주변 온도에서 밤새 교반했다. 모든 휘발성 물질을 제거하고 잔류물은 진공 하에 3시간 동안 완전히 건조했다. 생성물은 톨루엔(3×50 mL)으로 추출하고 셀라이트 패드를 통해 여과했다. 합친 여과액을 약 20 mL로 감소시키고 헵탄(20 mL)으로 층을 만들고 -35℃로 냉각하여 생성물을 갈색 고체로서 침전시켰다. 수율: 1.5 g, 64%. ^{1}H NMR (CD_2Cl_2): δ 8.12 (dd, J = 8.9 및 0.8 Hz, 2H), 7.62-7.52 (m, 3H), 7.49 (m, 1H), 7.43 (dd, J = 8.8 및 1.7 Hz, 2H), 6.72 (m, 2H), 2.29 (m, 2H), 1.21 (m, 6H), 1.19 (s, 18H), 1.11 (dd, J = 16.3 및 7.1 Hz, 6H), -0.95 (s, 6H, TiC*H*$_3$). ^{31}P{^{1}H} NMR (CD_2Cl_2): δ 24.5.

[2717] 복합체 3의 배위 구는 단결정 X선 결정학으로 확인했다(표 3의 세부사항 참조). 복합체 3의 ORTEP 다이어그램은 도 3에 제공된다.

표 3

표 3

복합체 3 의 결정학적 실험 세부사항

A. 결정 데이터	
화학식	$C_{36}H_{50}Cl_2NPTi$ ($C_{35}H_{48}NPTi{\bullet}CH_2Cl_2$)
화학식량	646.54
결정 색 및 성질 [a]	노란색 단편
결정 치수(mm)	0.30 × 0.27 × 0.12
결정계	단사정계
공간 군	$P2_1/c$ (14 번)
단위 셀 매개변수 [b]	
a (Å)	12.453(3)
b (Å)	18.038(5)
c (Å)	16.936(4)
β (deg)	109.782(3)
V (Å^3)	3579.8(15)
Z	4
ρ계산치 (g cm^{-3})	1.200
μ (mm^{-1})	0.457
B. 데이터 수집 및 정제 조건	
회절계	Bruker PLATFORM/APEX II CCD [c]
방사선 (λ [Å])	흑연-단일크롬화된 Mo Kα (0.71073)
온도 (°C)	-80
스캔 유형	ω 스캔 (0.3°) (45 초 노출)
데이터수집 2θ 한계 (deg)	51.55
수집된 총 데이터	31244 ($-15 \le h \le 15$, $-22 \le k \le 22$, $-20 \le l \le 20$)
독립 반사	6830 (R_{int} = 0.0747)
관찰된 반사 수 (*NO*)	4479 [$F_o^2 \ge 2\sigma(F_o^2)$]
구조 솔루션 방법	내재적 위상조정 (*SHELXT-2014* [d])
정제 방법	F^2 에 대한 전체 행렬 최소 자승법 (*SHELXL–2018* [e,f])
흡수 교정 방법	가우스 적분 (페이스-인덱스화됨)
투과 계수 범위	1.0000–0.8274
데이터/제약/매개변수	6830 / 0 / 345
적합도 (S) [g] [모든 데이터]	1.036
최종 R 지수 [h]	
R_1 [$F_o^2 \ge 2\sigma(F_o^2)$]	0.0746
wR_2 [모든 데이터]	0.2149
최대 차이 피크 및 홀	0.796 및 -0.515 e Å^{-3}

표 3 에 대한 주석:

[a] 디클로로메탄/펜탄 용액에서 재결정하여 수득함.

[b] 4.52° < 2□ < 45.44° 로 하여 4915 반사의 최소 자승 정제로부터 수득함.

[c] 회절계 작동, 데이터 수집, 데이터 축소 및 흡수 교정에 대한 프로그램은 Bruker 에 의해 공급된 것임.

[2718]

[d] Sheldrick, G. M. *ActCrystallogr.* **2015**, *A71*, 3–8. (*SHELXT-2014*)

[e] Sheldrick, G. M. *ActCrystallogr.* **2015**, *C71*, 3–8. (*SHELXL-2018/3*)

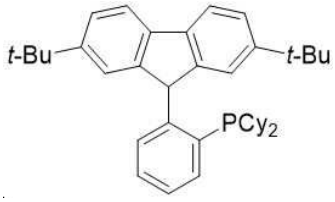
[f] 무질서하거나 부분 점유 용매 디클로로메탄 염소 또는 탄소 원자로서 잔류 전자 밀도의 피크를 정제하려는 시도는 성공하지 못했다. 데이터는 *PLATON* (Spek, A. L. *ActCrystallogr.* **2015**, *C71*, 9–18. *PLATON* - a multipurpose crystallographic tool. Utrecht University, Utrecht, The Netherlands)에서 구현된 SQUEEZE 절차를 사용하여 무질서한 전자 밀도에 대해 교정되었다. 총 전자 수가 156 개(용매 디클로로메탄 4 개 분자 또는 표적 분자의 화학식 단위 당 1 개 분자와 일치)인 총 용매 접근 가능 공극 부피 553 Å^3 가 단위 셀에서 발견되었다.

[g] $S = [\Sigma w(F_o^2 - F_c^2)2/(n-p)]^{1/2}$ (n = 데이터 수; p = 변동된 매개변수 수; $w = [s^2(F_o^2) + (0.0941P)^2 + 4.6324P]^{-1}$ 여기서 $P = [\mathrm{Max}(F_o^2, 0) + 2F_c^2]/3$).

[h] $R_1 = \Sigma||F_o| - |F_c||/\Sigma|F_o|$; $wR_2 = [\Sigma w(F_o^2 - F_c^2)^2/\Sigma w(F_o^4)]^{1/2}$.

[2719]

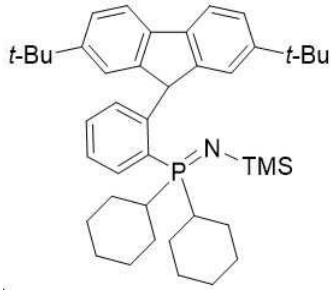
[2720] 화합물 4a



[2721]

[2722] 화합물 2a(3.56 g, 8.2 mmol)를 THF(60 mL) 및 Et_2O(80 mL)의 혼합물에 용해했다. 용액을 액체 N_2/EtOH 배쓰를 이용하여 -115℃±5℃로 냉각했다. 용액에 *n*-BuLi 용액(5.4 mL, 8.06 mmol, 헥산 중 1.6 M, 추가 7 mL의 펜탄으로 희석함)을 교반하에 30분에 걸쳐 적가했다. 냉각 배쓰의 온도는 2시간에 걸쳐 -115℃±5℃로 유지했다. -115℃의 반응 혼합물에 클로로디사이클로헥실포스핀(2.0 g, 8.6 mmol)의 THF 용액(7 mL)을 적가했다. 반응 혼합물을 밤새 교반하면서 천천히 주변 온도로 가온했다. 휘발성 물질을 진공 하에 제거하고 잔류물을 톨루엔(40 mL)으로 추출하고 셀라이트 패드를 통해 여과했다. 휘발성 물질은 진공 하에 제거했다. 미정제 물질(톨루엔-d_8)의 ^{31}P NMR 분석은 δ -6.1(*n*-BuPCy_2 부산물인 것으로 의심됨) 및 -15.3 ppm(원하는 생성물)에서 2개의 공명을 보여주었다. 회백색 고체는 뜨거운 헵탄(25 mL)에 용해시키고 여과한 다음 16시간 동안 결정화되도록 두었다. 노란색 모액을 따라내고 무색 고체를 차가운 펜탄 일부(2×5 mL)로 세척한 다음 진공 하에 건조했다. 수율: 4.0 g, 90%. ^{1}H NMR (톨루엔-d_8): δ 7.75 (d, *J* = 7.4 Hz, 2H), 7.52 (br. s, 2H), 7.50 (br. s, 1H), 7.40 (dd, *J* = 8.1 및 2.0 Hz, 3H), 7.00-6.96 (m, 1H), 6.86 (d, *J* = 13.7 Hz, 1H), 6.76-6.72 (m, 1H), 6.54 (ddd, *J* = 8.0, 4.2, 및 1.4 Hz, 1H), 2.08-2.05 (m, 2H), 1.93-1.83 (m, 6H), 1.74-1.70 (m, 2H), 1.52-1.35 (m, 10H), 1.28 (s, 18H). ^{31}P{^{1}H} (톨루엔-d_8): δ -15.3.

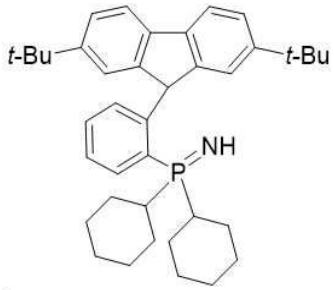
[2723] 화합물 4b



[2724]

[2725] 화합물 4a(2.13 g, 4.0 mmol)의 CH_2Cl_2 용액(20 mL)에 $HN(SiMe_3)_2$(2.4 mL, 12 mmol)를 첨가한 다음, 헥사클로로에탄(0.92 g, 4.0 mmol)의 CH_2Cl_2 용액(10 mL)을 첨가하여 탁한 흰색 반응 혼합물을 제공했다. 1시간 동안 교반한 후, 분취액을 취하고 진공 하에 건조했다. ^{1}H NMR 분광법으로 분석한 결과, 반응물이 화합물 4b를 약 90% 순도로 함유하고 있음을 시사했다. 혼합물을 여과하고, 여과액을 진공 하에 농축하여 무색 끈적한 고체를 제공했고, 추가 정제 없이 사용했다. ^{1}H NMR ($CDCl_3$): δ 7.71 (s, 1H), 7.61 (d, *J* = 7.9 Hz, 2H), 7.38-7.33 (m, 5H), 7.20-7.14 (m, 4H), 6.42 (ddd, *J* = 7.9, 7.6, 및 1.4 Hz 1H), 2.20-2.15 (m, 4H), 1.96-1.77 (m, 8H), 1.55-1.36 (m, 8H), 1.29 (m, 21H), -0.21 (s, 9H). ^{31}P{^{1}H} NMR ($CDCl_3$): δ 18.3.

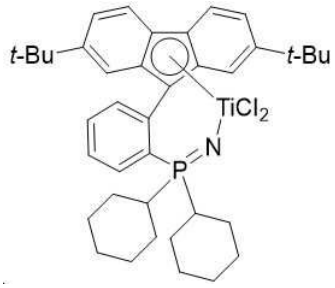
[2726] 화합물 4c



[2727]

[2728] 미정제 화합물 4b(전술한 바와 같음, 순도 ~90%)의 THF 용액(30 mL)에 CsF(0.88 g, 6.0 mmol)의 MeOH 용액(20 mL)을 주변 온도에서 교반하에 첨가했다. 반응 혼합물의 헤드스페이스를 순간적으로 탈기시키고, 혼합물을 밤새 60℃로 가열했다. 진공 하에서 용매를 제거하고, 잔류물을 뜨거운 톨루엔(80 mL)에 흡수시키고, 혼합물을 셀라이트를 통해 여과했다. 휘발성 물질을 진공 하에서 제거하고, 결과적으로 생성된 고체를 세척하고, 차가운 펜탄(2×5 mL)으로 따라내고, 남아 있는 무색 고체는 원하는 생성물인 것으로 결정되었다. 수율: 1.3 g, 61%. ^{1}H NMR (CD_2Cl_2): δ 7.69 (d, *J* = 7.2 Hz, 2H), 7.46-7.40 (m, 1H), 7.38 (dd, *J* = 8.4 및 2.8 Hz, 2H), 7.25-7.21 (m, 3H), 7.18-7.11 (m, 1H), 6.40-6.37 (m, 1H), 7.25 (s, 2H), 2.29-2.20 (중첩 m, 2H), 1.95-1.81 (m, 4H), 1.77-1.73 (m, 2H), 1.57-1.29 (중첩 m, 12H), 1.27 (s, 18H). ^{31}P NMR (CD_2Cl_2): δ 39.2.

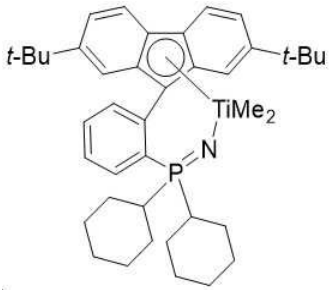
[2729] 복합체 4



[2730]

[2731] *n*-BuLi 용액(9.9 mL, 16 mmol, 헥산 중 1.6 M)을 -78℃에서 화합물 4c(4.28 g, 7.6 mmol)의 THF 용액(150 mL)에 적가했다. *n*-BuLi를 첨가한 후, 냉각 배쓰를 제거하고, 반응물을 주변 온도로 가온한 후, 2시간 동안 교반했다. 수득된 붉은색 용액을 다시 -78℃로 냉각시키고, $Ti(NMe_2)_2Cl_2$(1.56 g, 7.6 mmol)의 톨루엔 용액(60 mL)을 천천히 첨가했다. 반응물을 주변 온도로 가온한 후, 밤새 교반했다. 모든 휘발성 물질을 진공 하에서 제거한 후, 잔류물을 톨루엔(200 mL)에 흡수시키고, 셀라이트 패드를 통해 여과시켰다. 합친 여과액에 클로로트리메틸실란(9.6 mL, 75.5 mmol)을 첨가하고, 혼합물을 2일 동안 교반하에 90℃로 가열했다. 모든 휘발성 물질을 진공 하에서 제거한 후, 수득한 짙은 붉은색 고체를 펜탄(5×10 mL)으로 세척하고 진공 하에 건조했다. 수율: 1.9 g, 25%. ^{1}H NMR (CD_2Cl_2): δ 7.93 (d, *J* = 9.0 Hz, 2H), 7.76-7.62 (m, 4H), 7.61-7.56 (m, 2H), 6.92 (s, 2H), 2.09-1.66 (m, 12H), 1.43-1.28 (m, 12H), 1.23 (s, 18H). ^{31}P{^{1}H} NMR (CD_2Cl_2): δ 27.2.

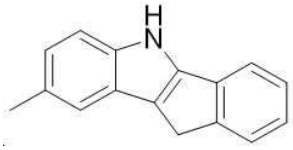
[2732] 복합체 5



[2733]

[2734] 복합체 4(1.18 g, 1.7 mmol)의 톨루엔 용액(40 mL)에 주변 온도에서 브롬화 메틸마그네슘 용액(1.2 mL, 3.8 mmol, Et_2O 중 3.0M)을 첨가했고, 그 결과 붉은색에서 짙은 갈색/검정색으로 빠르게 색이 변했다. 10분간 교반한 후, 휘발성 물질을 진공 하에서 제거하고, 잔류물을 진공 하에서 3시간 동안 철저히 건조했다. 잔류물을 톨루엔(40 mL)에 흡수시키고 여과한 후, 생성된 여과액을 진공 하에서 농축 건조했다. 짙은 녹색/갈색 고체를 펜탄 일부(2×5 mL)로 세척한 다음 진공 하에서 건조했다. 수율: 0.64 g, 58%. ^{1}H NMR ($CDCl_3$): δ 8.11 (d, J = 9.8 Hz, 2H), 7.59-7.53 (m, 4H), 7.43 (dd, J = 8.5 및 1.0 Hz, 2H), 6.71 (d, J = 1.1 Hz, 2H), 2.04-1.68 (m, 12H), 1.45-1.23 (m, 12H), 1.21 (s, 18H), -0.85 (s, 6H). ^{31}P{^{1}H} NMR ($CDCl_3$): δ 18.8.

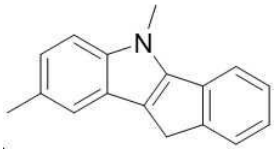
[2735] 8-메틸-5,10-디하이드로인데노[1,2-*b*]인돌

[2736] 

[2737] 이 물질은 문헌[Grandini, C. *et al*. in *Organometallics*, **2004**, *23*, 344-360]에 기술된 대로 실질적으로 제조했다.

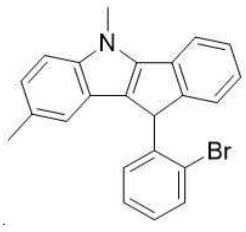
[2738] 1-인다논(5.02 g, 38.0 mmol), *p*-톨릴하이드라진 염산염(6.03 g, 38.0 mmol) 및 *p*-톨루엔술폰산 일수화물(0.3 g)을 *i*-PrOH(150 mol)에 현탁시켰다. 응축기를 부착하고 혼합물을 45분 동안 환류시켰고, 그 동안 반응 혼합물은 노란 주황색 현탁액이 되었다. 반응 혼합물을 0℃로 15분 동안 냉각시키고 여과했다. 여과 케이크를 여과액이 무색이 될 때까지 *i*-PrOH로 헹구었다. 잔류 휘발성 물질은 감압 하에 제거하여 원하는 생성물을 흰색 고체로서 제공했다. 수율: 7.45 g, 89%. ^{1}H NMR ($CDCl_3$) δ 8.23 (br, 1H), 7.53 (d, J = 7.4 Hz, 1H), 7.45 (m, 2H), 7.32 (m, 2H), 7.20 (t, J = 7.4 Hz, 1H), 7.01 (d, J = 8.5 Hz, 1H), 3.71 (s, 2H), 2.48 (s, 3H).

[2739] 5,8-디메틸-5,10-디하이드로인데노[1,2-*b*]인돌

[2740] 

[2741] 8-메틸-5,10-디하이드로인데노[1,2-*b*]인돌(1.73 g, 7.88 mmol) 및 칼륨 *tert*-부톡사이드(885 mg, 7.88 mmol)를 THF(60 mL)에 용해하고, 반투명한 노란색 용액을 1시간 동안 교반했다. 요오도메탄(0.49 mL, 1.12 g, 7.88 mmol)을 주사기를 통해 첨가하자 즉시 흰색 침전물이 형성되었다. 30분 후, 반응 혼합물을 포화 수성 NH_4Cl(100 mL)에 붓고 CH_2Cl_2(100 mL)로 추출했다. 유기 추출물을 물(2×50 mL), 염수(50 mL)로 헹구고, 무수 Na_2SO_4로 건조시키고, 여과하고, 감압 하에 제거하여 옅은 노란색 고체를 제공했다. 미정제 생성물을 뜨거운 헵탄에서 재결정화로 정제하여 원하는 생성물을 회백색 고체로서 제공했다. 수율: 1.64 g, 89%. ^{1}H NMR ($CDCl_3$) δ 7.66 (d, J = 7.5 Hz, 1H), 7.55 (d, J = 7.5 Hz, 1H), 7.45 (s, 1H), 7.36 (t, J = 7.5 Hz, 1H), 7.31 - 7.20 (m, 1H), 7.08 (d, J = 8.3 Hz, 1H), 4.04 (s, 3H), 3.70 (s, 2H), 2.51 (s, 3H).

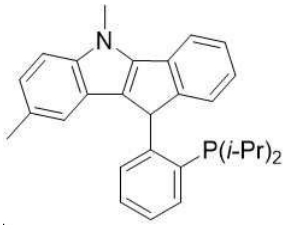
[2742] 화합물 6a

[2743] 

[2744] 5,8-디메틸-5,10-디하이드로인데노[1,2-b]인돌(4.67 g, 20.0 mmol)의 THF 용액(80 mL)에 *n*-BuLi 용액(12.5 mL, 21.0 mmol, 헥산 중 1.6 M)을 주변 온도에서 적가했다. 반응 혼합물을 밤새 교반하여 밝은 주황색-붉은색 용액

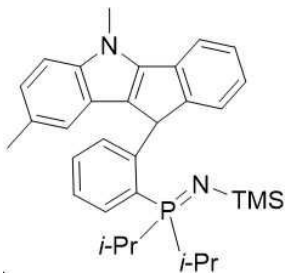
을 제공했다. 반응물에 무수 염화아연(4.09 g, 30.0 mmol)의 THF 용액(40 mL)을 첨가하고, 결과적으로 생성된 옅은 노란색 반응 혼합물을 3시간 동안 교반했다. $Pd(PPh_3)_4$(1.16 g, 1.00 mmol) 및 1,2-디브로모벤젠(4.72 g, 20.0 mmol)을 순차적으로 첨가한 후 플라스크의 헤드스페이스를 순간적으로 탈기시키고, 반응 혼합물을 5일 동안 65-67℃로 가열했다. 반응 혼합물을 감압 하에 ~30 mL로 농축하고 물과 톨루엔(각각 75 mL) 사이에 분배시켰다. 유기층을 수성 층의 추가 톨루엔 추출물(2×30 mL)과 합쳤다. 합친 유기층을 물(2×30 mL), 그 다음 염수(30 mL)로 세척한 다음, 무수 Na_2SO_4로 건조했다. 짙은 적갈색의 탁한 추출물을 여과하여 짙은 적갈색 여과액으로부터 흰색 고체를 제거했다. 여과액을 감압 하에 농축했다. 뜨거운 헵탄에서의 재결정화는 물질 순도의 약간의 개선을 야기했다. 2차 정제는 물질을 최소한의 디클로로메탄에 재용해하고 헵탄을 첨가하고 N_2 흐름 하에 90℃로 15분 동안 가열하여 디클로로메탄을 증발시키고 침전물을 제공했다. -35℃로 냉각한 다음 따라 내고, 단리된 고체를 진공 하에 건조하여 생성물을 ~92% 순도(4.04 g, 10.4 mmol, 52% 수율)로 제공했다. 이 물질을 컬럼 크로마토그래피(EtOAc/헵탄, ~5 % v/v EtOAc까지 구배 용출, R_f = 0.22(TLC, 헵탄 중 4% EtOAc))로 추가로 정제하여 NMR 시 >95% 순도로 원하는 생성물 1.54 g을 제공했다. ^{1}H NMR ($CDCl_3$): δ 7.73 (dd, *J* = 8.0 및 1.2 Hz, 1H), 7.66 (dm, *J* = 7.5 Hz, 1H), 7.48 (dm, *J* = 7.6 Hz, 1H), 7.35 (m, 1H), 7.29 (d, *J* = 8.4 Hz, 1H), 7.17 (m, 2H), 7.11-7.02 (m, 2H), 7.00 (td, *J* = 7.6 및 1.1 Hz, 1H), 6.61 (dd, *J* = 7.8 및 1.5 Hz, 1H), 5.60 (s, 1H), 4.09 (s, 3H), 2.40 (s, 3H).

[2745] 화합물 6b

[2746] 

[2747] 화합물 6a(1.13 g, 2.92 mmol)를 THF(10 mL) 및 Et_2O(50 mL)의 혼합물에 용해했다. 용액을 액체 N_2/EtOH 배쓰를 사용하여 -115℃±5℃로 냉각했다. 용액에 *n*-BuLi(1.91 mL, 3.06 mmol, 헥산 중 1.6 M) 용액을 교반하에 5분에 걸쳐 적가했다. 냉각 배쓰의 온도는 2시간에 걸쳐 -115℃±5℃로 유지시켰다. -115℃에서 반응 혼합물에 클로로디이소프로필포스핀(0.47 g, 3.06 mmol)의 THF 용액(10 mL)을 적가했다. 반응 혼합물을 밤새 교반하면서 천천히 주변 온도로 가온시켰다. 결과적으로 생성된 옅은 노란색 용액을 진공 하에서 농축하고, 헵탄(20 mL)으로 분쇄하고, 진공 하에서 농축 건조시키고, 잔류물을 톨루엔(3×50 mL)으로 추출한 다음, 필터 캐뉼라로 여과했다. 합쳐진 여과액의 용매를 진공 하에서 제거한 후, 잔류물을 세척하고 차가운 펜탄(-35℃)으로 두 번 따라 내고, 그 다음 진공 하에서 건조하여 무색 고체를 제공했다. ^{1}H NMR로 분석한 결과, 이 물질은 원하는 포스핀(화합물 6b)과 미반응 출발 물질(화합물 6a)이 ~3:1 비율로 혼합된 혼합물, 뿐만 아니라 기타 불순물임을 보여주었다. 미정제 물질은 추가 정제 없이 화합물 6c의 합성을 위해 진행시켰고, 해당 단계에서 정제했다. 미정제 물질의 ^{31}P NMR 스펙트럼은 단 하나의 공명을 보여주었다. $^{31}P\{^1H\}$ NMR (톨루엔-d_8): δ -7.5.

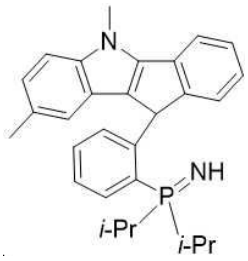
[2748] 화합물 6c

[2749] 

[2750] 상기에 기술된 바와 같은 미정제 화합물 6b(740 mg, 1.74 mmol의 화합물 6b로 가정됨)의 톨루엔 용액(50 mL)에 과량의 헥사클로로에탄 C_2Cl_6(900 mg, 4 mmol)을 첨가하고, 혼합물을 교반하여 시약을 용해시켰다. 무색 침전물이 형성되기 시작했고, 혼합물을 4시간 동안 방치했다. 혼합물을 따라 내고, 결과적으로 생성된 고체를 세척하

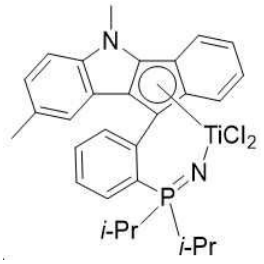
고, 톨루엔 일부(3×3 mL)로 따라 내고, 진공 하에서 건조했다. 잔류물을 CH_2Cl_2(20 mL)에 흡수시키고, 순수한 $HN(SiMe_3)_2$(2.0 mL, 9.5 mmol)를 주사기로 적가했다. 무색 침전물이 형성되기 시작했고, 혼합물을 주변 온도에서 밤새 방치했다. 결과적으로 생성된 혼합물을 여과하고, 진공 하에 일단 건조된 무색 고체는 고순도(>95%)의 원하는 생성물인 것으로 결정되었다. 수율: 0.73 g, 82%. ^{1}H NMR ($CDCl_3$): δ 7.63 (d, *J* = 7.5 Hz, 1H), 7.38 (m, 2H), 7.33 (s, 1H), 7.27 (m, 2H), 7.18 (s, 1H), 7.11 (m, 2H), 7.00 (m, 2H), 6.56 (m, 1H), 4.09 (s, 3H), 2.53 (7중선, *J* = 7.0 Hz, 1H), 2.44 (7중선, *J* = 7.0 Hz, 1H), 2.33 (s, 3H), 1.36 (m, 6H), 1.24 (m, 6H), -0.21 (s, 9H). ^{31}P{^{1}H} NMR ($CDCl_3$): δ 22.9 ppm.

[2751] 화합물 6d

[2752] 

[2753] 건조 메탄올(5 mL) 및 THF(15 mL) 중 화합물 6c(740 mg, 1.44 mmol)의 용액에 CsF(329 mg, 2.16 mmol)를 첨가했다. 혼합물을 밤새 교반하면서 50℃로 가열했다. 휘발성 물질을 진공 하에서 제거하여 흰색의 끈적끈적한 고체 잔류물을 제공했다. 잔류물을 톨루엔(3×10 mL)으로 추출하고 셀라이트를 통해 여과했다. 여과액을 진공 하에서 농축 건조하여 무색 고체를 제공했다. 수율: 0.64 g, 정량적. ^{1}H NMR ($CDCl_3$): δ 7.65 (d, *J* = 7.5 Hz, 1H), 7.49 (td, *J* = 8.8 및 1.0 Hz, 1H), 7.30 (td, *J* = 7.5 및 1.1 Hz, 1H), 7.24 (m, 4H), 7.10 (m, 2H), 7.04 (s, 1H), 6.99 (dd, *J* = 8.4 및 1.4 Hz, 1H), 6.61 (ddd, *J* = 7.8, 3.3, 및 1.0 Hz, 1H), 4.08 (s, 3H), 2.64 (m, 2H), 2.33 (s, 3H), 1.42 (m, 6H), 1.29 (m, 6H). ^{31}P{^{1}H} NMR ($CDCl_3$): δ 44.4.

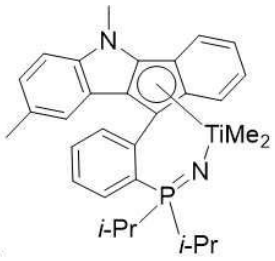
[2754] 복합체 6

[2755] 

[2756] -78℃에서 화합물 6d(625 mg, 1.42 mmol)의 THF 용액(30 mL)에 *n*-BuLi 용액(1.8 mL, 2.9 mmol, 1.6 M 헥산)을 캐뉼라로 적가하여 첨가했고, 즉시 밝은 보라색으로 색이 변했다. 혼합물을 천천히 주변 온도로 가온한 다음 진공 하에 농축하여 보라색 고체를 제공했다. 고체 물질을 톨루엔(20 mL)으로 분쇄하여 주황색 슬러리를 생성한 다음, 45℃로 가열하면서 진공 하에 농축했다. 분쇄 및 농축 과정을 한 번 더 반복했다. ^{1}H NMR 분광법으로 고체 잔류물을 분석한 결과 일부 잔류 THF가 여전히 존재하고 스펙트럼이 넓어진 것으로 나타났다. 톨루엔(40 mL)을 첨가하고 혼합물을 -78℃로 냉각했다. 빠르게 교반된 슬러리에 $Ti(NMe_2)_2Cl_2$(243 mg, 1.49 mmol)의 톨루엔 용액(20 mL)을 캐뉼라를 통해 적가했다. 결과적으로 생성된 짙은 붉은색 혼합물을 -78℃에서 10분간 교반한 다음, 천천히 주변 온도로 가온시켰다. 진공 하에 휘발성 물질을 제거한 후, 짙은 붉은색 고체를 톨루엔(20 mL)에 재용해시키고, 혼합물을 소결 유리 프릿을 통해 여과했다. 과량의 클로로트리메틸실란(1.5 mL, 16 mmol)을 용액에 첨가하고, 혼합물을 2일 동안 90℃로 가열하기 전에 헤드스페이스를 부분적으로 탈기시켰다. 결과적으로 생성된 혼합물을 주변 온도로 냉각시킨 다음, 진공 하에 농축 건조했다. 고체 잔류물을 톨루엔(8 mL)으로 옮긴 후, 헵탄 일부(10 mL)를 첨가하고, 결과적으로 생성된 고체를 여과하여 단리하고, 헵탄의 추가 일부로 헹궜다. 결과적으로 생성된 짙은 붉은색 고체는 진공 하에서 건조했다. 수율: 440 mg, 55%. ^{1}H NMR ($CDCl_3$): δ 7.94

(d, J = 8.6 Hz, 1H), 7.72 (m, 3H), 7.39 (m, 1H), 7.25 (m, 1H), 7.17 (d, J = 8.6 Hz, 2H), 7.07 (m, 2H), 6.82 (s, 1H), 4.17 (s, 3H), 2.39 (7중선, J = 8.2 Hz, 1H), 2.29 (7중선, J = 7.2 Hz, 1H), 2.26 (s, 3H), 1.19 (m, 12H). $^{31}P\{^{1}H\}$ NMR ($CDCl_3$): δ 31.0 ppm.

[2757] 복합체 7



[2758]

[2759] 주변 온도에서 복합체 6(440mg, 0.79 mmol)의 톨루엔 용액/현탁액(10 mL)에 브롬화 메틸마그네슘(0.6 mL, 1.7 mmol, Et_2O 중 3.0M) 용액을 첨가했다. 짙은 붉은색에서 밝은 주황색으로 즉각적인 색 변화가 일어났다. 혼합물을 2시간 동안 교반한 다음, 진공 하에서 휘발성 물질을 제거했다. 잔류물을 톨루엔(10 mL)으로 분쇄한 다음, 진공 하에서 건조될 때까지 농축했다. 잔류물을 펜탄(10 mL)으로 분쇄한 다음, 진공 하에서 다시 농축했다. 잔류물을 톨루엔(10 mL)에 흡수시키고, 현탁액을 셀라이트 패드를 통해 여과했다. 밝은 노란색/주황색 여과액을 진공 하에 농축하여 끈적끈적한 주황색 유리질 반고체를 제공했다. 펜탄(5 mL)을 첨가하고 교반하여 비정질 고체가 밝은 노란색 분말을 형성하게 했고, 이를 따라 내기로 단리하고 진공 하에서 건조했다. 여과 패드를 가온 톨루엔의 추가 일부로 추출하고 상기 과정을 반복하여 순수한 고체 노란색 생성물의 추가 일부를 수득했다. 수율: 345 mg, 수율 84%. ^{1}H NMR (톨루엔-d_8): δ 7.88 (d, J = 8.6 Hz, 1H), 7.36 (m, 1H, ArH), 7.16 (t, J = 7.6 Hz, 1H), 7.10-6.88 (m, 7H, tol-d_8 신호와 중첩), 3.69 (s, 3H), 2.18 (s, 3H), 1.80 (m, 2H), 1.04 (m, 6H) 0.86 (m, 6H), -0.12 (s, 3H), -0.31 (s, 3H). $^{31}P\{^{1}H\}$ NMR (톨루엔-d_8): δ 22.3 ppm.

[2760] 화합물 8a

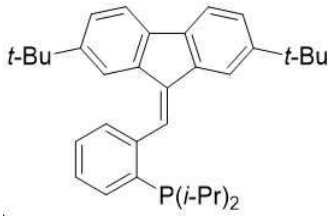


[2761]

[2762] 화합물 8a는 문헌[Yamaguchi, E., Abe, A., Itoh, A. *Asian Journal of Organic Chemistry* **2022**, *11*, e202200039]에 제공된 절차의 수정을 사용하여 제조했다.

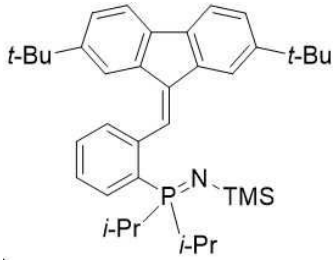
[2763] -78℃에서 교반하면서 KOtBu(14.25 g, 127 mmol) 및 2,7-디-*tert*-부틸플루오렌(17.68 g, 63.5 mmol)의 톨루엔 용액(30 mL)에 건조한 MeOH(130 mL)를 첨가했다. 혼합물을 주변 온도로 가온한 후, 2-브로모벤즈알데하이드(11.75 g, 63.5 mmol)의 MeOH 용액(30 mL)을 첨가하고 결과적으로 생성된 혼합물을 85℃에서 ~20시간 동안 가열하여 환류했다. 주변 온도로 냉각한 후, 반응 혼합물을 진공 하에 농축 건조시키고, 그 다음 Et_2O(200 mL)를 첨가하여 노란색 슬러리를 형성시켰다. 혼합물을 2시간 동안 ~5℃로 냉각한 다음 여과하고, 그 다음 여과액을 진공 하에 농축 건조시켜 노란색 고체를 제공했다. 이 고체 잔류물을 분말로 마쇄하고, MeOH(250 mL)로 1시간 동안 분쇄한 다음, 여과하여 단리했다. 노란색 고체를 MeOH 일부(3×20 mL)로 추가로 세척한 다음, 진공 하에 건조했다. 수율: 24.6 g, 87%. ^{1}H NMR (톨루엔-d_8): δ 7.88 (s, 1H), 7.52 (s, 1H), 7.51-7.42 (m, 3H), 7.42-7.35 (m, 2H), 7.33 (dd, J = 1.8 및 1.7 Hz, 1H), 7.23 (dd, J = 8.0 및 1.7, 1H), 6.98 (m, 1H), 6.80 (t, J = 8.2 Hz, 1H), 1.33 (s, 9H), 1.11 (s, 9H).

[2764] 화합물 8b

[2765] 

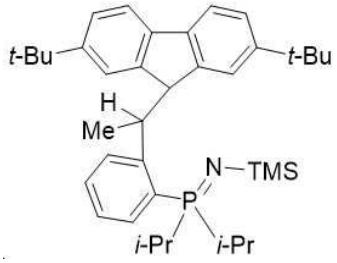
[2766] -78℃에서 교반하면서 THF(120 mL) 및 Et_2O(80 mL) 중의 화합물 8a(12.0 g, 26.9 mmol)의 용액에 *n*-BuLi(17.5 mL, 28.0 mmol, 헥산 중 1.6 M) 용액을 20분에 걸쳐 캐뉼라를 통해 적가했다. 노란색에서 붉은색으로 즉각적인 색 변화가 일어났고 몇 분 후에 침전물이 형성되기 시작했다. 생성된 슬러리를 -78℃에서 2시간 동안 교반한 다음 클로로디이소프로필포스핀(4.27 g, 28.0 mmol)의 Et_2O 용액(10 mL)을 캐뉼라를 통해 적가했다. 반응 혼합물을 주변 온도로 밤새 가온시킨 후, 결과적으로 생성되는 옅은 노란색 용액을 진공 하에 농축 건조했다. 고체 잔류물을 펜탄(100 mL)에 흡수시키고 30분 동안 교반한 다음, 여과했다. 여과액을 ~5 mL로 농축한 다음, 밤새 -35℃로 냉각하여 생성물을 결정화했다. 모액을 따라내고 결과적으로 생성된 고체를 세척하고 차가운(-35℃) 펜탄(~10 mL)으로 따라낸 다음, 진공 하에 건조했다. 수율: 11.8 g, 91%. ^{1}H NMR (톨루엔-d_8): δ 8.39 (s, 1H), 8.01 (s, 1H), 7.60 (m, 1H), 7.53 (d, *J* = 8.0 Hz, 1H), 7.52-7.47 (m, 2H), 7.41-7.35 (m, 1H), 7.32 (dd, *J* = 8.0 및 1.7 Hz, 1H), 7.24 (dd, *J* = 8.0 및 1.6, 1H), 7.20-7.13 (m, 2H), 1.90 (7중선의 d, *J* = 7.0 및 1.3 Hz, 2H), 1.29 (s, 9H), 1.18 (s, 9H), 0.97-0.85 (2개의 중첩 dd, 12H). ^{31}P{^{1}H} NMR (톨루엔-d_8): δ -3.8.

[2767] 화합물 8c

[2768] 

[2769] -35℃로 냉각된 화합물 8b(10.0 g, 20.7 mmol)의 CH_2Cl_2 용액(~60 mL)에 주변 온도의 CH_2Cl_2 용액(10 mL) 헥사클로로에탄(4.90 g, 20.7 mmol)을 천천히 첨가했다. 결과적으로 생성된 용액을 주변 온도에서 1시간 동안 교반한 다음, 순수한 $HN(SiMe_3)_2$(10 g, 62 mmol)를 적가 방식으로 첨가했다. ~10분 후 탁해진 혼합물을 주변 온도에서 밤새 교반했다. 생성된 슬러리를 진공 하에 ~40 mL로 농축한 후, 톨루엔(40 mL)을 첨가하고 슬러리를 진공 하에 건조 농축하여 용매, 과량의 $HN(SiMe_3)_2$ 및 테트라클로로에틸렌 부산물을 제거했다. 잔류물을 펜탄(70 mL)에 흡수시키고 여과한 다음, 여과 패드를 펜탄의 추가 일부(3×5 mL)로 세척했다. 노란색 여과액을 진공 하에서 결정화가 일어나기 시작할 때까지 농축한 다음(~10 mL) -35℃로 밤새 냉각했다. 노란색 결정질 고체는 따라 내기로 단리한 다음, 차가운 펜탄 일부(2×5 mL)로 세척하고 진공 하에 건조했다. 수율: 11.2 g, 95%. ^{1}H NMR (톨루엔-d_8): δ 8.20 (s, 1H), 7.99 (s, 1H), 7.92 (dd, *J* = 11.2 및 8.0 Hz, 1H), 7.51 (d, *J* = 7.9 Hz, 1H), 7.48 (d, *J* = 7.9 Hz, 1H), 7.40 (dd, *J* = 7.9 및 3.6 Hz, 1H), 7.34 (dd, *J* = 8.0 및 1.7 Hz, 1H), 7.25-7.17 (m, 2H), 7.17-7.11 (m, 2H), 2.06 (7중선, *J* = 6.8 Hz, 2H), 1.44 (s, 9H), 1.16 (s, 9H), 0.99 (dd, *J* = 15.6 및 7.0 Hz, 6H), 0.86 (dd, *J* = 16.1 및 7.0 Hz, 6H), 0.41 (s, 9H). ^{31}P NMR (톨루엔-d_8): δ 22.0.

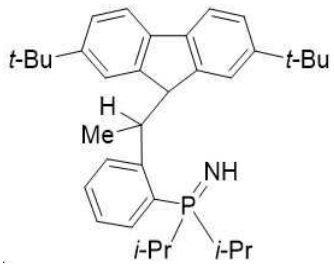
[2770] 화합물 8d



[2771]

[2772] 화합물 8c(6.75 g, 11.8 mmol)의 냉각된(-35℃) THF 용액(60 mL)에 메틸리튬(7.7 mL, 12.3 mmol, Et_2O 중 1.6 M) 용액을 주사기로 적가했다. 즉각적으로 색이 녹색으로 변했고, 그 다음 더 많은 MeLi 용액이 첨가되자 짙은 붉은색으로 변했다. 결과적으로 생성된 붉은색 용액을 ~20시간 동안 교반한 다음 -35℃로 냉각했다. 짙은 붉은색이 사라지고 밝은 녹색으로 색 변화가 일어날 때까지, 냉각된 용액에 교반하에 건조한 MeOH를 첨가했다. 혼합물을 추가로 20분 동안 교반한 다음, 진공 하에 농축 건조했다. 잔류물을 펜탄(80 mL)으로 옮긴 다음, ~20 mL까지 농축한 다음, -35℃로 냉각했다. 고체 생성물을 따라내기로 단리한 다음, 차가운 펜탄 일부(2×5 mL)로 세척하고 진공 하에 건조했다. 수율: 6.90 g, 99%. ^{1}H NMR (CD_2Cl_2): δ 7.82(dd, *J* = 7.8 및 3.4 Hz, 1H), 7.64-7.55 (m, 3H), 7.53 (d, *J* = 8.0 Hz, 1H), 7.48 (dd, *J* = 12.2 및 8.5, 1H), 7.38 (dd, *J* = 8.0 및 1.7 Hz, 1H), 7.33-7.26 (m, 1H), 7.21 (dd, *J* = 8.0 및 1.7 Hz, 1H), 6.58 (s, 1H), 4.34 (br. m, 1H), 4.19 (d, *J* = 10.2 Hz, 1H), 2.09 (7중선의 d, *J* = 7.2 및 2.0 Hz, 1H), 1.79 (7중선, *J* = 7.3 Hz, 1H), 1.52 (d, *J* = 6.5 Hz, 3H), 1.37 (s, 9H), 1.06 (s, 9H), 1.01 (dd, *J* = 15.8 및 7.0 Hz, 3H), 0.73 (dd, *J* = 15.5 및 7.0 Hz, 3H), 0.67 (dd, *J* = 15.5 및 7.0 Hz, 3H), 0.63 (dd, *J* = 15.5 및 7.0 Hz, 3H), -0.25 (s, 9H). ^{31}P{^{1}H} NMR (CD_2Cl_2): δ 22.3.

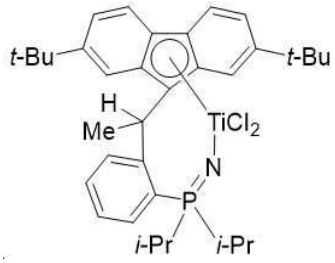
[2773] 화합물 8e



[2774]

[2775] 화합물 8d(6.9 g, 11.8 mmol) 및 CsF(1.80 g, 11.8 mmol)를 교반 막대가 장착된 100 mL 하이포바이알에서 THF(30 mL) 및 건조 MeOH(30 mL)의 혼합물에 용해시켰다. 바이알을 밀봉하고 작은 게이지 바늘로 배기시키고 반응 혼합물을 20시간 동안 교반했다. 반응 혼합물의 소량을 진공 하에 건조한 다음, ^{1}H NMR로 분석하여 반응이 완료되었음을 확인했다. 그런 다음 반응 혼합물을 진공 하에 농축 건조시키고 잔류물을 톨루엔(30 mL)에 흡수시키고 슬러리를 셀라이트 패드를 통해 여과했다. 여과 패드를 톨루엔 일부(3×6 mL)로 세척하고 합쳐진 밝은 녹색 여과액을 진공 하에 농축 건조했다. 용액을 ~10 mL로 농축한 즉시, 무색 고체의 결정화가 관찰되었지만 물질은 진공 하에 완전히 건조되었다. 잔류물을 펜탄(30 mL)으로 옮긴 다음, -35℃로 냉각시켰다. 녹색 모액을 따라내어 버리고, 고체를 차가운 펜탄 일부로 세척한 다음 단리하고 진공 하에 건조하여 원하는 생성물을 무색 고체로서 제공했다. 수율: 4.77 g, 78%. ^{1}H NMR (톨루엔-d_8): δ 8.50 (s, 1H), 7.65 (d, *J* = 4.4 Hz, 1H), 7.63 (d, *J* = 4.4 Hz, 1H), 7.39 (dt, *J* = 8.5 및 3.3 Hz, 1H), 7.32 (dd, *J* = 8.0 및 1.7 Hz, 1H), 7.28 (m, 1H), 7.11 (m, 2H), 6.90 (s, 1H), 5.90 (br. m, , 1H), 4.69 (d, *J* = 4.4 Hz, 1H), 2.08-1.97 (m, 1H), 1.96-1.82 (m, 1H), 1.43 (s, 9H), 1.27 (s, 9H), 1.10 (dd, *J* = 14.9 및 7.1 Hz, 3H), 1.00 (dd, *J* = 14.6 및 6.9 Hz, 3H), 0.87 (dd, *J* = 15.3 및 7.1 Hz, 3H), 0.81 (d, *J* = 7.2Hz, 3Hz), 0.74 (dd, *J* = 15.3 및 7.1 Hz, 3H), 0.16 (br. s, 1H). ^{31}P NMR (톨루엔-d_8): δ 43.4.

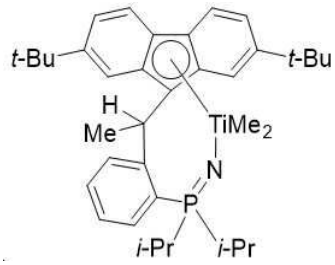
[2776] 복합체 8



[2777]

[2778] 화합물 8e(4.66 g, 9.08 mmol)의 톨루엔/THF(20/1 vol/vol, 총 50 mL)의 용액에 *n*-BuLi(11.8 mL, 18.9 mmol, 헥산 중 1.6 M) 용액을 주변 온도에서 적가했다. 생성된 슬러리를 -78℃로 냉각한 다음, $Ti(NMe_2)_2Cl_2$의 톨루엔 용액(50 ml)을 혼합물을 빠르게 교반하면서 적가했다. 슬러리를 밤새 주변 온도로 천천히 가온한 후 반응 혼합물은 주황색 용액이 되었다. 용액을 50℃에서 1시간 동안 가열한 다음 주변 온도로 다시 냉각했다. 과량의 클로로트리메틸실란(9.85 g, 90.7 mmol)을 용액에 첨가하고 생성된 혼합물을 밤새 90℃로 가열했다. 결과적으로 생성된 짙은 붉은색 혼합물을 주변 온도로 냉각한 다음, 0℃에서 3시간 동안 냉각한 후 붉은색 고체가 결정화되었다. 붉은색 고체를 여과하여 단리하고 펜탄(20 mL)으로 세척한 다음, 진공 하에 건조했다. ^{1}H NMR 분석 결과, 생성물에는 대략 1당량의 용매화 톨루엔이 함유되어 있음을 보여주었다. 복합체 8·(C_7H_8) 수율: 2.2 g, 33%. ^{1}H NMR (CD_2Cl_2): δ 8.21 (dd, *J* = 8.0 및 4.1 Hz, 1H), 7.90 (dd, *J* = 8.6 및 1.0 Hz, 1H), 7.86-7.78 (m, 2H), 7.62-7.52 (m, 3H), 7.50-7.42 (m, 1H), 7.36 (dd, *J* = 8.6 및 1.7Hz, 1H), 7.28-7.21 (m, 1H), 7.20-7.10 (m, 2H), 6.26 (s, 1H), 5.83 (q, *J* = 7.1 Hz, 1H), 2.66-2.54 (m, 1H), 2.48-2.36 (m, 1H), 2.34 (s, 용매화된 톨루엔-C*H*$_3$), 1.99 (d, *J* = 7.1Hz, 3H), 1.42 (s, 9H), 1.36 (dd, *J* = 17.3 및 7.2 Hz, 3H), 1.31 (dd, *J* = 16.4 및 6.8 Hz, 3H), 1.18 (dd, *J* = 17.2 및 7.2 Hz, 3H), 1.13 (dd, *J* = 16.7 및 6.9 Hz, 3H), 1.00 (s, 9H). ^{31}P{^{1}H} NMR (CD_2Cl_2): 30.4.

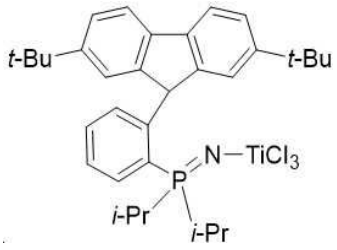
[2779] 복합체 9



[2780]

[2781] 주변 온도에서 톨루엔(5 mL) 및 Et_2O(30 mL) 중 복합체 8·(C_7H_8)(1.1 g, 1.5 mmol)의 용액/현탁액에 브롬화 메틸마그네슘(1.3 mL, 3.9 mmol, Et_2O 중 3.0 M)의 용액을 첨가했다. 혼합물을 2시간 동안 교반한 다음 진공 하에서 휘발성 물질을 제거했다. 잔류물을 톨루엔(40 mL)에 흡수시키고, 결과적으로 생성된 노란색-주황색 슬러리를 셀라이트 패드를 통해 여과했다. 여과액을 진공 하에서 농축하여 원하는 생성물을 주황색 결정질 고체로서 제공했다. ^{1}H NMR 분석 결과 생성물에 대략 1 당량의 용매화 톨루엔이 함유되어 있음을 보여주었다. 복합체 9·(1 C_7H_8)의 수율: 0.97 g, 93%. ^{1}H NMR (톨루엔-d_8): δ 8.09 (d, *J* = 8.8 Hz, 1H), 8.03 (d, *J* = 8.9Hz, 1H), 7.80 (dd, *J* = 8.0 및 3.9 Hz, 1H), 7.55 (s, 1H), 7.43 (dd, *J* = 8.8 및 1.6 Hz, 1H), 7.30 (t, *J* = 7.3Hz, 1H), 7.24 (dd, *J* =8.9 및 1.7Hz, 1H), 7.13-6.88 (m, 5H), 6.12 (s, 1H), 5.44 (q, *J* = 7.3 Hz, 1H), 2.12 (s, 용매화 톨루엔-C*H*$_3$), 2.02-1.86 (m, 2H), 1.81 (d, *J* = 7.1 Hz, 3H), 1.44 (s, 9H), 1.20 (dd, *J* = 15.4 및 6.5 Hz, 3H), 1.07 (dd, *J* = 16.4 및 7.3 Hz, 3H), 0.95 (dd, *J* = 15.7 및 7.0 Hz, 3H), 0.82 (dd, *J* = 16.1 및 7.3 Hz, 3H), -0.18 (s, 3H), -0.52 (s, 3H). ^{31}P{^{1}H} NMR (톨루엔-d_8): δ 16.7.

[2782] 복합체 10

[2783] 

[2784] 화합물 2d(3.2 g, 6.59 mmol)의 THF 용액(100 mL)에 *n*-BuLi(4.1 mL, 6.56 mmol, 헥산 중 1.6 M) 용액을 주변 온도에서 첨가했다. 주변 온도에서 3시간 동안 교반한 후, 혼합물을 -78℃로 냉각시키고 $Ti(NMe_2)_2Cl_2$(1.36 g, 6.57 mmol)의 THF 용액(200 mL)을 적가했다. 반응 혼합물을 교반하면서 밤새도록 주변 온도로 천천히 가온시켰다. 모든 휘발성 물질을 진공 하에서 제거한 후, 잔류물을 톨루엔(3×50 mL)으로 추출하고 셀라이트 패드를 통해 여과했다. 합친 여과액에 클로로트리메틸실란(4.0 g, 36.8 mmol)을 첨가하고 수득한 혼합물을 90℃에서 밤새도록 가열했다. 주변 온도로 냉각한 후, 모든 휘발성 물질을 진공 하에서 제거하고, 수득한 고체를 뜨거운 톨루엔(15 mL)에 용해시켰다. 하룻밤 동안 -35℃로 냉각한 후, 무색 고체 생성물이 침전되었고, 따라 내기 및 진공 하에 건조를 통해 단리했다. 수율: 2.6 g, 65%. ^{1}H NMR (CD_2Cl_2): δ 7.73 (d, *J* = 8.0 Hz, 2H), 7.62 (br. s, 1H), 7.45 (ddd, *J* = 8.0, 1.8, 및 0.4 Hz, 2H), 7.39 (m, 1H), 7.32 (m, 1H), 7.24 (s, 2H), 6.56 (ddd, *J* = 7.8, 4.4, 및 1.0 Hz, 1H), 6.45 (br. s, 1H), 3.02 (m 또는 중첩성 7중선, 2H), 1.70 (dd, *J* = 17.5 및 7.0 Hz, 6H), 1.47 (dd, *J* = 17.5 및 7.0 Hz, 6H), 1.28 (s, 18). $^{31}P\{^{1}H\}$ NMR (CD_2Cl_2): δ 44.1.

[2785] 복합체 10의 배위 구는 단결정 X선 결정학으로 확인했다(표 4의 세부사항 참조). 복합체 10의 ORTEP 다이어그램은 도 4에 제공된다.

표 4

표 4

복합체 10 의 결정학적 실험 세부사항

A. 결정 데이터	
화학식	$C_{36.50}H_{51}Cl_3NPTi$ ($C_{33}H_{43}Cl_3NPTi$•$0.5C_7H_{16}$)
화학식량	689.00
결정 색 및 성질 [a]	무색 블록
결정 치수(mm)	0.39 × 0.12 × 0.07
결정계	사방정계
공간 군	$Pca2_1$ (29 번)
단위 셀 매개변수 [b]	
a (Å)	17.6688(14)
b (Å)	16.3720(13)
c (Å)	25.967(2)
V (Å^3)	7511.5(10)
Z	8
ρ계산치 (g cm^{-3})	1.219
μ (mm^{-1})	0.509
B. 데이터 수집 및 정제 조건	
회절계	Bruker PLATFORM/APEX II CCD [c]
방사선 (λ [Å])	흑연-단일크롬화된 Mo Kα (0.71073)
온도 (°C)	-80
스캔 유형	ω 스캔 (0.3°) (45 초 노출)
데이터수집 2θ 한계 (deg)	51.53
수집된 총 데이터	67896 (-21 ≤ h ≤ 21, -19 ≤ k ≤ 19, -31 ≤ l ≤ 31)
독립 반사	14367 (R_{int} = 0.0597)
관찰된 반사 수 (*NO*)	10913 [$F_o^2 \geq 2\sigma(F_o^2)$]
구조 솔루션 방법	내재적 위상조정 (*SHELXT-2014* [d])
정제 방법	F^2 에 대한 전체 행렬 최소 자승법 (*SHELXL–2018* [e,f])
흡수 교정 방법	가우스 적분 (페이스-인덱스화됨)
투과 계수 범위	1.0000--0.8409
데이터/제약/매개변수	14367 / 474 [g] / 873
Flack 절대 구조 매개변수 [h]	0.016(13)
적합도 (S) [i] [모든 데이터]	1.035
최종 R 지수 [j]	
R_1 [$F_o^2 \geq 2\sigma(F_o^2)$]	0.0445
wR_2 [모든 데이터]	0.1142
최대 차이 피크 및 홀	0.397 및 -0.312 e Å^{-3}

표 4 에 대한 주석:

[a] 톨루엔, 헵탄, 펜탄 및 디클로로메탄의 혼합물에서 재결정하여 수득함.

[b] 4.62° < 2θ < 43.04°로 하여 9888 반사의 최소 자승 정제로부터 수득함.

[c] 회절계 작동, 데이터수집, 데이터 축소 및 흡수 교정에 대한 프로그램은 Bruker 에 의해 공급된 것임.

[d] Sheldrick, G. M. *ActCrystallogr.* **2015**, *A71*, 3–8. (*SHELXT-2014*)

[2786]

[e] Sheldrick, G. M. *ActCrystallogr.* **2015**, *C71*, 3–8. (*SHELXL-2018/3*)

[f] 무질서하거나 부분 점유 용매 헵탄 탄소 원자로서 잔류 전자 밀도의 피크를 정제하려는 시도는 성공하지 못했다. 데이터는 *PLATON* (Spek, A. L. *ActCrystallogr.* **2015**, *C71*, 9–18. *PLATON* - a multipurpose crystallographic tool. Utrecht University, Utrecht, The Netherlands)에서 구현된 SQUEEZE 절차를 사용하여 무질서한 전자 밀도에 대해 교정되었다. 총 전자 수가 229 개 (용매 헵탄 4 개 분자 또는 티타늄 복합체의 화학식 단위 당 0.5 개 분자와 일치)인 총 용매 접근 가능 공극 부피 798 Å^3 가 단위 셀에서 발견되었다.

[g] 총 62 개 동일한 거리 (**SADI**) 제약을 분자 A 및 분자 B 모두의 무질서한 기에 적용하여 두 부분 사이에 일치하는 기하구조(즉, 결합 길이 및 각)를 보장했다. 이와 마찬가지로, 총 411 개 강성 결합 (**RIGU**) 제약을 무질서한 기의 이방성 변위 매개변수에 적용했다.

[h] Flack, H. D. *ActCrystallogr.* **1983**, *A39*, 876–881; Flack, H. D.; Bernardinelli, G. *ActCrystallogr.* **1999**, *A55*, 908–915; Flack, H. D.; Bernardinelli, G. *J. Appl. Cryst.* **2000**, *33*, 1143–1148. Flack 매개변수는 구조가 정확한 구성이면 0 에 가까운 값으로 정제되고, 역 구성이면 1 에 가까운 값으로 정제될 것이다.

[i] $S = [\Sigma w(F_o^2 - F_c^2)2/(n-p)]^{1/2}$ (n = 데이터 수; p = 변동된 매개변수 수; $w = [\sigma^2(F_o^2) + (0.0528P)^2 + 0.9847P]^{-1}$ where $P = [\text{Max}(F_o^2, 0) + 2F_c^2]/3$).

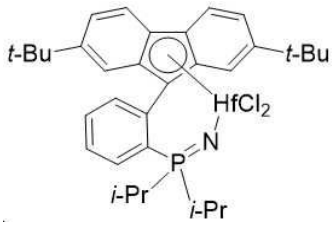
[j] $R_1 = \Sigma||F_o| - |F_c||/\Sigma|F_o|$; $wR_2 = [\Sigma w(F_o^2 - F_c^2)^2/\Sigma w(F_o^4)]^{1/2}$.

[2787]

[2788] 복합체 10(대안 경로)

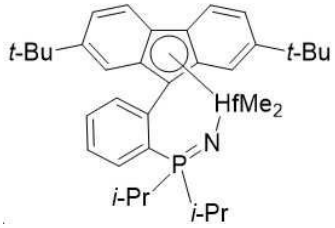
[2789] 화합물 2c(2.99 g, 5.36 mmol)의 톨루엔 용액(20 mL)에 $TiCl_4$(1.016 g, 5.36 mmol)의 톨루엔 용액(20 mL)을 적가했다. 결과적으로 생성된 녹색 용액/슬러리를 5시간 동안 가열하여 환류시킨 결과, 투명하고 주황색 색조의 용액이 초래되었다. 휘발성 물질을 진공 하에 제거하여 흰색 결정질 고체를 생성했다. 수율: 3.60 g, 92%. 톨루엔-d_8 및 CD_2Cl_2에서 ^{1}H NMR로 분석한 결과, 용매화의 톨루엔이 대략 0.8 당량 존재함을 보여주었다. NMR 분광 데이터는 상기에 기술한 바와 같이, 달리 $Ti(NMe_2)_2Cl_2$를 사용하여 제조한 복합체 10의 데이터와 동일했다.

[2790] 복합체 11

[2791] 

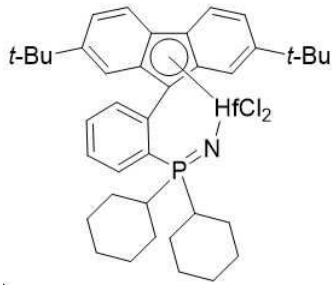
[2792] -78℃에서 화합물 2d(4.0 g, 8.24 mmol)의 톨루엔 용액에 *n*-BuLi(10.3 mL, 16.48 mmol, 헥산 중 1.6 M) 용액을 천천히 첨가했다. 혼합물을 -78℃에서 3시간 동안 교반한 후, $Hf(NEt_2)_2Cl_2$(2.78 g, 8.34 mmol)를 고체로서 첨가했고, 결과적으로 생성된 혼합물을 밤새 교반하면서 주변 온도로 천천히 가온시켰다. 모든 휘발성 물질을 진공 하에서 제거하고, 생성물을 톨루엔 일부(3×50 mL)로 추출하고, 합친 추출물을 셀라이트 패드를 통해 여과했다. 합친 여과액에 $SiCl_4$(6.0 g, 35.31 mmol)를 첨가하고, 혼합물을 90℃에서 3일 동안 가열했다. 혼합물을 진공 하에 농축 건조시킨 후, 잔류물을 비등 톨루엔(~25 mL)에 용해시키고 뜨거운 상태에서 여과했다. 여과액이 냉각되면서 원하는 생성물이 침전되었고, 여과하여 분리하고 진공 하에 건조했다. 수율: 4.4 g, 73%. ^{1}H NMR (CD_2Cl_2): δ 8.07 (dd, *J* = 8.9 및 0.7 Hz, 2H), 7.65 (m, 3H), 7.50 (m, 3H), 7.01 (m, 2H), 2.33 (m, 2H), 1.24 (s, 18H), 1.17 (m, 12H). ^{31}P{^{1}H} NMR (CD_2Cl_2): δ 31.2.

[2793] 복합체 12

[2794] 

[2795] 복합체 11(4.4 g, 6.0 mmol)의 톨루엔 현탁액(100 mL)에 브롬화 메틸마그네슘(6.0 mL, 18 mmol, Et_2O 중 3.0M) 용액을 주변 온도에서 교반하면서 첨가했다. 혼합물을 밤새 교반한 후, 반응 혼합물을 진공 하에 농축 건조했다. 잔류물을 톨루엔 일부(3×50 mL)로 추출하고 합친 추출물을 셀라이트 패드를 통해 여과했다. 여과액을 진공 하에 농축 건조시킨 후, 수득한 잔류물을 톨루엔(100 mL)에 재용해하고 셀라이트 패드를 통해 여과했다. 이 과정을 3번 반복하여 임의의 미반응 CH_3MgBr을 제거했다. 최종 고체 생성물은 톨루엔과 헵탄의 혼합물로부터 미정제 물질을 재결정화하여 수득했다. 수율: 3.1 g, 73%. ^{1}H NMR (CD_2Cl_2): δ 8.09 (dd, *J* = 8.9 및 0.7, 2H), 7.56 (m, 3H), 7.41 (m, 3H), 6.91 (m, 2H), 2.67 (m, 2H), 1.23 (s, 18H), 1.49 (dd, *J* = 8.6 및 7.0 Hz, 6H), 1.10 (dd, *J* = 8.7 및 7.1 Hz, 6H). ^{31}P{^{1}H} NMR (CD_2Cl_2): δ 26.4.

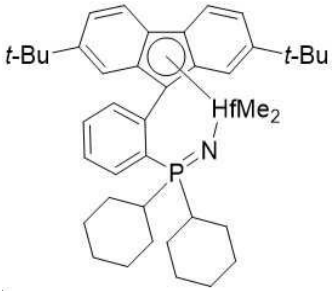
[2796] 복합체 13



[2797]

[2798] -78℃에서 화합물 4c(2.27 g, 4.0 mmol)의 톨루엔 용액(100 mL)에 *n*-BuLi 용액(5.3 mL, 8.4 mmol, 헥산 중 1.6 M)을 적가한 결과 용액이 밝은 주황색으로 변했다. *n*-BuLi를 첨가한 후, 냉각 배쓰를 제거하고, 반응 혼합물을 주변 온도로 가온시키고, 2시간 동안 교반했다. 결과적으로 생성된 붉은색 용액을 다시 -78℃로 냉각한 후, $Hf(NEt_2)_2Cl_2$(2.16 g, 4.0 mmol)의 톨루엔 현탁액(60 mL)을 10분에 걸쳐 캐뉼라로 분할 첨가했고, 반응물을 냉각 배쓰에서 밤새도록 천천히 가온시켰다. 그 다음, 반응 혼합물을 진공 하에 농축 건조시킨 다음, 잔류물을 톨루엔(50 mL)에 흡수시키고 여과했다. 여과액에 클로로트리메틸실란(5.1 mL, 40.1 mmol)을 첨가한 다음, 플라스크의 헤드스페이스를 순간적으로 탈기시켰다. 플라스크를 테프론 마개로 밀봉하고 혼합물을 교반하면서 90℃에서 2일간 가열했다. 반응 혼합물을 진공 하에 농축했다. ^{1}H NMR로 잔류물을 분석한 결과, 반응은 완료되지 않았고, 따라서 잔류물을 다시 톨루엔에 다시 흡수시키고 클로로트리메틸실란의 다른 일부(3 mL, 3.0 mmol)로 처리했고, 상기에 설명한 대로 90℃로 하루 더 가열했다. 반응 혼합물을 진공 하에 농축 건조시키고 잔류물을 톨루엔(50 mL)에 흡수시키고 슬러리를 여과했다. 여과액을 진공 하에 농축하여 생성물을 노란색 고체로서 제공했다. 수율: 2.6 g, 80 %. ^{1}H NMR (CD_2Cl_2): δ 8.06 (d, *J* = 9.2 Hz, 2H), 7.64-7.61 (m, 4H), 7.50-7.48 (m, 2H), 7.00 (s, 2H), 2.05-1.68 (m, 16H), 1.32-1.27 (m, 16H), 1.26 (s, 18H). $^{31}P\{^{1}H\}$ NMR (CD_2Cl_2): δ 24.7.

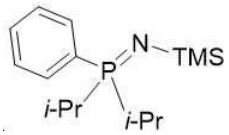
[2799] 복합체 14



[2800]

[2801] 복합체 14(0.50 g, 0.6 mmol)의 톨루엔 용액(7 mL)에 브롬화 메틸마그네슘(0.40 mL, 1.4 mmol, Et_2O 중 3.0 M) 용액을 주변 온도에서 적가했다. 주변 온도에서 5분간 교반한 후, 반응 혼합물을 진공 하에 농축 건조하여 노란색-갈색 고체 잔류물을 제공했다. 잔류물을 펜탄(50 mL)으로 분쇄하고 2회 농축 건조하여 잔류 Et_2O를 제거했다. 그런 다음 잔류물을 톨루엔(15 mL)에 흡수시키고 여과하고 여과액을 진공 하에 농축 건조시켰다. 고체 잔류물을 펜탄 일부(3×3 mL)로 세척한 다음, 진공 하에 건조시켜 생성물을 회백색 고체로서 제공했다. ^{1}H NMR 분석 결과, 생성물에 대략 1 당량의 용매화 톨루엔이 함유되어 있는 것이 보였다. 수율: 0.3 g, 53% ^{1}H NMR ($CDCl_3$): δ 8.08 (d, *J* = 9.6 Hz, 2H), 7.55-7.54 (m, 4H), 7.44-7.38 (m, 4H), 7.25 (m, 2H, tol.), 7.20 (m, 3H, tol.), 6.89 (br. s, 2H), 2.37 (s, 3H, tol.), 1.98 (br. m, 5H), 1.80 (br. m, 6H), 1.68 (br. m, 6H), 1.27-1.24 (m, 23H), -1.42 (s, 6H). $^{31}P\{^{1}H\}$ NMR ($CDCl_3$): δ 21.0.

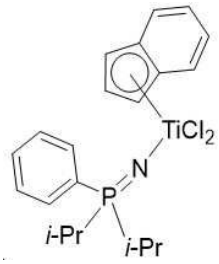
[2802] 화합물 15a



[2803]

[2804] 페닐디이소프로필포스핀(3.5 g, 18.02 mmol)의 톨루엔(30 mL) 용액에 주변 온도에서 아지도트리메틸실란(4.56 g, 5.2 mL, 39.5 mmol)을 첨가했다. 혼합물을 100℃에서 밤새 가열했다. 그런 다음 용액을 주변 온도로 냉각하고 모든 휘발성 물질을 진공 하에서 제거한 후 생성물을 흰색 고체로서 수득했다. 수율: 5.0 g, 98%. ^{1}H NMR (CD_2Cl_2): δ 7.65 (m, 2H), 7.45 (m, 3H), 2.20 (m, 2H), 1.07 (dd, J = 8.4 및 7.0 Hz, 6H), 0.93 (dd, J = 8.8 및 7.1 Hz, 6H), 0.05 (s, 9H). ^{31}P{^{1}H} NMR (CD_2Cl_2): δ 21.6.

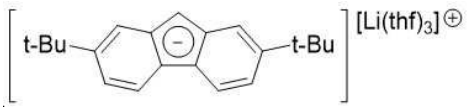
[2805] 복합체 15



[2806]

[2807] $TiCl_4$(4.75 g, 25 mmol)의 톨루엔 용액(200 mL)에 EtOH(1.15 g, 25.0 mmol)를 첨가하고, 결과적으로 생성된 혼합물을 60℃에서 밤새 가열했다. 수득한 붉은색 용액을 주변 온도로 냉각한 후, 모든 휘발성 물질을 진공 하에서 제거했다. 잔류물을 톨루엔(50 mL)으로 옮긴 다음, 고체 화합물 15a(4.5 g, 16.0 mmol)를 첨가했다. 반응 혼합물을 90℃로 밤새 가열했다. 혼합물을 진공 하에 농축 건조시킨 후, 생성물을 THF(100 mL)에 흡수시키고, 결과적으로 생성된 용액을 -78℃로 냉각했다. 갓 제조한 인데닐 리튬(1.95 g, 16.0 mmol)의 THF 용액(50 mL)을 캐뉼라를 통해 적가했다. 그런 다음 혼합물을 밤새 교반하면서 주변 온도로 천천히 가온시켰다. 혼합물을 진공 하에서 건조 농축한 후, 잔류물을 톨루엔(50 mL)에 흡수시키고, 셀라이트 패드를 통해 여과하고, 여과 케이크를 톨루엔의 추가 일부(2×50 mL)로 추출했다. 여과액을 진공 하에서 건조 농축하고, 잔류물을 헵탄으로 층을 이룬 톨루엔으로부터 2회 재결정하고, 따라 내어 단리하고, 진공 하에 건조했다. 수율: 1.4 g, 19 %. ^{1}H NMR (CD_2Cl_2): δ 7.79 (m, 2H), 7.66 (m, 2H), 7.60 (m, 2H), 7.27 (m, 2H), 7.16 (m, 2H), 6.99 (t, J = 3.4 Hz, 1H), 6.63 (d, J = 3.3 Hz, 1H), 2.52 (m, 2H), 1.33 (dd, J = 9.6 및 7.0, 6H), 1.12 (dd, J = 10.3 및 7.1 Hz, 6H). ^{31}P{^{1}H} NMR (CD_2Cl_2): δ 30.9.

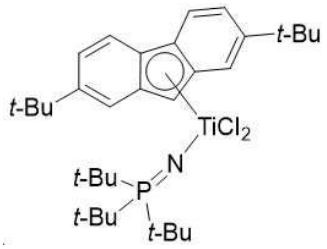
[2808] 화합물 16a



[2809]

[2810] 2,7-디-*tert*-부틸플루오렌(7.94 g, 28.5 mmol)의 THF 용액(50 mL)에 *n*-BuLi의 용액(18.7 mL, 29.9 mmol, 헥산 중 1.6 M)을 주변 온도에서 적가하여 밝은 주황색, 적당한 발열 및 발포를 초래했다. 주변 온도에서 밤새 교반한 후, 밝은 주황색 용액을 진공 하에 농축 건조하여 밝은 노란색 분말을 제공했다. 톨루엔 및 헵탄에서 재결정화한 다음, 단리하고 진공 하에 건조하여 원하는 생성물을 밝은 노란색 결정질 고체로서 제공했다. 수율: 12.4 g, 87% 수율. ^{1}H NMR (톨루엔-d_8): δ 8.19 (d, J = 8.4 Hz, 2H), 7.71 (s, 2H), 7.02 (m, 2H), 6.14 (s, 1H), 2.96 (m, 12H, THF), 1.53 (s, 18H), 1.25 (m, 12H, THF).

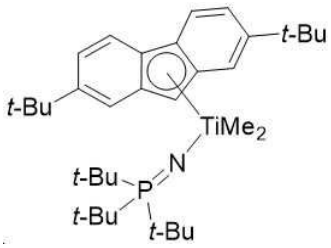
[2811] 복합체 16



[2812]

[2813] t-$Bu_3PNTiCl_3$(1.853 g, 5.00 mmol)의 THF 현탁액(30 mL)에 화합물 16a(2.50 g, 5.00 mmol)의 톨루엔 용액(20 mL)을 첨가한 결과 노란색에서 짙은 붉은색으로 즉각적인 색 변화, 노란색의 현탁된 *t*-$Bu_3PNTiCl_3$의 용해, 및 새로운 침전물의 형성이 초래되었다. 주변 온도에서 2시간 동안 교반한 후, 반응 혼합물을 진공 하에 농축 건조시켰다. 잔류물을 펜탄 일부에 슬러리화하고 다시 증발시켜 짙은 붉은 자주색 분말을 제공했다. 잔류물을 CH_2Cl_2에 추출하고 여과하고, 여과액을 포화 상태까지 농축하고, 펜탄으로 층을 만들고, -35℃로 밤새 냉각시켜 원하는 생성물을 짙은 붉은 자주색 결정질 고체로서 제공했다. 용액의 농축은 생성물의 추가 수확물을 제공했다. 합쳐진 수율: 2.31 g, 수율 75%. ^{1}H NMR ($CDCl_3$) δ 7.85 (d, *J* = 8.5 Hz, 2H), 7.53 (m, 2H), 7.44 (dd, *J* = 8.5 및 1.8 Hz, 2H), 6.64 (s, 1H), 1.40 (d, *J* = 14.0 Hz, 27H), 1.36 (s, 18H). ^{31}P{^{1}H} NMR ($CDCl_3$) δ 49.3.

[2814] 복합체 17



[2815]

[2816] 화합물 16b(1.07 g, 1.75 mmol)의 붉은 자주색 Et_2O 슬러리(30 mL)에 브롬화 메틸마그네슘 용액(1.28 mL, 3.85 mmol, Et_2O 중 3.0 M)을 첨가한 결과, 현탁 물질이 용해되고 밝은 노란색 현탁액이 형성되었다. 주변 온도에서 15분간 교반한 후, 반응 혼합물을 진공 하에 농축 건조시켰다. 노란색 고체 잔류물을 펜탄의 일부로 추출하고 셀라이트 패드를 통해 여과하여 노란색 여과액을 제공했다. 추출물이 무색이 될 때까지 여과 케이크를 펜탄으로 헹구었다. 합쳐진 펜탄 여과액을 농축하여 원하는 생성물을 노란색 분말로서 제공했다. 수율: 0.68 g, 수율 68%. ^{1}H NMR (톨루엔-d_8) δ 8.12 (d, *J* = 8.7 Hz, 2H), 7.42 (dd, *J* = 8.7 및 1.7 Hz, 2H), 7.36 (m, 2H), 6.04 (s, 1H), 1.37 (s, 18H), 1.23 (d, *J* = 12.9 Hz, 27H), -0.46 (s, 6H). ^{31}P{^{1}H} NMR (톨루엔-d_8) δ 31.3.

[2817] 용액상 중합: 연속 에틸렌/1-옥텐 공중합

[2818] 용액상 중합은 용매로서 사이클로헥산을 사용하고 70 mL 교반 반응기를 140℃~240℃ 사이로 작동시키는 연속 중합 단위(CPU)에서 수행했다. 20 mL 부피의 상류 혼합 반응기는 중합 반응기보다 5℃ 낮은 온도에서 작동시켰다. 혼합 반응기는 에틸렌, 옥텐 및 보충 용매 스트림을 예열하기 위해 사용했다. 촉매 공급물, 예컨대 유기금속 복합*(예비중합 촉매)의 오르토-자일렌 또는 사이클로헥산 용액; 붕소계 촉매 활성화제, $(Ph_3C)[B(C_6F_5)_4]$ (TB) 또는 [(수소화된 탈로우 알킬)$_2$(Me)NH][$B(C_6F_5)_4$] (AB); 알루미늄계 공촉매, Et_3Al(TEAL), *i*-Bu_3Al(TIBAL), Et_2AlOEt(DEAL-E) 또는 알킬알루미녹산(MMAO-7); 방해된 페놀 개질제, 2,6-디-*tert*-부틸-4-에틸페놀(BHEB); 및 추가 보충 사이클로헥산 용매 흐름은 원하는 경우 직렬로 조합되거나, 또는 연속 공정으로 반응기에 직접 첨가했다. 표에서 붕산염 첨가 방법 아래에 '반응기 내'로 정의된 특정 실험에서 붕소계 활성화제 용액은 반응기에 직접 첨가했고 다른 촉매 성분과 분리되었다. 표에서 붕산염 첨가 방법 아래에 '직렬로'로 정의된 특정 실험에서 붕소계 활성화제 용액은 예비중합 촉매 용액과 직렬로 조합되었고, 조합된 흐름은 반응기에 직접 첨가되거나 알루미늄계 공촉매 및 BHEB(사용되는 경우)의 흐름(또는 조합된 흐름)과 조합되었다. 알루미늄 첨가 방법 아래

에 '직렬로'로 정의된 특정 실험에서, 예비중합 촉매 용액(또는 예비중합 촉매와 붕소계 활성화제의 조합된 용액)을 알루미늄계 공촉매 용액과 직렬로 조합했고, 이러한 경우 반응기에 도달하기 전 관에서의 접촉(또는 저장) 시간은 사이클로헥산 보충 용매 흐름의 첨가 또는 공제를 통해 대략 25초로 유지되었다. 그렇지 않은 경우 알루미늄계 공촉매와 BHEB(사용된 경우)의 용액은 반응기에 직접 첨가했고 예비중합 촉매 용액 및 붕소계 공촉매 용액(알루미늄 첨가 방법 하에 '반응기 내'로 정의됨)과 분리되었다. BHEB가 사용된 모든 실험에서 MMAO-7과 BHEB 용액은 반응기 상류인 다른 촉매 성분과 접촉하기 위한 분기점 상류에서 조합되었다. 반응기로 제공되는 모든 공급물에 대한 총 용액 흐름은 27 mL/분으로 유지되었다.

[2819] 에틸렌/1-옥텐 공중합체는 표에 명시된 바와 같은 1-옥텐/에틸렌 중량 비율을 사용하여 제조하거나, 또는 1-옥텐의 흐름을 차단하여 에틸렌 단일중합체를 제조했다. 에틸렌은 반응기 온도에 따라 서로 다른 속도로 공급했고: 140℃에서 2.10 g/분, 160℃에서 2.70 g/분, 190℃에서 3.50 g/분, 200℃에서 3.80 g/분, 210℃에서 4.10 g/분, 220℃에서 4.48 g/분, 230℃에서 4.77 g/분, 240℃에서 4.93 g/분, 단, 중합 실행 번호(poly. run nos.) 63 및 64에서는 220℃에서 에틸렌 흐름 속도가 4.30 g/분이었다. CPU 시스템은 10.5 MPa의 압력에서 작동되었다. 용매, 단량체 및 공단량체 스트림은 반응기에 공급되기 전에 정제 트레인으로 정제했다. 중합 활성, k_p($mM^{-1} \cdot min^{-1}$로 표현)는 다음과 같이 정의된다:

[2820] $$k_p = \left(\frac{Q}{100-Q}\right)\left(\frac{1}{[M]}\right)\left(\frac{1}{HUT}\right)$$

[2821] 여기서 Q는 에틸렌 전환율(%)(온라인 NIR 검출기를 사용하여 측정), [M]은 반응기 내 촉매 농도(M = Ti 또는 Hf; mM 단위의 농도), HUT는 반응기 내 저장 시간이다(2.6분 값이 사용됨).

[2822] 공중합체 샘플은 90±1% 에틸렌 전환율(Q)을 목표로 수집했고(각각 Q 목표가 80% 및 70%인 중합 실행 번호 45 및 46은 제외), 진공 오븐에서 건조한 다음, 분석 전에 마쇄 및 균질화했다. 촉매 활성이 낮아 90% 목표를 충족할 수 없는 경우, 중합체 샘플은 취하지 않았다.

[2823] 공중합 조건은 표 5, 7, 9 및 11에 나열되며, 공중합 결과 및 공중합체 특성은 표 6, 8, 10 및 12에 나열된다.

[2824] 표 5 및 6, 표 7 및 8, 표 11 및 12에 나열된 실행에 대한 추가 조건: 붕소계 활성화제는 $(Ph_3C)[B(C_6F_5)_4]$ (TB)였고, 알루미늄계 공촉매는 MMAO-7이었다. 표 11 및 12에 나열된 실행의 경우, 붕산염 첨가 방법은 복합체 12 또는 14와 '직렬로'였고, 알루미늄계 공촉매 및 BHEB(사용된 경우)의 조합 흐름은 반응기에 직접 공급되었다('반응기 내').

[2825] 표 9 및 10에 나열된 실행에 대한 추가 조건: 예비중합 복합체 3을 사용했고; 반응 온도는 220℃였으며; 1-옥텐/에틸렌 비율은 0.30 wt/wt였고; 에틸렌 흐름 속도는 4.48 g/min이었고; 붕산염 첨가 방법은 복합체 3과 '직렬로'였고, 알루미늄계 공촉매 및 BHEB(사용된 경우)의 조합 흐름은 반응기에 직접 공급되었다('반응기 내'). 중합 실행 번호 38 및 39의 데이터는 비교를 위해 표 9 및 10에서 반복되었다.

표 5

표 5

연속 에틸렌/1-옥텐 공중합 조건 - Ti 계 촉매를 사용한 140, 160, 및 190℃ 실험

중합 실행 번호	촉매 복합체 번호	붕산염 첨가 방법	알루미늄 첨가 방법	반응기 온도 (°C)	에틸렌 흐름 (g/min)	B / Ti (몰비)	Al / Ti (몰비)	BHEB / Al (몰비)	1-옥텐/ 에틸렌 비 (wt/wt)
1	복합체 1	반응기 내	반응기 내	140	2.10	1.2	40.0	0.5	0.15
2	복합체 1	반응기 내	반응기 내	140	2.10	1.2	40.0	0.5	0.30
3	복합체 1	반응기 내	반응기 내	140	2.10	1.2	40.0	0.5	0.50
4	복합체 1	반응기 내	반응기 내	160	2.70	1.2	40.0	0.5	0.30
5	복합체 1	반응기 내	반응기 내	190	3.50	1.2	40.0	0.5	0
6	복합체 1	반응기 내	반응기 내	190	3.50	1.2	40.0	0.5	0.15
7	복합체 1	반응기 내	반응기 내	190	3.50	1.2	40.0	0.5	0.30
8	복합체 1	반응기 내	반응기 내	190	3.50	1.2	40.0	0.5	0.50
9	복합체 1	반응기 내	반응기 내	190	3.50	1.2	40.0	-	0.30
10	복합체 3	직렬로	-	140	2.10	1.0	-	-	0.70
11	복합체 3	직렬로	-	160	2.70	1.0	-	-	0.15
12	복합체 3	직렬로	-	160	2.70	1.0	-	-	0.30
13	복합체 3	직렬로	-	160	2.70	1.0	-	-	0.50
14	복합체 3	직렬로	반응기 내	160	2.70	1.4	5.0	0.6	0.30
15	복합체 3	직렬로	반응기 내	160	2.70	1.4	5.0	0.6	0.50
16	복합체 3	직렬로	반응기 내	160	2.70	1.4	5.0	0.6	0.70
17	복합체 3	직렬로	반응기 내	190	3.50	1.4	5.0	0.6	0.15
18	복합체 3	직렬로	반응기 내	190	3.50	1.4	5.0	0.6	0.30
19	복합체 3	직렬로	반응기 내	190	3.50	1.4	5.0	0.6	0.50
20	복합체 3	직렬로	반응기 내	190	3.50	1.4	5.0	-	0.30
21	복합체 3	직렬로	-	190	3.50	1.4	-	-	0.30
22	복합체 5	직렬로	반응기 내	190	3.50	1.2	5.0	0.3	0.30
23	복합체 7	직렬로	반응기 내	190	3.50	1.8	5.0	0.3	0.30
24	복합체 9	직렬로	반응기 내	190	3.50	2.2	2.5	0.3	0.30
25	복합체 10	반응기 내	직렬로	160	2.70	1.2	15.1	0.7	0.30
26	복합체 10	반응기 내	직렬로	190	3.50	1.2	15.1	0.7	0.30
27	복합체 15	반응기 내	반응기 내	140	2.10	1.2	80.0	0.3	0.15
28	복합체 15	반응기 내	반응기 내	140	2.10	1.2	80.0	0.3	0.30

[2826]

29	복합체 15	반응기 내	반응기 내	140	2.10	1.2	80.0	0.3	0.50
30	복합체 15	반응기 내	반응기 내	160	2.70	1.2	80.0	0.3	0.30
31	복합체 15	반응기 내	반응기 내	190	3.50	1.2	80.0	0.3	0
32	복합체 17	직렬로	반응기 내	140	2.10	1.4	20.0	0.6	0.30
33	복합체 17	직렬로	반응기 내	160	2.70	1.4	20.0	0.6	0.30
34	복합체 17	직렬로	반응기 내	190	3.50	1.4	20.0	0.6	0.30

[2827]

표 6

표 6

연속 에틸렌/1-옥텐 공중합 결과 - Ti 계 촉매를 사용한 140, 160, 및 190℃ 실험

중합 실행 번호	[Ti] (μM)	에틸렌 전환 (Q %)	k_p ($mM^{-1} \cdot min^{-1}$)	FTIR BrF (수/1000C)	FTIR BrF (Wt%)	GPC-RI M_n	GPC-RI M_w	GPC-RI M_z	GPC-RI M_w/M_n	GPC-IR4 M_w
1	4.07	90.31	879	10.3	7.8	38,268	69,476	114,276	1.82	-
2	4.07	89.33	791	17.6	12.7	29,633	52,924	82,602	1.79	-
3	4.44	89.22	716	27.0	18.6	23,173	42,525	68,416	1.84	-
4	6.67	90.62	557	17.5	12.6	19,976	36,126	55,617	1.81	-
5	7.41	90.61	501	0.8	0.6	26,298	49,164	79,836	1.87	-
6	8.89	89.85	383	8.3	6.3	19,470	33,730	51,175	1.73	-
7	8.89	89.12	354	15.0	11.0	14,529	26,832	41,239	1.85	-
8	11.11	89.70	301	24.2	16.9	10,544	20,733	33,250	1.97	-
9	8.89	30.45	19	샘플 없음	-	-	-	-	-	-
10	0.18	89.21	17,886	35.1	23.2	136,224	303,701	564,532	2.23	316,000
11	0.31	89.52	10,559	8.0	6.1	123,832	290,362	611,997	2.34	333,000
12	0.28	89.17	11,400	14.9	10.9	115,519	238,214	446,766	2.06	288,000
13	0.29	89.70	11,594	25.5	17.7	110,550	209,758	374,455	1.90	251,000
14	0.32	90.18	10,898	16.1	11.7	126,990	267,426	531,410	2.11	-
15	0.32	89.29	9,894	25.3	17.6	104,388	221,070	419,373	2.12	-
16	0.42	90.32	8,612	34.0	22.6	94,507	182,307	311,544	1.93	-
17	0.66	90.10	5,325	8.1	6.2	99,107	184,459	315,611	1.86	-
18	0.51	89.43	6,389	14.8	10.9	76,880	159,486	284,784	2.07	-
19	0.56	90.54	6,626	24.7	17.2	64,104	124,082	212,169	1.94	-
20	0.65	90.23	5,480	15.2	11.1	68,852	153,387	271,846	2.23	-
21	1.02	90.25	3,495	15.2	11.1	79,285	150,606	252,230	1.90	-
22	2.78	89.94	1,237	14.7	10.8	84,298	167,656	287,725	1.99	-
23	2.22	90.45	1,639	15.3	11.2	68,078	149,419	254,143	2.19	-
24	2.78	90.39	1,302	14.4	10.6	72,998	154,252	289,841	2.11	-
25	3.89	90.66	960	16.5	12.0	142,292	286,569	563,942	2.01	-
26	3.78	89.84	900	16.1	11.8	80,504	172,886	348,126	2.15	-
27	8.15	89.70	411	4.5	3.5	65,711	113,092	173,113	1.72	-
28	11.85	90.70	316	9.7	7.3	50,143	86,725	131,790	1.73	-
29	11.85	90.20	299	13.4	9.9	42,633	73,807	113,606	1.73	-
30	25.19	89.50	131	8.0	6.1	45,942	82,671	129,269	1.80	-
31	14.81	79.06	98	샘플 없음						
32	12.96	60.82	46	샘플 없음	-	-	-	-	-	-
33	12.96	56.00	38	샘플 없음	-	-	-	-	-	-
34	11.11	37.00	20	샘플 없음	-	-	-	-	-	-

[2828]

[2829] 1,2-페닐렌을 통해 2-인데닐 모이어티에 연결된 복합체 1에서 유래된 촉매는 P-페닐과 인데닐 모이어티를 통해 연결되지 않은 비가교된 복합체 15에서 유래된 촉매보다 더 높은 공중합 활성 및 더 높은 1-옥텐 공단량체 혼입 효율을 가졌다(중합 실행 1 내지 3을 각각 실행 27 내지 29와 비교하고, 그리고 실행 4를 실행 30과 비교함). 복합체 1에서 유래된 촉매도 190℃에서 활성이며 90% 에틸렌 전환 목표를 달성할 수 있으며(중합 실행 5 내지 8 참조), 반면 복합체 15에서 유래된 촉매는 190℃에서 훨씬 덜 활성이었고 높은 촉매 농도에서조차 전환 목표를 달성할 수 없었다(중합 실행 5와 실행 31 비교). 비가교된 복합체 15에서 유래된 촉매에 대해 가장 높은 활성을 야기한 Al/Ti 비율은 Al/Ti = 80인 것으로 밝혀졌으며, 이는 복합체 1, 3, 5, 7 및 9에서 유래된 것과 같이 본 개시내용의 다른 촉매에 대해 발견된 최적의 Al/Ti 비율보다 높은 것이었다.

[2830] 복합체 1에서 유래된 촉매 조성물은 방해된 페놀 개질제 BHEB가 제거된 경우에는 만족스럽지 않았다(중합 실행 9와 실행 8 비교). 이론으로 얽매려는 것은 아니지만, 복합체 1의 2-인데닐 치환체는 활성 부위에 충분한 입체 보호를 제공하지 못하여 촉매가 비개질된 MMAO-7의 루이스 산성 종에 의한 공격을 받기 쉽게 만들어 촉매 비활성화를 야기할 것으로 추측된다. 이러한 결함은 입체적으로 더 벌키한 η-배위된 사이클로펜타디에닐 치환체를 갖고 다양한 알루미늄계 공촉매에 대한 강건성을 나타내는 복합체 3, 5, 7 및 9와 같은 다른 복합체의 설계에서 해결된다.

[2831] 염화물 활성화 가능한 리간드를 보유하는 복합체 1 및 복합체 15는 활성 촉매 조성물을 형성하기 위해 알킬알루미녹산 공촉매를 필요로 했지만, 디메틸 활성화 가능한 리간드를 갖는 복합체 3은 알킬알루미녹산 공촉매(또는

다른 수분 스캐빈징 화합물) 없이 실행될 수 있으며 놀랍게도 매우 높은 활성을 달성한다(예를 들어, 중합 실행 10을 실행 1 내지 3과 비교하고; 실행 11 내지 13을 실행 4와 비교하고, 실행 21을 실행 7과 비교 시). 알루미늄계 공촉매(스캐빈저) 없이 실행되었음에도 불구하고, 실행 10 내지 13 및 실행 21로부터의 공중합체의 다분산도(M_w/M_n)는 ~2이며, 이는 촉매가 불순물에 대해 강건하고 단일 부위 촉매처럼 거동함을 시사한다. 그럼에도 불구하고 복합체 3은 알킬알루미녹산 공촉매와 호환 가능한데, 이는 상업용 중합 반응기의 반응기 공급물에는 다양한 수준의 불순물이 함유될 수 있으므로 상업적 응용예에 바람직하다(예를 들어, 중합 실행 14와 실행 12 비교).

[2832] 놀랍게도, 복합체 3에서 유래된 촉매는 TB와 같은 붕소계 활성화제로 활성화되고, 선택적으로 MMAO-7과 같은 알루미늄계 공촉매 및 선택적으로 BHEB와 같은 방해된 페놀 개질제의 존재 하에 높은 활성, 높은 1-옥텐 혼입 및 높은 공중합체 분자량을 제공할 수 있다(중합 실행 10~21을 표의 다른 실행과 비교 시). 관련 기술분야의 기술자는 고온에서 높은 효율로 고분자량 공중합체를 생산하는 촉매로서 복합체 3을 사용할 수 있는 잠재력을 인식할 것이다. 복합체 3에서 유래된 촉매는 BHEB 또는 MMAO-7과 BHEB가 모두 없는 경우에도 190℃에서 높은 활성, 고분자량 역량 및 좁은 다분산성(단일 부위 거동을 나타냄)을 유지하지만(중합 실행 20 및 21을 실행 18과 비교 시), 가장 높은 활성은 4가지 촉매 성분 모두에 의해 수득된다(실행 18 참조). 또한, 복합체 3에서 유래된 촉매 조성물에 대해 최대 중합 활성을 달성하는 데에는 비교적 낮은 Al/Ti 비율(예: Al/Ti = 5)이 필요한 것으로 밝혀졌다(예: 중합 실행 14 내지 19 참조).

[2833] 포스핀이민 P 원자에 서로 다른 알킬 치환(예: 사이클로헥실)을 갖는 예비중합 촉매 복합체(복합체 5, 실행 22) 또는 인데노[1,2-*b*]인돌릴 모이어티와 같은 서로 다른 η-배위된 사이클로펜타디에닐 유형 리간드를 갖는 예비중합 촉매 복합체(복합체 7, 실행 23), 또는 포스핀이민 P 원자와 η-배위된 플루오레닐 리간드 사이에 3원자 가교를 갖는 예비중합 촉매 복합체(복합체 9, 실행 24)도 고온(190℃)에서 높은 활성과 높은 공중합체 분자량 역량을 갖는 촉매를 야기한다.

[2834] 리간드 전구체가 포스핀이민 N만을 통해 $TiCl_3$에 결합된 복합체 10은 놀랍게도 TB, MMAO-7 및 BHEB로 활성화될 때 활성 촉매를 야기하고(중합 실행 25 및 26 참조), 복합체 3에서 유래된 촉매와 유사한 1-옥텐 공단량체 혼입 및 공중합체 MW 역량을 갖는다(실행 25를 실행 12 및 14와 비교하고 실행 26을 실행 18과 비교 시). 이론으로 얽매려는 것은 아니지만, 상기 관찰은 복합체 10에서 유래된 촉매가 활성 촉매 종을 형성하기 전에 동일계에서 발생되어야 하는 추가 단계(예: Ti에서의 알킬화 및 η-배위된 플루오레닐을 형성하기 위한 알칸 제거)로 인해 활성이 더 낮을지라도, 복합체 10 및 복합체 3에서 유래된 촉매는 TB, MMAO-7 및 BHEB로 활성화되었을 때 반응기에서 유사한 활성 종을 야기한다는 것을 강력하게 시사한다.

[2835] 복합체 1과 비교하여 복합체 15에 대해 상기에서 논의된 바와 같이, 가교된 복합체의 해당 구조 모이어티와 유사한 포스핀이민 및 η-배위된 보조 리간드를 보유하는 비가교 복합체는 성능이 떨어지는 촉매를 야기한다. 예를 들어, 연결 또는 가교되지 않은 포스핀이민과 플루오레닐 보조 리간드를 갖는 복합체 17에서 유래된 촉매는 관련 있는 가교된 포스핀이민/플루오레닐 시스템 복합체 3과 유사한 방식으로 활성화된 경우 반응기 내 높은 촉매 농도에서조차, 140, 160 또는 190℃에서 90% 에틸렌 전환 목표에 도달할 수 없었다(중합 실행 32~34 참조).

[2836] 복합체 3(즉, 디이소프로필페닐포스핀이민과 η-배위된 2,7-디-*tert*-부틸플루오레닐 보조 리간드를 갖는)과 같은 리간드 단편을 갖는 비가교 복합체를 합성하려는 시도는 성공하지 못했다. 이 관찰은 다양한 서로 다른 가교된 포스핀이민/η-배위된 사이클로펜타디에닐 복합체가 합성될 수 있게 하는 가교된 리간드 설계의 또 다른 이점을 강조한다.

표 7

표 7

연속 에틸렌/1-옥텐 공중합 조건 - Ti계 촉매를 사용한 200 내지 240℃ 실험

중합 실행 번호	촉매 복합체 번호	붕산염 첨가 방법	알루미늄 첨가 방법	반응기 온도 (°C)	에틸렌 흐름 (g/min)	B / Ti (몰비)	Al / Ti (몰비)	BHEB / Al (몰비)	1-옥텐 / 에틸렌 비 (wt/wt)
35	복합체 3	직렬로	반응기 내	200	3.80	1.4	5.0	0.6	0.30
36	복합체 3	직렬로	반응기 내	210	4.10	1.4	5.1	0.6	0.30
37	복합체 3	직렬로	반응기 내	220	4.48	1.4	5.0	0.6	0
38	복합체 3	직렬로	반응기 내	220	4.48	1.4	5.0	0.6	0.30
39	복합체 3	직렬로	반응기 내	220	4.48	1.4	5.0	-	0.30
40	복합체 3	직렬로	-	220	4.48	1.4	-	-	0.30
41	복합체 3	직렬로	-	220	4.48	1.0	-	-	0
42	복합체 3	직렬로	-	220	4.48	1.0	-	-	0.15
43	복합체 3	직렬로	-	220	4.48	1.0	-	-	0.30
44	복합체 3	직렬로	-	220	4.48	1.0	-	-	0.50
45	복합체 3	직렬로	-	220	4.48	1.0	-	-	0.30
46	복합체 3	직렬로	-	220	4.48	1.0	-	-	0.30
47	복합체 3	직렬로	-	230	4.77	1.0	-	-	0.30
48	복합체 3	직렬로	-	230	4.77	1.0	-	-	0
49	복합체 3	직렬로	-	240	4.93	1.0	-	-	0.30
50	복합체 3	직렬로	-	240	4.93	1.0	-	-	0
51	복합체 5	직렬로	반응기 내	220	4.48	1.2	5.0	0.3	0.30
52	복합체 5	직렬로	반응기 내	220	4.48	1.2	5.0	-	0.30
53	복합체 5	직렬로	반응기 내	230	4.77	1.2	5.0	0.3	0.30
54	복합체 5	직렬로	반응기 내	240	4.93	1.2	5.0	0.3	0.30
55	복합체 7	직렬로	반응기 내	220	4.48	1.8	5.0	0.3	0.30
56	복합체 7	직렬로	반응기 내	220	4.48	1.8	5.0	-	0.30
57	복합체 7	직렬로	반응기 내	230	4.77	1.4	10.0	0.6	0.30
58	복합체 7	직렬로	반응기 내	240	4.93	1.4	10.0	0.6	0.30
59	복합체 9	직렬로	반응기 내	220	4.48	2.2	2.5	0.3	0.30
60	복합체 9	직렬로	반응기 내	220	4.48	2.2	2.5	-	0.30
61	복합체 9	직렬로	반응기 내	230	4.77	1.4	10.0	0.6	0.30
62	복합체 9	직렬로	반응기 내	240	4.93	1.4	10.0	0.6	0.30
63	복합체 10	반응기 내	직렬로	220	4.30	1.2	15.0	0.7	0.30
64	복합체 10	직렬로	직렬로	220	4.30	1.8	30.0	0.7	0.30

[2837]

표 8

표 8

연속 에틸렌/1-옥텐 공중합 결과 - Ti 계 촉매를 사용한 200 내지 240℃ 실험

중합 실행 번호	[Ti] (μM)	에틸렌 전환 (Q %)	k_p ($mM^{-1} \cdot min^{-1}$)	FTIR BrF (수 /1000C)	FTIR BrF (Wt%)	GPC-RI M_n	GPC-RI M_w	GPC-RI M_z	GPC-RI M_w/M_n	GPC-IR4 M_w
35	0.69	89.85	4,903	14.9	10.9	73,109	133,680	221,215	1.83	-
36	1.17	90.66	3,200	16.0	11.7	54,527	106,641	180,321	1.96	-
37	4.44	89.65	750	2.3	1.8	76,284	160,031	293,188	2.10	-
38	1.89	90.81	2,012	16.0	11.7	46,188	88,020	142,871	1.91	-
39	2.04	90.26	1,750	16.2	11.8	44,281	88,871	148,780	2.01	-
40	2.85	90.66	1,309	16.3	11.8	43,818	86,090	145,237	1.96	-
41	5.56	89.18	570	2.3	1.8	38,006	105,012	234,875	2.76	158,000
42	2.78	90.34	1,295	9.3	7.0	51,366	108,284	188,105	2.11	111,000
43	2.78	90.70	1,350	16.2	11.8	43,994	85,585	148,703	1.95	84,100
44	2.78	90.70	1,350	25.0	17.4	34,655	66,799	111,078	1.93	66,800
45	1.11	79.55	1,346	11.4	8.6	73,652	138,068	231,322	1.87	138,000
46	0.94	69.70	936	9.2	6.9	90,676	177,129	313,907	1.95	181,000
47	5.00	90.29	715	17.1	12.4	33,578	65,042	106,555	1.94	64,200
48	13.89	91.00	280	3.3	2.6	65,538	124,396	210,403	1.90	126,000
49	8.89	89.40	365	16.7	12.1	29,216	56,004	91,070	1.92	55,500
50	16.67	89.75	202	3.7	2.9	57,867	114,256	204,789	1.97	111,000
51	4.81	90.31	745	16.4	11.9	46,915	88,416	144,394	1.88	-
52	7.22	90.42	503	16.5	12.0	48,235	90,659	149,739	1.88	-
53	7.59	90.37	476	16.6	12.1	35,017	66,985	106,864	1.91	-
54	9.81	89.68	341	16.2	11.8	30,019	57,695	93,065	1.92	-
55	3.91	89.95	880	15.4	11.3	32,270	84,625	145,511	2.62	-
56	3.47	89.83	980	15.3	11.2	35,795	86,120	147,141	2.41	-
57	9.11	90.35	395	15.7	11.5	32,637	70,500	116,013	2.16	-
58	10.44	90.22	340	15.3	11.2	26,345	59,060	96,942	2.24	-
59	8.56	90.17	413	13.8	10.2	38,371	83,499	139,460	2.18	-
60	8.56	90.50	428	14.1	10.4	36,763	83,420	141,385	2.27	-
61	17.22	89.73	195	15.1	11.1	33,714	70,400	115,213	2.09	-
62	29.44	90.18	120	15.9	11.6	25,836	55,090	91,797	2.13	-
63	6.22	89.10	506	15.4	11.3	40,173	86,095	149,625	2.14	-
64	2.37	90.08	1,478	n.d.	-	-	-	-	-	-

[2838]

[2839] 200 내지 최대 240℃ 범위의 반응기 온도에서 복합체 3, 5, 7 및 9에서 유래된 촉매는 TB와 같은 붕소계 활성화제로 활성화되는 경우, 그리고 선택적으로 MMAO-7과 같은 알루미늄계 공촉매, 및 선택적으로 BHEB와 같은 방해된 페놀 개질제의 존재 하에, 중간 내지 높은 활성, 높은 1-옥텐 혼입 및 높은 공중합체 분자량을 제공할 수 있다(중합 실행 35 내지 62 참조). 놀랍게도, 복합체 3, 5, 7 및 9에서 유래된 촉매는 유용한 성능 속성(예: 높은 (공)중합체 분자량 역량과 함께 높은 1-옥텐 혼입 효율) 및 단일 부위 거동(즉, 대부분의 경우 M_w/M_n ~2 및 모든 경우 M_w/M_n <3의 좁은 다분산도를 갖는 중합체 생성)을 적어도 240℃ 이하에서(중합 실행 49, 54, 58 및 62 참조), 심지어 MMAO 및/또는 BHEB가 없는 경우(예를 들어, 중합 실행 49 및 50 참조)에도 유지한다.

[2840] 복합체 3에서 유래된 촉매를 사용한 중합 실행 45 및 46은 각각 80% 및 70%의 에틸렌 전환(Q) 목표로 실행되었고, 1-옥텐 공단량체 혼입 및 공중합체 분자량을 조절하기 위한 목적으로 에틸렌 농도 변동에 대한 촉매의 반응성을 보여준다(실행 45 및 46을 Q = 90%인 실행 43과 비교 시).

[2841] 더 낮은 온도에서의 관찰과 유사하게, 220℃의 반응기 온도에서 포스핀이민- 배위된 복합체 10에서 유래된 촉매는 복합체 3에서 유래된 촉매와 유사한 1-옥텐 혼입 및 공중합체 분자량을 갖는 공중합체를 생성하여, 반응기에서 유사한 촉매 종을 생성한다는 것을 강력하게 시사한다(중합 실행 63을 실행 38과 비교 시). 더욱이, 복합체 10에서 유래된 촉매의 활성은 촉매 비율을 변경하고 촉매 성분의 첨가 순서를 변경함으로써 유의미하게 개선되었다(실행 64를 실행 63과 비교 시).

[2842] 일반적으로, 반응 온도가 높을수록 촉매 비활성화 속도가 더 높아져 촉매 활성이 감소한다. 그러나, 에너지 절감을 야기하기 때문에 반응 온도가 높을수록 바람직할 수 있다. 예를 들어, 반응 온도가 높을수록 하류 증류 단계에서 용액을 가열하는 데 필요한 에너지 투입을 감소시킨다. 이와 관련하여, 복합체 3, 5, 7, 9 및 10에서 유래된 촉매는 놀라운 고온 성능을 제공한다. 예를 들어, 복합체 3에서 유래된 촉매는 190℃를 초과하는 온도에서

높은 중합 활성, 높은 공단량체 혼입 및 높은 분자량을 제공한다. 또한, 이 실시예는 복합체 3이 알킬알루미녹산 공촉매의 존재 또는 부재 하에서 성능이 우수하고, 존재 시, 방해된 페놀 개질제의 부재 하에서도 활성을 유지하는 잠재력이 있음을 보여준다.

표 9

표 9

연속 에틸렌/1-옥텐 공중합 조건 - 복합체 3 을 사용한 220℃ 실험

중합체 실행 번호	붕산염 활성화제	알루미늄 공촉매	B / Ti (몰비)	Al / Ti (몰비)	BHEB / Al (몰비)
65	TB	TEAL	1.4	5.0	0.3
66	TB	TEAL	1.4	5.0	-
66	TB	TIBAL	1.4	5.0	0.3
67	TB	TIBAL	1.4	5.0	-
38 (표 7)	TB	MMAO	1.4	5.0	0.6
39 (표 7)	TB	MMAO	1.4	5.0	-
68	TB	DEAL-E	1.4	10.0	0.3
69	TB	DEAL-E	1.4	10.0	-
70	AB	MMAO	1.8	5.0	0.3
71	AB	MMAO	1.8	5.0	-
72	AB	DEAL-E	1.8	20.0	0.3
73	AB	DEAL-E	1.8	20.0	-

[2843]

표 10

표 10

연속 에틸렌/1-옥텐 공중합 결과 - 복합체 3 을 사용한 220℃ 실험

중합 실행 번호	[Ti] (μM)	에틸렌 전환 (Q %)	k_p ($mM^{-1}\cdot min^{-1}$)	FTIR BrF (수 /1000C)	FTIR BrF (Wt%)	GPC-RI M_n	GPC-RI M_w	GPC-RI M_z	GPC-RI M_w/M_n
64	5.56	90.22	638	17.6	12.7	44,298	88,286	143,009	1.99
65	8.89	90.43	409	16.6	12.1	48,002	90,198	143,542	1.88
66	4.86	89.87	702	15.7	11.5	54,477	96,945	155,065	1.78
67	6.67	90.30	537	16.2	11.8	43,911	92,627	158,276	2.11
38 (표 8)	1.89	90.81	2,012	16.0	11.7	46,188	88,020	142,871	1.91
39 (표 8)	2.04	90.26	1,750	16.2	11.8	44,281	88,871	148,780	2.01
68	2.28	90.10	1,537	15.3	11.2	46,313	94,065	163,293	2.03
69	2.36	90.29	1,515	15.6	11.4	43,161	89,204	154,083	2.07
70	1.89	90.20	1,874	15.7	11.5	40,992	87,428	145,977	2.13
71	1.89	90.18	1,870	15.7	11.5	48,826	92,529	153,824	1.90
72	1.81	89.81	1,878	15.4	11.3	53,455	107,226	180,456	2.01
73	1.81	90.06	1,930	15.6	11.4	51,768	105,002	179,728	2.03

[2844]

[2845] 복합체 3은 트리틸(TB) 또는 암모늄(AB) 붕산염 활성화제로, 그리고 다양한 알루미늄계 공촉매 및 선택적으로 방해된 페놀 BHEB의 존재 하에 활성화되어, 높은 반응기 온도(220℃)에서 단일 부위 거동(좁은 다분산성)을 유지하면서 유사한 성능의 촉매(1-옥텐 혼입 및 MW 성능)를 생성할 수 있다. 가장 높은 활성은 MMAO 또는 DEAL-E 스캐빈저 및 선택적으로 BHEB와 함께 TB 또는 AB 활성화제를 사용하여 수득되었다(중합 실행 38 및 39와 실행 68 내지 73 참조).

표 11

표 11

연속 에틸렌/1-옥텐 공중합 조건 - Hf계 촉매를 사용한 140, 160, 및 190℃ 실험

중합 실행 번호	촉매 복합체 번호	반응기 온도 (°C)	에틸렌 흐름 (g/min)	B / Hf (몰비)	Al / Hf (몰비)	BHEB / Al (몰비)	1-옥텐 / 에틸렌 비 (wt/wt)
74	복합체 12	140	2.10	0.8	-	-	0
75	복합체 12	140	2.10	0.8	-	-	0.30
76	복합체 12	140	2.10	1.4	-	-	0.30
77	복합체 12	140	2.10	1.4	20.0	0.6	0.30
78	복합체 12	160	2.70	0.8	-	-	0
79	복합체 12	160	2.70	0.8	-	-	0.30
80	복합체 12	160	2.70	0.8	20.0	0.6	0.30
81	복합체 12	190	3.50	1.4	-	-	0
82	복합체 12	190	3.50	1.4	-	-	0.30
83	복합체 14	160	2.70	1.6	-	-	0
84	복합체 14	160	2.70	1.6	-	-	0.30
85	복합체 14	190	3.50	1.4	-	-	0
86	복합체 14	190	3.50	1.4	-	-	0.30

[2846]

표 12

표 12

연속 에틸렌/1-옥텐 공중합 결과 - Hf계 촉매를 사용한 140, 160, 및 190℃ 실험

중합 실행 번호	[Ti] (μM)	에틸렌 전환 (Q %)	k_p ($mM^{-1}\cdot min^{-1}$)	FTIR BrF (수 /1000C)	FTIR BrF (Wt%)	GPC-RI M_n	GPC-RI M_w	GPC-RI M_z	GPC-RI M_w/M_n
74	1.67	89.87	2,047	-	-	2,456	5,908	9,833	2.41
75	2.33	90.10	1,500	-	-	1,412	3,269	5,404	2.32
76	12.96	96.23	758	샘플 없음	-	-	-	-	-
77	12.96	30.96	13	샘플 없음	-	-	-	-	-
78	1.56	90.38	2,323	-	-	2,709	6,552	11,473	2.42
79	2.04	90.80	1,864	24.8	17.3	1,597	3,550	5,944	2.22
80	12.96	27.12	11	샘플 없음	-	-	-	-	-
81	2.48	89.76	1,359	-	-	3,211	6,335	10,273	1.97
82	3.15	90.34	1,143	27.6	18.9	814	1,917	3,926	2.36
83	0.63	90.38	5,738	-	-	2,925	7,001	11,750	2.39
84	0.96	90.73	3,909	22.5	15.8	2,322	4,353	6,638	1.87
85	0.87	90.20	4,067	-	-	919	3,936	10,459	4.28
86	1.15	90.13	3,059	23.7	16.6	1,379	3,425	6,333	2.48

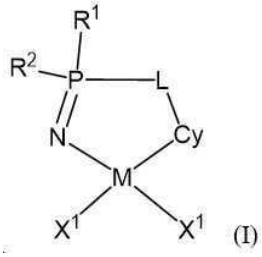
[2847]

[2848] 하프늄계 복합체 12 및 14와 붕소계 활성화제 TB에서 유래된 촉매는 적어도 190℃ 이하의 반응기 온도에서 에틸렌 단일중합 또는 에틸렌/1-옥텐 공중합에 대한 중간 내지 높은 활성을 갖는다. Ti계 복합체 3, 5, 7 및 9에서 유래된 촉매 조성물과 달리, 복합체 12 및 14에서 유래된 촉매 조성물은 MMAO/BHEB 공촉매의 존재에 민감하고 강력하게 비활성화된다(중합 실행 77을 실행 76과 비교하고 실행 80을 실행 79와 비교 시).

[2849] 하프늄계 복합체 12 및 14에서 유래된 촉매는 1-옥텐 함량이 높은 저분자량 단일중합체 또는 공중합체를 생성한다. 저분자량 폴리에틸렌 생성물은, 예를 들어 플라스틱용 안료 분산제 및 성형 공정 또는 핫멜트 접착제용 첨가제로서 상업적 응용 가능성이 있다.

[2850] 본 개시내용의 비제한적 실시양태는 다음을 포함한다:

[2851] 실시양태 1. 화학식 I로 표현되는 유기금속 복합체:

[2852] 

(I)

[2853] 여기서,

[2854] M은 Ti, Zr 또는 Hf이고;

[2855] R^1 및 R^2는 각각 독립적으로 수소 및 R^X로 이루어진 군 중에서 선택되거나; 또는 R^1 및 R^2는 이들이 부착된 P 원자와 함께, 비치환되거나, 또는 할로겐 원자, C_{1-20} 알킬 기, C_{1-20} 알콕시 기, C_{7-20} 알킬아릴 기, C_{7-20} 아릴알킬 기, C_{6-20} 아릴 기, C_{6-20} 아릴옥시 기, C_{7-20} 알킬아릴옥시 기, 및 C_{7-20} 아릴알킬옥시 기로 이루어진 군 중에서 선택되는 하나 이상의 치환체에 의해 추가로 치환되는 3-10원 헤테로환형 기를 형성하며;

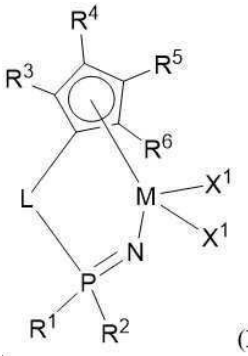
[2856] 각 R^X는 할로겐 원자; 하이드로카르빌 기가 비치환되거나, 또는 하나 이상의 할로겐 원자, C_{1-20} 알킬 기, C_{1-20} 알콕시 기, C_{7-20} 알킬아릴 기, C_{7-20} 아릴알킬 기, C_{6-20} 아릴 기, C_{6-20} 아릴옥시 기, C_{7-20} 알킬아릴옥시 기, 및/또는 C_{7-20} 아릴알킬옥시 기에 의해 추가로 치환되는 C_{1-30} 하이드로카르빌 기; 화학식 $-NR'_2$의 아미도 기; 화학식 $-Si(R^a)_3$의 실릴 기; 화학식 $-Ge(R^a)_3$의 게르마닐 기; 및 화학식 $-N=P(R^b)(R^c)(R^d)$의 포스핀이민 기로 이루어진 군 중에서 독립적으로 선택되고; 여기서 각 R'는 수소, C_{1-20} 알킬 기, 및 C_{6-20} 아릴 기로 이루어지는 군 중에서 독립적으로 선택되고; 각 R^a는 수소, C_{1-8} 알킬 기, C_{1-8} 알콕시 기, C_{6-20} 아릴옥시 기 및 C_{6-20} 아릴 기로 이루어진 군 중에서 독립적으로 선택되고; R^b, R^c, R^d는 각각 독립적으로 C_{1-20} 알킬 기이며;

[2857] 각 X^1은 활성화 가능한 리간드이고;

[2858] Cy는 L에 공유 결합되고 η-결합을 통해 M에 배위된 사이클로펜타디에닐형 리간드이고; 그리고

[2859] L은 Cy와 P를 연결하는 원자의 근접한 사슬을 함유하는 가교 기로서, 여기서 근접한 사슬은 2개 또는 3개의 원자를 함유한다.

[2860] 실시양태 2. 실시양태 1에 있어서, 화학식 II로 표현되는 유기금속 복합체:

[2861] 

(II)

[2862] 여기서, M, R^1, R^2, L 및 X^1은 화학식 I에서 정의된 바와 같고;

[2863] R^3, R^4, R^5 및 R^6은 각각 독립적으로 다음으로 이루어진 군 중에서 선택되고:

[2864] 할로겐;

[2865] 수소;

[2866] C_{1-30} 하이드로카르빌 기로서, 여기서 하이드로카르빌 기는 비치환되거나, 또는 할로겐 원자, C_{1-20} 알킬 기, C_{1-20} 알콕시 기, C_{7-20} 알킬아릴 기, C_{7-20} 아릴알킬 기, C_{6-20} 아릴 기, C_{6-20} 아릴옥시 기, C_{7-20} 알킬아릴옥시 기, 및 C_{7-20} 아릴알킬옥시 기로 이루어지는 군 중에서 선택되는 하나 이상의 치환체에 의해 추가로 치환되는 C_{1-30} 하이드로카르빌 기;

[2867] 헤테로원자 함유 C_{1-30} 하이드로카르빌 기로서, 여기서 헤테로원자 함유 하이드로카르빌 기는 비치환되거나, 또는 할로겐 원자, C_{1-20} 알킬 기, C_{1-20} 알콕시 기, C_{7-20} 알킬아릴 기, C_{7-20} 아릴알킬 기, C_{6-20} 아릴 기, C_{6-20} 아릴옥시 기, C_{7-20} 알킬아릴옥시 기, 및 C_{7-20} 아릴알킬옥시 기로 이루어지는 군 중에서 선택되는 하나 이상의 치환체에 의해 추가로 치환되는 헤테로원자 함유 C_{1-30} 하이드로카르빌 기;

[2868] 옥시 기, -OR';

[2869] 아미도 기, $-NR'_2$;

[2870] 포스피도 기, $-PR'_2$;

[2871] 티올레이트 기, -SR';

[2872] 화학식 $-Si(R^a)_3$의 실릴 기; 및

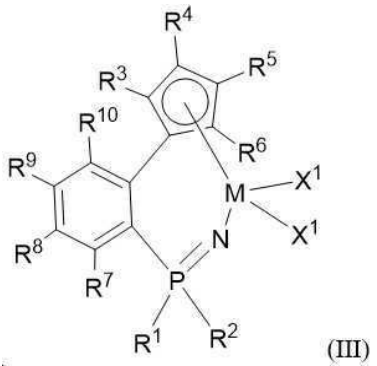
[2873] 화학식 $-Ge(R^a)_3$의 게르마닐 기;

[2874] 여기서, R^3, R^4, R^5 및 R^6 중 2개의 인접한 기는 선택적으로 결합되어 환형 하이드로카르빌 기 또는 환형 헤테로원자 함유 하이드로카르빌 기를 형성할 수 있고, 이 환형 하이드로카르빌 기 또는 환형 헤테로원자 함유 하이드로카르빌 기는 비치환되거나, 또는 할로겐 원자, C_{1-20} 알킬 기, C_{1-20} 알콕시 기, C_{7-20} 알킬아릴 기, C_{7-20} 아릴알킬 기, C_{6-20} 아릴 기, C_{6-20} 아릴옥시 기, C_{7-20} 알킬아릴옥시 기, C_{7-20} 아릴알킬옥시 기, 화학식 $-NR'_2$의 아미도 기, 화학식 $-PR'_2$의 포스피도 기, 화학식 -SR'의 티올레이트 기, 화학식 $-Si(R^a)_3$의 실릴 기, 및 화학식 $-Ge(R^a)_3$의 게르마닐 기로 이루어지는 군 중에서 선택되는 하나 이상의 치환체에 의해 추가로 치환되고;

[2875] 여기서 각 R'는 수소, C_{1-20} 알킬 기, 및 C_{6-20} 아릴 기로 이루어지는 군 중에서 독립적으로 선택되고;

[2876] 여기서 각 R^a는 수소, C_{1-8} 알킬 기, C_{1-8} 알콕시 기, C_{6-20} 아릴옥시 기 및 C_{6-20} 아릴 기로 이루어지는 군 중에서 독립적으로 선택된다.

[2877] 실시양태 3. 실시양태 2에 있어서, 화학식 III으로 표현되는 유기금속 복합체:

[2878] 

(III)

[2879] 여기서, M, R^1, R^2, R^3, R^4, R^5, R^6 및 X^1은 화학식 I 및 II에서 정의된 바와 같고;

[2880] 여기서, R^7, R^8, R^9, 및 R^{10}은 각각 독립적으로 다음으로 이루어진 군 중에서 선택되고:

[2881] 할로겐;

[2882] 수소;

[2883] C_{1-30} 하이드로카르빌 기로서, 여기서 하이드로카르빌 기는 비치환되거나, 또는 할로겐 원자, C_{1-20} 알킬 기, C_{1-20} 알콕시 기, C_{7-20} 알킬아릴 기, C_{7-20} 아릴알킬 기, C_{6-20} 아릴 기, C_{6-20} 아릴옥시 기, C_{7-20} 알킬아릴옥시 기, 및 C_{7-20} 아릴알킬옥시 기로 이루어지는 군 중에서 선택되는 하나 이상의 치환체에 의해 추가로 치환되는 C_{1-30} 하이드로카르빌 기;

[2884] 헤테로원자 함유 C_{1-30} 하이드로카르빌 기로서, 여기서 헤테로원자 함유 하이드로카르빌 기는 비치환되거나, 또는 할로겐 원자, C_{1-20} 알킬 기, C_{1-20} 알콕시 기, C_{7-20} 알킬아릴 기, C_{7-20} 아릴알킬 기, C_{6-20} 아릴 기, C_{6-20} 아릴옥시 기, C_{7-20} 알킬아릴옥시 기, 및 C_{7-20} 아릴알킬옥시 기로 이루어지는 군 중에서 선택되는 하나 이상의 치환체에 의해 추가로 치환되는 헤테로원자 함유 C_{1-30} 하이드로카르빌 기;

[2885] 옥시 기, -OR';

[2886] 아미도 기, $-NR'_2$;

[2887] 포스피도 기, $-PR'_2$;

[2888] 티올레이트 기, -SR';

[2889] 화학식 $-Si(R^a)_3$의 실릴 기; 및

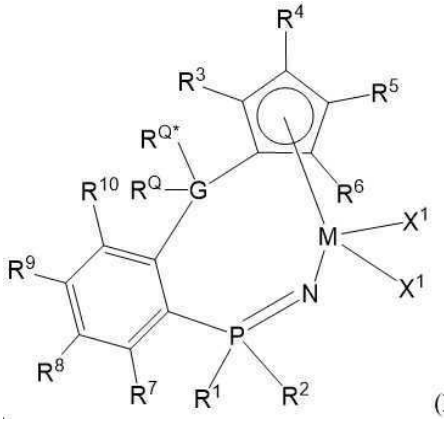
[2890] 화학식 $-Ge(R^a)_3$의 게르마닐 기;

[2891] 여기서, R^7, R^8, R^9, 및 R^{10} 중 2개의 인접한 기는 선택적으로 결합되어 환형 하이드로카르빌 기 또는 환형 헤테로원자 함유 하이드로카르빌 기를 형성할 수 있고, 이 환형 하이드로카르빌 기 또는 환형 헤테로원자 함유 하이드로카르빌 기는 비치환되거나, 또는 할로겐 원자, C_{1-20} 알킬 기, C_{1-20} 알콕시 기, C_{7-20} 알킬아릴 기, C_{7-20} 아릴알킬 기, C_{6-20} 아릴 기, C_{6-20} 아릴옥시 기, C_{7-20} 알킬아릴옥시 기, C_{7-20} 아릴알킬옥시 기, 화학식 $-NR'_2$의 아미도 기, 화학식 $-PR'_2$의 포스피도 기, 화학식 -SR'의 티올레이트 기, 화학식 $-Si(R^a)_3$의 실릴 기, 및 화학식 $-Ge(R^a)_3$의 게르마닐 기로 이루어지는 군 중에서 선택되는 하나 이상의 치환체에 의해 추가로 치환되고;

[2892] 여기서 각 R'는 수소, C_{1-20} 알킬 기, 및 C_{6-20} 아릴 기로 이루어지는 군 중에서 독립적으로 선택되고;

[2893] 여기서 각 R^a는 수소, C_{1-8} 알킬 기, C_{1-8} 알콕시 기, C_{6-20} 아릴옥시 기 및 C_{6-20} 아릴 기로 이루어지는 군 중에서 독립적으로 선택된다.

[2894] 실시양태 4. 실시양태 2에 있어서, 화학식 IV로 표현되는 유기금속 복합체:

[2895] 

(IV)

[2896] 여기서, M, R^1, R^2, R^3, R^4, R^5, R^6 및 X^1은 화학식 I 및 II에서 정의된 바와 같고;

[2897] 여기서, G는 C 또는 Si이고;

[2898] 여기서, R^Q 및 R^{Q*}는 각각 독립적으로 다음으로 이루어진 군 중에서 선택되며:

[2899] 할로겐;

[2900] 수소;

[2901] C_{1-30} 하이드로카르빌 기로서, 여기서 하이드로카르빌 기는 비치환되거나, 또는 할로겐 원자, C_{1-20} 알킬 기, C_{1-20} 알콕시 기, C_{7-20} 알킬아릴 기, C_{7-20} 아릴알킬 기, C_{6-20} 아릴 기, C_{6-20} 아릴옥시 기, C_{7-20} 알킬아릴옥시 기, 및 C_{7-20} 아릴알킬옥시 기로 이루어지는 군 중에서 선택되는 하나 이상의 치환체에 의해 추가로 치환되는 C_{1-30} 하이드로카르빌 기;

[2902] 헤테로원자 함유 C_{1-30} 하이드로카르빌 기로서, 여기서 헤테로원자 함유 하이드로카르빌 기는 비치환되거나, 또는 할로겐 원자, C_{1-20} 알킬 기, C_{1-20} 알콕시 기, C_{7-20} 알킬아릴 기, C_{7-20} 아릴알킬 기, C_{6-20} 아릴 기, C_{6-20} 아릴옥시 기, C_{7-20} 알킬아릴옥시 기, 및 C_{7-20} 아릴알킬옥시 기로 이루어지는 군 중에서 선택되는 하나 이상의 치환체에 의해 추가로 치환되는 헤테로원자 함유 C_{1-30} 하이드로카르빌 기;

[2903] 여기서, R^Q 및 R^{Q*} 기는 선택적으로 결합되어 환형 하이드로카르빌 기 또는 환형 헤테로원자 함유 하이드로카르빌 기를 형성할 수 있고, 이 환형 하이드로카르빌 기 또는 환형 헤테로원자 함유 하이드로카르빌 기는 비치환되거나, 또는 할로겐 원자, C_{1-20} 알킬 기, C_{1-20} 알콕시 기, C_{7-20} 알킬아릴 기, C_{7-20} 아릴알킬 기, C_{6-20} 아릴 기, C_{6-20} 아릴옥시 기, C_{7-20} 알킬아릴옥시 기, C_{7-20} 아릴알킬옥시 기, 화학식 $-NR'_2$의 아미도 기; 화학식 $-PR'_2$의 포스피도 기, 화학식 $-SR'$의 티올레이트 기, 화학식 $-Si(R^a)_3$의 실릴 기, 및 화학식 $-Ge(R^a)_3$의 게르마닐 기로 이루어지는 군 중에서 선택되는 하나 이상의 치환체에 의해 추가로 치환되며;

[2904] 여기서, R^7, R^8, R^9, 및 R^{10}은 각각 독립적으로 다음으로 이루어진 군 중에서 선택되고:

[2905] 할로겐;

[2906] 수소;

[2907] C_{1-30} 하이드로카르빌 기로서, 여기서 하이드로카르빌 기는 비치환되거나, 또는 할로겐 원자, C_{1-20} 알킬 기, C_{1-20} 알콕시 기, C_{7-20} 알킬아릴 기, C_{7-20} 아릴알킬 기, C_{6-20} 아릴 기, C_{6-20} 아릴옥시 기, C_{7-20} 알킬아릴옥시 기, 및 C_{7-20} 아릴알킬옥시 기로 이루어지는 군 중에서 선택되는 하나 이상의 치환체에 의해 추가로 치환되는, C_{1-30} 하이드로카르빌 기;

[2908] 헤테로원자 함유 C_{1-30} 하이드로카르빌 기로서, 여기서 헤테로원자 함유 하이드로카르빌 기는 비치환되거나, 또는

할로겐 원자, C_{1-20} 알킬 기, C_{1-20} 알콕시 기, C_{7-20} 알킬아릴 기, C_{7-20} 아릴알킬 기, C_{6-20} 아릴 기, C_{6-20} 아릴옥시 기, C_{7-20} 알킬아릴옥시 기, 및 C_{7-20} 아릴알킬옥시 기로 이루어지는 군 중에서 선택되는 하나 이상의 치환체에 의해 추가로 치환되는, 헤테로원자 함유 C_{1-30} 하이드로카르빌 기;

[2909] 옥시 기, -OR';

[2910] 아미도 기, $-NR'_2$;

[2911] 포스피도 기, $-PR'_2$;

[2912] 티올레이트 기, -SR';

[2913] 화학식 $-Si(R^a)_3$의 실릴 기; 및

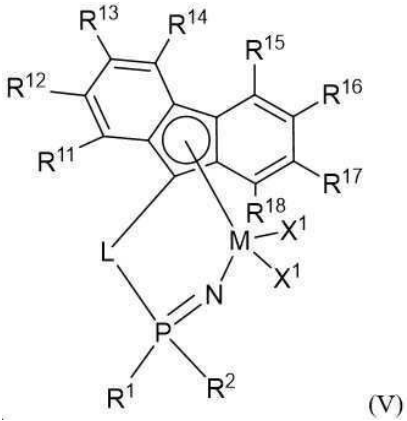
[2914] 화학식 $-Ge(R^a)_3$의 게르마닐 기;

[2915] 여기서, R^7, R^8, R^9, 및 R^{10} 중 2개의 인접한 기는 선택적으로 결합되어 환형 하이드로카르빌 기 또는 환형 헤테로원자 함유 하이드로카르빌 기를 형성할 수 있고, 이 환형 하이드로카르빌 기 또는 환형 헤테로원자 함유 하이드로카르빌 기는 비치환되거나, 또는 할로겐 원자, C_{1-20} 알킬 기, C_{1-20} 알콕시 기, C_{7-20} 알킬아릴 기, C_{7-20} 아릴알킬 기, C_{6-20} 아릴 기, C_{6-20} 아릴옥시 기, C_{7-20} 알킬아릴옥시 기, C_{7-20} 아릴알킬옥시 기, 화학식 $-NR'_2$의 아미도 기, 화학식 $-PR'_2$의 포스피도 기, 화학식 -SR'의 티올레이트 기, 화학식 $-Si(R^a)_3$의 실릴 기, 및 화학식 $-Ge(R^a)_3$의 게르마닐 기로 이루어지는 군 중에서 선택되는 하나 이상의 치환체에 의해 추가로 치환되고;

[2916] 여기서 각 R'는 수소, C_{1-20} 알킬 기, 및 C_{6-20} 아릴 기로 이루어지는 군 중에서 독립적으로 선택되고;

[2917] 여기서 각 R^a는 수소, C_{1-8} 알킬 기, C_{1-8} 알콕시 기, C_{6-20} 아릴옥시 기 및 C_{6-20} 아릴 기로 이루어지는 군 중에서 독립적으로 선택된다.

[2918] 실시양태 5. 실시양태 1에 있어서, 화학식 V로 표현되는 유기금속 복합체:

[2919] 

(V)

[2920] 여기서, M, R^1, R^2, L 및 X^1은 화학식 I에서 정의된 바와 같고;

[2921] 여기서, R^{11}, R^{12}, R^{13}, R^{14}, R^{15}, R^{16}, R^{17}, R^{18}은 각각 독립적으로 다음으로 이루어진 군 중에서 선택되고:

[2922] 할로겐;

[2923] 수소;

[2924] C_{1-30} 하이드로카르빌 기로서, 여기서 하이드로카르빌 기는 비치환되거나, 또는 할로겐 원자, C_{1-20} 알킬 기, C_{1-20} 알콕시 기, C_{7-20} 알킬아릴 기, C_{7-20} 아릴알킬 기, C_{6-20} 아릴 기, C_{6-20} 아릴옥시 기, C_{7-20} 알킬아릴옥시 기, 및 C_{7-}

$_{20}$ 아릴알킬옥시 기로 이루어지는 군 중에서 선택되는 하나 이상의 치환체에 의해 추가로 치환되는, C_{1-30} 하이드로카르빌 기;

[2925] 헤테로원자 함유 C_{1-30} 하이드로카르빌 기로서, 여기서 헤테로원자 함유 하이드로카르빌 기는 비치환되거나, 또는 할로겐 원자, C_{1-20} 알킬 기, C_{1-20} 알콕시 기, C_{7-20} 알킬아릴 기, C_{7-20} 아릴알킬 기, C_{6-20} 아릴 기, C_{6-20} 아릴옥시 기, C_{7-20} 알킬아릴옥시 기, 및 C_{7-20} 아릴알킬옥시 기로 이루어지는 군 중에서 선택되는 하나 이상의 치환체에 의해 추가로 치환되는, 헤테로원자 함유 C_{1-30} 하이드로카르빌 기;

[2926] 옥시 기, -OR';

[2927] 아미도 기, $-NR'_2$;

[2928] 포스피도 기, $-PR'_2$;

[2929] 티올레이트 기, -SR';

[2930] 화학식 $-Si(R^a)_3$의 실릴 기; 및

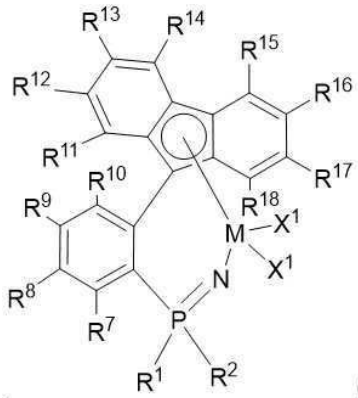
[2931] 화학식 $-Ge(R^a)_3$의 게르마닐 기;

[2932] 여기서, R^{11}, R^{12}, R^{13}, R^{14}, R^{15}, R^{16}, R^{17}, R^{18} 중 2개의 인접한 기는 선택적으로 결합되어 환형 하이드로카르빌 기 또는 환형 헤테로원자 함유 하이드로카르빌 기를 형성할 수 있고, 이 환형 하이드로카르빌 기 또는 환형 헤테로원자 함유 하이드로카르빌 기는 비치환되거나, 또는 할로겐 원자, C_{1-20} 알킬 기, C_{1-20} 알콕시 기, C_{7-20} 알킬아릴 기, C_{7-20} 아릴알킬 기, C_{6-20} 아릴 기, C_{6-20} 아릴옥시 기, C_{7-20} 알킬아릴옥시 기, C_{7-20} 아릴알킬옥시 기, 화학식 $-NR'_2$의 아미도 기, 화학식 $-PR'_2$의 포스피도 기, 화학식 -SR'의 티올레이트 기, 화학식 $-Si(R^a)_3$의 실릴 기, 및 화학식 $-Ge(R^a)_3$의 게르마닐 기로 이루어지는 군 중에서 선택되는 하나 이상의 치환체에 의해 추가로 치환되고;

[2933] 여기서 각 R'는 수소, C_{1-20} 알킬 기, 및 C_{6-20} 아릴 기로 이루어지는 군 중에서 독립적으로 선택되고;

[2934] 여기서 각 R^a는 수소, C_{1-8} 알킬 기, C_{1-8} 알콕시 기, C_{6-20} 아릴옥시 기 및 C_{6-20} 아릴 기로 이루어지는 군 중에서 독립적으로 선택된다.

[2935] 실시양태 6. 실시양태 5에 있어서, 화학식 VI으로 표현되는 유기금속 복합체:

[2936] 

(VI)

[2937] 여기서, M, R^1, R^2, R^{11}, R^{12}, R^{13}, R^{14}, R^{15}, R^{16}, R^{17}, R^{18} 및 X^1은 화학식 I 및 V에서 정의된 바와 같고;

[2938] 여기서, R^7, R^8, R^9, 및 R^{10}은 각각 독립적으로 다음으로 이루어진 군 중에서 선택되고:

[2939] 할로겐;

[2940] 수소;

[2941] C_{1-30} 하이드로카르빌 기로서, 여기서 하이드로카르빌 기는 비치환되거나, 또는 할로겐 원자, C_{1-20} 알킬 기, C_{1-20} 알콕시 기, C_{7-20} 알킬아릴 기, C_{7-20} 아릴알킬 기, C_{6-20} 아릴 기, C_{6-20} 아릴옥시 기, C_{7-20} 알킬아릴옥시 기, 및 C_{7-20} 아릴알킬옥시 기로 이루어지는 군 중에서 선택되는 하나 이상의 치환체에 의해 추가로 치환되는, C_{1-30} 하이드로카르빌 기;

[2942] 헤테로원자 함유 C_{1-30} 하이드로카르빌 기로서, 여기서 헤테로원자 함유 하이드로카르빌 기는 비치환되거나, 또는 할로겐 원자, C_{1-20} 알킬 기, C_{1-20} 알콕시 기, C_{7-20} 알킬아릴 기, C_{7-20} 아릴알킬 기, C_{6-20} 아릴 기, C_{6-20} 아릴옥시 기, C_{7-20} 알킬아릴옥시 기, 및 C_{7-20} 아릴알킬옥시 기로 이루어지는 군 중에서 선택되는 하나 이상의 치환체에 의해 추가로 치환되는, 헤테로원자 함유 C_{1-30} 하이드로카르빌 기;

[2943] 옥시 기, -OR';

[2944] 아미도 기, $-NR'_2$;

[2945] 포스피도 기, $-PR'_2$;

[2946] 티올레이트 기, -SR';

[2947] 화학식 $-Si(R^a)_3$의 실릴 기; 및

[2948] 화학식 $-Ge(R^a)_3$의 게르마닐 기;

[2949] 여기서, R^7, R^8, R^9, 및 R^{10} 중 2개의 인접한 기는 선택적으로 결합되어 환형 하이드로카르빌 기 또는 환형 헤테로원자 함유 하이드로카르빌 기를 형성할 수 있고, 이 환형 하이드로카르빌 기 또는 환형 헤테로원자 함유 하이드로카르빌 기는 비치환되거나, 또는 할로겐 원자, C_{1-20} 알킬 기, C_{1-20} 알콕시 기, C_{7-20} 알킬아릴 기, C_{7-20} 아릴알킬 기, C_{6-20} 아릴 기, C_{6-20} 아릴옥시 기, C_{7-20} 알킬아릴옥시 기, C_{7-20} 아릴알킬옥시 기, 화학식 $-NR'_2$의 아미도 기, 화학식 $-PR'_2$의 포스피도 기, 화학식 -SR'의 티올레이트 기, 화학식 $-Si(R^a)_3$의 실릴 기, 및 화학식 $-Ge(R^a)_3$의 게르마닐 기로 이루어지는 군 중에서 선택되는 하나 이상의 치환체에 의해 추가로 치환되고;

[2950] 여기서 각 R'는 수소, C_{1-20} 알킬 기, 및 C_{6-20} 아릴 기로 이루어지는 군 중에서 독립적으로 선택되고;

[2951] 여기서 각 R^a는 수소, C_{1-8} 알킬 기, C_{1-8} 알콕시 기, C_{6-20} 아릴옥시 기 및 C_{6-20} 아릴 기로 이루어지는 군 중에서 독립적으로 선택된다.

[2952] 실시양태 7. 실시양태 6에 있어서, M이 Ti인 유기금속 복합체.

[2953] 실시양태 8. 실시양태 6 또는 7에 있어서, R^7, R^8, R^9, 및 R^{10}이 각각 수소인, 유기금속 복합체.

[2954] 실시양태 9. 실시양태 6 내지 8 중 어느 하나에 있어서, R^1 및 R^2가 각각 독립적으로 비치환된 C_{1-30} 하이드로카르빌 기인, 유기금속 복합체.

[2955] 실시양태 10. 실시양태 6 내지 9 중 어느 하나에 있어서, R^1 및 R^2가 각각 독립적으로 이소프로필, 사이클로헥실 및 *tert*-부틸로 이루어지는 군 중에서 선택되는, 유기금속 복합체.

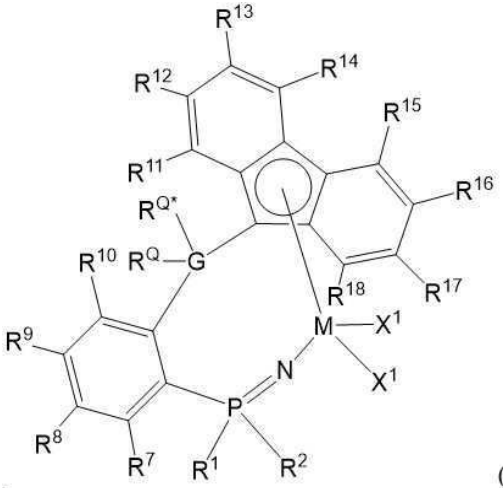
[2956] 실시양태 11. 실시양태 6 내지 10 중 어느 하나에 있어서, R^{12} 및 R^{17}이 각각 독립적으로 비치환된 C_{1-30} 하이드로카르빌 기이고, R^{11}, R^{13}, R^{14}, R^{15}, R^{16}, 및 R^{18}이 각각 수소인, 유기금속 복합체.

[2957] 실시양태 12. 실시양태 6 내지 11 중 어느 하나에 있어서, R^{12} 및 R^{17}이 각각 *tert*-부틸 기인, 유기금속 복합체.

[2958] 실시양태 13. 실시양태 6 내지 12 중 어느 하나에 있어서, 각 X^1이 독립적으로, C_{1-6} 알킬 기, C_{7-10} 아릴알킬 기, 및 할로겐으로 이루어지는 군 중에서 선택되는, 유기금속 복합체.

[2959] 실시양태 14. 실시양태 6 내지 13 중 어느 하나에 있어서, 각 X^1이 독립적으로 메틸 기 및 Cl로 이루어지는 군 중에서 선택되는, 유기금속 복합체.

[2960] 실시양태 15. 실시양태 5에 있어서, 화학식 VII로 표현되는, 유기금속 복합체:

[2961] 

(VII)

[2962] 여기서, M, R^1, R^2, R^{11}, R^{12}, R^{13}, R^{14}, R^{15}, R^{16}, R^{17}, R^{18} 및 X^1은 화학식 I 및 V에서 정의된 바와 같고;

[2963] 여기서, G는 C 또는 Si이고;

[2964] 여기서, R^Q 및 R^{Q*}는 각각 독립적으로 다음으로 이루어진 군 중에서 선택되며:

[2965] 할로겐;

[2966] 수소;

[2967] C_{1-30} 하이드로카르빌 기로서, 여기서 하이드로카르빌 기는 비치환되거나, 또는 할로겐 원자, C_{1-20} 알킬 기, C_{1-20} 알콕시 기, C_{7-20} 알킬아릴 기, C_{7-20} 아릴알킬 기, C_{6-20} 아릴 기, C_{6-20} 아릴옥시 기, C_{7-20} 알킬아릴옥시 기, 및 C_{7-20} 아릴알킬옥시 기로 이루어지는 군 중에서 선택되는 하나 이상의 치환체에 의해 추가로 치환되는 C_{1-30} 하이드로카르빌 기;

[2968] 헤테로원자 함유 C_{1-30} 하이드로카르빌 기로서, 여기서 헤테로원자 함유 하이드로카르빌 기는 비치환되거나, 또는 할로겐 원자, C_{1-20} 알킬 기, C_{1-20} 알콕시 기, C_{7-20} 알킬아릴 기, C_{7-20} 아릴알킬 기, C_{6-20} 아릴 기, C_{6-20} 아릴옥시 기, C_{7-20} 알킬아릴옥시 기, 및 C_{7-20} 아릴알킬옥시 기로 이루어지는 군 중에서 선택되는 하나 이상의 치환체에 의해 추가로 치환되는 헤테로원자 함유 C_{1-30} 하이드로카르빌 기;

[2969] 여기서, R^Q 및 R^{Q*} 기는 선택적으로 결합되어 환형 하이드로카르빌 기 또는 환형 헤테로원자 함유 하이드로카르빌 기를 형성할 수 있고, 이 환형 하이드로카르빌 기 또는 환형 헤테로원자 함유 하이드로카르빌 기는 비치환되거나, 또는 할로겐 원자, C_{1-20} 알킬 기, C_{1-20} 알콕시 기, C_{7-20} 알킬아릴 기, C_{7-20} 아릴알킬 기, C_{6-20} 아릴 기, C_{6-20} 아릴옥시 기, C_{7-20} 알킬아릴옥시 기, C_{7-20} 아릴알킬옥시 기, 화학식 $-NR'_2$의 아미도 기; 화학식 $-PR'_2$의 포스피도 기, 화학식 -SR'의 티올레이트 기, 화학식 $-Si(R^a)_3$의 실릴 기, 및 화학식 $-Ge(R^a)_3$의 게르마닐 기로 이루어지는 군 중에서 선택되는 하나 이상의 치환체에 의해 추가로 치환되며;

[2970] 여기서, R^7, R^8, R^9, 및 R^{10}은 각각 독립적으로 다음으로 이루어진 군 중에서 선택되고:

[2971] 할로겐;

[2972] 수소;

[2973] C_{1-30} 하이드로카르빌 기로서, 여기서 하이드로카르빌 기는 비치환되거나, 또는 할로겐 원자, C_{1-20} 알킬 기, C_{1-20} 알콕시 기, C_{7-20} 알킬아릴 기, C_{7-20} 아릴알킬 기, C_{6-20} 아릴 기, C_{6-20} 아릴옥시 기, C_{7-20} 알킬아릴옥시 기, 및 C_{7-20} 아릴알킬옥시 기로 이루어지는 군 중에서 선택되는 하나 이상의 치환체에 의해 추가로 치환되는, C_{1-30} 하이드로카르빌 기;

[2974] 헤테로원자 함유 C_{1-30} 하이드로카르빌 기로서, 여기서 헤테로원자 함유 하이드로카르빌 기는 비치환되거나, 또는 할로겐 원자, C_{1-20} 알킬 기, C_{1-20} 알콕시 기, C_{7-20} 알킬아릴 기, C_{7-20} 아릴알킬 기, C_{6-20} 아릴 기, C_{6-20} 아릴옥시 기, C_{7-20} 알킬아릴옥시 기, 및 C_{7-20} 아릴알킬옥시 기로 이루어지는 군 중에서 선택되는 하나 이상의 치환체에 의해 추가로 치환되는, 헤테로원자 함유 C_{1-30} 하이드로카르빌 기;

[2975] 옥시 기, -OR';

[2976] 아미도 기, $-NR'_2$;

[2977] 포스피도 기, $-PR'_2$;

[2978] 티올레이트 기, -SR';

[2979] 화학식 $-Si(R^a)_3$의 실릴 기; 및

[2980] 화학식 $-Ge(R^a)_3$의 게르마닐 기;

[2981] 여기서, R^7, R^8, R^9, 및 R^{10} 중 2개의 인접한 기는 선택적으로 결합되어 환형 하이드로카르빌 기 또는 환형 헤테로원자 함유 하이드로카르빌 기를 형성할 수 있고, 이 환형 하이드로카르빌 기 또는 환형 헤테로원자 함유 하이드로카르빌 기는 비치환되거나, 또는 할로겐 원자, C_{1-20} 알킬 기, C_{1-20} 알콕시 기, C_{7-20} 알킬아릴 기, C_{7-20} 아릴알킬 기, C_{6-20} 아릴 기, C_{6-20} 아릴옥시 기, C_{7-20} 알킬아릴옥시 기, C_{7-20} 아릴알킬옥시 기, 화학식 $-NR'_2$의 아미도 기, 화학식 $-PR'_2$의 포스피도 기, 화학식 -SR'의 티올레이트 기, 화학식 $-Si(R^a)_3$의 실릴 기, 및 화학식 $-Ge(R^a)_3$의 게르마닐 기로 이루어지는 군 중에서 선택되는 하나 이상의 치환체에 의해 추가로 치환되고;

[2982] 여기서 각 R'는 수소, C_{1-20} 알킬 기, 및 C_{6-20} 아릴 기로 이루어지는 군 중에서 독립적으로 선택되고;

[2983] 여기서 각 R^a는 수소, C_{1-8} 알킬 기, C_{1-8} 알콕시 기, C_{6-20} 아릴옥시 기 및 C_{6-20} 아릴 기로 이루어지는 군 중에서 독립적으로 선택된다.

[2984] 실시양태 16. 실시양태 15에 있어서, M이 Ti인, 유기금속 복합체.

[2985] 실시양태 17. 실시양태 15 또는 16에 있어서, R^7, R^8, R^9, 및 R^{10}이 각각 수소인, 유기금속 복합체.

[2986] 실시양태 18. 실시양태 15 내지 17 중 어느 하나에 있어서, R^1 및 R^2가 각각 독립적으로 비치환된 C_{1-30} 하이드로카르빌 기인, 유기금속 복합체.

[2987] 실시양태 19. 실시양태 15 내지 18 중 어느 하나에 있어서, R^1 및 R^2가 각각 독립적으로 이소프로필, 사이클로헥실 및 *tert*-부틸로 이루어지는 군 중에서 선택되는, 유기금속 복합체.

[2988] 실시양태 20. 실시양태 15 내지 19 중 어느 하나에 있어서, R^{12} 및 R^{17}이 각각 독립적으로 비치환된 C_{1-30} 하이드로카르빌 기이고, R^{11}, R^{13}, R^{14}, R^{15}, R^{16}, 및 R^{18}은 각각 수소인, 유기금속 복합체.

[2989] 실시양태 21. 실시양태 15 내지 20 중 어느 하나에 있어서, R^{12} 및 R^{17}이 각각 *tert*-부틸 기인, 유기금속 복합체.

[2990] 실시양태 22. 실시양태 15 내지 21 중 어느 하나에 있어서, G가 탄소인, 유기금속 복합*.

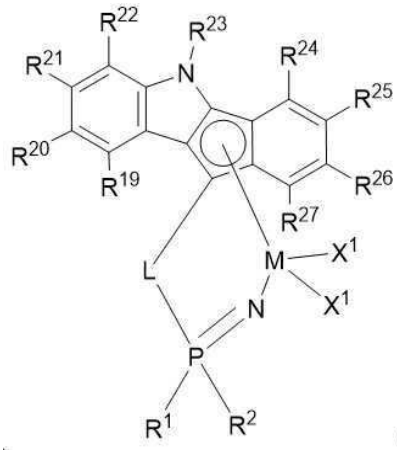
[2991] 실시양태 23. 실시양태 15 내지 22 중 어느 하나에 있어서, R^{Q} 및 R^{Q*} 기는 각각 독립적으로 수소, C_{1-20} 알킬 기, 및 C_{6-20} 아릴 기로 이루어지는 군 중에서 선택되는, 유기금속 복합체.

[2992] 실시양태 24. 실시양태 15 내지 23 중 어느 하나에 있어서, R^{Q}가 수소이고, R^{Q*}가 C_{1-8} 알킬 기인, 유기금속 복합체.

[2993] 실시양태 25. 실시양태 15 내지 24 중 어느 하나에 있어서, 각 X^{1}이 독립적으로 C_{1-6} 알킬 기, C_{7-10} 아릴알킬 기, 및 할로겐으로 이루어지는 군 중에서 선택되는, 유기금속 복합체.

[2994] 실시양태 26. 실시양태 15 내지 25 중 어느 하나에 있어서, 각 X^{1}이 독립적으로 메틸 기 및 Cl로 이루어지는 군 중에서 선택되는, 유기금속 복합체.

[2995] 실시양태 27. 실시양태 1에 있어서, 화학식 VIII로 표현되는, 유기금속 복합체:

[2996] 

(VIII)

[2997] 여기서, M, R^{1}, R^{2}, L 및 X^{1}은 화학식 I에서 정의된 바와 같고;

[2998] 여기서, R^{23}은 다음으로 이루어진 군 중에서 선택되며:

[2999] 수소;

[3000] C_{1-30} 하이드로카르빌 기로서, 여기서 하이드로카르빌 기는 비치환되거나, 또는 할로겐 원자, C_{1-20} 알킬 기, C_{1-20} 알콕시 기, C_{7-20} 알킬아릴 기, C_{7-20} 아릴알킬 기, C_{6-20} 아릴 기, C_{6-20} 아릴옥시 기, C_{7-20} 알킬아릴옥시 기, 및 C_{7-20} 아릴알킬옥시 기로 이루어지는 군 중에서 선택되는 하나 이상의 치환체에 의해 추가로 치환되는 C_{1-30} 하이드로카르빌 기;

[3001] 헤테로원자 함유 C_{1-30} 하이드로카르빌 기로서, 여기서 헤테로원자 함유 하이드로카르빌 기는 비치환되거나, 또는 할로겐 원자, C_{1-20} 알킬 기, C_{1-20} 알콕시 기, C_{7-20} 알킬아릴 기, C_{7-20} 아릴알킬 기, C_{6-20} 아릴 기, C_{6-20} 아릴옥시 기, C_{7-20} 알킬아릴옥시 기, 및 C_{7-20} 아릴알킬옥시 기로 이루어지는 군 중에서 선택되는 하나 이상의 치환체에 의해 추가로 치환되는 헤테로원자 함유 C_{1-30} 하이드로카르빌 기;

[3002] 여기서, R^{19}, R^{20}, R^{21}, R^{22}, R^{24}, R^{25}, R^{26}, 및 R^{27}은 각각 독립적으로 다음으로 이루어진 군 중에서 선택되고:

[3003] 할로겐;

[3004] 수소;

[3005] C_{1-30} 하이드로카르빌 기로서, 여기서 하이드로카르빌 기는 비치환되거나, 또는 할로겐 원자, C_{1-20} 알킬 기, C_{1-20} 알콕시 기, C_{7-20} 알킬아릴 기, C_{7-20} 아릴알킬 기, C_{6-20} 아릴 기, C_{6-20} 아릴옥시 기, C_{7-20} 알킬아릴옥시 기, 및 C_{7-}

$_{20}$ 아릴알킬옥시 기로 이루어지는 군 중에서 선택되는 하나 이상의 치환체에 의해 추가로 치환되는, C_{1-30} 하이드로카르빌 기;

[3006] 헤테로원자 함유 C_{1-30} 하이드로카르빌 기로서, 여기서 헤테로원자 함유 하이드로카르빌 기는 비치환되거나, 또는 할로겐 원자, C_{1-20} 알킬 기, C_{1-20} 알콕시 기, C_{7-20} 알킬아릴 기, C_{7-20} 아릴알킬 기, C_{6-20} 아릴 기, C_{6-20} 아릴옥시 기, C_{7-20} 알킬아릴옥시 기, 및 C_{7-20} 아릴알킬옥시 기로 이루어지는 군 중에서 선택되는 하나 이상의 치환체에 의해 추가로 치환되는, 헤테로원자 함유 C_{1-30} 하이드로카르빌 기;

[3007] 옥시 기, -OR';

[3008] 아미도 기, $-NR'_2$;

[3009] 포스피도 기, $-PR'_2$;

[3010] 티올레이트 기, -SR';

[3011] 화학식 $-Si(R^a)_3$의 실릴 기; 및

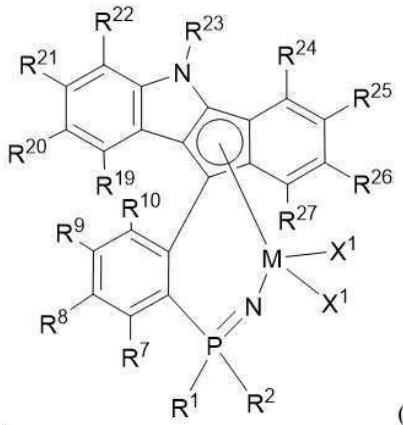
[3012] 화학식 $-Ge(R^a)_3$의 게르마닐 기;

[3013] 여기서, R^{19}, R^{20}, R^{21}, R^{22}, R^{24}, R^{25}, R^{26}, 및 R^{27} 중 2개의 인접한 기는 선택적으로 결합되어 환형 하이드로카르빌 기 또는 환형 헤테로원자 함유 하이드로카르빌 기를 형성할 수 있고, 이 환형 하이드로카르빌 기 또는 환형 헤테로원자 함유 하이드로카르빌 기는 비치환되거나, 또는 할로겐 원자, C_{1-20} 알킬 기, C_{1-20} 알콕시 기, C_{7-20} 알킬아릴 기, C_{7-20} 아릴알킬 기, C_{6-20} 아릴 기, C_{6-20} 아릴옥시 기, C_{7-20} 알킬아릴옥시 기, C_{7-20} 아릴알킬옥시 기, 화학식 $-NR'_2$의 아미도 기, 화학식 $-PR'_2$의 포스피도 기, 화학식 -SR'의 티올레이트 기, 화학식 $-Si(R^a)_3$의 실릴 기, 및 화학식 $-Ge(R^a)_3$의 게르마닐 기로 이루어지는 군 중에서 선택되는 하나 이상의 치환체에 의해 추가로 치환되고;

[3014] 여기서 각 R'는 수소, C_{1-20} 알킬 기, 및 C_{6-20} 아릴 기로 이루어지는 군 중에서 독립적으로 선택되고;

[3015] 여기서 각 R^a는 수소, C_{1-8} 알킬 기, C_{1-8} 알콕시 기, C_{6-20} 아릴옥시 기 및 C_{6-20} 아릴 기로 이루어지는 군 중에서 독립적으로 선택된다.

[3016] 실시양태 28. 실시양태 27에 있어서, 화학식 IX로 표현되는, 유기금속 복합체:



(IX)

[3017]

[3018] 여기서, M, R^1, R^2, R^{19}, R^{20}, R^{21}, R^{22}, R^{23}, R^{24}, R^{25}, R^{26}, R^{27} 및 X^1은 화학식 I 및 VIII에서 정의된 바와 같고:

[3019] 여기서, R^7, R^8, R^9 및 R^{10}은 각각 독립적으로 다음으로 이루어진 군 중에서 선택되며:

[3020] 할로겐;

[3021] 수소;

[3022] C_{1-30} 하이드로카르빌 기로서, 여기서 하이드로카르빌 기는 비치환되거나, 또는 할로겐 원자, C_{1-20} 알킬 기, C_{1-20} 알콕시 기, C_{7-20} 알킬아릴 기, C_{7-20} 아릴알킬 기, C_{6-20} 아릴 기, C_{6-20} 아릴옥시 기, C_{7-20} 알킬아릴옥시 기, 및 C_{7-20} 아릴알킬옥시 기로 이루어지는 군 중에서 선택되는 하나 이상의 치환체에 의해 추가로 치환되는 C_{1-30} 하이드로카르빌 기;

[3023] 헤테로원자 함유 C_{1-30} 하이드로카르빌 기로서, 여기서 헤테로원자 함유 하이드로카르빌 기는 비치환되거나, 또는 할로겐 원자, C_{1-20} 알킬 기, C_{1-20} 알콕시 기, C_{7-20} 알킬아릴 기, C_{7-20} 아릴알킬 기, C_{6-20} 아릴 기, C_{6-20} 아릴옥시 기, C_{7-20} 알킬아릴옥시 기, 및 C_{7-20} 아릴알킬옥시 기로 이루어지는 군 중에서 선택되는 하나 이상의 치환체에 의해 추가로 치환되는 헤테로원자 함유 C_{1-30} 하이드로카르빌 기;

[3024] 옥시 기, -OR';

[3025] 아미도 기, $-NR'_2$;

[3026] 포스피도 기, $-PR'_2$;

[3027] 티올레이트 기, -SR';

[3028] 화학식 $-Si(R^a)_3$의 실릴 기; 및

[3029] 화학식 $-Ge(R^a)_3$의 게르마닐 기;

[3030] 여기서, R^7, R^8, R^9, 및 R^{10} 중 2개의 인접한 기는 선택적으로 결합되어 환형 하이드로카르빌 기 또는 환형 헤테로원자 함유 하이드로카르빌 기를 형성할 수 있고, 이 환형 하이드로카르빌 기 또는 환형 헤테로원자 함유 하이드로카르빌 기는 비치환되거나, 또는 할로겐 원자, C_{1-20} 알킬 기, C_{1-20} 알콕시 기, C_{7-20} 알킬아릴 기, C_{7-20} 아릴알킬 기, C_{6-20} 아릴 기, C_{6-20} 아릴옥시 기, C_{7-20} 알킬아릴옥시 기, C_{7-20} 아릴알킬옥시 기, 화학식 $-NR'_2$의 아미도 기, 화학식 $-PR'_2$의 포스피도 기, 화학식 -SR'의 티올레이트 기, 화학식 $-Si(R^a)_3$의 실릴 기, 및 화학식 $-Ge(R^a)_3$의 게르마닐 기로 이루어지는 군 중에서 선택되는 하나 이상의 치환체에 의해 추가로 치환되고;

[3031] 여기서 각 R'는 수소, C_{1-20} 알킬 기, 및 C_{6-20} 아릴 기로 이루어지는 군 중에서 독립적으로 선택되고;

[3032] 여기서 각 R^a는 수소, C_{1-8} 알킬 기, C_{1-8} 알콕시 기, C_{6-20} 아릴옥시 기 및 C_{6-20} 아릴 기로 이루어지는 군 중에서 독립적으로 선택된다.

[3033] 실시양태 29. 실시양태 28에 있어서, M이 Ti인, 유기금속 복합체.

[3034] 실시양태 30. 실시양태 28 또는 29에 있어서, R^7, R^8, R^9, 및 R^{10}이 각각 수소인, 유기금속 복합체.

[3035] 실시양태 31. 실시양태 28 내지 30 중 어느 하나에 있어서, R^1 및 R^2가 각각 독립적으로 비치환된 C_{1-30} 하이드로카르빌 기인, 유기금속 복합체.

[3036] 실시양태 32. 실시양태 28 내지 31 중 어느 하나에 있어서, R^1 및 R^2가 각각 독립적으로 이소프로필, 사이클로헥실 및 *tert*-부틸로 이루어지는 군 중에서 선택되는, 유기금속 복합체.

[3037] 실시양태 33. 실시양태 28 내지 32 중 어느 하나에 있어서, R^{23}이 비치환된 C_{1-30} 하이드로카르빌 기인, 유기금속 복합체.

[3038] 실시양태 34. 실시양태 28 내지 33 중 어느 하나에 있어서, R^{23}이 C_{1-8} 알킬 기인, 유기금속 복합체.

[3039] 실시양태 35. 실시양태 28 내지 34 중 어느 하나에 있어서, R^{20}이 비치환된 C_{1-30} 하이드로카르빌 기인, 유기금속 복합체.

[3040] 실시양태 36. 실시양태 28 내지 35 중 어느 하나에 있어서, R^{20}이 C_{1-8} 알킬 기인, 유기금속 복합체.

[3041] 실시양태 37. 실시양태 28 내지 34 중 어느 하나에 있어서, R^{20}이 비치환된 C_{1-30} 하이드로카르빌 기이고, R^{19}, R^{21}, R^{22}, R^{24}, R^{25}, R^{26}, 및 R^{27}이 각각 수소인, 유기금속 복합*.

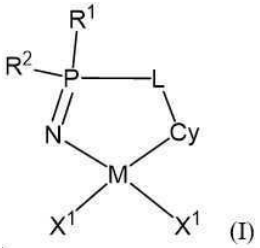
[3042] 실시양태 38. 실시양태 37에 있어서, R^{20}이 C_{1-8} 알킬 기인, 유기금속 복합체.

[3043] 실시양태 39. 실시양태 28 내지 38 중 어느 하나에 있어서, 각 X^1이 C_{1-6} 알킬 기, C_{7-10} 아릴알킬 기, 및 할로겐으로 이루어지는 군 중에서 독립적으로 선택되는, 유기금속 복합체.

[3044] 실시양태 40. 실시양태 28 내지 39 중 어느 하나에 있어서, 각 X^1이 메틸 기 및 Cl로 이루어지는 군 중에서 독립적으로 선택되는, 유기금속 복합체.

[3045] 실시양태 41. 다음을 포함하는 올레핀 중합 촉매 시스템:

[3046] i) 화학식 I로 표현되는 유기금속 복합체;

[3047] 

(I)

[3048] 여기서,

[3049] M은 Ti, Zr 또는 Hf이고;

[3050] R^1 및 R^2는 각각 독립적으로 수소 및 R^X로 이루어진 군 중에서 선택되거나; 또는 R^1 및 R^2는 이들이 부착된 P 원자와 함께, 비치환되거나, 또는 할로겐 원자, C_{1-20} 알킬 기, C_{1-20} 알콕시 기, C_{7-20} 알킬아릴 기, C_{7-20} 아릴알킬 기, C_{6-20} 아릴 기, C_{6-20} 아릴옥시 기, C_{7-20} 알킬아릴옥시 기, 및 C_{7-20} 아릴알킬옥시 기로 이루어진 군 중에서 선택되는 하나 이상의 치환체에 의해 추가로 치환되는 3-10원 헤테로환형 기를 형성하며;

[3051] 각 R^X는 할로겐 원자; 하이드로카르빌 기가 비치환되거나, 또는 하나 이상의 할로겐 원자, C_{1-20} 알킬 기, C_{1-20} 알콕시 기, C_{7-20} 알킬아릴 기, C_{7-20} 아릴알킬 기, C_{6-20} 아릴 기, C_{6-20} 아릴옥시 기, C_{7-20} 알킬아릴옥시 기, 및/또는 C_{7-20} 아릴알킬옥시 기에 의해 추가로 치환되는 C_{1-30} 하이드로카르빌 기; 화학식 $-NR'_2$의 아미도 기; 화학식 $-Si(R^a)_3$의 실릴 기; 화학식 $-Ge(R^a)_3$의 게르마닐 기; 및 화학식 $-N=P(R^b)(R^c)(R^d)$의 포스핀이민 기로 이루어진 군 중에서 독립적으로 선택되고; 여기서 각 R'는 수소, C_{1-20} 알킬 기, 및 C_{6-20} 아릴 기로 이루어지는 군 중에서 독립적으로 선택되고; 각 R^a는 수소, C_{1-8} 알킬 기, C_{1-8} 알콕시 기, C_{6-20} 아릴옥시 기 및 C_{6-20} 아릴 기로 이루어진 군 중에서 독립적으로 선택되고; R^b, R^c, R^d는 각각 독립적으로 C_{1-20} 알킬 기이며;

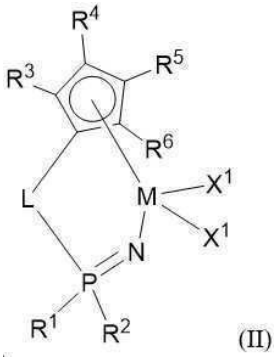
[3052] 각 X^1은 활성화 가능한 리간드이고;

[3053] Cy는 L에 공유 결합되고 η-결합을 통해 M에 배위된 사이클로펜타디에닐형 리간드이고; 그리고

[3054] L은 Cy와 P를 연결하는 원자의 근접한 사슬을 함유하는 가교 기로서, 여기서 근접한 사슬은 2개 또는 3개의 원자를 함유함; 및

[3055] ii) 촉매 활성화제.

[3056] 실시양태 42. 실시양태 41에 있어서, 유기금속 복합체가 화학식 II로 표현되는, 올레핀 중합 촉매 시스템:

[3057] 

(II)

[3058] 여기서, M, R^1, R^2, L 및 X^1은 화학식 I에서 정의된 바와 같고;

[3059] R^3, R^4, R^5 및 R^6은 각각 독립적으로 다음으로 이루어진 군 중에서 선택되고:

[3060] 할로겐;

[3061] 수소;

[3062] C_{1-30} 하이드로카르빌 기로서, 여기서 하이드로카르빌 기는 비치환되거나, 또는 할로겐 원자, C_{1-20} 알킬 기, C_{1-20} 알콕시 기, C_{7-20} 알킬아릴 기, C_{7-20} 아릴알킬 기, C_{6-20} 아릴 기, C_{6-20} 아릴옥시 기, C_{7-20} 알킬아릴옥시 기, 및 C_{7-20} 아릴알킬옥시 기로 이루어지는 군 중에서 선택되는 하나 이상의 치환체에 의해 추가로 치환되는 C_{1-30} 하이드로카르빌 기;

[3063] 헤테로원자 함유 C_{1-30} 하이드로카르빌 기로서, 여기서 헤테로원자 함유 하이드로카르빌 기는 비치환되거나, 또는 할로겐 원자, C_{1-20} 알킬 기, C_{1-20} 알콕시 기, C_{7-20} 알킬아릴 기, C_{7-20} 아릴알킬 기, C_{6-20} 아릴 기, C_{6-20} 아릴옥시 기, C_{7-20} 알킬아릴옥시 기, 및 C_{7-20} 아릴알킬옥시 기로 이루어지는 군 중에서 선택되는 하나 이상의 치환체에 의해 추가로 치환되는 헤테로원자 함유 C_{1-30} 하이드로카르빌 기;

[3064] 옥시 기, -OR';

[3065] 아미도 기, $-NR'_2$;

[3066] 포스피도 기, $-PR'_2$;

[3067] 티올레이트 기, -SR';

[3068] 화학식 $-Si(R^a)_3$의 실릴 기; 및

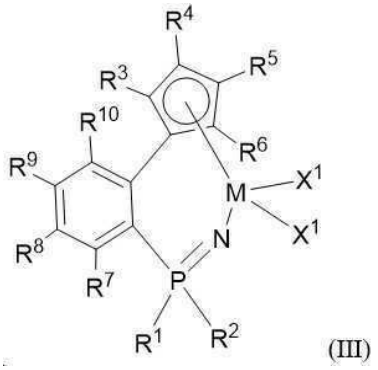
[3069] 화학식 $-Ge(R^a)_3$의 게르마닐 기;

[3070] 여기서, R^3, R^4, R^5 및 R^6 중 2개의 인접한 기는 선택적으로 결합되어 환형 하이드로카르빌 기 또는 환형 헤테로원자 함유 하이드로카르빌 기를 형성할 수 있고, 이 환형 하이드로카르빌 기 또는 환형 헤테로원자 함유 하이드로카르빌 기는 비치환되거나, 또는 할로겐 원자, C_{1-20} 알킬 기, C_{1-20} 알콕시 기, C_{7-20} 알킬아릴 기, C_{7-20} 아릴알킬 기, C_{6-20} 아릴 기, C_{6-20} 아릴옥시 기, C_{7-20} 알킬아릴옥시 기, C_{7-20} 아릴알킬옥시 기, 화학식 $-NR'_2$의 아미도 기, 화학식 $-PR'_2$의 포스피도 기, 화학식 -SR'의 티올레이트 기, 화학식 $-Si(R^a)_3$의 실릴 기, 및 화학식 $-Ge(R^a)_3$의 게르마닐 기로 이루어지는 군 중에서 선택되는 하나 이상의 치환체에 의해 추가로 치환되고;

[3071] 여기서 각 R'는 수소, C_{1-20} 알킬 기, 및 C_{6-20} 아릴 기로 이루어지는 군 중에서 독립적으로 선택되고;

[3072] 여기서 각 R^a는 수소, C_{1-8} 알킬 기, C_{1-8} 알콕시 기, C_{6-20} 아릴옥시 기 및 C_{6-20} 아릴 기로 이루어지는 군 중에서 독립적으로 선택된다.

[3073] 실시양태 43. 실시양태 42에 있어서, 유기금속 복합체가 화학식 III으로 표현되는, 올레핀 중합 촉매 시스템:

[3074] 

(III)

[3075] 여기서, M, R^1, R^2, R^3, R^4, R^5, R^6 및 X^1은 화학식 I 및 II에서 정의된 바와 같고;

[3076] 여기서, R^7, R^8, R^9, 및 R^{10}은 각각 독립적으로 다음으로 이루어진 군 중에서 선택되고:

[3077] 할로겐;

[3078] 수소;

[3079] C_{1-30} 하이드로카르빌 기로서, 여기서 하이드로카르빌 기는 비치환되거나, 또는 할로겐 원자, C_{1-20} 알킬 기, C_{1-20} 알콕시 기, C_{7-20} 알킬아릴 기, C_{7-20} 아릴알킬 기, C_{6-20} 아릴 기, C_{6-20} 아릴옥시 기, C_{7-20} 알킬아릴옥시 기, 및 C_{7-20} 아릴알킬옥시 기로 이루어지는 군 중에서 선택되는 하나 이상의 치환체에 의해 추가로 치환되는 C_{1-30} 하이드로카르빌 기;

[3080] 헤테로원자 함유 C_{1-30} 하이드로카르빌 기로서, 여기서 헤테로원자 함유 하이드로카르빌 기는 비치환되거나, 또는 할로겐 원자, C_{1-20} 알킬 기, C_{1-20} 알콕시 기, C_{7-20} 알킬아릴 기, C_{7-20} 아릴알킬 기, C_{6-20} 아릴 기, C_{6-20} 아릴옥시 기, C_{7-20} 알킬아릴옥시 기, 및 C_{7-20} 아릴알킬옥시 기로 이루어지는 군 중에서 선택되는 하나 이상의 치환체에 의해 추가로 치환되는 헤테로원자 함유 C_{1-30} 하이드로카르빌 기;

[3081] 옥시 기, -OR';

[3082] 아미도 기, $-NR'_2$;

[3083] 포스피도 기, $-PR'_2$;

[3084] 티올레이트 기, -SR';

[3085] 화학식 $-Si(R^a)_3$의 실릴 기; 및

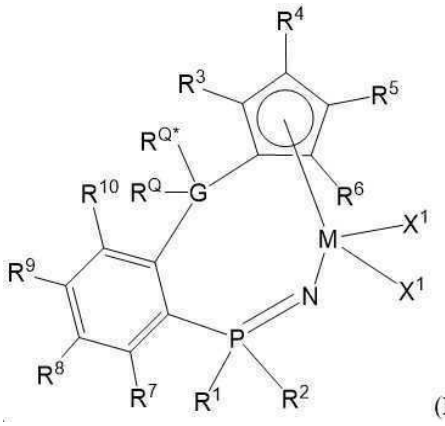
[3086] 화학식 $-Ge(R^a)_3$의 게르마닐 기;

[3087] 여기서, R^7, R^8, R^9, 및 R^{10} 중 2개의 인접한 기는 선택적으로 결합되어 환형 하이드로카르빌 기 또는 환형 헤테로원자 함유 하이드로카르빌 기를 형성할 수 있고, 이 환형 하이드로카르빌 기 또는 환형 헤테로원자 함유 하이드로카르빌 기는 비치환되거나, 또는 할로겐 원자, C_{1-20} 알킬 기, C_{1-20} 알콕시 기, C_{7-20} 알킬아릴 기, C_{7-20} 아릴알킬 기, C_{6-20} 아릴 기, C_{6-20} 아릴옥시 기, C_{7-20} 알킬아릴옥시 기, C_{7-20} 아릴알킬옥시 기, 화학식 $-NR'_2$의 아미도 기, 화학식 $-PR'_2$의 포스피도 기, 화학식 -SR'의 티올레이트 기, 화학식 $-Si(R^a)_3$의 실릴 기, 및 화학식 $-Ge(R^a)_3$의 게르마닐 기로 이루어지는 군 중에서 선택되는 하나 이상의 치환체에 의해 추가로 치환되고;

[3088] 여기서 각 R'는 수소, C_{1-20} 알킬 기, 및 C_{6-20} 아릴 기로 이루어지는 군 중에서 독립적으로 선택되고;

[3089] 여기서 각 R^a는 수소, C_{1-8} 알킬 기, C_{1-8} 알콕시 기, C_{6-20} 아릴옥시 기 및 C_{6-20} 아릴 기로 이루어지는 군 중에서 독립적으로 선택된다.

[3090] 실시양태 44. 실시양태 42에 있어서, 유기금속 복합체가 화학식 IV로 표현되는, 올레핀 중합 촉매 시스템:

[3091] 

(IV)

[3092] 여기서, M, R^1, R^2, R^3, R^4, R^5, R^6 및 X^1은 화학식 I 및 II에서 정의된 바와 같고;

[3093] 여기서, G는 C 또는 Si이고;

[3094] 여기서, R^Q 및 R^{Q*}는 각각 독립적으로 다음으로 이루어진 군 중에서 선택되며:

[3095] 할로겐;

[3096] 수소;

[3097] C_{1-30} 하이드로카르빌 기로서, 여기서 하이드로카르빌 기는 비치환되거나, 또는 할로겐 원자, C_{1-20} 알킬 기, C_{1-20} 알콕시 기, C_{7-20} 알킬아릴 기, C_{7-20} 아릴알킬 기, C_{6-20} 아릴 기, C_{6-20} 아릴옥시 기, C_{7-20} 알킬아릴옥시 기, 및 C_{7-20} 아릴알킬옥시 기로 이루어지는 군 중에서 선택되는 하나 이상의 치환체에 의해 추가로 치환되는 C_{1-30} 하이드로카르빌 기;

[3098] 헤테로원자 함유 C_{1-30} 하이드로카르빌 기로서, 여기서 헤테로원자 함유 하이드로카르빌 기는 비치환되거나, 또는 할로겐 원자, C_{1-20} 알킬 기, C_{1-20} 알콕시 기, C_{7-20} 알킬아릴 기, C_{7-20} 아릴알킬 기, C_{6-20} 아릴 기, C_{6-20} 아릴옥시 기, C_{7-20} 알킬아릴옥시 기, 및 C_{7-20} 아릴알킬옥시 기로 이루어지는 군 중에서 선택되는 하나 이상의 치환체에 의해 추가로 치환되는 헤테로원자 함유 C_{1-30} 하이드로카르빌 기;

[3099] 여기서, R^Q 및 R^{Q*} 기는 선택적으로 결합되어 환형 하이드로카르빌 기 또는 환형 헤테로원자 함유 하이드로카르빌 기를 형성할 수 있고, 이 환형 하이드로카르빌 기 또는 환형 헤테로원자 함유 하이드로카르빌 기는 비치환되거나, 또는 할로겐 원자, C_{1-20} 알킬 기, C_{1-20} 알콕시 기, C_{7-20} 알킬아릴 기, C_{7-20} 아릴알킬 기, C_{6-20} 아릴 기, C_{6-20} 아릴옥시 기, C_{7-20} 알킬아릴옥시 기, C_{7-20} 아릴알킬옥시 기, 화학식 $-NR'_2$의 아미도 기, 화학식 $-PR'_2$의 포스피도 기, 화학식 -SR'의 티올레이트 기, 화학식 $-Si(R^a)_3$의 실릴 기, 및 화학식 $-Ge(R^a)_3$의 게르마닐 기로 이루어지는 군 중에서 선택되는 하나 이상의 치환체에 의해 추가로 치환되며;

[3100] 여기서, R^7, R^8, R^9, 및 R^{10}은 각각 독립적으로 다음으로 이루어진 군 중에서 선택되고:

[3101] 할로겐;

[3102] 수소;

[3103] C_{1-30} 하이드로카르빌 기로서, 여기서 하이드로카르빌 기는 비치환되거나, 또는 할로겐 원자, C_{1-20} 알킬 기, C_{1-20}

알콕시 기, C_{7-20} 알킬아릴 기, C_{7-20} 아릴알킬 기, C_{6-20} 아릴 기, C_{6-20} 아릴옥시 기, C_{7-20} 알킬아릴옥시 기, 및 C_{7-20} 아릴알킬옥시 기로 이루어지는 군 중에서 선택되는 하나 이상의 치환체에 의해 추가로 치환되는, C_{1-30} 하이드로카르빌 기;

[3104] 헤테로원자 함유 C_{1-30} 하이드로카르빌 기로서, 여기서 헤테로원자 함유 하이드로카르빌 기는 비치환되거나, 또는 할로겐 원자, C_{1-20} 알킬 기, C_{1-20} 알콕시 기, C_{7-20} 알킬아릴 기, C_{7-20} 아릴알킬 기, C_{6-20} 아릴 기, C_{6-20} 아릴옥시 기, C_{7-20} 알킬아릴옥시 기, 및 C_{7-20} 아릴알킬옥시 기로 이루어지는 군 중에서 선택되는 하나 이상의 치환체에 의해 추가로 치환되는, 헤테로원자 함유 C_{1-30} 하이드로카르빌 기;

[3105] 옥시 기, -OR';

[3106] 아미도 기, $-NR'_2$;

[3107] 포스피도 기, $-PR'_2$;

[3108] 티올레이트 기, -SR';

[3109] 화학식 $-Si(R^a)_3$의 실릴 기; 및

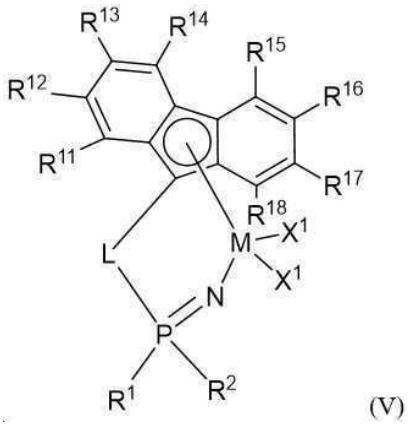
[3110] 화학식 $-Ge(R^a)_3$의 게르마닐 기;

[3111] 여기서, R^7, R^8, R^9, 및 R^{10} 중 2개의 인접한 기는 선택적으로 결합되어 환형 하이드로카르빌 기 또는 환형 헤테로원자 함유 하이드로카르빌 기를 형성할 수 있고, 이 환형 하이드로카르빌 기 또는 환형 헤테로원자 함유 하이드로카르빌 기는 비치환되거나, 또는 할로겐 원자, C_{1-20} 알킬 기, C_{1-20} 알콕시 기, C_{7-20} 알킬아릴 기, C_{7-20} 아릴알킬 기, C_{6-20} 아릴 기, C_{6-20} 아릴옥시 기, C_{7-20} 알킬아릴옥시 기, C_{7-20} 아릴알킬옥시 기, 화학식 $-NR'_2$의 아미도 기, 화학식 $-PR'_2$의 포스피도 기, 화학식 -SR'의 티올레이트 기, 화학식 $-Si(R^a)_3$의 실릴 기, 및 화학식 $-Ge(R^a)_3$의 게르마닐 기로 이루어지는 군 중에서 선택되는 하나 이상의 치환체에 의해 추가로 치환되고;

[3112] 여기서 각 R'는 수소, C_{1-20} 알킬 기, 및 C_{6-20} 아릴 기로 이루어지는 군 중에서 독립적으로 선택되고;

[3113] 여기서 각 R^a는 수소, C_{1-8} 알킬 기, C_{1-8} 알콕시 기, C_{6-20} 아릴옥시 기 및 C_{6-20} 아릴 기로 이루어지는 군 중에서 독립적으로 선택된다.

[3114] 실시양태 45. 실시양태 41에 있어서, 유기금속 복합체가 화학식 V로 표현되는 올레핀 중합 촉매 시스템:

[3115] 

(V)

[3116] 여기서, M, R^1, R^2, L 및 X^1은 화학식 I에서 정의된 바와 같고;

[3117] 여기서, R^{11}, R^{12}, R^{13}, R^{14}, R^{15}, R^{16}, R^{17}, R^{18}은 각각 독립적으로 다음으로 이루어진 군 중에서 선택되고:

[3118] 할로겐;

[3119] 수소;

[3120] C_{1-30} 하이드로카르빌 기로서, 여기서 하이드로카르빌 기는 비치환되거나, 또는 할로겐 원자, C_{1-20} 알킬 기, C_{1-20} 알콕시 기, C_{7-20} 알킬아릴 기, C_{7-20} 아릴알킬 기, C_{6-20} 아릴 기, C_{6-20} 아릴옥시 기, C_{7-20} 알킬아릴옥시 기, 및 C_{7-20} 아릴알킬옥시 기로 이루어지는 군 중에서 선택되는 하나 이상의 치환체에 의해 추가로 치환되는, C_{1-30} 하이드로카르빌 기;

[3121] 헤테로원자 함유 C_{1-30} 하이드로카르빌 기로서, 여기서 헤테로원자 함유 하이드로카르빌 기는 비치환되거나, 또는 할로겐 원자, C_{1-20} 알킬 기, C_{1-20} 알콕시 기, C_{7-20} 알킬아릴 기, C_{7-20} 아릴알킬 기, C_{6-20} 아릴 기, C_{6-20} 아릴옥시 기, C_{7-20} 알킬아릴옥시 기, 및 C_{7-20} 아릴알킬옥시 기로 이루어지는 군 중에서 선택되는 하나 이상의 치환체에 의해 추가로 치환되는, 헤테로원자 함유 C_{1-30} 하이드로카르빌 기;

[3122] 옥시 기, -OR';

[3123] 아미도 기, $-NR'_2$;

[3124] 포스피도 기, $-PR'_2$;

[3125] 티올레이트 기, -SR';

[3126] 화학식 $-Si(R^a)_3$의 실릴 기; 및

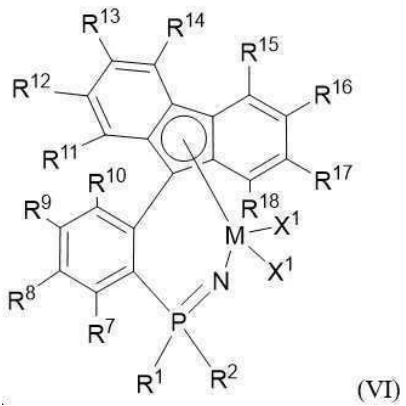
[3127] 화학식 $-Ge(R^a)_3$의 게르마닐 기;

[3128] 여기서, R^{11}, R^{12}, R^{13}, R^{14}, R^{15}, R^{16}, R^{17}, R^{18} 중 2개의 인접한 기는 선택적으로 결합되어 환형 하이드로카르빌 기 또는 환형 헤테로원자 함유 하이드로카르빌 기를 형성할 수 있고, 이 환형 하이드로카르빌 기 또는 환형 헤테로원자 함유 하이드로카르빌 기는 비치환되거나, 또는 할로겐 원자, C_{1-20} 알킬 기, C_{1-20} 알콕시 기, C_{7-20} 알킬아릴 기, C_{7-20} 아릴알킬 기, C_{6-20} 아릴 기, C_{6-20} 아릴옥시 기, C_{7-20} 알킬아릴옥시 기, C_{7-20} 아릴알킬옥시 기, 화학식 $-NR'_2$의 아미도 기, 화학식 $-PR'_2$의 포스피도 기, 화학식 -SR'의 티올레이트 기, 화학식 $-Si(R^a)_3$의 실릴 기, 및 화학식 $-Ge(R^a)_3$의 게르마닐 기로 이루어지는 군 중에서 선택되는 하나 이상의 치환체에 의해 추가로 치환되고;

[3129] 여기서 각 R'는 수소, C_{1-20} 알킬 기, 및 C_{6-20} 아릴 기로 이루어지는 군 중에서 독립적으로 선택되고;

[3130] 여기서 각 R^a는 수소, C_{1-8} 알킬 기, C_{1-8} 알콕시 기, C_{6-20} 아릴옥시 기 및 C_{6-20} 아릴 기로 이루어지는 군 중에서 독립적으로 선택된다.

[3131] 실시양태 46. 실시양태 45에 있어서, 유기금속 복합체가 화학식 VI으로 표현되는, 올레핀 중합 촉매 시스템:

[3132] 

(VI)

[3133] 여기서, M, R^1, R^2, R^{11}, R^{12}, R^{13}, R^{14}, R^{15}, R^{16}, R^{17}, R^{18} 및 X^1은 화학식 I 및 V에서 정의된 바와 같고;

[3134] 여기서, R^7, R^8, R^9, 및 R^{10}은 각각 독립적으로 다음으로 이루어진 군 중에서 선택되고:

[3135] 할로겐;

[3136] 수소;

[3137] C_{1-30} 하이드로카르빌 기로서, 여기서 하이드로카르빌 기는 비치환되거나, 또는 할로겐 원자, C_{1-20} 알킬 기, C_{1-20} 알콕시 기, C_{7-20} 알킬아릴 기, C_{7-20} 아릴알킬 기, C_{6-20} 아릴 기, C_{6-20} 아릴옥시 기, C_{7-20} 알킬아릴옥시 기, 및 C_{7-20} 아릴알킬옥시 기로 이루어지는 군 중에서 선택되는 하나 이상의 치환체에 의해 추가로 치환되는, C_{1-30} 하이드로카르빌 기;

[3138] 헤테로원자 함유 C_{1-30} 하이드로카르빌 기로서, 여기서 헤테로원자 함유 하이드로카르빌 기는 비치환되거나, 또는 할로겐 원자, C_{1-20} 알킬 기, C_{1-20} 알콕시 기, C_{7-20} 알킬아릴 기, C_{7-20} 아릴알킬 기, C_{6-20} 아릴 기, C_{6-20} 아릴옥시 기, C_{7-20} 알킬아릴옥시 기, 및 C_{7-20} 아릴알킬옥시 기로 이루어지는 군 중에서 선택되는 하나 이상의 치환체에 의해 추가로 치환되는, 헤테로원자 함유 C_{1-30} 하이드로카르빌 기;

[3139] 옥시 기, -OR';

[3140] 아미도 기, $-NR'_2$;

[3141] 포스피도 기, $-PR'_2$;

[3142] 티올레이트 기, -SR';

[3143] 화학식 $-Si(R^a)_3$의 실릴 기; 및

[3144] 화학식 $-Ge(R^a)_3$의 게르마닐 기;

[3145] 여기서, R^7, R^8, R^9, 및 R^{10} 중 2개의 인접한 기는 선택적으로 결합되어 환형 하이드로카르빌 기 또는 환형 헤테로원자 함유 하이드로카르빌 기를 형성할 수 있고, 이 환형 하이드로카르빌 기 또는 환형 헤테로원자 함유 하이드로카르빌 기는 비치환되거나, 또는 할로겐 원자, C_{1-20} 알킬 기, C_{1-20} 알콕시 기, C_{7-20} 알킬아릴 기, C_{7-20} 아릴알킬 기, C_{6-20} 아릴 기, C_{6-20} 아릴옥시 기, C_{7-20} 알킬아릴옥시 기, C_{7-20} 아릴알킬옥시 기, 화학식 $-NR'_2$의 아미도 기, 화학식 $-PR'_2$의 포스피도 기, 화학식 -SR'의 티올레이트 기, 화학식 $-Si(R^a)_3$의 실릴 기, 및 화학식 $-Ge(R^a)_3$의 게르마닐 기로 이루어지는 군 중에서 선택되는 하나 이상의 치환체에 의해 추가로 치환되고;

[3146] 여기서 각 R'는 수소, C_{1-20} 알킬 기, 및 C_{6-20} 아릴 기로 이루어지는 군 중에서 독립적으로 선택되고;

[3147] 여기서 각 R^a는 수소, C_{1-8} 알킬 기, C_{1-8} 알콕시 기, C_{6-20} 아릴옥시 기 및 C_{6-20} 아릴 기로 이루어지는 군 중에서 독립적으로 선택된다.

[3148] 실시양태 47. 실시양태 46에 있어서, M이 Ti인, 올레핀 중합 촉매 시스템.

[3149] 실시양태 48. 실시양태 46 또는 47에 있어서, R^7, R^8, R^9, 및 R^{10}이 각각 수소인, 올레핀 중합 촉매 시스템.

[3150] 실시양태 49. 실시양태 46 내지 48 중 어느 하나에 있어서, R^1 및 R^2가 각각 독립적으로 비치환된 C_{1-30} 하이드로카르빌 기인, 올레핀 중합 촉매 시스템.

[3151] 실시양태 50. 실시양태 46 내지 49 중 어느 하나에 있어서, R^1 및 R^2가 각각 독립적으로 이소프로필, 사이클로헥실 및 *tert*-부틸로 이루어지는 군 중에서 선택되는, 올레핀 중합 촉매 시스템.

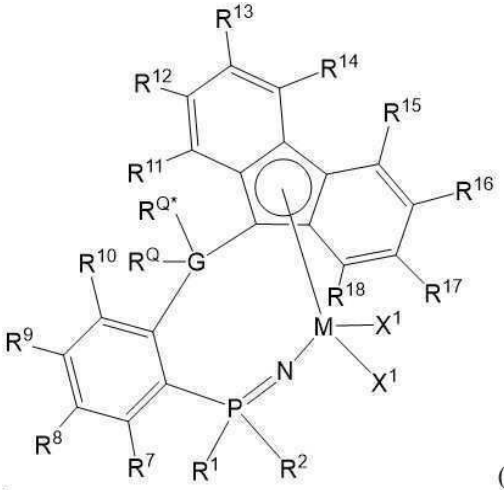
[3152] 실시양태 51. 실시양태 46 내지 50 중 어느 하나에 있어서, R^{12} 및 R^{17}이 각각 독립적으로 비치환된 C_{1-30} 하이드로카르빌 기이고, R^{11}, R^{13}, R^{14}, R^{15}, R^{16}, 및 R^{18}은 각각 수소인, 올레핀 중합 촉매 시스템.

[3153] 실시양태 52. 실시양태 46 내지 51 중 어느 하나에 있어서, R^{12} 및 R^{17}이 각각 *tert*-부틸 기인, 올레핀 중합 촉매 시스템.

[3154] 실시양태 53. 실시양태 46 내지 52 중 어느 하나에 있어서, 각 X^1이 독립적으로, C_{1-6} 알킬 기, C_{7-10} 아릴알킬 기, 및 할로겐으로 이루어지는 군 중에서 선택되는, 올레핀 중합 촉매 시스템.

[3155] 실시양태 54. 실시양태 46 내지 53 중 어느 하나에 있어서, 각 X^1이 독립적으로 메틸 기 및 Cl로 이루어지는 군 중에서 선택되는, 올레핀 중합 촉매 시스템.

[3156] 실시양태 55. 실시양태 45에 있어서, 유기금속 복합체가 화학식 VII로 표현되는, 올레핀 중합 촉매 시스템:

[3157] 

(VII)

[3158] 여기서, M, R^1, R^2, R^{11}, R^{12}, R^{13}, R^{14}, R^{15}, R^{16}, R^{17}, R^{18} 및 X^1은 화학식 I 및 V에서 정의된 바와 같고;

[3159] 여기서, G는 C 또는 Si이고;

[3160] 여기서, R^Q 및 R^{Q*}는 각각 독립적으로 다음으로 이루어진 군 중에서 선택되며:

[3161] 할로겐;

[3162] 수소;

[3163] C_{1-30} 하이드로카르빌 기로서, 여기서 하이드로카르빌 기는 비치환되거나, 또는 할로겐 원자, C_{1-20} 알킬 기, C_{1-20} 알콕시 기, C_{7-20} 알킬아릴 기, C_{7-20} 아릴알킬 기, C_{6-20} 아릴 기, C_{6-20} 아릴옥시 기, C_{7-20} 알킬아릴옥시 기, 및 C_{7-20} 아릴알킬옥시 기로 이루어지는 군 중에서 선택되는 하나 이상의 치환체에 의해 추가로 치환되는 C_{1-30} 하이드로카르빌 기;

[3164] 헤테로원자 함유 C_{1-30} 하이드로카르빌 기로서, 여기서 헤테로원자 함유 하이드로카르빌 기는 비치환되거나, 또는 할로겐 원자, C_{1-20} 알킬 기, C_{1-20} 알콕시 기, C_{7-20} 알킬아릴 기, C_{7-20} 아릴알킬 기, C_{6-20} 아릴 기, C_{6-20} 아릴옥시 기, C_{7-20} 알킬아릴옥시 기, 및 C_{7-20} 아릴알킬옥시 기로 이루어지는 군 중에서 선택되는 하나 이상의 치환체에 의해 추가로 치환되는 헤테로원자 함유 C_{1-30} 하이드로카르빌 기;

[3165] 여기서, R^Q 및 R^{Q*} 기는 선택적으로 결합되어 환형 하이드로카르빌 기 또는 환형 헤테로원자 함유 하이드로카르빌 기를 형성할 수 있고, 이 환형 하이드로카르빌 기 또는 환형 헤테로원자 함유 하이드로카르빌 기는 비치환되거나, 또는 할로겐 원자, C_{1-20} 알킬 기, C_{1-20} 알콕시 기, C_{7-20} 알킬아릴 기, C_{7-20} 아릴알킬 기, C_{6-20} 아릴 기, C_{6-20} 아릴옥시 기, C_{7-20} 알킬아릴옥시 기, C_{7-20} 아릴알킬옥시 기, 화학식 $-NR'_2$의 아미도 기; 화학식 $-PR'_2$의 포스

피도 기, 화학식 -SR'의 티올레이트 기, 화학식 $-Si(R^a)_3$의 실릴 기, 및 화학식 $-Ge(R^a)_3$의 게르마닐 기로 이루어지는 군 중에서 선택되는 하나 이상의 치환체에 의해 추가로 치환되며;

[3166] 여기서, R^7, R^8, R^9, 및 R^{10}은 각각 독립적으로 다음으로 이루어진 군 중에서 선택되고:

[3167] 할로겐;

[3168] 수소;

[3169] C_{1-30} 하이드로카르빌 기로서, 여기서 하이드로카르빌 기는 비치환되거나, 또는 할로겐 원자, C_{1-20} 알킬 기, C_{1-20} 알콕시 기, C_{7-20} 알킬아릴 기, C_{7-20} 아릴알킬 기, C_{6-20} 아릴 기, C_{6-20} 아릴옥시 기, C_{7-20} 알킬아릴옥시 기, 및 C_{7-20} 아릴알킬옥시 기로 이루어지는 군 중에서 선택되는 하나 이상의 치환체에 의해 추가로 치환되는, C_{1-30} 하이드로카르빌 기;

[3170] 헤테로원자 함유 C_{1-30} 하이드로카르빌 기로서, 여기서 헤테로원자 함유 하이드로카르빌 기는 비치환되거나, 또는 할로겐 원자, C_{1-20} 알킬 기, C_{1-20} 알콕시 기, C_{7-20} 알킬아릴 기, C_{7-20} 아릴알킬 기, C_{6-20} 아릴 기, C_{6-20} 아릴옥시 기, C_{7-20} 알킬아릴옥시 기, 및 C_{7-20} 아릴알킬옥시 기로 이루어지는 군 중에서 선택되는 하나 이상의 치환체에 의해 추가로 치환되는, 헤테로원자 함유 C_{1-30} 하이드로카르빌 기;

[3171] 옥시 기, -OR';

[3172] 아미도 기, $-NR'_2$;

[3173] 포스피도 기, $-PR'_2$;

[3174] 티올레이트 기, -SR';

[3175] 화학식 $-Si(R^a)_3$의 실릴 기; 및

[3176] 화학식 $-Ge(R^a)_3$의 게르마닐 기;

[3177] 여기서, R^7, R^8, R^9, 및 R^{10} 중 2개의 인접한 기는 선택적으로 결합되어 환형 하이드로카르빌 기 또는 환형 헤테로원자 함유 하이드로카르빌 기를 형성할 수 있고, 이 환형 하이드로카르빌 기 또는 환형 헤테로원자 함유 하이드로카르빌 기는 비치환되거나, 또는 할로겐 원자, C_{1-20} 알킬 기, C_{1-20} 알콕시 기, C_{7-20} 알킬아릴 기, C_{7-20} 아릴알킬 기, C_{6-20} 아릴 기, C_{6-20} 아릴옥시 기, C_{7-20} 알킬아릴옥시 기, C_{7-20} 아릴알킬옥시 기, 화학식 $-NR'_2$의 아미도 기, 화학식 $-PR'_2$의 포스피도 기, 화학식 -SR'의 티올레이트 기, 화학식 $-Si(R^a)_3$의 실릴 기, 및 화학식 $-Ge(R^a)_3$의 게르마닐 기로 이루어지는 군 중에서 선택되는 하나 이상의 치환체에 의해 추가로 치환되고;

[3178] 여기서 각 R'는 수소, C_{1-20} 알킬 기, 및 C_{6-20} 아릴 기로 이루어지는 군 중에서 독립적으로 선택되고;

[3179] 여기서 각 R^a는 수소, C_{1-8} 알킬 기, C_{1-8} 알콕시 기, C_{6-20} 아릴옥시 기 및 C_{6-20} 아릴 기로 이루어지는 군 중에서 독립적으로 선택된다.

[3180] 실시양태 56. 실시양태 55에 있어서, M이 Ti인, 올레핀 중합 촉매 시스템.

[3181] 실시양태 57. 실시양태 55 또는 56에 있어서, R^7, R^8, R^9, 및 R^{10}이 각각 수소인, 올레핀 중합 촉매 시스템.

[3182] 실시양태 58. 실시양태 55 내지 57 중 어느 하나에 있어서, R^1 및 R^2가 각각 독립적으로 비치환된 C_{1-30} 하이드로카르빌 기인, 올레핀 중합 촉매 시스템.

[3183] 실시양태 59. 실시양태 55 내지 58 중 어느 하나에 있어서, R^1 및 R^2가 각각 독립적으로 이소프로필, 사이클로헥실 및 *tert*-부틸로 이루어지는 군 중에서 선택되는, 올레핀 중합 촉매 시스템.

[3184] 실시양태 60. 실시양태 55 내지 59 중 어느 하나에 있어서, R^{12} 및 R^{17}이 각각 독립적으로 비치환된 C_{1-30} 하이드로카르빌 기이고, R^{11}, R^{13}, R^{14}, R^{15}, R^{16}, 및 R^{18}은 각각 수소인, 올레핀 중합 촉매 시스템.

[3185] 실시양태 61. 실시양태 55 내지 60 중 어느 하나에 있어서, R^{12} 및 R^{17}이 각각 *tert*-부틸 기인, 올레핀 중합 촉매 시스템.

[3186] 실시양태 62. 실시양태 55 내지 61 중 어느 하나에 있어서, G가 탄소인, 올레핀 중합 촉매 시스템.

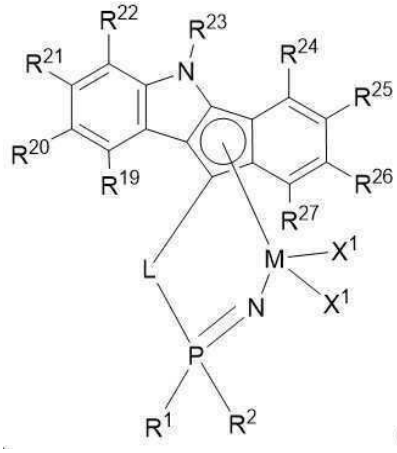
[3187] 실시양태 63. 실시양태 55 내지 62 중 어느 하나에 있어서, R^{Q} 및 R^{Q*}는 각각 독립적으로 수소, C_{1-20} 알킬 기, 및 C_{6-20} 아릴 기로 이루어지는 군 중에서 선택되는, 올레핀 중합 촉매 시스템.

[3188] 실시양태 64. 실시양태 55 내지 63 중 어느 하나에 있어서, R^{Q}가 수소이고, R^{Q*}가 C_{1-8} 알킬 기인, 올레핀 중합 촉매 시스템.

[3189] 실시양태 65. 실시양태 55 내지 64 중 어느 하나에 있어서, 각 X^{1}이 독립적으로 C_{1-6} 알킬 기, C_{7-10} 아릴알킬 기, 및 할로겐으로 이루어지는 군 중에서 선택되는, 올레핀 중합 촉매 시스템.

[3190] 실시양태 66. 실시양태 55 내지 65 중 어느 하나에 있어서, 각 X^{1}이 독립적으로 메틸 기 및 Cl로 이루어지는 군 중에서 선택되는, 올레핀 중합 촉매 시스템.

[3191] 실시양태 67. 실시양태 41에 있어서, 유기금속 복합체가 화학식 VIII로 표현되는 것인, 올레핀 중합 촉매 시스템:

[3192] 

(VIII)

[3193] 여기서, M, R^{1}, R^{2}, L 및 X^{1}은 화학식 I에서 정의된 바와 같고;

[3194] 여기서, R^{23}은 다음으로 이루어진 군 중에서 선택되며:

[3195] 수소;

[3196] C_{1-30} 하이드로카르빌 기로서, 여기서 하이드로카르빌 기는 비치환되거나, 또는 할로겐 원자, C_{1-20} 알킬 기, C_{1-20} 알콕시 기, C_{7-20} 알킬아릴 기, C_{7-20} 아릴알킬 기, C_{6-20} 아릴 기, C_{6-20} 아릴옥시 기, C_{7-20} 알킬아릴옥시 기, 및 C_{7-20} 아릴알킬옥시 기로 이루어지는 군 중에서 선택되는 하나 이상의 치환체에 의해 추가로 치환되는 C_{1-30} 하이드로카르빌 기;

[3197] 헤테로원자 함유 C_{1-30} 하이드로카르빌 기로서, 여기서 헤테로원자 함유 하이드로카르빌 기는 비치환되거나, 또는 할로겐 원자, C_{1-20} 알킬 기, C_{1-20} 알콕시 기, C_{7-20} 알킬아릴 기, C_{7-20} 아릴알킬 기, C_{6-20} 아릴 기, C_{6-20} 아릴옥시 기, C_{7-20} 알킬아릴옥시 기, 및 C_{7-20} 아릴알킬옥시 기로 이루어지는 군 중에서 선택되는 하나 이상의 치환체에 의해 추가로 치환되는 헤테로원자 함유 C_{1-30} 하이드로카르빌 기;

[3198] 여기서, R^{19}, R^{20}, R^{21}, R^{22}, R^{24}, R^{25}, R^{26}, 및 R^{27}은 각각 독립적으로 다음으로 이루어진 군 중에서 선택되고:

[3199] 할로겐;

[3200] 수소;

[3201] C_{1-30} 하이드로카르빌 기로서, 여기서 하이드로카르빌 기는 비치환되거나, 또는 할로겐 원자, C_{1-20} 알킬 기, C_{1-20} 알콕시 기, C_{7-20} 알킬아릴 기, C_{7-20} 아릴알킬 기, C_{6-20} 아릴 기, C_{6-20} 아릴옥시 기, C_{7-20} 알킬아릴옥시 기, 및 C_{7-20} 아릴알킬옥시 기로 이루어지는 군 중에서 선택되는 하나 이상의 치환체에 의해 추가로 치환되는, C_{1-30} 하이드로카르빌 기;

[3202] 헤테로원자 함유 C_{1-30} 하이드로카르빌 기로서, 여기서 헤테로원자 함유 하이드로카르빌 기는 비치환되거나, 또는 할로겐 원자, C_{1-20} 알킬 기, C_{1-20} 알콕시 기, C_{7-20} 알킬아릴 기, C_{7-20} 아릴알킬 기, C_{6-20} 아릴 기, C_{6-20} 아릴옥시 기, C_{7-20} 알킬아릴옥시 기, 및 C_{7-20} 아릴알킬옥시 기로 이루어지는 군 중에서 선택되는 하나 이상의 치환체에 의해 추가로 치환되는, 헤테로원자 함유 C_{1-30} 하이드로카르빌 기;

[3203] 옥시 기, -OR';

[3204] 아미도 기, $-NR'_2$;

[3205] 포스피도 기, $-PR'_2$;

[3206] 티올레이트 기, -SR';

[3207] 화학식 $-Si(R^a)_3$의 실릴 기; 및

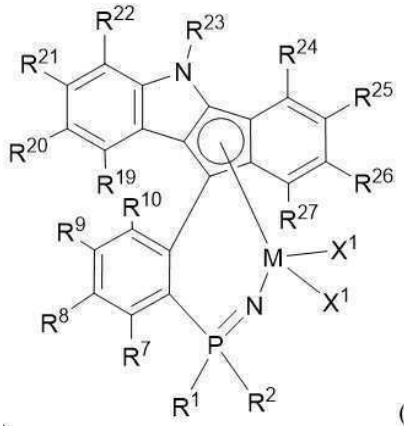
[3208] 화학식 $-Ge(R^a)_3$의 게르마닐 기;

[3209] 여기서, R^{19}, R^{20}, R^{21}, R^{22}, R^{24}, R^{25}, R^{26}, 및 R^{27} 중 2개의 인접한 기는 선택적으로 결합되어 환형 하이드로카르빌 기 또는 환형 헤테로원자 함유 하이드로카르빌 기를 형성할 수 있고, 이 환형 하이드로카르빌 기 또는 환형 헤테로원자 함유 하이드로카르빌 기는 비치환되거나, 또는 할로겐 원자, C_{1-20} 알킬 기, C_{1-20} 알콕시 기, C_{7-20} 알킬아릴 기, C_{7-20} 아릴알킬 기, C_{6-20} 아릴 기, C_{6-20} 아릴옥시 기, C_{7-20} 알킬아릴옥시 기, C_{7-20} 아릴알킬옥시 기, 화학식 $-NR'_2$의 아미도 기, 화학식 $-PR'_2$의 포스피도 기, 화학식 -SR'의 티올레이트 기, 화학식 $-Si(R^a)_3$의 실릴 기, 및 화학식 $-Ge(R^a)_3$의 게르마닐 기로 이루어지는 군 중에서 선택되는 하나 이상의 치환체에 의해 추가로 치환되고;

[3210] 여기서 각 R'는 수소, C_{1-20} 알킬 기, 및 C_{6-20} 아릴 기로 이루어지는 군 중에서 독립적으로 선택되고;

[3211] 여기서 각 R^a는 수소, C_{1-8} 알킬 기, C_{1-8} 알콕시 기, C_{6-20} 아릴옥시 기 및 C_{6-20} 아릴 기로 이루어지는 군 중에서 독립적으로 선택된다.

[3212] 실시양태 68. 실시양태 67에 있어서, 유기금속 복합체가 화학식 IX로 표현되는, 올레핀 중합 촉매 시스템:



(IX)

[3213]

[3214] 여기서, M, R^1, R^2, R^{19}, R^{20}, R^{21}, R^{22}, R^{23}, R^{24}, R^{25}, R^{26}, R^{27} 및 X^1은 화학식 I 및 VIII에서 정의된 바와 같고:

[3215] 여기서, R^7, R^8, R^9 및 R^{10}은 각각 독립적으로 다음으로 이루어진 군 중에서 선택되며:

[3216] 할로겐;

[3217] 수소;

[3218] C_{1-30} 하이드로카르빌 기로서, 여기서 하이드로카르빌 기는 비치환되거나, 또는 할로겐 원자, C_{1-20} 알킬 기, C_{1-20} 알콕시 기, C_{7-20} 알킬아릴 기, C_{7-20} 아릴알킬 기, C_{6-20} 아릴 기, C_{6-20} 아릴옥시 기, C_{7-20} 알킬아릴옥시 기, 및 C_{7-20} 아릴알킬옥시 기로 이루어지는 군 중에서 선택되는 하나 이상의 치환체에 의해 추가로 치환되는 C_{1-30} 하이드로카르빌 기;

[3219] 헤테로원자 함유 C_{1-30} 하이드로카르빌 기로서, 여기서 헤테로원자 함유 하이드로카르빌 기는 비치환되거나, 또는 할로겐 원자, C_{1-20} 알킬 기, C_{1-20} 알콕시 기, C_{7-20} 알킬아릴 기, C_{7-20} 아릴알킬 기, C_{6-20} 아릴 기, C_{6-20} 아릴옥시 기, C_{7-20} 알킬아릴옥시 기, 및 C_{7-20} 아릴알킬옥시 기로 이루어지는 군 중에서 선택되는 하나 이상의 치환체에 의해 추가로 치환되는 헤테로원자 함유 C_{1-30} 하이드로카르빌 기;

[3220] 옥시 기, -OR';

[3221] 아미도 기, $-NR'_2$;

[3222] 포스피도 기, $-PR'_2$;

[3223] 티올레이트 기, -SR';

[3224] 화학식 $-Si(R^a)_3$의 실릴 기; 및

[3225] 화학식 $-Ge(R^a)_3$의 게르마닐 기;

[3226] 여기서, R^7, R^8, R^9, 및 R^{10} 중 2개의 인접한 기는 선택적으로 결합되어 환형 하이드로카르빌 기 또는 환형 헤테로원자 함유 하이드로카르빌 기를 형성할 수 있고, 이 환형 하이드로카르빌 기 또는 환형 헤테로원자 함유 하이드로카르빌 기는 비치환되거나, 또는 할로겐 원자, C_{1-20} 알킬 기, C_{1-20} 알콕시 기, C_{7-20} 알킬아릴 기, C_{7-20} 아릴알킬 기, C_{6-20} 아릴 기, C_{6-20} 아릴옥시 기, C_{7-20} 알킬아릴옥시 기, C_{7-20} 아릴알킬옥시 기, 화학식 $-NR'_2$의 아미도 기, 화학식 $-PR'_2$의 포스피도 기, 화학식 -SR'의 티올레이트 기, 화학식 $-Si(R^a)_3$의 실릴 기, 및 화학식 $-Ge(R^a)_3$의 게르마닐 기로 이루어지는 군 중에서 선택되는 하나 이상의 치환체에 의해 추가로 치환되고;

[3227] 여기서 각 R'는 수소, C_{1-20} 알킬 기, 및 C_{6-20} 아릴 기로 이루어지는 군 중에서 독립적으로 선택되고;

[3228] 여기서 각 R^a는 수소, C_{1-8} 알킬 기, C_{1-8} 알콕시 기, C_{6-20} 아릴옥시 기 및 C_{6-20} 아릴 기로 이루어지는 군 중에서 독립적으로 선택된다.

[3229] 실시양태 69. 실시양태 68에 있어서, M이 Ti인, 올레핀 중합 촉매 시스템.

[3230] 실시양태 70. 실시양태 68 또는 69에 있어서, R^7, R^8, R^9, 및 R^{10}이 각각 수소인, 올레핀 중합 촉매 시스템.

[3231] 실시양태 71. 실시양태 68 내지 70 중 어느 하나에 있어서, R^1 및 R^2가 각각 독립적으로 비치환된 C_{1-30} 하이드로카르빌 기인, 올레핀 중합 촉매 시스템.

[3232] 실시양태 72. 실시양태 68 내지 71 중 어느 하나에 있어서, R^1 및 R^2가 각각 독립적으로 이소프로필, 사이클로헥실 및 *tert*-부틸로 이루어지는 군 중에서 선택되는, 올레핀 중합 촉매 시스템.

[3233] 실시양태 73. 실시양태 68 내지 72 중 어느 하나에 있어서, R^{23}이 비치환된 C_{1-30} 하이드로카르빌 기인, 올레핀 중합 촉매 시스템.

[3234] 실시양태 74. 실시양태 68 내지 73 중 어느 하나에 있어서, R^{23}이 C_{1-8} 알킬 기인, 올레핀 중합 촉매 시스템.

[3235] 실시양태 75. 실시양태 68 내지 74 중 어느 하나에 있어서, R^{20}이 비치환된 C_{1-30} 하이드로카르빌 기인, 올레핀 중합 촉매 시스템.

[3236] 실시양태 76. 실시양태 68 내지 75 중 어느 하나에 있어서, R^{20}이 비치환된 C_{1-8} 알킬 기인, 올레핀 중합 촉매 시스템.

[3237] 실시양태 77. 실시양태 68 내지 74 중 어느 하나에 있어서, R^{20}이 비치환된 C_{1-30} 하이드로카르빌 기이고, R^{19}, R^{21}, R^{22}, R^{24}, R^{25}, R^{26}, 및 R^{27}이 각각 수소인, 올레핀 중합 촉매 시스템.

[3238] 실시양태 78. 실시양태 77에 있어서, R^{20}이 C_{1-8} 알킬 기인, 올레핀 중합 촉매 시스템.

[3239] 실시양태 79. 실시양태 68 내지 78 중 어느 하나에 있어서, 각 X^1이 C_{1-6} 알킬 기, C_{7-10} 아릴알킬 기, 및 할로겐으로 이루어지는 군 중에서 독립적으로 선택되는, 올레핀 중합 촉매 시스템.

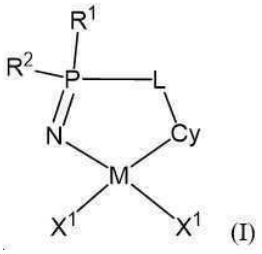
[3240] 실시양태 80. 실시양태 68 내지 79 중 어느 하나에 있어서, 각 X^1이 메틸 기 및 Cl로 이루어지는 군 중에서 독립적으로 선택되는, 올레핀 중합 촉매 시스템.

[3241] 실시양태 81. 실시양태 41 내지 80 중 어느 하나에 있어서, 촉매 활성화제가 알킬알루미녹산 공촉매, 유기알루미늄 화합물, 붕소계 촉매 활성화제, 및 이들의 혼합물로 이루어지는 군 중에서 선택되는, 올레핀 중합 촉매 시스템.

[3242] 실시양태 82. 실시양태 81에 있어서, 붕소계 촉매 활성화제가 [(수소화된 탈로우 알킬)$_2$(Me)NH][B(C_6F_5)$_4$]; N,N-디메틸아닐리늄 테트라키스(펜타플루오로페닐) 붕산염 ("[Me_2NHPh][B(C_6F_5)$_4$]"); 및 트리페닐메틸륨 테트라키스(펜타플루오로페닐) 붕산염 ("[Ph_3C][B(C_6F_5)$_4$]")으로 이루어지는 군 중에서 선택되는, 올레핀 중합 촉매 시스템.

[3243] 실시양태 83. 에틸렌을 다음을 포함하는 올레핀 중합 촉매 시스템의 존재 하에, 선택적으로 하나 이상의 C_3-C_{12} 알파-올레핀과 중합시키는 것을 포함하는 중합 공정:

[3244] i) 화학식 I로 표현되는 유기금속 복합체;

[3245] 
(I)

[3246] 여기서,

[3247] M은 Ti, Zr 또는 Hf이고;

[3248] R^1 및 R^2는 각각 독립적으로 수소 및 R^X로 이루어진 군 중에서 선택되거나; 또는 R^1 및 R^2는 이들이 부착된 P 원자와 함께, 비치환되거나, 또는 할로겐 원자, C_{1-20} 알킬 기, C_{1-20} 알콕시 기, C_{7-20} 알킬아릴 기, C_{7-20} 아릴알킬 기, C_{6-20} 아릴 기, C_{6-20} 아릴옥시 기, C_{7-20} 알킬아릴옥시 기, 및 C_{7-20} 아릴알킬옥시 기로 이루어진 군 중에서 선택되는 하나 이상의 치환체에 의해 추가로 치환되는 3-10원 헤테로환형 기를 형성하며;

[3249] 각 R^X는 할로겐 원자; 하이드로카르빌 기가 비치환되거나, 또는 하나 이상의 할로겐 원자, C_{1-20} 알킬 기, C_{1-20} 알콕시 기, C_{7-20} 알킬아릴 기, C_{7-20} 아릴알킬 기, C_{6-20} 아릴 기, C_{6-20} 아릴옥시 기, C_{7-20} 알킬아릴옥시 기, 및/또는 C_{7-20} 아릴알킬옥시 기에 의해 추가로 치환되는 C_{1-30} 하이드로카르빌 기; 화학식 $-NR'_2$의 아미도 기; 화학식 $-Si(R^a)_3$의 실릴 기; 화학식 $-Ge(R^a)_3$의 게르마닐 기; 및 화학식 $-N=P(R^b)(R^c)(R^d)$의 포스핀이민 기로 이루어진 군 중에서 독립적으로 선택되고; 여기서 각 R'는 수소, C_{1-20} 알킬 기, 및 C_{6-20} 아릴 기로 이루어지는 군 중에서 독립적으로 선택되고; 각 R^a는 수소, C_{1-8} 알킬 기, C_{1-8} 알콕시 기, C_{6-20} 아릴옥시 기 및 C_{6-20} 아릴 기로 이루어진 군 중에서 독립적으로 선택되고; R^b, R^c, R^d는 각각 독립적으로 C_{1-20} 알킬 기이며;

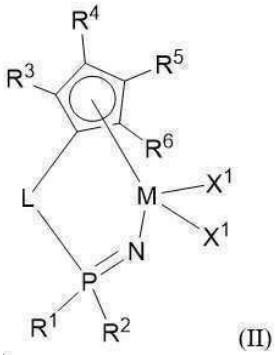
[3250] 각 X^1은 활성화 가능한 리간드이고;

[3251] Cy는 L에 공유 결합되고 η-결합을 통해 M에 배위된 사이클로펜타디에닐형 리간드이고; 그리고

[3252] L은 Cy와 P를 연결하는 원자의 근접한 사슬을 함유하는 가교 기로서, 여기서 근접한 사슬은 2개 또는 3개의 원자를 함유함; 및

[3253] ii) 촉매 활성화제.

[3254] 실시양태 84. 실시양태 83에 있어서, 유기금속 복합체가 화학식 II로 표현되는, 중합 공정:

[3255] 
(II)

[3256] 여기서, M, R^1, R^2, L 및 X^1은 화학식 I에서 정의된 바와 같고;

[3257] R^3, R^4, R^5 및 R^6은 각각 독립적으로 다음으로 이루어진 군 중에서 선택되고:

[3258] 할로겐;

[3259] 수소;

[3260] C_{1-30} 하이드로카르빌 기로서, 여기서 하이드로카르빌 기는 비치환되거나, 또는 할로겐 원자, C_{1-20} 알킬 기, C_{1-20} 알콕시 기, C_{7-20} 알킬아릴 기, C_{7-20} 아릴알킬 기, C_{6-20} 아릴 기, C_{6-20} 아릴옥시 기, C_{7-20} 알킬아릴옥시 기, 및 C_{7-20} 아릴알킬옥시 기로 이루어지는 군 중에서 선택되는 하나 이상의 치환체에 의해 추가로 치환되는 C_{1-30} 하이드로카르빌 기;

[3261] 헤테로원자 함유 C_{1-30} 하이드로카르빌 기로서, 여기서 헤테로원자 함유 하이드로카르빌 기는 비치환되거나, 또는 할로겐 원자, C_{1-20} 알킬 기, C_{1-20} 알콕시 기, C_{7-20} 알킬아릴 기, C_{7-20} 아릴알킬 기, C_{6-20} 아릴 기, C_{6-20} 아릴옥시 기, C_{7-20} 알킬아릴옥시 기, 및 C_{7-20} 아릴알킬옥시 기로 이루어지는 군 중에서 선택되는 하나 이상의 치환체에 의해 추가로 치환되는 헤테로원자 함유 C_{1-30} 하이드로카르빌 기;

[3262] 옥시 기, -OR';

[3263] 아미도 기, $-NR'_2$;

[3264] 포스피도 기, $-PR'_2$;

[3265] 티올레이트 기, -SR';

[3266] 화학식 $-Si(R^a)_3$의 실릴 기; 및

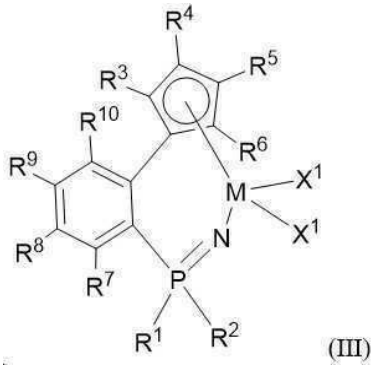
[3267] 화학식 $-Ge(R^a)_3$의 게르마닐 기;

[3268] 여기서, R^3, R^4, R^5 및 R^6 중 2개의 인접한 기는 선택적으로 결합되어 환형 하이드로카르빌 기 또는 환형 헤테로원자 함유 하이드로카르빌 기를 형성할 수 있고, 이 환형 하이드로카르빌 기 또는 환형 헤테로원자 함유 하이드로카르빌 기는 비치환되거나, 또는 할로겐 원자, C_{1-20} 알킬 기, C_{1-20} 알콕시 기, C_{7-20} 알킬아릴 기, C_{7-20} 아릴알킬 기, C_{6-20} 아릴 기, C_{6-20} 아릴옥시 기, C_{7-20} 알킬아릴옥시 기, C_{7-20} 아릴알킬옥시 기, 화학식 $-NR'_2$의 아미도 기, 화학식 $-PR'_2$의 포스피도 기, 화학식 -SR'의 티올레이트 기, 화학식 $-Si(R^a)_3$의 실릴 기, 및 화학식 $-Ge(R^a)_3$의 게르마닐 기로 이루어지는 군 중에서 선택되는 하나 이상의 치환체에 의해 추가로 치환되고;

[3269] 여기서 각 R'는 수소, C_{1-20} 알킬 기, 및 C_{6-20} 아릴 기로 이루어지는 군 중에서 독립적으로 선택되고;

[3270] 여기서 각 R^a는 수소, C_{1-8} 알킬 기, C_{1-8} 알콕시 기, C_{6-20} 아릴옥시 기 및 C_{6-20} 아릴 기로 이루어지는 군 중에서 독립적으로 선택된다.

[3271] 실시양태 85. 실시양태 84에 있어서, 유기금속 복합체가 화학식 III으로 표현되는, 중합 공정:

[3272] 

(III)

[3273] 여기서, M, R^1, R^2, R^3, R^4, R^5, R^6 및 X^1은 화학식 I 및 II에서 정의된 바와 같고;

[3274] 여기서, R^7, R^8, R^9, 및 R^{10}은 각각 독립적으로 다음으로 이루어진 군 중에서 선택되고:

[3275] 할로겐;

[3276] 수소;

[3277] C_{1-30} 하이드로카르빌 기로서, 여기서 하이드로카르빌 기는 비치환되거나, 또는 할로겐 원자, C_{1-20} 알킬 기, C_{1-20} 알콕시 기, C_{7-20} 알킬아릴 기, C_{7-20} 아릴알킬 기, C_{6-20} 아릴 기, C_{6-20} 아릴옥시 기, C_{7-20} 알킬아릴옥시 기, 및 C_{7-20} 아릴알킬옥시 기로 이루어지는 군 중에서 선택되는 하나 이상의 치환체에 의해 추가로 치환되는 C_{1-30} 하이드로카르빌 기;

[3278] 헤테로원자 함유 C_{1-30} 하이드로카르빌 기로서, 여기서 헤테로원자 함유 하이드로카르빌 기는 비치환되거나, 또는 할로겐 원자, C_{1-20} 알킬 기, C_{1-20} 알콕시 기, C_{7-20} 알킬아릴 기, C_{7-20} 아릴알킬 기, C_{6-20} 아릴 기, C_{6-20} 아릴옥시 기, C_{7-20} 알킬아릴옥시 기, 및 C_{7-20} 아릴알킬옥시 기로 이루어지는 군 중에서 선택되는 하나 이상의 치환체에 의해 추가로 치환되는 헤테로원자 함유 C_{1-30} 하이드로카르빌 기;

[3279] 옥시 기, -OR';

[3280] 아미도 기, $-NR'_2$;

[3281] 포스피도 기, $-PR'_2$;

[3282] 티올레이트 기, -SR';

[3283] 화학식 $-Si(R^a)_3$의 실릴 기; 및

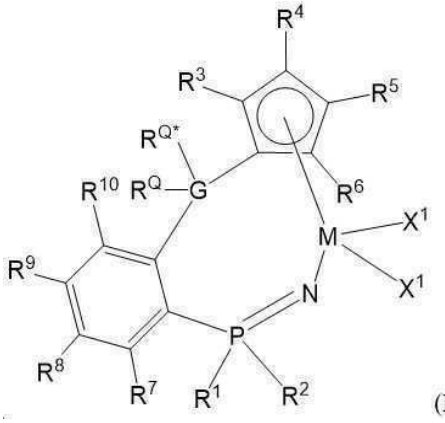
[3284] 화학식 $-Ge(R^a)_3$의 게르마닐 기;

[3285] 여기서, R^7, R^8, R^9, 및 R^{10} 중 2개의 인접한 기는 선택적으로 결합되어 환형 하이드로카르빌 기 또는 환형 헤테로원자 함유 하이드로카르빌 기를 형성할 수 있고, 이 환형 하이드로카르빌 기 또는 환형 헤테로원자 함유 하이드로카르빌 기는 비치환되거나, 또는 할로겐 원자, C_{1-20} 알킬 기, C_{1-20} 알콕시 기, C_{7-20} 알킬아릴 기, C_{7-20} 아릴알킬 기, C_{6-20} 아릴 기, C_{6-20} 아릴옥시 기, C_{7-20} 알킬아릴옥시 기, C_{7-20} 아릴알킬옥시 기, 화학식 $-NR'_2$의 아미도 기, 화학식 $-PR'_2$의 포스피도 기, 화학식 -SR'의 티올레이트 기, 화학식 $-Si(R^a)_3$의 실릴 기, 및 화학식 $-Ge(R^a)_3$의 게르마닐 기로 이루어지는 군 중에서 선택되는 하나 이상의 치환체에 의해 추가로 치환되고;

[3286] 여기서 각 R'는 수소, C_{1-20} 알킬 기, 및 C_{6-20} 아릴 기로 이루어지는 군 중에서 독립적으로 선택되고;

[3287] 여기서 각 R^a는 수소, C_{1-8} 알킬 기, C_{1-8} 알콕시 기, C_{6-20} 아릴옥시 기 및 C_{6-20} 아릴 기로 이루어지는 군 중에서 독립적으로 선택된다.

[3288] 실시양태 86. 실시양태 84에 있어서, 유기금속 복합체가 화학식 IV로 표현되는, 중합 공정:

[3289] 

(IV)

[3290] 여기서, M, R^1, R^2, R^3, R^4, R^5, R^6 및 X^1은 화학식 I 및 II에서 정의된 바와 같고;

[3291] 여기서, G는 C 또는 Si이고;

[3292] 여기서, R^Q 및 R^{Q*}는 각각 독립적으로 다음으로 이루어진 군 중에서 선택되며:

[3293] 할로겐;

[3294] 수소;

[3295] C_{1-30} 하이드로카르빌 기로서, 여기서 하이드로카르빌 기는 비치환되거나, 또는 할로겐 원자, C_{1-20} 알킬 기, C_{1-20} 알콕시 기, C_{7-20} 알킬아릴 기, C_{7-20} 아릴알킬 기, C_{6-20} 아릴 기, C_{6-20} 아릴옥시 기, C_{7-20} 알킬아릴옥시 기, 및 C_{7-20} 아릴알킬옥시 기로 이루어지는 군 중에서 선택되는 하나 이상의 치환체에 의해 추가로 치환되는 C_{1-30} 하이드로카르빌 기;

[3296] 헤테로원자 함유 C_{1-30} 하이드로카르빌 기로서, 여기서 헤테로원자 함유 하이드로카르빌 기는 비치환되거나, 또는 할로겐 원자, C_{1-20} 알킬 기, C_{1-20} 알콕시 기, C_{7-20} 알킬아릴 기, C_{7-20} 아릴알킬 기, C_{6-20} 아릴 기, C_{6-20} 아릴옥시 기, C_{7-20} 알킬아릴옥시 기, 및 C_{7-20} 아릴알킬옥시 기로 이루어지는 군 중에서 선택되는 하나 이상의 치환체에 의해 추가로 치환되는 헤테로원자 함유 C_{1-30} 하이드로카르빌 기;

[3297] 여기서, R^Q 및 R^{Q*} 기는 선택적으로 결합되어 환형 하이드로카르빌 기 또는 환형 헤테로원자 함유 하이드로카르빌 기를 형성할 수 있고, 이 환형 하이드로카르빌 기 또는 환형 헤테로원자 함유 하이드로카르빌 기는 비치환되거나, 또는 할로겐 원자, C_{1-20} 알킬 기, C_{1-20} 알콕시 기, C_{7-20} 알킬아릴 기, C_{7-20} 아릴알킬 기, C_{6-20} 아릴 기, C_{6-20} 아릴옥시 기, C_{7-20} 알킬아릴옥시 기, C_{7-20} 아릴알킬옥시 기, 화학식 $-NR'_2$의 아미도 기; 화학식 $-PR'_2$의 포스피도 기, 화학식 -SR'의 티올레이트 기, 화학식 $-Si(R^a)_3$의 실릴 기, 및 화학식 $-Ge(R^a)_3$의 게르마닐 기로 이루어지는 군 중에서 선택되는 하나 이상의 치환체에 의해 추가로 치환되며;

[3298] 여기서, R^7, R^8, R^9, 및 R^{10}은 각각 독립적으로 다음으로 이루어진 군 중에서 선택되고:

[3299] 할로겐;

[3300] 수소;

[3301] C_{1-30} 하이드로카르빌 기로서, 여기서 하이드로카르빌 기는 비치환되거나, 또는 할로겐 원자, C_{1-20} 알킬 기, C_{1-20} 알콕시 기, C_{7-20} 알킬아릴 기, C_{7-20} 아릴알킬 기, C_{6-20} 아릴 기, C_{6-20} 아릴옥시 기, C_{7-20} 알킬아릴옥시 기, 및 C_{7-20} 아릴알킬옥시 기로 이루어지는 군 중에서 선택되는 하나 이상의 치환체에 의해 추가로 치환되는, C_{1-30} 하이드로카르빌 기;

[3302] 헤테로원자 함유 C_{1-30} 하이드로카르빌 기로서, 여기서 헤테로원자 함유 하이드로카르빌 기는 비치환되거나, 또는

할로겐 원자, C_{1-20} 알킬 기, C_{1-20} 알콕시 기, C_{7-20} 알킬아릴 기, C_{7-20} 아릴알킬 기, C_{6-20} 아릴 기, C_{6-20} 아릴옥시 기, C_{7-20} 알킬아릴옥시 기, 및 C_{7-20} 아릴알킬옥시 기로 이루어지는 군 중에서 선택되는 하나 이상의 치환체에 의해 추가로 치환되는, 헤테로원자 함유 C_{1-30} 하이드로카르빌 기;

[3303] 옥시 기, -OR';

[3304] 아미도 기, $-NR'_2$;

[3305] 포스피도 기, $-PR'_2$;

[3306] 티올레이트 기, -SR';

[3307] 화학식 $-Si(R^a)_3$의 실릴 기; 및

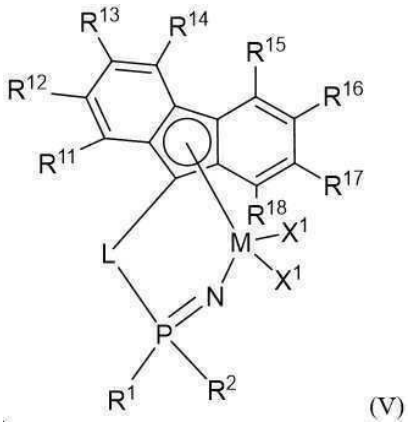
[3308] 화학식 $-Ge(R^a)_3$의 게르마닐 기;

[3309] 여기서, R^7, R^8, R^9, 및 R^{10} 중 2개의 인접한 기는 선택적으로 결합되어 환형 하이드로카르빌 기 또는 환형 헤테로원자 함유 하이드로카르빌 기를 형성할 수 있고, 이 환형 하이드로카르빌 기 또는 환형 헤테로원자 함유 하이드로카르빌 기는 비치환되거나, 또는 할로겐 원자, C_{1-20} 알킬 기, C_{1-20} 알콕시 기, C_{7-20} 알킬아릴 기, C_{7-20} 아릴알킬 기, C_{6-20} 아릴 기, C_{6-20} 아릴옥시 기, C_{7-20} 알킬아릴옥시 기, C_{7-20} 아릴알킬옥시 기, 화학식 $-NR'_2$의 아미도 기, 화학식 $-PR'_2$의 포스피도 기, 화학식 -SR'의 티올레이트 기, 화학식 $-Si(R^a)_3$의 실릴 기, 및 화학식 $-Ge(R^a)_3$의 게르마닐 기로 이루어지는 군 중에서 선택되는 하나 이상의 치환체에 의해 추가로 치환되고;

[3310] 여기서 각 R'는 수소, C_{1-20} 알킬 기, 및 C_{6-20} 아릴 기로 이루어지는 군 중에서 독립적으로 선택되고;

[3311] 여기서 각 R^a는 수소, C_{1-8} 알킬 기, C_{1-8} 알콕시 기, C_{6-20} 아릴옥시 기 및 C_{6-20} 아릴 기로 이루어지는 군 중에서 독립적으로 선택된다.

[3312] 실시양태 87. 실시양태 83에 있어서, 유기금속 복합체가 화학식 V로 표현되는 중합 공정:

[3313] 

(V)

[3314] 여기서, M, R^1, R^2, L 및 X^1은 화학식 I에서 정의된 바와 같고;

[3315] 여기서, R^{11}, R^{12}, R^{13}, R^{14}, R^{15}, R^{16}, R^{17}, R^{18}은 각각 독립적으로 다음으로 이루어진 군 중에서 선택되고:

[3316] 할로겐;

[3317] 수소;

[3318] C_{1-30} 하이드로카르빌 기로서, 여기서 하이드로카르빌 기는 비치환되거나, 또는 할로겐 원자, C_{1-20} 알킬 기, C_{1-20} 알콕시 기, C_{7-20} 알킬아릴 기, C_{7-20} 아릴알킬 기, C_{6-20} 아릴 기, C_{6-20} 아릴옥시 기, C_{7-20} 알킬아릴옥시 기, 및 C_{7-}

$_{20}$ 아릴알킬옥시 기로 이루어지는 군 중에서 선택되는 하나 이상의 치환체에 의해 추가로 치환되는, C_{1-30} 하이드로카르빌 기;

[3319] 헤테로원자 함유 C_{1-30} 하이드로카르빌 기로서, 여기서 헤테로원자 함유 하이드로카르빌 기는 비치환되거나, 또는 할로겐 원자, C_{1-20} 알킬 기, C_{1-20} 알콕시 기, C_{7-20} 알킬아릴 기, C_{7-20} 아릴알킬 기, C_{6-20} 아릴 기, C_{6-20} 아릴옥시 기, C_{7-20} 알킬아릴옥시 기, 및 C_{7-20} 아릴알킬옥시 기로 이루어지는 군 중에서 선택되는 하나 이상의 치환체에 의해 추가로 치환되는, 헤테로원자 함유 C_{1-30} 하이드로카르빌 기;

[3320] 옥시 기, -OR';

[3321] 아미도 기, $-NR'_2$;

[3322] 포스피도 기, $-PR'_2$;

[3323] 티올레이트 기, -SR';

[3324] 화학식 $-Si(R^a)_3$의 실릴 기; 및

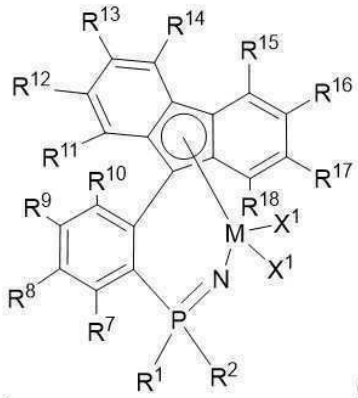
[3325] 화학식 $-Ge(R^a)_3$의 게르마닐 기;

[3326] 여기서, R^{11}, R^{12}, R^{13}, R^{14}, R^{15}, R^{16}, R^{17}, R^{18} 중 2개의 인접한 기는 선택적으로 결합되어 환형 하이드로카르빌 기 또는 환형 헤테로원자 함유 하이드로카르빌 기를 형성할 수 있고, 이 환형 하이드로카르빌 기 또는 환형 헤테로원자 함유 하이드로카르빌 기는 비치환되거나, 또는 할로겐 원자, C_{1-20} 알킬 기, C_{1-20} 알콕시 기, C_{7-20} 알킬아릴 기, C_{7-20} 아릴알킬 기, C_{6-20} 아릴 기, C_{6-20} 아릴옥시 기, C_{7-20} 알킬아릴옥시 기, C_{7-20} 아릴알킬옥시 기, 화학식 $-NR'_2$의 아미도 기, 화학식 $-PR'_2$의 포스피도 기, 화학식 -SR'의 티올레이트 기, 화학식 $-Si(R^a)_3$의 실릴 기, 및 화학식 $-Ge(R^a)_3$의 게르마닐 기로 이루어지는 군 중에서 선택되는 하나 이상의 치환체에 의해 추가로 치환되고;

[3327] 여기서 각 R'는 수소, C_{1-20} 알킬 기, 및 C_{6-20} 아릴 기로 이루어지는 군 중에서 독립적으로 선택되고;

[3328] 여기서 각 R^a는 수소, C_{1-8} 알킬 기, C_{1-8} 알콕시 기, C_{6-20} 아릴옥시 기 및 C_{6-20} 아릴 기로 이루어지는 군 중에서 독립적으로 선택된다.

[3329] 실시양태 88. 실시양태 87에 있어서, 유기금속 복합체가 화학식 VI으로 표현되는, 중합 공정:

[3330] 

(VI)

[3331] 여기서, M, R^1, R^2, R^{11}, R^{12}, R^{13}, R^{14}, R^{15}, R^{16}, R^{17}, R^{18} 및 X^1은 화학식 I 및 V에서 정의된 바와 같고;

[3332] 여기서, R^7, R^8, R^9, 및 R^{10}은 각각 독립적으로 다음으로 이루어진 군 중에서 선택되고:

[3333] 할로겐;

[3334] 수소;

[3335] C_{1-30} 하이드로카르빌 기로서, 여기서 하이드로카르빌 기는 비치환되거나, 또는 할로겐 원자, C_{1-20} 알킬 기, C_{1-20} 알콕시 기, C_{7-20} 알킬아릴 기, C_{7-20} 아릴알킬 기, C_{6-20} 아릴 기, C_{6-20} 아릴옥시 기, C_{7-20} 알킬아릴옥시 기, 및 C_{7-20} 아릴알킬옥시 기로 이루어지는 군 중에서 선택되는 하나 이상의 치환체에 의해 추가로 치환되는, C_{1-30} 하이드로카르빌 기;

[3336] 헤테로원자 함유 C_{1-30} 하이드로카르빌 기로서, 여기서 헤테로원자 함유 하이드로카르빌 기는 비치환되거나, 또는 할로겐 원자, C_{1-20} 알킬 기, C_{1-20} 알콕시 기, C_{7-20} 알킬아릴 기, C_{7-20} 아릴알킬 기, C_{6-20} 아릴 기, C_{6-20} 아릴옥시 기, C_{7-20} 알킬아릴옥시 기, 및 C_{7-20} 아릴알킬옥시 기로 이루어지는 군 중에서 선택되는 하나 이상의 치환체에 의해 추가로 치환되는, 헤테로원자 함유 C_{1-30} 하이드로카르빌 기;

[3337] 옥시 기, -OR';

[3338] 아미도 기, $-NR'_2$;

[3339] 포스피도 기, $-PR'_2$;

[3340] 티올레이트 기, -SR';

[3341] 화학식 $-Si(R^a)_3$의 실릴 기; 및

[3342] 화학식 $-Ge(R^a)_3$의 게르마닐 기;

[3343] 여기서, R^7, R^8, R^9, 및 R^{10} 중 2개의 인접한 기는 선택적으로 결합되어 환형 하이드로카르빌 기 또는 환형 헤테로원자 함유 하이드로카르빌 기를 형성할 수 있고, 이 환형 하이드로카르빌 기 또는 환형 헤테로원자 함유 하이드로카르빌 기는 비치환되거나, 또는 할로겐 원자, C_{1-20} 알킬 기, C_{1-20} 알콕시 기, C_{7-20} 알킬아릴 기, C_{7-20} 아릴알킬 기, C_{6-20} 아릴 기, C_{6-20} 아릴옥시 기, C_{7-20} 알킬아릴옥시 기, C_{7-20} 아릴알킬옥시 기, 화학식 $-NR'_2$의 아미도 기, 화학식 $-PR'_2$의 포스피도 기, 화학식 -SR'의 티올레이트 기, 화학식 $-Si(R^a)_3$의 실릴 기, 및 화학식 $-Ge(R^a)_3$의 게르마닐 기로 이루어지는 군 중에서 선택되는 하나 이상의 치환체에 의해 추가로 치환되고;

[3344] 여기서 각 R'는 수소, C_{1-20} 알킬 기, 및 C_{6-20} 아릴 기로 이루어지는 군 중에서 독립적으로 선택되고;

[3345] 여기서 각 R^a는 수소, C_{1-8} 알킬 기, C_{1-8} 알콕시 기, C_{6-20} 아릴옥시 기 및 C_{6-20} 아릴 기로 이루어지는 군 중에서 독립적으로 선택된다.

[3346] 실시양태 89. 실시양태 88에 있어서, M이 Ti인, 중합 공정.

[3347] 실시양태 90. 실시양태 88 또는 89에 있어서, R^7, R^8, R^9, 및 R^{10}이 각각 수소인, 중합 공정.

[3348] 실시양태 91. 실시양태 88 내지 90 중 어느 하나에 있어서, R^1 및 R^2가 각각 독립적으로 비치환된 C_{1-30} 하이드로카르빌 기인, 중합 공정.

[3349] 실시양태 92. 실시양태 88 내지 91 중 어느 하나에 있어서, R^1 및 R^2가 각각 독립적으로 이소프로필, 사이클로헥실 및 *tert*-부틸로 이루어지는 군 중에서 선택되는, 중합 공정.

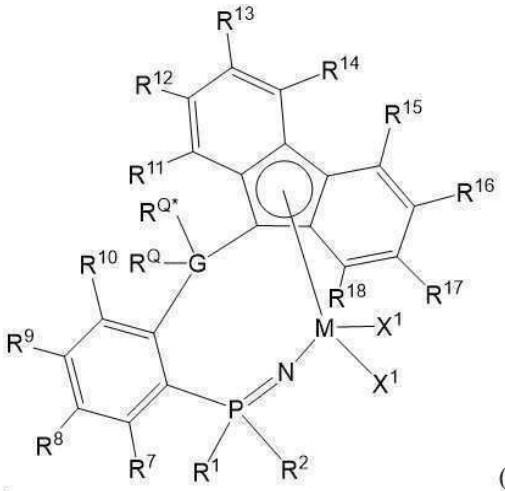
[3350] 실시양태 93. 실시양태 88 내지 92 중 어느 하나에 있어서, R^{12} 및 R^{17}이 각각 독립적으로 비치환된 C_{1-30} 하이드로카르빌 기이고, R^{11}, R^{13}, R^{14}, R^{15}, R^{16}, 및 R^{18}은 각각 수소인, 중합 공정.

[3351] 실시양태 94. 실시양태 88 내지 93 중 어느 하나에 있어서, R^{12} 및 R^{17}이 각각 *tert*-부틸 기인, 중합 공정.

[3352] 실시양태 95. 실시양태 88 내지 94 중 어느 하나에 있어서, 각 X^1이 C_{1-6} 알킬 기, C_{7-10} 아릴알킬 기, 및 할로겐으로 이루어지는 군 중에서 독립적으로 선택되는, 중합 공정.

[3353] 실시양태 96. 실시양태 88 내지 95 중 어느 하나에 있어서, 각 X^1이 메틸 기 및 Cl로 이루어지는 군 중에서 독립적으로 선택되는, 중합 공정.

[3354] 실시양태 97. 실시양태 87에 있어서, 유기금속 복합체가 화학식 VII로 표현되는, 중합 공정:



(VII)

[3355]

[3356] 여기서, M, R^1, R^2, R^{11}, R^{12}, R^{13}, R^{14}, R^{15}, R^{16}, R^{17}, R^{18} 및 X^1은 화학식 I 및 V에서 정의된 바와 같고;

[3357] 여기서, G는 C 또는 Si이고;

[3358] 여기서, R^Q 및 R^{Q*}는 각각 독립적으로 다음으로 이루어진 군 중에서 선택되며:

[3359] 할로겐;

[3360] 수소;

[3361] C_{1-30} 하이드로카르빌 기로서, 여기서 하이드로카르빌 기는 비치환되거나, 또는 할로겐 원자, C_{1-20} 알킬 기, C_{1-20} 알콕시 기, C_{7-20} 알킬아릴 기, C_{7-20} 아릴알킬 기, C_{6-20} 아릴 기, C_{6-20} 아릴옥시 기, C_{7-20} 알킬아릴옥시 기, 및 C_{7-20} 아릴알킬옥시 기로 이루어지는 군 중에서 선택되는 하나 이상의 치환체에 의해 추가로 치환되는 C_{1-30} 하이드로카르빌 기;

[3362] 헤테로원자 함유 C_{1-30} 하이드로카르빌 기로서, 여기서 헤테로원자 함유 하이드로카르빌 기는 비치환되거나, 또는 할로겐 원자, C_{1-20} 알킬 기, C_{1-20} 알콕시 기, C_{7-20} 알킬아릴 기, C_{7-20} 아릴알킬 기, C_{6-20} 아릴 기, C_{6-20} 아릴옥시 기, C_{7-20} 알킬아릴옥시 기, 및 C_{7-20} 아릴알킬옥시 기로 이루어지는 군 중에서 선택되는 하나 이상의 치환체에 의해 추가로 치환되는 헤테로원자 함유 C_{1-30} 하이드로카르빌 기;

[3363] 여기서, R^Q 및 R^{Q*} 기는 선택적으로 결합되어 환형 하이드로카르빌 기 또는 환형 헤테로원자 함유 하이드로카르빌 기를 형성할 수 있고, 이 환형 하이드로카르빌 기 또는 환형 헤테로원자 함유 하이드로카르빌 기는 비치환되거나, 또는 할로겐 원자, C_{1-20} 알킬 기, C_{1-20} 알콕시 기, C_{7-20} 알킬아릴 기, C_{7-20} 아릴알킬 기, C_{6-20} 아릴 기, C_{6-20} 아릴옥시 기, C_{7-20} 알킬아릴옥시 기, C_{7-20} 아릴알킬옥시 기, 화학식 $-NR'_2$의 아미도 기; 화학식 $-PR'_2$의 포스피도 기, 화학식 -SR'의 티올레이트 기, 화학식 $-Si(R^a)_3$의 실릴 기, 및 화학식 $-Ge(R^a)_3$의 게르마닐 기로 이루어지는 군 중에서 선택되는 하나 이상의 치환체에 의해 추가로 치환되며;

[3364] 여기서, R^7, R^8, R^9, 및 R^{10}은 각각 독립적으로 다음으로 이루어진 군 중에서 선택되고:

[3365] 할로겐;

[3366] 수소;

[3367] C_{1-30} 하이드로카르빌 기로서, 여기서 하이드로카르빌 기는 비치환되거나, 또는 할로겐 원자, C_{1-20} 알킬 기, C_{1-20} 알콕시 기, C_{7-20} 알킬아릴 기, C_{7-20} 아릴알킬 기, C_{6-20} 아릴 기, C_{6-20} 아릴옥시 기, C_{7-20} 알킬아릴옥시 기, 및 C_{7-20} 아릴알킬옥시 기로 이루어지는 군 중에서 선택되는 하나 이상의 치환체에 의해 추가로 치환되는, C_{1-30} 하이드로카르빌 기;

[3368] 헤테로원자 함유 C_{1-30} 하이드로카르빌 기로서, 여기서 헤테로원자 함유 하이드로카르빌 기는 비치환되거나, 또는 할로겐 원자, C_{1-20} 알킬 기, C_{1-20} 알콕시 기, C_{7-20} 알킬아릴 기, C_{7-20} 아릴알킬 기, C_{6-20} 아릴 기, C_{6-20} 아릴옥시 기, C_{7-20} 알킬아릴옥시 기, 및 C_{7-20} 아릴알킬옥시 기로 이루어지는 군 중에서 선택되는 하나 이상의 치환체에 의해 추가로 치환되는, 헤테로원자 함유 C_{1-30} 하이드로카르빌 기;

[3369] 옥시 기, -OR';

[3370] 아미도 기, $-NR'_2$;

[3371] 포스피도 기, $-PR'_2$;

[3372] 티올레이트 기, -SR';

[3373] 화학식 $-Si(R^a)_3$의 실릴 기; 및

[3374] 화학식 $-Ge(R^a)_3$의 게르마닐 기;

[3375] 여기서, R^7, R^8, R^9, 및 R^{10} 중 2개의 인접한 기는 선택적으로 결합되어 환형 하이드로카르빌 기 또는 환형 헤테로원자 함유 하이드로카르빌 기를 형성할 수 있고, 이 환형 하이드로카르빌 기 또는 환형 헤테로원자 함유 하이드로카르빌 기는 비치환되거나, 또는 할로겐 원자, C_{1-20} 알킬 기, C_{1-20} 알콕시 기, C_{7-20} 알킬아릴 기, C_{7-20} 아릴알킬 기, C_{6-20} 아릴 기, C_{6-20} 아릴옥시 기, C_{7-20} 알킬아릴옥시 기, C_{7-20} 아릴알킬옥시 기, 화학식 $-NR'_2$의 아미도 기, 화학식 $-PR'_2$의 포스피도 기, 화학식 -SR'의 티올레이트 기, 화학식 $-Si(R^a)_3$의 실릴 기, 및 화학식 $-Ge(R^a)_3$의 게르마닐 기로 이루어지는 군 중에서 선택되는 하나 이상의 치환체에 의해 추가로 치환되고;

[3376] 여기서 각 R'는 수소, C_{1-20} 알킬 기, 및 C_{6-20} 아릴 기로 이루어지는 군 중에서 독립적으로 선택되고;

[3377] 여기서 각 R^a는 수소, C_{1-8} 알킬 기, C_{1-8} 알콕시 기, C_{6-20} 아릴옥시 기 및 C_{6-20} 아릴 기로 이루어지는 군 중에서 독립적으로 선택된다.

[3378] 실시양태 98. 실시양태 97에 있어서, M이 Ti인, 중합 공정.

[3379] 실시양태 99. 실시양태 97 또는 98에 있어서, R^7, R^8, R^9, 및 R^{10}이 각각 수소인, 중합 공정.

[3380] 실시양태 100. 실시양태 97 내지 99 중 어느 하나에 있어서, R^1 및 R^2가 각각 독립적으로 비치환된 C_{1-30} 하이드로카르빌 기인, 중합 공정.

[3381] 실시양태 101. 실시양태 97 내지 100 중 어느 하나에 있어서, R^1 및 R^2가 각각 독립적으로 이소프로필, 사이클로헥실 및 *tert*-부틸로 이루어지는 군 중에서 선택되는, 중합 공정.

[3382] 실시양태 102. 실시양태 97 내지 101 중 어느 하나에 있어서, R^{12} 및 R^{17}이 각각 독립적으로 비치환된 C_{1-30} 하이드로카르빌 기이고, R^{11}, R^{13}, R^{14}, R^{15}, R^{16}, 및 R^{18}은 각각 수소인, 중합 공정.

[3383] 실시양태 103. 실시양태 97 내지 102 중 어느 하나에 있어서, R^{12} 및 R^{17}이 각각 *tert*-부틸 기인, 중합 공정.

[3384] 실시양태 104. 실시양태 97 내지 103 중 어느 하나에 있어서, G가 탄소인, 중합 공정.

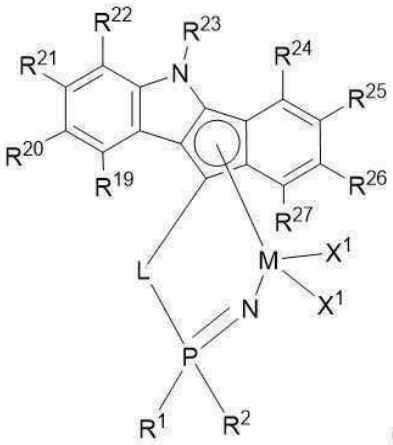
[3385] 실시양태 105. 실시양태 97 내지 104 중 어느 하나에 있어서, R^{Q} 및 R^{Q*}는 각각 독립적으로 수소, C_{1-20} 알킬 기, 및 C_{6-20} 아릴 기로 이루어지는 군 중에서 선택되는, 중합 공정.

[3386] 실시양태 106. 실시양태 97 내지 105 중 어느 하나에 있어서, R^{Q}가 수소이고, R^{Q*}가 C_{1-8} 알킬 기인, 중합 공정.

[3387] 실시양태 107. 실시양태 97 내지 106 중 어느 하나에 있어서, 각 X^{1}이 독립적으로 C_{1-6} 알킬 기, C_{7-10} 아릴알킬 기, 및 할로겐으로 이루어지는 군 중에서 선택되는, 중합 공정.

[3388] 실시양태 108. 실시양태 97 내지 107 중 어느 하나에 있어서, 각 X^{1}이 독립적으로 메틸 기 및 Cl로 이루어지는 군 중에서 선택되는, 중합 공정.

[3389] 실시양태 109. 실시양태 83에 있어서, 유기금속 복합체가 화학식 VIII로 표현되는 것인, 중합 공정:

[3390] 

(VIII)

[3391] 여기서, M, R^{1}, R^{2}, L 및 X^{1}은 화학식 I에서 정의된 바와 같고;

[3392] 여기서, R^{23}은 다음으로 이루어진 군 중에서 선택되며:

[3393] 수소;

[3394] C_{1-30} 하이드로카르빌 기로서, 여기서 하이드로카르빌 기는 비치환되거나, 또는 할로겐 원자, C_{1-20} 알킬 기, C_{1-20} 알콕시 기, C_{7-20} 알킬아릴 기, C_{7-20} 아릴알킬 기, C_{6-20} 아릴 기, C_{6-20} 아릴옥시 기, C_{7-20} 알킬아릴옥시 기, 및 C_{7-20} 아릴알킬옥시 기로 이루어지는 군 중에서 선택되는 하나 이상의 치환체에 의해 추가로 치환되는 C_{1-30} 하이드로카르빌 기;

[3395] 헤테로원자 함유 C_{1-30} 하이드로카르빌 기로서, 여기서 헤테로원자 함유 하이드로카르빌 기는 비치환되거나, 또는 할로겐 원자, C_{1-20} 알킬 기, C_{1-20} 알콕시 기, C_{7-20} 알킬아릴 기, C_{7-20} 아릴알킬 기, C_{6-20} 아릴 기, C_{6-20} 아릴옥시 기, C_{7-20} 알킬아릴옥시 기, 및 C_{7-20} 아릴알킬옥시 기로 이루어지는 군 중에서 선택되는 하나 이상의 치환체에 의해 추가로 치환되는 헤테로원자 함유 C_{1-30} 하이드로카르빌 기;

[3396] 여기서, R^{19}, R^{20}, R^{21}, R^{22}, R^{24}, R^{25}, R^{26}, 및 R^{27}은 각각 독립적으로 다음으로 이루어진 군 중에서 선택되고:

[3397] 할로겐;

[3398] 수소;

[3399] C_{1-30} 하이드로카르빌 기로서, 여기서 하이드로카르빌 기는 비치환되거나, 또는 할로겐 원자, C_{1-20} 알킬 기, C_{1-20} 알콕시 기, C_{7-20} 알킬아릴 기, C_{7-20} 아릴알킬 기, C_{6-20} 아릴 기, C_{6-20} 아릴옥시 기, C_{7-20} 알킬아릴옥시 기, 및 C_{7-20} 아릴알킬옥시 기로 이루어지는 군 중에서 선택되는 하나 이상의 치환체에 의해 추가로 치환되는, C_{1-30} 하이드

로카르빌 기;

[3400] 헤테로원자 함유 C_{1-30} 하이드로카르빌 기로서, 여기서 헤테로원자 함유 하이드로카르빌 기는 비치환되거나, 또는 할로겐 원자, C_{1-20} 알킬 기, C_{1-20} 알콕시 기, C_{7-20} 알킬아릴 기, C_{7-20} 아릴알킬 기, C_{6-20} 아릴 기, C_{6-20} 아릴옥시 기, C_{7-20} 알킬아릴옥시 기, 및 C_{7-20} 아릴알킬옥시 기로 이루어지는 군 중에서 선택되는 하나 이상의 치환체에 의해 추가로 치환되는, 헤테로원자 함유 C_{1-30} 하이드로카르빌 기;

[3401] 옥시 기, -OR';

[3402] 아미도 기, $-NR'_2$;

[3403] 포스피도 기, $-PR'_2$;

[3404] 티올레이트 기, -SR';

[3405] 화학식 $-Si(R^a)_3$의 실릴 기; 및

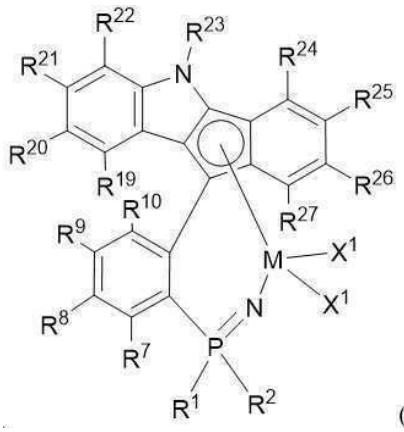
[3406] 화학식 $-Ge(R^a)_3$의 게르마닐 기;

[3407] 여기서, R^{19}, R^{20}, R^{21}, R^{22}, R^{24}, R^{25}, R^{26}, 및 R^{27} 중 2개의 인접한 기는 선택적으로 결합되어 환형 하이드로카르빌 기 또는 환형 헤테로원자 함유 하이드로카르빌 기를 형성할 수 있고, 이 환형 하이드로카르빌 기 또는 환형 헤테로원자 함유 하이드로카르빌 기는 비치환되거나, 또는 할로겐 원자, C_{1-20} 알킬 기, C_{1-20} 알콕시 기, C_{7-20} 알킬아릴 기, C_{7-20} 아릴알킬 기, C_{6-20} 아릴 기, C_{6-20} 아릴옥시 기, C_{7-20} 알킬아릴옥시 기, C_{7-20} 아릴알킬옥시 기, 화학식 $-NR'_2$의 아미도 기, 화학식 $-PR'_2$의 포스피도 기, 화학식 -SR'의 티올레이트 기, 화학식 $-Si(R^a)_3$의 실릴 기, 및 화학식 $-Ge(R^a)_3$의 게르마닐 기로 이루어지는 군 중에서 선택되는 하나 이상의 치환체에 의해 추가로 치환되고;

[3408] 여기서 각 R'는 수소, C_{1-20} 알킬 기, 및 C_{6-20} 아릴 기로 이루어지는 군 중에서 독립적으로 선택되고;

[3409] 여기서 각 R^a는 수소, C_{1-8} 알킬 기, C_{1-8} 알콕시 기, C_{6-20} 아릴옥시 기 및 C_{6-20} 아릴 기로 이루어지는 군 중에서 독립적으로 선택된다.

[3410] 실시양태 110. 실시양태 109에 있어서, 유기금속 복합체가 화학식 IX로 표현되는, 중합 공정:

[3411] 

(IX)

[3412] 여기서, M, R^1, R^2, R^{19}, R^{20}, R^{21}, R^{22}, R^{24}, R^{25}, R^{26}, R^{27} 및 X^1은 화학식 I 및 VIII에서 정의된 바와 같고:

[3413] 여기서, R^7, R^8, R^9 및 R^{10}은 다음으로 이루어진 군 중에서 선택되며:

[3414] 할로겐;

[3415] 수소;

[3416] C_{1-30} 하이드로카르빌 기로서, 여기서 하이드로카르빌 기는 비치환되거나, 또는 할로겐 원자, C_{1-20} 알킬 기, C_{1-20} 알콕시 기, C_{7-20} 알킬아릴 기, C_{7-20} 아릴알킬 기, C_{6-20} 아릴 기, C_{6-20} 아릴옥시 기, C_{7-20} 알킬아릴옥시 기, 및 C_{7-20} 아릴알킬옥시 기로 이루어지는 군 중에서 선택되는 하나 이상의 치환체에 의해 추가로 치환되는 C_{1-30} 하이드로카르빌 기;

[3417] 헤테로원자 함유 C_{1-30} 하이드로카르빌 기로서, 여기서 헤테로원자 함유 하이드로카르빌 기는 비치환되거나, 또는 할로겐 원자, C_{1-20} 알킬 기, C_{1-20} 알콕시 기, C_{7-20} 알킬아릴 기, C_{7-20} 아릴알킬 기, C_{6-20} 아릴 기, C_{6-20} 아릴옥시 기, C_{7-20} 알킬아릴옥시 기, 및 C_{7-20} 아릴알킬옥시 기로 이루어지는 군 중에서 선택되는 하나 이상의 치환체에 의해 추가로 치환되는 헤테로원자 함유 C_{1-30} 하이드로카르빌 기;

[3418] 옥시 기, -OR';

[3419] 아미도 기, $-NR'_2$;

[3420] 포스피도 기, $-PR'_2$;

[3421] 티올레이트 기, -SR';

[3422] 화학식 $-Si(R^a)_3$의 실릴 기; 및

[3423] 화학식 $-Ge(R^a)_3$의 게르마닐 기;

[3424] 여기서, R^7, R^8, R^9, 및 R^{10} 중 2개의 인접한 기는 선택적으로 결합되어 환형 하이드로카르빌 기 또는 환형 헤테로원자 함유 하이드로카르빌 기를 형성할 수 있고, 이 환형 하이드로카르빌 기 또는 환형 헤테로원자 함유 하이드로카르빌 기는 비치환되거나, 또는 할로겐 원자, C_{1-20} 알킬 기, C_{1-20} 알콕시 기, C_{7-20} 알킬아릴 기, C_{7-20} 아릴알킬 기, C_{6-20} 아릴 기, C_{6-20} 아릴옥시 기, C_{7-20} 알킬아릴옥시 기, C_{7-20} 아릴알킬옥시 기, 화학식 $-NR'_2$의 아미도 기, 화학식 $-PR'_2$의 포스피도 기, 화학식 -SR'의 티올레이트 기, 화학식 $-Si(R^a)_3$의 실릴 기, 및 화학식 $-Ge(R^a)_3$의 게르마닐 기로 이루어지는 군 중에서 선택되는 하나 이상의 치환체에 의해 추가로 치환되고;

[3425] 여기서 각 R'는 수소, C_{1-20} 알킬 기, 및 C_{6-20} 아릴 기로 이루어지는 군 중에서 독립적으로 선택되고;

[3426] 여기서 각 R^a는 수소, C_{1-8} 알킬 기, C_{1-8} 알콕시 기, C_{6-20} 아릴옥시 기 및 C_{6-20} 아릴 기로 이루어지는 군 중에서 독립적으로 선택된다.

[3427] 실시양태 111. 실시양태 110에 있어서, M이 Ti인, 중합 공정.

[3428] 실시양태 112. 실시양태 110 또는 111에 있어서, R^7, R^8, R^9, 및 R^{10}이 각각 수소인, 중합 공정.

[3429] 실시양태 113. 실시양태 110 내지 112 중 어느 하나에 있어서, R^1 및 R^2가 각각 독립적으로 비치환된 C_{1-30} 하이드로카르빌 기인, 중합 공정.

[3430] 실시양태 114. 실시양태 110 내지 113 중 어느 하나에 있어서, R^1 및 R^2가 각각 독립적으로 이소프로필, 사이클로헥실 및 *tert*-부틸로 이루어지는 군 중에서 선택되는, 중합 공정.

[3431] 실시양태 115. 실시양태 110 내지 114 중 어느 하나에 있어서, R^{23}이 비치환된 C_{1-30} 하이드로카르빌 기인, 중합 공정.

[3432] 실시양태 116. 실시양태 110 내지 115 중 어느 하나에 있어서, R^{23}이 C_{1-8} 알킬 기인, 중합 공정.

[3433] 실시양태 117. 실시양태 110 내지 116 중 어느 하나에 있어서, R^{20}이 비치환된 C_{1-30} 하이드로카르빌 기인, 중합 공정.

[3434] 실시양태 118. 실시양태 110 내지 117 중 어느 하나에 있어서, R^{20}이 비치환된 C_{1-8} 알킬 기인, 중합 공정.

[3435] 실시양태 119. 실시양태 110 내지 116 중 어느 하나에 있어서, R^{20}이 비치환된 C_{1-30} 하이드로카르빌 기이고, R^{19}, R^{21}, R^{22}, R^{24}, R^{25}, R^{26}, 및 R^{27}이 각각 수소인, 중합 공정.

[3436] 실시양태 120. 실시양태 119에 있어서, R^{20}이 C_{1-8} 알킬 기인, 중합 공정.

[3437] 실시양태 121. 실시양태 110 내지 120 중 어느 하나에 있어서, 각 X^1이 C_{1-6} 알킬 기, C_{7-10} 아릴알킬 기, 및 할로겐으로 이루어지는 군 중에서 독립적으로 선택되는, 중합 공정.

[3438] 실시양태 122. 실시양태 110 내지 121 중 어느 하나에 있어서, 각 X^1이 메틸 기 및 Cl로 이루어지는 군 중에서 독립적으로 선택되는, 중합 공정.

[3439] 실시양태 123. 실시양태 83 내지 122 중 어느 하나에 있어서, 촉매 활성화제가 알킬알루미녹산 공촉매, 유기알루미늄 화합물, 붕소계 촉매 활성화제, 및 이들의 혼합물로 이루어지는 군 중에서 선택되는, 중합 공정.

[3440] 실시양태 124. 실시양태 123에 있어서, 붕소계 촉매 활성화제가 [(수소화된 탈로우 알킬)$_2$(Me)NH][$B(C_6F_5)_4$]; N,N-디메틸아닐리늄 테트라키스(펜타플루오로페닐) 붕산염 ("[Me_2NHPh][$B(C_6F_5)_4$]"); 및 트리페닐메틸륨 테트라키스(펜타플루오로페닐) 붕산염 ("[Ph_3C][$B(C_6F_5)_4$]")으로 이루어지는 군 중에서 선택되는, 중합 공정.

[3441] 실시양태 125. 실시양태 83 내지 124 중 어느 하나에 있어서, 하나 이상의 C_3-C_{12} 알파-올레핀이 1-부텐, 1-헥센, 및 1-옥텐으로 이루어지는 군 중에서 선택되는 하나 이상의 알파-올레핀을 포함하는, 중합 공정.

[3442] 실시양태 126. 실시양태 83 내지 124 중 어느 하나에 있어서, 공정이 에틸렌을 1-옥텐과 중합시키는 것을 포함하는, 중합 공정.

[3443] 실시양태 127. 실시양태 83 내지 126 중 어느 하나에 있어서, 공정이 용매에서 수행되는 용액 상 중합 공정인, 중합 공정.

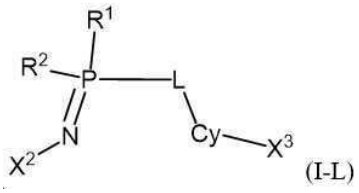
[3444] 실시양태 128. 실시양태 127에 있어서, 용액 상 중합 공정이 적어도 160℃의 온도에서 수행되는, 중합 공정.

[3445] 실시양태 129. 실시양태 83 내지 126 중 어느 한 항에 있어서, 중합 공정이 용매에서 수행되는 연속 용액 상 중합 공정인, 중합 공정.

[3446] 실시양태 130. 실시양태 129에 있어서, 연속 용액 상 중합 공정이 적어도 하나의 연속 교반 탱크 반응기에서 수행되는, 중합 공정.

[3447] 실시양태 131. 실시양태 129 내지 130에 있어서, 연속 용액 상 중합 공정이 적어도 160℃의 온도에서 수행되는, 중합 공정.

[3448] 실시양태 132. 화학식 I-L로 표현되는 예비금속화 화합물:

[3449] 

(I-L)

[3450] 여기서,

[3451] R^1 및 R^2는 각각 독립적으로 수소 및 R^X로 이루어진 군 중에서 선택되거나; 또는 R^1 및 R^2는 이들이 부착된 P 원자와 함께, 비치환되거나, 또는 할로겐 원자, C_{1-20} 알킬 기, C_{1-20} 알콕시 기, C_{7-20} 알킬아릴 기, C_{7-20} 아릴알킬

기, C_{6-20} 아릴 기, C_{6-20} 아릴옥시 기, C_{7-20} 알킬아릴옥시 기, 및 C_{7-20} 아릴알킬옥시 기로 이루어진 군 중에서 선택되는 하나 이상의 치환체에 의해 추가로 치환되는 3-10원 헤테로환형 기를 형성하며;

[3452] 각 R^X는 할로겐 원자; 하이드로카르빌 기가 비치환되거나, 또는 하나 이상의 할로겐 원자, C_{1-20} 알킬 기, C_{1-20} 알콕시 기, C_{7-20} 알킬아릴 기, C_{7-20} 아릴알킬 기, C_{6-20} 아릴 기, C_{6-20} 아릴옥시 기, C_{7-20} 알킬아릴옥시 기, 및/또는 C_{7-20} 아릴알킬옥시 기에 의해 추가로 치환되는 C_{1-30} 하이드로카르빌 기; 화학식 $-NR'_2$의 아미도 기; 화학식 $-Si(R^a)_3$의 실릴 기; 화학식 $-Ge(R^a)_3$의 게르마닐 기; 및 화학식 $-N=P(R^b)(R^c)(R^d)$의 포스핀이민 기로 이루어진 군 중에서 독립적으로 선택되고; 여기서 각 R'는 수소, C_{1-20} 알킬 기, 및 C_{6-20} 아릴 기로 이루어지는 군 중에서 독립적으로 선택되고; 각 R^a는 수소, C_{1-8} 알킬 기, C_{1-8} 알콕시 기, C_{6-20} 아릴옥시 기 및 C_{6-20} 아릴 기로 이루어진 군 중에서 독립적으로 선택되고; R^b, R^c, R^d는 각각 독립적으로 C_{1-20} 알킬 기이며;

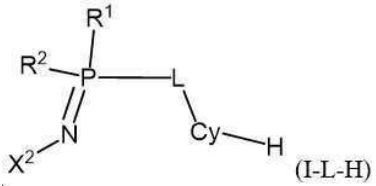
[3453] Cy는 사이클로펜타디에닐형 모이어티이고 L 및 X^3에 공유 결합되고,

[3454] X^2는 수소, 또는 화학식 $-Si(R^e)_3$의 실릴 기이고,

[3455] X^3은 수소, 또는 화학식 $-Si(R^e)_3$의 실릴 기, 또는 화학식 $Sn(R^e)_3$의 주석 기이며; 여기서, 각 R^e는 수소, C_{1-8} 알킬 기, C_{1-8} 알콕시 기, C_{6-20} 아릴옥시 기, 및 C_{6-20} 아릴 기로 이루어지는 군 중에서 독립적으로 선택되고; 그리고

[3456] L은 Cy와 P를 연결하는 원자의 근접한 사슬을 함유하는 가교 기로서, 여기서 근접한 사슬은 2개 또는 3개의 원자를 함유한다.

[3457] 실시양태 133. 화학식 I-L-H로 표현되는 예비금속화 화합물:

[3458] 

(I-L-H)

[3459] 여기서,

[3460] R^1 및 R^2는 각각 독립적으로 수소 및 R^X로 이루어진 군 중에서 선택되거나; 또는 R^1 및 R^2는 이들이 부착된 P 원자와 함께, 비치환되거나, 또는 할로겐 원자, C_{1-20} 알킬 기, C_{1-20} 알콕시 기, C_{7-20} 알킬아릴 기, C_{7-20} 아릴알킬 기, C_{6-20} 아릴 기, C_{6-20} 아릴옥시 기, C_{7-20} 알킬아릴옥시 기, 및 C_{7-20} 아릴알킬옥시 기로 이루어진 군 중에서 선택되는 하나 이상의 치환체에 의해 추가로 치환되는 3-10원 헤테로환형 기를 형성하며;

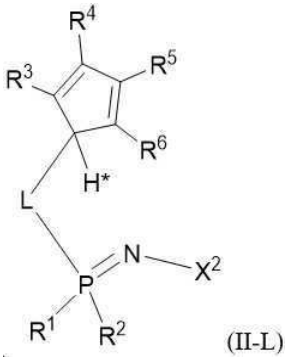
[3461] 각 R^X는 할로겐 원자; 하이드로카르빌 기가 비치환되거나, 또는 하나 이상의 할로겐 원자, C_{1-20} 알킬 기, C_{1-20} 알콕시 기, C_{7-20} 알킬아릴 기, C_{7-20} 아릴알킬 기, C_{6-20} 아릴 기, C_{6-20} 아릴옥시 기, C_{7-20} 알킬아릴옥시 기, 및/또는 C_{7-20} 아릴알킬옥시 기에 의해 추가로 치환되는 C_{1-30} 하이드로카르빌 기; 화학식 $-NR'_2$의 아미도 기; 화학식 $-Si(R^a)_3$의 실릴 기; 화학식 $-Ge(R^a)_3$의 게르마닐 기; 및 화학식 $-N=P(R^b)(R^c)(R^d)$의 포스핀이민 기로 이루어진 군 중에서 독립적으로 선택되고; 여기서 각 R'는 수소, C_{1-20} 알킬 기, 및 C_{6-20} 아릴 기로 이루어지는 군 중에서 독립적으로 선택되고; 각 R^a는 수소, C_{1-8} 알킬 기, C_{1-8} 알콕시 기, C_{6-20} 아릴옥시 기 및 C_{6-20} 아릴 기로 이루어진 군 중에서 독립적으로 선택되고; R^b, R^c, R^d는 각각 독립적으로 C_{1-20} 알킬 기이며;

[3462] X^2는 수소, 또는 화학식 $-Si(R^e)_3$의 실릴 기이고, 여기서 각 R^e는 수소, C_{1-8} 알킬 기, C_{1-8} 알콕시 기, C_{6-20} 아릴옥시 기 및 C_{6-20} 아릴 기로 이루어지는 군 중에서 독립적으로 선택되고;

[3463] Cy는 사이클로펜타디에닐형 모이어티이고 L 및 H에 공유 결합되고; 그리고

[3464] L은 Cy와 P를 연결하는 원자의 근접한 사슬을 함유하는 가교 기로서, 여기서 근접한 사슬은 2개 또는 3개의 원자를 함유한다.

[3465] 실시양태 134. 실시양태 133에 있어서, 예비금속화 화합물이 화학식 II-L로 표현되거나, 또는 사이클로펜타디에닐 고리 내에서 수소 H^*의 이동에 의해 입수 가능한 화학식 II-L의 이중 결합 이성질체인, 예비금속화 화합물:

[3466] 

(II-L)

[3467] 여기서, R^1, R^2, L 및 X^2는 화학식 I-L-H에서 정의된 바와 같고;

[3468] 여기서, R^3, R^4, R^5 및 R^6은 각각 독립적으로 다음으로 이루어진 군 중에서 선택되고:

[3469] 할로겐;

[3470] 수소;

[3471] C_{1-30} 하이드로카르빌 기로서, 여기서 하이드로카르빌 기는 비치환되거나, 또는 할로겐 원자, C_{1-20} 알킬 기, C_{1-20} 알콕시 기, C_{7-20} 알킬아릴 기, C_{7-20} 아릴알킬 기, C_{6-20} 아릴 기, C_{6-20} 아릴옥시 기, C_{7-20} 알킬아릴옥시 기, 및 C_{7-20} 아릴알킬옥시 기로 이루어지는 군 중에서 선택되는 하나 이상의 치환체에 의해 추가로 치환되는 C_{1-30} 하이드로카르빌 기;

[3472] 헤테로원자 함유 C_{1-30} 하이드로카르빌 기로서, 여기서 헤테로원자 함유 하이드로카르빌 기는 비치환되거나, 또는 할로겐 원자, C_{1-20} 알킬 기, C_{1-20} 알콕시 기, C_{7-20} 알킬아릴 기, C_{7-20} 아릴알킬 기, C_{6-20} 아릴 기, C_{6-20} 아릴옥시 기, C_{7-20} 알킬아릴옥시 기, 및 C_{7-20} 아릴알킬옥시 기로 이루어지는 군 중에서 선택되는 하나 이상의 치환체에 의해 추가로 치환되는 헤테로원자 함유 C_{1-30} 하이드로카르빌 기;

[3473] 옥시 기, -OR';

[3474] 아미도 기, $-NR'_2$;

[3475] 포스피도 기, $-PR'_2$;

[3476] 티올레이트 기, -SR';

[3477] 화학식 $-Si(R^a)_3$의 실릴 기; 및

[3478] 화학식 $-Ge(R^a)_3$의 게르마닐 기;

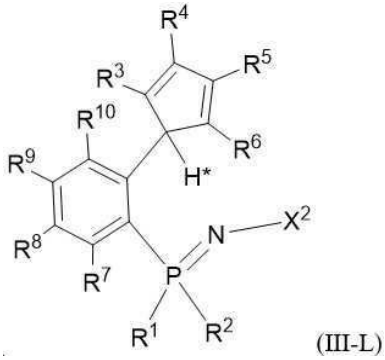
[3479] 여기서, R^3, R^4, R^5 및 R^6 중 2개의 인접한 기는 선택적으로 결합되어 환형 하이드로카르빌 기 또는 환형 헤테로원자 함유 하이드로카르빌 기를 형성할 수 있고, 이 환형 하이드로카르빌 기 또는 환형 헤테로원자 함유 하이드로카르빌 기는 비치환되거나, 또는 할로겐 원자, C_{1-20} 알킬 기, C_{1-20} 알콕시 기, C_{7-20} 알킬아릴 기, C_{7-20} 아릴알킬 기, C_{6-20} 아릴 기, C_{6-20} 아릴옥시 기, C_{7-20} 알킬아릴옥시 기, C_{7-20} 아릴알킬옥시 기, 화학식 $-NR'_2$의 아미도 기, 화학식 $-PR'_2$의 포스피도 기, 화학식 -SR'의 티올레이트 기, 화학식 $-Si(R^a)_3$의 실릴 기, 및 화학식

$-Ge(R^a)_3$의 게르마닐 기로 이루어지는 군 중에서 선택되는 하나 이상의 치환체에 의해 추가로 치환되고;

[3480] 여기서 각 R'는 수소, C_{1-20} 알킬 기, 및 C_{6-20} 아릴 기로 이루어지는 군 중에서 독립적으로 선택되고;

[3481] 여기서 각 R^a는 수소, C_{1-8} 알킬 기, C_{1-8} 알콕시 기, C_{6-20} 아릴옥시 기 및 C_{6-20} 아릴 기로 이루어지는 군 중에서 독립적으로 선택된다.

[3482] 실시양태 135. 실시양태 134에 있어서, 예비금속화 화합물이 화학식 III-L로 표현되거나, 또는 사이클로펜타디에닐 고리 내에서 수소 H^*의 이동에 의해 입수 가능한 화학식 III-L의 이중 결합 이성질체인, 예비금속화 화합물:

[3483] 

(III-L)

[3484] 여기서, R^1, R^2, R^3, R^4, R^5, R^6, 및 X^2는 화학식 I-L-H 및 II-L에서 정의된 바와 같고;

[3485] 여기서, R^7, R^8, R^9, 및 R^{10}은 각각 독립적으로 다음으로 이루어진 군 중에서 선택되고:

[3486] 할로겐;

[3487] 수소;

[3488] C_{1-30} 하이드로카르빌 기로서, 여기서 하이드로카르빌 기는 비치환되거나, 또는 할로겐 원자, C_{1-20} 알킬 기, C_{1-20} 알콕시 기, C_{7-20} 알킬아릴 기, C_{7-20} 아릴알킬 기, C_{6-20} 아릴 기, C_{6-20} 아릴옥시 기, C_{7-20} 알킬아릴옥시 기, 및 C_{7-20} 아릴알킬옥시 기로 이루어지는 군 중에서 선택되는 하나 이상의 치환체에 의해 추가로 치환되는 C_{1-30} 하이드로카르빌 기;

[3489] 헤테로원자 함유 C_{1-30} 하이드로카르빌 기로서, 여기서 헤테로원자 함유 하이드로카르빌 기는 비치환되거나, 또는 할로겐 원자, C_{1-20} 알킬 기, C_{1-20} 알콕시 기, C_{7-20} 알킬아릴 기, C_{7-20} 아릴알킬 기, C_{6-20} 아릴 기, C_{6-20} 아릴옥시 기, C_{7-20} 알킬아릴옥시 기, 및 C_{7-20} 아릴알킬옥시 기로 이루어지는 군 중에서 선택되는 하나 이상의 치환체에 의해 추가로 치환되는 헤테로원자 함유 C_{1-30} 하이드로카르빌 기;

[3490] 옥시 기, -OR';

[3491] 아미도 기, $-NR'_2$;

[3492] 포스피도 기, $-PR'_2$;

[3493] 티올레이트 기, -SR';

[3494] 화학식 $-Si(R^a)_3$의 실릴 기; 및

[3495] 화학식 $-Ge(R^a)_3$의 게르마닐 기;

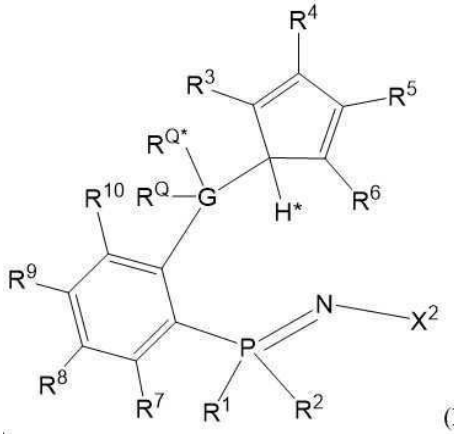
[3496] 여기서, R^7, R^8, R^9, 및 R^{10} 중 2개의 인접한 기는 선택적으로 결합되어 환형 하이드로카르빌 기 또는 환형 헤테로원자 함유 하이드로카르빌 기를 형성할 수 있고, 이 환형 하이드로카르빌 기 또는 환형 헤테로원자 함유 하이

드로카르빌 기는 비치환되거나, 또는 할로겐 원자, C_{1-20} 알킬 기, C_{1-20} 알콕시 기, C_{7-20} 알킬아릴 기, C_{7-20} 아릴알킬 기, C_{6-20} 아릴 기, C_{6-20} 아릴옥시 기, C_{7-20} 알킬아릴옥시 기, C_{7-20} 아릴알킬옥시 기, 화학식 $-NR'_2$의 아미도 기, 화학식 $-PR'_2$의 포스피도 기, 화학식 $-SR'$의 티올레이트 기, 화학식 $-Si(R^a)_3$의 실릴 기, 및 화학식 $-Ge(R^a)_3$의 게르마닐 기로 이루어지는 군 중에서 선택되는 하나 이상의 치환체에 의해 추가로 치환되고;

[3497] 여기서 각 R'는 수소, C_{1-20} 알킬 기, 및 C_{6-20} 아릴 기로 이루어지는 군 중에서 독립적으로 선택되고;

[3498] 여기서 각 R^a는 수소, C_{1-8} 알킬 기, C_{1-8} 알콕시 기, C_{6-20} 아릴옥시 기 및 C_{6-20} 아릴 기로 이루어지는 군 중에서 독립적으로 선택된다.

[3499] 실시양태 136. 실시양태 134에 있어서, 예비금속화 화합물이 화학식 IV-L로 표현되거나, 또는 사이클로펜타디에닐 고리 내에서 수소 H^*의 이동에 의해 입수 가능한 화학식 IV-L의 이중 결합 이성질체인, 예비금속화 화합물:



(IV-L)

[3500]

[3501] 여기서, R^1, R^2, R^3, R^4, R^5, R^6, 및 X^2는 화학식 I-L-H 및 II-L에서 정의된 바와 같고;

[3502] 여기서, G는 C 또는 Si이고;

[3503] 여기서, R^Q 및 R^{Q*}는 각각 독립적으로 다음으로 이루어진 군 중에서 선택되며:

[3504] 할로겐;

[3505] 수소;

[3506] C_{1-30} 하이드로카르빌 기로서, 여기서 하이드로카르빌 기는 비치환되거나, 또는 할로겐 원자, C_{1-20} 알킬 기, C_{1-20} 알콕시 기, C_{7-20} 알킬아릴 기, C_{7-20} 아릴알킬 기, C_{6-20} 아릴 기, C_{6-20} 아릴옥시 기, C_{7-20} 알킬아릴옥시 기, 및 C_{7-20} 아릴알킬옥시 기로 이루어지는 군 중에서 선택되는 하나 이상의 치환체에 의해 추가로 치환되는 C_{1-30} 하이드로카르빌 기;

[3507] 헤테로원자 함유 C_{1-30} 하이드로카르빌 기로서, 여기서 헤테로원자 함유 하이드로카르빌 기는 비치환되거나, 또는 할로겐 원자, C_{1-20} 알킬 기, C_{1-20} 알콕시 기, C_{7-20} 알킬아릴 기, C_{7-20} 아릴알킬 기, C_{6-20} 아릴 기, C_{6-20} 아릴옥시 기, C_{7-20} 알킬아릴옥시 기, 및 C_{7-20} 아릴알킬옥시 기로 이루어지는 군 중에서 선택되는 하나 이상의 치환체에 의해 추가로 치환되는 헤테로원자 함유 C_{1-30} 하이드로카르빌 기;

[3508] 여기서, R^Q 및 R^{Q*} 기는 선택적으로 결합되어 환형 하이드로카르빌 기 또는 환형 헤테로원자 함유 하이드로카르빌 기를 형성할 수 있고, 이 환형 하이드로카르빌 기 또는 환형 헤테로원자 함유 하이드로카르빌 기는 비치환되거나, 또는 할로겐 원자, C_{1-20} 알킬 기, C_{1-20} 알콕시 기, C_{7-20} 알킬아릴 기, C_{7-20} 아릴알킬 기, C_{6-20} 아릴 기, C_{6-20} 아릴옥시 기, C_{7-20} 알킬아릴옥시 기, C_{7-20} 아릴알킬옥시 기, 화학식 $-NR'_2$의 아미도 기, 화학식 $-PR'_2$의 포스피도 기, 화학식 $-SR'$의 티올레이트 기, 화학식 $-Si(R^a)_3$의 실릴 기, 및 화학식 $-Ge(R^a)_3$의 게르마닐 기로 이루

어지는 군 중에서 선택되는 하나 이상의 치환체에 의해 추가로 치환되며;

[3509] 여기서, R^7, R^8, R^9, 및 R^{10}은 각각 독립적으로 다음으로 이루어진 군 중에서 선택되고:

[3510] 할로겐;

[3511] 수소;

[3512] C_{1-30} 하이드로카르빌 기로서, 여기서 하이드로카르빌 기는 비치환되거나, 또는 할로겐 원자, C_{1-20} 알킬 기, C_{1-20} 알콕시 기, C_{7-20} 알킬아릴 기, C_{7-20} 아릴알킬 기, C_{6-20} 아릴 기, C_{6-20} 아릴옥시 기, C_{7-20} 알킬아릴옥시 기, 및 C_{7-20} 아릴알킬옥시 기로 이루어지는 군 중에서 선택되는 하나 이상의 치환체에 의해 추가로 치환되는, C_{1-30} 하이드로카르빌 기;

[3513] 헤테로원자 함유 C_{1-30} 하이드로카르빌 기로서, 여기서 헤테로원자 함유 하이드로카르빌 기는 비치환되거나, 또는 할로겐 원자, C_{1-20} 알킬 기, C_{1-20} 알콕시 기, C_{7-20} 알킬아릴 기, C_{7-20} 아릴알킬 기, C_{6-20} 아릴 기, C_{6-20} 아릴옥시 기, C_{7-20} 알킬아릴옥시 기, 및 C_{7-20} 아릴알킬옥시 기로 이루어지는 군 중에서 선택되는 하나 이상의 치환체에 의해 추가로 치환되는, 헤테로원자 함유 C_{1-30} 하이드로카르빌 기;

[3514] 옥시 기, -OR';

[3515] 아미도 기, $-NR'_2$;

[3516] 포스피도 기, $-PR'_2$;

[3517] 티올레이트 기, -SR';

[3518] 화학식 $-Si(R^a)_3$의 실릴 기; 및

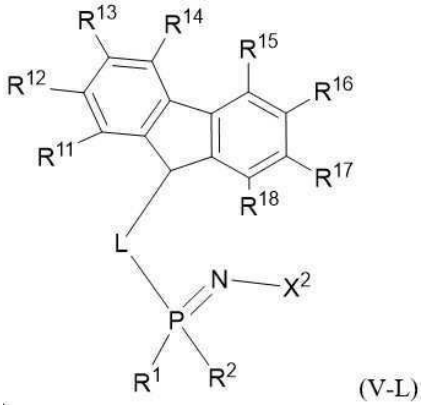
[3519] 화학식 $-Ge(R^a)_3$의 게르마닐 기;

[3520] 여기서, R^7, R^8, R^9, 및 R^{10} 중 2개의 인접한 기는 선택적으로 결합되어 환형 하이드로카르빌 기 또는 환형 헤테로원자 함유 하이드로카르빌 기를 형성할 수 있고, 이 환형 하이드로카르빌 기 또는 환형 헤테로원자 함유 하이드로카르빌 기는 비치환되거나, 또는 할로겐 원자, C_{1-20} 알킬 기, C_{1-20} 알콕시 기, C_{7-20} 알킬아릴 기, C_{7-20} 아릴알킬 기, C_{6-20} 아릴 기, C_{6-20} 아릴옥시 기, C_{7-20} 알킬아릴옥시 기, C_{7-20} 아릴알킬옥시 기, 화학식 $-NR'_2$의 아미도 기, 화학식 $-PR'_2$의 포스피도 기, 화학식 -SR'의 티올레이트 기, 화학식 $-Si(R^a)_3$의 실릴 기, 및 화학식 $-Ge(R^a)_3$의 게르마닐 기로 이루어지는 군 중에서 선택되는 하나 이상의 치환체에 의해 추가로 치환되고;

[3521] 여기서 각 R'는 수소, C_{1-20} 알킬 기, 및 C_{6-20} 아릴 기로 이루어지는 군 중에서 독립적으로 선택되고; 그리고

[3522] 여기서 각 R^a는 수소, C_{1-8} 알킬 기, C_{1-8} 알콕시 기, C_{6-20} 아릴옥시 기 및 C_{6-20} 아릴 기로 이루어지는 군 중에서 독립적으로 선택된다.

[3523] 실시양태 137. 실시양태 133에 있어서, 예비금속화 화합물이 화학식 V-L로 표현되는, 예비금속화 화합물:

[3524] 

(V-L)

[3525] 여기서, R^1, R^2, L 및 X^2는 화학식 I-L-H에서 정의된 바와 같고;

[3526] 여기서, R^{11}, R^{12}, R^{13}, R^{14}, R^{15}, R^{16}, R^{17}, R^{18}은 각각 독립적으로 다음으로 이루어진 군 중에서 선택되고:

[3527] 할로겐;

[3528] 수소;

[3529] C_{1-30} 하이드로카르빌 기로서, 여기서 하이드로카르빌 기는 비치환되거나, 또는 할로겐 원자, C_{1-20} 알킬 기, C_{1-20} 알콕시 기, C_{7-20} 알킬아릴 기, C_{7-20} 아릴알킬 기, C_{6-20} 아릴 기, C_{6-20} 아릴옥시 기, C_{7-20} 알킬아릴옥시 기, 및 C_{7-20} 아릴알킬옥시 기로 이루어지는 군 중에서 선택되는 하나 이상의 치환체에 의해 추가로 치환되는, C_{1-30} 하이드로카르빌 기;

[3530] 헤테로원자 함유 C_{1-30} 하이드로카르빌 기로서, 여기서 헤테로원자 함유 하이드로카르빌 기는 비치환되거나, 또는 할로겐 원자, C_{1-20} 알킬 기, C_{1-20} 알콕시 기, C_{7-20} 알킬아릴 기, C_{7-20} 아릴알킬 기, C_{6-20} 아릴 기, C_{6-20} 아릴옥시 기, C_{7-20} 알킬아릴옥시 기, 및 C_{7-20} 아릴알킬옥시 기로 이루어지는 군 중에서 선택되는 하나 이상의 치환체에 의해 추가로 치환되는, 헤테로원자 함유 C_{1-30} 하이드로카르빌 기;

[3531] 옥시 기, -OR';

[3532] 아미도 기, $-NR'_2$;

[3533] 포스피도 기, $-PR'_2$;

[3534] 티올레이트 기, -SR';

[3535] 화학식 $-Si(R^a)_3$의 실릴 기; 및

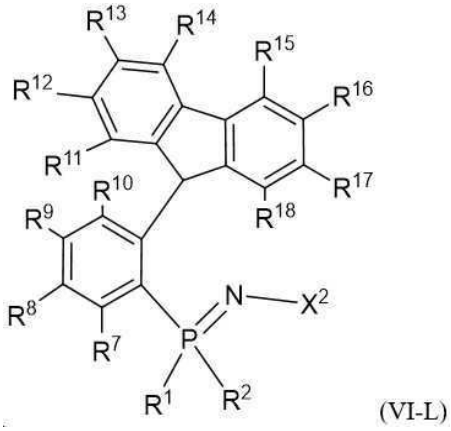
[3536] 화학식 $-Ge(R^a)_3$의 게르마닐 기;

[3537] 여기서, R^{11}, R^{12}, R^{13}, R^{14}, R^{15}, R^{16}, R^{17}, R^{18} 중 2개의 인접한 기는 선택적으로 결합되어 환형 하이드로카르빌 기 또는 환형 헤테로원자 함유 하이드로카르빌 기를 형성할 수 있고, 이 환형 하이드로카르빌 기 또는 환형 헤테로원자 함유 하이드로카르빌 기는 비치환되거나, 또는 할로겐 원자, C_{1-20} 알킬 기, C_{1-20} 알콕시 기, C_{7-20} 알킬아릴 기, C_{7-20} 아릴알킬 기, C_{6-20} 아릴 기, C_{6-20} 아릴옥시 기, C_{7-20} 알킬아릴옥시 기, C_{7-20} 아릴알킬옥시 기, 화학식 $-NR'_2$의 아미도 기, 화학식 $-PR'_2$의 포스피도 기, 화학식 -SR'의 티올레이트 기, 화학식 $-Si(R^a)_3$의 실릴 기, 및 화학식 $-Ge(R^a)_3$의 게르마닐 기로 이루어지는 군 중에서 선택되는 하나 이상의 치환체에 의해 추가로 치환되고;

[3538] 여기서 각 R'는 수소, C_{1-20} 알킬 기, 및 C_{6-20} 아릴 기로 이루어지는 군 중에서 독립적으로 선택되고;

[3539] 여기서 각 R^a는 수소, C_{1-8} 알킬 기, C_{1-8} 알콕시 기, C_{6-20} 아릴옥시 기 및 C_{6-20} 아릴 기로 이루어지는 군 중에서 독립적으로 선택된다.

[3540] 실시양태 138. 실시양태 137에 있어서, 예비금속화 화합물이 화학식 VI-L로 표현되는, 예비금속화 화합물:

[3541] 
(VI-L)

[3542] 여기서, R^1, R^2, R^{11}, R^{12}, R^{13}, R^{14}, R^{15}, R^{16}, R^{17}, R^{18}, 및 X^2는 화학식 I-L-H 및 V-L에서 정의된 바와 같고;

[3543] 여기서, R^7, R^8, R^9, 및 R^{10}은 각각 독립적으로 다음으로 이루어진 군 중에서 선택되고:

[3544] 할로겐;

[3545] 수소;

[3546] C_{1-30} 하이드로카르빌 기로서, 여기서 하이드로카르빌 기는 비치환되거나, 또는 할로겐 원자, C_{1-20} 알킬 기, C_{1-20} 알콕시 기, C_{7-20} 알킬아릴 기, C_{7-20} 아릴알킬 기, C_{6-20} 아릴 기, C_{6-20} 아릴옥시 기, C_{7-20} 알킬아릴옥시 기, 및 C_{7-20} 아릴알킬옥시 기로 이루어지는 군 중에서 선택되는 하나 이상의 치환체에 의해 추가로 치환되는, C_{1-30} 하이드로카르빌 기;

[3547] 헤테로원자 함유 C_{1-30} 하이드로카르빌 기로서, 여기서 헤테로원자 함유 하이드로카르빌 기는 비치환되거나, 또는 할로겐 원자, C_{1-20} 알킬 기, C_{1-20} 알콕시 기, C_{7-20} 알킬아릴 기, C_{7-20} 아릴알킬 기, C_{6-20} 아릴 기, C_{6-20} 아릴옥시 기, C_{7-20} 알킬아릴옥시 기, 및 C_{7-20} 아릴알킬옥시 기로 이루어지는 군 중에서 선택되는 하나 이상의 치환체에 의해 추가로 치환되는, 헤테로원자 함유 C_{1-30} 하이드로카르빌 기;

[3548] 옥시 기, -OR';

[3549] 아미도 기, $-NR'_2$;

[3550] 포스피도 기, $-PR'_2$;

[3551] 티올레이트 기, -SR';

[3552] 화학식 $-Si(R^a)_3$의 실릴 기; 및

[3553] 화학식 $-Ge(R^a)_3$의 게르마닐 기;

[3554] 여기서, R^7, R^8, R^9, 및 R^{10} 중 2개의 인접한 기는 선택적으로 결합되어 환형 하이드로카르빌 기 또는 환형 헤테로원자 함유 하이드로카르빌 기를 형성할 수 있고, 이 환형 하이드로카르빌 기 또는 환형 헤테로원자 함유 하이드로카르빌 기는 비치환되거나, 또는 할로겐 원자, C_{1-20} 알킬 기, C_{1-20} 알콕시 기, C_{7-20} 알킬아릴 기, C_{7-20} 아릴알킬 기, C_{6-20} 아릴 기, C_{6-20} 아릴옥시 기, C_{7-20} 알킬아릴옥시 기, C_{7-20} 아릴알킬옥시 기, 화학식 $-NR'_2$의 아미도

기, 화학식 $-PR'_2$의 포스피도 기, 화학식 -SR'의 티올레이트 기, 화학식 $-Si(R^a)_3$의 실릴 기, 및 화학식 $-Ge(R^a)_3$의 게르마닐 기로 이루어지는 군 중에서 선택되는 하나 이상의 치환체에 의해 추가로 치환되고;

[3555] 여기서 각 R'는 수소, C_{1-20} 알킬 기, 및 C_{6-20} 아릴 기로 이루어지는 군 중에서 독립적으로 선택되고;

[3556] 여기서 각 R^a는 수소, C_{1-8} 알킬 기, C_{1-8} 알콕시 기, C_{6-20} 아릴옥시 기 및 C_{6-20} 아릴 기로 이루어지는 군 중에서 독립적으로 선택된다.

[3557] 실시양태 139. 실시양태 138에 있어서, R^7, R^8, R^9, 및 R^{10}은 각각 수소인, 예비금속화 화합물.

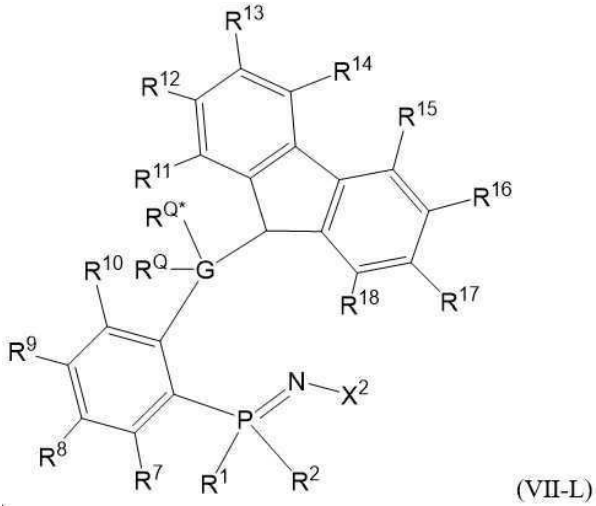
[3558] 실시양태 140. 실시양태 138 또는 139에 있어서, R^1 및 R^2가 각각 독립적으로 비치환된 C_{1-30} 하이드로카르빌 기인, 예비금속화 화합물.

[3559] 실시양태 141. 실시양태 138 내지 140 중 어느 하나에 있어서, R^1 및 R^2가 각각 독립적으로 이소프로필, 사이클로헥실 및 *tert*-부틸로 이루어지는 군 중에서 선택되는, 예비금속화 화합물.

[3560] 실시양태 142. 실시양태 138 내지 141 중 어느 하나에 있어서, R^{12} 및 R^{17}이 각각 독립적으로 비치환된 C_{1-30} 하이드로카르빌 기이고, R^{11}, R^{13}, R^{14}, R^{15}, R^{16}, 및 R^{18}은 각각 수소인, 예비금속화 화합물.

[3561] 실시양태 143. 실시양태 138 내지 142 중 어느 하나에 있어서, R^{12} 및 R^{17}이 각각 *tert*-부틸 기인, 예비금속화 화합물.

[3562] 실시양태 144. 실시양태 137에 있어서, 예비금속화 화합물이 화학식 VII-L로 표현되는, 예비금속화 화합물:

[3563] 

(VII-L)

[3564] 여기서, R^1, R^2, R^{11}, R^{12}, R^{13}, R^{14}, R^{15}, R^{16}, R^{17}, R^{18}, 및 X^2는 화학식 I-L-H 및 V-L에서 정의된 바와 같고;

[3565] 여기서, G는 C 또는 Si이고;

[3566] 여기서, R^Q 및 R^{Q*}는 각각 독립적으로 다음으로 이루어진 군 중에서 선택되며:

[3567] 할로겐;

[3568] 수소;

[3569] C_{1-30} 하이드로카르빌 기로서, 여기서 하이드로카르빌 기는 비치환되거나, 또는 할로겐 원자, C_{1-20} 알킬 기, C_{1-20} 알콕시 기, C_{7-20} 알킬아릴 기, C_{7-20} 아릴알킬 기, C_{6-20} 아릴 기, C_{6-20} 아릴옥시 기, C_{7-20} 알킬아릴옥시 기, 및 C_{7-20} 아릴알킬옥시 기로 이루어지는 군 중에서 선택되는 하나 이상의 치환체에 의해 추가로 치환되는 C_{1-30} 하이드로카르빌 기;

[3570] 헤테로원자 함유 C_{1-30} 하이드로카르빌 기로서, 여기서 헤테로원자 함유 하이드로카르빌 기는 비치환되거나, 또는 할로겐 원자, C_{1-20} 알킬 기, C_{1-20} 알콕시 기, C_{7-20} 알킬아릴 기, C_{7-20} 아릴알킬 기, C_{6-20} 아릴 기, C_{6-20} 아릴옥시 기, C_{7-20} 알킬아릴옥시 기, 및 C_{7-20} 아릴알킬옥시 기로 이루어지는 군 중에서 선택되는 하나 이상의 치환체에 의해 추가로 치환되는 헤테로원자 함유 C_{1-30} 하이드로카르빌 기;

[3571] 여기서, R^{Q} 및 R^{Q*} 기는 선택적으로 결합되어 환형 하이드로카르빌 기 또는 환형 헤테로원자 함유 하이드로카르빌 기를 형성할 수 있고, 이 환형 하이드로카르빌 기 또는 환형 헤테로원자 함유 하이드로카르빌 기는 비치환되거나, 또는 할로겐 원자, C_{1-20} 알킬 기, C_{1-20} 알콕시 기, C_{7-20} 알킬아릴 기, C_{7-20} 아릴알킬 기, C_{6-20} 아릴 기, C_{6-20} 아릴옥시 기, C_{7-20} 알킬아릴옥시 기, C_{7-20} 아릴알킬옥시 기, 화학식 $-NR'_2$의 아미도 기; 화학식 $-PR'_2$의 포스피도 기, 화학식 -SR'의 티올레이트 기, 화학식 $-Si(R^a)_3$의 실릴 기, 및 화학식 $-Ge(R^a)_3$의 게르마닐 기로 이루어지는 군 중에서 선택되는 하나 이상의 치환체에 의해 추가로 치환되며;

[3572] 여기서, R^7, R^8, R^9, 및 R^{10}은 각각 독립적으로 다음으로 이루어진 군 중에서 선택되고:

[3573] 할로겐;

[3574] 수소;

[3575] C_{1-30} 하이드로카르빌 기로서, 여기서 하이드로카르빌 기는 비치환되거나, 또는 할로겐 원자, C_{1-20} 알킬 기, C_{1-20} 알콕시 기, C_{7-20} 알킬아릴 기, C_{7-20} 아릴알킬 기, C_{6-20} 아릴 기, C_{6-20} 아릴옥시 기, C_{7-20} 알킬아릴옥시 기, 및 C_{7-20} 아릴알킬옥시 기로 이루어지는 군 중에서 선택되는 하나 이상의 치환체에 의해 추가로 치환되는, C_{1-30} 하이드로카르빌 기;

[3576] 헤테로원자 함유 C_{1-30} 하이드로카르빌 기로서, 여기서 헤테로원자 함유 하이드로카르빌 기는 비치환되거나, 또는 할로겐 원자, C_{1-20} 알킬 기, C_{1-20} 알콕시 기, C_{7-20} 알킬아릴 기, C_{7-20} 아릴알킬 기, C_{6-20} 아릴 기, C_{6-20} 아릴옥시 기, C_{7-20} 알킬아릴옥시 기, 및 C_{7-20} 아릴알킬옥시 기로 이루어지는 군 중에서 선택되는 하나 이상의 치환체에 의해 추가로 치환되는, 헤테로원자 함유 C_{1-30} 하이드로카르빌 기;

[3577] 옥시 기, -OR';

[3578] 아미도 기, $-NR'_2$;

[3579] 포스피도 기, $-PR'_2$;

[3580] 티올레이트 기, -SR';

[3581] 화학식 $-Si(R^a)_3$의 실릴 기; 및

[3582] 화학식 $-Ge(R^a)_3$의 게르마닐 기;

[3583] 여기서, R^7, R^8, R^9, 및 R^{10} 중 2개의 인접한 기는 선택적으로 결합되어 환형 하이드로카르빌 기 또는 환형 헤테로원자 함유 하이드로카르빌 기를 형성할 수 있고, 이 환형 하이드로카르빌 기 또는 환형 헤테로원자 함유 하이드로카르빌 기는 비치환되거나, 또는 할로겐 원자, C_{1-20} 알킬 기, C_{1-20} 알콕시 기, C_{7-20} 알킬아릴 기, C_{7-20} 아릴알킬 기, C_{6-20} 아릴 기, C_{6-20} 아릴옥시 기, C_{7-20} 알킬아릴옥시 기, C_{7-20} 아릴알킬옥시 기, 화학식 $-NR'_2$의 아미도 기, 화학식 $-PR'_2$의 포스피도 기, 화학식 -SR'의 티올레이트 기, 화학식 $-Si(R^a)_3$의 실릴 기, 및 화학식 $-Ge(R^a)_3$의 게르마닐 기로 이루어지는 군 중에서 선택되는 하나 이상의 치환체에 의해 추가로 치환되고;

[3584] 여기서 각 R'는 수소, C_{1-20} 알킬 기, 및 C_{6-20} 아릴 기로 이루어지는 군 중에서 독립적으로 선택되고;

[3585] 여기서 각 R^a는 수소, C_{1-8} 알킬 기, C_{1-8} 알콕시 기, C_{6-20} 아릴옥시 기 및 C_{6-20} 아릴 기로 이루어지는 군 중에서

독립적으로 선택된다.

[3586] 실시양태 145. 실시양태 144에 있어서, R^7, R^8, R^9 및 R^{10}이 각각 수소인, 예비금속화 화합물.

[3587] 실시양태 146. 실시양태 144 또는 145에 있어서, R^1 및 R^2가 각각 독립적으로 비치환된 C_{1-30} 하이드로카르빌 기인, 예비금속화 화합물.

[3588] 실시양태 147. 실시양태 144 내지 146 중 어느 하나에 있어서, R^1 및 R^2가 각각 독립적으로 이소프로필, 사이클로헥실 및 *tert*-부틸로 이루어지는 군 중에서 선택되는, 예비금속화 화합물.

[3589] 실시양태 148. 실시양태 144 내지 147 중 어느 하나에 있어서, R^{12} 및 R^{17}이 각각 독립적으로 비치환된 C_{1-30} 하이드로카르빌 기이고, R^{11}, R^{13}, R^{14}, R^{15}, R^{16} 및 R^{18}이 각각 수소인, 예비금속화 화합물.

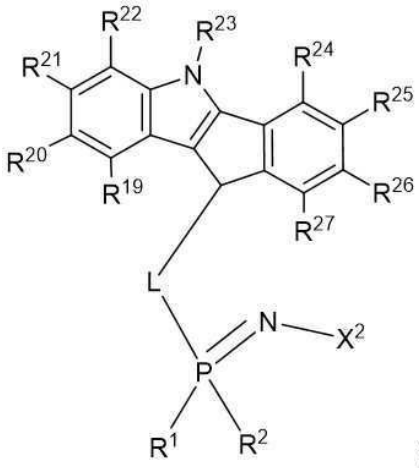
[3590] 실시양태 149. 실시양태 144 내지 148 중 어느 하나에 있어서, R^{12} 및 R^{17}이 각각 *tert*-부틸 기인, 예비금속화 화합물.

[3591] 실시양태 150. 실시양태 144 내지 149 중 어느 하나에 있어서, G가 탄소인, 예비금속화 화합물.

[3592] 실시양태 151. 실시양태 144 내지 150 중 어느 하나에 있어서, R^Q 및 R^{Q*}가 각각 독립적으로 수소, C_{1-20} 알킬 기 및 C_{6-20} 아릴 기로 이루어지는 군 중에서 선택되는, 예비금속화 화합물.

[3593] 실시양태 152. 실시양태 144 내지 151 중 어느 하나에 있어서, R^Q가 수소이고, R^{Q*}가 C_{1-8} 알킬 기인, 예비금속화 화합물.

[3594] 실시양태 153. 실시양태 133에 있어서, 예비금속화 화합물이 화학식 VIII-L로 표현되는 것인, 예비금속화 화합물:

[3595] 

(VIII-L)

[3596] 여기서, R^1, R^2, L 및 X^2는 화학식 I-L-H에서 정의된 바와 같고;

[3597] 여기서, R^{23}은 다음으로 이루어진 군 중에서 선택되며:

[3598] 수소;

[3599] C_{1-30} 하이드로카르빌 기로서, 여기서 하이드로카르빌 기는 비치환되거나, 또는 할로겐 원자, C_{1-20} 알킬 기, C_{1-20} 알콕시 기, C_{7-20} 알킬아릴 기, C_{7-20} 아릴알킬 기, C_{6-20} 아릴 기, C_{6-20} 아릴옥시 기, C_{7-20} 알킬아릴옥시 기, 및 C_{7-20} 아릴알킬옥시 기로 이루어지는 군 중에서 선택되는 하나 이상의 치환체에 의해 추가로 치환되는 C_{1-30} 하이드로카르빌 기;

[3600] 헤테로원자 함유 C_{1-30} 하이드로카르빌 기로서, 여기서 헤테로원자 함유 하이드로카르빌 기는 비치환되거나, 또는

할로겐 원자, C_{1-20} 알킬 기, C_{1-20} 알콕시 기, C_{7-20} 알킬아릴 기, C_{7-20} 아릴알킬 기, C_{6-20} 아릴 기, C_{6-20} 아릴옥시 기, C_{7-20} 알킬아릴옥시 기, 및 C_{7-20} 아릴알킬옥시 기로 이루어지는 군 중에서 선택되는 하나 이상의 치환체에 의해 추가로 치환되는 헤테로원자 함유 C_{1-30} 하이드로카르빌 기;

[3601] 여기서, R^{19}, R^{20}, R^{21}, R^{22}, R^{24}, R^{25}, R^{26}, 및 R^{27}은 각각 독립적으로 다음으로 이루어진 군 중에서 선택되고:

[3602] 할로겐;

[3603] 수소;

[3604] C_{1-30} 하이드로카르빌 기로서, 여기서 하이드로카르빌 기는 비치환되거나, 또는 할로겐 원자, C_{1-20} 알킬 기, C_{1-20} 알콕시 기, C_{7-20} 알킬아릴 기, C_{7-20} 아릴알킬 기, C_{6-20} 아릴 기, C_{6-20} 아릴옥시 기, C_{7-20} 알킬아릴옥시 기, 및 C_{7-20} 아릴알킬옥시 기로 이루어지는 군 중에서 선택되는 하나 이상의 치환체에 의해 추가로 치환되는, C_{1-30} 하이드로카르빌 기;

[3605] 헤테로원자 함유 C_{1-30} 하이드로카르빌 기로서, 여기서 헤테로원자 함유 하이드로카르빌 기는 비치환되거나, 또는 할로겐 원자, C_{1-20} 알킬 기, C_{1-20} 알콕시 기, C_{7-20} 알킬아릴 기, C_{7-20} 아릴알킬 기, C_{6-20} 아릴 기, C_{6-20} 아릴옥시 기, C_{7-20} 알킬아릴옥시 기, 및 C_{7-20} 아릴알킬옥시 기로 이루어지는 군 중에서 선택되는 하나 이상의 치환체에 의해 추가로 치환되는, 헤테로원자 함유 C_{1-30} 하이드로카르빌 기;

[3606] 옥시 기, -OR';

[3607] 아미도 기, $-NR'_2$;

[3608] 포스피도 기, $-PR'_2$;

[3609] 티올레이트 기, -SR';

[3610] 화학식 $-Si(R^a)_3$의 실릴 기; 및

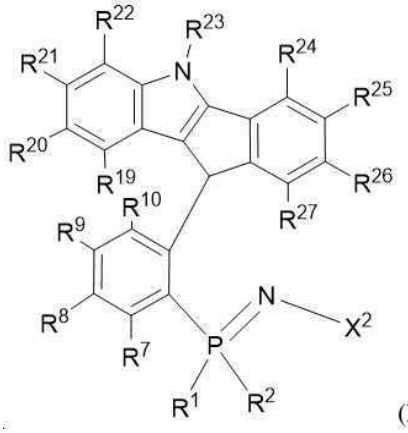
[3611] 화학식 $-Ge(R^a)_3$의 게르마닐 기;

[3612] 여기서, R^{19}, R^{20}, R^{21}, R^{22}, R^{24}, R^{25}, R^{26}, 및 R^{27} 중 2개의 인접한 기는 선택적으로 결합되어 환형 하이드로카르빌 기 또는 환형 헤테로원자 함유 하이드로카르빌 기를 형성할 수 있고, 이 환형 하이드로카르빌 기 또는 환형 헤테로원자 함유 하이드로카르빌 기는 비치환되거나, 또는 할로겐 원자, C_{1-20} 알킬 기, C_{1-20} 알콕시 기, C_{7-20} 알킬아릴 기, C_{7-20} 아릴알킬 기, C_{6-20} 아릴 기, C_{6-20} 아릴옥시 기, C_{7-20} 알킬아릴옥시 기, C_{7-20} 아릴알킬옥시 기, 화학식 $-NR'_2$의 아미도 기, 화학식 $-PR'_2$의 포스피도 기, 화학식 -SR'의 티올레이트 기, 화학식 $-Si(R^a)_3$의 실릴 기, 및 화학식 $-Ge(R^a)_3$의 게르마닐 기로 이루어지는 군 중에서 선택되는 하나 이상의 치환체에 의해 추가로 치환되고;

[3613] 여기서 각 R'는 수소, C_{1-20} 알킬 기, 및 C_{6-20} 아릴 기로 이루어지는 군 중에서 독립적으로 선택되고;

[3614] 여기서 각 R^a는 수소, C_{1-8} 알킬 기, C_{1-8} 알콕시 기, C_{6-20} 아릴옥시 기 및 C_{6-20} 아릴 기로 이루어지는 군 중에서 독립적으로 선택된다.

[3615] 실시양태 154. 실시양태 153에 있어서, 예비금속화 화합물이 화학식 IX-L로 표현되는 것인, 예비금속화 화합물:



(IX-L)

[3616]

[3617] 여기서, R^1, R^2, R^{19}, R^{20}, R^{21}, R^{22}, R^{23}, R^{24}, R^{25}, R^{26}, R^{27} 및 X^2는 화학식 I-L-H 및 VIII-L에서 정의된 바와 같고;

[3618] 여기서, R^7, R^8, R^9, 및 R^{10}은 각각 독립적으로 다음으로 이루어진 군 중에서 선택되고:

[3619] 할로겐;

[3620] 수소;

[3621] C_{1-30} 하이드로카르빌 기로서, 여기서 하이드로카르빌 기는 비치환되거나, 또는 할로겐 원자, C_{1-20} 알킬 기, C_{1-20} 알콕시 기, C_{7-20} 알킬아릴 기, C_{7-20} 아릴알킬 기, C_{6-20} 아릴 기, C_{6-20} 아릴옥시 기, C_{7-20} 알킬아릴옥시 기, 및 C_{7-20} 아릴알킬옥시 기로 이루어지는 군 중에서 선택되는 하나 이상의 치환체에 의해 추가로 치환되는, C_{1-30} 하이드로카르빌 기;

[3622] 헤테로원자 함유 C_{1-30} 하이드로카르빌 기로서, 여기서 헤테로원자 함유 하이드로카르빌 기는 비치환되거나, 또는 할로겐 원자, C_{1-20} 알킬 기, C_{1-20} 알콕시 기, C_{7-20} 알킬아릴 기, C_{7-20} 아릴알킬 기, C_{6-20} 아릴 기, C_{6-20} 아릴옥시 기, C_{7-20} 알킬아릴옥시 기, 및 C_{7-20} 아릴알킬옥시 기로 이루어지는 군 중에서 선택되는 하나 이상의 치환체에 의해 추가로 치환되는, 헤테로원자 함유 C_{1-30} 하이드로카르빌 기;

[3623] 옥시 기, -OR';

[3624] 아미도 기, $-NR'_2$;

[3625] 포스피도 기, $-PR'_2$;

[3626] 티올레이트 기, -SR';

[3627] 화학식 $-Si(R^a)_3$의 실릴 기; 및

[3628] 화학식 $-Ge(R^a)_3$의 게르마닐 기;

[3629] 여기서, R^7, R^8, R^9, 및 R^{10} 중 2개의 인접한 기는 선택적으로 결합되어 환형 하이드로카르빌 기 또는 환형 헤테로원자 함유 하이드로카르빌 기를 형성할 수 있고, 이 환형 하이드로카르빌 기 또는 환형 헤테로원자 함유 하이드로카르빌 기는 비치환되거나, 또는 할로겐 원자, C_{1-20} 알킬 기, C_{1-20} 알콕시 기, C_{7-20} 알킬아릴 기, C_{7-20} 아릴알킬 기, C_{6-20} 아릴 기, C_{6-20} 아릴옥시 기, C_{7-20} 알킬아릴옥시 기, C_{7-20} 아릴알킬옥시 기, 화학식 $-NR'_2$의 아미도 기, 화학식 $-PR'_2$의 포스피도 기, 화학식 -SR'의 티올레이트 기, 화학식 $-Si(R^a)_3$의 실릴 기, 및 화학식

$-Ge(R^a)_3$의 게르마닐 기로 이루어지는 군 중에서 선택되는 하나 이상의 치환체에 의해 추가로 치환되고;

[3630] 여기서 각 R'는 수소, C_{1-20} 알킬 기, 및 C_{6-20} 아릴 기로 이루어지는 군 중에서 독립적으로 선택되고;

[3631] 여기서 각 R^a는 수소, C_{1-8} 알킬 기, C_{1-8} 알콕시 기, C_{6-20} 아릴옥시 기 및 C_{6-20} 아릴 기로 이루어지는 군 중에서 독립적으로 선택된다.

[3632] 실시양태 155. 실시양태 154에 있어서, R^7, R^8, R^9 및 R^{10}이 각각 수소인, 예비금속화 화합물.

[3633] 실시양태 156. 실시양태 154 또는 155에 있어서, R^1 및 R^2가 각각 독립적으로 비치환된 C_{1-30} 하이드로카르빌 기인, 예비금속화 화합물.

[3634] 실시양태 157. 실시양태 154 내지 156 중 어느 하나에 있어서, R^1 및 R^2가 각각 독립적으로 이소프로필, 사이클로헥실 및 *tert*-부틸로 이루어지는 군 중에서 선택되는, 예비금속화 화합물.

[3635] 실시양태 158. 실시양태 154 내지 157 중 어느 하나에 있어서, R^{23}이 비치환된 C_{1-30} 하이드로카르빌 기인, 예비금속화 화합물.

[3636] 실시양태 159. 실시양태 154 내지 158 중 어느 하나에 있어서, R^{23}이 C_{1-8} 알킬 기인, 예비금속화 화합물.

[3637] 실시양태 160. 실시양태 154 내지 159 중 어느 하나에 있어서, R^{20}이 비치환된 C_{1-30} 하이드로카르빌 기인, 예비금속화 화합물.

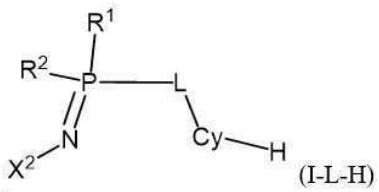
[3638] 실시양태 161. 실시양태 154 내지 160 중 어느 하나에 있어서, R^{20}이 비치환된 C_{1-8} 알킬 기인, 예비금속화 화합물.

[3639] 실시양태 162. 실시양태 154 내지 159 중 어느 하나에 있어서, R^{20}이 비치환된 C_{1-30} 하이드로카르빌 기이고, R^{19}, R^{21}, R^{22}, R^{24}, R^{25}, R^{26}, 및 R^{27}이 각각 수소인, 예비금속화 화합물.

[3640] 실시양태 163. 실시양태 162에 있어서, R^{20}이 C_{1-8} 알킬 기인, 예비금속화 화합물.

[3641] 실시양태 164. 실시양태 133 내지 163 중 어느 하나에 있어서, X^2가 수소 또는 트리메틸실릴 기, $-SiMe_3$인, 예비금속화 화합물.

[3642] 실시양태 165. 화학식 I-L-H로 표현되는 화합물을 화학식 MX^*_4를 갖는 4족 전이 금속 화합물과 반응시키는 것을 포함하는, 유기금속 복합체를 제조하는 공정:

[3643] 

(I-L-H)

[3644] 여기서,

[3645] M은 Ti, Zr 또는 Hf이고;

[3646] R^1 및 R^2는 각각 독립적으로 수소 및 R^X로 이루어진 군 중에서 선택되거나; 또는 R^1 및 R^2는 이들이 부착된 P 원자와 함께, 비치환되거나, 또는 할로겐 원자, C_{1-20} 알킬 기, C_{1-20} 알콕시 기, C_{7-20} 알킬아릴 기, C_{7-20} 아릴알킬 기, C_{6-20} 아릴 기, C_{6-20} 아릴옥시 기, C_{7-20} 알킬아릴옥시 기, 및 C_{7-20} 아릴알킬옥시 기로 이루어진 군 중에서 선택되는 하나 이상의 치환체에 의해 추가로 치환되는 3-10원 헤테로환형 기를 형성하며;

[3647] 각 R^X는 할로겐 원자; 하이드로카르빌 기가 비치환되거나, 또는 하나 이상의 할로겐 원자, C_{1-20} 알킬 기, C_{1-20} 알콕시 기, C_{7-20} 알킬아릴 기, C_{7-20} 아릴알킬 기, C_{6-20} 아릴 기, C_{6-20} 아릴옥시 기, C_{7-20} 알킬아릴옥시 기, 및/또는 C_{7-20} 아릴알킬옥시 기에 의해 추가로 치환되는 C_{1-30} 하이드로카르빌 기; 화학식 $-NR'_2$의 아미도 기; 화학식 $-Si(R^a)_3$의 실릴 기; 화학식 $-Ge(R^a)_3$의 게르마닐 기; 및 화학식 $-N=P(R^b)(R^c)(R^d)$의 포스핀이민 기로 이루어진 군 중에서 독립적으로 선택되고; 여기서 각 R'는 수소, C_{1-20} 알킬 기, 및 C_{6-20} 아릴 기로 이루어지는 군 중에서 독립적으로 선택되고; 각 R^a는 수소, C_{1-8} 알킬 기, C_{1-8} 알콕시 기, C_{6-20} 아릴옥시 기 및 C_{6-20} 아릴 기로 이루어진 군 중에서 독립적으로 선택되고; R^b, R^c, R^d는 각각 독립적으로 C_{1-20} 알킬 기이며;

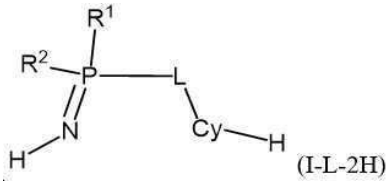
[3648] X^2는 화학식 $-Si(R^e)_3$의 실릴 기이고, 여기서 각 R^e는 수소, C_{1-8} 알킬 기, C_{1-8} 알콕시 기, C_{6-20} 아릴옥시 기 및 C_{6-20} 아릴 기로 이루어지는 군 중에서 독립적으로 선택되고;

[3649] Cy는 사이클로펜타디에닐형 모이어티이고, L 및 H에 공유 결합되고; 그리고

[3650] L은 Cy와 P를 연결하는 원자의 근접한 사슬을 함유하는 가교 기로서, 여기서 근접한 사슬은 2개 또는 3개의 원자를 함유하고; 그리고

[3651] 각 X^*는 할로겐, 수소, 화학식 $-NR^{\epsilon}_2$의 아미도 기, C_{1-20} 알킬 기, C_{1-20} 알콕시 기, C_{7-20} 알킬아릴 기, C_{7-20} 아릴알킬 기, C_{6-20} 아릴 기, C_{6-20} 아릴옥사이드 기, C_{7-20} 알킬아릴옥시 기, 및 C_{7-20} 아릴알킬옥시 기로 이루어지는 군 중에서 독립적으로 선택되고; 여기서 각 R^{ϵ}는 수소, C_{1-20} 알킬 기, 및 C_{6-20} 아릴 기로 이루어지는 군 중에서 독립적으로 선택된다.

[3652] 실시양태 166. 화학식 I-L-2H로 표현되는 화합물을 염기와 반응시킨 뒤 화학식 MX^*_4를 갖는 4족 전이 금속 화합물과 반응시키는 것을 포함하는, 유기금속 복합체를 제조하는 공정:

[3653] 

(I-L-2H)

[3654] 여기서,

[3655] M은 Ti, Zr 또는 Hf이고;

[3656] R^1 및 R^2는 각각 독립적으로 수소 및 R^X로 이루어진 군 중에서 선택되거나; 또는 R^1 및 R^2는 이들이 부착된 P 원자와 함께, 비치환되거나, 또는 할로겐 원자, C_{1-20} 알킬 기, C_{1-20} 알콕시 기, C_{7-20} 알킬아릴 기, C_{7-20} 아릴알킬 기, C_{6-20} 아릴 기, C_{6-20} 아릴옥시 기, C_{7-20} 알킬아릴옥시 기, 및 C_{7-20} 아릴알킬옥시 기로 이루어진 군 중에서 선택되는 하나 이상의 치환체에 의해 추가로 치환되는 3-10원 헤테로환형 기를 형성하며;

[3657] 각 R^X는 할로겐 원자; 하이드로카르빌 기가 비치환되거나, 또는 하나 이상의 할로겐 원자, C_{1-20} 알킬 기, C_{1-20} 알콕시 기, C_{7-20} 알킬아릴 기, C_{7-20} 아릴알킬 기, C_{6-20} 아릴 기, C_{6-20} 아릴옥시 기, C_{7-20} 알킬아릴옥시 기, 및/또는 C_{7-20} 아릴알킬옥시 기에 의해 추가로 치환되는 C_{1-30} 하이드로카르빌 기; 화학식 $-NR'_2$의 아미도 기; 화학식 $-Si(R^a)_3$의 실릴 기; 화학식 $-Ge(R^a)_3$의 게르마닐 기; 및 화학식 $-N=P(R^b)(R^c)(R^d)$의 포스핀이민 기로 이루어진 군 중에서 독립적으로 선택되고; 여기서 각 R'는 수소, C_{1-20} 알킬 기, 및 C_{6-20} 아릴 기로 이루어지는 군 중에서 독립적으로 선택되고; 각 R^a는 수소, C_{1-8} 알킬 기, C_{1-8} 알콕시 기, C_{6-20} 아릴옥시 기 및 C_{6-20} 아릴 기로 이루어진

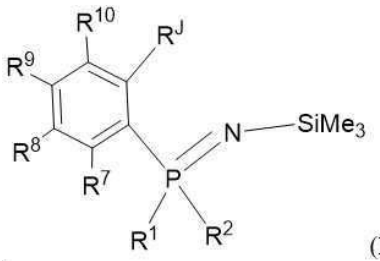
군 중에서 독립적으로 선택되고; R^b, R^c, R^d는 각각 독립적으로 C_{1-20} 알킬 기이며;

[3658] Cy는 사이클로펜타디에닐형 모이어티이고 L 및 H에 공유 결합되며; 그리고

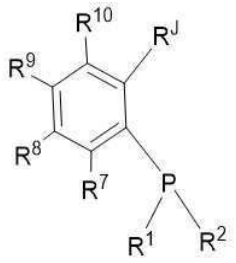
[3659] L은 Cy와 P를 연결하는 원자의 근접한 사슬을 함유하는 가교 기로서, 여기서 근접한 사슬은 2개 또는 3개의 원자를 함유하고; 그리고

[3660] 각 X^*는 할로겐, 수소, 화학식 $-NR^{\epsilon}_2$의 아미도 기, C_{1-20} 알킬 기, C_{1-20} 알콕시 기, C_{7-20} 알킬아릴 기, C_{7-20} 아릴알킬 기, C_{6-20} 아릴 기, C_{6-20} 아릴옥사이드 기, C_{7-20} 알킬아릴옥시 기, 및 C_{7-20} 아릴알킬옥시 기로 이루어지는 군 중에서 독립적으로 선택되고; 여기서 각 R^{ϵ}는 수소, C_{1-20} 알킬 기, 및 C_{6-20} 아릴 기로 이루어지는 군 중에서 독립적으로 선택된다.

[3661] 실시양태 167. 화학식 I-P-TMS로 표현되는 화합물을 제조하는 방법으로서, 이 방법은 화학식 I-P로 표현되는 포스핀 화합물을 헥사클로로에탄, $Cl_3C\text{-}CCl_3$; 및 헥사메틸디실라잔, $[(CH_3)_3Si]_2NH$와 조합하는 것을 포함하는 방법:

[3662] 

(I-P-TMS)

[3663] 

(I-P)

[3664] 여기서, R^J는 다음으로 이루어지는 군 중에서 선택되고:

[3665] 하이드로카르빌 기로서, 여기서 하이드로카르빌 기는 비치환되거나, 또는 할로겐 원자, C_{1-20} 알킬 기, C_{1-20} 알콕시 기, C_{7-20} 알킬아릴 기, C_{7-20} 아릴알킬 기, C_{6-20} 아릴 기, C_{6-20} 아릴옥시 기, C_{7-20} 알킬아릴옥시 기, 및 C_{7-20} 아릴알킬옥시 기, 화학식 $-NR'_2$의 아미도 기, 화학식 $-PR'_2$의 포스피도 기, 화학식 -SR'의 티올레이트 기, 화학식 $-Si(R^a)_3$의 실릴 기, 및 화학식 $-Ge(R^a)_3$의 게르마닐 기로 이루어지는 군 중에서 선택되는 하나 이상의 치환체에 의해 추가로 치환되는, 하이드로카르빌 기;

[3666] 헤테로원자 함유 하이드로카르빌 기로서, 여기서 헤테로원자 함유 하이드로카르빌 기는 비치환되거나, 또는 할로겐 원자, C_{1-20} 알킬 기, C_{1-20} 알콕시 기, C_{7-20} 알킬아릴 기, C_{7-20} 아릴알킬 기, C_{6-20} 아릴 기, C_{6-20} 아릴옥시 기, C_{7-20} 알킬아릴옥시 기, 및 C_{7-20} 아릴알킬옥시 기, 화학식 $-NR'_2$의 아미도 기, 화학식 $-PR'_2$의 포스피도 기, 화학식 -SR'의 티올레이트 기, 화학식 $-Si(R^a)_3$의 실릴 기, 및 화학식 $-Ge(R^a)_3$의 게르마닐 기로 이루어지는 군 중에서 선택되는 하나 이상의 치환체에 의해 추가로 치환되는, 헤테로원자 함유 하이드로카르빌 기;

[3667] 여기서, R^1 및 R^2는 각각 독립적으로 하이드로카르빌 기가 비치환되거나, 또는 하나 이상의 할로겐 원자, C_{1-20} 알킬 기, C_{1-20} 알콕시 기, C_{7-20} 알킬아릴 기, C_{7-20} 아릴알킬 기, C_{6-20} 아릴 기, C_{6-20} 아릴옥시 기, C_{7-20} 알킬아릴옥시 기, 및/또는 C_{7-20} 아릴알킬옥시 기에 의해 추가로 치환되는 C_{1-30} 하이드로카르빌 기 중에서 선택되고;

[3668] 여기서, R^7, R^8, R^9, 및 R^{10}은 각각 독립적으로 다음으로 이루어진 군 중에서 선택되고:

[3669] 할로겐;

[3670] 수소;

[3671] C_{1-30} 하이드로카르빌 기로서, 여기서 하이드로카르빌 기는 비치환되거나, 또는 할로겐 원자, C_{1-20} 알킬 기, C_{1-20} 알콕시 기, C_{7-20} 알킬아릴 기, C_{7-20} 아릴알킬 기, C_{6-20} 아릴 기, C_{6-20} 아릴옥시 기, C_{7-20} 알킬아릴옥시 기, 및 C_{7-20} 아릴알킬옥시 기로 이루어지는 군 중에서 선택되는 하나 이상의 치환체에 의해 추가로 치환되는, C_{1-30} 하이드로카르빌 기;

[3672] 헤테로원자 함유 C_{1-30} 하이드로카르빌 기로서, 여기서 헤테로원자 함유 하이드로카르빌 기는 비치환되거나, 또는 할로겐 원자, C_{1-20} 알킬 기, C_{1-20} 알콕시 기, C_{7-20} 알킬아릴 기, C_{7-20} 아릴알킬 기, C_{6-20} 아릴 기, C_{6-20} 아릴옥시 기, C_{7-20} 알킬아릴옥시 기, 및 C_{7-20} 아릴알킬옥시 기로 이루어지는 군 중에서 선택되는 하나 이상의 치환체에 의해 추가로 치환되는, 헤테로원자 함유 C_{1-30} 하이드로카르빌 기;

[3673] 옥시 기, -OR';

[3674] 아미도 기, $-NR'_2$;

[3675] 포스피도 기 $-PR'_2$;

[3676] 티올레이트 기 SR';

[3677] 화학식 $-Si(R^a)_3$의 실릴 기; 및

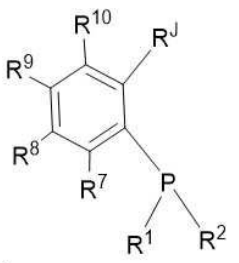
[3678] 화학식 $-Ge(R^a)_3$의 게르마닐 기;

[3679] 여기서, R^7, R^8, R^9, 및 R^{10} 중 2개의 인접한 기는 선택적으로 결합되어 환형 하이드로카르빌 기 또는 환형 헤테로원자 함유 하이드로카르빌 기를 형성할 수 있고, 이 환형 하이드로카르빌 기 또는 환형 헤테로원자 함유 하이드로카르빌 기는 비치환되거나, 또는 할로겐 원자, C_{1-20} 알킬 기, C_{1-20} 알콕시 기, C_{7-20} 알킬아릴 기, C_{7-20} 아릴알킬 기, C_{6-20} 아릴 기, C_{6-20} 아릴옥시 기, C_{7-20} 알킬아릴옥시 기, C_{7-20} 아릴알킬옥시 기, 아미도 기 $-NR'_2$, 포스피도 기 $-PR'_2$, 티올레이트 기 -SR', 화학식 $-Si(R^a)_3$의 실릴 기, 및 화학식 $-Ge(R^a)_3$의 게르마닐 기로 이루어지는 군 중에서 선택되는 하나 이상의 치환체에 의해 추가로 치환되고;

[3680] 여기서 각 R'는 수소, C_{1-20} 알킬 기, 및 C_{6-20} 아릴 기로 이루어지는 군 중에서 독립적으로 선택되고;

[3681] 여기서 각 R^a는 수소, C_{1-8} 알킬 기, C_{1-8} 알콕시 기, C_{6-20} 아릴옥시 기 및 C_{6-20} 아릴 기로 이루어지는 군 중에서 독립적으로 선택된다.

[3682] 실시양태 168. 실시양태 167에 있어서, 방법이 화학식 I-P로 표현되는 포스핀 화합물을 헥사클로로에탄, Cl_3C-CCl_3과 조합하는, 제1 반응 단계 (i); 및

[3683] 

(I-P)

[3684] 제1 반응 단계에서 형성된 반응 생성물과 헥사메틸디실라잔, $[(CH_3)_3Si]_2NH$을 조합하는 제2 반응 단계 (ii)

[3685] 를 포함하는 방법.

[3686] 실시양태 169. 실시양태 167 또는 168에 있어서, 포스핀 화합물, (I-P) 및 헥사클로로에탄, Cl_3C-CCl_3이 약 1:1의 몰 비로 조합되는, 방법.

[3687] 실시양태 170. 실시양태 168에 있어서, 헥사메틸디실라잔, $[(CH_3)_3Si]_2NH$의 몰 과량이 제1 반응 단계에서 형성된 반응 생성물과 조합되는, 방법.

[3688] 실시양태 171. 실시양태 167 내지 170 중 어느 하나에 있어서, 포스핀 화합물, (I-P)에 대한 헥사메틸디실라잔, $[(CH_3)_3Si]_2NH$의 몰 비가 1.0 초과인, 방법.

[3689] 실시양태 172. 실시양태 167 내지 171 중 어느 하나에 있어서, 포스핀 화합물, (I-P); 헥사클로로에탄, Cl_3C-CCl_3; 및 헥사메틸디실라잔, $[(CH_3)_3Si]_2NH$가 극성 용매에서 조합되는, 방법.

[3690] 실시양태 173. 실시양태 172에 있어서, 극성 용매가 디클로로메탄, 1,2-디클로로에탄, 아세토니트릴 및 테트라하이드로푸란으로 이루어지는 군 중에서 선택되는, 방법.

[3691] 실시양태 174. 실시양태 168에 있어서, 단계 (i) 및 (ii)가 단일 반응 용기에서 수행되는, 방법.

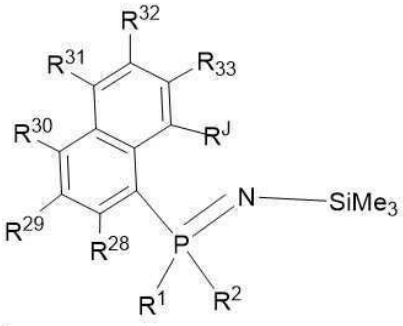
[3692] 실시양태 175. 실시양태 167 내지 174 중 어느 하나에 있어서, R^1 및 R^2가 1차 알킬 기, 2차 알킬 기, 3차 알킬 기, 및 아릴 기로 이루어지는 군 중에서 독립적으로 선택되는, 방법.

[3693] 실시양태 176. 실시양태 167 내지 175 중 어느 하나에 있어서, R^1 및 R^2가 2차 알킬 기인, 방법.

[3694] 실시양태 177. 실시양태 167 내지 175 중 어느 하나에 있어서, R^1 및 R^2가 3차 알킬 기인, 방법.

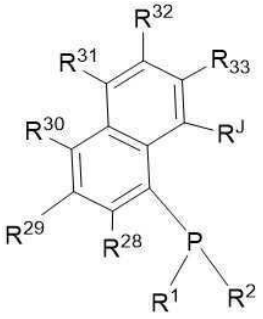
[3695] 실시양태 178. 실시양태 167 내지 177 중 어느 하나에 있어서, R^7, R^8, R^9 및 R^{10}이 각각 수소인, 방법.

[3696] 실시양태 179. 화학식 II-P-TMS로 표현되는 화합물을 제조하는 방법으로서:

[3697] 

(II-P-TMS)

[3698] 이 방법이 화학식 II-P로 표현되는 포스핀 화합물을 헥사클로로에탄, Cl_3C-CCl_3; 및 헥사메틸디실라잔, $[(CH_3)_3Si]_2NH$와 조합하는 것을 포함하는, 방법:

[3699] 

(II-P)

[3700] 여기서, R^J는 다음으로 이루어지는 군 중에서 선택되고:

[3701] 하이드로카르빌 기로서, 여기서 하이드로카르빌 기는 비치환되거나, 또는 할로겐 원자, C_{1-20} 알킬 기, C_{1-20} 알콕시 기, C_{7-20} 알킬아릴 기, C_{7-20} 아릴알킬 기, C_{6-20} 아릴 기, C_{6-20} 아릴옥시 기, C_{7-20} 알킬아릴옥시 기, C_{7-20} 아릴알킬옥시 기, 화학식 $-NR'_2$의 아미도 기, 화학식 $-PR'_2$의 포스피도 기, 화학식 $-SR'$의 티올레이트 기, 화학식 $-Si(R^a)_3$의 실릴 기, 및 화학식 $-Ge(R^a)_3$의 게르마닐 기로 이루어지는 군 중에서 선택되는 하나 이상의 치환체에 의해 추가로 치환되는, 하이드로카르빌 기;

[3702] 헤테로원자 함유 하이드로카르빌 기로서, 여기서 헤테로원자 함유 하이드로카르빌 기는 비치환되거나, 또는 할로겐 원자, C_{1-20} 알킬 기, C_{1-20} 알콕시 기, C_{7-20} 알킬아릴 기, C_{7-20} 아릴알킬 기, C_{6-20} 아릴 기, C_{6-20} 아릴옥시 기, C_{7-20} 알킬아릴옥시 기, 및 C_{7-20} 아릴알킬옥시 기, 화학식 $-NR'_2$의 아미도 기; 화학식 $-PR'_2$의 포스피도 기, 화학식 $-SR'$의 티올레이트 기, 화학식 $-Si(R^a)_3$의 실릴 기, 및 화학식 $-Ge(R^a)_3$의 게르마닐 기로 이루어지는 군 중에서 선택되는 하나 이상의 치환체에 의해 추가로 치환되는, 헤테로원자 함유 하이드로카르빌 기;

[3703] 여기서, R^1 및 R^2는 각각 독립적으로 하이드로카르빌 기가 비치환되거나, 또는 하나 이상의 할로겐 원자, C_{1-20} 알킬 기, C_{1-20} 알콕시 기, C_{7-20} 알킬아릴 기, C_{7-20} 아릴알킬 기, C_{6-20} 아릴 기, C_{6-20} 아릴옥시 기, C_{7-20} 알킬아릴옥시 기, 및/또는 C_{7-20} 아릴알킬옥시 기에 의해 추가로 치환되는 C_{1-30} 하이드로카르빌 기 중에서 선택되고;

[3704] 여기서, R^{28}, R^{29}, R^{30}, R^{31}, R^{32} 및 R^{33}은 각각 독립적으로 다음으로 이루어진 군 중에서 선택되고:

[3705] 할로겐;

[3706] 수소;

[3707] C_{1-30} 하이드로카르빌 기로서, 여기서 하이드로카르빌 기는 비치환되거나, 또는 할로겐 원자, C_{1-20} 알킬 기, C_{1-20} 알콕시 기, C_{7-20} 알킬아릴 기, C_{7-20} 아릴알킬 기, C_{6-20} 아릴 기, C_{6-20} 아릴옥시 기, C_{7-20} 알킬아릴옥시 기, 및 C_{7-20} 아릴알킬옥시 기로 이루어지는 군 중에서 선택되는 하나 이상의 치환체에 의해 추가로 치환되는, C_{1-30} 하이드로카르빌 기;

[3708] 헤테로원자 함유 C_{1-30} 하이드로카르빌 기로서, 여기서 헤테로원자 함유 하이드로카르빌 기는 비치환되거나, 또는 할로겐 원자, C_{1-20} 알킬 기, C_{1-20} 알콕시 기, C_{7-20} 알킬아릴 기, C_{7-20} 아릴알킬 기, C_{6-20} 아릴 기, C_{6-20} 아릴옥시 기, C_{7-20} 알킬아릴옥시 기, 및 C_{7-20} 아릴알킬옥시 기로 이루어지는 군 중에서 선택되는 하나 이상의 치환체에 의해 추가로 치환되는, 헤테로원자 함유 C_{1-30} 하이드로카르빌 기;

[3709] 옥시 기, $-OR'$;

[3710] 아미도 기, $-NR'_2$;

[3711] 포스피도 기 $-PR'_2$;

[3712] 티올레이트 기 SR';

[3713] 화학식 $-Si(R^a)_3$의 실릴 기; 및

[3714] 화학식 $-Ge(R^a)_3$의 게르마닐 기;

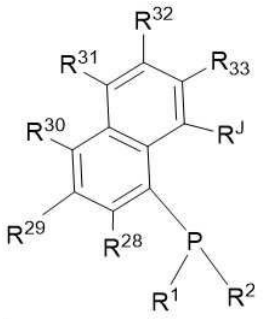
[3715] 여기서, R^{28}, R^{29}, R^{30}, R^{31}, R^{32} 및 R^{33} 중 2개의 인접한 기는 선택적으로 결합되어 환형 하이드로카르빌 기 또는 환형 헤테로원자 함유 하이드로카르빌 기를 형성할 수 있고, 이 환형 하이드로카르빌 기 또는 환형 헤테로원자 함유 하이드로카르빌 기는 비치환되거나, 또는 할로겐 원자, C_{1-20} 알킬 기, C_{1-20} 알콕시 기, C_{7-20} 알킬아릴 기, C_{7-20} 아릴알킬 기, C_{6-20} 아릴 기, C_{6-20} 아릴옥시 기, C_{7-20} 알킬아릴옥시 기, C_{7-20} 아릴알킬옥시 기, 아미도 기

-NR'_2, 포스피도 기 -PR'_2, 티올레이트 기 -SR', 화학식 -$Si(R^a)_3$의 실릴 기, 및 화학식 -$Ge(R^a)_3$의 게르마닐 기로 이루어지는 군 중에서 선택되는 하나 이상의 치환체에 의해 추가로 치환되고;

[3716] 여기서 각 R'는 수소, C_{1-20} 알킬 기, 및 C_{6-20} 아릴 기로 이루어지는 군 중에서 독립적으로 선택되고;

[3717] 여기서 각 R^a는 수소, C_{1-8} 알킬 기, C_{1-8} 알콕시 기, C_{6-20} 아릴옥시 기 및 C_{6-20} 아릴 기로 이루어지는 군 중에서 독립적으로 선택된다.

[3718] 실시양태 180. 실시양태 179에 있어서, 방법이 화학식 II-P로 표현되는 포스핀 화합물을 헥사클로로에탄, Cl_3C-CCl_3과 조합하는, 제1 반응 단계 (i);

[3719]  (II-P); 및

[3720] 제1 반응 단계에서 형성된 반응 생성물과 헥사메틸디실라잔, $[(CH_3)_3Si]_2NH$를 조합하는 제2 반응 단계 (ii)

[3721] 를 포함하는 방법.

[3722] 실시양태 181. 실시양태 179 또는 180에 있어서, 포스핀 화합물, (II-P) 및 헥사클로로에탄, Cl_3C-CCl_3이 약 1:1의 몰 비로 조합되는, 방법.

[3723] 실시양태 182. 실시양태 179에 있어서, 헥사메틸디실라잔, $[(CH_3)_3Si]_2NH$의 몰 과량이 제1 반응 단계에서 형성된 반응 생성물과 조합되는, 방법.

[3724] 실시양태 183. 실시양태 178 내지 181 중 어느 하나에 있어서, 포스핀 화합물, (II-P)에 대한 헥사메틸디실라잔, $[(CH_3)_3Si]_2NH$의 몰 비가 1.0 초과인, 방법.

[3725] 실시양태 184. 실시양태 179 내지 183 중 어느 하나에 있어서, 포스핀 화합물, (II-P); 헥사클로로에탄, Cl_3C-CCl_3; 및 헥사메틸디실라잔, $[(CH_3)_3Si]_2NH$가 극성 용매에서 조합되는, 방법.

[3726] 실시양태 185. 실시양태 184에 있어서, 극성 용매가 디클로로메탄, 1,2-디클로로에탄, 아세토니트릴 및 테트라하이드로푸란으로 이루어지는 군 중에서 선택되는, 방법.

[3727] 실시양태 186. 실시양태 180에 있어서, 단계 (i) 및 (ii)가 단일 반응 용기에서 수행되는, 방법.

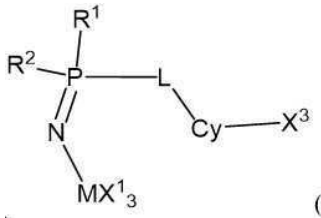
[3728] 실시양태 187. 실시양태 179 내지 186 중 어느 하나에 있어서, R^1 및 R^2가 1차 알킬 기, 2차 알킬 기, 3차 알킬 기, 및 아릴 기로 이루어지는 군 중에서 독립적으로 선택되는, 방법.

[3729] 실시양태 188. 실시양태 179 내지 187 중 어느 하나에 있어서, R^1 및 R^2가 2차 알킬 기인, 방법.

[3730] 실시양태 189. 실시양태 179 내지 187 중 어느 하나에 있어서, R^1 및 R^2가 3차 알킬 기인, 방법.

[3731] 실시양태 190. 실시양태 179 내지 189 중 어느 하나에 있어서, R^{28}, R^{29}, R^{30}, R^{31}, R^{32} 및 R^{33}이 각각 수소인, 방법.

[3732] 실시양태 191. 화학식 I-M으로 표현되는 유기금속 복합체:



[3733] (I-M)

[3734] 여기서,

[3735] M은 Ti, Zr 또는 Hf이고;

[3736] R^1 및 R^2는 각각 독립적으로 수소 및 R^X로 이루어진 군 중에서 선택되거나; 또는 R^1 및 R^2는 이들이 부착된 P 원자와 함께, 비치환되거나, 또는 할로겐 원자, C_{1-20} 알킬 기, C_{1-20} 알콕시 기, C_{7-20} 알킬아릴 기, C_{7-20} 아릴알킬 기, C_{6-20} 아릴 기, C_{6-20} 아릴옥시 기, C_{7-20} 알킬아릴옥시 기, 및 C_{7-20} 아릴알킬옥시 기로 이루어진 군 중에서 선택되는 하나 이상의 치환체에 의해 추가로 치환되는 3-10원 헤테로환형 기를 형성하며;

[3737] 각 R^X는 할로겐 원자; 하이드로카르빌 기가 비치환되거나, 또는 하나 이상의 할로겐 원자, C_{1-20} 알킬 기, C_{1-20} 알콕시 기, C_{7-20} 알킬아릴 기, C_{7-20} 아릴알킬 기, C_{6-20} 아릴 기, C_{6-20} 아릴옥시 기, C_{7-20} 알킬아릴옥시 기, 및/또는 C_{7-20} 아릴알킬옥시 기에 의해 추가로 치환되는 C_{1-30} 하이드로카르빌 기; 화학식 $-NR'_2$의 아미도 기; 화학식 $-Si(R^a)_3$의 실릴 기; 화학식 $-Ge(R^a)_3$의 게르마닐 기; 및 화학식 $-N=P(R^b)(R^c)(R^d)$의 포스핀이민 기로 이루어진 군 중에서 독립적으로 선택되고; 여기서 각 R'는 수소, C_{1-20} 알킬 기, 및 C_{6-20} 아릴 기로 이루어지는 군 중에서 독립적으로 선택되고; 각 R^a는 수소, C_{1-8} 알킬 기, C_{1-8} 알콕시 기, C_{6-20} 아릴옥시 기 및 C_{6-20} 아릴 기로 이루어진 군 중에서 독립적으로 선택되고; R^b, R^c, R^d는 각각 독립적으로 C_{1-20} 알킬 기이며;

[3738] Cy는 사이클로펜타디에닐형 모이어티이고 L 및 X^3에 공유 결합되며,

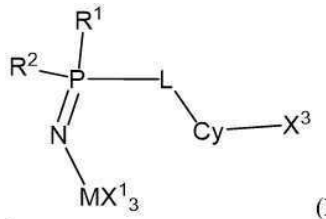
[3739] 각 X^1은 활성화 가능한 리간드이고;

[3740] X^3은 수소, 또는 화학식 $-Si(R^e)_3$의 실릴 기, 또는 화학식 $Sn(R^e)_3$의 주석 기이며; 여기서, 각 R^e는 수소, C_{1-8} 알킬 기, C_{1-8} 알콕시 기, C_{6-20} 아릴옥시 기, 및 C_{6-20} 아릴 기로 이루어지는 군 중에서 독립적으로 선택되고; 그리고

[3741] L은 Cy와 P를 연결하는 원자의 근접한 사슬을 함유하는 가교 기로서, 여기서 근접한 사슬은 2개 또는 3개의 원자를 함유한다.

[3742] 실시양태 192. 다음을 포함하는 올레핀 중합 촉매 시스템:

[3743] i) 화학식 I-M으로 표현되는 유기금속 복합체:



[3744] (I-M)

[3745] 여기서,

[3746] M은 Ti, Zr 또는 Hf이고;

[3747] R^1 및 R^2는 각각 독립적으로 수소 및 R^X로 이루어진 군 중에서 선택되거나; 또는 R^1 및 R^2는 이들이 부착된 P 원

자와 함께, 비치환되거나, 또는 할로겐 원자, C_{1-20} 알킬 기, C_{1-20} 알콕시 기, C_{7-20} 알킬아릴 기, C_{7-20} 아릴알킬 기, C_{6-20} 아릴 기, C_{6-20} 아릴옥시 기, C_{7-20} 알킬아릴옥시 기, 및 C_{7-20} 아릴알킬옥시 기로 이루어진 군 중에서 선택되는 하나 이상의 치환체에 의해 추가로 치환되는 3-10원 헤테로환형 기를 형성하며;

[3748] 각 R^X는 할로겐 원자; 하이드로카르빌 기가 비치환되거나, 또는 하나 이상의 할로겐 원자, C_{1-20} 알킬 기, C_{1-20} 알콕시 기, C_{7-20} 알킬아릴 기, C_{7-20} 아릴알킬 기, C_{6-20} 아릴 기, C_{6-20} 아릴옥시 기, C_{7-20} 알킬아릴옥시 기, 및/또는 C_{7-20} 아릴알킬옥시 기에 의해 추가로 치환되는 C_{1-30} 하이드로카르빌 기; 화학식 $-NR'_2$의 아미도 기; 화학식 $-Si(R^a)_3$의 실릴 기; 화학식 $-Ge(R^a)_3$의 게르마닐 기; 및 화학식 $-N=P(R^b)(R^c)(R^d)$의 포스핀이민 기로 이루어진 군 중에서 독립적으로 선택되고; 여기서 각 R'는 수소, C_{1-20} 알킬 기, 및 C_{6-20} 아릴 기로 이루어지는 군 중에서 독립적으로 선택되고; 각 R^a는 수소, C_{1-8} 알킬 기, C_{1-8} 알콕시 기, C_{6-20} 아릴옥시 기 및 C_{6-20} 아릴 기로 이루어진 군 중에서 독립적으로 선택되고; R^b, R^c, R^d는 각각 독립적으로 C_{1-20} 알킬 기이며;

[3749] Cy는 사이클로펜타디에닐형 모이어티이고 L 및 X^3에 공유 결합되며,

[3750] 각 X^1은 활성화 가능한 리간드이고;

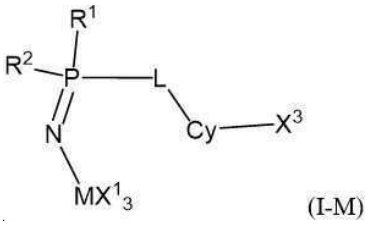
[3751] X^3은 수소, 또는 화학식 $-Si(R^e)_3$의 실릴 기, 또는 화학식 $Sn(R^e)_3$의 주석 기이며; 여기서, 각 R^e는 수소, C_{1-8} 알킬 기, C_{1-8} 알콕시 기, C_{6-20} 아릴옥시 기, 및 C_{6-20} 아릴 기로 이루어지는 군 중에서 독립적으로 선택되고; 그리고

[3752] L은 Cy와 P를 연결하는 원자의 근접한 사슬을 함유하는 가교 기로서, 여기서 근접한 사슬은 2개 또는 3개의 원자를 함유함; 및

[3753] ii) 촉매 활성화제.

[3754] 실시양태 193. 다음을 포함하는 올레핀 중합 촉매 시스템의 존재 하에 에틸렌을 선택적으로 하나 이상의 C_3-C_{12} 알파-올레핀과 중합시키는 것을 포함하는 중합 공정:

[3755] i) 화학식 I-M으로 표현되는 유기금속 복합체:

[3756] 

(I-M)

[3757] 여기서,

[3758] M은 Ti, Zr 또는 Hf이고;

[3759] R^1 및 R^2는 각각 독립적으로 수소 및 R^X로 이루어진 군 중에서 선택되거나; 또는 R^1 및 R^2는 이들이 부착된 P 원자와 함께, 비치환되거나, 또는 할로겐 원자, C_{1-20} 알킬 기, C_{1-20} 알콕시 기, C_{7-20} 알킬아릴 기, C_{7-20} 아릴알킬 기, C_{6-20} 아릴 기, C_{6-20} 아릴옥시 기, C_{7-20} 알킬아릴옥시 기, 및 C_{7-20} 아릴알킬옥시 기로 이루어진 군 중에서 선택되는 하나 이상의 치환체에 의해 추가로 치환되는 3-10원 헤테로환형 기를 형성하며;

[3760] 각 R^X는 할로겐 원자; 하이드로카르빌 기가 비치환되거나, 또는 하나 이상의 할로겐 원자, C_{1-20} 알킬 기, C_{1-20} 알콕시 기, C_{7-20} 알킬아릴 기, C_{7-20} 아릴알킬 기, C_{6-20} 아릴 기, C_{6-20} 아릴옥시 기, C_{7-20} 알킬아릴옥시 기, 및/또는 C_{7-20} 아릴알킬옥시 기에 의해 추가로 치환되는 C_{1-30} 하이드로카르빌 기; 화학식 $-NR'_2$의 아미도 기; 화학식 $-Si(R^a)_3$의 실릴 기; 화학식 $-Ge(R^a)_3$의 게르마닐 기; 및 화학식 $-N=P(R^b)(R^c)(R^d)$의 포스핀이민 기로 이루어진

군 중에서 독립적으로 선택되고; 여기서 각 R'는 수소, C_{1-20} 알킬 기, 및 C_{6-20} 아릴 기로 이루어지는 군 중에서 독립적으로 선택되고; 각 R^a는 수소, C_{1-8} 알킬 기, C_{1-8} 알콕시 기, C_{6-20} 아릴옥시 기 및 C_{6-20} 아릴 기로 이루어진 군 중에서 독립적으로 선택되고; R^b, R^c, R^d는 각각 독립적으로 C_{1-20} 알킬 기이며;

[3761] Cy는 사이클로펜타디에닐형 모이어티이고 L 및 X^3에 공유 결합되며,

[3762] 각 X^1은 활성화 가능한 리간드이고;

[3763] X^3은 수소, 또는 화학식 $-Si(R^e)_3$의 실릴 기, 또는 화학식 $Sn(R^e)_3$의 주석 기이며; 여기서, 각 R^e는 수소, C_{1-8} 알킬 기, C_{1-8} 알콕시 기, C_{6-20} 아릴옥시 기, 및 C_{6-20} 아릴 기로 이루어지는 군 중에서 독립적으로 선택되고; 그리고

[3764] L은 Cy와 P를 연결하는 원자의 근접한 사슬을 함유하는 가교 기로서, 여기서 근접한 사슬은 2개 또는 3개의 원자를 함유함; 및

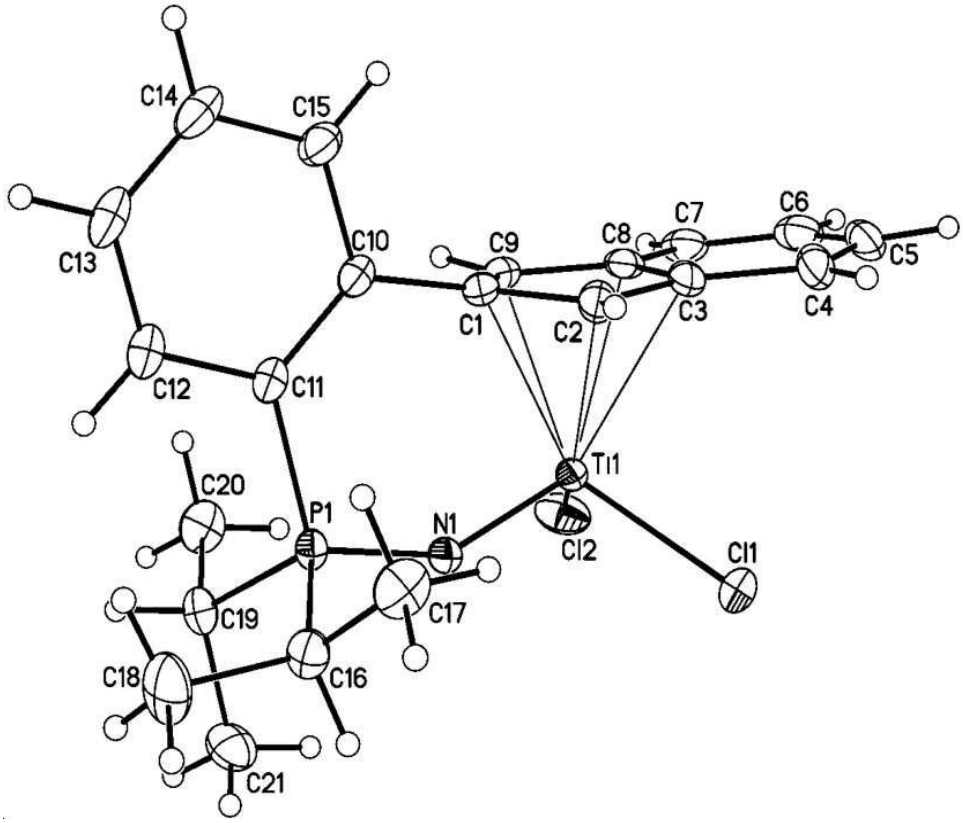
[3765] ii) 촉매 활성화제.

[3766] 산업상 이용 가능성

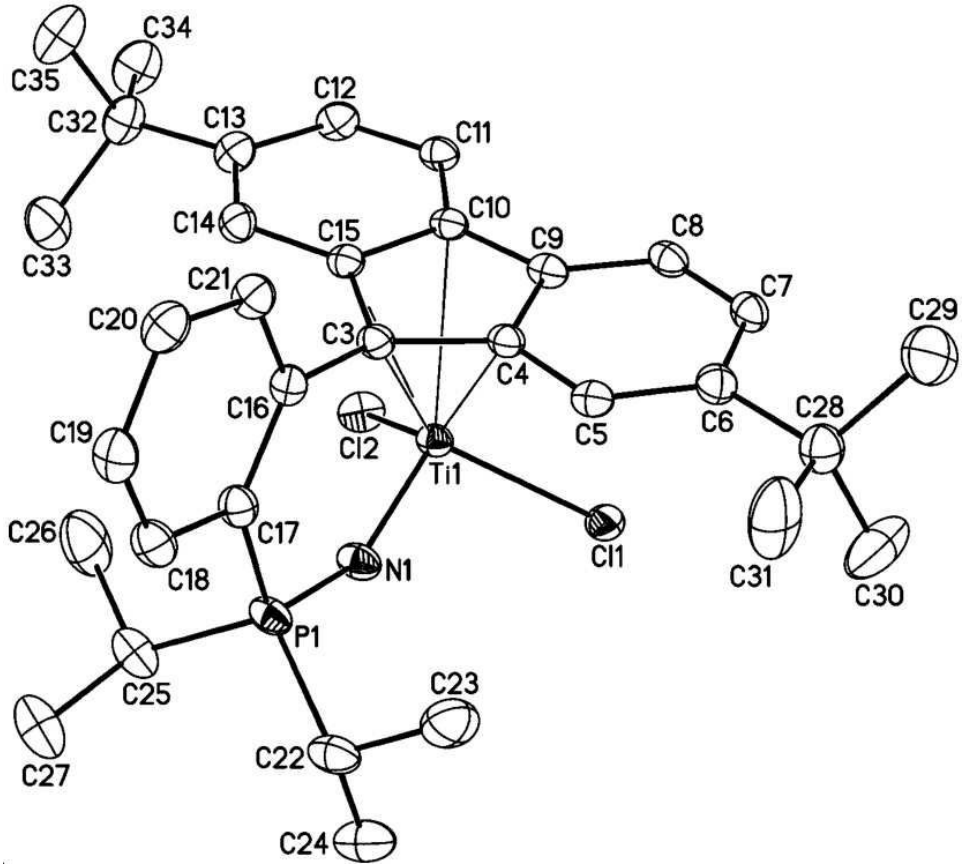
[3767] 올레핀 중합 촉매 시스템에 사용될 수 있는 유기금속 복합체가 제공된다. 올레핀 중합 촉매 시스템은 에틸렌을 알파-올레핀과 중합시키는 데 효과적이고 고온 용액상 중합 공정에 사용될 수 있다.

도면

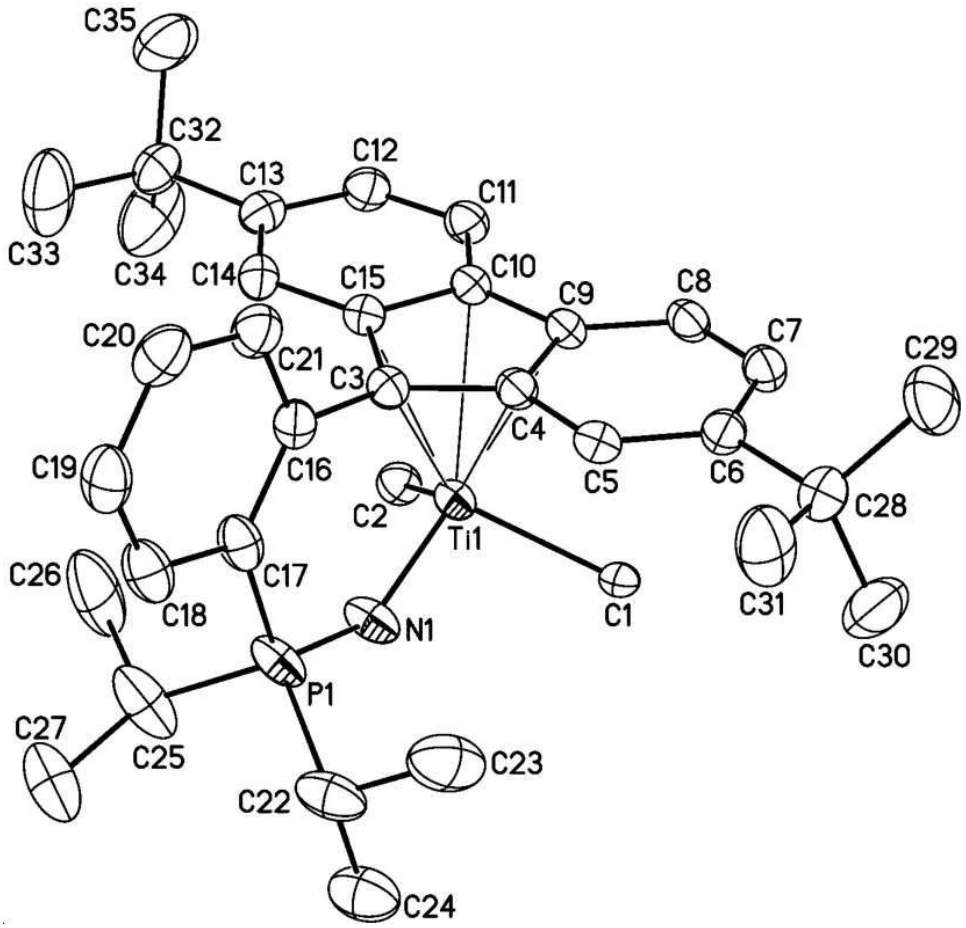
도면1



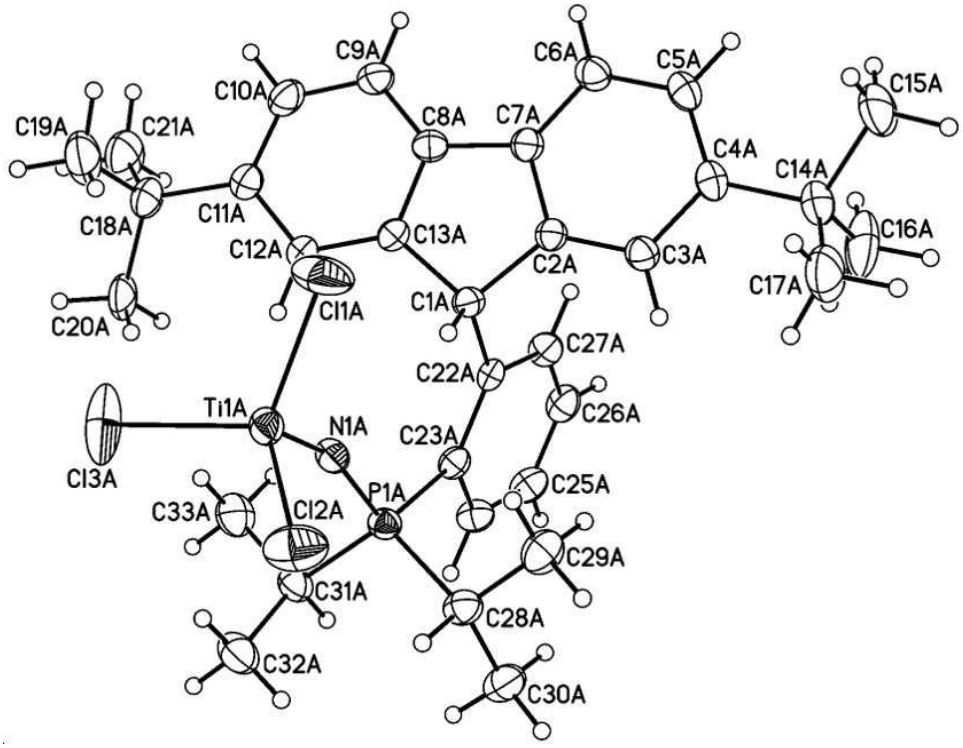
도면2


C34
C35
C32
C12
C13
C11
C33
C14
C15
C10
C9
C8
C21
C7
C29
C20
C3
C4
C16
C5
C6
C28
C19
Cl2
Ti1
C26
C17
Cl1
C18
N1
C31
C30
P1
C25
C23
C27
C22
C24

도면3


C35
C32
C12
C13
C11
C33
C34
C14
C15
C10
C9
C8
C20
C21
C7
C29
C3
C4
C19
C16
C5
C6
C2
Ti1
C28
C26
C17
C31
C18
N1
C1
C30
P1
C27
C25
C23
C22
C24

도면4


C9A
C6A
C5A
C15A
C10A
C8A
C7A
C19A
C21A
C4A
C14A
C11A
C18A
C13A
C16A
C12A
C2A
C3A
C17A
Cl1A
C1A
C20A
C27A
C22A
Ti1A
C26A
N1A
C23A
Cl3A
C25A
P1A
C33A
Cl2A
C29A
C31A
C28A
C32A
C30A