Organic Square

No.24
June
2008

目次

特別講座

トロポロン化学の新たな発展を期待して 日本大学工学部非常勤講師 特別研究員 安並 正文......2

グリーンケミストリー

前処理用固相抽出カラム Presep® シリーズ......9

取扱い製品紹介

SiliCycle社 金属スカベンジャーキット7Novabiochem社 2官能性PEG化試薬8(株)インフォグラム製 Chemical Design ESSENTIAL13Wavefunction, Inc.製 分子モデリングソフトウェア Spartan (スパルタン)15

その他

お知らせ

試薬管理はなぜ必要か(3)12"分子モデリング Start Upセミナー" 開催記「分子モデリング導入のコツ!」14グリーンケミストリー2008(第4阪)発行!!16



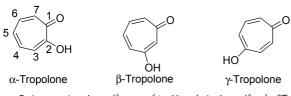
トロポロン化学の新たな発展を期待して

日本大学工学部非常勤講師 特別研究員 安並 正文

序言:この小論文はトロポロン化学の総説ではなく、また最近のトピックスをまとめたものでもない。かつては合成困難であったトロポロン系化合物も、工業的にも可能な多量合成法が開発され、入手が比較的容易になってきた。一方、ある目的をもってトロポロン誘導体を合成しようとした際に、その特異的性質により種々の困難に遭遇することもあり、筆者はかねがねトロポロン誘導体の Organic Synthesis 的な文献が必要であると考えている。この度、和光純薬工業のカタログリストにトロポロンおよびその基本的誘導体が掲載されることとなり、入手が一層容易になることが期待される。この機会に、トロポロン骨格を含む化合物を合成する際に、重要な合成中間体となり得る基本的誘導体の合成法などを紹介し、トロポロン類の応用的発展の一助となればと考える。

1. トロポロン類:

トロポン(シクロへプタトリエノン)骨格に水酸基を導入したトロポロンには、2-ヒドロキシトロポン(α -トロポロン)、3-ヒドロキシトロポン(β -トロポロン)、4-ヒドロキシトロポン(γ -トロポロン)の3種類の異性体があるが、一般にトロポロンといえば α -トロポロンを指す。 α -トロポロンは最も広く詳細に研究されている新規芳香族化合物の一つであり、本稿においては α -トロポロンのみを対象とする(Scheme 1)¹⁾



Scheme 1 トロポロン(ヒドロキシトロポン)類

トロポロンの構造・性質:トロポロンは pKa 6.7 の弱酸性物質である。またその構造から予想されるように金属イオンと容易反応し、有色の塩を形成する。このことから反応に用いる反応容器、後処理などに用いる水などには、特に注意が必要である。トロポロン化学の初期においては、この有色の塩を形成する性質を応用した鉄イオンの検出・定量などの研究も行われている。

トロポロンはプロトトロピックな高速互変異性体であり、その互変異性は -100 $^{\circ}$ Cにおいてもフリーズしない。結晶状態では2分子が向き合った形で結晶形を形作ることが明らかになっている(Scheme 2) 1d)。

$$M$$
=Metal: Fe Cu etc

Scheme 2 トロポロンの構造と基本的性質

2. トロポロン類の合成:

2-1. シクロヘプタノンを経由する合成法:シクロヘキサノンのジアゾメタンによる環拡大反応により得られるシクロヘプタノンを、二酸化セレンにより酸化して得られるジケトンを、臭素化一脱臭化水素すると、3-ブロモトロポロンが得られる。3-ブロモトロポロンを塩基の存在下加水素分解することによりトロポロンが合成された。この合成方法は、環拡大反応の過程が多量合成にはネックとなるが、トロポロンの直接臭素化では合成困難な3-ブロモトロポロンを経由する点が

特徴で、トロポロン化学の初期には 3-ブロモトロポロンが最も得易いハロゲン置換体であった(Scheme~3) 2)。

Scheme 3 シクロヘプタンジオンを経由する合成法

2-2. トロピリウムカチオンを経由する合成反応:シクロペンタジエン(CPD)とアセチレンとの環化付加反応生成物を熱分解することにより得られる、シクロヘプタトリエン(CHT:トロピリデン)を五塩化リンで処理するとトロピリウムカチオンが生成する。このカチオンは7員環化合物の最も基本的は化学種であり、さまざまな反応が検討されている³⁾。

このトロピリウムカチオンを水酸化ナトリウムで中和して生成するジトロピルエーテルの、酸触媒による不均化反応によりトロポンと CHT が得られる。得られたトロポンとヒドラジンとの反応で生成する 2-アミノトロポンを塩基により加水分解するとトロポロンが得られる 4)。またトロポンは CHTの二酸化セレンによる酸化で得られることも知られている(Scheme 4) 5)。

$$\begin{array}{c|c} H & PCI_5 \\ \hline \\ H & \end{array} \begin{array}{c} NaOH \\ \hline \\ X \end{array} \begin{array}{c} H \\ \hline \\ NH_2 \end{array} \begin{array}{c} H_3O^+ \\ \hline \\ NH_2 \end{array} \begin{array}{c} H \\ \hline \\ OH \\ \hline \\ Tropolone \end{array} \begin{array}{c} H \\ \hline \\ Tropolone \end{array} \begin{array}{c} H \\ \hline \\ Tropolone \end{array}$$

Scheme 4 トロピリウムカチオンを経由する合成法

2-3. CPD からの多量合成法: CPD とジクロロケテンとの付加反応で生成する付加体を、アルカリ加水分解するとトロポロンが生成する。この反応は、段階も短く、最も多量合成に適した方法であり、最近ではもっぱらこの方法によりトロポロンの合成が行われている(Scheme 5) 6)。

Scheme 5 CPD とジクロロケテンとの付加体を経由する合成法

また、この合成法では CPD の段階でアルキル基などを導入することが可能で、後述するようにアルキルトロポロン類の合成にも応用されている。

2-4. 天然物から単離されるトロポロン類:台湾ヒノキまたは青森産ヒバの精油中からイソプロピルトロポロン類が単離される $^{7a)}$ 。これらのトロポロン類はニオイヒバ (*Thuja Plicata D Don*) からも単離され、ツヤプリシンとよばれている $^{7b)}$ 。特に 4-イソプロピルトロポロンは台湾ヒノキから単離されたことから、ヒノキチオールとよばれている(Scheme 6)。

$$\alpha$$
-Thujaplicin β -Thujaplicin γ -Thujaplicin (Hinokitiol)

Scheme 6 天然物から単離される代表的なテルペン系トロポロン類

また青森産ヒバ(Thujopsis dolabrata Sieb. Et Zucc)から β -ドラブリンが単離された。その不飽和側鎖を酸化すること により、4-アセチルトロポロンに誘導する方法が確立され、 この官能基を持つ有用な合成中間体を用いたトロポロン誘導 体の合成研究が広範に行われている(Scheme 7)⁸⁾。

$$\begin{array}{c} \text{O} & \begin{array}{c} \text{1)} \text{ H}_2\text{O}_2 \, / \, \text{HCOOH} \\ \text{2)} \, \text{KIO}_4 \, / \, \text{H}_2\text{SO}_4 \end{array} \\ \text{OH} & \begin{array}{c} \text{O} \\ \text{OH} \end{array} \\ \beta\text{-Dolabrin} & \begin{array}{c} \text{O} \\ \text{O} \\ \text{4-Acetyltropolone} \end{array}$$

Scheme 7 青森産ヒバの精油から単離された β -ドラブリンと、それから誘導された 4-アセチルトロポロン

3. 基本的な誘導体の合成:

3-1. アルキル誘導体の合成: CPD からプロトンを脱離して生成するシクロペンタジエニドは安定な新規芳香族化合物である。このアニオンとハロゲン化アルキルとの求核置換反応により合成されるアルキル CPD に、ジクロロケテンとの反応によるトロポロン合成法を適用し、アルキルトロポロン類を合成することができる(Scheme 8)。

Scheme 8 アルキル CPD を用いるアルキルトロポロン類 の合成法

3-2. 求電子置換反応による種々の置換体の合成:トロポロンは求電子置換反応により種々の置換体を与える。臭素化反応では、3,5,7-トリブロモトロポロンが最も得易い誘導体である。3-ブロモトロポロンの直接合成は困難であるが、炭酸カリウムの存在下でのヨウ素化反応により高収率で生成する3-ヨードトロポロンのハロゲン交換反応で合成できる。そのほかニトロ化、アリールジアゾニウム塩との反応で 5-置換体を与える(Scheme 9)。

Scheme 9 求電子置換反応により単一生成物を与える反応

合成的に有用と考えられる 5-ハロトロポロン類は、ニトロソ化により高収率で生成する 5-ニトロソトロポロンを接触還元して得られる 5-アミノトロポロンの Sandmeyer 反応で、5-クロロー,5-ブロモー,および5-シアノトロポロンが合成できるが、この反応ではトロポロンの性質上、最初に銅塩が生成するので、硫化水素による銅を外す処理が必要となる(Scheme 10)。

Scheme 10 Sandmeyer 反応を応用した 5-置換トロポロン 類の合成

トロポロンの直接の臭素化では合成困難な 3,7-ジブロモー、および 3,5-ジブロモトロポロンは 2-メトキシトロポン (トロポロンメチルエーテル) の臭素化により合成することができる (Scheme 11) 9)。

Scheme 11 2-メトキシトロポンを用いるジブロモトロポロン類の合成

3-3. デヒドロトロポロンを経由する反応: 3-ブロモトロポロンを DMSO 中 CH_3ONa で処理すると、3-メトキシトロポロンと 4-メトキシトロポロンの1:1混合物を高収率で与える。また 5-ブロモトロポロンを同様に処理すると、4-メトキシトロポロンと 5-メトキシトロポロンの1:1混合物が得られる。さらに 4-ブロモトロポロンを同様に処理すると、3-, 4-, おおび 5-メトキシトロポロンの混合物を与える。これらの反応は、DMSO の溶媒効果により CH_3ONa の塩基性が高められ、デヒドロトロポロン中間体が生成したものと考えられている(Scheme 12) 10a)。

Scheme 12 デヒドロトロポロン中間体を経由する反応

実際 これらのブロモトロポロン類を DMSO 中 Diphenylisobenzofuran (DPIBF) の存在下、t-BuOK で処理すると、それぞれ付加体を与えること、およびクロロトロポロン、ヨードトロポロン類を用いた同様の反応の反応速度の比較からこれらの中間体の存在が支持されている。

このデヒドロトロポロン中間体は様々な誘導体の合成面への応用も可能で、例えばゾアントキサンチン類の合成にも応用されている $^{10b)}$ 。

類似のデヒドロトロポン中間体が、トリアゾロトロポン誘導体の四酢酸鉛による酸化で生成することが確認され、合成的に応用されている(Scheme 13)¹¹⁾。

$$O = \begin{pmatrix} N & Pb(0Ac)_4 \\ N & \\ NH_2 \end{pmatrix}$$

$$O = \begin{pmatrix} O & \\ Dehydrotropone \end{pmatrix}$$

$$O = \begin{pmatrix} O & \\ Dehydrotropone \end{pmatrix}$$

Scheme 13 デヒドロトポン中間体の生成

4. トロポロン核上における C-C 結合の形成:

トロポロンはルイス酸が共存すると、安定なカチオン体を 生成するので、ベンゼン系化合物において合成的に極めて重 要な、Friedel-Crafts 反応などの C-C 結合反応を適用するこ とができないため、トロポロン誘導体の応用に大きな障害と なっている。 直接 C-C 結合を形成する反応としては、 Reimer-Tieman 反応によるホルミル化 12 、ヒドロキシメチル 化反応が知られている 13 。ヒドロキシメチル化反応において は、多置換体も同時に生成する。(Scheme 14)

Scheme 14 トロポロンの Reimer-Tieman 反応

5. 活性トロポノイドの合成と合成的応用:

トロポロンの水酸基を、OMe, OTs, CI で置き換えた化合物 (II) は、共鳴構造 (IIa) の寄与があるために求核試薬との反応性が極めて高く、活性トロポノイドと呼ばれている。

5-1. 活性トロポノイドの合成と反応性:トロポロンのジメチル硫酸でメチル化により、2-メトキシトロポンが生成する。また塩基の存在下トシルクロリドで処理すると、2-トシロキシトロポンが定量的収率で得られる。また2-トシロキシトロポンのジオキサン溶液に乾燥塩化水素ガスを通じると、短時間の反応で高収率で2-クロロトロポンを与える。これらの活性トロポノイドの求核試薬との反応性は、2-クロロ体が最も高く、ついで2-トシロキシ体が高い(Scheme 15)。

$$\begin{array}{c} O \\ O \\ O \\ \end{array}$$

$$\begin{array}{c} O \\ Z \\ \end{array}$$

$$\begin{array}{c} O \\ \end{array}$$

$$\begin{array}{c}$$

Scheme 15 活性トロポノイドの生成と反応性

これらの活性トロポノイドと求核試薬との反応は 2-位で 置換する正常置換反応と、7-位に求核試薬の反応する異常置 換反応(cine reaction) がある。2-クロロ体は殆ど異常置換体を与えるのに対し、2-メトキシ体は通常正常置換体を与え、2-トシロキシ体は、試薬・反応条件により正常置換体、異常置換体の双方を与える(Scheme 16)。

Scheme 16 活性トロポノイドと求核試薬との反応性

この異常置換反応を応用してトロポロン環上の置換基の位置を変換することができる。トロポロンの直接のハロゲン化では合成できない 4-クロロ-、4-ブロモトロポロンは、前述の5-置換体から次のように合成される (Scheme 17)。

Scheme 17 活性トロポノイドの異常置換反応を応用した4 - 置換体の合成

5-2. 活性トロポノイドと活性メチレン化合物の反応によるアズレン類の合成:活性トロポノイドの反応の一つとして、活性メチレン化合物と反応させると、2-位にアミノ基または水酸基を有するアズレン誘導体が生成することが見出された。例えば2-トシロキシトロポンとシアノ酢酸エチル(ECA)との反応では、2-アミノ-1,3-ジエトキシカルボニルアズレンを主生成物とする次の4種類のアズレン類が生成する(Scheme 18) 14)。

Scheme 18 2-トシロキシトロポンと ECA との反応

また、マロノニトリル (MLN) との反応では、1,3-ジシアノ-2-アミノアズレンが高収率で生成し $^{15)}$ 、また 2-メトキシトロポンとマロン酸ジエチル (DEM) との反応では、2-ヒドロキシ-1,3-ジェトキシカルボニルアズレンが生成する (Scheme 19) $^{16)}$

Scheme 19 活性トロポノイドと MNL および DEM との反 ks

このアズレン生成反応は、その後の研究により反応機構が解明され、オキサアズレノンまたはオキサアズレノンイミン中間体を経る連続的多段階反応であることが明らかになっている。

これらの反応で生成するアズレン類は、他のアズレン合成 法では合成できない 5 員環上に官能基を持つことが大きな特 徴で、アミノ基、水酸基の反応性の応用、または変換などに より、アズレン誘導体の合成に重要な合成中間体を合成する ことができる。

さらに活性トロポノイドと尿素、チオ尿素、グアニジンなどとの反応により、さまざまなヘテロ原子を含んだアズレン類の合成も行われている ¹⁷⁾。

6. トロポロン類の応用的研究:

4-イソプロピルトロポロン(ヒノキチオール)には強い殺菌作用があることが知られ、院内感染の予防、鮮度保持剤などとして応用されている。また、液晶性を示す化合物の合成と応用研究も広く行われている ¹⁸⁾。

7. まとめ:

以上述べたように、ベンゼン系化合物に適用可能な一般的な反応をトロポロン類に適用する場合、その特異的性質から大きな制限がある。しかし最近の有機合成反応の進歩、特に炭素一炭素結合の形成反応の分野における進歩はめざましいものがあり、それらを用いたトロポロン誘導体の合成も可能になると考えられる。益々得易くなったトロポロン類を用いて、トロポロン化学が今後一層発展することを期待する。

References

- トロポロン系化合物の総説および構造・物性に関する文献
 a) 小竹無二雄 監修 "大有機化学" 13巻、野副鉄男、非ベンゼン系芳香族化合物, 朝倉書店、1960.
 - b) 日本化学会編, 化学総説 No 15, 新しい芳香族系の化学、東京大学出版、1977
 - c) T. Asao, M. Oda, Houben-Weyl "Methoden der organishen Chemie" Band 5, Teil 2c
 - d) H. Shimanouti, Y. Sasada, Tetrahedron Lett., 2421 (1970); K. Ohmori, M. Yasunami, *Proc. Inst. Eng. Nihon Univ.* 45, 127 (2004)
- T. Nozoe, S. Seto, Y. Kitahara, M. Kunori, Y. Nakayama, *Proc. Japan, Acad.*, 26(7), 38(1950)
- W. von E. Doering, L. H. Knox, J. Am. Chem. Soc., 76, 3203, (1954), 79, 352 (1957); T. Asao, M. Oda, Houben-Weyl "Methoden der organishen Chemie" Band 5, Teil 2c

- 4. T. Nozoe, S. Seto, H. Takeda, S. Morosawa, K. Matsumoto, Sci. Rept. Tohoku Univ., Ser 1, 36, 126, (1952)
- G.Sunagawa, N. Soma, H. Nakao, Y. Matsumoto, J. Pharm. Soc., Jpn., 81, 1792 (1961); P. RAdlick. J. Org. Chem., 29, 960 (1964)
- P. R. Story, S. R. Fahrenholtz, J. Am. Chem. Soc., 87, 1623 (1965)
- a) H. Erdtman, J. Gripenburg, Acta Chem. Scand., 2 625 (1948)
 - b) T. Nozoe, S. Katsura, *J. Pharm. Soc. Jpn.*, 64. 181 (1944);
 T. Nozoe, S. Seto, K. Kikuchi, T. Mukai, S. Matsumoto, M. Murase, *Proc. Japan Acad.*, 26 (7), 43 (1950)
- 8. T. Nozoe, K. Takase, M. Ogata, *Chem. & Ind.*, **1957**, 1070.
- T. Nozoe, K. Takase, M. Yasunami, Bull, Chem. Soc. Jpn., 44, 2218 (1971)
- a) T. Yamatani, M. Yasunami, K. Takase, *Tetrahedron Lett.*, 1970, 1725
 b) M. Yasunami, Y. Sasagawa, K. Takase, *Chem. Lett.*, 1980,
 - b) M. Yasunami, Y. Sasagawa, K. Takase, *Chem. Lett.*, 1980 205
- T. Nakazawa, I. Murata, Angew. Chem. Int. Ed., 10, 711 (1975)
- J. W. cook, R. A. Raphael, A. I. Scott, J. Chem. Soc., 1952, 4416
- 13. T. Nozoe, T. Mukai, K. Takase, *Proc. Japan. Acad.*, **27**, 561 (1951)
- T. Nozoe, S. Matsumura, Y. Murase, S. Seto, Chem. & Ind.,
 1955, 1257; T. Nozoe, S. Seto, S. Matsumura, T. Asano,
 Proc. Japan. Acad., 32, 339 (1956); T. Nozoe, S. Seto, K.
 Takase, S. Matsumura, T. Nakazawa, Nippon Kagaku Zasshi,
 86, 346 (1965)
- T. Nozoe, S. Seto, S. Matsumura, Y. Murase, *Proc. Japan Acad.*, 32, 339 (1956)
- T. Nozoe, K. Takase, N. Shimazaki, Bull. Chem. Soc. Jpn., 37, 1644 (1964)
- 17. 文献 1a) p-539
- M. Mori, K. Kubo, M. Takemoto, H. Kitaura, S. Ujiie, *Liquid Crystals*, (2006) 33(5), 521; M. Mori, K. Kubo, M. Takemoto,
 S. Ujiie, *ibid*, (2005) 32(8), 1021



トロポロン誘導体



最近、医薬品原料や EL 材料として注目されている「非ベンゼン系芳香族化合物」です。

また、"3-メチルカルボニル-2*H*-シクロペプタ[*b*]フラン-2-オン"、"5-イソプロピル-3-メチルカルボニル-2*H*-シクロペプタ[*b*]フラン-2-オン"はアズレン類合成の重要な出発化合物のひとつです。

英 名	和名	コード No.	容量	希望納入価格(円)
2-(Tosyloxy)-2,4,6-cycloheptatrien- 1-one	2-(トシルオキシ)-2,4,6- シクロヘプタトリエン-1-オン	204-17111 200-17113	1g 5g	5,000 16,500
規格:有機合成用 別名: 2-Tosyloxytropone、Tropolone Tosyla CAS: 38768-08-0	te、tropolone <i>p</i> -Toluenesulfonate		0-\$- 0 0	CH ₃
	2-クロロ-2.4.6-	($C_{14}H_{12}O_4S = 2$	
2-Chloro-2,4,6-cycloheptatrien-1-one	2-クロロ-2,4,0- シクロヘプタトリエン-1-オン	038-20541	1g	16,000
規格:有機合成用 別名:2-Chlorotropone CAS:3839-48-3			CI	ı
			C ₇ H ₅ CIO = 1	40.57
2-Methoxy-2,4,6-cycloheptatrien-1-one	2-メトキシ-2,4,6- シクロヘプタトリエン-1-オン	137-15711	1g	12,000
規格:有機合成用 別名:2-Methoxytropone CAS:2161-40-2			OCH OCH	d ₃
			$C_8H_8O_2 = 13$	
2-Hydroxy-5-isopropyl-2,4,6-cycloheptatrien-1-one 規格:有機合成用 別名: γ-Thujaplicin、5-Isopropyl-tropolone CAS: 672-76-4	2-ヒドロキシ-5-イソプロピル-2,4,6-シクロヘプタトリエン-1-オン	088-08701 084-08703	1g 5g C ₁₀ H ₁₂ O ₂ = 1	3,500 9,500 OH =O
3-(Methoxycarbonyl)-2 <i>H</i> -cyclohepta[<i>b</i>]furan-2-one	3-(メトキシカルボニル)-2 <i>H-</i> シクロヘプタ[b]フラン-2-オン	134-15721 130-15723	1g 5g	10,000 36,000
規 格:有機合成用 CAS: 50603-71-9		4	$C_{11}H_8O_4 = 20$	=O 2 ₂ CH ₃
5-lsopropyl-3-(methoxycarbonyl)-2 <i>H</i> -cyclohepta[<i>b</i>]furan-2-one	5-イソプロピル-3- (メトキシカルボニル)-2 <i>H-</i> シクロヘプタ[b]フラン-2-オン	095-05571 091-05573	1g 5g	3,500 9,000
規格: 有機合成用 CAS:99909-62-3	シケロペプザ[D] フラン-2-オ フ		C	≻o co₂ch₃
Hinokitiol	ヒノキチオール	085-06251 081-06253	1g	2,800
規格:有機合成用 別名:2-Hydroxy-4-isopropyl-2,4,6-cyclohepta CAS:499-44-5			5g C ₁₀ H ₁₂ O ₂ = 1	8,500 ≔O OH 64.20

取扱い製品紹介

SiliCycle 社 金属スカベンジャーキット SILICYCLE (



シリカゲルに官能基を結合させたもので、主に、遷移金属類の除去にご使用いただけます。

金属触媒は、合成分野で広く用いられておりますが、金属試薬の除去の方法として一般的に用いられている再結晶などでは、 除去が操作上困難な場合があります。特に医薬品製造においては、目的物に影響を与える事なく、効率よく金属を除去する方法 が、強く求められています。

本キットは、SiliCycle 社の幅広い製品群から、特に良く使用される金属スカベンジャー6 種類をまとめたものです。最適な金 属スカベンジャーの選定や反応条件の検討時のスクリーニングにご利用下さい。

【キットに含まれる金属スカベンジャー】

品名 (メーカコード)	構 造	品名 (メーカコード)	構 造
SiliaBond Diamine (R49030B)	Loading: 1.4mmol/g Si NH2	SiliaBond Thiol (R51030B)	Loading: 1.2mmol/g Si SH
SiliaBond TAAcOH (R69030B)	Loading: 0.4mmol/g	SiliaBond Thiourea (R69530B)	Loading: 1.2mmol/g Si N H H
SiliaBond TAAcONa (R69230B)	Loading: 0.4mmol/g ONA ONA ONA ONA ONA	SiliaBond Triamine (R48030B)	Loading: 1.2mmol/g

【各スカベンジャーによるパラジウム除去結果】

(単位:ppm)

スカベンジャー	Pd(AcO) ₂	Pd ₂ (C ₃ H ₅) ₂ Cl ₂	Pd(PPh ₃) ₄	Pd ₂ (dba) ₃
SiliaBond Thiol	0.07	0.04	150	20
SiliaBond Thiourea	0.8	1.3	95	50
SiliaBond TAAcOH	0.06	0.25	1.4	50
SiliaBond TAAcONa	42	_	144	_
SiliaBond Triamine	0.3	1.3	220	280



各パラジウム錯体 THF 溶液(1000ppm)に、4 当量のスカベンジャーを加え、室温で 1時間、もしくは18時間攪拌した際のパラジウム除去結果。

コード No.	メーカコード	品 名	容量	希望納入価格(円)
515-39671			5g×6	50,500
_	K30730B	SiliaBond Metal Scavenger Kit	10g×6	67,800
_	K30730B	(6 種類)	25g×6	125,400
_			100g×6	376,000
_	SPE-K30730B-06U	SiliaPrep Metal Scavenger Kit (SPE カラム: 2g/6mℓ/個)	10 個×6	77,000

可溶化タグ・スペーサー導入用2 官能性 PEG 化試薬

Novabiochem®

【特 長】

- 構造が Fmoc または Boc アミノ酸と類似しており、ペプチド合成的手法で PEG 化できます。
- PEG の分子量分布が狭く、高品質です(図3)。

【用 途】

1. 可溶化タグ

難溶性分子に本製品をカップリングさせれば、溶解性が向上します。例えば、凝集性が高いペプチドに対して本製品をカップリングさせれば 凝集を解消 させることができます (図1)。

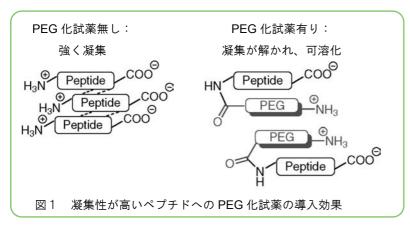


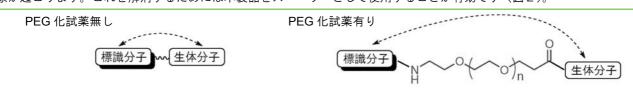
表 1 ペプチド DSFVbetaALM-NH2の可溶化

N末端へのPEG化試薬の導入			
(01-63-0109, n = 11)			
なし	あり		
0	0		
×	0		
×	0		
×	0		
×	(
0	0		
	(01-63-010 なし 〇 × × ×		

◎:易溶 ○:可溶 ×:難溶または不容

2. スペーサー

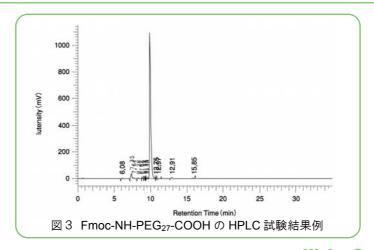
生体分子に標識分子を直接カップリングさせた場合、両分子が相互作用を起こしてしまう場合があります。標識分子=ビオチンを例にとると、相互作用の結果、アビジンへの親和力が低下したり、生体分子の生物学的活性が減少するなどの好ましくない現象が起こります。これを解消するためには本製品をスペーサーとして使用することが有効です(図2)。



生体分子との相互作用で、本来の 活性が得られない

生体分子との距離が大きく、相互作用を 受けにくい

図2 PEG 化試薬の導入による相互作用の防止



取扱い製品紹介・グリーンケミストリー

コード No.	メーカーコード	製 品 名	分子量	包装単位	希望納入価格(円)
_	01-63-0203	Fmoc-NH-PEG-COOH (9 atoms)	385.4	1g	55,000
_	01-63-0198	Fmoc-NH-PEG ₂ -COOH (13 atoms)	443.5	1g	61,000
_	01-63-0199	Fmoc-NH-PEG ₃ -COOH (16 atoms)	487.5	1g	66,000
_	01-63-0200	Fmoc-NH-PEG ₄ -COOH (19 atoms)	531.6	1g	77,000
_	01-63-0204	Fmoc-NH-PEG ₅ -COOH (22 atoms)	575.7	1g	88,000
_	01-63-0109	Fmoc-NH-PEG ₁₁ -COOH (40 atoms)	839.9	1g	162,000
_	01-63-0150	Fmoc-NH-PEG ₂₇ -COOH (88 atoms)	1544.8	1g	184,000
_	01-63-0205	Boc-NH-PEG-COOH · DCHA (9 atoms)	444.6	1g	55,000
_	01-63-0206	Boc-NH-PEG ₃ -COOH (16 atoms)	365.4	1g	66,000
_	01-63-0207	Boc-NH-PEG₅-COOH (22 atoms)	453.5	1g	88,000
	01-63-0151	Boc-NH-PEG ₂₇ -COOH (88 atoms)	1422.7	1g	184,400

参考文献

- 1. B. Baumeister et al. (2003) Biopolymers, 71, 339.
- 2. V. Kumar and J. Aldrich, (2003) Org. Lett., 5, 613.
- 3. A. M. P. Koskinen et al. (1995) *Bioorg. Med. Chem. Lett.*, **5**, 573.
- 4. J. W. Trauger et al. (2001) Biochemistry, 40, 7092.
- 5. K. Ohtsuka et al. (2006) Analyst, 131, 55
- 6. B. Jose et al. (2005) Chem. Biol., 12, 1041

前処理用固相抽出カラム Presep® シリーズ

Presep®-NH₂

有機合成、HPLC, GC 分析などの試料の前処理として 用いられる固相抽出法は、簡便で溶媒使用量も少ないな どの利点からあらゆる方面で多用されております。

プレセップシリーズの形状は、両端密閉型カートリッジタイプの「プレセップ®-Cタイプ」と一端が開放型の「プレセップ®シリンジタイプ」の2種類があります。



Presep® Type M



Presep[®]-C (Short) Presep[®]-C

コード No.	品 名	充填量	規格	容量	希望納入価格(円)
299-48751	Presep®-C NH ₂ (Short)	360mg	試料前処理用	10 個×5	28,000
295-48851	Presep®-C NH ₂	820mg	試料前処理用	10 個×5	30,000
297-47451	Presep®-C C18(ODS) (Short)	470mg	試料前処理用	10 個×5	25,000
292-32251	Presep®-C C18(ODS)	900mg	試料前処理用	10 個×5	29,000
291-48554	Presep [®] C18(ODS) Type M	50	计划部列进用	10 個×2	40,000
297-48551	Fresep Cro(ODS) Type M	5g	5g 試料前処理用 -		照会

NMR 用試薬



■NMR テストチューブ

ご好評頂いております NMR チューブを更に使いやすくしました。キャップデザインを改良し、脱着しやすくしました。一定のところでキャップが止まるように工夫してある為、キャップが入り込み過ぎません。



コード No.	品 名	規 格	容量	希望納入価格(円)
291-47851	NMR Test Tube S-Type*1)		10 本	2,000
297-47853	$(\phi 4.932\sim 4.970$ mm $\times 7$ in.)		100 本	19,000
297-47951	NMR Test Tube HG-Type*2)		10 本	4,000
293-47953	$(\phi 4.951 \sim 4.965$ mm $\times 7$ in.)	NMR 用	100 本	38,000
293-48151	NMR Test Tube S-Type*1)	INIVITY /TI	10 本	2,200
299-48153	$(\phi 4.932\sim 4.970$ mm $\times 8$ in. $)$		100 本	20,900
295-48351	NMR Test Tube HG-Type*2)		10 本	4,400
291-48353	$(\phi 4.951 \sim 4.965$ mm $\times 8$ in.)		100 本	41,800

*1) S-Type:スタンダードタイプ。外径幅公差が広め。*2) HG-Type:ハイグレードタイプ。外径幅公差が狭く高周波領域に強い。

■ポリエチレンキャップ

7インチチューブに付属している赤、8インチチューブに付属している緑のほか、白・青・黄色の全5種類をご用意しました。材質はポリエチレンです。印がつけやすいので、一度に多数の測定を行う際は大変便利です。

チューブと併せて、是非ご活用下さい。







コード No.	品 名	規 格	容 量	希望納入価格(円)
297-49151	NMR テストチューブ用ポリエチレンキャップ(赤)	NMR 用	100 個	2,800
293-49251	NMR テストチューブ用ポリエチレンキャップ(緑)	NMR 用	100 個	2,800
299-49351	NMR テストチューブ用ポリエチレンキャップ(白)	NMR 用	100 個	2,800
290-49401	NMR テストチューブ用ポリエチレンキャップ(青)	NMR 用	100 個	2,800
291-49551	NMR テストチューブ用ポリエチレンキャップ(黄)	NMR 用	100 個	2,800

【関連商品】

NMR 用溶媒

コード No.	品 名	規 格	容量	希望納入価格(円)
013-18421	Acetone-d ₆ , 100%(min.99.95%)	NMR 用	0.8m ℓ ×10	20,000
012-11931			10g	6,800
017-19862	Acetone-d ₆ , 99.9%	NMR 用	25g	8,500
018-11933			50g	16,000
019-17161		NMR 用	10g	6,500
014-18412	Acetone-d ₆ , 99,9% containing 0.05v/v% TMS		25g	11,000
015-17163			50g	21,000
010-18431	Acetonitrile-d ₃ , 100%(min.99.95%)	NMR 用	0.8mℓ×10	21,000
016-17311	Acetonitrile-d ₃ , 99.8%	NMR 用	10g	11,000
012-17313	Acetoriume-u ₃ , 55.070	INIVIX H	50g	34,000

コード No.	品 名	規格	容量	希望納入価格(円)
028-14251	Benzene-d ₆ , 100%(min.99.95%)	NMR 用	0.8m ℓ ×10	20,000
025-14261		E	50g	23,000
021-15081	Benzene-d ₆ , 99.6%	NMR 用	100g	28,000
036-18011			50g	3,600
032-18013	Chloroform-d, 99.8%	NMR 用	100g	5,700
035-19201			100g×10	35,000
039-19221			50g	3,200
035-19223	Chloroform-d, 99.8%, containing 1v/v% TMS	NMR 用	100g	5,000
032-19211			50g	3,200
039-18001	Chloroform-d, 99.8%, containing 0.05v/v% TMS	NMR 用	100g	5,700
038-19213	Chioroform-d, 99.8%, containing 0.05V/V% TMS NMR 用		100g×10	35,000
034-17211	Chloroform-d, 99.7%, containing 0.05v/v% TMS	NMR 用	100 g	5,600
030-16691	-		50g	3,100
036-16693	Chloroform-d, 99.7%, containing TMS	NMR 用	100g	5,600
040-26423	35% Deuterium Chloride Soln. in D ₂ O, 99.5%	NMR 用	50g	13,000
043-26413	20% Deuterium Chloride Soln. in D ₂ O, 99.5%	NMR 用	50g	13,000
046-29041	Deuterium Oxide, 100%(min. 99.95%)	NMR 用	0.6mℓ×10	5,000
048-26843	` '		10g	3,300
040-26842			25g	5,800
042-26841	Deuterium Oxide, 99.9%	NMR 用	100g	16,500
046-26844			1kg	照会
040-18831			10g	4,500
048-18832	Deuterium Oxide, min. 99.75%	NMR 用	25g	6,000
044-18834			1kg	照会
043-29051		NMR 用	1g×10	17,800
048-27781	Dichloromethane-d ₂ , 99.9%		5g	15,000
046-27782			25g	42,000
046-22961	D: 11	NIMD III	1mℓ	4,400
042-22963	Dichloromethane-d ₂ , 99.75%	NMR 用	10mℓ	17,500
045-27791	Dimethyl Sulfoxide-d ₆ , 100%(min.99.95%)	NMR 用	0.8m ℓ ×10	19,000
046-29063			0.6mℓ×10	3,700
040-29061	Dimethyl Sulfoxide-d ₆ , 99.9%	NMR 用	10g	3,800
048-29062			25g	7,500
049-29092	Dimethyl Sulfoxide-d ₆ , 99.9%, containing 1v/v% TMS	NMR 用	25g	7,500
048-29084			10g	3,200
042-29082	Dimethyl Sulfoxide-d ₆ , 99.9%, containing 0.05v/v% TMS	NMR 用	25g	7,500
044-29086			50g	13,500
047-29071	Dimethyl Sulfoxide-d ₆ , 99.9%(septam)	NMR 用	10g	3,800
135-14531			0.6mℓ×10	10,800
130-10402	Methopol d. 00.99/	NIMD E	25mℓ	23,000
131-14533	Methanol-d₄, 99.8%	NMR 用	10g	10,500
134-13641			50g	48,000
135-12951	Methanol-d₄, 99.8% containing 0.05v/v% TMS	NMR 用	10g	12,000
202-15071	Tetrahydrofuran-d ₈ , 100%(min.99.95%)	NMR 用	0.8mℓ×10	72,000
206-16071	Tetrahydrofuran-d ₈ , 99.5%	NMR 用	10g	40,000
200-14271	Talvana d. 00 69/	NIMD III	10g	14,500
201-16082	Toluene-d ₈ , 99.6%	NMR 用	25g	20,000
201-10002			209	20,000

試薬管理はなぜ必要か(3)

和光純薬工業㈱ 試薬情報管理課 吉村 雅幸

今回は法規制による薬品管理の必要性についての続きで、消防法を取り上げます。

消防法

化学薬品による火災や爆発による災害を予防、軽減するために、消防法では化学薬品を危険物、指定可燃物、届出を要する物質に分け、 その取扱量に応じて規制を行なっている。

危険物とは表1に決められた性質を有する物質(法で指定されているものと事業者が自ら試験しなければならないものとがある)で、第1類から第6類までに分けられており、おのおの指定数量が決められている。

指定数量以上取り扱う場合は市町村長へ許可を得ることが必要で、 構造設備の基準や、取扱いの技術上の基準を遵守すること、危険物取 扱者による立会いなどが要求される。また指定数量の 1/5 以上から指 定数量未満までは消防署長へ少量危険物取扱所の届出が必要である。

指定可燃物と届け出を要する物質は可燃性固体類、可燃性液体類など決められた性状を有するものや消防活動を阻害する物質(毒劇物が多い)が指定されており、決められた数量以上取り扱う場合は消防署への届出が必要である。

以上のように危険物や指定可燃物、届出物質は取り扱い数量の管理が必要であり、危険物の場合、試薬といえども一品目の数量が少ない場合でもおのおのの指定数量に対する比率を合計した値が1以上の場合は指定数量以上取り扱っていると見なされるので気をつけなければならない。

薬品管理⇒取り扱い薬品が危険物であるかどうか、危険物であれば何 類に該当するのか。またその指定数量はいくらで現在の取 り扱い数量はそれを越えていないか。(Total 比率は1以上 でないか)

引火性液体: 引火点が常温より低い物質は特殊引火物、第一石油類、 第二石油類、アルコール類に分類されるもので、点火源があればすぐ に引火するので注意しなければならない。物が燃えるには燃えるもの (ここでは引火性液体)と点火源と燃やすもの(酸素、空気、酸化剤)の三つが必要で、このうちの一つでも欠ければ燃焼は起きない。そこで燃焼を防ぐためには点火源と燃やすものの管理が必要になる。マッチライター類の持ち込み禁止や種火のある機器のそばで引火性液体を使用しないこと。静電気の発生を防止するために静電防止作業衣や静電靴、アースの設置、流動体は静電気を起こさないように流速をゆっくりしたり、静電気を蓄めない材質の容器を使用することなどが上げられる。

燃やすものの管理としては、空気を絶つこと、不活性ガスで被うこと、酸化剤から離して保管すること、過酸化物を発生させない(エーテル、THF、ジオキサンなどエーテル結合を持っている化合物は過酸化物を生成しやすい)ことなどが上げられる。

また、引火性液体はその蒸気が空気と混ざって爆発をおこすことがある。爆発限界といわれるもので物質毎に決まった値がある。上限濃度と下限濃度の範囲内にあれば点火源があれば爆発する。満杯入っているドラム缶より使用後空になっているドラム缶のほうが危険であるといわれるのはこのためである。

混食発火: 地震や取り扱い中誤って落としたりして化学薬品が混ざり合い発火する場合がある。酸化剤+還元剤、酸化剤+可燃性物質+強酸、金属粉+酸素(酸化剤)などで、薬品の保管時に隣同士に置かないよう配慮する。

消防法では運搬の基準として混載してはならないものを指定している(指定数量の 1/10 以上に限る。表2参照)ので保管時に参考にすると良い。

混食により有毒ガスが発生する場合があるので次の組み合わせにならないよう保管場所を離すこと。: シアン化合物と酸で青酸ガス、次 亜塩素酸塩類と酸で塩素ガス。

次回へつづく

表 1 消防法 危険物

類別	危険性	性質	指定されている品目	表示	指定数量
第 1 類	酸化性固体	酸素を出して可燃物と反応し、火 災、爆発を起こす固体	過塩素酸塩類過酸化ナトリ ウムなど	火気・衝撃注意、 可燃物接触注意、 禁水	第一種 50kg 第二種 300kg 第三種 1000kg
第2類	可燃性固体	低温で引火、着火し易い固体	赤リン、金属粉など	火気厳禁、 火気注意、禁水	第一種 100kg 第二種 500kg
第3類	自然発火性物質 及び禁水性物質	空気又は水と反応して発火する物 質	水素化リチウム、金属ナトリ ウムなど	空気接触注意 · 禁水	第一種 10kg 第二種 50kg 第三種 300kg
第 4 類	引火性液体 引火点 250℃以 上は非該当	引火しやすい液体 特殊引火物 引火点-20℃以下 発火点 100℃以下 発火点 100℃以下) 第一石油類 引火点 21℃未満 アルコール類 60%以上 第二石油類 引火点 21℃以上 70℃未満 第三石油類 引火点 70℃以上 200℃未満 第四石油類 引火点 200℃以上 250℃未満 動植物油類	ジェチルエーテル 二硫化炭素 アセトン、ガソリン メタノール、エタノール 灯油、軽油 重油、クレオソート油 ギア―油、シリンダー油	火気厳禁 水溶性 (水溶性のもの)	*水溶性は倍 特引 50ℓ 第一石 *200ℓ アルコール 400ℓ 第二石 *1000ℓ 第三石 *2000ℓ 第四石 6000ℓ 動植油 10000ℓ
第5類	自己反応性物質	熱や衝撃で着火、燃焼、爆発を起 こす物質	硝酸エステルなど	火気厳禁、衝撃注意	第一種 10kg 第二種 100kg
第6類	酸化性液体	可燃物と反応してその燃焼を促進 する液体	過塩素酸、過酸化水素など	可燃物接触注意	300kg

表 2 消防法危険物混載禁止物質

類別	第一類	第二類	第三類	第四類	第五類	第六類
第一類(酸化性固体)		×	×	×	×	0
第二類(可燃性固体)	×		×	0	0	×
第三類(自然発火性物質及び禁水性物質)	×	×		0	×	×
第四類(引火性液体)	×	0	0		0	×
第五類(自己反応性物質)	×	0	×	0		×
第六類(酸化性液体)	0	×	×	×	×	

〇混載可能 ×混載禁止 指定数量の 1/10 を越えるものに適用

取扱い製品紹介

簡単操作の化学物質安全管理支援システム Chemical Design ESSENTIAL ■NFOGRAM



- 実験をしようとして、"試薬がない!!"
- 薬品を注文した後で、"在庫がたくさんあったのに・・・"
- そろそろ薬品管理システムを導入したいけど機能が多すぎる上、コストがかかる!!

【CHEMICAL DESIGN For Laboratory ESSENTIAL】を使ってみませんか?

ご好調いただいております【CHEMICAL DESIGN For Laboratory】をベースに試薬管理において基本的な部分を簡単な操作で 行えるようにした商品です。

ただ単に、「試薬がいま何本あってどこに何があるかが知りたい」そんな皆様に、【ESSENTIAL】をご提案させていただきます。

①試薬登録、②在庫検索、③保管場所登録機能、④廃棄処理、⑤保管場所変更、⑥履歴機能、⑦バックアップ機能、⑧発注点管理機能 の8つの機能をご利用いただけます。

機能を限定することでコスト面でも安価になりました。

また、どの機能もお客様が利用しやすいように操作性を重視した作りとなっています。

例えば、「試薬登録」は、在庫の本数管理がメインですので試薬に貼付してある製品バーコードとあらかじめ登録しておいた保管場所のバーコードをバーコードリーダで読み取っていただくだけです。試薬瓶ごとの管理用バーコードを印刷及び貼付する作業は必要ありません。(※一部の薬品については別途手入力が必要な場合もあります。)





【ESSENTIAL】では、このように単純な操作でわかりやすく試薬の管理が可能です。

【機能概要】

- ◎試薬登録機能……購入した試薬をシステムに登録します。
- ◎保管場所登録機能…管理したい保管場所を登録します。
- ◎在庫検索機能……試薬の在庫を検索します。
- ◎廃棄処理機能……使用終了した試薬をシステムより削除します。
- ◎保管場所変更機能…試薬の保管場所を移動します。
- ◎履歴機能·····・使用の履歴を CSV で書き出します。
 - トレーサビリティーに有用です。
- ◎発注点管理機能……発注点を設定できます。
- ◎バックアップ機能

【動作環境】

- ◎インテルペンティアム 4 2GHz 以上または同等以上のプロセッサ
- ◎Microsoft WindowsXP 日本語版
- ◎512MB 以上のメモリ搭載
- ◎500MB 以上のハードディスク容量



※予告なく本仕様及び推奨環境を変更する場合がございます。 詳しくは代理店へ問い合わせください。

コード No.	品 名	容量	希望納入価格(円)
306-31681	(CD06-ES001) CHEMICAL DESIGN For Laboratory ESSENTIAL		650,000

※バーコードリーダは別売です。

※ 予告なく本仕様及び推奨環境を変更する場合がございます。詳しくは代理店へお問い合わせください。

"分子モデリング Start Up セミナー"開催記『分子モデリング導入のコツ!』



- ・コンピュータを利用して、業務を効率化したい...
- ・コンピュータをもっと活用して、ワンランク上の研究成果につなげたい...

1

•「計算化学」は、「実験化学」を"相補的"に サポートできるレベルに達してきています!!

去る3月6~7日、当社東京支店におきまして、実験化学者の皆様が化学教育や研究に「分子モデリング」を活用するメリットや導入時のポイントなどのご紹介セミナーを開催いたしました。

1. 特別セミナー 講師: 東邦大学 理学部 化学科 教授 幅田 揚一 氏

☆「化学教育へ、"分子モデリング"をスムーズに導入するコツ!

使いやすいモデリングソフトと高性能パソコンの普及によって、コンピュータによる分子モデリングは化学の研究のみならず大学や高等学校の化学教育においても重要な役割を担うようになってきました。

海外で発行された多くの有機化学の教科書には、すでに分子モデリングデータやアニメーションを含む CD-ROM が添付されており、日本でも訳本に CD-ROM が添付されるようになりました。また最近の e-ラーニングの普及に伴い、いくつかの出版社のホームページには学生が自習できるシステムが作られています。

これらのマルチメディア教材は学生にとっても教える側に とっても魅力的なものですが、授業に導入することを考えた 場合その多彩な内容ゆえに使い方に困ることが少なくありま せん。

東邦大学理学部化学科では、1997年より授業の中で分子モデリングソフトや分子モデリングデータによって作成したアニメーションを利用し始め、段階的に授業へ分子モデリングを導入してきました。

具体的には、①低学年の学生に対しては分子モデリングを利用することによって分子を三次元的に考えさせる習慣をつけさせ(理解)、②有機化学の基礎ができた学生に対しては分子モデリングデータを使って反応性や反応機構を予測するトレーニングを行い(考察)、③さらに学部高学年の学生あるいは大学院修士課程の学生に対しては分子モデリングを NMR などの分析機器のように研究ツールとして利用できる(使う)ように教育することを試みてきました。

本セミナーでは"大学の化学教育へ分子モデリングを導入する際のコツ"を、演者が行ってきた経験をもとに紹介しました。





左からクロロホルム, ジクロロメタン, クロロメタンの静 電ポテンシャルマップ。

☆「研究で、"分子モデリング"を初めて導入するコツ」

最近の分子モデリングソフトは"画面上で分子を組み立ててマウスをクリックする"だけで簡単にかつ高速で高レベルの計算を行ってくれます。以前のように座標を入力することも必要ないし結合情報も入力しなくてよいのです。

しかしながら分子モデリングを使ったことのない人にとっては、分子モデリングデータを自分の研究で使用するためには様々なバリアーがあると思われます。

たとえば、(a) 自分が必要な計算にはどの程度の計算手法を使えばよいのか、(b) 計算によって得られた結果は果たして信頼できるものなのか、(c) 分子軌道や電子密度等値面、静電ポテンシャルなどといった様々な性質を表示することができるがそれらをどのような場面で使えばよいのか、などです。

これまで計算化学に関する書籍は数多く出版されていますが、実際の研究への応用例をまとめたものはそれほど多くはありません。

本セミナーでは"分子モデリングを初めて扱う人"が研究で計算化学を行うときに最低限知っておかねばならない事項

を説明するとともに、計算化学がまったくの素人である演者 が分子モデリングデータを研究に使った事例を紹介しました。

- 1. 静電ポテンシャル等値面
 - ・配位しやすいヘテロ原子を予測する
 - · NMR の磁気異方性効果の方向を予測する
- 2. 静電ポテンシャルマップ
 - ·各種置換基がついたベンゼン環上の電子密度を比較する
- 3. エネルギー
 - ・ジアステレオマー間のエネルギーを見積もる
- 4. HOMO-LUMO
 - ・銀イオンとベンゼン環の間の Ag+―π相互作用を見る
- 5. 配座解析
 - ・安定な配座とX線結晶構造解析
- 6. NBO 解析
 - · Ag+—π相互作用の性質を考察



スライド集はこちら

http://www.wako-chem.co.jp/siyaku/info/soft/article/sp2.htm



[講師紹介]

東邦大学 理学部 化学科 教授 幅田 揚一 氏

1987 年 東邦大学大学院理学研究科博士後期課程修了。理学博士。ライオン株式会社勤務を経て 1989 年 東邦大学理学 部化学科助手。1995 年から 1997 年まで Brigham Young 大学 (BYU) 化学・生化学科博士研究員。東邦大学理学部化学 科講師、助教授を経て、2005 年より現職。専門分野は、構造有機化学、超分子化学。

2. 体験ワークショップハンズオン



分子モデリングを初めて使用される方を対象とし、一人一台のパソコンを用いて「Spartan の主な機能」をご体験いただきました。

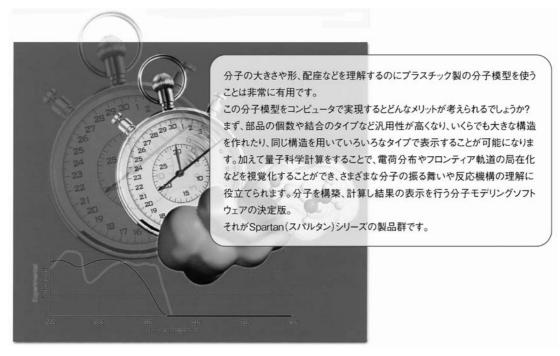
さらに、分子モデリングの理論的背景にも触れそのそれぞれの手法の 組み合わせた使い方についても解説いたしました。



[講師紹介]

米国法人 Wavefunction, Inc. 日本支店長 内田 典孝 氏

分子モデリングソフトウェア Spartan【スパルタン】For Windows



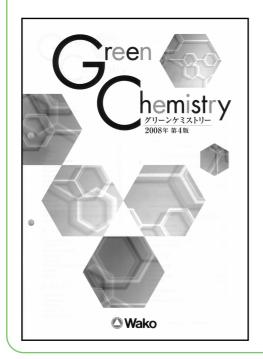
【動作環境システム】

- ●Intel Pentium II以上または AMD Athron
- ●メモリー実装: 512MB 以上
- ●モニター解像度 1024×768 以上
- Windows XP, Vista
- ●空ディスク容量: **10GB**
- Microsoft Internet Explorer
- ●CD/DVD* ROM ドライブ

コード No.	メーカーコード	品 名	容量	希望納入価格(円)
305-32011	S6F-CW	Spartan '06 Full Edition for Corporate(Windows) スパルタン '06 フル、企業向け(ウィンドウズ版)	1セット	600,000
302-32021	S6E-CW	Spartan '06 Essential Edition for Corporate(Windows) スパルタン '06 エッセンシャル、企業向け(ウィンドウズ版)	1セット	350,000
309-32031	S6F-GW	Spartan '06 Full Edition for Government(Windows) スパルタン '06 フル、政府系機関向け(ウィンドウズ版)	1セット	440,000
306-32041	S6E-GW	Spartan '06 Essential Edition for Government(Windows) スパルタン '06 エッセンシャル、政府系機関向け(ウィンドウズ版)	1セット	280,000
303-32051	S6F-EW	Spartan '06 Full Edition for Education(Windows) スパルタン '06 フル、教育機関向け(ウィンドウズ版)	1セット	228,000
300-32061	S6F-FW	Spartan '06 Essential Edition for Education(Windows) スパルタン '06 エッセンシャル、教育機関向け(ウィンドウズ版)	1セット	138,000
307-32071	SSA-PW01	Spartan Student Edition, Single Pack Access Code(Windows) スパルタン、学生向け、1ライセンス(ウィンドウズ版)	1セット	12,000
304-32081	SSU-DW01	Spartan Student Edition, Single Pack USB Dongle Set(Windows) スパルタン、学生向け、1ライセンス(ウィンドウズ版)	1セット	40,000
301-32091	SSU-DW10	Spartan Student Edition, 10 License Pack(Windows) スパルタン、学生向け、10 ライセンスパック(ウィンドウズ版)	1セット	320,000
304-32101	SSU-DW30	Spartan Student Edition, 30 License Pack(Windows) スパルタン、学生向け、30 ライセンスパック(ウィンドウズ版)	1セット	756,000
301-32111	SSU-DW50	Spartan Student Edition, 50 License Pack(Windows) スパルタン、学生向け、50 ライセンスパック(ウィンドウズ版)	1セット	1,100,000

●希望納入価格には消費税が含まれておりません。

グリーンケミストリー2008年(第4版)発行!!



当社では、「グリーンケミストリー」の重要性にいち早く注目し、その推進 に有用な試薬の開発を進めてまいりました。

本カタログには、当社で商品化した各種固定化触媒をはじめとした「グリ ーンケミストリー関連製品」を掲載しております。

Index も充実させました。従来のアルファベット順に加え、金属別 Index も掲載しております。

[カタログ構成]

- 1. 固定化触媒
- 2. 金属触媒
- 3. 配位子
- 4. 有機分子触媒
- 5. 「非有機(水系)溶媒反応」研究用試薬
- 6. 生体触媒
- 7. フルオラス反応研究用試薬
- 8. その他

本文に収載しております試薬は試験・研究の目的にのみ使用されるもので、「医療品」、「食品」、「家庭用品」などとして使用できません。 価格はすべて希望納入価格であり、消費税等が含まれておりません。

本社 ®540-8605 大阪市中央区道修町三丁目 1 番 2 号 ☎ (06) 6203-1788 (試薬学術部) 支店 ®103-0023 東京都中央区日本橋本町四丁目5番13号 ☎ (03) 3270-8243 (試薬学術部)

- ●中国営業所 ☎(082)285-6381(代)
- ●九州営業所 ☎(092) 622-1005(代) ●横浜営業所 ☎(045) 476-2061(代) ●東海営業所 ☎(052) 772-0788(代) ●筑波営業所 ☎(029) 858-2278(代) ●東北営業所 ☎(022) 222-3072(代) ●北海道営業所 ☎(011) 271-0285(代)

フリーダイヤル 0120-052-099 フリーファックス 0120-052-806

■ご意見・お問い合せ、本誌のDM新規登録・変更等については、 E-mail ; org@wako-chem.co.jp &c

Wako Chemicals USA, Inc. http://www.wakousa.com

· Head Office (Richmond, VA) European Office

Tel: +1-804-714-1920 Los Angeles Sales Office

Tel: +1-949-679-1700 Boston Sales Office Tel: +1-617-354-6772 Wako Chemicals GmbH http://www.wako-chemicals.de Tel: +49-2131-311-0

URL: http://www.wako-chem.co.jp

08607学01H