(19) OFICINA ESPAÑOLA DE PATENTES Y MARCAS

ESPAÑA

(11) Número de publicación: **2 985 819**

(51) Int. Cl.:

C07F 15/00 (2006.01)

C07C 45/50 (2006.01)

(12) TRADUCCIÓN DE PATENTE EUROPEA T3

(96) Fecha de presentación y número de la solicitud europea: **17.12.2021 E 21215348 (0)**

(97) Fecha y número de publicación de la concesión europea: **22.05.2024 EP 4197998**

(54) Título: **Complejo Pt-Sixantfos-Yodo y complejo Pt-Sixantfos-Bromo**

(45) Fecha de publicación y mención en BOPI de la traducción de la patente:
07.11.2024

(73) Titular/es:

EVONIK OXENO GMBH & CO. KG (100.0%)
Paul-Baumann-Straße 1
45772 Marl, DE

(72) Inventor/es:

SCHNEIDER, CAROLIN;
JACKSTELL, RALF;
BELLER, MATTHIAS y
FRANKE, ROBERT

(74) Agente/Representante:

LEHMANN NOVO, María Isabel

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).

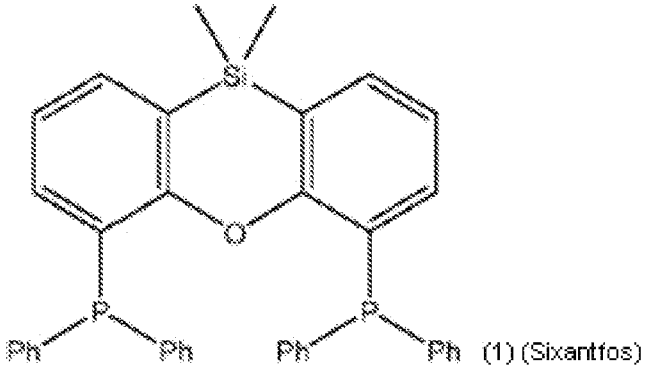
DESCRIPCIÓN

Complejo Pt-sixantfos-Yodo y complejo Pt-Sixantfos-Bromo

La presente invención se refiere a un complejo Pt-Sixantfos-yodo y a un complejo Pt-Sixantfos-bromo, y a su uso para la catálisis de una reacción de hidroformilación.

En P. Meessen et al., Journal of Organometallic Chemistry, 551, (1998), 165-170 se describe el uso de Sixantfos$PtCl_2$ para la hidroformilación de 3-pentenoato de metilo.

En R. van Duren et al., Dalton Transactions, 2007, 1053-1059, "Platinum-catalyzed hydroformylation of terminal and internal octenes", se describen catalizadores de Pt/Sn.



(1) (Sixantfos)

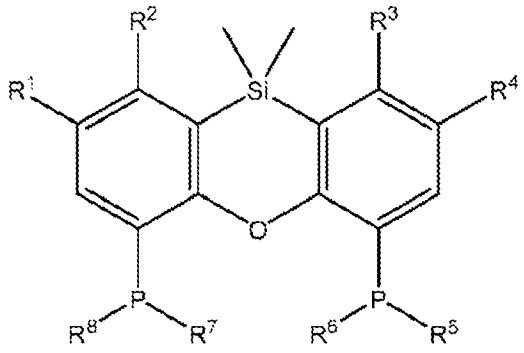
La presente invención se ha basado en el objetivo de proporcionar un nuevo complejo. A este respecto, se pretende que el complejo proporcione un mayor rendimiento en la catálisis de reacciones de hidroformilación en comparación con el complejo descrito en el estado de la técnica.

Este objetivo se logra mediante un complejo según la reivindicación 1.

El complejo comprende:

a) Pt;

b) un ligando correspondiente a la fórmula (I):



(I),

en la que R^1, R^2, R^3, R^4, R^5, R^6, R^7, R^8 se seleccionan de entre: -H, -alquilo (C_1-C_{12}), -arilo (C_6-C_{20});

c) un ligando de yodo o ligando de bromo.

El término alquilo (C_1-C_{12}) comprende grupos alquilo de cadena lineal y ramificados con 1 a 12 átomos de carbono. Preferentemente, a este respecto, se trata de grupos alquilo (C_1-C_8), de forma particularmente preferida alquilo (C_1-C_6), de la forma más preferida alquilo (C_1-C_4).

Son grupos alquilo (C_1-C_{12}) adecuados, en particular, metilo, etilo, propilo, isopropilo, *n*-butilo, *iso*-butilo, *sec*-butilo, *terc*-butilo, *n*-pentilo, 2-pentilo, 2-metilbutilo, 3-metilbutilo, 1,2-dimetilpropilo, 1,1-dimetilpropilo, 2,2-dimetilpropilo, 1-etilpropilo, *n*-hexilo, 2-hexilo, 2-metilpentilo, 3-metilpentilo, 4-metilpentilo, 1,1-dimetilbutilo, 1,2-dimetilbutilo, 2,2-dimetilbutilo, 1,3-dimetilbutilo, 2,3-dimetilbutilo, 3,3-dimetilbutilo, 1,1,2-trimetilpropilo , 1,2,2-trimetilpropilo, 1-etilbutilo,

1-etil-2-metilpropilo, *n*-heptilo, 2-heptilo, 3-heptilo, 2-etilpentilo, 1-propilbutilo, *n*-octilo, 2-etilhexilo, 2-propilheptilo, nonilo, decilo.

El término arilo (C_6-C_{20}) comprende restos hidrocarburo aromáticos monocíclicos o policíclicos con 6 a 20 átomos de carbono. Preferentemente, a este respecto, se trata de arilo (C_6-C_{14}), de forma particularmente preferida arilo (C_6-C_{10}).

Son grupos arilo (C_6-C_{20}) adecuados, en particular, fenilo, naftilo, indenilo, fluorenilo, antracenilo, fenantrenilo, naftacenilo, crisenilo, pirenilo, coronenilo. Son grupos arilo (C_6-C_{20}) preferidos fenilo, naftilo y antracenilo

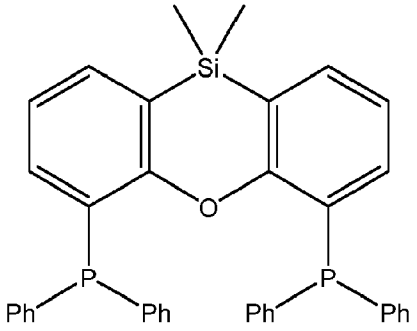
En una forma de realización R^5, R^6, R^7, R^8 representan arilo (C_6-C_{20}).

En una forma de realización R^5, R^6, R^7, R^8 representan -Ph.

En una forma de realización R^1 y R^4 representan -H.

En una forma de realización R^2 y R^3 representan -H.

En una forma de realización, el compuesto según la fórmula (I) tiene la estructura (1):



(**1**).

En una forma de realización, el complejo presenta exactamente un ligando correspondiente a la fórmula (I).

En una forma de realización, el complejo presenta al menos dos ligandos de yodo.

En una forma de realización, el complejo presenta exactamente dos ligandos de yodo.

En una forma de realización, el complejo presenta al menos dos ligandos de bromo.

En una forma de realización, el complejo presenta exactamente dos ligados de bromo.

Además del propio complejo, se reivindica también su uso para la catálisis de una reacción de hidroformilación.

Uso de un complejo previamente descrito para la catálisis de una reacción de hidroformilación.

La invención se explicará con más detalle a continuación mediante ejemplos de realización.

Descripción del ensayo

Se cargó un vial con PtX_2 (X = halógeno), ligando y una varilla agitadora secada en horno. Después se cierra el vial con un septo (caucho de estireno-butadieno recubierto de PTFE) y una tapa de resina fenólica. El vial se evacua tres veces y se vuelve a llenar con argón. Se añadieron tolueno y 1-octeno al vial utilizando una jeringa. El vial se colocó en una placa de aleación que se transfirió a un autoclave de la serie Parr Instruments 4560 bajo atmósfera de argón. Después de purgar el autoclave tres veces con CO/H_2 la presión del gas de síntesis se aumentó a 40 bar a temperatura ambiente. La reacción se llevó a cabo a 80 °C durante 18 h. Una vez finalizada la reacción, se enfrió el autoclave a temperatura ambiente y se despresurizó cuidadosamente. El rendimiento y la selectividad se determinaron mediante análisis por CG.

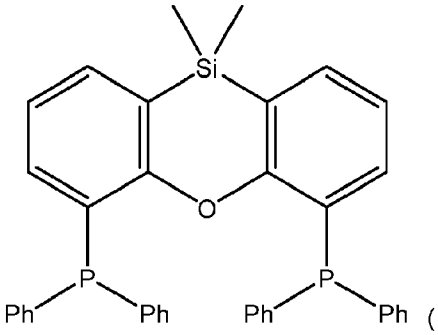
Variación del halógeno



Condiciones de reacción:

1,0 mmol de 1-octeno, PtX_2 al 0,5% molar, 2,0 equivalentes de ligando (1), disolvente: tolueno, $p(CO/H_2)$: 40 bar, T: 80 °C, t: 18 h.

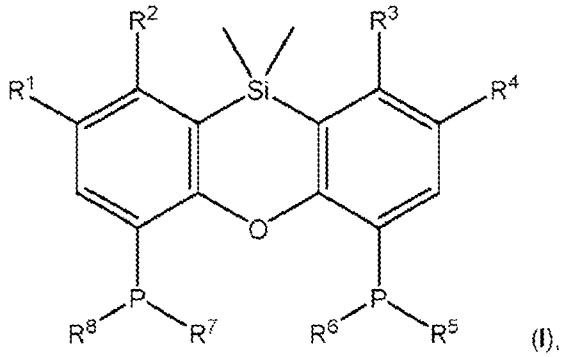
Rendimiento

Ligando	Halógeno	Rendimiento [%]
 (**1**)	I / Br / Cl	98 / 97 / <1

Como muestran los resultados del ensayo, el objetivo se logra por medio del complejo según la invención.

REIVINDICACIONES

1. Complejo que comprende:
a) Pt;
b) un ligando correspondiente a la fórmula (I):



(I),

en la que R^1, R^2, R^3, R^4, R^5, R^6, R^7, R^8 se seleccionan de entre: -H, -alquilo (C_1-C_{12}), -arilo (C_6-C_{20});
c) un ligando de yodo o ligando de bromo.

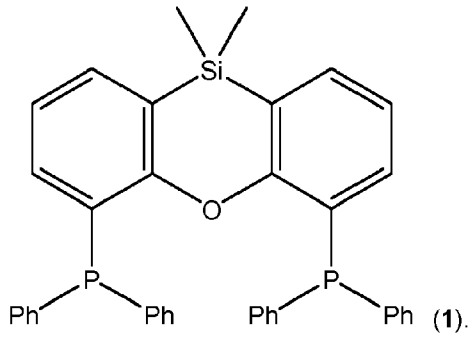
2. Complejo según la reivindicación 1,
en el que R^5, R^6, R^7, R^8 representan arilo (C_6-C_{20}).

3. Complejo según cualquiera de las reivindicaciones 1 o 2,
en el que R^5, R^6, R^7, R^8 representan -Ph.

4. Complejo según cualquiera de las reivindicaciones 1 a 3,
en el que R^1 y R^4 representan -H.

5. Complejo según cualquiera de las reivindicaciones 1 a 4,
en el que R^2 y R^3 representan -H.

6. Complejo según cualquiera de las reivindicaciones 1 a 5,
en el que el compuesto según la fórmula (I) presenta la estructura (1):



(1).

7. Complejo según cualquiera de las reivindicaciones 1 a 6,
en el que el complejo presenta exactamente un ligando correspondiente a la fórmula (I).

8. Complejo según cualquiera de las reivindicaciones 1 a 7,
en el que el complejo presenta al menos dos ligandos de yodo

9. Complejo según la reivindicación 8,
en el que el complejo presenta exactamente dos ligandos de yodo

10. Complejo según cualquiera de las reivindicaciones 1 a 7,
en el que el complejo presenta al menos dos ligandos de bromo

11. Complejo según la reivindicación 10,
en el que el complejo presenta exactamente dos ligandos de bromo

12. Uso de un complejo según cualquiera de las reivindicaciones 1 a 11 para la catálisis de una reacción de hidroformilación.