

(19) 日本国特許庁(JP)

(12) 公開特許公報(A)

(11) 特許出願公開番号

特開2004-306014  
(P2004-306014A)

(43) 公開日 平成16年11月4日(2004.11.4)

(51) Int. Cl. <sup>7</sup>	F I	テーマコード (参考)
<b>BO1J 31/38</b>	BO1J 31/38 Z	4G069
<b>BO1J 37/04</b>	BO1J 37/04 102	4H006
<b>CO7C 2/34</b>	CO7C 2/34	4H039
<b>CO7C 11/107</b>	CO7C 11/107	4J128
<b>CO8F 4/646</b>	CO8F 4/646	
審査請求 未請求 請求項の数 7 O L (全 77 頁) 最終頁に続く		

(21) 出願番号	特願2004-26445 (P2004-26445)	(71) 出願人	000002093 住友化学工業株式会社 大阪府大阪市中央区北浜4丁目5番33号
(22) 出願日	平成16年2月3日(2004.2.3)	(74) 代理人	100093285 弁理士 久保山 隆
(31) 優先権主張番号	特願2003-84765 (P2003-84765)	(74) 代理人	100113000 弁理士 中山 亨
(32) 優先日	平成15年3月26日(2003.3.26)	(74) 代理人	100119471 弁理士 榎本 雅之
(33) 優先権主張国	日本国 (JP)	(72) 発明者	並河 正明 千葉県市原市姉崎海岸5の1 住友化学工業株式会社内
最終頁に続く			

(54) 【発明の名称】 オレフィン三量化触媒及びオレフィン三量体の製造方法

(57) 【要約】

【課題】 オレフィン三量体が高選択率で得られるオレフィン三量化触媒及び該触媒を用いるオレフィン三量体の製造方法を提供すること。

【解決手段】 下記成分(i)、(ii)及び(iii)を接触させてなるオレフィン三量化触媒。

(i) : 下記式 [ I ] で表される遷移金属化合物



Ar : 芳香環基

A : 元素の周期律表の第13~16族原子から選ばれる少なくとも1種の原子を有する架橋基

Cp : シクロペンタジエン形アニオン骨格を有する基

M : 元素の周期律表の第4族金属原子

n : 1~3の整数

X : 水素原子、ハロゲン原子、炭化水素基、置換シリル基、炭化水素オキシ基、2置換アミノ基又はジエン。

(ii) : 下記式 [ II ] で表される有機アルミニウム化合物



E<sup>1</sup> : 炭化水素基。

(iii) : アルミノキサン化合物

【選択図】 なし

## 【特許請求の範囲】

## 【請求項 1】

下記成分 (i)、(ii) 及び (iii) を接触させてなるオレフィン三量化触媒。

(i) : 下記式 [ I ] で表される遷移金属化合物



Ar : 芳香環基

A : 元素の周期律表の第 13 ~ 16 族原子から選ばれる少なくとも 1 種の原子を有する架橋基

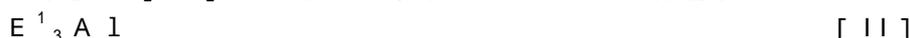
Cp : シクロペンタジエン形アニオン骨格を有する基

M : 元素の周期律表の第 4 族金属原子

n : 1 ~ 3 の整数

X : 水素原子、ハロゲン原子、炭化水素基、置換シリル基、炭化水素オキシ基、2 置換アミノ基又はジエン。ただし、X が複数ある場合は、夫々の X は互いに同じであってもよく異なってもよい。

(ii) : 下記式 [ II ] で表される有機アルミニウム化合物



(iii) : アルミノキサン化合物

## 【請求項 2】

下記式 (イ) 及び (ロ) を充足する請求項 1 に記載のオレフィン三量化触媒。

[ 成分 (ii) に含まれるアルミニウム原子のモル数 ] / [ 成分 (i) に含まれる第 4 族金属原子のモル数 ] = 0 . 1 ~ 1 0 0 0 0 \quad (イ)

[ 成分 (iii) に含まれるアルミニウム原子のモル数 ] / [ 成分 (i) に含まれる第 4 族金属原子のモル数 ] = 0 . 1 ~ 1 0 0 0 0 \quad (ロ)

## 【請求項 3】

成分 (ii) と成分 (iii) の接触処理量割合が、成分 (ii) と成分 (iii) との混合物の  $^{27}Al$  - 核磁気共鳴スペクトルにおいて、155 ppm 付近に現れるピークのピーク面積と 60 ppm 付近に現れるピークのピーク面積との比が 0 . 3 以上となる接触処理量割合である請求項 1 または 2 に記載のオレフィン三量化触媒。

## 【請求項 4】

成分 (ii) がトリメチルアルミニウムである請求項 1 ~ 3 のいずれかに記載のオレフィン三量化触媒。

## 【請求項 5】

下記成分 (i) 及び (iv) を接触させてなるオレフィン三量化触媒。

(i) : 下記式 [ I ] で表される遷移金属化合物



Ar : 芳香環基

A : 元素の周期律表の第 13 ~ 16 族原子から選ばれる少なくとも 1 種の原子を有する架橋基

Cp : シクロペンタジエン形アニオン骨格を有する基

M : 元素の周期律表の第 4 族金属原子

n : 1 ~ 3 の整数

X : 水素原子、ハロゲン原子、炭化水素基、置換シリル基、炭化水素オキシ基、2 置換アミノ基又はジエン。ただし、X が複数ある場合は、夫々の X は互いに同じであってもよく異なってもよい。

(iv) :  $^{27}Al$  - 核磁気共鳴スペクトルにおいて、155 ppm 付近に現れるピークのピーク面積と 60 ppm 付近に現れるピークのピーク面積との比が 0 . 3 以上であるアルミノキサン化合物

## 【請求項 6】

請求項 1 ~ 5 のいずれかに記載のオレフィン三量化触媒を用いるオレフィン三量体の製造方法。

10

20

30

40

50

## 【請求項 7】

請求項 1 ~ 5 のいずれかに記載のオレフィン三量化触媒を用いるヘキセンの製造方法。

## 【発明の詳細な説明】

## 【技術分野】

## 【0001】

本発明は、オレフィンの三量化触媒及び該触媒を用いるオレフィン三量体の製造方法に関するものである。

## 【背景技術】

## 【0002】

エチレンの三量化反応による 1 - ヘキセンの合成など、オレフィン三量体の合成に用いられる第 4 族金属原子を含有する触媒としては、シクロペンタジエニルチタニウムトリクロライドとナトリウムアマルガムとからなる触媒が知られており、該触媒を用いてエチレンを反応させることにより 1 - ブテンと 1 - ヘキセンが得られることが報告されている（例えば、特許文献 1 参照。）。また、（1 - メチル - 1 - フェニルエチルシクロペンタジエニル）チタニウムトリクロライドとメチルアルミノキサンとからなる触媒が知られており、該触媒を用いてエチレンを反応させることにより、1 - ヘキセン、1 - オクテンなどが得られることが知られている（例えば、特許文献 2 参照。）。

10

## 【0003】

【特許文献 1】特公昭 44 - 4961 号公報

【特許文献 2】国際公開 02 / 066405 号パンフレット

20

## 【発明の開示】

## 【発明が解決しようとする課題】

## 【0004】

しかしながら、上記のチタン化合物触媒を用いたオレフィンの反応では、三量体以外に、二量体や四量体などが副生することがあり、三量体の選択率は十分満足いくものではなかった。

かかる状況のもと、本発明が解決しようとする課題は、オレフィン三量体が高選択率で得られるオレフィン三量化触媒及び該触媒を用いるオレフィン三量体の製造方法を提供することにある。

## 【課題を解決するための手段】

30

## 【0005】

すなわち、本発明の第一は、下記成分 ( i )、( ii ) 及び ( iii ) を接触させてなるオレフィン三量化触媒にかかるものである。

( i ) : 下記式 [ I ] で表される遷移金属化合物



Ar : 芳香環基

A : 元素の周期律表の第 13 ~ 16 族原子から選ばれる少なくとも 1 種の原子を有する架橋基

Cp : シクロペンタジエン形アニオン骨格を有する基

M : 元素の周期律表の第 4 族金属原子

40

n : 1 ~ 3 の整数

X : 水素原子、ハロゲン原子、炭化水素基、置換シリル基、炭化水素オキシ基、2 置換アミノ基又はジエン。ただし、X が複数ある場合は、夫々の X は互いに同じであってもよく異なってもよい。

( ii ) : 下記式 [ II ] で表される有機アルミニウム化合物



E<sup>1</sup> : 炭化水素基。ただし、夫々の E<sup>1</sup> は互いに同じであってもよく異なってもよい。

( iii ) : アルミノキサン化合物

## 【0006】

50

また、本発明の第二は、下記成分 ( i ) 及び ( iv ) を接触させてなるオレフィン三量化触媒にかかるものである。

( i ) : 下記式 [ I ] で表される遷移金属化合物



Ar : 芳香環基

A : 元素の周期律表の第 13 ~ 16 族原子から選ばれる少なくとも 1 種の原子を有する架橋基

Cp : シクロペンタジエン形アニオン骨格を有する基

M : 元素の周期律表の第 4 族金属原子

n : 1 ~ 3 の整数

X : 水素原子、ハロゲン原子、炭化水素基、置換シリル基、炭化水素オキシ基、2 置換アミノ基又はジエン。ただし、X が複数ある場合は、夫々の X は互いに同じであってもよく異なってもよい。

( iv ) :  $^{27}Al$  - 核磁気共鳴スペクトルにおいて、155 ppm 付近に現れるピークのピーク面積と 60 ppm 付近に現れるピークのピーク面積との比が 0.7 以上であるアルミノキサン化合物

【0007】

また、本発明の第三は、上記のオレフィン三量化触媒を用いるオレフィン三量体の製造方法にかかるものである。

【発明の効果】

【0008】

本発明により、オレフィン三量体が高選択率で得られるオレフィン三量化触媒及び該触媒を用いるオレフィン三量体の製造方法を提供することができる。本発明のオレフィン三量化触媒は、ヘキセン、特に 1 - ヘキセンの製造に好適である。

【発明を実施するための最良の形態】

【0009】

本発明の成分 ( i ) は、下記式 [ I ] で表される遷移金属化合物である。



Ar : 芳香環基

A : 元素の周期律表の第 13 ~ 16 族原子から選ばれる少なくとも 1 種の原子を有する架橋基

Cp : シクロペンタジエン形アニオン骨格を有する基

M : 元素の周期律表の第 4 族金属原子

n : 1 ~ 3 の整数

X : 水素原子、ハロゲン原子、炭化水素基、置換シリル基、炭化水素オキシ基、2 置換アミノ基又はジエン。ただし、X が複数ある場合は、夫々の X は互いに同じであってもよく異なってもよい。

【0010】

式 [ I ] の Ar の芳香環基は、芳香族化合物から誘導され、遊離原子価を環の原子に持つ基であり、該芳香族化合物としては、単環化合物又は多環化合物のいずれでもよく、複素環化合物であってもよい。

【0011】

式 [ I ] の Ar としては、例えば、フェニル基、2 - メチルフェニル基、3 - メチルフェニル基、4 - メチルフェニル基、2 - イソプロピルフェニル基、3 - イソプロピルフェニル基、4 - イソプロピルフェニル基、2 - tert - ブチルフェニル基、3 - tert - ブチルフェニル基、4 - tert - ブチルフェニル基、2 - フェニルフェニル基、3 - フェニルフェニル基、4 - フェニルフェニル基、2, 4 - ジメチルフェニル基、2, 6 - ジメチルフェニル基、2, 4 - ジイソプロピルフェニル基、2, 6 - ジイソプロピルフェニル基、2, 4 - ジ - tert - ブチルフェニル基、2, 6 - ジ - tert - ブチルフェニル基、2, 4 - ジフェニルフェニル基、2, 6 - ジフェニルフェニル基、2, 4, 6 -

10

20

30

40

50

トリメチルフェニル基、2, 4, 6 - トリイソプロピルフェニル基、2, 4, 6 - tert - ブチルフェニル基、2, 4, 6 - トリフェニルフェニル基、2 - メトキシフェニル基、3 - メトキシフェニル基、4 - メトキシフェニル基、2, 4 - ジメトキシフェニル基、2, 6 - ジメトキシフェニル基、2, 4, 6 - トリメトキシフェニル基、2 - フェノキシフェニル基、3 - フェノキシフェニル基、4 - フェノキシフェニル基、2, 4 - ジフェノキシフェニル基、2, 6 - ジフェノキシフェニル基、2, 4, 6 - トリフェノキシフェニル基、2 - フルオロフェニル基、3 - フルオロフェニル基、4 - フルオロフェニル基、2 - クロロフェニル基、3 - クロロフェニル基、4 - クロロフェニル基、2 - プロモフェニル基、3 - プロモフェニル基、4 - プロモフェニル基、2 - ヨードフェニル基、3 - ヨードフェニル基、4 - ヨードフェニル基、2, 4 - ジフルオロフェニル基、2, 6 - ジフルオロフェニル基、2, 4 - ジクロロフェニル基、2, 6 - ジクロロフェニル基、2, 4 - ジプロモフェニル基、2, 6 - ジプロモフェニル基、2, 4 - ジヨードフェニル基、2, 6 - ジヨードフェニル基、2, 4, 6 - トリフルオロフェニル基、2, 4, 6 - トリクロロフェニル基、2, 4, 6 - トリプロモフェニル基、2, 4, 6 - トリヨードフェニル基、2, 3, 5, 6 - テトラフルオロフェニル基、2, 3, 5, 6 - テトラクロロフェニル基、2, 3, 5, 6 - テトラプロモフェニル基、2, 3, 5, 6 - テトラヨードフェニル基、ペンタフルオロフェニル基、ペンタクロロフェニル基、ペンタプロモフェニル基、ペンタヨードフェニル基、2 - トリフルオロメチルフェニル基、3 - トリフルオロメチルフェニル基、4 - トリフルオロメチルフェニル基、2, 4 - ビス(トリフルオロメチル)フェニル基、2, 6 - ビス(トリフルオロメチル)フェニル基、2, 4, 6 - トリス(トリフルオロメチル)フェニル基などの単環式芳香環基；ナフタレニル基、アントラセニル基、トリフェニレニル基、ピレニル基などの多環式芳香環基；2 - ピリジル基、3 - ピリジル基、4 - ピリジル基、6 - メチル - 2 - ピリジル基、2 - ピラジニル基、2 - ピリミジニル基などの複素芳香環基などが挙げられる。好ましくは、フェニル基、2, 6 - ジメチルフェニル基、2, 6 - ジイソプロピルフェニル基、2, 6 - tert - ブチルフェニル基、2, 6 - ジフェニルフェニル基、2, 4, 6 - トリメチルフェニル基、2, 4, 6 - トリフェニルフェニル基、2 - メトキシフェニル基、2, 6 - ジメトキシフェニル基、2, 4, 6 - トリメトキシフェニル基、2 - フルオロフェニル基、2, 6 - ジフルオロフェニル基、2, 4, 6 - トリフルオロフェニル基、2, 3, 5, 6 - テトラフルオロフェニル基、ペンタフルオロフェニル基、2 - トリフルオロメチルフェニル基、2, 6 - ビス(トリフルオロメチル)フェニル基又は2, 4, 6 - トリス(トリフルオロメチル)フェニル基であり、より好ましくはフェニル基である。

#### 【0012】

式 [ I ] の A は、Ar と Cp とをつなぐ架橋基であって、元素の周期律表 ( I U P A C 無機化学命名法改訂版 1 9 8 9 ) の第 1 3 ~ 1 6 族原子から選ばれる少なくとも 1 種の原子を有する架橋基であり、- B R -、- C R<sub>2</sub> -、- S i R<sub>2</sub> -、- N R -、- P R -、- O -、- S -、- S O -、- S O<sub>2</sub> - (ただし、R は、水素原子、炭化水素基、炭化水素オキシ基又は 2 置換アミノ基を表し、R が複数ある場合、夫々の R は互いに同じであってもよく異なってもよい。) もしくはこれらの組合せからなるものである。

#### 【0013】

式 [ I ] の A として具体的には、ボランジイル基、メチルボランジイル基、イソプロピルボランジイル基、tert - ブチルボランジイル基、フェニルボランジイル基、ペンタフルオロフェニルボランジイル基、ジイソプロピルアミノボランジイル基などの硼素架橋基；メチレン基、イソプロピリデン基、3, 3 - ペンタンジイル基、フェニルメチレン基、ジフェニルメチレン基、1, 2 - エタンジイル基、1, 1 - エタンジイル基、2 - メチル - 1, 2 - プロパンジイル基、2, 3 - ジメチル - 2, 3 - ブタンジイル基、1, 1 - ジフェニル - 1, 2 - エタンジイル基、1, 2 - ジフェニル - 1, 2 - エタンジイル基、1, 1, 2, 2 - テトラフェニル - 1, 2 - エタンジイル基、1, 3 - プロパンジイル基、フェニレン基などの炭素架橋基；シリレン基、ジメチルシリレン基、ジエチルシリレン基、ジフェニルシリレン基、ジシリレン基、ビス(ジメチルシリレン)基、ビス(ジエチ

ルシリレン)基、ビス(ジフェニルシリレン)基、Si, Si-ジメチルメチレンシリレン基などのケイ素架橋基；イミノ基、メチルイミノ基、イソプロピルイミノ基、tert-ブチルイミノ基、フェニルイミノ基などの窒素架橋基；メチルホスフィンジイル基、イソプロピルホスフィンジイル基、tert-ブチルホスフィンジイル基、フェニルホスフィンジイル基などのリン架橋基；酸素架橋基であるオキシ基；メチレンオキシ基、フェニレンオキシ基、ジ(メチレンオキシ)基などの含酸素炭化水素架橋基；メチレンチオ基、フェニレンチオ基などの含硫黄炭化水素架橋基；チオ基、ジチオ基、スルフィニル基、スルホニル基などの硫黄架橋基等が挙げられる。好ましくは、イソプロピルボランジイル基、フェニルボランジイル基、ジイソプロピルアミノボランジイル基、メチレン基、イソプロピリデン基、ジフェニルメチレン基、1,2-エタンジイル基、2,3-ジメチル-2,3-ブタンジイル基、フェニレン基、ジメチルシリレン基、ジフェニルシリレン基、イソプロピルイミノ基、オキシ基、メチレンオキシ基又はチオ基であり、より好ましくはメチレン基、イソプロピリデン基、1,2-エタンジイル基、オキシ基又はメチレンオキシ基である。

10

20

30

40

50

#### 【0014】

式[I]のC<sub>p</sub>はシクロペンタジエン形アニオン骨格を有する基であり、例えば<sup>5</sup>- (置換)シクロペンタジエニル基、<sup>5</sup>- (置換)インデニル基、<sup>5</sup>- (置換)フルオレニル基などがあげられる。具体的には、<sup>5</sup>-シクロペンタジエニル基、<sup>5</sup>-メチルシクロペンタジエニル基、<sup>5</sup>-ジメチルシクロペンタジエニル基、<sup>5</sup>-トリメチルシクロペンタジエニル基、<sup>5</sup>-テトラメチルシクロペンタジエニル基、<sup>5</sup>-エチルシクロペンタジエニル基、<sup>5</sup>-n-プロピルシクロペンタジエニル基、<sup>5</sup>-イソプロピルシクロペンタジエニル基、<sup>5</sup>-n-ブチルシクロペンタジエニル基、<sup>5</sup>-sec-ブチルシクロペンタジエニル基、<sup>5</sup>-tert-ブチルシクロペンタジエニル基、<sup>5</sup>-n-ペンチルシクロペンタジエニル基、<sup>5</sup>-ネオペンチルシクロペンタジエニル基、<sup>5</sup>-n-ヘキシルシクロペンタジエニル基、<sup>5</sup>-n-オクチルシクロペンタジエニル基、<sup>5</sup>-フェニルシクロペンタジエニル基、<sup>5</sup>-ナフチルシクロペンタジエニル基、<sup>5</sup>-トリメチルシリルシクロペンタジエニル基、<sup>5</sup>-トリエチルシリルシクロペンタジエニル基、<sup>5</sup>-tert-ブチルジメチルシリルシクロペンタジエニル基、<sup>5</sup>-インデニル基、<sup>5</sup>-メチルインデニル基、<sup>5</sup>-ジメチルインデニル基、<sup>5</sup>-エチルインデニル基、<sup>5</sup>-n-プロピルインデニル基、<sup>5</sup>-イソプロピルインデニル基、<sup>5</sup>-n-ブチルインデニル基、<sup>5</sup>-sec-ブチルインデニル基、<sup>5</sup>-tert-ブチルインデニル基、<sup>5</sup>-n-ペンチルインデニル基、<sup>5</sup>-ネオペンチルインデニル基、<sup>5</sup>-n-ヘキシルインデニル基、<sup>5</sup>-n-オクチルインデニル基、<sup>5</sup>-n-デシルインデニル基、<sup>5</sup>-フェニルインデニル基、<sup>5</sup>-メチルフェニルインデニル基、<sup>5</sup>-ナフチルインデニル基、<sup>5</sup>-トリメチルシリルインデニル基、<sup>5</sup>-トリエチルシリルインデニル基、<sup>5</sup>-tert-ブチルジメチルシリルインデニル基、<sup>5</sup>-テトラヒドロインデニル基、<sup>5</sup>-フルオレニル基、<sup>5</sup>-メチルフルオレニル基、<sup>5</sup>-ジメチルフルオレニル基、<sup>5</sup>-エチルフルオレニル基、<sup>5</sup>-ジエチルフルオレニル基、<sup>5</sup>-n-プロピルフルオレニル基、<sup>5</sup>-ジ-n-プロピルフルオレニル基、<sup>5</sup>-イソプロピルフルオレニル基、<sup>5</sup>-ジイソプロピルフルオレニル基、<sup>5</sup>-n-ブチルフルオレニル基、<sup>5</sup>-sec-ブチルフルオレニル基、<sup>5</sup>-tert-ブチルフルオレニル基、<sup>5</sup>-ジ-n-ブチルフルオレニル基、<sup>5</sup>-ジ-sec-ブチルフルオレニル基、<sup>5</sup>-ジ-tert-ブチルフルオレニル基、<sup>5</sup>-n-ペンチルフルオレニル基、<sup>5</sup>-ネオペンチルフルオレニル基、<sup>5</sup>-n-ヘキシルフルオレニル基、<sup>5</sup>-n-オクチルフルオレニル基、<sup>5</sup>-n-デシルフルオレニル基、<sup>5</sup>-n-ドデシルフルオレニル基、<sup>5</sup>-フェニルフルオレニル基、<sup>5</sup>-ジ-フェニルフルオレニル基、<sup>5</sup>-メチルフェニルフルオレニル基、<sup>5</sup>-ナフチルフルオレニル基、<sup>5</sup>-トリメチルシリルフルオレニル基、<sup>5</sup>-ビス-トリメチルシリルフルオレニル基、<sup>5</sup>-トリエチルシリルフルオレニル基、<sup>5</sup>-tert-ブチルジメチルシリルフルオレニル基などが挙げられ、好ましくは<sup>5</sup>-シクロペンタジエニル基、<sup>5</sup>-メチルシクロペンタジエニル基、<sup>5</sup>-ジメチルシクロペンタジエニル基、<sup>5</sup>-トリメチルシクロペンタジエニ

ル基、<sup>5</sup>-テトラメチルシクロペンタジエニル基、<sup>5</sup>-n-ブチルシクロペンタジエニル基、<sup>5</sup>-tert-ブチルシクロペンタジエニル基、<sup>5</sup>-フェニルシクロペンタジエニル基、<sup>5</sup>-トリメチルシリルシクロペンタジエニル基、<sup>5</sup>-tert-ブチルジメチルシリルシクロペンタジエニル基、<sup>5</sup>-インデニル基、<sup>5</sup>-テトラヒドロインデニル基又は<sup>5</sup>-フルオレニル基である。

## 【0015】

式 [ I ] の M は元素の周期律表 ( I U P A C 無機化学命名法改訂版 1 9 8 9 ) の第 4 族金属原子を表し、例えば、チタン原子、ジルコニウム原子、ハフニウム原子などを挙げることができる。好ましくはチタン原子である。

## 【0016】

式 [ I ] の n は 1 ~ 3 の整数を表し、好ましくは 2 又は 3 である。

10

## 【0017】

式 [ I ] の X は、水素原子、ハロゲン原子、炭化水素基、置換シリル基、炭化水素オキシ基、2 置換アミノ基又はジエンを表し、X が複数ある場合は、夫々の X は互いに同じであってもよく異なってもよい。

## 【0018】

式 [ I ] において、X のハロゲン原子としては、フッ素原子、塩素原子、臭素原子、ヨウ素原子などが例示され、好ましくは塩素原子又は臭素原子であり、より好ましくは塩素原子である。

## 【0019】

式 [ I ] において、X 及び R の炭化水素基としては、アルキル基、アラルキル基、アリール基などを挙げることができる。

20

## 【0020】

X 及び R のアルキル基としては、例えばメチル基、エチル基、n-プロピル基、イソプロピル基、n-ブチル基、sec-ブチル基、tert-ブチル基、イソブチル基、n-ペンチル基、ネオペンチル基、tert-ペンチル基、n-ヘキシル基、n-オクチル基、n-デシル基、n-ドデシル基、n-ペンタデシル基、n-エイコシル基などがあげられる。

## 【0021】

これらのアルキル基はいずれもフッ素原子、塩素原子、臭素原子、ヨウ素原子などのハロゲン原子で置換されていてもよく、ハロゲン原子で置換されたアルキル基としては、例えばフルオロメチル基、ジフルオロメチル基、トリフルオロメチル基、クロロメチル基、ジクロロメチル基、トリクロロメチル基、プロモメチル基、ジプロモメチル基、トリプロモメチル基、ヨードメチル基、ジヨードメチル基、トリヨードメチル基、フルオロエチル基、ジフルオロエチル基、トリフルオロエチル基、テトラフルオロエチル基、ペンタフルオロエチル基、クロロエチル基、ジクロロエチル基、トリクロロエチル基、テトラクロロエチル基、ペンタクロロエチル基、プロモエチル基、ジプロモエチル基、トリプロモエチル基、テトラプロモエチル基、ペンタプロモエチル基、パーフルオロプロピル基、パーフルオロブチル基、パーフルオロペンチル基、パーフルオロヘキシル基、パーフルオロオクチル基、パーフルオロドデシル基、パーフルオロペンタデシル基、パーフルオロエイコシル基、パークロロプロピル基、パークロロブチル基、パークロロペンチル基、パークロロヘキシル基、パークロロクチル基、パークロロドデシル基、パークロロペンタデシル基、パークロロエイコシル基、パープロモプロピル基、パープロモブチル基、パープロモペンチル基、パープロモヘキシル基、パープロモクチル基、パープロモドデシル基、パープロモペンタデシル基、パープロモエイコシル基などがあげられる。

30

40

## 【0022】

X 及び R のアルキル基としては、好ましくは炭素原子数 1 ~ 2 0 のアルキル基であり、より好ましくはメチル基、エチル基、イソプロピル基、tert-ブチル基、イソブチル基、tert-ペンチル基又はトリフルオロメチル基である。

## 【0023】

50

X及びRのアラルキル基としては、例えばベンジル基、(2-メチルフェニル)メチル基、(3-メチルフェニル)メチル基、(4-メチルフェニル)メチル基、(2,3-ジメチルフェニル)メチル基、(2,4-ジメチルフェニル)メチル基、(2,5-ジメチルフェニル)メチル基、(2,6-ジメチルフェニル)メチル基、(3,4-ジメチルフェニル)メチル基、(4,6-ジメチルフェニル)メチル基、(2,3,4-トリメチルフェニル)メチル基、(2,3,5-トリメチルフェニル)メチル基、(2,3,6-トリメチルフェニル)メチル基、(3,4,5-トリメチルフェニル)メチル基、(2,4,6-トリメチルフェニル)メチル基、(2,3,4,5-テトラメチルフェニル)メチル基、(2,3,4,6-テトラメチルフェニル)メチル基、(2,3,5,6-テトラメチルフェニル)メチル基、(ペンタメチルフェニル)メチル基、(エチルフェニル)メチル基、(n-プロピルフェニル)メチル基、(イソプロピルフェニル)メチル基、(n-ブチルフェニル)メチル基、(sec-ブチルフェニル)メチル基、(tert-ブチルフェニル)メチル基、(n-ペンチルフェニル)メチル基、(ネオペンチルフェニル)メチル基、(n-ヘキシルフェニル)メチル基、(n-オクチルフェニル)メチル基、(n-デシルフェニル)メチル基、(n-デシルフェニル)メチル基、(n-テトラデシルフェニル)メチル基、ナフチルメチル基、アントラセニルメチル基などがあげられる。

10

## 【0024】

これらのアラルキル基はいずれも、フッ素原子、塩素原子、臭素原子、ヨウ素原子などのハロゲン原子；メトキシ基、エトキシ基等のアルコキシ基；フェノキシ基などのアリーロキシ基；ベンジルオキシ基などのアラルキルオキシ基などで置換されていてもよい。

20

## 【0025】

X及びRのアラルキル基としては、好ましくは炭素原子数7~20のアラルキル基であり、より好ましくはベンジル基である。

## 【0026】

X及びRのアリール基としては、例えばフェニル基、2-トリル基、3-トリル基、4-トリル基、2,3-キシリル基、2,4-キシリル基、2,5-キシリル基、2,6-キシリル基、3,4-キシリル基、3,5-キシリル基、2,3,4-トリメチルフェニル基、2,3,5-トリメチルフェニル基、2,3,6-トリメチルフェニル基、2,4,6-トリメチルフェニル基、3,4,5-トリメチルフェニル基、2,3,4,5-テトラメチルフェニル基、2,3,4,6-テトラメチルフェニル基、2,3,5,6-テトラメチルフェニル基、ペンタメチルフェニル基、エチルフェニル基、n-プロピルフェニル基、イソプロピルフェニル基、n-ブチルフェニル基、sec-ブチルフェニル基、tert-ブチルフェニル基、n-ペンチルフェニル基、ネオペンチルフェニル基、n-ヘキシルフェニル基、n-オクチルフェニル基、n-デシルフェニル基、n-ドデシルフェニル基、n-テトラデシルフェニル基、ナフチル基、アントラセニル基などがあげられる。

30

## 【0027】

これらのアリール基はいずれも、フッ素原子、塩素原子、臭素原子、ヨウ素原子などのハロゲン原子；メトキシ基、エトキシ基等のアルコキシ基；フェノキシ基などのアリーロキシ基；ベンジルオキシ基などのアラルキルオキシ基などで置換されていてもよい。

40

## 【0028】

X及びRのアリール基としては、好ましくは炭素原子数6~20のアリール基であり、より好ましくはフェニル基である。

## 【0029】

式[I]におけるX及びRの置換シリル基とは、炭化水素基で置換されたシリル基であり、該炭化水素基は、フッ素原子、塩素原子、臭素原子、ヨウ素原子などのハロゲン原子；メトキシ基、エトキシ基等のアルコキシ基；フェノキシ基などのアリーロキシ基；ベンジルオキシ基などのアラルキルオキシ基などで置換されていてもよい。該炭化水素基としては、例えばメチル基、エチル基、n-プロピル基、イソプロピル基、n-ブチル基、sec-ブチル基、tert-ブチル基、イソブチル基、n-ペンチル基、n-ヘキシル

50

基、シクロヘキシル基などの炭素原子数 1 ~ 20 のアルキル基、フェニル基などのアリアル基などが好ましくあげられる。

【0030】

X 及び R の置換シリル基としては、例えばメチルシリル基、エチルシリル基、フェニルシリル基などの炭素原子数 1 ~ 20 の 1 置換シリル基；ジメチルシリル基、ジエチルシリル基、ジフェニルシリル基などの炭素原子数 2 ~ 20 の 2 置換シリル基；トリメチルシリル基、トリエチルシリル基、トリ - n - プロピルシリル基、トリイソプロピルシリル基、トリ - n - ブチルシリル基、トリ - sec - ブチルシリル基、トリ - tert - ブチルシリル基、トリイソブチルシリル基、tert - ブチルジメチルシリル基、トリ - n - ペンチルシリル基、トリ - n - ヘキシルシリル基、トリシクロヘキシルシリル基、トリフェニルシリル基などの炭素原子数 3 ~ 20 の 3 置換シリル基などが好ましくあげられ、さらに好ましくはトリメチルシリル基、tert - ブチルジメチルシリル基、トリフェニルシリル基である。

10

【0031】

式 [ I ] において、X 及び R の炭化水素オキシ基としては、アルコキシ基、アラルキルオキシ基、アリアルオキシ基などをあげることができる。

【0032】

X 及び R のアルコキシ基としては、例えばメトキシ基、エトキシ基、n - プロポキシ基、イソプロポキシ基、n - ブトキシ基、sec - ブトキシ基、tert - ブトキシ基、n - ペンチルオキシ基、ネオペンチルオキシ基、n - ヘキシルオキシ基、n - オクチルオキシ基、n - ドデシルオキシ基、n - ペンタデシルオキシ基、n - エイコシルオキシ基などが挙げられる。

20

【0033】

これらのアルコキシ基はいずれも、フッ素原子、塩素原子、臭素原子、ヨウ素原子などのハロゲン原子；メトキシ基、エトキシ基等のアルコキシ基；フェノキシ基などのアリアルオキシ基；ベンジルオキシ基などのアラルキルオキシ基などで置換されていてもよい。

【0034】

X 及び R のアルコキシ基としては、炭素原子数 1 ~ 20 のアルコキシ基が好ましく、より好ましくはメトキシ基、エトキシ基、イソプロポキシ基、tert - ブトキシ基である。

30

【0035】

X 及び R のアラルキルオキシ基としては、例えばベンジルオキシ基、( 2 - メチルフェニル ) メトキシ基、( 3 - メチルフェニル ) メトキシ基、( 4 - メチルフェニル ) メトキシ基、( 2, 3 - ジメチルフェニル ) メトキシ基、( 2, 4 - ジメチルフェニル ) メトキシ基、( 2, 5 - ジメチルフェニル ) メトキシ基、( 2, 6 - ジメチルフェニル ) メトキシ基、( 3, 4 - ジメチルフェニル ) メトキシ基、( 3, 5 - ジメチルフェニル ) メトキシ基、( 2, 3, 4 - トリメチルフェニル ) メトキシ基、( 2, 3, 5 - トリメチルフェニル ) メトキシ基、( 2, 3, 6 - トリメチルフェニル ) メトキシ基、( 2, 4, 5 - トリメチルフェニル ) メトキシ基、( 2, 4, 6 - トリメチルフェニル ) メトキシ基、( 3, 4, 5 - トリメチルフェニル ) メトキシ基、( 2, 3, 4, 5 - テトラメチルフェニル ) メトキシ基、( 2, 3, 4, 6 - テトラメチルフェニル ) メトキシ基、( 2, 3, 5, 6 - テトラメチルフェニル ) メトキシ基、( ペンタメチルフェニル ) メトキシ基、( エチルフェニル ) メトキシ基、( n - プロピルフェニル ) メトキシ基、( イソプロピルフェニル ) メトキシ基、( n - ブチルフェニル ) メトキシ基、( sec - ブチルフェニル ) メトキシ基、( tert - ブチルフェニル ) メトキシ基、( n - ヘキシルフェニル ) メトキシ基、( n - オクチルフェニル ) メトキシ基、( n - デシルフェニル ) メトキシ基、( n - テトラデシルフェニル ) メトキシ基ナフチルメトキシ基、アントラセニルメトキシ基などが挙げられる。

40

【0036】

これらのアラルキルオキシ基はいずれも、フッ素原子、塩素原子、臭素原子、ヨウ素原

50

子などのハロゲン原子；メトキシ基、エトキシ基等のアルコキシ基；フェノキシ基などのアリールオキシ基；ベンジルオキシ基などのアラルキルオキシ基などで置換されていてもよい。

【0037】

X及びRのアラルキルオキシ基としては、炭素原子数7～20のアラルキルオキシ基が好ましく、より好ましくはベンジルオキシ基である。

【0038】

X及びRのアリールオキシ基としては、例えばフェノキシ基、2-メチルフェノキシ基、3-メチルフェノキシ基、4-メチルフェノキシ基、2、3-ジメチルフェノキシ基、2、4-ジメチルフェノキシ基、2、5-ジメチルフェノキシ基、2、6-ジメチルフェノキシ基、3，4-ジメチルフェノキシ基、3，5-ジメチルフェノキシ基、2-tert-ブチル-3-メチルフェノキシ基、2-tert-ブチル-4-メチルフェノキシ基、2-tert-ブチル-5-メチルフェノキシ基、2-tert-ブチル-6-メチルフェノキシ基、2，3，4-トリメチルフェノキシ基、2，3，5-トリメチルフェノキシ基、2，3，6-トリメチルフェノキシ基、2，4，5-トリメチルフェノキシ基、2，4，6-トリメチルフェノキシ基、2-tert-ブチル-3，4-ジメチルフェノキシ基、2-tert-ブチル-3，5-ジメチルフェノキシ基、2-tert-ブチル-3，6-ジメチルフェノキシ基、2，6-ジ-tert-ブチル-3-メチルフェノキシ基、2-tert-ブチル-4，5-ジメチルフェノキシ基、2，6-ジ-tert-ブチル-4-メチルフェノキシ基、3，4，5-トリメチルフェノキシ基、2，3，4，5-テトラメチルフェノキシ基、2-tert-ブチル-3，4，5-トリメチルフェノキシ基、2，3，4，6-テトラメチルフェノキシ基、2-tert-ブチル-3，4，6-トリメチルフェノキシ基、2，6-ジ-tert-ブチル-3，4-ジメチルフェノキシ基、2，3，5，6-テトラメチルフェノキシ基、2-tert-ブチル-3，5，6-トリメチルフェノキシ基、2，6-ジ-tert-ブチル-3，5-ジメチルフェノキシ基、ペンタメチルフェノキシ基、エチルフェノキシ基、n-プロピルフェノキシ基、イソプロピルフェノキシ基、n-ブチルフェノキシ基、sec-ブチルフェノキシ基、tert-ブチルフェノキシ基、n-ヘキシルフェノキシ基、n-オクチルフェノキシ基、n-デシルフェノキシ基、n-テトラデシルフェノキシ基、ナフトキシ基、アントラセノキシ基などが挙げられる。

【0039】

これらのアリールオキシ基はいずれも、フッ素原子、塩素原子、臭素原子、ヨウ素原子などのハロゲン原子；メトキシ基、エトキシ基等のアルコキシ基；フェノキシ基などのアリールオキシ基；ベンジルオキシ基などのアラルキルオキシ基などで置換されていてもよい。

【0040】

X及びRのアリールオキシ基としては、炭素原子数6～20のアリールオキシ基が好ましい。

【0041】

式[I]におけるX及びRの2置換アミノ基とは、2つの炭化水素基で置換されたアミノ基又は2つのシリル基で置換されたアミノ基であり、該炭化水素基又は該シリル基は、フッ素原子、塩素原子、臭素原子、ヨウ素原子などのハロゲン原子；メトキシ基、エトキシ基等のアルコキシ基；フェノキシ基などのアリールオキシ基；ベンジルオキシ基などのアラルキルオキシ基などで置換されていてもよい。ここで炭化水素基としては、例えばメチル基、エチル基、n-プロピル基、イソプロピル基、n-ブチル基、sec-ブチル基、tert-ブチル基、イソブチル基、n-ペンチル基、n-ヘキシル基、シクロヘキシル基などの炭素原子数1～20のアルキル基；フェニル基などの炭素原子数6～20のアリール基；ベンジル基などの炭素原子数7～10のアラルキル基などが好ましく挙げられ、シリル基としては、トリメチルシリル基、tert-ブチルジメチルシリル基などが挙げられる。

10

20

30

40

50

## 【0042】

X及びRの2置換アミノ基としては、例えばジメチルアミノ基、ジエチルアミノ基、ジ-n-プロピルアミノ基、ジイソプロピルアミノ基、ジ-n-ブチルアミノ基、ジ-sec-ブチルアミノ基、ジ-tert-ブチルアミノ基、ジイソブチルアミノ基、tert-ブチルイソプロピルアミノ基、ジ-n-ヘキシルアミノ基、ジ-n-オクチルアミノ基、ジフェニルアミノ基、ビストリメチルシリルアミノ基、ビス-tert-ブチルジメチルシリルアミノ基などがあげられ、好ましくはジメチルアミノ基、ジエチルアミノ基、ジイソプロピルアミノ基、ジ-tert-ブチルアミノ基、ビストリメチルシリルアミノ基であり、より好ましくはジメチルアミノ基、ジエチルアミノ基である。

## 【0043】

式[I]におけるXのジエンとしては、1,3-ブタジエン、1,3-ペンタジエン、2,4-ヘキサジエン、1,4-ジフェニル-1,3-ブタジエン、1,4-ビス(4-メチルフェニル)-1,3-ブタジエン等が挙げられる。好ましくは、2,4-ヘキサジエン又は1,4-ジフェニル-1,3-ブタジエンである。

## 【0044】

式[I]のXとしては、好ましくは、それぞれ独立に、ハロゲン原子、アルキル基、アラルキル基又はアリール基であり、より好ましくは、それぞれ独立に、ハロゲン原子、アルキル基、アラルキル基であり、より好ましくはハロゲン原子又はアルキル基である。

## 【0045】

式[I]で示される遷移金属化合物としては、Aがメチレン基である化合物があげられ、例えば、Aがメチレン基であり、Cpが<sup>5</sup>-シクロペンタジエニル基であり、Mがチタン原子であり、Xが塩素原子であり、nが3である化合物としては、トリクロロ(ベンジル-<sup>5</sup>-シクロペンタジエニル)チタン、トリクロロ(2-メチルベンジル-<sup>5</sup>-シクロペンタジエニル)チタン、トリクロロ(3-メチルベンジル-<sup>5</sup>-シクロペンタジエニル)チタン、トリクロロ(4-メチルベンジル-<sup>5</sup>-シクロペンタジエニル)チタン、トリクロロ(2-イソプロピルベンジル-<sup>5</sup>-シクロペンタジエニル)チタン、トリクロロ(3-イソプロピルベンジル-<sup>5</sup>-シクロペンタジエニル)チタン、トリクロロ(4-イソプロピルベンジル-<sup>5</sup>-シクロペンタジエニル)チタン、トリクロロ(2-フェニルベンジル-<sup>5</sup>-シクロペンタジエニル)チタン、トリクロロ(3-フェニルベンジル-<sup>5</sup>-シクロペンタジエニル)チタン、トリクロロ(4-フェニルベンジル-<sup>5</sup>-シクロペンタジエニル)チタン、トリクロロ(2,4-ジメチルベンジル-<sup>5</sup>-シクロペンタジエニル)チタン、トリクロロ(2,6-ジメチルベンジル-<sup>5</sup>-シクロペンタジエニル)チタン、トリクロロ(2,4-ジイソプロピルベンジル-<sup>5</sup>-シクロペンタジエニル)チタン、トリクロロ(2,6-ジイソプロピルベンジル-<sup>5</sup>-シクロペンタジエニル)チタン、トリクロロ(2,4-ジ-tert-ブチルベンジル-<sup>5</sup>-シクロペンタジエニル)チタン、トリクロロ(2,6-ジ-tert-ブチルベンジル-<sup>5</sup>-シクロペンタジエニル)チタン、トリクロロ(2,4-ジフェニルベンジル-<sup>5</sup>-シクロペンタジエニル)チタン、トリクロロ(2,6-ジフェニルベンジル-<sup>5</sup>-シクロペンタジエニル)チタン、トリクロロ(2,4,6-トリメチルベンジル-<sup>5</sup>-シクロペンタジエニル)チタン、トリクロロ(2,4,6-トリイソプロピルベンジル-<sup>5</sup>-シクロペンタジエニル)チタン、トリクロロ(2,4,6-トリ-tert-ブチルベンジル-<sup>5</sup>-シクロペンタジエニル)チタン、トリクロロ(2,4,6-トリフェニルベンジル-<sup>5</sup>-シクロペンタジエニル)チタン、トリクロロ(2-メトキシベンジル-<sup>5</sup>-シクロペンタジエニル)チタン、トリクロロ(3-メトキシベンジル-<sup>5</sup>-シクロペンタジエニル)チタン、トリクロロ(4-メトキシベンジル-<sup>5</sup>-シクロペンタジエニル)チタン、トリクロロ(2,4-ジメトキシベンジル-<sup>5</sup>-シクロペンタジエニル)チタン、トリクロロ(2,6-ジメトキシベンジル-<sup>5</sup>-シクロペンタジエニル)チタン、トリクロロ(2,4,6-トリメトキシベンジル-<sup>5</sup>-シクロペンタジエニル)チタン、トリクロロ(2-フェノキシベンジル-<sup>5</sup>-シクロペンタジエニル)チタン、トリクロロ(3-フェノキシベンジル-<sup>5</sup>-シクロペンタジエニル)チタン、トリクロロ

10

20

30

40

50





ニル)チタン、トリクロロ(3-ヨードベンジル-<sup>5</sup>-テトラメチルシクロペンタジエ  
 ニル)チタン、トリクロロ(4-ヨードベンジル-<sup>5</sup>-テトラメチルシクロペンタジエ  
 ニル)チタン、トリクロロ(2,4-ジフルオロベンジル-<sup>5</sup>-テトラメチルシクロペ  
 ンタジエニル)チタン、トリクロロ(2,6-ジフルオロベンジル-<sup>5</sup>-テトラメチル  
 シクロペンタジエニル)チタン、トリクロロ(2,4-ジクロロベンジル-<sup>5</sup>-テトラ  
 メチルシクロペンタジエニル)チタン、トリクロロ(2,6-ジクロロベンジル-<sup>5</sup>-テ  
 トラメチルシクロペンタジエニル)チタン、トリクロロ(2,4-ジブromoベンジル-  
<sup>5</sup>-テトラメチルシクロペンタジエニル)チタン、トリクロロ(2,6-ジブromoベンジ  
 ル-<sup>5</sup>-テトラメチルシクロペンタジエニル)チタン、トリクロロ(2,4-ジヨード  
 ベンジル-<sup>5</sup>-テトラメチルシクロペンタジエニル)チタン、トリクロロ(2,6-ジ  
 ヨードベンジル-<sup>5</sup>-テトラメチルシクロペンタジエニル)チタン、トリクロロ(2,  
 4,6-トリフルオロベンジル-<sup>5</sup>-テトラメチルシクロペンタジエニル)チタン、ト  
 リクロロ(2,4,6-トリクロロベンジル-<sup>5</sup>-テトラメチルシクロペンタジエニル  
 )チタン、トリクロロ(2,4,6-トリブromoベンジル-<sup>5</sup>-テトラメチルシクロペ  
 ンタジエニル)チタン、トリクロロ(2,4,6-トリヨードベンジル-<sup>5</sup>-テトラメ  
 チルシクロペンタジエニル)チタン、トリクロロ(2,3,5,6-テトラフルオロベン  
 ジル-<sup>5</sup>-テトラメチルシクロペンタジエニル)チタン、トリクロロ(2,3,5,6  
 -テトラクロロベンジル-<sup>5</sup>-テトラメチルシクロペンタジエニル)チタン、トリクロ  
 ロ(2,3,5,6-テトラブromoベンジル-<sup>5</sup>-テトラメチルシクロペンタジエニル  
 )チタン、トリクロロ(2,3,5,6-テトラヨードベンジル-<sup>5</sup>-テトラメチルシ  
 クロペンタジエニル)チタン、トリクロロ(ペンタフルオロベンジル-<sup>5</sup>-テトラメ  
 チルシクロペンタジエニル)チタン、トリクロロ(ペンタクロロベンジル-<sup>5</sup>-テトラ  
 メチルシクロペンタジエニル)チタン、トリクロロ(ペンタブromoベンジル-<sup>5</sup>-テ  
 トラメチルシクロペンタジエニル)チタン、トリクロロ(ペンタヨードベンジル-<sup>5</sup>-テ  
 トラメチルシクロペンタジエニル)チタン、トリクロロ(2-トリフルオロメチルベン  
 ジル-<sup>5</sup>-テトラメチルシクロペンタジエニル)チタン、トリクロロ(3-トリフルオロ  
 メチルベンジル-<sup>5</sup>-テトラメチルシクロペンタジエニル)チタン、トリクロロ(4-ト  
 リフルオロメチルベンジル-<sup>5</sup>-テトラメチルシクロペンタジエニル)チタン、トリク  
 ロロ{2,4-ビス(トリフルオロメチル)ベンジル-<sup>5</sup>-テトラメチルシクロペンタ  
 ジエニル}チタン、トリクロロ{2,6-ビス(トリフルオロメチル)ベンジル-<sup>5</sup>-  
 テトラメチルシクロペンタジエニル}チタン、トリクロロ{2,4,6-トリス(トリフ  
 ルオロメチル)ベンジル-<sup>5</sup>-テトラメチルシクロペンタジエニル}チタン、トリク  
 ロロ(ナフタレニルメチレン-<sup>5</sup>-テトラメチルシクロペンタジエニル)チタン、トリク  
 ロロ(アントラセニルメチレン-<sup>5</sup>-テトラメチルシクロペンタジエニル)チタン、ト  
 リクロロ(トリフェニルメチレン-<sup>5</sup>-テトラメチルシクロペンタジエニル)チタ  
 ン、トリクロロ(ピレニルメチレン-<sup>5</sup>-テトラメチルシクロペンタジエニル)チタ  
 ン、トリクロロ(2-ピリジルメチレン-<sup>5</sup>-テトラメチルシクロペンタジエニル)チ  
 タン、トリクロロ(3-ピリジルメチレン-<sup>5</sup>-テトラメチルシクロペンタジエニル)チ  
 タン、トリクロロ(4-ピリジルメチレン-<sup>5</sup>-テトラメチルシクロペンタジエニル)  
 チタン、トリクロロ{(6-メチル-2-ピリジル)メチレン-<sup>5</sup>-テトラメチルシク  
 ロペンタジエニル}チタン、トリクロロ(2-ピラジニルメチレン-<sup>5</sup>-テトラメチル  
 シクロペンタジエニル)チタン、トリクロロ(2-ピリミジニルメチレン-<sup>5</sup>-テトラ  
 メチルシクロペンタジエニル)チタンなど(以下、これらの化合物を、化合物群(2)と  
 称する。)が挙げられる。

【0047】

また、Aがメチレン基であり、Cpが<sup>5</sup>-メチルシクロペンタジエニル基、<sup>5</sup>-ジメ  
 チルシクロペンタジエニル基、<sup>5</sup>-トリメチルシクロペンタジエニル基、<sup>5</sup>-n-ブチ  
 ルシクロペンタジエニル基、<sup>5</sup>-tert-ブチルシクロペンタジエニル基、<sup>5</sup>-フェ  
 ニルシクロペンタジエニル基、<sup>5</sup>-トリメチルシリルシクロペンタジエニル基、<sup>5</sup>-t  
 ert-ブチルジメチルシリルシクロペンタジエニル基、<sup>5</sup>-インデニル基、<sup>5</sup>-テト

10

20

30

40

50

ラヒドロインデニル基又は<sup>5</sup>-フルオレニル基であり、Mがチタン原子であり、Xが塩素原子であり、nが3である化合物としては、上記化合物群(1)で示した化合物の<sup>5</sup>-シクロペンタジエニルを、<sup>5</sup>-メチルシクロペンタジエニル、<sup>5</sup>-ジメチルシクロペンタジエニル、<sup>5</sup>-トリメチルシクロペンタジエニル、<sup>5</sup>-n-ブチルシクロペンタジエニル、<sup>5</sup>-tert-ブチルシクロペンタジエニル、<sup>5</sup>-フェニルシクロペンタジエニル、<sup>5</sup>-トリメチルシリルシクロペンタジエニル、<sup>5</sup>-tert-ブチルジメチルシリルシクロペンタジエニル、<sup>5</sup>-インデニル、<sup>5</sup>-テトラヒドロインデニル又は<sup>5</sup>-フルオレニルに変更した化合物など(以下、これらの化合物を、化合物群(3)と称する。)があげられる。

【0048】

式[I]で示される遷移金属化合物としては、Aがイソプロピリデン基である化合物があげられ、例えば、Aがイソプロピリデン基であり、Cpが<sup>5</sup>-シクロペンタジエニル基であり、Mがチタン原子であり、Xが塩素原子であり、nが3である化合物としては、トリクロロ(1-フェニル-1-メチルエチル-<sup>5</sup>-シクロペンタジエニル)チタン、トリクロロ{1-(2-メチルフェニル)-1-メチルエチル-<sup>5</sup>-シクロペンタジエニル}チタン、トリクロロ{1-(3-メチルフェニル)-1-メチルエチル-<sup>5</sup>-シクロペンタジエニル}チタン、トリクロロ{1-(4-メチルフェニル)-1-メチルエチル-<sup>5</sup>-シクロペンタジエニル}チタン、トリクロロ{1-(2-イソプロピルフェニル)-1-メチルエチル-<sup>5</sup>-シクロペンタジエニル}チタン、トリクロロ{1-(3-イソプロピルフェニル)-1-メチルエチル-<sup>5</sup>-シクロペンタジエニル}チタン、トリクロロ{1-(4-イソプロピルフェニル)-1-メチルエチル-<sup>5</sup>-シクロペンタジエニル}チタン、トリクロロ{1-(2-フェニルフェニル)-1-メチルエチル-<sup>5</sup>-シクロペンタジエニル}チタン、トリクロロ{1-(3-フェニルフェニル)-1-メチルエチル-<sup>5</sup>-シクロペンタジエニル}チタン、トリクロロ{1-(4-フェニルフェニル)-1-メチルエチル-<sup>5</sup>-シクロペンタジエニル}チタン、トリクロロ{1-(2,4-ジメチルフェニル)-1-メチルエチル-<sup>5</sup>-シクロペンタジエニル}チタン、トリクロロ{1-(2,6-ジメチルフェニル)-1-メチルエチル-<sup>5</sup>-シクロペンタジエニル}チタン、トリクロロ{1-(2,4-ジイソプロピルフェニル)-1-メチルエチル-<sup>5</sup>-シクロペンタジエニル}チタン、トリクロロ{1-(2,6-ジイソプロピルフェニル)-1-メチルエチル-<sup>5</sup>-シクロペンタジエニル}チタン、トリクロロ{1-(2,4-ジtert-ブチルフェニル)-1-メチルエチル-<sup>5</sup>-シクロペンタジエニル}チタン、トリクロロ{1-(2,6-ジtert-ブチルフェニル)-1-メチルエチル-<sup>5</sup>-シクロペンタジエニル}チタン、トリクロロ{1-(2,4-ジフェニルフェニル)-1-メチルエチル-<sup>5</sup>-シクロペンタジエニル}チタン、トリクロロ{1-(2,6-ジフェニルフェニル)-1-メチルエチル-<sup>5</sup>-シクロペンタジエニル}チタン、トリクロロ{1-(2,4,6-トリメチルフェニル)-1-メチルエチル-<sup>5</sup>-シクロペンタジエニル}チタン、トリクロロ{1-(2,4,6-トリイソプロピルフェニル)-1-メチルエチル-<sup>5</sup>-シクロペンタジエニル}チタン、トリクロロ{1-(2,4,6-トリtert-ブチルフェニル)-1-メチルエチル-<sup>5</sup>-シクロペンタジエニル}チタン、トリクロロ{1-(2,4,6-トリフェニルフェニル)-1-メチルエチル-<sup>5</sup>-シクロペンタジエニル}チタン、トリクロロ{1-(2-メトキシフェニル)-1-メチルエチル-<sup>5</sup>-シクロペンタジエニル}チタン、トリクロロ{1-(3-メトキシフェニル)-1-メチルエチル-<sup>5</sup>-シクロペンタジエニル}チタン、トリクロロ{1-(4-メトキシフェニル)-1-メチルエチル-<sup>5</sup>-シクロペンタジエニル}チタン、トリクロロ{1-(2,4-ジメトキシフェニル)-1-メチルエチル-<sup>5</sup>-シクロペンタジエニル}チタン、トリクロロ{1-(2,6-ジメトキシフェニル)-1-メチルエチル-<sup>5</sup>-シクロペンタジエニル}チタン、トリクロロ{1-(2,4,6-トリメトキシフェニル)-1-メチルエチル-<sup>5</sup>-シクロペンタジエニル}チタン、トリクロロ{1-(2-フェノキシフェニル)-1-メチルエチル-<sup>5</sup>-シクロペンタジエニル}チタン、トリクロロ{1-(3-フェノ

10

20

30

40

50



ン、トリクロロ [ 1 - { 2 , 4 - ビス (トリフルオロメチル) フェニル } - 1 - メチルエチル - <sup>5</sup> - シクロペンタジエニル ] チタン、トリクロロ [ 1 - { 2 , 6 - ビス (トリフルオロメチル) フェニル } - 1 - メチルエチル - <sup>5</sup> - シクロペンタジエニル ] チタン、トリクロロ [ 1 - { 2 , 4 , 6 - トリス (トリフルオロメチル) フェニル } - 1 - メチルエチル - <sup>5</sup> - シクロペンタジエニル ] チタン、トリクロロ ( 1 - ナフタレニル - 1 - メチルエチル - <sup>5</sup> - シクロペンタジエニル ) チタン、トリクロロ ( 1 - アントラセニル - 1 - メチルエチル - <sup>5</sup> - シクロペンタジエニル ) チタン、トリクロロ ( 1 - トリフェニレニル - 1 - メチルエチル - <sup>5</sup> - シクロペンタジエニル ) チタン、トリクロロ ( 1 - ピレニル - 1 - メチルエチル - <sup>5</sup> - シクロペンタジエニル ) チタン、トリクロロ { 1 - ( 2 - ピリジル ) - 1 - メチルエチル - <sup>5</sup> - シクロペンタジエニル } チタン、トリクロロ { 1 - ( 3 - ピリジル ) - 1 - メチルエチル - <sup>5</sup> - シクロペンタジエニル } チタン、トリクロロ { 1 - ( 4 - ピリジル ) - 1 - メチルエチル - <sup>5</sup> - シクロペンタジエニル } チタン、トリクロロ { 1 - ( 6 - メチル - 2 - ピリジル ) - 1 - メチルエチル - <sup>5</sup> - シクロペンタジエニル } チタン、トリクロロ { 1 - ( 2 - ピラジニル ) - 1 - メチルエチル - <sup>5</sup> - シクロペンタジエニル } チタン、トリクロロ { 1 - ( 2 - ピリミジニル ) - 1 - メチルエチル - <sup>5</sup> - シクロペンタジエニル } チタンなど ( 以下、これらの化合物を、化合物群 ( 4 ) と称する。 ) が挙げられる。

10

## 【 0 0 4 9 】

また、A がイソプロピリデン基であり、C p が <sup>5</sup> - テトラメチルシクロペンタジエニル基であり、M がチタン原子であり、X が塩素原子であり、n が 3 である化合物としては、トリクロロ ( 1 - フェニル - 1 - メチルエチル - <sup>5</sup> - テトラメチルシクロペンタジエニル ) チタン、トリクロロ { 1 - ( 2 - メチルフェニル ) - 1 - メチルエチル - <sup>5</sup> - テトラメチルシクロペンタジエニル } チタン、トリクロロ { 1 - ( 3 - メチルフェニル ) - 1 - メチルエチル - <sup>5</sup> - テトラメチルシクロペンタジエニル } チタン、トリクロロ { 1 - ( 4 - メチルフェニル ) - 1 - メチルエチル - <sup>5</sup> - テトラメチルシクロペンタジエニル } チタン、トリクロロ { 1 - ( 2 - イソプロピルフェニル ) - 1 - メチルエチル - <sup>5</sup> - テトラメチルシクロペンタジエニル } チタン、トリクロロ { 1 - ( 3 - イソプロピルフェニル ) - 1 - メチルエチル - <sup>5</sup> - テトラメチルシクロペンタジエニル } チタン、トリクロロ { 1 - ( 4 - イソプロピルフェニル ) - 1 - メチルエチル - <sup>5</sup> - テトラメチルシクロペンタジエニル } チタン、トリクロロ { 1 - ( 2 - フェニルフェニル ) - 1 - メチルエチル - <sup>5</sup> - テトラメチルシクロペンタジエニル } チタン、トリクロロ { 1 - ( 3 - フェニルフェニル ) - 1 - メチルエチル - <sup>5</sup> - テトラメチルシクロペンタジエニル } チタン、トリクロロ { 1 - ( 4 - フェニルフェニル ) - 1 - メチルエチル - <sup>5</sup> - テトラメチルシクロペンタジエニル } チタン、トリクロロ { 1 - ( 2 , 4 - ジメチルフェニル ) - 1 - メチルエチル - <sup>5</sup> - テトラメチルシクロペンタジエニル } チタン、トリクロロ { 1 - ( 2 , 6 - ジメチルフェニル ) - 1 - メチルエチル - <sup>5</sup> - テトラメチルシクロペンタジエニル } チタン、トリクロロ { 1 - ( 2 , 4 - ジイソプロピルフェニル ) - 1 - メチルエチル - <sup>5</sup> - テトラメチルシクロペンタジエニル } チタン、トリクロロ { 1 - ( 2 , 6 - ジイソプロピルフェニル ) - 1 - メチルエチル - <sup>5</sup> - テトラメチルシクロペンタジエニル } チタン、トリクロロ { 1 - ( 2 , 4 - ジ - t e r t - プチルフェニル ) - 1 - メチルエチル - <sup>5</sup> - テトラメチルシクロペンタジエニル } チタン、トリクロロ { 1 - ( 2 , 6 - ジ - t e r t - プチルフェニル ) - 1 - メチルエチル - <sup>5</sup> - テトラメチルシクロペンタジエニル } チタン、トリクロロ { 1 - ( 2 , 4 - ジフェニルフェニル ) - 1 - メチルエチル - <sup>5</sup> - テトラメチルシクロペンタジエニル } チタン、トリクロロ { 1 - ( 2 , 6 - ジフェニルフェニル ) - 1 - メチルエチル - <sup>5</sup> - テトラメチルシクロペンタジエニル } チタン、トリクロロ { 1 - ( 2 , 4 , 6 - トリメチルフェニル ) - 1 - メチルエチル - <sup>5</sup> - テトラメチルシクロペンタジエニル } チタン、トリクロロ { 1 - ( 2 , 4 , 6 - トリイソプロピルフェニル ) - 1 - メチルエチル - <sup>5</sup> - テトラメチルシクロペンタジエニル } チタン、トリクロロ { 1 - ( 2 , 4 , 6 - トリ - t e r t - プチルフェニル ) - 1 - メチルエチル - <sup>5</sup> - テトラメチルシクロペンタジエニル } チタン、トリクロロ { 1 - ( 2

20

30

40

50



{ 1 - ( 2 , 4 , 6 - トリヨードフェニル ) - 1 - メチルエチル - <sup>5</sup> - テトラメチルシクロペンタジエニル } チタン、トリクロロ { 1 - ( 2 , 3 , 5 , 6 - テトラフルオロフェニル ) - 1 - メチルエチル - <sup>5</sup> - テトラメチルシクロペンタジエニル } チタン、トリクロロ { 1 - ( 2 , 3 , 5 , 6 - テトラクロロフェニル ) - 1 - メチルエチル - <sup>5</sup> - テトラメチルシクロペンタジエニル } チタン、トリクロロ { 1 - ( 2 , 3 , 5 , 6 - テトラブロモフェニル ) - 1 - メチルエチル - <sup>5</sup> - テトラメチルシクロペンタジエニル } チタン、トリクロロ { 1 - ( 2 , 3 , 5 , 6 - テトラヨードフェニル ) - 1 - メチルエチル - <sup>5</sup> - テトラメチルシクロペンタジエニル } チタン、トリクロロ { 1 - ( ペンタフルオロフェニル ) - 1 - メチルエチル - <sup>5</sup> - テトラメチルシクロペンタジエニル } チタン、トリクロロ { 1 - ( ペンタクロロフェニル ) - 1 - メチルエチル - <sup>5</sup> - テトラメチルシクロペンタジエニル } チタン、トリクロロ { 1 - ( ペンタブロモフェニル ) - 1 - メチルエチル - <sup>5</sup> - テトラメチルシクロペンタジエニル } チタン、トリクロロ { 1 - ( ペンタヨードフェニル ) - 1 - メチルエチル - <sup>5</sup> - テトラメチルシクロペンタジエニル } チタン、トリクロロ { 1 - ( 2 - トリフルオロメチルフェニル ) - 1 - メチルエチル - <sup>5</sup> - テトラメチルシクロペンタジエニル } チタン、トリクロロ { 1 - ( 3 - トリフルオロメチルフェニル ) - 1 - メチルエチル - <sup>5</sup> - テトラメチルシクロペンタジエニル } チタン、トリクロロ { 1 - ( 4 - トリフルオロメチルフェニル ) - 1 - メチルエチル - <sup>5</sup> - テトラメチルシクロペンタジエニル } チタン、トリクロロ [ 1 - { 2 , 4 - ビス ( トリフルオロメチル ) フェニル } - 1 - メチルエチル - <sup>5</sup> - テトラメチルシクロペンタジエニル ] チタン、トリクロロ [ 1 - { 2 , 6 - ビス ( トリフルオロメチル ) フェニル } - 1 - メチルエチル - <sup>5</sup> - テトラメチルシクロペンタジエニル ] チタン、トリクロロ [ 1 - { 2 , 4 , 6 - トリス ( トリフルオロメチル ) フェニル } - 1 - メチルエチル - <sup>5</sup> - テトラメチルシクロペンタジエニル ] チタン、トリクロロ ( 1 - ナフタレニル - 1 - メチルエチル - <sup>5</sup> - テトラメチルシクロペンタジエニル ) チタン、トリクロロ ( 1 - アントラセニル - 1 - メチルエチル - <sup>5</sup> - テトラメチルシクロペンタジエニル ) チタン、トリクロロ ( 1 - トリフェニレニル - 1 - メチルエチル - <sup>5</sup> - テトラメチルシクロペンタジエニル ) チタン、トリクロロ ( 1 - ピレニル - 1 - メチルエチル - <sup>5</sup> - テトラメチルシクロペンタジエニル ) チタン、トリクロロ { 1 - ( 2 - ピリジル ) - 1 - メチルエチル - <sup>5</sup> - テトラメチルシクロペンタジエニル } チタン、トリクロロ { 1 - ( 3 - ピリジル ) - 1 - メチルエチル - <sup>5</sup> - テトラメチルシクロペンタジエニル } チタン、トリクロロ { 1 - ( 4 - ピリジル ) - 1 - メチルエチル - <sup>5</sup> - テトラメチルシクロペンタジエニル } チタン、トリクロロ { 1 - ( 6 - メチル - 2 - ピリジル ) - 1 - メチルエチル - <sup>5</sup> - テトラメチルシクロペンタジエニル } チタン、トリクロロ { 1 - ( 2 - ピラジニル ) - 1 - メチルエチル - <sup>5</sup> - テトラメチルシクロペンタジエニル } チタン、トリクロロ { 1 - ( 2 - ピリミジニル ) - 1 - メチルエチル - <sup>5</sup> - テトラメチルシクロペンタジエニル } チタンなど ( 以下、これらの化合物を、化合物群 ( 5 ) と称する。 ) が挙げられる。

【 0 0 5 0 】

また、A がイソプロピリデン基であり、C p が <sup>5</sup> - メチルシクロペンタジエニル基、<sup>5</sup> - ジメチルシクロペンタジエニル基、<sup>5</sup> - トリメチルシクロペンタジエニル基、<sup>5</sup> - n - ブチルシクロペンタジエニル基、<sup>5</sup> - tert - ブチルシクロペンタジエニル基、<sup>5</sup> - フェニルシクロペンタジエニル基、<sup>5</sup> - トリメチルシリルシクロペンタジエニル基、<sup>5</sup> - tert - ブチルジメチルシリルシクロペンタジエニル基、<sup>5</sup> - インデニル基、<sup>5</sup> - テトラヒドロインデニル基又は <sup>5</sup> - フルオレニル基であり、M がチタン原子であり、X が塩素原子であり、n が 3 である化合物としては、上記化合物群 ( 4 ) で示した化合物の <sup>5</sup> - シクロペンタジエニルを、<sup>5</sup> - メチルシクロペンタジエニル、<sup>5</sup> - ジメチルシクロペンタジエニル、<sup>5</sup> - トリメチルシクロペンタジエニル、<sup>5</sup> - n - ブチルシクロペンタジエニル、<sup>5</sup> - tert - ブチルシクロペンタジエニル、<sup>5</sup> - フェニルシクロペンタジエニル、<sup>5</sup> - トリメチルシリルシクロペンタジエニル、<sup>5</sup> - tert - ブチルジメチルシリルシクロペンタジエニル、<sup>5</sup> - インデニル、<sup>5</sup> - テトラヒドロインデニル

又は <sup>5</sup>-フルオレニルに変更した化合物など（以下、これらの化合物を、化合物群（6）と称する。）があげられる。

【0051】

式 [ I ] で示される遷移金属化合物としては、A がジフェニルメチレン基である化合物があげられ、例えば、A がジフェニルメチレン基であり、C p が <sup>5</sup>-シクロペンタジエニル基であり、M がチタン原子であり、X が塩素原子であり、n が 3 である化合物としては、トリクロロ（トリフェニルメチル - <sup>5</sup>-シクロペンタジエニル）チタン、トリクロロ {ジフェニル（2 - メチルフェニル）メチル - <sup>5</sup>-シクロペンタジエニル} チタン、トリクロロ {ジフェニル（3 - メチルフェニル）メチル - <sup>5</sup>-シクロペンタジエニル} チタン、トリクロロ {ジフェニル（4 - メチルフェニル）メチル - <sup>5</sup>-シクロペンタジエニル} チタン、トリクロロ {ジフェニル（2 - イソプロピルフェニル）メチル - <sup>5</sup>-シクロペンタジエニル} チタン、トリクロロ {ジフェニル（3 - イソプロピルフェニル）メチル - <sup>5</sup>-シクロペンタジエニル} チタン、トリクロロ {ジフェニル（4 - イソプロピルフェニル）メチル - <sup>5</sup>-シクロペンタジエニル} チタン、トリクロロ {ジフェニル（2 - フェニルフェニル）メチル - <sup>5</sup>-シクロペンタジエニル} チタン、トリクロロ {ジフェニル（3 - フェニルフェニル）メチル - <sup>5</sup>-シクロペンタジエニル} チタン、トリクロロ {ジフェニル（4 - フェニルフェニル）メチル - <sup>5</sup>-シクロペンタジエニル} チタン、トリクロロ {ジフェニル（2, 4 - ジメチルフェニル）メチル - <sup>5</sup>-シクロペンタジエニル} チタン、トリクロロ {ジフェニル（2, 6 - ジメチルフェニル）メチル - <sup>5</sup>-シクロペンタジエニル} チタン、トリクロロ {ジフェニル（2, 4 - ジイソプロピルフェニル）メチル - <sup>5</sup>-シクロペンタジエニル} チタン、トリクロロ {ジフェニル（2, 6 - ジイソプロピルフェニル）メチル - <sup>5</sup>-シクロペンタジエニル} チタン、トリクロロ {ジフェニル（2, 4 - ジ - t e r t - プチルフェニル）メチル - <sup>5</sup>-シクロペンタジエニル} チタン、トリクロロ {ジフェニル（2, 6 - ジ - t e r t - プチルフェニル）メチル - <sup>5</sup>-シクロペンタジエニル} チタン、トリクロロ {ジフェニル（2, 4 - ジフェニルフェニル）メチル - <sup>5</sup>-シクロペンタジエニル} チタン、トリクロロ {ジフェニル（2, 6 - ジフェニルフェニル）メチル - <sup>5</sup>-シクロペンタジエニル} チタン、トリクロロ {ジフェニル（2, 4, 6 - トリメチルフェニル）メチル - <sup>5</sup>-シクロペンタジエニル} チタン、トリクロロ {ジフェニル（2, 4, 6 - トリイソプロピルフェニル）メチル - <sup>5</sup>-シクロペンタジエニル} チタン、トリクロロ {ジフェニル（2, 4, 6 - トリ - t e r t - プチルフェニル）メチル - <sup>5</sup>-シクロペンタジエニル} チタン、トリクロロ {ジフェニル（2, 4, 6 - トリフェニルフェニル）メチル - <sup>5</sup>-シクロペンタジエニル} チタン、トリクロロ {ジフェニル（2 - メトキシフェニル）メチル - <sup>5</sup>-シクロペンタジエニル} チタン、トリクロロ {ジフェニル（3 - メトキシフェニル）メチル - <sup>5</sup>-シクロペンタジエニル} チタン、トリクロロ {ジフェニル（4 - メトキシフェニル）メチル - <sup>5</sup>-シクロペンタジエニル} チタン、トリクロロ {ジフェニル（2, 4 - ジメトキシフェニル）メチル - <sup>5</sup>-シクロペンタジエニル} チタン、トリクロロ {ジフェニル（2, 6 - ジメトキシフェニル）メチル - <sup>5</sup>-シクロペンタジエニル} チタン、トリクロロ {ジフェニル（2, 4, 6 - トリメトキシフェニル）メチル - <sup>5</sup>-シクロペンタジエニル} チタン、トリクロロ {ジフェニル（2 - フェノキシフェニル）メチル - <sup>5</sup>-シクロペンタジエニル} チタン、トリクロロ {ジフェニル（3 - フェノキシフェニル）メチル - <sup>5</sup>-シクロペンタジエニル} チタン、トリクロロ {ジフェニル（4 - フェノキシフェニル）メチル - <sup>5</sup>-シクロペンタジエニル} チタン、トリクロロ {ジフェニル（2, 4 - ジフェノキシフェニル）メチル - <sup>5</sup>-シクロペンタジエニル} チタン、トリクロロ {ジフェニル（2, 6 - ジフェノキシフェニル）メチル - <sup>5</sup>-シクロペンタジエニル} チタン、トリクロロ {ジフェニル（2, 4, 6 - トリフェノキシフェニル）メチル - <sup>5</sup>-シクロペンタジエニル} チタン、トリクロロ {ジフェニル（2 - フルオロフェニル）メチル - <sup>5</sup>-シクロペンタジエニル} チタン、トリクロロ {ジフェニル（3 - フルオロフェニル）メチル - <sup>5</sup>-シクロペンタジエニル} チタン、トリクロロ {ジフェニル（4 - フルオロフェニル）メチル - <sup>5</sup>-シクロペンタジエニル} チタン、トリクロロ

10

20

30

40

50



ペンタジエニル}チタン、トリクロロ{ジフェニル(2-ピラジニル)メチル-<sup>5</sup>-シクロペンタジエニル}チタン、トリクロロ{ジフェニル(2-ピリミジニル)メチル-<sup>5</sup>-シクロペンタジエニル}チタンなど(以下、これらの化合物を、化合物群(7)と称する。)が挙げられる。

【0052】

また、Aがジフェニルメチレン基であり、Cpが<sup>5</sup>-テトラメチルシクロペンタジエニル基であり、Mがチタン原子であり、Xが塩素原子であり、nが3である化合物としては、トリクロロ(トリフェニルメチル-<sup>5</sup>-テトラメチルシクロペンタジエニル)チタン、トリクロロ{ジフェニル(2-メチルフェニル)メチル-<sup>5</sup>-テトラメチルシクロペンタジエニル}チタン、トリクロロ{ジフェニル(3-メチルフェニル)メチル-<sup>5</sup>-テトラメチルシクロペンタジエニル}チタン、トリクロロ{ジフェニル(4-メチルフェニル)メチル-<sup>5</sup>-テトラメチルシクロペンタジエニル}チタン、トリクロロ{ジフェニル(2-イソプロピルフェニル)メチル-<sup>5</sup>-テトラメチルシクロペンタジエニル}チタン、トリクロロ{ジフェニル(3-イソプロピルフェニル)メチル-<sup>5</sup>-テトラメチルシクロペンタジエニル}チタン、トリクロロ{ジフェニル(4-イソプロピルフェニル)メチル-<sup>5</sup>-テトラメチルシクロペンタジエニル}チタン、トリクロロ{ジフェニル(2-フェニルフェニル)メチル-<sup>5</sup>-テトラメチルシクロペンタジエニル}チタン、トリクロロ{ジフェニル(3-フェニルフェニル)メチル-<sup>5</sup>-テトラメチルシクロペンタジエニル}チタン、トリクロロ{ジフェニル(4-フェニルフェニル)メチル-<sup>5</sup>-テトラメチルシクロペンタジエニル}チタン、トリクロロ{ジフェニル(2,4-ジメチルフェニル)メチル-<sup>5</sup>-テトラメチルシクロペンタジエニル}チタン、トリクロロ{ジフェニル(2,6-ジメチルフェニル)メチル-<sup>5</sup>-テトラメチルシクロペンタジエニル}チタン、トリクロロ{ジフェニル(2,4-ジイソプロピルフェニル)メチル-<sup>5</sup>-テトラメチルシクロペンタジエニル}チタン、トリクロロ{ジフェニル(2,6-ジイソプロピルフェニル)メチル-<sup>5</sup>-テトラメチルシクロペンタジエニル}チタン、トリクロロ{ジフェニル(2,4-ジ-tert-ブチルフェニル)メチル-<sup>5</sup>-テトラメチルシクロペンタジエニル}チタン、トリクロロ{ジフェニル(2,6-ジ-tert-ブチルフェニル)メチル-<sup>5</sup>-テトラメチルシクロペンタジエニル}チタン、トリクロロ{ジフェニル(2,4-ジフェニルフェニル)メチル-<sup>5</sup>-テトラメチルシクロペンタジエニル}チタン、トリクロロ{ジフェニル(2,6-ジフェニルフェニル)メチル-<sup>5</sup>-テトラメチルシクロペンタジエニル}チタン、トリクロロ{ジフェニル(2,4,6-トリメチルフェニル)メチル-<sup>5</sup>-テトラメチルシクロペンタジエニル}チタン、トリクロロ{ジフェニル(2,4,6-トリイソプロピルフェニル)メチル-<sup>5</sup>-テトラメチルシクロペンタジエニル}チタン、トリクロロ{ジフェニル(2,4,6-トリ-tert-ブチルフェニル)メチル-<sup>5</sup>-テトラメチルシクロペンタジエニル}チタン、トリクロロ{ジフェニル(2,4,6-トリフェニルフェニル)メチル-<sup>5</sup>-テトラメチルシクロペンタジエニル}チタン、トリクロロ{ジフェニル(2-メトキシフェニル)メチル-<sup>5</sup>-テトラメチルシクロペンタジエニル}チタン、トリクロロ{ジフェニル(3-メトキシフェニル)メチル-<sup>5</sup>-テトラメチルシクロペンタジエニル}チタン、トリクロロ{ジフェニル(4-メトキシフェニル)メチル-<sup>5</sup>-テトラメチルシクロペンタジエニル}チタン、トリクロロ{ジフェニル(2,4-ジメトキシフェニル)メチル-<sup>5</sup>-テトラメチルシクロペンタジエニル}チタン、トリクロロ{ジフェニル(2,6-ジメトキシフェニル)メチル-<sup>5</sup>-テトラメチルシクロペンタジエニル}チタン、トリクロロ{ジフェニル(2,4,6-トリメトキシフェニル)メチル-<sup>5</sup>-テトラメチルシクロペンタジエニル}チタン、トリクロロ{ジフェニル(2-フェノキシフェニル)メチル-<sup>5</sup>-テトラメチルシクロペンタジエニル}チタン、トリクロロ{ジフェニル(3-フェノキシフェニル)メチル-<sup>5</sup>-テトラメチルシクロペンタジエニル}チタン、トリクロロ{ジフェニル(4-フェノキシフェニル)メチル-<sup>5</sup>-テトラメチルシクロペンタジエニル}チタン、トリクロロ{ジフェニル(2,4-ジフェノキシフェニル)メチル-<sup>5</sup>-テトラメチルシクロペンタジエニル}チタン、トリクロロ{ジフェ

10

20

30

40

50



ル}メチル - <sup>5</sup> - テトラメチルシクロペンタジエニル]チタン、トリクロロ [ジフェニル { 2 , 6 - ビス (トリフルオロメチル) フェニル }メチル - <sup>5</sup> - テトラメチルシクロペンタジエニル]チタン、トリクロロ [ジフェニル { 2 , 4 , 6 - トリス (トリフルオロメチル) フェニル }メチル - <sup>5</sup> - テトラメチルシクロペンタジエニル]チタン、トリクロロ (ナフタレニルジフェニルメチル - <sup>5</sup> - テトラメチルシクロペンタジエニル)チタン、トリクロロ (アントラセニルジフェニルメチル - <sup>5</sup> - テトラメチルシクロペンタジエニル)チタン、トリクロロ (トリフェニレニルジフェニルメチル - <sup>5</sup> - テトラメチルシクロペンタジエニル)チタン、トリクロロ (ジフェニルピレニルメチル - <sup>5</sup> - テトラメチルシクロペンタジエニル)チタン、トリクロロ {ジフェニル ( 2 - ピリジル)メチル - <sup>5</sup> - テトラメチルシクロペンタジエニル}チタン、トリクロロ {ジフェニル ( 3 - ピリジル)メチル - <sup>5</sup> - テトラメチルシクロペンタジエニル}チタン、トリクロロ {ジフェニル ( 4 - ピリジル)メチル - <sup>5</sup> - テトラメチルシクロペンタジエニル}チタン、トリクロロ {ジフェニル ( 6 - メチル - 2 - ピリジル)メチル - <sup>5</sup> - テトラメチルシクロペンタジエニル}チタン、トリクロロ {ジフェニル ( 2 - ピラジニル)メチル - <sup>5</sup> - テトラメチルシクロペンタジエニル}チタン、トリクロロ {ジフェニル ( 2 - ピリミジニル)メチル - <sup>5</sup> - テトラメチルシクロペンタジエニル}チタンなど (以下、これらの化合物を、化合物群 ( 8 ) と称する。 ) が挙げられる。

#### 【 0 0 5 3 】

また、A がジフェニルメチレン基であり、C p が <sup>5</sup> - メチルシクロペンタジエニル基、<sup>5</sup> - ジメチルシクロペンタジエニル基、<sup>5</sup> - トリメチルシクロペンタジエニル基、<sup>5</sup> - n - ブチルシクロペンタジエニル基、<sup>5</sup> - tert - ブチルシクロペンタジエニル基、<sup>5</sup> - フェニルシクロペンタジエニル基、<sup>5</sup> - トリメチルシリルシクロペンタジエニル基、<sup>5</sup> - tert - ブチルジメチルシリルシクロペンタジエニル基、<sup>5</sup> - インデニル基、<sup>5</sup> - テトラヒドロインデニル基又は <sup>5</sup> - フルオレニル基であり、M がチタン原子であり、X が塩素原子であり、n が 3 である化合物としては、上記化合物群 ( 7 ) で示した化合物の <sup>5</sup> - シクロペンタジエニルを、<sup>5</sup> - メチルシクロペンタジエニル、<sup>5</sup> - ジメチルシクロペンタジエニル、<sup>5</sup> - トリメチルシクロペンタジエニル、<sup>5</sup> - n - ブチルシクロペンタジエニル、<sup>5</sup> - tert - ブチルシクロペンタジエニル、<sup>5</sup> - フェニルシクロペンタジエニル、<sup>5</sup> - トリメチルシリルシクロペンタジエニル、<sup>5</sup> - tert - ブチルジメチルシリルシクロペンタジエニル、<sup>5</sup> - インデニル、<sup>5</sup> - テトラヒドロインデニル又は <sup>5</sup> - フルオレニルに変更した化合物など (以下、これらの化合物を、化合物群 ( 9 ) と称する。 ) があげられる。

#### 【 0 0 5 4 】

式 [ I ] で示される遷移金属化合物としては、A が 1 , 2 - エチレン基である化合物があげられ、例えば、A が 1 , 2 - エチレン基であり、C p が <sup>5</sup> - シクロペンタジエニル基であり、M がチタン原子であり、X が塩素原子であり、n が 3 である化合物としては、トリクロロ ( 2 - フェニルエチル - <sup>5</sup> - シクロペンタジエニル)チタン、トリクロロ { 2 - ( 2 - メチルフェニル)エチル - <sup>5</sup> - シクロペンタジエニル}チタン、トリクロロ { 2 - ( 3 - メチルフェニル)エチル - <sup>5</sup> - シクロペンタジエニル}チタン、トリクロロ { 2 - ( 4 - メチルフェニル)エチル - <sup>5</sup> - シクロペンタジエニル}チタン、トリクロロ { 2 - ( 2 - イソプロピルフェニル)エチル - <sup>5</sup> - シクロペンタジエニル}チタン、トリクロロ { 2 - ( 3 - イソプロピルフェニル)エチル - <sup>5</sup> - シクロペンタジエニル}チタン、トリクロロ { 2 - ( 4 - イソプロピルフェニル)エチル - <sup>5</sup> - シクロペンタジエニル}チタン、トリクロロ { 2 - ( 2 - フェニルフェニル)エチル - <sup>5</sup> - シクロペンタジエニル}チタン、トリクロロ { 2 - ( 3 - フェニルフェニル)エチル - <sup>5</sup> - シクロペンタジエニル}チタン、トリクロロ { 2 - ( 4 - フェニルフェニル)エチル - <sup>5</sup> - シクロペンタジエニル}チタン、トリクロロ { 2 - ( 2 , 4 - ジメチルフェニル)エチル - <sup>5</sup> - シクロペンタジエニル}チタン、トリクロロ { 2 - ( 2 , 6 - ジメチルフェニル)エチル - <sup>5</sup> - シクロペンタジエニル}チタン、トリクロロ { 2 - ( 2 , 4 - ジイソプロピルフェニル)エチル - <sup>5</sup> - シクロペンタジエニル}チタン、トリクロロ { 2 - ( 2



ロ { 2 - ( 2 , 3 , 5 , 6 - テトラフルオロフェニル ) エチル - <sup>5</sup> - シクロペンタジエニル } チタン、トリクロロ { 2 - ( 2 , 3 , 5 , 6 - テトラクロロフェニル ) エチル - <sup>5</sup> - シクロペンタジエニル } チタン、トリクロロ { 2 - ( 2 , 3 , 5 , 6 - テトラプロモフェニル ) エチル - <sup>5</sup> - シクロペンタジエニル } チタン、トリクロロ { 2 - ( 2 , 3 , 5 , 6 - テトラヨードフェニル ) エチル - <sup>5</sup> - シクロペンタジエニル } チタン、トリクロロ { 2 - ( ペンタフルオロフェニル ) エチル - <sup>5</sup> - シクロペンタジエニル } チタン、トリクロロ { 2 - ( ペンタクロロフェニル ) エチル - <sup>5</sup> - シクロペンタジエニル } チタン、トリクロロ { 2 - ( ペンタプロモフェニル ) エチル - <sup>5</sup> - シクロペンタジエニル } チタン、トリクロロ { 2 - ( ペンタヨードフェニル ) エチル - <sup>5</sup> - シクロペンタジエニル } チタン、トリクロロ { 2 - ( 2 - トリフルオロメチルフェニル ) エチル - <sup>5</sup> - シクロペンタジエニル } チタン、トリクロロ { 2 - ( 3 - トリフルオロメチルフェニル ) エチル - <sup>5</sup> - シクロペンタジエニル } チタン、トリクロロ { 2 - ( 4 - トリフルオロメチルフェニル ) エチル - <sup>5</sup> - シクロペンタジエニル } チタン、トリクロロ [ 2 - { 2 , 4 - ビス ( トリフルオロメチル ) フェニル } エチル - <sup>5</sup> - シクロペンタジエニル ] チタン、トリクロロ [ 2 - { 2 , 6 - ビス ( トリフルオロメチル ) フェニル } エチル - <sup>5</sup> - シクロペンタジエニル ] チタン、トリクロロ [ 2 - { 2 , 4 , 6 - トリス ( トリフルオロメチル ) フェニル } エチル - <sup>5</sup> - シクロペンタジエニル ] チタン、トリクロロ ( 2 - ナフタレニルエチル - <sup>5</sup> - シクロペンタジエニル ) チタン、トリクロロ ( 2 - アントラセニルエチル - <sup>5</sup> - シクロペンタジエニル ) チタン、トリクロロ ( 2 - トリフェニレニルエチル - <sup>5</sup> - シクロペンタジエニル ) チタン、トリクロロ ( 2 - ピレニルエチル - <sup>5</sup> - シクロペンタジエニル ) チタン、トリクロロ { 2 - ( 2 - ピリジル ) エチル - <sup>5</sup> - シクロペンタジエニル } チタン、トリクロロ { 2 - ( 3 - ピリジル ) エチル - <sup>5</sup> - シクロペンタジエニル } チタン、トリクロロ { 2 - ( 4 - ピリジル ) エチル - <sup>5</sup> - シクロペンタジエニル } チタン、トリクロロ { 2 - ( 6 - メチル - 2 - ピリジル ) エチル - <sup>5</sup> - シクロペンタジエニル } チタン、トリクロロ { 2 - ( 2 - ピラジニル ) エチル - <sup>5</sup> - シクロペンタジエニル } チタン、トリクロロ { 2 - ( 2 - ピリミジニル ) エチル - <sup>5</sup> - シクロペンタジエニル } チタンなど ( 以下、これらの化合物を、化合物群 ( 10 ) と称する。 ) が挙げられる。

#### 【 0 0 5 5 】

また、A が 1 , 2 - エチレン基であり、C p が <sup>5</sup> - テトラメチルシクロペンタジエニル基であり、M がチタン原子であり、X が塩素原子であり、n が 3 である化合物としては、トリクロロ ( 2 - フェニルエチル - <sup>5</sup> - テトラメチルシクロペンタジエニル ) チタン、トリクロロ { 2 - ( 2 - メチルフェニル ) エチル - <sup>5</sup> - テトラメチルシクロペンタジエニル } チタン、トリクロロ { 2 - ( 3 - メチルフェニル ) エチル - <sup>5</sup> - テトラメチルシクロペンタジエニル } チタン、トリクロロ { 2 - ( 4 - メチルフェニル ) エチル - <sup>5</sup> - テトラメチルシクロペンタジエニル } チタン、トリクロロ { 2 - ( 2 - イソプロピルフェニル ) エチル - <sup>5</sup> - テトラメチルシクロペンタジエニル } チタン、トリクロロ { 2 - ( 3 - イソプロピルフェニル ) エチル - <sup>5</sup> - テトラメチルシクロペンタジエニル } チタン、トリクロロ { 2 - ( 4 - イソプロピルフェニル ) エチル - <sup>5</sup> - テトラメチルシクロペンタジエニル } チタン、トリクロロ { 2 - ( 2 - フェニルフェニル ) エチル - <sup>5</sup> - テトラメチルシクロペンタジエニル } チタン、トリクロロ { 2 - ( 3 - フェニルフェニル ) エチル - <sup>5</sup> - テトラメチルシクロペンタジエニル } チタン、トリクロロ { 2 - ( 4 - フェニルフェニル ) エチル - <sup>5</sup> - テトラメチルシクロペンタジエニル } チタン、トリクロロ { 2 - ( 2 , 4 - ジメチルフェニル ) エチル - <sup>5</sup> - テトラメチルシクロペンタジエニル } チタン、トリクロロ { 2 - ( 2 , 6 - ジメチルフェニル ) エチル - <sup>5</sup> - テトラメチルシクロペンタジエニル } チタン、トリクロロ { 2 - ( 2 , 4 - ジイソプロピルフェニル ) エチル - <sup>5</sup> - テトラメチルシクロペンタジエニル } チタン、トリクロロ { 2 - ( 2 , 6 - ジイソプロピルフェニル ) エチル - <sup>5</sup> - テトラメチルシクロペンタジエニル } チタン、トリクロロ { 2 - ( 2 , 4 - ジ - t e r t - ブチルフェニル ) エチル - <sup>5</sup> - テトラメチルシクロペンタジエニル } チタン、トリクロロ { 2 - ( 2 , 6 - ジ - t e r t - ブチ



- トリクロロフェニル) エチル - <sup>5</sup> - シテトラメチルクロペンタジエニル} チタン、トリクロロ { 2 - ( 2 , 4 , 6 - トリプロモフェニル ) エチル - <sup>5</sup> - テトラメチルシクロペンタジエニル } チタン、トリクロロ { 2 - ( 2 , 4 , 6 - トリヨードフェニル ) エチル - <sup>5</sup> - テトラメチルシクロペンタジエニル } チタン、トリクロロ { 2 - ( 2 , 3 , 5 , 6 - テトラフルオロフェニル ) エチル - <sup>5</sup> - テトラメチルシクロペンタジエニル } チタン、トリクロロ { 2 - ( 2 , 3 , 5 , 6 - テトラクロロフェニル ) エチル - <sup>5</sup> - テトラメチルシクロペンタジエニル } チタン、トリクロロ { 2 - ( 2 , 3 , 5 , 6 - テトラプロモフェニル ) エチル - <sup>5</sup> - テトラメチルシクロペンタジエニル } チタン、トリクロロ { 2 - ( 2 , 3 , 5 , 6 - テトラヨードフェニル ) エチル - <sup>5</sup> - テトラメチルシクロペンタジエニル } チタン、トリクロロ { 2 - ( ペンタフルオロフェニル ) エチル - <sup>5</sup> - テトラメチルシクロペンタジエニル } チタン、トリクロロ { 2 - ( ペンタクロロフェニル ) エチル - <sup>5</sup> - テトラメチルシクロペンタジエニル } チタン、トリクロロ { 2 - ( ペンタプロモフェニル ) エチル - <sup>5</sup> - テトラメチルシクロペンタジエニル } チタン、トリクロロ { 2 - ( ペンタヨードフェニル ) エチル - <sup>5</sup> - テトラメチルシクロペンタジエニル } チタン、トリクロロ { 2 - ( 2 - トリフルオロメチルフェニル ) エチル - <sup>5</sup> - テトラメチルシクロペンタジエニル } チタン、トリクロロ { 2 - ( 3 - トリフルオロメチルフェニル ) エチル - <sup>5</sup> - テトラメチルシクロペンタジエニル } チタン、トリクロロ { 2 - ( 4 - トリフルオロメチルフェニル ) エチル - <sup>5</sup> - テトラメチルシクロペンタジエニル } チタン、トリクロロ [ 2 - { 2 , 4 - ビス ( トリフルオロメチル ) フェニル } エチル - <sup>5</sup> - テトラメチルシクロペンタジエニル ] チタン、トリクロロ [ 2 - { 2 , 6 - ビス ( トリフルオロメチル ) フェニル } エチル - <sup>5</sup> - テトラメチルシクロペンタジエニル ] チタン、トリクロロ [ 2 - { 2 , 4 , 6 - トリス ( トリフルオロメチル ) フェニル } エチル - <sup>5</sup> - テトラメチルシクロペンタジエニル ] チタン、トリクロロ ( 2 - ナフタレニルエチル - <sup>5</sup> - テトラメチルシクロペンタジエニル ) チタン、トリクロロ ( 2 - アントラセニルエチル - <sup>5</sup> - テトラメチルシクロペンタジエニル ) チタン、トリクロロ ( 2 - トリフェニレニルエチル - <sup>5</sup> - テトラメチルシクロペンタジエニル ) チタン、トリクロロ ( 2 - ピレニルエチル - <sup>5</sup> - テトラメチルシクロペンタジエニル ) チタン、トリクロロ { 2 - ( 2 - ピリジル ) エチル - <sup>5</sup> - テトラメチルシクロペンタジエニル } チタン、トリクロロ { 2 - ( 3 - ピリジル ) エチル - <sup>5</sup> - テトラメチルシクロペンタジエニル } チタン、トリクロロ { 2 - ( 4 - ピリジル ) エチル - <sup>5</sup> - テトラメチルシクロペンタジエニル } チタン、トリクロロ { 2 - ( 6 - メチル - 2 - ピリジル ) エチル - <sup>5</sup> - テトラメチルシクロペンタジエニル } チタン、トリクロロ { 2 - ( 2 - ピラジニル ) エチル - <sup>5</sup> - テトラメチルシクロペンタジエニル } チタン、トリクロロ { 2 - ( 2 - ピリミジニル ) エチル - <sup>5</sup> - テトラメチルシクロペンタジエニル } チタンなど ( 以下、これらの化合物を、化合物群 ( 1 1 ) と称する。 ) が挙げられる。

10

20

30

【 0 0 5 6 】

また、A が 1 , 2 - エチレン基であり、C p が <sup>5</sup> - メチルシクロペンタジエニル基、<sup>5</sup> - ジメチルシクロペンタジエニル基、<sup>5</sup> - トリメチルシクロペンタジエニル基、<sup>5</sup> - n - ブチルシクロペンタジエニル基、<sup>5</sup> - t e r t - ブチルシクロペンタジエニル基、<sup>5</sup> - フェニルシクロペンタジエニル基、<sup>5</sup> - トリメチルシリルシクロペンタジエニル基、<sup>5</sup> - t e r t - ブチルジメチルシリルシクロペンタジエニル基、<sup>5</sup> - インデニル基、<sup>5</sup> - テトラヒドロインデニル基又は <sup>5</sup> - フルオレニル基であり、M がチタン原子であり、X が塩素原子であり、n が 3 である化合物としては、上記化合物群 ( 1 0 ) で示した化合物の <sup>5</sup> - シクロペンタジエニルを、<sup>5</sup> - メチルシクロペンタジエニル、<sup>5</sup> - ジメチルシクロペンタジエニル、<sup>5</sup> - トリメチルシクロペンタジエニル、<sup>5</sup> - n - ブチルシクロペンタジエニル、<sup>5</sup> - t e r t - ブチルシクロペンタジエニル、<sup>5</sup> - フェニルシクロペンタジエニル、<sup>5</sup> - トリメチルシリルシクロペンタジエニル、<sup>5</sup> - t e r t - ブチルジメチルシリルシクロペンタジエニル、<sup>5</sup> - インデニル、<sup>5</sup> - テトラヒドロインデニル又は <sup>5</sup> - フルオレニルに変更した化合物など ( 以下、これらの化合物を、化合物群 ( 1 2 ) と称する。 ) があげられる。

50

## 【 0 0 5 7 】

式 [ I ] で示される遷移金属化合物としては、A が 2 , 3 - ジメチル - 2 , 3 - ブタンジイル基である化合物があげられ、例えば、A が 2 , 3 - ジメチル - 2 , 3 - ブタンジイル基であり、C p が <sup>5</sup>-シクロペンタジエニル基であり、M がチタン原子であり、X が塩素原子であり、n が 3 である化合物としては、

トリクロロ ( 1 , 1 , 2 , 2 - テトラメチル - 2 - フェニルエチル - <sup>5</sup>-シクロペンタジエニル ) チタン、トリクロロ { 1 , 1 , 2 , 2 - テトラメチル - ( 2 - メチルフェニル ) エチル - <sup>5</sup>-シクロペンタジエニル } チタン、トリクロロ { 1 , 1 , 2 , 2 - テトラメチル - ( 3 - メチルフェニル ) エチル - <sup>5</sup>-シクロペンタジエニル } チタン、トリクロロ { 1 , 1 , 2 , 2 - テトラメチル - ( 4 - メチルフェニル ) エチル - <sup>5</sup>-シクロペンタジエニル } チタン、トリクロロ { 1 , 1 , 2 , 2 - テトラメチル - ( 2 - イソプロピルフェニル ) エチル - <sup>5</sup>-シクロペンタジエニル } チタン、トリクロロ { 1 , 1 , 2 , 2 - テトラメチル - ( 3 - イソプロピルフェニル ) エチル - <sup>5</sup>-シクロペンタジエニル } チタン、トリクロロ { 1 , 1 , 2 , 2 - テトラメチル - ( 4 - イソプロピルフェニル ) エチル - <sup>5</sup>-シクロペンタジエニル } チタン、トリクロロ { 1 , 1 , 2 , 2 - テトラメチル - ( 2 - フェニルフェニル ) エチル - <sup>5</sup>-シクロペンタジエニル } チタン、トリクロロ { 1 , 1 , 2 , 2 - テトラメチル - ( 3 - フェニルフェニル ) エチル - <sup>5</sup>-シクロペンタジエニル } チタン、トリクロロ { 1 , 1 , 2 , 2 - テトラメチル - ( 4 - フェニルフェニル ) エチル - <sup>5</sup>-シクロペンタジエニル } チタン、トリクロロ { 1 , 1 , 2 , 2 - テトラメチル - ( 2 , 4 - ジメチルフェニル ) エチル - <sup>5</sup>-シクロペンタジエニル } チタン、トリクロロ { 1 , 1 , 2 , 2 - テトラメチル - ( 2 , 6 - ジメチルフェニル ) エチル - <sup>5</sup>-シクロペンタジエニル } チタン、トリクロロ { 1 , 1 , 2 , 2 - テトラメチル - ( 2 , 4 - ジイソプロピルフェニル ) エチル - <sup>5</sup>-シクロペンタジエニル } チタン、トリクロロ { 1 , 1 , 2 , 2 - テトラメチル - ( 2 , 6 - ジイソプロピルフェニル ) エチル - <sup>5</sup>-シクロペンタジエニル } チタン、トリクロロ { 1 , 1 , 2 , 2 - テトラメチル - ( 2 , 4 - ジ - t e r t - ブチルフェニル ) エチル - <sup>5</sup>-シクロペンタジエニル } チタン、トリクロロ { 1 , 1 , 2 , 2 - テトラメチル - ( 2 , 6 - ジ - t e r t - ブチルフェニル ) エチル - <sup>5</sup>-シクロペンタジエニル } チタン、トリクロロ { 1 , 1 , 2 , 2 - テトラメチル - ( 2 , 4 - ジフェニルフェニル ) エチル - <sup>5</sup>-シクロペンタジエニル } チタン、トリクロロ { 1 , 1 , 2 , 2 - テトラメチル - ( 2 , 6 - ジフェニルフェニル ) エチル - <sup>5</sup>-シクロペンタジエニル } チタン、トリクロロ { 1 , 1 , 2 , 2 - テトラメチル - ( 2 , 4 , 6 - トリメチルフェニル ) エチル - <sup>5</sup>-シクロペンタジエニル } チタン、トリクロロ { 1 , 1 , 2 , 2 - テトラメチル - ( 2 , 4 , 6 - トリイソプロピルフェニル ) エチル - <sup>5</sup>-シクロペンタジエニル } チタン、トリクロロ { 1 , 1 , 2 , 2 - テトラメチル - ( 2 , 4 , 6 - トリ - t e r t - ブチルフェニル ) エチル - <sup>5</sup>-シクロペンタジエニル } チタン、トリクロロ { 1 , 1 , 2 , 2 - テトラメチル - ( 2 , 4 , 6 - トリフェニルフェニル ) エチル - <sup>5</sup>-シクロペンタジエニル } チタン、トリクロロ { 1 , 1 , 2 , 2 - テトラメチル - ( 2 - メトキシフェニル ) エチル - <sup>5</sup>-シクロペンタジエニル } チタン、トリクロロ { 1 , 1 , 2 , 2 - テトラメチル - ( 3 - メトキシフェニル ) エチル - <sup>5</sup>-シクロペンタジエニル } チタン、トリクロロ { 1 , 1 , 2 , 2 - テトラメチル - ( 4 - メトキシフェニル ) エチル - <sup>5</sup>-シクロペンタジエニル } チタン、トリクロロ { 1 , 1 , 2 , 2 - テトラメチル - ( 2 , 4 - ジメトキシフェニル ) エチル - <sup>5</sup>-シクロペンタジエニル } チタン、トリクロロ { 1 , 1 , 2 , 2 - テトラメチル - ( 2 , 4 , 6 - トリメトキシフェニル ) エチル - <sup>5</sup>-シクロペンタジエニル } チタン、トリクロロ { 1 , 1 , 2 , 2 - テトラメチル - ( 2 - フェノキシフェニル ) エチル - <sup>5</sup>-シクロペンタジエニル } チタン、トリクロロ { 1 , 1 , 2 , 2 - テトラメチル - ( 3 - フェノキシフェニル ) エチル - <sup>5</sup>-シクロペンタジエニル } チタン、トリクロロ { 1 , 1 , 2 , 2 - テトラ

10

20

30

40

50



テトラメチル - ( 2 - トリフルオロメチルフェニル ) エチル - <sup>5</sup> - シクロペンタジエニル } チタン、トリクロロ { 1, 1, 2, 2 - テトラメチル - ( 3 - トリフルオロメチルフェニル ) エチル - <sup>5</sup> - シクロペンタジエニル } チタン、トリクロロ { 1, 1, 2, 2 - テトラメチル - ( 4 - トリフルオロメチルフェニル ) エチル - <sup>5</sup> - シクロペンタジエニル } チタン、トリクロロ [ 1, 1, 2, 2 - テトラメチル - { 2, 4 - ビス ( トリフルオロメチル ) フェニル } エチル - <sup>5</sup> - シクロペンタジエニル ] チタン、トリクロロ [ 1, 1, 2, 2 - テトラメチル - { 2, 6 - ビス ( トリフルオロメチル ) フェニル } エチル - <sup>5</sup> - シクロペンタジエニル ] チタン、トリクロロ [ 1, 1, 2, 2 - テトラメチル - { 2, 4, 6 - トリス ( トリフルオロメチル ) フェニル } エチル - <sup>5</sup> - シクロペンタジエニル ] チタン、トリクロロ ( 1, 1, 2, 2 - テトラメチル - ナフタレニルエチル - <sup>5</sup> - シクロペンタジエニル ) チタン、トリクロロ ( 2 - アントラセニル - 1, 1, 2, 2 - テトラメチルエチル - <sup>5</sup> - シクロペンタジエニル ) チタン、トリクロロ ( 1, 1, 2, 2 - テトラメチル - 2 - トリフェニレニルエチル - <sup>5</sup> - シクロペンタジエニル ) チタン、トリクロロ ( 1, 1, 2, 2 - テトラメチル - 2 - ピレニルエチル - <sup>5</sup> - シクロペンタジエニル ) チタン、トリクロロ { 1, 1, 2, 2 - テトラメチル - 2 - ( 2 - ピリジル ) エチル - <sup>5</sup> - シクロペンタジエニル } チタン、トリクロロ { 1, 1, 2, 2 - テトラメチル - 2 - ( 3 - ピリジル ) エチル - <sup>5</sup> - シクロペンタジエニル } チタン、トリクロロ { 1, 1, 2, 2 - テトラメチル - 2 - ( 4 - ピリジル ) エチル - <sup>5</sup> - シクロペンタジエニル } チタン、トリクロロ { 1, 1, 2, 2 - テトラメチル - 2 - ( 6 - メチル - 2 - ピリジル ) エチル - <sup>5</sup> - シクロペンタジエニル } チタン、トリクロロ { 1, 1, 2, 2 - テトラメチル - 2 - ( 2 - ピラジニル ) エチル - <sup>5</sup> - シクロペンタジエニル } チタン、トリクロロ { 1, 1, 2, 2 - テトラメチル - 2 - ( 2 - ピリミジニル ) エチル - <sup>5</sup> - シクロペンタジエニル } チタンなど ( 以下、これらの化合物を、化合物群 ( 13 ) と称する。 ) が挙げられる。

【 0 0 5 8 】

また、A が 2, 3 - ジメチル - 2, 3 - ブタンジイル基であり、C p が <sup>5</sup> - テトラメチルシクロペンタジエニル基であり、M がチタン原子であり、X が塩素原子であり、n が 3 である化合物としては、トリクロロ ( 1, 1, 2, 2 - テトラメチル - 2 - フェニルエチル - <sup>5</sup> - テトラメチルシクロペンタジエニル ) チタン、トリクロロ { 1, 1, 2, 2 - テトラメチル - 2 - ( 2 - メチルフェニル ) エチル - <sup>5</sup> - テトラメチルシクロペンタジエニル } チタン、トリクロロ { 1, 1, 2, 2 - テトラメチル - 2 - ( 3 - メチルフェニル ) エチル - <sup>5</sup> - テトラメチルシクロペンタジエニル } チタン、トリクロロ { 1, 1, 2, 2 - テトラメチル - 2 - ( 4 - メチルフェニル ) エチル - <sup>5</sup> - テトラメチルシクロペンタジエニル } チタン、トリクロロ { 1, 1, 2, 2 - テトラメチル - 2 - ( 2 - イソプロピルフェニル ) エチル - <sup>5</sup> - テトラメチルシクロペンタジエニル } チタン、トリクロロ { 1, 1, 2, 2 - テトラメチル - 2 - ( 3 - イソプロピルフェニル ) エチル - <sup>5</sup> - テトラメチルシクロペンタジエニル } チタン、トリクロロ { 1, 1, 2, 2 - テトラメチル - 2 - ( 4 - イソプロピルフェニル ) エチル - <sup>5</sup> - テトラメチルシクロペンタジエニル } チタン、トリクロロ { 1, 1, 2, 2 - テトラメチル - 2 - ( 2 - フェニルフェニル ) エチル - <sup>5</sup> - テトラメチルシクロペンタジエニル } チタン、トリクロロ { 1, 1, 2, 2 - テトラメチル - 2 - ( 3 - フェニルフェニル ) エチル - <sup>5</sup> - テトラメチルシクロペンタジエニル } チタン、トリクロロ { 1, 1, 2, 2 - テトラメチル - 2 - ( 4 - フェニルフェニル ) エチル - <sup>5</sup> - テトラメチルシクロペンタジエニル } チタン、トリクロロ { 1, 1, 2, 2 - テトラメチル - 2 - ( 2, 4 - ジメチルフェニル ) エチル - <sup>5</sup> - テトラメチルシクロペンタジエニル } チタン、トリクロロ { 1, 1, 2, 2 - テトラメチル - 2 - ( 2, 6 - ジメチルフェニル ) エチル - <sup>5</sup> - テトラメチルシクロペンタジエニル } チタン、トリクロロ { 1, 1, 2, 2 - テトラメチル - 2 - ( 2, 4 - ジイソプロピルフェニル ) エチル - <sup>5</sup> - テトラメチルシクロペンタジエニル } チタン、トリクロロ { 1, 1, 2, 2 - テトラメチル - 2 - ( 2, 6 - ジイソプロピルフェニル ) エチル - <sup>5</sup> - テトラメチルシクロペンタジエニル } チタン、トリクロロ { 1, 1, 2, 2 - テトラ





2 - テトラメチル - 2 - トリフェニレニルエチル - <sup>5</sup> - テトラメチルシクロペンタジエニル) チタン、トリクロロ ( 1 , 1 , 2 , 2 - テトラメチル - 2 - ピレニルエチル - <sup>5</sup> - テトラメチルシクロペンタジエニル ) チタン、トリクロロ { 1 , 1 , 2 , 2 - テトラメチル - 2 - ( 2 - ピリジル ) エチル - <sup>5</sup> - テトラメチルシクロペンタジエニル } チタン、トリクロロ { 1 , 1 , 2 , 2 - テトラメチル - 2 - ( 3 - ピリジル ) エチル - <sup>5</sup> - テトラメチルシクロペンタジエニル } チタン、トリクロロ { 1 , 1 , 2 , 2 - テトラメチル - 2 - ( 4 - ピリジル ) エチル - <sup>5</sup> - テトラメチルシクロペンタジエニル } チタン、トリクロロ { 1 , 1 , 2 , 2 - テトラメチル - 2 - ( 6 - メチル - 2 - ピリジル ) エチル - <sup>5</sup> - テトラメチルシクロペンタジエニル } チタン、トリクロロ { 1 , 1 , 2 , 2 - テトラメチル - 2 - ( 2 - ピラジニル ) エチル - <sup>5</sup> - テトラメチルシクロペンタジエニル } チタン、トリクロロ { 1 , 1 , 2 , 2 - テトラメチル - 2 - ( 2 - ピリミジニル ) エチル - <sup>5</sup> - テトラメチルシクロペンタジエニル } チタンなど ( 以下、これらの化合物を、化合物群 ( 1 4 ) と称する。 ) が挙げられる。

10

## 【 0 0 5 9 】

また、A が 2 , 3 - ジメチル - 2 , 3 - ブタンジイル基であり、C p が <sup>5</sup> - メチルシクロペンタジエニル基、<sup>5</sup> - ジメチルシクロペンタジエニル基、<sup>5</sup> - トリメチルシクロペンタジエニル基、<sup>5</sup> - n - ブチルシクロペンタジエニル基、<sup>5</sup> - t e r t - ブチルシクロペンタジエニル基、<sup>5</sup> - フェニルシクロペンタジエニル基、<sup>5</sup> - トリメチルシリルシクロペンタジエニル基、<sup>5</sup> - t e r t - ブチルジメチルシリルシクロペンタジエニル基、<sup>5</sup> - インデニル基、<sup>5</sup> - テトラヒドロインデニル基又は <sup>5</sup> - フルオレニル基であり、M がチタン原子であり、X が塩素原子であり、n が 3 である化合物としては、上記化合物群 ( 1 3 ) で示した化合物の <sup>5</sup> - シクロペンタジエニルを、<sup>5</sup> - メチルシクロペンタジエニル、<sup>5</sup> - ジメチルシクロペンタジエニル、<sup>5</sup> - トリメチルシクロペンタジエニル、<sup>5</sup> - n - ブチルシクロペンタジエニル、<sup>5</sup> - t e r t - ブチルシクロペンタジエニル、<sup>5</sup> - フェニルシクロペンタジエニル、<sup>5</sup> - トリメチルシリルシクロペンタジエニル、<sup>5</sup> - t e r t - ブチルジメチルシリルシクロペンタジエニル、<sup>5</sup> - インデニル、<sup>5</sup> - テトラヒドロインデニル又は <sup>5</sup> - フルオレニルに変更した化合物など ( 以下、これらの化合物を、化合物群 ( 1 5 ) と称する。 ) があげられる。

20

## 【 0 0 6 0 】

式 [ I ] で示される遷移金属化合物としては、A が 1 , 4 - フェニレン基である化合物があげられ、例えば、A が 1 , 4 - フェニレン基であり、C p が <sup>5</sup> - シクロペンタジエニル基であり、M がチタン原子であり、X が塩素原子であり、n が 3 である化合物としては、トリクロロ ( 4 - フェニルフェニル - <sup>5</sup> - シクロペンタジエニル ) チタン、トリクロロ { 4 - ( 2 - メチルフェニル ) フェニル - <sup>5</sup> - シクロペンタジエニル } チタン、トリクロロ { 4 - ( 3 - メチルフェニル ) フェニル - <sup>5</sup> - シクロペンタジエニル } チタン、トリクロロ { 4 - ( 4 - メチルフェニル ) フェニル - <sup>5</sup> - シクロペンタジエニル } チタン、トリクロロ { 4 - ( 2 - イソプロピルフェニル ) フェニル - <sup>5</sup> - シクロペンタジエニル } チタン、トリクロロ { 4 - ( 3 - イソプロピルフェニル ) フェニル - <sup>5</sup> - シクロペンタジエニル } チタン、トリクロロ { 4 - ( 4 - イソプロピルフェニル ) フェニル - <sup>5</sup> - シクロペンタジエニル } チタン、トリクロロ { 4 - ( 2 - フェニルフェニル ) フェニル - <sup>5</sup> - シクロペンタジエニル } チタン、トリクロロ { 4 - ( 3 - フェニルフェニル ) フェニル - <sup>5</sup> - シクロペンタジエニル } チタン、トリクロロ { 4 - ( 4 - フェニルフェニル ) フェニル - <sup>5</sup> - シクロペンタジエニル } チタン、トリクロロ { 4 - ( 2 , 4 - ジメチルフェニル ) フェニル - <sup>5</sup> - シクロペンタジエニル } チタン、トリクロロ { 4 - ( 2 , 6 - ジメチルフェニル ) フェニル - <sup>5</sup> - シクロペンタジエニル } チタン、トリクロロ { 4 - ( 2 , 4 - ジイソプロピルフェニル ) フェニル - <sup>5</sup> - シクロペンタジエニル } チタン、トリクロロ { 4 - ( 2 , 6 - ジイソプロピルフェニル ) フェニル - <sup>5</sup> - シクロペンタジエニル } チタン、トリクロロ { 4 - ( 2 , 4 - ジ - t e r t - ブチルフェニル ) フェニル - <sup>5</sup> - シクロペンタジエニル } チタン、トリクロロ { 4 - ( 2 , 6 - ジ - t e r t - ブチルフェニル ) フェニル - <sup>5</sup> - シクロペンタジエニル } チタン、トリクロロ

30

40

50



ン、トリクロロ{4-(2,3,5,6-テトラプロモフェニル)フェニル-<sup>5</sup>-シクロペンタジエニル}チタン、トリクロロ{4-(2,3,5,6-テトラヨードフェニル)フェニル-<sup>5</sup>-シクロペンタジエニル}チタン、トリクロロ{4-(ペンタフルオロフェニル)フェニル-<sup>5</sup>-シクロペンタジエニル}チタン、トリクロロ{4ル-(ペンタクロロフェニル)フェニル-<sup>5</sup>-シクロペンタジエニル}チタン、トリクロロ{4-(ペンタプロモフェニル)フェニル-<sup>5</sup>-シクロペンタジエニル}チタン、トリクロロ{4-(ペンタヨードフェニル)フェニル-<sup>5</sup>-シクロペンタジエニル}チタン、トリクロロ{4-(2-トリフルオロメチルフェニル)フェニル-<sup>5</sup>-シクロペンタジエニル}チタン、トリクロロ{4-(3-トリフルオロメチルフェニル)フェニル-<sup>5</sup>-シクロペンタジエニル}チタン、トリクロロ{4-(4-トリフルオロメチルフェニル)フェニル-<sup>5</sup>-シクロペンタジエニル}チタン、トリクロロ[4-{2,4-ビス(トリフルオロメチル)フェニル}フェニル-<sup>5</sup>-シクロペンタジエニル]チタン、トリクロロ[4-{2,6-ビス(トリフルオロメチル)フェニル}フェニル-<sup>5</sup>-シクロペンタジエニル]チタン、トリクロロ[4-{2,4,6-トリス(トリフルオロメチル)フェニル}フェニル-<sup>5</sup>-シクロペンタジエニル]チタン、トリクロロ(4-ナフタレニルフェニル-<sup>5</sup>-シクロペンタジエニル)チタン、トリクロロ(4-アントラセニルフェニル-<sup>5</sup>-シクロペンタジエニル)チタン、トリクロロ(4-トリフェニレニルフェニル-<sup>5</sup>-シクロペンタジエニル)チタン、トリクロロ{4-(2-ピレニル)フェニル-<sup>5</sup>-シクロペンタジエニル}チタン、トリクロロ{4-(2-ピリジル)フェニル-<sup>5</sup>-シクロペンタジエニル}チタン、トリクロロ{4-(3-ピリジル)フェニル-<sup>5</sup>-シクロペンタジエニル}チタン、トリクロロ{4-(4-ピリジル)フェニル-<sup>5</sup>-シクロペンタジエニル}チタン、トリクロロ{4-(6-メチル-2-ピリジル)フェニル-<sup>5</sup>-シクロペンタジエニル}チタン、トリクロロ{4-(2-ピラジニル)フェニル-<sup>5</sup>-シクロペンタジエニル}チタン、トリクロロ{4-(2-ピリミジニル)フェニル-<sup>5</sup>-シクロペンタジエニル}チタンなど(以下、これらの化合物を、化合物群(16)と称する。)が挙げられる。

【0061】

また、Aが1,4-フェニレン基であり、Cpが<sup>5</sup>-テトラメチルシクロペンタジエニル基であり、Mがチタン原子であり、Xが塩素原子であり、nが3である化合物としては、トリクロロ(4-フェニルフェニル-<sup>5</sup>-テトラメチルシクロペンタジエニル)チタン、トリクロロ{4-(2-メチルフェニル)フェニル-<sup>5</sup>-テトラメチルシクロペンタジエニル}チタン、トリクロロ{4-(3-メチルフェニル)フェニル-<sup>5</sup>-テトラメチルシクロペンタジエニル}チタン、トリクロロ{4-(4-メチルフェニル)フェニル-<sup>5</sup>-テトラメチルシクロペンタジエニル}チタン、トリクロロ{4-(2-イソプロピルフェニル)フェニル-<sup>5</sup>-テトラメチルシクロペンタジエニル}チタン、トリクロロ{4-(3-イソプロピルフェニル)フェニル-<sup>5</sup>-テトラメチルシクロペンタジエニル}チタン、トリクロロ{4-(4-イソプロピルフェニル)フェニル-<sup>5</sup>-テトラメチルシクロペンタジエニル}チタン、トリクロロ{4-(2-フェニルフェニル)フェニル-<sup>5</sup>-テトラメチルシクロペンタジエニル}チタン、トリクロロ{4-(3-フェニルフェニル)フェニル-<sup>5</sup>-テトラメチルシクロペンタジエニル}チタン、トリクロロ{4-(4-フェニルフェニル)フェニル-<sup>5</sup>-テトラメチルシクロペンタジエニル}チタン、トリクロロ{4-(2,4-ジメチルフェニル)フェニル-<sup>5</sup>-テトラメチルシクロペンタジエニル}チタン、トリクロロ{4-(2,6-ジメチルフェニル)フェニル-<sup>5</sup>-テトラメチルシクロペンタジエニル}チタン、トリクロロ{4-(2,4-ジイソプロピルフェニル)フェニル-<sup>5</sup>-テトラメチルシクロペンタジエニル}チタン、トリクロロ{4-(2,6-ジイソプロピルフェニル)フェニル-<sup>5</sup>-テトラメチルシクロペンタジエニル}チタン、トリクロロ{4-(2,4-ジ-tert-ブチルフェニル)フェニル-<sup>5</sup>-テトラメチルシクロペンタジエニル}チタン、トリクロロ{4-(2,6-ジ-tert-ブチルフェニル)フェニル-<sup>5</sup>-テトラメチルシクロペンタジエニル}チタン、トリクロロ{4-(2,4-ジフェニルフェニル)フェニル-



メチルクロペンタジエニル}チタン、トリクロロ{4-(2,4,6-トリプロモフェニル)フェニル-<sup>5</sup>-テトラメチルシクロペンタジエニル}チタン、トリクロロ{4-(2,4,6-トリヨードフェニル)フェニル-<sup>5</sup>-テトラメチルシクロペンタジエニル}チタン、トリクロロ{4-(2,3,5,6-テトラフルオロフェニル)フェニル-<sup>5</sup>-テトラメチルシクロペンタジエニル}チタン、トリクロロ{4-(2,3,5,6-テトラクロロフェニル)フェニル-<sup>5</sup>-テトラメチルシクロペンタジエニル}チタン、トリクロロ{4-(2,3,5,6-テトラプロモフェニル)フェニル-<sup>5</sup>-テトラメチルシクロペンタジエニル}チタン、トリクロロ{4-(2,3,5,6-テトラヨードフェニル)フェニル-<sup>5</sup>-テトラメチルシクロペンタジエニル}チタン、トリクロロ{4-(ペンタフルオロフェニル)フェニル-<sup>5</sup>-テトラメチルシクロペンタジエニル}チタン、トリクロロ{4-(ペンタクロロフェニル)フェニル-<sup>5</sup>-テトラメチルシクロペンタジエニル}チタン、トリクロロ{4-(ペンタプロモフェニル)フェニル-<sup>5</sup>-テトラメチルシクロペンタジエニル}チタン、トリクロロ{4-(ペンタヨードフェニル)フェニル-<sup>5</sup>-テトラメチルシクロペンタジエニル}チタン、トリクロロ{4-(2-トリフルオロメチルフェニル)フェニル-<sup>5</sup>-テトラメチルシクロペンタジエニル}チタン、トリクロロ{4-(3-トリフルオロメチルフェニル)フェニル-<sup>5</sup>-テトラメチルシクロペンタジエニル}チタン、トリクロロ{4-(4-トリフルオロメチルフェニル)フェニル-<sup>5</sup>-テトラメチルシクロペンタジエニル}チタン、トリクロロ[4-{2,4-ビス(トリフルオロメチル)フェニル}フェニル-<sup>5</sup>-テトラメチルシクロペンタジエニル]チタン、トリクロロ[4-{2,6-ビス(トリフルオロメチル)フェニル}フェニル-<sup>5</sup>-テトラメチルシクロペンタジエニル]チタン、トリクロロ[4-{2,4,6-トリス(トリフルオロメチル)フェニル}フェニル-<sup>5</sup>-テトラメチルシクロペンタジエニル]チタン、トリクロロ(4-ナフタレニルフェニル-<sup>5</sup>-テトラメチルシクロペンタジエニル)チタン、トリクロロ(4-アントラセニルフェニル-<sup>5</sup>-テトラメチルシクロペンタジエニル)チタン、トリクロロ(4-トリフェニレニルフェニル-<sup>5</sup>-テトラメチルシクロペンタジエニル)チタン、トリクロロ(4-ピレニルフェニル-<sup>5</sup>-テトラメチルシクロペンタジエニル)チタン、トリクロロ{4-(2-ピリジル)フェニル-<sup>5</sup>-テトラメチルシクロペンタジエニル}チタン、トリクロロ{4-(3-ピリジル)フェニル-<sup>5</sup>-テトラメチルシクロペンタジエニル}チタン、トリクロロ{4-(4-ピリジル)フェニル-<sup>5</sup>-テトラメチルシクロペンタジエニル}チタン、トリクロロ{4-(6-メチル-2-ピリジル)フェニル-<sup>5</sup>-テトラメチルシクロペンタジエニル}チタン、トリクロロ{4-(2-ピラジニル)フェニル-<sup>5</sup>-テトラメチルシクロペンタジエニル}チタン、トリクロロ{4-(2-ピリミジニル)フェニル-<sup>5</sup>-テトラメチルシクロペンタジエニル}チタンなど(以下、これらの化合物を、化合物群(17)と称する。)が挙げられる。

【0062】

また、Aが1,4-フェニレン基であり、Cpが<sup>5</sup>-メチルシクロペンタジエニル基、<sup>5</sup>-ジメチルシクロペンタジエニル基、<sup>5</sup>-トリメチルシクロペンタジエニル基、<sup>5</sup>-n-ブチルシクロペンタジエニル基、<sup>5</sup>-tert-ブチルシクロペンタジエニル基、<sup>5</sup>-フェニルシクロペンタジエニル基、<sup>5</sup>-トリメチルシリルシクロペンタジエニル基、<sup>5</sup>-tert-ブチルジメチルシリルシクロペンタジエニル基、<sup>5</sup>-インデニル基、<sup>5</sup>-テトラヒドロインデニル基又は<sup>5</sup>-フルオレニル基であり、Mがチタン原子であり、Xが塩素原子であり、nが3である化合物としては、上記化合物群(16)で示した化合物の<sup>5</sup>-シクロペンタジエニルを、<sup>5</sup>-メチルシクロペンタジエニル、<sup>5</sup>-ジメチルシクロペンタジエニル、<sup>5</sup>-トリメチルシクロペンタジエニル、<sup>5</sup>-n-ブチルシクロペンタジエニル、<sup>5</sup>-tert-ブチルシクロペンタジエニル、<sup>5</sup>-フェニルシクロペンタジエニル、<sup>5</sup>-トリメチルシリルシクロペンタジエニル、<sup>5</sup>-tert-ブチルジメチルシリルシクロペンタジエニル、<sup>5</sup>-インデニル、<sup>5</sup>-テトラヒドロインデニル又は<sup>5</sup>-フルオレニルに変更した化合物など(以下、これらの化合物を、化合物群(18)と称する。)があげられる。



エニル}チタン、トリクロロ{ジメチル(2-プロモフェニル)シリル-<sup>5</sup>-シクロペンタジエニル}チタン、トリクロロ{ジメチル(3-プロモフェニル)シリル-<sup>5</sup>-シクロペンタジエニル}チタン、トリクロロ{ジメチル(4-プロモフェニル)シリル-<sup>5</sup>-シクロペンタジエニル}チタン、トリクロロ{ジメチル(2-ヨードフェニル)シリル-<sup>5</sup>-シクロペンタジエニル}チタン、トリクロロ{ジメチル(3-ヨードフェニル)シリル-<sup>5</sup>-シクロペンタジエニル}チタン、トリクロロ{ジメチル(4-ヨードフェニル)シリル-<sup>5</sup>-シクロペンタジエニル}チタン、トリクロロ{ジメチル(2,4-ジフルオロフェニル)シリル-<sup>5</sup>-シクロペンタジエニル}チタン、トリクロロ{ジメチル(2,6-ジフルオロフェニル)シリル-<sup>5</sup>-シクロペンタジエニル}チタン、トリクロロ{ジメチル(2,4-ジクロロフェニル)シリル-<sup>5</sup>-シクロペンタジエニル}チタン、トリクロロ{ジメチル(2,6-ジクロロフェニル)シリル-<sup>5</sup>-シクロペンタジエニル}チタン、トリクロロ{ジメチル(2,4-ジプロモフェニル)シリル-<sup>5</sup>-シクロペンタジエニル}チタン、トリクロロ{ジメチル(2,6-ジプロモフェニル)シリル-<sup>5</sup>-シクロペンタジエニル}チタン、トリクロロ{ジメチル(2,4-ジヨードフェニル)シリル-<sup>5</sup>-シクロペンタジエニル}チタン、トリクロロ{ジメチル(2,6-ジヨードフェニル)シリル-<sup>5</sup>-シクロペンタジエニル}チタン、トリクロロ{ジメチル(2,4,6-トリフルオロフェニル)シリル-<sup>5</sup>-シクロペンタジエニル}チタン、トリクロロ{ジメチル(2,4,6-トリクロロフェニル)フシリル-<sup>5</sup>-シクロペンタジエニル}チタン、トリクロロ{ジメチル(2,4,6-トリプロモフェニル)シリル-<sup>5</sup>-シクロペンタジエニル}チタン、トリクロロ{ジメチル(2,4,6-トリヨードフェニル)シリル-<sup>5</sup>-シクロペンタジエニル}チタン、トリクロロ{ジメチル(2,3,5,6-テトラフルオロフェニル)シリル-<sup>5</sup>-シクロペンタジエニル}チタン、トリクロロ{ジメチル(2,3,5,6-テトラクロロフェニル)シリル-<sup>5</sup>-シクロペンタジエニル}チタン、トリクロロ{ジメチル(2,3,5,6-テトラプロモフェニル)シリル-<sup>5</sup>-シクロペンタジエニル}チタン、トリクロロ{ジメチル(2,3,5,6-テトラヨードフェニル)シリル-<sup>5</sup>-シクロペンタジエニル}チタン、トリクロロ{ジメチル(ペンタフルオロフェニル)シリル-<sup>5</sup>-シクロペンタジエニル}チタン、トリクロロ{ジメチル(ペンタクロロフェニル)シリル-<sup>5</sup>-シクロペンタジエニル}チタン、トリクロロ{ジメチル(ペンタプロモフェニル)シリル-<sup>5</sup>-シクロペンタジエニル}チタン、トリクロロ{ジメチル(ペンタヨードフェニル)シリル-<sup>5</sup>-シクロペンタジエニル}チタン、トリクロロ{ジメチル(2-トリフルオロメチルフェニル)シリル-<sup>5</sup>-シクロペンタジエニル}チタン、トリクロロ{ジメチル(3-トリフルオロメチルフェニル)シリル-<sup>5</sup>-シクロペンタジエニル}チタン、トリクロロ{ジメチル(4-トリフルオロメチルフェニル)シリル-<sup>5</sup>-シクロペンタジエニル}チタン、トリクロロ[ジメチル{2,4-ビス(トリフルオロメチル)フェニル}シリル-<sup>5</sup>-シクロペンタジエニル]チタン、トリクロロ[ジメチル{2,6-ビス(トリフルオロメチル)フェニル}シリル-<sup>5</sup>-シクロペンタジエニル]チタン、トリクロロ(ジメチルナフタレニルシリル-<sup>5</sup>-シクロペンタジエニル)チタン、トリクロロ(アントラセニルジメチルシリル-<sup>5</sup>-シクロペンタジエニル)チタン、トリクロロ(ジメチルトリフェニレニルシリル-<sup>5</sup>-シクロペンタジエニル)チタン、トリクロロ{ジメチル(2-ピレニル)シリル-<sup>5</sup>-シクロペンタジエニル}チタン、トリクロロ{ジメチル(2-ピリジル)シリル-<sup>5</sup>-シクロペンタジエニル}チタン、トリクロロ{ジメチル(3-ピリジル)シリル-<sup>5</sup>-シクロペンタジエニル}チタン、トリクロロ{ジメチル(4-ピリジル)シリル-<sup>5</sup>-シクロペンタジエニル}チタン、トリクロロ{ジメチル(6-メチル-2-ピリジル)シリル-<sup>5</sup>-シクロペンタジエニル}チタン、トリクロロ{ジメチル(2-ピラジニル)シリル-<sup>5</sup>-シクロペンタジエニル}チタン、トリクロロ{ジメチル(2-ピリミジニル)シリル-<sup>5</sup>-シクロペンタジエニル}チタンなど(以下、これらの化合物を、化合物群(19)と称する。)が挙げられる。

10

20

30

40

50





クロロ (アントラセニルジメチルシリル - <sup>5</sup> - テトラメチルシクロペンタジエニル) チタン、トリクロロ (ジメチルトリフェニルシリル - <sup>5</sup> - テトラメチルシクロペンタジエニル) チタン、トリクロロ {ジメチル (2 - ピレニル) シリル - <sup>5</sup> - テトラメチルシクロペンタジエニル} チタン、トリクロロ {ジメチル (2 - ピリジル) シリル - <sup>5</sup> - テトラメチルシクロペンタジエニル} チタン、トリクロロ {ジメチル (3 - ピリジル) シリル - <sup>5</sup> - テトラメチルシクロペンタジエニル} チタン、トリクロロ {ジメチル (4 - ピリジル) シリル - <sup>5</sup> - テトラメチルシクロペンタジエニル} チタン、トリクロロ {ジメチル (6 - メチル - 2 - ピリジル) シリル - <sup>5</sup> - テトラメチルシクロペンタジエニル} チタン、トリクロロ {ジメチル (2 - ピラジニル) シリル - <sup>5</sup> - テトラメチルシクロペンタジエニル} チタン、トリクロロ {ジメチル (2 - ピリミジニル) シリル - <sup>5</sup> - テ

10

## 【0065】

また、A がジメチルシリレン基であり、C p が <sup>5</sup> - メチルシクロペンタジエニル基、<sup>5</sup> - ジメチルシクロペンタジエニル基、<sup>5</sup> - トリメチルシクロペンタジエニル基、<sup>5</sup> - n - ブチルシクロペンタジエニル基、<sup>5</sup> - tert - ブチルシクロペンタジエニル基、<sup>5</sup> - フェニルシクロペンタジエニル基、<sup>5</sup> - トリメチルシリルシクロペンタジエニル基、<sup>5</sup> - tert - ブチルジメチルシリルシクロペンタジエニル基、<sup>5</sup> - インデニル基、<sup>5</sup> - テトラヒドロインデニル基又は <sup>5</sup> - フルオレニル基であり、M がチタン原子であり、X が塩素原子であり、n が 3 である化合物としては、上記化合物群 (19) で示した

20

## 【0066】

式 [I] で示される遷移金属化合物としては、A がジフェニルシリレン基である化合物があげられ、例えば、A がジフェニルシリレン基であり、C p が <sup>5</sup> - シクロペンタジエニル基であり、M がチタン原子であり、X が塩素原子であり、n が 3 である化合物としては、トリクロロ (トリフェニルシリル - <sup>5</sup> - シクロペンタジエニル) チタン、トリクロロ {ジフェニル (2 - メチルフェニル) シリル - <sup>5</sup> - シクロペンタジエニル} チタン、トリクロロ {ジフェニル (3 - メチルフェニル) シリル - <sup>5</sup> - シクロペンタジエニル} チタン、トリクロロ {ジフェニル (4 - メチルフェニル) シリル - <sup>5</sup> - シクロペンタジエニル} チタン、トリクロロ {ジフェニル (2 - イソプロピルフェニル) シリル - <sup>5</sup> - シクロペンタジエニル} チタン、トリクロロ {ジフェニル (3 - イソプロピルフェニル) シリル - <sup>5</sup> - シクロペンタジエニル} チタン、トリクロロ {ジフェニル (4 - イソプロピルフェニル) シリル - <sup>5</sup> - シクロペンタジエニル} チタン、トリクロロ {ジフェニル (2 - フェニルフェニル) シリル - <sup>5</sup> - シクロペンタジエニル} チタン、トリクロロ {ジフェニル (3 - フェニルフェニル) シリル - <sup>5</sup> - シクロペンタジエニル} チタン、トリクロロ {ジフェニル (4 - フェニルフェニル) シリル - <sup>5</sup> - シクロペンタジエニル} チタン、トリクロロ {ジフェニル (2, 4 - ジメチルフェニル) シリル - <sup>5</sup> - シクロペンタジエニル} チタン、トリクロロ {ジフェニル (2, 6 - ジメチルフェニル) シリル - <sup>5</sup> - シクロペンタジエニル} チタン、トリクロロ {ジフェニル (2, 4 - ジイソプロピルフェニル) シリル - <sup>5</sup> - シクロペンタジエニル} チタン、トリクロロ {ジフェニル (2, 6 - ジイソプロピルフェニル) シリル - <sup>5</sup> - シクロペンタジエニル} チタン、トリクロロ {ジフェニル (2, 4 - ジ - tert - ブチルフェニル) シリル - <sup>5</sup> - シクロペンタジエニル} チタン、トリクロロ {ジフェニル (2, 6 - ジ - tert - ブチルフェニル) シリル - <sup>5</sup> - シクロペンタジエニル} チタン、トリクロロ {ジフェニル (2, 4 -

30

40

50



ニル)シリル - <sup>5</sup> - シクロペンタジエニル}チタン、トリクロロ{ジフェニル(2, 3, 5, 6 - テトラクロロフェニル)シリル - <sup>5</sup> - シクロペンタジエニル}チタン、トリクロロ{ジフェニル(2, 3, 5, 6 - テトラプロモフェニル)シリル - <sup>5</sup> - シクロペンタジエニル}チタン、トリクロロ{ジフェニル(2, 3, 5, 6 - テトラヨードフェニル)シリル - <sup>5</sup> - シクロペンタジエニル}チタン、トリクロロ{ジフェニル(ペンタフルオロフェニル)シリル - <sup>5</sup> - シクロペンタジエニル}チタン、トリクロロ{ジフェニル(ペンタクロロフェニル)シリル - <sup>5</sup> - シクロペンタジエニル}チタン、トリクロロ{ジフェニル(ペンタプロモフェニル)シリル - <sup>5</sup> - シクロペンタジエニル}チタン、トリクロロ{ジフェニル(ペンタヨードフェニル)シリル - <sup>5</sup> - シクロペンタジエニル}チタン、トリクロロ{ジフェニル(2 - トリフルオロメチルフェニル)シリル - <sup>5</sup> - シクロペンタジエニル}チタン、トリクロロ{ジフェニル(3 - トリフルオロメチルフェニル)シリル - <sup>5</sup> - シクロペンタジエニル}チタン、トリクロロ{ジフェニル(4 - トリフルオロメチルフェニル)シリル - <sup>5</sup> - シクロペンタジエニル}チタン、トリクロロ[ジフェニル{2, 4 - ビス(トリフルオロメチル)フェニル}シリル - <sup>5</sup> - シクロペンタジエニル]チタン、トリクロロ[ジメチル{2, 6 - ビス(トリフルオロメチル)フェニル}シリル - <sup>5</sup> - シクロペンタジエニル]チタン、トリクロロ[ジフェニル{2, 4, 6 - トリス(トリフルオロメチル)フェニル}シリル - <sup>5</sup> - シクロペンタジエニル]チタン、トリクロロ(ナフタレニルジフェニルシリル - <sup>5</sup> - シクロペンタジエニル)チタン、トリクロロ(アントラセニルジフェニルシリル - <sup>5</sup> - シクロペンタジエニル)チタン、トリクロロ(ジフェニルトリフェニレニルシリル - <sup>5</sup> - シクロペンタジエニル)チタン、トリクロロ{ジフェニル(2 - ピレニル)シリル - <sup>5</sup> - シクロペンタジエニル}チタン、トリクロロ{ジフェニル(2 - ピリジル)シリル - <sup>5</sup> - シクロペンタジエニル}チタン、トリクロロ{ジフェニル(3 - ピリジル)シリル - <sup>5</sup> - シクロペンタジエニル}チタン、トリクロロ{ジフェニル(4 - ピリジル)シリル - <sup>5</sup> - シクロペンタジエニル}チタン、トリクロロ{ジフェニル(6 - メチル - 2 - ピリジル)シリル - <sup>5</sup> - シクロペンタジエニル}チタン、トリクロロ{ジフェニル(2 - ピラジニル)シリル - <sup>5</sup> - シクロペンタジエニル}チタン、トリクロロ{ジフェニル(2 - ピリミジニル)シリル - <sup>5</sup> - シクロペンタジエニル}チタンなど(以下、これらの化合物を、化合物群(22)と称する。)が挙げられる。

10

20

30

40

50

【0067】

また、Aがジフェニルシリレン基であり、Cpが<sup>5</sup>-テトラメチルシクロペンタジエニル基であり、Mがチタン原子であり、Xが塩素原子であり、nが3である化合物としては、トリクロロ(トリフェニルシリル - <sup>5</sup> - テトラメチルシクロペンタジエニル)チタン、トリクロロ{ジフェニル(2 - メチルフェニル)シリル - <sup>5</sup> - テトラメチルシクロペンタジエニル}チタン、トリクロロ{ジフェニル(3 - メチルフェニル)シリル - <sup>5</sup> - テトラメチルシクロペンタジエニル}チタン、トリクロロ{ジフェニル(4 - メチルフェニル)シリル - <sup>5</sup> - テトラメチルシクロペンタジエニル}チタン、トリクロロ{ジフェニル(2 - イソプロピルフェニル)シリル - <sup>5</sup> - テトラメチルシクロペンタジエニル}チタン、トリクロロ{ジフェニル(3 - イソプロピルフェニル)シリル - <sup>5</sup> - テトラメチルシクロペンタジエニル}チタン、トリクロロ{ジフェニル(4 - イソプロピルフェニル)シリル - <sup>5</sup> - テトラメチルシクロペンタジエニル}チタン、トリクロロ{ジフェニル(2 - フェニルフェニル)シリル - <sup>5</sup> - テトラメチルシクロペンタジエニル}チタン、トリクロロ{ジフェニル(3 - フェニルフェニル)シリル - <sup>5</sup> - テトラメチルシクロペンタジエニル}チタン、トリクロロ{ジフェニル(4 - フェニルフェニル)シリル - <sup>5</sup> - テトラメチルシクロペンタジエニル}チタン、トリクロロ{ジフェニル(2, 4 - ジメチルフェニル)シリル - <sup>5</sup> - テトラメチルシクロペンタジエニル}チタン、トリクロロ{ジフェニル(2, 6 - ジメチルフェニル)シリル - <sup>5</sup> - テトラメチルシクロペンタジエニル}チタン、トリクロロ{ジフェニル(2, 4 - ジイソプロピルフェニル)シリル - <sup>5</sup> - テトラメチルシクロペンタジエニル}チタン、トリクロロ{ジフェニル(2, 6 - ジイソプロピルフェニル)シリル - <sup>5</sup> - テトラメチルシクロペンタジエニル}チタ



テトラメチルシクロペンタジエニル}チタン、トリクロロ{ジフェニル(2, 4-ジヨードフェニル)シリル-<sup>5</sup>-テトラメチルシクロペンタジエニル}チタン、トリクロロ{ジフェニル(2, 6-ジヨードフェニル)シリル-<sup>5</sup>-テトラメチルシクロペンタジエニル}チタン、トリクロロ{ジフェニル(2, 4, 6-トリフルオロフェニル)シリル-<sup>5</sup>-テトラメチルシクロペンタジエニル}チタン、トリクロロ{ジフェニル(2, 4, 6-トリクロロフェニル)シリル-<sup>5</sup>-テトラメチルシクロペンタジエニル}チタン、トリクロロ{ジフェニル(2, 4, 6-トリブromoフェニル)シリル-<sup>5</sup>-テトラメチルシクロペンタジエニル}チタン、トリクロロ{ジフェニル(2, 4, 6-トリヨードフェニル)シリル-<sup>5</sup>-テトラメチルシクロペンタジエニル}チタン、トリクロロ{ジフェニル(2, 3, 5, 6-テトラフルオロフェニル)シリル-<sup>5</sup>-シクロペンタジエニル}チタン、トリクロロ{ジフェニル(2, 3, 5, 6-テトラクロロフェニル)シリル-<sup>5</sup>-テトラメチルシクロペンタジエニル}チタン、トリクロロ{ジフェニル(2, 3, 5, 6-テトラブromoフェニル)シリル-<sup>5</sup>-テトラメチルシクロペンタジエニル}チタン、トリクロロ{ジフェニル(2, 3, 5, 6-テトラヨードフェニル)シリル-<sup>5</sup>-テトラメチルシクロペンタジエニル}チタン、トリクロロ{ジフェニル(ペンタフルオロフェニル)シリル-<sup>5</sup>-テトラメチルシクロペンタジエニル}チタン、トリクロロ{ジフェニル(ペンタクロロフェニル)シリル-<sup>5</sup>-テトラメチルシクロペンタジエニル}チタン、トリクロロ{ジフェニル(ペンタブromoフェニル)シリル-<sup>5</sup>-テトラメチルシクロペンタジエニル}チタン、トリクロロ{ジフェニル(ペンタヨードフェニル)シリル-<sup>5</sup>-テトラメチルシクロペンタジエニル}チタン、トリクロロ{ジフェニル(2-トリフルオロメチルフェニル)シリル-<sup>5</sup>-テトラメチルシクロペンタジエニル}チタン、トリクロロ{ジフェニル(3-トリフルオロメチルフェニル)シリル-<sup>5</sup>-テトラメチルシクロペンタジエニル}チタン、トリクロロ{ジフェニル(4-トリフルオロメチルフェニル)シリル-<sup>5</sup>-テトラメチルシクロペンタジエニル}チタン、トリクロロ[ジフェニル{2, 4-ビス(トリフルオロメチル)フェニル}シリル-<sup>5</sup>-テトラメチルシクロペンタジエニル]チタン、トリクロロ[ジフェニル{2, 6-ビス(トリフルオロメチル)フェニル}シリル-<sup>5</sup>-テトラメチルシクロペンタジエニル]チタン、トリクロロ[ジフェニル{2, 4, 6-トリス(トリフルオロメチル)フェニル}シリル-<sup>5</sup>-テトラメチルシクロペンタジエニル]チタン、トリクロロ(ナフタレニルジフェニルシリル-<sup>5</sup>-テトラメチルシクロペンタジエニル)チタン、トリクロロ(アントラセニルジフェニルシリル-<sup>5</sup>-テトラメチルシクロペンタジエニル)チタン、トリクロロ(ジフェニルトリフェニレニルシリル-<sup>5</sup>-テトラメチルシクロペンタジエニル)チタン、トリクロロ{ジフェニル(2-ピレニル)シリル-<sup>5</sup>-テトラメチルシクロペンタジエニル}チタン、トリクロロ{ジフェニル(2-ピリジル)シリル-<sup>5</sup>-テトラメチルシクロペンタジエニル}チタン、トリクロロ{ジフェニル(3-ピリジル)シリル-<sup>5</sup>-テトラメチルシクロペンタジエニル}チタン、トリクロロ{ジフェニル(4-ピリジル)シリル-<sup>5</sup>-テトラメチルシクロペンタジエニル}チタン、トリクロロ{ジフェニル(6-メチル-2-ピリジル)シリル-<sup>5</sup>-テトラメチルシクロペンタジエニル}チタン、トリクロロ{ジフェニル(2-ピラジニル)シリル-<sup>5</sup>-テトラメチルシクロペンタジエニル}チタン、トリクロロ{ジフェニル(2-ピリミジニル)シリル-<sup>5</sup>-テトラメチルシクロペンタジエニル}チタンなど(以下、これらの化合物を、化合物群(23)と称する。)が挙げられる。

【0068】

また、Aがジフェニルシリレン基であり、Cpが<sup>5</sup>-メチルシクロペンタジエニル基、<sup>5</sup>-ジメチルシクロペンタジエニル基、<sup>5</sup>-トリメチルシクロペンタジエニル基、<sup>5</sup>-n-ブチルシクロペンタジエニル基、<sup>5</sup>-tert-ブチルシクロペンタジエニル基、<sup>5</sup>-フェニルシクロペンタジエニル基、<sup>5</sup>-トリメチルシリルシクロペンタジエニル基、<sup>5</sup>-tert-ブチルジメチルシリルシクロペンタジエニル基、<sup>5</sup>-インデニル基、<sup>5</sup>-テトラヒドロインデニル基又は<sup>5</sup>-フルオレニル基であり、Mがチタン原子であり、Xが塩素原子であり、nが3である化合物としては、上記化合物群(22)で示した

化合物の<sup>5</sup>-シクロペンタジエニルを、<sup>5</sup>-メチルシクロペンタジエニル、<sup>5</sup>-ジメチルシクロペンタジエニル、<sup>5</sup>-トリメチルシクロペンタジエニル、<sup>5</sup>-n-ブチルシクロペンタジエニル、<sup>5</sup>-tert-ブチルシクロペンタジエニル、<sup>5</sup>-フェニルシクロペンタジエニル、<sup>5</sup>-トリメチルシリルシクロペンタジエニル、<sup>5</sup>-tert-ブチルジメチルシリルシクロペンタジエニル、<sup>5</sup>-インデニル、<sup>5</sup>-テトラヒドロインデニル又は<sup>5</sup>-フルオレニルに変更した化合物など(以下、これらの化合物を、化合物群(24)と称する。)があげられる。

【0069】

式[I]で示される遷移金属化合物としては、Aがイソプロピルイミノ基である化合物があげられ、例えば、Aがイソプロピルイミノ基であり、Cpが<sup>5</sup>-シクロペンタジエニル基であり、Mがチタン原子であり、Xが塩素原子であり、nが3である化合物としては、トリクロロ(フェニルイソプロピルイミノ-<sup>5</sup>-シクロペンタジエニル)チタン、トリクロロ{(2-メチルフェニル)イソプロピルイミノ-<sup>5</sup>-シクロペンタジエニル}チタン、トリクロロ{(3-メチルフェニル)イソプロピルイミノ-<sup>5</sup>-シクロペンタジエニル}チタン、トリクロロ{(4-メチルフェニル)イソプロピルイミノ-<sup>5</sup>-シクロペンタジエニル}チタン、トリクロロ{(2-イソプロピルフェニル)イソプロピルイミノ-<sup>5</sup>-シクロペンタジエニル}チタン、トリクロロ{(3-イソプロピルフェニル)イソプロピルイミノ-<sup>5</sup>-シクロペンタジエニル}チタン、トリクロロ{(4-イソプロピルフェニル)イソプロピルイミノ-<sup>5</sup>-シクロペンタジエニル}チタン、トリクロロ{(2-フェニルフェニル)イソプロピルイミノ-<sup>5</sup>-シクロペンタジエニル}チタン、トリクロロ{(3-フェニルフェニル)イソプロピルイミノ-<sup>5</sup>-シクロペンタジエニル}チタン、トリクロロ{(4-フェニルフェニル)イソプロピルイミノ-<sup>5</sup>-シクロペンタジエニル}チタン、トリクロロ{(2,4-ジメチルフェニル)イソプロピルイミノ-<sup>5</sup>-シクロペンタジエニル}チタン、トリクロロ{(2,6-ジメチルフェニル)イソプロピルイミノ-<sup>5</sup>-シクロペンタジエニル}チタン、トリクロロ{(2,4-ジイソプロピルフェニル)イソプロピルイミノ-<sup>5</sup>-シクロペンタジエニル}チタン、トリクロロ{(2,6-ジイソプロピルフェニル)イソプロピルイミノ-<sup>5</sup>-シクロペンタジエニル}チタン、トリクロロ{(2,4-ジ-tert-ブチルフェニル)イソプロピルイミノ-<sup>5</sup>-シクロペンタジエニル}チタン、トリクロロ{(2,6-ジ-tert-ブチルフェニル)イソプロピルイミノ-<sup>5</sup>-シクロペンタジエニル}チタン、トリクロロ{(2,4-ジフェニルフェニル)イソプロピルイミノ-<sup>5</sup>-シクロペンタジエニル}チタン、トリクロロ{(2,6-ジフェニルフェニル)イソプロピルイミノ-<sup>5</sup>-シクロペンタジエニル}チタン、トリクロロ{(2,4,6-トリメチルフェニル)イソプロピルイミノ-<sup>5</sup>-シクロペンタジエニル}チタン、トリクロロ{(2,4,6-トリイソプロピルフェニル)イソプロピルイミノ-<sup>5</sup>-シクロペンタジエニル}チタン、トリクロロ{(2,4,6-トリtert-ブチルフェニル)イソプロピルイミノ-<sup>5</sup>-シクロペンタジエニル}チタン、トリクロロ{(2,4,6-トリフェニルフェニル)イソプロピルイミノ-<sup>5</sup>-シクロペンタジエニル}チタン、トリクロロ{(2-メトキシフェニル)イソプロピルイミノ-<sup>5</sup>-シクロペンタジエニル}チタン、トリクロロ{(3-メトキシフェニル)イソプロピルイミノ-<sup>5</sup>-シクロペンタジエニル}チタン、トリクロロ{(4-メトキシフェニル)イソプロピルイミノ-<sup>5</sup>-シクロペンタジエニル}チタン、トリクロロ{(2,4-ジメトキシフェニル)イソプロピルイミノ-<sup>5</sup>-シクロペンタジエニル}チタン、トリクロロ{(2,6-ジメトキシフェニル)イソプロピルイミノ-<sup>5</sup>-シクロペンタジエニル}チタン、トリクロロ{(2,4,6-トリメトキシフェニル)イソプロピルイミノ-<sup>5</sup>-シクロペンタジエニル}チタン、トリクロロ{(2-フェノキシフェニル)イソプロピルイミノ-<sup>5</sup>-シクロペンタジエニル}チタン、トリクロロ{(3-フェノキシフェニル)イソプロピルイミノ-<sup>5</sup>-シクロペンタジエニル}チタン、トリクロロ{(4-フェノキシフェニル)イソプロピルイミノ-<sup>5</sup>-シクロペンタジエニル}チタン、トリクロロ{(2,4-ジフェノキシフェニル)イソプロピルイミノ-<sup>5</sup>-シクロペンタジエニル}チタン、トリクロロ{(

10

20

30

40

50



ジエニル)チタン、トリクロロ(アントラセニルイソプロピルイミノ - <sup>5</sup> - シクロペンタジエニル)チタン、トリクロロ(トリフェニルイソプロピルイミノ - <sup>5</sup> - シクロペンタジエニル)チタン、トリクロロ{イソプロピル(2 - ピレニル)イミノ - <sup>5</sup> - シクロペンタジエニル}チタン、トリクロロ{イソプロピル(2 - プリジル)イミノ - <sup>5</sup> - シクロペンタジエニル}チタン、トリクロロ{イソプロピル(3 - プリジル)イミノ - <sup>5</sup> - シクロペンタジエニル}チタン、トリクロロ{イソプロピル(4 - プリジル)イミノ - <sup>5</sup> - シクロペンタジエニル}チタン、トリクロロ{イソプロピル(6 - メチル - 2 - プリジル)イミノ - <sup>5</sup> - シクロペンタジエニル}チタン、トリクロロ{イソプロピル(2 - ピラジニル)イミノ - <sup>5</sup> - シクロペンタジエニル}チタン、トリクロロ{イソプロピル(2 - ピリミジニル)イミノ - <sup>5</sup> - シクロペンタジエニル}チタンなど(以下、これらの化合物を、化合物群(25)と称する。)が挙げられる。

10

## 【0070】

また、Aがイソプロピルイミノ基であり、Cpが<sup>5</sup> - テトラメチルシクロペンタジエニル基であり、Mがチタン原子であり、Xが塩素原子であり、nが3である化合物としては、トリクロロ(フェニルイソプロピルイミノ - <sup>5</sup> - テトラメチルシクロペンタジエニル)チタン、トリクロロ{(2 - メチルフェニル)イソプロピルイミノ - <sup>5</sup> - テトラメチルシクロペンタジエニル}チタン、トリクロロ{(3 - メチルフェニル)イソプロピルイミノ - <sup>5</sup> - テトラメチルシクロペンタジエニル}チタン、トリクロロ{(4 - メチルフェニル)イソプロピルイミノ - <sup>5</sup> - テトラメチルシクロペンタジエニル}チタン、トリクロロ{(2 - イソプロピルフェニル)イソプロピルイミノ - <sup>5</sup> - テトラメチルシクロペンタジエニル}チタン、トリクロロ{(3 - イソプロピルフェニル)イソプロピルイミノ - <sup>5</sup> - テトラメチルシクロペンタジエニル}チタン、トリクロロ{(4 - イソプロピルフェニル)イソプロピルイミノ - <sup>5</sup> - テトラメチルシクロペンタジエニル}チタン、トリクロロ{(2 - フェニルフェニル)イソプロピルイミノ - <sup>5</sup> - テトラメチルシクロペンタジエニル}チタン、トリクロロ{(3 - フェニルフェニル)イソプロピルイミノ - <sup>5</sup> - テトラメチルシクロペンタジエニル}チタン、トリクロロ{(4 - フェニルフェニル)イソプロピルイミノ - <sup>5</sup> - テトラメチルシクロペンタジエニル}チタン、トリクロロ{(2, 4 - ジメチルフェニル)イソプロピルイミノ - <sup>5</sup> - テトラメチルシクロペンタジエニル}チタン、トリクロロ{(2, 6 - ジメチルフェニル)イソプロピルイミノ - <sup>5</sup> - テトラメチルシクロペンタジエニル}チタン、トリクロロ{(2, 4 - ジイソプロピルフェニル)イソプロピルイミノ - <sup>5</sup> - テトラメチルシクロペンタジエニル}チタン、トリクロロ{(2, 6 - ジイソプロピルフェニル)イソプロピルイミノ - <sup>5</sup> - テトラメチルシクロペンタジエニル}チタン、トリクロロ{(2, 4 - ジ - tert - ブチルフェニル)イソプロピルイミノ - <sup>5</sup> - テトラメチルシクロペンタジエニル}チタン、トリクロロ{(2, 6 - ジ - tert - ブチルフェニル)イソプロピルイミノ - <sup>5</sup> - テトラメチルシクロペンタジエニル}チタン、トリクロロ{(2, 4 - ジフェニルフェニル)イソプロピルイミノ - <sup>5</sup> - テトラメチルシクロペンタジエニル}チタン、トリクロロ{(2, 6 - ジフェニルフェニル)イソプロピルイミノ - <sup>5</sup> - テトラメチルシクロペンタジエニル}チタン、トリクロロ{(2, 4, 6 - トリメチルフェニル)イソプロピルイミノ - <sup>5</sup> - テトラメチルシクロペンタジエニル}チタン、トリクロロ{(2, 4, 6 - トリイソプロピルフェニル)イソプロピルイミノ - <sup>5</sup> - テトラメチルシクロペンタジエニル}チタン、トリクロロ{(2, 4, 6 - トリ - tert - ブチルフェニル)イソプロピルイミノ - <sup>5</sup> - テトラメチルシクロペンタジエニル}チタン、トリクロロ{(2, 4, 6 - トリフェニルフェニル)イソプロピルイミノ - <sup>5</sup> - テトラメチルシクロペンタジエニル}チタン、トリクロロ{(2 - メトキシフェニル)イソプロピルイミノ - <sup>5</sup> - テトラメチルシクロペンタジエニル}チタン、トリクロロ{(3 - メトキシフェニル)イソプロピルイミノ - <sup>5</sup> - テトラメチルシクロペンタジエニル}チタン、トリクロロ{(4 - メトキシフェニル)イソプロピルイミノ - <sup>5</sup> - テトラメチルシクロペンタジエニル}チタン、トリクロロ{(2, 4 - ジメトキシフェニル)イソプロピルイミノ - <sup>5</sup> - テトラメチルシクロペンタジエニル}チタン、トリクロロ{(2, 6 - ジメトキシフェニル)イ

20

30

40

50



ンタククロフェニル) イソプロピルイミノ - <sup>5</sup> - テトラメチルシクロペンタジエニル} チタン、トリクロロ{(ペンタプロモフェニル) イソプロピルイミノ - <sup>5</sup> - テトラメチルシクロペンタジエニル} チタン、トリクロロ{(ペンタヨードフェニル) イソプロピルイミノ - <sup>5</sup> - テトラメチルシクロペンタジエニル} チタン、トリクロロ{(2 - トリフルオロメチルフェニル) イソプロピルイミノ - <sup>5</sup> - テトラメチルシクロペンタジエニル} チタン、トリクロロ{(3 - トリフルオロメチルフェニル) イソプロピルイミノ - <sup>5</sup> - テトラメチルシクロペンタジエニル} チタン、トリクロロ{イソプロピルイミノ(4 - トリフルオロメチルフェニル) イソプロピルイミノ - <sup>5</sup> - テトラメチルシクロペンタジエニル} チタン、トリクロロ[ { 2 , 4 - ビス(トリフルオロメチル) フェニル } イソプロピルイミノ - <sup>5</sup> - テトラメチルシクロペンタジエニル ] チタン、トリクロロ[ { 2 , 6 - ビス(トリフルオロメチル) フェニル } イソプロピルイミノ - <sup>5</sup> - テトラメチルシクロペンタジエニル ] チタン、トリクロロ[ { 2 , 4 , 6 - トリス(トリフルオロメチル) フェニル } イソプロピルイミノ - <sup>5</sup> - テトラメチルシクロペンタジエニル ] チタン、トリクロロ(ナフタレニルイソプロピルイミノ - <sup>5</sup> - テトラメチルシクロペンタジエニル) チタン、トリクロロ(アントラセニルイソプロピルイミノ - <sup>5</sup> - テトラメチルシクロペンタジエニル) チタン、トリクロロ(トリフェニレニルイソプロピルイミノ - <sup>5</sup> - テトラメチルシクロペンタジエニル) チタン、トリクロロ{イソプロピル(2 - ピレニル) イミノ - <sup>5</sup> - テトラメチルシクロペンタジエニル} チタン、トリクロロ{イソプロピル(2 - ピリジル) イミノ - <sup>5</sup> - テトラメチルシクロペンタジエニル} チタン、トリクロロ{イソプロピル(3 - ピリジル) イミノ - <sup>5</sup> - テトラメチルシクロペンタジエニル} チタン、トリクロロ{イソプロピル(4 - ピリジル) イミノ - <sup>5</sup> - テトラメチルシクロペンタジエニル} チタン、トリクロロ{イソプロピル(6 - メチル - 2 - ピリジル) イミノ - <sup>5</sup> - テトラメチルシクロペンタジエニル} チタン、トリクロロ{イソプロピル(2 - ピラジニル) イミノ - <sup>5</sup> - テトラメチルシクロペンタジエニル} チタン、トリクロロ{イソプロピル(2 - ピリミジニル) イミノ - <sup>5</sup> - テトラメチルシクロペンタジエニル} チタンなど(以下、これらの化合物を、化合物群(26)と称する。)が挙げられる。

#### 【0071】

また、Aがイソプロピルイミノ基であり、Cpが<sup>5</sup>-メチルシクロペンタジエニル基、<sup>5</sup>-ジメチルシクロペンタジエニル基、<sup>5</sup>-トリメチルシクロペンタジエニル基、<sup>5</sup>-n-ブチルシクロペンタジエニル基、<sup>5</sup>-tert-ブチルシクロペンタジエニル基、<sup>5</sup>-フェニルシクロペンタジエニル基、<sup>5</sup>-トリメチルシリルシクロペンタジエニル基、<sup>5</sup>-tert-ブチルジメチルシリルシクロペンタジエニル基、<sup>5</sup>-インデニル基、<sup>5</sup>-テトラヒドロインデニル基又は<sup>5</sup>-フルオレニル基であり、Mがチタン原子であり、Xが塩素原子であり、nが3である化合物としては、上記化合物群(25)で示した化合物の<sup>5</sup>-シクロペンタジエニルを、<sup>5</sup>-メチルシクロペンタジエニル、<sup>5</sup>-ジメチルシクロペンタジエニル、<sup>5</sup>-トリメチルシクロペンタジエニル、<sup>5</sup>-n-ブチルシクロペンタジエニル、<sup>5</sup>-tert-ブチルシクロペンタジエニル、<sup>5</sup>-フェニルシクロペンタジエニル、<sup>5</sup>-トリメチルシリルシクロペンタジエニル、<sup>5</sup>-tert-ブチルジメチルシリルシクロペンタジエニル、<sup>5</sup>-インデニル、<sup>5</sup>-テトラヒドロインデニル又は<sup>5</sup>-フルオレニルに変更した化合物など(以下、これらの化合物を、化合物群(27)と称する。)があげられる。

#### 【0072】

式[I]で示される遷移金属化合物としては、Aがジイソプロピルアミノボランジイル基である化合物があげられ、例えば、Aがジイソプロピルアミノボランジイル基であり、Cpが<sup>5</sup>-シクロペンタジエニル基であり、Mがチタン原子であり、Xが塩素原子であり、nが3である化合物としては、トリクロロ(ジイソプロピルアミノフェニルボランジイル - <sup>5</sup> - シクロペンタジエニル) チタン、トリクロロ{ジイソプロピルアミノ(2 - メチルフェニル) ボランジイル - <sup>5</sup> - シクロペンタジエニル} チタン、トリクロロ{ジイソプロピルアミノ(3 - メチルフェニル) ボランジイル - <sup>5</sup> - シクロペンタジエニル



ペンタジエニル}チタン、トリクロロ{ジイソプロピルアミノ(4-クロロフェニル)ボ  
 ランジイル - <sup>5</sup> - シクロペンタジエニル}チタン、トリクロロ{ジイソプロピルアミノ  
 (2-プロモフェニル)ボランジイル - <sup>5</sup> - シクロペンタジエニル}チタン、トリクロ  
 ロ{ジイソプロピルアミノ(3-プロモフェニル)ボランジイル - <sup>5</sup> - シクロペンタジ  
 エニル}チタン、トリクロロ{ジイソプロピルアミノ(4-プロモフェニル)ボランジ  
 イル - <sup>5</sup> - シクロペンタジエニル}チタン、トリクロロ{ジイソプロピルアミノ(2-ヨ  
 ードフェニル)ボランジイル - <sup>5</sup> - シクロペンタジエニル}チタン、トリクロロ{ジイ  
 ソプロピルアミノ(3-ヨードフェニル)ボランジイル - <sup>5</sup> - シクロペンタジエニル}
 10

チタン、トリクロロ{ジイソプロピルアミノ(4-ヨードフェニル)ボランジイル - <sup>5</sup>  
 - シクロペンタジエニル}チタン、トリクロロ{ジイソプロピルアミノ(2,4-ジフル  
 オロフェニル)ボランジイル - <sup>5</sup> - シクロペンタジエニル}チタン、トリクロロ{ジイ  
 ソプロピルアミノ(2,6-ジフルオロフェニル)ボランジイル - <sup>5</sup> - シクロペンタジ  
 エニル}チタン、トリクロロ{ジイソプロピルアミノ(2,4-ジクロロフェニル)ボラ  
 ンジイル - <sup>5</sup> - シクロペンタジエニル}チタン、トリクロロ{ジイソプロピルアミノ(
 2,6-ジクロロフェニル)ボランジイル - <sup>5</sup> - シクロペンタジエニル}チタン、トリ  
 クロロ{ジイソプロピルアミノ(2,4-ジプロモフェニル)ボランジイル - <sup>5</sup> - シク  
 ロペンタジエニル}チタン、トリクロロ{ジイソプロピルアミノ(2,6-ジプロモフェ  
 ニル)ボランジイル - <sup>5</sup> - シクロペンタジエニル}チタン、トリクロロ{ジイソプロピ  
 ルアミノ(2,4-ジヨードフェニル)ボランジイル - <sup>5</sup> - シクロペンタジエニル}チ  
 20

タン、トリクロロ{ジイソプロピルアミノ(2,6-ジヨードフェニル)ボランジイル -  
<sup>5</sup> - シクロペンタジエニル}チタン、トリクロロ{ジイソプロピルアミノ(2,4,6  
 -トリフルオロフェニル)ボランジイル - <sup>5</sup> - シクロペンタジエニル}チタン、トリク  
 ロロ{ジイソプロピルアミノ(2,4,6-トリクロロフェニル)ボランジイル - <sup>5</sup> -  
 シクロペンタジエニル}チタン、トリクロロ{ジイソプロピルアミノ(2,4,6-トリ  
 プロモフェニル)ボランジイル - <sup>5</sup> - シクロペンタジエニル}チタン、トリクロロ{ジ  
 イソプロピルアミノ(2,4,6-トリヨードフェニル)ボランジイル - <sup>5</sup> - シクロペ  
 ンタジエニル}チタン、トリクロロ{ジイソプロピルアミノ(2,3,5,6-テトラフ  
 ルオロフェニル)ボランジイル - <sup>5</sup> - シクロペンタジエニル}チタン、トリクロロ{ジ  
 イソプロピルアミノ(2,3,5,6-テトラクロロフェニル)ボランジイル - <sup>5</sup> - シ  
 クロペンタジエニル}チタン、トリクロロ{ジイソプロピルアミノ(2,3,5,6-テ  
 30

トラプロモフェニル)ボランジイル - <sup>5</sup> - シクロペンタジエニル}チタン、トリクロロ  
 {ジイソプロピルアミノ(2,3,5,6-テトラヨードフェニル)ボランジイル - <sup>5</sup>  
 - シクロペンタジエニル}チタン、トリクロロ{ジイソプロピルアミノ(ペンタフルオ  
 ロフェニル)ボランジイル - <sup>5</sup> - シクロペンタジエニル}チタン、トリクロロ{ジイソ  
 プロピルアミノ(ペンタクロロフェニル)ボランジイル - <sup>5</sup> - シクロペンタジエニル}チ  
 タン、トリクロロ{ジイソプロピルアミノ(ペンタプロモフェニル)ボランジイル - <sup>5</sup>  
 - シクロペンタジエニル}チタン、トリクロロ{(ペンタヨードフェニル)ボランジイル  
 - <sup>5</sup> - シクロペンタジエニル}チタン、トリクロロ{ジイソプロピルアミノ(2-トリ  
 フルオロメチルフェニル)ボランジイル - <sup>5</sup> - シクロペンタジエニル}チタン、トリク  
 40

ロロ{ジイソプロピルアミノ(3-トリフルオロメチルフェニル)ボランジイル - <sup>5</sup> -  
 シクロペンタジエニル}チタン、トリクロロ{ジイソプロピルアミノ(4-トリフルオ  
 ロメチルフェニル)ボランジイル - <sup>5</sup> - シクロペンタジエニル}チタン、トリクロロ[ジ  
 イソプロピルアミノ{2,4-ビス(トリフルオロメチル)フェニル}ボランジイル -  
<sup>5</sup> - シクロペンタジエニル]チタン、トリクロロ[ジイソプロピルアミノ{2,6-ビス  
 (トリフルオロメチル)フェニル}ボランジイル - <sup>5</sup> - シクロペンタジエニル]チタン  
 、トリクロロ[ジイソプロピルアミノ{2,4,6-トリス(トリフルオロメチル)フェ  
 ニル}ボランジイル - <sup>5</sup> - シクロペンタジエニル]チタン、トリクロロ{(ジイソプロ  
 50

ピルアミノ)ナフタレニルボランジイル - <sup>5</sup> - シクロペンタジエニル}チタン、トリク  
 ロロ{アントラセニル(ジイソプロピルアミノ)ボランジイル - <sup>5</sup> - シクロペンタジエ  
 ニル}チタン、トリクロロ{(ジイソプロピルアミノ)トリフェニレニルボランジイル -

<sup>5</sup>-シクロペンタジエニル}チタン、トリクロロ{(ジイソプロピルアミノ)ピレニルボランジイル - <sup>5</sup>-シクロペンタジエニル}チタン、トリクロロ{ジイソプロピルアミノ(2-ピリジル)ボランジイル - <sup>5</sup>-シクロペンタジエニル}チタン、トリクロロ{ジイソプロピルアミノ(3-ピリジル)ボランジイル - <sup>5</sup>-シクロペンタジエニル}チタン、トリクロロ{ジイソプロピルアミノ(4-ピリジル)ボランジイル - <sup>5</sup>-シクロペンタジエニル}チタン、トリクロロ{ジイソプロピルアミノ(6-メチル-2-ピリジル)ボランジイル - <sup>5</sup>-シクロペンタジエニル}チタン、トリクロロ{ジイソプロピルアミノ(2-ピラジニル)ボランジイル - <sup>5</sup>-シクロペンタジエニル}チタン、トリクロロ{ジイソプロピルアミノ(2-ピリミジニル)ボランジイル - <sup>5</sup>-シクロペンタジエニル}チタンなど(以下、これらの化合物を、化合物群(28)と称する。)が挙げられる。 10

【0073】

また、Aがジイソプロピルアミノボランジイル基であり、Cpが<sup>5</sup>-テトラメチルシクロペンタジエニル基であり、Mがチタン原子であり、Xが塩素原子であり、nが3である化合物としては、トリクロロ(ジイソプロピルアミノフェニルボランジイル - <sup>5</sup>-テトラメチルシクロペンタジエニル)チタン、トリクロロ{ジイソプロピルアミノ(2-メチルフェニル)ボランジイル - <sup>5</sup>-テトラメチルシクロペンタジエニル}チタン、トリクロロ{ジイソプロピルアミノ(3-メチルフェニル)ボランジイル - <sup>5</sup>-テトラメチルシクロペンタジエニル}チタン、トリクロロ{ジイソプロピルアミノ(4-メチルフェニル)ボランジイル - <sup>5</sup>-テトラメチルシクロペンタジエニル}チタン、トリクロロ{ジイソプロピルアミノ(2-イソプロピルフェニル)ボランジイル - <sup>5</sup>-テトラメチルシクロペンタジエニル}チタン、トリクロロ{ジイソプロピルアミノ(3-イソプロピルフェニル)ボランジイル - <sup>5</sup>-テトラメチルシクロペンタジエニル}チタン、トリクロロ{ジイソプロピルアミノ(4-イソプロピルフェニル)ボランジイル - <sup>5</sup>-テトラメチルシクロペンタジエニル}チタン、トリクロロ{ジイソプロピルアミノ(2-フェニルフェニル)ボランジイル - <sup>5</sup>-テトラメチルシクロペンタジエニル}チタン、トリクロロ{ジイソプロピルアミノ(3-フェニルフェニル)ボランジイル - <sup>5</sup>-テトラメチルシクロペンタジエニル}チタン、トリクロロ{ジイソプロピルアミノ(4-フェニルフェニル)ボランジイル - <sup>5</sup>-テトラメチルシクロペンタジエニル}チタン、トリクロロ{ジイソプロピルアミノ(2,4-ジメチルフェニル)ボランジイル - <sup>5</sup>-テトラメチルシクロペンタジエニル}チタン、トリクロロ{ジイソプロピルアミノ(2,6-ジメチルフェニル)ボランジイル - <sup>5</sup>-テトラメチルシクロペンタジエニル}チタン、トリクロロ{ジイソプロピルアミノ(2,4-ジイソプロピルフェニル)ボランジイル - <sup>5</sup>-テトラメチルシクロペンタジエニル}チタン、トリクロロ{ジイソプロピルアミノ(2,6-ジイソプロピルフェニル)ボランジイル - <sup>5</sup>-テトラメチルシクロペンタジエニル}チタン、トリクロロ{ジイソプロピルアミノ(2,4-ジ-tert-ブチルフェニル)ボランジイル - <sup>5</sup>-テトラメチルシクロペンタジエニル}チタン、トリクロロ{ジイソプロピルアミノ(2,6-ジ-tert-ブチルフェニル)ボランジイル - <sup>5</sup>-テトラメチルシクロペンタジエニル}チタン、トリクロロ{ジイソプロピルアミノ(2,4-ジフェニルフェニル)ボランジイル - <sup>5</sup>-テトラメチルシクロペンタジエニル}チタン、トリクロロ{(ジイソプロピルアミノ)2,4,6-トリメチルフェニル)ボランジイル - <sup>5</sup>-テトラメチルシクロペンタジエニル}チタン、トリクロロ{ジイソプロピルアミノ(2,4,6-トリイソプロピルフェニル)ボランジイル - <sup>5</sup>-テトラメチルシクロペンタジエニル}チタン、トリクロロ{ジイソプロピルアミノ(2,4,6-トリ-tert-ブチルフェニル)ボランジイル - <sup>5</sup>-テトラメチルシクロペンタジエニル}チタン、トリクロロ{ジイソプロピルアミノ(2,4,6-トリフェニルフェニル)ボランジイル - <sup>5</sup>-テトラメチルシクロペンタジエニル}チタン、トリクロロ{ジイソプロピルアミノ(2-メトキシフェニル)ボランジイル - <sup>5</sup>-テトラメチルシクロペンタジエニル}チタン、トリクロロ{ジイソプロピル 50



- トリプロモフェニル) ボランジイル - <sup>5</sup> - テトラメチルシクロペンタジエニル} チタン、トリクロロ {ジイソプロピルアミノ (2, 4, 6 - トリヨードフェニル) ボランジイル - <sup>5</sup> - テトラメチルシクロペンタジエニル} チタン、トリクロロ {ジイソプロピルアミノ (2, 3, 5, 6 - テトラフルオロフェニル) ボランジイル - <sup>5</sup> - テトラメチルシクロペンタジエニル} チタン、トリクロロ {ジイソプロピルアミノ (2, 3, 5, 6 - テトラクロロフェニル) ボランジイル - <sup>5</sup> - テトラメチルシクロペンタジエニル} チタン、トリクロロ {ジイソプロピルアミノ (2, 3, 5, 6 - テトラプロモフェニル) ボランジイル - <sup>5</sup> - テトラメチルシクロペンタジエニル} チタン、トリクロロ {ジイソプロピルアミノ (ペンタフルオロフェニル) ボランジイル - <sup>5</sup> - テトラメチルシクロペンタジエニル} チタン、トリクロロ {ジイソプロピルアミノ (ペンタクロロフェニル) ボランジイル - <sup>5</sup> - テトラメチルシクロペンタジエニル} チタン、トリクロロ {ジイソプロピルアミノ (ペンタプロモフェニル) ボランジイル - <sup>5</sup> - テトラメチルシクロペンタジエニル} チタン、トリクロロ { (ペンタヨードフェニル) ボランジイル - <sup>5</sup> - テトラメチルシクロペンタジエニル} チタン、トリクロロ {ジイソプロピルアミノ (2 - トリフルオロメチルフェニル) ボランジイル - <sup>5</sup> - テトラメチルシクロペンタジエニル} チタン、トリクロロ {ジイソプロピルアミノ (3 - トリフルオロメチルフェニル) ボランジイル - <sup>5</sup> - テトラメチルシクロペンタジエニル} チタン、トリクロロ {ジイソプロピルアミノ (4 - トリフルオロメチルフェニル) ボランジイル - <sup>5</sup> - テトラメチルシクロペンタジエニル} チタン、トリクロロ [ジイソプロピルアミノ {2, 4 - ビス (トリフルオロメチル) フェニル} ボランジイル - <sup>5</sup> - テトラメチルシクロペンタジエニル} チタン、トリクロロ [ジイソプロピルアミノ {2, 6 - ビス (トリフルオロメチル) フェニル} ボランジイル - <sup>5</sup> - テトラメチルシクロペンタジエニル} チタン、トリクロロ [ジイソプロピルアミノ {2, 4, 6 - トリス (トリフルオロメチル) フェニル} ボランジイル - <sup>5</sup> - テトラメチルシクロペンタジエニル} チタン、トリクロロ { (ジイソプロピルアミノ) ナフタレニルボランジイル - <sup>5</sup> - テトラメチルシクロペンタジエニル} チタン、トリクロロ {アントラセニル (ジイソプロピルアミノ) ボランジイル - <sup>5</sup> - テトラメチルシクロペンタジエニル} チタン、トリクロロ { (ジイソプロピルアミノ) トリフェニレニルボランジイル - <sup>5</sup> - テトラメチルシクロペンタジエニル} チタン、トリクロロ { (ジイソプロピルアミノ) ピレニルボランジイル - <sup>5</sup> - テトラメチルシクロペンタジエニル} チタン、トリクロロ {ジイソプロピルアミノ (2 - ピリジル) ボランジイル - <sup>5</sup> - テトラメチルシクロペンタジエニル} チタン、トリクロロ {ジイソプロピルアミノ (3 - ピリジル) ボランジイル - <sup>5</sup> - テトラメチルシクロペンタジエニル} チタン、トリクロロ {ジイソプロピルアミノ (4 - ピリジル) ボランジイル - <sup>5</sup> - テトラメチルシクロペンタジエニル} チタン、トリクロロ {ジイソプロピルアミノ (6 - メチル - 2 - ピリジル) ボランジイル - <sup>5</sup> - テトラメチルシクロペンタジエニル} チタン、トリクロロ {ジイソプロピルアミノ (2 - ピラジニル) ボランジイル - <sup>5</sup> - テトラメチルシクロペンタジエニル} チタン、トリクロロ {ジイソプロピルアミノ (2 - ピリミジニル) ボランジイル - <sup>5</sup> - テトラメチルシクロペンタジエニル} チタンなど (以下、これらの化合物を、化合物群 (29) と称する。) が挙げられる。

【0074】

また、A がジイソプロピルアミノボランジイル基であり、C<sub>p</sub> が <sup>5</sup> - メチルシクロペンタジエニル基、<sup>5</sup> - ジメチルシクロペンタジエニル基、<sup>5</sup> - トリメチルシクロペンタジエニル基、<sup>5</sup> - n - ブチルシクロペンタジエニル基、<sup>5</sup> - tert - ブチルシクロペンタジエニル基、<sup>5</sup> - フェニルシクロペンタジエニル基、<sup>5</sup> - トリメチルシリルシクロペンタジエニル基、<sup>5</sup> - tert - ブチルジメチルシリルシクロペンタジエニル基、<sup>5</sup> - インデニル基、<sup>5</sup> - テトラヒドロインデニル基又は <sup>5</sup> - フルオレニル基であり、M がチタン原子であり、X が塩素原子であり、n が 3 である化合物としては、上記化合物群 (28) で示した化合物の <sup>5</sup> - シクロペンタジエニルを、<sup>5</sup> - メチルシクロペンタジエニ

ル、<sup>5</sup>-ジメチルシクロペンタジエニル、<sup>5</sup>-トリメチルシクロペンタジエニル、<sup>5</sup>-*n*-ブチルシクロペンタジエニル、<sup>5</sup>-*tert*-ブチルシクロペンタジエニル、<sup>5</sup>-フェニルシクロペンタジエニル、<sup>5</sup>-トリメチルシリルシクロペンタジエニル、<sup>5</sup>-*tert*-ブチルジメチルシリルシクロペンタジエニル、<sup>5</sup>-インデニル、<sup>5</sup>-テトラヒドロインデニル又は<sup>5</sup>-フルオレニルに変更した化合物など(以下、これらの化合物を、化合物群(30)と称する。)があげられる。

【0075】

式[I]で示される遷移金属化合物としては、Aがオキソ基である化合物があげられ、例えば、Aがオキソ基であり、Cpが<sup>5</sup>-シクロペンタジエニル基であり、Mがチタン原子であり、Xが塩素原子であり、nが3である化合物としては、トリクロロ(フェノキシ-<sup>5</sup>-シクロペンタジエニル)チタン、トリクロロ(2-メチルフェノキシ-<sup>5</sup>-シクロペンタジエニル)チタン、トリクロロ(3-メチルフェノキシ-<sup>5</sup>-シクロペンタジエニル)チタン、トリクロロ{(4-メチルフェノキシ-<sup>5</sup>-シクロペンタジエニル)チタン、トリクロロ{(2-イソプロピルフェノキシ-<sup>5</sup>-シクロペンタジエニル)チタン、トリクロロ(3-イソプロピルフェノキシ-<sup>5</sup>-シクロペンタジエニル)チタン、トリクロロ(4-イソプロピルフェノキシ-<sup>5</sup>-シクロペンタジエニル)チタン、トリクロロ(2-フェニルフェノキシ-<sup>5</sup>-シクロペンタジエニル)チタン、トリクロロ(3-フェニルフェノキシ-<sup>5</sup>-シクロペンタジエニル)チタン、トリクロロ(4-フェニルフェノキシ-<sup>5</sup>-シクロペンタジエニル)チタン、トリクロロ(2,4-ジメチルフェノキシ-<sup>5</sup>-シクロペンタジエニル)チタン、トリクロロ(2,6-ジメチルフェノキシ-<sup>5</sup>-シクロペンタジエニル)チタン、トリクロロ(2,4-ジイソプロピルフェノキシ-<sup>5</sup>-シクロペンタジエニル)チタン、トリクロロ(2,6-ジイソプロピルフェノキシ-<sup>5</sup>-シクロペンタジエニル)チタン、トリクロロ(2,4-ジ-*tert*-ブチルフェノキシ-<sup>5</sup>-シクロペンタジエニル)チタン、トリクロロ(2,6-ジ-*tert*-ブチルフェノキシ-<sup>5</sup>-シクロペンタジエニル)チタン、トリクロロ(2,4-ジフェニルフェノキシ-<sup>5</sup>-シクロペンタジエニル)チタン、トリクロロ(2,6-ジフェニルフェノキシ-<sup>5</sup>-シクロペンタジエニル)チタン、トリクロロ(2,4,6-トリメチルフェノキシ-<sup>5</sup>-シクロペンタジエニル)チタン、トリクロロ(2,4,6-トリイソプロピルフェノキシ-<sup>5</sup>-シクロペンタジエニル)チタン、トリクロロ(2,4,6-トリ-*tert*-ブチルフェノキシ-<sup>5</sup>-シクロペンタジエニル)チタン、トリクロロ{(2,4,6-トリフェニルフェノキシ-<sup>5</sup>-シクロペンタジエニル)チタン、トリクロロ(2-メトキシフェノキシ-<sup>5</sup>-シクロペンタジエニル)チタン、トリクロロ{(3-メトキシフェノキシ-<sup>5</sup>-シクロペンタジエニル)チタン、トリクロロ(4-メトキシフェノキシ-<sup>5</sup>-シクロペンタジエニル)チタン、トリクロロ(2,4-ジメトキシフェノキシ-<sup>5</sup>-シクロペンタジエニル)チタン、トリクロロ(2,6-ジメトキシフェノキシ-<sup>5</sup>-シクロペンタジエニル)チタン、トリクロロ(2,4,6-トリメトキシフェノキシ-<sup>5</sup>-シクロペンタジエニル)チタン、トリクロロ(2-フェノキシフェノキシ-<sup>5</sup>-シクロペンタジエニル)チタン、トリクロロ(3-フェノキシフェノキシ-<sup>5</sup>-シクロペンタジエニル)チタン、トリクロロ(4-フェノキシフェノキシ-<sup>5</sup>-シクロペンタジエニル)チタン、トリクロロ(2,4-ジフェノキシフェノキシ-<sup>5</sup>-シクロペンタジエニル)チタン、トリクロロ(2,6-ジフェノキシフェノキシ-<sup>5</sup>-シクロペンタジエニル)チタン、トリクロロ(2,4,6-トリフェノキシフェノキシ-<sup>5</sup>-シクロペンタジエニル)チタン、トリクロロ(2-フルオロフェノキシ-<sup>5</sup>-シクロペンタジエニル)チタン、トリクロロ(3-フルオロフェノキシ-<sup>5</sup>-シクロペンタジエニル)チタン、トリクロロ{(4-フルオロフェノキシ-<sup>5</sup>-シクロペンタジエニル)チタン、トリクロロ(2-クロロフェノキシ-<sup>5</sup>-シクロペンタジエニル)チタン、トリクロロ(3-クロロフェノキシ-<sup>5</sup>-シクロペンタジエニル)チタン、トリクロロ(4-クロロフェノキシ-<sup>5</sup>-シクロペンタジエニル)チタン、トリクロロ(2-ブromoフェノキシ-<sup>5</sup>-シクロペンタジエニル)チタン、トリクロロ{(3-ブromoフェノキシ-<sup>5</sup>-シクロペンタジエニル)チタン、トリクロロ(

4 - プロモフェノキシ - <sup>5</sup> - シクロペンタジエニル) チタン、トリクロロ ( 2 - ヨードフェノキシ - <sup>5</sup> - シクロペンタジエニル) チタン、トリクロロ ( 3 - ヨードフェノキシ - <sup>5</sup> - シクロペンタジエニル) チタン、トリクロロ ( 4 - ヨードフェノキシ - <sup>5</sup> - シクロペンタジエニル) チタン、トリクロロ ( 2, 4 - ジフルオロフェノキシ - <sup>5</sup> - シクロペンタジエニル) チタン、トリクロロ ( 2, 6 - ジフルオロフェノキシ - <sup>5</sup> - シクロペンタジエニル) チタン、トリクロロ { ( 2, 4 - ジクロロフェノキシ - <sup>5</sup> - シクロペンタジエニル) チタン、トリクロロ ( 2, 6 - ジクロロフェノキシ - <sup>5</sup> - シクロペンタジエニル) チタン、トリクロロ ( 2, 4 - ジプロモフェノキシ - <sup>5</sup> - シクロペンタジエニル) チタン、トリクロロ ( 2, 6 - ジプロモフェノキシ - <sup>5</sup> - シクロペンタジエニル) チタン、トリクロロ ( 2, 4 - ジヨードフェノキシ - <sup>5</sup> - シクロペンタジエニル) チタン、トリクロロ ( 2, 6 - ジヨードフェノキシ - <sup>5</sup> - シクロペンタジエニル) チタン、トリクロロ ( 2, 4, 6 - トリフルオロフェノキシ - <sup>5</sup> - シクロペンタジエニル) チタン、トリクロロ { ( 2, 4, 6 - トリクロロフェノキシ - <sup>5</sup> - シクロペンタジエニル) チタン、トリクロロ ( 2, 4, 6 - トリプロモフェノキシ - <sup>5</sup> - シクロペンタジエニル) チタン、トリクロロ ( 2, 4, 6 - トリヨードフェノキシ - <sup>5</sup> - シクロペンタジエニル) チタン、トリクロロ ( 2, 3, 5, 6 - テトラフルオロフェノキシ - <sup>5</sup> - シクロペンタジエニル) チタン、トリクロロ ( 2, 3, 5, 6 - テトラクロロフェノキシ - <sup>5</sup> - シクロペンタジエニル) チタン、トリクロロ ( 2, 3, 5, 6 - テトラプロモフェノキシ - <sup>5</sup> - シクロペンタジエニル) チタン、トリクロロ ( 2, 3, 5, 6 - テトラヨードフェノキシ - <sup>5</sup> - シクロペンタジエニル) チタン、トリクロロ ( ペンタフルオロフェノキシ - <sup>5</sup> - シクロペンタジエニル) チタン、トリクロロ ( ペンタクロロフェノキシ - <sup>5</sup> - シクロペンタジエニル) チタン、トリクロロ ( ペンタプロモフェノキシ - <sup>5</sup> - シクロペンタジエニル) チタン、トリクロロ ( ペンタヨードフェノキシ - <sup>5</sup> - シクロペンタジエニル) チタン、トリクロロ ( 2 - トリフルオロメチルフェノキシ - <sup>5</sup> - シクロペンタジエニル) チタン、トリクロロ ( 3 - トリフルオロメチルフェノキシ - <sup>5</sup> - シクロペンタジエニル) チタン、トリクロロ ( 4 - トリフルオロメチルフェノキシ - <sup>5</sup> - シクロペンタジエニル) チタン、トリクロロ { 2, 4 - ビス ( トリフルオロメチル ) フェノキシ - <sup>5</sup> - シクロペンタジエニル } チタン、トリクロロ { 2, 6 - ビス ( トリフルオロメチル ) フェノキシ - <sup>5</sup> - シクロペンタジエニル } チタン、トリクロロ { 2, 4, 6 - トリス ( トリフルオロメチル ) フェノキシ - <sup>5</sup> - シクロペンタジエニル } チタン、トリクロロ ( ナフタレノキシ - <sup>5</sup> - シクロペンタジエニル) チタン、トリクロロ ( アントラセノキシ - <sup>5</sup> - シクロペンタジエニル) チタン、トリクロロ ( トリフェニレノキシ - <sup>5</sup> - シクロペンタジエニル) チタン、トリクロロ { ( ピレノキシ - <sup>5</sup> - シクロペンタジエニル) チタン、トリクロロ { ( 2 - ピリジノキシ - <sup>5</sup> - シクロペンタジエニル) チタン、トリクロロ ( 3 - ピリジノキシ - <sup>5</sup> - シクロペンタジエニル) チタン、トリクロロ ( 4 - ピリジノキシ - <sup>5</sup> - シクロペンタジエニル) チタン、トリクロロ ( 6 - メチル - 2 - ピリジノキシ - <sup>5</sup> - シクロペンタジエニル) チタン、トリクロロ ( 2 - ピラジニロキシ - <sup>5</sup> - シクロペンタジエニル) チタン、トリクロロ ( 2 - ピリミジニロキシ - <sup>5</sup> - シクロペンタジエニル) チタンなど ( 以下、これらの化合物を、化合物群 ( 31 ) と称する。 ) が挙げられる。

【 0 0 7 6 】

また、A がオキソ基であり、C p が <sup>5</sup> - テトラメチルシクロペンタジエニル基であり、M がチタン原子であり、X が塩素原子であり、n が 3 である化合物としては、トリクロロ ( フェノキシ - <sup>5</sup> - テトラメチルシクロペンタジエニル) チタン、トリクロロ ( 2 - メチルフェノキシ - <sup>5</sup> - テトラメチルシクロペンタジエニル) チタン、トリクロロ ( 3 - メチルフェノキシ - <sup>5</sup> - テトラメチルシクロペンタジエニル) チタン、トリクロロ { ( 4 - メチルフェノキシ - <sup>5</sup> - テトラメチルシクロペンタジエニル) チタン、トリクロロ { ( 2 - イソプロピルフェノキシ - <sup>5</sup> - テトラメチルシクロペンタジエニル) チタン、トリクロロ ( 3 - イソプロピルフェノキシ - <sup>5</sup> - テトラメチルシクロペンタジエニル) チタン、トリクロロ ( 4 - イソプロピルフェノキシ - <sup>5</sup> - テトラメチルシクロペンタ



)チタン、トリクロロ(2, 4 - ジョードフェノキシ - <sup>5</sup> - テトラメチルシクロペンタジエニル)チタン、トリクロロ(2, 6 - ジョードフェノキシ - <sup>5</sup> - テトラメチルシクロペンタジエニル)チタン、トリクロロ(2, 4, 6 - トリフルオロフェノキシ - <sup>5</sup> - テトラメチルシクロペンタジエニル)チタン、トリクロロ{(2, 4, 6 - トリクロロフェノキシ - <sup>5</sup> - テトラメチルシクロペンタジエニル)チタン、トリクロロ(2, 4, 6 - トリプロモフェノキシ - <sup>5</sup> - テトラメチルシクロペンタジエニル)チタン、トリクロロ(2, 4, 6 - トリヨードフェノキシ - <sup>5</sup> - テトラメチルシクロペンタジエニル)チタン、トリクロロ(2, 3, 5, 6 - テトラフルオロフェノキシ - <sup>5</sup> - テトラメチルシクロペンタジエニル)チタン、トリクロロ(2, 3, 5, 6 - テトラクロロフェノキシ - <sup>5</sup> - テトラメチルシクロペンタジエニル)チタン、トリクロロ(2, 3, 5, 6 - テトラプロモフェノキシ - <sup>5</sup> - テトラメチルシクロペンタジエニル)チタン、トリクロロ(2, 3, 5, 6 - テトラヨードフェノキシ - <sup>5</sup> - テトラメチルシクロペンタジエニル)チタン、トリクロロ(ペンタフルオロフェノキシ - <sup>5</sup> - テトラメチルシクロペンタジエニル)チタン、トリクロロ(ペンタクロロフェノキシ - <sup>5</sup> - テトラメチルシクロペンタジエニル)チタン、トリクロロ(ペンタプロモフェノキシ - <sup>5</sup> - テトラメチルシクロペンタジエニル)チタン、トリクロロ(ペンタヨードフェノキシ - <sup>5</sup> - テトラメチルシクロペンタジエニル)チタン、トリクロロ(2 - トリフルオロメチルフェノキシ - <sup>5</sup> - テトラメチルシクロペンタジエニル)チタン、トリクロロ(3 - トリフルオロメチルフェノキシ - <sup>5</sup> - テトラメチルシクロペンタジエニル)チタン、トリクロロ(4 - トリフルオロメチルフェノキシ - <sup>5</sup> - テトラメチルシクロペンタジエニル)チタン、トリクロロ{2, 4 - ビス(トリフルオロメチル)フェノキシ - <sup>5</sup> - テトラメチルシクロペンタジエニル}チタン、トリクロロ{2, 6 - ビス(トリフルオロメチル)フェノキシ - <sup>5</sup> - テトラメチルシクロペンタジエニル}チタン、トリクロロ{2, 4, 6 - トリス(トリフルオロメチル)フェノキシ - <sup>5</sup> - テトラメチルシクロペンタジエニル}チタン、トリクロロ(ナフタレノキシ - <sup>5</sup> - テトラメチルシクロペンタジエニル)チタン、トリクロロ(アントラセノキシ - <sup>5</sup> - テトラメチルシクロペンタジエニル)チタン、トリクロロ(トリフェニレノキシ - <sup>5</sup> - テトラメチルシクロペンタジエニル)チタン、トリクロロ{(ピレノキシ - <sup>5</sup> - テトラメチルシクロペンタジエニル)チタン、トリクロロ{(2 - ピリジノキシ - <sup>5</sup> - テトラメチルシクロペンタジエニル)チタン、トリクロロ(3 - ピリジノキシ - <sup>5</sup> - テトラメチルシクロペンタジエニル)チタン、トリクロロ(4 - ピリジノキシ - <sup>5</sup> - テトラメチルシクロペンタジエニル)チタン、トリクロロ(6 - メチル - 2 - ピリジノキシ - <sup>5</sup> - テトラメチルシクロペンタジエニル)チタン、トリクロロ(2 - ピラジニロキシ - <sup>5</sup> - テトラメチルシクロペンタジエニル)チタン、トリクロロ(2 - ピリミジニロキシ - <sup>5</sup> - テトラメチルシクロペンタジエニル)チタンなど(以下、これらの化合物を、化合物群(32)と称する。)が挙げられる。

【0077】

また、Aがオキソ基であり、Cpが<sup>5</sup>-メチルシクロペンタジエニル基、<sup>5</sup>-ジメチルシクロペンタジエニル基、<sup>5</sup>-トリメチルシクロペンタジエニル基、<sup>5</sup>-n-ブチルシクロペンタジエニル基、<sup>5</sup>-tert-ブチルシクロペンタジエニル基、<sup>5</sup>-フェニルシクロペンタジエニル基、<sup>5</sup>-トリメチルシリルシクロペンタジエニル基、<sup>5</sup>-tert-ブチルジメチルシリルシクロペンタジエニル基、<sup>5</sup>-インデニル基、<sup>5</sup>-テトラヒドロインデニル基又は<sup>5</sup>-フルオレニル基であり、Mがチタン原子であり、Xが塩素原子であり、nが3である化合物としては、上記化合物群(31)で示した化合物の<sup>5</sup>-シクロペンタジエニルを、<sup>5</sup>-メチルシクロペンタジエニル、<sup>5</sup>-ジメチルシクロペンタジエニル、<sup>5</sup>-トリメチルシクロペンタジエニル、<sup>5</sup>-n-ブチルシクロペンタジエニル、<sup>5</sup>-tert-ブチルシクロペンタジエニル、<sup>5</sup>-フェニルシクロペンタジエニル、<sup>5</sup>-トリメチルシリルシクロペンタジエニル、<sup>5</sup>-tert-ブチルジメチルシリルシクロペンタジエニル、<sup>5</sup>-インデニル、<sup>5</sup>-テトラヒドロインデニル又は<sup>5</sup>-フルオレニルに変更した化合物など(以下、これらの化合物を、化合物群(33)と称する。)があげられる。

10

20

30

40

50



ルオロベンジルオキシ - <sup>5</sup> - シクロペンタジエニル) チタン、トリクロロ ( 2 , 6 - ジ  
 フルオロベンジルオキシ - <sup>5</sup> - シクロペンタジエニル) チタン、トリクロロ ( 2 , 4 -  
 ジクロロベンジルオキシ - <sup>5</sup> - シクロペンタジエニル) チタン、トリクロロ ( 2 , 6 - ジ  
 クロロベンジルオキシ - <sup>5</sup> - シクロペンタジエニル) チタン、トリクロロ ( 2 , 4 - ジ  
 プロモベンジルオキシ - <sup>5</sup> - シクロペンタジエニル) チタン、トリクロロ ( 2 , 6 - ジ  
 プロモベンジルオキシ - <sup>5</sup> - シクロペンタジエニル) チタン、トリクロロ ( 2 , 4 - ジ  
 ヨードベンジルオキシ - <sup>5</sup> - シクロペンタジエニル) チタン、トリクロロ ( 2 , 6 - ジ  
 ヨードベンジルオキシ - <sup>5</sup> - シクロペンタジエニル) チタン、トリクロロ ( 2 , 4 , 6  
 - トリフルオロベンジルオキシ - <sup>5</sup> - シクロペンタジエニル) チタン、トリクロロ ( 2  
 , 4 , 6 - トリクロロベンジルオキシ - <sup>5</sup> - シクロペンタジエニル) チタン、トリクロ  
 ロ ( 2 , 4 , 6 - トリプロモベンジルオキシ - <sup>5</sup> - シクロペンタジエニル) チタン、トリ  
 クロロ ( 2 , 4 , 6 - トリヨードベンジルオキシ - <sup>5</sup> - シクロペンタジエニル) チタ  
 ン、トリクロロ ( 2 , 3 , 5 , 6 - テトラフルオロベンジルオキシ - <sup>5</sup> - シクロペンタ  
 ジエニル) チタン、トリクロロ ( 2 , 3 , 5 , 6 - テトラクロロベンジルオキシ - <sup>5</sup> -  
 シクロペンタジエニル) チタン、トリクロロ ( 2 , 3 , 5 , 6 - テトラプロモベンジルオ  
 キシ - <sup>5</sup> - シクロペンタジエニル) チタン、トリクロロ ( 2 , 3 , 5 , 6 - テトラヨ  
 ードベンジルオキシ - <sup>5</sup> - シクロペンタジエニル) チタン、トリクロロ ( ペンタフルオロ  
 ベンジルオキシ - <sup>5</sup> - シクロペンタジエニル) チタン、トリクロロ ( ペンタクロロベン  
 ジルオキシ - <sup>5</sup> - シクロペンタジエニル) チタン、トリクロロ ( ペンタプロモベンジル  
 オキシ - <sup>5</sup> - シクロペンタジエニル) チタン、トリクロロ ( ペンタヨードベンジルオキ  
 シ - <sup>5</sup> - シクロペンタジエニル) チタン、トリクロロ ( 2 - トリフルオロメチルベンジ  
 ルオキシ - <sup>5</sup> - シクロペンタジエニル) チタン、トリクロロ ( 3 - トリフルオロメチル  
 ベンジルオキシ - <sup>5</sup> - シクロペンタジエニル) チタン、トリクロロ ( 4 - トリフルオロ  
 メチルベンジルオキシ - <sup>5</sup> - シクロペンタジエニル) チタン、トリクロロ { 2 , 4 - ビ  
 ス ( トリフルオロメチル ) ベンジルオキシ - <sup>5</sup> - シクロペンタジエニル } チタン、トリ  
 クロロ { 2 , 6 - ビス ( トリフルオロメチル ) ベンジルオキシ - <sup>5</sup> - シクロペンタジエ  
 ニル } チタン、トリクロロ { 2 , 4 , 6 - トリス ( トリフルオロメチル ) ベンジルオキシ  
 - <sup>5</sup> - シクロペンタジエニル } チタン、トリクロロ ( ナフタレニルメチレンオキシ - <sup>5</sup>  
 - シクロペンタジエニル) チタン、トリクロロ ( アントラセニルメチレンオキシ - <sup>5</sup> -  
 シクロペンタジエニル) チタン、トリクロロ ( トリフェニルメチレンオキシ - <sup>5</sup> -  
 シクロペンタジエニル) チタン、トリクロロ ( ピレニルメチレンオキシ - <sup>5</sup> - シクロペ  
 ンタジエニル) チタン、トリクロロ ( 2 - ピリジルメチレンオキシ - <sup>5</sup> - シクロペンタ  
 ジエニル) チタン、トリクロロ ( 3 - ピリジルメチレンオキシ - <sup>5</sup> - シクロペンタジエ  
 ニル) チタン、トリクロロ ( 4 - ピリジルメチレンオキシ - <sup>5</sup> - シクロペンタジエニル  
 ) チタン、トリクロロ { ( 6 - メチル - 2 - ピリジル ) メチレンオキシ - <sup>5</sup> - シクロペ  
 ンタジエニル } チタン、トリクロロ ( 2 - ピラジニルメチレンオキシ - <sup>5</sup> - シクロペ  
 ンタジエニル) チタン、トリクロロ ( 2 - ピリミジニルメチレンオキシ - <sup>5</sup> - シクロペ  
 ンタジエニル) チタンなど ( 以下、これらの化合物を、化合物群 ( 34 ) と称する。 ) が挙  
 げられる。

【 0 0 7 9 】

また、A がメチレンオキシ基であり、C p が <sup>5</sup> - テトラメチルシクロペンタジエニル  
 基であり、M がチタン原子であり、X が塩素原子であり、n が 3 である化合物としては、  
 トリクロロ ( ベンジルオキシ - <sup>5</sup> - テトラメチルシクロペンタジエニル) チタン、トリ  
 クロロ ( 2 - メチルベンジルオキシ - <sup>5</sup> - テトラメチルシクロペンタジエニル) チタン  
 、トリクロロ ( 3 - メチルベンジルオキシ - <sup>5</sup> - テトラメチルシクロペンタジエニル)  
 チタン、トリクロロ ( 4 - メチルベンジルオキシ - <sup>5</sup> - テトラメチルシクロペンタジエ  
 ニル) チタン、トリクロロ ( 2 - イソプロピルベンジルオキシ - <sup>5</sup> - テトラメチルシク  
 ロペンタジエニル) チタン、トリクロロ ( 3 - イソプロピルベンジルオキシ - <sup>5</sup> - テト  
 ラメチルシクロペンタジエニル) チタン、トリクロロ ( 4 - イソプロピルベンジルオキシ  
 - <sup>5</sup> - テトラメチルシクロペンタジエニル) チタン、トリクロロ ( 2 - フェニルベンジ



ラメチルシクロペンタジエニル)チタン、トリクロロ(2, 6 - ジブromoベンジルオキシ - <sup>5</sup> - テトラメチルシクロペンタジエニル)チタン、トリクロロ(2, 4 - ジョードベンジルオキシ - <sup>5</sup> - テトラメチルシクロペンタジエニル)チタン、トリクロロ(2, 6 - ジョードベンジルオキシ - <sup>5</sup> - テトラメチルシクロペンタジエニル)チタン、トリクロロ(2, 4, 6 - トリフルオロベンジルオキシ - <sup>5</sup> - テトラメチルシクロペンタジエニル)チタン、トリクロロ(2, 4, 6 - トリクロロベンジルオキシ - <sup>5</sup> - テトラメチルシクロペンタジエニル)チタン、トリクロロ(2, 4, 6 - トリブromoベンジルオキシ - <sup>5</sup> - テトラメチルシクロペンタジエニル)チタン、トリクロロ(2, 4, 6 - トリョードベンジルオキシ - <sup>5</sup> - テトラメチルシクロペンタジエニル)チタン、トリクロロ(2, 3, 5, 6 - テトラフルオロベンジルオキシ - <sup>5</sup> - テトラメチルシクロペンタジエニル)チタン、トリクロロ(2, 3, 5, 6 - テトラクロロベンジルオキシ - <sup>5</sup> - テトラメチルシクロペンタジエニル)チタン、トリクロロ(2, 3, 5, 6 - テトラブromoベンジルオキシ - <sup>5</sup> - テトラメチルシクロペンタジエニル)チタン、トリクロロ(2, 3, 5, 6 - テトラョードベンジルオキシ - <sup>5</sup> - テトラメチルシクロペンタジエニル)チタン、トリクロロ(ペンタフルオロベンジルオキシ - <sup>5</sup> - テトラメチルシクロペンタジエニル)チタン、トリクロロ(ペンタクロロベンジルオキシ - <sup>5</sup> - テトラメチルシクロペンタジエニル)チタン、トリクロロ(ペンタブromoベンジルオキシ - <sup>5</sup> - テトラメチルシクロペンタジエニル)チタン、トリクロロ(ペンタョードベンジルオキシ - <sup>5</sup> - テトラメチルシクロペンタジエニル)チタン、トリクロロ(2 - トリフルオロメチルベンジルオキシ - <sup>5</sup> - テトラメチルシクロペンタジエニル)チタン、トリクロロ(3 - トリフルオロメチルベンジルオキシ - <sup>5</sup> - テトラメチルシクロペンタジエニル)チタン、トリクロロ(4 - トリフルオロメチルベンジルオキシ - <sup>5</sup> - テトラメチルシクロペンタジエニル)チタン、トリクロロ{2, 4 - ビス(トリフルオロメチル)ベンジルオキシ - <sup>5</sup> - テトラメチルシクロペンタジエニル}チタン、トリクロロ{2, 6 - ビス(トリフルオロメチル)ベンジルオキシ - <sup>5</sup> - テトラメチルシクロペンタジエニル}チタン、トリクロロ{2, 4, 6 - トリス(トリフルオロメチル)ベンジルオキシ - <sup>5</sup> - テトラメチルシクロペンタジエニル}チタン、トリクロロ(ナフタレニルメチレンオキシ - <sup>5</sup> - テトラメチルシクロペンタジエニル)チタン、トリクロロ(アントラセニルメチレンオキシ - <sup>5</sup> - テトラメチルシクロペンタジエニル)チタン、トリクロロ(トリフェニルメチレンオキシ - <sup>5</sup> - テトラメチルシクロペンタジエニル)チタン、トリクロロ(ピレニルメチレンオキシ - <sup>5</sup> - テトラメチルシクロペンタジエニル)チタン、トリクロロ(2 - ピリジルメチレンオキシ - <sup>5</sup> - テトラメチルシクロペンタジエニル)チタン、トリクロロ(3 - ピリジルメチレンオキシ - <sup>5</sup> - テトラメチルシクロペンタジエニル)チタン、トリクロロ(4 - ピリジルメチレンオキシ - <sup>5</sup> - テトラメチルシクロペンタジエニル)チタン、トリクロロ{(6 - メチル - 2 - ピリジル)メチレンオキシ - <sup>5</sup> - テトラメチルシクロペンタジエニル}チタン、トリクロロ(2 - ピラジニルメチレンオキシ - <sup>5</sup> - テトラメチルシクロペンタジエニル)チタン、トリクロロ(2 - ピリミジニルメチレンオキシ - <sup>5</sup> - テトラメチルシクロペンタジエニル)チタンなど(以下、これらの化合物を、化合物群(35)と称する。)が挙げられる。

【0080】

また、Aがメチレンオキシ基であり、Cpが<sup>5</sup>-メチルシクロペンタジエニル基、<sup>5</sup>-ジメチルシクロペンタジエニル基、<sup>5</sup>-トリメチルシクロペンタジエニル基、<sup>5</sup>-n-ブチルシクロペンタジエニル基、<sup>5</sup>-tert-ブチルシクロペンタジエニル基、<sup>5</sup>-フェニルシクロペンタジエニル基、<sup>5</sup>-トリメチルシリルシクロペンタジエニル基、<sup>5</sup>-tert-ブチルジメチルシリルシクロペンタジエニル基、<sup>5</sup>-インデニル基、<sup>5</sup>-テトラヒドロインデニル基又は<sup>5</sup>-フルオレニル基であり、Mがチタン原子であり、Xが塩素原子であり、nが3である化合物としては、上記化合物群(34)で示した化合物の<sup>5</sup>-シクロペンタジエニルを、<sup>5</sup>-メチルシクロペンタジエニル、<sup>5</sup>-ジメチルシクロペンタジエニル、<sup>5</sup>-トリメチルシクロペンタジエニル、<sup>5</sup>-n-ブチルシクロペンタジエニル、<sup>5</sup>-tert-ブチルシクロペンタジエニル、<sup>5</sup>-フェニルシクロペ

ンタジエニル、<sup>5</sup>-トリメチルシリルシクロペンタジエニル、<sup>5</sup>-tert-ブチルジメチルシリルシクロペンタジエニル、<sup>5</sup>-インデニル、<sup>5</sup>-テトラヒドロインデニル又は<sup>5</sup>-フルオレニルに変更した化合物など(以下、これらの化合物を、化合物群(36))と称する。)があげられる。

【0081】

式[I]で示される遷移金属化合物としては、Aがチオ基である化合物があげられ、例えば、Aがチオ基であり、Cpが<sup>5</sup>-シクロペンタジエニル基であり、Mがチタン原子であり、Xが塩素原子であり、nが3である化合物としては、トリクロロ(チオフェノキシ-<sup>5</sup>-シクロペンタジエニル)チタン、トリクロロ(2-メチルチオフェノキシ-<sup>5</sup>-シクロペンタジエニル)チタン、トリクロロ(3-メチルチオフェノキシ-<sup>5</sup>-シクロペンタジエニル)チタン、トリクロロ(4-メチルチオフェノキシ-<sup>5</sup>-シクロペンタジエニル)チタン、トリクロロ(2-イソプロピルチオフェノキシ-<sup>5</sup>-シクロペンタジエニル)チタン、トリクロロ(3-イソプロピルチオフェノキシ-<sup>5</sup>-シクロペンタジエニル)チタン、トリクロロ(4-イソプロピルチオフェノキシ-<sup>5</sup>-シクロペンタジエニル)チタン、トリクロロ(2-フェニルチオフェノキシ-<sup>5</sup>-シクロペンタジエニル)チタン、トリクロロ(3-フェニルチオフェノキシ-<sup>5</sup>-シクロペンタジエニル)チタン、トリクロロ(4-フェニルチオフェノキシ-<sup>5</sup>-シクロペンタジエニル)チタン、トリクロロ(2,4-ジメチルチオフェノキシ-<sup>5</sup>-シクロペンタジエニル)チタン、トリクロロ(2,6-ジメチルチオフェノキシ-<sup>5</sup>-シクロペンタジエニル)チタン、トリクロロ(2,4-ジイソプロピルチオフェノキシ-<sup>5</sup>-シクロペンタジエニル)チタン、トリクロロ(2,6-ジイソプロピルチオフェノキシ-<sup>5</sup>-シクロペンタジエニル)チタン、トリクロロ(2,4-ジ-tert-ブチルチオフェノキシ-<sup>5</sup>-シクロペンタジエニル)チタン、トリクロロ(2,6-ジ-tert-ブチルチオフェノキシ-<sup>5</sup>-シクロペンタジエニル)チタン、トリクロロ(2,4-ジフェニルチオフェノキシ-<sup>5</sup>-シクロペンタジエニル)チタン、トリクロロ(2,6-ジフェニルチオフェノキシ-<sup>5</sup>-シクロペンタジエニル)チタン、トリクロロ(2,4,6-トリメチルチオフェノキシ-<sup>5</sup>-シクロペンタジエニル)チタン、トリクロロ(2,4,6-トリイソプロピルチオフェノキシ-<sup>5</sup>-シクロペンタジエニル)チタン、トリクロロ(2,4,6-トリ-tert-ブチルチオフェノキシ-<sup>5</sup>-シクロペンタジエニル)チタン、トリクロロ(2,4,6-トリフェニルチオフェノキシ-<sup>5</sup>-シクロペンタジエニル)チタン、トリクロロ(2-メトキシチオフェノキシ-<sup>5</sup>-シクロペンタジエニル)チタン、トリクロロ(3-メトキシチオフェノキシ-<sup>5</sup>-シクロペンタジエニル)チタン、トリクロロ(4-メトキシチオフェノキシ-<sup>5</sup>-シクロペンタジエニル)チタン、トリクロロ(2,4-ジメトキシチオフェノキシ-<sup>5</sup>-シクロペンタジエニル)チタン、トリクロロ(2,6-ジメトキシチオフェノキシ-<sup>5</sup>-シクロペンタジエニル)チタン、トリクロロ(2,4,6-トリメトキシチオフェノキシ-<sup>5</sup>-シクロペンタジエニル)チタン、トリクロロ(2-フェノキシチオフェノキシ-<sup>5</sup>-シクロペンタジエニル)チタン、トリクロロ(3-フェノキシチオフェノキシ-<sup>5</sup>-シクロペンタジエニル)チタン、トリクロロ(4-フェノキシチオフェノキシ-<sup>5</sup>-シクロペンタジエニル)チタン、トリクロロ(2,4-ジフェノキシチオフェノキシ-<sup>5</sup>-シクロペンタジエニル)チタン、トリクロロ(2,6-ジフェノキシチオフェノキシ-<sup>5</sup>-シクロペンタジエニル)チタン、トリクロロ(2,4,6-トリフェノキシチオフェノキシ-<sup>5</sup>-シクロペンタジエニル)チタン、トリクロロ(2-フルオロチオフェノキシ-<sup>5</sup>-シクロペンタジエニル)チタン、トリクロロ(3-フルオロチオフェノキシ-<sup>5</sup>-シクロペンタジエニル)チタン、トリクロロ(4-フルオロチオフェノキシ-<sup>5</sup>-シクロペンタジエニル)チタン、トリクロロ(2-クロロチオフェノキシ-<sup>5</sup>-シクロペンタジエニル)チタン、トリクロロ(3-クロロチオフェノキシ-<sup>5</sup>-シクロペンタジエニル)チタン、トリクロロ(4-クロロチオフェノキシ-<sup>5</sup>-シクロペンタジエニル)チタン、トリクロロ(2-ブromoチオフェノキシ-<sup>5</sup>-シクロペンタジエニル)チタン、トリクロロ(3-ブromoチオフェノキシ-<sup>5</sup>-シクロペンタジエニル)チタン、トリクロロ(4-ブ

10

20

30

40

50

ロモチオフェノキシ - <sup>5</sup> - シクロペンタジエニル) チタン、トリクロロ ( 2 - ヨードチ  
 オフェノキシ - <sup>5</sup> - シクロペンタジエニル) チタン、トリクロロ ( 3 - ヨードチオフェ  
 ノキシ - <sup>5</sup> - シクロペンタジエニル) チタン、トリクロロ ( 4 - ヨードチオフェノキシ  
 - <sup>5</sup> - シクロペンタジエニル) チタン、トリクロロ ( 2 , 4 - ジフルオロチオフェノキ  
 シ - <sup>5</sup> - シクロペンタジエニル) チタン、トリクロロ ( 2 , 6 - ジフルオロチオフェノ  
 キシ - <sup>5</sup> - シクロペンタジエニル) チタン、トリクロロ ( 2 , 4 - ジクロロチオフェノ  
 キシ - <sup>5</sup> - シクロペンタジエニル) チタン、トリクロロ ( 2 , 6 - ジクロロチオフェノキ  
 シ - <sup>5</sup> - シクロペンタジエニル) チタン、トリクロロ ( 2 , 4 - ジブロモチオフェノキ  
 シ - <sup>5</sup> - シクロペンタジエニル) チタン、トリクロロ ( 2 , 6 - ジブロモチオフェノキ  
 シ - <sup>5</sup> - シクロペンタジエニル) チタン、トリクロロ ( 2 , 4 - ジヨードチオフェノキ  
 シ - <sup>5</sup> - シクロペンタジエニル) チタン、トリクロロ ( 2 , 6 - ジヨードチオフェノキ  
 シ - <sup>5</sup> - シクロペンタジエニル) チタン、トリクロロ ( 2 , 4 , 6 - トリフルオロチオ  
 フェノキシ - <sup>5</sup> - シクロペンタジエニル) チタン、トリクロロ ( 2 , 4 , 6 - トリクロ  
 ロチオフェノキシ - <sup>5</sup> - シクロペンタジエニル) チタン、トリクロロ ( 2 , 4 , 6 - ト  
 リブロモチオフェノキシ - <sup>5</sup> - シクロペンタジエニル) チタン、トリクロロ ( 2 , 4 ,  
 6 - トリヨードチオフェノキシ - <sup>5</sup> - シクロペンタジエニル) チタン、トリクロロ ( 2  
 , 3 , 5 , 6 - テトラフルオロチオフェノキシ - <sup>5</sup> - シクロペンタジエニル) チタン、  
 トリクロロ ( 2 , 3 , 5 , 6 - テトラクロロチオフェノキシ - <sup>5</sup> - シクロペンタジエニ  
 ル) チタン、トリクロロ ( 2 , 3 , 5 , 6 - テトラブロモチオフェノキシ - <sup>5</sup> - シクロ  
 ペンタジエニル) チタン、トリクロロ ( 2 , 3 , 5 , 6 - テトラヨードチオフェノキシ -  
<sup>5</sup> - シクロペンタジエニル) チタン、トリクロロ ( ペンタフルオロチオフェノキシ - <sup>5</sup>  
 - シクロペンタジエニル) チタン、トリクロロ ( ペンタクロロチオフェノキシ - <sup>5</sup> - シ  
 クロペンタジエニル) チタン、トリクロロ ( ペンタブロモチオフェノキシ - <sup>5</sup> - シクロ  
 ペンタジエニル) チタン、トリクロロ ( ペンタヨードチオフェノキシ - <sup>5</sup> - シクロペン  
 タジエニル) チタン、トリクロロ ( 2 - トリフルオロメチルチオフェノキシ - <sup>5</sup> - シク  
 ロペンタジエニル) チタン、トリクロロ ( 3 - トリフルオロメチルチオフェノキシ - <sup>5</sup>  
 - シクロペンタジエニル) チタン、トリクロロ ( 4 - トリフルオロメチルチオフェノキシ  
 - <sup>5</sup> - シクロペンタジエニル) チタン、トリクロロ { 2 , 4 - ビス ( トリフルオロメチ  
 ル) チオフェノキシ - <sup>5</sup> - シクロペンタジエニル } チタン、トリクロロ { 2 , 6 - ビス  
 ( トリフルオロメチル) チオフェノキシ - <sup>5</sup> - シクロペンタジエニル } チタン、トリク  
 ロロ { 2 , 4 , 6 - トリス ( トリフルオロメチル) チオフェノキシ - <sup>5</sup> - シクロペンタ  
 ジエニル } チタン、トリクロロ ( ナフタレニルチオフェノキシ - <sup>5</sup> - シクロペンタジエ  
 ニル) チタン、トリクロロ ( アントラセニルチオフェノキシ - <sup>5</sup> - シクロペンタジエニ  
 ル) チタン、トリクロロ ( トリフェニレニルチオフェノキシ - <sup>5</sup> - シクロペンタジエニ  
 ル) チタン、トリクロロ ( ピレニルチオフェノキシ - <sup>5</sup> - シクロペンタジエニル) チタ  
 ン、トリクロロ ( 2 - ピリジルチオフェノキシ - <sup>5</sup> - シクロペンタジエニル) チタン、  
 トリクロロ ( 3 - ピリジルチオフェノキシ - <sup>5</sup> - シクロペンタジエニル) チタン、トリ  
 クロロ ( 4 - ピリジルチオフェノキシ - <sup>5</sup> - シクロペンタジエニル) チタン、トリク  
 ロロ { ( 6 - メチル - 2 - ピリジル) チオフェノキシ - <sup>5</sup> - シクロペンタジエニル } チタ  
 ン、トリクロロ ( 2 - ピラジニルチオフェノキシ - <sup>5</sup> - シクロペンタジエニル) チタン  
 、トリクロロ ( 2 - ピリミジニルチオフェノキシ - <sup>5</sup> - シクロペンタジエニル) チタン  
 など ( 以下、これらの化合物を、化合物群 ( 37 ) と称する。 ) が挙げられる。

【 0 0 8 2 】

また、A がチオ基であり、C p が <sup>5</sup> - テトラメチルシクロペンタジエニル基であり、  
 M がチタン原子であり、X が塩素原子であり、n が 3 である化合物としては、トリクロロ  
 ( チオフェノキシ - <sup>5</sup> - テトラメチルシクロペンタジエニル) チタン、トリクロロ ( 2  
 - メチルチオフェノキシ - <sup>5</sup> - テトラメチルシクロペンタジエニル) チタン、トリクロ  
 ロ ( 3 - メチルチオフェノキシ - <sup>5</sup> - テトラメチルシクロペンタジエニル) チタン、ト  
 リクロロ ( 4 - メチルチオフェノキシ - <sup>5</sup> - テトラメチルシクロペンタジエニル) チタ  
 ン、トリクロロ ( 2 - イソプロピルチオフェノキシ - <sup>5</sup> - テトラメチルシクロペンタジ

10

20

30

40

50



ロロ ( 2 , 4 - ジクロロチオフェノキシ - <sup>5</sup> - テトラメチルシクロペンタジエニルチ  
 タン、トリクロロ ( 2 , 6 - ジクロロチオフェノキシ - <sup>5</sup> - テトラメチルシクロペンタジ  
 エニル ) チタン、トリクロロ ( 2 , 4 - ジブromoチオフェノキシ - <sup>5</sup> - テトラメチルシ  
 クロペンタジエニル ) チタン、トリクロロ ( 2 , 6 - ジブromoチオフェノキシ - <sup>5</sup> - テ  
 トラメチルシクロペンタジエニル ) チタン、トリクロロ ( 2 , 4 - ジヨードチオフェノキ  
 シ - <sup>5</sup> - テトラメチルシクロペンタジエニル ) チタン、トリクロロ ( 2 , 6 - ジヨード  
 チオフェノキシ - <sup>5</sup> - テトラメチルシクロペンタジエニル ) チタン、トリクロロ ( 2 ,  
 4 , 6 - トリフルオロチオフェノキシ - <sup>5</sup> - テトラメチルシクロペンタジエニル ) チタ  
 ン、トリクロロ ( 2 , 4 , 6 - トリクロロチオフェノキシ - <sup>5</sup> - テトラメチルシクロペ  
 ンタジエニル ) チタン、トリクロロ ( 2 , 4 , 6 - トリブromoチオフェノキシ - <sup>5</sup> - テ  
 トラメチルシクロペンタジエニル ) チタン、トリクロロ ( 2 , 4 , 6 - トリヨードチオフ  
 ェノキシ - <sup>5</sup> - テトラメチルシクロペンタジエニル ) チタン、トリクロロ ( 2 , 3 , 5  
 , 6 - テトラフルオロチオフェノキシ - <sup>5</sup> - テトラメチルシクロペンタジエニル ) チタ  
 ン、トリクロロ ( 2 , 3 , 5 , 6 - テトラクロロチオフェノキシ - <sup>5</sup> - テトラメチルシ  
 クロペンタジエニル ) チタン、トリクロロ ( 2 , 3 , 5 , 6 - テトラブromoチオフェノキ  
 シ - <sup>5</sup> - テトラメチルシクロペンタジエニル ) チタン、トリクロロ ( 2 , 3 , 5 , 6 -  
 テトラヨードチオフェノキシ - <sup>5</sup> - テトラメチルシクロペンタジエニル ) チタン、トリ  
 クロロ ( ペンタフルオロチオフェノキシ - <sup>5</sup> - テトラメチルシクロペンタジエニル ) チ  
 タン、トリクロロ ( ペンタクロロチオフェノキシ - <sup>5</sup> - テトラメチルシクロペンタジエ  
 ニル ) チタン、トリクロロ ( ペンタブromoチオフェノキシ - <sup>5</sup> - テトラメチルシクロペ  
 ンタジエニル ) チタン、トリクロロ ( ペンタヨードチオフェノキシ - <sup>5</sup> - テトラメチル  
 シクロペンタジエニル ) チタン、トリクロロ ( 2 - トリフルオロメチルチオフェノキシ -  
<sup>5</sup> - テトラメチルシクロペンタジエニル ) チタン、トリクロロ ( 3 - トリフルオロメチ  
 ルチオフェノキシ - <sup>5</sup> - テトラメチルシクロペンタジエニル ) チタン、トリクロロ ( 4  
 - トリフルオロメチルチオフェノキシ - <sup>5</sup> - テトラメチルシクロペンタジエニル ) チタ  
 ン、トリクロロ { 2 , 4 - ビス ( トリフルオロメチル ) チオフェノキシ - <sup>5</sup> - テトラメ  
 チルシクロペンタジエニル } チタン、トリクロロ { 2 , 6 - ビス ( トリフルオロメチル )  
 チオフェノキシ - <sup>5</sup> - テトラメチルシクロペンタジエニル } チタン、トリクロロ { 2 ,  
 4 , 6 - トリス ( トリフルオロメチル ) チオフェノキシ - <sup>5</sup> - テトラメチルシクロペ  
 ンタジエニル } チタン、トリクロロ ( ナフタレニルチオフェノキシ - <sup>5</sup> - テトラメチルシ  
 クロペンタジエニル ) チタン、トリクロロ ( アントラセニルチオフェノキシ - <sup>5</sup> - テト  
 ラメチルシクロペンタジエニル ) チタン、トリクロロ ( トリフェニレニルチオフェノキシ  
 - <sup>5</sup> - テトラメチルシクロペンタジエニル ) チタン、トリクロロ ( ピレニルチオフェノ  
 キシ - <sup>5</sup> - テトラメチルシクロペンタジエニル ) チタン、トリクロロ ( 2 - ピリジルチ  
 オフェノキシ - <sup>5</sup> - テトラメチルシクロペンタジエニル ) チタン、トリクロロ ( 3 - ピ  
 リジルチオフェノキシ - <sup>5</sup> - テトラメチルシクロペンタジエニル ) チタン、トリクロロ  
 ( 4 - ピリジルチオフェノキシ - <sup>5</sup> - テトラメチルシクロペンタジエニル ) チタン、ト  
 リクロロ { ( 6 - メチル - 2 - ピリジル ) チオフェノキシ - <sup>5</sup> - テトラメチルシクロペ  
 ンタジエニル } チタン、トリクロロ ( 2 - ピラジニルチオフェノキシ - <sup>5</sup> - テトラメチ  
 ルシクロペンタジエニル ) チタン、トリクロロ ( 2 - ピリミジニルチオフェノキシ - <sup>5</sup>  
 - テトラメチルシクロペンタジエニル ) チタンなど ( 以下、これらの化合物を、化合物群  
 ( 38 ) と称する。 ) が挙げられる。

【 0 0 8 3 】

また、A がチオ基であり、C p が <sup>5</sup> - メチルシクロペンタジエニル基、<sup>5</sup> - ジメチル  
 シクロペンタジエニル基、<sup>5</sup> - トリメチルシクロペンタジエニル基、<sup>5</sup> - n - ブチルシ  
 クロペンタジエニル基、<sup>5</sup> - t e r t - ブチルシクロペンタジエニル基、<sup>5</sup> - フェニル  
 シクロペンタジエニル基、<sup>5</sup> - トリメチルシリルシクロペンタジエニル基、<sup>5</sup> - t e r  
 t - ブチルジメチルシリルシクロペンタジエニル基、<sup>5</sup> - インデニル基、<sup>5</sup> - テトラヒ  
 ドロインデニル基又は <sup>5</sup> - フルオレニル基であり、M がチタン原子であり、X が塩素原  
 子であり、n が 3 である化合物としては、上記化合物群 ( 37 ) で示した化合物の <sup>5</sup> -

シクロペンタジエニルを、<sup>5</sup>-メチルシクロペンタジエニル、<sup>5</sup>-ジメチルシクロペンタジエニル、<sup>5</sup>-トリメチルシクロペンタジエニル、<sup>5</sup>-n-ブチルシクロペンタジエニル、<sup>5</sup>-tert-ブチルシクロペンタジエニル、<sup>5</sup>-フェニルシクロペンタジエニル、<sup>5</sup>-トリメチルシリルシクロペンタジエニル、<sup>5</sup>-tert-ブチルジメチルシリルシクロペンタジエニル、<sup>5</sup>-インデニル、<sup>5</sup>-テトラヒドロインデニル又は<sup>5</sup>-フルオレニルに変更した化合物など(以下、これらの化合物を、化合物群(39)と称する。)があげられる。

## 【0084】

式[I]で示される遷移金属化合物としては、Mがジルコニウム原子あるいはハフニウム原子である化合物があげられ、具体的には、上記化合物群(1)~(39)のチタニウムをジルコニウムあるいはハフニウムに変更した化合物など(以下、これらの化合物を、化合物群(40)と称する。)があげられる。

10

## 【0085】

式[I]で示される遷移金属化合物としては、上記化合物群(1)~(40)のトリクロロをトリプロモ、トリヨード、トリメチル、トリベンジル、トリメトキシ、トリ-n-ブトキシ、トリイソプロポキシ、トリフェノキシ、トリス(N,N-ジメチルアミノ)、トリス(N,N-ジエチルアミノ)、ジプロモ、ジヨード、ジメチル、ジベンジル、ジメトキシ、ジ-n-ブトキシ、ジイソプロポキシ、ジフェノキシ、ビス(N,N-ジメチルアミノ)、ビス(N,N-ジエチルアミノ)、1,3-ブタジエン、2,4-ヘキサジエン、1,4-ジフェニル-1,3-ブタジエン、2-ブテン-1,4-ジイル、3-ヘキセン-2,5-ジイル又は1,4-ジフェニル-2-ブテン-1,4-ジイルに変更した化合物など(以下、これらの化合物を、化合物群(41)と称する。)があげられる。

20

## 【0086】

本発明において用いる一般式[I]で表される遷移金属化合物の合成方法は特に限定されるものではないが、例えばMacromol. Rapid Commun., Vol.22, p339-344(2001)に記載の方法により製造される。

## 【0087】

本発明の成分(ii)は、下記式[II]で表される有機アルミニウム化合物である。



E<sup>1</sup>:炭化水素基。ただし、夫々のE<sup>1</sup>は互いに同じであってもよく異なってもよい

30

## 【0088】

式[II]のE<sup>1</sup>の炭化水素基としては、アルキル基、アラルキル基、アリール基などを挙げることができ、アルキル基、アラルキル基、アリール基の具体例としては、成分(i)のXにおいて例示したアルキル基、アラルキル基、アリール基などを挙げることができる。好ましくは炭素原子数1~8の炭化水素基であり、より好ましくは炭素原子数1~8のアルキル基である。

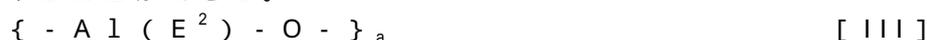
## 【0089】

成分(ii)の具体例としては、トリメチルアルミニウム、トリエチルアルミニウム、トリプロピルアルミニウム、トリイソブチルアルミニウム、トリヘキシルアルミニウム、トリオクチルアルミニウム等をあげることができ、これらは1種又は2種以上組み合わせて使用される。成分(ii)として好ましくは、トリメチルアルミニウムである。

40

## 【0090】

本発明の成分(iii)で用いられるアルミノキサン化合物としては、例えば、下記式[III]で表される環状のアルミノキサン、又は下記式[IV]で表される線状のアルミノキサンをあげることができる。



## 【0091】

式[III]において、aは2以上の整数であり、好ましくは2~40の整数である。E<sup>2</sup>

50

は炭化水素基であり、メチル基、エチル基、ノルマルプロピル基、イソプロピル基、ノルマルブチル基、イソブチル基、ノルマルペンチル基、ネオペンチル基などのアルキル基を例示することができ、好ましくは、メチル基又はイソブチル基である。また、夫々の E<sup>2</sup> は互いに同じであってもよく異なってもよい。

【0092】

式 [IV] において、b は 1 以上の整数であり、好ましくは 1 ~ 40 の整数である。E<sup>3</sup> は炭化水素基であり、メチル基、エチル基、ノルマルプロピル基、イソプロピル基、ノルマルブチル基、イソブチル基、ノルマルペンチル基、ネオペンチル基などのアルキル基を例示することができ、好ましくは、メチル基又はイソブチル基である。また、夫々の E<sup>3</sup> は互いに同じであってもよく異なってもよい。

10

【0093】

式 [III] で表される環状のアルミノキサン及び式 [IV] で表される線状のアルミノキサンの製造方法としては、例えば、1 種もしくは複数種のトリアルキルアルミニウム (トリメチルアルミニウムなど) を適当な有機溶剤 (トルエン、脂肪族炭化水素など) に溶かした溶液と水とを接触させて製造する方法、結晶水を含んでいる金属塩 (硫酸銅水和物など) とトリアルキルアルミニウム (トリメチルアルミニウムなど) とを接触させて製造する方法が例示できる。

【0094】

本発明のオレフィン三量化触媒の第一の態様は、上記成分 (i)、成分 (ii) 及び成分 (iii) を接触させてなる接触処理物である。

20

【0095】

成分 (i)、成分 (ii) 及び成分 (iii) を接触させる方法としては、成分 (i) と成分 (ii) と成分 (iii) とが接触し、オレフィン三量化触媒が形成されるならどのような手段によってもよく、あらかじめ溶媒で希釈してもしくは希釈せずに成分 (i) と成分 (ii) と成分 (iii) とを混合して接触させる方法や、別々に反応槽に供給して反応槽の中で接触させる方法を取ることができる。ここで、成分 (i) ~ 成分 (iii) は、それぞれ複数種類の化合物を組み合わせる場合があるが、それらのうちの一部をあらかじめ混合して使用してもよいし、別々に反応槽に供給して使用してもよい。

【0096】

成分 (i) と成分 (ii) との接触処理量割合としては、[成分 (ii) のモル数] / [成分 (i) に含まれる第 4 族金属原子のモル数] が、好ましくは 0.1 ~ 10000 であり、より好ましくは 0.1 ~ 5000 であり、更に好ましくは 5 ~ 1000 であり、特に好ましくは 5 ~ 500 である。また、成分 (i) と成分 (iii) との接触処理量割合としては、[成分 (iii) に含まれる Al 原子モル数] / [成分 (i) に含まれる第 4 族金属原子のモル数] が、好ましくは 0.1 ~ 10000 であり、より好ましくは 0.4 ~ 5000 であり、更に好ましくは 5 ~ 2000 であり、特に好ましくは 20 ~ 2000 である。

30

【0097】

成分 (ii) と成分 (iii) の接触処理量割合としては、成分 (ii) と成分 (iii) との混合物の<sup>27</sup>A1 - 核磁気共鳴スペクトルにおいて、155 ppm 付近に現れるピークのピーク面積と 60 ppm 付近に現れるピークのピーク面積との比が 0.3 以上となる接触処理量割合であることが好ましく、155 ppm 付近に現れるピークのピーク面積と 60 ppm 付近に現れるピークのピーク面積との比が 0.7 以上となる接触処理量割合であることがより好ましい。

40

【0098】

<sup>27</sup>A1 - 核磁気共鳴スペクトルにおいて、155 ppm 付近に現れるピークのピーク面積 (I<sub>1</sub>) は、155 ppm 付近に現れるピークと 60 ppm 付近に現れるピークとの間にあるスペクトル曲線上の極小点を点 P とし、点 P からベースラインに垂直に下ろした直線とベースラインとの交点を点 Q とし、155 ppm 付近に現れるピークを含む曲線で点 P よりも高磁場側 (155 ppm 付近に現れるピークの頂点側) の曲線を曲線 a とし、曲線 a とベースラインとの交点を R とし、曲線 a と、点 P と点 Q とを結ぶ線分と、点 Q と

50

点 R とを結ぶ線分とで囲まれた領域の面積であり、60 ppm 付近に現れるピークのピーク面積 (  $S_2$  ) は、60 ppm 付近に現れるピークを含む曲線で点 P よりも低磁場側 ( 60 ppm 付近に現れるピークの頂点側 ) の曲線を曲線 b とし、曲線 b とベースラインとの交点を S とし、曲線 b と、点 P と点 Q とを結ぶ線分と、点 Q と点 S とを結ぶ線分とで囲まれた領域の面積である。なお、 $^{27}\text{Al}$ -核磁気共鳴スペクトルは、核磁気共鳴スペクトル測定装置を用いて、下記条件で測定される。

観測周波数 : 65.177 MHz

観測範囲 : 31250 Hz

外部基準 :  $\text{Al}(\text{OH})_3$  重水溶液 ( 0 ppm )

繰返し時間 : 1.0 sec.

積算回数 : 6000 回

試料濃度 : 1 mol / L ( アルミニウム原子換算 )

10

#### 【0099】

本発明において、 $^{27}\text{Al}$ -核磁気共鳴スペクトルでの 155 ppm 付近に現れるピークおよび 60 ppm 付近に現れるピークは、それぞれ、通常、 $155 \pm 10$  ppm の範囲および  $60 \pm 10$  ppm の範囲に現れるピークである。なお、「T. Sugano、他 3 名、「Characterization of alumoxanes by  $^{27}\text{Al}$ -NMR spectra」,「Journal of Molecular Catalysis」, ELSEVIER, 1993年, Volume82, p.93-101」によれば、155 ppm 付近に現れるピークは、アルミノキサンの Al 原子にアルキル基が配位した  $\text{R}_2\text{Al}(\text{O})_2$  構造 ( 但し、R はアルキル基を示す。 ) に由来するシグナルのピークであり、60 ppm 付近に現れるピークは、アルミノキサンの Al 原子に酸素原子が配位した  $\text{RAl}(\text{O})_3$  構造 ( 但し、R はアルキル基を示す。 ) に由来するシグナルのピークである。

20

#### 【0100】

成分 ( i ) ~ 成分 ( iii ) を、溶液状態、溶媒に懸濁した状態またはスラリー状態で用いる場合における各成分の濃度は、オレフィン三量化反応器に各成分を供給する装置の性能などの条件により、適宜選択される。一般に、成分 ( i ) の濃度は、成分 ( i ) に含まれる第 4 族金属原子のモル濃度換算で、通常  $0.001 \sim 200$  mmol / リットルであり、より好ましくは  $0.001 \sim 100$  mmol / リットルであり、さらに好ましくは、 $0.05 \sim 50$  mmol / リットルである。成分 ( ii ) の濃度は、通常  $0.01 \sim 500$  mmol / リットルであり、より好ましくは、 $0.1 \sim 2500$  mmol / リットルであり、さらに好ましくは、 $0.1 \sim 2000$  mmol / リットルである。成分 ( iii ) の濃度は、成分 ( iii ) に含まれる Al 原子のモル濃度換算で、通常  $0.01 \sim 5000$  mmol / リットルであり、より好ましくは、 $0.1 \sim 2500$  mmol / リットルであり、さらに好ましくは、 $0.1 \sim 2000$  mmol / リットルである。

30

#### 【0101】

本発明のオレフィン三量化触媒の第二の態様は、上記成分 ( i ) 及び下記成分 ( iv ) を接触させてなる接触処理物である。

( iv ) :  $^{27}\text{Al}$ -核磁気共鳴スペクトルにおいて、155 ppm 付近に現れるピークのピーク面積と 60 ppm 付近に現れるピークのピーク面積との比が 0.3 以上であるアルミノキサン化合物

40

#### 【0102】

成分 ( iv ) の  $^{27}\text{Al}$ -核磁気共鳴スペクトルにおいて、155 ppm 付近に現れるピークのピーク面積と 60 ppm 付近に現れるピークのピーク面積との比は、0.3 以上であり、好ましくは 0.7 以上である。該比は、上述した方法により求められる。

#### 【0103】

本発明の成分 ( iv ) で用いられるアルミノキサン化合物としては、例えば、上記成分 ( iii ) で例示したアルミノキサン化合物をあげることができる。また、該当する市販品を用いることができる。

#### 【0104】

成分 ( i ) 及び成分 ( iv ) を接触させる方法としては、成分 ( i ) と成分 ( iv ) とが接

50

触し、オレフィン三量化触媒が形成されるならどのような手段によってもよく、あらかじめ溶媒で希釈してもしくは希釈せずに成分(i)と成分(iv)とを混合して接触させる方法や、別々に反応槽に供給して反応槽の中で接触させる方法を取ることができる。ここで、成分(i)及び成分(iv)は、それぞれ複数種類の化合物を組み合わせる使用する場合があるが、それらのうちの一部をあらかじめ混合して使用してもよいし、別々に反応槽に供給して使用してもよい。

【0105】

成分(i)と成分(iv)との接触処理量割合としては、[成分(iv)に含まれるアルミニウム原子のモル数] / [成分(i)に含まれる第4族金属原子のモル数]が、好ましくは0.1~10000であり、より好ましくは0.5~10000であり、更に好ましくは25~2500である。

10

【0106】

成分(i)及び成分(iv)を、溶液状態、溶媒に懸濁した状態又はスラリー状態で用いる場合における各成分の濃度は、オレフィン三量化反応器に各成分を供給する装置の性能などの条件により、適宜選択される。一般に、成分(i)の濃度は、成分(i)に含まれる第4族金属原子のモル濃度換算で、通常0.001~200mmol/リットルであり、より好ましくは0.001~100mmol/リットルであり、さらに好ましくは、0.05~50mmol/リットルである。成分(iv)の濃度は、通常0.01~5000mmol/リットルであり、より好ましくは、0.1~2500mmol/リットルであり、さらに好ましくは、0.1~2000mmol/リットルである。

20

【0107】

本発明のオレフィン三量化触媒を用いるオレフィン三量体の製造方法としては、例えば固定床反応法、気相反応法、適当な溶媒を使用する溶液反応法、スラリー反応法など任意の方法を使用することができる。溶媒を使用する場合、触媒を失活させないという条件の各種の溶媒が使用可能であり、このような溶媒の例として、ブタン、ペンタン、ヘキサン、ヘプタン、オクタンなどの脂肪族炭化水素；ベンゼン、トルエンなどの芳香族炭化水素；メチレンジクロライドなどのハロゲン化炭化水素などをあげることができる。また、これら製造方法において、連続式反応、回分式反応のどちらを用いてもよい。

【0108】

オレフィン三量化反応の反応温度については、通常-50~200であり、好ましくは-20~100である。また、反応圧力については、通常6MPa以下である。反応時間は、目的とするオレフィン三量体の種類、反応装置により適宜決定され、通常1分間~20時間である。

30

【0109】

本発明のオレフィン三量体の製造方法に用いられるオレフィンとしては、好ましくはエチレンであり、本発明のオレフィン三量体の製造方法は、ヘキセン、特に1-ヘキセンの製造に好適である。

【0110】

本発明のオレフィン三量化触媒は、オレフィン三量化反応の選択率が高く、該触媒を用いたオレフィン三量体の製造方法では、オレフィン三量体を高選択率で得られる。また、本発明のオレフィン三量化触媒は、オレフィン三量化反応の活性に優れ、該触媒を用いたオレフィン三量体の製造方法は、オレフィン三量体の収率に優れる。

40

【実施例】

【0111】

以下に、本発明を実施例により更に詳細に説明する。

I. 分析

(1) <sup>27</sup>Al - 核磁気共鳴スペクトル

アルミニウム原子換算で1mol/Lのトルエン溶液となる様に調整した溶液を試料として、径5mmのNMRチューブを用い下記条件で測定した。

測定機器 : Bruker社製 AC-250

50

観測周波数：65.177 MHz  
 観測範囲：31250 Hz  
 外部基準：Al(OH)<sub>3</sub> 重水溶液 (0 ppm)  
 繰返し時間：1.0 sec.  
 積算回数：6000回

(2) 1-ヘキセンの生成量及び三量化反応選択率

反応生成物中の1-ヘキセンの生成量及び三量化反応選択率(全生成物中の1-ヘキセンの割合)は、ガスクロマトグラフィーにより、下記条件により行った。

装置：Hewlett Packard製ガスクロマトグラフ(HP-5890 series II)  
 カラム：J&W Scientific製 DB-1 60m  
 キャリアー：窒素  
 内部標準物質：シクロヘキサン  
 試料量：1 μl  
 インジェクション温度：230  
 検出器温度：230  
 カラム温度：40 から230 へ8 /分へ昇温

10

【0112】

II. 原料

(a) 遷移金属化合物

20

トリクロロ(1-メチル-1-フェニルエチルシクロペンタジエニル)チタン(以下、LTiCl<sub>3</sub>と称する。): P. LongoらのMacromol. Rapid Commun., (2001), Vol. 22, 339頁に記載の方法により合成した。

(b) 有機アルミニウム化合物

トリメチルアルミニウム(TMA): 東ソー・ファインケム製2.09 mol/l トルエン溶液を用いた。 $\eta_1 / \eta_2 = 0.59$

(c) 有機アルミニウムオキシ化合物

(1) MMAO-A: Albemarle製、商品名MMAO、Al濃度 = 2.79 mol/l Isoper-C溶液を用いた。 $\eta_1 / \eta_2 = 0.89$ 。

(2) PMAO-S: 東ソー・ファインケム製、商品名PMAO-S、Al濃度 = 3.15 mol/l トルエン溶液を用いた。 $\eta_1 / \eta_2 = 0.75$ 。

30

(3) MAO-W: Witco製、商品名MAO、Al濃度 = 1.66 mol/l トルエン溶液を用いた。 $\eta_1 / \eta_2 = 0.39$ 。

(4) DMAO: Albemarle製、商品名DMAO、Al濃度 = 1.61 mol/l トルエン溶液を用いた。 $\eta_1 / \eta_2 = 0$ 。

(5) MMAO-3A: 東ソー・ファインケム製、商品名MMAO-3A、Al濃度 = 1.52 mol/l トルエン溶液を用いた。 $\eta_1 / \eta_2 = 0$ 。

(6) MMAO-4: 東ソー・ファインケム製、商品名MMAO-4、Al濃度 = 2.48 mol/l トルエン溶液を用いた。 $\eta_1 / \eta_2 = 0.75$ 。

【0113】

40

[実施例1]

内容積0.4リットルの攪拌機付きオートクレーブを真空乾燥してアルゴンで置換後、室温にて、溶媒としてトルエン200mlを仕込み、次に、オートクレーブを60 まで昇温し、エチレン2.0MPaをオートクレーブに仕込んだ。続いて、MMAO-3A 0.56ml (Al量 = 0.85 mmol) を窒素気流下でオートクレーブに投入し、次に、TMAのトルエン溶液 (Al濃度 = 2.09 mol/l) 0.07ml (Al量 = 0.15 mmol) を窒素気流下で投入し、更にLTiCl<sub>3</sub> 1.0 μmol を窒素気流下でオートクレーブに投入することにより反応を開始し、エチレン圧が2.0MPaに調整されるようにエチレンをフィードし、温度を60 に調節しながら、60分間反応を行った。その結果、1-ヘキセンがTi錯体1molあたり $8.31 \times 10^5$  g、三量化反応

50

選択率が63.3重量%であった。また、MMAO-3Aと、MMAO-3AのAl量0.85molあたりAl量が0.15mol量となるTMAとを、別途混合調整した混合物の $\eta_1/\eta_2$ は0.37であった。

【0114】

[実施例2]

MMAO-3Aを0.49ml(Al量=0.75mmol)とし、TMAのトルエン溶液を0.12ml(Al量=0.25mmol)とする以外は、実施例1と同様に行った。その結果、1-ヘキセンがTi錯体1molあたり $2.77 \times 10^6$ g生成し、三量化反応選択率は90.5重量%であった。また、MMAO-3Aと、MMAO-3AのAl量0.75molあたりAl量が0.25mol量となるTMAのトルエン溶液とを、

10

【0115】

[実施例3]

MMAO-3Aを0.46ml(Al量=0.70mmol)とし、TMAのトルエン溶液を0.15ml(Al量=0.30mmol)とする以外は、実施例1と同様に行った。その結果、1-ヘキセンがTi錯体1molあたり $2.42 \times 10^6$ g生成し、三量化反応選択率は86.3重量%であった。また、MMAO-3Aと、MMAO-3AのAl量0.70molあたりAl量が0.30mol量となるTMAのトルエン溶液とを、

20

【0116】

[実施例4]

MMAO-3Aを0.33ml(Al量=0.50mmol)とし、TMAのトルエン溶液を0.24ml(Al量=0.50mmol)とする以外は、実施例1と同様に行った。その結果、1-ヘキセンがTi錯体1molあたり $1.52 \times 10^6$ g生成し、三量化反応選択率は84.9重量%であった。また、MMAO-3Aと、MMAO-3AのAl量0.50molあたりAl量が0.50mol量となるTMAのトルエン溶液とを、

【0117】

[比較例1]

内容積0.4リットルの攪拌機付きオートクレーブを真空乾燥してアルゴンで置換後、室温にて、溶媒としてトルエン200mlを仕込み、次に、オートクレーブを60℃まで昇温し、エチレン2.0MPaをオートクレーブに仕込んだ。続いて、MMAO-3A 0.66ml(Al量=1.00mmol)を窒素気流下でオートクレーブに投入し、次にLTiCl<sub>3</sub> 1.0μmolを窒素気流下でオートクレーブに投入することにより反応を開始し、エチレン圧が2.0MPaに調整されるようにエチレンをフィードし、温度を60℃に調節しながら、60分間反応を行った。その結果、1-ヘキセンがTi錯体1molあたり $1.28 \times 10^5$ g生成し、三量化反応選択率は18.2重量%であった。

30

【0118】

[比較例2]

MMAO-3Aの代わりにTMAのトルエン溶液(Al濃度=2.09mol/l)を0.48ml(Al量=1.00mmol)用いた以外は比較例1と同様に行った。その結果、1-ヘキセンの生成が認められず、三量化反応選択率は0重量%であった。

40

【0119】

[実施例5]

MMAO-3Aの代わりにMMAO-Aを0.27ml(Al量=0.75mmol)用いた以外は実施例2と同様に行った。その結果、1-ヘキセンがTi錯体1molあたり $8.89 \times 10^5$ g生成し、三量化反応選択率は77.0重量%であった。また、MMAO-Aと、MMAO-AのAl量0.75molあたりAl量が0.25mol量となるTMAのトルエン溶液とを、別途混合調整した混合物の $\eta_1/\eta_2$ は1.08であった。

【0120】

50

## [ 実施例 6 ]

MMAO - 3 A の代わりに PMAO - S を 0.24 ml ( Al 量 = 0.75 mmol ) 用いた以外は実施例 2 と同様に行った。その結果、1 - ヘキセンが Ti 錯体 1 mol あたり  $2.75 \times 10^6$  g 生成し、三量化反応選択率は 87.8 重量%であった。また、PMAO - S と、PMAO - S の Al 量 0.75 mol あたり Al 量が 0.25 mol 量となる TMA のトルエン溶液とを、別途混合調整した混合物の  $\eta_{sp}/c$  は 1.98 であった。

【 0 1 2 1 】

## [ 実施例 7 ]

MMAO - 3 A の代わりに MAO - W を 0.45 ml ( Al 量 = 0.75 mmol ) 用いた以外は実施例 2 と同様に行った。その結果、1 - ヘキセンが Ti 錯体 1 mol あたり  $1.02 \times 10^6$  g 生成し、三量化反応選択率は 81.4 重量%であった。また、MAO - W と、MAO - W の Al 量 0.75 mol あたり Al 量が 0.25 mol 量となる TMA のトルエン溶液とを、別途混合調整した混合物の  $\eta_{sp}/c$  は 1.86 であった。

10

【 0 1 2 2 】

## [ 実施例 8 ]

MMAO - 3 A の代わりに MMAO - 4 を 0.30 ml ( Al 量 = 0.75 mmol ) 用いた以外は実施例 2 と同様に行った。その結果、1 - ヘキセンが Ti 錯体 1 mol あたり  $2.79 \times 10^6$  g 生成し、三量化反応選択率は 86.3 重量%であった。MMAO - 4 と、MMAO - 4 の Al 量 0.75 mol あたり Al 量が 0.25 mol 量となる TMA のトルエン溶液とを、別途混合調整した混合物の  $\eta_{sp}/c$  は 1.56 であった。

20

【 0 1 2 3 】

## [ 実施例 9 ]

MMAO - 3 A の代わりに DMAO を 0.47 ml ( Al 量 = 0.75 mmol ) 用いた以外は実施例 2 と同様に行った。その結果、1 - ヘキセンが Ti 錯体 1 mol あたり  $4.3 \times 10^4$  g 生成し、三量化反応選択率は 64.0 重量%であった。また、DMAO と、DMAO の Al 量 0.75 mol あたり Al 量が 0.25 mol 量となる TMA のトルエン溶液とを、別途混合調整した混合物の  $\eta_{sp}/c$  は 0.64 であった。

【 0 1 2 4 】

## [ 比較例 3 ]

MMAO - 3 A の代わりに DMAO を 0.62 ml ( Al 量 = 1.00 mmol ) 用いた以外は比較例 1 と同様に行った。その結果、1 - ヘキセンの生成が認められず、三量化反応選択率は 0 重量%であった。

30

【 0 1 2 5 】

## [ 実施例 10 ]

MMAO - 3 A の代わりに MMAO - A を 0.40 ml ( Al 量 = 1.00 mmol ) 用いた以外は比較例 1 と同様に行った。その結果、1 - ヘキセンが Ti 錯体 1 mol あたり  $6.35 \times 10^5$  g 生成し、三量化反応選択率は 67.4 重量%であった。

【 0 1 2 6 】

## [ 実施例 11 ]

MMAO - 3 A の代わりに PMAO - S を 0.32 ml ( Al 量 = 1.00 mmol ) 用いた以外は比較例 1 と同様に行った。その結果、1 - ヘキセンが Ti 錯体 1 mol あたり  $2.36 \times 10^5$  g 生成し、三量化反応選択率は 84.0 重量%であった。

40

【 0 1 2 7 】

## [ 実施例 12 ]

MMAO - 3 A の代わりに MAO - W を 0.60 ml ( Al 量 = 1.00 mmol ) 用いた以外は比較例 1 と同様に行った。その結果、1 - ヘキセンが Ti 錯体 1 mol あたり  $1.08 \times 10^5$  g 生成し、三量化反応選択率は 45.4 重量%であった。

## フロントページの続き

(51)Int.Cl.<sup>7</sup>

F I

テーマコード(参考)

// C 0 7 B 61/00

C 0 7 B 61/00 3 0 0

Fターム(参考) 4G069 AA06 AA08 BA21A BA21B BA27A BA27B BC15A BC16A BC16B BC20A  
BC24A BC49A BC50B BE05A BE05B BE14A BE32A BE33A BE33B BE36A  
BE36B BE37A BE37B CC13 DA02 EC27 FA01 FB04 FB77 FC08  
4H006 AA02 AC21 AC92 BA09 BA10 BA39 BA44 BA45  
4H039 CA29 CL19  
4J128 AA01 AB00 AB01 AC01 AC10 AC28 AD01 AD11 BC15B BC25B  
EB01 EB02 GA26 GB07

【要約の続き】