

【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】令和4年5月27日(2022.5.27)

【国際公開番号】WO2020/003035

【公表番号】特表2021-530441(P2021-530441A)

【公表日】令和3年11月11日(2021.11.11)

【出願番号】特願2020-567893(P2020-567893)

【国際特許分類】

C 0 7 F 1 5 / 0 0 ( 2 0 0 6 . 0 1 )

C 0 7 B 3 7 / 0 6 ( 2 0 0 6 . 0 1 )

B 0 1 J 3 1 / 2 2 ( 2 0 0 6 . 0 1 )

B 0 1 J 3 1 / 2 4 ( 2 0 0 6 . 0 1 )

10

【 F I 】

C 0 7 F 1 5 / 0 0 A C S P

C 0 7 B 3 7 / 0 6

B 0 1 J 3 1 / 2 2 Z

B 0 1 J 3 1 / 2 4 Z

【手続補正書】

20

【提出日】令和4年5月19日(2022.5.19)

【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】

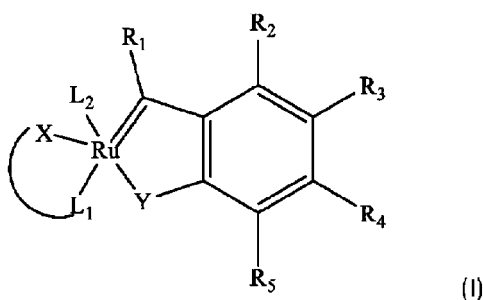
【特許請求の範囲】

【請求項1】

式Iの化合物：

【化1】

30



(式中、

40

【化2】



は、一価のアニオン性二座配位子であり、

Yは、酸素又は硫黄であり、

L<sub>2</sub>は、中性の配位子であり、

R<sub>1</sub>は、水素、(C<sub>1</sub>~C<sub>20</sub>)アルキル、(C<sub>2</sub>~C<sub>20</sub>)アルケニル、(C<sub>2</sub>~C<sub>20</sub>)アルキニル及び(C<sub>6</sub>~C<sub>10</sub>)アリアルからなる群から選択され、

R<sub>2</sub>、R<sub>3</sub>、R<sub>4</sub>及びR<sub>5</sub>は同一であるか若しくは異なり、それぞれ独立して、水素、ハ

50

ロゲン、(C<sub>1</sub>~C<sub>16</sub>)アルキル、(C<sub>1</sub>~C<sub>16</sub>)アルコキシ、(C<sub>1</sub>~C<sub>16</sub>)ペルハロゲンアルキル、(C<sub>3</sub>~C<sub>7</sub>)シクロアルキル、(C<sub>2</sub>~C<sub>16</sub>)アルケニル、(C<sub>6</sub>~C<sub>14</sub>)アリール、(C<sub>6</sub>~C<sub>14</sub>)ペルハロゲンアリール、(C<sub>3</sub>~C<sub>12</sub>)ヘテロシクリル、-OR<sub>6</sub>、-NO<sub>2</sub>、-COOH、-COOR<sub>6</sub>、-CONR<sub>6</sub>R<sub>7</sub>、-SO<sub>2</sub>NR<sub>6</sub>R<sub>7</sub>、-SO<sub>2</sub>R<sub>6</sub>、-CHO、-COR<sub>6</sub>からなる群から選択され、式中、R<sub>6</sub>及びR<sub>7</sub>は同一であるか若しくは異なり、それぞれ独立して、(C<sub>1</sub>~C<sub>6</sub>)アルキル、(C<sub>1</sub>~C<sub>6</sub>)ペルハロゲンアルキル、(C<sub>6</sub>~C<sub>14</sub>)アリール、(C<sub>6</sub>~C<sub>14</sub>)ペルハロゲンアリールからなる群から選択される、或いは、R<sub>2</sub>、R<sub>3</sub>、R<sub>4</sub>及びR<sub>5</sub>のうち2つ以上は、それらが結合している炭素原子と一緒に、置換若しくは非置換縮合(C<sub>4</sub>~C<sub>8</sub>)炭素環又は置換若しくは非置換縮合芳香環を形成する)。

10

## 【請求項2】

Yが酸素であり、

R<sub>1</sub>が水素であり、

R<sub>2</sub>、R<sub>3</sub>、R<sub>4</sub>及びR<sub>5</sub>は同一であるか又は異なり、それぞれ独立して、水素、メチル、エチル及び-NO<sub>2</sub>からなる群から選択され、

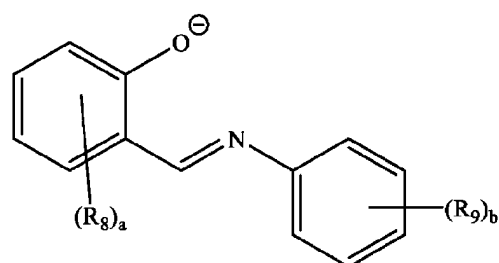
## 【化3】



が式2：

20

## 【化4】



2

30

(式中、

a及びbは0~5の整数であり、

R<sub>8</sub>及びR<sub>9</sub>はそれぞれ、同一であっても異なってもよく、互いに独立して、水素、ハロゲン、(C<sub>1</sub>~C<sub>16</sub>)アルキル、(C<sub>1</sub>~C<sub>16</sub>)アルコキシ、(C<sub>1</sub>~C<sub>16</sub>)ペルハロゲンアルキル、(C<sub>3</sub>~C<sub>7</sub>)シクロアルキル、(C<sub>2</sub>~C<sub>16</sub>)アルケニル、(C<sub>6</sub>~C<sub>14</sub>)アリール、(C<sub>6</sub>~C<sub>14</sub>)ペルハロゲンアリール、(C<sub>3</sub>~C<sub>12</sub>)ヘテロシクリル、-OR<sub>6</sub>、-NO<sub>2</sub>、-COOH、-COOR<sub>6</sub>、-CONR<sub>6</sub>R<sub>7</sub>、-SO<sub>2</sub>NR<sub>6</sub>R<sub>7</sub>、-SO<sub>2</sub>R<sub>6</sub>、-CHO、-COR<sub>6</sub>からなる群から選択され、式中、R<sub>6</sub>及びR<sub>7</sub>は同一であるか又は異なり、それぞれ独立して、(C<sub>1</sub>~C<sub>6</sub>)アルキル、(C<sub>1</sub>~C<sub>6</sub>)ペルハロゲンアルキル、(C<sub>6</sub>~C<sub>14</sub>)アリール、(C<sub>6</sub>~C<sub>14</sub>)ペルハロゲンアリールからなる群から選択される)

40

を有する、請求項1に記載の化合物。

## 【請求項3】

Yは酸素であり、

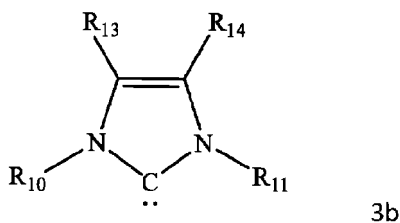
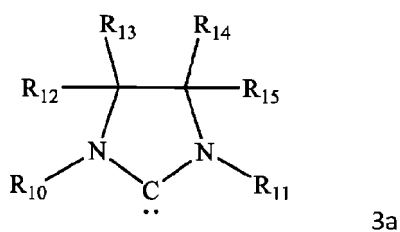
R<sub>1</sub>は水素であり、

R<sub>2</sub>、R<sub>3</sub>、R<sub>4</sub>及びR<sub>5</sub>は同一であるか又は異なり、それぞれ独立して、水素、メチル、エチル及び-NO<sub>2</sub>からなる群から選択され、

L<sub>2</sub>は、式3a又は3b：

50

## 【化 5】



10

の配位子であり、  
式中、

R<sub>10</sub> 及び R<sub>11</sub> は同一であるか又は異なり、それぞれ独立して、(C<sub>1</sub> ~ C<sub>12</sub>) アルキル、(C<sub>3</sub> ~ C<sub>12</sub>) シクロアルキル、(C<sub>2</sub> ~ C<sub>12</sub>) アルケニル及び置換又は非置換 (C<sub>6</sub> ~ C<sub>14</sub>) アリールからなる群から選択され、

20

R<sub>12</sub>、R<sub>13</sub>、R<sub>14</sub> 及び R<sub>15</sub> は同一であるか又は異なり、それぞれ独立して、水素、任意選択により (C<sub>1</sub> ~ C<sub>6</sub>) アルキル、(C<sub>1</sub> ~ C<sub>6</sub>) ペルハロアルキル、(C<sub>1</sub> ~ C<sub>6</sub>) アルコキシ又はハロゲンのうちの少なくとも1つで置換された、(C<sub>1</sub> ~ C<sub>12</sub>) アルキル、(C<sub>3</sub> ~ C<sub>12</sub>) シクロアルキル、(C<sub>2</sub> ~ C<sub>12</sub>) アルケニル、(C<sub>6</sub> ~ C<sub>14</sub>) アリールからなる群から選択されるか、或いは

R<sub>12</sub>、R<sub>13</sub>、R<sub>14</sub>、R<sub>15</sub> は、任意選択により、それらが結合している炭素原子と一緒に、置換若しくは非置換縮合 (C<sub>4</sub> ~ C<sub>8</sub>) 炭素環、又は置換若しくは非置換縮合芳香環を形成することができる、請求項 1 に記載の化合物。

【請求項 4】

30

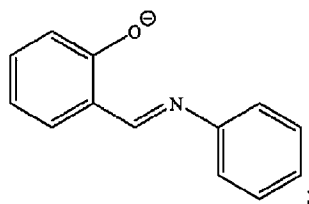
【化 6】



が、

式 2 a の基：

【化 7】

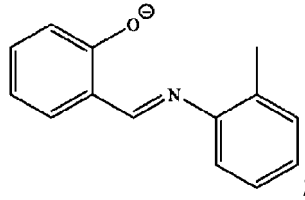


40

式 2 b の基：

50

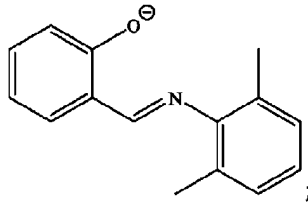
【化 8】



式 2 c の基 :

【化 9】

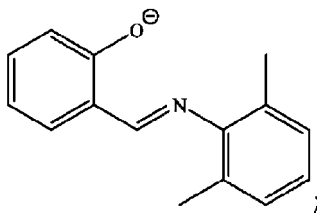
10



式 2 d の基 :

【化 10】

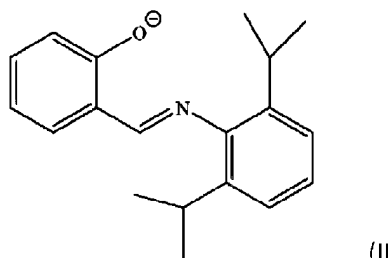
20



式 2 e の基 :

【化 11】

30

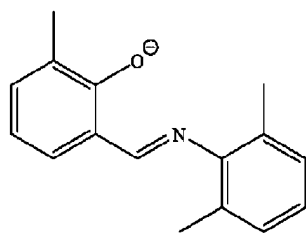


(IIE); 及び

式 2 f の基 :

【化 12】

40



(IIF).

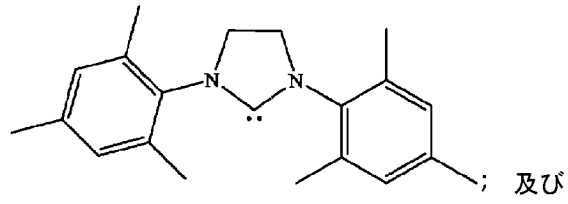
からなる群から選択される、請求項 1 に記載の化合物。

50

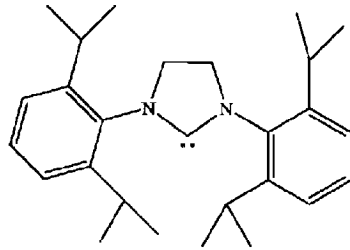
【請求項 5】

L 2 が、

【化 1 3】



10



からなる群から選択される、請求項 1 に記載の化合物。

【請求項 6】

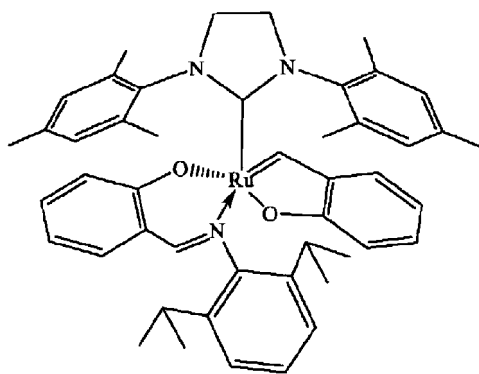
20

30

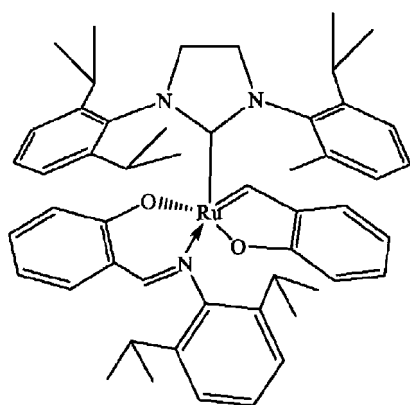
40

50

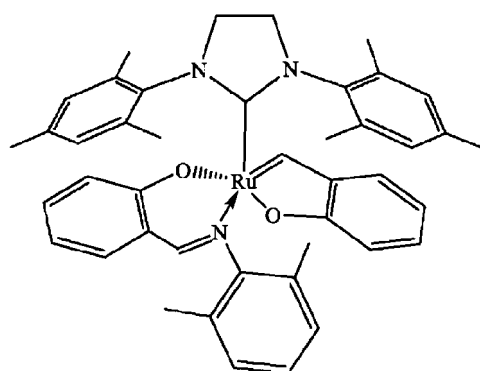
## 【化 1 4】



10



20



30

からなる群から選択される、請求項 1 に記載の化合物。

## 【請求項 7】

少なくとも 1 種のオレフィンを、触媒前駆体としての請求項 1 に記載の化合物と接触させることを含む、オレフィンのメタセシス反応を行うための方法。

## 【請求項 8】

前記メタセシス反応が、有機溶媒中で行われる、請求項 7 に記載の方法。

40

## 【請求項 9】

前記有機溶媒が、ジクロロメタン、ジクロロエタン、トルエン、酢酸エチル及びこれらの任意の組み合わせの混合物からなる群から選択される、請求項 8 に記載の方法。

## 【請求項 10】

前記メタセシス反応が、一切の溶媒なしで行われる、請求項 7 に記載の方法。

## 【請求項 11】

前記メタセシス反応が、化学活性剤の存在下で行われる、請求項 7 に記載の方法。

## 【請求項 12】

前記化学活性剤が、ブレンステッド若しくはルイス酸又はアルカン若しくはシランの八

50

口誘導体である、請求項 1 1 に記載の方法。

【請求項 1 3】

前記化学活性剤が、塩化水素、クロロトリメチルシラン又は p - トルエンスルホン酸である、請求項 1 2 に記載の方法。

【請求項 1 4】

前記メタセシス反応が、ジシクロペンタジエンの開環メタセシス重合である、請求項 7 に記載の方法。

【請求項 1 5】

一般式 1 の触媒（前駆体）が固体形態でジシクロペンタジエンに添加される、請求項 1 4 に記載の方法。

10

【請求項 1 6】

前記重合反応が、ジシクロペンタジエンと一般式 1 の触媒（前駆体）との混合物を 3 0 以上の温度に加熱することによって開始される、請求項 1 2 に記載の方法。

【請求項 1 7】

前記メタセシス反応が、2 0 ~ 1 2 0 の温度で行われる、請求項 7 に記載の方法。

【請求項 1 8】

前記メタセシス反応が、1 分 ~ 2 4 時間にわたって行われる、請求項 7 に記載の方法。

【請求項 1 9】

前記メタセシス反応が、架橋結合の形成を促進する添加剤の存在下で行われる、請求項 7 に記載の方法。

20

【請求項 2 0】

前記メタセシス反応が、1 0 0 0 p p m 以下の量の触媒（前駆体）を使用して行われる、請求項 7 に記載の方法。

【手続補正 2】

【補正対象書類名】明細書

【補正対象項目名】0 0 1 5

【補正方法】変更

【補正の内容】

【0 0 1 5】

は、一価のアニオン性二座配位子であり、

30

Y は、酸素又は硫黄であり、

L<sub>2</sub> は、中性の配位子であり、

R<sub>1</sub> は、水素、(C<sub>1</sub> ~ C<sub>20</sub>) アルキル、(C<sub>2</sub> ~ C<sub>20</sub>) アルケニル、(C<sub>2</sub> ~ C<sub>20</sub>) アルキニル及び(C<sub>6</sub> ~ C<sub>10</sub>) アリールからなる群から選択され、

R<sub>2</sub>、R<sub>3</sub>、R<sub>4</sub> 及び R<sub>5</sub> は同一であるか若しくは異なり、それぞれ独立して、水素、ハロゲン、(C<sub>1</sub> ~ C<sub>16</sub>) アルキル、(C<sub>1</sub> ~ C<sub>16</sub>) アルコキシ、(C<sub>1</sub> ~ C<sub>16</sub>) ペルハロゲンアルキル、(C<sub>3</sub> ~ C<sub>7</sub>) シクロアルキル、(C<sub>2</sub> ~ C<sub>16</sub>) アルケニル、(C<sub>6</sub> ~ C<sub>14</sub>) アリール、(C<sub>6</sub> ~ C<sub>14</sub>) ペルハロゲンアリール、(C<sub>3</sub> ~ C<sub>12</sub>) ヘテロシクリル、-OR<sub>6</sub>、-NO<sub>2</sub>、-COOH、-COOR<sub>6</sub>、-CONR<sub>6</sub>R<sub>7</sub>、-SO<sub>2</sub>NR<sub>6</sub>R<sub>7</sub>、-SO<sub>2</sub>R<sub>6</sub>、-CHO、-COR<sub>6</sub> からなる群から選択され、式中、R<sub>6</sub> 及び R<sub>7</sub> は同一であるか若しくは異なり、それぞれ独立して、(C<sub>1</sub> ~ C<sub>6</sub>) アルキル、(C<sub>1</sub> ~ C<sub>6</sub>) ペルハロゲンアルキル、(C<sub>6</sub> ~ C<sub>14</sub>) アリール、(C<sub>6</sub> ~ C<sub>14</sub>) ペルハロゲンアリールからなる群から選択される、或いは、R<sub>2</sub>、R<sub>3</sub>、R<sub>4</sub> 及び R<sub>5</sub> のうちの 2 つ以上は、それらが結合している炭素原子と一緒に、置換若しくは非置換縮合(C<sub>4</sub> ~ C<sub>8</sub>) 炭素環又は置換若しくは非置換縮合芳香環を形成する。

40

【手続補正 3】

【補正対象書類名】明細書

【補正対象項目名】0 0 2 3

【補正方法】変更

【補正の内容】

50

## 【 0 0 2 3 】

( 式中、

a 及び b は 0 ~ 5 の整数であり、

R<sub>8</sub> 及び R<sub>9</sub> はそれぞれ、同一であっても異なってもよく、互いに独立して、水素、ハロゲン、( C<sub>1</sub> ~ C<sub>16</sub> ) アルキル、( C<sub>1</sub> ~ C<sub>16</sub> ) アルコキシ、( C<sub>1</sub> ~ C<sub>16</sub> ) ペルハロゲンアルキル、( C<sub>3</sub> ~ C<sub>7</sub> ) シクロアルキル、( C<sub>2</sub> ~ C<sub>16</sub> ) アルケニル、( C<sub>6</sub> ~ C<sub>14</sub> ) アリール、( C<sub>6</sub> ~ C<sub>14</sub> ) ペルハロゲンアリール、( C<sub>3</sub> ~ C<sub>12</sub> ) ヘテロシクリル、- OR<sub>6</sub>、- NO<sub>2</sub>、- COOH、- COOR<sub>6</sub>、- CONR<sub>6</sub>R<sub>7</sub>、- SO<sub>2</sub>NR<sub>6</sub>R<sub>7</sub>、- SO<sub>2</sub>R<sub>6</sub>、- CHO、- COR<sub>6</sub> からなる群から選択され、式中、R<sub>6</sub> 及び R<sub>7</sub> は同一であるか又は異なり、それぞれ独立して、( C<sub>1</sub> ~ C<sub>6</sub> ) アルキル、( C<sub>1</sub> ~ C<sub>6</sub> ) ペルハロゲンアルキル、( C<sub>6</sub> ~ C<sub>14</sub> ) アリール、( C<sub>6</sub> ~ C<sub>14</sub> ) ペルハロゲンアリールからなる群から選択される)。

10

## 【 手続補正 4 】

【 補正対象書類名 】 明細書

【 補正対象項目名 】 0 0 6 5

【 補正方法 】 変更

【 補正の内容 】

## 【 0 0 6 5 】

用語「ペルハロゲンアルキル」は、全ての水素がハロゲン原子で置き換えられ、該ハロゲン原子が同一であっても異なってもよい、上記のアルキルを表す。

20

30

40

50