(19)日本国特許庁(JP)　(12)公表特許公報(A)　(11)公表番号
特表2025-510021
(P2025-510021A)
(43)公表日　令和7年4月14日(2025.4.14)

(51)国際特許分類		FI		テーマコード（参考）
C07F 17/00 (2006.01)		C07F	17/00	CSP　4H049
C07F 7/28 (2006.01)		C07F	7/28	F　4H050
C07F 19/00 (2006.01)		C07F	19/00	4J100
C07F 9/22 (2006.01)		C07F	9/22	4J128
C08F 210/02 (2006.01)		C08F	210/02	

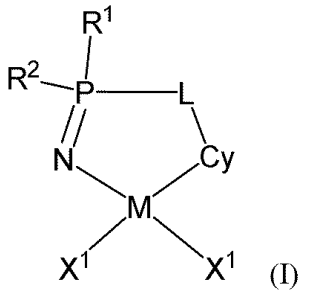
審査請求　未請求　予備審査請求　未請求　（全429頁）　最終頁に続く

(21)出願番号　特願2024-556217(P2024-556217)
(86)(22)出願日　令和5年3月21日(2023.3.21)
(85)翻訳文提出日　令和6年10月29日(2024.10.29)
(86)国際出願番号　PCT/IB2023/052757
(87)国際公開番号　WO2023/187552
(87)国際公開日　令和5年10月5日(2023.10.5)
(31)優先権主張番号　63/322,409
(32)優先日　令和4年3月22日(2022.3.22)
(33)優先権主張国・地域又は機関
米国(US)
(31)優先権主張番号　63/344,881
(32)優先日　令和4年5月23日(2022.5.23)
(33)優先権主張国・地域又は機関
米国(US)
(81)指定国・地域　AP(BW,CV,GH,GM,KE,LR,LS,MW,MZ
最終頁に続く

(71)出願人　505382548
ノバ ケミカルズ（インターナショナル）ソシエテ アノニム
スイス国 １７００ フリブール、 アヴニュ ドゥ ラ ガール １４
(74)代理人　110000855
弁理士法人浅村特許事務所
(72)発明者　ファン、チェン
カナダ ティー３ケイ ６エイチ８ アルバータ、カルガリー、パナマウント マナー エヌダブリュー １３２
(72)発明者　カーター、チャールズ
カナダ ティー３エイ ６エル７ アルバータ、カルガリー、ヒドゥン クリーク ロード エヌダブリュー １４２
最終頁に続く

(54)【発明の名称】　有機金属錯体、オレフィン重合触媒系及び重合プロセス

(57)【要約】
オレフィン重合触媒系の一部を形成し得るプレ重合触媒として有用な有機金属錯体を記載する。触媒系は、エチレンの重合に使用され、任意選択で１つ以上のＣ３－１２アルファ－オレフィンコモノマーとのエチレンの重合に使用される。有機金属錯体は、広く、式Ｉ：



(I)

で表され、式中、Ｌは、ＰとＣｙを連結する原子の連続鎖を含む架橋基であり、連続鎖は２個又は３個の原子を含み、Ｃｙは、シクロペンタジエニル型配位子である。このオレフィン重合触媒系は、高温での溶液相重合プロセスにおいて、エチレンとアルファ－オレフィンを重合

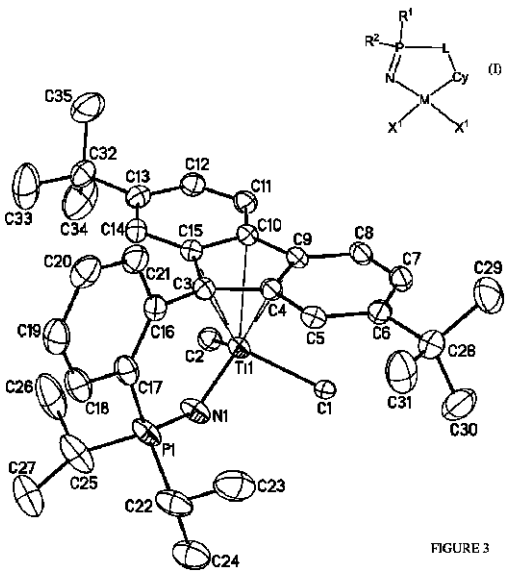
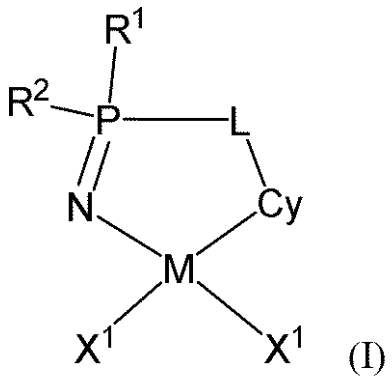


FIGURE 3

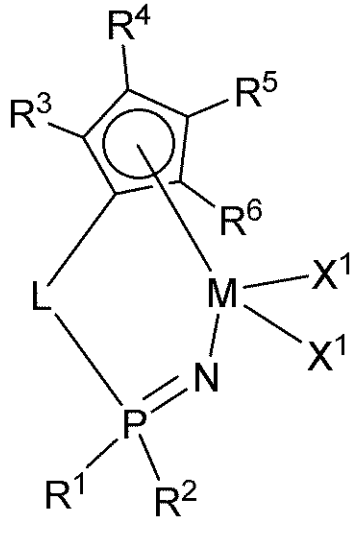
【特許請求の範囲】
【請求項１】
有機金属錯体であって、式Ｉ：
【化１】



(I)

で表され、
式中、
Ｍは、Ｔｉ、Ｚｒ又はＨｆであり；
R^1及びR^2は、各々独立して、水素及びR^Xからなる群から選択されるか；又はR^1及びR^2は、それらが結合しているＰ原子と一緒になって、非置換であるか、又はハロゲン原子、C_{1-20}アルキル基、C_{1-20}アルコキシ基、C_{7-20}アルキルアリール基、C_{7-20}アリールアルキル基、C_{6-20}アリール基、C_{6-20}アリールオキシ基、C_{7-20}アルキルアリールオキシ基、及びC_{7-20}アリールアルキルオキシ基からなる群から選択される１つ以上の置換基によってさらに置換されている３－１０員複素環式基を形成し；
各R^Xは、独立して、ハロゲン原子；C_{1-30}ヒドロカルビル基（このヒドロカルビル基は、非置換であるか、又は１つ以上のハロゲン原子、C_{1-20}アルキル基、C_{1-20}アルコキシ基、C_{7-20}アルキルアリール基、C_{7-20}アリールアルキル基、C_{6-20}アリール基、C_{6-20}アリールオキシ基、C_{7-20}アルキルアリールオキシ基、及び／又はC_{7-20}アリールアルキルオキシ基によってさらに置換されている）；式－ＮＲ’$_2$のアミド基；式－Ｓｉ（R^a）$_3$のシリル基；式－Ｇｅ（R^a）$_3$のゲルマニル基；及び式Ｎ＝Ｐ（R^b）（R^c）（R^d）のホスフィンイミン基からなる群から選択され；ここで、各Ｒ’は、独立して、水素、C_{1-20}アルキル基、及びC_{6-20}アリール基からなる群から選択され；ここで、各R^aは、独立して、水素、C_{1-8}アルキル基、C_{1-8}アルコキシ基、C_{6-20}アリールオキシ基及びC_{6-20}アリール基からなる群から選択され、R^b、R^c、R^dは、各々独立して、C_{1-20}アルキル基であり；
各X^1は、活性化可能な配位子であり；
Ｃｙは、Ｌに共有結合し、η－結合を介してＭに配位するシクロペンタジエニル型配位子であり；
Ｌは、ＰとＣｙを連結する原子の連続鎖を含む架橋基であり、連続鎖は２個又は３個の原子を含む、
有機金属錯体。
【請求項２】
請求項１に記載の有機金属錯体であって、式ＩＩ：

【化２】



(II)

で表され、

式中、Ｒ^{3}、Ｒ^{4}、Ｒ^{5}及びＲ^{6}は、各々独立して、

ハロゲン；

水素；

Ｃ$_{1-30}$ヒドロカルビル基（このヒドロカルビル基は、非置換であるか、又はハロゲン原子、Ｃ$_{1-20}$アルキル基、Ｃ$_{1-20}$アルコキシ基、Ｃ$_{7-20}$アルキルアリール基、Ｃ$_{7-20}$アリールアルキル基、Ｃ$_{6-20}$アリール基、Ｃ$_{6-20}$アリールオキシ基、Ｃ$_{7-20}$アルキルアリールオキシ基、及びＣ$_{7-20}$アリールアルキルオキシ基からなる群から選択される１つ以上の置換基によってさらに置換されている）；

ヘテロ原子含有Ｃ$_{1-30}$ヒドロカルビル基（このヘテロ原子含有ヒドロカルビル基は、非置換であるか、又はハロゲン原子、Ｃ$_{1-20}$アルキル基、Ｃ$_{1-20}$アルコキシ基、Ｃ$_{7-20}$アルキルアリール基、Ｃ$_{7-20}$アリールアルキル基、Ｃ$_{6-20}$アリール基、Ｃ$_{6-20}$アリールオキシ基、Ｃ$_{7-20}$アルキルアリールオキシ基、及びＣ$_{7-20}$アリールアルキルオキシ基からなる群から選択される１つ以上の置換基によってさらに置換されている）；

オキシ基、－ＯＲ’；

アミド基、－ＮＲ’$_{2}$；

ホスフィド基、－ＰＲ’$_{2}$；

チオラート基、－ＳＲ’；

式－Ｓｉ（Ｒ^{a}）$_{3}$のシリル基；

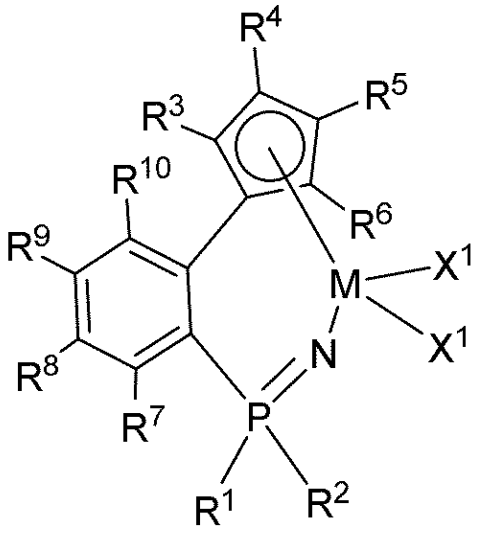
式－Ｇｅ（Ｒ^{a}）$_{3}$のゲルマニル基；

からなる群から選択され；

ここで、Ｒ^{3}、Ｒ^{4}、Ｒ^{5}及びＲ^{6}の２つの隣接する基は、任意に結合して環状ヒドロカルビル基又は環状ヘテロ原子含有ヒドロカルビル基を形成してもよく、環状ヒドロカルビル基又は環状ヘテロ原子含有ヒドロカルビル基は、非置換であるか、又はハロゲン原子、Ｃ$_{1-20}$アルキル基、Ｃ$_{1-20}$アルコキシ基、Ｃ$_{7-20}$アルキルアリール基、Ｃ$_{7-20}$アリールアルキル基、Ｃ$_{6-20}$アリール基、Ｃ$_{6-20}$アリールオキシ基、Ｃ$_{7-20}$アルキルアリールオキシ基、Ｃ$_{7-20}$アリールアルキルオキシ基、式－ＮＲ’$_{2}$のアミド基、式－ＰＲ’$_{2}$のホスフィド基、式－ＳＲ’のチオラート基、式－Ｓｉ（Ｒ^{a}）$_{3}$のシリル基、及び式－Ｇｅ（Ｒ^{a}）$_{3}$のゲルマニル基からなる群から選択される１つ以上の置換基によってさらに置換されており；

ここで、各Ｒ’は、独立して、水素、Ｃ$_{1-20}$アルキル基、及びＣ$_{6-20}$アリール基

からなる群から選択され；
ここで、各R^aは、独立して、水素、C_{1-8}アルキル基、C_{1-8}アルコキシ基、C_{6-20}アリールオキシ基及びC_{6-20}アリール基からなる群から選択される、
上記有機金属錯体。
【請求項３】
請求項２に記載の有機金属錯体であって、式ＩＩＩ：
【化３】



(III)

で表され、
式中、R^7、R^8、R^9及びR^{10}は、各々独立して、
ハロゲン；
水素；
C_{1-30}ヒドロカルビル基（このヒドロカルビル基は、非置換であるか、又はハロゲン原子、C_{1-20}アルキル基、C_{1-20}アルコキシ基、C_{7-20}アルキルアリール基、C_{7-20}アリールアルキル基、C_{6-20}アリール基、C_{6-20}アリールオキシ基、C_{7-20}アルキルアリールオキシ基、及びC_{7-20}アリールアルキルオキシ基からなる群から選択される１つ以上の置換基によってさらに置換されている）；
ヘテロ原子含有C_{1-30}ヒドロカルビル基（このヘテロ原子含有ヒドロカルビル基は、非置換であるか、又はハロゲン原子、C_{1-20}アルキル基、C_{1-20}アルコキシ基、C_{7-20}アルキルアリール基、C_{7-20}アリールアルキル基、C_{6-20}アリール基、C_{6-20}アリールオキシ基、C_{7-20}アルキルアリールオキシ基、及びC_{7-20}アリールアルキルオキシ基からなる群から選択される１つ以上の置換基によってさらに置換されている）；
オキシ基、－ＯＲ’；
アミド基、－ＮＲ’$_2$；
ホスフィド基、－ＰＲ’$_2$；
チオラート基、－ＳＲ’；
式－Ｓｉ（R^a）$_3$のシリル基；
式－Ｇｅ（R^a）$_3$のゲルマニル基；
からなる群から選択され；
ここで、R^7、R^8、R^9及びR^{10}の２つの隣接する基は、任意に結合して環状ヒドロカルビル基又は環状ヘテロ原子含有ヒドロカルビル基を形成してもよく、環状ヒドロカルビル基又は環状ヘテロ原子含有ヒドロカルビル基は、非置換であるか、又はハロゲン原子、C_{1-20}アルキル基、C_{1-20}アルコキシ基、C_{7-20}アルキルアリール基、C

７－２０アリールアルキル基、Ｃ６－２０アリール基、Ｃ６－２０アリールオキシ基、Ｃ７－２０アルキルアリールオキシ基、Ｃ７－２０アリールアルキルオキシ基、式－ＮＲ’$_2$のアミド基、式－ＰＲ’$_2$のホスフィド基、式－ＳＲ’のチオラート基、式－Ｓｉ（Ｒ^a）$_3$のシリル基、及び式－Ｇｅ（Ｒ^a）$_3$のゲルマニル基からなる群から選択される１つ以上の置換基によってさらに置換されており；

ここで、各Ｒ’は、独立して、水素、Ｃ$_{1-20}$アルキル基、及びＣ６－２０アリール基からなる群から選択され；

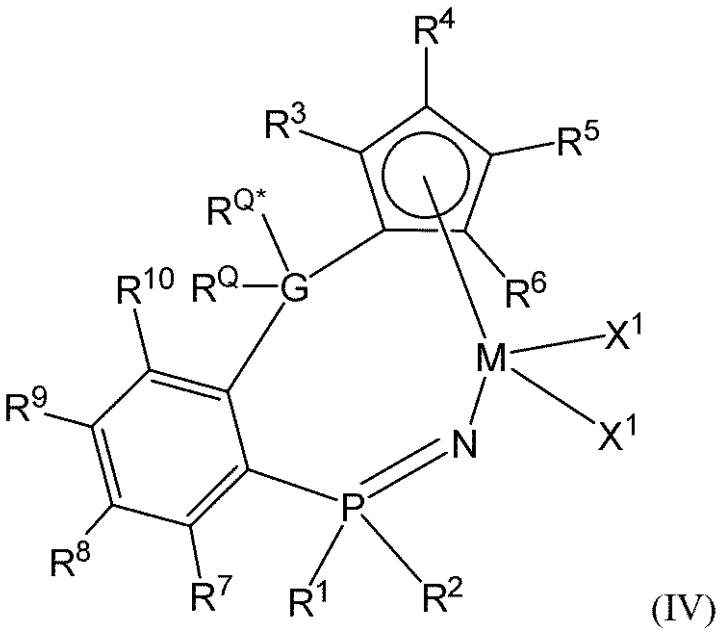
ここで、各Ｒ^{a}は、独立して、水素、Ｃ１－８アルキル基、Ｃ１－８アルコキシ基、Ｃ６－２０アリールオキシ基及びＣ６－２０アリール基からなる群から選択される、

上記有機金属錯体。

【請求項４】

請求項２に記載の有機金属錯体であって、式ＩＶ：

【化４】



(IV)

で表され、

式中、Ｇは、Ｃ又はＳｉであり；

式中、Ｒ^{Q}及びＲ^{Q*}は、各々独立して、

ハロゲン；

水素；

Ｃ$_{1-30}$ヒドロカルビル基（このヒドロカルビル基は、非置換であるか、又はハロゲン原子、Ｃ１－２０アルキル基、Ｃ１－２０アルコキシ基、Ｃ７－２０アルキルアリール基、Ｃ７－２０アリールアルキル基、Ｃ６－２０アリール基、Ｃ６－２０アリールオキシ基、Ｃ７－２０アルキルアリールオキシ基、及びＣ７－２０アリールアルキルオキシ基からなる群から選択される１つ以上の置換基によってさらに置換されている）；

ヘテロ原子含有Ｃ$_{1-30}$ヒドロカルビル基（このヘテロ原子含有ヒドロカルビル基は、非置換であるか、又はハロゲン原子、Ｃ１－２０アルキル基、Ｃ１－２０アルコキシ基、Ｃ７－２０アルキルアリール基、Ｃ７－２０アリールアルキル基、Ｃ６－２０アリール基、Ｃ６－２０アリールオキシ基、Ｃ７－２０アルキルアリールオキシ基、及びＣ７－２０アリールアルキルオキシ基からなる群から選択される１つ以上の置換基によってさらに置換されている）；

ここで、Ｒ^{Q}及びＲ^{Q*}の基は、任意に結合して環状ヒドロカルビル基又は環状ヘテロ原子含有ヒドロカルビル基を形成してもよく、環状ヒドロカルビル基又は環状ヘテロ原子

含有ヒドロカルビル基は、非置換であるか、又はハロゲン原子、Ｃ１－２０アルキル基、Ｃ１－２０アルコキシ基、Ｃ７－２０アルキルアリール基、Ｃ７－２０アリールアルキル基、Ｃ６－２０アリール基、Ｃ６－２０アリールオキシ基、Ｃ７－２０アルキルアリールオキシ基、Ｃ７－２０アリールアルキルオキシ基、式－ＮＲ’２のアミド基、式－ＰＲ’２のホスフィド基、式－ＳＲ’のチオラート基、式－Ｓｉ（Ｒａ）３のシリル基、及び式－Ｇｅ（Ｒａ）３のゲルマニル基からなる群から選択される１つ以上の置換基によってさらに置換されており；

式中、Ｒ７、Ｒ８、Ｒ９及びＲ１０は、各々独立して、

ハロゲン；

水素；

Ｃ１－３０ヒドロカルビル基（このヒドロカルビル基は、非置換であるか、又はハロゲン原子、Ｃ１－２０アルキル基、Ｃ１－２０アルコキシ基、Ｃ７－２０アルキルアリール基、Ｃ７－２０アリールアルキル基、Ｃ６－２０アリール基、Ｃ６－２０アリールオキシ基、Ｃ７－２０アルキルアリールオキシ基、及びＣ７－２０アリールアルキルオキシ基からなる群から選択される１つ以上の置換基によってさらに置換されている）；

ヘテロ原子含有Ｃ１－３０ヒドロカルビル基（このヘテロ原子含有ヒドロカルビル基は、非置換であるか、又はハロゲン原子、Ｃ１－２０アルキル基、Ｃ１－２０アルコキシ基、Ｃ７－２０アルキルアリール基、Ｃ７－２０アリールアルキル基、Ｃ６－２０アリール基、Ｃ６－２０アリールオキシ基、Ｃ７－２０アルキルアリールオキシ基、及びＣ７－２０アリールアルキルオキシ基からなる群から選択される１つ以上の置換基によってさらに置換されている）；

オキシ基、－ＯＲ’；

アミド基、－ＮＲ’２；

ホスフィド基、－ＰＲ’２；

チオラート基、－ＳＲ’；

式－Ｓｉ（Ｒａ）３のシリル基；

式－Ｇｅ（Ｒａ）３のゲルマニル基；

からなる群から選択され；

ここで、Ｒ７、Ｒ８、Ｒ９及びＲ１０の２つの隣接する基は、任意に結合して環状ヒドロカルビル基又は環状ヘテロ原子含有ヒドロカルビル基を形成してもよく、環状ヒドロカルビル基又は環状ヘテロ原子含有ヒドロカルビル基は、非置換であるか、又はハロゲン原子、Ｃ１－２０アルキル基、Ｃ１－２０アルコキシ基、Ｃ７－２０アルキルアリール基、Ｃ７－２０アリールアルキル基、Ｃ６－２０アリール基、Ｃ６－２０アリールオキシ基、Ｃ７－２０アルキルアリールオキシ基、Ｃ７－２０アリールアルキルオキシ基、式－ＮＲ’２のアミド基、式－ＰＲ’２のホスフィド基、式－ＳＲ’のチオラート基、式－Ｓｉ（Ｒａ）３のシリル基、及び式－Ｇｅ（Ｒａ）３のゲルマニル基からなる群から選択される１つ以上の置換基によってさらに置換されており；

ここで、各Ｒ’は、独立して、水素、Ｃ１－２０アルキル基、及びＣ６－２０アリール基からなる群から選択され；

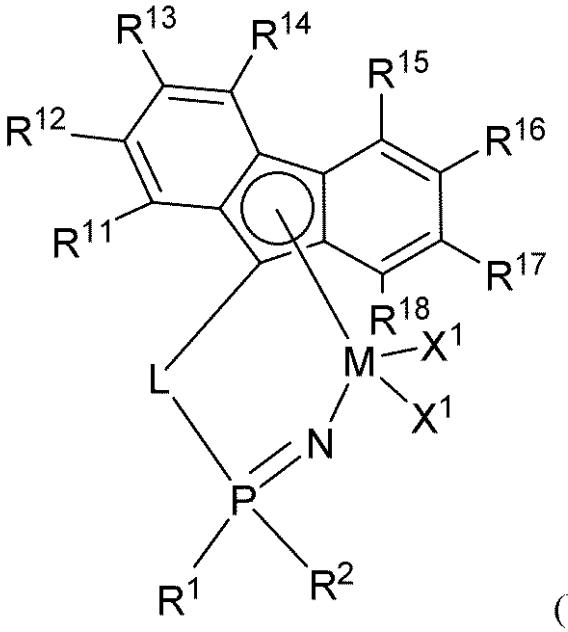
ここで、各Ｒａは、独立して、水素、Ｃ１－８アルキル基、Ｃ１－８アルコキシ基、Ｃ６－２０アリールオキシ基及びＣ６－２０アリール基からなる群から選択される、

上記有機金属錯体。

【請求項５】

請求項１に記載の有機金属錯体であって、式Ｖ：

【化５】



(V)

で表され、

式中、R^{11}、R^{12}、R^{13}、R^{14}、R^{15}、R^{16}、R^{17}、R^{18}は、各々独立して、

ハロゲン；

水素；

C_{1-30}ヒドロカルビル基（このヒドロカルビル基は、非置換であるか、又はハロゲン原子、C_{1-20}アルキル基、C_{1-20}アルコキシ基、C_{7-20}アルキルアリール基、C_{7-20}アリールアルキル基、C_{6-20}アリール基、C_{6-20}アリールオキシ基、C_{7-20}アルキルアリールオキシ基、及びC_{7-20}アリールアルキルオキシ基からなる群から選択される１つ以上の置換基によってさらに置換されている）；

ヘテロ原子含有C_{1-30}ヒドロカルビル基（このヘテロ原子含有ヒドロカルビル基は、非置換であるか、又はハロゲン原子、C_{1-20}アルキル基、C_{1-20}アルコキシ基、C_{7-20}アルキルアリール基、C_{7-20}アリールアルキル基、C_{6-20}アリール基、C_{6-20}アリールオキシ基、C_{7-20}アルキルアリールオキシ基、及びC_{7-20}アリールアルキルオキシ基からなる群から選択される１つ以上の置換基によってさらに置換されている）；

オキシ基、－ＯＲ’；

アミド基、－ＮＲ’$_2$；

ホスフィド基、－ＰＲ’$_2$；

チオラート基、－ＳＲ’；

式－Ｓｉ（R^a）$_3$のシリル基；

式－Ｇｅ（R^a）$_3$のゲルマニル基；

からなる群から選択され；

ここで、R^{11}、R^{12}、R^{13}、R^{14}、R^{15}、R^{16}、R^{17}、R^{18}の２つの隣接する基は、任意に結合して環状ヒドロカルビル基又は環状ヘテロ原子含有ヒドロカルビル基を形成してもよく、環状ヒドロカルビル基又は環状ヘテロ原子含有ヒドロカルビル基は、非置換であるか、又はハロゲン原子、C_{1-20}アルキル基、C_{1-20}アルコキシ基、C_{7-20}アルキルアリール基、C_{7-20}アリールアルキル基、C_{6-20}アリール基、C_{6-20}アリールオキシ基、C_{7-20}アルキルアリールオキシ基、C_{7-20}アリール

アルキルオキシ基、式－ＮＲ’$_2$のアミド基、式－ＰＲ’$_2$のホスフィド基、式－ＳＲ’のチオラート基、式－Ｓｉ（Ｒ^a）$_3$のシリル基、及び式－Ｇｅ（Ｒ^a）$_3$のゲルマニル基からなる群から選択される１つ以上の置換基によってさらに置換されており；

ここで、各Ｒ’は、独立して、水素、Ｃ$_{1-20}$アルキル基、及びＣ$_{6-20}$アリール基からなる群から選択され；

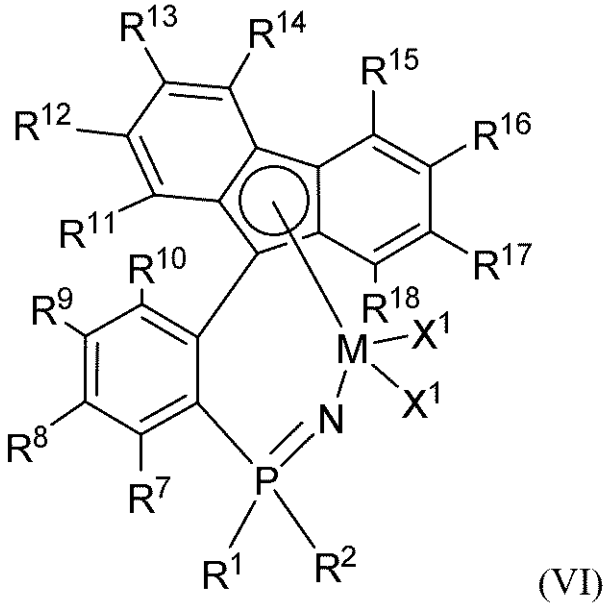
ここで、各Ｒ^{a}は、独立して、水素、Ｃ$_{1-8}$アルキル基、Ｃ$_{1-8}$アルコキシ基、Ｃ$_{6-20}$アリールオキシ基及びＣ$_{6-20}$アリール基からなる群から選択される、

上記有機金属錯体。

【請求項６】

請求項５に記載の有機金属錯体であって、式ＶＩ：

【化６】



(VI)

で表され、

式中、Ｒ^7、Ｒ^8、Ｒ^{9}及びＲ^{10}は、各々独立して、

ハロゲン；

水素；

Ｃ$_{1-30}$ヒドロカルビル基（このヒドロカルビル基は、非置換であるか、又はハロゲン原子、Ｃ$_{1-20}$アルキル基、Ｃ$_{1-20}$アルコキシ基、Ｃ$_{7-20}$アルキルアリール基、Ｃ$_{7-20}$アリールアルキル基、Ｃ$_{6-20}$アリール基、Ｃ$_{6-20}$アリールオキシ基、Ｃ$_{7-20}$アルキルアリールオキシ基、及びＣ$_{7-20}$アリールアルキルオキシ基からなる群から選択される１つ以上の置換基によってさらに置換されている）；

ヘテロ原子含有Ｃ$_{1-30}$ヒドロカルビル基（このヘテロ原子含有ヒドロカルビル基は、非置換であるか、又はハロゲン原子、Ｃ$_{1-20}$アルキル基、Ｃ$_{1-20}$アルコキシ基、Ｃ$_{7-20}$アルキルアリール基、Ｃ$_{7-20}$アリールアルキル基、Ｃ$_{6-20}$アリール基、Ｃ$_{6-20}$アリールオキシ基、Ｃ$_{7-20}$アルキルアリールオキシ基、及びＣ$_{7-20}$アリールアルキルオキシ基からなる群から選択される１つ以上の置換基によってさらに置換されている）；

オキシ基、－ＯＲ’；

アミド基、－ＮＲ’$_2$；

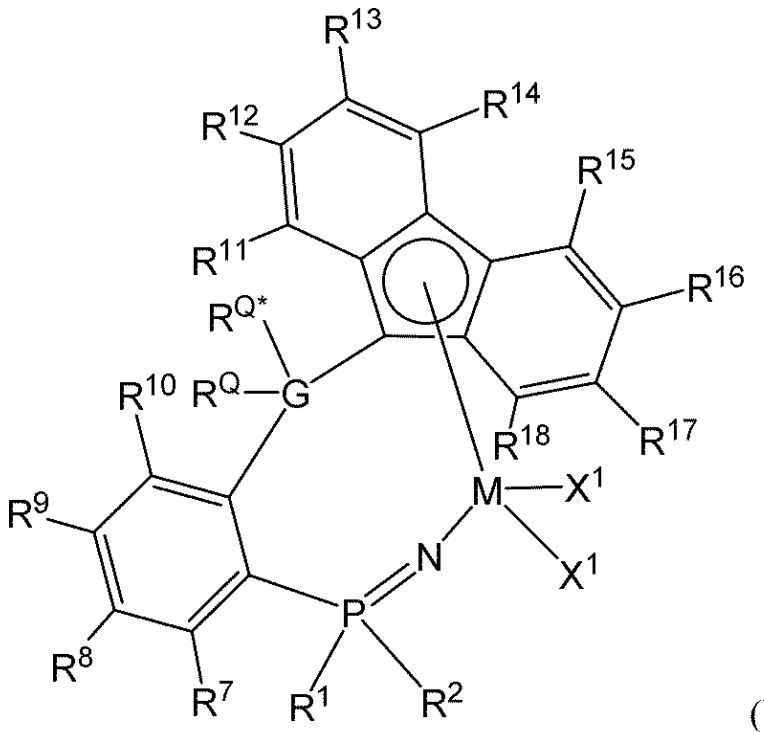
ホスフィド基、－ＰＲ’$_2$；

チオラート基、－ＳＲ’；

式－Ｓｉ（Ｒ^a）$_3$のシリル基；

式－Ｇｅ（Ｒ^{a}）$_{3}$のゲルマニル基；
からなる群から選択され；
ここで、Ｒ^{7}、Ｒ^{8}、Ｒ^{9}及びＲ^{10}の２つの隣接する基は、任意に結合して環状ヒドロカルビル基又は環状ヘテロ原子含有ヒドロカルビル基を形成してもよく、環状ヒドロカルビル基又は環状ヘテロ原子含有ヒドロカルビル基は、非置換であるか、又はハロゲン原子、Ｃ$_{1-20}$アルキル基、Ｃ$_{1-20}$アルコキシ基、Ｃ$_{7-20}$アルキルアリール基、Ｃ$_{7-20}$アリールアルキル基、Ｃ$_{6-20}$アリール基、Ｃ$_{6-20}$アリールオキシ基、Ｃ$_{7-20}$アルキルアリールオキシ基、Ｃ$_{7-20}$アリールアルキルオキシ基、式－ＮＲ’$_{2}$のアミド基、式－ＰＲ’$_{2}$のホスフィド基、式－ＳＲ’のチオラート基、式－Ｓｉ（Ｒ^{a}）$_{3}$のシリル基、及び式－Ｇｅ（Ｒ^{a}）$_{3}$のゲルマニル基からなる群から選択される１つ以上の置換基によってさらに置換されており；
ここで、各Ｒ’は、独立して、水素、Ｃ$_{1-20}$アルキル基、及びＣ$_{6-20}$アリール基からなる群から選択され；
ここで、各Ｒ^{a}は、独立して、水素、Ｃ$_{1-8}$アルキル基、Ｃ$_{1-8}$アルコキシ基、Ｃ$_{6-20}$アリールオキシ基及びＣ$_{6-20}$アリール基からなる群から選択される、
上記有機金属錯体。
【請求項７】
Ｍが Ｔｉである、請求項６に記載の有機金属錯体。
【請求項８】
Ｒ^{7}、Ｒ^{8}、Ｒ^{9}及びＲ^{10}が、各々水素である、請求項６に記載の有機金属錯体。
【請求項９】
Ｒ^{1}及びＲ^{2}が、各々独立して、非置換のＣ$_{1-30}$ヒドロカルビル基である、請求項６に記載の有機金属錯体。
【請求項１０】
Ｒ^{1}及びＲ^{2}が、各々独立して、イソプロピル、シクロヘキシル及びｔｅｒｔ－ブチルからなる群から選択される、請求項９に記載の有機金属錯体。
【請求項１１】
Ｒ^{12}及びＲ^{17}が、各々独立して、非置換のＣ$_{1-30}$ヒドロカルビル基であり、Ｒ^{11}、Ｒ^{13}、Ｒ^{14}、Ｒ^{15}、Ｒ^{16}及びＲ^{18}が、各々水素である、請求項６に記載の有機金属錯体。
【請求項１２】
Ｒ^{12}及びＲ^{17}が、各々ｔｅｒｔ－ブチル基である、請求項１１に記載の有機金属錯体。
【請求項１３】
各Ｘ^{1}が、独立して、Ｃ$_{1-6}$アルキル基、Ｃ$_{7-10}$アリールアルキル基、及びハロゲンからなる群から選択される、請求項６に記載の有機金属錯体。
【請求項１４】
各Ｘ^{1}が、独立して、メチル基及びＣｌからなる群から選択される、請求項１３に記載の有機金属錯体。
【請求項１５】
請求項５に記載の有機金属錯体であって、式ＶＩＩ：

【化７】



(VII)

で表され、

式中、Ｇは、Ｃ又はＳｉであり；

式中、R^{Q}及びR^{Q*}は、各々独立して、

ハロゲン；

水素；

C_{1-30}ヒドロカルビル基（このヒドロカルビル基は、非置換であるか、又はハロゲン原子、C_{1-20}アルキル基、C_{1-20}アルコキシ基、C_{7-20}アルキルアリール基、C_{7-20}アリールアルキル基、C_{6-20}アリール基、C_{6-20}アリールオキシ基、C_{7-20}アルキルアリールオキシ基、及びC_{7-20}アリールアルキルオキシ基からなる群から選択される１つ以上の置換基によってさらに置換されている）；

ヘテロ原子含有C_{1-30}ヒドロカルビル基（このヘテロ原子含有ヒドロカルビル基は、非置換であるか、又はハロゲン原子、C_{1-20}アルキル基、C_{1-20}アルコキシ基、C_{7-20}アルキルアリール基、C_{7-20}アリールアルキル基、C_{6-20}アリール基、C_{6-20}アリールオキシ基、C_{7-20}アルキルアリールオキシ基、及びC_{7-20}アリールアルキルオキシ基からなる群から選択される１つ以上の置換基によってさらに置換されている）；

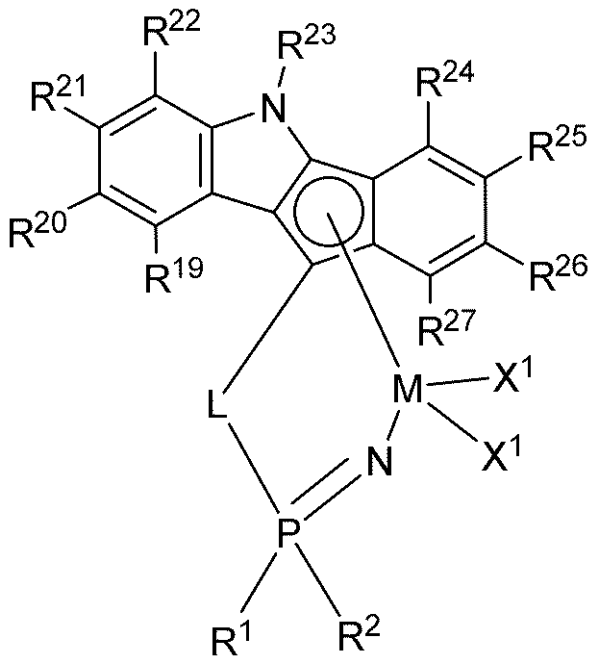
ここで、R^{Q}及びR^{Q*}の基は、任意に結合して環状ヒドロカルビル基又は環状ヘテロ原子含有ヒドロカルビル基を形成してもよく、環状ヒドロカルビル基又は環状ヘテロ原子含有ヒドロカルビル基は、非置換であるか、又はハロゲン原子、C_{1-20}アルキル基、C_{1-20}アルコキシ基、C_{7-20}アルキルアリール基、C_{7-20}アリールアルキル基、C_{6-20}アリール基、C_{6-20}アリールオキシ基、C_{7-20}アルキルアリールオキシ基、C_{7-20}アリールアルキルオキシ基、式－NR'_2のアミド基、式－PR'_2のホスフィド基、式－SR'のチオラート基、式－$Si(R^a)_3$のシリル基、及び式－$Ge(R^a)_3$のゲルマニル基からなる群から選択される１つ以上の置換基によってさらに置換されており；

式中、R^{7}、R^{8}、R^{9}及びR^{10}は、各々独立して、

ハロゲン；

水素；
C_{1-30}ヒドロカルビル基（このヒドロカルビル基は、非置換であるか、又はハロゲン原子、C_{1-20}アルキル基、C_{1-20}アルコキシ基、C_{7-20}アルキルアリール基、C_{7-20}アリールアルキル基、C_{6-20}アリール基、C_{6-20}アリールオキシ基、C_{7-20}アルキルアリールオキシ基、及びC_{7-20}アリールアルキルオキシ基からなる群から選択される１つ以上の置換基によってさらに置換されている）；
ヘテロ原子含有C_{1-30}ヒドロカルビル基（このヘテロ原子含有ヒドロカルビル基は、非置換であるか、又はハロゲン原子、C_{1-20}アルキル基、C_{1-20}アルコキシ基、C_{7-20}アルキルアリール基、C_{7-20}アリールアルキル基、C_{6-20}アリール基、C_{6-20}アリールオキシ基、C_{7-20}アルキルアリールオキシ基、及びC_{7-20}アリールアルキルオキシ基からなる群から選択される１つ以上の置換基によってさらに置換されている）；
オキシ基、－ＯＲ’；
アミド基、$-NR'_2$；
ホスフィド基、$-PR'_2$；
チオラート基、－ＳＲ’；
式－Ｓｉ（R^a）$_3$のシリル基；
式－Ｇｅ（R^a）$_3$のゲルマニル基；
からなる群から選択され；
ここで、R^7、R^8、R^9及びR^{10}の２つの隣接する基は、任意に結合して環状ヒドロカルビル基又は環状ヘテロ原子含有ヒドロカルビル基を形成してもよく、環状ヒドロカルビル基又は環状ヘテロ原子含有ヒドロカルビル基は、非置換であるか、又はハロゲン原子、C_{1-20}アルキル基、C_{1-20}アルコキシ基、C_{7-20}アルキルアリール基、C_{7-20}アリールアルキル基、C_{6-20}アリール基、C_{6-20}アリールオキシ基、C_{7-20}アルキルアリールオキシ基、C_{7-20}アリールアルキルオキシ基、式$-NR'_2$のアミド基、式$-PR'_2$のホスフィド基、式－ＳＲ’のチオラート基、式－Ｓｉ（R^a）$_3$のシリル基、及び式－Ｇｅ（R^a）$_3$のゲルマニル基からなる群から選択される１つ以上の置換基によってさらに置換されており；
ここで、各Ｒ’は、独立して、水素、C_{1-20}アルキル基、及びC_{6-20}アリール基からなる群から選択され；
ここで、各R^aは、独立して、水素、C_{1-8}アルキル基、C_{1-8}アルコキシ基、C_{6-20}アリールオキシ基及びC_{6-20}アリール基からなる群から選択される、
上記有機金属錯体。
【請求項１６】
ＭがＴｉである、請求項１５に記載の有機金属錯体。
【請求項１７】
R^7、R^8、R^9及びR^{10}が、各々水素である、請求項１５に記載の有機金属錯体。
【請求項１８】
R^1及びR^2が、各々独立して、非置換のC_{1-30}ヒドロカルビル基である、請求項１５に記載の有機金属錯体。
【請求項１９】
R^1及びR^2が、各々独立して、イソプロピル、シクロヘキシル及びｔｅｒｔ－ブチルからなる群から選択される、請求項１８に記載の有機金属錯体。
【請求項２０】
R^{12}及びR^{17}が、各々独立して、非置換のC_{1-30}ヒドロカルビル基であり、R^{11}、R^{13}、R^{14}、R^{15}、R^{16}及びR^{18}が、各々水素である、請求項１５に記載の有機金属錯体。
【請求項２１】
R^{12}及びR^{17}が、各々ｔｅｒｔ－ブチル基である、請求項２０に記載の有機金属錯体。

【請求項２２】
Ｇが炭素である、請求項１５に記載の有機金属錯体。
【請求項２３】
R^{Q}及びR^{Q*}が、各々独立して、水素、Ｃ１－２０アルキル基及びＣ６－２０アリール基からなる群から選択される、請求項２２に記載の有機金属錯体。
【請求項２４】
R^{Q}が水素であり、R^{Q*}がＣ１－８アルキル基である、請求項２２に記載の有機金属錯体。
【請求項２５】
各X^{1}が、独立して、Ｃ１－６アルキル基、Ｃ７－１０アリールアルキル基、及びハロゲンからなる群から選択される、請求項１５に記載の有機金属錯体。
【請求項２６】
各X^{1}が、独立して、メチル基及びＣｌからなる群から選択される、請求項２５に記載の有機金属錯体。
【請求項２７】
請求項１に記載の有機金属錯体であって、式ＶＩＩＩ：
【化８】

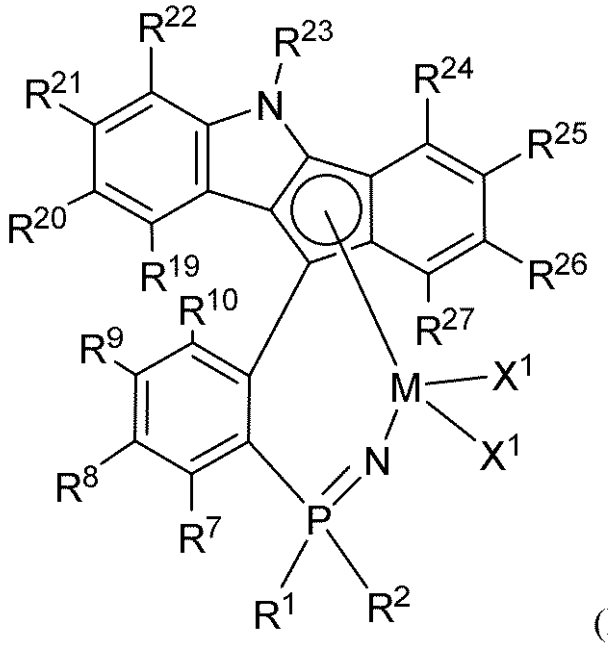


(VIII)

で表され、
式中、R^{23}は、
水素；
Ｃ１－３０ヒドロカルビル基（このヒドロカルビル基は、非置換であるか、又はハロゲン原子、Ｃ１－２０アルキル基、Ｃ１－２０アルコキシ基、Ｃ７－２０アルキルアリール基、Ｃ７－２０アリールアルキル基、Ｃ６－２０アリール基、Ｃ６－２０アリールオキシ基、Ｃ７－２０アルキルアリールオキシ基、及びＣ７－２０アリールアルキルオキシ基からなる群から選択される１つ以上の置換基によってさらに置換されている）；
ヘテロ原子含有Ｃ１－３０ヒドロカルビル基（このヘテロ原子含有ヒドロカルビル基は、非置換であるか、又はハロゲン原子、Ｃ１－２０アルキル基、Ｃ１－２０アルコキシ基、Ｃ７－２０アルキルアリール基、Ｃ７－２０アリールアルキル基、Ｃ６－２０アリール基、Ｃ６－２０アリールオキシ基、Ｃ７－２０アルキルアリールオキシ基、及びＣ７－２０アリ

ールアルキルオキシ基からなる群から選択される１つ以上の置換基によってさらに置換されている）；
からなる群から選択され；
式中、R^{19}、R^{20}、R^{21}、R^{22}、R^{24}、R^{25}、R^{26}、及びR^{27}は、各々独立して、
ハロゲン；
水素；
C_{1-30}ヒドロカルビル基（このヒドロカルビル基は、非置換であるか、又はハロゲン原子、C_{1-20}アルキル基、C_{1-20}アルコキシ基、C_{7-20}アルキルアリール基、C_{7-20}アリールアルキル基、C_{6-20}アリール基、C_{6-20}アリールオキシ基、C_{7-20}アルキルアリールオキシ基、及びC_{7-20}アリールアルキルオキシ基からなる群から選択される１つ以上の置換基によってさらに置換されている）；
ヘテロ原子含有C_{1-30}ヒドロカルビル基（このヘテロ原子含有ヒドロカルビル基は、非置換であるか、又はハロゲン原子、C_{1-20}アルキル基、C_{1-20}アルコキシ基、C_{7-20}アルキルアリール基、C_{7-20}アリールアルキル基、C_{6-20}アリール基、C_{6-20}アリールオキシ基、C_{7-20}アルキルアリールオキシ基、及びC_{7-20}アリールアルキルオキシ基からなる群から選択される１つ以上の置換基によってさらに置換されている）；
オキシ基、－ＯＲ’；
アミド基、－ＮＲ’$_2$；
ホスフィド基、－ＰＲ’$_2$；
チオラート基、－ＳＲ’；
式－Ｓｉ（R^a）$_3$のシリル基；
式－Ｇｅ（R^a）$_3$のゲルマニル基；
からなる群から選択され；
ここで、R^{19}、R^{20}、R^{21}、R^{22}、R^{24}、R^{25}、R^{26}、及びR^{27}の２つの隣接する基は、任意に結合して環状ヒドロカルビル基又は環状ヘテロ原子含有ヒドロカルビル基を形成してもよく、環状ヒドロカルビル基又は環状ヘテロ原子含有ヒドロカルビル基は、非置換であるか、又はハロゲン原子、C_{1-20}アルキル基、C_{1-20}アルコキシ基、C_{7-20}アルキルアリール基、C_{7-20}アリールアルキル基、C_{6-20}アリール基、C_{6-20}アリールオキシ基、C_{7-20}アルキルアリールオキシ基、C_{7-20}アリールアルキルオキシ基、式－ＮＲ’$_2$のアミド基、式－ＰＲ’$_2$のホスフィド基、式－ＳＲ’のチオラート基、式－Ｓｉ（R^a）$_3$のシリル基、及び式－Ｇｅ（R^a）$_3$のゲルマニル基からなる群から選択される１つ以上の置換基によってさらに置換されており；
ここで、各Ｒ’は、独立して、水素、C_{1-20}アルキル基、及びC_{6-20}アリール基からなる群から選択され；
ここで、各R^aは、独立して、水素、C_{1-8}アルキル基、C_{1-8}アルコキシ基、C_{6-20}アリールオキシ基及びC_{6-20}アリール基からなる群から選択される、
上記有機金属錯体。
【請求項２８】
請求項２７に記載の有機金属錯体であって、式ＩＸ：

【化９】

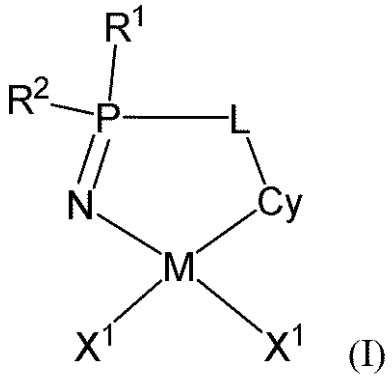


(IX)

で表され、
式中、Ｒ^{7}、Ｒ^{8}、Ｒ^{9}及びＲ^{10}は、各々独立して、
ハロゲン；
水素；
Ｃ$_{1-30}$ヒドロカルビル基（このヒドロカルビル基は、非置換であるか、又はハロゲン原子、Ｃ$_{1-20}$アルキル基、Ｃ$_{1-20}$アルコキシ基、Ｃ$_{7-20}$アルキルアリール基、Ｃ$_{7-20}$アリールアルキル基、Ｃ$_{6-20}$アリール基、Ｃ$_{6-20}$アリールオキシ基、Ｃ$_{7-20}$アルキルアリールオキシ基、及びＣ$_{7-20}$アリールアルキルオキシ基からなる群から選択される１つ以上の置換基によってさらに置換されている）；
ヘテロ原子含有Ｃ$_{1-30}$ヒドロカルビル基（このヘテロ原子含有ヒドロカルビル基は、非置換であるか、又はハロゲン原子、Ｃ$_{1-20}$アルキル基、Ｃ$_{1-20}$アルコキシ基、Ｃ$_{7-20}$アルキルアリール基、Ｃ$_{7-20}$アリールアルキル基、Ｃ$_{6-20}$アリール基、Ｃ$_{6-20}$アリールオキシ基、Ｃ$_{7-20}$アルキルアリールオキシ基、及びＣ$_{7-20}$アリールアルキルオキシ基からなる群から選択される１つ以上の置換基によってさらに置換されている）；
オキシ基、－ＯＲ’；
アミド基、－ＮＲ’$_2$；
ホスフィド基、－ＰＲ’$_2$；
チオラート基、－ＳＲ’；
式－Ｓｉ（Ｒ^{a}）$_3$のシリル基；
式－Ｇｅ（Ｒ^{a}）$_3$のゲルマニル基；
からなる群から選択され；
ここで、Ｒ^{7}、Ｒ^{8}、Ｒ^{9}及びＲ^{10}の２つの隣接する基は、任意に結合して環状ヒドロカルビル基又は環状ヘテロ原子含有ヒドロカルビル基を形成してもよく、環状ヒドロカルビル基又は環状ヘテロ原子含有ヒドロカルビル基は、非置換であるか、又はハロゲン原子、Ｃ$_{1-20}$アルキル基、Ｃ$_{1-20}$アルコキシ基、Ｃ$_{7-20}$アルキルアリール基、Ｃ$_{7-20}$アリールアルキル基、Ｃ$_{6-20}$アリール基、Ｃ$_{6-20}$アリールオキシ基、Ｃ$_{7-20}$アルキルアリールオキシ基、Ｃ$_{7-20}$アリールアルキルオキシ基、式－ＮＲ’$_2$のアミド基、式－ＰＲ’$_2$のホスフィド基、式－ＳＲ’のチオラート基、式－Ｓｉ（Ｒ^{a}）$_3$

のシリル基、及び式－Ｇｅ（Ｒ^{a}）$_{3}$のゲルマニル基からなる群から選択される１つ以上の置換基によってさらに置換されており；
ここで、各Ｒ’は、独立して、水素、Ｃ$_{1-20}$アルキル基、及びＣ$_{6-20}$アリール基からなる群から選択され；
ここで、各Ｒ^{a}は、独立して、水素、Ｃ$_{1-8}$アルキル基、Ｃ$_{1-8}$アルコキシ基、Ｃ$_{6-20}$アリールオキシ基及びＣ$_{6-20}$アリール基からなる群から選択される、
上記有機金属錯体。
【請求項２９】
ＭがＴｉである、請求項２８に記載の有機金属錯体。
【請求項３０】
Ｒ^{7}、Ｒ^{8}、Ｒ^{9}及びＲ^{10}が、各々水素である、請求項２８に記載の有機金属錯体。
【請求項３１】
Ｒ^{1}及びＲ^{2}が、各々独立して、非置換のＣ$_{1-30}$ヒドロカルビル基である、請求項２８に記載の有機金属錯体。
【請求項３２】
Ｒ^{1}及びＲ^{2}が、各々独立して、イソプロピル、シクロヘキシル及びｔｅｒｔ－ブチルからなる群から選択される、請求項３１に記載の有機金属錯体。
【請求項３３】
Ｒ^{23}が、非置換のＣ$_{1-30}$ヒドロカルビル基である、請求項２８に記載の有機金属錯体。
【請求項３４】
Ｒ^{23}が、Ｃ$_{1-8}$アルキル基である、請求項３３に記載の有機金属錯体。
【請求項３５】
Ｒ^{20}が、非置換のＣ$_{1-30}$ヒドロカルビル基である、請求項２８に記載の有機金属錯体。
【請求項３６】
Ｒ^{20}が、Ｃ$_{1-8}$アルキル基である、請求項３５に記載の有機金属錯体。
【請求項３７】
Ｒ^{20}が、非置換のＣ$_{1-30}$ヒドロカルビル基であり、Ｒ^{19}、Ｒ^{21}、Ｒ^{22}、Ｒ^{24}、Ｒ^{25}、Ｒ^{26}、及びＲ^{27}が、各々水素である、請求項２８に記載の有機金属錯体。
【請求項３８】
Ｒ^{20}が、Ｃ$_{1-8}$アルキル基である、請求項３７に記載の有機金属錯体。
【請求項３９】
各Ｘ^{1}が、独立して、Ｃ$_{1-6}$アルキル基、Ｃ$_{7-10}$アリールアルキル基、及びハロゲンからなる群から選択される、請求項２８に記載の有機金属錯体。
【請求項４０】
各Ｘ^{1}が、独立して、メチル基及びＣｌからなる群から選択される、請求項３９に記載の有機金属錯体。
【請求項４１】
オレフィン重合触媒系であって、
ｉ）有機金属錯体であって、式Ｉ：

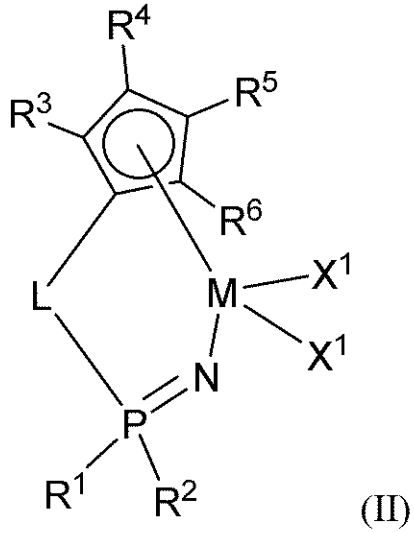
【化１０】



(I)

で表され、
式中、
Ｍは、Ｔｉ、Ｚｒ又はＨｆであり；
Ｒ^{1}及びＲ^{2}は、各々独立して、水素及びＲ^{X}からなる群から選択されるか；又はＲ^{1}及びＲ^{2}は、それらが結合しているＰ原子と一緒になって、非置換であるか、又はハロゲン原子、Ｃ$_{1-20}$アルキル基、Ｃ$_{1-20}$アルコキシ基、Ｃ$_{7-20}$アルキルアリール基、Ｃ$_{7-20}$アリールアルキル基、Ｃ$_{6-20}$アリール基、Ｃ$_{6-20}$アリールオキシ基、Ｃ$_{7-20}$アルキルアリールオキシ基、及びＣ$_{7-20}$アリールアルキルオキシ基からなる群から選択される１つ以上の置換基によってさらに置換されている３－１０員複素環式基を形成し；
各Ｒ^{X}は、独立して、ハロゲン原子；Ｃ$_{1-30}$ヒドロカルビル基（このヒドロカルビル基は、非置換であるか、又は１つ以上のハロゲン原子、Ｃ$_{1-20}$アルキル基、Ｃ$_{1-20}$アルコキシ基、Ｃ$_{7-20}$アルキルアリール基、Ｃ$_{7-20}$アリールアルキル基、Ｃ$_{6-20}$アリール基、Ｃ$_{6-20}$アリールオキシ基、Ｃ$_{7-20}$アルキルアリールオキシ基、及び／又はＣ$_{7-20}$アリールアルキルオキシ基によってさらに置換されている）；式－ＮＲ’$_{2}$のアミド基；式－Ｓｉ（Ｒ^{a}）$_{3}$のシリル基；式－Ｇｅ（Ｒ^{a}）$_{3}$のゲルマニル基；及び式Ｎ＝Ｐ（Ｒ^{b}）（Ｒ^{c}）（Ｒ^{d}）のホスフィンイミン基からなる群から選択され；ここで、各Ｒ’は、独立して、水素、Ｃ$_{1-20}$アルキル基、及びＣ$_{6-20}$アリール基からなる群から選択され；ここで、各Ｒ^{a}は、独立して、水素、Ｃ$_{1-8}$アルキル基、Ｃ$_{1-8}$アルコキシ基、Ｃ$_{6-20}$アリールオキシ基及びＣ$_{6-20}$アリール基からなる群から選択され、Ｒ^{b}、Ｒ^{c}、Ｒ^{d}は、各々独立して、Ｃ$_{1-20}$アルキル基であり；
各Ｘ^{1}は、活性化可能な配位子であり；
Ｃｙは、Ｌに共有結合し、η－結合を介してＭに配位するシクロペンタジエニル型配位子であり；
Ｌは、ＰとＣｙを連結する原子の連続鎖を含む架橋基であり、連続鎖は２個又は３個の原子を含む、有機金属錯体と、
ｉｉ）触媒活性剤と、
を含む、オレフィン重合触媒系。
【請求項４２】
請求項４１に記載のオレフィン重合触媒系であって、前記有機金属錯体が、式ＩＩ：

【化１１】



(II)

で表され、

式中、R^3、R^4、R^5及びR^6は、各々独立して、

ハロゲン；

水素；

C_{1-30}ヒドロカルビル基（このヒドロカルビル基は、非置換であるか、又はハロゲン原子、C_{1-20}アルキル基、C_{1-20}アルコキシ基、C_{7-20}アルキルアリール基、C_{7-20}アリールアルキル基、C_{6-20}アリール基、C_{6-20}アリールオキシ基、C_{7-20}アルキルアリールオキシ基、及びC_{7-20}アリールアルキルオキシ基からなる群から選択される１つ以上の置換基によってさらに置換されている）；

ヘテロ原子含有C_{1-30}ヒドロカルビル基（このヘテロ原子含有ヒドロカルビル基は、非置換であるか、又はハロゲン原子、C_{1-20}アルキル基、C_{1-20}アルコキシ基、C_{7-20}アルキルアリール基、C_{7-20}アリールアルキル基、C_{6-20}アリール基、C_{6-20}アリールオキシ基、C_{7-20}アルキルアリールオキシ基、及びC_{7-20}アリールアルキルオキシ基からなる群から選択される１つ以上の置換基によってさらに置換されている）；

オキシ基、－ＯＲ’；

アミド基、－ＮＲ’$_2$；

ホスフィド基、－ＰＲ’$_2$；

チオラート基、－ＳＲ’；

式－Ｓｉ（R^a）$_3$のシリル基；

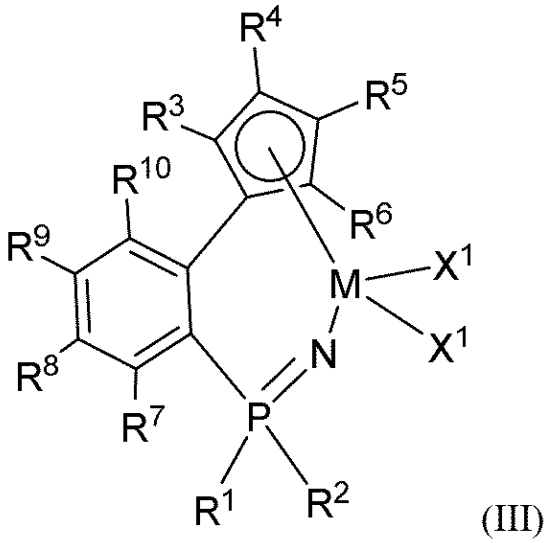
式－Ｇｅ（R^a）$_3$のゲルマニル基；

からなる群から選択され；

ここで、R^3、R^4、R^5及びR^6の２つの隣接する基は、任意に結合して環状ヒドロカルビル基又は環状ヘテロ原子含有ヒドロカルビル基を形成してもよく、環状ヒドロカルビル基又は環状ヘテロ原子含有ヒドロカルビル基は、非置換であるか、又はハロゲン原子、C_{1-20}アルキル基、C_{1-20}アルコキシ基、C_{7-20}アルキルアリール基、C_{7-20}アリールアルキル基、C_{6-20}アリール基、C_{6-20}アリールオキシ基、C_{7-20}アルキルアリールオキシ基、C_{7-20}アリールアルキルオキシ基、式－ＮＲ’$_2$のアミド基、式－ＰＲ’$_2$のホスフィド基、式－ＳＲ’のチオラート基、式－Ｓｉ（R^a）$_3$のシリル基、及び式－Ｇｅ（R^a）$_3$のゲルマニル基からなる群から選択される１つ以上の置換基によってさらに置換されており；

ここで、各Ｒ’は、独立して、水素、C_{1-20}アルキル基、及びC_{6-20}アリール基

からなる群から選択され；
ここで、各R^aは、独立して、水素、C_{1-8}アルキル基、C_{1-8}アルコキシ基、C_{6-20}アリールオキシ基及びC_{6-20}アリール基からなる群から選択される、
上記オレフィン重合触媒系。
【請求項４３】
請求項４２に記載のオレフィン重合触媒系であって、前記有機金属錯体が、式ＩＩＩ：
【化１２】



(III)

で表され、
式中、R^7、R^8、R^9及びR^{10}は、各々独立して、
ハロゲン；
水素；
C_{1-30}ヒドロカルビル基（このヒドロカルビル基は、非置換であるか、又はハロゲン原子、C_{1-20}アルキル基、C_{1-20}アルコキシ基、C_{7-20}アルキルアリール基、C_{7-20}アリールアルキル基、C_{6-20}アリール基、C_{6-20}アリールオキシ基、C_{7-20}アルキルアリールオキシ基、及びC_{7-20}アリールアルキルオキシ基からなる群から選択される１つ以上の置換基によってさらに置換されている）；
ヘテロ原子含有C_{1-30}ヒドロカルビル基（このヘテロ原子含有ヒドロカルビル基は、非置換であるか、又はハロゲン原子、C_{1-20}アルキル基、C_{1-20}アルコキシ基、C_{7-20}アルキルアリール基、C_{7-20}アリールアルキル基、C_{6-20}アリール基、C_{6-20}アリールオキシ基、C_{7-20}アルキルアリールオキシ基、及びC_{7-20}アリールアルキルオキシ基からなる群から選択される１つ以上の置換基によってさらに置換されている）；
オキシ基、－ＯＲ’；
アミド基、－ＮＲ’$_2$；
ホスフィド基、－ＰＲ’$_2$；
チオラート基、－ＳＲ’；
式－Ｓｉ（R^a）$_3$のシリル基；
式－Ｇｅ（R^a）$_3$のゲルマニル基；
からなる群から選択され；
ここで、R^7、R^8、R^9及びR^{10}の２つの隣接する基は、任意に結合して環状ヒドロカルビル基又は環状ヘテロ原子含有ヒドロカルビル基を形成してもよく、環状ヒドロカルビル基又は環状ヘテロ原子含有ヒドロカルビル基は、非置換であるか、又はハロゲン原子、C_{1-20}アルキル基、C_{1-20}アルコキシ基、C_{7-20}アルキルアリール基、C

７－２０アリールアルキル基、Ｃ６－２０アリール基、Ｃ６－２０アリールオキシ基、Ｃ７－２０アルキルアリールオキシ基、Ｃ７－２０アリールアルキルオキシ基、式－ＮＲ’２のアミド基、式－ＰＲ’２のホスフィド基、式－ＳＲ’のチオラート基、式－Ｓｉ（Ｒａ）３のシリル基、及び式－Ｇｅ（Ｒａ）３のゲルマニル基からなる群から選択される１つ以上の置換基によってさらに置換されており；

ここで、各Ｒ’は、独立して、水素、Ｃ１－２０アルキル基、及びＣ６－２０アリール基からなる群から選択され；

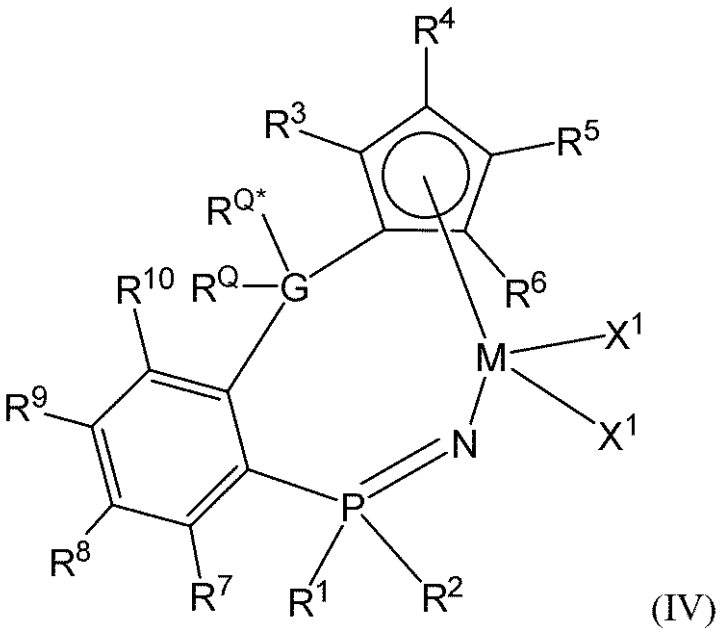
ここで、各Ｒａは、独立して、水素、Ｃ１－８アルキル基、Ｃ１－８アルコキシ基、Ｃ６－２０アリールオキシ基及びＣ６－２０アリール基からなる群から選択される、

上記オレフィン重合触媒系。

【請求項４４】

請求項４２に記載のオレフィン重合触媒系であって、前記有機金属錯体が、式ＩＶ：

【化１３】



(IV)

で表され、

式中、Ｇは、Ｃ又はＳｉであり；

式中、ＲＱ及びＲＱ＊は、各々独立して、

ハロゲン；

水素；

Ｃ１－３０ヒドロカルビル基（このヒドロカルビル基は、非置換であるか、又はハロゲン原子、Ｃ１－２０アルキル基、Ｃ１－２０アルコキシ基、Ｃ７－２０アルキルアリール基、Ｃ７－２０アリールアルキル基、Ｃ６－２０アリール基、Ｃ６－２０アリールオキシ基、Ｃ７－２０アルキルアリールオキシ基、及びＣ７－２０アリールアルキルオキシ基からなる群から選択される１つ以上の置換基によってさらに置換されている）；

ヘテロ原子含有Ｃ１－３０ヒドロカルビル基（このヘテロ原子含有ヒドロカルビル基は、非置換であるか、又はハロゲン原子、Ｃ１－２０アルキル基、Ｃ１－２０アルコキシ基、Ｃ７－２０アルキルアリール基、Ｃ７－２０アリールアルキル基、Ｃ６－２０アリール基、Ｃ６－２０アリールオキシ基、Ｃ７－２０アルキルアリールオキシ基、及びＣ７－２０アリールアルキルオキシ基からなる群から選択される１つ以上の置換基によってさらに置換されている）；

ここで、ＲＱ及びＲＱ＊の基は、任意に結合して環状ヒドロカルビル基又は環状ヘテロ原子含有ヒドロカルビル基を形成してもよく、環状ヒドロカルビル基又は環状ヘテロ原子

含有ヒドロカルビル基は、非置換であるか、又はハロゲン原子、Ｃ１－２０アルキル基、Ｃ１－２０アルコキシ基、Ｃ７－２０アルキルアリール基、Ｃ７－２０アリールアルキル基、Ｃ６－２０アリール基、Ｃ６－２０アリールオキシ基、Ｃ７－２０アルキルアリールオキシ基、Ｃ７－２０アリールアルキルオキシ基、式－ＮＲ’２のアミド基、式－ＰＲ’２のホスフィド基、式－ＳＲ’のチオラート基、式－Ｓｉ（Ｒａ）３のシリル基、及び式－Ｇｅ（Ｒａ）３のゲルマニル基からなる群から選択される１つ以上の置換基によってさらに置換されており；

式中、Ｒ７、Ｒ８、Ｒ９及びＲ１０は、各々独立して、

ハロゲン；

水素；

Ｃ１－３０ヒドロカルビル基（このヒドロカルビル基は、非置換であるか、又はハロゲン原子、Ｃ１－２０アルキル基、Ｃ１－２０アルコキシ基、Ｃ７－２０アルキルアリール基、Ｃ７－２０アリールアルキル基、Ｃ６－２０アリール基、Ｃ６－２０アリールオキシ基、Ｃ７－２０アルキルアリールオキシ基、及びＣ７－２０アリールアルキルオキシ基からなる群から選択される１つ以上の置換基によってさらに置換されている）；

ヘテロ原子含有Ｃ１－３０ヒドロカルビル基（このヘテロ原子含有ヒドロカルビル基は、非置換であるか、又はハロゲン原子、Ｃ１－２０アルキル基、Ｃ１－２０アルコキシ基、Ｃ７－２０アルキルアリール基、Ｃ７－２０アリールアルキル基、Ｃ６－２０アリール基、Ｃ６－２０アリールオキシ基、Ｃ７－２０アルキルアリールオキシ基、及びＣ７－２０アリールアルキルオキシ基からなる群から選択される１つ以上の置換基によってさらに置換されている）；

オキシ基、－ＯＲ’；

アミド基、－ＮＲ’２；

ホスフィド基、－ＰＲ’２；

チオラート基、－ＳＲ’；

式－Ｓｉ（Ｒａ）３のシリル基；

式－Ｇｅ（Ｒａ）３のゲルマニル基；

からなる群から選択され；

ここで、Ｒ７、Ｒ８、Ｒ９及びＲ１０の２つの隣接する基は、任意に結合して環状ヒドロカルビル基又は環状ヘテロ原子含有ヒドロカルビル基を形成してもよく、環状ヒドロカルビル基又は環状ヘテロ原子含有ヒドロカルビル基は、非置換であるか、又はハロゲン原子、Ｃ１－２０アルキル基、Ｃ１－２０アルコキシ基、Ｃ７－２０アルキルアリール基、Ｃ７－２０アリールアルキル基、Ｃ６－２０アリール基、Ｃ６－２０アリールオキシ基、Ｃ７－２０アルキルアリールオキシ基、Ｃ７－２０アリールアルキルオキシ基、式－ＮＲ’２のアミド基、式－ＰＲ’２のホスフィド基、式－ＳＲ’のチオラート基、式－Ｓｉ（Ｒａ）３のシリル基、及び式－Ｇｅ（Ｒａ）３のゲルマニル基からなる群から選択される１つ以上の置換基によってさらに置換されており；

ここで、各Ｒ’は、独立して、水素、Ｃ１－２０アルキル基、及びＣ６－２０アリール基からなる群から選択され；

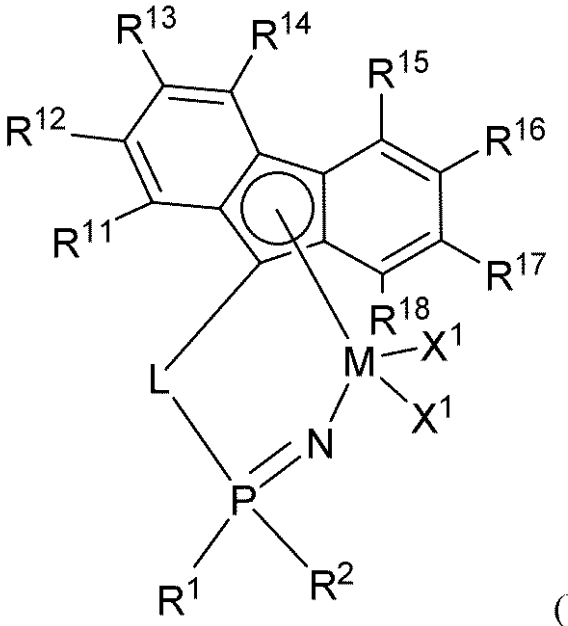
ここで、各Ｒａは、独立して、水素、Ｃ１－８アルキル基、Ｃ１－８アルコキシ基、Ｃ６－２０アリールオキシ基及びＣ６－２０アリール基からなる群から選択される、

上記オレフィン重合触媒系。

【請求項４５】

請求項４１に記載のオレフィン重合触媒系であって、前記有機金属錯体が、式Ｖ：

【化１４】



(V)

で表され、

式中、R^{11}、R^{12}、R^{13}、R^{14}、R^{15}、R^{16}、R^{17}、R^{18}は、各々独立して、

ハロゲン；

水素；

C_{1-30}ヒドロカルビル基（このヒドロカルビル基は、非置換であるか、又はハロゲン原子、C_{1-20}アルキル基、C_{1-20}アルコキシ基、C_{7-20}アルキルアリール基、C_{7-20}アリールアルキル基、C_{6-20}アリール基、C_{6-20}アリールオキシ基、C_{7-20}アルキルアリールオキシ基、及びC_{7-20}アリールアルキルオキシ基からなる群から選択される１つ以上の置換基によってさらに置換されている）；

ヘテロ原子含有C_{1-30}ヒドロカルビル基（このヘテロ原子含有ヒドロカルビル基は、非置換であるか、又はハロゲン原子、C_{1-20}アルキル基、C_{1-20}アルコキシ基、C_{7-20}アルキルアリール基、C_{7-20}アリールアルキル基、C_{6-20}アリール基、C_{6-20}アリールオキシ基、C_{7-20}アルキルアリールオキシ基、及びC_{7-20}アリールアルキルオキシ基からなる群から選択される１つ以上の置換基によってさらに置換されている）；

オキシ基、－ＯＲ’；

アミド基、－ＮＲ’$_2$；

ホスフィド基、－ＰＲ’$_2$；

チオラート基、－ＳＲ’；

式－Ｓｉ（Ｒ^a）$_3$のシリル基；

式－Ｇｅ（Ｒ^a）$_3$のゲルマニル基；

からなる群から選択され；

ここで、R^{11}、R^{12}、R^{13}、R^{14}、R^{15}、R^{16}、R^{17}、R^{18}の２つの隣接する基は、任意に結合して環状ヒドロカルビル基又は環状ヘテロ原子含有ヒドロカルビル基を形成してもよく、環状ヒドロカルビル基又は環状ヘテロ原子含有ヒドロカルビル基は、非置換であるか、又はハロゲン原子、C_{1-20}アルキル基、C_{1-20}アルコキシ基、C_{7-20}アルキルアリール基、C_{7-20}アリールアルキル基、C_{6-20}アリール基、C_{6-20}アリールオキシ基、C_{7-20}アルキルアリールオキシ基、C_{7-20}アリール

アルキルオキシ基、式－ＮＲ’$_2$のアミド基、式－ＰＲ’$_2$のホスフィド基、式－ＳＲ’のチオラート基、式－Ｓｉ（Ｒ^a）$_3$のシリル基、及び式－Ｇｅ（Ｒ^a）$_3$のゲルマニル基からなる群から選択される１つ以上の置換基によってさらに置換されており；

ここで、各Ｒ’は、独立して、水素、Ｃ$_{1-20}$アルキル基、及びＣ$_{6-20}$アリール基からなる群から選択され；

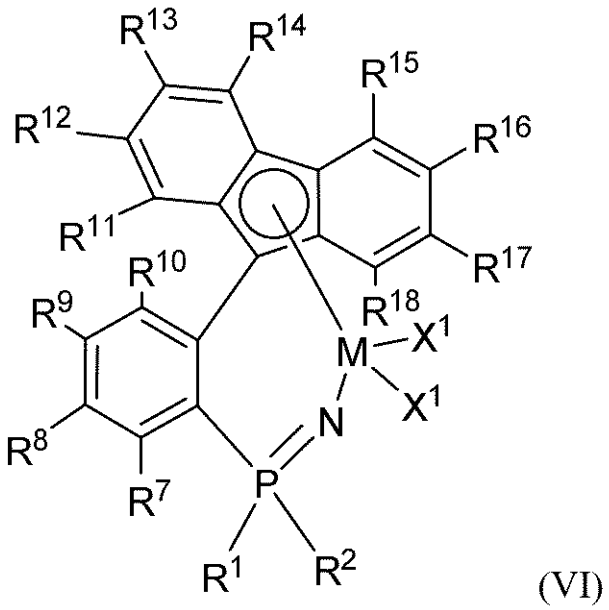
ここで、各Ｒ^{a}は、独立して、水素、Ｃ$_{1-8}$アルキル基、Ｃ$_{1-8}$アルコキシ基、Ｃ$_{6-20}$アリールオキシ基及びＣ$_{6-20}$アリール基からなる群から選択される、

上記オレフィン重合触媒系。

【請求項４６】

請求項４５に記載のオレフィン重合触媒系であって、前記有機金属錯体が、式ＶＩ：

【化１５】



(VI)

で表され、

式中、Ｒ^7、Ｒ^8、Ｒ^{9}及びＲ^{10}は、各々独立して、

ハロゲン；

水素；

Ｃ$_{1-30}$ヒドロカルビル基（このヒドロカルビル基は、非置換であるか、又はハロゲン原子、Ｃ$_{1-20}$アルキル基、Ｃ$_{1-20}$アルコキシ基、Ｃ$_{7-20}$アルキルアリール基、Ｃ$_{7-20}$アリールアルキル基、Ｃ$_{6-20}$アリール基、Ｃ$_{6-20}$アリールオキシ基、Ｃ$_{7-20}$アルキルアリールオキシ基、及びＣ$_{7-20}$アリールアルキルオキシ基からなる群から選択される１つ以上の置換基によってさらに置換されている）；

ヘテロ原子含有Ｃ$_{1-30}$ヒドロカルビル基（このヘテロ原子含有ヒドロカルビル基は、非置換であるか、又はハロゲン原子、Ｃ$_{1-20}$アルキル基、Ｃ$_{1-20}$アルコキシ基、Ｃ$_{7-20}$アルキルアリール基、Ｃ$_{7-20}$アリールアルキル基、Ｃ$_{6-20}$アリール基、Ｃ$_{6-20}$アリールオキシ基、Ｃ$_{7-20}$アルキルアリールオキシ基、及びＣ$_{7-20}$アリールアルキルオキシ基からなる群から選択される１つ以上の置換基によってさらに置換されている）；

オキシ基、－ＯＲ’；

アミド基、－ＮＲ’$_2$；

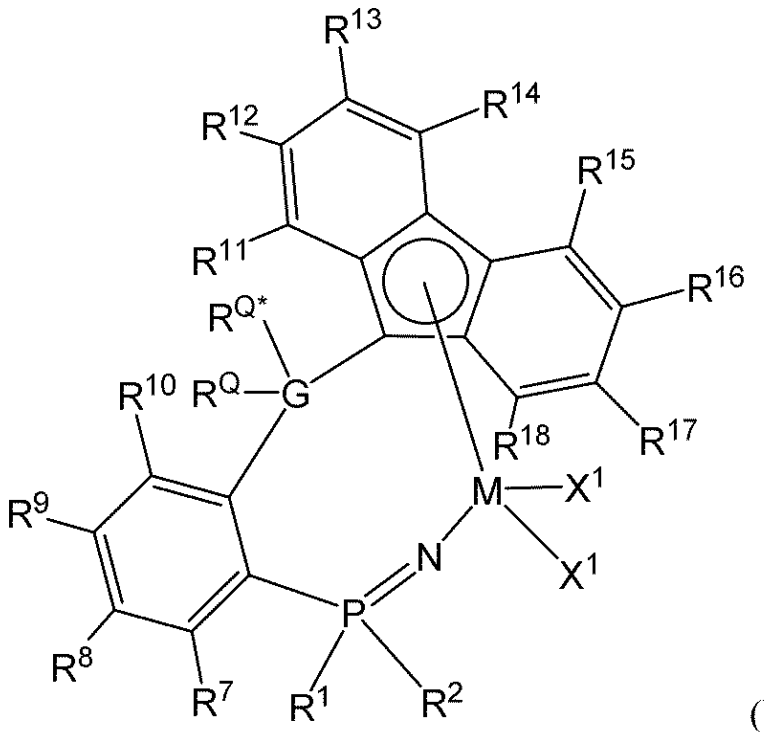
ホスフィド基、－ＰＲ’$_2$；

チオラート基、－ＳＲ’；

式－Ｓｉ（Ｒ^a）$_3$のシリル基；

式－Ｇｅ（Ｒ^{a}）$_{3}$のゲルマニル基；
からなる群から選択され；
ここで、Ｒ^{7}、Ｒ^{8}、Ｒ^{9}及びＲ^{10}の２つの隣接する基は、任意に結合して環状ヒドロカルビル基又は環状ヘテロ原子含有ヒドロカルビル基を形成してもよく、環状ヒドロカルビル基又は環状ヘテロ原子含有ヒドロカルビル基は、非置換であるか、又はハロゲン原子、Ｃ$_{1-20}$アルキル基、Ｃ$_{1-20}$アルコキシ基、Ｃ$_{7-20}$アルキルアリール基、Ｃ$_{7-20}$アリールアルキル基、Ｃ$_{6-20}$アリール基、Ｃ$_{6-20}$アリールオキシ基、Ｃ$_{7-20}$アルキルアリールオキシ基、Ｃ$_{7-20}$アリールアルキルオキシ基、式－ＮＲ’$_{2}$のアミド基、式－ＰＲ’$_{2}$のホスフィド基、式－ＳＲ’のチオラート基、式－Ｓｉ（Ｒ^{a}）$_{3}$のシリル基、及び式－Ｇｅ（Ｒ^{a}）$_{3}$のゲルマニル基からなる群から選択される１つ以上の置換基によってさらに置換されており；
ここで、各Ｒ’は、独立して、水素、Ｃ$_{1-20}$アルキル基、及びＣ$_{6-20}$アリール基からなる群から選択され；
ここで、各Ｒ^{a}は、独立して、水素、Ｃ$_{1-8}$アルキル基、Ｃ$_{1-8}$アルコキシ基、Ｃ$_{6-20}$アリールオキシ基及びＣ$_{6-20}$アリール基からなる群から選択される、
上記オレフィン重合触媒系。
【請求項４７】
ＭがＴｉである、請求項４６に記載のオレフィン重合触媒系。
【請求項４８】
Ｒ^{7}、Ｒ^{8}、Ｒ^{9}及びＲ^{10}が、各々水素である、請求項４６に記載のオレフィン重合触媒系。
【請求項４９】
Ｒ^{1}及びＲ^{2}が、各々独立して、非置換のＣ$_{1-30}$ヒドロカルビル基である、請求項４６に記載のオレフィン重合触媒系。
【請求項５０】
Ｒ^{1}及びＲ^{2}が、各々独立して、イソプロピル、シクロヘキシル及びｔｅｒｔ－ブチルからなる群から選択される、請求項４９に記載のオレフィン重合触媒系。
【請求項５１】
Ｒ^{12}及びＲ^{17}が、各々独立して、非置換のＣ$_{1-30}$ヒドロカルビル基であり、Ｒ^{11}、Ｒ^{13}、Ｒ^{14}、Ｒ^{15}、Ｒ^{16}及びＲ^{18}が、各々水素である、請求項４６に記載のオレフィン重合触媒系。
【請求項５２】
Ｒ^{12}及びＲ^{17}が、各々ｔｅｒｔ－ブチル基である、請求項５１に記載のオレフィン重合触媒系。
【請求項５３】
各Ｘ^{1}が、独立して、Ｃ$_{1-6}$アルキル基、Ｃ$_{7-10}$アリールアルキル基、及びハロゲンからなる群から選択される、請求項４６に記載のオレフィン重合触媒系。
【請求項５４】
各Ｘ^{1}が、独立して、メチル基及びＣｌからなる群から選択される、請求項５３に記載のオレフィン重合触媒系。
【請求項５５】
請求項４５に記載のオレフィン重合触媒系であって、前記有機金属錯体が、式ＶＩＩ：

【化１６】



(VII)

で表され、

式中、Ｇは、Ｃ又はＳｉであり；

式中、R^{Q}及びR^{Q*}は、各々独立して、

ハロゲン；

水素；

C_{1-30}ヒドロカルビル基（このヒドロカルビル基は、非置換であるか、又はハロゲン原子、C_{1-20}アルキル基、C_{1-20}アルコキシ基、C_{7-20}アルキルアリール基、C_{7-20}アリールアルキル基、C_{6-20}アリール基、C_{6-20}アリールオキシ基、C_{7-20}アルキルアリールオキシ基、及びC_{7-20}アリールアルキルオキシ基からなる群から選択される１つ以上の置換基によってさらに置換されている）；

ヘテロ原子含有C_{1-30}ヒドロカルビル基（このヘテロ原子含有ヒドロカルビル基は、非置換であるか、又はハロゲン原子、C_{1-20}アルキル基、C_{1-20}アルコキシ基、C_{7-20}アルキルアリール基、C_{7-20}アリールアルキル基、C_{6-20}アリール基、C_{6-20}アリールオキシ基、C_{7-20}アルキルアリールオキシ基、及びC_{7-20}アリールアルキルオキシ基からなる群から選択される１つ以上の置換基によってさらに置換されている）；

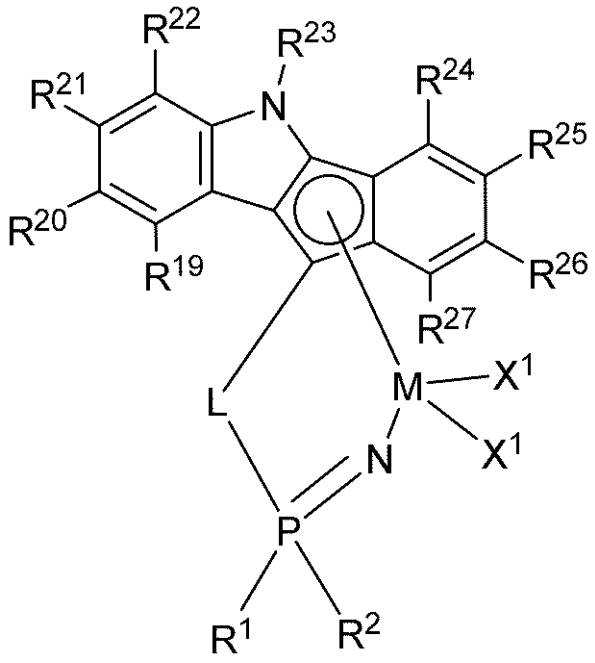
ここで、R^{Q}及びR^{Q*}の基は、任意に結合して環状ヒドロカルビル基又は環状ヘテロ原子含有ヒドロカルビル基を形成してもよく、環状ヒドロカルビル基又は環状ヘテロ原子含有ヒドロカルビル基は、非置換であるか、又はハロゲン原子、C_{1-20}アルキル基、C_{1-20}アルコキシ基、C_{7-20}アルキルアリール基、C_{7-20}アリールアルキル基、C_{6-20}アリール基、C_{6-20}アリールオキシ基、C_{7-20}アルキルアリールオキシ基、C_{7-20}アリールアルキルオキシ基、式－NR'_2のアミド基、式－PR'_2のホスフィド基、式－SR'のチオラート基、式－$Si(R^a)_3$のシリル基、及び式－$Ge(R^a)_3$のゲルマニル基からなる群から選択される１つ以上の置換基によってさらに置換されており；

式中、R^{7}、R^{8}、R^{9}及びR^{10}は、各々独立して、

ハロゲン；

水素；
C_{1-30}ヒドロカルビル基（このヒドロカルビル基は、非置換であるか、又はハロゲン原子、C_{1-20}アルキル基、C_{1-20}アルコキシ基、C_{7-20}アルキルアリール基、C_{7-20}アリールアルキル基、C_{6-20}アリール基、C_{6-20}アリールオキシ基、C_{7-20}アルキルアリールオキシ基、及びC_{7-20}アリールアルキルオキシ基からなる群から選択される１つ以上の置換基によってさらに置換されている）；
ヘテロ原子含有C_{1-30}ヒドロカルビル基（このヘテロ原子含有ヒドロカルビル基は、非置換であるか、又はハロゲン原子、C_{1-20}アルキル基、C_{1-20}アルコキシ基、C_{7-20}アルキルアリール基、C_{7-20}アリールアルキル基、C_{6-20}アリール基、C_{6-20}アリールオキシ基、C_{7-20}アルキルアリールオキシ基、及びC_{7-20}アリールアルキルオキシ基からなる群から選択される１つ以上の置換基によってさらに置換されている）；
オキシ基、－ＯＲ’；
アミド基、－ＮＲ’$_2$；
ホスフィド基、－ＰＲ’$_2$；
チオラート基、－ＳＲ’；
式－Ｓｉ（Ｒ^a）$_3$のシリル基；
式－Ｇｅ（Ｒ^a）$_3$のゲルマニル基；
からなる群から選択され；
ここで、R^7、R^8、R^9及びR^{10}の２つの隣接する基は、任意に結合して環状ヒドロカルビル基又は環状ヘテロ原子含有ヒドロカルビル基を形成してもよく、環状ヒドロカルビル基又は環状ヘテロ原子含有ヒドロカルビル基は、非置換であるか、又はハロゲン原子、C_{1-20}アルキル基、C_{1-20}アルコキシ基、C_{7-20}アルキルアリール基、C_{7-20}アリールアルキル基、C_{6-20}アリール基、C_{6-20}アリールオキシ基、C_{7-20}アルキルアリールオキシ基、C_{7-20}アリールアルキルオキシ基、式－ＮＲ’$_2$のアミド基、式－ＰＲ’$_2$のホスフィド基、式－ＳＲ’のチオラート基、式－Ｓｉ（Ｒ^a）$_3$のシリル基、及び式－Ｇｅ（Ｒ^a）$_3$のゲルマニル基からなる群から選択される１つ以上の置換基によってさらに置換されており；
ここで、各Ｒ’は、独立して、水素、C_{1-20}アルキル基、及びC_{6-20}アリール基からなる群から選択され；
ここで、各Ｒ^{a}は、独立して、水素、C_{1-8}アルキル基、C_{1-8}アルコキシ基、C_{6-20}アリールオキシ基及びC_{6-20}アリール基からなる群から選択される、
上記オレフィン重合触媒系。
【請求項５６】
ＭがＴｉである、請求項５５に記載のオレフィン重合触媒系。
【請求項５７】
R^7、R^8、R^9及びR^{10}が、各々水素である、請求項５５に記載のオレフィン重合触媒系。
【請求項５８】
R^1及びR^2が、各々独立して、非置換のC_{1-30}ヒドロカルビル基である、請求項５５に記載のオレフィン重合触媒系。
【請求項５９】
R^1及びR^2が、各々独立して、イソプロピル、シクロヘキシル及びｔｅｒｔ－ブチルからなる群から選択される、請求項５８に記載のオレフィン重合触媒系。
【請求項６０】
R^{12}及びR^{17}が、各々独立して、非置換のC_{1-30}ヒドロカルビル基であり、R^{11}、R^{13}、R^{14}、R^{15}、R^{16}及びR^{18}が、各々水素である、請求項５５に記載のオレフィン重合触媒系。
【請求項６１】
R^{12}及びR^{17}が、各々ｔｅｒｔ－ブチル基である、請求項６０に記載のオレフィン

重合触媒系。
【請求項６２】
Ｇが炭素である、請求項５５に記載のオレフィン重合触媒系。
【請求項６３】
R^{Q}及び$R^{Q}*$が、各々独立して、水素、C_{1-20}アルキル基及びC_{6-20}アリール基からなる群から選択される、請求項６２に記載のオレフィン重合触媒系。
【請求項６４】
R^{Q}が水素であり、$R^{Q}*$がC_{1-8}アルキル基である、請求項６２に記載のオレフィン重合触媒系。
【請求項６５】
各X^{1}が、独立して、C_{1-6}アルキル基、C_{7-10}アリールアルキル基、及びハロゲンからなる群から選択される、請求項５５に記載のオレフィン重合触媒系。
【請求項６６】
各X^{1}が、独立して、メチル基及びＣｌからなる群から選択される、請求項６５に記載のオレフィン重合触媒系。
【請求項６７】
請求項４１に記載のオレフィン重合触媒系であって、前記有機金属錯体が、式ＶＩＩＩ：
【化１７】

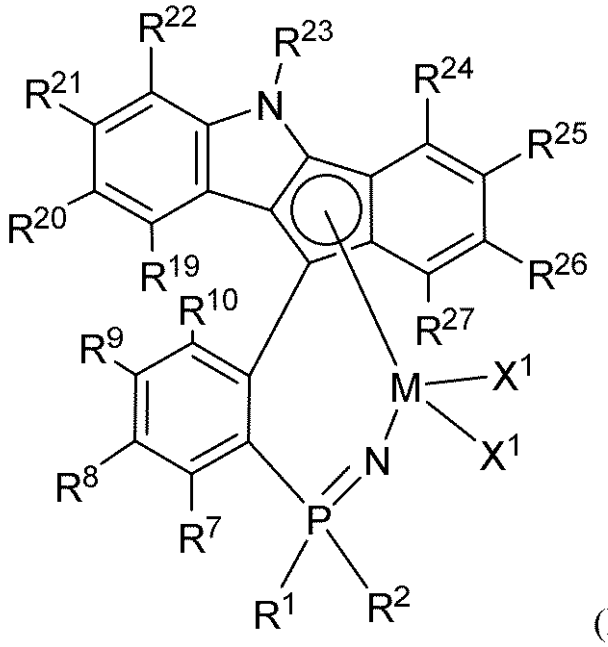


(VIII)

で表され、
式中、R^{23}は、
水素；
C_{1-30}ヒドロカルビル基（このヒドロカルビル基は、非置換であるか、又はハロゲン原子、C_{1-20}アルキル基、C_{1-20}アルコキシ基、C_{7-20}アルキルアリール基、C_{7-20}アリールアルキル基、C_{6-20}アリール基、C_{6-20}アリールオキシ基、C_{7-20}アルキルアリールオキシ基、及びC_{7-20}アリールアルキルオキシ基からなる群から選択される１つ以上の置換基によってさらに置換されている）；
ヘテロ原子含有C_{1-30}ヒドロカルビル基（このヘテロ原子含有ヒドロカルビル基は、非置換であるか、又はハロゲン原子、C_{1-20}アルキル基、C_{1-20}アルコキシ基、

Ｃ７－２０アルキルアリール基、Ｃ７－２０アリールアルキル基、Ｃ６－２０アリール基、Ｃ６－２０アリールオキシ基、Ｃ７－２０アルキルアリールオキシ基、及びＣ７－２０アリールアルキルオキシ基からなる群から選択される１つ以上の置換基によってさらに置換されている）；
からなる群から選択され；
式中、Ｒ１９、Ｒ２０、Ｒ２１、Ｒ２２、Ｒ２４、Ｒ２５、Ｒ２６、及びＲ２７は、各々独立して、
ハロゲン；
水素；
Ｃ１－３０ヒドロカルビル基（このヒドロカルビル基は、非置換であるか、又はハロゲン原子、Ｃ１－２０アルキル基、Ｃ１－２０アルコキシ基、Ｃ７－２０アルキルアリール基、Ｃ７－２０アリールアルキル基、Ｃ６－２０アリール基、Ｃ６－２０アリールオキシ基、Ｃ７－２０アルキルアリールオキシ基、及びＣ７－２０アリールアルキルオキシ基からなる群から選択される１つ以上の置換基によってさらに置換されている）；
ヘテロ原子含有Ｃ１－３０ヒドロカルビル基（このヘテロ原子含有ヒドロカルビル基は、非置換であるか、又はハロゲン原子、Ｃ１－２０アルキル基、Ｃ１－２０アルコキシ基、Ｃ７－２０アルキルアリール基、Ｃ７－２０アリールアルキル基、Ｃ６－２０アリール基、Ｃ６－２０アリールオキシ基、Ｃ７－２０アルキルアリールオキシ基、及びＣ７－２０アリールアルキルオキシ基からなる群から選択される１つ以上の置換基によってさらに置換されている）；
オキシ基、－ＯＲ’；
アミド基、－ＮＲ’$_2$；
ホスフィド基、－ＰＲ’$_2$；
チオラート基、－ＳＲ’；
式－Ｓｉ（Ｒ^a）$_3$のシリル基；
式－Ｇｅ（Ｒ^a）$_3$のゲルマニル基；
からなる群から選択され；
ここで、Ｒ１９、Ｒ２０、Ｒ２１、Ｒ２２、Ｒ２４、Ｒ２５、Ｒ２６、及びＲ２７の２つの隣接する基は、任意に結合して環状ヒドロカルビル基又は環状ヘテロ原子含有ヒドロカルビル基を形成してもよく、環状ヒドロカルビル基又は環状ヘテロ原子含有ヒドロカルビル基は、非置換であるか、又はハロゲン原子、Ｃ１－２０アルキル基、Ｃ１－２０アルコキシ基、Ｃ７－２０アルキルアリール基、Ｃ７－２０アリールアルキル基、Ｃ６－２０アリール基、Ｃ６－２０アリールオキシ基、Ｃ７－２０アルキルアリールオキシ基、Ｃ７－２０アリールアルキルオキシ基、式－ＮＲ’$_2$のアミド基、式－ＰＲ’$_2$のホスフィド基、式－ＳＲ’のチオラート基、式－Ｓｉ（Ｒ^a）$_3$のシリル基、及び式－Ｇｅ（Ｒ^a）$_3$のゲルマニル基からなる群から選択される１つ以上の置換基によってさらに置換されており；
ここで、各Ｒ’は、独立して、水素、Ｃ1－２０アルキル基、及びＣ６－２０アリール基からなる群から選択され；
ここで、各Ｒ^{a}は、独立して、水素、Ｃ１－８アルキル基、Ｃ１－８アルコキシ基、Ｃ６－２０アリールオキシ基及びＣ６－２０アリール基からなる群から選択される、
上記オレフィン重合触媒系。
【請求項６８】
請求項６７に記載のオレフィン重合触媒系であって、前記有機金属錯体が、式ＩＸ：

【化１８】



(IX)

で表され、

式中、R^7、R^8、R^9及びR^{10}は、各々独立して、

ハロゲン；

水素；

C_{1-30}ヒドロカルビル基（このヒドロカルビル基は、非置換であるか、又はハロゲン原子、C_{1-20}アルキル基、C_{1-20}アルコキシ基、C_{7-20}アルキルアリール基、C_{7-20}アリールアルキル基、C_{6-20}アリール基、C_{6-20}アリールオキシ基、C_{7-20}アルキルアリールオキシ基、及びC_{7-20}アリールアルキルオキシ基からなる群から選択される１つ以上の置換基によってさらに置換されている）；

ヘテロ原子含有C_{1-30}ヒドロカルビル基（このヘテロ原子含有ヒドロカルビル基は、非置換であるか、又はハロゲン原子、C_{1-20}アルキル基、C_{1-20}アルコキシ基、C_{7-20}アルキルアリール基、C_{7-20}アリールアルキル基、C_{6-20}アリール基、C_{6-20}アリールオキシ基、C_{7-20}アルキルアリールオキシ基、及びC_{7-20}アリールアルキルオキシ基からなる群から選択される１つ以上の置換基によってさらに置換されている）；

オキシ基、－ＯＲ’；

アミド基、－ＮＲ’$_2$；

ホスフィド基、－ＰＲ’$_2$；

チオラート基、－ＳＲ’；

式－Ｓｉ（R^a）$_3$のシリル基；

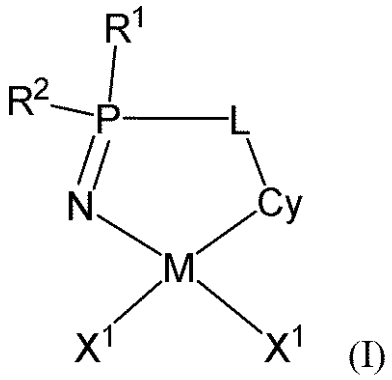
式－Ｇｅ（R^a）$_3$のゲルマニル基；

からなる群から選択され；

ここで、R^7、R^8、R^9及びR^{10}の２つの隣接する基は、任意に結合して環状ヒドロカルビル基又は環状ヘテロ原子含有ヒドロカルビル基を形成してもよく、環状ヒドロカルビル基又は環状ヘテロ原子含有ヒドロカルビル基は、非置換であるか、又はハロゲン原子、C_{1-20}アルキル基、C_{1-20}アルコキシ基、C_{7-20}アルキルアリール基、C_{7-20}アリールアルキル基、C_{6-20}アリール基、C_{6-20}アリールオキシ基、C_{7-20}アルキルアリールオキシ基、C_{7-20}アリールアルキルオキシ基、式－ＮＲ’$_2$のアミド基、式－ＰＲ’$_2$のホスフィド基、式－ＳＲ’のチオラート基、式－Ｓｉ（R^a）$_3$

のシリル基、及び式－Ｇｅ（Ｒ^{a}）$_{3}$のゲルマニル基からなる群から選択される１つ以上の置換基によってさらに置換されており；
ここで、各Ｒ’は、独立して、水素、Ｃ$_{1-20}$アルキル基、及びＣ$_{6-20}$アリール基からなる群から選択され；
ここで、各Ｒ^{a}は、独立して、水素、Ｃ$_{1-8}$アルキル基、Ｃ$_{1-8}$アルコキシ基、Ｃ$_{6-20}$アリールオキシ基及びＣ$_{6-20}$アリール基からなる群から選択される、
上記オレフィン重合触媒系。
【請求項６９】
ＭがＴｉである、請求項６８に記載のオレフィン重合触媒系。
【請求項７０】
Ｒ^{7}、Ｒ^{8}、Ｒ^{9}及びＲ^{10}が、各々水素である、請求項６８に記載のオレフィン重合触媒系。
【請求項７１】
Ｒ^{1}及びＲ^{2}が、各々独立して、非置換のＣ$_{1-30}$ヒドロカルビル基である、請求項６８に記載のオレフィン重合触媒系。
【請求項７２】
Ｒ^{1}及びＲ^{2}が、各々独立して、イソプロピル、シクロヘキシル及びｔｅｒｔ－ブチルからなる群から選択される、請求項７１に記載のオレフィン重合触媒系。
【請求項７３】
Ｒ^{23}が、非置換のＣ$_{1-30}$ヒドロカルビル基である、請求項６８に記載のオレフィン重合触媒系。
【請求項７４】
Ｒ^{23}が、Ｃ$_{1-8}$アルキル基である、請求項７３に記載のオレフィン重合触媒系。
【請求項７５】
Ｒ^{20}が、非置換のＣ$_{1-30}$ヒドロカルビル基である、請求項６８に記載のオレフィン重合触媒系。
【請求項７６】
Ｒ^{20}が、非置換のＣ$_{1-8}$アルキル基である、請求項７５に記載のオレフィン重合触媒系。
【請求項７７】
Ｒ^{20}が、非置換のＣ$_{1-30}$ヒドロカルビル基であり、Ｒ^{19}、Ｒ^{21}、Ｒ^{22}、Ｒ^{24}、Ｒ^{25}、Ｒ^{26}、及びＲ^{27}が、各々水素である、請求項６８に記載のオレフィン重合触媒系。
【請求項７８】
Ｒ^{20}が、Ｃ$_{1-8}$アルキル基である、請求項７７に記載のオレフィン重合触媒系。
【請求項７９】
各Ｘ^{1}が、独立して、Ｃ$_{1-6}$アルキル基、Ｃ$_{7-10}$アリールアルキル基、及びハロゲンからなる群から選択される、請求項６８に記載のオレフィン重合触媒系。
【請求項８０】
各Ｘ^{1}が、独立して、メチル基及びＣｌからなる群から選択される、請求項７９に記載のオレフィン重合触媒系。
【請求項８１】
触媒活性剤が、アルキルアルミノキサン共触媒、有機アルミニウム化合物、ホウ素系触媒活性剤、及びそれらの混合物からなる群から選択される、請求項４１～８０のいずれか一項に記載のオレフィン重合触媒系。
【請求項８２】
ホウ素系触媒活性剤が、［（水素化牛脂アルキル）$_{2}$（Ｍｅ）ＮＨ］［Ｂ（Ｃ$_{6}$Ｆ$_{5}$）$_{4}$］；Ｎ，Ｎ－ジメチルアニリニウムテトラキス（ペンタフルオロフェニル）ボレート（「［Ｍｅ$_{2}$ＮＨＰｈ］［Ｂ（Ｃ$_{6}$Ｆ$_{5}$）$_{4}$］」）；及びトリフェニルメチリウムテトラキス（ペンタフルオロフェニル）ボレート（「［Ｐｈ$_{3}$Ｃ］［Ｂ（Ｃ$_{6}$Ｆ$_{5}$）$_{4}$］」）から

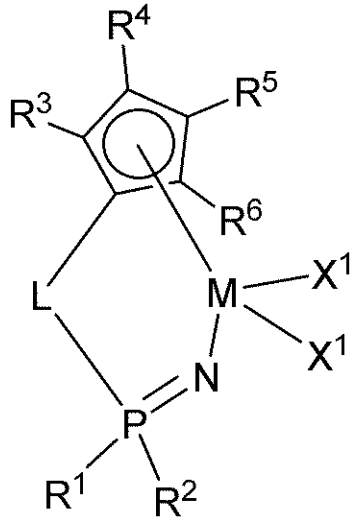
なる群から選択される、請求項８１に記載のオレフィン重合触媒系。
【請求項８３】
エチレンを、任意選択で１つ以上のＣ３－１２アルファ－オレフィンと、オレフィン重合触媒系の存在下で重合することを含む、重合プロセスであって、
オレフィン重合触媒系が、
ｉ）有機金属錯体であって、式Ｉ：
【化１９】



(I)

で表され、
式中、
Ｍは、Ｔｉ、Ｚｒ又はＨｆであり；
Ｒ１及びＲ２は、各々独立して、水素及びＲＸからなる群から選択されるか；又はＲ１及びＲ２は、それらが結合しているＰ原子と一緒になって、非置換であるか、又はハロゲン原子、Ｃ１－２０アルキル基、Ｃ１－２０アルコキシ基、Ｃ７－２０アルキルアリール基、Ｃ７－２０アリールアルキル基、Ｃ６－２０アリール基、Ｃ６－２０アリールオキシ基、Ｃ７－２０アルキルアリールオキシ基、及びＣ７－２０アリールアルキルオキシ基からなる群から選択される１つ以上の置換基によってさらに置換されている３－１０員複素環式基を形成し；
各ＲＸは、独立して、ハロゲン原子；Ｃ１－３０ヒドロカルビル基（このヒドロカルビル基は、非置換であるか、又は１つ以上のハロゲン原子、Ｃ１－２０アルキル基、Ｃ１－２０アルコキシ基、Ｃ７－２０アルキルアリール基、Ｃ７－２０アリールアルキル基、Ｃ６－２０アリール基、Ｃ６－２０アリールオキシ基、Ｃ７－２０アルキルアリールオキシ基、及び／又はＣ７－２０アリールアルキルオキシ基によってさらに置換されている）；式－ＮＲ’2のアミド基；式－Ｓｉ（Ｒａ）3のシリル基；式－Ｇｅ（Ｒａ）3のゲルマニル基；及び式Ｎ＝Ｐ（Ｒｂ）（Ｒｃ）（Ｒｄ）のホスフィンイミン基からなる群から選択され；ここで、各Ｒ’は、独立して、水素、Ｃ1－２０アルキル基、及びＣ６－２０アリール基からなる群から選択され；ここで、各Ｒａは、独立して、水素、Ｃ１－８アルキル基、Ｃ１－８アルコキシ基、Ｃ６－２０アリールオキシ基及びＣ６－２０アリール基からなる群から選択され、Ｒｂ、Ｒｃ、Ｒｄは、各々独立して、Ｃ１－２０アルキル基であり；
各Ｘ１は、活性化可能な配位子であり；
Ｃｙは、Ｌに共有結合し、η－結合を介してＭに配位するシクロペンタジエニル型配位子であり；
Ｌは、ＰとＣｙを連結する原子の連続鎖を含む架橋基であり、連続鎖は２個又は３個の原子を含む、有機金属錯体と、
ｉｉ）触媒活性剤と、
を含む、重合プロセス。
【請求項８４】
請求項８３に記載の重合プロセスであって、前記有機金属錯体が、式ＩＩ：

【化２０】



(II)

で表され、

式中、R^3、R^4、R^5及びR^6は、各々独立して、

ハロゲン；

水素；

C_{1-30}ヒドロカルビル基（このヒドロカルビル基は、非置換であるか、又はハロゲン原子、C_{1-20}アルキル基、C_{1-20}アルコキシ基、C_{7-20}アルキルアリール基、C_{7-20}アリールアルキル基、C_{6-20}アリール基、C_{6-20}アリールオキシ基、C_{7-20}アルキルアリールオキシ基、及びC_{7-20}アリールアルキルオキシ基からなる群から選択される１つ以上の置換基によってさらに置換されている）；

ヘテロ原子含有C_{1-30}ヒドロカルビル基（このヘテロ原子含有ヒドロカルビル基は、非置換であるか、又はハロゲン原子、C_{1-20}アルキル基、C_{1-20}アルコキシ基、C_{7-20}アルキルアリール基、C_{7-20}アリールアルキル基、C_{6-20}アリール基、C_{6-20}アリールオキシ基、C_{7-20}アルキルアリールオキシ基、及びC_{7-20}アリールアルキルオキシ基からなる群から選択される１つ以上の置換基によってさらに置換されている）；

オキシ基、－ＯＲ’；

アミド基、－ＮＲ’$_2$；

ホスフィド基、－ＰＲ’$_2$；

チオラート基、－ＳＲ’；

式－Ｓｉ（R^a）$_3$のシリル基；

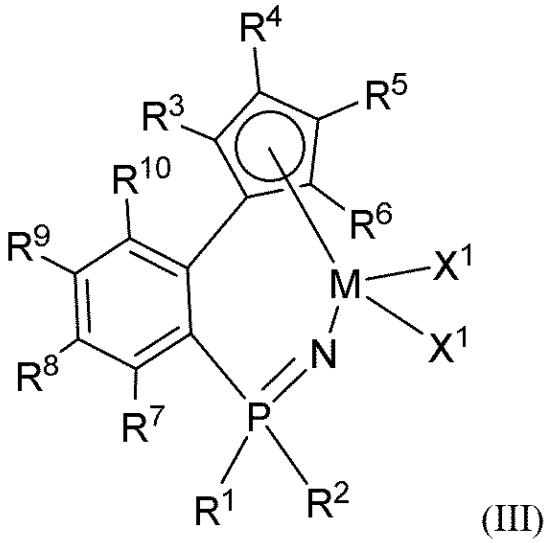
式－Ｇｅ（R^a）$_3$のゲルマニル基；

からなる群から選択され；

ここで、R^3、R^4、R^5及びR^6の２つの隣接する基は、任意に結合して環状ヒドロカルビル基又は環状ヘテロ原子含有ヒドロカルビル基を形成してもよく、環状ヒドロカルビル基又は環状ヘテロ原子含有ヒドロカルビル基は、非置換であるか、又はハロゲン原子、C_{1-20}アルキル基、C_{1-20}アルコキシ基、C_{7-20}アルキルアリール基、C_{7-20}アリールアルキル基、C_{6-20}アリール基、C_{6-20}アリールオキシ基、C_{7-20}アルキルアリールオキシ基、C_{7-20}アリールアルキルオキシ基、式－ＮＲ’$_2$のアミド基、式－ＰＲ’$_2$のホスフィド基、式－ＳＲ’のチオラート基、式－Ｓｉ（R^a）$_3$のシリル基、及び式－Ｇｅ（R^a）$_3$のゲルマニル基からなる群から選択される１つ以上の置換基によってさらに置換されており；

ここで、各Ｒ’は、独立して、水素、C_{1-20}アルキル基、及びC_{6-20}アリール基

からなる群から選択され；
ここで、各R^aは、独立して、水素、C_{1-8}アルキル基、C_{1-8}アルコキシ基、C_{6-20}アリールオキシ基及びC_{6-20}アリール基からなる群から選択される、
上記重合プロセス。
【請求項８５】
請求項８４に記載の重合プロセスであって、前記有機金属錯体が、式ＩＩＩ：
【化２１】



(III)

で表され、
式中、R^7、R^8、R^9及びR^{10}は、各々独立して、
ハロゲン；
水素；
C_{1-30}ヒドロカルビル基（このヒドロカルビル基は、非置換であるか、又はハロゲン原子、C_{1-20}アルキル基、C_{1-20}アルコキシ基、C_{7-20}アルキルアリール基、C_{7-20}アリールアルキル基、C_{6-20}アリール基、C_{6-20}アリールオキシ基、C_{7-20}アルキルアリールオキシ基、及びC_{7-20}アリールアルキルオキシ基からなる群から選択される１つ以上の置換基によってさらに置換されている）；
ヘテロ原子含有C_{1-30}ヒドロカルビル基（このヘテロ原子含有ヒドロカルビル基は、非置換であるか、又はハロゲン原子、C_{1-20}アルキル基、C_{1-20}アルコキシ基、C_{7-20}アルキルアリール基、C_{7-20}アリールアルキル基、C_{6-20}アリール基、C_{6-20}アリールオキシ基、C_{7-20}アルキルアリールオキシ基、及びC_{7-20}アリールアルキルオキシ基からなる群から選択される１つ以上の置換基によってさらに置換されている）；
オキシ基、－ＯＲ’；
アミド基、－ＮＲ’$_2$；
ホスフィド基、－ＰＲ’$_2$；
チオラート基、－ＳＲ’；
式－Ｓｉ（R^a）$_3$のシリル基；
式－Ｇｅ（R^a）$_3$のゲルマニル基；
からなる群から選択され；
ここで、R^7、R^8、R^9及びR^{10}の２つの隣接する基は、任意に結合して環状ヒドロカルビル基又は環状ヘテロ原子含有ヒドロカルビル基を形成してもよく、環状ヒドロカルビル基又は環状ヘテロ原子含有ヒドロカルビル基は、非置換であるか、又はハロゲン原子、C_{1-20}アルキル基、C_{1-20}アルコキシ基、C_{7-20}アルキルアリール基、C

７－２０アリールアルキル基、Ｃ６－２０アリール基、Ｃ６－２０アリールオキシ基、Ｃ７－２０アルキルアリールオキシ基、Ｃ７－２０アリールアルキルオキシ基、式－ＮＲ’$_2$のアミド基、式－ＰＲ’$_2$のホスフィド基、式－ＳＲ’のチオラート基、式－Ｓｉ（Ｒ^a）$_3$のシリル基、及び式－Ｇｅ（Ｒ^a）$_3$のゲルマニル基からなる群から選択される１つ以上の置換基によってさらに置換されており；

ここで、各Ｒ’は、独立して、水素、Ｃ$_{1-20}$アルキル基、及びＣ６－２０アリール基からなる群から選択され；

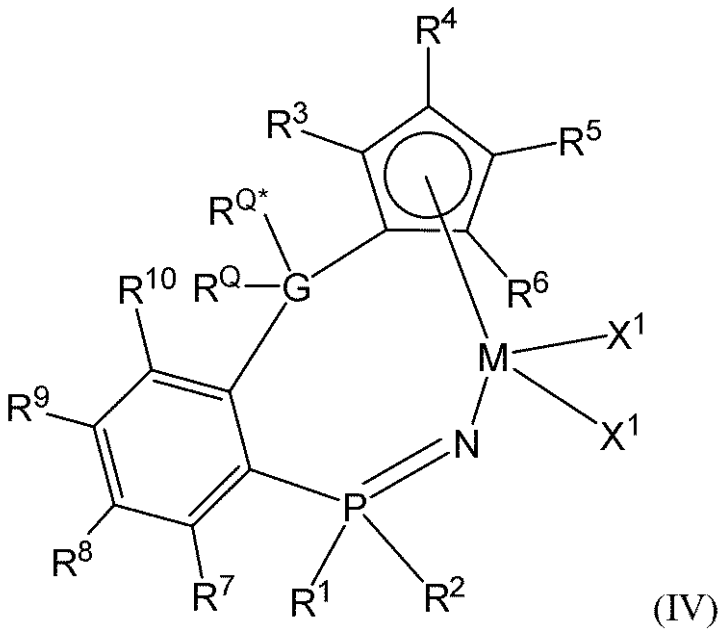
ここで、各Ｒ^{a}は、独立して、水素、Ｃ１－８アルキル基、Ｃ１－８アルコキシ基、Ｃ６－２０アリールオキシ基及びＣ６－２０アリール基からなる群から選択される、

上記重合プロセス。

【請求項８６】

請求項８４に記載の重合プロセスであって、前記有機金属錯体が、式ＩＶ：

【化２２】



(IV)

で表され、

式中、Ｇは、Ｃ又はＳｉであり；

式中、Ｒ^{Q}及びＲ^{Q*}は、各々独立して、

ハロゲン；

水素；

Ｃ$_{1-30}$ヒドロカルビル基（このヒドロカルビル基は、非置換であるか、又はハロゲン原子、Ｃ１－２０アルキル基、Ｃ１－２０アルコキシ基、Ｃ７－２０アルキルアリール基、Ｃ７－２０アリールアルキル基、Ｃ６－２０アリール基、Ｃ６－２０アリールオキシ基、Ｃ７－２０アルキルアリールオキシ基、及びＣ７－２０アリールアルキルオキシ基からなる群から選択される１つ以上の置換基によってさらに置換されている）；

ヘテロ原子含有Ｃ$_{1-30}$ヒドロカルビル基（このヘテロ原子含有ヒドロカルビル基は、非置換であるか、又はハロゲン原子、Ｃ１－２０アルキル基、Ｃ１－２０アルコキシ基、Ｃ７－２０アルキルアリール基、Ｃ７－２０アリールアルキル基、Ｃ６－２０アリール基、Ｃ６－２０アリールオキシ基、Ｃ７－２０アルキルアリールオキシ基、及びＣ７－２０アリールアルキルオキシ基からなる群から選択される１つ以上の置換基によってさらに置換されている）；

ここで、Ｒ^{Q}及びＲ^{Q*}の基は、任意に結合して環状ヒドロカルビル基又は環状ヘテロ原子含有ヒドロカルビル基を形成してもよく、環状ヒドロカルビル基又は環状ヘテロ原子

含有ヒドロカルビル基は、非置換であるか、又はハロゲン原子、Ｃ１－２０アルキル基、Ｃ１－２０アルコキシ基、Ｃ７－２０アルキルアリール基、Ｃ７－２０アリールアルキル基、Ｃ６－２０アリール基、Ｃ６－２０アリールオキシ基、Ｃ７－２０アルキルアリールオキシ基、Ｃ７－２０アリールアルキルオキシ基、式－ＮＲ’２のアミド基、式－ＰＲ’２のホスフィド基、式－ＳＲ’のチオラート基、式－Ｓｉ（Ｒａ）３のシリル基、及び式－Ｇｅ（Ｒａ）３のゲルマニル基からなる群から選択される１つ以上の置換基によってさらに置換されており；

式中、Ｒ７、Ｒ８、Ｒ９及びＲ１０は、各々独立して、

ハロゲン；

水素；

Ｃ１－３０ヒドロカルビル基（このヒドロカルビル基は、非置換であるか、又はハロゲン原子、Ｃ１－２０アルキル基、Ｃ１－２０アルコキシ基、Ｃ７－２０アルキルアリール基、Ｃ７－２０アリールアルキル基、Ｃ６－２０アリール基、Ｃ６－２０アリールオキシ基、Ｃ７－２０アルキルアリールオキシ基、及びＣ７－２０アリールアルキルオキシ基からなる群から選択される１つ以上の置換基によってさらに置換されている）；

ヘテロ原子含有Ｃ１－３０ヒドロカルビル基（このヘテロ原子含有ヒドロカルビル基は、非置換であるか、又はハロゲン原子、Ｃ１－２０アルキル基、Ｃ１－２０アルコキシ基、Ｃ７－２０アルキルアリール基、Ｃ７－２０アリールアルキル基、Ｃ６－２０アリール基、Ｃ６－２０アリールオキシ基、Ｃ７－２０アルキルアリールオキシ基、及びＣ７－２０アリールアルキルオキシ基からなる群から選択される１つ以上の置換基によってさらに置換されている）；

オキシ基、－ＯＲ’；

アミド基、－ＮＲ’２；

ホスフィド基、－ＰＲ’２；

チオラート基、－ＳＲ’；

式－Ｓｉ（Ｒａ）３のシリル基；

式－Ｇｅ（Ｒａ）３のゲルマニル基；

からなる群から選択され；

ここで、Ｒ７、Ｒ８、Ｒ９及びＲ１０の２つの隣接する基は、任意に結合して環状ヒドロカルビル基又は環状ヘテロ原子含有ヒドロカルビル基を形成してもよく、環状ヒドロカルビル基又は環状ヘテロ原子含有ヒドロカルビル基は、非置換であるか、又はハロゲン原子、Ｃ１－２０アルキル基、Ｃ１－２０アルコキシ基、Ｃ７－２０アルキルアリール基、Ｃ７－２０アリールアルキル基、Ｃ６－２０アリール基、Ｃ６－２０アリールオキシ基、Ｃ７－２０アルキルアリールオキシ基、Ｃ７－２０アリールアルキルオキシ基、式－ＮＲ’２のアミド基、式－ＰＲ’２のホスフィド基、式－ＳＲ’のチオラート基、式－Ｓｉ（Ｒａ）３のシリル基、及び式－Ｇｅ（Ｒａ）３のゲルマニル基からなる群から選択される１つ以上の置換基によってさらに置換されており；

ここで、各Ｒ’は、独立して、水素、Ｃ１－２０アルキル基、及びＣ６－２０アリール基からなる群から選択され；

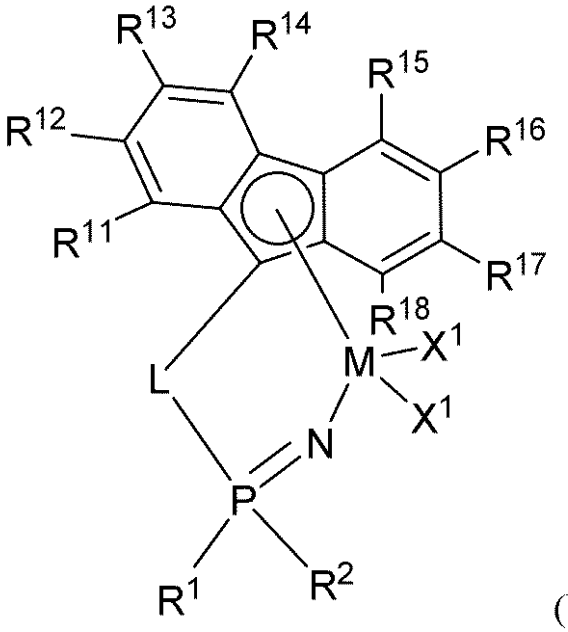
ここで、各Ｒａは、独立して、水素、Ｃ１－８アルキル基、Ｃ１－８アルコキシ基、Ｃ６－２０アリールオキシ基及びＣ６－２０アリール基からなる群から選択される、

上記重合プロセス。

【請求項８７】

請求項８３に記載の重合プロセスであって、前記有機金属錯体が、式Ｖ：

【化２３】



(V)

で表され、

式中、R^{11}、R^{12}、R^{13}、R^{14}、R^{15}、R^{16}、R^{17}、R^{18}は、各々独立して、

ハロゲン；

水素；

C_{1-30}ヒドロカルビル基（このヒドロカルビル基は、非置換であるか、又はハロゲン原子、C_{1-20}アルキル基、C_{1-20}アルコキシ基、C_{7-20}アルキルアリール基、C_{7-20}アリールアルキル基、C_{6-20}アリール基、C_{6-20}アリールオキシ基、C_{7-20}アルキルアリールオキシ基、及びC_{7-20}アリールアルキルオキシ基からなる群から選択される１つ以上の置換基によってさらに置換されている）；

ヘテロ原子含有C_{1-30}ヒドロカルビル基（このヘテロ原子含有ヒドロカルビル基は、非置換であるか、又はハロゲン原子、C_{1-20}アルキル基、C_{1-20}アルコキシ基、C_{7-20}アルキルアリール基、C_{7-20}アリールアルキル基、C_{6-20}アリール基、C_{6-20}アリールオキシ基、C_{7-20}アルキルアリールオキシ基、及びC_{7-20}アリールアルキルオキシ基からなる群から選択される１つ以上の置換基によってさらに置換されている）；

オキシ基、－ＯＲ’；

アミド基、－ＮＲ’$_2$；

ホスフィド基、－ＰＲ’$_2$；

チオラート基、－ＳＲ’；

式－Ｓｉ（R^a）$_3$のシリル基；

式－Ｇｅ（R^a）$_3$のゲルマニル基；

からなる群から選択され；

ここで、R^{11}、R^{12}、R^{13}、R^{14}、R^{15}、R^{16}、R^{17}、R^{18}の２つの隣接する基は、任意に結合して環状ヒドロカルビル基又は環状ヘテロ原子含有ヒドロカルビル基を形成してもよく、環状ヒドロカルビル基又は環状ヘテロ原子含有ヒドロカルビル基は、非置換であるか、又はハロゲン原子、C_{1-20}アルキル基、C_{1-20}アルコキシ基、C_{7-20}アルキルアリール基、C_{7-20}アリールアルキル基、C_{6-20}アリール基、C_{6-20}アリールオキシ基、C_{7-20}アルキルアリールオキシ基、C_{7-20}アリール

アルキルオキシ基、式－ＮＲ’$_2$のアミド基、式－ＰＲ’$_2$のホスフィド基、式－ＳＲ’のチオラート基、式－Ｓｉ（Ｒ^a）$_3$のシリル基、及び式－Ｇｅ（Ｒ^a）$_3$のゲルマニル基からなる群から選択される１つ以上の置換基によってさらに置換されており；

ここで、各Ｒ’は、独立して、水素、Ｃ$_{1-20}$アルキル基、及びＣ$_{6-20}$アリール基からなる群から選択され；

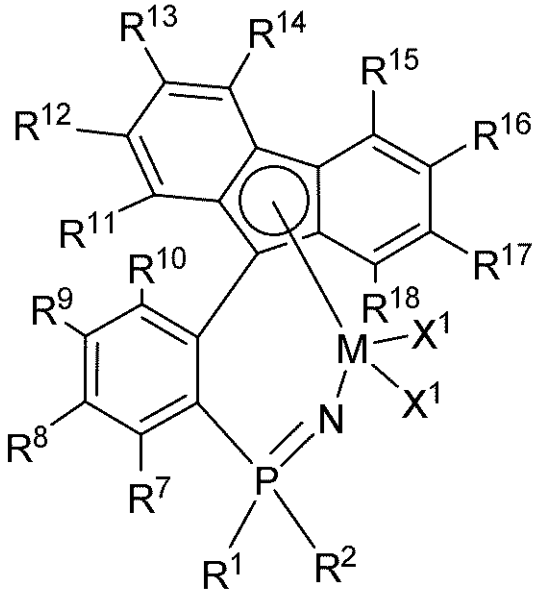
ここで、各Ｒ^{a}は、独立して、水素、Ｃ$_{1-8}$アルキル基、Ｃ$_{1-8}$アルコキシ基、Ｃ$_{6-20}$アリールオキシ基及びＣ$_{6-20}$アリール基からなる群から選択される、

上記重合プロセス。

【請求項８８】

請求項８７に記載の重合プロセスであって、前記有機金属錯体が、式ＶＩ：

【化２４】



(VI)

で表され、

式中、Ｒ^7、Ｒ^8、Ｒ^{9}及びＲ^{10}は、各々独立して、

ハロゲン；

水素；

Ｃ$_{1-30}$ヒドロカルビル基（このヒドロカルビル基は、非置換であるか、又はハロゲン原子、Ｃ$_{1-20}$アルキル基、Ｃ$_{1-20}$アルコキシ基、Ｃ$_{7-20}$アルキルアリール基、Ｃ$_{7-20}$アリールアルキル基、Ｃ$_{6-20}$アリール基、Ｃ$_{6-20}$アリールオキシ基、Ｃ$_{7-20}$アルキルアリールオキシ基、及びＣ$_{7-20}$アリールアルキルオキシ基からなる群から選択される１つ以上の置換基によってさらに置換されている）；

ヘテロ原子含有Ｃ$_{1-30}$ヒドロカルビル基（このヘテロ原子含有ヒドロカルビル基は、非置換であるか、又はハロゲン原子、Ｃ$_{1-20}$アルキル基、Ｃ$_{1-20}$アルコキシ基、Ｃ$_{7-20}$アルキルアリール基、Ｃ$_{7-20}$アリールアルキル基、Ｃ$_{6-20}$アリール基、Ｃ$_{6-20}$アリールオキシ基、Ｃ$_{7-20}$アルキルアリールオキシ基、及びＣ$_{7-20}$アリールアルキルオキシ基からなる群から選択される１つ以上の置換基によってさらに置換されている）；

オキシ基、－ＯＲ’；

アミド基、－ＮＲ’$_2$；

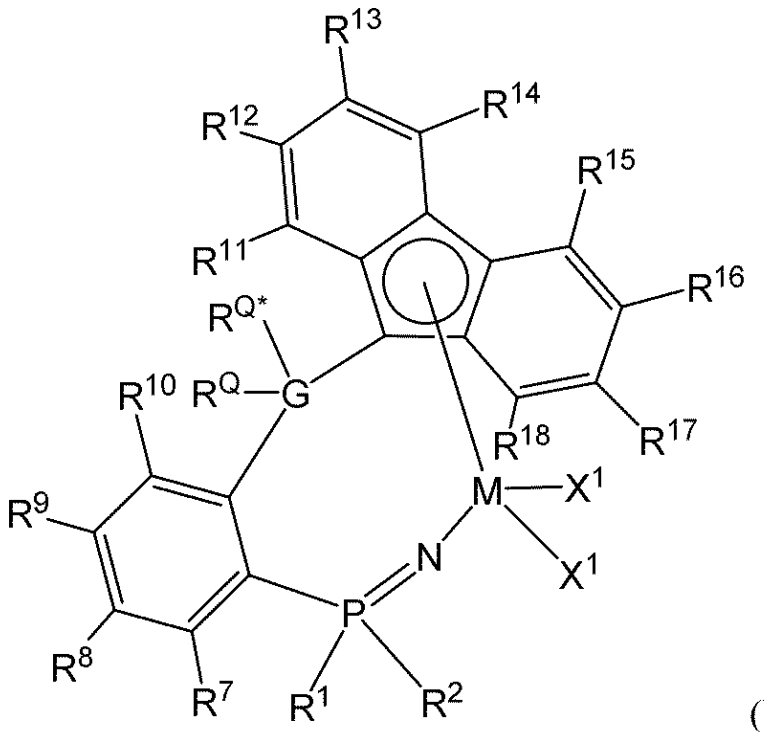
ホスフィド基、－ＰＲ’$_2$；

チオラート基、－ＳＲ’；

式－Ｓｉ（Ｒ^a）$_3$のシリル基；

式－Ｇｅ（Ｒ^{a}）$_{3}$のゲルマニル基；
からなる群から選択され；
ここで、Ｒ^{7}、Ｒ^{8}、Ｒ^{9}及びＲ^{10}の２つの隣接する基は、任意に結合して環状ヒドロカルビル基又は環状ヘテロ原子含有ヒドロカルビル基を形成してもよく、環状ヒドロカルビル基又は環状ヘテロ原子含有ヒドロカルビル基は、非置換であるか、又はハロゲン原子、Ｃ$_{1-20}$アルキル基、Ｃ$_{1-20}$アルコキシ基、Ｃ$_{7-20}$アルキルアリール基、Ｃ$_{7-20}$アリールアルキル基、Ｃ$_{6-20}$アリール基、Ｃ$_{6-20}$アリールオキシ基、Ｃ$_{7-20}$アルキルアリールオキシ基、Ｃ$_{7-20}$アリールアルキルオキシ基、式－ＮＲ’$_{2}$のアミド基、式－ＰＲ’$_{2}$のホスフィド基、式－ＳＲ’のチオラート基、式－Ｓｉ（Ｒ^{a}）$_{3}$のシリル基、及び式－Ｇｅ（Ｒ^{a}）$_{3}$のゲルマニル基からなる群から選択される１つ以上の置換基によってさらに置換されており；
ここで、各Ｒ’は、独立して、水素、Ｃ$_{1-20}$アルキル基、及びＣ$_{6-20}$アリール基からなる群から選択され；
ここで、各Ｒ^{a}は、独立して、水素、Ｃ$_{1-8}$アルキル基、Ｃ$_{1-8}$アルコキシ基、Ｃ$_{6-20}$アリールオキシ基及びＣ$_{6-20}$アリール基からなる群から選択される、
上記重合プロセス。
【請求項８９】
ＭがＴｉである、請求項８８に記載の重合プロセス。
【請求項９０】
Ｒ^{7}、Ｒ^{8}、Ｒ^{9}及びＲ^{10}が、各々水素である、請求項８８に記載の重合プロセス。
【請求項９１】
Ｒ^{1}及びＲ^{2}が、各々独立して、非置換のＣ$_{1-30}$ヒドロカルビル基である、請求項８８に記載の重合プロセス。
【請求項９２】
Ｒ^{1}及びＲ^{2}が、各々独立して、イソプロピル、シクロヘキシル及びｔｅｒｔ－ブチルからなる群から選択される、請求項９１に記載の重合プロセス。
【請求項９３】
Ｒ^{12}及びＲ^{17}が、各々独立して、非置換のＣ$_{1-30}$ヒドロカルビル基であり、Ｒ^{11}、Ｒ^{13}、Ｒ^{14}、Ｒ^{15}、Ｒ^{16}及びＲ^{18}が、各々水素である、請求項８８に記載の重合プロセス。
【請求項９４】
Ｒ^{12}及びＲ^{17}が、各々ｔｅｒｔ－ブチル基である、請求項９３に記載の重合プロセス。
【請求項９５】
各Ｘ^{1}が、独立して、Ｃ$_{1-6}$アルキル基、Ｃ$_{7-10}$アリールアルキル基、及びハロゲンからなる群から選択される、請求項８８に記載の重合プロセス。
【請求項９６】
各Ｘ^{1}が、独立して、メチル基及びＣｌからなる群から選択される、請求項９５に記載の重合プロセス。
【請求項９７】
請求項８７に記載の重合プロセスであって、前記有機金属錯体が、式ＶＩＩ：

【化２５】



(VII)

で表され、

式中、Ｇは、Ｃ又はＳｉであり；

式中、R^{Q}及びR^{Q*}は、各々独立して、

ハロゲン；

水素；

C_{1-30}ヒドロカルビル基（このヒドロカルビル基は、非置換であるか、又はハロゲン原子、C_{1-20}アルキル基、C_{1-20}アルコキシ基、C_{7-20}アルキルアリール基、C_{7-20}アリールアルキル基、C_{6-20}アリール基、C_{6-20}アリールオキシ基、C_{7-20}アルキルアリールオキシ基、及びC_{7-20}アリールアルキルオキシ基からなる群から選択される１つ以上の置換基によってさらに置換されている）；

ヘテロ原子含有C_{1-30}ヒドロカルビル基（このヘテロ原子含有ヒドロカルビル基は、非置換であるか、又はハロゲン原子、C_{1-20}アルキル基、C_{1-20}アルコキシ基、C_{7-20}アルキルアリール基、C_{7-20}アリールアルキル基、C_{6-20}アリール基、C_{6-20}アリールオキシ基、C_{7-20}アルキルアリールオキシ基、及びC_{7-20}アリールアルキルオキシ基からなる群から選択される１つ以上の置換基によってさらに置換されている）；

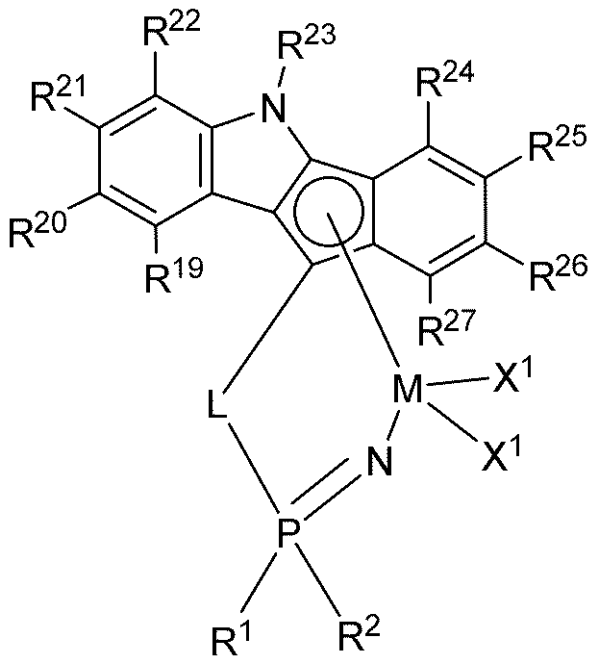
ここで、R^{Q}及びR^{Q*}の基は、任意に結合して環状ヒドロカルビル基又は環状ヘテロ原子含有ヒドロカルビル基を形成してもよく、環状ヒドロカルビル基又は環状ヘテロ原子含有ヒドロカルビル基は、非置換であるか、又はハロゲン原子、C_{1-20}アルキル基、C_{1-20}アルコキシ基、C_{7-20}アルキルアリール基、C_{7-20}アリールアルキル基、C_{6-20}アリール基、C_{6-20}アリールオキシ基、C_{7-20}アルキルアリールオキシ基、C_{7-20}アリールアルキルオキシ基、式－NR'_2のアミド基、式－PR'_2のホスフィド基、式－SR'のチオラート基、式－$Si(R^a)_3$のシリル基、及び式－$Ge(R^a)_3$のゲルマニル基からなる群から選択される１つ以上の置換基によってさらに置換されており；

式中、R^{7}、R^{8}、R^{9}及びR^{10}は、各々独立して、

ハロゲン；

水素；
C_{1-30}ヒドロカルビル基（このヒドロカルビル基は、非置換であるか、又はハロゲン原子、C_{1-20}アルキル基、C_{1-20}アルコキシ基、C_{7-20}アルキルアリール基、C_{7-20}アリールアルキル基、C_{6-20}アリール基、C_{6-20}アリールオキシ基、C_{7-20}アルキルアリールオキシ基、及びC_{7-20}アリールアルキルオキシ基からなる群から選択される１つ以上の置換基によってさらに置換されている）；
ヘテロ原子含有C_{1-30}ヒドロカルビル基（このヘテロ原子含有ヒドロカルビル基は、非置換であるか、又はハロゲン原子、C_{1-20}アルキル基、C_{1-20}アルコキシ基、C_{7-20}アルキルアリール基、C_{7-20}アリールアルキル基、C_{6-20}アリール基、C_{6-20}アリールオキシ基、C_{7-20}アルキルアリールオキシ基、及びC_{7-20}アリールアルキルオキシ基からなる群から選択される１つ以上の置換基によってさらに置換されている）；
オキシ基、－ＯＲ’；
アミド基、$-NR'_2$；
ホスフィド基、$-PR'_2$；
チオラート基、－ＳＲ’；
式－Ｓｉ（R^a）$_3$のシリル基；
式－Ｇｅ（R^a）$_3$のゲルマニル基；
からなる群から選択され；
ここで、R^7、R^8、R^9及びR^{10}の２つの隣接する基は、任意に結合して環状ヒドロカルビル基又は環状ヘテロ原子含有ヒドロカルビル基を形成してもよく、環状ヒドロカルビル基又は環状ヘテロ原子含有ヒドロカルビル基は、非置換であるか、又はハロゲン原子、C_{1-20}アルキル基、C_{1-20}アルコキシ基、C_{7-20}アルキルアリール基、C_{7-20}アリールアルキル基、C_{6-20}アリール基、C_{6-20}アリールオキシ基、C_{7-20}アルキルアリールオキシ基、C_{7-20}アリールアルキルオキシ基、式$-NR'_2$のアミド基、式$-PR'_2$のホスフィド基、式－ＳＲ’のチオラート基、式－Ｓｉ（R^a）$_3$のシリル基、及び式－Ｇｅ（R^a）$_3$のゲルマニル基からなる群から選択される１つ以上の置換基によってさらに置換されており；
ここで、各Ｒ’は、独立して、水素、C_{1-20}アルキル基、及びC_{6-20}アリール基からなる群から選択され；
ここで、各R^aは、独立して、水素、C_{1-8}アルキル基、C_{1-8}アルコキシ基、C_{6-20}アリールオキシ基及びC_{6-20}アリール基からなる群から選択される、
上記重合プロセス。
【請求項９８】
ＭがＴｉである、請求項９７に記載の重合プロセス。
【請求項９９】
R^7、R^8、R^9及びR^{10}が、各々水素である、請求項９７に記載の重合プロセス。
【請求項１００】
R^1及びR^2が、各々独立して、非置換のC_{1-30}ヒドロカルビル基である、請求項９７に記載の重合プロセス。
【請求項１０１】
R^1及びR^2が、各々独立して、イソプロピル、シクロヘキシル及びｔｅｒｔ－ブチルからなる群から選択される、請求項１００に記載の重合プロセス。
【請求項１０２】
R^{12}及びR^{17}が、各々独立して、非置換のC_{1-30}ヒドロカルビル基であり、R^{11}、R^{13}、R^{14}、R^{15}、R^{16}及びR^{18}が、各々水素である、請求項９７に記載の重合プロセス。
【請求項１０３】
R^{12}及びR^{17}が、各々ｔｅｒｔ－ブチル基である、請求項１０２に記載の重合プロセス。

【請求項１０４】
Ｇが炭素である、請求項９７に記載の重合プロセス。
【請求項１０５】
R^Q及びR^{Q*}が、各々独立して、水素、Ｃ１－２０アルキル基及びＣ６－２０アリール基からなる群から選択される、請求項１０４に記載の重合プロセス。
【請求項１０６】
R^Qが水素であり、R^{Q*}がＣ１－８アルキル基である、請求項１０４に記載の重合プロセス。
【請求項１０７】
各X^1が、独立して、Ｃ１－６アルキル基、Ｃ７－１０アリールアルキル基、及びハロゲンからなる群から選択される、請求項９７に記載の重合プロセス。
【請求項１０８】
各X^1が、独立して、メチル基及びＣｌからなる群から選択される、請求項１０７に記載の重合プロセス。
【請求項１０９】
請求項８３に記載の重合プロセスであって、前記有機金属錯体が、式ＶＩＩＩ：
【化２６】

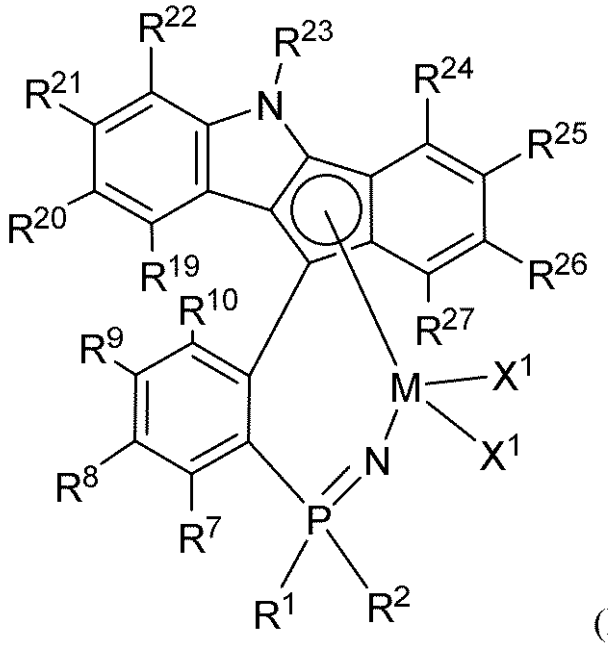


(VIII)

で表され、
式中、R^{23}は、
水素；
Ｃ１－３０ヒドロカルビル基（このヒドロカルビル基は、非置換であるか、又はハロゲン原子、Ｃ１－２０アルキル基、Ｃ１－２０アルコキシ基、Ｃ７－２０アルキルアリール基、Ｃ７－２０アリールアルキル基、Ｃ６－２０アリール基、Ｃ６－２０アリールオキシ基、Ｃ７－２０アルキルアリールオキシ基、及びＣ７－２０アリールアルキルオキシ基からなる群から選択される１つ以上の置換基によってさらに置換されている）；
ヘテロ原子含有Ｃ１－３０ヒドロカルビル基（このヘテロ原子含有ヒドロカルビル基は、非置換であるか、又はハロゲン原子、Ｃ１－２０アルキル基、Ｃ１－２０アルコキシ基、Ｃ７－２０アルキルアリール基、Ｃ７－２０アリールアルキル基、Ｃ６－２０アリール基、Ｃ６－２０アリールオキシ基、Ｃ７－２０アルキルアリールオキシ基、及びＣ７－２０アリ

ールアルキルオキシ基からなる群から選択される１つ以上の置換基によってさらに置換されている）；
からなる群から選択され；
式中、R^{19}、R^{20}、R^{21}、R^{22}、R^{24}、R^{25}、R^{26}、及びR^{27}は、各々独立して、
ハロゲン；
水素；
C_{1-30}ヒドロカルビル基（このヒドロカルビル基は、非置換であるか、又はハロゲン原子、C_{1-20}アルキル基、C_{1-20}アルコキシ基、C_{7-20}アルキルアリール基、C_{7-20}アリールアルキル基、C_{6-20}アリール基、C_{6-20}アリールオキシ基、C_{7-20}アルキルアリールオキシ基、及びC_{7-20}アリールアルキルオキシ基からなる群から選択される１つ以上の置換基によってさらに置換されている）；
ヘテロ原子含有C_{1-30}ヒドロカルビル基（このヘテロ原子含有ヒドロカルビル基は、非置換であるか、又はハロゲン原子、C_{1-20}アルキル基、C_{1-20}アルコキシ基、C_{7-20}アルキルアリール基、C_{7-20}アリールアルキル基、C_{6-20}アリール基、C_{6-20}アリールオキシ基、C_{7-20}アルキルアリールオキシ基、及びC_{7-20}アリールアルキルオキシ基からなる群から選択される１つ以上の置換基によってさらに置換されている）；
オキシ基、－ＯＲ’；
アミド基、－ＮＲ’$_2$；
ホスフィド基、－ＰＲ’$_2$；
チオラート基、－ＳＲ’；
式－Ｓｉ（R^a）$_3$のシリル基；
式－Ｇｅ（R^a）$_3$のゲルマニル基；
からなる群から選択され；
ここで、R^{19}、R^{20}、R^{21}、R^{22}、R^{24}、R^{25}、R^{26}、及びR^{27}の２つの隣接する基は、任意に結合して環状ヒドロカルビル基又は環状ヘテロ原子含有ヒドロカルビル基を形成してもよく、環状ヒドロカルビル基又は環状ヘテロ原子含有ヒドロカルビル基は、非置換であるか、又はハロゲン原子、C_{1-20}アルキル基、C_{1-20}アルコキシ基、C_{7-20}アルキルアリール基、C_{7-20}アリールアルキル基、C_{6-20}アリール基、C_{6-20}アリールオキシ基、C_{7-20}アルキルアリールオキシ基、C_{7-20}アリールアルキルオキシ基、式－ＮＲ’$_2$のアミド基、式－ＰＲ’$_2$のホスフィド基、式－ＳＲ’のチオラート基、式－Ｓｉ（R^a）$_3$のシリル基、及び式－Ｇｅ（R^a）$_3$のゲルマニル基からなる群から選択される１つ以上の置換基によってさらに置換されており；
ここで、各Ｒ’は、独立して、水素、C_{1-20}アルキル基、及びC_{6-20}アリール基からなる群から選択され；
ここで、各R^aは、独立して、水素、C_{1-8}アルキル基、C_{1-8}アルコキシ基、C_{6-20}アリールオキシ基及びC_{6-20}アリール基からなる群から選択される、
上記重合プロセス。
【請求項１１０】
請求項１０９に記載の重合プロセスであって、前記有機金属錯体が、式ＩＸ：

【化２７】



(IX)

で表され、

式中、Ｒ７、Ｒ８、Ｒ９及びＲ１０は、各々独立して、

ハロゲン；

水素；

Ｃ１－３０ヒドロカルビル基（このヒドロカルビル基は、非置換であるか、又はハロゲン原子、Ｃ１－２０アルキル基、Ｃ１－２０アルコキシ基、Ｃ７－２０アルキルアリール基、Ｃ７－２０アリールアルキル基、Ｃ６－２０アリール基、Ｃ６－２０アリールオキシ基、Ｃ７－２０アルキルアリールオキシ基、及びＣ７－２０アリールアルキルオキシ基からなる群から選択される１つ以上の置換基によってさらに置換されている）；

ヘテロ原子含有Ｃ１－３０ヒドロカルビル基（このヘテロ原子含有ヒドロカルビル基は、非置換であるか、又はハロゲン原子、Ｃ１－２０アルキル基、Ｃ１－２０アルコキシ基、Ｃ７－２０アルキルアリール基、Ｃ７－２０アリールアルキル基、Ｃ６－２０アリール基、Ｃ６－２０アリールオキシ基、Ｃ７－２０アルキルアリールオキシ基、及びＣ７－２０アリールアルキルオキシ基からなる群から選択される１つ以上の置換基によってさらに置換されている）；

オキシ基、－ＯＲ’；

アミド基、－ＮＲ’$_2$；

ホスフィド基、－ＰＲ’$_2$；

チオラート基、－ＳＲ’；

式－Ｓｉ（Ｒ^a）$_3$のシリル基；

式－Ｇｅ（Ｒ^a）$_3$のゲルマニル基；

からなる群から選択され；

ここで、Ｒ７、Ｒ８、Ｒ９及びＲ１０の２つの隣接する基は、任意に結合して環状ヒドロカルビル基又は環状ヘテロ原子含有ヒドロカルビル基を形成してもよく、環状ヒドロカルビル基又は環状ヘテロ原子含有ヒドロカルビル基は、非置換であるか、又はハロゲン原子、Ｃ１－２０アルキル基、Ｃ１－２０アルコキシ基、Ｃ７－２０アルキルアリール基、Ｃ７－２０アリールアルキル基、Ｃ６－２０アリール基、Ｃ６－２０アリールオキシ基、Ｃ７－２０アルキルアリールオキシ基、Ｃ７－２０アリールアルキルオキシ基、式－ＮＲ’$_2$のアミド基、式－ＰＲ’$_2$のホスフィド基、式－ＳＲ’のチオラート基、式－Ｓｉ（Ｒ^a）$_3$

のシリル基、及び式－Ｇｅ（Ｒ^{a}）$_{3}$のゲルマニル基からなる群から選択される１つ以上の置換基によってさらに置換されており；
ここで、各Ｒ’は、独立して、水素、Ｃ$_{1-20}$アルキル基、及びＣ$_{6-20}$アリール基からなる群から選択され；
ここで、各Ｒ^{a}は、独立して、水素、Ｃ$_{1-8}$アルキル基、Ｃ$_{1-8}$アルコキシ基、Ｃ$_{6-20}$アリールオキシ基及びＣ$_{6-20}$アリール基からなる群から選択される、
上記重合プロセス。
【請求項１１１】
ＭがＴｉである、請求項１１０に記載の重合プロセス。
【請求項１１２】
Ｒ^{7}、Ｒ^{8}、Ｒ^{9}及びＲ^{10}が、各々水素である、請求項１１０に記載の重合プロセス。
【請求項１１３】
Ｒ^{1}及びＲ^{2}が、各々独立して、非置換のＣ$_{1-30}$ヒドロカルビル基である、請求項１１０に記載の重合プロセス。
【請求項１１４】
Ｒ^{1}及びＲ^{2}が、各々独立して、イソプロピル、シクロヘキシル及びｔｅｒｔ－ブチルからなる群から選択される、請求項１１３に記載の重合プロセス。
【請求項１１５】
Ｒ^{23}が、非置換のＣ$_{1-30}$ヒドロカルビル基である、請求項１１０に記載の重合プロセス。
【請求項１１６】
Ｒ^{23}が、Ｃ$_{1-8}$アルキル基である、請求項１１５に記載の重合プロセス。
【請求項１１７】
Ｒ^{20}が、非置換のＣ$_{1-30}$ヒドロカルビル基である、請求項１１０に記載の重合プロセス。
【請求項１１８】
Ｒ^{20}が、非置換のＣ$_{1-8}$アルキル基である、請求項１１７に記載の重合プロセス。
【請求項１１９】
Ｒ^{20}が、非置換のＣ$_{1-30}$ヒドロカルビル基であり、Ｒ^{19}、Ｒ^{21}、Ｒ^{22}、Ｒ^{24}、Ｒ^{25}、Ｒ^{26}、及びＲ^{27}が、各々水素である、請求項１１０に記載の重合プロセス。
【請求項１２０】
Ｒ^{20}が、Ｃ$_{1-8}$アルキル基である、請求項１１９に記載の重合プロセス。
【請求項１２１】
各Ｘ^{1}が、独立して、Ｃ$_{1-6}$アルキル基、Ｃ$_{7-10}$アリールアルキル基、及びハロゲンからなる群から選択される、請求項１１０に記載の重合プロセス。
【請求項１２２】
各Ｘ^{1}が、独立して、メチル基及びＣｌからなる群から選択される、請求項１２１に記載の重合プロセス。
【請求項１２３】
触媒活性剤が、アルキルアルミノキサン共触媒、有機アルミニウム化合物、ホウ素系触媒活性剤、及びそれらの混合物からなる群から選択される、請求項８３～１２２のいずれか一項に記載の重合プロセス。
【請求項１２４】
ホウ素系触媒活性剤が、［（水素化牛脂アルキル）$_{2}$（Ｍｅ）ＮＨ］［Ｂ（Ｃ$_{6}$Ｆ$_{5}$）$_{4}$］；Ｎ，Ｎ－ジメチルアニリニウムテトラキス（ペンタフルオロフェニル）ボレート（「［Ｍｅ$_{2}$ＮＨＰｈ］［Ｂ（Ｃ$_{6}$Ｆ$_{5}$）$_{4}$］」）；及びトリフェニルメチリウムテトラキス（ペンタフルオロフェニル）ボレート（「［Ｐｈ$_{3}$Ｃ］［Ｂ（Ｃ$_{6}$Ｆ$_{5}$）$_{4}$］」）からなる群から選択される、請求項１２３に記載の重合プロセス。
【請求項１２５】

１つ以上のＣ３－Ｃ１２アルファ－オレフィンが、１－ブテン、１－ヘキセン、及び１－オクテンからなる群から選択される１つ以上のアルファ－オレフィンを含む、請求項８３～１２４のいずれか一項に記載の重合プロセス。

【請求項１２６】

重合プロセスが、エチレンを１－オクテンと重合することを含む、請求項８３～１２４のいずれか一項に記載の重合プロセス。

【請求項１２７】

重合プロセスが、溶媒中で行われる溶液相重合プロセスである、請求項８３～１２６のいずれか一項に記載の重合プロセス。

【請求項１２８】

溶液相重合プロセスが、少なくとも１６０℃の温度で行われる、請求項１２７に記載の重合プロセス。

【請求項１２９】

重合プロセスが、溶媒中で行われる連続溶液相重合プロセスである、請求項８３～１２６のいずれか一項に記載の重合プロセス。

【請求項１３０】

連続溶液相重合プロセスが、少なくとも１つの連続撹拌タンク反応器内で行われる、請求項１２９に記載の重合プロセス。

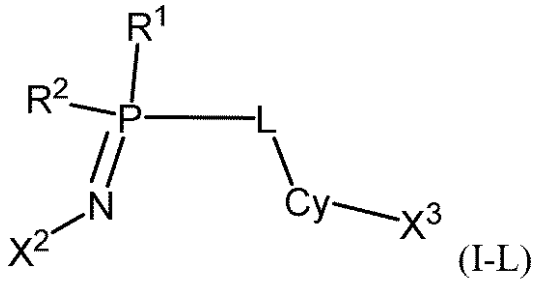
【請求項１３１】

連続溶液相重合プロセスが、少なくとも１６０℃の温度で行われる、請求項１２９又は１３０に記載の重合プロセス。

【請求項１３２】

プレメタル化化合物であって、式Ｉ－Ｌ：

【化２８】



(I-L)

で表され、

式中、

R^1及びR^2は、各々独立して、水素及びR^Xからなる群から選択されるか；又はR^1及びR^2は、それらが結合しているＰ原子と一緒になって、非置換であるか、又はハロゲン原子、Ｃ１－２０アルキル基、Ｃ１－２０アルコキシ基、Ｃ７－２０アルキルアリール基、Ｃ７－２０アリールアルキル基、Ｃ６－２０アリール基、Ｃ６－２０アリールオキシ基、Ｃ７－２０アルキルアリールオキシ基、及びＣ７－２０アリールアルキルオキシ基からなる群から選択される１つ以上の置換基によってさらに置換されている３－１０員複素環式基を形成し；

各R^Xは、独立して、ハロゲン原子；Ｃ１－３０ヒドロカルビル基（このヒドロカルビル基は、非置換であるか、又は１つ以上のハロゲン原子、Ｃ１－２０アルキル基、Ｃ１－２０アルコキシ基、Ｃ７－２０アルキルアリール基、Ｃ７－２０アリールアルキル基、Ｃ６－２０アリール基、Ｃ６－２０アリールオキシ基、Ｃ７－２０アルキルアリールオキシ基、及び／又はＣ７－２０アリールアルキルオキシ基によってさらに置換されている）；式－ＮＲ’$_2$のアミド基；式－Ｓｉ（R^a）$_3$のシリル基；式－Ｇｅ（R^a）$_3$のゲルマニル基

；及び式Ｎ＝Ｐ（Ｒ^{b}）（Ｒ^{c}）（Ｒ^{d}）のホスフィンイミン基からなる群から選択され；ここで、各Ｒ’は、独立して、水素、Ｃ$_{1-20}$アルキル基、及びＣ$_{6-20}$アリール基からなる群から選択され；ここで、各Ｒ^{a}は、独立して、水素、Ｃ$_{1-8}$アルキル基、Ｃ$_{1-8}$アルコキシ基、Ｃ$_{6-20}$アリールオキシ基及びＣ$_{6-20}$アリール基からなる群から選択され、Ｒ^{b}、Ｒ^{c}、Ｒ^{d}は、各々独立して、Ｃ$_{1-20}$アルキル基であり；

Ｃｙは、シクロペンタジエニル型部分であり、Ｌ及びＸ^{3}に共有結合しており；

Ｘ^{2}は、水素、又は式－Ｓｉ（Ｒ^{e}）$_{3}$のシリル基であり；

Ｘ^{3}は、水素、又は式－Ｓｉ（Ｒ^{e}）$_{3}$のシリル基、若しくは式Ｓｎ（Ｒ^{e}）$_{3}$のスタンニル基であり；

ここで、各Ｒ^{e}は、独立して、水素、Ｃ$_{1-8}$アルキル基、Ｃ$_{1-8}$アルコキシ基、Ｃ$_{6-20}$アリールオキシ基、及びＣ$_{6-20}$アリール基からなる群から選択され；

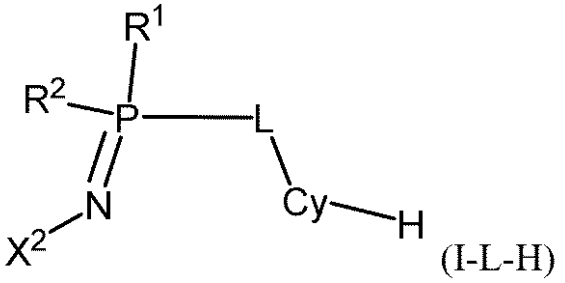
Ｌは、ＰとＣｙを連結する原子の連続鎖を含む架橋基であり、連続鎖は２個又は３個の原子を含む、

プレメタル化化合物。

【請求項１３３】

プレメタル化化合物であって、式Ｉ－Ｌ－Ｈ：

【化２９】



で表され、

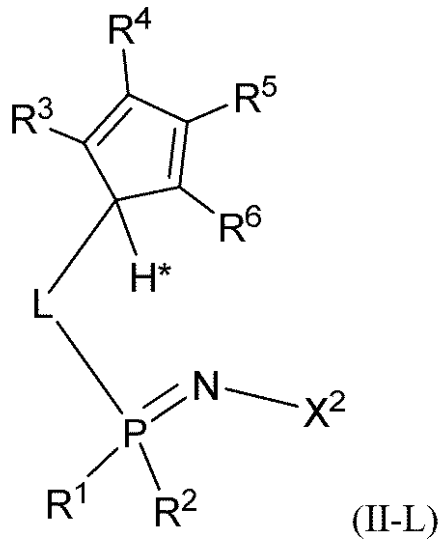
式中、

Ｒ^{1}及びＲ^{2}は、各々独立して、水素及びＲ^{X}からなる群から選択されるか；又はＲ^{1}及びＲ^{2}は、それらが結合しているＰ原子と一緒になって、非置換であるか、又はハロゲン原子、Ｃ$_{1-20}$アルキル基、Ｃ$_{1-20}$アルコキシ基、Ｃ$_{7-20}$アルキルアリール基、Ｃ$_{7-20}$アリールアルキル基、Ｃ$_{6-20}$アリール基、Ｃ$_{6-20}$アリールオキシ基、Ｃ$_{7-20}$アルキルアリールオキシ基、及びＣ$_{7-20}$アリールアルキルオキシ基からなる群から選択される１つ以上の置換基によってさらに置換されている３－１０員複素環式基を形成し；

各Ｒ^{X}は、独立して、ハロゲン原子；Ｃ$_{1-30}$ヒドロカルビル基（このヒドロカルビル基は、非置換であるか、又は１つ以上のハロゲン原子、Ｃ$_{1-20}$アルキル基、Ｃ$_{1-20}$アルコキシ基、Ｃ$_{7-20}$アルキルアリール基、Ｃ$_{7-20}$アリールアルキル基、Ｃ$_{6-20}$アリール基、Ｃ$_{6-20}$アリールオキシ基、Ｃ$_{7-20}$アルキルアリールオキシ基、及び／又はＣ$_{7-20}$アリールアルキルオキシ基によってさらに置換されている）；式－ＮＲ’$_{2}$のアミド基；式－Ｓｉ（Ｒ^{a}）$_{3}$のシリル基；式－Ｇｅ（Ｒ^{a}）$_{3}$のゲルマニル基；及び式Ｎ＝Ｐ（Ｒ^{b}）（Ｒ^{c}）（Ｒ^{d}）のホスフィンイミン基からなる群から選択され；ここで、各Ｒ’は、独立して、水素、Ｃ$_{1-20}$アルキル基、及びＣ$_{6-20}$アリール基からなる群から選択され；ここで、各Ｒ^{a}は、独立して、水素、Ｃ$_{1-8}$アルキル基、Ｃ$_{1-8}$アルコキシ基、Ｃ$_{6-20}$アリールオキシ基及びＣ$_{6-20}$アリール基からなる群から選択され、Ｒ^{b}、Ｒ^{c}、Ｒ^{d}は、各々独立して、Ｃ$_{1-20}$アルキル基であり；

Ｘ^{2}は、水素、又は式－Ｓｉ（Ｒ^{e}）$_{3}$のシリル基であり、ここで、各Ｒ^{e}は、独立して、水素、Ｃ$_{1-8}$アルキル基、Ｃ$_{1-8}$アルコキシ基、Ｃ$_{6-20}$アリールオキシ基及びＣ$_{6-20}$アリール基からなる群から選択され；

Ｃｙは、シクロペンタジエニル型部分であり、Ｌ及びＨに共有結合しており；
Ｌは、ＰとＣｙを連結する原子の連続鎖を含む架橋基であり、連続鎖は２個又は３個の原子を含む、
プレメタル化化合物。
【請求項１３４】
請求項１３３に記載のプレメタル化化合物であって、当該プレメタル化化合物は、式ＩＩ－Ｌ：
【化３０】



(II-L)

で表されるか、又はシクロペンタジエニル環内の水素Ｈ＊の移動によって得られる式ＩＩ－Ｌの二重結合異性体であり；
式中、Ｒ^{3}、Ｒ^{4}、Ｒ^{5}及びＲ^{6}は、各々独立して、
ハロゲン；
水素；
Ｃ$_{1-30}$ヒドロカルビル基（このヒドロカルビル基は、非置換であるか、又はハロゲン原子、Ｃ$_{1-20}$アルキル基、Ｃ$_{1-20}$アルコキシ基、Ｃ$_{7-20}$アルキルアリール基、Ｃ$_{7-20}$アリールアルキル基、Ｃ$_{6-20}$アリール基、Ｃ$_{6-20}$アリールオキシ基、Ｃ$_{7-20}$アルキルアリールオキシ基、及びＣ$_{7-20}$アリールアルキルオキシ基からなる群から選択される１つ以上の置換基によってさらに置換されている）；
ヘテロ原子含有Ｃ$_{1-30}$ヒドロカルビル基（このヘテロ原子含有ヒドロカルビル基は、非置換であるか、又はハロゲン原子、Ｃ$_{1-20}$アルキル基、Ｃ$_{1-20}$アルコキシ基、Ｃ$_{7-20}$アルキルアリール基、Ｃ$_{7-20}$アリールアルキル基、Ｃ$_{6-20}$アリール基、Ｃ$_{6-20}$アリールオキシ基、Ｃ$_{7-20}$アルキルアリールオキシ基、及びＣ$_{7-20}$アリールアルキルオキシ基からなる群から選択される１つ以上の置換基によってさらに置換されている）；
オキシ基、－ＯＲ’；
アミド基、－ＮＲ’$_{2}$；
ホスフィド基、－ＰＲ’$_{2}$；
チオラート基、－ＳＲ’；
式－Ｓｉ（Ｒ^{a}）$_{3}$のシリル基；
式－Ｇｅ（Ｒ^{a}）$_{3}$のゲルマニル基；
からなる群から選択され；
ここで、Ｒ^{3}、Ｒ^{4}、Ｒ^{5}及びＲ^{6}の２つの隣接する基は、任意に結合して環状ヒドロカルビル基又は環状ヘテロ原子含有ヒドロカルビル基を形成してもよく、環状ヒドロカル

ビル基又は環状ヘテロ原子含有ヒドロカルビル基は、非置換であるか、又はハロゲン原子、Ｃ１－２０アルキル基、Ｃ１－２０アルコキシ基、Ｃ７－２０アルキルアリール基、Ｃ７－２０アリールアルキル基、Ｃ６－２０アリール基、Ｃ６－２０アリールオキシ基、Ｃ７－２０アルキルアリールオキシ基、Ｃ７－２０アリールアルキルオキシ基、式－ＮＲ’$_2$のアミド基、式－ＰＲ’$_2$のホスフィド基、式－ＳＲ’のチオラート基、式－Ｓｉ（Ｒ^a）$_3$のシリル基、及び式－Ｇｅ（Ｒ^a）$_3$のゲルマニル基からなる群から選択される１つ以上の置換基によってさらに置換されており；

ここで、各Ｒ’は、独立して、水素、Ｃ$_{1-20}$アルキル基、及びＣ６－２０アリール基からなる群から選択され；

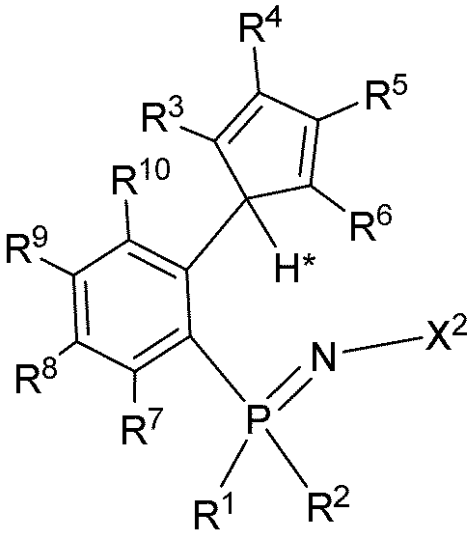
ここで、各Ｒ^{a}は、独立して、水素、Ｃ１－８アルキル基、Ｃ１－８アルコキシ基、Ｃ６－２０アリールオキシ基及びＣ６－２０アリール基からなる群から選択される、

上記プレメタル化化合物。

【請求項１３５】

請求項１３４に記載のプレメタル化化合物であって、当該プレメタル化化合物は、式ＩＩＩ－Ｌ：

【化３１】



(III-L)

で表されるか、又はシクロペンタジエニル環内の水素Ｈ＊の移動によって得られる式ＩＩＩ－Ｌの二重結合異性体であり；

式中、Ｒ^7、Ｒ^8、Ｒ^{9}及びＲ^{10}は、各々独立して、

ハロゲン；

水素；

Ｃ$_{1-30}$ヒドロカルビル基（このヒドロカルビル基は、非置換であるか、又はハロゲン原子、Ｃ１－２０アルキル基、Ｃ１－２０アルコキシ基、Ｃ７－２０アルキルアリール基、Ｃ７－２０アリールアルキル基、Ｃ６－２０アリール基、Ｃ６－２０アリールオキシ基、Ｃ７－２０アルキルアリールオキシ基、及びＣ７－２０アリールアルキルオキシ基からなる群から選択される１つ以上の置換基によってさらに置換されている）；

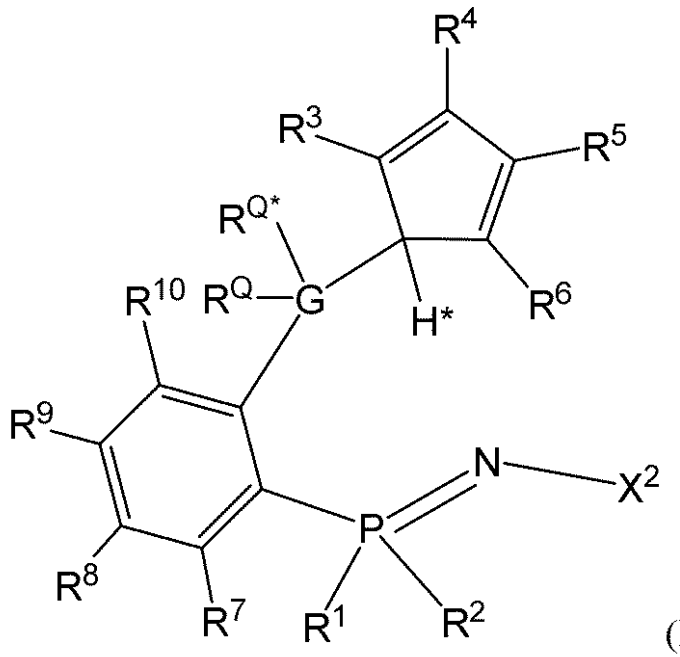
ヘテロ原子含有Ｃ$_{1-30}$ヒドロカルビル基（このヘテロ原子含有ヒドロカルビル基は、非置換であるか、又はハロゲン原子、Ｃ１－２０アルキル基、Ｃ１－２０アルコキシ基、Ｃ７－２０アルキルアリール基、Ｃ７－２０アリールアルキル基、Ｃ６－２０アリール基、Ｃ６－２０アリールオキシ基、Ｃ７－２０アルキルアリールオキシ基、及びＣ７－２０アリールアルキルオキシ基からなる群から選択される１つ以上の置換基によってさらに置換されている）；

オキシ基、－ＯＲ’；

アミド基、－ＮＲ’$_2$；
ホスフィド基、－ＰＲ’$_2$；
チオラート基、－ＳＲ’；
式－Ｓｉ（Ｒ^a）$_3$のシリル基；
式－Ｇｅ（Ｒ^a）$_3$のゲルマニル基；
からなる群から選択され；
ここで、Ｒ^7、Ｒ^8、Ｒ^{9}及びＲ^{10}の２つの隣接する基は、任意に結合して環状ヒドロカルビル基又は環状ヘテロ原子含有ヒドロカルビル基を形成してもよく、環状ヒドロカルビル基又は環状ヘテロ原子含有ヒドロカルビル基は、非置換であるか、又はハロゲン原子、Ｃ$_{1-20}$アルキル基、Ｃ$_{1-20}$アルコキシ基、Ｃ$_{7-20}$アルキルアリール基、Ｃ$_{7-20}$アリールアルキル基、Ｃ$_{6-20}$アリール基、Ｃ$_{6-20}$アリールオキシ基、Ｃ$_{7-20}$アルキルアリールオキシ基、Ｃ$_{7-20}$アリールアルキルオキシ基、式－ＮＲ’$_2$のアミド基、式－ＰＲ’$_2$のホスフィド基、式－ＳＲ’のチオラート基、式－Ｓｉ（Ｒ^a）$_3$のシリル基、及び式－Ｇｅ（Ｒ^a）$_3$のゲルマニル基からなる群から選択される１つ以上の置換基によってさらに置換されており；
ここで、各Ｒ’は、独立して、水素、Ｃ$_{1-20}$アルキル基、及びＣ$_{6-20}$アリール基からなる群から選択され；
ここで、各Ｒ^{a}は、独立して、水素、Ｃ$_{1-8}$アルキル基、Ｃ$_{1-8}$アルコキシ基、Ｃ$_{6-20}$アリールオキシ基及びＣ$_{6-20}$アリール基からなる群から選択される、
上記プレメタル化化合物。

【請求項１３６】
請求項１３４に記載のプレメタル化化合物であって、当該プレメタル化化合物は、式ＩＶ－Ｌ：

【化３２】



(IV-L)

で表されるか、又はシクロペンタジエニル環内の水素Ｈ＊の移動によって得られる式ＩＶ－Ｌの二重結合異性体であり；
式中、Ｇは、Ｃ又はＳｉであり；
式中、Ｒ^{Q}及びＲ^Q＊は、各々独立して、
ハロゲン；
水素；

Ｃ１－３０ヒドロカルビル基（このヒドロカルビル基は、非置換であるか、又はハロゲン原子、Ｃ１－２０アルキル基、Ｃ１－２０アルコキシ基、Ｃ７－２０アルキルアリール基、Ｃ７－２０アリールアルキル基、Ｃ６－２０アリール基、Ｃ６－２０アリールオキシ基、Ｃ７－２０アルキルアリールオキシ基、及びＣ７－２０アリールアルキルオキシ基からなる群から選択される１つ以上の置換基によってさらに置換されている）；

ヘテロ原子含有Ｃ１－３０ヒドロカルビル基（このヘテロ原子含有ヒドロカルビル基は、非置換であるか、又はハロゲン原子、Ｃ１－２０アルキル基、Ｃ１－２０アルコキシ基、Ｃ７－２０アルキルアリール基、Ｃ７－２０アリールアルキル基、Ｃ６－２０アリール基、Ｃ６－２０アリールオキシ基、Ｃ７－２０アルキルアリールオキシ基、及びＣ７－２０アリールアルキルオキシ基からなる群から選択される１つ以上の置換基によってさらに置換されている）；

ここで、R^Q及びR^{Q*}の基は、任意に結合して環状ヒドロカルビル基又は環状ヘテロ原子含有ヒドロカルビル基を形成してもよく、環状ヒドロカルビル基又は環状ヘテロ原子含有ヒドロカルビル基は、非置換であるか、又はハロゲン原子、Ｃ１－２０アルキル基、Ｃ１－２０アルコキシ基、Ｃ７－２０アルキルアリール基、Ｃ７－２０アリールアルキル基、Ｃ６－２０アリール基、Ｃ６－２０アリールオキシ基、Ｃ７－２０アルキルアリールオキシ基、Ｃ７－２０アリールアルキルオキシ基、式－ＮＲ’$_2$のアミド基、式－ＰＲ’$_2$のホスフィド基、式－ＳＲ’のチオラート基、式－Ｓｉ（R^a）$_3$のシリル基、及び式－Ｇｅ（R^a）$_3$のゲルマニル基からなる群から選択される１つ以上の置換基によってさらに置換されており；

式中、R^7、R^8、R^9及びR^{10}は、各々独立して、

ハロゲン；

水素；

Ｃ１－３０ヒドロカルビル基（このヒドロカルビル基は、非置換であるか、又はハロゲン原子、Ｃ１－２０アルキル基、Ｃ１－２０アルコキシ基、Ｃ７－２０アルキルアリール基、Ｃ７－２０アリールアルキル基、Ｃ６－２０アリール基、Ｃ６－２０アリールオキシ基、Ｃ７－２０アルキルアリールオキシ基、及びＣ７－２０アリールアルキルオキシ基からなる群から選択される１つ以上の置換基によってさらに置換されている）；

ヘテロ原子含有Ｃ１－３０ヒドロカルビル基（このヘテロ原子含有ヒドロカルビル基は、非置換であるか、又はハロゲン原子、Ｃ１－２０アルキル基、Ｃ１－２０アルコキシ基、Ｃ７－２０アルキルアリール基、Ｃ７－２０アリールアルキル基、Ｃ６－２０アリール基、Ｃ６－２０アリールオキシ基、Ｃ７－２０アルキルアリールオキシ基、及びＣ７－２０アリールアルキルオキシ基からなる群から選択される１つ以上の置換基によってさらに置換されている）；

オキシ基、－ＯＲ’；

アミド基、－ＮＲ’$_2$；

ホスフィド基、－ＰＲ’$_2$；

チオラート基、－ＳＲ’；

式－Ｓｉ（R^a）$_3$のシリル基；

式－Ｇｅ（R^a）$_3$のゲルマニル基；

からなる群から選択され；

ここで、R^7、R^8、R^9及びR^{10}の２つの隣接する基は、任意に結合して環状ヒドロカルビル基又は環状ヘテロ原子含有ヒドロカルビル基を形成してもよく、環状ヒドロカルビル基又は環状ヘテロ原子含有ヒドロカルビル基は、非置換であるか、又はハロゲン原子、Ｃ１－２０アルキル基、Ｃ１－２０アルコキシ基、Ｃ７－２０アルキルアリール基、Ｃ７－２０アリールアルキル基、Ｃ６－２０アリール基、Ｃ６－２０アリールオキシ基、Ｃ７－２０アルキルアリールオキシ基、Ｃ７－２０アリールアルキルオキシ基、式－ＮＲ’$_2$のアミド基、式－ＰＲ’$_2$のホスフィド基、式－ＳＲ’のチオラート基、式－Ｓｉ（R^a）$_3$のシリル基、及び式－Ｇｅ（R^a）$_3$のゲルマニル基からなる群から選択される１つ以上の置換基によってさらに置換されており；

ここで、各Ｒ’は、独立して、水素、Ｃ１－２０アルキル基、及びＣ６－２０アリール基からなる群から選択され；

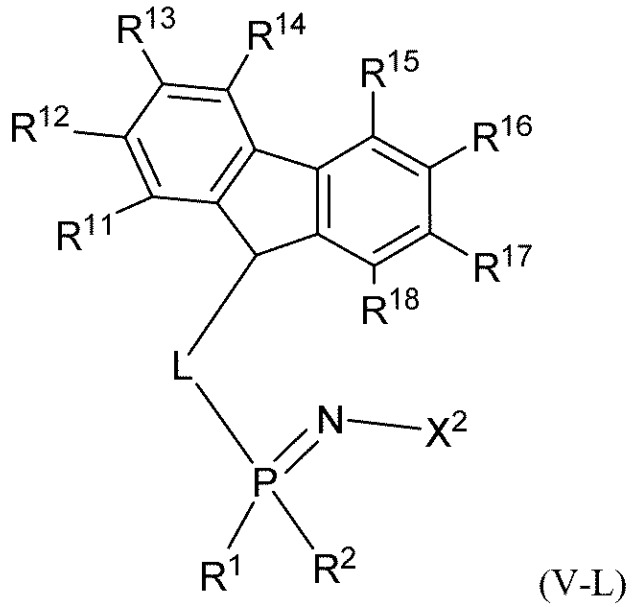
ここで、各Ｒａは、独立して、水素、Ｃ１－８アルキル基、Ｃ１－８アルコキシ基、Ｃ６－２０アリールオキシ基及びＣ６－２０アリール基からなる群から選択される、

上記プレメタル化化合物。

【請求項１３７】

請求項１３３に記載のプレメタル化化合物であって、当該プレメタル化化合物は、式Ｖ－Ｌ：

【化３３】



(V-L)

で表され、

式中、Ｒ１１、Ｒ１２、Ｒ１３、Ｒ１４、Ｒ１５、Ｒ１６、Ｒ１７、Ｒ１８は、各々独立して、

ハロゲン；

水素；

Ｃ１－３０ヒドロカルビル基（このヒドロカルビル基は、非置換であるか、又はハロゲン原子、Ｃ１－２０アルキル基、Ｃ１－２０アルコキシ基、Ｃ７－２０アルキルアリール基、Ｃ７－２０アリールアルキル基、Ｃ６－２０アリール基、Ｃ６－２０アリールオキシ基、Ｃ７－２０アルキルアリールオキシ基、及びＣ７－２０アリールアルキルオキシ基からなる群から選択される１つ以上の置換基によってさらに置換されている）；

ヘテロ原子含有Ｃ１－３０ヒドロカルビル基（このヘテロ原子含有ヒドロカルビル基は、非置換であるか、又はハロゲン原子、Ｃ１－２０アルキル基、Ｃ１－２０アルコキシ基、Ｃ７－２０アルキルアリール基、Ｃ７－２０アリールアルキル基、Ｃ６－２０アリール基、Ｃ６－２０アリールオキシ基、Ｃ７－２０アルキルアリールオキシ基、及びＣ７－２０アリールアルキルオキシ基からなる群から選択される１つ以上の置換基によってさらに置換されている）；

オキシ基、－ＯＲ’；

アミド基、－ＮＲ’$_2$；

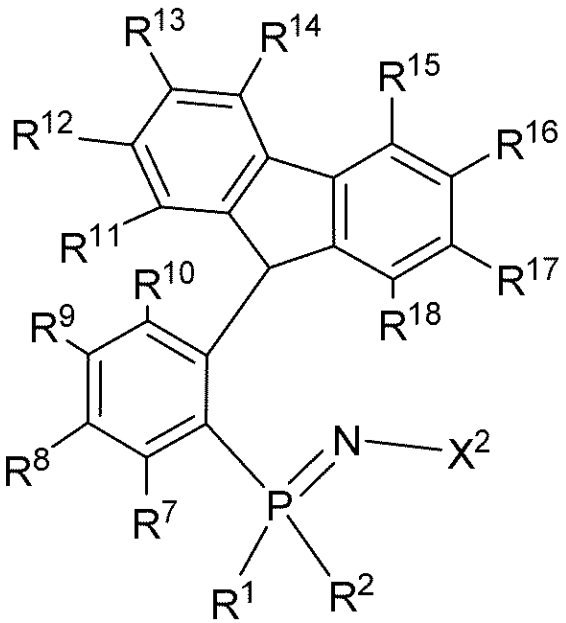
ホスフィド基、－ＰＲ’$_2$；

チオラート基、－ＳＲ’；

式－Ｓｉ（Ｒａ）$_3$のシリル基；

式－Ｇｅ（Ｒａ）$_3$のゲルマニル基；

からなる群から選択され；
ここで、R^{11}、R^{12}、R^{13}、R^{14}、R^{15}、R^{16}、R^{17}、R^{18}の２つの隣接する基は、任意に結合して環状ヒドロカルビル基又は環状ヘテロ原子含有ヒドロカルビル基を形成してもよく、環状ヒドロカルビル基又は環状ヘテロ原子含有ヒドロカルビル基は、非置換であるか、又はハロゲン原子、C_{1-20}アルキル基、C_{1-20}アルコキシ基、C_{7-20}アルキルアリール基、C_{7-20}アリールアルキル基、C_{6-20}アリール基、C_{6-20}アリールオキシ基、C_{7-20}アルキルアリールオキシ基、C_{7-20}アリールアルキルオキシ基、式－NR'_2のアミド基、式－PR'_2のホスフィド基、式－SR'のチオラート基、式－$Si(R^a)_3$のシリル基、及び式－$Ge(R^a)_3$のゲルマニル基からなる群から選択される１つ以上の置換基によってさらに置換されており；
ここで、各R'は、独立して、水素、C_{1-20}アルキル基、及びC_{6-20}アリール基からなる群から選択され；
ここで、各R^aは、独立して、水素、C_{1-8}アルキル基、C_{1-8}アルコキシ基、C_{6-20}アリールオキシ基及びC_{6-20}アリール基からなる群から選択される、
上記プレメタル化化合物。
【請求項１３８】
請求項１３７に記載のプレメタル化化合物であって、当該プレメタル化化合物は、式ＶＩ－Ｌ：
【化３４】

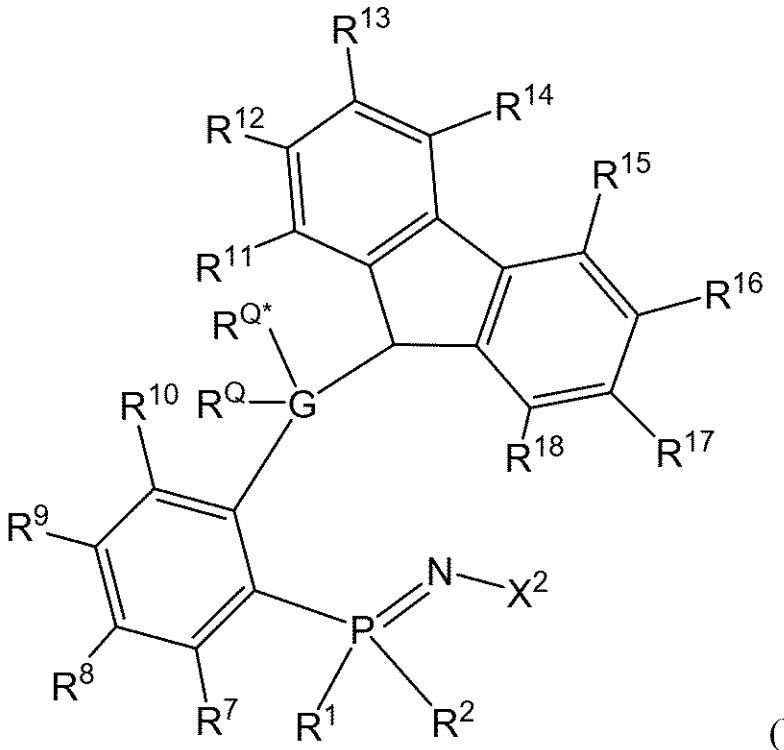


(VI-L)

で表され、
式中、R^7、R^8、R^9及びR^{10}は、各々独立して、
ハロゲン；
水素；
C_{1-30}ヒドロカルビル基（このヒドロカルビル基は、非置換であるか、又はハロゲン原子、C_{1-20}アルキル基、C_{1-20}アルコキシ基、C_{7-20}アルキルアリール基、C_{7-20}アリールアルキル基、C_{6-20}アリール基、C_{6-20}アリールオキシ基、C_{7-20}アルキルアリールオキシ基、及びC_{7-20}アリールアルキルオキシ基からなる群から選択される１つ以上の置換基によってさらに置換されている）；
ヘテロ原子含有C_{1-30}ヒドロカルビル基（このヘテロ原子含有ヒドロカルビル基は、非置換であるか、又はハロゲン原子、C_{1-20}アルキル基、C_{1-20}アルコキシ基、C_{7-20}アルキルアリール基、C_{7-20}アリールアルキル基、C_{6-20}アリール基、

Ｃ６－２０アリールオキシ基、Ｃ７－２０アルキルアリールオキシ基、及びＣ７－２０アリールアルキルオキシ基からなる群から選択される１つ以上の置換基によってさらに置換されている）；
　オキシ基、－ＯＲ’；
　アミド基、－ＮＲ’2；
　ホスフィド基、－ＰＲ’2；
　チオラート基、－ＳＲ’；
　式－Ｓｉ（Ｒａ）3のシリル基；
　式－Ｇｅ（Ｒａ）3のゲルマニル基；
からなる群から選択され；
　ここで、Ｒ7、Ｒ8、Ｒ9及びＲ10の２つの隣接する基は、任意に結合して環状ヒドロカルビル基又は環状ヘテロ原子含有ヒドロカルビル基を形成してもよく、環状ヒドロカルビル基又は環状ヘテロ原子含有ヒドロカルビル基は、非置換であるか、又はハロゲン原子、Ｃ１－２０アルキル基、Ｃ１－２０アルコキシ基、Ｃ７－２０アルキルアリール基、Ｃ７－２０アリールアルキル基、Ｃ６－２０アリール基、Ｃ６－２０アリールオキシ基、Ｃ７－２０アルキルアリールオキシ基、Ｃ７－２０アリールアルキルオキシ基、式－ＮＲ’2のアミド基、式－ＰＲ’2のホスフィド基、式－ＳＲ’のチオラート基、式－Ｓｉ（Ｒａ）3のシリル基、及び式－Ｇｅ（Ｒａ）3のゲルマニル基からなる群から選択される１つ以上の置換基によってさらに置換されており；
　ここで、各Ｒ’は、独立して、水素、Ｃ1－２０アルキル基、及びＣ６－２０アリール基からなる群から選択され；
　ここで、各Ｒａは、独立して、水素、Ｃ１－８アルキル基、Ｃ１－８アルコキシ基、Ｃ６－２０アリールオキシ基及びＣ６－２０アリール基からなる群から選択される、
上記プレメタル化化合物。
【請求項１３９】
　Ｒ7、Ｒ8、Ｒ9及びＲ10が、各々水素である、請求項１３８に記載のプレメタル化化合物。
【請求項１４０】
　Ｒ1及びＲ2が、各々独立して、非置換のＣ１－３０ヒドロカルビル基である、請求項１３８に記載のプレメタル化化合物。
【請求項１４１】
　Ｒ1及びＲ2が、各々独立して、イソプロピル、シクロヘキシル及びｔｅｒｔ－ブチルからなる群から選択される、請求項１４０に記載のプレメタル化化合物。
【請求項１４２】
　Ｒ12及びＲ17が、各々独立して、非置換のＣ１－３０ヒドロカルビル基であり、Ｒ11、Ｒ13、Ｒ14、Ｒ15、Ｒ16及びＲ18が、各々水素である、請求項１３８に記載のプレメタル化化合物。
【請求項１４３】
　Ｒ12及びＲ17が、各々ｔｅｒｔ－ブチル基である、請求項１４２に記載のプレメタル化化合物。
【請求項１４４】
　請求項１３７に記載のプレメタル化化合物であって、当該プレメタル化化合物は、式ＶＩＩ－Ｌ：

【化３５】

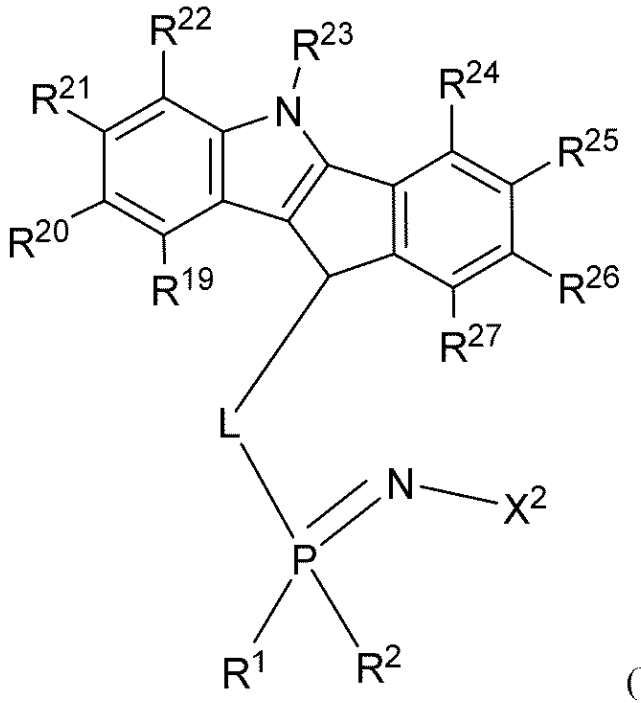


(VII-L)

で表され、
式中、Ｇは、Ｃ又はＳｉであり；
式中、R^{Q}及びR^{Q*}は、各々独立して、
ハロゲン；
水素；
C_{1-30}ヒドロカルビル基（このヒドロカルビル基は、非置換であるか、又はハロゲン原子、C_{1-20}アルキル基、C_{1-20}アルコキシ基、C_{7-20}アルキルアリール基、C_{7-20}アリールアルキル基、C_{6-20}アリール基、C_{6-20}アリールオキシ基、C_{7-20}アルキルアリールオキシ基、及びC_{7-20}アリールアルキルオキシ基からなる群から選択される１つ以上の置換基によってさらに置換されている）；
ヘテロ原子含有C_{1-30}ヒドロカルビル基（このヘテロ原子含有ヒドロカルビル基は、非置換であるか、又はハロゲン原子、C_{1-20}アルキル基、C_{1-20}アルコキシ基、C_{7-20}アルキルアリール基、C_{7-20}アリールアルキル基、C_{6-20}アリール基、C_{6-20}アリールオキシ基、C_{7-20}アルキルアリールオキシ基、及びC_{7-20}アリールアルキルオキシ基からなる群から選択される１つ以上の置換基によってさらに置換されている）；
ここで、R^{Q}及びR^{Q*}の基は、任意に結合して環状ヒドロカルビル基又は環状ヘテロ原子含有ヒドロカルビル基を形成してもよく、環状ヒドロカルビル基又は環状ヘテロ原子含有ヒドロカルビル基は、非置換であるか、又はハロゲン原子、C_{1-20}アルキル基、C_{1-20}アルコキシ基、C_{7-20}アルキルアリール基、C_{7-20}アリールアルキル基、C_{6-20}アリール基、C_{6-20}アリールオキシ基、C_{7-20}アルキルアリールオキシ基、C_{7-20}アリールアルキルオキシ基、式－ＮＲ’$_2$のアミド基、式－ＰＲ’$_2$のホスフィド基、式－ＳＲ’のチオラート基、式－Ｓｉ（R^{a}）$_3$のシリル基、及び式－Ｇｅ（R^{a}）$_3$のゲルマニル基からなる群から選択される１つ以上の置換基によってさらに置換されており；
式中、R^{7}、R^{8}、R^{9}及びR^{10}は、各々独立して、
ハロゲン；

水素；
C_{1-30}ヒドロカルビル基（このヒドロカルビル基は、非置換であるか、又はハロゲン原子、C_{1-20}アルキル基、C_{1-20}アルコキシ基、C_{7-20}アルキルアリール基、C_{7-20}アリールアルキル基、C_{6-20}アリール基、C_{6-20}アリールオキシ基、C_{7-20}アルキルアリールオキシ基、及びC_{7-20}アリールアルキルオキシ基からなる群から選択される１つ以上の置換基によってさらに置換されている）；
ヘテロ原子含有C_{1-30}ヒドロカルビル基（このヘテロ原子含有ヒドロカルビル基は、非置換であるか、又はハロゲン原子、C_{1-20}アルキル基、C_{1-20}アルコキシ基、C_{7-20}アルキルアリール基、C_{7-20}アリールアルキル基、C_{6-20}アリール基、C_{6-20}アリールオキシ基、C_{7-20}アルキルアリールオキシ基、及びC_{7-20}アリールアルキルオキシ基からなる群から選択される１つ以上の置換基によってさらに置換されている）；
オキシ基、－ＯＲ’；
アミド基、－NR'_2；
ホスフィド基、－PR'_2；
チオラート基、－ＳＲ’；
式－$Si(R^a)_3$のシリル基；
式－$Ge(R^a)_3$のゲルマニル基；
からなる群から選択され；
ここで、R^7、R^8、R^9及びR^{10}の２つの隣接する基は、任意に結合して環状ヒドロカルビル基又は環状ヘテロ原子含有ヒドロカルビル基を形成してもよく、環状ヒドロカルビル基又は環状ヘテロ原子含有ヒドロカルビル基は、非置換であるか、又はハロゲン原子、C_{1-20}アルキル基、C_{1-20}アルコキシ基、C_{7-20}アルキルアリール基、C_{7-20}アリールアルキル基、C_{6-20}アリール基、C_{6-20}アリールオキシ基、C_{7-20}アルキルアリールオキシ基、C_{7-20}アリールアルキルオキシ基、式－NR'_2のアミド基、式－PR'_2のホスフィド基、式－ＳＲ’のチオラート基、式－$Si(R^a)_3$のシリル基、及び式－$Ge(R^a)_3$のゲルマニル基からなる群から選択される１つ以上の置換基によってさらに置換されており；
ここで、各Ｒ’は、独立して、水素、C_{1-20}アルキル基、及びC_{6-20}アリール基からなる群から選択され；
ここで、各R^aは、独立して、水素、C_{1-8}アルキル基、C_{1-8}アルコキシ基、C_{6-20}アリールオキシ基及びC_{6-20}アリール基からなる群から選択される、
上記プレメタル化化合物。
【請求項１４５】
R^7、R^8、R^9及びR^{10}が、各々水素である、請求項１４４に記載のプレメタル化化合物。
【請求項１４６】
R^1及びR^2が、各々独立して、非置換のC_{1-30}ヒドロカルビル基である、請求項１４４に記載のプレメタル化化合物。
【請求項１４７】
R^1及びR^2が、各々独立して、イソプロピル、シクロヘキシル及びｔｅｒｔ－ブチルからなる群から選択される、請求項１４６に記載のプレメタル化化合物。
【請求項１４８】
R^{12}及びR^{17}が、各々独立して、非置換のC_{1-30}ヒドロカルビル基であり、R^{11}、R^{13}、R^{14}、R^{15}、R^{16}及びR^{18}が、各々水素である、請求項１４４に記載のプレメタル化化合物。
【請求項１４９】
R^{12}及びR^{17}が、各々ｔｅｒｔ－ブチル基である、請求項１４８に記載のプレメタル化化合物。
【請求項１５０】

Ｇが炭素である、請求項１４４に記載のプレメタル化化合物。
【請求項１５１】
Ｒ^{Q}及びＲ^{Q}＊が、各々独立して、水素、Ｃ$_{1-20}$アルキル基及びＣ$_{6-20}$アリール基からなる群から選択される、請求項１５０に記載のプレメタル化化合物。
【請求項１５２】
Ｒ^{Q}が水素であり、Ｒ^{Q}＊がＣ$_{1-8}$アルキル基である、請求項１５０に記載のプレメタル化化合物。
【請求項１５３】
請求項１３３に記載のプレメタル化化合物であって、当該プレメタル化化合物は、式ＶＩＩＩ－Ｌ：
【化３６】

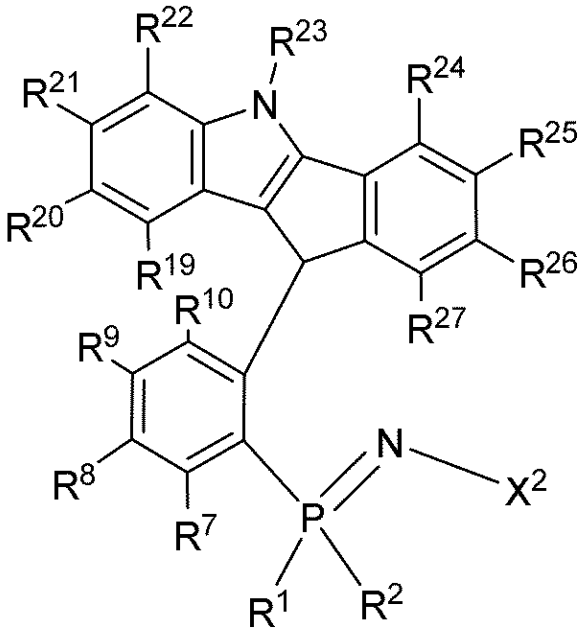


(VIII-L)

で表され、
式中、Ｒ^{23}は、
水素；
Ｃ$_{1-30}$ヒドロカルビル基（このヒドロカルビル基は、非置換であるか、又はハロゲン原子、Ｃ$_{1-20}$アルキル基、Ｃ$_{1-20}$アルコキシ基、Ｃ$_{7-20}$アルキルアリール基、Ｃ$_{7-20}$アリールアルキル基、Ｃ$_{6-20}$アリール基、Ｃ$_{6-20}$アリールオキシ基、Ｃ$_{7-20}$アルキルアリールオキシ基、及びＣ$_{7-20}$アリールアルキルオキシ基からなる群から選択される１つ以上の置換基によってさらに置換されている）；
ヘテロ原子含有Ｃ$_{1-30}$ヒドロカルビル基（このヘテロ原子含有ヒドロカルビル基は、非置換であるか、又はハロゲン原子、Ｃ$_{1-20}$アルキル基、Ｃ$_{1-20}$アルコキシ基、Ｃ$_{7-20}$アルキルアリール基、Ｃ$_{7-20}$アリールアルキル基、Ｃ$_{6-20}$アリール基、Ｃ$_{6-20}$アリールオキシ基、Ｃ$_{7-20}$アルキルアリールオキシ基、及びＣ$_{7-20}$アリールアルキルオキシ基からなる群から選択される１つ以上の置換基によってさらに置換されている）；
からなる群から選択され；
式中、Ｒ^{19}、Ｒ^{20}、Ｒ^{21}、Ｒ^{22}、Ｒ^{24}、Ｒ^{25}、Ｒ^{26}、及びＲ^{27}は、各々独立して、
ハロゲン；

水素；
C_{1-30}ヒドロカルビル基（このヒドロカルビル基は、非置換であるか、又はハロゲン原子、C_{1-20}アルキル基、C_{1-20}アルコキシ基、C_{7-20}アルキルアリール基、C_{7-20}アリールアルキル基、C_{6-20}アリール基、C_{6-20}アリールオキシ基、C_{7-20}アルキルアリールオキシ基、及びC_{7-20}アリールアルキルオキシ基からなる群から選択される１つ以上の置換基によってさらに置換されている）；
ヘテロ原子含有C_{1-30}ヒドロカルビル基（このヘテロ原子含有ヒドロカルビル基は、非置換であるか、又はハロゲン原子、C_{1-20}アルキル基、C_{1-20}アルコキシ基、C_{7-20}アルキルアリール基、C_{7-20}アリールアルキル基、C_{6-20}アリール基、C_{6-20}アリールオキシ基、C_{7-20}アルキルアリールオキシ基、及びC_{7-20}アリールアルキルオキシ基からなる群から選択される１つ以上の置換基によってさらに置換されている）；
オキシ基、－ＯＲ’；
アミド基、$-NR'_2$；
ホスフィド基、$-PR'_2$；
チオラート基、－ＳＲ’；
式－Ｓｉ（R^a）$_3$のシリル基；
式－Ｇｅ（R^a）$_3$のゲルマニル基；
からなる群から選択され；
ここで、R^{19}、R^{20}、R^{21}、R^{22}、R^{24}、R^{25}、R^{26}、及びR^{27}の２つの隣接する基は、任意に結合して環状ヒドロカルビル基又は環状ヘテロ原子含有ヒドロカルビル基を形成してもよく、環状ヒドロカルビル基又は環状ヘテロ原子含有ヒドロカルビル基は、非置換であるか、又はハロゲン原子、C_{1-20}アルキル基、C_{1-20}アルコキシ基、C_{7-20}アルキルアリール基、C_{7-20}アリールアルキル基、C_{6-20}アリール基、C_{6-20}アリールオキシ基、C_{7-20}アルキルアリールオキシ基、C_{7-20}アリールアルキルオキシ基、式$-NR'_2$のアミド基、式$-PR'_2$のホスフィド基、式－ＳＲ’のチオラート基、式－Ｓｉ（R^a）$_3$のシリル基、及び式－Ｇｅ（R^a）$_3$のゲルマニル基からなる群から選択される１つ以上の置換基によってさらに置換されており；
ここで、各Ｒ’は、独立して、水素、C_{1-20}アルキル基、及びC_{6-20}アリール基からなる群から選択され；
ここで、各R^aは、独立して、水素、C_{1-8}アルキル基、C_{1-8}アルコキシ基、C_{6-20}アリールオキシ基及びC_{6-20}アリール基からなる群から選択される、
上記プレメタル化化合物。
【請求項１５４】
請求項１５３に記載のプレメタル化化合物であって、当該プレメタル化化合物は、式ＩＸ－Ｌ：

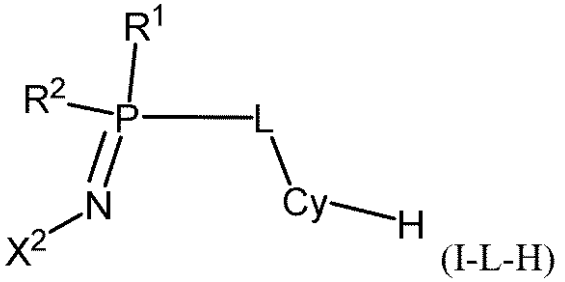
【化３７】



(IX-L)

で表され、
式中、Ｒ^{7}、Ｒ^{8}、Ｒ^{9}及びＲ^{10}は、各々独立して、
ハロゲン；
水素；
Ｃ$_{1-30}$ヒドロカルビル基（このヒドロカルビル基は、非置換であるか、又はハロゲン原子、Ｃ$_{1-20}$アルキル基、Ｃ$_{1-20}$アルコキシ基、Ｃ$_{7-20}$アルキルアリール基、Ｃ$_{7-20}$アリールアルキル基、Ｃ$_{6-20}$アリール基、Ｃ$_{6-20}$アリールオキシ基、Ｃ$_{7-20}$アルキルアリールオキシ基、及びＣ$_{7-20}$アリールアルキルオキシ基からなる群から選択される１つ以上の置換基によってさらに置換されている）；
ヘテロ原子含有Ｃ$_{1-30}$ヒドロカルビル基（このヘテロ原子含有ヒドロカルビル基は、非置換であるか、又はハロゲン原子、Ｃ$_{1-20}$アルキル基、Ｃ$_{1-20}$アルコキシ基、Ｃ$_{7-20}$アルキルアリール基、Ｃ$_{7-20}$アリールアルキル基、Ｃ$_{6-20}$アリール基、Ｃ$_{6-20}$アリールオキシ基、Ｃ$_{7-20}$アルキルアリールオキシ基、及びＣ$_{7-20}$アリールアルキルオキシ基からなる群から選択される１つ以上の置換基によってさらに置換されている）；
オキシ基、－ＯＲ’；
アミド基、－ＮＲ’$_2$；
ホスフィド基、－ＰＲ’$_2$；
チオラート基、－ＳＲ’；
式－Ｓｉ（Ｒ^{a}）$_3$のシリル基；
式－Ｇｅ（Ｒ^{a}）$_3$のゲルマニル基；
からなる群から選択され；
ここで、Ｒ^{7}、Ｒ^{8}、Ｒ^{9}及びＲ^{10}の２つの隣接する基は、任意に結合して環状ヒドロカルビル基又は環状ヘテロ原子含有ヒドロカルビル基を形成してもよく、環状ヒドロカルビル基又は環状ヘテロ原子含有ヒドロカルビル基は、非置換であるか、又はハロゲン原子、Ｃ$_{1-20}$アルキル基、Ｃ$_{1-20}$アルコキシ基、Ｃ$_{7-20}$アルキルアリール基、Ｃ$_{7-20}$アリールアルキル基、Ｃ$_{6-20}$アリール基、Ｃ$_{6-20}$アリールオキシ基、Ｃ$_{7-20}$アルキルアリールオキシ基、Ｃ$_{7-20}$アリールアルキルオキシ基、式－ＮＲ’$_2$のアミド基、式－ＰＲ’$_2$のホスフィド基、式－ＳＲ’のチオラート基、式－Ｓｉ（Ｒ^{a}）$_3$

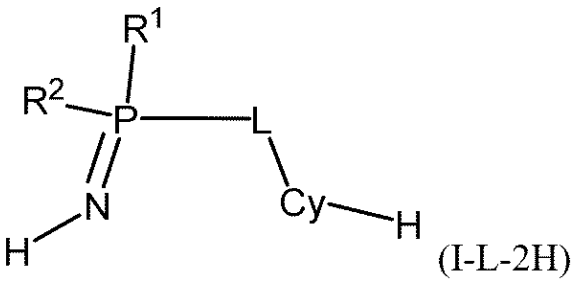
のシリル基、及び式－Ｇｅ（Ｒ^{a}）$_{3}$のゲルマニル基からなる群から選択される１つ以上の置換基によってさらに置換されており；
ここで、各Ｒ’は、独立して、水素、Ｃ$_{1-20}$アルキル基、及びＣ$_{6-20}$アリール基からなる群から選択され；
ここで、各Ｒ^{a}は、独立して、水素、Ｃ$_{1-8}$アルキル基、Ｃ$_{1-8}$アルコキシ基、Ｃ$_{6-20}$アリールオキシ基及びＣ$_{6-20}$アリール基からなる群から選択される、
上記プレメタル化化合物。
【請求項１５５】
Ｒ^{7}、Ｒ^{8}、Ｒ^{9}及びＲ^{10}が、各々水素である、請求項１５４に記載のプレメタル化化合物。
【請求項１５６】
Ｒ^{1}及びＲ^{2}が、各々独立して、非置換のＣ$_{1-30}$ヒドロカルビル基である、請求項１５４に記載のプレメタル化化合物。
【請求項１５７】
Ｒ^{1}及びＲ^{2}が、各々独立して、イソプロピル、シクロヘキシル及びｔｅｒｔ－ブチルからなる群から選択される、請求項１５６に記載のプレメタル化化合物。
【請求項１５８】
Ｒ^{23}が、非置換のＣ$_{1-30}$ヒドロカルビル基である、請求項１５４に記載のプレメタル化化合物。
【請求項１５９】
Ｒ^{23}が、Ｃ$_{1-8}$アルキル基である、請求項１５８に記載のプレメタル化化合物。
【請求項１６０】
Ｒ^{20}が、非置換のＣ$_{1-30}$ヒドロカルビル基である、請求項１５４に記載のプレメタル化化合物。
【請求項１６１】
Ｒ^{20}が、非置換のＣ$_{1-8}$アルキル基である、請求項１６０に記載のプレメタル化化合物。
【請求項１６２】
Ｒ^{20}が、非置換のＣ$_{1-30}$ヒドロカルビル基であり、Ｒ^{19}、Ｒ^{21}、Ｒ^{22}、Ｒ^{24}、Ｒ^{25}、Ｒ^{26}、及びＲ^{27}が、各々水素である、請求項１５４に記載のプレメタル化化合物。
【請求項１６３】
Ｒ^{20}が、Ｃ$_{1-8}$アルキル基である、請求項１６２に記載のプレメタル化化合物。
【請求項１６４】
Ｘ^{2}が、水素又はトリメチルシリル基、－ＳｉＭｅ$_{3}$である、請求項１３３～１６３のいずれか一項に記載のプレメタル化化合物。
【請求項１６５】
有機金属錯体を作製するプロセスであって、当該プロセスは、式Ｉ－Ｌ－Ｈ：
【化３８】



(I-L-H)

で表される化合物を、式ＭＸ＊$_{4}$を有する第４族遷移金属化合物と反応させることを含み

、
式中、
Mは、Ｔｉ、Ｚｒ又はＨｆであり；
R^1及びR^2は、各々独立して、水素及びR^Xからなる群から選択されるか；又はR^1及びR^2は、それらが結合しているＰ原子と一緒になって、非置換であるか、又はハロゲン原子、C_{1-20}アルキル基、C_{1-20}アルコキシ基、C_{7-20}アルキルアリール基、C_{7-20}アリールアルキル基、C_{6-20}アリール基、C_{6-20}アリールオキシ基、C_{7-20}アルキルアリールオキシ基、及びC_{7-20}アリールアルキルオキシ基からなる群から選択される１つ以上の置換基によってさらに置換されている３－１０員複素環式基を形成し；
各R^Xは、独立して、ハロゲン原子；C_{1-30}ヒドロカルビル基（このヒドロカルビル基は、非置換であるか、又は１つ以上のハロゲン原子、C_{1-20}アルキル基、C_{1-20}アルコキシ基、C_{7-20}アルキルアリール基、C_{7-20}アリールアルキル基、C_{6-20}アリール基、C_{6-20}アリールオキシ基、C_{7-20}アルキルアリールオキシ基、及び／又はC_{7-20}アリールアルキルオキシ基によってさらに置換されている）；式－NR'_2のアミド基；式－Ｓｉ（R^a）$_3$のシリル基；式－Ｇｅ（R^a）$_3$のゲルマニル基；及び式Ｎ＝Ｐ（R^b）（R^c）（R^d）のホスフィンイミン基からなる群から選択され；ここで、各Ｒ’は、独立して、水素、C_{1-20}アルキル基、及びC_{6-20}アリール基からなる群から選択され；ここで、各R^aは、独立して、水素、C_{1-8}アルキル基、C_{1-8}アルコキシ基、C_{6-20}アリールオキシ基及びC_{6-20}アリール基からなる群から選択され、R^b、R^c、R^dは、各々独立して、C_{1-20}アルキル基であり；
X^2は、式－Ｓｉ（R^e）$_3$のシリル基であり、ここで、各R^eは、独立して、水素、C_{1-8}アルキル基、C_{1-8}アルコキシ基、C_{6-20}アリールオキシ基、及びC_{6-20}アリール基からなる群から選択され；
Ｃｙは、シクロペンタジエニル型部分であり、Ｌ及びＨに共有結合しており；
Ｌは、ＰとＣｙを連結する原子の連続鎖を含む架橋基であり、連続鎖は２個又は３個の原子を含み；
各Ｘ＊は、独立して、ハロゲン、水素、式－NR^E_2のアミド基、C_{1-20}アルキル基、C_{1-20}アルコキシ基、C_{7-20}アルキルアリール基、C_{7-20}アリールアルキル基、C_{6-20}アリール基、C_{6-20}アリールオキシド基、C_{7-20}アルキルアリールオキシ基、及びC_{7-20}アリールアルキルオキシ基からなる群から選択され；ここで、各R^Eは、独立して、水素、C_{1-20}アルキル基、及びC_{6-20}アリール基からなる群から選択される、
上記プロセス。
【請求項１６６】
有機金属錯体を作製するプロセスであって、当該プロセスは、式Ｉ－Ｌ－２Ｈ：
【化３９】



(I-L-2H)

で表される化合物を塩基と反応させ、次いで、式MX^*_4を有する第４族遷移金属化合物と反応させることを含み、
式中、

Ｍは、Ｔｉ、Ｚｒ又はＨｆであり；

R^1及びR^2は、各々独立して、水素及びR^Xからなる群から選択されるか；又はR^1及びR^2は、それらが結合しているＰ原子と一緒になって、非置換であるか、又はハロゲン原子、C_{1-20}アルキル基、C_{1-20}アルコキシ基、C_{7-20}アルキルアリール基、C_{7-20}アリールアルキル基、C_{6-20}アリール基、C_{6-20}アリールオキシ基、C_{7-20}アルキルアリールオキシ基、及びC_{7-20}アリールアルキルオキシ基からなる群から選択される１つ以上の置換基によってさらに置換されている３－１０員複素環式基を形成し；

各R^Xは、独立して、ハロゲン原子；C_{1-30}ヒドロカルビル基（このヒドロカルビル基は、非置換であるか、又は１つ以上のハロゲン原子、C_{1-20}アルキル基、C_{1-20}アルコキシ基、C_{7-20}アルキルアリール基、C_{7-20}アリールアルキル基、C_{6-20}アリール基、C_{6-20}アリールオキシ基、C_{7-20}アルキルアリールオキシ基、及び／又はC_{7-20}アリールアルキルオキシ基によってさらに置換されている）；式－NR'_2のアミド基；式－Ｓｉ（R^a）$_3$のシリル基；式－Ｇｅ（R^a）$_3$のゲルマニル基；及び式Ｎ＝Ｐ（R^b）（R^c）（R^d）のホスフィンイミン基からなる群から選択され；ここで、各Ｒ’は、独立して、水素、C_{1-20}アルキル基、及びC_{6-20}アリール基からなる群から選択され；ここで、各R^aは、独立して、水素、C_{1-8}アルキル基、C_{1-8}アルコキシ基、C_{6-20}アリールオキシ基及びC_{6-20}アリール基からなる群から選択され、R^b、R^c、R^dは、各々独立して、C_{1-20}アルキル基であり；

Ｃｙは、シクロペンタジエニル型部分であり、Ｌ及びＨに共有結合しており；

Ｌは、ＰとＣｙを連結する原子の連続鎖を含む架橋基であり、連続鎖は２個又は３個の原子を含み；

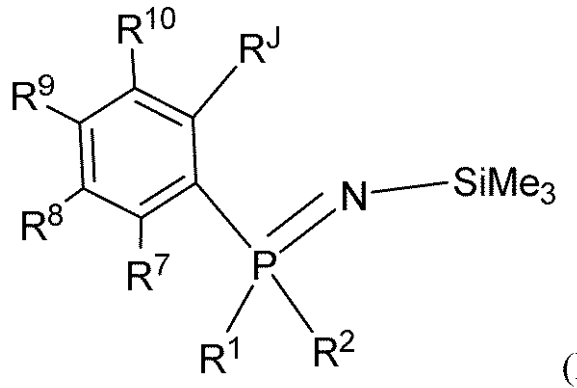
各Ｘ＊は、独立して、ハロゲン、水素、式－NR^E_2のアミド基、C_{1-20}アルキル基、C_{1-20}アルコキシ基、C_{7-20}アルキルアリール基、C_{7-20}アリールアルキル基、C_{6-20}アリール基、C_{6-20}アリールオキシド基、C_{7-20}アルキルアリールオキシ基、及びC_{7-20}アリールアルキルオキシ基からなる群から選択され；ここで、各R^Eは、独立して、水素、C_{1-20}アルキル基、及びC_{6-20}アリール基からなる群から選択される、

上記プロセス。

【請求項１６７】

式Ｉ－Ｐ－ＴＭＳ：

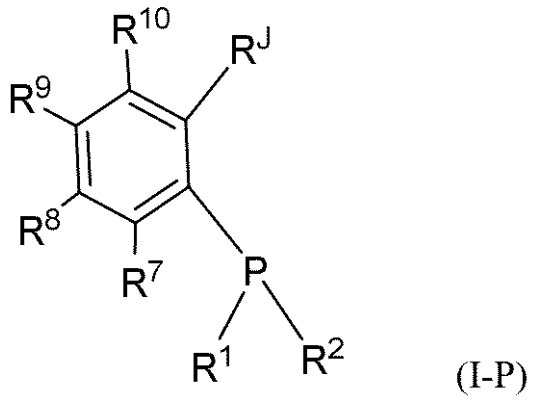
【化４０】



(I-P-TMS)

で表される化合物の作製方法であって、当該方法は、式Ｉ－Ｐ：

【化４１】



(I-P)

で表されるホスフィン化合物を、ヘキサクロロエタンＣｌ３Ｃ－ＣＣｌ３；及びヘキサメチルジシラザン［（ＣＨ３）３Ｓｉ］２ＮＨと組み合わせることを含み、

式中、ＲＪは、

ヒドロカルビル基（このヒドロカルビル基は、非置換であるか、又はハロゲン原子、Ｃ１－２０アルキル基、Ｃ１－２０アルコキシ基、Ｃ７－２０アルキルアリール基、Ｃ７－２０アリールアルキル基、Ｃ６－２０アリール基、Ｃ６－２０アリールオキシ基、Ｃ７－２０アルキルアリールオキシ基、及びＣ７－２０アリールアルキルオキシ基、式－ＮＲ’２のアミド基、式－ＰＲ’２のホスフィド基、式－ＳＲ’のチオラート基、式－Ｓｉ（Ｒａ）３のシリル基、及び式－Ｇｅ（Ｒａ）３のゲルマニル基からなる群から選択される１つ以上の置換基によってさらに置換されている）；

ヘテロ原子含有ヒドロカルビル基（このヘテロ原子含有ヒドロカルビル基は、非置換であるか、又はハロゲン原子、Ｃ１－２０アルキル基、Ｃ１－２０アルコキシ基、Ｃ７－２０アルキルアリール基、Ｃ７－２０アリールアルキル基、Ｃ６－２０アリール基、Ｃ６－２０アリールオキシ基、Ｃ７－２０アルキルアリールオキシ基、及びＣ７－２０アリールアルキルオキシ基、式－－ＮＲ’２のアミド基、式－ＰＲ’２のホスフィド基、式－ＳＲ’のチオラート基、式－Ｓｉ（Ｒａ）３のシリル基、及び式－Ｇｅ（Ｒａ）３のゲルマニル基からなる群から選択される１つ以上の置換基によってさらに置換されている）；

からなる群から選択され、

式中、Ｒ１及びＲ２は、各々独立して、Ｃ１－３０ヒドロカルビル基（このヒドロカルビル基は、非置換であるか、又は１つ以上のハロゲン原子、Ｃ１－２０アルキル基、Ｃ１－２０アルコキシ基、Ｃ７－２０アルキルアリール基、Ｃ７－２０アリールアルキル基、Ｃ６－２０アリール基、Ｃ６－２０アリールオキシ基、Ｃ７－２０アルキルアリールオキシ基、及び／又はＣ７－２０アリールアルキルオキシ基によってさらに置換されている）から選択され、

式中、Ｒ７、Ｒ８、Ｒ９及びＲ１０は、各々独立して、

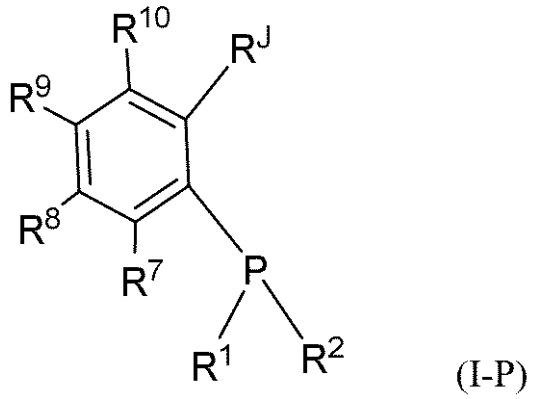
ハロゲン；

水素；

Ｃ１－３０ヒドロカルビル基（このヒドロカルビル基は、非置換であるか、又はハロゲン原子、Ｃ１－２０アルキル基、Ｃ１－２０アルコキシ基、Ｃ７－２０アルキルアリール基、Ｃ７－２０アリールアルキル基、Ｃ６－２０アリール基、Ｃ６－２０アリールオキシ基、Ｃ７－２０アルキルアリールオキシ基、及びＣ７－２０アリールアルキルオキシ基からなる群から選択される１つ以上の置換基によってさらに置換されている）；

ヘテロ原子含有Ｃ１－３０ヒドロカルビル基（このヘテロ原子含有ヒドロカルビル基は、非置換であるか、又はハロゲン原子、Ｃ１－２０アルキル基、Ｃ１－２０アルコキシ基、Ｃ７－２０アルキルアリール基、Ｃ７－２０アリールアルキル基、Ｃ６－２０アリール基、Ｃ６－２０アリールオキシ基、Ｃ７－２０アルキルアリールオキシ基、及びＣ７－２０アリ

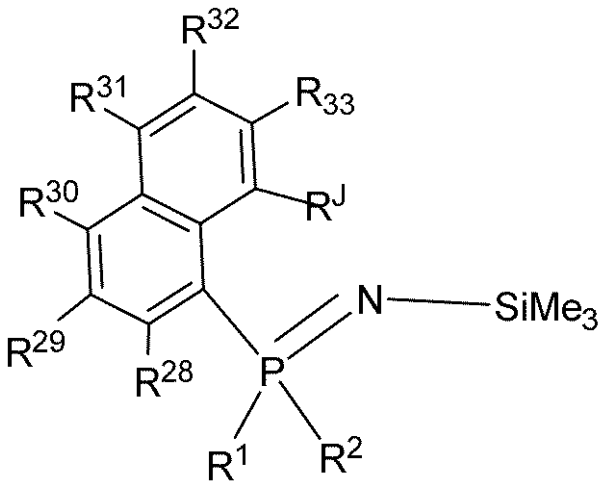
ールアルキルオキシ基からなる群から選択される１つ以上の置換基によってさらに置換されている）；
オキシ基、－ＯＲ’；
アミド基、－ＮＲ’$_2$；
ホスフィド基、－ＰＲ’$_2$；
チオラート基、－ＳＲ’；
式－Ｓｉ（Ｒ^a）$_3$のシリル基；
式－Ｇｅ（Ｒ^a）$_3$のゲルマニル基；
からなる群から選択され；
ここで、Ｒ^7、Ｒ^8、Ｒ^{9}及びＲ^{10}の２つの隣接する基は、任意に結合して環状ヒドロカルビル基又は環状ヘテロ原子含有ヒドロカルビル基を形成してもよく、環状ヒドロカルビル基又は環状ヘテロ原子含有ヒドロカルビル基は、非置換であるか、又はハロゲン原子、Ｃ$_{1-20}$アルキル基、Ｃ$_{1-20}$アルコキシ基、Ｃ$_{7-20}$アルキルアリール基、Ｃ$_{7-20}$アリールアルキル基、Ｃ$_{6-20}$アリール基、Ｃ$_{6-20}$アリールオキシ基、Ｃ$_{7-20}$アルキルアリールオキシ基、Ｃ$_{7-20}$アリールアルキルオキシ基、アミド基－ＮＲ’$_2$、ホスフィド基－ＰＲ’$_2$、チオラート基－ＳＲ’、式－Ｓｉ（Ｒ^a）$_3$のシリル基、及び式－Ｇｅ（Ｒ^a）$_3$のゲルマニル基からなる群から選択される１つ以上の置換基によってさらに置換されており；
ここで、各Ｒ’は、独立して、水素、Ｃ$_{1-20}$アルキル基、及びＣ$_{6-20}$アリール基からなる群から選択され；
ここで、各Ｒ^{a}は、独立して、水素、Ｃ$_{1-8}$アルキル基、Ｃ$_{1-8}$アルコキシ基、Ｃ$_{6-20}$アリールオキシ基及びＣ$_{6-20}$アリール基からなる群から選択される、
上記方法。
【請求項１６８】
請求項１６７に記載の方法であって、
式Ｉ－Ｐ：
【化４２】



(I-P)

で表されるホスフィン化合物を、ヘキサクロロエタンＣｌ$_3$Ｃ－ＣＣｌ$_3$と組み合わせる第１の反応工程（ｉ）と、
ヘキサメチルジシラザン［（ＣＨ$_3$）$_3$Ｓｉ］$_2$ＮＨを、第１の反応工程で形成された反応生成物と組み合わせる第２の反応工程（ｉｉ）と、
を含む、上記方法。
【請求項１６９】
ホスフィン化合物（ＩＩ－Ｐ）とヘキサクロロエタンＣｌ$_3$Ｃ－ＣＣｌ$_3$を、約１：１のモル比で組み合わせる、請求項１６７に記載の方法。
【請求項１７０】
モル過剰のヘキサメチルジシラザン［（ＣＨ$_3$）$_3$Ｓｉ］$_2$ＮＨを、第１の反応工程で

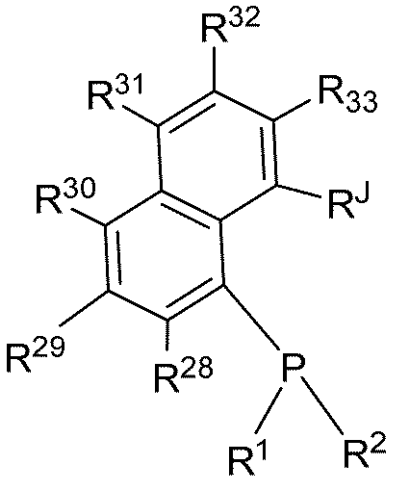
形成された反応生成物と組み合わせる、請求項１６８に記載の方法。
【請求項１７１】
ホスフィン化合物（ＩＩ－Ｐ）に対する、ヘキサメチルジシラザン［（ＣＨ$_3$）$_3$Ｓｉ］$_2$ＮＨのモル比が１．０より大きい、請求項１６７に記載の方法。
【請求項１７２】
ホスフィン化合物（ＩＩ－Ｐ）；ヘキサクロロエタンＣｌ$_3$Ｃ－ＣＣｌ$_3$；及びヘキサメチルジシラザン［（ＣＨ$_3$）$_3$Ｓｉ］$_2$ＮＨを、極性溶媒中で組み合わせる、請求項１６７に記載の方法。
【請求項１７３】
極性溶媒が、ジクロロメタン、１，２－ジクロロエタン、アセトニトリル及びテトラヒドロフランからなる群から選択される、請求項１７２に記載の方法。
【請求項１７４】
工程（ｉ）及び工程（ｉｉ）が、単一の反応容器内で行われる、請求項１６８に記載の方法。
【請求項１７５】
Ｒ^{1}及びＲ^{2}が、独立して、第一級アルキル基、第二級アルキル基、第三級アルキル基、及びアリール基からなる群から選択される、請求項１６７に記載の方法。
【請求項１７６】
Ｒ^{1}及びＲ^{2}が、第二級アルキル基である、請求項１７５に記載の方法。
【請求項１７７】
Ｒ^{1}及びＲ^{2}が、第三級アルキル基である、請求項１７５に記載の方法。
【請求項１７８】
Ｒ^7、Ｒ^8、Ｒ^{9}及びＲ^{10}が、各々水素である、請求項１６７に記載の方法。
【請求項１７９】
式ＩＩ－Ｐ－ＴＭＳ：
【化４３】



(II-P-TMS)

で表される化合物の作製方法であって、当該方法は、式ＩＩ－Ｐ：

【化４４】



(II-P)

で表されるホスフィン化合物を、ヘキサクロロエタンCl_3C-CCl_3；及びヘキサメチルジシラザン［$(CH_3)_3Si]_2NH$と組み合わせることを含み、

式中、R^Jは、

ヒドロカルビル基（このヒドロカルビル基は、非置換であるか、又はハロゲン原子、C_{1-20}アルキル基、C_{1-20}アルコキシ基、C_{7-20}アルキルアリール基、C_{7-20}アリールアルキル基、C_{6-20}アリール基、C_{6-20}アリールオキシ基、C_{7-20}アルキルアリールオキシ基、C_{7-20}アリールアルキルオキシ基、式$-NR'_2$のアミド基、式$-PR'_2$のホスフィド基、式$-SR'$のチオラート基、式$-Si(R^a)_3$のシリル基、及び式$-Ge(R^a)_3$のゲルマニル基からなる群から選択される１つ以上の置換基によってさらに置換されている）；

ヘテロ原子含有ヒドロカルビル基（このヘテロ原子含有ヒドロカルビル基は、非置換であるか、又はハロゲン原子、C_{1-20}アルキル基、C_{1-20}アルコキシ基、C_{7-20}アルキルアリール基、C_{7-20}アリールアルキル基、C_{6-20}アリール基、C_{6-20}アリールオキシ基、C_{7-20}アルキルアリールオキシ基、及びC_{7-20}アリールアルキルオキシ基、式－－NR'_2のアミド基、式$-PR'_2$のホスフィド基、式$-SR'$のチオラート基、式$-Si(R^a)_3$のシリル基、及び式$-Ge(R^a)_3$のゲルマニル基からなる群から選択される１つ以上の置換基によってさらに置換されている）；

からなる群から選択され、

式中、R^1及びR^2は、各々独立して、C_{1-30}ヒドロカルビル基（このヒドロカルビル基は、非置換であるか、又は１つ以上のハロゲン原子、C_{1-20}アルキル基、C_{1-20}アルコキシ基、C_{7-20}アルキルアリール基、C_{7-20}アリールアルキル基、C_{6-20}アリール基、C_{6-20}アリールオキシ基、C_{7-20}アルキルアリールオキシ基、及び／又はC_{7-20}アリールアルキルオキシ基によってさらに置換されている）から選択され、

式中、R^{28}、R^{29}、R^{30}、R^{31}、R^{32}及びR^{33}は、各々独立して、

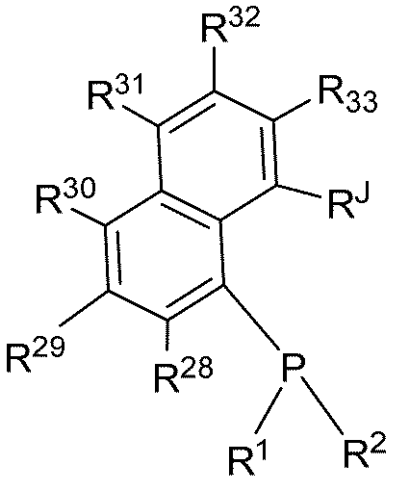
ハロゲン；

水素；

C_{1-30}ヒドロカルビル基（このヒドロカルビル基は、非置換であるか、又はハロゲン原子、C_{1-20}アルキル基、C_{1-20}アルコキシ基、C_{7-20}アルキルアリール基、C_{7-20}アリールアルキル基、C_{6-20}アリール基、C_{6-20}アリールオキシ基、C_{7-20}アルキルアリールオキシ基、及びC_{7-20}アリールアルキルオキシ基からなる群から選択される１つ以上の置換基によってさらに置換されている）；

ヘテロ原子含有C_{1-30}ヒドロカルビル基（このヘテロ原子含有ヒドロカルビル基は

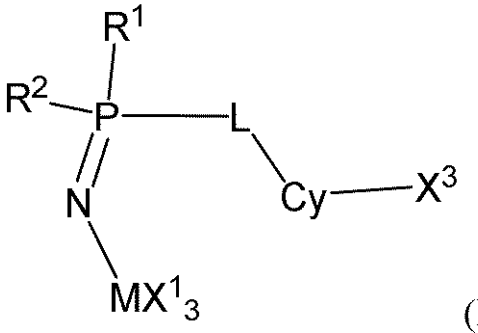
、非置換であるか、又はハロゲン原子、Ｃ１－２０アルキル基、Ｃ１－２０アルコキシ基、Ｃ７－２０アルキルアリール基、Ｃ７－２０アリールアルキル基、Ｃ６－２０アリール基、Ｃ６－２０アリールオキシ基、Ｃ７－２０アルキルアリールオキシ基、及びＣ７－２０アリールアルキルオキシ基からなる群から選択される１つ以上の置換基によってさらに置換されている）；
オキシ基、－ＯＲ’；
アミド基、－ＮＲ’$_2$；
ホスフィド基、－ＰＲ’$_2$；
チオラート基、－ＳＲ’；
式－Ｓｉ（Ｒ^a）$_3$のシリル基；
式－Ｇｅ（Ｒ^a）$_3$のゲルマニル基；
からなる群から選択され；
ここで、Ｒ^{28}、Ｒ^{29}、Ｒ^{30}、Ｒ^{31}、Ｒ^{32}及びＲ^{33}の２つの隣接する基は、任意に結合して環状ヒドロカルビル基又は環状ヘテロ原子含有ヒドロカルビル基を形成してもよく、環状ヒドロカルビル基又は環状ヘテロ原子含有ヒドロカルビル基は、非置換であるか、又はハロゲン原子、Ｃ１－２０アルキル基、Ｃ１－２０アルコキシ基、Ｃ７－２０アルキルアリール基、Ｃ７－２０アリールアルキル基、Ｃ６－２０アリール基、Ｃ６－２０アリールオキシ基、Ｃ７－２０アルキルアリールオキシ基、Ｃ７－２０アリールアルキルオキシ基、アミド基－ＮＲ’$_2$、ホスフィド基－ＰＲ’$_2$、チオラート基－ＳＲ’、式－Ｓｉ（Ｒ^a）$_3$のシリル基、及び式－Ｇｅ（Ｒ^a）$_3$のゲルマニル基からなる群から選択される１つ以上の置換基によってさらに置換されており；
ここで、各Ｒ’は、独立して、水素、Ｃ$_{1-20}$アルキル基、及びＣ６－２０アリール基からなる群から選択され；
ここで、各Ｒ^{a}は、独立して、水素、Ｃ１－８アルキル基、Ｃ１－８アルコキシ基、Ｃ６－２０アリールオキシ基及びＣ６－２０アリール基からなる群から選択される、
上記方法。
【請求項１８０】
請求項１７９に記載の方法であって、
式ＩＩ－Ｐ：
【化４５】



(II-P)

で表されるホスフィン化合物を、ヘキサクロロエタンＣｌ$_3$Ｃ－ＣＣｌ$_3$と組み合わせる第１の反応工程（ｉ）と、
ヘキサメチルジシラザン［（ＣＨ$_3$）$_3$Ｓｉ］$_2$ＮＨを、第１の反応工程で形成された反応生成物と組み合わせる第２の反応工程（ｉｉ）と、

を含む、上記方法。
【請求項１８１】
ホスフィン化合物（ＩＩ－Ｐ）とヘキサクロロエタンＣｌ$_3$Ｃ－ＣＣｌ$_3$を、約１：１のモル比で組み合わせる、請求項１７９に記載の方法。
【請求項１８２】
モル過剰のヘキサメチルジシラザン［（ＣＨ$_3$）$_3$Ｓｉ］$_2$ＮＨを、第１の反応工程で形成された反応生成物と組み合わせる、請求項１８０に記載の方法。
【請求項１８３】
ホスフィン化合物（ＩＩ－Ｐ）に対する、ヘキサメチルジシラザン［（ＣＨ$_3$）$_3$Ｓｉ］$_2$ＮＨのモル比が１．０より大きい、請求項１７９に記載の方法。
【請求項１８４】
ホスフィン化合物（ＩＩ－Ｐ）；ヘキサクロロエタンＣｌ$_3$Ｃ－ＣＣｌ$_3$；及びヘキサメチルジシラザン［（ＣＨ$_3$）$_3$Ｓｉ］$_2$ＮＨを、極性溶媒中で組み合わせる、請求項１７９に記載の方法。
【請求項１８５】
極性溶媒が、ジクロロメタン、１，２－ジクロロエタン、アセトニトリル及びテトラヒドロフランからなる群から選択される、請求項１８４に記載の方法。
【請求項１８６】
工程（ｉ）及び工程（ｉｉ）が、単一の反応容器内で行われる、請求項１８０に記載の方法。
【請求項１８７】
Ｒ^{1}及びＲ^{2}が、独立して、第一級アルキル基、第二級アルキル基、第三級アルキル基、及びアリール基からなる群から選択される、請求項１７９に記載の方法。
【請求項１８８】
Ｒ^{1}及びＲ^{2}が、第二級アルキル基である、請求項１８７に記載の方法。
【請求項１８９】
Ｒ^{1}及びＲ^{2}が、第三級アルキル基である、請求項１８７に記載の方法。
【請求項１９０】
Ｒ^{28}、Ｒ^{29}、Ｒ^{30}、Ｒ^{31}、Ｒ^{32}及びＲ^{33}が、各々水素である、請求項１７９に記載の方法。
【請求項１９１】
有機金属錯体であって、式Ｉ－Ｍ：
【化４６】



(I-M)

で表され、
式中、
Ｍは、Ｔｉ、Ｚｒ又はＨｆであり；
Ｒ^{1}及びＲ^{2}は、各々独立して、水素及びＲ^{X}からなる群から選択されるか；又はＲ^{1}及びＲ^{2}は、それらが結合しているＰ原子と一緒になって、非置換であるか、又はハロゲン原子、Ｃ$_{1-20}$アルキル基、Ｃ$_{1-20}$アルコキシ基、Ｃ$_{7-20}$アルキルアリール基

、Ｃ７－２０アリールアルキル基、Ｃ６－２０アリール基、Ｃ６－２０アリールオキシ基、Ｃ７－２０アルキルアリールオキシ基、及びＣ７－２０アリールアルキルオキシ基からなる群から選択される１つ以上の置換基によってさらに置換されている３－１０員複素環式基を形成し；

各Ｒ^{X}は、独立して、ハロゲン原子；Ｃ１－３０ヒドロカルビル基（このヒドロカルビル基は、非置換であるか、又は１つ以上のハロゲン原子、Ｃ１－２０アルキル基、Ｃ１－２０アルコキシ基、Ｃ７－２０アルキルアリール基、Ｃ７－２０アリールアルキル基、Ｃ６－２０アリール基、Ｃ６－２０アリールオキシ基、Ｃ７－２０アルキルアリールオキシ基、及び／又はＣ７－２０アリールアルキルオキシ基によってさらに置換されている）；式－ＮＲ’$_2$のアミド基；式－Ｓｉ（Ｒ^{a}）$_3$のシリル基；式－Ｇｅ（Ｒ^{a}）$_3$のゲルマニル基；及び式Ｎ＝Ｐ（Ｒ^{b}）（Ｒ^{c}）（Ｒ^{d}）のホスフィンイミン基からなる群から選択され；ここで、各Ｒ’は、独立して、水素、Ｃ1－２０アルキル基、及びＣ６－２０アリール基からなる群から選択され；ここで、各Ｒ^{a}は、独立して、水素、Ｃ１－８アルキル基、Ｃ１－８アルコキシ基、Ｃ６－２０アリールオキシ基及びＣ６－２０アリール基からなる群から選択され、Ｒ^{b}、Ｒ^{c}、Ｒ^{d}は、各々独立して、Ｃ１－２０アルキル基であり；

Ｃｙは、シクロペンタジエニル型部分であり、Ｌ及びＸ^{3}に共有結合しており；

各Ｘ^{1}は、活性化可能な配位子であり；

Ｘ^{3}は、水素、又は式－Ｓｉ（Ｒ^{e}）$_3$のシリル基、若しくは式Ｓｎ（Ｒ^{e}）$_3$のスタンニル基であり；ここで、各Ｒ^{e}は、独立して、水素、Ｃ１－８アルキル基、Ｃ１－８アルコキシ基、Ｃ６－２０アリールオキシ基、及びＣ６－２０アリール基からなる群から選択され；

Ｌは、ＰとＣｙを連結する原子の連続鎖を含む架橋基であり、連続鎖は２個又は３個の原子を含む、

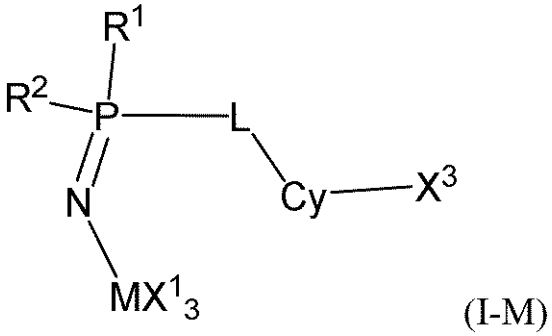
有機金属錯体。

【請求項１９２】

オレフィン重合触媒系であって、

ｉ）有機金属錯体であって、式Ｉ－Ｍ：

【化４７】



(I-M)

で表され、

式中、

Ｍは、Ｔｉ、Ｚｒ又はＨｆであり；

Ｒ^{1}及びＲ^{2}は、各々独立して、水素及びＲ^{X}からなる群から選択されるか；又はＲ^{1}及びＲ^{2}は、それらが結合しているＰ原子と一緒になって、非置換であるか、又はハロゲン原子、Ｃ１－２０アルキル基、Ｃ１－２０アルコキシ基、Ｃ７－２０アルキルアリール基、Ｃ７－２０アリールアルキル基、Ｃ６－２０アリール基、Ｃ６－２０アリールオキシ基、Ｃ７－２０アルキルアリールオキシ基、及びＣ７－２０アリールアルキルオキシ基からなる群から選択される１つ以上の置換基によってさらに置換されている３－１０員複素環式基を形成し；

各Ｒ^{X}は、独立して、ハロゲン原子；Ｃ１－３０ヒドロカルビル基（このヒドロカルビ

ル基は、非置換であるか、又は１つ以上のハロゲン原子、Ｃ１－２０アルキル基、Ｃ１－２０アルコキシ基、Ｃ７－２０アルキルアリール基、Ｃ７－２０アリールアルキル基、Ｃ６－２０アリール基、Ｃ６－２０アリールオキシ基、Ｃ７－２０アルキルアリールオキシ基、及び／又はＣ７－２０アリールアルキルオキシ基によってさらに置換されている）；式－ＮＲ’$_2$のアミド基；式－Ｓｉ（Ｒ^a）$_3$のシリル基；式－Ｇｅ（Ｒ^a）$_3$のゲルマニル基；及び式Ｎ＝Ｐ（Ｒ^b）（Ｒ^c）（Ｒ^d）のホスフィンイミン基からなる群から選択され；ここで、各Ｒ’は、独立して、水素、Ｃ$_{1-20}$アルキル基、及びＣ６－２０アリール基からなる群から選択され；ここで、各Ｒ^{a}は、独立して、水素、Ｃ１－８アルキル基、Ｃ１－８アルコキシ基、Ｃ６－２０アリールオキシ基及びＣ６－２０アリール基からなる群から選択され、Ｒ^b、Ｒ^c、Ｒ^{d}は、各々独立して、Ｃ１－２０アルキル基であり；

Ｃｙは、シクロペンタジエニル型部分であり、Ｌ及びＸ^{3}に共有結合しており；

各Ｘ^{1}は、活性化可能な配位子であり；

Ｘ^{3}は、水素、又は式－Ｓｉ（Ｒ^e）$_3$のシリル基、若しくは式Ｓｎ（Ｒ^e）$_3$のスタンニル基であり；ここで、各Ｒ^{e}は、独立して、水素、Ｃ１－８アルキル基、Ｃ１－８アルコキシ基、Ｃ６－２０アリールオキシ基、及びＣ６－２０アリール基からなる群から選択され；

Ｌは、ＰとＣｙを連結する原子の連続鎖を含む架橋基であり、連続鎖は２個又は３個の原子を含む、有機金属錯体と、

ｉｉ）触媒活性剤と、

を含む、オレフィン重合触媒系。

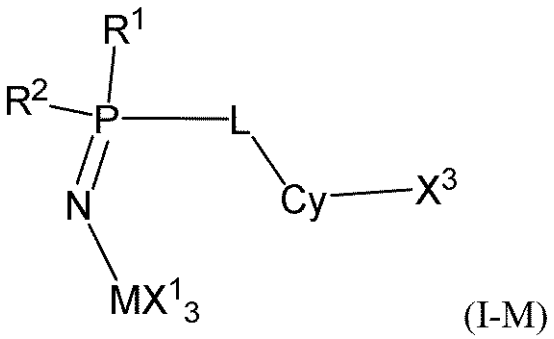
【請求項１９３】

エチレンを、任意選択で１つ以上のＣ３－１２アルファ－オレフィンと、オレフィン重合触媒系の存在下で重合することを含む、重合プロセスであって、

オレフィン重合触媒系が、

ｉ）有機金属錯体であって、式Ｉ－Ｍ：

【化４８】



(I-M)

で表され、

式中、

Ｍは、Ｔｉ、Ｚｒ又はＨｆであり；

Ｒ^{1}及びＲ^{2}は、各々独立して、水素及びＲ^{X}からなる群から選択されるか；又はＲ^{1}及びＲ^{2}は、それらが結合しているＰ原子と一緒になって、非置換であるか、又はハロゲン原子、Ｃ１－２０アルキル基、Ｃ１－２０アルコキシ基、Ｃ７－２０アルキルアリール基、Ｃ７－２０アリールアルキル基、Ｃ６－２０アリール基、Ｃ６－２０アリールオキシ基、Ｃ７－２０アルキルアリールオキシ基、及びＣ７－２０アリールアルキルオキシ基からなる群から選択される１つ以上の置換基によってさらに置換されている３－１０員複素環式基を形成し；

各Ｒ^{X}は、独立して、ハロゲン原子；Ｃ１－３０ヒドロカルビル基（このヒドロカルビル基は、非置換であるか、又は１つ以上のハロゲン原子、Ｃ１－２０アルキル基、Ｃ１－２０アルコキシ基、Ｃ７－２０アルキルアリール基、Ｃ７－２０アリールアルキル基、Ｃ６

－２０アリール基、Ｃ６－２０アリールオキシ基、Ｃ７－２０アルキルアリールオキシ基、及び／又はＣ７－２０アリールアルキルオキシ基によってさらに置換されている）；式－ＮＲ’２のアミド基；式－Ｓｉ（Ｒａ）３のシリル基；式－Ｇｅ（Ｒａ）３のゲルマニル基；及び式Ｎ＝Ｐ（Ｒｂ）（Ｒｃ）（Ｒｄ）のホスフィンイミン基からなる群から選択され；ここで、各Ｒ’は、独立して、水素、Ｃ１－２０アルキル基、及びＣ６－２０アリール基からなる群から選択され；ここで、各Ｒａは、独立して、水素、Ｃ１－８アルキル基、Ｃ１－８アルコキシ基、Ｃ６－２０アリールオキシ基及びＣ６－２０アリール基からなる群から選択され、Ｒｂ、Ｒｃ、Ｒｄは、各々独立して、Ｃ１－２０アルキル基であり；

Ｃｙは、シクロペンタジエニル型部分であり、Ｌ及びＸ３に共有結合しており；

各Ｘ１は、活性化可能な配位子であり；

Ｘ３は、水素、又は式－Ｓｉ（Ｒｅ）３のシリル基、若しくは式Ｓｎ（Ｒｅ）３のスタンニル基であり；ここで、各Ｒｅは、独立して、水素、Ｃ１－８アルキル基、Ｃ１－８アルコキシ基、Ｃ６－２０アリールオキシ基、及びＣ６－２０アリール基からなる群から選択され；

Ｌは、ＰとＣｙを連結する原子の連続鎖を含む架橋基であり、連続鎖は２個又は３個の原子を含む、有機金属錯体と、

ｉｉ）触媒活性剤と、

を含む、重合プロセス。

【発明の詳細な説明】

【技術分野】

【０００１】

オレフィン重合触媒系内で使用される有機金属錯体が提供される。有機金属錯体を含むオレフィン重合触媒系は、エチレンの重合に使用され、任意選択で１つ以上のアルファ－オレフィンとのエチレンの重合に使用される。

【背景技術】

【０００２】

オレフィンの重合を行うために、多種多様なシングルサイト触媒が開発されてきた。例えば、ホスフィンイミン配位子を含むオレフィン重合触媒が知られている。シクロペンタジエニル型配位子を有する重合触媒、いわゆる「ハーフサンドイッチ錯体」も知られている。

【０００３】

米国特許第６，０６３，８７９号には、モノシクロペンタジエニル配位子とホスフィンイミン配位子を含む第ＩＶ族金属錯体が記載されている。この錯体は、エチレンの重合、及び任意選択で１つ以上の脂肪族又は芳香族ヒドロカルビルＣ２－２０モノ又はジオレフィンとのエチレンの重合に有用であると記載されている。

【０００４】

高温オレフィン重合プロセス（溶液相オレフィン重合など）で使用するシングルサイト触媒の性能を向上させることが継続的に望まれている。より高温で作動する触媒が望ましく、なぜなら、重合中の反応温度が高いほどエネルギー消費が減少するためである。

【０００５】

したがって、より熱安定性の高いシングルサイト触媒を提供することが望ましい。

【発明の概要】

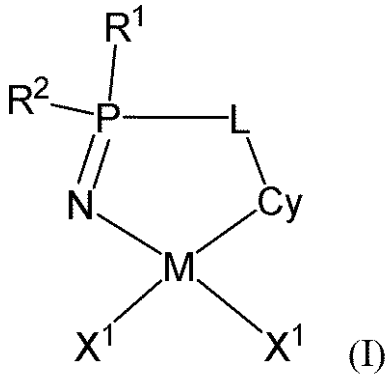
【０００６】

我々は、高い活性を有するとともに高い変換効率で高い分子量のポリエチレンを生成するオレフィン重合触媒系に使用できる有機金属錯体（本明細書では「プレ重合触媒」とも称する）について報告する。このオレフィン重合触媒系は、高温での溶液相重合プロセスにおいて、エチレンとアルファ－オレフィンを重合するのに効果的であり、高い分子量を有しかつアルファ－オレフィンの組み込み度が高いエチレンコポリマーを生成する。

【０００７】

本開示の一実施形態は、有機金属錯体であって、式Ｉ：

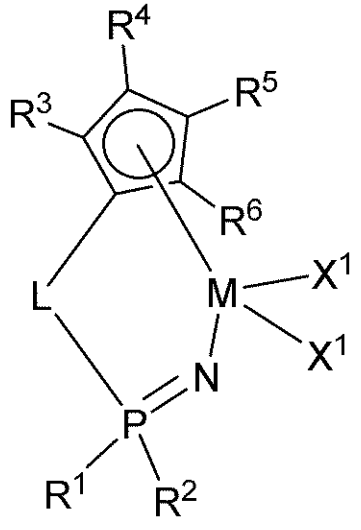
【化１】



(I)

で表され、
式中、
Ｍは、Ｔｉ、Ｚｒ又はＨｆであり；
Ｒ^{1}及びＲ^{2}は、各々独立して、水素及びＲ^{X}からなる群から選択されるか；又はＲ^{1}及びＲ^{2}は、それらが結合しているＰ原子と一緒になって、非置換であるか、又はハロゲン原子、Ｃ$_{1-20}$アルキル基、Ｃ$_{1-20}$アルコキシ基、Ｃ$_{7-20}$アルキルアリール基、Ｃ$_{7-20}$アリールアルキル基、Ｃ$_{6-20}$アリール基、Ｃ$_{6-20}$アリールオキシ基、Ｃ$_{7-20}$アルキルアリールオキシ基、及びＣ$_{7-20}$アリールアルキルオキシ基からなる群から選択される１つ以上の置換基によってさらに置換されている３－１０員複素環式基を形成し；
各Ｒ^{X}は、独立して、ハロゲン原子；Ｃ$_{1-30}$ヒドロカルビル基（このヒドロカルビル基は、非置換であるか、又は１つ以上のハロゲン原子、Ｃ$_{1-20}$アルキル基、Ｃ$_{1-20}$アルコキシ基、Ｃ$_{7-20}$アルキルアリール基、Ｃ$_{7-20}$アリールアルキル基、Ｃ$_{6-20}$アリール基、Ｃ$_{6-20}$アリールオキシ基、Ｃ$_{7-20}$アルキルアリールオキシ基、及び／又はＣ$_{7-20}$アリールアルキルオキシ基によってさらに置換されている）；式－ＮＲ’$_{2}$のアミド基；式－Ｓｉ（Ｒ^{a}）$_{3}$のシリル基；式－Ｇｅ（Ｒ^{a}）$_{3}$のゲルマニル基；及び式Ｎ＝Ｐ（Ｒ^{b}）（Ｒ^{c}）（Ｒ^{d}）のホスフィンイミン基からなる群から選択され；ここで、各Ｒ’は、独立して、水素、Ｃ$_{1-20}$アルキル基、及びＣ$_{6-20}$アリール基からなる群から選択され；ここで、各Ｒ^{a}は、独立して、水素、Ｃ$_{1-8}$アルキル基、Ｃ$_{1-8}$アルコキシ基、Ｃ$_{6-20}$アリールオキシ基及びＣ$_{6-20}$アリール基からなる群から選択され、Ｒ^{b}、Ｒ^{c}、Ｒ^{d}は、各々独立して、Ｃ$_{1-20}$アルキル基であり；
各Ｘ^{1}は、活性化可能な配位子であり；
Ｃｙは、Ｌに共有結合し、η－結合を介してＭに配位するシクロペンタジエニル型配位子であり；
Ｌは、ＰとＣｙを連結する原子の連続鎖を含む架橋基であり、連続鎖は２個又は３個の原子を含む、有機金属錯体である。
【０００８】
本開示の一実施形態は、有機金属錯体であって、式ＩＩ：

【化２】



(II)

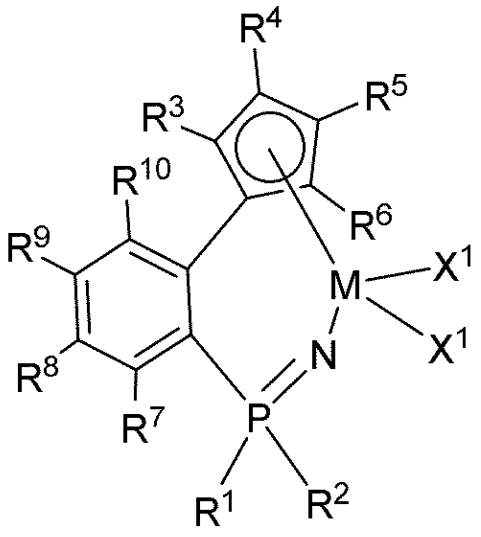
で表され、
式中、
Ｍは、Ｔｉ、Ｚｒ又はＨｆであり；
Ｒ^{1}及びＲ^{2}は、各々独立して、水素及びＲ^{X}からなる群から選択されるか；又はＲ^{1}及びＲ^{2}は、それらが結合しているＰ原子と一緒になって、非置換であるか、又はハロゲン原子、Ｃ$_{1-20}$アルキル基、Ｃ$_{1-20}$アルコキシ基、Ｃ$_{7-20}$アルキルアリール基、Ｃ$_{7-20}$アリールアルキル基、Ｃ$_{6-20}$アリール基、Ｃ$_{6-20}$アリールオキシ基、Ｃ$_{7-20}$アルキルアリールオキシ基、及びＣ$_{7-20}$アリールアルキルオキシ基からなる群から選択される１つ以上の置換基によってさらに置換されている３－１０員複素環式基を形成し；
各Ｒ^{X}は、独立して、ハロゲン原子；Ｃ$_{1-30}$ヒドロカルビル基（このヒドロカルビル基は、非置換であるか、又は１つ以上のハロゲン原子、Ｃ$_{1-20}$アルキル基、Ｃ$_{1-20}$アルコキシ基、Ｃ$_{7-20}$アルキルアリール基、Ｃ$_{7-20}$アリールアルキル基、Ｃ$_{6-20}$アリール基、Ｃ$_{6-20}$アリールオキシ基、Ｃ$_{7-20}$アルキルアリールオキシ基、及び／又はＣ$_{7-20}$アリールアルキルオキシ基によってさらに置換されている）；式－ＮＲ’$_{2}$のアミド基；式－Ｓｉ（Ｒ^{a}）$_{3}$のシリル基；式－Ｇｅ（Ｒ^{a}）$_{3}$のゲルマニル基；及び式Ｎ＝Ｐ（Ｒ^{b}）（Ｒ^{c}）（Ｒ^{d}）のホスフィンイミン基からなる群から選択され；
式中、Ｒ^{3}、Ｒ^{4}、Ｒ^{5}及びＲ^{6}は、各々独立して、
ハロゲン；
水素；
Ｃ$_{1-30}$ヒドロカルビル基（このヒドロカルビル基は、非置換であるか、又はハロゲン原子、Ｃ$_{1-20}$アルキル基、Ｃ$_{1-20}$アルコキシ基、Ｃ$_{7-20}$アルキルアリール基、Ｃ$_{7-20}$アリールアルキル基、Ｃ$_{6-20}$アリール基、Ｃ$_{6-20}$アリールオキシ基、Ｃ$_{7-20}$アルキルアリールオキシ基、及びＣ$_{7-20}$アリールアルキルオキシ基からなる群から選択される１つ以上の置換基によってさらに置換されている）；
ヘテロ原子含有Ｃ$_{1-30}$ヒドロカルビル基（このヘテロ原子含有ヒドロカルビル基は、非置換であるか、又はハロゲン原子、Ｃ$_{1-20}$アルキル基、Ｃ$_{1-20}$アルコキシ基、Ｃ$_{7-20}$アルキルアリール基、Ｃ$_{7-20}$アリールアルキル基、Ｃ$_{6-20}$アリール基、Ｃ$_{6-20}$アリールオキシ基、Ｃ$_{7-20}$アルキルアリールオキシ基、及びＣ$_{7-20}$アリールアルキルオキシ基からなる群から選択される１つ以上の置換基によってさらに置換されている）；

オキシ基、－ＯＲ’；
アミド基、－ＮＲ’$_2$；
ホスフィド基、－ＰＲ’$_2$；
チオラート基、－ＳＲ’；
式－Ｓｉ（Ｒ^a）$_3$のシリル基；
式－Ｇｅ（Ｒ^a）$_3$のゲルマニル基；
からなる群から選択され；
ここで、Ｒ^3、Ｒ^4、Ｒ^{5}及びＲ^{6}の２つの隣接する基は、任意に結合して環状ヒドロカルビル基又は環状ヘテロ原子含有ヒドロカルビル基を形成してもよく、環状ヒドロカルビル基又は環状ヘテロ原子含有ヒドロカルビル基は、非置換であるか、又はハロゲン原子、Ｃ$_{1-20}$アルキル基、Ｃ$_{1-20}$アルコキシ基、Ｃ$_{7-20}$アルキルアリール基、Ｃ$_{7-20}$アリールアルキル基、Ｃ$_{6-20}$アリール基、Ｃ$_{6-20}$アリールオキシ基、Ｃ$_{7-20}$アルキルアリールオキシ基、Ｃ$_{7-20}$アリールアルキルオキシ基、式－ＮＲ’$_2$のアミド基、式－ＰＲ’$_2$のホスフィド基、式－ＳＲ’のチオラート基、式－Ｓｉ（Ｒ^a）$_3$のシリル基、及び式－Ｇｅ（Ｒ^a）$_3$のゲルマニル基からなる群から選択される１つ以上の置換基によってさらに置換されており；
ここで、各Ｒ’は、独立して、水素、Ｃ$_{1-20}$アルキル基、及びＣ$_{6-20}$アリール基からなる群から選択され；
ここで、各Ｒ^{a}は、独立して、水素、Ｃ$_{1-8}$アルキル基、Ｃ$_{1-8}$アルコキシ基、Ｃ$_{6-20}$アリールオキシ基及びＣ$_{6-20}$アリール基からなる群から選択され、Ｒ^b、Ｒ^c、Ｒ^{d}は、各々独立して、Ｃ$_{1-20}$アルキル基であり；
各Ｘ^{1}は、活性化可能な配位子であり；
Ｌは、ＰとＣｙを連結する原子の連続鎖を含む架橋基であり、連続鎖は２個又は３個の原子を含む、有機金属錯体である。

【０００９】

本開示の一実施形態は、有機金属錯体であって、式ＩＩＩ：

【化３】



(III)

で表され、
式中、Ｍは、Ｔｉ、Ｚｒ又はＨｆであり；
式中、Ｒ^{1}及びＲ^{2}は、各々独立して、水素及びＲ^{X}からなる群から選択されるか；又はＲ^{1}及びＲ^{2}は、それらが結合しているＰ原子と一緒になって、非置換であるか、又はハロゲン原子、Ｃ$_{1-20}$アルキル基、Ｃ$_{1-20}$アルコキシ基、Ｃ$_{7-20}$アルキルアリール基、Ｃ$_{7-20}$アリールアルキル基、Ｃ$_{6-20}$アリール基、Ｃ$_{6-20}$アリールオキ

シ基、Ｃ７－２０アルキルアリールオキシ基、及びＣ７－２０アリールアルキルオキシ基からなる群から選択される１つ以上の置換基によってさらに置換されている３－１０員複素環式基を形成し；

各Ｒ^{X}は、独立して、ハロゲン原子；Ｃ１－３０ヒドロカルビル基（このヒドロカルビル基は、非置換であるか、又は１つ以上のハロゲン原子、Ｃ１－２０アルキル基、Ｃ１－２０アルコキシ基、Ｃ７－２０アルキルアリール基、Ｃ７－２０アリールアルキル基、Ｃ６－２０アリール基、Ｃ６－２０アリールオキシ基、Ｃ７－２０アルキルアリールオキシ基、及び／又はＣ７－２０アリールアルキルオキシ基によってさらに置換されている）；式－ＮＲ’$_2$のアミド基；式－Ｓｉ（Ｒ^{a}）$_3$のシリル基；式－Ｇｅ（Ｒ^{a}）$_3$のゲルマニル基；及び式Ｎ＝Ｐ（Ｒ^{b}）（Ｒ^{c}）（Ｒ^{d}）のホスフィンイミン基からなる群から選択され；

式中、Ｒ^{3}、Ｒ^{4}、Ｒ^{5}、Ｒ^{6}、Ｒ^{7}、Ｒ^{8}、Ｒ^{9}及びＲ^{10}は、各々独立して、

ハロゲン；

水素；

Ｃ１－３０ヒドロカルビル基（このヒドロカルビル基は、非置換であるか、又はハロゲン原子、Ｃ１－２０アルキル基、Ｃ１－２０アルコキシ基、Ｃ７－２０アルキルアリール基、Ｃ７－２０アリールアルキル基、Ｃ６－２０アリール基、Ｃ６－２０アリールオキシ基、Ｃ７－２０アルキルアリールオキシ基、及びＣ７－２０アリールアルキルオキシ基からなる群から選択される１つ以上の置換基によってさらに置換されている）；

ヘテロ原子含有Ｃ１－３０ヒドロカルビル基（このヘテロ原子含有ヒドロカルビル基は、非置換であるか、又はハロゲン原子、Ｃ１－２０アルキル基、Ｃ１－２０アルコキシ基、Ｃ７－２０アルキルアリール基、Ｃ７－２０アリールアルキル基、Ｃ６－２０アリール基、Ｃ６－２０アリールオキシ基、Ｃ７－２０アルキルアリールオキシ基、及びＣ７－２０アリールアルキルオキシ基からなる群から選択される１つ以上の置換基によってさらに置換されている）；

オキシ基、－ＯＲ’；

アミド基、－ＮＲ’$_2$；

ホスフィド基、－ＰＲ’$_2$；

チオラート基、－ＳＲ’；

式－Ｓｉ（Ｒ^{a}）$_3$のシリル基；

式－Ｇｅ（Ｒ^{a}）$_3$のゲルマニル基；

からなる群から選択され；

ここで、Ｒ^{3}、Ｒ^{4}、Ｒ^{5}、Ｒ^{6}、Ｒ^{7}、Ｒ^{8}、Ｒ^{9}及びＲ^{10}の２つの隣接する基は、任意に結合して環状ヒドロカルビル基又は環状ヘテロ原子含有ヒドロカルビル基を形成してもよく、環状ヒドロカルビル基又は環状ヘテロ原子含有ヒドロカルビル基は、非置換であるか、又はハロゲン原子、Ｃ１－２０アルキル基、Ｃ１－２０アルコキシ基、Ｃ７－２０アルキルアリール基、Ｃ７－２０アリールアルキル基、Ｃ６－２０アリール基、Ｃ６－２０アリールオキシ基、Ｃ７－２０アルキルアリールオキシ基、Ｃ７－２０アリールアルキルオキシ基、式－ＮＲ’$_2$のアミド基、式－ＰＲ’$_2$のホスフィド基、式－ＳＲ’のチオラート基、式－Ｓｉ（Ｒ^{a}）$_3$のシリル基、及び式－Ｇｅ（Ｒ^{a}）$_3$のゲルマニル基からなる群から選択される１つ以上の置換基によってさらに置換されており；

ここで、各Ｒ’は、独立して、水素、Ｃ1－２０アルキル基、及びＣ６－２０アリール基からなる群から選択され；

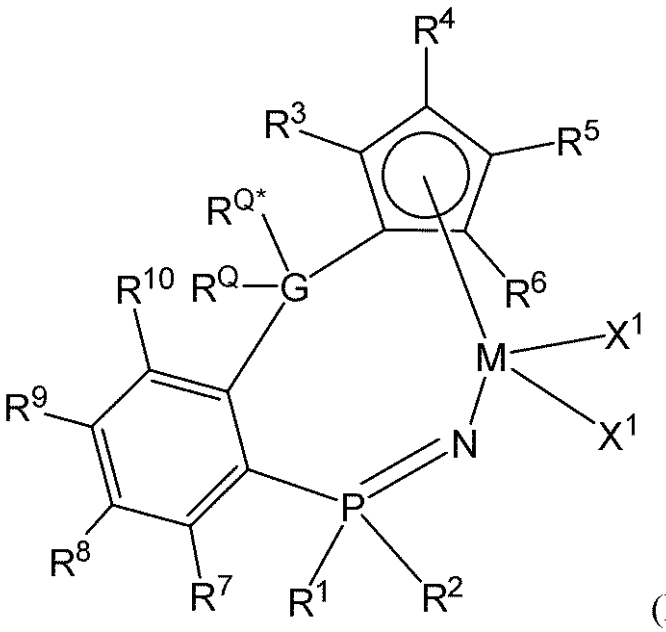
ここで、各Ｒ^{a}は、独立して、水素、Ｃ１－８アルキル基、Ｃ１－８アルコキシ基、Ｃ６－２０アリールオキシ基、Ｃ６－２０アリール基からなる群から選択され；Ｒ^{b}、Ｒ^{c}、Ｒ^{d}は、各々独立して、Ｃ１－２０アルキル基であり；

式中、各Ｘ^{1}は、活性化可能な配位子である、有機金属錯体である。

【００１０】

本開示の一実施形態は、有機金属錯体であって、式ＩＶ：

【化４】



(IV)

で表され、

式中、Ｍは、Ｔｉ、Ｚｒ又はＨｆであり；

式中、Ｒ^{1}及びＲ^{2}は、各々独立して、水素及びＲ^{X}からなる群から選択されるか；又はＲ^{1}及びＲ^{2}は、それらが結合しているＰ原子と一緒になって、非置換であるか、又はハロゲン原子、Ｃ$_{1-20}$アルキル基、Ｃ$_{1-20}$アルコキシ基、Ｃ$_{7-20}$アルキルアリール基、Ｃ$_{7-20}$アリールアルキル基、Ｃ$_{6-20}$アリール基、Ｃ$_{6-20}$アリールオキシ基、Ｃ$_{7-20}$アルキルアリールオキシ基、及びＣ$_{7-20}$アリールアルキルオキシ基からなる群から選択される１つ以上の置換基によってさらに置換されている３－１０員複素環式基を形成し；

各Ｒ^{X}は、独立して、ハロゲン原子；Ｃ$_{1-30}$ヒドロカルビル基（このヒドロカルビル基は、非置換であるか、又は１つ以上のハロゲン原子、Ｃ$_{1-20}$アルキル基、Ｃ$_{1-20}$アルコキシ基、Ｃ$_{7-20}$アルキルアリール基、Ｃ$_{7-20}$アリールアルキル基、Ｃ$_{6-20}$アリール基、Ｃ$_{6-20}$アリールオキシ基、Ｃ$_{7-20}$アルキルアリールオキシ基、及び／又はＣ$_{7-20}$アリールアルキルオキシ基によってさらに置換されている）；式－ＮＲ’$_{2}$のアミド基；式－Ｓｉ（Ｒ^{a}）$_{3}$のシリル基；式－Ｇｅ（Ｒ^{a}）$_{3}$のゲルマニル基；及び式Ｎ＝Ｐ（Ｒ^{b}）（Ｒ^{c}）（Ｒ^{d}）のホスフィンイミン基からなる群から選択され；

式中、Ｇは、Ｃ又はＳｉであり；

式中、Ｒ^{Q}及びＲ^{Q*}は、各々独立して、

ハロゲン；

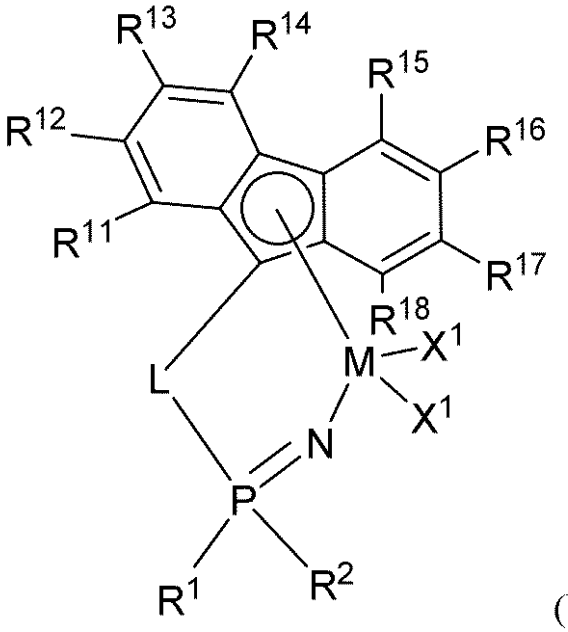
水素；

Ｃ$_{1-30}$ヒドロカルビル基（このヒドロカルビル基は、非置換であるか、又はハロゲン原子、Ｃ$_{1-20}$アルキル基、Ｃ$_{1-20}$アルコキシ基、Ｃ$_{7-20}$アルキルアリール基、Ｃ$_{7-20}$アリールアルキル基、Ｃ$_{6-20}$アリール基、Ｃ$_{6-20}$アリールオキシ基、Ｃ$_{7-20}$アルキルアリールオキシ基、及びＣ$_{7-20}$アリールアルキルオキシ基からなる群から選択される１つ以上の置換基によってさらに置換されている）；

ヘテロ原子含有Ｃ$_{1-30}$ヒドロカルビル基（このヘテロ原子含有ヒドロカルビル基は、非置換であるか、又はハロゲン原子、Ｃ$_{1-20}$アルキル基、Ｃ$_{1-20}$アルコキシ基、Ｃ$_{7-20}$アルキルアリール基、Ｃ$_{7-20}$アリールアルキル基、Ｃ$_{6-20}$アリール基、Ｃ$_{6-20}$アリールオキシ基、Ｃ$_{7-20}$アルキルアリールオキシ基、及びＣ$_{7-20}$アリ

ールアルキルオキシ基からなる群から選択される１つ以上の置換基によってさらに置換されている）；
ここで、R^{Q}及びR^{Q*}の基は、任意に結合して環状ヒドロカルビル基又は環状ヘテロ原子含有ヒドロカルビル基を形成してもよく、環状ヒドロカルビル基又は環状ヘテロ原子含有ヒドロカルビル基は、非置換であるか、又はハロゲン原子、C_{1-20}アルキル基、C_{1-20}アルコキシ基、C_{7-20}アルキルアリール基、C_{7-20}アリールアルキル基、C_{6-20}アリール基、C_{6-20}アリールオキシ基、C_{7-20}アルキルアリールオキシ基、C_{7-20}アリールアルキルオキシ基、式－ＮＲ’$_2$のアミド基、式－ＰＲ’$_2$のホスフィド基、式－ＳＲ’のチオラート基、式－Ｓｉ（R^{a}）$_3$のシリル基、及び式－Ｇｅ（R^{a}）$_3$のゲルマニル基からなる群から選択される１つ以上の置換基によってさらに置換されており；
式中、R^{3}、R^{4}、R^{5}、R^{6}、R^{7}、R^{8}、R^{9}及びR^{10}は、各々独立して、
ハロゲン；
水素；
C_{1-30}ヒドロカルビル基（このヒドロカルビル基は、非置換であるか、又はハロゲン原子、C_{1-20}アルキル基、C_{1-20}アルコキシ基、C_{7-20}アルキルアリール基、C_{7-20}アリールアルキル基、C_{6-20}アリール基、C_{6-20}アリールオキシ基、C_{7-20}アルキルアリールオキシ基、及びC_{7-20}アリールアルキルオキシ基からなる群から選択される１つ以上の置換基によってさらに置換されている）；
ヘテロ原子含有C_{1-30}ヒドロカルビル基（このヘテロ原子含有ヒドロカルビル基は、非置換であるか、又はハロゲン原子、C_{1-20}アルキル基、C_{1-20}アルコキシ基、C_{7-20}アルキルアリール基、C_{7-20}アリールアルキル基、C_{6-20}アリール基、C_{6-20}アリールオキシ基、C_{7-20}アルキルアリールオキシ基、及びC_{7-20}アリールアルキルオキシ基からなる群から選択される１つ以上の置換基によってさらに置換されている）；
オキシ基、－ＯＲ’；
アミド基、－ＮＲ’$_2$；
ホスフィド基、－ＰＲ’$_2$；
チオラート基、－ＳＲ’；
式－Ｓｉ（R^{a}）$_3$のシリル基；
式－Ｇｅ（R^{a}）$_3$のゲルマニル基；
からなる群から選択され；
ここで、R^{3}、R^{4}、R^{5}、R^{6}、R^{7}、R^{8}、R^{9}及びR^{10}の２つの隣接する基は、任意に結合して環状ヒドロカルビル基又は環状ヘテロ原子含有ヒドロカルビル基を形成してもよく、環状ヒドロカルビル基又は環状ヘテロ原子含有ヒドロカルビル基は、非置換であるか、又はハロゲン原子、C_{1-20}アルキル基、C_{1-20}アルコキシ基、C_{7-20}アルキルアリール基、C_{7-20}アリールアルキル基、C_{6-20}アリール基、C_{6-20}アリールオキシ基、C_{7-20}アルキルアリールオキシ基、C_{7-20}アリールアルキルオキシ基、式－ＮＲ’$_2$のアミド基、式－ＰＲ’$_2$のホスフィド基、式－ＳＲ’のチオラート基、式－Ｓｉ（R^{a}）$_3$のシリル基、及び式－Ｇｅ（R^{a}）$_3$のゲルマニル基からなる群から選択される１つ以上の置換基によってさらに置換されており；
ここで、各Ｒ’は、独立して、水素、C_{1-20}アルキル基、及びC_{6-20}アリール基からなる群から選択され；
ここで、各R^{a}は、独立して、水素、C_{1-8}アルキル基、C_{1-8}アルコキシ基、C_{6-20}アリールオキシ基及びC_{6-20}アリール基からなる群から選択され；R^{b}、R^{c}、R^{d}は、各々独立して、C_{1-20}アルキル基であり；
式中、各X^{1}は、活性化可能な配位子である、有機金属錯体である。
【００１１】
本開示の一実施形態は、有機金属錯体であって、式Ｖ：

【化５】



(V)

で表され、

式中、Ｍは、Ｔｉ、Ｚｒ又はＨｆであり；

式中、R^1及びR^2は、各々独立して、水素及びR^Xからなる群から選択されるか；又はR^1及びR^2は、それらが結合しているＰ原子と一緒になって、非置換であるか、又はハロゲン原子、C_{1-20}アルキル基、C_{1-20}アルコキシ基、C_{7-20}アルキルアリール基、C_{7-20}アリールアルキル基、C_{6-20}アリール基、C_{6-20}アリールオキシ基、C_{7-20}アルキルアリールオキシ基、及びC_{7-20}アリールアルキルオキシ基からなる群から選択される１つ以上の置換基によってさらに置換されている３－１０員複素環式基を形成し；

各R^Xは、独立して、ハロゲン原子；C_{1-30}ヒドロカルビル基（このヒドロカルビル基は、非置換であるか、又は１つ以上のハロゲン原子、C_{1-20}アルキル基、C_{1-20}アルコキシ基、C_{7-20}アルキルアリール基、C_{7-20}アリールアルキル基、C_{6-20}アリール基、C_{6-20}アリールオキシ基、C_{7-20}アルキルアリールオキシ基、及び／又はC_{7-20}アリールアルキルオキシ基によってさらに置換されている）；式－NR'_2のアミド基；式－Ｓｉ（R^a）$_3$のシリル基；式－Ｇｅ（R^a）$_3$のゲルマニル基；及び式Ｎ＝Ｐ（R^b）（R^c）（R^d）のホスフィンイミン基からなる群から選択され；

式中、R^{11}、R^{12}、R^{13}、R^{14}、R^{15}、R^{16}、R^{17}、R^{18}は、各々独立して、

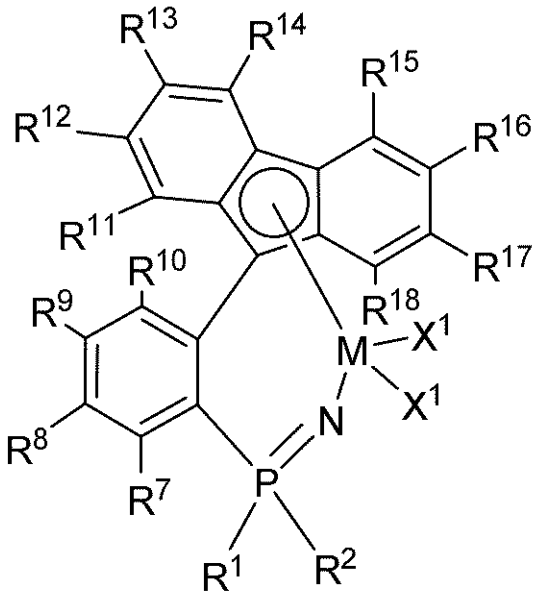
ハロゲン；

水素；

C_{1-30}ヒドロカルビル基（このヒドロカルビル基は、非置換であるか、又はハロゲン原子、C_{1-20}アルキル基、C_{1-20}アルコキシ基、C_{7-20}アルキルアリール基、C_{7-20}アリールアルキル基、C_{6-20}アリール基、C_{6-20}アリールオキシ基、C_{7-20}アルキルアリールオキシ基、及びC_{7-20}アリールアルキルオキシ基からなる群から選択される１つ以上の置換基によってさらに置換されている）；

ヘテロ原子含有C_{1-30}ヒドロカルビル基（このヘテロ原子含有ヒドロカルビル基は、非置換であるか、又はハロゲン原子、C_{1-20}アルキル基、C_{1-20}アルコキシ基、C_{7-20}アルキルアリール基、C_{7-20}アリールアルキル基、C_{6-20}アリール基、

Ｃ６－２０アリールオキシ基、Ｃ７－２０アルキルアリールオキシ基、及びＣ７－２０アリールアルキルオキシ基からなる群から選択される１つ以上の置換基によってさらに置換されている）；
　オキシ基、－ＯＲ’；
　アミド基、－ＮＲ’$_2$；
　ホスフィド基、－ＰＲ’$_2$；
　チオラート基、－ＳＲ’；
　式－Ｓｉ（Ｒ^a）$_3$のシリル基；
　式－Ｇｅ（Ｒ^a）$_3$のゲルマニル基；
からなる群から選択され；
　ここで、Ｒ^{11}、Ｒ^{12}、Ｒ^{13}、Ｒ^{14}、Ｒ^{15}、Ｒ^{16}、Ｒ^{17}、Ｒ^{18}の２つの隣接する基は、任意に結合して環状ヒドロカルビル基又は環状ヘテロ原子含有ヒドロカルビル基を形成してもよく、環状ヒドロカルビル基又は環状ヘテロ原子含有ヒドロカルビル基は、非置換であるか、又はハロゲン原子、Ｃ１－２０アルキル基、Ｃ１－２０アルコキシ基、Ｃ７－２０アルキルアリール基、Ｃ７－２０アリールアルキル基、Ｃ６－２０アリール基、Ｃ６－２０アリールオキシ基、Ｃ７－２０アルキルアリールオキシ基、Ｃ７－２０アリールアルキルオキシ基、式－ＮＲ’$_2$のアミド基、式－ＰＲ’$_2$のホスフィド基、式－ＳＲ’のチオラート基、式－Ｓｉ（Ｒ^a）$_3$のシリル基、及び式－Ｇｅ（Ｒ^a）$_3$のゲルマニル基からなる群から選択される１つ以上の置換基によってさらに置換されており；
　ここで、各Ｒ’は、独立して、水素、Ｃ$_1$－２０アルキル基、及びＣ６－２０アリール基からなる群から選択され；
　ここで、各Ｒ^{a}は、独立して、水素、Ｃ１－８アルキル基、Ｃ１－８アルコキシ基、Ｃ６－２０アリールオキシ基及びＣ６－２０アリール基からなる群から選択され、Ｒ^b、Ｒ^c、Ｒ^{d}は、各々独立して、Ｃ１－２０アルキル基であり；
　各Ｘ^{1}は、活性化可能な配位子であり；
　Ｌは、ＰとＣｙを連結する原子の連続鎖を含む架橋基であり、連続鎖は２個又は３個の原子を含む、有機金属錯体である。
【００１２】
　本開示の一実施形態は、有機金属錯体であって、式ＶＩ：
【化６】



(VI)

で表され、

式中、Ｍは、Ｔｉ、Ｚｒ又はＨｆであり；
式中、R^1及びR^2は、各々独立して、水素及びR^Xからなる群から選択されるか；又はR^1及びR^2は、それらが結合しているＰ原子と一緒になって、非置換であるか、又はハロゲン原子、C_{1-20}アルキル基、C_{1-20}アルコキシ基、C_{7-20}アルキルアリール基、C_{7-20}アリールアルキル基、C_{6-20}アリール基、C_{6-20}アリールオキシ基、C_{7-20}アルキルアリールオキシ基、及びC_{7-20}アリールアルキルオキシ基からなる群から選択される１つ以上の置換基によってさらに置換されている３－１０員複素環式基を形成し；
各R^Xは、独立して、ハロゲン原子；C_{1-30}ヒドロカルビル基（このヒドロカルビル基は、非置換であるか、又は１つ以上のハロゲン原子、C_{1-20}アルキル基、C_{1-20}アルコキシ基、C_{7-20}アルキルアリール基、C_{7-20}アリールアルキル基、C_{6-20}アリール基、C_{6-20}アリールオキシ基、C_{7-20}アルキルアリールオキシ基、及び／又はC_{7-20}アリールアルキルオキシ基によってさらに置換されている）；式－NR'_2のアミド基；式－$Si(R^a)_3$のシリル基；式－$Ge(R^a)_3$のゲルマニル基；及び式Ｎ＝Ｐ（R^b）（R^c）（R^d）のホスフィンイミン基からなる群から選択され；
式中、R^7、R^8、R^9、R^{10}、R^{11}、R^{12}、R^{13}、R^{14}、R^{15}、R^{16}、R^{17}及びR^{18}は、各々独立して、
ハロゲン；
水素；
C_{1-30}ヒドロカルビル基（このヒドロカルビル基は、非置換であるか、又はハロゲン原子、C_{1-20}アルキル基、C_{1-20}アルコキシ基、C_{7-20}アルキルアリール基、C_{7-20}アリールアルキル基、C_{6-20}アリール基、C_{6-20}アリールオキシ基、C_{7-20}アルキルアリールオキシ基、及びC_{7-20}アリールアルキルオキシ基からなる群から選択される１つ以上の置換基によってさらに置換されている）；
ヘテロ原子含有C_{1-30}ヒドロカルビル基（このヘテロ原子含有ヒドロカルビル基は、非置換であるか、又はハロゲン原子、C_{1-20}アルキル基、C_{1-20}アルコキシ基、C_{7-20}アルキルアリール基、C_{7-20}アリールアルキル基、C_{6-20}アリール基、C_{6-20}アリールオキシ基、C_{7-20}アルキルアリールオキシ基、及びC_{7-20}アリールアルキルオキシ基からなる群から選択される１つ以上の置換基によってさらに置換されている）；
オキシ基、－ＯＲ’；
アミド基、－NR'_2；
ホスフィド基、－PR'_2；
チオラート基、－ＳＲ’；
式－$Si(R^a)_3$のシリル基；
式－$Ge(R^a)_3$のゲルマニル基；
からなる群から選択され；
ここで、R^7、R^8、R^9、R^{10}、R^{11}、R^{12}、R^{13}、R^{14}、R^{15}、R^{16}、R^{17}及びR^{18}の２つの隣接する基は、任意に結合して環状ヒドロカルビル基又は環状ヘテロ原子含有ヒドロカルビル基を形成してもよく、環状ヒドロカルビル基又は環状ヘテロ原子含有ヒドロカルビル基は、非置換であるか、又はハロゲン原子、C_{1-20}アルキル基、C_{1-20}アルコキシ基、C_{7-20}アルキルアリール基、C_{7-20}アリールアルキル基、C_{6-20}アリール基、C_{6-20}アリールオキシ基、C_{7-20}アルキルアリールオキシ基、C_{7-20}アリールアルキルオキシ基、式－NR'_2のアミド基、式－PR'_2のホスフィド基、式－ＳＲ’のチオラート基、式－$Si(R^a)_3$のシリル基、及び式－$Ge(R^a)_3$のゲルマニル基からなる群から選択される１つ以上の置換基によってさらに置換されており；
ここで、各Ｒ’は、独立して、水素、C_{1-20}アルキル基、及びC_{6-20}アリール基からなる群から選択され；

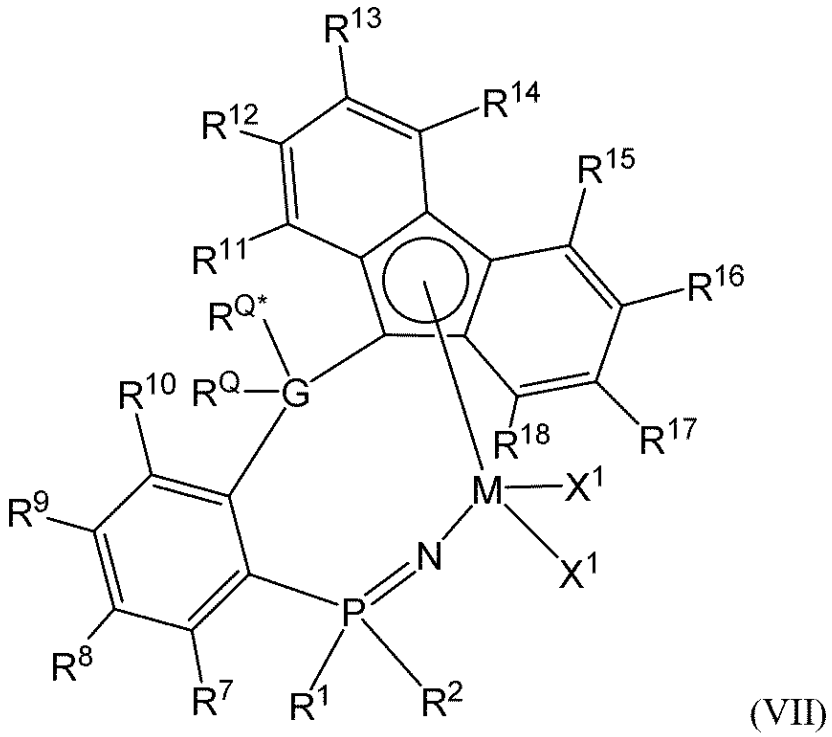
ここで、各R^aは、独立して、水素、C_{1-8}アルキル基、C_{1-8}アルコキシ基、C_{6-20}アリールオキシ基及びC_{6-20}アリール基からなる群から選択され、R^b、R^c、R^dは、各々独立して、C_{1-20}アルキル基であり；

各X^1は、活性化可能な配位子である、有機金属錯体である。

【００１３】

本開示の一実施形態は、有機金属錯体であって、式ＶＩＩ：

【化７】



(VII)

で表され、

式中、Ｍは、Ｔｉ、Ｚｒ又はＨｆであり；

式中、R^1及びR^2は、各々独立して、水素及びR^Xからなる群から選択されるか；又はR^1及びR^2は、それらが結合しているＰ原子と一緒になって、非置換であるか、又はハロゲン原子、C_{1-20}アルキル基、C_{1-20}アルコキシ基、C_{7-20}アルキルアリール基、C_{7-20}アリールアルキル基、C_{6-20}アリール基、C_{6-20}アリールオキシ基、C_{7-20}アルキルアリールオキシ基、及びC_{7-20}アリールアルキルオキシ基からなる群から選択される１つ以上の置換基によってさらに置換されている３－１０員複素環式基を形成し；

各R^Xは、独立して、ハロゲン原子；C_{1-30}ヒドロカルビル基（このヒドロカルビル基は、非置換であるか、又は１つ以上のハロゲン原子、C_{1-20}アルキル基、C_{1-20}アルコキシ基、C_{7-20}アルキルアリール基、C_{7-20}アリールアルキル基、C_{6-20}アリール基、C_{6-20}アリールオキシ基、C_{7-20}アルキルアリールオキシ基、及び／又はC_{7-20}アリールアルキルオキシ基によってさらに置換されている）；式－ＮＲ’$_2$のアミド基；式－Ｓｉ（R^a）$_3$のシリル基；式－Ｇｅ（R^a）$_3$のゲルマニル基；及び式Ｎ＝Ｐ（R^b）（R^c）（R^d）のホスフィンイミン基からなる群から選択され；

式中、Ｇは、Ｃ又はＳｉであり；

式中、R^Q及びR^{Q*}は、各々独立して、

ハロゲン；

水素；

Ｃ１－３０ヒドロカルビル基（このヒドロカルビル基は、非置換であるか、又はハロゲン原子、Ｃ１－２０アルキル基、Ｃ１－２０アルコキシ基、Ｃ７－２０アルキルアリール基、Ｃ７－２０アリールアルキル基、Ｃ６－２０アリール基、Ｃ６－２０アリールオキシ基、Ｃ７－２０アルキルアリールオキシ基、及びＣ７－２０アリールアルキルオキシ基からなる群から選択される１つ以上の置換基によってさらに置換されている）；

ヘテロ原子含有Ｃ１－３０ヒドロカルビル基（このヘテロ原子含有ヒドロカルビル基は、非置換であるか、又はハロゲン原子、Ｃ１－２０アルキル基、Ｃ１－２０アルコキシ基、Ｃ７－２０アルキルアリール基、Ｃ７－２０アリールアルキル基、Ｃ６－２０アリール基、Ｃ６－２０アリールオキシ基、Ｃ７－２０アルキルアリールオキシ基、及びＣ７－２０アリールアルキルオキシ基からなる群から選択される１つ以上の置換基によってさらに置換されている）；

ここで、R^Q及びR^{Q*}の基は、任意に結合して環状ヒドロカルビル基又は環状ヘテロ原子含有ヒドロカルビル基を形成してもよく、環状ヒドロカルビル基又は環状ヘテロ原子含有ヒドロカルビル基は、非置換であるか、又はハロゲン原子、Ｃ１－２０アルキル基、Ｃ１－２０アルコキシ基、Ｃ７－２０アルキルアリール基、Ｃ７－２０アリールアルキル基、Ｃ６－２０アリール基、Ｃ６－２０アリールオキシ基、Ｃ７－２０アルキルアリールオキシ基、Ｃ７－２０アリールアルキルオキシ基、式－ＮＲ’$_2$のアミド基、式－ＰＲ’$_2$のホスフィド基、式－ＳＲ’のチオラート基、式－Ｓｉ（R^a）$_3$のシリル基、及び式－Ｇｅ（R^a）$_3$のゲルマニル基からなる群から選択される１つ以上の置換基によってさらに置換されており；

式中、R^7、R^8、R^9、R^{10}、R^{11}、R^{12}、R^{13}、R^{14}、R^{15}、R^{16}、R^{17}及びR^{18}は、各々独立して、

ハロゲン；

水素；

Ｃ１－３０ヒドロカルビル基（このヒドロカルビル基は、非置換であるか、又はハロゲン原子、Ｃ１－２０アルキル基、Ｃ１－２０アルコキシ基、Ｃ７－２０アルキルアリール基、Ｃ７－２０アリールアルキル基、Ｃ６－２０アリール基、Ｃ６－２０アリールオキシ基、Ｃ７－２０アルキルアリールオキシ基、及びＣ７－２０アリールアルキルオキシ基からなる群から選択される１つ以上の置換基によってさらに置換されている）；

ヘテロ原子含有Ｃ１－３０ヒドロカルビル基（このヘテロ原子含有ヒドロカルビル基は、非置換であるか、又はハロゲン原子、Ｃ１－２０アルキル基、Ｃ１－２０アルコキシ基、Ｃ７－２０アルキルアリール基、Ｃ７－２０アリールアルキル基、Ｃ６－２０アリール基、Ｃ６－２０アリールオキシ基、Ｃ７－２０アルキルアリールオキシ基、及びＣ７－２０アリールアルキルオキシ基からなる群から選択される１つ以上の置換基によってさらに置換されている）；

オキシ基、－ＯＲ’；

アミド基、－ＮＲ’$_2$；

ホスフィド基、－ＰＲ’$_2$；

チオラート基、－ＳＲ’；

式－Ｓｉ（R^a）$_3$のシリル基；

式－Ｇｅ（R^a）$_3$のゲルマニル基；

からなる群から選択され；

ここで、R^7、R^8、R^9、R^{10}、R^{11}、R^{12}、R^{13}、R^{14}、R^{15}、R^{16}、R^{17}及びR^{18}の２つの隣接する基は、任意に結合して環状ヒドロカルビル基又は環状ヘテロ原子含有ヒドロカルビル基を形成してもよく、環状ヒドロカルビル基又は環状ヘテロ原子含有ヒドロカルビル基は、非置換であるか、又はハロゲン原子、Ｃ１－２０アルキル基、Ｃ１－２０アルコキシ基、Ｃ７－２０アルキルアリール基、Ｃ７－２０アリールアルキル基、Ｃ６－２０アリール基、Ｃ６－２０アリールオキシ基、Ｃ７－２０アルキルアリールオキシ基、Ｃ７－２０アリールアルキルオキシ基、式－ＮＲ’$_2$のアミド基、式－ＰＲ’$_2$のホスフィド基、式－ＳＲ’のチオラート基、式－Ｓｉ（R^a）$_3$のシリル基、及び式－

Ｇｅ（Ｒ^{a}）$_{3}$のゲルマニル基からなる群から選択される１つ以上の置換基によってさらに置換されており；

ここで、各Ｒ’は、独立して、水素、Ｃ$_{1-20}$アルキル基、及びＣ$_{6-20}$アリール基からなる群から選択され；

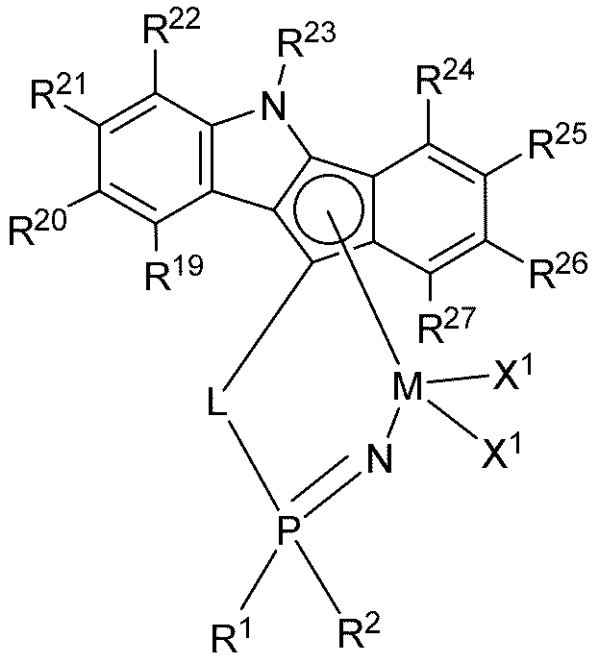
ここで、各Ｒ^{a}は、独立して、水素、Ｃ$_{1-8}$アルキル基、Ｃ$_{1-8}$アルコキシ基、Ｃ$_{6-20}$アリールオキシ基及びＣ$_{6-20}$アリール基からなる群から選択され、Ｒ^{b}、Ｒ^{c}、Ｒ^{d}は、各々独立して、Ｃ$_{1-20}$アルキル基であり；

各Ｘ^{1}は、活性化可能な配位子である、有機金属錯体である。

【００１４】

本開示の一実施形態は、有機金属錯体であって、式ＶＩＩＩ：

【化８】



(VIII)

で表され、

式中、Ｍは、Ｔｉ、Ｚｒ又はＨｆであり；

式中、Ｒ^{1}及びＲ^{2}は、各々独立して、水素及びＲ^{X}からなる群から選択されるか；又はＲ^{1}及びＲ^{2}は、それらが結合しているＰ原子と一緒になって、非置換であるか、又はハロゲン原子、Ｃ$_{1-20}$アルキル基、Ｃ$_{1-20}$アルコキシ基、Ｃ$_{7-20}$アルキルアリール基、Ｃ$_{7-20}$アリールアルキル基、Ｃ$_{6-20}$アリール基、Ｃ$_{6-20}$アリールオキシ基、Ｃ$_{7-20}$アルキルアリールオキシ基、及びＣ$_{7-20}$アリールアルキルオキシ基からなる群から選択される１つ以上の置換基によってさらに置換されている３－１０員複素環式基を形成し；

各Ｒ^{X}は、独立して、ハロゲン原子；Ｃ$_{1-30}$ヒドロカルビル基（このヒドロカルビル基は、非置換であるか、又は１つ以上のハロゲン原子、Ｃ$_{1-20}$アルキル基、Ｃ$_{1-20}$アルコキシ基、Ｃ$_{7-20}$アルキルアリール基、Ｃ$_{7-20}$アリールアルキル基、Ｃ$_{6-20}$アリール基、Ｃ$_{6-20}$アリールオキシ基、Ｃ$_{7-20}$アルキルアリールオキシ基、及び／又はＣ$_{7-20}$アリールアルキルオキシ基によってさらに置換されている）；式－ＮＲ’$_{2}$のアミド基；式－Ｓｉ（Ｒ^{a}）$_{3}$のシリル基；式－Ｇｅ（Ｒ^{a}）$_{3}$のゲルマニル基；及び式Ｎ＝Ｐ（Ｒ^{b}）（Ｒ^{c}）（Ｒ^{d}）のホスフィンイミン基からなる群から選択され；

式中、Ｒ^{23}は、

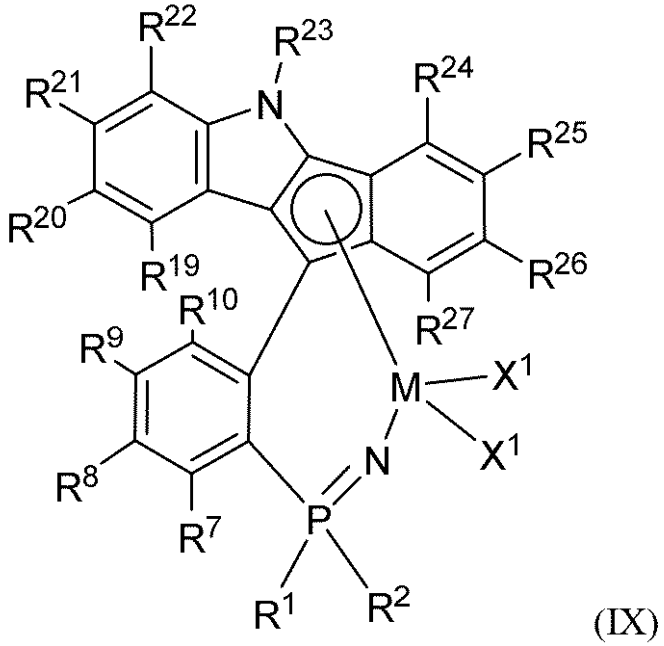
水素；
C_{1-30}ヒドロカルビル基（このヒドロカルビル基は、非置換であるか、又はハロゲン原子、C_{1-20}アルキル基、C_{1-20}アルコキシ基、C_{7-20}アルキルアリール基、C_{7-20}アリールアルキル基、C_{6-20}アリール基、C_{6-20}アリールオキシ基、C_{7-20}アルキルアリールオキシ基、及びC_{7-20}アリールアルキルオキシ基からなる群から選択される１つ以上の置換基によってさらに置換されている）；
ヘテロ原子含有C_{1-30}ヒドロカルビル基（このヘテロ原子含有ヒドロカルビル基は、非置換であるか、又はハロゲン原子、C_{1-20}アルキル基、C_{1-20}アルコキシ基、C_{7-20}アルキルアリール基、C_{7-20}アリールアルキル基、C_{6-20}アリール基、C_{6-20}アリールオキシ基、C_{7-20}アルキルアリールオキシ基、及びC_{7-20}アリールアルキルオキシ基からなる群から選択される１つ以上の置換基によってさらに置換されている）；
からなる群から選択され；
式中、R^{19}、R^{20}、R^{21}、R^{22}、R^{24}、R^{25}、R^{26}、及びR^{27}は、各々独立して、
ハロゲン；
水素；
C_{1-30}ヒドロカルビル基（このヒドロカルビル基は、非置換であるか、又はハロゲン原子、C_{1-20}アルキル基、C_{1-20}アルコキシ基、C_{7-20}アルキルアリール基、C_{7-20}アリールアルキル基、C_{6-20}アリール基、C_{6-20}アリールオキシ基、C_{7-20}アルキルアリールオキシ基、及びC_{7-20}アリールアルキルオキシ基からなる群から選択される１つ以上の置換基によってさらに置換されている）；
ヘテロ原子含有C_{1-30}ヒドロカルビル基（このヘテロ原子含有ヒドロカルビル基は、非置換であるか、又はハロゲン原子、C_{1-20}アルキル基、C_{1-20}アルコキシ基、C_{7-20}アルキルアリール基、C_{7-20}アリールアルキル基、C_{6-20}アリール基、C_{6-20}アリールオキシ基、C_{7-20}アルキルアリールオキシ基、及びC_{7-20}アリールアルキルオキシ基からなる群から選択される１つ以上の置換基によってさらに置換されている）；
オキシ基、－ＯＲ’；
アミド基、－ＮＲ’$_2$；
ホスフィド基、－ＰＲ’$_2$；
チオラート基、－ＳＲ’；
式－Ｓｉ（R^a）$_3$のシリル基；
式－Ｇｅ（R^a）$_3$のゲルマニル基；
からなる群から選択され；
ここで、R^{19}、R^{20}、R^{21}、R^{22}、R^{24}、R^{25}、R^{26}、及びR^{27}の２つの隣接する基は、任意に結合して環状ヒドロカルビル基又は環状ヘテロ原子含有ヒドロカルビル基を形成してもよく、環状ヒドロカルビル基又は環状ヘテロ原子含有ヒドロカルビル基は、非置換であるか、又はハロゲン原子、C_{1-20}アルキル基、C_{1-20}アルコキシ基、C_{7-20}アルキルアリール基、C_{7-20}アリールアルキル基、C_{6-20}アリール基、C_{6-20}アリールオキシ基、C_{7-20}アルキルアリールオキシ基、C_{7-20}アリールアルキルオキシ基、式－ＮＲ’$_2$のアミド基、式－ＰＲ’$_2$のホスフィド基、式－ＳＲ’のチオラート基、式－Ｓｉ（R^a）$_3$のシリル基、及び式－Ｇｅ（R^a）$_3$のゲルマニル基からなる群から選択される１つ以上の置換基によってさらに置換されており；
ここで、各Ｒ’は、独立して、水素、C_{1-20}アルキル基、及びC_{6-20}アリール基からなる群から選択され；
ここで、各R^aは、独立して、水素、C_{1-8}アルキル基、C_{1-8}アルコキシ基、C_{6-20}アリールオキシ基及びC_{6-20}アリール基からなる群から選択され、R^b、R^c、R^dは、各々独立して、C_{1-20}アルキル基であり；
各X^1は、活性化可能な配位子であり；

Ｌは、ＰとＣｙを連結する原子の連続鎖を含む架橋基であり、連続鎖は２個又は３個の原子を含む、有機金属錯体である。

【００１５】

本開示の一実施形態は、有機金属錯体であって、式ＩＸ：

【化９】



(IX)

で表され、

式中、Ｍは、Ｔｉ、Ｚｒ又はＨｆであり；

式中、R^1及びR^2は、各々独立して、水素及びR^Xからなる群から選択されるか；又はR^1及びR^2は、それらが結合しているＰ原子と一緒になって、非置換であるか、又はハロゲン原子、C_{1-20}アルキル基、C_{1-20}アルコキシ基、C_{7-20}アルキルアリール基、C_{7-20}アリールアルキル基、C_{6-20}アリール基、C_{6-20}アリールオキシ基、C_{7-20}アルキルアリールオキシ基、及びC_{7-20}アリールアルキルオキシ基からなる群から選択される１つ以上の置換基によってさらに置換されている３－１０員複素環式基を形成し；

各R^Xは、独立して、ハロゲン原子；C_{1-30}ヒドロカルビル基（このヒドロカルビル基は、非置換であるか、又は１つ以上のハロゲン原子、C_{1-20}アルキル基、C_{1-20}アルコキシ基、C_{7-20}アルキルアリール基、C_{7-20}アリールアルキル基、C_{6-20}アリール基、C_{6-20}アリールオキシ基、C_{7-20}アルキルアリールオキシ基、及び／又はC_{7-20}アリールアルキルオキシ基によってさらに置換されている）；式－NR'_2のアミド基；式－Ｓｉ（R^a）$_3$のシリル基；式－Ｇｅ（R^a）$_3$のゲルマニル基；及び式Ｎ＝Ｐ（R^b）（R^c）（R^d）のホスフィンイミン基からなる群から選択され；

式中、R^{23}は、

水素；

C_{1-30}ヒドロカルビル基（このヒドロカルビル基は、非置換であるか、又はハロゲン原子、C_{1-20}アルキル基、C_{1-20}アルコキシ基、C_{7-20}アルキルアリール基、C_{7-20}アリールアルキル基、C_{6-20}アリール基、C_{6-20}アリールオキシ基、C_{7-20}アルキルアリールオキシ基、及びC_{7-20}アリールアルキルオキシ基からなる群から選択される１つ以上の置換基によってさらに置換されている）；

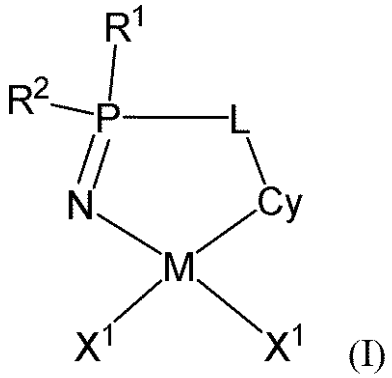
ヘテロ原子含有C_{1-30}ヒドロカルビル基（このヘテロ原子含有ヒドロカルビル基は

、非置換であるか、又はハロゲン原子、Ｃ１－２０アルキル基、Ｃ１－２０アルコキシ基、Ｃ７－２０アルキルアリール基、Ｃ７－２０アリールアルキル基、Ｃ６－２０アリール基、Ｃ６－２０アリールオキシ基、Ｃ７－２０アルキルアリールオキシ基、及びＣ７－２０アリールアルキルオキシ基からなる群から選択される１つ以上の置換基によってさらに置換されている）；
からなる群から選択され；
式中、Ｒ７、Ｒ８、Ｒ９、Ｒ１０、Ｒ１９、Ｒ２０、Ｒ２１、Ｒ２２、Ｒ２４、Ｒ２５、Ｒ２６、及びＲ２７は、各々独立して、
ハロゲン；
水素；
Ｃ１－３０ヒドロカルビル基（このヒドロカルビル基は、非置換であるか、又はハロゲン原子、Ｃ１－２０アルキル基、Ｃ１－２０アルコキシ基、Ｃ７－２０アルキルアリール基、Ｃ７－２０アリールアルキル基、Ｃ６－２０アリール基、Ｃ６－２０アリールオキシ基、Ｃ７－２０アルキルアリールオキシ基、及びＣ７－２０アリールアルキルオキシ基からなる群から選択される１つ以上の置換基によってさらに置換されている）；
ヘテロ原子含有Ｃ１－３０ヒドロカルビル基（このヘテロ原子含有ヒドロカルビル基は、非置換であるか、又はハロゲン原子、Ｃ１－２０アルキル基、Ｃ１－２０アルコキシ基、Ｃ７－２０アルキルアリール基、Ｃ７－２０アリールアルキル基、Ｃ６－２０アリール基、Ｃ６－２０アリールオキシ基、Ｃ７－２０アルキルアリールオキシ基、及びＣ７－２０アリールアルキルオキシ基からなる群から選択される１つ以上の置換基によってさらに置換されている）；
オキシ基、－ＯＲ’；
アミド基、－ＮＲ’$_2$；
ホスフィド基、－ＰＲ’$_2$；
チオラート基、－ＳＲ’；
式－Ｓｉ（Ｒ^a）$_3$のシリル基；
式－Ｇｅ（Ｒ^a）$_3$のゲルマニル基；
からなる群から選択され；
ここで、Ｒ７、Ｒ８、Ｒ９、Ｒ１０、Ｒ１９、Ｒ２０、Ｒ２１、Ｒ２２、Ｒ２４、Ｒ２５、Ｒ２６、及びＲ２７の２つの隣接する基は、任意に結合して環状ヒドロカルビル基又は環状ヘテロ原子含有ヒドロカルビル基を形成してもよく、環状ヒドロカルビル基又は環状ヘテロ原子含有ヒドロカルビル基は、非置換であるか、又はハロゲン原子、Ｃ１－２０アルキル基、Ｃ１－２０アルコキシ基、Ｃ７－２０アルキルアリール基、Ｃ７－２０アリールアルキル基、Ｃ６－２０アリール基、Ｃ６－２０アリールオキシ基、Ｃ７－２０アルキルアリールオキシ基、Ｃ７－２０アリールアルキルオキシ基、式－ＮＲ’$_2$のアミド基、式－ＰＲ’$_2$のホスフィド基、式－ＳＲ’のチオラート基、式－Ｓｉ（Ｒ^a）$_3$のシリル基、及び式－Ｇｅ（Ｒ^a）$_3$のゲルマニル基からなる群から選択される１つ以上の置換基によってさらに置換されており；
ここで、各Ｒ’は、独立して、水素、Ｃ1－２０アルキル基、及びＣ６－２０アリール基からなる群から選択され；
ここで、各Ｒ^{a}は、独立して、水素、Ｃ１－８アルキル基、Ｃ１－８アルコキシ基、Ｃ６－２０アリールオキシ基及びＣ６－２０アリール基からなる群から選択され、Ｒ^b、Ｒ^c、Ｒ^{d}は、各々独立して、Ｃ１－２０アルキル基であり；
各Ｘ１は、活性化可能な配位子である、有機金属錯体である。

【００１６】

一実施形態は、オレフィン重合触媒系であって、
ｉ）有機金属錯体であって、式Ｉ：

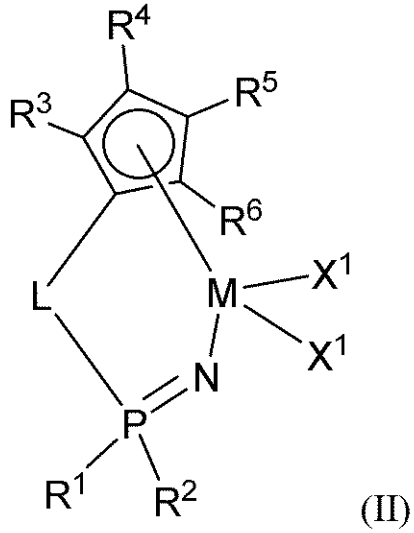
【化１０】



(I)

で表され、
式中、
Ｍは、Ｔｉ、Ｚｒ又はＨｆであり；
Ｒ^{1}及びＲ^{2}は、各々独立して、水素及びＲ^{X}からなる群から選択されるか；又はＲ^{1}及びＲ^{2}は、それらが結合しているＰ原子と一緒になって、非置換であるか、又はハロゲン原子、Ｃ$_{1-20}$アルキル基、Ｃ$_{1-20}$アルコキシ基、Ｃ$_{7-20}$アルキルアリール基、Ｃ$_{7-20}$アリールアルキル基、Ｃ$_{6-20}$アリール基、Ｃ$_{6-20}$アリールオキシ基、Ｃ$_{7-20}$アルキルアリールオキシ基、及びＣ$_{7-20}$アリールアルキルオキシ基からなる群から選択される１つ以上の置換基によってさらに置換されている３－１０員複素環式基を形成し；
各Ｒ^{X}は、独立して、ハロゲン原子；Ｃ$_{1-30}$ヒドロカルビル基（このヒドロカルビル基は、非置換であるか、又は１つ以上のハロゲン原子、Ｃ$_{1-20}$アルキル基、Ｃ$_{1-20}$アルコキシ基、Ｃ$_{7-20}$アルキルアリール基、Ｃ$_{7-20}$アリールアルキル基、Ｃ$_{6-20}$アリール基、Ｃ$_{6-20}$アリールオキシ基、Ｃ$_{7-20}$アルキルアリールオキシ基、及び／又はＣ$_{7-20}$アリールアルキルオキシ基によってさらに置換されている）；式－ＮＲ’$_{2}$のアミド基；式－Ｓｉ（Ｒ^{a}）$_{3}$のシリル基；式－Ｇｅ（Ｒ^{a}）$_{3}$のゲルマニル基；及び式Ｎ＝Ｐ（Ｒ^{b}）（Ｒ^{c}）（Ｒ^{d}）のホスフィンイミン基からなる群から選択され；ここで、各Ｒ’は、独立して、水素、Ｃ$_{1-20}$アルキル基、及びＣ$_{6-20}$アリール基からなる群から選択され；ここで、各Ｒ^{a}は、独立して、水素、Ｃ$_{1-8}$アルキル基、Ｃ$_{1-8}$アルコキシ基、Ｃ$_{6-20}$アリールオキシ基及びＣ$_{6-20}$アリール基からなる群から選択され、Ｒ^{b}、Ｒ^{c}、Ｒ^{d}は、各々独立して、Ｃ$_{1-20}$アルキル基であり；
各Ｘ^{1}は、活性化可能な配位子であり；
Ｃｙは、Ｌに共有結合し、η－結合を介してＭに配位するシクロペンタジエニル型配位子であり；
Ｌは、ＰとＣｙを連結する原子の連続鎖を含む架橋基であり、連続鎖は２個又は３個の原子を含む、有機金属錯体と、
ｉｉ）触媒活性剤と、
を含む、オレフィン重合触媒系である。
【００１７】
一実施形態は、オレフィン重合触媒系であって、
ｉ）有機金属錯体であって、式ＩＩ：

【化１１】



(II)

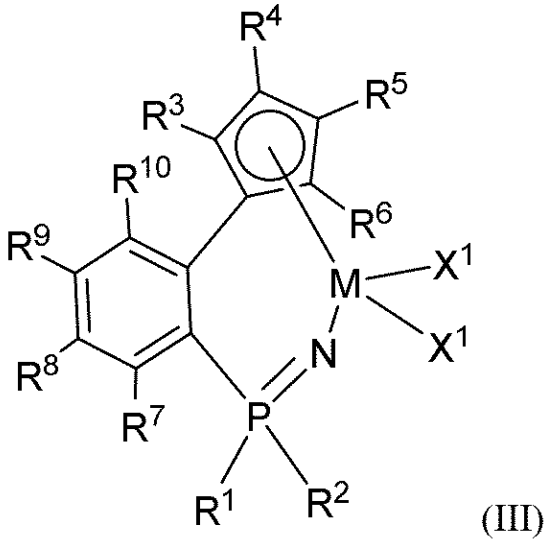
で表され、
式中、
Ｍは、Ｔｉ、Ｚｒ又はＨｆであり；
Ｒ^{1}及びＲ^{2}は、各々独立して、水素及びＲ^{X}からなる群から選択されるか；又はＲ^{1}及びＲ^{2}は、それらが結合しているＰ原子と一緒になって、非置換であるか、又はハロゲン原子、Ｃ$_{1-20}$アルキル基、Ｃ$_{1-20}$アルコキシ基、Ｃ$_{7-20}$アルキルアリール基、Ｃ$_{7-20}$アリールアルキル基、Ｃ$_{6-20}$アリール基、Ｃ$_{6-20}$アリールオキシ基、Ｃ$_{7-20}$アルキルアリールオキシ基、及びＣ$_{7-20}$アリールアルキルオキシ基からなる群から選択される１つ以上の置換基によってさらに置換されている３－１０員複素環式基を形成し；
各Ｒ^{X}は、独立して、ハロゲン原子；Ｃ$_{1-30}$ヒドロカルビル基（このヒドロカルビル基は、非置換であるか、又は１つ以上のハロゲン原子、Ｃ$_{1-20}$アルキル基、Ｃ$_{1-20}$アルコキシ基、Ｃ$_{7-20}$アルキルアリール基、Ｃ$_{7-20}$アリールアルキル基、Ｃ$_{6-20}$アリール基、Ｃ$_{6-20}$アリールオキシ基、Ｃ$_{7-20}$アルキルアリールオキシ基、及び／又はＣ$_{7-20}$アリールアルキルオキシ基によってさらに置換されている）；式－ＮＲ’$_{2}$のアミド基；式－Ｓｉ（Ｒ^{a}）$_{3}$のシリル基；式－Ｇｅ（Ｒ^{a}）$_{3}$のゲルマニル基；及び式Ｎ＝Ｐ（Ｒ^{b}）（Ｒ^{c}）（Ｒ^{d}）のホスフィンイミン基からなる群から選択され；
式中、Ｒ^{3}、Ｒ^{4}、Ｒ^{5}及びＲ^{6}は、各々独立して、
ハロゲン；
水素；
Ｃ$_{1-30}$ヒドロカルビル基（このヒドロカルビル基は、非置換であるか、又はハロゲン原子、Ｃ$_{1-20}$アルキル基、Ｃ$_{1-20}$アルコキシ基、Ｃ$_{7-20}$アルキルアリール基、Ｃ$_{7-20}$アリールアルキル基、Ｃ$_{6-20}$アリール基、Ｃ$_{6-20}$アリールオキシ基、Ｃ$_{7-20}$アルキルアリールオキシ基、及びＣ$_{7-20}$アリールアルキルオキシ基からなる群から選択される１つ以上の置換基によってさらに置換されている）；
ヘテロ原子含有Ｃ$_{1-30}$ヒドロカルビル基（このヘテロ原子含有ヒドロカルビル基は、非置換であるか、又はハロゲン原子、Ｃ$_{1-20}$アルキル基、Ｃ$_{1-20}$アルコキシ基、Ｃ$_{7-20}$アルキルアリール基、Ｃ$_{7-20}$アリールアルキル基、Ｃ$_{6-20}$アリール基、Ｃ$_{6-20}$アリールオキシ基、Ｃ$_{7-20}$アルキルアリールオキシ基、及びＣ$_{7-20}$アリールアルキルオキシ基からなる群から選択される１つ以上の置換基によってさらに置換されている）；

オキシ基、－ＯＲ’；
アミド基、－ＮＲ’$_2$；
ホスフィド基、－ＰＲ’$_2$；
チオラート基、－ＳＲ’；
式－Ｓｉ（Ｒ^a）$_3$のシリル基；
式－Ｇｅ（Ｒ^a）$_3$のゲルマニル基；
からなる群から選択され；
ここで、Ｒ^3、Ｒ^4、Ｒ^{5}及びＲ^{6}の２つの隣接する基は、任意に結合して環状ヒドロカルビル基又は環状ヘテロ原子含有ヒドロカルビル基を形成してもよく、環状ヒドロカルビル基又は環状ヘテロ原子含有ヒドロカルビル基は、非置換であるか、又はハロゲン原子、Ｃ$_{1-20}$アルキル基、Ｃ$_{1-20}$アルコキシ基、Ｃ$_{7-20}$アルキルアリール基、Ｃ$_{7-20}$アリールアルキル基、Ｃ$_{6-20}$アリール基、Ｃ$_{6-20}$アリールオキシ基、Ｃ$_{7-20}$アルキルアリールオキシ基、Ｃ$_{7-20}$アリールアルキルオキシ基、式－ＮＲ’$_2$のアミド基、式－ＰＲ’$_2$のホスフィド基、式－ＳＲ’のチオラート基、式－Ｓｉ（Ｒ^a）$_3$のシリル基、及び式－Ｇｅ（Ｒ^a）$_3$のゲルマニル基からなる群から選択される１つ以上の置換基によってさらに置換されており；
ここで、各Ｒ’は、独立して、水素、Ｃ$_{1-20}$アルキル基、及びＣ$_{6-20}$アリール基からなる群から選択され；
ここで、各Ｒ^{a}は、独立して、水素、Ｃ$_{1-8}$アルキル基、Ｃ$_{1-8}$アルコキシ基、Ｃ$_{6-20}$アリールオキシ基及びＣ$_{6-20}$アリール基からなる群から選択され、Ｒ^b、Ｒ^c、Ｒ^{d}は、各々独立して、Ｃ$_{1-20}$アルキル基であり；
各Ｘ^{1}は、活性化可能な配位子であり；
Ｌは、ＰとＣｙを連結する原子の連続鎖を含む架橋基であり、連続鎖は２個又は３個の原子を含む、有機金属錯体と、
ｉｉ）触媒活性剤と、
を含む、オレフィン重合触媒系である。

【００１８】

一実施形態は、オレフィン重合触媒系であって、
ｉ）有機金属錯体であって、式ＩＩＩ：

【化１２】



(III)

で表され、
式中、Ｍは、Ｔｉ、Ｚｒ又はＨｆであり；
式中、Ｒ^{1}及びＲ^{2}は、各々独立して、水素及びＲ^{X}からなる群から選択されるか；又

はR^1及びR^2は、それらが結合しているＰ原子と一緒になって、非置換であるか、又はハロゲン原子、C_{1-20}アルキル基、C_{1-20}アルコキシ基、C_{7-20}アルキルアリール基、C_{7-20}アリールアルキル基、C_{6-20}アリール基、C_{6-20}アリールオキシ基、C_{7-20}アルキルアリールオキシ基、及びC_{7-20}アリールアルキルオキシ基からなる群から選択される１つ以上の置換基によってさらに置換されている３－１０員複素環式基を形成し；

各R^Xは、独立して、ハロゲン原子；C_{1-30}ヒドロカルビル基（このヒドロカルビル基は、非置換であるか、又は１つ以上のハロゲン原子、C_{1-20}アルキル基、C_{1-20}アルコキシ基、C_{7-20}アルキルアリール基、C_{7-20}アリールアルキル基、C_{6-20}アリール基、C_{6-20}アリールオキシ基、C_{7-20}アルキルアリールオキシ基、及び／又はC_{7-20}アリールアルキルオキシ基によってさらに置換されている）；式－NR'_2のアミド基；式－$Si(R^a)_3$のシリル基；式－$Ge(R^a)_3$のゲルマニル基；及び式$N=P(R^b)(R^c)(R^d)$のホスフィンイミン基からなる群から選択され；

式中、R^3、R^4、R^5、R^6、R^7、R^8、R^9及びR^{10}は、各々独立して、

ハロゲン；

水素；

C_{1-30}ヒドロカルビル基（このヒドロカルビル基は、非置換であるか、又はハロゲン原子、C_{1-20}アルキル基、C_{1-20}アルコキシ基、C_{7-20}アルキルアリール基、C_{7-20}アリールアルキル基、C_{6-20}アリール基、C_{6-20}アリールオキシ基、C_{7-20}アルキルアリールオキシ基、及びC_{7-20}アリールアルキルオキシ基からなる群から選択される１つ以上の置換基によってさらに置換されている）；

ヘテロ原子含有C_{1-30}ヒドロカルビル基（このヘテロ原子含有ヒドロカルビル基は、非置換であるか、又はハロゲン原子、C_{1-20}アルキル基、C_{1-20}アルコキシ基、C_{7-20}アルキルアリール基、C_{7-20}アリールアルキル基、C_{6-20}アリール基、C_{6-20}アリールオキシ基、C_{7-20}アルキルアリールオキシ基、及びC_{7-20}アリールアルキルオキシ基からなる群から選択される１つ以上の置換基によってさらに置換されている）；

オキシ基、－ＯＲ’；

アミド基、－NR'_2；

ホスフィド基、－PR'_2；

チオラート基、－ＳＲ’；

式－$Si(R^a)_3$のシリル基；

式－$Ge(R^a)_3$のゲルマニル基；

からなる群から選択され；

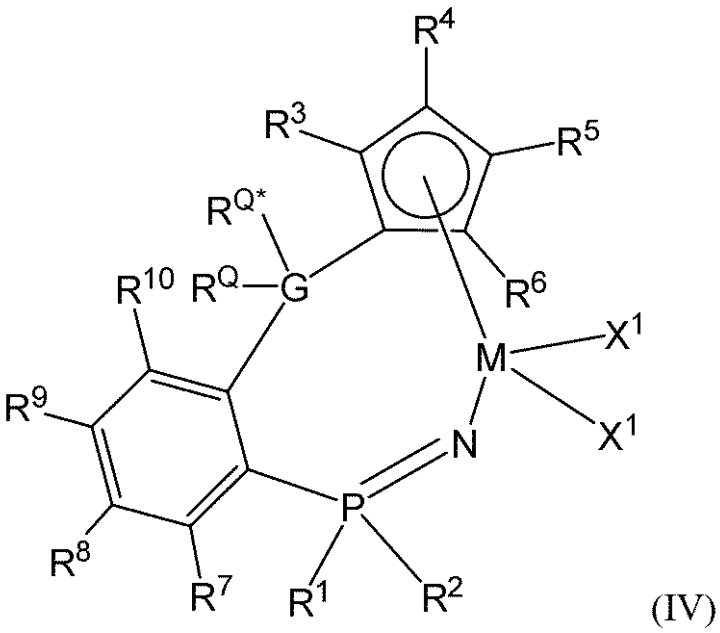
ここで、R^3、R^4、R^5、R^6、R^7、R^8、R^9及びR^{10}の２つの隣接する基は、任意に結合して環状ヒドロカルビル基又は環状ヘテロ原子含有ヒドロカルビル基を形成してもよく、環状ヒドロカルビル基又は環状ヘテロ原子含有ヒドロカルビル基は、非置換であるか、又はハロゲン原子、C_{1-20}アルキル基、C_{1-20}アルコキシ基、C_{7-20}アルキルアリール基、C_{7-20}アリールアルキル基、C_{6-20}アリール基、C_{6-20}アリールオキシ基、C_{7-20}アルキルアリールオキシ基、C_{7-20}アリールアルキルオキシ基、式－NR'_2のアミド基、式－PR'_2のホスフィド基、式－ＳＲ’のチオラート基、式－$Si(R^a)_3$のシリル基、及び式－$Ge(R^a)_3$のゲルマニル基からなる群から選択される１つ以上の置換基によってさらに置換されており；

ここで、各Ｒ’は、独立して、水素、C_{1-20}アルキル基、及びC_{6-20}アリール基からなる群から選択され；

ここで、各R^aは、独立して、水素、C_{1-8}アルキル基、C_{1-8}アルコキシ基、C_{6-20}アリールオキシ基及びC_{6-20}アリール基からなる群から選択され；R^b、R^c、R^dは、各々独立して、C_{1-20}アルキル基であり；

式中、各X^1は、活性化可能な配位子である、有機金属錯体と、

ｉｉ）触媒活性剤と、
を含む、オレフィン重合触媒系である。
【００１９】
一実施形態は、オレフィン重合触媒系であって、
ｉ）有機金属錯体であって、式ＩＶ：
【化１３】

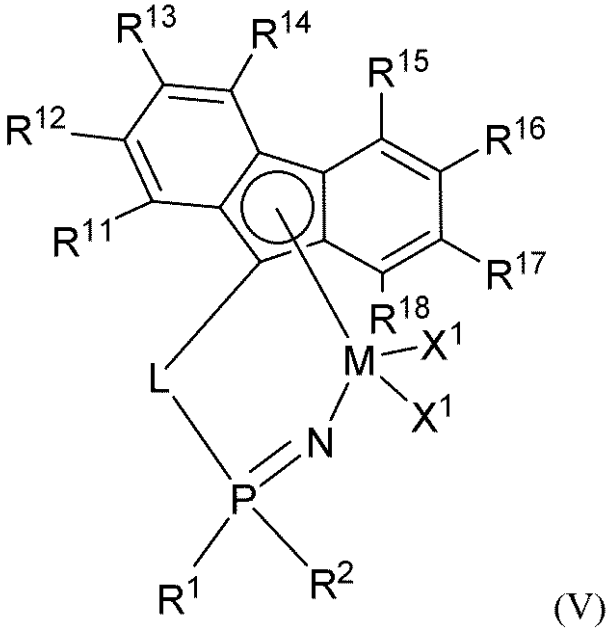


(IV)

で表され、
式中、Ｍは、Ｔｉ、Ｚｒ又はＨｆであり；
式中、Ｒ^{1}及びＲ^{2}は、各々独立して、水素及びＲ^{X}からなる群から選択されるか；又はＲ^{1}及びＲ^{2}は、それらが結合しているＰ原子と一緒になって、非置換であるか、又はハロゲン原子、Ｃ$_{1-20}$アルキル基、Ｃ$_{1-20}$アルコキシ基、Ｃ$_{7-20}$アルキルアリール基、Ｃ$_{7-20}$アリールアルキル基、Ｃ$_{6-20}$アリール基、Ｃ$_{6-20}$アリールオキシ基、Ｃ$_{7-20}$アルキルアリールオキシ基、及びＣ$_{7-20}$アリールアルキルオキシ基からなる群から選択される１つ以上の置換基によってさらに置換されている３－１０員複素環式基を形成し；
各Ｒ^{X}は、独立して、ハロゲン原子；Ｃ$_{1-30}$ヒドロカルビル基（このヒドロカルビル基は、非置換であるか、又は１つ以上のハロゲン原子、Ｃ$_{1-20}$アルキル基、Ｃ$_{1-20}$アルコキシ基、Ｃ$_{7-20}$アルキルアリール基、Ｃ$_{7-20}$アリールアルキル基、Ｃ$_{6-20}$アリール基、Ｃ$_{6-20}$アリールオキシ基、Ｃ$_{7-20}$アルキルアリールオキシ基、及び／又はＣ$_{7-20}$アリールアルキルオキシ基によってさらに置換されている）；式－ＮＲ’$_{2}$のアミド基；式－Ｓｉ（Ｒ^{a}）$_{3}$のシリル基；式－Ｇｅ（Ｒ^{a}）$_{3}$のゲルマニル基；及び式Ｎ＝Ｐ（Ｒ^{b}）（Ｒ^{c}）（Ｒ^{d}）のホスフィンイミン基からなる群から選択され；
式中、Ｇは、Ｃ又はＳｉであり；
式中、Ｒ^{Q}及びＲ^{Q}＊は、各々独立して、
ハロゲン；
水素；
Ｃ$_{1-30}$ヒドロカルビル基（このヒドロカルビル基は、非置換であるか、又はハロゲン原子、Ｃ$_{1-20}$アルキル基、Ｃ$_{1-20}$アルコキシ基、Ｃ$_{7-20}$アルキルアリール基、Ｃ$_{7-20}$アリールアルキル基、Ｃ$_{6-20}$アリール基、Ｃ$_{6-20}$アリールオキシ基、Ｃ$_{7-20}$アルキルアリールオキシ基、及びＣ$_{7-20}$アリールアルキルオキシ基からなる

群から選択される１つ以上の置換基によってさらに置換されている）；
ヘテロ原子含有Ｃ$_{1-30}$ヒドロカルビル基（このヘテロ原子含有ヒドロカルビル基は、非置換であるか、又はハロゲン原子、Ｃ$_{1-20}$アルキル基、Ｃ$_{1-20}$アルコキシ基、Ｃ$_{7-20}$アルキルアリール基、Ｃ$_{7-20}$アリールアルキル基、Ｃ$_{6-20}$アリール基、Ｃ$_{6-20}$アリールオキシ基、Ｃ$_{7-20}$アルキルアリールオキシ基、及びＣ$_{7-20}$アリールアルキルオキシ基からなる群から選択される１つ以上の置換基によってさらに置換されている）；
ここで、Ｒ^{Q}及びＲ^{Q}＊の基は、任意に結合して環状ヒドロカルビル基又は環状ヘテロ原子含有ヒドロカルビル基を形成してもよく、環状ヒドロカルビル基又は環状ヘテロ原子含有ヒドロカルビル基は、非置換であるか、又はハロゲン原子、Ｃ$_{1-20}$アルキル基、Ｃ$_{1-20}$アルコキシ基、Ｃ$_{7-20}$アルキルアリール基、Ｃ$_{7-20}$アリールアルキル基、Ｃ$_{6-20}$アリール基、Ｃ$_{6-20}$アリールオキシ基、Ｃ$_{7-20}$アルキルアリールオキシ基、Ｃ$_{7-20}$アリールアルキルオキシ基、式－ＮＲ’$_2$のアミド基、式－ＰＲ’$_2$のホスフィド基、式－ＳＲ’のチオラート基、式－Ｓｉ（Ｒ^{a}）$_3$のシリル基、及び式－Ｇｅ（Ｒ^{a}）$_3$のゲルマニル基からなる群から選択される１つ以上の置換基によってさらに置換されており；
式中、Ｒ^{3}、Ｒ^{4}、Ｒ^{5}、Ｒ^{6}、Ｒ^{7}、Ｒ^{8}、Ｒ^{9}及びＲ^{10}は、各々独立して、
ハロゲン；
水素；
Ｃ$_{1-30}$ヒドロカルビル基（このヒドロカルビル基は、非置換であるか、又はハロゲン原子、Ｃ$_{1-20}$アルキル基、Ｃ$_{1-20}$アルコキシ基、Ｃ$_{7-20}$アルキルアリール基、Ｃ$_{7-20}$アリールアルキル基、Ｃ$_{6-20}$アリール基、Ｃ$_{6-20}$アリールオキシ基、Ｃ$_{7-20}$アルキルアリールオキシ基、及びＣ$_{7-20}$アリールアルキルオキシ基からなる群から選択される１つ以上の置換基によってさらに置換されている）；
ヘテロ原子含有Ｃ$_{1-30}$ヒドロカルビル基（このヘテロ原子含有ヒドロカルビル基は、非置換であるか、又はハロゲン原子、Ｃ$_{1-20}$アルキル基、Ｃ$_{1-20}$アルコキシ基、Ｃ$_{7-20}$アルキルアリール基、Ｃ$_{7-20}$アリールアルキル基、Ｃ$_{6-20}$アリール基、Ｃ$_{6-20}$アリールオキシ基、Ｃ$_{7-20}$アルキルアリールオキシ基、及びＣ$_{7-20}$アリールアルキルオキシ基からなる群から選択される１つ以上の置換基によってさらに置換されている）；
オキシ基、－ＯＲ’；
アミド基、－ＮＲ’$_2$；
ホスフィド基、－ＰＲ’$_2$；
チオラート基、－ＳＲ’；
式－Ｓｉ（Ｒ^{a}）$_3$のシリル基；
式－Ｇｅ（Ｒ^{a}）$_3$のゲルマニル基；
からなる群から選択され；
ここで、Ｒ^{3}、Ｒ^{4}、Ｒ^{5}、Ｒ^{6}、Ｒ^{7}、Ｒ^{8}、Ｒ^{9}及びＲ^{10}の２つの隣接する基は、任意に結合して環状ヒドロカルビル基又は環状ヘテロ原子含有ヒドロカルビル基を形成してもよく、環状ヒドロカルビル基又は環状ヘテロ原子含有ヒドロカルビル基は、非置換であるか、又はハロゲン原子、Ｃ$_{1-20}$アルキル基、Ｃ$_{1-20}$アルコキシ基、Ｃ$_{7-20}$アルキルアリール基、Ｃ$_{7-20}$アリールアルキル基、Ｃ$_{6-20}$アリール基、Ｃ$_{6-20}$アリールオキシ基、Ｃ$_{7-20}$アルキルアリールオキシ基、Ｃ$_{7-20}$アリールアルキルオキシ基、式－ＮＲ’$_2$のアミド基、式－ＰＲ’$_2$のホスフィド基、式－ＳＲ’のチオラート基、式－Ｓｉ（Ｒ^{a}）$_3$のシリル基、及び式－Ｇｅ（Ｒ^{a}）$_3$のゲルマニル基からなる群から選択される１つ以上の置換基によってさらに置換されており；
ここで、各Ｒ’は、独立して、水素、Ｃ$_{1-20}$アルキル基、及びＣ$_{6-20}$アリール基からなる群から選択され；
ここで、各Ｒ^{a}は、独立して、水素、Ｃ$_{1-8}$アルキル基、Ｃ$_{1-8}$アルコキシ基、Ｃ$_{6-20}$アリールオキシ基及びＣ$_{6-20}$アリール基からなる群から選択され；Ｒ^{b}、Ｒ^{c}、

R^dは、各々独立して、C_{1-20}アルキル基であり；
式中、各X^1は、活性化可能な配位子である、有機金属錯体と、
ｉｉ）触媒活性剤と、
を含む、オレフィン重合触媒系である。
【００２０】
一実施形態は、オレフィン重合触媒系であって、
ｉ）有機金属錯体であって、式Ｖ：
【化１４】



(V)

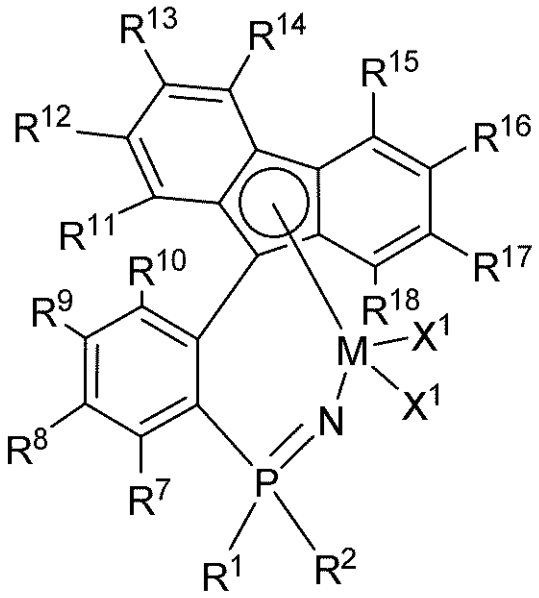
で表され、
式中、Ｍは、Ｔｉ、Ｚｒ又はＨｆであり；
式中、R^1及びR^2は、各々独立して、水素及びR^Xからなる群から選択されるか；又はR^1及びR^2は、それらが結合しているＰ原子と一緒になって、非置換であるか、又はハロゲン原子、C_{1-20}アルキル基、C_{1-20}アルコキシ基、C_{7-20}アルキルアリール基、C_{7-20}アリールアルキル基、C_{6-20}アリール基、C_{6-20}アリールオキシ基、C_{7-20}アルキルアリールオキシ基、及びC_{7-20}アリールアルキルオキシ基からなる群から選択される１つ以上の置換基によってさらに置換されている３－１０員複素環式基を形成し；
各R^Xは、独立して、ハロゲン原子；C_{1-30}ヒドロカルビル基（このヒドロカルビル基は、非置換であるか、又は１つ以上のハロゲン原子、C_{1-20}アルキル基、C_{1-20}アルコキシ基、C_{7-20}アルキルアリール基、C_{7-20}アリールアルキル基、C_{6-20}アリール基、C_{6-20}アリールオキシ基、C_{7-20}アルキルアリールオキシ基、及び／又はC_{7-20}アリールアルキルオキシ基によってさらに置換されている）；式－NR'_2のアミド基；式－$Si(R^a)_3$のシリル基；式－$Ge(R^a)_3$のゲルマニル基；及び式$N=P(R^b)(R^c)(R^d)$のホスフィンイミン基からなる群から選択され；
式中、R^{11}、R^{12}、R^{13}、R^{14}、R^{15}、R^{16}、R^{17}、R^{18}は、各々独立して、
ハロゲン；
水素；
C_{1-30}ヒドロカルビル基（このヒドロカルビル基は、非置換であるか、又はハロゲ

ン原子、Ｃ１－２０アルキル基、Ｃ１－２０アルコキシ基、Ｃ７－２０アルキルアリール基、Ｃ７－２０アリールアルキル基、Ｃ６－２０アリール基、Ｃ６－２０アリールオキシ基、Ｃ７－２０アルキルアリールオキシ基、及びＣ７－２０アリールアルキルオキシ基からなる群から選択される１つ以上の置換基によってさらに置換されている）；
ヘテロ原子含有Ｃ１－３０ヒドロカルビル基（このヘテロ原子含有ヒドロカルビル基は、非置換であるか、又はハロゲン原子、Ｃ１－２０アルキル基、Ｃ１－２０アルコキシ基、Ｃ７－２０アルキルアリール基、Ｃ７－２０アリールアルキル基、Ｃ６－２０アリール基、Ｃ６－２０アリールオキシ基、Ｃ７－２０アルキルアリールオキシ基、及びＣ７－２０アリールアルキルオキシ基からなる群から選択される１つ以上の置換基によってさらに置換されている）；
オキシ基、－ＯＲ’；
アミド基、－ＮＲ’$_2$；
ホスフィド基、－ＰＲ’$_2$；
チオラート基、－ＳＲ’；
式－Ｓｉ（Ｒ^a）$_3$のシリル基；
式－Ｇｅ（Ｒ^a）$_3$のゲルマニル基；
からなる群から選択され；
ここで、Ｒ^{11}、Ｒ^{12}、Ｒ^{13}、Ｒ^{14}、Ｒ^{15}、Ｒ^{16}、Ｒ^{17}、Ｒ^{18}の２つの隣接する基は、任意に結合して環状ヒドロカルビル基又は環状ヘテロ原子含有ヒドロカルビル基を形成してもよく、環状ヒドロカルビル基又は環状ヘテロ原子含有ヒドロカルビル基は、非置換であるか、又はハロゲン原子、Ｃ１－２０アルキル基、Ｃ１－２０アルコキシ基、Ｃ７－２０アルキルアリール基、Ｃ７－２０アリールアルキル基、Ｃ６－２０アリール基、Ｃ６－２０アリールオキシ基、Ｃ７－２０アルキルアリールオキシ基、Ｃ７－２０アリールアルキルオキシ基、式－ＮＲ’$_2$のアミド基、式－ＰＲ’$_2$のホスフィド基、式－ＳＲ’のチオラート基、式－Ｓｉ（Ｒ^a）$_3$のシリル基、及び式－Ｇｅ（Ｒ^a）$_3$のゲルマニル基からなる群から選択される１つ以上の置換基によってさらに置換されており；
ここで、各Ｒ’は、独立して、水素、Ｃ1－２０アルキル基、及びＣ６－２０アリール基からなる群から選択され；
ここで、各Ｒ^{a}は、独立して、水素、Ｃ１－８アルキル基、Ｃ１－８アルコキシ基、Ｃ６－２０アリールオキシ基及びＣ６－２０アリール基からなる群から選択され；Ｒ^b、Ｒ^c、Ｒ^{d}は、各々独立して、Ｃ１－２０アルキル基であり；
各Ｘ^{1}は、活性化可能な配位子であり；
Ｌは、ＰとＣｙを連結する原子の連続鎖を含む架橋基であり、連続鎖は２個又は３個の原子を含む、有機金属錯体と、
ｉｉ）触媒活性剤と、
を含む、オレフィン重合触媒系である。

【００２１】

一実施形態は、オレフィン重合触媒系であって、
ｉ）有機金属錯体であって、式ＶＩ：

【化１５】



(VI)

で表され、

式中、Ｍは、Ｔｉ、Ｚｒ又はＨｆであり；

式中、Ｒ^{1}及びＲ^{2}は、各々独立して、水素及びＲ^{X}からなる群から選択されるか；又はＲ^{1}及びＲ^{2}は、それらが結合しているＰ原子と一緒になって、非置換であるか、又はハロゲン原子、Ｃ$_{1-20}$アルキル基、Ｃ$_{1-20}$アルコキシ基、Ｃ$_{7-20}$アルキルアリール基、Ｃ$_{7-20}$アリールアルキル基、Ｃ$_{6-20}$アリール基、Ｃ$_{6-20}$アリールオキシ基、Ｃ$_{7-20}$アルキルアリールオキシ基、及びＣ$_{7-20}$アリールアルキルオキシ基からなる群から選択される１つ以上の置換基によってさらに置換されている３－１０員複素環式基を形成し；

各Ｒ^{X}は、独立して、ハロゲン原子；Ｃ$_{1-30}$ヒドロカルビル基（このヒドロカルビル基は、非置換であるか、又は１つ以上のハロゲン原子、Ｃ$_{1-20}$アルキル基、Ｃ$_{1-20}$アルコキシ基、Ｃ$_{7-20}$アルキルアリール基、Ｃ$_{7-20}$アリールアルキル基、Ｃ$_{6-20}$アリール基、Ｃ$_{6-20}$アリールオキシ基、Ｃ$_{7-20}$アルキルアリールオキシ基、及び／又はＣ$_{7-20}$アリールアルキルオキシ基によってさらに置換されている）；式－ＮＲ’$_{2}$のアミド基；式－Ｓｉ（Ｒ^{a}）$_{3}$のシリル基；式－Ｇｅ（Ｒ^{a}）$_{3}$のゲルマニル基；及び式Ｎ＝Ｐ（Ｒ^{b}）（Ｒ^{c}）（Ｒ^{d}）のホスフィンイミン基からなる群から選択され；

式中、Ｒ^{7}、Ｒ^{8}、Ｒ^{9}、Ｒ^{10}、Ｒ^{11}、Ｒ^{12}、Ｒ^{13}、Ｒ^{14}、Ｒ^{15}、Ｒ^{16}、Ｒ^{17}及びＲ^{18}は、各々独立して、

ハロゲン；

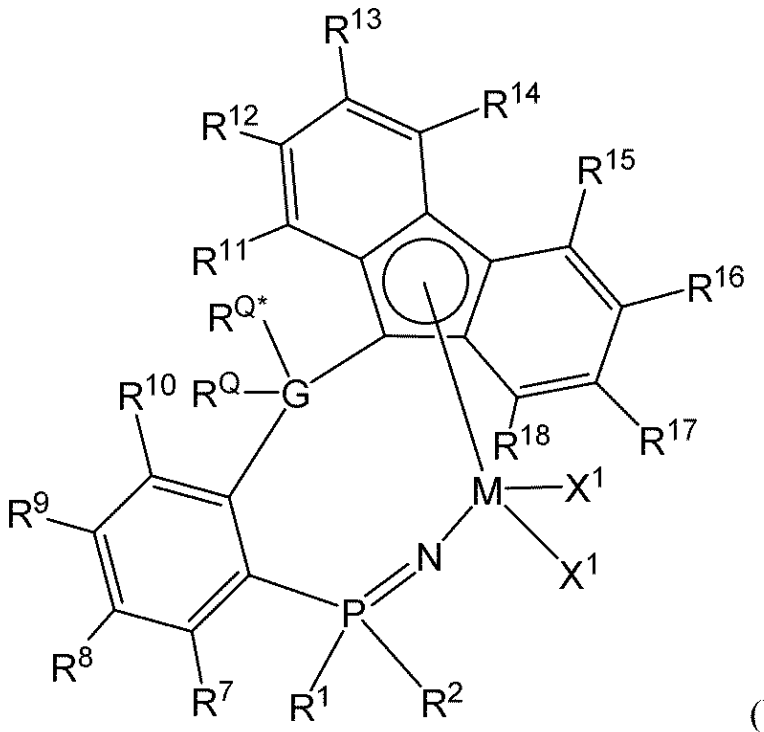
水素；

Ｃ$_{1-30}$ヒドロカルビル基（このヒドロカルビル基は、非置換であるか、又はハロゲン原子、Ｃ$_{1-20}$アルキル基、Ｃ$_{1-20}$アルコキシ基、Ｃ$_{7-20}$アルキルアリール基、Ｃ$_{7-20}$アリールアルキル基、Ｃ$_{6-20}$アリール基、Ｃ$_{6-20}$アリールオキシ基、Ｃ$_{7-20}$アルキルアリールオキシ基、及びＣ$_{7-20}$アリールアルキルオキシ基からなる群から選択される１つ以上の置換基によってさらに置換されている）；

ヘテロ原子含有Ｃ$_{1-30}$ヒドロカルビル基（このヘテロ原子含有ヒドロカルビル基は、非置換であるか、又はハロゲン原子、Ｃ$_{1-20}$アルキル基、Ｃ$_{1-20}$アルコキシ基、Ｃ$_{7-20}$アルキルアリール基、Ｃ$_{7-20}$アリールアルキル基、Ｃ$_{6-20}$アリール基、Ｃ$_{6-20}$アリールオキシ基、Ｃ$_{7-20}$アルキルアリールオキシ基、及びＣ$_{7-20}$アリ

ールアルキルオキシ基からなる群から選択される１つ以上の置換基によってさらに置換されている）；
　オキシ基、－ＯＲ’；
　アミド基、－ＮＲ’$_2$；
　ホスフィド基、－ＰＲ’$_2$；
　チオラート基、－ＳＲ’；
　式－Ｓｉ（Ｒ^a）$_3$のシリル基；
　式－Ｇｅ（Ｒ^a）$_3$のゲルマニル基；
からなる群から選択され；
　ここで、Ｒ^7、Ｒ^8、Ｒ^9、Ｒ^{10}、Ｒ^{11}、Ｒ^{12}、Ｒ^{13}、Ｒ^{14}、Ｒ^{15}、Ｒ^{16}、Ｒ^{17}及びＲ^{18}の２つの隣接する基は、任意に結合して環状ヒドロカルビル基又は環状ヘテロ原子含有ヒドロカルビル基を形成してもよく、環状ヒドロカルビル基又は環状ヘテロ原子含有ヒドロカルビル基は、非置換であるか、又はハロゲン原子、Ｃ$_{1-20}$アルキル基、Ｃ$_{1-20}$アルコキシ基、Ｃ$_{7-20}$アルキルアリール基、Ｃ$_{7-20}$アリールアルキル基、Ｃ$_{6-20}$アリール基、Ｃ$_{6-20}$アリールオキシ基、Ｃ$_{7-20}$アルキルアリールオキシ基、Ｃ$_{7-20}$アリールアルキルオキシ基、式－ＮＲ’$_2$のアミド基、式－ＰＲ’$_2$のホスフィド基、式－ＳＲ’のチオラート基、式－Ｓｉ（Ｒ^a）$_3$のシリル基、及び式－Ｇｅ（Ｒ^a）$_3$のゲルマニル基からなる群から選択される１つ以上の置換基によってさらに置換されており；
　ここで、各Ｒ’は、独立して、水素、Ｃ$_{1-20}$アルキル基、及びＣ$_{6-20}$アリール基からなる群から選択され；
　ここで、各Ｒ^{a}は、独立して、水素、Ｃ$_{1-8}$アルキル基、Ｃ$_{1-8}$アルコキシ基、Ｃ$_{6-20}$アリールオキシ基及びＣ$_{6-20}$アリール基からなる群から選択され、Ｒ^b、Ｒ^c、Ｒ^{d}は、各々独立して、Ｃ$_{1-20}$アルキル基であり；
　各Ｘ^{1}は、活性化可能な配位子である、有機金属錯体と、
　ｉｉ）触媒活性剤と、
を含む、オレフィン重合触媒系である。
【００２２】
　一実施形態は、オレフィン重合触媒系であって、
　ｉ）有機金属錯体であって、式ＶＩＩ：

【化１６】



(VII)

で表され、

式中、Ｍは、Ｔｉ、Ｚｒ又はＨｆであり；

式中、Ｒ^{1}及びＲ^{2}は、各々独立して、水素及びＲ^{X}からなる群から選択されるか；又はＲ^{1}及びＲ^{2}は、それらが結合しているＰ原子と一緒になって、非置換であるか、又はハロゲン原子、Ｃ$_{1-20}$アルキル基、Ｃ$_{1-20}$アルコキシ基、Ｃ$_{7-20}$アルキルアリール基、Ｃ$_{7-20}$アリールアルキル基、Ｃ$_{6-20}$アリール基、Ｃ$_{6-20}$アリールオキシ基、Ｃ$_{7-20}$アルキルアリールオキシ基、及びＣ$_{7-20}$アリールアルキルオキシ基からなる群から選択される１つ以上の置換基によってさらに置換されている３－１０員複素環式基を形成し；

各Ｒ^{X}は、独立して、ハロゲン原子；Ｃ$_{1-30}$ヒドロカルビル基（このヒドロカルビル基は、非置換であるか、又は１つ以上のハロゲン原子、Ｃ$_{1-20}$アルキル基、Ｃ$_{1-20}$アルコキシ基、Ｃ$_{7-20}$アルキルアリール基、Ｃ$_{7-20}$アリールアルキル基、Ｃ$_{6-20}$アリール基、Ｃ$_{6-20}$アリールオキシ基、Ｃ$_{7-20}$アルキルアリールオキシ基、及び／又はＣ$_{7-20}$アリールアルキルオキシ基によってさらに置換されている）；式－ＮＲ’$_{2}$のアミド基；式－Ｓｉ（Ｒ^{a}）$_{3}$のシリル基；式－Ｇｅ（Ｒ^{a}）$_{3}$のゲルマニル基；及び式Ｎ＝Ｐ（Ｒ^{b}）（Ｒ^{c}）（Ｒ^{d}）のホスフィンイミン基からなる群から選択され；

式中、Ｇは、Ｃ又はＳｉであり；

式中、Ｒ^{Q}及びＲ^{Q*}は、各々独立して、

ハロゲン；

水素；

Ｃ$_{1-30}$ヒドロカルビル基（このヒドロカルビル基は、非置換であるか、又はハロゲン原子、Ｃ$_{1-20}$アルキル基、Ｃ$_{1-20}$アルコキシ基、Ｃ$_{7-20}$アルキルアリール基、Ｃ$_{7-20}$アリールアルキル基、Ｃ$_{6-20}$アリール基、Ｃ$_{6-20}$アリールオキシ基、Ｃ$_{7-20}$アルキルアリールオキシ基、及びＣ$_{7-20}$アリールアルキルオキシ基からなる群から選択される１つ以上の置換基によってさらに置換されている）；

ヘテロ原子含有Ｃ$_{1-30}$ヒドロカルビル基（このヘテロ原子含有ヒドロカルビル基は

、非置換であるか、又はハロゲン原子、Ｃ１－２０アルキル基、Ｃ１－２０アルコキシ基、Ｃ７－２０アルキルアリール基、Ｃ７－２０アリールアルキル基、Ｃ６－２０アリール基、Ｃ６－２０アリールオキシ基、Ｃ７－２０アルキルアリールオキシ基、及びＣ７－２０アリールアルキルオキシ基からなる群から選択される１つ以上の置換基によってさらに置換されている）；

ここで、Ｒ^{Q}及びＲ^{Q*}の基は、任意に結合して環状ヒドロカルビル基又は環状ヘテロ原子含有ヒドロカルビル基を形成してもよく、環状ヒドロカルビル基又は環状ヘテロ原子含有ヒドロカルビル基は、非置換であるか、又はハロゲン原子、Ｃ１－２０アルキル基、Ｃ１－２０アルコキシ基、Ｃ７－２０アルキルアリール基、Ｃ７－２０アリールアルキル基、Ｃ６－２０アリール基、Ｃ６－２０アリールオキシ基、Ｃ７－２０アルキルアリールオキシ基、Ｃ７－２０アリールアルキルオキシ基、式－ＮＲ’$_2$のアミド基、式－ＰＲ’$_2$のホスフィド基、式－ＳＲ’のチオラート基、式－Ｓｉ（Ｒ^{a}）$_3$のシリル基、及び式－Ｇｅ（Ｒ^{a}）$_3$のゲルマニル基からなる群から選択される１つ以上の置換基によってさらに置換されており；

式中、Ｒ^{7}、Ｒ^{8}、Ｒ^{9}、Ｒ^{10}、Ｒ^{11}、Ｒ^{12}、Ｒ^{13}、Ｒ^{14}、Ｒ^{15}、Ｒ^{16}、Ｒ^{17}及びＲ^{18}は、各々独立して、

ハロゲン；

水素；

Ｃ１－３０ヒドロカルビル基（このヒドロカルビル基は、非置換であるか、又はハロゲン原子、Ｃ１－２０アルキル基、Ｃ１－２０アルコキシ基、Ｃ７－２０アルキルアリール基、Ｃ７－２０アリールアルキル基、Ｃ６－２０アリール基、Ｃ６－２０アリールオキシ基、Ｃ７－２０アルキルアリールオキシ基、及びＣ７－２０アリールアルキルオキシ基からなる群から選択される１つ以上の置換基によってさらに置換されている）；

ヘテロ原子含有Ｃ１－３０ヒドロカルビル基（このヘテロ原子含有ヒドロカルビル基は、非置換であるか、又はハロゲン原子、Ｃ１－２０アルキル基、Ｃ１－２０アルコキシ基、Ｃ７－２０アルキルアリール基、Ｃ７－２０アリールアルキル基、Ｃ６－２０アリール基、Ｃ６－２０アリールオキシ基、Ｃ７－２０アルキルアリールオキシ基、及びＣ７－２０アリールアルキルオキシ基からなる群から選択される１つ以上の置換基によってさらに置換されている）；

オキシ基、－ＯＲ’；

アミド基、－ＮＲ’$_2$；

ホスフィド基、－ＰＲ’$_2$；

チオラート基、－ＳＲ’；

式－Ｓｉ（Ｒ^{a}）$_3$のシリル基；

式－Ｇｅ（Ｒ^{a}）$_3$のゲルマニル基；

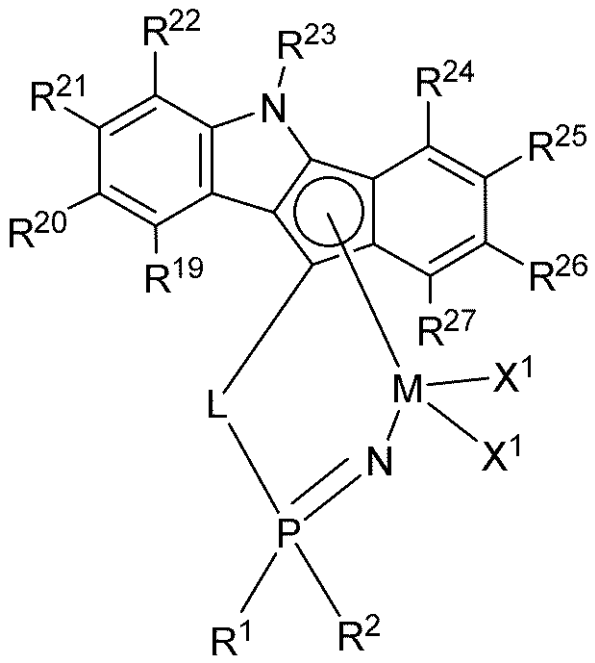
からなる群から選択され；

ここで、Ｒ^{7}、Ｒ^{8}、Ｒ^{9}、Ｒ^{10}、Ｒ^{11}、Ｒ^{12}、Ｒ^{13}、Ｒ^{14}、Ｒ^{15}、Ｒ^{16}、Ｒ^{17}及びＲ^{18}の２つの隣接する基は、任意に結合して環状ヒドロカルビル基又は環状ヘテロ原子含有ヒドロカルビル基を形成してもよく、環状ヒドロカルビル基又は環状ヘテロ原子含有ヒドロカルビル基は、非置換であるか、又はハロゲン原子、Ｃ１－２０アルキル基、Ｃ１－２０アルコキシ基、Ｃ７－２０アルキルアリール基、Ｃ７－２０アリールアルキル基、Ｃ６－２０アリール基、Ｃ６－２０アリールオキシ基、Ｃ７－２０アルキルアリールオキシ基、Ｃ７－２０アリールアルキルオキシ基、式－ＮＲ’$_2$のアミド基、式－ＰＲ’$_2$のホスフィド基、式－ＳＲ’のチオラート基、式－Ｓｉ（Ｒ^{a}）$_3$のシリル基、及び式－Ｇｅ（Ｒ^{a}）$_3$のゲルマニル基からなる群から選択される１つ以上の置換基によってさらに置換されており；

ここで、各Ｒ’は、独立して、水素、Ｃ$_1$－２０アルキル基、及びＣ６－２０アリール基からなる群から選択され；

ここで、各Ｒ^{a}は、独立して、水素、Ｃ１－８アルキル基、Ｃ１－８アルコキシ基、Ｃ６－２０アリールオキシ基及びＣ６－２０アリール基からなる群から選択され、Ｒ^{b}、Ｒ^{c}、

R^dは、各々独立して、C_{1-20}アルキル基であり；
各X^1は、活性化可能な配位子である、有機金属錯体と、
ｉｉ）触媒活性剤と、
を含む、オレフィン重合触媒系である。
【００２３】
一実施形態は、オレフィン重合触媒系であって、
ｉ）有機金属錯体であって、式ＶＩＩＩ：
【化１７】



(VIII)

で表され、
式中、Ｍは、Ｔｉ、Ｚｒ又はＨｆであり；
式中、R^1及びR^2は、各々独立して、水素及びR^Xからなる群から選択されるか；又はR^1及びR^2は、それらが結合しているＰ原子と一緒になって、非置換であるか、又はハロゲン原子、C_{1-20}アルキル基、C_{1-20}アルコキシ基、C_{7-20}アルキルアリール基、C_{7-20}アリールアルキル基、C_{6-20}アリール基、C_{6-20}アリールオキシ基、C_{7-20}アルキルアリールオキシ基、及びC_{7-20}アリールアルキルオキシ基からなる群から選択される１つ以上の置換基によってさらに置換されている３－１０員複素環式基を形成し；
各R^Xは、独立して、ハロゲン原子；C_{1-30}ヒドロカルビル基（このヒドロカルビル基は、非置換であるか、又は１つ以上のハロゲン原子、C_{1-20}アルキル基、C_{1-20}アルコキシ基、C_{7-20}アルキルアリール基、C_{7-20}アリールアルキル基、C_{6-20}アリール基、C_{6-20}アリールオキシ基、C_{7-20}アルキルアリールオキシ基、及び／又はC_{7-20}アリールアルキルオキシ基によってさらに置換されている）；式－NR'_2のアミド基；式－Ｓｉ（R^a）$_3$のシリル基；式－Ｇｅ（R^a）$_3$のゲルマニル基；及び式Ｎ＝Ｐ（R^b）（R^c）（R^d）のホスフィンイミン基からなる群から選択され；
式中、R^{23}は、
水素；
C_{1-30}ヒドロカルビル基（このヒドロカルビル基は、非置換であるか、又はハロゲン原子、C_{1-20}アルキル基、C_{1-20}アルコキシ基、C_{7-20}アルキルアリール基

、Ｃ７－２０アリールアルキル基、Ｃ６－２０アリール基、Ｃ６－２０アリールオキシ基、Ｃ７－２０アルキルアリールオキシ基、及びＣ７－２０アリールアルキルオキシ基からなる群から選択される１つ以上の置換基によってさらに置換されている）；

ヘテロ原子含有Ｃ１－３０ヒドロカルビル基（このヘテロ原子含有ヒドロカルビル基は、非置換であるか、又はハロゲン原子、Ｃ１－２０アルキル基、Ｃ１－２０アルコキシ基、Ｃ７－２０アルキルアリール基、Ｃ７－２０アリールアルキル基、Ｃ６－２０アリール基、Ｃ６－２０アリールオキシ基、Ｃ７－２０アルキルアリールオキシ基、及びＣ７－２０アリールアルキルオキシ基からなる群から選択される１つ以上の置換基によってさらに置換されている）；

からなる群から選択され；

式中、Ｒ１９、Ｒ２０、Ｒ２１、Ｒ２２、Ｒ２４、Ｒ２５、Ｒ２６、及びＲ２７は、各々独立して、

ハロゲン；

水素；

Ｃ１－３０ヒドロカルビル基（このヒドロカルビル基は、非置換であるか、又はハロゲン原子、Ｃ１－２０アルキル基、Ｃ１－２０アルコキシ基、Ｃ７－２０アルキルアリール基、Ｃ７－２０アリールアルキル基、Ｃ６－２０アリール基、Ｃ６－２０アリールオキシ基、Ｃ７－２０アルキルアリールオキシ基、及びＣ７－２０アリールアルキルオキシ基からなる群から選択される１つ以上の置換基によってさらに置換されている）；

ヘテロ原子含有Ｃ１－３０ヒドロカルビル基（このヘテロ原子含有ヒドロカルビル基は、非置換であるか、又はハロゲン原子、Ｃ１－２０アルキル基、Ｃ１－２０アルコキシ基、Ｃ７－２０アルキルアリール基、Ｃ７－２０アリールアルキル基、Ｃ６－２０アリール基、Ｃ６－２０アリールオキシ基、Ｃ７－２０アルキルアリールオキシ基、及びＣ７－２０アリールアルキルオキシ基からなる群から選択される１つ以上の置換基によってさらに置換されている）；

オキシ基、－ＯＲ’；

アミド基、－ＮＲ’$_2$；

ホスフィド基、－ＰＲ’$_2$；

チオラート基、－ＳＲ’；

式－Ｓｉ（Ｒ^a）$_3$のシリル基；

式－Ｇｅ（Ｒ^a）$_3$のゲルマニル基；

からなる群から選択され；

ここで、Ｒ１９、Ｒ２０、Ｒ２１、Ｒ２２、Ｒ２４、Ｒ２５、Ｒ２６、及びＲ２７の２つの隣接する基は、任意に結合して環状ヒドロカルビル基又は環状ヘテロ原子含有ヒドロカルビル基を形成してもよく、環状ヒドロカルビル基又は環状ヘテロ原子含有ヒドロカルビル基は、非置換であるか、又はハロゲン原子、Ｃ１－２０アルキル基、Ｃ１－２０アルコキシ基、Ｃ７－２０アルキルアリール基、Ｃ７－２０アリールアルキル基、Ｃ６－２０アリール基、Ｃ６－２０アリールオキシ基、Ｃ７－２０アルキルアリールオキシ基、Ｃ７－２０アリールアルキルオキシ基、式－ＮＲ’$_2$のアミド基、式－ＰＲ’$_2$のホスフィド基、式－ＳＲ’のチオラート基、式－Ｓｉ（Ｒ^a）$_3$のシリル基、及び式－Ｇｅ（Ｒ^a）$_3$のゲルマニル基からなる群から選択される１つ以上の置換基によってさらに置換されており；

ここで、各Ｒ’は、独立して、水素、Ｃ1－２０アルキル基、及びＣ６－２０アリール基からなる群から選択され；

ここで、各Ｒ^{a}は、独立して、水素、Ｃ１－８アルキル基、Ｃ１－８アルコキシ基、Ｃ６－２０アリールオキシ基及びＣ６－２０アリール基からなる群から選択され；Ｒ^b、Ｒ^c、Ｒ^{d}は、各々独立して、Ｃ１－２０アルキル基であり；

各Ｘ^{1}は、活性化可能な配位子であり；

Ｌは、ＰとＣｙを連結する原子の連続鎖を含む架橋基であり、連続鎖は２個又は３個の原子を含む、有機金属錯体と、

ｉｉ）触媒活性剤と、

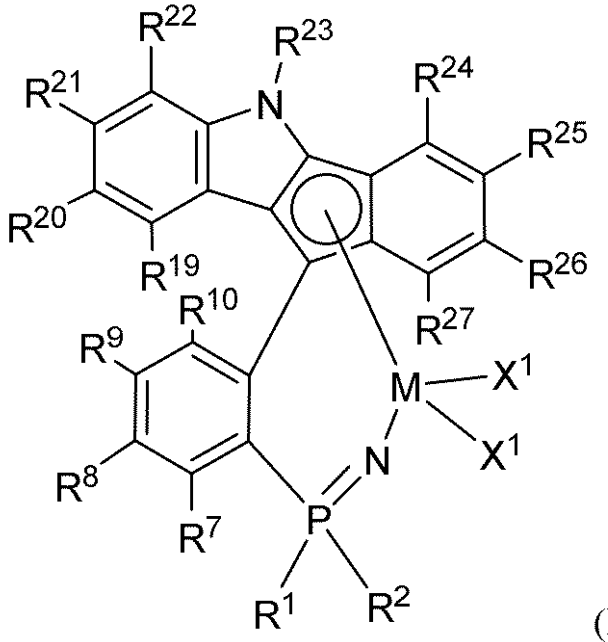
を含む、オレフィン重合触媒系である。

【００２４】

一実施形態は、オレフィン重合触媒系であって、

ｉ）有機金属錯体であって、式ＩＸ：

【化１８】



(IX)

で表され、

式中、Ｍは、Ｔｉ、Ｚｒ又はＨｆであり；

式中、R^1及びR^2は、各々独立して、水素及びR^Xからなる群から選択されるか；又はR^1及びR^2は、それらが結合しているＰ原子と一緒になって、非置換であるか、又はハロゲン原子、C_{1-20}アルキル基、C_{1-20}アルコキシ基、C_{7-20}アルキルアリール基、C_{7-20}アリールアルキル基、C_{6-20}アリール基、C_{6-20}アリールオキシ基、C_{7-20}アルキルアリールオキシ基、及びC_{7-20}アリールアルキルオキシ基からなる群から選択される１つ以上の置換基によってさらに置換されている３－１０員複素環式基を形成し；

各R^Xは、独立して、ハロゲン原子；C_{1-30}ヒドロカルビル基（このヒドロカルビル基は、非置換であるか、又は１つ以上のハロゲン原子、C_{1-20}アルキル基、C_{1-20}アルコキシ基、C_{7-20}アルキルアリール基、C_{7-20}アリールアルキル基、C_{6-20}アリール基、C_{6-20}アリールオキシ基、C_{7-20}アルキルアリールオキシ基、及び／又はC_{7-20}アリールアルキルオキシ基によってさらに置換されている）；式－NR'_2のアミド基；式－$Si(R^a)_3$のシリル基；式－$Ge(R^a)_3$のゲルマニル基；及び式Ｎ＝Ｐ（R^b）（R^c）（R^d）のホスフィンイミン基からなる群から選択され；

式中、R^{23}は、

水素；

C_{1-30}ヒドロカルビル基（このヒドロカルビル基は、非置換であるか、又はハロゲン原子、C_{1-20}アルキル基、C_{1-20}アルコキシ基、C_{7-20}アルキルアリール基、C_{7-20}アリールアルキル基、C_{6-20}アリール基、C_{6-20}アリールオキシ基、C_{7-20}アルキルアリールオキシ基、及びC_{7-20}アリールアルキルオキシ基からなる群から選択される１つ以上の置換基によってさらに置換されている）；

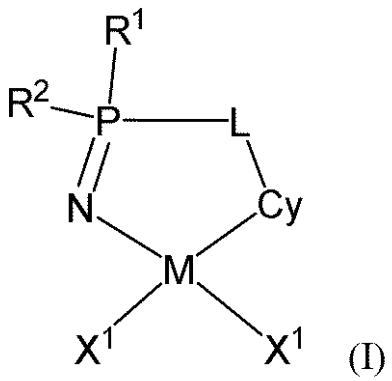
ヘテロ原子含有C_{1-30}ヒドロカルビル基（このヘテロ原子含有ヒドロカルビル基は

、非置換であるか、又はハロゲン原子、Ｃ１－２０アルキル基、Ｃ１－２０アルコキシ基、Ｃ７－２０アルキルアリール基、Ｃ７－２０アリールアルキル基、Ｃ６－２０アリール基、Ｃ６－２０アリールオキシ基、Ｃ７－２０アルキルアリールオキシ基、及びＣ７－２０アリールアルキルオキシ基からなる群から選択される１つ以上の置換基によってさらに置換されている）；
からなる群から選択され；
式中、Ｒ７、Ｒ８、Ｒ９、Ｒ１０、Ｒ１９、Ｒ２０、Ｒ２１、Ｒ２２、Ｒ２４、Ｒ２５、Ｒ２６、及びＲ２７は、各々独立して、
ハロゲン；
水素；
Ｃ１－３０ヒドロカルビル基（このヒドロカルビル基は、非置換であるか、又はハロゲン原子、Ｃ１－２０アルキル基、Ｃ１－２０アルコキシ基、Ｃ７－２０アルキルアリール基、Ｃ７－２０アリールアルキル基、Ｃ６－２０アリール基、Ｃ６－２０アリールオキシ基、Ｃ７－２０アルキルアリールオキシ基、及びＣ７－２０アリールアルキルオキシ基からなる群から選択される１つ以上の置換基によってさらに置換されている）；
ヘテロ原子含有Ｃ１－３０ヒドロカルビル基（このヘテロ原子含有ヒドロカルビル基は、非置換であるか、又はハロゲン原子、Ｃ１－２０アルキル基、Ｃ１－２０アルコキシ基、Ｃ７－２０アルキルアリール基、Ｃ７－２０アリールアルキル基、Ｃ６－２０アリール基、Ｃ６－２０アリールオキシ基、Ｃ７－２０アルキルアリールオキシ基、及びＣ７－２０アリールアルキルオキシ基からなる群から選択される１つ以上の置換基によってさらに置換されている）；
オキシ基、－ＯＲ’；
アミド基、－ＮＲ’$_2$；
ホスフィド基、－ＰＲ’$_2$；
チオラート基、－ＳＲ’；
式－Ｓｉ（Ｒ^a）$_3$のシリル基；
式－Ｇｅ（Ｒ^a）$_3$のゲルマニル基；
からなる群から選択され；
ここで、Ｒ７、Ｒ８、Ｒ９、Ｒ１０、Ｒ１９、Ｒ２０、Ｒ２１、Ｒ２２、Ｒ２４、Ｒ２５、Ｒ２６、及びＲ２７の２つの隣接する基は、任意に結合して環状ヒドロカルビル基又は環状ヘテロ原子含有ヒドロカルビル基を形成してもよく、環状ヒドロカルビル基又は環状ヘテロ原子含有ヒドロカルビル基は、非置換であるか、又はハロゲン原子、Ｃ１－２０アルキル基、Ｃ１－２０アルコキシ基、Ｃ７－２０アルキルアリール基、Ｃ７－２０アリールアルキル基、Ｃ６－２０アリール基、Ｃ６－２０アリールオキシ基、Ｃ７－２０アルキルアリールオキシ基、Ｃ７－２０アリールアルキルオキシ基、式－ＮＲ’$_2$のアミド基、式－ＰＲ’$_2$のホスフィド基、式－ＳＲ’のチオラート基、式－Ｓｉ（Ｒ^a）$_3$のシリル基、及び式－Ｇｅ（Ｒ^a）$_3$のゲルマニル基からなる群から選択される１つ以上の置換基によってさらに置換されており；
ここで、各Ｒ’は、独立して、水素、Ｃ1－２０アルキル基、及びＣ６－２０アリール基からなる群から選択され；
ここで、各Ｒ^{a}は、独立して、水素、Ｃ１－８アルキル基、Ｃ１－８アルコキシ基、Ｃ６－２０アリールオキシ基及びＣ６－２０アリール基からなる群から選択され、Ｒ^b、Ｒ^c、Ｒ^{d}は、各々独立して、Ｃ１－２０アルキル基であり；
各Ｘ１は、活性化可能な配位子である、有機金属錯体と、
ｉｉ）触媒活性剤と、
を含む、オレフィン重合触媒系である。

【００２５】

本開示の一実施形態では、触媒活性剤は、アルキルアルミノキサン共触媒、有機アルミニウム化合物、ホウ素系触媒活性剤、及びそれらの混合物からなる群から選択される触媒活性剤を含む。

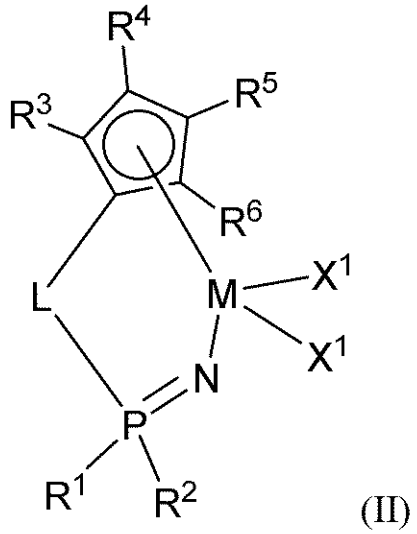
【００２６】
本開示の一実施形態では、ホウ素系触媒活性剤は、［（水素化牛脂アルキル）$_2$（Ｍｅ）ＮＨ］［Ｂ（Ｃ$_6$Ｆ$_5$）$_4$］；Ｎ，Ｎ－ジメチルアニリニウムテトラキス（ペンタフルオロフェニル）ボレート（「［Ｍｅ$_2$ＮＨＰｈ］［Ｂ（Ｃ$_6$Ｆ$_5$）$_4$］」）；及びトリフェニルメチリウムテトラキス（ペンタフルオロフェニル）ボレート（「［Ｐｈ$_3$Ｃ］［Ｂ（Ｃ$_6$Ｆ$_5$）$_4$］」）からなる群から選択される。
【００２７】
本開示の一実施形態は、エチレンを、任意選択で１つ以上のＣ$_{3-12}$アルファ－オレフィンと、オレフィン重合触媒系の存在下で重合することを含む、重合プロセスであって、
オレフィン重合触媒系が、
ｉ）有機金属錯体であって、式Ｉ：
【化１９】



(I)

で表され、
式中、
Ｍは、Ｔｉ、Ｚｒ又はＨｆであり；
Ｒ^{1}及びＲ^{2}は、各々独立して、水素及びＲ^{X}からなる群から選択されるか；又はＲ^{1}及びＲ^{2}は、それらが結合しているＰ原子と一緒になって、非置換であるか、又はハロゲン原子、Ｃ$_{1-20}$アルキル基、Ｃ$_{1-20}$アルコキシ基、Ｃ$_{7-20}$アルキルアリール基、Ｃ$_{7-20}$アリールアルキル基、Ｃ$_{6-20}$アリール基、Ｃ$_{6-20}$アリールオキシ基、Ｃ$_{7-20}$アルキルアリールオキシ基、及びＣ$_{7-20}$アリールアルキルオキシ基からなる群から選択される１つ以上の置換基によってさらに置換されている３－１０員複素環式基を形成し；
各Ｒ^{X}は、独立して、ハロゲン原子；Ｃ$_{1-30}$ヒドロカルビル基（このヒドロカルビル基は、非置換であるか、又は１つ以上のハロゲン原子、Ｃ$_{1-20}$アルキル基、Ｃ$_{1-20}$アルコキシ基、Ｃ$_{7-20}$アルキルアリール基、Ｃ$_{7-20}$アリールアルキル基、Ｃ$_{6-20}$アリール基、Ｃ$_{6-20}$アリールオキシ基、Ｃ$_{7-20}$アルキルアリールオキシ基、及び／又はＣ$_{7-20}$アリールアルキルオキシ基によってさらに置換されている）；式－ＮＲ’$_2$のアミド基；式－Ｓｉ（Ｒ^a）$_3$のシリル基；式－Ｇｅ（Ｒ^a）$_3$のゲルマニル基；及び式Ｎ＝Ｐ（Ｒ^b）（Ｒ^c）（Ｒ^d）のホスフィンイミン基からなる群から選択され；ここで、各Ｒ’は、独立して、水素、Ｃ$_{1-20}$アルキル基、及びＣ$_{6-20}$アリール基からなる群から選択され；ここで、各Ｒ^{a}は、独立して、水素、Ｃ$_{1-8}$アルキル基、Ｃ$_{1-8}$アルコキシ基、Ｃ$_{6-20}$アリールオキシ基及びＣ$_{6-20}$アリール基からなる群から選択され、Ｒ^b、Ｒ^c、Ｒ^{d}は、各々独立して、Ｃ$_{1-20}$アルキル基であり；
各Ｘ^{1}は、活性化可能な配位子であり；
Ｃｙは、Ｌに共有結合し、η－結合を介してＭに配位するシクロペンタジエニル型配位子であり；

Ｌは、ＰとＣｙを連結する原子の連続鎖を含む架橋基であり、連続鎖は２個又は３個の原子を含む、有機金属錯体と、
ｉｉ）触媒活性剤と、
を含む、重合プロセスである。
【００２８】
本開示の一実施形態は、エチレンを、任意選択で１つ以上のＣ$_{3-12}$アルファ－オレフィンと、オレフィン重合触媒系の存在下で重合することを含む、重合プロセスであって、
オレフィン重合触媒系が、
ｉ）有機金属錯体であって、式ＩＩ：
【化２０】

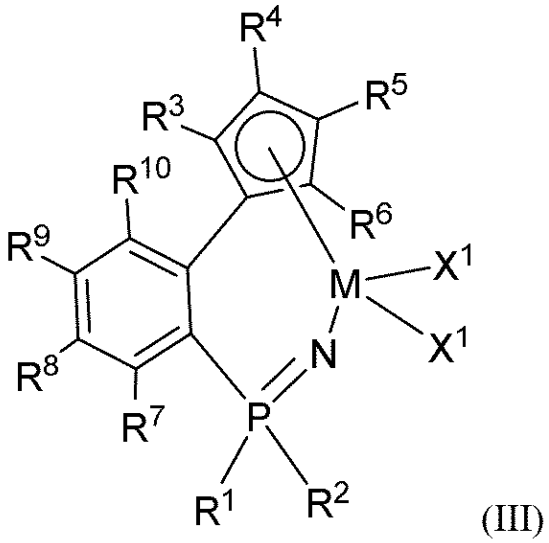


(II)

で表され、
式中、
Ｍは、Ｔｉ、Ｚｒ又はＨｆであり；
Ｒ^{1}及びＲ^{2}は、各々独立して、水素及びＲ^{X}からなる群から選択されるか；又はＲ^{1}及びＲ^{2}は、それらが結合しているＰ原子と一緒になって、非置換であるか、又はハロゲン原子、Ｃ$_{1-20}$アルキル基、Ｃ$_{1-20}$アルコキシ基、Ｃ$_{7-20}$アルキルアリール基、Ｃ$_{7-20}$アリールアルキル基、Ｃ$_{6-20}$アリール基、Ｃ$_{6-20}$アリールオキシ基、Ｃ$_{7-20}$アルキルアリールオキシ基、及びＣ$_{7-20}$アリールアルキルオキシ基からなる群から選択される１つ以上の置換基によってさらに置換されている３－１０員複素環式基を形成し；
各Ｒ^{X}は、独立して、ハロゲン原子；Ｃ$_{1-30}$ヒドロカルビル基（このヒドロカルビル基は、非置換であるか、又は１つ以上のハロゲン原子、Ｃ$_{1-20}$アルキル基、Ｃ$_{1-20}$アルコキシ基、Ｃ$_{7-20}$アルキルアリール基、Ｃ$_{7-20}$アリールアルキル基、Ｃ$_{6-20}$アリール基、Ｃ$_{6-20}$アリールオキシ基、Ｃ$_{7-20}$アルキルアリールオキシ基、及び／又はＣ$_{7-20}$アリールアルキルオキシ基によってさらに置換されている）；式－ＮＲ’$_{2}$のアミド基；式－Ｓｉ（Ｒ^{a}）$_{3}$のシリル基；式－Ｇｅ（Ｒ^{a}）$_{3}$のゲルマニル基；及び式Ｎ＝Ｐ（Ｒ^{b}）（Ｒ^{c}）（Ｒ^{d}）のホスフィンイミン基からなる群から選択され；
式中、Ｒ^{3}、Ｒ^{4}、Ｒ^{5}及びＲ^{6}は、各々独立して、
ハロゲン；
水素；
Ｃ$_{1-30}$ヒドロカルビル基（このヒドロカルビル基は、非置換であるか、又はハロゲ

ン原子、Ｃ１－２０アルキル基、Ｃ１－２０アルコキシ基、Ｃ７－２０アルキルアリール基、Ｃ７－２０アリールアルキル基、Ｃ６－２０アリール基、Ｃ６－２０アリールオキシ基、Ｃ７－２０アルキルアリールオキシ基、及びＣ７－２０アリールアルキルオキシ基からなる群から選択される１つ以上の置換基によってさらに置換されている）；
ヘテロ原子含有Ｃ１－３０ヒドロカルビル基（このヘテロ原子含有ヒドロカルビル基は、非置換であるか、又はハロゲン原子、Ｃ１－２０アルキル基、Ｃ１－２０アルコキシ基、Ｃ７－２０アルキルアリール基、Ｃ７－２０アリールアルキル基、Ｃ６－２０アリール基、Ｃ６－２０アリールオキシ基、Ｃ７－２０アルキルアリールオキシ基、及びＣ７－２０アリールアルキルオキシ基からなる群から選択される１つ以上の置換基によってさらに置換されている）；
オキシ基、－ＯＲ’；
アミド基、－ＮＲ’$_2$；
ホスフィド基、－ＰＲ’$_2$；
チオラート基、－ＳＲ’；
式－Ｓｉ（Ｒ^a）$_3$のシリル基；
式－Ｇｅ（Ｒ^a）$_3$のゲルマニル基；
からなる群から選択され；
ここで、Ｒ^3、Ｒ^4、Ｒ^{5}及びＲ^{6}の２つの隣接する基は、任意に結合して環状ヒドロカルビル基又は環状ヘテロ原子含有ヒドロカルビル基を形成してもよく、環状ヒドロカルビル基又は環状ヘテロ原子含有ヒドロカルビル基は、非置換であるか、又はハロゲン原子、Ｃ１－２０アルキル基、Ｃ１－２０アルコキシ基、Ｃ７－２０アルキルアリール基、Ｃ７－２０アリールアルキル基、Ｃ６－２０アリール基、Ｃ６－２０アリールオキシ基、Ｃ７－２０アルキルアリールオキシ基、Ｃ７－２０アリールアルキルオキシ基、式－ＮＲ’$_2$のアミド基、式－ＰＲ’$_2$のホスフィド基、式－ＳＲ’のチオラート基、式－Ｓｉ（Ｒ^a）$_3$のシリル基、及び式－Ｇｅ（Ｒ^a）$_3$のゲルマニル基からなる群から選択される１つ以上の置換基によってさらに置換されており；
ここで、各Ｒ’は、独立して、水素、Ｃ1－２０アルキル基、及びＣ６－２０アリール基からなる群から選択され；
ここで、各Ｒ^{a}は、独立して、水素、Ｃ１－８アルキル基、Ｃ１－８アルコキシ基、Ｃ６－２０アリールオキシ基及びＣ６－２０アリール基からなる群から選択され、Ｒ^b、Ｒ^c、Ｒ^{d}は、各々独立して、Ｃ１－２０アルキル基であり；
各Ｘ^{1}は、活性化可能な配位子であり；
Ｌは、ＰとＣｙを連結する原子の連続鎖を含む架橋基であり、連続鎖は２個又は３個の原子を含む、有機金属錯体と、
ｉｉ）触媒活性剤と、
を含む、重合プロセスである。
【００２９】
本開示の一実施形態は、エチレンを、任意選択で１つ以上のＣ３－１２アルファ－オレフィンと、オレフィン重合触媒系の存在下で重合することを含む、重合プロセスであって、
オレフィン重合触媒系が、
ｉ）有機金属錯体であって、式ＩＩＩ：

【化２１】



(III)

で表され、

式中、Ｍは、Ｔｉ、Ｚｒ又はＨｆであり；

式中、Ｒ[1]及びＲ[2]は、各々独立して、水素及びＲ[X]からなる群から選択されるか；又はＲ[1]及びＲ[2]は、それらが結合しているＰ原子と一緒になって、非置換であるか、又はハロゲン原子、Ｃ１－２０アルキル基、Ｃ１－２０アルコキシ基、Ｃ７－２０アルキルアリール基、Ｃ７－２０アリールアルキル基、Ｃ６－２０アリール基、Ｃ６－２０アリールオキシ基、Ｃ７－２０アルキルアリールオキシ基、及びＣ７－２０アリールアルキルオキシ基からなる群から選択される１つ以上の置換基によってさらに置換されている３－１０員複素環式基を形成し；

各Ｒ[X]は、独立して、ハロゲン原子；Ｃ１－３０ヒドロカルビル基（このヒドロカルビル基は、非置換であるか、又は１つ以上のハロゲン原子、Ｃ１－２０アルキル基、Ｃ１－２０アルコキシ基、Ｃ７－２０アルキルアリール基、Ｃ７－２０アリールアルキル基、Ｃ６－２０アリール基、Ｃ６－２０アリールオキシ基、Ｃ７－２０アルキルアリールオキシ基、及び／又はＣ７－２０アリールアルキルオキシ基によってさらに置換されている）；式－ＮＲ’[2]のアミド基；式－Ｓｉ（Ｒ[a]）[3]のシリル基；式－Ｇｅ（Ｒ[a]）[3]のゲルマニル基；及び式Ｎ＝Ｐ（Ｒ[b]）（Ｒ[c]）（Ｒ[d]）のホスフィンイミン基からなる群から選択され；

式中、Ｒ[3]、Ｒ[4]、Ｒ[5]、Ｒ[6]、Ｒ[7]、Ｒ[8]、Ｒ[9]及びＲ[10]は、各々独立して、

ハロゲン；

水素；

Ｃ１－３０ヒドロカルビル基（このヒドロカルビル基は、非置換であるか、又はハロゲン原子、Ｃ１－２０アルキル基、Ｃ１－２０アルコキシ基、Ｃ７－２０アルキルアリール基、Ｃ７－２０アリールアルキル基、Ｃ６－２０アリール基、Ｃ６－２０アリールオキシ基、Ｃ７－２０アルキルアリールオキシ基、及びＣ７－２０アリールアルキルオキシ基からなる群から選択される１つ以上の置換基によってさらに置換されている）；

ヘテロ原子含有Ｃ１－３０ヒドロカルビル基（このヘテロ原子含有ヒドロカルビル基は、非置換であるか、又はハロゲン原子、Ｃ１－２０アルキル基、Ｃ１－２０アルコキシ基、Ｃ７－２０アルキルアリール基、Ｃ７－２０アリールアルキル基、Ｃ６－２０アリール基、Ｃ６－２０アリールオキシ基、Ｃ７－２０アルキルアリールオキシ基、及びＣ７－２０アリールアルキルオキシ基からなる群から選択される１つ以上の置換基によってさらに置換されている）；

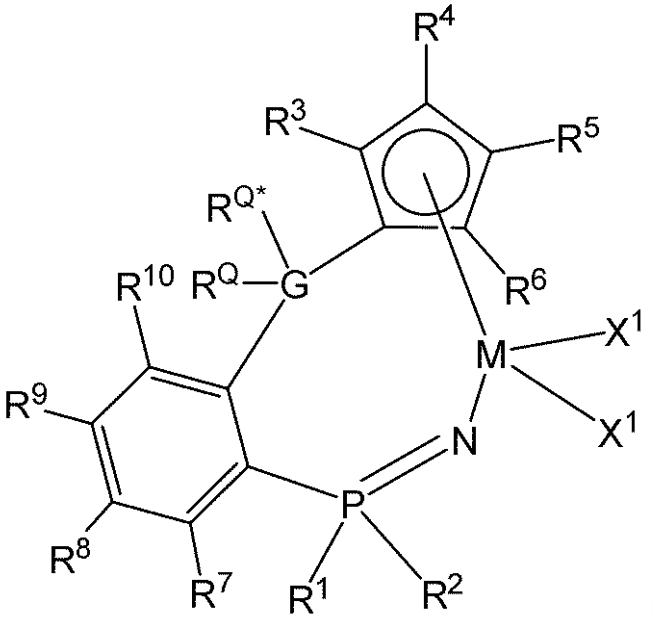
オキシ基、－ＯＲ’；

アミド基、－ＮＲ’$_2$；
ホスフィド基、－ＰＲ’$_2$；
チオラート基、－ＳＲ’；
式－Ｓｉ（Ｒ^a）$_3$のシリル基；
式－Ｇｅ（Ｒ^a）$_3$のゲルマニル基；
からなる群から選択され；
ここで、Ｒ^3、Ｒ^4、Ｒ^5、Ｒ^6、Ｒ^7、Ｒ^8、Ｒ^{9}及びＲ^{10}の２つの隣接する基は、任意に結合して環状ヒドロカルビル基又は環状ヘテロ原子含有ヒドロカルビル基を形成してもよく、環状ヒドロカルビル基又は環状ヘテロ原子含有ヒドロカルビル基は、非置換であるか、又はハロゲン原子、Ｃ$_{1-20}$アルキル基、Ｃ$_{1-20}$アルコキシ基、Ｃ$_{7-20}$アルキルアリール基、Ｃ$_{7-20}$アリールアルキル基、Ｃ$_{6-20}$アリール基、Ｃ$_{6-20}$アリールオキシ基、Ｃ$_{7-20}$アルキルアリールオキシ基、Ｃ$_{7-20}$アリールアルキルオキシ基、式－ＮＲ’$_2$のアミド基、式－ＰＲ’$_2$のホスフィド基、式－ＳＲ’のチオラート基、式－Ｓｉ（Ｒ^a）$_3$のシリル基、及び式－Ｇｅ（Ｒ^a）$_3$のゲルマニル基からなる群から選択される１つ以上の置換基によってさらに置換されており；
ここで、各Ｒ’は、独立して、水素、Ｃ$_{1-20}$アルキル基、及びＣ$_{6-20}$アリール基からなる群から選択され；
ここで、各Ｒ^{a}は、独立して、水素、Ｃ$_{1-8}$アルキル基、Ｃ$_{1-8}$アルコキシ基、Ｃ$_{6-20}$アリールオキシ基及びＣ$_{6-20}$アリール基からなる群から選択され；Ｒ^b、Ｒ^c、Ｒ^{d}は、各々独立して、Ｃ$_{1-20}$アルキル基であり；
式中、各Ｘ^{1}は、活性化可能な配位子である、有機金属錯体と、
ｉｉ）触媒活性剤と、
を含む、重合プロセスである。

【００３０】

本開示の一実施形態は、エチレンを、任意選択で１つ以上のＣ$_{3-12}$アルファ－オレフィンと、オレフィン重合触媒系の存在下で重合することを含む、重合プロセスであって、
オレフィン重合触媒系が、
ｉ）有機金属錯体であって、式ＩＶ：

【化２２】



(IV)

で表され、

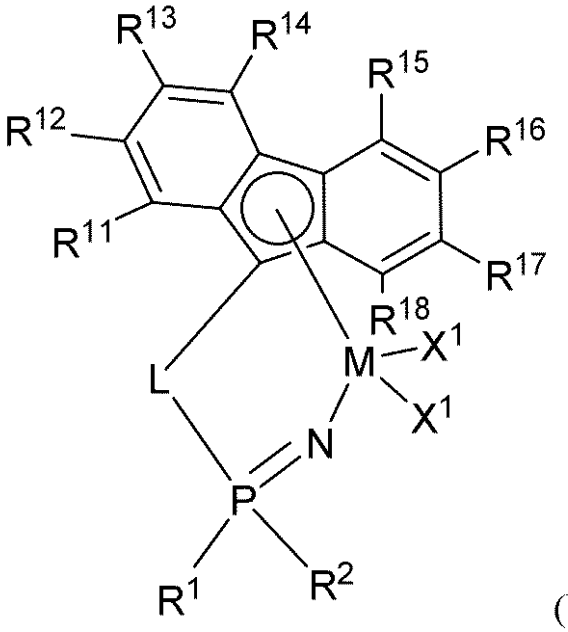
式中、Ｍは、Ｔｉ、Ｚｒ又はＨｆであり；
式中、Ｒ^{1}及びＲ^{2}は、各々独立して、水素及びＲ^{X}からなる群から選択されるか；又はＲ^{1}及びＲ^{2}は、それらが結合しているＰ原子と一緒になって、非置換であるか、又はハロゲン原子、Ｃ$_{1-20}$アルキル基、Ｃ$_{1-20}$アルコキシ基、Ｃ$_{7-20}$アルキルアリール基、Ｃ$_{7-20}$アリールアルキル基、Ｃ$_{6-20}$アリール基、Ｃ$_{6-20}$アリールオキシ基、Ｃ$_{7-20}$アルキルアリールオキシ基、及びＣ$_{7-20}$アリールアルキルオキシ基からなる群から選択される１つ以上の置換基によってさらに置換されている３－１０員複素環式基を形成し；
各Ｒ^{X}は、独立して、ハロゲン原子；Ｃ$_{1-30}$ヒドロカルビル基（このヒドロカルビル基は、非置換であるか、又は１つ以上のハロゲン原子、Ｃ$_{1-20}$アルキル基、Ｃ$_{1-20}$アルコキシ基、Ｃ$_{7-20}$アルキルアリール基、Ｃ$_{7-20}$アリールアルキル基、Ｃ$_{6-20}$アリール基、Ｃ$_{6-20}$アリールオキシ基、Ｃ$_{7-20}$アルキルアリールオキシ基、及び／又はＣ$_{7-20}$アリールアルキルオキシ基によってさらに置換されている）；式－ＮＲ’$_{2}$のアミド基；式－Ｓｉ（Ｒ^{a}）$_{3}$のシリル基；式－Ｇｅ（Ｒ^{a}）$_{3}$のゲルマニル基；及び式Ｎ＝Ｐ（Ｒ^{b}）（Ｒ^{c}）（Ｒ^{d}）のホスフィンイミン基からなる群から選択され；
式中、Ｇは、Ｃ又はＳｉであり；
式中、Ｒ^{Q}及びＲ^{Q}＊は、各々独立して、
ハロゲン；
水素；
Ｃ$_{1-30}$ヒドロカルビル基（このヒドロカルビル基は、非置換であるか、又はハロゲン原子、Ｃ$_{1-20}$アルキル基、Ｃ$_{1-20}$アルコキシ基、Ｃ$_{7-20}$アルキルアリール基、Ｃ$_{7-20}$アリールアルキル基、Ｃ$_{6-20}$アリール基、Ｃ$_{6-20}$アリールオキシ基、Ｃ$_{7-20}$アルキルアリールオキシ基、及びＣ$_{7-20}$アリールアルキルオキシ基からなる群から選択される１つ以上の置換基によってさらに置換されている）；
ヘテロ原子含有Ｃ$_{1-30}$ヒドロカルビル基（このヘテロ原子含有ヒドロカルビル基は、非置換であるか、又はハロゲン原子、Ｃ$_{1-20}$アルキル基、Ｃ$_{1-20}$アルコキシ基、Ｃ$_{7-20}$アルキルアリール基、Ｃ$_{7-20}$アリールアルキル基、Ｃ$_{6-20}$アリール基、Ｃ$_{6-20}$アリールオキシ基、Ｃ$_{7-20}$アルキルアリールオキシ基、及びＣ$_{7-20}$アリールアルキルオキシ基からなる群から選択される１つ以上の置換基によってさらに置換されている）；
ここで、Ｒ^{Q}及びＲ^{Q}＊の基は、任意に結合して環状ヒドロカルビル基又は環状ヘテロ原子含有ヒドロカルビル基を形成してもよく、環状ヒドロカルビル基又は環状ヘテロ原子含有ヒドロカルビル基は、非置換であるか、又はハロゲン原子、Ｃ$_{1-20}$アルキル基、Ｃ$_{1-20}$アルコキシ基、Ｃ$_{7-20}$アルキルアリール基、Ｃ$_{7-20}$アリールアルキル基、Ｃ$_{6-20}$アリール基、Ｃ$_{6-20}$アリールオキシ基、Ｃ$_{7-20}$アルキルアリールオキシ基、Ｃ$_{7-20}$アリールアルキルオキシ基、式－ＮＲ’$_{2}$のアミド基、式－ＰＲ’$_{2}$のホスフィド基、式－ＳＲ’のチオラート基、式－Ｓｉ（Ｒ^{a}）$_{3}$のシリル基、及び式－Ｇｅ（Ｒ^{a}）$_{3}$のゲルマニル基からなる群から選択される１つ以上の置換基によってさらに置換されており；
式中、Ｒ^{3}、Ｒ^{4}、Ｒ^{5}、Ｒ^{6}、Ｒ^{7}、Ｒ^{8}、Ｒ^{9}及びＲ^{10}は、各々独立して、
ハロゲン；
水素；
Ｃ$_{1-30}$ヒドロカルビル基（このヒドロカルビル基は、非置換であるか、又はハロゲン原子、Ｃ$_{1-20}$アルキル基、Ｃ$_{1-20}$アルコキシ基、Ｃ$_{7-20}$アルキルアリール基、Ｃ$_{7-20}$アリールアルキル基、Ｃ$_{6-20}$アリール基、Ｃ$_{6-20}$アリールオキシ基、Ｃ$_{7-20}$アルキルアリールオキシ基、及びＣ$_{7-20}$アリールアルキルオキシ基からなる群から選択される１つ以上の置換基によってさらに置換されている）；
ヘテロ原子含有Ｃ$_{1-30}$ヒドロカルビル基（このヘテロ原子含有ヒドロカルビル基は、非置換であるか、又はハロゲン原子、Ｃ$_{1-20}$アルキル基、Ｃ$_{1-20}$アルコキシ基、

Ｃ７－２０アルキルアリール基、Ｃ７－２０アリールアルキル基、Ｃ６－２０アリール基、Ｃ６－２０アリールオキシ基、Ｃ７－２０アルキルアリールオキシ基、及びＣ７－２０アリールアルキルオキシ基からなる群から選択される１つ以上の置換基によってさらに置換されている）；
オキシ基、－ＯＲ’；
アミド基、－ＮＲ’2；
ホスフィド基、－ＰＲ’2；
チオラート基、－ＳＲ’；
式－Ｓｉ（Ｒａ）3のシリル基；
式－Ｇｅ（Ｒａ）3のゲルマニル基；
からなる群から選択され；
ここで、Ｒ3、Ｒ4、Ｒ5、Ｒ6、Ｒ7、Ｒ8、Ｒ9及びＲ10の２つの隣接する基は、任意に結合して環状ヒドロカルビル基又は環状ヘテロ原子含有ヒドロカルビル基を形成してもよく、環状ヒドロカルビル基又は環状ヘテロ原子含有ヒドロカルビル基は、非置換であるか、又はハロゲン原子、Ｃ１－２０アルキル基、Ｃ１－２０アルコキシ基、Ｃ７－２０アルキルアリール基、Ｃ７－２０アリールアルキル基、Ｃ６－２０アリール基、Ｃ６－２０アリールオキシ基、Ｃ７－２０アルキルアリールオキシ基、Ｃ７－２０アリールアルキルオキシ基、式－ＮＲ’2のアミド基、式－ＰＲ’2のホスフィド基、式－ＳＲ’のチオラート基、式－Ｓｉ（Ｒａ）3のシリル基、及び式－Ｇｅ（Ｒａ）3のゲルマニル基からなる群から選択される１つ以上の置換基によってさらに置換されており；
ここで、各Ｒ’は、独立して、水素、Ｃ1－２０アルキル基、及びＣ６－２０アリール基からなる群から選択され；
ここで、各Ｒａは、独立して、水素、Ｃ１－８アルキル基、Ｃ１－８アルコキシ基、Ｃ６－２０アリールオキシ基及びＣ６－２０アリール基からなる群から選択され；Ｒｂ、Ｒｃ、Ｒｄは、各々独立して、Ｃ１－２０アルキル基であり；
式中、各Ｘ1は、活性化可能な配位子である、有機金属錯体と、
ｉｉ）触媒活性剤と、
を含む、重合プロセスである。

【００３１】

本開示の一実施形態は、エチレンを、任意選択で１つ以上のＣ３－１２アルファ－オレフィンと、オレフィン重合触媒系の存在下で重合することを含む、重合プロセスであって、
オレフィン重合触媒系が、
ｉ）有機金属錯体であって、式Ｖ：

【化２３】



(V)

で表され、

式中、Ｍは、Ｔｉ、Ｚｒ又はＨｆであり；

式中、R^1及びR^2は、各々独立して、水素及びR^Xからなる群から選択されるか；又はR^1及びR^2は、それらが結合しているＰ原子と一緒になって、非置換であるか、又はハロゲン原子、C_{1-20}アルキル基、C_{1-20}アルコキシ基、C_{7-20}アルキルアリール基、C_{7-20}アリールアルキル基、C_{6-20}アリール基、C_{6-20}アリールオキシ基、C_{7-20}アルキルアリールオキシ基、及びC_{7-20}アリールアルキルオキシ基からなる群から選択される１つ以上の置換基によってさらに置換されている３－１０員複素環式基を形成し；

各R^Xは、独立して、ハロゲン原子；C_{1-30}ヒドロカルビル基（このヒドロカルビル基は、非置換であるか、又は１つ以上のハロゲン原子、C_{1-20}アルキル基、C_{1-20}アルコキシ基、C_{7-20}アルキルアリール基、C_{7-20}アリールアルキル基、C_{6-20}アリール基、C_{6-20}アリールオキシ基、C_{7-20}アルキルアリールオキシ基、及び／又はC_{7-20}アリールアルキルオキシ基によってさらに置換されている）；式－NR'_2のアミド基；式－Ｓｉ（R^a）$_3$のシリル基；式－Ｇｅ（R^a）$_3$のゲルマニル基；及び式Ｎ＝Ｐ（R^b）（R^c）（R^d）のホスフィンイミン基からなる群から選択され；

式中、R^{11}、R^{12}、R^{13}、R^{14}、R^{15}、R^{16}、R^{17}、R^{18}は、各々独立して、

ハロゲン；

水素；

C_{1-30}ヒドロカルビル基（このヒドロカルビル基は、非置換であるか、又はハロゲン原子、C_{1-20}アルキル基、C_{1-20}アルコキシ基、C_{7-20}アルキルアリール基、C_{7-20}アリールアルキル基、C_{6-20}アリール基、C_{6-20}アリールオキシ基、C_{7-20}アルキルアリールオキシ基、及びC_{7-20}アリールアルキルオキシ基からなる群から選択される１つ以上の置換基によってさらに置換されている）；

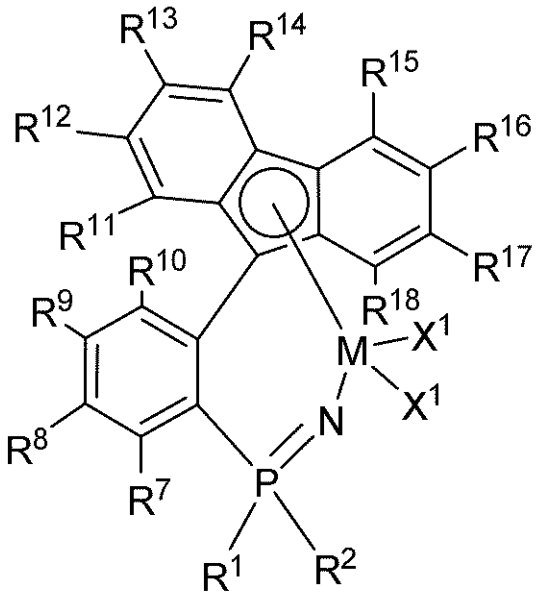
ヘテロ原子含有C_{1-30}ヒドロカルビル基（このヘテロ原子含有ヒドロカルビル基は、非置換であるか、又はハロゲン原子、C_{1-20}アルキル基、C_{1-20}アルコキシ基、C_{7-20}アルキルアリール基、C_{7-20}アリールアルキル基、C_{6-20}アリール基、

Ｃ６－２０アリールオキシ基、Ｃ７－２０アルキルアリールオキシ基、及びＣ７－２０アリールアルキルオキシ基からなる群から選択される１つ以上の置換基によってさらに置換されている）；
　オキシ基、－ＯＲ’；
　アミド基、－ＮＲ’2；
　ホスフィド基、－ＰＲ’2；
　チオラート基、－ＳＲ’；
　式－Ｓｉ（Ｒａ）3のシリル基；
　式－Ｇｅ（Ｒａ）3のゲルマニル基；
からなる群から選択され；
　ここで、Ｒ１１、Ｒ１２、Ｒ１３、Ｒ１４、Ｒ１５、Ｒ１６、Ｒ１７、Ｒ１８の２つの隣接する基は、任意に結合して環状ヒドロカルビル基又は環状ヘテロ原子含有ヒドロカルビル基を形成してもよく、環状ヒドロカルビル基又は環状ヘテロ原子含有ヒドロカルビル基は、非置換であるか、又はハロゲン原子、Ｃ１－２０アルキル基、Ｃ１－２０アルコキシ基、Ｃ７－２０アルキルアリール基、Ｃ７－２０アリールアルキル基、Ｃ６－２０アリール基、Ｃ６－２０アリールオキシ基、Ｃ７－２０アルキルアリールオキシ基、Ｃ７－２０アリールアルキルオキシ基、式－ＮＲ’2のアミド基、式－ＰＲ’2のホスフィド基、式－ＳＲ’のチオラート基、式－Ｓｉ（Ｒａ）3のシリル基、及び式－Ｇｅ（Ｒａ）3のゲルマニル基からなる群から選択される１つ以上の置換基によってさらに置換されており；
　ここで、各Ｒ’は、独立して、水素、Ｃ1－２０アルキル基、及びＣ６－２０アリール基からなる群から選択され；
　ここで、各Ｒａは、独立して、水素、Ｃ１－８アルキル基、Ｃ１－８アルコキシ基、Ｃ６－２０アリールオキシ基及びＣ６－２０アリール基からなる群から選択され；Ｒｂ、Ｒｃ、Ｒｄは、各々独立して、Ｃ１－２０アルキル基であり；
　各Ｘ１は、活性化可能な配位子であり；
　Ｌは、ＰとＣｙを連結する原子の連続鎖を含む架橋基であり、連続鎖は２個又は３個の原子を含む、有機金属錯体と、
　ｉｉ）触媒活性剤と、
を含む、重合プロセスである。

【００３２】

　本開示の一実施形態は、エチレンを、任意選択で１つ以上のＣ３－１２アルファ－オレフィンと、オレフィン重合触媒系の存在下で重合することを含む、重合プロセスであって、
　オレフィン重合触媒系が、
　ｉ）有機金属錯体であって、式ＶＩ：

【化２４】



(VI)

で表され、

式中、Ｍは、Ｔｉ、Ｚｒ又はＨｆであり；

式中、Ｒ^{1}及びＲ^{2}は、各々独立して、水素及びＲ^{X}からなる群から選択されるか；又はＲ^{1}及びＲ^{2}は、それらが結合しているＰ原子と一緒になって、非置換であるか、又はハロゲン原子、Ｃ$_{1-20}$アルキル基、Ｃ$_{1-20}$アルコキシ基、Ｃ$_{7-20}$アルキルアリール基、Ｃ$_{7-20}$アリールアルキル基、Ｃ$_{6-20}$アリール基、Ｃ$_{6-20}$アリールオキシ基、Ｃ$_{7-20}$アルキルアリールオキシ基、及びＣ$_{7-20}$アリールアルキルオキシ基からなる群から選択される１つ以上の置換基によってさらに置換されている３－１０員複素環式基を形成し；

各Ｒ^{X}は、独立して、ハロゲン原子；Ｃ$_{1-30}$ヒドロカルビル基（このヒドロカルビル基は、非置換であるか、又は１つ以上のハロゲン原子、Ｃ$_{1-20}$アルキル基、Ｃ$_{1-20}$アルコキシ基、Ｃ$_{7-20}$アルキルアリール基、Ｃ$_{7-20}$アリールアルキル基、Ｃ$_{6-20}$アリール基、Ｃ$_{6-20}$アリールオキシ基、Ｃ$_{7-20}$アルキルアリールオキシ基、及び／又はＣ$_{7-20}$アリールアルキルオキシ基によってさらに置換されている）；式－ＮＲ’$_{2}$のアミド基；式－Ｓｉ（Ｒ^{a}）$_{3}$のシリル基；式－Ｇｅ（Ｒ^{a}）$_{3}$のゲルマニル基；及び式Ｎ＝Ｐ（Ｒ^{b}）（Ｒ^{c}）（Ｒ^{d}）のホスフィンイミン基からなる群から選択され；

式中、Ｒ^{7}、Ｒ^{8}、Ｒ^{9}、Ｒ^{10}、Ｒ^{11}、Ｒ^{12}、Ｒ^{13}、Ｒ^{14}、Ｒ^{15}、Ｒ^{16}、Ｒ^{17}及びＲ^{18}は、各々独立して、

ハロゲン；

水素；

Ｃ$_{1-30}$ヒドロカルビル基（このヒドロカルビル基は、非置換であるか、又はハロゲン原子、Ｃ$_{1-20}$アルキル基、Ｃ$_{1-20}$アルコキシ基、Ｃ$_{7-20}$アルキルアリール基、Ｃ$_{7-20}$アリールアルキル基、Ｃ$_{6-20}$アリール基、Ｃ$_{6-20}$アリールオキシ基、Ｃ$_{7-20}$アルキルアリールオキシ基、及びＣ$_{7-20}$アリールアルキルオキシ基からなる群から選択される１つ以上の置換基によってさらに置換されている）；

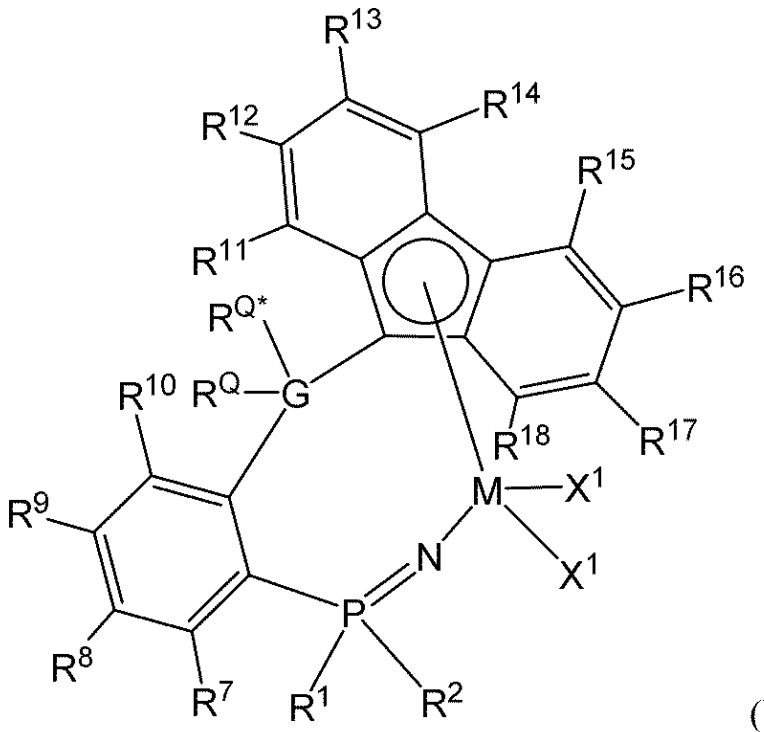
ヘテロ原子含有Ｃ$_{1-30}$ヒドロカルビル基（このヘテロ原子含有ヒドロカルビル基は、非置換であるか、又はハロゲン原子、Ｃ$_{1-20}$アルキル基、Ｃ$_{1-20}$アルコキシ基、Ｃ$_{7-20}$アルキルアリール基、Ｃ$_{7-20}$アリールアルキル基、Ｃ$_{6-20}$アリール基、Ｃ$_{6-20}$アリールオキシ基、Ｃ$_{7-20}$アルキルアリールオキシ基、及びＣ$_{7-20}$アリ

ールアルキルオキシ基からなる群から選択される１つ以上の置換基によってさらに置換されている）；
オキシ基、－ＯＲ’；
アミド基、－ＮＲ’$_2$；
ホスフィド基、－ＰＲ’$_2$；
チオラート基、－ＳＲ’；
式－Ｓｉ（Ｒ^a）$_3$のシリル基；
式－Ｇｅ（Ｒ^a）$_3$のゲルマニル基；
からなる群から選択され；
ここで、Ｒ^7、Ｒ^8、Ｒ^9、Ｒ^{10}、Ｒ^{11}、Ｒ^{12}、Ｒ^{13}、Ｒ^{14}、Ｒ^{15}、Ｒ^{16}、Ｒ^{17}及びＲ^{18}の２つの隣接する基は、任意に結合して環状ヒドロカルビル基又は環状ヘテロ原子含有ヒドロカルビル基を形成してもよく、環状ヒドロカルビル基又は環状ヘテロ原子含有ヒドロカルビル基は、非置換であるか、又はハロゲン原子、Ｃ$_{1-20}$アルキル基、Ｃ$_{1-20}$アルコキシ基、Ｃ$_{7-20}$アルキルアリール基、Ｃ$_{7-20}$アリールアルキル基、Ｃ$_{6-20}$アリール基、Ｃ$_{6-20}$アリールオキシ基、Ｃ$_{7-20}$アルキルアリールオキシ基、Ｃ$_{7-20}$アリールアルキルオキシ基、式－ＮＲ’$_2$のアミド基、式－ＰＲ’$_2$のホスフィド基、式－ＳＲ’のチオラート基、式－Ｓｉ（Ｒ^a）$_3$のシリル基、及び式－Ｇｅ（Ｒ^a）$_3$のゲルマニル基からなる群から選択される１つ以上の置換基によってさらに置換されており；
ここで、各Ｒ’は、独立して、水素、Ｃ$_{1-20}$アルキル基、及びＣ$_{6-20}$アリール基からなる群から選択され；
ここで、各Ｒ^{a}は、独立して、水素、Ｃ$_{1-8}$アルキル基、Ｃ$_{1-8}$アルコキシ基、Ｃ$_{6-20}$アリールオキシ基及びＣ$_{6-20}$アリール基からなる群から選択され、Ｒ^b、Ｒ^c、Ｒ^{d}は、各々独立して、Ｃ$_{1-20}$アルキル基であり；
各Ｘ^{1}は、活性化可能な配位子である、有機金属錯体と、
ｉｉ）触媒活性剤と、
を含む、重合プロセスである。

【００３３】

本開示の一実施形態は、エチレンを、任意選択で１つ以上のＣ$_{3-12}$アルファ－オレフィンと、オレフィン重合触媒系の存在下で重合することを含む、重合プロセスであって、
オレフィン重合触媒系が、
ｉ）有機金属錯体であって、式ＶＩＩ：

【化２５】



(VII)

で表され、

式中、Ｍは、Ｔｉ、Ｚｒ又はＨｆであり；

式中、Ｒ^{1}及びＲ^{2}は、各々独立して、水素及びＲ^{X}からなる群から選択されるか；又はＲ^{1}及びＲ^{2}は、それらが結合しているＰ原子と一緒になって、非置換であるか、又はハロゲン原子、Ｃ$_{1-20}$アルキル基、Ｃ$_{1-20}$アルコキシ基、Ｃ$_{7-20}$アルキルアリール基、Ｃ$_{7-20}$アリールアルキル基、Ｃ$_{6-20}$アリール基、Ｃ$_{6-20}$アリールオキシ基、Ｃ$_{7-20}$アルキルアリールオキシ基、及びＣ$_{7-20}$アリールアルキルオキシ基からなる群から選択される１つ以上の置換基によってさらに置換されている３－１０員複素環式基を形成し；

各Ｒ^{X}は、独立して、ハロゲン原子；Ｃ$_{1-30}$ヒドロカルビル基（このヒドロカルビル基は、非置換であるか、又は１つ以上のハロゲン原子、Ｃ$_{1-20}$アルキル基、Ｃ$_{1-20}$アルコキシ基、Ｃ$_{7-20}$アルキルアリール基、Ｃ$_{7-20}$アリールアルキル基、Ｃ$_{6-20}$アリール基、Ｃ$_{6-20}$アリールオキシ基、Ｃ$_{7-20}$アルキルアリールオキシ基、及び／又はＣ$_{7-20}$アリールアルキルオキシ基によってさらに置換されている）；式－ＮＲ’$_{2}$のアミド基；式－Ｓｉ（Ｒ^{a}）$_{3}$のシリル基；式－Ｇｅ（Ｒ^{a}）$_{3}$のゲルマニル基；及び式Ｎ＝Ｐ（Ｒ^{b}）（Ｒ^{c}）（Ｒ^{d}）のホスフィンイミン基からなる群から選択され；

式中、Ｇは、Ｃ又はＳｉであり；

式中、Ｒ^{Q}及びＲ^{Q*}は、各々独立して、

ハロゲン；

水素；

Ｃ$_{1-30}$ヒドロカルビル基（このヒドロカルビル基は、非置換であるか、又はハロゲン原子、Ｃ$_{1-20}$アルキル基、Ｃ$_{1-20}$アルコキシ基、Ｃ$_{7-20}$アルキルアリール基、Ｃ$_{7-20}$アリールアルキル基、Ｃ$_{6-20}$アリール基、Ｃ$_{6-20}$アリールオキシ基、Ｃ$_{7-20}$アルキルアリールオキシ基、及びＣ$_{7-20}$アリールアルキルオキシ基からなる群から選択される１つ以上の置換基によってさらに置換されている）；

ヘテロ原子含有Ｃ$_{1-30}$ヒドロカルビル基（このヘテロ原子含有ヒドロカルビル基は

、非置換であるか、又はハロゲン原子、Ｃ１－２０アルキル基、Ｃ１－２０アルコキシ基、Ｃ７－２０アルキルアリール基、Ｃ７－２０アリールアルキル基、Ｃ６－２０アリール基、Ｃ６－２０アリールオキシ基、Ｃ７－２０アルキルアリールオキシ基、及びＣ７－２０アリールアルキルオキシ基からなる群から選択される１つ以上の置換基によってさらに置換されている）；

ここで、Ｒ^{Q}及びＲ^{Q*}の基は、任意に結合して環状ヒドロカルビル基又は環状ヘテロ原子含有ヒドロカルビル基を形成してもよく、環状ヒドロカルビル基又は環状ヘテロ原子含有ヒドロカルビル基は、非置換であるか、又はハロゲン原子、Ｃ１－２０アルキル基、Ｃ１－２０アルコキシ基、Ｃ７－２０アルキルアリール基、Ｃ７－２０アリールアルキル基、Ｃ６－２０アリール基、Ｃ６－２０アリールオキシ基、Ｃ７－２０アルキルアリールオキシ基、Ｃ７－２０アリールアルキルオキシ基、式－ＮＲ’$_2$のアミド基、式－ＰＲ’$_2$のホスフィド基、式－ＳＲ’のチオラート基、式－Ｓｉ（Ｒ^{a}）$_3$のシリル基、及び式－Ｇｅ（Ｒ^{a}）$_3$のゲルマニル基からなる群から選択される１つ以上の置換基によってさらに置換されており；

式中、Ｒ^{7}、Ｒ^{8}、Ｒ^{9}、Ｒ^{10}、Ｒ^{11}、Ｒ^{12}、Ｒ^{13}、Ｒ^{14}、Ｒ^{15}、Ｒ^{16}、Ｒ^{17}及びＲ^{18}は、各々独立して、

ハロゲン；

水素；

Ｃ１－３０ヒドロカルビル基（このヒドロカルビル基は、非置換であるか、又はハロゲン原子、Ｃ１－２０アルキル基、Ｃ１－２０アルコキシ基、Ｃ７－２０アルキルアリール基、Ｃ７－２０アリールアルキル基、Ｃ６－２０アリール基、Ｃ６－２０アリールオキシ基、Ｃ７－２０アルキルアリールオキシ基、及びＣ７－２０アリールアルキルオキシ基からなる群から選択される１つ以上の置換基によってさらに置換されている）；

ヘテロ原子含有Ｃ１－３０ヒドロカルビル基（このヘテロ原子含有ヒドロカルビル基は、非置換であるか、又はハロゲン原子、Ｃ１－２０アルキル基、Ｃ１－２０アルコキシ基、Ｃ７－２０アルキルアリール基、Ｃ７－２０アリールアルキル基、Ｃ６－２０アリール基、Ｃ６－２０アリールオキシ基、Ｃ７－２０アルキルアリールオキシ基、及びＣ７－２０アリールアルキルオキシ基からなる群から選択される１つ以上の置換基によってさらに置換されている）；

オキシ基、－ＯＲ’；

アミド基、－ＮＲ’$_2$；

ホスフィド基、－ＰＲ’$_2$；

チオラート基、－ＳＲ’；

式－Ｓｉ（Ｒ^{a}）$_3$のシリル基；

式－Ｇｅ（Ｒ^{a}）$_3$のゲルマニル基；

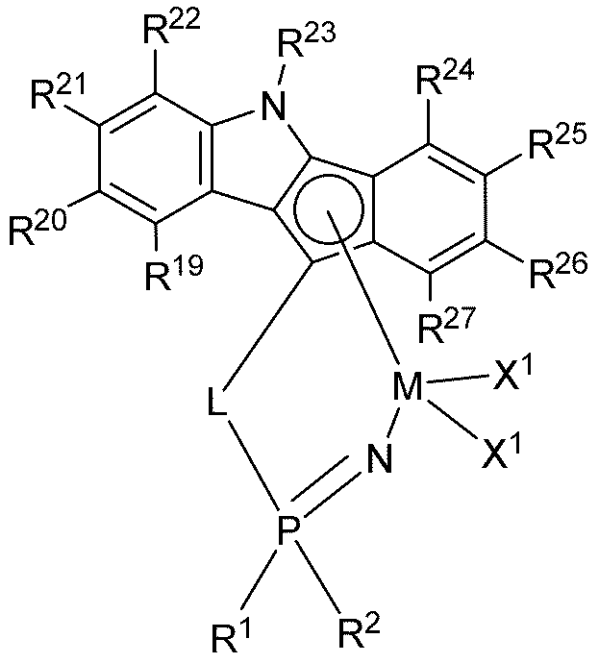
からなる群から選択され；

ここで、Ｒ^{7}、Ｒ^{8}、Ｒ^{9}、Ｒ^{10}、Ｒ^{11}、Ｒ^{12}、Ｒ^{13}、Ｒ^{14}、Ｒ^{15}、Ｒ^{16}、Ｒ^{17}及びＲ^{18}の２つの隣接する基は、任意に結合して環状ヒドロカルビル基又は環状ヘテロ原子含有ヒドロカルビル基を形成してもよく、環状ヒドロカルビル基又は環状ヘテロ原子含有ヒドロカルビル基は、非置換であるか、又はハロゲン原子、Ｃ１－２０アルキル基、Ｃ１－２０アルコキシ基、Ｃ７－２０アルキルアリール基、Ｃ７－２０アリールアルキル基、Ｃ６－２０アリール基、Ｃ６－２０アリールオキシ基、Ｃ７－２０アルキルアリールオキシ基、Ｃ７－２０アリールアルキルオキシ基、式－ＮＲ’$_2$のアミド基、式－ＰＲ’$_2$のホスフィド基、式－ＳＲ’のチオラート基、式－Ｓｉ（Ｒ^{a}）$_3$のシリル基、及び式－Ｇｅ（Ｒ^{a}）$_3$のゲルマニル基からなる群から選択される１つ以上の置換基によってさらに置換されており；

ここで、各Ｒ’は、独立して、水素、Ｃ$_1$－２０アルキル基、及びＣ６－２０アリール基からなる群から選択され；

ここで、各Ｒ^{a}は、独立して、水素、Ｃ１－８アルキル基、Ｃ１－８アルコキシ基、Ｃ６－２０アリールオキシ基及びＣ６－２０アリール基からなる群から選択され、Ｒ^{b}、Ｒ^{c}、

R^dは、各々独立して、C_{1-20}アルキル基であり；
各X^1は、活性化可能な配位子である、有機金属錯体と、
ｉｉ）触媒活性剤と、
を含む、重合プロセスである。
【００３４】
本開示の一実施形態は、エチレンを、任意選択で１つ以上のC_{3-12}アルファ－オレフィンと、オレフィン重合触媒系の存在下で重合することを含む、重合プロセスであって、
オレフィン重合触媒系が、
ｉ）有機金属錯体であって、式ＶＩＩＩ：
【化２６】

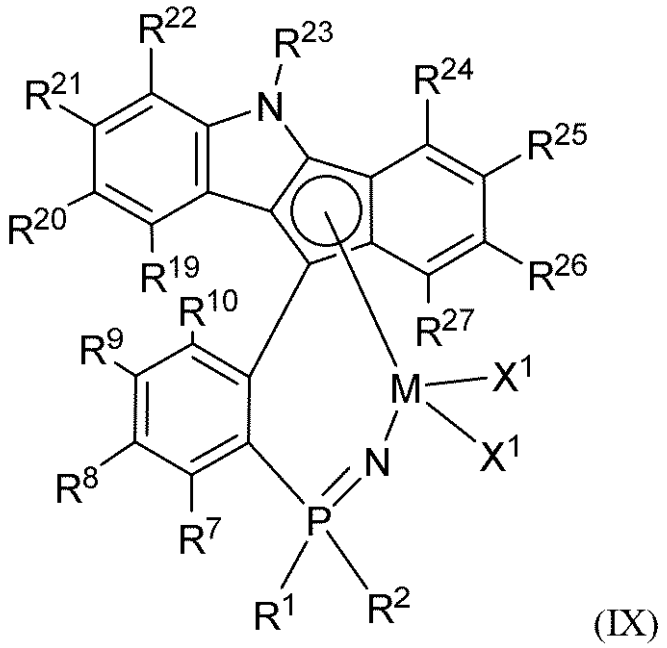


(VIII)

で表され、
式中、Ｍは、Ｔｉ、Ｚｒ又はＨｆであり；
式中、R^1及びR^2は、各々独立して、水素及びR^Xからなる群から選択されるか；又はR^1及びR^2は、それらが結合しているＰ原子と一緒になって、非置換であるか、又はハロゲン原子、C_{1-20}アルキル基、C_{1-20}アルコキシ基、C_{7-20}アルキルアリール基、C_{7-20}アリールアルキル基、C_{6-20}アリール基、C_{6-20}アリールオキシ基、C_{7-20}アルキルアリールオキシ基、及びC_{7-20}アリールアルキルオキシ基からなる群から選択される１つ以上の置換基によってさらに置換されている３－１０員複素環式基を形成し；
各R^Xは、独立して、ハロゲン原子；C_{1-30}ヒドロカルビル基（このヒドロカルビル基は、非置換であるか、又は１つ以上のハロゲン原子、C_{1-20}アルキル基、C_{1-20}アルコキシ基、C_{7-20}アルキルアリール基、C_{7-20}アリールアルキル基、C_{6-20}アリール基、C_{6-20}アリールオキシ基、C_{7-20}アルキルアリールオキシ基、及び／又はC_{7-20}アリールアルキルオキシ基によってさらに置換されている）；式－NR'_2のアミド基；式－Ｓｉ（R^a）$_3$のシリル基；式－Ｇｅ（R^a）$_3$のゲルマニル基；及び式Ｎ＝Ｐ（R^b）（R^c）（R^d）のホスフィンイミン基からなる群から選択され；
式中、R^{23}は、

水素；
C_{1-30}ヒドロカルビル基（このヒドロカルビル基は、非置換であるか、又はハロゲン原子、C_{1-20}アルキル基、C_{1-20}アルコキシ基、C_{7-20}アルキルアリール基、C_{7-20}アリールアルキル基、C_{6-20}アリール基、C_{6-20}アリールオキシ基、C_{7-20}アルキルアリールオキシ基、及びC_{7-20}アリールアルキルオキシ基からなる群から選択される１つ以上の置換基によってさらに置換されている）；
ヘテロ原子含有C_{1-30}ヒドロカルビル基（このヘテロ原子含有ヒドロカルビル基は、非置換であるか、又はハロゲン原子、C_{1-20}アルキル基、C_{1-20}アルコキシ基、C_{7-20}アルキルアリール基、C_{7-20}アリールアルキル基、C_{6-20}アリール基、C_{6-20}アリールオキシ基、C_{7-20}アルキルアリールオキシ基、及びC_{7-20}アリールアルキルオキシ基からなる群から選択される１つ以上の置換基によってさらに置換されている）；
からなる群から選択され；
式中、R^{19}、R^{20}、R^{21}、R^{22}、R^{24}、R^{25}、R^{26}、及びR^{27}は、各々独立して、
ハロゲン；
水素；
C_{1-30}ヒドロカルビル基（このヒドロカルビル基は、非置換であるか、又はハロゲン原子、C_{1-20}アルキル基、C_{1-20}アルコキシ基、C_{7-20}アルキルアリール基、C_{7-20}アリールアルキル基、C_{6-20}アリール基、C_{6-20}アリールオキシ基、C_{7-20}アルキルアリールオキシ基、及びC_{7-20}アリールアルキルオキシ基からなる群から選択される１つ以上の置換基によってさらに置換されている）；
ヘテロ原子含有C_{1-30}ヒドロカルビル基（このヘテロ原子含有ヒドロカルビル基は、非置換であるか、又はハロゲン原子、C_{1-20}アルキル基、C_{1-20}アルコキシ基、C_{7-20}アルキルアリール基、C_{7-20}アリールアルキル基、C_{6-20}アリール基、C_{6-20}アリールオキシ基、C_{7-20}アルキルアリールオキシ基、及びC_{7-20}アリールアルキルオキシ基からなる群から選択される１つ以上の置換基によってさらに置換されている）；
オキシ基、－ＯＲ’；
アミド基、－ＮＲ’$_2$；
ホスフィド基、－ＰＲ’$_2$；
チオラート基、－ＳＲ’；
式－Ｓｉ（R^a）$_3$のシリル基；
式－Ｇｅ（R^a）$_3$のゲルマニル基；
からなる群から選択され；
ここで、R^{19}、R^{20}、R^{21}、R^{22}、R^{24}、R^{25}、R^{26}、及びR^{27}の２つの隣接する基は、任意に結合して環状ヒドロカルビル基又は環状ヘテロ原子含有ヒドロカルビル基を形成してもよく、環状ヒドロカルビル基又は環状ヘテロ原子含有ヒドロカルビル基は、非置換であるか、又はハロゲン原子、C_{1-20}アルキル基、C_{1-20}アルコキシ基、C_{7-20}アルキルアリール基、C_{7-20}アリールアルキル基、C_{6-20}アリール基、C_{6-20}アリールオキシ基、C_{7-20}アルキルアリールオキシ基、C_{7-20}アリールアルキルオキシ基、式－ＮＲ’$_2$のアミド基、式－ＰＲ’$_2$のホスフィド基、式－ＳＲ’のチオラート基、式－Ｓｉ（R^a）$_3$のシリル基、及び式－Ｇｅ（R^a）$_3$のゲルマニル基からなる群から選択される１つ以上の置換基によってさらに置換されており；
ここで、各Ｒ’は、独立して、水素、C_{1-20}アルキル基、及びC_{6-20}アリール基からなる群から選択され；
ここで、各R^aは、独立して、水素、C_{1-8}アルキル基、C_{1-8}アルコキシ基、C_{6-20}アリールオキシ基及びC_{6-20}アリール基からなる群から選択され；R^b、R^c、R^dは、各々独立して、C_{1-20}アルキル基であり；
各X^1は、活性化可能な配位子であり；

Ｌは、ＰとＣｙを連結する原子の連続鎖を含む架橋基であり、連続鎖は２個又は３個の原子を含む、有機金属錯体と、
ｉｉ）触媒活性剤と、
を含む、重合プロセスである。
【００３５】
本開示の一実施形態は、エチレンを、任意選択で１つ以上のＣ$_{3-12}$アルファ－オレフィンと、オレフィン重合触媒系の存在下で重合することを含む、重合プロセスであって、
オレフィン重合触媒系が、
ｉ）有機金属錯体であって、式ＩＸ：
【化２７】



(IX)

で表され、
式中、Ｍは、Ｔｉ、Ｚｒ又はＨｆであり；
式中、Ｒ^{1}及びＲ^{2}は、各々独立して、水素及びＲ^{X}からなる群から選択されるか；又はＲ^{1}及びＲ^{2}は、それらが結合しているＰ原子と一緒になって、非置換であるか、又はハロゲン原子、Ｃ$_{1-20}$アルキル基、Ｃ$_{1-20}$アルコキシ基、Ｃ$_{7-20}$アルキルアリール基、Ｃ$_{7-20}$アリールアルキル基、Ｃ$_{6-20}$アリール基、Ｃ$_{6-20}$アリールオキシ基、Ｃ$_{7-20}$アルキルアリールオキシ基、及びＣ$_{7-20}$アリールアルキルオキシ基からなる群から選択される１つ以上の置換基によってさらに置換されている３－１０員複素環式基を形成し；
各Ｒ^{X}は、独立して、ハロゲン原子；Ｃ$_{1-30}$ヒドロカルビル基（このヒドロカルビル基は、非置換であるか、又は１つ以上のハロゲン原子、Ｃ$_{1-20}$アルキル基、Ｃ$_{1-20}$アルコキシ基、Ｃ$_{7-20}$アルキルアリール基、Ｃ$_{7-20}$アリールアルキル基、Ｃ$_{6-20}$アリール基、Ｃ$_{6-20}$アリールオキシ基、Ｃ$_{7-20}$アルキルアリールオキシ基、及び／又はＣ$_{7-20}$アリールアルキルオキシ基によってさらに置換されている）；式－ＮＲ’$_{2}$のアミド基；式－Ｓｉ（Ｒ^{a}）$_{3}$のシリル基；式－Ｇｅ（Ｒ^{a}）$_{3}$のゲルマニル基；及び式Ｎ＝Ｐ（Ｒ^{b}）（Ｒ^{c}）（Ｒ^{d}）のホスフィンイミン基からなる群から選択され；
式中、Ｒ^{23}は、
水素；

Ｃ１－３０ヒドロカルビル基（このヒドロカルビル基は、非置換であるか、又はハロゲン原子、Ｃ１－２０アルキル基、Ｃ１－２０アルコキシ基、Ｃ７－２０アルキルアリール基、Ｃ７－２０アリールアルキル基、Ｃ６－２０アリール基、Ｃ６－２０アリールオキシ基、Ｃ７－２０アルキルアリールオキシ基、及びＣ７－２０アリールアルキルオキシ基からなる群から選択される１つ以上の置換基によってさらに置換されている）；

ヘテロ原子含有Ｃ１－３０ヒドロカルビル基（このヘテロ原子含有ヒドロカルビル基は、非置換であるか、又はハロゲン原子、Ｃ１－２０アルキル基、Ｃ１－２０アルコキシ基、Ｃ７－２０アルキルアリール基、Ｃ７－２０アリールアルキル基、Ｃ６－２０アリール基、Ｃ６－２０アリールオキシ基、Ｃ７－２０アルキルアリールオキシ基、及びＣ７－２０アリールアルキルオキシ基からなる群から選択される１つ以上の置換基によってさらに置換されている）；

からなる群から選択され；

式中、Ｒ７、Ｒ８、Ｒ９、Ｒ１０、Ｒ１９、Ｒ２０、Ｒ２１、Ｒ２２、Ｒ２４、Ｒ２５、Ｒ２６、及びＲ２７は、各々独立して、

ハロゲン；

水素；

Ｃ１－３０ヒドロカルビル基（このヒドロカルビル基は、非置換であるか、又はハロゲン原子、Ｃ１－２０アルキル基、Ｃ１－２０アルコキシ基、Ｃ７－２０アルキルアリール基、Ｃ７－２０アリールアルキル基、Ｃ６－２０アリール基、Ｃ６－２０アリールオキシ基、Ｃ７－２０アルキルアリールオキシ基、及びＣ７－２０アリールアルキルオキシ基からなる群から選択される１つ以上の置換基によってさらに置換されている）；

ヘテロ原子含有Ｃ１－３０ヒドロカルビル基（このヘテロ原子含有ヒドロカルビル基は、非置換であるか、又はハロゲン原子、Ｃ１－２０アルキル基、Ｃ１－２０アルコキシ基、Ｃ７－２０アルキルアリール基、Ｃ７－２０アリールアルキル基、Ｃ６－２０アリール基、Ｃ６－２０アリールオキシ基、Ｃ７－２０アルキルアリールオキシ基、及びＣ７－２０アリールアルキルオキシ基からなる群から選択される１つ以上の置換基によってさらに置換されている）；

オキシ基、－ＯＲ’；

アミド基、－ＮＲ’$_2$；

ホスフィド基、－ＰＲ’$_2$；

チオラート基、－ＳＲ’；

式－Ｓｉ（Ｒ^a）$_3$のシリル基；

式－Ｇｅ（Ｒ^a）$_3$のゲルマニル基；

からなる群から選択され；

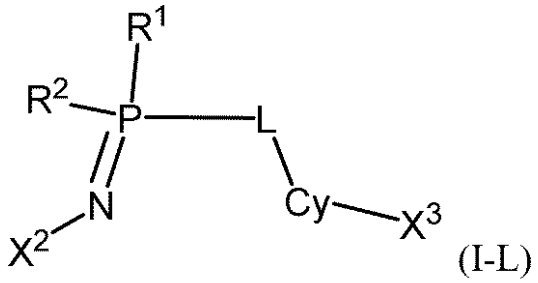
ここで、Ｒ７、Ｒ８、Ｒ９、Ｒ１０、Ｒ１９、Ｒ２０、Ｒ２１、Ｒ２２、Ｒ２４、Ｒ２５、Ｒ２６、及びＲ２７の２つの隣接する基は、任意に結合して環状ヒドロカルビル基又は環状ヘテロ原子含有ヒドロカルビル基を形成してもよく、環状ヒドロカルビル基又は環状ヘテロ原子含有ヒドロカルビル基は、非置換であるか、又はハロゲン原子、Ｃ１－２０アルキル基、Ｃ１－２０アルコキシ基、Ｃ７－２０アルキルアリール基、Ｃ７－２０アリールアルキル基、Ｃ６－２０アリール基、Ｃ６－２０アリールオキシ基、Ｃ７－２０アルキルアリールオキシ基、Ｃ７－２０アリールアルキルオキシ基、式－ＮＲ’$_2$のアミド基、式－ＰＲ’$_2$のホスフィド基、式－ＳＲ’のチオラート基、式－Ｓｉ（Ｒ^a）$_3$のシリル基、及び式－Ｇｅ（Ｒ^a）$_3$のゲルマニル基からなる群から選択される１つ以上の置換基によってさらに置換されており；

ここで、各Ｒ’は、独立して、水素、Ｃ$_{1-20}$アルキル基、及びＣ６－２０アリール基からなる群から選択され；

ここで、各Ｒ^{a}は、独立して、水素、Ｃ１－８アルキル基、Ｃ１－８アルコキシ基、Ｃ６－２０アリールオキシ基及びＣ６－２０アリール基からなる群から選択され、Ｒ^b、Ｒ^c、Ｒ^{d}は、各々独立して、Ｃ１－２０アルキル基であり；

各Ｘ１は、活性化可能な配位子である、有機金属錯体と、

ｉｉ）触媒活性剤と、
を含む、重合プロセスである。
【００３６】
一実施形態では、１つ以上のＣ$_{3}$－Ｃ$_{12}$アルファ－オレフィンが、プロピレン、１－ブテン、１－ヘキセン、及び１－オクテンからなる群から選択される１つ以上のアルファ－オレフィンを含む。
一実施形態では、１つ以上のＣ$_{3}$－Ｃ$_{12}$アルファ－オレフィンが、１－ブテン、１－ヘキセン、及び１－オクテンからなる群から選択される１つ以上のアルファ－オレフィンを含む。
【００３７】
一実施形態では、重合プロセスは、エチレンを１－オクテンと重合することを含む。
【００３８】
一実施形態では、重合プロセスは、溶媒中で行われる溶液相重合プロセスである。
【００３９】
一実施形態では、溶液相重合プロセスは、少なくとも１４０℃の温度で行われる。
一実施形態では、溶液相重合プロセスは、少なくとも１６０℃の温度で行われる。
【００４０】
一実施形態では、重合プロセスは、溶媒中で行われる連続溶液相重合プロセスである。
【００４１】
一実施形態では、連続溶液相重合プロセスは、少なくとも１つの連続撹拌タンク反応器内で行われる。
一実施形態では、連続溶液相重合プロセスは、少なくとも１つの連続撹拌タンク反応器内で、少なくとも１４０℃の温度で行われる。
一実施形態では、連続溶液相重合プロセスは、少なくとも１つの連続撹拌タンク反応器内で、少なくとも１６０℃の温度で行われる。
【００４２】
本開示の一実施形態は、式Ｉ－Ｌ：
【化２８】



(I-L)

で表される化合物であり、
式中、
Ｒ^{1}及びＲ^{2}は、各々独立して、水素及びＲ^{X}からなる群から選択されるか；又はＲ^{1}及びＲ^{2}は、それらが結合しているＰ原子と一緒になって、非置換であるか、又はハロゲン原子、Ｃ$_{1-20}$アルキル基、Ｃ$_{1-20}$アルコキシ基、Ｃ$_{7-20}$アルキルアリール基、Ｃ$_{7-20}$アリールアルキル基、Ｃ$_{6-20}$アリール基、Ｃ$_{6-20}$アリールオキシ基、Ｃ$_{7-20}$アルキルアリールオキシ基、及びＣ$_{7-20}$アリールアルキルオキシ基からなる群から選択される１つ以上の置換基によってさらに置換されている３－１０員複素環式基を形成し；
各Ｒ^{X}は、独立して、ハロゲン原子；Ｃ$_{1-30}$ヒドロカルビル基（このヒドロカルビル基は、非置換であるか、又は１つ以上のハロゲン原子、Ｃ$_{1-20}$アルキル基、Ｃ$_{1-}$

２０アルコキシ基、Ｃ７－２０アルキルアリール基、Ｃ７－２０アリールアルキル基、Ｃ６－２０アリール基、Ｃ６－２０アリールオキシ基、Ｃ７－２０アルキルアリールオキシ基、及び／又はＣ７－２０アリールアルキルオキシ基によってさらに置換されている）；式－ＮＲ’２のアミド基；式－Ｓｉ（Ｒａ）３のシリル基；式－Ｇｅ（Ｒａ）３のゲルマニル基；及び式Ｎ＝Ｐ（Ｒｂ）（Ｒｃ）（Ｒｄ）のホスフィンイミン基からなる群から選択され；ここで、各Ｒ’は、独立して、水素、Ｃ1－２０アルキル基、及びＣ６－２０アリール基からなる群から選択され；ここで、各Ｒａは、独立して、水素、Ｃ１－８アルキル基、Ｃ１－８アルコキシ基、Ｃ６－２０アリールオキシ基及びＣ６－２０アリール基からなる群から選択され、Ｒｂ、Ｒｃ、Ｒｄは、各々独立して、Ｃ１－２０アルキル基であり；

Ｃｙは、シクロペンタジエニル型部分であり、Ｌ及びＸ３に共有結合しており、

Ｘ２は、水素、又は式－Ｓｉ（Ｒｅ）３のシリル基であり、

Ｘ３は、水素、又は式－Ｓｉ（Ｒｅ）３のシリル基、若しくは式Ｓｎ（Ｒｅ）３のスタンニル基であり；

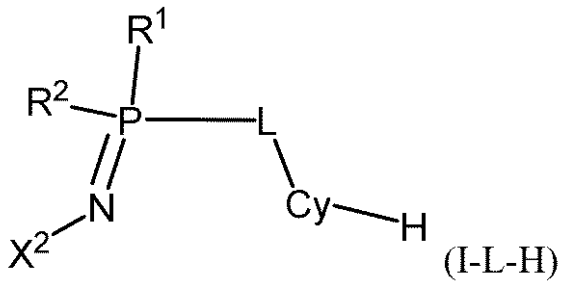
ここで、各Ｒｅは、独立して、水素、Ｃ１－８アルキル基、Ｃ１－８アルコキシ基、Ｃ６－２０アリールオキシ基、及びＣ６－２０アリール基からなる群から選択され；

Ｌは、ＰとＣｙを連結する原子の連続鎖を含む架橋基であり、連続鎖は２個又は３個の原子を含む。

【００４３】

本開示の一実施形態は、式Ｉ－Ｌ－Ｈ：

【化２９】



(I-L-H)

で表される化合物であり、

式中、

Ｒ１及びＲ２は、各々独立して、水素及びＲＸからなる群から選択されるか；又はＲ１及びＲ２は、それらが結合しているＰ原子と一緒になって、非置換であるか、又はハロゲン原子、Ｃ１－２０アルキル基、Ｃ１－２０アルコキシ基、Ｃ７－２０アルキルアリール基、Ｃ７－２０アリールアルキル基、Ｃ６－２０アリール基、Ｃ６－２０アリールオキシ基、Ｃ７－２０アルキルアリールオキシ基、及びＣ７－２０アリールアルキルオキシ基からなる群から選択される１つ以上の置換基によってさらに置換されている３－１０員複素環式基を形成し；

各ＲＸは、独立して、ハロゲン原子；Ｃ１－３０ヒドロカルビル基（このヒドロカルビル基は、非置換であるか、又は１つ以上のハロゲン原子、Ｃ１－２０アルキル基、Ｃ１－２０アルコキシ基、Ｃ７－２０アルキルアリール基、Ｃ７－２０アリールアルキル基、Ｃ６－２０アリール基、Ｃ６－２０アリールオキシ基、Ｃ７－２０アルキルアリールオキシ基、及び／又はＣ７－２０アリールアルキルオキシ基によってさらに置換されている）；式－ＮＲ’２のアミド基；式－Ｓｉ（Ｒａ）３のシリル基；式－Ｇｅ（Ｒａ）３のゲルマニル基；及び式Ｎ＝Ｐ（Ｒｂ）（Ｒｃ）（Ｒｄ）のホスフィンイミン基からなる群から選択され；ここで、各Ｒ’は、独立して、水素、Ｃ1－２０アルキル基、及びＣ６－２０アリール基からなる群から選択され；ここで、各Ｒａは、独立して、水素、Ｃ１－８アルキル基、Ｃ１－８アルコキシ基、Ｃ６－２０アリールオキシ基及びＣ６－２０アリール基からなる群から選択され、Ｒｂ、Ｒｃ、Ｒｄは、各々独立して、Ｃ１－２０アルキル基であり；

X^2は、水素、又は式－Ｓｉ（R^e）$_3$のシリル基であり、ここで、各R^eは、独立して、水素、C_{1-8}アルキル基、C_{1-8}アルコキシ基、C_{6-20}アリールオキシ基及びC_{6-20}アリール基からなる群から選択され；

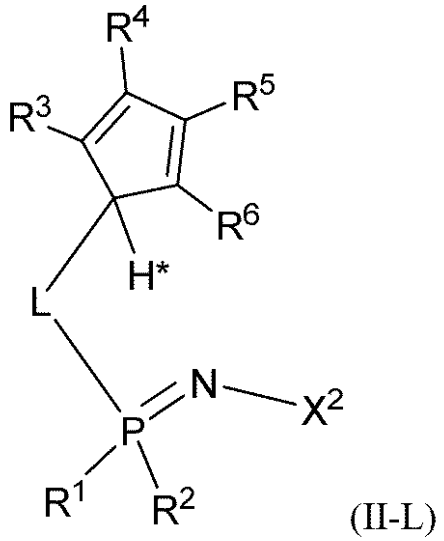
Ｃｙは、シクロペンタジエニル型部分であり、Ｌ及びＨに共有結合しており；

Ｌは、ＰとＣｙを連結する原子の連続鎖を含む架橋基であり、連続鎖は２個又は３個の原子を含む。

【００４４】

本開示の一実施形態は、式ＩＩ－Ｌ：

【化３０】



(II-L)

で表される化合物か、又はシクロペンタジエニル環内の水素Ｈ＊の移動によって得られる式ＩＩ－Ｌの二重結合異性体であり；

式中、R^1及びR^2は、各々独立して、水素及びR^Xからなる群から選択されるか；又はR^1及びR^2は、それらが結合しているＰ原子と一緒になって、非置換であるか、又はハロゲン原子、C_{1-20}アルキル基、C_{1-20}アルコキシ基、C_{7-20}アルキルアリール基、C_{7-20}アリールアルキル基、C_{6-20}アリール基、C_{6-20}アリールオキシ基、C_{7-20}アルキルアリールオキシ基、及びC_{7-20}アリールアルキルオキシ基からなる群から選択される１つ以上の置換基によってさらに置換されている３－１０員複素環式基を形成し；

各R^Xは、独立して、ハロゲン原子；C_{1-30}ヒドロカルビル基（このヒドロカルビル基は、非置換であるか、又は１つ以上のハロゲン原子、C_{1-20}アルキル基、C_{1-20}アルコキシ基、C_{7-20}アルキルアリール基、C_{7-20}アリールアルキル基、C_{6-20}アリール基、C_{6-20}アリールオキシ基、C_{7-20}アルキルアリールオキシ基、及び／又はC_{7-20}アリールアルキルオキシ基によってさらに置換されている）；式－ＮＲ’$_2$のアミド基；式－Ｓｉ（R^a）$_3$のシリル基；式－Ｇｅ（R^a）$_3$のゲルマニル基；及び式Ｎ＝Ｐ（R^b）（R^c）（R^d）のホスフィンイミン基からなる群から選択され；

式中、R^3、R^4、R^5及びR^6は、各々独立して、

ハロゲン；

水素；

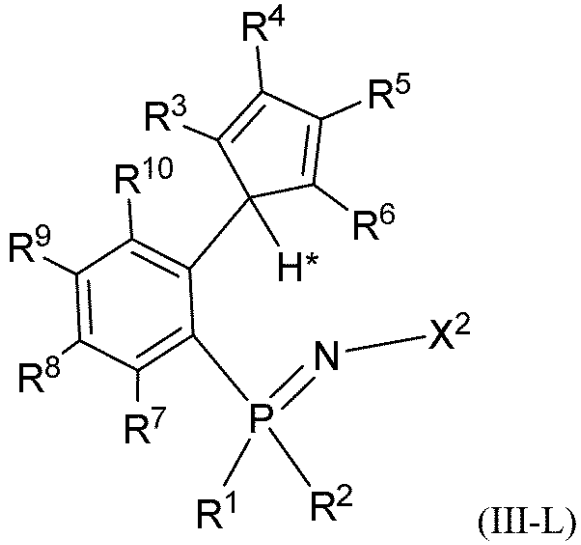
C_{1-30}ヒドロカルビル基（このヒドロカルビル基は、非置換であるか、又はハロゲン原子、C_{1-20}アルキル基、C_{1-20}アルコキシ基、C_{7-20}アルキルアリール基、C_{7-20}アリールアルキル基、C_{6-20}アリール基、C_{6-20}アリールオキシ基、C_{7-20}アルキルアリールオキシ基、及びC_{7-20}アリールアルキルオキシ基からなる

群から選択される１つ以上の置換基によってさらに置換されている）；
ヘテロ原子含有Ｃ$_{1-30}$ヒドロカルビル基（このヘテロ原子含有ヒドロカルビル基は、非置換であるか、又はハロゲン原子、Ｃ$_{1-20}$アルキル基、Ｃ$_{1-20}$アルコキシ基、Ｃ$_{7-20}$アルキルアリール基、Ｃ$_{7-20}$アリールアルキル基、Ｃ$_{6-20}$アリール基、Ｃ$_{6-20}$アリールオキシ基、Ｃ$_{7-20}$アルキルアリールオキシ基、及びＣ$_{7-20}$アリールアルキルオキシ基からなる群から選択される１つ以上の置換基によってさらに置換されている）；
オキシ基、－ＯＲ’；
アミド基、－ＮＲ’$_2$；
ホスフィド基、－ＰＲ’$_2$；
チオラート基、－ＳＲ’；
式－Ｓｉ（Ｒ^a）$_3$のシリル基；
式－Ｇｅ（Ｒ^a）$_3$のゲルマニル基；
からなる群から選択され；
ここで、Ｒ^3、Ｒ^4、Ｒ^{5}及びＲ^{6}の２つの隣接する基は、任意に結合して環状ヒドロカルビル基又は環状ヘテロ原子含有ヒドロカルビル基を形成してもよく、環状ヒドロカルビル基又は環状ヘテロ原子含有ヒドロカルビル基は、非置換であるか、又はハロゲン原子、Ｃ$_{1-20}$アルキル基、Ｃ$_{1-20}$アルコキシ基、Ｃ$_{7-20}$アルキルアリール基、Ｃ$_{7-20}$アリールアルキル基、Ｃ$_{6-20}$アリール基、Ｃ$_{6-20}$アリールオキシ基、Ｃ$_{7-20}$アルキルアリールオキシ基、Ｃ$_{7-20}$アリールアルキルオキシ基、式－ＮＲ’$_2$のアミド基、式－ＰＲ’$_2$のホスフィド基、式－ＳＲ’のチオラート基、式－Ｓｉ（Ｒ^a）$_3$のシリル基、及び式－Ｇｅ（Ｒ^a）$_3$のゲルマニル基からなる群から選択される１つ以上の置換基によってさらに置換されており；
ここで、各Ｒ’は、独立して、水素、Ｃ$_{1-20}$アルキル基、及びＣ$_{6-20}$アリール基からなる群から選択され；
ここで、各Ｒ^{a}は、独立して、水素、Ｃ$_{1-8}$アルキル基、Ｃ$_{1-8}$アルコキシ基、Ｃ$_{6-20}$アリールオキシ基及びＣ$_{6-20}$アリール基からなる群から選択され、Ｒ^b、Ｒ^c、Ｒ^{d}は、各々独立して、Ｃ$_{1-20}$アルキル基であり；
Ｘ^{2}は、水素、又は式－Ｓｉ（Ｒ^e）$_3$のシリル基であり、ここで、各Ｒ^{e}は、独立して、水素、Ｃ$_{1-8}$アルキル基、Ｃ$_{1-8}$アルコキシ基、Ｃ$_{6-20}$アリールオキシ基及びＣ$_{6-20}$アリール基からなる群から選択され；
Ｌは、ＰとＣｙを連結する原子の連続鎖を含む架橋基であり、連続鎖は２個又は３個の原子を含む。

【００４５】

本開示の一実施形態は、式ＩＩＩ－Ｌ：

【化３１】



(III-L)

で表される化合物か、又はシクロペンタジエニル環内の水素Ｈ＊の移動によって得られる式ＩＩＩ－Ｌの二重結合異性体であり；

Ｒ１及びＲ２は、各々独立して、水素及びＲＸからなる群から選択されるか；又はＲ１及びＲ２は、それらが結合しているＰ原子と一緒になって、非置換であるか、又はハロゲン原子、Ｃ１－２０アルキル基、Ｃ１－２０アルコキシ基、Ｃ７－２０アルキルアリール基、Ｃ７－２０アリールアルキル基、Ｃ６－２０アリール基、Ｃ６－２０アリールオキシ基、Ｃ７－２０アルキルアリールオキシ基、及びＣ７－２０アリールアルキルオキシ基からなる群から選択される１つ以上の置換基によってさらに置換されている３－１０員複素環式基を形成し；

各ＲＸは、独立して、ハロゲン原子；Ｃ１－３０ヒドロカルビル基（このヒドロカルビル基は、非置換であるか、又は１つ以上のハロゲン原子、Ｃ１－２０アルキル基、Ｃ１－２０アルコキシ基、Ｃ７－２０アルキルアリール基、Ｃ７－２０アリールアルキル基、Ｃ６－２０アリール基、Ｃ６－２０アリールオキシ基、Ｃ７－２０アルキルアリールオキシ基、及び／又はＣ７－２０アリールアルキルオキシ基によってさらに置換されている）；式－ＮＲ’２のアミド基；式－Ｓｉ（Ｒａ）３のシリル基；式－Ｇｅ（Ｒａ）３のゲルマニル基；及び式Ｎ＝Ｐ（Ｒｂ）（Ｒｃ）（Ｒｄ）のホスフィンイミン基からなる群から選択され；

式中、Ｒ３、Ｒ４、Ｒ５、Ｒ６、Ｒ７、Ｒ８、Ｒ９及びＲ１０は、各々独立して、

ハロゲン；

水素；

Ｃ１－３０ヒドロカルビル基（このヒドロカルビル基は、非置換であるか、又はハロゲン原子、Ｃ１－２０アルキル基、Ｃ１－２０アルコキシ基、Ｃ７－２０アルキルアリール基、Ｃ７－２０アリールアルキル基、Ｃ６－２０アリール基、Ｃ６－２０アリールオキシ基、Ｃ７－２０アルキルアリールオキシ基、及びＣ７－２０アリールアルキルオキシ基からなる群から選択される１つ以上の置換基によってさらに置換されている）；

ヘテロ原子含有Ｃ１－３０ヒドロカルビル基（このヘテロ原子含有ヒドロカルビル基は、非置換であるか、又はハロゲン原子、Ｃ１－２０アルキル基、Ｃ１－２０アルコキシ基、Ｃ７－２０アルキルアリール基、Ｃ７－２０アリールアルキル基、Ｃ６－２０アリール基、Ｃ６－２０アリールオキシ基、Ｃ７－２０アルキルアリールオキシ基、及びＣ７－２０アリールアルキルオキシ基からなる群から選択される１つ以上の置換基によってさらに置換されている）；

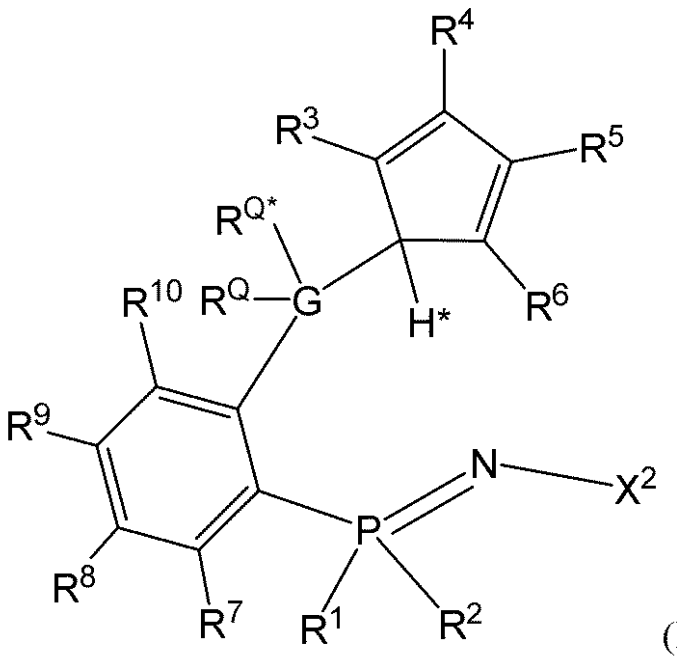
オキシ基、－ＯＲ’；

アミド基、－ＮＲ’$_2$；
ホスフィド基、－ＰＲ’$_2$；
チオラート基、－ＳＲ’；
式－Ｓｉ（Ｒ^a）$_3$のシリル基；
式－Ｇｅ（Ｒ^a）$_3$のゲルマニル基；
からなる群から選択され；
ここで、Ｒ^3、Ｒ^4、Ｒ^5、Ｒ^6、Ｒ^7、Ｒ^8、Ｒ^{9}及びＲ^{10}の２つの隣接する基は、任意に結合して環状ヒドロカルビル基又は環状ヘテロ原子含有ヒドロカルビル基を形成してもよく、環状ヒドロカルビル基又は環状ヘテロ原子含有ヒドロカルビル基は、非置換であるか、又はハロゲン原子、Ｃ$_{1-20}$アルキル基、Ｃ$_{1-20}$アルコキシ基、Ｃ$_{7-20}$アルキルアリール基、Ｃ$_{7-20}$アリールアルキル基、Ｃ$_{6-20}$アリール基、Ｃ$_{6-20}$アリールオキシ基、Ｃ$_{7-20}$アルキルアリールオキシ基、Ｃ$_{7-20}$アリールアルキルオキシ基、式－ＮＲ’$_2$のアミド基、式－ＰＲ’$_2$のホスフィド基、式－ＳＲ’のチオラート基、式－Ｓｉ（Ｒ^a）$_3$のシリル基、及び式－Ｇｅ（Ｒ^a）$_3$のゲルマニル基からなる群から選択される１つ以上の置換基によってさらに置換されており；
ここで、各Ｒ’は、独立して、水素、Ｃ$_{1-20}$アルキル基、及びＣ$_{6-20}$アリール基からなる群から選択され；
ここで、各Ｒ^{a}は、独立して、水素、Ｃ$_{1-8}$アルキル基、Ｃ$_{1-8}$アルコキシ基、Ｃ$_{6-20}$アリールオキシ基及びＣ$_{6-20}$アリール基からなる群から選択され；Ｒ^b、Ｒ^c、Ｒ^{d}は、各々独立して、Ｃ$_{1-20}$アルキル基であり；
Ｘ^{2}は、水素、又は式－Ｓｉ（Ｒ^e）$_3$のシリル基であり、ここで、各Ｒ^{e}は、独立して、水素、Ｃ$_{1-8}$アルキル基、Ｃ$_{1-8}$アルコキシ基、Ｃ$_{6-20}$アリールオキシ基、及びＣ$_{6-20}$アリール基からなる群から選択される。

【００４６】

本開示の一実施形態は、式ＩＶ－Ｌ：

【化３２】



(IV-L)

で表される化合物であり、
式中、Ｒ^{1}及びＲ^{2}は、各々独立して、水素及びＲ^{X}からなる群から選択されるか；又はＲ^{1}及びＲ^{2}は、それらが結合しているＰ原子と一緒になって、非置換であるか、又はハロゲン原子、Ｃ$_{1-20}$アルキル基、Ｃ$_{1-20}$アルコキシ基、Ｃ$_{7-20}$アルキルアリ

ール基、Ｃ７－２０アリールアルキル基、Ｃ６－２０アリール基、Ｃ６－２０アリールオキシ基、Ｃ７－２０アルキルアリールオキシ基、及びＣ７－２０アリールアルキルオキシ基からなる群から選択される１つ以上の置換基によってさらに置換されている３－１０員複素環式基を形成し；

各Ｒ^{X}は、独立して、ハロゲン原子；Ｃ１－３０ヒドロカルビル基（このヒドロカルビル基は、非置換であるか、又は１つ以上のハロゲン原子、Ｃ１－２０アルキル基、Ｃ１－２０アルコキシ基、Ｃ７－２０アルキルアリール基、Ｃ７－２０アリールアルキル基、Ｃ６－２０アリール基、Ｃ６－２０アリールオキシ基、Ｃ７－２０アルキルアリールオキシ基、及び／又はＣ７－２０アリールアルキルオキシ基によってさらに置換されている）；式－ＮＲ’$_2$のアミド基；式－Ｓｉ（Ｒ^{a}）$_3$のシリル基；式－Ｇｅ（Ｒ^{a}）$_3$のゲルマニル基；及び式Ｎ＝Ｐ（Ｒ^{b}）（Ｒ^{c}）（Ｒ^{d}）のホスフィンイミン基からなる群から選択され；

式中、Ｇは、Ｃ又はＳｉであり；

式中、Ｒ^{Q}及びＲ^{Q}＊は、各々独立して、

ハロゲン；

水素；

Ｃ１－３０ヒドロカルビル基（このヒドロカルビル基は、非置換であるか、又はハロゲン原子、Ｃ１－２０アルキル基、Ｃ１－２０アルコキシ基、Ｃ７－２０アルキルアリール基、Ｃ７－２０アリールアルキル基、Ｃ６－２０アリール基、Ｃ６－２０アリールオキシ基、Ｃ７－２０アルキルアリールオキシ基、及びＣ７－２０アリールアルキルオキシ基からなる群から選択される１つ以上の置換基によってさらに置換されている）；

ヘテロ原子含有Ｃ１－３０ヒドロカルビル基（このヘテロ原子含有ヒドロカルビル基は、非置換であるか、又はハロゲン原子、Ｃ１－２０アルキル基、Ｃ１－２０アルコキシ基、Ｃ７－２０アルキルアリール基、Ｃ７－２０アリールアルキル基、Ｃ６－２０アリール基、Ｃ６－２０アリールオキシ基、Ｃ７－２０アルキルアリールオキシ基、及びＣ７－２０アリールアルキルオキシ基からなる群から選択される１つ以上の置換基によってさらに置換されている）；

ここで、Ｒ^{Q}及びＲ^{Q}＊の基は、任意に結合して環状ヒドロカルビル基又は環状ヘテロ原子含有ヒドロカルビル基を形成してもよく、環状ヒドロカルビル基又は環状ヘテロ原子含有ヒドロカルビル基は、非置換であるか、又はハロゲン原子、Ｃ１－２０アルキル基、Ｃ１－２０アルコキシ基、Ｃ７－２０アルキルアリール基、Ｃ７－２０アリールアルキル基、Ｃ６－２０アリール基、Ｃ６－２０アリールオキシ基、Ｃ７－２０アルキルアリールオキシ基、Ｃ７－２０アリールアルキルオキシ基、式－ＮＲ’$_2$のアミド基、式－ＰＲ’$_2$のホスフィド基、式－ＳＲ’のチオラート基、式－Ｓｉ（Ｒ^{a}）$_3$のシリル基、及び式－Ｇｅ（Ｒ^{a}）$_3$のゲルマニル基からなる群から選択される１つ以上の置換基によってさらに置換されており；

式中、Ｒ^{3}、Ｒ^{4}、Ｒ^{5}、Ｒ^{6}、Ｒ^{7}、Ｒ^{8}、Ｒ^{9}及びＲ^{10}は、各々独立して、

ハロゲン；

水素；

Ｃ１－３０ヒドロカルビル基（このヒドロカルビル基は、非置換であるか、又はハロゲン原子、Ｃ１－２０アルキル基、Ｃ１－２０アルコキシ基、Ｃ７－２０アルキルアリール基、Ｃ７－２０アリールアルキル基、Ｃ６－２０アリール基、Ｃ６－２０アリールオキシ基、Ｃ７－２０アルキルアリールオキシ基、及びＣ７－２０アリールアルキルオキシ基からなる群から選択される１つ以上の置換基によってさらに置換されている）；

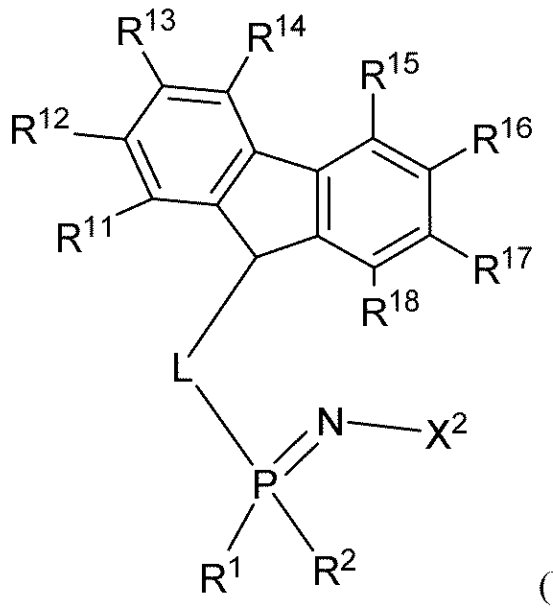
ヘテロ原子含有Ｃ１－３０ヒドロカルビル基（このヘテロ原子含有ヒドロカルビル基は、非置換であるか、又はハロゲン原子、Ｃ１－２０アルキル基、Ｃ１－２０アルコキシ基、Ｃ７－２０アルキルアリール基、Ｃ７－２０アリールアルキル基、Ｃ６－２０アリール基、Ｃ６－２０アリールオキシ基、Ｃ７－２０アルキルアリールオキシ基、及びＣ７－２０アリールアルキルオキシ基からなる群から選択される１つ以上の置換基によってさらに置換されている）；

オキシ基、－ＯＲ’；
アミド基、－ＮＲ’$_2$；
ホスフィド基、－ＰＲ’$_2$；
チオラート基、－ＳＲ’；
式－Ｓｉ（Ｒ^a）$_3$のシリル基；
式－Ｇｅ（Ｒ^a）$_3$のゲルマニル基；
からなる群から選択され；
ここで、Ｒ^3、Ｒ^4、Ｒ^5、Ｒ^6、Ｒ^7、Ｒ^8、Ｒ^{9}及びＲ^{10}の２つの隣接する基は、任意に結合して環状ヒドロカルビル基又は環状ヘテロ原子含有ヒドロカルビル基を形成してもよく、環状ヒドロカルビル基又は環状ヘテロ原子含有ヒドロカルビル基は、非置換であるか、又はハロゲン原子、Ｃ$_{1-20}$アルキル基、Ｃ$_{1-20}$アルコキシ基、Ｃ$_{7-20}$アルキルアリール基、Ｃ$_{7-20}$アリールアルキル基、Ｃ$_{6-20}$アリール基、Ｃ$_{6-20}$アリールオキシ基、Ｃ$_{7-20}$アルキルアリールオキシ基、Ｃ$_{7-20}$アリールアルキルオキシ基、式－ＮＲ’$_2$のアミド基、式－ＰＲ’$_2$のホスフィド基、式－ＳＲ’のチオラート基、式－Ｓｉ（Ｒ^a）$_3$のシリル基、及び式－Ｇｅ（Ｒ^a）$_3$のゲルマニル基からなる群から選択される１つ以上の置換基によってさらに置換されており；
ここで、各Ｒ’は、独立して、水素、Ｃ$_{1-20}$アルキル基、及びＣ$_{6-20}$アリール基からなる群から選択され；
ここで、各Ｒ^{a}は、独立して、水素、Ｃ$_{1-8}$アルキル基、Ｃ$_{1-8}$アルコキシ基、Ｃ$_{6-20}$アリールオキシ基及びＣ$_{6-20}$アリール基からなる群から選択され；Ｒ^b、Ｒ^c、Ｒ^{d}は、各々独立して、Ｃ$_{1-20}$アルキル基であり；
Ｘ^{2}は、水素、又は式－Ｓｉ（Ｒ^e）$_3$のシリル基であり、ここで、各Ｒ^{e}は、独立して、水素、Ｃ$_{1-8}$アルキル基、Ｃ$_{1-8}$アルコキシ基、Ｃ$_{6-20}$アリールオキシ基、及びＣ$_{6-20}$アリール基からなる群から選択される。

【００４７】

本開示の一実施形態は、式Ｖ－Ｌ：

【化３３】



(V-L)

で表される化合物であり、
式中、Ｒ^{1}及びＲ^{2}は、各々独立して、水素及びＲ^{X}からなる群から選択されるか；又はＲ^{1}及びＲ^{2}は、それらが結合しているＰ原子と一緒になって、非置換であるか、又はハロゲン原子、Ｃ$_{1-20}$アルキル基、Ｃ$_{1-20}$アルコキシ基、Ｃ$_{7-20}$アルキルアリ

ール基、C_{7-20}アリールアルキル基、C_{6-20}アリール基、C_{6-20}アリールオキシ基、C_{7-20}アルキルアリールオキシ基、及びC_{7-20}アリールアルキルオキシ基からなる群から選択される１つ以上の置換基によってさらに置換されている３－１０員複素環式基を形成し；

各R^Xは、独立して、ハロゲン原子；C_{1-30}ヒドロカルビル基（このヒドロカルビル基は、非置換であるか、又は１つ以上のハロゲン原子、C_{1-20}アルキル基、C_{1-20}アルコキシ基、C_{7-20}アルキルアリール基、C_{7-20}アリールアルキル基、C_{6-20}アリール基、C_{6-20}アリールオキシ基、C_{7-20}アルキルアリールオキシ基、及び／又はC_{7-20}アリールアルキルオキシ基によってさらに置換されている）；式－NR'_2のアミド基；式－$Si(R^a)_3$のシリル基；式－$Ge(R^a)_3$のゲルマニル基；及び式$N=P(R^b)(R^c)(R^d)$のホスフィンイミン基からなる群から選択され；

式中、R^{11}、R^{12}、R^{13}、R^{14}、R^{15}、R^{16}、R^{17}、R^{18}は、各々独立して、

ハロゲン；

水素；

C_{1-30}ヒドロカルビル基（このヒドロカルビル基は、非置換であるか、又はハロゲン原子、C_{1-20}アルキル基、C_{1-20}アルコキシ基、C_{7-20}アルキルアリール基、C_{7-20}アリールアルキル基、C_{6-20}アリール基、C_{6-20}アリールオキシ基、C_{7-20}アルキルアリールオキシ基、及びC_{7-20}アリールアルキルオキシ基からなる群から選択される１つ以上の置換基によってさらに置換されている）；

ヘテロ原子含有C_{1-30}ヒドロカルビル基（このヘテロ原子含有ヒドロカルビル基は、非置換であるか、又はハロゲン原子、C_{1-20}アルキル基、C_{1-20}アルコキシ基、C_{7-20}アルキルアリール基、C_{7-20}アリールアルキル基、C_{6-20}アリール基、C_{6-20}アリールオキシ基、C_{7-20}アルキルアリールオキシ基、及びC_{7-20}アリールアルキルオキシ基からなる群から選択される１つ以上の置換基によってさらに置換されている）；

オキシ基、－OR'；

アミド基、－NR'_2；

ホスフィド基、－PR'_2；

チオラート基、－SR'；

式－$Si(R^a)_3$のシリル基；

式－$Ge(R^a)_3$のゲルマニル基；

からなる群から選択され；

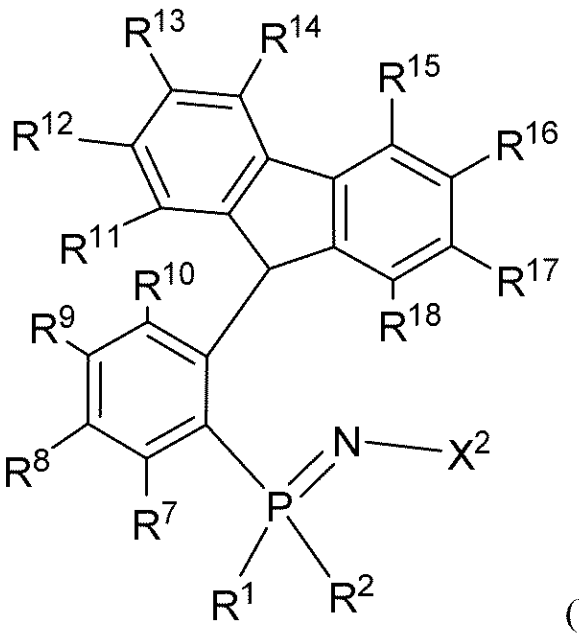
ここで、R^{11}、R^{12}、R^{13}、R^{14}、R^{15}、R^{16}、R^{17}、R^{18}の２つの隣接する基は、任意に結合して環状ヒドロカルビル基又は環状ヘテロ原子含有ヒドロカルビル基を形成してもよく、環状ヒドロカルビル基又は環状ヘテロ原子含有ヒドロカルビル基は、非置換であるか、又はハロゲン原子、C_{1-20}アルキル基、C_{1-20}アルコキシ基、C_{7-20}アルキルアリール基、C_{7-20}アリールアルキル基、C_{6-20}アリール基、C_{6-20}アリールオキシ基、C_{7-20}アルキルアリールオキシ基、C_{7-20}アリールアルキルオキシ基、式－NR'_2のアミド基、式－PR'_2のホスフィド基、式－SR'のチオラート基、式－$Si(R^a)_3$のシリル基、及び式－$Ge(R^a)_3$のゲルマニル基からなる群から選択される１つ以上の置換基によってさらに置換されており；

ここで、各R'は、独立して、水素、C_{1-20}アルキル基、及びC_{6-20}アリール基からなる群から選択され；

ここで、各R^aは、独立して、水素、C_{1-8}アルキル基、C_{1-8}アルコキシ基、C_{6-20}アリールオキシ基及びC_{6-20}アリール基からなる群から選択され；R^b、R^c、R^dは、各々独立して、C_{1-20}アルキル基であり；

X^2は、水素、又は式－$Si(R^e)_3$のシリル基であり、ここで、各R^eは、独立して、水素、C_{1-8}アルキル基、C_{1-8}アルコキシ基、C_{6-20}アリールオキシ基、及

びＣ６－２０アリール基からなる群から選択され；
Ｌは、ＰとＣｙを連結する原子の連続鎖を含む架橋基であり、連続鎖は２個又は３個の原子を含む。
【００４８】
本開示の一実施形態は、式ＶＩ－Ｌ：
【化３４】



(VI-L)

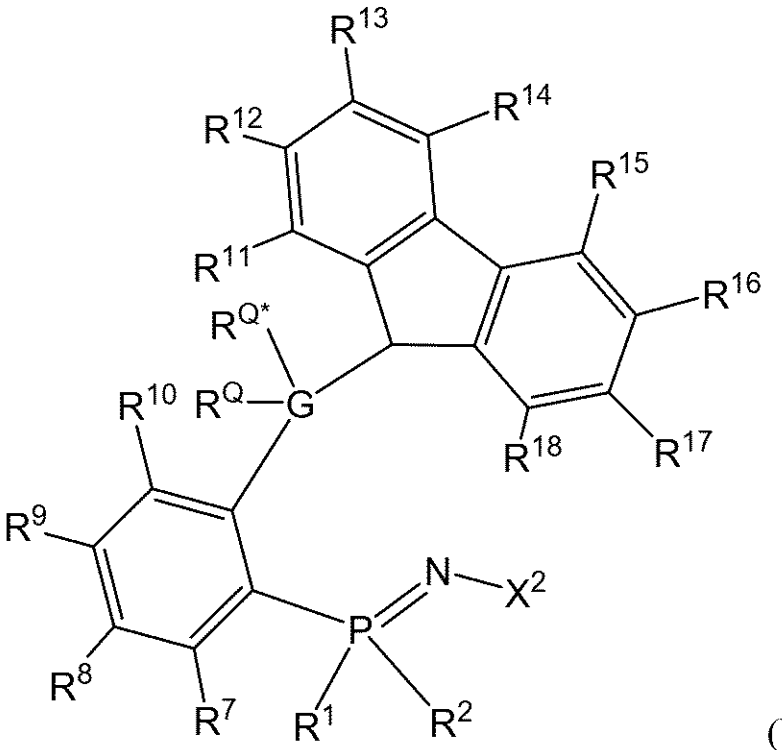
で表される化合物であり、
式中、Ｒ１及びＲ２は、各々独立して、水素及びＲＸからなる群から選択されるか；又はＲ１及びＲ２は、それらが結合しているＰ原子と一緒になって、非置換であるか、又はハロゲン原子、Ｃ１－２０アルキル基、Ｃ１－２０アルコキシ基、Ｃ７－２０アルキルアリール基、Ｃ７－２０アリールアルキル基、Ｃ６－２０アリール基、Ｃ６－２０アリールオキシ基、Ｃ７－２０アルキルアリールオキシ基、及びＣ７－２０アリールアルキルオキシ基からなる群から選択される１つ以上の置換基によってさらに置換されている３－１０員複素環式基を形成し；
各ＲＸは、独立して、ハロゲン原子；Ｃ１－３０ヒドロカルビル基（このヒドロカルビル基は、非置換であるか、又は１つ以上のハロゲン原子、Ｃ１－２０アルキル基、Ｃ１－２０アルコキシ基、Ｃ７－２０アルキルアリール基、Ｃ７－２０アリールアルキル基、Ｃ６－２０アリール基、Ｃ６－２０アリールオキシ基、Ｃ７－２０アルキルアリールオキシ基、及び／又はＣ７－２０アリールアルキルオキシ基によってさらに置換されている）；式－ＮＲ’２のアミド基；式－Ｓｉ（Ｒａ）３のシリル基；式－Ｇｅ（Ｒａ）３のゲルマニル基；及び式Ｎ＝Ｐ（Ｒｂ）（Ｒｃ）（Ｒｄ）のホスフィンイミン基からなる群から選択され；
式中、Ｒ７、Ｒ８、Ｒ９、Ｒ１０、Ｒ１１、Ｒ１２、Ｒ１３、Ｒ１４、Ｒ１５、Ｒ１６、Ｒ１７及びＲ１８は、各々独立して、
ハロゲン；
水素；
Ｃ１－３０ヒドロカルビル基（このヒドロカルビル基は、非置換であるか、又はハロゲン原子、Ｃ１－２０アルキル基、Ｃ１－２０アルコキシ基、Ｃ７－２０アルキルアリール基、Ｃ７－２０アリールアルキル基、Ｃ６－２０アリール基、Ｃ６－２０アリールオキシ基、Ｃ７－２０アルキルアリールオキシ基、及びＣ７－２０アリールアルキルオキシ基からなる群から選択される１つ以上の置換基によってさらに置換されている）；

ヘテロ原子含有Ｃ１－３０ヒドロカルビル基（このヘテロ原子含有ヒドロカルビル基は、非置換であるか、又はハロゲン原子、Ｃ１－２０アルキル基、Ｃ１－２０アルコキシ基、Ｃ７－２０アルキルアリール基、Ｃ７－２０アリールアルキル基、Ｃ６－２０アリール基、Ｃ６－２０アリールオキシ基、Ｃ７－２０アルキルアリールオキシ基、及びＣ７－２０アリールアルキルオキシ基からなる群から選択される１つ以上の置換基によってさらに置換されている）；
オキシ基、－ＯＲ’；
アミド基、－ＮＲ’$_2$；
ホスフィド基、－ＰＲ’$_2$；
チオラート基、－ＳＲ’；
式－Ｓｉ（Ｒ^a）$_3$のシリル基；
式－Ｇｅ（Ｒ^a）$_3$のゲルマニル基；
からなる群から選択され；
ここで、Ｒ^7、Ｒ^8、Ｒ^9、Ｒ^{10}、Ｒ^{11}、Ｒ^{12}、Ｒ^{13}、Ｒ^{14}、Ｒ^{15}、Ｒ^{16}、Ｒ^{17}及びＲ^{18}の２つの隣接する基は、任意に結合して環状ヒドロカルビル基又は環状ヘテロ原子含有ヒドロカルビル基を形成してもよく、環状ヒドロカルビル基又は環状ヘテロ原子含有ヒドロカルビル基は、非置換であるか、又はハロゲン原子、Ｃ１－２０アルキル基、Ｃ１－２０アルコキシ基、Ｃ７－２０アルキルアリール基、Ｃ７－２０アリールアルキル基、Ｃ６－２０アリール基、Ｃ６－２０アリールオキシ基、Ｃ７－２０アルキルアリールオキシ基、Ｃ７－２０アリールアルキルオキシ基、式－ＮＲ’$_2$のアミド基、式－ＰＲ’$_2$のホスフィド基、式－ＳＲ’のチオラート基、式－Ｓｉ（Ｒ^a）$_3$のシリル基、及び式－Ｇｅ（Ｒ^a）$_3$のゲルマニル基からなる群から選択される１つ以上の置換基によってさらに置換されており；
ここで、各Ｒ’は、独立して、水素、Ｃ$_{1-20}$アルキル基、及びＣ６－２０アリール基からなる群から選択され；
ここで、各Ｒ^{a}は、独立して、水素、Ｃ１－８アルキル基、Ｃ１－８アルコキシ基、Ｃ６－２０アリールオキシ基及びＣ６－２０アリール基からなる群から選択され；Ｒ^b、Ｒ^c、Ｒ^{d}は、各々独立して、Ｃ１－２０アルキル基であり；
Ｘ^{2}は、水素、又は式－Ｓｉ（Ｒ^e）$_3$のシリル基であり、ここで、各Ｒ^{e}は、独立して、水素、Ｃ１－８アルキル基、Ｃ１－８アルコキシ基、Ｃ６－２０アリールオキシ基、及びＣ６－２０アリール基からなる群から選択される。

【００４９】

本開示の一実施形態は、式ＶＩＩ－Ｌ：

【化３５】



(VII-L)

で表される化合物であり、

式中、R^1及びR^2は、各々独立して、水素及びR^Xからなる群から選択されるか；又はR^1及びR^2は、それらが結合しているＰ原子と一緒になって、非置換であるか、又はハロゲン原子、Ｃ$_{1-20}$アルキル基、Ｃ$_{1-20}$アルコキシ基、Ｃ$_{7-20}$アルキルアリール基、Ｃ$_{7-20}$アリールアルキル基、Ｃ$_{6-20}$アリール基、Ｃ$_{6-20}$アリールオキシ基、Ｃ$_{7-20}$アルキルアリールオキシ基、及びＣ$_{7-20}$アリールアルキルオキシ基からなる群から選択される１つ以上の置換基によってさらに置換されている３－１０員複素環式基を形成し；

各R^Xは、独立して、ハロゲン原子；Ｃ$_{1-30}$ヒドロカルビル基（このヒドロカルビル基は、非置換であるか、又は１つ以上のハロゲン原子、Ｃ$_{1-20}$アルキル基、Ｃ$_{1-20}$アルコキシ基、Ｃ$_{7-20}$アルキルアリール基、Ｃ$_{7-20}$アリールアルキル基、Ｃ$_{6-20}$アリール基、Ｃ$_{6-20}$アリールオキシ基、Ｃ$_{7-20}$アルキルアリールオキシ基、及び／又はＣ$_{7-20}$アリールアルキルオキシ基によってさらに置換されている）；式－ＮＲ’$_2$のアミド基；式－Ｓｉ（R^a）$_3$のシリル基；式－Ｇｅ（R^a）$_3$のゲルマニル基；及び式Ｎ＝Ｐ（R^b）（R^c）（R^d）のホスフィンイミン基からなる群から選択され；

式中、Ｇは、Ｃ又はＳｉであり；

式中、R^Q及びR^{Q*}は、各々独立して、

ハロゲン；

水素；

Ｃ$_{1-30}$ヒドロカルビル基（このヒドロカルビル基は、非置換であるか、又はハロゲン原子、Ｃ$_{1-20}$アルキル基、Ｃ$_{1-20}$アルコキシ基、Ｃ$_{7-20}$アルキルアリール基、Ｃ$_{7-20}$アリールアルキル基、Ｃ$_{6-20}$アリール基、Ｃ$_{6-20}$アリールオキシ基、Ｃ$_{7-20}$アルキルアリールオキシ基、及びＣ$_{7-20}$アリールアルキルオキシ基からなる群から選択される１つ以上の置換基によってさらに置換されている）；

ヘテロ原子含有Ｃ$_{1-30}$ヒドロカルビル基（このヘテロ原子含有ヒドロカルビル基は、非置換であるか、又はハロゲン原子、Ｃ$_{1-20}$アルキル基、Ｃ$_{1-20}$アルコキシ基、

Ｃ７－２０アルキルアリール基、Ｃ７－２０アリールアルキル基、Ｃ６－２０アリール基、Ｃ６－２０アリールオキシ基、Ｃ７－２０アルキルアリールオキシ基、及びＣ７－２０アリールアルキルオキシ基からなる群から選択される１つ以上の置換基によってさらに置換されている）；

ここで、Ｒ^{Q}及びＲ^{Q}＊の基は、任意に結合して環状ヒドロカルビル基又は環状ヘテロ原子含有ヒドロカルビル基を形成してもよく、環状ヒドロカルビル基又は環状ヘテロ原子含有ヒドロカルビル基は、非置換であるか、又はハロゲン原子、Ｃ１－２０アルキル基、Ｃ１－２０アルコキシ基、Ｃ７－２０アルキルアリール基、Ｃ７－２０アリールアルキル基、Ｃ６－２０アリール基、Ｃ６－２０アリールオキシ基、Ｃ７－２０アルキルアリールオキシ基、Ｃ７－２０アリールアルキルオキシ基、式－ＮＲ’$_2$のアミド基、式－ＰＲ’$_2$のホスフィド基、式－ＳＲ’のチオラート基、式－Ｓｉ（Ｒ^{a}）$_3$のシリル基、及び式－Ｇｅ（Ｒ^{a}）$_3$のゲルマニル基からなる群から選択される１つ以上の置換基によってさらに置換されており；

式中、Ｒ^{7}、Ｒ^{8}、Ｒ^{9}、Ｒ^{10}、Ｒ^{11}、Ｒ^{12}、Ｒ^{13}、Ｒ^{14}、Ｒ^{15}、Ｒ^{16}、Ｒ^{17}及びＲ^{18}は、各々独立して、

ハロゲン；

水素；

Ｃ１－３０ヒドロカルビル基（このヒドロカルビル基は、非置換であるか、又はハロゲン原子、Ｃ１－２０アルキル基、Ｃ１－２０アルコキシ基、Ｃ７－２０アルキルアリール基、Ｃ７－２０アリールアルキル基、Ｃ６－２０アリール基、Ｃ６－２０アリールオキシ基、Ｃ７－２０アルキルアリールオキシ基、及びＣ７－２０アリールアルキルオキシ基からなる群から選択される１つ以上の置換基によってさらに置換されている）；

ヘテロ原子含有Ｃ１－３０ヒドロカルビル基（このヘテロ原子含有ヒドロカルビル基は、非置換であるか、又はハロゲン原子、Ｃ１－２０アルキル基、Ｃ１－２０アルコキシ基、Ｃ７－２０アルキルアリール基、Ｃ７－２０アリールアルキル基、Ｃ６－２０アリール基、Ｃ６－２０アリールオキシ基、Ｃ７－２０アルキルアリールオキシ基、及びＣ７－２０アリールアルキルオキシ基からなる群から選択される１つ以上の置換基によってさらに置換されている）；

オキシ基、－ＯＲ’；

アミド基、－ＮＲ’$_2$；

ホスフィド基、－ＰＲ’$_2$；

チオラート基、－ＳＲ’；

式－Ｓｉ（Ｒ^{a}）$_3$のシリル基；

式－Ｇｅ（Ｒ^{a}）$_3$のゲルマニル基；

からなる群から選択され；

ここで、Ｒ^{7}、Ｒ^{8}、Ｒ^{9}、Ｒ^{10}、Ｒ^{11}、Ｒ^{12}、Ｒ^{13}、Ｒ^{14}、Ｒ^{15}、Ｒ^{16}、Ｒ^{17}及びＲ^{18}の２つの隣接する基は、任意に結合して環状ヒドロカルビル基又は環状ヘテロ原子含有ヒドロカルビル基を形成してもよく、環状ヒドロカルビル基又は環状ヘテロ原子含有ヒドロカルビル基は、非置換であるか、又はハロゲン原子、Ｃ１－２０アルキル基、Ｃ１－２０アルコキシ基、Ｃ７－２０アルキルアリール基、Ｃ７－２０アリールアルキル基、Ｃ６－２０アリール基、Ｃ６－２０アリールオキシ基、Ｃ７－２０アルキルアリールオキシ基、Ｃ７－２０アリールアルキルオキシ基、式－ＮＲ’$_2$のアミド基、式－ＰＲ’$_2$のホスフィド基、式－ＳＲ’のチオラート基、式－Ｓｉ（Ｒ^{a}）$_3$のシリル基、及び式－Ｇｅ（Ｒ^{a}）$_3$のゲルマニル基からなる群から選択される１つ以上の置換基によってさらに置換されており；

ここで、各Ｒ’は、独立して、水素、Ｃ１－２０アルキル基、及びＣ６－２０アリール基からなる群から選択され；

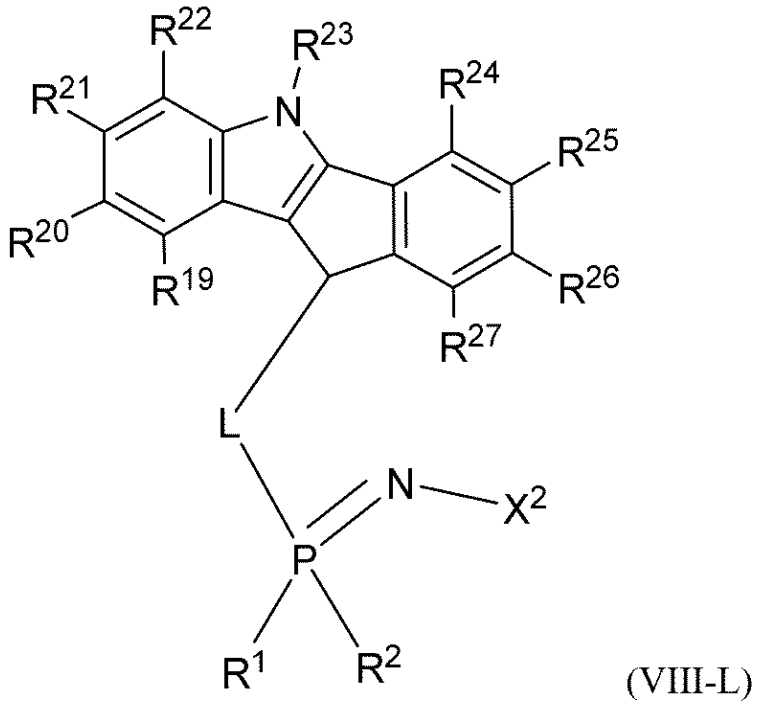
ここで、各Ｒ^{a}は、独立して、水素、Ｃ１－８アルキル基、Ｃ１－８アルコキシ基、Ｃ６－２０アリールオキシ基及びＣ６－２０アリール基からなる群から選択され；Ｒ^{b}、Ｒ^{c}、Ｒ^{d}は、各々独立して、Ｃ１－２０アルキル基であり；

X^2は、水素、又は式－Ｓｉ（R^e）$_3$のシリル基であり、ここで、各R^eは、独立して、水素、C_{1-8}アルキル基、C_{1-8}アルコキシ基、C_{6-20}アリールオキシ基、及びC_{6-20}アリール基からなる群から選択される。

【００５０】

本開示の一実施形態は、式ＶＩＩＩ－Ｌ：

【化３６】



(VIII-L)

で表される化合物であり、

式中、R^1及びR^2は、各々独立して、水素及びR^Xからなる群から選択されるか；又はR^1及びR^2は、それらが結合しているＰ原子と一緒になって、非置換であるか、又はハロゲン原子、C_{1-20}アルキル基、C_{1-20}アルコキシ基、C_{7-20}アルキルアリール基、C_{7-20}アリールアルキル基、C_{6-20}アリール基、C_{6-20}アリールオキシ基、C_{7-20}アルキルアリールオキシ基、及びC_{7-20}アリールアルキルオキシ基からなる群から選択される１つ以上の置換基によってさらに置換されている３－１０員複素環式基を形成し；

各R^Xは、独立して、ハロゲン原子；C_{1-30}ヒドロカルビル基（このヒドロカルビル基は、非置換であるか、又は１つ以上のハロゲン原子、C_{1-20}アルキル基、C_{1-20}アルコキシ基、C_{7-20}アルキルアリール基、C_{7-20}アリールアルキル基、C_{6-20}アリール基、C_{6-20}アリールオキシ基、C_{7-20}アルキルアリールオキシ基、及び／又はC_{7-20}アリールアルキルオキシ基によってさらに置換されている）；式－ＮＲ’$_2$のアミド基；式－Ｓｉ（R^a）$_3$のシリル基；式－Ｇｅ（R^a）$_3$のゲルマニル基；及び式Ｎ＝Ｐ（R^b）（R^c）（R^d）のホスフィンイミン基からなる群から選択され；

式中、R^{23}は、

水素；

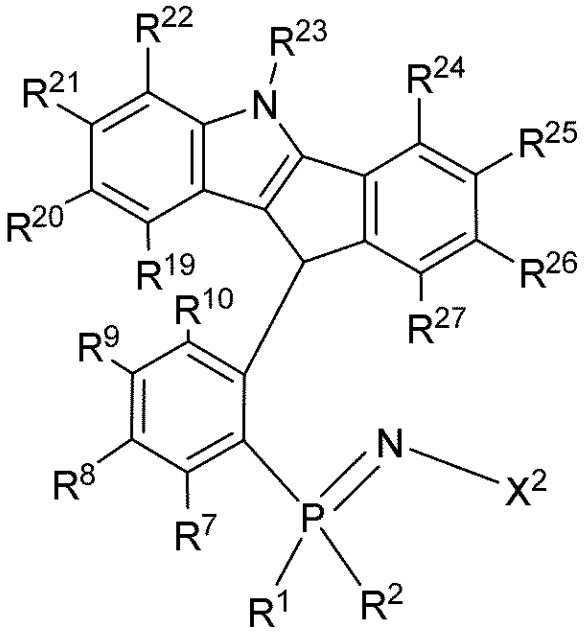
C_{1-30}ヒドロカルビル基（このヒドロカルビル基は、非置換であるか、又はハロゲン原子、C_{1-20}アルキル基、C_{1-20}アルコキシ基、C_{7-20}アルキルアリール基、C_{7-20}アリールアルキル基、C_{6-20}アリール基、C_{6-20}アリールオキシ基、C_{7-20}アルキルアリールオキシ基、及びC_{7-20}アリールアルキルオキシ基からなる群から選択される１つ以上の置換基によってさらに置換されている）；

ヘテロ原子含有Ｃ１－３０ヒドロカルビル基（このヘテロ原子含有ヒドロカルビル基は、非置換であるか、又はハロゲン原子、Ｃ１－２０アルキル基、Ｃ１－２０アルコキシ基、Ｃ７－２０アルキルアリール基、Ｃ７－２０アリールアルキル基、Ｃ６－２０アリール基、Ｃ６－２０アリールオキシ基、Ｃ７－２０アルキルアリールオキシ基、及びＣ７－２０アリールアルキルオキシ基からなる群から選択される１つ以上の置換基によってさらに置換されている）；
からなる群から選択され；
式中、Ｒ１９、Ｒ２０、Ｒ２１、Ｒ２２、Ｒ２４、Ｒ２５、Ｒ２６、及びＲ２７は、各々独立して、
ハロゲン；
水素；
Ｃ１－３０ヒドロカルビル基（このヒドロカルビル基は、非置換であるか、又はハロゲン原子、Ｃ１－２０アルキル基、Ｃ１－２０アルコキシ基、Ｃ７－２０アルキルアリール基、Ｃ７－２０アリールアルキル基、Ｃ６－２０アリール基、Ｃ６－２０アリールオキシ基、Ｃ７－２０アルキルアリールオキシ基、及びＣ７－２０アリールアルキルオキシ基からなる群から選択される１つ以上の置換基によってさらに置換されている）；
ヘテロ原子含有Ｃ１－３０ヒドロカルビル基（このヘテロ原子含有ヒドロカルビル基は、非置換であるか、又はハロゲン原子、Ｃ１－２０アルキル基、Ｃ１－２０アルコキシ基、Ｃ７－２０アルキルアリール基、Ｃ７－２０アリールアルキル基、Ｃ６－２０アリール基、Ｃ６－２０アリールオキシ基、Ｃ７－２０アルキルアリールオキシ基、及びＣ７－２０アリールアルキルオキシ基からなる群から選択される１つ以上の置換基によってさらに置換されている）；
オキシ基、－ＯＲ’；
アミド基、－ＮＲ’$_2$；
ホスフィド基、－ＰＲ’$_2$；
チオラート基、－ＳＲ’；
式－Ｓｉ（Ｒ^a）$_3$のシリル基；
式－Ｇｅ（Ｒ^a）$_3$のゲルマニル基；
からなる群から選択され；
ここで、Ｒ１９、Ｒ２０、Ｒ２１、Ｒ２２、Ｒ２４、Ｒ２５、Ｒ２６、及びＲ２７の２つの隣接する基は、任意に結合して環状ヒドロカルビル基又は環状ヘテロ原子含有ヒドロカルビル基を形成してもよく、環状ヒドロカルビル基又は環状ヘテロ原子含有ヒドロカルビル基は、非置換であるか、又はハロゲン原子、Ｃ１－２０アルキル基、Ｃ１－２０アルコキシ基、Ｃ７－２０アルキルアリール基、Ｃ７－２０アリールアルキル基、Ｃ６－２０アリール基、Ｃ６－２０アリールオキシ基、Ｃ７－２０アルキルアリールオキシ基、Ｃ７－２０アリールアルキルオキシ基、式－ＮＲ’$_2$のアミド基、式－ＰＲ’$_2$のホスフィド基、式－ＳＲ’のチオラート基、式－Ｓｉ（Ｒ^a）$_3$のシリル基、及び式－Ｇｅ（Ｒ^a）$_3$のゲルマニル基からなる群から選択される１つ以上の置換基によってさらに置換されており；
ここで、各Ｒ’は、独立して、水素、Ｃ$_1$－２０アルキル基、及びＣ６－２０アリール基からなる群から選択され；
ここで、各Ｒ^{a}は、独立して、水素、Ｃ１－８アルキル基、Ｃ１－８アルコキシ基、Ｃ６－２０アリールオキシ基及びＣ６－２０アリール基からなる群から選択され；Ｒ^b、Ｒ^c、Ｒ^{d}は、各々独立して、Ｃ１－２０アルキル基であり；
Ｘ^{2}は、水素、又は式－Ｓｉ（Ｒ^e）$_3$のシリル基であり、ここで、各Ｒ^{e}は、独立して、水素、Ｃ１－８アルキル基、Ｃ１－８アルコキシ基、Ｃ６－２０アリールオキシ基、及びＣ６－２０アリール基からなる群から選択され；
Ｌは、ＰとＣｙを連結する原子の連続鎖を含む架橋基であり、連続鎖は２個又は３個の原子を含む。

【００５１】

本開示の一実施形態は、式ＩＸ－Ｌ：

【化３７】



(IX-L)

で表される化合物であり、

式中、R^1及びR^2は、各々独立して、水素及びR^Xからなる群から選択されるか；又はR^1及びR^2は、それらが結合しているＰ原子と一緒になって、非置換であるか、又はハロゲン原子、Ｃ$_{1-20}$アルキル基、Ｃ$_{1-20}$アルコキシ基、Ｃ$_{7-20}$アルキルアリール基、Ｃ$_{7-20}$アリールアルキル基、Ｃ$_{6-20}$アリール基、Ｃ$_{6-20}$アリールオキシ基、Ｃ$_{7-20}$アルキルアリールオキシ基、及びＣ$_{7-20}$アリールアルキルオキシ基からなる群から選択される１つ以上の置換基によってさらに置換されている３－１０員複素環式基を形成し；

各R^Xは、独立して、ハロゲン原子；Ｃ$_{1-30}$ヒドロカルビル基（このヒドロカルビル基は、非置換であるか、又は１つ以上のハロゲン原子、Ｃ$_{1-20}$アルキル基、Ｃ$_{1-20}$アルコキシ基、Ｃ$_{7-20}$アルキルアリール基、Ｃ$_{7-20}$アリールアルキル基、Ｃ$_{6-20}$アリール基、Ｃ$_{6-20}$アリールオキシ基、Ｃ$_{7-20}$アルキルアリールオキシ基、及び／又はＣ$_{7-20}$アリールアルキルオキシ基によってさらに置換されている）；式－ＮＲ’$_2$のアミド基；式－Ｓｉ（R^a）$_3$のシリル基；式－Ｇｅ（R^a）$_3$のゲルマニル基；及び式Ｎ＝Ｐ（R^b）（R^c）（R^d）のホスフィンイミン基からなる群から選択され；

式中、R^{23}は、

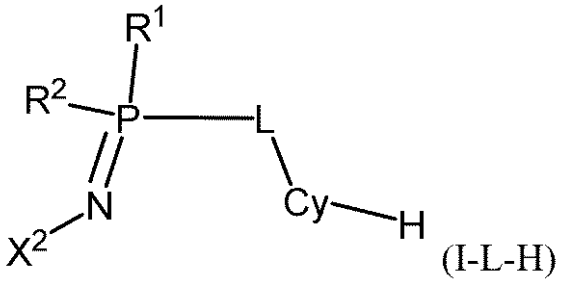
水素；

Ｃ$_{1-30}$ヒドロカルビル基（このヒドロカルビル基は、非置換であるか、又はハロゲン原子、Ｃ$_{1-20}$アルキル基、Ｃ$_{1-20}$アルコキシ基、Ｃ$_{7-20}$アルキルアリール基、Ｃ$_{7-20}$アリールアルキル基、Ｃ$_{6-20}$アリール基、Ｃ$_{6-20}$アリールオキシ基、Ｃ$_{7-20}$アルキルアリールオキシ基、及びＣ$_{7-20}$アリールアルキルオキシ基からなる群から選択される１つ以上の置換基によってさらに置換されている）；

ヘテロ原子含有Ｃ$_{1-30}$ヒドロカルビル基（このヘテロ原子含有ヒドロカルビル基は、非置換であるか、又はハロゲン原子、Ｃ$_{1-20}$アルキル基、Ｃ$_{1-20}$アルコキシ基、Ｃ$_{7-20}$アルキルアリール基、Ｃ$_{7-20}$アリールアルキル基、Ｃ$_{6-20}$アリール基、Ｃ$_{6-20}$アリールオキシ基、Ｃ$_{7-20}$アルキルアリールオキシ基、及びＣ$_{7-20}$アリールアルキルオキシ基からなる群から選択される１つ以上の置換基によってさらに置換されている）；

からなる群から選択され；
式中、R^7、R^8、R^9、R^{10}、R^{19}、R^{20}、R^{21}、R^{22}、R^{24}、R^{25}、R^{26}及びR^{27}は、各々独立して、
ハロゲン；
水素；
C_{1-30}ヒドロカルビル基（このヒドロカルビル基は、非置換であるか、又はハロゲン原子、C_{1-20}アルキル基、C_{1-20}アルコキシ基、C_{7-20}アルキルアリール基、C_{7-20}アリールアルキル基、C_{6-20}アリール基、C_{6-20}アリールオキシ基、C_{7-20}アルキルアリールオキシ基、及びC_{7-20}アリールアルキルオキシ基からなる群から選択される１つ以上の置換基によってさらに置換されている）；
ヘテロ原子含有C_{1-30}ヒドロカルビル基（このヘテロ原子含有ヒドロカルビル基は、非置換であるか、又はハロゲン原子、C_{1-20}アルキル基、C_{1-20}アルコキシ基、C_{7-20}アルキルアリール基、C_{7-20}アリールアルキル基、C_{6-20}アリール基、C_{6-20}アリールオキシ基、C_{7-20}アルキルアリールオキシ基、及びC_{7-20}アリールアルキルオキシ基からなる群から選択される１つ以上の置換基によってさらに置換されている）；
オキシ基、－ＯＲ’；
アミド基、－ＮＲ’$_2$；
ホスフィド基、－ＰＲ’$_2$；
チオラート基、－ＳＲ’；
式－Ｓｉ（R^a）$_3$のシリル基；
式－Ｇｅ（R^a）$_3$のゲルマニル基；
からなる群から選択され；
ここで、R^7、R^8、R^9、R^{10}、R^{19}、R^{20}、R^{21}、R^{22}、R^{24}、R^{25}、R^{26}及びR^{27}の２つの隣接する基は、任意に結合して環状ヒドロカルビル基又は環状ヘテロ原子含有ヒドロカルビル基を形成してもよく、環状ヒドロカルビル基又は環状ヘテロ原子含有ヒドロカルビル基は、非置換であるか、又はハロゲン原子、C_{1-20}アルキル基、C_{1-20}アルコキシ基、C_{7-20}アルキルアリール基、C_{7-20}アリールアルキル基、C_{6-20}アリール基、C_{6-20}アリールオキシ基、C_{7-20}アルキルアリールオキシ基、C_{7-20}アリールアルキルオキシ基、式－ＮＲ’$_2$のアミド基、式－ＰＲ’$_2$のホスフィド基、式－ＳＲ’のチオラート基、式－Ｓｉ（R^a）$_3$のシリル基、及び式－Ｇｅ（R^a）$_3$のゲルマニル基からなる群から選択される１つ以上の置換基によってさらに置換されており；
ここで、各Ｒ’は、独立して、水素、C_{1-20}アルキル基、及びC_{6-20}アリール基からなる群から選択され；
ここで、各R^aは、独立して、水素、C_{1-8}アルキル基、C_{1-8}アルコキシ基、C_{6-20}アリールオキシ基及びC_{6-20}アリール基からなる群から選択され；R^b、R^c、R^dは、各々独立して、C_{1-20}アルキル基であり；
X^2は、水素、又は式－Ｓｉ（R^e）$_3$のシリル基であり、ここで、各R^eは、独立して、水素、C_{1-8}アルキル基、C_{1-8}アルコキシ基、C_{6-20}アリールオキシ基、及びC_{6-20}アリール基からなる群から選択される。
【００５２】
一実施形態は、有機金属錯体を作製するプロセスであって、当該プロセスは、式Ｉ－Ｌ－Ｈ：

【化３８】



で表される化合物を、式ＭＸ＊$_4$を有する第４族遷移金属化合物と反応させることを含み、

式中、

Ｍは、Ｔｉ、Ｚｒ又はＨｆであり；

Ｒ^{1}及びＲ^{2}は、各々独立して、水素及びＲ^{X}からなる群から選択されるか；又はＲ^{1}及びＲ^{2}は、それらが結合しているＰ原子と一緒になって、非置換であるか、又はハロゲン原子、Ｃ$_{1-20}$アルキル基、Ｃ$_{1-20}$アルコキシ基、Ｃ$_{7-20}$アルキルアリール基、Ｃ$_{7-20}$アリールアルキル基、Ｃ$_{6-20}$アリール基、Ｃ$_{6-20}$アリールオキシ基、Ｃ$_{7-20}$アルキルアリールオキシ基、及びＣ$_{7-20}$アリールアルキルオキシ基からなる群から選択される１つ以上の置換基によってさらに置換されている３－１０員複素環式基を形成し；

各Ｒ^{X}は、独立して、ハロゲン原子；Ｃ$_{1-30}$ヒドロカルビル基（このヒドロカルビル基は、非置換であるか、又は１つ以上のハロゲン原子、Ｃ$_{1-20}$アルキル基、Ｃ$_{1-20}$アルコキシ基、Ｃ$_{7-20}$アルキルアリール基、Ｃ$_{7-20}$アリールアルキル基、Ｃ$_{6-20}$アリール基、Ｃ$_{6-20}$アリールオキシ基、Ｃ$_{7-20}$アルキルアリールオキシ基、及び／又はＣ$_{7-20}$アリールアルキルオキシ基によってさらに置換されている）；式－ＮＲ’$_2$のアミド基；式－Ｓｉ（Ｒ^a）$_3$のシリル基；式－Ｇｅ（Ｒ^a）$_3$のゲルマニル基；及び式Ｎ＝Ｐ（Ｒ^b）（Ｒ^c）（Ｒ^d）のホスフィンイミン基からなる群から選択され；ここで、各Ｒ’は、独立して、水素、Ｃ$_{1-20}$アルキル基、及びＣ$_{6-20}$アリール基からなる群から選択され；ここで、各Ｒ^{a}は、独立して、水素、Ｃ$_{1-8}$アルキル基、Ｃ$_{1-8}$アルコキシ基、Ｃ$_{6-20}$アリールオキシ基及びＣ$_{6-20}$アリール基からなる群から選択され、Ｒ^b、Ｒ^c、Ｒ^{d}は、各々独立して、Ｃ$_{1-20}$アルキル基であり；

Ｘ^{2}は、式－Ｓｉ（Ｒ^e）$_3$のシリル基であり、ここで、各Ｒ^{e}は、独立して、水素、Ｃ$_{1-8}$アルキル基、Ｃ$_{1-8}$アルコキシ基、Ｃ$_{6-20}$アリールオキシ基、及びＣ$_{6-20}$アリール基からなる群から選択され；

Ｃｙは、シクロペンタジエニル型部分であり、Ｌ及びＨに共有結合しており；

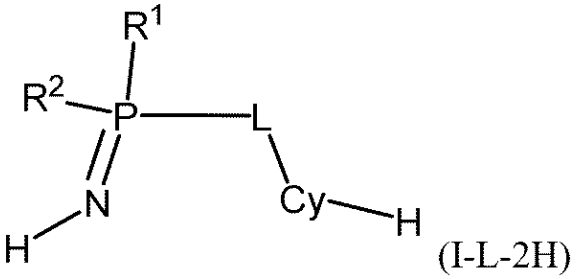
Ｌは、ＰとＣｙを連結する原子の連続鎖を含む架橋基であり、連続鎖は２個又は３個の原子を含み；

各Ｘ＊は、独立して、ハロゲン、水素、式－ＮＲ$^E_2$のアミド基、Ｃ$_{1-20}$アルキル基、Ｃ$_{1-20}$アルコキシ基、Ｃ$_{7-20}$アルキルアリール基、Ｃ$_{7-20}$アリールアルキル基、Ｃ$_{6-20}$アリール基、Ｃ$_{6-20}$アリールオキシド基、Ｃ$_{7-20}$アルキルアリールオキシ基、及びＣ$_{7-20}$アリールアルキルオキシ基からなる群から選択され；ここで、各Ｒ^{E}は、独立して、水素、Ｃ$_{1-20}$アルキル基、及びＣ$_{6-20}$アリール基からなる群から選択される。

【００５３】

本開示の一実施形態は、有機金属錯体を作製するプロセスであって、当該プロセスは、式Ｉ－Ｌ－２Ｈ：

【化３９】



(I-L-2H)

で表される化合物を塩基と反応させ、次いで、式ＭＸ＊$_4$を有する第４族遷移金属化合物と反応させることを含み、

式中、

Ｍは、Ｔｉ、Ｚｒ又はＨｆであり；

Ｒ^{1}及びＲ^{2}は、各々独立して、水素及びＲ^{X}からなる群から選択されるか；又はＲ^{1}及びＲ^{2}は、それらが結合しているＰ原子と一緒になって、非置換であるか、又はハロゲン原子、Ｃ$_{1-20}$アルキル基、Ｃ$_{1-20}$アルコキシ基、Ｃ$_{7-20}$アルキルアリール基、Ｃ$_{7-20}$アリールアルキル基、Ｃ$_{6-20}$アリール基、Ｃ$_{6-20}$アリールオキシ基、Ｃ$_{7-20}$アルキルアリールオキシ基、及びＣ$_{7-20}$アリールアルキルオキシ基からなる群から選択される１つ以上の置換基によってさらに置換されている３－１０員複素環式基を形成し；

各Ｒ^{X}は、独立して、ハロゲン原子；Ｃ$_{1-30}$ヒドロカルビル基（このヒドロカルビル基は、非置換であるか、又は１つ以上のハロゲン原子、Ｃ$_{1-20}$アルキル基、Ｃ$_{1-20}$アルコキシ基、Ｃ$_{7-20}$アルキルアリール基、Ｃ$_{7-20}$アリールアルキル基、Ｃ$_{6-20}$アリール基、Ｃ$_{6-20}$アリールオキシ基、Ｃ$_{7-20}$アルキルアリールオキシ基、及び／又はＣ$_{7-20}$アリールアルキルオキシ基によってさらに置換されている）；式－ＮＲ’$_2$のアミド基；式－Ｓｉ（Ｒ^a）$_3$のシリル基；式－Ｇｅ（Ｒ^a）$_3$のゲルマニル基；及び式Ｎ＝Ｐ（Ｒ^b）（Ｒ^c）（Ｒ^d）のホスフィンイミン基からなる群から選択され；ここで、各Ｒ’は、独立して、水素、Ｃ$_{1-20}$アルキル基、及びＣ$_{6-20}$アリール基からなる群から選択され；ここで、各Ｒ^{a}は、独立して、水素、Ｃ$_{1-8}$アルキル基、Ｃ$_{1-8}$アルコキシ基、Ｃ$_{6-20}$アリールオキシ基及びＣ$_{6-20}$アリール基からなる群から選択され、Ｒ^b、Ｒ^c、Ｒ^{d}は、各々独立して、Ｃ$_{1-20}$アルキル基であり；

Ｃｙは、シクロペンタジエニル型部分であり、Ｌ及びＨに共有結合しており；

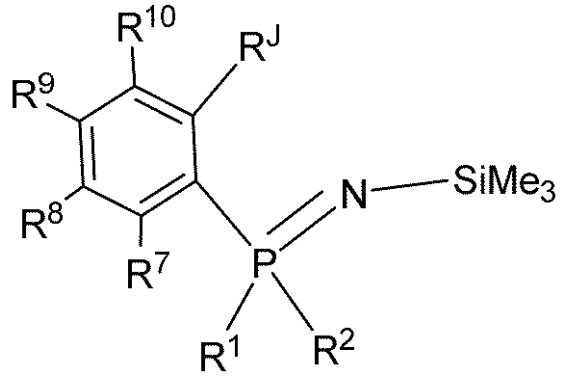
Ｌは、ＰとＣｙを連結する原子の連続鎖を含む架橋基であり、連続鎖は２個又は３個の原子を含み；

各Ｘ＊は、独立して、ハロゲン、水素、式－ＮＲ$^E_2$のアミド基、Ｃ$_{1-20}$アルキル基、Ｃ$_{1-20}$アルコキシ基、Ｃ$_{7-20}$アルキルアリール基、Ｃ$_{7-20}$アリールアルキル基、Ｃ$_{6-20}$アリール基、Ｃ$_{6-20}$アリールオキシド基、Ｃ$_{7-20}$アルキルアリールオキシ基、及びＣ$_{7-20}$アリールアルキルオキシ基からなる群から選択され；ここで、各Ｒ^{E}は、独立して、水素、Ｃ$_{1-20}$アルキル基、及びＣ$_{6-20}$アリール基からなる群から選択される。

【００５４】

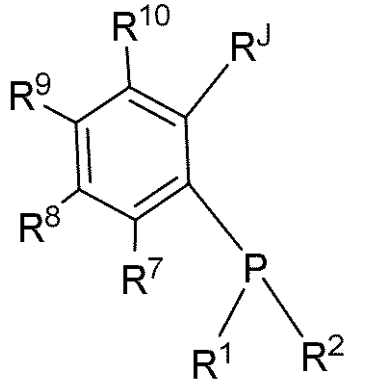
本開示の一実施形態は、式Ｉ－Ｐ－ＴＭＳ：

【化４０】



(I-P-TMS)

で表される化合物の作製方法であって、
当該方法は、式Ｉ－Ｐ：
【化４１】



(I-P)

で表されるホスフィン化合物を、ヘキサクロロエタンCl_3C-CCl_3；及びヘキサメチルジシラザン［$(CH_3)_3Si]_2NH$と組み合わせることを含み、
式中、R^Jは、
ヒドロカルビル基（このヒドロカルビル基は、非置換であるか、又はハロゲン原子、C_{1-20}アルキル基、C_{1-20}アルコキシ基、C_{7-20}アルキルアリール基、C_{7-20}アリールアルキル基、C_{6-20}アリール基、C_{6-20}アリールオキシ基、C_{7-20}アルキルアリールオキシ基、C_{7-20}アリールアルキルオキシ基、式－NR'_2のアミド基、式－PR'_2のホスフィド基、式－SR'のチオラート基、式－$Si(R^a)_3$のシリル基、及び式－$Ge(R^a)_3$のゲルマニル基からなる群から選択される１つ以上の置換基によってさらに置換されている）；
ヘテロ原子含有ヒドロカルビル基（このヘテロ原子含有ヒドロカルビル基は、非置換であるか、又はハロゲン原子、C_{1-20}アルキル基、C_{1-20}アルコキシ基、C_{7-20}アルキルアリール基、C_{7-20}アリールアルキル基、C_{6-20}アリール基、C_{6-20}アリールオキシ基、C_{7-20}アルキルアリールオキシ基、C_{7-20}アリールアルキルオキシ基、式－NR'_2のアミド基、式－PR'_2のホスフィド基、式－SR'のチオラート基、式－$Si(R^a)_3$のシリル基、及び式－$Ge(R^a)_3$のゲルマニル基からなる群から選択される１つ以上の置換基によってさらに置換されている）；
からなる群から選択され、
式中、R^1及びR^2は、各々独立して、C_{1-30}ヒドロカルビル基（このヒドロカルビル基は、非置換であるか、又は１つ以上のハロゲン原子、C_{1-20}アルキル基、C_1

－２０アルコキシ基、Ｃ７－２０アルキルアリール基、Ｃ７－２０アリールアルキル基、Ｃ６－２０アリール基、Ｃ６－２０アリールオキシ基、Ｃ７－２０アルキルアリールオキシ基、及び／又はＣ７－２０アリールアルキルオキシ基によってさらに置換されている）から選択され、

式中、Ｒ７、Ｒ８、Ｒ９及びＲ１０は、各々独立して、

ハロゲン；

水素；

Ｃ１－３０ヒドロカルビル基（このヒドロカルビル基は、非置換であるか、又はハロゲン原子、Ｃ１－２０アルキル基、Ｃ１－２０アルコキシ基、Ｃ７－２０アルキルアリール基、Ｃ７－２０アリールアルキル基、Ｃ６－２０アリール基、Ｃ６－２０アリールオキシ基、Ｃ７－２０アルキルアリールオキシ基、及びＣ７－２０アリールアルキルオキシ基からなる群から選択される１つ以上の置換基によってさらに置換されている）；

ヘテロ原子含有Ｃ１－３０ヒドロカルビル基（このヘテロ原子含有ヒドロカルビル基は、非置換であるか、又はハロゲン原子、Ｃ１－２０アルキル基、Ｃ１－２０アルコキシ基、Ｃ７－２０アルキルアリール基、Ｃ７－２０アリールアルキル基、Ｃ６－２０アリール基、Ｃ６－２０アリールオキシ基、Ｃ７－２０アルキルアリールオキシ基、及びＣ７－２０アリールアルキルオキシ基からなる群から選択される１つ以上の置換基によってさらに置換されている）；

オキシ基、－ＯＲ’；

アミド基、－ＮＲ’$_2$；

ホスフィド基、－ＰＲ’$_2$；

チオラート基、－ＳＲ’；

式－Ｓｉ（Ｒ^a）$_3$のシリル基；

式－Ｇｅ（Ｒ^a）$_3$のゲルマニル基；

からなる群から選択され；

ここで、Ｒ７、Ｒ８、Ｒ９及びＲ１０の２つの隣接する基は、任意に結合して環状ヒドロカルビル基又は環状ヘテロ原子含有ヒドロカルビル基を形成してもよく、環状ヒドロカルビル基又は環状ヘテロ原子含有ヒドロカルビル基は、非置換であるか、又はハロゲン原子、Ｃ１－２０アルキル基、Ｃ１－２０アルコキシ基、Ｃ７－２０アルキルアリール基、Ｃ７－２０アリールアルキル基、Ｃ６－２０アリール基、Ｃ６－２０アリールオキシ基、Ｃ７－２０アルキルアリールオキシ基、Ｃ７－２０アリールアルキルオキシ基、アミド基－ＮＲ’$_2$、ホスフィド基－ＰＲ’$_2$、チオラート基－ＳＲ’、式－Ｓｉ（Ｒ^a）$_3$のシリル基、及び式－Ｇｅ（Ｒ^a）$_3$のゲルマニル基からなる群から選択される１つ以上の置換基によってさらに置換されており；

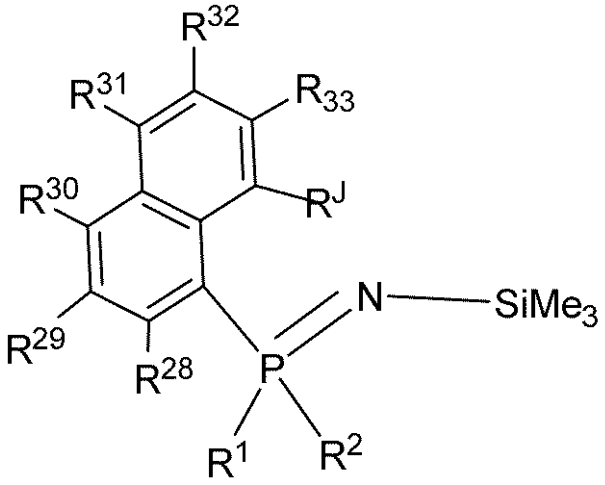
ここで、各Ｒ’は、独立して、水素、Ｃ１－２０アルキル基、及びＣ６－２０アリール基からなる群から選択され；

ここで、各Ｒ^{a}は、独立して、水素、Ｃ１－８アルキル基、Ｃ１－８アルコキシ基、Ｃ６－２０アリールオキシ基及びＣ６－２０アリール基からなる群から選択される。

【００５５】

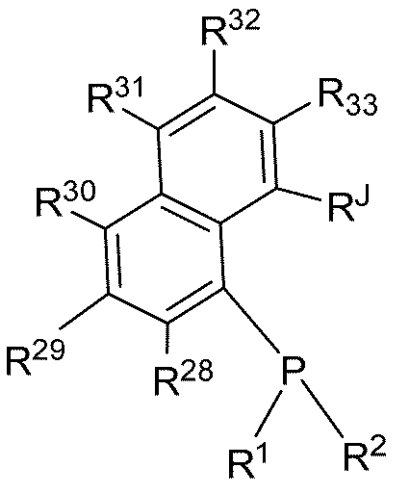
本開示の一実施形態は、式ＩＩ－Ｐ－ＴＭＳ：

【化４２】



(II-P-TMS)

で表される化合物の作製方法であって、
当該方法は、式ＩＩ－Ｐ：
【化４３】



(II-P)

で表されるホスフィン化合物を、ヘキサクロロエタンＣｌ$_3$Ｃ－ＣＣｌ$_3$；及びヘキサメチルジシラザン［（ＣＨ$_3$）$_3$Ｓｉ］$_2$ＮＨと組み合わせることを含み、

式中、Ｒ^{J}は、

ヒドロカルビル基（このヒドロカルビル基は、非置換であるか、又はハロゲン原子、Ｃ$_{1-20}$アルキル基、Ｃ$_{1-20}$アルコキシ基、Ｃ$_{7-20}$アルキルアリール基、Ｃ$_{7-20}$アリールアルキル基、Ｃ$_{6-20}$アリール基、Ｃ$_{6-20}$アリールオキシ基、Ｃ$_{7-20}$アルキルアリールオキシ基、Ｃ$_{7-20}$アリールアルキルオキシ基、式－ＮＲ’$_2$のアミド基、式－ＰＲ’$_2$のホスフィド基、式－ＳＲ’のチオラート基、式－Ｓｉ（Ｒ^a）$_3$のシリル基、及び式－Ｇｅ（Ｒ^a）$_3$のゲルマニル基からなる群から選択される１つ以上の置換基によってさらに置換されている）；

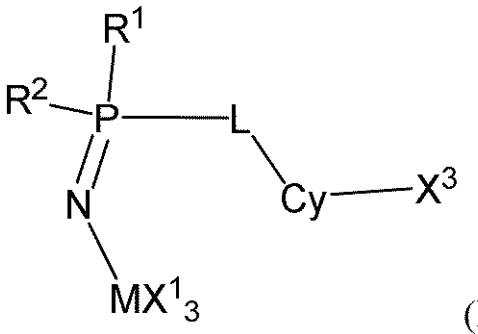
ヘテロ原子含有ヒドロカルビル基（このヘテロ原子含有ヒドロカルビル基は、非置換であるか、又はハロゲン原子、Ｃ$_{1-20}$アルキル基、Ｃ$_{1-20}$アルコキシ基、Ｃ$_{7-20}$アルキルアリール基、Ｃ$_{7-20}$アリールアルキル基、Ｃ$_{6-20}$アリール基、Ｃ$_{6-20}$アリールオキシ基、Ｃ$_{7-20}$アルキルアリールオキシ基、Ｃ$_{7-20}$アリールアルキルオ

キシ基、式－ＮＲ’$_2$のアミド基、式－ＰＲ’$_2$のホスフィド基、式－ＳＲ’のチオラート基、式－Ｓｉ（Ｒ^a）$_3$のシリル基、及び式－Ｇｅ（Ｒ^a）$_3$のゲルマニル基からなる群から選択される１つ以上の置換基によってさらに置換されている）；
からなる群から選択され、
式中、Ｒ^{1}及びＲ^{2}は、各々独立して、Ｃ$_{1-30}$ヒドロカルビル基（このヒドロカルビル基は、非置換であるか、又は１つ以上のハロゲン原子、Ｃ$_{1-20}$アルキル基、Ｃ$_{1-20}$アルコキシ基、Ｃ$_{7-20}$アルキルアリール基、Ｃ$_{7-20}$アリールアルキル基、Ｃ$_{6-20}$アリール基、Ｃ$_{6-20}$アリールオキシ基、Ｃ$_{7-20}$アルキルアリールオキシ基、及び／又はＣ$_{7-20}$アリールアルキルオキシ基によってさらに置換されている）から選択され、
式中、Ｒ^{28}、Ｒ^{29}、Ｒ^{30}、Ｒ^{31}、Ｒ^{32}及びＲ^{33}は、各々独立して、
ハロゲン；
水素；
Ｃ$_{1-30}$ヒドロカルビル基（このヒドロカルビル基は、非置換であるか、又はハロゲン原子、Ｃ$_{1-20}$アルキル基、Ｃ$_{1-20}$アルコキシ基、Ｃ$_{7-20}$アルキルアリール基、Ｃ$_{7-20}$アリールアルキル基、Ｃ$_{6-20}$アリール基、Ｃ$_{6-20}$アリールオキシ基、Ｃ$_{7-20}$アルキルアリールオキシ基、及びＣ$_{7-20}$アリールアルキルオキシ基からなる群から選択される１つ以上の置換基によってさらに置換されている）；
ヘテロ原子含有Ｃ$_{1-30}$ヒドロカルビル基（このヘテロ原子含有ヒドロカルビル基は、非置換であるか、又はハロゲン原子、Ｃ$_{1-20}$アルキル基、Ｃ$_{1-20}$アルコキシ基、Ｃ$_{7-20}$アルキルアリール基、Ｃ$_{7-20}$アリールアルキル基、Ｃ$_{6-20}$アリール基、Ｃ$_{6-20}$アリールオキシ基、Ｃ$_{7-20}$アルキルアリールオキシ基、及びＣ$_{7-20}$アリールアルキルオキシ基からなる群から選択される１つ以上の置換基によってさらに置換されている）；
オキシ基、－ＯＲ’；
アミド基、－ＮＲ’$_2$；
ホスフィド基、－ＰＲ’$_2$；
チオラート基、－ＳＲ’；
式－Ｓｉ（Ｒ^a）$_3$のシリル基；
式－Ｇｅ（Ｒ^a）$_3$のゲルマニル基；
からなる群から選択され；
ここで、Ｒ^{28}、Ｒ^{29}、Ｒ^{30}、Ｒ^{31}、Ｒ^{32}及びＲ^{33}の２つの隣接する基は、任意に結合して環状ヒドロカルビル基又は環状ヘテロ原子含有ヒドロカルビル基を形成してもよく、環状ヒドロカルビル基又は環状ヘテロ原子含有ヒドロカルビル基は、非置換であるか、又はハロゲン原子、Ｃ$_{1-20}$アルキル基、Ｃ$_{1-20}$アルコキシ基、Ｃ$_{7-20}$アルキルアリール基、Ｃ$_{7-20}$アリールアルキル基、Ｃ$_{6-20}$アリール基、Ｃ$_{6-20}$アリールオキシ基、Ｃ$_{7-20}$アルキルアリールオキシ基、Ｃ$_{7-20}$アリールアルキルオキシ基、アミド基－ＮＲ’$_2$、ホスフィド基－ＰＲ’$_2$、チオラート基－ＳＲ’、式－Ｓｉ（Ｒ^a）$_3$のシリル基、及び式－Ｇｅ（Ｒ^a）$_3$のゲルマニル基からなる群から選択される１つ以上の置換基によってさらに置換されており；
ここで、各Ｒ’は、独立して、水素、Ｃ$_{1-20}$アルキル基、及びＣ$_{6-20}$アリール基からなる群から選択され；
ここで、各Ｒ^{a}は、独立して、水素、Ｃ$_{1-8}$アルキル基、Ｃ$_{1-8}$アルコキシ基、Ｃ$_{6-20}$アリールオキシ基及びＣ$_{6-20}$アリール基からなる群から選択される。

【００５６】

本開示の一実施形態は、有機金属錯体であって、式Ｉ－Ｍ：

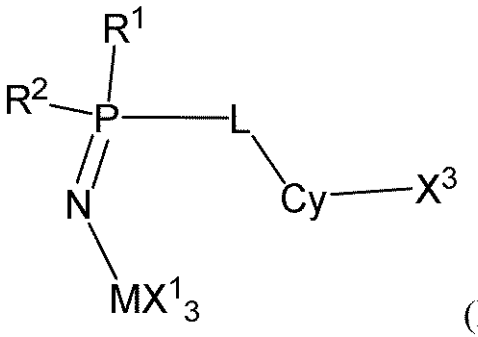
【化４４】



(I-M)

で表され、
式中、
Ｍは、Ｔｉ、Ｚｒ又はＨｆであり；
R^1及びR^2は、各々独立して、水素及びR^Xからなる群から選択されるか；又はR^1及びR^2は、それらが結合しているＰ原子と一緒になって、非置換であるか、又はハロゲン原子、C_{1-20}アルキル基、C_{1-20}アルコキシ基、C_{7-20}アルキルアリール基、C_{7-20}アリールアルキル基、C_{6-20}アリール基、C_{6-20}アリールオキシ基、C_{7-20}アルキルアリールオキシ基、及びC_{7-20}アリールアルキルオキシ基からなる群から選択される１つ以上の置換基によってさらに置換されている３－１０員複素環式基を形成し；
各R^Xは、独立して、ハロゲン原子；C_{1-30}ヒドロカルビル基（このヒドロカルビル基は、非置換であるか、又は１つ以上のハロゲン原子、C_{1-20}アルキル基、C_{1-20}アルコキシ基、C_{7-20}アルキルアリール基、C_{7-20}アリールアルキル基、C_{6-20}アリール基、C_{6-20}アリールオキシ基、C_{7-20}アルキルアリールオキシ基、及び／又はC_{7-20}アリールアルキルオキシ基によってさらに置換されている）；式－NR'_2のアミド基；式－$Si(R^a)_3$のシリル基；式－$Ge(R^a)_3$のゲルマニル基；及び式$N=P(R^b)(R^c)(R^d)$のホスフィンイミン基からなる群から選択され；ここで、各Ｒ’は、独立して、水素、C_{1-20}アルキル基、及びC_{6-20}アリール基からなる群から選択され；ここで、各R^aは、独立して、水素、C_{1-8}アルキル基、C_{1-8}アルコキシ基、C_{6-20}アリールオキシ基及びC_{6-20}アリール基からなる群から選択され、R^b、R^c、R^dは、各々独立して、C_{1-20}アルキル基であり；
Ｃｙは、シクロペンタジエニル型部分であり、Ｌ及びX^3に共有結合しており；
各X^1は、活性化可能な配位子であり；
X^3は、水素、又は式－Ｓｉ（R^e）$_3$のシリル基、若しくは式Ｓｎ（R^e）$_3$のスタンニル基であり；
ここで、各R^eは、独立して、水素、C_{1-8}アルキル基、C_{1-8}アルコキシ基、C_{6-20}アリールオキシ基、及びC_{6-20}アリール基からなる群から選択され；
Ｌは、ＰとＣｙを連結する原子の連続鎖を含む架橋基であり、連続鎖は２個又は３個の原子を含む、
有機金属錯体。
【００５７】
本開示の一実施形態は、オレフィン重合触媒系であって、
ｉ）有機金属錯体であって、式Ｉ－Ｍ：

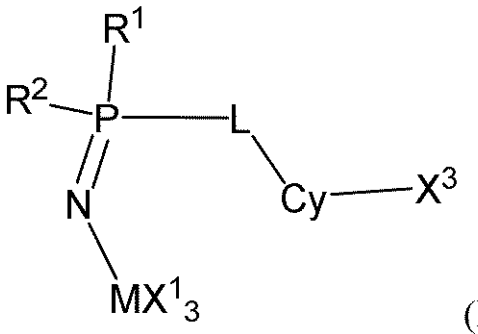
【化４５】



(I-M)

で表され、
式中、
Ｍは、Ｔｉ、Ｚｒ又はＨｆであり；
R^1及びR^2は、各々独立して、水素及びR^Xからなる群から選択されるか；又はR^1及びR^2は、それらが結合しているＰ原子と一緒になって、非置換であるか、又はハロゲン原子、C_{1-20}アルキル基、C_{1-20}アルコキシ基、C_{7-20}アルキルアリール基、C_{7-20}アリールアルキル基、C_{6-20}アリール基、C_{6-20}アリールオキシ基、C_{7-20}アルキルアリールオキシ基、及びC_{7-20}アリールアルキルオキシ基からなる群から選択される１つ以上の置換基によってさらに置換されている３－１０員複素環式基を形成し；
各R^Xは、独立して、ハロゲン原子；C_{1-30}ヒドロカルビル基（このヒドロカルビル基は、非置換であるか、又は１つ以上のハロゲン原子、C_{1-20}アルキル基、C_{1-20}アルコキシ基、C_{7-20}アルキルアリール基、C_{7-20}アリールアルキル基、C_{6-20}アリール基、C_{6-20}アリールオキシ基、C_{7-20}アルキルアリールオキシ基、及び／又はC_{7-20}アリールアルキルオキシ基によってさらに置換されている）；式－ＮＲ’$_2$のアミド基；式－Ｓｉ（R^a）$_3$のシリル基；式－Ｇｅ（R^a）$_3$のゲルマニル基；及び式Ｎ＝Ｐ（R^b）（R^c）（R^d）のホスフィンイミン基からなる群から選択され；ここで、各Ｒ’は、独立して、水素、C_{1-20}アルキル基、及びC_{6-20}アリール基からなる群から選択され；ここで、各R^aは、独立して、水素、C_{1-8}アルキル基、C_{1-8}アルコキシ基、C_{6-20}アリールオキシ基及びC_{6-20}アリール基からなる群から選択され、R^b、R^c、R^dは、各々独立して、C_{1-20}アルキル基であり；
Ｃｙは、シクロペンタジエニル型部分であり、Ｌ及びX^3に共有結合しており；
各X^1は、活性化可能な配位子であり；
X^3は、水素、又は式－Ｓｉ（R^e）$_3$のシリル基、若しくは式Ｓｎ（R^e）$_3$のスタンニル基であり；
ここで、各R^eは、独立して、水素、C_{1-8}アルキル基、C_{1-8}アルコキシ基、C_{6-20}アリールオキシ基、及びC_{6-20}アリール基からなる群から選択され；
Ｌは、ＰとＣｙを連結する原子の連続鎖を含む架橋基であり、連続鎖は２個又は３個の原子を含む、有機金属錯体と、
ｉｉ）触媒活性剤と、
を含む、オレフィン重合触媒系。
【００５８】
本開示の一実施形態は、エチレンを、任意選択で１つ以上のC_{3-12}アルファ－オレフィンと、オレフィン重合触媒系の存在下で重合することを含む、重合プロセスであって、
オレフィン重合触媒系が、
ｉ）有機金属錯体であって、式Ｉ－Ｍ：

【化４６】



(I-M)

で表され、
式中、
Ｍは、Ｔｉ、Ｚｒ又はＨｆであり；
R^1及びR^2は、各々独立して、水素及びR^Xからなる群から選択されるか；又はR^1及びR^2は、それらが結合しているＰ原子と一緒になって、非置換であるか、又はハロゲン原子、C_{1-20}アルキル基、C_{1-20}アルコキシ基、C_{7-20}アルキルアリール基、C_{7-20}アリールアルキル基、C_{6-20}アリール基、C_{6-20}アリールオキシ基、C_{7-20}アルキルアリールオキシ基、及びC_{7-20}アリールアルキルオキシ基からなる群から選択される１つ以上の置換基によってさらに置換されている３－１０員複素環式基を形成し；
各R^Xは、独立して、ハロゲン原子；C_{1-30}ヒドロカルビル基（このヒドロカルビル基は、非置換であるか、又は１つ以上のハロゲン原子、C_{1-20}アルキル基、C_{1-20}アルコキシ基、C_{7-20}アルキルアリール基、C_{7-20}アリールアルキル基、C_{6-20}アリール基、C_{6-20}アリールオキシ基、C_{7-20}アルキルアリールオキシ基、及び／又はC_{7-20}アリールアルキルオキシ基によってさらに置換されている）；式－ＮＲ’$_2$のアミド基；式－Ｓｉ（R^a）$_3$のシリル基；式－Ｇｅ（R^a）$_3$のゲルマニル基；及び式Ｎ＝Ｐ（R^b）（R^c）（R^d）のホスフィンイミン基からなる群から選択され；ここで、各Ｒ’は、独立して、水素、C_{1-20}アルキル基、及びC_{6-20}アリール基からなる群から選択され；ここで、各R^aは、独立して、水素、C_{1-8}アルキル基、C_{1-8}アルコキシ基、C_{6-20}アリールオキシ基及びC_{6-20}アリール基からなる群から選択され、R^b、R^c、R^dは、各々独立して、C_{1-20}アルキル基であり；
Ｃｙは、シクロペンタジエニル型部分であり、Ｌ及びX^3に共有結合しており；
各X^1は、活性化可能な配位子であり；
X^3は、水素、又は式－Ｓｉ（R^e）$_3$のシリル基、若しくは式Ｓｎ（R^e）$_3$のスタンニル基であり；
ここで、各R^eは、独立して、水素、C_{1-8}アルキル基、C_{1-8}アルコキシ基、C_{6-20}アリールオキシ基、及びC_{6-20}アリール基からなる群から選択され；
Ｌは、ＰとＣｙを連結する原子の連続鎖を含む架橋基であり、連続鎖は２個又は３個の原子を含む、有機金属錯体と、
ｉｉ）触媒活性剤と、
を含む、重合プロセス。
【図面の簡単な説明】
【００５９】
【図１】図１は、本開示の有機金属錯体である、錯体１のＯａｋ　Ｒｉｄｇｅ　Ｔｈｅｒｍａｌ　Ｅｌｌｉｐｓｏｉｄ　Ｐｌｏｔ（ＯＲＴＥＰ）を示す。ＯＲＴＥＰは、Ｘ線回折によって決定された本開示の有機金属錯体の分子構造を表す。
【図２】図２は、本開示の有機金属錯体である、錯体２のＯａｋ　Ｒｉｄｇｅ　Ｔｈｅｒｍａｌ　Ｅｌｌｉｐｓｏｉｄ　Ｐｌｏｔ（ＯＲＴＥＰ）を示す。ＯＲＴＥＰは、Ｘ線回折

によって決定された本開示の有機金属錯体の分子構造を表す。
【図３】図３は、本開示の有機金属錯体である、錯体３のＯａｋ　Ｒｉｄｇｅ　Ｔｈｅｒｍａｌ　Ｅｌｌｉｐｓｏｉｄ　Ｐｌｏｔ（ＯＲＴＥＰ）を示す。ＯＲＴＥＰは、Ｘ線回折によって決定された本開示の有機金属錯体の分子構造を表す。
【図４】図４は、本開示の有機金属錯体である、錯体１００Ａｋ　Ｒｉｄｇｅ　Ｔｈｅｒｍａｌ　Ｅｌｌｉｐｓｏｉｄ　Ｐｌｏｔ（ＯＲＴＥＰ）を示す。ＯＲＴＥＰは、Ｘ線回折によって決定された本開示の有機金属錯体の分子構造を表す。
【発明を実施するための形態】
【００６０】
本明細書で使用される場合、「モノマー」という用語は、化学的に反応し、それ自体又は他のモノマーと化学的に結合してポリマーを形成し得る小分子を指す。
【００６１】
本明細書で使用される場合、「α－オレフィン」又は「アルファ－オレフィン」という用語は、鎖の一端に二重結合を有する３～２０個の炭素原子を含む直鎖状炭化水素鎖を有するモノマーを説明するために使用され、同等の用語は「直鎖状α－オレフィン」である。　本明細書で使用される場合、「ポリエチレン」又は「エチレンポリマー」という用語は、エチレンポリマーを作製するために使用される特定の触媒又は特定のプロセスにかかわらず、エチレンモノマー及び任意選択で１つ以上の追加のモノマーから生成された高分子を指す。ポリエチレンの分野では、１つ以上の追加のモノマーは「コモノマー」と呼ばれ、α－オレフィンを含むことが多い。「ホモポリマー」という用語は、一般に、１種類のモノマーのみを含むポリマーを指す。「エチレンホモポリマー」は、重合性モノマーとしてエチレンのみを使用して作製される。「コポリマー」という用語は、２種類以上のモノマーを含むポリマーを指す。「エチレンコポリマー」は、エチレンと１種類以上の他の重合性モノマーとを使用して作製される。一般的なポリエチレンには、高密度ポリエチレン（ＨＤＰＥ）、中密度ポリエチレン（ＭＤＰＥ）、直鎖状低密度ポリエチレン（ＬＬＤＰＥ）、超低密度ポリエチレン（ＶＬＤＰＥ）又は極低密度ポリエチレン（ＵＬＤＰＥ）、プラストマー及びエラストマーが含まれる。ポリエチレンという用語には、エチレンに加えて、２つ以上のコモノマー含むポリエチレンターポリマーも含まれる。ポリエチレンという用語には、上記のポリエチレンの組合せ又はブレンドも含まれる。
【００６２】
本明細書で使用される場合、「ヒドロカルビル」、「ヒドロカルビルラジカル」又は「ヒドロカルビル基」という用語は、直鎖状、分岐状、環状、非環状、脂肪族、オレフィン（すなわち、二重結合不飽和を有する）、アセチレン（すなわち、三重結合不飽和を有する）、及び少なくとも１つの水素原子が不足している水素及び炭素を含むアリール（芳香族）基を指す。したがって、当業者であれば、「ヒドロカルビル基」が、非限定的な例として、第一級、第二級（例えば、シクロアルキル基など）、又は第三級アルキル基であってもよいアルキル基、アルケニル基、アルキニル基、及びアリール基を含むことを理解するであろう。「環状ヒドロカルビル基」という用語は、「ヒドロカルビル基」という用語のサブセットであり、少なくとも１つの環状部分を含み、その中に１つ以上の芳香族環、及び／又は１つ以上の非芳香族環が存在する可能性があるヒドロカルビル基を具体的に意味する。「非環状ヒドロカルビル基」という用語は、「ヒドロカルビル基」という用語のサブセットであり、その中に芳香族環構造又は非芳香族環構造などの環状部分を含まないヒドロカルビル基を具体的に意味する。
【００６３】
本明細書で使用される場合、「ヘテロ原子」という用語は、炭素に結合できる炭素及び水素以外の任意の原子を含む。「ヘテロ原子含有」又は「ヘテロ原子含有ヒドロカルビル基」という用語は、水素原子を含まない１つ以上の非炭素原子がヒドロカルビル基に存在することを意味する。ヘテロ原子含有ヒドロカルビル基に存在し得る非炭素原子（及び非水素原子）の非限定的な例としては、Ｎ、Ｏ、Ｓ、Ｐ、Ｓｉ、並びに例えばＦ及び／又はＢｒなどのハロゲン化物、並びにＳｎなどの金属が挙げられる。ヘテロ原子含有ヒドロカ

ルビル基の非限定的な例としては、例えばアリールオキシ基、アルコキシ基、アルキルアリールオキシ基、アリールアルキルオキシ基、シリル基、及びシロキシ基が挙げられる。ヘテロ原子含有ヒドロカルビル基のさらなる非限定的な例としては、一般に、例えばイミン、アミン部分、酸化物部分、ホスフィン部分、エーテル、ケトン、複素環式化合物、オキサゾリン、チオエーテルなどが挙げられる。「環状ヘテロ原子含有ヒドロカルビル基」という用語は、「ヘテロ原子含有ヒドロカルビル基」という用語のサブセットであり、少なくとも１つの環状部分を含み、その中に１つ以上の芳香族環、及び／又は１つ以上の非芳香族環が存在する可能性があるヘテロ原子含有ヒドロカルビル基を具体的に意味する。「非環状ヘテロ原子含有ヒドロカルビル基」という用語は、「ヘテロ原子含有ヒドロカルビル基」という用語のサブセットであり、その中に芳香族環構造又は非芳香族環構造などの環状部分を含まないヘテロ原子含有ヒドロカルビル基を具体的に意味する。

【００６４】

本開示の一実施形態では、ヘテロ原子含有ヒドロカルビル基は、ホウ素、アルミニウム、シリコン、ゲルマニウム、窒素、リン、酸素及び硫黄からなる群から選択される１～３個の原子を含むヒドロカルビル基である。

【００６５】

本開示の一実施形態では、環状ヘテロ原子含有ヒドロカルビル基は、ホウ素、アルミニウム、シリコン、ゲルマニウム、窒素、リン、酸素及び硫黄からなる群から選択される１～３個の原子を含む環状ヒドロカルビル基である。

【００６６】

「複素環式基」という用語は、「環状ヘテロ原子含有ヒドロカルビル基」という用語のサブセットであり、具体的には、環構造内に、例えばホウ素、アルミニウム、シリコン、ゲルマニウム、窒素、リン、酸素、及び硫黄からなる群から選択される少なくとも１つのヘテロ原子をさらに含む炭素骨格を有する環系を指す。

【００６７】

本明細書で使用される場合、「アルキルラジカル」又は「アルキル基」には、１つの水素基が不足している直鎖状、分岐状及び環状のパラフィン基が含まれ、非限定的な例としては、メチル（－ＣＨ$_3$）基及びエチル（－ＣＨ$_2$ＣＨ$_3$）基が挙げられる。「アルケニルラジカル」又は「アルケニル基」という用語は、１つの水素基が不足している少なくとも１つの炭素－炭素二重結合を含む直鎖状、分岐状及び環状の炭化水素を指す。「アルキニルラジカル」又は「アルキニル基」という用語は、１つの水素基が不足している少なくとも１つの炭素－炭素三重結合を含む直鎖状、分岐状及び環状の炭化水素を指す。

【００６８】

本明細書で使用される場合、「アリールラジカル」又は「アリール基」という用語は、分子が芳香族環構造を有するフェニル、ナフチル、ピリジル、及びその他の基を含み、非限定的な例としては、ナフタレン、フェナントレン、及びアントラセンが挙げられる。

【００６９】

「アリールアルキル」は、「アルキル基」のサブセットであり、アリール基がペンダントとなっているアルキル基であり、非限定的な例としては、ベンジル、フェネチル、及びトリルメチルが挙げられる。「アルキルアリール」基は、「アリール基」のサブセットであり、１つ以上のアルキル基がペンダントとなっているアリール基であり、非限定的な例としては、トリル、キシリル、メシチル、クミルが挙げられる。

【００７０】

「アルコキシ基」は、アルキル基がペンダントとなっているオキシ基であり、例えば、メトキシ基、エトキシ基、イソプロポキシ基などが挙げられる。「アリールアルキルオキシ基」は、アリールアルキル基がペンダントとなっているオキシ基である（明確にするために、アルキル部分はオキシ部分に結合しており、アリール基はアルキル部分に結合している）。

【００７１】

「アリールオキシ」基は、アリール基がペンダントとなっているオキシ基であり、例え

ば、フェノキシ基などが挙げられる。「アルキルアリールオキシ基」とは、アルキルアリール基がペンダントとなっているオキシ基である（明確にするために、アリール部分はオキシ部分に結合しており、アルキル基はアリール部分に結合している）。

【００７２】

本開示では、ヒドロカルビル基又はヘテロ原子含有ヒドロカルビル基（又はこれらの基のサブセット、例えばアルキル基、アルコキシ基、アリール基、アリールオキシ基など）は、非置換又は置換であるとさらに具体的に定義され得る。本明細書で使用される「非置換」という用語は、非置換という用語によって参照される分子基に水素基が結合していることを意味する。「置換」という用語は、この用語によって参照される基が、その基内の任意の位置で１つ以上の水素基と置き換わった１つ以上の部分を有することを意味する。部分の非限定的な例としては、ハロゲン基（Ｆ、Ｃｌ、Ｂｒ）、アルキル基、アルキルアリール基、アリールアルキル基、アルコキシ基、アリール基、アリールオキシ基、アミド基、シリル基又はゲルマニル基、ヒドロキシル基、カルボニル基、カルボキシル基、アミン基、ホスフィン基、フェニル基、ナフチル基、C_1～C_{10}アルキル基、C_2～C_{10}アルケニル基、及びそれらの組合せが挙げられる。

【００７３】

オキシ基は、当業者によく知られており、式－ＯＲ’で表すことができ、式中、各Ｒ’基は、水素又はヒドロカルビル基又はヘテロ原子含有ヒドロカルビル基である。オキシ基中のＲ’基は、置換されていても非置換であってもよい（ヒドロカルビル基又はヘテロ原子含有ヒドロカルビル基の場合）。

【００７４】

アミド基は、当業者によく知られており、式－ＮＲ’$_2$で表すことができ、式中、各Ｒ’基は、水素又はヒドロカルビル基又はヘテロ原子含有ヒドロカルビル基である。アミド基中の各Ｒ’基は、置換されていても非置換であってもよい（ヒドロカルビル基又はヘテロ原子含有ヒドロカルビル基の場合）。

【００７５】

ホスフィド基は当業者によく知られており、式－ＰＲ’$_2$で表すことができ、式中、各Ｒ’基は、水素又はヒドロカルビル基又はヘテロ原子含有ヒドロカルビル基である。ホスフィド基中の各Ｒ’基は、置換されていても非置換であってもよい（ヒドロカルビル基又はヘテロ原子含有ヒドロカルビル基の場合）。

【００７６】

チオラート基は当業者によく知られており、式－ＳＲ’で表すことができ、式中、Ｒ’基は、水素又はヒドロカルビル基又はヘテロ原子含有ヒドロカルビル基である。チオラート基のＲ’基は、置換されていても非置換であってもよい（ヒドロカルビル基又はヘテロ原子含有ヒドロカルビル基の場合）。

【００７７】

本開示の実施形態では、任意のヒドロカルビル基及び／又は任意のヘテロ原子含有ヒドロカルビル基は、非置換であっても置換されていてもよい。

【００７８】

本明細書に記載の有機金属錯体は、オレフィンからポリマーを得るために、１つ以上の共触媒種又は触媒活性剤種による活性化を必要とする。したがって、活性化されていない重合触媒又は有機金属錯体は、「プレ重合触媒」と記載されることがある。

【００７９】

＜有機金属錯体（「プレ重合触媒」）＞

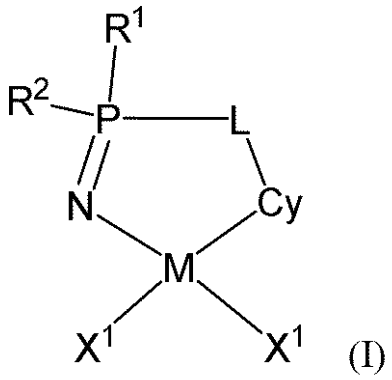
本開示で使用される有機金属錯体又はプレ重合触媒は、一般にいわゆる「シングルサイト触媒」とみなされる場合があるが、本明細書では、「シングルサイト触媒」という用語は、重合触媒を、チーグラー・ナッタ触媒やクロム系触媒などの従来のマルチサイト重合触媒とみなされる重合触媒と区別するために使用されている。当業者であれば、例えば、メタロセン触媒、拘束幾何形状の触媒、及びホスフィンイミン触媒はすべて一般に「シングルサイト触媒」とみなされるが、これらの「シングルサイト触媒」の各々は、特定の条

件下では、マルチサイト触媒の挙動とみなされるものを示すこともあることを理解するであろう。本開示で使用されるプレ重合触媒も同様であり、したがって「シングルサイト触媒」という用語は、マルチサイト挙動の側面を示す可能性のあるプレ重合触媒を排除するものではない。

【００８０】

本開示の一実施形態は、有機金属錯体であって、式Ｉ：

【化４７】



(I)

で表され、

式中、

Ｍは、Ｔｉ、Ｚｒ又はＨｆであり；

R^1及びR^2は、各々独立して、水素及びR^Xからなる群から選択されるか；又はR^1及びR^2は、それらが結合しているＰ原子と一緒になって、非置換であるか、又はハロゲン原子、C_{1-20}アルキル基、C_{1-20}アルコキシ基、C_{7-20}アルキルアリール基、C_{7-20}アリールアルキル基、C_{6-20}アリール基、C_{6-20}アリールオキシ基、C_{7-20}アルキルアリールオキシ基、及びC_{7-20}アリールアルキルオキシ基からなる群から選択される１つ以上の置換基によってさらに置換されている３－１０員複素環式基を形成し；

各R^Xは、独立して、ハロゲン原子；C_{1-30}ヒドロカルビル基（このヒドロカルビル基は、非置換であるか、又は１つ以上のハロゲン原子、C_{1-20}アルキル基、C_{1-20}アルコキシ基、C_{7-20}アルキルアリール基、C_{7-20}アリールアルキル基、C_{6-20}アリール基、C_{6-20}アリールオキシ基、C_{7-20}アルキルアリールオキシ基、及び／又はC_{7-20}アリールアルキルオキシ基によってさらに置換されている）；式－NR'_2のアミド基；式－Ｓｉ（R^a）$_3$のシリル基；式－Ｇｅ（R^a）$_3$のゲルマニル基；及び式Ｎ＝Ｐ（R^b）（R^c）（R^d）のホスフィンイミン基からなる群から選択され；ここで、各Ｒ’は、独立して、水素、C_{1-20}アルキル基、及びC_{6-20}アリール基からなる群から選択され；ここで、各R^aは、独立して、水素、C_{1-8}アルキル基、C_{1-8}アルコキシ基、C_{6-20}アリールオキシ基及びC_{6-20}アリール基からなる群から選択され、R^b、R^c、R^dは、各々独立して、C_{1-20}アルキル基であり；

各X^1は、活性化可能な配位子であり；

Ｃｙは、Ｌに共有結合し、η－結合を介してＭに配位するシクロペンタジエニル型配位子であり；

Ｌは、ＰとＣｙを連結する原子の連続鎖を含む架橋基であり、連続鎖は２個又は３個の原子を含む、有機金属錯体である。

【００８１】

「原子の連続鎖」という語句は、言及されている原子が順番に結合しており、一方の端がＰに、もう一方の端がＣｙに結合していることを意味する。

【００８２】

いくつかの実施形態では、R^1及びR^2は、各々独立して、ハロゲン原子；C_{1-30}ヒドロカルビル基（このヒドロカルビル基は、非置換であるか、又は１つ以上のハロゲン原子、C_{1-20}アルキル基、C_{1-20}アルコキシ基、C_{7-20}アルキルアリール基、C_{7-20}アリールアルキル基、C_{6-20}アリール基、C_{6-20}アリールオキシ基、C_{7-20}アルキルアリールオキシ基、及び／又はC_{7-20}アリールアルキルオキシ基によってさらに置換されている）；式－NR'_2のアミド基；式－$Si(R^a)_3$のシリル基；式－$Ge(R^a)_3$のゲルマニル基；及び式$N=P(R^b)(R^c)(R^d)$のホスフィンイミン基からなる群から選択され；ここで、各R'は、独立して、水素、C_{1-20}アルキル基、及びC_{6-20}アリール基からなる群から選択され；ここで、各R^aは、独立して、水素、C_{1-8}アルキル基、C_{1-8}アルコキシ基、C_{6-20}アリールオキシ基及びC_{6-20}アリール基からなる群から選択され、R^b、R^c、R^dは、各々独立して、C_{1-20}アルキル基である。

【００８３】

いくつかの実施形態では、R^1及びR^2は、各々独立して、ハロゲン原子；C_{1-30}ヒドロカルビル基（このヒドロカルビル基は、非置換であるか、又は１つ以上のハロゲン原子、C_{1-20}アルキル基、C_{1-20}アルコキシ基、C_{7-20}アルキルアリール基、C_{7-20}アリールアルキル基、C_{6-20}アリール基、C_{6-20}アリールオキシ基、C_{7-20}アルキルアリールオキシ基、及び／又はC_{7-20}アリールアルキルオキシ基によってさらに置換されている）からなる群から選択される。

【００８４】

いくつかの実施形態では、R^1及びR^2は、各々独立して、C_{1-30}ヒドロカルビル基であり、このヒドロカルビル基は、非置換であるか、又は１つ以上のハロゲン原子、C_{1-20}アルキル基、C_{1-20}アルコキシ基、C_{7-20}アルキルアリール基、C_{7-20}アリールアルキル基、C_{6-20}アリール基、C_{6-20}アリールオキシ基、C_{7-20}アルキルアリールオキシ基、及び／又はC_{7-20}アリールアルキルオキシ基によってさらに置換されている。

【００８５】

いくつかの実施形態では、R^1及びR^2は、各々独立して、非置換のC_{1-30}ヒドロカルビル基である。

いくつかの実施形態では、R^1及びR^2は、各々独立して、非置換のC_{1-20}ヒドロカルビル基である。

いくつかの実施形態では、R^1及びR^2は、各々独立して、非置換のC_{1-12}ヒドロカルビル基である。

いくつかの実施形態では、R^1及びR^2は、各々独立して、C_{1-20}アルキル基である。

いくつかの実施形態では、R^1及びR^2は、各々独立して、C_{1-12}アルキル基である。

いくつかの実施形態では、R^1及びR^2は、各々独立して、C_{1-9}アルキル基である。

いくつかの実施形態では、R^1及びR^2は、各々独立して、分岐状C_{3-8}アルキル基である。

いくつかの実施形態では、R^1及びR^2は、各々独立して、C_{6-20}アリール基である。

いくつかの実施形態では、R^1及びR^2は、同じである。

いくつかの実施形態では、R^1及びR^2は、各々独立して、イソプロピル、シクロヘキシル及びｔｅｒｔ－ブチルからなる群から選択される。

いくつかの実施形態では、R^1及びR^2は、各々イソプロピル基である。

いくつかの実施形態では、R^1及びR^2は、各々シクロヘキシル基である。

いくつかの実施形態では、R^1及びR^2は、各々ｔｅｒｔ－ブチル基である。

【００８６】

いくつかの実施形態では、各R'は、C_{1-8}アルキル基である。

いくつかの実施形態では、各Ｒ’は、Ｃ6－２０アリール基である。
いくつかの実施形態では、各Ｒ’は、メチル基である。
いくつかの実施形態では、各Ｒ’は、フェニル基である。
【００８７】
いくつかの実施形態では、各Ｒ^{a}は、Ｃ１－８アルキル基である。
いくつかの実施形態では、各Ｒ^{a}は、Ｃ６－２０アリール基である。
いくつかの実施形態では、各Ｒ^{a}は、メチル基である。
いくつかの実施形態では、各Ｒ^{a}は、エチル基である。
いくつかの実施形態では、各Ｒ^{a}は、フェニル基である。
【００８８】
いくつかの実施形態では、Ｒ^{b}、Ｒ^{c}、Ｒ^{d}の各々は、Ｃ１－１２アルキル基である。
いくつかの実施形態では、Ｒ^{b}、Ｒ^{c}、Ｒ^{d}の各々は、Ｃ１－９アルキル基である。
いくつかの実施形態では、Ｒ^{b}、Ｒ^{c}、Ｒ^{d}の各々は、Ｃ１－６アルキル基である。
いくつかの実施形態では、Ｒ^{b}、Ｒ^{c}、Ｒ^{d}の各々は、分岐状Ｃ３－８アルキル基である。
いくつかの実施形態では、Ｒ^{b}、Ｒ^{c}、Ｒ^{d}の各々は、イソプロピル基である。
いくつかの実施形態では、Ｒ^{b}、Ｒ^{c}、Ｒ^{d}の各々は、シクロヘキシル基である。
いくつかの実施形態では、Ｒ^{b}、Ｒ^{c}、Ｒ^{d}の各々は、ｔｅｒｔ－ブチル基である。
【００８９】
いくつかの実施形態では、Ｒ^{1}及びＲ^{2}は、それらが結合しているＰ原子と一緒になって、非置換であるか、又はハロゲン原子、Ｃ１－２０アルキル基、Ｃ１－２０アルコキシ基、Ｃ７－２０アルキルアリール基、Ｃ７－２０アリールアルキル基、Ｃ６－２０アリール基、Ｃ６－２０アリールオキシ基、Ｃ７－２０アルキルアリールオキシ基、及びＣ７－２０アリールアルキルオキシ基からなる群から選択される１つ以上の置換基によってさらに置換されている３－１０員複素環式基を形成する。
【００９０】
いくつかの実施形態では、Ｒ^{1}及びＲ^{2}は、それらが結合しているＰ原子と一緒になって、非置換であるか、又はハロゲン原子、Ｃ１－２０アルキル基、Ｃ１－２０アルコキシ基、Ｃ７－２０アルキルアリール基、Ｃ７－２０アリールアルキル基、Ｃ６－２０アリール基、Ｃ６－２０アリールオキシ基、Ｃ７－２０アルキルアリールオキシ基、及びＣ７－２０アリールアルキルオキシ基からなる群から選択される１つ以上の置換基によってさらに置換されている４－６員複素環式基を形成する。
【００９１】
いくつかの実施形態では、Ｒ^{1}及びＲ^{2}は、それらが結合しているＰ原子と一緒になって、非置換であるか、又はハロゲン原子、Ｃ１－２０アルキル基、Ｃ１－２０アルコキシ基、Ｃ７－２０アルキルアリール基、Ｃ７－２０アリールアルキル基、Ｃ６－２０アリール基、Ｃ６－２０アリールオキシ基、Ｃ７－２０アルキルアリールオキシ基、及びＣ７－２０アリールアルキルオキシ基からなる群から選択される１つ以上の置換基によってさらに置換されている５－６員複素環式基を形成する。
【００９２】
各Ｘ^{1}は、独立して、活性化可能な配位子である。各Ｘ^{1}は、同じでも異なっていてもよい。いくつかの実施形態では、各Ｘ^{1}は同じである。
【００９３】
「活性化可能な配位子」という用語は、触媒活性剤及び／又は共触媒によって活性化され、オレフィンの重合を促進することができる配位子を指す。活性化可能な配位子Ｘ^{1}は、プロトン分解反応を介して金属中心Ｍから切断されるか、又は適切な酸性又は求電子性触媒活性剤化合物（「共触媒」化合物とも呼ばれる）によって金属中心Ｍから引き抜かれる可能性があり、その例を以下に記載する。活性化可能な配位子Ｘ^{1}は、金属中心Ｍから切断又は引き抜かれる別の配位子に変換される可能性もある（例えば、ハロゲン化物はアルキル基に変換される可能性がある）。いかなる単一の理論に縛られることを望まないが

、プロトン分解反応又は引き抜き反応により、オレフィンを重合できる活性な「カチオン」金属中心が生成される。

【００９４】

いくつかの実施形態では、各X^1は、独立して、水素原子、ハロゲン原子、C_{1-10}ヒドロカルビル基、C_{1-10}アルコキシ基、C_{6-10}アリールオキシド基（前記ヒドロカルビル基、アルコキシ基、及びアリールオキシド基の各々は、非置換であるか、又はハロゲン原子、C_{1-8}アルキル基、C_{1-8}アルコキシ基、C_{6-10}アリール基若しくはアリールオキシ基によってさらに置換されていてもよい）、アミド基（非置換（すなわち、$-NH_2$）であるか、又は最大２つのC_{1-8}アルキル基で置換されている（すなわち、$-NR'_2$、ここで、各$R' = C_{1-8}$アルキル））、並びにホスフィド基（非置換（すなわち、$-PH_2$）であるか、又は最大２つのC_{1-8}アルキル基で置換されている（すなわち、$-PR'_2$、ここで、各$R' = C_{1-8}$アルキル））からなる群から選択される。

【００９５】

いくつかの実施形態では、各X^1は、独立して、ハロゲン、水素、式$-NR^E_2$のアミド基、C_{1-20}アルキル基、C_{1-20}アルコキシ基、C_{7-20}アルキルアリール基、C_{7-20}アリールアルキル基、C_{6-20}アリール基、C_{6-20}アリールオキシド基、C_{7-20}アルキルアリールオキシ基、及びC_{7-20}アリールアルキルオキシ基からなる群から選択され；ここで、各R^Eは、独立して、水素、C_{1-20}アルキル基、及びC_{6-20}アリール基からなる群から選択される。

【００９６】

いくつかの実施形態では、２つの活性化可能なX^1配位子が互いに結合して、例えば、置換又は非置換ジエン配位子（すなわち、１，３－ジエン）を形成してもよく、あるいは非局在化ヘテロ原子含有基（アセテート基など）を形成してもよい。

【００９７】

本開示の実施形態では、各X^1は、独立して、ハロゲン原子、C_{1-4}アルキル基及びベンジル基からなる群から選択される。

本開示の実施形態では、各X^1は、独立して、C_{1-6}アルキル基、C_{7-10}アリールアルキル基及びハロゲンからなる群から選択される。

いくつかの実施形態では、各X^1は、独立して、非置換のC_{1-6}アルキル及びハロゲンから選択される。

実施形態では、各X^1は、ハロゲン原子（例えば、塩化物）又はヒドロカルビル基（例えば、メチル基、ベンジル基）である。

実施形態では、各X^1は、ベンジル基である。

実施形態では、各X^1は、$-CH_2C_6F_5$基（すなわち、ペンタフルオロベンジル基）である。

実施形態では、各X^1は、メチルである。

いくつかの実施形態では、各X^1は、独立して、メチル又はＣｌである。

いくつかの実施形態では、各X^1は、ハロゲンである。

いくつかの実施形態では、各X^1は、Ｃｌである。

【００９８】

いくつかの実施形態では、Ｍは、Ｔｉである。

いくつかの実施形態では、Ｍは、Ｈｆである。

いくつかの実施形態では、Ｍは、Ｚｒである。

【００９９】

本開示で使用される「Ｃｙ」は、その構造内にシクロペンタジエニル部分を含む「シクロペンタジエニル型配位子」を表し、シクロペンタジエニル部分は、５員炭素環を指し、非局在化π結合を介して、又は場合によってはσ結合を介して、金属中心に配位することができる。

【０１００】

いくつかの実施形態では、「Ｃｙ」は、その構造内にシクロペンタジエニル部分を含む

「シクロペンタジエニル型配位子」を表し、シクロペンタジエニル部分は、環内に非局在化π結合（例えば、芳香族性）を有する５員炭素環を指し、金属中心に配位することができる。

【０１０１】

本開示では、シクロペンタジエニル型配位子Ｃｙは、Ｌに共有結合し、η－（又はｅｔａ－）結合を介してＭに配位する。当業者は、η－結合が配位子のハプト数を示し、典型的にはη^{5}－結合によるＣｙ配位子の金属中心Ｍへの配位を指すことを理解しているが、場合によっては、シクロペンタジエニル型配位子の性質に応じて、η^{3}－結合及びη^{1}－結合も可能であることを理解している。

【０１０２】

いくつかの実施形態では、シクロペンタジエニル型配位子Ｃｙは、Ｌに共有結合し、η^{5}－結合又はη^{3}－結合、又はη^{1}－結合を介してＭに配位する。

いくつかの実施形態では、シクロペンタジエニル型配位子Ｃｙは、Ｌに共有結合し、η^{5}－結合又はη^{3}－結合を介してＭに配位する。

いくつかの実施形態では、シクロペンタジエニル型配位子Ｃｙは、Ｌに共有結合し、η^{5}－結合又はη^{1}－結合を介してＭに配位する。

いくつかの実施形態では、シクロペンタジエニル型配位子Ｃｙは、Ｌに共有結合し、η^{5}－結合を介してＭに配位する。

いくつかの実施形態では、シクロペンタジエニル型配位子Ｃｙは、Ｌに共有結合し、η^{3}－結合を介してＭに配位する。

いくつかの実施形態では、シクロペンタジエニル型配位子Ｃｙは、Ｌに共有結合し、η^{1}－結合を介してＭに配位する。

【０１０３】

本明細書で使用される場合、「シクロペンタジエニル型配位子」という用語は、少なくとも１つの５員炭素環を含み、この環がｅｔａ－５（又は場合によってはｅｔａ－３、又は場合によってはｅｔａ－１）結合を介して金属に結合している配位子を含むことを意味する。このように、「シクロペンタジエニル型配位子」という用語には、例えば、非置換シクロペンタジエニル、一重又は多重置換シクロペンタジエニル、非置換インデニル、一重又は多重置換インデニル、非置換フルオレニル、及び一重又は多重置換フルオレニルが含まれる。インデニル配位子及びフルオレニル配位子の水素化バージョンも、ｅｔａ－５（又は場合によってはｅｔａ－３、又はｅｔａ－１）結合を介して金属に結合する５員炭素環がそのまま残っている限り、本開示で使用することが想定される。

【０１０４】

本開示の実施形態では、シクロペンタジエニル配位子、インデニル配位子（又はその水素化バージョン）及びフルオレニル配位子（又はその水素化バージョン）の置換基は、Ｃ$_{1-30}$ヒドロカルビル基（このヒドロカルビル基は、非置換であるか、例えばハロゲン（ペンタフルオロベンジル基－ＣＨ$_{2}$Ｃ$_{6}$Ｆ$_{5}$の場合など）、Ｃ$_{1-20}$アルコキシ基、Ｃ$_{6-20}$アリール基、Ｃ$_{6-20}$アリールオキシ基（各々、例えばハロゲンによってさらに置換されてもよい））、アミド基（非置換であるか、又は最大２つのＣ$_{1-8}$アルキル基で置換されている）、ホスフィド基（非置換であるか、又は最大２つのＣ$_{1-8}$アルキル基で置換されている）、式－Ｓｉ（Ｒ^{a}）$_{3}$のシリル基（ここで、各Ｒ^{a}は、独立して、水素、Ｃ$_{1-8}$アルキル基、Ｃ$_{1-8}$アルコキシ基、Ｃ$_{6-20}$アリールオキシ基及びＣ$_{6-20}$アリール基からなる群から選択される）；及び式－Ｇｅ（Ｒ^{a}）$_{3}$のゲルマニル基（ここで、Ｒ^{a}は上記で定義した通りである）からなる群から選択されてもよい。

【０１０５】

いくつかの実施形態では、Ｃｙは、ヘテロ原子置換シクロペンタジエニル型配位子、及びヘテロ原子含有シクロペンタジエニル型配位子からなる群から選択される。

いくつかの実施形態では、Ｃｙは、置換又は非置換インデノ［１，２－ｂ］インドリル及びインデノ［２，１－ｂ］インドリル配位子からなる群から選択される。

いくつかの実施形態では、Ｃｙは、非置換又は置換シクロペンタジエニル配位子、非置

換又は置換シクロペンテノフェナントリル配位子及びその水素化バージョン、非置換又は置換インデニル配位子及びその水素化バージョン、非置換又は置換フルオレニル配位子及びその水素化バージョン、非置換又は置換オクタヒドロフルオレニル配位子、及び非置換又は置換アズレニル配位子からなる群から選択される。

【０１０６】

いくつかの実施形態では、Ｃｙは、シクロペンタジエニル配位子であって、これは、非置換であるか、あるいは、

ハロゲン；

水素；

C_{1-30}ヒドロカルビル基（このヒドロカルビル基は、非置換であるか、又はハロゲン原子、C_{1-20}アルキル基、C_{1-20}アルコキシ基、C_{7-20}アルキルアリール基、C_{7-20}アリールアルキル基、C_{6-20}アリール基、C_{6-20}アリールオキシ基、C_{7-20}アルキルアリールオキシ基、及びC_{7-20}アリールアルキルオキシ基からなる群から選択される１つ以上の置換基によってさらに置換されている）；

ヘテロ原子含有C_{1-30}ヒドロカルビル基（このヘテロ原子含有ヒドロカルビル基は、非置換であるか、又はハロゲン原子、C_{1-20}アルキル基、C_{1-20}アルコキシ基、C_{7-20}アルキルアリール基、C_{7-20}アリールアルキル基、C_{6-20}アリール基、C_{6-20}アリールオキシ基、C_{7-20}アルキルアリールオキシ基、及びC_{7-20}アリールアルキルオキシ基からなる群から選択される１つ以上の置換基によってさらに置換されている）；

オキシ基、－ＯＲ’；

アミド基、$-NR'_2$；

ホスフィド基、$-PR'_2$；

チオラート基、－ＳＲ’；

式－Ｓｉ（R^a）$_3$のシリル基；

式－Ｇｅ（R^a）$_3$のゲルマニル基；

からなる群から独立して選択される最大４つの置換基によって置換されており；

ここで、シクロペンタジエニル配位子上の２つの隣接する置換基は、任意に結合して環状ヒドロカルビル基又は環状ヘテロ原子含有ヒドロカルビル基を形成してもよく、環状ヒドロカルビル基又は環状ヘテロ原子含有ヒドロカルビル基は、非置換であるか、又はハロゲン原子、C_{1-20}アルキル基、C_{1-20}アルコキシ基、C_{7-20}アルキルアリール基、C_{7-20}アリールアルキル基、C_{6-20}アリール基、C_{6-20}アリールオキシ基、C_{7-20}アルキルアリールオキシ基、C_{7-20}アリールアルキルオキシ基、式$-NR'_2$のアミド基、式$-PR'_2$のホスフィド基、式－ＳＲ’のチオラート基、式－Ｓｉ（R^a）$_3$のシリル基、及び式－Ｇｅ（R^a）$_3$のゲルマニル基からなる群から選択される１つ以上の置換基によってさらに置換されており；

ここで、各Ｒ’は、独立して、水素、C_{1-20}アルキル基、及びC_{6-20}アリール基からなる群から選択され；

ここで、各R^aは、独立して、水素、C_{1-8}アルキル基、C_{1-8}アルコキシ基、C_{6-20}アリールオキシ基及びC_{6-20}アリール基からなる群から選択される。

【０１０７】

いくつかの実施形態では、Ｃｙは、インデニル配位子であって、これは、非置換であるか、あるいは、

ハロゲン；

水素；

C_{1-30}ヒドロカルビル基（このヒドロカルビル基は、非置換であるか、又はハロゲン原子、C_{1-20}アルキル基、C_{1-20}アルコキシ基、C_{7-20}アルキルアリール基、C_{7-20}アリールアルキル基、C_{6-20}アリール基、C_{6-20}アリールオキシ基、C_{7-20}アルキルアリールオキシ基、及びC_{7-20}アリールアルキルオキシ基からなる群から選択される１つ以上の置換基によってさらに置換されている）；

ヘテロ原子含有Ｃ１－３０ヒドロカルビル基（このヘテロ原子含有ヒドロカルビル基は、非置換であるか、又はハロゲン原子、Ｃ１－２０アルキル基、Ｃ１－２０アルコキシ基、Ｃ７－２０アルキルアリール基、Ｃ７－２０アリールアルキル基、Ｃ６－２０アリール基、Ｃ６－２０アリールオキシ基、Ｃ７－２０アルキルアリールオキシ基、及びＣ７－２０アリールアルキルオキシ基からなる群から選択される１つ以上の置換基によってさらに置換されている）；
オキシ基、－ＯＲ’；
アミド基、－ＮＲ’2；
ホスフィド基、－ＰＲ’2；
チオラート基、－ＳＲ’；
式－Ｓｉ（Ｒa）3のシリル基；
式－Ｇｅ（Ｒa）3のゲルマニル基；
からなる群から独立して選択される最大６つの置換基によって置換されており；
ここで、インデニル配位子上の２つの隣接する置換基は、任意に結合して環状ヒドロカルビル基又は環状ヘテロ原子含有ヒドロカルビル基を形成してもよく、環状ヒドロカルビル基又は環状ヘテロ原子含有ヒドロカルビル基は、非置換であるか、又はハロゲン原子、Ｃ１－２０アルキル基、Ｃ１－２０アルコキシ基、Ｃ７－２０アルキルアリール基、Ｃ７－２０アリールアルキル基、Ｃ６－２０アリール基、Ｃ６－２０アリールオキシ基、Ｃ７－２０アルキルアリールオキシ基、Ｃ７－２０アリールアルキルオキシ基、式－ＮＲ’2のアミド基、式－ＰＲ’2のホスフィド基、式－ＳＲ’のチオラート基、式－Ｓｉ（Ｒa）3のシリル基、及び式－Ｇｅ（Ｒa）3のゲルマニル基からなる群から選択される１つ以上の置換基によってさらに置換されており；
ここで、各Ｒ’は、独立して、水素、Ｃ1－２０アルキル基、及びＣ６－２０アリール基からなる群から選択され；
ここで、各Ｒaは、独立して、水素、Ｃ１－８アルキル基、Ｃ１－８アルコキシ基、Ｃ６－２０アリールオキシ基及びＣ６－２０アリール基からなる群から選択される。

【０１０８】

いくつかの実施形態では、Ｃｙは、フルオレニル配位子であって、これは、非置換であるか、あるいは、
ハロゲン；
水素；
Ｃ１－３０ヒドロカルビル基（このヒドロカルビル基は、非置換であるか、又はハロゲン原子、Ｃ１－２０アルキル基、Ｃ１－２０アルコキシ基、Ｃ７－２０アルキルアリール基、Ｃ７－２０アリールアルキル基、Ｃ６－２０アリール基、Ｃ６－２０アリールオキシ基、Ｃ７－２０アルキルアリールオキシ基、及びＣ７－２０アリールアルキルオキシ基からなる群から選択される１つ以上の置換基によってさらに置換されている）；
ヘテロ原子含有Ｃ１－３０ヒドロカルビル基（このヘテロ原子含有ヒドロカルビル基は、非置換であるか、又はハロゲン原子、Ｃ１－２０アルキル基、Ｃ１－２０アルコキシ基、Ｃ７－２０アルキルアリール基、Ｃ７－２０アリールアルキル基、Ｃ６－２０アリール基、Ｃ６－２０アリールオキシ基、Ｃ７－２０アルキルアリールオキシ基、及びＣ７－２０アリールアルキルオキシ基からなる群から選択される１つ以上の置換基によってさらに置換されている）；
オキシ基、－ＯＲ’；
アミド基、－ＮＲ’2；
ホスフィド基、－ＰＲ’2；
チオラート基、－ＳＲ’；
式－Ｓｉ（Ｒa）3のシリル基；
式－Ｇｅ（Ｒa）3のゲルマニル基；
からなる群から独立して選択される最大８つの置換基によって置換されており；
ここで、フルオレニル配位子上の２つの隣接する置換基は、任意に結合して環状ヒドロ

カルビル基又は環状ヘテロ原子含有ヒドロカルビル基を形成してもよく、環状ヒドロカルビル基又は環状ヘテロ原子含有ヒドロカルビル基は、非置換であるか、又はハロゲン原子、C_{1-20}アルキル基、C_{1-20}アルコキシ基、C_{7-20}アルキルアリール基、C_{7-20}アリールアルキル基、C_{6-20}アリール基、C_{6-20}アリールオキシ基、C_{7-20}アルキルアリールオキシ基、C_{7-20}アリールアルキルオキシ基、式－NR'_2のアミド基、式－PR'_2のホスフィド基、式－SR'のチオラート基、式－$Si(R^a)_3$のシリル基、及び式－$Ge(R^a)_3$のゲルマニル基からなる群から選択される１つ以上の置換基によってさらに置換されており；

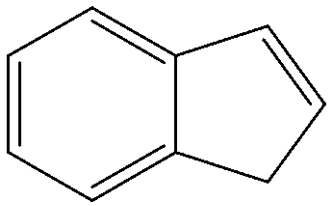
ここで、各R'は、独立して、水素、C_{1-20}アルキル基、及びC_{6-20}アリール基からなる群から選択され；

ここで、各R^aは、独立して、水素、C_{1-8}アルキル基、C_{1-8}アルコキシ基、C_{6-20}アリールオキシ基及びC_{6-20}アリール基からなる群から選択される。

【０１０９】

当業者であれば、インデニル基が、化合物インデンに由来するヒドロカルビル基であることを理解する：

【化４８】

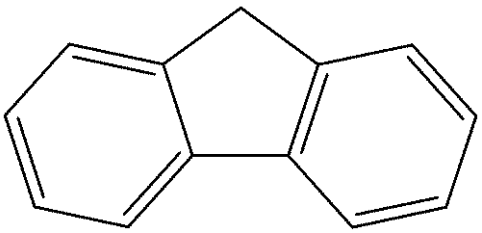


indene

【０１１０】

当業者であれば、フルオレニル基が、化合物フルオレンに由来するヒドロカルビル基であることを理解する：

【化４９】



fluorene

【０１１１】

シクロペンタジエニルと同様に、インデニル基又はフルオレニル基は、脱プロトン化後、η^5－結合（又は場合によってはη^3－結合、又は場合によってはη^1－結合）によって金属中心に配位することができる。

【０１１２】

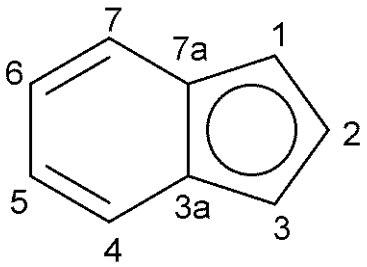
いくつかの実施形態では、Ｃｙは、非置換又は置換インデニル配位子である。

いくつかの実施形態では、Ｃｙは、非置換インデニル配位子である。

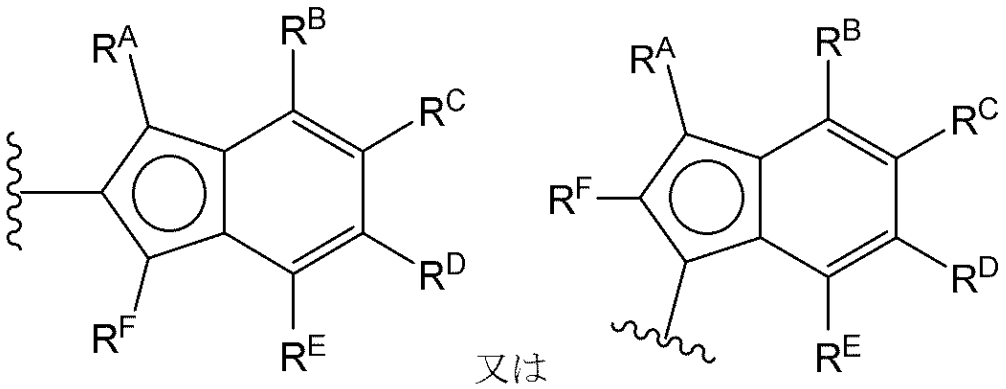
いくつかの実施形態では、Ｃｙは、置換インデニル配位子である。

いくつかの実施形態では、Ｃｙは、非置換又は置換フルオレニル配位子である。

いくつかの実施形態では、Ｃｙは、非置換フルオレニル配位子である。
いくつかの実施形態では、Ｃｙは、置換フルオレニル配位子である。
【０１１３】
いくつかの実施形態では、Ｃｙは、Ｌ基の１位又は２位に結合した非置換インデニル配位子であり、インデニル環上の位置は以下のように番号付けされる：
【化５０】

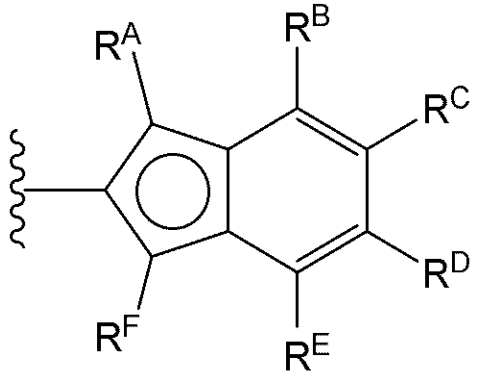


【０１１４】
いくつかの実施形態では、Ｃｙは、Ｌ基の１位に結合した非置換インデニル配位子である。
いくつかの実施形態では、Ｃｙは、Ｌ基の２位に結合した非置換インデニル配位子である。
【０１１５】
いくつかの実施形態では、Ｃｙは、式：
【化５１】



であり、
式中、
～～～～～
は、Ｌへの結合点を示し、R^A、R^B、R^C、R^D、R^E及びR^Fの各々は、独立して、Ｈ、C_{1-12}ヒドロカルビル基及びC_{1-12}ヘテロ原子含有ヒドロカルビル基から選択される。いくつかの実施形態では、R^A、R^B、R^C、R^D、R^E及びR^Fの各々は、独立して、Ｈ及び非置換C_{1-6}アルキル基から選択される。いくつかの実施形態では、R^A、R^B、R^C、R^D、R^E及びR^Fの各々は、Ｈである。いくつかの実施形態では、R^B、R^C、R^D及びR^Eの２つの隣接する基は、結合して環を形成する。
【０１１６】
いくつかの実施形態では、Ｃｙは、式：

【化５２】



であり、
式中、
〰〰〰

は、Ｌへの結合点を示し、Ｒ^{A}、Ｒ^{B}、Ｒ^{C}、Ｒ^{D}、Ｒ^{E}及びＲ^{F}の各々は、独立して、Ｈ、Ｃ$_{1-12}$ヒドロカルビル基及びＣ$_{1-12}$ヘテロ原子含有ヒドロカルビル基から選択される。いくつかの実施形態では、Ｒ^{A}、Ｒ^{B}、Ｒ^{C}、Ｒ^{D}、Ｒ^{E}及びＲ^{F}の各々は、独立して、Ｈ及び非置換Ｃ$_{1-6}$アルキル基から選択される。いくつかの実施形態では、Ｒ^{A}、Ｒ^{B}、Ｒ^{C}、Ｒ^{D}、Ｒ^{E}及びＲ^{F}の各々は、Ｈである。いくつかの実施形態では、Ｒ^{B}、Ｒ^{C}、Ｒ^{D}及びＲ^{E}の２つの隣接する基は、結合して環を形成する。

【０１１７】

いくつかの実施形態では、Ｌは、ＰとＣｙを連結する原子の連続鎖を含む架橋基であり、連続鎖は３個の原子を含む。いくつかの実施形態では、Ｌは、ＰとＣｙを連結する原子の連続鎖を含む架橋基であり、連続鎖は２個の原子を含む。「原子の連続鎖」という語句は、言及されている原子が順番に結合しており、一方の端がＰに、もう一方の端がＣｙに結合していることを意味する。

【０１１８】

いくつかの実施形態では、Ｌは、少なくとも１つの環状ヒドロカルビル基又は少なくとも１つの環状ヘテロ原子含有ヒドロカルビル基を含む架橋基である。

【０１１９】

いくつかの実施形態では、Ｌは、少なくとも１つのシクロアルキレン基、ヘテロシクロアルキレン基、アリーレン基又はヘテロアリーレン基を含む架橋基である。「シクロアルキレン」という用語は、シクロ脂肪族環を含む二価の基を指す。「ヘテロシクロアルキレン」という用語は、ヘテロシクロ脂肪族環を含む二価の基を指す。「アリーレン」という用語は、芳香族環を含む二価の基を指す。「ヘテロアリーレン」という用語は、ヘテロ芳香族環を含む二価の基を指す。

【０１２０】

いくつかの実施形態では、Ｌは、少なくとも１つのアリーレン基又はヘテロアリーレン基を含む架橋基である。

【０１２１】

いくつかの実施形態では、Ｌは、少なくとも１つのシクロアルキレン基、又はヘテロシクロアルキレン基を含む架橋基である。

【０１２２】

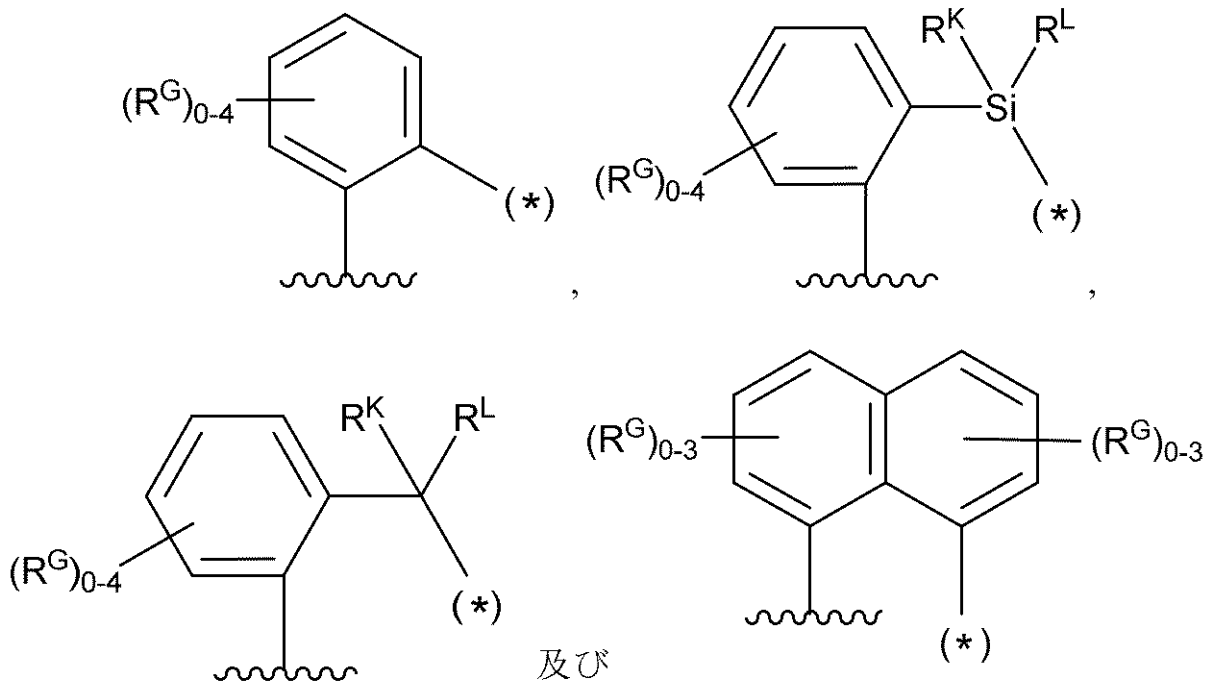
いくつかの実施形態では、Ｌは、炭素原子、水素原子及びヘテロ原子から選択される１～５０個の原子を含み、少なくとも１つのフェニレン基を含む架橋基である。

【０１２３】

いくつかの実施形態では、Ｌは、少なくとも１つのアリーレン基を含む架橋基である。

いくつかの実施形態では、Ｌは、少なくとも１つのフェニレン基を含む架橋基である。
【０１２４】
いくつかの実施形態では、Ｌは、炭素原子、水素原子及びヘテロ原子から選択される１～５０個の原子を含む架橋基であり、少なくとも１つのアリーレン基又はヘテロアリーレン基を含む。いくつかの実施形態では、Ｌは、炭素原子、水素原子及びヘテロ原子から選択される１～５０個の原子を含む架橋基であり、少なくとも１つのアリーレン基を含む。いくつかの実施形態では、Ｌは、炭素原子、水素原子及びヘテロ原子から選択される１～５０個の原子を含む架橋基であり、少なくとも１つのフェニレン基を含む。いくつかの実施形態では、Ｌは、炭素原子及び水素原子から選択される１～５０個の原子を含む架橋基であり、少なくとも１つのフェニレン基を含む。
【０１２５】
Ｌ内のアリーレン基又はヘテロアリーレン基は、直接又は間接的に、Ｐに共有結合していてもよい。Ｌ内のアリーレン基又はヘテロアリーレン基は、直接、Ｐに共有結合していてもよい（すなわち、Ｐからアリーレン基又はヘテロアリーレン基の環の原子への共有結合が存在してもよい）。あるいは、Ｌ内のアリーレン基又はヘテロアリーレン基は、間接的に、Ｐに共有結合していてもよい（すなわち、Ｐとアリーレン基又はヘテロアリーレン基の環の原子との間に、さらなる二価の基が存在してもよい）。さらなる二価の基は、ヒドロカルビレン基、例えばアルキレン基又はアルケニレン基であってもよく、又は１つ以上のヘテロ原子を含む二価の基であってもよい。
【０１２６】
Ｌ内のアリーレン基又はヘテロアリーレン基は、直接又は間接的に、Ｃｙに共有結合していてもよい。Ｌ内のアリーレン基又はヘテロアリーレン基は、直接、Ｃｙに共有結合していてもよい（すなわち、Ｃｙからアリーレン基又はヘテロアリーレン基の環の原子への共有結合が存在してもよい）。あるいは、Ｌ内のアリーレン基又はヘテロアリーレン基は、間接的に、Ｃｙに共有結合していてもよい（すなわち、Ｃｙとアリーレン基又はヘテロアリーレン基の環の原子との間に、さらなる二価の基が存在してもよい）。さらなる二価の基は、ヒドロカルビレン基、例えばアルキレン基又はアルケニレン基であってもよく、又は１つ以上のヘテロ原子を含む二価の基であってもよい。
【０１２７】
いくつかの実施形態では、Ｌは、ＰとＣｙを連結する原子の連続鎖を含む架橋基であり、フェニレン基の隣接する炭素原子は原子の連続鎖の一部を形成する。
【０１２８】
いくつかの実施形態では、Ｌは、式：

【化５３】



から選択され、
式中、

は、Ｐへの結合点を示し；（＊）は、Ｃｙへの結合点を示し；式中、各Ｒ^{G}は、独立して、
ハロゲン；
Ｃ$_{1-30}$ヒドロカルビル基（このヒドロカルビル基は、非置換であるか、又はハロゲン原子、Ｃ$_{1-20}$アルキル基、Ｃ$_{1-20}$アルコキシ基、Ｃ$_{7-20}$アルキルアリール基、Ｃ$_{7-20}$アリールアルキル基、Ｃ$_{6-20}$アリール基、Ｃ$_{6-20}$アリールオキシ基、Ｃ$_{7-20}$アルキルアリールオキシ基、及びＣ$_{7-20}$アリールアルキルオキシ基からなる群から選択される１つ以上の置換基によってさらに置換されている）；
ヘテロ原子含有Ｃ$_{1-30}$ヒドロカルビル基（このヘテロ原子含有ヒドロカルビル基は、非置換であるか、又はハロゲン原子、Ｃ$_{1-20}$アルキル基、Ｃ$_{1-20}$アルコキシ基、Ｃ$_{7-20}$アルキルアリール基、Ｃ$_{7-20}$アリールアルキル基、Ｃ$_{6-20}$アリール基、Ｃ$_{6-20}$アリールオキシ基、Ｃ$_{7-20}$アルキルアリールオキシ基、及びＣ$_{7-20}$アリールアルキルオキシ基からなる群から選択される１つ以上の置換基によってさらに置換されている）；
オキシ基、－ＯＲ’；
アミド基、－ＮＲ’$_2$；
ホスフィド基、－ＰＲ’$_2$；
チオラート基、－ＳＲ’；
式－Ｓｉ（Ｒ^{a}）$_3$のシリル基；
式－Ｇｅ（Ｒ^{a}）$_3$のゲルマニル基；
からなる群から選択され；
ここで、２つの隣接するＲ^{G}基は、任意に結合して環状ヒドロカルビル基又は環状ヘテロ原子含有ヒドロカルビル基を形成してもよく、環状ヒドロカルビル基又は環状ヘテロ原子含有ヒドロカルビル基は、非置換であるか、又はハロゲン原子、Ｃ$_{1-20}$アルキル基、Ｃ$_{1-20}$アルコキシ基、Ｃ$_{7-20}$アルキルアリール基、Ｃ$_{7-20}$アリールアルキル

基、Ｃ６－２０アリール基、Ｃ６－２０アリールオキシ基、Ｃ７－２０アルキルアリールオキシ基、Ｃ７－２０アリールアルキルオキシ基、式－ＮＲ’２のアミド基、式－ＰＲ’２のホスフィド基、式－ＳＲ’のチオラート基、式－Ｓｉ（Ｒａ）３のシリル基、及び式－Ｇｅ（Ｒａ）３のゲルマニル基からなる群から選択される１つ以上の置換基によってさらに置換されており；

ここで、Ｒ^{K}及びＲ^{L}は、各々独立して、

ハロゲン；

水素；

Ｃ１－３０ヒドロカルビル基（このヒドロカルビル基は、非置換であるか、又はハロゲン原子、Ｃ１－２０アルキル基、Ｃ１－２０アルコキシ基、Ｃ７－２０アルキルアリール基、Ｃ７－２０アリールアルキル基、Ｃ６－２０アリール基、Ｃ６－２０アリールオキシ基、Ｃ７－２０アルキルアリールオキシ基、及びＣ７－２０アリールアルキルオキシ基からなる群から選択される１つ以上の置換基によってさらに置換されている）；

ヘテロ原子含有Ｃ１－３０ヒドロカルビル基（このヘテロ原子含有ヒドロカルビル基は、非置換であるか、又はハロゲン原子、Ｃ１－２０アルキル基、Ｃ１－２０アルコキシ基、Ｃ７－２０アルキルアリール基、Ｃ７－２０アリールアルキル基、Ｃ６－２０アリール基、Ｃ６－２０アリールオキシ基、Ｃ７－２０アルキルアリールオキシ基、及びＣ７－２０アリールアルキルオキシ基からなる群から選択される１つ以上の置換基によってさらに置換されている）；

からなる群から選択され；

ここで、Ｒ^{K}及びＲ^{L}の基は、任意に結合して環状ヒドロカルビル基又は環状ヘテロ原子含有ヒドロカルビル基を形成してもよく、環状ヒドロカルビル基又は環状ヘテロ原子含有ヒドロカルビル基は、非置換であるか、又はハロゲン原子、Ｃ１－２０アルキル基、Ｃ１－２０アルコキシ基、Ｃ７－２０アルキルアリール基、Ｃ７－２０アリールアルキル基、Ｃ６－２０アリール基、Ｃ６－２０アリールオキシ基、Ｃ７－２０アルキルアリールオキシ基、Ｃ７－２０アリールアルキルオキシ基、式－ＮＲ’２のアミド基、式－ＰＲ’２のホスフィド基、式－ＳＲ’のチオラート基、式－Ｓｉ（Ｒａ）３のシリル基、及び式－Ｇｅ（Ｒａ）３のゲルマニル基からなる群から選択される１つ以上の置換基によってさらに置換されており；

ここで、各Ｒ’は、独立して、水素、Ｃ1－２０アルキル基、及びＣ６－２０アリール基からなる群から選択され；

ここで、各Ｒａは、独立して、水素、Ｃ１－８アルキル基、Ｃ１－８アルコキシ基、Ｃ６－２０アリールオキシ基及びＣ６－２０アリール基からなる群から選択される。

【０１２９】

実施形態では、各Ｒ^{G}は、独立して、ハロゲン及び非置換Ｃ１－１２アルキルから選択される。

いくつかの実施形態では、Ｒ^{G}は存在しない（フェニレン基、又はナフタレン基は非置換である）。

【０１３０】

実施形態では、Ｒ^{K}及びＲ^{L}は、各々独立して、水素、非置換Ｃ１－１２アルキル基、及び非置換又は置換Ｃ６－２０アリール基から選択される。

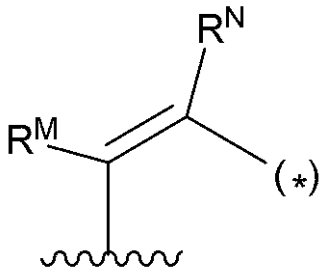
実施形態では、Ｒ^{K}及びＲ^{L}は、各々独立して、非置換Ｃ１－１２アルキル基、及び非置換又は置換Ｃ６－２０アリール基から選択される。

いくつかの実施形態では、Ｒ^{K}及びＲ^{L}は、各々水素である。

【０１３１】

いくつかの実施形態では、Ｌは、式：

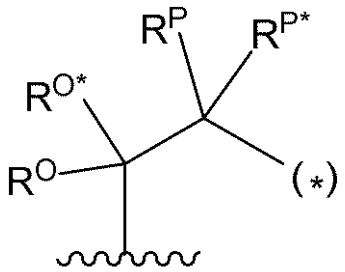
【化５４】



であり、
式中、R^M及びR^Nは、各々独立して、
ハロゲン；
水素；
C_{1-30}ヒドロカルビル基（このヒドロカルビル基は、非置換であるか、又はハロゲン原子、C_{1-20}アルキル基、C_{1-20}アルコキシ基、C_{7-20}アルキルアリール基、C_{7-20}アリールアルキル基、C_{6-20}アリール基、C_{6-20}アリールオキシ基、C_{7-20}アルキルアリールオキシ基、及びC_{7-20}アリールアルキルオキシ基からなる群から選択される１つ以上の置換基によってさらに置換されている）；
ヘテロ原子含有C_{1-30}ヒドロカルビル基（このヘテロ原子含有ヒドロカルビル基は、非置換であるか、又はハロゲン原子、C_{1-20}アルキル基、C_{1-20}アルコキシ基、C_{7-20}アルキルアリール基、C_{7-20}アリールアルキル基、C_{6-20}アリール基、C_{6-20}アリールオキシ基、C_{7-20}アルキルアリールオキシ基、及びC_{7-20}アリールアルキルオキシ基からなる群から選択される１つ以上の置換基によってさらに置換されている）；
オキシ基、－ＯＲ’；
アミド基、－ＮＲ’$_2$；
ホスフィド基、－ＰＲ’$_2$；
チオラート基、－ＳＲ’；
式－Ｓｉ（R^a）$_3$のシリル基；
式－Ｇｅ（R^a）$_3$のゲルマニル基；
からなる群から選択され；
ここで、R^M及びR^Nの２つの隣接する基は、任意に結合して環状ヒドロカルビル基又は環状ヘテロ原子含有ヒドロカルビル基を形成してもよく、環状ヒドロカルビル基又は環状ヘテロ原子含有ヒドロカルビル基は、非置換であるか、又はハロゲン原子、C_{1-20}アルキル基、C_{1-20}アルコキシ基、C_{7-20}アルキルアリール基、C_{7-20}アリールアルキル基、C_{6-20}アリール基、C_{6-20}アリールオキシ基、C_{7-20}アルキルアリールオキシ基、C_{7-20}アリールアルキルオキシ基、式－ＮＲ’$_2$のアミド基、式－ＰＲ’$_2$のホスフィド基、式－ＳＲ’のチオラート基、式－Ｓｉ（R^a）$_3$のシリル基、及び式－Ｇｅ（R^a）$_3$のゲルマニル基からなる群から選択される１つ以上の置換基によってさらに置換されており；
ここで、各Ｒ’は、独立して、水素、C_{1-20}アルキル基、及びC_{6-20}アリール基からなる群から選択され；
ここで、各R^aは、独立して、水素、C_{1-8}アルキル基、C_{1-8}アルコキシ基、C_{6-20}アリールオキシ基及びC_{6-20}アリール基からなる群から選択され；
式中、

は、Ｐへの結合点を示し；（＊）は、Ｃｙへの結合点を示す。

【０１３２】
いくつかの実施形態では、R^M及びR^Nは、各々独立して、ハロゲン、水素、C_{1-30}アルキル基、C_{1-30}アルコキシ基、C_{7-30}アルキルアリール基、C_{7-30}アリールアルキル基、C_{6-30}アリール基、C_{6-30}アリールオキシド基、C_{7-30}アルキルアリールオキシ基、及びC_{7-30}アリールアルキルオキシ基からなる群から選択される。
【０１３３】
いくつかの実施形態では、R^M及びR^Nは、各々独立して、ハロゲン、水素、C_{1-20}アルキル基、C_{1-20}アルコキシ基、C_{7-20}アルキルアリール基、C_{7-20}アリールアルキル基、C_{6-20}アリール基、C_{6-20}アリールオキシド基、C_{7-20}アルキルアリールオキシ基、及びC_{7-20}アリールアルキルオキシ基からなる群から選択される。
【０１３４】
いくつかの実施形態では、R^M基とR^N基が結合して環状ヒドロカルビル基を形成する。
【０１３５】
いくつかの実施形態では、R^M基とR^N基が結合してフェニレン基を形成し、フェニレン基は、非置換であるか、又はハロゲン原子、C_{1-20}アルキル基、C_{1-20}アルコキシ基、C_{7-20}アルキルアリール基、C_{7-20}アリールアルキル基、C_{6-20}アリール基、C_{6-20}アリールオキシ基、C_{7-20}アルキルアリールオキシ基、C_{7-20}アリールアルキルオキシ基、$-NR'_2$、アミド基、$-PR'_2$、ホスフィド基、$-SR'$、チオラート基、式$-Si(R^a)_3$のシリル基、及び式$-Ge(R^a)_3$のゲルマニル基からなる群から選択される１つ以上の置換基によってさらに置換されており；ここで、各R'は、独立して、水素、C_{1-20}アルキル基、及びC_{6-20}アリール基からなる群から選択され；ここで、各R^aは、独立して、水素、C_{1-8}アルキル基、C_{1-8}アルコキシ基、C_{6-20}アリールオキシ基及びC_{6-20}アリール基からなる群から選択される。
【０１３６】
いくつかの実施形態では、R^M基とR^N基が結合して、それ以上置換されないフェニレン基を形成する。
【０１３７】
いくつかの実施形態では、Ｌは、式：
【化５５】



であり、
式中、R^O、R^O*、R^P及びR^P*は、各々独立して、
ハロゲン；
水素；
C_{1-30}ヒドロカルビル基（このヒドロカルビル基は、非置換であるか、又はハロゲン原子、C_{1-20}アルキル基、C_{1-20}アルコキシ基、C_{7-20}アルキルアリール基、C_{7-20}アリールアルキル基、C_{6-20}アリール基、C_{6-20}アリールオキシ基、C_{7-20}アルキルアリールオキシ基、及びC_{7-20}アリールアルキルオキシ基からなる

群から選択される１つ以上の置換基によってさらに置換されている）；
ヘテロ原子含有Ｃ$_{1-30}$ヒドロカルビル基（このヘテロ原子含有ヒドロカルビル基は、非置換であるか、又はハロゲン原子、Ｃ$_{1-20}$アルキル基、Ｃ$_{1-20}$アルコキシ基、Ｃ$_{7-20}$アルキルアリール基、Ｃ$_{7-20}$アリールアルキル基、Ｃ$_{6-20}$アリール基、Ｃ$_{6-20}$アリールオキシ基、Ｃ$_{7-20}$アルキルアリールオキシ基、及びＣ$_{7-20}$アリールアルキルオキシ基からなる群から選択される１つ以上の置換基によってさらに置換されている）；
オキシ基、－ＯＲ’；
アミド基、－ＮＲ’$_2$；
ホスフィド基、－ＰＲ’$_2$；
チオラート基、－ＳＲ’；
式－Ｓｉ（Ｒ^a）$_3$のシリル基；
式－Ｇｅ（Ｒ^a）$_3$のゲルマニル基；
からなる群から選択され；
ここで、Ｒ^O、Ｒ^O＊、Ｒ^{P}及びＲ^P＊のうちの２つの基は、任意に結合して環状ヒドロカルビル基又は環状ヘテロ原子含有ヒドロカルビル基を形成してもよく、環状ヒドロカルビル基又は環状ヘテロ原子含有ヒドロカルビル基は、非置換であるか、又はハロゲン原子、Ｃ$_{1-20}$アルキル基、Ｃ$_{1-20}$アルコキシ基、Ｃ$_{7-20}$アルキルアリール基、Ｃ$_{7-20}$アリールアルキル基、Ｃ$_{6-20}$アリール基、Ｃ$_{6-20}$アリールオキシ基、Ｃ$_{7-20}$アルキルアリールオキシ基、Ｃ$_{7-20}$アリールアルキルオキシ基、式－ＮＲ’$_2$のアミド基、式－ＰＲ’$_2$のホスフィド基、式－ＳＲ’のチオラート基、式－Ｓｉ（Ｒ^a）$_3$のシリル基、及び式－Ｇｅ（Ｒ^a）$_3$のゲルマニル基からなる群から選択される１つ以上の置換基によってさらに置換されており；
ここで、各Ｒ’は、独立して、水素、Ｃ$_{1-20}$アルキル基、及びＣ$_{6-20}$アリール基からなる群から選択され；
ここで、各Ｒ^{a}は、独立して、水素、Ｃ$_{1-8}$アルキル基、Ｃ$_{1-8}$アルコキシ基、Ｃ$_{6-20}$アリールオキシ基及びＣ$_{6-20}$アリール基からなる群から選択され；
式中、

は、Ｐへの結合点を示し；（＊）は、Ｃｙへの結合点を示す。

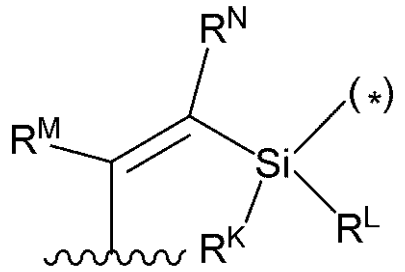
【０１３８】
いくつかの実施形態では、Ｒ^O、Ｒ^O＊、Ｒ^{P}及びＲ^P＊は、各々独立して、ハロゲン、水素、Ｃ$_{1-30}$アルキル基、Ｃ$_{1-30}$アルコキシ基、Ｃ$_{7-30}$アルキルアリール基、Ｃ$_{7-30}$アリールアルキル基、Ｃ$_{6-30}$アリール基、Ｃ$_{6-30}$アリールオキシド基、Ｃ$_{7-30}$アルキルアリールオキシ基、及びＣ$_{7-30}$アリールアルキルオキシ基からなる群から選択される。

【０１３９】
いくつかの実施形態では、Ｒ^O、Ｒ^O＊、Ｒ^{P}及びＲ^P＊は、各々独立して、ハロゲン、水素、Ｃ$_{1-20}$アルキル基、Ｃ$_{1-20}$アルコキシ基、Ｃ$_{7-20}$アルキルアリール基、Ｃ$_{7-20}$アリールアルキル基、Ｃ$_{6-20}$アリール基、Ｃ$_{6-20}$アリールオキシド基、Ｃ$_{7-20}$アルキルアリールオキシ基、及びＣ$_{7-20}$アリールアルキルオキシ基からなる群から選択される。

【０１４０】
いくつかの実施形態では、１つのＲ^{O}基と１つのＲ^{P}基が結合して環状ヒドロカルビル基を形成する。
いくつかの実施形態では、１つのＲ^{O}基と１つのＲ^{P}基が結合してシクロヘキシル基を形成する。

【０１４１】
いくつかの実施形態では、Ｌは、式：

【化５６】



であり、

式中、R^K及びR^Lは、各々独立して、水素、非置換C_{1-12}アルキル基、及び非置換又は置換C_{6-20}アリール基から選択され、

R^M及びR^Nは、各々独立して、

ハロゲン；

水素；

C_{1-30}ヒドロカルビル基（このヒドロカルビル基は、非置換であるか、又はハロゲン原子、C_{1-20}アルキル基、C_{1-20}アルコキシ基、C_{7-20}アルキルアリール基、C_{7-20}アリールアルキル基、C_{6-20}アリール基、C_{6-20}アリールオキシ基、C_{7-20}アルキルアリールオキシ基、及びC_{7-20}アリールアルキルオキシ基からなる群から選択される１つ以上の置換基によってさらに置換されている）；

ヘテロ原子含有C_{1-30}ヒドロカルビル基（このヘテロ原子含有ヒドロカルビル基は、非置換であるか、又はハロゲン原子、C_{1-20}アルキル基、C_{1-20}アルコキシ基、C_{7-20}アルキルアリール基、C_{7-20}アリールアルキル基、C_{6-20}アリール基、C_{6-20}アリールオキシ基、C_{7-20}アルキルアリールオキシ基、及びC_{7-20}アリールアルキルオキシ基からなる群から選択される１つ以上の置換基によってさらに置換されている）；

オキシ基、－ＯＲ’；

アミド基、－ＮＲ’$_2$；

ホスフィド基、－ＰＲ’$_2$；

チオラート基、－ＳＲ’；

式－Ｓｉ（R^a）$_3$のシリル基；

式－Ｇｅ（R^a）$_3$のゲルマニル基；

からなる群から選択され；

ここで、R^M及びR^Nの２つの隣接する基は、任意に結合して環状ヒドロカルビル基又は環状ヘテロ原子含有ヒドロカルビル基を形成してもよく、環状ヒドロカルビル基又は環状ヘテロ原子含有ヒドロカルビル基は、非置換であるか、又はハロゲン原子、C_{1-20}アルキル基、C_{1-20}アルコキシ基、C_{7-20}アルキルアリール基、C_{7-20}アリールアルキル基、C_{6-20}アリール基、C_{6-20}アリールオキシ基、C_{7-20}アルキルアリールオキシ基、C_{7-20}アリールアルキルオキシ基、式－ＮＲ’$_2$のアミド基、式－ＰＲ’$_2$のホスフィド基、式－ＳＲ’のチオラート基、式－Ｓｉ（R^a）$_3$のシリル基、及び式－Ｇｅ（R^a）$_3$のゲルマニル基からなる群から選択される１つ以上の置換基によってさらに置換されており；

ここで、各Ｒ’は、独立して、水素、C_{1-20}アルキル基、及びC_{6-20}アリール基からなる群から選択され；

ここで、各R^aは、独立して、水素、C_{1-8}アルキル基、C_{1-8}アルコキシ基、C_{6-20}アリールオキシ基及びC_{6-20}アリール基からなる群から選択され；

式中、

〰〰〰

は、Ｐへの結合点を示し；（＊）は、Ｃｙへの結合点を示す。

【０１４２】

いくつかの実施形態では、R^M及びR^Nは、各々独立して、ハロゲン、水素、C_{1-30}アルキル基、C_{1-30}アルコキシ基、C_{7-30}アルキルアリール基、C_{7-30}アリールアルキル基、C_{6-30}アリール基、C_{6-30}アリールオキシド基、C_{7-30}アルキルアリールオキシ基、及びC_{7-30}アリールアルキルオキシ基からなる群から選択される。

【０１４３】

いくつかの実施形態では、R^M及びR^Nは、各々独立して、ハロゲン、水素、C_{1-20}アルキル基、C_{1-20}アルコキシ基、C_{7-20}アルキルアリール基、C_{7-20}アリールアルキル基、C_{6-20}アリール基、C_{6-20}アリールオキシド基、C_{7-20}アルキルアリールオキシ基、及びC_{7-20}アリールアルキルオキシ基からなる群から選択される。

【０１４４】

いくつかの実施形態では、R^M基とR^N基が結合して環状ヒドロカルビル基を形成する。

【０１４５】

いくつかの実施形態では、R^M基とR^N基が結合してフェニレン基を形成し、フェニレン基は、非置換であるか、又はハロゲン原子、C_{1-20}アルキル基、C_{1-20}アルコキシ基、C_{7-20}アルキルアリール基、C_{7-20}アリールアルキル基、C_{6-20}アリール基、C_{6-20}アリールオキシ基、C_{7-20}アルキルアリールオキシ基、C_{7-20}アリールアルキルオキシ基、－NR'_2、アミド基、－PR'_2、ホスフィド基、－SR'、チオラート基、式－$Si(R^a)_3$のシリル基、及び式－$Ge(R^a)_3$のゲルマニル基からなる群から選択される１つ以上の置換基によってさらに置換されており；ここで、各Ｒ’は、独立して、水素、C_{1-20}アルキル基、及びC_{6-20}アリール基からなる群から選択され；ここで、各R^aは、独立して、水素、C_{1-8}アルキル基、C_{1-8}アルコキシ基、C_{6-20}アリールオキシ基及びC_{6-20}アリール基からなる群から選択される。

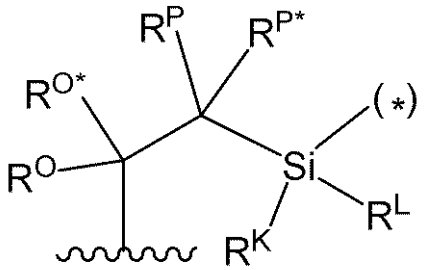
【０１４６】

いくつかの実施形態では、R^M基とR^N基が結合して、それ以上置換されないフェニレン基を形成する。

【０１４７】

いくつかの実施形態では、Ｌは、式：

【化５７】



であり、

式中、R^K及びR^Lは、各々独立して、水素、非置換C_{1-12}アルキル基、及び非置換又は置換C_{6-20}アリール基から選択され、

R^O、R^{O*}、R^P及びR^{P*}は、各々独立して、

ハロゲン；

水素；

C_{1-30}ヒドロカルビル基（このヒドロカルビル基は、非置換であるか、又はハロゲ

ン原子、C_{1-20}アルキル基、C_{1-20}アルコキシ基、C_{7-20}アルキルアリール基、C_{7-20}アリールアルキル基、C_{6-20}アリール基、C_{6-20}アリールオキシ基、C_{7-20}アルキルアリールオキシ基、及びC_{7-20}アリールアルキルオキシ基からなる群から選択される１つ以上の置換基によってさらに置換されている）；
ヘテロ原子含有C_{1-30}ヒドロカルビル基（このヘテロ原子含有ヒドロカルビル基は、非置換であるか、又はハロゲン原子、C_{1-20}アルキル基、C_{1-20}アルコキシ基、C_{7-20}アルキルアリール基、C_{7-20}アリールアルキル基、C_{6-20}アリール基、C_{6-20}アリールオキシ基、C_{7-20}アルキルアリールオキシ基、及びC_{7-20}アリールアルキルオキシ基からなる群から選択される１つ以上の置換基によってさらに置換されている）；
オキシ基、－ＯＲ’；
アミド基、－ＮＲ’$_2$；
ホスフィド基、－ＰＲ’$_2$；
チオラート基、－ＳＲ’；
式－Ｓｉ（R^a）$_3$のシリル基；
式－Ｇｅ（R^a）$_3$のゲルマニル基；
からなる群から選択され；
ここで、R^O、R^{O*}、R^P及びR^{P*}のうちの２つの基は、任意に結合して環状ヒドロカルビル基又は環状ヘテロ原子含有ヒドロカルビル基を形成してもよく、環状ヒドロカルビル基又は環状ヘテロ原子含有ヒドロカルビル基は、非置換であるか、又はハロゲン原子、C_{1-20}アルキル基、C_{1-20}アルコキシ基、C_{7-20}アルキルアリール基、C_{7-20}アリールアルキル基、C_{6-20}アリール基、C_{6-20}アリールオキシ基、C_{7-20}アルキルアリールオキシ基、C_{7-20}アリールアルキルオキシ基、式－ＮＲ’$_2$のアミド基、式－ＰＲ’$_2$のホスフィド基、式－ＳＲ’のチオラート基、式－Ｓｉ（R^a）$_3$のシリル基、及び式－Ｇｅ（R^a）$_3$のゲルマニル基からなる群から選択される１つ以上の置換基によってさらに置換されており；
ここで、各Ｒ’は、独立して、水素、C_{1-20}アルキル基、及びC_{6-20}アリール基からなる群から選択され；
ここで、各R^aは、独立して、水素、C_{1-8}アルキル基、C_{1-8}アルコキシ基、C_{6-20}アリールオキシ基及びC_{6-20}アリール基からなる群から選択され；
式中、

は、Ｐへの結合点を示し；（＊）は、Ｃｙへの結合点を示す。

【０１４８】
いくつかの実施形態では、R^O、R^{O*}、R^P及びR^{P*}は、各々独立して、ハロゲン、水素、C_{1-30}アルキル基、C_{1-30}アルコキシ基、C_{7-30}アルキルアリール基、C_{7-30}アリールアルキル基、C_{6-30}アリール基、C_{6-30}アリールオキシド基、C_{7-30}アルキルアリールオキシ基、及びC_{7-30}アリールアルキルオキシ基からなる群から選択される。

【０１４９】
いくつかの実施形態では、R^O、R^{O*}、R^P及びR^{P*}は、各々独立して、ハロゲン、水素、C_{1-20}アルキル基、C_{1-20}アルコキシ基、C_{7-20}アルキルアリール基、C_{7-20}アリールアルキル基、C_{6-20}アリール基、C_{6-20}アリールオキシド基、C_{7-20}アルキルアリールオキシ基、及びC_{7-20}アリールアルキルオキシ基からなる群から選択される。

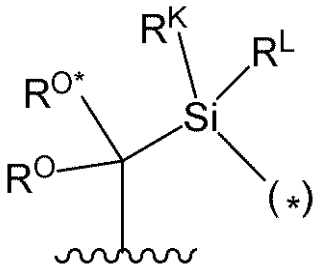
【０１５０】
いくつかの実施形態では、１つのR^O基と１つのR^P基が結合して環状ヒドロカルビル基を形成する。
いくつかの実施形態では、１つのR^O基と１つのR^P基が結合してシクロヘキシル基を

形成する。

【０１５１】

いくつかの実施形態では、Ｌは、式：

【化５８】



であり、

式中、R^K及びR^Lは、各々独立して、水素、非置換Ｃ$_{1-12}$アルキル基、及び非置換又は置換Ｃ$_{6-20}$アリール基から選択され、

R^O及びR^{O*}は、各々独立して、

ハロゲン；

水素；

Ｃ$_{1-30}$ヒドロカルビル基（このヒドロカルビル基は、非置換であるか、又はハロゲン原子、Ｃ$_{1-20}$アルキル基、Ｃ$_{1-20}$アルコキシ基、Ｃ$_{7-20}$アルキルアリール基、Ｃ$_{7-20}$アリールアルキル基、Ｃ$_{6-20}$アリール基、Ｃ$_{6-20}$アリールオキシ基、Ｃ$_{7-20}$アルキルアリールオキシ基、及びＣ$_{7-20}$アリールアルキルオキシ基からなる群から選択される１つ以上の置換基によってさらに置換されている）；

ヘテロ原子含有Ｃ$_{1-30}$ヒドロカルビル基（このヘテロ原子含有ヒドロカルビル基は、非置換であるか、又はハロゲン原子、Ｃ$_{1-20}$アルキル基、Ｃ$_{1-20}$アルコキシ基、Ｃ$_{7-20}$アルキルアリール基、Ｃ$_{7-20}$アリールアルキル基、Ｃ$_{6-20}$アリール基、Ｃ$_{6-20}$アリールオキシ基、Ｃ$_{7-20}$アルキルアリールオキシ基、及びＣ$_{7-20}$アリールアルキルオキシ基からなる群から選択される１つ以上の置換基によってさらに置換されている）；

オキシ基、－ＯＲ’；

アミド基、－ＮＲ’$_2$；

ホスフィド基、－ＰＲ’$_2$；

チオラート基、－ＳＲ’；

式－Ｓｉ（R^a）$_3$のシリル基；

式－Ｇｅ（R^a）$_3$のゲルマニル基；

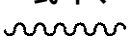
からなる群から選択され；

ここで、R^O及びR^{O*}のうちの２つの基は、任意に結合して環状ヒドロカルビル基又は環状ヘテロ原子含有ヒドロカルビル基を形成してもよく、環状ヒドロカルビル基又は環状ヘテロ原子含有ヒドロカルビル基は、非置換であるか、又はハロゲン原子、Ｃ$_{1-20}$アルキル基、Ｃ$_{1-20}$アルコキシ基、Ｃ$_{7-20}$アルキルアリール基、Ｃ$_{7-20}$アリールアルキル基、Ｃ$_{6-20}$アリール基、Ｃ$_{6-20}$アリールオキシ基、Ｃ$_{7-20}$アルキルアリールオキシ基、Ｃ$_{7-20}$アリールアルキルオキシ基、式－ＮＲ’$_2$のアミド基、式－ＰＲ’$_2$のホスフィド基、式－ＳＲ’のチオラート基、式－Ｓｉ（R^a）$_3$のシリル基、及び式－Ｇｅ（R^a）$_3$のゲルマニル基からなる群から選択される１つ以上の置換基によってさらに置換されており；

ここで、各Ｒ’は、独立して、水素、Ｃ$_{1-20}$アルキル基、及びＣ$_{6-20}$アリール基からなる群から選択され；

ここで、各R^aは、独立して、水素、Ｃ$_{1-8}$アルキル基、Ｃ$_{1-8}$アルコキシ基、Ｃ$_{6-20}$アリールオキシ基及びＣ$_{6-20}$アリール基からなる群から選択され；

式中、



は、Ｐへの結合点を示し；（＊）は、Ｃｙへの結合点を示す。

【０１５２】

いくつかの実施形態では、R^O及びR^{O*}は、各々独立して、ハロゲン、水素、C_{1-30}アルキル基、C_{1-30}アルコキシ基、C_{7-30}アルキルアリール基、C_{7-30}アリールアルキル基、C_{6-30}アリール基、C_{6-30}アリールオキシド基、C_{7-30}アルキルアリールオキシ基、及びC_{7-30}アリールアルキルオキシ基からなる群から選択される。

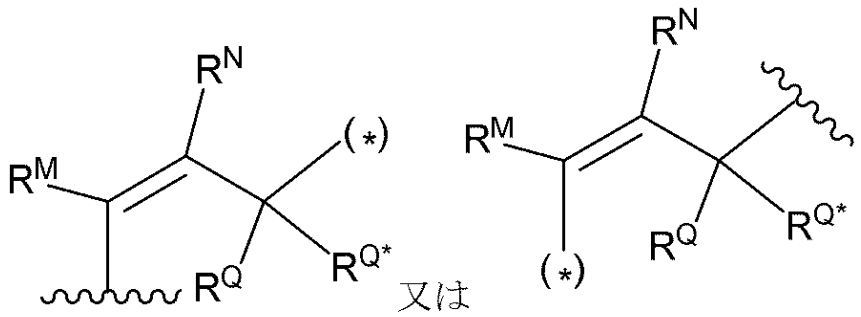
【０１５３】

いくつかの実施形態では、R^O及びR^{O*}は、各々独立して、ハロゲン、水素、C_{1-20}アルキル基、C_{1-20}アルコキシ基、C_{7-20}アルキルアリール基、C_{7-20}アリールアルキル基、C_{6-20}アリール基、C_{6-20}アリールオキシド基、C_{7-20}アルキルアリールオキシ基、及びC_{7-20}アリールアルキルオキシ基からなる群から選択される。

【０１５４】

いくつかの実施形態では、Ｌは、式：

【化５９】



であり、

式中、R^M、R^N、R^Q、及びR^{Q*}は、各々独立して、

ハロゲン；

水素；

C_{1-30}ヒドロカルビル基（このヒドロカルビル基は、非置換であるか、又はハロゲン原子、C_{1-20}アルキル基、C_{1-20}アルコキシ基、C_{7-20}アルキルアリール基、C_{7-20}アリールアルキル基、C_{6-20}アリール基、C_{6-20}アリールオキシ基、C_{7-20}アルキルアリールオキシ基、及びC_{7-20}アリールアルキルオキシ基からなる群から選択される１つ以上の置換基によってさらに置換されている）；

ヘテロ原子含有C_{1-30}ヒドロカルビル基（このヘテロ原子含有ヒドロカルビル基は、非置換であるか、又はハロゲン原子、C_{1-20}アルキル基、C_{1-20}アルコキシ基、C_{7-20}アルキルアリール基、C_{7-20}アリールアルキル基、C_{6-20}アリール基、C_{6-20}アリールオキシ基、C_{7-20}アルキルアリールオキシ基、及びC_{7-20}アリールアルキルオキシ基からなる群から選択される１つ以上の置換基によってさらに置換されている）；

オキシ基、－ＯＲ’；

アミド基、－ＮＲ’$_2$；

ホスフィド基、－ＰＲ’$_2$；

チオラート基、－ＳＲ’；

式－Ｓｉ（R^a）$_3$のシリル基；

式－Ｇｅ（Ｒａ）３のゲルマニル基；
からなる群から選択され；
ここで、ＲＭ及びＲＮの２つの隣接する基は、任意に結合して環状ヒドロカルビル基又は環状ヘテロ原子含有ヒドロカルビル基を形成してもよく、環状ヒドロカルビル基又は環状ヘテロ原子含有ヒドロカルビル基は、非置換であるか、又はハロゲン原子、Ｃ１－２０アルキル基、Ｃ１－２０アルコキシ基、Ｃ７－２０アルキルアリール基、Ｃ７－２０アリールアルキル基、Ｃ６－２０アリール基、Ｃ６－２０アリールオキシ基、Ｃ７－２０アルキルアリールオキシ基、Ｃ７－２０アリールアルキルオキシ基、式－ＮＲ’２のアミド基、式－ＰＲ’２のホスフィド基、式－ＳＲ’のチオラート基、式－Ｓｉ（Ｒａ）３のシリル基、及び式－Ｇｅ（Ｒａ）３のゲルマニル基からなる群から選択される１つ以上の置換基によってさらに置換されており；
ここで、ＲＱ及びＲＱ＊のうちの２つの基は、任意に結合して環状ヒドロカルビル基又は環状ヘテロ原子含有ヒドロカルビル基を形成してもよく、環状ヒドロカルビル基又は環状ヘテロ原子含有ヒドロカルビル基は、非置換であるか、又はハロゲン原子、Ｃ１－２０アルキル基、Ｃ１－２０アルコキシ基、Ｃ７－２０アルキルアリール基、Ｃ７－２０アリールアルキル基、Ｃ６－２０アリール基、Ｃ６－２０アリールオキシ基、Ｃ７－２０アルキルアリールオキシ基、Ｃ７－２０アリールアルキルオキシ基、式－ＮＲ’２のアミド基、式－ＰＲ’２のホスフィド基、式－ＳＲ’のチオラート基、式－Ｓｉ（Ｒａ）３のシリル基、及び式－Ｇｅ（Ｒａ）３のゲルマニル基からなる群から選択される１つ以上の置換基によってさらに置換されており；
ここで、各Ｒ’は、独立して、水素、Ｃ１－２０アルキル基、及びＣ６－２０アリール基からなる群から選択され；
ここで、各Ｒａは、独立して、水素、Ｃ１－８アルキル基、Ｃ１－８アルコキシ基、Ｃ６－２０アリールオキシ基及びＣ６－２０アリール基からなる群から選択され；
式中、

は、Ｐへの結合点を示し；（＊）は、Ｃｙへの結合点を示す。
【０１５５】
いくつかの実施形態では、ＲＭ及びＲＮは、各々独立して、ハロゲン、水素、Ｃ１－３０アルキル基、Ｃ１－３０アルコキシ基、Ｃ７－３０アルキルアリール基、Ｃ７－３０アリールアルキル基、Ｃ６－３０アリール基、Ｃ６－３０アリールオキシド基、Ｃ７－３０アルキルアリールオキシ基、及びＣ７－３０アリールアルキルオキシ基からなる群から選択される。
【０１５６】
いくつかの実施形態では、ＲＭ及びＲＮは、各々独立して、ハロゲン、水素、Ｃ１－２０アルキル基、Ｃ１－２０アルコキシ基、Ｃ７－２０アルキルアリール基、Ｃ７－２０アリールアルキル基、Ｃ６－２０アリール基、Ｃ６－２０アリールオキシド基、Ｃ７－２０アルキルアリールオキシ基、及びＣ７－２０アリールアルキルオキシ基からなる群から選択される。
【０１５７】
いくつかの実施形態では、ＲＭ基とＲＮ基が結合して環状ヒドロカルビル基を形成する。
【０１５８】
いくつかの実施形態では、ＲＭ基とＲＮ基が結合してフェニレン基を形成し、フェニレン基は、非置換であるか、又はハロゲン原子、Ｃ１－２０アルキル基、Ｃ１－２０アルコキシ基、Ｃ７－２０アルキルアリール基、Ｃ７－２０アリールアルキル基、Ｃ６－２０アリール基、Ｃ６－２０アリールオキシ基、Ｃ７－２０アルキルアリールオキシ基、Ｃ７－２０アリールアルキルオキシ基、－ＮＲ’２、アミド基、－ＰＲ’２、ホスフィド基、－ＳＲ’、チオラート基、式－Ｓｉ（Ｒａ）３のシリル基、及び式－Ｇｅ（Ｒａ）３のゲルマニル基か

らなる群から選択される１つ以上の置換基によってさらに置換されており；ここで、各Ｒ’は、独立して、水素、Ｃ$_{1-20}$アルキル基、及びＣ$_{6-20}$アリール基からなる群から選択され；ここで、各Ｒ^{a}は、独立して、水素、Ｃ$_{1-8}$アルキル基、Ｃ$_{1-8}$アルコキシ基、Ｃ$_{6-20}$アリールオキシ基及びＣ$_{6-20}$アリール基からなる群から選択される。

【０１５９】

いくつかの実施形態では、Ｒ^{M}基とＲ^{N}基が結合して、それ以上置換されないフェニレン基を形成する。

【０１６０】

いくつかの実施形態では、Ｒ^{Q}及びＲ^{Q}＊は、各々独立して、ハロゲン、水素、Ｃ$_{1-30}$アルキル基、Ｃ$_{1-30}$アルコキシ基、Ｃ$_{7-30}$アルキルアリール基、Ｃ$_{7-30}$アリールアルキル基、Ｃ$_{6-30}$アリール基、Ｃ$_{6-30}$アリールオキシド基、Ｃ$_{7-30}$アルキルアリールオキシ基、及びＣ$_{7-30}$アリールアルキルオキシ基からなる群から選択される。

【０１６１】

いくつかの実施形態では、Ｒ^{Q}及びＲ^{Q}＊は、各々独立して、ハロゲン、水素、Ｃ$_{1-20}$アルキル基、Ｃ$_{1-20}$アルコキシ基、Ｃ$_{7-20}$アルキルアリール基、Ｃ$_{7-20}$アリールアルキル基、Ｃ$_{6-20}$アリール基、Ｃ$_{6-20}$アリールオキシド基、Ｃ$_{7-20}$アルキルアリールオキシ基、及びＣ$_{7-20}$アリールアルキルオキシ基からなる群から選択される。

【０１６２】

実施形態では、シリル基は、式－Ｓｉ（Ｒ^{a}）$_{3}$を有し、式中、Ｒ^{a}基は、独立して、水素原子、Ｃ$_{1-8}$アルキル又はアルコキシ基、Ｃ$_{6-10}$アリール基、及びＣ$_{6-10}$アリールオキシ基から選択される。

実施形態では、シリル基は、式－Ｓｉ（Ｒａ）$_{3}$を有し、式中、Ｒａ基は、独立して、Ｃ$_{1-8}$アルキル又はアルコキシ基、Ｃ$_{6-10}$アリール基、及びＣ$_{6-10}$アリールオキシ基から選択される。

【０１６３】

本開示のいくつかの実施形態では、オキシ基は、式－ＯＲ’を有し、式中、Ｒ’基は、水素原子、Ｃ$_{1-10}$アルキル基、及びＣ$_{6-10}$アリール基からなる群から選択される。

本開示のいくつかの実施形態では、オキシ基は、式－ＯＲ’を有し、式中、Ｒ’基は、Ｃ$_{1-10}$アルキル基、及びＣ$_{6-10}$アリール基からなる群から選択される。

【０１６４】

本開示のいくつかの実施形態では、アミド基は、式－ＮＲ’$_{2}$を有し、式中、Ｒ’基は、独立して、水素原子、Ｃ$_{1-10}$アルキル基、Ｃ$_{6-10}$アリール基からなる群から選択される。

本開示のいくつかの実施形態では、アミド基は、式－ＮＲ’$_{2}$を有し、式中、Ｒ’基は、独立して、Ｃ$_{1-10}$アルキル基、及びＣ$_{6-10}$アリール基からなる群から選択される。

【０１６５】

本開示のいくつかの実施形態では、ホスフィド基は、式－ＰＲ’$_{2}$を有し、式中、Ｒ’基は、独立して、水素原子、Ｃ１－１０アルキル基、及びＣ$_{6-10}$アリール基からなる群から選択される。

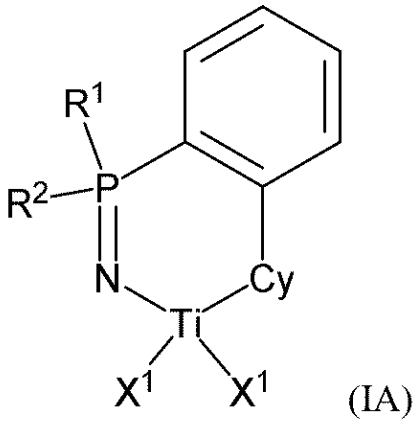
本開示のいくつかの実施形態では、ホスフィド基は、式－ＰＲ’$_{2}$を有し、式中、Ｒ’基は、独立して、Ｃ$_{1-10}$アルキル基、及びＣ$_{6-10}$アリール基からなる群から選択される。

【０１６６】

本開示のいくつかの実施形態では、チオラート基は、式－ＳＲ’を有し、式中、Ｒ’基は、水素原子、Ｃ$_{1-10}$アルキル基、及びＣ$_{6-10}$アリール基からなる群から選択される。

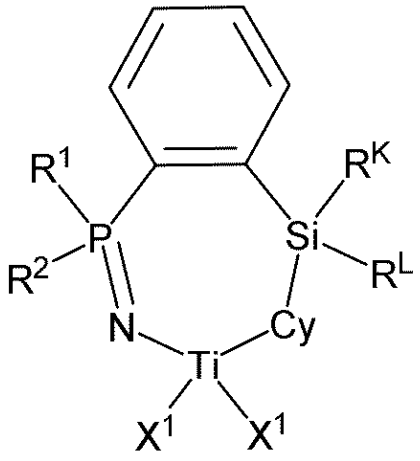
本開示のいくつかの実施形態では、チオラート基は、式－ＳＲ’を有し、式中、Ｒ’基は、Ｃ$_{1-10}$アルキル基、及びＣ$_{6-10}$アリール基からなる群から選択される。

【０１６７】
本開示の実施形態では、式Ｉの有機金属錯体は、式ＩＡ：
【化６０】



(IA)

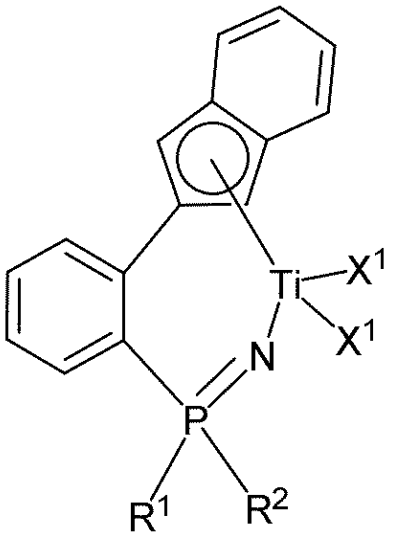
で表される有機金属錯体であり、
式中、Ｒ^{1}、Ｒ^{2}、Ｘ^{1}及びＣｙは、上記式Ｉで定義した通りである。
【０１６８】
本開示の実施形態では、式Ｉの有機金属錯体は、式ＩＢ：
【化６１】



(IB)

で表される有機金属錯体であり、
式中、Ｒ^{1}、Ｒ^{2}、Ｒ^{K}、Ｒ^{L}、Ｘ^{1}及びＣｙは、上記式Ｉで定義した通りである。
【０１６９】
本開示の実施形態では、式Ｉの有機金属錯体は、式ＩＣ：

【化６２】



(IC)

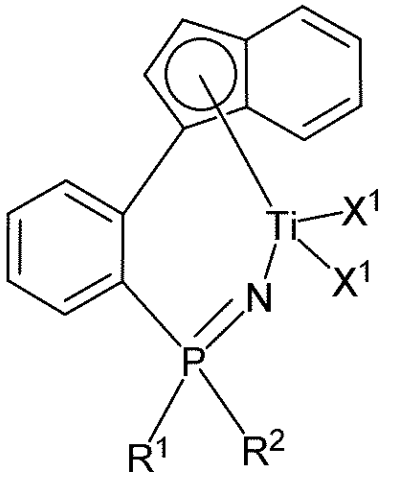
で表される有機金属錯体であり、

式中、R^1、R^2及びX^1の各々は、上記式Ｉで定義した通りである。

【０１７０】

本開示の実施形態では、式Ｉの有機金属錯体は、式ＩＣ＊：

【化６３】



(IC*)

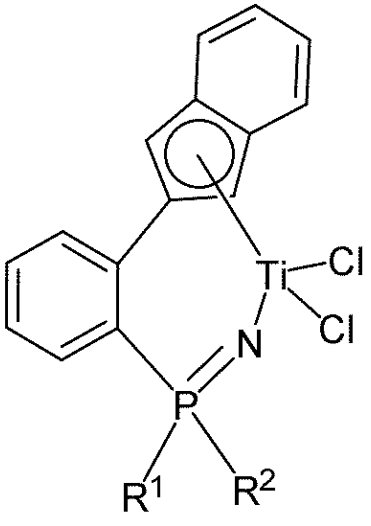
で表される有機金属錯体であり、

式中、R^1、R^2及びX^1の各々は、上記式Ｉで定義した通りである。

【０１７１】

本開示の実施形態では、式Ｉの有機金属錯体は、式ＩＤ：

【化６４】



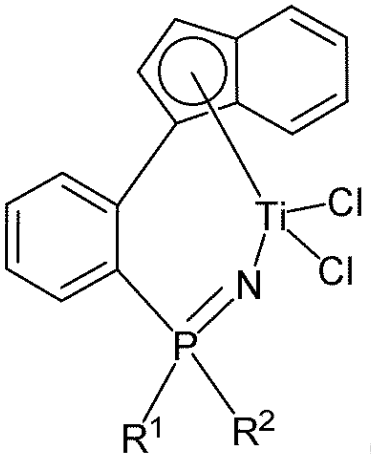
(ID)

で表される有機金属錯体であり、
式中、Ｒ^{1}及びＲ^{2}は、上記式Ｉで定義した通りである。

【０１７２】

本開示の実施形態では、式Ｉの有機金属錯体は、式ＩＤ＊：

【化６５】



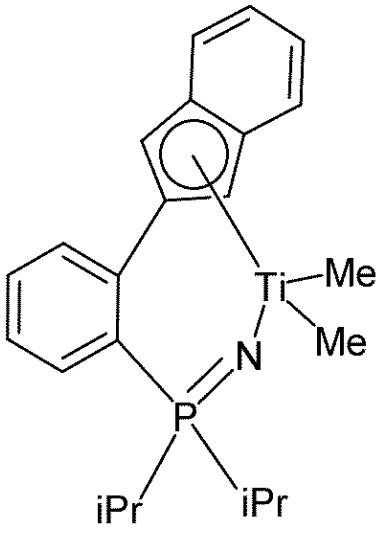
(ID*)

で表される有機金属錯体であり、
式中、Ｒ^{1}及びＲ^{2}は、上記式Ｉで定義した通りである。

【０１７３】

本開示の一実施形態では、式Ｉの有機金属錯体は、式ＩＥ：

【化６６】



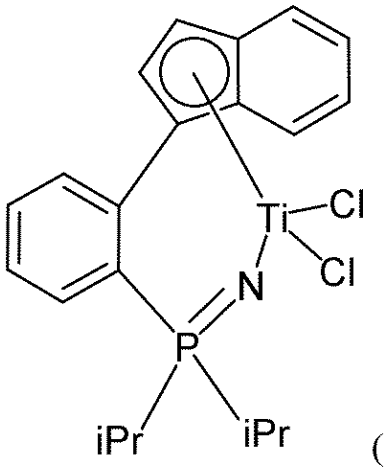
(1F).

で表される有機金属錯体である。

【０１７４】

本開示の一実施形態では、式Ｉの有機金属錯体は、式ＩＥ＊：

【化６７】



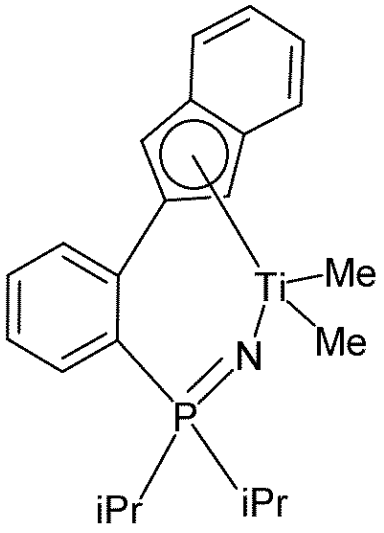
(1E*)

で表される有機金属錯体である。

【０１７５】

本開示の一実施形態では、式Ｉの有機金属錯体は、式ＩＦ：

【化６８】



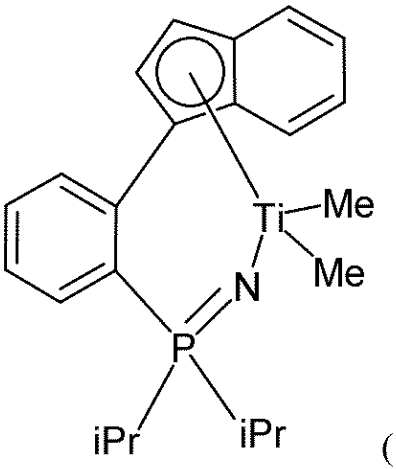
(1F).

で表される有機金属錯体である。

【０１７６】

本開示の一実施形態では、式Ｉの有機金属錯体は、式ＩＦ＊：

【化６９】



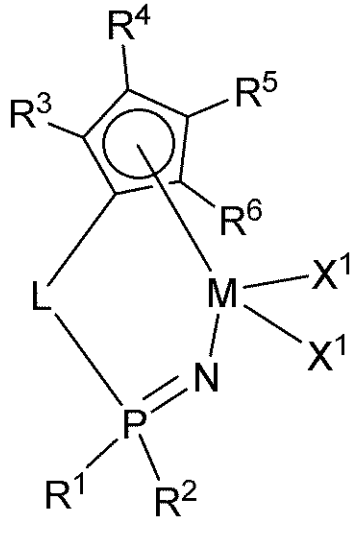
(1F*)

で表される有機金属錯体である。

【０１７７】

本開示の実施形態では、式Ｉの有機金属錯体は、式ＩＩ：

【化７０】



(II)

で表される有機金属錯体であり、

式中、Ｍ、Ｒ^{1}、Ｒ^{2}、Ｘ^{1}及びＬは、上記式Ｉで定義した通りであり；

式中、Ｒ^{3}、Ｒ^{4}、Ｒ^{5}及びＲ^{6}は、各々独立して、

ハロゲン；

水素；

Ｃ$_{1-30}$ヒドロカルビル基（このヒドロカルビル基は、非置換であるか、又はハロゲン原子、Ｃ$_{1-20}$アルキル基、Ｃ$_{1-20}$アルコキシ基、Ｃ$_{7-20}$アルキルアリール基、Ｃ$_{7-20}$アリールアルキル基、Ｃ$_{6-20}$アリール基、Ｃ$_{6-20}$アリールオキシ基、Ｃ$_{7-20}$アルキルアリールオキシ基、及びＣ$_{7-20}$アリールアルキルオキシ基からなる群から選択される１つ以上の置換基によってさらに置換されている）；

ヘテロ原子含有Ｃ$_{1-30}$ヒドロカルビル基（このヘテロ原子含有ヒドロカルビル基は、非置換であるか、又はハロゲン原子、Ｃ$_{1-20}$アルキル基、Ｃ$_{1-20}$アルコキシ基、Ｃ$_{7-20}$アルキルアリール基、Ｃ$_{7-20}$アリールアルキル基、Ｃ$_{6-20}$アリール基、Ｃ$_{6-20}$アリールオキシ基、Ｃ$_{7-20}$アルキルアリールオキシ基、及びＣ$_{7-20}$アリールアルキルオキシ基からなる群から選択される１つ以上の置換基によってさらに置換されている）；

オキシ基、－ＯＲ’；

アミド基、－ＮＲ’$_{2}$；

ホスフィド基、－ＰＲ’$_{2}$；

チオラート基、－ＳＲ’；

式－Ｓｉ（Ｒ^{a}）$_{3}$のシリル基；

式－Ｇｅ（Ｒ^{a}）$_{3}$のゲルマニル基；

からなる群から選択され；

ここで、Ｒ^{3}、Ｒ^{4}、Ｒ^{5}及びＲ^{6}の２つの隣接する基は、任意に結合して環状ヒドロカルビル基又は環状ヘテロ原子含有ヒドロカルビル基を形成してもよく、環状ヒドロカルビル基又は環状ヘテロ原子含有ヒドロカルビル基は、非置換であるか、又はハロゲン原子、Ｃ$_{1-20}$アルキル基、Ｃ$_{1-20}$アルコキシ基、Ｃ$_{7-20}$アルキルアリール基、Ｃ$_{7-20}$アリールアルキル基、Ｃ$_{6-20}$アリール基、Ｃ$_{6-20}$アリールオキシ基、Ｃ$_{7-20}$アルキルアリールオキシ基、Ｃ$_{7-20}$アリールアルキルオキシ基、式－ＮＲ’$_{2}$のアミド基、式－ＰＲ’$_{2}$のホスフィド基、式－ＳＲ’のチオラート基、式－Ｓｉ（Ｒ^{a}）$_{3}$のシリル基、及び式－Ｇｅ（Ｒ^{a}）$_{3}$のゲルマニル基からなる群から選択される１つ以上の置換基によってさらに置換されており；

ここで、各Ｒ’は、独立して、水素、Ｃ1－２０アルキル基、及びＣ６－２０アリール基からなる群から選択され；

ここで、各Ｒａは、独立して、水素、Ｃ１－８アルキル基、Ｃ１－８アルコキシ基、Ｃ６－２０アリールオキシ基及びＣ６－２０アリール基からなる群から選択される、有機金属錯体である。

【０１７８】

いくつかの実施形態では、Ｒ３、Ｒ４、Ｒ５及びＲ６は、各々独立して、ハロゲン；水素；Ｃ１－３０ヒドロカルビル基（このヒドロカルビル基は、非置換であるか、又はハロゲン原子、Ｃ１－２０アルキル基、Ｃ１－２０アルコキシ基、Ｃ７－２０アルキルアリール基、Ｃ７－２０アリールアルキル基、Ｃ６－２０アリール基、Ｃ６－２０アリールオキシ基、Ｃ７－２０アルキルアリールオキシ基、及びＣ７－２０アリールアルキルオキシ基からなる群から選択される１つ以上の置換基によってさらに置換されている）；並びにヘテロ原子含有Ｃ１－３０ヒドロカルビル基（このヘテロ原子含有ヒドロカルビル基は、非置換であるか、又はハロゲン原子、Ｃ１－２０アルキル基、Ｃ１－２０アルコキシ基、Ｃ７－２０アルキルアリール基、Ｃ７－２０アリールアルキル基、Ｃ６－２０アリール基、Ｃ６－２０アリールオキシ基、Ｃ７－２０アルキルアリールオキシ基、及びＣ７－２０アリールアルキルオキシ基からなる群から選択される１つ以上の置換基によってさらに置換されている）；からなる群から選択され；ここで、Ｒ３、Ｒ４、Ｒ５及びＲ６の２つの隣接する基は、任意に結合して環状ヒドロカルビル基又は環状ヘテロ原子含有ヒドロカルビル基を形成してもよく、環状ヒドロカルビル基又は環状ヘテロ原子含有ヒドロカルビル基は、非置換であるか、又はハロゲン原子、Ｃ１－２０アルキル基、Ｃ１－２０アルコキシ基、Ｃ７－２０アルキルアリール基、Ｃ７－２０アリールアルキル基、Ｃ６－２０アリール基、Ｃ６－２０アリールオキシ基、Ｃ７－２０アルキルアリールオキシ基、Ｃ７－２０アリールアルキルオキシ基、－ＮＲ’2、アミド基、－ＰＲ’2、ホスフィド基、－ＳＲ’、チオラート基、式－Ｓｉ（Ｒａ）3のシリル基、及び式－Ｇｅ（Ｒａ）3のゲルマニル基からなる群から選択される１つ以上の置換基によってさらに置換されており；ここで、各Ｒ’は、独立して、水素、Ｃ１－２０アルキル基、及びＣ６－２０アリール基からなる群から選択され；ここで、各Ｒａは、独立して、水素、Ｃ１－８アルキル基、Ｃ１－８アルコキシ基、Ｃ６－２０アリールオキシ基及びＣ６－２０アリール基からなる群から選択される。

【０１７９】

いくつかの実施形態では、Ｒ３、Ｒ４、Ｒ５及びＲ６は、各々独立して、ハロゲン；水素；並びにＣ１－３０ヒドロカルビル基（このヒドロカルビル基は、非置換であるか、又はハロゲン原子、Ｃ１－２０アルキル基、Ｃ１－２０アルコキシ基、Ｃ７－２０アルキルアリール基、Ｃ７－２０アリールアルキル基、Ｃ６－２０アリール基、Ｃ６－２０アリールオキシ基、Ｃ７－２０アルキルアリールオキシ基、及びＣ７－２０アリールアルキルオキシ基からなる群から選択される１つ以上の置換基によってさらに置換されている）；からなる群から選択され；ここで、Ｒ３、Ｒ４、Ｒ５及びＲ６の２つの隣接する基は、任意に結合して環状ヒドロカルビル基を形成してもよく、環状ヒドロカルビル基は、非置換であるか、又はハロゲン原子、Ｃ１－２０アルキル基、Ｃ１－２０アルコキシ基、Ｃ７－２０アルキルアリール基、Ｃ７－２０アリールアルキル基、Ｃ６－２０アリール基、Ｃ６－２０アリールオキシ基、Ｃ７－２０アルキルアリールオキシ基、Ｃ７－２０アリールアルキルオキシ基、－ＮＲ’2、アミド基、－ＰＲ’2、ホスフィド基、－ＳＲ’、チオラート基、式－Ｓｉ（Ｒａ）3のシリル基、及び式－Ｇｅ（Ｒａ）3のゲルマニル基からなる群から選択される１つ以上の置換基によってさらに置換されており；ここで、各Ｒ’は、独立して、水素、Ｃ１－２０アルキル基、及びＣ６－２０アリール基からなる群から選択され；ここで、各Ｒａは、独立して、水素、Ｃ１－８アルキル基、Ｃ１－８アルコキシ基、Ｃ６－２０アリールオキシ基及びＣ６－２０アリール基からなる群から選択される。

【０１８０】

いくつかの実施形態では、Ｒ３、Ｒ４、Ｒ５及びＲ６は、各々独立して、ハロゲン；水素；並びにヘテロ原子含有Ｃ１－３０ヒドロカルビル基（このヘテロ原子含有ヒドロカル

ビル基は、非置換であるか、又はハロゲン原子、C_{1-20}アルキル基、C_{1-20}アルコキシ基、C_{7-20}アルキルアリール基、C_{7-20}アリールアルキル基、C_{6-20}アリール基、C_{6-20}アリールオキシ基、C_{7-20}アルキルアリールオキシ基、及びC_{7-20}アリールアルキルオキシ基からなる群から選択される１つ以上の置換基によってさらに置換されている）；からなる群から選択され；ここで、R^3、R^4、R^5及びR^6の２つの隣接する基は、任意に結合して環状ヘテロ原子含有ヒドロカルビル基を形成してもよく、環状ヘテロ原子含有ヒドロカルビル基は、非置換であるか、又はハロゲン原子、C_{1-20}アルキル基、C_{1-20}アルコキシ基、C_{7-20}アルキルアリール基、C_{7-20}アリールアルキル基、C_{6-20}アリール基、C_{6-20}アリールオキシ基、C_{7-20}アルキルアリールオキシ基、C_{7-20}アリールアルキルオキシ基、$-NR'_2$、アミド基、$-PR'_2$、ホスフィド基、$-SR'$、チオラート基、式$-Si(R^a)_3$のシリル基、及び式$-Ge(R^a)_3$のゲルマニル基からなる群から選択される１つ以上の置換基によってさらに置換されており；ここで、各R'は、独立して、水素、C_{1-20}アルキル基、及びC_{6-20}アリール基からなる群から選択され；ここで、各R^aは、独立して、水素、C_{1-8}アルキル基、C_{1-8}アルコキシ基、C_{6-20}アリールオキシ基及びC_{6-20}アリール基からなる群から選択される。

【０１８１】

いくつかの実施形態では、R^3、R^4、R^5及びR^6は、各々独立して、ハロゲン、水素、C_{1-30}アルキル基、C_{1-30}アルコキシ基、C_{7-30}アルキルアリール基、C_{7-30}アリールアルキル基、C_{6-30}アリール基、C_{6-30}アリールオキシド基、C_{7-30}アルキルアリールオキシ基、及びC_{7-30}アリールアルキルオキシ基からなる群から選択される。

【０１８２】

いくつかの実施形態では、R^3、R^4、R^5及びR^6は、各々独立して、ハロゲン、水素、C_{1-20}アルキル基、C_{1-20}アルコキシ基、C_{7-20}アルキルアリール基、C_{7-20}アリールアルキル基、C_{6-20}アリール基、C_{6-20}アリールオキシド基、C_{7-20}アルキルアリールオキシ基、及びC_{7-20}アリールアルキルオキシ基からなる群から選択される。

【０１８３】

いくつかの実施形態では、R^3、R^4、R^5及びR^6は、各々独立して、ハロゲン、水素、及びC_{1-30}ヒドロカルビル基からなる群から選択され、このヒドロカルビル基は、非置換であるか、又は１つ以上のハロゲン原子によってさらに置換されている。

【０１８４】

いくつかの実施形態では、R^3、R^4、R^5及びR^6は、各々独立して、ハロゲン、水素、及びC_{1-30}ヘテロ原子含有ヒドロカルビル基からなる群から選択され、このヘテロ原子含有ヒドロカルビル基は、非置換であるか、又は１つ以上のハロゲン原子によってさらに置換されている。

【０１８５】

いくつかの実施形態では、R^3、R^4、R^5及びR^6は、各々独立して、水素及びC_{1-30}ヒドロカルビル基からなる群から選択され、このヒドロカルビル基は、非置換であるか、又は１つ以上のハロゲン原子によってさらに置換されている。

【０１８６】

いくつかの実施形態では、R^3、R^4、R^5及びR^6は、各々独立して、水素及びC_{1-30}ヘテロ原子含有ヒドロカルビル基からなる群から選択され、このヘテロ原子含有ヒドロカルビル基は、非置換であるか、又は１つ以上のハロゲン原子によってさらに置換されている。

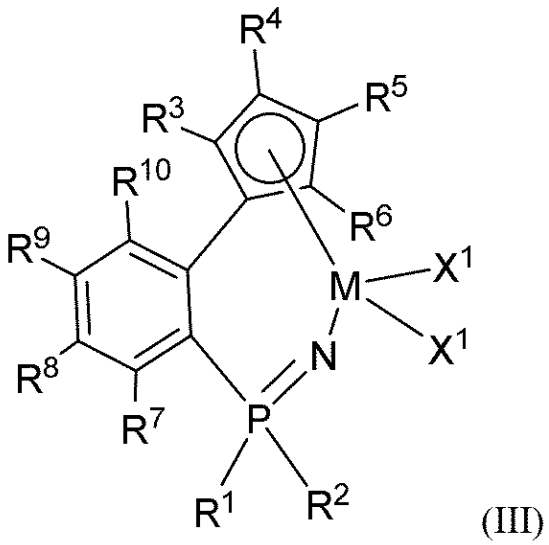
【０１８７】

いくつかの実施形態では、R^3、R^4、R^5及びR^6は、各々水素である。

【０１８８】

本開示の実施形態では、式ＩＩの有機金属錯体は、式ＩＩＩ：

【化７１】



(III)

で表される有機金属錯体であり、

式中、Ｍ、Ｒ^{1}、Ｒ^{2}、Ｒ^{3}、Ｒ^{4}、Ｒ^{5}、Ｒ^{6}及びＸ^{1}は、上記式Ｉ及び式ＩＩで定義した通りであり；

式中、Ｒ^{7}、Ｒ^{8}、Ｒ^{9}及びＲ^{10}は、各々独立して、

ハロゲン；

水素；

Ｃ$_{1-30}$ヒドロカルビル基（このヒドロカルビル基は、非置換であるか、又はハロゲン原子、Ｃ$_{1-20}$アルキル基、Ｃ$_{1-20}$アルコキシ基、Ｃ$_{7-20}$アルキルアリール基、Ｃ$_{7-20}$アリールアルキル基、Ｃ$_{6-20}$アリール基、Ｃ$_{6-20}$アリールオキシ基、Ｃ$_{7-20}$アルキルアリールオキシ基、及びＣ$_{7-20}$アリールアルキルオキシ基からなる群から選択される１つ以上の置換基によってさらに置換されている）；

ヘテロ原子含有Ｃ$_{1-30}$ヒドロカルビル基（このヘテロ原子含有ヒドロカルビル基は、非置換であるか、又はハロゲン原子、Ｃ$_{1-20}$アルキル基、Ｃ$_{1-20}$アルコキシ基、Ｃ$_{7-20}$アルキルアリール基、Ｃ$_{7-20}$アリールアルキル基、Ｃ$_{6-20}$アリール基、Ｃ$_{6-20}$アリールオキシ基、Ｃ$_{7-20}$アルキルアリールオキシ基、及びＣ$_{7-20}$アリールアルキルオキシ基からなる群から選択される１つ以上の置換基によってさらに置換されている）；

オキシ基、－ＯＲ’；

アミド基、－ＮＲ’$_{2}$；

ホスフィド基、－ＰＲ’$_{2}$；

チオラート基、－ＳＲ’；

式－Ｓｉ（Ｒ^{a}）$_{3}$のシリル基；

式－Ｇｅ（Ｒ^{a}）$_{3}$のゲルマニル基；

からなる群から選択され；

ここで、Ｒ^{7}、Ｒ^{8}、Ｒ^{9}及びＲ^{10}の２つの隣接する基は、任意に結合して環状ヒドロカルビル基又は環状ヘテロ原子含有ヒドロカルビル基を形成してもよく、環状ヒドロカルビル基又は環状ヘテロ原子含有ヒドロカルビル基は、非置換であるか、又はハロゲン原子、Ｃ$_{1-20}$アルキル基、Ｃ$_{1-20}$アルコキシ基、Ｃ$_{7-20}$アルキルアリール基、Ｃ$_{7-20}$アリールアルキル基、Ｃ$_{6-20}$アリール基、Ｃ$_{6-20}$アリールオキシ基、Ｃ$_{7-20}$アルキルアリールオキシ基、Ｃ$_{7-20}$アリールアルキルオキシ基、式－ＮＲ’$_{2}$のアミド基、式－ＰＲ’$_{2}$のホスフィド基、式－ＳＲ’のチオラート基、式－Ｓｉ（Ｒ^{a}）$_{3}$のシリル基、及び式－Ｇｅ（Ｒ^{a}）$_{3}$のゲルマニル基からなる群から選択される１つ以上

の置換基によってさらに置換されており；
ここで、各Ｒ’は、独立して、水素、Ｃ$_{1-20}$アルキル基、及びＣ$_{6-20}$アリール基からなる群から選択され；
ここで、各Ｒ^{a}は、独立して、水素、Ｃ$_{1-8}$アルキル基、Ｃ$_{1-8}$アルコキシ基、Ｃ$_{6-20}$アリールオキシ基及びＣ$_{6-20}$アリール基からなる群から選択される、有機金属錯体である。
【０１８９】
いくつかの実施形態では、Ｒ^{7}、Ｒ^{8}、Ｒ^{9}及びＲ^{10}は、各々独立して、ハロゲン；水素；Ｃ$_{1-30}$ヒドロカルビル基（このヒドロカルビル基は、非置換であるか、又はハロゲン原子、Ｃ$_{1-20}$アルキル基、Ｃ$_{1-20}$アルコキシ基、Ｃ$_{7-20}$アルキルアリール基、Ｃ$_{7-20}$アリールアルキル基、Ｃ$_{6-20}$アリール基、Ｃ$_{6-20}$アリールオキシ基、Ｃ$_{7-20}$アルキルアリールオキシ基、及びＣ$_{7-20}$アリールアルキルオキシ基からなる群から選択される１つ以上の置換基によってさらに置換されている）；並びにヘテロ原子含有Ｃ$_{1-30}$ヒドロカルビル基（このヘテロ原子含有ヒドロカルビル基は、非置換であるか、又はハロゲン原子、Ｃ$_{1-20}$アルキル基、Ｃ$_{1-20}$アルコキシ基、Ｃ$_{7-20}$アルキルアリール基、Ｃ$_{7-20}$アリールアルキル基、Ｃ$_{6-20}$アリール基、Ｃ$_{6-20}$アリールオキシ基、Ｃ$_{7-20}$アルキルアリールオキシ基、及びＣ$_{7-20}$アリールアルキルオキシ基からなる群から選択される１つ以上の置換基によってさらに置換されている）；からなる群から選択され；ここで、Ｒ^{7}、Ｒ^{8}、Ｒ^{9}及びＲ^{10}の２つの隣接する基は、任意に結合して環状ヒドロカルビル基又は環状ヘテロ原子含有ヒドロカルビル基を形成してもよく、環状ヒドロカルビル基又は環状ヘテロ原子含有ヒドロカルビル基は、非置換であるか、又はハロゲン原子、Ｃ$_{1-20}$アルキル基、Ｃ$_{1-20}$アルコキシ基、Ｃ$_{7-20}$アルキルアリール基、Ｃ$_{7-20}$アリールアルキル基、Ｃ$_{6-20}$アリール基、Ｃ$_{6-20}$アリールオキシ基、Ｃ$_{7-20}$アルキルアリールオキシ基、Ｃ$_{7-20}$アリールアルキルオキシ基、－ＮＲ’$_{2}$、アミド基、－ＰＲ’$_{2}$、ホスフィド基、－ＳＲ’、チオラート基、式－Ｓｉ（Ｒ^{a}）$_{3}$のシリル基、及び式－Ｇｅ（Ｒ^{a}）$_{3}$のゲルマニル基からなる群から選択される１つ以上の置換基によってさらに置換されており；ここで、各Ｒ’は、独立して、水素、Ｃ$_{1-20}$アルキル基、及びＣ$_{6-20}$アリール基からなる群から選択され；ここで、各Ｒ^{a}は、独立して、水素、Ｃ$_{1-8}$アルキル基、Ｃ$_{1-8}$アルコキシ基、Ｃ$_{6-20}$アリールオキシ基及びＣ$_{6-20}$アリール基からなる群から選択される。
【０１９０】
いくつかの実施形態では、Ｒ^{7}、Ｒ^{8}、Ｒ^{9}及びＲ^{10}は、各々独立して、ハロゲン；水素；並びにＣ$_{1-30}$ヒドロカルビル基（このヒドロカルビル基は、非置換であるか、又はハロゲン原子、Ｃ$_{1-20}$アルキル基、Ｃ$_{1-20}$アルコキシ基、Ｃ$_{7-20}$アルキルアリール基、Ｃ$_{7-20}$アリールアルキル基、Ｃ$_{6-20}$アリール基、Ｃ$_{6-20}$アリールオキシ基、Ｃ$_{7-20}$アルキルアリールオキシ基、及びＣ$_{7-20}$アリールアルキルオキシ基からなる群から選択される１つ以上の置換基によってさらに置換されている）；からなる群から選択され；ここで、Ｒ^{7}、Ｒ^{8}、Ｒ^{9}及びＲ^{10}の２つの隣接する基は、任意に結合して環状ヒドロカルビル基を形成してもよく、環状ヒドロカルビル基は、非置換であるか、又はハロゲン原子、Ｃ$_{1-20}$アルキル基、Ｃ$_{1-20}$アルコキシ基、Ｃ$_{7-20}$アルキルアリール基、Ｃ$_{7-20}$アリールアルキル基、Ｃ$_{6-20}$アリール基、Ｃ$_{6-20}$アリールオキシ基、Ｃ$_{7-20}$アルキルアリールオキシ基、Ｃ$_{7-20}$アリールアルキルオキシ基、－ＮＲ’$_{2}$、アミド基、－ＰＲ’$_{2}$、ホスフィド基、－ＳＲ’、チオラート基、式－Ｓｉ（Ｒ^{a}）$_{3}$のシリル基、及び式－Ｇｅ（Ｒ^{a}）$_{3}$のゲルマニル基からなる群から選択される１つ以上の置換基によってさらに置換されており；ここで、各Ｒ’は、独立して、水素、Ｃ$_{1-20}$アルキル基、及びＣ$_{6-20}$アリール基からなる群から選択され；ここで、各Ｒ^{a}は、独立して、水素、Ｃ$_{1-8}$アルキル基、Ｃ$_{1-8}$アルコキシ基、Ｃ$_{6-20}$アリールオキシ基及びＣ$_{6-20}$アリール基からなる群から選択される。
【０１９１】
いくつかの実施形態では、Ｒ^{7}、Ｒ^{8}、Ｒ^{9}及びＲ^{10}は、各々独立して、ハロゲン；

水素；並びにヘテロ原子含有C_{1-30}ヒドロカルビル基（このヘテロ原子含有ヒドロカルビル基は、非置換であるか、又はハロゲン原子、C_{1-20}アルキル基、C_{1-20}アルコキシ基、C_{7-20}アルキルアリール基、C_{7-20}アリールアルキル基、C_{6-20}アリール基、C_{6-20}アリールオキシ基、C_{7-20}アルキルアリールオキシ基、及びC_{7-20}アリールアルキルオキシ基からなる群から選択される１つ以上の置換基によってさらに置換されている）；からなる群から選択され；ここで、R^7、R^8、R^9及びR^{10}の２つの隣接する基は、任意に結合して環状ヘテロ原子含有ヒドロカルビル基を形成してもよく、環状ヘテロ原子含有ヒドロカルビル基は、非置換であるか、又はハロゲン原子、C_{1-20}アルキル基、C_{1-20}アルコキシ基、C_{7-20}アルキルアリール基、C_{7-20}アリールアルキル基、C_{6-20}アリール基、C_{6-20}アリールオキシ基、C_{7-20}アルキルアリールオキシ基、C_{7-20}アリールアルキルオキシ基、$-NR'_2$、アミド基、$-PR'_2$、ホスフィド基、$-SR'$、チオラート基、式$-Si(R^a)_3$のシリル基、及び式$-Ge(R^a)_3$のゲルマニル基からなる群から選択される１つ以上の置換基によってさらに置換されており；ここで、各R'は、独立して、水素、C_{1-20}アルキル基、及びC_{6-20}アリール基からなる群から選択され；ここで、各R^aは、独立して、水素、C_{1-8}アルキル基、C_{1-8}アルコキシ基、C_{6-20}アリールオキシ基及びC_{6-20}アリール基からなる群から選択される。

【０１９２】

いくつかの実施形態では、R^7、R^8、R^9及びR^{10}は、各々独立して、ハロゲン、水素、C_{1-30}アルキル基、C_{1-30}アルコキシ基、C_{7-30}アルキルアリール基、C_{7-30}アリールアルキル基、C_{6-30}アリール基、C_{6-30}アリールオキシド基、C_{7-30}アルキルアリールオキシ基、及びC_{7-30}アリールアルキルオキシ基からなる群から選択される。

【０１９３】

いくつかの実施形態では、R^7、R^8、R^9及びR^{10}は、各々独立して、ハロゲン、水素、C_{1-20}アルキル基、C_{1-20}アルコキシ基、C_{7-20}アルキルアリール基、C_{7-20}アリールアルキル基、C_{6-20}アリール基、C_{6-20}アリールオキシド基、C_{7-20}アルキルアリールオキシ基、及びC_{7-20}アリールアルキルオキシ基からなる群から選択される。

【０１９４】

いくつかの実施形態では、R^7、R^8、R^9及びR^{10}は、各々独立して、ハロゲン、水素、及びC_{1-30}ヒドロカルビル基からなる群から選択され、このヒドロカルビル基は、非置換であるか、又は１つ以上のハロゲン原子によってさらに置換されている。

【０１９５】

いくつかの実施形態では、R^7、R^8、R^9及びR^{10}は、各々独立して、ハロゲン、水素、及びC_{1-30}ヘテロ原子含有ヒドロカルビル基からなる群から選択され、このヘテロ原子含有ヒドロカルビル基は、非置換であるか、又は１つ以上のハロゲン原子によってさらに置換されている。

【０１９６】

いくつかの実施形態では、R^7、R^8、R^9及びR^{10}は、各々独立して、水素及びC_{1-30}ヒドロカルビル基からなる群から選択され、このヒドロカルビル基は、非置換であるか、又は１つ以上のハロゲン原子によってさらに置換されている。

【０１９７】

いくつかの実施形態では、R^7、R^8、R^9及びR^{10}は、各々独立して、水素及びC_{1-30}ヘテロ原子含有ヒドロカルビル基からなる群から選択され、このヘテロ原子含有ヒドロカルビル基は、非置換であるか、又は１つ以上のハロゲン原子によってさらに置換されている。

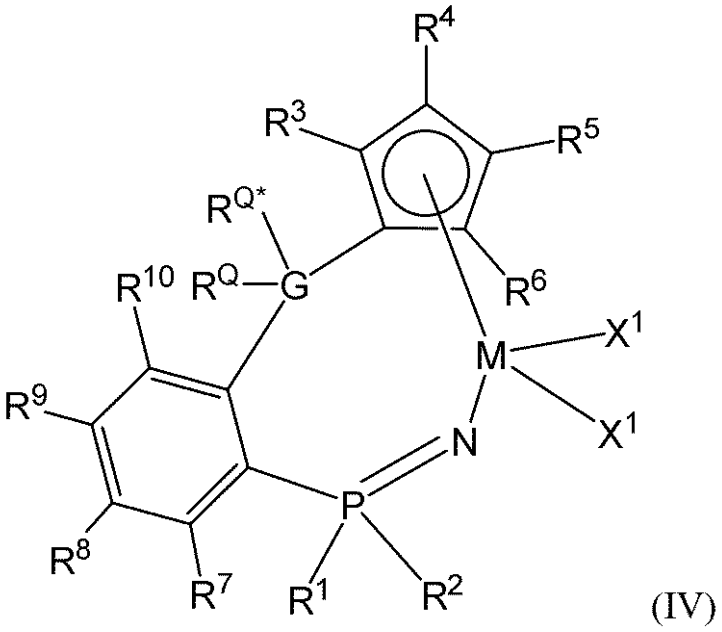
【０１９８】

いくつかの実施形態では、R^7、R^8、R^9及びR^{10}は、各々水素である。

【０１９９】

本開示の実施形態では、式ＩＩの有機金属錯体は、式ＩＶ：

【化７２】



(IV)

で表される有機金属錯体であり、

式中、Ｍ、Ｒ^{1}、Ｒ^{2}、Ｒ^{3}、Ｒ^{4}、Ｒ^{5}、Ｒ^{6}及びＸ^{1}は、上記式Ｉ及び式ＩＩで定義した通りであり；

式中、Ｇは、第１４族元素であり；

式中、Ｒ^{Q}及びＲ^{Q}＊は、各々独立して、

ハロゲン；

水素；

Ｃ$_{1-30}$ヒドロカルビル基（このヒドロカルビル基は、非置換であるか、又はハロゲン原子、Ｃ$_{1-20}$アルキル基、Ｃ$_{1-20}$アルコキシ基、Ｃ$_{7-20}$アルキルアリール基、Ｃ$_{7-20}$アリールアルキル基、Ｃ$_{6-20}$アリール基、Ｃ$_{6-20}$アリールオキシ基、Ｃ$_{7-20}$アルキルアリールオキシ基、及びＣ$_{7-20}$アリールアルキルオキシ基からなる群から選択される１つ以上の置換基によってさらに置換されている）；

ヘテロ原子含有Ｃ$_{1-30}$ヒドロカルビル基（このヘテロ原子含有ヒドロカルビル基は、非置換であるか、又はハロゲン原子、Ｃ$_{1-20}$アルキル基、Ｃ$_{1-20}$アルコキシ基、Ｃ$_{7-20}$アルキルアリール基、Ｃ$_{7-20}$アリールアルキル基、Ｃ$_{6-20}$アリール基、Ｃ$_{6-20}$アリールオキシ基、Ｃ$_{7-20}$アルキルアリールオキシ基、及びＣ$_{7-20}$アリールアルキルオキシ基からなる群から選択される１つ以上の置換基によってさらに置換されている）；

ここで、Ｒ^{Q}及びＲ^{Q}＊の基は、任意に結合して環状ヒドロカルビル基又は環状ヘテロ原子含有ヒドロカルビル基を形成してもよく、環状ヒドロカルビル基又は環状ヘテロ原子含有ヒドロカルビル基は、非置換であるか、又はハロゲン原子、Ｃ$_{1-20}$アルキル基、Ｃ$_{1-20}$アルコキシ基、Ｃ$_{7-20}$アルキルアリール基、Ｃ$_{7-20}$アリールアルキル基、Ｃ$_{6-20}$アリール基、Ｃ$_{6-20}$アリールオキシ基、Ｃ$_{7-20}$アルキルアリールオキシ基、Ｃ$_{7-20}$アリールアルキルオキシ基、式－ＮＲ’$_{2}$のアミド基、式－ＰＲ’$_{2}$のホスフィド基、式－ＳＲ’のチオラート基、式－Ｓｉ（Ｒ^{a}）$_{3}$のシリル基、及び式－Ｇｅ（Ｒ^{a}）$_{3}$のゲルマニル基からなる群から選択される１つ以上の置換基によってさらに置換されており；

式中、Ｒ^{7}、Ｒ^{8}、Ｒ^{9}及びＲ^{10}は、各々独立して、

ハロゲン；

水素；
C_{1-30}ヒドロカルビル基（このヒドロカルビル基は、非置換であるか、又はハロゲン原子、C_{1-20}アルキル基、C_{1-20}アルコキシ基、C_{7-20}アルキルアリール基、C_{7-20}アリールアルキル基、C_{6-20}アリール基、C_{6-20}アリールオキシ基、C_{7-20}アルキルアリールオキシ基、及びC_{7-20}アリールアルキルオキシ基からなる群から選択される１つ以上の置換基によってさらに置換されている）；
ヘテロ原子含有C_{1-30}ヒドロカルビル基（このヘテロ原子含有ヒドロカルビル基は、非置換であるか、又はハロゲン原子、C_{1-20}アルキル基、C_{1-20}アルコキシ基、C_{7-20}アルキルアリール基、C_{7-20}アリールアルキル基、C_{6-20}アリール基、C_{6-20}アリールオキシ基、C_{7-20}アルキルアリールオキシ基、及びC_{7-20}アリールアルキルオキシ基からなる群から選択される１つ以上の置換基によってさらに置換されている）；
オキシ基、－ＯＲ’；
アミド基、－NR'_2；
ホスフィド基、－PR'_2；
チオラート基、－ＳＲ’；
式－Ｓｉ（R^a）$_3$のシリル基；
式－Ｇｅ（R^a）$_3$のゲルマニル基；
からなる群から選択され；
ここで、R^7、R^8、R^9及びR^{10}の２つの隣接する基は、任意に結合して環状ヒドロカルビル基又は環状ヘテロ原子含有ヒドロカルビル基を形成してもよく、環状ヒドロカルビル基又は環状ヘテロ原子含有ヒドロカルビル基は、非置換であるか、又はハロゲン原子、C_{1-20}アルキル基、C_{1-20}アルコキシ基、C_{7-20}アルキルアリール基、C_{7-20}アリールアルキル基、C_{6-20}アリール基、C_{6-20}アリールオキシ基、C_{7-20}アルキルアリールオキシ基、C_{7-20}アリールアルキルオキシ基、式－NR'_2のアミド基、式－PR'_2のホスフィド基、式－ＳＲ’のチオラート基、式－Ｓｉ（R^a）$_3$のシリル基、及び式－Ｇｅ（R^a）$_3$のゲルマニル基からなる群から選択される１つ以上の置換基によってさらに置換されており；
ここで、各Ｒ’は、独立して、水素、C_{1-20}アルキル基、及びC_{6-20}アリール基からなる群から選択され；
ここで、各R^aは、独立して、水素、C_{1-8}アルキル基、C_{1-8}アルコキシ基、C_{6-20}アリールオキシ基及びC_{6-20}アリール基からなる群から選択される、有機金属錯体である。
【０２００】
いくつかの実施形態では、Ｇは、炭素Ｃ、又はシリコンＳｉ、又はゲルマニウムＧｅである。
いくつかの実施形態では、Ｇは、炭素Ｃ、又はシリコンＳｉである。
いくつかの実施形態では、Ｇは、炭素Ｃである。
いくつかの実施形態では、Ｇは、シリコンＳｉである。
いくつかの実施形態では、Ｇは、ゲルマニウムＧｅである。
【０２０１】
いくつかの実施形態では、R^Q及びR^{Q*}は、各々独立して、ハロゲン、水素、C_{1-30}アルキル基、C_{1-30}アルコキシ基、C_{7-30}アルキルアリール基、C_{7-30}アリールアルキル基、C_{6-30}アリール基、C_{6-30}アリールオキシド基、C_{7-30}アルキルアリールオキシ基、及びC_{7-30}アリールアルキルオキシ基からなる群から選択される。
【０２０２】
いくつかの実施形態では、R^Q及びR^{Q*}は、各々独立して、ハロゲン、水素、C_{1-20}アルキル基、C_{1-20}アルコキシ基、C_{7-20}アルキルアリール基、C_{7-20}アリールアルキル基、C_{6-20}アリール基、C_{6-20}アリールオキシド基、C_{7-20}ア

ルキルアリールオキシ基、及びC7－20アリールアルキルオキシ基からなる群から選択される。

【0203】

実施形態では、、RQ及びRQ＊は、各々独立して、水素、C1－20アルキル基及びC6－20アリール基からなる群から選択される。

【0204】

実施形態では、各RQ及びRQ＊は、各々独立して、C1－8アルキル基である。

実施形態では、各RQ及びRQ＊は、各々独立して、C6－20アリール基である。

実施形態では、RQは水素であり、RQ＊はC1－8アルキル基である。

実施形態では、RQは水素であり、RQ＊はC6－20アリール基である。

実施形態では、RQは水素であり、RQ＊はメチル基である。

実施形態では、RQは水素であり、RQ＊はフェニル基である。

実施形態では、RQ及びRQ＊は、各々水素である。

【0205】

いくつかの実施形態では、R7、R8、R9及びR10は、各々独立して、ハロゲン；水素；C1－30ヒドロカルビル基（このヒドロカルビル基は、非置換であるか、又はハロゲン原子、C1－20アルキル基、C1－20アルコキシ基、C7－20アルキルアリール基、C7－20アリールアルキル基、C6－20アリール基、C6－20アリールオキシ基、C7－20アルキルアリールオキシ基、及びC7－20アリールアルキルオキシ基からなる群から選択される1つ以上の置換基によってさらに置換されている）；並びにヘテロ原子含有C1－30ヒドロカルビル基（このヘテロ原子含有ヒドロカルビル基は、非置換であるか、又はハロゲン原子、C1－20アルキル基、C1－20アルコキシ基、C7－20アルキルアリール基、C7－20アリールアルキル基、C6－20アリール基、C6－20アリールオキシ基、C7－20アルキルアリールオキシ基、及びC7－20アリールアルキルオキシ基からなる群から選択される1つ以上の置換基によってさらに置換されている）；からなる群から選択され；ここで、R7、R8、R9及びR10の2つの隣接する基は、任意に結合して環状ヒドロカルビル基又は環状ヘテロ原子含有ヒドロカルビル基を形成してもよく、環状ヒドロカルビル基又は環状ヘテロ原子含有ヒドロカルビル基は、非置換であるか、又はハロゲン原子、C1－20アルキル基、C1－20アルコキシ基、C7－20アルキルアリール基、C7－20アリールアルキル基、C6－20アリール基、C6－20アリールオキシ基、C7－20アルキルアリールオキシ基、C7－20アリールアルキルオキシ基、－NR’2、アミド基、－PR’2、ホスフィド基、－SR’、チオラート基、式－Si（Ra）3のシリル基、及び式－Ge（Ra）3のゲルマニル基からなる群から選択される1つ以上の置換基によってさらに置換されており；ここで、各R’は、独立して、水素、C1－20アルキル基、及びC6－20アリール基からなる群から選択され；ここで、各Raは、独立して、水素、C1－8アルキル基、C1－8アルコキシ基、C6－20アリールオキシ基及びC6－20アリール基からなる群から選択される。

【0206】

いくつかの実施形態では、R7、R8、R9及びR10は、各々独立して、ハロゲン；水素；並びにC1－30ヒドロカルビル基（このヒドロカルビル基は、非置換であるか、又はハロゲン原子、C1－20アルキル基、C1－20アルコキシ基、C7－20アルキルアリール基、C7－20アリールアルキル基、C6－20アリール基、C6－20アリールオキシ基、C7－20アルキルアリールオキシ基、及びC7－20アリールアルキルオキシ基からなる群から選択される1つ以上の置換基によってさらに置換されている）；からなる群から選択され；ここで、R7、R8、R9及びR10の2つの隣接する基は、任意に結合して環状ヒドロカルビル基を形成してもよく、環状ヒドロカルビル基は、非置換であるか、又はハロゲン原子、C1－20アルキル基、C1－20アルコキシ基、C7－20アルキルアリール基、C7－20アリールアルキル基、C6－20アリール基、C6－20アリールオキシ基、C7－20アルキルアリールオキシ基、C7－20アリールアルキルオキシ基、－NR’2、アミド基、－PR’2、ホスフィド基、－SR’、チオラート基、式－S

ｉ（Ｒ^{a}）$_{3}$のシリル基、及び式－Ｇｅ（Ｒ^{a}）$_{3}$のゲルマニル基からなる群から選択される１つ以上の置換基によってさらに置換されており；ここで、各Ｒ’は、独立して、水素、Ｃ$_{1-20}$アルキル基、及びＣ$_{6-20}$アリール基からなる群から選択され；ここで、各Ｒ^{a}は、独立して、水素、Ｃ$_{1-8}$アルキル基、Ｃ$_{1-8}$アルコキシ基、Ｃ$_{6-20}$アリールオキシ基及びＣ$_{6-20}$アリール基からなる群から選択される。

【０２０７】

いくつかの実施形態では、Ｒ^{7}、Ｒ^{8}、Ｒ^{9}及びＲ^{10}は、各々独立して、ハロゲン；水素；並びにヘテロ原子含有Ｃ$_{1-30}$ヒドロカルビル基（このヘテロ原子含有ヒドロカルビル基は、非置換であるか、又はハロゲン原子、Ｃ$_{1-20}$アルキル基、Ｃ$_{1-20}$アルコキシ基、Ｃ$_{7-20}$アルキルアリール基、Ｃ$_{7-20}$アリールアルキル基、Ｃ$_{6-20}$アリール基、Ｃ$_{6-20}$アリールオキシ基、Ｃ$_{7-20}$アルキルアリールオキシ基、及びＣ$_{7-20}$アリールアルキルオキシ基からなる群から選択される１つ以上の置換基によってさらに置換されている）；からなる群から選択され；ここで、Ｒ^{7}、Ｒ^{8}、Ｒ^{9}及びＲ^{10}の２つの隣接する基は、任意に結合して環状ヘテロ原子含有ヒドロカルビル基を形成してもよく、環状ヘテロ原子含有ヒドロカルビル基は、非置換であるか、又はハロゲン原子、Ｃ$_{1-20}$アルキル基、Ｃ$_{1-20}$アルコキシ基、Ｃ$_{7-20}$アルキルアリール基、Ｃ$_{7-20}$アリールアルキル基、Ｃ$_{6-20}$アリール基、Ｃ$_{6-20}$アリールオキシ基、Ｃ$_{7-20}$アルキルアリールオキシ基、Ｃ$_{7-20}$アリールアルキルオキシ基、－ＮＲ’$_{2}$、アミド基、－ＰＲ’$_{2}$、ホスフィド基、－ＳＲ’、チオラート基、式－Ｓｉ（Ｒ^{a}）$_{3}$のシリル基、及び式－Ｇｅ（Ｒ^{a}）$_{3}$のゲルマニル基からなる群から選択される１つ以上の置換基によってさらに置換されており；ここで、各Ｒ’は、独立して、水素、Ｃ$_{1-20}$アルキル基、及びＣ$_{6-20}$アリール基からなる群から選択され；ここで、各Ｒ^{a}は、独立して、水素、Ｃ$_{1-8}$アルキル基、Ｃ$_{1-8}$アルコキシ基、Ｃ$_{6-20}$アリールオキシ基及びＣ$_{6-20}$アリール基からなる群から選択される。

【０２０８】

いくつかの実施形態では、Ｒ^{7}、Ｒ^{8}、Ｒ^{9}及びＲ^{10}は、各々独立して、ハロゲン、水素、Ｃ$_{1-30}$アルキル基、Ｃ$_{1-30}$アルコキシ基、Ｃ$_{7-30}$アルキルアリール基、Ｃ$_{7-30}$アリールアルキル基、Ｃ$_{6-30}$アリール基、Ｃ$_{6-30}$アリールオキシド基、Ｃ$_{7-30}$アルキルアリールオキシ基、及びＣ$_{7-30}$アリールアルキルオキシ基からなる群から選択される。

【０２０９】

いくつかの実施形態では、Ｒ^{7}、Ｒ^{8}、Ｒ^{9}及びＲ^{10}は、各々独立して、ハロゲン、水素、Ｃ$_{1-20}$アルキル基、Ｃ$_{1-20}$アルコキシ基、Ｃ$_{7-20}$アルキルアリール基、Ｃ$_{7-20}$アリールアルキル基、Ｃ$_{6-20}$アリール基、Ｃ$_{6-20}$アリールオキシド基、Ｃ$_{7-20}$アルキルアリールオキシ基、及びＣ$_{7-20}$アリールアルキルオキシ基からなる群から選択される。

【０２１０】

いくつかの実施形態では、Ｒ^{7}、Ｒ^{8}、Ｒ^{9}及びＲ^{10}は、各々独立して、ハロゲン、水素、及びＣ$_{1-30}$ヒドロカルビル基からなる群から選択され、このヒドロカルビル基は、非置換であるか、又は１つ以上のハロゲン原子によってさらに置換されている。

【０２１１】

いくつかの実施形態では、Ｒ^{7}、Ｒ^{8}、Ｒ^{9}及びＲ^{10}は、各々独立して、ハロゲン、水素、及びＣ$_{1-30}$ヘテロ原子含有ヒドロカルビル基からなる群から選択され、このヘテロ原子含有ヒドロカルビル基は、非置換であるか、又は１つ以上のハロゲン原子によってさらに置換されている。

【０２１２】

いくつかの実施形態では、Ｒ^{7}、Ｒ^{8}、Ｒ^{9}及びＲ^{10}は、各々独立して、水素及びＣ$_{1-30}$ヒドロカルビル基からなる群から選択され、このヒドロカルビル基は、非置換であるか、又は１つ以上のハロゲン原子によってさらに置換されている。

【０２１３】

いくつかの実施形態では、R^7、R^8、R^9及びR^{10}は、各々独立して、水素及びC_{1-30}ヘテロ原子含有ヒドロカルビル基からなる群から選択され、このヘテロ原子含有ヒドロカルビル基は、非置換であるか、又は１つ以上のハロゲン原子によってさらに置換されている。

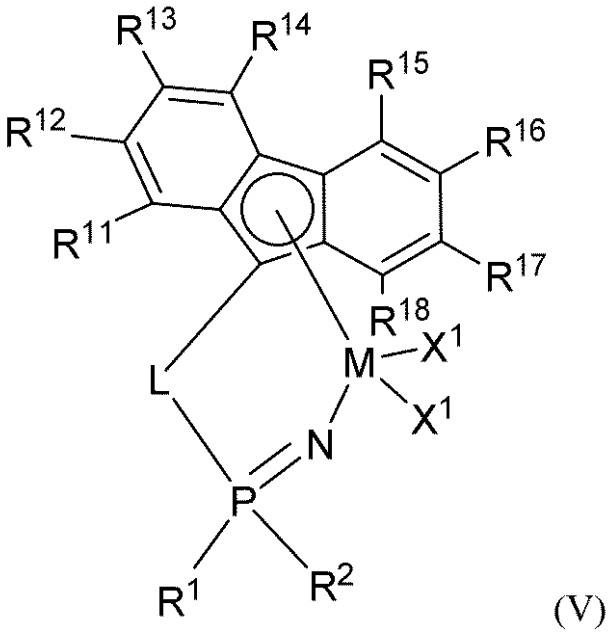
【０２１４】

いくつかの実施形態では、R^7、R^8、R^9及びR^{10}は、各々水素である。

【０２１５】

本開示の実施形態では、式Ｉの有機金属錯体は、式Ｖ：

【化７３】



(V)

で表される有機金属錯体であり、

式中、Ｍ、R^1、R^2、X^1及びＬは、上記式Ｉで定義した通りであり；

式中、R^{11}、R^{12}、R^{13}、R^{14}、R^{15}、R^{16}、R^{17}、R^{18}は、各々独立して、

ハロゲン；

水素；

C_{1-30}ヒドロカルビル基（このヒドロカルビル基は、非置換であるか、又はハロゲン原子、C_{1-20}アルキル基、C_{1-20}アルコキシ基、C_{7-20}アルキルアリール基、C_{7-20}アリールアルキル基、C_{6-20}アリール基、C_{6-20}アリールオキシ基、C_{7-20}アルキルアリールオキシ基、及びC_{7-20}アリールアルキルオキシ基からなる群から選択される１つ以上の置換基によってさらに置換されている）；

ヘテロ原子含有C_{1-30}ヒドロカルビル基（このヘテロ原子含有ヒドロカルビル基は、非置換であるか、又はハロゲン原子、C_{1-20}アルキル基、C_{1-20}アルコキシ基、C_{7-20}アルキルアリール基、C_{7-20}アリールアルキル基、C_{6-20}アリール基、C_{6-20}アリールオキシ基、C_{7-20}アルキルアリールオキシ基、及びC_{7-20}アリールアルキルオキシ基からなる群から選択される１つ以上の置換基によってさらに置換されている）；

オキシ基、－ＯＲ’；

アミド基、－ＮＲ’$_2$；

ホスフィド基、－ＰＲ’$_2$；

チオラート基、－ＳＲ’；

式－Ｓｉ（Ｒａ）３のシリル基；
式－Ｇｅ（Ｒａ）３のゲルマニル基；
からなる群から選択され；
ここで、Ｒ１１、Ｒ１２、Ｒ１３、Ｒ１４、Ｒ１５、Ｒ１６、Ｒ１７、Ｒ１８の２つの隣接する基は、任意に結合して環状ヒドロカルビル基又は環状ヘテロ原子含有ヒドロカルビル基を形成してもよく、環状ヒドロカルビル基又は環状ヘテロ原子含有ヒドロカルビル基は、非置換であるか、又はハロゲン原子、Ｃ１－２０アルキル基、Ｃ１－２０アルコキシ基、Ｃ７－２０アルキルアリール基、Ｃ７－２０アリールアルキル基、Ｃ６－２０アリール基、Ｃ６－２０アリールオキシ基、Ｃ７－２０アルキルアリールオキシ基、Ｃ７－２０アリールアルキルオキシ基、式－ＮＲ’２のアミド基、式－ＰＲ’２のホスフィド基、式－ＳＲ’のチオラート基、式－Ｓｉ（Ｒａ）３のシリル基、及び式－Ｇｅ（Ｒａ）３のゲルマニル基からなる群から選択される１つ以上の置換基によってさらに置換されており；
ここで、各Ｒ’は、独立して、水素、Ｃ1－２０アルキル基、及びＣ６－２０アリール基からなる群から選択され；
ここで、各Ｒａは、独立して、水素、Ｃ１－８アルキル基、Ｃ１－８アルコキシ基、Ｃ６－２０アリールオキシ基及びＣ６－２０アリール基からなる群から選択される、有機金属錯体である。

【０２１６】

いくつかの実施形態では、Ｒ１１、Ｒ１２、Ｒ１３、Ｒ１４、Ｒ１５、Ｒ１６、Ｒ１７、Ｒ１８は、各々独立して、ハロゲン；水素；Ｃ１－３０ヒドロカルビル基（このヒドロカルビル基は、非置換であるか、又はハロゲン原子、Ｃ１－２０アルキル基、Ｃ１－２０アルコキシ基、Ｃ７－２０アルキルアリール基、Ｃ７－２０アリールアルキル基、Ｃ６－２０アリール基、Ｃ６－２０アリールオキシ基、Ｃ７－２０アルキルアリールオキシ基、及びＣ７－２０アリールアルキルオキシ基からなる群から選択される１つ以上の置換基によってさらに置換されている）；並びにヘテロ原子含有Ｃ１－３０ヒドロカルビル基（このヘテロ原子含有ヒドロカルビル基は、非置換であるか、又はハロゲン原子、Ｃ１－２０アルキル基、Ｃ１－２０アルコキシ基、Ｃ７－２０アルキルアリール基、Ｃ７－２０アリールアルキル基、Ｃ６－２０アリール基、Ｃ６－２０アリールオキシ基、Ｃ７－２０アルキルアリールオキシ基、及びＣ７－２０アリールアルキルオキシ基からなる群から選択される１つ以上の置換基によってさらに置換されている）；からなる群から選択され；ここで、Ｒ１１、Ｒ１２、Ｒ１３、Ｒ１４、Ｒ１５、Ｒ１６、Ｒ１７、Ｒ１８の２つの隣接する基は、任意に結合して環状ヒドロカルビル基又は環状ヘテロ原子含有ヒドロカルビル基を形成してもよく、環状ヒドロカルビル基又は環状ヘテロ原子含有ヒドロカルビル基は、非置換であるか、又はハロゲン原子、Ｃ１－２０アルキル基、Ｃ１－２０アルコキシ基、Ｃ７－２０アルキルアリール基、Ｃ７－２０アリールアルキル基、Ｃ６－２０アリール基、Ｃ６－２０アリールオキシ基、Ｃ７－２０アルキルアリールオキシ基、Ｃ７－２０アリールアルキルオキシ基、－ＮＲ’２、アミド基、－ＰＲ’２、ホスフィド基、－ＳＲ’、チオラート基、式－Ｓｉ（Ｒａ）３のシリル基、及び式－Ｇｅ（Ｒａ）３のゲルマニル基からなる群から選択される１つ以上の置換基によってさらに置換されており；ここで、各Ｒ’は、独立して、水素、Ｃ１－２０アルキル基、及びＣ６－２０アリール基からなる群から選択され；ここで、各Ｒａは、独立して、水素、Ｃ１－８アルキル基、Ｃ１－８アルコキシ基、Ｃ６－２０アリールオキシ基及びＣ６－２０アリール基からなる群から選択される。

【０２１７】

いくつかの実施形態では、Ｒ１１、Ｒ１２、Ｒ１３、Ｒ１４、Ｒ１５、Ｒ１６、Ｒ１７、Ｒ１８は、各々独立して、ハロゲン；水素；並びにＣ１－３０ヒドロカルビル基（このヒドロカルビル基は、非置換であるか、又はハロゲン原子、Ｃ１－２０アルキル基、Ｃ１－２０アルコキシ基、Ｃ７－２０アルキルアリール基、Ｃ７－２０アリールアルキル基、Ｃ６－２０アリール基、Ｃ６－２０アリールオキシ基、Ｃ７－２０アルキルアリールオキシ基、及びＣ７－２０アリールアルキルオキシ基からなる群から選択される１つ以上の置換基によってさらに置換されている）；からなる群から選択され；ここで、Ｒ１１、Ｒ１２、Ｒ

R^{13}、R^{14}、R^{15}、R^{16}、R^{17}、R^{18}の２つの隣接する基は、任意に結合して環状ヒドロカルビル基を形成してもよく、環状ヒドロカルビル基は、非置換であるか、又はハロゲン原子、C_{1-20}アルキル基、C_{1-20}アルコキシ基、C_{7-20}アルキルアリール基、C_{7-20}アリールアルキル基、C_{6-20}アリール基、C_{6-20}アリールオキシ基、C_{7-20}アルキルアリールオキシ基、C_{7-20}アリールアルキルオキシ基、－NR'_2、アミド基、－PR'_2、ホスフィド基、－SR'、チオラート基、式－$Si(R^a)_3$のシリル基、及び式－$Ge(R^a)_3$のゲルマニル基からなる群から選択される１つ以上の置換基によってさらに置換されており；ここで、各R'は、独立して、水素、C_{1-20}アルキル基、及びC_{6-20}アリール基からなる群から選択され；ここで、各R^aは、独立して、水素、C_{1-8}アルキル基、C_{1-8}アルコキシ基、C_{6-20}アリールオキシ基及びC_{6-20}アリール基からなる群から選択される。

【０２１８】

いくつかの実施形態では、R^{11}、R^{12}、R^{13}、R^{14}、R^{15}、R^{16}、R^{17}、R^{18}は、各々独立して、ハロゲン；水素；並びにヘテロ原子含有C_{1-30}ヒドロカルビル基（このヘテロ原子含有ヒドロカルビル基は、非置換であるか、又はハロゲン原子、C_{1-20}アルキル基、C_{1-20}アルコキシ基、C_{7-20}アルキルアリール基、C_{7-20}アリールアルキル基、C_{6-20}アリール基、C_{6-20}アリールオキシ基、C_{7-20}アルキルアリールオキシ基、及びC_{7-20}アリールアルキルオキシ基からなる群から選択される１つ以上の置換基によってさらに置換されている）；からなる群から選択され；ここで、R^{11}、R^{12}、R^{13}、R^{14}、R^{15}、R^{16}、R^{17}、R^{18}の２つの隣接する基は、任意に結合して環状ヘテロ原子含有ヒドロカルビル基を形成してもよく、環状ヘテロ原子含有ヒドロカルビル基は、非置換であるか、又はハロゲン原子、C_{1-20}アルキル基、C_{1-20}アルコキシ基、C_{7-20}アルキルアリール基、C_{7-20}アリールアルキル基、C_{6-20}アリール基、C_{6-20}アリールオキシ基、C_{7-20}アルキルアリールオキシ基、C_{7-20}アリールアルキルオキシ基、－NR'_2、アミド基、－PR'_2、ホスフィド基、－SR'、チオラート基、式－$Si(R^a)_3$のシリル基、及び式－$Ge(R^a)_3$のゲルマニル基からなる群から選択される１つ以上の置換基によってさらに置換されており；ここで、各R'は、独立して、水素、C_{1-20}アルキル基、及びC_{6-20}アリール基からなる群から選択され；ここで、各R^aは、独立して、水素、C_{1-8}アルキル基、C_{1-8}アルコキシ基、C_{6-20}アリールオキシ基及びC_{6-20}アリール基からなる群から選択される。

【０２１９】

いくつかの実施形態では、R^{11}、R^{12}、R^{13}、R^{14}、R^{15}、R^{16}、R^{17}、R^{18}は、各々独立して、ハロゲン、水素、C_{1-30}アルキル基、C_{1-30}アルコキシ基、C_{7-30}アルキルアリール基、C_{7-30}アリールアルキル基、C_{6-30}アリール基、C_{6-30}アリールオキシド基、C_{7-30}アルキルアリールオキシ基、及びC_{7-30}アリールアルキルオキシ基からなる群から選択される。

【０２２０】

いくつかの実施形態では、R^{11}、R^{12}、R^{13}、R^{14}、R^{15}、R^{16}、R^{17}、R^{18}は、各々独立して、ハロゲン、水素、C_{1-20}アルキル基、C_{1-20}アルコキシ基、C_{7-20}アルキルアリール基、C_{7-20}アリールアルキル基、C_{6-20}アリール基、C_{6-20}アリールオキシド基、C_{7-20}アルキルアリールオキシ基、及びC_{7-20}アリールアルキルオキシ基からなる群から選択される。

【０２２１】

いくつかの実施形態では、R^{11}、R^{12}、R^{13}、R^{14}、R^{15}、R^{16}、R^{17}、R^{18}は、各々独立して、ハロゲン、水素、及びC_{1-30}ヒドロカルビル基からなる群から選択され、このヒドロカルビル基は、非置換であるか、又は１つ以上のハロゲン原子によってさらに置換されている。

【０２２２】

いくつかの実施形態では、R^{11}、R^{12}、R^{13}、R^{14}、R^{15}、R^{16}、R^{17}、

R^{18}は、各々独立して、ハロゲン、水素、及びC_{1-30}ヘテロ原子含有ヒドロカルビル基からなる群から選択され、このヘテロ原子含有ヒドロカルビル基は、非置換であるか、又は１つ以上のハロゲン原子によってさらに置換されている。

【０２２３】

いくつかの実施形態では、R^{11}、R^{12}、R^{13}、R^{14}、R^{15}、R^{16}、R^{17}、R^{18}は、各々独立して、水素及びC_{1-30}ヒドロカルビル基からなる群から選択され、このヒドロカルビル基は、非置換であるか、又は１つ以上のハロゲン原子によってさらに置換されている。

【０２２４】

いくつかの実施形態では、R^{11}、R^{12}、R^{13}、R^{14}、R^{15}、R^{16}、R^{17}、R^{18}は、各々独立して、水素及びC_{1-30}ヘテロ原子含有ヒドロカルビル基からなる群から選択され、このヘテロ原子含有ヒドロカルビル基は、非置換であるか、又は１つ以上のハロゲン原子によってさらに置換されている。

【０２２５】

いくつかの実施形態では、R^{12}及びR^{17}は、各々独立して、非置換のC_{1-30}ヒドロカルビル基である。

いくつかの実施形態では、R^{13}及びR^{16}は、各々独立して、非置換のC_{1-30}ヒドロカルビル基である。

いくつかの実施形態では、R^{12}及びR^{17}は、C_{1-20}アルキル基である。

いくつかの実施形態では、R^{13}及びR^{16}は、C_{1-20}アルキル基である。

いくつかの実施形態では、R^{12}及びR^{17}は、C_{6-20}アリール基である。

いくつかの実施形態では、R^{13}及びR^{16}は、C_{6-20}アリール基である。

いくつかの実施形態では、R^{12}及びR^{17}は、各々ｔｅｒｔ－ブチル基である。

いくつかの実施形態では、R^{13}及びR^{16}は、各々ｔｅｒｔ－ブチル基である。

【０２２６】

いくつかの実施形態では、R^{11}、R^{13}、R^{14}、R^{15}、R^{16}及びR^{18}は、各々水素である。

いくつかの実施形態では、R^{11}、R^{12}、R^{14}、R^{15}、R^{17}及びR^{18}は、各々水素である。

いくつかの実施形態では、R^{11}、R^{12}、R^{13}、R^{14}、R^{15}、R^{16}、R^{17}及びR^{18}は、各々水素である。

いくつかの実施形態では、R^{11}、R^{13}、R^{14}、R^{15}、R^{16}及びR^{18}は、各々水素であり、R^{12}及びR^{17}は、各々独立して、非置換のC_{1-30}ヒドロカルビル基である。

いくつかの実施形態では、R^{11}、R^{13}、R^{14}、R^{15}、R^{16}及びR^{18}は、各々水素であり、R^{12}及びR^{17}は、各々ｔｅｒｔ－ブチル基である。

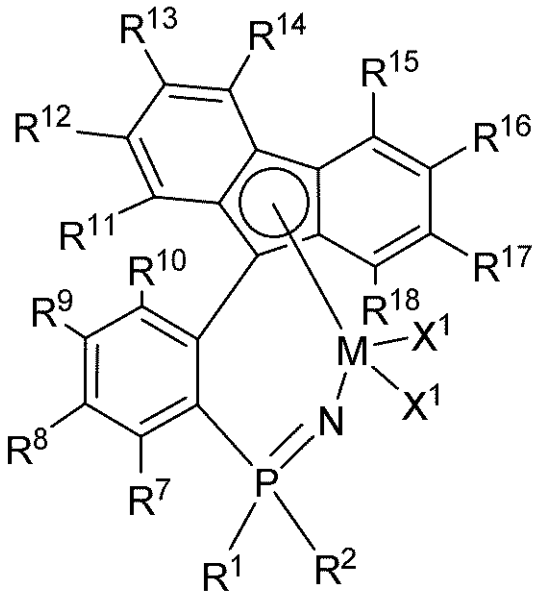
いくつかの実施形態では、R^{11}、R^{12}、R^{14}、R^{15}、R^{17}及びR^{18}は、各々水素であり、R^{13}及びR^{16}は、各々独立して、非置換のC_{1-30}ヒドロカルビル基である。

いくつかの実施形態では、R^{11}、R^{12}、R^{14}、R^{15}、R^{17}及びR^{18}は、各々水素であり、R^{13}及びR^{16}は、各々ｔｅｒｔ－ブチル基である。

【０２２７】

本開示の実施形態では、式Ｖの有機金属錯体は、式ＶＩ：

【化７４】



(VI)

で表される有機金属錯体であり、

式中、Ｍ、Ｒ１、Ｒ２、Ｒ１１、Ｒ１２、Ｒ１３、Ｒ１４、Ｒ１５、Ｒ１６、Ｒ１７、Ｒ１８、及びＸ１は、上記式Ｉ及び式Ｖで定義した通りであり；

式中、Ｒ７、Ｒ８、Ｒ９及びＲ１０は、各々独立して、

ハロゲン；

水素；

Ｃ１－３０ヒドロカルビル基（このヒドロカルビル基は、非置換であるか、又はハロゲン原子、Ｃ１－２０アルキル基、Ｃ１－２０アルコキシ基、Ｃ７－２０アルキルアリール基、Ｃ７－２０アリールアルキル基、Ｃ６－２０アリール基、Ｃ６－２０アリールオキシ基、Ｃ７－２０アルキルアリールオキシ基、及びＣ７－２０アリールアルキルオキシ基からなる群から選択される１つ以上の置換基によってさらに置換されている）；

ヘテロ原子含有Ｃ１－３０ヒドロカルビル基（このヘテロ原子含有ヒドロカルビル基は、非置換であるか、又はハロゲン原子、Ｃ１－２０アルキル基、Ｃ１－２０アルコキシ基、Ｃ７－２０アルキルアリール基、Ｃ７－２０アリールアルキル基、Ｃ６－２０アリール基、Ｃ６－２０アリールオキシ基、Ｃ７－２０アルキルアリールオキシ基、及びＣ７－２０アリールアルキルオキシ基からなる群から選択される１つ以上の置換基によってさらに置換されている）；

オキシ基、－ＯＲ’；

アミド基、－ＮＲ’$_2$；

ホスフィド基、－ＰＲ’$_2$；

チオラート基、－ＳＲ’；

式－Ｓｉ（Ｒ^a）$_3$のシリル基；

式－Ｇｅ（Ｒ^a）$_3$のゲルマニル基；

からなる群から選択され；

ここで、Ｒ７、Ｒ８、Ｒ９及びＲ１０の２つの隣接する基は、任意に結合して環状ヒドロカルビル基又は環状ヘテロ原子含有ヒドロカルビル基を形成してもよく、環状ヒドロカルビル基又は環状ヘテロ原子含有ヒドロカルビル基は、非置換であるか、又はハロゲン原子、Ｃ１－２０アルキル基、Ｃ１－２０アルコキシ基、Ｃ７－２０アルキルアリール基、Ｃ７－２０アリールアルキル基、Ｃ６－２０アリール基、Ｃ６－２０アリールオキシ基、Ｃ７－２０アルキルアリールオキシ基、Ｃ７－２０アリールアルキルオキシ基、式－ＮＲ’$_2$の

アミド基、式－ＰＲ’$_2$のホスフィド基、式－ＳＲ’のチオラート基、式－Ｓｉ（Ｒ^a）$_3$のシリル基、及び式－Ｇｅ（Ｒ^a）$_3$のゲルマニル基からなる群から選択される１つ以上の置換基によってさらに置換されており；

ここで、各Ｒ’は、独立して、水素、Ｃ$_{1-20}$アルキル基、及びＣ$_{6-20}$アリール基からなる群から選択され；

ここで、各Ｒ^{a}は、独立して、水素、Ｃ$_{1-8}$アルキル基、Ｃ$_{1-8}$アルコキシ基、Ｃ$_{6-20}$アリールオキシ基及びＣ$_{6-20}$アリール基からなる群から選択される、有機金属錯体である。

【０２２８】

いくつかの実施形態では、Ｒ^7、Ｒ^8、Ｒ^{9}及びＲ^{10}は、各々独立して、ハロゲン；水素；Ｃ$_{1-30}$ヒドロカルビル基（このヒドロカルビル基は、非置換であるか、又はハロゲン原子、Ｃ$_{1-20}$アルキル基、Ｃ$_{1-20}$アルコキシ基、Ｃ$_{7-20}$アルキルアリール基、Ｃ$_{7-20}$アリールアルキル基、Ｃ$_{6-20}$アリール基、Ｃ$_{6-20}$アリールオキシ基、Ｃ$_{7-20}$アルキルアリールオキシ基、及びＣ$_{7-20}$アリールアルキルオキシ基からなる群から選択される１つ以上の置換基によってさらに置換されている）；並びにヘテロ原子含有Ｃ$_{1-30}$ヒドロカルビル基（このヘテロ原子含有ヒドロカルビル基は、非置換であるか、又はハロゲン原子、Ｃ$_{1-20}$アルキル基、Ｃ$_{1-20}$アルコキシ基、Ｃ$_{7-20}$アルキルアリール基、Ｃ$_{7-20}$アリールアルキル基、Ｃ$_{6-20}$アリール基、Ｃ$_{6-20}$アリールオキシ基、Ｃ$_{7-20}$アルキルアリールオキシ基、及びＣ$_{7-20}$アリールアルキルオキシ基からなる群から選択される１つ以上の置換基によってさらに置換されている）；からなる群から選択され；ここで、Ｒ^7、Ｒ^8、Ｒ^{9}及びＲ^{10}の２つの隣接する基は、任意に結合して環状ヒドロカルビル基又は環状ヘテロ原子含有ヒドロカルビル基を形成してもよく、環状ヒドロカルビル基又は環状ヘテロ原子含有ヒドロカルビル基は、非置換であるか、又はハロゲン原子、Ｃ$_{1-20}$アルキル基、Ｃ$_{1-20}$アルコキシ基、Ｃ$_{7-20}$アルキルアリール基、Ｃ$_{7-20}$アリールアルキル基、Ｃ$_{6-20}$アリール基、Ｃ$_{6-20}$アリールオキシ基、Ｃ$_{7-20}$アルキルアリールオキシ基、Ｃ$_{7-20}$アリールアルキルオキシ基、－ＮＲ’$_2$、アミド基、－ＰＲ’$_2$、ホスフィド基、－ＳＲ’、チオラート基、式－Ｓｉ（Ｒ^a）$_3$のシリル基、及び式－Ｇｅ（Ｒ^a）$_3$のゲルマニル基からなる群から選択される１つ以上の置換基によってさらに置換されており；ここで、各Ｒ’は、独立して、水素、Ｃ$_{1-20}$アルキル基、及びＣ$_{6-20}$アリール基からなる群から選択され；ここで、各Ｒ^{a}は、独立して、水素、Ｃ$_{1-8}$アルキル基、Ｃ$_{1-8}$アルコキシ基、Ｃ$_{6-20}$アリールオキシ基及びＣ$_{6-20}$アリール基からなる群から選択される。

【０２２９】

いくつかの実施形態では、Ｒ^7、Ｒ^8、Ｒ^{9}及びＲ^{10}は、各々独立して、ハロゲン；水素；並びにＣ$_{1-30}$ヒドロカルビル基（このヒドロカルビル基は、非置換であるか、又はハロゲン原子、Ｃ$_{1-20}$アルキル基、Ｃ$_{1-20}$アルコキシ基、Ｃ$_{7-20}$アルキルアリール基、Ｃ$_{7-20}$アリールアルキル基、Ｃ$_{6-20}$アリール基、Ｃ$_{6-20}$アリールオキシ基、Ｃ$_{7-20}$アルキルアリールオキシ基、及びＣ$_{7-20}$アリールアルキルオキシ基からなる群から選択される１つ以上の置換基によってさらに置換されている）；からなる群から選択され；ここで、Ｒ^7、Ｒ^8、Ｒ^{9}及びＲ^{10}の２つの隣接する基は、任意に結合して環状ヒドロカルビル基を形成してもよく、環状ヒドロカルビル基は、非置換であるか、又はハロゲン原子、Ｃ$_{1-20}$アルキル基、Ｃ$_{1-20}$アルコキシ基、Ｃ$_{7-20}$アルキルアリール基、Ｃ$_{7-20}$アリールアルキル基、Ｃ$_{6-20}$アリール基、Ｃ$_{6-20}$アリールオキシ基、Ｃ$_{7-20}$アルキルアリールオキシ基、Ｃ$_{7-20}$アリールアルキルオキシ基、－ＮＲ’$_2$、アミド基、－ＰＲ’$_2$、ホスフィド基、－ＳＲ’、チオラート基、式－Ｓｉ（Ｒ^a）$_3$のシリル基、及び式－Ｇｅ（Ｒ^a）$_3$のゲルマニル基からなる群から選択される１つ以上の置換基によってさらに置換されており；ここで、各Ｒ’は、独立して、水素、Ｃ$_{1-20}$アルキル基、及びＣ$_{6-20}$アリール基からなる群から選択され；ここで、各Ｒ^{a}は、独立して、水素、Ｃ$_{1-8}$アルキル基、Ｃ$_{1-8}$アルコキシ基、Ｃ$_{6-20}$アリールオキシ基及びＣ$_{6-20}$アリール基からなる群から選択される。

【０２３０】
いくつかの実施形態では、R^7、R^8、R^9及びR^{10}は、各々独立して、ハロゲン；水素；並びにヘテロ原子含有C_{1-30}ヒドロカルビル基（このヘテロ原子含有ヒドロカルビル基は、非置換であるか、又はハロゲン原子、C_{1-20}アルキル基、C_{1-20}アルコキシ基、C_{7-20}アルキルアリール基、C_{7-20}アリールアルキル基、C_{6-20}アリール基、C_{6-20}アリールオキシ基、C_{7-20}アルキルアリールオキシ基、及びC_{7-20}アリールアルキルオキシ基からなる群から選択される１つ以上の置換基によってさらに置換されている）；からなる群から選択され；ここで、R^7、R^8、R^9及びR^{10}の２つの隣接する基は、任意に結合して環状ヘテロ原子含有ヒドロカルビル基を形成してもよく、環状ヘテロ原子含有ヒドロカルビル基は、非置換であるか、又はハロゲン原子、C_{1-20}アルキル基、C_{1-20}アルコキシ基、C_{7-20}アルキルアリール基、C_{7-20}アリールアルキル基、C_{6-20}アリール基、C_{6-20}アリールオキシ基、C_{7-20}アルキルアリールオキシ基、C_{7-20}アリールアルキルオキシ基、$-NR'_2$、アミド基、$-PR'_2$、ホスフィド基、$-SR'$、チオラート基、式$-Si(R^a)_3$のシリル基、及び式$-Ge(R^a)_3$のゲルマニル基からなる群から選択される１つ以上の置換基によってさらに置換されており；ここで、各R'は、独立して、水素、C_{1-20}アルキル基、及びC_{6-20}アリール基からなる群から選択され；ここで、各R^aは、独立して、水素、C_{1-8}アルキル基、C_{1-8}アルコキシ基、C_{6-20}アリールオキシ基及びC_{6-20}アリール基からなる群から選択される。

【０２３１】
いくつかの実施形態では、R^7、R^8、R^9及びR^{10}は、各々独立して、ハロゲン、水素、C_{1-30}アルキル基、C_{1-30}アルコキシ基、C_{7-30}アルキルアリール基、C_{7-30}アリールアルキル基、C_{6-30}アリール基、C_{6-30}アリールオキシド基、C_{7-30}アルキルアリールオキシ基、及びC_{7-30}アリールアルキルオキシ基からなる群から選択される。

【０２３２】
いくつかの実施形態では、R^7、R^8、R^9及びR^{10}は、各々独立して、ハロゲン、水素、C_{1-20}アルキル基、C_{1-20}アルコキシ基、C_{7-20}アルキルアリール基、C_{7-20}アリールアルキル基、C_{6-20}アリール基、C_{6-20}アリールオキシド基、C_{7-20}アルキルアリールオキシ基、及びC_{7-20}アリールアルキルオキシ基からなる群から選択される。

【０２３３】
いくつかの実施形態では、R^7、R^8、R^9及びR^{10}は、各々独立して、ハロゲン、水素、及びC_{1-30}ヒドロカルビル基からなる群から選択され、このヒドロカルビル基は、非置換であるか、又は１つ以上のハロゲン原子によってさらに置換されている。

【０２３４】
いくつかの実施形態では、R^7、R^8、R^9及びR^{10}は、各々独立して、ハロゲン、水素、及びC_{1-30}ヘテロ原子含有ヒドロカルビル基からなる群から選択され、このヘテロ原子含有ヒドロカルビル基は、非置換であるか、又は１つ以上のハロゲン原子によってさらに置換されている。

【０２３５】
いくつかの実施形態では、R^7、R^8、R^9及びR^{10}は、各々独立して、水素及びC_{1-30}ヒドロカルビル基からなる群から選択され、このヒドロカルビル基は、非置換であるか、又は１つ以上のハロゲン原子によってさらに置換されている。

【０２３６】
いくつかの実施形態では、R^7、R^8、R^9及びR^{10}は、各々独立して、水素及びC_{1-30}ヘテロ原子含有ヒドロカルビル基からなる群から選択され、このヘテロ原子含有ヒドロカルビル基は、非置換であるか、又は１つ以上のハロゲン原子によってさらに置換されている。

【０２３７】

いくつかの実施形態では、R^7、R^8、R^9及びR^{10}は、各々水素である。

いくつかの実施形態では、R^7、R^8、R^9及びR^{10}は、各々水素であり、R^{11}、R^{12}、R^{13}、R^{14}、R^{15}、R^{16}、R^{17}、R^{18}は、各々独立して、ハロゲン、水素、C_{1-30}アルキル基、及びC_{6-30}アリール基からなる群から選択される。

いくつかの実施形態では、R^7、R^8、R^9及びR^{10}は、各々水素であり、R^{11}、R^{13}、R^{14}、R^{15}、R^{16}及びR^{18}は、各々水素であり、R^{12}及びR^{17}は、各々独立して、C_{1-20}アルキル基又はC_{6-20}アリール基である。

いくつかの実施形態では、R^7、R^8、R^9及びR^{10}は、各々水素であり、R^{11}、R^{13}、R^{14}、R^{15}、R^{16}及びR^{18}は、各々水素であり、R^{12}及びR^{17}は、各々tert－ブチル基である。

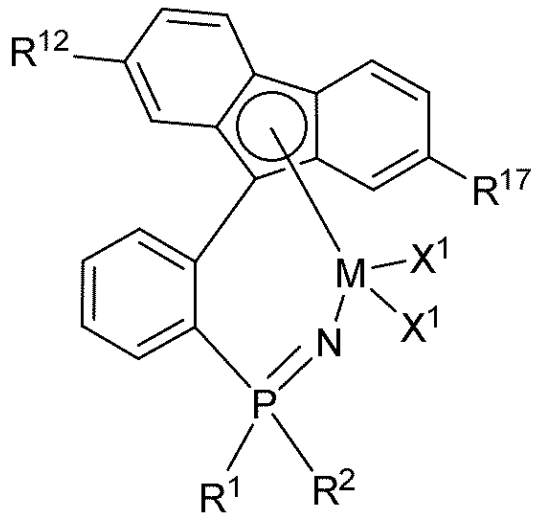
いくつかの実施形態では、R^7、R^8、R^9及びR^{10}は、各々水素であり、R^{11}、R^{12}、R^{14}、R^{15}、R^{17}及びR^{18}は、各々水素であり、R^{13}及びR^{16}は、各々独立して、C_{1-20}アルキル基又はC_{6-20}アリール基である。

いくつかの実施形態では、R^7、R^8、R^9及びR^{10}は、各々水素であり、R^{11}、R^{12}、R^{14}、R^{15}、R^{17}及びR^{18}は、各々水素であり、R^{13}及びR^{16}は、各々tert－ブチル基である。

【０２３８】

本開示の実施形態では、式ＶＩの有機金属錯体は、式ＶＩａ：

【化７５】



(VIa)

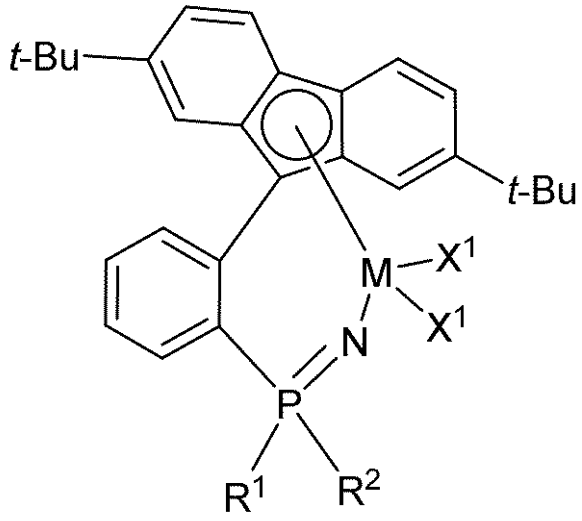
で表される有機金属錯体であり、

式中、Ｍ、R^1、R^2、R^{12}、R^{17}及びX^1は、上記式Ｉ及び式Ｖで定義した通りである。

【０２３９】

本開示の実施形態では、式ＶＩの有機金属錯体は、式ＶＩｂ：

【化７６】



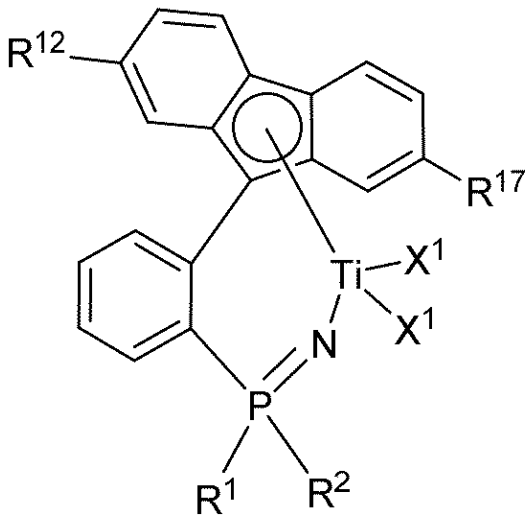
(IVb)

で表される有機金属錯体であり、
式中、Ｍ、Ｒ１、Ｒ２及びＸ１は、上記式Ｉで定義した通りである。

【０２４０】

本開示の実施形態では、式ＶＩの有機金属錯体は、式ＩＶｃ：

【化７７】



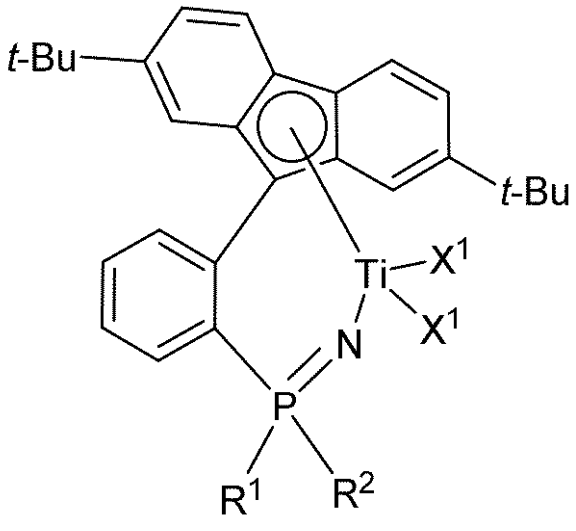
(IVc)

で表される有機金属錯体であり、
式中、Ｒ１、Ｒ２、Ｒ１２、Ｒ１７及びＸ１は、上記式Ｉ及び式Ｖで定義した通りである。

【０２４１】

本開示の実施形態では、式ＶＩの有機金属錯体は、式ＶＩｄ：

【化７８】



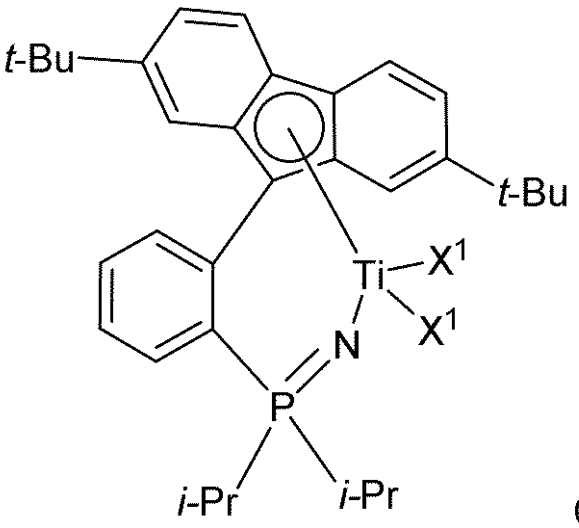
(VId)

で表される有機金属錯体であり、
式中、Ｒ^{1}、Ｒ^{2}及びＸ^{1}は、上記式Ｉで定義した通りである。

【０２４２】

本開示の実施形態では、式ＶＩの有機金属錯体は、式ＶＩｅ：

【化７９】



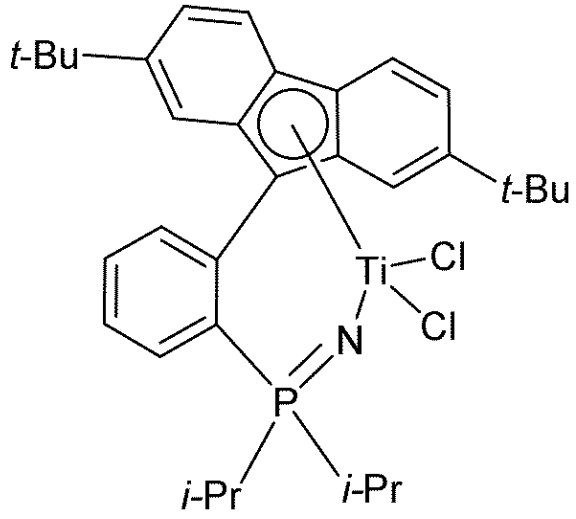
(VIe)

で表される有機金属錯体であり、
式中、Ｘ^{1}は、上記式Ｉで定義した通りである。

【０２４３】

本開示の一実施形態では、式ＶＩの有機金属錯体は、式ＶＩｆ：

【化８０】



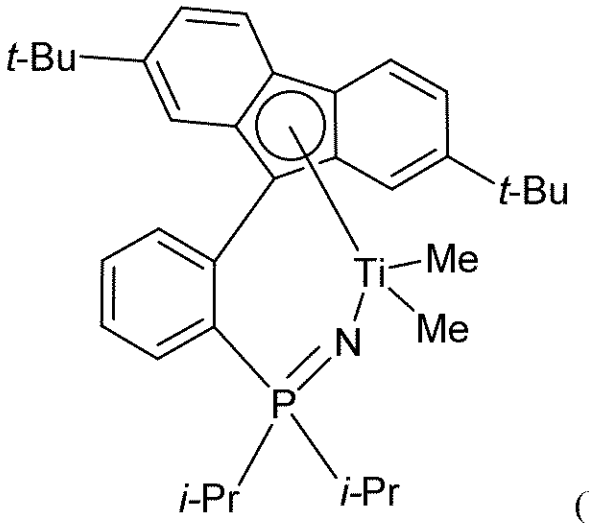
(VIf).

で表される有機金属錯体である。

【０２４４】

本開示の一実施形態では、式ＶＩの有機金属錯体は、式ＶＩｇ：

【化８１】



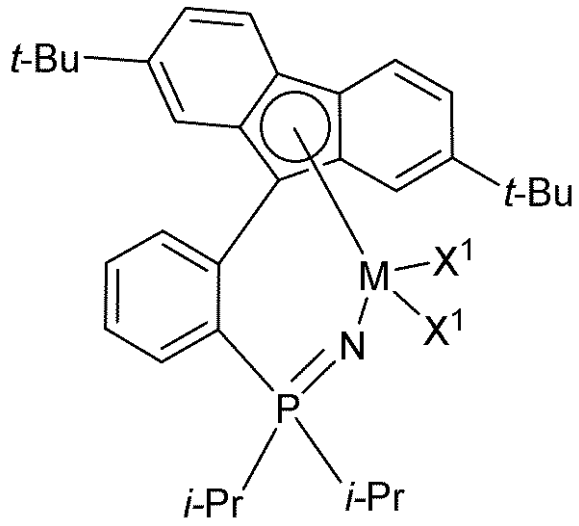
(VIg).

で表される有機金属錯体である。

【０２４５】

本開示の一実施形態では、式ＶＩの有機金属錯体は、式ＶＩｈ：

【化８２】



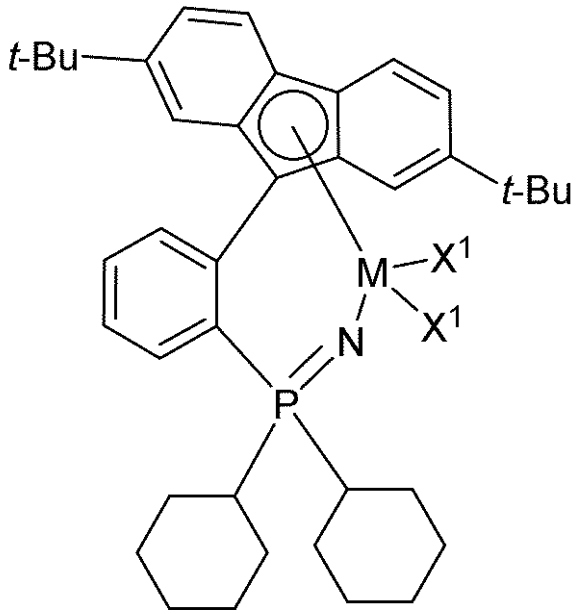
(VIh)

で表される有機金属錯体であり、
式中、Ｍ及びＸ１は、上記式Ｉで定義した通りである。

【０２４６】

本開示の一実施形態では、式ＶＩの有機金属錯体は、式ＶＩｉ：

【化８３】



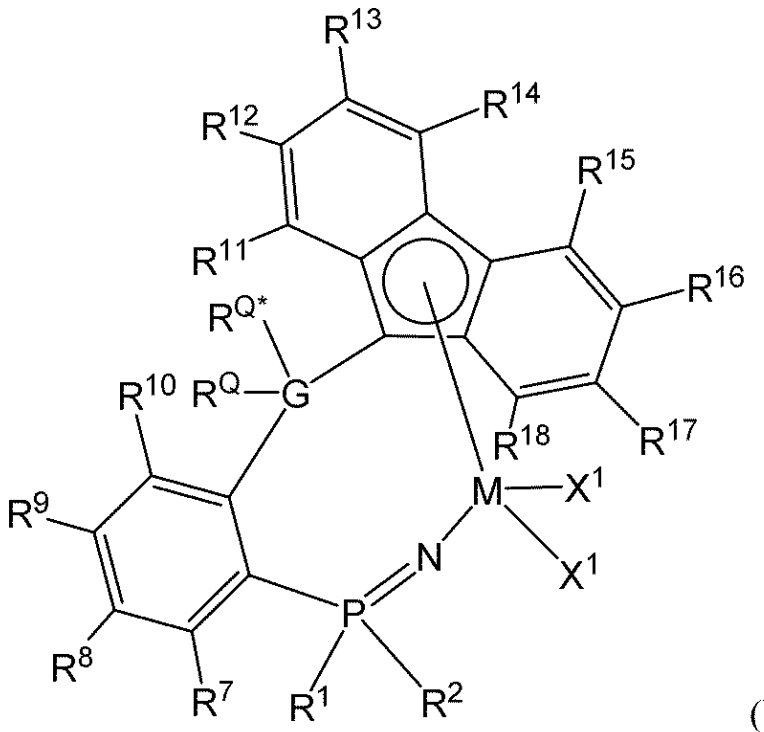
(VIi)

で表される有機金属錯体であり、
式中、Ｍ及びＸ１は、上記式Ｉで定義した通りである。

【０２４７】

本開示の実施形態では、式Ｖの有機金属錯体は、式ＶＩＩ：

【化８４】



(VII)

で表される有機金属錯体であり、

式中、Ｍ、Ｒ^{1}、Ｒ^{2}、Ｒ^{11}、Ｒ^{12}、Ｒ^{13}、Ｒ^{14}、Ｒ^{15}、Ｒ^{16}、Ｒ^{17}、Ｒ^{18}、及びＸ^{1}は、上記式Ｉ及び式Ｖで定義した通りであり；

式中、Ｇは、第１４族元素であり；

式中、Ｒ^{Q}及びＲ^{Q}＊は、各々独立して、

ハロゲン；

水素；

Ｃ$_{1-30}$ヒドロカルビル基（このヒドロカルビル基は、非置換であるか、又はハロゲン原子、Ｃ$_{1-20}$アルキル基、Ｃ$_{1-20}$アルコキシ基、Ｃ$_{7-20}$アルキルアリール基、Ｃ$_{7-20}$アリールアルキル基、Ｃ$_{6-20}$アリール基、Ｃ$_{6-20}$アリールオキシ基、Ｃ$_{7-20}$アルキルアリールオキシ基、及びＣ$_{7-20}$アリールアルキルオキシ基からなる群から選択される１つ以上の置換基によってさらに置換されている）；

ヘテロ原子含有Ｃ$_{1-30}$ヒドロカルビル基（このヘテロ原子含有ヒドロカルビル基は、非置換であるか、又はハロゲン原子、Ｃ$_{1-20}$アルキル基、Ｃ$_{1-20}$アルコキシ基、Ｃ$_{7-20}$アルキルアリール基、Ｃ$_{7-20}$アリールアルキル基、Ｃ$_{6-20}$アリール基、Ｃ$_{6-20}$アリールオキシ基、Ｃ$_{7-20}$アルキルアリールオキシ基、及びＣ$_{7-20}$アリールアルキルオキシ基からなる群から選択される１つ以上の置換基によってさらに置換されている）；

ここで、Ｒ^{Q}及びＲ^{Q}＊の基は、任意に結合して環状ヒドロカルビル基又は環状ヘテロ原子含有ヒドロカルビル基を形成してもよく、環状ヒドロカルビル基又は環状ヘテロ原子含有ヒドロカルビル基は、非置換であるか、又はハロゲン原子、Ｃ$_{1-20}$アルキル基、Ｃ$_{1-20}$アルコキシ基、Ｃ$_{7-20}$アルキルアリール基、Ｃ$_{7-20}$アリールアルキル基、Ｃ$_{6-20}$アリール基、Ｃ$_{6-20}$アリールオキシ基、Ｃ$_{7-20}$アルキルアリールオキシ基、Ｃ$_{7-20}$アリールアルキルオキシ基、式－ＮＲ’$_{2}$のアミド基、式－ＰＲ’$_{2}$のホスフィド基、式－ＳＲ’のチオラート基、式－Ｓｉ（Ｒ^{a}）$_{3}$のシリル基、及び式－Ｇｅ（Ｒ^{a}）$_{3}$のゲルマニル基からなる群から選択される１つ以上の置換基によってさらに置換されており；

式中、R^7、R^8、R^9及びR^{10}は、各々独立して、
ハロゲン；
水素；
C_{1-30}ヒドロカルビル基（このヒドロカルビル基は、非置換であるか、又はハロゲン原子、C_{1-20}アルキル基、C_{1-20}アルコキシ基、C_{7-20}アルキルアリール基、C_{7-20}アリールアルキル基、C_{6-20}アリール基、C_{6-20}アリールオキシ基、C_{7-20}アルキルアリールオキシ基、及びC_{7-20}アリールアルキルオキシ基からなる群から選択される１つ以上の置換基によってさらに置換されている）；
ヘテロ原子含有C_{1-30}ヒドロカルビル基（このヘテロ原子含有ヒドロカルビル基は、非置換であるか、又はハロゲン原子、C_{1-20}アルキル基、C_{1-20}アルコキシ基、C_{7-20}アルキルアリール基、C_{7-20}アリールアルキル基、C_{6-20}アリール基、C_{6-20}アリールオキシ基、C_{7-20}アルキルアリールオキシ基、及びC_{7-20}アリールアルキルオキシ基からなる群から選択される１つ以上の置換基によってさらに置換されている）；
オキシ基、－ＯＲ’；
アミド基、－ＮＲ’$_2$；
ホスフィド基、－ＰＲ’$_2$；
チオラート基、－ＳＲ’；
式－Ｓｉ（R^a）$_3$のシリル基；
式－Ｇｅ（R^a）$_3$のゲルマニル基；
からなる群から選択され；
ここで、R^7、R^8、R^9及びR^{10}の２つの隣接する基は、任意に結合して環状ヒドロカルビル基又は環状ヘテロ原子含有ヒドロカルビル基を形成してもよく、環状ヒドロカルビル基又は環状ヘテロ原子含有ヒドロカルビル基は、非置換であるか、又はハロゲン原子、C_{1-20}アルキル基、C_{1-20}アルコキシ基、C_{7-20}アルキルアリール基、C_{7-20}アリールアルキル基、C_{6-20}アリール基、C_{6-20}アリールオキシ基、C_{7-20}アルキルアリールオキシ基、C_{7-20}アリールアルキルオキシ基、式－ＮＲ’$_2$のアミド基、式－ＰＲ’$_2$のホスフィド基、式－ＳＲ’のチオラート基、式－Ｓｉ（R^a）$_3$のシリル基、及び式－Ｇｅ（R^a）$_3$のゲルマニル基からなる群から選択される１つ以上の置換基によってさらに置換されており；
ここで、各Ｒ’は、独立して、水素、C_{1-20}アルキル基、及びC_{6-20}アリール基からなる群から選択され；
ここで、各R^aは、独立して、水素、C_{1-8}アルキル基、C_{1-8}アルコキシ基、C_{6-20}アリールオキシ基及びC_{6-20}アリール基からなる群から選択される、有機金属錯体である。

【０２４８】

いくつかの実施形態では、Ｇは、炭素Ｃ、又はシリコンＳｉ、又はゲルマニウムＧｅである。
いくつかの実施形態では、Ｇは、炭素Ｃ、又はシリコンＳｉである。
いくつかの実施形態では、Ｇは、炭素Ｃである。
いくつかの実施形態では、Ｇは、シリコンＳｉである。
いくつかの実施形態では、Ｇは、ゲルマニウムＧｅである。

【０２４９】

いくつかの実施形態では、R^Q及びR^{Q*}は、各々独立して、ハロゲン、水素、C_{1-30}アルキル基、C_{1-30}アルコキシ基、C_{7-30}アルキルアリール基、C_{7-30}アリールアルキル基、C_{6-30}アリール基、C_{6-30}アリールオキシド基、C_{7-30}アルキルアリールオキシ基、及びC_{7-30}アリールアルキルオキシ基からなる群から選択される。

【０２５０】

いくつかの実施形態では、R^Q及びR^{Q*}は、各々独立して、ハロゲン、水素、C_{1-}

２０アルキル基、Ｃ１－２０アルコキシ基、Ｃ７－２０アルキルアリール基、Ｃ７－２０アリールアルキル基、Ｃ６－２０アリール基、Ｃ６－２０アリールオキシド基、Ｃ７－２０アルキルアリールオキシ基、及びＣ７－２０アリールアルキルオキシ基からなる群から選択される。

【０２５１】

実施形態では、、Ｒ^{Q}及びＲ^{Q}＊は、各々独立して、水素、Ｃ１－２０アルキル基及びＣ６－２０アリール基からなる群から選択される。

【０２５２】

実施形態では、各Ｒ^{Q}及びＲ^{Q}＊は、各々独立して、Ｃ１－８アルキル基である。

実施形態では、各Ｒ^{Q}及びＲ^{Q}＊は、各々独立して、Ｃ６－２０アリール基である。

実施形態では、Ｒ^{Q}は水素であり、Ｒ^{Q}＊はＣ１－８アルキル基である。

実施形態では、Ｒ^{Q}は水素であり、Ｒ^{Q}＊はＣ６－２０アリール基である。

実施形態では、Ｒ^{Q}は水素であり、Ｒ^{Q}＊はメチル基である。

実施形態では、Ｒ^{Q}は水素であり、Ｒ^{Q}＊はフェニル基である。

実施形態では、Ｒ^{Q}及びＲ^{Q}＊は、各々水素である。

【０２５３】

いくつかの実施形態では、Ｒ^{7}、Ｒ^{8}、Ｒ^{9}及びＲ^{10}は、各々独立して、ハロゲン；水素；Ｃ１－３０ヒドロカルビル基（このヒドロカルビル基は、非置換であるか、又はハロゲン原子、Ｃ１－２０アルキル基、Ｃ１－２０アルコキシ基、Ｃ７－２０アルキルアリール基、Ｃ７－２０アリールアルキル基、Ｃ６－２０アリール基、Ｃ６－２０アリールオキシ基、Ｃ７－２０アルキルアリールオキシ基、及びＣ７－２０アリールアルキルオキシ基からなる群から選択される１つ以上の置換基によってさらに置換されている）；並びにヘテロ原子含有Ｃ１－３０ヒドロカルビル基（このヘテロ原子含有ヒドロカルビル基は、非置換であるか、又はハロゲン原子、Ｃ１－２０アルキル基、Ｃ１－２０アルコキシ基、Ｃ７－２０アルキルアリール基、Ｃ７－２０アリールアルキル基、Ｃ６－２０アリール基、Ｃ６－２０アリールオキシ基、Ｃ７－２０アルキルアリールオキシ基、及びＣ７－２０アリールアルキルオキシ基からなる群から選択される１つ以上の置換基によってさらに置換されている）；からなる群から選択され；ここで、Ｒ^{7}、Ｒ^{8}、Ｒ^{9}及びＲ^{10}の２つの隣接する基は、任意に結合して環状ヒドロカルビル基又は環状ヘテロ原子含有ヒドロカルビル基を形成してもよく、環状ヒドロカルビル基又は環状ヘテロ原子含有ヒドロカルビル基は、非置換であるか、又はハロゲン原子、Ｃ１－２０アルキル基、Ｃ１－２０アルコキシ基、Ｃ７－２０アルキルアリール基、Ｃ７－２０アリールアルキル基、Ｃ６－２０アリール基、Ｃ６－２０アリールオキシ基、Ｃ７－２０アルキルアリールオキシ基、Ｃ７－２０アリールアルキルオキシ基、－ＮＲ’$_2$、アミド基、－ＰＲ’$_2$、ホスフィド基、－ＳＲ’、チオラート基、式－Ｓｉ（Ｒ^{a}）$_3$のシリル基、及び式－Ｇｅ（Ｒ^{a}）$_3$のゲルマニル基からなる群から選択される１つ以上の置換基によってさらに置換されており；ここで、各Ｒ’は、独立して、水素、Ｃ１－２０アルキル基、及びＣ６－２０アリール基からなる群から選択され；ここで、各Ｒ^{a}は、独立して、水素、Ｃ１－８アルキル基、Ｃ１－８アルコキシ基、Ｃ６－２０アリールオキシ基及びＣ６－２０アリール基からなる群から選択される。

【０２５４】

いくつかの実施形態では、Ｒ^{7}、Ｒ^{8}、Ｒ^{9}及びＲ^{10}は、各々独立して、ハロゲン；水素；並びにＣ１－３０ヒドロカルビル基（このヒドロカルビル基は、非置換であるか、又はハロゲン原子、Ｃ１－２０アルキル基、Ｃ１－２０アルコキシ基、Ｃ７－２０アルキルアリール基、Ｃ７－２０アリールアルキル基、Ｃ６－２０アリール基、Ｃ６－２０アリールオキシ基、Ｃ７－２０アルキルアリールオキシ基、及びＣ７－２０アリールアルキルオキシ基からなる群から選択される１つ以上の置換基によってさらに置換されている）；からなる群から選択され；ここで、Ｒ^{7}、Ｒ^{8}、Ｒ^{9}及びＲ^{10}の２つの隣接する基は、任意に結合して環状ヒドロカルビル基を形成してもよく、環状ヒドロカルビル基は、非置換であるか、又はハロゲン原子、Ｃ１－２０アルキル基、Ｃ１－２０アルコキシ基、Ｃ７－２０アルキルアリール基、Ｃ７－２０アリールアルキル基、Ｃ６－２０アリール基、Ｃ６－２０ア

リールオキシ基、C_{7-20}アルキルアリールオキシ基、C_{7-20}アリールアルキルオキシ基、－NR'_2、アミド基、－PR'_2、ホスフィド基、－SR'、チオラート基、式－$Si(R^a)_3$のシリル基、及び式－$Ge(R^a)_3$のゲルマニル基からなる群から選択される１つ以上の置換基によってさらに置換されており；ここで、各Ｒ’は、独立して、水素、C_{1-20}アルキル基、及びC_{6-20}アリール基からなる群から選択され；ここで、各R^aは、独立して、水素、C_{1-8}アルキル基、C_{1-8}アルコキシ基、C_{6-20}アリールオキシ基及びC_{6-20}アリール基からなる群から選択される。

【０２５５】

いくつかの実施形態では、R^7、R^8、R^9及びR^{10}は、各々独立して、ハロゲン；水素；並びにヘテロ原子含有C_{1-30}ヒドロカルビル基（このヘテロ原子含有ヒドロカルビル基は、非置換であるか、又はハロゲン原子、C_{1-20}アルキル基、C_{1-20}アルコキシ基、C_{7-20}アルキルアリール基、C_{7-20}アリールアルキル基、C_{6-20}アリール基、C_{6-20}アリールオキシ基、C_{7-20}アルキルアリールオキシ基、及びC_{7-20}アリールアルキルオキシ基からなる群から選択される１つ以上の置換基によってさらに置換されている）；からなる群から選択され；ここで、R^7、R^8、R^9及びR^{10}の２つの隣接する基は、任意に結合して環状ヘテロ原子含有ヒドロカルビル基を形成してもよく、環状ヘテロ原子含有ヒドロカルビル基は、非置換であるか、又はハロゲン原子、C_{1-20}アルキル基、C_{1-20}アルコキシ基、C_{7-20}アルキルアリール基、C_{7-20}アリールアルキル基、C_{6-20}アリール基、C_{6-20}アリールオキシ基、C_{7-20}アルキルアリールオキシ基、C_{7-20}アリールアルキルオキシ基、－NR'_2、アミド基、－PR'_2、ホスフィド基、－SR'、チオラート基、式－$Si(R^a)_3$のシリル基、及び式－$Ge(R^a)_3$のゲルマニル基からなる群から選択される１つ以上の置換基によってさらに置換されており；ここで、各Ｒ’は、独立して、水素、C_{1-20}アルキル基、及びC_{6-20}アリール基からなる群から選択され；ここで、各R^aは、独立して、水素、C_{1-8}アルキル基、C_{1-8}アルコキシ基、C_{6-20}アリールオキシ基及びC_{6-20}アリール基からなる群から選択される。

【０２５６】

いくつかの実施形態では、R^7、R^8、R^9及びR^{10}は、各々独立して、ハロゲン、水素、C_{1-30}アルキル基、C_{1-30}アルコキシ基、C_{7-30}アルキルアリール基、C_{7-30}アリールアルキル基、C_{6-30}アリール基、C_{6-30}アリールオキシド基、C_{7-30}アルキルアリールオキシ基、及びC_{7-30}アリールアルキルオキシ基からなる群から選択される。

【０２５７】

いくつかの実施形態では、R^7、R^8、R^9及びR^{10}は、各々独立して、ハロゲン、水素、C_{1-20}アルキル基、C_{1-20}アルコキシ基、C_{7-20}アルキルアリール基、C_{7-20}アリールアルキル基、C_{6-20}アリール基、C_{6-20}アリールオキシド基、C_{7-20}アルキルアリールオキシ基、及びC_{7-20}アリールアルキルオキシ基からなる群から選択される。

【０２５８】

いくつかの実施形態では、R^7、R^8、R^9及びR^{10}は、各々独立して、ハロゲン、水素、及びC_{1-30}ヒドロカルビル基からなる群から選択され、このヒドロカルビル基は、非置換であるか、又は１つ以上のハロゲン原子によってさらに置換されている。

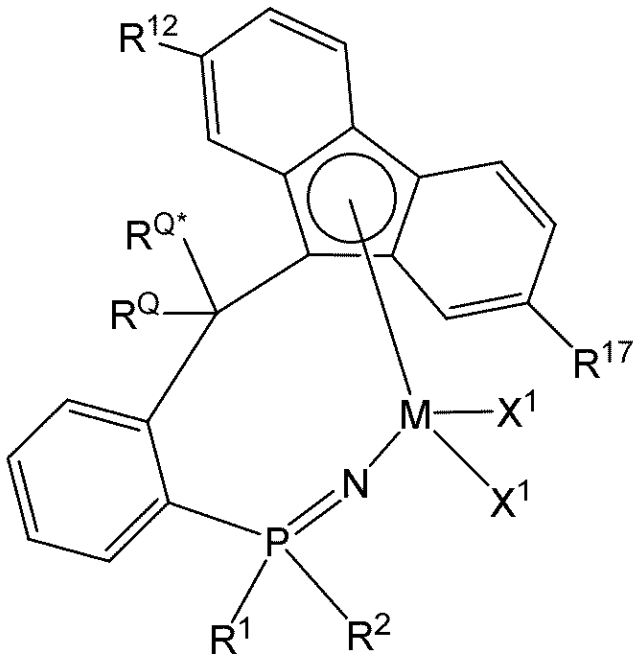
【０２５９】

いくつかの実施形態では、R^7、R^8、R^9及びR^{10}は、各々独立して、ハロゲン、水素、及びC_{1-30}ヘテロ原子含有ヒドロカルビル基からなる群から選択され、このヘテロ原子含有ヒドロカルビル基は、非置換であるか、又は１つ以上のハロゲン原子によってさらに置換されている。

【０２６０】

いくつかの実施形態では、R^7、R^8、R^9及びR^{10}は、各々独立して、水素及びC_{1-30}ヒドロカルビル基からなる群から選択され、このヒドロカルビル基は、非置換で

あるか、又は１つ以上のハロゲン原子によってさらに置換されている。
【０２６１】
いくつかの実施形態では、R^7、R^8、R^9及びR^{10}は、各々独立して、水素及びC_{1-30}ヘテロ原子含有ヒドロカルビル基からなる群から選択され、このヘテロ原子含有ヒドロカルビル基は、非置換であるか、又は１つ以上のハロゲン原子によってさらに置換されている。
【０２６２】
いくつかの実施形態では、R^7、R^8、R^9及びR^{10}は、各々水素である。
いくつかの実施形態では、R^7、R^8、R^9及びR^{10}は、各々水素であり、R^{11}、R^{12}、R^{13}、R^{14}、R^{15}、R^{16}、R^{17}、R^{18}は、各々独立して、ハロゲン、水素、C_{1-30}アルキル基、及びC_{6-30}アリール基からなる群から選択される。
いくつかの実施形態では、R^7、R^8、R^9及びR^{10}は、各々水素であり、R^{11}、R^{13}、R^{14}、R^{15}、R^{16}及びR^{18}は、各々水素であり、R^{12}及びR^{17}は、各々独立して、C_{1-20}アルキル基又はC_{6-20}アリール基である。
いくつかの実施形態では、R^7、R^8、R^9及びR^{10}は、各々水素であり、R^{11}、R^{13}、R^{14}、R^{15}、R^{16}及びR^{18}は、各々水素であり、R^{12}及びR^{17}は、各々ｔｅｒｔ－ブチル基である。
いくつかの実施形態では、R^7、R^8、R^9及びR^{10}は、各々水素であり、R^{11}、R^{12}、R^{14}、R^{15}、R^{17}及びR^{18}は、各々水素であり、R^{13}及びR^{16}は、各々独立して、C_{1-20}アルキル基又はC_{6-20}アリール基である。
いくつかの実施形態では、R^7、R^8、R^9及びR^{10}は、各々水素であり、R^{11}、R^{12}、R^{14}、R^{15}、R^{17}及びR^{18}は、各々水素であり、R^{13}及びR^{16}は、各々ｔｅｒｔ－ブチル基である。
【０２６３】
本開示の実施形態では、式ＶＩＩの有機金属錯体は、式ＶＩＩａ：
【化８５】

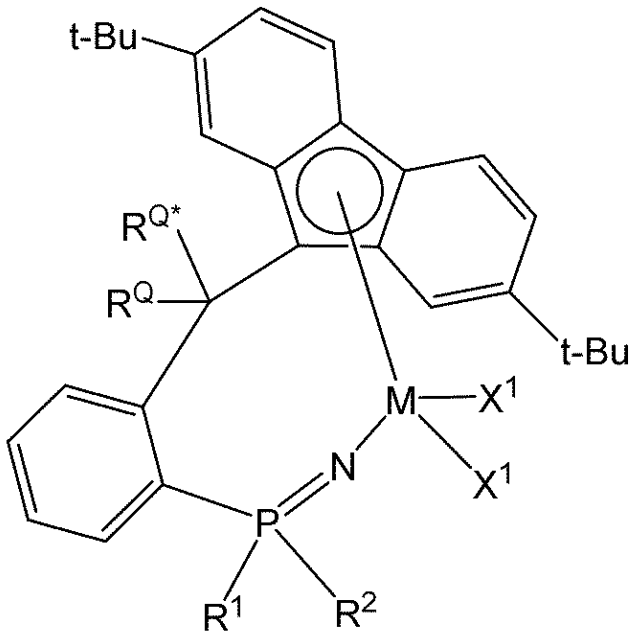


(VIIa)

で表される有機金属錯体であり、
式中、Ｍ、R^1、R^2、R^Q、R^{Q*}、R^{12}、R^{17}及びX^1は、上記式Ｉ、式Ｖ及び式ＶＩＩで定義した通りである。
【０２６４】

本開示の実施形態では、式ＶＩＩの有機金属錯体は、式ＶＩＩｂ：

【化８６】



(VIIb)

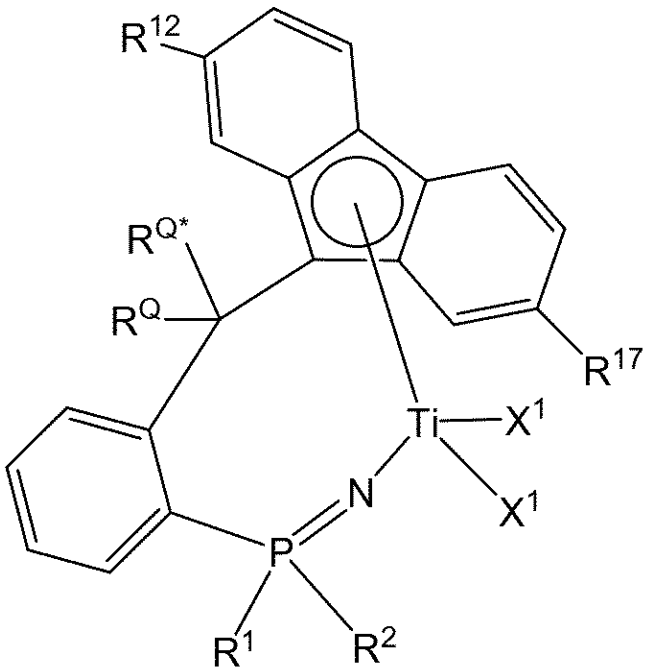
で表される有機金属錯体であり、

式中、Ｍ、Ｒ^{1}、Ｒ^{2}、Ｒ^{Q}、Ｒ^{Q}＊及びＸ^{1}は、上記式Ｉ及び式ＶＩＩで定義した通りである。

【０２６５】

本開示の実施形態では、式ＶＩＩの有機金属錯体は、式ＶＩＩｃ：

【化８７】

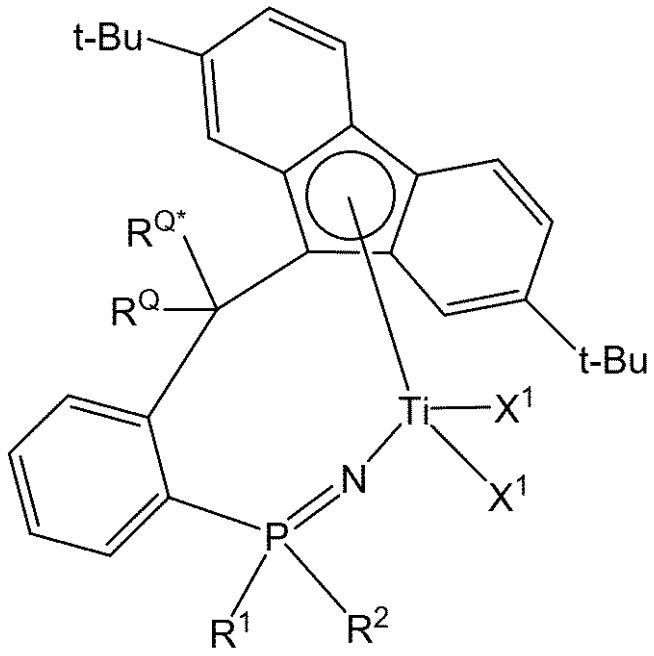


(VIIc)

で表される有機金属錯体であり、

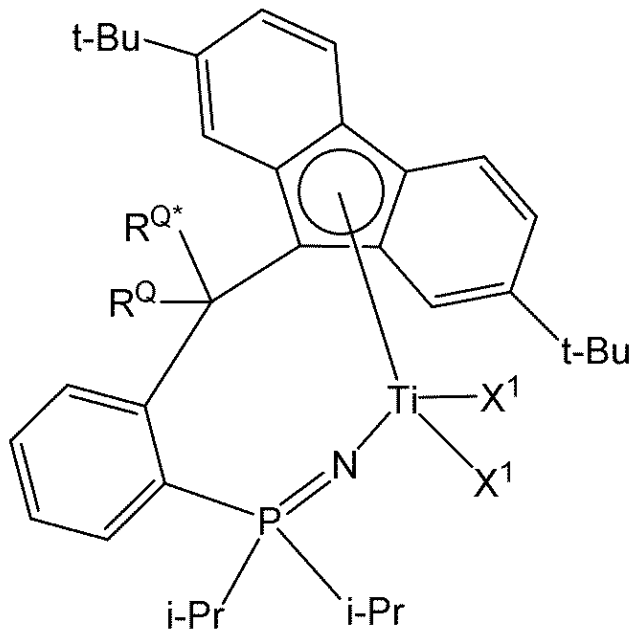
式中、Ｒ^{1}、Ｒ^{2}、Ｒ^{Q}、Ｒ^{Q}＊、Ｒ^{12}、Ｒ^{17}及びＸ^{1}は、上記式Ｉ、式Ｖ及び式ＶＩＩで定義した通りである。

【０２６６】
本開示の実施形態では、式ＶＩＩの有機金属錯体は、式ＶＩＩｄ：
【化８８】



(VIId)

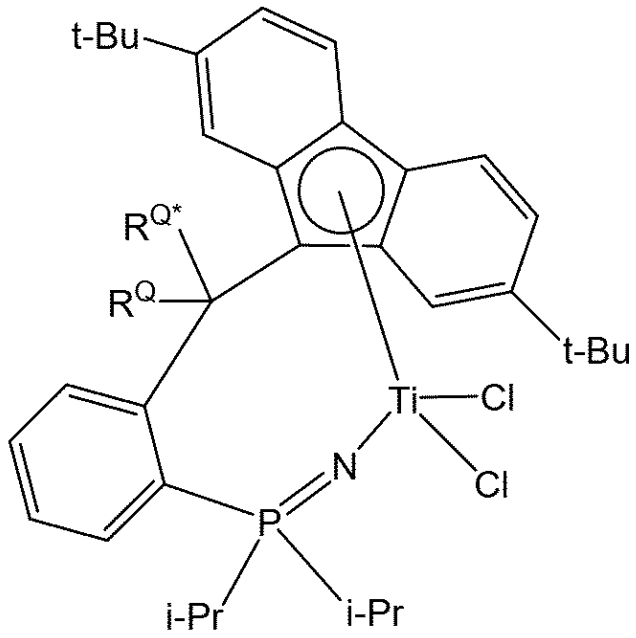
で表される有機金属錯体であり、
式中、Ｒ^{1}、Ｒ^{2}、Ｒ^{Q}、Ｒ^{Q}＊及びＸ^{1}は、上記式Ｉ及び式ＶＩＩで定義した通りである。
【０２６７】
本開示の実施形態では、式ＶＩＩの有機金属錯体は、式ＶＩＩｅ：
【化８９】



(VIIe)

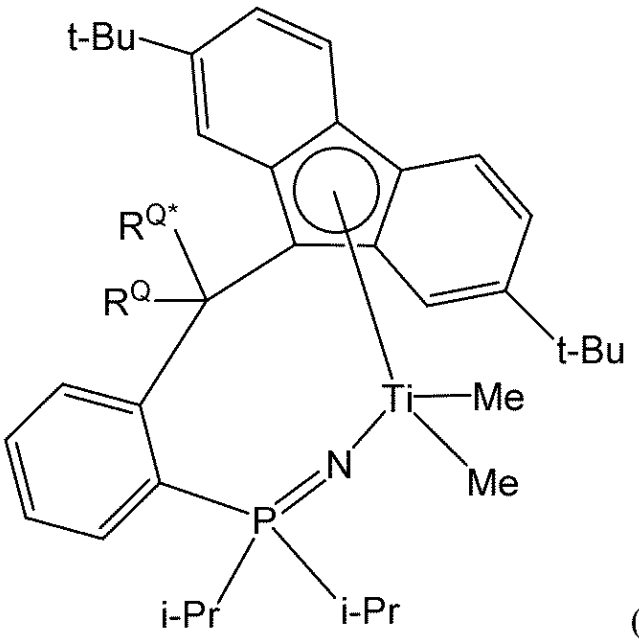
で表される有機金属錯体であり、
式中、Ｒ^{Q}、Ｒ^{Q}＊及びＸ^{1}は、上記式Ｉ及び式ＶＩＩで定義した通りである。

【０２６８】
本開示の実施形態では、式ＶＩＩの有機金属錯体は、式ＶＩＩｆ：
【化９０】



(VIIf).

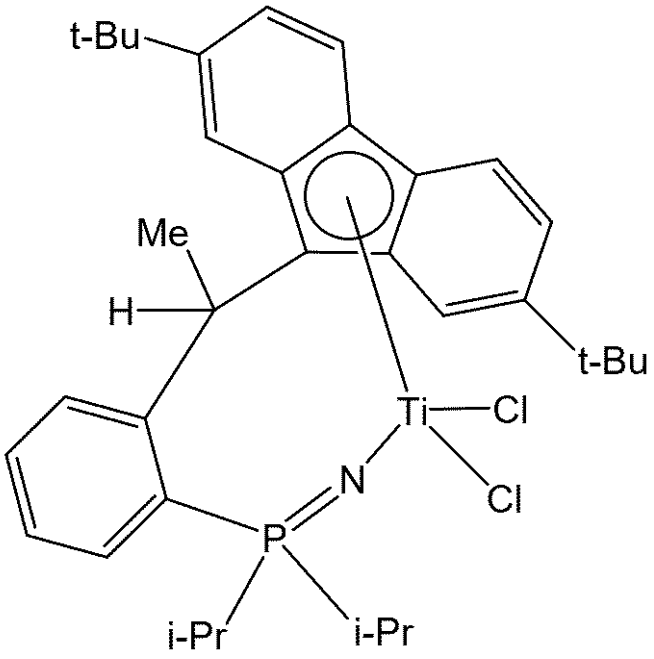
で表される有機金属錯体であり、
式中、R^Q及びR^{Q*}は、上記式ＶＩＩで定義した通りである。
【０２６９】
本開示の実施形態では、式ＶＩＩの有機金属錯体は、式ＶＩＩｇ：
【化９１】



(VIIg)

で表される有機金属錯体であり、
式中、R^Q及びR^{Q*}は、上記式ＶＩＩで定義した通りである。
【０２７０】
本開示の一実施形態では、式ＶＩＩの有機金属錯体は、式ＶＩＩｈ：

【化９２】



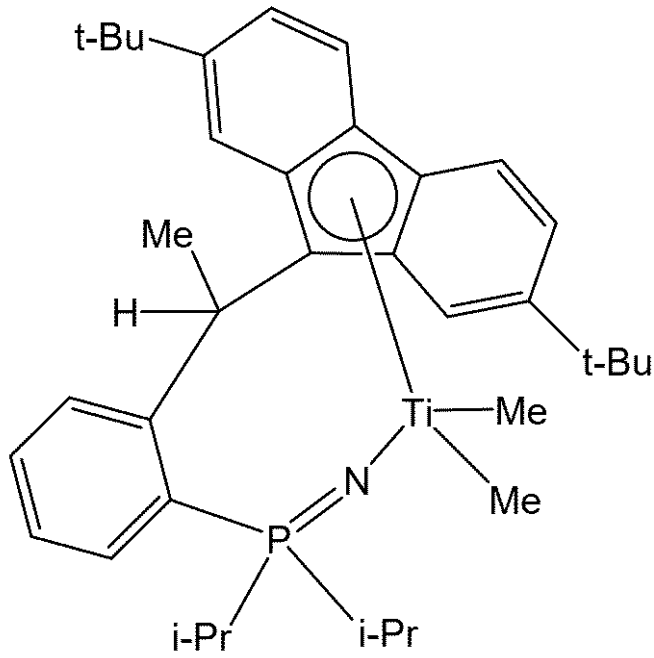
(VIIh).

で表される有機金属錯体である。

【０２７１】

本開示の一実施形態では、式ＶＩＩの有機金属錯体は、式ＶＩＩｉ：

【化９３】



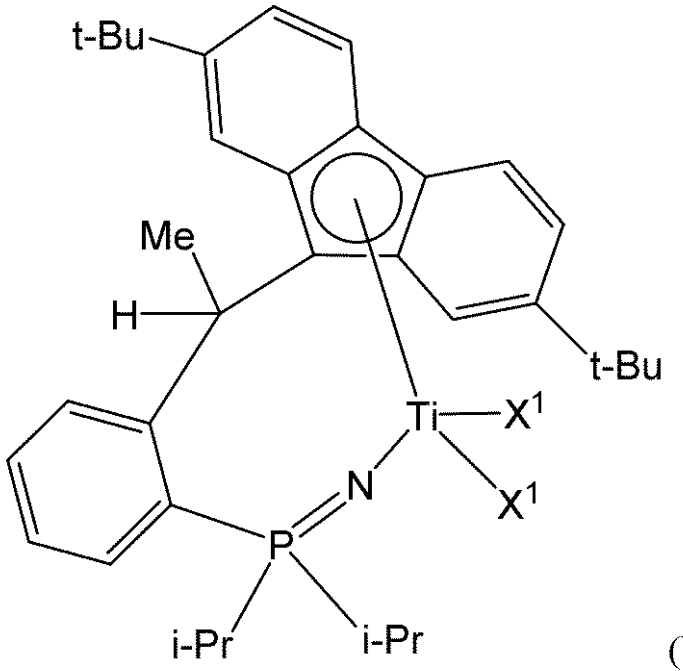
(VIIi).

で表される有機金属錯体である。

【０２７２】

本開示の実施形態では、式ＶＩＩの有機金属錯体は、式ＶＩＩｊ：

【化９４】



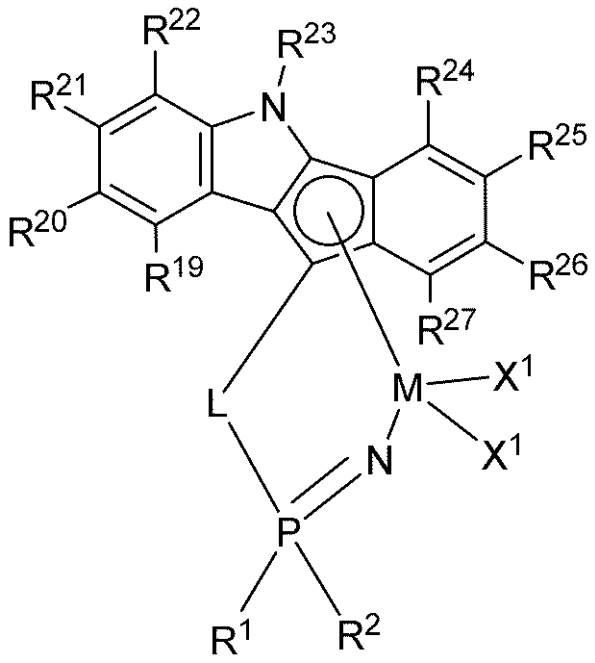
(VIIj)

で表される有機金属錯体であり、
式中、Ｘ１は、上記式Ｉで定義した通りである。

【０２７３】

本開示の実施形態では、式Ｉの有機金属錯体は、式ＶＩＩＩ：

【化９５】



(VIII)

で表される有機金属錯体であり、
式中、Ｍ、Ｒ１、Ｒ２、Ｘ１及びＬは、上記式Ｉで定義した通りであり；
式中、Ｒ２３は、

水素；
Ｃ１－３０ヒドロカルビル基（このヒドロカルビル基は、非置換であるか、又はハロゲン原子、Ｃ１－２０アルキル基、Ｃ１－２０アルコキシ基、Ｃ７－２０アルキルアリール基、Ｃ７－２０アリールアルキル基、Ｃ６－２０アリール基、Ｃ６－２０アリールオキシ基、Ｃ７－２０アルキルアリールオキシ基、及びＣ７－２０アリールアルキルオキシ基からなる群から選択される１つ以上の置換基によってさらに置換されている）；
ヘテロ原子含有Ｃ１－３０ヒドロカルビル基（このヘテロ原子含有ヒドロカルビル基は、非置換であるか、又はハロゲン原子、Ｃ１－２０アルキル基、Ｃ１－２０アルコキシ基、Ｃ７－２０アルキルアリール基、Ｃ７－２０アリールアルキル基、Ｃ６－２０アリール基、Ｃ６－２０アリールオキシ基、Ｃ７－２０アルキルアリールオキシ基、及びＣ７－２０アリールアルキルオキシ基からなる群から選択される１つ以上の置換基によってさらに置換されている）；
からなる群から選択され；
式中、Ｒ１９、Ｒ２０、Ｒ２１、Ｒ２２、Ｒ２４、Ｒ２５、Ｒ２６、及びＲ２７は、各々独立して、
ハロゲン；
水素；
Ｃ１－３０ヒドロカルビル基（このヒドロカルビル基は、非置換であるか、又はハロゲン原子、Ｃ１－２０アルキル基、Ｃ１－２０アルコキシ基、Ｃ７－２０アルキルアリール基、Ｃ７－２０アリールアルキル基、Ｃ６－２０アリール基、Ｃ６－２０アリールオキシ基、Ｃ７－２０アルキルアリールオキシ基、及びＣ７－２０アリールアルキルオキシ基からなる群から選択される１つ以上の置換基によってさらに置換されている）；
ヘテロ原子含有Ｃ１－３０ヒドロカルビル基（このヘテロ原子含有ヒドロカルビル基は、非置換であるか、又はハロゲン原子、Ｃ１－２０アルキル基、Ｃ１－２０アルコキシ基、Ｃ７－２０アルキルアリール基、Ｃ７－２０アリールアルキル基、Ｃ６－２０アリール基、Ｃ６－２０アリールオキシ基、Ｃ７－２０アルキルアリールオキシ基、及びＣ７－２０アリールアルキルオキシ基からなる群から選択される１つ以上の置換基によってさらに置換されている）；
オキシ基、－ＯＲ’；
アミド基、－ＮＲ’$_2$；
ホスフィド基、－ＰＲ’$_2$；
チオラート基、－ＳＲ’；
式－Ｓｉ（Ｒ^a）$_3$のシリル基；
式－Ｇｅ（Ｒ^a）$_3$のゲルマニル基；
からなる群から選択され；
ここで、Ｒ１９、Ｒ２０、Ｒ２１、Ｒ２２、Ｒ２４、Ｒ２５、Ｒ２６、及びＲ２７の２つの隣接する基は、任意に結合して環状ヒドロカルビル基又は環状ヘテロ原子含有ヒドロカルビル基を形成してもよく、環状ヒドロカルビル基又は環状ヘテロ原子含有ヒドロカルビル基は、非置換であるか、又はハロゲン原子、Ｃ１－２０アルキル基、Ｃ１－２０アルコキシ基、Ｃ７－２０アルキルアリール基、Ｃ７－２０アリールアルキル基、Ｃ６－２０アリール基、Ｃ６－２０アリールオキシ基、Ｃ７－２０アルキルアリールオキシ基、Ｃ７－２０アリールアルキルオキシ基、式－ＮＲ’$_2$のアミド基、式－ＰＲ’$_2$のホスフィド基、式－ＳＲ’のチオラート基、式－Ｓｉ（Ｒ^a）$_3$のシリル基、及び式－Ｇｅ（Ｒ^a）$_3$のゲルマニル基からなる群から選択される１つ以上の置換基によってさらに置換されており；
ここで、各Ｒ’は、独立して、水素、Ｃ$_1$－２０アルキル基、及びＣ６－２０アリール基からなる群から選択され；
ここで、各Ｒ^{a}は、独立して、水素、Ｃ１－８アルキル基、Ｃ１－８アルコキシ基、Ｃ６－２０アリールオキシ基及びＣ６－２０アリール基からなる群から選択される、有機金属錯体である。
【０２７４】

いくつかの実施形態では、R^{23}は、C_{1-30}ヒドロカルビル基からなる群から選択され、このヒドロカルビル基は、非置換であるか、又はハロゲン原子、C_{1-20}アルキル基、C_{1-20}アルコキシ基、C_{7-20}アルキルアリール基、C_{7-20}アリールアルキル基、C_{6-20}アリール基、C_{6-20}アリールオキシ基、C_{7-20}アルキルアリールオキシ基、及びC_{7-20}アリールアルキルオキシ基からなる群から選択される１つ以上の置換基によってさらに置換されている。

【０２７５】

いくつかの実施形態では、R^{23}は、ヘテロ原子含有C_{1-30}ヒドロカルビル基からなる群から選択され、このヘテロ原子含有ヒドロカルビル基は、非置換であるか、又はハロゲン原子、C_{1-20}アルキル基、C_{1-20}アルコキシ基、C_{7-20}アルキルアリール基、C_{7-20}アリールアルキル基、C_{6-20}アリール基、C_{6-20}アリールオキシ基、C_{7-20}アルキルアリールオキシ基、及びC_{7-20}アリールアルキルオキシ基からなる群から選択される１つ以上の置換基によってさらに置換されている。

【０２７６】

いくつかの実施形態では、R^{19}、R^{20}、R^{21}、R^{22}、R^{24}、R^{25}、R^{26}、及びR^{27}は、各々独立して、ハロゲン；水素；C_{1-30}ヒドロカルビル基（このヒドロカルビル基は、非置換であるか、又はハロゲン原子、C_{1-20}アルキル基、C_{1-20}アルコキシ基、C_{7-20}アルキルアリール基、C_{7-20}アリールアルキル基、C_{6-20}アリール基、C_{6-20}アリールオキシ基、C_{7-20}アルキルアリールオキシ基、及びC_{7-20}アリールアルキルオキシ基からなる群から選択される１つ以上の置換基によってさらに置換されている）；並びにヘテロ原子含有C_{1-30}ヒドロカルビル基（このヘテロ原子含有ヒドロカルビル基は、非置換であるか、又はハロゲン原子、C_{1-20}アルキル基、C_{1-20}アルコキシ基、C_{7-20}アルキルアリール基、C_{7-20}アリールアルキル基、C_{6-20}アリール基、C_{6-20}アリールオキシ基、C_{7-20}アルキルアリールオキシ基、及びC_{7-20}アリールアルキルオキシ基からなる群から選択される１つ以上の置換基によってさらに置換されている）；からなる群から選択され；ここで、R^{19}、R^{20}、R^{21}、R^{22}、R^{24}、R^{25}、R^{26}、及びR^{27}の２つの隣接する基は、任意に結合して環状ヒドロカルビル基又は環状ヘテロ原子含有ヒドロカルビル基を形成してもよく、環状ヒドロカルビル基又は環状ヘテロ原子含有ヒドロカルビル基は、非置換であるか、又はハロゲン原子、C_{1-20}アルキル基、C_{1-20}アルコキシ基、C_{7-20}アルキルアリール基、C_{7-20}アリールアルキル基、C_{6-20}アリール基、C_{6-20}アリールオキシ基、C_{7-20}アルキルアリールオキシ基、C_{7-20}アリールアルキルオキシ基、－NR'_2、アミド基、－PR'_2、ホスフィド基、－SR'、チオラート基、式－$Si(R^a)_3$のシリル基、及び式－$Ge(R^a)_3$のゲルマニル基からなる群から選択される１つ以上の置換基によってさらに置換されており；ここで、各R'は、独立して、水素、C_{1-20}アルキル基、及びC_{6-20}アリール基からなる群から選択され；ここで、各R^aは、独立して、水素、C_{1-8}アルキル基、C_{1-8}アルコキシ基、C_{6-20}アリールオキシ基及びC_{6-20}アリール基からなる群から選択される。

【０２７７】

いくつかの実施形態では、R^{19}、R^{20}、R^{21}、R^{22}、R^{24}、R^{25}、R^{26}、及びR^{27}は、各々独立して、ハロゲン；水素；並びにC_{1-30}ヒドロカルビル基（このヒドロカルビル基は、非置換であるか、又はハロゲン原子、C_{1-20}アルキル基、C_{1-20}アルコキシ基、C_{7-20}アルキルアリール基、C_{7-20}アリールアルキル基、C_{6-20}アリール基、C_{6-20}アリールオキシ基、C_{7-20}アルキルアリールオキシ基、及びC_{7-20}アリールアルキルオキシ基からなる群から選択される１つ以上の置換基によってさらに置換されている）；からなる群から選択され；ここで、R^{19}、R^{20}、R^{21}、R^{22}、R^{24}、R^{25}、R^{26}、及びR^{27}の２つの隣接する基は、任意に結合して環状ヒドロカルビル基を形成してもよく、環状ヒドロカルビル基は、非置換であるか、又はハロゲン原子、C_{1-20}アルキル基、C_{1-20}アルコキシ基、C_{7-20}アルキルアリール基、C_{7-20}アリールアルキル基、C_{6-20}アリール基、C_{6-20}アリ

ールオキシ基、C_{7-20}アルキルアリールオキシ基、C_{7-20}アリールアルキルオキシ基、－NR'_2、アミド基、－PR'_2、ホスフィド基、－SR'、チオラート基、式－$Si(R^a)_3$のシリル基、及び式－$Ge(R^a)_3$のゲルマニル基からなる群から選択される１つ以上の置換基によってさらに置換されており；ここで、各R'は、独立して、水素、C_{1-20}アルキル基、及びC_{6-20}アリール基からなる群から選択され；ここで、各R^aは、独立して、水素、C_{1-8}アルキル基、C_{1-8}アルコキシ基、C_{6-20}アリールオキシ基及びC_{6-20}アリール基からなる群から選択される。

【０２７８】

いくつかの実施形態では、R^{19}、R^{20}、R^{21}、R^{22}、R^{24}、R^{25}、R^{26}、及びR^{27}は、各々独立して、ハロゲン；水素；並びにヘテロ原子含有C_{1-30}ヒドロカルビル基（このヘテロ原子含有ヒドロカルビル基は、非置換であるか、又はハロゲン原子、C_{1-20}アルキル基、C_{1-20}アルコキシ基、C_{7-20}アルキルアリール基、C_{7-20}アリールアルキル基、C_{6-20}アリール基、C_{6-20}アリールオキシ基、C_{7-20}アルキルアリールオキシ基、及びC_{7-20}アリールアルキルオキシ基からなる群から選択される１つ以上の置換基によってさらに置換されている）；からなる群から選択され；ここで、R^{19}、R^{20}、R^{21}、R^{22}、R^{24}、R^{25}、R^{26}、及びR^{27}の２つの隣接する基は、任意に結合して環状ヘテロ原子含有ヒドロカルビル基を形成してもよく、環状ヘテロ原子含有ヒドロカルビル基は、非置換であるか、又はハロゲン原子、C_{1-20}アルキル基、C_{1-20}アルコキシ基、C_{7-20}アルキルアリール基、C_{7-20}アリールアルキル基、C_{6-20}アリール基、C_{6-20}アリールオキシ基、C_{7-20}アルキルアリールオキシ基、C_{7-20}アリールアルキルオキシ基、－NR'_2、アミド基、－PR'_2、ホスフィド基、－SR'、チオラート基、式－$Si(R^a)_3$のシリル基、及び式－$Ge(R^a)_3$のゲルマニル基からなる群から選択される１つ以上の置換基によってさらに置換されており；ここで、各R'は、独立して、水素、C_{1-20}アルキル基、及びC_{6-20}アリール基からなる群から選択され；ここで、各R^aは、独立して、水素、C_{1-8}アルキル基、C_{1-8}アルコキシ基、C_{6-20}アリールオキシ基及びC_{6-20}アリール基からなる群から選択される。

【０２７９】

いくつかの実施形態では、R^{19}、R^{20}、R^{21}、R^{22}、R^{24}、R^{25}、R^{26}、及びR^{27}は、各々独立して、ハロゲン、水素、C_{1-30}アルキル基、C_{1-30}アルコキシ基、C_{7-30}アルキルアリール基、C_{7-30}アリールアルキル基、C_{6-30}アリール基、C_{6-30}アリールオキシド基、C_{7-30}アルキルアリールオキシ基、及びC_{7-30}アリールアルキルオキシ基からなる群から選択される。

【０２８０】

いくつかの実施形態では、R^{19}、R^{20}、R^{21}、R^{22}、R^{24}、R^{25}、R^{26}、及びR^{27}は、各々独立して、ハロゲン、水素、C_{1-20}アルキル基、C_{1-20}アルコキシ基、C_{7-20}アルキルアリール基、C_{7-20}アリールアルキル基、C_{6-20}アリール基、C_{6-20}アリールオキシド基、C_{7-20}アルキルアリールオキシ基、及びC_{7-20}アリールアルキルオキシ基からなる群から選択される。

【０２８１】

いくつかの実施形態では、R^{19}、R^{20}、R^{21}、R^{22}、R^{24}、R^{25}、R^{26}、及びR^{27}は、各々独立して、ハロゲン、水素、及びC_{1-30}ヒドロカルビル基からなる群から選択され、このヒドロカルビル基は、非置換であるか、又は１つ以上のハロゲン原子によってさらに置換されている。

【０２８２】

いくつかの実施形態では、R^{19}、R^{20}、R^{21}、R^{22}、R^{24}、R^{25}、R^{26}、及びR^{27}は、各々独立して、ハロゲン、水素、及びC_{1-30}ヘテロ原子含有ヒドロカルビル基からなる群から選択され、このヘテロ原子含有ヒドロカルビル基は、非置換であるか、又は１つ以上のハロゲン原子によってさらに置換されている。

【０２８３】

いくつかの実施形態では、R^{19}、R^{20}、R^{21}、R^{22}、R^{24}、R^{25}、R^{26}、及びR^{27}は、各々独立して、水素及びC_{1-30}ヒドロカルビル基からなる群から選択され、このヒドロカルビル基は、非置換であるか、又は１つ以上のハロゲン原子によってさらに置換されている。

【０２８４】

いくつかの実施形態では、R^{19}、R^{20}、R^{21}、R^{22}、R^{24}、R^{25}、R^{26}、及びR^{27}は、各々独立して、水素及びC_{1-30}ヘテロ原子含有ヒドロカルビル基からなる群から選択され、このヘテロ原子含有ヒドロカルビル基は、非置換であるか、又は１つ以上のハロゲン原子によってさらに置換されている。

【０２８５】

いくつかの実施形態では、R^{20}は、非置換のC_{1-30}ヒドロカルビル基である。

いくつかの実施形態では、R^{20}は、C_{1-8}アルキル基である。

いくつかの実施形態では、R^{19}、R^{21}、R^{22}、R^{24}、R^{25}、R^{26}、及びR^{27}は、各々水素である。

いくつかの実施形態では、R^{19}、R^{20}、R^{21}、R^{22}、R^{24}、R^{25}、R^{26}、及びR^{27}は、各々水素である。

いくつかの実施形態では、R^{20}は、非置換のC_{1-30}ヒドロカルビル基であり、R^{19}、R^{21}、R^{22}、R^{24}、R^{25}、R^{26}、及びR^{27}は、各々水素である。

いくつかの実施形態では、R^{20}は、C_{1-8}アルキル基であり、R^{19}、R^{21}、R^{22}、R^{24}、R^{25}、R^{26}、及びR^{27}は、各々水素である。

【０２８６】

いくつかの実施形態では、R^{20}は、メチル基である。

いくつかの実施形態では、R^{20}は、フェニル基である。

いくつかの実施形態では、R^{23}は、水素、C_{1-30}アルキル基、及びC_{6-20}アリール基からなる群から選択される。

いくつかの実施形態では、R^{23}は、C_{1-30}アルキル基、及びC_{6-20}アリール基からなる群から選択される。

いくつかの実施形態では、R^{23}は、非置換のC_{1-30}ヒドロカルビル基である。

いくつかの実施形態では、R^{23}は、C_{1-8}アルキル基である。

いくつかの実施形態では、R^{23}は、メチル基である。

いくつかの実施形態では、R^{23}は、フェニル基である。

【０２８７】

いくつかの実施形態では、R_{20}及びR_{23}は、各々独立して、非置換のC_{1-30}ヒドロカルビル基であり、R^{19}、R^{21}、R^{22}、R^{24}、R^{25}、R^{26}、及びR^{27}は、各々水素である。

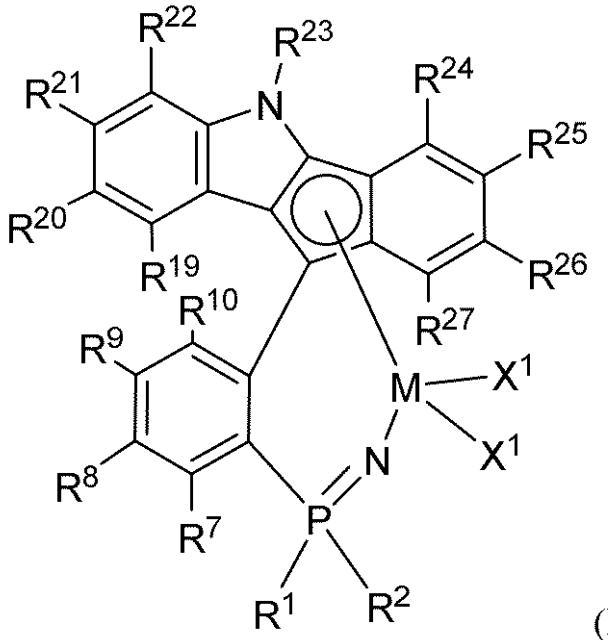
いくつかの実施形態では、R_{20}及びR_{23}は、各々独立して、C_{1-8}アルキル基であり、R^{19}、R^{21}、R^{22}、R^{24}、R^{25}、R^{26}、及びR^{27}は、各々水素である。

いくつかの実施形態では、R_{20}及びR_{23}は、各々メチル基であり、R^{19}、R^{21}、R^{22}、R^{24}、R^{25}、R^{26}、及びR^{27}は、各々水素である。

【０２８８】

本開示の実施形態では、式ＶＩＩＩの有機金属錯体は、式ＩＸ：

【化９６】



(IX)

で表される有機金属錯体であり、

式中、Ｍ、Ｒ１、Ｒ２、Ｒ１９、Ｒ２０、Ｒ２１、Ｒ２２、Ｒ２３、Ｒ２４、Ｒ２５、Ｒ２６、Ｒ２７及びＸ１は、上記式Ｉ及び式ＶＩＩＩで定義した通りであり；

式中、Ｒ７、Ｒ８、Ｒ９及びＲ１０は、各々独立して、

ハロゲン；

水素；

Ｃ１－３０ヒドロカルビル基（このヒドロカルビル基は、非置換であるか、又はハロゲン原子、Ｃ１－２０アルキル基、Ｃ１－２０アルコキシ基、Ｃ７－２０アルキルアリール基、Ｃ７－２０アリールアルキル基、Ｃ６－２０アリール基、Ｃ６－２０アリールオキシ基、Ｃ７－２０アルキルアリールオキシ基、及びＣ７－２０アリールアルキルオキシ基からなる群から選択される１つ以上の置換基によってさらに置換されている）；

ヘテロ原子含有Ｃ１－３０ヒドロカルビル基（このヘテロ原子含有ヒドロカルビル基は、非置換であるか、又はハロゲン原子、Ｃ１－２０アルキル基、Ｃ１－２０アルコキシ基、Ｃ７－２０アルキルアリール基、Ｃ７－２０アリールアルキル基、Ｃ６－２０アリール基、Ｃ６－２０アリールオキシ基、Ｃ７－２０アルキルアリールオキシ基、及びＣ７－２０アリールアルキルオキシ基からなる群から選択される１つ以上の置換基によってさらに置換されている）；

オキシ基、－ＯＲ’；

アミド基、－ＮＲ’$_2$；

ホスフィド基、－ＰＲ’$_2$；

チオラート基、－ＳＲ’；

式－Ｓｉ（Ｒ^a）$_3$のシリル基；

式－Ｇｅ（Ｒ^a）$_3$のゲルマニル基；

からなる群から選択され；

ここで、Ｒ７、Ｒ８、Ｒ９及びＲ１０の２つの隣接する基は、任意に結合して環状ヒドロカルビル基又は環状ヘテロ原子含有ヒドロカルビル基を形成してもよく、環状ヒドロカルビル基又は環状ヘテロ原子含有ヒドロカルビル基は、非置換であるか、又はハロゲン原子、Ｃ１－２０アルキル基、Ｃ１－２０アルコキシ基、Ｃ７－２０アルキルアリール基、Ｃ７－２０アリールアルキル基、Ｃ６－２０アリール基、Ｃ６－２０アリールオキシ基、Ｃ７

－２０アルキルアリールオキシ基、Ｃ７－２０アリールアルキルオキシ基、式－ＮＲ’２のアミド基、式－ＰＲ’２のホスフィド基、式－ＳＲ’のチオラート基、式－Ｓｉ（Ｒａ）３のシリル基、及び式－Ｇｅ（Ｒａ）３のゲルマニル基からなる群から選択される１つ以上の置換基によってさらに置換されており；

ここで、各Ｒ’は、独立して、水素、Ｃ1－２０アルキル基、及びＣ６－２０アリール基からなる群から選択され；

ここで、各Ｒａは、独立して、水素、Ｃ１－８アルキル基、Ｃ１－８アルコキシ基、Ｃ６－２０アリールオキシ基及びＣ６－２０アリール基からなる群から選択される、有機金属錯体である。

【０２８９】

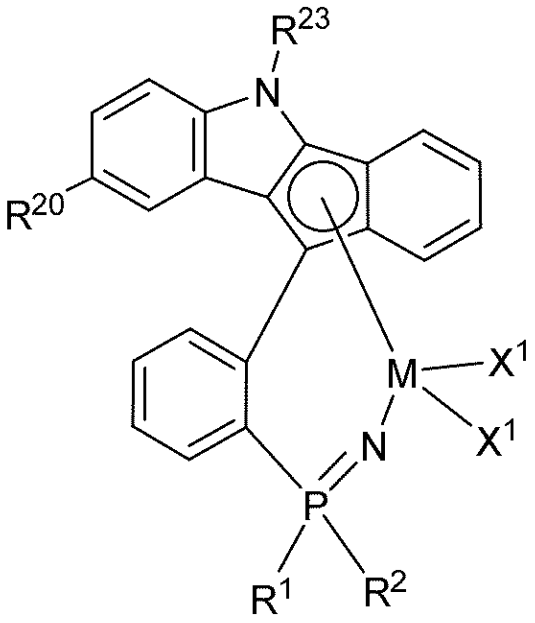
いくつかの実施形態では、Ｒ７、Ｒ８、Ｒ９及びＲ１０は、各々独立して、ハロゲン；水素；Ｃ１－３０ヒドロカルビル基（このヒドロカルビル基は、非置換であるか、又はハロゲン原子、Ｃ１－２０アルキル基、Ｃ１－２０アルコキシ基、Ｃ７－２０アルキルアリール基、Ｃ７－２０アリールアルキル基、Ｃ６－２０アリール基、Ｃ６－２０アリールオキシ基、Ｃ７－２０アルキルアリールオキシ基、及びＣ７－２０アリールアルキルオキシ基からなる群から選択される１つ以上の置換基によってさらに置換されている）；並びにヘテロ原子含有Ｃ１－３０ヒドロカルビル基（このヘテロ原子含有ヒドロカルビル基は、非置換であるか、又はハロゲン原子、Ｃ１－２０アルキル基、Ｃ１－２０アルコキシ基、Ｃ７－２０アルキルアリール基、Ｃ７－２０アリールアルキル基、Ｃ６－２０アリール基、Ｃ６－２０アリールオキシ基、Ｃ７－２０アルキルアリールオキシ基、及びＣ７－２０アリールアルキルオキシ基からなる群から選択される１つ以上の置換基によってさらに置換されている）；からなる群から選択され；ここで、Ｒ７、Ｒ８、Ｒ９及びＲ１０の２つの隣接する基は、任意に結合して環状ヒドロカルビル基又は環状ヘテロ原子含有ヒドロカルビル基を形成してもよく、環状ヒドロカルビル基又は環状ヘテロ原子含有ヒドロカルビル基は、非置換であるか、又はハロゲン原子、Ｃ１－２０アルキル基、Ｃ１－２０アルコキシ基、Ｃ７－２０アルキルアリール基、Ｃ７－２０アリールアルキル基、Ｃ６－２０アリール基、Ｃ６－２０アリールオキシ基、Ｃ７－２０アルキルアリールオキシ基、Ｃ７－２０アリールアルキルオキシ基、－ＮＲ’２、アミド基、－ＰＲ’２、ホスフィド基、－ＳＲ’、チオラート基、式－Ｓｉ（Ｒａ）３のシリル基、及び式－Ｇｅ（Ｒａ）３のゲルマニル基からなる群から選択される１つ以上の置換基によってさらに置換されており；ここで、各Ｒ’は、独立して、水素、Ｃ１－２０アルキル基、及びＣ６－２０アリール基からなる群から選択され；ここで、各Ｒａは、独立して、水素、Ｃ１－８アルキル基、Ｃ１－８アルコキシ基、Ｃ６－２０アリールオキシ基及びＣ６－２０アリール基からなる群から選択される。

【０２９０】

いくつかの実施形態では、Ｒ７、Ｒ８、Ｒ９及びＲ１０は、各々独立して、ハロゲン；水素；並びにＣ１－３０ヒドロカルビル基（このヒドロカルビル基は、非置換であるか、又はハロゲン原子、Ｃ１－２０アルキル基、Ｃ１－２０アルコキシ基、Ｃ７－２０アルキルアリール基、Ｃ７－２０アリールアルキル基、Ｃ６－２０アリール基、Ｃ６－２０アリールオキシ基、Ｃ７－２０アルキルアリールオキシ基、及びＣ７－２０アリールアルキルオキシ基からなる群から選択される１つ以上の置換基によってさらに置換されている）；からなる群から選択され；ここで、Ｒ７、Ｒ８、Ｒ９及びＲ１０の２つの隣接する基は、任意に結合して環状ヒドロカルビル基を形成してもよく、環状ヒドロカルビル基は、非置換であるか、又はハロゲン原子、Ｃ１－２０アルキル基、Ｃ１－２０アルコキシ基、Ｃ７－２０アルキルアリール基、Ｃ７－２０アリールアルキル基、Ｃ６－２０アリール基、Ｃ６－２０アリールオキシ基、Ｃ７－２０アルキルアリールオキシ基、Ｃ７－２０アリールアルキルオキシ基、－ＮＲ’２、アミド基、－ＰＲ’２、ホスフィド基、－ＳＲ’、チオラート基、式－Ｓｉ（Ｒａ）３のシリル基、及び式－Ｇｅ（Ｒａ）３のゲルマニル基からなる群から選択される１つ以上の置換基によってさらに置換されており；ここで、各Ｒ’は、独立して、水素、Ｃ１－２０アルキル基、及びＣ６－２０アリール基からなる群から選択され；ここで、各Ｒａは、独立して、水素、Ｃ１－８アルキル基、Ｃ１－８アルコキシ基、Ｃ６－２０アリ

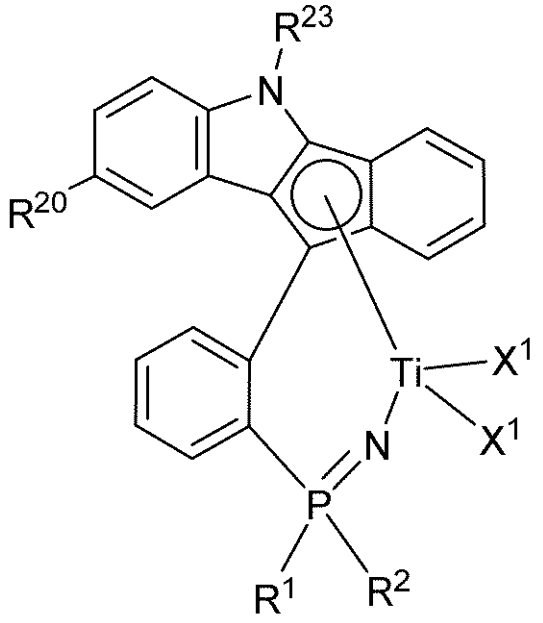
ールオキシ基及びC6－20アリール基からなる群から選択される。
【0291】
いくつかの実施形態では、R7、R8、R9及びR10は、各々独立して、ハロゲン；水素；並びにヘテロ原子含有C1－30ヒドロカルビル基（このヘテロ原子含有ヒドロカルビル基は、非置換であるか、又はハロゲン原子、C1－20アルキル基、C1－20アルコキシ基、C7－20アルキルアリール基、C7－20アリールアルキル基、C6－20アリール基、C6－20アリールオキシ基、C7－20アルキルアリールオキシ基、及びC7－20アリールアルキルオキシ基からなる群から選択される1つ以上の置換基によってさらに置換されている）；からなる群から選択され；ここで、R7、R8、R9及びR10の2つの隣接する基は、任意に結合して環状ヘテロ原子含有ヒドロカルビル基を形成してもよく、環状ヘテロ原子含有ヒドロカルビル基は、非置換であるか、又はハロゲン原子、C1－20アルキル基、C1－20アルコキシ基、C7－20アルキルアリール基、C7－20アリールアルキル基、C6－20アリール基、C6－20アリールオキシ基、C7－20アルキルアリールオキシ基、C7－20アリールアルキルオキシ基、－NR’2、アミド基、－PR’2、ホスフィド基、－SR’、チオラート基、式－Si（Ra）3のシリル基、及び式－Ge（Ra）3のゲルマニル基からなる群から選択される1つ以上の置換基によってさらに置換されており；ここで、各R’は、独立して、水素、C1－20アルキル基、及びC6－20アリール基からなる群から選択され；ここで、各Raは、独立して、水素、C1－8アルキル基、C1－8アルコキシ基、C6－20アリールオキシ基及びC6－20アリール基からなる群から選択される。
【0292】
いくつかの実施形態では、R7、R8、R9及びR10は、各々独立して、ハロゲン、水素、C1－30アルキル基、C1－30アルコキシ基、C7－30アルキルアリール基、C7－30アリールアルキル基、C6－30アリール基、C6－30アリールオキシド基、C7－30アルキルアリールオキシ基、及びC7－30アリールアルキルオキシ基からなる群から選択される。
【0293】
いくつかの実施形態では、R7、R8、R9及びR10は、各々独立して、ハロゲン、水素、C1－20アルキル基、C1－20アルコキシ基、C7－20アルキルアリール基、C7－20アリールアルキル基、C6－20アリール基、C6－20アリールオキシド基、C7－20アルキルアリールオキシ基、及びC7－20アリールアルキルオキシ基からなる群から選択される。
【0294】
いくつかの実施形態では、R7、R8、R9及びR10は、各々独立して、ハロゲン、水素、及びC1－30ヒドロカルビル基からなる群から選択され、このヒドロカルビル基は、非置換であるか、又は1つ以上のハロゲン原子によってさらに置換されている。
【0295】
いくつかの実施形態では、R7、R8、R9及びR10は、各々独立して、ハロゲン、水素、及びC1－30ヘテロ原子含有ヒドロカルビル基からなる群から選択され、このヘテロ原子含有ヒドロカルビル基は、非置換であるか、又は1つ以上のハロゲン原子によってさらに置換されている。
【0296】
いくつかの実施形態では、R7、R8、R9及びR10は、各々独立して、水素及びC1－30ヒドロカルビル基からなる群から選択され、このヒドロカルビル基は、非置換であるか、又は1つ以上のハロゲン原子によってさらに置換されている。
【0297】
いくつかの実施形態では、R7、R8、R9及びR10は、各々独立して、水素及びC1－30ヘテロ原子含有ヒドロカルビル基からなる群から選択され、このヘテロ原子含有ヒドロカルビル基は、非置換であるか、又は1つ以上のハロゲン原子によってさらに置換されている。

【０２９８】
いくつかの実施形態では、Ｒ^{7}、Ｒ^{8}、Ｒ^{9}及びＲ^{10}は、各々水素である。
【０２９９】
本開示の実施形態では、式ＩＸの有機金属錯体は、式ＩＸａ：
【化９７】



(IXa)

で表される有機金属錯体であり、
式中、Ｍ、Ｒ^{1}、Ｒ^{2}、Ｒ^{20}、Ｒ^{23}及びＸ^{1}は、上記式Ｉ及び式ＶＩＩＩで定義した通りである。
【０３００】
本開示の実施形態では、式ＩＸの有機金属錯体は、式ＩＸｂ：
【化９８】



(IXb)

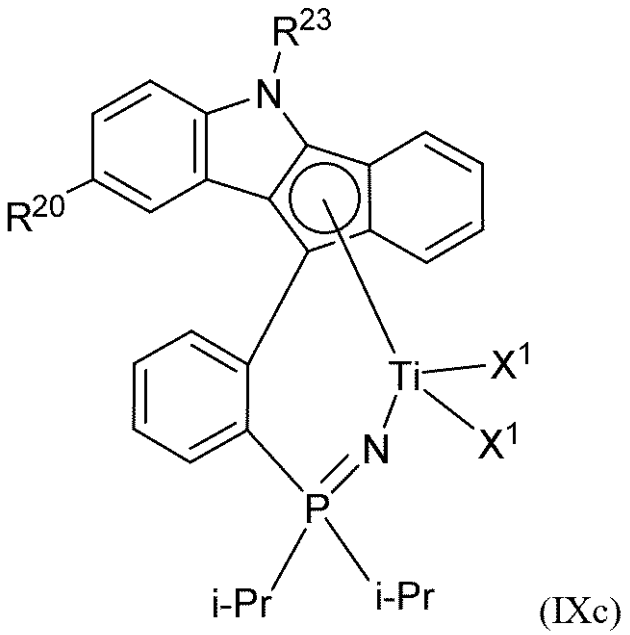
で表される有機金属錯体であり、

式中、R^1、R^2、R^{20}、R^{23}及びX^1は、上記式Ｉ及び式ＶＩＩＩで定義した通りである。

【０３０１】

本開示の実施形態では、式ＩＸの有機金属錯体は、式ＩＸｃ：

【化９９】



(IXc)

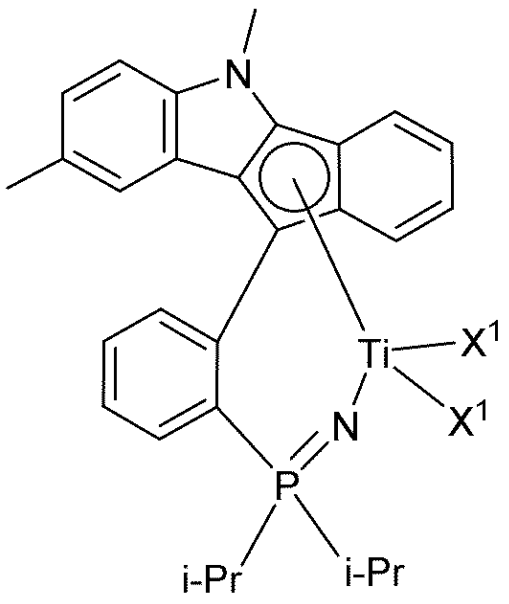
で表される有機金属錯体であり、

式中、R^{20}、R^{23}及びX^1は、上記式Ｉ及び式ＶＩＩＩで定義した通りである。

【０３０２】

本開示の実施形態では、式ＩＸの有機金属錯体は、式ＩＸｄ：

【化１００】



(IXd)

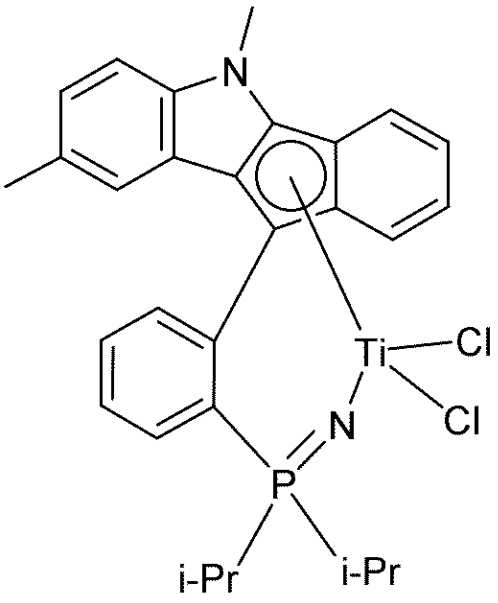
で表される有機金属錯体であり、

式中、X^1は、上記式Ｉで定義した通りである。

【０３０３】

本開示の一実施形態では、式ＩＸの有機金属錯体は、式ＩＸｅ：

【化１０１】



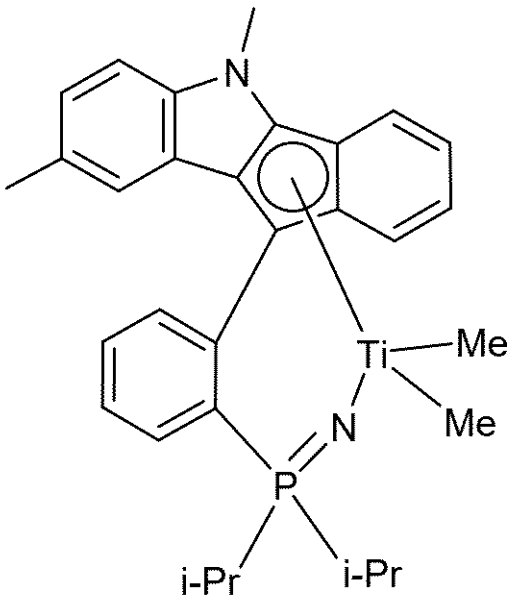
(IXe).

表される有機金属錯体である。

【０３０４】

本開示の一実施形態では、式ＩＸの有機金属錯体は、式ＩＸｆ：

【化１０２】



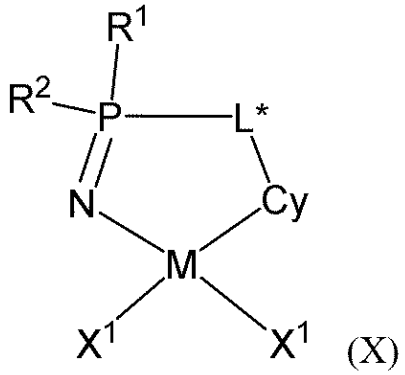
(IXf).

で表される有機金属錯体である。

【０３０５】

本開示の別の実施形態では、有機金属錯体は、式Ｘ：

【化１０３】



(X)

で表され、

式中、Ｍ、Ｒ１、Ｒ２、Ｃｙ及びＸ１は、上記式Ｉで定義した通りであり、

Ｌ＊は、少なくとも１つのシクロアルキレン基、ヘテロシクロアルキレン基、アリーレン基又はヘテロアリーレン基を含む架橋基である。

【０３０６】

「シクロアルキレン」という用語は、シクロ脂肪族環を含む二価の基を指す。「ヘテロシクロアルキレン」という用語は、ヘテロシクロ脂肪族環を含む二価の基を指す。「アリーレン」という用語は、芳香族環を含む二価の基を指す。「ヘテロアリーレン」という用語は、ヘテロ芳香族環を含む二価の基を指す。

【０３０７】

いくつかの実施形態では、Ｌ＊は、少なくとも１つのアリーレン基又はヘテロアリーレン基を含む架橋基である。

【０３０８】

いくつかの実施形態では、Ｌ＊は、少なくとも１つのアリーレン基を含む架橋基である。いくつかの実施形態では、Ｌ＊は、少なくとも１つのフェニレン基を含む架橋基である。

【０３０９】

いくつかの実施形態では、Ｌ＊は、炭素原子、水素原子及びヘテロ原子から選択される１～５０個の原子を含む架橋基であり、少なくとも１つのアリーレン基又はヘテロアリーレン基を含む。いくつかの実施形態では、Ｌ＊は、炭素原子、水素原子及びヘテロ原子から選択される１～５０個の原子を含む架橋基であり、少なくとも１つのアリーレン基を含む。いくつかの実施形態では、Ｌ＊は、炭素原子、水素原子及びヘテロ原子から選択される１～５０個の原子を含む架橋基であり、少なくとも１つのフェニレン基を含む。いくつかの実施形態では、Ｌ＊は、炭素原子及び水素原子から選択される１～５０個の原子を含む架橋基であり、少なくとも１つのフェニレン基を含む。

【０３１０】

Ｌ＊内のアリーレン基又はヘテロアリーレン基は、直接又は間接的に、Ｐに共有結合していてもよい。Ｌ＊内のアリーレン基又はヘテロアリーレン基は、直接、Ｐに共有結合していてもよい（すなわち、Ｐからアリーレン基又はヘテロアリーレン基の環の原子への共有結合が存在してもよい）。あるいは、Ｌ内のアリーレン基又はヘテロアリーレン基は、間接的に、Ｐに共有結合していてもよい（すなわち、Ｐとアリーレン基又はヘテロアリーレン基の環の原子との間に、さらなる二価の基が存在してもよい）。さらなる二価の基は、ヒドロカルビレン基、例えばアルキレン基又はアルケニレン基であってもよく、又は１つ以上のヘテロ原子を含む二価の基であってもよい。

【０３１１】

Ｌ＊内のアリーレン基又はヘテロアリーレン基は、直接又は間接的に、Ｃｙに共有結合

していてもよい。Ｌ＊内のアリーレン基又はヘテロアリーレン基は、直接、Ｃｙに共有結合していてもよい（すなわち、Ｐからアリーレン基又はヘテロアリーレン基の環の原子への共有結合が存在してもよい）。あるいは、Ｌ内のアリーレン基又はヘテロアリーレン基は、間接的に、Ｃｙに共有結合していてもよい（すなわち、Ｃｙとアリーレン基又はヘテロアリーレン基の環の原子との間に、さらなる二価の基が存在してもよい）。さらなる二価の基は、ヒドロカルビレン基、例えばアルキレン基又はアルケニレン基であってもよく、又は１つ以上のヘテロ原子を含む二価の基であってもよい。

【０３１２】

いくつかの実施形態では、Ｌ＊は、ＰとＣｙを連結する原子の連続鎖を含み、連続鎖は４個以下の原子を含む。いくつかの実施形態では、Ｌ＊は、ＰとＣｙを連結する原子の連続鎖を含み、連続鎖は３個以下の原子を含む。いくつかの実施形態では、Ｌ＊は、ＰとＣｙを連結する原子の連続鎖を含み、連続鎖は３個の原子を含む。いくつかの実施形態では、Ｌ＊は、ＰとＣｙを連結する原子の連続鎖を含み、連続鎖は２個の原子を含む。

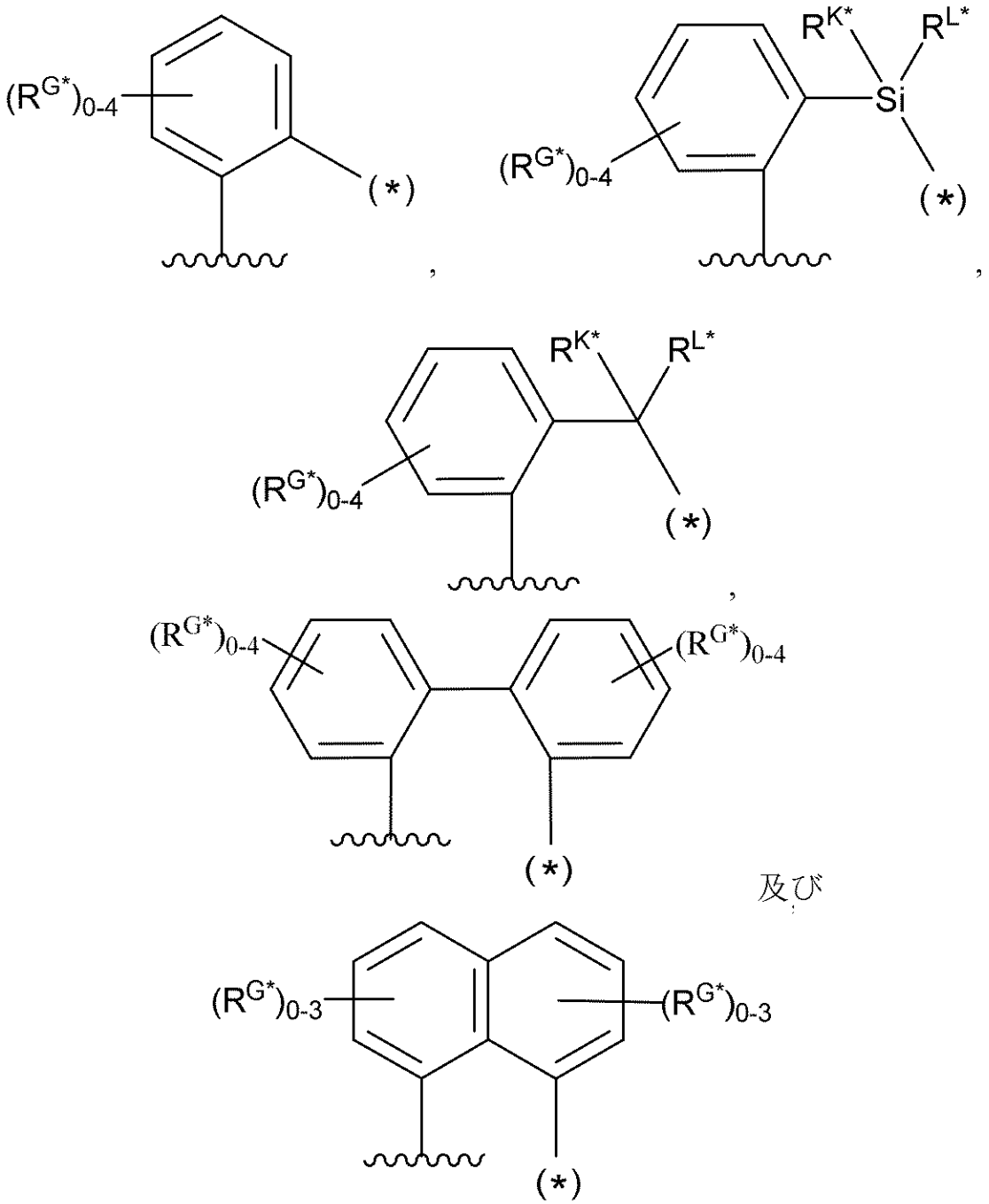
【０３１３】

いくつかの実施形態では、Ｌ＊は、ＰとＣｙを連結する原子の連続鎖を含み、フェニレン基の２個のオルト炭素原子は原子の連続鎖の一部を形成する。

【０３１４】

いくつかの実施形態では、Ｌ＊は、式：

【化１０４】



から選択され、式中、

は、Ｐへの結合点を示し；（＊）は、Ｃｙへの結合点を示し；各Ｒ^{Ｇ}＊は、独立して、ハロゲン及び非置換Ｃ$_{1-12}$アルキルから選択され；Ｒ^{Ｋ}＊及びＲ^{Ｌ}＊は、各々独立して、水素、非置換Ｃ$_{1-12}$アルキル基、及び非置換又は置換Ｃ$_{6-20}$アリール基から選択される。

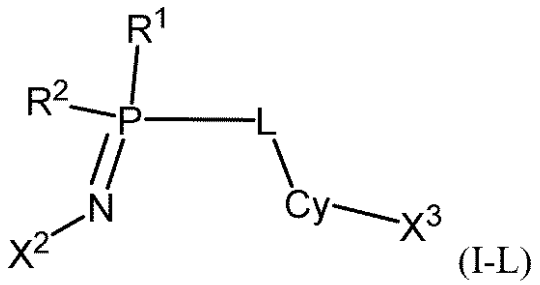
【０３１５】

実施形態では、Ｒ^{Ｋ}＊及びＲ^{Ｌ}＊は、各々独立して、非置換Ｃ$_{1-12}$アルキル基、及び非置換又は置換Ｃ$_{6-20}$アリール基から選択される。

【０３１６】

いくつかの実施形態では、Ｒ^{Ｇ}＊は存在しない（フェニレン基、又はビフェニル基、又

はナフタレン基は非置換である）。
【０３１７】
いくつかの実施形態では、R^{K*}及びR^{L*}は、各々水素である。
【０３１８】
＜プレメタル化化合物＞
本開示の一実施形態は、プレメタル化化合物であって、式Ｉ－Ｌ：
【化１０５】



(I-L)

で表され、
式中、
R^1及びR^2は、各々独立して、水素及びR^Xからなる群から選択されるか；又はR^1及びR^2は、それらが結合しているＰ原子と一緒になって、非置換であるか、又はハロゲン原子、C_{1-20}アルキル基、C_{1-20}アルコキシ基、C_{7-20}アルキルアリール基、C_{7-20}アリールアルキル基、C_{6-20}アリール基、C_{6-20}アリールオキシ基、C_{7-20}アルキルアリールオキシ基、及びC_{7-20}アリールアルキルオキシ基からなる群から選択される１つ以上の置換基によってさらに置換されている３－１０員複素環式基を形成し；
各R^Xは、独立して、ハロゲン原子；C_{1-30}ヒドロカルビル基（このヒドロカルビル基は、非置換であるか、又は１つ以上のハロゲン原子、C_{1-20}アルキル基、C_{1-20}アルコキシ基、C_{7-20}アルキルアリール基、C_{7-20}アリールアルキル基、C_{6-20}アリール基、C_{6-20}アリールオキシ基、C_{7-20}アルキルアリールオキシ基、及び／又はC_{7-20}アリールアルキルオキシ基によってさらに置換されている）；式－NR'_2のアミド基；式－Ｓｉ（R^a）$_3$のシリル基；式－Ｇｅ（R^a）$_3$のゲルマニル基；及び式Ｎ＝Ｐ（R^b）（R^c）（R^d）のホスフィンイミン基からなる群から選択され；ここで、各Ｒ’は、独立して、水素、C_{1-20}アルキル基、及びC_{6-20}アリール基からなる群から選択され；ここで、各R^aは、独立して、水素、C_{1-8}アルキル基、C_{1-8}アルコキシ基、C_{6-20}アリールオキシ基及びC_{6-20}アリール基からなる群から選択され、R^b、R^c、R^dは、各々独立して、C_{1-20}アルキル基であり；
Ｃｙは、シクロペンタジエニル型部分であり、Ｌ及びX^3に共有結合しており；
X^2は、水素、又は式－Ｓｉ（R^e）$_3$のシリル基であり、
X^3は、水素、又は式－Ｓｉ（R^e）$_3$のシリル基、若しくは式Ｓｎ（R^e）$_3$のスタンニル基であり；
ここで、各R^eは、独立して、水素、C_{1-8}アルキル基、C_{1-8}アルコキシ基、C_{6-20}アリールオキシ基、及びC_{6-20}アリール基からなる群から選択され；
Ｌは、ＰとＣｙを連結する原子の連続鎖を含む架橋基であり、連続鎖は２個又は３個の原子を含む。
【０３１９】
いくつかの実施形態では、X^2は、水素である。
いくつかの実施形態では、X^2は、式－Ｓｉ（R^e）$_3$のシリル基であり、式中、各R^eは、独立して、水素、C_{1-8}アルキル基、C_{1-8}アルコキシ基、C_{6-20}アリール

オキシ基及びC6－20アリール基からなる群から選択される。
いくつかの実施形態では、X2は、－Si（Me）3である。
【0320】
いくつかの実施形態では、X3は、水素である。
いくつかの実施形態では、X3は、式－Si（Re）3のシリル基であり、式中、各Reは、独立して、水素、C1－8アルキル基、C1－8アルコキシ基、C6－20アリールオキシ基及びC6－20アリール基からなる群から選択される。
いくつかの実施形態では、X3は、－Si（Me）3である。
【0321】
いくつかの実施形態では、R1及びR2は、各々独立して、ハロゲン原子；C1－30ヒドロカルビル基（このヒドロカルビル基は、非置換であるか、又は1つ以上のハロゲン原子、C1－20アルキル基、C1－20アルコキシ基、C7－20アルキルアリール基、C7－20アリールアルキル基、C6－20アリール基、C6－20アリールオキシ基、C7－20アルキルアリールオキシ基、及び／又はC7－20アリールアルキルオキシ基によってさらに置換されている）；式－NR'2のアミド基；式－Si（Ra）3のシリル基；式－Ge（Ra）3のゲルマニル基；及び式N＝P（Rb）（Rc）（Rd）のホスフィンイミン基からなる群から選択され；ここで、各R'は、独立して、水素、C1－20アルキル基、及びC6－20アリール基からなる群から選択され；ここで、各Raは、独立して、水素、C1－8アルキル基、C1－8アルコキシ基、C6－20アリールオキシ基及びC6－20アリール基からなる群から選択され、Rb、Rc、Rdは、各々独立して、C1－20アルキル基である。
【0322】
いくつかの実施形態では、R1及びR2は、各々独立して、ハロゲン原子；C1－30ヒドロカルビル基（このヒドロカルビル基は、非置換であるか、又は1つ以上のハロゲン原子、C1－20アルキル基、C1－20アルコキシ基、C7－20アルキルアリール基、C7－20アリールアルキル基、C6－20アリール基、C6－20アリールオキシ基、C7－20アルキルアリールオキシ基、及び／又はC7－20アリールアルキルオキシ基によってさらに置換されている）からなる群から選択される。
【0323】
いくつかの実施形態では、R1及びR2は、各々C1－30ヒドロカルビル基であり、このヒドロカルビル基は、非置換であるか、又は1つ以上のハロゲン原子、C1－20アルキル基、C1－20アルコキシ基、C7－20アルキルアリール基、C7－20アリールアルキル基、C6－20アリール基、C6－20アリールオキシ基、C7－20アルキルアリールオキシ基、及び／又はC7－20アリールアルキルオキシ基によってさらに置換されている。
【0324】
いくつかの実施形態では、R1及びR2は、各々独立して、非置換のC1－30ヒドロカルビル基である。
いくつかの実施形態では、R1及びR2は、各々独立して、非置換のC1－20ヒドロカルビル基である。
いくつかの実施形態では、R1及びR2は、各々独立して、非置換のC1－12ヒドロカルビル基である。
いくつかの実施形態では、R1及びR2は、各々独立して、C1－20アルキル基である。
いくつかの実施形態では、R1及びR2は、各々独立して、C1－12アルキル基である。
いくつかの実施形態では、R1及びR2は、各々独立して、C1－9アルキル基である。
いくつかの実施形態では、R1及びR2は、各々独立して、分岐状C3－8アルキル基である。
いくつかの実施形態では、R1及びR2は、各々独立して、C6－20アリール基であ

る。
いくつかの実施形態では、R^1及びR^2は、同じである。
いくつかの実施形態では、R^1及びR^2は、各々独立して、イソプロピル、シクロヘキシル及びｔｅｒｔ－ブチルからなる群から選択される。
いくつかの実施形態では、R^1及びR^2は、各々イソプロピル基である。
いくつかの実施形態では、R^1及びR^2は、各々シクロヘキシル基である。
いくつかの実施形態では、R^1及びR^2は、各々ｔｅｒｔ－ブチル基である。
【０３２５】
いくつかの実施形態では、各Ｒ’は、C_{1-8}アルキル基である。
いくつかの実施形態では、各Ｒ’は、C_{6-20}アリール基である。
いくつかの実施形態では、各Ｒ’は、メチル基である。
いくつかの実施形態では、各Ｒ’は、フェニル基である。
【０３２６】
いくつかの実施形態では、各R^aは、C_{1-8}アルキル基である。
いくつかの実施形態では、各R^aは、C_{6-20}アリール基である。
いくつかの実施形態では、各R^aは、メチル基である。
いくつかの実施形態では、各R^aは、エチル基である。
いくつかの実施形態では、各R^aは、フェニル基である。
【０３２７】
いくつかの実施形態では、R^b、R^c、R^dの各々は、C_{1-12}アルキル基である。
いくつかの実施形態では、R^b、R^c、R^dの各々は、C_{1-9}アルキル基である。
いくつかの実施形態では、R^b、R^c、R^dの各々は、C_{1-6}アルキル基である。
いくつかの実施形態では、R^b、R^c、R^dの各々は、分岐状C_{3-8}アルキル基である。
いくつかの実施形態では、R^b、R^c、R^dの各々は、イソプロピル基である。
いくつかの実施形態では、R^b、R^c、R^dの各々は、シクロヘキシル基である。
いくつかの実施形態では、R^b、R^c、R^dの各々は、ｔｅｒｔ－ブチル基である。
【０３２８】
いくつかの実施形態では、R^1及びR^2は、それらが結合しているＰ原子と一緒になって、非置換であるか、又はハロゲン原子、C_{1-20}アルキル基、C_{1-20}アルコキシ基、C_{7-20}アルキルアリール基、C_{7-20}アリールアルキル基、C_{6-20}アリール基、C_{6-20}アリールオキシ基、C_{7-20}アルキルアリールオキシ基、及びC_{7-20}アリールアルキルオキシ基からなる群から選択される１つ以上の置換基によってさらに置換されている３－１０員複素環式基を形成する。
【０３２９】
いくつかの実施形態では、R^1及びR^2は、それらが結合しているＰ原子と一緒になって、非置換であるか、又はハロゲン原子、C_{1-20}アルキル基、C_{1-20}アルコキシ基、C_{7-20}アルキルアリール基、C_{7-20}アリールアルキル基、C_{6-20}アリール基、C_{6-20}アリールオキシ基、C_{7-20}アルキルアリールオキシ基、及びC_{7-20}アリールアルキルオキシ基からなる群から選択される１つ以上の置換基によってさらに置換されている４－６員複素環式基を形成する。
【０３３０】
いくつかの実施形態では、R^1及びR^2は、それらが結合しているＰ原子と一緒になって、非置換であるか、又はハロゲン原子、C_{1-20}アルキル基、C_{1-20}アルコキシ基、C_{7-20}アルキルアリール基、C_{7-20}アリールアルキル基、C_{6-20}アリール基、C_{6-20}アリールオキシ基、C_{7-20}アルキルアリールオキシ基、及びC_{7-20}アリールアルキルオキシ基からなる群から選択される１つ以上の置換基によってさらに置換されている５－６員複素環式基を形成する。
【０３３１】
本開示において、プレメタル化化合物又は非メタル化部分に言及する場合、Ｃｙは「シ

クロペンタジエニル型部分」であり、Ｃｙ－Ｈはシクロペンタジエニル型配位子のプロトン化形態を表す。したがって、Ｃｙ－Ｈは、シクロペンタジエン環構造を含むプレメタル化部分を表し、この構造は、脱プロトン化されて環内に非局在化π結合（例えば、芳香族性）を有する５員炭素環を形成することができ、シクロペンタジエニル型配位子として遷移金属中心に配位し得る。

【０３３２】

本開示において、プレメタル化化合物又は非メタル化部分に言及する場合、Ｃｙは「シクロペンタジエニル型部分」であり、Ｃｙ－Ｓｉ（Ｒ^{e}）$_{3}$はシクロペンタジエニル型配位子のシリル化形態を表す。したがって、Ｃｙ－Ｓｉ（Ｒ^{e}）$_{3}$は、シクロペンタジエン環構造を含むプレメタル化部分を表し、この構造は、脱シリル化されて環内に非局在化π結合（例えば、芳香族性）を有する５員炭素環を形成することができ、シクロペンタジエニル型配位子として遷移金属中心に配位し得る。

【０３３３】

本開示において、プレメタル化化合物又は非メタル化部分に言及する場合、Ｃｙは「シクロペンタジエニル型部分」であり、Ｃｙ－Ｓｎ（Ｒ^{e}）$_{3}$はシクロペンタジエニル型配位子のスタニル化形態を表す。したがって、Ｃｙ－Ｓｎ（Ｒ^{e}）$_{3}$は、シクロペンタジエン環構造を含むプレメタル化部分を表し、この構造は、脱スタニル化されて環内に非局在化π結合（例えば、芳香族性）を有する５員炭素環を形成することができ、シクロペンタジエニル型配位子として遷移金属中心に配位し得る。

【０３３４】

このように、「シクロペンタジエニル型部分」という用語には、例えば、非置換シクロペンタジエニル、一重又は多重置換シクロペンタジエニル、非置換インデニル、一重又は多重置換インデニル、非置換フルオレニル、及び一重又は多重置換フルオレニルが含まれる。インデニル部分及びフルオレニル部分の水素化バージョンも、本開示で使用することが想定される。

【０３３５】

本開示の実施形態では、シクロペンタジエニル部分、インデニル部分（又はその水素化バージョン）及びフルオレニル部分（又はその水素化バージョン）の置換基は、Ｃ$_{1-30}$ヒドロカルビル基（このヒドロカルビル基は、非置換であるか、例えばハロゲン（ペンタフルオロベンジル基－ＣＨ$_{2}$Ｃ$_{6}$Ｆ$_{5}$の場合など）、Ｃ$_{1-20}$アルコキシ基、Ｃ$_{6-20}$アリール基、Ｃ$_{6-20}$アリールオキシ基（各々、例えばハロゲンによってさらに置換されてもよい））、アミド基（非置換であるか、又は最大２つのＣ$_{1-8}$アルキル基で置換されている）、ホスフィド基（非置換であるか、又は最大２つのＣ$_{1-8}$アルキル基で置換されている）、式－Ｓｉ（Ｒ^{a}）$_{3}$のシリル基（ここで、各Ｒ^{a}は、独立して、水素、Ｃ$_{1-8}$アルキル基、及びＣ$_{6-10}$アリール基からなる群から選択される）；及び式－Ｇｅ（Ｒ^{a}）$_{3}$のゲルマニル基（ここで、Ｒ^{a}は上記で定義した通りである）からなる群から選択されてもよい。

【０３３６】

いくつかの実施形態では、Ｃｙは、ヘテロ原子置換シクロペンタジエニル型部分、及びヘテロ原子含有シクロペンタジエニル型部分からなる群から選択される。

いくつかの実施形態では、Ｃｙは、置換又は非置換インデノ［１，２－ｂ］インドリル及びインデノ［２，１－ｂ］インドリル部分からなる群から選択される。

いくつかの実施形態では、Ｃｙは、非置換又は置換シクロペンタジエニル部分、非置換又は置換シクロペンテノフェナントリル部分及びその水素化バージョン、非置換又は置換インデニル部分及びその水素化バージョン、非置換又は置換フルオレニル部分及びその水素化バージョン、非置換又は置換オクタヒドロフルオレニル部分、及び非置換又は置換アズレニル配位子からなる群から選択される。

【０３３７】

いくつかの実施形態では、Ｃｙは、シクロペンタジエニル部分であって、これは、非置換であるか、あるいは、

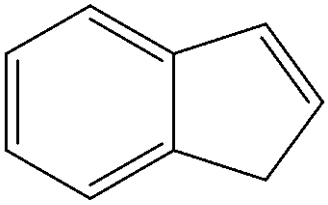
ハロゲン；
水素；
C_{1-30}ヒドロカルビル基（このヒドロカルビル基は、非置換であるか、又はハロゲン原子、C_{1-20}アルキル基、C_{1-20}アルコキシ基、C_{7-20}アルキルアリール基、C_{7-20}アリールアルキル基、C_{6-20}アリール基、C_{6-20}アリールオキシ基、C_{7-20}アルキルアリールオキシ基、及びC_{7-20}アリールアルキルオキシ基からなる群から選択される１つ以上の置換基によってさらに置換されている）；
ヘテロ原子含有C_{1-30}ヒドロカルビル基（このヘテロ原子含有ヒドロカルビル基は、非置換であるか、又はハロゲン原子、C_{1-20}アルキル基、C_{1-20}アルコキシ基、C_{7-20}アルキルアリール基、C_{7-20}アリールアルキル基、C_{6-20}アリール基、C_{6-20}アリールオキシ基、C_{7-20}アルキルアリールオキシ基、及びC_{7-20}アリールアルキルオキシ基からなる群から選択される１つ以上の置換基によってさらに置換されている）；
オキシ基、－ＯＲ’；
アミド基、$-NR'_2$；
ホスフィド基、$-PR'_2$；
チオラート基、－ＳＲ’；
式－Ｓｉ（R^a）$_3$のシリル基；
式－Ｇｅ（R^a）$_3$のゲルマニル基；
からなる群から独立して選択される最大４つの置換基によって置換されており；
ここで、シクロペンタジエニル部分上の２つの隣接する置換基は、任意に結合して環状ヒドロカルビル基又は環状ヘテロ原子含有ヒドロカルビル基を形成してもよく、環状ヒドロカルビル基又は環状ヘテロ原子含有ヒドロカルビル基は、非置換であるか、又はハロゲン原子、C_{1-20}アルキル基、C_{1-20}アルコキシ基、C_{7-20}アルキルアリール基、C_{7-20}アリールアルキル基、C_{6-20}アリール基、C_{6-20}アリールオキシ基、C_{7-20}アルキルアリールオキシ基、C_{7-20}アリールアルキルオキシ基、式$-NR'_2$のアミド基、式$-PR'_2$のホスフィド基、式－ＳＲ’のチオラート基、式－Ｓｉ（R^a）$_3$のシリル基、及び式－Ｇｅ（R^a）$_3$のゲルマニル基からなる群から選択される１つ以上の置換基によってさらに置換されており；
ここで、各Ｒ’は、独立して、水素、C_{1-20}アルキル基、及びC_{6-20}アリール基からなる群から選択され；
ここで、各R^aは、独立して、水素、C_{1-8}アルキル基、C_{1-8}アルコキシ基、C_{6-20}アリールオキシ基及びC_{6-20}アリール基からなる群から選択される。
【０３３８】
いくつかの実施形態では、Ｃｙは、インデニル部分であって、これは、非置換であるか、あるいは、
ハロゲン；
水素；
C_{1-30}ヒドロカルビル基（このヒドロカルビル基は、非置換であるか、又はハロゲン原子、C_{1-20}アルキル基、C_{1-20}アルコキシ基、C_{7-20}アルキルアリール基、C_{7-20}アリールアルキル基、C_{6-20}アリール基、C_{6-20}アリールオキシ基、C_{7-20}アルキルアリールオキシ基、及びC_{7-20}アリールアルキルオキシ基からなる群から選択される１つ以上の置換基によってさらに置換されている）；
ヘテロ原子含有C_{1-30}ヒドロカルビル基（このヘテロ原子含有ヒドロカルビル基は、非置換であるか、又はハロゲン原子、C_{1-20}アルキル基、C_{1-20}アルコキシ基、C_{7-20}アルキルアリール基、C_{7-20}アリールアルキル基、C_{6-20}アリール基、C_{6-20}アリールオキシ基、C_{7-20}アルキルアリールオキシ基、及びC_{7-20}アリールアルキルオキシ基からなる群から選択される１つ以上の置換基によってさらに置換されている）；
オキシ基、－ＯＲ’；

アミド基、－ＮＲ’$_2$；
ホスフィド基、－ＰＲ’$_2$；
チオラート基、－ＳＲ’；
式－Ｓｉ（Ｒ^a）$_3$のシリル基；
式－Ｇｅ（Ｒ^a）$_3$のゲルマニル基；
からなる群から独立して選択される最大６つの置換基によって置換されており；
ここで、インデニル部分上の２つの隣接する置換基は、任意に結合して環状ヒドロカルビル基又は環状ヘテロ原子含有ヒドロカルビル基を形成してもよく、環状ヒドロカルビル基又は環状ヘテロ原子含有ヒドロカルビル基は、非置換であるか、又はハロゲン原子、Ｃ$_{1-20}$アルキル基、Ｃ$_{1-20}$アルコキシ基、Ｃ$_{7-20}$アルキルアリール基、Ｃ$_{7-20}$アリールアルキル基、Ｃ$_{6-20}$アリール基、Ｃ$_{6-20}$アリールオキシ基、Ｃ$_{7-20}$アルキルアリールオキシ基、Ｃ$_{7-20}$アリールアルキルオキシ基、式－ＮＲ’$_2$のアミド基、式－ＰＲ’$_2$のホスフィド基、式－ＳＲ’のチオラート基、式－Ｓｉ（Ｒ^a）$_3$のシリル基、及び式－Ｇｅ（Ｒ^a）$_3$のゲルマニル基からなる群から選択される１つ以上の置換基によってさらに置換されており；
ここで、各Ｒ’は、独立して、水素、Ｃ$_{1-20}$アルキル基、及びＣ$_{6-20}$アリール基からなる群から選択され；
ここで、各Ｒ^{a}は、独立して、水素、Ｃ$_{1-8}$アルキル基、Ｃ$_{1-8}$アルコキシ基、Ｃ$_{6-20}$アリールオキシ基及びＣ$_{6-20}$アリール基からなる群から選択される。

【０３３９】

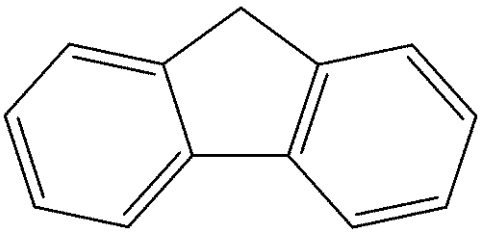
いくつかの実施形態では、Ｃｙは、フルオレニル部分であって、これは、非置換であるか、あるいは、
ハロゲン；
水素；
Ｃ$_{1-30}$ヒドロカルビル基（このヒドロカルビル基は、非置換であるか、又はハロゲン原子、Ｃ$_{1-20}$アルキル基、Ｃ$_{1-20}$アルコキシ基、Ｃ$_{7-20}$アルキルアリール基、Ｃ$_{7-20}$アリールアルキル基、Ｃ$_{6-20}$アリール基、Ｃ$_{6-20}$アリールオキシ基、Ｃ$_{7-20}$アルキルアリールオキシ基、及びＣ$_{7-20}$アリールアルキルオキシ基からなる群から選択される１つ以上の置換基によってさらに置換されている）；
ヘテロ原子含有Ｃ$_{1-30}$ヒドロカルビル基（このヘテロ原子含有ヒドロカルビル基は、非置換であるか、又はハロゲン原子、Ｃ$_{1-20}$アルキル基、Ｃ$_{1-20}$アルコキシ基、Ｃ$_{7-20}$アルキルアリール基、Ｃ$_{7-20}$アリールアルキル基、Ｃ$_{6-20}$アリール基、Ｃ$_{6-20}$アリールオキシ基、Ｃ$_{7-20}$アルキルアリールオキシ基、及びＣ$_{7-20}$アリールアルキルオキシ基からなる群から選択される１つ以上の置換基によってさらに置換されている）；
オキシ基、－ＯＲ’；
アミド基、－ＮＲ’$_2$；
ホスフィド基、－ＰＲ’$_2$；
チオラート基、－ＳＲ’；
式－Ｓｉ（Ｒ^a）$_3$のシリル基；
式－Ｇｅ（Ｒ^a）$_3$のゲルマニル基；
からなる群から独立して選択される最大８つの置換基によって置換されており；
ここで、フルオレニル部分上の２つの隣接する置換基は、任意に結合して環状ヒドロカルビル基又は環状ヘテロ原子含有ヒドロカルビル基を形成してもよく、環状ヒドロカルビル基又は環状ヘテロ原子含有ヒドロカルビル基は、非置換であるか、又はハロゲン原子、Ｃ$_{1-20}$アルキル基、Ｃ$_{1-20}$アルコキシ基、Ｃ$_{7-20}$アルキルアリール基、Ｃ$_{7-20}$アリールアルキル基、Ｃ$_{6-20}$アリール基、Ｃ$_{6-20}$アリールオキシ基、Ｃ$_{7-20}$アルキルアリールオキシ基、Ｃ$_{7-20}$アリールアルキルオキシ基、式－ＮＲ’$_2$のアミド基、式－ＰＲ’$_2$のホスフィド基、式－ＳＲ’のチオラート基、式－Ｓｉ（Ｒ^a）$_3$のシリル基、及び式－Ｇｅ（Ｒ^a）$_3$のゲルマニル基からなる群から選択される１つ以上の置

換基によってさらに置換されており；
ここで、各Ｒ’は、独立して、水素、Ｃ$_{1-20}$アルキル基、及びＣ$_{6-20}$アリール基からなる群から選択され；
ここで、各Ｒ^{a}は、独立して、水素、Ｃ$_{1-8}$アルキル基、Ｃ$_{1-8}$アルコキシ基、Ｃ$_{6-20}$アリールオキシ基及びＣ$_{6-20}$アリール基からなる群から選択される。
【０３４０】
当業者であれば、インデニル部分が、化合物インデンに由来するヒドロカルビル基であることを理解する：
【化１０６】



indene

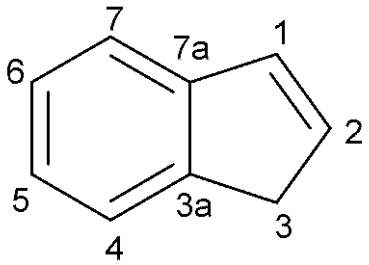
【０３４１】
当業者であれば、フルオレニル部分が、化合物フルオレンに由来するヒドロカルビル基であることを理解する：
【化１０７】



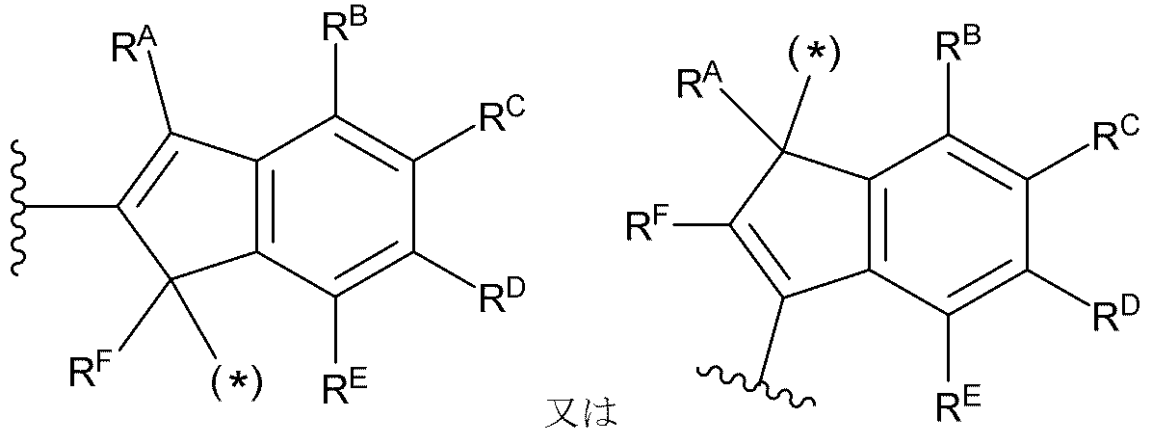
fluorene

【０３４２】
シクロペンタジエニルと同様に、インデニル又はフルオレニルヒドロカルビル部分は、脱プロトン化後、η^{5}－結合（又は場合によってはη^{3}－結合、又は場合によってはη^{1}－結合）によって金属中心に配位することができる。
【０３４３】
いくつかの実施形態では、Ｃｙは、非置換又は置換インデニル部分である。
いくつかの実施形態では、Ｃｙは、非置換インデニル部分である。
いくつかの実施形態では、Ｃｙは、置換インデニル部分である。
いくつかの実施形態では、Ｃｙは、非置換又は置換フルオレニル部分である。
いくつかの実施形態では、Ｃｙは、非置換フルオレニル部分である。
いくつかの実施形態では、Ｃｙは、置換フルオレニル部分である。
【０３４４】
いくつかの実施形態では、Ｃｙは、Ｌ基の１位又は２位に結合した非置換インデニル部分であり、インデニル環上の位置は以下のように番号付けされる：

【化１０８】

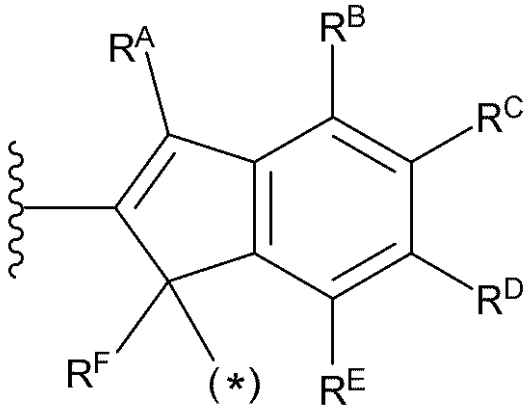


【０３４５】
いくつかの実施形態では、Ｃｙは、Ｌ基の１位に結合した非置換インデニル部分である。
いくつかの実施形態では、Ｃｙは、Ｌ基の２位に結合した非置換インデニル部分である。
【０３４６】
いくつかの実施形態では、Ｃｙは、式：
【化１０９】



であり、
式中、
〰〰〰
は、Ｌへの結合点を示し、R^A、R^B、R^C、R^D、R^E及びR^Fの各々は、独立して、Ｈ、C_{1-12}ヒドロカルビル基及びC_{1-12}ヘテロ原子含有ヒドロカルビル基から選択される。いくつかの実施形態では、R^A、R^B、R^C、R^D、R^E及びR^Fの各々は、独立して、Ｈ及び非置換C_{1-6}アルキル基から選択される。いくつかの実施形態では、R^A、R^B、R^C、R^D、R^E及びR^Fの各々は、Ｈである。いくつかの実施形態では、R^B、R^C、R^D及びR^Eの２つの隣接する基は、結合して環を形成する。
【０３４７】
いくつかの実施形態では、Ｃｙは、式：

【化１１０】



であり、
式中、
〰〰〰

は、Ｌへの結合点を示し、R^A、R^B、R^C、R^D、R^E及びR^Fの各々は、独立して、Ｈ、C_{1-12}ヒドロカルビル基及びC_{1-12}ヘテロ原子含有ヒドロカルビル基から選択される。いくつかの実施形態では、R^A、R^B、R^C、R^D、R^E及びR^Fの各々は、独立して、Ｈ及び非置換C_{1-6}アルキル基から選択される。いくつかの実施形態では、R^A、R^B、R^C、R^D、R^E及びR^Fの各々は、Ｈである。いくつかの実施形態では、R^B、R^C、R^D及びR^Eの２つの隣接する基は、結合して環を形成する。

【０３４８】

いくつかの実施形態では、Ｌは、ＰとＣｙを連結する原子の連続鎖を含む架橋基であり、連続鎖は３個の原子を含む。いくつかの実施形態では、Ｌは、ＰとＣｙを連結する原子の連続鎖を含む架橋基であり、連続鎖は２個の原子を含む。「原子の連続鎖」という語句は、言及されている原子が順番に結合しており、一方の端がＰに、もう一方の端がＣｙに結合していることを意味する。

【０３４９】

いくつかの実施形態では、Ｌは、少なくとも１つの環状ヒドロカルビル基又は少なくとも１つの環状ヘテロ原子含有ヒドロカルビル基を含む架橋基である。

【０３５０】

いくつかの実施形態では、Ｌは、少なくとも１つのシクロアルキレン基、ヘテロシクロアルキレン基、アリーレン基又はヘテロアリーレン基を含む架橋基である。「シクロアルキレン」という用語は、シクロ脂肪族環を含む二価の基を指す。「ヘテロシクロアルキレン」という用語は、ヘテロシクロ脂肪族環を含む二価の基を指す。「アリーレン」という用語は、芳香族環を含む二価の基を指す。「ヘテロアリーレン」という用語は、ヘテロ芳香族環を含む二価の基を指す。

【０３５１】

いくつかの実施形態では、Ｌは、少なくとも１つのアリーレン基又はヘテロアリーレン基を含む架橋基である。

【０３５２】

いくつかの実施形態では、Ｌは、少なくとも１つのシクロアルキレン基、又はヘテロシクロアルキレン基を含む架橋基である。

【０３５３】

いくつかの実施形態では、Ｌは、炭素原子、水素原子及びヘテロ原子から選択される１～５０個の原子を含み、少なくとも１つのフェニレン基を含む架橋基である。

【０３５４】

いくつかの実施形態では、Ｌは、少なくとも１つのアリーレン基を含む架橋基である。いくつかの実施形態では、Ｌは、少なくとも１つのフェニレン基を含む架橋基である。

【０３５５】

いくつかの実施形態では、Ｌは、炭素原子、水素原子及びヘテロ原子から選択される１～５０個の原子を含む架橋基であり、少なくとも１つのアリーレン基又はヘテロアリーレン基を含む。いくつかの実施形態では、Ｌは、炭素原子、水素原子及びヘテロ原子から選択される１～５０個の原子を含む架橋基であり、少なくとも１つのアリーレン基を含む。いくつかの実施形態では、Ｌは、炭素原子、水素原子及びヘテロ原子から選択される１～５０個の原子を含む架橋基であり、少なくとも１つのフェニレン基を含む。いくつかの実施形態では、Ｌは、炭素原子及び水素原子から選択される１～５０個の原子を含む架橋基であり、少なくとも１つのフェニレン基を含む。

【０３５６】

Ｌ内のアリーレン基又はヘテロアリーレン基は、直接又は間接的に、Ｐに共有結合していてもよい。Ｌ内のアリーレン基又はヘテロアリーレン基は、直接、Ｐに共有結合していてもよい（すなわち、Ｐからアリーレン基又はヘテロアリーレン基の環の原子への共有結合が存在してもよい）。あるいは、Ｌ内のアリーレン基又はヘテロアリーレン基は、間接的に、Ｐに共有結合していてもよい（すなわち、Ｐとアリーレン基又はヘテロアリーレン基の環の原子との間に、さらなる二価の基が存在してもよい）。さらなる二価の基は、ヒドロカルビレン基、例えばアルキレン基又はアルケニレン基であってもよく、又は１つ以上のヘテロ原子を含む二価の基であってもよい。

【０３５７】

Ｌ内のアリーレン基又はヘテロアリーレン基は、直接又は間接的に、Ｃｙに共有結合していてもよい。Ｌ内のアリーレン基又はヘテロアリーレン基は、直接、Ｃｙに共有結合していてもよい（すなわち、Ｃｙからアリーレン基又はヘテロアリーレン基の環の原子への共有結合が存在してもよい）。あるいは、Ｌ内のアリーレン基又はヘテロアリーレン基は、間接的に、Ｃｙに共有結合していてもよい（すなわち、Ｃｙとアリーレン基又はヘテロアリーレン基の環の原子との間に、さらなる二価の基が存在してもよい）。さらなる二価の基は、ヒドロカルビレン基、例えばアルキレン基又はアルケニレン基であってもよく、又は１つ以上のヘテロ原子を含む二価の基であってもよい。

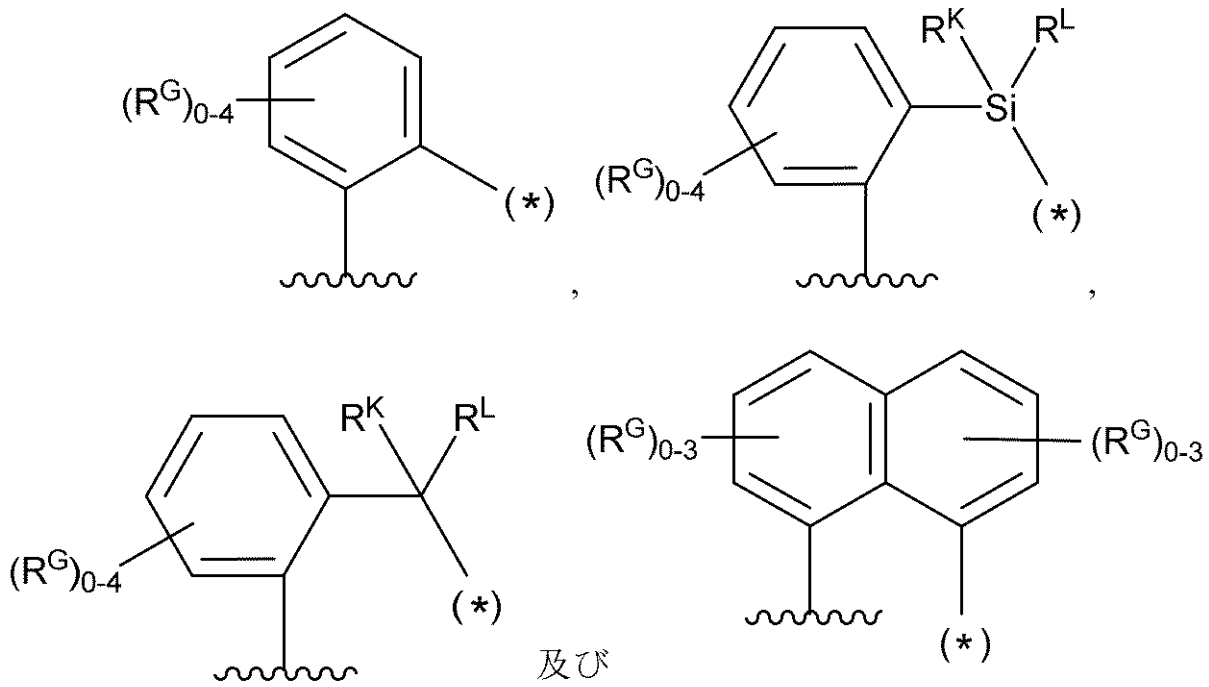
【０３５８】

いくつかの実施形態では、Ｌは、ＰとＣｙを連結する原子の連続鎖を含む架橋基であり、フェニレン基の隣接する炭素原子は原子の連続鎖の一部を形成する。

【０３５９】

いくつかの実施形態では、Ｌは、式：

【化１１１】



から選択され、
式中、

は、Ｐへの結合点を示し；（＊）は、Ｃｙへの結合点を示し；式中、各Ｒ^{G}は、独立して、
ハロゲン；
Ｃ$_{1-30}$ヒドロカルビル基（このヒドロカルビル基は、非置換であるか、又はハロゲン原子、Ｃ$_{1-20}$アルキル基、Ｃ$_{1-20}$アルコキシ基、Ｃ$_{7-20}$アルキルアリール基、Ｃ$_{7-20}$アリールアルキル基、Ｃ$_{6-20}$アリール基、Ｃ$_{6-20}$アリールオキシ基、Ｃ$_{7-20}$アルキルアリールオキシ基、及びＣ$_{7-20}$アリールアルキルオキシ基からなる群から選択される１つ以上の置換基によってさらに置換されている）；
ヘテロ原子含有Ｃ$_{1-30}$ヒドロカルビル基（このヘテロ原子含有ヒドロカルビル基は、非置換であるか、又はハロゲン原子、Ｃ$_{1-20}$アルキル基、Ｃ$_{1-20}$アルコキシ基、Ｃ$_{7-20}$アルキルアリール基、Ｃ$_{7-20}$アリールアルキル基、Ｃ$_{6-20}$アリール基、Ｃ$_{6-20}$アリールオキシ基、Ｃ$_{7-20}$アルキルアリールオキシ基、及びＣ$_{7-20}$アリールアルキルオキシ基からなる群から選択される１つ以上の置換基によってさらに置換されている）；
オキシ基、－ＯＲ’；
アミド基、－ＮＲ’$_2$；
ホスフィド基、－ＰＲ’$_2$；
チオラート基、－ＳＲ’；
式－Ｓｉ（Ｒ^{a}）$_3$のシリル基；
式－Ｇｅ（Ｒ^{a}）$_3$のゲルマニル基；
からなる群から選択され；
ここで、２つの隣接するＲ^{G}基は、任意に結合して環状ヒドロカルビル基又は環状ヘテロ原子含有ヒドロカルビル基を形成してもよく、環状ヒドロカルビル基又は環状ヘテロ原子含有ヒドロカルビル基は、非置換であるか、又はハロゲン原子、Ｃ$_{1-20}$アルキル基、Ｃ$_{1-20}$アルコキシ基、Ｃ$_{7-20}$アルキルアリール基、Ｃ$_{7-20}$アリールアルキル

基、Ｃ６－２０アリール基、Ｃ６－２０アリールオキシ基、Ｃ７－２０アルキルアリールオキシ基、Ｃ７－２０アリールアルキルオキシ基、式－ＮＲ’２のアミド基、式－ＰＲ’２のホスフィド基、式－ＳＲ’のチオラート基、式－Ｓｉ（Ｒａ）３のシリル基、及び式－Ｇｅ（Ｒａ）３のゲルマニル基からなる群から選択される１つ以上の置換基によってさらに置換されており；

ここで、Ｒ^{K}及びＲ^{L}は、各々独立して、

ハロゲン；

水素；

Ｃ１－３０ヒドロカルビル基（このヒドロカルビル基は、非置換であるか、又はハロゲン原子、Ｃ１－２０アルキル基、Ｃ１－２０アルコキシ基、Ｃ７－２０アルキルアリール基、Ｃ７－２０アリールアルキル基、Ｃ６－２０アリール基、Ｃ６－２０アリールオキシ基、Ｃ７－２０アルキルアリールオキシ基、及びＣ７－２０アリールアルキルオキシ基からなる群から選択される１つ以上の置換基によってさらに置換されている）；

ヘテロ原子含有Ｃ１－３０ヒドロカルビル基（このヘテロ原子含有ヒドロカルビル基は、非置換であるか、又はハロゲン原子、Ｃ１－２０アルキル基、Ｃ１－２０アルコキシ基、Ｃ７－２０アルキルアリール基、Ｃ７－２０アリールアルキル基、Ｃ６－２０アリール基、Ｃ６－２０アリールオキシ基、Ｃ７－２０アルキルアリールオキシ基、及びＣ７－２０アリールアルキルオキシ基からなる群から選択される１つ以上の置換基によってさらに置換されている）；

からなる群から選択され；

ここで、Ｒ^{K}及びＲ^{L}の基は、任意に結合して環状ヒドロカルビル基又は環状ヘテロ原子含有ヒドロカルビル基を形成してもよく、環状ヒドロカルビル基又は環状ヘテロ原子含有ヒドロカルビル基は、非置換であるか、又はハロゲン原子、Ｃ１－２０アルキル基、Ｃ１－２０アルコキシ基、Ｃ７－２０アルキルアリール基、Ｃ７－２０アリールアルキル基、Ｃ６－２０アリール基、Ｃ６－２０アリールオキシ基、Ｃ７－２０アルキルアリールオキシ基、Ｃ７－２０アリールアルキルオキシ基、式－ＮＲ’２のアミド基、式－ＰＲ’２のホスフィド基、式－ＳＲ’のチオラート基、式－Ｓｉ（Ｒａ）３のシリル基、及び式－Ｇｅ（Ｒａ）３のゲルマニル基からなる群から選択される１つ以上の置換基によってさらに置換されており；

ここで、各Ｒ’は、独立して、水素、Ｃ1－２０アルキル基、及びＣ６－２０アリール基からなる群から選択され；

ここで、各Ｒａは、独立して、水素、Ｃ１－８アルキル基、Ｃ１－８アルコキシ基、Ｃ６－２０アリールオキシ基及びＣ６－２０アリール基からなる群から選択される。

【０３６０】

実施形態では、各Ｒ^{G}は、独立して、ハロゲン及び非置換Ｃ１－１２アルキルから選択される。

いくつかの実施形態では、Ｒ^{G}は存在しない（フェニレン基、又はナフタレン基は非置換である）。

【０３６１】

実施形態では、Ｒ^{K}及びＲ^{L}は、各々独立して、水素、非置換Ｃ１－１２アルキル基、及び非置換又は置換Ｃ６－２０アリール基から選択される。

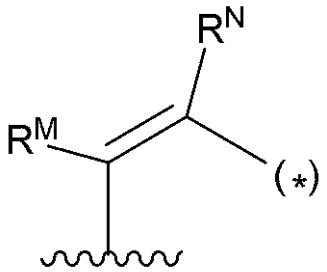
実施形態では、Ｒ^{K}及びＲ^{L}は、各々独立して、非置換Ｃ１－１２アルキル基、及び非置換又は置換Ｃ６－２０アリール基から選択される。

いくつかの実施形態では、Ｒ^{K}及びＲ^{L}は、各々水素である。

【０３６２】

いくつかの実施形態では、Ｌは、式：

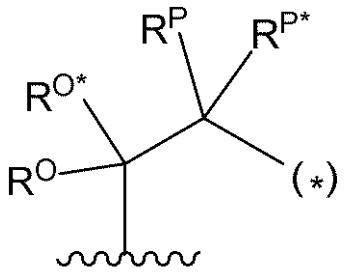
【化１１２】



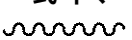
であり、
式中、R^M及びR^Nは、各々独立して、
ハロゲン；
水素；
C_{1-30}ヒドロカルビル基（このヒドロカルビル基は、非置換であるか、又はハロゲン原子、C_{1-20}アルキル基、C_{1-20}アルコキシ基、C_{7-20}アルキルアリール基、C_{7-20}アリールアルキル基、C_{6-20}アリール基、C_{6-20}アリールオキシ基、C_{7-20}アルキルアリールオキシ基、及びC_{7-20}アリールアルキルオキシ基からなる群から選択される１つ以上の置換基によってさらに置換されている）；
ヘテロ原子含有C_{1-30}ヒドロカルビル基（このヘテロ原子含有ヒドロカルビル基は、非置換であるか、又はハロゲン原子、C_{1-20}アルキル基、C_{1-20}アルコキシ基、C_{7-20}アルキルアリール基、C_{7-20}アリールアルキル基、C_{6-20}アリール基、C_{6-20}アリールオキシ基、C_{7-20}アルキルアリールオキシ基、及びC_{7-20}アリールアルキルオキシ基からなる群から選択される１つ以上の置換基によってさらに置換されている）；
オキシ基、－ＯＲ’；
アミド基、－ＮＲ’$_2$；
ホスフィド基、－ＰＲ’$_2$；
チオラート基、－ＳＲ’；
式－Ｓｉ（R^a）$_3$のシリル基；
式－Ｇｅ（R^a）$_3$のゲルマニル基；
からなる群から選択され；
ここで、R^M及びR^Nの２つの隣接する基は、任意に結合して環状ヒドロカルビル基又は環状ヘテロ原子含有ヒドロカルビル基を形成してもよく、環状ヒドロカルビル基又は環状ヘテロ原子含有ヒドロカルビル基は、非置換であるか、又はハロゲン原子、C_{1-20}アルキル基、C_{1-20}アルコキシ基、C_{7-20}アルキルアリール基、C_{7-20}アリールアルキル基、C_{6-20}アリール基、C_{6-20}アリールオキシ基、C_{7-20}アルキルアリールオキシ基、C_{7-20}アリールアルキルオキシ基、式－ＮＲ’$_2$のアミド基、式－ＰＲ’$_2$のホスフィド基、式－ＳＲ’のチオラート基、式－Ｓｉ（R^a）$_3$のシリル基、及び式－Ｇｅ（R^a）$_3$のゲルマニル基からなる群から選択される１つ以上の置換基によってさらに置換されており；
ここで、各Ｒ’は、独立して、水素、C_{1-20}アルキル基、及びC_{6-20}アリール基からなる群から選択され；
ここで、各R^aは、独立して、水素、C_{1-8}アルキル基、C_{1-8}アルコキシ基、C_{6-20}アリールオキシ基及びC_{6-20}アリール基からなる群から選択され；
式中、

は、Ｐへの結合点を示し；（＊）は、Ｃｙへの結合点を示す。

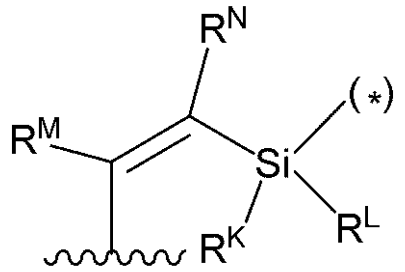
【０３６３】
いくつかの実施形態では、R^M及びR^Nは、各々独立して、ハロゲン、水素、C_{1-30}アルキル基、C_{1-30}アルコキシ基、C_{7-30}アルキルアリール基、C_{7-30}アリールアルキル基、C_{6-30}アリール基、C_{6-30}アリールオキシド基、C_{7-30}アルキルアリールオキシ基、及びC_{7-30}アリールアルキルオキシ基からなる群から選択される。
【０３６４】
いくつかの実施形態では、R^M及びR^Nは、各々独立して、ハロゲン、水素、C_{1-20}アルキル基、C_{1-20}アルコキシ基、C_{7-20}アルキルアリール基、C_{7-20}アリールアルキル基、C_{6-20}アリール基、C_{6-20}アリールオキシド基、C_{7-20}アルキルアリールオキシ基、及びC_{7-20}アリールアルキルオキシ基からなる群から選択される。
【０３６５】
いくつかの実施形態では、R^M基とR^N基が結合して環状ヒドロカルビル基を形成する。
【０３６６】
いくつかの実施形態では、R^M基とR^N基が結合してフェニレン基を形成し、フェニレン基は、非置換であるか、又はハロゲン原子、C_{1-20}アルキル基、C_{1-20}アルコキシ基、C_{7-20}アルキルアリール基、C_{7-20}アリールアルキル基、C_{6-20}アリール基、C_{6-20}アリールオキシ基、C_{7-20}アルキルアリールオキシ基、C_{7-20}アリールアルキルオキシ基、$-NR'_2$、アミド基、$-PR'_2$、ホスフィド基、$-SR'$、チオラート基、式$-Si(R^a)_3$のシリル基、及び式$-Ge(R^a)_3$のゲルマニル基からなる群から選択される１つ以上の置換基によってさらに置換されており；ここで、各R'は、独立して、水素、C_{1-20}アルキル基、及びC_{6-20}アリール基からなる群から選択され；ここで、各R^aは、独立して、水素、C_{1-8}アルキル基、C_{1-8}アルコキシ基、C_{6-20}アリールオキシ基及びC_{6-20}アリール基からなる群から選択される。
【０３６７】
いくつかの実施形態では、R^M基とR^N基が結合して、それ以上置換されないフェニレン基を形成する。
【０３６８】
いくつかの実施形態では、Ｌは、式：
【化１１３】



であり、
式中、R^O、R^O*、R^P及びR^P*は、各々独立して、
ハロゲン；
水素；
C_{1-30}ヒドロカルビル基（このヒドロカルビル基は、非置換であるか、又はハロゲン原子、C_{1-20}アルキル基、C_{1-20}アルコキシ基、C_{7-20}アルキルアリール基、C_{7-20}アリールアルキル基、C_{6-20}アリール基、C_{6-20}アリールオキシ基、C_{7-20}アルキルアリールオキシ基、及びC_{7-20}アリールアルキルオキシ基からなる

群から選択される１つ以上の置換基によってさらに置換されている）；
ヘテロ原子含有Ｃ$_{1-30}$ヒドロカルビル基（このヘテロ原子含有ヒドロカルビル基は、非置換であるか、又はハロゲン原子、Ｃ$_{1-20}$アルキル基、Ｃ$_{1-20}$アルコキシ基、Ｃ$_{7-20}$アルキルアリール基、Ｃ$_{7-20}$アリールアルキル基、Ｃ$_{6-20}$アリール基、Ｃ$_{6-20}$アリールオキシ基、Ｃ$_{7-20}$アルキルアリールオキシ基、及びＣ$_{7-20}$アリールアルキルオキシ基からなる群から選択される１つ以上の置換基によってさらに置換されている）；
オキシ基、－ＯＲ’；
アミド基、－ＮＲ’$_2$；
ホスフィド基、－ＰＲ’$_2$；
チオラート基、－ＳＲ’；
式－Ｓｉ（Ｒ^a）$_3$のシリル基；
式－Ｇｅ（Ｒ^a）$_3$のゲルマニル基；
からなる群から選択され；
ここで、Ｒ^O、Ｒ^O＊、Ｒ^{P}及びＲ^P＊のうちの２つの基は、任意に結合して環状ヒドロカルビル基又は環状ヘテロ原子含有ヒドロカルビル基を形成してもよく、環状ヒドロカルビル基又は環状ヘテロ原子含有ヒドロカルビル基は、非置換であるか、又はハロゲン原子、Ｃ$_{1-20}$アルキル基、Ｃ$_{1-20}$アルコキシ基、Ｃ$_{7-20}$アルキルアリール基、Ｃ$_{7-20}$アリールアルキル基、Ｃ$_{6-20}$アリール基、Ｃ$_{6-20}$アリールオキシ基、Ｃ$_{7-20}$アルキルアリールオキシ基、Ｃ$_{7-20}$アリールアルキルオキシ基、式－ＮＲ’$_2$のアミド基、式－ＰＲ’$_2$のホスフィド基、式－ＳＲ’のチオラート基、式－Ｓｉ（Ｒ^a）$_3$のシリル基、及び式－Ｇｅ（Ｒ^a）$_3$のゲルマニル基からなる群から選択される１つ以上の置換基によってさらに置換されており；
ここで、各Ｒ’は、独立して、水素、Ｃ$_{1-20}$アルキル基、及びＣ$_{6-20}$アリール基からなる群から選択され；
ここで、各Ｒ^{a}は、独立して、水素、Ｃ$_{1-8}$アルキル基、Ｃ$_{1-8}$アルコキシ基、Ｃ$_{6-20}$アリールオキシ基及びＣ$_{6-20}$アリール基からなる群から選択され；
式中、

は、Ｐへの結合点を示し；（＊）は、Ｃｙへの結合点を示す。
【０３６９】
いくつかの実施形態では、Ｒ^O、Ｒ^O＊、Ｒ^{P}及びＲ^P＊は、各々独立して、ハロゲン、水素、Ｃ$_{1-30}$アルキル基、Ｃ$_{1-30}$アルコキシ基、Ｃ$_{7-30}$アルキルアリール基、Ｃ$_{7-30}$アリールアルキル基、Ｃ$_{6-30}$アリール基、Ｃ$_{6-30}$アリールオキシド基、Ｃ$_{7-30}$アルキルアリールオキシ基、及びＣ$_{7-30}$アリールアルキルオキシ基からなる群から選択される。
いくつかの実施形態では、Ｒ^O、Ｒ^O＊、Ｒ^{P}及びＲ^P＊は、各々独立して、ハロゲン、水素、Ｃ$_{1-20}$アルキル基、Ｃ$_{1-20}$アルコキシ基、Ｃ$_{7-20}$アルキルアリール基、Ｃ$_{7-20}$アリールアルキル基、Ｃ$_{6-20}$アリール基、Ｃ$_{6-20}$アリールオキシド基、Ｃ$_{7-20}$アルキルアリールオキシ基、及びＣ$_{7-20}$アリールアルキルオキシ基からなる群から選択される。
【０３７０】
いくつかの実施形態では、１つのＲ^{O}基と１つのＲ^{P}基が結合して環状ヒドロカルビル基を形成する。
いくつかの実施形態では、１つのＲ^{O}基と１つのＲ^{P}基が結合してシクロヘキシル基を形成する。
【０３７１】
いくつかの実施形態では、Ｌは、式：

【化１１４】



であり、
式中、R^K及びR^Lは、各々独立して、水素、非置換C_{1-12}アルキル基、及び非置換又は置換C_{6-20}アリール基から選択され、
R^M及びR^Nは、各々独立して、
ハロゲン；
水素；
C_{1-30}ヒドロカルビル基（このヒドロカルビル基は、非置換であるか、又はハロゲン原子、C_{1-20}アルキル基、C_{1-20}アルコキシ基、C_{7-20}アルキルアリール基、C_{7-20}アリールアルキル基、C_{6-20}アリール基、C_{6-20}アリールオキシ基、C_{7-20}アルキルアリールオキシ基、及びC_{7-20}アリールアルキルオキシ基からなる群から選択される１つ以上の置換基によってさらに置換されている）；
ヘテロ原子含有C_{1-30}ヒドロカルビル基（このヘテロ原子含有ヒドロカルビル基は、非置換であるか、又はハロゲン原子、C_{1-20}アルキル基、C_{1-20}アルコキシ基、C_{7-20}アルキルアリール基、C_{7-20}アリールアルキル基、C_{6-20}アリール基、C_{6-20}アリールオキシ基、C_{7-20}アルキルアリールオキシ基、及びC_{7-20}アリールアルキルオキシ基からなる群から選択される１つ以上の置換基によってさらに置換されている）；
オキシ基、－ＯＲ’；
アミド基、－ＮＲ’$_2$；
ホスフィド基、－ＰＲ’$_2$；
チオラート基、－ＳＲ’；
式－Ｓｉ（R^a）$_3$のシリル基；
式－Ｇｅ（R^a）$_3$のゲルマニル基；
からなる群から選択され；
ここで、R^M及びR^Nの２つの隣接する基は、任意に結合して環状ヒドロカルビル基又は環状ヘテロ原子含有ヒドロカルビル基を形成してもよく、環状ヒドロカルビル基又は環状ヘテロ原子含有ヒドロカルビル基は、非置換であるか、又はハロゲン原子、C_{1-20}アルキル基、C_{1-20}アルコキシ基、C_{7-20}アルキルアリール基、C_{7-20}アリールアルキル基、C_{6-20}アリール基、C_{6-20}アリールオキシ基、C_{7-20}アルキルアリールオキシ基、C_{7-20}アリールアルキルオキシ基、式－ＮＲ’$_2$のアミド基、式－ＰＲ’$_2$のホスフィド基、式－ＳＲ’のチオラート基、式－Ｓｉ（R^a）$_3$のシリル基、及び式－Ｇｅ（R^a）$_3$のゲルマニル基からなる群から選択される１つ以上の置換基によってさらに置換されており；
ここで、各Ｒ’は、独立して、水素、C_{1-20}アルキル基、及びC_{6-20}アリール基からなる群から選択され；
ここで、各R^aは、独立して、水素、C_{1-8}アルキル基、C_{1-8}アルコキシ基、C_{6-20}アリールオキシ基及びC_{6-20}アリール基からなる群から選択され；
式中、

は、Ｐへの結合点を示し；（＊）は、Ｃｙへの結合点を示す。

【０３７２】

いくつかの実施形態では、R^M及びR^Nは、各々独立して、ハロゲン、水素、C_{1-30}アルキル基、C_{1-30}アルコキシ基、C_{7-30}アルキルアリール基、C_{7-30}アリールアルキル基、C_{6-30}アリール基、C_{6-30}アリールオキシド基、C_{7-30}アルキルアリールオキシ基、及びC_{7-30}アリールアルキルオキシ基からなる群から選択される。

【０３７３】

いくつかの実施形態では、R^M及びR^Nは、各々独立して、ハロゲン、水素、C_{1-20}アルキル基、C_{1-20}アルコキシ基、C_{7-20}アルキルアリール基、C_{7-20}アリールアルキル基、C_{6-20}アリール基、C_{6-20}アリールオキシド基、C_{7-20}アルキルアリールオキシ基、及びC_{7-20}アリールアルキルオキシ基からなる群から選択される。

【０３７４】

いくつかの実施形態では、R^M基とR^N基が結合して環状ヒドロカルビル基を形成する。

【０３７５】

いくつかの実施形態では、R^M基とR^N基が結合してフェニレン基を形成し、フェニレン基は、非置換であるか、又はハロゲン原子、C_{1-20}アルキル基、C_{1-20}アルコキシ基、C_{7-20}アルキルアリール基、C_{7-20}アリールアルキル基、C_{6-20}アリール基、C_{6-20}アリールオキシ基、C_{7-20}アルキルアリールオキシ基、C_{7-20}アリールアルキルオキシ基、－NR'_2、アミド基、－PR'_2、ホスフィド基、－SR'、チオラート基、式－$Si(R^a)_3$のシリル基、及び式－$Ge(R^a)_3$のゲルマニル基からなる群から選択される１つ以上の置換基によってさらに置換されており；ここで、各Ｒ’は、独立して、水素、C_{1-20}アルキル基、及びC_{6-20}アリール基からなる群から選択され；ここで、各R^aは、独立して、水素、C_{1-8}アルキル基、C_{1-8}アルコキシ基、C_{6-20}アリールオキシ基及びC_{6-20}アリール基からなる群から選択される。

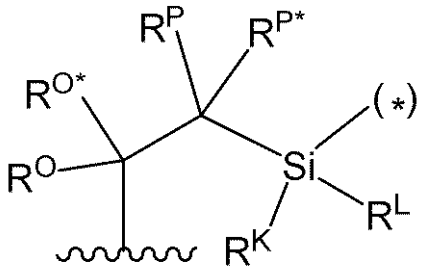
【０３７６】

いくつかの実施形態では、R^M基とR^N基が結合して、それ以上置換されないフェニレン基を形成する。

【０３７７】

いくつかの実施形態では、Ｌは、式：

【化１１５】



であり、

式中、R^K及びR^Lは、各々独立して、水素、非置換C_{1-12}アルキル基、及び非置換又は置換C_{6-20}アリール基から選択され、

R^O、R^{O*}、R^P及びR^{P*}は、各々独立して、

ハロゲン；

水素；

C_{1-30}ヒドロカルビル基（このヒドロカルビル基は、非置換であるか、又はハロゲ

ン原子、C_{1-20}アルキル基、C_{1-20}アルコキシ基、C_{7-20}アルキルアリール基、C_{7-20}アリールアルキル基、C_{6-20}アリール基、C_{6-20}アリールオキシ基、C_{7-20}アルキルアリールオキシ基、及びC_{7-20}アリールアルキルオキシ基からなる群から選択される１つ以上の置換基によってさらに置換されている）；
ヘテロ原子含有C_{1-30}ヒドロカルビル基（このヘテロ原子含有ヒドロカルビル基は、非置換であるか、又はハロゲン原子、C_{1-20}アルキル基、C_{1-20}アルコキシ基、C_{7-20}アルキルアリール基、C_{7-20}アリールアルキル基、C_{6-20}アリール基、C_{6-20}アリールオキシ基、C_{7-20}アルキルアリールオキシ基、及びC_{7-20}アリールアルキルオキシ基からなる群から選択される１つ以上の置換基によってさらに置換されている）；
オキシ基、－ＯＲ’；
アミド基、－ＮＲ’$_2$；
ホスフィド基、－ＰＲ’$_2$；
チオラート基、－ＳＲ’；
式－Ｓｉ（R^a）$_3$のシリル基；
式－Ｇｅ（R^a）$_3$のゲルマニル基；
からなる群から選択され；
ここで、R^O、R^O＊、R^P及びR^P＊のうちの２つの基は、任意に結合して環状ヒドロカルビル基又は環状ヘテロ原子含有ヒドロカルビル基を形成してもよく、環状ヒドロカルビル基又は環状ヘテロ原子含有ヒドロカルビル基は、非置換であるか、又はハロゲン原子、C_{1-20}アルキル基、C_{1-20}アルコキシ基、C_{7-20}アルキルアリール基、C_{7-20}アリールアルキル基、C_{6-20}アリール基、C_{6-20}アリールオキシ基、C_{7-20}アルキルアリールオキシ基、C_{7-20}アリールアルキルオキシ基、式－ＮＲ’$_2$のアミド基、式－ＰＲ’$_2$のホスフィド基、式－ＳＲ’のチオラート基、式－Ｓｉ（R^a）$_3$のシリル基、及び式－Ｇｅ（R^a）$_3$のゲルマニル基からなる群から選択される１つ以上の置換基によってさらに置換されており；
ここで、各Ｒ’は、独立して、水素、C_{1-20}アルキル基、及びC_{6-20}アリール基からなる群から選択され；
ここで、各R^aは、独立して、水素、C_{1-8}アルキル基、C_{1-8}アルコキシ基、C_{6-20}アリールオキシ基及びC_{6-20}アリール基からなる群から選択され；
式中、

は、Ｐへの結合点を示し；（＊）は、Ｃｙへの結合点を示す。

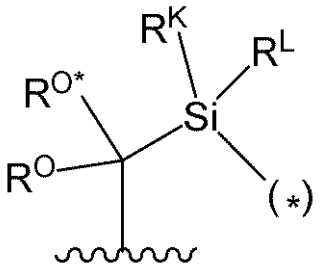
【０３７８】

いくつかの実施形態では、R^O、R^O＊、R^P及びR^P＊は、各々独立して、ハロゲン、水素、C_{1-30}アルキル基、C_{1-30}アルコキシ基、C_{7-30}アルキルアリール基、C_{7-30}アリールアルキル基、C_{6-30}アリール基、C_{6-30}アリールオキシド基、C_{7-30}アルキルアリールオキシ基、及びC_{7-30}アリールアルキルオキシ基からなる群から選択される。
いくつかの実施形態では、R^O、R^O＊、R^P及びR^P＊は、各々独立して、ハロゲン、水素、C_{1-20}アルキル基、C_{1-20}アルコキシ基、C_{7-20}アルキルアリール基、C_{7-20}アリールアルキル基、C_{6-20}アリール基、C_{6-20}アリールオキシド基、C_{7-20}アルキルアリールオキシ基、及びC_{7-20}アリールアルキルオキシ基からなる群から選択される。

【０３７９】

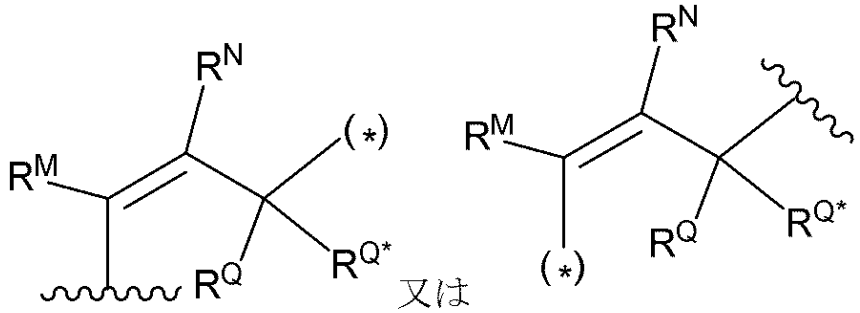
いくつかの実施形態では、１つのR^O基と１つのR^P基が結合して環状ヒドロカルビル基を形成する。
いくつかの実施形態では、１つのR^O基と１つのR^P基が結合してシクロヘキシル基を形成する。

【０３８０】
いくつかの実施形態では、Ｌは、式：
【化１１６】



であり、
式中、Ｒ^{K}及びＲ^{L}は、各々独立して、水素、非置換Ｃ$_{1-12}$アルキル基、及び非置換又は置換Ｃ$_{6-20}$アリール基から選択され、
Ｒ^{O}及びＲ^{O}＊は、各々独立して、
ハロゲン；
水素；
Ｃ$_{1-30}$ヒドロカルビル基（このヒドロカルビル基は、非置換であるか、又はハロゲン原子、Ｃ$_{1-20}$アルキル基、Ｃ$_{1-20}$アルコキシ基、Ｃ$_{7-20}$アルキルアリール基、Ｃ$_{7-20}$アリールアルキル基、Ｃ$_{6-20}$アリール基、Ｃ$_{6-20}$アリールオキシ基、Ｃ$_{7-20}$アルキルアリールオキシ基、及びＣ$_{7-20}$アリールアルキルオキシ基からなる群から選択される１つ以上の置換基によってさらに置換されている）；
ヘテロ原子含有Ｃ$_{1-30}$ヒドロカルビル基（このヘテロ原子含有ヒドロカルビル基は、非置換であるか、又はハロゲン原子、Ｃ$_{1-20}$アルキル基、Ｃ$_{1-20}$アルコキシ基、Ｃ$_{7-20}$アルキルアリール基、Ｃ$_{7-20}$アリールアルキル基、Ｃ$_{6-20}$アリール基、Ｃ$_{6-20}$アリールオキシ基、Ｃ$_{7-20}$アルキルアリールオキシ基、及びＣ$_{7-20}$アリールアルキルオキシ基からなる群から選択される１つ以上の置換基によってさらに置換されている）；
オキシ基、－ＯＲ’；
アミド基、－ＮＲ’$_2$；
ホスフィド基、－ＰＲ’$_2$；
チオラート基、－ＳＲ’；
式－Ｓｉ（Ｒ^{a}）$_3$のシリル基；
式－Ｇｅ（Ｒ^{a}）$_3$のゲルマニル基；
からなる群から選択され；
ここで、Ｒ^{O}及びＲ^{O}＊のうちの２つの基は、任意に結合して環状ヒドロカルビル基又は環状ヘテロ原子含有ヒドロカルビル基を形成してもよく、環状ヒドロカルビル基又は環状ヘテロ原子含有ヒドロカルビル基は、非置換であるか、又はハロゲン原子、Ｃ$_{1-20}$アルキル基、Ｃ$_{1-20}$アルコキシ基、Ｃ$_{7-20}$アルキルアリール基、Ｃ$_{7-20}$アリールアルキル基、Ｃ$_{6-20}$アリール基、Ｃ$_{6-20}$アリールオキシ基、Ｃ$_{7-20}$アルキルアリールオキシ基、Ｃ$_{7-20}$アリールアルキルオキシ基、式－ＮＲ’$_2$のアミド基、式－ＰＲ’$_2$のホスフィド基、式－ＳＲ’のチオラート基、式－Ｓｉ（Ｒ^{a}）$_3$のシリル基、及び式－Ｇｅ（Ｒ^{a}）$_3$のゲルマニル基からなる群から選択される１つ以上の置換基によってさらに置換されており；
ここで、各Ｒ’は、独立して、水素、Ｃ$_{1-20}$アルキル基、及びＣ$_{6-20}$アリール基からなる群から選択され；
ここで、各Ｒ^{a}は、独立して、水素、Ｃ$_{1-8}$アルキル基、Ｃ$_{1-8}$アルコキシ基、Ｃ$_{6-20}$アリールオキシ基及びＣ$_{6-20}$アリール基からなる群から選択され；
式中、

は、Ｐへの結合点を示し；（＊）は、Ｃｙへの結合点を示す。
【０３８１】
いくつかの実施形態では、R^O及びR^{O*}は、各々独立して、ハロゲン、水素、C_{1-30}アルキル基、C_{1-30}アルコキシ基、C_{7-30}アルキルアリール基、C_{7-30}アリールアルキル基、C_{6-30}アリール基、C_{6-30}アリールオキシド基、C_{7-30}アルキルアリールオキシ基、及びC_{7-30}アリールアルキルオキシ基からなる群から選択される。
いくつかの実施形態では、R^O及びR^{O*}は、各々独立して、ハロゲン、水素、C_{1-20}アルキル基、C_{1-20}アルコキシ基、C_{7-20}アルキルアリール基、C_{7-20}アリールアルキル基、C_{6-20}アリール基、C_{6-20}アリールオキシド基、C_{7-20}アルキルアリールオキシ基、及びC_{7-20}アリールアルキルオキシ基からなる群から選択される。
【０３８２】
いくつかの実施形態では、Ｌは、式：
【化１１７】



であり、
式中、R^M、R^N、R^Q、及びR^{Q*}は、各々独立して、
ハロゲン；
水素；
C_{1-30}ヒドロカルビル基（このヒドロカルビル基は、非置換であるか、又はハロゲン原子、C_{1-20}アルキル基、C_{1-20}アルコキシ基、C_{7-20}アルキルアリール基、C_{7-20}アリールアルキル基、C_{6-20}アリール基、C_{6-20}アリールオキシ基、C_{7-20}アルキルアリールオキシ基、及びC_{7-20}アリールアルキルオキシ基からなる群から選択される１つ以上の置換基によってさらに置換されている）；
ヘテロ原子含有C_{1-30}ヒドロカルビル基（このヘテロ原子含有ヒドロカルビル基は、非置換であるか、又はハロゲン原子、C_{1-20}アルキル基、C_{1-20}アルコキシ基、C_{7-20}アルキルアリール基、C_{7-20}アリールアルキル基、C_{6-20}アリール基、C_{6-20}アリールオキシ基、C_{7-20}アルキルアリールオキシ基、及びC_{7-20}アリールアルキルオキシ基からなる群から選択される１つ以上の置換基によってさらに置換されている）；
オキシ基、－ＯＲ’；
アミド基、－ＮＲ’$_2$；
ホスフィド基、－ＰＲ’$_2$；
チオラート基、－ＳＲ’；
式－Ｓｉ（R^a）$_3$のシリル基；
式－Ｇｅ（R^a）$_3$のゲルマニル基；
からなる群から選択され；

ここで、R^M及びR^Nの２つの隣接する基は、任意に結合して環状ヒドロカルビル基又は環状ヘテロ原子含有ヒドロカルビル基を形成してもよく、環状ヒドロカルビル基又は環状ヘテロ原子含有ヒドロカルビル基は、非置換であるか、又はハロゲン原子、C_{1-20}アルキル基、C_{1-20}アルコキシ基、C_{7-20}アルキルアリール基、C_{7-20}アリールアルキル基、C_{6-20}アリール基、C_{6-20}アリールオキシ基、C_{7-20}アルキルアリールオキシ基、C_{7-20}アリールアルキルオキシ基、式－NR'_2のアミド基、式－PR'_2のホスフィド基、式－SR'のチオラート基、式－$Si(R^a)_3$のシリル基、及び式－$Ge(R^a)_3$のゲルマニル基からなる群から選択される１つ以上の置換基によってさらに置換されており；

ここで、R^Q及びR^{Q*}のうちの２つの基は、任意に結合して環状ヒドロカルビル基又は環状ヘテロ原子含有ヒドロカルビル基を形成してもよく、環状ヒドロカルビル基又は環状ヘテロ原子含有ヒドロカルビル基は、非置換であるか、又はハロゲン原子、C_{1-20}アルキル基、C_{1-20}アルコキシ基、C_{7-20}アルキルアリール基、C_{7-20}アリールアルキル基、C_{6-20}アリール基、C_{6-20}アリールオキシ基、C_{7-20}アルキルアリールオキシ基、C_{7-20}アリールアルキルオキシ基、式－NR'_2のアミド基、式－PR'_2のホスフィド基、式－SR'のチオラート基、式－$Si(R^a)_3$のシリル基、及び式－$Ge(R^a)_3$のゲルマニル基からなる群から選択される１つ以上の置換基によってさらに置換されており；

ここで、各R'は、独立して、水素、C_{1-20}アルキル基、及びC_{6-20}アリール基からなる群から選択され；

ここで、各R^aは、独立して、水素、C_{1-8}アルキル基、C_{1-8}アルコキシ基、C_{6-20}アリールオキシ基及びC_{6-20}アリール基からなる群から選択され；

式中、

は、Ｐへの結合点を示し；（＊）は、Ｃｙへの結合点を示す。

【０３８３】

いくつかの実施形態では、R^M及びR^Nは、各々独立して、ハロゲン、水素、C_{1-30}アルキル基、C_{1-30}アルコキシ基、C_{7-30}アルキルアリール基、C_{7-30}アリールアルキル基、C_{6-30}アリール基、C_{6-30}アリールオキシド基、C_{7-30}アルキルアリールオキシ基、及びC_{7-30}アリールアルキルオキシ基からなる群から選択される。

【０３８４】

いくつかの実施形態では、R^M及びR^Nは、各々独立して、ハロゲン、水素、C_{1-20}アルキル基、C_{1-20}アルコキシ基、C_{7-20}アルキルアリール基、C_{7-20}アリールアルキル基、C_{6-20}アリール基、C_{6-20}アリールオキシド基、C_{7-20}アルキルアリールオキシ基、及びC_{7-20}アリールアルキルオキシ基からなる群から選択される。

【０３８５】

いくつかの実施形態では、R^M基とR^N基が結合して環状ヒドロカルビル基を形成する。

【０３８６】

いくつかの実施形態では、R^M基とR^N基が結合してフェニレン基を形成し、フェニレン基は、非置換であるか、又はハロゲン原子、C_{1-20}アルキル基、C_{1-20}アルコキシ基、C_{7-20}アルキルアリール基、C_{7-20}アリールアルキル基、C_{6-20}アリール基、C_{6-20}アリールオキシ基、C_{7-20}アルキルアリールオキシ基、C_{7-20}アリールアルキルオキシ基、－NR'_2、アミド基、－PR'_2、ホスフィド基、－SR'、チオラート基、式－$Si(R^a)_3$のシリル基、及び式－$Ge(R^a)_3$のゲルマニル基からなる群から選択される１つ以上の置換基によってさらに置換されており；ここで、各R'は、独立して、水素、C_{1-20}アルキル基、及びC_{6-20}アリール基からなる群から

選択され；ここで、各R^aは、独立して、水素、C_{1-8}アルキル基、C_{1-8}アルコキシ基、C_{6-20}アリールオキシ基及びC_{6-20}アリール基からなる群から選択される。

【０３８７】

いくつかの実施形態では、R^M基とR^N基が結合して、それ以上置換されないフェニレン基を形成する。

【０３８８】

いくつかの実施形態では、R^Q及びR^{Q*}は、各々独立して、ハロゲン、水素、C_{1-30}アルキル基、C_{1-30}アルコキシ基、C_{7-30}アルキルアリール基、C_{7-30}アリールアルキル基、C_{6-30}アリール基、C_{6-30}アリールオキシド基、C_{7-30}アルキルアリールオキシ基、及びC_{7-30}アリールアルキルオキシ基からなる群から選択される。

【０３８９】

いくつかの実施形態では、R^Q及びR^{Q*}は、各々独立して、ハロゲン、水素、C_{1-20}アルキル基、C_{1-20}アルコキシ基、C_{7-20}アルキルアリール基、C_{7-20}アリールアルキル基、C_{6-20}アリール基、C_{6-20}アリールオキシド基、C_{7-20}アルキルアリールオキシ基、及びC_{7-20}アリールアルキルオキシ基からなる群から選択される。

【０３９０】

実施形態では、シリル基は、式－Ｓｉ（R^a）$_3$を有し、式中、R^a基は、独立して、水素原子、C_{1-8}アルキル又はアルコキシ基、C_{6-10}アリール基、及びC_{6-10}アリールオキシ基から選択される。

実施形態では、シリル基は、式－Ｓｉ（Ｒａ）$_3$を有し、式中、Ｒａ基は、独立して、C_{1-8}アルキル又はアルコキシ基、C_{6-10}アリール基、及びC_{6-10}アリールオキシ基から選択される。

【０３９１】

本開示のいくつかの実施形態では、オキシ基は、式－ＯＲ’を有し、式中、Ｒ’基は、水素原子、C_{1-10}アルキル基、及びC_{6-10}アリール基からなる群から選択される。

本開示のいくつかの実施形態では、オキシ基は、式－ＯＲ’を有し、式中、Ｒ’基は、C_{1-10}アルキル基、及びC_{6-10}アリール基からなる群から選択される。

【０３９２】

本開示のいくつかの実施形態では、アミド基は、式－ＮＲ’$_2$を有し、式中、Ｒ’基は、独立して、水素原子、C_{1-10}アルキル基、C_{6-10}アリール基からなる群から選択される。

本開示のいくつかの実施形態では、アミド基は、式－ＮＲ’$_2$を有し、式中、Ｒ’基は、独立して、C_{1-10}アルキル基、及びC_{6-10}アリール基からなる群から選択される。

【０３９３】

本開示のいくつかの実施形態では、ホスフィド基は、式－ＰＲ’$_2$を有し、式中、Ｒ’基は、独立して、水素原子、C_{1-10}アルキル基、及びC_{6-10}アリール基からなる群から選択される。

本開示のいくつかの実施形態では、ホスフィド基は、式－ＰＲ’$_2$を有し、式中、Ｒ’基は、独立して、C_{1-10}アルキル基、及びC_{6-10}アリール基からなる群から選択される。

【０３９４】

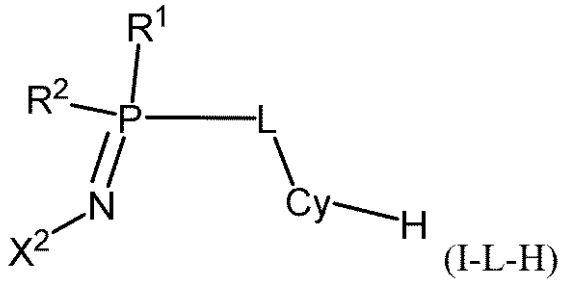
本開示のいくつかの実施形態では、チオラート基は、式－ＳＲ’を有し、式中、Ｒ’基は、水素原子、C_{1-10}アルキル基、及びC_{6-10}アリール基からなる群から選択される。

本開示のいくつかの実施形態では、チオラート基は、式－ＳＲ’を有し、式中、Ｒ’基は、C_{1-10}アルキル基、及びC_{6-10}アリール基からなる群から選択される。

【０３９５】

本開示の実施形態では、式Ｉ－Ｌのプレメタル化化合物は、式Ｉ－Ｌ－Ｈ：

【化１１８】



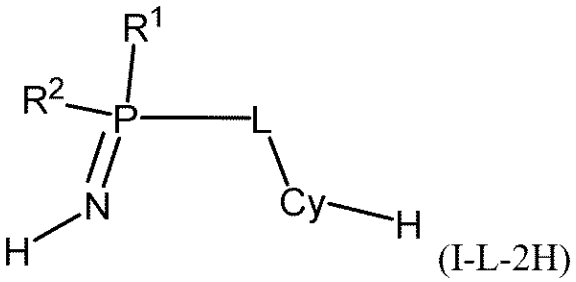
(I-L-H)

で表されるプレメタル化化合物であり、
式中、Ｒ^{1}、Ｒ^{2}、Ｌ、Ｃｙ、及びＸ^{2}は、上記式Ｉ－Ｌで定義した通りである。

【０３９６】

本開示の実施形態では、式Ｉ－Ｌのプレメタル化化合物は、式Ｉ－Ｌ－２Ｈ：

【化１１９】



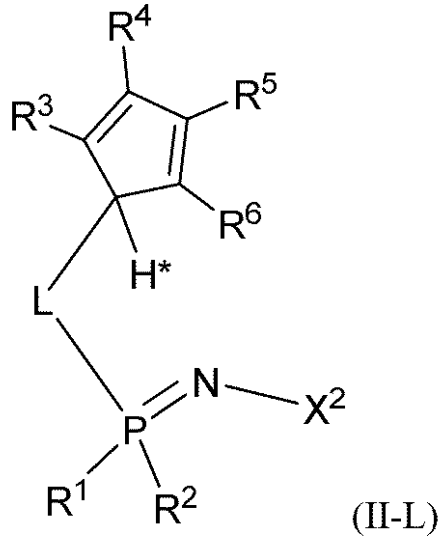
(I-L-2H)

で表されるプレメタル化化合物であり、
式中、Ｒ^{1}、Ｒ^{2}、Ｌ、及びＣｙは、上記式Ｉ－Ｌで定義した通りである。

【０３９７】

本開示の実施形態では、式Ｉ－Ｌのプレメタル化化合物は、式ＩＩ－Ｌ：

【化１２０】



(II-L)

で表されるプレメタル化化合物であるか、又はシクロペンタジエニル環内の水素Ｈ＊の移動によって得られる式ＩＩ－Ｌの二重結合異性体であり；

式中、R^1、R^2、Ｌ及びX^2は、上記式Ｉ－Ｌで定義した通りであり；
式中、R^3、R^4、R^5及びR^6は、各々独立して、
ハロゲン；
水素；
C_{1-30}ヒドロカルビル基（このヒドロカルビル基は、非置換であるか、又はハロゲン原子、C_{1-20}アルキル基、C_{1-20}アルコキシ基、C_{7-20}アルキルアリール基、C_{7-20}アリールアルキル基、C_{6-20}アリール基、C_{6-20}アリールオキシ基、C_{7-20}アルキルアリールオキシ基、及びC_{7-20}アリールアルキルオキシ基からなる群から選択される１つ以上の置換基によってさらに置換されている）；
ヘテロ原子含有C_{1-30}ヒドロカルビル基（このヘテロ原子含有ヒドロカルビル基は、非置換であるか、又はハロゲン原子、C_{1-20}アルキル基、C_{1-20}アルコキシ基、C_{7-20}アルキルアリール基、C_{7-20}アリールアルキル基、C_{6-20}アリール基、C_{6-20}アリールオキシ基、C_{7-20}アルキルアリールオキシ基、及びC_{7-20}アリールアルキルオキシ基からなる群から選択される１つ以上の置換基によってさらに置換されている）；
オキシ基、－ＯＲ’；
アミド基、$-NR'_2$；
ホスフィド基、$-PR'_2$；
チオラート基、－ＳＲ’；
式－Ｓｉ（R^a）$_3$のシリル基；
式－Ｇｅ（R^a）$_3$のゲルマニル基；
からなる群から選択され；
ここで、R^3、R^4、R^5及びR^6の２つの隣接する基は、任意に結合して環状ヒドロカルビル基又は環状ヘテロ原子含有ヒドロカルビル基を形成してもよく、環状ヒドロカルビル基又は環状ヘテロ原子含有ヒドロカルビル基は、非置換であるか、又はハロゲン原子、C_{1-20}アルキル基、C_{1-20}アルコキシ基、C_{7-20}アルキルアリール基、C_{7-20}アリールアルキル基、C_{6-20}アリール基、C_{6-20}アリールオキシ基、C_{7-20}アルキルアリールオキシ基、C_{7-20}アリールアルキルオキシ基、式$-NR'_2$のアミド基、式$-PR'_2$のホスフィド基、式－ＳＲ’のチオラート基、式－Ｓｉ（R^a）$_3$のシリル基、及び式－Ｇｅ（R^a）$_3$のゲルマニル基からなる群から選択される１つ以上の置換基によってさらに置換されており；
ここで、各Ｒ’は、独立して、水素、C_{1-20}アルキル基、及びC_{6-20}アリール基からなる群から選択され；
ここで、各R^aは、独立して、水素、C_{1-8}アルキル基、C_{1-8}アルコキシ基、C_{6-20}アリールオキシ基及びC_{6-20}アリール基からなる群から選択される、プレメタル化化合物である。

【０３９８】

いくつかの実施形態では、R^3、R^4、R^5及びR^6は、各々独立して、ハロゲン；水素；C_{1-30}ヒドロカルビル基（このヒドロカルビル基は、非置換であるか、又はハロゲン原子、C_{1-20}アルキル基、C_{1-20}アルコキシ基、C_{7-20}アルキルアリール基、C_{7-20}アリールアルキル基、C_{6-20}アリール基、C_{6-20}アリールオキシ基、C_{7-20}アルキルアリールオキシ基、及びC_{7-20}アリールアルキルオキシ基からなる群から選択される１つ以上の置換基によってさらに置換されている）；並びにヘテロ原子含有C_{1-30}ヒドロカルビル基（このヘテロ原子含有ヒドロカルビル基は、非置換であるか、又はハロゲン原子、C_{1-20}アルキル基、C_{1-20}アルコキシ基、C_{7-20}アルキルアリール基、C_{7-20}アリールアルキル基、C_{6-20}アリール基、C_{6-20}アリールオキシ基、C_{7-20}アルキルアリールオキシ基、及びC_{7-20}アリールアルキルオキシ基からなる群から選択される１つ以上の置換基によってさらに置換されている）；からなる群から選択され；ここで、R^3、R^4、R^5及びR^6の２つの隣接する基は、任意に結合して環状ヒドロカルビル基又は環状ヘテロ原子含有ヒドロカルビル基を形成し

てもよく、環状ヒドロカルビル基又は環状ヘテロ原子含有ヒドロカルビル基は、非置換であるか、又はハロゲン原子、C_{1-20}アルキル基、C_{1-20}アルコキシ基、C_{7-20}アルキルアリール基、C_{7-20}アリールアルキル基、C_{6-20}アリール基、C_{6-20}アリールオキシ基、C_{7-20}アルキルアリールオキシ基、C_{7-20}アリールアルキルオキシ基、－NR'_2、アミド基、－PR'_2、ホスフィド基、－SR'、チオラート基、式－$Si(R^a)_3$のシリル基、及び式－$Ge(R^a)_3$のゲルマニル基からなる群から選択される１つ以上の置換基によってさらに置換されており；ここで、各R'は、独立して、水素、C_{1-20}アルキル基、及びC_{6-20}アリール基からなる群から選択され；ここで、各R^aは、独立して、水素、C_{1-8}アルキル基、C_{1-8}アルコキシ基、C_{6-20}アリールオキシ基及びC_{6-20}アリール基からなる群から選択される。

【０３９９】

いくつかの実施形態では、R^3、R^4、R^5及びR^6は、各々独立して、ハロゲン；水素；並びにC_{1-30}ヒドロカルビル基（このヒドロカルビル基は、非置換であるか、又はハロゲン原子、C_{1-20}アルキル基、C_{1-20}アルコキシ基、C_{7-20}アルキルアリール基、C_{7-20}アリールアルキル基、C_{6-20}アリール基、C_{6-20}アリールオキシ基、C_{7-20}アルキルアリールオキシ基、及びC_{7-20}アリールアルキルオキシ基からなる群から選択される１つ以上の置換基によってさらに置換されている）；からなる群から選択され；ここで、R^3、R^4、R^5及びR^6の２つの隣接する基は、任意に結合して環状ヒドロカルビル基を形成してもよく、環状ヒドロカルビル基は、非置換であるか、又はハロゲン原子、C_{1-20}アルキル基、C_{1-20}アルコキシ基、C_{7-20}アルキルアリール基、C_{7-20}アリールアルキル基、C_{6-20}アリール基、C_{6-20}アリールオキシ基、C_{7-20}アルキルアリールオキシ基、C_{7-20}アリールアルキルオキシ基、－NR'_2、アミド基、－PR'_2、ホスフィド基、－SR'、チオラート基、式－$Si(R^a)_3$のシリル基、及び式－$Ge(R^a)_3$のゲルマニル基からなる群から選択される１つ以上の置換基によってさらに置換されており；ここで、各R'は、独立して、水素、C_{1-20}アルキル基、及びC_{6-20}アリール基からなる群から選択され；ここで、各R^aは、独立して、水素、C_{1-8}アルキル基、C_{1-8}アルコキシ基、C_{6-20}アリールオキシ基及びC_{6-20}アリール基からなる群から選択される。

【０４００】

いくつかの実施形態では、R^3、R^4、R^5及びR^6は、各々独立して、ハロゲン；水素；並びにヘテロ原子含有C_{1-30}ヒドロカルビル基（このヘテロ原子含有ヒドロカルビル基は、非置換であるか、又はハロゲン原子、C_{1-20}アルキル基、C_{1-20}アルコキシ基、C_{7-20}アルキルアリール基、C_{7-20}アリールアルキル基、C_{6-20}アリール基、C_{6-20}アリールオキシ基、C_{7-20}アルキルアリールオキシ基、及びC_{7-20}アリールアルキルオキシ基からなる群から選択される１つ以上の置換基によってさらに置換されている）；からなる群から選択され；ここで、R^3、R^4、R^5及びR^6の２つの隣接する基は、任意に結合して環状ヘテロ原子含有ヒドロカルビル基を形成してもよく、環状ヘテロ原子含有ヒドロカルビル基は、非置換であるか、又はハロゲン原子、C_{1-20}アルキル基、C_{1-20}アルコキシ基、C_{7-20}アルキルアリール基、C_{7-20}アリールアルキル基、C_{6-20}アリール基、C_{6-20}アリールオキシ基、C_{7-20}アルキルアリールオキシ基、C_{7-20}アリールアルキルオキシ基、－NR'_2、アミド基、－PR'_2、ホスフィド基、－SR'、チオラート基、式－$Si(R^a)_3$のシリル基、及び式－$Ge(R^a)_3$のゲルマニル基からなる群から選択される１つ以上の置換基によってさらに置換されており；ここで、各R'は、独立して、水素、C_{1-20}アルキル基、及びC_{6-20}アリール基からなる群から選択され；ここで、各R^aは、独立して、水素、C_{1-8}アルキル基、C_{1-8}アルコキシ基、C_{6-20}アリールオキシ基及びC_{6-20}アリール基からなる群から選択される。

【０４０１】

いくつかの実施形態では、R^3、R^4、R^5及びR^6は、各々独立して、ハロゲン、水素、C_{1-30}アルキル基、C_{1-30}アルコキシ基、C_{7-30}アルキルアリール基、C

７－３０アリールアルキル基、Ｃ６－３０アリール基、Ｃ６－３０アリールオキシド基、Ｃ７－３０アルキルアリールオキシ基、及びＣ７－３０アリールアルキルオキシ基からなる群から選択される。

【０４０２】

いくつかの実施形態では、Ｒ３、Ｒ４、Ｒ５及びＲ６は、各々独立して、ハロゲン、水素、Ｃ１－２０アルキル基、Ｃ１－２０アルコキシ基、Ｃ７－２０アルキルアリール基、Ｃ７－２０アリールアルキル基、Ｃ６－２０アリール基、Ｃ６－２０アリールオキシド基、Ｃ７－２０アルキルアリールオキシ基、及びＣ７－２０アリールアルキルオキシ基からなる群から選択される。

【０４０３】

いくつかの実施形態では、Ｒ３、Ｒ４、Ｒ５及びＲ６は、各々独立して、ハロゲン、水素、及びＣ１－３０ヒドロカルビル基からなる群から選択され、このヒドロカルビル基は、非置換であるか、又は１つ以上のハロゲン原子によってさらに置換されている。

【０４０４】

いくつかの実施形態では、Ｒ３、Ｒ４、Ｒ５及びＲ６は、各々独立して、ハロゲン、水素、及びＣ１－３０ヘテロ原子含有ヒドロカルビル基からなる群から選択され、このヘテロ原子含有ヒドロカルビル基は、非置換であるか、又は１つ以上のハロゲン原子によってさらに置換されている。

【０４０５】

いくつかの実施形態では、Ｒ３、Ｒ４、Ｒ５及びＲ６は、各々独立して、水素及びＣ１－３０ヒドロカルビル基からなる群から選択され、このヒドロカルビル基は、非置換であるか、又は１つ以上のハロゲン原子によってさらに置換されている。

【０４０６】

いくつかの実施形態では、Ｒ３、Ｒ４、Ｒ５及びＲ６は、各々独立して、水素及びＣ１－３０ヘテロ原子含有ヒドロカルビル基からなる群から選択され、このヘテロ原子含有ヒドロカルビル基は、非置換であるか、又は１つ以上のハロゲン原子によってさらに置換されている。

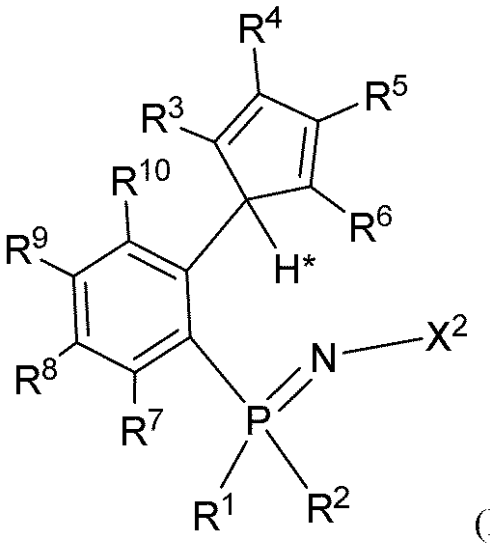
【０４０７】

いくつかの実施形態では、Ｒ３、Ｒ４、Ｒ５及びＲ６は、各々水素である。

【０４０８】

本開示の実施形態では、式ＩＩ－Ｌのプレメタル化化合物は、式ＩＩＩ－Ｌ：

【化１２１】



(III-L)

で表されるプレメタル化化合物であるか、又はシクロペンタジエニル環内の水素Ｈ＊の移

動によって得られる式ＩＩＩ－Ｌの二重結合異性体であり；
式中、R^1、R^2、R^3、R^4、R^5、R^6、及びX^2は、上記式Ｉ－Ｌ及び式ＩＩ－Ｌで定義した通りであり；
式中、R^7、R^8、R^9及びR^{10}は、各々独立して、
ハロゲン；
水素；
C_{1-30}ヒドロカルビル基（このヒドロカルビル基は、非置換であるか、又はハロゲン原子、C_{1-20}アルキル基、C_{1-20}アルコキシ基、C_{7-20}アルキルアリール基、C_{7-20}アリールアルキル基、C_{6-20}アリール基、C_{6-20}アリールオキシ基、C_{7-20}アルキルアリールオキシ基、及びC_{7-20}アリールアルキルオキシ基からなる群から選択される１つ以上の置換基によってさらに置換されている）；
ヘテロ原子含有C_{1-30}ヒドロカルビル基（このヘテロ原子含有ヒドロカルビル基は、非置換であるか、又はハロゲン原子、C_{1-20}アルキル基、C_{1-20}アルコキシ基、C_{7-20}アルキルアリール基、C_{7-20}アリールアルキル基、C_{6-20}アリール基、C_{6-20}アリールオキシ基、C_{7-20}アルキルアリールオキシ基、及びC_{7-20}アリールアルキルオキシ基からなる群から選択される１つ以上の置換基によってさらに置換されている）；
オキシ基、－ＯＲ’；
アミド基、－NR'_2；
ホスフィド基、－PR'_2；
チオラート基、－ＳＲ’；
式－Ｓｉ（R^a）$_3$のシリル基；
式－Ｇｅ（R^a）$_3$のゲルマニル基；
からなる群から選択され；
ここで、R^7、R^8、R^9及びR^{10}の２つの隣接する基は、任意に結合して環状ヒドロカルビル基又は環状ヘテロ原子含有ヒドロカルビル基を形成してもよく、環状ヒドロカルビル基又は環状ヘテロ原子含有ヒドロカルビル基は、非置換であるか、又はハロゲン原子、C_{1-20}アルキル基、C_{1-20}アルコキシ基、C_{7-20}アルキルアリール基、C_{7-20}アリールアルキル基、C_{6-20}アリール基、C_{6-20}アリールオキシ基、C_{7-20}アルキルアリールオキシ基、C_{7-20}アリールアルキルオキシ基、式－NR'_2のアミド基、式－PR'_2のホスフィド基、式－ＳＲ’のチオラート基、式－Ｓｉ（R^a）$_3$のシリル基、及び式－Ｇｅ（R^a）$_3$のゲルマニル基からなる群から選択される１つ以上の置換基によってさらに置換されており；
ここで、各Ｒ’は、独立して、水素、C_{1-20}アルキル基、及びC_{6-20}アリール基からなる群から選択され；
ここで、各R^aは、独立して、水素、C_{1-8}アルキル基、C_{1-8}アルコキシ基、C_{6-20}アリールオキシ基及びC_{6-20}アリール基からなる群から選択される、プレメタル化化合物である。
【０４０９】
いくつかの実施形態では、R^7、R^8、R^9及びR^{10}は、各々独立して、ハロゲン；水素；C_{1-30}ヒドロカルビル基（このヒドロカルビル基は、非置換であるか、又はハロゲン原子、C_{1-20}アルキル基、C_{1-20}アルコキシ基、C_{7-20}アルキルアリール基、C_{7-20}アリールアルキル基、C_{6-20}アリール基、C_{6-20}アリールオキシ基、C_{7-20}アルキルアリールオキシ基、及びC_{7-20}アリールアルキルオキシ基からなる群から選択される１つ以上の置換基によってさらに置換されている）；並びにヘテロ原子含有C_{1-30}ヒドロカルビル基（このヘテロ原子含有ヒドロカルビル基は、非置換であるか、又はハロゲン原子、C_{1-20}アルキル基、C_{1-20}アルコキシ基、C_{7-20}アルキルアリール基、C_{7-20}アリールアルキル基、C_{6-20}アリール基、C_{6-20}アリールオキシ基、C_{7-20}アルキルアリールオキシ基、及びC_{7-20}アリールアルキルオキシ基からなる群から選択される１つ以上の置換基によってさらに置換されている

）；からなる群から選択され；ここで、R^7、R^8、R^9及びR^{10}の２つの隣接する基は、任意に結合して環状ヒドロカルビル基又は環状ヘテロ原子含有ヒドロカルビル基を形成してもよく、環状ヒドロカルビル基又は環状ヘテロ原子含有ヒドロカルビル基は、非置換であるか、又はハロゲン原子、C_{1-20}アルキル基、C_{1-20}アルコキシ基、C_{7-20}アルキルアリール基、C_{7-20}アリールアルキル基、C_{6-20}アリール基、C_{6-20}アリールオキシ基、C_{7-20}アルキルアリールオキシ基、C_{7-20}アリールアルキルオキシ基、－NR'_2、アミド基、－PR'_2、ホスフィド基、－SR'、チオラート基、式－$Si(R^a)_3$のシリル基、及び式－$Ge(R^a)_3$のゲルマニル基からなる群から選択される１つ以上の置換基によってさらに置換されており；ここで、各Ｒ’は、独立して、水素、C_{1-20}アルキル基、及びC_{6-20}アリール基からなる群から選択され；ここで、各R^aは、独立して、水素、C_{1-8}アルキル基、C_{1-8}アルコキシ基、C_{6-20}アリールオキシ基及びC_{6-20}アリール基からなる群から選択される。

【０４１０】

いくつかの実施形態では、R^7、R^8、R^9及びR^{10}は、各々独立して、ハロゲン；水素；並びにC_{1-30}ヒドロカルビル基（このヒドロカルビル基は、非置換であるか、又はハロゲン原子、C_{1-20}アルキル基、C_{1-20}アルコキシ基、C_{7-20}アルキルアリール基、C_{7-20}アリールアルキル基、C_{6-20}アリール基、C_{6-20}アリールオキシ基、C_{7-20}アルキルアリールオキシ基、及びC_{7-20}アリールアルキルオキシ基からなる群から選択される１つ以上の置換基によってさらに置換されている）；からなる群から選択され；ここで、R^7、R^8、R^9及びR^{10}の２つの隣接する基は、任意に結合して環状ヒドロカルビル基を形成してもよく、環状ヒドロカルビル基は、非置換であるか、又はハロゲン原子、C_{1-20}アルキル基、C_{1-20}アルコキシ基、C_{7-20}アルキルアリール基、C_{7-20}アリールアルキル基、C_{6-20}アリール基、C_{6-20}アリールオキシ基、C_{7-20}アルキルアリールオキシ基、C_{7-20}アリールアルキルオキシ基、－NR'_2、アミド基、－PR'_2、ホスフィド基、－SR'、チオラート基、式－$Si(R^a)_3$のシリル基、及び式－$Ge(R^a)_3$のゲルマニル基からなる群から選択される１つ以上の置換基によってさらに置換されており；ここで、各Ｒ’は、独立して、水素、C_{1-20}アルキル基、及びC_{6-20}アリール基からなる群から選択され；ここで、各R^aは、独立して、水素、C_{1-8}アルキル基、C_{1-8}アルコキシ基、C_{6-20}アリールオキシ基及びC_{6-20}アリール基からなる群から選択される。

【０４１１】

いくつかの実施形態では、R^7、R^8、R^9及びR^{10}は、各々独立して、ハロゲン；水素；並びにヘテロ原子含有C_{1-30}ヒドロカルビル基（このヘテロ原子含有ヒドロカルビル基は、非置換であるか、又はハロゲン原子、C_{1-20}アルキル基、C_{1-20}アルコキシ基、C_{7-20}アルキルアリール基、C_{7-20}アリールアルキル基、C_{6-20}アリール基、C_{6-20}アリールオキシ基、C_{7-20}アルキルアリールオキシ基、及びC_{7-20}アリールアルキルオキシ基からなる群から選択される１つ以上の置換基によってさらに置換されている）；からなる群から選択され；ここで、R^7、R^8、R^9及びR^{10}の２つの隣接する基は、任意に結合して環状ヘテロ原子含有ヒドロカルビル基を形成してもよく、環状ヘテロ原子含有ヒドロカルビル基は、非置換であるか、又はハロゲン原子、C_{1-20}アルキル基、C_{1-20}アルコキシ基、C_{7-20}アルキルアリール基、C_{7-20}アリールアルキル基、C_{6-20}アリール基、C_{6-20}アリールオキシ基、C_{7-20}アルキルアリールオキシ基、C_{7-20}アリールアルキルオキシ基、－NR'_2、アミド基、－PR'_2、ホスフィド基、－SR'、チオラート基、式－$Si(R^a)_3$のシリル基、及び式－$Ge(R^a)_3$のゲルマニル基からなる群から選択される１つ以上の置換基によってさらに置換されており；ここで、各Ｒ’は、独立して、水素、C_{1-20}アルキル基、及びC_{6-20}アリール基からなる群から選択され；ここで、各R^aは、独立して、水素、C_{1-8}アルキル基、C_{1-8}アルコキシ基、C_{6-20}アリールオキシ基及びC_{6-20}アリール基からなる群から選択される。

【０４１２】

いくつかの実施形態では、R^7、R^8、R^9及びR^{10}は、各々独立して、ハロゲン、水素、C_{1-30}アルキル基、C_{1-30}アルコキシ基、C_{7-30}アルキルアリール基、C_{7-30}アリールアルキル基、C_{6-30}アリール基、C_{6-30}アリールオキシド基、C_{7-30}アルキルアリールオキシ基、及びC_{7-30}アリールアルキルオキシ基からなる群から選択される。

【０４１３】

いくつかの実施形態では、R^7、R^8、R^9及びR^{10}は、各々独立して、ハロゲン、水素、C_{1-20}アルキル基、C_{1-20}アルコキシ基、C_{7-20}アルキルアリール基、C_{7-20}アリールアルキル基、C_{6-20}アリール基、C_{6-20}アリールオキシド基、C_{7-20}アルキルアリールオキシ基、及びC_{7-20}アリールアルキルオキシ基からなる群から選択される。

【０４１４】

いくつかの実施形態では、R^7、R^8、R^9及びR^{10}は、各々独立して、ハロゲン、水素、及びC_{1-30}ヒドロカルビル基からなる群から選択され、このヒドロカルビル基は、非置換であるか、又は１つ以上のハロゲン原子によってさらに置換されている。

【０４１５】

いくつかの実施形態では、R^7、R^8、R^9及びR^{10}は、各々独立して、ハロゲン、水素、及びC_{1-30}ヘテロ原子含有ヒドロカルビル基からなる群から選択され、このヘテロ原子含有ヒドロカルビル基は、非置換であるか、又は１つ以上のハロゲン原子によってさらに置換されている。

【０４１６】

いくつかの実施形態では、R^7、R^8、R^9及びR^{10}は、各々独立して、水素及びC_{1-30}ヒドロカルビル基からなる群から選択され、このヒドロカルビル基は、非置換であるか、又は１つ以上のハロゲン原子によってさらに置換されている。

【０４１７】

いくつかの実施形態では、R^7、R^8、R^9及びR^{10}は、各々独立して、水素及びC_{1-30}ヘテロ原子含有ヒドロカルビル基からなる群から選択され、このヘテロ原子含有ヒドロカルビル基は、非置換であるか、又は１つ以上のハロゲン原子によってさらに置換されている。

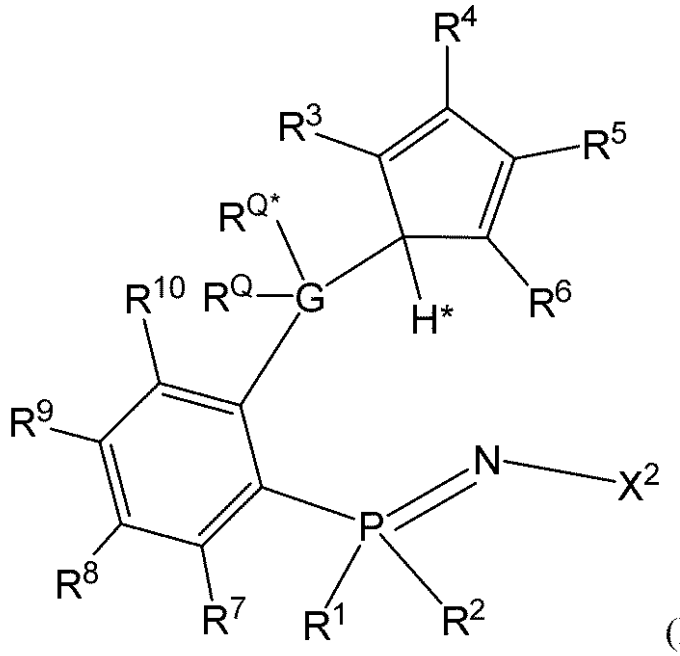
【０４１８】

いくつかの実施形態では、R^7、R^8、R^9及びR^{10}は、各々水素である。

【０４１９】

本開示の実施形態では、式ＩＩ－Ｌのプレメタル化化合物は、式ＩＶ－Ｌ：

【化１２２】



(IV-L)

で表されるプレメタル化化合物であるか、又はシクロペンタジエニル環内の水素Ｈ＊の移動によって得られる式ＩＶ－Ｌの二重結合異性体であり；

式中、R^1、R^2、R^3、R^4、R^5、R^6、及びX^2は、上記式Ｉ－Ｌ及び式ＩＩ－Ｌで定義した通りであり；

式中、Ｇは、第１４族元素であり；

式中、R^Q及びR^{Q*}は、各々独立して、

ハロゲン；

水素；

C_{1-30}ヒドロカルビル基（このヒドロカルビル基は、非置換であるか、又はハロゲン原子、C_{1-20}アルキル基、C_{1-20}アルコキシ基、C_{7-20}アルキルアリール基、C_{7-20}アリールアルキル基、C_{6-20}アリール基、C_{6-20}アリールオキシ基、C_{7-20}アルキルアリールオキシ基、及びC_{7-20}アリールアルキルオキシ基からなる群から選択される１つ以上の置換基によってさらに置換されている）；

ヘテロ原子含有C_{1-30}ヒドロカルビル基（このヘテロ原子含有ヒドロカルビル基は、非置換であるか、又はハロゲン原子、C_{1-20}アルキル基、C_{1-20}アルコキシ基、C_{7-20}アルキルアリール基、C_{7-20}アリールアルキル基、C_{6-20}アリール基、C_{6-20}アリールオキシ基、C_{7-20}アルキルアリールオキシ基、及びC_{7-20}アリールアルキルオキシ基からなる群から選択される１つ以上の置換基によってさらに置換されている）；

ここで、R^Q及びR^{Q*}の基は、任意に結合して環状ヒドロカルビル基又は環状ヘテロ原子含有ヒドロカルビル基を形成してもよく、環状ヒドロカルビル基又は環状ヘテロ原子含有ヒドロカルビル基は、非置換であるか、又はハロゲン原子、C_{1-20}アルキル基、C_{1-20}アルコキシ基、C_{7-20}アルキルアリール基、C_{7-20}アリールアルキル基、C_{6-20}アリール基、C_{6-20}アリールオキシ基、C_{7-20}アルキルアリールオキシ基、C_{7-20}アリールアルキルオキシ基、式－ＮＲ’$_2$のアミド基、式－ＰＲ’$_2$のホスフィド基、式－ＳＲ’のチオラート基、式－Ｓｉ（R^a）$_3$のシリル基、及び式－Ｇｅ（R^a）$_3$のゲルマニル基からなる群から選択される１つ以上の置換基によってさらに置換されており；

式中、R^7、R^8、R^9及びR^{10}は、各々独立して、

ハロゲン；
水素；
C_{1-30}ヒドロカルビル基（このヒドロカルビル基は、非置換であるか、又はハロゲン原子、C_{1-20}アルキル基、C_{1-20}アルコキシ基、C_{7-20}アルキルアリール基、C_{7-20}アリールアルキル基、C_{6-20}アリール基、C_{6-20}アリールオキシ基、C_{7-20}アルキルアリールオキシ基、及びC_{7-20}アリールアルキルオキシ基からなる群から選択される１つ以上の置換基によってさらに置換されている）；
ヘテロ原子含有C_{1-30}ヒドロカルビル基（このヘテロ原子含有ヒドロカルビル基は、非置換であるか、又はハロゲン原子、C_{1-20}アルキル基、C_{1-20}アルコキシ基、C_{7-20}アルキルアリール基、C_{7-20}アリールアルキル基、C_{6-20}アリール基、C_{6-20}アリールオキシ基、C_{7-20}アルキルアリールオキシ基、及びC_{7-20}アリールアルキルオキシ基からなる群から選択される１つ以上の置換基によってさらに置換されている）；
オキシ基、－ＯＲ’；
アミド基、－ＮＲ’$_2$；
ホスフィド基、－ＰＲ’$_2$；
チオラート基、－ＳＲ’；
式－Ｓｉ（R^a）$_3$のシリル基；
式－Ｇｅ（R^a）$_3$のゲルマニル基；
からなる群から選択され；
ここで、R^7、R^8、R^9及びR^{10}の２つの隣接する基は、任意に結合して環状ヒドロカルビル基又は環状ヘテロ原子含有ヒドロカルビル基を形成してもよく、環状ヒドロカルビル基又は環状ヘテロ原子含有ヒドロカルビル基は、非置換であるか、又はハロゲン原子、C_{1-20}アルキル基、C_{1-20}アルコキシ基、C_{7-20}アルキルアリール基、C_{7-20}アリールアルキル基、C_{6-20}アリール基、C_{6-20}アリールオキシ基、C_{7-20}アルキルアリールオキシ基、C_{7-20}アリールアルキルオキシ基、式－ＮＲ’$_2$のアミド基、式－ＰＲ’$_2$のホスフィド基、式－ＳＲ’のチオラート基、式－Ｓｉ（R^a）$_3$のシリル基、及び式－Ｇｅ（R^a）$_3$のゲルマニル基からなる群から選択される１つ以上の置換基によってさらに置換されており；
ここで、各Ｒ’は、独立して、水素、C_{1-20}アルキル基、及びC_{6-20}アリール基からなる群から選択され；
ここで、各R^aは、独立して、水素、C_{1-8}アルキル基、C_{1-8}アルコキシ基、C_{6-20}アリールオキシ基及びC_{6-20}アリール基からなる群から選択される、プレメタル化化合物である。

【０４２０】

いくつかの実施形態では、Ｇは、炭素Ｃ、又はシリコンＳｉ、又はゲルマニウムＧｅである。
いくつかの実施形態では、Ｇは、炭素Ｃ、又はシリコンＳｉである。
いくつかの実施形態では、Ｇは、炭素Ｃである。
いくつかの実施形態では、Ｇは、シリコンＳｉである。
いくつかの実施形態では、Ｇは、ゲルマニウムＧｅである。

【０４２１】

いくつかの実施形態では、R^Q及びR^{Q*}は、各々独立して、ハロゲン、水素、C_{1-30}アルキル基、C_{1-30}アルコキシ基、C_{7-30}アルキルアリール基、C_{7-30}アリールアルキル基、C_{6-30}アリール基、C_{6-30}アリールオキシド基、C_{7-30}アルキルアリールオキシ基、及びC_{7-30}アリールアルキルオキシ基からなる群から選択される。

【０４２２】

いくつかの実施形態では、R^Q及びR^{Q*}は、各々独立して、ハロゲン、水素、C_{1-20}アルキル基、C_{1-20}アルコキシ基、C_{7-20}アルキルアリール基、C_{7-20}ア

リールアルキル基、C_{6-20}アリール基、C_{6-20}アリールオキシド基、C_{7-20}アルキルアリールオキシ基、及びC_{7-230}アリールアルキルオキシ基からなる群から選択される。

【０４２３】

実施形態では、、R^{Q}及び$R^{Q}*$は、各々独立して、水素、C_{1-20}アルキル基及びC_{6-20}アリール基からなる群から選択される。

【０４２４】

実施形態では、各R^{Q}及び$R^{Q}*$は、各々独立して、C_{1-8}アルキル基である。

実施形態では、各R^{Q}及び$R^{Q}*$は、各々独立して、C_{6-20}アリール基である。

実施形態では、R^{Q}は水素であり、$R^{Q}*$はC_{1-8}アルキル基である。

実施形態では、R^{Q}は水素であり、$R^{Q}*$はC_{6-20}アリール基である。

実施形態では、R^{Q}は水素であり、$R^{Q}*$はメチル基である。

実施形態では、R^{Q}は水素であり、$R^{Q}*$はフェニル基である。

実施形態では、R^{Q}及び$R^{Q}*$は、各々水素である。

【０４２５】

いくつかの実施形態では、R^{7}、R^{8}、R^{9}及びR^{10}は、各々独立して、ハロゲン；水素；C_{1-30}ヒドロカルビル基（このヒドロカルビル基は、非置換であるか、又はハロゲン原子、C_{1-20}アルキル基、C_{1-20}アルコキシ基、C_{7-20}アルキルアリール基、C_{7-20}アリールアルキル基、C_{6-20}アリール基、C_{6-20}アリールオキシ基、C_{7-20}アルキルアリールオキシ基、及びC_{7-20}アリールアルキルオキシ基からなる群から選択される１つ以上の置換基によってさらに置換されている）；並びにヘテロ原子含有C_{1-30}ヒドロカルビル基（このヘテロ原子含有ヒドロカルビル基は、非置換であるか、又はハロゲン原子、C_{1-20}アルキル基、C_{1-20}アルコキシ基、C_{7-20}アルキルアリール基、C_{7-20}アリールアルキル基、C_{6-20}アリール基、C_{6-20}アリールオキシ基、C_{7-20}アルキルアリールオキシ基、及びC_{7-20}アリールアルキルオキシ基からなる群から選択される１つ以上の置換基によってさらに置換されている）；からなる群から選択され；ここで、R^{7}、R^{8}、R^{9}及びR^{10}の２つの隣接する基は、任意に結合して環状ヒドロカルビル基又は環状ヘテロ原子含有ヒドロカルビル基を形成してもよく、環状ヒドロカルビル基又は環状ヘテロ原子含有ヒドロカルビル基は、非置換であるか、又はハロゲン原子、C_{1-20}アルキル基、C_{1-20}アルコキシ基、C_{7-20}アルキルアリール基、C_{7-20}アリールアルキル基、C_{6-20}アリール基、C_{6-20}アリールオキシ基、C_{7-20}アルキルアリールオキシ基、C_{7-20}アリールアルキルオキシ基、－NR'_2、アミド基、－PR'_2、ホスフィド基、－SR'、チオラート基、式－$Si(R^{a})_3$のシリル基、及び式－$Ge(R^{a})_3$のゲルマニル基からなる群から選択される１つ以上の置換基によってさらに置換されており；ここで、各R'は、独立して、水素、C_{1-20}アルキル基、及びC_{6-20}アリール基からなる群から選択され；ここで、各R^{a}は、独立して、水素、C_{1-8}アルキル基、C_{1-8}アルコキシ基、C_{6-20}アリールオキシ基及びC_{6-20}アリール基からなる群から選択される。

【０４２６】

いくつかの実施形態では、R^{7}、R^{8}、R^{9}及びR^{10}は、各々独立して、ハロゲン；水素；並びにC_{1-30}ヒドロカルビル基（このヒドロカルビル基は、非置換であるか、又はハロゲン原子、C_{1-20}アルキル基、C_{1-20}アルコキシ基、C_{7-20}アルキルアリール基、C_{7-20}アリールアルキル基、C_{6-20}アリール基、C_{6-20}アリールオキシ基、C_{7-20}アルキルアリールオキシ基、及びC_{7-20}アリールアルキルオキシ基からなる群から選択される１つ以上の置換基によってさらに置換されている）；からなる群から選択され；ここで、R^{7}、R^{8}、R^{9}及びR^{10}の２つの隣接する基は、任意に結合して環状ヒドロカルビル基を形成してもよく、環状ヒドロカルビル基は、非置換であるか、又はハロゲン原子、C_{1-20}アルキル基、C_{1-20}アルコキシ基、C_{7-20}アルキルアリール基、C_{7-20}アリールアルキル基、C_{6-20}アリール基、C_{6-20}アリールオキシ基、C_{7-20}アルキルアリールオキシ基、C_{7-20}アリールアルキルオキ

シ基、－ＮＲ’$_2$、アミド基、－ＰＲ’$_2$、ホスフィド基、－ＳＲ’、チオラート基、式－Ｓｉ（Ｒ^a）$_3$のシリル基、及び式－Ｇｅ（Ｒ^a）$_3$のゲルマニル基からなる群から選択される１つ以上の置換基によってさらに置換されており；ここで、各Ｒ’は、独立して、水素、Ｃ$_{1-20}$アルキル基、及びＣ$_{6-20}$アリール基からなる群から選択され；ここで、各Ｒ^{a}は、独立して、水素、Ｃ$_{1-8}$アルキル基、Ｃ$_{1-8}$アルコキシ基、Ｃ$_{6-20}$アリールオキシ基及びＣ$_{6-20}$アリール基からなる群から選択される。

【０４２７】

いくつかの実施形態では、Ｒ^7、Ｒ^8、Ｒ^{9}及びＲ^{10}は、各々独立して、ハロゲン；水素；並びにヘテロ原子含有Ｃ$_{1-30}$ヒドロカルビル基（このヘテロ原子含有ヒドロカルビル基は、非置換であるか、又はハロゲン原子、Ｃ$_{1-20}$アルキル基、Ｃ$_{1-20}$アルコキシ基、Ｃ$_{7-20}$アルキルアリール基、Ｃ$_{7-20}$アリールアルキル基、Ｃ$_{6-20}$アリール基、Ｃ$_{6-20}$アリールオキシ基、Ｃ$_{7-20}$アルキルアリールオキシ基、及びＣ$_{7-20}$アリールアルキルオキシ基からなる群から選択される１つ以上の置換基によってさらに置換されている）；からなる群から選択され；ここで、Ｒ^7、Ｒ^8、Ｒ^{9}及びＲ^{10}の２つの隣接する基は、任意に結合して環状ヘテロ原子含有ヒドロカルビル基を形成してもよく、環状ヘテロ原子含有ヒドロカルビル基は、非置換であるか、又はハロゲン原子、Ｃ$_{1-20}$アルキル基、Ｃ$_{1-20}$アルコキシ基、Ｃ$_{7-20}$アルキルアリール基、Ｃ$_{7-20}$アリールアルキル基、Ｃ$_{6-20}$アリール基、Ｃ$_{6-20}$アリールオキシ基、Ｃ$_{7-20}$アルキルアリールオキシ基、Ｃ$_{7-20}$アリールアルキルオキシ基、－ＮＲ’$_2$、アミド基、－ＰＲ’$_2$、ホスフィド基、－ＳＲ’、チオラート基、式－Ｓｉ（Ｒ^a）$_3$のシリル基、及び式－Ｇｅ（Ｒ^a）$_3$のゲルマニル基からなる群から選択される１つ以上の置換基によってさらに置換されており；ここで、各Ｒ’は、独立して、水素、Ｃ$_{1-20}$アルキル基、及びＣ$_{6-20}$アリール基からなる群から選択され；ここで、各Ｒ^{a}は、独立して、水素、Ｃ$_{1-8}$アルキル基、Ｃ$_{1-8}$アルコキシ基、Ｃ$_{6-20}$アリールオキシ基及びＣ$_{6-20}$アリール基からなる群から選択される。

【０４２８】

いくつかの実施形態では、Ｒ^7、Ｒ^8、Ｒ^{9}及びＲ^{10}は、各々独立して、ハロゲン、水素、Ｃ$_{1-30}$アルキル基、Ｃ$_{1-30}$アルコキシ基、Ｃ$_{7-30}$アルキルアリール基、Ｃ$_{7-30}$アリールアルキル基、Ｃ$_{6-30}$アリール基、Ｃ$_{6-30}$アリールオキシド基、Ｃ$_{7-30}$アルキルアリールオキシ基、及びＣ$_{7-30}$アリールアルキルオキシ基からなる群から選択される。

【０４２９】

いくつかの実施形態では、Ｒ^7、Ｒ^8、Ｒ^{9}及びＲ^{10}は、各々独立して、ハロゲン、水素、Ｃ$_{1-20}$アルキル基、Ｃ$_{1-20}$アルコキシ基、Ｃ$_{7-20}$アルキルアリール基、Ｃ$_{7-20}$アリールアルキル基、Ｃ$_{6-20}$アリール基、Ｃ$_{6-20}$アリールオキシド基、Ｃ$_{7-20}$アルキルアリールオキシ基、及びＣ$_{7-20}$アリールアルキルオキシ基からなる群から選択される。

【０４３０】

いくつかの実施形態では、Ｒ^7、Ｒ^8、Ｒ^{9}及びＲ^{10}は、各々独立して、ハロゲン、水素、及びＣ$_{1-30}$ヒドロカルビル基からなる群から選択され、このヒドロカルビル基は、非置換であるか、又は１つ以上のハロゲン原子によってさらに置換されている。

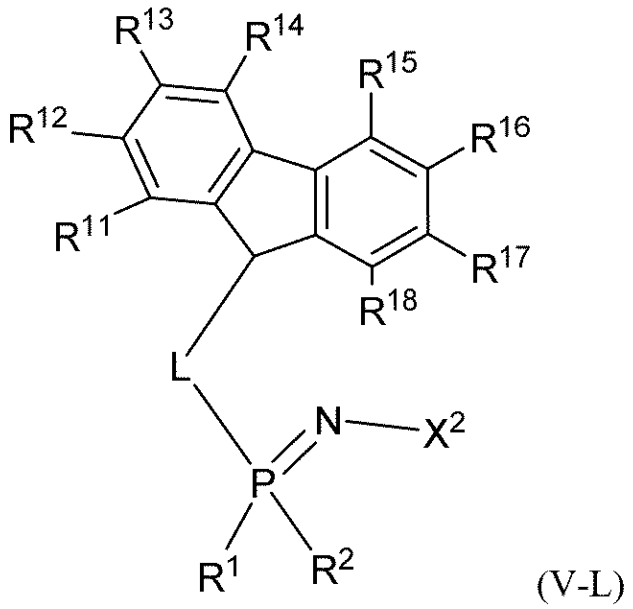
【０４３１】

いくつかの実施形態では、Ｒ^7、Ｒ^8、Ｒ^{9}及びＲ^{10}は、各々独立して、ハロゲン、水素、及びＣ$_{1-30}$ヘテロ原子含有ヒドロカルビル基からなる群から選択され、このヘテロ原子含有ヒドロカルビル基は、非置換であるか、又は１つ以上のハロゲン原子によってさらに置換されている。

【０４３２】

いくつかの実施形態では、Ｒ^7、Ｒ^8、Ｒ^{9}及びＲ^{10}は、各々独立して、水素及びＣ$_{1-30}$ヒドロカルビル基からなる群から選択され、このヒドロカルビル基は、非置換であるか、又は１つ以上のハロゲン原子によってさらに置換されている。

【０４３３】
いくつかの実施形態では、Ｒ^{7}、Ｒ^{8}、Ｒ^{9}及びＲ^{10}は、各々独立して、水素及びＣ$_{1-30}$ヘテロ原子含有ヒドロカルビル基からなる群から選択され、このヘテロ原子含有ヒドロカルビル基は、非置換であるか、又は１つ以上のハロゲン原子によってさらに置換されている。
【０４３４】
いくつかの実施形態では、Ｒ^{7}、Ｒ^{8}、Ｒ^{9}及びＲ^{10}は、各々水素である。
【０４３５】
本開示の実施形態では、式Ｉ－Ｌのプレメタル化化合物は、式Ｖ－Ｌ：
【化１２３】



(V-L)

で表されるプレメタル化化合物であり、
式中、Ｒ^{1}、Ｒ^{2}、Ｌ及びＸ^{2}は、上記式Ｉ－Ｌで定義した通りであり；
式中、Ｒ^{11}、Ｒ^{12}、Ｒ^{13}、Ｒ^{14}、Ｒ^{15}、Ｒ^{16}、Ｒ^{17}、Ｒ^{18}は、各々独立して、
ハロゲン；
水素；
Ｃ$_{1-30}$ヒドロカルビル基（このヒドロカルビル基は、非置換であるか、又はハロゲン原子、Ｃ$_{1-20}$アルキル基、Ｃ$_{1-20}$アルコキシ基、Ｃ$_{7-20}$アルキルアリール基、Ｃ$_{7-20}$アリールアルキル基、Ｃ$_{6-20}$アリール基、Ｃ$_{6-20}$アリールオキシ基、Ｃ$_{7-20}$アルキルアリールオキシ基、及びＣ$_{7-20}$アリールアルキルオキシ基からなる群から選択される１つ以上の置換基によってさらに置換されている）；
ヘテロ原子含有Ｃ$_{1-30}$ヒドロカルビル基（このヘテロ原子含有ヒドロカルビル基は、非置換であるか、又はハロゲン原子、Ｃ$_{1-20}$アルキル基、Ｃ$_{1-20}$アルコキシ基、Ｃ$_{7-20}$アルキルアリール基、Ｃ$_{7-20}$アリールアルキル基、Ｃ$_{6-20}$アリール基、Ｃ$_{6-20}$アリールオキシ基、Ｃ$_{7-20}$アルキルアリールオキシ基、及びＣ$_{7-20}$アリールアルキルオキシ基からなる群から選択される１つ以上の置換基によってさらに置換されている）；
オキシ基、－ＯＲ’；
アミド基、－ＮＲ’$_{2}$；
ホスフィド基、－ＰＲ’$_{2}$；
チオラート基、－ＳＲ’；

式－Ｓｉ（Ｒａ）３のシリル基；
式－Ｇｅ（Ｒａ）３のゲルマニル基；
からなる群から選択され；
ここで、Ｒ１１、Ｒ１２、Ｒ１３、Ｒ１４、Ｒ１５、Ｒ１６、Ｒ１７、Ｒ１８の２つの隣接する基は、任意に結合して環状ヒドロカルビル基又は環状ヘテロ原子含有ヒドロカルビル基を形成してもよく、環状ヒドロカルビル基又は環状ヘテロ原子含有ヒドロカルビル基は、非置換であるか、又はハロゲン原子、Ｃ１－２０アルキル基、Ｃ１－２０アルコキシ基、Ｃ７－２０アルキルアリール基、Ｃ７－２０アリールアルキル基、Ｃ６－２０アリール基、Ｃ６－２０アリールオキシ基、Ｃ７－２０アルキルアリールオキシ基、Ｃ７－２０アリールアルキルオキシ基、式－ＮＲ’２のアミド基、式－ＰＲ’２のホスフィド基、式－ＳＲ’のチオラート基、式－Ｓｉ（Ｒａ）３のシリル基、及び式－Ｇｅ（Ｒａ）３のゲルマニル基からなる群から選択される１つ以上の置換基によってさらに置換されており；
ここで、各Ｒ’は、独立して、水素、Ｃ1－２０アルキル基、及びＣ６－２０アリール基からなる群から選択され；
ここで、各Ｒａは、独立して、水素、Ｃ１－８アルキル基、Ｃ１－８アルコキシ基、Ｃ６－２０アリールオキシ基及びＣ６－２０アリール基からなる群から選択される、プレメタル化化合物である。

【０４３６】

いくつかの実施形態では、Ｒ１１、Ｒ１２、Ｒ１３、Ｒ１４、Ｒ１５、Ｒ１６、Ｒ１７、Ｒ１８は、各々独立して、ハロゲン；水素；Ｃ１－３０ヒドロカルビル基（このヒドロカルビル基は、非置換であるか、又はハロゲン原子、Ｃ１－２０アルキル基、Ｃ１－２０アルコキシ基、Ｃ７－２０アルキルアリール基、Ｃ７－２０アリールアルキル基、Ｃ６－２０アリール基、Ｃ６－２０アリールオキシ基、Ｃ７－２０アルキルアリールオキシ基、及びＣ７－２０アリールアルキルオキシ基からなる群から選択される１つ以上の置換基によってさらに置換されている）；並びにヘテロ原子含有Ｃ１－３０ヒドロカルビル基（このヘテロ原子含有ヒドロカルビル基は、非置換であるか、又はハロゲン原子、Ｃ１－２０アルキル基、Ｃ１－２０アルコキシ基、Ｃ７－２０アルキルアリール基、Ｃ７－２０アリールアルキル基、Ｃ６－２０アリール基、Ｃ６－２０アリールオキシ基、Ｃ７－２０アルキルアリールオキシ基、及びＣ７－２０アリールアルキルオキシ基からなる群から選択される１つ以上の置換基によってさらに置換されている）；からなる群から選択され；ここで、Ｒ１１、Ｒ１２、Ｒ１３、Ｒ１４、Ｒ１５、Ｒ１６、Ｒ１７、Ｒ１８の２つの隣接する基は、任意に結合して環状ヒドロカルビル基又は環状ヘテロ原子含有ヒドロカルビル基を形成してもよく、環状ヒドロカルビル基又は環状ヘテロ原子含有ヒドロカルビル基は、非置換であるか、又はハロゲン原子、Ｃ１－２０アルキル基、Ｃ１－２０アルコキシ基、Ｃ７－２０アルキルアリール基、Ｃ７－２０アリールアルキル基、Ｃ６－２０アリール基、Ｃ６－２０アリールオキシ基、Ｃ７－２０アルキルアリールオキシ基、Ｃ７－２０アリールアルキルオキシ基、－ＮＲ’２、アミド基、－ＰＲ’２、ホスフィド基、－ＳＲ’、チオラート基、式－Ｓｉ（Ｒａ）３のシリル基、及び式－Ｇｅ（Ｒａ）３のゲルマニル基からなる群から選択される１つ以上の置換基によってさらに置換されており；ここで、各Ｒ’は、独立して、水素、Ｃ１－２０アルキル基、及びＣ６－２０アリール基からなる群から選択され；ここで、各Ｒａは、独立して、水素、Ｃ１－８アルキル基、Ｃ１－８アルコキシ基、Ｃ６－２０アリールオキシ基及びＣ６－２０アリール基からなる群から選択される。

【０４３７】

いくつかの実施形態では、Ｒ１１、Ｒ１２、Ｒ１３、Ｒ１４、Ｒ１５、Ｒ１６、Ｒ１７、Ｒ１８は、各々独立して、ハロゲン；水素；並びにＣ１－３０ヒドロカルビル基（このヒドロカルビル基は、非置換であるか、又はハロゲン原子、Ｃ１－２０アルキル基、Ｃ１－２０アルコキシ基、Ｃ７－２０アルキルアリール基、Ｃ７－２０アリールアルキル基、Ｃ６－２０アリール基、Ｃ６－２０アリールオキシ基、Ｃ７－２０アルキルアリールオキシ基、及びＣ７－２０アリールアルキルオキシ基からなる群から選択される１つ以上の置換基によってさらに置換されている）；からなる群から選択され；ここで、Ｒ１１、Ｒ１２、Ｒ

R^{13}、R^{14}、R^{15}、R^{16}、R^{17}、R^{18}の２つの隣接する基は、任意に結合して環状ヒドロカルビル基を形成してもよく、環状ヒドロカルビル基は、非置換であるか、又はハロゲン原子、C_{1-20}アルキル基、C_{1-20}アルコキシ基、C_{7-20}アルキルアリール基、C_{7-20}アリールアルキル基、C_{6-20}アリール基、C_{6-20}アリールオキシ基、C_{7-20}アルキルアリールオキシ基、C_{7-20}アリールアルキルオキシ基、－NR'_2、アミド基、－PR'_2、ホスフィド基、－SR'、チオラート基、式－$Si(R^a)_3$のシリル基、及び式－$Ge(R^a)_3$のゲルマニル基からなる群から選択される１つ以上の置換基によってさらに置換されており；ここで、各R'は、独立して、水素、C_{1-20}アルキル基、及びC_{6-20}アリール基からなる群から選択され；ここで、各R^aは、独立して、水素、C_{1-8}アルキル基、C_{1-8}アルコキシ基、C_{6-20}アリールオキシ基及びC_{6-20}アリール基からなる群から選択される。

【０４３８】

いくつかの実施形態では、R^{11}、R^{12}、R^{13}、R^{14}、R^{15}、R^{16}、R^{17}、R^{18}は、各々独立して、ハロゲン；水素；並びにヘテロ原子含有C_{1-30}ヒドロカルビル基（このヘテロ原子含有ヒドロカルビル基は、非置換であるか、又はハロゲン原子、C_{1-20}アルキル基、C_{1-20}アルコキシ基、C_{7-20}アルキルアリール基、C_{7-20}アリールアルキル基、C_{6-20}アリール基、C_{6-20}アリールオキシ基、C_{7-20}アルキルアリールオキシ基、及びC_{7-20}アリールアルキルオキシ基からなる群から選択される１つ以上の置換基によってさらに置換されている）；からなる群から選択され；ここで、R^{11}、R^{12}、R^{13}、R^{14}、R^{15}、R^{16}、R^{17}、R^{18}の２つの隣接する基は、任意に結合して環状ヘテロ原子含有ヒドロカルビル基を形成してもよく、環状ヘテロ原子含有ヒドロカルビル基は、非置換であるか、又はハロゲン原子、C_{1-20}アルキル基、C_{1-20}アルコキシ基、C_{7-20}アルキルアリール基、C_{7-20}アリールアルキル基、C_{6-20}アリール基、C_{6-20}アリールオキシ基、C_{7-20}アルキルアリールオキシ基、C_{7-20}アリールアルキルオキシ基、－NR'_2、アミド基、－PR'_2、ホスフィド基、－SR'、チオラート基、式－$Si(R^a)_3$のシリル基、及び式－$Ge(R^a)_3$のゲルマニル基からなる群から選択される１つ以上の置換基によってさらに置換されており；ここで、各R'は、独立して、水素、C_{1-20}アルキル基、及びC_{6-20}アリール基からなる群から選択され；ここで、各R^aは、独立して、水素、C_{1-8}アルキル基、C_{1-8}アルコキシ基、C_{6-20}アリールオキシ基及びC_{6-20}アリール基からなる群から選択される。

【０４３９】

いくつかの実施形態では、R^{11}、R^{12}、R^{13}、R^{14}、R^{15}、R^{16}、R^{17}、R^{18}は、各々独立して、ハロゲン、水素、C_{1-30}アルキル基、C_{1-30}アルコキシ基、C_{7-30}アルキルアリール基、C_{7-30}アリールアルキル基、C_{6-30}アリール基、C_{6-30}アリールオキシド基、C_{7-30}アルキルアリールオキシ基、及びC_{7-30}アリールアルキルオキシ基からなる群から選択される。

【０４４０】

いくつかの実施形態では、R^{11}、R^{12}、R^{13}、R^{14}、R^{15}、R^{16}、R^{17}、R^{18}は、各々独立して、ハロゲン、水素、C_{1-20}アルキル基、C_{1-20}アルコキシ基、C_{7-20}アルキルアリール基、C_{7-20}アリールアルキル基、C_{6-20}アリール基、C_{6-20}アリールオキシド基、C_{7-20}アルキルアリールオキシ基、及びC_{7-20}アリールアルキルオキシ基からなる群から選択される。

【０４４１】

いくつかの実施形態では、R^{11}、R^{12}、R^{13}、R^{14}、R^{15}、R^{16}、R^{17}、R^{18}は、各々独立して、ハロゲン、水素、及びC_{1-30}ヒドロカルビル基からなる群から選択され、このヒドロカルビル基は、非置換であるか、又は１つ以上のハロゲン原子によってさらに置換されている。

【０４４２】

いくつかの実施形態では、R^{11}、R^{12}、R^{13}、R^{14}、R^{15}、R^{16}、R^{17}、

R^{18}は、各々独立して、ハロゲン、水素、及びC_{1-30}ヘテロ原子含有ヒドロカルビル基からなる群から選択され、このヘテロ原子含有ヒドロカルビル基は、非置換であるか、又は１つ以上のハロゲン原子によってさらに置換されている。

【０４４３】

いくつかの実施形態では、R^{11}、R^{12}、R^{13}、R^{14}、R^{15}、R^{16}、R^{17}、R^{18}は、各々独立して、水素及びC_{1-30}ヒドロカルビル基からなる群から選択され、このヒドロカルビル基は、非置換であるか、又は１つ以上のハロゲン原子によってさらに置換されている。

【０４４４】

いくつかの実施形態では、R^{11}、R^{12}、R^{13}、R^{14}、R^{15}、R^{16}、R^{17}、R^{18}は、各々独立して、水素及びC_{1-30}ヘテロ原子含有ヒドロカルビル基からなる群から選択され、このヘテロ原子含有ヒドロカルビル基は、非置換であるか、又は１つ以上のハロゲン原子によってさらに置換されている。

【０４４５】

いくつかの実施形態では、R^{12}及びR^{17}は、各々独立して、非置換のC_{1-30}ヒドロカルビル基である。

いくつかの実施形態では、R^{13}及びR^{16}は、各々独立して、非置換のC_{1-30}ヒドロカルビル基である。

いくつかの実施形態では、R^{12}及びR^{17}は、C_{1-20}アルキル基である。

いくつかの実施形態では、R^{13}及びR^{16}は、C_{1-20}アルキル基である。

いくつかの実施形態では、R^{12}及びR^{17}は、C_{6-20}アリール基である。

いくつかの実施形態では、R^{13}及びR^{16}は、C_{6-20}アリール基である。

いくつかの実施形態では、R^{12}及びR^{17}は、各々ｔｅｒｔ－ブチル基である。

いくつかの実施形態では、R^{13}及びR^{16}は、各々ｔｅｒｔ－ブチル基である。

【０４４６】

いくつかの実施形態では、R^{11}、R^{12}、R^{13}、R^{14}、R^{15}、R^{16}、R^{17}及びR^{18}は、各々水素である。

いくつかの実施形態では、R^{11}、R^{13}、R^{14}、R^{15}、R^{16}及びR^{18}は、各々水素である。

いくつかの実施形態では、R^{11}、R^{12}、R^{14}、R^{15}、R^{17}及びR^{18}は、各々水素である。

いくつかの実施形態では、R^{11}、R^{13}、R^{14}、R^{15}、R^{16}及びR^{18}は、各々水素であり、R^{12}及びR^{17}は、各々独立して、非置換のC_{1-30}ヒドロカルビル基である。

いくつかの実施形態では、R^{11}、R^{13}、R^{14}、R^{15}、R^{16}及びR^{18}は、各々水素であり、R^{12}及びR^{17}は、各々ｔｅｒｔ－ブチル基である。

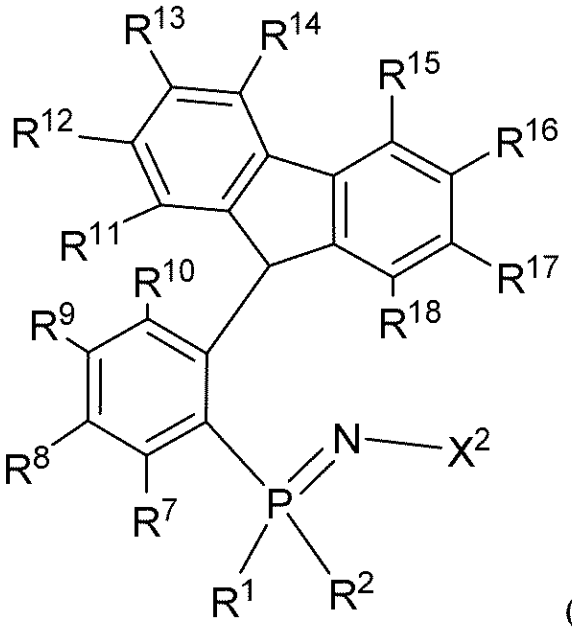
いくつかの実施形態では、R^{11}、R^{12}、R^{14}、R^{15}、R^{17}及びR^{18}は、各々水素であり、R^{13}及びR^{16}は、各々独立して、非置換のC_{1-30}ヒドロカルビル基である。

いくつかの実施形態では、R^{11}、R^{12}、R^{14}、R^{15}、R^{17}及びR^{18}は、各々水素であり、R^{13}及びR^{16}は、各々ｔｅｒｔ－ブチル基である。

【０４４７】

本開示の実施形態では、式Ｖ－Ｌのプレメタル化化合物は、式ＶＩ－Ｌ：

【化１２４】



(VI-L)

で表されるプレメタル化化合物であり、
式中、R^1、R^2、R^{11}、R^{12}、R^{13}、R^{14}、R^{15}、R^{16}、R^{17}、R^{18}、及びX^2は、上記式Ｉ－Ｌ及び式Ｖ－Ｌで定義した通りであり；
式中、R^7、R^8、R^9及びR^{10}は、各々独立して、
ハロゲン；
水素；
C_{1-30}ヒドロカルビル基（このヒドロカルビル基は、非置換であるか、又はハロゲン原子、C_{1-20}アルキル基、C_{1-20}アルコキシ基、C_{7-20}アルキルアリール基、C_{7-20}アリールアルキル基、C_{6-20}アリール基、C_{6-20}アリールオキシ基、C_{7-20}アルキルアリールオキシ基、及びC_{7-20}アリールアルキルオキシ基からなる群から選択される１つ以上の置換基によってさらに置換されている）；
ヘテロ原子含有C_{1-30}ヒドロカルビル基（このヘテロ原子含有ヒドロカルビル基は、非置換であるか、又はハロゲン原子、C_{1-20}アルキル基、C_{1-20}アルコキシ基、C_{7-20}アルキルアリール基、C_{7-20}アリールアルキル基、C_{6-20}アリール基、C_{6-20}アリールオキシ基、C_{7-20}アルキルアリールオキシ基、及びC_{7-20}アリールアルキルオキシ基からなる群から選択される１つ以上の置換基によってさらに置換されている）；
オキシ基、－ＯＲ’；
アミド基、－ＮＲ’$_2$；
ホスフィド基、－ＰＲ’$_2$；
チオラート基、－ＳＲ’；
式－Ｓｉ（R^a）$_3$のシリル基；
式－Ｇｅ（R^a）$_3$のゲルマニル基；
からなる群から選択され；
ここで、R^7、R^8、R^9及びR^{10}の２つの隣接する基は、任意に結合して環状ヒドロカルビル基又は環状ヘテロ原子含有ヒドロカルビル基を形成してもよく、環状ヒドロカルビル基又は環状ヘテロ原子含有ヒドロカルビル基は、非置換であるか、又はハロゲン原子、C_{1-20}アルキル基、C_{1-20}アルコキシ基、C_{7-20}アルキルアリール基、C_{7-20}アリールアルキル基、C_{6-20}アリール基、C_{6-20}アリールオキシ基、C_{7-20}アルキルアリールオキシ基、C_{7-20}アリールアルキルオキシ基、式－ＮＲ’$_2$の

アミド基、式－ＰＲ’$_2$のホスフィド基、式－ＳＲ’のチオラート基、式－Ｓｉ（Ｒ^a）$_3$のシリル基、及び式－Ｇｅ（Ｒ^a）$_3$のゲルマニル基からなる群から選択される１つ以上の置換基によってさらに置換されており；

ここで、各Ｒ’は、独立して、水素、Ｃ$_{1-20}$アルキル基、及びＣ$_{6-20}$アリール基からなる群から選択され；

ここで、各Ｒ^{a}は、独立して、水素、Ｃ$_{1-8}$アルキル基、Ｃ$_{1-8}$アルコキシ基、Ｃ$_{6-20}$アリールオキシ基及びＣ$_{6-20}$アリール基からなる群から選択される、プレメタル化化合物である。

【０４４８】

いくつかの実施形態では、Ｒ^7、Ｒ^8、Ｒ^{9}及びＲ^{10}は、各々独立して、ハロゲン；水素；Ｃ$_{1-30}$ヒドロカルビル基（このヒドロカルビル基は、非置換であるか、又はハロゲン原子、Ｃ$_{1-20}$アルキル基、Ｃ$_{1-20}$アルコキシ基、Ｃ$_{7-20}$アルキルアリール基、Ｃ$_{7-20}$アリールアルキル基、Ｃ$_{6-20}$アリール基、Ｃ$_{6-20}$アリールオキシ基、Ｃ$_{7-20}$アルキルアリールオキシ基、及びＣ$_{7-20}$アリールアルキルオキシ基からなる群から選択される１つ以上の置換基によってさらに置換されている）；並びにヘテロ原子含有Ｃ$_{1-30}$ヒドロカルビル基（このヘテロ原子含有ヒドロカルビル基は、非置換であるか、又はハロゲン原子、Ｃ$_{1-20}$アルキル基、Ｃ$_{1-20}$アルコキシ基、Ｃ$_{7-20}$アルキルアリール基、Ｃ$_{7-20}$アリールアルキル基、Ｃ$_{6-20}$アリール基、Ｃ$_{6-20}$アリールオキシ基、Ｃ$_{7-20}$アルキルアリールオキシ基、及びＣ$_{7-20}$アリールアルキルオキシ基からなる群から選択される１つ以上の置換基によってさらに置換されている）；からなる群から選択され；ここで、Ｒ^7、Ｒ^8、Ｒ^{9}及びＲ^{10}の２つの隣接する基は、任意に結合して環状ヒドロカルビル基又は環状ヘテロ原子含有ヒドロカルビル基を形成してもよく、環状ヒドロカルビル基又は環状ヘテロ原子含有ヒドロカルビル基は、非置換であるか、又はハロゲン原子、Ｃ$_{1-20}$アルキル基、Ｃ$_{1-20}$アルコキシ基、Ｃ$_{7-20}$アルキルアリール基、Ｃ$_{7-20}$アリールアルキル基、Ｃ$_{6-20}$アリール基、Ｃ$_{6-20}$アリールオキシ基、Ｃ$_{7-20}$アルキルアリールオキシ基、Ｃ$_{7-20}$アリールアルキルオキシ基、－ＮＲ’$_2$、アミド基、－ＰＲ’$_2$、ホスフィド基、－ＳＲ’、チオラート基、式－Ｓｉ（Ｒ^a）$_3$のシリル基、及び式－Ｇｅ（Ｒ^a）$_3$のゲルマニル基からなる群から選択される１つ以上の置換基によってさらに置換されており；ここで、各Ｒ’は、独立して、水素、Ｃ$_{1-20}$アルキル基、及びＣ$_{6-20}$アリール基からなる群から選択され；ここで、各Ｒ^{a}は、独立して、水素、Ｃ$_{1-8}$アルキル基、Ｃ$_{1-8}$アルコキシ基、Ｃ$_{6-20}$アリールオキシ基及びＣ$_{6-20}$アリール基からなる群から選択される。

【０４４９】

いくつかの実施形態では、Ｒ^7、Ｒ^8、Ｒ^{9}及びＲ^{10}は、各々独立して、ハロゲン；水素；並びにＣ$_{1-30}$ヒドロカルビル基（このヒドロカルビル基は、非置換であるか、又はハロゲン原子、Ｃ$_{1-20}$アルキル基、Ｃ$_{1-20}$アルコキシ基、Ｃ$_{7-20}$アルキルアリール基、Ｃ$_{7-20}$アリールアルキル基、Ｃ$_{6-20}$アリール基、Ｃ$_{6-20}$アリールオキシ基、Ｃ$_{7-20}$アルキルアリールオキシ基、及びＣ$_{7-20}$アリールアルキルオキシ基からなる群から選択される１つ以上の置換基によってさらに置換されている）；からなる群から選択され；ここで、Ｒ^7、Ｒ^8、Ｒ^{9}及びＲ^{10}の２つの隣接する基は、任意に結合して環状ヒドロカルビル基を形成してもよく、環状ヒドロカルビル基は、非置換であるか、又はハロゲン原子、Ｃ$_{1-20}$アルキル基、Ｃ$_{1-20}$アルコキシ基、Ｃ$_{7-20}$アルキルアリール基、Ｃ$_{7-20}$アリールアルキル基、Ｃ$_{6-20}$アリール基、Ｃ$_{6-20}$アリールオキシ基、Ｃ$_{7-20}$アルキルアリールオキシ基、Ｃ$_{7-20}$アリールアルキルオキシ基、－ＮＲ’$_2$、アミド基、－ＰＲ’$_2$、ホスフィド基、－ＳＲ’、チオラート基、式－Ｓｉ（Ｒ^a）$_3$のシリル基、及び式－Ｇｅ（Ｒ^a）$_3$のゲルマニル基からなる群から選択される１つ以上の置換基によってさらに置換されており；ここで、各Ｒ’は、独立して、水素、Ｃ$_{1-20}$アルキル基、及びＣ$_{6-20}$アリール基からなる群から選択され；ここで、各Ｒ^{a}は、独立して、水素、Ｃ$_{1-8}$アルキル基、Ｃ$_{1-8}$アルコキシ基、Ｃ$_{6-20}$アリールオキシ基及びＣ$_{6-20}$アリール基からなる群から選択される。

【０４５０】
いくつかの実施形態では、R^7、R^8、R^9及びR^{10}は、各々独立して、ハロゲン；水素；並びにヘテロ原子含有C_{1-30}ヒドロカルビル基（このヘテロ原子含有ヒドロカルビル基は、非置換であるか、又はハロゲン原子、C_{1-20}アルキル基、C_{1-20}アルコキシ基、C_{7-20}アルキルアリール基、C_{7-20}アリールアルキル基、C_{6-20}アリール基、C_{6-20}アリールオキシ基、C_{7-20}アルキルアリールオキシ基、及びC_{7-20}アリールアルキルオキシ基からなる群から選択される１つ以上の置換基によってさらに置換されている）；からなる群から選択され；ここで、R^7、R^8、R^9及びR^{10}の２つの隣接する基は、任意に結合して環状ヘテロ原子含有ヒドロカルビル基を形成してもよく、環状ヘテロ原子含有ヒドロカルビル基は、非置換であるか、又はハロゲン原子、C_{1-20}アルキル基、C_{1-20}アルコキシ基、C_{7-20}アルキルアリール基、C_{7-20}アリールアルキル基、C_{6-20}アリール基、C_{6-20}アリールオキシ基、C_{7-20}アルキルアリールオキシ基、C_{7-20}アリールアルキルオキシ基、$-NR'_2$、アミド基、$-PR'_2$、ホスフィド基、$-SR'$、チオラート基、式$-Si(R^a)_3$のシリル基、及び式$-Ge(R^a)_3$のゲルマニル基からなる群から選択される１つ以上の置換基によってさらに置換されており；ここで、各R'は、独立して、水素、C_{1-20}アルキル基、及びC_{6-20}アリール基からなる群から選択され；ここで、各R^aは、独立して、水素、C_{1-8}アルキル基、C_{1-8}アルコキシ基、C_{6-20}アリールオキシ基及びC_{6-20}アリール基からなる群から選択される。

【０４５１】
いくつかの実施形態では、R^7、R^8、R^9及びR^{10}は、各々独立して、ハロゲン、水素、C_{1-30}アルキル基、C_{1-30}アルコキシ基、C_{7-30}アルキルアリール基、C_{7-30}アリールアルキル基、C_{6-30}アリール基、C_{6-30}アリールオキシド基、C_{7-30}アルキルアリールオキシ基、及びC_{7-30}アリールアルキルオキシ基からなる群から選択される。

【０４５２】
いくつかの実施形態では、R^7、R^8、R^9及びR^{10}は、各々独立して、ハロゲン、水素、C_{1-20}アルキル基、C_{1-20}アルコキシ基、C_{7-20}アルキルアリール基、C_{7-20}アリールアルキル基、C_{6-20}アリール基、C_{6-20}アリールオキシド基、C_{7-20}アルキルアリールオキシ基、及びC_{7-20}アリールアルキルオキシ基からなる群から選択される。

【０４５３】
いくつかの実施形態では、R^7、R^8、R^9及びR^{10}は、各々独立して、ハロゲン、水素、及びC_{1-30}ヒドロカルビル基からなる群から選択され、このヒドロカルビル基は、非置換であるか、又は１つ以上のハロゲン原子によってさらに置換されている。

【０４５４】
いくつかの実施形態では、R^7、R^8、R^9及びR^{10}は、各々独立して、ハロゲン、水素、及びC_{1-30}ヘテロ原子含有ヒドロカルビル基からなる群から選択され、このヘテロ原子含有ヒドロカルビル基は、非置換であるか、又は１つ以上のハロゲン原子によってさらに置換されている。

【０４５５】
いくつかの実施形態では、R^7、R^8、R^9及びR^{10}は、各々独立して、水素及びC_{1-30}ヒドロカルビル基からなる群から選択され、このヒドロカルビル基は、非置換であるか、又は１つ以上のハロゲン原子によってさらに置換されている。

【０４５６】
いくつかの実施形態では、R^7、R^8、R^9及びR^{10}は、各々独立して、水素及びC_{1-30}ヘテロ原子含有ヒドロカルビル基からなる群から選択され、このヘテロ原子含有ヒドロカルビル基は、非置換であるか、又は１つ以上のハロゲン原子によってさらに置換されている。

【０４５７】

いくつかの実施形態では、R^7、R^8、R^9及びR^{10}は、各々水素である。

【０４５８】

いくつかの実施形態では、R^7、R^8、R^9及びR^{10}は、各々水素であり、R^{11}、R^{12}、R^{13}、R^{14}、R^{15}、R^{16}、R^{17}、R^{18}は、各々独立して、ハロゲン、水素、C_{1-30}アルキル基、及びC_{6-30}アリール基からなる群から選択される。

いくつかの実施形態では、R^7、R^8、R^9及びR^{10}は、各々水素であり、R^{11}、R^{13}、R^{14}、R^{15}、R^{16}及びR^{18}は、各々水素であり、R^{12}及びR^{17}は、各々独立して、C_{1-20}アルキル基又はC_{6-20}アリール基である。

いくつかの実施形態では、R^7、R^8、R^9及びR^{10}は、各々水素であり、R^{11}、R^{13}、R^{14}、R^{15}、R^{16}及びR^{18}は、各々水素であり、R^{12}及びR^{17}は、各々ｔｅｒｔ－ブチル基である。

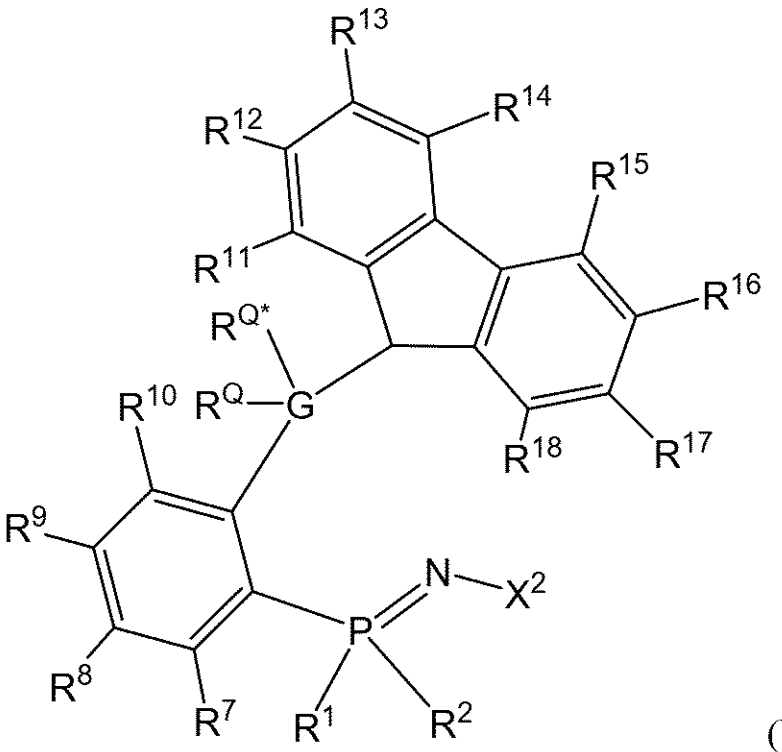
いくつかの実施形態では、R^7、R^8、R^9及びR^{10}は、各々水素であり、R^{11}、R^{12}、R^{14}、R^{15}、R^{17}及びR^{18}は、各々水素であり、R^{13}及びR^{16}は、各々独立して、C_{1-20}アルキル基又はC_{6-20}アリール基である。

いくつかの実施形態では、R^7、R^8、R^9及びR^{10}は、各々水素であり、R^{11}、R^{12}、R^{14}、R^{15}、R^{17}及びR^{18}は、各々水素であり、R^{13}及びR^{16}は、各々ｔｅｒｔ－ブチル基である。

【０４５９】

本開示の実施形態では、式Ｖ－Ｌのプレメタル化化合物は、式ＶＩＩ－Ｌ：

【化１２５】



(VII-L)

で表されるプレメタル化化合物であり、

式中、R^1、R^2、R^{11}、R^{12}、R^{13}、R^{14}、R^{15}、R^{16}、R^{17}、R^{18}、及びX^2は、上記式Ｉ－Ｌ及び式Ｖ－Ｌで定義した通りであり；

式中、Ｇは、第１４族元素であり；

式中、R^Q及びR^{Q*}は、各々独立して、

ハロゲン；

水素；

C_{1-30}ヒドロカルビル基（このヒドロカルビル基は、非置換であるか、又はハロゲ

ン原子、Ｃ１－２０アルキル基、Ｃ１－２０アルコキシ基、Ｃ７－２０アルキルアリール基、Ｃ７－２０アリールアルキル基、Ｃ６－２０アリール基、Ｃ６－２０アリールオキシ基、Ｃ７－２０アルキルアリールオキシ基、及びＣ７－２０アリールアルキルオキシ基からなる群から選択される１つ以上の置換基によってさらに置換されている）；

ヘテロ原子含有Ｃ１－３０ヒドロカルビル基（このヘテロ原子含有ヒドロカルビル基は、非置換であるか、又はハロゲン原子、Ｃ１－２０アルキル基、Ｃ１－２０アルコキシ基、Ｃ７－２０アルキルアリール基、Ｃ７－２０アリールアルキル基、Ｃ６－２０アリール基、Ｃ６－２０アリールオキシ基、Ｃ７－２０アルキルアリールオキシ基、及びＣ７－２０アリールアルキルオキシ基からなる群から選択される１つ以上の置換基によってさらに置換されている）；

ここで、Ｒ^{Q}及びＲ^{Q}＊の基は、任意に結合して環状ヒドロカルビル基又は環状ヘテロ原子含有ヒドロカルビル基を形成してもよく、環状ヒドロカルビル基又は環状ヘテロ原子含有ヒドロカルビル基は、非置換であるか、又はハロゲン原子、Ｃ１－２０アルキル基、Ｃ１－２０アルコキシ基、Ｃ７－２０アルキルアリール基、Ｃ７－２０アリールアルキル基、Ｃ６－２０アリール基、Ｃ６－２０アリールオキシ基、Ｃ７－２０アルキルアリールオキシ基、Ｃ７－２０アリールアルキルオキシ基、式－ＮＲ’$_2$のアミド基、式－ＰＲ’$_2$のホスフィド基、式－ＳＲ’のチオラート基、式－Ｓｉ（Ｒ^{a}）$_3$のシリル基、及び式－Ｇｅ（Ｒ^{a}）$_3$のゲルマニル基からなる群から選択される１つ以上の置換基によってさらに置換されており；

式中、Ｒ^{7}、Ｒ^{8}、Ｒ^{9}及びＲ^{10}は、各々独立して、

ハロゲン；

水素；

Ｃ１－３０ヒドロカルビル基（このヒドロカルビル基は、非置換であるか、又はハロゲン原子、Ｃ１－２０アルキル基、Ｃ１－２０アルコキシ基、Ｃ７－２０アルキルアリール基、Ｃ７－２０アリールアルキル基、Ｃ６－２０アリール基、Ｃ６－２０アリールオキシ基、Ｃ７－２０アルキルアリールオキシ基、及びＣ７－２０アリールアルキルオキシ基からなる群から選択される１つ以上の置換基によってさらに置換されている）；

ヘテロ原子含有Ｃ１－３０ヒドロカルビル基（このヘテロ原子含有ヒドロカルビル基は、非置換であるか、又はハロゲン原子、Ｃ１－２０アルキル基、Ｃ１－２０アルコキシ基、Ｃ７－２０アルキルアリール基、Ｃ７－２０アリールアルキル基、Ｃ６－２０アリール基、Ｃ６－２０アリールオキシ基、Ｃ７－２０アルキルアリールオキシ基、及びＣ７－２０アリールアルキルオキシ基からなる群から選択される１つ以上の置換基によってさらに置換されている）；

オキシ基、－ＯＲ’；

アミド基、－ＮＲ’$_2$；

ホスフィド基、－ＰＲ’$_2$；

チオラート基、－ＳＲ’；

式－Ｓｉ（Ｒ^{a}）$_3$のシリル基；

式－Ｇｅ（Ｒ^{a}）$_3$のゲルマニル基；

からなる群から選択され；

ここで、Ｒ^{7}、Ｒ^{8}、Ｒ^{9}及びＲ^{10}の２つの隣接する基は、任意に結合して環状ヒドロカルビル基又は環状ヘテロ原子含有ヒドロカルビル基を形成してもよく、環状ヒドロカルビル基又は環状ヘテロ原子含有ヒドロカルビル基は、非置換であるか、又はハロゲン原子、Ｃ１－２０アルキル基、Ｃ１－２０アルコキシ基、Ｃ７－２０アルキルアリール基、Ｃ７－２０アリールアルキル基、Ｃ６－２０アリール基、Ｃ６－２０アリールオキシ基、Ｃ７－２０アルキルアリールオキシ基、Ｃ７－２０アリールアルキルオキシ基、式－ＮＲ’$_2$のアミド基、式－ＰＲ’$_2$のホスフィド基、式－ＳＲ’のチオラート基、式－Ｓｉ（Ｒ^{a}）$_3$のシリル基、及び式－Ｇｅ（Ｒ^{a}）$_3$のゲルマニル基からなる群から選択される１つ以上の置換基によってさらに置換されており；

ここで、各Ｒ’は、独立して、水素、Ｃ$_{1}$－２０アルキル基、及びＣ６－２０アリール基

からなる群から選択され；
ここで、各R^aは、独立して、水素、C_{1-8}アルキル基、C_{1-8}アルコキシ基、C_{6-20}アリールオキシ基及びC_{6-20}アリール基からなる群から選択される、プレメタル化化合物である。
【０４６０】
いくつかの実施形態では、Ｇは、炭素Ｃ、又はシリコンＳｉ、又はゲルマニウムＧｅである。
いくつかの実施形態では、Ｇは、炭素Ｃ、又はシリコンＳｉである。
いくつかの実施形態では、Ｇは、炭素Ｃである。
いくつかの実施形態では、Ｇは、シリコンＳｉである。
いくつかの実施形態では、Ｇは、ゲルマニウムＧｅである。
【０４６１】
いくつかの実施形態では、R^Q及びR^{Q*}は、各々独立して、ハロゲン、水素、C_{1-30}アルキル基、C_{1-30}アルコキシ基、C_{7-30}アルキルアリール基、C_{7-30}アリールアルキル基、C_{6-30}アリール基、C_{6-30}アリールオキシド基、C_{7-30}アルキルアリールオキシ基、及びC_{7-30}アリールアルキルオキシ基からなる群から選択される。
【０４６２】
いくつかの実施形態では、R^Q及びR^{Q*}は、各々独立して、ハロゲン、水素、C_{1-20}アルキル基、C_{1-20}アルコキシ基、C_{7-20}アルキルアリール基、C_{7-20}アリールアルキル基、C_{6-20}アリール基、C_{6-20}アリールオキシド基、C_{7-20}アルキルアリールオキシ基、及びC_{7-20}アリールアルキルオキシ基からなる群から選択される。
【０４６３】
実施形態では、、R^Q及びR^{Q*}は、各々独立して、水素、C_{1-20}アルキル基及びC_{6-20}アリール基からなる群から選択される。
【０４６４】
実施形態では、各R^Q及びR^{Q*}は、各々独立して、C_{1-8}アルキル基である。
実施形態では、各R^Q及びR^{Q*}は、各々独立して、C_{6-20}アリール基である。
実施形態では、R^Qは水素であり、R^{Q*}はC_{1-8}アルキル基である。
実施形態では、R^Qは水素であり、R^{Q*}はC_{6-20}アリール基である。
実施形態では、R^Qは水素であり、R^{Q*}はメチル基である。
実施形態では、R^Qは水素であり、R^{Q*}はフェニル基である。
実施形態では、R^Q及びR^{Q*}は、各々水素である。
【０４６５】
いくつかの実施形態では、R^7、R^8、R^9及びR^{10}は、各々独立して、ハロゲン；水素；C_{1-30}ヒドロカルビル基（このヒドロカルビル基は、非置換であるか、又はハロゲン原子、C_{1-20}アルキル基、C_{1-20}アルコキシ基、C_{7-20}アルキルアリール基、C_{7-20}アリールアルキル基、C_{6-20}アリール基、C_{6-20}アリールオキシ基、C_{7-20}アルキルアリールオキシ基、及びC_{7-20}アリールアルキルオキシ基からなる群から選択される１つ以上の置換基によってさらに置換されている）；並びにヘテロ原子含有C_{1-30}ヒドロカルビル基（このヘテロ原子含有ヒドロカルビル基は、非置換であるか、又はハロゲン原子、C_{1-20}アルキル基、C_{1-20}アルコキシ基、C_{7-20}アルキルアリール基、C_{7-20}アリールアルキル基、C_{6-20}アリール基、C_{6-20}アリールオキシ基、C_{7-20}アルキルアリールオキシ基、及びC_{7-20}アリールアルキルオキシ基からなる群から選択される１つ以上の置換基によってさらに置換されている）；からなる群から選択され；ここで、R^7、R^8、R^9及びR^{10}の２つの隣接する基は、任意に結合して環状ヒドロカルビル基又は環状ヘテロ原子含有ヒドロカルビル基を形成してもよく、環状ヒドロカルビル基又は環状ヘテロ原子含有ヒドロカルビル基は、非置換であるか、又はハロゲン原子、C_{1-20}アルキル基、C_{1-20}アルコキシ基、C_{7-}

２０アルキルアリール基、Ｃ７－２０アリールアルキル基、Ｃ６－２０アリール基、Ｃ６－２０アリールオキシ基、Ｃ７－２０アルキルアリールオキシ基、Ｃ７－２０アリールアルキルオキシ基、－ＮＲ’2、アミド基、－ＰＲ’2、ホスフィド基、－ＳＲ’、チオラート基、式－Ｓｉ（Ｒａ）3のシリル基、及び式－Ｇｅ（Ｒａ）3のゲルマニル基からなる群から選択される１つ以上の置換基によってさらに置換されており；ここで、各Ｒ’は、独立して、水素、Ｃ１－２０アルキル基、及びＣ６－２０アリール基からなる群から選択され；ここで、各Ｒａは、独立して、水素、Ｃ１－８アルキル基、Ｃ１－８アルコキシ基、Ｃ６－２０アリールオキシ基及びＣ６－２０アリール基からなる群から選択される。

【０４６６】

いくつかの実施形態では、Ｒ７、Ｒ８、Ｒ９及びＲ１０は、各々独立して、ハロゲン；水素；並びにＣ１－３０ヒドロカルビル基（このヒドロカルビル基は、非置換であるか、又はハロゲン原子、Ｃ１－２０アルキル基、Ｃ１－２０アルコキシ基、Ｃ７－２０アルキルアリール基、Ｃ７－２０アリールアルキル基、Ｃ６－２０アリール基、Ｃ６－２０アリールオキシ基、Ｃ７－２０アルキルアリールオキシ基、及びＣ７－２０アリールアルキルオキシ基からなる群から選択される１つ以上の置換基によってさらに置換されている）；からなる群から選択され；ここで、Ｒ７、Ｒ８、Ｒ９及びＲ１０の２つの隣接する基は、任意に結合して環状ヒドロカルビル基を形成してもよく、環状ヒドロカルビル基は、非置換であるか、又はハロゲン原子、Ｃ１－２０アルキル基、Ｃ１－２０アルコキシ基、Ｃ７－２０アルキルアリール基、Ｃ７－２０アリールアルキル基、Ｃ６－２０アリール基、Ｃ６－２０アリールオキシ基、Ｃ７－２０アルキルアリールオキシ基、Ｃ７－２０アリールアルキルオキシ基、－ＮＲ’2、アミド基、－ＰＲ’2、ホスフィド基、－ＳＲ’、チオラート基、式－Ｓｉ（Ｒａ）3のシリル基、及び式－Ｇｅ（Ｒａ）3のゲルマニル基からなる群から選択される１つ以上の置換基によってさらに置換されており；ここで、各Ｒ’は、独立して、水素、Ｃ１－２０アルキル基、及びＣ６－２０アリール基からなる群から選択され；ここで、各Ｒａは、独立して、水素、Ｃ１－８アルキル基、Ｃ１－８アルコキシ基、Ｃ６－２０アリールオキシ基及びＣ６－２０アリール基からなる群から選択される。

【０４６７】

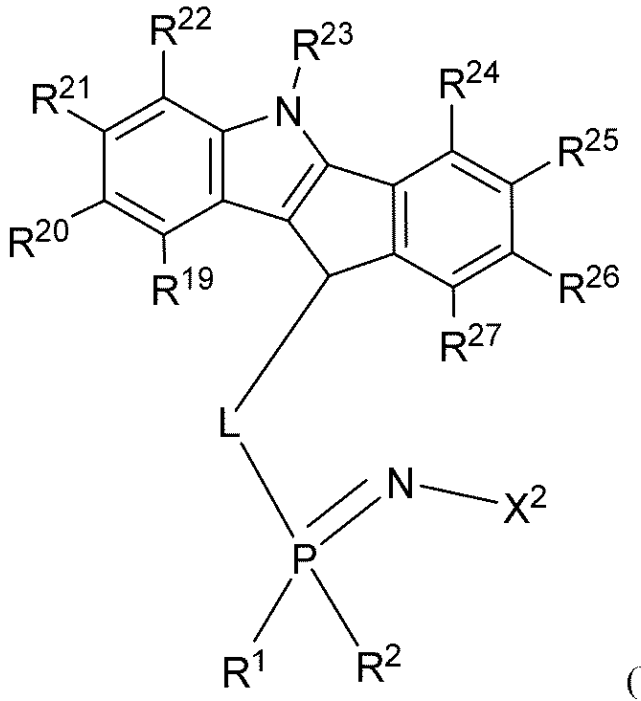
いくつかの実施形態では、Ｒ７、Ｒ８、Ｒ９及びＲ１０は、各々独立して、ハロゲン；水素；並びにヘテロ原子含有Ｃ１－３０ヒドロカルビル基（このヘテロ原子含有ヒドロカルビル基は、非置換であるか、又はハロゲン原子、Ｃ１－２０アルキル基、Ｃ１－２０アルコキシ基、Ｃ７－２０アルキルアリール基、Ｃ７－２０アリールアルキル基、Ｃ６－２０アリール基、Ｃ６－２０アリールオキシ基、Ｃ７－２０アルキルアリールオキシ基、及びＣ７－２０アリールアルキルオキシ基からなる群から選択される１つ以上の置換基によってさらに置換されている）；からなる群から選択され；ここで、Ｒ７、Ｒ８、Ｒ９及びＲ１０の２つの隣接する基は、任意に結合して環状ヘテロ原子含有ヒドロカルビル基を形成してもよく、環状ヘテロ原子含有ヒドロカルビル基は、非置換であるか、又はハロゲン原子、Ｃ１－２０アルキル基、Ｃ１－２０アルコキシ基、Ｃ７－２０アルキルアリール基、Ｃ７－２０アリールアルキル基、Ｃ６－２０アリール基、Ｃ６－２０アリールオキシ基、Ｃ７－２０アルキルアリールオキシ基、Ｃ７－２０アリールアルキルオキシ基、－ＮＲ’2、アミド基、－ＰＲ’2、ホスフィド基、－ＳＲ’、チオラート基、式－Ｓｉ（Ｒａ）3のシリル基、及び式－Ｇｅ（Ｒａ）3のゲルマニル基からなる群から選択される１つ以上の置換基によってさらに置換されており；ここで、各Ｒ’は、独立して、水素、Ｃ1－２０アルキル基、及びＣ６－２０アリール基からなる群から選択され；ここで、各Ｒａは、独立して、水素、Ｃ１－８アルキル基、Ｃ１－８アルコキシ基、Ｃ６－２０アリールオキシ基及びＣ６－２０アリール基からなる群から選択される。

【０４６８】

いくつかの実施形態では、Ｒ７、Ｒ８、Ｒ９及びＲ１０は、各々独立して、ハロゲン、水素、Ｃ１－３０アルキル基、Ｃ１－３０アルコキシ基、Ｃ７－３０アルキルアリール基、Ｃ７－３０アリールアルキル基、Ｃ６－３０アリール基、Ｃ６－３０アリールオキシド基、Ｃ７－３０アルキルアリールオキシ基、及びＣ７－３０アリールアルキルオキシ基からなる

群から選択される。
【０４６９】
いくつかの実施形態では、R^7、R^8、R^9及びR^{10}は、各々独立して、ハロゲン、水素、C_{1-20}アルキル基、C_{1-20}アルコキシ基、C_{7-20}アルキルアリール基、C_{7-20}アリールアルキル基、C_{6-20}アリール基、C_{6-20}アリールオキシド基、C_{7-20}アルキルアリールオキシ基、及びC_{7-20}アリールアルキルオキシ基からなる群から選択される。
【０４７０】
いくつかの実施形態では、R^7、R^8、R^9及びR^{10}は、各々独立して、ハロゲン、水素、及びC_{1-30}ヒドロカルビル基からなる群から選択され、このヒドロカルビル基は、非置換であるか、又は１つ以上のハロゲン原子によってさらに置換されている。
【０４７１】
いくつかの実施形態では、R^7、R^8、R^9及びR^{10}は、各々独立して、ハロゲン、水素、及びC_{1-30}ヘテロ原子含有ヒドロカルビル基からなる群から選択され、このヘテロ原子含有ヒドロカルビル基は、非置換であるか、又は１つ以上のハロゲン原子によってさらに置換されている。
【０４７２】
いくつかの実施形態では、R^7、R^8、R^9及びR^{10}は、各々独立して、水素及びC_{1-30}ヒドロカルビル基からなる群から選択され、このヒドロカルビル基は、非置換であるか、又は１つ以上のハロゲン原子によってさらに置換されている。
【０４７３】
いくつかの実施形態では、R^7、R^8、R^9及びR^{10}は、各々独立して、水素及びC_{1-30}ヘテロ原子含有ヒドロカルビル基からなる群から選択され、このヘテロ原子含有ヒドロカルビル基は、非置換であるか、又は１つ以上のハロゲン原子によってさらに置換されている。
【０４７４】
いくつかの実施形態では、R^7、R^8、R^9及びR^{10}は、各々水素である。
【０４７５】
いくつかの実施形態では、R^7、R^8、R^9及びR^{10}は、各々水素であり、R^{11}、R^{12}、R^{13}、R^{14}、R^{15}、R^{16}、R^{17}、R^{18}は、各々独立して、ハロゲン、水素、C_{1-30}アルキル基、及びC_{6-30}アリール基からなる群から選択される。
いくつかの実施形態では、R^7、R^8、R^9及びR^{10}は、各々水素であり、R^{11}、R^{13}、R^{14}、R^{15}、R^{16}及びR^{18}は、各々水素であり、R^{12}及びR^{17}は、各々独立して、C_{1-20}アルキル基又はC_{6-20}アリール基である。
いくつかの実施形態では、R^7、R^8、R^9及びR^{10}は、各々水素であり、R^{11}、R^{13}、R^{14}、R^{15}、R^{16}及びR^{18}は、各々水素であり、R^{12}及びR^{17}は、各々ｔｅｒｔ－ブチル基である。
いくつかの実施形態では、R^7、R^8、R^9及びR^{10}は、各々水素であり、R^{11}、R^{12}、R^{14}、R^{15}、R^{17}及びR^{18}は、各々水素であり、R^{13}及びR^{16}は、各々独立して、C_{1-20}アルキル基又はC_{6-20}アリール基である。
いくつかの実施形態では、R^7、R^8、R^9及びR^{10}は、各々水素であり、R^{11}、R^{12}、R^{14}、R^{15}、R^{17}及びR^{18}は、各々水素であり、R^{13}及びR^{16}は、各々ｔｅｒｔ－ブチル基である。
【０４７６】
本開示の実施形態では、式Ｉ－Ｌのプレメタル化化合物は、式ＶＩＩＩ－Ｌ：

【化１２６】



(VIII-L)

で表されるプレメタル化化合物であり、

式中、R^1、R^2、Ｌ及びX^2は、上記式Ｉ－Ｌで定義した通りであり；

式中、R^{23}は、

水素；

C_{1-30}ヒドロカルビル基（このヒドロカルビル基は、非置換であるか、又はハロゲン原子、C_{1-20}アルキル基、C_{1-20}アルコキシ基、C_{7-20}アルキルアリール基、C_{7-20}アリールアルキル基、C_{6-20}アリール基、C_{6-20}アリールオキシ基、C_{7-20}アルキルアリールオキシ基、及びC_{7-20}アリールアルキルオキシ基からなる群から選択される１つ以上の置換基によってさらに置換されている）；

ヘテロ原子含有C_{1-30}ヒドロカルビル基（このヘテロ原子含有ヒドロカルビル基は、非置換であるか、又はハロゲン原子、C_{1-20}アルキル基、C_{1-20}アルコキシ基、C_{7-20}アルキルアリール基、C_{7-20}アリールアルキル基、C_{6-20}アリール基、C_{6-20}アリールオキシ基、C_{7-20}アルキルアリールオキシ基、及びC_{7-20}アリールアルキルオキシ基からなる群から選択される１つ以上の置換基によってさらに置換されている）；

からなる群から選択され；

式中、R^{19}、R^{20}、R^{21}、R^{22}、R^{24}、R^{25}、R^{26}、及びR^{27}は、各々独立して、

ハロゲン；

水素；

C_{1-30}ヒドロカルビル基（このヒドロカルビル基は、非置換であるか、又はハロゲン原子、C_{1-20}アルキル基、C_{1-20}アルコキシ基、C_{7-20}アルキルアリール基、C_{7-20}アリールアルキル基、C_{6-20}アリール基、C_{6-20}アリールオキシ基、C_{7-20}アルキルアリールオキシ基、及びC_{7-20}アリールアルキルオキシ基からなる群から選択される１つ以上の置換基によってさらに置換されている）；

ヘテロ原子含有C_{1-30}ヒドロカルビル基（このヘテロ原子含有ヒドロカルビル基は、非置換であるか、又はハロゲン原子、C_{1-20}アルキル基、C_{1-20}アルコキシ基、C_{7-20}アルキルアリール基、C_{7-20}アリールアルキル基、C_{6-20}アリール基、

C_{6-20}アリールオキシ基、C_{7-20}アルキルアリールオキシ基、及びC_{7-20}アリールアルキルオキシ基からなる群から選択される１つ以上の置換基によってさらに置換されている）；
　オキシ基、－ＯＲ’；
　アミド基、－ＮＲ’$_2$；
　ホスフィド基、－ＰＲ’$_2$；
　チオラート基、－ＳＲ’；
　式－Ｓｉ（Ｒ^a）$_3$のシリル基；
　式－Ｇｅ（Ｒ^a）$_3$のゲルマニル基；
からなる群から選択され；
　ここで、Ｒ^{19}、Ｒ^{20}、Ｒ^{21}、Ｒ^{22}、Ｒ^{24}、Ｒ^{25}、Ｒ^{26}、及びＲ^{27}の２つの隣接する基は、任意に結合して環状ヒドロカルビル基又は環状ヘテロ原子含有ヒドロカルビル基を形成してもよく、環状ヒドロカルビル基又は環状ヘテロ原子含有ヒドロカルビル基は、非置換であるか、又はハロゲン原子、C_{1-20}アルキル基、C_{1-20}アルコキシ基、C_{7-20}アルキルアリール基、C_{7-20}アリールアルキル基、C_{6-20}アリール基、C_{6-20}アリールオキシ基、C_{7-20}アルキルアリールオキシ基、C_{7-20}アリールアルキルオキシ基、式－ＮＲ’$_2$のアミド基、式－ＰＲ’$_2$のホスフィド基、式－ＳＲ’のチオラート基、式－Ｓｉ（Ｒ^a）$_3$のシリル基、及び式－Ｇｅ（Ｒ^a）$_3$のゲルマニル基からなる群から選択される１つ以上の置換基によってさらに置換されており；
　ここで、各Ｒ’は、独立して、水素、C_{1-20}アルキル基、及びC_{6-20}アリール基からなる群から選択され；
　ここで、各Ｒ^{a}は、独立して、水素、C_{1-8}アルキル基、C_{1-8}アルコキシ基、C_{6-20}アリールオキシ基及びC_{6-20}アリール基からなる群から選択される、プレメタル化化合物である。
【０４７７】
　いくつかの実施形態では、Ｒ^{23}は、C_{1-30}ヒドロカルビル基からなる群から選択され、このヒドロカルビル基は、非置換であるか、又はハロゲン原子、C_{1-20}アルキル基、C_{1-20}アルコキシ基、C_{7-20}アルキルアリール基、C_{7-20}アリールアルキル基、C_{6-20}アリール基、C_{6-20}アリールオキシ基、C_{7-20}アルキルアリールオキシ基、及びC_{7-20}アリールアルキルオキシ基からなる群から選択される１つ以上の置換基によってさらに置換されている。
【０４７８】
　いくつかの実施形態では、Ｒ^{23}は、ヘテロ原子含有C_{1-30}ヒドロカルビル基からなる群から選択され、このヘテロ原子含有ヒドロカルビル基は、非置換であるか、
又はハロゲン原子、C_{1-20}アルキル基、C_{1-20}アルコキシ基、C_{7-20}アルキルアリール基、C_{7-20}アリールアルキル基、C_{6-20}アリール基、C_{6-20}アリールオキシ基、C_{7-20}アルキルアリールオキシ基、及びC_{7-20}アリールアルキルオキシ基からなる群から選択される１つ以上の置換基によってさらに置換されている。
【０４７９】
　いくつかの実施形態では、Ｒ^{19}、Ｒ^{20}、Ｒ^{21}、Ｒ^{22}、Ｒ^{24}、Ｒ^{25}、Ｒ^{26}、及びＲ^{27}は、各々独立して、ハロゲン；水素；C_{1-30}ヒドロカルビル基（このヒドロカルビル基は、非置換であるか、又はハロゲン原子、C_{1-20}アルキル基、C_{1-20}アルコキシ基、C_{7-20}アルキルアリール基、C_{7-20}アリールアルキル基、C_{6-20}アリール基、C_{6-20}アリールオキシ基、C_{7-20}アルキルアリールオキシ基、及びC_{7-20}アリールアルキルオキシ基からなる群から選択される１つ以上の置換基によってさらに置換されている）；並びにヘテロ原子含有C_{1-30}ヒドロカルビル基（このヘテロ原子含有ヒドロカルビル基は、非置換であるか、又はハロゲン原子、C_{1-20}アルキル基、C_{1-20}アルコキシ基、C_{7-20}アルキルアリール基、C_{7-20}アリールアルキル基、C_{6-20}アリール基、C_{6-20}アリールオキシ基、C_{7-20}アルキルアリールオキシ基、及びC_{7-20}アリールアルキルオキシ基からなる群から選択される１つ

以上の置換基によってさらに置換されている）；からなる群から選択され；ここで、R^{19}、R^{20}、R^{21}、R^{22}、R^{24}、R^{25}、R^{26}、及びR^{27}の２つの隣接する基は、任意に結合して環状ヒドロカルビル基又は環状ヘテロ原子含有ヒドロカルビル基を形成してもよく、環状ヒドロカルビル基又は環状ヘテロ原子含有ヒドロカルビル基は、非置換であるか、又はハロゲン原子、C_{1-20}アルキル基、C_{1-20}アルコキシ基、C_{7-20}アルキルアリール基、C_{7-20}アリールアルキル基、C_{6-20}アリール基、C_{6-20}アリールオキシ基、C_{7-20}アルキルアリールオキシ基、C_{7-20}アリールアルキルオキシ基、－NR'_2、アミド基、－PR'_2、ホスフィド基、－SR'、チオラート基、式－$Si(R^a)_3$のシリル基、及び式－$Ge(R^a)_3$のゲルマニル基からなる群から選択される１つ以上の置換基によってさらに置換されており；ここで、各R'は、独立して、水素、C_{1-20}アルキル基、及びC_{6-20}アリール基からなる群から選択され；ここで、各R^aは、独立して、水素、C_{1-8}アルキル基、C_{1-8}アルコキシ基、C_{6-20}アリールオキシ基及びC_{6-20}アリール基からなる群から選択される。

【０４８０】

いくつかの実施形態では、R^{19}、R^{20}、R^{21}、R^{22}、R^{24}、R^{25}、R^{26}、及びR^{27}は、各々独立して、ハロゲン；水素；並びにC_{1-30}ヒドロカルビル基（このヒドロカルビル基は、非置換であるか、又はハロゲン原子、C_{1-20}アルキル基、C_{1-20}アルコキシ基、C_{7-20}アルキルアリール基、C_{7-20}アリールアルキル基、C_{6-20}アリール基、C_{6-20}アリールオキシ基、C_{7-20}アルキルアリールオキシ基、及びC_{7-20}アリールアルキルオキシ基からなる群から選択される１つ以上の置換基によってさらに置換されている）；からなる群から選択され；ここで、R^{19}、R^{20}、R^{21}、R^{22}、R^{24}、R^{25}、R^{26}、及びR^{27}の２つの隣接する基は、任意に結合して環状ヒドロカルビル基を形成してもよく、環状ヒドロカルビル基は、非置換であるか、又はハロゲン原子、C_{1-20}アルキル基、C_{1-20}アルコキシ基、C_{7-20}アルキルアリール基、C_{7-20}アリールアルキル基、C_{6-20}アリール基、C_{6-20}アリールオキシ基、C_{7-20}アルキルアリールオキシ基、C_{7-20}アリールアルキルオキシ基、－NR'_2、アミド基、－PR'_2、ホスフィド基、－SR'、チオラート基、式－$Si(R^a)_3$のシリル基、及び式－$Ge(R^a)_3$のゲルマニル基からなる群から選択される１つ以上の置換基によってさらに置換されており；ここで、各R'は、独立して、水素、C_{1-20}アルキル基、及びC_{6-20}アリール基からなる群から選択され；ここで、各R^aは、独立して、水素、C_{1-8}アルキル基、C_{1-8}アルコキシ基、C_{6-20}アリールオキシ基及びC_{6-20}アリール基からなる群から選択される。

【０４８１】

いくつかの実施形態では、R^{19}、R^{20}、R^{21}、R^{22}、R^{24}、R^{25}、R^{26}、及びR^{27}は、各々独立して、ハロゲン；水素；並びにヘテロ原子含有C_{1-30}ヒドロカルビル基（このヘテロ原子含有ヒドロカルビル基は、非置換であるか、又はハロゲン原子、C_{1-20}アルキル基、C_{1-20}アルコキシ基、C_{7-20}アルキルアリール基、C_{7-20}アリールアルキル基、C_{6-20}アリール基、C_{6-20}アリールオキシ基、C_{7-20}アルキルアリールオキシ基、及びC_{7-20}アリールアルキルオキシ基からなる群から選択される１つ以上の置換基によってさらに置換されている）；からなる群から選択され；ここで、R^{19}、R^{20}、R^{21}、R^{22}、R^{24}、R^{25}、R^{26}、及びR^{27}の２つの隣接する基は、任意に結合して環状ヘテロ原子含有ヒドロカルビル基を形成してもよく、環状ヘテロ原子含有ヒドロカルビル基は、非置換であるか、又はハロゲン原子、C_{1-20}アルキル基、C_{1-20}アルコキシ基、C_{7-20}アルキルアリール基、C_{7-20}アリールアルキル基、C_{6-20}アリール基、C_{6-20}アリールオキシ基、C_{7-20}アルキルアリールオキシ基、C_{7-20}アリールアルキルオキシ基、－NR'_2、アミド基、－PR'_2、ホスフィド基、－SR'、チオラート基、式－$Si(R^a)_3$のシリル基、及び式－$Ge(R^a)_3$のゲルマニル基からなる群から選択される１つ以上の置換基によってさらに置換されており；ここで、各R'は、独立して、水素、C_{1-20}アルキル基、及びC_{6-20}アリール基からなる群から選択され；ここで、各R^aは、独立して、水素、

C_{1-8}アルキル基、C_{1-8}アルコキシ基、C_{6-20}アリールオキシ基及びC_{6-20}アリール基からなる群から選択される。

【０４８２】

いくつかの実施形態では、R^{19}、R^{20}、R^{21}、R^{22}、R^{24}、R^{25}、R^{26}、及びR^{27}は、各々独立して、ハロゲン、水素、C_{1-30}アルキル基、C_{1-30}アルコキシ基、C_{7-30}アルキルアリール基、C_{7-30}アリールアルキル基、C_{6-30}アリール基、C_{6-30}アリールオキシド基、C_{7-30}アルキルアリールオキシ基、及びC_{7-30}アリールアルキルオキシ基からなる群から選択される。

【０４８３】

いくつかの実施形態では、R^{19}、R^{20}、R^{21}、R^{22}、R^{24}、R^{25}、R^{26}、及びR^{27}は、各々独立して、ハロゲン、水素、C_{1-20}アルキル基、C_{1-20}アルコキシ基、C_{7-20}アルキルアリール基、C_{7-20}アリールアルキル基、C_{6-20}アリール基、C_{6-20}アリールオキシド基、C_{7-20}アルキルアリールオキシ基、及びC_{7-20}アリールアルキルオキシ基からなる群から選択される。

【０４８４】

いくつかの実施形態では、R^{19}、R^{20}、R^{21}、R^{22}、R^{24}、R^{25}、R^{26}、及びR^{27}は、各々独立して、ハロゲン、水素、及びC_{1-30}ヒドロカルビル基からなる群から選択され、このヒドロカルビル基は、非置換であるか、又は１つ以上のハロゲン原子によってさらに置換されている。

【０４８５】

いくつかの実施形態では、R^{19}、R^{20}、R^{21}、R^{22}、R^{24}、R^{25}、R^{26}、及びR^{27}は、各々独立して、ハロゲン、水素、及びC_{1-30}ヘテロ原子含有ヒドロカルビル基からなる群から選択され、このヘテロ原子含有ヒドロカルビル基は、非置換であるか、又は１つ以上のハロゲン原子によってさらに置換されている。

【０４８６】

いくつかの実施形態では、R^{19}、R^{20}、R^{21}、R^{22}、R^{24}、R^{25}、R^{26}、及びR^{27}は、各々独立して、水素及びC_{1-30}ヒドロカルビル基からなる群から選択され、このヒドロカルビル基は、非置換であるか、又は１つ以上のハロゲン原子によってさらに置換されている。

【０４８７】

いくつかの実施形態では、R^{19}、R^{20}、R^{21}、R^{22}、R^{24}、R^{25}、R^{26}、及びR^{27}は、各々独立して、水素及びC_{1-30}ヘテロ原子含有ヒドロカルビル基からなる群から選択され、このヘテロ原子含有ヒドロカルビル基は、非置換であるか、又は１つ以上のハロゲン原子によってさらに置換されている。

【０４８８】

いくつかの実施形態では、R^{20}は、非置換のC_{1-30}ヒドロカルビル基である。

いくつかの実施形態では、R^{20}は、C_{1-8}アルキル基である。

いくつかの実施形態では、R^{19}、R^{20}、R^{21}、R^{22}、R^{24}、R^{25}、R^{26}、及びR^{27}は、各々水素である。

いくつかの実施形態では、R^{20}は、非置換のC_{1-30}ヒドロカルビル基であり、R^{19}、R^{21}、R^{22}、R^{24}、R^{25}、R^{26}、及びR^{27}は、各々水素である。

いくつかの実施形態では、R^{20}は、C_{1-8}アルキル基であり、R^{19}、R^{21}、R^{22}、R^{24}、R^{25}、R^{26}、及びR^{27}は、各々水素である。

いくつかの実施形態では、R^{20}は、メチル基である。

いくつかの実施形態では、R^{20}は、フェニル基である。

【０４８９】

いくつかの実施形態では、R^{23}は、水素、C_{1-30}アルキル基、及びC_{6-20}アリール基からなる群から選択される。

いくつかの実施形態では、R^{23}は、C_{1-30}アルキル基、及びC_{6-20}アリール基からなる群から選択される。

いくつかの実施形態では、R^{23}は、非置換のC_{1-30}ヒドロカルビル基である。
いくつかの実施形態では、R^{23}は、C_{1-8}アルキル基である。
いくつかの実施形態では、R^{23}は、メチル基である。
いくつかの実施形態では、R^{23}は、フェニル基である。

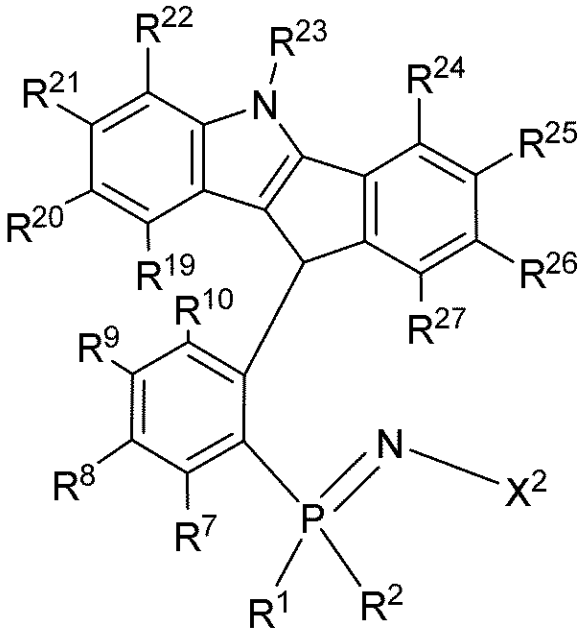
【０４９０】

いくつかの実施形態では、R_{20}及びR_{23}は、各々独立して、非置換のC_{1-30}ヒドロカルビル基であり、R^{19}、R^{21}、R^{22}、R^{24}、R^{25}、R^{26}、及びR^{27}は、各々水素である。
いくつかの実施形態では、R_{20}及びR_{23}は、各々独立して、C_{1-8}アルキル基であり、R^{19}、R^{21}、R^{22}、R^{24}、R^{25}、R^{26}、及びR^{27}は、各々水素である。
いくつかの実施形態では、R_{20}及びR_{23}は、各々メチル基であり、R^{19}、R^{21}、R^{22}、R^{24}、R^{25}、R^{26}、及びR^{27}は、各々水素である。

【０４９１】

本開示の実施形態では、式ＶＩＩＩ－Ｌのプレメタル化化合物は、式ＩＸ－Ｌ：

【化１２７】



(IX-L)

で表されるプレメタル化化合物であり、
式中、R^{1}、R^{2}、R^{19}、R^{20}、R^{21}、R^{22}、R^{23}、R^{24}、R^{25}、R^{26}、R^{27}及びX^{2}は、上記式Ｉ－Ｌ及び式ＶＩＩＩ－Ｌで定義した通りであり；
式中、R^{7}、R^{8}、R^{9}及びR^{10}は、各々独立して、
ハロゲン；
水素；
C_{1-30}ヒドロカルビル基（このヒドロカルビル基は、非置換であるか、又はハロゲン原子、C_{1-20}アルキル基、C_{1-20}アルコキシ基、C_{7-20}アルキルアリール基、C_{7-20}アリールアルキル基、C_{6-20}アリール基、C_{6-20}アリールオキシ基、C_{7-20}アルキルアリールオキシ基、及びC_{7-20}アリールアルキルオキシ基からなる群から選択される１つ以上の置換基によってさらに置換されている）；
ヘテロ原子含有C_{1-30}ヒドロカルビル基（このヘテロ原子含有ヒドロカルビル基は、非置換であるか、又はハロゲン原子、C_{1-20}アルキル基、C_{1-20}アルコキシ基、C_{7-20}アルキルアリール基、C_{7-20}アリールアルキル基、C_{6-20}アリール基、C_{6-20}アリールオキシ基、C_{7-20}アルキルアリールオキシ基、及びC_{7-20}アリ

ールアルキルオキシ基からなる群から選択される１つ以上の置換基によってさらに置換されている）；
オキシ基、－ＯＲ’；
アミド基、－ＮＲ’$_2$；
ホスフィド基、－ＰＲ’$_2$；
チオラート基、－ＳＲ’；
式－Ｓｉ（Ｒ^a）$_3$のシリル基；
式－Ｇｅ（Ｒ^a）$_3$のゲルマニル基；
からなる群から選択され；
ここで、Ｒ^7、Ｒ^8、Ｒ^{9}及びＲ^{10}の２つの隣接する基は、任意に結合して環状ヒドロカルビル基又は環状ヘテロ原子含有ヒドロカルビル基を形成してもよく、環状ヒドロカルビル基又は環状ヘテロ原子含有ヒドロカルビル基は、非置換であるか、又はハロゲン原子、Ｃ$_{1-20}$アルキル基、Ｃ$_{1-20}$アルコキシ基、Ｃ$_{7-20}$アルキルアリール基、Ｃ$_{7-20}$アリールアルキル基、Ｃ$_{6-20}$アリール基、Ｃ$_{6-20}$アリールオキシ基、Ｃ$_{7-20}$アルキルアリールオキシ基、Ｃ$_{7-20}$アリールアルキルオキシ基、式－ＮＲ’$_2$のアミド基、式－ＰＲ’$_2$のホスフィド基、式－ＳＲ’のチオラート基、式－Ｓｉ（Ｒ^a）$_3$のシリル基、及び式－Ｇｅ（Ｒ^a）$_3$のゲルマニル基からなる群から選択される１つ以上の置換基によってさらに置換されており；
ここで、各Ｒ’は、独立して、水素、Ｃ$_{1-20}$アルキル基、及びＣ$_{6-20}$アリール基からなる群から選択され；
ここで、各Ｒ^{a}は、独立して、水素、Ｃ$_{1-8}$アルキル基、Ｃ$_{1-8}$アルコキシ基、Ｃ$_{6-20}$アリールオキシ基及びＣ$_{6-20}$アリール基からなる群から選択される、プレメタル化化合物である。

【０４９２】

いくつかの実施形態では、Ｒ^7、Ｒ^8、Ｒ^{9}及びＲ^{10}は、各々独立して、ハロゲン；水素；Ｃ$_{1-30}$ヒドロカルビル基（このヒドロカルビル基は、非置換であるか、又はハロゲン原子、Ｃ$_{1-20}$アルキル基、Ｃ$_{1-20}$アルコキシ基、Ｃ$_{7-20}$アルキルアリール基、Ｃ$_{7-20}$アリールアルキル基、Ｃ$_{6-20}$アリール基、Ｃ$_{6-20}$アリールオキシ基、Ｃ$_{7-20}$アルキルアリールオキシ基、及びＣ$_{7-20}$アリールアルキルオキシ基からなる群から選択される１つ以上の置換基によってさらに置換されている）；並びにヘテロ原子含有Ｃ$_{1-30}$ヒドロカルビル基（このヘテロ原子含有ヒドロカルビル基は、非置換であるか、又はハロゲン原子、Ｃ$_{1-20}$アルキル基、Ｃ$_{1-20}$アルコキシ基、Ｃ$_{7-20}$アルキルアリール基、Ｃ$_{7-20}$アリールアルキル基、Ｃ$_{6-20}$アリール基、Ｃ$_{6-20}$アリールオキシ基、Ｃ$_{7-20}$アルキルアリールオキシ基、及びＣ$_{7-20}$アリールアルキルオキシ基からなる群から選択される１つ以上の置換基によってさらに置換されている）；からなる群から選択され；ここで、Ｒ^7、Ｒ^8、Ｒ^{9}及びＲ^{10}の２つの隣接する基は、任意に結合して環状ヒドロカルビル基又は環状ヘテロ原子含有ヒドロカルビル基を形成してもよく、環状ヒドロカルビル基又は環状ヘテロ原子含有ヒドロカルビル基は、非置換であるか、又はハロゲン原子、Ｃ$_{1-20}$アルキル基、Ｃ$_{1-20}$アルコキシ基、Ｃ$_{7-20}$アルキルアリール基、Ｃ$_{7-20}$アリールアルキル基、Ｃ$_{6-20}$アリール基、Ｃ$_{6-20}$アリールオキシ基、Ｃ$_{7-20}$アルキルアリールオキシ基、Ｃ$_{7-20}$アリールアルキルオキシ基、－ＮＲ’$_2$、アミド基、－ＰＲ’$_2$、ホスフィド基、－ＳＲ’、チオラート基、式－Ｓｉ（Ｒ^a）$_3$のシリル基、及び式－Ｇｅ（Ｒ^a）$_3$のゲルマニル基からなる群から選択される１つ以上の置換基によってさらに置換されており；ここで、各Ｒ’は、独立して、水素、Ｃ$_{1-20}$アルキル基、及びＣ$_{6-20}$アリール基からなる群から選択され；ここで、各Ｒ^{a}は、独立して、水素、Ｃ$_{1-8}$アルキル基、Ｃ$_{1-8}$アルコキシ基、Ｃ$_{6-20}$アリールオキシ基及びＣ$_{6-20}$アリール基からなる群から選択される。

【０４９３】

いくつかの実施形態では、Ｒ^7、Ｒ^8、Ｒ^{9}及びＲ^{10}は、各々独立して、ハロゲン；水素；並びにＣ$_{1-30}$ヒドロカルビル基（このヒドロカルビル基は、非置換であるか、

又はハロゲン原子、Ｃ１－２０アルキル基、Ｃ１－２０アルコキシ基、Ｃ７－２０アルキルアリール基、Ｃ７－２０アリールアルキル基、Ｃ６－２０アリール基、Ｃ６－２０アリールオキシ基、Ｃ７－２０アルキルアリールオキシ基、及びＣ７－２０アリールアルキルオキシ基からなる群から選択される１つ以上の置換基によってさらに置換されている）；からなる群から選択され；ここで、Ｒ７、Ｒ８、Ｒ９及びＲ１０の２つの隣接する基は、任意に結合して環状ヒドロカルビル基を形成してもよく、環状ヒドロカルビル基は、非置換であるか、又はハロゲン原子、Ｃ１－２０アルキル基、Ｃ１－２０アルコキシ基、Ｃ７－２０アルキルアリール基、Ｃ７－２０アリールアルキル基、Ｃ６－２０アリール基、Ｃ６－２０アリールオキシ基、Ｃ７－２０アルキルアリールオキシ基、Ｃ７－２０アリールアルキルオキシ基、－ＮＲ’2、アミド基、－ＰＲ’2、ホスフィド基、－ＳＲ’、チオラート基、式－Ｓｉ（Ｒａ）３のシリル基、及び式－Ｇｅ（Ｒａ）３のゲルマニル基からなる群から選択される１つ以上の置換基によってさらに置換されており；ここで、各Ｒ’は、独立して、水素、Ｃ１－２０アルキル基、及びＣ６－２０アリール基からなる群から選択され；ここで、各Ｒａは、独立して、水素、Ｃ１－８アルキル基、Ｃ１－８アルコキシ基、Ｃ６－２０アリールオキシ基及びＣ６－２０アリール基からなる群から選択される。

【０４９４】

いくつかの実施形態では、Ｒ７、Ｒ８、Ｒ９及びＲ１０は、各々独立して、ハロゲン；水素；並びにヘテロ原子含有Ｃ１－３０ヒドロカルビル基（このヘテロ原子含有ヒドロカルビル基は、非置換であるか、又はハロゲン原子、Ｃ１－２０アルキル基、Ｃ１－２０アルコキシ基、Ｃ７－２０アルキルアリール基、Ｃ７－２０アリールアルキル基、Ｃ６－２０アリール基、Ｃ６－２０アリールオキシ基、Ｃ７－２０アルキルアリールオキシ基、及びＣ７－２０アリールアルキルオキシ基からなる群から選択される１つ以上の置換基によってさらに置換されている）；からなる群から選択され；ここで、Ｒ７、Ｒ８、Ｒ９及びＲ１０の２つの隣接する基は、任意に結合して環状ヘテロ原子含有ヒドロカルビル基を形成してもよく、環状ヘテロ原子含有ヒドロカルビル基は、非置換であるか、又はハロゲン原子、Ｃ１－２０アルキル基、Ｃ１－２０アルコキシ基、Ｃ７－２０アルキルアリール基、Ｃ７－２０アリールアルキル基、Ｃ６－２０アリール基、Ｃ６－２０アリールオキシ基、Ｃ７－２０アルキルアリールオキシ基、Ｃ７－２０アリールアルキルオキシ基、－ＮＲ’2、アミド基、－ＰＲ’2、ホスフィド基、－ＳＲ’、チオラート基、式－Ｓｉ（Ｒａ）３のシリル基、及び式－Ｇｅ（Ｒａ）３のゲルマニル基からなる群から選択される１つ以上の置換基によってさらに置換されており；ここで、各Ｒ’は、独立して、水素、Ｃ１－２０アルキル基、及びＣ６－２０アリール基からなる群から選択され；ここで、各Ｒａは、独立して、水素、Ｃ１－８アルキル基、Ｃ１－８アルコキシ基、Ｃ６－２０アリールオキシ基及びＣ６－２０アリール基からなる群から選択される。

【０４９５】

いくつかの実施形態では、Ｒ７、Ｒ８、Ｒ９及びＲ１０は、各々独立して、ハロゲン、水素、Ｃ１－３０アルキル基、Ｃ１－３０アルコキシ基、Ｃ７－３０アルキルアリール基、Ｃ７－３０アリールアルキル基、Ｃ６－３０アリール基、Ｃ６－３０アリールオキシド基、Ｃ７－３０アルキルアリールオキシ基、及びＣ７－３０アリールアルキルオキシ基からなる群から選択される。

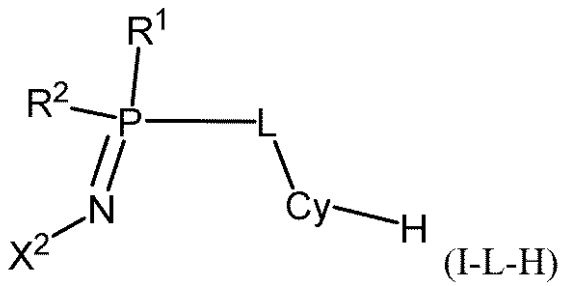
【０４９６】

いくつかの実施形態では、Ｒ７、Ｒ８、Ｒ９及びＲ１０は、各々独立して、ハロゲン、水素、Ｃ１－２０アルキル基、Ｃ１－２０アルコキシ基、Ｃ７－２０アルキルアリール基、Ｃ７－２０アリールアルキル基、Ｃ６－２０アリール基、Ｃ６－２０アリールオキシド基、Ｃ７－２０アルキルアリールオキシ基、及びＣ７－２０アリールアルキルオキシ基からなる群から選択される。

【０４９７】

いくつかの実施形態では、Ｒ７、Ｒ８、Ｒ９及びＲ１０は、各々独立して、ハロゲン、水素、及びＣ１－３０ヒドロカルビル基からなる群から選択され、このヒドロカルビル基は、非置換であるか、又は１つ以上のハロゲン原子によってさらに置換されている。

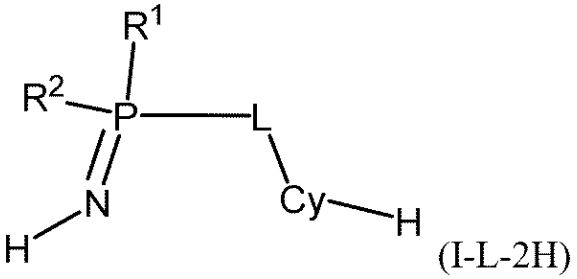
【０４９８】
いくつかの実施形態では、R^7、R^8、R^9及びR^{10}は、各々独立して、ハロゲン、水素、及びC_{1-30}ヘテロ原子含有ヒドロカルビル基からなる群から選択され、このヘテロ原子含有ヒドロカルビル基は、非置換であるか、又は１つ以上のハロゲン原子によってさらに置換されている。
【０４９９】
いくつかの実施形態では、R^7、R^8、R^9及びR^{10}は、各々独立して、水素及びC_{1-30}ヒドロカルビル基からなる群から選択され、このヒドロカルビル基は、非置換であるか、又は１つ以上のハロゲン原子によってさらに置換されている。
【０５００】
いくつかの実施形態では、R^7、R^8、R^9及びR^{10}は、各々独立して、水素及びC_{1-30}ヘテロ原子含有ヒドロカルビル基からなる群から選択され、このヘテロ原子含有ヒドロカルビル基は、非置換であるか、又は１つ以上のハロゲン原子によってさらに置換されている。
【０５０１】
いくつかの実施形態では、R^7、R^8、R^9及びR^{10}は、各々水素である。
【０５０２】
＜メタル化反応＞
本開示の一実施形態は、有機金属錯体（プレ重合触媒）を作製するプロセスであって、当該プロセスは、式Ｉ－Ｌ－Ｈ：
【化１２８】



(I-L-H)

で表される化合物を、式MX^*_4を有する第４族遷移金属化合物と反応させることを含み、
式中、
Ｍは、Ｔｉ、Ｚｒ又はＨｆであり；
各X^*は、独立して、ハロゲン、水素、式－NR^E_2のアミド基、C_{1-20}アルキル基、C_{1-20}アルコキシ基、C_{7-20}アルキルアリール基、C_{7-20}アリールアルキル基、C_{6-20}アリール基、C_{6-20}アリールオキシド基、C_{7-20}アルキルアリールオキシ基、及びC_{7-20}アリールアルキルオキシ基からなる群から選択され；ここで、各R^Eは、独立して、水素、C_{1-20}アルキル基、及びC_{6-20}アリール基からなる群から選択され；
X^2は、式－Ｓｉ（R^e）$_3$のシリル基であり、ここで、各R^eは、独立して、水素、C_{1-8}アルキル基、C_{1-8}アルコキシ基、C_{6-20}アリールオキシ基、及びC_{6-20}アリール基からなる群から選択され；
式中、R^1、R^2、Ｌ、及びＣｙは、上記式Ｉ－Ｌで定義した通りである。
【０５０３】
本開示の一実施形態は、有機金属錯体（プレ重合触媒）を作製するプロセスであって、当該プロセスは、式Ｉ－Ｌ－２Ｈ：

【化１２９】



(I-L-2H)

で表される化合物を塩基と反応させ、次いで、式ＭＸ＊$_4$を有する第４族遷移金属化合物と反応させることを含み、

式中、

Ｍは、Ｔｉ、Ｚｒ又はＨｆであり；

各Ｘ＊は、独立して、ハロゲン、水素、式－ＮＲ$^E_2$のアミド基、Ｃ$_{1-20}$アルキル基、Ｃ$_{1-20}$アルコキシ基、Ｃ$_{7-20}$アルキルアリール基、Ｃ$_{7-20}$アリールアルキル基、Ｃ$_{6-20}$アリール基、Ｃ$_{6-20}$アリールオキシド基、Ｃ$_{7-20}$アルキルアリールオキシ基、及びＣ$_{7-20}$アリールアルキルオキシ基からなる群から選択され；ここで、各Ｒ^{E}は、独立して、水素、Ｃ$_{1-20}$アルキル基、及びＣ$_{6-20}$アリール基からなる群から選択され；

式中、Ｒ^1、Ｒ^2、Ｌ、及びＣｙは、上記式Ｉ－Ｌで定義した通りである。

【０５０４】

実施形態では、各Ｘ＊は、ハロゲンである。

実施形態では、各Ｘ＊は、塩化物である。

【０５０５】

実施形態では、各Ｒ^{e}は、メチルである。

【０５０６】

実施形態では、Ｍは、Ｔｉである。

実施形態では、Ｍは、Ｈｆである。

【０５０７】

いくつかの実施形態では、ＭＸ＊$_4$は、ＴｉＣｌ$_4$である。

いくつかの実施形態では、ＭＸ＊$_4$は、Ｔｉ（ＮＭｅ$_2$）Ｃｌ$_2$である。

いくつかの実施形態では、ＭＸ＊$_4$は、Ｔｉ（ＮＭｅ$_2$）$_4$である。

【０５０８】

いくつかの実施形態では、各Ｘ＊は、独立して、ハロゲン原子及び式－ＮＲ$^E_2$を有するアミド基からなる群から選択され、Ｒ^{E}基は、独立して、水素原子、Ｃ$_{1-10}$アルキル基及びＣ$_{6-10}$アリール基からなる群から選択される。

いくつかの実施形態では、各Ｘ＊は、独立して、塩化物原子及び式－ＮＲ$^E_2$を有するアミド基からなる群から選択され、Ｒ^{E}基は、独立して、水素原子、Ｃ$_{1-10}$アルキル基及びＣ$_{6-10}$アリール基からなる群から選択される。

いくつかの実施形態では、各Ｘ＊は、独立して、塩化物及びジメチルアミド基（－ＮＭｅ$_2$）からなる群から選択される。

実施形態では、各Ｘ＊は、ジメチルアミド基（－ＮＭｅ$_2$）である。

【０５０９】

実施形態では、Ｘ^{2}は、トリメチルシリル基、－ＳｉＭｅ$_3$である。

【０５１０】

本開示の実施形態では、メタル化反応（有機金属錯体の生成用）に使用できる塩基としては、有機アルカリ金属化合物が挙げられ、例えば、メチルリチウム、エチルリチウム、ｎ－ブチルリチウム、ｓｅｃ－ブチルリチウム、ｔｅｒｔ－ブチルリチウム、リチウムト

リメチルシリルアセチリド、リチウムアセチリド、トリメチルシリルメチルリチウム、ビニルリチウム、フェニルリチウム、アリルリチウムなどの有機リチウム化合物などが挙げられる。

【０５１１】

実施形態では、使用される塩基の量は、式Ｉ－Ｌ－２Ｈを有する化合物１モルあたり０．５～５モルの塩基の範囲とすることができる。さらなる実施形態では、使用される塩基の量は、式Ｉ－Ｌ－２Ｈを有する化合物１モルあたり１．０～３．０モルの塩基の範囲とすることができ、又は式Ｉ－Ｌ－２Ｈを有する化合物１モルあたり１．５～２．５モルの塩基の範囲とすることができ、又は式Ｉ－Ｌ－２Ｈを有する化合物１モルあたり１．８～２．３モルの塩基の範囲とすることができ、又は式Ｉ－Ｌ－２Ｈを有する化合物１モルあたり約２モルの塩基とすることができる。

【０５１２】

いくつかの実施形態では、塩基は、アミン化合物と組み合わせて使用してもよい。このようなアミン化合物としては、メチルアミン、エチルアミン、ｎ－プロピルアミン、イソプロピルアミン、ｎ－ブチルアミン、ｔｅｒｔ－ブチルアミン、ｎ－オクチルアミン、ｎ－デシルアミン、アニリン及びエチレンジアミン等の第一級アミン化合物、ジメチルアミン、ジエチルアミン、ジ－ｎ－プロピルアミン、ジ－ｎ－ブチルアミン、ジ－ｔｅｒｔ－ブチルアミン、ジ－ｎ－オクチルアミン、ジ－ｎ－デシルアミン、ピロリジン、ヘキサメチルジシラザン及びジフェニルアミン等の第二級アミン化合物、トリメチルアミン、トリエチルアミン、トリ－ｎ－プロピルアミン、トリ－ｎ－ブチルアミン、ジイソプロピルエチルアミン、トリ－ｎ－オクチルアミン、トリ－ｎ－デシルアミン、トリフェニルアミン、Ｎ，Ｎ－ジメチルアニリン、Ｎ，Ｎ，Ｎ’，Ｎ’－テトラメチルエチレンジアミン、Ｎ－メチルピロリジン、４－ジメチルアミノピリジン等の第三級アミン化合物が挙げられる。

【０５１３】

このようなアミン化合物の使用量は、本開示の実施形態では、塩基１モルあたりアミン化合物１０モル以下、０．５～１０モル、又は１～３モルの範囲である。

【０５１４】

メタル化反応は、一般に不活性溶媒中で行われる。実施形態では、このような溶媒としては、非プロトン性溶媒が挙げられ、例えば、ベンゼンやトルエンなどの芳香族炭化水素溶媒、ヘキサンやヘプタンなどの脂肪族炭化水素溶媒、ジエチルエーテル、テトラヒドロフラン、１，４－ジオキサンなどのエーテル溶媒、ヘキサメチルリン酸アミド、ジメチルホルムアミドなどのアミド溶媒、アセトニトリル、ジクロロメタン、１，２－ジクロロエタン、プロピオニトリル、アセトン、ジエチルケトン、メチルイソブチルケトン、シクロヘキサノンなどの極性溶媒、クロロベンゼン、ジクロロベンゼンなどのハロゲン化溶媒などが挙げられる。実施形態では、これらの溶媒は、単独で使用してもよいし、又は２種以上の混合物として使用してもよい。

【０５１５】

メタル化反応は、一般に、式Ｉ－Ｌ－Ｈを有する化合物と式MX^*_4を有する第４族遷移金属化合物を、溶媒に添加することによって行うことができ、本開示の様々な実施形態で使用するために、様々な順序での化合物添加が考慮されている。いくつかの実施形態では、式Ｉ－Ｌ－Ｈを有する化合物と式MX^*_4を有する第４族遷移金属化合物を同時に添加してもよい。

【０５１６】

メタル化反応は、一般に、式Ｉ－Ｌ－２Ｈを有する化合物と塩基を、溶媒に添加し、その後、式MX^*_4を有する第４族遷移金属化合物を添加することによって行うことができるが、本開示の様々な実施形態で使用するために、他の順序での化合物添加も考慮されている。いくつかの実施形態では、式Ｉ－Ｌ－２Ｈを有する化合物と塩基を、溶媒に添加した後、沈殿する可能性のある固体を反応系から除去し、次いで、上記と同じ溶媒に添加し、その後、式MX^*_4を有する第４族遷移金属化合物をそこに添加してもよい。いくつかの実施形態では、式Ｉ－Ｌ－２Ｈを有する化合物、塩基、及び式MX^*_4を有する第４族

遷移金属化合物を同時に添加してもよい。

【０５１７】

実施形態では、有機金属錯体は、このようにして得られた反応混合物から従来の方法を用いて反得られてもよく、従来の方法としては、例えば、生成された沈殿物をろ過するか、真空下で溶媒を除去して有機金属錯体を生成物として得ることが挙げられ、任意に溶媒で洗浄することができる。

【０５１８】

＜有機金属錯体前駆体＞

本開示のいくつかの実施形態では、理論に縛られることを望まないが、式ＩからＩＸで表される有機金属錯体は、式Ｉ－Ｍ（以下に示す）で表される有機金属錯体から、１つ以上の試薬（X^3及び１つの活性化可能なX^1配位子の消失を促進する試薬）の存在下で、その場で形成され、その結果、シクロペンタジエニル型部分が、η結合を介して、シクロペンタジエニル型配位子として金属中心Ｍに配位することができる。

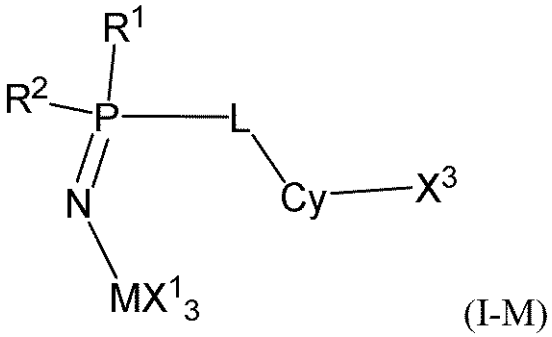
【０５１９】

X^3の消失を促進することができる試薬は、本開示のいくつかの実施形態では、以下に記載される触媒活性剤及び共触媒であり、ホウ素系活性剤、アルキルアルミノキサン共触媒、及び有機アルミニウム化合物が挙げられる。

【０５２０】

それに応じて、本開示のさらなる実施形態では、プレ重合触媒は、式Ｉ－Ｍ：

【化１３０】



(I-M)

で表される有機金属錯体であり、

式中、Ｍ、R^1、R^2、Ｌ、及びX^1は、上記式Ｉで定義した通りであり、Ｃｙ及びX^3は、上記式Ｉ－Ｌで定義した通りである。

【０５２１】

本開示の実施形態では、X^3は水素である。

【０５２２】

＜オレフィン重合触媒系＞

オレフィン重合触媒系では、有機金属錯体（プレ重合触媒）は、触媒活性剤と組み合わせて使用され、オレフィン重合用の活性重合触媒を形成する。理論に縛られることを望まないが、触媒活性剤は、プレ重合触媒の金属中心から活性化可能な配位子を引き抜くことによって（例えば、プロトン分解又は求電子抽出によって）、活性な「カチオン」金属中心を生成する。

【０５２３】

プレ重合触媒を活性化するために使用される触媒活性剤（「共触媒」とも呼ばれる）は、当業者に知られている任意の適切な触媒活性剤（又は共触媒）であってもよく、いわゆるイオン性活性剤からなる群から選択される１つ以上の活性剤を含み、イオン性活性剤には、ホウ素系活性剤、アルキルアルミノキサン、及び有機アルミニウム化合物が含まれる。

【０５２４】

触媒活性剤は、アルキル化剤と一緒に任意に使用してもよく、当技術分野でもよく知られており、アルキルアルミノキサン化合物、有機アルミニウム化合物、及びジアルキル亜鉛化合物を含む。

【０５２５】

ホウ素系触媒活性剤は、「イオン性活性剤」としても知られており、当業者によく知られている。アルキルアルミノキサンは、触媒活性剤又は共触媒としても機能することができ、当業者によく知られている。

【０５２６】

理論に縛られることを望まないが、アルキルアルミノキサンなどのアルミニウム系の種、及び有機アルミニウム化合物は、それ自体が触媒活性剤として、及び／又はアルキル化剤として、及び／又は捕捉化合物として作用する可能性がある（例えば、それらは、重合反応器内に存在する可能性のある、有機金属錯体の重合活性に悪影響を与える種と反応する）。

【０５２７】

本開示の一実施形態では、有機金属錯体（プレ重合触媒）に加えて、オレフィン重合触媒系は、少なくとも１つのホウ素系触媒活性剤を含む。

本開示の一実施形態では、有機金属錯体（プレ重合触媒）に加えて、オレフィン重合触媒系は、少なくとも１つのホウ素系触媒活性剤、及び少なくとも１つのアルキルアルミノキサン共触媒を含む。

【０５２８】

本開示のいくつかの実施形態では、オレフィン重合触媒系は、共触媒として有機アルミニウム化合物をさらに含んでもよい。

本開示のいくつかの実施形態では、オレフィン重合触媒系は、ヒンダードフェノール化合物をさらに含んでもよい。

【０５２９】

理論に縛られることを望まないが、本開示で使用されるアルキルアルミノキサンは、式：$R_2Al^1O(RAl^1O)_mAl^1R_2$の複合アルミニウム化合物であり、式中、各Ｒは、独立して、C_{1-20}ヒドロカルビル基からなる群から選択され、ｍは３～５０である。

【０５３０】

本開示の一実施形態では、アルキルアルミノキサンのＲはメチル基であり、ｍは１０～４０である。

【０５３１】

アルキルアルミノキサンは、典型的には、有機金属錯体（例えば、プレ重合触媒）中の第４族遷移金属の量と比較して、相当なモル過剰で使用される。実施形態では、Al^1：第４族遷移金属のモル比は、約５：１から約１０，０００：１、又は約１０：１から約１０００：１、又は約３０：１から約５００：１であってもよい。

【０５３２】

当業者であれば、重合プロセス中に存在する不純物を除去（又は滴定除去）するために、有機金属錯体中の第４族遷移金属に対するアルキルアルミノキサンの使用量を最適化できることが分かるであろう。いくつかの実施形態では、Al^1：第４族遷移金属のモル比は、オレフィン重合触媒系の活性を最大化するように最適化されており、約０．１：１から１００：１超又は１００：１超の範囲であってもよい。

【０５３３】

本開示の一実施形態では、アルキルアルミノキサン共触媒は、メチルアルミノキサン（ＭＡＯ）である。

本開示の一実施形態では、アルキルアルミノキサン共触媒は、修飾メチルアルミノキサン（ＭＭＡＯ）である。

【０５３４】

アルキルアルミノキサンは、触媒アルキル化剤、触媒活性剤、及び捕捉剤として複数の

役割を果たすことができ、このことは当技術分野でよく知られている。したがって、アルキルアルミノキサン活性剤は、ハロゲンなどの活性化可能な配位子と組み合わせて使用されることが多い。

【０５３５】

ホウ素系触媒活性剤（いくつかの実施形態では「イオン性活性剤」としても知られる）は、以下からなる群から選択されてもよい：（ｉ）式［Ｒ^{34}］$^{+}$［Ｂ（Ｒ^{35}）$_{4}$］$^{-}$の化合物（式中、Ｂは、ホウ素原子であり、Ｒ^{34}は、環状Ｃ$_{5-7}$芳香族カチオン又はトリフェニルメチルカチオンであり、各Ｒ^{35}は、独立して、フェニル基と式－Ｓｉ－（Ｒ*）$_{3}$のシリル基とからなる群から選択され、ここで、当該フェニル基は、非置換であるか又は３～５個の置換基（フッ素原子、非置換であるか、又はフッ素原子で置換されたＣ$_{1-4}$アルキル又はアルコキシ基からなる群から選択される置換基）で置換されており、シリル基中の各Ｒ*は、独立して、水素原子及びＣ$_{1-4}$アルキル基からなる群から選択される）、（ｉｉ）式［（Ｒ^{36}）$_{t}$ＺＨ］$^{+}$［Ｂ（Ｒ^{35}）$_{4}$］$^{-}$の化合物（式中、Ｂはホウ素原子であり、Ｈは、水素原子であり、Ｚは、窒素原子又はリン原子であり、ｔは２又は３であり、Ｒ^{36}は、Ｃ$_{1-30}$アルキル基、非置換であるか又は最大３つのＣ$_{1-4}$アルキル基で置換されているフェニル基からなる群から選択され、窒素原子と一緒になって１つのＲ^{36}がアニリニウム基を形成してもよく、Ｒ^{35}は、上記で定義される通りである）、（ｉｉｉ）式Ｂ（Ｒ^{35}）$_{3}$の化合物（式中、Ｒ^{35}は、上記で定義される通りである）、及びその付加物、例えばヒドロシラン－Ｂ（Ｃ$_{6}$Ｆ$_{5}$）$_{3}$。

【０５３６】

いくつかの実施形態では、上記化合物において、好ましくは、Ｒ^{35}はペンタフルオロフェニル基であり、Ｒ^{34}はトリフェニルメチルカチオンであり、Ｚは窒素原子であり、Ｒ^{36}はＣ$_{1-4}$アルキル基であるか、又は１つのＲ^{36}が窒素原子と一緒になってアニリニウム基（例えば、２つのＣ$_{1-4}$アルキル基などの２つのＲ^{36}基によって置換されているＰｈＲ$^{36}{}_{2}$ＮＨ$^{+}$）を形成する。

【０５３７】

シングルサイト触媒（例えば、プレ重合触媒）をイオン化することができ、本開示の実施形態で使用できる、ホウ素系触媒活性剤化合物の例としては、以下のものが挙げられる：トリエチルアンモニウムテトラ（フェニル）ホウ素、トリプロピルアンモニウムテトラ（フェニル）ホウ素、トリ（ｎ－ブチル）アンモニウムテトラ（フェニル）ホウ素、トリメチルアンモニウムテトラ（ｐ－トリル）ホウ素、トリメチルアンモニウムテトラ（ｏ－トリル）ホウ素、トリブチルアンモニウムテトラキス（ペンタフルオロフェニル）ホウ素、トリプロピルアンモニウムテトラキス（ｏ，ｐ－ジメチルフェニル）ホウ素、トリブチルアンモニウムテトラキス（ｍ，ｍ－ジメチルフェニル）ホウ素、トリブチルアンモニウムテトラキス（ｐ－トリフルオロメチルフェニル）ホウ素、トリブチルアンモニウムテトラキス（ペンタフルオロフェニル）ホウ素、トリ（ｎ－ブチル）アンモニウムテトラ（ｏ－トリル）ホウ素、Ｎ，Ｎ－ジメチルアニリニウムテトラ（フェニル）ホウ素、Ｎ，Ｎ－ジエチルアニリニウムテトラ（フェニル）ホウ素、Ｎ，Ｎ－ジエチルアニリニウムテトラ（フェニル）ｎ－ブチルホウ素、Ｎ，Ｎ－２，４，６－ペンタメチルアニリニウムテトラ（フェニル）ホウ素、ジ（イソプロピル）アンモニウムテトラキス（ペンタフルオロフェニル）ホウ素、ジシクロヘキシルアンモニウムテトラ（フェニル）ホウ素、トリフェニルホスホニウムテトラ（フェニル）ホウ素、トリ（メチルフェニル）ホスホニウムテトラ（フェニル）ホウ素、トリ（ジメチルフェニル）ホスホニウムテトラ（フェニル）ホウ素、トロピリウムテトラキス（ペンタフルオロフェニル）ボレート、トリフェニルメチリウムテトラキスペンタフルオロフェニルボレート、ベンゼン（ジアゾニウム）テトラキス（ペンタフルオロフェニル）ボレート、トロピリウムフェニルトリス（ペンタフルオロフェニル）ボレート、トリフェニルメチリウムフェニルトリス（ペンタフルオロフェニル）ボレート、ベンゼン（ジアゾニウム）フェニルトリス（ペンタフルオロフェニル）ボレート、トロピリウムテトラキス（２，３，５，６－テトラフルオロフェニル）ボレート、トリフェニルメチリウムテトラキス（２，３，５，６－テトラフルオロフェニル）ボレート、ベ

ンゼン（ジアゾニウム）テトラキス（３，４，５－トリフルオロフェニル）ボレート、トロピリウムテトラキス（３，４，５－トリフルオロフェニル）ボレート、ベンゼン（ジアゾニウム）テトラキス（３，４，５－トリフルオロフェニル）ボレート、トロピリウムテトラキス（１，２，２－トリフルオロエテニル）ボレート、トリフェニルメチリウムテトラキス（１，２，２－トリフルオロエテニル）ボレート、ベンゼン（ジアゾニウム）テトラキス（１，２，２－トリフルオロエテニル）ボレート、トロピリウムテトラキス（２，３，４，５－テトラフルオロフェニル）ボレート、トリフェニルメチリウムテトラキス（２，３，４，５－テトラフルオロフェニル）ボレート、及びベンゼン（ジアゾニウム）テトラキス（２，３，４，５－テトラフルオロフェニル）ボレート。

【０５３８】

シングルサイト触媒（例えば、プレ重合触媒）をイオン化することができ、本開示の実施形態で使用できる、ホウ素系触媒活性剤化合物のさらなる具体例は、米国特許第５，９１９，９８３号、第６，１２１，１８５号、第１０，７３０，９６４号及び第１１，０４１，０３１号に開示されている。ホウ素系触媒活性剤、［（水素化牛脂アルキル）$_2$（Ｍｅ）ＮＨ］［Ｂ（C_6F_5）$_4$］は、「ビス（水素化牛脂アルキル）メチルアンモニウムテトラキス（ペンタフルオロフェニル）ボレート」としても知られており、式は［（$C_{18-22}H_{37-45}$）$_2$（Ｍｅ）ＮＨ］［Ｂ（C_6F_5）$_4$］である。

【０５３９】

本開示の実施形態では、ホウ素系触媒活性剤は、［（水素化牛脂アルキル）$_2$（Ｍｅ）ＮＨ］［Ｂ（C_6F_5）$_4$］、及び／又はＮ，Ｎ－ジメチルアニリニウムテトラキス（ペンタフルオロフェニル）ボレート（「［Me_2NHPh］［Ｂ（C_6F_5）$_4$］」）、及び／又はトリフェニルメチリウムテトラキス（ペンタフルオロフェニル）ボレート（「［Ph_3C］［Ｂ（C_6F_5）$_4$］」）、及び／又はトリス（ペンタフルオロフェニル）ボロンを含む。

【０５４０】

本開示の実施形態では、ホウ素系触媒活性剤は、［（水素化牛脂アルキル）$_2$（Ｍｅ）ＮＨ］［Ｂ（C_6F_5）$_4$］、又はＮ，Ｎ－ジメチルアニリニウムテトラキス（ペンタフルオロフェニル）ボレート（「［Me_2NHPh］［Ｂ（C_6F_5）$_4$］」）、又はトリフェニルメチリウムテトラキス（ペンタフルオロフェニル）ボレート（「［Ph_3C］［Ｂ（C_6F_5）$_4$］」）、又はトリス（ペンタフルオロフェニル）ボロンを含む。

【０５４１】

本開示の実施形態では、ホウ素系触媒活性剤は、Ｎ，Ｎ－ジメチルアニリニウムテトラキス（ペンタフルオロフェニル）ボレート（「［Me_2NHPh］［Ｂ（C_6F_5）$_4$］」）、及び／又はトリフェニルメチリウムテトラキス（ペンタフルオロフェニル）ボレート（「［Ph_3C］［Ｂ（C_6F_5）$_4$］」）、及び／又はトリス（ペンタフルオロフェニル）ボロンを含む。

【０５４２】

本開示の実施形態では、ホウ素系触媒活性剤は、Ｎ，Ｎ－ジメチルアニリニウムテトラキス（ペンタフルオロフェニル）ボレート（「［Me_2NHPh］［Ｂ（C_6F_5）$_4$］」）、又はトリフェニルメチリウムテトラキス（ペンタフルオロフェニル）ボレート（「［Ph_3C］［Ｂ（C_6F_5）$_4$］」）、又はトリス（ペンタフルオロフェニル）ボロンを含む。

本開示の一実施形態では、ホウ素系触媒活性剤は、［（水素化牛脂アルキル）$_2$（Ｍｅ）ＮＨ］［Ｂ（C_6F_5）$_4$］、Ｎ，Ｎ－ジメチルアニリニウムテトラキス（ペンタフルオロフェニル）ボレート（「［Me_2NHPh］［Ｂ（C_6F_5）$_4$］」）、及びトリフェニルメチリウムテトラキス（ペンタフルオロフェニル）ボレート（「［Ph_3C］［Ｂ（C_6F_5）$_4$］」）からなる群から選択されるイオン性活性剤を含む。

【０５４３】

本開示の一実施形態では、ホウ素系触媒活性剤は、Ｎ，Ｎ－ジメチルアニリニウムテトラキス（ペンタフルオロフェニル）ボレート（「［Me_2NHPh］［Ｂ（C_6F_5）$_4$

］」）である。
【０５４４】
本開示の一実施形態では、ホウ素系触媒活性剤は、トリフェニルメチリウムテトラキス（ペンタフルオロフェニル）ボレート（「［Ph_3C］［$B(C_6F_5)_4$］」）である。
【０５４５】
本開示の一実施形態では、ホウ素系触媒活性剤は、［（水素化牛脂アルキル）$_2$（Ｍｅ）ＮＨ］［$B(C_6F_5)_4$］である。
【０５４６】
本開示の一実施形態では、ホウ素系触媒活性剤は、トリヒドロカルビルアンモニウムテトラキス（ペンタフルオロフェニル）ボレート（［R^Z_3NH］［$B(C_6F_5)_4$］）であり、ここで、各R^Zは、独立して、C_{1-40}分岐状アルキル基、C_{1-40}直鎖状アルキル基、又はC_{6-30}アリール基であり、ここで、分岐状アルキル基、直鎖状アルキル基、又はアリール基の各々は、非置換であるか、又は１つ以上のハロゲン、C_{1-30}アルキル基、C_{6-20}アリール基、C_{6-20}アリールオキシド基、C_{7-20}アルキルアリールオキシ基、及び／又はC_{7-20}アリールアルキルオキシ基によってさらに置換されている。
【０５４７】
実施形態では、ホウ素系触媒活性剤は、第４族遷移金属（例えば、プレ重合触媒中のチタン又はハフニウム）とホウ素のモル比が約１：０．５から約１：１０、又は約１：１から約１：６となる量で使用してもよい。
【０５４８】
任意選択で、本開示の実施形態では、オレフィン重合触媒系は、式：
$Al(R^{37})_m(OR^{38})_n(X¥)_p$
で定義される有機アルミニウム化合物をさらに含んでもよく、式中、R^{37}及びR^{38}は、各々独立して、C_1～C_{20}のヒドロカルビル基であり、X¥はハロゲン化物であり、ｍ＋ｎ＋ｐ＝３であり、ｍ＞１である。
【０５４９】
本開示の一実施形態では、使用される有機アルミニウム化合物は、式：
$Al(R^{37})_x(OR^{38})_y$
で定義され、式中、ｘは１～３であり、ｘ＋ｙ＝３であり、R^{37}はC_1～C_{10}のヒドロカルビル基であり、R^{38}はアルキル基又はアリール基である。
【０５５０】
本開示の一実施形態では、使用される有機アルミニウム化合物は、式：
$Al(R^{37})_3$
で定義され、式中、R^{37}はC_1～C_{20}のヒドロカルビル基である。
【０５５１】
本開示の一実施形態では、使用される有機アルミニウム化合物は、式：
$Al(R^{37})_3$
で定義され、式中、R^{37}はC_{6-20}のアリール基であり、このアリール基は、非置換であるか、又は１つ以上のフッ素で置換されている。
【０５５２】
特定の実施形態では、有機アルミニウム化合物としては、トリエチルアルミニウム、トリイソブチルアルミニウム、トリ－ｎ－オクチルアルミニウム及びジエチルアルミニウムエトキシドが挙げられる。
【０５５３】
任意選択で、本開示の実施形態では、オレフィン重合触媒系は、式：
$Zn(R^{39})_2$
で定義されるジアルキル亜鉛化合物をさらに含んでもよく、式中、各R^{39}は、独立して、C_1～C_{20}のアルキル基である。

【０５５４】
任意選択で、本開示の実施形態では、オレフィン重合触媒系は、ヒンダードフェノール化合物をさらに含んでもよい。
【０５５５】
本開示の実施形態では、ヒンダードフェノール化合物を、有機金属錯体（プレ重合触媒）及びアルキルアルミノキサン共触媒と組み合わせて使用して、オレフィン重合触媒系を提供する。本開示の実施形態では、ヒンダードフェノール化合物を、有機金属錯体（プレ重合触媒）、アルキルアルミノキサン共触媒及び有機アルミニウム化合物と組み合わせて使用して、オレフィン重合触媒系を提供する。本開示の実施形態では、ヒンダードフェノール化合物を、有機金属錯体（プレ重合触媒）、ホウ素系触媒活性剤及びアルキルアルミノキサン共触媒と組み合わせて使用して、オレフィン重合触媒系を提供する。本開示の実施形態では、ヒンダードフェノール化合物を、有機金属錯体（プレ重合触媒）、ホウ素系触媒活性剤、アルキルアルミノキサン共触媒、及び有機アルミニウム化合物と組み合わせて使用して、オレフィン重合触媒系を提供する。本開示の実施形態では、ヒンダードフェノール化合物を、有機金属錯体（プレ重合触媒）、ホウ素系触媒活性剤、アルキルアルミノキサン共触媒、有機アルミニウム化合物及びジアルキル亜鉛化合物と組み合わせて使用して、オレフィン重合触媒系を提供する。
【０５５６】
一般に、ヒンダードフェノール化合物（又は「立体的にヒンダード」フェノール化合物）は、立体的にかさ高いヒドロカルビル基などの１つ以上のかさ高い置換基を有するフェノールであり、その非限定的な例としては、ｔｅｒｔ－ブチル基及び１－アダマンチル基が挙げられる。
【０５５７】
本開示の実施形態では、ヒンダードフェノール化合物は、ヒドロキシ基に結合した炭素原子に隣接する炭素原子の少なくとも一方又は両方に、立体的にかさ高いヒドロカルビル基を有する（例えば、かさ高いヒドロカルビル基が、ヒンダードフェノール部分の２位及び６位の一方又は両方に位置する）。
【０５５８】
本開示の実施形態では、ヒンダードフェノール化合物は、２，６－ジヒドロカルビル基置換ヒンダードフェノール部分を含む。
【０５５９】
本開示の実施形態では、ヒンダードフェノール化合物は、２，６－ジヒドロカルビル基置換ヒンダードフェノール部分を含み、この部分は、３、４、及び５の位置のうちの１つ以上で、ヒドロカルビル基又はヘテロ原子含有ヒドロカルビル基でさらに任意に置換されている。
【０５６０】
本開示の実施形態において使用され得るヒンダードフェノール化合物の非限定的な例としては、ブチル化フェノール系抗酸化剤、ブチル化ヒドロキシトルエン；２，６－ジ－ｔｅｒｔ－ブチル－４－エチルフェノール（「ＢＨＥＢ」）；４，４’－メチレンビス（２，６－ジ－ｔｅｒｔ－ブチルフェノール）；１，３，５－トリメチル－２，４，６－トリス（３，５－ジ－ｔｅｒｔ－ブチル－４－ヒドロキシベンジル）ベンゼン及びオクタデシル－３－（３’，５’－ジ－ｔｅｒｔ－ブチル－４’－ヒドロキシフェニル）プロピオネートが挙げられる。
【０５６１】
実施形態では、ヒンダードフェノール化合物は、アルキルアルミノキサン共触媒からのアルミニウムとヒンダードフェノール化合物とのモル比（すなわち、Al^{1}：ヒンダードフェノール化合物の比）が約１：１から約１０：１、又は約２：１から約５：１となる量で存在する。
【０５６２】
任意選択で、実施形態では、ヒンダードフェノール化合物を、アルキルアルミノキサン

共触媒に添加するか、又は有機アルミニウム化合物に添加し、この添加を、アルキルアルミノキサン又は有機アルミニウム化合物をオレフィン重合触媒系の１つ以上の他の成分（例えば、プレ重合触媒）と接触させる前に行う。

【０５６３】

本開示の一実施形態は、以下のものを含むオレフィン重合触媒系である：ｉ）上記の有機金属錯体（プレ重合触媒）と、ｉｉ）触媒活性剤。

【０５６４】

本開示の一実施形態は、以下のものを含むオレフィン重合触媒系である：ｉ）上記の有機金属錯体（プレ重合触媒）と、ｉｉ）アルキルアルミノキサン共触媒、有機アルミニウム化合物、ホウ素系触媒活性剤、及びそれらの混合物からなる群から選択される触媒活性剤。

【０５６５】

本開示の一実施形態は、以下のものを含むオレフィン重合触媒系である：ｉ）上記の有機金属錯体（プレ重合触媒）と、ｉｉ）ホウ素系触媒活性剤を含む触媒活性剤。

【０５６６】

本開示の一実施形態は、以下のものを含むオレフィン重合触媒系である：ｉ）上記の有機金属錯体（プレ重合触媒）と、ｉｉ）アルキルアルミノキサン共触媒を含む触媒活性剤。

【０５６７】

本開示の一実施形態は、以下のものを含むオレフィン重合触媒系である：ｉ）上記の有機金属錯体（プレ重合触媒）と、ｉｉ）有機アルミニウム化合物を含む触媒活性剤。

【０５６８】

本開示の一実施形態は、以下のものを含むオレフィン重合触媒系である：ｉ）上記の有機金属錯体（プレ重合触媒）と、ｉｉ）ホウ素系触媒活性剤及びアルキルアルミノキサン共触媒を含む触媒活性剤。

【０５６９】

本開示の一実施形態は、以下のものを含むオレフィン重合触媒系である：ｉ）上記の有機金属錯体（プレ重合触媒）と、ｉｉ）ホウ素系触媒活性剤及び有機アルミニウム化合物を含む触媒活性剤。

【０５７０】

本開示の一実施形態は、以下のものを含むオレフィン重合触媒系である：ｉ）上記の有機金属錯体（プレ重合触媒）と、ｉｉ）ホウ素系触媒活性剤、アルキルアルミノキサン共触媒、及び有機アルミニウム化合物を含む触媒活性剤。

【０５７１】

本開示の一実施形態は、以下のものを含むオレフィン重合触媒系である：ｉ）上記の有機金属錯体（プレ重合触媒）と、ｉｉ）ホウ素系触媒活性剤を含む触媒活性剤と、ｉｉｉ）ジアルキル亜鉛化合物。

【０５７２】

本開示の一実施形態は、以下のものを含むオレフィン重合触媒系である：ｉ）上記の有機金属錯体（プレ重合触媒）と、ｉｉ）ホウ素系触媒活性剤及びアルキルアルミノキサン共触媒を含む触媒活性剤と、ｉｉｉ）ジアルキル亜鉛化合物。

【０５７３】

本開示の一実施形態は、以下のものを含むオレフィン重合触媒系である：ｉ）上記の有機金属錯体（プレ重合触媒）と、ｉｉ）ホウ素系触媒活性剤、アルキルアルミノキサン共触媒、及び有機アルミニウム化合物を含む触媒活性剤と、ｉｉｉ）ジアルキル亜鉛化合物。

【０５７４】

本開示の一実施形態は、以下のものを含むオレフィン重合触媒系である：ｉ）上記の有機金属錯体（プレ重合触媒）と、ｉｉ）ホウ素系触媒活性剤及びアルキルアルミノキサン共触媒を含む触媒活性剤と、ｉｉｉ）ヒンダードフェノール化合物。

【０５７５】
本開示の一実施形態は、以下のものを含むオレフィン重合触媒系である：ｉ）上記の有機金属錯体（プレ重合触媒）と、ｉｉ）ホウ素系触媒活性剤、アルキルアルミノキサン共触媒、及び有機アルミニウム化合物を含む触媒活性剤と、ｉｉｉ）ヒンダードフェノール化合物。
【０５７６】
本開示の一実施形態は、以下のものを含むオレフィン重合触媒系である：ｉ）上記の有機金属錯体（プレ重合触媒）と、ｉｉ）ホウ素系触媒活性剤、アルキルアルミノキサン共触媒を含む触媒活性剤と、ｉｉｉ）ジアルキル亜鉛化合物と、ｉｖ）ヒンダードフェノール化合物。
【０５７７】
本開示の一実施形態は、以下のものを含むオレフィン重合触媒系である：ｉ）上記の有機金属錯体（プレ重合触媒）と、ｉｉ）ホウ素系触媒活性剤、アルキルアルミノキサン共触媒、及び有機アルミニウム化合物を含む触媒活性剤と、ｉｉｉ）ジアルキル亜鉛化合物と、ｉｖ）ヒンダードフェノール化合物。
【０５７８】
本開示の一実施形態は、以下のものを含むオレフィン重合触媒系である：ｉ）上記の有機金属錯体（プレ重合触媒）と、ｉｉ）アルキルアルミノキサン共触媒を含む触媒活性剤と、ｉｉｉ）ヒンダードフェノール化合物。
【０５７９】
本開示の一実施形態は、以下のものを含むオレフィン重合触媒系である：ｉ）上記の有機金属錯体（プレ重合触媒）と、ｉｉ）アルキルアルミノキサン共触媒及び有機アルミニウム化合物を含む触媒活性剤と、ｉｉｉ）ヒンダードフェノール化合物。
【０５８０】
＜重合プロセス＞
本開示の実施形態は、エチレンを、任意選択で１つ以上のアルファ－オレフィンと、上記のオレフィン重合触媒系の存在下で重合することを含む、重合プロセスである。
【０５８１】
本開示の実施形態は、エチレンを、任意選択で１つ以上のC_{3-12}アルファ－オレフィンと、上記のオレフィン重合触媒系の存在下で重合することを含む、重合プロセスである。
【０５８２】
本開示の別の実施形態は、１つ以上のアルファ－オレフィンを、上記のオレフィン重合触媒系の存在下で重合することを含む、重合プロセスである。
【０５８３】
本開示の別の実施形態は、１つ以上のC_{3-12}アルファ－オレフィン（例えばプロピレンなど）を、上記のオレフィン重合触媒系の存在下で重合することを含む、重合プロセスである。
【０５８４】
本開示のオレフィン重合触媒系は、気相重合、スラリー相重合、又は溶液相重合などの従来のオレフィン重合プロセスで使用することができる。実施形態では、気相重合及びスラリー相重合では「不均一化（ｈｅｔｅｒｏｇｅｎｉｚｅｄ）」触媒系の使用が好ましく、溶液相重合では均一触媒の使用が好ましい。不均一化触媒系は、プレ重合触媒、又はオレフィン重合触媒系の成分を、例えばシリカ支持体などの支持体に担持することによって形成できる。シリカ支持体材料及び適切な代替支持体材料は、当業者によく知られている。
【０５８５】
本開示の一実施形態では、重合プロセスは、エチレンを、任意に１つ以上のC_3～C_{12}アルファ－オレフィンと重合することを含む。
【０５８６】

本開示の一実施形態では、重合プロセスは、エチレンを、プロピレン、１－ブテン、１－ペンテン、１－ヘキセン、１－オクテン、１－デセン、及びそれらの混合物からなる群から選択される１つ以上のアルファ－オレフィンと重合することを含む。

【０５８７】

本開示の一実施形態では、重合プロセスは、エチレンを、１－ブテン、１－ヘキセン、１－オクテン、及びそれらの混合物からなる群から選択される１つ以上のアルファ－オレフィンと重合することを含む。

【０５８８】

本開示の一実施形態では、重合プロセスは、エチレンを、１－ブテン、１－ヘキセン、及び１－オクテンからなる群から選択される１つ以上のアルファ－オレフィンと重合することを含む。

【０５８９】

本開示の一実施形態では、重合プロセスは、エチレンを１－オクテンと重合することを含む。

【０５９０】

気相重合が使用される場合、様々な実施形態において、使用される圧力は、１～１０００ｐｓｉ、又は５０～４００ｐｓｉ、又は１００～３００ｐｓｉの範囲であってもよく、様々な実施形態において、使用される温度は、３０℃～１３０℃、又は６５℃～１１０℃の範囲であってもよい。本開示の実施形態では、気相重合プロセスに、撹拌床気相反応器システム又は流動床気相反応器システムを使用することができる。このような気相プロセスは文献に広く記載されている（例えば、米国特許第４，５４３，３９９号、第４，５８８，７９０号、第５，０２８，６７０号、第５，３１７，０３６号、第５，３５２，７４９号、第５，４０５，９２２号、第５，４３６，３０４号、第５，４５３，４７１号、第５，４６２，９９９号、第５，６１６，６６１号、及び第５，６６８，２２８号を参照）。１つ以上の反応器を使用してもよく、互いに直列に構成してもよい。

【０５９１】

一般に、流動床気相重合反応器は、モノマー（エチレンなど）、コモノマー（アルファ－オレフィンなど）、及び少なくとも部分的にガス状であるその他の任意の成分の流れによって流動化されるポリマー粒子及び触媒粒子（例えば、不均一化オレフィン重合触媒系粒子又は不均一化オレフィン重合触媒系成分粒子）の「床（ｂｅｄ）」を使用する。熱は、流動床を流れるモノマー（及びコモノマー）の重合エンタルピーによって発生する。未反応のモノマー、コモノマー、及びその他の任意のガス状成分は流動床から出て、この熱を除去するために冷却システムと接触する。モノマー、コモノマー、及び任意のその他の成分（凝縮性液体など）を含む冷却されたガス流は、その後、前のパスで重合されたものを置き換えるための「補充」モノマー（及びコモノマー）とともに、重合ゾーンを通って再循環される。同時に、ポリマー生成物が反応器から取り出される。当業者には理解されるように、重合床の「流動化」特性は、反応熱を均一に分配／混合するのに役立ち、それによって局所的な温度勾配の形成を最小限に抑える。

【０５９２】

重合は、一般に、触媒毒が実質的に存在しない状態で行われる。触媒活性を高めるために、有機アルミニウム化合物などの化合物を触媒毒の捕捉剤として使用してもよい。捕捉剤の特定の非限定的な例としては、トリイソブチルアルミニウムなどのアルミニウムアルキルを含む金属アルキルが挙げられる。所望のポリオレフィンを形成する際に重合触媒の作用を妨げない限り、従来の補助剤をプロセスに含めることができる。例えば、水素又は金属又は非金属水素化物（例えば、シリル水素化物）を、プロセスにおける連鎖移動剤として使用することができる。実施形態では、水素を、総モノマー供給量１モルあたり最大約１０モルの水素の量で使用することができる。

【０５９３】

スラリー相重合プロセスの詳細な説明は、特許文献に広く報告されている。「粒子形態重合」としても知られるスラリー相重合プロセスでは、ポリマーが溶解する温度よりも低

い温度に保たれるが、これは米国特許第３，２４８，１７９号に記載されている。スラリープロセスには、ループ反応器を使用するもの、及び単一の撹拌反応器を使用するもの、又は複数のループ及び／又は撹拌反応器を直列、並列、及びそれらを組み合わせて使用するものが含まれる。スラリー相重合プロセスの非限定的な例としては、連続ループプロセス又は撹拌タンクプロセスが挙げられる。スラリー相重合プロセスのさらなる例は、例えば米国特許第４，６１３，４８４号に記載されている。

【０５９４】

スラリー重合プロセスは、希釈剤の存在下で実施され、希釈剤は、一般に、アルカン（イソアルカンを含む）、芳香族、又はシクロアルカン希釈剤などの炭化水素希釈剤である。実施形態では、希釈剤は、エチレンとの共重合に使用されるアルファ－オレフィンコモノマーであってもよい。アルカン希釈剤には、プロパン、ブタン（すなわち、ノルマルブタン及び／又はイソブタン）、ペンタン、ヘキサン、ヘプタン、及びオクタンが含まれる。モノマー及びコモノマーは希釈剤に溶解（又は混和）してもよいが、ポリマーは（重合条件下では）溶解しない。一実施形態では、重合温度は約５℃～約２００℃であってもよい。さらなる実施形態では、重合温度は約１２０℃未満、又は約１０℃～約１１０℃である。スラリー相重合反応温度は、ポリマー（例えば、エチレンコポリマー）が固体粒子の形態で生成されるように選択される。反応圧力は、希釈剤及び反応温度の選択によって影響を受ける。例えば、実施形態では、希釈剤としてイソブタンを使用する場合、圧力は１５～４５気圧（約２２０～６６０ｐｓｉ、又は約１５００～４６００ｋＰａ）の範囲であり、プロパンを使用する場合は、その約２倍の３０～９０気圧（約４４０～１３００ｐｓｉ、又は約３０００～９１００ｋＰａ）の範囲である（例えば、米国特許第５，６８４，０９７号を参照）。スラリー相重合プロセスにおける圧力は、一般に、重合可能なモノマー及びコモノマー（例えば、エチレン及び任意で１つ以上のアルファ－オレフィン）の少なくとも一部を液相に保持するのに十分な高さに保たれる。

【０５９５】

一実施形態では、スラリー相重合反応は、内部撹拌機（例えば、インペラ）を有し、さらに少なくとも１つのセットリングレッグ（ｓｅｔｔｌｉｎｇ　ｌｅｇ）を含むジャケット付き閉ループ反応器で行われる。オレフィン重合触媒系成分（不活性支持体上に懸濁されているか、懸濁されていない）、モノマー／コモノマー及び希釈剤は、必要に応じて液体又は懸濁液としてスラリー相重合反応器に供給することができる。スラリーはループ反応器を循環し、ジャケットは反応器の温度を制御するために使用される。一連の減圧弁を通ってスラリーはセットリングレッグに入り、その後、減圧されて希釈剤及び未反応モノマー／コモノマーをフラッシュし、通常はサイクロンで生成物ポリマーを回収する。希釈剤及び未反応モノマー／コモノマーは回収され、反応器に戻される。

【０５９６】

本開示の一実施形態では、重合プロセスは、溶媒中で行われる溶液相重合プロセスである。

【０５９７】

本開示の一実施形態では、重合プロセスは、溶媒中で行われる連続溶液相重合プロセスである。

【０５９８】

エチレンの単独重合又はエチレンと１つ以上のアルファ－オレフィンとの共重合のための溶液重合プロセスは、当技術分野でよく知られている（例えば、米国特許第６，３７２，８６４号及び６，７７７，５０９号を参照）。これらのプロセスは、様々な実施形態において、不活性炭化水素溶媒、典型的には、C_{5-12}炭化水素の存在下で行われ、これは、非置換であるか、又はペンタン、メチルペンタン、ヘキサン、ヘプタン、オクタン、シクロヘキサン、メチルシクロヘキサン、及び水素化ナフサなどのC_{1-4}アルキル基で置換されていてもよい。市販されており、本開示の実施形態で使用できる、適切な溶媒の例は、「Ｉｓｏｐａｒ　Ｅ」（エクソンケミカル社製のC_{8-12}脂肪族溶媒）である。

【０５９９】

従来の溶液相プロセスにおける重合温度は、約８０℃～約３００℃であり得る。本開示の一実施形態では、溶液相重合プロセスにおける重合温度は、約１２０℃～約２５０℃である。さらなる実施形態では、溶液相重合プロセスは、少なくとも１４０℃、又は少なくとも１６０℃、又は少なくとも１７０℃、又は少なくとも１８０℃、又は少なくとも１９０℃の温度で行われる。さらなる実施形態では、溶液相重合プロセスにおける重合温度は、約１２０℃～約３３０℃、又は約１３０℃～約３２０℃、又は約１４０℃～約３２０℃、又は約１５０℃～約３２０℃、又は約１６０℃～約３２０℃、又は約１４０℃～約３００℃、又は約１５０℃～約３００℃、又は約１６０℃～約３００℃、又は約１４０℃～約２８０℃、又は約１５０℃～約２８０℃、又は約１６０℃～約２８０℃、又は約１４０℃～約２６０℃、又は約１５０℃～約２６０℃、又は約１６０℃～約２６０℃、又は約１４０℃～約２４０℃、又は約１５０℃～約２４０℃、又は約１６０℃～約２４０℃、又は約１４０℃～約２２０℃、又は約１５０℃～約２２０℃、又は約１６０℃～約２２０℃であってもよい。

【０６００】

溶液相重合プロセスにおける重合圧力は、「中圧プロセス」であってもよく、これは、反応器内の圧力が約６，０００ｐｓｉ（約４２，０００キロパスカル又はｋＰａ）未満であることを意味する。本開示の実施形態では、溶液相重合プロセスにおける重合圧力は、約１０，０００～約４０，０００ｋＰａ、又は約１４，０００～約２２，０００ｋＰａ（すなわち、約２，０００ｐｓｉ～約３，０００ｐｓｉ）であってもよい。

【０６０１】

エチレンとの共重合に適したコモノマーには、C_{3-20}アルファ－オレフィン（モノオレフィン及びジオレフィンを含む）が含まれる。本開示の実施形態においてエチレンと共重合できるコモノマーの非限定的な例としては、C_{3-12}アルファ－オレフィン（非置換であるか、又は最大２つのC_{1-6}アルキル基で置換されている）、C_{8-12}ビニル芳香族モノマー（非置換であるか、又はC_{1-4}アルキル基からなる群から選択される最大２つの置換基で置換されている）、及びC_{4-12}直鎖又は環状ジオレフィン（非置換であるか、又はC_{1-4}アルキル基で置換されている）が挙げられるこのようなアルファ－オレフィンの例示的な非限定的な例としては、プロピレン、１－ブテン、１－ペンテン、１－ヘキセン、１－オクテン及び１－デセン、スチレン、アルファメチルスチレン、並びに拘束環環状オレフィン（例えば、シクロブテン、シクロペンテン、ジシクロペンタジエンノルボルネン、アルキル置換ノルボルネン、アルケニル置換ノルボルネン）など、（例えば、５－メチレン－２－ノルボルネン、５－エチリデン－２－ノルボルネン、及びビシクロ－（２，２，１）－ヘプター２，５－ジエン）の１つ以上が挙げられる。

【０６０２】

本開示の一実施形態では、溶液相重合プロセスは、エチレンを、プロピレン、１－ブテン、１－ペンテン、１－ヘキセン、１－オクテン、１－デセン、及びそれらの混合物からなる群から選択される１つ以上のアルファ－オレフィンと重合することを含む。

【０６０３】

本開示の一実施形態では、溶液相重合プロセスは、エチレンを、１－ブテン、１－ヘキセン、１－オクテン、及びそれらの混合物からなる群から選択される１つ以上のアルファ－オレフィンと重合することを含む。

【０６０４】

本開示の一実施形態では、溶液相重合プロセスは、エチレンを、１－ブテン、１－ヘキセン、及び１－オクテンからなる群から選択される１つ以上のアルファ－オレフィンと重合することを含む。

【０６０５】

本開示の一実施形態では、溶液相重合プロセスは、エチレンを１－オクテンと重合することを含む。

【０６０６】

溶液重合では、モノマー及び任意のコモノマーは、反応器に供給される前に溶媒に溶解

／分散される（あるいは、ガス状のモノマー（又はコモノマー）の場合は、モノマー（又はコモノマー）を反応器に供給して重合反応混合物に溶解させることができる）。混合する前に、溶媒、モノマー及び任意のコモノマーは、一般に、水、酸素又は金属不純物などの潜在的な触媒毒を除去するために精製される。原料の精製には、例えば、分子ふるい、アルミナ床及び酸素除去触媒の使用など、当技術分野で周知の標準的な方法を採用することができる。これらはすべて、重合性モノマーの精製に有用であることが知られている。溶媒自体（例えば、メチルペンタン、シクロヘキサン、ヘキサン又はトルエン）も同様の方法で処理して、潜在的な触媒毒を除去することができる。

【０６０７】

原料モノマー、コモノマー、又は他の溶液プロセス成分（例えば、溶媒）は、溶液相重合反応器に供給する前に加熱又は冷却してもよい。

【０６０８】

本開示の実施形態では、オレフィン重合触媒系成分（例えば、有機金属錯体及び触媒活性剤、及び任意選択でヒンダードフェノール）は、重合反応に使用される溶媒に予め混合されてもよいし、重合反応器に別々の流れとして供給されてもよい。いくつかの実施形態では、重合反応ゾーン（例えば、重合反応器）に入る前にオレフィン重合触媒系成分に反応時間を与えるために、予め混合することが望ましい場合がある。このような「インライン混合」技術の例は、例えば米国特許第５，５８９，５５５号など、多数の特許に記載されている。

【０６０９】

本開示の一実施形態では、溶液相重合プロセスは連続プロセスである。「連続プロセス」という用語は、重合プロセスフロー（例えば、溶媒、エチレン、任意のアルファ－オレフィンコモノマー、オレフィン重合触媒系成分）が重合ゾーン（例えば、重合反応器）に連続的に供給され、そこでポリマー（例えば、エチレンホモポリマー又はエチレンコポリマー）が形成され、そこからプロセスフロー排出蒸気を介してポリマーが連続的に除去されることを意味する。

【０６１０】

本開示の一実施形態では、溶液相重合プロセスは、少なくとも１つの連続撹拌タンク反応器（「ＣＳＴＲ」）内で行われる。

【０６１１】

本開示の一実施形態では、溶液相重合プロセスは、互いに直列又は並列に配置された少なくとも２つの重合反応器内で行われる。

【０６１２】

本開示の一実施形態では、溶液相重合プロセスは、互いに直列又は並列に配置された少なくとも３つの重合反応器内で行われる。

【０６１３】

本開示の一実施形態では、溶液相重合プロセスは、少なくとも２つの順次に配置された連続撹拌タンク反応器内で行われる（プロセスフローは、第１の上流ＣＳＴＲから第２の下流ＣＳＴＲに移送される）。

【０６１４】

本開示の一実施形態では、溶液相重合プロセスは、互いに並列に配置された少なくとも２つの連続撹拌タンク反応器内で行われる（プロセスフローは、第１のＣＳＴＲ及び第２のＣＳＴＲの各々から移送され、その後、組み合わされる）。

【０６１５】

いくつかの実施形態では、連続溶液相重合プロセスは、平均反応器温度が約１００℃～約１４０℃である第１撹拌タンク重合反応器と、平均温度が少なくとも約１０℃、又は第１反応器の平均反応器温度より少なくとも約２０℃高い第２撹拌タンク重合反応器とを含む。

【０６１６】

いくつかの実施形態では、連続溶液相重合プロセスは、平均反応器温度が約１００℃～

約１６０℃である第１撹拌タンク重合反応器と、平均温度が少なくとも約１０℃、又は第１反応器の平均反応器温度より少なくとも約２０℃高い第２撹拌タンク重合反応器とを含む。

【０６１７】

本開示の一実施形態では、溶液相重合プロセスは、少なくとも１つの管状反応器内で行われる。

【０６１８】

本開示の一実施形態では、溶液相重合プロセスは、順次又は並列に配置された２つの連続撹拌タンク反応器と、管状反応器内で行われ、管状反応器は、第２の連続撹拌タンク反応器（順次配置）から、又は第１及び第２の連続撹拌タンク反応器の組合せ（並列配置）から、プロセスフローを受け取る。

【０６１９】

本開示の一実施形態では、溶液相重合プロセスは、２つの順次に配列された連続撹拌タンク反応器と、管状反応器内で行われ、管状反応器は、第２の連続撹拌タンク反応器からプロセスフローを受け取る。

【０６２０】

溶液相重合プロセスでは、一般に、反応物が十分に混合される条件下で反応器が操作され、反応器内のオレフィン重合触媒（例えば、活性化シングルサイト触媒錯体）の滞留時間（又は「ホールドアップ時間」）は、反応器の設計及び容量に依存する。

【０６２１】

実施形態では、所定の反応器内のオレフィン重合触媒（例えば、活性化シングルサイト触媒錯体）の滞留時間は、数秒～約２０分である。さらなる実施形態では、所定の反応器内のオレフィン重合触媒（例えば、活性化シングルサイト触媒錯体）の滞留時間は、約１０分未満、又は約５分未満、又は約３分未満である。

【０６２２】

本開示の実施形態では、ＣＳＴＲ反応器に供給されるエチレンの少なくとも６０重量パーセント（ｗｔ％）が、オレフィン重合触媒系によってエチレンホモポリマー又はエチレンコポリマーに重合される。さらなる実施形態では、ＣＳＴＲ反応器に供給されるエチレンの少なくとも７０重量％、又は少なくとも８０重量％、又は少なくとも８５重量％、又は少なくとも９０重量％、又は少なくとも９５重量％が、オレフィン重合触媒系によってエチレンホモポリマー又はエチレンコポリマーに重合される。

【０６２３】

複数のＣＳＴＲが使用される場合、各反応器で高いポリマー生成速度を維持するために、オレフィン重合触媒系成分を各ＣＳＴＲに追加することができる。

【０６２４】

複数のＣＳＴＲが使用される場合、各ＣＳＴＲで使用されるオレフィン重合触媒は、同じタイプの重合触媒に基づくものであってもよいし、異なるタイプの重合触媒に基づくものであってもよい。

【０６２５】

本開示の一実施形態では、２つ以上のＣＳＴＲ反応器の各ＣＳＴＲにおいて同じタイプのオレフィン重合触媒が使用される。

【０６２６】

一実施形態では、混合触媒系が使用され、この混合触媒系では、１つのオレフィン重合触媒がシングルサイト触媒（例えば、本開示に従って記載されたオレフィン重合触媒系）であり、１つのオレフィン重合触媒がチーグラー・ナッタ触媒であり、シングルサイト触媒が第１のＣＳＴＲで使用され、チーグラー・ナッタ触媒が第２のＣＳＴＲで使用され、複数の反応器が、順次又は並列に配置される。

【０６２７】

「管状反応器」という用語は、その従来の意味を伝えることを意図しており、すなわち、単純な管（チューブ）であり、ＣＳＴＲとは異なり、一般にインペラ、スターラーなど

を使用して撹拌されない。実施形態では、管状反応器は、長さ／直径（Ｌ／Ｄ）比が少なくとも１０／１である。実施形態では、管状反応器は、断熱的に操作される。一般的な非限定的な説明として、理論に縛られることを望まないが、管状反応器では、重合反応が進行するにつれて、モノマー（例えば、エチレン）及び／又はコモノマー（例えば、アルファ－オレフィン）が消費され、溶液の温度が、管の長さに沿って上昇する（これにより、未反応のコモノマーをポリマー溶液から分離する効率が向上し得る）。実施形態では、その温度は、管状反応器の長さに沿って、約３℃を超えて上昇し得る。実施形態では、管状反応器はＣＳＴＲの下流に位置し、管状反応器からの排出温度は、ＣＳＴＲからの排出温度（及びそこからプロセスフローが管状反応器に供給される）より少なくとも約３℃高い場合がある。

【０６２８】

実施形態では、管状反応器は、シングルサイトプレ重合触媒、チーグラー・ナッタ触媒成分、触媒活性剤、共触媒、及びヒンダードフェノール化合物などの追加の重合触媒系成分を添加するための、又はモノマー、コモノマー、水素などを添加するための供給ポートを備えていてもよい。別の実施形態では、追加の重合触媒成分は、管状反応器に添加されない。

【０６２９】

一実施形態では、少なくとも１つのＣＳＴＲと組み合わせて使用される管状反応器の総体積は、少なくとも１つのＣＳＴＲの体積の少なくとも約１０体積パーセント（ｖｏｌ％）、又は少なくとも１つのＣＳＴＲの体積の約３０ｖｏｌ％～約２００ｖｏｌ％である（明確にするために、少なくとも１つのＣＳＴＲの体積が１０００リットルである場合、管状反応器の体積は少なくとも約１００リットル、又は約３００～２０００リットルである）。

【０６３０】

実施形態では、反応器システムを出る際に、非反応性成分を除去（及び任意で回収）してもよく、得られたポリマー（例えば、エチレンコポリマー又はエチレンホモポリマー）を、従来の方法（例えば、脱揮プロセスを使用して）で仕上げてもよい。一実施形態では、２段階脱揮プロセスを使用して、重合プロセス溶媒からポリマー組成物を回収してもよい。本開示の実施形態で使用され得る適切な脱揮プロセスは、米国特許第９，９６３，５２９号；第１０，５３８，６５４号及び第１０，６２６，２５６号に記載されている。

【０６３１】

＜代替ホスフィン酸化方法＞

本開示の実施形態は、オルト置換フェニル基を有するホスフィン化合物を酸化する方法である。

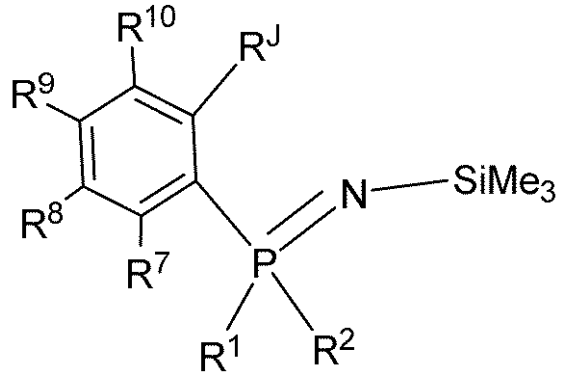
【０６３２】

本開示の実施形態は、置換アリール基を有するホスフィン化合物を酸化する方法である。

【０６３３】

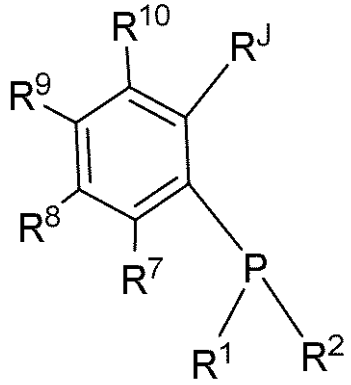
本開示の一実施形態は、式Ｉ－Ｐ－ＴＭＳ：

【化１３１】



(I-P-TMS)

で表される化合物の作製方法であって、
当該方法は、式Ｉ－Ｐ：
【化１３２】



(I-P)

で表されるホスフィン化合物を、ヘキサクロロエタンCl_3C-CCl_3；及びヘキサメチルジシラザン［$(CH_3)_3Si]_2NH$と組み合わせることを含み、
式中、R^Jは、
ヒドロカルビル基（このヒドロカルビル基は、非置換であるか、又はハロゲン原子、C_{1-20}アルキル基、C_{1-20}アルコキシ基、C_{7-20}アルキルアリール基、C_{7-20}アリールアルキル基、C_{6-20}アリール基、C_{6-20}アリールオキシ基、C_{7-20}アルキルアリールオキシ基、及びC_{7-20}アリールアルキルオキシ基、式－ＮＲ’$_2$のアミド基、式－ＰＲ’$_2$のホスフィド基、式－ＳＲ’のチオラート基、式－Ｓｉ（R^a）$_3$のシリル基、及び式－Ｇｅ（R^a）$_3$のゲルマニル基からなる群から選択される１つ以上の置換基によってさらに置換されている）；
ヘテロ原子含有ヒドロカルビル基（このヘテロ原子含有ヒドロカルビル基は、非置換であるか、又はハロゲン原子、C_{1-20}アルキル基、C_{1-20}アルコキシ基、C_{7-20}アルキルアリール基、C_{7-20}アリールアルキル基、C_{6-20}アリール基、C_{6-20}アリールオキシ基、C_{7-20}アルキルアリールオキシ基、及びC_{7-20}アリールアルキルオキシ基、式－ＮＲ’$_2$のアミド基、式－ＰＲ’$_2$のホスフィド基、式－ＳＲ’のチオラート基、式－Ｓｉ（R^a）$_3$のシリル基、及び式－Ｇｅ（R^a）$_3$のゲルマニル基からなる群から選択される１つ以上の置換基によってさらに置換されている）；
からなる群から選択され、
式中、R^1及びR^2は、各々独立して、C_{1-30}ヒドロカルビル基（このヒドロカルビル基は、非置換であるか、又は１つ以上のハロゲン原子、C_{1-20}アルキル基、C_1

－２０アルコキシ基、Ｃ７－２０アルキルアリール基、Ｃ７－２０アリールアルキル基、Ｃ６－２０アリール基、Ｃ６－２０アリールオキシ基、Ｃ７－２０アルキルアリールオキシ基、及び／又はＣ７－２０アリールアルキルオキシ基によってさらに置換されている）から選択され、

式中、Ｒ７、Ｒ８、Ｒ９及びＲ１０は、各々独立して、

ハロゲン；

水素；

Ｃ１－３０ヒドロカルビル基（このヒドロカルビル基は、非置換であるか、又はハロゲン原子、Ｃ１－２０アルキル基、Ｃ１－２０アルコキシ基、Ｃ７－２０アルキルアリール基、Ｃ７－２０アリールアルキル基、Ｃ６－２０アリール基、Ｃ６－２０アリールオキシ基、Ｃ７－２０アルキルアリールオキシ基、及びＣ７－２０アリールアルキルオキシ基からなる群から選択される１つ以上の置換基によってさらに置換されている）；

ヘテロ原子含有Ｃ１－３０ヒドロカルビル基（このヘテロ原子含有ヒドロカルビル基は、非置換であるか、又はハロゲン原子、Ｃ１－２０アルキル基、Ｃ１－２０アルコキシ基、Ｃ７－２０アルキルアリール基、Ｃ７－２０アリールアルキル基、Ｃ６－２０アリール基、Ｃ６－２０アリールオキシ基、Ｃ７－２０アルキルアリールオキシ基、及びＣ７－２０アリールアルキルオキシ基からなる群から選択される１つ以上の置換基によってさらに置換されている）；

オキシ基、－ＯＲ’；

アミド基、－ＮＲ’$_2$；

ホスフィド基、－ＰＲ’$_2$；

チオラート基、－ＳＲ’；

式－Ｓｉ（Ｒ^a）$_3$のシリル基；

式－Ｇｅ（Ｒ^a）$_3$のゲルマニル基；

からなる群から選択され；

ここで、Ｒ７、Ｒ８、Ｒ９及びＲ１０の２つの隣接する基は、任意に結合して環状ヒドロカルビル基又は環状ヘテロ原子含有ヒドロカルビル基を形成してもよく、環状ヒドロカルビル基又は環状ヘテロ原子含有ヒドロカルビル基は、非置換であるか、又はハロゲン原子、Ｃ１－２０アルキル基、Ｃ１－２０アルコキシ基、Ｃ７－２０アルキルアリール基、Ｃ７－２０アリールアルキル基、Ｃ６－２０アリール基、Ｃ６－２０アリールオキシ基、Ｃ７－２０アルキルアリールオキシ基、Ｃ７－２０アリールアルキルオキシ基、アミド基－ＮＲ’$_2$、ホスフィド基－ＰＲ’$_2$、チオラート基－ＳＲ’、式－Ｓｉ（Ｒ^a）$_3$のシリル基、及び式－Ｇｅ（Ｒ^a）$_3$のゲルマニル基からなる群から選択される１つ以上の置換基によってさらに置換されており；

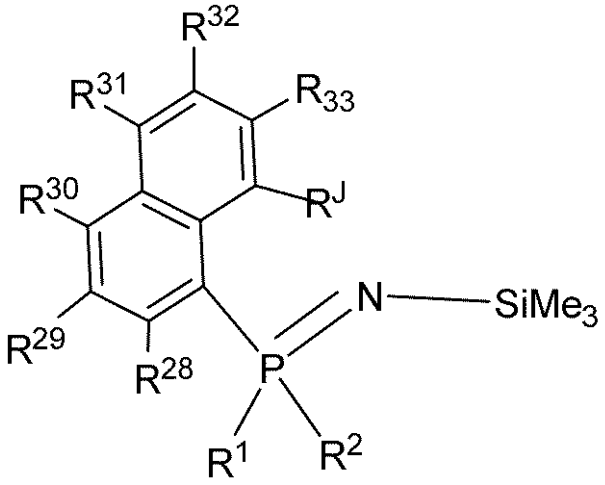
ここで、各Ｒ’は、独立して、水素、Ｃ１－２０アルキル基、及びＣ６－２０アリール基からなる群から選択され；

ここで、各Ｒ^{a}は、独立して、水素、Ｃ１－８アルキル基、Ｃ１－８アルコキシ基、Ｃ６－２０アリールオキシ基及びＣ６－２０アリール基からなる群から選択される。

【０６３４】

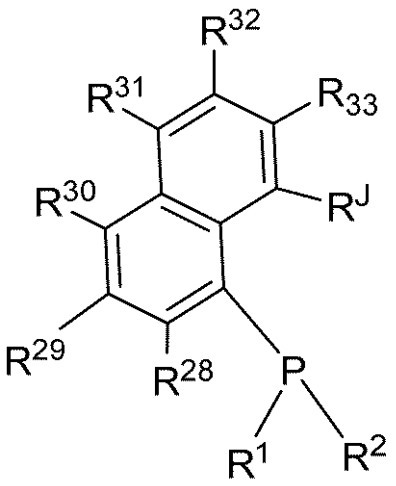
本開示の一実施形態は、式ＩＩ－Ｐ－ＴＭＳ：

【化１３３】



(II-P-TMS)

で表される化合物の作製方法であって、
当該方法は、式ＩＩ－Ｐ：
【化１３４】



(II-P)

で表されるホスフィン化合物を、ヘキサクロロエタンＣｌ$_3$Ｃ－ＣＣｌ$_3$；及びヘキサメチルジシラザン［（ＣＨ$_3$）$_3$Ｓｉ］$_2$ＮＨと組み合わせることを含み、

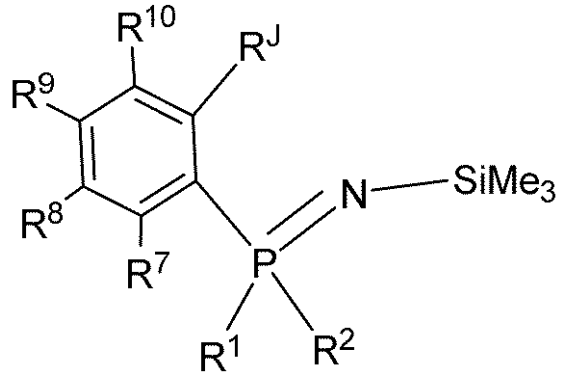
式中、Ｒ^{J}は、

ヒドロカルビル基（このヒドロカルビル基は、非置換であるか、又はハロゲン原子、Ｃ$_{1-20}$アルキル基、Ｃ$_{1-20}$アルコキシ基、Ｃ$_{7-20}$アルキルアリール基、Ｃ$_{7-20}$アリールアルキル基、Ｃ$_{6-20}$アリール基、Ｃ$_{6-20}$アリールオキシ基、Ｃ$_{7-20}$アルキルアリールオキシ基、Ｃ$_{7-20}$アリールアルキルオキシ基、式－ＮＲ’$_2$のアミド基、式－ＰＲ’$_2$のホスフィド基、式－ＳＲ’のチオラート基、式－Ｓｉ（Ｒ^a）$_3$のシリル基、及び式－Ｇｅ（Ｒ^a）$_3$のゲルマニル基からなる群から選択される１つ以上の置換基によってさらに置換されている）；

ヘテロ原子含有ヒドロカルビル基（このヘテロ原子含有ヒドロカルビル基は、非置換であるか、又はハロゲン原子、Ｃ$_{1-20}$アルキル基、Ｃ$_{1-20}$アルコキシ基、Ｃ$_{7-20}$アルキルアリール基、Ｃ$_{7-20}$アリールアルキル基、Ｃ$_{6-20}$アリール基、Ｃ$_{6-20}$アリールオキシ基、Ｃ$_{7-20}$アルキルアリールオキシ基、Ｃ$_{7-20}$アリールアルキルオ

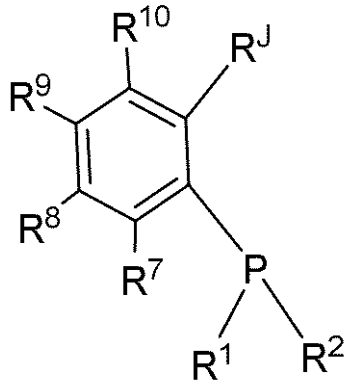
キシ基、式－ＮＲ’$_2$のアミド基、式－ＰＲ’$_2$のホスフィド基、式－ＳＲ’のチオラート基、式－Ｓｉ（Ｒ^a）$_3$のシリル基、及び式－Ｇｅ（Ｒ^a）$_3$のゲルマニル基からなる群から選択される１つ以上の置換基によってさらに置換されている）；
からなる群から選択され、
式中、Ｒ^{1}及びＲ^{2}は、各々独立して、Ｃ$_{1-30}$ヒドロカルビル基（このヒドロカルビル基は、非置換であるか、又は１つ以上のハロゲン原子、Ｃ$_{1-20}$アルキル基、Ｃ$_{1-20}$アルコキシ基、Ｃ$_{7-20}$アルキルアリール基、Ｃ$_{7-20}$アリールアルキル基、Ｃ$_{6-20}$アリール基、Ｃ$_{6-20}$アリールオキシ基、Ｃ$_{7-20}$アルキルアリールオキシ基、及び／又はＣ$_{7-20}$アリールアルキルオキシ基によってさらに置換されている）から選択され、
式中、Ｒ^{28}、Ｒ^{29}、Ｒ^{30}、Ｒ^{31}、Ｒ^{32}及びＲ^{33}は、各々独立して、
ハロゲン；
水素；
Ｃ$_{1-30}$ヒドロカルビル基（このヒドロカルビル基は、非置換であるか、又はハロゲン原子、Ｃ$_{1-20}$アルキル基、Ｃ$_{1-20}$アルコキシ基、Ｃ$_{7-20}$アルキルアリール基、Ｃ$_{7-20}$アリールアルキル基、Ｃ$_{6-20}$アリール基、Ｃ$_{6-20}$アリールオキシ基、Ｃ$_{7-20}$アルキルアリールオキシ基、及びＣ$_{7-20}$アリールアルキルオキシ基からなる群から選択される１つ以上の置換基によってさらに置換されている）；
ヘテロ原子含有Ｃ$_{1-30}$ヒドロカルビル基（このヘテロ原子含有ヒドロカルビル基は、非置換であるか、又はハロゲン原子、Ｃ$_{1-20}$アルキル基、Ｃ$_{1-20}$アルコキシ基、Ｃ$_{7-20}$アルキルアリール基、Ｃ$_{7-20}$アリールアルキル基、Ｃ$_{6-20}$アリール基、Ｃ$_{6-20}$アリールオキシ基、Ｃ$_{7-20}$アルキルアリールオキシ基、及びＣ$_{7-20}$アリールアルキルオキシ基からなる群から選択される１つ以上の置換基によってさらに置換されている）；
オキシ基、－ＯＲ’；
アミド基、－ＮＲ’$_2$；
ホスフィド基、－ＰＲ’$_2$；
チオラート基、－ＳＲ’；
式－Ｓｉ（Ｒ^a）$_3$のシリル基；
式－Ｇｅ（Ｒ^a）$_3$のゲルマニル基；
からなる群から選択され；
ここで、Ｒ^{28}、Ｒ^{29}、Ｒ^{30}、Ｒ^{31}、Ｒ^{32}及びＲ^{33}の２つの隣接する基は、任意に結合して環状ヒドロカルビル基又は環状ヘテロ原子含有ヒドロカルビル基を形成してもよく、環状ヒドロカルビル基又は環状ヘテロ原子含有ヒドロカルビル基は、非置換であるか、又はハロゲン原子、Ｃ$_{1-20}$アルキル基、Ｃ$_{1-20}$アルコキシ基、Ｃ$_{7-20}$アルキルアリール基、Ｃ$_{7-20}$アリールアルキル基、Ｃ$_{6-20}$アリール基、Ｃ$_{6-20}$アリールオキシ基、Ｃ$_{7-20}$アルキルアリールオキシ基、Ｃ$_{7-20}$アリールアルキルオキシ基、アミド基－ＮＲ’$_2$、ホスフィド基－ＰＲ’$_2$、チオラート基－ＳＲ’、式－Ｓｉ（Ｒ^a）$_3$のシリル基、及び式－Ｇｅ（Ｒ^a）$_3$のゲルマニル基からなる群から選択される１つ以上の置換基によってさらに置換されており；
ここで、各Ｒ’は、独立して、水素、Ｃ$_{1-20}$アルキル基、及びＣ$_{6-20}$アリール基からなる群から選択され；
ここで、各Ｒ^{a}は、独立して、水素、Ｃ$_{1-8}$アルキル基、Ｃ$_{1-8}$アルコキシ基、Ｃ$_{6-20}$アリールオキシ基及びＣ$_{6-20}$アリール基からなる群から選択される。
【０６３５】
本開示の一実施形態は、式Ｉ－Ｐ－ＴＭＳ：

【化１３５】



(I-P-TMS)

で表される化合物の作製方法であって、
当該方法は、
式Ｉ－Ｐ：
【化１３６】

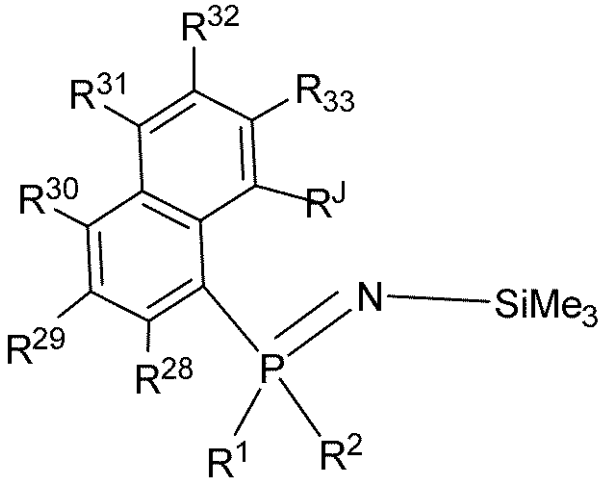


(I-P)

で表されるホスフィン化合物を、Cl_2、Br_2、及びヘキサクロロエタンCl_3C-CCl_3からなる群から選択される塩化物又は臭化物の供給源と組み合わせる第１の反応工程（ｉ）と、
ヘキサメチルジシラザン［$(CH_3)_3Si]_2NH$を、第１の反応工程で形成された反応生成物と組み合わせる第２の反応工程（ｉｉ）と、
含み、
式中、R^Jは、
ヒドロカルビル基（このヒドロカルビル基は、非置換であるか、又はハロゲン原子、C_{1-20}アルキル基、C_{1-20}アルコキシ基、C_{7-20}アルキルアリール基、C_{7-20}アリールアルキル基、C_{6-20}アリール基、C_{6-20}アリールオキシ基、C_{7-20}アルキルアリールオキシ基、及びC_{7-20}アリールアルキルオキシ基、式$-NR'_2$のアミド基、式$-PR'_2$のホスフィド基、式$-SR'$のチオラート基、式$-Si(R^a)_3$のシリル基、及び式$-Ge(R^a)_3$のゲルマニル基からなる群から選択される１つ以上の置換基によってさらに置換されている）；
ヘテロ原子含有ヒドロカルビル基（このヘテロ原子含有ヒドロカルビル基は、非置換であるか、又はハロゲン原子、C_{1-20}アルキル基、C_{1-20}アルコキシ基、C_{7-20}アルキルアリール基、C_{7-20}アリールアルキル基、C_{6-20}アリール基、C_{6-20}アリールオキシ基、C_{7-20}アルキルアリールオキシ基、及びC_{7-20}アリールアルキルオキシ基、式$-NR'_2$のアミド基、式$-PR'_2$のホスフィド基、式$-SR'$のチオラー

ト基、式－Ｓｉ（Ｒａ）３のシリル基、及び式－Ｇｅ（Ｒａ）３のゲルマニル基からなる群から選択される１つ以上の置換基によってさらに置換されている）；
からなる群から選択され、
式中、Ｒ１及びＲ２は、各々独立して、Ｃ１－３０ヒドロカルビル基（このヒドロカルビル基は、非置換であるか、又は１つ以上のハロゲン原子、Ｃ１－２０アルキル基、Ｃ１－２０アルコキシ基、Ｃ７－２０アルキルアリール基、Ｃ７－２０アリールアルキル基、Ｃ６－２０アリール基、Ｃ６－２０アリールオキシ基、Ｃ７－２０アルキルアリールオキシ基、及び／又はＣ７－２０アリールアルキルオキシ基によってさらに置換されている）から選択され、
式中、Ｒ７、Ｒ８、Ｒ９及びＲ１０は、各々独立して、
ハロゲン；
水素；
Ｃ１－３０ヒドロカルビル基（このヒドロカルビル基は、非置換であるか、又はハロゲン原子、Ｃ１－２０アルキル基、Ｃ１－２０アルコキシ基、Ｃ７－２０アルキルアリール基、Ｃ７－２０アリールアルキル基、Ｃ６－２０アリール基、Ｃ６－２０アリールオキシ基、Ｃ７－２０アルキルアリールオキシ基、及びＣ７－２０アリールアルキルオキシ基からなる群から選択される１つ以上の置換基によってさらに置換されている）；
ヘテロ原子含有Ｃ１－３０ヒドロカルビル基（このヘテロ原子含有ヒドロカルビル基は、非置換であるか、又はハロゲン原子、Ｃ１－２０アルキル基、Ｃ１－２０アルコキシ基、Ｃ７－２０アルキルアリール基、Ｃ７－２０アリールアルキル基、Ｃ６－２０アリール基、Ｃ６－２０アリールオキシ基、Ｃ７－２０アルキルアリールオキシ基、及びＣ７－２０アリールアルキルオキシ基からなる群から選択される１つ以上の置換基によってさらに置換されている）；
オキシ基、－ＯＲ’；
アミド基、－ＮＲ’２；
ホスフィド基、－ＰＲ’２；
チオラート基、－ＳＲ’；
式－Ｓｉ（Ｒａ）３のシリル基；
式－Ｇｅ（Ｒａ）３のゲルマニル基；
からなる群から選択され；
ここで、Ｒ７、Ｒ８、Ｒ９及びＲ１０の２つの隣接する基は、任意に結合して環状ヒドロカルビル基又は環状ヘテロ原子含有ヒドロカルビル基を形成してもよく、環状ヒドロカルビル基又は環状ヘテロ原子含有ヒドロカルビル基は、非置換であるか、又はハロゲン原子、Ｃ１－２０アルキル基、Ｃ１－２０アルコキシ基、Ｃ７－２０アルキルアリール基、Ｃ７－２０アリールアルキル基、Ｃ６－２０アリール基、Ｃ６－２０アリールオキシ基、Ｃ７－２０アルキルアリールオキシ基、Ｃ７－２０アリールアルキルオキシ基、アミド基－ＮＲ’２、ホスフィド基－ＰＲ’２、チオラート基－ＳＲ’、式－Ｓｉ（Ｒａ）３のシリル基、及び式－Ｇｅ（Ｒａ）３のゲルマニル基からなる群から選択される１つ以上の置換基によってさらに置換されており；
ここで、各Ｒ’は、独立して、水素、Ｃ1－２０アルキル基、及びＣ６－２０アリール基からなる群から選択され；
ここで、各Ｒａは、独立して、水素、Ｃ１－８アルキル基、Ｃ１－８アルコキシ基、Ｃ６－２０アリールオキシ基及びＣ６－２０アリール基からなる群から選択される。
【０６３６】
本開示の一実施形態は、式ＩＩ－Ｐ－ＴＭＳ：

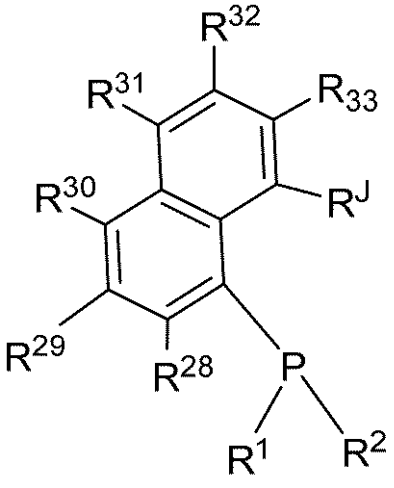
【化１３７】



(II-P-TMS)

で表される化合物の作製方法であって、
当該方法は、
式ＩＩ－Ｐ：

【化１３８】



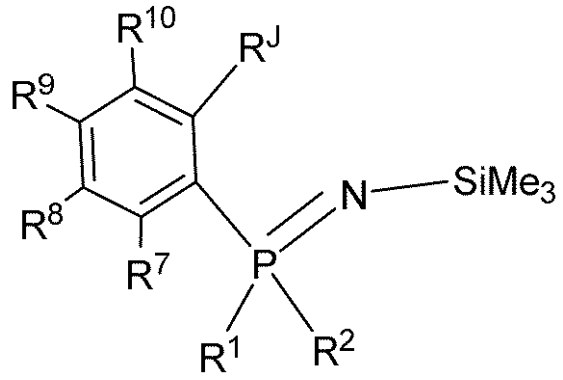
(II-P)

で表されるホスフィン化合物を、Cl_2、Br_2、及びヘキサクロロエタンCl_3C-CCl_3からなる群から選択される塩化物又は臭化物の供給源と組み合わせる第１の反応工程（ｉ）と、
ヘキサメチルジシラザン［$(CH_3)_3Si]_2NH$を、第１の反応工程で形成された反応生成物と組み合わせる第２の反応工程（ｉｉ）と、
含み、
式中、R^Jは、
ヒドロカルビル基（このヒドロカルビル基は、非置換であるか、又はハロゲン原子、Ｃ１－２０アルキル基、Ｃ１－２０アルコキシ基、Ｃ７－２０アルキルアリール基、Ｃ７－２０アリールアルキル基、Ｃ６－２０アリール基、Ｃ６－２０アリールオキシ基、Ｃ７－２０アルキルアリールオキシ基、Ｃ７－２０アリールアルキルオキシ基、式－ＮＲ’$_2$のアミド基、式－ＰＲ’$_2$のホスフィド基、式－ＳＲ’のチオラート基、式－Ｓｉ（R^a）$_3$のシリル基、及び式－Ｇｅ（R^a）$_3$のゲルマニル基からなる群から選択される１つ以上の置換基

によってさらに置換されている)；
ヘテロ原子含有ヒドロカルビル基（このヘテロ原子含有ヒドロカルビル基は、非置換であるか、又はハロゲン原子、C_{1-20}アルキル基、C_{1-20}アルコキシ基、C_{7-20}アルキルアリール基、C_{7-20}アリールアルキル基、C_{6-20}アリール基、C_{6-20}アリールオキシ基、C_{7-20}アルキルアリールオキシ基、C_{7-20}アリールアルキルオキシ基、式－NR'_2のアミド基、式－PR'_2のホスフィド基、式－SR'のチオラート基、式－$Si(R^a)_3$のシリル基、及び式－$Ge(R^a)_3$のゲルマニル基からなる群から選択される１つ以上の置換基によってさらに置換されている)；
からなる群から選択され、
式中、R^1及びR^2は、各々独立して、C_{1-30}ヒドロカルビル基（このヒドロカルビル基は、非置換であるか、又は１つ以上のハロゲン原子、C_{1-20}アルキル基、C_{1-20}アルコキシ基、C_{7-20}アルキルアリール基、C_{7-20}アリールアルキル基、C_{6-20}アリール基、C_{6-20}アリールオキシ基、C_{7-20}アルキルアリールオキシ基、及び／又はC_{7-20}アリールアルキルオキシ基によってさらに置換されている）から選択され、
式中、R^{28}、R^{29}、R^{30}、R^{31}、R^{32}及びR^{33}は、各々独立して、
ハロゲン；
水素；
C_{1-30}ヒドロカルビル基（このヒドロカルビル基は、非置換であるか、又はハロゲン原子、C_{1-20}アルキル基、C_{1-20}アルコキシ基、C_{7-20}アルキルアリール基、C_{7-20}アリールアルキル基、C_{6-20}アリール基、C_{6-20}アリールオキシ基、C_{7-20}アルキルアリールオキシ基、及びC_{7-20}アリールアルキルオキシ基からなる群から選択される１つ以上の置換基によってさらに置換されている）；
ヘテロ原子含有C_{1-30}ヒドロカルビル基（このヘテロ原子含有ヒドロカルビル基は、非置換であるか、又はハロゲン原子、C_{1-20}アルキル基、C_{1-20}アルコキシ基、C_{7-20}アルキルアリール基、C_{7-20}アリールアルキル基、C_{6-20}アリール基、C_{6-20}アリールオキシ基、C_{7-20}アルキルアリールオキシ基、及びC_{7-20}アリールアルキルオキシ基からなる群から選択される１つ以上の置換基によってさらに置換されている）；
オキシ基、－OR'；
アミド基、－NR'_2；
ホスフィド基、－PR'_2；
チオラート基、－SR'；
式－$Si(R^a)_3$のシリル基；
式－$Ge(R^a)_3$のゲルマニル基；
からなる群から選択され；
ここで、R^{28}、R^{29}、R^{30}、R^{31}、R^{32}及びR^{33}の２つの隣接する基は、任意に結合して環状ヒドロカルビル基又は環状ヘテロ原子含有ヒドロカルビル基を形成してもよく、環状ヒドロカルビル基又は環状ヘテロ原子含有ヒドロカルビル基は、非置換であるか、又はハロゲン原子、C_{1-20}アルキル基、C_{1-20}アルコキシ基、C_{7-20}アルキルアリール基、C_{7-20}アリールアルキル基、C_{6-20}アリール基、C_{6-20}アリールオキシ基、C_{7-20}アルキルアリールオキシ基、C_{7-20}アリールアルキルオキシ基、アミド基－NR'_2、ホスフィド基－PR'_2、チオラート基－SR'、式－$Si(R^a)_3$のシリル基、及び式－$Ge(R^a)_3$のゲルマニル基からなる群から選択される１つ以上の置換基によってさらに置換されており；
ここで、各R'は、独立して、水素、C_{1-20}アルキル基、及びC_{6-20}アリール基からなる群から選択され；
ここで、各R^aは、独立して、水素、C_{1-8}アルキル基、C_{1-8}アルコキシ基、C_{6-20}アリールオキシ基及びC_{6-20}アリール基からなる群から選択される。
【０６３７】

本開示の一実施形態は、式Ｉ－Ｐ－ＴＭＳ：

【化１３９】



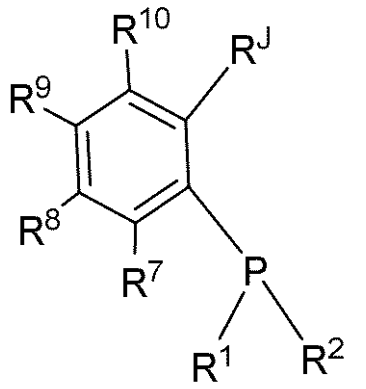
(I-P-TMS)

で表される化合物の作製方法であって、

当該方法は、

式Ｉ－Ｐ：

【化１４０】



(I-P)

で表されるホスフィン化合物を、ヘキサクロロエタンCl_3C-CCl_3と組み合わせる第１の反応工程（ｉ）と、

ヘキサメチルジシラザン［$(CH_3)_3Si]_2NH$を、第１の反応工程で形成された反応生成物と組み合わせる第２の反応工程（ｉｉ）と、

含み、

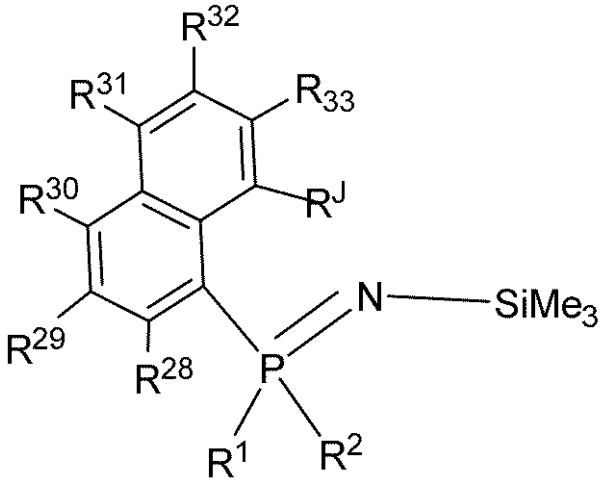
式中、R^Jは、

ヒドロカルビル基（このヒドロカルビル基は、非置換であるか、又はハロゲン原子、C_{1-20}アルキル基、C_{1-20}アルコキシ基、C_{7-20}アルキルアリール基、C_{7-20}アリールアルキル基、C_{6-20}アリール基、C_{6-20}アリールオキシ基、C_{7-20}アルキルアリールオキシ基、及びC_{7-20}アリールアルキルオキシ基、式－ＮＲ’$_2$のアミド基、式－ＰＲ’$_2$のホスフィド基、式－ＳＲ’のチオラート基、式－Ｓｉ（R^a）$_3$のシリル基、及び式－Ｇｅ（R^a）$_3$のゲルマニル基からなる群から選択される１つ以上の置換基によってさらに置換されている）；

ヘテロ原子含有ヒドロカルビル基（このヘテロ原子含有ヒドロカルビル基は、非置換であるか、又はハロゲン原子、C_{1-20}アルキル基、C_{1-20}アルコキシ基、C_{7-20}アルキルアリール基、C_{7-20}アリールアルキル基、C_{6-20}アリール基、C_{6-20}アリールオキシ基、C_{7-20}アルキルアリールオキシ基、及びC_{7-20}アリールアルキルオキシ基、式－ＮＲ’$_2$のアミド基、式－ＰＲ’$_2$のホスフィド基、式－ＳＲ’のチオラー

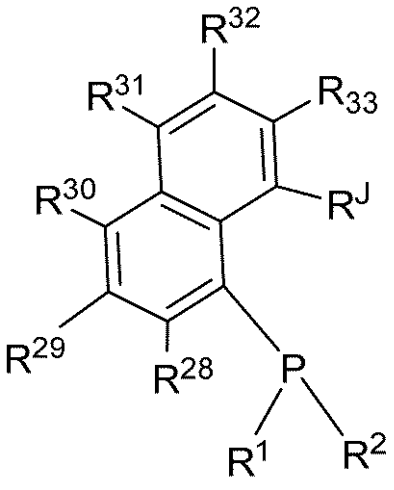
ト基、式－Ｓｉ（Ｒａ）３のシリル基、及び式－Ｇｅ（Ｒａ）３のゲルマニル基からなる群から選択される１つ以上の置換基によってさらに置換されている）；
からなる群から選択され、
式中、Ｒ１及びＲ２は、各々独立して、Ｃ１－３０ヒドロカルビル基（このヒドロカルビル基は、非置換であるか、又は１つ以上のハロゲン原子、Ｃ１－２０アルキル基、Ｃ１－２０アルコキシ基、Ｃ７－２０アルキルアリール基、Ｃ７－２０アリールアルキル基、Ｃ６－２０アリール基、Ｃ６－２０アリールオキシ基、Ｃ７－２０アルキルアリールオキシ基、及び／又はＣ７－２０アリールアルキルオキシ基によってさらに置換されている）から選択され、
式中、Ｒ７、Ｒ８、Ｒ９及びＲ１０は、各々独立して、
ハロゲン；
水素；
Ｃ１－３０ヒドロカルビル基（このヒドロカルビル基は、非置換であるか、又はハロゲン原子、Ｃ１－２０アルキル基、Ｃ１－２０アルコキシ基、Ｃ７－２０アルキルアリール基、Ｃ７－２０アリールアルキル基、Ｃ６－２０アリール基、Ｃ６－２０アリールオキシ基、Ｃ７－２０アルキルアリールオキシ基、及びＣ７－２０アリールアルキルオキシ基からなる群から選択される１つ以上の置換基によってさらに置換されている）；
ヘテロ原子含有Ｃ１－３０ヒドロカルビル基（このヘテロ原子含有ヒドロカルビル基は、非置換であるか、又はハロゲン原子、Ｃ１－２０アルキル基、Ｃ１－２０アルコキシ基、Ｃ７－２０アルキルアリール基、Ｃ７－２０アリールアルキル基、Ｃ６－２０アリール基、Ｃ６－２０アリールオキシ基、Ｃ７－２０アルキルアリールオキシ基、及びＣ７－２０アリールアルキルオキシ基からなる群から選択される１つ以上の置換基によってさらに置換されている）；
オキシ基、－ＯＲ’；
アミド基、－ＮＲ’２；
ホスフィド基、－ＰＲ’２；
チオラート基、－ＳＲ’；
式－Ｓｉ（Ｒａ）３のシリル基；
式－Ｇｅ（Ｒａ）３のゲルマニル基；
からなる群から選択され；
ここで、Ｒ７、Ｒ８、Ｒ９及びＲ１０の２つの隣接する基は、任意に結合して環状ヒドロカルビル基又は環状ヘテロ原子含有ヒドロカルビル基を形成してもよく、環状ヒドロカルビル基又は環状ヘテロ原子含有ヒドロカルビル基は、非置換であるか、又はハロゲン原子、Ｃ１－２０アルキル基、Ｃ１－２０アルコキシ基、Ｃ７－２０アルキルアリール基、Ｃ７－２０アリールアルキル基、Ｃ６－２０アリール基、Ｃ６－２０アリールオキシ基、Ｃ７－２０アルキルアリールオキシ基、Ｃ７－２０アリールアルキルオキシ基、アミド基－ＮＲ’２、ホスフィド基－ＰＲ’２、チオラート基－ＳＲ’、式－Ｓｉ（Ｒａ）３のシリル基、及び式－Ｇｅ（Ｒａ）３のゲルマニル基からなる群から選択される１つ以上の置換基によってさらに置換されており；
ここで、各Ｒ’は、独立して、水素、Ｃ1－２０アルキル基、及びＣ６－２０アリール基からなる群から選択され；
ここで、各Ｒａは、独立して、水素、Ｃ１－８アルキル基、Ｃ１－８アルコキシ基、Ｃ６－２０アリールオキシ基及びＣ６－２０アリール基からなる群から選択される。
【０６３８】
本開示の一実施形態は、式ＩＩ－Ｐ－ＴＭＳ：

【化１４１】



(II-P-TMS)

で表される化合物の作製方法であって、
当該方法は、
式ＩＩ－Ｐ：
【化１４２】



(II-P)

で表されるホスフィン化合物を、ヘキサクロロエタンCl_3C-CCl_3と組み合わせる第１の反応工程（ｉ）と、
ヘキサメチルジシラザン［$(CH_3)_3Si]_2NH$を、第１の反応工程で形成された反応生成物と組み合わせる第２の反応工程（ｉｉ）と、
含み、
式中、R^Jは、
ヒドロカルビル基（このヒドロカルビル基は、非置換であるか、又はハロゲン原子、C_{1-20}アルキル基、C_{1-20}アルコキシ基、C_{7-20}アルキルアリール基、C_{7-20}アリールアルキル基、C_{6-20}アリール基、C_{6-20}アリールオキシ基、C_{7-20}アルキルアリールオキシ基、C_{7-20}アリールアルキルオキシ基、式$-NR'_2$のアミド基、式$-PR'_2$のホスフィド基、式$-SR'$のチオラート基、式$-Si(R^a)_3$のシリル基、及び式$-Ge(R^a)_3$のゲルマニル基からなる群から選択される１つ以上の置換基によってさらに置換されている）；

ヘテロ原子含有ヒドロカルビル基（このヘテロ原子含有ヒドロカルビル基は、非置換であるか、又はハロゲン原子、Ｃ１－２０アルキル基、Ｃ１－２０アルコキシ基、Ｃ７－２０アルキルアリール基、Ｃ７－２０アリールアルキル基、Ｃ６－２０アリール基、Ｃ６－２０アリールオキシ基、Ｃ７－２０アルキルアリールオキシ基、Ｃ７－２０アリールアルキルオキシ基、式－ＮＲ’２のアミド基、式－ＰＲ’２のホスフィド基、式－ＳＲ’のチオラート基、式－Ｓｉ（Ｒａ）３のシリル基、及び式－Ｇｅ（Ｒａ）３のゲルマニル基からなる群から選択される１つ以上の置換基によってさらに置換されている）；
からなる群から選択され、
式中、Ｒ１及びＲ２は、各々独立して、Ｃ１－３０ヒドロカルビル基（このヒドロカルビル基は、非置換であるか、又は１つ以上のハロゲン原子、Ｃ１－２０アルキル基、Ｃ１－２０アルコキシ基、Ｃ７－２０アルキルアリール基、Ｃ７－２０アリールアルキル基、Ｃ６－２０アリール基、Ｃ６－２０アリールオキシ基、Ｃ７－２０アルキルアリールオキシ基、及び／又はＣ７－２０アリールアルキルオキシ基によってさらに置換されている）から選択され、
式中、Ｒ２８、Ｒ２９、Ｒ３０、Ｒ３１、Ｒ３２及びＲ３３は、各々独立して、
ハロゲン；
水素；
Ｃ１－３０ヒドロカルビル基（このヒドロカルビル基は、非置換であるか、又はハロゲン原子、Ｃ１－２０アルキル基、Ｃ１－２０アルコキシ基、Ｃ７－２０アルキルアリール基、Ｃ７－２０アリールアルキル基、Ｃ６－２０アリール基、Ｃ６－２０アリールオキシ基、Ｃ７－２０アルキルアリールオキシ基、及びＣ７－２０アリールアルキルオキシ基からなる群から選択される１つ以上の置換基によってさらに置換されている）；
ヘテロ原子含有Ｃ１－３０ヒドロカルビル基（このヘテロ原子含有ヒドロカルビル基は、非置換であるか、又はハロゲン原子、Ｃ１－２０アルキル基、Ｃ１－２０アルコキシ基、Ｃ７－２０アルキルアリール基、Ｃ７－２０アリールアルキル基、Ｃ６－２０アリール基、Ｃ６－２０アリールオキシ基、Ｃ７－２０アルキルアリールオキシ基、及びＣ７－２０アリールアルキルオキシ基からなる群から選択される１つ以上の置換基によってさらに置換されている）；
オキシ基、－ＯＲ’；
アミド基、－ＮＲ’２；
ホスフィド基、－ＰＲ’２；
チオラート基、－ＳＲ’；
式－Ｓｉ（Ｒａ）３のシリル基；
式－Ｇｅ（Ｒａ）３のゲルマニル基；
からなる群から選択され；
ここで、Ｒ２８、Ｒ２９、Ｒ３０、Ｒ３１、Ｒ３２及びＲ３３の２つの隣接する基は、任意に結合して環状ヒドロカルビル基又は環状ヘテロ原子含有ヒドロカルビル基を形成してもよく、環状ヒドロカルビル基又は環状ヘテロ原子含有ヒドロカルビル基は、非置換であるか、又はハロゲン原子、Ｃ１－２０アルキル基、Ｃ１－２０アルコキシ基、Ｃ７－２０アルキルアリール基、Ｃ７－２０アリールアルキル基、Ｃ６－２０アリール基、Ｃ６－２０アリールオキシ基、Ｃ７－２０アルキルアリールオキシ基、Ｃ７－２０アリールアルキルオキシ基、アミド基－ＮＲ’２、ホスフィド基－ＰＲ’２、チオラート基－ＳＲ’、式－Ｓｉ（Ｒａ）３のシリル基、及び式－Ｇｅ（Ｒａ）３のゲルマニル基からなる群から選択される１つ以上の置換基によってさらに置換されており；
ここで、各Ｒ’は、独立して、水素、Ｃ1－２０アルキル基、及びＣ６－２０アリール基からなる群から選択され；
ここで、各Ｒａは、独立して、水素、Ｃ１－８アルキル基、Ｃ１－８アルコキシ基、Ｃ６－２０アリールオキシ基及びＣ６－２０アリール基からなる群から選択される。
【０６３９】
実施形態では、ホスフィン化合物Ｉ－ＰとヘキサクロロエタンＣｌ３Ｃ－ＣＣｌ３を、

約１：１のモル比で組み合わせる。
【０６４０】
実施形態では、ホスフィン化合物ＩＩ－ＰとヘキサクロロエタンCl_3C-CCl_3を、約１：１のモル比で組み合わせる。
【０６４１】
実施形態では、ホスフィン化合物Ｉ－Ｐを使用する場合、モル過剰のヘキサメチルジシラザン［$(CH_3)_3Si]_2NH$を、第１の反応工程（ｉ）で形成された反応生成物と組み合わせる。
【０６４２】
実施形態では、ホスフィン化合物ＩＩ－Ｐを使用する場合、モル過剰のヘキサメチルジシラザン［$(CH_3)_3Si]_2NH$を、第１の反応工程（ｉ）で形成された反応生成物と組み合わせる。
【０６４３】
実施形態では、ホスフィン化合物（Ｉ－Ｐ）に対する、ヘキサメチルジシラザン［$(CH_3)_3Si]_2NH$のモル比は、１．０より大きいか、又は１．５以上、又は２．０以上、又は２．５以上、又は３．０以上、又は３．５以上、又は４．０以上、又は４．５以上、又は５．０以上、又は１．５～５．０、又は１．５～４．５、又は１．５～４．０、又は２．０～４．０、又は２．５～３．５である。
【０６４４】
実施形態では、ホスフィン化合物（ＩＩ－Ｐ）に対する、ヘキサメチルジシラザン［$(CH_3)_3Si]_2NH$のモル比は、１．０より大きいか、又は１．５以上、又は２．０以上、又は２．５以上、又は３．０以上、又は３．５以上、又は４．０以上、又は４．５以上、又は５．０以上、又は１．５～５．０、又は１．５～４．５、又は１．５～４．０、又は２．０～４．０、又は２．５～３．５である。
【０６４５】
実施形態では、ホスフィン化合物Ｉ－Ｐを使用する場合、第１の反応工程（ｉ）で形成された反応生成物に対する、ヘキサメチルジシラザン［$(CH_3)_3Si]_2NH$のモル比は、１．０より大きいか、又は１．５以上、又は２．０以上、又は２．５以上、又は３．０以上、又は３．５以上、又は４．０以上、又は４．５以上、又は５．０以上、又は１．５～５．０、又は１．５～４．５、又は１．５～４．０、又は２．０～４．０、又は２．５～３．５である。
【０６４６】
実施形態では、ホスフィン化合物ＩＩ－Ｐを使用する場合、第１の反応工程（ｉ）で形成された反応生成物に対する、ヘキサメチルジシラザン［$(CH_3)_3Si]_2NH$のモル比は、１．０より大きいか、又は１．５以上、又は２．０以上、又は２．５以上、又は３．０以上、又は３．５以上、又は４．０以上、又は４．５以上、又は５．０以上、又は１．５～５．０、又は１．５～４．５、又は１．５～４．０、又は２．０～４．０、又は２．５～３．５である。
【０６４７】
実施形態では、ホスフィン化合物（Ｉ－Ｐ）、ヘキサクロロエタンCl_3C-CCl_3；及びヘキサメチルジシラザン［$(CH_3)_3Si]_2NH$を、極性溶媒中で組み合わせる。
【０６４８】
実施形態では、ホスフィン化合物（ＩＩ－Ｐ）、ヘキサクロロエタンCl_3C-CCl_3；及びヘキサメチルジシラザン［$(CH_3)_3Si]_2NH$を、極性溶媒中で組み合わせる。
【０６４９】
実施形態では、工程（ｉ）及び工程（ｉｉ）は、各々、極性反応溶媒中で行われる。
【０６５０】
本開示の実施形態では、極性反応溶媒は、ジクロロメタン、１，２－ジクロロエタン、

ジエチルアセテート、ピリジン、アセトン、ジメチルホルムアミド、ジメチルスルホキシド、アセトニトリル、テトラヒドロフラン及びそれらの混合物からなる群から選択される。

【０６５１】

本開示の実施形態では、極性反応溶媒は、ジクロロメタン、１，２－ジクロロエタン、アセトニトリル、テトラヒドロフラン及びそれらの混合物からなる群から選択される。

【０６５２】

本開示の実施形態では、極性反応溶媒は、ジクロロメタン、１，２－ジクロロエタン及びそれらの混合物からなる群から選択される。

【０６５３】

実施形態では、第１の反応工程（ｉ）の生成物は、第２の反応工程（ｉｉ）を行う前に反応溶媒から単離されない。

【０６５４】

実施形態では、工程（ｉ）及び工程（ｉｉ）は、両方とも単一の反応容器内で行われる。

【０６５５】

実施形態では、工程（ｉ）及び工程（ｉｉ）は、両方とも単一の反応容器内で行われ、第１の反応工程（ｉ）の生成物は、第２の反応工程（ｉｉ）を行う前に反応溶媒から単離されない。

【０６５６】

本開示の実施形態では、ホスフィン化合物（Ｉ－Ｐ）、又はホスフィン化合物（ＩＩ－Ｐ）；ヘキサクロロエタンCl_3C-CCl_3；及びヘキサメチルジシラザン［$(CH_3)_3Si]_2NH$を、周囲温度で組み合わせる。

【０６５７】

実施形態では、工程（ｉ）及び工程（ｉｉ）は、各々、周囲温度で行われる。

【０６５８】

実施形態では、式Ｉ－Ｐ－ＴＭＳ又は式ＩＩ－Ｐ－ＴＭＳで表される化合物は、反応混合物から従来の方法を用いて得られてもよく、従来の方法としては、例えば、ろ過、抽出、沈殿、結晶化、再結晶化、真空下での溶媒の除去、溶媒又は希釈剤での洗浄など、及びそれらの組合せが挙げられる。

【０６５９】

実施形態では、ブレンステッド塩基を、ホスフィン化合物（Ｉ－Ｐ）、又はホスフィン化合物（ＩＩ－Ｐ）；ヘキサクロロエタンCl_3C-CCl_3；及びヘキサメチルジシラザン［$(CH_3)_3Si]_2NH$の組合せによって形成された反応生成物に添加することにより、式Ｉ－Ｐ－ＴＭＳ又は式ＩＩ－Ｐ－ＴＭＳで表される化合物を得る。

【０６６０】

実施形態では、ブレンステッド塩基を、第２の反応工程（ｉｉ）で形成された反応生成物に添加することにより、式Ｉ－Ｐ－ＴＭＳ又は式ＩＩ－Ｐ－ＴＭＳで表される化合物を得る。

【０６６１】

いくつかの実施形態では、ブレンステッド塩基は、アミド塩化合物であってもよい。このようなアミド塩化合物としては、例えば、［$((CH_3)_3Si)_2N$］Ｋが挙げられる。

【０６６２】

いくつかの実施形態では、ブレンステッド塩基は、アミン化合物であってもよい。このようなアミン化合物としては、メチルアミン、エチルアミン、ｎ－プロピルアミン、イソプロピルアミン、ｎ－ブチルアミン、ｔｅｒｔ－ブチルアミン、ｎ－オクチルアミン、ｎ－デシルアミン、アニリン及びエチレンジアミン等の第一級アミン化合物、ジメチルアミン、ジエチルアミン、ジ－ｎ－プロピルアミン、ジ－ｎ－ブチルアミン、ジ－ｔｅｒｔ－ブチルアミン、ジ－ｎ－オクチルアミン、ジ－ｎ－デシルアミン、ピロリジン、ヘキサメ

チルジシラザン及びジフェニルアミン等の第二級アミン化合物、トリメチルアミン、トリエチルアミン、トリ－ｎ－プロピルアミン、トリ－ｎ－ブチルアミン、ジイソプロピルエチルアミン、トリ－ｎ－オクチルアミン、トリ－ｎ－デシルアミン、トリフェニルアミン、Ｎ，Ｎ－ジメチルアニリン、Ｎ，Ｎ，Ｎ’，Ｎ’－テトラメチルエチレンジアミン、Ｎ－メチルピロリジン及び４－ジメチルアミノピリジン等の第三級アミン化合物が挙げられる。

【０６６３】

実施形態では、R^1及びR^2は、各々独立して、非置換のC_{1-30}ヒドロカルビル基である。

実施形態では、R^1及びR^2は、独立して、第一級アルキル基、第二級アルキル基、第三級アルキル基、及びアリール基からなる群から選択される。

実施形態では、R_1及びR_2は、第二級アルキル基である。

実施形態では、R_1及びR_2は、第三級アルキル基である。

実施形態では、R^1及びR^2は、各々独立して、イソプロピル、シクロヘキシル及びｔｅｒｔ－ブチルからなる群から選択される。

実施形態では、R_1及びR_2は、各々独立して、イソプロピル及びシクロヘキシルからなる群から選択される。

【０６６４】

いくつかの実施形態では、R^7、R^8、R^9及びR^{10}は、各々独立して、ハロゲン、水素、C_{1-30}アルキル基、C_{1-30}アルコキシ基、C_{7-30}アルキルアリール基、C_{7-30}アリールアルキル基、C_{6-30}アリール基、C_{6-30}アリールオキシド基、C_{7-30}アルキルアリールオキシ基、及びC_{7-30}アリールアルキルオキシ基からなる群から選択される。

いくつかの実施形態では、R^7、R^8、R^9及びR^{10}は、各々独立して、ハロゲン、水素、C_{1-20}アルキル基、C_{1-20}アルコキシ基、C_{7-20}アルキルアリール基、C_{7-20}アリールアルキル基、C_{6-20}アリール基、C_{6-20}アリールオキシド基、C_{7-20}アルキルアリールオキシ基、及びC_{7-20}アリールアルキルオキシ基からなる群から選択される。

いくつかの実施形態では、R^7、R^8、R^9及びR^{10}は、各々独立して、ハロゲン、水素、及びC_{1-30}ヒドロカルビル基からなる群から選択され、このヒドロカルビル基は、非置換であるか、又は１つ以上のハロゲン原子によってさらに置換されている。

いくつかの実施形態では、R^7、R^8、R^9及びR^{10}は、各々独立して、ハロゲン、水素、及びC_{1-30}ヘテロ原子含有ヒドロカルビル基からなる群から選択され、このヘテロ原子含有ヒドロカルビル基は、非置換であるか、又は１つ以上のハロゲン原子によってさらに置換されている。

いくつかの実施形態では、R^7、R^8、R^9及びR^{10}は、各々独立して、水素及びC_{1-30}ヒドロカルビル基からなる群から選択され、このヒドロカルビル基は、非置換であるか、又は１つ以上のハロゲン原子によってさらに置換されている。

いくつかの実施形態では、R^7、R^8、R^9及びR^{10}は、各々独立して、水素及びC_{1-30}ヘテロ原子含有ヒドロカルビル基からなる群から選択され、このヘテロ原子含有ヒドロカルビル基は、非置換であるか、又は１つ以上のハロゲン原子によってさらに置換されている。

実施形態では、R^7、R^8、R^9及びR^{10}は、各々水素である。

【０６６５】

いくつかの実施形態では、R^{28}、R^{29}、R^{30}、R^{31}、R^{32}及びR^{33}は、各々独立して、ハロゲン、水素、C_{1-30}アルキル基、C_{1-30}アルコキシ基、C_{7-30}アルキルアリール基、C_{7-30}アリールアルキル基、C_{6-30}アリール基、C_{6-30}アリールオキシド基、C_{7-30}アルキルアリールオキシ基、及びC_{7-30}アリールアルキルオキシ基からなる群から選択される。

いくつかの実施形態では、R^7、R^8、R^9及びR^{10}は、各々独立して、ハロゲン、

水素、Ｃ１－２０アルキル基、Ｃ１－２０アルコキシ基、Ｃ７－２０アルキルアリール基、Ｃ７－２０アリールアルキル基、Ｃ６－２０アリール基、Ｃ６－２０アリールオキシド基、Ｃ７－２０アルキルアリールオキシ基、及びＣ７－２０アリールアルキルオキシ基からなる群から選択される。

いくつかの実施形態では、Ｒ２８、Ｒ２９、Ｒ３０、Ｒ３１、Ｒ３２及びＲ３３は、各々独立して、ハロゲン、水素、及びＣ１－３０ヒドロカルビル基からなる群から選択され、このヒドロカルビル基は、非置換であるか、又は１つ以上のハロゲン原子によってさらに置換されている。

いくつかの実施形態では、Ｒ２８、Ｒ２９、Ｒ３０、Ｒ３１、Ｒ３２及びＲ３３は、各々独立して、ハロゲン、水素、及びＣ１－３０ヘテロ原子含有ヒドロカルビル基からなる群から選択され、このヘテロ原子含有ヒドロカルビル基は、非置換であるか、又は１つ以上のハロゲン原子によってさらに置換されている。

いくつかの実施形態では、Ｒ２８、Ｒ２９、Ｒ３０、Ｒ３１、Ｒ３２及びＲ３３は、各々独立して、水素及びＣ１－３０ヒドロカルビル基からなる群から選択され、このヒドロカルビル基は、非置換であるか、又は１つ以上のハロゲン原子によってさらに置換されている。

いくつかの実施形態では、Ｒ２８、Ｒ２９、Ｒ３０、Ｒ３１、Ｒ３２及びＲ３３は、各々独立して、水素及びＣ１－３０ヘテロ原子含有ヒドロカルビル基からなる群から選択され、このヘテロ原子含有ヒドロカルビル基は、非置換であるか、又は１つ以上のハロゲン原子によってさらに置換されている。

実施形態では、Ｒ２８、Ｒ２９、Ｒ３０、Ｒ３１、Ｒ３２及びＲ３３は、各々水素である。

【０６６６】

以下の実施例は、本開示の選択された実施形態を説明する目的で提示されたものであり、提示された実施例は、提示された特許請求の範囲を限定するものではないことが理解される。

【実施例】

【０６６７】

＜一般＞

【０６６８】

＜一般的な実験方法＞

空気及び／又は湿気に敏感な化合物を含むすべての反応は、標準的なＳｃｈｌｅｎｋ技術を使用して、窒素下で、又は不活性雰囲気グローブボックス内で行った。反応溶媒は、Ｐａｎｇｂｏｒｎらによって記載されたシステムを使用して精製し（Ｐａｎｇｂｏｒｎ，Ａ．Ｂ．Ｇ．；Ｇｒｕｂｂｓ，Ｒ．Ｈ．；Ｒｏｓｅｎ，Ｒ．Ｋ．；Ｔｉｍｍｅｒｓ，Ｆ．Ｊ．Ｏｒｇａｎｏｍｅｔａｌｌｉｃｓ　１９９６，１５，１５１８）、その後、不活性雰囲気グローブボックス内で、活性化モレキュラーシーブ上に保管した。空気及び湿気に対して安定な反応用の溶媒はＶＷＲ社から購入し、受け取ったまま使用した。重水素化溶媒はＣＩＬ社から購入し、活性化１３ｘモレキュラーシーブ上に保管した。セライトはＳｉｇｍａ－Ａｌｄｒｉｃｈから購入し、オーブン乾燥後、湿気に敏感な化学反応に使用するためグローブボックス内に保管した。フッ化セシウム（ＣｓＦ）はＳｉｇｍａ－Ａｌｄｒｉｃｈから購入し、使用前に、真空下で１５０℃で乾燥させた。テトラキス（ジメチルアミド）チタン（ＩＶ）（Ｔｉ（ＮＭｅ$_2$）$_4$）はＳｔｒｅｍ　Ｃｈｅｍｉｃａｌｓから購入し、受け取った使用した。ＭＭＡＯ－７（Ｉｓｏｐａｒ－Ｅ中の７重量％溶液）、ジエチルアルミニウムエトキシド（ＤＥＡＬ－Ｅ；ヘプタン中の２５重量％溶液）、トリエチルアルミニウム（ＴＥＡＬ；ヘプタン中の２５重量％溶液）、及びトリイソブチルアルミニウム（ＴＩＢＡＬ；ヘキサン中の２５重量％溶液）は、Ｎｏｕｒｙｏｎから購入し、受け取ったまま使用した。トリフェニルカルベニウムテトラキス（ペンタフルオロフェニル）ボレート、（Ｐｈ$_3$Ｃ）［Ｂ（Ｃ$_6$Ｆ$_5$）$_4$］（本明細書ではＴＢと略記する）は、Ａｌｂｅｍａｒｌｅ　Ｃｏｒｐ．から購入し、受け取ったまま使用した。ジ（水素化牛脂）

メチルアンモニウム（‘Ａｒｍｅｅｎｉｕｍ’）テトラキス（ペンタフルオロフェニル）ボレート（メチルシクロヘキサン中１１．０重量％）（本明細書ではＡＢと略記する）は、Ｂｏｕｌｄｅｒ Ｓｃｉｅｎｔｉｆｉｃから購入した。その他の試薬はすべてＳｉｇｍａ－Ａｌｄｒｉｃｈから購入し、受け取ったまま使用した。

【０６６９】

Ｔｉ（ＮＭｅ$_2$）$_2$Ｃｌ$_2$は、以下の手順に従って調製した：Ｗａｎｇ，Ｃ．；Ｅｒｋｅｒ，Ｇ．；Ｋｅｈｒ，Ｇ．；Ｗｅｄｅｋｉｎｇ，Ｋ．；Ｆｒｏｈｌｉｃｈ，Ｒ．Ｏｒｇａｎｏｍｅｔａｌｌｉｃｓ（２００５年），２４，４７６０。

ＰＰｈ（ｉ－Ｐｒ）$_2$は、以下の手順に従って調製した：Ｂｏｎｔｅｍｐｓ，Ｓ．；Ｓｉｒｃｏｇｌｏｕ，Ｍ．；Ｂｏｕｈａｄｉｒ，Ｇ；Ｐｕｓｃｈｍａｎｎ，Ｈ．；Ｈｏｗａｒｄ，Ｊ．Ａ．Ｋ．；Ｄｙｅｒ，Ｐ．Ｗ．；Ｍｉｑｕｅｕ，Ｋ．；Ｂｏｕｒｉｓｓｏｕ，Ｄ．Ｃｈｅｍｉｓｔｒｙ－Ａ Ｅｕｒｏｐｅａｎ Ｊｏｕｒｎａｌ（２００８年），１４（２），７３１。

２－インデニルボロン酸は、以下の手順に従って調製した：Ｉｊｐｅｉｊ，Ｅ．Ｇ．；Ｂｅｉｊｅｒ，Ｆ．Ｈ．；Ａｒｔｓ，Ｈ．Ｊ．；Ｎｅｗｔｏｎ，Ｃ．；ｄｅ Ｖｒｉｅｓ，Ｊ．Ｇ．；Ｇｒｕｔｅｒ，Ｇ．Ｍ．Ｊ．Ｏｒｇ．Ｃｈｅｍ．（２００２年），６７，１６９。

２－ブロモフェニル－ジイソプロピルホスフィンは、以下の手順に従って調製した：ＤｅＭｏｔｔ，Ｊ．；Ｇｕ，Ｗ．；ＭｃＣｕｌｌｏｃｈ，Ｂ．Ｊ．；Ｈｅｒｂｅｒｔ，Ｄ．Ｅ．；Ｇｏｓｈｅｒｔ，Ｍ．Ｄ．；Ｗａｌｅｎｓｋｙ，Ｊ．Ｒ．；Ｚｈｏｕ，Ｊ．；Ｏｚｅｒｏｖ，Ｏ．Ｖ．Ｏｒｇａｎｏｍｅｔａｌｌｉｃｓ（２０１５年），３４，１６，３９３０。

インデニルリチウムは、以下の手順に従って調製した：Ｋｅｒ，Ｖ．；Ｌａｍ，Ｐ．；Ｊｉａｎｇ，Ｙ．；Ｈｏａｎｇ，Ｐ．；Ｃａｒｔｅｒ，Ｃ．；Ｍｏｒｒｉｓｏｎ，Ｄ．ＵＳ２０１４０１００３４３Ａ１，（２０１４年）。

トリ－ｔｅｒｔ－ブチルホスフィンイミンチタントリクロリド（ｔ－Ｂｕ$_3$ＰＮＴｉＣｌ$_3$）は、以下の手順に従って調製した：Ｇａｏ，Ｘ．；Ｈｅ，Ｚｈｉｗｅｉ．ＣＡ２８２０５０１Ａ１，（２０１４年）。

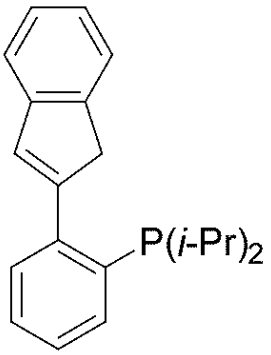
【０６７０】

ＮＭＲスペクトルは、Ｂｒｕｋｅｒ４００ＭＨｚ分光計（^{1}Ｈの場合は４００．１ＭＨｚ、^{31}Ｐの場合は１６２ＭＨｚ）で記録した。単結晶Ｘ線回折は、Ｂｒｕｋｅｒ ＰＬＡＴＦＯＲＭ／ＡＰＥＸ ＩＩ ＣＣＤ回折計で実施した。Ｘ線回折研究に関する追加の実験詳細は、表１～表４にまとめている。

【０６７１】

連続溶液共重合実験の分子量（ＧＰＣ－ＲＩ Ｍ$_w$、Ｍ$_n$及びＭ$_z$、単位ｇ／ｍｏｌ）及び分子量分布（ＧＰＣ－ＲＩ Ｍ$_w$／Ｍ$_n$）データは、従来のサイズ排除（ゲル浸透）クロマトグラフィー（ＳＥＣ、又ははＧＰＣ）を用いて取得した。それに応じて、ポリマー試料溶液（１～２ｍｇ／ｍＬ）は、ポリマーを１，２，４－トリクロロベンゼン（ＴＣＢ）中で加熱し、オーブン内で、１５０℃で４時間、ホイール上で回転させることにより調製した。酸化劣化に対してポリマーを安定化させるために、酸化防止剤２，６－ジ－ｔｅｒｔ－ブチル－４－メチルフェノール（ＢＨＴ）を混合物に添加した。ＢＨＴ濃度は２５０ｐｐｍであった。試料溶液は、４本のＳｈｏｄｅｘカラム（ＨＴ８０３、ＨＴ８０４、ＨＴ８０５、及びＨＴ８０６）を備えたＰＬ２２０高温クロマトグラフィーユニットで、ＴＣＢを移動相として用い、流速１．０ｍＬ／分、１４０℃でクロマトグラフィーし、濃度検出器として示差屈折率（ＤＲＩ）を用いた。ＳＥＣカラムを酸化劣化から保護するために、ＢＨＴを２５０ｐｐｍの濃度で移動相に添加した。試料注入量は２００μＬであった。ＳＥＣ生データを、ＣＩＲＲＵＳ ＧＰＣソフトウェアで処理した。ＳＥＣカラムは、狭い分布のポリスチレン標準で校正した。ＡＳＴＭ標準試験法Ｄ６４７４に記載されているように、Ｍａｒｋ－Ｈｏｕｗｉｎｋ式を用いて、ポリスチレン分子量をポリエチレン分子量に変換した。

【０６７２】
場合によっては、連続溶液共重合実験で生成されたコポリマーについて、異なるＧＰＣ機器を使用して、重量平均分子量（ＧＰＣ－ＩＲ４　M_w）を提供する。それらは、ポリマーのM_wを迅速に決定するために、３本のＧＰＣカラムを備えたＰｏｌｙｍｅｒ　Ｃｈａｒ　ＧＰＣ－ＩＲ４機器を使用して分析した。それに応じて、ポリマー試料（５～７ｍｇ）を試料バイアルに量り入れ、オートサンプラーに装填した。バイアルに６ｍｌの１，２，４－トリクロロベンゼン（ＴＣＢ）を入れ、１６０分間振とうしながら１６０℃に加熱した。酸化劣化に対してポリマーを安定化させるために、２，６－ジ－ｔｅｒｔ－ブチル－４－メチルフェノール（ＢＨＴ）を２５０ｍｍの濃度でＴＣＢに添加した。試料溶液は、３本のＧＰＣカラム（例えば、ＰＬ　Ｍｉｘｅｄ　Ｂ）を備えたＰｏｌｙｍｅｒ　Ｃｈａｒ　ＧＰＣ－ＩＲ４クロマトグラフィーユニットで、ＴＣＢを移動相として用い、流速１．０ｍＬ／分、１４０℃でクロマトグラフィーし、濃度検出器としてＩｎｆｒａｒｅｄ　ＩＲ４を用いた。ＳＥＣカラムを酸化劣化から保護するために、ＢＨＴを２５０ｐｐｍの濃度で移動相に添加した。試料注入量は２００μＬであった。ＳＥＣ生データを、マイクロソフトエクセルマクロを用いて処理した。ＳＥＣカラムは、狭い分布のポリスチレン標準で校正した。ＡＳＴＭ標準試験法Ｄ６４７４に記載されているように、Ｍａｒｋ－Ｈｏｕｗｉｎｋ式を用いて、ポリスチレン分子量をポリエチレン分子量に変換した。
【０６７３】
ＦＴＩＲ分岐周波数（CH_3／１０００Ｃとして報告）は、ＡＳＴＭ標準試験法Ｄ６６４５に記載されている方法を用いて、Ｔｈｅｒｍｏ－Ｎｉｃｏｌｅｔ　７５０　Ｍａｇｎａ－ＩＲ　分光光度計でポリマープラークから測定した。ポリマープラークは、ＡＳＴＭ標準試験法Ｄ１９２８（現在はＤ４７０３に置き換えられている）に基づき、圧縮成形装置（Ｗａｂａｓｈ－Ｇｅｎｅｓｉｓシリーズプレス）を用いて調製される。
【０６７４】
＜合成方法及び結晶学的実験データ＞
【０６７５】
＜化合物１ａ＞
【化１４３】



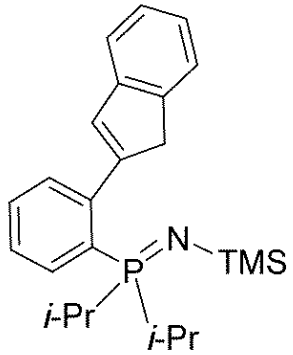
【０６７６】
２－インデニルボロン酸（４ｇ、１４．６４ｍｍｏｌ）、２－ブロモフェニル－ジイソプロピルホスフィン（２．６ｇ、１６．２５ｍｍｏｌ）、Ｐｄ（PPh_3）$_4$（０．８５ｇ、０．７４ｍｍｏｌ）、Cs_2CO_3（９．５ｇ、２９．１６ｍｍｏｌ）、及び１，４－ジオキサン（２００ｍＬ）を組み合わせて、１００℃で３日間加熱した。揮発性物質を真空下で除去し、残渣をヘプタン（３×８０ｍＬ）で抽出し、セライトのパッドでろ過した。揮発性物質を真空下で除去し、得られた黄色の液体を、クーゲルロール蒸留装置で蒸留して精製した。収量：３．２ｇ，７１％収率。^{1}Ｈ　ＮＭＲ（CD_2Cl_2）：δ　７．５７（ｍ，１Ｈ），７．４６（ｍ，１Ｈ），７．３９（ｄｔ，Ｊ＝７．５及び０．８Ｈｚ，１Ｈ），７．３５（ｍ，３Ｈ），７．２７（ｍ，１Ｈ），７．１７（ｄｔ，Ｊ＝７．

４及び１．２Ｈｚ，１Ｈ），６．８１（ｄｔ，Ｊ＝０．７及び０．７Ｈｚ，１Ｈ），３．９１（ｓ，２Ｈ），２．０８（ｍ，２Ｈ），１．０７（ｄｄ，Ｊ＝７．８及び７．０Ｈｚ，６Ｈ），０．９１（ｑ，Ｊ＝６．９及び５．０Ｈｚ，６Ｈ）。^{31}Ｐ｛^{1}Ｈ｝　ＮＭＲ（CD_2Cl_2）：δ　－２．６。

【０６７７】

＜化合物１ｂ＞

【化１４４】



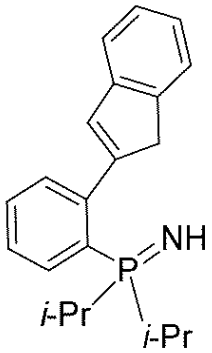
【０６７８】

化合物１ａ（２．５ｇ，８．１１ｍｍｏｌ）のトルエン溶液（１０ｍＬ）に、アジドトリメチルシラン（２．６３ｇ，２２．８１ｍｍｏｌ）を加えた。混合物を１００℃で３日間加熱した。揮発性物質を真空下で除去し、得られた暗緑色の油状物を、さらに精製せずに使用した。^{1}Ｈ　ＮＭＲ（CD_2Cl_2）：δ　８．０６（ｍ，１Ｈ），７．４８（ｄ，Ｊ＝８．０Ｈｚ，１Ｈ），７．４２（ｍ，３Ｈ），７．３０（ｔ，Ｊ＝７．４Ｈｚ，１Ｈ），７．２１（ｍ，２Ｈ），６．７０（ｂｒ．ｓ，１Ｈ），３．７４（ｓ，２Ｈ），１．９４（ｍ，２Ｈ），１．１２（ｄｄ，Ｊ＝８．８及び６．８Ｈｚ，６Ｈ），０．８７（ｄｄ，Ｊ＝９．２及び７．１Ｈｚ，６Ｈ），０．０２（ｓ，９Ｈ）。^{31}Ｐ｛^{1}Ｈ｝　ＮＭＲ（CD_2Cl_2）：δ　２３．６。

【０６７９】

＜化合物１ｃ＞

【化１４５】



【０６８０】

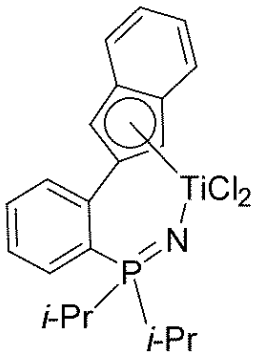
化合物１ｂ（６．８ｇ，１７．１９ｍｍｏｌ）、ＣｓＦ（２．８７ｇ，１８．８９ｍｍｏｌ）、ＭｅＯＨ（５ｍＬ）、及びＴＨＦ（６０ｍＬ）を混合し、６０℃で一晩加熱した。揮発性物質を真空下で除去し、残渣をトルエン（３×５０ｍＬ）で抽出し、セライトのパッドでろ過した。揮発性物質を真空下で除去し、得られた暗赤色の油状物を、さらに精製せずに使用した。主たる（目的）生成物に対応するＮＭＲ分光データを以下に示す。^{1}Ｈ　ＮＭＲ（CD_2Cl_2）：δ　７．７６（ｍ，１Ｈ），７．６５（ｍ，２Ｈ），７．５６（ｍ，１Ｈ），７．４５（ｍ，４Ｈ），７．２５（ｍ，３Ｈ），３．９１（ｓ，２Ｈ

），２．１４（ｍ，２Ｈ），１．１６（ｍ，６Ｈ），０．９５（ｍ，６Ｈ）。^{31}Ｐ｛^{1}Ｈ｝　ＮＭＲ（CD_2Cl_2）：δ　４３．０４。

【０６８１】

＜錯体１＞

【化１４６】



【０６８２】

粗製化合物１ｃ（上記で得られたもの、３．１３ｇ、９．６８ｍｍｏｌ）のＴＨＦ溶液（５０ｍＬ）に、ｎ－ＢｕＬｉ（６ｍＬ、９．６ｍｍｏｌ、ヘキサン中１．６Ｍ）の溶液を加えた。反応物を周囲温度で２時間撹拌し、得られた溶液を、Ｔｉ（NMe_2）$_2Cl_2$（２．０ｇ、９．６７ｍｍｏｌ）のＴＨＦ溶液（５０ｍＬ）に、－７８℃でゆっくりと滴下した。反応物を周囲温度まで温め、一晩撹拌した後、すべての揮発性物質を真空下で除去した。残渣をトルエン（３×５０ｍＬ）で抽出し、セライトのパッドでろ過した。合わせたろ液にクロロトリメチルシラン（４．２ｇ、３８．６６ｍｍｏｌ）を加えた。得られた混合物を９０℃で一晩加熱した。溶液を真空下で濃縮し、残渣をトルエン（２０ｍＬ）から再結晶させて、暗緑色の固体を得た。収量：１．８ｇ，４３％収率。^{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及び７．０Ｈｚ，６Ｈ），１．１６（ｄｄ，Ｊ＝１０．０及び７．２，６Ｈ）。^{31}Ｐ｛^{1}Ｈ｝　ＮＭＲ（CD_2Cl_2）：δ　３２．９。

【０６８３】

錯体１の配位圏を、単結晶Ｘ線結晶構造解析によって確認した（詳細は表１参照）。錯体１のＯＲＴＥＰ図を図１に示す。

【０６８４】

【表１】

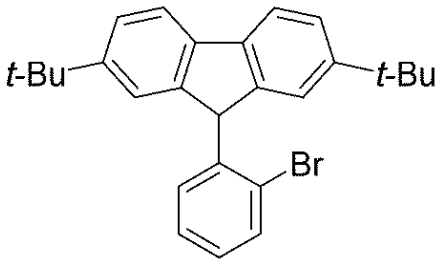
表１

錯体１の結晶学的実験の詳細

A. 結晶データ	
式	$C_{21}H_{24}Cl_2NPTi$
式量	440.18
結晶色及び晶癖 [a]	*緑色　ブロック*
結晶寸法 (mm)	0.52 × 0.16 × 0.11
結晶系	単斜晶
空間群	$P2_1/c$ (No. 14)
単位格子パラメータ [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*
ρ calcd (g cm^{-3})	1.385
μ (mm^{-1})	0.740
B. データ収集及び精密化条件	
回折計	Bruker PLATFORM/APEX II CCD [c]
放射線 (λ [Å])	graphite-monochromated Mo Ka (0.71073)
温度 (°C)	-80
スキャンタイプ	w スキャン (0.3°) (20 秒暴露)
データ収集 2θ limit (deg)	58.36
収集した総データ	32944 ($-15 \le h \le 15$, $-15 \le k \le 15$, $-22 \le l \le 22$)
独立反射	5712 (R_{int} = 0.0281)
観察された反射の数 (*NO*)	4962 [$F_o^2 \ge 2\sigma(F_o^2)$]
構造解析法	固有位相 (*SHELXT-2014* [d])
精密化法	full-matrix least-squares on F^2 (*SHELXL–2018* [e])
吸収補正法	Gaussian integration (face-indexed)
透過率の範囲	0.9502–0.7227
データ/抑制/パラメータ	5712 / 0 / 235
適合度 (S) [f] [全データ]	1.058
最終 R 指数 [g]	
R_1 [$F_o^2 \ge 2\sigma(F_o^2)$]	0.0334
wR_2 [全データ]	0.0926
ピーク及びホールの最大差	0.570 及び -0.523 e Å^{-3}

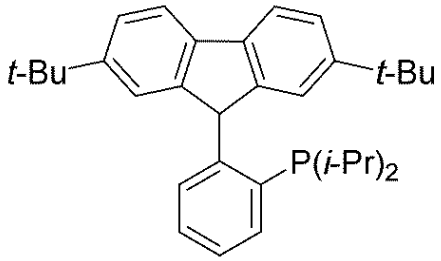
表 1 の注釈:
[a] トルエン／ヘプタン／ペンタン／ジクロロメタン溶液からの再結晶化により取得.
[b] 5.04 °< 2*q* < 58.24 °を用いた 9962 反射の最小二乗法精密化から取得.
[c] 回折計操作, データ収集, データ削減及び吸収補正のプログラムは Bruker によって提供されたもの.
[d] Sheldrick, G. M. *Acta Crystallogr.* **2015**, *A71*, 3–8. (*SHELXT-2014*)
[e] Sheldrick, G. M. *Acta Crystallogr.* **2015**, *C71*, 3–8. (*SHELXL-2018/3*)
[f] $S = [\Sigma w(F_o^2 - F_c^2)2/(n-p)]^{1/2}$ (n = データの数; p = 変化させたパラメータの数; $w = [s^2(F_o^2) + (0.0446P)^2 + 0.9554P]^{-1}$, 式中 $P = [\mathrm{Max}(F_o^2, 0) + 2F_c^2]/3$).
[g] $R_1 = \Sigma||F_o| - |F_c||/\Sigma|F_o|$; $wR_2 = [\Sigma w(F_o^2 - F_c^2)^2/\Sigma w(F_o^4)]^{1/2}$.

【０６８５】
＜化合物２ａ＞
【化１４７】



【０６８６】
２，７－ジ－ｔｅｒｔ－ブチルフルオレン（８．５ｇ、３０．５２ｍｍｏｌ）のＴＨＦ溶液（６０ｍＬ）に、ｎ－ＢｕＬｉ（１９．１ｍＬ、３０．５６ｍｍｏｌ、ヘキサン中１．６Ｍ）の溶液を周囲温度でゆっくりと加えた。反応物を２時間撹拌した後、無水$ZnCl_2$（６．３ｇ、４６．２３ｍｍｏｌ）を固体として加えた。混合物を一晩撹拌した後、混合物に１，２－ジボロモベンゼン（７．２ｇ、３０．５２ｍｍｏｌ）、$Pd(PPh_3)_4$（１．７６ｇ、１．５２ｍｍｏｌ）、及び追加のＴＨＦ（１００ｍＬ）を加えた。反応物を４日間加熱還流した。周囲温度まで冷却した後、反応物を飽和NH_4Cl水溶液（２００ｍＬ）でクエンチし、トルエン（３×１５０ｍＬ）で抽出した。合わせた有機層を塩水（１５０ｍＬ）と水（２００ｍＬ）で洗浄した。得られた有機層を無水Na_2SO_4で乾燥させ、ろ過した。ろ液から揮発性物質を真空下で除去し、残渣を沸騰ヘプタン（３×１５０ｍＬ）で抽出し、セライトのパッドでろ過した。ヘプタン溶液を約２０ｍＬに濃縮した。加熱してすべての固体を溶液に溶解した後、得られた溶液を周囲温度で放置した。得られた白色の固体沈殿物を、ろ過により単離し、真空下で乾燥させた。収量：７．０ｇ，５３％収率。^{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）。
【０６８７】
＜化合物２ｂ＞

【化１４８】



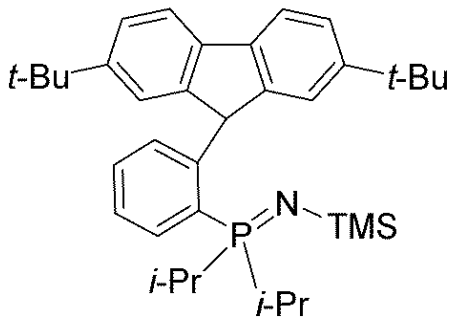
【０６８８】

化合物２ａ（４．５ｇ、１０．３８ｍｍｏｌ）を、ＴＨＦ（１００ｍＬ）とＥｔ$_2$Ｏ（１００ｍＬ）の混合液に溶解した。この溶液を、液体Ｎ$_2$／ＥｔＯＨ浴で、－１１５℃±５℃に冷却した。この溶液に、ｎ－ＢｕＬｉ（６．５ｍＬ、１０．４ｍｍｏｌ、ヘキサン中１．６Ｍ）の溶液を、３０分かけて撹拌しながら滴下した。冷却浴の温度を、－１１５℃±５℃で２時間にわたって維持した。－１１５℃の反応混合物に、クロロジイソプロピルホスフィン（１．５９ｇ、１０．４２ｍｍｏｌ）を滴下した。反応混合物を、一晩撹拌しながらゆっくりと周囲温度まで温めた。揮発性物質を真空下で除去し、残渣をトルエン（３×５０ｍＬ）に抽出し、セライトのパッドでろ過した。合わせたろ液の溶媒を真空下で除去した後、生成物を沸騰ヘプタン（１５ｍＬ）から再結晶させた。収量：３．０ｇ，６１％収率。^{1}Ｈ ＮＭＲ（ＣＤ$_2$Ｃｌ$_2$）：δ ７．７０（ｄ，Ｊ＝８．０Ｈｚ，２Ｈ），７．６０（ｄｔ，Ｊ＝７．８及び１．７Ｈｚ，１Ｈ），７．４０（ｄｄｄ，Ｊ＝８．１，１．７，及び０．６Ｈｚ，２Ｈ），７．２６（ｔ，Ｊ＝０．７Ｈｚ２Ｈ），７．２２（ｔｄ，Ｊ＝７．４及び１．３Ｈｚ，１Ｈ），７．０５（ｔｄ，Ｊ＝８．１及び１．１Ｈｚ，１Ｈ），６．５２（ｄ，Ｊ＝１２．６Ｈｚ，１Ｈ），６．３６（ｄｄｄ，Ｊ＝７．８，４．０，及び１．３Ｈｚ，１Ｈ），２．３０（ｍ，２Ｈ），１．２９（ｍ，６Ｈ），１．２６（ｓ，１８Ｈ），１．１３（ｄｄ，Ｊ＝１１．５及び６．７Ｈｚ，６Ｈ）。^{31}Ｐ｛^{1}Ｈ｝ ＮＭＲ（ＣＤ$_2$Ｃｌ$_2$）：δ －６．０。

【０６８９】

＜化合物２ｃ、合成経路Ａ＞

【化１４９】



【０６９０】

化合物２ｂ（６．０ｇ、１２．７５ｍｍｏｌ）、アジドトリメチルシラン（５．０ｍＬ、４．４ｇ、３８ｍｍｏｌ）、及びトルエン（４０ｍＬ）を混合し、１００℃で５日間加熱した。反応物を周囲温度まで冷却した後、すべての揮発性物質を真空下で除去した。生成物は高純度で定量的収率で得られ、さらに精製せずに使用した。^{1}Ｈ ＮＭＲ（ＣＤ$_2$Ｃｌ$_2$）：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，１８Ｈ），１．２０（ｄｄ，Ｈ

），－０．２２（ｓ，９Ｈ）．^{31}ＰＮＭＲ（CD_2Cl_2）：δ２４．３．^{1}ＨＮＭＲ（トルエン－d_8）：７．９４－７．７７（ｂｒ．ｍ，１Ｈ），７．７１（ｄ，Ｊ＝８Ｈｚ，２Ｈ），７．５５（ｓ，２Ｈ），７．３６（ｄｄ，Ｊ＝８及び２Ｈｚ，２Ｈ），６．８１（ｔ，Ｊ＝７Ｈｚ，１Ｈ），６．６４（ｔ，Ｊ＝７Ｈｚ，１Ｈ），６．５０（ｄｄ，Ｊ＝８及び４Ｈｚ，１Ｈ），２．１５－２．０１（ｍ，２Ｈ），１．２８（ｓ，１８Ｈ），１．２５（ｄｄ，Ｊ＝１６及び７Ｈｚ，６Ｈ），１．０８（ｄｄ，Ｊ＝１６及び７Ｈｚ，６Ｈ），０．０７（ｓ，９Ｈ）。^{31}Ｐ｛^{1}Ｈ｝　ＮＭＲ（トルエン－d_8）：δ　２２．９。

【０６９１】

＜化合物２ｃ、合成経路Ｂ＞

１００ｍＬバイアル中のCH_2Cl_2（３０ｍｌ）中の化合物２ｂ（４．７１ｇ、１０ｍｍｏｌ）の溶液に、ヘキサクロロエタン（２．３７ｇ、１０ｍｍｏｌ）のCH_2Cl_2溶液（２５ｍｌ）をゆっくりと加えた。ヘキサクロロエタン溶液の入ったバイアルを、CH_2Cl_2（３×２ｍｌ）でリンスし、リンス溶液を反応バイアルに加えた。周囲温度で２０分間撹拌した後、$HN(SiMe_3)_2$（４．８ｇ、３０ｍｍｏｌ）を添加した。約１０分後に白色沈殿物が形成され始め、混合物を周囲温度でさらに３時間撹拌した。トルエン（１２ｍｌ）を加え、混合物をポンプで送液して乾燥させた（注：より沸点の高い溶媒であるトルエンを加えることで、テトラクロロエチレン副生成物と過剰の$HN(SiMe_3)_2$の除去が容易になる）。残渣をペンタンの一部（約６０ｍＬ）で２０分間撹拌しながら粉砕し、固体をろ過して単離し、固体をペンタン（３×５ｍＬ）でさらにリンスした。ペンタンのろ液を真空下で濃縮し、生成物が結晶化し始めたら体積を約１０ｍＬにした。残りの溶媒を真空下で除去し、生成物を無色の結晶性固体として得た。収量：５．５５ｇ、９９％収率。合成経路Ｂで得られた化合物２ｃのＮＭＲスペクトルは、合成経路Ａで得られた化合物２ｃのスペクトルと同一であった

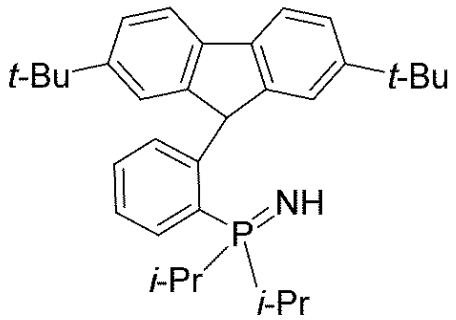
【０６９２】

当業者であれば、合成経路Ｂの方が、合成経路Ａと比較して、例えば化合物２ｃなどのホスフィンイミン化合物を合成するためのより容易な合成経路を提供し得ることを認識するであろう。合成経路Ａでは、トリメチルシリルアジド（Me_3SiN_3）との反応、還流温度、及びホスフィン化合物（例えば化合物２ｂ）をホスフィンイミン化合物（例えば化合物２ｃ）に酸化するのに数日を要するのに対し、合成経路Ｂでは、周囲温度で、より危険性の低い試薬を使用し、反応時間を短縮して合成を行うことができる。

【０６９３】

＜化合物２ｄ＞

【化１５０】



【０６９４】

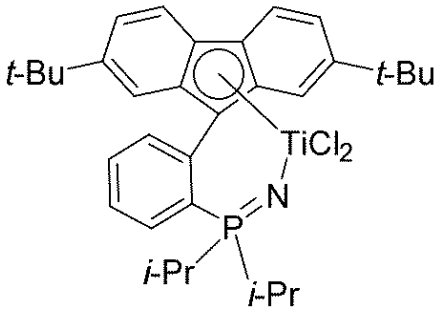
合成経路Ａ又はＢのいずれかで得られた化合物２ｃ（４．１５ｇ、７．４４ｍｍｏｌ）、ＣｓＦ（１．４ｇ、９．２２ｍｍｏｌ）、ＴＨＦ（３０ｍＬ）、及びＭｅＯＨ（２０ｍＬ）を組み合わせて、撹拌した混合物を６０℃で一晩加熱した。反応物を周囲温度まで冷却し、すべての揮発性物質を真空下で除去した後、残渣を熱トルエン（３×５０ｍＬ）で抽出し、セライトのパッドでろ過した。合わせたろ液の溶媒を真空下で除去し、得られた

固体を沸騰ヘプタン（２０ｍＬ）に溶解した。周囲温度で一晩保存すると、白色沈殿物が形成された。母液をデカントした後、白色固体として得られた生成物をペンタン（３×１０ｍＬ）で洗浄し、真空下で乾燥させた。収量：３．０ｇ，８３％収率。^{1}Ｈ　ＮＭＲ（CD_2Cl_2）：δ　７．７０（ｄ，Ｊ＝８．０Ｈｚ，３Ｈ），７．５０（ｔ，Ｊ＝９．２Ｈｚ，１Ｈ），７．４０（ｄｄ，Ｊ＝８．１及び１．９Ｈｚ，２Ｈ），７．２４（ｍ，３Ｈ），７．１４（ｍ，１Ｈ），６．４１（ｍ，１Ｈ），２．５６（ｍ，２Ｈ），１．３５（ｄｄ，Ｊ＝１５．０及び６．９Ｈｚ，６Ｈ），１．２６（ｓ，１８Ｈ），１．２３（ｍ，６Ｈ）。^{31}Ｐ｛^{1}Ｈ｝　ＮＭＲ（CD_2Cl_2）：δ　４４．７。

【０６９５】

＜錯体２＞

【化１５１】



【０６９６】

ｎ－ＢｕＬｉ溶液（８ｍＬ、１２．８ｍｍｏｌ、ヘキサン中１．６Ｍ）を、化合物２ｄ（３．１ｇ、６．３８ｍｍｏｌ）のトルエン溶液（１００ｍＬ）に、－７８℃で滴下した。ｎ－ＢｕＬｉを加えた後、冷浴を取り除き、反応物を周囲温度まで温め、２時間撹拌した。得られた赤色の溶液を再び－７８℃に冷却し、Ｔｉ（NMe_2）$_2Cl_2$（１．３２ｇ、６．３８ｍｍｏｌ）のトルエン溶液（４０ｍＬ）をゆっくりと加えた。反応物を周囲温度まで温め、一晩撹拌した。すべての揮発性物質を真空下で除去した後、残渣をトルエン（３×５０ｍＬ）で抽出し、セライトのパッドでろ過した。合わせたろ液にクロロトリメチルシラン（７．０ｇ、６４．４ｍｍｏｌ）を加えた。混合物を９０℃で加熱し、３日間撹拌した。すべての揮発性物質を真空下で除去した後、得られた暗赤色の固体を、熱トルエン（３×３０ｍＬ）で洗浄し、真空下で乾燥させた。収量：２．５ｇ，６３％収率。^{1}Ｈ　ＮＭＲ（CD_2Cl_2）：δ　７．９５（ｄｄ，Ｊ＝８．９及び０．８Ｈｚ，２Ｈ），７．８０－７．６４（ｍ，４Ｈ），７．５９（ｄｄ，Ｊ＝９．０及び１．８Ｈｚ，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。

【０６９７】

錯体２の配位圏を、単結晶Ｘ線結晶構造解析によって確認した（詳細は表２参照）。錯体２のＯＲＴＥＰ図を図２に示す。

【０６９８】

【表２】

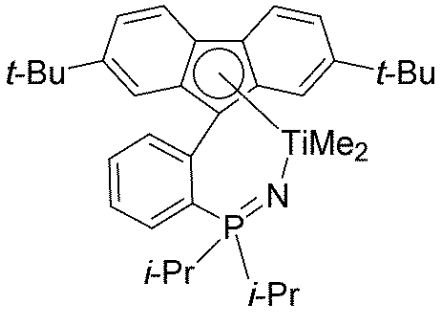
表２

錯体２の結晶学的実験の詳細

A. 結晶データ	
式	$C_{34}H_{43}Cl_5NPTi$ ($C_{33}H_{42}Cl_2NPTi$•$CHCl_3$)
式量	721.81
結晶色及び晶癖 [a]	オレンジ色　プレート
結晶寸法 (mm)	0.24 × 0.20 × 0.06
結晶系	単斜晶
空間群	$P2_1/c$ (No. 14)
単位格子パラメータ [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
ρ calcd (g cm^{-3})	1.326
μ (mm^{-1})	0.675
B. データ収集及び精密化条件	
回折計	Bruker PLATFORM/APEX II CCD [c]
放射線 (λ [Å])	graphite-monochromated Mo Ka (0.71073)
温度 (°C)	-80
スキャンタイプ	w スキャン (0.3°) (30 秒暴露)
データ収集 2θ limit (deg)	52.85
収集した総データ	36843 ($-16 \le h \le 16$, $-22 \le k \le 22$, $-20 \le l \le 20$)
独立反射	7411 (R_{int} = 0.0726)
観察された反射の数 (*NO*)	5263 [$F_o^2 \ge 2\sigma(F_o^2)$]
構造解析法	固有位相 (*SHELXT-2014* [d])
精密化法	full-matrix least-squares on F^2 (*SHELXL–2018* [e])
吸収補正法	Gaussian integration (face-indexed)
透過率の範囲	1.0000–0.8717
データ/抑制/パラメータ	7411 / 52[f] / 439
適合度 (S) [g] [全データ]	1.041
最終 R 指数 [h]	
R_1 [$F_o^2 \ge 2\sigma(F_o^2)$]	0.0493
wR_2 [全データ]	0.1348
ピーク及びホールの最大差	0.528 及び -0.624 e Å^{-3}

表２の注釈:
[a] ペンタン／トルエン／ジクロロメタン／シクロヘキサン／クロロホルム溶液からの再結晶化により取得. (NMR チューブ A から取得した結晶)
[b] 5.14°＜2□＜46.70°を用いた 5775 反射の最小二乗法精密化から取得.
[c] 回折計操作, データ収集, データ削減及び吸収補正のプログラムは Bruker によって提供されたもの.
[d] Sheldrick, G. M. *Acta Crystallogr.* **2015**, *A71*, 3–8. (*SHELXT-2014*)
[e] Sheldrick, G. M. *Acta Crystallogr.* **2015**, *C71*, 3–8. (*SHELXL-2018/3*)
[f] 無秩序な tert-ブチル基 (炭素原子 C28, C29, C30, C31, C29A, C30A 及び C31A) 内の C–C 距離は, *SHELXL* **SADI** 命令を使用することによりほぼ同じになるように抑制された. C13–C32 及び C13–C32A 距離は, **SADI** を使用することによりほぼ同じになるように抑制された. 剛結合抑制が, **RIGU** 命令の使用により, 他の無秩序な *tert*-ブチル基の炭素原子の異方性変位パラメータに適用された .
[g] $S = [\Sigma w(F_o^2 - F_c^2)2/(n-p)]^{1/2}$ (n ＝データの数; p = 変化させたパラメータの数; $w = [s^2(F_o^2) + (0.0558P)^2 + 2.0267P]^{-1}$, 式中 $P = [\mathrm{Max}(F_o^2, 0) + 2F_c^2]/3$).
[h] $R_1 = \Sigma||F_o| - |F_c||/\Sigma F_o|$; $wR_2 = [\Sigma w(F_o^2 - F_c^2)^2/\Sigma w(F_o^4)]^{1/2}$.

【０６９９】
＜錯体３＞
【化１５２】



【０７００】
錯体２（２．５ｇ、４．０５ｍｍｏｌ）とメチルマグネシウムブロミドの溶液（５．４ｍＬ、１６．２ｍｍｏｌ、Et_2O中３Ｍ）を、トルエン（１５０ｍＬ）中で組み合わせ、混合物を周囲温度で一晩撹拌した。すべての揮発性物質を除去し、残渣を真空下で３時間かけて完全に乾燥させた。生成物をトルエン（３×５０ｍＬ）で抽出し、セライトのパッドでろ過した。合わせたろ液を約２０ｍＬに減らし、ヘプタン（２０ｍＬ）を用いて層状にし、－３５℃に冷却して生成物を茶色の固体として沈殿させた。収量：１．５ｇ，６４％収率。^{1}Ｈ ＮＭＲ（CD_2Cl_2）：δ ８．１２（ｄｄ，Ｊ＝８．９及び０．８Ｈｚ，２Ｈ），７．６２－７．５２（ｍ，３Ｈ），７．４９（ｍ，１Ｈ），７．４３（ｄｄ，Ｊ＝８．８及び１．７Ｈｚ，２Ｈ），６．７２（ｍ，２Ｈ），２．２９（ｍ，２Ｈ），１．２１（ｍ，６Ｈ），１．１９（ｓ，１８Ｈ），１．１１（ｄｄ，Ｊ＝１６．３及び７．１Ｈｚ，６Ｈ），－０．９５（ｓ，６Ｈ，$TiCH_3$）。^{31}Ｐ｛^{1}Ｈ｝ ＮＭＲ（CD_2Cl_2）：δ ２４．５。

【０７０１】
錯体３の配位圏を、単結晶Ｘ線結晶構造解析によって確認した（詳細は表３参照）。錯体３のＯＲＴＥＰ図を図３に示す。

【０７０２】
【表３】

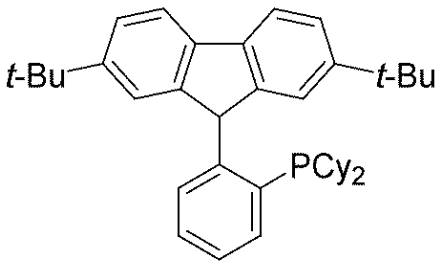
表３

錯体３の結晶学的実験の詳細

A. 結晶データ	
式	$C_{36}H_{50}Cl_2NPTi$ ($C_{35}H_{48}NPTi{\bullet}CH_2Cl_2$)
式量	646.54
結晶色及び晶癖 [a]	黄色　フラグメント
結晶寸法 (mm)	0.30 × 0.27 × 0.12
結晶系	単斜晶
空間群	$P2_1/c$ (No. 14)
単位格子パラメータ [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
ρ calcd (g cm^{-3})	1.200
μ (mm^{-1})	0.457
B. データ収集及び精密化条件	
回折計	Bruker PLATFORM/APEX II CCD [c]
放射線 (λ [Å])	graphite-monochromated Mo Kα (0.71073)
温度 (°C)	-80
スキャンタイプ	w スキャン (0.3°) (45 秒暴露)
データ収集 2θ limit (deg)	51.55
収集した総データ	31244 ($-15 \le h \le 15$, $-22 \le k \le 22$, $-20 \le l \le 20$)
独立反射	6830 (R_{int} = 0.0747)
観察された反射の数 (*NO*)	4479 [$F_o^2 \ge 2\sigma(F_o^2)$]
構造解析法	固有位相 (*SHELXT-2014* [d])
精密化法	full-matrix least-squares on F^2 (*SHELXL–2018* [e,f])
吸収補正法	Gaussian integration (face-indexed)
透過率の範囲	1.0000–0.8274
データ/抑制/パラメータ	6830 / 0 / 345
適合度 (S) [g] [全データ]	1.036
最終 R 指数 [h]	
R_1 [$F_o^2 \ge 2\sigma(F_o^2)$]	0.0746
wR_2 [全データ]	0.2149
ピーク及びホールの最大差	0.796 及び -0.515 e Å^{-3}

表 3 の注釈:
[a] ジクロロメタン／ペンタン溶液からの再結晶化により取得.
[b] 4.52 ° < 2□ < 45.44 °を用いた 4915 反射の最小二乗法精密化から取得.
[c] 回折計操作, データ収集, データ削減及び吸収補正のプログラムは Bruker によって提供されたもの.
[d] Sheldrick, G. M. *Acta Crystallogr.* **2015**, *A71*, 3–8. (*SHELXT-2014*)
[e] Sheldrick, G. M. *Acta Crystallogr.* **2015**, *C71*, 3–8. (*SHELXL-2018/3*)
[f] 残留電子密度のピークを無秩序又は部分占有溶媒ジクロロメタンの塩素原子若しくは炭素原子として精密化する試みは不成功であった. データは *PLATON* (Spek, A. L. *Acta Crystallogr.* **2015**, *C71*, 9–18. *PLATON* – 多目的結晶学的ツール. ユトレヒト大学, ユトレヒト, オランダ) に実装されている SQUEEZE 手順の使用を通して無秩序電子密度に対して補正した. 総溶媒アクセス可能空隙体積 553 Å^3 と総電子数 156 (溶媒ジクロロメタンの 4 分子, 又は標的分子の式単位あたり 1 分子と一致) が, 単位格子内に見出された.
[g] $S = [\Sigma w(F_o^2 - F_c^2)2/(n-p)]^{1/2}$ (n = データの数; p = 変化させたパラメータの数; $w = [s^2(F_o^2) + (0.0941P)^2 + 4.6324P]^{-1}$, 式中 $P = [\mathrm{Max}(F_o^2, 0) + 2F_c^2]/3$).
[h] $R_1 = \Sigma||F_o| - |F_c||/\Sigma|F_o|$; $wR_2 = [\Sigma w(F_o^2 - F_c^2)^2/\Sigma w(F_o^4)]^{1/2}$.

【０７０３】
＜化合物４ａ＞
【化１５３】



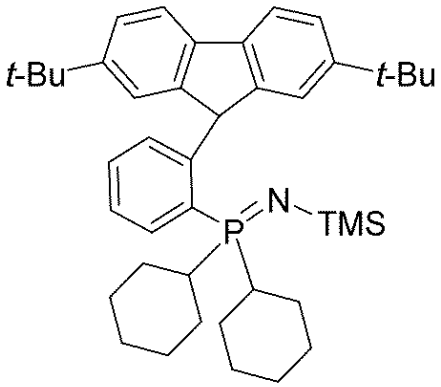
【０７０４】
化合物２ａ（３．５６ｇ、８．２ｍｍｏｌ）を、ＴＨＦ（６０ｍＬ）とＥｔ$_2$Ｏ（８０ｍＬ）の混合液に溶解した。この溶液を、液体Ｎ$_2$／ＥｔＯＨ浴で、－１１５℃±５℃に冷却した。この溶液に、ｎ－ＢｕＬｉ（５．４ｍＬ、８．０６ｍｍｏｌ、ヘキサン中１．６Ｍ、追加のペンタン７ｍＬで希釈）溶液を、３０分かけて撹拌しながら滴下した。冷却浴の温度を、－１１５℃±５℃で２時間にわたって維持した。－１１５℃の反応混合物に、クロロジシクロヘキシルホスフィン（２．０ｇ、８．６ｍｍｏｌ）のＴＨＦ溶液（７ｍＬ）を滴下した。反応混合物を、一晩撹拌しながらゆっくりと周囲温度まで温めた。揮発性物質を真空下で除去し、残渣をトルエン（４０ｍＬ）に抽出し、セライトのパッドでろ過した。揮発性物質を真空下で除去した。粗製物質（トルエン－ｄ８）の^{31}Ｐ　ＮＭＲ分析では、δが－６．１（ｎ－ＢｕＰＣｙ$_2$副生成物と推定）と－１５．３ｐｐｍ（目的の生成物）の２つの共鳴が示された。オフホワイトの固体を、熱ヘプタン（２５ｍＬ）に溶解し、ろ過し、１６時間放置して結晶化させた。黄色の母液をデカントし、無色の固体を冷ペンタン（２×５ｍＬ）で洗浄し、次いで、真空下で乾燥させた。収量：４．０ｇ，９０％収率。^{1}Ｈ　ＮＭＲ（トルエン－ｄ$_8$）：δ　７．７５（ｄ，Ｊ＝７．４Ｈｚ，２Ｈ），７．５２（ｂｒ．ｓ，２Ｈ），７．５０（ｂｒ．ｓ，１Ｈ），７．４０（ｄｄ，Ｊ

＝８．１及び２．０Ｈｚ，３Ｈ），７．００－６．９６（ｍ，１Ｈ），６．８６（ｄ，Ｊ＝１３．７Ｈｚ，１Ｈ），６．７６－６．７２（ｍ，１Ｈ），６．５４（ｄｄｄ，Ｊ＝８．０，４．２，及び１．４Ｈｚ，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｝（トルエン－ｄ$_{8}$）：δ －１５．３。

【０７０５】

＜化合物４ｂ＞

【化１５４】



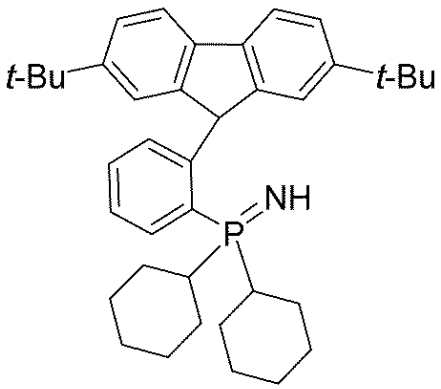
【０７０６】

化合物４ａ（２．１３ｇ、４．０ｍｍｏｌ）のＣＨ$_{2}$Ｃｌ$_{2}$溶液（２０ｍＬ）にＨＮ（ＳｉＭｅ$_{3}$）$_{2}$（２．４ｍＬ、１２ｍｍｏｌ）を加え、続いて、ヘキサクロロエタン（０．９２ｇ、４．０ｍｍｏｌ）のＣＨ$_{2}$Ｃｌ$_{2}$溶液（１０ｍＬ）を加えて、濁った白色の反応混合物を得た。１時間撹拌した後、一部を採取し、真空下で乾燥させた。^{1}Ｈ　ＮＭＲ分光法による分析により、反応物には化合物４ｂが約９０％の純度で含まれていることが示唆された。混合物をろ過し、ろ液を真空下で濃縮して無色の粘着性のある固体を得た。これを、さらに精製せずに使用した。^{1}Ｈ　ＮＭＲ（ＣＤＣｌ$_{3}$）：δ　７．７１（ｓ，１Ｈ），７．６１（ｄ，Ｊ＝７．９Ｈｚ，２Ｈ），７．３８－７．３３（ｍ，５Ｈ），７．２０－７．１４（ｍ，４Ｈ），６．４２（ｄｄｄ，Ｊ＝７．９，７．６，及び１．４Ｈｚ１Ｈ），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。

【０７０７】

＜化合物４ｃ＞

【化１５５】



【０７０８】

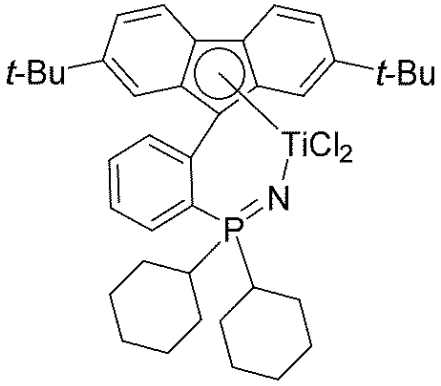
粗製化合物４ｂ（上記の通り、純度約９０％）のＴＨＦ溶液（３０ｍＬ）に、ＣｓＦ（

０．８８ｇ、６．０ｍｍｏｌ）のＭｅＯＨ溶液（２０ｍＬ）を、周囲温度で撹拌しながら加えた。反応混合物のヘッドスペースを短時間排気し、混合物を一晩６０℃に加熱した。溶媒を真空下で除去し、残渣を熱トルエン（８０ｍＬ）に取り、混合物をセライトでろ過した。揮発性物質を真空下で除去し、得られた固体を冷ペンタン（２×５ｍＬ）で洗浄してデカントし、残った無色の固体が目的の生成物であることが確認された。収量：１．３ｇ，６１％収率。^{1}Ｈ　ＮＭＲ（CD_2Cl_2）：δ　７．６９（ｄ，Ｊ＝７．２Ｈｚ，２Ｈ），７．４６－７．４０（ｍ，１Ｈ），７．３８（ｄｄ，Ｊ＝８．４及び２．８Ｈｚ，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（オーバーラップ　ｍ，２Ｈ），１．９５－１．８１（ｍ，４Ｈ），１．７７－１．７３（ｍ，２Ｈ），１．５７－１．２９（オーバーラップ　ｍ，１２Ｈ），１．２７（ｓ，１８Ｈ）。^{31}Ｐ　ＮＭＲ（CD_2Cl_2）：δ　３９．２。

【０７０９】

＜錯体４＞

【化１５６】



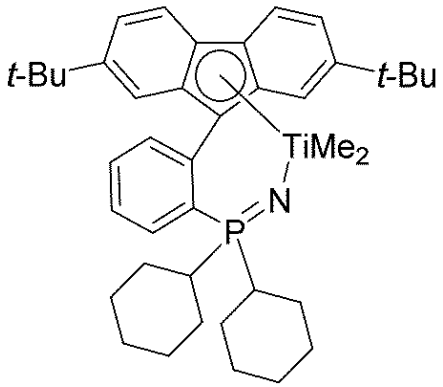
【０７１０】

ｎ－ＢｕＬｉ溶液（９．９ｍＬ、１６ｍｍｏｌ、ヘキサン中１．６Ｍ）を、化合物４ｃ（４．２８ｇ、７．６ｍｍｏｌ）のＴＨＦ溶液（１５０ｍＬ）に、－７８℃で滴下した。ｎ－ＢｕＬｉを加えた後、冷浴を取り除き、反応物を周囲温度まで温め、２時間撹拌した。得られた赤色の溶液を再び－７８℃に冷却し、Ｔｉ（ＮＭｅ$_2$）$_2$Ｃｌ$_2$（１．５６ｇ、７．６ｍｍｏｌ）のトルエン溶液（６０ｍＬ）をゆっくりと加えた。反応物を周囲温度まで温め、一晩撹拌した。すべての揮発性物質を真空下で除去した後、残渣をトルエン（２００ｍＬ）に取り、セライトのパッドでろ過した。合わせたろ液にクロロトリメチルシラン（９．６ｍＬ、７５．５ｍｍｏｌ）を加え、混合物を２日間撹拌しながら９０℃で加熱した。すべての揮発性物質を真空下で除去した後、得られた暗赤色の固体を、ペンタン（５×１０ｍＬ）で洗浄し、真空下で乾燥させた。収量：１．９ｇ，２５％収率。^{1}Ｈ　ＮＭＲ（CD_2Cl_2）：δ　７．９３（ｄ，Ｊ＝９．０Ｈｚ，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。

【０７１１】

＜錯体５＞

【化１５７】



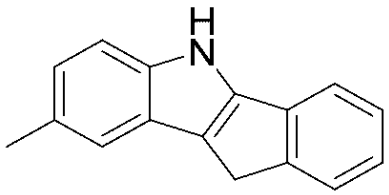
【０７１２】

錯体４（１．１８ｇ、１．７ｍｍｏｌ）のトルエン溶液（４０ｍＬ）に、メチルマグネシウムブロミドの溶液（１．２ｍＬ、３．８ｍｍｏｌ、Et_2O中３．０Ｍ）を周囲温度で加えた結果、迅速な色変化が赤色から暗褐色／黒色へと生じた。１０分間撹拌した後、揮発性物質を真空下で除去し、残渣を真空下で３時間徹底的に乾燥させた。残渣をトルエン（４０ｍＬ）に取り、ろ過し、得られたろ液を真空下で濃縮乾固した。暗緑色／茶色の固体を、ペンタン（２×５ｍＬ）で洗浄し、次いで、真空下で乾燥させた。収量：０．６４ｇ，５８％収率。^{1}Ｈ　ＮＭＲ（$CDCl_3$）：δ　８．１１（ｄ，Ｊ＝９．８Ｈｚ，２Ｈ），７．５９－７．５３（ｍ，４Ｈ），７．４３（ｄｄ，Ｊ＝８．５及び１．０Ｈｚ，２Ｈ），６．７１（ｄ，Ｊ＝１．１Ｈｚ，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。

【０７１３】

＜８－メチル－５，１０－ジヒドロインデノ［１，２－ｂ］インドール＞

【化１５８】



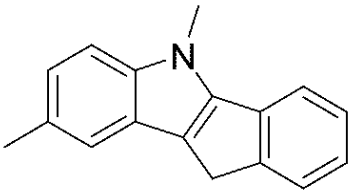
【０７１４】

この材料は、Ｇｒａｎｄｉｎｉ，Ｃ．他、Ｏｒｇａｎｏｍｅｔａｌｌｉｃｓ（２００４、２３、３４４－３６）の記載に概ね従って調製した。

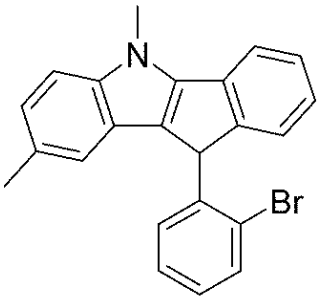
【０７１５】

１－インダノン（５．０２ｇ、３８．０ｍｍｏｌ）、ｐ－トリルヒドラジン塩酸塩（６．０３ｇ、３８．０ｍｍｏｌ）及びｐ－トルエンスルホン酸一水和物（０．３ｇ）を、ｉ－ＰｒＯＨ（１５０ｍｏｌ）に懸濁した。凝縮器を取り付け、混合物を４５分間還流したところ、反応混合物は黄橙色の懸濁液になった。反応混合物を、０℃に１５分間冷却し、ろ過した。ろ過ケーキを、ろ液が無色になるまで、ｉ－ＰｒＯＨでリンスした。残留揮発分を減圧下で除去し、目的の生成物を白色固体として得た。収量：７．４５ｇ，８９％収率。^{1}Ｈ　ＮＭＲ（$CDCl_3$）δ　８．２３（ｂｒ，１Ｈ），７．５３（ｄ，Ｊ＝７．４Ｈｚ，１Ｈ），７．４５（ｍ，２Ｈ），７．３２（ｍ，２Ｈ），７．２０（ｔ，Ｊ＝７．４Ｈｚ，１Ｈ），７．０１（ｄ，Ｊ＝８．５Ｈｚ，１Ｈ），３．７１（ｓ，２Ｈ），２．４８（ｓ，３Ｈ）。

【０７１６】
＜５，８－ジメチル－５，１０－ジヒドロインデノ［１，２－ｂ］インドール＞
【化１５９】



【０７１７】
８－メチル－５，１０－ジヒドロインデノ［１，２－ｂ］インドール（１．７３ｇ、７．８８ｍｍｏｌ）とカリウムｔｅｒｔ－ブトキシド（８８５ｍｇ、７．８８ｍｍｏｌ）を、ＴＨＦ（６０ｍＬ）に溶解し、半透明の黄色の溶液を１時間撹拌した。ヨードメタン（０．４９ｍＬ、１．１２ｇ、７．８８ｍｍｏｌ）を注射器で加えたところ、すぐに白色沈殿物が形成された。３０分後、反応混合物を、飽和NH_4Cl水溶液（１００ｍＬ）に注ぎ、CH_2Cl_2（１００ｍＬ）で抽出した。有機抽出物を、水（２×５０ｍＬ）、塩水（５０ｍＬ）でリンスし、無水Na_2SO_4で乾燥させ、ろ過し、減圧下で除去して淡黄色の固体を得た。粗製生成物を、熱ヘプタンから再結晶化して精製し、目的の生成物をオフホワイトの固体として得た。収量：１．６４ｇ，８９％収率。^1H ＮＭＲ（$CDCl_3$）δ ７．６６（ｄ，Ｊ＝７．５Ｈｚ，１Ｈ），７．５５（ｄ，Ｊ＝７．５Ｈｚ，１Ｈ），７．４５（ｓ，１Ｈ），７．３６（ｔ，Ｊ＝７．５Ｈｚ，１Ｈ），７．３１－７．２０（ｍ，１Ｈ），７．０８（ｄ，Ｊ＝８．３Ｈｚ，１Ｈ），４．０４（ｓ，３Ｈ），３．７０（ｓ，２Ｈ），２．５１（ｓ，３Ｈ）。
【０７１８】
＜化合物６ａ＞
【化１６０】



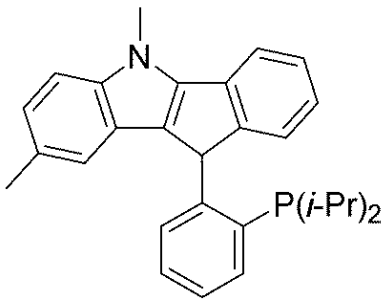
【０７１９】
５，８－ジメチル－５，１０－ジヒドロインデノ［１，２－ｂ］インドール（４．６７ｇ、２０．０ｍｍｏｌ）のＴＨＦ溶液（８０ｍＬ）に、ｎ－ＢｕＬｉ（１２．５ｍＬ、２１．０ｍｍｏｌ、ヘキサン中１．６Ｍ）の溶液を周囲温度で滴下した。反応混合物を一晩撹拌すると、明るいオレンジレッドの溶液が得られた。。この反応液に、無水塩化亜鉛（４．０９ｇ、３０．０ｍｍｏｌ）のＴＨＦ溶液（４０ｍＬ）を加え、得られた淡黄色の反応混合物を３時間撹拌した。Ｐｄ（PPh_3）$_4$（１．１６ｇ、１．００ｍｍｏｌ）と１，２－ジブロモベンゼン（４．７２ｇ、２０．０ｍｍｏｌ）を連続して加えた後、フラスコのヘッドスペースを短時間排気し、反応混合物を６５～６７℃で５日間加熱した。反応混合物を減圧下で約３０ｍＬに濃縮し、水とトルエン（各々７５ｍＬ）に分配した。有機層を、水層からのさらなるトルエン抽出物（２×３０ｍＬ）と合わせた。合わせた有機層を、水（２×３０ｍＬ）で洗浄し、次いで塩水（３０ｍＬ）で洗浄し、次いで無水Na_2SO_4で乾燥させた。暗赤褐色の濁った抽出物をろ過し、暗赤褐色のろ液から白色固体を

除去した。ろ液を減圧下で濃縮した。熱ヘプタンからの再結晶化により、物質の純度がいくらか向上した。２回目の精製は、この物質を最小限のジクロロメタンに再溶解し、ヘプタンを加え、N_2流下で９０℃に１５分間加熱してジクロロメタンを蒸発させ、沈殿物を得ることによって行った。－３５℃に冷却し、単離した固体をデカンテーションし、真空下で乾燥させると、約９２％の純度（４．０４ｇ、１０．４ｍｍｏｌ、５２％の収率）の生成物が得られた。この物質を、カラムクロマトグラフィー（ＥｔＯＡｃ／ヘプタン、約５％ｖ／ｖＥｔＯＡｃまでの勾配溶出、R_f＝０．２２（ＴＬＣ、ヘプタン中４％ＥｔＯＡｃ））でさらに精製したところ、ＮＭＲによる純度が９５％を超える目的の生成物が１．５４ｇ得られた。^{1}Ｈ　ＮＭＲ（$CDCl_3$）：δ　７．７３（ｄｄ，Ｊ＝８．０及び１．２Ｈｚ，１Ｈ），７．６６（ｄｍ，Ｊ＝７．５Ｈｚ，１Ｈ），７．４８（ｄｍ，Ｊ＝７．６Ｈｚ，１Ｈ），７．３５（ｍ，１Ｈ），７．２９（ｄ，Ｊ＝８．４Ｈｚ，１Ｈ），７．１７（ｍ，２Ｈ），７．１１－７．０２（ｍ，２Ｈ），７．００（ｔｄ，Ｊ＝７．６及び１．１Ｈｚ，１Ｈ），６．６１（ｄｄ，Ｊ＝７．８及び１．５Ｈｚ，１Ｈ），５．６０（ｓ，１Ｈ），４．０９（ｓ，３Ｈ），２．４０（ｓ，３Ｈ）。

【０７２０】

＜化合物６ｂ＞

【化１６１】



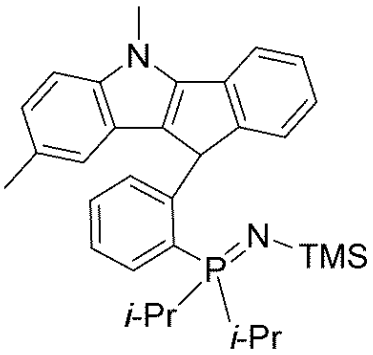
【０７２１】

化合物６ａ（１．１３ｇ、２．９２ｍｍｏｌ）を、ＴＨＦ（１０ｍＬ）とEt_2O（５０ｍＬ）の混合液に溶解した。この溶液を、液体N_2／ＥｔＯＨ浴で、－１１５℃±５℃に冷却した。この溶液に、ｎ－ＢｕＬｉ溶液（１．９１ｍＬ、３．０６ｍｍｏｌ、ヘキサン中１．６Ｍ）を、５分かけて撹拌しながら滴下した。冷却浴の温度を、－１１５℃±５℃で２時間にわたって維持した。－１１５℃の反応混合物に、クロロジイソプロピルホスフィン（０．４７ｇ、３．０６ｍｍｏｌ）のＴＨＦ溶液（１０ｍＬ）を滴下した。反応混合物を、一晩撹拌しながらゆっくりと周囲温度まで温めた。得られた淡黄色の溶液を真空下で濃縮し、ヘプタン（２０ｍＬ）で粉砕し、真空下で濃縮乾固し、残渣をトルエン（３×５０ｍＬ）に抽出し、フィルターカニューレでろ過した。合わせたろ液の溶媒を真空下で除去した後、残渣を冷ペンタン（－３５℃）で２回洗浄し、デカントし、次いで、真空下で乾燥させて無色の固体を得た。^{1}Ｈ　ＮＭＲによる分析では、この物質は目的のホスフィン（化合物６ｂ）と未反応の出発物質（化合物６ａ）の混合物であり、その比率は約３：１であり、その他の不純物も含まれていることがわかった。粗製物質は、化合物６ｃの合成のためにさらに精製することなく使用し、その段階で精製した。粗製物質の^{31}ＰＮＭＲスペクトルは、１つの共鳴のみを示した。^{31}Ｐ｛^{1}Ｈ｝　ＮＭＲ（トルエン－d_8）：δ　－７．５。

【０７２２】

＜化合物６ｃ＞

【化１６２】



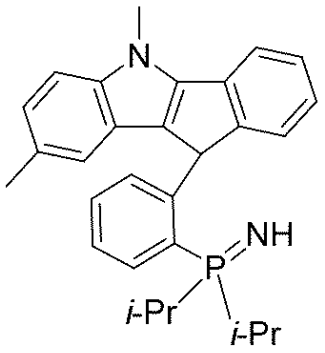
【０７２３】

上記の粗製化合物６ｂ（７４０ｍｇ、化合物６ｂが１．７４ｍｍｏｌであると仮定）のトルエン溶液（５０ｍＬ）に、過剰量のヘキサクロロエタン、C_2Cl_6（９００ｍｇ、４ｍｍｏｌ）を加え、混合物を撹拌して試薬を溶解した。無色の沈殿物が形成され始めたので、混合物を４時間放置した。混合物をデカントし、得られた固体をトルエン（３×３ｍＬ）で洗浄してデカントし、真空下で乾燥させた。残渣をCH_2Cl_2（２０ｍＬ）に取り、注射器を介して$HN(SiMe_3)_2$（２．０ｍＬ、９．５ｍｍｏｌ）を滴下した。無色の沈殿物が形成され始めたので、混合物を周囲温度で一晩放置した。得られた混合物をろ過し、無色の固体を真空下で乾燥させたところ、この固体が高純度（＞９５％）の目的の生成物であることが確認された。収量：０．７３ｇ，８２％収率。^1H ＮＭＲ（$CDCl_3$）：δ ７．６３（ｄ，Ｊ＝７．５Ｈｚ，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（ｓｅｐｔ．，Ｊ＝７．０Ｈｚ，１Ｈ），２．４４（ｓｅｐｔ．，Ｊ＝７．０Ｈｚ，１Ｈ），２．３３（ｓ，３Ｈ），１．３６（ｍ，６Ｈ），１．２４（ｍ，６Ｈ），－０．２１（ｓ，９Ｈ）。$^{31}P\{^1H\}$ ＮＭＲ（$CDCl_3$）：δ ２２．９ｐｐｍ。

【０７２４】

＜化合物６ｄ＞

【化１６３】



【０７２５】

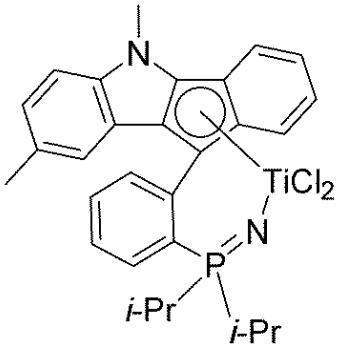
乾燥メタノール（５ｍＬ）中の化合物６ｃ（７４０ｍｇ、１．４４ｍｍｏｌ）及びＴＨＦ（１５ｍＬ）溶液に、ＣｓＦ（３２９ｍｇ、２．１６ｍｍｏｌ）を加えた。この混合物を一晩撹拌しながら５０℃に加熱した。揮発性物質を真空下で除去し、白色の粘着性のある固体残渣を得た。残渣をトルエン（３×１０ｍＬ）で抽出し、セライトでろ過した。ろ液を真空下で濃縮乾固し、無色の固体を得た。収量：０．６４ｇ，定量的。^1H ＮＭＲ（$CDCl_3$）：δ ７．６５（ｄ，Ｊ＝７．５Ｈｚ，１Ｈ），７．４９（ｔｄ，Ｊ＝８．８及び１．０Ｈｚ，１Ｈ），７．３０（ｔｄ，Ｊ＝７．５及び１．１Ｈｚ，１Ｈ），７

．２４（ｍ，４Ｈ），７．１０（ｍ，２Ｈ），７．０４（ｓ，１Ｈ），６．９９（ｄｄ，Ｊ＝８．４及び１．４Ｈｚ，１Ｈ），６．６１（ｄｄｄ，Ｊ＝７．８，３．３，及び１．０Ｈｚ，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。

【０７２６】

＜錯体６＞

【化１６４】



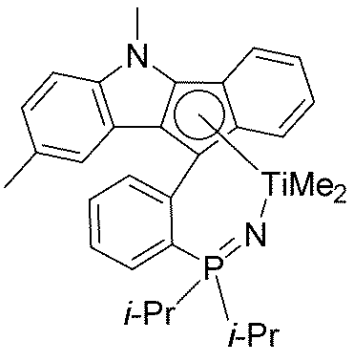
【０７２７】

化合物６ｄ（６２５ｍｇ、１．４２ｍｍｏｌ）のＴＨＦ溶液（３０ｍＬ）に、－７８℃で、ｎ－ＢｕＬｉ（１．８ｍＬ、２．９ｍｍｏｌ、１．６Ｍヘキサン）溶液をカニューレで滴下したところ、迅速な色変化が明るい紫色へと生じた。混合物をゆっくりと周囲温度まで温め、次いで、真空下で濃縮して紫色の固体を得た。この固体物質をトルエン（２０ｍＬ）で粉砕してオレンジ色のスラリーを生成し、次いで、４５℃まで加熱しながら真空下で濃縮した。粉砕と濃縮のプロセスをもう一度繰り返した。^{1}Ｈ　ＮＭＲ分光法による固体残渣の分析により、残留ＴＨＦがまだ存在していることが示され、スペクトルが広がっているように見えた。トルエン（４０ｍＬ）を加え、混合物を－７８℃まで冷却した。急速に撹拌したスラリーに、Ｔｉ（ＮＭｅ$_2$）$_2$Ｃｌ$_2$（２４３ｍｇ、１．４９ｍｍｏｌ）のトルエン溶液（２０ｍＬ）をカニューレを介して滴下した。得られた暗赤色の混合物を、－７８℃で１０分間撹拌し、次いで、ゆっくりと周囲温度まで温めた。真空下で揮発性物質を除去した後、暗赤色の固体をトルエン（２０ｍＬ）に再溶解し、混合物を焼結ガラスフリットでろ過した。過剰量のクロロトリメチルシラン（１．５ｍＬ、１６ｍｍｏｌ）を溶液に加え、ヘッドスペースを部分的に排気してから、混合物を９０℃で２日間加熱した。得られた混合物を周囲温度まで冷却し、次いで、真空下で濃縮乾固した。固体残渣をトルエン（８ｍＬ）に取り込んだ後、ヘプタンの一部（１０ｍＬ）を加え、得られた固体をろ過で単離し、追加のヘプタンでリンスした。得られた暗赤色の固体を、真空下で乾燥させた。収量：４４０ｍｇ，５５％収率。^{1}Ｈ　ＮＭＲ（ＣＤＣｌ$_3$）：δ　７．９４（ｄ，Ｊ＝８．６Ｈｚ，１Ｈ），７．７２（ｍ，３Ｈ），７．３９（ｍ，１Ｈ），７．２５（ｍ，１Ｈ），７．１７（ｄ，Ｊ＝８．６Ｈｚ，２Ｈ），７．０７（ｍ，２Ｈ），６．８２（ｓ，１Ｈ），４．１７（ｓ，３Ｈ），２．３９（ｓｅｐｔ．，Ｊ＝８．２Ｈｚ，１Ｈ），２．２９（ｓｅｐｔ．，Ｊ＝７．２Ｈｚ，１Ｈ），２．２６（ｓ，３Ｈ），１．１９（ｍ，１２Ｈ）。^{31}Ｐ｛^{1}Ｈ｝　ＮＭＲ（ＣＤＣｌ$_3$）：δ　３１．０ｐｐｍ。

【０７２８】

＜錯体７＞

【化１６５】



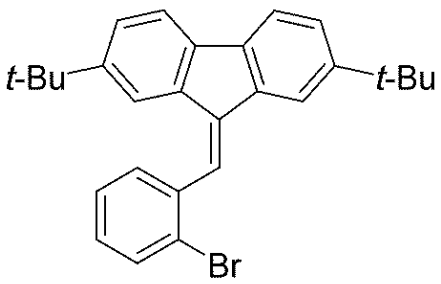
【０７２９】

錯体６（４４０ｍｇ、０．７９ｍｍｏｌ）のトルエン溶液／懸濁液（１０ｍＬ）に、メチルマグネシウムブロミドの溶液（０．６ｍＬ、１．７ｍｍｏｌ、Et_2O中３．０Ｍ）を周囲温度で加えた。迅速な色変化が暗赤色から明るいオレンジ色へと生じた。混合物を２時間撹拌し、次いで、揮発性物質を真空下で除去した。残渣をトルエン（１０ｍＬ）で粉砕し、次いで、真空下で濃縮乾固した。残渣をペンタン（１０ｍＬ）で粉砕し、次いで、真空下で再度濃縮した。残渣をトルエン（１０ｍＬ）に溶解し、懸濁液をセライトのパッドでろ過した。明るい黄色／オレンジ色のろ液を真空下で濃縮し、粘着性のあるオレンジ色のガラス状の半固体を得た。ペンタン（５ｍＬ）を加えて撹拌すると、非晶質固体が明るい黄色の粉末を形成し、これをデカンテーションで単離し、真空下で乾燥させた。フィルターパッドをさらに少量の温かいトルエンで抽出し、上記のプロセスを繰り返して、純粋な固体の黄色の生成物をさらに得た。収量：３４５ｍｇ，８４％収率。^{1}H ＮＭＲ（トルエン－d_8）：δ ７．８８（ｄ，Ｊ＝８．６Ｈｚ，１Ｈ），７．３６（ｍ，１Ｈ，ＡｒＨ），７．１６（ｔ，Ｊ＝７．６Ｈｚ，１Ｈ），７．１０－６．８８（ｍ，７Ｈ，トルエン－d_8シグナルとオーバーラップ），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（トルエン－d_8）：δ ２２．３ｐｐｍ。

【０７３０】

＜化合物８ａ＞

【化１６６】



【０７３１】

化合物８ａは、Ｙａｍａｇｕｃｈｉ，Ｅ．，Ａｂｅ，Ａ．，Ｉｔｏｈ，Ａ．Ａｓｉａｎ Ｊｏｕｒｎａｌ ｏｆ Ｏｒｇａｎｉｃ Ｃｈｅｍｉｓｔｒｙ ２０２２，１１，ｅ２０２２００３９に記載されている手順を修正して調製した。

【０７３２】

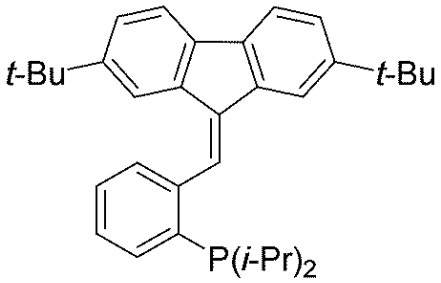
ＫＯｔＢｕ（１４．２５ｇ、１２７ｍｍｏｌ）及び２，７－ジ－ｔｅｒｔ－ブチルフルオレン（１７．６８ｇ、６３．５ｍｍｏｌ）のトルエン溶液（３０ｍＬ）に、－７８℃で撹拌しながら、乾燥ＭｅＯＨ（１３０ｍＬ）を加えた。混合物を周囲温度まで温めた後、

２－ブロモベンズアルデヒド（１１．７５ｇ、６３．５ｍｍｏｌ）のＭｅＯＨ溶液（３０ｍＬ）を加え、得られた混合物を８５℃で約２０時間加熱還流した。周囲温度まで冷却した後、反応混合物を真空下で濃縮乾固し、次いで、Et_2O（２００ｍＬ）を加えて黄色のスラリーを形成した。混合物を約５℃で２時間冷却し、次いでろ過し、ろ液を真空下で濃縮乾固して黄色の固体を得た。この固体残渣を粉砕して粉末にし、ＭｅＯＨ（２５０ｍＬ）で１時間粉砕した後、ろ過して単離した。黄色の固体をさらにＭｅＯＨ（３×２０ｍＬ）で洗浄し、次いで、真空下で乾燥させた。収量：２４．６ｇ，８７％収率。^{1}Ｈ ＮＭＲ（トルエン－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及び１．７Ｈｚ，１Ｈ），７．２３（ｄｄ，Ｊ＝８．０及び１．７，１Ｈ），６．９８（ｍ，１Ｈ），６．８０（ｔ，Ｊ＝８．２Ｈｚ，１Ｈ），１．３３（ｓ，９Ｈ），１．１１（ｓ，９Ｈ）。

【０７３３】

＜化合物８ｂ＞

【化１６７】



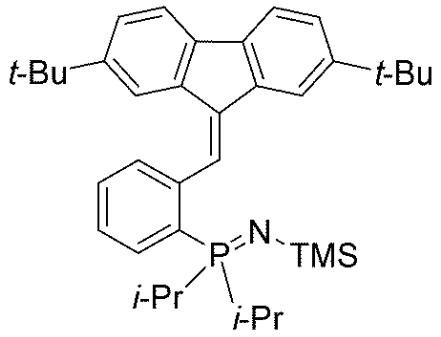
【０７３４】

ＴＨＦ（１２０ｍＬ）及びEt_2O（８０ｍＬ）中の化合物８ａ（１２．０ｇ、２６．９ｍｍｏｌ）の溶液に、－７８℃で撹拌しながら、ｎ－ＢｕＬｉ（１７．５ｍＬ、２８．０ｍｍｏｌ、ヘキサン中１．６Ｍ）溶液をカニューレを介して２０分かけて滴下した。迅速な色変化が黄色から赤色へと生じ、数分後に沈殿物が形成され始めた。得られたスラリーを、－７８℃で２時間撹拌し、次いで、クロロジイソプロピルホスフィン（４．２７ｇ、２８．０ｍｍｏｌ）のEt_2O溶液（１０ｍＬ）をカニューレを介して滴下した。反応混合物を、一晩かけて周囲温度まで温めた後、得られた淡黄色の溶液を、真空下で濃縮乾固した。固体残渣をペンタン（１００ｍＬ）に取り、３０分間撹拌した後、ろ過した。ろ液を約５ｍＬに濃縮し、その後一晩、－３５℃に冷却して生成物を結晶化させた。母液をデカントし、得られた固体を、冷（－３５℃）ペンタン（約１０ｍＬ）で洗浄してデカントし、次いで、真空下で乾燥させた。収量：１１．８ｇ，９１％収率。^{1}Ｈ ＮＭＲ（トルエン－d_8）：δ ８．３９（ｓ，１Ｈ），８．０１（ｓ，１Ｈ），７．６０（ｍ，１Ｈ），７．５３（ｄ，Ｊ＝８．０Ｈｚ，１Ｈ），７．５２－７．４７（ｍ，２Ｈ），７．４１－７．３５（ｍ，１Ｈ），７．３２（ｄｄ，Ｊ＝８．０及び１．７Ｈｚ，１Ｈ），７．２４（ｄｄ，Ｊ＝８．０及び１．６，１Ｈ），７．２０－７．１３（ｍ，２Ｈ），１．９０（ｓｅｐｔ．ｏｄ，Ｊ＝７．０及び１．３Ｈｚ，２Ｈ），１．２９（ｓ，９Ｈ），１．１８（ｓ，９Ｈ），０．９７－０．８５（２つのオーバーラップ ｄｄ，１２Ｈ）。^{31}Ｐ｛^{1}Ｈ｝ ＮＭＲ（トルエン－d_8）：δ －３．８。

【０７３５】

＜化合物８ｃ＞

【化１６８】



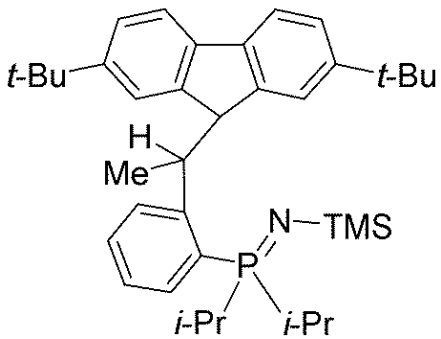
【０７３６】

－３５℃に冷却した化合物８ｂ（１０．０ｇ、２０．７ｍｍｏｌ）のCH_2Cl_2溶液（約６０ｍＬ）に、ヘキサクロロエタン（４．９０ｇ、２０．７ｍｍｏｌ）のCH_2Cl_2溶液（１０ｍＬ）を周囲温度でゆっくりと加えた。得られた溶液を周囲温度で１時間撹拌し、その後、$HN(SiMe_3)_2$（１０ｇ、６２ｍｍｏｌ）を滴下した。約１０分後に濁った混合物を周囲温度で一晩撹拌した。得られたスラリーを真空下で約４０ｍＬに濃縮した後、トルエン（４０ｍＬ）を加え、スラリーを真空下で濃縮乾固して、溶媒、過剰の$HN(SiMe_3)_2$、及びテトラクロロエチレン副生成物を除去した。残渣をペンタン（７０ｍＬ）に取り、ろ過し、フィルターパッドをペンタン（３×５ｍＬ）で洗浄した。黄色のろ液を、真空下で結晶化が始まるまで濃縮し（約１０ｍＬ）、その後一晩、－３５℃に冷却した。黄色の結晶性固体をデカンテーションで単離し、その後冷ペンタン（２×５ｍＬ）で洗浄し、真空下で乾燥させた。収量：１１．２ｇ，９５％収率。^{1}Ｈ ＮＭＲ（トルエン－d_8）：δ ８．２０（ｓ，１Ｈ），７．９９（ｓ，１Ｈ），７．９２（ｄｄ，Ｊ＝１１．２及び８．０Ｈｚ，１Ｈ），７．５１（ｄ，Ｊ＝７．９Ｈｚ，１Ｈ），７．４８（ｄ，Ｊ＝７．９Ｈｚ，１Ｈ），７．４０（ｄｄ，Ｊ＝７．９及び３．６Ｈｚ，１Ｈ），７．３４（ｄｄ，Ｊ＝８．０及び１．７Ｈｚ，１Ｈ），７．２５－７．１７（ｍ，２Ｈ），７．１７－７．１１（ｍ，２Ｈ），２．０６（ｓｅｐｔ．，Ｊ＝６．８Ｈｚ，２Ｈ），１．４４（ｓ，９Ｈ），１．１６（ｓ，９Ｈ），０．９９（ｄｄ，Ｊ＝１５．６及び７．０Ｈｚ，６Ｈ），０．８６（ｄｄ，Ｊ＝１６．１及び７．０Ｈｚ，６Ｈ），０．４１（ｓ，９Ｈ）。^{31}Ｐ ＮＭＲ（トルエン－d_8）：δ ２２．０。

【０７３７】

＜化合物８ｄ＞

【化１６９】



【０７３８】

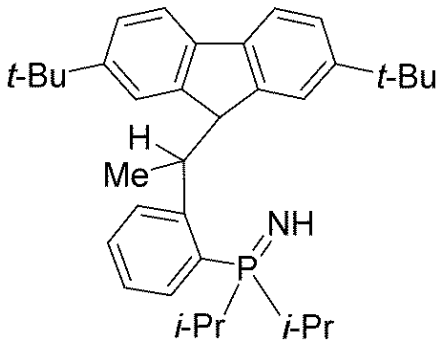
化合物８ｃ（６．７５ｇ、１１．８ｍｍｏｌ）の冷却した（－３５℃）ＴＨＦ溶液（６０ｍＬ）に、メチルリチウム溶液（７．７ｍＬ、１２．３ｍｍｏｌ、Et_2O中１．６Ｍ）を注射器を介して滴下した。さらにＭｅＬｉ溶液を加えると、迅速な色変化が緑色へと

生じ、次いで、暗赤色へと生じた。得られた赤色溶液を約２０時間撹拌し、その後－３５℃に冷却した。冷却した溶液に、乾燥メタノールを撹拌しながら加え、暗赤色が消えて明るい緑色へと色変化が生じるまで続けた。混合物をさらに２０分間撹拌し、次いで、真空下で濃縮乾固した。残渣をペンタン（８０ｍＬ）に取り、約２０ｍＬに濃縮した後、－３５℃に冷却した。固体生成物をデカンテーションで単離し、冷ペンタン（２×５ｍＬ）で洗浄し、真空下で乾燥させた。収量：６．９０ｇ，９９％収率。^{1}Ｈ　ＮＭＲ（CD_2Cl_2）：δ　７．８２（ｄｄ，Ｊ＝７．８及び３．４Ｈｚ，１Ｈ），７．６４－７．５５（ｍ，３Ｈ），７．５３（ｄ，Ｊ＝８．０Ｈｚ，１Ｈ），７．４８（ｄｄ，Ｊ＝１２．２及び８．５，１Ｈ），７．３８（ｄｄ，Ｊ＝８．０及び１．７Ｈｚ，１Ｈ），７．３３－７．２６（ｍ，１Ｈ），７．２１（ｄｄ，Ｊ＝８．０及び１．７Ｈｚ，１Ｈ），６．５８（ｓ，１Ｈ），４．３４（ｂｒ．ｍ，１Ｈ），４．１９（ｄ，Ｊ＝１０．２Ｈｚ，１Ｈ），２．０９（ｓｅｐｔ．のｄ，Ｊ＝７．２及び２．０Ｈｚ，１Ｈ），１．７９（ｓｅｐｔ．，Ｊ＝７．３Ｈｚ，１Ｈ），１．５２（ｄ，Ｊ＝６．５Ｈｚ，３Ｈ），１．３７（ｓ，９Ｈ），１．０６（ｓ，９Ｈ），１．０１（ｄｄ，Ｊ＝１５．８及び７．０Ｈｚ，３Ｈ），０．７３（ｄｄ，Ｊ＝１５．５及び７．０Ｈｚ，３Ｈ），０．６７（ｄｄ，Ｊ＝１５．５及び７．０Ｈｚ，３Ｈ），０．６３（ｄｄ，Ｊ＝１５．５及び７．０Ｈｚ，３Ｈ），－０．２５（ｓ，９Ｈ）。^{31}Ｐ｛^{1}Ｈ｝　ＮＭＲ（CD_2Cl_2）：δ　２２．３。

【０７３９】

＜化合物８ｅ＞

【化１７０】



【０７４０】

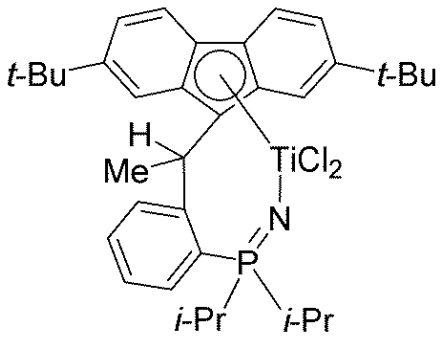
化合物８ｄ（６．９ｇ、１１．８ｍｍｏｌ）及びＣｓＦ（１．８０ｇ、１１．８ｍｍｏｌ）を、撹拌子を備えた１００ｍＬハイポバイアル内のＴＨＦ（３０ｍＬ）及び乾燥ＭｅＯＨ（３０ｍＬ）の混合液に溶解した。バイアルを密封し、小さなゲージの針で通気し、反応混合物を２０時間撹拌した。反応混合物の少量を真空下で乾燥させ、^{1}Ｈ　ＮＭＲで分析したところ、反応が完了したことがわかった。次に、反応混合物を真空下で濃縮乾固し、残渣をトルエン（３０ｍＬ）に取り、スラリーをセライトのパッドでろ過した。フィルターパッドをトルエン（３×６ｍＬ）で洗浄し、合わせた薄緑色のろ液を真空下で濃縮乾固した。溶液を約１０ｍＬまで濃縮すると無色の固体の結晶化が観察されたが、物質は真空下で完全に乾燥された。残渣をペンタン（３０ｍＬ）に取り、－３５℃に冷却した。緑色の母液をデカントして廃棄し、固体を冷ペンタンの一部で洗浄した後に単離し、真空下で乾燥させて、目的の生成物を無色の固体として得た。収量：４．７７ｇ，７８％収率。^{1}Ｈ　ＮＭＲ（トルエン－d_8）：δ　８．５０（ｓ，１Ｈ），７．６５（ｄ，Ｊ＝４．４Ｈｚ，１Ｈ），７．６３（ｄ，Ｊ＝４．４Ｈｚ，１Ｈ），７．３９（ｄｔ，Ｊ＝８．５及び３．３Ｈｚ，１Ｈ），７．３２（ｄｄ，Ｊ＝８．０及び１．７Ｈｚ，１Ｈ），７．２８（ｍ，１Ｈ），７．１１（ｍ，２Ｈ），６．９０（ｓ，１Ｈ），５．９０（ｂｒ．ｍ，，１Ｈ），４．６９（ｄ，Ｊ＝４．４Ｈｚ，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及び７．１Ｈｚ，３Ｈ），１．００（ｄｄ，Ｊ＝１４．６及

び６．９Ｈｚ，３Ｈ），０．８７（ｄｄ，Ｊ＝１５．３及び７．１Ｈｚ，３Ｈ），０．８１（ｄ，Ｊ＝７．２Ｈｚ，３Ｈｚ），０．７４（ｄｄ，Ｊ＝１５．３及び７．１Ｈｚ，３Ｈ），０．１６（ｂｒ．ｓ，１Ｈ）。^{31}Ｐ　ＮＭＲ（トルエン－ｄ$_8$）：δ　４３．４。

【０７４１】

＜錯体８＞

【化１７１】



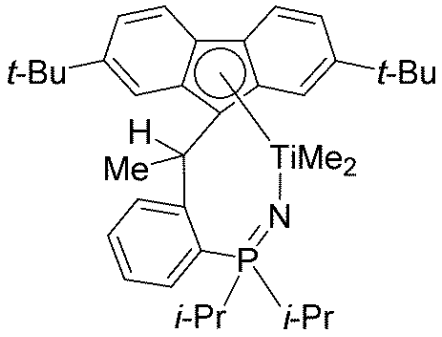
【０７４２】

化合物８ｅ（４．６６ｇ、９．０８ｍｍｏｌ）のトルエン／ＴＨＦ（２０／１ｖｏｌ／ｖｏｌ、合計５０ｍＬ）溶液に、ｎ－ＢｕＬｉ（１１．８ｍＬ、１８．９ｍｍｏｌ、ヘキサン中１．６Ｍ）溶液を周囲温度で滴下した。得られたスラリーを－７８℃に冷却し、混合物を急速に撹拌しながら、Ｔｉ（ＮＭｅ$_2$）$_2$Ｃｌ$_2$のトルエン溶液（５０ｍｌ）を滴下した。スラリーを一晩かけてゆっくりと周囲温度まで温めた後、反応混合物はオレンジ色の溶液になった。溶液を５０℃で１時間加熱し、その後周囲温度まで冷却した。過剰量のクロロトリメチルシラン（９．８５ｇ、９０．７ｍｍｏｌ）を溶液に加え、得られた混合物を一晩、９０℃に加熱した。得られた暗赤色の混合物を周囲温度まで冷却し、その後０℃で３時間冷却したところ、赤色の固体が結晶化した。赤色の固体を、ろ過により単離し、ペンタン（２０ｍＬ）で洗浄し、真空下で乾燥させた。^{1}Ｈ　ＮＭＲ分析により、生成物には溶媒和トルエンが約１当量含まれていることが示された。錯体８・（Ｃ$_7$Ｈ$_8$）の収量：２．２ｇ，３３％収率。^{1}Ｈ　ＮＭＲ（ＣＤ$_2$Ｃｌ$_2$）：δ　８．２１（ｄｄ，Ｊ＝８．０及び４．１Ｈｚ，１Ｈ），７．９０（ｄｄ，Ｊ＝８．６及び１．０Ｈｚ，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及び１．７Ｈｚ，１Ｈ），７．２８－７．２１（ｍ，１Ｈ），７．２０－７．１０（ｍ，２Ｈ），６．２６（ｓ，１Ｈ），５．８３（ｑ，Ｊ＝７．１Ｈｚ，１Ｈ），２．６６－２．５４（ｍ，１Ｈ），２．４８－２．３６（ｍ，１Ｈ），２．３４（ｓ，ｓｏｌｖａｔｅｄトルエン－ＣＨ$_3$），１．９９（ｄ，Ｊ＝７．１Ｈｚ，３Ｈ），１．４２（ｓ，９Ｈ），１．３６（ｄｄ，Ｊ＝１７．３及び７．２Ｈｚ，３Ｈ），１．３１（ｄｄ，Ｊ＝１６．４及び６．８Ｈｚ，３Ｈ），１．１８（ｄｄ，Ｊ＝１７．２及び７．２Ｈｚ，３Ｈ），１．１３（ｄｄ，Ｊ＝１６．７及び６．９Ｈｚ，３Ｈ），１．００（ｓ，９Ｈ）。^{31}Ｐ｛^{1}Ｈ｝　ＮＭＲ（ＣＤ$_2$Ｃｌ$_2$）：３０．４。

【０７４３】

＜錯体９＞

【化１７２】



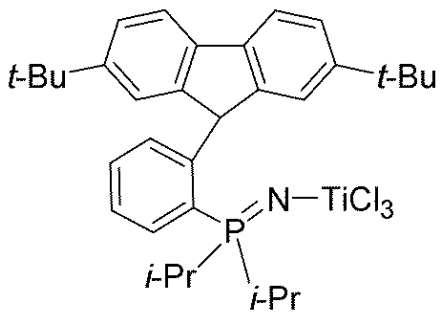
【０７４４】

トルエン（５ｍＬ）及びEt_2O（３０ｍＬ）中の錯体８・（C_7H_8）（１．１ｇ、１．５ｍｍｏｌ）の溶液／懸濁液に、メチルマグネシウムブロミドの溶液（１．３ｍＬ、３．９ｍｍｏｌ、Et_2O中３．０Ｍ）を周囲温度で加えた。混合物を２時間撹拌し、次いで揮発性物質を真空下で除去した。残渣をトルエン（４０ｍＬ）に溶解し、得られた黄橙色のスラリーを、セライトのパッドを通してろ過した。ろ液を真空下で濃縮し、目的の生成物をオレンジ色の結晶性固体として得た。^1H　ＮＭＲ分析により、生成物には溶媒和トルエンが約１当量含まれていることが示された。錯体９・（１　C_7H_8）の収量：０．９７ｇ，９３％収率。^1H　ＮＭＲ（トルエン－d_8）：δ　８．０９（ｄ，Ｊ＝８．８Ｈｚ，１Ｈ），８．０３（ｄ，Ｊ＝８．９Ｈｚ，１Ｈ），７．８０（ｄｄ，Ｊ＝８．０及び３．９Ｈｚ，１Ｈ），７．５５（ｓ，１Ｈ），７．４３（ｄｄ，Ｊ＝８．８及び１．６Ｈｚ，１Ｈ），７．３０（ｔ，Ｊ＝７．３Ｈｚ，１Ｈ），７．２４（ｄｄ，Ｊ＝８．９及び１．７Ｈｚ，１Ｈ），７．１３－６．８８（ｍ，５Ｈ），６．１２（ｓ，１Ｈ），５．４４（ｑ，Ｊ＝７．３Ｈｚ，１Ｈ），２．１２（ｓ，ｓｏｌｖａｔｅｄトルエン－CH_3），２．０２－１．８６（ｍ，２Ｈ），１．８１（ｄ，Ｊ＝７．１Ｈｚ，３Ｈ），１．４４（ｓ，９Ｈ），１．２０（ｄｄ，Ｊ＝１５．４及び６．５Ｈｚ，３Ｈ），１．０７（ｄｄ，Ｊ＝１６．４及び７．３Ｈｚ，３Ｈ），０．９５（ｄｄ，Ｊ＝１５．７及び７．０Ｈｚ，３Ｈ），０．８２（ｄｄ，Ｊ＝１６．１及び７．３Ｈｚ，３Ｈ），－０．１８（ｓ，３Ｈ），－０．５２（ｓ，３Ｈ）。$^{31}P\{^1H\}$　ＮＭＲ（トルエン－d_8）：δ　１６．７。

【０７４５】

＜錯体１０＞

【化１７３】



【０７４６】

化合物２ｄ（３．２ｇ、６．５９ｍｍｏｌ）のＴＨＦ溶液（１００ｍＬ）に、ｎ－ＢｕＬｉ（４．１ｍＬ、６．５６ｍｍｏｌ、ヘキサン中１．６Ｍ）の溶液を周囲温度で加えた。周囲温度で３時間撹拌した後、混合物を－７８℃に冷却し、$Ti(NMe_2)_2Cl_2$（１．３６ｇ、６．５７ｍｍｏｌ）のＴＨＦ溶液（２００ｍＬ）を滴下した。反応混合物

を撹拌しながら一晩かけてゆっくりと周囲温度まで温めた。すべての揮発性物質を真空下で除去した後、残渣をトルエン（３×５０ｍＬ）で抽出し、セライトのパッドでろ過した。合わせたろ液にクロロトリメチルシラン（４．０ｇ、３６．８ｍｍｏｌ）を加え、得られた混合物を９０℃で一晩加熱した。周囲温度まで冷却した後、すべての揮発性物質を真空下で除去し、得られた固体を熱トルエン（１５ｍＬ）に溶解した。－３５℃に一晩冷却した後、無色の固体生成物が沈殿し、デカンテーションと真空下での乾燥によって単離した。収量：２．６ｇ，６５％収率。^{1}Ｈ　ＮＭＲ（CD_2Cl_2）：δ　７．７３（ｄ，Ｊ＝８．０Ｈｚ，２Ｈ），７．６２（ｂｒ．ｓ，１Ｈ），７．４５（ｄｄｄ，Ｊ＝８．０，１．８，及び０．４Ｈｚ，２Ｈ），７．３９（ｍ，１Ｈ），７．３２（ｍ，１Ｈ），７．２４（ｓ，２Ｈ），６．５６（ｄｄｄ，Ｊ＝７．８，４．４，及び１．０Ｈｚ，１Ｈ），６．４５（ｂｒ．ｓ，１Ｈ），３．０２（ｍ又はオーバーラップｓｅｐｔｅｔｓ，２Ｈ），１．７０（ｄｄ，Ｊ＝１７．５及び７．０Ｈｚ，６Ｈ），１．４７（ｄｄ，Ｊ＝１７．５及び７．０Ｈｚ，６Ｈ），１．２８（ｓ，１８）。^{31}Ｐ｛^{1}Ｈ｝　ＮＭＲ（CD_2Cl_2）：δ　４４．１。

【０７４７】

錯体１０の配位圏を、単結晶Ｘ線結晶構造解析によって確認した（詳細は表４参照）。錯体１０のＯＲＴＥＰ図を図４に示す。

【０７４８】

【表４】

表４

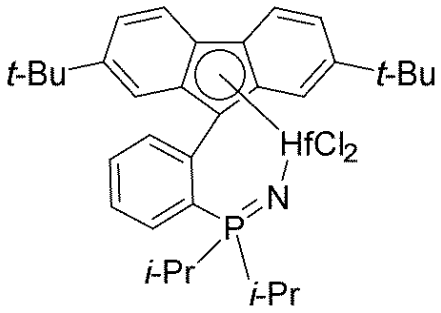
錯体 10 の結晶学的実験の詳細

A. 結晶データ	
式	$C_{36.50}H_{51}Cl_3NPTi$ $(C_{33}H_{43}Cl_3NPTi•0.5C_7H_{16})$
式量	689.00
結晶色及び晶癖 [a]	無色 ブロック
結晶寸法 (mm)	0.39 × 0.12 × 0.07
結晶系	斜方晶
空間群	$Pca2_1$ (No. 29)
単位格子パラメータ [b]	
a (Å)	17.6688(14)
b (Å)	16.3720(13)
c (Å)	25.967(2)
V (Å^3)	7511.5(10)
Z	8
ρ calcd (g cm^{-3})	1.219
μ (mm^{-1})	0.509
B. データ収集及び精密化条件	
回折計	Bruker PLATFORM/APEX II CCD [c]
放射線(λ [Å])	graphite-monochromated Mo K*a* (0.71073)
温度 (°C)	-80
スキャンタイプ	*w* スキャン (0.3°) (45 秒暴露)
データ収集 2θ limit (deg)	51.53
収集した総データ	67896 ($-21 \le h \le 21$, $-19 \le k \le 19$, $-31 \le l \le 31$)
独立反射	14367 (R_{int} = 0.0597)
観察された反射の数 (*NO*)	10913 [$F_o^2 \ge 2\sigma(F_o^2)$]
構造解析法	固有位相 (*SHELXT-2014* [d])
精密化法	full-matrix least-squares on F^2 (*SHELXL–2018* [e,f])
吸収補正法	Gaussian integration (face-indexed)
透過率の範囲	1.0000--0.8409
データ/抑制/パラメータ	14367 / 474 [g] / 873
Flack 絶対構造パラメータ *h*	0.016(13)
適合度 (*S*) [i] [全データ]	1.035
最終 *R* 指数 [j]	
R_1 [$F_o^2 \ge 2\sigma(F_o^2)$]	0.0445
wR_2 [全データ]	0.1142
ピーク及びホールの最大差	0.397 及び -0.312 e Å^{-3}

表 4 の注釈:
[a] トルエン, ヘプタン, ペンタン及びジクロロメタンの混合物からの再結晶化により取得.
[b] 4.62° < 2θ < 43.04°を用いた 9888 反射の最小二乗法精密化から取得.
[c] 回折計操作, データ収集 , データ削減及び吸収補正のプログラムは Bruker によって提供されたもの.
[d] Sheldrick, G. M. *Acta Crystallogr.* **2015**, *A71*, 3–8. (*SHELXT-2014*)
[e] Sheldrick, G. M. *Acta Crystallogr.* **2015**, *C71*, 3–8. (*SHELXL-2018/3*)
[f] 残留電子密度のピークを無秩序又は部分占有溶媒ヘプタン炭素原子として精密化する試みは不成功であった. データは *PLATON* (Spek, A. L. *Acta Crystallogr.* **2015**, *C71*, 9–18. *PLATON* – 多目的結晶学的ツール. ユトレヒト大学, ユトレヒト, オランダ) に実装されている SQUEEZE 手順の使用を通して無秩序電子密度に対して補正した. 総溶媒アクセス可能空隙体積 798 Å^3 と総電子数 229 (溶媒ヘプタンの 4 分子, 又はチタン錯体の式単位あたり 0.5 分子と一致) が, 単位格子内に見出された.
[g] 分子 A と分子 B の両方の無秩序基に合計 62 の同一距離 (**SADI**) 抑制を適用し、両方の部分間の形状 (すなわち、結合長と角度) の一貫性を確保した. 同様に, 合計 411 の剛結合 (**RIGU**) 抑制を無秩序基の異方性変位パラメータに適用した.
[h] Flack, H. D. *Acta Crystallogr.* **1983**, *A39*, 876–881; Flack, H. D.; Bernardinelli, G. *Acta Crystallogr.* **1999**, *A55*, 908–915; Flack, H. D.; Bernardinelli, G. *J. Appl. Cryst.* **2000**, *33*, 1143–1148. Flack パラメータは, 構造が正しい構成の場合は 0 に近い値に調製され,反転構成の場合は 1 に近い値に調整される.
[I] $S = [\Sigma w(F_o^2 - F_c^2)2/(n-p)]^{1/2}$ (n = データの数; p = 変化させたパラメータの数; $w = [\sigma^2(F_o^2) + (0.0528P)^2 + 0.9847P]^{-1}$, 式中 $P = [\mathrm{Max}(F_o^2, 0) + 2F_c^2]/3$).
[j] $R_1 = \Sigma||F_o| - |F_c||/\Sigma|F_o|$; $wR_2 = [\Sigma w(F_o^2 - F_c^2)^2/\Sigma w(F_o^4)]^{1/2}$.

【０７４９】
＜錯体１０（代替経路）＞
化合物２ｃ（２．９９ｇ、５．３６ｍｍｏｌ）のトルエン溶液（２０ｍＬ）に、$TiCl_4$（１．０１６ｇ、５．３６ｍｍｏｌ）のトルエン溶液（２０ｍＬ）を滴下した。得られた緑色の溶液／スラリーを５時間加熱還流すると、透明なオレンジがかった溶液が得られた。揮発性物質を真空下で除去し、白色の結晶性固体を生成した。収量：３．６０ｇ，９２％収率。トルエン－d_8及びCD_2Cl_2中の、^{1}Ｈ　ＮＭＲによる分析により、約０．８当量のトルエン溶媒和物が存在することが示された。ＮＭＲ分光データは、上記の$Ti(NMe_2)_2Cl_2$を用いて調製した錯体１０のものと同一であった。
【０７５０】
＜錯体１１＞

【化１７４】



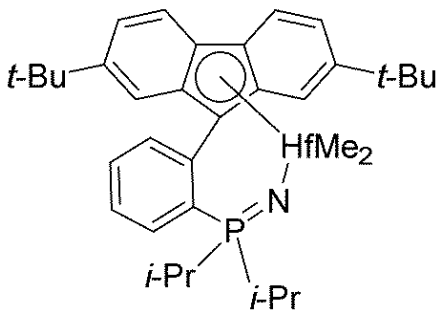
【０７５１】

化合物２ｄ（４．０ｇ、８．２４ｍｍｏｌ）のトルエン溶液に、－７８℃で、ｎ－ＢｕＬｉ（１０．３ｍＬ、１６．４８ｍｍｏｌ、ヘキサン中１．６Ｍ）の溶液をゆっくりと加えた。この混合物を、－７８℃で３時間撹拌した後、Ｈｆ（ＮＥｔ$_2$）$_2$Ｃｌ$_2$（２．７８ｇ、８．３４ｍｍｏｌ）を固体として加え、得られた混合物を一晩撹拌しながらゆっくりと周囲温度まで温めた。すべての揮発性物質を真空下で除去し、生成物をトルエン（３×５０ｍＬ）で抽出し、合わせた抽出物をセライトのパッドでろ過した。合わせたろ液にＳｉＣｌ$_4$（６．０ｇ、３５．３１ｍｍｏｌ）を加え、混合物を９０℃で３日間加熱した。この混合物を真空下で濃縮乾固した後、残渣を沸騰トルエン（約２５ｍＬ）に溶解し、その後、熱いうちにろ過した。ろ液が冷えると目的の生成物が沈殿し、これをろ過により単離し、真空下で乾燥させた。収量：４．４ｇ，７３％収率。^{1}Ｈ　ＮＭＲ（ＣＤ$_2$Ｃｌ$_2$）：δ　８．０７（ｄｄ，Ｊ＝８．９及び０．７Ｈｚ，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$_2$Ｃｌ$_2$）：δ　３１．２。

【０７５２】

＜錯体１２＞

【化１７５】



【０７５３】

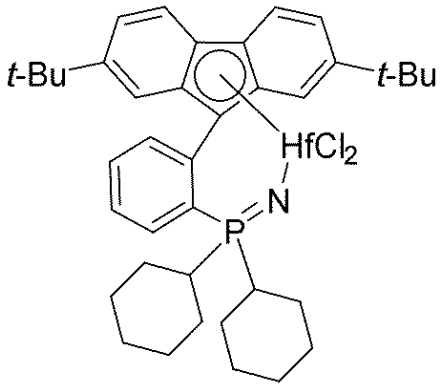
錯体１１（４．４ｇ、６．０ｍｍｏｌ）のトルエン懸濁液（１００ｍＬ）に、メチルマグネシウムブロミドの溶液（６．０ｍＬ、１８ｍｍｏｌ、Ｅｔ$_2$Ｏ中３．０Ｍ）を、周囲温度で撹拌しながら加えた。この混合物を一晩撹拌した後、反応混合物を真空下で濃縮乾固した。残渣をトルエン（３×５０ｍＬ）で抽出し、合わせた抽出物をセライトのパッドでろ過した。ろ液を真空下で濃縮乾固した後、得られた残渣をトルエン（１００ｍＬ）に再溶解し、セライトのパッドでろ過した。このプロセスを３回繰り返して、未反応のＣＨ$_3$ＭｇＢｒを除去した。最終的な固体生成物は、トルエンとヘプタンの混合物から粗製物質を再結晶化することによって得られた。収量：３．１ｇ，７３％収率。^{1}Ｈ　ＮＭＲ（ＣＤ$_2$Ｃｌ$_2$）：δ　８．０９（ｄｄ，Ｊ＝８．９及び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及び７．０Ｈｚ，６Ｈ），１．１０（ｄｄ，Ｊ＝８．７及び７．１Ｈｚ，６Ｈ）。^{31}Ｐ｛^{1}Ｈ｝　ＮＭＲ（CD_2Cl_2）：δ　２６．４。

【０７５４】

＜錯体１３＞

【化１７６】



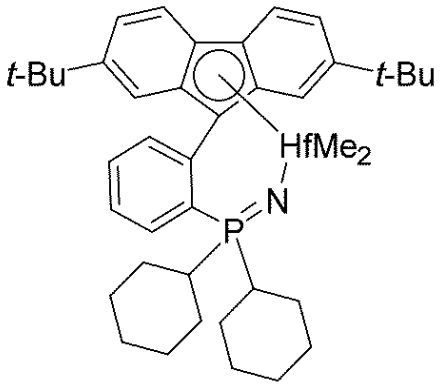
【０７５５】

化合物４ｃ（２．２７ｇ、４．０ｍｍｏｌ）のトルエン溶液（１００ｍＬ）に、－７８℃で、ｎ－ＢｕＬｉ（５．３ｍＬ、８．４ｍｍｏｌ、ヘキサン中１．６Ｍ）の溶液を滴下すると、溶液は明るいオレンジ色に変わった。ｎ－ＢｕＬｉを添加した後、冷浴を取り除き、反応混合物を周囲温度まで温めて２時間撹拌した。得られた赤色の溶液を再び－７８℃に冷却した後、Ｈｆ（ＮＥｔ$_2$）$_2$Ｃｌ$_2$（２．１６ｇ、４．０ｍｍｏｌ）のトルエン懸濁液（６０ｍＬ）をカニューレで１０分かけて少しずつ加え、反応物を冷浴で一晩ゆっくり温めた。次に、反応混合物を真空下で濃縮乾固し、その後、残渣をトルエン（５０ｍＬ）に取り、ろ過した。ろ液にクロロトリメチルシラン（５．１ｍＬ、４０．１ｍｍｏｌ）を加え、フラスコのヘッドスペースを短時間排気した。フラスコをテフロン（登録商標）ストッパーで密封し、混合物を２日間撹拌しながら９０℃で加熱した。反応混合物を真空下で濃縮した。^{1}Ｈ　ＮＭＲによる残渣の分析により、反応が不完全であったことが示唆されたため、残渣をトルエンに戻し、さらにクロロトリメチルシランの一部（３ｍＬ、３．０ｍｍｏｌ）で処理し、上記のようにさらに１日、９０℃に加熱した。反応混合物を真空下で濃縮乾固し、残渣をトルエン（５０ｍＬ）に取り、スラリーをろ過した。ろ液を真空下で濃縮し、生成物を黄色の固体として得た。収量：２．６ｇ，８０％収率。^{1}Ｈ　ＮＭＲ（CD_2Cl_2）：δ　８．０６（ｄ，Ｊ＝９．２Ｈｚ，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。

【０７５６】

＜錯体１４＞

【化１７７】



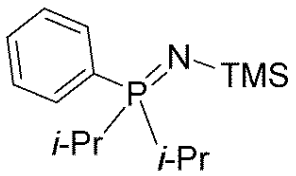
【０７５７】

錯体１４（０．５０ｇ、０．６ｍｍｏｌ）のトルエン溶液（７ｍＬ）に、メチルマグネシウムブロミドの溶液（０．４０ｍＬ、１．４ｍｍｏｌ、Et_2O中３．０Ｍ）を周囲温度で滴下した。周囲温度で５分間撹拌した後、反応混合物を真空下で濃縮乾固し、黄褐色の固体残渣を得た。残渣をペンタン（５０ｍＬ）で粉砕し、２回濃縮乾固して残留Et_2Oを除去した。次に、残渣をトルエン（１５ｍＬ）に取り、ろ過し、ろ液を真空下で濃縮乾固した。固体残渣をペンタン（３×３ｍＬ）で洗浄し、その後、真空下で乾燥させて、オフホワイトの固体として生成物を得た。^1H ＮＭＲ分析により、生成物には溶媒和トルエンが約１当量含まれていることが示された。収量：０．３ｇ，５３％収率。^1H ＮＭＲ（$CDCl_3$）：δ ８．０８（ｄ，Ｊ＝９．６Ｈｚ，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）。$^{31}P\{^1H\}$ ＮＭＲ（$CDCl_3$）：δ ２１．０。

【０７５８】

＜化合物１５ａ＞

【化１７８】



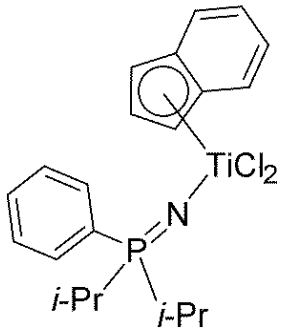
【０７５９】

フェニルジイソプロピルホスフィン（３．５ｇ、１８．０２ｍｍｏｌ）のトルエン（３０ｍＬ）溶液に、アジドトリメチルシラン（４．５６ｇ、５．２ｍＬ、３９．５ｍｍｏｌ）を周囲温度で加えた。混合物を１００℃で一晩加熱した。その後、溶液を周囲温度まで冷却し、すべての揮発性物質を真空下で除去した後、生成物を白色固体として得た。収量：５．０ｇ，９８％収率。^1H ＮＭＲ（CD_2Cl_2）：δ ７．６５（ｍ，２Ｈ），７．４５（ｍ，３Ｈ），２．２０（ｍ，２Ｈ），１．０７（ｄｄ，Ｊ＝８．４及び７．０Ｈｚ，６Ｈ），０．９３（ｄｄ，Ｊ＝８．８及び７．１Ｈｚ，６Ｈ），０．０５（ｓ，９Ｈ）。$^{31}P\{^1H\}$ ＮＭＲ（CD_2Cl_2）：δ ２１．６。

【０７６０】

＜錯体１５＞

【化１７９】



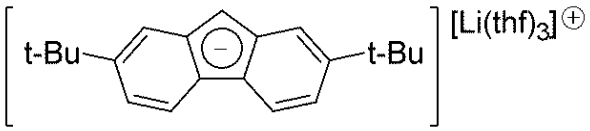
【０７６１】

ＴｉＣｌ$_4$（４．７５ｇ、２５ｍｍｏｌ）のトルエン溶液（２００ｍＬ）に、ＥｔＯＨ（１．１５ｇ、２５．０ｍｍｏｌ）を加え、得られた混合物を６０℃で一晩加熱した。得られた赤色溶液を周囲温度まで冷却した後、すべての揮発性物質を真空下で除去した。残渣をトルエン（５０ｍＬ）に溶解し、固体の化合物１５ａ（４．５ｇ、１６．０ｍｍｏｌ）を加えた。反応混合物を９０℃で一晩加熱した。この混合物を真空下で濃縮乾固した後、生成物をＴＨＦ（１００ｍＬ）に取り、得られた溶液を－７８℃に冷却した。新しく調製したインデニルリチウム（１．９５ｇ、１６．０ｍｍｏｌ）のＴＨＦ溶液（５０ｍＬ）を、カニューレを介して滴下した。その後、混合物を一晩撹拌しながらゆっくりと周囲温度まで温めた。混合物を真空下で濃縮乾固した後、残渣をトルエン（５０ｍＬ）に取り、セライトのパッドでろ過し、ろ過ケーキをさらにトルエン（２×５０ｍＬ）で抽出した。ろ液を真空下で濃縮乾固し、残渣をヘプタンを用いて層状にしてトルエンから２回再結晶させ、デカンテーションで分離し、真空下で乾燥させた。収量：１．４ｇ，１９％収率。^{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＝３．４Ｈｚ，１Ｈ），６．６３（ｄ，Ｊ＝３．３Ｈｚ，１Ｈ），２．５２（ｍ，２Ｈ），１．３３（ｄｄ，Ｊ＝９．６及び７．０，６Ｈ），１．１２（ｄｄ，Ｊ＝１０．３及び７．１Ｈｚ，６Ｈ）。^{31}Ｐ｛^{1}Ｈ｝　ＮＭＲ（CD_2Cl_2）：δ　３０．９。

【０７６２】

＜化合物１６ａ＞

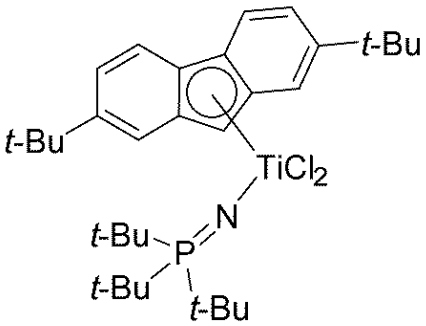
【化１８０】



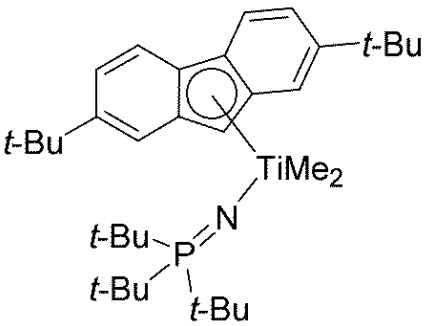
【０７６３】

２，７－ジ－ｔｅｒｔ－ブチルフルオレン（７．９４ｇ、２８．５ｍｍｏｌ）のＴＨＦ溶液（５０ｍＬ）に、ｎ－ＢｕＬｉ（１８．７ｍＬ、２９．９ｍｍｏｌ、ヘキサン中１．６Ｍ）の溶液を周囲温度で滴下したところ、明るいオレンジ色に変色し、中程度の発熱と発泡が生じた。周囲温度で一晩撹拌した後、明るいオレンジ色の溶液を真空下で濃縮乾固し、明るい黄色の粉末を得た。トルエンとヘプタンから再結晶化し、続いて、真空下で単離と乾燥を行ったところ、目的の生成物が明るい黄色の結晶性固体として得られた。収量：１２．４ｇ，８７％収率。^{1}Ｈ　ＮＭＲ（トルエン－d_8）：δ　８．１９（ｄ，Ｊ＝８．４Ｈｚ，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）。

【０７６４】
＜錯体１６＞
【化１８１】



【０７６５】
ｔ－Ｂｕ３ＰＮＴｉＣｌ３（１．８５３ｇ、５．００ｍｍｏｌ）のＴＨＦ懸濁液（３０ｍＬ）に化合物１６ａ（２．５０ｇ、５．００ｍｍｏｌ）のトルエン溶液（２０ｍＬ）を加えたところ、瞬時に色変化が黄色から暗赤色へと生じ、黄色の懸濁液ｔ－Ｂｕ３ＰＮＴｉＣｌ３が溶解し、新しい沈殿物が形成された。周囲温度で２時間撹拌した後、反応混合物を真空下で濃縮乾固した。残渣をペンタンの一部でスラリー化し、再度蒸発させて暗赤紫色の粉末を得た。残渣をＣＨ２Ｃｌ２に抽出してろ過し、ろ液を飽和まで濃縮し、ペンタンを用いて層状にし、一晩－３５℃に冷却して、暗赤紫色の結晶性固体として目的の生成物を得た。液体を濃縮すると、さらに生成物が得られた。合計収量：２．３１ｇ，７５％収率。^{1}Ｈ ＮＭＲ（ＣＤＣｌ３）δ ７．８５（ｄ，Ｊ＝８．５Ｈｚ，２Ｈ），７．５３（ｍ，２Ｈ），７．４４（ｄｄ，Ｊ＝８．５及び１．８Ｈｚ，２Ｈ），６．６４（ｓ，１Ｈ），１．４０（ｄ，Ｊ＝１４．０Ｈｚ，２７Ｈ），１．３６（ｓ，１８Ｈ）。^{31}Ｐ｛^{1}Ｈ｝ＮＭＲ（ＣＤＣｌ３）δ ４９．３。
【０７６６】
＜錯体１７＞
【化１８２】



【０７６７】
化合物１６ｂ（１．０７ｇ、１．７５ｍｍｏｌ）の赤紫色のＥｔ２Ｏスラリー（３０ｍＬ）に、メチルマグネシウムブロミドの溶液（１．２８ｍＬ、３．８５ｍｍｏｌ、Ｅｔ２Ｏ中３．０Ｍ）を加えたところ、懸濁物質が溶解し、明るい黄色の懸濁液が形成された。周囲温度で１５分間撹拌した後、反応混合物を真空下で濃縮乾固した。黄色の固体残渣をペンタンの一部で抽出し、セライトのパッドでろ過して黄色のろ液を得た。ろ過ケーキを、抽出物が無色になるまで、ペンタンでリンスした。合わせたペンタンのろ液を濃縮すると、目的の生成物が黄色の粉末として得られた。収量：０．６８ｇ，６８％収率。^{1}Ｈ ＮＭＲ（トルエン－ｄ８）δ ８．１２（ｄ，Ｊ＝８．７Ｈｚ，２Ｈ），７．４２（ｄｄ

，Ｊ＝８．７及び１．７Ｈｚ，２Ｈ），７．３６（ｍ，２Ｈ），６．０４（ｓ，１Ｈ），１．３７（ｓ，１８Ｈ），１．２３（ｄ，Ｊ＝１２．９Ｈｚ，２７Ｈ），－０．４６（ｓ，６Ｈ）。^{31}Ｐ｛^{1}Ｈ｝ＮＭＲ（トルエン－ｄ$_8$）δ　３１．３。

【０７６８】

＜溶液相重合：連続エチレン／１－オクテン共重合＞

溶液相重合は、シクロヘキサンを溶媒として用い、１４０℃～２４０℃で操作する７０ｍＬの撹拌反応器を用いて、連続重合ユニット（ＣＰＵ）で実施した。２０ｍＬ容量の上流混合反応器を、重合反応器より５℃低い温度で操作した。この混合反応器は、エチレン、オクテン、及び補充溶媒流を予熱するために使用した。触媒供給物、すなわち、有機金属錯体（プレ重合触媒）のオルトキシレン溶液又はシクロヘキサン溶液；ホウ素系触媒活性剤である（Ｐｈ$_3$Ｃ）［Ｂ（Ｃ$_6$Ｆ$_5$）$_4$］（ＴＢ）又は［（水素化牛脂アルキル）$_2$（Ｍｅ）ＮＨ］［Ｂ（Ｃ$_6$Ｆ$_5$）$_4$］（ＡＢ）；アルミニウム系共触媒であるＥｔ$_3$Ａｌ（ＴＥＡＬ）、ｉ－Ｂｕ$_3$Ａｌ（ＴＩＢＡＬ）、Ｅｔ$_2$ＡｌＯＥｔ（ＤＥＡＬ－Ｅ）、又はアルキルアルミノキサン（ＭＭＡＯ－７）；ヒンダードフェノール改質剤である２，６－ジ－ｔｅｒｔ－ブチル－４－エチルフェノール（ＢＨＥＢ）、及び追加の補充シクロヘキサン溶媒流などの触媒供給物は、必要に応じてインラインで組み合わせるか、又は連続プロセスで反応器に直接添加した。表において、ホウ酸塩添加法が「反応器内（‘ｉｎ－ｒｅａｃｔｏｒ’）」と定義されている特定の実験では、ホウ素系活性剤の溶液が、反応器に直接添加され、他の触媒成分から分離された。表において、ホウ酸塩添加法が「インライン（‘ｉｎ－ｌｉｎｅ’）」と定義されている特定の実験では、ホウ素系活性剤の溶液が、プレ重合触媒の溶液とインラインで組み合わされ、この組み合わせたフローが反応器に直接添加されるか、又はアルミニウム系共触媒及びＢＨＥＢ（使用する場合）のフロー（又は組み合わせフロー）と組み合わされた。アルミニウム添加法が「インライン（‘ｉｎ－ｌｉｎｅ’）」」と定義されている特定の実験では、プレ重合触媒の溶液（又はプレ重合触媒とホウ素系活性剤を組み合わせた溶液）が、アルミニウム系共触媒の溶液とインラインで組み合わされ、これらのケースでは、反応器に到達する前の管内の接触（又はホールドアップ）時間は、シクロヘキサン補充溶媒フローの追加又は削減によって約２５秒に維持された。それ以外の場合、アルミニウム系共触媒とＢＨＥＢ（使用する場合）の溶液は、反応器に直接添加され、プレ重合触媒とホウ素系共触媒の溶液から分離された（アルミニウム添加法は「反応器内（‘ｉｎ－ｒｅａｃｔｏｒ’）」と定義される）。ＢＨＥＢを使用したすべての実験では、ＭＭＡＯ－７とＢＨＥＢの溶液を、反応器の上流にある他の触媒成分と接触させるための分岐点の上流で組み合わせた。反応器へのすべての供給物の総溶液流量を、２７ｍＬ／分に維持した。

【０７６９】

エチレン／１－オクテンコポリマーは、表に記載した１－オクテン／エチレンの重量比を用いて作製し、エチレンホモポリマーは、１－オクテンの流れを止めることによって作製した。エチレンを、反応器温度に応じて異なる速度で供給した：１４０℃で２．１０ｇ／分、１６０℃で２．７０ｇ／分、１９０℃で３．５０ｇ／分、２００℃で３．８０ｇ／分、２１０℃で４．１０ｇ／分、２２０℃で４．４８ｇ／分、２３０℃で４．７７ｇ／分、２４０℃で４．９３ｇ／分であった。ただし、重合ラン番号（重合ランＮｏ．）６３と６４は例外で、２２０℃でのエチレン流量は４．３０ｇ／分であった。ＣＰＵシステムを１０．５ＭＰａの圧力で操作した。溶媒、モノマー、及びコモノマーの流れを、反応器に供給する前に精製トレインで精製した。重合活性ｋ$_p$（単位、ｍＭ$^{-1}$×ｍｉｎ$^{-1}$で表す）は次のように定義される：

【数１】

$$k_{\mathrm{p}} = \left(\frac{Q}{100 - Q}\right)\left(\frac{1}{[\mathrm{M}]}\right)\left(\frac{1}{\mathrm{HUT}}\right)$$

ここで、Ｑはエチレン変換率（％）（オンラインＮＩＲ検出器を用いて測定）、［Ｍ］は反応器内の触媒濃度（Ｍ＝Ｔｉ又はＨｆ、濃度はｍＭ）、ＨＵＴは反応器内のホールドアップ時間（２．６分の値を使用）である。

【０７７０】

コポリマー試料は、エチレン変換率（Ｑ）９０±１％を目標として収集され（重合ラン番号４５と４６を除く。重合ラン番号４５と４６はそれぞれＱ目標が８０％と７０％であったため）、真空オーブンで乾燥させた後、粉砕して均質化してから分析した。触媒活性が低いために９０％の目標を達成できなかった場合は、ポリマー試料は採取しなかった。

【０７７１】

共重合条件を、表５、表７、表９、及び表１１に示し、共重合結果とコポリマー特性を、表６、表８、表１０、及び表１２に示す。

【０７７２】

表５と表６、表７と表８、及び表１１と表１２に示したランの追加条件：ホウ素系活性剤は（Ph_3C）［Ｂ（C_6F_5）$_4$］（ＴＢ）であり、アルミニウム系共触媒はＭＭＡＯ－７であった。表１１と１２に示したランでは、ホウ酸塩添加法は、錯体１２又は１４のいずれかとともに「インライン（ｉｎ－ｌｉｎｅ）」であり、アルミニウム系共触媒とＢＨＥＢ（使用する場合）を組み合わせたフローは、反応器に直接供給した（「反応器内（ｉｎ－ｒｅａｃｔｏｒ）」。

【０７７３】

表９及び１０に示したランの追加条件：プレ重合錯体３を使用し；反応温度は２２０℃であり；１－オクテン／エチレン比は０．３０ｗｔ／ｗｔであり；エチレン流量は４．４８ｇ／分であり；ホウ酸塩添加法は錯体３とともに「インライン（ｉｎ－ｌｉｎｅ）」であり、アルミニウム系共触媒とＢＨＥＢ（使用する場合）を組み合わせたフローは、反応器に直接供給した（「反応器内（ｉｎ－ｒｅａｃｔｏｒ）」）。比較のため、表９と表１０に、重合ラン番号３８及び３９のデータを繰り返し示している。

【０７７４】

【表５】

表５

連続エチレン／1-オクテン共重合条件－

Ti系触媒を用いた140, 160, 及び190 °C実験

重合ラン No.	触媒錯体 No.	ホウ酸塩添加法	アルミニウム添加法	反応器温度 (°C)	エチレン流 (g/min)	B / Ti (モル比)	Al / Ti (モル比)	BHEB / Al (モル比)	1-オクテン/エチレン比 (wt/wt)
1	錯体 1	反応器内	反応器内	140	2.10	1.2	40.0	0.5	0.15
2	錯体 1	反応器内	反応器内	140	2.10	1.2	40.0	0.5	0.30
3	錯体 1	反応器内	反応器内	140	2.10	1.2	40.0	0.5	0.50
4	錯体 1	反応器内	反応器内	160	2.70	1.2	40.0	0.5	0.30
5	錯体 1	反応器内	反応器内	190	3.50	1.2	40.0	0.5	0
6	錯体 1	反応器内	反応器内	190	3.50	1.2	40.0	0.5	0.15
7	錯体 1	反応器内	反応器内	190	3.50	1.2	40.0	0.5	0.30
8	錯体 1	反応器内	反応器内	190	3.50	1.2	40.0	0.5	0.50
9	錯体 1	反応器内	反応器内	190	3.50	1.2	40.0	-	0.30
10	錯体 3	インライン	-	140	2.10	1.0	-	-	0.70
11	錯体 3	インライン	-	160	2.70	1.0	-	-	0.15
12	錯体 3	インライン	-	160	2.70	1.0	-	-	0.30
13	錯体 3	インライン	-	160	2.70	1.0	-	-	0.50
14	錯体 3	インライン	反応器内	160	2.70	1.4	5.0	0.6	0.30
15	錯体 3	インライン	反応器内	160	2.70	1.4	5.0	0.6	0.50
16	錯体 3	インライン	反応器内	160	2.70	1.4	5.0	0.6	0.70
17	錯体 3	インライン	反応器内	190	3.50	1.4	5.0	0.6	0.15
18	錯体 3	インライン	反応器内	190	3.50	1.4	5.0	0.6	0.30
19	錯体 3	インライン	反応器内	190	3.50	1.4	5.0	0.6	0.50
20	錯体 3	インライン	反応器内	190	3.50	1.4	5.0	-	0.30
21	錯体 3	インライン	-	190	3.50	1.4	-	-	0.30
22	錯体 5	インライン	反応器内	190	3.50	1.2	5.0	0.3	0.30
23	錯体 7	インライン	反応器内	190	3.50	1.8	5.0	0.3	0.30
24	錯体 9	インライン	反応器内	190	3.50	2.2	2.5	0.3	0.30
25	錯体 10	反応器内	インライン	160	2.70	1.2	15.1	0.7	0.30
26	錯体 10	反応器内	インライン	190	3.50	1.2	15.1	0.7	0.30
27	錯体 15	反応器内	反応器内	140	2.10	1.2	80.0	0.3	0.15
28	錯体 15	反応器内	反応器内	140	2.10	1.2	80.0	0.3	0.30
29	錯体 15	反応器内	反応器内	140	2.10	1.2	80.0	0.3	0.50
30	錯体 15	反応器内	反応器内	160	2.70	1.2	80.0	0.3	0.30
31	錯体 15	反応器内	反応器内	190	3.50	1.2	80.0	0.3	0
32	錯体 17	インライン	反応器内	140	2.10	1.4	20.0	0.6	0.30
33	錯体 17	インライン	反応器内	160	2.70	1.4	20.0	0.6	0.30
34	錯体 17	インライン	反応器内	190	3.50	1.4	20.0	0.6	0.30

【０７７５】

【表６】

表６

連続エチレン／1-オクテン共重合結果－

Ti 系触媒を用いた 140, 160, 及び 190 °C 実験

重合.ラン No.	[Ti] (μM)	エチレン変換率 (Q %)	k_p ($mM^{-1}\cdot min^{-1}$)	FTIR BrF (no./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	試料なし	-	-	-	-	-	-
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	試料なし						
32	12.96	60.82	46	試料なし	-	-	-	-	-	-
33	12.96	56.00	38	試料なし	-	-	-	-	-	-
34	11.11	37.00	20	試料なし	-	-	-	-	-	-

【０７７６】

１，２－フェニレンを介して２－インデニル部分に連結している錯体１由来の触媒は、Ｐ－フェニル及びインデニル部分を介して連結していない非架橋錯体１５由来の触媒よりも共重合活性が高く、１－オクテンコモノマーの組み込み効率も高い（重合ラン１～３を、それぞれ重合ラン２７～２９と比較し、重合ラン４を重合ラン３０と比較）。錯体１由来の触媒は、１９０℃でも活性があり、エチレン変換率９０％の目標を達成できる（重合ラン５～８を参照）のに対し、錯体１５由来の触媒は、１９０℃では活性がはるかに低く、高い触媒濃度でも変換率目標を達成できなかった（重合ラン５と重合ラン３１を比較）。非架橋錯体１５由来の触媒で最も高い活性をもたらしたＡｌ／Ｔｉ比は、Ａｌ／Ｔｉ＝

８０であることが見出されたが、これは、錯体１、３、５、７、及び９由来の触媒など、本開示の他の触媒で見出された最適なＡｌ／Ｔｉ比よりも高い。

【０７７７】

錯体１由来の触媒組成物は、ヒンダードフェノール改質剤ＢＨＥＢが除去されると機能しなくなった（重合ラン９と重合ラン８を比較）。理論に縛られることなく推測するに、錯体１における２－インデニル置換基は、活性サイトに十分な立体的保護を提供せず、これにより、触媒は未修飾ＭＭＡＯ－７のルイス酸性種による攻撃を受けやすくなり、触媒の不活性化につながると考えられる。この欠陥は、錯体３、５、７、９などの他の錯体の設計で対処されており、これらの錯体は、立体的にかさ高いｈ－配位シクロペンタジエニル置換基を有し、様々なアルミニウム系共触媒に対して堅牢性を示す

【０７７８】

塩化物活性化可能配位子を有する錯体１及び錯体１５は、活性触媒組成物を形成するためにアルキルアルミノキサン共触媒を必要としたが、ジメチル活性化可能配位子を有する錯体３は、アルキルアルミノキサン共触媒（又は他の水分捕捉化合物）なしで、ランを実行することができ、驚くべきことに非常に高い活性を達成する（例えば、重合ラン１０を重合ラン１～３と比較し、重合ラン１１～１３を重合ラン４と比較し、重合ラン２１を重合ラン７と比較）。アルミニウム系共触媒（捕捉剤）なしでランを実行しているにもかかわらず、重合ラン１０～１３及び重合ラン２１のコポリマーの多分散度（M_w／M_n）は約２であり、触媒が不純物に対して堅牢であり、シングルサイト触媒として作用していることを示唆している。それでもなお、錯体３は、アルキルアルミノキサン共触媒と適合性があり、このことは、商業用途には望ましい。なぜなら、商業用重合反応器の反応器供給物には様々なレベルの不純物が含まれている可能性があるからである（例えば、重合ラン１４と重合ラン１２を比較）。

【０７７９】

驚くべきことに、錯体３由来の触媒は、ホウ素系活性剤（ＴＢなど）で活性化され、任意選択でアルミニウム系共触媒（ＭＭＡＯ－７など）、及び任意選択でヒンダードフェノール改質剤（ＢＨＥＢなど）の存在下で活性化されると、高い活性、高い１－オクテン組み込み、及び高いコポリマー分子量を実現できる（重合ラン１０～２１を表中の他の重合ランと比較）。当業者であれば、錯体３が、高温で高効率に高い分子量コポリマーを生成する触媒として使用できる可能性を認識するであろう。錯体３由来の触媒は、ＢＨＥＢがない場合でも、又はＭＭＡＯ－７とＢＨＥＢの両方がない場合でも、１９０℃で高い活性、高い分子量生成能、狭い多分散性（シングルサイト挙動を示す）を維持する（重合ラン２０及び２１を重合ラン１８と比較）。ただし、最も高い活性は４つの触媒成分すべてを使用した場合に得られる（重合ラン１８を参照）。さらに、錯体３由来の触媒組成物で最大の重合活性を達成するには、比較的低いＡｌ／Ｔｉ比（例えば、Ａｌ／Ｔｉ＝５）が必要であることが見出された（例えば、重合ラン１４～１９を参照）。

【０７８０】

ホスフィンイミンＰ原子に異なるアルキル置換基（例えば、シクロヘキシル）を有するプレ重合触媒錯体（錯体５、実験２２）、又はインデノ［１，２－ｂ］インドリル部分などの異なるｈ－配位シクロペンタジエニル型配位子を有するプレ重合触媒錯体（錯体７、実験２３）、又はホスフィンイミンＰ原子とｈ－配位フルオレニル配位子の間に３原子架橋を有するプレ重合触媒錯体（錯体９、実験２４）も、高温（１９０℃）で、高い活性及と高いコポリマー分子量生成能を有する触媒をもたらす。

【０７８１】

配位子前駆体がホスフィンイミンＮのみを介して$TiCl_3$に結合した錯体１０は、驚くべきことに、ＴＢ、ＭＭＡＯ－７、及びＢＨＥＢで活性化すると活性触媒となり（重合ラン２５及び２６を参照）、錯体３由来の触媒と同様の１－オクテンコモノマー組み込みとコポリマーＭＷ生成能を示す（重合ラン２５を重合ラン１２及び１４と比較し、重合ラン２６を重合ラン１８と比較）。理論に縛られることを望まないが、上記の観察結果は、錯体１０及び錯体３由来の触媒が、ＴＢ、ＭＭＡＯ－７、及びＢＨＥＢによって活性化さ

れると、反応器内で同様の活性種をもたらすことを強く示唆している。ただし、錯体１０由来の触媒の場合、活性触媒種を形成する前にその場で行わなければ追加の工程（例えば、Ｔｉでのアルキル化、及びｈ－配位フルオレニルを形成するためのアルカン除去）のために、触媒の活性は低くなる。

【０７８２】

錯体１５と錯体１の比較について上述したように、架橋錯体の構造部分と同様のホスフィンイミン及びｈ－配位補助配位子を有する非架橋錯体は、性能の低い触媒をもたらす。例えば、連結も架橋もされていないホスフィンイミン及びフルオレニル補助配位子を有する錯体１７由来の触媒は、関連する架橋ホスフィンイミン／フルオレニル系錯体３と同様に活性化した場合、反応器内の触媒濃度が高くても、１４０、１６０、又は１９０℃で９０％のエチレン変換率という目標に到達することができなかった（重合ラン３２～３４を参照）。

【０７８３】

錯体３のような配位子フラグメントを有する（すなわち、ジイソプロピルフェニルホスフィンイミン及びｈ－配位２，７－ジ－ｔｅｒｔ－ブチルフルオレニル補助配位子を有する）非架橋錯体を合成する試みは不成功であった。この観察結果は、様々な架橋ホスフィンイミン／ｈ－配位シクロペンタジエニル錯体の合成を可能にする架橋配位子設計のもう１つの利点を強調している。

【０７８４】

【表７】

表７

連続エチレン／1-オクテン共重合条件－

Ti系触媒を用いた200～240 °C実験

重合ラン No.	触媒錯体 No.	ホウ酸塩添加法	アルミニウム添加法	反応器温度 (°C)	エチレン流 (g/min)	B / Ti (モル比)	Al / Ti (モル比)	BHEB / Al (モル比)	1-オクテン/エチレン比 (wt/wt)
35	錯体 3	インライン	反応器内	200	3.80	1.4	5.0	0.6	0.30
36	錯体 3	インライン	反応器内	210	4.10	1.4	5.1	0.6	0.30
37	錯体 3	インライン	反応器内	220	4.48	1.4	5.0	0.6	0
38	錯体 3	インライン	反応器内	220	4.48	1.4	5.0	0.6	0.30
39	錯体 3	インライン	反応器内	220	4.48	1.4	5.0	-	0.30
40	錯体 3	インライン	-	220	4.48	1.4	-	-	0.30
41	錯体 3	インライン	-	220	4.48	1.0	-	-	0
42	錯体 3	インライン	-	220	4.48	1.0	-	-	0.15
43	錯体 3	インライン	-	220	4.48	1.0	-	-	0.30
44	錯体 3	インライン	-	220	4.48	1.0	-	-	0.50
45	錯体 3	インライン	-	220	4.48	1.0	-	-	0.30
46	錯体 3	インライン	-	220	4.48	1.0	-	-	0.30
47	錯体 3	インライン	-	230	4.77	1.0	-	-	0.30
48	錯体 3	インライン	-	230	4.77	1.0	-	-	0
49	錯体 3	インライン	-	240	4.93	1.0	-	-	0.30
50	錯体 3	インライン	-	240	4.93	1.0	-	-	0
51	錯体 5	インライン	反応器内	220	4.48	1.2	5.0	0.3	0.30
52	錯体 5	インライン	反応器内	220	4.48	1.2	5.0	-	0.30
53	錯体 5	インライン	反応器内	230	4.77	1.2	5.0	0.3	0.30
54	錯体 5	インライン	反応器内	240	4.93	1.2	5.0	0.3	0.30
55	錯体 7	インライン	反応器内	220	4.48	1.8	5.0	0.3	0.30
56	錯体 7	インライン	反応器内	220	4.48	1.8	5.0	-	0.30
57	錯体 7	インライン	反応器内	230	4.77	1.4	10.0	0.6	0.30
58	錯体 7	インライン	反応器内	240	4.93	1.4	10.0	0.6	0.30
59	錯体 9	インライン	反応器内	220	4.48	2.2	2.5	0.3	0.30
60	錯体 9	インライン	反応器内	220	4.48	2.2	2.5	-	0.30
61	錯体 9	インライン	反応器内	230	4.77	1.4	10.0	0.6	0.30
62	錯体 9	インライン	反応器内	240	4.93	1.4	10.0	0.6	0.30
63	錯体 10	反応器内	インライン	220	4.30	1.2	15.0	0.7	0.30
64	錯体 10	インライン	インライン	220	4.30	1.8	30.0	0.7	0.30

【０７８５】

【表８】

表８

連続エチレン／1-オクテン共重合結果－

Ti系触媒を用いた200～240 °C実験

重合ラン No.	[Ti] (μM)	エチレン変換率 (Q %)	k_p ($mM^{-1}\cdot min^{-1}$)	FTIR BrF (no./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.	-	-	-	-	-	-

【０７８６】

反応器温度が２００～２４０℃の範囲で、錯体３、５、７、及び９由来の触媒は、ホウ素系活性剤（ＴＢなど）で活性化され、任意選択でアルミニウム系共触媒（ＭＭＡＯ－７など）、及び任意選択でヒンダードフェノール改質剤（ＢＨＥＢなど）の存在下で活性化されると、中程度から高い活性、高い１－オクテン組み込み、及び高いコポリマー分子量を実現できる（重合ラン３５～６２を参照）。驚くべきことに、錯体３、５、７、及び９由来の触媒は、ＭＭＡＯ及び／又はＢＨＥＢがない場合でも（例えば、重合ラン４９及び５０を参照）、少なくとも２４０℃まで（重合ラン４９、５４、５８、及び６２を参照）、有用な性能特性（例えば、１－オクテン組み込み効率が高く、（コ）ポリマー分子量生

成能が高い）とシングルサイト挙動（すなわち、ほとんどの場合にM_w／M_nが約２で、すべての場合にM_w／M_nが３未満の狭い多分散性を有するポリマーを生成）を維持する。

【０７８７】

錯体３由来の触媒を用いた重合ラン４５及び４６は、エチレン変換率（Ｑ）目標をそれぞれ８０％及び７０％として実行され、１－オクテンコモノマーの組み込み及びコポリマー分子量を調節する目的で、エチレン濃度を変化させることに対する触媒の応答性を示している（重合ラン４５及び４６を、Ｑ＝９０％の重合ラン４３と比較）。

【０７８８】

より低温での観察と同様に、反応器温度２２０℃でホスフィンイミン配位錯体１０由来の触媒は、錯体３由来の触媒と同様の１－オクテン組み込み及びコポリマー分子量を有するコポリマーを生成し、それらは、反応器内で同様の触媒種を生成することを強く示唆している（重合ラン６３と重合ラン３８を比較）。さらに、錯体１０由来の触媒の活性は、触媒比率の変更と触媒成分の添加順序の変更によって大幅に改善された（重合ラン６４と重合ラン６３を比較）。

【０７８９】

一般に、反応温度が高いほど触媒の不活性化率が高くなり、触媒活性が低下する。ただし、反応温度が高い方がエネルギー節約につながるため望ましい場合がある。例えば、反応温度が高いと、下流の蒸留工程で溶液を加熱するために必要なエネルギー投入量を低減できる。この点で、錯体３、５、７、９、及び１０由来の触媒は、優れた高温性能を発揮する。例えば、錯体３由来の触媒は、１９０℃を超える温度で、高い重合活性、高いコモノマー組み込み、及び高い分子量を実現する。さらに、これらの例は、錯体３が、アルキルアルミノキサン共触媒の有無にかかわらず良好に機能し、アルキルアミノキサン共触媒が存在する場合には、ヒンダードフェノール改質剤が存在しなくても活性を維持する可能性があることを示している。

【０７９０】

【表９】

表９

連続エチレン／1-オクテン共重合条件 －

錯体3を用いた 220 °C 実験

重合ラン No.	ホウ酸塩活性剤	アルミニウム共触媒	B / Ti (モル比)	Al / Ti (モル比)	BHEB / Al (モル比)
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 (表 7)	TB	MMAO	1.4	5.0	0.6
39 (表 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	-

【０７９１】

【表１０】

表10

連続エチレン／1-オクテン共重合結果－

錯体3を用いた220 ˚C 実験

重合ラン No.	[Ti] (μM)	エチレン変換率 (Q %)	k_p ($mM^{-1}\cdot min^{-1}$)	FTIR BrF (no./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 (表 8)	1.89	90.81	2,012	16.0	11.7	46,188	88,020	142,871	1.91
39 (表 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

【０７９２】

錯体３は、トリチル（ＴＢ）又はアンモニウム（ＡＢ）ボレート活性剤とともに、様々なアルミニウム系共触媒の存在下で、また任意選択でヒンダードフェノールＢＨＥＢの存在下で、活性化することができ、これにより、高い反応器温度（２２０℃）でシングルサイト挙動（狭い多分散性）を維持しながら、同様の性能を有する触媒（１－オクテンの組み込みとＭＷ生成能を有する触媒）を生成することができる。最も高い活性は、ＴＢ又はＡＢ活性剤のいずれかと、ＭＭＡＯ又はＤＥＡＬ－Ｅ捕捉剤のいずれか、及び任意選択でＢＨＥＢを使用した場合に得られた（重合ラン３８及び３９、並びに重合ラン６８～７３を参照）。

【０７９３】

【表１１】

表 11

連続エチレン／1-オクテン共重合条件 －

Hf 系触媒を用いた 140, 160, 及び 190 °C 実験

重合ラン No.	触媒錯体 No.	反応器温度 (°C)	エチレン流 (g/min)	B / Hf (モル比)	Al / Hf (モル比)	BHEB / Al (モル比)	1-オクテン / エチレン 比 (wt/wt)
74	錯体 12	140	2.10	0.8	-	-	0
75	錯体 12	140	2.10	0.8	-	-	0.30
76	錯体 12	140	2.10	1.4	-	-	0.30
77	錯体 12	140	2.10	1.4	20.0	0.6	0.30
78	錯体 12	160	2.70	0.8	-	-	0
79	錯体 12	160	2.70	0.8	-	-	0.30
80	錯体 12	160	2.70	0.8	20.0	0.6	0.30
81	錯体 12	190	3.50	1.4	-	-	0
82	錯体 12	190	3.50	1.4	-	-	0.30
83	錯体 14	160	2.70	1.6	-	-	0
84	錯体 14	160	2.70	1.6	-	-	0.30
85	錯体 14	190	3.50	1.4	-	-	0
86	錯体 14	190	3.50	1.4	-	-	0.30

【０７９４】

【表１２】

表 12

連続エチレン／1-オクテン共重合結果 –

Hf 系触媒を用いた 140, 160, 及び 190 °C 実験

重合ラン No.	[Ti] (μM)	エチレン変換率 (Q %)	k_p ($mM^{-1}\cdot min^{-1}$)	FTIR BrF no. /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	試料なし	-	-	-	-	-
77	12.96	30.96	13	試料なし	-	-	-	-	-
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	試料なし	-	-	-	-	-
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

【０７９５】

ハフニウム系錯体１２及び１４とホウ素系活性剤ＴＢ由来の触媒は、少なくとも１９０℃までの反応器温度でエチレン単独重合又はエチレン／１－オクテン共重合に対して、中程度から高い活性を有する。チタン系錯体３、５、７、及び９由来の触媒組成物とは対照的に、錯体１２及び１４由来の触媒組成物は、ＭＭＡＯ／ＢＨＥＢ共触媒の存在に敏感であり、強く不活性化される（重合ラン７７と重合ラン７６を比較し、重合ラン８０と重合ラン７９を比較する）。

【０７９６】

ハフニウム系錯体１２及び１４由来の触媒は、１－オクテンの含有量が高い低分子量のホモポリマー又はコポリマーを生成する。低分子量ポリエチレン生成物は、例えば、プラスチック用の顔料分散剤、成形プロセス用の添加剤又はホットメルト接着剤用の添加剤として商業的用途を有している。

【０７９７】

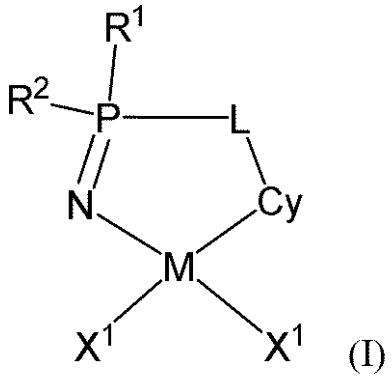
本開示の非限定的な実施形態には、以下の実施形態が含まれる。

【０７９８】

＜実施形態１＞

有機金属錯体であって、式Ｉ：

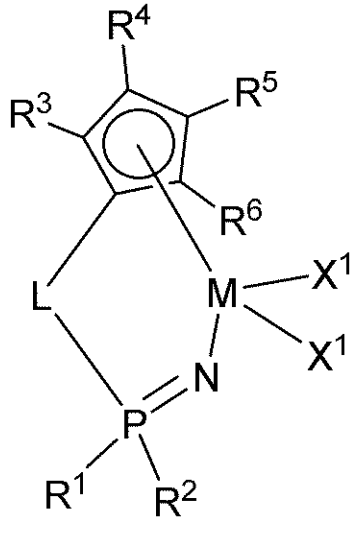
【化１８３】



(I)

で表され、
式中、
Ｍは、Ｔｉ、Ｚｒ又はＨｆであり；
R^1及びR^2は、各々独立して、水素及びR^Xからなる群から選択されるか；又はR^1及びR^2は、それらが結合しているＰ原子と一緒になって、非置換であるか、又はハロゲン原子、C_{1-20}アルキル基、C_{1-20}アルコキシ基、C_{7-20}アルキルアリール基、C_{7-20}アリールアルキル基、C_{6-20}アリール基、C_{6-20}アリールオキシ基、C_{7-20}アルキルアリールオキシ基、及びC_{7-20}アリールアルキルオキシ基からなる群から選択される１つ以上の置換基によってさらに置換されている３－１０員複素環式基を形成し；
各R^Xは、独立して、ハロゲン原子；C_{1-30}ヒドロカルビル基（このヒドロカルビル基は、非置換であるか、又は１つ以上のハロゲン原子、C_{1-20}アルキル基、C_{1-20}アルコキシ基、C_{7-20}アルキルアリール基、C_{7-20}アリールアルキル基、C_{6-20}アリール基、C_{6-20}アリールオキシ基、C_{7-20}アルキルアリールオキシ基、及び／又はC_{7-20}アリールアルキルオキシ基によってさらに置換されている）；式－NR'_2のアミド基；式－Ｓｉ（R^a）$_3$のシリル基；式－Ｇｅ（R^a）$_3$のゲルマニル基；及び式Ｎ＝Ｐ（R^b）（R^c）（R^d）のホスフィンイミン基からなる群から選択され；ここで、各Ｒ’は、独立して、水素、C_{1-20}アルキル基、及びC_{6-20}アリール基からなる群から選択され；ここで、各R^aは、独立して、水素、C_{1-8}アルキル基、C_{1-8}アルコキシ基、C_{6-20}アリールオキシ基及びC_{6-20}アリール基からなる群から選択され、R^b、R^c、R^dは、各々独立して、C_{1-20}アルキル基であり；
各X^1は、活性化可能な配位子であり；
Ｃｙは、Ｌに共有結合し、η－結合を介してＭに配位するシクロペンタジエニル型配位子であり；
Ｌは、ＰとＣｙを連結する原子の連続鎖を含む架橋基であり、連続鎖は２個又は３個の原子を含む、
有機金属錯体。
【０７９９】
＜実施形態２＞
実施形態１に記載の有機金属錯体であって、式ＩＩ：

【化１８４】



(II)

で表され、

式中、Ｍ、Ｒ^{1}、Ｒ^{2}、Ｌ及びＸ^{1}は、式Ｉで定義した通りであり；

式中、Ｒ^{3}、Ｒ^{4}、Ｒ^{5}及びＲ^{6}は、各々独立して、

ハロゲン；

水素；

Ｃ$_{1-30}$ヒドロカルビル基（このヒドロカルビル基は、非置換であるか、又はハロゲン原子、Ｃ$_{1-20}$アルキル基、Ｃ$_{1-20}$アルコキシ基、Ｃ$_{7-20}$アルキルアリール基、Ｃ$_{7-20}$アリールアルキル基、Ｃ$_{6-20}$アリール基、Ｃ$_{6-20}$アリールオキシ基、Ｃ$_{7-20}$アルキルアリールオキシ基、及びＣ$_{7-20}$アリールアルキルオキシ基からなる群から選択される１つ以上の置換基によってさらに置換されている）；

ヘテロ原子含有Ｃ$_{1-30}$ヒドロカルビル基（このヘテロ原子含有ヒドロカルビル基は、非置換であるか、又はハロゲン原子、Ｃ$_{1-20}$アルキル基、Ｃ$_{1-20}$アルコキシ基、Ｃ$_{7-20}$アルキルアリール基、Ｃ$_{7-20}$アリールアルキル基、Ｃ$_{6-20}$アリール基、Ｃ$_{6-20}$アリールオキシ基、Ｃ$_{7-20}$アルキルアリールオキシ基、及びＣ$_{7-20}$アリールアルキルオキシ基からなる群から選択される１つ以上の置換基によってさらに置換されている）；

オキシ基、－ＯＲ’；

アミド基、－ＮＲ’$_{2}$；

ホスフィド基、－ＰＲ’$_{2}$；

チオラート基、－ＳＲ’；

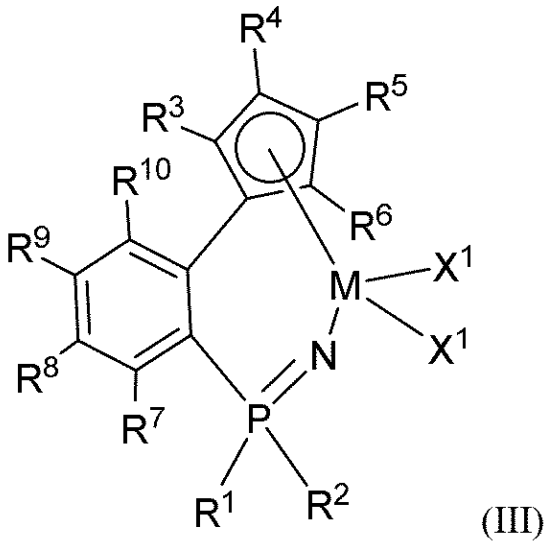
式－Ｓｉ（Ｒ^{a}）$_{3}$のシリル基；

式－Ｇｅ（Ｒ^{a}）$_{3}$のゲルマニル基；

からなる群から選択され；

ここで、Ｒ^{3}、Ｒ^{4}、Ｒ^{5}及びＲ^{6}の２つの隣接する基は、任意に結合して環状ヒドロカルビル基又は環状ヘテロ原子含有ヒドロカルビル基を形成してもよく、環状ヒドロカルビル基又は環状ヘテロ原子含有ヒドロカルビル基は、非置換であるか、又はハロゲン原子、Ｃ$_{1-20}$アルキル基、Ｃ$_{1-20}$アルコキシ基、Ｃ$_{7-20}$アルキルアリール基、Ｃ$_{7-20}$アリールアルキル基、Ｃ$_{6-20}$アリール基、Ｃ$_{6-20}$アリールオキシ基、Ｃ$_{7-20}$アルキルアリールオキシ基、Ｃ$_{7-20}$アリールアルキルオキシ基、式－ＮＲ’$_{2}$のアミド基、式－ＰＲ’$_{2}$のホスフィド基、式－ＳＲ’のチオラート基、式－Ｓｉ（Ｒ^{a}）$_{3}$のシリル基、及び式－Ｇｅ（Ｒ^{a}）$_{3}$のゲルマニル基からなる群から選択される１つ以上の置換基によってさらに置換されており；

ここで、各Ｒ’は、独立して、水素、Ｃ$_{1-20}$アルキル基、及びＣ$_{6-20}$アリール基からなる群から選択され；
ここで、各Ｒ^{a}は、独立して、水素、Ｃ$_{1-8}$アルキル基、Ｃ$_{1-8}$アルコキシ基、Ｃ$_{6-20}$アリールオキシ基及びＣ$_{6-20}$アリール基からなる群から選択される、
上記有機金属錯体。
【０８００】
＜実施形態３＞
実施形態２に記載の有機金属錯体であって、式ＩＩＩ：
【化１８５】



(III)

で表され、
式中、Ｍ、Ｒ^{1}、Ｒ^{2}、Ｒ^{3}、Ｒ^{4}、Ｒ^{5}、Ｒ^{6}及びＸ^{1}は、式Ｉ及び式ＩＩで定義した通りであり；
式中、Ｒ^{7}、Ｒ^{8}、Ｒ^{9}及びＲ^{10}は、各々独立して、
ハロゲン；
水素；
Ｃ$_{1-30}$ヒドロカルビル基（このヒドロカルビル基は、非置換であるか、又はハロゲン原子、Ｃ$_{1-20}$アルキル基、Ｃ$_{1-20}$アルコキシ基、Ｃ$_{7-20}$アルキルアリール基、Ｃ$_{7-20}$アリールアルキル基、Ｃ$_{6-20}$アリール基、Ｃ$_{6-20}$アリールオキシ基、Ｃ$_{7-20}$アルキルアリールオキシ基、及びＣ$_{7-20}$アリールアルキルオキシ基からなる群から選択される１つ以上の置換基によってさらに置換されている）；
ヘテロ原子含有Ｃ$_{1-30}$ヒドロカルビル基（このヘテロ原子含有ヒドロカルビル基は、非置換であるか、又はハロゲン原子、Ｃ$_{1-20}$アルキル基、Ｃ$_{1-20}$アルコキシ基、Ｃ$_{7-20}$アルキルアリール基、Ｃ$_{7-20}$アリールアルキル基、Ｃ$_{6-20}$アリール基、Ｃ$_{6-20}$アリールオキシ基、Ｃ$_{7-20}$アルキルアリールオキシ基、及びＣ$_{7-20}$アリールアルキルオキシ基からなる群から選択される１つ以上の置換基によってさらに置換されている）；
オキシ基、－ＯＲ’；
アミド基、－ＮＲ’$_{2}$；
ホスフィド基、－ＰＲ’$_{2}$；
チオラート基、－ＳＲ’；
式－Ｓｉ（Ｒ^{a}）$_{3}$のシリル基；
式－Ｇｅ（Ｒ^{a}）$_{3}$のゲルマニル基；
からなる群から選択され；

ここで、R^7、R^8、R^9及びR^{10}の２つの隣接する基は、任意に結合して環状ヒドロカルビル基又は環状ヘテロ原子含有ヒドロカルビル基を形成してもよく、環状ヒドロカルビル基又は環状ヘテロ原子含有ヒドロカルビル基は、非置換であるか、又はハロゲン原子、C_{1-20}アルキル基、C_{1-20}アルコキシ基、C_{7-20}アルキルアリール基、C_{7-20}アリールアルキル基、C_{6-20}アリール基、C_{6-20}アリールオキシ基、C_{7-20}アルキルアリールオキシ基、C_{7-20}アリールアルキルオキシ基、式－NR'_2のアミド基、式－PR'_2のホスフィド基、式－SR'のチオラート基、式－$Si(R^a)_3$のシリル基、及び式－$Ge(R^a)_3$のゲルマニル基からなる群から選択される１つ以上の置換基によってさらに置換されており；

ここで、各R'は、独立して、水素、C_{1-20}アルキル基、及びC_{6-20}アリール基からなる群から選択され；

ここで、各R^aは、独立して、水素、C_{1-8}アルキル基、C_{1-8}アルコキシ基、C_{6-20}アリールオキシ基及びC_{6-20}アリール基からなる群から選択される、

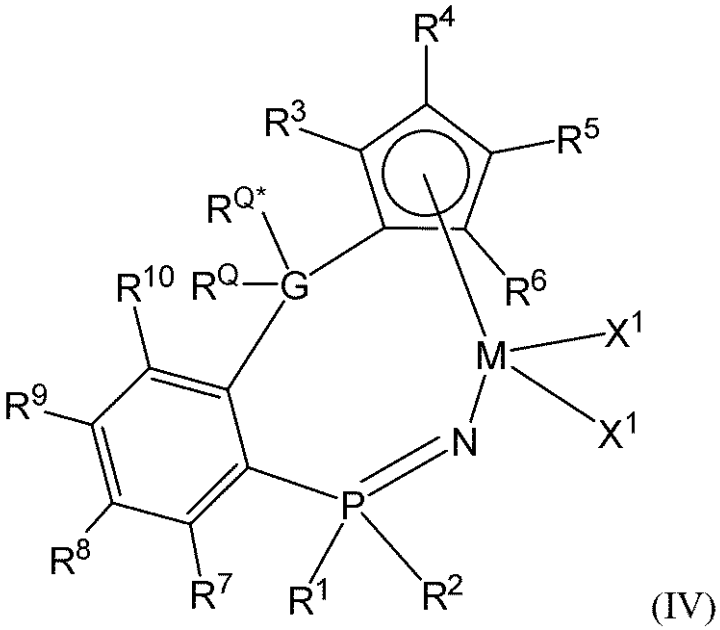
上記有機金属錯体。

【０８０１】

＜実施形態４＞

実施形態２に記載の有機金属錯体であって、式ＩＶ：

【化１８６】



(IV)

で表され、

式中、M、R^1、R^2、R^3、R^4、R^5、R^6及びX^1は、式Ｉ及び式ＩＩで定義した通りであり；

式中、Ｇは、Ｃ又はＳｉであり；

式中、R^Q及びR^{Q*}は、各々独立して、

ハロゲン；

水素；

C_{1-30}ヒドロカルビル基（このヒドロカルビル基は、非置換であるか、又はハロゲン原子、C_{1-20}アルキル基、C_{1-20}アルコキシ基、C_{7-20}アルキルアリール基、C_{7-20}アリールアルキル基、C_{6-20}アリール基、C_{6-20}アリールオキシ基、C_{7-20}アルキルアリールオキシ基、及びC_{7-20}アリールアルキルオキシ基からなる群から選択される１つ以上の置換基によってさらに置換されている）；

ヘテロ原子含有C_{1-30}ヒドロカルビル基（このヘテロ原子含有ヒドロカルビル基は

、非置換であるか、又はハロゲン原子、Ｃ１－２０アルキル基、Ｃ１－２０アルコキシ基、Ｃ７－２０アルキルアリール基、Ｃ７－２０アリールアルキル基、Ｃ６－２０アリール基、Ｃ６－２０アリールオキシ基、Ｃ７－２０アルキルアリールオキシ基、及びＣ７－２０アリールアルキルオキシ基からなる群から選択される１つ以上の置換基によってさらに置換されている）；

ここで、Ｒ^{Q}及びＲ^{Q}＊の基は、任意に結合して環状ヒドロカルビル基又は環状ヘテロ原子含有ヒドロカルビル基を形成してもよく、環状ヒドロカルビル基又は環状ヘテロ原子含有ヒドロカルビル基は、非置換であるか、又はハロゲン原子、Ｃ１－２０アルキル基、Ｃ１－２０アルコキシ基、Ｃ７－２０アルキルアリール基、Ｃ７－２０アリールアルキル基、Ｃ６－２０アリール基、Ｃ６－２０アリールオキシ基、Ｃ７－２０アルキルアリールオキシ基、Ｃ７－２０アリールアルキルオキシ基、式－ＮＲ’$_2$のアミド基、式－ＰＲ’$_2$のホスフィド基、式－ＳＲ’のチオラート基、式－Ｓｉ（Ｒ^{a}）$_3$のシリル基、及び式－Ｇｅ（Ｒ^{a}）$_3$のゲルマニル基からなる群から選択される１つ以上の置換基によってさらに置換されており；

式中、Ｒ^{7}、Ｒ^{8}、Ｒ^{9}及びＲ^{10}は、各々独立して、

ハロゲン；

水素；

Ｃ１－３０ヒドロカルビル基（このヒドロカルビル基は、非置換であるか、又はハロゲン原子、Ｃ１－２０アルキル基、Ｃ１－２０アルコキシ基、Ｃ７－２０アルキルアリール基、Ｃ７－２０アリールアルキル基、Ｃ６－２０アリール基、Ｃ６－２０アリールオキシ基、Ｃ７－２０アルキルアリールオキシ基、及びＣ７－２０アリールアルキルオキシ基からなる群から選択される１つ以上の置換基によってさらに置換されている）；

ヘテロ原子含有Ｃ１－３０ヒドロカルビル基（このヘテロ原子含有ヒドロカルビル基は、非置換であるか、又はハロゲン原子、Ｃ１－２０アルキル基、Ｃ１－２０アルコキシ基、Ｃ７－２０アルキルアリール基、Ｃ７－２０アリールアルキル基、Ｃ６－２０アリール基、Ｃ６－２０アリールオキシ基、Ｃ７－２０アルキルアリールオキシ基、及びＣ７－２０アリールアルキルオキシ基からなる群から選択される１つ以上の置換基によってさらに置換されている）；

オキシ基、－ＯＲ’；

アミド基、－ＮＲ’$_2$；

ホスフィド基、－ＰＲ’$_2$；

チオラート基、－ＳＲ’；

式－Ｓｉ（Ｒ^{a}）$_3$のシリル基；

式－Ｇｅ（Ｒ^{a}）$_3$のゲルマニル基；

からなる群から選択され；

ここで、Ｒ^{7}、Ｒ^{8}、Ｒ^{9}及びＲ^{10}の２つの隣接する基は、任意に結合して環状ヒドロカルビル基又は環状ヘテロ原子含有ヒドロカルビル基を形成してもよく、環状ヒドロカルビル基又は環状ヘテロ原子含有ヒドロカルビル基は、非置換であるか、又はハロゲン原子、Ｃ１－２０アルキル基、Ｃ１－２０アルコキシ基、Ｃ７－２０アルキルアリール基、Ｃ７－２０アリールアルキル基、Ｃ６－２０アリール基、Ｃ６－２０アリールオキシ基、Ｃ７－２０アルキルアリールオキシ基、Ｃ７－２０アリールアルキルオキシ基、式－ＮＲ’$_2$のアミド基、式－ＰＲ’$_2$のホスフィド基、式－ＳＲ’のチオラート基、式－Ｓｉ（Ｒ^{a}）$_3$のシリル基、及び式－Ｇｅ（Ｒ^{a}）$_3$のゲルマニル基からなる群から選択される１つ以上の置換基によってさらに置換されており；

ここで、各Ｒ’は、独立して、水素、Ｃ$_{1}$－２０アルキル基、及びＣ６－２０アリール基からなる群から選択され；

ここで、各Ｒ^{a}は、独立して、水素、Ｃ１－８アルキル基、Ｃ１－８アルコキシ基、Ｃ６－２０アリールオキシ基及びＣ６－２０アリール基からなる群から選択される、

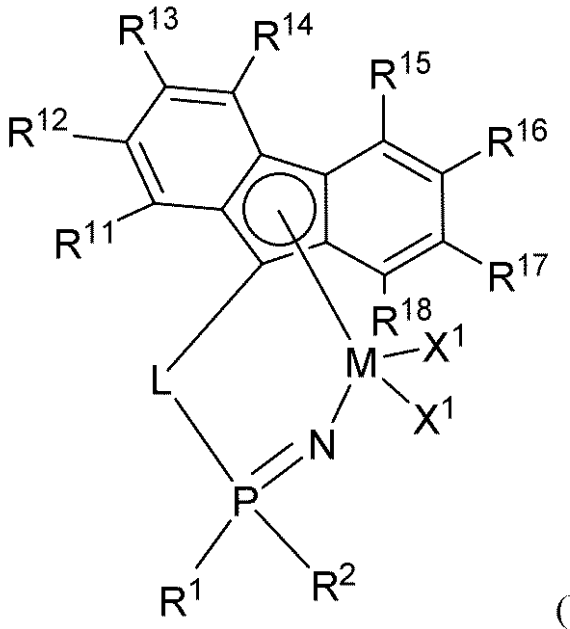
上記有機金属錯体。

【０８０２】

＜実施形態５＞

実施形態１に記載の有機金属錯体であって、式Ｖ：

【化１８７】



(V)

で表され、

式中、Ｍ、Ｒ^{1}、Ｒ^{2}、Ｌ及びＸ^{1}は、式Ｉで定義した通りであり；

式中、Ｒ^{11}、Ｒ^{12}、Ｒ^{13}、Ｒ^{14}、Ｒ^{15}、Ｒ^{16}、Ｒ^{17}、Ｒ^{18}は、各々独立して、

ハロゲン；

水素；

Ｃ$_{1-30}$ヒドロカルビル基（このヒドロカルビル基は、非置換であるか、又はハロゲン原子、Ｃ$_{1-20}$アルキル基、Ｃ$_{1-20}$アルコキシ基、Ｃ$_{7-20}$アルキルアリール基、Ｃ$_{7-20}$アリールアルキル基、Ｃ$_{6-20}$アリール基、Ｃ$_{6-20}$アリールオキシ基、Ｃ$_{7-20}$アルキルアリールオキシ基、及びＣ$_{7-20}$アリールアルキルオキシ基からなる群から選択される１つ以上の置換基によってさらに置換されている）；

ヘテロ原子含有Ｃ$_{1-30}$ヒドロカルビル基（このヘテロ原子含有ヒドロカルビル基は、非置換であるか、又はハロゲン原子、Ｃ$_{1-20}$アルキル基、Ｃ$_{1-20}$アルコキシ基、Ｃ$_{7-20}$アルキルアリール基、Ｃ$_{7-20}$アリールアルキル基、Ｃ$_{6-20}$アリール基、Ｃ$_{6-20}$アリールオキシ基、Ｃ$_{7-20}$アルキルアリールオキシ基、及びＣ$_{7-20}$アリールアルキルオキシ基からなる群から選択される１つ以上の置換基によってさらに置換されている）；

オキシ基、－ＯＲ’；

アミド基、－ＮＲ’$_{2}$；

ホスフィド基、－ＰＲ’$_{2}$；

チオラート基、－ＳＲ’；

式－Ｓｉ（Ｒ^{a}）$_{3}$のシリル基；

式－Ｇｅ（Ｒ^{a}）$_{3}$のゲルマニル基；

からなる群から選択され；

ここで、Ｒ^{11}、Ｒ^{12}、Ｒ^{13}、Ｒ^{14}、Ｒ^{15}、Ｒ^{16}、Ｒ^{17}、Ｒ^{18}の２つの隣接する基は、任意に結合して環状ヒドロカルビル基又は環状ヘテロ原子含有ヒドロカルビル基を形成してもよく、環状ヒドロカルビル基又は環状ヘテロ原子含有ヒドロカルビル基は

、非置換であるか、又はハロゲン原子、Ｃ１－２０アルキル基、Ｃ１－２０アルコキシ基、Ｃ７－２０アルキルアリール基、Ｃ７－２０アリールアルキル基、Ｃ６－２０アリール基、Ｃ６－２０アリールオキシ基、Ｃ７－２０アルキルアリールオキシ基、Ｃ７－２０アリールアルキルオキシ基、式－ＮＲ’$_2$のアミド基、式－ＰＲ’$_2$のホスフィド基、式－ＳＲ’のチオラート基、式－Ｓｉ（Ｒ^a）$_3$のシリル基、及び式－Ｇｅ（Ｒ^a）$_3$のゲルマニル基からなる群から選択される１つ以上の置換基によってさらに置換されており；

ここで、各Ｒ’は、独立して、水素、Ｃ$_1$－２０アルキル基、及びＣ６－２０アリール基からなる群から選択され；

ここで、各Ｒ^{a}は、独立して、水素、Ｃ１－８アルキル基、Ｃ１－８アルコキシ基、Ｃ６－２０アリールオキシ基及びＣ６－２０アリール基からなる群から選択される、

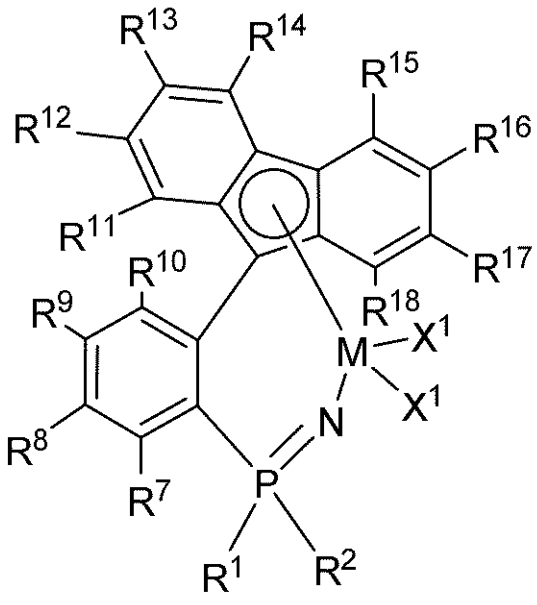
上記有機金属錯体。

【０８０３】

＜実施形態６＞

実施形態５に記載の有機金属錯体であって、式ＶＩ：

【化１８８】



(VI)

で表され、

式中、Ｍ、Ｒ^1、Ｒ^2、Ｒ^{11}、Ｒ^{12}、Ｒ^{13}、Ｒ^{14}、Ｒ^{15}、Ｒ^{16}、Ｒ^{17}、Ｒ^{18}及びＸ^{1}は、式Ｉ及び式Ｖで定義した通りであり；

式中、Ｒ^7、Ｒ^8、Ｒ^{9}及びＲ^{10}は、各々独立して、

ハロゲン；

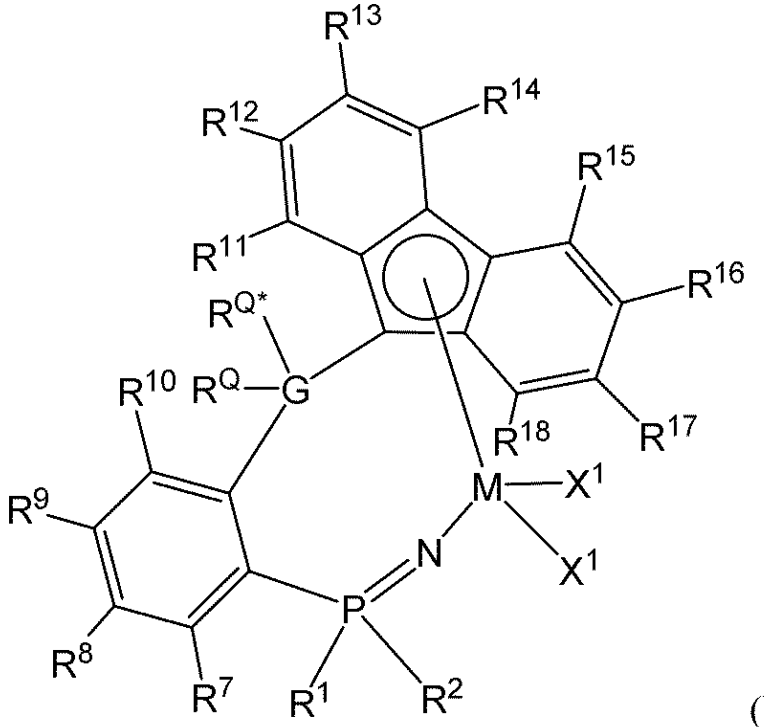
水素；

Ｃ１－３０ヒドロカルビル基（このヒドロカルビル基は、非置換であるか、又はハロゲン原子、Ｃ１－２０アルキル基、Ｃ１－２０アルコキシ基、Ｃ７－２０アルキルアリール基、Ｃ７－２０アリールアルキル基、Ｃ６－２０アリール基、Ｃ６－２０アリールオキシ基、Ｃ７－２０アルキルアリールオキシ基、及びＣ７－２０アリールアルキルオキシ基からなる群から選択される１つ以上の置換基によってさらに置換されている）；

ヘテロ原子含有Ｃ１－３０ヒドロカルビル基（このヘテロ原子含有ヒドロカルビル基は、非置換であるか、又はハロゲン原子、Ｃ１－２０アルキル基、Ｃ１－２０アルコキシ基、Ｃ７－２０アルキルアリール基、Ｃ７－２０アリールアルキル基、Ｃ６－２０アリール基、Ｃ６－２０アリールオキシ基、Ｃ７－２０アルキルアリールオキシ基、及びＣ７－２０アリールアルキルオキシ基からなる群から選択される１つ以上の置換基によってさらに置換さ

れている）；
　オキシ基、－ＯＲ’；
　アミド基、－ＮＲ’$_2$；
　ホスフィド基、－ＰＲ’$_2$；
　チオラート基、－ＳＲ’；
　式－Ｓｉ（Ｒ^a）$_3$のシリル基；
　式－Ｇｅ（Ｒ^a）$_3$のゲルマニル基；
からなる群から選択され；
　ここで、Ｒ^7、Ｒ^8、Ｒ^{9}及びＲ^{10}の２つの隣接する基は、任意に結合して環状ヒドロカルビル基又は環状ヘテロ原子含有ヒドロカルビル基を形成してもよく、環状ヒドロカルビル基又は環状ヘテロ原子含有ヒドロカルビル基は、非置換であるか、又はハロゲン原子、Ｃ$_{1-20}$アルキル基、Ｃ$_{1-20}$アルコキシ基、Ｃ$_{7-20}$アルキルアリール基、Ｃ$_{7-20}$アリールアルキル基、Ｃ$_{6-20}$アリール基、Ｃ$_{6-20}$アリールオキシ基、Ｃ$_{7-20}$アルキルアリールオキシ基、Ｃ$_{7-20}$アリールアルキルオキシ基、式－ＮＲ’$_2$のアミド基、式－ＰＲ’$_2$のホスフィド基、式－ＳＲ’のチオラート基、式－Ｓｉ（Ｒ^a）$_3$のシリル基、及び式－Ｇｅ（Ｒ^a）$_3$のゲルマニル基からなる群から選択される１つ以上の置換基によってさらに置換されており；
　ここで、各Ｒ’は、独立して、水素、Ｃ$_{1-20}$アルキル基、及びＣ$_{6-20}$アリール基からなる群から選択され；
　ここで、各Ｒ^{a}は、独立して、水素、Ｃ$_{1-8}$アルキル基、Ｃ$_{1-8}$アルコキシ基、Ｃ$_{6-20}$アリールオキシ基及びＣ$_{6-20}$アリール基からなる群から選択される、
上記有機金属錯体。
【０８０４】
＜実施形態７＞
　ＭがＴｉである、実施形態６に記載の有機金属錯体。
【０８０５】
＜実施形態８＞
　Ｒ^7、Ｒ^8、Ｒ^{9}及びＲ^{10}が、各々水素である、実施形態６又は７に記載の有機金属錯体。
【０８０６】
＜実施形態９＞
　Ｒ^{1}及びＲ^{2}が、各々独立して、非置換のＣ$_{1-30}$ヒドロカルビル基である、実施形態６～８のいずれか一項に記載の有機金属錯体。
【０８０７】
＜実施形態１０＞
　Ｒ^{1}及びＲ^{2}が、各々独立して、イソプロピル、シクロヘキシル及びｔｅｒｔ－ブチルからなる群から選択される、実施形態６～９のいずれか一項に記載の有機金属錯体。
【０８０８】
＜実施形態１１＞
　Ｒ^{12}及びＲ^{17}が、各々独立して、非置換のＣ$_{1-30}$ヒドロカルビル基であり、Ｒ^{11}、Ｒ^{13}、Ｒ^{14}、Ｒ^{15}、Ｒ^{16}及びＲ^{18}が、各々水素である、実施形態６～１０のいずれか一項に記載の有機金属錯体。
【０８０９】
＜実施形態１２＞
　Ｒ^{12}及びＲ^{17}が、各々ｔｅｒｔ－ブチル基である、実施形態６～１１のいずれか一項に記載の有機金属錯体。
【０８１０】
＜実施形態１３＞
　各Ｘ^{1}が、独立して、Ｃ$_{1-6}$アルキル基、Ｃ$_{7-10}$アリールアルキル基、及びハロゲンからなる群から選択される、実施形態６～１２のいずれか一項に記載の有機金属錯体。

【０８１１】
＜実施形態１４＞
各Ｘ^{1}が、独立して、メチル基及びＣｌからなる群から選択される実施形態６～１３のいずれか一項に記載の有機金属錯体。
【０８１２】
＜実施形態１５＞
実施形態５に記載の有機金属錯体であって、式ＶＩＩ：
【化１８９】



(VII)

で表され、
式中、Ｍ、Ｒ^{1}、Ｒ^{2}、Ｒ^{11}、Ｒ^{12}、Ｒ^{13}、Ｒ^{14}、Ｒ^{15}、Ｒ^{16}、Ｒ^{17}、Ｒ^{18}及びＸ^{1}は、式Ｉ及び式Ｖで定義した通りであり；
式中、Ｇは、Ｃ又はＳｉであり；
式中、Ｒ^{Q}及びＲ^{Q}＊は、各々独立して、
ハロゲン；
水素；
Ｃ$_{1-30}$ヒドロカルビル基（このヒドロカルビル基は、非置換であるか、又はハロゲン原子、Ｃ$_{1-20}$アルキル基、Ｃ$_{1-20}$アルコキシ基、Ｃ$_{7-20}$アルキルアリール基、Ｃ$_{7-20}$アリールアルキル基、Ｃ$_{6-20}$アリール基、Ｃ$_{6-20}$アリールオキシ基、Ｃ$_{7-20}$アルキルアリールオキシ基、及びＣ$_{7-20}$アリールアルキルオキシ基からなる群から選択される１つ以上の置換基によってさらに置換されている）；
ヘテロ原子含有Ｃ$_{1-30}$ヒドロカルビル基（このヘテロ原子含有ヒドロカルビル基は、非置換であるか、又はハロゲン原子、Ｃ$_{1-20}$アルキル基、Ｃ$_{1-20}$アルコキシ基、Ｃ$_{7-20}$アルキルアリール基、Ｃ$_{7-20}$アリールアルキル基、Ｃ$_{6-20}$アリール基、Ｃ$_{6-20}$アリールオキシ基、Ｃ$_{7-20}$アルキルアリールオキシ基、及びＣ$_{7-20}$アリールアルキルオキシ基からなる群から選択される１つ以上の置換基によってさらに置換されている）；
ここで、Ｒ^{Q}及びＲ^{Q}＊の基は、任意に結合して環状ヒドロカルビル基又は環状ヘテロ原子含有ヒドロカルビル基を形成してもよく、環状ヒドロカルビル基又は環状ヘテロ原子

含有ヒドロカルビル基は、非置換であるか、又はハロゲン原子、Ｃ１－２０アルキル基、Ｃ１－２０アルコキシ基、Ｃ７－２０アルキルアリール基、Ｃ７－２０アリールアルキル基、Ｃ６－２０アリール基、Ｃ６－２０アリールオキシ基、Ｃ７－２０アルキルアリールオキシ基、Ｃ７－２０アリールアルキルオキシ基、式－ＮＲ’２のアミド基、式－ＰＲ’２のホスフィド基、式－ＳＲ’のチオラート基、式－Ｓｉ（Ｒａ）３のシリル基、及び式－Ｇｅ（Ｒａ）３のゲルマニル基からなる群から選択される１つ以上の置換基によってさらに置換されており；

式中、Ｒ７、Ｒ８、Ｒ９及びＲ１０は、各々独立して、

ハロゲン；

水素；

Ｃ１－３０ヒドロカルビル基（このヒドロカルビル基は、非置換であるか、又はハロゲン原子、Ｃ１－２０アルキル基、Ｃ１－２０アルコキシ基、Ｃ７－２０アルキルアリール基、Ｃ７－２０アリールアルキル基、Ｃ６－２０アリール基、Ｃ６－２０アリールオキシ基、Ｃ７－２０アルキルアリールオキシ基、及びＣ７－２０アリールアルキルオキシ基からなる群から選択される１つ以上の置換基によってさらに置換されている）；

ヘテロ原子含有Ｃ１－３０ヒドロカルビル基（このヘテロ原子含有ヒドロカルビル基は、非置換であるか、又はハロゲン原子、Ｃ１－２０アルキル基、Ｃ１－２０アルコキシ基、Ｃ７－２０アルキルアリール基、Ｃ７－２０アリールアルキル基、Ｃ６－２０アリール基、Ｃ６－２０アリールオキシ基、Ｃ７－２０アルキルアリールオキシ基、及びＣ７－２０アリールアルキルオキシ基からなる群から選択される１つ以上の置換基によってさらに置換されている）；

オキシ基、－ＯＲ’；

アミド基、－ＮＲ’２；

ホスフィド基、－ＰＲ’２；

チオラート基、－ＳＲ’；

式－Ｓｉ（Ｒａ）３のシリル基；

式－Ｇｅ（Ｒａ）３のゲルマニル基；

からなる群から選択され；

ここで、Ｒ７、Ｒ８、Ｒ９及びＲ１０の２つの隣接する基は、任意に結合して環状ヒドロカルビル基又は環状ヘテロ原子含有ヒドロカルビル基を形成してもよく、環状ヒドロカルビル基又は環状ヘテロ原子含有ヒドロカルビル基は、非置換であるか、又はハロゲン原子、Ｃ１－２０アルキル基、Ｃ１－２０アルコキシ基、Ｃ７－２０アルキルアリール基、Ｃ７－２０アリールアルキル基、Ｃ６－２０アリール基、Ｃ６－２０アリールオキシ基、Ｃ７－２０アルキルアリールオキシ基、Ｃ７－２０アリールアルキルオキシ基、式－ＮＲ’２のアミド基、式－ＰＲ’２のホスフィド基、式－ＳＲ’のチオラート基、式－Ｓｉ（Ｒａ）３のシリル基、及び式－Ｇｅ（Ｒａ）３のゲルマニル基からなる群から選択される１つ以上の置換基によってさらに置換されており；

ここで、各Ｒ’は、独立して、水素、Ｃ１－２０アルキル基、及びＣ６－２０アリール基からなる群から選択され；

ここで、各Ｒａは、独立して、水素、Ｃ１－８アルキル基、Ｃ１－８アルコキシ基、Ｃ６－２０アリールオキシ基及びＣ６－２０アリール基からなる群から選択される、

上記有機金属錯体。

【０８１３】

＜実施形態１６＞

ＭがＴｉである、実施形態１５に記載の有機金属錯体。

【０８１４】

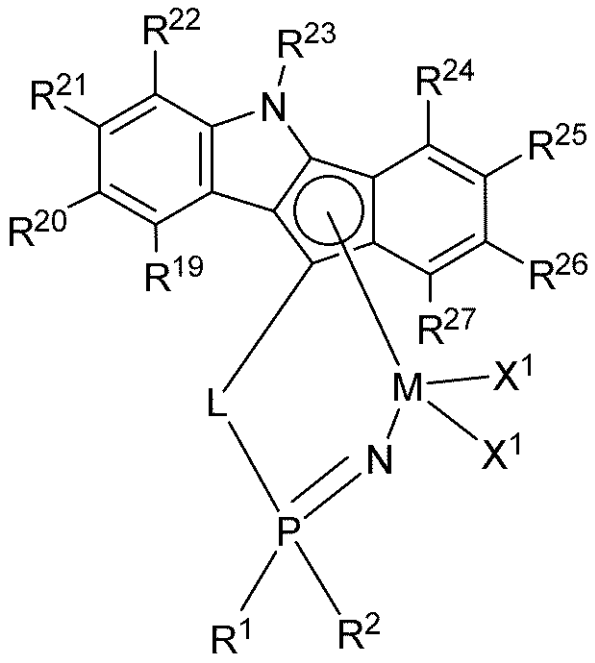
＜実施形態１７＞

Ｒ７、Ｒ８、Ｒ９及びＲ１０が、各々水素である、実施形態１５又は１６に記載の有機金属錯体。

【０８１５】

＜実施形態１８＞
　R^1及びR^2が、各々独立して、非置換のC_{1-30}ヒドロカルビル基である、実施形態１５～１７のいずれか一項に記載の有機金属錯体。
【０８１６】
＜実施形態１９＞
　R^1及びR^2が、各々独立して、イソプロピル、シクロヘキシル及びｔｅｒｔ－ブチルからなる群から選択される、実施形態１５～１８のいずれか一項に記載の有機金属錯体。
【０８１７】
＜実施形態２０＞
　R^{12}及びR^{17}が、各々独立して、非置換のC_{1-30}ヒドロカルビル基であり、R^{11}、R^{13}、R^{14}、R^{15}、R^{16}及びR^{18}が、各々水素である、実施形態１５～１９のいずれか一項に記載の有機金属錯体。
【０８１８】
＜実施形態２１＞
　R^{12}及びR^{17}が、各々ｔｅｒｔ－ブチル基である、実施形態１５～２０のいずれか一項に記載の有機金属錯体。
【０８１９】
＜実施形態２２＞
　Ｇが炭素である、実施形態１５～２１のいずれか一項に記載の有機金属錯体。
【０８２０】
＜実施形態２３＞
　R^Q及びR^{Q*}が、各々独立して、水素、C_{1-20}アルキル基及びC_{6-20}アリール基からなる群から選択される、実施形態１５～２２のいずれか一項に記載の有機金属錯体。
【０８２１】
＜実施形態２４＞
　R^Qが水素であり、R^{Q*}がC_{1-8}アルキル基である、実施形態１５～２３のいずれか一項に記載の有機金属錯体。
【０８２２】
＜実施形態２５＞
　各X^1が、独立して、C_{1-6}アルキル基、C_{7-10}アリールアルキル基、及びハロゲンからなる群から選択される、実施形態１５～２４のいずれか一項に記載の有機金属錯体。
【０８２３】
＜実施形態２６＞
　各X^1が、独立して、メチル基及びＣｌからなる群から選択される、実施形態１５～２５のいずれか一項に記載の有機金属錯体。
【０８２４】
＜実施形態２７＞
　実施形態１に記載の有機金属錯体であって、式ＶＩＩＩ：

【化１９０】



(VIII)

で表され、

式中、Ｍ、Ｒ１、Ｒ２、Ｌ及びＸ１は、式Ｉで定義した通りであり；

式中、Ｒ２３は、

水素；

Ｃ１－３０ヒドロカルビル基（このヒドロカルビル基は、非置換であるか、又はハロゲン原子、Ｃ１－２０アルキル基、Ｃ１－２０アルコキシ基、Ｃ７－２０アルキルアリール基、Ｃ７－２０アリールアルキル基、Ｃ６－２０アリール基、Ｃ６－２０アリールオキシ基、Ｃ７－２０アルキルアリールオキシ基、及びＣ７－２０アリールアルキルオキシ基からなる群から選択される１つ以上の置換基によってさらに置換されている）；

ヘテロ原子含有Ｃ１－３０ヒドロカルビル基（このヘテロ原子含有ヒドロカルビル基は、非置換であるか、又はハロゲン原子、Ｃ１－２０アルキル基、Ｃ１－２０アルコキシ基、Ｃ７－２０アルキルアリール基、Ｃ７－２０アリールアルキル基、Ｃ６－２０アリール基、Ｃ６－２０アリールオキシ基、Ｃ７－２０アルキルアリールオキシ基、及びＣ７－２０アリールアルキルオキシ基からなる群から選択される１つ以上の置換基によってさらに置換されている）；

からなる群から選択され；

式中、Ｒ１９、Ｒ２０、Ｒ２１、Ｒ２２、Ｒ２４、Ｒ２５、Ｒ２６、及びＲ２７は、各々独立して、

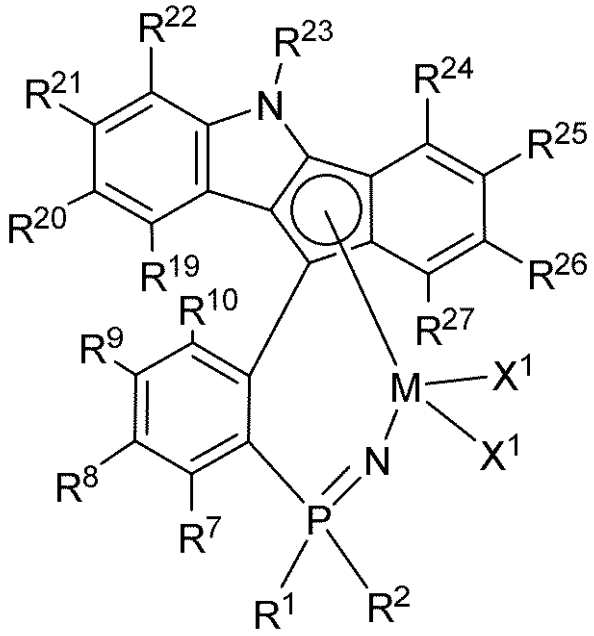
ハロゲン；

水素；

Ｃ１－３０ヒドロカルビル基（このヒドロカルビル基は、非置換であるか、又はハロゲン原子、Ｃ１－２０アルキル基、Ｃ１－２０アルコキシ基、Ｃ７－２０アルキルアリール基、Ｃ７－２０アリールアルキル基、Ｃ６－２０アリール基、Ｃ６－２０アリールオキシ基、Ｃ７－２０アルキルアリールオキシ基、及びＣ７－２０アリールアルキルオキシ基からなる群から選択される１つ以上の置換基によってさらに置換されている）；

ヘテロ原子含有Ｃ１－３０ヒドロカルビル基（このヘテロ原子含有ヒドロカルビル基は、非置換であるか、又はハロゲン原子、Ｃ１－２０アルキル基、Ｃ１－２０アルコキシ基、Ｃ７－２０アルキルアリール基、Ｃ７－２０アリールアルキル基、Ｃ６－２０アリール基、

Ｃ６－２０アリールオキシ基、Ｃ７－２０アルキルアリールオキシ基、及びＣ７－２０アリールアルキルオキシ基からなる群から選択される１つ以上の置換基によってさらに置換されている）；
　オキシ基、－ＯＲ’；
　アミド基、－ＮＲ’2；
　ホスフィド基、－ＰＲ’2；
　チオラート基、－ＳＲ’；
　式－Ｓｉ（Ｒａ）3のシリル基；
　式－Ｇｅ（Ｒａ）3のゲルマニル基；
からなる群から選択され；
　ここで、Ｒ19、Ｒ20、Ｒ21、Ｒ22、Ｒ24、Ｒ25、Ｒ26、及びＲ27の２つの隣接する基は、任意に結合して環状ヒドロカルビル基又は環状ヘテロ原子含有ヒドロカルビル基を形成してもよく、環状ヒドロカルビル基又は環状ヘテロ原子含有ヒドロカルビル基は、非置換であるか、又はハロゲン原子、Ｃ１－２０アルキル基、Ｃ１－２０アルコキシ基、Ｃ７－２０アルキルアリール基、Ｃ７－２０アリールアルキル基、Ｃ６－２０アリール基、Ｃ６－２０アリールオキシ基、Ｃ７－２０アルキルアリールオキシ基、Ｃ７－２０アリールアルキルオキシ基、式－ＮＲ’2のアミド基、式－ＰＲ’2のホスフィド基、式－ＳＲ’のチオラート基、式－Ｓｉ（Ｒａ）3のシリル基、及び式－Ｇｅ（Ｒａ）3のゲルマニル基からなる群から選択される１つ以上の置換基によってさらに置換されており；
　ここで、各Ｒ’は、独立して、水素、Ｃ1－２０アルキル基、及びＣ６－２０アリール基からなる群から選択され；
　ここで、各Ｒａは、独立して、水素、Ｃ１－８アルキル基、Ｃ１－８アルコキシ基、Ｃ６－２０アリールオキシ基及びＣ６－２０アリール基からなる群から選択される、
上記有機金属錯体。
【０８２５】
＜実施形態２８＞
　実施形態２７に記載の有機金属錯体であって、式ＩＸ：
【化１９１】



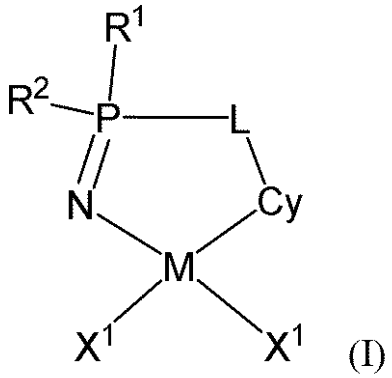
(IX)

で表され、
　式中、Ｍ、Ｒ１、Ｒ２、Ｒ１９、Ｒ２０、Ｒ２１、Ｒ２２、Ｒ２３、Ｒ２４、Ｒ２５、Ｒ２

^{6}、R^{27}及びX^{1}は、式Ｉ及び式ＶＩＩＩで定義した通りであり；
式中、R^{7}、R^{8}、R^{9}及びR^{10}は、各々独立して、
ハロゲン；
水素；
Ｃ$_{1-30}$ヒドロカルビル基（このヒドロカルビル基は、非置換であるか、又はハロゲン原子、Ｃ$_{1-20}$アルキル基、Ｃ$_{1-20}$アルコキシ基、Ｃ$_{7-20}$アルキルアリール基、Ｃ$_{7-20}$アリールアルキル基、Ｃ$_{6-20}$アリール基、Ｃ$_{6-20}$アリールオキシ基、Ｃ$_{7-20}$アルキルアリールオキシ基、及びＣ$_{7-20}$アリールアルキルオキシ基からなる群から選択される１つ以上の置換基によってさらに置換されている）；
ヘテロ原子含有Ｃ$_{1-30}$ヒドロカルビル基（このヘテロ原子含有ヒドロカルビル基は、非置換であるか、又はハロゲン原子、Ｃ$_{1-20}$アルキル基、Ｃ$_{1-20}$アルコキシ基、Ｃ$_{7-20}$アルキルアリール基、Ｃ$_{7-20}$アリールアルキル基、Ｃ$_{6-20}$アリール基、Ｃ$_{6-20}$アリールオキシ基、Ｃ$_{7-20}$アルキルアリールオキシ基、及びＣ$_{7-20}$アリールアルキルオキシ基からなる群から選択される１つ以上の置換基によってさらに置換されている）；
オキシ基、－ＯＲ’；
アミド基、－ＮＲ’$_{2}$；
ホスフィド基、－ＰＲ’$_{2}$；
チオラート基、－ＳＲ’；
式－Ｓｉ（Ｒ^{a}）$_{3}$のシリル基；
式－Ｇｅ（Ｒ^{a}）$_{3}$のゲルマニル基；
からなる群から選択され；
ここで、R^{7}、R^{8}、R^{9}及びR^{10}の２つの隣接する基は、任意に結合して環状ヒドロカルビル基又は環状ヘテロ原子含有ヒドロカルビル基を形成してもよく、環状ヒドロカルビル基又は環状ヘテロ原子含有ヒドロカルビル基は、非置換であるか、又はハロゲン原子、Ｃ$_{1-20}$アルキル基、Ｃ$_{1-20}$アルコキシ基、Ｃ$_{7-20}$アルキルアリール基、Ｃ$_{7-20}$アリールアルキル基、Ｃ$_{6-20}$アリール基、Ｃ$_{6-20}$アリールオキシ基、Ｃ$_{7-20}$アルキルアリールオキシ基、Ｃ$_{7-20}$アリールアルキルオキシ基、式－ＮＲ’$_{2}$のアミド基、式－ＰＲ’$_{2}$のホスフィド基、式－ＳＲ’のチオラート基、式－Ｓｉ（Ｒ^{a}）$_{3}$のシリル基、及び式－Ｇｅ（Ｒ^{a}）$_{3}$のゲルマニル基からなる群から選択される１つ以上の置換基によってさらに置換されており；
ここで、各Ｒ’は、独立して、水素、Ｃ$_{1-20}$アルキル基、及びＣ$_{6-20}$アリール基からなる群から選択され；
ここで、各Ｒ^{a}は、独立して、水素、Ｃ$_{1-8}$アルキル基、Ｃ$_{1-8}$アルコキシ基、Ｃ$_{6-20}$アリールオキシ基及びＣ$_{6-20}$アリール基からなる群から選択される、
上記有機金属錯体。
【０８２６】
＜実施形態２９＞
Ｍが Ｔｉである、実施形態２８に記載の有機金属錯体。
【０８２７】
＜実施形態３０＞
R^{7}、R^{8}、R^{9}及びR^{10}が、各々水素である、実施形態２８又は２９に記載の有機金属錯体。
【０８２８】
＜実施形態３１＞
R^{1}及びR^{2}が、各々独立して、非置換のＣ$_{1-30}$ヒドロカルビル基である、実施形態２８～３０のいずれか一項に記載の有機金属錯体。
【０８２９】
＜実施形態３２＞
R^{1}及びR^{2}が、各々独立して、イソプロピル、シクロヘキシル及びｔｅｒｔ－ブチル

からなる群から選択される、実施形態２８～３１のいずれか一項に記載の有機金属錯体。
【０８３０】
＜実施形態３３＞
Ｒ^{23}が、非置換のＣ$_{1-30}$ヒドロカルビル基である、実施形態２８～３２のいずれか一項に記載の有機金属錯体。
【０８３１】
＜実施形態３４＞
Ｒ^{23}が、Ｃ$_{1-8}$アルキル基である、実施形態２８～３３のいずれか一項に記載の有機金属錯体。
【０８３２】
＜実施形態３５＞
Ｒ^{20}が、非置換のＣ$_{1-30}$ヒドロカルビル基である、実施形態２８～３４のいずれか一項に記載の有機金属錯体。
【０８３３】
＜実施形態３６＞
Ｒ^{20}が、Ｃ$_{1-8}$アルキル基である、実施形態２８～３５のいずれか一項に記載の有機金属錯体。
【０８３４】
＜実施形態３７＞
Ｒ^{20}が、非置換のＣ$_{1-30}$ヒドロカルビル基であり、Ｒ^{19}、Ｒ^{21}、Ｒ^{22}、Ｒ^{24}、Ｒ^{25}、Ｒ^{26}、及びＲ^{27}が、各々水素である、実施形態２８～３４のいずれか一項に記載の有機金属錯体。
【０８３５】
＜実施形態３８＞
Ｒ^{20}が、Ｃ$_{1-8}$アルキル基である、実施形態３７に記載の有機金属錯体。
【０８３６】
＜実施形態３９＞
各Ｘ^{1}が、独立して、Ｃ$_{1-6}$アルキル基、Ｃ$_{7-10}$アリールアルキル基、及びハロゲンからなる群から選択される、実施形態２８～３８のいずれか一項に記載の有機金属錯体。
【０８３７】
＜実施形態４０＞
各Ｘ^{1}が、独立して、メチル基及びＣｌからなる群から選択される、実施形態２８～３９のいずれか一項に記載の有機金属錯体。
【０８３８】
＜実施形態４１＞
オレフィン重合触媒系であって、
ｉ）有機金属錯体であって、式Ｉ：

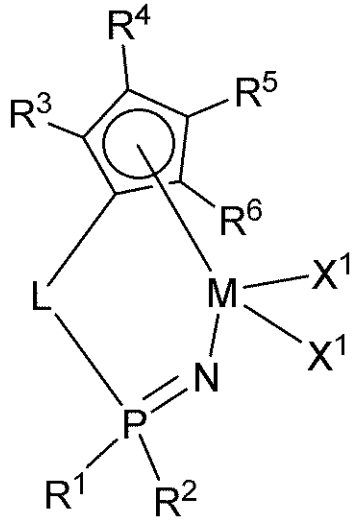
【化１９２】



(I)

で表され、
式中、
Ｍは、Ｔｉ、Ｚｒ又はＨｆであり；
R^1及びR^2は、各々独立して、水素及びR^Xからなる群から選択されるか；又はR^1及びR^2は、それらが結合しているＰ原子と一緒になって、非置換であるか、又はハロゲン原子、C_{1-20}アルキル基、C_{1-20}アルコキシ基、C_{7-20}アルキルアリール基、C_{7-20}アリールアルキル基、C_{6-20}アリール基、C_{6-20}アリールオキシ基、C_{7-20}アルキルアリールオキシ基、及びC_{7-20}アリールアルキルオキシ基からなる群から選択される１つ以上の置換基によってさらに置換されている３－１０員複素環式基を形成し；
各R^Xは、独立して、ハロゲン原子；C_{1-30}ヒドロカルビル基（このヒドロカルビル基は、非置換であるか、又は１つ以上のハロゲン原子、C_{1-20}アルキル基、C_{1-20}アルコキシ基、C_{7-20}アルキルアリール基、C_{7-20}アリールアルキル基、C_{6-20}アリール基、C_{6-20}アリールオキシ基、C_{7-20}アルキルアリールオキシ基、及び／又はC_{7-20}アリールアルキルオキシ基によってさらに置換されている）；式－NR'_2のアミド基；式－$Si(R^a)_3$のシリル基；式－$Ge(R^a)_3$のゲルマニル基；及び式Ｎ＝Ｐ（R^b）（R^c）（R^d）のホスフィンイミン基からなる群から選択され；ここで、各Ｒ’は、独立して、水素、C_{1-20}アルキル基、及びC_{6-20}アリール基からなる群から選択され；ここで、各R^aは、独立して、水素、C_{1-8}アルキル基、C_{1-8}アルコキシ基、C_{6-20}アリールオキシ基及びC_{6-20}アリール基からなる群から選択され、R^b、R^c、R^dは、各々独立して、C_{1-20}アルキル基であり；
各X^1は、活性化可能な配位子であり；
Ｃｙは、Ｌに共有結合し、η－結合を介してＭに配位するシクロペンタジエニル型配位子であり；
Ｌは、ＰとＣｙを連結する原子の連続鎖を含む架橋基であり、連続鎖は２個又は３個の原子を含む、有機金属錯体と、
ｉｉ）触媒活性剤と、
を含む、オレフィン重合触媒系。
【０８３９】
＜実施形態４２＞
実施形態４１に記載のオレフィン重合触媒系であって、前記有機金属錯体が、式ＩＩ：

【化１９３】



(II)

で表され、

式中、Ｍ、Ｒ^{1}、Ｒ^{2}、Ｌ及びＸ^{1}は、式Ｉで定義した通りであり；

式中、Ｒ^{3}、Ｒ^{4}、Ｒ^{5}及びＲ^{6}は、各々独立して、

ハロゲン；

水素；

Ｃ$_{1-30}$ヒドロカルビル基（このヒドロカルビル基は、非置換であるか、又はハロゲン原子、Ｃ$_{1-20}$アルキル基、Ｃ$_{1-20}$アルコキシ基、Ｃ$_{7-20}$アルキルアリール基、Ｃ$_{7-20}$アリールアルキル基、Ｃ$_{6-20}$アリール基、Ｃ$_{6-20}$アリールオキシ基、Ｃ$_{7-20}$アルキルアリールオキシ基、及びＣ$_{7-20}$アリールアルキルオキシ基からなる群から選択される１つ以上の置換基によってさらに置換されている）；

ヘテロ原子含有Ｃ$_{1-30}$ヒドロカルビル基（このヘテロ原子含有ヒドロカルビル基は、非置換であるか、又はハロゲン原子、Ｃ$_{1-20}$アルキル基、Ｃ$_{1-20}$アルコキシ基、Ｃ$_{7-20}$アルキルアリール基、Ｃ$_{7-20}$アリールアルキル基、Ｃ$_{6-20}$アリール基、Ｃ$_{6-20}$アリールオキシ基、Ｃ$_{7-20}$アルキルアリールオキシ基、及びＣ$_{7-20}$アリールアルキルオキシ基からなる群から選択される１つ以上の置換基によってさらに置換されている）；

オキシ基、－ＯＲ’；

アミド基、－ＮＲ’$_{2}$；

ホスフィド基、－ＰＲ’$_{2}$；

チオラート基、－ＳＲ’；

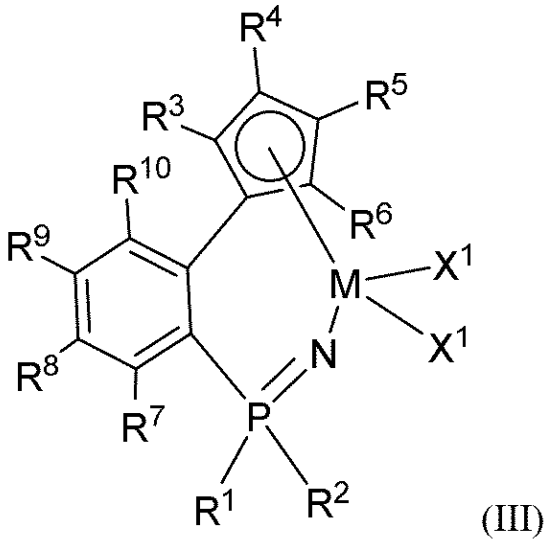
式－Ｓｉ（Ｒ^{a}）$_{3}$のシリル基；

式－Ｇｅ（Ｒ^{a}）$_{3}$のゲルマニル基；

からなる群から選択され；

ここで、Ｒ^{3}、Ｒ^{4}、Ｒ^{5}及びＲ^{6}の２つの隣接する基は、任意に結合して環状ヒドロカルビル基又は環状ヘテロ原子含有ヒドロカルビル基を形成してもよく、環状ヒドロカルビル基又は環状ヘテロ原子含有ヒドロカルビル基は、非置換であるか、又はハロゲン原子、Ｃ$_{1-20}$アルキル基、Ｃ$_{1-20}$アルコキシ基、Ｃ$_{7-20}$アルキルアリール基、Ｃ$_{7-20}$アリールアルキル基、Ｃ$_{6-20}$アリール基、Ｃ$_{6-20}$アリールオキシ基、Ｃ$_{7-20}$アルキルアリールオキシ基、Ｃ$_{7-20}$アリールアルキルオキシ基、式－ＮＲ’$_{2}$のアミド基、式－ＰＲ’$_{2}$のホスフィド基、式－ＳＲ’のチオラート基、式－Ｓｉ（Ｒ^{a}）$_{3}$のシリル基、及び式－Ｇｅ（Ｒ^{a}）$_{3}$のゲルマニル基からなる群から選択される１つ以上の置換基によってさらに置換されており；

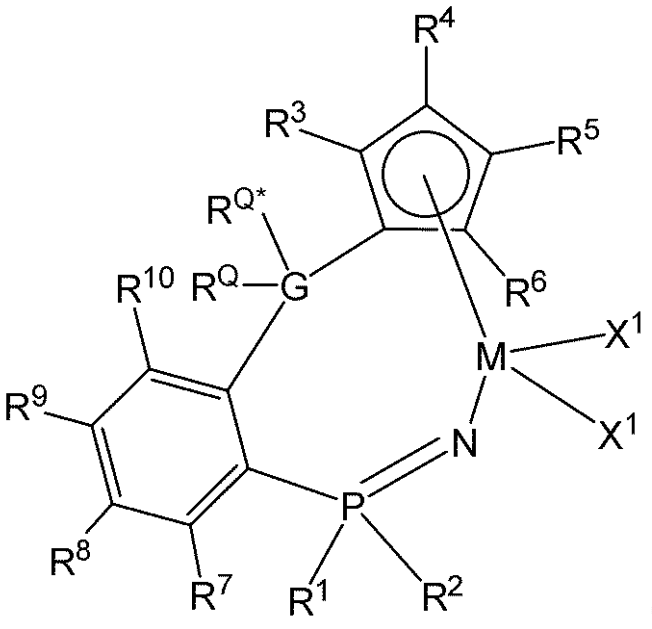
ここで、各Ｒ’は、独立して、水素、Ｃ1－２０アルキル基、及びＣ６－２０アリール基からなる群から選択され；
ここで、各Ｒａは、独立して、水素、Ｃ１－８アルキル基、Ｃ１－８アルコキシ基、Ｃ６－２０アリールオキシ基及びＣ６－２０アリール基からなる群から選択される、
上記オレフィン重合触媒系。
【０８４０】
＜実施形態４３＞
実施形態４２に記載のオレフィン重合触媒系であって、前記有機金属錯体が、式ＩＩＩ：
【化１９４】



(III)

で表され、
式中、Ｍ、Ｒ１、Ｒ２、Ｒ３、Ｒ４、Ｒ５、Ｒ６及びＸ１は、式Ｉ及び式ＩＩで定義した通りであり；
式中、Ｒ７、Ｒ８、Ｒ９及びＲ１０は、各々独立して、
ハロゲン；
水素；
Ｃ１－３０ヒドロカルビル基（このヒドロカルビル基は、非置換であるか、又はハロゲン原子、Ｃ１－２０アルキル基、Ｃ１－２０アルコキシ基、Ｃ７－２０アルキルアリール基、Ｃ７－２０アリールアルキル基、Ｃ６－２０アリール基、Ｃ６－２０アリールオキシ基、Ｃ７－２０アルキルアリールオキシ基、及びＣ７－２０アリールアルキルオキシ基からなる群から選択される１つ以上の置換基によってさらに置換されている）；
ヘテロ原子含有Ｃ１－３０ヒドロカルビル基（このヘテロ原子含有ヒドロカルビル基は、非置換であるか、又はハロゲン原子、Ｃ１－２０アルキル基、Ｃ１－２０アルコキシ基、Ｃ７－２０アルキルアリール基、Ｃ７－２０アリールアルキル基、Ｃ６－２０アリール基、Ｃ６－２０アリールオキシ基、Ｃ７－２０アルキルアリールオキシ基、及びＣ７－２０アリールアルキルオキシ基からなる群から選択される１つ以上の置換基によってさらに置換されている）；
オキシ基、－ＯＲ’；
アミド基、－ＮＲ’2；
ホスフィド基、－ＰＲ’2；
チオラート基、－ＳＲ’；
式－Ｓｉ（Ｒａ）3のシリル基；
式－Ｇｅ（Ｒａ）3のゲルマニル基；

からなる群から選択され；
ここで、R^7、R^8、R^9及びR^{10}の２つの隣接する基は、任意に結合して環状ヒドロカルビル基又は環状ヘテロ原子含有ヒドロカルビル基を形成してもよく、環状ヒドロカルビル基又は環状ヘテロ原子含有ヒドロカルビル基は、非置換であるか、又はハロゲン原子、C_{1-20}アルキル基、C_{1-20}アルコキシ基、C_{7-20}アルキルアリール基、C_{7-20}アリールアルキル基、C_{6-20}アリール基、C_{6-20}アリールオキシ基、C_{7-20}アルキルアリールオキシ基、C_{7-20}アリールアルキルオキシ基、式－NR'_2のアミド基、式－PR'_2のホスフィド基、式－SR'のチオラート基、式－$Si(R^a)_3$のシリル基、及び式－$Ge(R^a)_3$のゲルマニル基からなる群から選択される１つ以上の置換基によってさらに置換されており；
ここで、各R'は、独立して、水素、C_{1-20}アルキル基、及びC_{6-20}アリール基からなる群から選択され；
ここで、各R^aは、独立して、水素、C_{1-8}アルキル基、C_{1-8}アルコキシ基、C_{6-20}アリールオキシ基及びC_{6-20}アリール基からなる群から選択される、
上記オレフィン重合触媒系。
【０８４１】
＜実施形態４４＞
実施形態４２に記載のオレフィン重合触媒系であって、前記有機金属錯体が、式ＩＶ：
【化１９５】



(IV)

で表され、
式中、M、R^1、R^2、R^3、R^4、R^5、R^6及びX^1は、式Ｉ及び式ＩＩで定義した通りであり；
式中、Gは、C又はSiであり；
式中、R^Q及びR^{Q*}は、各々独立して、
ハロゲン；
水素；
C_{1-30}ヒドロカルビル基（このヒドロカルビル基は、非置換であるか、又はハロゲン原子、C_{1-20}アルキル基、C_{1-20}アルコキシ基、C_{7-20}アルキルアリール基、C_{7-20}アリールアルキル基、C_{6-20}アリール基、C_{6-20}アリールオキシ基、C_{7-20}アルキルアリールオキシ基、及びC_{7-20}アリールアルキルオキシ基からなる群から選択される１つ以上の置換基によってさらに置換されている）；

ヘテロ原子含有C_{1-30}ヒドロカルビル基（このヘテロ原子含有ヒドロカルビル基は、非置換であるか、又はハロゲン原子、C_{1-20}アルキル基、C_{1-20}アルコキシ基、C_{7-20}アルキルアリール基、C_{7-20}アリールアルキル基、C_{6-20}アリール基、C_{6-20}アリールオキシ基、C_{7-20}アルキルアリールオキシ基、及びC_{7-20}アリールアルキルオキシ基からなる群から選択される１つ以上の置換基によってさらに置換されている）；

ここで、R^{Q}及びR^{Q*}の基は、任意に結合して環状ヒドロカルビル基又は環状ヘテロ原子含有ヒドロカルビル基を形成してもよく、環状ヒドロカルビル基又は環状ヘテロ原子含有ヒドロカルビル基は、非置換であるか、又はハロゲン原子、C_{1-20}アルキル基、C_{1-20}アルコキシ基、C_{7-20}アルキルアリール基、C_{7-20}アリールアルキル基、C_{6-20}アリール基、C_{6-20}アリールオキシ基、C_{7-20}アルキルアリールオキシ基、C_{7-20}アリールアルキルオキシ基、式－NR'_2のアミド基、式－PR'_2のホスフィド基、式－SR'のチオラート基、式－$Si(R^a)_3$のシリル基、及び式－$Ge(R^a)_3$のゲルマニル基からなる群から選択される１つ以上の置換基によってさらに置換されており；

式中、R^7、R^8、R^9及びR^{10}は、各々独立して、

ハロゲン；

水素；

C_{1-30}ヒドロカルビル基（このヒドロカルビル基は、非置換であるか、又はハロゲン原子、C_{1-20}アルキル基、C_{1-20}アルコキシ基、C_{7-20}アルキルアリール基、C_{7-20}アリールアルキル基、C_{6-20}アリール基、C_{6-20}アリールオキシ基、C_{7-20}アルキルアリールオキシ基、及びC_{7-20}アリールアルキルオキシ基からなる群から選択される１つ以上の置換基によってさらに置換されている）；

ヘテロ原子含有C_{1-30}ヒドロカルビル基（このヘテロ原子含有ヒドロカルビル基は、非置換であるか、又はハロゲン原子、C_{1-20}アルキル基、C_{1-20}アルコキシ基、C_{7-20}アルキルアリール基、C_{7-20}アリールアルキル基、C_{6-20}アリール基、C_{6-20}アリールオキシ基、C_{7-20}アルキルアリールオキシ基、及びC_{7-20}アリールアルキルオキシ基からなる群から選択される１つ以上の置換基によってさらに置換されている）；

オキシ基、－OR'；

アミド基、－NR'_2；

ホスフィド基、－PR'_2；

チオラート基、－SR'；

式－$Si(R^a)_3$のシリル基；

式－$Ge(R^a)_3$のゲルマニル基；

からなる群から選択され；

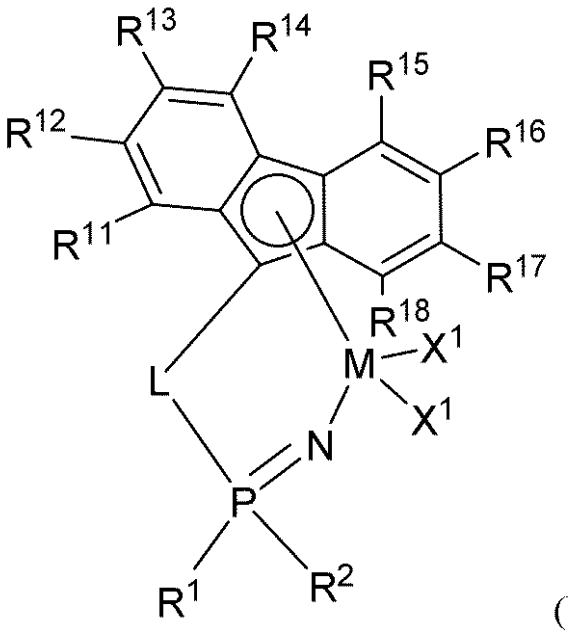
ここで、R^7、R^8、R^9及びR^{10}の２つの隣接する基は、任意に結合して環状ヒドロカルビル基又は環状ヘテロ原子含有ヒドロカルビル基を形成してもよく、環状ヒドロカルビル基又は環状ヘテロ原子含有ヒドロカルビル基は、非置換であるか、又はハロゲン原子、C_{1-20}アルキル基、C_{1-20}アルコキシ基、C_{7-20}アルキルアリール基、C_{7-20}アリールアルキル基、C_{6-20}アリール基、C_{6-20}アリールオキシ基、C_{7-20}アルキルアリールオキシ基、C_{7-20}アリールアルキルオキシ基、式－NR'_2のアミド基、式－PR'_2のホスフィド基、式－SR'のチオラート基、式－$Si(R^a)_3$のシリル基、及び式－$Ge(R^a)_3$のゲルマニル基からなる群から選択される１つ以上の置換基によってさらに置換されており；

ここで、各R'は、独立して、水素、C_{1-20}アルキル基、及びC_{6-20}アリール基からなる群から選択され；

ここで、各R^aは、独立して、水素、C_{1-8}アルキル基、C_{1-8}アルコキシ基、C_{6-20}アリールオキシ基及びC_{6-20}アリール基からなる群から選択される、

上記オレフィン重合触媒系。

【０８４２】
＜実施形態４５＞
実施形態４１に記載のオレフィン重合触媒系であって、前記有機金属錯体が、式Ｖ：
【化１９６】



(V)

で表され、
式中、Ｍ、Ｒ１、Ｒ２、Ｌ及びＸ１は、式Ｉで定義した通りであり；
式中、Ｒ１１、Ｒ１２、Ｒ１３、Ｒ１４、Ｒ１５、Ｒ１６、Ｒ１７、Ｒ１８は、各々独立して、
ハロゲン；
水素；
Ｃ１－３０ヒドロカルビル基（このヒドロカルビル基は、非置換であるか、又はハロゲン原子、Ｃ１－２０アルキル基、Ｃ１－２０アルコキシ基、Ｃ７－２０アルキルアリール基、Ｃ７－２０アリールアルキル基、Ｃ６－２０アリール基、Ｃ６－２０アリールオキシ基、Ｃ７－２０アルキルアリールオキシ基、及びＣ７－２０アリールアルキルオキシ基からなる群から選択される１つ以上の置換基によってさらに置換されている）；
ヘテロ原子含有Ｃ１－３０ヒドロカルビル基（このヘテロ原子含有ヒドロカルビル基は、非置換であるか、又はハロゲン原子、Ｃ１－２０アルキル基、Ｃ１－２０アルコキシ基、Ｃ７－２０アルキルアリール基、Ｃ７－２０アリールアルキル基、Ｃ６－２０アリール基、Ｃ６－２０アリールオキシ基、Ｃ７－２０アルキルアリールオキシ基、及びＣ７－２０アリールアルキルオキシ基からなる群から選択される１つ以上の置換基によってさらに置換されている）；
オキシ基、－ＯＲ’；
アミド基、－ＮＲ’$_2$；
ホスフィド基、－ＰＲ’$_2$；
チオラート基、－ＳＲ’；
式－Ｓｉ（Ｒ^a）$_3$のシリル基；
式－Ｇｅ（Ｒ^a）$_3$のゲルマニル基；
からなる群から選択され；
ここで、Ｒ１１、Ｒ１２、Ｒ１３、Ｒ１４、Ｒ１５、Ｒ１６、Ｒ１７、Ｒ１８の２つの隣接する基は、任意に結合して環状ヒドロカルビル基又は環状ヘテロ原子含有ヒドロカルビル

基を形成してもよく、環状ヒドロカルビル基又は環状ヘテロ原子含有ヒドロカルビル基は、非置換であるか、又はハロゲン原子、Ｃ１－２０アルキル基、Ｃ１－２０アルコキシ基、Ｃ７－２０アルキルアリール基、Ｃ７－２０アリールアルキル基、Ｃ６－２０アリール基、Ｃ６－２０アリールオキシ基、Ｃ７－２０アルキルアリールオキシ基、Ｃ７－２０アリールアルキルオキシ基、式－ＮＲ’$_2$のアミド基、式－ＰＲ’$_2$のホスフィド基、式－ＳＲ’のチオラート基、式－Ｓｉ（Ｒ^a）$_3$のシリル基、及び式－Ｇｅ（Ｒ^a）$_3$のゲルマニル基からなる群から選択される１つ以上の置換基によってさらに置換されており；

ここで、各Ｒ’は、独立して、水素、Ｃ$_1$－２０アルキル基、及びＣ６－２０アリール基からなる群から選択され；

ここで、各Ｒ^{a}は、独立して、水素、Ｃ１－８アルキル基、Ｃ１－８アルコキシ基、Ｃ６－２０アリールオキシ基及びＣ６－２０アリール基からなる群から選択される、

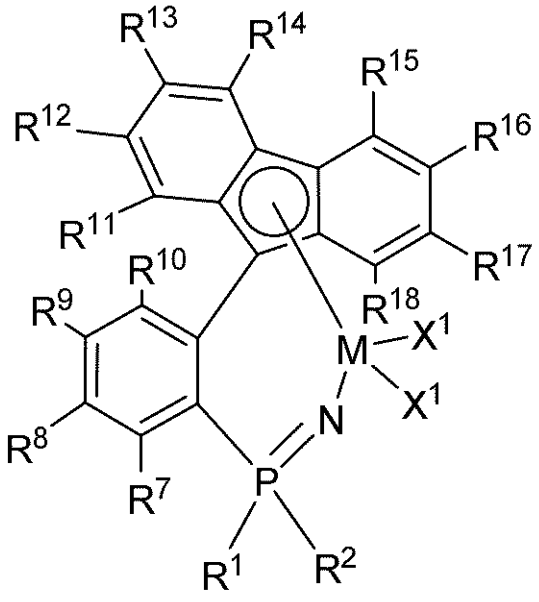
上記オレフィン重合触媒系。

【０８４３】

＜実施形態４６＞

実施形態４５に記載のオレフィン重合触媒系であって、前記有機金属錯体が、式ＶＩ：

【化１９７】



(VI)

で表され、

式中、Ｍ、Ｒ^1、Ｒ^2、Ｒ^{11}、Ｒ^{12}、Ｒ^{13}、Ｒ^{14}、Ｒ^{15}、Ｒ^{16}、Ｒ^{17}、Ｒ^{18}及びＸ^{1}は、式Ｉ及び式Ｖで定義した通りであり；

式中、Ｒ^7、Ｒ^8、Ｒ^{9}及びＲ^{10}は、各々独立して、

ハロゲン；

水素；

Ｃ１－３０ヒドロカルビル基（このヒドロカルビル基は、非置換であるか、又はハロゲン原子、Ｃ１－２０アルキル基、Ｃ１－２０アルコキシ基、Ｃ７－２０アルキルアリール基、Ｃ７－２０アリールアルキル基、Ｃ６－２０アリール基、Ｃ６－２０アリールオキシ基、Ｃ７－２０アルキルアリールオキシ基、及びＣ７－２０アリールアルキルオキシ基からなる群から選択される１つ以上の置換基によってさらに置換されている）；

ヘテロ原子含有Ｃ１－３０ヒドロカルビル基（このヘテロ原子含有ヒドロカルビル基は、非置換であるか、又はハロゲン原子、Ｃ１－２０アルキル基、Ｃ１－２０アルコキシ基、Ｃ７－２０アルキルアリール基、Ｃ７－２０アリールアルキル基、Ｃ６－２０アリール基、Ｃ６－２０アリールオキシ基、Ｃ７－２０アルキルアリールオキシ基、及びＣ７－２０アリ

ールアルキルオキシ基からなる群から選択される１つ以上の置換基によってさらに置換されている）；
　オキシ基、－ＯＲ’；
　アミド基、－ＮＲ’$_2$；
　ホスフィド基、－ＰＲ’$_2$；
　チオラート基、－ＳＲ’；
　式－Ｓｉ（Ｒ^a）$_3$のシリル基；
　式－Ｇｅ（Ｒ^a）$_3$のゲルマニル基；
からなる群から選択され；
　ここで、Ｒ^7、Ｒ^8、Ｒ^{9}及びＲ^{10}の２つの隣接する基は、任意に結合して環状ヒドロカルビル基又は環状ヘテロ原子含有ヒドロカルビル基を形成してもよく、環状ヒドロカルビル基又は環状ヘテロ原子含有ヒドロカルビル基は、非置換であるか、又はハロゲン原子、Ｃ$_{1-20}$アルキル基、Ｃ$_{1-20}$アルコキシ基、Ｃ$_{7-20}$アルキルアリール基、Ｃ$_{7-20}$アリールアルキル基、Ｃ$_{6-20}$アリール基、Ｃ$_{6-20}$アリールオキシ基、Ｃ$_{7-20}$アルキルアリールオキシ基、Ｃ$_{7-20}$アリールアルキルオキシ基、式－ＮＲ’$_2$のアミド基、式－ＰＲ’$_2$のホスフィド基、式－ＳＲ’のチオラート基、式－Ｓｉ（Ｒ^a）$_3$のシリル基、及び式－Ｇｅ（Ｒ^a）$_3$のゲルマニル基からなる群から選択される１つ以上の置換基によってさらに置換されており；
　ここで、各Ｒ’は、独立して、水素、Ｃ$_{1-20}$アルキル基、及びＣ$_{6-20}$アリール基からなる群から選択され；
　ここで、各Ｒ^{a}は、独立して、水素、Ｃ$_{1-8}$アルキル基、Ｃ$_{1-8}$アルコキシ基、Ｃ$_{6-20}$アリールオキシ基及びＣ$_{6-20}$アリール基からなる群から選択される、
上記オレフィン重合触媒系。
【０８４４】
＜実施形態４７＞
　ＭがＴｉである、実施形態４６に記載のオレフィン重合触媒系。
【０８４５】
＜実施形態４８＞
　Ｒ^7、Ｒ^8、Ｒ^{9}及びＲ^{10}が、各々水素である、実施形態４６又は４７に記載のオレフィン重合触媒系。
【０８４６】
＜実施形態４９＞
　Ｒ^{1}及びＲ^{2}が、各々独立して、非置換のＣ$_{1-30}$ヒドロカルビル基である、実施形態４６～４８のいずれか一項に記載のオレフィン重合触媒系。
【０８４７】
＜実施形態５０＞
　Ｒ^{1}及びＲ^{2}が、各々独立して、イソプロピル、シクロヘキシル及びｔｅｒｔ－ブチルからなる群から選択される、実施形態４６～４９のいずれか一項に記載のオレフィン重合触媒系。
【０８４８】
＜実施形態５１＞
　Ｒ^{12}及びＲ^{17}が、各々独立して、非置換のＣ$_{1-30}$ヒドロカルビル基であり、Ｒ^{11}、Ｒ^{13}、Ｒ^{14}、Ｒ^{15}、Ｒ^{16}及びＲ^{18}が、各々水素である、実施形態４６～５０のいずれか一項に記載のオレフィン重合触媒系。
【０８４９】
＜実施形態５２＞
　Ｒ^{12}及びＲ^{17}が、各々ｔｅｒｔ－ブチル基である、実施形態４６～５１のいずれか一項に記載のオレフィン重合触媒系。
【０８５０】
＜実施形態５３＞

各X^1が、独立して、C_{1-6}アルキル基、C_{7-10}アリールアルキル基、及びハロゲンからなる群から選択される、実施形態４６～５２のいずれか一項に記載のオレフィン重合触媒系。

【０８５１】

＜実施形態５４＞

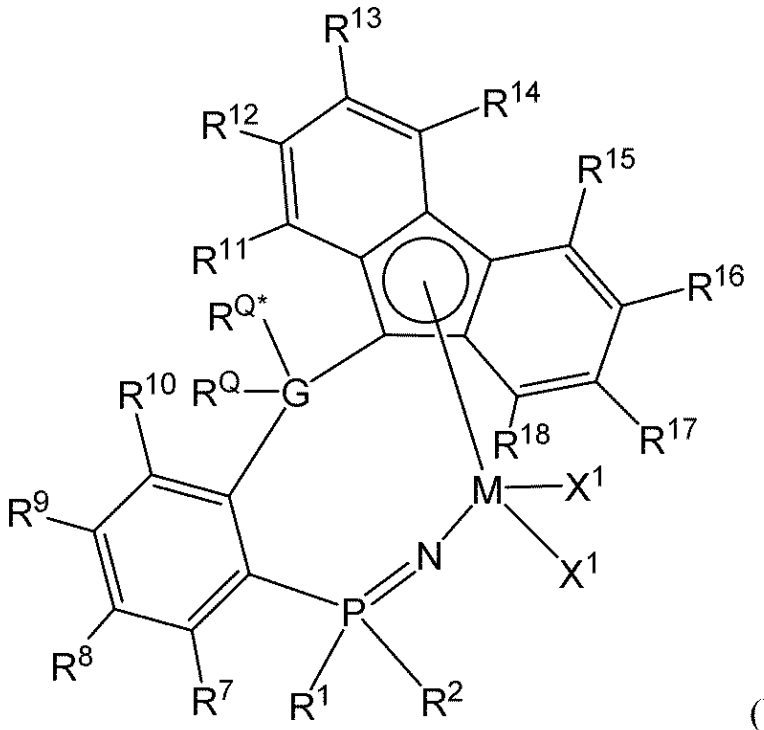
各X^1が、独立して、メチル基及びＣｌからなる群から選択される実施形態４６～５３のいずれか一項に記載のオレフィン重合触媒系。

【０８５２】

＜実施形態５５＞

実施形態４５に記載のオレフィン重合触媒系であって、前記有機金属錯体が、式ＶＩＩ：

【化１９８】



(VII)

で表され、

式中、Ｍ、R^1、R^2、R^{11}、R^{12}、R^{13}、R^{14}、R^{15}、R^{16}、R^{17}、R^{18}及びX^1は、式Ｉ及び式Ｖで定義した通りであり；

式中、Ｇは、Ｃ又はＳｉであり；

式中、R^Q及びR^{Q*}は、各々独立して、

ハロゲン；

水素；

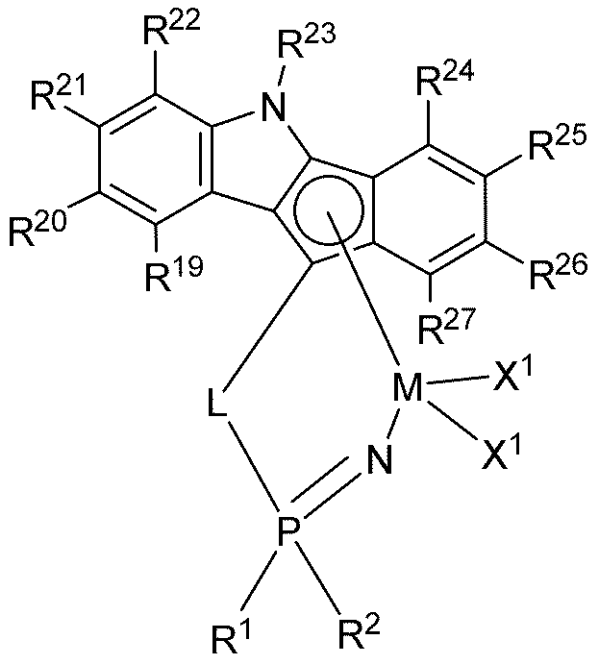
C_{1-30}ヒドロカルビル基（このヒドロカルビル基は、非置換であるか、又はハロゲン原子、C_{1-20}アルキル基、C_{1-20}アルコキシ基、C_{7-20}アルキルアリール基、C_{7-20}アリールアルキル基、C_{6-20}アリール基、C_{6-20}アリールオキシ基、C_{7-20}アルキルアリールオキシ基、及びC_{7-20}アリールアルキルオキシ基からなる群から選択される１つ以上の置換基によってさらに置換されている）；

ヘテロ原子含有C_{1-30}ヒドロカルビル基（このヘテロ原子含有ヒドロカルビル基は、非置換であるか、又はハロゲン原子、C_{1-20}アルキル基、C_{1-20}アルコキシ基、C_{7-20}アルキルアリール基、C_{7-20}アリールアルキル基、C_{6-20}アリール基、C_{6-20}アリールオキシ基、C_{7-20}アルキルアリールオキシ基、及びC_{7-20}アリ

ールアルキルオキシ基からなる群から選択される１つ以上の置換基によってさらに置換されている）；
ここで、R^{Q}及びR^{Q*}の基は、任意に結合して環状ヒドロカルビル基又は環状ヘテロ原子含有ヒドロカルビル基を形成してもよく、環状ヒドロカルビル基又は環状ヘテロ原子含有ヒドロカルビル基は、非置換であるか、又はハロゲン原子、C_{1-20}アルキル基、C_{1-20}アルコキシ基、C_{7-20}アルキルアリール基、C_{7-20}アリールアルキル基、C_{6-20}アリール基、C_{6-20}アリールオキシ基、C_{7-20}アルキルアリールオキシ基、C_{7-20}アリールアルキルオキシ基、式－ＮＲ’$_2$のアミド基、式－ＰＲ’$_2$のホスフィド基、式－ＳＲ’のチオラート基、式－Ｓｉ（R^a）$_3$のシリル基、及び式－Ｇｅ（R^a）$_3$のゲルマニル基からなる群から選択される１つ以上の置換基によってさらに置換されており；
式中、R^7、R^8、R^9及びR^{10}は、各々独立して、
ハロゲン；
水素；
C_{1-30}ヒドロカルビル基（このヒドロカルビル基は、非置換であるか、又はハロゲン原子、C_{1-20}アルキル基、C_{1-20}アルコキシ基、C_{7-20}アルキルアリール基、C_{7-20}アリールアルキル基、C_{6-20}アリール基、C_{6-20}アリールオキシ基、C_{7-20}アルキルアリールオキシ基、及びC_{7-20}アリールアルキルオキシ基からなる群から選択される１つ以上の置換基によってさらに置換されている）；
ヘテロ原子含有C_{1-30}ヒドロカルビル基（このヘテロ原子含有ヒドロカルビル基は、非置換であるか、又はハロゲン原子、C_{1-20}アルキル基、C_{1-20}アルコキシ基、C_{7-20}アルキルアリール基、C_{7-20}アリールアルキル基、C_{6-20}アリール基、C_{6-20}アリールオキシ基、C_{7-20}アルキルアリールオキシ基、及びC_{7-20}アリールアルキルオキシ基からなる群から選択される１つ以上の置換基によってさらに置換されている）；
オキシ基、－ＯＲ’；
アミド基、－ＮＲ’$_2$；
ホスフィド基、－ＰＲ’$_2$；
チオラート基、－ＳＲ’；
式－Ｓｉ（R^a）$_3$のシリル基；
式－Ｇｅ（R^a）$_3$のゲルマニル基；
からなる群から選択され；
ここで、R^7、R^8、R^9及びR^{10}の２つの隣接する基は、任意に結合して環状ヒドロカルビル基又は環状ヘテロ原子含有ヒドロカルビル基を形成してもよく、環状ヒドロカルビル基又は環状ヘテロ原子含有ヒドロカルビル基は、非置換であるか、又はハロゲン原子、C_{1-20}アルキル基、C_{1-20}アルコキシ基、C_{7-20}アルキルアリール基、C_{7-20}アリールアルキル基、C_{6-20}アリール基、C_{6-20}アリールオキシ基、C_{7-20}アルキルアリールオキシ基、C_{7-20}アリールアルキルオキシ基、式－ＮＲ’$_2$のアミド基、式－ＰＲ’$_2$のホスフィド基、式－ＳＲ’のチオラート基、式－Ｓｉ（R^a）$_3$のシリル基、及び式－Ｇｅ（R^a）$_3$のゲルマニル基からなる群から選択される１つ以上の置換基によってさらに置換されており；
ここで、各Ｒ’は、独立して、水素、C_{1-20}アルキル基、及びC_{6-20}アリール基からなる群から選択され；
ここで、各R^aは、独立して、水素、C_{1-8}アルキル基、C_{1-8}アルコキシ基、C_{6-20}アリールオキシ基及びC_{6-20}アリール基からなる群から選択される、
上記オレフィン重合触媒系。
【０８５３】
＜実施形態５６＞
Ｍが Ｔｉである、実施形態５５に記載のオレフィン重合触媒系。
【０８５４】

＜実施形態５７＞
Ｒ^{7}、Ｒ^{8}、Ｒ^{9}及びＲ^{10}が、各々水素である、実施形態５５又は５６に記載のオレフィン重合触媒系。
【０８５５】
＜実施形態５８＞
Ｒ^{1}及びＲ^{2}が、各々独立して、非置換のＣ$_{1-30}$ヒドロカルビル基である、実施形態５５～５７のいずれか一項に記載のオレフィン重合触媒系。
【０８５６】
＜実施形態５９＞
Ｒ^{1}及びＲ^{2}が、各々独立して、イソプロピル、シクロヘキシル及びｔｅｒｔ－ブチルからなる群から選択される、実施形態５５～５８のいずれか一項に記載のオレフィン重合触媒系。
【０８５７】
＜実施形態６０＞
Ｒ^{12}及びＲ^{17}が、各々独立して、非置換のＣ$_{1-30}$ヒドロカルビル基であり、Ｒ^{11}、Ｒ^{13}、Ｒ^{14}、Ｒ^{15}、Ｒ^{16}及びＲ^{18}が、各々水素である、実施形態５５～５９のいずれか一項に記載のオレフィン重合触媒系。
【０８５８】
＜実施形態６１＞
Ｒ^{12}及びＲ^{17}が、各々ｔｅｒｔ－ブチル基である、実施形態５５～６０のいずれか一項に記載のオレフィン重合触媒系。
【０８５９】
＜実施形態６２＞
Ｇが炭素である、実施形態５５～６１のいずれか一項に記載のオレフィン重合触媒系。
【０８６０】
＜実施形態６３＞
Ｒ^{Q}及びＲ^{Q}＊が、各々独立して、水素、Ｃ$_{1-20}$アルキル基及びＣ$_{6-20}$アリール基からなる群から選択される、実施形態５５～６２のいずれか一項に記載のオレフィン重合触媒系。
【０８６１】
＜実施形態６４＞
Ｒ^{Q}が水素であり、Ｒ^{Q}＊がＣ$_{1-8}$アルキル基である、実施形態５５～６３のいずれか一項に記載のオレフィン重合触媒系。
【０８６２】
＜実施形態６５＞
各Ｘ^{1}が、独立して、Ｃ$_{1-6}$アルキル基、Ｃ$_{7-10}$アリールアルキル基、及びハロゲンからなる群から選択される、実施形態５５～６４のいずれか一項に記載のオレフィン重合触媒系。
【０８６３】
＜実施形態６６＞
各Ｘ^{1}が、独立して、メチル基及びＣｌからなる群から選択される、実施形態５５～６５のいずれか一項に記載のオレフィン重合触媒系。
【０８６４】
＜実施形態６７＞
実施形態４１に記載のオレフィン重合触媒系であって、前記有機金属錯体が、式ＶＩＩＩ：

【化１９９】



(VIII)

で表され、

式中、Ｍ、Ｒ１、Ｒ２、Ｌ及びＸ１は、式Ｉで定義した通りであり；

式中、Ｒ２３は、

水素；

Ｃ１－３０ヒドロカルビル基（このヒドロカルビル基は、非置換であるか、又はハロゲン原子、Ｃ１－２０アルキル基、Ｃ１－２０アルコキシ基、Ｃ７－２０アルキルアリール基、Ｃ７－２０アリールアルキル基、Ｃ６－２０アリール基、Ｃ６－２０アリールオキシ基、Ｃ７－２０アルキルアリールオキシ基、及びＣ７－２０アリールアルキルオキシ基からなる群から選択される１つ以上の置換基によってさらに置換されている）；

ヘテロ原子含有Ｃ１－３０ヒドロカルビル基（このヘテロ原子含有ヒドロカルビル基は、非置換であるか、又はハロゲン原子、Ｃ１－２０アルキル基、Ｃ１－２０アルコキシ基、Ｃ７－２０アルキルアリール基、Ｃ７－２０アリールアルキル基、Ｃ６－２０アリール基、Ｃ６－２０アリールオキシ基、Ｃ７－２０アルキルアリールオキシ基、及びＣ７－２０アリールアルキルオキシ基からなる群から選択される１つ以上の置換基によってさらに置換されている）；

からなる群から選択され；

式中、Ｒ１９、Ｒ２０、Ｒ２１、Ｒ２２、Ｒ２４、Ｒ２５、Ｒ２６、及びＲ２７は、各々独立して、

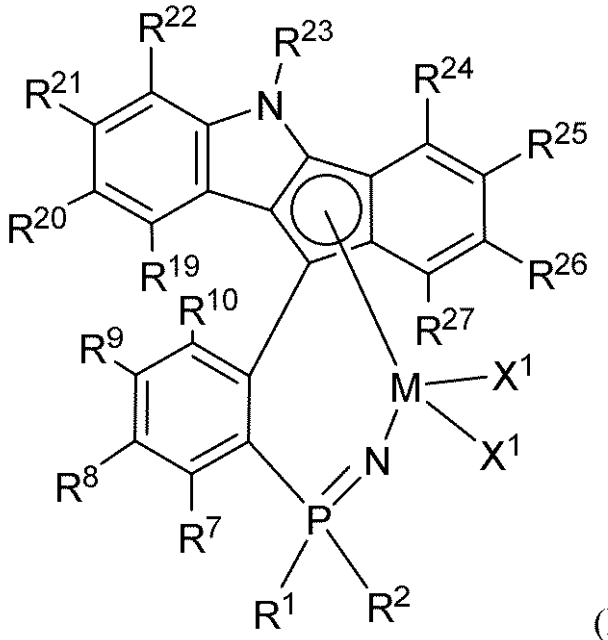
ハロゲン；

水素；

Ｃ１－３０ヒドロカルビル基（このヒドロカルビル基は、非置換であるか、又はハロゲン原子、Ｃ１－２０アルキル基、Ｃ１－２０アルコキシ基、Ｃ７－２０アルキルアリール基、Ｃ７－２０アリールアルキル基、Ｃ６－２０アリール基、Ｃ６－２０アリールオキシ基、Ｃ７－２０アルキルアリールオキシ基、及びＣ７－２０アリールアルキルオキシ基からなる群から選択される１つ以上の置換基によってさらに置換されている）；

ヘテロ原子含有Ｃ１－３０ヒドロカルビル基（このヘテロ原子含有ヒドロカルビル基は、非置換であるか、又はハロゲン原子、Ｃ１－２０アルキル基、Ｃ１－２０アルコキシ基、Ｃ７－２０アルキルアリール基、Ｃ７－２０アリールアルキル基、Ｃ６－２０アリール基、

Ｃ６－２０アリールオキシ基、Ｃ７－２０アルキルアリールオキシ基、及びＣ７－２０アリールアルキルオキシ基からなる群から選択される１つ以上の置換基によってさらに置換されている）；
　オキシ基、－ＯＲ’；
　アミド基、－ＮＲ’2；
　ホスフィド基、－ＰＲ’2；
　チオラート基、－ＳＲ’；
　式－Ｓｉ（Ｒａ）3のシリル基；
　式－Ｇｅ（Ｒａ）3のゲルマニル基；
からなる群から選択され；
　ここで、Ｒ19、Ｒ20、Ｒ21、Ｒ22、Ｒ24、Ｒ25、Ｒ26、及びＲ27の２つの隣接する基は、任意に結合して環状ヒドロカルビル基又は環状ヘテロ原子含有ヒドロカルビル基を形成してもよく、環状ヒドロカルビル基又は環状ヘテロ原子含有ヒドロカルビル基は、非置換であるか、又はハロゲン原子、Ｃ１－２０アルキル基、Ｃ１－２０アルコキシ基、Ｃ７－２０アルキルアリール基、Ｃ７－２０アリールアルキル基、Ｃ６－２０アリール基、Ｃ６－２０アリールオキシ基、Ｃ７－２０アルキルアリールオキシ基、Ｃ７－２０アリールアルキルオキシ基、式－ＮＲ’2のアミド基、式－ＰＲ’2のホスフィド基、式－ＳＲ’のチオラート基、式－Ｓｉ（Ｒａ）3のシリル基、及び式－Ｇｅ（Ｒａ）3のゲルマニル基からなる群から選択される１つ以上の置換基によってさらに置換されており；
　ここで、各Ｒ’は、独立して、水素、Ｃ1－２０アルキル基、及びＣ６－２０アリール基からなる群から選択され；
　ここで、各Ｒａは、独立して、水素、Ｃ１－８アルキル基、Ｃ１－８アルコキシ基、Ｃ６－２０アリールオキシ基及びＣ６－２０アリール基からなる群から選択される、
上記オレフィン重合触媒系。
【０８６５】
＜実施形態６８＞
　実施形態６７に記載のオレフィン重合触媒系であって、前記有機金属錯体が、式ＩＸ：
【化２００】



(IX)

で表され、
　式中、Ｍ、Ｒ1、Ｒ2、Ｒ19、Ｒ20、Ｒ21、Ｒ22、Ｒ23、Ｒ24、Ｒ25、Ｒ2

^{6}、R^{27}及びX^{1}は、式Ｉ及び式ＶＩＩＩで定義した通りであり；
式中、R^{7}、R^{8}、R^{9}及びR^{10}は、各々独立して、
ハロゲン；
水素；
C_{1-30}ヒドロカルビル基（このヒドロカルビル基は、非置換であるか、又はハロゲン原子、C_{1-20}アルキル基、C_{1-20}アルコキシ基、C_{7-20}アルキルアリール基、C_{7-20}アリールアルキル基、C_{6-20}アリール基、C_{6-20}アリールオキシ基、C_{7-20}アルキルアリールオキシ基、及びC_{7-20}アリールアルキルオキシ基からなる群から選択される１つ以上の置換基によってさらに置換されている）；
ヘテロ原子含有C_{1-30}ヒドロカルビル基（このヘテロ原子含有ヒドロカルビル基は、非置換であるか、又はハロゲン原子、C_{1-20}アルキル基、C_{1-20}アルコキシ基、C_{7-20}アルキルアリール基、C_{7-20}アリールアルキル基、C_{6-20}アリール基、C_{6-20}アリールオキシ基、C_{7-20}アルキルアリールオキシ基、及びC_{7-20}アリールアルキルオキシ基からなる群から選択される１つ以上の置換基によってさらに置換されている）；
オキシ基、－ＯＲ’；
アミド基、－ＮＲ’$_2$；
ホスフィド基、－ＰＲ’$_2$；
チオラート基、－ＳＲ’；
式－Ｓｉ（R^{a}）$_3$のシリル基；
式－Ｇｅ（R^{a}）$_3$のゲルマニル基；
からなる群から選択され；
ここで、R^{7}、R^{8}、R^{9}及びR^{10}の２つの隣接する基は、任意に結合して環状ヒドロカルビル基又は環状ヘテロ原子含有ヒドロカルビル基を形成してもよく、環状ヒドロカルビル基又は環状ヘテロ原子含有ヒドロカルビル基は、非置換であるか、又はハロゲン原子、C_{1-20}アルキル基、C_{1-20}アルコキシ基、C_{7-20}アルキルアリール基、C_{7-20}アリールアルキル基、C_{6-20}アリール基、C_{6-20}アリールオキシ基、C_{7-20}アルキルアリールオキシ基、C_{7-20}アリールアルキルオキシ基、式－ＮＲ’$_2$のアミド基、式－ＰＲ’$_2$のホスフィド基、式－ＳＲ’のチオラート基、式－Ｓｉ（R^{a}）$_3$のシリル基、及び式－Ｇｅ（R^{a}）$_3$のゲルマニル基からなる群から選択される１つ以上の置換基によってさらに置換されており；
ここで、各Ｒ’は、独立して、水素、C_{1-20}アルキル基、及びC_{6-20}アリール基からなる群から選択され；
ここで、各R^{a}は、独立して、水素、C_{1-8}アルキル基、C_{1-8}アルコキシ基、C_{6-20}アリールオキシ基及びC_{6-20}アリール基からなる群から選択される、
上記オレフィン重合触媒系。

【０８６６】

＜実施形態６９＞

Ｍが Ｔｉである、実施形態６８に記載のオレフィン重合触媒系。

【０８６７】

＜実施形態７０＞

R^{7}、R^{8}、R^{9}及びR^{10}が、各々水素である、実施形態６８又は６９に記載のオレフィン重合触媒系。

【０８６８】

＜実施形態７１＞

R^{1}及びR^{2}が、各々独立して、非置換のC_{1-30}ヒドロカルビル基である、実施形態６８～７０のいずれか一項に記載のオレフィン重合触媒系。

【０８６９】

＜実施形態７２＞

R^{1}及びR^{2}が、各々独立して、イソプロピル、シクロヘキシル及びｔｅｒｔ－ブチル

からなる群から選択される、実施形態６８～７１のいずれか一項に記載のオレフィン重合触媒系。

【０８７０】

＜実施形態７３＞

Ｒ^{23}が、非置換のＣ$_{1-30}$ヒドロカルビル基である、実施形態６８～７２のいずれか一項に記載のオレフィン重合触媒系。

【０８７１】

＜実施形態７４＞

Ｒ^{23}が、Ｃ$_{1-8}$アルキル基である、実施形態６８～７３のいずれか一項に記載のオレフィン重合触媒系。

【０８７２】

＜実施形態７５＞

Ｒ^{20}が、非置換のＣ$_{1-30}$ヒドロカルビル基である、実施形態６８～７４のいずれか一項に記載のオレフィン重合触媒系。

【０８７３】

＜実施形態７６＞

Ｒ^{20}が、非置換のＣ$_{1-8}$アルキル基である、実施形態６８～７５のいずれか一項に記載のオレフィン重合触媒系。

【０８７４】

＜実施形態７７＞

Ｒ^{20}が、非置換のＣ$_{1-30}$ヒドロカルビル基であり、Ｒ^{19}、Ｒ^{21}、Ｒ^{22}、Ｒ^{24}、Ｒ^{25}、Ｒ^{26}、及びＲ^{27}が、各々水素である、実施形態６８～７４のいずれか一項に記載のオレフィン重合触媒系。

【０８７５】

＜実施形態７８＞

Ｒ^{20}が、Ｃ$_{1-8}$アルキル基である、実施形態７７に記載のオレフィン重合触媒系。

【０８７６】

＜実施形態７９＞

各Ｘ^{1}が、独立して、Ｃ$_{1-6}$アルキル基、Ｃ$_{7-10}$アリールアルキル基、及びハロゲンからなる群から選択される、実施形態６８～７８のいずれか一項に記載のオレフィン重合触媒系。

【０８７７】

＜実施形態８０＞

各Ｘ^{1}が、独立して、メチル基及びＣｌからなる群から選択される、実施形態６８～７９のいずれか一項に記載のオレフィン重合触媒系。

【０８７８】

＜実施形態８１＞

触媒活性剤が、アルキルアルミノキサン共触媒、有機アルミニウム化合物、ホウ素系触媒活性剤、及びそれらの混合物からなる群から選択される、実施形態４１～８０のいずれか一項に記載のオレフィン重合触媒系。

【０８７９】

＜実施形態８２＞

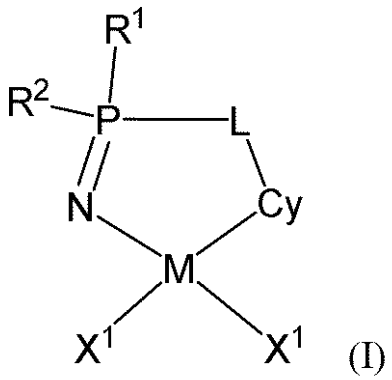
ホウ素系触媒活性剤が、［（水素化牛脂アルキル）$_2$（Ｍｅ）ＮＨ］［Ｂ（Ｃ$_6$Ｆ$_5$）$_4$］；Ｎ，Ｎ－ジメチルアニリニウムテトラキス（ペンタフルオロフェニル）ボレート（「［Ｍｅ$_2$ＮＨＰｈ］［Ｂ（Ｃ$_6$Ｆ$_5$）$_4$］」）；及びトリフェニルメチリウムテトラキス（ペンタフルオロフェニル）ボレート（「［Ｐｈ$_3$Ｃ］［Ｂ（Ｃ$_6$Ｆ$_5$）$_4$］」）からなる群から選択される、実施形態８１に記載のオレフィン重合触媒系。

【０８８０】

＜実施形態８３＞

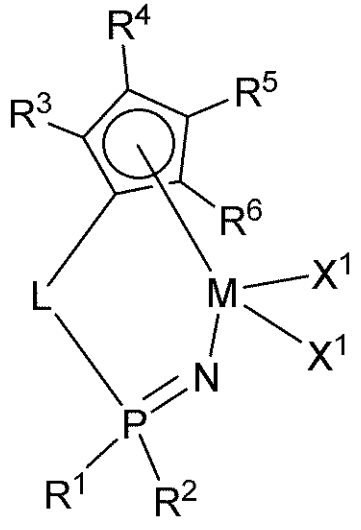
エチレンを、任意選択で１つ以上のＣ$_{3-12}$アルファ－オレフィンと、オレフィン重

合触媒系の存在下で重合することを含む、重合プロセスであって、
オレフィン重合触媒系が、
ｉ）有機金属錯体であって、式Ｉ：
【化２０１】



で表され、
式中、
Ｍは、Ｔｉ、Ｚｒ又はＨｆであり；
R^1及びR^2は、各々独立して、水素及びR^Xからなる群から選択されるか；又はR^1及びR^2は、それらが結合しているＰ原子と一緒になって、非置換であるか、又はハロゲン原子、C_{1-20}アルキル基、C_{1-20}アルコキシ基、C_{7-20}アルキルアリール基、C_{7-20}アリールアルキル基、C_{6-20}アリール基、C_{6-20}アリールオキシ基、C_{7-20}アルキルアリールオキシ基、及びC_{7-20}アリールアルキルオキシ基からなる群から選択される１つ以上の置換基によってさらに置換されている３－１０員複素環式基を形成し；
各R^Xは、独立して、ハロゲン原子；C_{1-30}ヒドロカルビル基（このヒドロカルビル基は、非置換であるか、又は１つ以上のハロゲン原子、C_{1-20}アルキル基、C_{1-20}アルコキシ基、C_{7-20}アルキルアリール基、C_{7-20}アリールアルキル基、C_{6-20}アリール基、C_{6-20}アリールオキシ基、C_{7-20}アルキルアリールオキシ基、及び／又はC_{7-20}アリールアルキルオキシ基によってさらに置換されている）；式－NR'_2のアミド基；式－Ｓｉ（R^a）$_3$のシリル基；式－Ｇｅ（R^a）$_3$のゲルマニル基；及び式Ｎ＝Ｐ（R^b）（R^c）（R^d）のホスフィンイミン基からなる群から選択され；ここで、各Ｒ’は、独立して、水素、C_{1-20}アルキル基、及びC_{6-20}アリール基からなる群から選択され；ここで、各R^aは、独立して、水素、C_{1-8}アルキル基、C_{1-8}アルコキシ基、C_{6-20}アリールオキシ基及びC_{6-20}アリール基からなる群から選択され、R^b、R^c、R^dは、各々独立して、C_{1-20}アルキル基であり；
各X^1は、活性化可能な配位子であり；
Ｃｙは、Ｌに共有結合し、η－結合を介してＭに配位するシクロペンタジエニル型配位子であり；
Ｌは、ＰとＣｙを連結する原子の連続鎖を含む架橋基であり、連続鎖は２個又は３個の原子を含む、有機金属錯体と、
ｉｉ）触媒活性剤と、
を含む、重合プロセス。
【０８８１】
＜実施形態８４＞
実施形態８３に記載の重合プロセスであって、前記有機金属錯体が、式ＩＩ：

【化２０２】



(II)

で表され、

式中、Ｍ、Ｒ^{1}、Ｒ^{2}、Ｌ及びＸ^{1}は、式Ｉで定義した通りであり；

式中、Ｒ^{3}、Ｒ^{4}、Ｒ^{5}及びＲ^{6}は、各々独立して、

ハロゲン；

水素；

Ｃ$_{1-30}$ヒドロカルビル基（このヒドロカルビル基は、非置換であるか、又はハロゲン原子、Ｃ$_{1-20}$アルキル基、Ｃ$_{1-20}$アルコキシ基、Ｃ$_{7-20}$アルキルアリール基、Ｃ$_{7-20}$アリールアルキル基、Ｃ$_{6-20}$アリール基、Ｃ$_{6-20}$アリールオキシ基、Ｃ$_{7-20}$アルキルアリールオキシ基、及びＣ$_{7-20}$アリールアルキルオキシ基からなる群から選択される１つ以上の置換基によってさらに置換されている）；

ヘテロ原子含有Ｃ$_{1-30}$ヒドロカルビル基（このヘテロ原子含有ヒドロカルビル基は、非置換であるか、又はハロゲン原子、Ｃ$_{1-20}$アルキル基、Ｃ$_{1-20}$アルコキシ基、Ｃ$_{7-20}$アルキルアリール基、Ｃ$_{7-20}$アリールアルキル基、Ｃ$_{6-20}$アリール基、Ｃ$_{6-20}$アリールオキシ基、Ｃ$_{7-20}$アルキルアリールオキシ基、及びＣ$_{7-20}$アリールアルキルオキシ基からなる群から選択される１つ以上の置換基によってさらに置換されている）；

オキシ基、－ＯＲ’；

アミド基、－ＮＲ’$_{2}$；

ホスフィド基、－ＰＲ’$_{2}$；

チオラート基、－ＳＲ’；

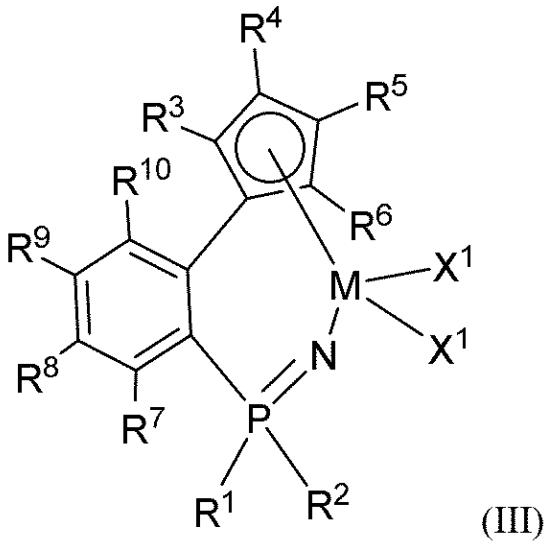
式－Ｓｉ（Ｒ^{a}）$_{3}$のシリル基；

式－Ｇｅ（Ｒ^{a}）$_{3}$のゲルマニル基；

からなる群から選択され；

ここで、Ｒ^{3}、Ｒ^{4}、Ｒ^{5}及びＲ^{6}の２つの隣接する基は、任意に結合して環状ヒドロカルビル基又は環状ヘテロ原子含有ヒドロカルビル基を形成してもよく、環状ヒドロカルビル基又は環状ヘテロ原子含有ヒドロカルビル基は、非置換であるか、又はハロゲン原子、Ｃ$_{1-20}$アルキル基、Ｃ$_{1-20}$アルコキシ基、Ｃ$_{7-20}$アルキルアリール基、Ｃ$_{7-20}$アリールアルキル基、Ｃ$_{6-20}$アリール基、Ｃ$_{6-20}$アリールオキシ基、Ｃ$_{7-20}$アルキルアリールオキシ基、Ｃ$_{7-20}$アリールアルキルオキシ基、式－ＮＲ’$_{2}$のアミド基、式－ＰＲ’$_{2}$のホスフィド基、式－ＳＲ’のチオラート基、式－Ｓｉ（Ｒ^{a}）$_{3}$のシリル基、及び式－Ｇｅ（Ｒ^{a}）$_{3}$のゲルマニル基からなる群から選択される１つ以上の置換基によってさらに置換されており；

ここで、各Ｒ’は、独立して、水素、Ｃ$_{1-20}$アルキル基、及びＣ$_{6-20}$アリール基からなる群から選択され；
ここで、各Ｒ^{a}は、独立して、水素、Ｃ$_{1-8}$アルキル基、Ｃ$_{1-8}$アルコキシ基、Ｃ$_{6-20}$アリールオキシ基及びＣ$_{6-20}$アリール基からなる群から選択される、
上記重合プロセス。
【０８８２】
＜実施形態８５＞
実施形態８４に記載の重合プロセスであって、前記有機金属錯体が、式ＩＩＩ：
【化２０３】



(III)

で表され、
式中、Ｍ、Ｒ^{1}、Ｒ^{2}、Ｒ^{3}、Ｒ^{4}、Ｒ^{5}、Ｒ^{6}及びＸ^{1}は、式Ｉ及び式ＩＩで定義した通りであり；
式中、Ｒ^{7}、Ｒ^{8}、Ｒ^{9}及びＲ^{10}は、各々独立して、
ハロゲン；
水素；
Ｃ$_{1-30}$ヒドロカルビル基（このヒドロカルビル基は、非置換であるか、又はハロゲン原子、Ｃ$_{1-20}$アルキル基、Ｃ$_{1-20}$アルコキシ基、Ｃ$_{7-20}$アルキルアリール基、Ｃ$_{7-20}$アリールアルキル基、Ｃ$_{6-20}$アリール基、Ｃ$_{6-20}$アリールオキシ基、Ｃ$_{7-20}$アルキルアリールオキシ基、及びＣ$_{7-20}$アリールアルキルオキシ基からなる群から選択される１つ以上の置換基によってさらに置換されている）；
ヘテロ原子含有Ｃ$_{1-30}$ヒドロカルビル基（このヘテロ原子含有ヒドロカルビル基は、非置換であるか、又はハロゲン原子、Ｃ$_{1-20}$アルキル基、Ｃ$_{1-20}$アルコキシ基、Ｃ$_{7-20}$アルキルアリール基、Ｃ$_{7-20}$アリールアルキル基、Ｃ$_{6-20}$アリール基、Ｃ$_{6-20}$アリールオキシ基、Ｃ$_{7-20}$アルキルアリールオキシ基、及びＣ$_{7-20}$アリールアルキルオキシ基からなる群から選択される１つ以上の置換基によってさらに置換されている）；
オキシ基、－ＯＲ’；
アミド基、－ＮＲ’$_{2}$；
ホスフィド基、－ＰＲ’$_{2}$；
チオラート基、－ＳＲ’；
式－Ｓｉ（Ｒ^{a}）$_{3}$のシリル基；
式－Ｇｅ（Ｒ^{a}）$_{3}$のゲルマニル基；
からなる群から選択され；

ここで、R^7、R^8、R^9及びR^{10}の２つの隣接する基は、任意に結合して環状ヒドロカルビル基又は環状ヘテロ原子含有ヒドロカルビル基を形成してもよく、環状ヒドロカルビル基又は環状ヘテロ原子含有ヒドロカルビル基は、非置換であるか、又はハロゲン原子、C_{1-20}アルキル基、C_{1-20}アルコキシ基、C_{7-20}アルキルアリール基、C_{7-20}アリールアルキル基、C_{6-20}アリール基、C_{6-20}アリールオキシ基、C_{7-20}アルキルアリールオキシ基、C_{7-20}アリールアルキルオキシ基、式－NR'_2のアミド基、式－PR'_2のホスフィド基、式－SR'のチオラート基、式－$Si(R^a)_3$のシリル基、及び式－$Ge(R^a)_3$のゲルマニル基からなる群から選択される１つ以上の置換基によってさらに置換されており；

ここで、各R'は、独立して、水素、C_{1-20}アルキル基、及びC_{6-20}アリール基からなる群から選択され；

ここで、各R^aは、独立して、水素、C_{1-8}アルキル基、C_{1-8}アルコキシ基、C_{6-20}アリールオキシ基及びC_{6-20}アリール基からなる群から選択される、

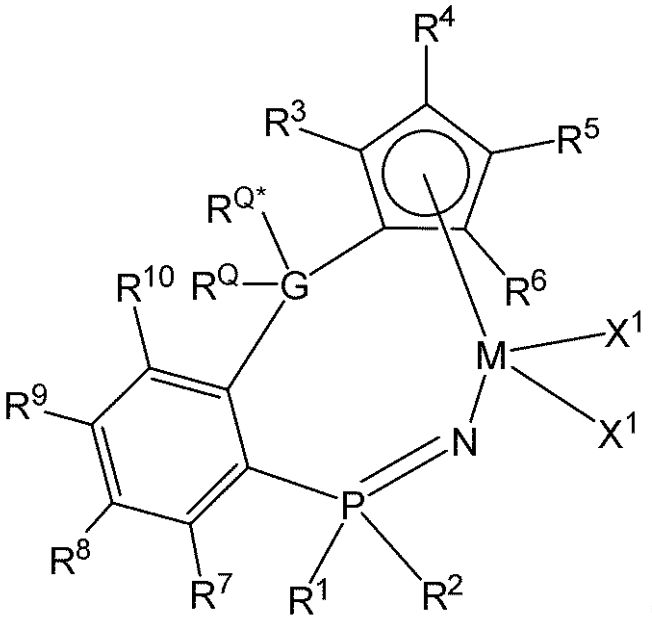
上記重合プロセス。

【０８８３】

＜実施形態８６＞

実施形態８４に記載の重合プロセスであって、前記有機金属錯体が、式ＩＶ：

【化２０４】



(IV)

で表され、

式中、M、R^1、R^2、R^3、R^4、R^5、R^6及びX^1は、式Ｉ及び式ＩＩで定義した通りであり；

式中、Ｇは、Ｃ又はＳｉであり；

式中、R^Q及びR^{Q*}は、各々独立して、

ハロゲン；

水素；

C_{1-30}ヒドロカルビル基（このヒドロカルビル基は、非置換であるか、又はハロゲン原子、C_{1-20}アルキル基、C_{1-20}アルコキシ基、C_{7-20}アルキルアリール基、C_{7-20}アリールアルキル基、C_{6-20}アリール基、C_{6-20}アリールオキシ基、C_{7-20}アルキルアリールオキシ基、及びC_{7-20}アリールアルキルオキシ基からなる群から選択される１つ以上の置換基によってさらに置換されている）；

ヘテロ原子含有C_{1-30}ヒドロカルビル基（このヘテロ原子含有ヒドロカルビル基は

、非置換であるか、又はハロゲン原子、Ｃ１－２０アルキル基、Ｃ１－２０アルコキシ基、Ｃ７－２０アルキルアリール基、Ｃ７－２０アリールアルキル基、Ｃ６－２０アリール基、Ｃ６－２０アリールオキシ基、Ｃ７－２０アルキルアリールオキシ基、及びＣ７－２０アリールアルキルオキシ基からなる群から選択される１つ以上の置換基によってさらに置換されている）；

ここで、Ｒ^{Q}及びＲ^{Q}＊の基は、任意に結合して環状ヒドロカルビル基又は環状ヘテロ原子含有ヒドロカルビル基を形成してもよく、環状ヒドロカルビル基又は環状ヘテロ原子含有ヒドロカルビル基は、非置換であるか、又はハロゲン原子、Ｃ１－２０アルキル基、Ｃ１－２０アルコキシ基、Ｃ７－２０アルキルアリール基、Ｃ７－２０アリールアルキル基、Ｃ６－２０アリール基、Ｃ６－２０アリールオキシ基、Ｃ７－２０アルキルアリールオキシ基、Ｃ７－２０アリールアルキルオキシ基、式－ＮＲ’$_2$のアミド基、式－ＰＲ’$_2$のホスフィド基、式－ＳＲ’のチオラート基、式－Ｓｉ（Ｒ^{a}）$_3$のシリル基、及び式－Ｇｅ（Ｒ^{a}）$_3$のゲルマニル基からなる群から選択される１つ以上の置換基によってさらに置換されており；

式中、Ｒ^{7}、Ｒ^{8}、Ｒ^{9}及びＲ^{10}は、各々独立して、

ハロゲン；

水素；

Ｃ１－３０ヒドロカルビル基（このヒドロカルビル基は、非置換であるか、又はハロゲン原子、Ｃ１－２０アルキル基、Ｃ１－２０アルコキシ基、Ｃ７－２０アルキルアリール基、Ｃ７－２０アリールアルキル基、Ｃ６－２０アリール基、Ｃ６－２０アリールオキシ基、Ｃ７－２０アルキルアリールオキシ基、及びＣ７－２０アリールアルキルオキシ基からなる群から選択される１つ以上の置換基によってさらに置換されている）；

ヘテロ原子含有Ｃ１－３０ヒドロカルビル基（このヘテロ原子含有ヒドロカルビル基は、非置換であるか、又はハロゲン原子、Ｃ１－２０アルキル基、Ｃ１－２０アルコキシ基、Ｃ７－２０アルキルアリール基、Ｃ７－２０アリールアルキル基、Ｃ６－２０アリール基、Ｃ６－２０アリールオキシ基、Ｃ７－２０アルキルアリールオキシ基、及びＣ７－２０アリールアルキルオキシ基からなる群から選択される１つ以上の置換基によってさらに置換されている）；

オキシ基、－ＯＲ’；

アミド基、－ＮＲ’$_2$；

ホスフィド基、－ＰＲ’$_2$；

チオラート基、－ＳＲ’；

式－Ｓｉ（Ｒ^{a}）$_3$のシリル基；

式－Ｇｅ（Ｒ^{a}）$_3$のゲルマニル基；

からなる群から選択され；

ここで、Ｒ^{7}、Ｒ^{8}、Ｒ^{9}及びＲ^{10}の２つの隣接する基は、任意に結合して環状ヒドロカルビル基又は環状ヘテロ原子含有ヒドロカルビル基を形成してもよく、環状ヒドロカルビル基又は環状ヘテロ原子含有ヒドロカルビル基は、非置換であるか、又はハロゲン原子、Ｃ１－２０アルキル基、Ｃ１－２０アルコキシ基、Ｃ７－２０アルキルアリール基、Ｃ７－２０アリールアルキル基、Ｃ６－２０アリール基、Ｃ６－２０アリールオキシ基、Ｃ７－２０アルキルアリールオキシ基、Ｃ７－２０アリールアルキルオキシ基、式－ＮＲ’$_2$のアミド基、式－ＰＲ’$_2$のホスフィド基、式－ＳＲ’のチオラート基、式－Ｓｉ（Ｒ^{a}）$_3$のシリル基、及び式－Ｇｅ（Ｒ^{a}）$_3$のゲルマニル基からなる群から選択される１つ以上の置換基によってさらに置換されており；

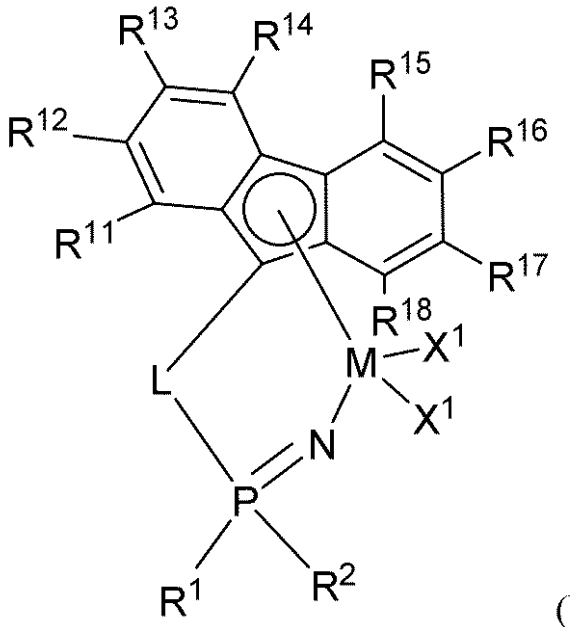
ここで、各Ｒ’は、独立して、水素、Ｃ$_{1}$－２０アルキル基、及びＣ６－２０アリール基からなる群から選択され；

ここで、各Ｒ^{a}は、独立して、水素、Ｃ１－８アルキル基、Ｃ１－８アルコキシ基、Ｃ６－２０アリールオキシ基及びＣ６－２０アリール基からなる群から選択される、

上記重合プロセス。

【０８８４】

＜実施形態８７＞
実施形態８３に記載の重合プロセスであって、前記有機金属錯体が、式Ｖ：
【化２０５】



(V)

で表され、
式中、Ｍ、Ｒ１、Ｒ２、Ｌ及びＸ１は、式Ｉで定義した通りであり；
式中、Ｒ１１、Ｒ１２、Ｒ１３、Ｒ１４、Ｒ１５、Ｒ１６、Ｒ１７、Ｒ１８は、各々独立して、
ハロゲン；
水素；
Ｃ１－３０ヒドロカルビル基（このヒドロカルビル基は、非置換であるか、又はハロゲン原子、Ｃ１－２０アルキル基、Ｃ１－２０アルコキシ基、Ｃ７－２０アルキルアリール基、Ｃ７－２０アリールアルキル基、Ｃ６－２０アリール基、Ｃ６－２０アリールオキシ基、Ｃ７－２０アルキルアリールオキシ基、及びＣ７－２０アリールアルキルオキシ基からなる群から選択される１つ以上の置換基によってさらに置換されている）；
ヘテロ原子含有Ｃ１－３０ヒドロカルビル基（このヘテロ原子含有ヒドロカルビル基は、非置換であるか、又はハロゲン原子、Ｃ１－２０アルキル基、Ｃ１－２０アルコキシ基、Ｃ７－２０アルキルアリール基、Ｃ７－２０アリールアルキル基、Ｃ６－２０アリール基、Ｃ６－２０アリールオキシ基、Ｃ７－２０アルキルアリールオキシ基、及びＣ７－２０アリールアルキルオキシ基からなる群から選択される１つ以上の置換基によってさらに置換されている）；
オキシ基、－ＯＲ’；
アミド基、－ＮＲ’２；
ホスフィド基、－ＰＲ’２；
チオラート基、－ＳＲ’；
式－Ｓｉ（Ｒａ）３のシリル基；
式－Ｇｅ（Ｒａ）３のゲルマニル基；
からなる群から選択され；
ここで、Ｒ１１、Ｒ１２、Ｒ１３、Ｒ１４、Ｒ１５、Ｒ１６、Ｒ１７、Ｒ１８の２つの隣接する基は、任意に結合して環状ヒドロカルビル基又は環状ヘテロ原子含有ヒドロカルビル基を形成してもよく、環状ヒドロカルビル基又は環状ヘテロ原子含有ヒドロカルビル基は

、非置換であるか、又はハロゲン原子、Ｃ１－２０アルキル基、Ｃ１－２０アルコキシ基、Ｃ７－２０アルキルアリール基、Ｃ７－２０アリールアルキル基、Ｃ６－２０アリール基、Ｃ６－２０アリールオキシ基、Ｃ７－２０アルキルアリールオキシ基、Ｃ７－２０アリールアルキルオキシ基、式－ＮＲ’2のアミド基、式－ＰＲ’2のホスフィド基、式－ＳＲ’のチオラート基、式－Ｓｉ（Ｒａ）3のシリル基、及び式－Ｇｅ（Ｒａ）3のゲルマニル基からなる群から選択される１つ以上の置換基によってさらに置換されており；

ここで、各Ｒ’は、独立して、水素、Ｃ1－２０アルキル基、及びＣ６－２０アリール基からなる群から選択され；

ここで、各Ｒａは、独立して、水素、Ｃ１－８アルキル基、Ｃ１－８アルコキシ基、Ｃ６－２０アリールオキシ基及びＣ６－２０アリール基からなる群から選択される、

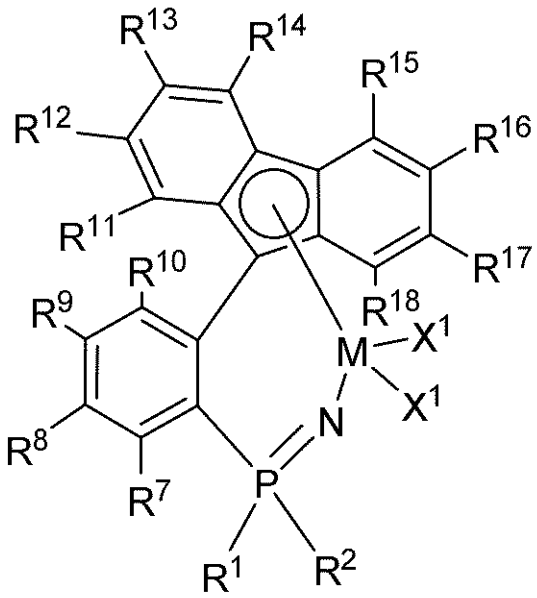
上記重合プロセス。

【０８８５】

＜実施形態８８＞

実施形態８７に記載の重合プロセスであって、前記有機金属錯体が、式ＶＩ：

【化２０６】



(VI)

で表され、

式中、Ｍ、Ｒ1、Ｒ2、Ｒ11、Ｒ12、Ｒ13、Ｒ14、Ｒ15、Ｒ16、Ｒ17、Ｒ18及びＸ1は、式Ｉ及び式Ｖで定義した通りであり；

式中、Ｒ7、Ｒ8、Ｒ9及びＲ10は、各々独立して、

ハロゲン；

水素；

Ｃ１－３０ヒドロカルビル基（このヒドロカルビル基は、非置換であるか、又はハロゲン原子、Ｃ１－２０アルキル基、Ｃ１－２０アルコキシ基、Ｃ７－２０アルキルアリール基、Ｃ７－２０アリールアルキル基、Ｃ６－２０アリール基、Ｃ６－２０アリールオキシ基、Ｃ７－２０アルキルアリールオキシ基、及びＣ７－２０アリールアルキルオキシ基からなる群から選択される１つ以上の置換基によってさらに置換されている）；

ヘテロ原子含有Ｃ１－３０ヒドロカルビル基（このヘテロ原子含有ヒドロカルビル基は、非置換であるか、又はハロゲン原子、Ｃ１－２０アルキル基、Ｃ１－２０アルコキシ基、Ｃ７－２０アルキルアリール基、Ｃ７－２０アリールアルキル基、Ｃ６－２０アリール基、Ｃ６－２０アリールオキシ基、Ｃ７－２０アルキルアリールオキシ基、及びＣ７－２０アリールアルキルオキシ基からなる群から選択される１つ以上の置換基によってさらに置換さ

れている）；
　オキシ基、－ＯＲ’；
　アミド基、－ＮＲ’$_2$；
　ホスフィド基、－ＰＲ’$_2$；
　チオラート基、－ＳＲ’；
　式－Ｓｉ（Ｒ^a）$_3$のシリル基；
　式－Ｇｅ（Ｒ^a）$_3$のゲルマニル基；
からなる群から選択され；
　ここで、Ｒ^7、Ｒ^8、Ｒ^{9}及びＲ^{10}の２つの隣接する基は、任意に結合して環状ヒドロカルビル基又は環状ヘテロ原子含有ヒドロカルビル基を形成してもよく、環状ヒドロカルビル基又は環状ヘテロ原子含有ヒドロカルビル基は、非置換であるか、又はハロゲン原子、Ｃ$_{1-20}$アルキル基、Ｃ$_{1-20}$アルコキシ基、Ｃ$_{7-20}$アルキルアリール基、Ｃ$_{7-20}$アリールアルキル基、Ｃ$_{6-20}$アリール基、Ｃ$_{6-20}$アリールオキシ基、Ｃ$_{7-20}$アルキルアリールオキシ基、Ｃ$_{7-20}$アリールアルキルオキシ基、式－ＮＲ’$_2$のアミド基、式－ＰＲ’$_2$のホスフィド基、式－ＳＲ’のチオラート基、式－Ｓｉ（Ｒ^a）$_3$のシリル基、及び式－Ｇｅ（Ｒ^a）$_3$のゲルマニル基からなる群から選択される１つ以上の置換基によってさらに置換されており；
　ここで、各Ｒ’は、独立して、水素、Ｃ$_{1-20}$アルキル基、及びＣ$_{6-20}$アリール基からなる群から選択され；
　ここで、各Ｒ^{a}は、独立して、水素、Ｃ$_{1-8}$アルキル基、Ｃ$_{1-8}$アルコキシ基、Ｃ$_{6-20}$アリールオキシ基及びＣ$_{6-20}$アリール基からなる群から選択される、
上記重合プロセス。
【０８８６】
＜実施形態８９＞
　Ｍがチタンである、実施形態８８に記載の重合プロセス。
【０８８７】
＜実施形態９０＞
　Ｒ^7、Ｒ^8、Ｒ^{9}及びＲ^{10}が、各々水素である、実施形態８８又は８９に記載の重合プロセス。
【０８８８】
＜実施形態９１＞
　Ｒ^{1}及びＲ^{2}が、各々独立して、非置換のＣ$_{1-30}$ヒドロカルビル基である、実施形態８８～９０のいずれか一項に記載の重合プロセス。
【０８８９】
＜実施形態９２＞
　Ｒ^{1}及びＲ^{2}が、各々独立して、イソプロピル、シクロヘキシル及びｔｅｒｔ－ブチルからなる群から選択される、実施形態８８～９１のいずれか一項に記載の重合プロセス。
【０８９０】
＜実施形態９３＞
　Ｒ^{12}及びＲ^{17}が、各々独立して、非置換のＣ$_{1-30}$ヒドロカルビル基であり、Ｒ^{11}、Ｒ^{13}、Ｒ^{14}、Ｒ^{15}、Ｒ^{16}及びＲ^{18}が、各々水素である、実施形態８８～９２のいずれか一項に記載の重合プロセス。
【０８９１】
＜実施形態９４＞
　Ｒ^{12}及びＲ^{17}が、各々ｔｅｒｔ－ブチル基である、実施形態８８～９３のいずれか一項に記載の重合プロセス。
【０８９２】
＜実施形態９５＞
　各Ｘ^{1}が、独立して、Ｃ$_{1-6}$アルキル基、Ｃ$_{7-10}$アリールアルキル基、及びハロゲンからなる群から選択される、実施形態８８～９４のいずれか一項に記載の重合プロセス

。

【０８９３】

＜実施形態９６＞

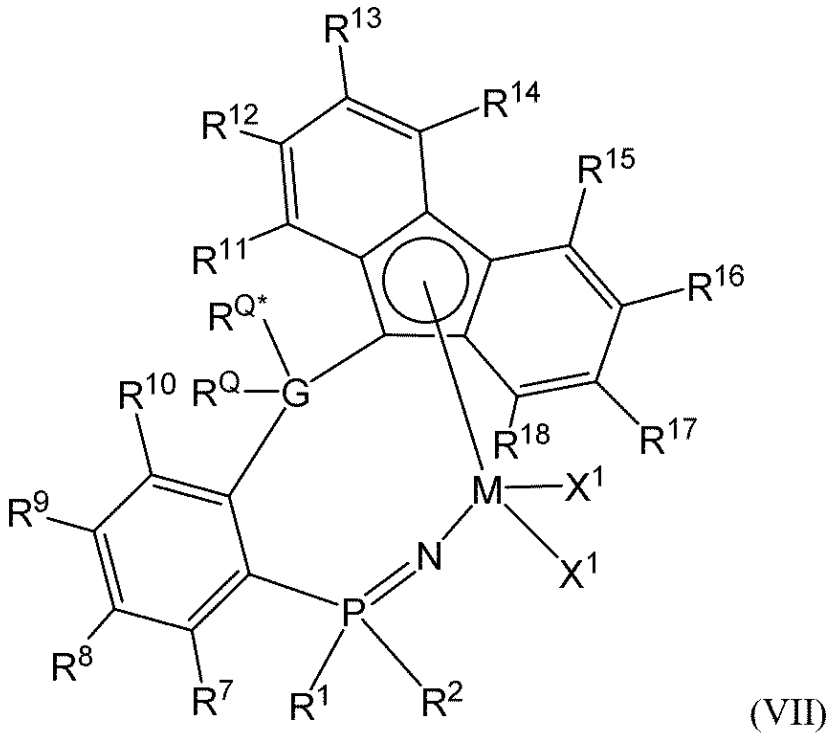
各Ｘ^{1}が、独立して、メチル基及びＣｌからなる群から選択される実施形態８８～９５のいずれか一項に記載の重合プロセス。

【０８９４】

＜実施形態９７＞

実施形態８７に記載の重合プロセスであって、前記有機金属錯体が、式ＶＩＩ：

【化２０７】



(VII)

で表され、

式中、Ｍ、Ｒ^{1}、Ｒ^{2}、Ｒ^{11}、Ｒ^{12}、Ｒ^{13}、Ｒ^{14}、Ｒ^{15}、Ｒ^{16}、Ｒ^{17}、Ｒ^{18}及びＸ^{1}は、式Ｉ及び式Ｖで定義した通りであり；

式中、Ｇは、Ｃ又はＳｉであり；

式中、Ｒ^{Q}及びＲ^{Q}＊は、各々独立して、

ハロゲン；

水素；

Ｃ$_{1-30}$ヒドロカルビル基（このヒドロカルビル基は、非置換であるか、又はハロゲン原子、Ｃ$_{1-20}$アルキル基、Ｃ$_{1-20}$アルコキシ基、Ｃ$_{7-20}$アルキルアリール基、Ｃ$_{7-20}$アリールアルキル基、Ｃ$_{6-20}$アリール基、Ｃ$_{6-20}$アリールオキシ基、Ｃ$_{7-20}$アルキルアリールオキシ基、及びＣ$_{7-20}$アリールアルキルオキシ基からなる群から選択される１つ以上の置換基によってさらに置換されている）；

ヘテロ原子含有Ｃ$_{1-30}$ヒドロカルビル基（このヘテロ原子含有ヒドロカルビル基は、非置換であるか、又はハロゲン原子、Ｃ$_{1-20}$アルキル基、Ｃ$_{1-20}$アルコキシ基、Ｃ$_{7-20}$アルキルアリール基、Ｃ$_{7-20}$アリールアルキル基、Ｃ$_{6-20}$アリール基、Ｃ$_{6-20}$アリールオキシ基、Ｃ$_{7-20}$アルキルアリールオキシ基、及びＣ$_{7-20}$アリールアルキルオキシ基からなる群から選択される１つ以上の置換基によってさらに置換されている）；

ここで、Ｒ^{Q}及びＲ^{Q}＊の基は、任意に結合して環状ヒドロカルビル基又は環状ヘテロ

原子含有ヒドロカルビル基を形成してもよく、環状ヒドロカルビル基又は環状ヘテロ原子含有ヒドロカルビル基は、非置換であるか、又はハロゲン原子、C_{1-20}アルキル基、C_{1-20}アルコキシ基、C_{7-20}アルキルアリール基、C_{7-20}アリールアルキル基、C_{6-20}アリール基、C_{6-20}アリールオキシ基、C_{7-20}アルキルアリールオキシ基、C_{7-20}アリールアルキルオキシ基、式－NR'_2のアミド基、式－PR'_2のホスフィド基、式－SR'のチオラート基、式－$Si(R^a)_3$のシリル基、及び式－$Ge(R^a)_3$のゲルマニル基からなる群から選択される１つ以上の置換基によってさらに置換されており；

式中、R^7、R^8、R^9及びR^{10}は、各々独立して、

ハロゲン；

水素；

C_{1-30}ヒドロカルビル基（このヒドロカルビル基は、非置換であるか、又はハロゲン原子、C_{1-20}アルキル基、C_{1-20}アルコキシ基、C_{7-20}アルキルアリール基、C_{7-20}アリールアルキル基、C_{6-20}アリール基、C_{6-20}アリールオキシ基、C_{7-20}アルキルアリールオキシ基、及びC_{7-20}アリールアルキルオキシ基からなる群から選択される１つ以上の置換基によってさらに置換されている）；

ヘテロ原子含有C_{1-30}ヒドロカルビル基（このヘテロ原子含有ヒドロカルビル基は、非置換であるか、又はハロゲン原子、C_{1-20}アルキル基、C_{1-20}アルコキシ基、C_{7-20}アルキルアリール基、C_{7-20}アリールアルキル基、C_{6-20}アリール基、C_{6-20}アリールオキシ基、C_{7-20}アルキルアリールオキシ基、及びC_{7-20}アリールアルキルオキシ基からなる群から選択される１つ以上の置換基によってさらに置換されている）；

オキシ基、－OR'；

アミド基、－NR'_2；

ホスフィド基、－PR'_2；

チオラート基、－SR'；

式－$Si(R^a)_3$のシリル基；

式－$Ge(R^a)_3$のゲルマニル基；

からなる群から選択され；

ここで、R^7、R^8、R^9及びR^{10}の２つの隣接する基は、任意に結合して環状ヒドロカルビル基又は環状ヘテロ原子含有ヒドロカルビル基を形成してもよく、環状ヒドロカルビル基又は環状ヘテロ原子含有ヒドロカルビル基は、非置換であるか、又はハロゲン原子、C_{1-20}アルキル基、C_{1-20}アルコキシ基、C_{7-20}アルキルアリール基、C_{7-20}アリールアルキル基、C_{6-20}アリール基、C_{6-20}アリールオキシ基、C_{7-20}アルキルアリールオキシ基、C_{7-20}アリールアルキルオキシ基、式－NR'_2のアミド基、式－PR'_2のホスフィド基、式－SR'のチオラート基、式－$Si(R^a)_3$のシリル基、及び式－$Ge(R^a)_3$のゲルマニル基からなる群から選択される１つ以上の置換基によってさらに置換されており；

ここで、各R'は、独立して、水素、C_{1-20}アルキル基、及びC_{6-20}アリール基からなる群から選択され；

ここで、各R^aは、独立して、水素、C_{1-8}アルキル基、C_{1-8}アルコキシ基、C_{6-20}アリールオキシ基及びC_{6-20}アリール基からなる群から選択される、

上記重合プロセス。

【０８９５】

＜実施形態９８＞

Ｍが Ｔｉである、実施形態９７に記載の重合プロセス。

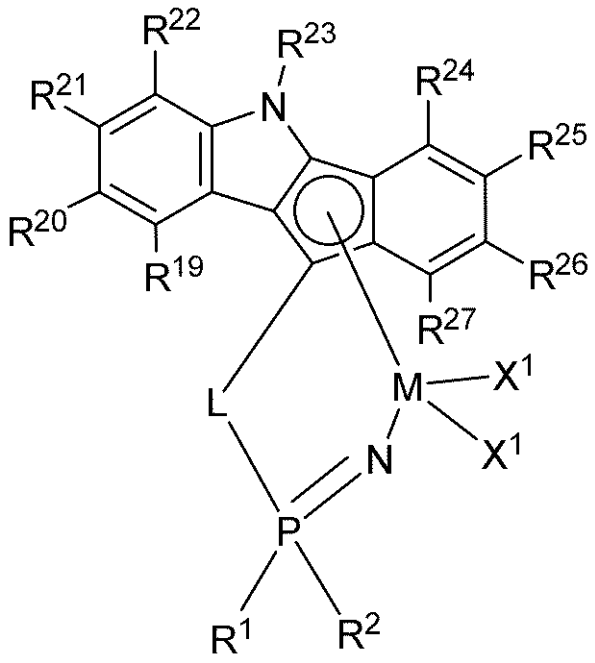
【０８９６】

＜実施形態９９＞

R^7、R^8、R^9及びR^{10}が、各々水素である、実施形態９７又は９８に記載の重合プロセス。

【０８９７】
＜実施形態１００＞
Ｒ^{1}及びＲ^{2}が、各々独立して、非置換のＣ$_{1-30}$ヒドロカルビル基である、実施形態９７～９９のいずれか一項に記載の重合プロセス。
【０８９８】
＜実施形態１０１＞
Ｒ^{1}及びＲ^{2}が、各々独立して、イソプロピル、シクロヘキシル及びｔｅｒｔ－ブチルからなる群から選択される、実施形態９７～１００のいずれか一項に記載の重合プロセス。
【０８９９】
＜実施形態１０２＞
Ｒ^{12}及びＲ^{17}が、各々独立して、非置換のＣ$_{1-30}$ヒドロカルビル基であり、Ｒ^{11}、Ｒ^{13}、Ｒ^{14}、Ｒ^{15}、Ｒ^{16}及びＲ^{18}が、各々水素である、実施形態９７～１０１のいずれか一項に記載の重合プロセス。
【０９００】
＜実施形態１０３＞
Ｒ^{12}及びＲ^{17}が、各々ｔｅｒｔ－ブチル基である、実施形態９７～１０２のいずれか一項に記載の重合プロセス。
【０９０１】
＜実施形態１０４＞
Ｇが炭素である、実施形態９７～１０３のいずれか一項に記載の重合プロセス。
【０９０２】
＜実施形態１０５＞
Ｒ^{Q}及びＲ^{Q}＊が、各々独立して、水素、Ｃ$_{1-20}$アルキル基及びＣ$_{6-20}$アリール基からなる群から選択される、実施形態９７～１０４のいずれか一項に記載の重合プロセス。
【０９０３】
＜実施形態１０６＞
Ｒ^{Q}が水素であり、Ｒ^{Q}＊がＣ$_{1-8}$アルキル基である、実施形態９７～１０５のいずれか一項に記載の重合プロセス。
【０９０４】
＜実施形態１０７＞
各Ｘ^{1}が、独立して、Ｃ$_{1-6}$アルキル基、Ｃ$_{7-10}$アリールアルキル基、及びハロゲンからなる群から選択される、実施形態９７～１０６のいずれか一項に記載の重合プロセス。
【０９０５】
＜実施形態１０８＞
各Ｘ^{1}が、独立して、メチル基及びＣｌからなる群から選択される、実施形態９７～１０７のいずれか一項に記載の重合プロセス。
【０９０６】
＜実施形態１０９＞
実施形態８３に記載の重合プロセスであって、前記有機金属錯体が、式ＶＩＩＩ：

【化２０８】



(VIII)

で表され、

式中、Ｍ、Ｒ１、Ｒ２、Ｌ及びＸ１は、式Ｉで定義した通りであり；

式中、Ｒ２３は、

水素；

Ｃ１－３０ヒドロカルビル基（このヒドロカルビル基は、非置換であるか、又はハロゲン原子、Ｃ１－２０アルキル基、Ｃ１－２０アルコキシ基、Ｃ７－２０アルキルアリール基、Ｃ７－２０アリールアルキル基、Ｃ６－２０アリール基、Ｃ６－２０アリールオキシ基、Ｃ７－２０アルキルアリールオキシ基、及びＣ７－２０アリールアルキルオキシ基からなる群から選択される１つ以上の置換基によってさらに置換されている）；

ヘテロ原子含有Ｃ１－３０ヒドロカルビル基（このヘテロ原子含有ヒドロカルビル基は、非置換であるか、又はハロゲン原子、Ｃ１－２０アルキル基、Ｃ１－２０アルコキシ基、Ｃ７－２０アルキルアリール基、Ｃ７－２０アリールアルキル基、Ｃ６－２０アリール基、Ｃ６－２０アリールオキシ基、Ｃ７－２０アルキルアリールオキシ基、及びＣ７－２０アリールアルキルオキシ基からなる群から選択される１つ以上の置換基によってさらに置換されている）；

からなる群から選択され；

式中、Ｒ１９、Ｒ２０、Ｒ２１、Ｒ２２、Ｒ２４、Ｒ２５、Ｒ２６、及びＲ２７は、各々独立して、

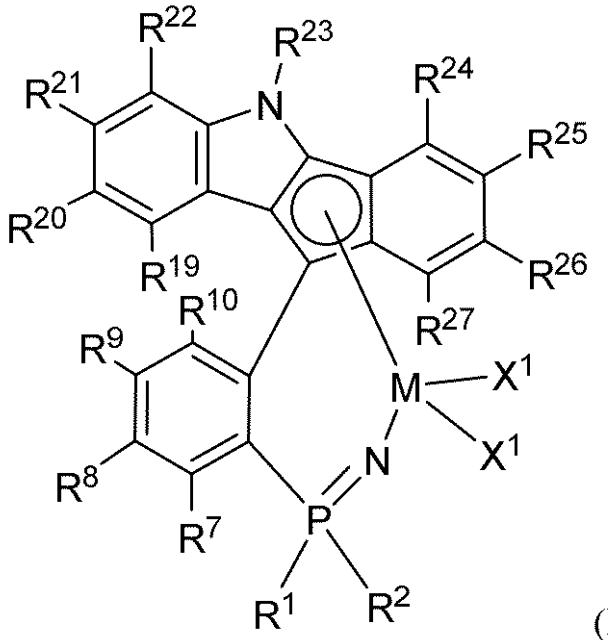
ハロゲン；

水素；

Ｃ１－３０ヒドロカルビル基（このヒドロカルビル基は、非置換であるか、又はハロゲン原子、Ｃ１－２０アルキル基、Ｃ１－２０アルコキシ基、Ｃ７－２０アルキルアリール基、Ｃ７－２０アリールアルキル基、Ｃ６－２０アリール基、Ｃ６－２０アリールオキシ基、Ｃ７－２０アルキルアリールオキシ基、及びＣ７－２０アリールアルキルオキシ基からなる群から選択される１つ以上の置換基によってさらに置換されている）；

ヘテロ原子含有Ｃ１－３０ヒドロカルビル基（このヘテロ原子含有ヒドロカルビル基は、非置換であるか、又はハロゲン原子、Ｃ１－２０アルキル基、Ｃ１－２０アルコキシ基、Ｃ７－２０アルキルアリール基、Ｃ７－２０アリールアルキル基、Ｃ６－２０アリール基、

Ｃ６－２０アリールオキシ基、Ｃ７－２０アルキルアリールオキシ基、及びＣ７－２０アリールアルキルオキシ基からなる群から選択される１つ以上の置換基によってさらに置換されている）；
　オキシ基、－ＯＲ’；
　アミド基、－ＮＲ’2；
　ホスフィド基、－ＰＲ’2；
　チオラート基、－ＳＲ’；
　式－Ｓｉ（Ｒａ）3のシリル基；
　式－Ｇｅ（Ｒａ）3のゲルマニル基；
からなる群から選択され；
　ここで、Ｒ19、Ｒ20、Ｒ21、Ｒ22、Ｒ24、Ｒ25、Ｒ26、及びＲ27の２つの隣接する基は、任意に結合して環状ヒドロカルビル基又は環状ヘテロ原子含有ヒドロカルビル基を形成してもよく、環状ヒドロカルビル基又は環状ヘテロ原子含有ヒドロカルビル基は、非置換であるか、又はハロゲン原子、Ｃ１－２０アルキル基、Ｃ１－２０アルコキシ基、Ｃ７－２０アルキルアリール基、Ｃ７－２０アリールアルキル基、Ｃ６－２０アリール基、Ｃ６－２０アリールオキシ基、Ｃ７－２０アルキルアリールオキシ基、Ｃ７－２０アリールアルキルオキシ基、式－ＮＲ’2のアミド基、式－ＰＲ’2のホスフィド基、式－ＳＲ’のチオラート基、式－Ｓｉ（Ｒａ）3のシリル基、及び式－Ｇｅ（Ｒａ）3のゲルマニル基からなる群から選択される１つ以上の置換基によってさらに置換されており；
　ここで、各Ｒ’は、独立して、水素、Ｃ1－２０アルキル基、及びＣ６－２０アリール基からなる群から選択され；
　ここで、各Ｒａは、独立して、水素、Ｃ１－８アルキル基、Ｃ１－８アルコキシ基、Ｃ６－２０アリールオキシ基及びＣ６－２０アリール基からなる群から選択される、
上記重合プロセス。
【０９０７】
＜実施形態１１０＞
　実施形態１０９に記載の重合プロセスであって、前記有機金属錯体が、式ＩＸ：
【化２０９】



(IX)

で表され、
　式中、Ｍ、Ｒ1、Ｒ2、Ｒ19、Ｒ20、Ｒ21、Ｒ22、Ｒ23、Ｒ24、Ｒ25、Ｒ2

^{6}、R^{27}及びX^{1}は、式Ｉ及び式ＶＩＩＩで定義した通りであり；
式中、R^{7}、R^{8}、R^{9}及びR^{10}は、各々独立して、
ハロゲン；
水素；
Ｃ$_{1-30}$ヒドロカルビル基（このヒドロカルビル基は、非置換であるか、又はハロゲン原子、Ｃ$_{1-20}$アルキル基、Ｃ$_{1-20}$アルコキシ基、Ｃ$_{7-20}$アルキルアリール基、Ｃ$_{7-20}$アリールアルキル基、Ｃ$_{6-20}$アリール基、Ｃ$_{6-20}$アリールオキシ基、Ｃ$_{7-20}$アルキルアリールオキシ基、及びＣ$_{7-20}$アリールアルキルオキシ基からなる群から選択される１つ以上の置換基によってさらに置換されている）；
ヘテロ原子含有Ｃ$_{1-30}$ヒドロカルビル基（このヘテロ原子含有ヒドロカルビル基は、非置換であるか、又はハロゲン原子、Ｃ$_{1-20}$アルキル基、Ｃ$_{1-20}$アルコキシ基、Ｃ$_{7-20}$アルキルアリール基、Ｃ$_{7-20}$アリールアルキル基、Ｃ$_{6-20}$アリール基、Ｃ$_{6-20}$アリールオキシ基、Ｃ$_{7-20}$アルキルアリールオキシ基、及びＣ$_{7-20}$アリールアルキルオキシ基からなる群から選択される１つ以上の置換基によってさらに置換されている）；
オキシ基、－ＯＲ’；
アミド基、－ＮＲ’$_{2}$；
ホスフィド基、－ＰＲ’$_{2}$；
チオラート基、－ＳＲ’；
式－Ｓｉ（R^{a}）$_{3}$のシリル基；
式－Ｇｅ（R^{a}）$_{3}$のゲルマニル基；
からなる群から選択され；
ここで、R^{7}、R^{8}、R^{9}及びR^{10}の２つの隣接する基は、任意に結合して環状ヒドロカルビル基又は環状ヘテロ原子含有ヒドロカルビル基を形成してもよく、環状ヒドロカルビル基又は環状ヘテロ原子含有ヒドロカルビル基は、非置換であるか、又はハロゲン原子、Ｃ$_{1-20}$アルキル基、Ｃ$_{1-20}$アルコキシ基、Ｃ$_{7-20}$アルキルアリール基、Ｃ$_{7-20}$アリールアルキル基、Ｃ$_{6-20}$アリール基、Ｃ$_{6-20}$アリールオキシ基、Ｃ$_{7-20}$アルキルアリールオキシ基、Ｃ$_{7-20}$アリールアルキルオキシ基、式－ＮＲ’$_{2}$のアミド基、式－ＰＲ’$_{2}$のホスフィド基、式－ＳＲ’のチオラート基、式－Ｓｉ（R^{a}）$_{3}$のシリル基、及び式－Ｇｅ（R^{a}）$_{3}$のゲルマニル基からなる群から選択される１つ以上の置換基によってさらに置換されており；
ここで、各Ｒ’は、独立して、水素、Ｃ$_{1-20}$アルキル基、及びＣ$_{6-20}$アリール基からなる群から選択され；
ここで、各R^{a}は、独立して、水素、Ｃ$_{1-8}$アルキル基、Ｃ$_{1-8}$アルコキシ基、Ｃ$_{6-20}$アリールオキシ基及びＣ$_{6-20}$アリール基からなる群から選択される、
上記重合プロセス。
【０９０８】
＜実施形態１１１＞
Ｍが Ｔｉである、実施形態１１０に記載の重合プロセス。
【０９０９】
＜実施形態１１２＞
R^{7}、R^{8}、R^{9}及びR^{10}が、各々水素である、実施形態１１０又は１１１に記載の重合プロセス。
【０９１０】
＜実施形態１１３＞
R^{1}及びR^{2}が、各々独立して、非置換のＣ$_{1-30}$ヒドロカルビル基である、実施形態１１０～１１２のいずれか一項に記載の重合プロセス。
【０９１１】
＜実施形態１１４＞
R^{1}及びR^{2}が、各々独立して、イソプロピル、シクロヘキシル及びｔｅｒｔ－ブチル

からなる群から選択される、実施形態１１０～１１３のいずれか一項に記載の重合プロセス。

【０９１２】

＜実施形態１１５＞

R^{23}が、非置換のC_{1-30}ヒドロカルビル基である、実施形態１１０～１１４のいずれか一項に記載の重合プロセス。

【０９１３】

＜実施形態１１６＞

R^{23}が、C_{1-8}アルキル基である、実施形態１１０～１１５のいずれか一項に記載の重合プロセス。

【０９１４】

＜実施形態１１７＞

R^{20}が、非置換のC_{1-30}ヒドロカルビル基である、実施形態１１０～１１６のいずれか一項に記載の重合プロセス。

【０９１５】

＜実施形態１１８＞

R^{20}が、非置換のC_{1-8}アルキル基である、実施形態１１０～１１７のいずれか一項に記載の重合プロセス。

【０９１６】

＜実施形態１１９＞

R^{20}が、非置換のC_{1-30}ヒドロカルビル基であり、R^{19}、R^{21}、R^{22}、R^{24}、R^{25}、R^{26}、及びR^{27}が、各々水素である、実施形態１１０～１１６のいずれか一項に記載の重合プロセス。

【０９１７】

＜実施形態１２０＞

R^{20}が、C_{1-8}アルキル基である、実施形態１１９に記載の重合プロセス。

【０９１８】

＜実施形態１２１＞

各X^1が、独立して、C_{1-6}アルキル基、C_{7-10}アリールアルキル基、及びハロゲンからなる群から選択される、実施形態１１０～１２０のいずれか一項に記載の重合プロセス。

【０９１９】

＜実施形態１２２＞

各X^1が、独立して、メチル基及びＣｌからなる群から選択される、実施形態１１０～１２１のいずれか一項に記載の重合プロセス。

【０９２０】

＜実施形態１２３＞

触媒活性剤が、アルキルアルミノキサン共触媒、有機アルミニウム化合物、ホウ素系触媒活性剤、及びそれらの混合物からなる群から選択される、実施形態８３～１２２のいずれか一項に記載の重合プロセス。

【０９２１】

＜実施形態１２４＞

ホウ素系触媒活性剤が、［（水素化牛脂アルキル）$_2$（Ｍｅ）ＮＨ］［Ｂ（C_6F_5）$_4$］；Ｎ，Ｎ－ジメチルアニリニウムテトラキス（ペンタフルオロフェニル）ボレート（「［Me_2NHPh］［Ｂ（C_6F_5）$_4$］」）；及びトリフェニルメチリウムテトラキス（ペンタフルオロフェニル）ボレート（「［Ph_3C］［Ｂ（C_6F_5）$_4$］」）からなる群から選択される、実施形態１２３に記載の重合プロセス。

【０９２２】

＜実施形態１２５＞

１つ以上のC_3－C_{12}アルファ－オレフィンが、１－ブテン、１－ヘキセン、及び１

－オクテンからなる群から選択される１つ以上のアルファ－オレフィンを含む、実施形態８３～１２４のいずれか一項に記載の重合プロセス。

【０９２３】

＜実施形態１２６＞

重合プロセスが、エチレンを１－オクテンと重合することを含む、実施形態８３～１２４のいずれか一項に記載の重合プロセス。

【０９２４】

＜実施形態１２７＞

重合プロセスが、溶媒中で行われる溶液相重合プロセスである、実施形態８３～１２６のいずれか一項に記載の重合プロセス。

【０９２５】

＜実施形態１２８＞

溶液相重合プロセスが、少なくとも１６０℃の温度で行われる、実施形態１２７に記載の重合プロセス。

【０９２６】

＜実施形態１２９＞

重合プロセスが、溶媒中で行われる連続溶液相重合プロセスである、実施形態８３～１２６のいずれか一項に記載の重合プロセス。

【０９２７】

＜実施形態１３０＞

連続溶液相重合プロセスが、少なくとも１つの連続撹拌タンク反応器内で行われる、実施形態１２９に記載の重合プロセス。

【０９２８】

＜実施形態１３１＞

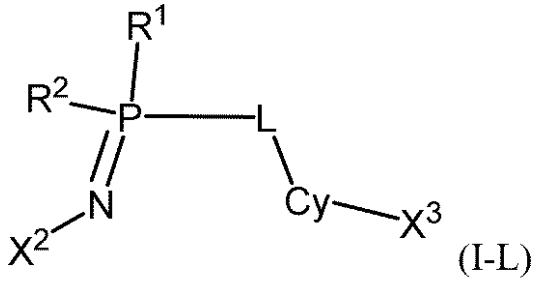
連続溶液相重合プロセスが、少なくとも１６０℃の温度で行われる、実施形態１２９又は１３０に記載の重合プロセス。

【０９２９】

＜実施形態１３２＞

プレメタル化化合物であって、式Ｉ－Ｌ：

【化２１０】



(I-L)

で表され、

式中、

R^1及びR^2は、各々独立して、水素及びR^Xからなる群から選択されるか；又はR^1及びR^2は、それらが結合しているＰ原子と一緒になって、非置換であるか、又はハロゲン原子、C_{1-20}アルキル基、C_{1-20}アルコキシ基、C_{7-20}アルキルアリール基、C_{7-20}アリールアルキル基、C_{6-20}アリール基、C_{6-20}アリールオキシ基、C_{7-20}アルキルアリールオキシ基、及びC_{7-20}アリールアルキルオキシ基からなる群から選択される１つ以上の置換基によってさらに置換されている３－１０員複素環式基を形成し；

各R^Xは、独立して、ハロゲン原子；C_{1-30}ヒドロカルビル基（このヒドロカルビル基は、非置換であるか、又は１つ以上のハロゲン原子、C_{1-20}アルキル基、C_{1-20}アルコキシ基、C_{7-20}アルキルアリール基、C_{7-20}アリールアルキル基、C_{6-20}アリール基、C_{6-20}アリールオキシ基、C_{7-20}アルキルアリールオキシ基、及び／又はC_{7-20}アリールアルキルオキシ基によってさらに置換されている）；式－NR'_2のアミド基；式－$Si(R^a)_3$のシリル基；式－$Ge(R^a)_3$のゲルマニル基；及び式N＝P（R^b）（R^c）（R^d）のホスフィンイミン基からなる群から選択され；ここで、各R'は、独立して、水素、C_{1-20}アルキル基、及びC_{6-20}アリール基からなる群から選択され；ここで、各R^aは、独立して、水素、C_{1-8}アルキル基、C_{1-8}アルコキシ基、C_{6-20}アリールオキシ基及びC_{6-20}アリール基からなる群から選択され、R^b、R^c、R^dは、各々独立して、C_{1-20}アルキル基であり；

Cyは、シクロペンタジエニル型部分であり、L及びX^3に共有結合しており；

X^2は、水素、又は式－Si（R^e）$_3$のシリル基であり；

X^3は、水素、又は式－Si（R^e）$_3$のシリル基、若しくは式Sn（R^e）$_3$のスタンニル基であり；

ここで、各R^eは、独立して、水素、C_{1-8}アルキル基、C_{1-8}アルコキシ基、C_{6-20}アリールオキシ基、及びC_{6-20}アリール基からなる群から選択され；

Lは、PとCyを連結する原子の連続鎖を含む架橋基であり、連続鎖は２個又は３個の原子を含む、

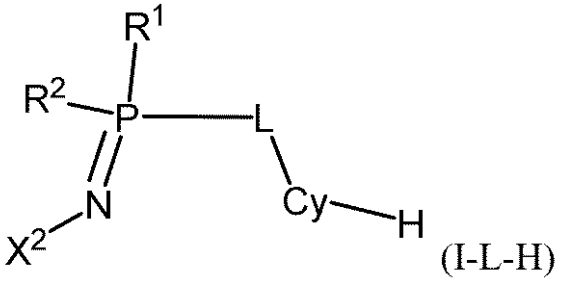
プレメタル化化合物。

【０９３０】

＜実施形態１３３＞

プレメタル化化合物であって、式Ｉ－Ｌ－Ｈ：

【化２１１】



(I-L-H)

で表され、

式中、

R^1及びR^2は、各々独立して、水素及びR^Xからなる群から選択されるか；又はR^1及びR^2は、それらが結合しているP原子と一緒になって、非置換であるか、又はハロゲン原子、C_{1-20}アルキル基、C_{1-20}アルコキシ基、C_{7-20}アルキルアリール基、C_{7-20}アリールアルキル基、C_{6-20}アリール基、C_{6-20}アリールオキシ基、C_{7-20}アルキルアリールオキシ基、及びC_{7-20}アリールアルキルオキシ基からなる群から選択される１つ以上の置換基によってさらに置換されている３－１０員複素環式基を形成し；

各R^Xは、独立して、ハロゲン原子；C_{1-30}ヒドロカルビル基（このヒドロカルビル基は、非置換であるか、又は１つ以上のハロゲン原子、C_{1-20}アルキル基、C_{1-20}アルコキシ基、C_{7-20}アルキルアリール基、C_{7-20}アリールアルキル基、C_{6-20}アリール基、C_{6-20}アリールオキシ基、C_{7-20}アルキルアリールオキシ基、及び／又はC_{7-20}アリールアルキルオキシ基によってさらに置換されている）；式－NR'_2のアミド基；式－$Si(R^a)_3$のシリル基；式－$Ge(R^a)_3$のゲルマニル基；及び式N＝P（R^b）（R^c）（R^d）のホスフィンイミン基からなる群から選択され

；ここで、各Ｒ’は、独立して、水素、Ｃ$_{1-20}$アルキル基、及びＣ$_{6-20}$アリール基からなる群から選択され；ここで、各Ｒ^{a}は、独立して、水素、Ｃ$_{1-8}$アルキル基、Ｃ$_{1-8}$アルコキシ基、Ｃ$_{6-20}$アリールオキシ基及びＣ$_{6-20}$アリール基からなる群から選択され、Ｒ^{b}、Ｒ^{c}、Ｒ^{d}は、各々独立して、Ｃ$_{1-20}$アルキル基であり；

Ｘ^{2}は、水素、又は式－Ｓｉ（Ｒ^{e}）$_{3}$のシリル基であり、ここで、各Ｒ^{e}は、独立して、水素、Ｃ$_{1-8}$アルキル基、Ｃ$_{1-8}$アルコキシ基、Ｃ$_{6-20}$アリールオキシ基及びＣ$_{6-20}$アリール基からなる群から選択され；

Ｃｙは、シクロペンタジエニル型部分であり、Ｌ及びＨに共有結合しており；

Ｌは、ＰとＣｙを連結する原子の連続鎖を含む架橋基であり、連続鎖は２個又は３個の原子を含む、

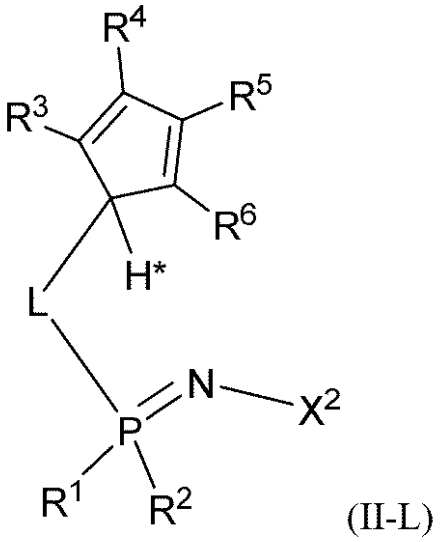
プレメタル化化合物。

【０９３１】

＜実施形態１３４＞

実施形態１３３に記載のプレメタル化化合物であって、当該プレメタル化化合物は、式ＩＩ－Ｌ：

【化２１２】



(II-L)

で表されるか、又はシクロペンタジエニル環内の水素Ｈ＊の移動によって得られる式ＩＩ－Ｌの二重結合異性体であり；

式中、Ｒ^{1}、Ｒ^{2}、Ｌ及びＸ^{2}は、式Ｉ－Ｌ－Ｈで定義した通りであり；

式中、Ｒ^{3}、Ｒ^{4}、Ｒ^{5}及びＲ^{6}は、各々独立して、

ハロゲン；

水素；

Ｃ$_{1-30}$ヒドロカルビル基（このヒドロカルビル基は、非置換であるか、又はハロゲン原子、Ｃ$_{1-20}$アルキル基、Ｃ$_{1-20}$アルコキシ基、Ｃ$_{7-20}$アルキルアリール基、Ｃ$_{7-20}$アリールアルキル基、Ｃ$_{6-20}$アリール基、Ｃ$_{6-20}$アリールオキシ基、Ｃ$_{7-20}$アルキルアリールオキシ基、及びＣ$_{7-20}$アリールアルキルオキシ基からなる群から選択される１つ以上の置換基によってさらに置換されている）；

ヘテロ原子含有Ｃ$_{1-30}$ヒドロカルビル基（このヘテロ原子含有ヒドロカルビル基は、非置換であるか、又はハロゲン原子、Ｃ$_{1-20}$アルキル基、Ｃ$_{1-20}$アルコキシ基、Ｃ$_{7-20}$アルキルアリール基、Ｃ$_{7-20}$アリールアルキル基、Ｃ$_{6-20}$アリール基、Ｃ$_{6-20}$アリールオキシ基、Ｃ$_{7-20}$アルキルアリールオキシ基、及びＣ$_{7-20}$アリールアルキルオキシ基からなる群から選択される１つ以上の置換基によってさらに置換されている）；

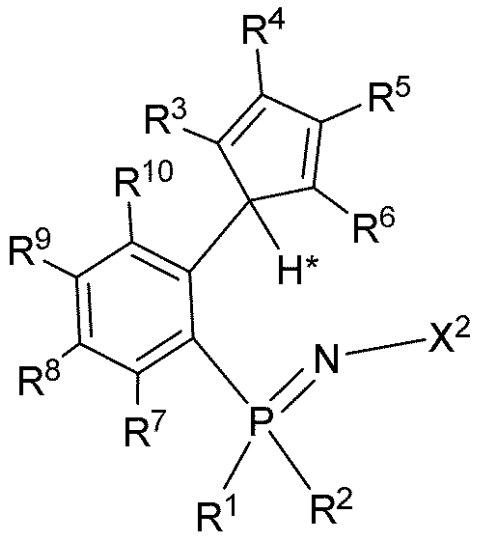
オキシ基、－ＯＲ’；
アミド基、－ＮＲ’$_2$；
ホスフィド基、－ＰＲ’$_2$；
チオラート基、－ＳＲ’；
式－Ｓｉ（Ｒ^a）$_3$のシリル基；
式－Ｇｅ（Ｒ^a）$_3$のゲルマニル基；
からなる群から選択され；
ここで、Ｒ^3、Ｒ^4、Ｒ^{5}及びＲ^{6}の２つの隣接する基は、任意に結合して環状ヒドロカルビル基又は環状ヘテロ原子含有ヒドロカルビル基を形成してもよく、環状ヒドロカルビル基又は環状ヘテロ原子含有ヒドロカルビル基は、非置換であるか、又はハロゲン原子、Ｃ$_{1-20}$アルキル基、Ｃ$_{1-20}$アルコキシ基、Ｃ$_{7-20}$アルキルアリール基、Ｃ$_{7-20}$アリールアルキル基、Ｃ$_{6-20}$アリール基、Ｃ$_{6-20}$アリールオキシ基、Ｃ$_{7-20}$アルキルアリールオキシ基、Ｃ$_{7-20}$アリールアルキルオキシ基、式－ＮＲ’$_2$のアミド基、式－ＰＲ’$_2$のホスフィド基、式－ＳＲ’のチオラート基、式－Ｓｉ（Ｒ^a）$_3$のシリル基、及び式－Ｇｅ（Ｒ^a）$_3$のゲルマニル基からなる群から選択される１つ以上の置換基によってさらに置換されており；
ここで、各Ｒ’は、独立して、水素、Ｃ$_{1-20}$アルキル基、及びＣ$_{6-20}$アリール基からなる群から選択され；
ここで、各Ｒ^{a}は、独立して、水素、Ｃ$_{1-8}$アルキル基、Ｃ$_{1-8}$アルコキシ基、Ｃ$_{6-20}$アリールオキシ基及びＣ$_{6-20}$アリール基からなる群から選択される、
上記プレメタル化化合物。

【０９３２】

＜実施形態１３５＞

実施形態１３４に記載のプレメタル化化合物であって、当該プレメタル化化合物は、式ＩＩＩ－Ｌ：

【化２１３】



(III-L)

で表されるか、又はシクロペンタジエニル環内の水素Ｈ＊の移動によって得られる式ＩＩＩ－Ｌの二重結合異性体であり；
式中、Ｒ^1、Ｒ^2、Ｒ^3、Ｒ^4、Ｒ^5、Ｒ^6、及びＸ^{2}は、式Ｉ－Ｌ－Ｈ及び式ＩＩ－Ｌで定義した通りであり；
式中、Ｒ^7、Ｒ^8、Ｒ^{9}及びＲ^{10}は、各々独立して、
ハロゲン；
水素；

Ｃ１－３０ヒドロカルビル基（このヒドロカルビル基は、非置換であるか、又はハロゲン原子、Ｃ１－２０アルキル基、Ｃ１－２０アルコキシ基、Ｃ７－２０アルキルアリール基、Ｃ７－２０アリールアルキル基、Ｃ６－２０アリール基、Ｃ６－２０アリールオキシ基、Ｃ７－２０アルキルアリールオキシ基、及びＣ７－２０アリールアルキルオキシ基からなる群から選択される１つ以上の置換基によってさらに置換されている）；

ヘテロ原子含有Ｃ１－３０ヒドロカルビル基（このヘテロ原子含有ヒドロカルビル基は、非置換であるか、又はハロゲン原子、Ｃ１－２０アルキル基、Ｃ１－２０アルコキシ基、Ｃ７－２０アルキルアリール基、Ｃ７－２０アリールアルキル基、Ｃ６－２０アリール基、Ｃ６－２０アリールオキシ基、Ｃ７－２０アルキルアリールオキシ基、及びＣ７－２０アリールアルキルオキシ基からなる群から選択される１つ以上の置換基によってさらに置換されている）；

オキシ基、－ＯＲ’；

アミド基、－ＮＲ’$_2$；

ホスフィド基、－ＰＲ’$_2$；

チオラート基、－ＳＲ’；

式－Ｓｉ（Ｒ^a）$_3$のシリル基；

式－Ｇｅ（Ｒ^a）$_3$のゲルマニル基；

からなる群から選択され；

ここで、Ｒ^7、Ｒ^8、Ｒ^{9}及びＲ^{10}の２つの隣接する基は、任意に結合して環状ヒドロカルビル基又は環状ヘテロ原子含有ヒドロカルビル基を形成してもよく、環状ヒドロカルビル基又は環状ヘテロ原子含有ヒドロカルビル基は、非置換であるか、又はハロゲン原子、Ｃ１－２０アルキル基、Ｃ１－２０アルコキシ基、Ｃ７－２０アルキルアリール基、Ｃ７－２０アリールアルキル基、Ｃ６－２０アリール基、Ｃ６－２０アリールオキシ基、Ｃ７－２０アルキルアリールオキシ基、Ｃ７－２０アリールアルキルオキシ基、式－ＮＲ’$_2$のアミド基、式－ＰＲ’$_2$のホスフィド基、式－ＳＲ’のチオラート基、式－Ｓｉ（Ｒ^a）$_3$のシリル基、及び式－Ｇｅ（Ｒ^a）$_3$のゲルマニル基からなる群から選択される１つ以上の置換基によってさらに置換されており；

ここで、各Ｒ’は、独立して、水素、Ｃ$_{1-20}$アルキル基、及びＣ６－２０アリール基からなる群から選択され；

ここで、各Ｒ^{a}は、独立して、水素、Ｃ１－８アルキル基、Ｃ１－８アルコキシ基、Ｃ６－２０アリールオキシ基及びＣ６－２０アリール基からなる群から選択される、

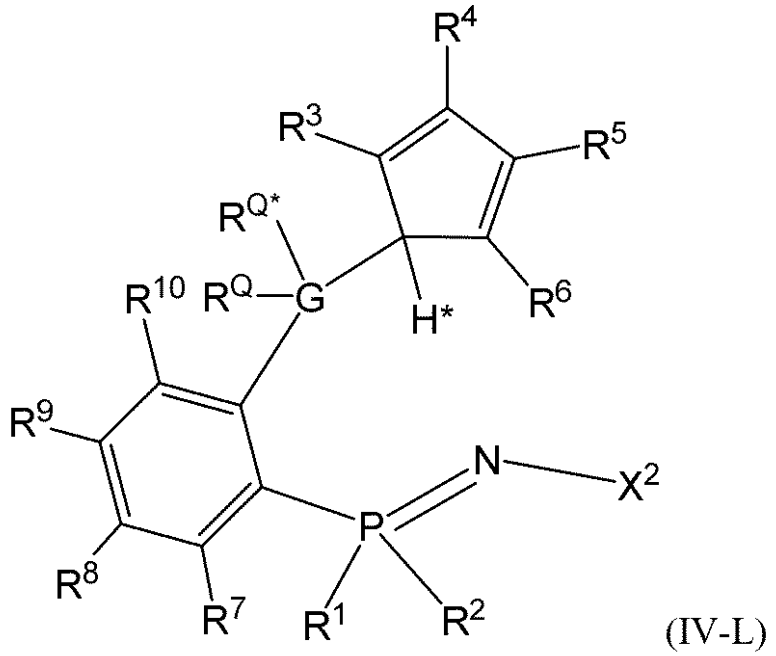
上記プレメタル化化合物。

【０９３３】

＜実施形態１３６＞

実施形態１３４に記載のプレメタル化化合物であって、当該プレメタル化化合物は、式ＩＶ－Ｌ：

【化２１４】



(IV-L)

で表されるか、又はシクロペンタジエニル環内の水素Ｈ＊の移動によって得られる式ＩＶ－Ｌの二重結合異性体であり；

式中、Ｒ^{1}、Ｒ^{2}、Ｒ^{3}、Ｒ^{4}、Ｒ^{5}、Ｒ^{6}、及びＸ^{2}は、式Ｉ－Ｌ－Ｈ及び式ＩＩ－Ｌで定義した通りであり；

式中、Ｇは、Ｃ又はＳｉであり；

式中、Ｒ^{Q}及びＲ^{Q}＊は、各々独立して、

ハロゲン；

水素；

Ｃ$_{1-30}$ヒドロカルビル基（このヒドロカルビル基は、非置換であるか、又はハロゲン原子、Ｃ$_{1-20}$アルキル基、Ｃ$_{1-20}$アルコキシ基、Ｃ$_{7-20}$アルキルアリール基、Ｃ$_{7-20}$アリールアルキル基、Ｃ$_{6-20}$アリール基、Ｃ$_{6-20}$アリールオキシ基、Ｃ$_{7-20}$アルキルアリールオキシ基、及びＣ$_{7-20}$アリールアルキルオキシ基からなる群から選択される１つ以上の置換基によってさらに置換されている）；

ヘテロ原子含有Ｃ$_{1-30}$ヒドロカルビル基（このヘテロ原子含有ヒドロカルビル基は、非置換であるか、又はハロゲン原子、Ｃ$_{1-20}$アルキル基、Ｃ$_{1-20}$アルコキシ基、Ｃ$_{7-20}$アルキルアリール基、Ｃ$_{7-20}$アリールアルキル基、Ｃ$_{6-20}$アリール基、Ｃ$_{6-20}$アリールオキシ基、Ｃ$_{7-20}$アルキルアリールオキシ基、及びＣ$_{7-20}$アリールアルキルオキシ基からなる群から選択される１つ以上の置換基によってさらに置換されている）；

ここで、Ｒ^{Q}及びＲ^{Q}＊の基は、任意に結合して環状ヒドロカルビル基又は環状ヘテロ原子含有ヒドロカルビル基を形成してもよく、環状ヒドロカルビル基又は環状ヘテロ原子含有ヒドロカルビル基は、非置換であるか、又はハロゲン原子、Ｃ$_{1-20}$アルキル基、Ｃ$_{1-20}$アルコキシ基、Ｃ$_{7-20}$アルキルアリール基、Ｃ$_{7-20}$アリールアルキル基、Ｃ$_{6-20}$アリール基、Ｃ$_{6-20}$アリールオキシ基、Ｃ$_{7-20}$アルキルアリールオキシ基、Ｃ$_{7-20}$アリールアルキルオキシ基、式－ＮＲ’$_{2}$のアミド基、式－ＰＲ’$_{2}$のホスフィド基、式－ＳＲ’のチオラート基、式－Ｓｉ（Ｒ^{a}）$_{3}$のシリル基、及び式－Ｇｅ（Ｒ^{a}）$_{3}$のゲルマニル基からなる群から選択される１つ以上の置換基によってさらに置換されており；

式中、Ｒ^{7}、Ｒ^{8}、Ｒ^{9}及びＲ^{10}は、各々独立して、

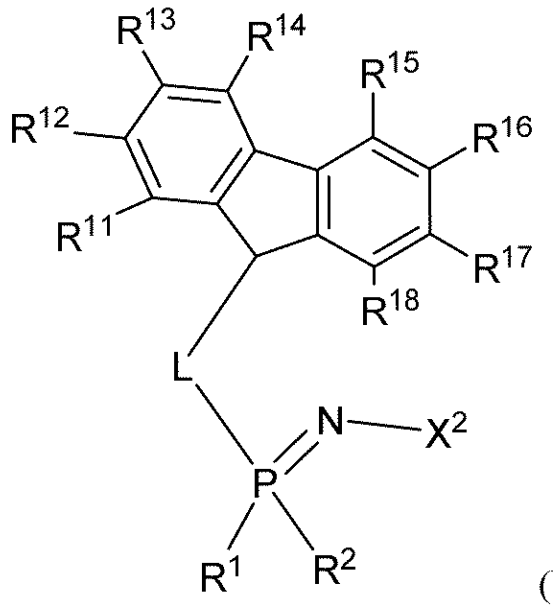
ハロゲン；
水素；
C_{1-30}ヒドロカルビル基（このヒドロカルビル基は、非置換であるか、又はハロゲン原子、C_{1-20}アルキル基、C_{1-20}アルコキシ基、C_{7-20}アルキルアリール基、C_{7-20}アリールアルキル基、C_{6-20}アリール基、C_{6-20}アリールオキシ基、C_{7-20}アルキルアリールオキシ基、及びC_{7-20}アリールアルキルオキシ基からなる群から選択される１つ以上の置換基によってさらに置換されている）；
ヘテロ原子含有C_{1-30}ヒドロカルビル基（このヘテロ原子含有ヒドロカルビル基は、非置換であるか、又はハロゲン原子、C_{1-20}アルキル基、C_{1-20}アルコキシ基、C_{7-20}アルキルアリール基、C_{7-20}アリールアルキル基、C_{6-20}アリール基、C_{6-20}アリールオキシ基、C_{7-20}アルキルアリールオキシ基、及びC_{7-20}アリールアルキルオキシ基からなる群から選択される１つ以上の置換基によってさらに置換されている）；
オキシ基、－ＯＲ’；
アミド基、－ＮＲ’$_2$；
ホスフィド基、－ＰＲ’$_2$；
チオラート基、－ＳＲ’；
式－Ｓｉ（R^a）$_3$のシリル基；
式－Ｇｅ（R^a）$_3$のゲルマニル基；
からなる群から選択され；
ここで、R^7、R^8、R^9及びR^{10}の２つの隣接する基は、任意に結合して環状ヒドロカルビル基又は環状ヘテロ原子含有ヒドロカルビル基を形成してもよく、環状ヒドロカルビル基又は環状ヘテロ原子含有ヒドロカルビル基は、非置換であるか、又はハロゲン原子、C_{1-20}アルキル基、C_{1-20}アルコキシ基、C_{7-20}アルキルアリール基、C_{7-20}アリールアルキル基、C_{6-20}アリール基、C_{6-20}アリールオキシ基、C_{7-20}アルキルアリールオキシ基、C_{7-20}アリールアルキルオキシ基、式－ＮＲ’$_2$のアミド基、式－ＰＲ’$_2$のホスフィド基、式－ＳＲ’のチオラート基、式－Ｓｉ（R^a）$_3$のシリル基、及び式－Ｇｅ（R^a）$_3$のゲルマニル基からなる群から選択される１つ以上の置換基によってさらに置換されており；
ここで、各Ｒ’は、独立して、水素、C_{1-20}アルキル基、及びC_{6-20}アリール基からなる群から選択され；
ここで、各R^aは、独立して、水素、C_{1-8}アルキル基、C_{1-8}アルコキシ基、C_{6-20}アリールオキシ基及びC_{6-20}アリール基からなる群から選択される、
上記プレメタル化化合物。

【０９３４】

＜実施形態１３７＞

実施形態１３３に記載のプレメタル化化合物であって、当該プレメタル化化合物は、式Ｖ－Ｌ：

【化２１５】



(V-L)

で表され、
式中、R^1、R^2、Ｌ及びX^2は、式Ｉ－Ｌ－Ｈで定義した通りであり；
式中、R^{11}、R^{12}、R^{13}、R^{14}、R^{15}、R^{16}、R^{17}、R^{18}は、各々独立して、
ハロゲン；
水素；
C_{1-30}ヒドロカルビル基（このヒドロカルビル基は、非置換であるか、又はハロゲン原子、C_{1-20}アルキル基、C_{1-20}アルコキシ基、C_{7-20}アルキルアリール基、C_{7-20}アリールアルキル基、C_{6-20}アリール基、C_{6-20}アリールオキシ基、C_{7-20}アルキルアリールオキシ基、及びC_{7-20}アリールアルキルオキシ基からなる群から選択される１つ以上の置換基によってさらに置換されている）；
ヘテロ原子含有C_{1-30}ヒドロカルビル基（このヘテロ原子含有ヒドロカルビル基は、非置換であるか、又はハロゲン原子、C_{1-20}アルキル基、C_{1-20}アルコキシ基、C_{7-20}アルキルアリール基、C_{7-20}アリールアルキル基、C_{6-20}アリール基、C_{6-20}アリールオキシ基、C_{7-20}アルキルアリールオキシ基、及びC_{7-20}アリールアルキルオキシ基からなる群から選択される１つ以上の置換基によってさらに置換されている）；
オキシ基、－ＯＲ’；
アミド基、－ＮＲ’$_2$；
ホスフィド基、－ＰＲ’$_2$；
チオラート基、－ＳＲ’；
式－Ｓｉ（R^a）$_3$のシリル基；
式－Ｇｅ（R^a）$_3$のゲルマニル基；
からなる群から選択され；
ここで、R^{11}、R^{12}、R^{13}、R^{14}、R^{15}、R^{16}、R^{17}、R^{18}の２つの隣接する基は、任意に結合して環状ヒドロカルビル基又は環状ヘテロ原子含有ヒドロカルビル基を形成してもよく、環状ヒドロカルビル基又は環状ヘテロ原子含有ヒドロカルビル基は、非置換であるか、又はハロゲン原子、C_{1-20}アルキル基、C_{1-20}アルコキシ基、C_{7-20}アルキルアリール基、C_{7-20}アリールアルキル基、C_{6-20}アリール基、C_{6-20}アリールオキシ基、C_{7-20}アルキルアリールオキシ基、C_{7-20}アリール

アルキルオキシ基、式－ＮＲ’$_2$のアミド基、式－ＰＲ’$_2$のホスフィド基、式－ＳＲ’のチオラート基、式－Ｓｉ（Ｒ^a）$_3$のシリル基、及び式－Ｇｅ（Ｒ^a）$_3$のゲルマニル基からなる群から選択される１つ以上の置換基によってさらに置換されており；

ここで、各Ｒ’は、独立して、水素、Ｃ$_{1-20}$アルキル基、及びＣ$_{6-20}$アリール基からなる群から選択され；

ここで、各Ｒ^{a}は、独立して、水素、Ｃ$_{1-8}$アルキル基、Ｃ$_{1-8}$アルコキシ基、Ｃ$_{6-20}$アリールオキシ基及びＣ$_{6-20}$アリール基からなる群から選択される、

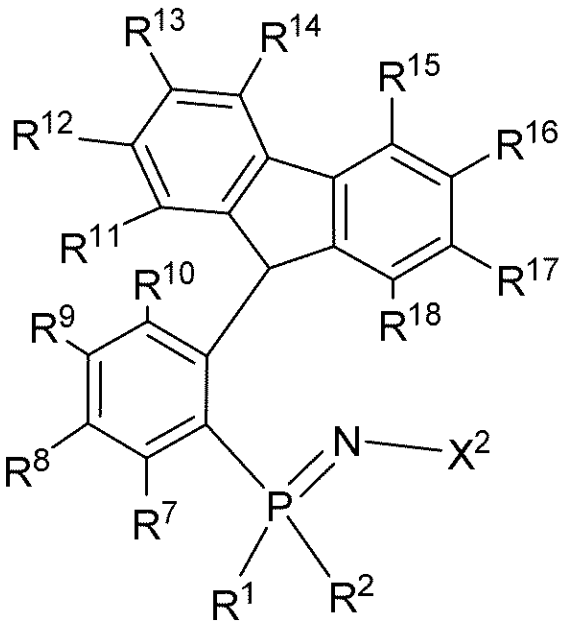
上記プレメタル化化合物。

【０９３５】

＜実施形態１３８＞

実施形態１３７に記載のプレメタル化化合物であって、当該プレメタル化化合物は、式ＶＩ－Ｌ：

【化２１６】



(VI-L)

で表され、

式中、Ｒ^1、Ｒ^2、Ｒ^{11}、Ｒ^{12}、Ｒ^{13}、Ｒ^{14}、Ｒ^{15}、Ｒ^{16}、Ｒ^{17}、Ｒ^{18}、及びＸ^{2}は、式Ｉ－Ｌ－Ｈ及び式Ｖ－Ｌで定義した通りであり；

式中、Ｒ^7、Ｒ^8、Ｒ^{9}及びＲ^{10}は、各々独立して、

ハロゲン；

水素；

Ｃ$_{1-30}$ヒドロカルビル基（このヒドロカルビル基は、非置換であるか、又はハロゲン原子、Ｃ$_{1-20}$アルキル基、Ｃ$_{1-20}$アルコキシ基、Ｃ$_{7-20}$アルキルアリール基、Ｃ$_{7-20}$アリールアルキル基、Ｃ$_{6-20}$アリール基、Ｃ$_{6-20}$アリールオキシ基、Ｃ$_{7-20}$アルキルアリールオキシ基、及びＣ$_{7-20}$アリールアルキルオキシ基からなる群から選択される１つ以上の置換基によってさらに置換されている）；

ヘテロ原子含有Ｃ$_{1-30}$ヒドロカルビル基（このヘテロ原子含有ヒドロカルビル基は、非置換であるか、又はハロゲン原子、Ｃ$_{1-20}$アルキル基、Ｃ$_{1-20}$アルコキシ基、Ｃ$_{7-20}$アルキルアリール基、Ｃ$_{7-20}$アリールアルキル基、Ｃ$_{6-20}$アリール基、Ｃ$_{6-20}$アリールオキシ基、Ｃ$_{7-20}$アルキルアリールオキシ基、及びＣ$_{7-20}$アリールアルキルオキシ基からなる群から選択される１つ以上の置換基によってさらに置換されている）；

オキシ基、－ＯＲ’；

アミド基、－ＮＲ’$_2$；
ホスフィド基、－ＰＲ’$_2$；
チオラート基、－ＳＲ’；
式－Ｓｉ（Ｒ^a）$_3$のシリル基；
式－Ｇｅ（Ｒ^a）$_3$のゲルマニル基；
からなる群から選択され；
ここで、Ｒ^7、Ｒ^8、Ｒ^{9}及びＲ^{10}の２つの隣接する基は、任意に結合して環状ヒドロカルビル基又は環状ヘテロ原子含有ヒドロカルビル基を形成してもよく、環状ヒドロカルビル基又は環状ヘテロ原子含有ヒドロカルビル基は、非置換であるか、又はハロゲン原子、Ｃ$_{1-20}$アルキル基、Ｃ$_{1-20}$アルコキシ基、Ｃ$_{7-20}$アルキルアリール基、Ｃ$_{7-20}$アリールアルキル基、Ｃ$_{6-20}$アリール基、Ｃ$_{6-20}$アリールオキシ基、Ｃ$_{7-20}$アルキルアリールオキシ基、Ｃ$_{7-20}$アリールアルキルオキシ基、式－ＮＲ’$_2$のアミド基、式－ＰＲ’$_2$のホスフィド基、式－ＳＲ’のチオラート基、式－Ｓｉ（Ｒ^a）$_3$のシリル基、及び式－Ｇｅ（Ｒ^a）$_3$のゲルマニル基からなる群から選択される１つ以上の置換基によってさらに置換されており；
ここで、各Ｒ’は、独立して、水素、Ｃ$_{1-20}$アルキル基、及びＣ$_{6-20}$アリール基からなる群から選択され；
ここで、各Ｒ^{a}は、独立して、水素、Ｃ$_{1-8}$アルキル基、Ｃ$_{1-8}$アルコキシ基、Ｃ$_{6-20}$アリールオキシ基及びＣ$_{6-20}$アリール基からなる群から選択される、
上記プレメタル化化合物。

【０９３６】

＜実施形態１３９＞

Ｒ^7、Ｒ^8、Ｒ^{9}及びＲ^{10}が、各々水素である、実施形態１３８に記載のプレメタル化化合物。

【０９３７】

＜実施形態１４０＞

Ｒ^{1}及びＲ^{2}が、各々独立して、非置換のＣ$_{1-30}$ヒドロカルビル基である、実施形態１３８又は１３９に記載のプレメタル化化合物。

【０９３８】

＜実施形態１４１＞

Ｒ^{1}及びＲ^{2}が、各々独立して、イソプロピル、シクロヘキシル及びｔｅｒｔ－ブチルからなる群から選択される、実施形態１３８～１４０のいずれか一項に記載のプレメタル化化合物。

【０９３９】

＜実施形態１４２＞

Ｒ^{12}及びＲ^{17}が、各々独立して、非置換のＣ$_{1-30}$ヒドロカルビル基であり、Ｒ^{11}、Ｒ^{13}、Ｒ^{14}、Ｒ^{15}、Ｒ^{16}及びＲ^{18}が、各々水素である、実施形態１３８～１４１のいずれか一項に記載のプレメタル化化合物。

【０９４０】

＜実施形態１４３＞

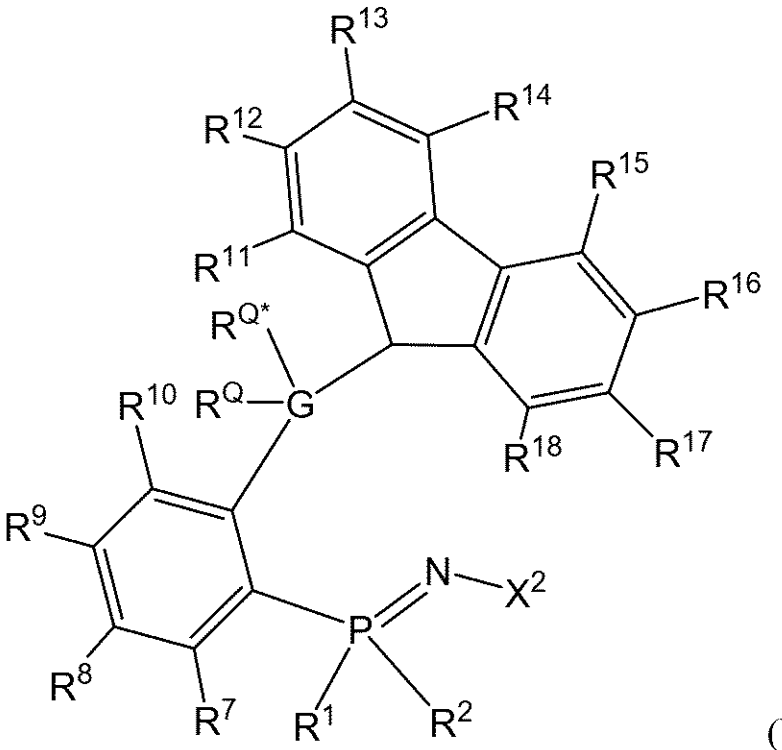
Ｒ^{12}及びＲ^{17}が、各々ｔｅｒｔ－ブチル基である、実施形態１３８～１４２のいずれか一項に記載のプレメタル化化合物。

【０９４１】

＜実施形態１４４＞

実施形態１３７に記載のプレメタル化化合物であって、当該プレメタル化化合物は、式ＶＩＩ－Ｌ：

【化２１７】



(VII-L)

で表され、

式中、R^1、R^2、R^{11}、R^{12}、R^{13}、R^{14}、R^{15}、R^{16}、R^{17}、R^{18}、及びX^2は、式Ｉ－Ｌ－Ｈ及び式Ｖ－Ｌで定義した通りであり；

式中、Ｇは、Ｃ又はＳｉであり；

式中、R^Q及びR^{Q*}は、各々独立して、

ハロゲン；

水素；

C_{1-30}ヒドロカルビル基（このヒドロカルビル基は、非置換であるか、又はハロゲン原子、C_{1-20}アルキル基、C_{1-20}アルコキシ基、C_{7-20}アルキルアリール基、C_{7-20}アリールアルキル基、C_{6-20}アリール基、C_{6-20}アリールオキシ基、C_{7-20}アルキルアリールオキシ基、及びC_{7-20}アリールアルキルオキシ基からなる群から選択される１つ以上の置換基によってさらに置換されている）；

ヘテロ原子含有C_{1-30}ヒドロカルビル基（このヘテロ原子含有ヒドロカルビル基は、非置換であるか、又はハロゲン原子、C_{1-20}アルキル基、C_{1-20}アルコキシ基、C_{7-20}アルキルアリール基、C_{7-20}アリールアルキル基、C_{6-20}アリール基、C_{6-20}アリールオキシ基、C_{7-20}アルキルアリールオキシ基、及びC_{7-20}アリールアルキルオキシ基からなる群から選択される１つ以上の置換基によってさらに置換されている）；

ここで、R^Q及びR^{Q*}の基は、任意に結合して環状ヒドロカルビル基又は環状ヘテロ原子含有ヒドロカルビル基を形成してもよく、環状ヒドロカルビル基又は環状ヘテロ原子含有ヒドロカルビル基は、非置換であるか、又はハロゲン原子、C_{1-20}アルキル基、C_{1-20}アルコキシ基、C_{7-20}アルキルアリール基、C_{7-20}アリールアルキル基、C_{6-20}アリール基、C_{6-20}アリールオキシ基、C_{7-20}アルキルアリールオキシ基、C_{7-20}アリールアルキルオキシ基、式－NR'_2のアミド基、式－PR'_2のホスフィド基、式－SR'のチオラート基、式－$Si(R^a)_3$のシリル基、及び式－$Ge(R^a)_3$のゲルマニル基からなる群から選択される１つ以上の置換基によってさらに置換されており；

式中、R^7、R^8、R^9及びR^{10}は、各々独立して、
ハロゲン；
水素；
C_{1-30}ヒドロカルビル基（このヒドロカルビル基は、非置換であるか、又はハロゲン原子、C_{1-20}アルキル基、C_{1-20}アルコキシ基、C_{7-20}アルキルアリール基、C_{7-20}アリールアルキル基、C_{6-20}アリール基、C_{6-20}アリールオキシ基、C_{7-20}アルキルアリールオキシ基、及びC_{7-20}アリールアルキルオキシ基からなる群から選択される１つ以上の置換基によってさらに置換されている）；
ヘテロ原子含有C_{1-30}ヒドロカルビル基（このヘテロ原子含有ヒドロカルビル基は、非置換であるか、又はハロゲン原子、C_{1-20}アルキル基、C_{1-20}アルコキシ基、C_{7-20}アルキルアリール基、C_{7-20}アリールアルキル基、C_{6-20}アリール基、C_{6-20}アリールオキシ基、C_{7-20}アルキルアリールオキシ基、及びC_{7-20}アリールアルキルオキシ基からなる群から選択される１つ以上の置換基によってさらに置換されている）；
オキシ基、－ＯＲ’；
アミド基、－ＮＲ’$_2$；
ホスフィド基、－ＰＲ’$_2$；
チオラート基、－ＳＲ’；
式－Ｓｉ（R^a）$_3$のシリル基；
式－Ｇｅ（R^a）$_3$のゲルマニル基；
からなる群から選択され；
ここで、R^7、R^8、R^9及びR^{10}の２つの隣接する基は、任意に結合して環状ヒドロカルビル基又は環状ヘテロ原子含有ヒドロカルビル基を形成してもよく、環状ヒドロカルビル基又は環状ヘテロ原子含有ヒドロカルビル基は、非置換であるか、又はハロゲン原子、C_{1-20}アルキル基、C_{1-20}アルコキシ基、C_{7-20}アルキルアリール基、C_{7-20}アリールアルキル基、C_{6-20}アリール基、C_{6-20}アリールオキシ基、C_{7-20}アルキルアリールオキシ基、C_{7-20}アリールアルキルオキシ基、式－ＮＲ’$_2$のアミド基、式－ＰＲ’$_2$のホスフィド基、式－ＳＲ’のチオラート基、式－Ｓｉ（R^a）$_3$のシリル基、及び式－Ｇｅ（R^a）$_3$のゲルマニル基からなる群から選択される１つ以上の置換基によってさらに置換されており；
ここで、各Ｒ’は、独立して、水素、C_{1-20}アルキル基、及びC_{6-20}アリール基からなる群から選択され；
ここで、各R^aは、独立して、水素、C_{1-8}アルキル基、C_{1-8}アルコキシ基、C_{6-20}アリールオキシ基及びC_{6-20}アリール基からなる群から選択される、
上記プレメタル化化合物。

【０９４２】

＜実施形態１４５＞

R^7、R^8、R^9及びR^{10}が、各々水素である、実施形態１４４に記載のプレメタル化化合物。

【０９４３】

＜実施形態１４６＞

R^1及びR^2が、各々独立して、非置換のC_{1-30}ヒドロカルビル基である、実施形態１４４又は１４５に記載のプレメタル化化合物。

【０９４４】

＜実施形態１４７＞

R^1及びR^2が、各々独立して、イソプロピル、シクロヘキシル及びｔｅｒｔ－ブチルからなる群から選択される、実施形態１４４～１４６のいずれか一項に記載のプレメタル化化合物。

【０９４５】

＜実施形態１４８＞

Ｒ^{12}及びＲ^{17}が、各々独立して、非置換のＣ$_{1-30}$ヒドロカルビル基であり、Ｒ^{11}、Ｒ^{13}、Ｒ^{14}、Ｒ^{15}、Ｒ^{16}及びＲ^{18}が、各々水素である、実施形態１４４～１４７のいずれか一項に記載のプレメタル化化合物。

【０９４６】

＜実施形態１４９＞

Ｒ^{12}及びＲ^{17}が、各々ｔｅｒｔ－ブチル基である、実施形態１４４～１４８のいずれか一項に記載のプレメタル化化合物。

【０９４７】

＜実施形態１５０＞

Ｇが炭素である、実施形態１４４～１４９のいずれか一項に記載のプレメタル化化合物。

【０９４８】

＜実施形態１５１＞

Ｒ^{Q}及びＲ^{Q}＊が、各々独立して、水素、Ｃ$_{1-20}$アルキル基及びＣ$_{6-20}$アリール基からなる群から選択される、実施形態１４４～１５０のいずれか一項に記載のプレメタル化化合物。

【０９４９】

＜実施形態１５２＞

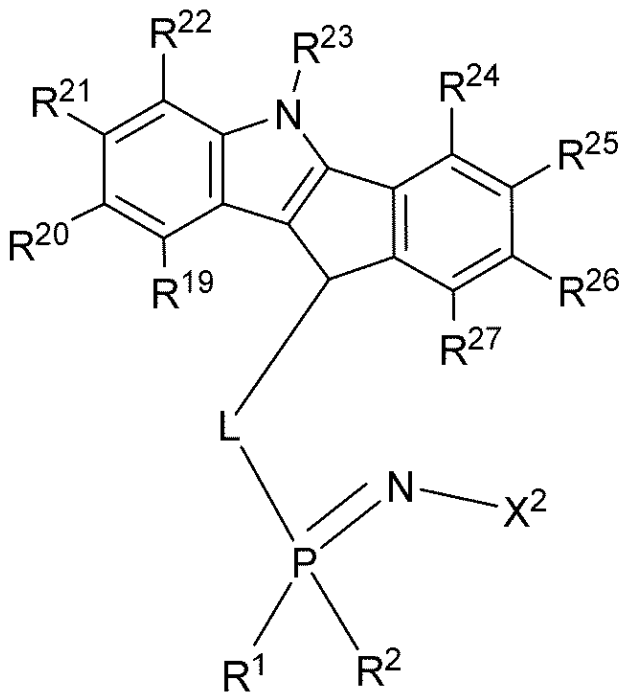
Ｒ^{Q}が水素であり、Ｒ^{Q}＊がＣ$_{1-8}$アルキル基である、実施形態１４４～１５１のいずれか一項に記載のプレメタル化化合物。

【０９５０】

＜実施形態１５３＞

実施形態１３３に記載のプレメタル化化合物であって、当該プレメタル化化合物は、式ＶＩＩＩ－Ｌ：

【化２１８】



(VIII-L)

で表され、

式中、Ｒ^{1}、Ｒ^{2}、Ｌ及びＸ^{2}は、式Ｉ－Ｌ－Ｈで定義した通りであり；

式中、Ｒ^{23}は、

水素；

Ｃ１－３０ヒドロカルビル基（このヒドロカルビル基は、非置換であるか、又はハロゲン原子、Ｃ１－２０アルキル基、Ｃ１－２０アルコキシ基、Ｃ７－２０アルキルアリール基、Ｃ７－２０アリールアルキル基、Ｃ６－２０アリール基、Ｃ６－２０アリールオキシ基、Ｃ７－２０アルキルアリールオキシ基、及びＣ７－２０アリールアルキルオキシ基からなる群から選択される１つ以上の置換基によってさらに置換されている）；

ヘテロ原子含有Ｃ１－３０ヒドロカルビル基（このヘテロ原子含有ヒドロカルビル基は、非置換であるか、又はハロゲン原子、Ｃ１－２０アルキル基、Ｃ１－２０アルコキシ基、Ｃ７－２０アルキルアリール基、Ｃ７－２０アリールアルキル基、Ｃ６－２０アリール基、Ｃ６－２０アリールオキシ基、Ｃ７－２０アルキルアリールオキシ基、及びＣ７－２０アリールアルキルオキシ基からなる群から選択される１つ以上の置換基によってさらに置換されている）；

からなる群から選択され；

式中、Ｒ１９、Ｒ２０、Ｒ２１、Ｒ２２、Ｒ２４、Ｒ２５、Ｒ２６、及びＲ２７は、各々独立して、

ハロゲン；

水素；

Ｃ１－３０ヒドロカルビル基（このヒドロカルビル基は、非置換であるか、又はハロゲン原子、Ｃ１－２０アルキル基、Ｃ１－２０アルコキシ基、Ｃ７－２０アルキルアリール基、Ｃ７－２０アリールアルキル基、Ｃ６－２０アリール基、Ｃ６－２０アリールオキシ基、Ｃ７－２０アルキルアリールオキシ基、及びＣ７－２０アリールアルキルオキシ基からなる群から選択される１つ以上の置換基によってさらに置換されている）；

ヘテロ原子含有Ｃ１－３０ヒドロカルビル基（このヘテロ原子含有ヒドロカルビル基は、非置換であるか、又はハロゲン原子、Ｃ１－２０アルキル基、Ｃ１－２０アルコキシ基、Ｃ７－２０アルキルアリール基、Ｃ７－２０アリールアルキル基、Ｃ６－２０アリール基、Ｃ６－２０アリールオキシ基、Ｃ７－２０アルキルアリールオキシ基、及びＣ７－２０アリールアルキルオキシ基からなる群から選択される１つ以上の置換基によってさらに置換されている）；

オキシ基、－ＯＲ’；

アミド基、－ＮＲ’$_2$；

ホスフィド基、－ＰＲ’$_2$；

チオラート基、－ＳＲ’；

式－Ｓｉ（Ｒ^a）$_3$のシリル基；

式－Ｇｅ（Ｒ^a）$_3$のゲルマニル基；

からなる群から選択され；

ここで、Ｒ１９、Ｒ２０、Ｒ２１、Ｒ２２、Ｒ２４、Ｒ２５、Ｒ２６、及びＲ２７の２つの隣接する基は、任意に結合して環状ヒドロカルビル基又は環状ヘテロ原子含有ヒドロカルビル基を形成してもよく、環状ヒドロカルビル基又は環状ヘテロ原子含有ヒドロカルビル基は、非置換であるか、又はハロゲン原子、Ｃ１－２０アルキル基、Ｃ１－２０アルコキシ基、Ｃ７－２０アルキルアリール基、Ｃ７－２０アリールアルキル基、Ｃ６－２０アリール基、Ｃ６－２０アリールオキシ基、Ｃ７－２０アルキルアリールオキシ基、Ｃ７－２０アリールアルキルオキシ基、式－ＮＲ’$_2$のアミド基、式－ＰＲ’$_2$のホスフィド基、式－ＳＲ’のチオラート基、式－Ｓｉ（Ｒ^a）$_3$のシリル基、及び式－Ｇｅ（Ｒ^a）$_3$のゲルマニル基からなる群から選択される１つ以上の置換基によってさらに置換されており；

ここで、各Ｒ’は、独立して、水素、Ｃ1－２０アルキル基、及びＣ６－２０アリール基からなる群から選択され；

ここで、各Ｒ^{a}は、独立して、水素、Ｃ１－８アルキル基、Ｃ１－８アルコキシ基、Ｃ６－２０アリールオキシ基及びＣ６－２０アリール基からなる群から選択される、

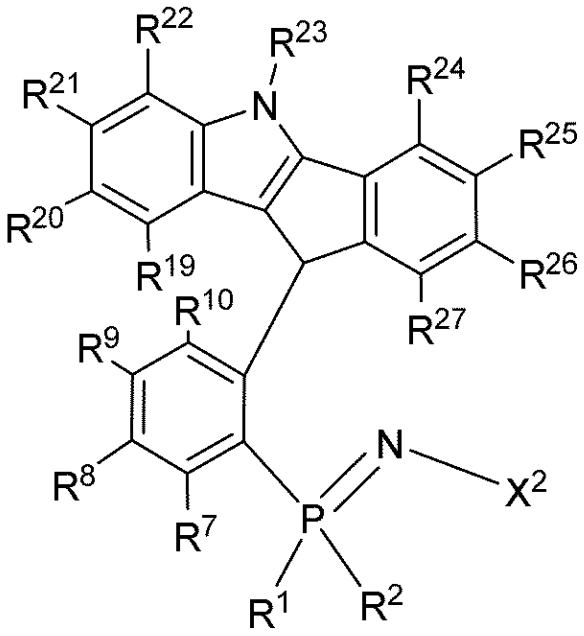
上記プレメタル化化合物。

【０９５１】

＜実施形態１５４＞

実施形態１５３に記載のプレメタル化化合物であって、当該プレメタル化化合物は、式ＩＸ－Ｌ：

【化２１９】



(IX-L)

で表され、

式中、R^1、R^2、R^{19}、R^{20}、R^{21}、R^{22}、R^{23}、R^{24}、R^{25}、R^{26}、R^{27}及びX^2は、式Ｉ－Ｌ－Ｈ及び式ＶＩＩＩ－Ｌで定義した通りであり；

式中、R^7、R^8、R^9及びR^{10}は、各々独立して、

ハロゲン；

水素；

C_{1-30}ヒドロカルビル基（このヒドロカルビル基は、非置換であるか、又はハロゲン原子、C_{1-20}アルキル基、C_{1-20}アルコキシ基、C_{7-20}アルキルアリール基、C_{7-20}アリールアルキル基、C_{6-20}アリール基、C_{6-20}アリールオキシ基、C_{7-20}アルキルアリールオキシ基、及びC_{7-20}アリールアルキルオキシ基からなる群から選択される１つ以上の置換基によってさらに置換されている）；

ヘテロ原子含有C_{1-30}ヒドロカルビル基（このヘテロ原子含有ヒドロカルビル基は、非置換であるか、又はハロゲン原子、C_{1-20}アルキル基、C_{1-20}アルコキシ基、C_{7-20}アルキルアリール基、C_{7-20}アリールアルキル基、C_{6-20}アリール基、C_{6-20}アリールオキシ基、C_{7-20}アルキルアリールオキシ基、及びC_{7-20}アリールアルキルオキシ基からなる群から選択される１つ以上の置換基によってさらに置換されている）；

オキシ基、－ＯＲ’；

アミド基、－ＮＲ’$_2$；

ホスフィド基、－ＰＲ’$_2$；

チオラート基、－ＳＲ’；

式－Ｓｉ（R^a）$_3$のシリル基；

式－Ｇｅ（R^a）$_3$のゲルマニル基；

からなる群から選択され；

ここで、R^7、R^8、R^9及びR^{10}の２つの隣接する基は、任意に結合して環状ヒドロカルビル基又は環状ヘテロ原子含有ヒドロカルビル基を形成してもよく、環状ヒドロカルビル基又は環状ヘテロ原子含有ヒドロカルビル基は、非置換であるか、又はハロゲン原

子、Ｃ１－２０アルキル基、Ｃ１－２０アルコキシ基、Ｃ７－２０アルキルアリール基、Ｃ７－２０アリールアルキル基、Ｃ６－２０アリール基、Ｃ６－２０アリールオキシ基、Ｃ７－２０アルキルアリールオキシ基、Ｃ７－２０アリールアルキルオキシ基、式－ＮＲ’２のアミド基、式－ＰＲ’２のホスフィド基、式－ＳＲ’のチオラート基、式－Ｓｉ（Ｒａ）３のシリル基、及び式－Ｇｅ（Ｒａ）３のゲルマニル基からなる群から選択される１つ以上の置換基によってさらに置換されており；

ここで、各Ｒ’は、独立して、水素、Ｃ1－２０アルキル基、及びＣ６－２０アリール基からなる群から選択され；

ここで、各Ｒａは、独立して、水素、Ｃ１－８アルキル基、Ｃ１－８アルコキシ基、Ｃ６－２０アリールオキシ基及びＣ６－２０アリール基からなる群から選択される、

上記プレメタル化化合物。

【０９５２】

＜実施形態１５５＞

Ｒ７、Ｒ８、Ｒ９及びＲ１０が、各々水素である、実施形態１５４に記載のプレメタル化化合物。

【０９５３】

＜実施形態１５６＞

Ｒ１及びＲ２が、各々独立して、非置換のＣ１－３０ヒドロカルビル基である、実施形態１５４又は１５５に記載のプレメタル化化合物。

【０９５４】

＜実施形態１５７＞

Ｒ１及びＲ２が、各々独立して、イソプロピル、シクロヘキシル及びｔｅｒｔ－ブチルからなる群から選択される、実施形態１５４～１５６のいずれか一項に記載のプレメタル化化合物。

【０９５５】

＜実施形態１５８＞

Ｒ２３が、非置換のＣ１－３０ヒドロカルビル基である、実施形態１５４～１５７のいずれか一項に記載のプレメタル化化合物。

【０９５６】

＜実施形態１５９＞

Ｒ２３が、Ｃ１－８アルキル基である、実施形態１５４～１５８のいずれか一項に記載のプレメタル化化合物。

【０９５７】

＜実施形態１６０＞

Ｒ２０が、非置換のＣ１－３０ヒドロカルビル基である、実施形態１５４～１５９のいずれか一項に記載のプレメタル化化合物。

【０９５８】

＜実施形態１６１＞

Ｒ２０が、非置換のＣ１－８アルキル基である、実施形態１５４～１６０のいずれか一項に記載のプレメタル化化合物。

【０９５９】

＜実施形態１６２＞

Ｒ２０が、非置換のＣ１－３０ヒドロカルビル基であり、Ｒ１９、Ｒ２１、Ｒ２２、Ｒ２４、Ｒ２５、Ｒ２６、及びＲ２７が、各々水素である、実施形態１５４～１５９のいずれか一項に記載のプレメタル化化合物。

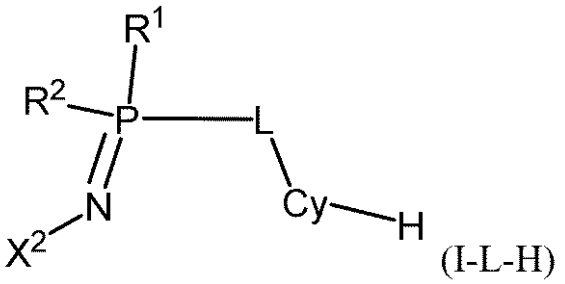
【０９６０】

＜実施形態１６３＞

Ｒ２０が、Ｃ１－８アルキル基である、実施形態１６２のいずれか一項に記載のプレメタル化化合物。

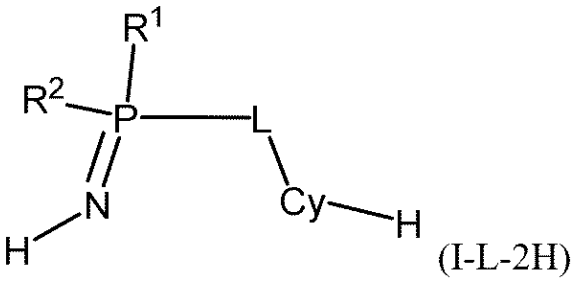
【０９６１】

＜実施形態１６４＞
　X^2が、水素又はトリメチルシリル基、－$SiMe_3$である、実施形態１３３～１６３のいずれか一項に記載のプレメタル化化合物。
【０９６２】
＜実施形態１６５＞
　有機金属錯体を作製するプロセスであって、当該プロセスは、式Ｉ－Ｌ－Ｈ：
【化２２０】



で表される化合物を、式MX^*_4を有する第４族遷移金属化合物と反応させることを含み、
式中、
　Ｍは、Ｔｉ、Ｚｒ又はＨｆであり；
　R^1及びR^2は、各々独立して、水素及びR^Xからなる群から選択されるか；又はR^1及びR^2は、それらが結合しているＰ原子と一緒になって、非置換であるか、又はハロゲン原子、C_{1-20}アルキル基、C_{1-20}アルコキシ基、C_{7-20}アルキルアリール基、C_{7-20}アリールアルキル基、C_{6-20}アリール基、C_{6-20}アリールオキシ基、C_{7-20}アルキルアリールオキシ基、及びC_{7-20}アリールアルキルオキシ基からなる群から選択される１つ以上の置換基によってさらに置換されている３－１０員複素環式基を形成し；
　各R^Xは、独立して、ハロゲン原子；C_{1-30}ヒドロカルビル基（このヒドロカルビル基は、非置換であるか、又は１つ以上のハロゲン原子、C_{1-20}アルキル基、C_{1-20}アルコキシ基、C_{7-20}アルキルアリール基、C_{7-20}アリールアルキル基、C_{6-20}アリール基、C_{6-20}アリールオキシ基、C_{7-20}アルキルアリールオキシ基、及び／又はC_{7-20}アリールアルキルオキシ基によってさらに置換されている）；式－NR'_2のアミド基；式－$Si(R^a)_3$のシリル基；式－$Ge(R^a)_3$のゲルマニル基；及び式$N=P(R^b)(R^c)(R^d)$のホスフィンイミン基からなる群から選択され；ここで、各Ｒ’は、独立して、水素、C_{1-20}アルキル基、及びC_{6-20}アリール基からなる群から選択され；ここで、各R^aは、独立して、水素、C_{1-8}アルキル基、C_{1-8}アルコキシ基、C_{6-20}アリールオキシ基及びC_{6-20}アリール基からなる群から選択され、R^b、R^c、R^dは、各々独立して、C_{1-20}アルキル基であり；
　X^2は、式－$Si(R^e)_3$のシリル基であり、ここで、各R^eは、独立して、水素、C_{1-8}アルキル基、C_{1-8}アルコキシ基、C_{6-20}アリールオキシ基、及びC_{6-20}アリール基からなる群から選択され；
　Ｃｙは、シクロペンタジエニル型部分であり、Ｌ及びＨに共有結合しており；
　Ｌは、ＰとＣｙを連結する原子の連続鎖を含む架橋基であり、連続鎖は２個又は３個の原子を含み；
　各X^*は、独立して、ハロゲン、水素、式－NR^E_2のアミド基、C_{1-20}アルキル基、C_{1-20}アルコキシ基、C_{7-20}アルキルアリール基、C_{7-20}アリールアルキル基、C_{6-20}アリール基、C_{6-20}アリールオキシド基、C_{7-20}アルキルアリールオキシ基、及びC_{7-20}アリールアルキルオキシ基からなる群から選択され；ここで、各R^Eは、独立して、水素、C_{1-20}アルキル基、及びC_{6-20}アリール基からなる

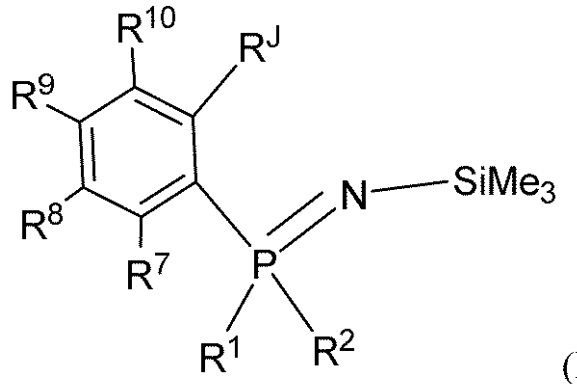
群から選択される、
上記プロセス。
【０９６３】
＜実施形態１６６＞
有機金属錯体を作製するプロセスであって、当該プロセスは、式Ｉ－Ｌ－２Ｈ：
【化２２１】



(I-L-2H)

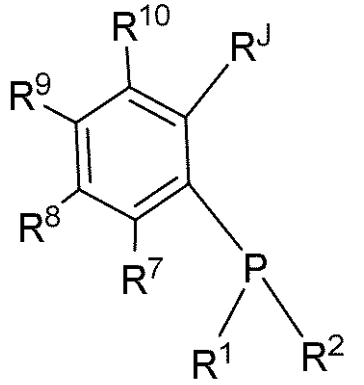
で表される化合物を塩基と反応させ、次いで、式ＭＸ＊$_4$を有する第４族遷移金属化合物と反応させることを含み、
式中、
Ｍは、Ｔｉ、Ｚｒ又はＨｆであり；
R^1及びR^2は、各々独立して、水素及びR^Xからなる群から選択されるか；又はR^1及びR^2は、それらが結合しているＰ原子と一緒になって、非置換であるか、又はハロゲン原子、Ｃ$_{1-20}$アルキル基、Ｃ$_{1-20}$アルコキシ基、Ｃ$_{7-20}$アルキルアリール基、Ｃ$_{7-20}$アリールアルキル基、Ｃ$_{6-20}$アリール基、Ｃ$_{6-20}$アリールオキシ基、Ｃ$_{7-20}$アルキルアリールオキシ基、及びＣ$_{7-20}$アリールアルキルオキシ基からなる群から選択される１つ以上の置換基によってさらに置換されている３－１０員複素環式基を形成し；
各R^Xは、独立して、ハロゲン原子；Ｃ$_{1-30}$ヒドロカルビル基（このヒドロカルビル基は、非置換であるか、又は１つ以上のハロゲン原子、Ｃ$_{1-20}$アルキル基、Ｃ$_{1-20}$アルコキシ基、Ｃ$_{7-20}$アルキルアリール基、Ｃ$_{7-20}$アリールアルキル基、Ｃ$_{6-20}$アリール基、Ｃ$_{6-20}$アリールオキシ基、Ｃ$_{7-20}$アルキルアリールオキシ基、及び／又はＣ$_{7-20}$アリールアルキルオキシ基によってさらに置換されている）；式－ＮＲ’$_2$のアミド基；式－Ｓｉ（R^a）$_3$のシリル基；式－Ｇｅ（R^a）$_3$のゲルマニル基；及び式Ｎ＝Ｐ（R^b）（R^c）（R^d）のホスフィンイミン基からなる群から選択され；ここで、各Ｒ’は、独立して、水素、Ｃ$_{1-20}$アルキル基、及びＣ$_{6-20}$アリール基からなる群から選択され；ここで、各R^aは、独立して、水素、Ｃ$_{1-8}$アルキル基、Ｃ$_{1-8}$アルコキシ基、Ｃ$_{6-20}$アリールオキシ基及びＣ$_{6-20}$アリール基からなる群から選択され、R^b、R^c、R^dは、各々独立して、Ｃ$_{1-20}$アルキル基であり；
Ｃｙは、シクロペンタジエニル型部分であり、Ｌ及びＨに共有結合しており；
Ｌは、ＰとＣｙを連結する原子の連続鎖を含む架橋基であり、連続鎖は２個又は３個の原子を含み；
各Ｘ＊は、独立して、ハロゲン、水素、式－ＮＲ$^E{}_2$のアミド基、Ｃ$_{1-20}$アルキル基、Ｃ$_{1-20}$アルコキシ基、Ｃ$_{7-20}$アルキルアリール基、Ｃ$_{7-20}$アリールアルキル基、Ｃ$_{6-20}$アリール基、Ｃ$_{6-20}$アリールオキシド基、Ｃ$_{7-20}$アルキルアリールオキシ基、及びＣ$_{7-20}$アリールアルキルオキシ基からなる群から選択され；ここで、各R^Eは、独立して、水素、Ｃ$_{1-20}$アルキル基、及びＣ$_{6-20}$アリール基からなる群から選択される、
上記プロセス。
【０９６４】
＜実施形態１６７＞

式Ｉ－Ｐ－ＴＭＳ：
【化２２２】



(I-P-TMS)

で表される化合物の作製方法であって、当該方法は、式Ｉ－Ｐ：
【化２２３】



(I-P)

で表されるホスフィン化合物を、ヘキサクロロエタンＣｌ$_3$Ｃ－ＣＣｌ$_3$；及びヘキサメチルジシラザン［（ＣＨ$_3$）$_3$Ｓｉ］$_2$ＮＨと組み合わせることを含み、

式中、Ｒ^{J}は、

ヒドロカルビル基（このヒドロカルビル基は、非置換であるか、又はハロゲン原子、Ｃ$_{1-20}$アルキル基、Ｃ$_{1-20}$アルコキシ基、Ｃ$_{7-20}$アルキルアリール基、Ｃ$_{7-20}$アリールアルキル基、Ｃ$_{6-20}$アリール基、Ｃ$_{6-20}$アリールオキシ基、Ｃ$_{7-20}$アルキルアリールオキシ基、及びＣ$_{7-20}$アリールアルキルオキシ基、式－ＮＲ’$_2$のアミド基、式－ＰＲ’$_2$のホスフィド基、式－ＳＲ’のチオラート基、式－Ｓｉ（Ｒ^a）$_3$のシリル基、及び式－Ｇｅ（Ｒ^a）$_3$のゲルマニル基からなる群から選択される１つ以上の置換基によってさらに置換されている）；

ヘテロ原子含有ヒドロカルビル基（このヘテロ原子含有ヒドロカルビル基は、非置換であるか、又はハロゲン原子、Ｃ$_{1-20}$アルキル基、Ｃ$_{1-20}$アルコキシ基、Ｃ$_{7-20}$アルキルアリール基、Ｃ$_{7-20}$アリールアルキル基、Ｃ$_{6-20}$アリール基、Ｃ$_{6-20}$アリールオキシ基、Ｃ$_{7-20}$アルキルアリールオキシ基、及びＣ$_{7-20}$アリールアルキルオキシ基、式－－ＮＲ’$_2$のアミド基、式－ＰＲ’$_2$のホスフィド基、式－ＳＲ’のチオラート基、式－Ｓｉ（Ｒ^a）$_3$のシリル基、及び式－Ｇｅ（Ｒ^a）$_3$のゲルマニル基からなる群から選択される１つ以上の置換基によってさらに置換されている）；

からなる群から選択され、

式中、Ｒ^{1}及びＲ^{2}は、各々独立して、Ｃ$_{1-30}$ヒドロカルビル基（このヒドロカルビル基は、非置換であるか、又は１つ以上のハロゲン原子、Ｃ$_{1-20}$アルキル基、Ｃ$_1$

－２０アルコキシ基、Ｃ７－２０アルキルアリール基、Ｃ７－２０アリールアルキル基、Ｃ６－２０アリール基、Ｃ６－２０アリールオキシ基、Ｃ７－２０アルキルアリールオキシ基、及び／又はＣ７－２０アリールアルキルオキシ基によってさらに置換されている）から選択され、

式中、Ｒ７、Ｒ８、Ｒ９及びＲ１０は、各々独立して、

ハロゲン；

水素；

Ｃ１－３０ヒドロカルビル基（このヒドロカルビル基は、非置換であるか、又はハロゲン原子、Ｃ１－２０アルキル基、Ｃ１－２０アルコキシ基、Ｃ７－２０アルキルアリール基、Ｃ７－２０アリールアルキル基、Ｃ６－２０アリール基、Ｃ６－２０アリールオキシ基、Ｃ７－２０アルキルアリールオキシ基、及びＣ７－２０アリールアルキルオキシ基からなる群から選択される１つ以上の置換基によってさらに置換されている）；

ヘテロ原子含有Ｃ１－３０ヒドロカルビル基（このヘテロ原子含有ヒドロカルビル基は、非置換であるか、又はハロゲン原子、Ｃ１－２０アルキル基、Ｃ１－２０アルコキシ基、Ｃ７－２０アルキルアリール基、Ｃ７－２０アリールアルキル基、Ｃ６－２０アリール基、Ｃ６－２０アリールオキシ基、Ｃ７－２０アルキルアリールオキシ基、及びＣ７－２０アリールアルキルオキシ基からなる群から選択される１つ以上の置換基によってさらに置換されている）；

オキシ基、－ＯＲ’；

アミド基、－ＮＲ’$_2$；

ホスフィド基、－ＰＲ’$_2$；

チオラート基、－ＳＲ’；

式－Ｓｉ（Ｒ^a）$_3$のシリル基；

式－Ｇｅ（Ｒ^a）$_3$のゲルマニル基；

からなる群から選択され；

ここで、Ｒ７、Ｒ８、Ｒ９及びＲ１０の２つの隣接する基は、任意に結合して環状ヒドロカルビル基又は環状ヘテロ原子含有ヒドロカルビル基を形成してもよく、環状ヒドロカルビル基又は環状ヘテロ原子含有ヒドロカルビル基は、非置換であるか、又はハロゲン原子、Ｃ１－２０アルキル基、Ｃ１－２０アルコキシ基、Ｃ７－２０アルキルアリール基、Ｃ７－２０アリールアルキル基、Ｃ６－２０アリール基、Ｃ６－２０アリールオキシ基、Ｃ７－２０アルキルアリールオキシ基、Ｃ７－２０アリールアルキルオキシ基、アミド基－ＮＲ’$_2$、ホスフィド基－ＰＲ’$_2$、チオラート基－ＳＲ’、式－Ｓｉ（Ｒ^a）$_3$のシリル基、及び式－Ｇｅ（Ｒ^a）$_3$のゲルマニル基からなる群から選択される１つ以上の置換基によってさらに置換されており；

ここで、各Ｒ’は、独立して、水素、Ｃ１－２０アルキル基、及びＣ６－２０アリール基からなる群から選択され；

ここで、各Ｒ^{a}は、独立して、水素、Ｃ１－８アルキル基、Ｃ１－８アルコキシ基、Ｃ６－２０アリールオキシ基及びＣ６－２０アリール基からなる群から選択される、

上記方法。

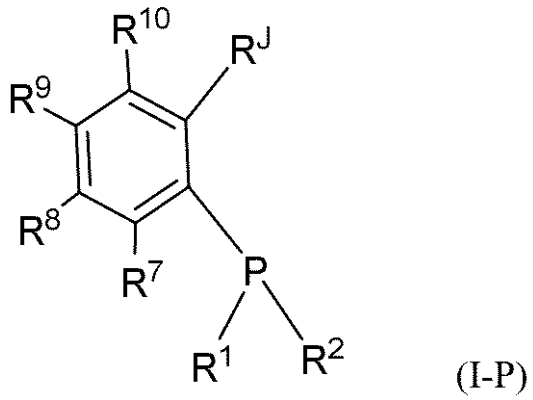
【０９６５】

＜実施形態１６８＞

実施形態１６７に記載の方法であって、

式Ｉ－Ｐ：

【化２２４】



(I-P)

で表されるホスフィン化合物を、ヘキサクロロエタンＣｌ３Ｃ－ＣＣｌ３と組み合わせる第１の反応工程（ｉ）と、
ヘキサメチルジシラザン［（ＣＨ３）３Ｓｉ］２ＮＨを、第１の反応工程で形成された反応生成物と組み合わせる第２の反応工程（ｉｉ）と、
を含む、上記方法。

【０９６６】

＜実施形態１６９＞

ホスフィン化合物（ＩＩ－Ｐ）とヘキサクロロエタンＣｌ３Ｃ－ＣＣｌ３を、約１：１のモル比で組み合わせる、実施形態１６７又は１６８に記載の方法。

【０９６７】

＜実施形態１７０＞

モル過剰のヘキサメチルジシラザン［（ＣＨ３）３Ｓｉ］２ＮＨを、第１の反応工程で形成された反応生成物と組み合わせる、実施形態１６８に記載の方法。

【０９６８】

＜実施形態１７１＞

ホスフィン化合物（ＩＩ－Ｐ）に対する、ヘキサメチルジシラザン［（ＣＨ３）３Ｓｉ］２ＮＨのモル比が１．０より大きい、実施形態１６７～１７０のいずれか一項に記載の方法。

【０９６９】

＜実施形態１７２＞

ホスフィン化合物（ＩＩ－Ｐ）；ヘキサクロロエタンＣｌ３Ｃ－ＣＣｌ３；及びヘキサメチルジシラザン［（ＣＨ３）３Ｓｉ］２ＮＨを、極性溶媒中で組み合わせる、実施形態１６７～１７１のいずれか一項に記載の方法。

【０９７０】

＜実施形態１７３＞

極性溶媒が、ジクロロメタン、１，２－ジクロロエタン、アセトニトリル及びテトラヒドロフランからなる群から選択される、実施形態１７２に記載の方法。

【０９７１】

＜実施形態１７４＞

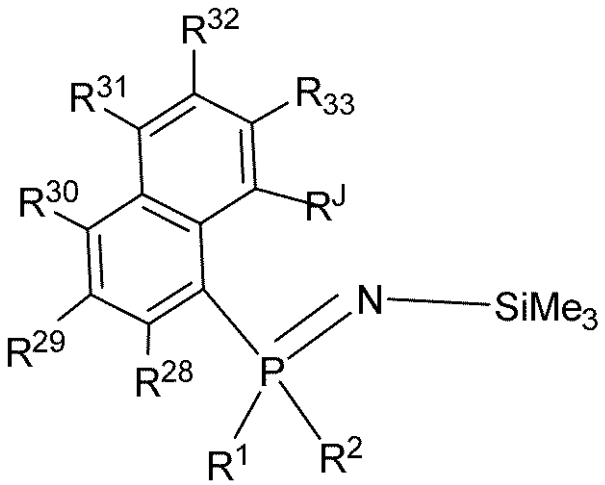
工程（ｉ）及び工程（ｉｉ）が、単一の反応容器内で行われる、実施形態１６８に記載の方法。

【０９７２】

＜実施形態１７５＞

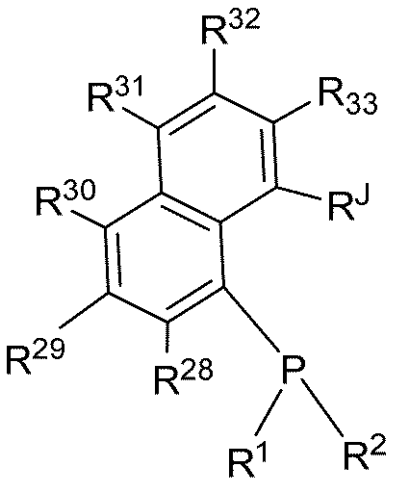
Ｒ１及びＲ２が、独立して、第一級アルキル基、第二級アルキル基、第三級アルキル基、及びアリール基からなる群から選択される、実施形態１６７～１７４のいずれか一項に記載の方法。

【０９７３】
＜実施形態１７６＞
Ｒ^{1}及びＲ^{2}が、第二級アルキル基である、実施形態１６７～１７５のいずれか一項に記載の方法。
【０９７４】
＜実施形態１７７＞
Ｒ^{1}及びＲ^{2}が、第三級アルキル基である、実施形態１６７～１７５のいずれか一項に記載の方法。
【０９７５】
＜実施形態１７８＞
Ｒ^{7}、Ｒ^{8}、Ｒ^{9}及びＲ^{10}が、各々水素である、実施形態１６７～１７７のいずれか一項に記載の方法。
【０９７６】
＜実施形態１７９＞
式ＩＩ－Ｐ－ＴＭＳ：
【化２２５】



(II-P-TMS)

で表される化合物の作製方法であって、当該方法は、式ＩＩ－Ｐ：
【化２２６】



(II-P)

で表されるホスフィン化合物を、ヘキサクロロエタンCl_3C-CCl_3；及びヘキサメチルジシラザン［$(CH_3)_3Si]_2NH$と組み合わせることを含み、

式中、R^Jは、

ヒドロカルビル基（このヒドロカルビル基は、非置換であるか、又はハロゲン原子、C_{1-20}アルキル基、C_{1-20}アルコキシ基、C_{7-20}アルキルアリール基、C_{7-20}アリールアルキル基、C_{6-20}アリール基、C_{6-20}アリールオキシ基、C_{7-20}アルキルアリールオキシ基、C_{7-20}アリールアルキルオキシ基、式$-NR'_2$のアミド基、式$-PR'_2$のホスフィド基、式$-SR'$のチオラート基、式$-Si(R^a)_3$のシリル基、及び式$-Ge(R^a)_3$のゲルマニル基からなる群から選択される１つ以上の置換基によってさらに置換されている）；

ヘテロ原子含有ヒドロカルビル基（このヘテロ原子含有ヒドロカルビル基は、非置換であるか、又はハロゲン原子、C_{1-20}アルキル基、C_{1-20}アルコキシ基、C_{7-20}アルキルアリール基、C_{7-20}アリールアルキル基、C_{6-20}アリール基、C_{6-20}アリールオキシ基、C_{7-20}アルキルアリールオキシ基、及びC_{7-20}アリールアルキルオキシ基、式－－NR'_2のアミド基、式$-PR'_2$のホスフィド基、式$-SR'$のチオラート基、式$-Si(R^a)_3$のシリル基、及び式$-Ge(R^a)_3$のゲルマニル基からなる群から選択される１つ以上の置換基によってさらに置換されている）；

からなる群から選択され、

式中、R^1及びR^2は、各々独立して、C_{1-30}ヒドロカルビル基（このヒドロカルビル基は、非置換であるか、又は１つ以上のハロゲン原子、C_{1-20}アルキル基、C_{1-20}アルコキシ基、C_{7-20}アルキルアリール基、C_{7-20}アリールアルキル基、C_{6-20}アリール基、C_{6-20}アリールオキシ基、C_{7-20}アルキルアリールオキシ基、及び／又はC_{7-20}アリールアルキルオキシ基によってさらに置換されている）から選択され、

式中、R^{28}、R^{29}、R^{30}、R^{31}、R^{32}及びR^{33}は、各々独立して、

ハロゲン；

水素；

C_{1-30}ヒドロカルビル基（このヒドロカルビル基は、非置換であるか、又はハロゲン原子、C_{1-20}アルキル基、C_{1-20}アルコキシ基、C_{7-20}アルキルアリール基、C_{7-20}アリールアルキル基、C_{6-20}アリール基、C_{6-20}アリールオキシ基、C_{7-20}アルキルアリールオキシ基、及びC_{7-20}アリールアルキルオキシ基からなる群から選択される１つ以上の置換基によってさらに置換されている）；

ヘテロ原子含有C_{1-30}ヒドロカルビル基（このヘテロ原子含有ヒドロカルビル基は、非置換であるか、又はハロゲン原子、C_{1-20}アルキル基、C_{1-20}アルコキシ基、C_{7-20}アルキルアリール基、C_{7-20}アリールアルキル基、C_{6-20}アリール基、C_{6-20}アリールオキシ基、C_{7-20}アルキルアリールオキシ基、及びC_{7-20}アリールアルキルオキシ基からなる群から選択される１つ以上の置換基によってさらに置換されている）；

オキシ基、$-OR'$；

アミド基、$-NR'_2$；

ホスフィド基、$-PR'_2$；

チオラート基、$-SR'$；

式$-Si(R^a)_3$のシリル基；

式$-Ge(R^a)_3$のゲルマニル基；

からなる群から選択され；

ここで、R^{28}、R^{29}、R^{30}、R^{31}、R^{32}及びR^{33}の２つの隣接する基は、任意に結合して環状ヒドロカルビル基又は環状ヘテロ原子含有ヒドロカルビル基を形成してもよく、環状ヒドロカルビル基又は環状ヘテロ原子含有ヒドロカルビル基は、非置換であるか、又はハロゲン原子、C_{1-20}アルキル基、C_{1-20}アルコキシ基、C_{7-20}アルキルアリール基、C_{7-20}アリールアルキル基、C_{6-20}アリール基、C_{6-20}ア

リールオキシ基、Ｃ７－２０アルキルアリールオキシ基、Ｃ７－２０アリールアルキルオキシ基、アミド基－ＮＲ’2、ホスフィド基－ＰＲ’2、チオラート基－ＳＲ’、式－Ｓｉ（Ｒａ）3のシリル基、及び式－Ｇｅ（Ｒａ）3のゲルマニル基からなる群から選択される１つ以上の置換基によってさらに置換されており；

ここで、各Ｒ’は、独立して、水素、Ｃ1－２０アルキル基、及びＣ６－２０アリール基からなる群から選択され；

ここで、各Ｒａは、独立して、水素、Ｃ１－８アルキル基、Ｃ１－８アルコキシ基、Ｃ６－２０アリールオキシ基及びＣ６－２０アリール基からなる群から選択される、

上記方法。

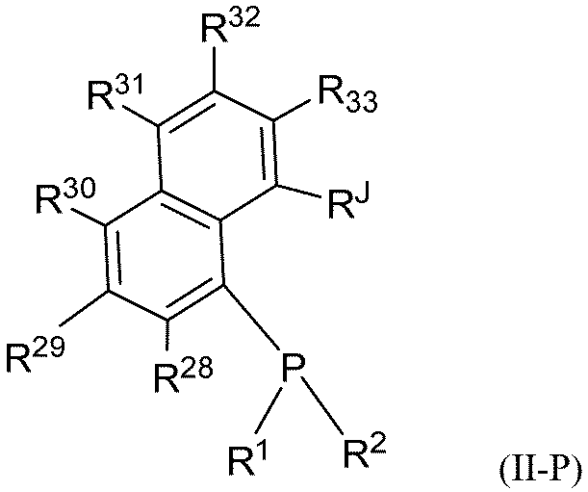
【０９７７】

＜実施形態１８０＞

実施形態１７９に記載の方法であって、

式ＩＩ－Ｐ：

【化２２７】



(II-P)

で表されるホスフィン化合物を、ヘキサクロロエタンＣｌ3Ｃ－ＣＣｌ3と組み合わせる第１の反応工程（ｉ）と、

ヘキサメチルジシラザン［（ＣＨ3）3Ｓｉ］2ＮＨを、第１の反応工程で形成された反応生成物と組み合わせる第２の反応工程（ｉｉ）と、

を含む、上記方法。

【０９７８】

＜実施形態１８１＞

ホスフィン化合物（ＩＩ－Ｐ）とヘキサクロロエタンＣｌ3Ｃ－ＣＣｌ3を、約１：１のモル比で組み合わせる、実施形態１７９又は１８０に記載の方法。

【０９７９】

＜実施形態１８２＞

モル過剰のヘキサメチルジシラザン［（ＣＨ3）3Ｓｉ］2ＮＨを、第１の反応工程で形成された反応生成物と組み合わせる、実施形態１７９に記載の方法。

【０９８０】

＜実施形態１８３＞

ホスフィン化合物（ＩＩ－Ｐ）に対する、ヘキサメチルジシラザン［（ＣＨ3）3Ｓｉ］2ＮＨのモル比が１．０より大きい、実施形態１７８～１８１のいずれか一項に記載の方法。

【０９８１】

＜実施形態１８４＞

ホスフィン化合物（ＩＩ－Ｐ）；ヘキサクロロエタンＣｌ$_3$Ｃ－ＣＣｌ$_3$；及びヘキサメチルジシラザン［（ＣＨ$_3$）$_3$Ｓｉ］$_2$ＮＨを、極性溶媒中で組み合わせる、実施形態１７９～１８３のいずれか一項に記載の方法。

【０９８２】

＜実施形態１８５＞

極性溶媒が、ジクロロメタン、１，２－ジクロロエタン、アセトニトリル及びテトラヒドロフランからなる群から選択される、実施形態１８４に記載の方法。

【０９８３】

＜実施形態１８６＞

工程（ｉ）及び工程（ｉｉ）が、単一の反応容器内で行われる、実施形態１８０に記載の方法。

【０９８４】

＜実施形態１８７＞

Ｒ^{1}及びＲ^{2}が、独立して、第一級アルキル基、第二級アルキル基、第三級アルキル基、及びアリール基からなる群から選択される、実施形態１７９～１８６のいずれか一項に記載の方法。

【０９８５】

＜実施形態１８８＞

Ｒ^{1}及びＲ^{2}が、第二級アルキル基である、実施形態１７９～１８７のいずれか一項に記載の方法。

【０９８６】

＜実施形態１８９＞

Ｒ^{1}及びＲ^{2}が、第三級アルキル基である、実施形態１７９～１８７のいずれか一項に記載の方法。

【０９８７】

＜実施形態１９０＞

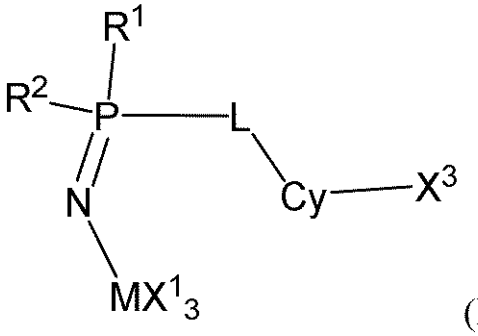
Ｒ^{28}、Ｒ^{29}、Ｒ^{30}、Ｒ^{31}、Ｒ^{32}及びＲ^{33}が、各々水素である、実施形態１７９～１８９のいずれか一項に記載の方法。

【０９８８】

＜実施形態１９１＞

有機金属錯体であって、式Ｉ－Ｍ：

【化２２８】



(I-M)

で表され、

式中、

Ｍは、Ｔｉ、Ｚｒ又はＨｆであり；

Ｒ^{1}及びＲ^{2}は、各々独立して、水素及びＲ^{X}からなる群から選択されるか；又はＲ^{1}及びＲ^{2}は、それらが結合しているＰ原子と一緒になって、非置換であるか、又はハロゲン原子、Ｃ$_{1-20}$アルキル基、Ｃ$_{1-20}$アルコキシ基、Ｃ$_{7-20}$アルキルアリール基、Ｃ$_{7-20}$アリールアルキル基、Ｃ$_{6-20}$アリール基、Ｃ$_{6-20}$アリールオキシ基、

Ｃ７－２０アルキルアリールオキシ基、及びＣ７－２０アリールアルキルオキシ基からなる群から選択される１つ以上の置換基によってさらに置換されている３－１０員複素環式基を形成し；

各Ｒ^{X}は、独立して、ハロゲン原子；Ｃ１－３０ヒドロカルビル基（このヒドロカルビル基は、非置換であるか、又は１つ以上のハロゲン原子、Ｃ１－２０アルキル基、Ｃ１－２０アルコキシ基、Ｃ７－２０アルキルアリール基、Ｃ７－２０アリールアルキル基、Ｃ６－２０アリール基、Ｃ６－２０アリールオキシ基、Ｃ７－２０アルキルアリールオキシ基、及び／又はＣ７－２０アリールアルキルオキシ基によってさらに置換されている）；式－ＮＲ’$_2$のアミド基；式－Ｓｉ（Ｒ^{a}）$_3$のシリル基；式－Ｇｅ（Ｒ^{a}）$_3$のゲルマニル基；及び式Ｎ＝Ｐ（Ｒ^{b}）（Ｒ^{c}）（Ｒ^{d}）のホスフィンイミン基からなる群から選択され；ここで、各Ｒ’は、独立して、水素、Ｃ$_{1-20}$アルキル基、及びＣ６－２０アリール基からなる群から選択され；ここで、各Ｒ^{a}は、独立して、水素、Ｃ１－８アルキル基、Ｃ１－８アルコキシ基、Ｃ６－２０アリールオキシ基及びＣ６－２０アリール基からなる群から選択され、Ｒ^{b}、Ｒ^{c}、Ｒ^{d}は、各々独立して、Ｃ１－２０アルキル基であり；

Ｃｙは、シクロペンタジエニル型部分であり、Ｌ及びＸ^{3}に共有結合しており；

各Ｘ^{1}は、活性化可能な配位子であり；

Ｘ^{3}は、水素、又は式－Ｓｉ（Ｒ^{e}）$_3$のシリル基、若しくは式Ｓｎ（Ｒ^{e}）$_3$のスタンニル基であり；ここで、各Ｒ^{e}は、独立して、水素、Ｃ１－８アルキル基、Ｃ１－８アルコキシ基、Ｃ６－２０アリールオキシ基、及びＣ６－２０アリール基からなる群から選択され；

Ｌは、ＰとＣｙを連結する原子の連続鎖を含む架橋基であり、連続鎖は２個又は３個の原子を含む、

有機金属錯体。

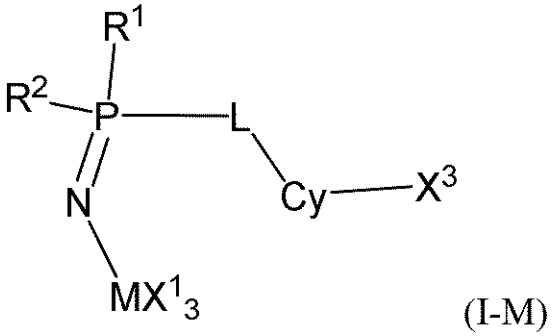
【０９８９】

＜実施形態１９２＞

オレフィン重合触媒系であって、

ｉ）有機金属錯体であって、式Ｉ－Ｍ：

【化２２９】



(I-M)

で表され、

式中、

Ｍは、Ｔｉ、Ｚｒ又はＨｆであり；

Ｒ^{1}及びＲ^{2}は、各々独立して、水素及びＲ^{X}からなる群から選択されるか；又はＲ^{1}及びＲ^{2}は、それらが結合しているＰ原子と一緒になって、非置換であるか、又はハロゲン原子、Ｃ１－２０アルキル基、Ｃ１－２０アルコキシ基、Ｃ７－２０アルキルアリール基、Ｃ７－２０アリールアルキル基、Ｃ６－２０アリール基、Ｃ６－２０アリールオキシ基、Ｃ７－２０アルキルアリールオキシ基、及びＣ７－２０アリールアルキルオキシ基からなる群から選択される１つ以上の置換基によってさらに置換されている３－１０員複素環式基を形成し；

各Ｒ^{X}は、独立して、ハロゲン原子；Ｃ１－３０ヒドロカルビ

ル基は、非置換であるか、又は１つ以上のハロゲン原子、Ｃ１－２０アルキル基、Ｃ１－２０アルコキシ基、Ｃ７－２０アルキルアリール基、Ｃ７－２０アリールアルキル基、Ｃ６－２０アリール基、Ｃ６－２０アリールオキシ基、Ｃ７－２０アルキルアリールオキシ基、及び／又はＣ７－２０アリールアルキルオキシ基によってさらに置換されている）；式－ＮＲ’２のアミド基；式－Ｓｉ（Ｒａ）３のシリル基；式－Ｇｅ（Ｒａ）３のゲルマニル基；及び式Ｎ＝Ｐ（Ｒｂ）（Ｒｃ）（Ｒｄ）のホスフィンイミン基からなる群から選択され；ここで、各Ｒ’は、独立して、水素、Ｃ1－２０アルキル基、及びＣ６－２０アリール基からなる群から選択され；ここで、各Ｒａは、独立して、水素、Ｃ１－８アルキル基、Ｃ１－８アルコキシ基、Ｃ６－２０アリールオキシ基及びＣ６－２０アリール基からなる群から選択され、Ｒｂ、Ｒｃ、Ｒｄは、各々独立して、Ｃ１－２０アルキル基であり；

Ｃｙは、シクロペンタジエニル型部分であり、Ｌ及びＸ３に共有結合しており；

各Ｘ１は、活性化可能な配位子であり；

Ｘ３は、水素、又は式－Ｓｉ（Ｒｅ）３のシリル基、若しくは式Ｓｎ（Ｒｅ）３のスタンニル基であり；ここで、各Ｒｅは、独立して、水素、Ｃ１－８アルキル基、Ｃ１－８アルコキシ基、Ｃ６－２０アリールオキシ基、及びＣ６－２０アリール基からなる群から選択され；

Ｌは、ＰとＣｙを連結する原子の連続鎖を含む架橋基であり、連続鎖は２個又は３個の原子を含む、有機金属錯体と、

ｉｉ）触媒活性剤と、

を含む、オレフィン重合触媒系。

【０９９０】

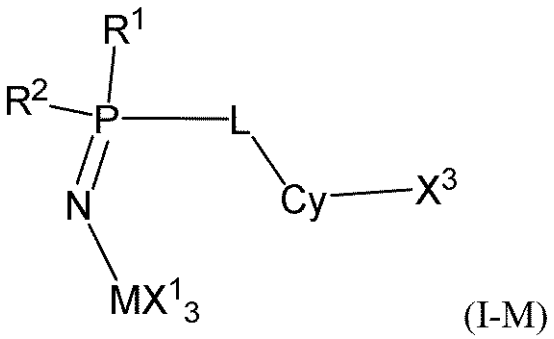
＜実施形態１９３＞

エチレンを、任意選択で１つ以上のＣ３－１２アルファ－オレフィンと、オレフィン重合触媒系の存在下で重合することを含む、重合プロセスであって、

オレフィン重合触媒系が、

ｉ）有機金属錯体であって、式Ｉ－Ｍ：

【化２３０】



(I-M)

で表され、

式中、

Ｍは、Ｔｉ、Ｚｒ又はＨｆであり；

Ｒ１及びＲ２は、各々独立して、水素及びＲＸからなる群から選択されるか；又はＲ１及びＲ２は、それらが結合しているＰ原子と一緒になって、非置換であるか、又はハロゲン原子、Ｃ１－２０アルキル基、Ｃ１－２０アルコキシ基、Ｃ７－２０アルキルアリール基、Ｃ７－２０アリールアルキル基、Ｃ６－２０アリール基、Ｃ６－２０アリールオキシ基、Ｃ７－２０アルキルアリールオキシ基、及びＣ７－２０アリールアルキルオキシ基からなる群から選択される１つ以上の置換基によってさらに置換されている３－１０員複素環式基を形成し；

各ＲＸは、独立して、ハロゲン原子；Ｃ１－３０ヒドロカルビル基（このヒドロカルビル基は、非置換であるか、又は１つ以上のハロゲン原子、Ｃ１－２０アルキル基、Ｃ１－

２０アルコキシ基、Ｃ７－２０アルキルアリール基、Ｃ７－２０アリールアルキル基、Ｃ６－２０アリール基、Ｃ６－２０アリールオキシ基、Ｃ７－２０アルキルアリールオキシ基、及び／又はＣ７－２０アリールアルキルオキシ基によってさらに置換されている）；式－ＮＲ’２のアミド基；式－Ｓｉ（Ｒａ）３のシリル基；式－Ｇｅ（Ｒａ）３のゲルマニル基；及び式Ｎ＝Ｐ（Ｒｂ）（Ｒｃ）（Ｒｄ）のホスフィンイミン基からなる群から選択され；ここで、各Ｒ’は、独立して、水素、Ｃ1－２０アルキル基、及びＣ６－２０アリール基からなる群から選択され；ここで、各Ｒａは、独立して、水素、Ｃ１－８アルキル基、Ｃ１－８アルコキシ基、Ｃ６－２０アリールオキシ基及びＣ６－２０アリール基からなる群から選択され、Ｒｂ、Ｒｃ、Ｒｄは、各々独立して、Ｃ１－２０アルキル基であり；

Ｃｙは、シクロペンタジエニル型部分であり、Ｌ及びＸ３に共有結合しており；

各Ｘ１は、活性化可能な配位子であり；

Ｘ３は、水素、又は式－Ｓｉ（Ｒｅ）３のシリル基、若しくは式Ｓｎ（Ｒｅ）３のスタンニル基であり；ここで、各Ｒｅは、独立して、水素、Ｃ１－８アルキル基、Ｃ１－８アルコキシ基、Ｃ６－２０アリールオキシ基、及びＣ６－２０アリール基からなる群から選択され；

Ｌは、ＰとＣｙを連結する原子の連続鎖を含む架橋基であり、連続鎖は２個又は３個の原子を含む、有機金属錯体と、

ｉｉ）触媒活性剤と、

を含む、重合プロセス。

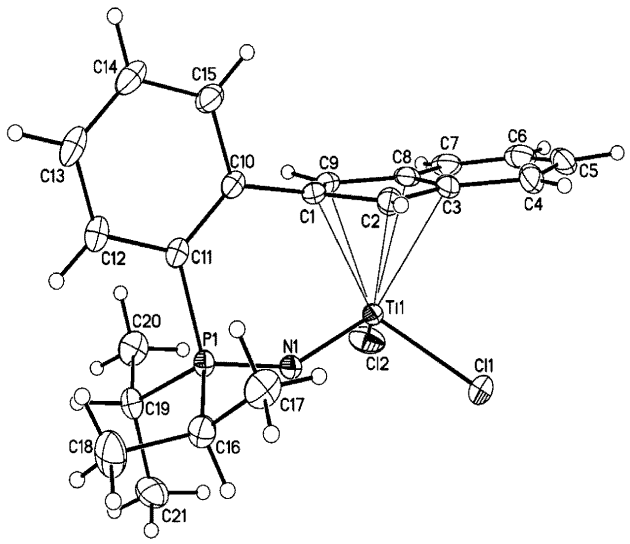
【産業上の利用可能性】

【０９９１】

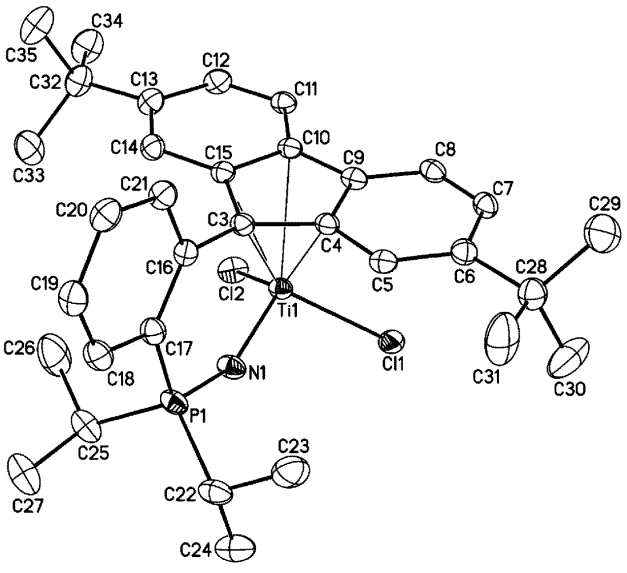
オレフィン重合触媒系内で使用できる有機金属錯体が提供される。オレフィン重合触媒系は、エチレンとアルファ－オレフィンの重合に効果的であり、高温溶液相重合プロセスで使用してもよい。

【図面】

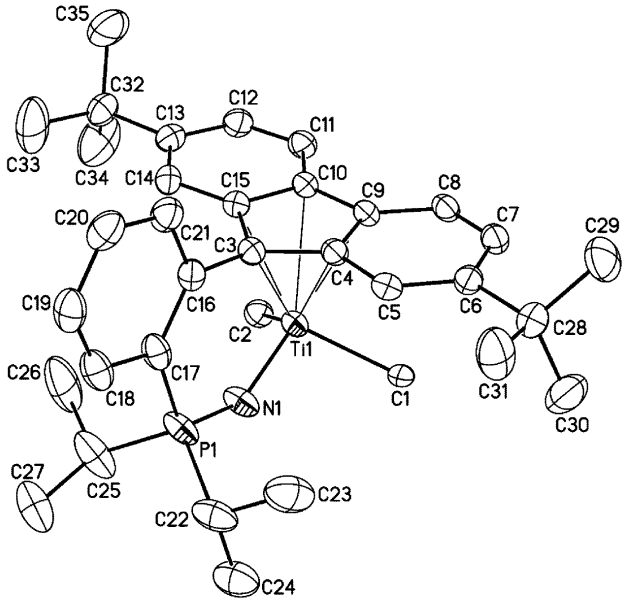
【図１】



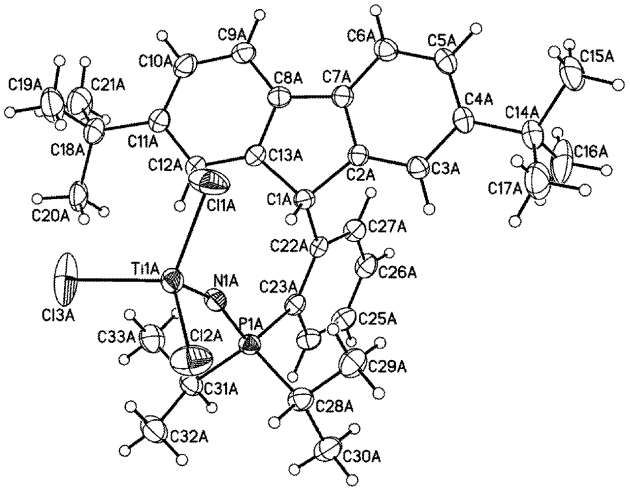
【図２】



【図３】


C35
C32
C33
C34
C13
C12
C11
C14
C15
C10
C9
C8
C7
C29
C20
C21
C3
C4
C5
C6
C28
C19
C16
C2
Ti1
C26
C17
C18
N1
C1
C31
C30
P1
C27
C25
C22
C23
C24

【図４】


C9A
C6A
C5A
C15A
C10A
C8A
C7A
C19A
C21A
C4A
C14A
C11A
C18A
C12A
C13A
C2A
C3A
C16A
C17A
C20A
Cl1A
C1A
C27A
C22A
Ti1A
N1A
C23A
C26A
Cl3A
C33A
Cl2A
P1A
C25A
C29A
C31A
C28A
C32A
C30A

【国際調査報告】

INTERNATIONAL SEARCH REPORT

International application No
PCT/IB2023/052757

A. CLASSIFICATION OF SUBJECT MATTER
INV. C07F9/535 B01J31/00 C07F17/00 C08F10/00
ADD.

According to International Patent Classification (IPC) or to both national classification and IPC

B. FIELDS SEARCHED

Minimum documentation searched (classification system followed by classification symbols)
C07F B01J C08F

Documentation searched other than minimum documentation to the extent that such documents are included in the fields searched

Electronic data base consulted during the international search (name of data base and, where practicable, search terms used)
EPO-Internal, CHEM ABS Data, WPI Data

C. DOCUMENTS CONSIDERED TO BE RELEVANT

Category*	Citation of document, with indication, where appropriate, of the relevant passages	Relevant to claim No.
X	ALHOMAIDAN OSAMAH ET AL: "Use of Olefin Metathesis to Link Phosphinimide-Cyclopentadienyl Ligand Complexes: Synthesis, Structure, and Ethylene Polymerization Activity", ORGANOMETALLICS, AMERICAN CHEMICAL SOCIETY, vol. 27, no. 23, 8 December 2008 (2008-12-08), pages 6343-6352, XP008131585, ISSN: 0276-7333, DOI: 10.1021/OM800672C [retrieved on 2008-10-28]	1,2,41, 42,83,84
A	compounds 1-25 abstract * schemes 1-3 * tables 1,2	3-40, 43-82, 85-193

-/--

[x] Further documents are listed in the continuation of Box C.

[x] See patent family annex.

* Special categories of cited documents :

"A" document defining the general state of the art which is not considered to be of particular relevance

"E" earlier application or patent but published on or after the international filing date

"L" document which may throw doubts on priority claim(s) or which is cited to establish the publication date of another citation or other special reason (as specified)

"O" document referring to an oral disclosure, use, exhibition or other means

"P" document published prior to the international filing date but later than the priority date claimed

"T" later document published after the international filing date or priority date and not in conflict with the application but cited to understand the principle or theory underlying the invention

"X" document of particular relevance;; the claimed invention cannot be considered novel or cannot be considered to involve an inventive step when the document is taken alone

"Y" document of particular relevance;; the claimed invention cannot be considered to involve an inventive step when the document is combined with one or more other such documents, such combination being obvious to a person skilled in the art

"&" document member of the same patent family

Date of the actual completion of the international search	Date of mailing of the international search report
12 June 2023	19/06/2023

Name and mailing address of the ISA/	Authorized officer
European Patent Office, P.B. 5818 Patentlaan 2 NL - 2280 HV Rijswijk Tel. (+31-70) 340-2040, Fax: (+31-70) 340-3016	Eberhard, Michael

Form PCT/ISA/210 (second sheet) (April 2005)

INTERNATIONAL SEARCH REPORT

International application No
PCT/IB2023/052757

C(Continuation). DOCUMENTS CONSIDERED TO BE RELEVANT

Category*	Citation of document, with indication, where appropriate, of the relevant passages	Relevant to claim No.
A	DE 10 2007 057854 A1 (UNIV MARBURG PHILIPPS [DE]) 4 June 2009 (2009-06-04) claims 1-17	1-193
A	GHESNER IOAN ET AL: "Di- tert-butylbiphenylphosphinimide Titanium and Zirconium Complexes:? Pendant Arene-Metal Interactions", ORGANOMETALLICS, vol. 25, no. 21, 1 October 2006 (2006-10-01), pages 4985-4995, XP093052360, ISSN: 0276-7333, DOI: 10.1021/om060569u * schemes 2, 7, 8 *	1-193

2

Form PCT/ISA/210 (continuation of second sheet) (April 2005)

INTERNATIONAL SEARCH REPORT

Information on patent family members

International application No
PCT/IB2023/052757

Patent document cited in search report	Publication date	Patent family member(s)	Publication date
DE 102007057854 A1	04-06-2009	AT 556082 T	15-05-2012
		DE 102007057854 A1	04-06-2009
		EP 2227479 A2	15-09-2010
		US 2011034715 A1	10-02-2011
		WO 2009068000 A2	04-06-2009

Form PCT/ISA/210 (patent family annex) (April 2005)

フロントページの続き

(51)国際特許分類		FI		テーマコード（参考）
C08F	*4/64 (2006.01)*	C08F	4/64	

,NA,RW,SD,SL,ST,SZ,TZ,UG,ZM,ZW),EA(AM,AZ,BY,KG,KZ,RU,TJ,TM),EP(AL,AT,BE,BG,CH,CY,CZ,DE,DK,EE,ES,FI,FR,GB,GR,HR,HU,IE,IS,IT,LT,LU,LV,MC,ME,MK,MT,NL,NO,PL,PT,RO,RS,SE,SI,SK,SM,TR),OA(BF,BJ,CF,CG,CI,CM,GA,GN,GQ,GW,KM,ML,MR,NE,SN,TD,TG),AE,AG,AL,AM,AO,AT,AU,AZ,BA,BB,BG,BH,BN,BR,BW,BY,BZ,CA,CH,CL,CN,CO,CR,CU,CV,CZ,DE,DJ,DK,DM,DO,DZ,EC,EE,EG,ES,FI,GB,GD,GE,GH,GM,GT,HN,HR,HU,ID,IL,IN,IQ,IR,IS,IT,JM,JO,JP,KE,KG,KH,KN,KP,KR,KW,KZ,LA,LC,LK,LR,LS,LU,LY,MA,MD,MG,MK,MN,MU,MW,MX,MY,MZ,NA,NG,NI,NO,NZ,OM,PA,PE,PG,PH,PL,PT,QA,RO,RS,RU,RW,SA,SC,SC,SD,SE,SG,SK,SL,ST,SV,SY,TH,TJ,TM,TN,TR,TT,TZ,UA,UG,US,UZ,VC,VN,WS,ZA,ZM,ZW

(72)発明者　モリソン、ダリル
カナダ ティー２エム ３エックス８ アルバータ、カルガリー、２２エイ ストリート エヌダブリュー ２４２１
(72)発明者　ガオ、シャオリャン
カナダ ティー３エル ２エヌ７ アルバータ、カルガリー、ブレイザー エステイツ リッジ ７８
(72)発明者　ゴエッテル、ジェイムズ ティー.
カナダ ティー２ケイ ２エヌ８ アルバータ、カルガリー、ノーラン ロード エヌダブリュー ５０２８
(72)発明者　クルス － ミレット、デイジー
カナダ ティー２エル ２エル５ アルバータ、カルガリー、サーティーセブンス ストリート エヌダブリュー ４５０１、エイ３０２
(72)発明者　チウ、フレデリック
カナダ ティー３イー ０ビー１ アルバータ、カルガリー、セブンティーンス アベニュー エスダブリュー ２９０９、７０４

Ｆターム（参考）　4H049　VN05 VP01 VW02
4H050　AA01 AA03 AB40 WB11 WB14 WB21
4J100　AA02P AA19Q CA04 FA10 FA19
4J128　AA01 AC01 AC10 AC20 AC28 AD02 AD11 AD13 AD16 AD18
AE05 AE13 BA00A BA02B BB00A BB01B BC12B BC13B BC14B BC15B BC25B
EA01 EB01 EB02 EB03 EB04 EB05 EB07 EB08 EB09 EB10 EC02
FA02 FA07 GA01 GA06 GB01

【要約の続き】
するのに効果的であり、高い分子量を有しかつアルファ－オレフィンの組み込み度が高いエチレンコポリマーを生成する。プレメタル化化合物、メタル化プロセス、有機金属錯体を作製するための合成方法、及び重合プロセスについても記載する。
【選択図】図３