

【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18年12月7日(2006.12.7)

【公表番号】特表2006-503887(P2006-503887A)

【公表日】平成18年2月2日(2006.2.2)

【年通号数】公開・登録公報2006-005

【出願番号】特願2004-545930(P2004-545930)

【国際特許分類】

**C 0 7 F 17/00 (2006.01)**

**C 0 8 F 4/64 (2006.01)**

C 0 7 F 7/00 (2006.01)

【F I】

C 0 7 F 17/00 C S P

C 0 8 F 4/64

C 0 7 F 7/00 A

【手続補正書】

【提出日】平成18年10月16日(2006.10.16)

【手続補正1】

【補正対象書類名】特許請求の範囲

【補正対象項目名】全文

【補正方法】変更

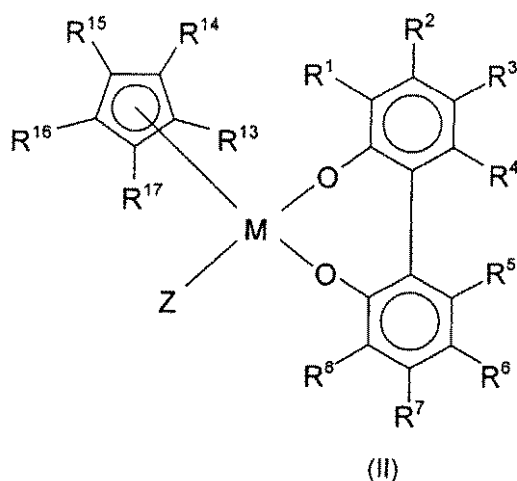
【補正の内容】

【特許請求の範囲】

【請求項1】

式(II)：

【化1】



[但し、Mが、チタン、ジルコニウム、ハフニウム、バナジウム、ニオブ、タンタル、クロム、モリブデン、タングステン又は周期表第III族の遷移元素若しくはランタニド元素を表し、

$R^1$ 、 $R^2$ 、 $R^4$ 、 $R^5$ 、 $R^7$ 及び $R^8$ が、同一でも異なっても良く、それぞれ水素、フッ素、塩素、臭素、ヨウ素、 $C_1 \sim C_{20}$ アルキル、置換基として $C_1 \sim C_{10}$ アルキル基を有していても良い3～8員のシクロアルキル、 $C_6 \sim C_{15}$ アリール、アルキル部分に1～10個の炭素原子を有し、アリール部分に6～20個の炭素原子を有するアルキルアリール

、アルキル部分に 1 ~ 10 個の炭素原子を有し、アリール部分に 6 ~ 20 個の炭素原子を有するアリールアルキル、 $-OR^{10}$ 、 $-SR^{10}$ 、 $-N(R^{10})_2$ 、 $-P(R^{10})_2$  又は  $-Si(R^{10})_3$  { 但し、 $R^{10}$  が、同一でも異なっても良く、それぞれ  $C_1 \sim C_{10}$  アルキル、 $C_6 \sim C_{15}$  アリール、 $C_3 \sim C_{10}$  シクロアルキル、アルキルアリール (これらの基は部分的又は完全にヘテロ原子で置換されていても良い) を表す。} を表し、

$R^3$  及び  $R^6$  が、同一でも異なっても良く、それぞれ水素、 $-OR^{11}$ 、 $-SR^{11}$ 、 $-N(R^{11})_2$  又は  $-P(R^{11})_2$  { 但し、 $R^{11}$  が、同一でも異なっても良く、それぞれ  $C_1 \sim C_{10}$  アルキル又は  $C_3 \sim C_{10}$  シクロアルキルを表す。} を表し、

$R^{13} \sim R^{17}$  が、同一でも異なっても良く、それぞれ水素、 $C_1 \sim C_{20}$  アルキル、置換基として  $C_1 \sim C_{10}$  アルキル基を有していても良い 5 ~ 7 員のシクロアルキル、 $C_6 \sim C_{15}$  アリール又はアリールアルキル (これらの隣接する基が一体化して炭素原子数 4 ~ 15 個の環式基を形成しても良い)、又は  $-Si(R^{18})_3$  { 但し、 $R^{18}$  が、同一でも異なっても良く、それぞれ  $C_1 \sim C_{10}$  アルキル、 $C_6 \sim C_{15}$  アリール又は  $C_3 \sim C_{10}$  シクロアルキルを表す。} を表し、そして

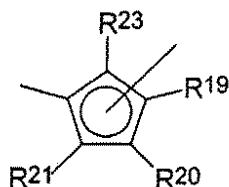
基  $R^{16}$  と Z が合体して  $[T(R^{25})(R^{26})]_m - E$  - 基 { 但し、T が、同一でも異なっても良く、それぞれケイ素、ゲルマニウム、スズ又は炭素を表し、

$R^{25}$  及び  $R^{26}$  が、それぞれ水素、 $C_1 \sim C_{10}$  アルキル、 $C_3 \sim C_{10}$  シクロアルキル又は  $C_6 \sim C_{15}$  アリールを表し、

m が、1、2、3 又は 4 を表し、そして

E が、

【化 2】



( 但し、 $R^{19} \sim R^{23}$  が、同一でも異なっても良く、それぞれ水素、 $C_1 \sim C_{20}$  アルキル、置換基として  $C_1 \sim C_{10}$  アルキル基を有していても良い 5 ~ 7 員のシクロアルキル、 $C_6 \sim C_{15}$  アリール又はアリールアルキル (これらの隣接する基が一体化して炭素原子数 4 ~ 15 個の環式基を形成しても良い)、又は  $-Si(R^{24})_3$  ( 但し、 $R^{24}$  が、同一でも異なっても良く、それぞれ  $C_1 \sim C_{10}$  アルキル、 $C_6 \sim C_{15}$  アリール又は  $C_3 \sim C_{10}$  シクロアルキルを表す。 ) を表す。 )

を表す。}

を形成する。]

で表されるラセミ体メタロセンビフェノキシド錯体。

【請求項 2】

式 (II) の  $R^{17}$  及び  $R^{23}$  が水素ではない請求項 1 に記載のラセミ体メタロセンビフェノキシド錯体。

【請求項 3】

式 (II) の  $R^1$  及び  $R^8$  が嵩高い置換基である請求項 1 又は 2 に記載のラセミ体メタロセンビフェノキシド錯体。

【請求項 4】

式 (II) の  $R^3$  及び  $R^6$  が、それぞれメトキシ、エトキシ、イソプロピルオキシ、tert-ブチルオキシ、シクロプロピルオキシ又はシクロヘキシルオキシである請求項 1 ~ 3 のいずれか 1 項に記載のラセミ体メタロセンビフェノキシド錯体。

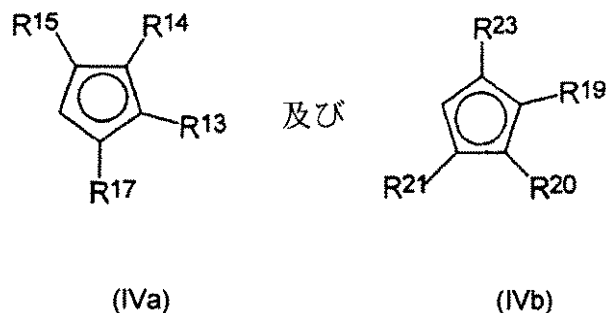
【請求項 5】

請求項 1 ~ 4 のいずれか 1 項に記載のラセミ体メタロセンビフェノキシド錯体を製造する方法であって、

下記の連続工程：

a) 式 (IVa) 及び (IVb)：

【化 3】



[ 但し、 $R^{13}$ 、 $R^{14}$ 、 $R^{15}$  及び  $R^{17}$  が、同一でも異なっても良く、それぞれ水素、 $C_1 \sim C_{20}$  アルキル、置換基として  $C_1 \sim C_{10}$  アルキル基を有していても良い 5 ~ 7 員のシクロアルキル、 $C_6 \sim C_{15}$  アリール又はアリールアルキル（これらの隣接する基が一体化して炭素原子数 4 ~ 15 個の環式基を形成しても良い）、又は  $-Si(R^{18})_3$  { 但し、 $R^{18}$  が、同一でも異なっても良く、それぞれ  $C_1 \sim C_{10}$  アルキル、 $C_6 \sim C_{15}$  アリール又は  $C_3 \sim C_{10}$  シクロアルキルを表す。} を表し、そして

$R^{19}$ 、 $R^{20}$ 、 $R^{21}$  及び  $R^{23}$  が、同一でも異なっても良く、それぞれ水素、 $C_1 \sim C_{20}$  アルキル、置換基として  $C_1 \sim C_{10}$  アルキル基を有していても良い 5 ~ 7 員のシクロアルキル、 $C_6 \sim C_{15}$  アリール又はアリールアルキル（これらの隣接する基が一体化して炭素原子数 4 ~ 15 個の環式基を形成しても良い）、又は  $-Si(R^{24})_3$  { 但し、 $R^{24}$  が、同一でも異なっても良く、 $C_1 \sim C_{10}$  アルキル、 $C_6 \sim C_{15}$  アリール又は  $C_3 \sim C_{10}$  シクロアルキルを表す。} を表す。]

により表される化合物を好適な脱プロトン剤により脱プロトン化する工程、

b) 脱プロトン化された化合物 (IVa) 及び (IVb) を、下記：

$[T(R^{25})(R^{26})]_m Hal_2$

[ 但し、 $Hal$  が、F、Cl、Br 又は I のハロゲン置換基を表し、

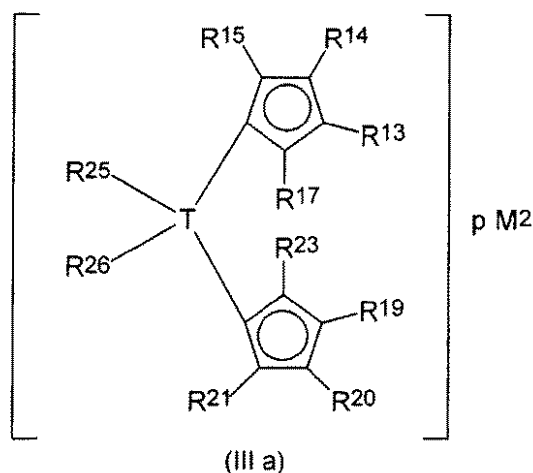
T が、同一でも異なっても良く、それぞれケイ素、ゲルマニウム、スズ又は炭素を表し、

$R^{25}$  及び  $R^{26}$  が、それぞれ水素、 $C_1 \sim C_{10}$  アルキル、 $C_3 \sim C_{10}$  シクロアルキル又は  $C_6 \sim C_{15}$  アリールを表し、そして

m が、1、2、3 又は 4 を表す。]

で表される化合物と反応させ、次いで好適な脱プロトン剤により脱プロトン化を繰り返して式 (IIIa)：

## 【化 4】



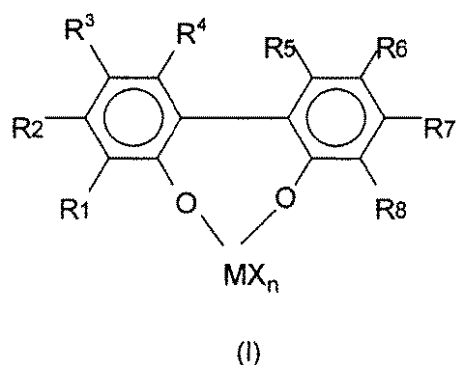
[ 但し、 $M^2$ が、アルカリ金属イオン又はアルカリ土類金属イオンを表し、そして  
 $p$ が、 $M^2$ がアルカリ金属土類イオンの時は1を表し、 $M^2$ がアルカリ金属イオンの時は2を表し、

$T$ 、 $R^{25}$ 、 $R^{26}$ 及び $m$ が前記と同義である。]

で表される化合物を形成する工程、

c) 式(IIIa)の化合物を、式(I)：

## 【化 5】



[ 但し、 $M$ が、チタン、ジルコニウム、ハフニウム、バナジウム、ニオブ、タンタル、クロム、モリブデン、タングステン又は周期表第III族の遷移元素若しくはランタニド元素を表し、

$X$ が、同一でも異なっても良く、それぞれフッ素、塩素、臭素、ヨウ素、水素、 $C_1 \sim C_{10}$ アルキル、 $C_6 \sim C_{15}$ アリール、アルキル部分に1～10個の炭素原子を有し、アリール部分に6～20個の炭素原子を有するアルキルアリール、 $-OR^9$ 又は $-NR^9_2$ { 但し、 $R^9$ が、同一でも異なっても良く、それぞれ $C_1 \sim C_{10}$ アルキル、 $C_6 \sim C_{15}$ アリール、 $C_3 \sim C_{10}$ シクロアルキル、アルキルアリールを表す。}を表し、

$n$ が、1～4の整数で、且つ( $M$ の原子価 - 2)に相当し、

$R^1$ 、 $R^2$ 、 $R^4$ 、 $R^5$ 、 $R^7$ 及び $R^8$ が、同一でも異なっても良く、それぞれ水素、フッ素、塩素、臭素、ヨウ素、 $C_1 \sim C_{20}$ アルキル、置換基として $C_1 \sim C_{10}$ アルキル基を有していても良い3～8員のシクロアルキル、 $C_6 \sim C_{15}$ アリール、アルキル部分に1～10個の炭素原子を有し、アリール部分に6～20個の炭素原子を有するアルキルアリール、アルキル部分に1～10個の炭素原子を有し、アリール部分に6～20個の炭素原子を有するアリールアルキル、 $-OR^{10}$ 、 $-SR^{10}$ 、 $-N(R^{10})_2$ 、 $-P(R^{10})_2$ 又は $-S$

$i(R^{10})_3$  {但し、 $R^{10}$ が、同一でも異なっても良く、それぞれ  $C_1 \sim C_{10}$  アルキル、 $C_6 \sim C_{15}$  アリール、 $C_3 \sim C_{10}$  シクロアルキル、アルキルアリール（これらの基は部分的又は完全にヘテロ原子で置換されていても良い）を表す。}を表し、そして

$R^3$ 及び $R^6$ が、同一でも異なっても良く、それぞれ水素、 $-OR^{11}$ 、 $-SR^{11}$ 、 $-N(R^{11})_2$ 又は $-P(R^{11})_2$  {但し、 $R^{11}$ が、同一でも異なっても良く、それぞれ  $C_1 \sim C_{10}$  アルキル又は $C_3 \sim C_{10}$  シクロアルキルを表す。}を表す。]

で表される遷移金属錯体と反応させ、次いでこうして得られた混合物を  $-78 \sim 250$  の温度で加熱する工程を含むことを特徴とする方法。

#### 【請求項6】

請求項1～4のいずれか1項に記載のラセミ体メタロセンビフェノキシド錯体を、オレフィン性不飽和化合物の重合のための触媒又は触媒の成分として、或いは立体選択合成における試薬又は触媒として使用する方法。