

Europäisches Patentamt  
Beschwerdekammern

European Patent Office  
Boards of Appeal

Office européen des brevets  
Chambres de recours



Veröffentlichung im Amtsblatt	Ja/Nein
Publication in the Official Journal	Yes/No
Publication au Journal Officiel	OUI/Non

20

Aktenzeichen / Case Number / N<sup>o</sup> du recours : T 198/85  
Anmeldenummer / Filing No / N<sup>o</sup> de la demande : 81 105 680.3  
Veröffentlichungs-Nr. / Publication No / N<sup>o</sup> de la publication : 0 045 429

Bezeichnung der Erfindung: Verfahren zur Herstellung von 4-tert.-Butyl-  
Title of invention: benzaldehyden  
Titre de l'invention :

Klassifikation / Classification / Classement : C 07 C 45/42

**ENTSCHEIDUNG / DECISION**

vom / of / du 17. November 1987

Anmelder / Applicant / Demandeur :

Patentinhaber / Proprietor of the patent / BAYER AG  
Titulaire du brevet :

Einsprechender / Opponent / Opposant : HOECHST AG

Stichwort / Headword / Référence : tert.-Butylbenzaldehyde/Bayer

EPO / EPC / CBE Artikel 56

Kennwort / Keyword / Mot clé : "Erfinderische Tätigkeit (verneint)"

**Leitsatz / Headnote / Sommaire**

Europäisches  
Patentamt

Beschwerdekammern

European Patent  
Office

Boards of Appeal

Office européen  
des brevets

Chambres de recours



Aktenzeichen: T 198/85

**E N T S C H E I D U N G**  
der Technischen Beschwerdekammer 3.3.1  
vom 17. November 1987

**Beschwerdeführer:**  
(Einsprechender)

HOECHST AKTIENGESELLSCHAFT  
- Zentrale Patentabteilung -  
Postfach 80 03 20  
D-6230 Frankfurt am Main 80

**Vertreter:**

**Beschwerdegegner:**  
(Patentinhaber)

BAYER AG  
Zentralbereich Patente, Marken und  
Lizenzen  
D-5090 Leverkusen

**Vertreter:**

**Angefochtene Entscheidung:**

Entscheidung der Einspruchsabteilung  
des Europäischen Patentamts vom  
17. Mai 1985, mit der der Einspruch  
gegen das europäische Patent Nr.  
0 045 429 aufgrund des Artikels 102  
(2) EPÜ zurückgewiesen worden ist.

**Zusammensetzung der Kammer:**

**Vorsitzender:** K. Jahn  
**Mitglieder:** R. Andrews  
R. Schulte

Europäisches  
Patentamt

Beschwerdekammern

European Patent  
Office

Boards of Appeal

Office européen  
des brevets

Chambres de recours



Aktenzeichen: T 198/85

**E N T S C H E I D U N G**  
der Technischen Beschwerdekammer 3.3.1  
vom 17. November 1987

**Beschwerdeführer:**  
(Einsprechender)

HOECHST AKTIENGESELLSCHAFT  
- Zentrale Patentabteilung -  
Postfach 80 03 20  
D-6230 Frankfurt am Main 80

**Vertreter:**

**Beschwerdegegner:**  
(Patentinhaber)

BAYER AG  
Zentralbereich Patente, Marken und  
Lizenzen  
D-5090 Leverkusen

**Vertreter:**

**Angefochtene Entscheidung:**

Entscheidung der Einspruchsabteilung  
des Europäischen Patentamts vom  
17. Mai 1985, mit der der Einspruch  
gegen das europäische Patent Nr.  
0 045 429 aufgrund des Artikels 102  
(2) EPÜ zurückgewiesen worden ist.

**Zusammensetzung der Kammer:**

**Vorsitzender:** K. Jahn  
**Mitglieder:** R. Andrews  
R. Schulte

## Sachverhalt und Anträge

- I. Der Hinweis auf die Bekanntmachung der Patenterteilung für die am 20. Juli 1981 eingegangene, die Priorität einer deutschen Voranmeldung (DE-3 029 367) vom 01. August 1980 in Anspruch nehmende europäische Patentanmeldung 81 105 680.3 erfolgte am 31. August 1983 (vgl. Patentblatt 83/35). Das Patent ist auf der Grundlage von neun Ansprüchen erteilt worden. Der einzige unabhängige Anspruch lautet:

"Verfahren zur Herstellung von gegebenenfalls am Kern durch Fluor, Chlor, Brom oder Jod ein- oder mehrfach substituiertem 4-tert.-Butylbenzaldehyd, dadurch gekennzeichnet, daß man gegebenenfalls am Kern durch Fluor, Chlor, Brom oder Jod ein- oder mehrfach substituiertes 4-tert.-Butyltoluol mit 1,6 bis 2,4 Mol Bromchlorid, gegebenenfalls in Gegenwart von Brom und/oder Chlor, als Halogenierungsmittel, pro Mol gegebenenfalls substituiertem 4-tert.-Butyltoluol, bei Temperaturen von 40 bis 230°C, gegebenenfalls in Gegenwart von inerten organischen Lösungs- oder Verdünnungsmitteln, umsetzt und anschließend das Halogenierungsgemisch, gegebenenfalls nach vorheriger Entfernung des im Gemisch enthaltenen, gegebenenfalls substituierten 4-tert.-Butylbenzylhalogenids, verseift."

- II. Gegen die Erteilung des europäischen Patents hat die Einsprechende am 28. Mai 1984 Einspruch eingelegt und den Widerruf des Patents mangels erfinderischer Tätigkeit beantragt. Die Begründung wurde u. a. auf die folgenden Dokumente gestützt:

- (1) DE-A-2 849 692
- (2) Ullmans Encyklopädie der technischen Chemie, 4. Aufl., Band 8, Seite 687

- (3) Houben-Weyl, Methoden der organischen Chemie, Band V/4, Halogenverbindungen (1960), Seite 16
- (4) Journal of the Chemical Society (London) 1926, Seite 218.

III. Durch Entscheidung vom 17. Mai 1985 wies die Einspruchsabteilung den Einspruch zurück und führte dazu im wesentlichen aus, der Gegenstand des angegriffenen Patents sei neu und beruhe auf erfinderischer Tätigkeit. Das Dokument (1) gebe keinen Hinweis auf die Verwendung von Bromchlorid anstelle von Brom. Im Hinblick auf die Lehre dieser Entgegenhaltung sei es überraschend, daß Bromchlorid bei der Herstellung von Aldehyden über die Seitenkettenbromierung einsetzbar sei. Die Entgegenhaltung (2) beschreibe zwar eine Mischung von Brom und Chlor bzw. Bromchlorid als Mittel zur Substitution von Wasserstoff durch Brom, jedoch nur in sehr allgemeiner Weise, ohne daß die Seitenkettenbromierung von Alkyлароматен angesprochen sei. Die Druckschriften (3) und (4) lägen dem Patentgegenstand ferner als die bereits erwähnten Dokumente (1) und (2). Vor allem aber stellten die von der Patentinhaberin für das beanspruchte Verfahren geltend gemachten Vorteile und überraschenden Effekte eine Basis für die erfinderische Tätigkeit dar.

IV. Gegen diese Entscheidung hat die Beschwerdeführerin (Einsprechende) am 05. Juli 1985 Beschwerde eingelegt und gleichzeitig die hierfür vorgesehene Gebühr entrichtet. Die Beschwerde wurde am 20. August 1985 im wesentlichen etwa wie folgt begründet:  
Aufgrund des einschlägigen Standes der Technik habe es keines erfinderischen Zutuns bedurft, um beim bekannten Verfahren nach (1) das Brom durch Bromchlorid zu ersetzen. Eine Chlorierung des aromatischen Kerns und/oder der tert.-Butylgruppe sei hierbei nicht zu befürchten gewesen.

- V. Die Beschwerdegegnerin widerspricht diesem Vorbringen und bestreitet, daß es zulässig sei, den in einigen Fällen bekannt gewordenen Ersatz des Halogenierungsmittels Brom durch das Halogenierungsmittel Bromchlorid als allgemein gültig hinzustellen. Angesichts der Konkurrenz zwischen einer möglichen  $\alpha$ -Seitenkettenhalogenierung,  $\beta$ -Seitenkettenhalogenierung und Kernhalogenierung bei gegebenenfalls substituierten p-tert.-Butyltoluolen sei es überraschend, daß Bromchlorid, ein chlorhaltiges Halogenierungsmittel, die selektive Bromierung der Methylgruppe ermöglicht.
- VI. In der mündlichen Verhandlung am 17. November 1987 haben die Beteiligten ihre oben wiedergegebenen Standpunkte bekräftigt und sich dabei nur noch auf die Entgegenhaltungen (1), (2), US-A-2 607 802 (6), The chemistry of the carbon-halogen bond, Part I, Saul Patai (Herausgeber), John Wiley & Sons (1973), Seiten 552 und 553 (10) und Seite 601 (18) sowie Recueil des Travaux Chimiques des Pays Bas, 1929, Seite 809 (13) gestützt.
- VII. Die Beschwerdeführerin beantragt, die angefochtene Entscheidung aufzuheben und das europäische Patent zu widerrufen. Die Beschwerdegegnerin beantragt, die Beschwerde zurückzuweisen und das Patent mit der am 19. März 1986 eingegangenen Änderung in Spalte 7 aufrechtzuerhalten.

### Entscheidungsgründe

1. Die Beschwerde entspricht den Artikeln 106 bis 108 sowie Regel 64 EPÜ; sie ist daher zulässig.

Die beantragte Änderung in Spalte 7, die auf die Streichung eines breit offenbarten Brom-Chlor-Verhältnisses hinausläuft, ist in formeller Hinsicht nicht zu beanstanden.

3. Das Streitpatent betrifft ein Verfahren zur Herstellung von gegebenenfalls substituierten 4-tert.-Butylbenzaldehyden aus gegebenenfalls substituierten 4-tert.-Butyltoluolen durch Halogenierung und anschließende Verseifung des Halogenierungsgemisches.
  - 3.1 Wie bereits in der Beschreibungseinleitung zum Streitpatent erwähnt, ist ein solches Verfahren aus (1) bekannt. Danach wird 4-tert.-Butyltoluol und dessen am Kern durch Halogen substituierte Derivate mit etwa 2 Mol Brom/Mol organisches Ausgangsmaterial bei Temperaturen von etwa 40 bis 200°C umgesetzt und das dabei gebildete 4-tert.-Butylbenzalbromid und dessen am Kern durch Halogen substituierte Derivate bei erhöhter Temperatur zu 4-tert.-Butylbenzaldehyd und dessen Derivaten verseift. Dabei wird eine Aldehydausbeute von beispielsweise 92,5% erzielt (vgl. Seite 9 unten). Von Nachteil ist bei diesem bekannten Verfahren, daß das für die Bromierung verwendete Brom relativ teuer ist, was die Wirtschaftlichkeit des Verfahrens beeinträchtigt (vgl. hierzu die Ausführungen in der Streitpatentschrift Brückenabsatz, Spalte 1/Spalte 2).
  - 3.2 Diesem nächsten Stand der Technik gegenüber ist daher die patentgemäß bestehende technische Aufgabe darin zu sehen, ein ökonomisches Verfahren zur Herstellung von gegebenenfalls substituierten 4-tert.-Butylbenzaldehyden in vergleichbarer Ausbeute (88 bis 93%) anzugeben, das mit wesentlich weniger Brom auskommt (vgl. Streitpatentschrift Spalte 8, zweiter vollständiger Absatz).

Diese Aufgabe wird verkürzt dargestellt dadurch gelöst, daß man das aus (1) bekannte Verfahren in analoger Weise mit Bromchlorid statt mit Brom durchführt.

Daß diese Aufgabe auch tatsächlich gelöst wird, ist im Hinblick auf die Beispiele 1 und 2 des Streitpatents glaubhaft.

4. Der beanspruchte Lösungsvorschlag ist keinem der angezogenen Dokumente zu entnehmen, also neu. Da die Neuheit unbestritten ist, erübrigen sich nähere Ausführungen hierzu.
5. Es ist daher zu untersuchen, ob es für den Fachmann angesichts der bestehenden technischen Aufgabe nahelag, hierfür das Verfahren nach dem Streitpatent vorzuschlagen.
  - 5.1 Da - wie bereits im Abschnitt 3.1 ausgeführt - die zweistufige Herstellung von 4-tert.-Butylbenzaldehyd durch Bromierung von 4-tert.-Butyltoluol mittels Brom und nachfolgende Verseifung des Benzaldehydbromids aus (1) bekannt war, und die Beschwerdegegnerin das patentbegründende Merkmal ihres Verfahrens in der Bromierungsstufe sieht, spitzt sich die Frage nach der erfinderischen Tätigkeit des Patentgegenstandes darauf zu, ob der bloße Austausch von Brom durch Bromchlorid erfinderisch ist. Nun war bereits aus (2) bekannt, daß die Substitution des Wasserstoffs durch Brom (Bromierung) sowohl mit Brom als auch einem äquimolekularen Gemisch aus Brom und Chlor bzw. Bromchlorid durchgeführt werden kann, ohne daß dabei eine nennenswerte Chlorierung stattfindet (S. 68/rechte Spalte Absätze 2 und 3 von unten). Die Angabe in (2), daß diese Substitutionsreaktion bei einer Reihe von Verbindungen sowie ganzen Stoffklassen inclusive Kohlenwasserstoffen

erfolgreich abläuft, spricht für die allgemeine Anwendbarkeit dieser Reaktion. Bei seiner Fähigkeit zur Abstraktion benötigte der Fachmann keinen Hinweis in (2), um die generelle Austauschbarkeit von Brom und Bromchlorid auch bei der Bromierung des Kohlenwasserstoffs tert.-Butyltoluol zu erkennen; hierzu befähigte ihn auch sein Wissen um die selektive Bromierung der Methylgruppe dieser Verbindung mit Brom nach (1).

Zudem weiß der Chemiker, daß aufgrund der Stöchiometrie der Bromierung einer CH-Bindung mit Hilfe von Brom nur eines der beiden Bromatome des Broms in die CBr-Bindung umgewandelt wird, während sich das andere Bromatom mit dem zu substituierenden Wasserstoffatom verbindet. Mit anderen Worten, bei der Bromierung mit Brom wird nur die Hälfte des Broms für die eigentliche Substitution genutzt. Diese Tatsache wird in (2) - stark verkürzt - in der Weise wiedergegeben, daß "bei der Substitution des Wasserstoffs große Mengen HBr-Gas anfallen". Im Anschluß daran wird angegeben, daß bei fehlender Verwendungsmöglichkeit für diesen HBr-Zwangsanfall anstelle von Brom Bromchlorid verwendet werden kann, wobei dann anstelle von HBr HCl anfällt. (2) vermittelt demnach die technische Lehre, daß bei der Bromierung mit Bromchlorid die Bildung des beim Einsatz von Brom unvermeidlich entstehenden HBr vermieden werden kann, so daß das gesamte Brom der Substitutionsreaktion zugute kommt. Dieses Wissen gab dem Fachmann die Anregung, die hier bestehende Aufgabe, jedenfalls was ihren ökonomischen Aspekt (Bromeinsparung) anlangt, in gleicher Weise, nämlich durch Austausch des aus (1) bekannten Broms durch Bromchlorid, zu lösen.

- 5.2 Hierdurch mußte auch gleichzeitig die Lösung der anderen bestehenden Teilaufgabe, der Erziehung vergleichbarer Ausbeuten, möglich erscheinen. Hierfür spricht bereits die

Aussage in (2), wonach bei Verwendung von Bromchlorid als Bromierungsmittel nur geringe Mengen chlorhaltiger Bromierungsprodukte entstehen. Dies wird bestätigt durch (13) Seite 809, wonach Bromchlorid ein starkes Bromierungsmittel ist, ohne dabei zu chlorieren. Demnach war beim Austausch von Brom gegen Bromchlorid im Verfahren nach (1) mit keiner ins Gewicht fallenden Minderung der Ausbeute zu rechnen.

- 5.3 Der Einwand der Beschwerdegegnerin, bei der bekannten Bromierung von tert.-Butyltoluol nach (1) sei beim Austausch von Brom gegen das patentgemäß vorgeschlagene Bromchlorid sowohl unerwünschte Chlorierung als auch unerwünschte Bromierung, d.h. Bromierung der tert.-Butylgruppe (also  $\beta$ -Seitenkettenbromierung) und des aromatischen Kern zu befürchten gewesen, geht fehl; denn allgemeines Fachwissen lehrt, daß die Selektivität der Bromierung von Alkyлароматен stark von den Reaktionsbedingungen abhängt. Dabei bedingen Kälte und Katalysatoren eine Kernbromierung (KKK-Regel), während Siedehitze und Sonnenlicht (oder aktinisches Licht) für Seitenkettenbromierung sorgt (SSS-Regel).

Diese Regeln gelten auch für Bromchlorid als Bromierungsmittel. So ist in Entgeghaltung (6) sowohl die Kernsubstitution (Beispiele 1, 3 und 4) als auch die Seitenkettensubstitution (Beispiel 2) bei Anwendung dieser Regeln beschrieben. In Beispiel 2 setzt sich 2-Chlor-4-nitrotoluol mit Bromchlorid bei höherer Temperatur und Bestrahlung mit UV-Licht zu  $\alpha, \alpha$ -Dibrom-2-chlor-4-nitrotoluol um. Eine Kernbromierung oder Kernchlorierung dieses Toluols erfolgt dabei nicht, so daß derartige unerwünschte Reaktionen auch bei der Bromierung des analogen 4-tert.-Butyltoluols mit Bromchlorid nicht zu erwarten waren,

sofern die Reaktion unter den bekannten Seitenkettenhalogenierungsbedingungen durchgeführt wird.

Spalte 1, Zeilen 6 bis 11 und 44 bis 51 von (6) bestätigt dies mit der Aussage, daß bei Halogenierungen mit Bromchlorid bzw. einer Mischung von Brom und Chlor im Molverhältnis um etwa 1:1 praktisch nur Bromierung erfolgt.

- 5.4 Gleichfalls mußte beim Einsatz von Bromchlorid mit keiner  $\beta$ -Halogenierung gerechnet werden, wie sie für das nicht selektive Chlor bekannt ist. Hierzu ist auf (10) (vgl. die letzten vier Zeilen auf Seite 552 und die Formelgleichung auf Seite 553) zu verweisen, wonach man durch Chlorierung von Ethylbenzol mit molekularem Chlor eine Mischung aus  $\alpha$ -Chlorethylbenzol und  $\beta$ -Chlorethylbenzol erhält, während die Bromierung von Ethylbenzol mit molekularem Brom nur  $\alpha$ -Bromethylbenzol liefert.
- 5.5 Entgegen der Auffassung der Beschwerdegegnerin hat auch gegen die Verwendung von Bromchlorid im Verfahren nach dem Streitpatent aufgrund der Literaturstelle (18) kein Vorurteil bestanden. Dort wird im Zusammenhang mit der Bromierung von Difluormethan mit Bromchlorid zu Bromdifluormethan ein radikalischer zweistufiger Reaktionsmechanismus vorgeschlagen. Danach soll zunächst ein Chlorradikal unter HCl-Bildung ein Difluormethinradikal erzeugen, welches sich dann mit Bromchlorid zu Bromdifluormethan umsetzt, unter Regenerierung des die Reaktionskette in Gang haltenden Chlorradikals. Im Anschluß an die Reaktionsgleichung findet sich die Schlußfolgerung, daß Bromchlorid als Bromierungsmittel eine ähnliche Selektivität wie Chlor hätte. Dieser Satz - so die Beschwerdegegnerin - soll ein Vorurteil gegen den Einsatz von Bromchlorid bei der Bromierung von tert.-Butyltoluol aufgerichtet haben; denn wenn Bromchlorid in (18) hinsichtlich

dessen Selektivität in die Nähe des bekanntlich nicht selektiven Chlors gerückt wird, hätte der Fachmann von einem Ersatz von Brom gemäß (1) durch Bromchlorid Abstand genommen.

- 5.6 Diese Betrachtungsweise verkennt zunächst, daß die These von der Ähnlichkeit von Chlor und Brom auf der Hypothese des dort vorgeschlagenen Reaktionsmechanismus beruht. Die Unzuverlässigkeit von Theorien, besonders auf dem Gebiet der Chemie, ist hinlänglich bekannt. So wären für den Fachmann auch andere Deutungsversuche möglich, etwa die Erklärung über eine Erniedrigung der Aktivierungsenergie für die Substitution durch die Präsenz des Chloratoms im Bromchlorid.

Analysiert man die Aussage in (18) vor dem Hintergrund der dort gegebenen technischen Fakten, so soll das Gelingen der Bromierung des Difluormethans mit Bromchlorid trotz Versagens der gleichen Reaktion mit Brom theoretisch erklärt werden. Aus dem bloßen Umstand, daß Difluormethan mit Chlor chlorierbar ist, schließen die Autoren von (18) auf eine Ähnlichkeit der Selektivität dieser beiden Halogenierungsmittel.

Diese dem Fachmann reichlich kühn erscheinende, weil auf einem einzigen Beispiel basierende Theorie hätte er nicht als universell gültig angesehen und erst recht nicht auf die Halogenierung des hier interessierenden, strukturell weit von Difluormethan abliegenden tert.-Butyltoluol angewendet. Zudem liegt auch bei dem genannten Toluol nicht der in (18) referierte Grenzfall von der alleinigen Bromierbarkeit mit Bromchlorid vor; vielmehr ist diese Verbindung in ausgezeichneter Ausbeute bereits mit Brom bromierbar.

Außerdem versteht der Fachmann den tatsächlich in (18) gebrauchten Ausdruck "Selektivität" wohl kaum in dem von der Beschwerdeführerin geltend gemachten Sinn, nämlich der Steuerung einer Umsetzung mit mehreren potentiellen Konkurrenzreaktionen in nur eine Richtung; denn im Gegensatz zum tert.-Butyltoluol mit 3 Wasserstoffatomen unterschiedlicher Reaktivität stellen sich beim symmetrischen Difluormethan mit gleich reaktiven Wasserstoffatomen keine Selektivitätsprobleme, die auf den vorliegenden Fall übertragen werden könnten.

Die Entgegenhaltung (18) hätte somit beim Fachmann keinen Zweifel an der Lösbarkeit der patentgemäß bestehenden Teilaufgabe der mit (1) vergleichbar hohen Ausbeuten durch den Austausch von Brom gegen Bromchlorid im Verfahren nach (1) aufkommen lassen, und erst recht kein Vorurteil bei ihm entstehen lassen können.

- 5.7 Aber selbst wenn man einräumen wollte, die Angabe in (13), wonach Bromchlorid ein stärkeres Bromierungsmittel ist als Brom (Seite 809 Absatz 1), könne im Sinne eines Rückgangs an Selektivität bei der Bromierung und damit eines Ausbeuteverlustes verstanden werden, so hätte die Gewißheit um die Lösbarkeit der wesentlichen Teilaufgabe der Brom einsparung durch den Austausch von Brom gegen Bromchlorid, das Wissen um den hohen Ausbeutestandard der Bromierung nach (1) und die Kenntnis von der bekannten bevorzugten Substituierbarkeit des Wasserstoffatoms in  $\alpha$ -Stellung dem Fachmann einen solchen Versuch nahegelegt.
- 5.8 Zusammenfassend ergibt sich, daß es zur Auffindung des Verfahrens nach Anspruch 1 des Streitpatents nur einfacher, der normalen Tätigkeit des Fachmanns zuzurechnender Überlegungen bedurfte, so daß dieses als nahe liegend und daher nicht als erfinderisch zu bewerten ist.

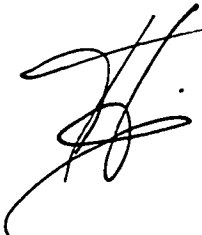
5.9 Die Unteransprüche 2 bis 9, für die ein eigener erfinderischer Gehalt weder geltend gemacht wurde, noch erkennbar ist, müssen wegen mangelnder Patentfähigkeit des Gegenstandes des Hauptanspruchs fallen.

### Entscheidungsformel

Aus diesen Gründen wird entschieden:

1. Die angefochtene Entscheidung wird aufgehoben.
2. Das europäische Patent Nr. 0 045 429 wird widerrufen.

Die Geschäftsstellenbeamte



Der Vorsitzende

