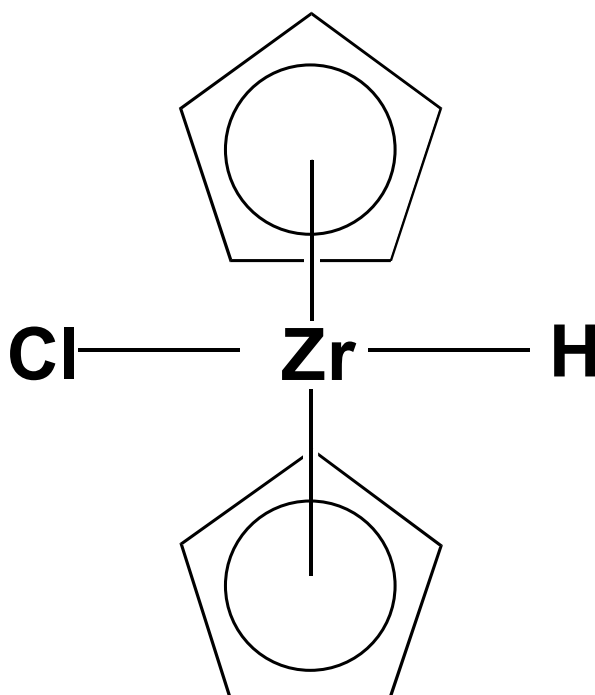


試作品

# 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(%) <sup>*1</sup> 理論値: 35.38	Cl(%) <sup>*1</sup> 理論値: 13.75	Zr/Cl (モル比) 理論値: 1.00	外観	3-ヘキシンとの ヒドロジルコネーション 反応時間 <sup>*2</sup> (分)@28°C	酸-加水分解 溶液の状態	
日亜品	<b>34.4</b>	<b>13.1</b>	<b>1.02</b>	白色粉末	<b>26</b>	澄明液	
試薬	A	35.2	12.5	1.09	淡桃色	88	不溶物が残留
	B	35.3	12.7	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

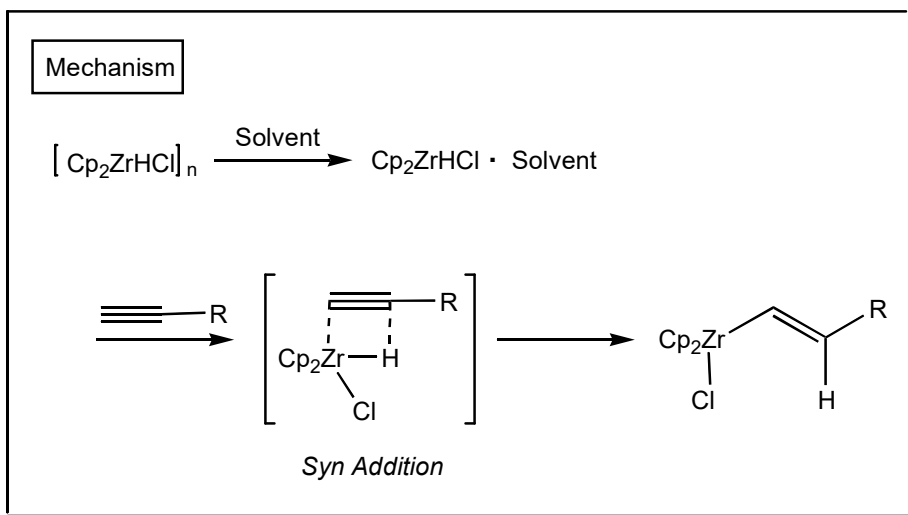
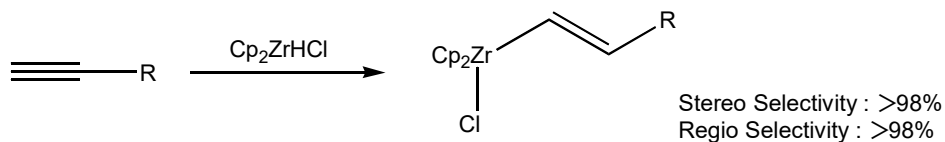
\*1 Zr, Cl含量は、当社分析値

\*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。

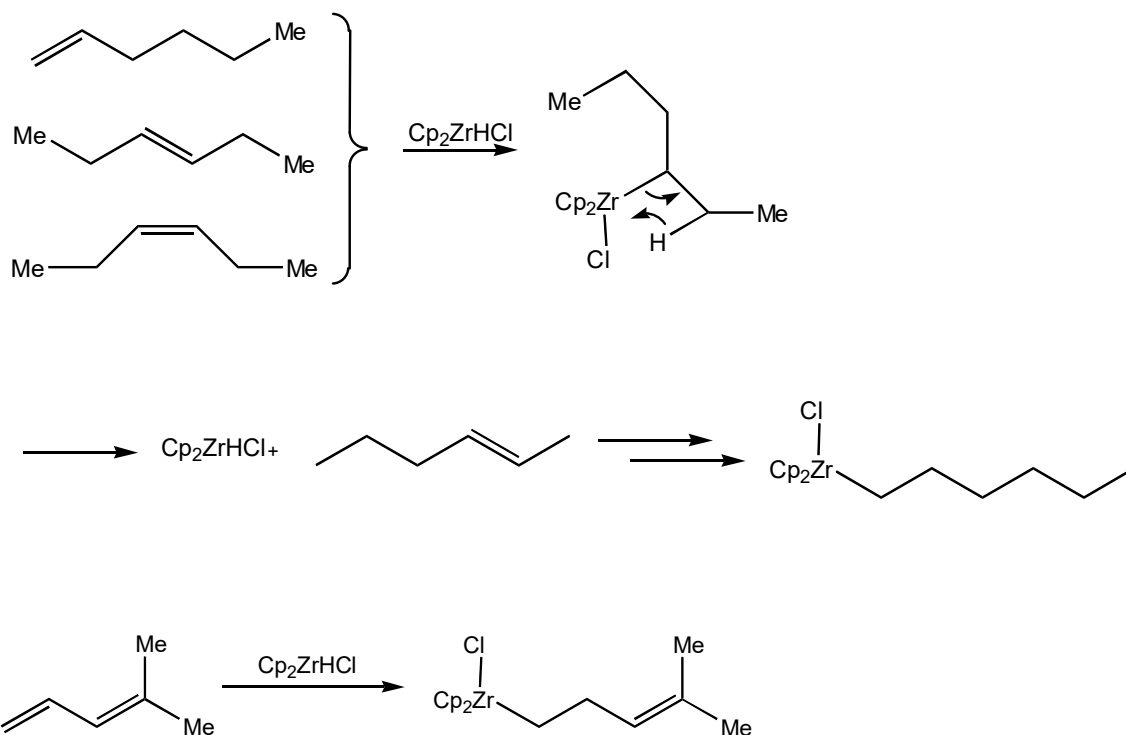
## 2. 反応例

### A. ヒドロジルコネーション

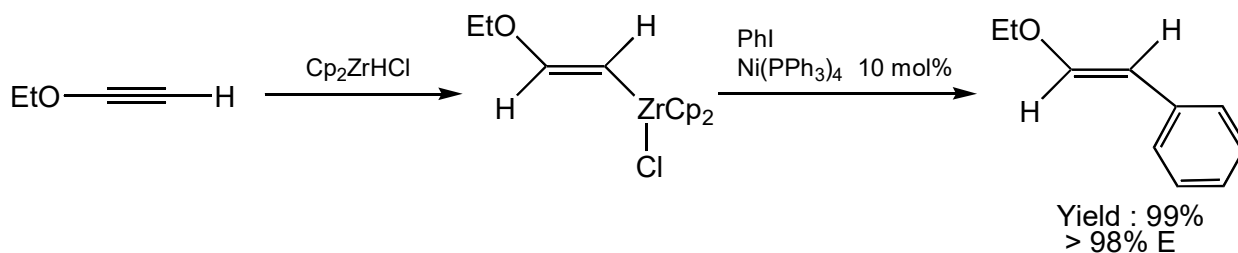
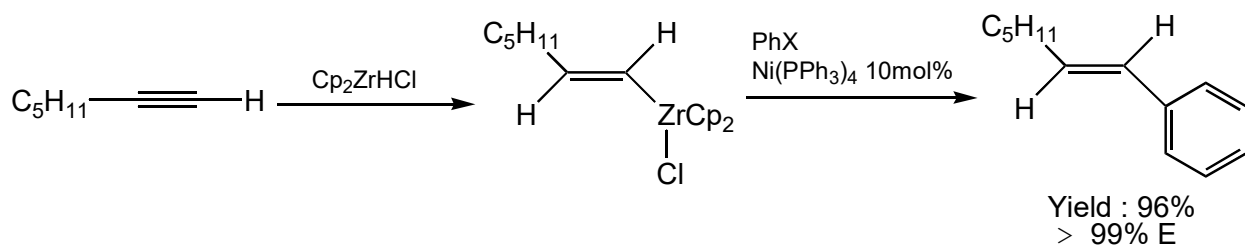
#### ○ アルキンのヒドロジルコネーション



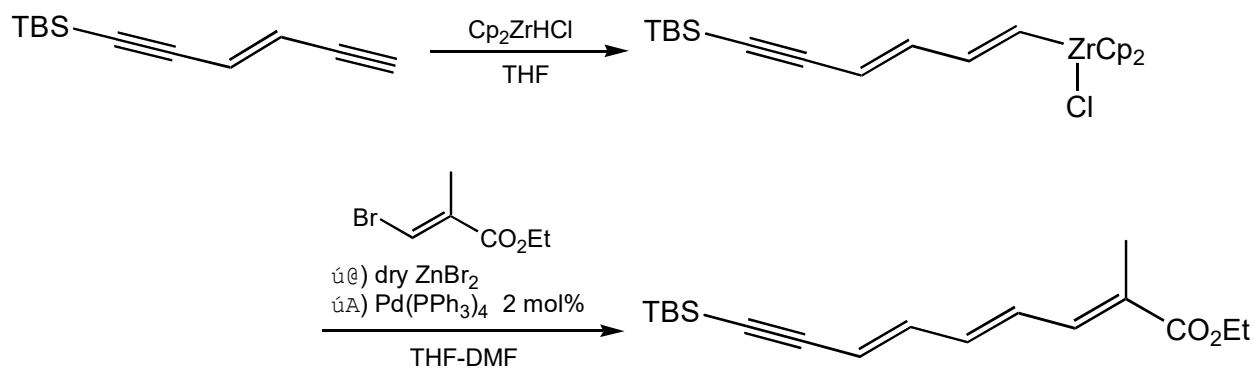
#### ○ アルケンのヒドロジルコネーション



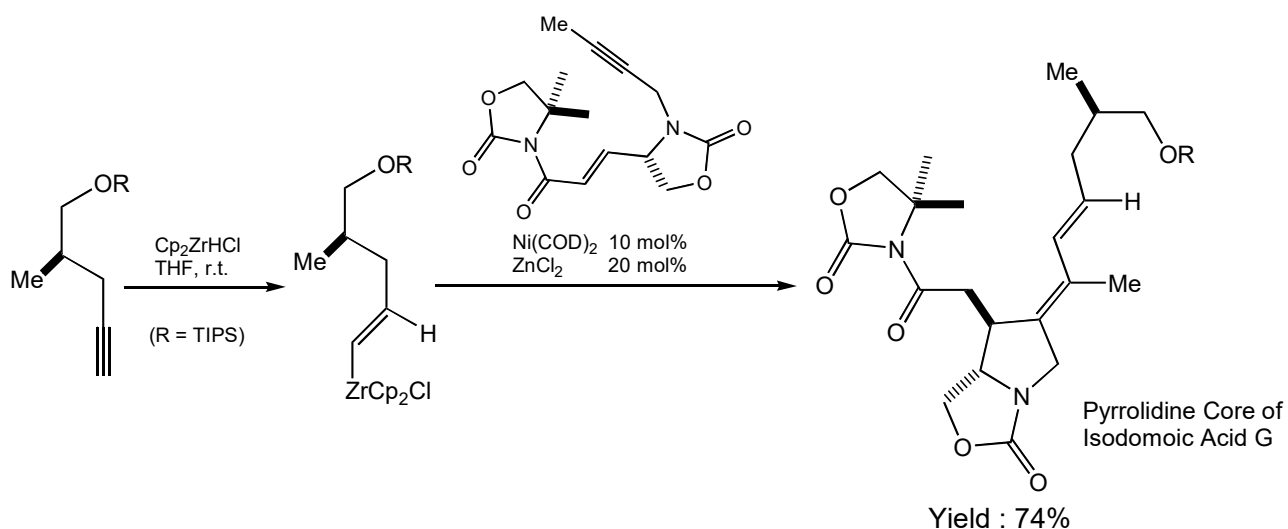
B. ヒドロジルコネーションを用いたクロスカップリング反応



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



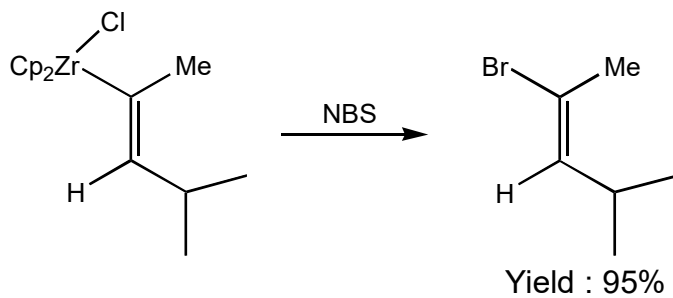
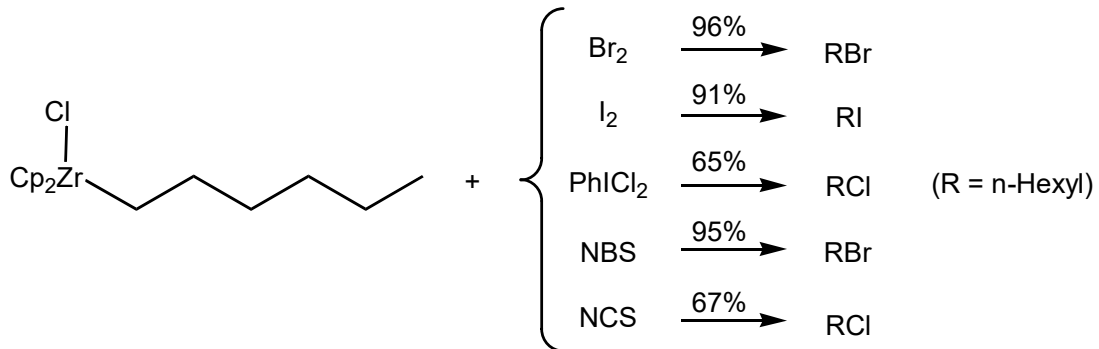
*Org. Lett.*, **8**, (17), 3675 (2006)



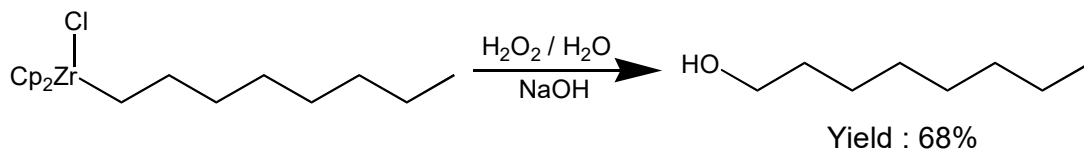
*Org. Lett.*, **5**, (20), 3771 (2003)

### C. アルキル、アルケニルジルコニウム化合物を用いた反応

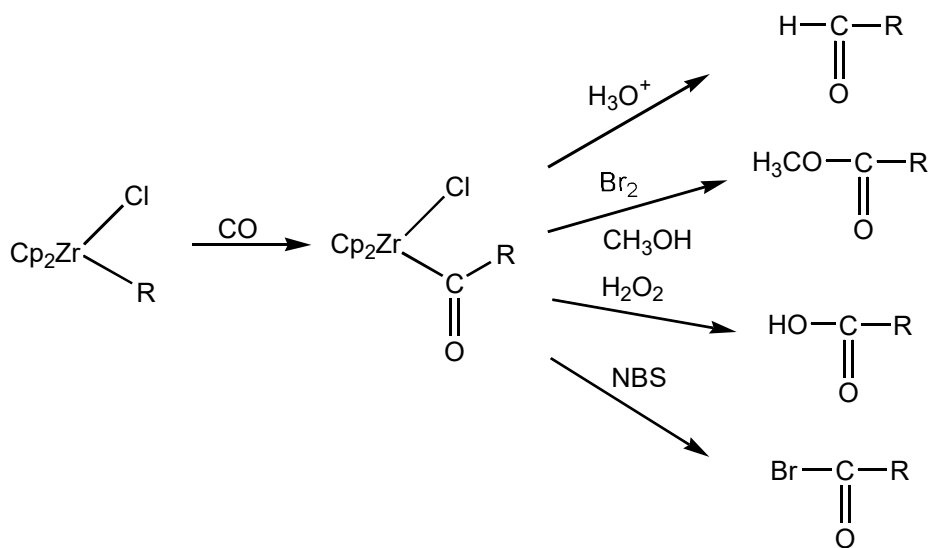
#### ○ アルキル、アルケニルハライドの合成



#### ○ アルコールの合成



#### ○ 挿入反応



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

■ 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(V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