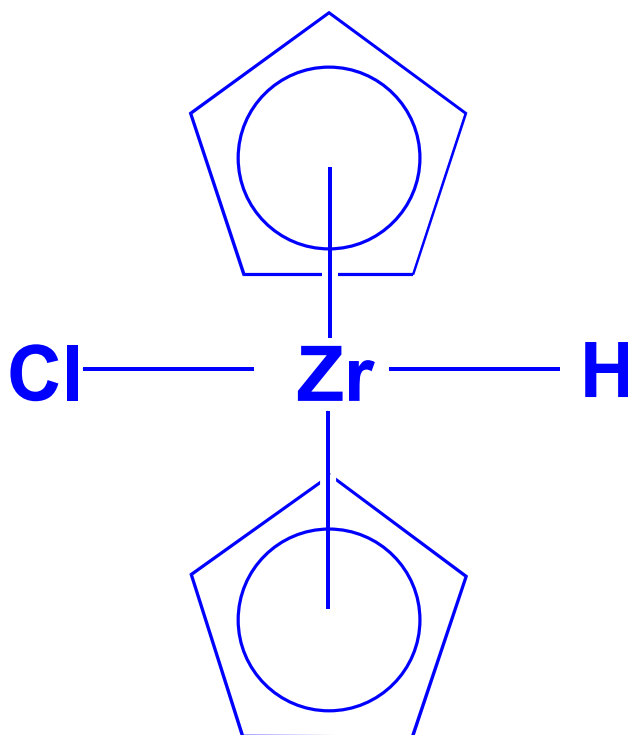


Zirconocene Chloride Hydride (Schwartz 試薬)

技術資料



日亜化学工業株式会社

1. 製品の案内

① 一般的性質

新規化学物質

化学名 : Bis-Cyclopentadienyl Zirconium (IV) Chloride Hydride
Zirconocene Chloride Hydride

分子式 : $(C_5H_5)_2ZrHCl$

分子量 : 257.87

外観性状 : 白色結晶

分解性 : 空気中の水分で分解し、 $(Cp_2ZrCl)_2O$ が生じる。
また、光により徐々に分解する。

② 品質

ジルコノセンクロリドヒドリドの分析

	規格値	分析例	理論値
Zr :	33.6%以上	34.4%	35.38%

【参考】 試薬品との比較

種類	Zr(%) *1 理論値 : 35.38	Cl(%) *1 理論値 : 13.75	Zr/Cl (モル比) 理論値 : 1.00	外観	3-ヘキシンの ヒドロジルコネーション 反応時間 *2 (分) @ 28°C	酸-加水分解 溶液の状態	
日亜品	34.4	13.1	1.02	白色粉末	26	澄明液	
試薬	A	35.2	1.09	淡桃色	88	不溶物が残留	
	B	35.3	1.08	白色粉末	45	不溶物が残留	
	C	36.1	12.7	1.10	白色粉末	53	不溶物が残留
	D	35.4	13.3	1.03	白色粉末	72	混濁液 不溶物が残留

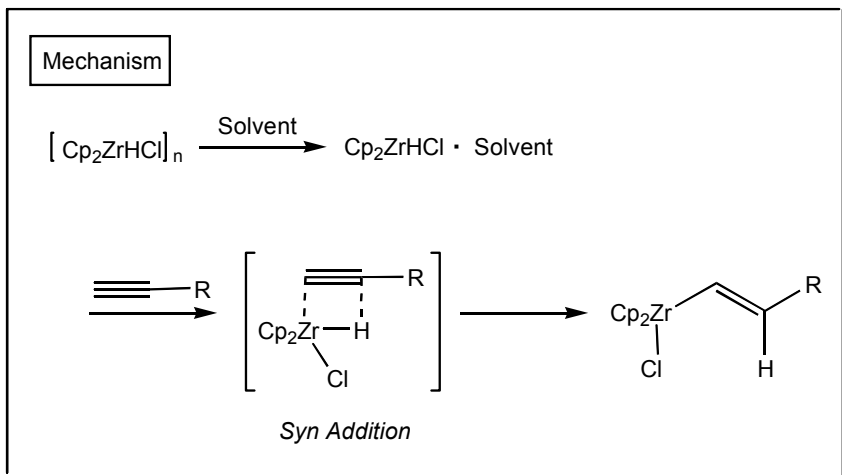
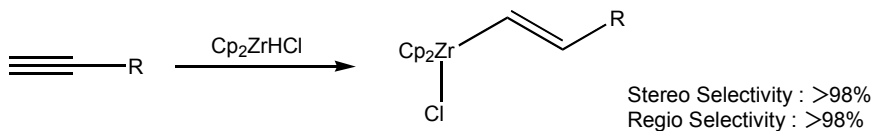
*1 Zr、Cl含量は、当社分析値

*2 反応スラリーが澄明液に変わった時間を、ヒドロジルコネーション反応終点とした。

2. 有機合成反応例

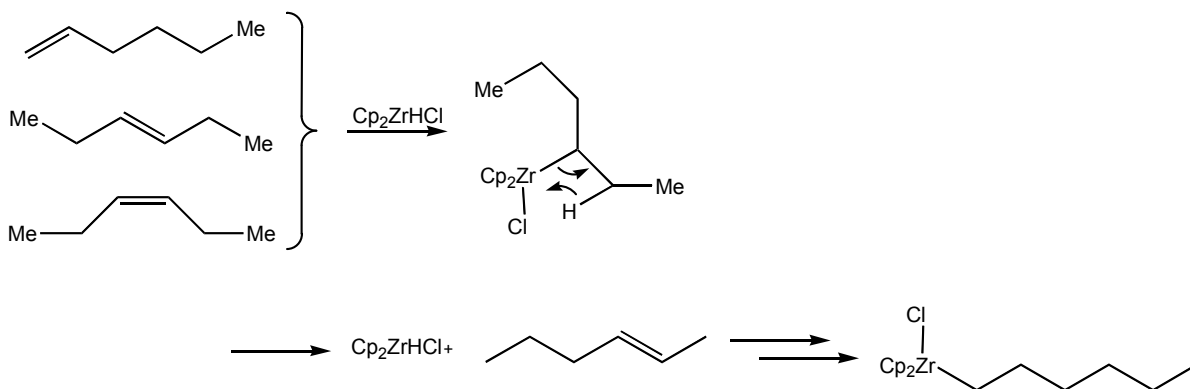
アルキンのヒドロジルコネーション

Hydrozirconation of Alkyne



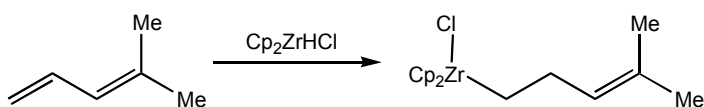
アルケンのヒドロジルコネーション

Hydrozirconation of Alkene



ジエンのヒドロジルコネーション

Hydrozirconation of Diene



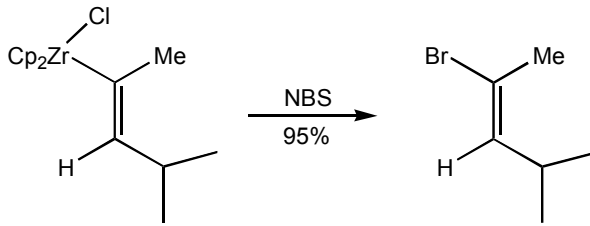
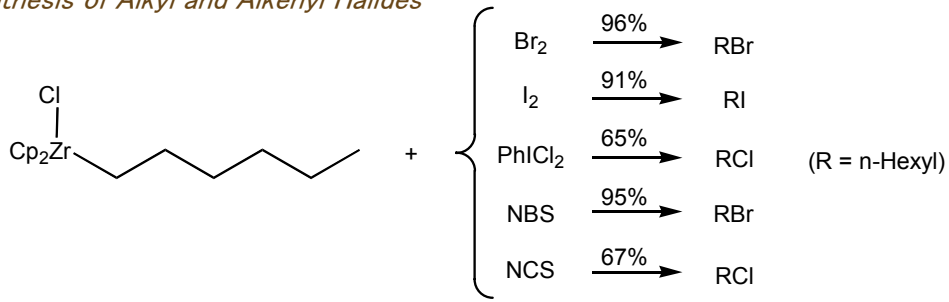
実験化学講座 5th ed., 18, 254 (2004)

アルキル、アルケニルジルコニウム化合物を用いた反応

Reaction of Alkyl- and Alkenylzirconium Compound

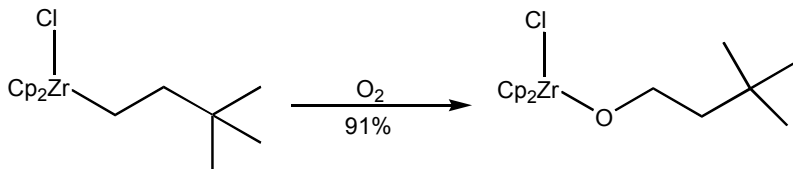
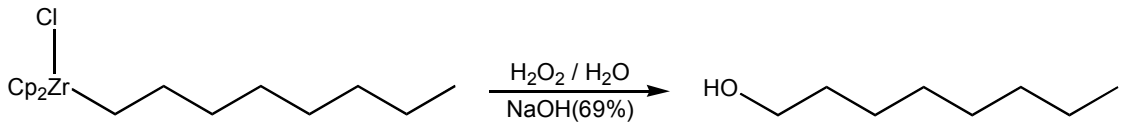
○ アルキル、アルケニルハライドの合成

Synthesis of Alkyl and Alkenyl Halides



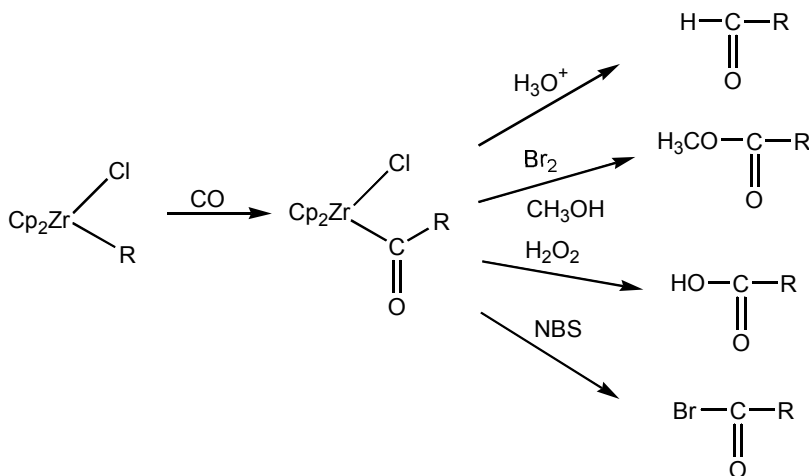
○ アルコールの合成

Synthesis of Alcohols



○ 挿入反応

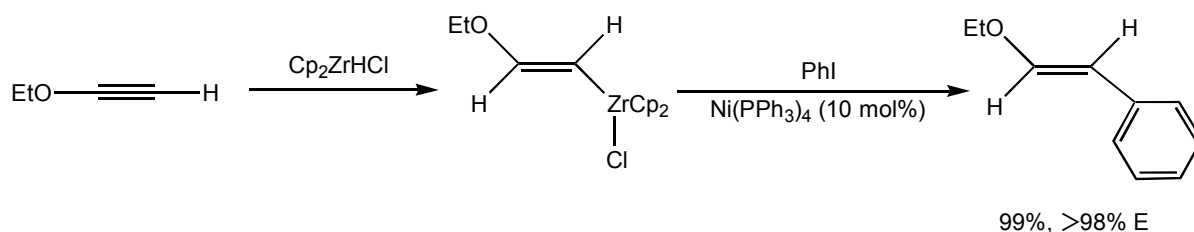
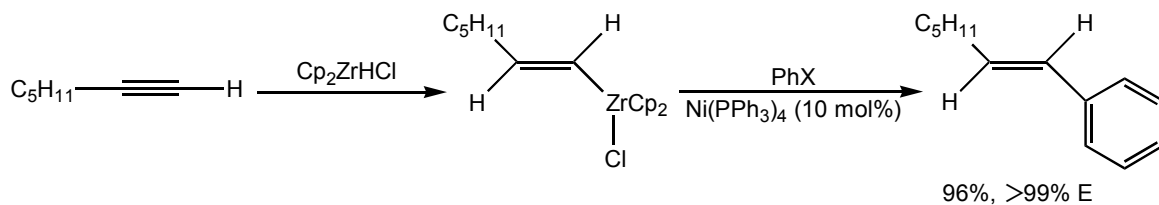
Insertion Reactions



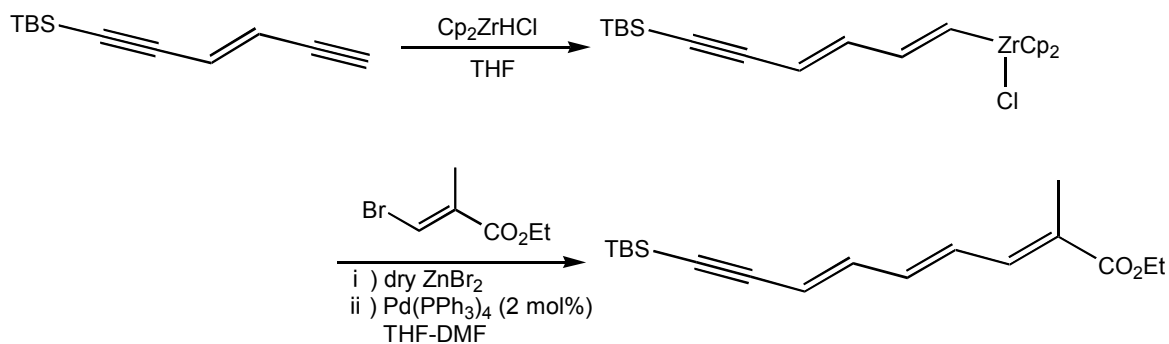
Angew. Chem. Int. Ed. Eng., 15, 333 (1976)

ヒドロジルコネーションを用いるクロスカップリング反応

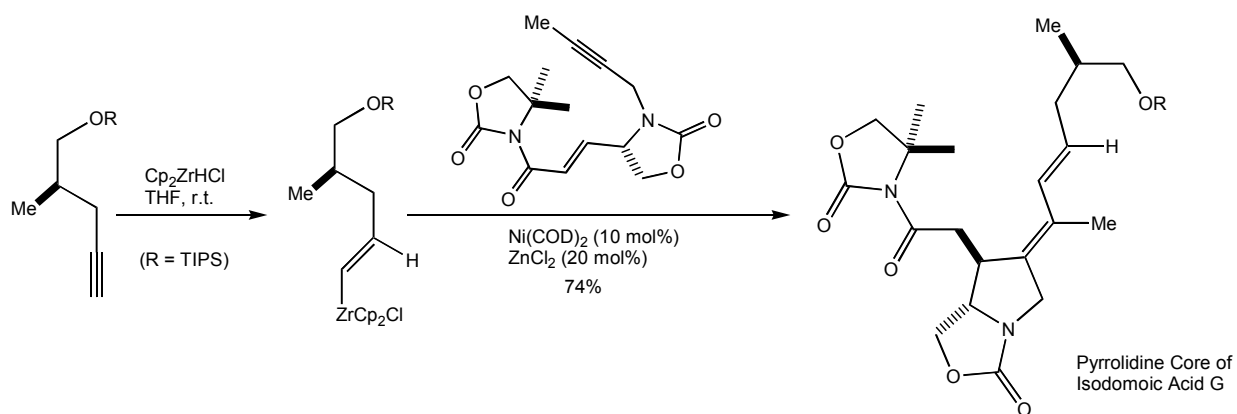
Pd- or Ni-Catalyzed Cross Coupling via Hydrozirconation



J. Am. Chem. Soc., **99**, (9), 3168 (1977)



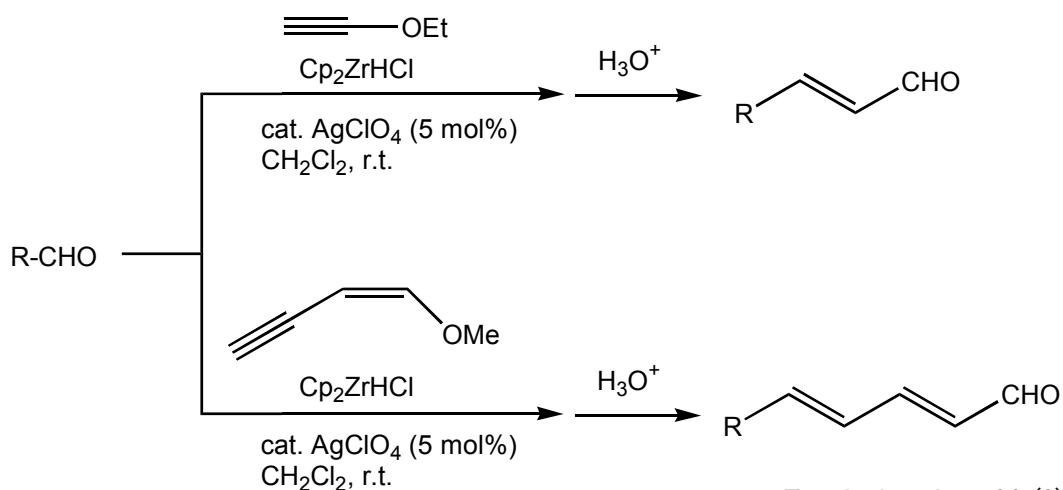
Org. Lett., **8**, (17), 3675 (2006)



Org. Lett., **5**, (20), 3771 (2003)

銀触媒下、アルコキシジルコノセクロリドを用いたアルデヒドの2及び4炭素増炭反応

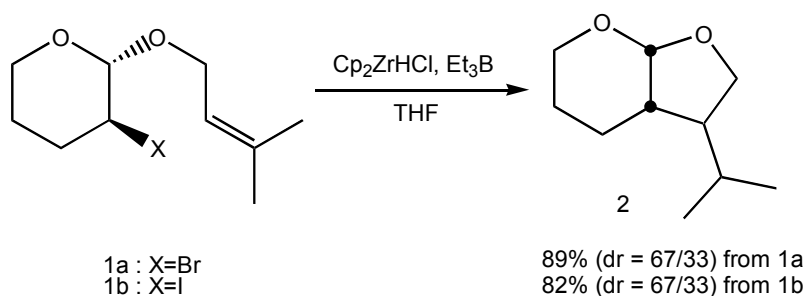
Two- and Four-Carbon Homologation of Aldehyde by AgClO_4 -Catalyzed Addition of Alkoxyalkenylzirconocene Chloride



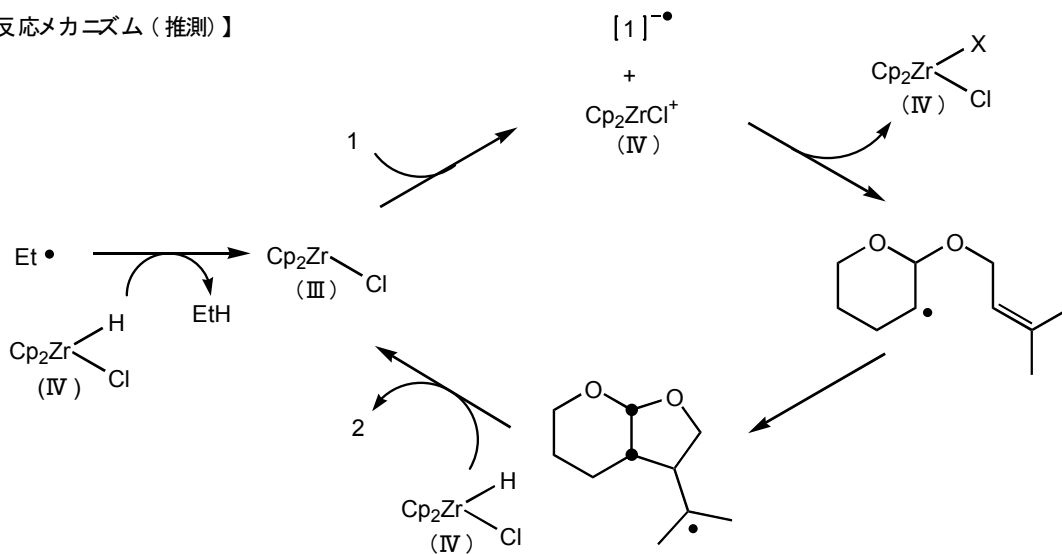
Tetrahedron, Lett., 34, (2), 341 (1993)

トリエチルボランから発生したラジカルとSchwartz試薬を用いた環化反応

Triethylborane-Induced Radical Reaction with Schwartz Reagent



【反応メカニズム (推測)】



J. Am. Chem. Soc., 123, (13), 3137 (2001)

■ 本カタログの掲載内容は2010年3月現在のものです。

■ お問い合わせ先

(製造、技術)

日亜化学工業株式会社 徳島工場(V工場)

〒771-0132

徳島県徳島市川内町平石夷野224番地

TEL:(088) 665-2311

FAX:(088) 665-5292

(営業)

日亜化学工業株式会社 東京営業所

〒108-0014

東京都港区芝5丁目34-7 田町センタービル13階

TEL:(03) 3456-3784

FAX:(03) 3453-2369



<http://www.nichia.co.jp>

Ever Researching for a Brighter World