

【公報種別】特許法第 17 条の 2 の規定による補正の掲載

【部門区分】第 3 部門第 2 区分

【発行日】平成 17 年 12 月 22 日 (2005.12.22)

【公表番号】特表 2004-531529 (P2004-531529A)

【公表日】平成 16 年 10 月 14 日 (2004.10.14)

【年通号数】公開・登録公報 2004-040

【出願番号】特願 2002-581454 (P2002-581454)

【国際特許分類第 7 版】

C 07 F 17/00

C 07 F 7/00

C 07 F 7/28

C 08 F 4/64

C 08 F 10/00

【F I】

C 07 F 17/00

C 07 F 7/00 A

C 07 F 7/28 F

C 08 F 4/64

C 08 F 10/00 5 1 0

【手続補正書】

【提出日】平成 17 年 3 月 8 日 (2005.3.8)

【手続補正 1】

【補正対象書類名】特許請求の範囲

【補正対象項目名】全文

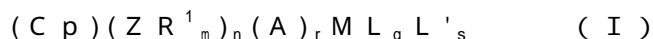
【補正方法】変更

【補正の内容】

【特許請求の範囲】

【請求項 1】

式 (I) :



[式中、 $(Z R^1_m)_n$ は、 C_p と A を橋架けする 2 価の基であり； Z は C 、 Si 、 Ge 、 N または P であり、かつ R^1 基は、互いに同一または異なって、水素または直鎖もしくは分岐した、飽和もしくは不飽和の $C_1 - C_{20}$ のアルキル、 $C_3 - C_{20}$ のシクロアルキル、 $C_6 - C_{20}$ のアリール、 $C_7 - C_{20}$ のアルキルアリールもしくは $C_7 - C_{20}$ のアリールアルキル基で、任意に元素の周期律表の 13 ~ 17 族に属する 1 つ以上のヘテロ原子を含み、または 2 つの R^1 が置換基を有する脂肪族または芳香族の $C_4 - C_7$ の環を形成することができ；

C_p は、置換もしくは無置換のシクロペンタジエニル基であり、任意に 4 から 6 の炭素原子を含み、任意に元素の周期律表の 13 ~ 17 族に属する 1 つ以上のヘテロ原子を含む、1 つ以上の置換もしくは無置換の、飽和、不飽和もしくは芳香環に縮合され；

A は、 O 、 S 、 NR^2 、 PR^2 (式中、 R^2 は水素、直鎖もしくは分岐した、飽和もしくは不飽和の $C_1 - C_{20}$ のアルキル、 $C_3 - C_{20}$ のシクロアルキル、 $C_6 - C_{20}$ のアリール、 $C_7 - C_{20}$ のアルキルアリールもしくは $C_7 - C_{20}$ のアリールアルキル、または A は C_p と同じ意味をもつ) であり；

M は、ジルコニウム、チタニウムまたはハフニウムから選択され；

L は、互いに同一または異なって、塩素、臭素、ヨウ素からなる群から選択され；

L' は、水素、直鎖もしくは分岐した、飽和もしくは不飽和の $C_1 - C_{20}$ のアルキル、 $C_3 - C_{20}$ のシクロアルキル、 $C_6 - C_{20}$ のアリール、 $C_7 - C_{20}$ のアルキルアリールもしくは

は $C_7 - C_{20}$ のアリールアルキル基からなる群から選択され、任意に 1 つ以上の Si または Ge 原子を含み；

m は、1 または 2、より詳しくは、 Z が N または P であるとき、それは 1 であり、 Z が C 、 Si または Ge であるとき、それは 2 であり；

n は、1、2、3 または 4 であり、 r が 0 または 2 であるとき、0 であり；

r は、0、1 または 2 であり；

q は、1、2 または 3 であり；

s は、0 または 1 であり；

s と q は、次式を満足し： $q + s = 3 - r$ の

前記の方法が、次の段階：

a) 式 $(Y - C_p)(Z R^1_m)_n(A - Y)_r$ の配位子、または n が 0 であるとき、配位子 $Y - C_p$ および $r(A - Y)$ との混合物と、 C_p に対して $EQ \cdot 1 + r$ モル当量である EQ 量の式 $L'_j B$ もしくは $L' M g L''$ の化合物（式中、 C_p 、 A 、 Z 、 R^1 、 m 、 r 、 q および L' は、上で定義された意味を有し； L'' は、塩素、臭素、ヨウ素からなる群から選択され； n は、1、2、3 または 4 の値を有する整数であり；基 Y は、互いに同一または異なって、好適な脱離基であり； $M g$ は、マグネシウムであり； B は、アルカリまたはアルカリ土類の金属であり；かつ j は、1 または 2 であり、 B がアルカリ金属であるとき、 j は 1 に等しく、 B がアルカリ土類金属であるとき、 j は 2 に等しい）とを反応させ；

b) 段階 a) から得られた生成物と、少なくとも 1 モル当量の式 $M L''_4$ （式中、 M は、上で定義された意味を有し、 L'' は、塩素、臭素、ヨウ素からなる群から選択される）の化合物とを反応させ；

c) 段階 a) で添加した式 $L'_j B$ または $L' M g L''$ の化合物の EQ 量が $1 + r + q$ より少ないならば、式 $L'_j B$ または $L' M g L''$ の化合物を、 $1 + r + q - EQ$ モル当量に等しいか、または多い量で反応混合物に添加し；

d) 任意に、混合物を精製し、かつラセミ体とメソ体を分離し；ならびに

e) 混合物と、 $T^1 L_w^1$ ； $T^2 L_w^2$ ； $O = T^3 L_w^3$ ； $R^6 C(O)L$ ； L_2 および $H L$ （式中、 T^1 、 T^2 、 T^3 、 L 、 w^1 、 w^2 、 w^3 および R^6 は、請求項 1 ~ 4 の何れかに記載されている）からなる群から選択されるハロゲン化剤とを反応させることからなる

ジハライドまたはモノハライドメタロセン化合物の製造方法。

【請求項 2】

2 価の橋架け $(Z R^1_m)_n$ が、 $C R^1_2$ 、 $(C R^1_2)_2$ 、 $(C R^1_2)_3$ 、 $Si R^1_2$ 、 $Ge R^1_2$ 、 $N R^1$ および $P R^1$ （式中、 R^1 は請求項 1 に記載されている）からなる群から選択され；

前記の金属 M と結合している配位子 C_p が、シクロペンタジエニル、モノ -、ジ -、トリ - およびテトラ - メチルシクロペンタジエニル；4 - tertブチル - シクロペンタジエニル；4 - アダマンチル - シクロペンタジエニル；インデニル；モノ -、ジ -、トリ - およびテトラメチルインデニル；4, 5, 6, 7 - テトラヒドロインデニル；フルオレニル；5, 10 - ジヒドロインデノ [1, 2 - b] インドール - 10 - イル；N - メチル - または N - フェニル - 5, 10 - ジヒドロインデノ [1, 2 - b] インドール - 10 - イル；5, 6 - ジヒドロインデノ [2, 1 - b] インドール - 6 - イル；N - メチル - または N - フェニル - 5, 6 - ジヒドロインデノ [2, 1 - b] インドール - 6 - イル；アザペンタレン - 4 - イル；チアペンタレン - 4 - イル；アザペンタレン - 6 - イル；チアペンタレン - 6 - イル；モノ -、ジ - およびトリ - メチル - アザペンタレン - 4 - イルおよび 2, 5 - ジメチル - シクロペンタ [1, 2 - b : 4, 3 - b'] - ジチオフエンからなる群から選択され；

基 A が C_p と同じ意味を有するか、またはそれが N - メチル、N - エチル、N - イソプロピル、N - ブチル、N - フェニル、N - ベンジル、N - シクロヘキシルおよび N - シクロドデシルである請求項 1 による方法。

【請求項 3】

2 価の橋架け $(Z R^1_m)_n$ が、 $Si(CH_3)_2$ 、 $SiPh_2$ 、 CH_2 、 $(CH_2)_2$ 、 $(CH_2)_3$ または $C(CH_3)_2$ からなる群から選択される請求項 2 による方法。

【請求項 4】

ハロゲン化剤が、 FeCl_3 、 CuCl_2 、 ZnCl_2 、 BCl_3 、 BBr_3 、 SiCl_4 、 PCl_5 、 SOCl_2 、 POCl_3 、 $\text{CH}_3\text{C}(\text{O})\text{Cl}$ 、 $\text{C}_6\text{H}_5\text{CH}_2\text{C}(\text{O})\text{Cl}$ 、 $\text{C}_6\text{H}_5\text{C}(\text{O})\text{Cl}$ 、 $\text{CH}_3\text{CH}_2\text{CH}_2\text{C}(\text{O})\text{Cl}$ 、 Br_2 、 Cl_2 、 I_2 、 HCl 、 HBr および HI からなる群から選択される請求項 1 ~ 3 の何れかによる方法。

【請求項 5】

段階 a) で添加された E Q 量が、 $1 + r$ E Q $1 + r + q$ である請求項 1 ~ 4 の何れかによる方法。

【請求項 6】

式 (III) :



(式中、 M 、 Cp 、 A 、 Z 、 R^1 、 m 、 q 、 s 、 L および L' は、請求項 1 ~ 5 の何れかにおいて定義された意味を有し、かつ n は 1、2、3 または 4 の値を有する整数である) の次の段階 :

a) 式 $(\text{Y} - \text{Cp})(\text{ZR}^1_m)_n(\text{A} - \text{Y})$ の配位子と、 Cp に対して少なくとも $2 + q$ モル当量の式 $\text{L}'_j\text{B}$ または $\text{L}'\text{Mg}\text{L}''$ (式中、 Cp 、 A 、 Z 、 R^1 、 L' および m は、上に記載され、 L'' は、塩素、臭素、ヨウ素からなる群から選択され； n は、1、2、3 または 4 の値を有する整数であり；基 Y は、互いに同一または異なって、好適な脱離基であり； Mg は、マグネシウムであり； B は、アルカリまたはアルカリ土類の金属であり；かつ j は、1 または 2 で、 B がアルカリ金属であるとき、 j は 1 に等しく、 B がアルカリ土類であるとき、 j は 2 に等しい) の化合物とを反応させ；

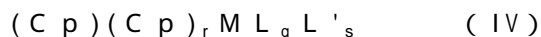
b) 段階 a) から得られた生成物と、少なくとも 1 モル当量の式 ML''_4 (式中、 M は、上で定義された意味を有し、 L'' は、塩素、臭素、ヨウ素からなる群から選択される) の化合物とを反応させ；

c) 任意に、混合物を精製し、かつラセミ体とメソ体を分離し；ならびに

d) 混合物と、 T^1L_w^1 ； T^2L_w^2 ； $\text{O}=\text{T}^3\text{L}_w^3$ ； $\text{R}^6\text{C}(\text{O})\text{L}$ ； L_2 および HL (式中、 T^1 、 T^2 、 T^3 、 L 、 w^1 、 w^2 、 w^3 および R^6 は、請求項 1 ~ 5 の何れかに記載されている) からなる群から選択されるハロゲン化剤とを反応させること
からなる請求項 1 ~ 5 の何れかによるジハライドまたはモノハライドメタロセン化合物の製造方法。

【請求項 7】

式 (IV) :



(式中、 M 、 Cp 、 M 、 L 、 L' 、 r 、 q および s は、請求項 1 ~ 6 の何れかに記載されている) の

次の段階 :

a) $1 + r$ 当量の式 $(\text{Y} - \text{Cp})$ の配位子と、少なくとも $3 + r$ モル当量の式 $\text{L}'_j\text{B}$ または $\text{L}'''\text{Mg}\text{L}'$ (式中、 Cp 、 L''' および L' は、請求項 1 ~ 5 の何れかに定義された意味を有し；基 Y は、互いに同一または異なって、好適な脱離基であり； B は、アルカリまたはアルカリ土類の金属であり； j は 1 または 2 で、 B がアルカリ金属であるとき、 j は 1 に等しく、 B がアルカリ土類金属であるとき、 j は 2 に等しい) の化合物との反応；

b) 段階 a) から得られた生成物と、少なくとも 1 モル当量の式 ML''_4 (式中、 M は、上で定義された意味を有し、 L'' は、塩素、臭素からなる群から選択される) の化合物との反応；

c) 任意に、混合物の精製；ならびに

d) 混合物と、 T^1L_w^1 ； T^2L_w^2 ； $\text{O}=\text{T}^3\text{L}_w^3$ ； $\text{R}^6\text{C}(\text{O})\text{L}$ ； L_2 および HL (式中、 T^1 、 T^2 、 T^3 、 L 、 w^1 、 w^2 、 w^3 、 R^6 は、請求項 1 ~ 4 の何れかに記載されている) からなる群から選択されるハロゲン化剤との反応
からなる請求項 1 ~ 6 の何れかによるジハライドまたはモノハライドメタロセン化合物の製造方法。

【請求項 8】

反応体 $M L'_4$ が、 $T i C l_4$ 、 $Z r C l_4$ 、 $H f C l_4$ からなる群から選択される請求項 1 ~ 7 の何れかによる方法。