

X<sup>1</sup> は、任意の陰イオン性配位子であり；

$L^1$  は、中性二電子配位子であり；

$L^2$  は、中性二電子配位子であって、任意選択で  $R^2$  に結合していてもよく；

$L^3$  は、中性電子供与性配位子であり；

$R^1$  及び  $R^2$  は、それぞれ独立に、水素、ヒドロカルビル、置換されたヒドロカルビル、ヘテロ原子含有ヒドロカルビル、置換されたヘテロ原子含有ヒドロカルビル、又は官能基であり、 $R^2$  は、任意選択で  $R^1$  及び / 又は  $L^2$  に結合していてもよく；

$Q^*$  は、 $L^1$  及び  $M$  に結合している二電子陰イオン性供与性架橋部分であって、 $L^1$  及び  $M$  と一緒に、1 つ又は複数の環状基を形成することができ、 $M$ 、 $L^1$  及び  $Q^*$  は、原子数 5 個、6 個又は 7 個の環サイズを有する  $M - Q^* - L^1$  キレート配位子環構造を形成しており；

$n$  及び  $k$  は、それぞれ独立に、0 又は 1 であるが、 $L^3$  は存在してもしなくてもよく；  
 $m$  は、0、1 又は 2 である。）

【請求項 4】

$X^1$ 、 $Q^*$ 、 $L^1$ 、 $L^2$ 、 $L^3$ 、 $R^1$  及び  $R^2$  のいずれか 2 つ以上が、一緒に、1 つ又は複数の環状基を形成する、請求項 3 に記載の化合物。

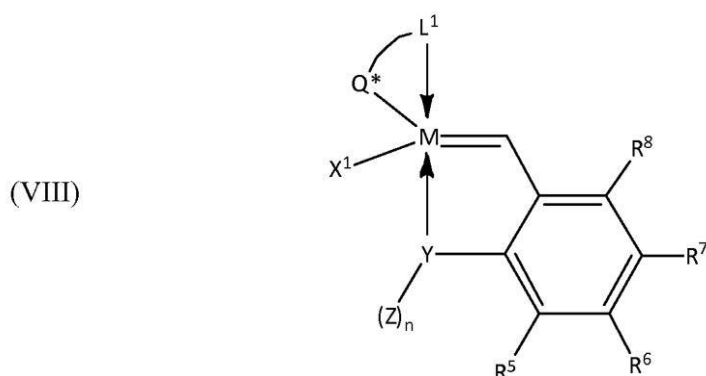
【請求項 5】

$X^1$ 、 $Q^*$ 、 $L^1$ 、 $L^2$ 、 $L^3$ 、 $R^1$  及び  $R^2$  のいずれか 1 つ又は複数が、担体に付着している、請求項 3 又は請求項 4 のいずれか一項に記載の化合物。

【請求項 6】

式 (VIII) の構造を有する、請求項 1 から 3 までのいずれか一項に記載の化合物。

【化 2】



(式中、

$M$ 、 $L^1$  及び  $Q^*$  は、前に定義されている通りであり；

$X^1$  は、任意の陰イオン性配位子であり；

$Y$  は、 $N$ 、 $O$ 、 $S$  及び  $P$  から選択されるヘテロ原子であり；

$R^5$ 、 $R^6$ 、 $R^7$  及び  $R^8$  は、それぞれ独立に、水素、ハロゲン、アルキル、アルケニル、アルキニル、アリール、ヘテロアルキル、ヘテロ原子含有アルケニル、ヘテロアルケニル、ヘテロアリール、アルコキシ、アルケニルオキシ、アリールオキシ、アルコシカルボニル、カルボニル、アルキルアミノ、アルキルチオ、アミノスルホニル、モノアルキルアミノスルホニル、ジアルキルアミノスルホニル、アルキルスルホニル、ニトリル、ニトロ、アルキルスルフィニル、トリハロアルキル、ペルフルオロアルキル、カルボン酸、ケトン、アルデヒド、ニトレート、シアノ、イソシアナート、ヒドロキシル、エステル、エーテル、アミン、イミン、アミド、ハロゲン置換アミド、トリフルオロアミド、スルフィド、ジスルフィド、スルホナート、カルバマート、シラン、シロキサン、ホスフィン、ホスファート、又はボラートから成る群から選択され、 $R^5$ 、 $R^6$ 、 $R^7$  及び  $R^8$  の任意の組合せは、結合して、1 個又は複数の環状基を形成することができ；

$n$  は、1 又は 2 であるが、二価のヘテロ原子である  $O$  又は  $S$  については  $n$  が 1 であり、三価のヘテロ原子である  $N$  又は  $P$  については  $n$  が 2 であり；

Z は、水素、アルキル、アリール、官能化されたアルキル、又は官能化されたアリールから選択され、官能基（単数又は複数）は、それぞれ独立に、以下の基：アルコキシ、アリールオキシ、ハロゲン、カルボン酸、ケトン、アルデヒド、ニトレート、シアノ、イソシアナート、ヒドロキシル、エステル、エーテル、アミン、イミン、アミド、トリフルオロアミド、スルフィド、ジスルフィド、カルバマート、シラン、シロキサン、ホスフィン、ホスファート又はボラート；メチル、イソプロピル、sec-ブチル、t-ブチル、ネオペンチル、ベンジル、フェニル及びトリメチルシリルの1つ又は複数であってもよく；且つ、 $X^1$ 、 $Q^*$ 、 $L^1$ 、Y、Z、 $R^5$ 、 $R^6$ 、 $R^7$  及び  $R^8$  の任意の組合せ（単数）又は組合せ（複数）は、担体に結合していてもよい。）

【請求項 7】

M が、 $M-Q^*-L^1$  キレート配位子環構造において  $Q^*$  の炭素原子に直接結合している、請求項 1 から 6 までのいずれか一項に記載の化合物。

【請求項 8】

M が、Ru 又は Os である、請求項 1 から 7 までのいずれか一項に記載の化合物。

【請求項 9】

$X^1$  が、ハロゲン化物、ニトレート、アルキル、アリール、アルコキシ、アルキルカルボキシレート、アリールオキシ、アルコキシカルボニル、アリールオキシカルボニル、アリールカルボキシレート、アシル、アシルオキシ、アルキルスルホナト、アリールスルホナト、アルキルスルファニル、アリールスルファニル、アルキルスルフィニル又はアリールスルフィニルから選択される、請求項 1 から 8 までのいずれか一項に記載の化合物。

【請求項 10】

$X^1$  が、カルボキシレート、ニトレート、フェノキシド、ハロゲン化物、スルホキシド又はニトリットから選択される、請求項 1 から 8 までのいずれか一項に記載の化合物。

【請求項 11】

$Q^*$  が、ヒドロカルビレン、置換されたヒドロカルビレン、ヘテロ原子含有ヒドロカルビレン、又は置換されたヘテロ原子含有ヒドロカルビレンから選択される、請求項 1 から 10 までのいずれか一項に記載の化合物。

【請求項 12】

$Q^*$  が、アルキレン、置換されたアルキレン、ヘテロ原子含有アルキレン、置換されたヘテロ原子含有アルキレン、シクロアルキレン、置換されたシクロアルキレン、ヘテロ原子含有シクロアルキレン、置換されたヘテロ原子含有シクロアルキレン、アリール、置換されたアリール、ヘテロ原子含有アリール、又は置換されたヘテロ原子含有アリールから選択される、請求項 11 に記載の化合物。

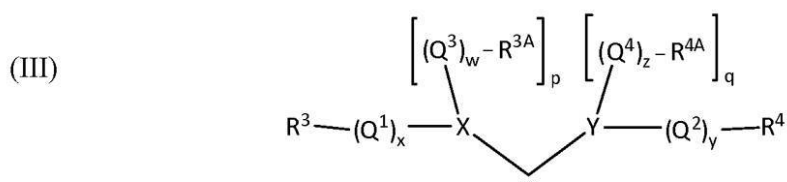
【請求項 13】

$Q^*$  が、シクロアルキレン、置換されたシクロアルキレン、アリール、又は置換されたアリールから選択される、請求項 11 に記載の化合物。

【請求項 14】

$L^1$  が、式 (III) の構造を有するカルベン配位子である、請求項 1 から 13 までのいずれか一項に記載の化合物。

【化 3】



(式中、

X 及び Y は、N、O、S 及び P から選択されたヘテロ原子であり；

$Q^1$ 、 $Q^2$ 、 $Q^3$  及び  $Q^4$  は、それぞれ独立に、ヒドロカルビレン、置換されたヒドロ

カルビレン、ヘテロ原子含有ヒドロカルビレン、及び置換されたヘテロ原子含有ヒドロカルビレンから選択され；

$R^3$ 、 $R^{3A}$ 、 $R^4$  及び  $R^{4A}$  は、それぞれ独立に、水素、ヒドロカルビル、置換されたヒドロカルビル、ヘテロ原子含有ヒドロカルビル、及び置換されたヘテロ原子含有ヒドロカルビルから選択され；

p 及び q は、0 又は 1 であるが、X が O 又は S である場合に p は 0 であり、Y が O 又は S である場合に q は 0 であり、X が N 又は P である場合に p は 1 であり、Y が N 又は P である場合に q は 1 であり；

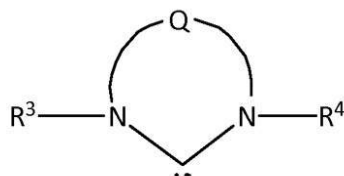
w、x、y 及び z は、それぞれ独立に、0 又は 1 である。）

【請求項 15】

$L^1$  が式 (V) の構造を有するカルベン配位子であるように、 $R^{3A}$  及び  $R^{4A}$  が結合して環状基を形成する、請求項 14 に記載の化合物。

【化 4】

(V)



(式中、

Q は、ヒドロカルビレン、置換されたヒドロカルビレン、ヘテロ原子含有ヒドロカルビレン、又は置換されたヘテロ原子含有ヒドロカルビレンから選択され、Q 内の隣接する原子上の 2 つ以上の置換基が、結合して、さらなる環状構造を形成してもよく；

$R^3$  及び  $R^4$  は、それぞれ独立に、ヒドロカルビル、置換されたヒドロカルビル、ヘテロ原子含有ヒドロカルビル、又は置換されたヘテロ原子含有ヒドロカルビルから選択される。）

【請求項 16】

$R^3$  及び  $R^4$  が、それぞれ独立に、シクロアルキル、置換されたシクロアルキル、ヘテロ原子含有シクロアルキル、置換されたヘテロ原子含有シクロアルキル、アリール、置換されたアリール、ヘテロ原子含有アリール、又は置換されたヘテロ原子含有アリールから選択される、請求項 14 又は請求項 15 のいずれか一項に記載の化合物。

【請求項 17】

$R^3$  が、シクロアルキル又は置換されたシクロアルキル基であり、 $R^4$  が、置換されたアリール基である、請求項 14 又は請求項 15 のいずれか一項に記載の化合物。

【請求項 18】

$R^3$  が、アダマンチル若しくは置換されたアダマンチル基、又は置換された  $C_3 \sim C_{12}$  シクロアルキル基である、請求項 17 に記載の化合物。

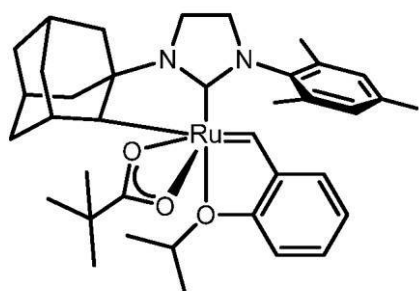
【請求項 19】

$R^4$  が、双方のオルト環位が置換されている、置換されたアリール基である、請求項 18 に記載の化合物。

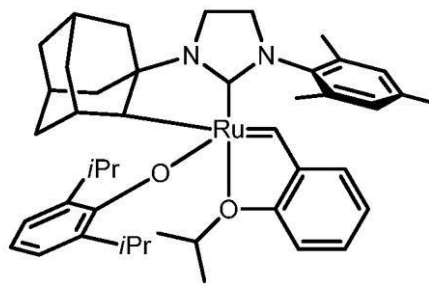
【請求項 20】

以下から選択される、C-H 活性化オレフィンメタセシス触媒化合物。

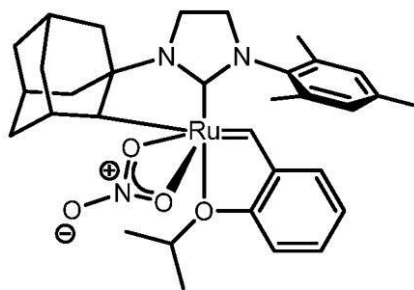
## 【化 5】



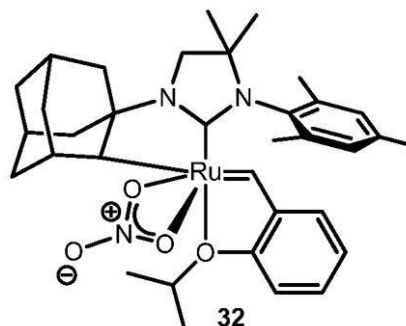
19a



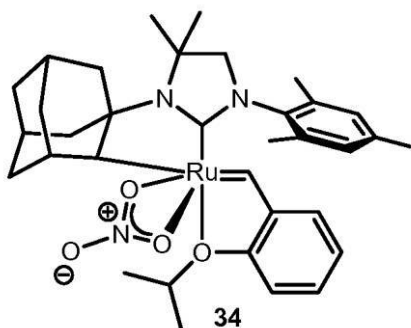
21a



22e

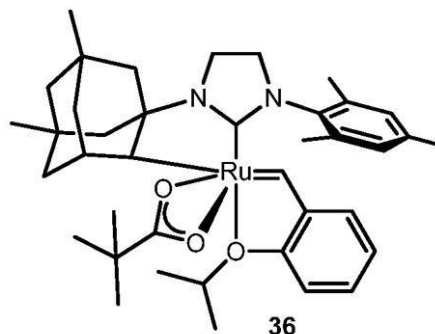


32



34

又は



36

## 【請求項 2 1】

C - H 活性化オレフィンメタセシス触媒化合物を作製する方法であって、

式  $M^1 X^2$  (式中、 $M^1$  は、銀、リチウム、ナトリウム、カリウム、ルビジウム、セシウム、マグネシウム、カルシウム、ストロンチウム、バリウム、鉄、亜鉛又はタリウムから選択され、 $X^2$  は、カルボキシレート陰イオンである) のカルボキシレート化合物を、

式  $(X^1)_2 (L^3)_n (L^2)_k L^1 M = (C)_m C R^1 R^2$  (式中、 $X^1$  は、任意の陰イオン性配位子であり、 $L^1$ 、 $L^2$  及び  $L^3$  は、それぞれ独立に、任意の中性電子供与性配位子であり、 $n$  及び  $k$  は、それぞれ独立に、0 又は 1 であり、 $m$  は、0、1 又は 2 であり、 $M$  は、第 8 族遷移金属であり、 $R^1$  及び  $R^2$  は、それぞれ独立に、水素、ヒドロカルビル、置換されたヒドロカルビル、ヘテロ原子含有ヒドロカルビル、置換されたヘテロ原子含有ヒドロカルビル、又は官能基から選択される) のオレフィンメタセシス触媒と；

原子数 5 個、6 個又は 7 個の環サイズを有する  $M - Q^* - L^1$  キレート配位子環構造において  $M$  及び  $L^1$  が二電子陰イオン性架橋分子  $Q^*$  によって一緒に結合されており、且つ  $X^2$  陰イオン性配位子を含有する、C - H 活性化オレフィンメタセシス触媒化合物が生成されるように、 $X^2$  陰イオンを  $X^1$  陰イオン性配位子と交換することを促進するのに有効な条件下で

接触させることを含む、上記方法。

## 【請求項 2 2】

$M$  が、 $M - Q^* - L^1$  キレート配位子環構造において  $Q^*$  の炭素原子に直接結合される

、請求項 2 1 に記載の方法。

【請求項 2 3】

$M^1$  が、銀又はナトリウムである、請求項 2 1 に記載の方法。

【請求項 2 4】

カルボキシラートが、式  $(R)_3COOM^1$  (式中、R は、独立して、水素、 $C_1 \sim C_{12}$  アルキル、置換された  $C_1 \sim C_{12}$  アルキル、 $C_3 \sim C_{12}$  シクロアルキル、置換された  $C_3 \sim C_{12}$  シクロアルキル、アリール、又は置換されたアリールから選択され、少なくとも 1 つの R は、水素ではない) のものである、請求項 2 1 に記載の方法。

【請求項 2 5】

R が、独立して、水素、 $C_1 \sim C_{12}$  アルキル又はアリールから選択される、請求項 2 4 に記載の方法。

【請求項 2 6】

$(R)_3$  が、t - ブチル、 $PhMe_2C$ 、 $Ph_2MeC$  又は  $Ph_3C$  から選択される、請求項 2 4 に記載の方法。

【請求項 2 7】

C - H 活性化オレフィンメタセシス触媒化合物を、

式  $M^2X^3$  (式中、 $M^2$  は陽イオンであり、 $X^3$  は陰イオンである) の陰イオン性配位子交換化合物と、

C - H 活性化オレフィンメタセシス触媒化合物が、原子数 5 個、6 個又は 7 個の環サイズを有する  $M-Q^*-L^1$  キレート配位子環構造、及び  $X^3$  陰イオン性配位子を含有するように、 $X^3$  陰イオンを  $X^2$  陰イオン性配位子と交換することを促進するのに有効な条件下で、

接触させることをさらに含む、請求項 2 1 に記載の方法。

【請求項 2 8】

$M^2$  が、水素、アンモニウム、銀、リチウム、ナトリウム、カリウム、ルビジウム、セシウム、マグネシウム、カルシウム、ストロンチウム、バリウム、鉄、亜鉛又はタリウムから選択され、 $X^3$  が、ハロゲン、アルキル、アリール、カルボキシラート、アルコキシ、アリールオキシ、スルホナート、ホスファート又はニトラートから選択される、請求項 2 7 に記載の方法。

【請求項 2 9】

触媒化合物が、請求項 1 から 2 0 までのいずれか一項に記載の化合物である、請求項 2 1 から 2 7 までのいずれか一項に記載の方法。