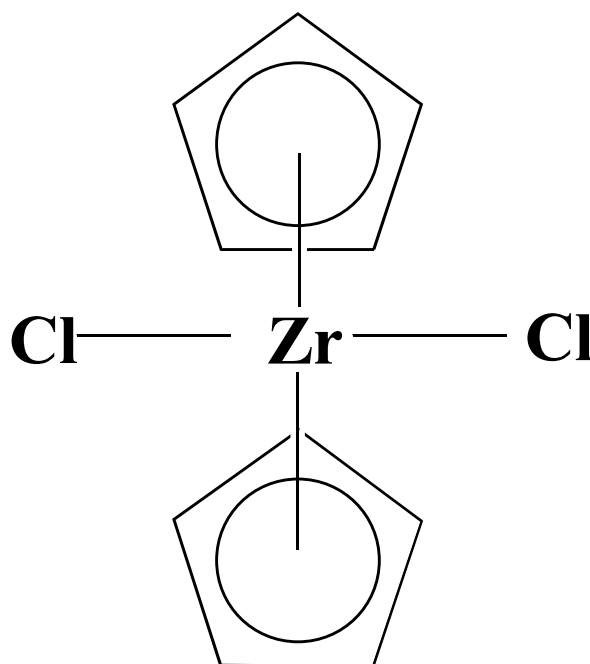


二塩化ジルコノセン

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

製品概要

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)

製品特性

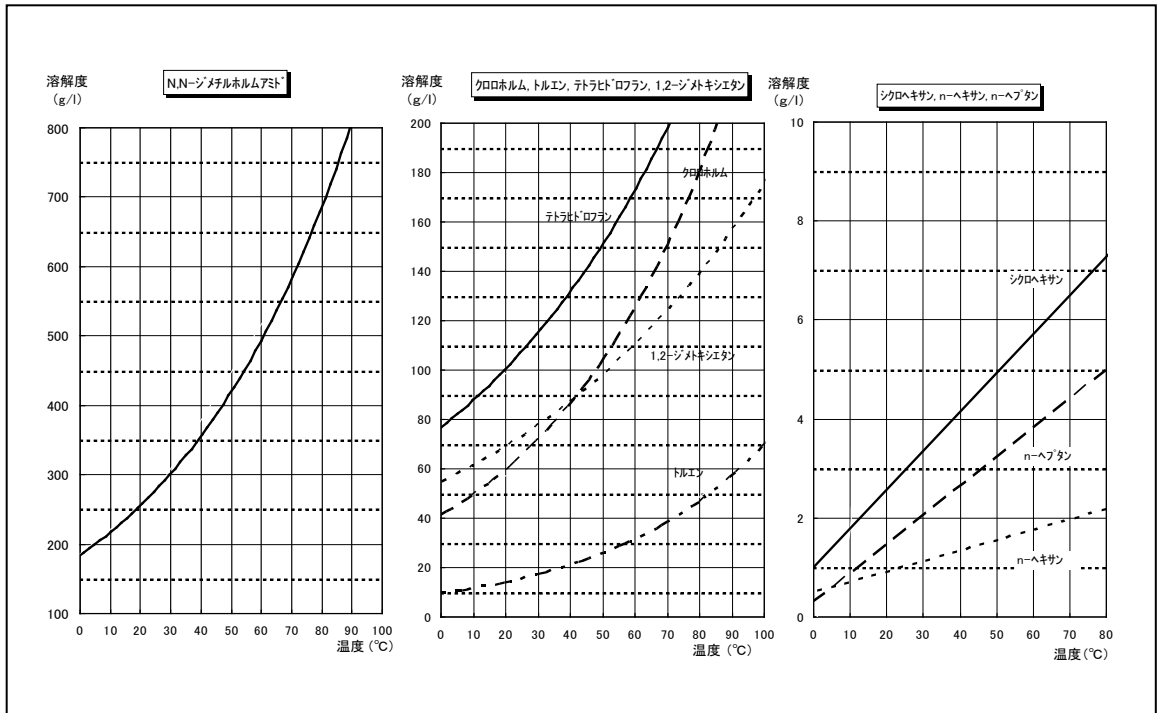
	規格値	分析例	理論値
Zr	≥30.60%	31.16%	31.21%
Cl	≥23.80%	24.20%	24.26%

【参考】 二塩化ジルコノセン 分析比較

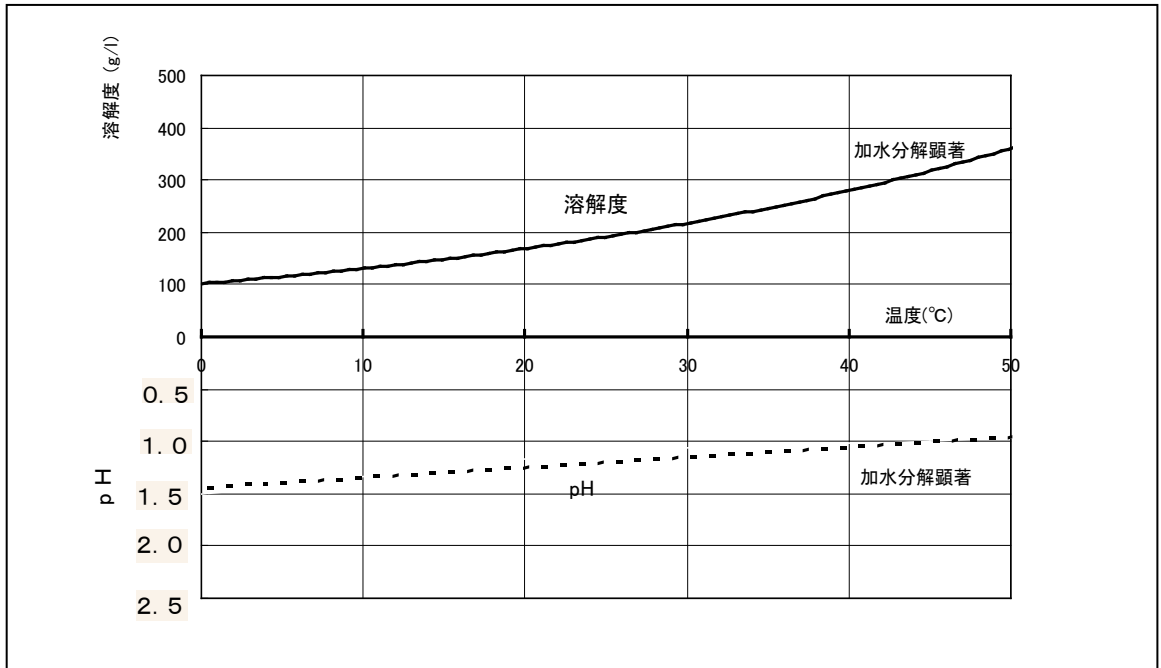
種類	Zr(%)	Cl(%)	Cl/Zr (モル比)	備考	
日亜品	31.16	24.20	2.00	白色針状結晶	
試薬	A	31.19	24.22	2.00	茶色 着色あり
	B	31.09	24.24	2.01	
	C	31.18	24.20	2.00	
	D	31.20	24.21	2.00	

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

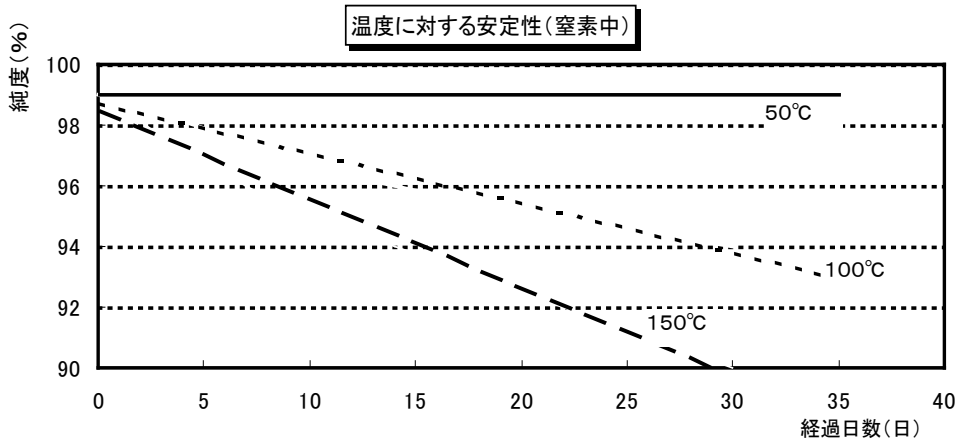


4. 水に対する溶解度とpHの関係

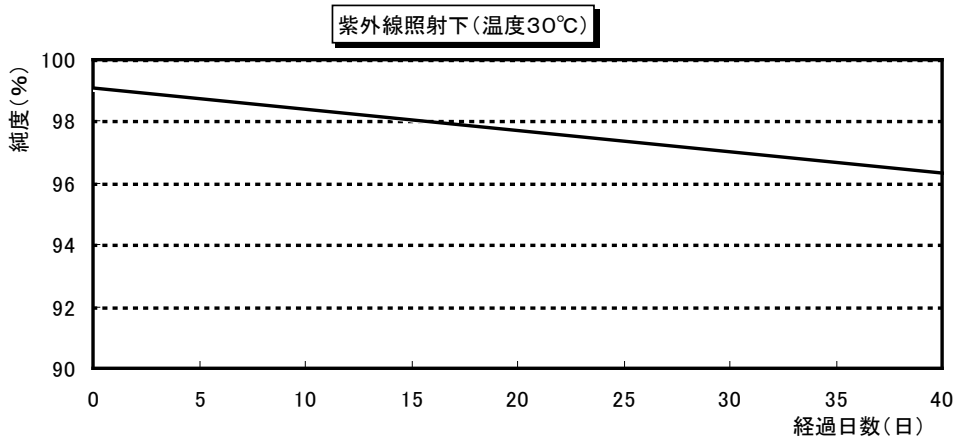


5. 安定性

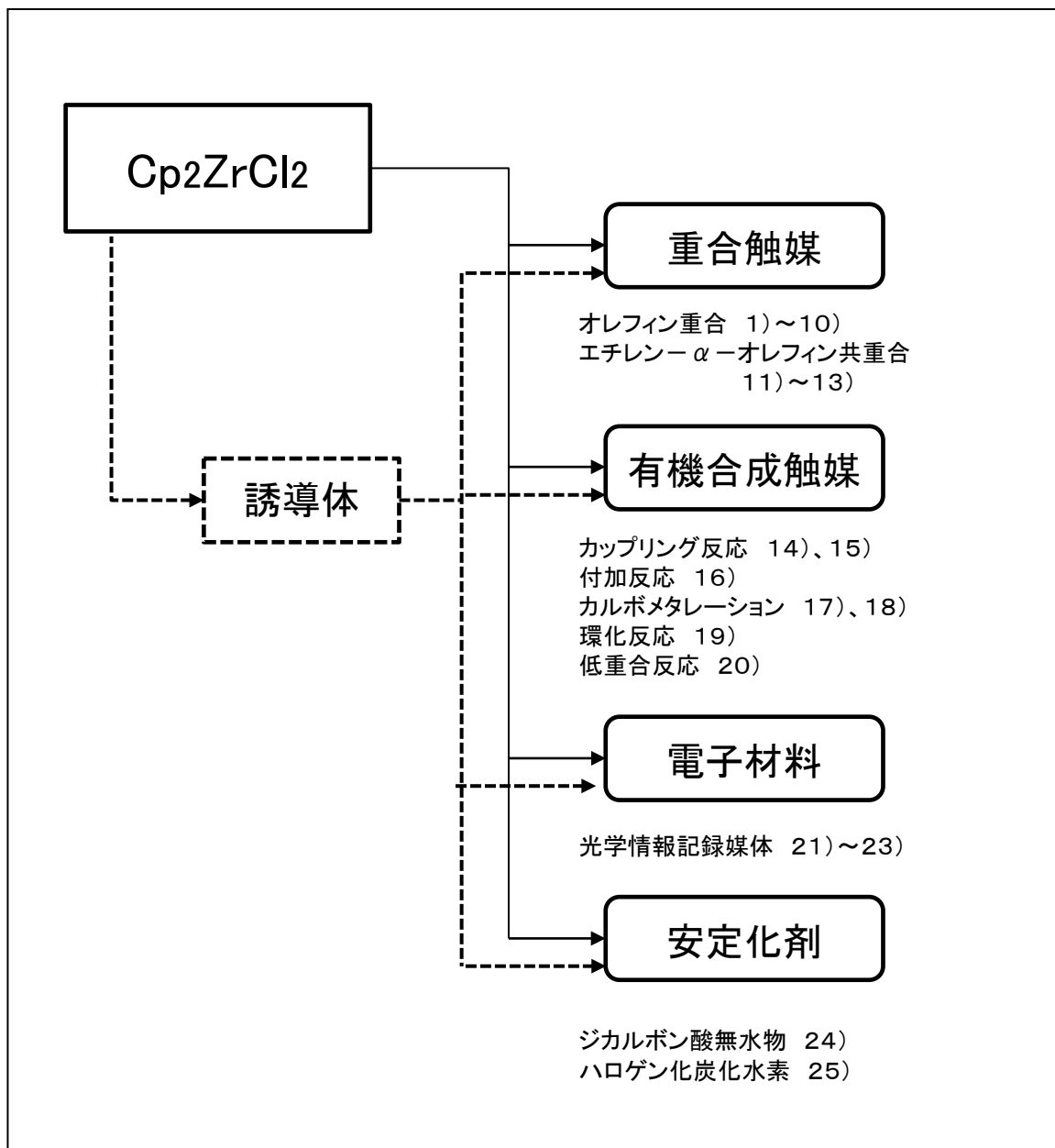
(1) 窒素雰囲気下50℃以下では安定で純度変化生じない



(2) 紫外線の影響を受け、徐々に品質低下する



6. 用途 (例)

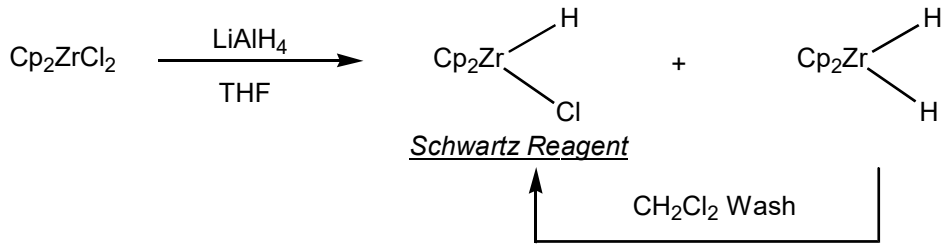


【用途例参考文献】

- 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

A. Schwartz 試薬

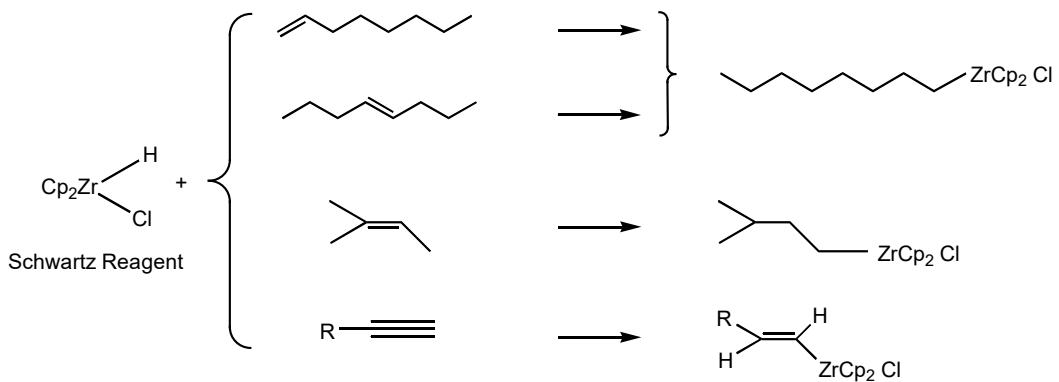


Tetrahedron Lett., **28**, 3895 (1987)

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

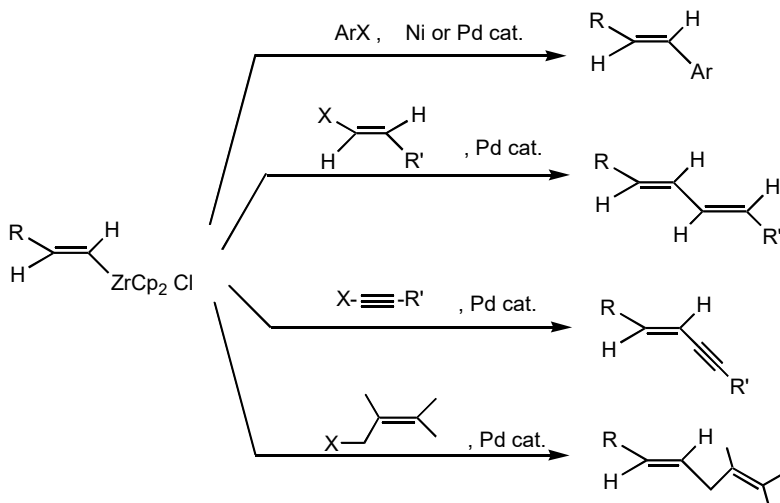
Tetrahedron Lett., **31**, 7257 (1990)

○ Schwartz試薬を用いるヒドロジルコネーション



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

B. 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

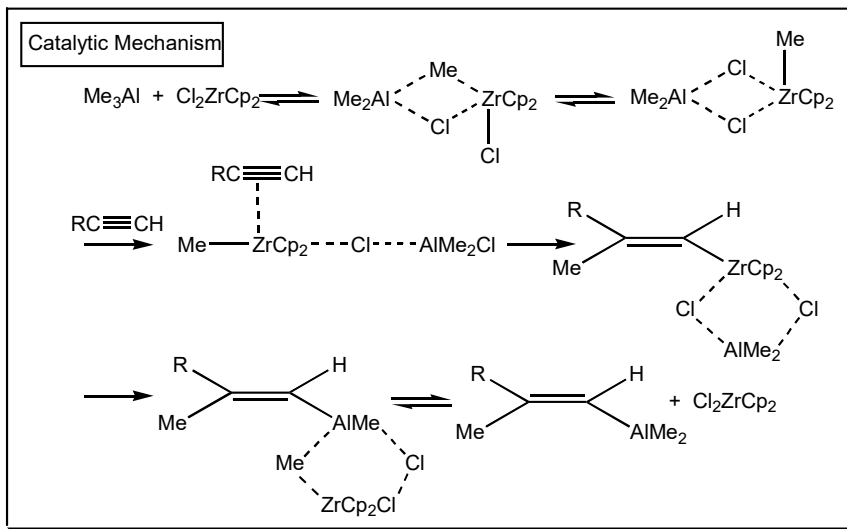
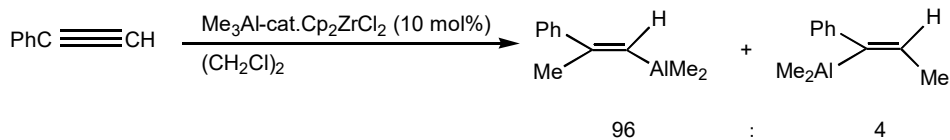


有機合成化学協会誌, **47**, 2 (1989)

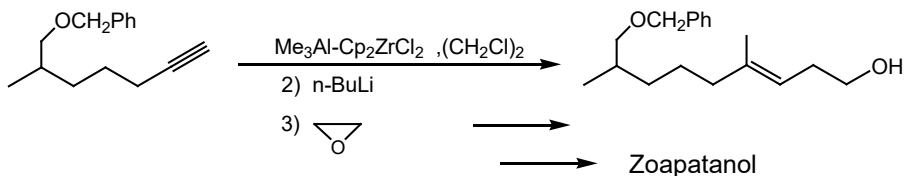
J. Am. Chem. Soc., **109**, 2393 (1987)

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

C. カーボメタル化反応

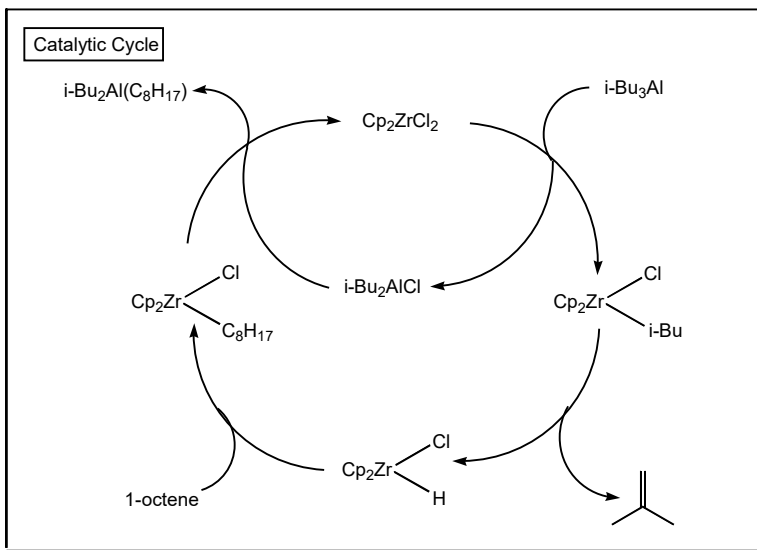
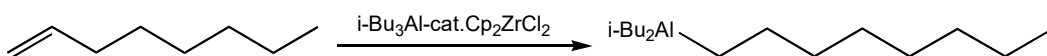


J. Am. Chem. Soc., **108**, 6639 (1985)
Aldrichim. Acta, **18**, 31 (1985)
Synthesis, 1 (1988)



J. Chem. Soc., Perkin Trans., I, 1589 (1985)

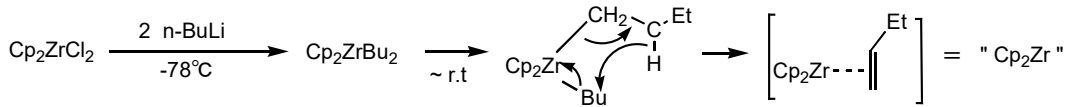
D. ヒドロメタル化反応



Tetrahedron. Lett., **21**, 1501 (1985)
Pure. Appl. Chem., **53**, 2333 (1981)

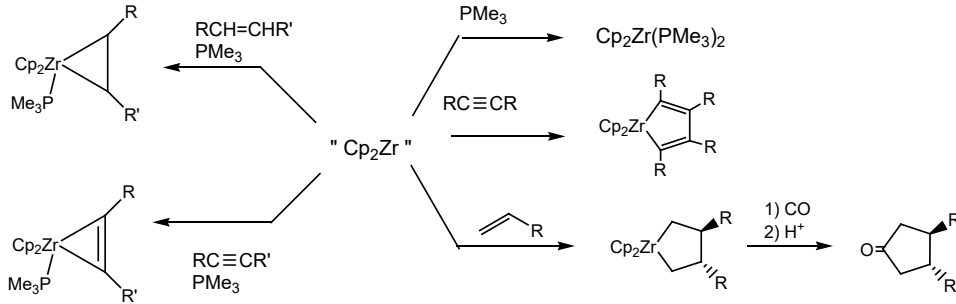
Cp₂Zr (二価ジルコノセン錯体) を用いる有機合成

E. 根岸試薬



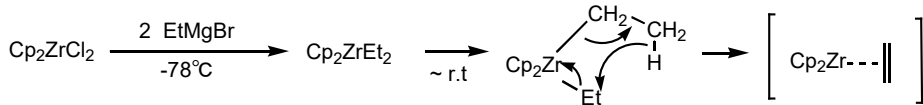
Tetrahedron Lett., 27, 2829 (1986)

○ 炭素-炭素結合生成反応

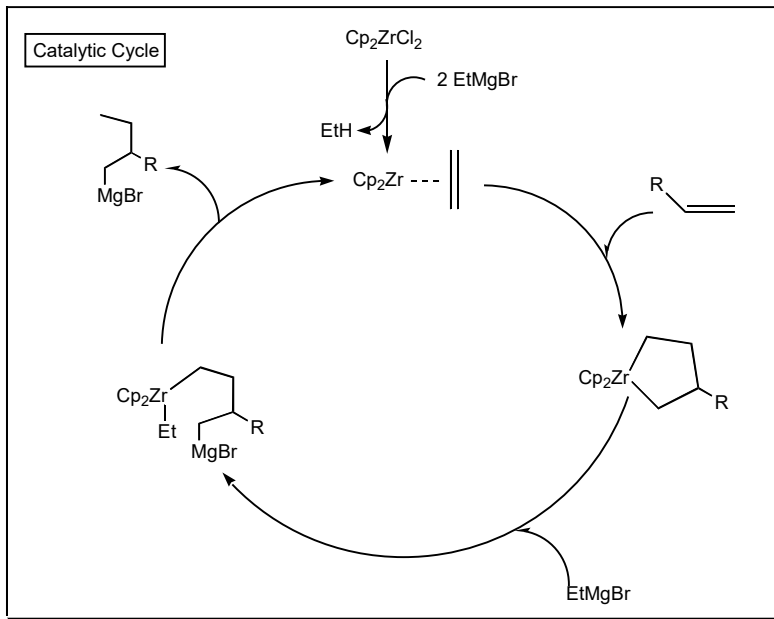
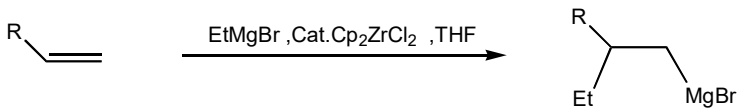


有機合成化学協会誌, 47, 2 (1989)
Synthesis., 1 (1988)
Aldrichim. Acta, 18, 31 (1985)
Chem. Rev., 88, 1047 (1989)

F. ジルコノセン-エチレン錯体



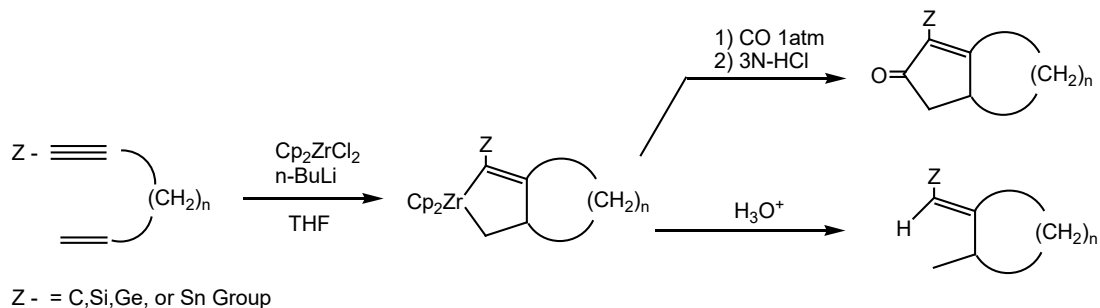
○ 炭素-炭素結合生成反応



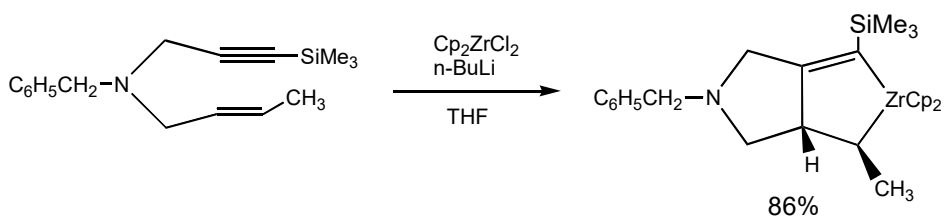
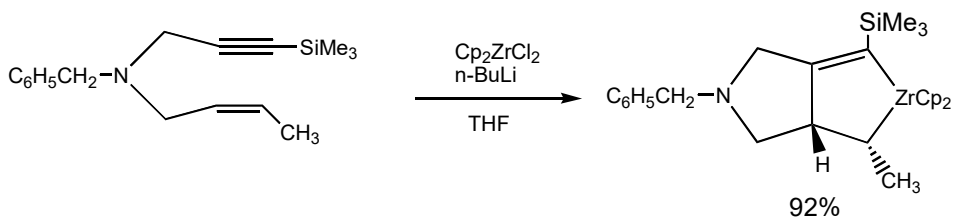
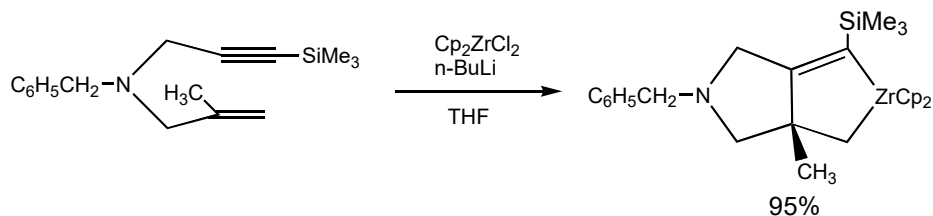
J. Am. Chem. Soc. 113, 6266 (1991)

Cp₂Zr (二価ジルコノセン錯体) を用いる有機合成

G. エニン 環化反応



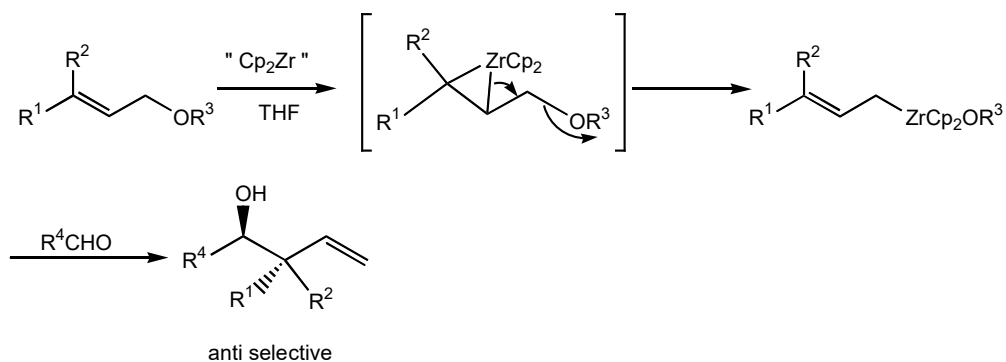
Tetrahedron Lett., 27, 2829 (1986)
J. Am. Chem. Soc., 107, 2568 (1985)
 有機合成化学協会誌, 47, 2 (1989)



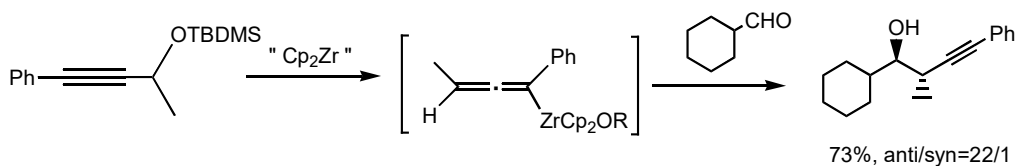
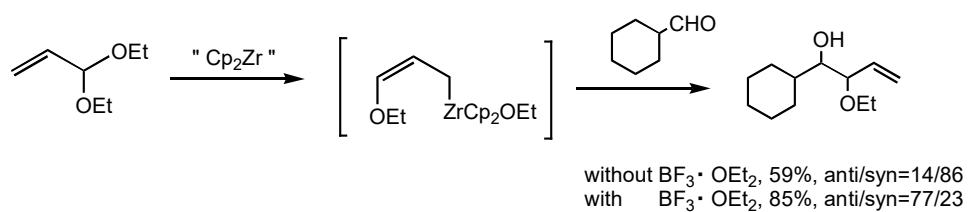
Tetrahedron Lett., 27, 2829 (1986)
 有機合成化学協会誌, 47, 2 (1989)

Cp₂Zr (二価ジルコノセン錯体) を用いる有機合成

H. アリルエーテルの反応



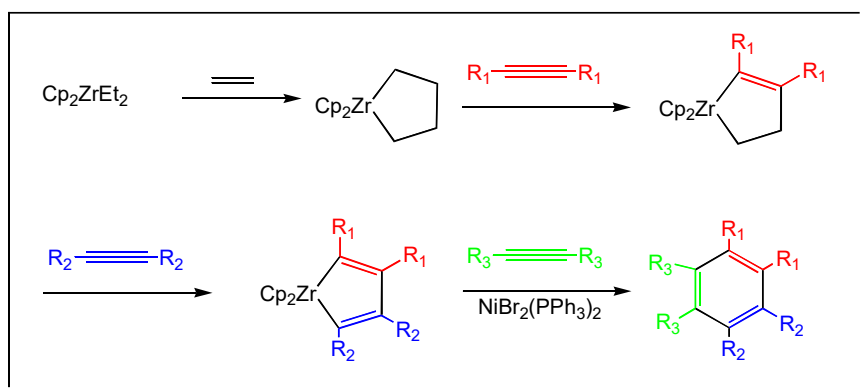
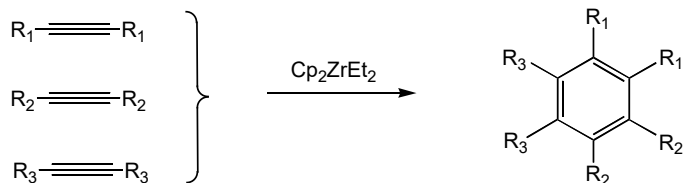
Entry	R ¹	R ²	R ³	R ⁴	Yield (%)	anti : syn
1	Ph	H	Me	Ph	79	10 : 1
2	Ph	H	Bn	Ph	89	15 : 1
3	Ph	H	TBDMS	Ph	96	23 : 1
4	Ph	H	TBDMS	iPr	96	49 : 1
5	Me	H	TBDMS	Ph	41	—



薬学雑誌, 123, 933 (2003)

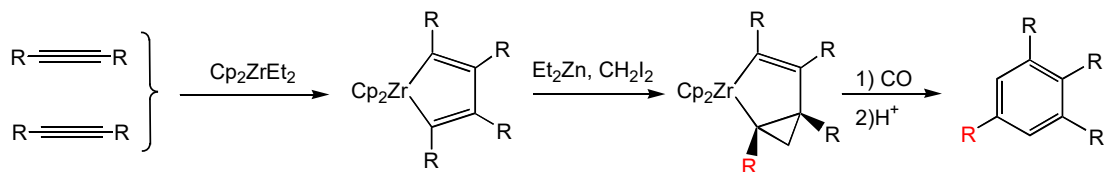
Cp₂Zr (二価ジルコノセン錯体) を用いる有機合成

I. 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



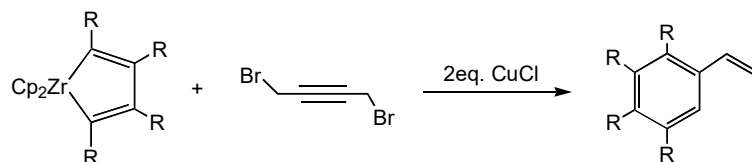
J. Am. Chem. Soc., 121, 11093 (1999)

○ 1,2,3,5-4置換ベンゼン誘導体の合成



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

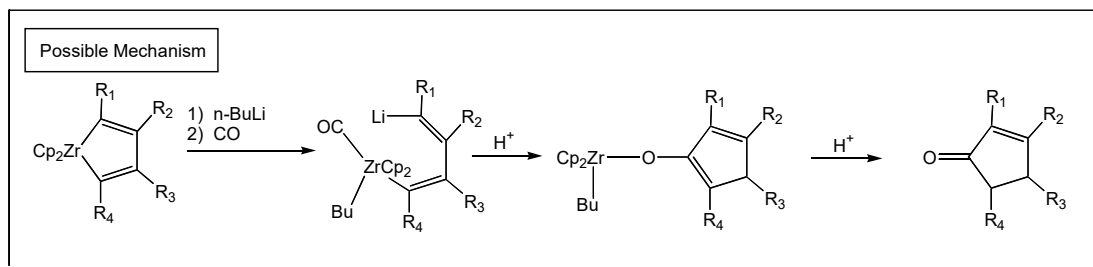
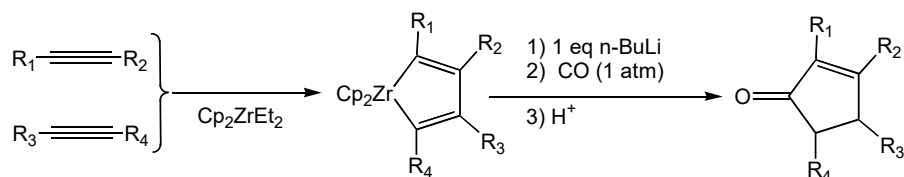
○ 銅(I)塩を用いたベンゼン誘導体の合成



Tetrahedron, 58, 1107 (2002)

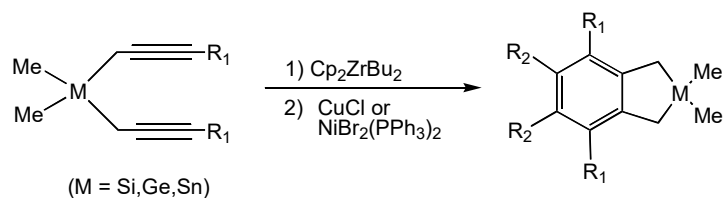
Cp₂Zr (二価ジルコノセン錯体) を用いる有機合成

○ シクロペンテノンの合成



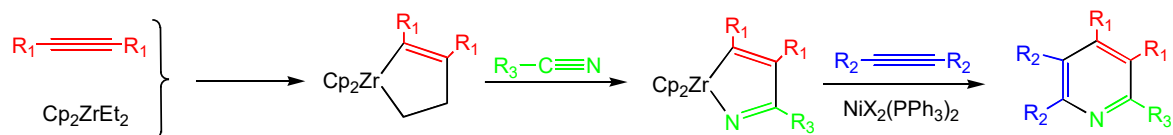
J. Am. Chem. Soc., 121, 1094 (1999)

○ ベンゾヘテロサイクルの合成



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



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 : ipr - rat LD₅₀ 30mg/kg

■ 本カタログの掲載内容は2023年12月現在のものです。

■ お問い合わせ先

(製造、技術、営業)

日亜化学工業株式会社 徳島工場
第三部門 鋳体製造部

〒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