

【公報種別】特許法第 17 条の 2 の規定による補正の掲載

【部門区分】第 3 部門第 2 区分

【発行日】平成 18 年 1 月 5 日 (2006.1.5)

【公表番号】特表 2002-509550 (P2002-509550A)

【公表日】平成 14 年 3 月 26 日 (2002.3.26)

【出願番号】特願平 11-511007

【国際特許分類】

C 0 7 C 253/10 (2006.01)

B 0 1 J 31/22 (2006.01)

C 0 7 C 255/07 (2006.01)

C 0 7 B 61/00 (2006.01)

【F I】

C 0 7 C 253/10

B 0 1 J 31/22 Z

C 0 7 C 255/07

C 0 7 B 61/00 3 0 0

【手続補正書】

【提出日】平成 17 年 6 月 23 日 (2005.6.23)

【手続補正 1】

【補正対象書類名】明細書

【補正対象項目名】補正の内容のとおり

【補正方法】変更

【補正の内容】

手 続 補 正 書

平成17年6月23日

特許庁長官 殿

1. 事件の表示

特願平11-511007号

2. 発明の名称

ジオレフィンのヒドロシアノ化および非共役2-アルキル-3-
モノアルケンニトリル類の異性化

3. 補正をする者

イー・アイ・デュボン・ドウ・ヌムール・アンド・カンパニー

4. 代 理 人

東京都港区赤坂2丁目6番20号

電 話 (03)3589-1201 (代表)

(7748) 弁理士 谷 義 一



5. 補正命令の日付

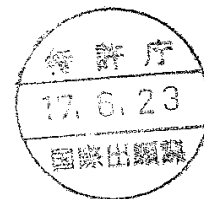
自 発

6. 補正対象書類名

明 細 書

7. 補正対象項目名

請求の範囲, 明細書



8. 補正の内容

(1) 請求の範囲を別紙の通り補正する。

(2) 明細書第38頁の表2の下に、下記を加入する。

「1. 非環式脂肪族ジオレフィン性化合物とHCNの源とを反応させることを含む、ジオレフィン性化合物の液相ヒドロシアノ化および得られる非共役の2-アルキル-3-モノアルケンニトリルの引き続く異性化のための改良されたプロセスであって、ゼロ価ニッケルと前述の式I、II、III、IV、V、VI、VII、VIII、IX、X、XI、XII、XIII および XIV で表わされる化合物からなる群から選択される少なくとも1つの多座ホスファイト配位子とを含む触媒前駆体組成物の存在下で、前記ヒドロシアノ化および引き続く異性化を実施することを特徴とする改良されたプロセス

(式中

それぞれの R^1 は、独立的に、1～12炭素原子の第1級、第2級もしくは第3級炭化水素基、または CH_2OR^3 (R^3 は $C_1\sim C_{12}$ のアルキルである)であり、少なくとも1つの R^1 は、第1級炭化水素基または CH_2OR^3 でなければならないことを条件とし；

それぞれの R^2 は、独立的に、H、ハロゲン、1～12炭素原子の第1級もしくは第2級炭化水素基、 OR^3 (R^3 は $C_1\sim C_{12}$ のアルキルである)、または $CO_2R^{3'}$ ($R^{3'}$ はアリールまたは $C_1\sim C_{12}$ のアルキルである)であり；

それぞれの $R^{2'}$ は、独立的に、H、ハロゲン、CHO、1～12炭素原子の第1級、第2級もしくは第3級炭化水素基、 OR^3 (R^3 は $C_1\sim C_{12}$ のアルキルである)、 $CO_2R^{3'}$ ($R^{3'}$ はアリールまたは $C_1\sim C_{12}$ のアルキルである)、または $C(R^3)(O)(R^3)$ (R^3 は $C_1\sim C_{12}$ のアルキルである)であり；

それぞれの R^4 は、独立的に、H、1～12炭素原子の第1級もしくは第2級炭化水素基、または CO_2R^3 (R^3 は $C_1\sim C_{12}$ のアルキルである)であり；および

それぞれの $R^{4'}$ は、独立的に、H、1～12炭素原子の第1級もしくは第2級炭化水素基、またはアリールである。)。

2. 前記ジオレフィン性化合物は、ブタジエンであることを特徴とする1. に

記載の改良されたプロセス。

3. 前記ヒドロシアノ化または前記異性化のいずれかがバッチ式操作として実施されるか、あるいは、前記ヒドロシアノ化および前記異性化の双方がバッチ式操作として実施されることを特徴とする1.に記載の改良されたプロセス。

4. 前記ヒドロシアノ化または前記異性化のいずれかが連続的に実施されるか、あるいは、前記ヒドロシアノ化および前記異性化の双方が連続的に実施されることを特徴とする1.に記載の改良されたプロセス。

5. 前記ジオレフィン性化合物は、4～10炭素原子を含有する共役ジオレフィン類を含むことを特徴とする1.に記載の改良されたプロセス。

6. 前記ジオレフィン性化合物は、1, 3-ブタジエン、シス-2, 4-ヘキサジエン、トランス-2, 4-ヘキサジエン、シス-1, 3-ペンタジエン、およびトランス-1, 3-ペンタジエンからなる群から選択されることを特徴とする5.に記載の改良されたプロセス。

7. 前記ヒドロシアノ化は、0℃から150℃までの温度において実施されることを特徴とする1.に記載の改良されたプロセス。

8. 前記ヒドロシアノ化中の前記触媒前駆体化合物に対する前記HCNのモル比は、100:1から5,000:1の間であることを特徴とする3.に記載の改良されたプロセス。

9. 前記ヒドロシアノ化中の前記触媒前駆体化合物に対する前記HCNのモル比は、100:1から5,000:1の間であることを特徴とする4.に記載の改良されたプロセス。

10. 非環式脂肪族ジオレフィン性化合物とHCNの源とを反応させることを含む、ジオレフィン性化合物の液相ヒドロシアノ化のための改良されたプロセスであって、ゼロ価ニッケルと前述の式I、II、III、IV、V、VI、VII、VIII、IX、X、XI、XII、XIIIおよびXIVで表わされる化合物からなる群から選択される少なくとも1つの多座ホスファイト配位子とを含む触媒前駆体組成物の存在下で、前記ヒドロシアノ化反応を実施することを特徴とする改良されたプロセス

(式中、

それぞれのR¹は、独立的に、1～12炭素原子の第1級、第2級もしくは第

3級炭化水素基、または CH_2OR^3 (R^3 は $\text{C}_1\sim\text{C}_{12}$ のアルキルである)であり、少なくとも1つの R^1 は、第1級炭化水素基または CH_2OR^3 でなければならないことを条件とし；

それぞれの R^2 は、独立的に、H、ハロゲン、1～12炭素原子の第1級もしくは第2級炭化水素基、 OR^3 (R^3 は $\text{C}_1\sim\text{C}_{12}$ のアルキルである)、または $\text{CO}_2\text{R}^{3'}$ ($\text{R}^{3'}$ はアリールまたは $\text{C}_1\sim\text{C}_{12}$ のアルキルである)であり；

それぞれの $\text{R}^{2'}$ は、独立的に、H、ハロゲン、 CHO 、1～12炭素原子の第1級、第2級もしくは第3級炭化水素基、 OR^3 (R^3 は $\text{C}_1\sim\text{C}_{12}$ のアルキルである)、 $\text{CO}_2\text{R}^{3'}$ ($\text{R}^{3'}$ はアリールまたは $\text{C}_1\sim\text{C}_{12}$ のアルキルである)、または $\text{C}(\text{R}^3)(\text{O})(\text{R}^3)$ (R^3 は $\text{C}_1\sim\text{C}_{12}$ のアルキルである)であり；

それぞれの R^4 は、独立的に、H、1～12炭素原子の第1級もしくは第2級炭化水素基、または CO_2R^3 (R^3 は $\text{C}_1\sim\text{C}_{12}$ のアルキルである)であり；および

それぞれの $\text{R}^{4'}$ は、独立的に、H、1～12炭素原子の第1級もしくは第2級炭化水素基、またはアリールである。))。

11. 前記ジオレフィン性化合物は、ブタジエンであることを特徴とする10.に記載の改良されたプロセス。

12. 前記ヒドロシアノ化は、バッチ式操作として実施されることを特徴とする10.に記載の改良されたプロセス。

13. 前記ヒドロシアノ化は、連続的に実施されることを特徴とする10.に記載の改良されたプロセス。

14. 前記ジオレフィン性化合物は、4～10炭素原子を含有する共役ジオレフィン類を含むことを特徴とする10.に記載の改良されたプロセス。

15. 前記ジオレフィン化合物は、1,3-ブタジエン、シス-2,4-ヘキサジエン、トランス-2,4-ヘキサジエン、シス-1,3-ペンタジエン、およびトランス-1,3-ペンタジエンからなる群から選択されることを特徴とする14.に記載の改良されたプロセス。

16. 前記ヒドロシアノ化は、0℃から150℃までの温度において実施されることを特徴とする10.に記載の改良されたプロセス。

17. 前記触媒前駆体化合物に対する前記HCNのモル比は、100：1から5,000：1であることを特徴とする12.に記載の改良されたプロセス。

18. 前記触媒前駆体化合物に対する前記HCNのモル比は、100：1から5,000：1であることを特徴とする13.に記載の改良されたプロセス。

19. 非共役の2-アルキル-3-モノアルケンニトリルの異性化のための改良されたプロセスであって、ゼロ価ニッケルと前述の式I、II、III、IV、V、VI、VII、VIII、IX、X、XI、XII、XIII および XIV で表わされる化合物からなる群から選択される少なくとも1つの多座ホスファイト配位子とを含む触媒前駆体組成物の存在下で、前記異性化を実施することを特徴とする改良されたプロセス
(式中、

それぞれの R^1 は、独立的に、1～12炭素原子の第1級、第2級もしくは第3級炭化水素基、または CH_2OR^3 (R^3 は $C_1\sim C_{12}$ のアルキルである)であり、少なくとも1つの R^1 は、第1級炭化水素基または CH_2OR^3 でなければならないことを条件とし；

それぞれの R^2 は、独立的に、H、ハロゲン、1～12炭素原子の第1級もしくは第2級炭化水素基、 OR^3 (R^3 は $C_1\sim C_{12}$ のアルキルである)、または $CO_2R^{3'}$ ($R^{3'}$ はアリールまたは $C_1\sim C_{12}$ のアルキルである)であり；

それぞれの $R^{2'}$ は、独立的に、H、ハロゲン、CHO、1～12炭素原子の第1級、第2級もしくは第3級炭化水素基、 OR^3 (R^3 は $C_1\sim C_{12}$ のアルキルである)、 $CO_2R^{3'}$ ($R^{3'}$ はアリールまたは $C_1\sim C_{12}$ のアルキルである)、または $C(R^3)(O)(R^3)$ (R^3 は $C_1\sim C_{12}$ のアルキルである)であり；

それぞれの R^4 は、独立的に、H、1～12炭素原子の第1級もしくは第2級炭化水素基、または CO_2R^3 (R^3 は $C_1\sim C_{12}$ のアルキルである)であり；および

それぞれの $R^{4'}$ は、独立的に、H、1～12炭素原子の第1級もしくは第2級炭化水素基、またはアリールである。))。

20. 前記非共役の2-アルキル-3-モノアルケンニトリルは、2-メチル-3-ブテンニトリルであることを特徴とする19.に記載の改良されたプロセス。

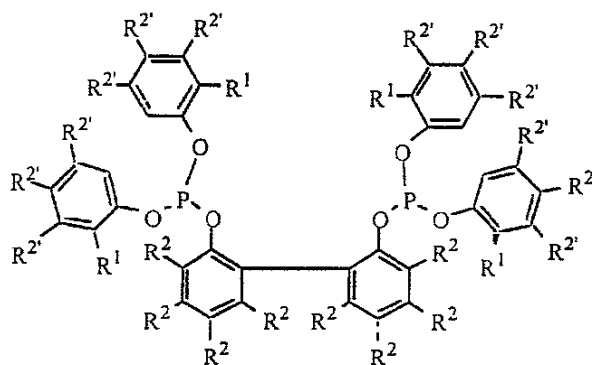
21. 前記異性化は、バッチ式操作として実施されることを特徴とする19.に記載の改良されたプロセス。
22. 前記異性化は、連続的に実施されることを特徴とする19.に記載の改良されたプロセス。
23. 前記非共役の2-アルキル-3-モノアルケンニトリルは、2-エチル-3-ブテンニトリル、および2-プロピル-3-ブテンニトリルからなる群から選択されることを特徴とする19.に記載の改良されたプロセス。
24. 前記異性化は、60℃から150℃までの温度において実施されることを特徴とする19.に記載の改良されたプロセス。
25. 前記触媒前駆体化合物に対する前記非共役の2-アルキル-3-モノアルケンニトリルのモル比は、100:1から5,000:1の間であることを特徴とする21.に記載の改良されたプロセス。
26. 前記触媒前駆体化合物に対する前記非共役の2-アルキル-3-モノアルケンニトリルのモル比は、100:1から5,000:1の間であることを特徴とする22.に記載の改良されたプロセス。
27. 前述の式X、XI、XII、XIIIおよびXIVからなる群から選択される多座ホスファイト配位子
- それぞれの R^2 は、独立的に、H、ハロゲン、1~12炭素原子の第1級もしくは第2級炭化水素基、 OR^3 (R^3 は $C_1 \sim C_{12}$ のアルキルである)、または $CO_2R^{3'}$ ($R^{3'}$ はアリールまたは $C_1 \sim C_{12}$ のアルキルである)であり；
- それぞれの $R^{2'}$ は、独立的に、H、ハロゲン、CHO、1~12炭素原子の第1級、第2級もしくは第3級炭化水素基、 OR^3 (R^3 は $C_1 \sim C_{12}$ のアルキルである)、 $CO_2R^{3'}$ ($R^{3'}$ はアリールまたは $C_1 \sim C_{12}$ のアルキルである)、または $C(R^3)(O)(R^3)$ (R^3 は $C_1 \sim C_{12}$ のアルキルである)であり；および。
- それぞれの $R^{4'}$ は、独立的に、H、1~12炭素原子の第1級もしくは第2級炭化水素基、またはアリールである。)
28. ゼロ価ニッケルと27.に記載の多座ホスファイト配位子とを含むことを特徴とする触媒前駆体組成物。」

以 上

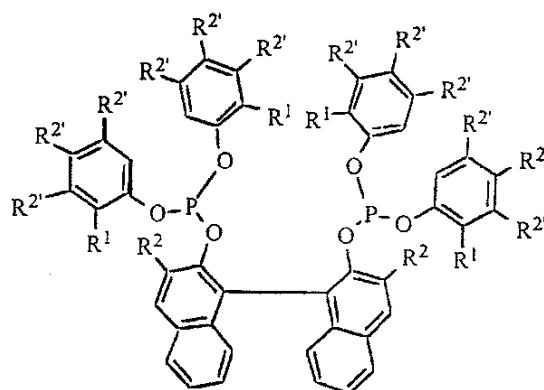
別 紙

請求の範囲

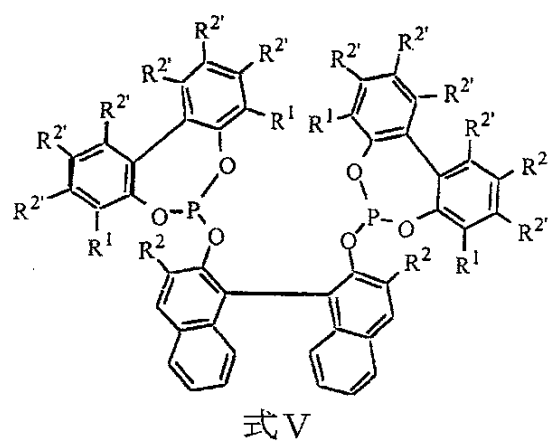
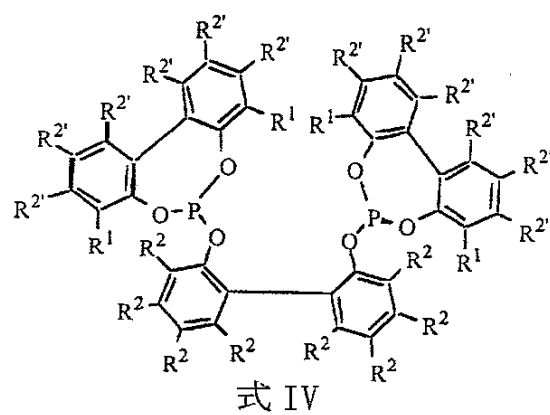
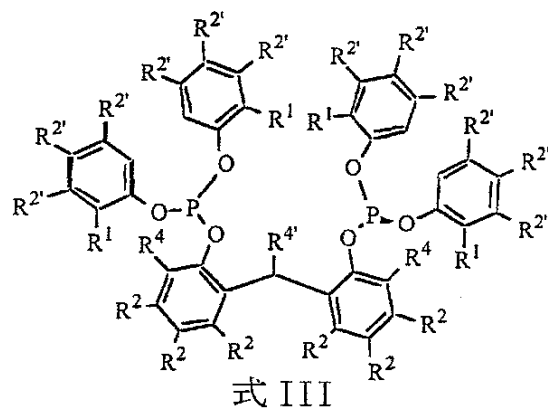
1. 非環式脂肪族ジオレフィン性化合物とHCNの源とを反応させることを含む、ジオレフィン性化合物の液相ヒドロシアノ化および得られる非共役の2-アルキル-3-モノアルケンニトリルの引き続く異性化のための改良されたプロセスであって、ゼロ価ニッケルと以下に示す式 I、II、III、IV、V、VI、VII、VIII、IX、X、XI、XII、XIII および XIV で表わされる化合物からなる群から選択される少なくとも1つの多座ホスファイト配位子 WO とを含む触媒前駆体組成物の存在下で、前記ヒドロシアノ化および引き続く異性化を実施することを特徴とする改良されたプロセス

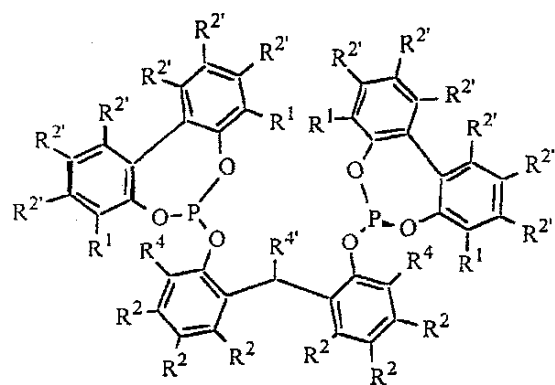


式 I

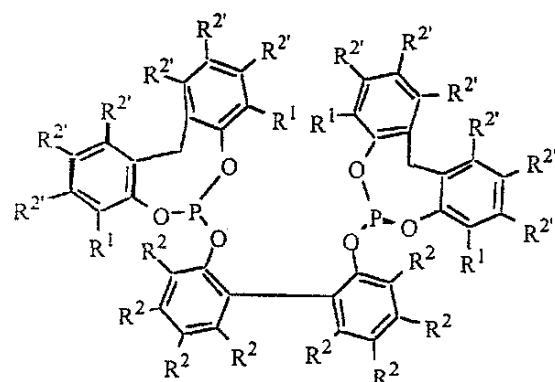


式 II

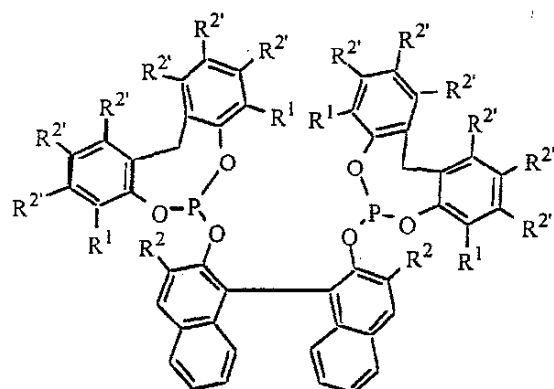




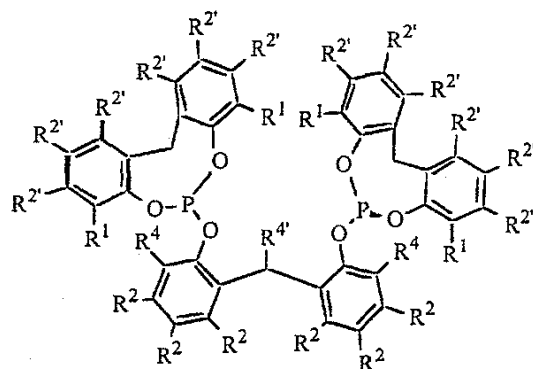
式 VI



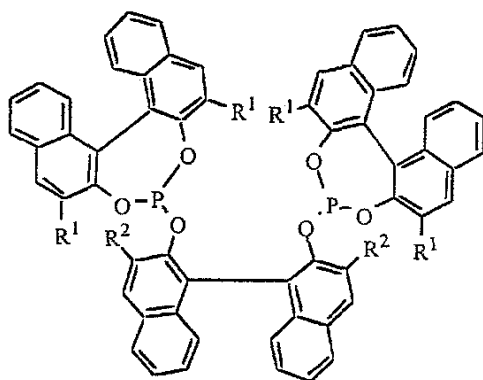
式 VII



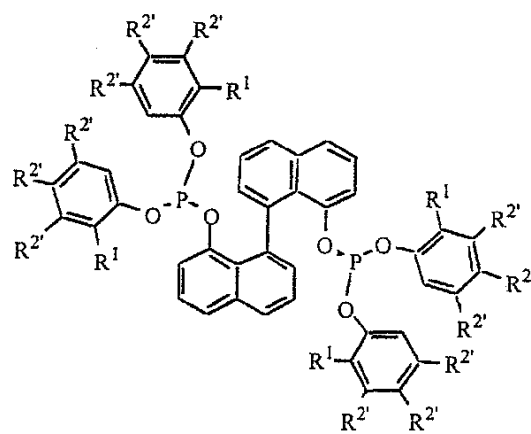
式 VIII



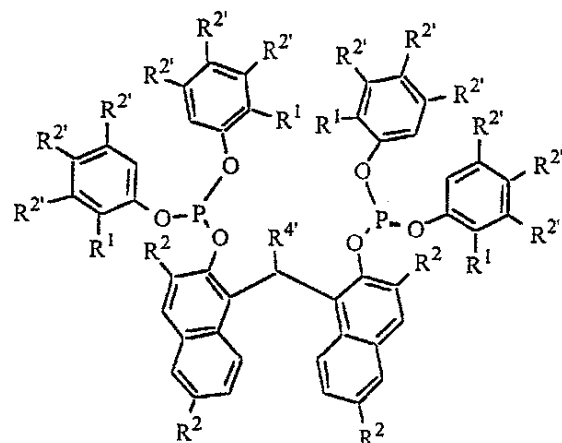
式 IX



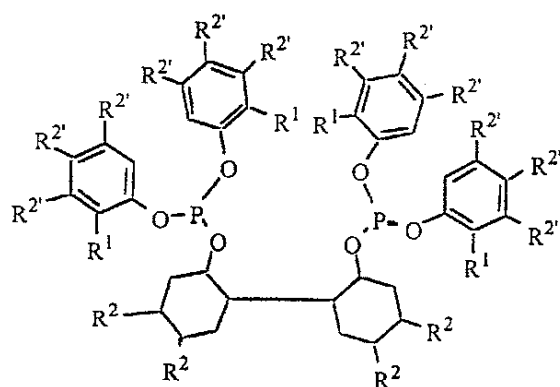
式 X



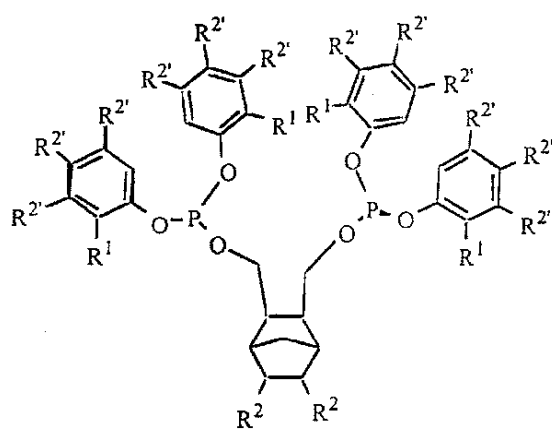
式 XI



式 XIII



式 XIII



式 XIV

(式中

それぞれの R^1 は、独立的に、1～12炭素原子の第1級、第2級もしくは第3級炭化水素基、または CH_2OR^3 (R^3 は $C_1\sim C_{12}$ のアルキルである)であり、

少なくとも1つの R^1 は、第1級炭化水素基または CH_2OR^3 でなければならないことを条件とし；

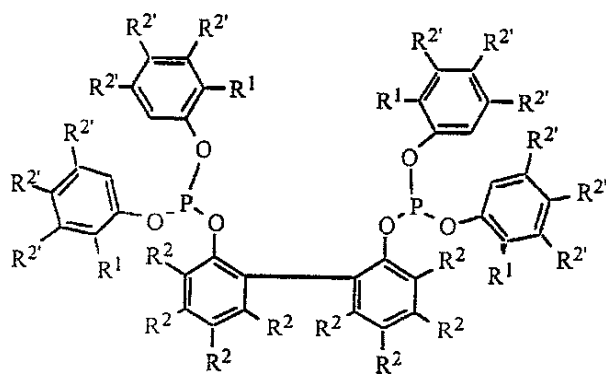
それぞれの R^2 は、独立的に、H、ハロゲン、1～12炭素原子の第1級もしくは第2級炭化水素基、 OR^3 (R^3 は $C_1\sim C_{12}$ のアルキルである)、または $CO_2R^{3'}$ ($R^{3'}$ はアリールまたは $C_1\sim C_{12}$ のアルキルである)であり；

それぞれの $R^{2'}$ は、独立的に、H、ハロゲン、CHO、1～12炭素原子の第1級、第2級もしくは第3級炭化水素基、 OR^3 (R^3 は $C_1\sim C_{12}$ のアルキルである)、 $CO_2R^{3'}$ ($R^{3'}$ はアリールまたは $C_1\sim C_{12}$ のアルキルである)、または $C(R^3)(O)(R^3)$ (R^3 は $C_1\sim C_{12}$ のアルキルである)であり；

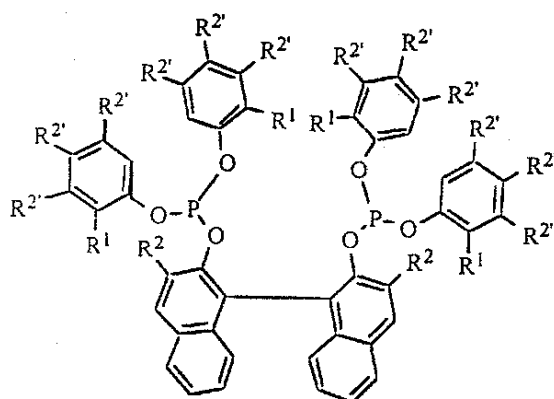
それぞれの R^4 は、独立的に、H、1～12炭素原子の第1級もしくは第2級炭化水素基、または CO_2R^3 (R^3 は $C_1\sim C_{12}$ のアルキルである)であり；および

それぞれの $R^{4'}$ は、独立的に、H、1～12炭素原子の第1級もしくは第2級炭化水素基、またはアリールである。。

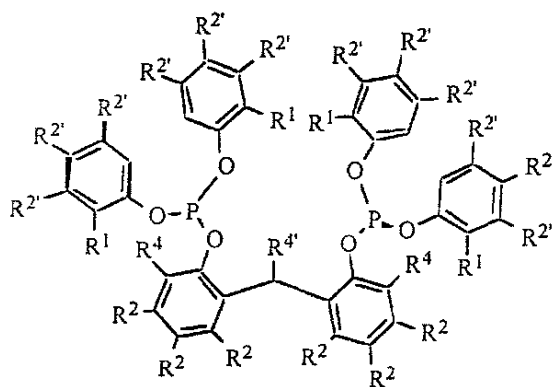
2. 非環式脂肪族ジオレフィン性化合物とHCNの源とを反応させることを含む、ジオレフィン性化合物の液相ヒドロシアノ化のための改良されたプロセスであって、ゼロ価ニッケルと以下に示す式I、II、III、IV、V、VI、VII、VIII、IX、X、XI、XII、XIII および XIV で表わされる化合物からなる群から選択される少なくとも1つの多座ホスファイト配位子とを含む触媒前駆体組成物の存在下で、前記ヒドロシアノ化反応を実施することを特徴とする改良されたプロセス



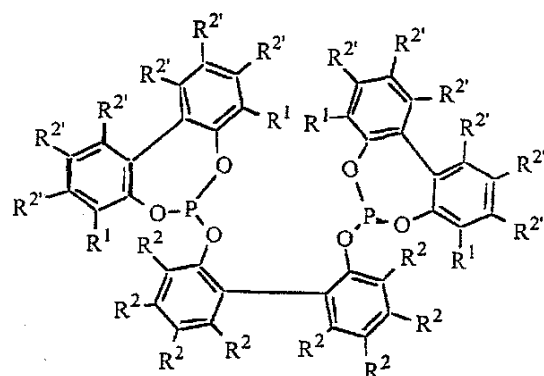
式 I



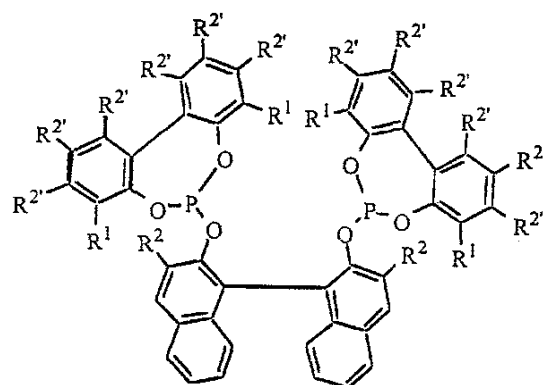
式 II



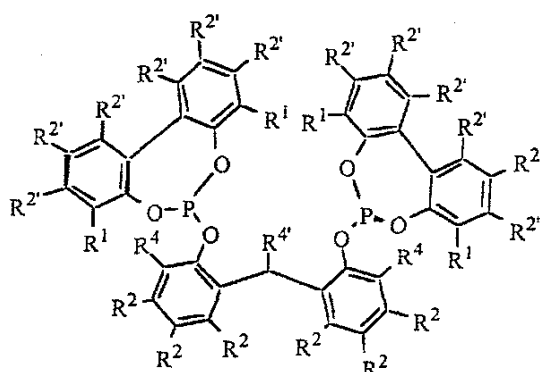
式 III



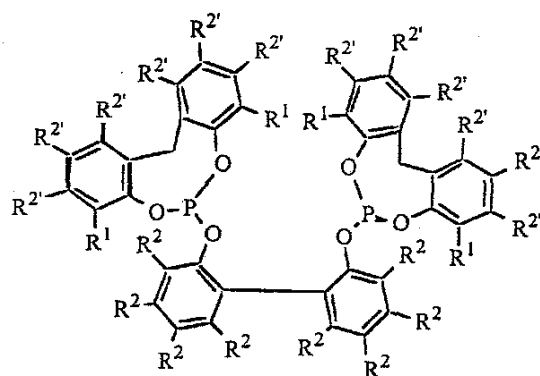
式 IV



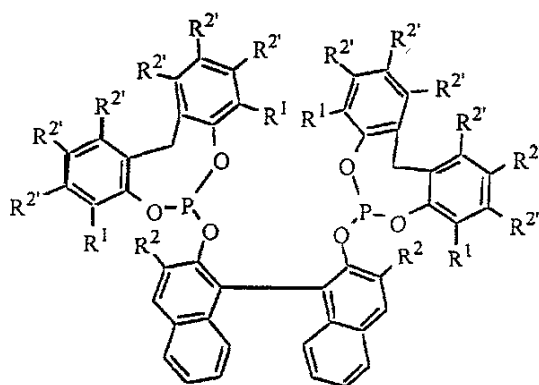
式 V



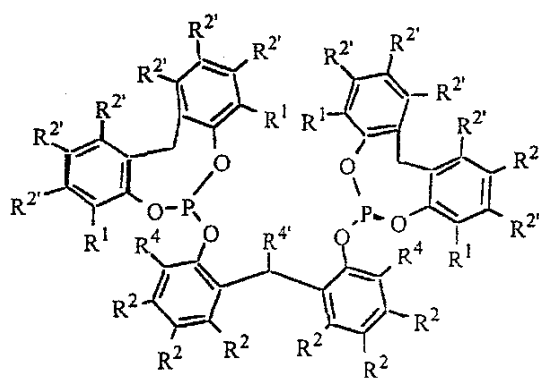
式 VI



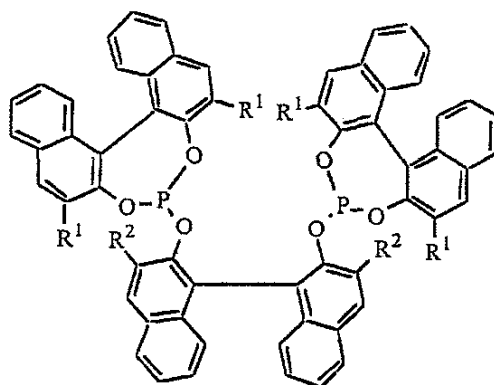
式 VII



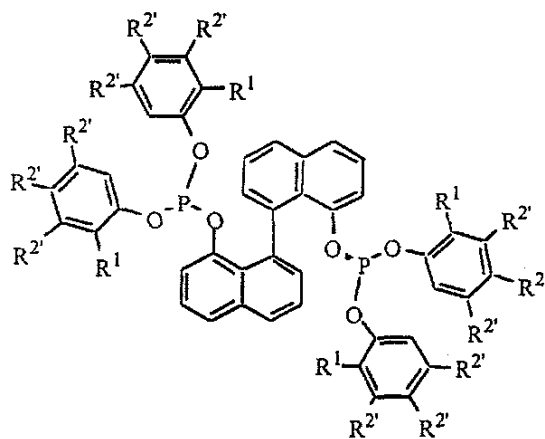
式 VIII



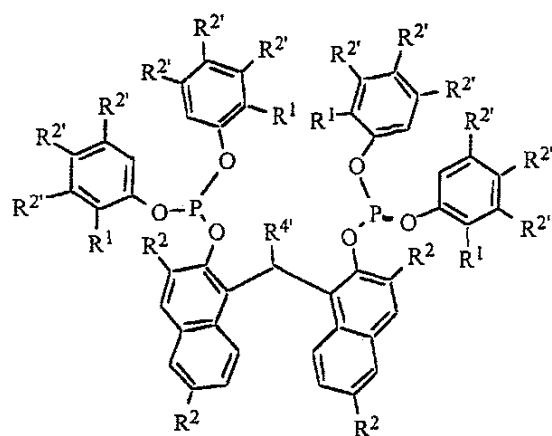
式 IX



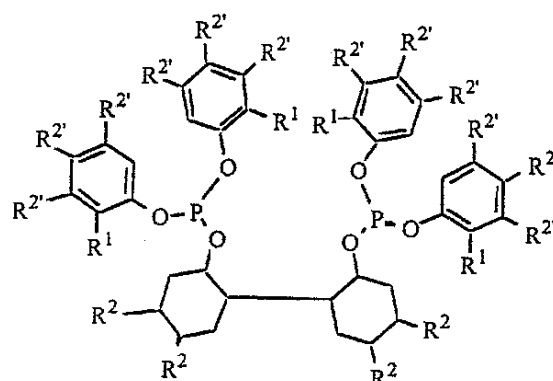
式 X



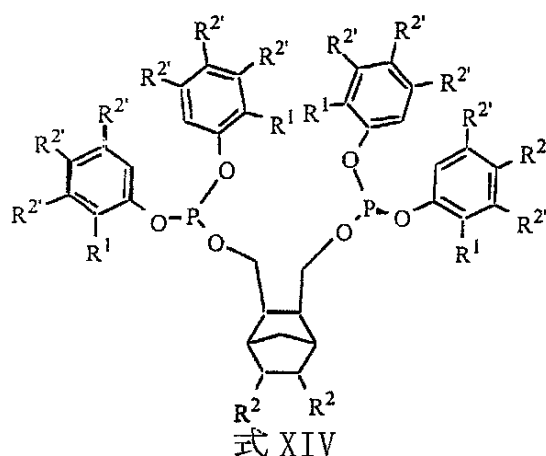
式 XI



式 XII



式 XIII



式 XIV

(式中、

それぞれの R^1 は、独立的に、1～12炭素原子の第1級、第2級もしくは第3級炭化水素基、または CH_2OR^3 (R^3 は $C_1\sim C_{12}$ のアルキルである)であり、少なくとも1つの R^1 は、第1級炭化水素基または CH_2OR^3 でなければならないことを条件とし；

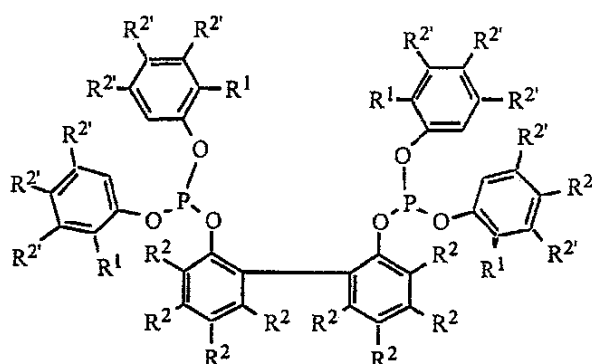
それぞれの R^2 は、独立的に、H、ハロゲン、1～12炭素原子の第1級もしくは第2級炭化水素基、 OR^3 (R^3 は $C_1\sim C_{12}$ のアルキルである)、または CO_2R^3 (R^3 はアリールまたは $C_1\sim C_{12}$ のアルキルである)であり；

それぞれの $R^{2'}$ は、独立的に、H、ハロゲン、CHO、1～12炭素原子の第1級、第2級もしくは第3級炭化水素基、 OR^3 (R^3 は $C_1\sim C_{12}$ のアルキルである)、 CO_2R^3 (R^3 はアリールまたは $C_1\sim C_{12}$ のアルキルである)、または $C(R^3)(O)(R^3)$ (R^3 は $C_1\sim C_{12}$ のアルキルである)であり；

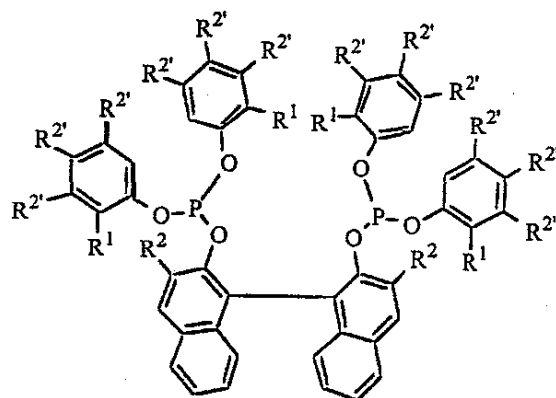
それぞれの R^4 は、独立的に、H、1～12炭素原子の第1級もしくは第2級炭化水素基、または CO_2R^3 (R^3 は $C_1\sim C_{12}$ のアルキルである)であり；および

それぞれの $R^{4'}$ は、独立的に、H、1～12炭素原子の第1級もしくは第2級炭化水素基、またはアリールである。。

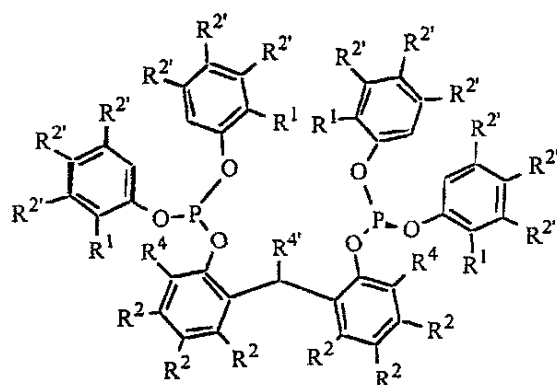
3. 非共役の2-アルキル-3-モノアルケンニトリルの異性化のための改良されたプロセスであって、ゼロ価ニッケルと以下に示す式I、II、III、IV、V、VI、VII、VIII、IX、X、XI、XII、XIII および XIV で表わされる化合物からなる群から選択される少なくとも1つの多座ホスファイト配位子とを含む触媒前駆体組成物の存在下で、前記異性化を実施することを特徴とする改良されたプロセス



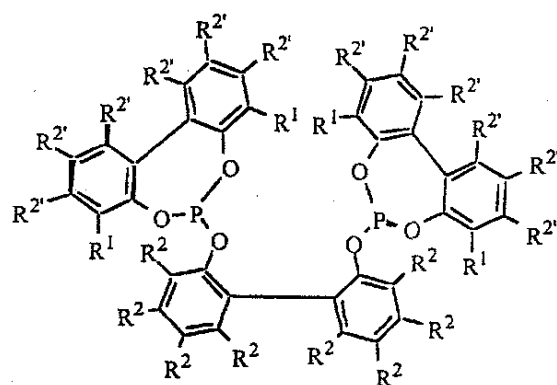
式 I



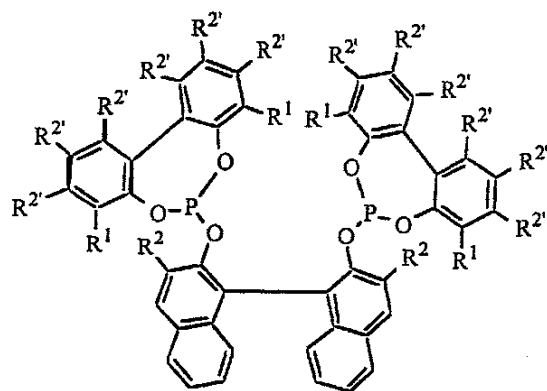
式 II



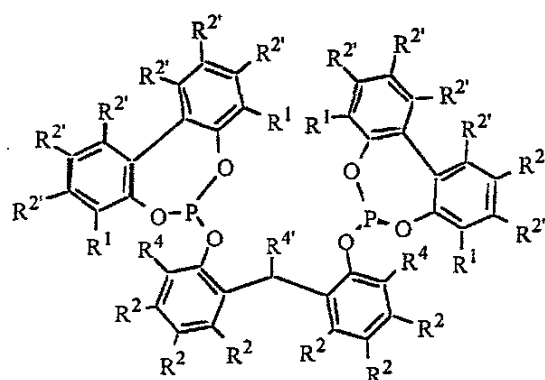
式 III



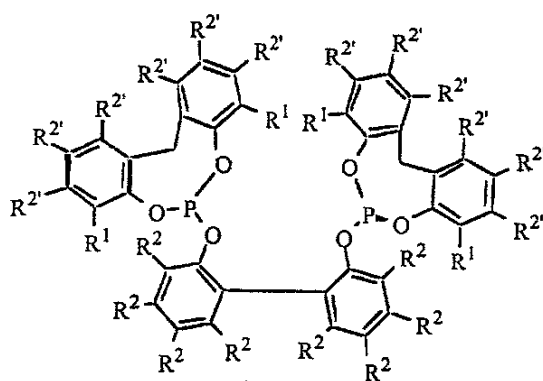
式 IV



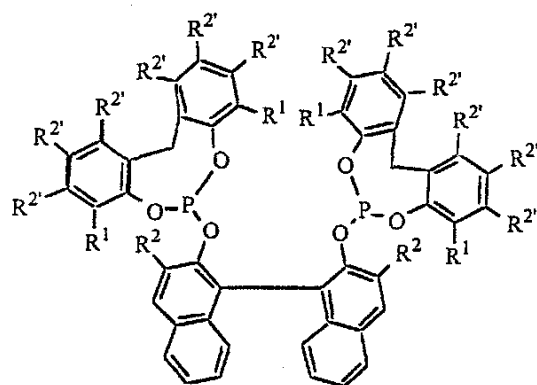
式 V



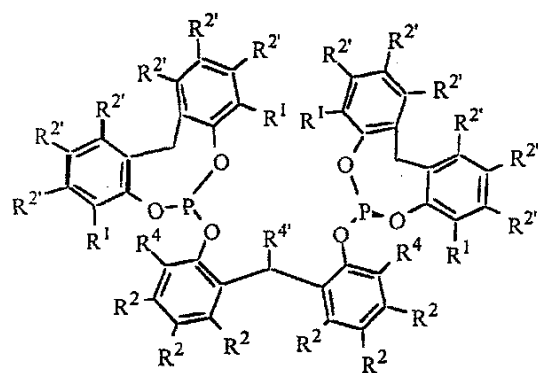
式 VI



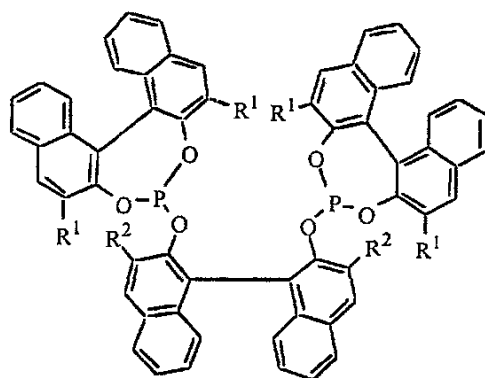
式 VII



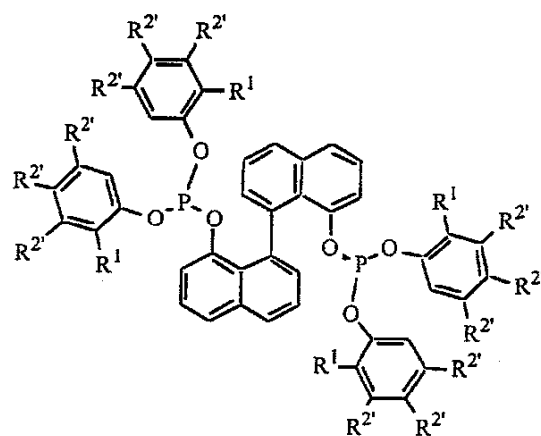
式 VIII



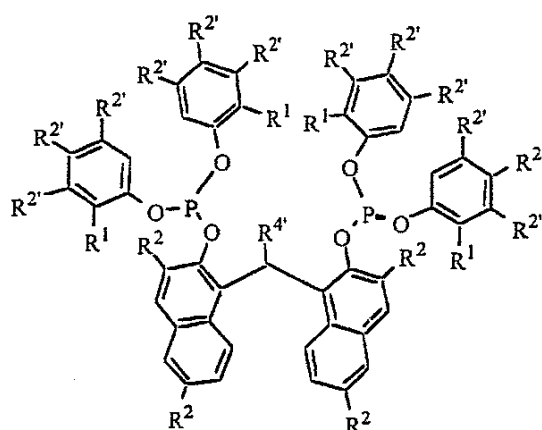
式 IX



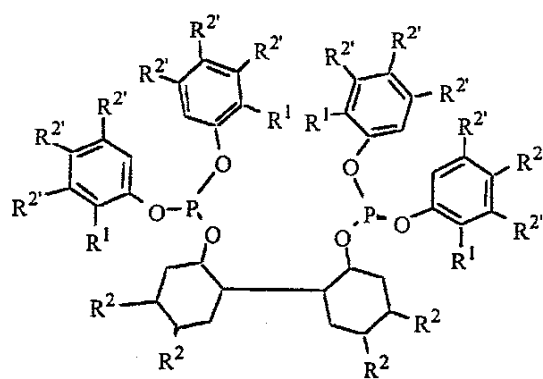
式 X



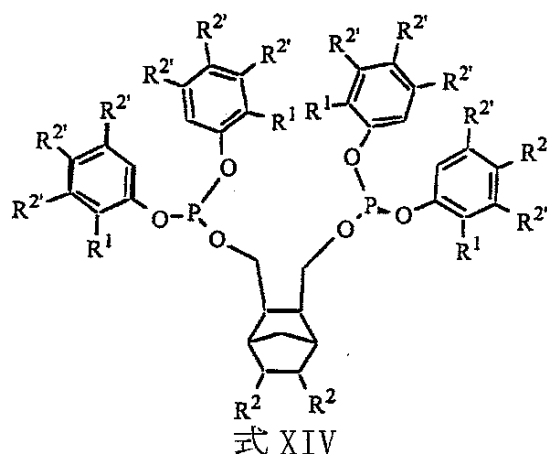
式 XI



式 XII



式 XIII



(式中、

それぞれの R^1 は、独立的に、1～12炭素原子の第1級、第2級もしくは第3級炭化水素基、または CH_2OR^3 (R^3 は $C_1\sim C_{12}$ のアルキルである)であり、少なくとも1つの R^1 は、第1級炭化水素基または CH_2OR^3 でなければならないことを条件とし；

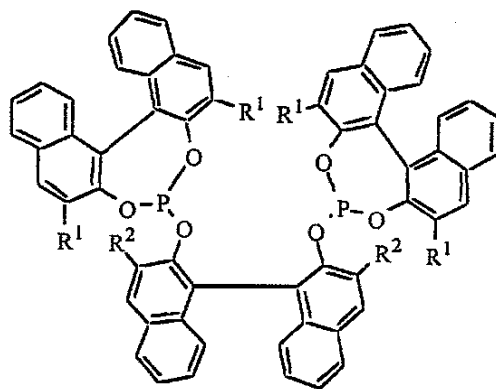
それぞれの R^2 は、独立的に、H、ハロゲン、1～12炭素原子の第1級もしくは第2級炭化水素基、 OR^3 (R^3 は $C_1\sim C_{12}$ のアルキルである)、または CO_2R^3 (R^3 はアリールまたは $C_1\sim C_{12}$ のアルキルである)であり；

それぞれの $R^{2'}$ は、独立的に、H、ハロゲン、CHO、1～12炭素原子の第1級、第2級もしくは第3級炭化水素基、 OR^3 (R^3 は $C_1\sim C_{12}$ のアルキルである)、 CO_2R^3 (R^3 はアリールまたは $C_1\sim C_{12}$ のアルキルである)、または $C(R^3)(O)(R^3)$ (R^3 は $C_1\sim C_{12}$ のアルキルである)であり；

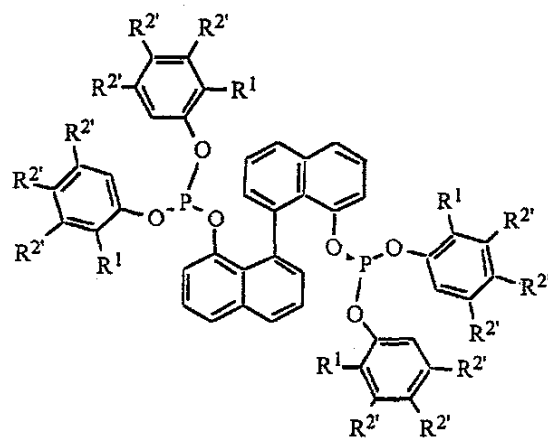
それぞれの R^4 は、独立的に、H、1～12炭素原子の第1級もしくは第2級炭化水素基、または CO_2R^3 (R^3 は $C_1\sim C_{12}$ のアルキルである)であり；および

それぞれの $R^{4'}$ は、独立的に、H、1～12炭素原子の第1級もしくは第2級炭化水素基、またはアリールである。)

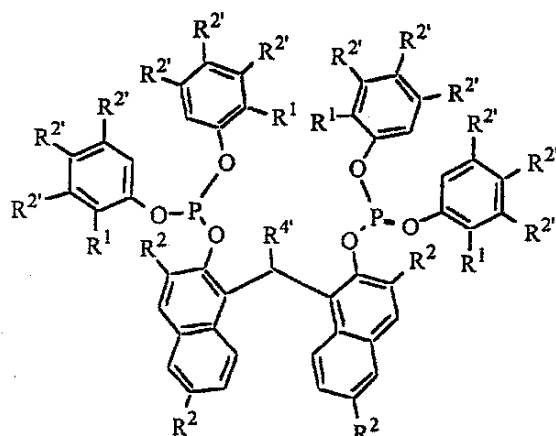
4. 以下に示される式X、XI、XII、XIII および XIV からなる群から選択される多座ホスファイト配位子



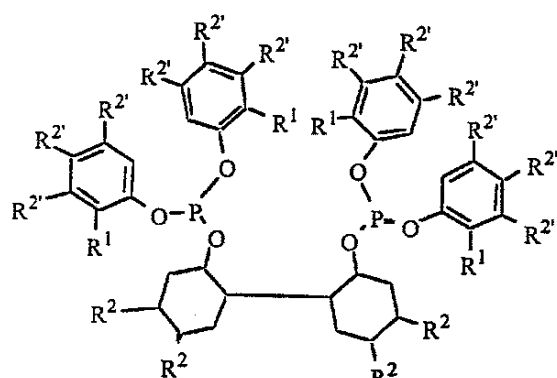
式 X



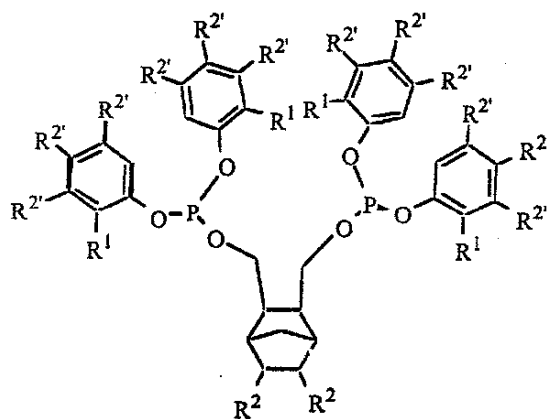
式 XI



式 XII



式 XIII



式 XIV

それぞれの R^2 は、独立的に、H、ハロゲン、1～12炭素原子の第1級もしくは第2級炭化水素基、 OR^3 (R^3 は $C_1\sim C_{12}$ のアルキルである)、または CO_2R^3 (R^3 はアリールまたは $C_1\sim C_{12}$ のアルキルである)であり；

それぞれの $R^{2'}$ は、独立的に、H、ハロゲン、CHO、1～12炭素原子の第

1級、第2級もしくは第3級炭化水素基、 OR^3 (R^3 は $\text{C}_1 \sim \text{C}_{12}$ のアルキルである)、 $\text{CO}_2\text{R}^{3'}$ ($\text{R}^{3'}$ はアリールまたは $\text{C}_1 \sim \text{C}_{12}$ のアルキルである)、または $\text{C}(\text{R}^3)(\text{O})(\text{R}^3)$ (R^3 は $\text{C}_1 \sim \text{C}_{12}$ のアルキルである) であり；および。

それぞれの $\text{R}^{4'}$ は、独立的に、H、1～12炭素原子の第1級もしくは第2級炭化水素基、またはアリールである。。

5. ゼロ価ニッケルと請求項4に記載の多座ホスファイト配位子とを含むことを特徴とする触媒前駆体組成物。

(以下余白)