

# Organic Square

NO. 29 2009  
SEPTEMBER

オーガニックスクエア

## 特別講座

超高活性アルコール酸化触媒 AZADO の開発

東北大学大学院薬学研究科 岩淵 好治 ..... 2

## グリーンケミストリー

2-Azaadamantane- <i>N</i> -oxyl (AZADO) .....	4
1-Methyl-2-azaadamantane- <i>N</i> -oxyl (1-Me-AZADO) .....	4
( <i>R</i> )-Homodinuclear Ni <sub>2</sub> -Schiff Base Catalyst .....	5
( <i>S</i> )-Homodinuclear Ni <sub>2</sub> -Schiff Base Catalyst .....	5
SiliaCat S-Pd、SiliaCat DPP-Pd .....	6
ふっ化カリウム (スプレードライ品) Potassium fluoride (spray dried) .....	7
Chiralscreen® .....	8
2-クロロ-1-(3,3,4,4,5,5,6,6,7,7,8,8,9,9,10,10,11,11,12,12,12-ヘンイコサフルオロドデシル) ピリジニウムトリフルオロメタンスルホン酸塩 .....	20

## 取扱い製品紹介

ケミカルタイプダイヤフラム式真空ポンプ .....	13
有機 EL 材料製品紹介 .....	14

## その他

有機合成用脱水溶媒シリーズ .....	10
ワコーケミカル新製品紹介 .....	11

## お知らせ

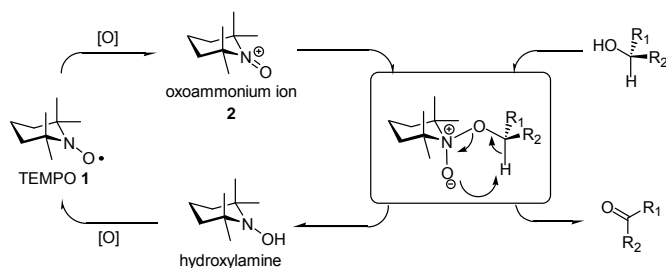
リアルタイム化学構造検索システム ITMolgres (2) リアルタイム化学構造検索 株式会社 理論創薬研究所 主任研究員 高橋 哲、代表取締役 吉森 篤史 .....	16
化学構造式検索機能 Q&A .....	18

## 超高活性アルコール酸化触媒 AZADO の開発

東北大学大学院薬学研究科 岩淵 好治

アルコールの酸化反応は、有機合成上の戦略拠点となるカルボニル化合物への直截的な到達を可能とする基本反応のひとつであり、例えば、6 価クロムを用いる Jones 酸化や PDC 酸化、DMSO を活性化させて供する Swern 酸化、Parikh-Doering 酸化、超原子価ヨウ素試薬による Dess-Martin 酸化、IBX 酸化などが実験室レベルで多用されている。しかし、医薬品等のファインケミカルの工業的製造においては、これら酸化剤の毒性と危険性の面から、酸化反応は極力回避すべきと考えられてきた<sup>1)</sup>。近年、環境への負荷の軽減に対する切迫した社会的要請を背景として、低毒性バルク酸化剤の活用を可能とする触媒的酸化法が注目を集め、精力的な研究が展開される中で、毒性が懸念される重金属に依存しない安定有機ニトロキシルラジカル TEMPO (1) を触媒とする酸化プロセスの優位性が見出され、医薬プロセス合成にも適用可能な数少ない手法として合成化学における地位を築き始めている (Figure 1)<sup>1,2)</sup>。

Figure 1. The proposed mechanism of TEMPO oxidation.



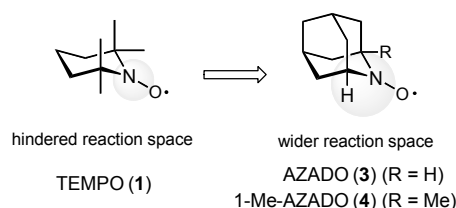
しかし、TEMPO 酸化は優れた 1 級アルコール選択的酸化手法として知られる一方で、2 級アルコールの酸化にはその適用性と効率性に問題を残していた。

我々は上述の課題を解決するべく TEMPO (1) の抜本的な構造改変を基本戦略として、有機ニトロキシルラジカル型アルコール酸化触媒の機能性開発に取り組み、これまで TEMPO (1) では酸化困難な立体的に嵩高いアルコールの触媒的酸化を実現する有機ニトロキシルラジカル 1-Me-AZADO (4)、AZADO (3)、ABNO (6) を見出してきた。本稿では、その開発のコンセプトとそれらのアルコール酸化触媒としての特性を解説する。

## 1. 高活性アルコール酸化触媒 AZADO の発見

TEMPO (1) はその化学的安定性を保障する構造因子である 4 つの Me 基が触媒活性中心近傍に立体障害をもたらし、このため嵩高い 2 級アルコールの酸化を困難としている。また、酸化触媒としての活性本体である oxoammonium ion (Figure 1, 2 参照) の反応系中での不安定性も指摘されている。これらの問題の解決を期して、我々は堅牢なアダマンタン骨格上に触媒活性部である *N*-オキシル基を組み込んだ 2-azaadamantane *N*-oxyl [AZADO (3)] の可能性に着目した。一見アザアダマンタン骨格は嵩高く、分子量も比較的大きいといった印象を受けるかも知れないが、TEMPO が分子量 156.25 であるのに対し、AZADO は 152.21 で、同程度である。3 は Bredt 則により *N*-オキシル基の  $\alpha$ -炭素に結合する水素の安定性が保障されている。それゆえ 3 は 1 に比べ広い反応場を獲得し、嵩高いアルコールの酸化も効率的に進行すると期待した (Figure 2)。

Figure 2. Design concept.



AZADO (3) は、Dupeyre らの文献<sup>3)</sup>に記載されていたが、酸化反応への応用例は知られていなかった。合成の簡便性から、まずはアザアダマンタンの 1 位にメチル基を残す 1-Me-AZADO (4) の合成を行い、このもののアルコール酸化反応への適用性を検討した (Table 1)。その結果、1-Me-AZADO (4) は 1 級アルコールのみならず、1 では酸化困難な立体的に嵩高い 2 級アルコールをも瞬時に酸化して高収率で生成物を与えることが明らかとなった。4 の触媒効率、我々の予想を遙かに上回るものであり、その TON は最大 27,000 にも達し、有機分子触媒の中でも卓越した触媒効率を発揮するものであった<sup>4,5)</sup> (1 の TON は ~2,300)。

Table 1. 1-Me-AZADO-catalyzed oxidation of secondary alcohols.

alcohol		Yield (%)		alcohol		Yield (%)		alcohol		Yield (%)	
		1-Me-AZADO	TEMPO			1-Me-AZADO	TEMPO			1-Me-AZADO	TEMPO
		96	96			94	0			99	16
		94	83			88	0			100	8
		93	15			95	5			100 <sup>a</sup>	12 <sup>a</sup>

<sup>a</sup> Ph(OAc)<sub>2</sub> (1.1eq) was used instead of NaOCl. The reaction were carried out in CH<sub>2</sub>Cl<sub>2</sub>, 14 h, rt.



#### 4. AZADO 酸化の特徴とポイント

AZADO 酸化の特徴として、以下の 3 点を挙げるができる。

##### (1) 超高活性

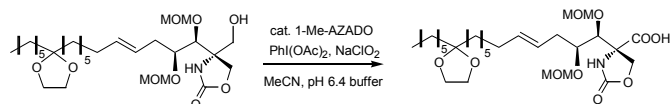
TEMPO の 20 倍以上の活性（触媒使用量 0.01 mol% でも反応が良好に進行する）。

##### (2) 立体障害の大きな 2 級アルコールの酸化が可能。

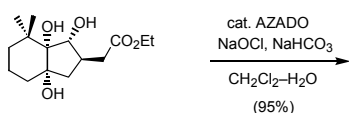
##### (3) 反応速度が速いため、TEMPO に比べ副反応生成物が少ない。

従来技術である TEMPO 酸化と比較した場合、基質適用性の拡大のみならず、触媒量が大幅に低減できるため、コストパフォーマンスの点でも優位性が期待される。なお、1 級および 2 級 OH 基を同一分子内に有するアルコール類の酸化では、NaOCl を 2 当量以上用いると、両 OH 基が対応するカルボニル化合物に酸化されるが、当量制限下にゆっくりと NaOCl を加えると 1 級水酸基を優先して酸化することができる。

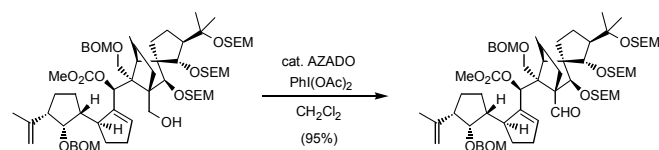
以下に示すように、AZADO 類は複雑な天然物合成の極めて重要な局面で活用され始めている。



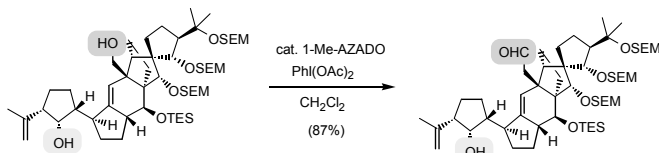
Inai M., Goto T., Furuta T., Kan T.: *Tetrahedron: Asymmetry*, **19**, 2271 (2008).



Shoji M., Suzuki E., Ueda M.: *J. Org. Chem.*, **74**, 3966 (2009).



Nicolaou K. C., Zhang H., Ortiz A.: *Angew. Chem. Int. Ed.*, **48**, 5642 (2009).



Nicolaou K. C., Ortiz A., Zhang H.: *Angew. Chem. Int. Ed.*, **48**, 5648 (2009).

おわりに

AZADO を用いる酸化反応は、超高活性かつ、広範囲な基質適用性を示す。また、本稿では割愛したが、酸化剤として酸素を用いる酸化反応も可能である<sup>9,10</sup>。AZADO 酸化が真に有用な工業的酸化反応として確立され、ファインケミカルや医薬品製造プロセスの合成設計に自由度をもたらすことを期待する。

#### 謝辞

本稿に記載された内容の一部は日産化学工業株式会社物質科学研究所 合成研究部との共同研究体制のもと独立行政法人 科学技術振興機構 (JST) における委託事業「平成 19 年度 産学共同シーズイノベーション化事業 顕在化ステージ」の委託を受けて実施されたものである。

#### 参考文献

- Dugger R. W., Ragan J. A., Ripin D. H. B.: *Org. Process Res. Dev.*, **9**, 253 (2005).
- de Nooy A. E. J., Besemer A. C., van Bekkum H.: *Synthesis*, 1153 (1996).
- Dupeyre R.-M., Rassat A.: *Tetrahedron Lett.*, 1839 (1975).
- Shibuya M., Tomizawa M., Suzuki I., Iwabuchi Y.: *J. Am. Chem. Soc.*, **128**, 8412 (2006).
- Iwabuchi Y.: *J. Syn Org. Chem., Jpn.*, **66**, 1076 (2008).
- (a) Zhao M., Li J., Mano E., Song Z. J., Tschaen D. M., Grabowski E. J. J., Reider P.: *J. Org. Chem.*, **64**, 2564 (1999).  
(b) Zhao M., Li J., Mano E., Song Z. J., Tschaen D. M.: *Org. Synth.*, **81**, 195 (2004).
- Shibuya M., Sato T., Tomizawa M., Iwabuchi Y.: *Chem. Commun.*, 1739 (2009).
- Shibuya M., Tomizawa M., Sasano Y., Iwabuchi Y.: *J. Org. Chem.*, **74**, 4619 (2009).
- Wang X., Liu R., Jin Y., Liang X.: *Chem. Eur. J.*, **14**, 2679 (2008).
- Osada Y., Shibuya M., Tomizawa M., Sasano Y., Iwabuchi Y.: *Abstracts of ISPC 08 The First International Symposium on Process Chemistry*, 358 (2008).

## グリーンケミストリー

高活性ニトロキシラジカル型アルコール酸化触媒

**2-Azaadamantane-N-oxyl (AZADO)**

**1-Methyl-2-azaadamantane-N-oxyl (1-Me-AZADO)**

Wako

アルコール類の酸化反応は、医薬、農薬、電子材料など幅広い分野の有機化合物の合成に利用されています。本品は堅牢なアダマンタン骨格を持つニトロキシラジカル型の超高活性なアルコール酸化触媒です。

コード No.	品名	略名	規格	容量	希望納入価格(円)
014-22001	2-Azaadamantane-N-oxyl	AZADO	有機合成用	100mg	8,000
010-22003				500mg	24,000
018-22004				1g	36,000
132-15261	1-Methyl-2-azaadamantane-N-oxyl	1-Me-AZADO	有機合成用	100mg	8,500
138-15263				500mg	29,000

(K.IW.)



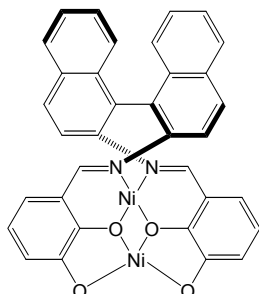
2 中心協奏機能不斉触媒

**(R)-Homodinuclear Ni<sub>2</sub>-Schiff Base Catalyst**  
**(S)-Homodinuclear Ni<sub>2</sub>-Schiff Base Catalyst**

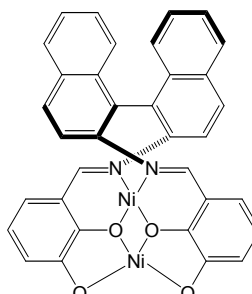


構造内に 2 つの金属を中心核にもつ、複核 Schiff 塩基錯体の触媒です\*)。 (R)-Homodinuclear Ni<sub>2</sub>-Schiff Base Catalyst (1b) は、触媒的不斉マンニヒ型反応において、anti-選択性と高いエナンチオ選択性を示します。従来の単核の Schiff 塩基触媒とは異なる性能をもつ触媒として期待されます。

\*) 東京大学大学院薬学研究科柴崎研究室にて開発されました。

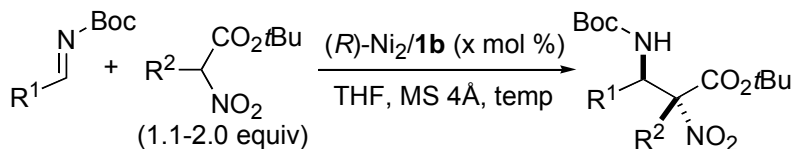


(R)-Homodinuclear Ni<sub>2</sub>-Schiff Base Catalyst (1b)  
 C<sub>34</sub>H<sub>20</sub>N<sub>2</sub>Ni<sub>2</sub>O<sub>4</sub> = 637.92



(S)-Homodinuclear Ni<sub>2</sub>-Schiff Base Catalyst (1a)  
 C<sub>34</sub>H<sub>20</sub>N<sub>2</sub>Ni<sub>2</sub>O<sub>4</sub> = 637.92

表 1. 複核 Ni<sub>2</sub> 触媒による触媒的不斉マンニヒ型反応



entry	imine R <sup>1</sup>	nitroacetate R <sup>2</sup>	cat (x mol %)	temp (°C)	time (h)	yield (%)	dr (anti/syn)	%ee (anti)
1	Ph-	Me	5	0	12	95	91:9	98
2	4-MeO-C <sub>6</sub> H <sub>4</sub> -	Me	5	0	12	92	87:13	98
3	4-Me-C <sub>6</sub> H <sub>4</sub> -	Me	5	0	12	90	89:11	97
4	4-Cl-C <sub>6</sub> H <sub>4</sub> -	Me	5	0	12	87	86:14	97
5	4-F-C <sub>6</sub> H <sub>4</sub> -	Me	5	0	12	91	90:10	91
6	3-thienyl-	Me	5	0	12	96	91:9	99
7	Ph-	Et	5	0	12	91	94:6	99
8	Ph-	nPr	5	0	12	92	92:8	>99
9	Ph-	Bn	5	0	12	94	88:12	94
10	PhCH <sub>2</sub> CH <sub>2</sub> -	Me	10	-40	36	73	>97:3	95
11	n-butyl	Me	10	-40	36	67	>97:3	93
12	i-butyl	Me	10	-40	24	85	>97:3	91
13	Ph-	Me	1	rt	12	93	88:12	98

参考文献

松永茂樹、柴崎正勝：和光純薬時報,77(2),5-7(2009).

Chen Z., Morimoto H., Matsunaga S., Shibasaki M.: *J. Am. Chem. Soc.*, **130**, 2170 (2008).

コード No.	品名	規格	容量	希望納入価格 (円)
087-09011	(R)-Homodinuclear Ni <sub>2</sub> -Schiff Base Catalyst	有機合成用	100mg	8,500
083-09013			500mg	31,000
084-09021	(S)-Homodinuclear Ni <sub>2</sub> -Schiff Base Catalyst	有機合成用	100mg	8,500
080-09023			500mg	31,000

(K.I.W.)



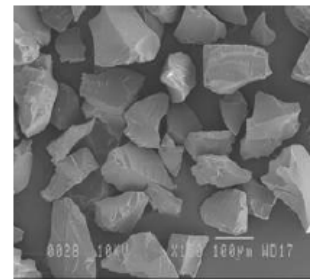
シリカゲル担持パラジウム触媒

SiliaCat S-Pd、SiliaCat DPP-Pd



## 特長

- 触媒ローディング量が正確
  - リサイクルが可能
  - 溶出が殆ど無い
  - 反応速度が速い
  - 大きい代謝回転数（触媒量 < 1 mol%）
- シリカゲル担体の為
    - ① 膨張が少ない
    - ② 静電荷が小さい
    - ③ 幅広い溶媒に適用可能
    - ④ 熱や物理的圧力に安定



顕微鏡写真

## SiliaCat S-Pd

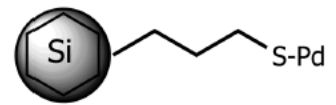
### 【適応】

- 鈴木・宮浦カップリング反応
- 右田・小杉・スティルカップリング反応
- 菌頭カップリング反応

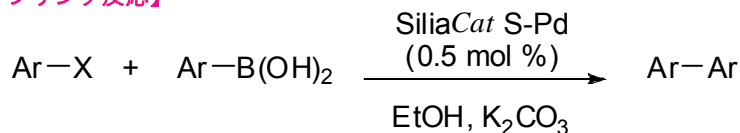
### 【特性】

- ローディング量 : 0.3~0.4mmol/g
- パラジウム酸化状態 : 2価 (2<sup>+</sup>)
- シリカゲル粒子径 : 63~150 μm
- 使用可能溶媒 : 全ての溶媒

### 【構造】

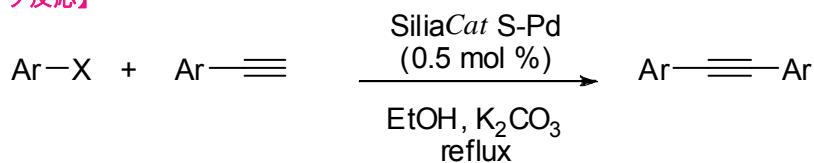


### 【鈴木・宮浦カップリング反応】



Ar-X	Ar-B(OH) <sub>2</sub>	反応時間	Ar-Ar	収率
		1 時間		97%
		16 時間		95%
		1 時間		98%
		2 時間		88%

### 【菌頭カップリング反応】



Ar-X	Ar-C≡C	反応時間	Ar-C≡C-Ar	収率*)
		1 時間		98%
		1 時間		81%
		1 時間 30 分		90%
		16 時間		98%

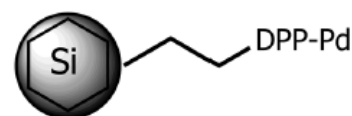
\*) GC/MS

## SiliaCat DPP-Pd

### 【適 応】

- 鈴木・宮浦カップリング反応
- ヘック反応
- 右田・小杉・スティルカップリング反応
- 菌頭カップリング反応
- 熊田・玉尾・コリュウカップリング反応

### 【構 造】

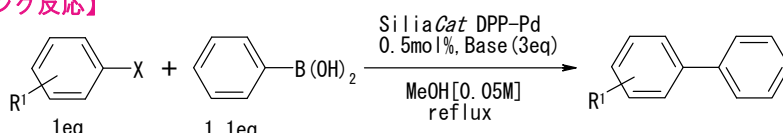


### 【特 性】

- ローディング量 : 0.2~0.3mmol/g
- パラジウム酸化状態 : 2価 (2<sup>+</sup>)
- シリカゲル粒子径 : 63~150 μm
- 使用可能溶媒 : 脱気溶媒

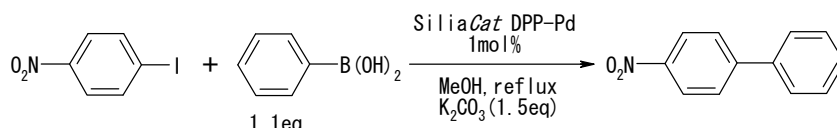
### 【鈴木・宮浦カップリング反応】

#### ■ 反応例



ハロゲン化合物	Base	反応時間	収 率
Ph-Br	KOAc	24 時間	80%
Ph-Br	K <sub>2</sub> CO <sub>3</sub>	24 時間	100%
Ph-I	K <sub>2</sub> CO <sub>3</sub>	24 時間	100%
4-NO <sub>2</sub> -PhBr	K <sub>2</sub> CO <sub>3</sub>	24 時間	100%

#### ■ 繰り返し試験



反応回数	反応時間	収 率
1 回	30 分	100%
:	:	:
9 回	30 分	100%
10 回	30 分	100%

コード No.	メーカーコード	品 名	容 量	希望納入価格 (円)
—	R510-100	SiliaCat S-Pd	5g	21,000
—			10g	33,200
—			25g	72,600
—			100g	232,000
—	R390-100	SiliaCat DPP-Pd	5g	21,000
—			10g	33,200
—			25g	72,600
—			100g	232,000

(U.T.)

### ふっ素化試薬

## ふっ化カリウム (スプレードライ品) Potassium fluoride (spray dried)

本品は、微粉末で比表面積が大きいことから、ふっ素化剤として有機合成に用いるのに適しています。

コード No.	品 名	分子式/分子量 CAS No.	容 量	希望納入価格 (円)
166-13241	Potassium fluoride (spray dried)	KF=58.10 [7789-23-3]	100g	2,900
168-13245			500g	5,700

### 参 考 文 献

- 1) *J. Fluorine Chem.*, **50**, 371 (1990).
- 2) *J. Chem. Soc., Chem. Commun.*, 1493 (1989).

他にも様々なふっ素化剤を取り扱っておりますのでご利用ください。

(K.IW.)

今回は酵素反応に対する疑問にお答え致します。

## ■はじめに

酵素による光学活性アルコールの合成といえば、リパーゼによる光学分割が代表的です。しかし、リパーゼが触媒する反応はラセミ体の速度論的分割であり、不要な対掌体は捨てる反応です。それに対してプロキラルなケトン为原料とした不斉還元の理論収率は100%となります。廃棄物排出量原単位（単位生産量あたりの廃棄物量）を減少させることが求められている現代社会において、理論的に高収率である反応は世の中の要望にマッチしているといえます。

## ■酵素反応に対する疑問

Chiralscreen® OHは、カルボニル基の不斉還元によって光学活性アルコールを合成するキラルバイオ触媒のセットです。「バイオ触媒（酵素）」というと、基質特異性が高い（基質の適用範囲が狭い）、基質濃度が上がらない、水系で反応するので水溶性の低い基質には適用できない、との話を聞くことがあります。しかし、必ずしもそうではないことを以下に紹介いたします。

## ■還元できる基質

酵素と基質の関係は、昔から「鍵と鍵穴の関係」と表現されています。つまり、ある酵素について、反応する基質は1種類で、他の基質には作用しないという意味です。例えば、Chiralscreen® OH E039というバイオ触媒は、種々の構造のケトンをいずれも>99%e.e.の立体選択性で還元し、対応する光学活性アルコールを与えます（図1）。そもそも基質となるケトンは生体基質とは大きく異なる構造をしているはずで、この点だけでも、酵素は「鍵と鍵穴」以上の基質認識能を有しているものがあることが分かります。更に付け加えるならば、Chiralscreen® OHは38種類のバイオ触媒からなり、それぞれは多様な生物に由来する異なる酵素です。つまり、Chiralscreen® OHはそれ自体が多様性のある触媒ライブラリーであるといえます。この中から適切なものをスクリーニングによって選択すれば、各種芳香族及び脂肪族アルコール、芳香族及び脂肪族ヒドロキシ酸、芳香族及び脂肪族ヒドロキシエステル類を高い光学純度で合成することができます。

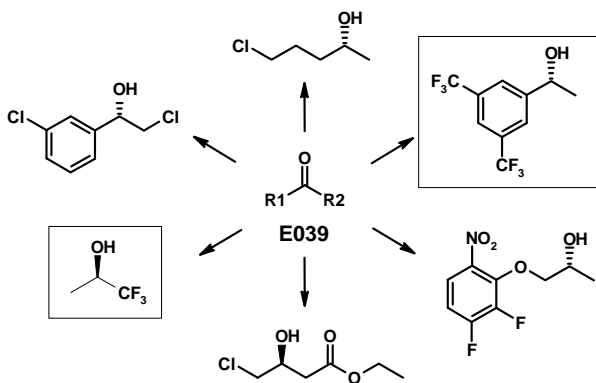


図1 Chiralscreen® OHで得られる光学活性アルコールの例

図1に示すように多様な基質を認識しているにもかかわらず、各基質における立体認識（官能基の認識）は厳密であるところもバイオ触媒の特長です。例えば、メチル基とトリフルオロメチル基は大きさがほぼ同じであり、1,1,1-トリフル

オロアセトン（擬対称ケトン）といえます。そのため、化学的には光学純度よく還元することは困難です。しかし、Chiralscreen®は2種類の触媒を使い分けることで、S体、R体両方を>99%e.e.で得ることができます。このことは、バイオ触媒がメチル基とトリフルオロメチル基を厳密に認識していることを示しています。

## ■有機溶媒の添加

次に、有機溶媒の添加で酵素が失活するだろうから、有機溶媒は使用できないのではないかという疑問にお答えします。Chiralscreen® OHの反応系には、5%までの有機溶媒を添加することも可能です。加えることのできる有機溶媒の種類は、低級アルコール類・エステル類・エーテル類・DMF・DMSO等、広汎に渡ります。

例えば、3',5'-ビス（トリフルオロメチル）アセトフェノンを基質とした場合、有機溶媒の添加によって失活するどころか最大で10倍以上の反応の加速が見られます（図2）。ここで特筆すべきは、有機溶媒の添加によって立体選択性は影響を受けず、有機溶媒無添加の系で>99%e.e.であれば、有機溶媒を添加しても生成したアルコールの光学純度は>99%e.e.を維持していたということです。また芳香族あるいは脂肪族炭化水素系溶媒の添加は、反応の加速作用はないか、むしろ反応速度が低下する傾向がみられます。といって全く使用できないわけではありません。前工程の都合でこれらの溶媒の溶液として基質が提供される場合でも、反応の最適化は可能です。

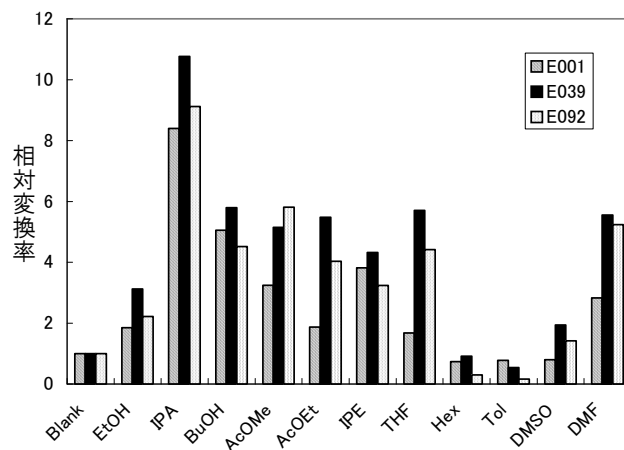


図2 有機溶媒の添加効果

## ■基質濃度

次に、酵素反応は水溶性の低い化合物に対しては適用できない、あるいは基質濃度が上げられないのではないか、という疑問にお答えします。

先の例にあげた3',5'-ビス（トリフルオロメチル）アセトフェノンは、水への溶解度が0.005%以下であり、ほとんど水に溶解しません。この極端に低い溶解度が原因で、基質濃度3%でも変換率は50%という結果しか得られませんでした。しかし、反応液に5%の2-プロパノールを添加するだけで、基質濃度10%の反応が完結するようになります。反応系に5%の2-プロパノールを添加しても基質の溶解度は一桁改善するにすぎず、完全に溶解しているわけではありません。それにも関わらず反応が完結するということは、Chiralscreen® OHを用いた還元反応の場合、水溶性の低い基



質でも通常の有機合成反応と同レベルの基質濃度で反応が可能であることを示しています。

これ以外にも 10%以上の基質濃度で反応を行っている例は数多くあります。4-クロロアセト酢酸エチルは、15%という高い基質濃度を達成しています。これまでに報告されている 4-クロロアセト酢酸エチルの酵素還元反応は、基質による酵素の失活が顕著なために一般に基質濃度が低いですが、Chiralscreen® OHは酵素にとってこれまで不可能と思われていた基質濃度でも反応を行うことができます。

■おわりに

今回は、光学活性アルコールを合成するためのキラルバイオ触媒 Chiralscreen® OH を例にあげ、酵素反応に対する疑問について反応例も交えてお答えしました。次回は、光学活性アミン・光学活性アミノ酸を合成するためのキラルバイオ触媒 Chiralscreen® NH を紹介する予定です。

**増産記念 価格 OFF キャンペーン実施中！ (8月1日～10月31日)**  
品ぞろえを増やしお値打ち価格でご提供します。

スクリーニングキット

コード No.	メーカーコード	品名	容量	キャンペーン価格(円)
300-37701	01005	キラルスクリーン® OH トライアルキット	5mg × 5種類 (1回用)	18,000
308-85731	01115	キラルスクリーン® OH-1 (ケトン用標準キット)	5mg × 15種類 (1回用)	38,000
304-85733	02115	キラルスクリーン® OH-1 (ケトン用標準キット)	50mg × 15種類 (10回用)	180,000
305-85741	01215	キラルスクリーン® OH-2 (ケトン用拡張キット)	5mg × 15種類 (1回用)	38,000
301-85743	02215	キラルスクリーン® OH-2 (ケトン用拡張キット)	50mg × 15種類 (10回用)	180,000
302-85751	01330	キラルスクリーン® OH-3 (ケトン用フルキット)	5mg × 30種類 (1回用)	75,000
308-85753	02330	キラルスクリーン® OH-3 (ケトン用フルキット)	50mg × 30種類 (10回用)	350,000
309-85761	01408	キラルスクリーン® OH-4 (α-ケト酸用キット)	5mg × 8種類 (1回用)	30,000
305-85763	02408	キラルスクリーン® OH-4 (α-ケト酸用キット)	50mg × 8種類 (10回用)	150,000
300-85811	11116	キラルスクリーン® NH-1 (アミン・アミノ酸用キット (ケトン・ケト酸タイプ))	5mg × 16種類 (1回用)	80,000
306-85813	12116	キラルスクリーン® NH-1 (アミン・アミノ酸用キット (ケトン・ケト酸タイプ))	50mg × 16種類 (10回用)	400,000
307-85821	11206	キラルスクリーン® NH-2 (D-アミノ酸用キット (アセチル体タイプ))	5mg × 6種類 (1回用)	32,000
303-85823	12206	キラルスクリーン® NH-2 (D-アミノ酸用キット (アセチル体タイプ))	50mg × 6種類 (10回用)	160,000
304-85831	11314	キラルスクリーン® NH-3 (D-アミノ酸用キット (アミノ酸タイプ))	5mg × 14種類 (1回用)	72,000
300-85833	12314	キラルスクリーン® NH-3 (D-アミノ酸用キット (アミノ酸タイプ))	50mg × 14種類 (10回用)	360,000
301-85841	11404	キラルスクリーン® NH-4 (L-アミノ酸用キット (アミノ酸タイプ))	5mg × 4種類 (1回用)	24,000
305-85883	12404	キラルスクリーン® NH-4 (L-アミノ酸用キット (アミノ酸タイプ))	50mg × 4種類 (10回用)	120,000

各酵素

品名	容量	キャンペーン価格 (円)
キラルスクリーン® OH EXXX	50mg	18,000
	250mg	45,000
	1000mg	988,000
キラルスクリーン® NH EXXX	50mg	36,000
	250mg	120,000
	1000mg	300,000

※XXXには各酵素番号が入ります。詳細はお問い合わせください。

(G.O.K.)



包装追加しました！！

有機合成用脱水溶媒シリーズ



■『超脱水』シリーズ登場

水分含量 10ppm 以下を保証した『超脱水』シリーズを発売しました（テトラヒドロフラン（安定剤不含）キャニスター缶 9L、18L 包装）。

■9L 包装登場

9L 包装のキャニスター缶入り製品を追加しました（ジエチルエーテル、テトラヒドロフラン（安定剤不含）（超脱水））。  
※その他、ジエチルエーテルと 1,4-ジオキサンに 100ml 包装を追加しております。

品名（安定剤）	水分	容器：ガラス瓶			水分	容器：キャニスター缶	
		100ml	500ml	3L		9L	18L
Acetone, Dehydrated	50ppm 以下	010-15533 1,700 円	016-15535 3,150 円	014-15531 13,200 円	50ppm 以下		012-15537 照会
Acetonitrile, Dehydrated	50ppm 以下	017-15543 2,100 円	013-15545 4,400 円	011-15541 15,200 円	50ppm 以下		019-15547 照会
Benzene, Dehydrated	30ppm 以下	022-12853 1,700 円	028-12855 3,650 円	026-12851 13,000 円			
1-Butanol, Dehydrated	50ppm 以下		020-13035 3,600 円	028-13031 13,000 円			
2-Butanone, Dehydrated	50ppm 以下		027-13045 3,600 円	025-13041 13,100 円			
Butyl Acetate, Dehydrated	50ppm 以下	027-13263 2,000 円	023-13265 4,000 円				
t-Butyl Methyl Ether, Dehydrated	50ppm 以下	024-15951 2,300 円	026-15955 5,000 円	020-15953 20,000 円			
Chloroform, Dehydrated (Ethanol 0.3~1.0%)	30ppm 以下	035-16283 1,750 円	031-16285 3,600 円	039-16281 14,000 円			
Chloroform, Dehydrated, Amylene added (Amylene 150ppm)	30ppm 以下	032-16813 1,800 円	038-16815 3,500 円	036-16811 14,000 円			
Cyclohexane, Dehydrated	30ppm 以下		036-16595 3,600 円	034-16591 13,000 円			
Cyclopentyl Methyl Ether, Dehydrated, with Stabilizer	30ppm 以下	032-20701 2,500 円	034-20705 6,000 円	038-20703 20,000 円			
Dichloromethane, Dehydrated (2-Methyl-2-butene 0.0005~0.005%)	30ppm 以下	048-25503 2,000 円	044-25505 3,500 円	042-25501 13,000 円	30ppm 以下		040-25507 照会
Diethyl Ether, Dehydrated (BHT 0.0003%)	50ppm 以下	045-25493 照会	041-25495 5,800 円		50ppm 以下	049-25491 照会	047-25497 照会
Diisopropyl Ether, Dehydrated	50ppm 以下	042-30371 2,300 円	044-30375 4,100 円	048-30373 15,000 円			
N, N-Dimethylacetamide, Dehydrated	50ppm 以下		042-25285 5,200 円	040-25281 20,000 円			
N, N-Dimethylformamide, Dehydrated	50ppm 以下	041-25473 1,800 円	047-25475 4,200 円	045-25471 15,000 円	50ppm 以下		043-25477 照会
Dimethyl Sulfoxide, Dehydrated	50ppm 以下	046-26023 2,500 円	042-26025 7,000 円				
1,4-Dioxane, Dehydrated (BHT 0.0005%)	50ppm 以下	048-25483 照会	044-25485 3,600 円	042-25481 13,000 円			
Ethanol, Dehydrated	50ppm 以下	055-06133 2,150 円	051-06135 4,400 円	059-06131 16,500 円			
Ethyl Acetate, Dehydrated	50ppm 以下	050-06183 1,700 円	056-06185 3,100 円	054-06181 12,000 円			
Ethylene Glycol, Dehydrated	50ppm 以下	053-06313 2,500 円	059-06315 7,000 円				
Heptane, Dehydrated	30ppm 以下	089-07273 2,500 円	085-07275 5,000 円				
Hexane, Dehydrated	30ppm 以下	089-07033 1,700 円	085-07035 3,100 円	083-07031 11,000 円	30ppm 以下		081-07037 照会

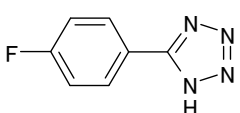
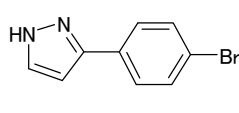
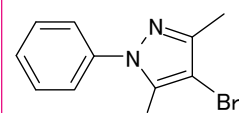
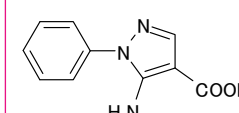
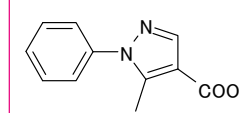
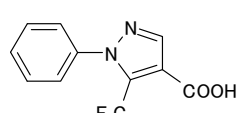
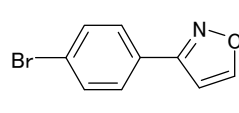
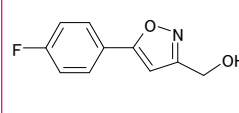
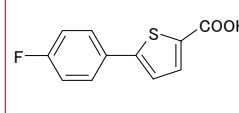
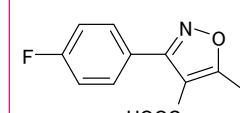
品名(安定剤)	水分	容器：ガラス瓶			水分	容器：キャニスター缶	
		100ml	500ml	3L		9L	18L
Methanol,Dehydrated	50ppm 以下	136-12383 1,700 円	132-12385 3,550 円	130-12381 12,700 円	50ppm 以下		138-12387 照会
4-Methyl-2-pentanone,Dehydrated	50ppm 以下	131-12713 2,500 円	137-12715 5,000 円				
1-Methyl-2-pyrrolidone,Dehydrated	50ppm 以下	138-12723 2,500 円	134-12725 5,000 円				
Pentane,Dehydrated	30ppm 以下		161-22025 5,000 円		30ppm 以下		167-22027 照会
1-Propanol,Dehydrated	50ppm 以下		166-18305 4,200 円	164-18301 14,000 円			
2-Propanol,Dehydrated (Iso- " )	50ppm 以下	165-17993 1,800 円	161-17995 3,150 円	169-17991 12,100 円			
Pyridine,Dehydrated	50ppm 以下	161-18453 2,500 円	167-18455 7,500 円	165-18451 20,000 円			
Tetrahydrofuran,Dehydrated (BHT 0.03%)	50ppm 以下	206-13433 1,700 円	202-13435 3,700 円	200-13431 13,200 円	50ppm 以下		208-13437 照会
Tetrahydrofuran,Dehydrate (no Stabilizer)	50ppm 以下	207-13963 1,700 円	203-13965 3,550 円	201-13961 13,100 円			
Tetrahydrofuran,Super Dehydrate (no Stabilizer)					10ppm 以下	205-17761 照会	203-17767 照会
Toluene,Dehydrated	30ppm 以下	203-13443 1,700 円	209-13445 3,100 円	207-13441 11,000 円	30ppm 以下		205-13447 照会
Xylene,Dehydrated	30ppm 以下		242-00685 3,550 円	240-00681 13,200 円			

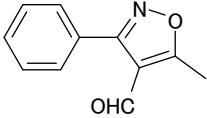
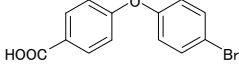
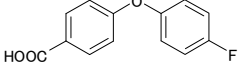
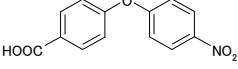
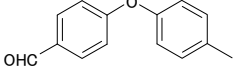
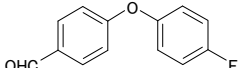
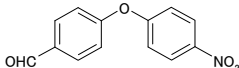
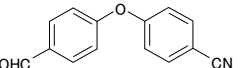
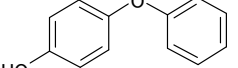
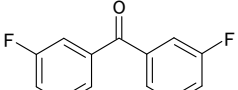
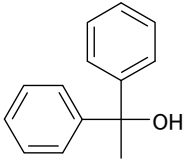
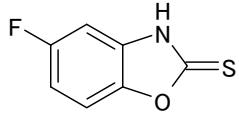
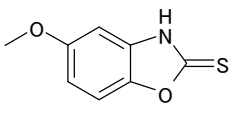
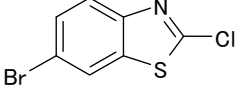
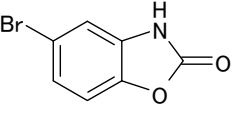
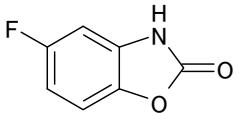
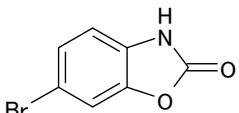
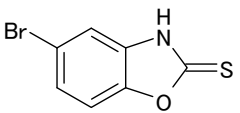
キャニスター缶は配管手配も承っております。お気軽にお問合せ下さい。  
(KN.H.)

## その他

## ワコーケミカル新製品紹介



<p>5-(4-Fluorophenyl)-1H-tetrazole</p>  <p>[50907-21-6]</p> <p>358-10381 1g 8,500 354-10383 5g 29,000</p>	<p>3-(4-Bromophenyl)-1H-pyrazole</p>  <p>[73387-46-9]</p> <p>356-10821 5g 13,000 354-10822 25g 52,000</p>	<p>4-Bromo-3-methyl-1-phenyl-1H-pyrazol-5-amine</p>  <p>[69464-98-8]</p> <p>355-10531 1g 13,000 351-10533 5g 45,000</p>	<p>5-Amino-1-phenyl-1H-pyrazole-4-carboxylic Acid</p>  <p>[51649-80-0]</p> <p>352-10541 1g 9,000 358-10543 5g 30,000</p>	<p>5-Methyl-1-phenyl-1H-pyrazole-4-carboxylic Acid</p>  <p>[91138-00-0]</p> <p>359-10551 1g 20,000</p>
<p>1-Phenyl-5-trifluoromethyl-1H-pyrazole-4-carboxylic Acid</p>  <p>[98534-81-7]</p> <p>356-10561 1g 7,500 352-10563 5g 26,000</p>	<p>3-(4-Bromophenyl) isoxazole</p>  <p>[13484-04-3]</p> <p>353-10571 1g 18,000</p>	<p>5-(4-Fluorophenyl)-3-isoxazolmethanol</p>  <p>[640291-97-0]</p> <p>350-10581 1g 12,000 356-10583 5g 44,000</p>	<p>5-(4-Fluorophenyl)thiophene-2-carboxylic Acid</p>  <p>[115933-30-7]</p> <p>355-10651 1g 12,000 351-10653 5g 45,000</p>	<p>3-(4-Fluorophenyl)-5-methylisoxazole-4-carboxylic Acid</p>  <p>[1736-21-6]</p> <p>352-10661 1g 12,000 358-10663 5g 45,000</p>

<p>5-Methyl-3-phenylisoxazole-4-carbaldehyde</p>  <p>[87967-95-1]</p> <p>359-10671 1g 16,000</p>	<p>4-(4-Bromophenoxy)benzoic Acid</p>  <p>[21120-68-3]</p> <p>354-10621 1g 9,000 350-10623 5g 32,000</p>	<p>4-(4-Fluorophenoxy)benzoic Acid</p>  <p>[129623-61-6]</p> <p>351-10631 1g 8,000 357-10633 5g 28,000</p>	<p>4-(4-Nitrophenoxy)benzoic Acid</p>  <p>[16309-45-8]</p> <p>358-10641 1g 8,000 354-10643 5g 28,000</p>	<p>4-(4-Methylphenoxy)benzaldehyde</p>  <p>[61343-83-7]</p> <p>356-10681 1g 11,000 352-10683 5g 39,000</p>
<p>4-(4-Fluorophenoxy)benzaldehyde</p>  <p>[137736-06-2]</p> <p>353-10691 1g 6,000 359-10693 5g 18,000</p>	<p>4-(4-Nitrophenoxy)benzaldehyde</p>  <p>[50961-54-1]</p> <p>356-10701 1g 11,000 352-10703 5g 39,000</p>	<p>4-(4-Formylphenoxy)benzotrile</p>  <p>[90178-71-5]</p> <p>353-10711 1g 11,000 359-10713 5g 39,000</p>	<p><i>p</i>-Phenoxyphenol</p>  <p>[831-82-3]</p> <p>353-00561 5g 2,500 351-00562 25g 6,000</p>	<p>3,3'-Difluorobenzophenone</p>  <p>[345-70-0]</p> <p>325-99631 1g 9,200 321-99633 5g 31,000</p>
<p>1,1-Diphenylethanol</p>  <p>[599-67-7]</p> <p>320-98422 25g 7,500 328-98423 100g 23,000</p>	<p>5-Fluorobenzoxazole-2-thiol</p>  <p>[13451-78-0]</p> <p>357-10351 1g 12,000 353-10353 5g 45,000</p>	<p>5-Methoxybenzoxazole-2-thiol</p>  <p>[49559-83-3]</p> <p>354-10361 1g 11,000 350-10363 5g 40,000</p>	<p>6-Bromo-2-chlorobenzothiazole</p>  <p>[80945-86-4]</p> <p>355-10391 1g 10,500 351-10393 5g 37,500</p>	<p>5-Bromo-2-benzoxazinone</p>  <p>[14733-73-4]</p> <p>354-10481 1g 11,000 350-10483 5g 40,000</p>
<p>5-Fluoro-2-benzoxazinone</p>  <p>[13451-79-1]</p> <p>351-10491 1g 12,000 357-10493 5g 47,000</p>	<p>6-Bromo-2-benzoxazinone</p>  <p>[19932-85-5]</p> <p>354-10501 1g 13,000 350-10503 5g 49,000</p>	<p>5-Bromo-1,3-benzoxazole-2-thiol</p>  <p>[439607-87-1]</p> <p>358-10521 1g 12,000 354-10523 5g 45,000</p>		

※別容量の注文にも対応致しますのでお問い合わせ下さい。

(K.I.W.)

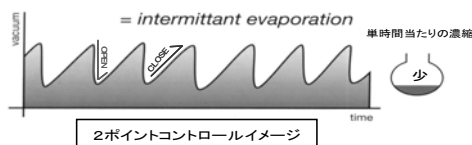
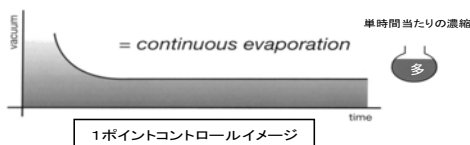
## 耐久性・耐化学薬品性に優れしかも低騒音・低振動！ ケミカルタイプダイヤフラム式真空ポンプ



ドイツ・バキューブランド社製のオイルフリーのケミカルタイプダイヤフラム式真空ポンプです。到達真空度や排気速度、溶媒回収型や真空コントロール機能搭載などご要望に応じて多様なラインアップがございます。電磁弁による真空コントローラやコンパクト設計のデジタル真空計（静電容量式・ピラニー式）など周辺関連機器もございます。万が一の修理や調整などは日本国内にて対応いたします。

### 特長

- 運転時の低騒音・低振動を実現  
シリンダがシリンダヘッドに接触しない構造
- 耐化学薬品性に優れ、長寿命を実現  
テフロン合成材シリンダヘッドとテフロンコーティングダイヤフラム、Kalrez 製バルブシールの採用
- ほぼ全機種に有機溶剤中毒予防規則対策に最適な溶媒回収型ラインアップを用意
- 調整要らずのシンプル構造  
ダイヤフラムやバルブシールなどの消耗部品をユーザー様にて交換可能（別途専用工具が必要）
- インバーターモーター回転数制御による1ポイントコントロールモデル（VARIO）や電磁弁による2ポイントコントロールモデルがございます。



品名	小型ダイヤフラム式真空ポンプ		溶媒回収型回転数制御方式ダイヤフラム式真空ポンプ
	MZ2CNT	MD1C	PC3001 VARIO
外観			
排気速度	33L/分	20L/分	28L/分
到達真空度	7hPa	2hPa	2hPa
特徴	スタンダードモデル	高真空・軽量・コンパクト	デジタルコントローラ搭載
希望納入価格（円）	280,000	320,000	798,000

### その他関連製品

- 真空コントローラ&電磁弁
  - 1) アルミナセラミック製圧力センサーを採用、耐化学薬品性に優れています。
  - 2) プログラム機能搭載（10ステップ）

圧力センサー	内蔵型 静電容量式
測定範囲	1060~1hPa
特徴	ダイヤル式で簡単操作
希望納入価格（円）	385,000（VV-B 6C セット）



真空コントローラ CVC3000



電磁弁 VV-B 6C

- デジタル真空計
  - ① 水銀を使用しない電子式真空計なので管理がしやすく安心。
  - ② DVR2 ならびに DCP3000 はアルミナセラミック製圧力センサーを採用しているため耐化学薬品性に優れています。
  - ③ DVR2 はコンパクトな圧力センサー内蔵型。
  - ④ DCP3000 ならびに VAP5 は取廻しに便利な圧力センサーセパレート型。

品名	DVR2	DCP3000	VAP5
外観			
圧力センサー	静電容量式（アルミナセラミック製）		ピラニー式
測定範囲	1080~1hPa	1080~0.1hPa	1000~10 <sup>-3</sup> hPa
特徴	電池式コンパクト	RS-232C 内蔵	高真空対応
希望納入価格（円）	120,000	225,000	220,000

(M.KR.)

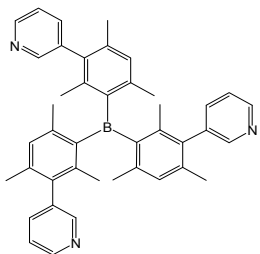
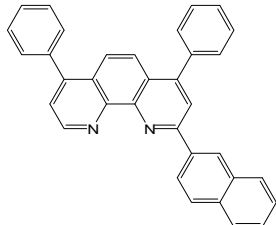
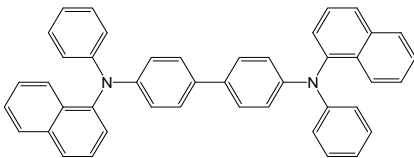
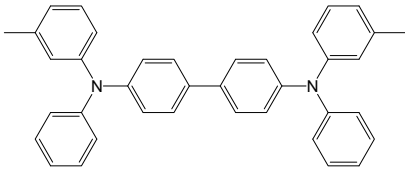
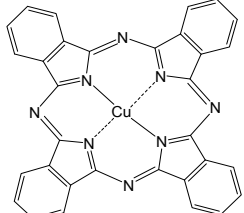


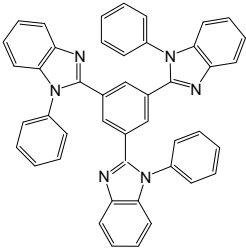
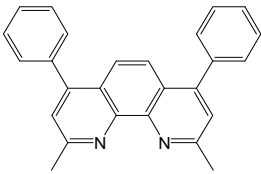
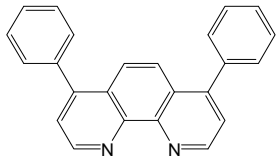
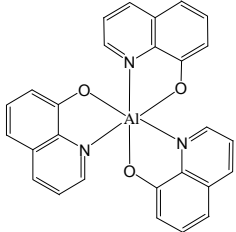
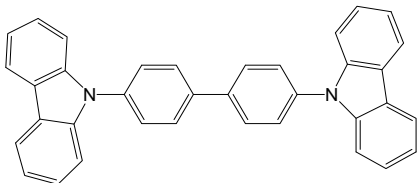


有機 EL 材料製品紹介



Luminescence Technology 社は台湾の有機 EL 材料メーカーです。多数の OLED 材料をラインアップしておりますので是非ご利用下さい。今回注目製品の一部をご紹介しますが、その他の製品については Luminescence Technology 社のウェブサイト (<http://www.lumtec.com.tw>) をご参照下さい。

メーカーコード	品名	容量	希望納入価格 (円)
LT-N856	3TPYMB (Tris(2,4,6-trimethyl-3-(pyridin-3-yl) phenyl) borane)	1g	151,100
		5g	照会
		分子式 : C <sub>42</sub> H <sub>42</sub> N <sub>3</sub> B	
		Molecular Weight : 599.61 g/mole	
		Thermal Gravimetric Analysis : 250°C (0.5% weight loss)	
		Absorption : 331nm (in THF)	
		Photoluminescent : 382nm (in THF)	
		Reference : <i>Chemistry Letters</i> , <b>36</b> (2), 262 (2007).	
LT-N860	HNBphen (2-(naphthalen-2-yl)-4,7-diphenyl-1,10-phenanthroline)	1g	120,100
		5g	照会
		分子式 : C <sub>34</sub> H <sub>22</sub> N <sub>2</sub>	
		Molecular Weight : 458.55 g/mole	
		Thermal Gravimetric Analysis : 350°C (0.5% weight loss)	
		Absorption : 281, 327nm (in CH <sub>2</sub> Cl <sub>2</sub> )	
		Photoluminescent : 398nm (in CH <sub>2</sub> Cl <sub>2</sub> )	
LT-E101	NPB (N, N'-Bis(naphthalen-1-yl)-N, N'- bis(phenyl)-benzidine)	5g	38,800
		10g	55,800
		分子式 : C <sub>44</sub> H <sub>32</sub> N <sub>2</sub>	
		Molecular Weight : 588.74 g/mole	
		Glass Transition Temperature : 99°C	
		Thermal Gravimetric Analysis : 380°C (0.5% weight loss)	
		Absorption : 339nm (in THF)	
		Photoluminescent : 450nm (in THF)	
		CAS No. : 123847-85-8	
LT-E103	TPD (N, N'-Bis(3-methylphenyl)-N, N'- bis(phenyl)-benzidine)	5g	38,800
		10g	55,800
		分子式 : C <sub>38</sub> H <sub>32</sub> N <sub>2</sub>	
		Molecular Weight : 516.67 g/mole	
		Thermal Gravimetric Analysis : 330°C (0.5% weight loss)	
		Absorption : 352nm (in THF)	
		Photoluminescent : 398nm (in THF)	
		CAS No. : 65181-78-4	
LT-E201	CuPC (Phthalocyanine, Copper complex)	5g	77,500
		10g	122,500
		分子式 : C <sub>32</sub> H <sub>16</sub> N <sub>8</sub> Cu	
		Molecular Weight : 576.07 g/mole	
		Thermal Gravimetric Analysis : 460°C (0.5% weight loss)	
		Photoluminescent : 404nm (film)	

メーカーコード	品名	容量	希望納入価格 (円)
LT-E302	TPBi (2,2',2''-(1,3,5-Benzinetriyl)-tris(1-phenyl-1H-benzimidazole))	1g	58,100
		5g	232,500
		分子式 : C <sub>45</sub> H <sub>30</sub> N <sub>6</sub> Molecular Weight : 654.76 g/mole Glass Transition Temperature : 122°C Thermal Gravimetric Analysis : 380°C (0.5% weight loss) Absorption : 305nm (in THF) Photoluminescent : 359, 370nm (in THF)	
LT-E304	BCP (2,9-Dimethyl-4,7-diphenyl-1,10-phenanthroline)	1g	45,000
		5g	177,500
		分子式 : C <sub>26</sub> H <sub>20</sub> N <sub>2</sub> Molecular Weight : 360.45 g/mole Thermal Gravimetric Analysis : 260°C (0.5% weight loss) Absorption : 277nm (in THF) Photoluminescent : 386nm (in THF) CAS No. : 4733-39-5	
LT-E305	Bphen (4,7-Diphenyl-1,10-phenanthroline)	1g	45,000
		5g	177,500
		分子式 : C <sub>24</sub> H <sub>16</sub> N <sub>2</sub> Molecular Weight : 332.49 g/mole Thermal Gravimetric Analysis : 260°C (0.5% weight loss) Absorption : 272nm (in THF) Photoluminescent : 379nm (in THF) CAS No. : 1662-01-7	
LT-E401	Alq3 (Tris(8-hydroxy-quinolato)aluminium)	5g	45,000
		10g	66,700
		分子式 : C <sub>27</sub> H <sub>18</sub> AlN <sub>3</sub> O <sub>3</sub> Molecular Weight : 459.43 g/mole Thermal Gravimetric Analysis : 300°C (0.5% weight loss) Absorption : 259nm (in THF) Photoluminescent : 512nm (in THF) CAS No. : 2085-33-8	
LT-E409	CBP (4,4'-Bis(carbazol-9-yl)biphenyl)	1g	27,900
		5g	110,800
		分子式 : C <sub>36</sub> H <sub>24</sub> N <sub>2</sub> Molecular Weight : 484.59 g/mole Thermal Gravimetric Analysis : 350°C (0.5% weight loss) Absorption : 292, 318nm (in THF) Photoluminescent : 369nm (in THF) CAS No. : 58328-31-7	

●掲載されている全製品は大容量でもご提供できます。

●Luminescence Technology 社では各種受託サービスも実施しております。お問い合わせ下さい。

(U.M.X.)

## (2) リアルタイム化学構造検索

株式会社 理論創薬研究所 主任研究員 高橋 哲、代表取締役 吉森 篤史

## ■リアルタイム検索

最近、ウェブ検索における新しいトレンドとして、「リアルタイム検索」が注目を集めている。ニュースやブログなど最新のインターネットコンテンツの中から、目的となる情報をリアルタイムに表示できるような検索手段であり、毎週のように様々な特色をもったサービスが公開されている。過去にブログが普及したように、新しいサービスの出現は、ユーザの好奇心を刺激し、新たな利用法の発見を促すかもしれない。それでは、通常のウェブ検索とリアルタイム検索の本質的な違いは何であるのか、ある専門家は次のように述べている：

“人間の機能に対応させると、通常の検索は記憶を検索するのに対して、リアルタイム検索は意識の流れを検索する。”

この意味の解釈は色々と考えられるが、情報に対するアクセスの即時性の実現が、新しいサービスの出現の起爆剤になることは間違いないといえるであろう。

## ■リアルタイム化学構造検索

通常、化学構造検索は、次の2つの工程により実現される。

- (1) 目的とする化合物の構造、もしくはその部分構造をクエリー構造として入力する。
- (2) クエリー構造を検索にかけ、ヒット化合物を取得する。

化学構造検索においては、網羅性のあるクエリー構造を準備できる場合を除き、合成研究者および創薬研究者は、(1) → (2) → (1) → (2) という工程を、反応経路などの知見および SAR 解析などの知見から繰り返し実施する。しかしながら通常の化学構造検索では、(1) → (2) の待ち時間、および (2) → (1) のデータの受け渡しの問題から、その連続性を実現することが難しい。例えば、(2) で目的とする化合物が見つからない場合、再度その代替化合物を入力し(1)、検索する(2)という煩雑な作業を繰り返す必要がある。

一方、リアルタイム構造検索では、(1) → (2) → (1) → (2) という工程を連続的に実行することができる。これは、リアルタイムなレスポンスによる(1) → (2)の待ち時間の大幅な短縮、(2) → (1)のデータのスムーズな受け渡しにより実現されるものである。この構造検索の連続性が、リアルタイム化学構造検索の大きな特徴であるといえる。

すなわち、リアルタイム化学構造検索の本質的な利点は、

“研究者の思考を中断させることなく、目的とする化合物を見つけだすことができる化学構造検索システム”

であると考えている。この機会に、ひとりでも多くの方々に ITMolgres により実現されたリアルタイム化学構造検索を実際に使って体験していただきたいと思っている。

## ■リアルタイム化学構造検索の操作方法

リアルタイム化学構造検索を行うことにより、クエリー構造を部分構造として持つ化合物が存在するかどうかをリアルタイムに知ることができる。

以下に操作方法を示す。

- ① “リアルタイム部分構造検索” チェックボックスにチェックを入れる（画面起動の際はデフォルトでチェックされている）。
- ② 分子入力エディタにクエリー構造を描画する。リアルタイム化学構造検索では、描画すると同時に検索が行われる（例として、ベンゼンを描画）。
- ③ 最大9件のヒット化合物が分子ビューワにリアルタイムに表示される。またヒット化合物は、一致構造がピンク色でハイライト表示されるようになっている。
- ④ 検索結果として、現在何番目のヒット化合物が表示されているのか知ることができる（例では、1-9 番目を表示していることが分かる）。
- ⑤ 表示されている化合物以外のヒット化合物を表示させたい場合は、“<<前へ”または“次へ>>”をクリックする（例では、現在 1-9 番目の化合物が表示されており、それ以前の化合物は存在しないため、“<<前へ”はクリックできないようになっている。また、“次へ>>”をクリックすると 10-18 番目の化合物が表示される）。

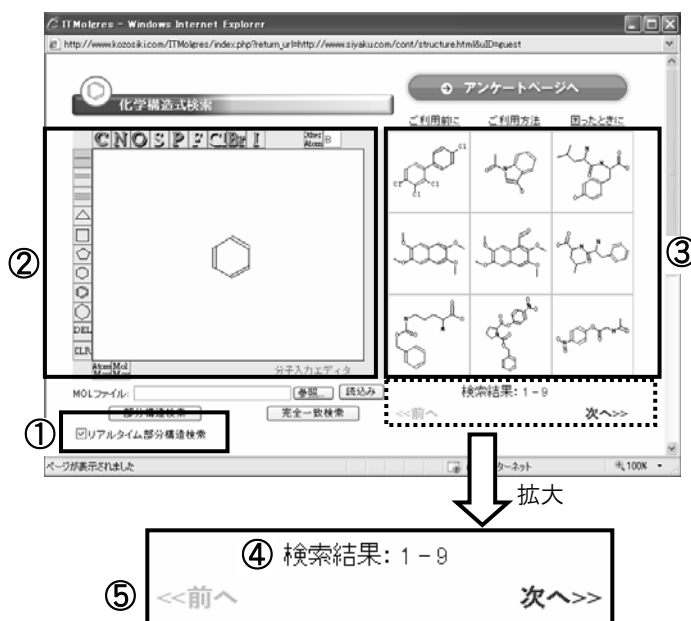


図1 リアルタイム部分構造検索

## ■通常の部分構造検索および完全一致検索の操作方法

ITMolgres では、リアルタイム化学構造検索のほかに、通常の部分構造検索および完全一致検索も行うことができる。通常の部分構造検索は、リアルタイムではない一般的な構造検索を行うものであり、ヒット化合物の総数を知ることが出来る。また完全一致検索は、クエリー構造に対して、完全に一致する構造を持つ化合物を検索する方法である。

以下に操作方法を示す。

① “リアルタイム部分構造検索” チェックボックスのチェックをはずす。

②分子入力エディタにクエリー構造を描画する。通常の部分構造検索および完全一致検索では、描画と同時に検索は開始されない（例として、インドールを描画）。

[通常の部分構造検索の場合]

③ “部分構造検索” ボタンをクリックし、検索を開始する。

[完全一致検索の場合]

④ “完全一致検索” ボタンをクリックし、検索を開始する。

⑤最大9件のヒット化合物が分子ビューワに表示される。またヒット化合物は、一致構造がピンク色でハイライト表示されている（例では、部分構造検索した際のヒット化合物を表示）。

⑥検索結果として、現在何番目のヒット化合物が表示されているのか知ることができる。また、データベース全体におけるヒット化合物の総数も表示される。ヒット化合物の総数が1000件未満の場合は正確な件数が表示され、1000件以上の場合は>1000と表示される（例では、10-18番目を表示しており、ヒット化合物の総数は726件であることを示している）。

⑦表示されている化合物以外のヒット化合物を表示させたい場合は、“<<前へ”または“次へ>>”をクリックする（例では、現在10-18番目の化合物が表示されており、“<<前へ”をクリックすると1-9番目の化合物が表示され、また、“次へ>>”をクリックすると19-27番目の化合物が表示される）。

※上記①では、“リアルタイム部分構造検索” チェックボックスのチェックをはずして検索を行ったが、リアルタイム化学構造検索と組み合わせて使用したい場合は、チェックボックスにチェックを入れる。

②

③ 部分構造検索

④ 完全一致検索

①  リアルタイム部分構造検索

⑤

⑥ 検索結果: 10 - 18 of 726

⑦ <<前へ 次へ>>

図2 通常の部分構造検索および完全一致検索

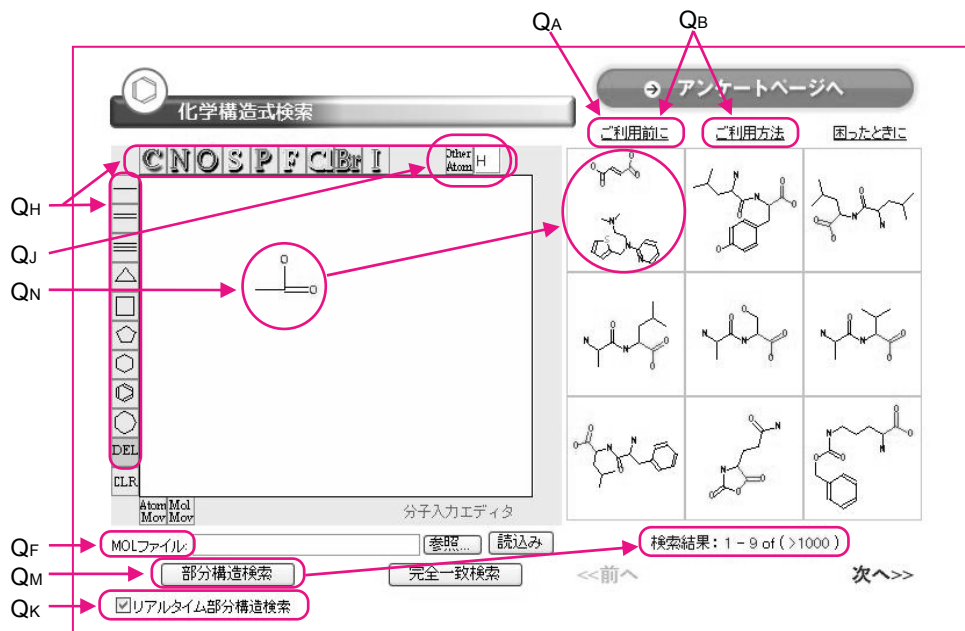
## ■最後に

今回は、リアルタイム化学構造検索の特徴と利点について述べ、リアルタイム化学構造検索、通常の部分構造検索、および完全一致検索の操作方法を紹介した。

次回は、リアルタイム化学構造検索が実現可能になることによって、新たに生み出された“インクリメント検索”、“デクリメント検索”、“フィードバック（再帰的）検索”という3つの検索手段について紹介する。

(G.M.)

当社が運営する試薬検索サイト Siyaku.com (<http://www.siyaku.com>) に、化学構造式検索機能が 2009 年 4 月 1 日に追加されました。おかげさまで多くの方にご利用いただいております。オープン以来、皆様から数多くのご感想、叱咤激励、ご提案をいただいております。今回はこれまでいただきましたお問い合わせに対しお答え致します。



## システム全般

- QA** 分子入力エディタが表示されず（左上にボタンが出る）、描画できない。
- AA** 本機能をご利用いただくためには、まずご利用いただくブラウザ（Internet Explorer など）側で、下記 4 点の設定が必要です。  
1. Cookie、2. ポップアップブロック、3. Java Applet、4. JavaScript  
詳細は、検索画面 右上の「ご利用前に」>「ブラウザ設定方法」をご参照ください。
- QB** 分子入力エディタが表示されず、「Java アプレットの読み込みに失敗しました」と出る。
- AB** 「Java Runtime Environment (JRE)」が、正常にインストールできていない可能性があります。本システムの推奨環境は下記のとおりです。詳細は、検索画面右上部の「ご利用前に」でご確認ください。  
 ■ OS およびブラウザ  
 【Microsoft Windows XP/Vista をご利用の場合】：Internet Explorer 6.x/7.x  
 【Apple Macintosh OS X をご利用の場合】：Safari 3.x  
 ■ Java Runtime Environment (JRE)：JRE 1.5.x/1.6.x  
 ■ モニタ解像度：1280×1024 ピクセル以上
- 化学構造式描画機能には、JAVA 機能を利用しております。ブラウザ設定で、“JAVA Applet” 及び “JAVA Script” がともに有効に設定されているのであれば、上記ソフトウェアがインストールされていない可能性があります。その場合には下記 URL から入手し（無料です）、インストールしていただきますようお願い申し上げます。  
<http://www.java.com/ja/download/>  
 また使用方法につきましては、同じく検索画面右上の「ご利用方法」をご覧ください。
- QC** JAVA アプレットを有効にしているのになかなか描画画面が表示されない（読み込みに時間がかかる）。
- AC** CPU の力不足やメモリの容量不足、通信環境上の不具合などのため JAVA アプレットの読み込みに時間がかかっている可能性があります。メモリの容量不足の場合でしたら、再起動により正常に起動できる場合があります。
- QD** ある構造を選択後「商品情報一覧へ」をクリックしても「Not Found」のみが表示される。
- AD** 本機能は、Siyaku.Com の検索機能の 1 つとして提供しております。従いまして、本機能に移動する直前のウィンドウを閉じてしまうと、検索結果の詳細を表示すべき（戻るべき）画面がなくなった状態となり、ご指摘のようなエラーメッセージが表示されてしまいます。本機能に移動する直前のウィンドウが開いている状態で、「商品情報一覧へ」のボタンをクリックしてみてください。



**QE** 検索したが、結果が出てこない。

**AE** 結果が全く出てこない場合、対象となる（部分）構造を持つ化合物が本データベースに登録されていないか、登録されていても構造式が登録されていない事が考えられます。お手数をおかけしますが、他の検索方法で化合物名や CAS No. から検索下さい。

## 描画機能

**QF** MOL ファイルをインストールしないと作動しないのか。

**AF** MOL ファイルは化学分野において、分子に関する構造情報を取り扱うための、代表的なファイルフォーマットの一つです。原子の種類と結合情報、並びに原子の座標データが記載されています。あらかじめ作成しておいた化学構造式を読み込む場合などに利用されます。起動のためには必要ありません。

**QG** ChemDraw で作成した構造式データ (.cdx) を利用したいが、MOL 形式のデータにどのように変換すればよいかわからない。

**AG** ChemDraw でしたら、対象化合物を選択後、File>Save as から、ファイルの種類 (T) で “MDL Molfile (\*.mol)” を選んで保存ボタンを押していただければ OK です。

**QH** 「-NCO」と描画したいができない。

**AH** 「-NCO」は、このままの形では入力できません。原子間に結合を描く必要があります。お手数ですが、上欄及び左側のテンプレートを利用して入力して下さい。具体的には、上欄の「N」と「O」、及び左側の二重結合を用いる事で描画できます。同様に「-COOH」、「-NO<sub>2</sub>」などもこのままの形では入力できません。

**QI** 入力の際、ベンゼン環を並べてピレンを作る方法が分からなかった。

**AI** 二線を共有する構造を一度に描画することはできません。ピレンの場合、フェナントレンを描画後、単結合を追記することで描画可能です。複雑な化合物でしたら、予め MOL 形式で保存された構造を読み込む方が効率的な場合もありますのでお試しください。

## 検索機能

**QJ** 水素「H」の記号がないために完全一致検索が出来なかった。スチレンを検索したが、メチル基のついたものが完全一致で検索された。

**AJ** 描画画面上部の「Other Atom」に「H」を入力することで、「H」を描画することが可能です。これにより特定部位が置換した構造を排除することができます。原子種に水素「H」を追加して欲しいというご要望は、多くの方からいただいております。バージョンアップで対応すべく検討しております。

**QK** 描画完了後に検索したい。

**AK** 描画画面左下の「リアルタイム部分構造検索」のチェックボタンをはずすことで、描画後に検索を開始することができます。

**QL** データベースに登録されていない化合物（群）はあるか。

**AL** 分子量 1,000 以上の化合物やフェロセンは登録されていません。また光学異性体の区別は今の所できません。二つ以上の異なる化合物が入っている場合、検索できる構造は主構造一種のみとなっています。

## 結果表示

**QM** 検索結果の全数はどこかに表示されるのか。どの程度まで絞り込んでいるか判断したい。

**AM** 描画画面下の「部分構造検索」をクリックしますと、ヒット件数が 1000 件以下の場合でしたら画面右下に、例えば次のように表示されます。「検索結果：1-9 of 705」。1000 件を超える場合は、「検索結果：1-9 of (>1000)」となります。

**QN** たとえば酢酸の構造を入力してもビューアーの最初の候補に酢酸ではなく他の構造が表示され、酢酸そのものを捜す上では不便。

**AN** 検索結果の表示順については、多くの皆様から同様のご意見を頂戴しております。バージョンアップ時に、検索結果の並べ替え機能（例えば分子量順）の追加などの対応が可能か検討しております。

今回お答えしたお問い合わせは全体の一部です。これからもご利用になる皆様の声にお応えしてまいります。ご不明な点、お気づきの点がございましたらご一報下さいますようよろしくお願い致します。

(G.TK.)

ミディウムフルオラス向山試薬

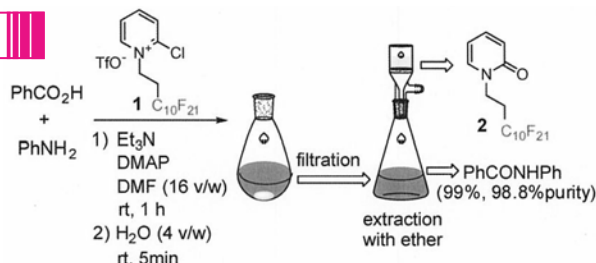
**2-クロロ-1-(3,3,4,4,5,5,6,6,7,7,8,8,9,9,10,10,11,11,12,12,12-ヘンイコサフルオロドデシル)ピリジニウムトリフルオロメタンスルホン酸塩**  
**2-Chloro-1-(3,3,4,4,5,5,6,6,7,7,8,8,9,9,10,10,11,11,12,12,12-henicosafuorododecyl) pyridinium Trifluoromethanesulfonate**

本品はフルオラスタグが導入されたカルボン酸の活性化剤です。フルオラスタグ (C<sub>10</sub>F<sub>21</sub>) が導入されていることにより、反応後溶媒に水を添加することで副生成物が析出、ろ過処理で容易に除去することができます。従来のライトフルオラスタグ、ヘビーフルオラスタグとは異なる特性をもちます。

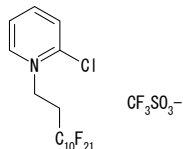
**特長**

■ 分離・回収が容易です。

**使用例**

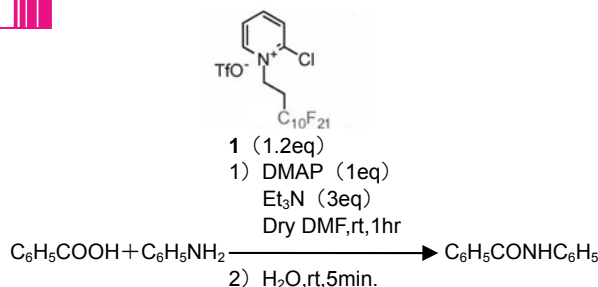


**構造式**



C<sub>17</sub>H<sub>6</sub>ClF<sub>21</sub>N · CF<sub>3</sub>SO<sub>3</sub> = 809.74  
 [1086010-18-5]

**反応例**



**参考文献**

Matsugi M., Suganuma S., Yoshida S., Hasebe S., Kunda Y., Hagihara K., Oka S.: *Tetrahedron Letters*, **49**, 6573-6574 (2008).

コード No.	品名	規格	容量	希望納入価格 (円)
031-20911	2-Chloro-1-(3,3,4,4,5,5,6,6,7,7,8,8,9,9,10,10,11,11,12,12,12-henicosafuorododecyl)pyridinium Trifluoromethanesulfonate	有機合成用	200mg	5,000
037-20913			1g	18,000

**【関連試薬】**

ライトフルオラス向山試薬

コード No.	品名	規格	容量	希望納入価格 (円)
036-20101	2-Chloro-1-(heptadecafluoroundecyl)pyridinium Trifluoromethanesulfonate	有機合成用	200mg	5,000
032-20103			1g	18,000

HPLC 用パッドカラム

コード No.	品名	カラムサイズ	容量	希望納入価格 (円)
001-00030	Wakopak® Fluofix®- II 120E	4.6mmI.D. × 150mm	1本	50,000
001-00030		4.6mmI.D. × 250mm	1本	58,000

(K.I.W.)

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。

**和光純薬工業株式会社**

本社 ☎ 540-8605 大阪市中央区道修町三丁目1番2号 Tel. (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 Tel. (03) 3270-8243 (試薬学術部)

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

Wako Chemicals USA, Inc.  
 http://www.wakousa.com  
 ●Head Office (Richmond, VA)  
 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  
 European Office  
 Tel: +49-2131-311-0

■ご意見・お問い合わせ、本誌のDM新規登録・変更等については、  
**E-mail : org@wako-chem.co.jp** まで  
**URL : http://www.wako-chem.co.jp**

09907.5 学<sub>01</sub>R