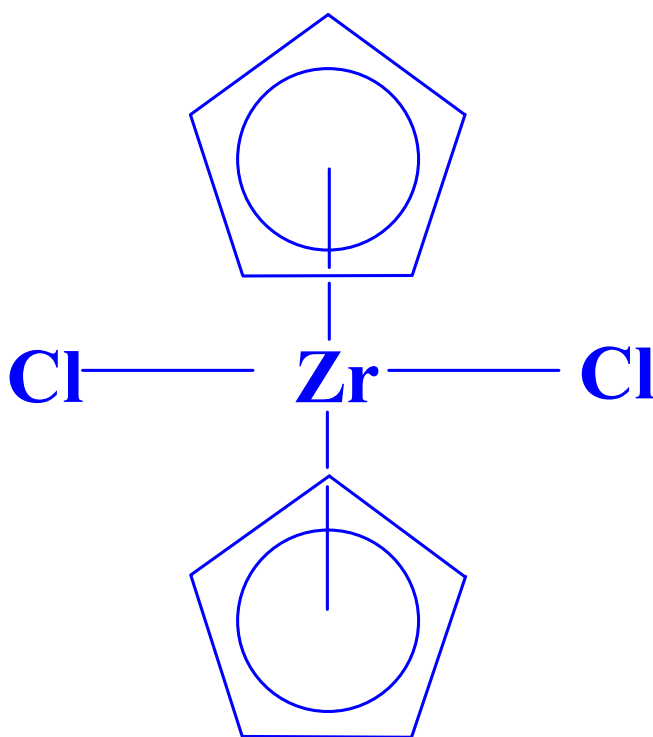


二塩化ジルコノセン

技術資料



日亜化学工業株式会社

目 次

1. 特徴
2. 製品の案内
3. 各種溶剤に対する溶解度
4. 水に対する溶解度とpHの関係
5. 安定性
6. 用途（例）
7. 有機合成反応（例）
8. 保存・取り扱い方法について

1. 特徴

- (1) 独自技術を駆使し、厳重な工程・品質の管理のもとで製造しておりますので均一で高品質です。
- (2) 高機能性材料となる各種誘導体の原料として活用できます。
（例）Schwartz試薬、根岸試薬

弊社独自の技術サービス体制を整えておりますので、その他のジルコニウム化合物（誘導体も含む）に関しましてもご相談に応じます。

2.製品の案内

① 一般的性質

新規化学物質

化学名	: Bis-Cyclopentadienyl Zirconium Dichloride
分子式	: $(C_5H_5)_2ZrCl_2$
分子量	: 292.32
外観性状	: 白色針状結晶
融点	: 242~245 °C
昇華点	: 150~180 °C (29.1 kPa)
溶解性	: ハロゲン化炭化水素、芳香族炭化水素、 極性溶媒に可溶、直鎖状炭化水素には難溶。
分解性	: 空気中に放置すると水分、酸素により徐々に分解する (塩化水素と $[ZrCl(C_5H_5)_2]_2O$ が生じる)

② 品質

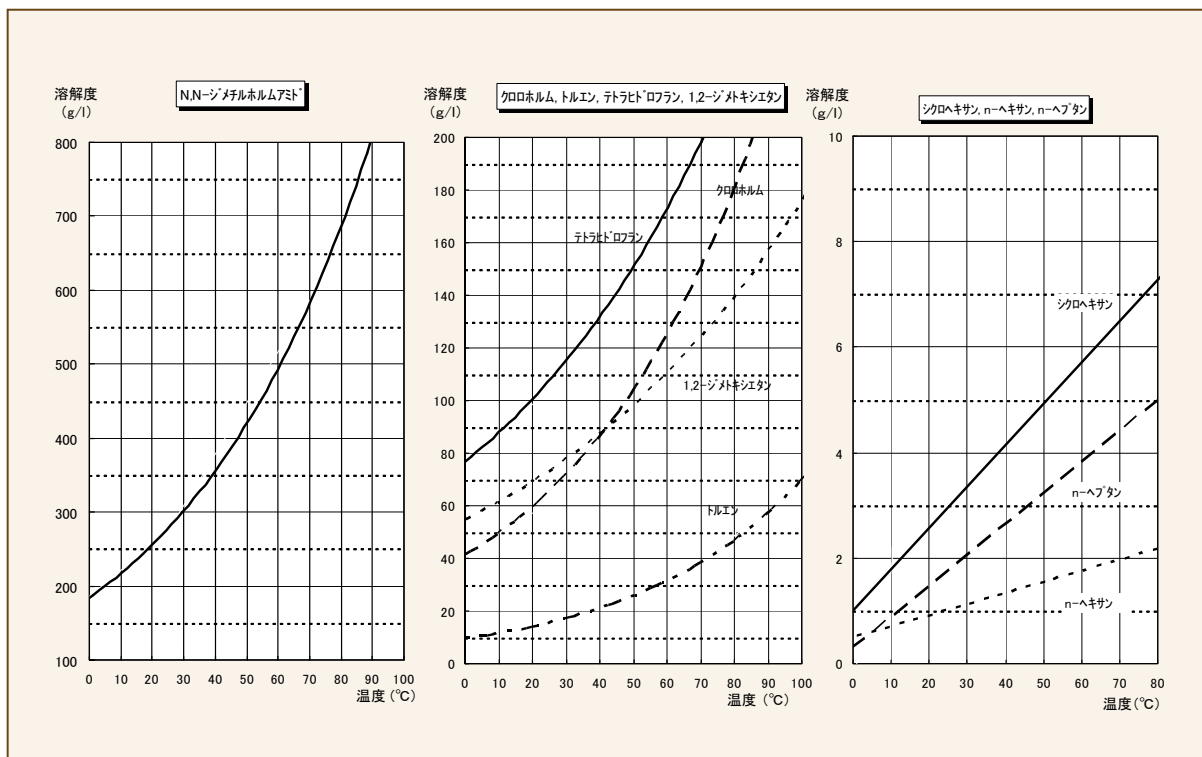
	規格値	分析例	理論値
純度	: 99.0 %以上	99.83 %	—
Zr	: 30.90%以上	31.16 %	31.21 %
Cl	: 24.00%以上	24.20 %	24.26 %
Fe	: 0.05%以下	0.002 %	

【参考】 二塩化ジルコノセン 分析比較 (当社分析結果)

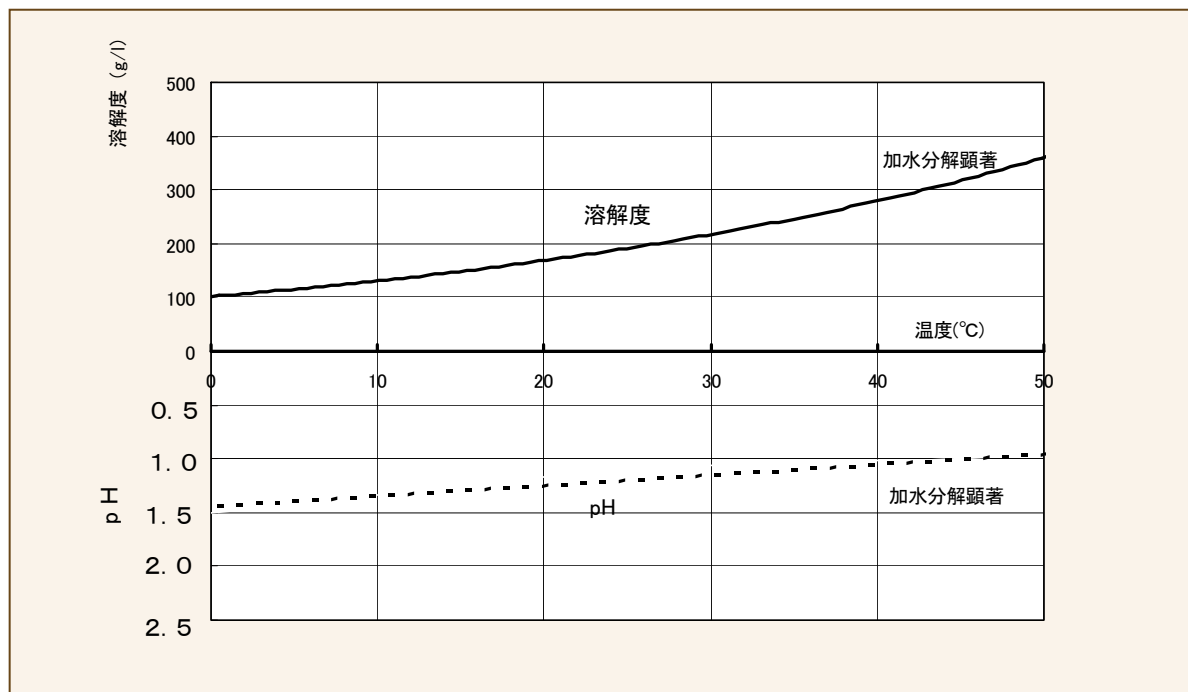
種類		Zr (%)	Cl (%)	Cl/Zr (モル比)	備考
日亜品		31.16	24.20	2.00	白色針状結晶
試薬	A社	31.19	24.22	2.00	茶色 着色あり
	B社	31.09	24.24	2.01	
	C社	31.18	24.20	2.00	
	D社	31.20	24.21	2.00	

③ 荷姿 梱包単位・荷姿については別途ご相談に応じます。

3. 各種溶剤に対する溶解度

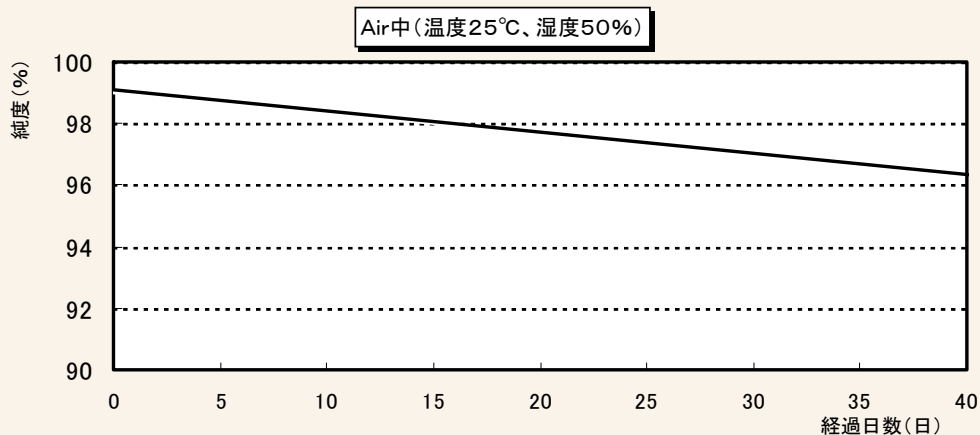


4. 水に対する溶解度とpHの関係

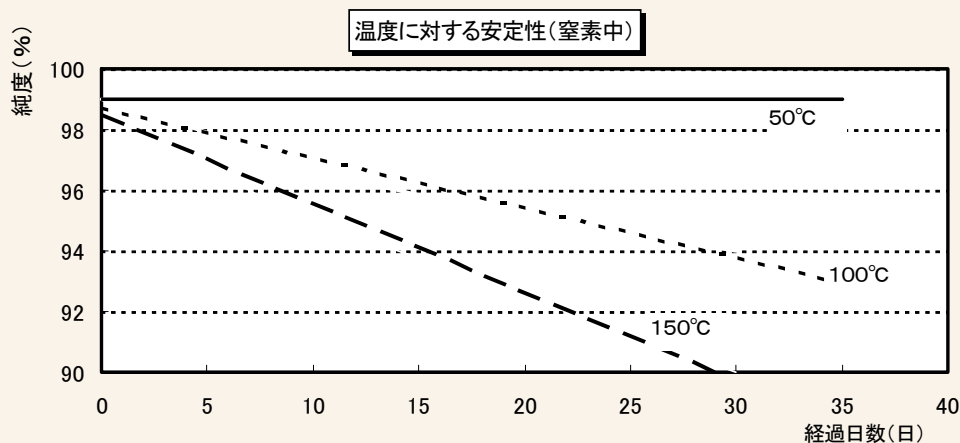


5. 安定性

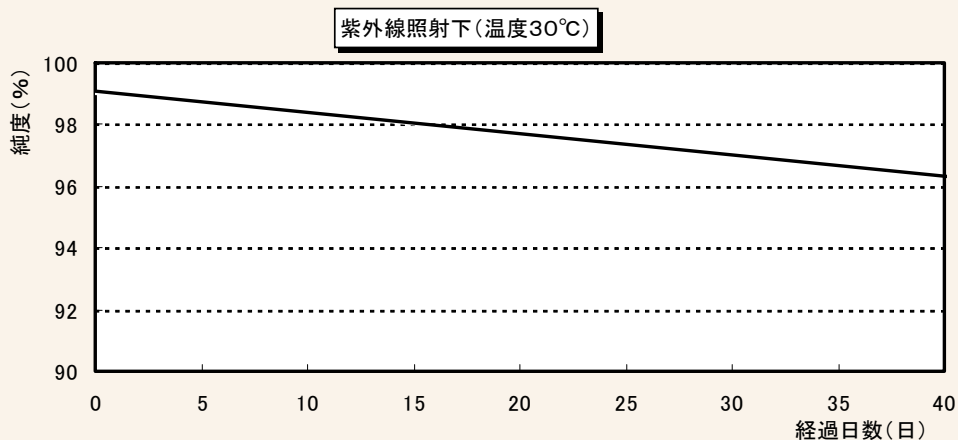
(1) 空気中では加水分解、及び酸素の影響を受け、徐々に品質低下する



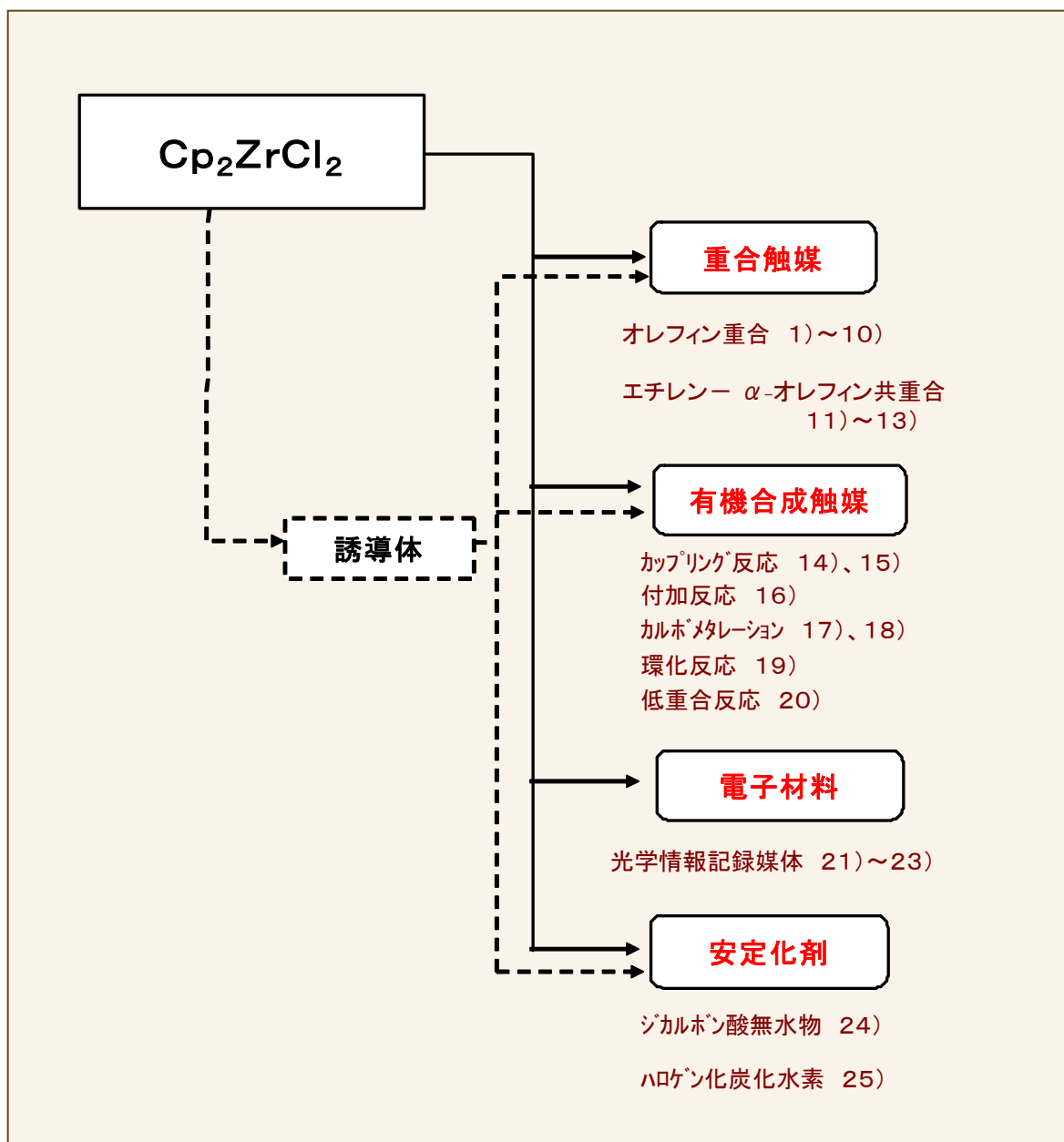
(2) 窒素雰囲気下50°C以下では安定で純度変化生じない



(3) 紫外線の影響を受け、徐々に品質低下する



6. 用途 (例)

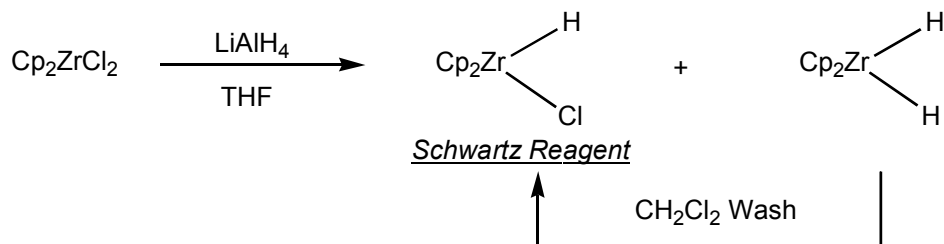


【用途例参考文献】

- 1) Inorganica Chimica Acta., 270, 20 (1998)
- 2) Acta Polytech.Scand.Chem.Technol.Ser., 227, 1 (1995)
- 3) J.Polym.Sci.,part A :Polym.Chem., 26, 3089 (1988)
- 4) 特開平11-035617
- 5) 特開平11-001511
- 6) 特開平5-331219
- 7) 特開平9-302017
- 8) 特開平10-316695
- 9) 特開平10-130316
- 10) 特開平9-328508
- 11) 特開平10-182749
- 12) 特開平9-241326
- 13) 特開平10-254094
- 14) J.Am.Chem.Soc., 109, 2393 (1987)
- 15) J.Am.Chem.Soc., 108, 7411(1986)
- 16) J.Am.Chem.Soc., 102, 1333 (1980)
- 17) J.Am.Chem.Soc., 108, 6639 (1985)
- 18) J.Organometal.Chem., 304, 17 (1986)
- 19) Tetrahedron Lett., 28, 917 (1987)
- 20) Inorganica Chimica Acta., 270, 20 (1998)
- 21) 特開昭63-165181
- 22) 特開昭63-165182
- 23) 特開昭63-168393
- 24) 特開昭48-028405
- 25) 特開平5-156062

7. 有機合成反応例

Schwartz 試薬



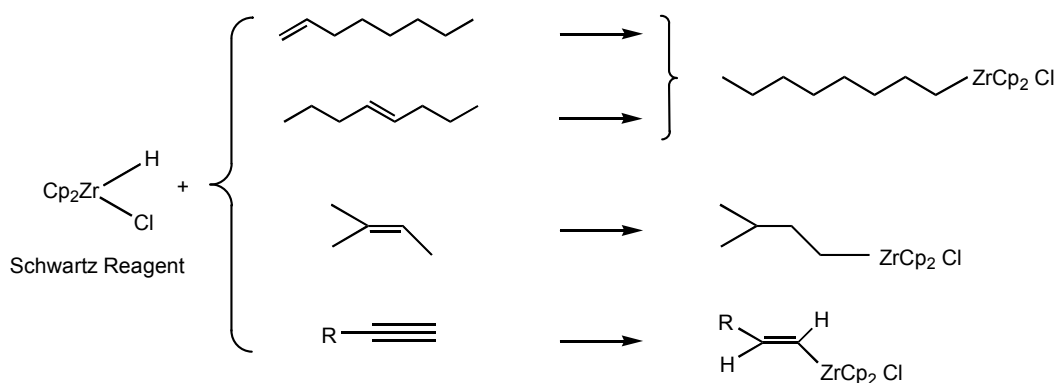
Tetrahedron Lett., **28**, 3895 (1987)

J.Org.Chem., **56**, 2590 (1991)

Tetrahedron Lett., **31**, 7257 (1990)

Schwartz試薬を用いるヒドロジルコノ化反応

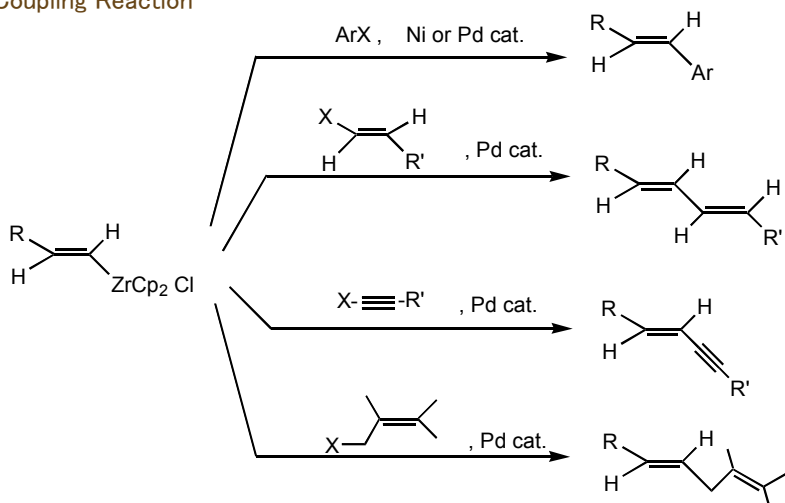
Hydrozircononation



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

アルケニルジルコニウム化合物のクロスカップリング反応

Cross Coupling Reaction



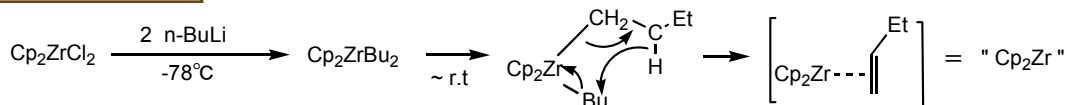
有機合成化学協会誌, **47**, 2 (1989)

J.Am.Chem.Soc., **109**, 2393 (1987)

Tetrahedron Lett., **30**, 4299 (1989)

~ Cp_2Zr (二価ジルコノセン錯体) を用いる有機合成 ~
Organic Synthesis Using Zirconocene(II) Complexes

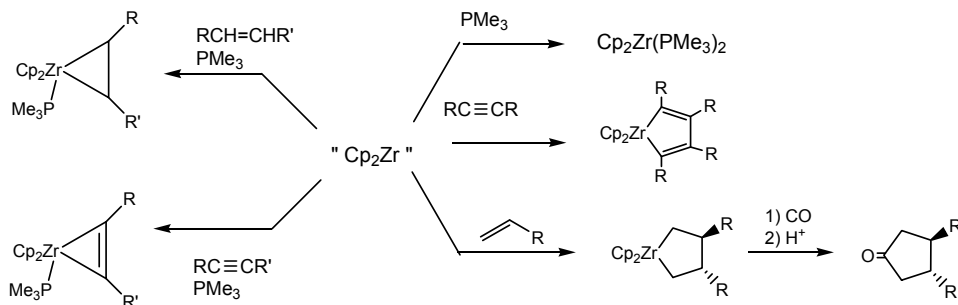
根岸試薬



○炭素-炭素結合生成反応

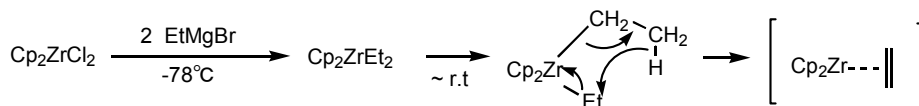
C-C Bond Formation Reactions Using "Cp₂Zr"

Tetrahedron Lett., 27, 2829 (1986)



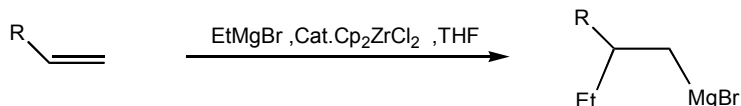
有機合成化学協会誌, 47, 2 (1989)
Synthesis., 1 (1988)
Aldrichim. Acta, 18, 31 (1985)
Chem.Rev., 88, 1047 (1989)

ジルコノセン-エチレン錯体

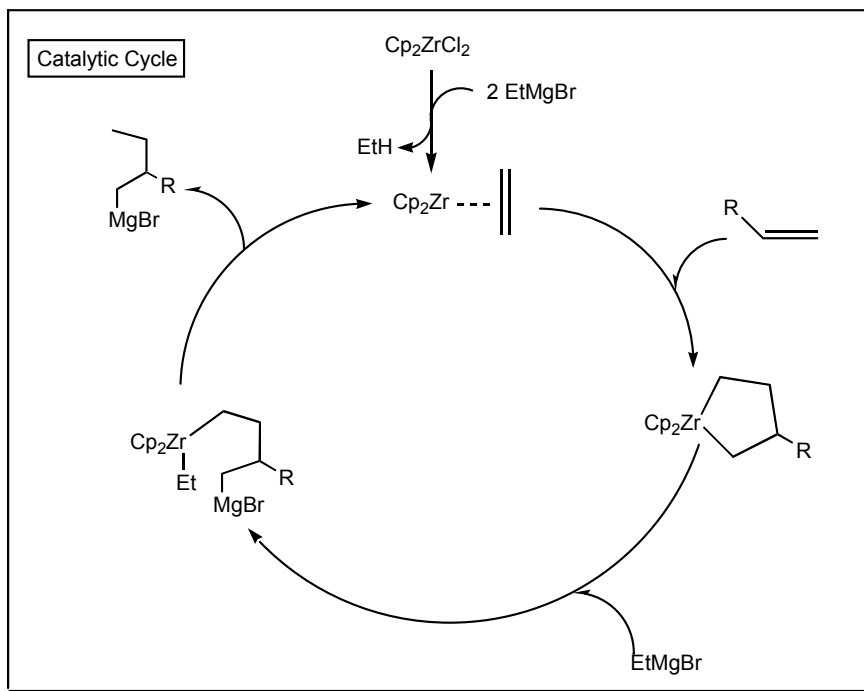


○炭素-炭素結合生成反応

C-C Bond Formation Reactions Using Zirconocene-Ethylene Complex



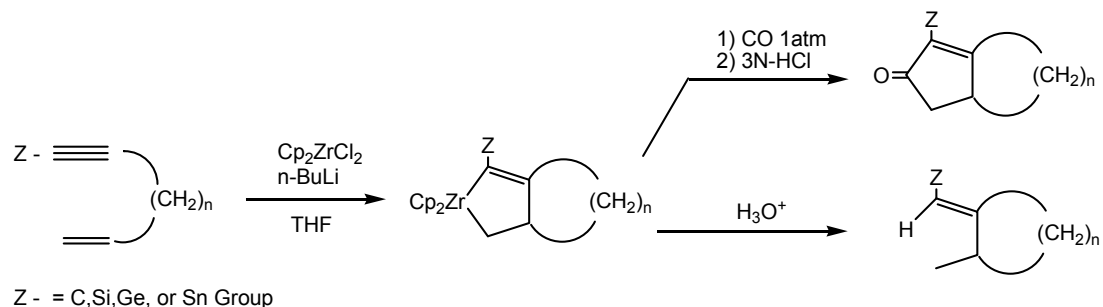
J. Am. Chem. Soc. 113, 6266 (1991)



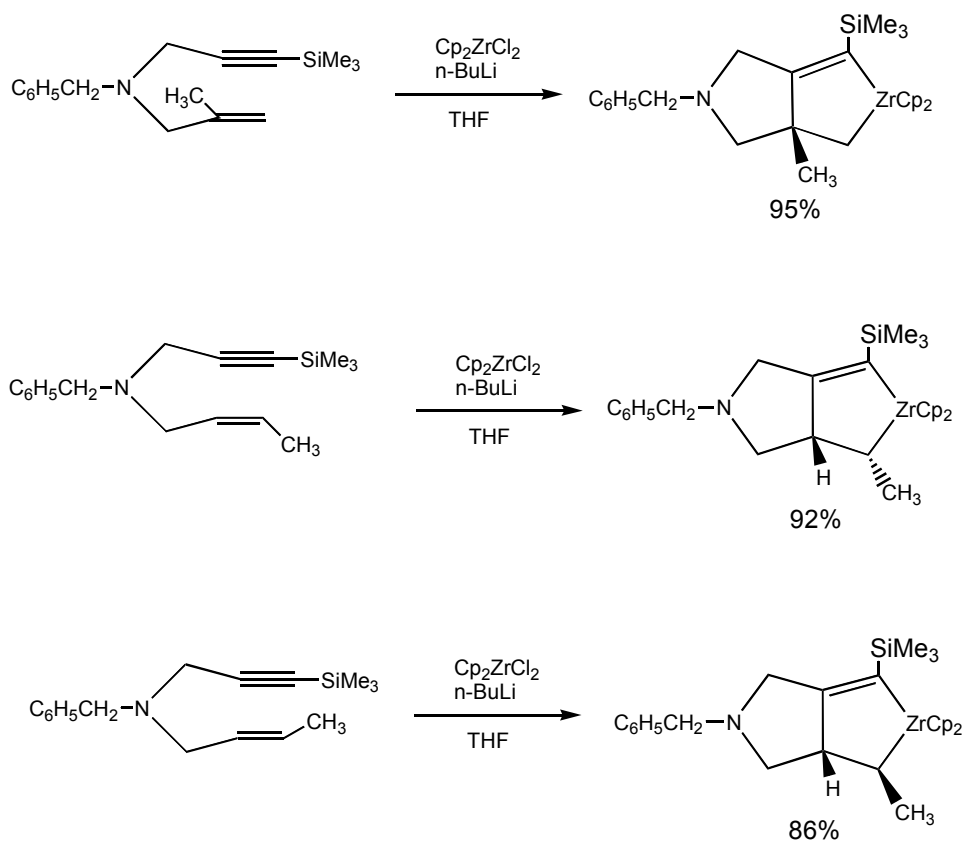
~ Cp₂Zr (二価ジルコノセン錯体) を用いる有機合成 ~
Organic Synthesis Using Zirconocene(II) Complexes

エンイン 環化反応

Intramolecular Bicyclization Reactions of Enynes Using “Cp₂Zr”



Tetrahedron Lett., 27, 2829 (1986)
J. Am. Chem. Soc., 107, 2568 (1985)
 有機合成化学協会誌, 47, 2 (1989)

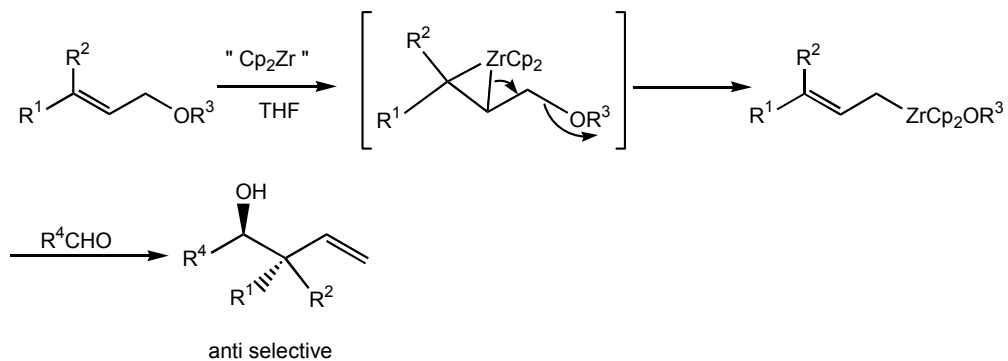


Tetrahedron Lett., 27, 2829 (1986)
 有機合成化学協会誌, 47, 2 (1989)

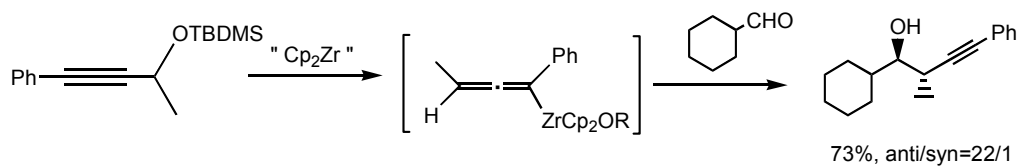
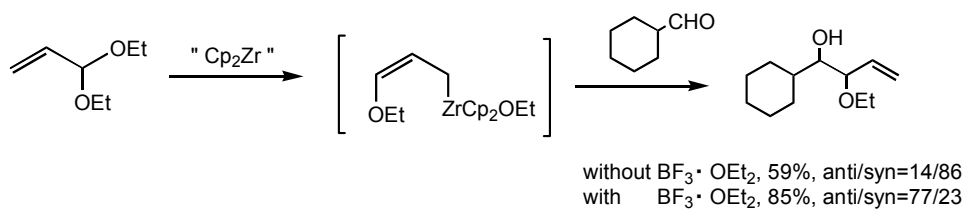
~ Cp₂Zr (二価ジルコノセン錯体) を用いる有機合成 ~
Organic Synthesis Using Zirconocene(II) Complexes

アリルエーテルの反応

Preparation and Reactions of Allylic Zirconium Species



Entry	R ¹	R ²	R ³	R ⁴	Yield (%)	anti : syn
1	Ph	H	Me	Ph	79	10 : 1
2	Ph	H	Bn	Ph	89	15 : 1
3	Ph	H	TBDMS	Ph	96	23 : 1
4	Ph	H	TBDMS	iPr	96	49 : 1
5	Me	H	TBDMS	Ph	41	—

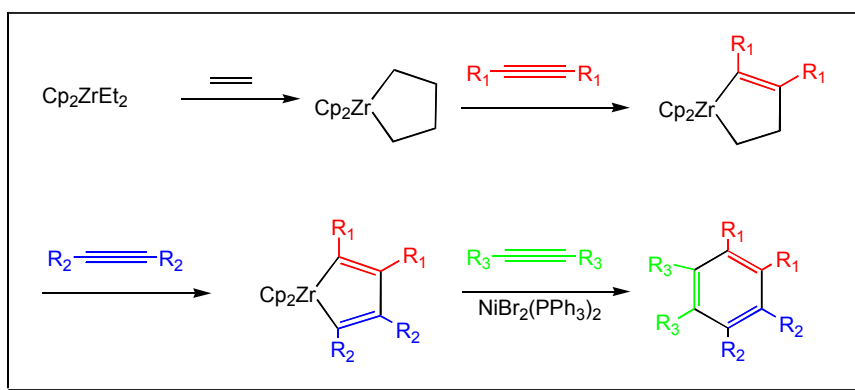
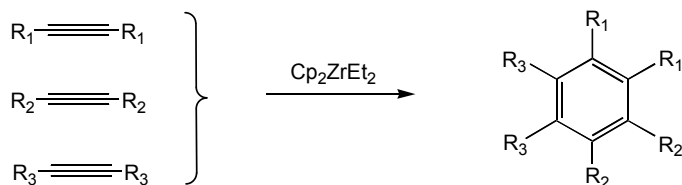


薬学雑誌, 123, 933 (2003)

～ Cp_2Zr (二価ジルコノセン錯体) を用いる有機合成 ～
Organic Synthesis Using Zirconocene(II) Complexes

ジルコナシクロペンタジエンを用いたベンゼン誘導体の合成

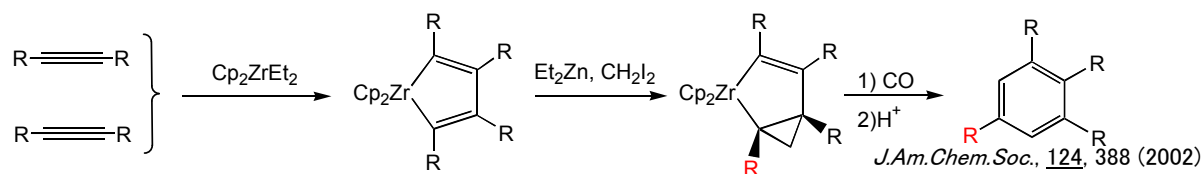
Synthesis of Benzene Derivatives Using Zirconacyclopentadienes



J. Am. Chem. Soc., **121**, 11093 (1999)

○ 1,2,3,5-4置換ベンゼン誘導体の合成

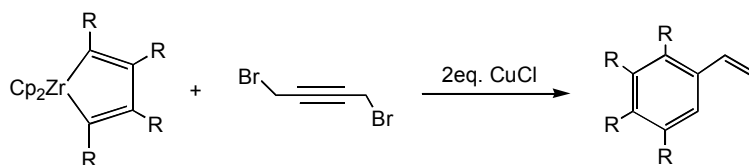
Synthesis of 1,2,3,5-Tetrasubstituted Benzene Derivatives



J. Am. Chem. Soc., **124**, 388 (2002)

○ 銅(I)塩を用いたベンゼン誘導体の合成

Synthesis of Benzene Derivatives Mediated by Copper(I) Salts

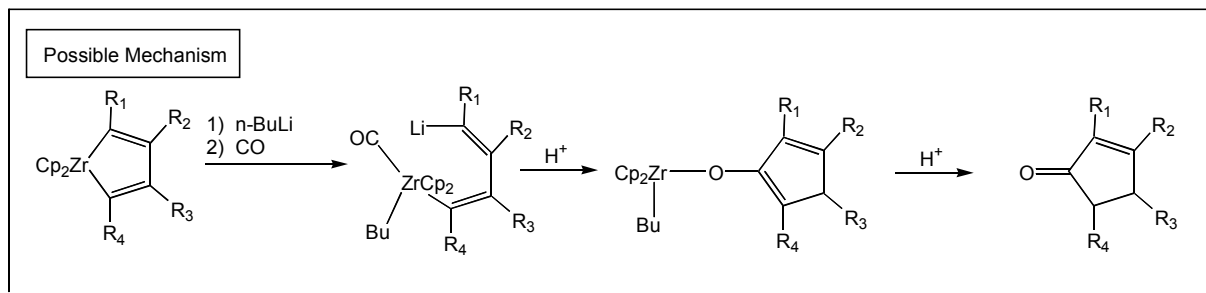
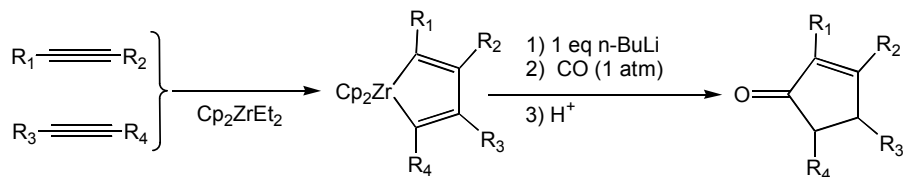


Tetrahedron **58**, 1107 (2002)

~ Cp₂Zr (二価ジルコノセン錯体) を用いる有機合成 ~
Organic Synthesis Using Zirconocene(II) Complexes

○ シクロペンテノンの合成

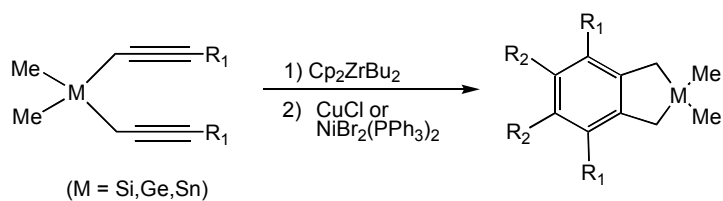
Synthesis of cyclopentenones by Zirconacyclopentadienes



J. Am. Chem. Soc., 121, 1094 (1999)

○ ベンゾヘテロサイクルの合成

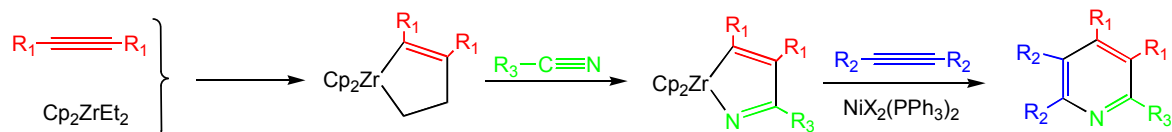
Synthesis of Benzoheterocyclic Compounds by Zirconacyclopentadienes



Heterocycles., 54, 943 (2001)

○ ジルコナシクロペンタジエンを用いたピリジン誘導体の合成

Synthesis of pyridine derivatives by Zirconacyclopentadienes



J. Am. Chem. Soc., 124, 5059 (2002)

8. 保存・取り扱い方法について

① 保存・取り扱い方法

保存 : 熱及び直射日光を避けた湿気のない冷暗所に保存する。

取扱 : 製品の開封は乾燥した不活性ガス雰囲気下で行うこと。

乾燥した器具や脱水処理した低水分溶媒を使用し、開封後は十分不活性ガスで置換したのち、密封し保存方法に従い保管する。

② 事故時の処理

手や顔に付着するとアレルギー性発疹を招くことがある為、付着した場合はすみやかに清水で洗い流す。

保護具 : ゴム手袋・保護眼鏡・防塵マスク

③ 火災発生時の処置

火気のない安全な場所へ移動する。

万一延焼の場合は大量の水、或いは粉末消火剤で消火する。

④ 廃棄処分について

酸、又はアルカリ溶解後、中和処理で水酸化ジルコニウムとして分離する。
或いは可燃性溶剤等に混ぜ、焼却後酸化ジルコニウムとして産廃廃棄物基準に従い処分する。

⑤ 毒性

急性毒性 : LD50:30mg/kg(腹腔内、ラット)
[Registry of Toxic Effects of Chemical Substances]

許容濃度 : 5mg/m³ (Zrとして)
[American Conference of Governmental Industrial Hygienista 1984年]

⑥ 関係法令

化学物質の審査及び製造等の規制に関する法律 (化審法)
労働安全衛生法 (新規化学物質)

CAS No : 1291-32-3

■ 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