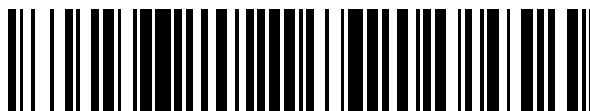


19



OFICINA ESPAÑOLA DE  
PATENTES Y MARCAS

ESPAÑA



11 Número de publicación: **2 653 362**

51 Int. Cl.:

**C07F 3/06** (2006.01)

**C07F 3/02** (2006.01)

**C07F 5/00** (2006.01)

**C07F 5/06** (2006.01)

**C08F 2/38** (2006.01)

12

TRADUCCIÓN DE PATENTE EUROPEA

T3

86 Fecha de presentación y número de la solicitud internacional: **30.06.2010 PCT/JP2010/061110**

87 Fecha y número de publicación internacional: **06.01.2011 WO11002000**

96 Fecha de presentación y número de la solicitud europea: **30.06.2010 E 10794168 (4)**

97 Fecha y número de publicación de la concesión europea: **25.10.2017 EP 2450361**

54 Título: **Compuestos organometálicos y un proceso para la preparación de los mismos**

30 Prioridad:

**01.07.2009 JP 2009156560**

**01.07.2009 JP 2009156561**

45 Fecha de publicación y mención en BOPI de la traducción de la patente:

**06.02.2018**

73 Titular/es:

**MITSUI CHEMICALS, INC. (100.0%)**

**5-2, Higashi-Shimbashi 1-chome**

**Minato-ku Tokyo 105-7117, JP**

72 Inventor/es:

**OCHIAI, TAKASHI y**

**MAKIO, HARUYUKI**

74 Agente/Representante:

**PONS ARIÑO, Ángel**

ES 2 653 362 T3

Aviso: En el plazo de nueve meses a contar desde la fecha de publicación en el Boletín Europeo de Patentes, de la mención de concesión de la patente europea, cualquier persona podrá oponerse ante la Oficina Europea de Patentes a la patente concedida. La oposición deberá formularse por escrito y estar motivada; sólo se considerará como formulada una vez que se haya realizado el pago de la tasa de oposición (art. 99.1 del Convenio sobre Concesión de Patentes Europeas).

## DESCRIPCIÓN

Compuestos organometálicos y un proceso para la preparación de los mismos

5 **Campo técnico**

La presente invención se refiere a un compuesto organometálico y a un método de producción del mismo, en particular a un compuesto organometálico que contiene magnesio, cinc, aluminio o galio que es útil como un agente de transferencia de cadenas y un reactivo de síntesis orgánica en la reacción de polimerización de un compuesto que contiene dobles enlaces.

**Antecedentes de la técnica**

Los compuestos organometálicos son compuestos que tienen un enlace carbono-metal (los compuestos pueden incluir compuestos de hidruro que tienen un enlace hidrógeno-metal). En general, el enlace carbono-metal tiene una alta reactividad y la reactividad es diversa dependiendo de los tipos de grupos orgánicos y metales. De este modo, los compuestos organometálicos se han convertido en reactivos de reacción indispensables para la industria química actual, tal como para el uso en diversas reacciones de síntesis orgánica. Se espera que un compuesto organometálico binuclear que tenga enlaces carbono-metal plurales en una molécula tenga propiedades tales como una reactividad más diversa. Aunque se han notificado diversos casos de un compuesto organometálico binuclear que no tiene ningún grupo funcional (Documentos No de Patente 1, 2 y 3), apenas puede decirse que un método de síntesis del mismo sea un método de síntesis industrial. Además, no se ha notificado ningún caso de un compuesto organometálico binuclear que tenga un grupo funcional.

Por otra parte, se sabía bien que en la producción de polímeros tales como polietileno y polipropileno usando un catalizador de polimerización de metal de transición, los compuestos organometálicos tales como dietilcinc, trimetilaluminio, trietilaluminio y trioctilaluminio actúan como un agente regulador del peso molecular. Gibson et al. notifica que el uso de compuestos de dialquilocinc en la polimerización de olefinas usando un cierto tipo de un complejo de metal de transición puede proporcionar un oligómero de etileno del que un extremo está protegido con un metal en el que la distribución del peso molecular es una distribución de tipo Poisson (Documento de Patente 1). En este caso, la distribución de Poisson se representa por  $\chi_p = (x^p e^{-x})/p!$ , en la que  $\chi_p$  es la fracción molar de un polímero obtenido después de que se polimerizara un número  $p$  de olefinas, y  $x$  es el coeficiente de Poisson. Debido a que la distribución del peso molecular es una distribución de tipo Poisson, se considera que la transferencia de cadena desde el catalizador al metal es reversible y un agente de transferencia de cadenas con dicha naturaleza se denomina un agente de transferencia de cadenas reversible. Cuando la reacción de la transferencia de cadena al compuesto organometálico es reversible y tan rápida como la reacción de crecimiento de la cadena, no queda ningún compuesto organometálico sin reaccionar y puede obtenerse eficientemente un polímero del que un extremo está protegido con un metal.

La reacción de la transferencia de cadena al compuesto organometálico en la polimerización de olefinas utiliza una reacción de intercambio de metal, una de las reacciones elementales en química organometálica, obteniendo de este modo un polímero en el que, formalmente, el grupo orgánico derivado del compuesto organometálico empleado como un agente regulador del peso molecular está unido a un extremo del polímero de olefina, y el metal derivado del compuesto organometálico está unido al otro extremo. La modificación de un enlace carbono-metal en el extremo puede conducir a la introducción de un grupo funcional en el extremo de la poliolefina.

Además, un polímero de olefina funcional en ambos extremos, que tiene un grupo funcional en ambos extremos, puede estar provisto de más propiedades diversas. Un polímero de olefina funcional en ambos extremos de este tipo se sintetiza mediante polimerización viva, hidrogenación de polímeros de metátesis, descomposición térmica de poliolefinas, pero la síntesis va acompañada de baja productividad, baja relación de funcionalización, bajo peso molecular y similares, lo que limita el ámbito de aplicación.

Entre los compuestos organometálicos, un compuesto de organocinc ha estado atayendo la atención por su capacidad para coexistir con grupos funcionales debido a su reactividad moderada. De este modo, el compuesto de organocinc ha sido intensamente desarrollada como un reactivo organometálico multi-funcionalizado.

El compuesto de organocinc se prepara por lo general a partir de haluros de cinc y litios orgánicos o reactivo de Grignard, implicando la preparación la producción secundaria de sales inorgánicas tales como haluros de litio y haluros de magnesio. Dichas sales inorgánicas producidas secundariamente posiblemente tienen una influencia sobre la reactividad y, por tanto, deben retirarse. Como método para retirar las sales inorgánicas producidas secundariamente, Charette et al. han notificado que se somete a centrifugación una mezcla de reacción y se usa un sobrenadante para preparar de este modo un reactivo de organocinc libre de sales inorgánicas producidas secundariamente (Documento de Patente 2), pero debe tenerse en cuenta que el método de centrifugación en una atmósfera inerte es difícil de emplear a escala industrial.

Se ha notificado un método que no implica la generación de dichas sales inorgánicas y un medio eficaz es la

reacción de intercambio de boro-cinc. En esta reacción, la hidroboração de borano con un alquino terminal o un alqueno terminal produce un alquil borano o un alquenal borano, con el que se hace reaccionar dimetil o dietil cinc y de este modo puede obtenerse un compuesto de alquil o alquenal cinc en el que el boro se ha intercambiado con el cinc. Debido a que el producto secundario es trialquilborano, que tiene un punto de ebullición bajo, el producto

5 secundario es fácil de retirar a presión reducida a nivel de laboratorio, y se han notificado varios casos acerca de la preparación de diversos compuestos de alquilocinc multifuncionales (Documento No de Patente 2). Además, se han notificado varios casos acerca de la síntesis de compuestos de organocinc cíclicos cuyos dos extremos se metalizan mediante métodos similares (Documentos No de Patente 1 y 3). Como otro método que no implica la generación de sales inorgánicas, puede mencionarse otro método de intercambio de halógeno-metal. Knochel et al. han notificado

10 que un compuesto de yoduro de alquilo que tiene un grupo funcional se hace reaccionar con dietilcinc y después se retira un exceso de dietilcinc y yoduro de etilo a presión reducida, sintetizando de este modo un compuesto un alquil cinc que tiene un grupo funcional (Documento No de Patente 4).

Estos métodos de síntesis que no implican la generación de las sales inorgánicas, sin embargo, requieren un a

15 cantidad excesiva de dietilcinc no acompañado de disolvente con el fin de obtener un rendimiento de la reacción alto. Además, en lugar de no generar sales inorgánicas, se producen secundariamente alquilboranos, haluros de etilo y similares. Por esta razón, un método de este tipo a escala industrial necesita realizarse con un control de la reacción avanzado y con medidas de seguridad avanzadas con respecto al uso de dietilcinc no acompañado de disolvente. Además, es necesario proporcionar un equipo para retirar compuestos de bajo punto de ebullición

20 incluyendo el dietilcinc.

También se ha descrito la síntesis de compuestos organometálicos para usos alternativos. Por ejemplo, el Documento de Patente 3 describe compuestos que contienen boro o aluminio, que se dice que son particularmente

25 útiles como combustibles de alta energía para la propulsión de misiles y cohetes.

Como se ha descrito anteriormente, se han notificado varios casos acerca de métodos de síntesis de compuestos organometálicos tales como compuestos de organocinc. Sin embargo, no puede decirse que ninguno de los métodos sea eficiente en términos de economía de átomos, ya que se generan productos secundarios tales como sales inorgánicas, alquilboranos y haluros de alquilo, y no se ha proporcionado ningún método que sea empleable y

30 eficiente en la industria. Por tanto, se ha deseado un método de producción más práctico. Se desvelan complejos para su uso en la preparación de polímeros en el Documento de Patente 4.

#### Lista de citas

#### 35 Documentos de Patente

Documento de Patente 1: folleto WO-2003-014046

Documento de Patente 2: folleto WO-2008-134890

Documento de Patente 3: US 3.084.180

40 Documento de Patente 4: US 5.468.707

Documento No de Patente 1: *J. Organomet. Chem.* 1998, 562, 133-139

Documento No de Patente 2: *Angew. Chem., Int. Ed. Ing.* 1996, 35, 2-4

Documento No de Patente 3: *J. Organomet. Chem.* 1982, 224, 217-221

45 Documento No de Patente 4: *J. Org. Chem.*, 1992, 57, 1956-1958

#### Sumario de la invención

##### Problema que se ha de resolver por la invención

50 Es un objeto de la presente invención proporcionar un compuesto organometálico novedoso que funcione de forma útil como agente de transferencia de cadena y similar en la reacción de polimerización de un compuesto que contiene dobles enlaces, y sea capaz de producir un polímero de olefina funcional en ambos extremos útil. Es otro objeto de la presente invención proporcionar un método para producir eficientemente un compuesto organometálico

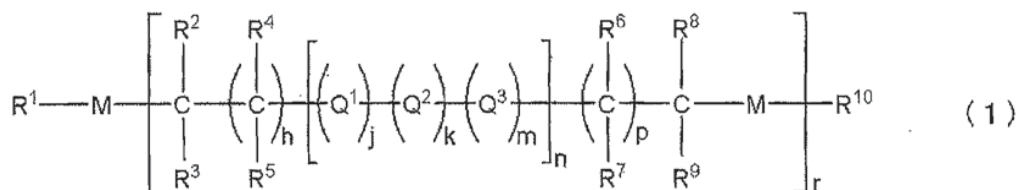
55 novedoso.

##### Medios para resolver el problema

Un compuesto organometálico (1) de la presente invención tiene una estructura representada por la siguiente

60 fórmula general (1).

[Fórmula química 1]

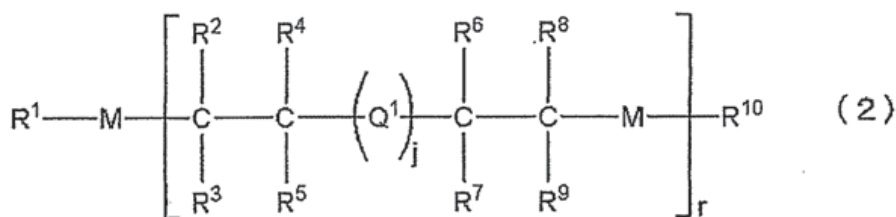


En la fórmula general (1), M es un átomo de magnesio, un átomo de cinc, un grupo Al-R<sup>11</sup> o un grupo Ga-R<sup>11</sup>, a condición de que R<sup>11</sup> sea un átomo de hidrógeno, un grupo hidrocarburo, un átomo de halógeno, un grupo que contiene silicio o un grupo que contiene oxígeno; R<sup>1</sup> y R<sup>10</sup> son cada uno independientemente un grupo hidrocarburo que tiene de 1 a 20 átomos de carbono o R<sup>1</sup> y R<sup>10</sup> pueden estar unidos entre sí para formar un grupo conector divalente (R<sup>101</sup>) que tiene 4 o más átomos de carbono y que contiene opcionalmente un heteroátomo excluyendo carbono e hidrógeno y, por tanto, forma un anillo; R<sup>2</sup> a R<sup>9</sup> son cada uno independientemente un átomo de hidrógeno o un grupo hidrocarburo que tiene de 1 a 20 átomos de carbono; Q<sup>1</sup> y Q<sup>3</sup> son cada uno independientemente un grupo hidrocarburo divalente; Q<sup>2</sup> es un grupo conector divalente que contiene un enlace mediante un heteroátomo excluyendo carbono; h, j, k, m y p son cada uno independientemente 0 o 1; n es un número entero de 0 a 10; y r es un número entero de 2 a 10000, a condición de que:

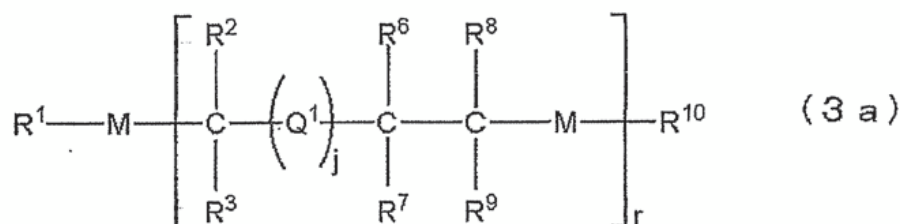
R<sup>1</sup> a R<sup>11</sup> puede ser un grupo formado mediante la sustitución de una parte de los átomos de hidrógeno del grupo hidrocarburo con un sustituyente que contiene un heteroátomo excluyendo carbono e hidrógeno; Q<sup>1</sup> y Q<sup>3</sup> pueden ser un grupo formado mediante la sustitución de una parte de los átomos de hidrógeno del grupo hidrocarburo divalente con un sustituyente que contiene un heteroátomo excluyendo carbono e hidrógeno; cuando h es 0, al menos uno de R<sup>2</sup> y R<sup>3</sup> es un grupo hidrocarburo que tiene de 2 a 20 átomos de carbono; cuando h es 1, al menos uno de R<sup>4</sup> y R<sup>5</sup> es un grupo hidrocarburo que tiene de 1 a 20 átomos de carbono; cuando p es 0, al menos uno de R<sup>8</sup> y R<sup>9</sup> es un grupo hidrocarburo que tiene de 2 a 20 átomos de carbono; cuando p es 1, al menos uno de R<sup>6</sup> y R<sup>7</sup> es un grupo hidrocarburo que tiene 1 a 20 átomos de carbono; cuando n es 2 o más, Q<sup>1</sup>, Q<sup>2</sup>, Q<sup>3</sup>, j, k y m plurales pueden ser individualmente iguales o diferentes entre sí; Q<sup>1</sup>, Q<sup>2</sup>, Q<sup>3</sup>, h, j, k, m, n, p plurales y R<sup>2</sup> a R<sup>9</sup> pueden ser individualmente iguales o diferentes entre sí.

El compuesto organometálico (1) de la presente invención incluye los representados por las siguientes fórmulas generales (2), (3a), (3b), (3c) y (4).

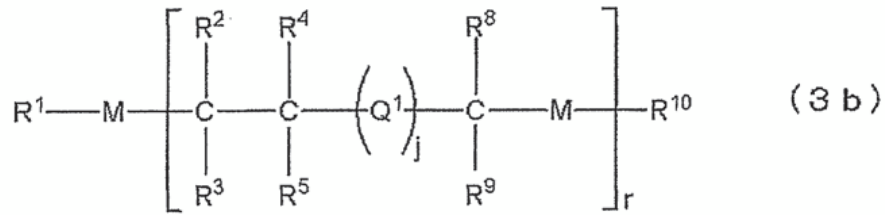
[Fórmula química 2]



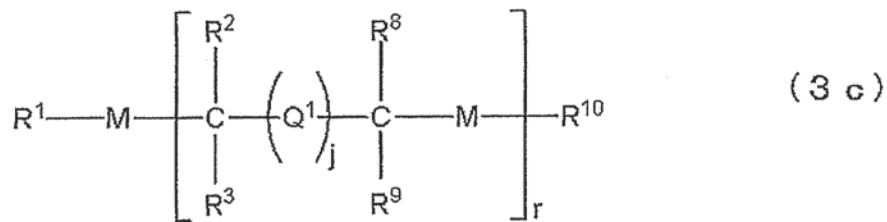
[Fórmula química 3]



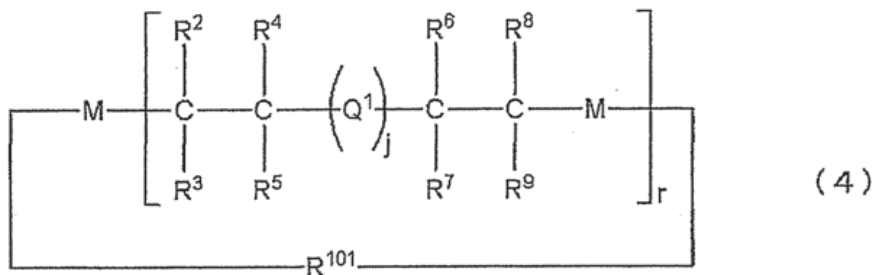
[Fórmula química 4]



[Fórmula química 5]



[Fórmula química 6]

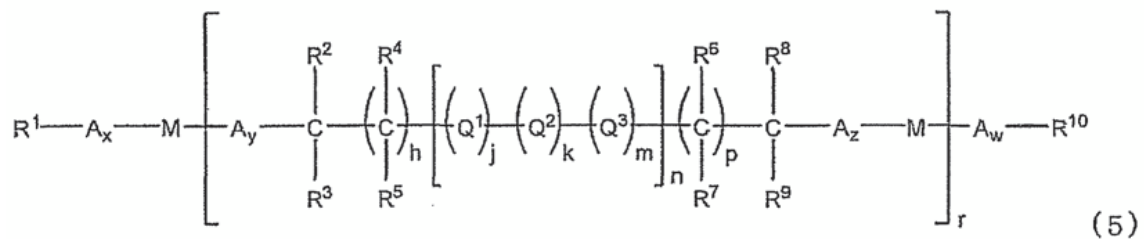


5 En las fórmulas generales (2), (3a), (3b), (3c) y (4), M, R<sup>1</sup> a R<sup>10</sup>, Q<sup>1</sup>, j y r se definen cada uno de la misma manera que en la fórmula general (1) de la reivindicación 1; y R<sup>101</sup> es un grupo conector divalente que tiene 4 o más átomos de carbono y que contiene opcionalmente un heteroátomo excluyendo carbono e hidrógeno.

10 En el compuesto organometálico (1) de la presente invención, M es preferentemente un grupo Al-R<sup>11</sup> o un átomo de cinc.

15 Un compuesto organometálico (5) de la presente invención se representa por la siguiente fórmula general (5).

[Fórmula química 7]

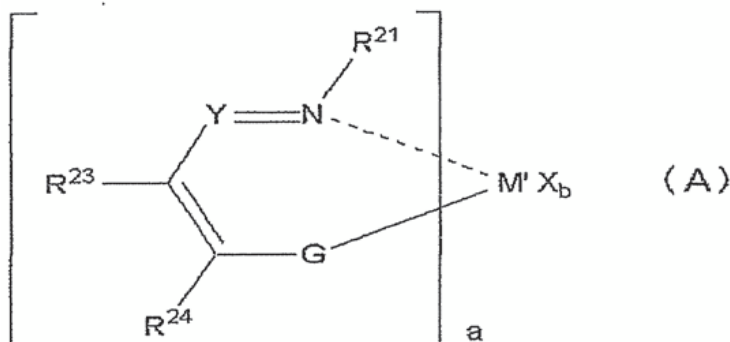


En la fórmula general (5), A es una unidad derivada de una α-olefina lineal o ramificada que tiene de 2 a 30 átomos de carbono, una olefina cíclica, un dieno, un polieno o un compuesto de vinilo aromático; x, y, z y w son cada uno un

número entero de 1 o más; y  $x + y + z + w =$  de 8 a 100000.  $M, Q^1, Q^2, Q^3, h, j, k, m, n, p$  y  $R^1$  a  $R^{10}$  se definen de la misma manera que en la fórmula general (1).

5 Un método para la producción del compuesto organometálico de la presente invención se caracteriza por que en presencia de un compuesto de metal de transición (A) representado por la siguiente fórmula general (A), un compuesto de dieno (B) representado por la siguiente fórmula general (B) se hace reaccionar con un compuesto organometálico (C) representado por la siguiente fórmula general (C), para obtener de este modo el compuesto organometálico (1) anterior.

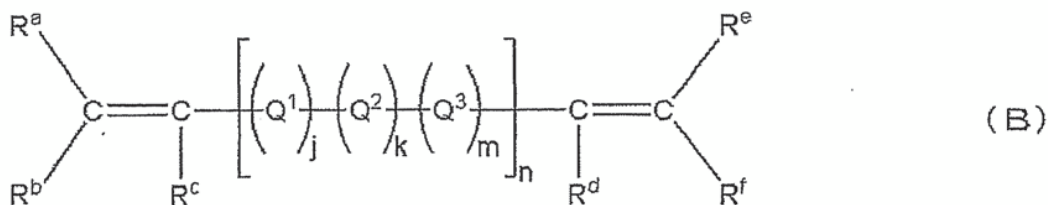
[Fórmula química 8]



10 En la fórmula general (A),  $M'$  es un átomo de metal de transición seleccionado entre los Grupos 3 a 11 de la tabla periódica de los elementos (el Grupo 3 incluye un lantánido y un actínido);  $a$  es un número entero de 1 a 3, que es el número de ligandos coordinados con el átomo de metal de transición  $M'$ ;  $X$  es un átomo o un grupo seleccionado entre el grupo que consiste en un átomo de hidrógeno, un átomo de halógeno, un átomo de oxígeno, un grupo hidrocarburo, un grupo que contiene silicio, un grupo que contiene germanio, un grupo que contiene estaño, un grupo que contiene boro, un grupo que contiene aluminio, un grupo que contiene fósforo, un grupo que contiene oxígeno, un grupo que contiene azufre, un grupo que contiene nitrógeno, un grupo que contiene halógeno y un resto de compuesto heterocíclico;  $b$  es un número entero de 0 a 3, que es el número de  $X$ ; cuando  $b$  es 2 o 3,  $X$  pueden ser iguales o diferentes entre sí y  $X$  plurales pueden estar unidos entre sí para formar un anillo;  $Y$  es un átomo de nitrógeno o un átomo de carbono que tiene un sustituyente  $R^{22}$ ;  $G$  es un átomo de oxígeno, un átomo de azufre, un átomo de selenio o un átomo de nitrógeno que tiene un sustituyente  $R^{25}$ ;  $R^{21}$  a  $R^{25}$  pueden ser iguales o diferentes entre sí y son un átomo o un grupo seleccionado entre el grupo que consiste en un grupo hidrocarburo, un átomo de halógeno, un átomo de hidrógeno, un grupo sililo sustituido con hidrocarburo, un grupo que contiene oxígeno, un grupo que contiene nitrógeno, un grupo que contiene azufre, un grupo que contiene boro, un grupo que contiene aluminio, un grupo que contiene fósforo, un grupo que contiene halógeno, un resto de compuesto heterocíclico, un grupo que contiene silicio, un grupo que contiene germanio y un grupo que contiene estaño; dos o más de  $R^{22}$  a  $R^{25}$  pueden estar unidos entre sí para formar un anillo; y cuando  $a$  es 2 o 3, los  $R^{21}$ , los  $R^{22}$ , los  $R^{23}$ , los  $R^{24}$  y los  $R^{25}$  pueden ser individualmente iguales o diferentes entre sí, y un grupo de  $R^{22}$ - $R^{25}$  contenido en uno cualquiera de los ligandos y un grupo de  $R^{22}$ - $R^{25}$  contenido en otro ligando pueden estar unidos.

30

[Fórmula química 9]



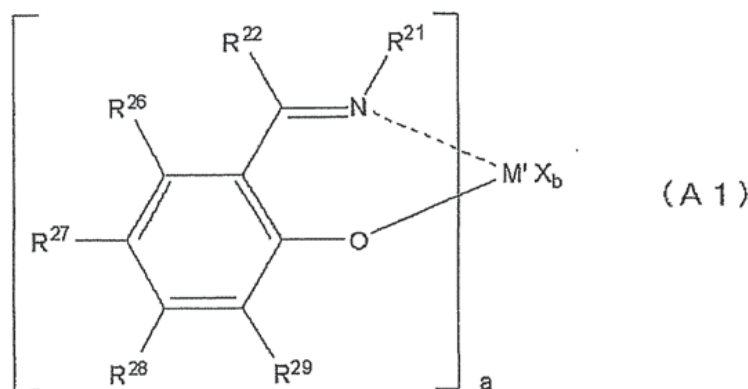
35 En la fórmula general (B), de  $R^a$  a  $R^f$  son cada uno independientemente un átomo de hidrógeno o un grupo hidrocarburo que tiene de 1 a 20 átomos de carbono y puede ser un grupo formado mediante la sustitución de una parte de los átomos de hidrógeno del grupo hidrocarburo con un sustituyente que contiene un heteroátomo excluyendo carbono e hidrógeno; y  $Q^1, Q^2, Q^3, j, k, m$  y  $n$  se definen cada uno de la misma manera que en la fórmula general (1).

[Fórmula química 10]

R-M-R (C)

- 5 En la fórmula general (C), M se define de la misma manera que en la fórmula general (1); dos R son cada uno, independientemente, un grupo hidrocarburo que tiene de 1 a 20 átomos de carbono y puede ser un grupo formado mediante la sustitución de una parte de los átomos de hidrógeno del grupo hidrocarburo con un sustituyente que contiene un heteroátomo excluyendo carbono e hidrógeno.
- 10 El compuesto de metal de transición (A) empleado en el método de producción de la presente invención es preferentemente un compuesto de metal de transición (A1) representado por la siguiente fórmula general (A1).

[Fórmula química 11]



- 15 En la fórmula general (A1), M', A, X, B, R<sup>21</sup> y R<sup>22</sup> se definen cada uno de la misma manera que en la fórmula general (A) de la reivindicación 1; R<sup>26</sup> a R<sup>29</sup> pueden ser iguales o diferentes entre sí y son un átomo o un grupo seleccionado entre el grupo que consiste en un átomo de hidrógeno, un grupo hidrocarburo, un átomo de halógeno, un grupo sililo sustituido con hidrocarburo, un grupo que contiene oxígeno, un grupo que contiene nitrógeno, un grupo que contiene azufre, un grupo que contiene boro, un grupo que contiene aluminio, un grupo que contiene fósforo, un grupo que contiene halógeno, un resto de compuesto heterocíclico, un grupo que contiene silicio, un grupo que contiene germanio y un grupo que contiene estaño y de estos, dos o más pueden estar unidos entre sí para formar un anillo; y cuando a es 2 o 3, los R<sup>21</sup>, los R<sup>22</sup>, los R<sup>26</sup>, los R<sup>27</sup>, los R<sup>28</sup> y los R<sup>29</sup> pueden ser individualmente iguales o diferentes entre sí y un grupo de R<sup>22</sup> y R<sup>26</sup>-R<sup>29</sup> contenido en uno cualquiera de los ligandos y un grupo de R<sup>22</sup> y R<sup>26</sup>-R<sup>29</sup> contenido en otro ligando pueden estar unidos.

- 25 M en el compuesto organometálico (C) es preferentemente un grupo Al-R<sup>11</sup> o un átomo de cinc.

Además, el método de producción de la presente invención emplea preferentemente un cocatalizador y un vehículo.

- 30 En el método de producción del compuesto organometálico de la presente invención, el método de producción del compuesto organometálico (5) se caracteriza porque el compuesto organometálico (1) se hace reaccionar con  $\alpha$ -olefinas lineales o ramificadas que tienen de 2 a 30 átomos de carbono, olefinas cíclicas, dienos, polienos o compuestos aromáticos de vinilo.

- 35 El método de producción de un polímero funcional en ambos extremos de la presente invención se caracteriza mediante la realización de una reacción de conversión de grupos funcionales en enlaces carbono-metal del compuesto organometálico (5).

Efectos de la invención

- 40 El compuesto organometálico novedoso de la presente invención es útil como un agente de transferencia de cadenas en la reacción de polimerización de un doble enlace que contiene el compuesto y pueden utilizarse en particular como un agente de transferencia de cadenas reversible en la reacción de polimerización y es capaz de producir un polímero que tiene un enlace carbono-metal en ambos extremos. Mediante la realización de una
- 45 reacción de conversión de grupos funcionales en enlaces carbono-metal en el polímero que tiene un enlace carbono-metal en ambos extremos, puede producirse un polímero funcional en ambos extremos.

De acuerdo con el método de producción de la presente invención, es posible producir eficientemente un compuesto

organometálico novedoso que es útil como un agente de transferencia de cadenas en la reacción de polimerización de un compuesto que contiene dobles enlaces, y puede usarse en particular como un agente de transferencia de cadenas reversible en la reacción de polimerización y también como un reactivo de síntesis orgánica, un material polimérico o un precursor de los mismos. A partir de un compuesto organometálico obtenible mediante el método de la presente invención, puede producirse un polímero que tiene un enlace carbono-metal en ambos extremos. Además, al realizar una conversión de grupos funcionales en los enlaces carbono-metal mediante métodos conocidos, puede producirse un polímero funcional en ambos extremos.

**Breve descripción de los dibujos**

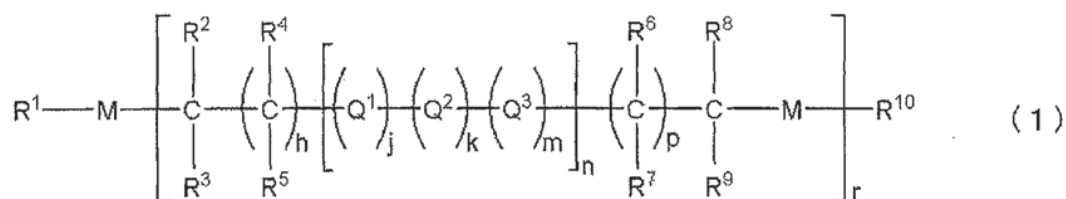
[Fig. 1] La Fig. 1 es un espectro de RMN-<sup>1</sup>H de un compuesto X-1 sintetizado en el Ejemplo 1.  
 [Fig. 2] La Fig. 2 es un espectro de RMN-<sup>1</sup>H de un polímero obtenido en el Ejemplo 9.  
 [Fig. 3] La Fig. 3 es un espectro de RMN-<sup>1</sup>H de un polímero obtenido en el Ejemplo 10.

**Realizaciones para realizar la invención**

[Compuesto organometálico (1)]

El compuesto organometálico de la presente invención tiene una estructura representada por la siguiente fórmula general (1).

[Fórmula química 12]



En la fórmula general (1), M es un átomo de magnesio, un átomo de cinc, un grupo Al-R<sup>11</sup> o un grupo Ga-R<sup>11</sup>; M plurales pueden ser iguales o diferente entre sí; M es preferentemente un átomo de cinc o un grupo Al-R<sup>11</sup>; y todos los M son preferentemente átomos de cinc.

R<sup>11</sup> es un átomo de hidrógeno, un grupo hidrocarburo, un átomo de halógeno, un grupo que contiene silicio o un grupo que contiene oxígeno.

Los ejemplos del grupo hidrocarburo incluyen grupos alquilo que tienen de 1 a 20 átomos de carbono, grupos arilo y grupos aril alquilo. Los ejemplos específicos de los mismos incluyen grupo metilo, grupo etilo, grupo propilo, grupo isopropilo, n-butilo, grupo isobutilo, grupo sec-butilo, grupo terc-butilo, grupo pentilo, grupo neopentilo, grupo hexilo, grupo octilo, grupo decilo, grupo ciclohexilo, grupo fenilo, grupo toliilo, grupo naftilo, grupo bencilo y grupo 2-feniletilo. R<sup>11</sup> puede ser un grupo formado mediante la sustitución de una parte de los átomos de hidrógeno del grupo hidrocarburo con un sustituyente que contiene un heteroátomo excluyendo carbono e hidrógeno. Como se usa en la presente invención, se refiere como que el "heteroátomo" incluye todos los átomos excluyendo carbono e hidrógeno. Los ejemplos del grupo formado por sustitución del grupo hidrocarburo con el sustituyente que contiene un heteroátomo incluyen grupo metoximetilo, grupo etoximetilo, grupo metoxietilo, grupo etoxietilo, grupo aminometilo, grupo aminoetilo, grupo dimetil aminometilo, grupo dietil aminometilo y grupo difenil aminometilo; y grupos hidrocarburo que contienen silicio, tales como grupo trimetilsililmetilo, grupo trietil sililmetilo, grupo trimetoxisililmetilo, grupo triisopropil sililmetilo, grupo trifenil sililmetilo, grupo terc-butildimetil sililmetilo, grupo trimetil sililetilo, grupo trietil sililetilo, grupo trimetoxi sililetilo, grupo triisopropil sililetilo, grupo trifenil sililetilo y grupo terc-butildimetil sililetilo.

Los ejemplos del átomo de halógeno incluyen flúor, cloro, bromo y yodo.

El grupo que contiene silicio es un grupo que contiene un átomo de silicio y que tiene un enlace en el átomo de silicio, incluyendo los ejemplos de los mismos un grupo trimetil sililo, grupo trimetoxi sililo, grupo trietil sililo, grupo triisopropil sililo y grupo terc-butildimetil sililo.

Los ejemplos del grupo que contiene oxígeno incluyen grupos alcoxi tales como grupo metoxi, grupo etoxi, grupo propoxi y grupo butoxi, cetonas tales como grupo metil carbonilo, grupo etil carbonilo, grupo propil carbonilo, grupo isopropil carbonilo, grupo n-butil carbonilo, grupo sec-butil carbonilo, grupo terc-butil carbonilo, grupo isobutil carbonilo, grupo metoxi carbonilo, grupo etoxi carbonilo, grupo propoxi carbonilo, grupo isopropoxi carbonilo, grupo n-butoxi carbonilo, grupo sec-butoxi carbonilo, grupo terc-butoxi carbonilo y grupo isobutoxi carbonilo, grupo éster y



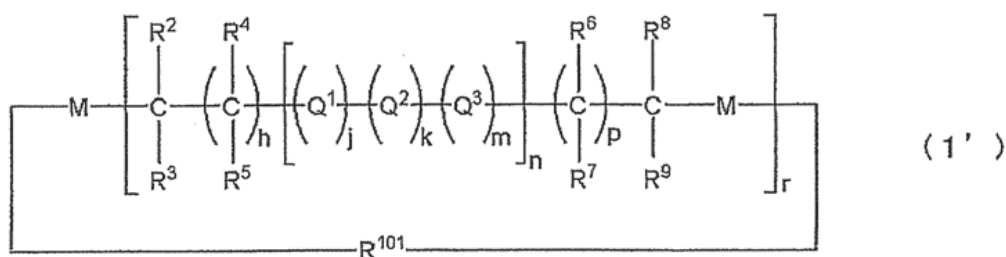
grupo hidroxilo.

De los átomos y grupos anteriores, como R<sup>11</sup>, son preferibles el grupo metilo, grupo etilo, grupo propilo, grupo isopropilo, grupo n-butilo, grupo isobutilo, grupo sec-butilo, grupo terc-butilo, grupo pentilo, grupo hexilo, grupo octilo, grupo fenilo, grupo bencilo, grupo trimetil sililo, grupo trimetil silil metilo, grupo trietil silil metilo y grupo triisopropil silil metilo; y son más preferibles el grupo metilo, grupo etilo, grupo isopropilo, grupo isobutilo, grupo hexilo, grupo fenilo, grupo trimetil silil metilo y grupo bencilo.

R<sup>1</sup> y R<sup>10</sup> son cada uno independientemente un grupo hidrocarburo que tiene de 1 a 20 átomos de carbono y pueden ser un grupo formado mediante la sustitución de una parte de los átomos de hidrógeno del grupo hidrocarburo con un sustituyente que contiene un heteroátomo excluyendo carbono e hidrógeno. Pueden mencionarse ejemplos del grupo hidrocarburo que tiene de 1 a 20 átomos de carbono como los ejemplos del grupo hidrocarburo denominado R<sup>11</sup>. R<sup>1</sup> y R<sup>10</sup> son, preferentemente, grupos alquilo, grupos arilo y grupos alquil arilo, que tienen de 1 a 20 átomos de carbono, incluyendo los ejemplos preferibles de los mismos grupo metilo, grupo etilo, grupo propilo, grupo isopropilo, grupo n-butilo, un grupo isobutilo, grupo sec-butilo, grupo terc-butilo, grupo neopentilo, grupo fenilo, grupo bencilo y grupo trimetil silil metilo.

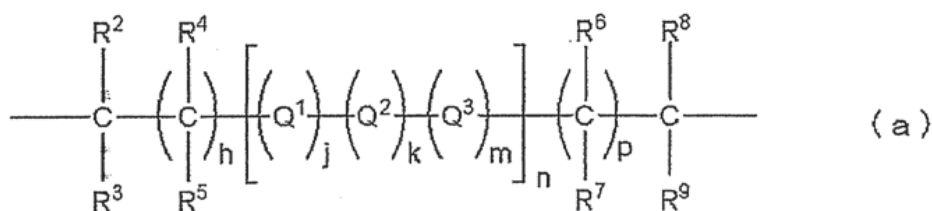
R<sup>1</sup> y R<sup>10</sup> pueden estar unidos entre sí para convertirse en R<sup>101</sup>, formando de este modo un anillo como un todo de una manera tal como se representa en la siguiente fórmula general (1').

[Fórmula química 13]

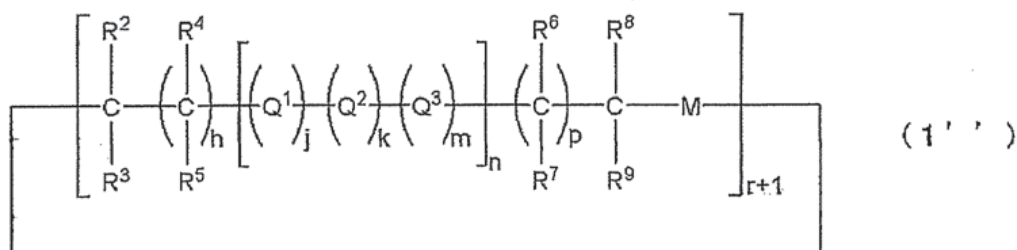


En este caso, R<sup>101</sup> es un grupo conector divalente que tiene 4 o más átomos de carbono y que contiene opcionalmente un heteroátomo excluyendo carbono e hidrógeno. R<sup>101</sup> normalmente se representa por la siguiente fórmula general (a), en cuyo caso un compuesto organometálico como un todo se representa por la siguiente fórmula general (1'').

[Fórmula química 14]



[Fórmula química 15]



En las fórmulas generales (a) y (1''), M, R<sup>2</sup> a R<sup>9</sup>, Q<sup>1</sup>, Q<sup>2</sup>, Q<sup>3</sup>, h, j, k, m, n, p y r se definen cada uno de la misma manera que en la fórmula general (1).

$R^2$  a  $R^9$  son cada uno independientemente un átomo de hidrógeno, o un grupo hidrocarburo que tiene de 1 a 20 átomos de carbono y puede ser un grupo formado mediante la sustitución de una parte de los átomos de hidrógeno del grupo hidrocarburo con un sustituyente que contiene un heteroátomo excluyendo carbono e hidrógeno. Los ejemplos del grupo hidrocarburo que tiene de 1 a 20 átomos de carbono pueden mencionarse como los ejemplos del grupo hidrocarburo denominado  $R^{11}$ .

De estos grupos,  $R^2$ ,  $R^3$ ,  $R^8$  y  $R^9$  son preferentemente un átomo de hidrógeno, grupo metilo, grupo etilo, grupo propilo, grupo isopropilo, grupo n-butilo, grupo isobutilo, grupo sec-butilo, grupo n-pentilo, grupo hexilo, grupo heptilo, grupo octilo, grupo nonilo, grupo decilo y grupo bencilo, y más preferentemente, un átomo de hidrógeno, grupo metilo, grupo etilo, grupo propilo, grupo isopropilo y grupo bencilo.

$R^4$ ,  $R^5$ ,  $R^6$  y  $R^7$  son preferentemente un átomo de hidrógeno, grupo metilo, grupo etilo, grupo propilo, grupo isopropilo, grupo n-butilo, grupo isobutilo, grupo sec-butilo, grupo terc-butilo, grupo n-pentilo, grupo hexilo, grupo heptilo, grupo octilo, grupo nonilo, grupo decilo y grupo fenilo y, más preferentemente, un átomo de hidrógeno, grupo metilo, grupo etilo, grupo propilo, grupo isopropilo y grupo fenilo.

h y p son cada uno independientemente 0 o 1, a condición de que cuando h es 0, al menos uno de  $R^2$  y  $R^3$  es un grupo hidrocarburo que tiene de 2 a 20 átomos de carbono, cuando h es 1, al menos uno de  $R^4$  y  $R^5$  es un grupo hidrocarburo que tiene de 1 a 20 átomos de carbono, cuando p es 0, al menos uno de  $R^8$  y  $R^9$  es un grupo hidrocarburo que tiene de 2 a 20 átomos de carbono y cuando p es 1, al menos uno de  $R^6$  y  $R^7$  es un grupo hidrocarburo que tiene de 1 a 20 átomos de carbono. Las características de las estructuras de  $R^2$  a  $R^9$  derivan del método para producir el compuesto organometálico (1) de la presente invención. Esto se describirá más adelante.

$Q^1$  y  $Q^3$  son cada uno independientemente un grupo hidrocarburo divalente y pueden ser un grupo formado mediante la sustitución de una parte de los átomos de hidrógeno del grupo hidrocarburo con un sustituyente que contiene un heteroátomo excluyendo carbono e hidrógeno. Los ejemplos del grupo hidrocarburo divalente incluyen grupos hidrocarburo saturados que tienen de 1 a 20 átomos de carbono, tales como  $-\text{CH}_2-$ ,  $-(\text{CH}_2)_2-$ ,  $-(\text{CH}_2)_3-$  y  $-(\text{CH}_2)_4-$ ; grupos hidrocarburo insaturados que tienen de 1 a 20 átomos de carbono, tales como  $-\text{CH}=\text{CH}-$ ,  $-\text{CH}=\text{CH}-\text{CH}_2-$ ,  $-\text{CH}_2-\text{CH}=\text{CH}-$ ,  $-\text{CH}_2-\text{CH}=\text{CH}-\text{CH}_2-$ ,  $-\text{C}=\text{C}-$  y  $-\text{C}=\text{C}-\text{CH}_2-$ ; grupos hidrocarburo saturados cíclicos, tales como ciclopentilideno, ciclopentileno, ciclohexilideno y ciclohexileno; grupos hidrocarburo aromáticos tales como grupos que tienen un anillo aromático de este tipo representado por las siguientes fórmulas:

[Fórmula química 16]



y restos de hidrocarburos cíclicos que tienen de 6 a 20 átomos de carbono, por ejemplo, benceno, naftaleno y antraceno y sus combinaciones, y pueden ser un grupo formado por la sustitución de una parte de los átomos de hidrógeno de los grupos hidrocarburo con un grupo hidrocarburo; un átomo de halógeno tal como flúor, cloro y bromo; y un grupo que contiene un heteroátomo tal como oxígeno, azufre, nitrógeno, fósforo, silicio, germanio, estaño y boro.

$Q^2$  es un grupo conector divalente que contiene un enlace mediante un heteroátomo excluyendo carbono. Los ejemplos del heteroátomo incluyen oxígeno, azufre, nitrógeno, fósforo, silicio, germanio, estaño y boro. Los ejemplos del grupo conector divalente que contiene un enlace mediante un heteroátomo de este tipo incluyen  $-\text{O}-$ ,  $-\text{O}-\text{CH}_2-$ ,  $-\text{O}-\text{CH}_2-\text{O}-$ ,  $-(\text{O}-\text{CH}_2)_n-\text{O}-$ ,  $-\text{O}-\text{O}-$ ,  $-\text{O}-\text{O}-\text{O}-$ ,  $-(\text{O}-\text{O})_n-\text{O}-$ ,  $-\text{O}-\text{O}-\text{O}-\text{O}-$ ,  $-\text{O}-\text{SiH}_2-$ ,  $-\text{O}-\text{SiH}_2-\text{O}-$ ,  $-\text{S}-$ ,  $-\text{SO}_2-$ ,  $-(\text{O}-\text{SiH}_2)_n-\text{O}-$ ,  $-\text{O}-\text{SiH}_2-$ ,  $-\text{NH}-\text{CO}-$ ,  $-\text{N}=\text{CH}-$ ,  $-\text{CO}_2-$ ,  $-\text{NH}-$ ,  $-\text{PH}-$ ,  $-\text{SiH}_2-$ ,  $-\text{GeH}-$ ,  $-\text{SnH}_2-$  y  $-\text{BH}-$ . Una parte de los átomos de hidrógeno de estos grupos conectores puede estar sustituida con un grupo hidrocarburo, un átomo de halógeno tal como flúor, cloro y bromo y un grupo que contenga un heteroátomo tal como oxígeno, azufre, nitrógeno, fósforo, silicio, germanio, estaño y boro.

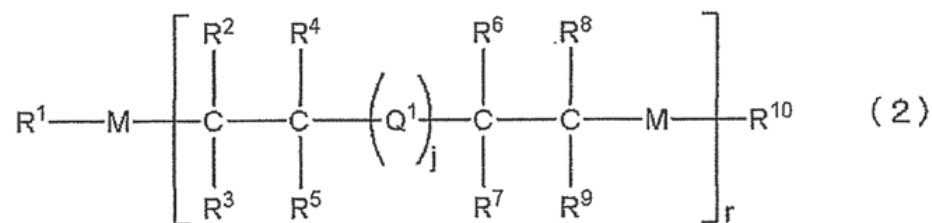
j, k y m son cada uno independientemente 0 o 1. n es un número entero de 0 a 10. r es un número entero de 2 a 10000, más preferentemente un número entero de 5 a 1000, aún más preferentemente un número entero de 20 a 500.

cuando n es 2 o más,  $Q^1$ ,  $Q^2$ ,  $Q^3$ , j, k y m plurales pueden ser individualmente iguales o diferentes entre sí. M plurales pueden ser iguales o diferentes entre sí. Cuando varios  $R^{11}$  están presentes, pueden ser iguales o diferentes entre sí.  $Q^1$ ,  $Q^2$ ,  $Q^3$ , h, j, k, m, n, p plurales y  $R^2$  a  $R^9$  pueden ser individualmente iguales o diferentes entre sí.

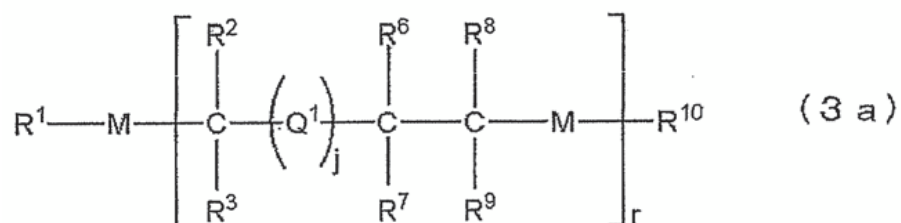
Los ejemplos del compuesto organometálico (1) representado por la fórmula general (1) incluyen los representados

por las siguientes fórmulas generales (2), (3a), (3b), (3c) y (4).

[Fórmula química 17]

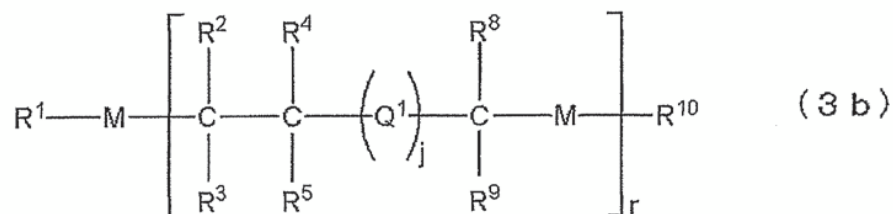


[Fórmula química 18]

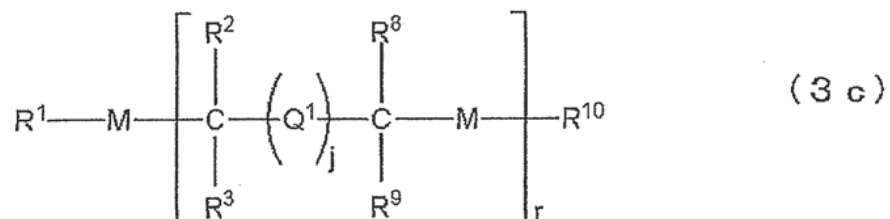


5

[Fórmula química 19]

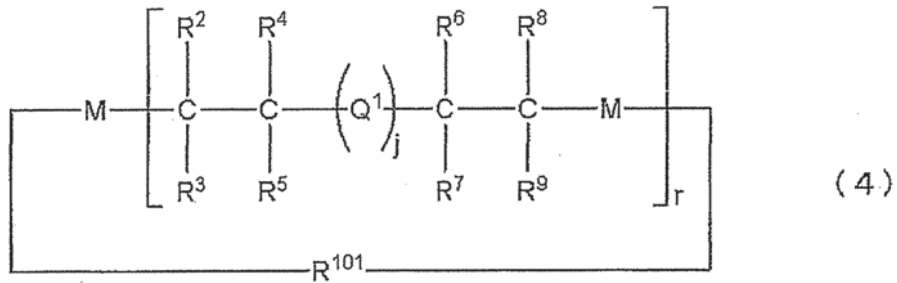


[Fórmula química 20]



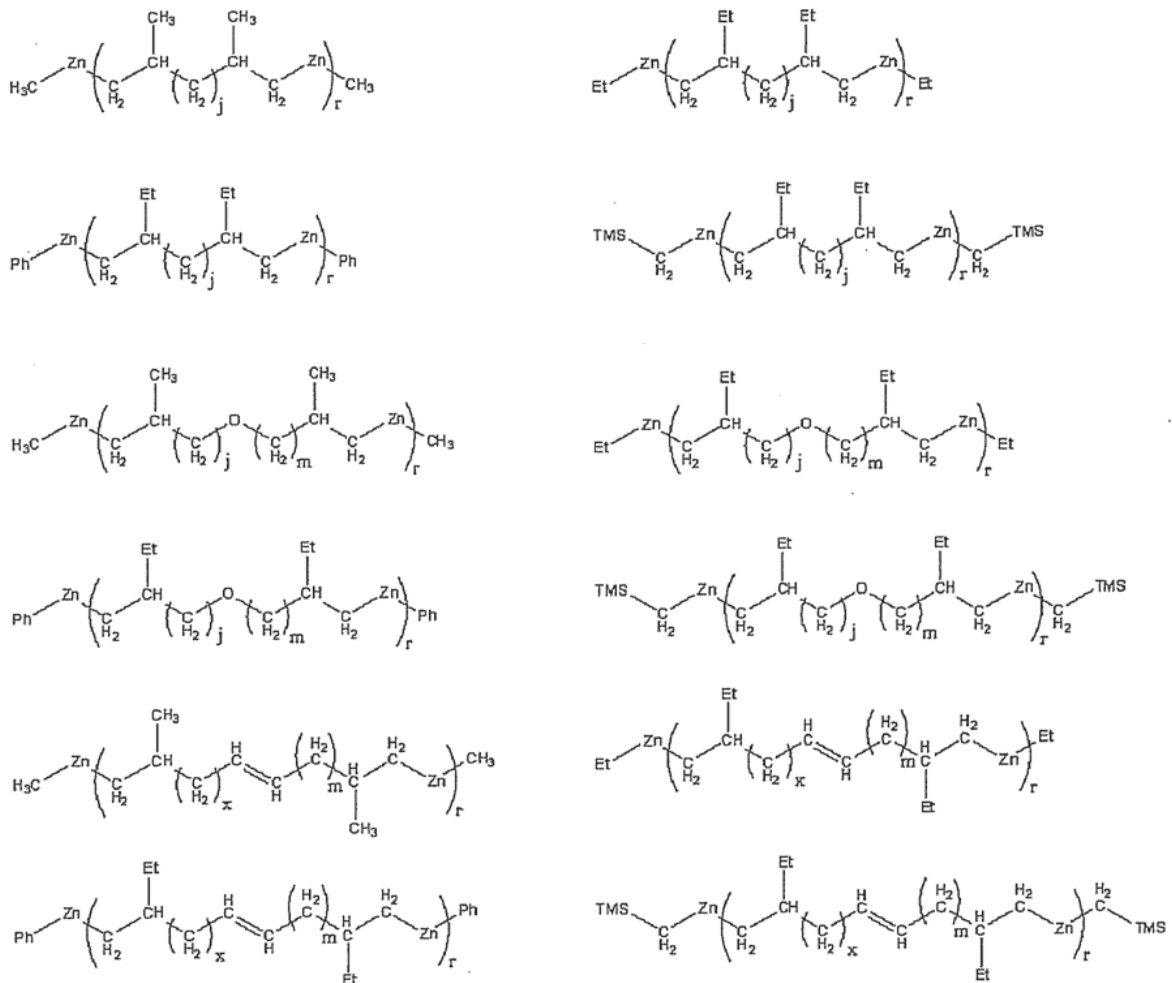
10

[Fórmula química 21]

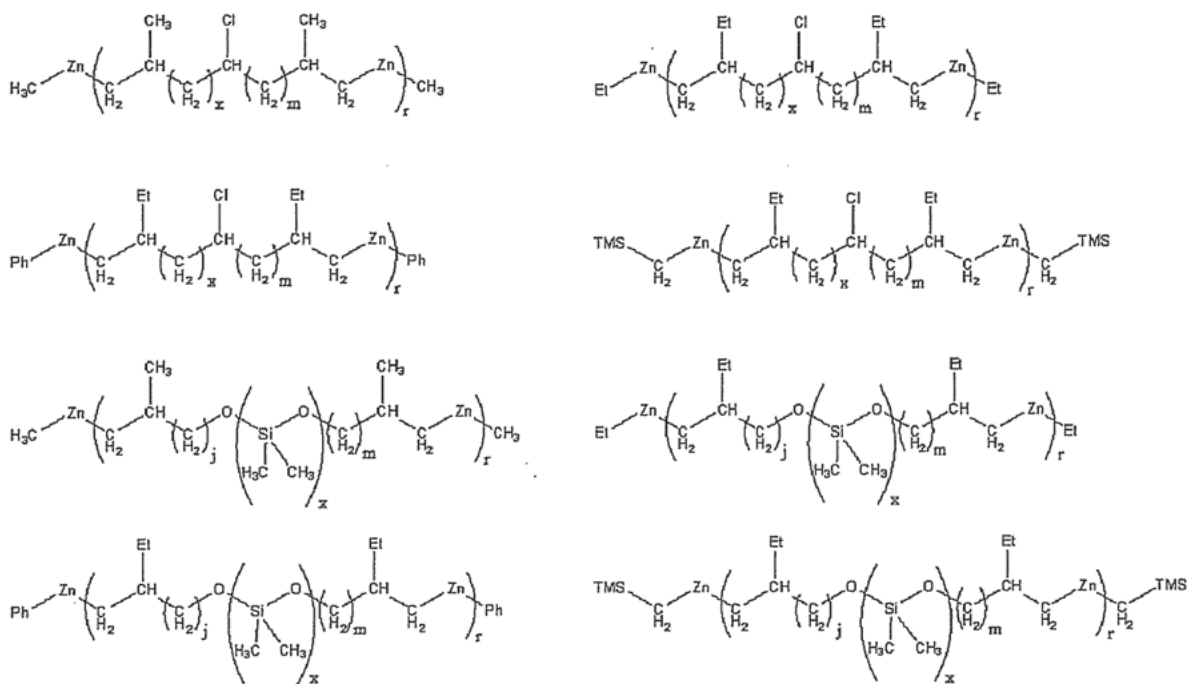


5 Los ejemplos específicos del compuesto organometálico de la presente invención representado por la fórmula general (1) incluyen compuestos representados por las siguientes fórmulas. En las fórmulas siguientes, Me significa grupo metilo, Et indica grupo etilo, Pr indica grupo propilo, Bu indica grupo butilo, Ph indica grupo fenilo y TMS indica grupo trimetil sililo.

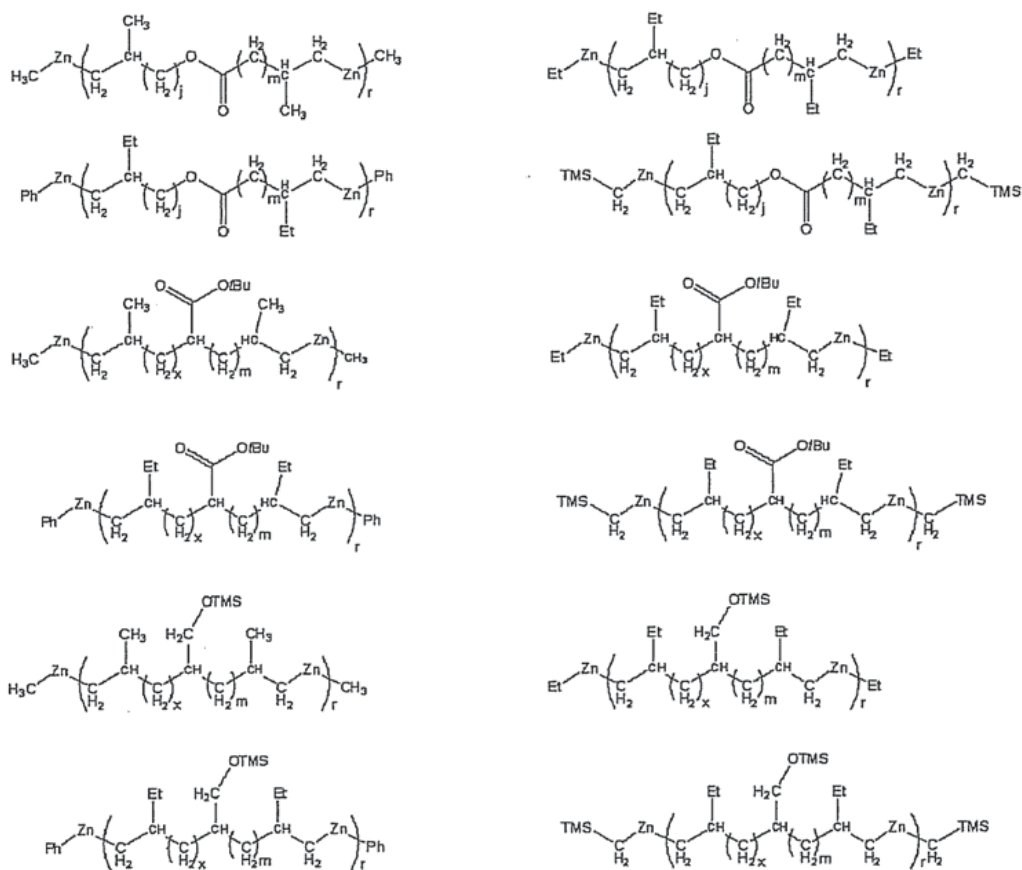
[Fórmula química 22]



[Fórmula química 23]

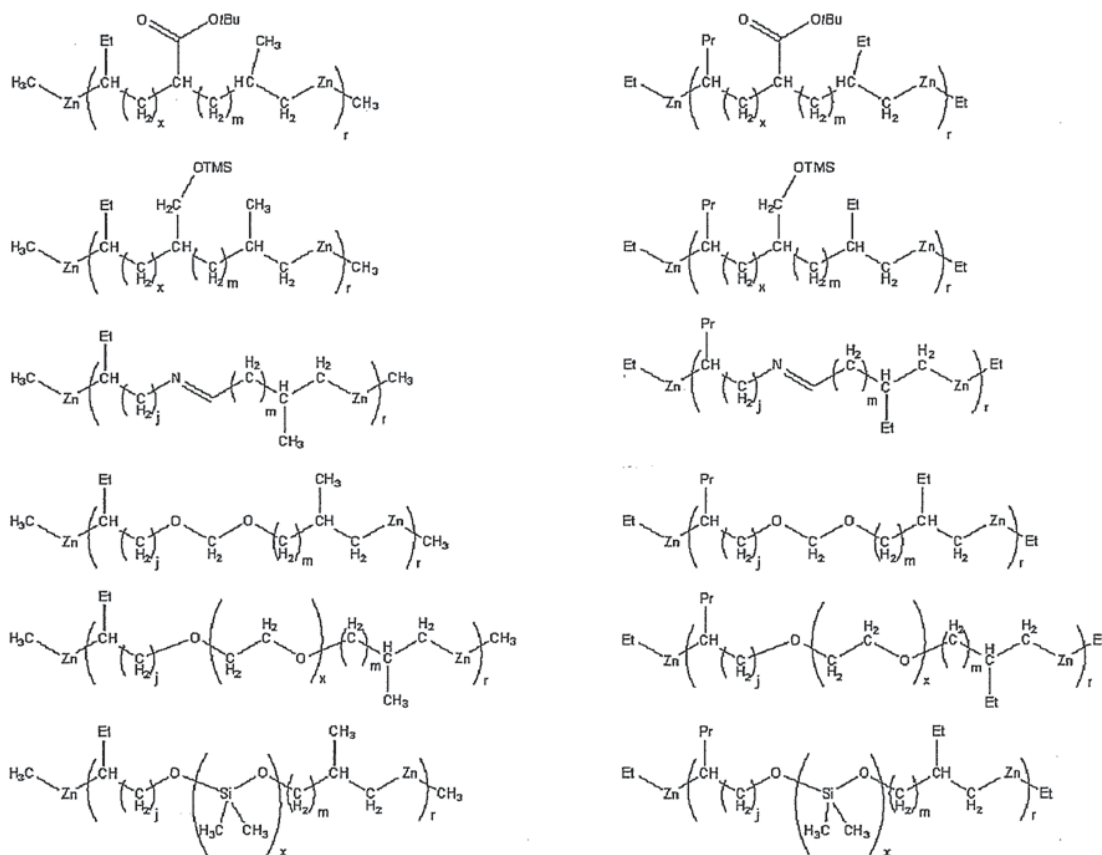


[Fórmula química 24]





[Fórmula química 27]



[Método para producir un Compuesto Organometálica (1)]

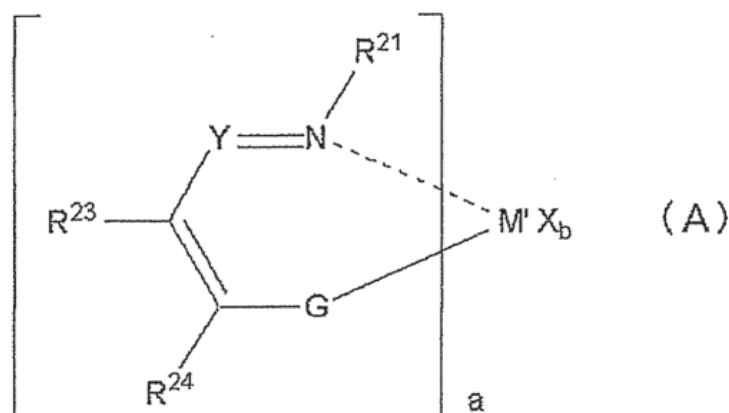
5 El compuesto organometálico (1) de la presente invención puede producirse mediante reacciones tales como una reacción entre un cinc halogenado y un organolitio correspondiente o reactivo de Grignard, o una reacción de intercambio de boro cinc entre un compuesto de boro correspondiente y un alquilocinc, pero preferentemente se produce mediante un método usando un compuesto de metal de transición (a), que se describe más adelante, como catalizador. En lo sucesivo en el presente documento, el método para producir el compuesto organometálico (1) de la presente invención usando el compuesto de metal de transición (A) como catalizador se describe en detalle.

15 El método para producir el compuesto organometálico de la presente invención se caracteriza porque en presencia del compuesto de metal de transición (A) representado por la siguiente fórmula general, un compuesto de dieno (B) representado por la siguiente fórmula general se hace reaccionar con un compuesto organometálico (C) representado por la siguiente fórmula general, para obtener de este modo el compuesto organometálico (1) representado por la fórmula general (1).

Compuesto de metal de transición (A)

20 El compuesto de metal de transición (A) empleado en el método para producir el compuesto organometálico (1) de la presente invención se representa por la siguiente fórmula (A).

[Fórmula química 28]



En la fórmula general (A), M' es un átomo de metal de transición seleccionado entre los Grupos 3 a 11 de la tabla periódica de los elementos (el Grupo 3 incluye un lantánido y un actínido), preferentemente un átomo de metal de transición del Grupo 4 o 5, más preferentemente un átomo de metal de transición del Grupo 4, y los ejemplos específicos del mismo incluyen titanio, circonio y hafnio y uno particularmente preferible es zirconio.

En el presente documento, N...M' generalmente indica coordinación, pero en la presente invención, la coordinación puede ocurrir o puede no ocurrir.

a es un número entero de 1 a 3, que es el número de un ligando coordinado con el átomo de metal de transición M'. Cuando a es 2 o 3, los ligandos pueden ser iguales o diferentes entre sí y los ligandos plurales pueden estar unidos entre sí a través de uno o más grupos de unión seleccionados entre el grupo que consiste en un grupo hidrocarburo, un grupo que contiene silicio, un grupo que contiene germanio, un grupo que contiene estaño, un grupo que contiene boro, un grupo que contiene aluminio, un grupo que contiene fósforo, un grupo que contiene oxígeno, un grupo que contiene azufre y un grupo que contiene nitrógeno. a es preferentemente 1 o 2, más preferentemente 2.

X es un átomo o un grupo seleccionado entre el grupo que consiste en un átomo de hidrógeno, un átomo de halógeno, un átomo de oxígeno, un grupo hidrocarburo, un grupo que contiene silicio, un grupo que contiene germanio, un grupo que contiene estaño, un grupo que contiene boro, un grupo que contiene aluminio, un grupo que contiene fósforo, un grupo que contiene oxígeno, un grupo que contiene azufre, un grupo que contiene nitrógeno, un grupo que contiene halógeno y un resto de compuesto heterocíclico. b es un número entero de 0 a 3, que es el número de X. Cuando b es 2 o 3, X pueden ser iguales o diferentes entre sí y X plurales pueden estar unidos entre sí para formar un anillo.

Los ejemplos del átomo de halógeno incluyen un átomo de flúor, un átomo de cloro, un átomo de bromo y un átomo de yodo.

Los ejemplos del grupo hidrocarburo incluyen grupos alquilo tales como metilo, etilo, propilo, butilo, hexilo, octilo, nonilo, dodecilo, eicosilo; grupos cicloalquilo que tienen de 3 a 30 átomos de carbono, tales como ciclopentilo, ciclohexilo, norbornilo y adamantilo; grupos alqueno tales como vinilo, propenilo y ciclohexenilo; grupos alquil arilo tales como bencilo, fenil etilo y fenil propilo; y grupos arilo tales como fenilo, toliilo, dimetil fenilo, trimetil fenilo, etil fenilo, propil fenilo, bifenilo, naftilo, metil naftilo, antrilo y fenantrilo.

El grupo que contiene silicio es un grupo que tiene de 1 a 5 átomos de silicio en un resto y que excluye un resto de compuesto heterocíclico. Los ejemplos específicos del mismo incluyen grupos sililo sustituidos con hidrocarburo tales como fenil sililo, difenil sililo, trimetil sililo, trietil sililo, tripropil sililo, triciclohexil sililo, trifenil sililo, metil difenil sililo, tritolil sililo y trinafil sililo; grupos silil éter sustituidos con hidrocarburo tales como trimetil silil éter; grupos alquilo sustituidos con silicio, tales como trimetil silil metilo; y grupos arilo sustituidos con silicio tales como trimetil silil fenilo. Cuando el grupo que contiene silicio contiene un átomo de carbono, el número del átomo de carbono es de 1 a 30, preferentemente de 1 a 20.

El grupo que contiene germanio es un grupo que tiene un átomo de germanio y que excluye un resto de compuesto heterocíclico. Los ejemplos del mismo incluyen aquellos en los que el silicio del grupo que contiene silicio anterior está sustituido con germanio. El grupo que contiene estaño es un grupo que tiene un átomo de estaño excluyendo un resto de compuesto heterocíclico. Los ejemplos del mismo incluyen aquellos en los que el silicio del grupo que contiene silicio anterior está sustituido con estaño.



El grupo que contiene boro es un grupo que tiene de 1 a 5 átomos de boro en un grupo y que excluye un resto de compuesto heterocíclico. Los ejemplos específicos del mismo incluyen  $BR_4$  (R es un átomo de hidrógeno, un grupo alquilo, un grupo arilo que tiene opcionalmente un sustituyente, un átomo de halógeno o similares).

- 5 El grupo que contiene aluminio es un grupo que tiene de 1 a 5 átomos de aluminio en un grupo y que excluye un resto de compuesto heterocíclico. Los ejemplos específicos del mismo incluyen  $AlR_4$  (R es un átomo de hidrógeno, un grupo alquilo, un grupo arilo que tiene opcionalmente un sustituyente, un átomo de halógeno o similares).

- 10 El grupo que contiene fósforo es un grupo que tiene de 1 a 5 átomos de fósforo en un grupo y que excluye un resto de compuesto heterocíclico. Los ejemplos específicos del mismo incluyen grupos trialkil fosfina tales como trimetil fosfina, tributil fosfina y triciclohexil fosfina; grupos triaril fosfina tales como trifenil fosfina y tritolil fosfina; grupos fosfito (grupos fosfuro) tales como fosfito de metilo, fosfito de etilo y fosfito de fenilo; grupo fosfónico; y grupo ácido fosfínico.

- 15 El grupo que contiene oxígeno es un grupo que tiene de 1 a 5 átomos de oxígeno en un grupo y que excluye un resto de compuesto heterocíclico. Los ejemplos específicos del mismo incluyen grupo hidroxilo; grupos alcoxi tales como metoxi, etoxi, propoxi y butoxi; grupos ariloxi tales como fenoxi, metil fenoxi, dimetil fenoxi y naftoxi; grupos aril alcoxi tales como fenil metoxi y fenil etoxi; grupo acetoxi; y grupo carbonilo. Cuando el grupo que contiene oxígeno contiene un átomo de carbono, el número del átomo de carbono es de 1 a 30, preferentemente de 1 a 20.

- 20 El grupo que contiene azufre es un grupo que tiene de 1 a 5 átomos de azufre en un grupo y que excluye un resto de compuesto heterocíclico. Los ejemplos específicos del mismo incluyen grupos sulfonato tales como sulfonato de metilo, sulfonato de trifluorometano, sulfonato de fenilo, sulfonato de bencilo, sulfonato de p-tolueno, sulfonato de trimetilbenceno, sulfonato de t-riisobutil benceno, sulfonato de p-clorobenceno y sulfonato de pentafluorobenceno; grupos sulfinato, tales como sulfinato de metilo, sulfinato de fenilo, sulfinato de bencilo, sulfinato de p-tolueno, sulfinato de trimetilbenceno y sulfinato de pentafluorobenceno; grupos alquiltio; y grupos ariltio. Cuando el grupo que contiene azufre contiene un átomo de carbono, el número del átomo de carbono es de 1 a 30, preferentemente de 1 a 20.

- 30 El grupo que contiene nitrógeno es un grupo que tiene de 1 a 5 átomos de nitrógeno en un grupo y que excluye un resto de compuesto heterocíclico. Los ejemplos específicos del mismo incluyen grupos amino; grupos alquil amino tales como metil amino, dimetil amino, dietil amino, dipropil amino, dibutil amino y dicitclohexil amino; y grupos aril amino o grupos alquil aril amino, tal como fenil amino, difenil amino, ditolil amino, dinaftil amino y metilfenil amino.

- 35 El grupo que contiene halógeno es un grupo que tiene un átomo de halógeno y que excluye un resto de compuesto heterocíclico. Los ejemplos del mismo incluyen grupos que contienen flúor tales como  $PF_6$  y  $BF_4$ , grupos que contienen cloro tales como  $ClO_4$  y  $SbCl_6$ , y grupos que contienen yodo, tales como  $IO_4$ . Los grupos que contienen halógeno también incluyen grupos en los que al menos un hidrógeno de los grupos hidrocarburo que tienen de 1 a 20 átomos de carbono está sustituido con un halógeno.

- 40 Los ejemplos del resto de compuesto heterocíclico incluyen restos de compuestos que contienen nitrógeno tales como pirrol, piridina, pirimidina, quinolina y triazina, compuestos que contienen oxígeno tales como furano y pirano, y compuestos que contienen azufre tales como tiofeno; y grupos en los que estos restos de compuestos heterocíclicos están sustituidos adicionalmente con sustituyentes tales como grupos alquilo y grupos alcoxi que tienen de 1 a 30 átomos de carbono, preferentemente de 1 a 20 átomos de carbono. Los restos de compuestos heterocíclicos no incluyen los grupos que contienen nitrógeno anteriores, los grupos que contienen oxígeno ni los grupos que contienen azufre.

- 50 Y es un átomo de nitrógeno o un átomo de carbono que tiene un sustituyente  $R^{22}$ , que es  $-C(R^{22})-$ .

G es un átomo de oxígeno, un átomo de azufre, un átomo de selenio o un átomo de nitrógeno que tiene un sustituyente  $R^{25}$ , es decir  $-N(R^{25})-$ .

- 55  $R^{21}$  a  $R^{25}$  pueden ser iguales o diferentes entre sí y son un átomo o un grupo seleccionado entre el grupo que consiste en un grupo hidrocarburo, un átomo de halógeno, un átomo de hidrógeno, un grupo sililo sustituido con hidrocarburo, un grupo que contiene oxígeno, un grupo que contiene nitrógeno, un grupo que contiene azufre, un grupo que contiene boro, un grupo que contiene aluminio, un grupo que contiene fósforo, un grupo que contiene halógeno, un resto de compuesto heterocíclico, un grupo que contiene silicio, un grupo que contiene germanio y un grupo que contiene estaño. Dos o más de  $R^{22}$  a  $R^{25}$  pueden estar unidos entre sí para formar un anillo. Cuando a es 2 o 3, los  $R^{21}$ , los  $R^{22}$ , los  $R^{23}$ , los  $R^{24}$  y los  $R^{25}$  pueden ser individualmente iguales o diferentes entre sí, y un grupo de  $R^{22}$ - $R^{25}$  contenido en uno cualquiera de los ligandos y un grupo de  $R^{22}$ - $R^{25}$  contenido en otro ligando pueden estar unidos.

- 65 Los ejemplos del átomo de halógeno, el grupo que contiene oxígeno, el grupo que contiene nitrógeno, el grupo que contiene azufre, el grupo que contiene boro, el grupo que contiene aluminio, el grupo que contiene fósforo, el resto de compuesto heterocíclico, el grupo que contiene silicio, el grupo que contiene germanio y el grupo que contiene

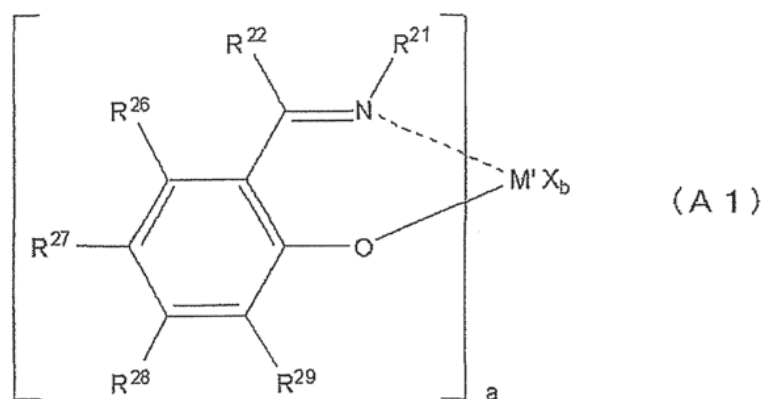
estaño, representados por  $R^{21}$  a  $R^{25}$  pueden ser los mencionados como los ejemplos de X de la fórmula general (a). Los ejemplos del grupo que contiene halógeno representado por  $R^{21}$  a  $R^{25}$  incluyen aquellos en los que al menos un hidrógeno de un grupo hidrocarburo está sustituido con un halógeno, teniendo el grupo hidrocarburo de 1 a 30 átomos de carbono, preferentemente de 1 a 20 átomos de carbono, por ejemplo, grupos alquilo tales como metilo, etilo, propilo, butilo, hexilo, octilo, nonilo, dodecilo y eicosilo; grupos cicloalquilo que tienen de 3 a 30 átomos de carbono, tales como ciclopentilo, ciclohexilo, norbornilo y adamantilo; grupos alqueno tales como vinilo, propenilo y ciclohexenilo; grupos aril alquilo tales como bencilo, fenil etilo y fenil propilo; y grupos arilo tales como fenilo, toliilo, dimetil fenilo, trimetil fenilo, etil fenilo, propil fenilo, bifenilo, n aftilo, metil naftilo, antrilo y fenantrilo. Los ejemplos específicos de los mismos incluyen trifluorometilo, perfluorometilo, pentafluorofenilo, perfluorohexilo, triclorometilo, percloroetilo, pentaclorofenilo y perclorohexilo.

Los ejemplos del grupo hidrocarburo representado por  $R^{21}$  a  $R^{25}$  incluyen aquellos que tienen de 1 a 30 átomos de carbono y los ejemplos específicos del mismo incluyen grupos alquilo lineales o ramificados que tienen de 1 a 30 átomos de carbono, preferentemente de 1 a 20 átomos de carbono, tales como metilo, etilo, n-propilo, isopropilo, n-butilo, isobutilo, sec-butilo, terc-butilo, n-pentilo, neopentilo y n-hexilo; grupos alqueno ramificados que tienen de 2 a 30 átomos de carbono, preferentemente de 2 a 20 átomos de carbono, tales como vinilo, alilo e isopropenilo; grupos alquilo lineales o ramificados que tienen de 2 a 30 átomos de carbono, preferentemente de 2 a 20 átomos de carbono, tales como etinilo y propargilo; grupos hidrocarburo saturados cíclicos que tienen de 3 a 30 átomos de carbono, preferentemente de 3 a 20 átomos de carbono, tales como ciclopropilo, ciclobutilo, ciclopentilo, ciclohexilo, norbornilo y adamantilo; grupos hidrocarburo insaturados cíclicos que tienen de 5 a 30 átomos de carbono, tales como ciclopentadienilo, indenilo y fluorenilo; grupos arilo que tienen de 6 a 30 átomos de carbono, preferentemente de 6 a 20 átomos de carbono, tales como fenilo, bencilo, naftilo, bifenilo, terfenilo, fenantrilo y antrilo; y grupos arilo sustituidos con alquilo, tales como toliilo, isopropil fenilo, terc-butil fenilo, dimetil fenilo y di-terc-butil fenilo. Los grupos hidrocarburo anteriores pueden estar sustituidos con otros grupos hidrocarburo, incluyendo ejemplos de los mismos grupos alquilo sustituidos con grupos arilo tales como bencilo y cumilo.

Los ejemplos del grupo sililo sustituido con hidrocarburo representado por  $R^{21}$  a  $R^{25}$  incluyen grupos teniendo un número total de átomos de carbono de 1 a 30. Los ejemplos específicos del mismo incluyen metil sililo, dimetil sililo, trimetil sililo, etil sililo, dietil sililo, trietil sililo, difenilmetil sililo, trifenil sililo, dimetilfenil sililo, dimetil(pentafluorofenil)sililo. De éstos, son preferibles metil sililo, dimetil sililo, trimetil sililo, etil sililo, dietil sililo, trietil sililo, dimetilfenil sililo y trifenil sililo. Son particularmente preferibles trimetil sililo, trietil sililo, trifenil sililo y dimetilfenil sililo.

Del compuesto de metal de transición (A), es preferible un compuesto de metal de transición (A1) representado por la siguiente fórmula general.

[Fórmula química 29]



En la fórmula general (A1),  $M'$ , A, X, B,  $R^{21}$  y  $R^{22}$  se definen cada uno de la misma manera que en la fórmula general (A).

$R^{26}$  a  $R^{29}$  pueden ser iguales o diferentes entre sí y son un átomo o un grupo seleccionado entre el grupo que consiste en un átomo de hidrógeno, un grupo hidrocarburo, un átomo de halógeno, un grupo sililo sustituido con hidrocarburo, un grupo que contiene oxígeno, un grupo que contiene nitrógeno, un grupo que contiene azufre, un grupo que contiene boro, un grupo que contiene aluminio, un grupo que contiene fósforo, un grupo que contiene halógeno, un resto de compuesto heterocíclico, un grupo que contiene silicio, un grupo que contiene germanio y un grupo que contiene estaño. De estos, dos o más pueden estar unidos entre sí para formar un anillo. Cuando a es 2 o

3, los R<sup>21</sup>, los R<sup>22</sup>, los R<sup>26</sup>, los R<sup>27</sup>, los R<sup>28</sup> y los R<sup>29</sup> pueden ser individualmente iguales o diferentes entre sí y un grupo de R<sup>22</sup> y R<sup>26</sup>-R<sup>29</sup> contenido en uno cualquiera de los ligandos y un grupo de R<sup>22</sup> y R<sup>26</sup>-R<sup>29</sup> contenido en otro ligando pueden estar unidos.

5 Los ejemplos del grupo hidrocarburo, el átomo de halógeno, el grupo sililo sustituido con hidrocarburo, el grupo que contiene oxígeno, el grupo que contiene nitrógeno, el grupo que contiene azufre, el grupo que contiene boro, el grupo que contiene aluminio, el grupo que contiene fósforo, el grupo que contiene halógeno, el resto de compuesto heterocíclico, el grupo que contiene silicio, el grupo que contiene germanio y el grupo que contiene estaño, representado por R<sup>26</sup> a R<sup>29</sup>, pueden ser los mencionados como los ejemplos de aquellos representados por R<sup>22</sup> a R<sup>25</sup>.

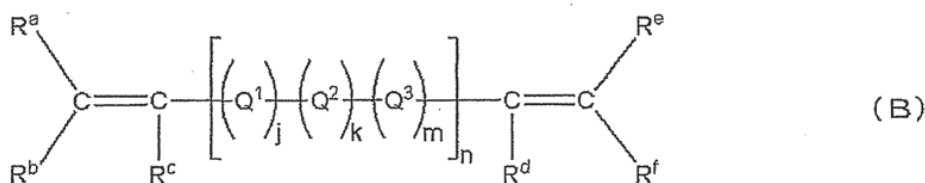
15 Como los compuestos de metales de transición (A) y (A1), pueden emplearse los descritos en el documento JP-A-2000-191713, el documento JP-A-2000-239312, el folleto WO01/055231, el documento JP-A-2003-40953 o similares, según sea necesario.

En el método de la presente invención, como el compuesto de metal de transición (A), puede emplearse un solo tipo de compuesto únicamente, pero, según sea necesario, pueden combinarse y emplearse dos o más tipos del compuesto de metal de transición (A) diferentes en estructura.

## 20 Compuesto de dieno (B)

El compuesto de dieno (B) empleado en el método para producir el compuesto organometálico (1) de la presente invención es un compuesto representado por la siguiente fórmula general.

[Fórmula química 30]



25 En la fórmula general (B), Q<sup>1</sup>, Q<sup>2</sup>, Q<sup>3</sup>, j, k, m y n se definen cada uno de la misma manera que en la fórmula general (1).

30 R<sup>a</sup> a R<sup>f</sup> son cada uno independientemente un átomo de hidrógeno o un grupo hidrocarburo que tiene de 1 a 20 átomos de carbono, y puede ser un grupo formado mediante la sustitución de una parte de los átomos de hidrógeno del grupo hidrocarburo con un sustituyente que contiene un heteroátomo excluyendo carbono e hidrógeno. Los ejemplos del grupo hidrocarburo incluyen grupos alquilo, grupos arilo y grupos aril alquilo que tienen de 1 a 20 átomos de carbono. Los ejemplos específicos de los mismos incluyen grupo metilo, grupo etilo, grupo propilo, grupo isopropilo, grupo n-butilo, grupo sec-butilo, grupo terc-butilo, grupo isobutilo, grupo pentilo, grupo hexilo, grupo octilo, grupo decilo, grupo ciclohexilo, grupo fenilo, grupo toliilo, grupo naftilo, grupo bencilo y grupo 2-feniletilo. Como de R<sup>a</sup> a R<sup>f</sup>, del átomo y los grupos anteriores, son preferibles un átomo de hidrógeno, grupo metilo, grupo etilo, grupo propilo, grupo fenilo, grupo bencilo, grupo 2-feniletilo y más preferibles son un átomo de hidrógeno, grupo metilo, grupo etilo y grupo fenilo y aún más preferible un átomo de hidrógeno y grupo metilo.

40 Los ejemplos específicos del compuesto de dieno incluyen compuestos de dieno conjugado tales como 1,3-butadieno, 1,3-pentadieno, 1,3-hexadieno, 1,3-heptadieno, 1,3-octadieno, 1-fenil-1,3-butadieno, 1-fenil-2,4-pentadieno, isopreno, 2-etil-1,3-butadieno, 2-propil-1,3-butadieno, 2-butil-1,3-butadieno, 2-pentil-1,3-butadieno, 2-hexil-1,3-butadieno, 2-heptil-1,3-butadieno, 2-octil-1,3-butadieno y 2-fenil-1,3-butadieno;

45 compuestos de dieno no conjugado en cadena tales como 1,4-pentadieno, 3-metil-1,4-pentadieno, 1,4-hexadieno, 3-metil-1,4-hexadieno, 4-metil-1,4-hexadieno, 5-metil-1,4-hexadieno, 4,5-dimetil-1,4-hexadieno, 1,5-hexadieno, 3-metil-1,5-hexadieno, 1,5-heptadieno, 3-metil-1,5-heptadieno, 1,6-heptadieno, 4-metil-1,6-heptadieno, 1,6-octadieno, 4-metil-1,6-octadieno, 7-metil-1,6-octadieno, 1,7-octadieno, 4-metil-1,7-octadieno, 1,7-nonadieno, 4-metil-1,7-nonadieno, 1,8-nonadieno, 4-metil-1,8-nonadieno, 1,8-decadieno, 5-metil-1,8-decadieno, 1,9-decadieno, 5-metil-1,9-decadieno, 1,10-undecadieno y 1,11-dodecadieno;

50 compuestos de trieno tales como 1,4,7-octatrieno, 3-metil-1,4,7-octatrieno, 1,5,9-decatrieno y 4-metil-1,5,9-decatrieno; compuestos de olefina cíclica tales como 5-metilen-2-norborneno, 5-vinil-2-norborneno, 5-(2-propenil)-2-norborneno, 5-(3-butenil)-2-norborneno, 5-(1-metil-2-propenil)-2-norborneno, 5-(4-pentenil)-2-norborneno, 5-(1-metil-3-butenil)-2-norborneno, 5-(5-hexenil)-2-norborneno, 5-(1-metil-4-pentenil)-2-norborneno, 5-(2,3-dimetil-3-butenil)-2-

- norborneno, 5 -(2-etil-3-butenil)-2-norborneno, 5 -(6-heptenil)-2-norborneno, 5 -(3-metil-5-hexenil)-2-norborneno, 5-(3,4-dimetil-4-pentenil)-2-norborneno, 5 -(3-etil-4-pentenil)-2-norborneno, 5 -(7-octenil)-2-norborneno, 5 -(2-metil-6-heptenil)-2-norborneno, 5 -(1,2-dimetil-5-hexenil)-2-norborneno, 5 -(5-etil-5-hexenil)-2-norborneno, 5 -(1,2,3-trimetil-4-pentenil)-2-norborneno, d iciclopentadieno, 5 -etiliden-2-norborneno, 5 -isopropiliden-2-norborneno, 1, 1'-bi(3-ciclopenteno), di (3-ciclopentenil)metano, 1, 3-di(3-ciclopentenil)propano, 1, 4-di(3-ciclopentenil)butano, di(3-ciclopentenil)pentano, 3 -metil-1,1'-bi(3-ciclopenteno), 4 -(3-ciclopentenilmetil)-1-metil-1-ciclopenteno, 4 -(3-(3-ciclopentenil)propil)-1-metil-1-ciclopenteno, 4-(4-(3-ciclopentenil)butil)-1-metil-1-ciclopenteno, 1,1'-bi(3-ciclohexeno), di(3-ciclohexenil)metano, 1,3-di(3-ciclohexenil)propano, 1,4-di(3-ciclohexenil)butano y 1,5-di(3-ciclohexenil)pentano; compuestos de dieno cíclicos tales como 6-clorometil-5-isopropenil-2-norborneno;
- 10 compuestos de di eno que c ontienen halógeno tales como 3-cloro-1,4-pentadieno, 3-bromo-3-metil-1,4-pentadieno, 3-cloro-1,4-hexadieno, 3-cloro-3-metil-1,4-hexadieno, 3-bromo-4-metil-1,4-hexadieno, 3-cloro-5-metil-1,4-hexadieno, 3-bromo-4,5-dimetil-1,4-hexadieno, 3-bromo-1,5-hexadieno, 3-cloro-3-metil-1,5-hexadieno, 3-bromo-1,5-heptadieno, 3-cloro-3-metil-1,5-heptadieno, 4 -bromo-1,6-heptadieno, 3-cloro-4-metil-1,6-heptadieno, 4-bromo-1,6-octadieno, 3 -cloro-4-metil-1,6-octadieno, 4 -bromo-7-metil-1,6-octadieno, 4 -cloro-1,7-octadieno, 3-cloro-4-metil-1,7-octadieno, 4 -bromo-1,7-nonadieno, 4 -bromo-4-metil-1,7-nonadieno, 4 -bromo-1,8-nonadieno, 3-cloro-4-metil-1,8-nonadieno, 5-bromo-1,8-decadieno, 3-cloro-5-metil-1,8-decadieno, 5 -bromo-1,9-decadieno, 3-cloro-5-metil-1,9-decadieno, 5-bromo-1,10-undecadieno y 5-bromo-1,11-dodecadieno;
- 15 dienos que contienen silano tales como bisviniloxi silano, dimetil bisviniloxi silano, bisaliloxi silano, dimetilbis aliloxi silano, di(3-butenil)dimetil silano, bis(3-buteniloxi)silano, di metilbis(3-buteniloxi)silano, di (4-pentenil)dimetil silano, bis(4-penteniloxi)silano, bis(4-penteniloxi)dimetilsilano, di(5-hexenil)dimetilsilano, bis(5-hexeniloxi)silano y bis(5-hexeniloxi)dimetilsilano;
- 20 compuestos de dieno que c ontienen éster tales c omo 3 -butenilo-4-pentenoato, 4 -pentenil-4-pentenoato, 4 -metoxicarbonil-1,7-octadieno y 4-metoxicarbonil-1,9-decadieno;
- 25 compuestos de dieno que contienen éter tales como divinil éter, dialil éter, di(4-buteniloxi)éter y di(5-hexeniloxi)éter;
- compuestos de dieno que contienen siloxi tales como 4-trimetil siloximetil-1,7-octadieno y 4-trimetil siloximetil-1,9-decadieno.

Estos compuestos de dieno están generalmente disponibles o pueden producirse mediante métodos conocidos.

- 30 En el m étodo de l a presente i nvención, c omo e l c ompuesto de d ieno ( B), puede e mplearse un solo tipo de compuesto únicamente, per o, según sea nec esario, pueden combinarse y emplearse dos o m ás clases del compuesto de dieno (B) diferentes en estructura.

#### Compuesto organometálico (C)

- 35 Un compuesto organometálico (C) empleado para producir el compuesto organometálico (1) de la presente invención es un compuesto representado por la siguiente fórmula general.  
[Fórmula química 31]

- 40 R-M-R (C)

- En la fórmula general (C), M es un átomo de magnesio, un átomo de cinc, un grupo Al-R<sup>11</sup>, o un grupo Ga-R<sup>11</sup>, y R<sup>11</sup> es un átomo de hidrógeno, un grupo hidrocarburo, un átomo de halógeno, un grupo que contiene silicio o un grupo que contiene oxígeno. Pueden mencionarse ejemplos del grupo hidrocarburo, el átomo de halógeno, el grupo que contiene silicio, el grupo que contiene oxígeno, representado por R<sup>11</sup>, como los ejemplos definidos para la fórmula general (1). M es preferentemente un átomo de cinc o un grupo Al-R<sup>11</sup>, más preferentemente un átomo de cinc.
- 45

- Dos R son cada uno independientemente un grupo hidrocarburo que tiene de 1 a 20 átomos de carbono, y pueden ser un grupo formado mediante la sustitución de una parte de los átomos de hidrógeno del grupo hidrocarburo con un sustituyente que contiene un heteroátomo excluyendo carbono e hidrógeno.
- 50

- Los ejemplos del grupo hidrocarburo, representados por R, incluyen grupos alquilo, grupos arilo y grupos aril alquilo, que tienen de 1 a 20 átomos de c arbono. L os ejemplos específicos del mismo incluyen grupo metilo, grupo etilo, grupo propilo, gr upo isopropilo, grupo n-butilo, grupo isobutilo, grupo sec-butilo, grupo terc-butilo, grupo pentilo, grupo neopentilo, grupo hexilo, grupo octilo, grupo decilo, grupo ciclohexilo, grupo fenilo, grupo toluilo, grupo naftilo, grupo bencilo, gr upo 2-feniletilo, grupo trimetil silil metilo, grupo trietil silil metil, grupo trimetoxi silil metilo, g rupo triisopropil silil metilo, grupo trifenil silil metilo, grupo terc-butil dimetil silil metilo, grupo trimetil silil etilo, grupo trietil silil etilo, grupo trimetoxi silil etilo, grupo triisopropil silil etilo, grupo trifenil silil etilo y grupo terc-butil dimetil silil etilo. De estos grupos hidrocarburo, son preferibles el grupo metilo, grupo etilo, grupo propilo, grupo isopropilo, grupo n-butilo, grupo isobutilo, grupo sec-butilo, grupo terc-butilo, grupo neopentilo, grupo octilo, grupo fenilo, grupo bencilo, grupo trimetil silil metilo y grupo trietil silil metilo; y son más preferibles el grupo metilo, grupo etilo, grupo isopropilo, grupo isobutilo, grupo terc-butilo, grupo fenilo, grupo bencilo y grupo trimetil silil metilo; y son aún más preferibles el grupo metilo, grupo etilo, gr upo isopropilo, gr upo fenilo y grupo trimetil silil metilo. E stos s e emplean solos o en combinación de dos o más tipos.
- 55
- 60

- 65 Los ejemplos específicos del compuesto organometálico (C) incluyen:

compuestos de organomagnesio tales como dibutil magnesio y dihexil magnesio, compuestos de organocinc tales como dimetil cinc, dietilcinc, dipropil cinc, diisopropil cinc, dibutil cinc, difenil cinc, dibencil cinc y bis(trimetilsililmetil)cinc;

5 compuestos de organoaluminio tales como tri-n-alquil aluminios por ejemplo, trimetil aluminio, trietil aluminio, tri-n-butil aluminio, tripropil aluminio, tripentil aluminio, trihexil aluminio, trioctil aluminio y tridecil aluminio; a lquil aluminios triramificadas, por ejemplo, triisopropil aluminio, triisobutil aluminio, tri-sec-butil aluminio, tri-terc-butil aluminio, tri-2-metil butil aluminio, tri-3-metil butil aluminio, tri-2-metil pentil aluminio, tri-3-metil pentil aluminio, tri-4-metil pentil aluminio, tri-2-metil hexil aluminio, tri-3-metil hexil aluminio y tri-2-etil hexil aluminio; tricicloalquil aluminios, por ejemplo, triciclohexil aluminio y triciclooctil aluminio; triaril aluminios, por ejemplo, trifenil aluminio y tritolil aluminio; hidruros de dialquil aluminio, por ejemplo, hidruro de isobutil aluminio; y compuestos de organogalio tales como trimetil galio, trietil galio, tripropil galio y tributil galio.

10 En la presente invención, como el compuesto organometálico (C), puede emplearse únicamente un solo tipo de compuesto, pero, según sea necesario, pueden combinarse y emplearse dos o más clases del compuesto organometálico (C) diferentes en estructura.

15 Con respecto a estos compuestos organometálicos, se ha sabido que la mezcla de compuestos organometálicos que tienen el mismo metal permite que transcurra el intercambio de sustituyentes. En otras palabras, el empleo de dos o más tipos de compuestos organometálicos que tienen el mismo metal en una relación arbitraria puede dar como resultado el efecto de proporcionar un compuesto organometálico que tiene un sustituyente arbitrario en una relación arbitraria.

20 Además, mediante la adición secuencial de dos o más compuestos organometálicos diferentes en reactividad o mediante la mezcla previa de dichos compuestos y la adición de la mezcla, es posible introducir preferentemente sustituyentes arbitrarios en los extremos representados por R y R<sup>10</sup> en la fórmula general (1), utilizando los dos tipos diferentes de reactividades. De este modo, la reactividad en los extremos puede controlarse.

25 Estos compuestos organometálicos (C) están fácilmente disponibles en la industria o pueden sintetizarse mediante métodos conocidos tales como el intercambio de halógeno metal y el intercambio de metales.

### 30 Componente cocatalizador (D)

En el método para producir el compuesto organometálico (1) de la presente invención, en presencia del compuesto de metal de transición (A) como catalizador, se hace reaccionar el compuesto de dieno (B) con el compuesto organometálico (C). En una realización preferible de la producción, junto con el compuesto de metal de transición (A) como catalizador, se usa un componente cocatalizador (D). Los ejemplos del componente cocatalizador (D) incluyen al menos un compuesto seleccionado entre:

40 (D-1) un compuesto organometálico,  
(D-2) un oxo-compuesto de organoaluminio, y  
(D-3) un compuesto que reacciona con el compuesto de metal de transición para formar un par iónico.

45 (D-1) Los ejemplos específicos del compuesto organometálico incluyen compuestos organometálicos de los Grupos 1, 2, 12 y 13 de la tabla periódica, tal como se describe a continuación.

(D-1a) Compuestos de organoaluminio representados por la fórmula general: R<sup>a</sup><sub>m</sub>Al(OR<sup>b</sup>)<sub>n</sub>H<sub>p</sub>X<sub>q</sub>.

50 En la fórmula, R<sup>a</sup> y R<sup>b</sup> pueden ser iguales o diferentes entre sí y son grupos hidrocarburo que tienen de 1 a 15 átomos de carbono, preferentemente de 1 a 4 átomos de carbono; X es un átomo de halógeno; y m satisface 0 < m ≤ 3, n satisface 0 ≤ n < 3, p satisface 0 ≤ p < 3 y q satisface 0 ≤ q < 3 y m + n + p + q = 3.

(D-1b) Compuestos complejos de alquilo que contienen un metal del Grupo 1 de la tabla periódica y aluminio y representados por la siguiente fórmula: M<sup>2</sup>AlR<sup>a</sup><sub>4</sub>.

55 En la fórmula, M<sup>2</sup> es Li, Na o K; y R<sup>a</sup> es un grupo hidrocarburo que tiene de 1 a 15 átomos de carbono, y preferentemente de 1 a 4 átomos de carbono.

(D-1c) Compuestos de dialquilo que contienen un metal del Grupo 2 o del Grupo 12 de la tabla periódica y representados por la siguiente fórmula: R<sup>a</sup>R<sup>b</sup>M<sup>3</sup>.

60 En la fórmula, R<sup>a</sup> y R<sup>b</sup> pueden ser iguales o diferentes entre sí y son cada uno un grupo hidrocarburo que tiene de 1 a 15 átomos de carbono y preferentemente de 1 a 4 átomos de carbono; y M<sup>3</sup> es Mg, Zn o Cd.

Los ejemplos de los compuestos orgánicos de aluminio (D-1a) incluyen:

65 compuestos de organoaluminio representados por la siguiente fórmula: R<sup>a</sup><sub>m</sub>Al(OR<sup>b</sup>)<sub>3-m</sub>

En la fórmula,  $R^a$  y  $R^b$  puede ser iguales o diferentes entre sí y son cada uno un grupo hidrocarburo que tiene de 1 a 15 y preferentemente de 1 a 4 átomos de carbono; y  $m$  satisface preferentemente  $1,5 < m \leq 3$ ; compuestos de organoaluminio representados por la siguiente fórmula:  $R^a_mAlX_{3-m}$

- 5 En la fórmula,  $R^a$  es un grupo hidrocarburo que tiene de 1 a 15 átomos de carbono y preferentemente de 1 a 4 átomos de carbono;  $X$  es un átomo de halógeno; y  $m$  preferentemente satisface  $0 < m \leq 3$ ; compuestos de organoaluminio representados por la siguiente fórmula:  $R^a_mAlH_{3-m}$

- 10 En la fórmula,  $R^a$  es un grupo hidrocarburo que tiene de 1 a 15 átomos de carbono y preferentemente de 1 a 4 átomos de carbono; y  $m$  preferentemente satisface  $2 < m \leq 3$ ; y compuestos de organoaluminio representados por la siguiente fórmula:  $R^a_mA(OR^b)_nX_q$

- 15 En la fórmula,  $R^a$  y  $R^b$  pueden ser iguales o diferentes entre sí y son cada uno un grupo hidrocarburo que tiene de 1 a 15 átomos de carbono y preferentemente de 1 a 4 átomos de carbono;  $X$  es un átomo de halógeno;  $m$  satisface  $0 < m \leq 3$ ,  $n$  satisface  $0 < n \leq 3$ ,  $q$  satisface  $0 < q \leq 3$  y  $m + n + q = 3$ .

Los ejemplos específicos del compuesto de organoaluminio que pertenecen a (D-1a) incluyen tri(n-alkil)aluminios tales como trimetilaluminio, trietilaluminio, tri(n-butil)aluminio, tripropilaluminio, triisopentilaluminio, trihexilaluminio, trioctilaluminio y tridecilaluminio;

- 20 trialkilaluminios de cadena ramificada tales como triisopropilaluminio, triisobutilaluminio, tri(sec-butil)aluminio, tri(terc-butil)aluminio, tri(2-metilbutil)aluminio, tri(3-metilbutil)aluminio, tri(2-metilpentil)aluminio, tri(3-metilpentil)aluminio, tri(4-metilpentil)aluminio, tri(2-metilhexil)aluminio, tri(3-metilhexil)aluminio y tri(2-etilhexil)aluminio;

- 25 tricicloalkilaluminios tales como triciclohexilaluminio y triciclooctilaluminio;

- 25 triarilaluminios tales como trifenilaluminio y tritolilaluminio;

hidruros de dialquilaluminio tales como hidruro de diisobutilaluminio;

trialquenilaluminios tales como los representados por la fórmula  $(i-C_4H_9)_xAl_y(C_5H_{10})_z$  (en la que  $x$ ,  $y$  y  $z$  son cada uno un número positivo y  $z \geq 2x$ ) incluyendo los ejemplos triisoprenilaluminio;

- 30 alcóxidos de dialquilaluminio tales como metóxido de isobutilaluminio, etóxido de isobutilaluminio e isopropóxido de isobutilaluminio;

alcóxidos de dialquilaluminio tales como metóxido de dimetilaluminio, etóxido de dimetilaluminio y butóxido de dibutilaluminio;

sesquialcóxidos de dialquilaluminio tales como sesquietóxido de etilaluminio y sesquibutóxido de butilaluminio;

- 35 alcóxidos de dialquilaluminio tales como los que tienen una composición promedio representada por  $R^a_{2,5}Al(OR^b)_{0,5}$ ;

arilóxidos de dialquilaluminio tales como fenóxido de dimetilaluminio, (2,6-di-t-butil-4-metilfenóxido) de dimetilaluminio, bis(2,6-di-t-butil-4-metilfenóxido) de etilaluminio, (2,6-di-t-butil-4-metilfenóxido) de diisobutilaluminio y (2,6-di-t-butil-4-metilfenóxido) de isobutilaluminio;

- 40 haluros de dialquilaluminio tales como cloruro de dimetilaluminio, cloruro de dietilaluminio, cloruro de dibutilaluminio, bromuro de dietilaluminio y cloruro de diisobutilaluminio;

sesquihaluros de dialquilaluminio tales como sesquicloruro de etilaluminio, sesquicloruro de butilaluminio y sesquibromuro de etilaluminio;

alquilaluminios parcialmente halogenados tales como dihaluros de dialquilaluminio incluyendo dicloruro de etilaluminio, dicloruro de propilaluminio y dibromuro de butilaluminio;

- 45 hidruros de dialquilaluminio tales como hidruro de dietilaluminio e hidruro de dibutilaluminio;

alquilaluminios parcialmente hidrogenados tales como dihidruros de dialquilaluminio incluyendo dihidruro de etilaluminio y dihidruro de propilaluminio; y

alquilaluminios parcialmente alcoxilados y halogenados tales como etoxicloruro de etilaluminio, butoxicloruro de butilaluminio y etoxibromuro de etilaluminio.

- 50 También son empleables compuestos análogos a (D-1a). Los ejemplos de dichos compuestos incluyen compuestos de organoaluminio, en los que dos o más compuestos de aluminio están unidos a través de un átomo de nitrógeno, tales como  $(C_2H_5)_2AlN(C_2H_5)Al(C_2H_5)_2$ .

- 55 Los ejemplos de los compuestos que pertenecen a (D-1b) incluyen  $LiAl(C_2H_5)_4$  y  $LiAl(C_7H_{15})_4$ .

Los ejemplos de otros compuestos como los compuestos organometálicos (D-1) incluyen metil-litio, etil-litio, propil-litio, butil-litio, bromuro de metilmagnesio, cloruro de metilmagnesio, bromuro de etilmagnesio, cloruro de etilmagnesio, bromuro de propilmagnesio, cloruro de propilmagnesio, bromuro de butilmagnesio, cloruro de butilmagnesio, dimetil magnesio, dietil magnesio, dibutil magnesio y butiletil magnesio.

- 60 También son empleables combinaciones de compuestos capaces de formar los compuestos de organoaluminio anteriores en el sistema, incluyendo los ejemplos en una combinación de haluro de aluminio y alquil-litio y en una combinación de haluro de aluminio y alquilmagnesio.

- 65 De los compuestos organometálicos (D-1), son preferibles los compuestos de organoaluminio. Los compuestos

organometálicos (D-1) se usan solos o se usan dos o más tipos en combinación.

Los ox i-compuestos de or ganoaluminio ( D-2) pue den s er al uminoxanos c onvencionales u ox i-compuestos de organoaluminio insolubles en benceno como se describen en el documento JP-A-H02-78687.

5 Por ejemplo, puede prepararse aluminóxano convencional mediante los siguientes procedimientos y se obtiene generalmente en forma de una solución en un disolvente de hidrocarburo.

10 (1) Un compuesto de organoaluminio tal como trialquilaluminio se añade a una suspensión de medio de hidrocarburo de un compuesto que contiene agua de adsorción o una sal que contiene agua de cristalización, por ejemplo, hidrato de cloruro de magnesio, hidrato de sulfato de cobre, hidrato de sulfato de aluminio, hidrato de sulfato de níquel o hidrato de cloruro ceroso, para permitir que el compuesto de organoaluminio reaccione con el agua de adsorción o el agua de cristalización.

15 (2) Se permite que agua, hielo o vapor de agua actúen directamente sobre un compuesto de organoaluminio tal como trialquilaluminio en un medio tal como benceno, tolueno, éter etílico o tetrahidrofurano.

(3) Se permite que un óxido de organoestaño tal como óxido de dimetilestaño u óxido de dibutilestaño reaccione con un compuesto de organoaluminio tal como trialquilaluminio en un medio tal como decano, benceno o tolueno.

20 El aluminóxano puede contener una pequeña cantidad de un componente organometálico. Además, el disolvente o el c ompuesto de or ganoaluminio sin reaccionar p uede separarse por d estilación d e l a s olución de al uminoxano recogida y el destilado pueden volver a disolverse en un disolvente o puede suspenderse en un disolvente malo para el aluminóxano.

25 Los ejemplos de los compuestos de organoaluminio utilizados en la preparación de aluminóxanos incluyen los compuestos de organoaluminio descritos anteriormente para los compuestos de organoaluminio que pertenecen a (D-1a).

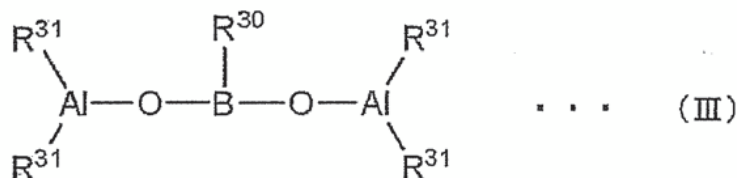
30 De estos, son preferibles los trialquilaluminios y tricicloalquilaluminios y es particularmente preferible el trimetilaluminio. Lo s c ompuestos de or ganoaluminio s e usan individualmente o se u san do s o m ás t ipos en combinación.

35 Los ejemplos de los disolventes utilizados en la preparación de aluminóxanos incluyen hidrocarburos aromáticos tales como benceno, t olueno, x ileno, c umeno y c imeno; hidrocarburos alifáticos t ales como pe ntano, hex ano, heptano, octano, decano, dodecano, hexadecano y octadecano; hidrocarburos alicíclicos tales como ciclopentano, ciclohexano, ciclooctano y metilciclopentano; fracciones de petróleo tales como gasolina, queroseno y aceite ligero; y haluros t ales como c loruros y bromuros de e stos h idrocarburos ar omáticos, al ifáticos y al icíclicos. T ambién s on empleables éteres tales como éter etílico y tetrahidrofurano. De los disolventes, son particularmente preferibles los hidrocarburos aromáticos o los hidrocarburos alifáticos.

40 El ox i-compuesto de organoaluminio insoluble en benceno contiene un componente de Al que es soluble en benceno a 60 °C, por l o ge neral en u na cantidad de no más d el 10 %, preferentemente no más de l 5 % y en particular preferentemente no más del 2 % en términos de átomos de Al. Es decir, el ox i-compuesto insoluble en benceno es preferentemente insoluble o difícilmente soluble en benceno.

45 Los ejemplos de los ox i-compuestos de organoaluminio incluyen adicionalmente ox i-compuestos de organoaluminio que contienen boro representados por la siguiente fórmula (III):

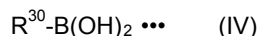
[Fórmula química 32]



50 En la fórmula, R<sup>30</sup> es un grupo hidrocarburo que tiene de 1 a 10 átomos de carbono; y R<sup>31</sup> pueden ser iguales o diferentes entre sí y son cada uno un átomo de hidrógeno, un átomo de halógeno o un grupo hidrocarburo que tiene de 1 a 10 átomos de carbono.

55 Los ox i-compuestos de or ganoaluminio que contienen b oro r epresentados por l a fórmula general ( III) pueden prepararse permitiendo que un ácido alquilborónico representado por la fórmula general (IV):

[Fórmula química 33]



5 (en la fórmula,  $R^{30}$  es el mismo grupo que se ha descrito anteriormente), para reaccionar con un compuesto de organoaluminio en un di solvente inerte a una temperatura de  $-80\text{ }^\circ\text{C}$  a temperatura ambiente durante 1 minuto a 24 horas en una atmósfera de gas inerte.

10 Los ejemplos de los ácidos alquilborónicos representados por la fórmula general (IV) incluyen ácido metilborónico, ácido etilborónico, ácido isopropilborónico, ácido n-propilborónico, ácido n-butilborónico, ácido isobutilborónico, ácido n-hexilborónico, ácido ciclohexilborónico, ácido fenilborónico, ácido 3,5-difluoroborónico, ácido pentafluorofenilborónico y ácido 3,5-bis-(trifluorometil)fenilborónico. De estos, son preferibles el ácido metilborónico, el ácido n-butilborónico, el ácido isobutilborónico, el ácido 3,5-difluorofenilborónico y el ácido pentafluorofenilborónico. Estos se usan solos o se usan dos o más tipos en combinación.

15 Los ejemplos de los compuestos de organoaluminio que se han de hacer reaccionar con los ácidos alquilborónicos incluyen los compuestos de organoaluminio descritos anteriormente para los compuestos de organoaluminio que pertenecen a (D-1a).

20 De estos, son preferibles los trialkilaluminios y tricicloalkilaluminios y son particularmente preferibles trimetilaluminio, trietilaluminio y triisobutilaluminio. Estos se usan solos o se usan dos o más tipos en combinación.

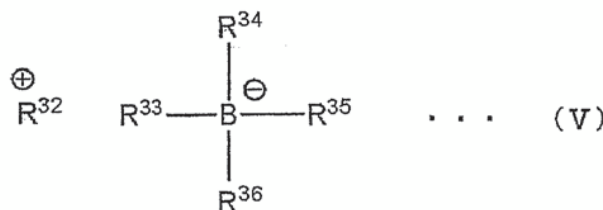
25 Los oxo-compuestos de organoaluminio (D-2) mencionados anteriormente se usan individualmente o se usan dos o más tipos en combinación.

Los compuestos (D-3) que reaccionan con el compuesto de metal de transición para formar un par iónico (en lo sucesivo en el presente documento, denominado "compuestos iónicos ionizados") son compuestos que reaccionan con el compuesto de metal de transición representado por la fórmula general (A) para formar un par iónico. Los ejemplos de dichos compuestos incluyen ácidos de Lewis, compuestos iónicos, compuestos de borano y compuestos de carborano como se describen en el documento JP-A-H01-501950, el documento JP-AH 01-502036, el documento JP-A-H03-179005, el documento JP-A-H03-179006, el documento JP-A-H03-207703, el documento JP-A-H03-207704 y en la Patente de los EE.UU. N.º 5321106. También pueden emplearse heteropolícompuestos e isopolícompuestos.

35 Los ácidos de Lewis incluyen compuestos representados por  $BR_3$  (R es flúor o un grupo fenilo que puede tener un sustituyente tal como flúor, grupo metilo o grupo trifluorometilo). Los ejemplos específicos incluyen trifluoroboro, trifenilboro, tris(4-fluorofenil)boro, tris(3,5-difluorofenil)boro, tris(4-fluorometilfenil)boro, tris(pentafluorofenil)boro, tris(p-tolil)boro, tris(o-tolil)boro y tris(3,5-dimetilfenil)boro.

40 Los compuestos iónicos incluyen compuestos representados por la siguiente fórmula general (V):

[Fórmula química 34]



45 En la fórmula anterior,  $R^{32}$  es, por ejemplo,  $H^+$ , catión carbonio, catión oxonio, catión amonio, catión fosfonio, catión cicloheptiltrienilo o catión ferrocenio teniendo un metal de transición.

50  $R^{33}$  a  $R^{36}$  pueden ser iguales o diferentes entre sí y son cada uno un grupo orgánico y preferentemente un grupo arilo o un grupo arilo sustituido. Los ejemplos de los cationes carbonio incluyen cationes carbonio tri-sustituidos tales como catión trifenilcarbonio, catión tri(metilfenil)carbonio y catión tri(dimetilfenil)carbonio.

55 Los ejemplos de los cationes de amonio incluyen cationes trialkilamonio, tales como catión trimetilamonio, catión trietilamonio, catión tripropilamonio, catión tributilamonio y catión tri(n-butil)amonio; cationes N,N-dialquilanilinio tales como catión N,N-dimetilanilinio, catión N,N-dietilanilinio y catión N,N,2,4,6-pentametilanilinio; y cationes dialquilamonio tales como di(isopropil)amonio y catión dicitlohexilamonio.



Los ejemplos de los cationes fosfonio incluyen cationes triarilfosfonio tales como catión trifenilfosfonio, catión tri(metilfenil)fosfonio y catión tri(dimetilfenil)fosfonio.

32 R es preferentemente catión carbonio o catión amonio y en particular preferentemente catión trifenilcarbonio, catión N,N-dimetilanilinio o catión N,N-dietilanilinio.

Los ejemplos de los compuestos iónicos incluyen adicionalmente sales de amonio sustituidas con trialquilo, sales de N,N-dialquilanilinio, sales de dialquilamonio y sales de triarilfosfonio.

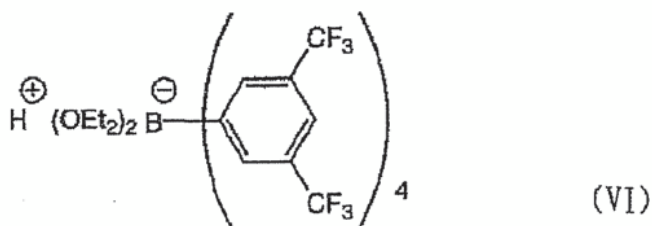
10 Los ejemplos específicos de las sales de amonio sustituidas con trialquilo incluyen tetrafenilborato de trietilamonio, tetrafenilborato de tripropilamonio, tetrafenilborato de tri(n-butil)amonio, tetra(p-tolil)borato de trimetilamonio, tetra(o-tolil)borato de trimetilamonio, tetra(pentafluorofenil)borato de tri(n-butil)amonio, tetra(o,p-dimetilfenil)borato de tripropilamonio, tetra(m,m-dimetilfenil)borato de tri(n-butil)amonio, tetra(p-trifluorometilfenil)borato de tri(n-butil)amonio, tetra(3,5-ditri fluorometilfenil)borato de tri(n-butil)amonio y tetra(o-tolil)borato de tri(n-butil)amonio.

15 Los ejemplos de las sales de N,N-dialquilanilinio incluyen tetrafenilborato de N,N-dimetilanilinio, tetrafenilborato de N,N-dietilanilinio y tetrafenilborato de N,N,2,4,6-pentametilanilinio.

20 Los ejemplos de las sales de dialquilamonio incluyen tetra(pentafluorofenil)borato de di(1-propil)amonio y tetrafenilborato de dicitohexilamonio.

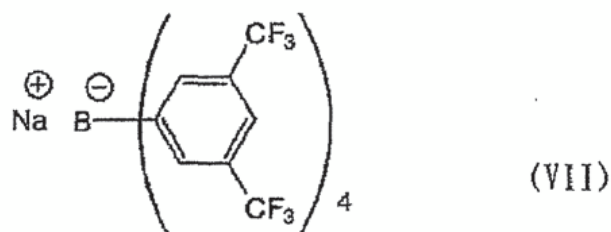
25 Los ejemplos de los compuestos iónicos incluyen adicionalmente tetraquis(pentafluorofenil)borato de trifenilcarbenio, tetraquis(pentafluorofenil)borato de ferroceno, complejo de penta fenilciclopentadienil trifenilcarbenio, complejo de penta fenilciclopentadienil N,N-dietilanilinio y compuestos de boro representados por la siguiente fórmula general (VI) o (VII).

[Fórmula química 35]



30 (en la fórmula, Et indica grupo etilo.)

[Fórmula química 36]



Los ejemplos de los compuestos de borano incluyen:

35 decaborano (14);  
sales de aniones tales como nonaborato de bis[tri(n-butil)amonio], decaborato de bis[tri(n-butil)amonio], undecaborato de bis[tri(n-butil)amonio], dodecaborato de bis[tri(n-butil)amonio], decaclorodecaborato de bis[tri(n-butil)amonio] y dodecaclorododecaborato de bis[tri(n-butil)amonio]; y  
40 sales de aniones de borano metálico tales como cobaltato (III) de bis(dodecahidridododecaborato) de tri(n-butil)amonio y niquelato (III) de bis(dodecahidridododecaborato) de bis[tri(n-butil)amonio].

Los ejemplos de los compuestos de carborano incluyen:

5 sales de aniones tales como 4-carbanonaborano (14), 1,3-dicarbanonaborano (13), 6,9-dicarbadeborano (14), dodecahidrido-1-fenil-1,3-dicarbanonaborano, do decahidrido-1-metil-1,3-dicarbanonaborano, un decahidrido-1,3-dimetil-1,3-dicarbanonaborano, 7, 8-dicarbaundecaborano (13), 2, 7-dicarbaundecaborano (13), unde cahidrido-7,8-dimetil-dicarbaundecaborano, dodecahidrido-11-metil-2,7-dicarbaundecaborano, tri(n-butil)amonio-1-carbadecaborato, tri(n-butil)amonio-1-carbaundecaborato, tri(n-butil)amonio-1-carbadodecaborato, tri(n-butil)amonio-1-trimetilsilil-1-carbadecaborato, tri(n-butil)amoniobromo-1-carbadodecaborato, tri(n-butil)amonio-6-carbadecaborato (14), tri(n-butil)amonio-6-carbadecaborato (12), tri(n-butil)amonio-7-carbaundecaborato (13), tri(n-butil)amonio-7,8-dicarbaundecaborato (12), tri(n-butil)amonio-2,9-dicarbaundecaborato (12), dodecahidrido-8-metil-7,9-dicarbaundecaborato de tri(n-butil)amonio, undecahidrido-8-etil-7,9-dicarbaundecaborato de tri(n-butil)amonio, undecahidrido-8-butil-7,9-dicarbaundecaborato de tri(n-butil)amonio, undecahidrido-8-alil-7,9-dicarbaundecaborato de tri(n-butil)amonio, undecahidrido-9-trimetilsilil-7,8-dicarbaundecaborato de tri(n-butil)amonio y undecahidrido-4,6-dibromo-7-carbaundecaborato de tri(n-butil)amonio; y sales de aniones de carborano de metal, tales como cobaltato (III) de bis(nonahidrido-1,3-dicarbanonaborato) de tri(n-butil)amonio, ferrato (III) de bis(undecahidrido-7,8-dicarbaundecaborato) de tri(n-butil)amonio, cobaltato (III) de bis(undecahidrido-7,8-dicarbaundecaborato) de tri(n-butil)amonio, niquelato (III) de bis(undecahidrido-7,8-dicarbaundecaborato) de tri(n-butil)amonio, cuprato (III) de bis(undecahidrido-7,8-dicarbaundecaborato) de tri(n-butil)amonio, aurato (III) de bis(undecahidrido-7,8-dicarbaundecaborato) de tri(n-butil)amonio, ferrato (III) de bis(nonahidrido-dimetil-7,8-dicarbaundecaborato) de tri(n-butil)amonio, cromato (III) de bis(nonahidrido-7,8-dimetil-7,8-dicarbaundecaborato) de tri(n-butil)amonio, cobaltato (III) de bis(tribromooctahidrido-7,8-dicarbaundecaborato) de tri(n-butil)amonio, cromato (III) de bis(undecahidrido-7-carbaundecaborato) de tris[tri(n-butil)amonio], manganato (IV) bis(undecahidrido-7-carbaundecaborato) de bis[tri(n-butil)amonio], cobaltato (III) de bis(undecahidrido-7-carbaundecaborato) de bis[tri(n-butil)amonio] y niquelato (IV) de bis(undecahidrido-7-carbaundecaborato) de bis[tri(n-butil)amonio].

25 Los heteropoli compuestos contienen un átomo seleccionado entre silicio, fósforo, titanio, germanio, arsénico y estaño, y uno o más átomos seleccionados entre vanadio, niobio, molibdeno y tungsteno. Los ejemplos de dichos compuestos incluyen, aunque no se limitan a los mismos, ácido fosfovanádico, ácido germanovanádico, ácido arsenovanádico, ácido fosfonióbico, ácido germanonióbico, ácido silicomolibdico, ácido fosfomolibdico, ácido titanomolibdico, ácido germanomolibdico, ácido arsenomolibdico, ácido estannomolibdico, ácido fosfotúngstico, ácido germanotúngstico, ácido estannotúngstico, ácido fosfomolibdovanádico, ácido fosfotungstovanádico, ácido germanotungstovanádico, ácido fosfomolibdotungstovanádico, ácido germanomolibdotungstovanádico, ácido fosfomolibdotúngstico, ácido fosfomolibdonióbico; sales de estos ácidos, tales como sales de estos ácidos con metales del Grupo 1 o Grupo 2 de la tabla periódica tales como litio, sodio, potasio, rubidio, cesio, berilio, magnesio, calcio, estroncio y bario; y sales orgánicas de los ácidos anteriores tales como sales de trifeniletilo.

35 Los compuestos iónicos ionizados anteriores (D-3) se usan individualmente o se usan dos o más tipos en combinación.

40 En la producción del compuesto organometálico (1) de la presente invención, el compuesto de metal de transición (A) puede usarse individualmente. Como alternativa, con el compuesto de metal de transición (A), puede usarse al menos un componente cocatalizador (D) seleccionado entre el compuesto organometálico (D-1), el oxo-compuesto de organoaluminio (D-2) y el compuesto (D-3) que reacciona con el compuesto de metal de transición para formar un par iónico.

45 En la presente invención, el compuesto organometálico (C) y el componente cocatalizador (D) pueden ser el mismo compuesto.

#### Vehículo (E)

50 En la producción del compuesto organometálico (1) de la presente invención, con el compuesto de metal de transición (A) y opcionalmente con al menos un componente cocatalizador (D) seleccionado entre el compuesto organometálico (D-1), el oxo-compuesto (D-2) y el compuesto iónico ionizado (D-3), puede usarse según sea necesario un vehículo (E), que se describe a continuación y/o un componente de compuesto orgánico (F), que se describe a continuación.

55 El vehículo (E) es un compuesto inorgánico o un orgánico en forma de sólido en forma de partículas granulares o finas.

60 Los compuestos inorgánicos preferidos incluyen óxidos porosos, haluros inorgánicos, minerales de arcilla y compuestos estratificados de intercambio iónico excluyendo los minerales de arcilla. Los ejemplos de los óxidos porosos incluyen SiO<sub>2</sub>, Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub>, MgO, ZrO, TiO<sub>2</sub>, B<sub>2</sub>O<sub>3</sub>, CaO, ZnO, BaO, ThO<sub>2</sub> y compuestos complejos o mezclas que contienen estos óxidos, tales como zeolita natural o sintética, SiO<sub>2</sub>-MgO, SiO<sub>2</sub>-Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub>, SiO<sub>2</sub>-TiO<sub>2</sub>, SiO<sub>2</sub>-V<sub>2</sub>O<sub>5</sub>, SiO<sub>2</sub>-Cr<sub>2</sub>O<sub>3</sub> y SiO<sub>2</sub>-TiO<sub>2</sub>-MgO. De éstos, son preferibles compuestos que contienen SiO<sub>2</sub> y/o Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub> como componente principal.

65 Los óxidos inorgánicos pueden contener pequeñas cantidades de componentes de carbonato, sulfato, nitrato y

óxido, tales como  $\text{Na}_2\text{CO}_3$ ,  $\text{K}_2\text{CO}_3$ ,  $\text{CaCO}_3$ ,  $\text{MgCO}_3$ ,  $\text{Na}_2\text{SO}_4$ ,  $\text{Al}_2(\text{SO}_4)_3$ ,  $\text{BaSO}_4$ ,  $\text{KNO}_3$ ,  $\text{Mg}(\text{NO}_3)_2$ ,  $\text{Al}(\text{NO}_3)_3$ ,  $\text{Na}_2\text{O}$ ,  $\text{K}_2\text{O}$  y  $\text{Li}_2\text{O}$ .

5 Los óxidos porosos tienen diferentes propiedades dependiendo del tipo y proceso de preparación. El vehículo utilizado en la presente invención tiene preferentemente un diámetro de partícula de 10 a 300  $\mu\text{m}$ , preferentemente de 20 a 200  $\mu\text{m}$ , una superficie específica de 50 a 1.000  $\text{m}^2/\text{g}$ , preferentemente de 100 a 700  $\text{m}^2/\text{g}$  y un volumen de poros de 0,3 a 3,0  $\text{cm}^3/\text{g}$ . Si es necesario, el vehículo puede calcinarse a 100 a 1000  $^\circ\text{C}$  y, preferentemente, de 150 a 700  $^\circ\text{C}$  antes de su uso.

10 Los ejemplos de los haluros inorgánicos incluyen  $\text{MgCl}_2$ ,  $\text{MgBr}_2$ ,  $\text{MnCl}_2$  y  $\text{MnBr}_2$ . Los haluros inorgánicos pueden usarse tal como son o pueden usarse después de ser pulverizados con un molino de bolas o un molino oscilante. Los haluros inorgánicos pueden disolverse en un disolvente tal como alcohol y pueden precipitar en forma de partículas finas con un agente de precipitación.

15 El vehículo (E) puede ser arcillas y las arcillas por lo general están compuestas principalmente de minerales de arcilla. Los compuestos estratificados de intercambio iónico son compuestos que tienen una estructura cristalina en la que los planos formados mediante enlace iónico o similar están apilados uno sobre otro en paralelo con una resistencia de unión débil, y en la que los iones contenidos en la misma son intercambiables. La mayoría de los minerales de arcilla son compuestos estratificados de intercambio iónico. Las arcillas, los minerales de arcilla y los  
20 compuestos estratificados de intercambio iónico no se limitan a compuestos naturales, sino que incluyen productos sintéticos.

Los ejemplos de los compuestos estratificados de intercambio iónico incluyen aquellos que tienen estructuras cristalinas estratificadas tales como una estructura de empaquetado más cercana a la hexagonal, una estructura de antimonio, una estructura de  $\text{CdCl}_2$  y una estructura de  $\text{CdI}_2$ .

Los ejemplos de los minerales de arcilla incluyen caolín, bentonita, arcilla kibushi, arcilla gairome, alofano, hisingerita, pirofillita, mica, montmorillonita, vermiculita, clorita, paligorskita, caolinita, nacrita, dickita y haloisita. Los  
30 ejemplos de los compuestos estratificados de intercambio iónico incluyen sales de metales polivalentes y ácidos cristalinos tales como  $\alpha\text{-Zr}(\text{HAsO}_4)_2 \cdot \text{H}_2\text{O}$ ,  $\alpha\text{-Zr}(\text{HPO}_4)_2$ ,  $\alpha\text{-Zr}(\text{KPO}_4)_2 \cdot 3\text{H}_2\text{O}$ ,  $\alpha\text{-Ti}(\text{HPO}_4)_2$ ,  $\alpha\text{-Ti}(\text{HAsO}_4)_2 \cdot \text{H}_2\text{O}$ ,  $\alpha\text{-Sn}(\text{HPO}_4)_2 \cdot \text{H}_2\text{O}$ ,  $\gamma\text{-Zr}(\text{HPO}_4)_2$ ,  $\gamma\text{-Ti}(\text{HPO}_4)_2$  y  $\gamma\text{-Ti}(\text{NH}_4\text{PO}_4)_2 \cdot \text{H}_2\text{O}$ .

Las arcillas, los minerales de arcilla y los compuestos estratificados de intercambio iónico preferentemente tienen un  
35 volumen de poro, como se mide en poros que tienen un radio de no menos de 20  $\text{Å}$  ( $1 \text{ Å} = 10^{-10} \text{ m}$ ) mediante un método de penetración de mercurio, de no menos de 0,1  $\text{cm}^3/\text{g}$  y en particular preferentemente de 0,3 a  $\text{cm}^3/\text{g}$ . El volumen de poro se mide en los poros que tienen un radio de 20 a  $3 \times 10^4 \text{ Å}$  ( $1 \text{ Å} = 10^{-10} \text{ m}$ ) mediante un método de penetración de mercurio usando un porosímetro de mercurio.

40 Conseguir una alta actividad de polimerización tiende a ser difícil si el vehículo tiene un volumen de poro de menos de 0,1  $\text{cc/g}$  como se mide en poros que tienen un radio de no menos de 20  $\text{Å}$  ( $1 \text{ Å} = 10^{-10} \text{ m}$ ). También es preferible que las arcillas y los minerales de arcilla se sometan a tratamientos químicos.

Son empleables cualesquier tratamientos químicos, por ejemplo, un tratamiento de superficie para eliminar las  
45 impurezas en la superficie y un tratamiento para modificar la estructura cristalina de los minerales de arcilla. Los ejemplos de dichos tratamientos químicos incluyen el tratamiento con ácido, el tratamiento con álcali, el tratamiento con sal y el tratamiento con una sustancia orgánica. El tratamiento con ácido elimina las impurezas de la superficie y también provoca la elución de cationes tales como Al, Fe y Mg en la estructura cristalina para aumentar el área superficial. El tratamiento con álcali destruye la estructura cristalina de la arcilla para provocar el cambio en la  
50 estructura de la arcilla. El tratamiento con sal y el tratamiento con la sustancia orgánica producen, por ejemplo, materiales compuestos iónicos, materiales compuestos moleculares o derivados orgánicos para cambiar el área superficial o la distancia entre estratos.

El compuesto estratificado de intercambio iónico puede ser un compuesto estratificado en el que los iones  
55 intercambiables entre los estratos se han intercambiado con otros iones grandes y voluminosos usando propiedades de intercambio iónico para agrandar la distancia entre los estratos. Los iones voluminosos desempeñan un papel de tipo columna para soportar la estructura estratificada y generalmente se denominan pilares. La introducción de otras sustancias entre los estratos de un compuesto estratificado se denomina intercalación. Los ejemplos de los compuestos huéspedes que se han de intercalar incluyen compuestos inorgánicos catiónicos tales como  $\text{TiCl}_4$  y  $\text{ZrCl}_4$ ; alcóxidos metálicos tales como  $\text{Ti}(\text{OR})_4$ ,  $\text{Zr}(\text{OR})_4$ ,  $\text{PO}(\text{OR})_3$  y  $\text{B}(\text{OR})_3$  (R es un grupo hidrocarburo o similar); y  
60 iones de hidróxido metálico tales como  $[\text{Al}_{13}\text{O}_4(\text{OH})_{24}]^{7+}$ ,  $[\text{Zr}_4(\text{OH})_{14}]^{2+}$  y  $[\text{Fe}_3\text{O}(\text{OCOCH}_3)_6]^+$ . Estos compuestos se usan solos o se usan dos o más tipos en combinación. La intercalación de los compuestos anteriores puede realizarse en presencia de polímeros obtenidos mediante hidrólisis de alcóxidos metálicos tales como  $\text{Si}(\text{OR})_4$ ,  $\text{Al}(\text{OR})_3$  y  $\text{Ge}(\text{OR})_4$  (R es un grupo hidrocarburo o similar) o en presencia de compuestos inorgánicos coloidales tales como  $\text{SiO}_2$ . Los ejemplos de los pilares incluyen óxidos producidos por la intercalación de los iones de  
65 hidróxido de metal anteriores entre los estratos seguida de deshidratación térmica.

Las arcillas, los minerales de arcilla y los compuestos estratificados de intercambio iónico pueden usarse tal como son o pueden usarse después de ser sometidos a molienda con bolas, tamizado o similar. Además, pueden usarse después de ser sometidos a adsorción de agua o tratamiento de deshidratación térmica. Además, pueden usarse solos o pueden usarse dos o más tipos en combinación.

De estos compuestos inorgánicos, son preferibles los minerales de arcilla y son particularmente preferibles montmorillonita, vermiculita, hectorita, tenorita y mica sintética.

Los ejemplos de los compuestos orgánicos empleables como vehículo (E) incluyen compuestos sólidos en forma de partículas granulares o finas que tienen un diámetro de partícula de 10 a 300 µm. Dichos compuestos incluyen (co)polímeros producidos usando α-olefinas que tienen de 2 a 14 átomos de carbono tales como etileno, propileno, 1-buteno y 4-metil-1-penteno como componente principal, (co)polímeros producidos usando vinilciclohexano o estireno como componente principal y productos modificados de estos polímeros.

15 Componente de compuesto orgánico (F)

El componente de compuesto orgánico (F) se usa opcionalmente para mejorar el rendimiento catalítico. Los ejemplos del compuesto orgánico incluyen, pero no se limitan a, alcoholes, compuestos fenólicos, ácidos carboxílicos, compuestos de fósforo y sulfonatos.

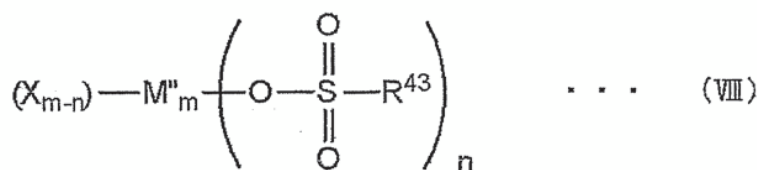
20 Como los alcoholes, se emplean por lo general los representados por R<sup>40</sup>-OH. En el presente documento, R<sup>40</sup> es un grupo hidrocarburo que tiene de 1 a 50 átomos de carbono o un grupo hidrocarburo halogenado que tiene de 1 a 50 átomos de carbono. Son preferibles los representados por la fórmula anterior en la que R<sup>40</sup> es un grupo hidrocarburo halogenado.

25 Como los compuestos fenólicos, se emplean por lo general los representados por R<sup>x</sup>-OH. En el presente documento, como R<sup>x</sup>, son preferibles aquellos en los que la posición α,α' en el grupo hidroxilo está sustituida con un grupo hidrocarburo que tiene de 1 a 20 átomos de carbono.

30 Como los ácidos carboxílicos, se emplean por lo general los representados por R<sup>41</sup>-COOH. R<sup>41</sup> es un grupo hidrocarburo que tiene de 1 a 50 átomos de carbono o un grupo hidrocarburo halogenado que tiene de 1 a 50 átomos de carbono y en particular preferentemente un grupo hidrocarburo halogenado que tiene de 1 a 50 átomos de carbono.

35 Como compuestos de fósforo preferidos, se emplean preferentemente ácidos fosfóricos que tienen un enlace P-O-H, fosfatos que tienen un enlace P-O-H y compuestos de óxido de fosfina que tienen un enlace P=O. Como los sulfonatos, se emplean los representados por la siguiente fórmula general (VIII).

[Fórmula química 37]



40 En la fórmula anterior, M<sup>m</sup> es un elemento de los Grupos 1 a 14 de la tabla periódica; R<sup>43</sup> es un átomo de hidrógeno, un grupo hidrocarburo que tiene de 1 a 20 átomos de carbono o un grupo hidrocarburo halogenado que tiene de 1 a 20 átomos de carbono;

45 X es un átomo de hidrógeno, un átomo de halógeno, un grupo hidrocarburo que tiene de 1 a 20 átomos de carbono o un grupo hidrocarburo halogenado que tiene de 1 a 20 átomos de carbono; m es un número entero de 1 a 7; y n es un número entero de 1 a 7.

50 Condiciones de producción del Compuesto Organometálico (1)

En el método de producción del compuesto organometálico (1) de la presente invención, en presencia del compuesto de metal de transición (A), el compuesto de dieno (B) y el compuesto organometálico (C), de los cuales los dos son materias primas, se hacen reaccionar entre sí, usando opcionalmente el componente cocatalizador (D), el vehículo (E) y el componente de compuesto orgánico (F).

55 En la reacción, puede usarse o puede no usarse un disolvente, pero la reacción se realiza preferentemente en una solución usando un disolvente de hidrocarburo inerte. Los ejemplos de disolventes de hidrocarburo inertes

empleables incluyen hidrocarburos alifáticos tales como propano, butano, pentano, hexano, heptano, octano, decano, dodecano y queroseno; hidrocarburos alicíclicos tales como ciclopentano, ciclohexano y metilciclopentano; hidrocarburos aromáticos tales como benceno, tolueno y xileno; hidrocarburos halogenados tales como cloruro de etileno, clorobenceno y diclorometano; y mezclas de estos disolventes.

5 La relación del compuesto de dieno (B) en el compuesto organometálico (C), de los cuales los dos son materias primas, es de manera que la relación molar  $[(B)/(C)]$  está generalmente en el intervalo de 0,2 a 5, preferentemente de 0,5 a 4, más preferentemente de 0,6 a 3, aún más preferentemente de 0,8 a 2.

10 El compuesto de metal de transición (A) se usa en una cantidad con respecto al compuesto de dieno (B) de manera que la relación molar  $[(A)/(B)]$  está generalmente en el intervalo de 0,00001 a 1, preferentemente de 0,0001 a 0,1, más preferentemente de 0,001 a 0,05, aún más preferentemente de 0,005 a 0,03.

15 La cantidad de uso del componente cocatalizador (D) es como se indica a continuación. Cuando se usa el compuesto organometálico (D-1), la cantidad del mismo es de manera que la relación molar  $[(D-1)/M']$  del componente (D-1) con respecto a todos los átomos de metal de transición (M') en el compuesto de metal de transición (A) está generalmente en el intervalo de 0,01 a 100000 y preferentemente de 0,05 a 50000. Cuando se usa el oxo-compuesto de organoaluminio (D-2), la cantidad del mismo es de manera que la relación molar  $[(D-2)/M']$  del átomo de aluminio en el componente (D-2) con respecto al átomo de metal de transición (M') en el compuesto de metal de transición (A) está generalmente en el intervalo de 10 a 500000 y preferentemente de 20 a 100000. Cuando se usa el compuesto iónico ionizado (D-3), la cantidad del mismo es de manera que la relación molar  $[(D-3)/M']$  del componente (D-3) con respecto al átomo de metal de transición (M') en el compuesto de metal de transición (A) está generalmente en el intervalo de 1 a 10 y preferentemente de 1 a 5.

25 La cantidad de uso del componente de compuesto orgánico (F) es como se indica a continuación. Cuando se usa el compuesto organometálico (D-1) como el componente cocatalizador (D), la relación molar  $[(F)/(D-1)]$  es tá generalmente en el intervalo de 0,01 a 10 y preferentemente de 0,1 a 5. Cuando se usa el oxo-compuesto de organoaluminio (D-2) como el componente cocatalizador (D), la relación molar  $[(F)/(D-2)]$  está generalmente en el intervalo de 0,001 a 2 y preferentemente de 0,005 a 1. Cuando el compuesto iónico ionizado (D-3) se usa como el componente (D), la relación molar  $[(F)/(D-3)]$  está generalmente en el intervalo de 0,01 a 10 y preferentemente de 0,1 a 5.

35 En el método de la presente invención, la presión en la reacción no está particularmente limitada y es posible cualquiera entre la presión normal, la presión reducida y la presión aumentada. La reacción por lo general se realiza preferentemente en una atmósfera de gas inerte, pero puede realizarse en copresencia de hidrógeno, según sea necesario. Si el hidrógeno está copresente, se genera un compuesto organometálico (1) que tiene una estructura en la que se añadió un átomo de hidrógeno en lugar del grupo R o el grupo  $R^{11}$  del compuesto organometálico (C). Si se usa hidrógeno, el uso del mismo es de manera que la relación molar  $[\text{hidrógeno}/(C)]$  por lo general se convierte en de 0,001 a 100, preferentemente de 0,01 a 50. Puede burbujearse hidrógeno en una solución de reacción. La presión no está particularmente limitada y es posible cualquiera entre la presión normal, la presión reducida y la presión aumentada.

45 La temperatura en la reacción entre el compuesto de dieno (B) y el compuesto organometálico (C) está por lo general en el intervalo de -80 a 100 °C, preferentemente de -30 a 60 °C, en particular preferentemente de -20 a 50 °C. La reacción puede realizarse en forma discontinua, semicontinua o continua. El tiempo de reacción es normalmente de 1 minuto a 100 horas, preferentemente de 5 minutos a 50 horas.

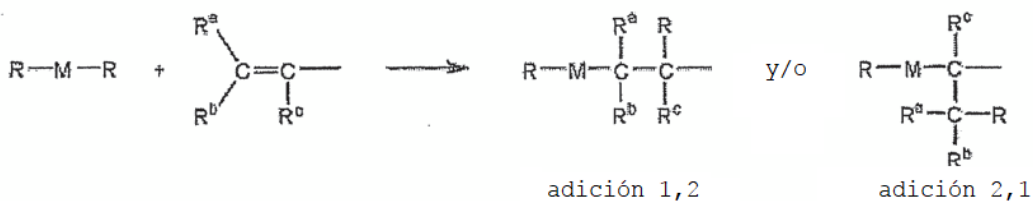
50 En la reacción, el compuesto de metal de transición (A), el compuesto de dieno (B) y el compuesto organometálico (C), el componente cocatalizador (D), el vehículo (E) y el componente de compuesto orgánico (F), que se usan opcionalmente, pueden añadirse y mezclarse en cualquier orden. Por ejemplo, el compuesto de dieno (B), el vehículo (E), el componente de compuesto orgánico (F), el compuesto organometálico (C), el componente cocatalizador (D) y el compuesto de metal de transición (A) se añaden en este orden.

55 El compuesto organometálico (1) de la presente invención generado después de la finalización de la reacción puede purificarse, según sea necesario, mediante métodos tales como filtración, recristalización, destilación y absorción. Por ejemplo, un líquido de mezcla de reacción se somete a filtración con el fin de eliminar los compuestos insolubles, tales como un vehículo y un residuo de catalizador, y del material resultante se eliminan a presión reducida un disolvente y un compuesto orgánico restante. Después, el material obtenible se disuelve de nuevo en un disolvente y la solución se somete a enfriamiento, tratamiento por recristalización y similares.

60 En la reacción para producir el compuesto organometálico (1) de la presente invención, el compuesto de dieno (B) y el compuesto organometálico (C), de los cuales los dos son materias primas, se unen entre sí por una reacción elemental como se representa por la siguiente fórmula general (esta fórmula normalmente muestra solo una parte implicada en la reacción y, por tanto, no muestra toda la reacción).

65

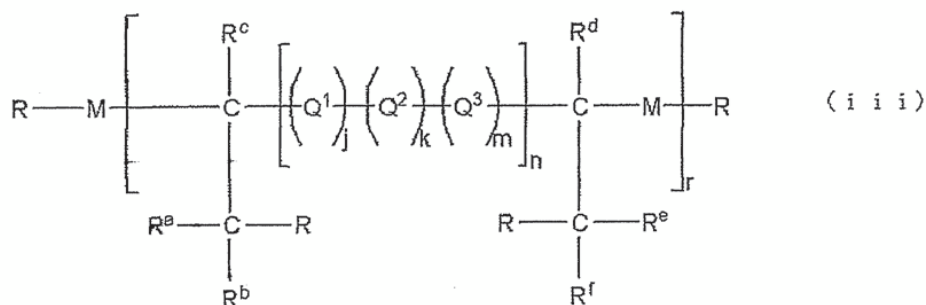
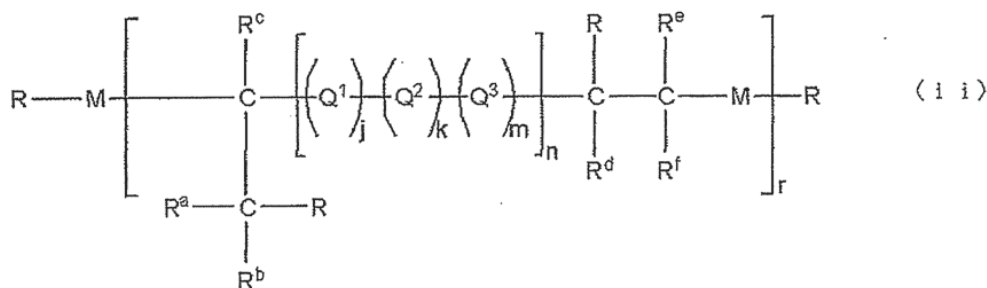
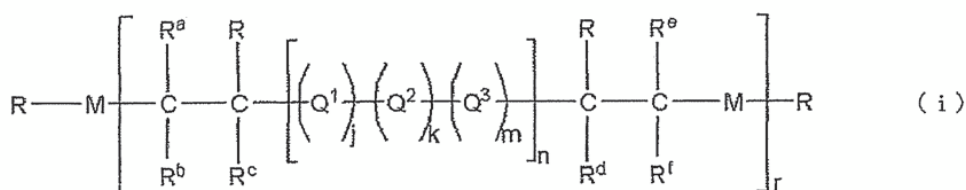
[Fórmula química 38]



5 Como se muestra en la fórmula anterior, las formas de unión incluyen la adición 1,2 y la adición 2,1. Si la reacción entre el compuesto de dieno (B) y el compuesto organometálico (C) ha transcurrido exclusivamente por adición 1,2, el compuesto organometálico (1) generado se representa como se muestra en la siguiente fórmula general (i). Si la reacción entre el compuesto de dieno (B) y el compuesto organometálico (C) ha transcurrido exclusivamente por adición 2,1, el compuesto organometálico (1) generado se representa como se muestra en la siguiente fórmula general (iii). Si la reacción entre el compuesto de dieno (B) y el compuesto organometálico (C) ha transcurrido por adición 1,2 y adición 2,1, de forma alternada, el compuesto organometálico (1) generado se representa como se muestra en la siguiente general fórmula (ii).

10

[Fórmula química 39]



15 Las relaciones correspondientes entre los sustituyentes en las fórmulas anteriores (i) a (iii) y los de la fórmula general del compuesto organometálico (1) se indican en la siguiente Tabla 1. Como se indica en la tabla, h y p son cada uno 1 cuando ocurre la adición 1,2 y son cada uno 0 cuando ocurre la adición 2,1.

[Tabla 1]

Fórmula (1)	R <sup>1</sup>	R <sup>2</sup>	R <sup>3</sup>	R <sup>4</sup>	R <sup>5</sup>	R <sup>6</sup>	R <sup>7</sup>	R <sup>8</sup>	R <sup>9</sup>	R <sup>10</sup>	h	p
Fórmula (i)	R	R <sup>a</sup>	R <sup>b</sup>	R	R <sup>c</sup>	R	R <sup>d</sup>	R <sup>e</sup>	R <sup>f</sup>	R	1	1

Fórmula (1)	R <sup>1</sup>	R <sup>2</sup>	R <sup>3</sup>	R <sup>4</sup>	R <sup>5</sup>	R <sup>6</sup>	R <sup>7</sup>	R <sup>8</sup>	R <sup>9</sup>	R <sup>10</sup>	h	p
Fórmula (ii)	R	R <sup>c</sup>	R <sup>a</sup> R <sup>b</sup> RC-	-	-	R	R <sup>d</sup>	R <sup>e</sup>	R <sup>f</sup>	R	0	1
Fórmula (iii)	R	R <sup>c</sup>	R <sup>a</sup> R <sup>b</sup> RC-	-	-	-	-	R <sup>d</sup>	R <sup>e</sup> R <sup>f</sup> RC-	R	0	0

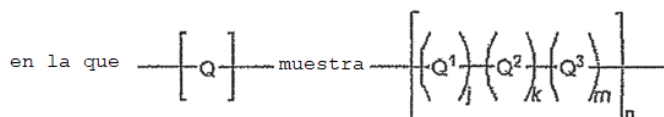
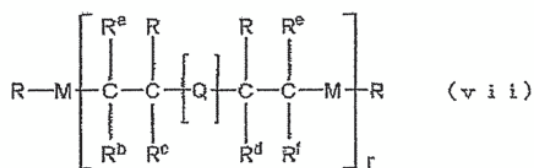
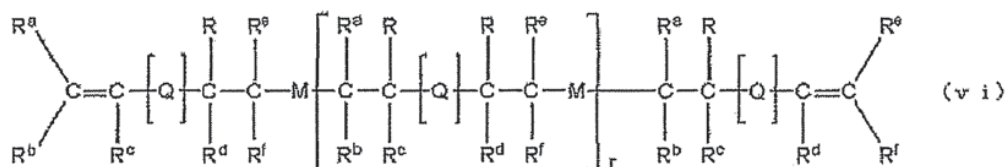
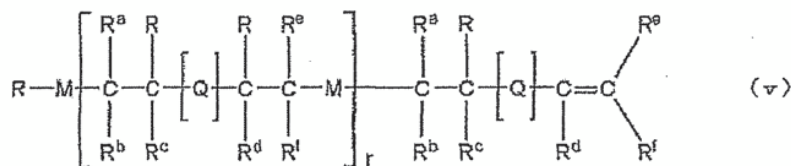
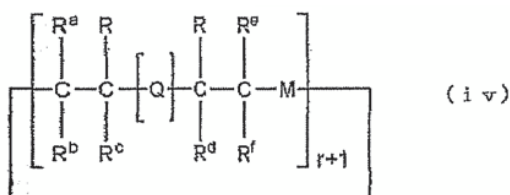
El compuesto organometálico (1) de la presente invención, si se produce mediante el método anterior, por lo general se genera como una mezcla de adición 1,2 y adición 2,1. La proporción entre la adición 1,2 y la adición 2,1 puede variarse cambiando los tipos del compuesto de metal de transición (A), el compuesto de dieno (B) y el compuesto organometálico (C) que se van a emplear, las condiciones de reacción y similares. Específicamente, en general, el aumento de la temperatura de reacción disminuye la proporción de adición 1,2, mientras que la disminución de la temperatura de reacción disminuye la proporción de adición 2,1, aunque esto depende de los tipos de compuesto del metal de transición (A), el compuesto de dieno (B) y el compuesto organometálico (C) que se van a emplear.

10 La proporción entre la adición 1,2 y la adición 2,1 puede calcularse a partir de una señal de carbono en la posición  $\alpha$  de un metal por RMN <sup>13</sup>C.

Como alternativa, la proporción puede calcularse a partir del cambio de estructura del compuesto de dieno (B). Específicamente, una mezcla obtenida de los compuestos organometálicos (i), (ii) y (iii) se hace reaccionar con agua o un ácido, para convertir de este modo un enlace metal-carbono en un enlace hidrógeno-carbono. Mediante el análisis de la relación de abundancia de una mezcla de compuesto orgánico obtenida, puede calcularse la proporción de inserción. En particular, tomando previamente los tiempos de retención de los compuestos orgánicos correspondientes a los compuestos organometálicos (i), (ii) y (iii) y realizando el análisis usando cromatografía de gases, puede calcularse fácilmente la relación de las cantidades de los compuestos organometálicos (i), (ii) y (iii) y, a partir del valor, pueden calcularse fácilmente las proporciones de inserción.

La reacción para producir el compuesto organometálico (1) genera un compuesto de cadena y un compuesto cíclico. Normalmente, como se muestra en las siguientes fórmulas, la reacción del compuesto de dieno (B) con el compuesto organometálico (C) en una relación equimolar da como resultado la generación de un compuesto cíclico de este tipo representado por (iv) o un compuesto de cadena de este tipo como se representa por (v); la reacción que implica un exceso del compuesto de dieno (B) da como resultado la generación de un compuesto de cadena de este tipo como se representa por (vi); y la reacción que implica un exceso del compuesto organometálico (C) da como resultado la generación de un compuesto de cadena de este tipo representado por (vii) (En las siguientes fórmulas generales, todas las formas de unión son adición 1,2, pero lo anterior se aplica en el caso de la adición 2,1 también).

[Fórmula química 40]



5 A condición de que cuando se hacen reaccionar d moles del compuesto de dieno (B) con z moles del compuesto organometálico (C), y la valencia del metal en el compuesto organometálico se define como k, el número de r en la fórmula general, que es el número de una unidad de r repetición promedio puede calcularse como se indica a continuación.

1)  $d > kz/2 > 0,5$

10 Se genera el compuesto de cadena representado por la fórmula general (vi) y el valor de r puede calcularse como se indica a continuación:

$$r = [2d / (2d - kz)] - k$$

15 2)  $kz/2 > d$ :

Se genera el compuesto de cadena representado por la fórmula general (vii) y el valor de r puede calcularse como se indica a continuación:

20  $r = 2d / (kz - 2d)$

Cuando el r obtenido en las relaciones anteriores es un número con un punto decimal, el número se redondea a un entero más cercano.



El compuesto organometálico (1) de la presente invención, si se produce mediante el método anterior, por lo general se genera como una mezcla de un compuesto de cadena y un compuesto cíclico.

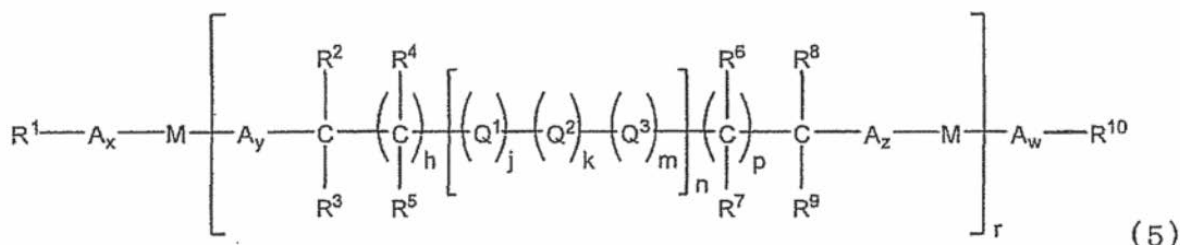
[Uso del Compuesto Organometálico (1)]

5 El compuesto organometálico (1) de la presente invención puede usarse como un agente de transferencia de cadenas, en particular como un agente de transferencia de cadenas reversible en la reacción de polimerización de un compuesto que contiene dobles enlaces y es capaz de producir un polímero que tiene un enlace carbono-metal en ambos extremos. Mediante el uso del compuesto organometálico (1) de la presente invención como un agente de

10 transferencia de cadenas, por ejemplo, de acuerdo con los métodos descritos en el documento JP-A-2008-533277 y el folleto WO-2003-014046, se genera formalmente un polímero en el enlace entre carbono y metal de ambos extremos del compuesto organometálico. Como resultado, incluso en la misma condición, puede obtenerse un polímero con peso molecular doble que tiene un enlace carbono-metal en ambos extremos.

15 Por ejemplo, la reacción entre el compuesto organometálico (1) con  $\alpha$ -olefinas lineales o ramificadas que tienen de 2 a 30 átomos de carbono, olefinas cíclicas, dienos o polienos, o compuestos de vinilo aromáticos, puede producir un compuesto organometálico (5) representado por la siguiente fórmula general (5).

[Fórmula química 41]



20 En la fórmula general (5), A es una unidad derivada de una  $\alpha$ -olefina lineal o ramificada que tiene de 2 a 30 átomos de carbono, una olefina cíclica, un dieno, un polieno o un compuesto de vinilo aromático; x, y, z y w son cada uno un número entero de 1 o más;  $x + y + z + w = 8$  a 100000.

25 M,  $Q^1$ ,  $Q^2$ ,  $Q^3$ , h, j, k, m, n, p y  $R^1$  a  $R^{10}$  se definen de la misma manera que en la fórmula general (1).

En la fórmula general (5), A deriva de una  $\alpha$ -olefina lineal o ramificada que tiene de 2 a 30 átomos de carbono, una olefina cíclica, un dieno, un polieno o un compuesto de vinilo aromático.

30 Los ejemplos de dichos compuestos incluyen:

$\alpha$ -olefinas lineales o ramificadas que tienen de 2 a 30 átomos de carbono, preferentemente de 2 a 20 átomos de carbono, tales como etileno, propileno, 1-buteno, 2-buteno, 1-penteno, 3-metil-1-buteno, 1-hexeno, 4-metil-1-penteno, 3-metil-1-penteno, 1-octeno, 1-deceno, 1-dodeceno, 1-tetradeceno, 1-hexadeceno, 1-octadeceno, 1-eicoseno, vinilciclopentano, vinilciclohexano, alilciclopentano y alilciclohexano;

35 olefinas cíclicas que tienen de 3 a 30 átomos de carbono, preferentemente de 3 a 20 átomos de carbono, tales como ciclopenteno, ciclohepteno, norborneno, 5-metil-2-norborneno, tetraciclododeceno y 2-metil-1,4,5,8-dimetano-1,2,3,4,4a,5,8,8a-octahidronaftaleno;

mono- o poli-alkil estirenos, tales como estireno, o-metilestireno, m-metilestireno, p-metilestireno, o, p-dimetilestireno, o-etilestireno, m-etilestireno y p-etilestireno;

40 compuestos de vinilo aromáticos tales como 3-fenilpropileno, 4-fenilpropileno y  $\alpha$ -metilestireno; y

dienos o polienos cíclicos o de cadena que tienen dos o más enlaces dobles que tienen de 4 a 30 átomos de carbono, preferentemente de 4 a 20 átomos de carbono, tales como butadieno, isopreno, 4-metil-1,3-pentadieno, 1,3-pentadieno, 1,4-pentadieno, 1,5-hexadieno, 1,4-hexadieno, 1,3-hexadieno, 1,3-octadieno, 1,4-octadieno, 1,5-octadieno, 1,6-octadieno, 1,7-octadieno, etilideno norborneno, vinil norborneno, dicitopentadieno, 7-metil-1,6-octadieno, 4-etilideno-8-metil-1,7-nonadieno y 5,9-dimetil-1,4,8-decatrino.

La reacción entre el compuesto organometálico (1) con el dieno o polieno anterior puede proporcionar un polímero con ramificaciones en  $A_x$ ,  $A_y$ ,  $A_z$  y  $A_w$  de la fórmula general (5). Dicho polímero ramificado también se incluye en el compuesto organometálicos (5).

De estos compuestos, son más preferibles etileno, propileno, 1-buteno, 1-penteno, 3-metil-1-buteno, 1-hexeno, 4-metil-1-penteno, 3-metil-1-penteno, 1-octeno, 1-deceno, vinilciclohexano, norborneno, 5-metil-2-norborneno, tetraciclododeceno, butadieno, etilideno-norborneno, vinilnorborneno, dicitopentadieno, estireno y p-metilestireno.

Estos compuestos pueden emplearse individualmente o en combinación de dos o más tipos.

Además, mediante la realización de la conversión de grupos funcionales por métodos conocidos en los enlaces carbono-metal del polímero que tiene un enlace carbono-metal en ambos extremos, puede producirse un polímero funcional en ambos extremos, tal como un poli olefina funcional en ambos extremos. Por ejemplo, mediante la realización de la conversión de grupos funcionales en los enlaces carbono-metal del compuesto organometálico (5), puede producirse un polímero funcional en ambos extremos.

Además, mediante el uso de los grupos funcionales introducidos en ambos extremos como un iniciador de la polimerización o mediante el uso de los grupos funcionales que se han tratado mediante métodos conocidos como un iniciador de la polimerización y, después, mediante la realización de una polimerización adicional, puede producirse un polímero de bloque ABA. Además, mediante la realización de una polimerización por condensación usando los grupos funcionales introducidos en ambos extremos como sitios activos de polimerización, pueden producirse polímeros de bloques que tienen diversas estructuras.

El compuesto organometálico (1) de la presente invención puede usarse también como un reactivo de síntesis orgánica, un material polimérico o un precursor de los mismos, específicamente como un reactivo nucleófilo que tiene sitios activos plurales o un precursor del mismo. Además, mediante la conversión del resto de metal en un compuesto, se obtiene un polímero con estructura altamente controlada o un precursor del mismo.

### Ejemplos

En lo sucesivo en el presente documento, la presente invención se describirá con referencia a los Ejemplos, pero la presente invención no se limita a estos Ejemplos. El análisis en los Ejemplos y Ejemplos Comparativos se realizó como se indica a continuación.

#### [m1] Medición de RMN

La RMN se midió empleando un aparato de RMN de 270 MHz o 500 MHz y benceno deuterado como disolvente (preparado después de un tratamiento de deshidratación usando tamiz molecular activo en atmósfera de nitrógeno y purificación por destilación a presión reducida), a menos que se indique lo contrario. El análisis en RMN-<sup>1</sup>H se basó en protones de restos del disolvente deuterado utilizado como disolvente. El análisis en RMN-<sup>13</sup>C se basó en el carbono del disolvente deuterado utilizado como disolvente.

#### [m2] Medición del cromatógrafo de gases (CG)

La CG se midió en las siguientes condiciones.

##### <Condiciones de medición por CG 1>

Aparato: GC-2010 (fabricado por Shimadzu Corporation)  
 Columna: DB-5MSUI (fabricada por Agilent Technologies)  
 Diámetro interior: 0,25 mm  
 Longitud: 30 m  
 Espesor de la película: 0,25 μm

##### Temperatura:

Columna: se mantuvo a 100 °C durante 5 min, se calentó a una velocidad de 20 °C/min y después se mantuvo a 300 °C durante 10 min;  
 Entrada: 300 °C  
 Detector: 300 °C

##### Gas transportador: helio

Caudal inicial: 1,10 ml/min  
 Ajuste de presión: 90 kPa  
 Velocidad lineal promedio: 27,3 cm/s  
 Relación de esprit: 30:1

##### <Condiciones de medición por CG 2>

Aparato: GC-2010 (fabricado por Shimadzu Corporation)  
 Columna: DB-5MSUI (fabricada por Agilent Technologies)

Diámetro interior: 0,25 mm

## ES 2 653 362 T3

Longitud: 30 m  
Espesor de la película: 0,25 µm

Temperatura:

5           Columna: se mantuvo a 40 °C durante 5 min, se calentó a una velocidad de 10 °C/min y después se mantuvo a 300 °C durante 10 min;  
          Entrada: 300 °C  
          Detector: 300 °C

10          Gas transportador: helio

          Caudal inicial: 1,10 ml/min  
          Ajuste de presión: 90 kPa  
15          Velocidad lineal promedio: 27,3 cm/s

Relación de espiral: 30:1

20          [m3] Análisis de masas por cromatografía de gases (CF-EM)

La CG-EM se midió en las siguientes condiciones.

<Condiciones de medición por CG-EM 1>

25          Aparato: GCMS-QP5050A (fabricado por Shimadzu Corporation)  
          Columna: DB-1 (fabricada por Agilent Technologies)

          Diámetro interior: 0,25 mm  
          Longitud: 30 m  
30          Espesor de la película: 0: 25 µm

Temperatura:

35          Columna: se mantuvo a 100 °C durante 5 min, se calentó a una velocidad de 20 °C/min y después se mantuvo a 200 °C durante 10 min;  
          Entrada: 300 °C  
          Detector: 300 °C

40          Gas transportador: helio

          Caudal inicial: 1,8 ml/min  
          Ajuste de presión: 104,8 kPa  
          Velocidad lineal promedio: 48,5 cm/s

45          Relación de espiral: 10:1

<Condiciones de medición por CG-EM 2>

50          Aparato: GCMS-QP5050A (fabricado por Shimadzu Corporation)  
          Columna: DB-1 (fabricada por Agilent Technologies)

          Diámetro interior: 0,25 mm  
          Longitud: 30 m  
55          Espesor de la película: 0: 25 µm

Temperatura:

60          Columna: se mantuvo a 40 °C durante 5 min, se calentó a una velocidad de 21 °C/min y después se mantuvo a 300 °C durante 10 min;  
          Entrada: 300 °C  
          Detector: 300 °C

Gas transportador: helio

65          Caudal inicial: 1,7 ml/min  
          Ajuste de presión: 100,0 kPa

Velocidad lineal promedio: 47,4 cm/s

Relación de esprit: 10:1

5 [m4] Cromatografía de permeación en gel (CPG)

La CPG se midió en las siguientes condiciones.

<Condiciones de medición por CPG>

10

Aparato de medición: cromatógrafo en gel de permeación Alliance GPC-2000 (fabricado por Waters)  
 Aparato de análisis: software de datos de procesamiento, Empower 2 (fabricado por Waters)  
 Columna: TSKgel GMH<sub>6</sub>-HT x 2 + TSKgel GMH<sub>6</sub>-HTL x 2, cada uno de los cuales tiene un DI de 7,5 mm x 30 cm  
 (fabricada por Tosoh Corporation) Temperatura de la columna: 140 °C

15

Fase móvil: o-diclorobenceno ( que contenía BHT al 0,025 %) D e t e c t o r : d e t e c t o r d e i n d i c e d e r e f r a c c i ó n  
 diferencial

Caudal: 1 ml/min

Concentración de la muestra: 0,15 % (p/v)

20

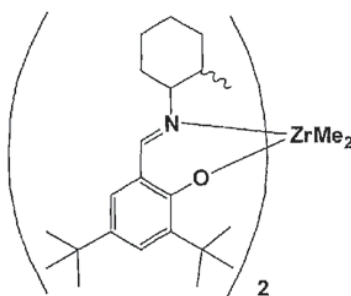
Calibración de la columna: poliestireno monodisperso (fabricado por Tosoh Corporation)

Se usaron los siguientes catalizadores y cocatalizador.

El "catalizador 1" es bis-(1-(2-metilciclohexil)(2-oxoil-3,5-di(t-butil)fenilimino))circoniodimetilo, que tiene la siguiente estructura.

25

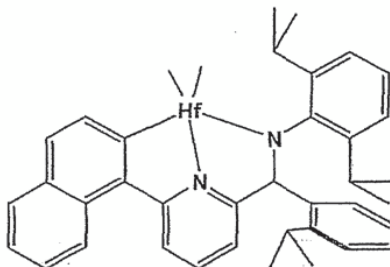
[Fórmula química 42]



El "catalizador 2" es [ N-(2,6-diisopropilfenil)amido(2-isopropilfenil)(α-naftaleno-2-diil(6-piridina-2-diil)metano)]hafniodimetil, que tiene la siguiente estructura.

30

[Fórmula química 43]



El "cocatalizador 1" es trifenilcarbeniotetraquis(pentafluorofenil)borato.

35 [Ejemplo 1] (Síntesis del Compuesto X-1)

Un matraz de recuperación de 50 ml de dos bocas con un agitador que tenía un grifo de tres vías conectado se secó suficientemente en atmósfera de nitrógeno seco y, a este, a temperatura ambiente, se le añadieron 7,5 ml de n-hexano, 2,0 ml (0,20 mmol en términos de un átomo de aluminio) de solución 0,1 M en n-hexano de metilaluminoxano, 2,0 ml (2,0 mmol en términos de 1,9-decadieno) de solución 1,0 M en n-hexano de 1,9-decadieno, y 3,0 ml (3,0 mmol en términos de un átomo de cinc) de solución 1,0 M en n-hexano de dietilcinc. El líquido de

40

mezcla de reacción se enfrió a 0 °C y, con agitación, se añadieron al mismo 0,5 ml (40 µmol en términos de moles) de solución 0,08 M en tolueno del cocatalizador 1. Después, a esto se le añadieron 2,0 ml (20 µmol en términos de moles) de una solución de catalizador preparada por separado del catalizador 1 (60,6 mg, 77,9 mmol) y 7,8 ml de ciclohexano. La solución mostró inmediatamente un color naranja. La solución se agitó a 0 °C durante 1 hora con protección de la luz, para obtener de este modo una mezcla de color naranja. Una parte de la mezcla se muestreó en atmósfera inerte y la muestra se concentró a presión reducida, para obtener de este modo una mezcla viscosa de color amarillo.

Se disolvieron aproximadamente 30 mg de esta mezcla viscosa de color amarillo en aproximadamente 0,5 ml de benceno deuterado, preparando de este modo una muestra para RMN.

Por RMN-<sup>1</sup>H, se observaron señales de posición α de cinc ensanchadas a -0,2 a 0,8 ppm y señales de hidrocarburos ensanchadas a 0,8 ppm a 2,0 ppm. No se observaron señales en las regiones de olefinas. El espectro RMN-<sup>1</sup>H se muestra en la Fig. 1.

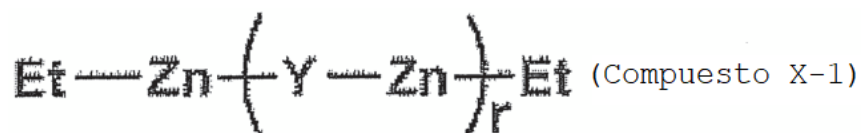
Por RMN-<sup>13</sup>C, se observaron señales de posición α de cinc ensanchadas a 23 a 24 ppm. Este valor una muestra buena correlación con una señal de posición α de cinc indicada en *J. Organomet. Chem.* 1982, 224, 217-221.

En esta solución de muestra de RMN, se añadió agua destilada en atmósfera de nitrógeno. Después, la mezcla se agitó suficientemente para hacer reaccionar cinc con agua, convirtiendo de este modo un enlace carbono-cinc en un enlace carbono-hidrógeno. A partir de entonces, una materia sólida precipitada se separó por filtración con algodón. Después, una muestra separada se analizó en condiciones de medición por CG 1, observándose indirectamente de este modo la estructura del producto.

Como resultado, no se observó ningún pico de 1,9-decadieno, una materia prima. Se observó un pico de 3,10-dimetildodecano, obtenible por adición 1,2 de dietilcinc, que se produce en dos sitios de olefinas, a un tiempo de retención de 8,5 minutos. Se observó un pico de 3-metiltridecano, obtenible por adición 1,2 y adición 2,1 de dietilcinc, que se producen en un sitio de olefina y en el otro sitio de olefina, respectivamente, a un tiempo de retención de 8,8 minutos. La relación de las áreas de estos dos picos fue 92:8. No se detectó ningún pico de tetradecano, obtenible por adición 2,1 de dietilcinc que se produce en dos sitios de olefinas. Las correlaciones entre los tiempos de retención y los compuestos se analizaron en condiciones de medición por CG-EM 1.

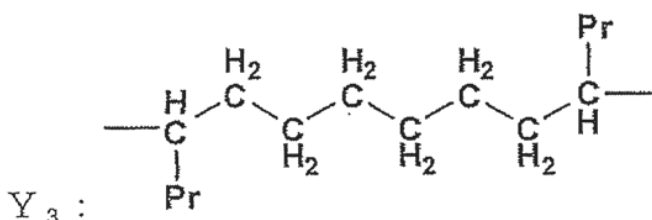
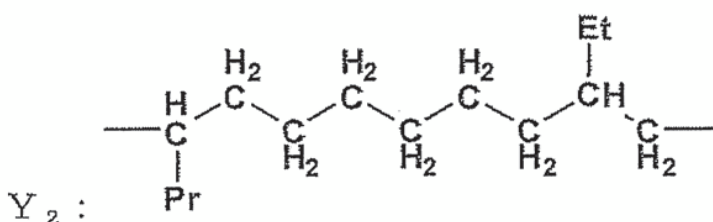
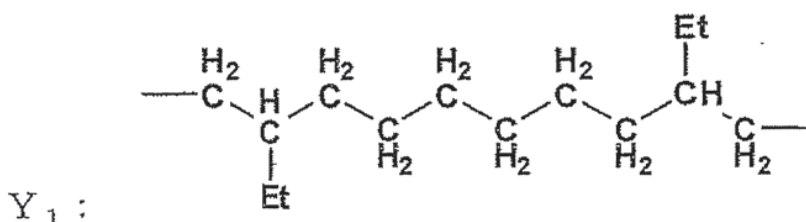
A partir del resultado anterior, se descubrió que el compuesto organometálico generado era un compuesto (X-1) en el que r = 2 en la siguiente fórmula y s:t:u = 92:8:0.

[Fórmula química 44]



en la que Y es una estructura representada por Y<sub>1</sub>, Y<sub>2</sub> o Y<sub>3</sub>, que se muestra a continuación, y la proporción de Y<sub>1</sub>:Y<sub>2</sub>:Y<sub>3</sub> = s:t:u (relación molar).

[Fórmula química 45]



[Ejemplo 2] (Síntesis del Compuesto X-1)

- 5 Se realizó el mismo procedimiento que en el Ejemplo 1, excepto porque la temperatura a la que el Cocatizador 1 y el Catalizador 1 se añadieron se cambió a la temperatura ambiente, obteniendo de este modo una mezcla de color amarillo. Una parte de la mezcla se muestreó en atmósfera inerte y la muestra se concentró a presión reducida, para obtener de este modo una mezcla viscosa de color amarillo.
- 10 Una parte de esta mezcla viscosa de color amarillo se muestreó, y en la muestra, se añadieron hexano y agua destilada en atmósfera de nitrógeno. Después, la mezcla se agitó suficientemente para hacer reaccionar cinc y agua, convirtiendo de este modo un enlace carbono-cinc en un enlace carbono-hidrógeno. A partir de entonces, una materia sólida precipitada se separó por filtración con algodón. Después, una capa orgánica separada se analizó en condiciones de medición por CG 1, observándose indirectamente de este modo la estructura del producto.
- 15 Como resultado, no se observó ningún pico de 1,9-decadieno, una materia prima. Se observó un pico de 3,10-dimetildodecano, obtenible por adición 1,2 de dietilcinc, que se produce en dos sitios de olefinas, a un tiempo de retención de 8,5 minutos. Se observó un pico de 3-metiltridecano, obtenible por adición 1,2 y adición 2,1 de dietilcinc, que se producen en un sitio de olefina y en el otro sitio de olefina, respectivamente, a un tiempo de retención de 8,8 minutos. Se detectó un pico de tetradecano, obtenible por adición 2,1 de dietilcinc que se produce en dos sitios de olefinas, a un tiempo de retención de 9,1 minutos. Las correlaciones entre los tiempos de retención y los compuestos se analizaron en condiciones de medición por CG-EM 1.
- 20 A partir del resultado anterior, se descubrió que el compuesto organometálico generado era un compuesto (X-1) en el que  $r = 2$  en la siguiente fórmula y  $s:t:u = 76:22:2$ .
- 25

[Ejemplo 3] (Síntesis del Compuesto X-3)

- 30 Un matraz de recuperación de 100 ml de dos bocas con un agitador que tenía un grifo de tres vías conectado se secó suficientemente en atmósfera de nitrógeno seco y, a éste, a temperatura ambiente, se le añadieron 9,1 ml (49,4 mmol) de 1,9-decadieno, 50,0 ml (54,5 mmol en términos de un átomo de cinc) de solución 1,09 M en n-

5 hexano de dietilcinc y 1,0 ml (0,10 mmol en términos de un átomo de aluminio) de solución 0,1 M en n-hexano de metilaluminoxano. Además, se añadieron 7,0 ml (560  $\mu$ mol en términos de moles) de solución 0,08 M en tolueno del Cocatalizador 1 y, después, se añadieron 27,0 ml (270  $\mu$ mol en términos de moles) de solución 0,01 M en ciclohexano del Catalizador 1. La solución mostró inmediatamente un color naranja intenso. La solución se agitó durante 1 hora con protección de la luz, obteniéndose de este modo una mezcla de color naranja.

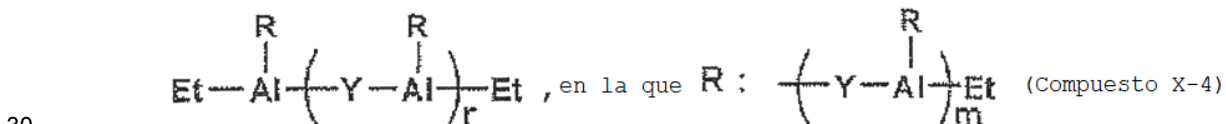
10 Una parte de esta mezcla de color naranja se muestreó y, en la muestra, se añadió alcohol isobutílico en atmósfera de nitrógeno. Después, la mezcla se agitó suficientemente y se añadió ácido clorhídrico para disolver de este modo una materia precipitada. Después, una capa orgánica separada se analizó en condiciones de medición por CG 1, observándose de este modo indirectamente la estructura del producto. Como resultado, se descubrió que el compuesto organometálico generado era un compuesto (X-3) en el que  $r = 9$  en la fórmula anterior descrita en el Ejemplo 1 y  $s:t:u = 76:22:2$ .

15 [Ejemplo 4] (Síntesis del Compuesto X-4)

20 Un matraz de recuperación de 200 ml de dos bocas con un agitador que tenía un grifo de tres vías conectado se secó suficientemente en atmósfera de nitrógeno seco y, a esta temperatura ambiente, se le añadieron 7,4 ml (40,2 mmol) de 1,9-decadieno y 28,0 ml (28,0 mmol en términos de un átomo de aluminio) de una solución 1,0 M en n-decano de trietilaluminio. Además, se añadieron 5,0 ml (0,4 mmol en términos de moles) de solución 0,08 M en tolueno del Cocatalizador 1 y, después, se añadieron 20,0 ml (0,2 mmol en términos de moles) de solución 0,01 M en ciclohexano del Catalizador 1. La solución mostró inmediatamente un color amarillo profundo. La solución se agitó durante 1 hora con protección de la luz, obteniéndose de este modo una mezcla de color amarillo.

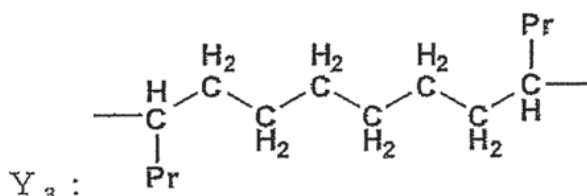
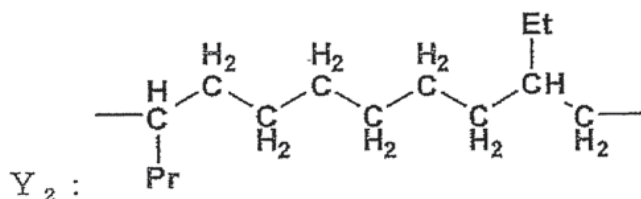
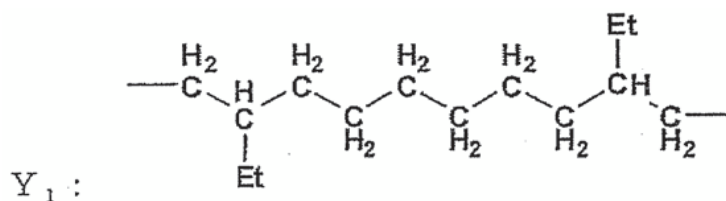
25 Una parte de esta mezcla de color naranja se muestreó, y en la muestra, se añadió alcohol isobutílico en atmósfera de nitrógeno. Después, la mezcla se agitó suficientemente y se añadió ácido clorhídrico y después la mezcla se filtró con algodón. Después, una capa orgánica separada se analizó en condiciones de medición por CG 1, observándose de este modo indirectamente la estructura del producto. Como resultado, se descubrió que el compuesto organometálico generado era un compuesto (X-4) en el que  $r + m = 22$  en la siguiente fórmula y  $s:t:u = 90:9:1$ .

[Fórmula química 46]



en la que Y es una estructura representada por  $Y_1$ ,  $Y_2$  o  $Y_3$ , que se muestra a continuación, y la proporción de  $Y_1:Y_2:Y_3 = s:t:u$  (relación molar).

[Fórmula química 47]

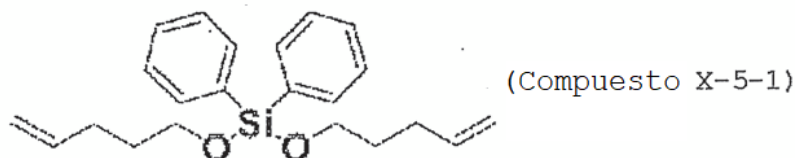


[Ejemplo 5] (Síntesis del Compuesto X-5)

5 Síntesis del Compuesto X-5-1

En un matraz de recuperación de dos bocas de 100 ml con un agitador que tenía un grifo de tres vías y un embudo de goteo conectados, a temperatura ambiente, se introdujeron 3,50 g (40,6 mmol) de 4-penten-1-ol, 4,21 g (41,6 mmol) de trietilamina y 30 ml de hexano. Con agitación, se añadió gota a gota una solución de hexano (10 ml) de 5,02 g (19,8 mmol) de difenil diclorosilano durante 5 minutos. A temperatura ambiente, la mezcla se agitó durante 1 hora y después se enfrió a 0 °C. Después, la reacción se finalizó mediante la adición de 5 ml de una solución acuosa saturada de hidrógeno carbonato de sodio. En el líquido de reacción, se añadieron hexano y agua y se separó una capa orgánica. Después, la capa orgánica se lavó usando una solución acuosa saturada de hidrógeno carbonato de sodio. La capa orgánica se concentró y se secó suficientemente a presión reducida, obteniéndose de este modo 2,12 g de un líquido viscoso transparente. Se encontró que este líquido viscoso transparente, mediante RMN-<sup>1</sup>H usando una mezcla de disolvente de cloroformo deuterado, era un compuesto X-5-1 representado por la siguiente fórmula.

[Fórmula química 48]



20

Síntesis del Compuesto X-5

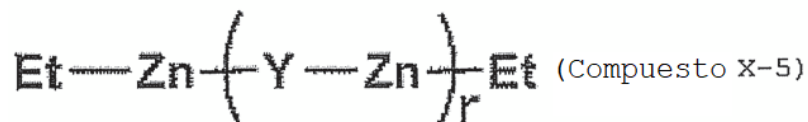
Se realizó el mismo procedimiento que en el Ejemplo 2, excepto porque el 1,9-decadieno se reemplazó con el Compuesto X-5-1, obteniéndose de este modo una mezcla de color amarillo. Una parte de esta mezcla de color amarillo se muestreó en atmósfera inerte y, en la muestra, se añadió alcohol isobutílico. Después, la mezcla se agitó suficientemente y se añadió ácido clorhídrico para disolver de este modo una materia precipitada. Después, una

25



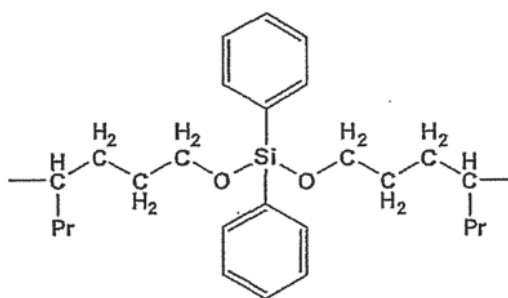
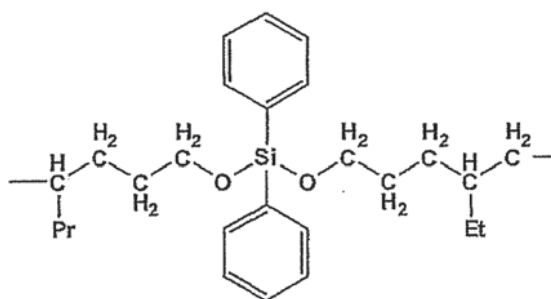
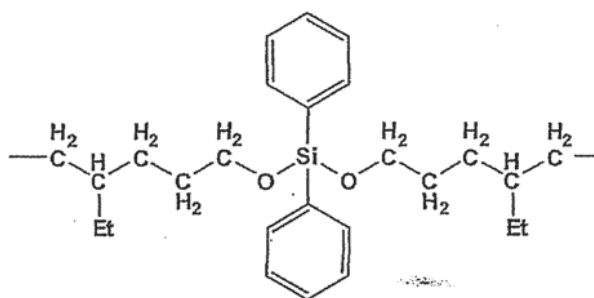
capa orgánica separada se analizó en condiciones de medición por CG 2, observándose de este modo indirectamente la estructura del producto. Como resultado, se observó un pico de 4-metil-1-hexenol, obtenible por adición 1,2 de dietilcinc que se produce en un sitio de olefina del compuesto X-5-1 y, después, la descomposición de un resto de silil-oxígeno en un tiempo de retención de 9,6 minutos. Se observó un pico de 1-heptanol, obtenible por 2,1-adición de dietilcinc que se produce en un sitio de olefina del compuesto X-5-1 y, después, la descomposición de un resto de silil-oxígeno, a un tiempo de retención de 10,1 minutos. La relación de las áreas de estos dos picos era de 95:5. Las correlaciones entre los tiempos de retención y los compuestos se analizaron en condiciones de medición por CG-EM 2. A partir del resultado anterior, se descubrió que el compuesto organometálico generado era un compuesto (X-5) en el que  $r = 2$  en la siguiente fórmula y  $s:t:u = 90:9:1$ .

[Fórmula química 49]



en la que Y es una estructura representada por Y<sub>1</sub>, Y<sub>2</sub> o Y<sub>3</sub>, que se muestra a continuación, y la proporción de Y<sub>1</sub>:Y<sub>2</sub>:Y<sub>3</sub> = r:p:q (relación molar).

[Fórmula química 50]

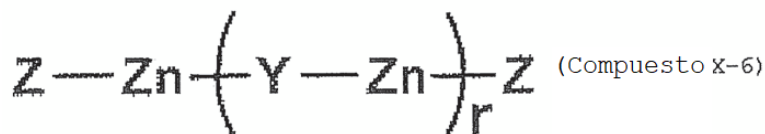


## [Ejemplo 6] (Síntesis del Compuesto X-6)

Un matraz de recuperación de dos bocas de 30 ml con un agitador que tenía un grifo de tres vías conectado se secó suficientemente en atmósfera de nitrógeno seco y, a esto, a temperatura ambiente, se le añadieron 8,0 ml de n-hexano, 0,2 ml (0,04 mmol en términos de un átomo de aluminio) de solución 0,2 M en n-hexano de metilaluminoxano, 0,64 ml (4,3 mmol en términos de moles) de 1,7-octadieno y 3,7 ml (4,0 mmol en términos de un átomo de cinc) de solución 1,09 M en n-hexano de dietilcinc. Mientras el líquido de mezcla de reacción se agitaba a temperatura ambiente, se añadieron 0,5 ml (0,04 mmol en términos de moles) de solución 0,08 M en tolueno del Cocatalizador 1 al mismo. Y, a esto se le añadieron 2,0 ml (20  $\mu$ mol en términos de moles) de una solución de catalizador preparada por separado del catalizador 1 (60,6 mg, 77,9  $\mu$ mol) y 7,8 ml de ciclohexano. La solución mostró inmediatamente de color naranja. La solución se agitó a temperatura ambiente durante 1 hora con protección de la luz y se concentró a presión reducida, para obtener de este modo una mezcla viscosa de color naranja. Una parte de esta mezcla viscosa de color naranja se muestreó en atmósfera inerte y, en la muestra, se añadió ácido clorhídrico 1,0 M y la mezcla se agitó suficientemente, convirtiendo de este modo un enlace carbono-cinc en un enlace carbono-hidrógeno. Después, una capa orgánica separada se analizó en condiciones de medición por CG 2, observándose de este modo indirectamente la estructura del producto.

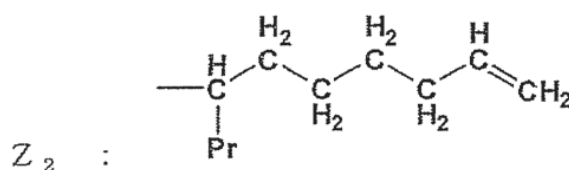
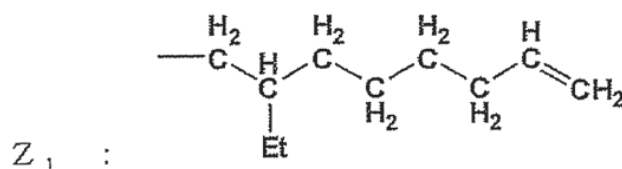
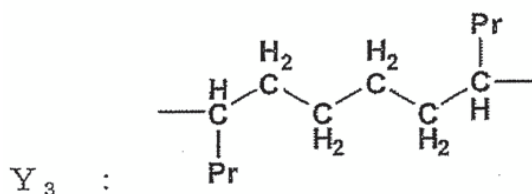
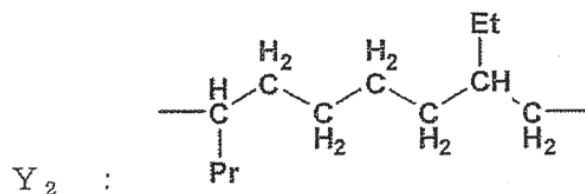
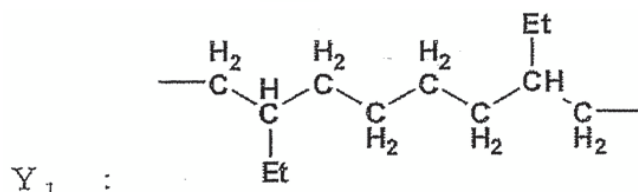
Como resultado, no se observó ningún pico de 1,7-octadieno, una materia prima. Se observó un pico de 7-metil-1-noneno, obtenible mediante adición 1,2 de dietilcinc que se produce en un sitio olefina, a un tiempo de retención de 10,6 minutos. Se observó un pico de 1-dodeceno, obtenible por adición 2,1 de dietilcinc que se produce en un sitio olefina, a un tiempo de retención de 11,0 minutos. Se observó un pico de 3,8-dimetildeceno, obtenible por adición 1,2 de dietilcinc que se produce en dos sitios de olefinas, a un tiempo de retención de 13,3 minutos. Se observó un pico de 3-metilundecano, obtenible por adición 1,2 y adición 2,1 de dietilcinc que se producen en un sitio de olefina y en el otro sitio de olefina, respectivamente, a un tiempo de retención de 13,7 minutos. Se observó un pico de dodeceno, obtenible por adición 2,1 de dietilcinc que se produce en dos sitios de olefinas, a un tiempo de retención de 14,2 minutos. La relación de las áreas de estos cinco picos era de 11:2:72:13:1. Las correlaciones entre los tiempos de retención y los compuestos se analizaron en condiciones de medición CG-EM 2. A partir del resultado anterior, se descubrió que el compuesto organometálico generado era un compuesto (X-6) en el que  $r = 12$  en la siguiente fórmula y  $s:t:u = 84:15:1$  y  $v:w = 84:16$ .

[Fórmula química 51]



en la que Y es una estructura representada por  $Y_1$ ,  $Y_2$  o  $Y_3$ , que se muestra a continuación, y Z es una estructura representada por  $Z_1$  o  $Z_2$ , que se muestra a continuación; y la proporción de  $Y_1:Y_2:Y_3 = s:t:u$  (relación molar) y la proporción de  $Z_1:Z_2 = v:w$  (relación molar).

[Fórmula química 52]



[Ejemplo 7] (Síntesis del Compuesto X-7)

5 Preparación del Componente sólido A

Bajo un flujo de nitrógeno, se suspendieron 30 g de sílice (fabricado por Asahi Glass Co., Ltd., área superficial específica: 870 m<sup>2</sup>/g, volumen de poro: 0,8 ml/g, diámetro de partícula promedio: 11,9 μm) que se había secado a 150 °C durante 5 horas, con 466 ml de tolueno purificado. Después, en la suspensión, se añadieron gota a gota 134,3 ml de metilaluminoxano (fabricado por Albemarle Corporation, solución en tolueno al 20 %, 308 mmol en términos de un átomo de Al) a 1 a 5 °C durante 30 minutos. Después, la mezcla se calentó durante 1,5 horas y se hizo reaccionar a 95 °C durante 4 horas. La temperatura del líquido de reacción se redujo a 60 °C y se separó un líquido sobrenadante por un método de decantación. Un componente sólido A obtenido de este modo (el vehículo (E)) se lavó tres veces con tolueno purificado. Después, se añadió tolueno al mismo, preparando de este modo una suspensión en tolueno del componente sólido A. Una parte del componente A sólido obtenido se recogió para estudiar la concentración. Se descubrió que la concentración de la suspensión era de 0,1189 g/ml y la concentración

de Al era de 0,8377 mmol/ml.

#### Preparación del Componente Catalizador Sólido B

- 5 En un matraz de vidrio de 200 ml reemplazado con nitrógeno, se introdujeron 45,2 ml de tolueno purificado y 44,8 ml (37,5 mmol en términos de un átomo de Al) de la suspensión de tolueno del componente sólido A preparado anteriormente. Después, con agitación, se añadió gota a gota solución 0,0075 mmol/ml en tolueno (10 ml) del Catalizador 1 durante 5 minutos, y se agitaron durante 1 hora a temperatura ambiente. Después, el líquido sobrenadante se separó por un método de decantación y el residuo se lavó tres veces usando 50 ml de tolueno.
- 10 Después, se añadieron 50 ml de tolueno al mismo, preparando de este modo una suspensión en tolueno de un componente catalizador sólido B. Una parte de la suspensión en tolueno del componente sólido B obtenido se recogió para estudiar la concentración. Se descubrió que la concentración de Zr era de 0,001381 mmol/ml y la concentración de Al era de 0,6745 mmol/ml.

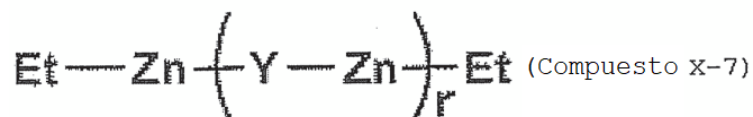
#### 15 Síntesis del Compuesto X-7

Un matraz Schlenk de 30 ml con un agitador que tenía un grifo de tres vías conectado se secó suficientemente en atmósfera de nitrógeno seco y, a éste, a temperatura ambiente, se le añadieron 5 ml de tolueno, 0,13 ml (0,20 mmol en términos de un átomo de aluminio) de solución 1,5 M en n-tolueno de metilaluminoxano, 0,29 ml (1,9 mmol en términos de moles) de 1,7-octadieno y 1,9 ml (0,20 mmol en términos de un átomo de cinc) de solución 1,05 M en n-hexano de dietilcinc. Mientras el líquido de mezcla se agitaba a temperatura ambiente, se añadieron 0,5 ml (0,04 mmol en términos de moles) de solución 0,08 M en hexano del Cocatalizador 1 al mismo. Y, al mismo se le añadió el componente catalizador sólido B (16,5 ml (0,02 mmol en términos de un átomo de zirconio) de suspensión 1,38 mM en tolueno). La solución se agitó a temperatura ambiente durante 20 horas con protección de la luz.

25 En atmósfera inerte, una parte del líquido de reacción se muestreó. Haciendo reaccionar alcohol isobutilico con el cinc orgánico, un enlace carbono-cinc se convirtió en un enlace carbono-hidrógeno y una capa orgánica separada después de la adición de n-hexano se analizó en condiciones de medición por CG 2, observándose de este modo indirectamente la estructura del producto. Como resultado, no se observó ningún pico de 1,7-octadieno, una materia prima. Se observó un pico de 3,8-dimetildecano, obtenible por adición 1,2 de dietilcinc que se produce en dos sitios de olefinas, a un tiempo de retención de 13,3 minutos. Se observó un pico de 3-metilundecano, obtenible por adición 1,2 y adición 2,1 de dietilcinc que se producen en un sitio de olefina y en el otro sitio de olefina, respectivamente, a un tiempo de retención de 13,7 minutos. Se detectó un pico de dodecano, obtenible por adición 2,1 de dietilcinc que se produce en dos sitios de olefinas, a un tiempo de retención de 14,2 minutos. La relación de las áreas de estos tres picos era de 84:15:1. Las correlaciones entre los tiempos de retención y los compuestos se analizaron en condiciones de medición por CG-EM 2. A partir del resultado anterior, se descubrió que el compuesto organometálico generado era un compuesto (X-7) en el que  $r = 32$  en la siguiente fórmula y  $s:t:u = 85:14:1$ .

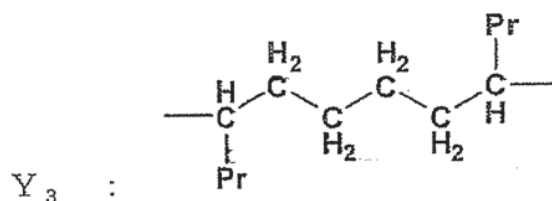
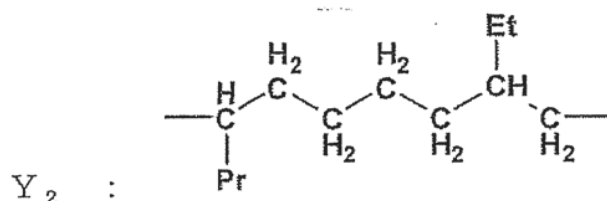
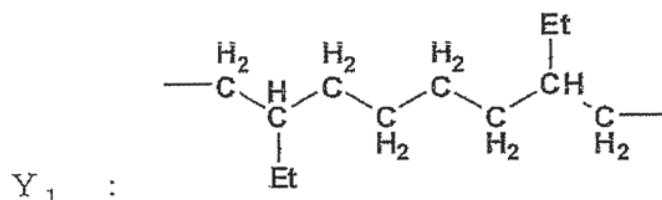
40 La suspensión obtenida se dejó reposar durante 5 minutos y se muestreó un líquido sobrenadante, y la muestra se analizó por el método de emisión de PAI. Se descubrió que la concentración de cinc era 0,046 M y la concentración de zirconio era inferior a 0,055 mM. La relación de la concentración de circonio con respecto a la concentración de cinc era de menos de 0,0012. De este modo, se obtuvo una solución de compuesto de organocinc que tenía una concentración extremadamente baja de circonio.

[Fórmula química 53]



45 en la que Y es una estructura representada por  $Y_1$ ,  $Y_2$  o  $Y_3$ , que se muestra a continuación, y la proporción de  $Y_1:Y_2:Y_3 = r:p:q$  (relación molar).

[Fórmula química 54]



[Ejemplo 8]

- 5 En un autoclave de acero inoxidable (SUS) suficientemente secado con nitrógeno seco, se introdujeron 50 ml de n-hexano. La presurización a 0,5 MPa usando etileno seguida de la descarga de la presión a la presión normal se repitió tres veces, saturando de este modo una capa líquida y una capa de gas con etileno. Con agitación, la temperatura se aumentó a 120 °C y después se añadió más etileno, presurizando de este modo a 0,7 MPa.
- 10 Después, se añadieron 0,2 mmol en términos de un átomo de aluminio de metilaluminoxano (MMAO), 0,24 mmol en términos de un átomo de cinc de la mezcla de color amarillo obtenida en el Ejemplo 2 y 4,0 μmol en términos de moles del Cocatalizador 1 (solución 0,08 M en tolueno). Después, se añadieron 1,0 μmol en términos de moles del Catalizador 1 (solución 0,33 M en tolueno), iniciando de este modo la polimerización. Durante la polimerización, se añadió etileno de manera que la presión fuera siempre de 0,7 MPa. La reacción se realizó a 120 °C durante 10 minutos y se añadieron 5 ml de alcohol isobutílico para finalizar la polimerización. Después de la finalización de la polimerización, el producto de reacción se vertió en metanol para precipitar una cantidad entera del polímero.
- 15 Después, se añadió ácido clorhídrico y se realizó una filtración usando un filtro de vidrio. El polímero se secó a presión reducida a 80 °C durante 10 horas y después se obtuvieron 1,44 g del polímero. La actividad de polimerización fue de 8600 g/mmol-Zr·h. El peso molecular se midió mediante CPG y se descubrió que, en términos de polietileno, el peso molecular promedio en número (Pn) era de 1990, el peso molecular promedio en peso (Pm) era de 3530 y Pm/Pn era de 1,78.

Este polímero se disolvió en ortodichlorobenceno deuterado y la solución se midió por RMN-<sup>1</sup>H y RMN-<sup>13</sup>C. A partir de una señal de RMN-<sup>13</sup>C obtenida, se midieron el carbono terminal y la cantidad de ramificaciones. Se descubrió que, por cada 1000 átomos de carbono, no se observó ninguna ramificación de metilo, se observó una ramificación de etilo en una cantidad de 2,4 y se observó una ramificación de propilo en una cantidad de 0,3. Este resultado indica que se obtuvo un polímero en el que se insertó etileno en un enlace carbono-cinc del Compuesto X-2. Es decir, este resultado demuestra que el compuesto X-2 funciona como un agente de transferencia de cadenas.

[Ejemplo 9]

- 30 En un reactor de vidrio de 500 ml secado suficientemente en atmósfera de nitrógeno seco, se introdujeron 250 ml de decano. Después de que la temperatura se aumentara a 100 °C, con agitación, se insufló gas etileno a presión normal (caudal: 100 l/h) en el reactor. Mientras se insuflaba gas etileno, se añadieron 0,20 mmol en términos de un átomo de aluminio de metilaluminoxano (MMAO), 4,02 mmol en términos de un átomo de cinc de la mezcla de color

naranja obtenida en el Ejemplo 3 y 16,0  $\mu\text{mol}$  en términos de moles del Cocatalizador 1 (solución 0,08 M en tolueno). Después, se añadieron 4,0  $\mu\text{mol}$  en términos de moles del Catalizador 1 (solución 0,001 M en tolueno), iniciando de este modo la polimerización. La reacción se realizó a 100 °C durante 10 minutos y después finalizó la insuflación de gas etileno. En su lugar, mientras se insuflaba nitrógeno (caudal: 50 l/h), se introdujeron 3,4 ml (23,9 mmol) de etilsuccinilcloruro y se agitaron a 100 °C. Cinco minutos después, se observó un precipitado de color blanco. Diez minutos después, con enfriamiento, se añadieron 3,0 ml de agua pura, terminando de este modo la reacción. La temperatura se enfrió a temperatura ambiente y después el producto de reacción se vertió en una solución mixta de acetona (0,5 l) y metanol (0,5 l) para precipitar un polímero. El polímero se recogió por filtración. El polímero se secó a presión reducida a 100 °C durante 12 horas. Se obtuvieron 9,87 g del polímero.

Este polímero se disolvió en tetracloroetano deuterado y la solución se sometió a medición por RMN-<sup>1</sup>H. El espectro de RMN-<sup>1</sup>H se muestra en la Figura 2. En este espectro, se observó un cuarteto correspondiente al grupo metileno de etiléster a aproximadamente 4,1 ppm; se observó un pico correspondiente a un grupo metileno en posición  $\beta$  de etiléster a aproximadamente 2,7 ppm; se observó un pico correspondiente a un grupo metileno en posición  $\delta$  de etiléster a aproximadamente 2,3 ppm; y se observó un pico correspondiente a un metilo terminal y un grupo metilo derivado de una ramificación de etilo a aproximadamente a 8 ppm. La relación de la suma de los valores integrados de los picos a aproximadamente 4,1 ppm, a aproximadamente 2,7 ppm, a aproximadamente 2,5 ppm y a aproximadamente 2,3 ppm a un valor integrado del pico a aproximadamente 0,8 ppm era de 8:3,76. Por tanto, se descubrió que se obtuvo un polietileno funcional en ambos extremos en el que la relación (relación de extremos funcionalizados) del número de grupos funcionales presentes en los extremos con respecto al número total de extremos del polímero era del 82 %.

#### [Ejemplo 10]

En un reactor de vidrio de 500 ml secado suficientemente en atmósfera de nitrógeno seco, se introdujeron 250 ml de tolueno. Después de que la temperatura se aumentara a 50 °C, con agitación, se insuflaron gas etileno de presión normal (caudal: 100 l/h) y gas propileno de presión normal (caudal: 100 l/h) en el reactor. Mientras que estos gases se insuflaban, se añadieron 0,20 mmol en términos de un átomo de aluminio de metilaluminoxano (MMAO), 4,01 mmol en términos de un átomo de cinc de la solución del compuesto de organocinc obtenida en el Ejemplo 7 y 16,0  $\mu\text{mol}$  en términos de moles del Cocatalizador 1 (solución 0,08 M en tolueno). Después, se añadieron 4,0  $\mu\text{mol}$  en términos de moles del Catalizador 2 (solución 0,001 M en tolueno), iniciando de este modo la polimerización. La reacción se realizó a 50 °C durante 2 minutos y después se finalizó la insuflación de los gases. En su lugar, mientras se insuflaba nitrógeno (caudal: 50 l/h), se introdujeron 3,4 ml (23,5 mmol) de etilsuccinilcloruro y se agitaron a 50 °C. Diez minutos después, con enfriamiento, se añadieron 3,0 ml de agua pura, finalizando de este modo la reacción. La temperatura se enfrió a temperatura ambiente y después el producto de reacción se vertió en agua pura (1,0 l). Usando un embudo de separación, se separó una capa orgánica y la capa orgánica se lavó usando una solución acuosa de hidrógeno carbonato de sodio y se lavó adicionalmente con agua pura. La capa orgánica resultante se concentró, obteniendo de este modo un polímero líquido. Este polímero se secó a presión reducida a 100 °C durante 12 horas. Se obtuvieron 2,96 g del polímero.

Este polímero se disolvió en tetracloroetano deuterado y la solución se sometió a medición por RMN-<sup>1</sup>H. El espectro de RMN-<sup>1</sup>H se muestra en la Figura 3. En este espectro, se observó un cuarteto correspondiente al grupo metileno de etiléster a aproximadamente 4,1 ppm; se observó un pico correspondiente a un grupo metileno en posición  $\beta$  de etiléster a aproximadamente 2,7 ppm; se observó un pico correspondiente a un grupo metileno en posición  $\alpha$  de etiléster a aproximadamente 2,5 ppm; y se observó un pico correspondiente a un grupo metileno en posición  $\delta$  de etiléster a aproximadamente 2,1 ppm a 2,4 ppm. Se descubrió a partir de esto que se obtuvo un copolímero de etileno propileno funcional en ambos extremos que tiene etiléster en los extremos.

#### [Ejemplo 11]

En un reactor de vidrio de 500 ml secado suficientemente en nitrógeno seco, se introdujeron 250 ml de tolueno y 15 ml de 1-octeno. Después de que la temperatura se aumentara a 50 °C, con agitación, se insufló gas etileno de presión normal (caudal: 100 l/h) en el reactor. Mientras se insuflaba gas de etileno, se añadieron 0,20 mmol en términos de un átomo de aluminio de metilaluminoxano (MMAO), 2,0 mmol en términos de un átomo de cinc de la solución de compuesto de organocinc obtenida en el Ejemplo 7 y 16,0  $\mu\text{mol}$  en términos de moles del Cocatalizador 1 (solución 0,08 M en tolueno). Después, se añadieron 0,25  $\mu\text{mol}$  en términos de moles del Catalizador 2 (solución 0,001 M en tolueno), iniciando de este modo la polimerización. La reacción se realizó a 50 °C durante 10 minutos y, después, se añadieron 0,05 mmol en términos de moles de bis(1,5-ciclooctadieno)níquel (solución 0,01 M en tolueno). Mientras se mantenía la insuflación del gas etileno, se realizó agitación a temperatura ambiente. Dos horas después, el producto de reacción se vertió en una solución mixta de metanol (1,0 l) y ácido clorhídrico concentrado (3 ml) para precipitar un polímero. El polímero se recogió por filtración. Este polímero se secó a presión reducida a 100 °C durante 12 horas. Se obtuvieron 1,5 g de un polímero viscoso de color blanco.

Este polímero se disolvió en tolueno deuterado y la solución se sometió a medición por RMN-<sup>1</sup>H. En este espectro, se observó un pico correspondiente a un grupo metileno de una olefina terminal a aproximadamente 5,8 ppm; y se

observó un pico correspondiente a un grupo metileno de una olefina terminal a aproximadamente 5,0 ppm. Se descubrió a partir de esto que este polímero tenía una olefina en los extremos.

[Ejemplo de Referencia 1]

- 5 Se realizó el mismo procedimiento que en el Ejemplo 7, excepto porque en el Ejemplo 7, la mezcla de color amarillo obtenida en el Ejemplo 2 se reemplazó con 0,24 mmol en términos de un átomo de cinc de dietilcinc, obteniéndose de este modo 1,24 g de un polímero.
- 10 Este polímero se disolvió en ortodichlorobenceno deuterado y la solución se sometió a medición por RMN-<sup>13</sup>C. A partir de una señal de RMN-<sup>13</sup>C obtenida, se midieron el carbono terminal y la cantidad de ramificaciones. Se descubrió que la ramificación etilo y la ramificación propilo por cada 1000 carbonos estaban por debajo del límite detectable.

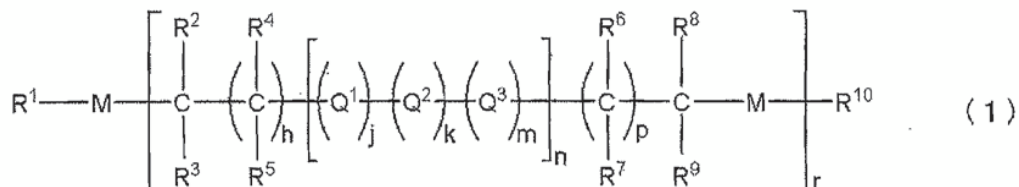
#### **Aplicabilidad industrial**

- 15 El compuesto organometálico novedoso de la presente invención es útil como agente de transferencia de cadenas en la reacción de polimerización de un compuesto que contiene dobles enlaces y puede usarse en particular como agente de transferencia de cadenas reversible en la reacción de polimerización, y es capaz de producir un polímero que tiene un enlace carbono-metal en ambos extremos.
- 20

## REIVINDICACIONES

1. Un compuesto organometálico (1) representado por la siguiente fórmula general (1).

[Fórmula química 1]



5

(en la fórmula general (1), M es un átomo de magnesio, un átomo de cinc, un grupo Al-R<sup>11</sup> o un grupo Ga-R<sup>11</sup>, a condición de que R<sup>11</sup> sea un átomo de hidrógeno, un grupo hidrocarburo, un átomo de halógeno, un grupo que contiene silicio o un grupo que contiene oxígeno; R<sup>1</sup> y R<sup>10</sup> son cada uno independientemente un grupo hidrocarburo que tiene de 1 a 20 átomos de carbono, o R<sup>1</sup> y R<sup>10</sup> pueden estar unidos entre sí para formar un grupo conector divalente (R<sup>101</sup>) que tenga 4 o más átomos de carbono y que contenga opcionalmente un heteroátomo excluyendo carbono e hidrógeno y de este modo formar un anillo; R a R<sup>9</sup> son cada uno independientemente un átomo de hidrógeno o un grupo hidrocarburo que tiene de 1 a 20 átomos de carbono; Q<sup>1</sup> y Q son cada uno independientemente un grupo hidrocarburo divalente; Q<sup>2</sup> es un grupo conector divalente que contiene un enlace con un heteroátomo excluyendo carbono; h, j, k, m y p son cada uno independientemente 0 o 1; n es un número entero de 0 a 10 y r es un número entero de 2 a 10000, a condición de que:

10

15

20

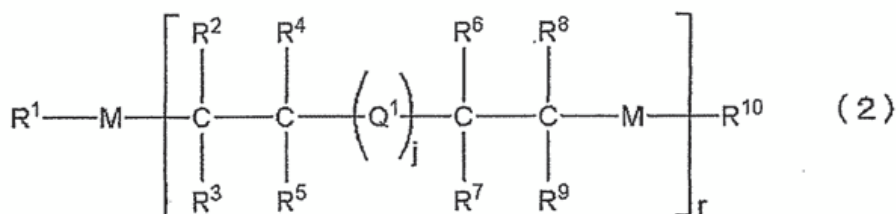
25

R<sup>1</sup> a R<sup>11</sup> pueden ser un grupo formado mediante la sustitución de una parte de los átomos de hidrógeno del grupo hidrocarburo con un sustituyente que contiene un heteroátomo excluyendo carbono e hidrógeno; Q<sup>1</sup> y Q<sup>3</sup> pueden ser un grupo formado mediante la sustitución de una parte de los átomos de hidrógeno del grupo hidrocarburo divalente con un sustituyente que contiene un heteroátomo excluyendo carbono e hidrógeno; cuando h es 0, al menos uno de R<sup>2</sup> y R<sup>3</sup> es un grupo hidrocarburo que tiene de 2 a 20 átomos de carbono; cuando h es 1, al menos uno de R<sup>4</sup> y R<sup>5</sup> es un grupo hidrocarburo que tiene de 1 a 20 átomos de carbono; cuando p es 0, al menos uno de R<sup>8</sup> y R<sup>9</sup> es un grupo hidrocarburo que tiene de 2 a 20 átomos de carbono; cuando p es 1, al menos uno de R<sup>6</sup> y R<sup>7</sup> es un grupo hidrocarburo que tiene de 1 a 20 átomos de carbono; cuando n es 2 o más, Q<sup>1</sup>, Q<sup>2</sup>, Q<sup>3</sup>, j, k y m plurales pueden ser individualmente iguales o diferentes entre sí; Q<sup>1</sup>, Q<sup>2</sup>, Q<sup>3</sup>, h, j, k, m, n, p plurales y R<sup>2</sup> a R<sup>9</sup> pueden ser individualmente iguales o diferentes entre sí).

2. El compuesto organometálico (1) de acuerdo con la reivindicación 1, que se representa por la siguiente fórmula general (2), (3a), (3b), (3c) o (4).

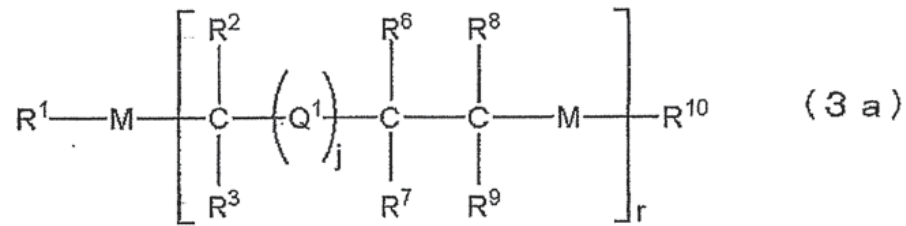
30

[Fórmula química 2]

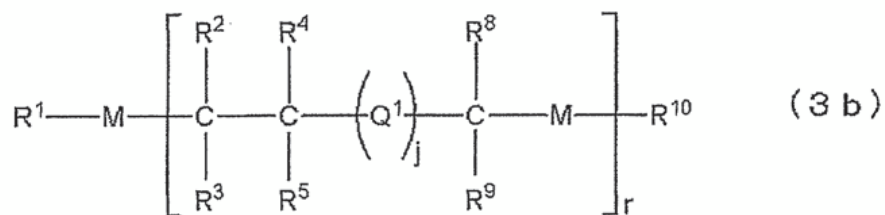




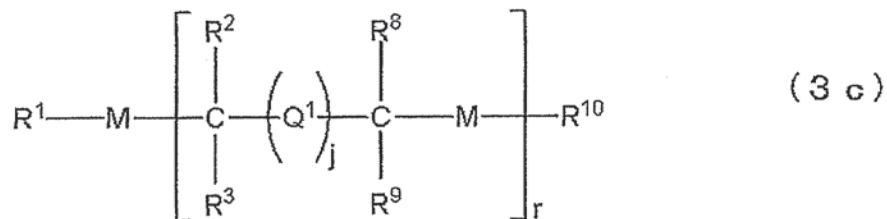
[Fórmula química 3]



[Fórmula química 4]

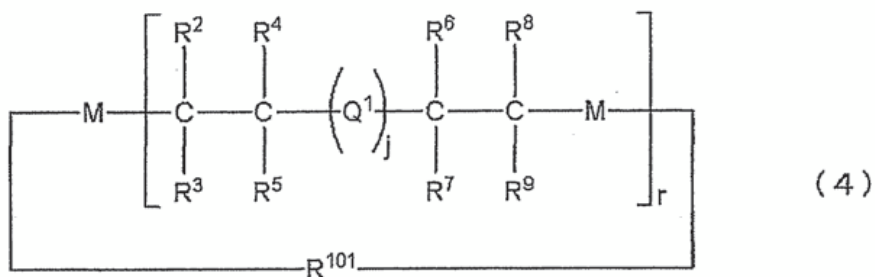


[Fórmula química 5]



5

[Fórmula química 6]

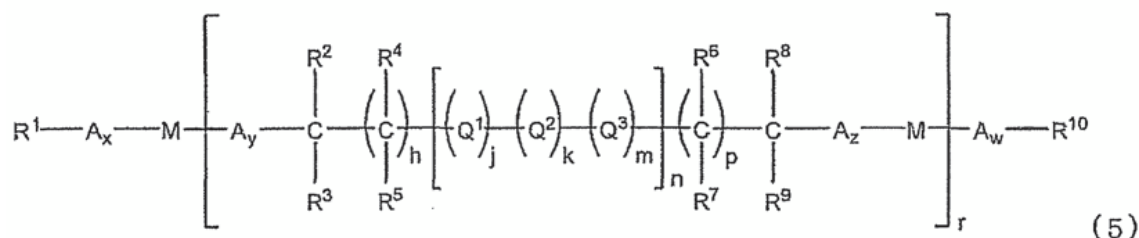


10 (en las fórmulas generales (2), (3a), (3b), (3c) y (4), M, R<sup>1</sup> a R<sup>10</sup>, Q<sup>1</sup>, j y r se definen cada uno de la misma manera que en la fórmula general (1) de la reivindicación 1; y R<sup>101</sup> es un grupo conector divalente que tiene 4 o más átomos de carbono y que contiene opcionalmente un heteroátomo excluyendo carbono e hidrógeno).

15 3. El compuesto organometálico (1) de acuerdo con la reivindicación 1 o 2, en el que M es un grupo Al-R<sup>11</sup> o un átomo de cinc.

4. Un compuesto organometálico (5) representado por la siguiente fórmula general (5).

[Fórmula química 7]



(en la fórmula general (5), A es una unidad derivada de una  $\alpha$ -olefina lineal o ramificada que tiene de 2 a 30 átomos de carbono, una olefina cíclica, un dieno, un polieno o un compuesto de vinilo aromático; x, y, z y w son cada uno un número entero de 1 o más;  $y + x + y + z + w = 8$  a 100000;

M es un átomo de magnesio, un átomo de cinc, un grupo Al-R<sup>11</sup> o un grupo Ga-R<sup>11</sup>, a condición de que R<sup>11</sup> sea un átomo de hidrógeno, un grupo hidrocarburo, un átomo de halógeno, un grupo que contiene silicio o un grupo que contiene oxígeno; R<sup>1</sup> y R<sup>10</sup> son cada uno independientemente un grupo hidrocarburo que tiene de 1 a 20 átomos de carbono, o R<sup>1</sup> y R<sup>10</sup> pueden unirse entre sí para formar un grupo conector divalente (R<sup>101</sup>) que tenga 4 o más átomos de carbono y que contenga opcionalmente un heteroátomo excluyendo carbono e hidrógeno y formar de este modo un anillo; R<sup>2</sup> a R<sup>9</sup> son cada uno independientemente un átomo de hidrógeno o un grupo hidrocarburo que tiene de 1 a 20 átomos de carbono; Q<sup>1</sup> y Q<sup>3</sup> son cada uno independientemente un grupo hidrocarburo divalente; Q<sup>2</sup> es un grupo conector divalente que contiene un enlace mediante un heteroátomo excluyendo carbono; h, j, k, m y p son cada uno independientemente 0 o 1; n es un número entero de 0 a 10; y r es un número entero de 2 a 10000, a condición de que:

R<sup>1</sup> a R<sup>11</sup> puede ser un grupo formado mediante la sustitución de una parte de los átomos de hidrógeno del grupo hidrocarburo con un sustituyente que contiene un heteroátomo excluyendo carbono e hidrógeno; Q<sup>1</sup> y Q<sup>3</sup> pueden ser un grupo formado mediante la sustitución de una parte de los átomos de hidrógeno del grupo hidrocarburo divalente con un sustituyente que contiene un heteroátomo excluyendo carbono e hidrógeno;

cuando h es 0, al menos uno de R<sup>2</sup> y R<sup>3</sup> es un grupo hidrocarburo que tiene de 2 a 20 átomos de carbono;

cuando h es 1, al menos uno de R<sup>4</sup> y R<sup>5</sup> es un grupo hidrocarburo que tiene de 1 a 20 átomos de carbono;

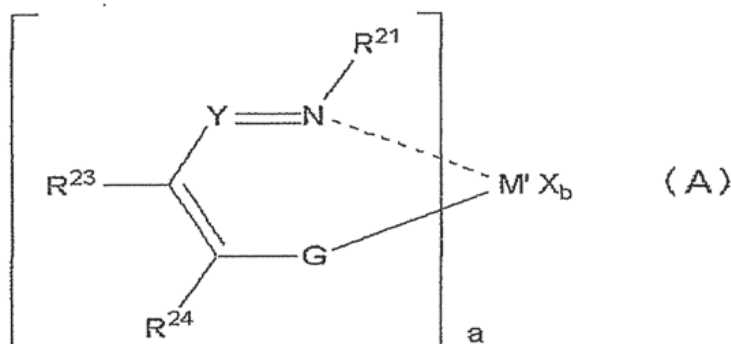
cuando p es 0, al menos uno de R<sup>8</sup> y R<sup>9</sup> es un grupo hidrocarburo que tiene de 2 a 20 átomos de carbono;

cuando p es 1, al menos uno de R<sup>6</sup> y R<sup>7</sup> es un grupo hidrocarburo que tiene de 1 a 20 átomos de carbono;

cuando n es 2 o más, Q<sup>1</sup>, Q<sup>2</sup>, Q<sup>3</sup>, j, k y m plurales pueden ser individualmente iguales o diferentes entre sí; Q<sup>1</sup>, Q<sup>2</sup>, Q<sup>3</sup>, h, j, k, m, n, p plurales y R<sup>2</sup> a R<sup>9</sup> puede ser individualmente iguales o diferentes entre sí).

5. Un método para producir el compuesto organometálico de acuerdo con la reivindicación 1, que comprende hacer reaccionar en presencia de un compuesto de metal de transición (A) representado por la siguiente fórmula general (A), un compuesto de dieno (B) representado por la siguiente fórmula general (B) con un compuesto organometálico (C) representado por la siguiente fórmula general (C).

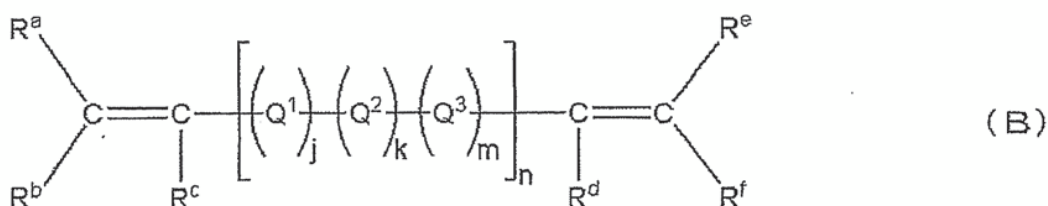
[Fórmula química 8]



(en la fórmula general (A), M' es un átomo de metal de transición seleccionado entre los Grupos 3 a 11 de la tabla periódica de los elementos (el Grupo 3 incluye un lantánido y un actínido); a es un entero de 1 a 3, que es el número de ligandos coordinados con el átomo de metal de transición M'; X es un átomo o un grupo seleccionado entre el grupo que consiste en un átomo de hidrógeno, un átomo de halógeno, un átomo de oxígeno, un grupo hidrocarburo, un grupo que contiene silicio, un grupo que contiene germanio, un grupo que contiene estaño, un grupo que contiene boro, un grupo que contiene aluminio, un grupo que contiene fósforo, un grupo que contiene oxígeno, un grupo que

contiene azufre, un grupo que contiene nitrógeno, un grupo que contiene halógeno y un resto de compuesto heterocíclico; b es un número entero de 0 a 3, que es el número de X; cuando b es 2 o 3, X pueden ser iguales o diferentes entre sí y X plurales pueden estar unidos entre sí para formar un anillo; Y es un átomo de nitrógeno o un átomo de carbono que tiene un sustituyente R<sup>22</sup>; G es un átomo de oxígeno, un átomo de azufre, un átomo de selenio o un átomo de nitrógeno que tiene un sustituyente R<sup>25</sup>; R<sup>21</sup> a R<sup>25</sup> pueden ser iguales o diferentes entre sí y son un átomo o un grupo seleccionado entre el grupo que consiste en un grupo hidrocarburo, un átomo de halógeno, un átomo de hidrógeno, un grupo sililo sustituido con hidrocarburo, un grupo que contiene oxígeno, un grupo que contiene nitrógeno, un grupo que contiene azufre, un grupo que contiene boro, un grupo que contiene aluminio, un grupo que contiene fósforo, un grupo que contiene halógeno, un resto de compuesto heterocíclico, un grupo que contiene silicio, un grupo que contiene germanio y un grupo que contiene estaño; dos o más de R<sup>22</sup> a R<sup>25</sup> pueden estar unidos entre sí para formar un anillo; y cuando a es 2 o 3, los R<sup>21</sup>, los R<sup>22</sup>, los R<sup>23</sup>, los R<sup>24</sup> y los R<sup>25</sup> pueden ser individualmente iguales o diferentes entre sí, y un grupo de R<sup>22</sup> - R<sup>25</sup> contenido en uno cualquiera de los ligandos y un grupo de R<sup>22</sup> - R<sup>25</sup> contenido en otro ligando pueden estar unidos).

[Fórmula química 9]



(en la fórmula general (B), R<sup>a</sup> a R<sup>f</sup> son cada uno independientemente un átomo de hidrógeno, o un grupo hidrocarburo que tiene de 1 a 20 átomos de carbono, y pueden ser un grupo formado mediante la sustitución de una parte de los átomos de hidrógeno de un grupo hidrocarburo con un sustituyente que contiene un heteroátomo excluyendo carbono e hidrógeno; y Q<sup>1</sup>, Q<sup>2</sup>, Q<sup>3</sup>, j, k, m y n se definen cada uno de la misma manera que en la fórmula general (1)).

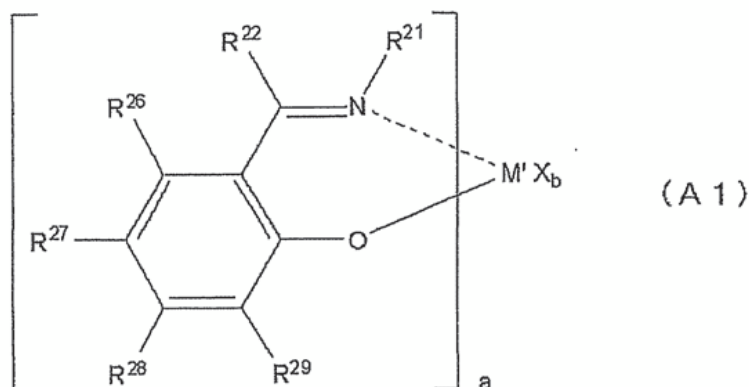
[Fórmula química 10]



(en la fórmula general (C), M se define de la misma manera que en la fórmula general (1); dos R son cada uno independientemente un grupo hidrocarburo que tiene de 1 a 20 átomos de carbono y pueden ser un grupo formado por sustitución de una parte de los átomos de hidrógeno del grupo hidrocarburo con un sustituyente que contiene un heteroátomo excluyendo carbono e hidrógeno).

6. El método para la producción del compuesto organometálico de acuerdo con la reivindicación 5, en el que el compuesto de metal de transición (A) es un compuesto de metal de transición (A1) representado por la siguiente fórmula general (A1).

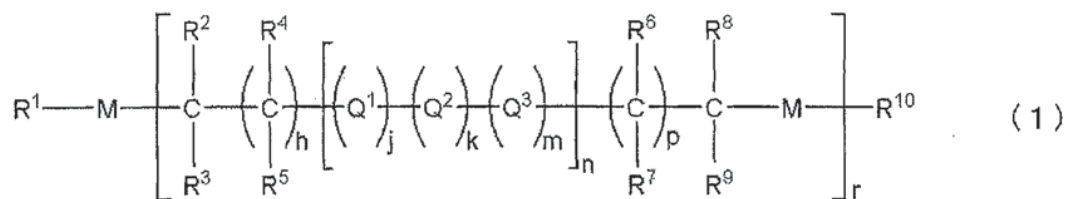
[Fórmula química 11]



(en la fórmula general (A1), M<sup>1</sup>, a, X, B, R<sup>21</sup> y R<sup>22</sup> se definen cada uno de la misma manera que en la fórmula general (A) de la reivindicación 1; R<sup>26</sup> a R<sup>29</sup> pueden ser iguales o diferentes entre sí y son un átomo o un grupo seleccionado entre el grupo que consiste en un átomo de hidrógeno, un grupo hidrocarburo, un átomo de halógeno, un grupo sililo sustituido con hidrocarburo, un grupo que contiene oxígeno, un grupo que contiene nitrógeno, un grupo que contiene azufre, un grupo que contiene boro, un grupo que contiene aluminio, un grupo que contiene fósforo, un grupo que contiene halógeno, un resto de compuesto heterocíclico, un grupo que contiene silicio, un grupo que contiene germanio y un grupo que contiene estaño y, de estos, dos o más pueden estar unidos entre sí para formar un anillo; y cuando a es 2 o 3, los R<sup>21</sup>, los R<sup>22</sup>, los R<sup>26</sup>, los R<sup>27</sup>, los R<sup>28</sup> y los R<sup>29</sup> pueden ser individualmente iguales o diferentes entre sí y un grupo de R<sup>22</sup> y R<sup>26</sup> - R<sup>29</sup> contenido en uno cualquiera de los ligandos y un grupo de R<sup>22</sup> y R<sup>26</sup> - R<sup>29</sup> contenido en otro ligando pueden estar unidos).

7. El método de producción del compuesto organometálico de acuerdo con la reivindicación 5, en el que M es un grupo Al-R<sup>11</sup> o un átomo de cinc.
8. El método de producción del compuesto organometálico de acuerdo con una cualquiera de las reivindicaciones 5 a 7, que emplea un cocatalizador y un vehículo.
9. Un método de producción de un compuesto organometálico (5) representado por la siguiente fórmula general (5), que comprende hacer reaccionar el compuesto organometálico (1) de acuerdo con la reivindicación 1 con un α-olefina lineal o ramificada que tiene de 2 a 30 átomos de carbono, una olefina cíclica, un dieno o un polieno, o un compuesto de vinilo aromático.

[Fórmula química 12]

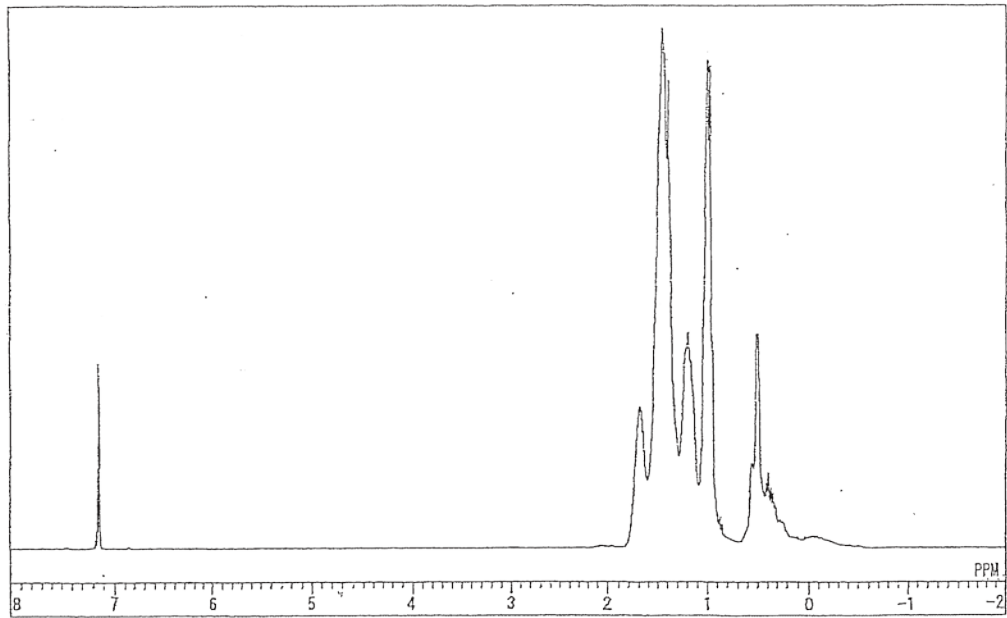


(en la fórmula general (5), A es una unidad derivada de una α-olefina lineal o ramificada que tiene de 2 a 30 átomos de carbono, una olefina cíclica, un dieno, un polieno o un compuesto de vinilo aromático; x, y, z y w son cada uno un número entero de 1 o más; x + y + z + w = 8 a 100000; M es un átomo de magnesio, un átomo de cinc, un grupo Al-R<sup>11</sup> o un grupo Ga-R<sup>11</sup>, a condición de que R<sup>11</sup> sea un átomo de hidrógeno, un grupo hidrocarburo, un átomo de halógeno, un grupo que contiene silicio o un grupo que contiene oxígeno; R<sup>1</sup> y R<sup>10</sup> son cada uno independientemente un grupo hidrocarburo que tiene de 1 a 20 átomos de carbono o R<sup>1</sup> y R<sup>10</sup> pueden estar unidos entre sí para formar un grupo conector divalente (R<sup>101</sup>) que tiene 4 o más átomos de carbono y que contiene opcionalmente un heteroátomo excluyendo carbono e hidrógeno y, de este modo, formar un anillo; R<sup>2</sup> a R<sup>9</sup> son cada uno independientemente un átomo de hidrógeno o un grupo hidrocarburo que tiene de 1 a 20 átomos de carbono; Q<sup>1</sup> y Q<sup>3</sup> son cada uno independientemente un grupo hidrocarburo divalente; Q<sup>2</sup> es un grupo conector divalente que contiene un enlace mediante un heteroátomo excluyendo carbono; h, j, k, m y p son cada uno independientemente 0 o 1; n es un número entero de 0 a 10; y r es un número entero de 2 a 10000, a condición de que:

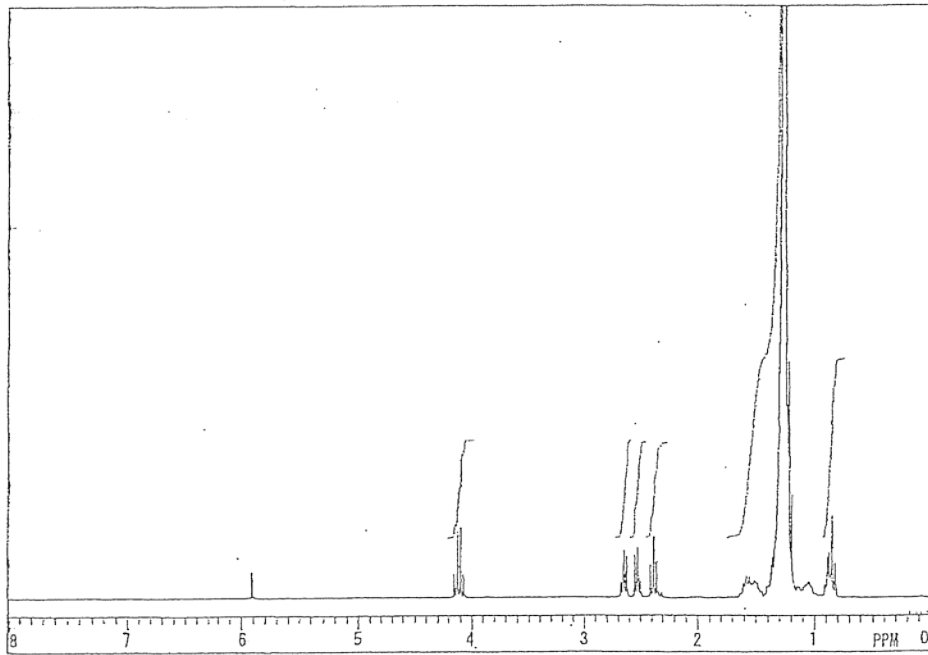
R<sup>1</sup> a R<sup>11</sup> pueden ser un grupo formado mediante la sustitución de una parte de los átomos de hidrógeno del grupo hidrocarburo con un sustituyente que contiene un heteroátomo excluyendo carbono e hidrógeno; Q<sup>1</sup> y Q<sup>3</sup> pueden ser un grupo formado mediante la sustitución de una parte de los átomos de hidrógeno del grupo hidrocarburo divalente con un sustituyente que contiene un heteroátomo excluyendo carbono e hidrógeno; cuando h es 0, al menos uno de R<sup>2</sup> y R<sup>3</sup> es un grupo hidrocarburo que tiene de 2 a 20 átomos de carbono; cuando h es 1, al menos uno de R<sup>4</sup> y R<sup>5</sup> es un grupo hidrocarburo que tiene de 1 a 20 átomos de carbono; cuando p es 0, al menos uno de R<sup>8</sup> y R<sup>9</sup> es un grupo hidrocarburo que tiene de 2 a 20 átomos de carbono; cuando p es 1, al menos uno de R<sup>6</sup> y R<sup>7</sup> es un grupo hidrocarburo que tiene de 1 a 20 átomos de carbono; cuando n es 2 o más, Q<sup>1</sup>, Q<sup>2</sup>, Q<sup>3</sup>, j, k y m plurales pueden ser individualmente iguales o diferentes entre sí; Q<sup>1</sup>, Q<sup>2</sup>, Q<sup>3</sup>, h, j, k, m, n, p plurales y R<sup>2</sup> a R<sup>9</sup> puede ser individualmente iguales o diferentes entre sí).

10. Un método para producir un polímero funcional en ambos extremos que comprende realizar la reacción de conversión de grupos funcionales en enlaces carbono-metal del compuesto organometálico (5) de acuerdo con la reivindicación 4.

[Fig.1]



[Fig.2]



[Fig. 3]

