

Organic Square

オーガニックスクエア
2011 March NO.35

特別講座

- 2 ノーベル賞受賞式に随行して
北海道大学大学院工学研究院 助教 山本 靖典

グリーンケミストリー

- 4 ボロン酸 1,8-ジアミノナフタレン保護試薬
6 有機トリオールポレート塩
10 (2*R*,2*R'*)-2,2'-(2-ヨード-1,3-フェニレン)ビス(オキシ)ビス(*N*-メチルプロパンアミド)
11 BINAP 系キラルホスフィン配位子
12 Me-BIPAM
12 光学活性アズレン誘導體
13 Maruoka Catalyst

合成材料

- 5 ワコーケミカル新製品紹介
8 重水素標識ボロン酸化合物
14 重水素化ビルディングブロック
15 チオフェン系ポリマー色素及びフラーレン誘導體
16 ドッキングベース化合物ライブラリー
17 ビルディングブロック類
20 テトラヒドロフラン(脱酸素)(安定剤不含)

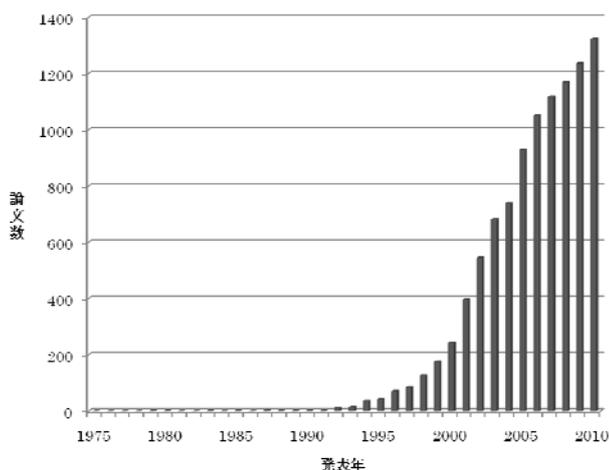
お知らせ

- 18 Siyaku.Com Chemical Search Online
18 “実験科学者”のための計算化学入門セミナー
19 Labo Lock II Series

ノーベル賞受賞式に随行して

北海道大学大学院工学研究院 助教 山本 靖典

2010年10月6日 18:30分過ぎ、Nobel財団の授賞者発表の中継を研究室で見ているとストックホルム大学Bäckball教授が現れた。この分野で研究しておられる多くの研究者がノーベル化学賞に、クロスカップリングが選ばれたと確信した瞬間だったのではないかと思う。R. F. Heck デラウェア大学名誉教授、根岸英一パデュエ大学教授、鈴木章北海道大学名誉教授と受賞者が発表されると、すぐにそれぞれのPCで中継を見ていた学生や先生方が部屋になだれ込み万歳をした。受賞対象となった「有機合成におけるパラジウム触媒クロスカップリング」に関する詳細については、既に多くの報道や解説にまとめられている¹⁾。鈴木カップリングは、有機ホウ素化合物の水や空気中での安定性と副生成物の除去の容易さにより広く応用され社会に貢献したことが高く評価された。Scifinderにより「Suzuki Coupling」をキーワードに検索をすると、その報告数は2000年以降急増し、最近では年間1000報を超える報告がある。特に近年、より複雑な骨格や官能基を有するホウ素化合物を合成する手法が触媒的合成化学により達成され、目的の位置へ直接ホウ素基が導入可能になった²⁾。それとともにホウ素基の修飾も発展した。安定性に優れ、正確な秤量が可能なピナコールボロン酸エステルやトリフルオロボレート塩³⁾により市販される種類も増えた。我々も非水系での反応に利用可能で触媒反応に高活性なトリオールボレート塩を開発し種々の触媒反応の開発に取り組んできた⁴⁾。さらに保護脱保護が容易でクロスカップリングに不活性な有機ホウ素化合物としてボロン酸1,8-ジアミノナフタレン(dan)保護試薬⁵⁾やメチルイミノニ酢酸(MIDA)保護試薬⁶⁾が開発され選択的連続カップリングが可能となりオリゴアレーンの合成が格段に進歩している。本稿では幸運にも受賞式に随行する機会を鈴木先生より頂いたのでその時の様子を報告したい。



Scifinderによる Suzuki Coupling の検索結果
(2011年1月25日)

12月5日 フランクフルト経由で1874年創業のグランドホテルに到着したのは夜10時過ぎ、雪が積もり気温もマイナスで澄んだすっきりした空気だった。宿泊者は受賞者と関係者、ロビーにはノーベルウィークの準備が進められていた。



受賞講演会場アウラ・マグナ

12月6日 8時30分頃からあたりが明るくなり、博物館に寄贈品を届けるため徒歩で10分ほどのノーベル博物館に向かい、受賞者顔合わせに参加させて頂いた。受賞者がノーベルファミリーとして迎えられる行事で、博物館に受賞者ゆかりの物を寄贈することになっている。鈴木先生は書籍「Organoboranes in Organic Syntheses」とパリトキシンの分子模型を寄贈し、恒例の館内のレストランの椅子の座面裏側にサインをされた。



© The Nobel Foundation 2010. Photo: Orasis
受賞講演直前の記念撮影

12月7日 朝からスウェーデン王立科学アカデミー本部にて物理学、化学、経済学賞の各受賞者が揃っての記者会見が開かれた。各受賞者に各国プレスから質問が寄せられ鈴木先生と根岸先生は有機合成化学と好きな分野を純粋に追い続ける大切さを強調しました。15時にはあたりが薄暗くなり日の短さに驚きました。夜は王立科学アカデミーでレセプションがありBäckball教授(化学賞選考委員、ストックホルム大)、Nicolau教授(米)らとお会いでき大変興奮しました。

12月8日 受賞講演 スtockホルム入りしてはじめての晴天、まさに晴れ舞台というにふさわしい日でした。会場のストックホルム大学の講堂アウラ・マグナでHeck先生、根岸先生の講演に続き、鈴木先生が講演した。「1965年から、有機ホウ素化合物を利用する有機合成に関する研究を続け、1970年代の後半頃から遷移金属触媒の存在下、有機ホウ素化合物と有機ハロゲン化合物のクロス・カップリング反応で炭素-炭素結合を作ること考えていた。しかし有機ホウ素化合物の反応性が低く、カップリング反応を実現することができなかった。その後、パラジウム触媒と塩基の存在下、期

待する炭素-炭素結合を作ることが可能であることが明らかになった。」と医薬品、農薬、液晶や有機 EL などへの応用例も含め 30 分のレクチャーの後、聴衆のストックホルム大学の多数の学生が根岸先生、鈴木先生を取り囲みサインを求めた。

12 月 9 日 日本大使主催昼食会が開かれ多くの現地日本人が参加され、こんなにも海外で活躍している日本人がいることに感動した。夕方からはノーベル財団主催レセプションが開かれ、山本尚教授、山本嘉則教授、杉野目道紀教授、Fu 教授らとお話する機会を得た。

12 月 10 日 授賞式、晩餐会

12 月 6 日に試着し裾上げをお願いしてあった燕尾服がホテルの部屋に届けられ、ホテル出発前に鈴木先生と随行団の集合写真を撮影、コンサートホールが儼かな雰囲気になり床にはブルーの絨毯に N に丸模様、各賞の授賞理由の説明と授与の合間にオーケストラの生演奏、ファンファーレの後、鈴木先生が授与されたときは感無量でした。その後、晩餐会のためコンサートホールから市庁舎に移動し 1300 名分の座席表が記された小冊子から自分席を探し着席します。スウェーデンの研究者と同席になり文化の話などしながら食事は前菜、魚料理、デザート の 3 品、合間にミュージカルなどの余興をはさみながら会は 3 時間続きます。その後、2 階にある黄金の間で舞踏会が催されます。フォーマルな印象はなく、激しく賑やかに、招待された学生は朝まで踊り明かすそうです。我々は 11:30 ごろホテルへ戻り、全てのスケジュールが終わった。



黄金の間での舞踏会の様子

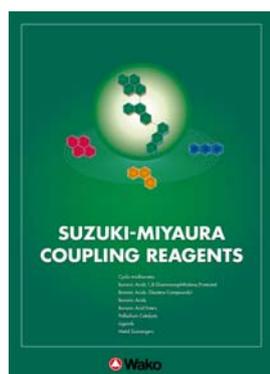
毎日が非日常的な出来事で、本当に貴重な経験をさせていただきました。ストックホルムに行き実際に目の当たりにするノーベル賞は、意外にも市民や学生に開かれたものであることに驚き、また高い志と夢を持って、誠実に研究し続けることの大切さを改めて感じた 1 週間であった。

参考文献

1. a) 化学と工業, 1 月号(2011), b) 現代化学, 11 月号, 12 月号(2010), 1 月号(2011), c) 化学, 12 月号(2010), 1 月号(2011). d) Newton 12 月号(2010), 1 月号(2011). e) 日経サイエンス 12 月号(2010).
2. a) D. G. Hall: "Boronic Acids" Wiley-VHC Verlag GmbH, Weinheim (2005). b) 山本靖典、宮浦憲夫: 有機合成化学協会誌, **66**, 194-204 (2008). c) N. Miyaura: *Bull. Chem. Soc. Jpn*, **81**, 1535-1553 (2008).
3. a) G. A. Molander, D. L. Sandrock: *Current Opinion in Drug Discovery & Development*, **12**, 811-823 (2009). b) G. A. Molander, B. Canturk: *Angew. Chem. Int. Ed.*, **48**, 9240-9261 (2009). c) G. A. Molander, N. Ellis: *Acc. Chem. Res.*, **40**, 275-286 (2007). d) G. A. Molander, R. Figueroa: *Aldrichimica Acta*, **38**, 49-56 (2005).
4. a) 山本靖典、宮浦憲夫: 和光純薬時報, **76**, 2-5 (2008). b) 山本靖典、宮浦憲夫: *Organic Square*, **27**, 2-4 (2009).
5. 杉野目道紀: 和光純薬時報, **78**, 2-6 (2010).
6. E. P. Gillis, M. D. Burke: *Aldrichimica Acta*, **42**, 17-27 (2009).



カール 16 世グスタフ国王よりメダルとディプロマを授与
© The Nobel Foundation 2010. Photo: Frida Westholm



「SUZUKI-MIYAUURA COUPLING REAGENTS」のパンフレットをご用意しています。ご請求ください。

他にも下記のパフレットがございますのでご請求ください。

Acetylene Derivatives
Aromatic Bromide Compounds
Biphenyl Compounds
Boronic Acid
Heterocyclic Compounds
Pyridine Compounds
Organic Electronic Materials

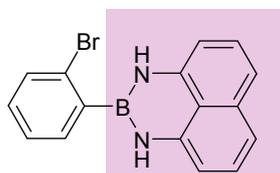
Adamantane Derivatives
Aromatic Fluoride Compounds
Thiol Compounds
Ionic Liquid
Thiophene Derivatives
Wittig & Horner-emmons Reagents
N-BOC Protected Compounds

【カタログ請求先】
Wako Organic Square 係
E-mail : org@wako-chem.co.jp

新たにピリジン骨格を有する試薬を追加しました

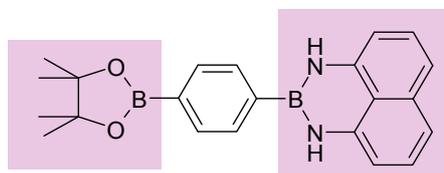
ボロン酸 1,8-ジアミノナフタレン保護試薬

本品はボロン酸を1,8-ジアミノナフタレンで保護した試薬で、鈴木-宮浦カップリング反応を利用してオリゴアレーンを迅速かつ精密に合成できます。1,8-ジアミノナフタレンは鈴木-宮浦カップリング反応条件下（アルカリ性）では安定で、酸水溶液で処理することにより簡単に脱保護され、次の反応に進めます。



B(dan)

o-Bromophenylboronic Acid
1,8-Diaminonaphthalene, Protected
CAS No.927384-42-7



B(pin)

B(dan)

p-Benzenediboronic Acid Pinacol Ester,
1,8-Diaminonaphthalene, Protected
CAS No.950511-16-7

反応例



| $\text{Ar}^1\text{B}(\text{OH})_2$ | $\text{}^x\text{Ar B}(\text{dan})$ | Product | Yield |
|------------------------------------|------------------------------------|---------|-------|
| | | | 95% |
| | | | 99% |

参考文献

- 1) H.Noguchi, T.Shioda, C.-M.Chou, M.Suginome: *Org. Lett.*, **10**, 377(2008).
- 2) H.Noguchi, K.Hojo, M.Suginome: *J. Am. Chem. Soc.*, **129**, 758(2007).

| | | | | |
|--|--|--|---|---|
| <p>3-(2-Bromopyridine)boronic Acid 1,8-Diaminonaphthalene, Protected</p> <p>NEW</p> <p>[-]</p> <p>029-16861 1g 13,000 円 025-16863 5g 46,000 円</p> | <p>5-(2-Bromopyridine)boronic Acid 1,8-Diaminonaphthalene, Protected</p> <p>NEW</p> <p>[-]</p> <p>026-16871 1g 11,000 円 022-16873 5g 39,000 円</p> | <p>5-(3-Bromopyridine)boronic Acid 1,8-Diaminonaphthalene, Protected</p> <p>NEW</p> <p>[-]</p> <p>023-16881 1g 11,000 円 029-16883 5g 39,000 円</p> | <p>m-Aminophenylboronic Acid 1,8-Diaminonaphthalene, Protected</p> <p>NEW</p> <p>[-]</p> <p>016-23421 1g 12,000 円 012-23423 5g 42,000 円</p> | <p>o-Bromophenylboronic Acid 1,8-Diaminonaphthalene, Protected</p> <p>[927384-42-7]</p> <p>026-16631 1g 11,000 円 022-16633 5g 39,000 円</p> |
| <p>m-Bromophenylboronic Acid 1,8-Diaminonaphthalene, Protected</p> <p>[927384-43-8]</p> <p>023-16641 1g 11,000 円 029-16643 5g 39,000 円</p> | <p>p-Bromophenylboronic Acid 1,8-Diaminonaphthalene, Protected</p> <p>[927384-44-9]</p> <p>020-16651 1g 11,000 円 026-16653 5g 39,000 円</p> | <p>o-Benzenediboronic Acid Pinacol Ester, 1,8-Diaminonaphthalene, Protected</p> <p>[950511-18-9]</p> <p>021-16701 1g 15,000 円 027-16703 5g 60,000 円</p> | <p>m-Benzenediboronic Acid Pinacol Ester, 1,8-Diaminonaphthalene, Protected</p> <p>[950511-17-8]</p> <p>028-16711 1g 15,000 円 024-16713 5g 60,000 円</p> | <p>p-Benzenediboronic Acid Pinacol Ester, 1,8-Diaminonaphthalene, Protected</p> <p>[950511-16-7]</p> <p>025-16721 1g 15,000 円 021-16723 5g 60,000 円</p> |

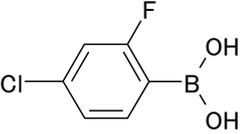
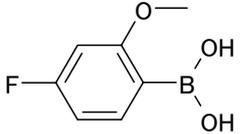
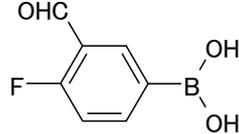
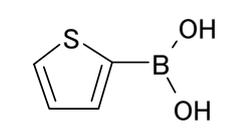
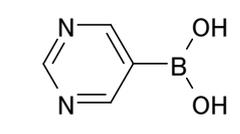
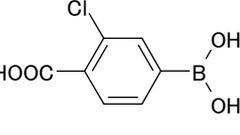
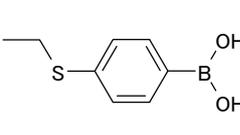
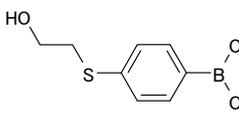
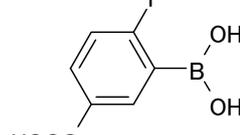
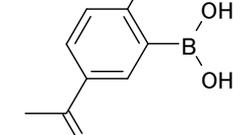
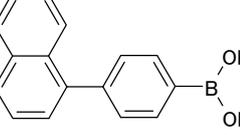
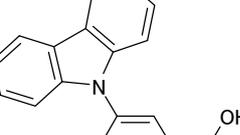
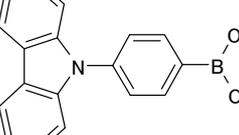
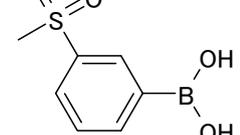
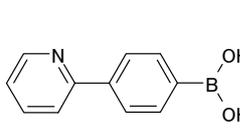
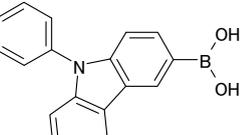
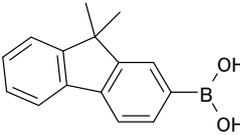
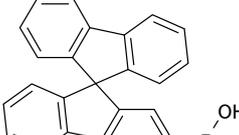
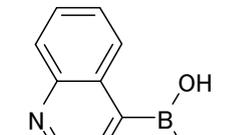
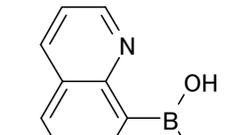
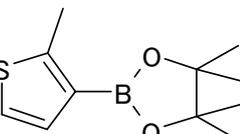
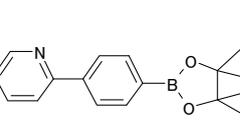
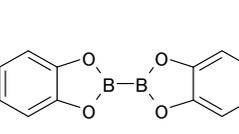
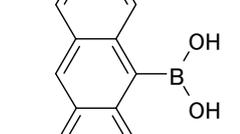
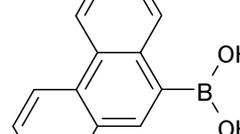
(K.K.)



ワコーケミカル新製品紹介



ボロン酸

| | | | | |
|---|--|--|--|--|
| <p>4-Chloro-2-fluorophenylboronic Acid</p>  <p>[160591-91-3] 351-15511 1g 5,000円 357-15513 5g 15,000円</p> | <p>4-Fluoro-2-methoxyphenylboronic Acid</p>  <p>[179899-07-1] 353-15711 1g 9,000円 359-15713 5g 32,000円</p> | <p>4-Fluoro-3-formylphenylboronic Acid</p>  <p>[374538-01-9] 359-15051 1g 6,000円 355-15053 5g 18,000円</p> | <p>2-Thiopheneboronic Acid</p>  <p>[6165-68-0] 358-15021 1g 4,000円 354-15023 5g 12,000円</p> | <p>5-Pyrimidineboronic Acid</p>  <p>[109299-78-7] 352-15781 1g 8,000円 358-15783 5g 25,000円</p> |
| <p>4-Carboxy-3-chlorophenylboronic Acid</p>  <p>[136496-72-5] 355-19051 1g 10,000円 351-19053 5g 35,000円</p> | <p><i>p</i>-(Ethylthio)phenylboronic Acid</p>  <p>[145349-76-4] 354-15501 1g 5,500円 350-15503 5g 16,000円</p> | <p>4-[(2-Hydroxyethyl)thio]phenylboronic Acid</p>  <p>[-] 356-15321 1g 10,000円 352-15323 5g 36,000円</p> | <p>5-Carboxy-2-fluorophenylboronic Acid</p>  <p>[874219-59-7] 350-19001 1g 12,000円 356-19003 5g 38,000円</p> | <p>(5-Acetyl-2-fluorophenyl)boronic Acid</p>  <p>[870777-29-0] 352-15301 1g 5,000円 358-15303 5g 14,000円</p> |
| <p>4-(1-Naphthyl)phenylboronic Acid</p>  <p>[870774-25-7] 359-15291 1g 6,000円 355-15293 5g 18,000円</p> | <p>3-(9<i>H</i>-Carbazol-9-yl)phenylboronic Acid</p>  <p>[864377-33-3] 351-19151 1g 7,000円 357-19153 5g 21,000円</p> | <p>4-(9<i>H</i>-Carbazol-9-yl)phenylboronic Acid</p>  <p>[419536-33-7] 351-18811 1g 8,000円 357-18813 5g 24,000円</p> | <p><i>m</i>-(Methanesulfonyl)phenylboronic Acid</p>  <p>[373384-18-0] 358-15521 1g 5,500円 354-15523 5g 16,000円</p> | <p>4-(2-Pyridyl)phenylboronic Acid</p>  <p>[-] 357-15851 1g 7,000円 353-15853 5g 22,000円</p> |
| <p>9-Phenylcarbazole-3-boronic Acid</p>  <p>[854952-58-2] 354-16101 1g 8,000円 350-16103 5g 24,000円</p> | <p>9,9-Dimethyl-2-fluoreneboronic Acid</p>  <p>[333432-28-3] 355-15651 1g 8,000円 351-15653 5g 24,000円</p> | <p>9,9'-Spiro(flourene-2-yl)boronic Acid</p>  <p>[236389-21-2] 359-17371 1g 8,000円 355-17373 5g 21,000円</p> | <p>4-Quinolineboronic Acid</p>  <p>[371764-64-6] 359-17871 1g 12,000円 355-17873 5g 46,000円</p> | <p>8-Quinolineboronic Acid</p>  <p>[86-58-8] 356-17381 1g 8,000円 352-17383 5g 23,000円</p> |
| <p>4,4,5,5-Tetramethyl-2-(2-methyl-3-thienyl)-1,3,2-dioxaborolane</p>  <p>[910553-12-7] 359-19071 1g 7,000円 355-19073 5g 22,000円</p> | <p>4-(2-Pyridyl)phenylboronic Acid Pinacol Ester</p>  <p>[908350-80-1] 358-14801 1g 7,500円 354-14803 5g 25,000円</p> | <p>Bis(catecholato)diboron</p>  <p>[13826-27-2] 352-17861 1g 7,500円 358-17863 5g 26,000円</p> | <p>9-Anthraceneboronic Acid</p>  <p>[100622-34-2] 352-15041 1g 6,000円 358-15043 5g 18,000円</p> | <p>9-Phenanthreneboronic Acid</p>  <p>[68572-87-2] 352-15281 1g 3,500円 358-15283 5g 8,500円</p> |

※別容量のご注文にも対応致します。また今回紹介しました製品以外にも、多種取り揃えておりますのでお問い合わせ下さい。

(K.I.W.)

鈴木-宮浦カップリング反応に有用です

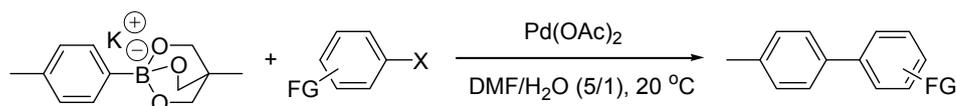
有機トリオールボレート塩

鈴木-宮浦カップリング反応は遷移金属を触媒に用いてアリールボロン酸とハロゲン化アリールからビアリール化合物を合成する手法として非常に有用で、近年最も利用される反応のひとつです。しかし多くのボロン酸は脱水三量化し、環状無水物となるため水の共存下に反応が行われることも少なくありません。また、一般に塩基を加えて反応を行います。塩基性水溶液中では加水分解するものもあり大過剰のボロン酸が必要となる場合もあります。

今回紹介致します有機環状トリオールボレートは宮浦らが開発したアート型錯体構造のボレート試薬で、Pd触媒を用いたクロスカップリング反応では塩基の添加が不要、さらに、水系・非水系どちらの溶媒中でも使用可能という特長を持ち、また、銅触媒を用いるN-アリール化反応にも有効です。

反応例

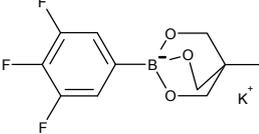
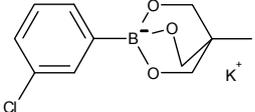
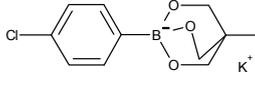
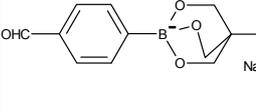
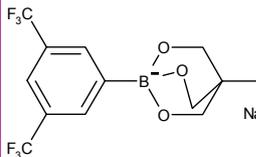
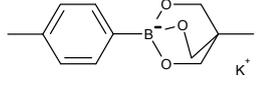
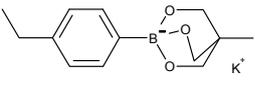
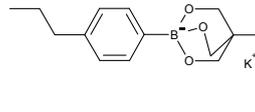
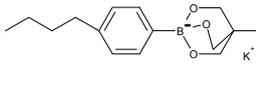
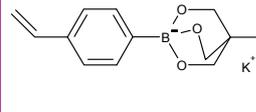
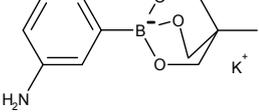
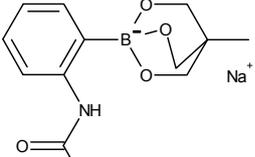
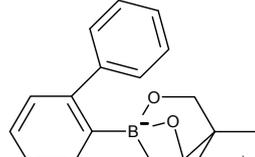
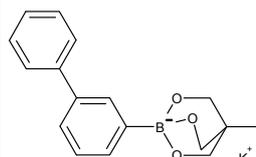
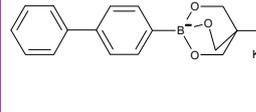
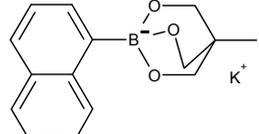
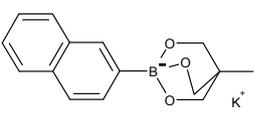
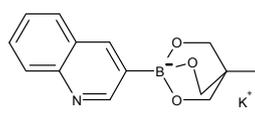
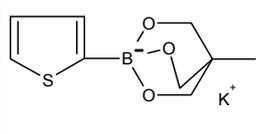
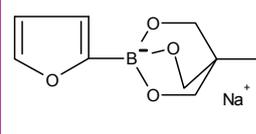
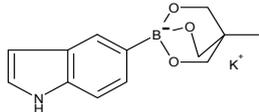
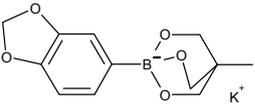
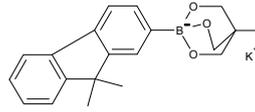
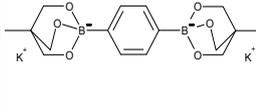
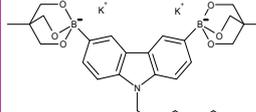
● トリオールボレート塩のビアリールカップリング反応



| X | FG | t[h] | Yield[%] |
|-----|----------------------|------|----------|
| Br | 4-NO ₂ | 5 | 99 |
| Br | 4-COMe | 5 | 99 |
| Br | 4-CO ₂ Me | 5 | 99 |
| Br | 4-Cl | 5 | 99 |
| Br | 2-MeO | 5 | 98 |
| Br | 4-MeO | 5 | 97 |
| OTf | 4-MeO | 22 | 89 |
| Br | 4-NMe ₂ | 22 | 92 |

Angew. Chem. Int. Ed., 47, 928-931 (2008).

| | | | | |
|---|--|--|--|--|
| <p>(2-Pyridine)cyclic-triolborate Lithium Salt</p> <p>[-]</p> <p>163-23761 1g 8,000 円</p> <p>169-23763 5g 26,000 円</p> | <p>(3-Pyridine)cyclic-triolborate Potassium Salt</p> <p>[-]</p> <p>160-23771 1g 9,000 円</p> <p>166-23773 5g 30,000 円</p> | <p>(4-Pyridine)cyclic-triolborate Sodium Salt</p> <p>[-]</p> <p>167-23781 1g 9,000 円</p> <p>163-23783 5g 31,000 円</p> | <p>2-(6-Chloropyridine)cyclic-triolborate Lithium Salt</p> <p>[-]</p> <p>030-21461 1g 20,000 円</p> <p>036-21463 5g 82,000 円</p> | <p>2-(5-Fluoropyridine)cyclic-triolborate Lithium Salt</p> <p>abt. 40%</p> <p>[-]</p> <p>066-05721 1g 28,000 円</p> |
| <p>2-(6-Fluoropyridine)cyclic-triolborate Lithium Salt</p> <p>[-]</p> <p>060-05621 1g 21,000 円</p> <p>066-05623 5g 85,000 円</p> | <p>2-(6-Methoxypyridine)cyclic-triolborate Lithium Salt</p> <p>[-]</p> <p>137-16311 1g 18,000 円</p> <p>133-16313 5g 73,000 円</p> | <p>Phenylcyclic-triolborate Potassium Salt</p> <p>[1014716-89-2]</p> <p>166-24111 1g 6,500 円</p> <p>162-24113 5g 22,000 円</p> | <p>(3-Bromophenyl)cyclic-triolborate Potassium Salt</p> <p>[-]</p> <p>024-16551 1g 12,000 円</p> <p>020-16553 5g 48,000 円</p> | <p>(4-Bromophenyl)cyclic-triolborate Potassium Salt</p> <p>[-]</p> <p>028-16571 1g 13,000 円</p> <p>024-16573 5g 50,000 円</p> |
| <p>(2-Fluorophenyl)cyclic-triolborate Potassium Salt</p> <p>[-]</p> <p>064-05521 1g 8,000 円</p> <p>060-05523 5g 25,000 円</p> | <p>(3-Fluorophenyl)cyclic-triolborate Potassium Salt</p> <p>[-]</p> <p>061-05531 1g 6,000 円</p> <p>067-05533 5g 20,000 円</p> | <p>(4-Fluorophenyl)cyclic-triolborate Potassium Salt</p> <p>[-]</p> <p>068-05541 1g 6,000 円</p> <p>064-05543 5g 19,000 円</p> | <p>(3,4-Difluorophenyl)cyclic-triolborate Potassium Salt</p> <p>[-]</p> <p>041-30841 1g 4,400 円</p> <p>047-30843 5g 13,500 円</p> | <p>(3,5-Difluorophenyl)cyclic-triolborate Potassium Salt</p> <p>[-]</p> <p>048-30851 1g 9,000 円</p> <p>044-30853 5g 31,000 円</p> |

| | | | | |
|--|--|---|---|--|
| <p>(3,4,5-Trifluorophenyl)cyclic-tri- borate Potassium Salt</p>  <p>[] 201-17481 1g 11,000 円 207-17483 5g 43,000 円</p> | <p>(3-Chlorophenyl)cyclic-tri- borate Potassium Salt</p>  <p>[] 032-21281 1g 14,000 円 038-21283 5g 57,000 円</p> | <p>(4-Chlorophenyl)cyclic-tri- borate Potassium Salt</p>  <p>[] 039-21291 1g 7,000 円 035-21293 5g 24,000 円</p> | <p>(4-Formylphenyl)cyclic-tri- borate Sodium Salt</p>  <p>[] 068-05301 1g 6,000 円 064-05303 5g 21,000 円</p> | <p>[3,5-Bis(trifluoromethyl)phenyl]cyclic- tri- borate Sodium Salt</p>  <p>[] 021-16681 1g 12,000 円 027-16683 5g 45,000 円</p> |
| <p>(4-Methylphenyl)cyclic-tri- borate Potassium Salt</p>  <p>[] 134-16061 1g 5,500 円 130-16063 5g 18,000 円</p> | <p>(4-Ethylphenyl)cyclic-tri- borate Potassium Salt</p>  <p>[] 056-07861 1g 5,500 円 052-07863 5g 16,000 円</p> | <p>(4-Propylphenyl)cyclic-tri- borate Potassium Salt</p>  <p>[] 160-24011 1g 5,000 円 166-24013 5g 15,000 円</p> | <p>(4-Butylphenyl)cyclic-tri- borate Potassium Salt</p>  <p>[] 021-16561 1g 22,000 円</p> | <p>(4-Vinylphenyl)cyclic-tri- borate Potassium Salt</p>  <p>[] 224-01841 1g 15,000 円 220-01843 5g 52,000 円</p> |
| <p>(3-Aminophenyl)cyclic-tri- borate Potassium Salt</p>  <p>[] 015-22891 1g 10,000 円 011-22893 5g 36,000 円</p> | <p>(2-Acetamidophenyl)cyclic-tri- borate Sodium Salt</p>  <p>[] 019-23031 1g 23,000 円 015-23033 5g 99,000 円</p> | <p>(2-Biphenyl)cyclic-tri- borate Potassium Salt</p>  <p>[] 021-16321 1g 8,000 円 027-16323 5g 28,000 円</p> | <p>(3-Biphenyl)cyclic-tri- borate Potassium Salt</p>  <p>[] 026-16511 1g 11,500 円 022-16513 5g 43,000 円</p> | <p>(4-Biphenyl)cyclic-tri- borate Potassium Salt</p>  <p>[] 023-16521 1g 9,500 円 029-16523 5g 36,000 円</p> |
| <p>(1-Naphthalene)cyclic-tri- borate Potassium Salt</p>  <p>[] 140-08771 1g 12,000 円 146-08773 5g 43,000 円</p> | <p>(2-Naphthalene)cyclic-tri- borate Potassium Salt</p>  <p>[] 144-08791 1g 10,000 円 140-08793 5g 39,000 円</p> | <p>(3-Quinoline)cyclic-tri- borate Potassium Salt</p>  <p>[] 175-00681 1g 18,000 円 171-00683 5g 63,000 円</p> | <p>(2-Thiophene)cyclic-tri- borate Potassium Salt</p>  <p>[] 204-17611 1g 照会 200-17613 5g 照会</p> | <p>(2-Furan)cyclic-tri- borate Sodium Salt</p>  <p>[] 063-05611 1g 12,000 円 069-05613 5g 43,000 円</p> |
| <p>(5-Indole)cyclic-tri- borate Potassium Salt</p>  <p>[] 099-05851 1g 13,000 円 095-05853 5g 47,000 円</p> | <p>[(3,4-Methylenedioxy)phenyl]cyclic- tri- borate Potassium Salt</p>  <p>[] 136-16141 1g 15,000 円 132-16143 5g 55,000 円</p> | <p>2-(9,9-Dimethylfluorene)cyclic- tri- borate Potassium Salt</p>  <p>[] 042-31091 1g 6,000 円 048-31093 5g 19,500 円</p> | <p>(p-Phenylene)dicyclic-tri- borate Dipotassium Salt</p>  <p>[] 165-24201 1g 16,000 円 161-24203 5g 62,000 円</p> | <p>[3,6-(9-Hexylcarbazole)]dicyclic- tri- borate Dipotassium Salt</p>  <p>[] 080-09121 1g 10,000 円 086-09123 5g 36,000 円</p> |

※別容量のご注文にも対応致します。また各種有機環状トリオールボレート塩を取り揃えておりますのでお問い合わせ下さい。
(K.K.)

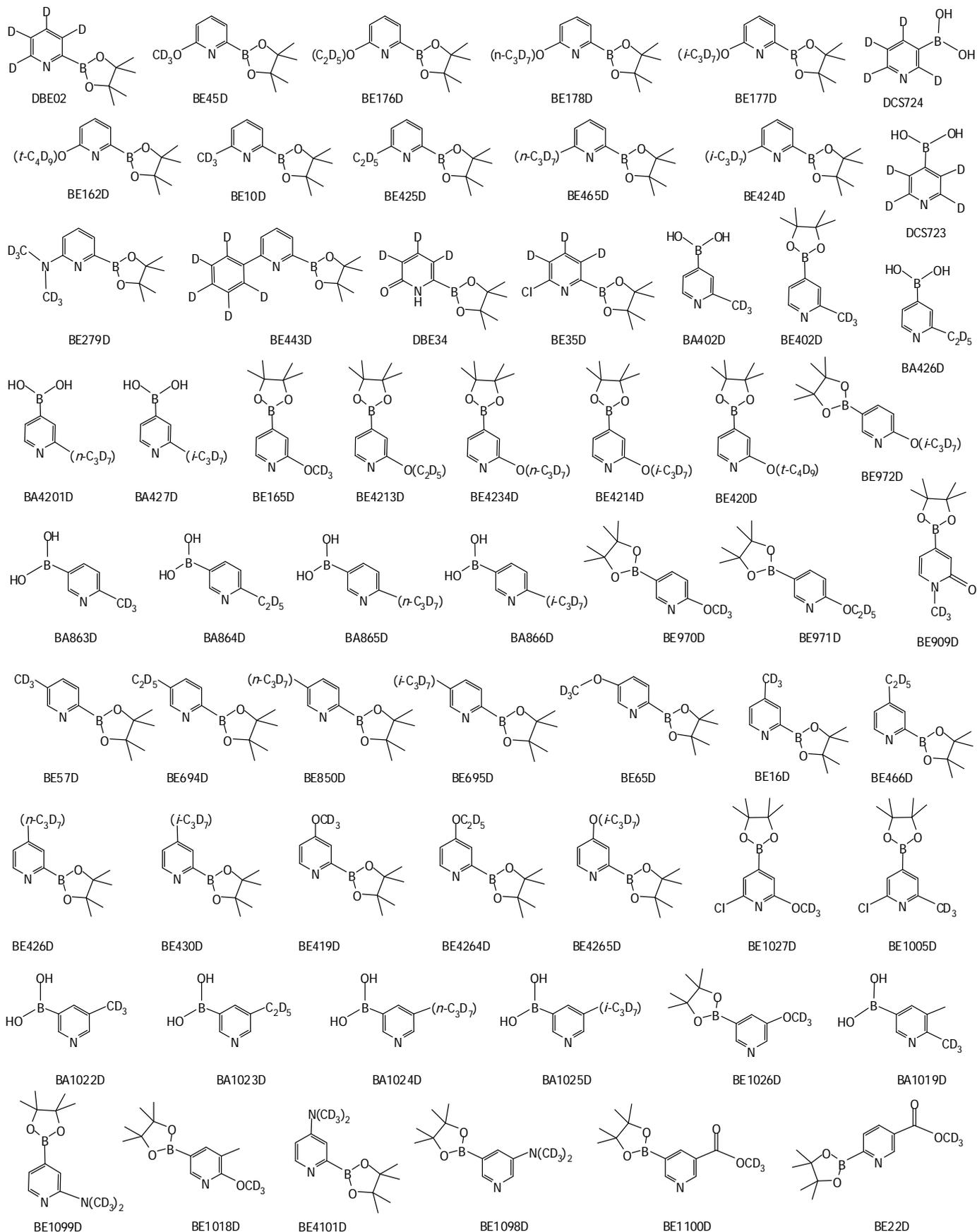


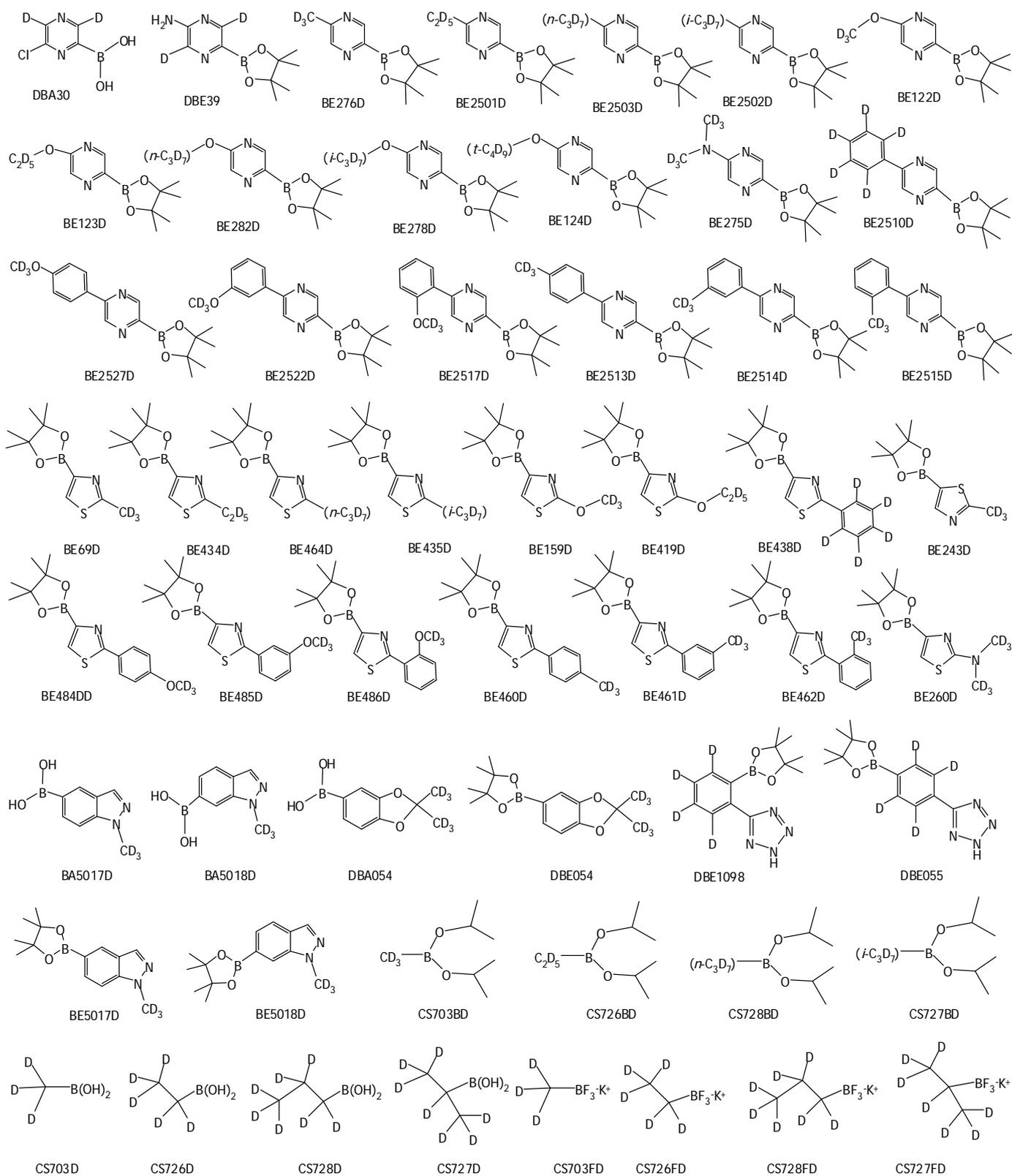
鈴木-宮浦カップリング反応試薬

重水素標識ボロン酸化合物

CombiPhos Catalysts, Inc.

CombiPhos 社では、様々な重水素化ホウ素化合物を取り揃えております。鈴木-宮浦カップリング反応を用いてクロスカップリングさせることにより、目的の重水素標識化合物を合成することができます。ここでは重水素化ホウ素化合物の一部を紹介いたします。





上記以外の重水素化ホウ素化合物も取り揃えています。お気軽にお問い合わせください。
(U.TN.)

キラル超原子価ヨウ素触媒

(2*R*,2*R'*)-2,2'-(2-ヨード-1,3-フェニレン)ビス(オキシ)ビス(*N*-メチルプロパンアミド)



光学活性化合物を合成するには不斉金属触媒が用いられています。その金属イオンには、パラジウムやルテニウムなどのレアメタルや、クロム、マンガ、オスミウムなどの有害元素が利用されてきました。近年、グリーンケミストリーの観点から環境調和型触媒の開発が求められています。

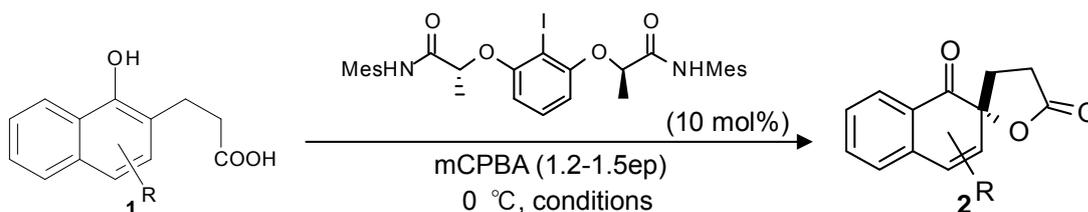
日本のヨウ素生産量はチリに次いで世界第2位であり、生産量のほとんどが千葉県南関東ガス田から産出する地下水から生産されており、日本にとって貴重な輸出資源です。ヨウ素はハロゲン元素のなかでも原子サイズが大きく、分極しやすく電気陰性度も小さいため、その原子価を容易に拡張し、オクテット則を超える超原子価ヨウ素(Ⅲ,Ⅴ,Ⅶ価)を形成することが知られています。このように、遷移金属に似た酸化・還元機能を有していることからヨウ素元素は注目されています。

今回ご紹介する製品は、名古屋大学の石原一彰教授が開発したキラル超原子価ヨウ素触媒です¹⁾²⁾。酸化剤として、立命館大学の北泰行教授が開発したヒドロキシナフチルカルボン酸の不斉分子内酸化的カップリング反応(北スピロラクトン化反応³⁾)に用いると89~94%の不斉収率を達成しました。これにより、医薬品中間体として有用なスピロラクトンの高い選択性で得られるようになりました。さらに、触媒前駆体を共酸化剤存在下で反応に用いると83~91%の不斉収率で生成物を与えました。この選択性は超原子価ヨウ素触媒技術としては最高レベルです。

特徴

- 触媒量で高い光学純度のスピロラクトンが得られる。
- 安価に入手可能なL-乳酸をキラル源に用いている。
- メタクロロ過安息香酸により反応系中で超原子価ヨウ素を発生させる。

反応例



| Entry | 2 (R) | Conditions | Yield (%) | ee (%) |
|-------|----------------------------------|---|-----------|------------------------|
| 1 | 2a (4-Me) | CHCl ₃ /CH ₃ NO ₂ , 17h | 59 | 84 |
| 2 | 2b (4-Cl) | CHCl ₃ , 30h | 72 | 90 |
| 3 | 2c (4-Br) | CHCl ₃ , 16h | 67 | 85 (98) ^{a)} |
| 4 | 2d (4-Ph) | CHCl ₃ , 27h | 62 | 87 (98) ^{a)} |
| 5 | 2e (4-COPh) ^{b)} | CHCl ₃ /CH ₃ NO ₂ (2:1), 16h | 94 | 83 (>99) ^{a)} |
| 6 | 2f (4-COAr) ^{c)} | CHCl ₃ /CH ₃ NO ₂ (2:1), 30h | 92 | 84 |
| 7 | 2g (6-OMe) | CHCl ₃ /CH ₃ NO ₂ (2:1), 18h | 40 | 87 |

a) After a single recrystallization. b) Compound **2e** was obtained in 67% yield and 91% ee under conditions: CHCl₃, 0°C 27 h. c) Ar=4-BrC₆H₄.

参考文献

- 1) M. Uyanik, T. Yasui, K. Ishihara: *Angew. Chem. Int. Ed.*, **49**, 2175 (2010).
- 2) M. Uyanik, T. Yasui, K. Ishihara: *Tetrahedron*, **66**, 5841(2010).
- 3) T. Dohi, A. Maruyama, N. Takenaga, K. Senami, Y. Minamitsuji, H. Fujioka, S. B. Caemmerer, Y. Kita: *Angew. Chem. Int. Ed.*, **47**, 3787, (2008).

| コード No. | 品名 | 規格 | 容量 | 希望納入価格(円) |
|-----------|--|-------|-------|-----------|
| 095-06051 | (2 <i>R</i> ,2 <i>R'</i>)-2,2'-(2-ヨード-1,3-フェニレン)ビス(オキシ)ビス | 有機合成用 | 250mg | 7,500 |
| 091-06053 | (<i>N</i> -メチルプロパンアミド) | | 1g | 19,500 |

(K.IW.)

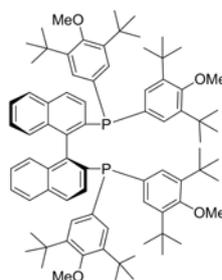


不斉水素化反応に有用

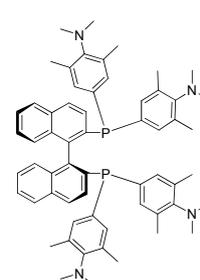
BINAP 系キラルホスフィン配位子



本品は光学活性物質の合成に使用される BINAP 系のキラルホスフィン配位子です。多くの基質に対して BINAP に優る不斉誘起を示します。反応の一例として Rh や Ru を用いた場合には、オレフィンの不斉還元を使用することができます。空気中でも比較的安定で、様々な溶媒において利用することができます。

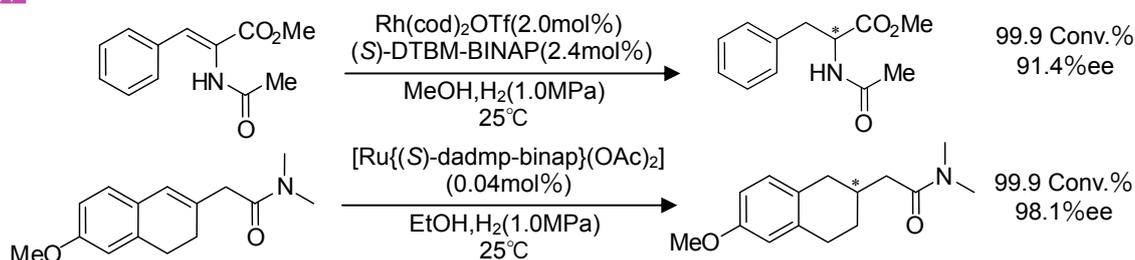


(S)-(-)-2,2'-Bis[bis(3,5-di-*tert*-butyl-4-methoxyphenyl)phosphino]-1,1'-binaphthyl
[(S)-(-)-DTBM-BINAP]
CAS No. 541502-07-2



(S)-(-)-2,2'-Bis[bis(4-dimethylamino-3,5-dimethylphenyl)phosphino]-1,1'-binaphthyl
[(S)-(-)-DADMP-BINAP]
CAS No. 930784-40-0

反応例



参考文献

- 1) 後藤充孝、山野光久、川口信治：特許 4489416
- 2) 後藤充孝、山野光久、川口信治：特許 4523227
- 3) 後藤充孝、山野光久、川口信治：WO 2007/034975 A1

| コード No. | 品名 | 規格 | 容量 | 希望納入価格(円) |
|-----------|--|-------|-------|-----------|
| 028-16951 | (S)-(-)-2,2'-Bis[bis(3,5-di- <i>tert</i> -butyl-4-methoxyphenyl)phosphino]-1,1'-binaphthyl | 有機合成用 | 250mg | 15,000 |
| 024-16953 | | | 1g | 43,000 |
| 025-16961 | (S)-(-)-2,2'-Bis[bis(4-dimethylamino-3,5-dimethylphenyl)phosphino]-1,1'-binaphthyl | 有機合成用 | 250mg | 16,000 |
| 021-16963 | | | 1g | 49,000 |

本品は武田薬品工業株式会社よりライセンスを受けて販売しております。

【関連製品】

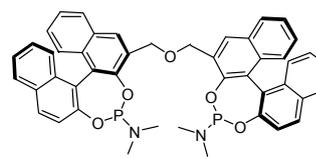
| コード No. | 品名 | 規格 | 容量 | 希望納入価格(円) |
|-----------|---|-------|-------|-----------|
| 027-16661 | (R)-BINAP-TMPTA Polymer | 有機合成用 | 100mg | 11,000 |
| 023-16663 | | | 500mg | 40,000 |
| 024-16671 | (S)-BINAP-TMPTA Polymer | 有機合成用 | 100mg | 11,000 |
| 020-16673 | | | 500mg | 40,000 |
| 025-16461 | (R)-(+)-2,2'-Bis(diphenylphosphinoyl)-5,5'-diiodo-1,1'-binaphthyl | 有機合成用 | 100mg | 8,000 |
| 021-16463 | | | 1g | 45,000 |
| 022-16471 | (S)-(-)-2,2'-Bis(diphenylphosphinoyl)-5,5'-diiodo-1,1'-binaphthyl | 有機合成用 | 100mg | 8,000 |
| 028-16473 | | | 1g | 45,000 |
| 325-91691 | (+/-)-2,2'-Bis(diphenylphosphino)-1,1'-binaphthyl | | 1g | 8,000 |
| 321-91693 | | | 5g | 18,000 |
| 328-91701 | (R)-(+)-2,2'-Bis(diphenylphosphino)-1,1'-binaphthyl | | 1g | 9,000 |
| 324-91703 | | | 5g | 27,000 |
| 325-91711 | (S)-(-)-2,2'-Bis(diphenylphosphino)-1,1'-binaphthyl | | 1g | 9,000 |
| 321-91713 | | | 5g | 27,000 |
| 028-16071 | (R)-(+)-1,1'-Bi-2-naphthol | 有機合成用 | 5g | 7,000 |
| 026-16072 | | | 25g | 21,000 |
| 025-16081 | (S)-(-)-1,1'-Bi-2-naphthol | 有機合成用 | 5g | 7,000 |
| 023-16082 | | | 25g | 21,000 |
| 048-30611 | | | 1g | 3,900 |
| 044-30613 | (1 <i>R</i> ,2 <i>R</i>)-(+)-1,2-Diphenylethylenediamine | 有機合成用 | 5g | 12,000 |
| 046-30612 | | | 25g | 42,000 |
| 045-30621 | | | 1g | 3,900 |
| 041-30623 | (1 <i>S</i> ,2 <i>S</i>)-(-)-1,2-Diphenylethylenediamine | 有機合成用 | 5g | 12,000 |
| 043-30622 | | | 25g | 42,000 |

(K.K.)

キラル配位子
Me-BIPAM



二座ホスホロアミダイト型のキラル配位子です。ロジウム触媒によるアリールボロン酸の不斉共役付加反応などで良好な収率、選択性が得られます。

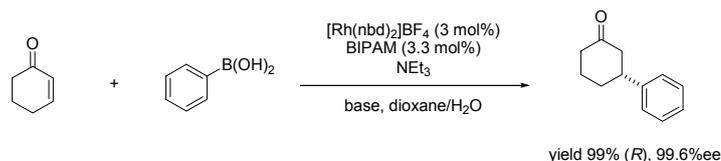


(R) - Me-BIPAM
C₄₆H₃₈N₂O₅P₂=760.75

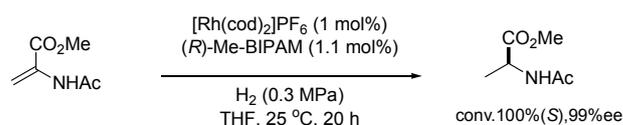
2,2'-[Oxybis(methylene)]bis[dinaphtho[2,1-d':1',2'-f][1,3,2]dioxaphosphepin-4-yl]dimethylamine **Bisphosphoramidite**

反応例

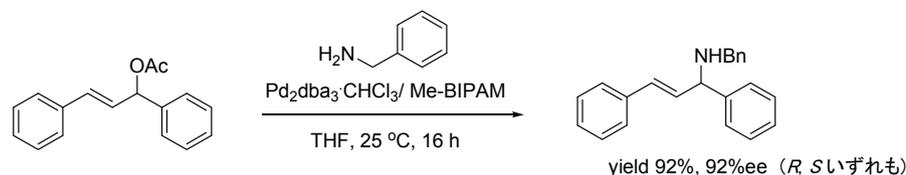
● Rh 触媒を用いる不斉共役付加反応



● Rh 触媒を用いる不斉水素化反応



● Pd 触媒を用いる不斉アリル位アミノ化反応



| コード No. | 品名 | 規格 | 容量 | 希望納入価格(円) |
|-----------|------------------|-------|-------|-----------|
| 139-15411 | (R)-(-)-Me-BIPAM | 有機合成用 | 200mg | 28,000 |
| 136-15421 | (S)-(+)-Me-BIPAM | 有機合成用 | 200mg | 28,000 |

参考文献

1) 山本靖典, 宮浦憲夫: *Organic Square*, **20**, 2 (2007).

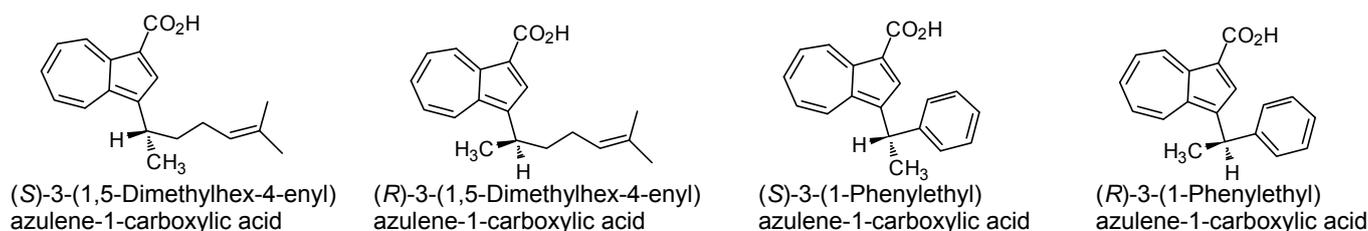
(K.I.W.)

光学活性アズレン誘導体



アズレンは「アズレンブルー」と称される紫紺色の化合物です。アズレン誘導体は、置換基の種類や位置に依存した色を示すことで知られており、各種医薬品、電子工業用原料として利用されています。本化合物は光学活性を有するアズレン誘導体であり、各種合成原料としてご利用いただけます。

また本化合物を酸塩化物に誘導後反応させることで、紫外・可視領域に吸収を有さないラセミ化合物をジアステレオマー混合物として目視で分離することが可能となります。



| コード No. | 品名 | 規格 | 容量 | 希望納入価格(円) |
|-----------|---|-------|-------|-----------|
| 045-31461 | (S)-3-(1,5-Dimethyl-4-hexenyl)azulene-1-carboxylic acid | 光学分割用 | 100mg | 16,000 |
| 048-31451 | (R)-3-(1,5-Dimethyl-4-hexenyl)azulene-1-carboxylic acid | 光学分割用 | 100mg | 16,000 |
| 164-24651 | (S)-3-(1-Phenylethyl)azulene-1-carboxylic acid | 光学分割用 | 100mg | 16,000 |
| 167-24641 | (R)-3-(1-Phenylethyl)azulene-1-carboxylic acid | 光学分割用 | 100mg | 16,000 |

(S.Y.)



キラル相間移動触媒

Maruoka Catalyst

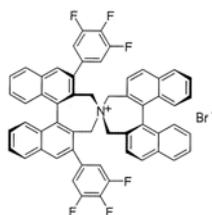


分子デザインの容易なビナフチル環を二つ有するスピロ型光学活性アンモニウム塩であるキラル相間移動触媒が、京都大学の丸岡教授によって考案されました。

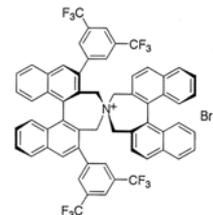
この(*R,R*)-3,4,5-Trifluorophenyl-NAS Bromide は、 α -アミノ酸誘導体の不斉アルキル化反応において高い触媒活性、高エナンチオ選択性を発現します¹⁾。

また、(*R,R*)-3,5-Bistrifluoromethylphenyl-NAS Bromide ではグリシン誘導体とアルデヒドとのアルドール反応により生理活性ペプチドの重要なキラルユニットとなる β -ヒドロキシ- α -アミノ酸誘導体を高収率で得ることができます。さらに、主生成物であるエリトロ異性体が高エナンチオ選択的に得られることが見いだされました²⁾。

構造式



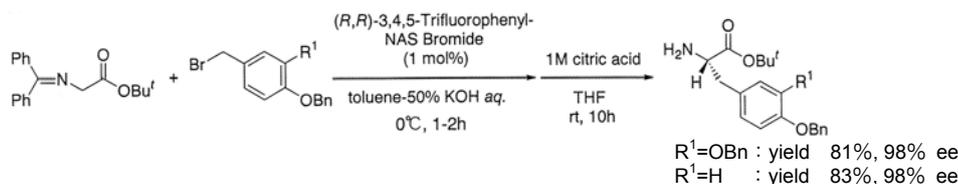
(*R,R*)-3,4,5-Trifluorophenyl-NAS Bromide
Maruoka catalyst *RR*-Trifluorophenyl Br Form



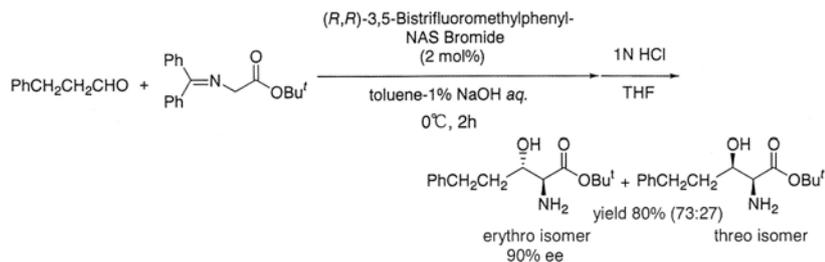
(*R,R*)-3,5-Bistrifluoromethylphenyl-NAS Bromide
Maruoka catalyst *RR*-Bistrifluoromethylphenyl Br Form

反応例

● α -アミノ酸誘導体の不斉アルキル化反応¹⁾



● β -ヒドロキシ- α -アミノ酸誘導体への直接不斉アルドール反応²⁾



| コード No. | 品名 | 規格 | 容量 | 希望納入価格(円) |
|-----------|--|-------|-------|-----------|
| 201-15921 | (R,R)-3,4,5-Trifluorophenyl-NAS Bromide | 有機合成用 | 100mg | 30,000 |
| 207-15923 | | | 500mg | 照会 |
| 201-16401 | (S,S)-3,4,5-Trifluorophenyl-NAS Bromide | 有機合成用 | 100mg | 30,000 |
| 207-16403 | | | 500mg | 照会 |
| 029-14921 | (R,R)-3,5-Bistrifluoromethylphenyl-NAS Bromide | 有機合成用 | 100mg | 30,000 |
| 025-14923 | | | 500mg | 照会 |
| 026-16251 | (S,S)-3,5-Bistrifluoromethylphenyl-NAS Bromide | 有機合成用 | 100mg | 30,000 |
| 022-16253 | | | 500mg | 照会 |

参考文献

- 1) T. Ooi, M. Kameda, H. Tannai, K. Maruoka : *Tetrahedron Lett.*, **41**, 8339 (2000).
- 2) T. Ooi, M. Taniguchi, M. Kameda, K. Maruoka : *Angew. Chem. Int. Ed.*, **41**, 4542 (2002).

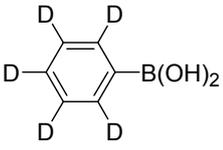
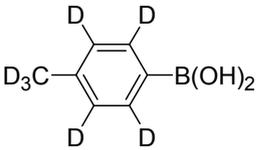
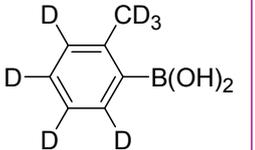
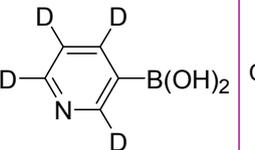
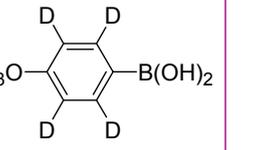
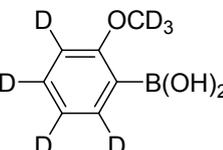
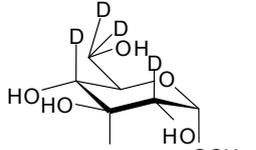
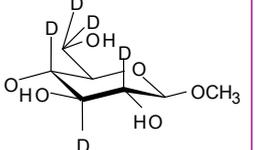
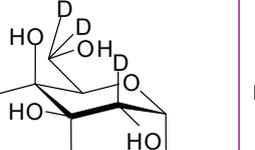
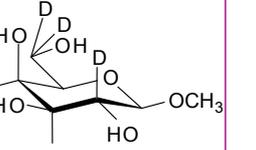
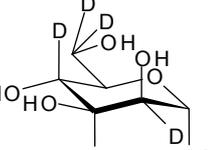
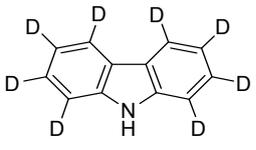
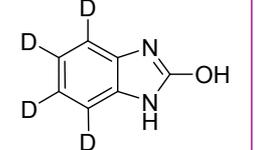
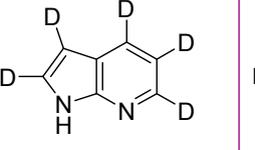
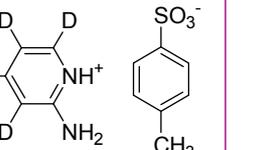
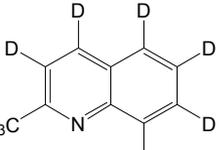
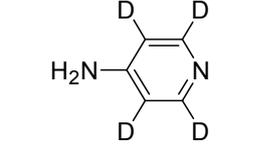
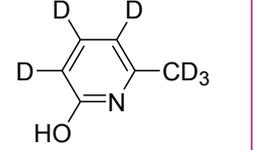
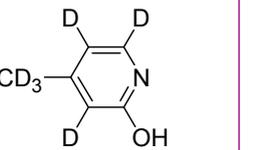
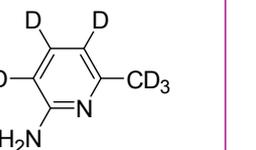
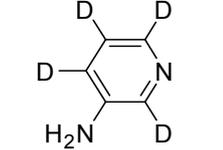
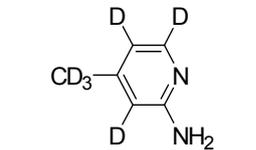
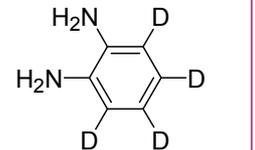
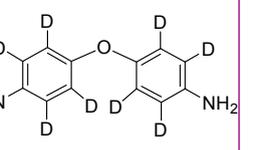
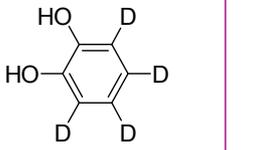
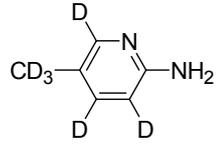
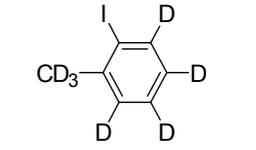
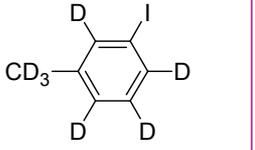
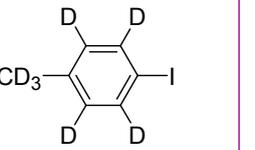
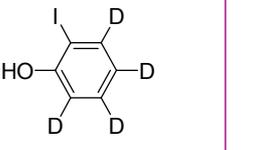
(K.IW.)

重水素化ビルディングブロック



古くから薬物動態に利用されてきた重水素化合物は、分析機器の発達に伴い微量定量分析の内部標準物質として、また近年は有機 EL や光ファイバーなどの電子工業材料としても利用されています。最近では、ヘビードラッグ¹⁾ (重水素化された医薬品) が、元の医薬品と比較し生体内での代謝分解作用に対する抵抗性を示すことから、薬効を持続させる可能性があるとして、新薬開発の分野での用途が注目されています。当社では特色ある合成の一つとして重水素化率の高い化合物を簡便に合成する重水素交換反応²⁾を開発し、広範な重水素化合物を安価かつ大量に提供しています。

※New

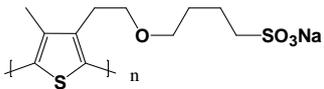
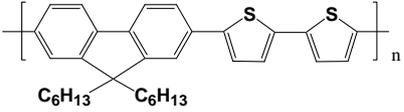
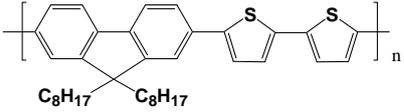
| | | | | |
|--|---|---|--|---|
| <p>※ Phenyl-d₅-boronic Acid</p>  <p>167-24521 1g 22,000円</p> | <p>※ p-Methylphenyl-d₇-boronic Acid</p>  <p>133-16651 500mg 70,000円</p> | <p>※ o-Methylphenyl-d₇-boronic Acid</p>  <p>130-16661 500mg 70,000円</p> | <p>※ 3-pyridine-d₄-boronic Acid</p>  <p>161-24781 500mg 70,000円</p> | <p>※ p-Methoxyphenyl-d₇-boronic Acid</p>  <p>139-16751 500mg 90,000円</p> |
| <p>※ o-Methoxyphenyl-d₇-boronic Acid</p>  <p>136-16761 500mg 90,000円</p> | <p>※ Methyl α-D-Glucopyranoside-2,3,4,6,6-d₅</p>  <p>138-16461 1g 60,000円</p> | <p>※ Methyl β-D-Glucopyranoside-2,3,4,6,6-d₅</p>  <p>135-16471 1g 60,000円</p> | <p>※ Methyl α-D-Galactopyranoside-2,3,4,6,6-d₅</p>  <p>132-16481 1g 60,000円</p> | <p>※ Methyl β-D-Galactopyranoside-2,3,4,6,6-d₅</p>  <p>139-16491 1g 60,000円</p> |
| <p>※ Methyl α-D-Mannopyranoside-2,3,4,6,6-d₅</p>  <p>132-16501 1g 60,000円</p> | <p>Carbazole-1,2,3,4,5,6,7,8-d₈</p>  <p>033-20971 1g 80,000円</p> | <p>2-Hydroxybenzimidazole-4,5,6,7-d₄</p>  <p>083-08991 1g 80,000円</p> | <p>7-Azaindole-2,3,4,5,6-d₅</p>  <p>014-22501 1g 80,000円</p> | <p>2-Aminopyridinium-3,4,5,6-d₄ p-Toluenesulfonate</p>  <p>016-22441 1g 68,000円</p> |
| <p>2-(Methyl-d₃)-8-quinolinol-3,4,5,6,7-d₅</p>  <p>131-16071 1g 80,000円</p> | <p>4-Aminopyridine-2,3,5,6-d₄</p>  <p>010-22461 1g 80,000円</p> | <p>2-Hydroxy-6-(methyl-d₃)pyridine-3,4,5-d₃</p>  <p>089-08971 1g 80,000円</p> | <p>2-Hydroxy-4-(methyl-d₃)pyridine-3,5,6-d₃</p>  <p>086-08981 1g 80,000円</p> | <p>2-Amino-6-(methyl-d₃)pyridine-3,4,5-d₃</p>  <p>017-22471 1g 80,000円</p> |
| <p>3-Aminopyridine-2,4,5,6-d₄</p>  <p>013-22451 1g 80,000円</p> | <p>2-Amino-4-(methyl-d₃)pyridine-3,5,6-d₃</p>  <p>011-22491 1g 80,000円</p> | <p>o-Phenylenediamine-3,4,5,6-d₄</p>  <p>164-23931 1g 80,000円</p> | <p>4,4'-Diaminodi(phenyl-2,3,5,6-d₄)Ether</p>  <p>049-30901 1g 80,000円</p> | <p>Pyrocatechol-3,4,5,6-d₄</p>  <p>167-23921 1g 60,000円</p> |
| <p>2-Amino-5-(methyl-d₃)pyridine-3,4,6-d₃</p>  <p>014-22481 1g 80,000円</p> | <p>o-Iodotoluene-d₇</p>  <p>095-05691 500mg 70,000円</p> | <p>m-Iodotoluene-d₇</p>  <p>098-05701 500mg 70,000円</p> | <p>p-Iodotoluene-d₇</p>  <p>095-05711 500mg 70,000円</p> | <p>o-Iodophenol-3,4,5,6-d₄</p>  <p>095-05711 500mg 70,000円</p> |

参考文献

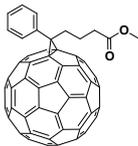
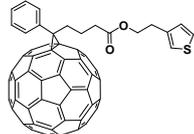
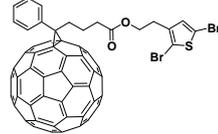
1) 佐藤健太郎: *Organic Square.*, **33**, 2 (2010).

2) 江崎啓祥, 栗田貴教, 藤原佑太, 前川智弘, 門口泰也, 佐治木弘尚: *有機合成化学協会誌*, **65**, 1179 (2007).

(T.S.)

| 品名 | $\lambda_{Abs}/\lambda_{PL}/$ 参考 M.W. | メーカーコード | 容量 | 希望納入価格(円) |
|---|--|----------|-------|-----------|
| Poly[2-(3-thienyl)ethoxy-4-butylsulfonate] sodium salt  | λ_{Abs} : 457 nm (pH >7) 770 nm (pH <7) λ_{PL} : 575 nm (pH >7) 566 nm (pH <7) M.W. : 80,000~1,000,000 | ADS2000P | 100mg | 21,800 |
| | | | 500mg | 65,300 |
| | | | 1g | 114,600 |
| | | | 2g | 200,100 |
| | | | 5g | 427,800 |
| | | | 10g | 797,500 |
| Poly[(9,9-dihexylfluorenyl-2,7-diyl)-alt-co-(bithiophene)]  | λ_{Abs} : 451 nm (in THF) 457 nm (film) λ_{PL} : 495 nm (in THF) 552 nm (film) M.W. : 10,000~100,000 | ADS2006P | 100mg | 21,800 |
| | | | 500mg | 65,300 |
| | | | 1g | 114,600 |
| | | | 2g | 200,100 |
| | | | 5g | 427,800 |
| | | | 10g | 797,500 |
| Poly[(9,9-dioctylfluorenyl-2,7-diyl)-alt-co-(bithiophene)]  | λ_{Abs} : 454 nm (in THF) N/A (film) λ_{PL} : 495 nm (in THF) 552 nm (film) M.W. : 10,000~100,000 | ADS2008P | 100mg | 21,800 |
| | | | 500mg | 65,300 |
| | | | 1g | 114,600 |
| | | | 2g | 200,100 |
| | | | 5g | 427,800 |
| | | | 10g | 797,500 |

フラーレン誘導体

| 品名 | $\lambda_{Abs}/\lambda_{PL}/$ 参考 M.W. | メーカーコード | 容量 | 希望納入価格(円) |
|---|--|----------|-------|-----------|
| [6,6]-Phenyl-C61 butyric acid methyl ester (PCBM)  | λ_{Abs} : 341 nm, 535 nm (in Toluene) λ_{PL} : N/A | ADS61BFA | 100mg | 27,600 |
| | | | 500mg | 71,100 |
| | | | 1g | 114,600 |
| | | | 2g | 200,100 |
| | | | 5g | 456,800 |
| | | | 10g | 855,500 |
| [6,6]-Phenyl-C61 butyric acid (3-ethylthiophene) ester  | λ_{Abs} : 342 nm (in Toluene) λ_{PL} : N/A | ADS64BFA | 100mg | 33,400 |
| | | | 500mg | 129,100 |
| | | | 1g | 216,100 |
| | | | 2g | 403,100 |
| | | | 5g | 935,300 |
| [6,6]-Phenyl-C61 butyric acid (2,5-dibromo-3-ethylthiophene) ester  | λ_{Abs} : 335 nm (in Toluene) λ_{PL} : N/A | ADS65BFA | 100mg | 114,600 |
| | | | 500mg | 201,600 |
| | | | 1g | 375,600 |
| | | | 2g | 722,100 |
| | | | 5g | 1,732,800 |

* ご使用の際には精製されることをお勧めします。
(U.TN.)

Otava 社 ドッキングベース化合物ライブラリー



Otava 社はユニークなドッキングベース化合物ライブラリーを提供しています。これらは同社が持つ約 50 万品目の化合物をレセプターに対する結合性で評価し、選定されたライブラリーです。

結合性の評価は、リガンドにおける活性部位の立体構造情報から、仮想的に各化合物の立体構造をはめ込んで、水素結合等の結合性をコンピューター計算に基づいてなされています。

下に示しますように、ターゲット毎に約 2000 品目の化合物が用意されています。

これらは単独での阻害活性等は確認されておりませんが、医薬品類似化合物との組み合わせにより、より強力な医薬品の発見が期待できます。

各ライブラリーの構造式データ (SD ファイル) と価格表 (購入品目数と容量による) をご用意しておりますのでご請求下さい。

【各ライブラリーのターゲットタンパク質と品目数】

| ターゲットタンパク質 | 品目数 |
|---|------|
| 3-phosphoinositide-dependent kinase 1 (PDK1) | 1926 |
| Aurora B kinase | 1987 |
| cAMP dependent protein kinase (PKA) | 1872 |
| c-Jun N-terminal protein kinase 2 (JNK2) | 1774 |
| Cyclin dependent kinase 2 (CDK2) | 1281 |
| Death-associated protein kinase 1 (DAPK1) | 1962 |
| Death-associated protein kinase 2 (DAPK2) | 2025 |
| Death-associated protein kinase 3 (DAPK3) | 1814 |
| Extracellular signal-regulated kinase 2 (ERK2) | 2053 |
| Fibroblast growth factor receptor 1 tyrosine kinase (FGFR1TK) | 1760 |
| Glycogen synthase kinase 3 (GSK3) | 980 |
| Janus kinase 2 (JAK2) | 2190 |
| P21-Activated kinase 1 (PAK1) | 2024 |
| p38 MAP kinase alpha | 2221 |
| Phosphatidylinositol 3-kinase (PI3K) | 1615 |
| Proto-oncogene tyrosine-protein kinase ABL1 | 2048 |
| Serine/Threonine-protein kinase CHK1 | 1946 |
| Vascular endothelial growth factor receptor 2 (VEGFR2) | 2235 |

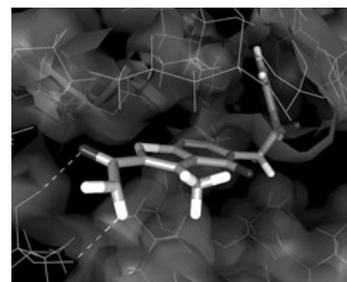


図1 リガンドにおける PAK1 活性部位に結合する PAK1 focused library の一例

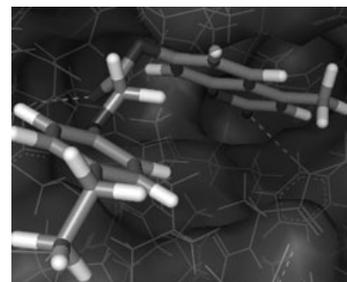


図2 リガンドにおける CHK1 活性部位に結合する CHK1 focused library の一例

(U.N.)



ChemBridge Co.

ビルディングブロック類



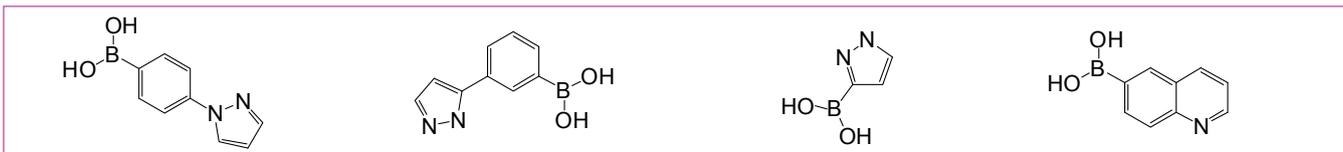
ChemBridge社は、“Discovery Chemistry”分野におけるリーディングカンパニーの1つです。この度当社では、同社の“Building Blocks”製品の取扱いを開始いたしました。

- 13,000 品目以上の Building Blocks Collection
- 1g & 5g 包装はメーカーにて常時在庫
- NMR & LC-MS で品質管理を行い、95%以上の純度を保証
- 1~25g スケールで提供可能

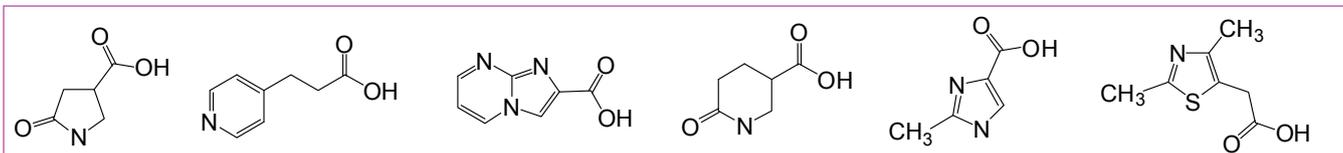


製品例

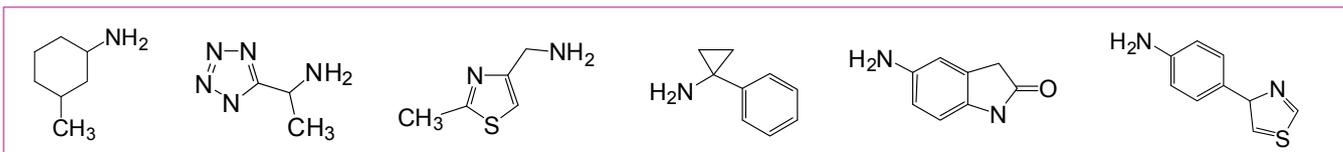
● Boronic acids



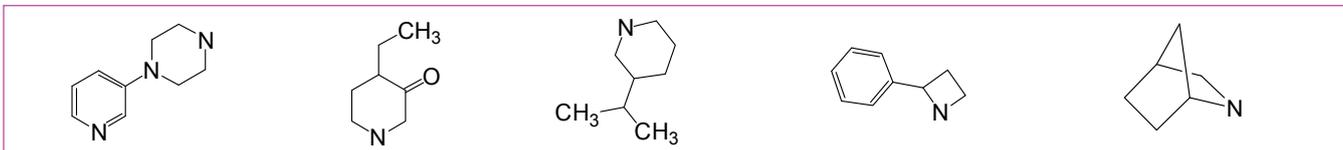
● Carboxylic acids



● Primary amines (aliphatic)

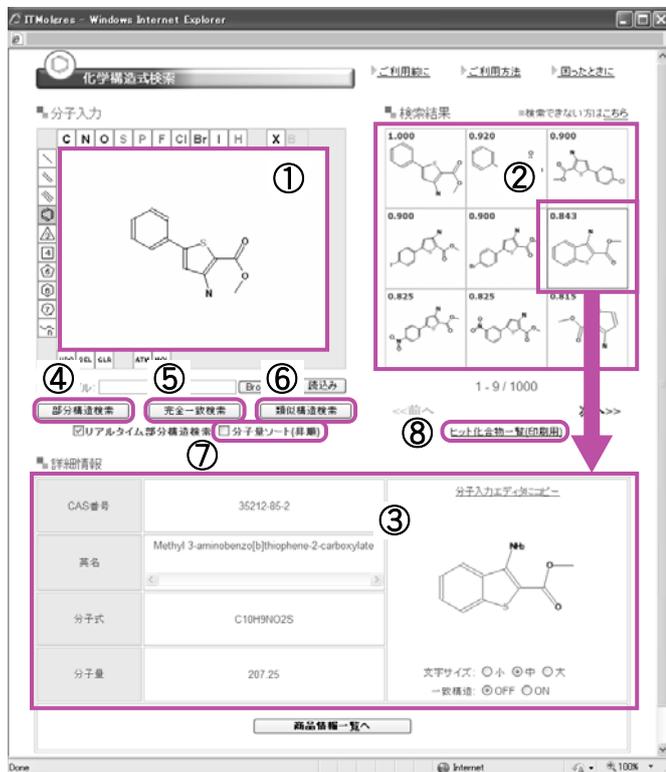


● Secondary amines (aliphatic)



(G.M.)

“リアルタイム”に検索結果を表示！
 「類似構造検索」で探索範囲を効率的に拡張！

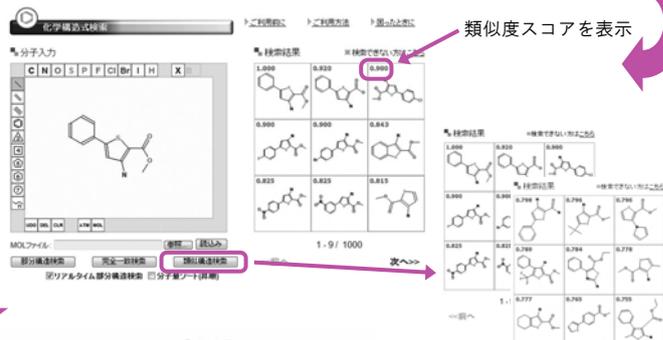


●業界初の“リアルタイム”構造検索

- ①構造を入力すると…
- ②瞬時に「ヒット化合物」を一覧表示
- ③さらに、選択した化合物の詳細情報を表示

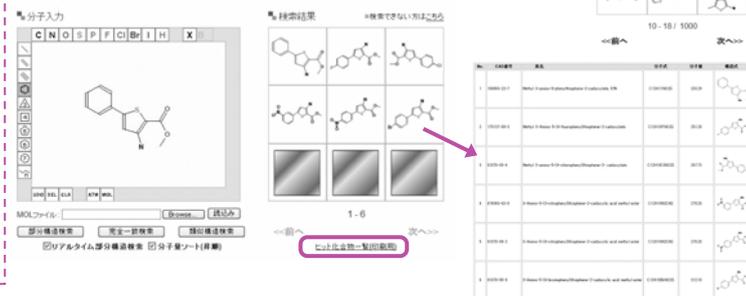
●多彩な抽出手法

- ④部分構造検索
クエリ構造を部分構造に含む化合物を抽出
- ⑤完全一致検索
クエリ構造と完全に一致する化合物を抽出
- ⑥類似構造検索 **NEW!**
独自の類似性基準に基づき探索範囲を効率的に拡張し、化合物を抽出



●便利機能

- ⑦分子量（昇順）による並べ替え
ボックスにチェックを入れることで、ヒット化合物を分子量順（昇順）に並べ替え表示
- ⑧ヒット化合物一覧の印刷 **NEW!**
“ヒット化合物一覧（印刷用）”をクリックすることにより“ヒット化合物一覧ページ”が開き、表示されている9件までの化合物情報を印刷可能



<http://www.siyaku.com/> で「構造式検索」のボタンをクリック！！
 思考を途切れさせることなく”Chemical Surfing”するために…
 “CSO” (Chemical Search Online)は進化し続けます…

“実験科学者”のための計算化学入門セミナー
「物質・分子・反応を計算化学で知り尽くそう！」

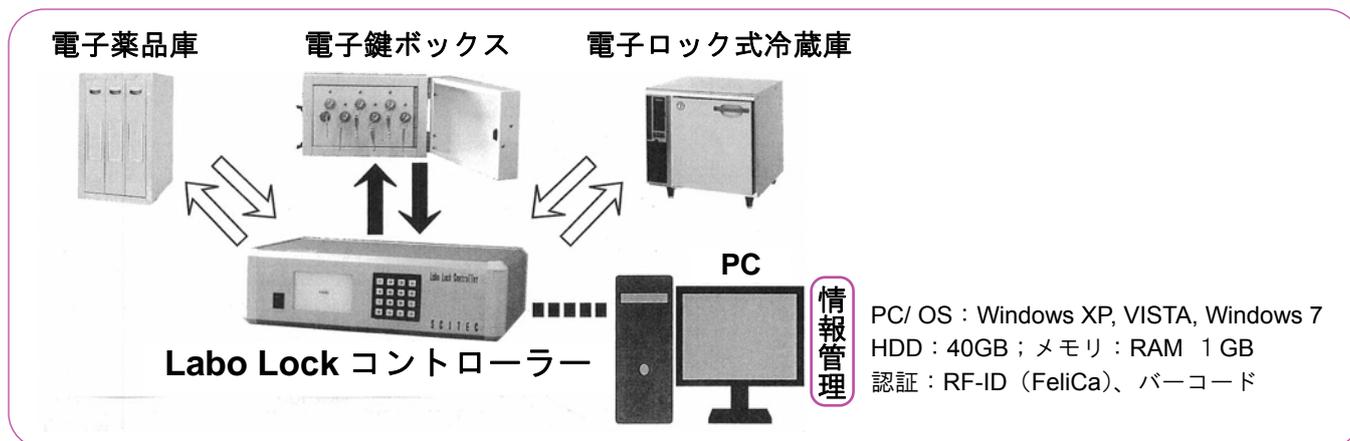


近年の PC の飛躍的な高性能化により、以前はワークステーションで行っていた計算が PC でも可能となりました。そして、計算化学ソフトウェアの開発・普及により、有機化合物などの低分子のみならず、タンパク質などの生体高分子の分子モデリングやシミュレーションを、PCで行うことが普通に行われるようになってきています。

この度、研究に計算化学ソフトウェアを取り入れておられる先生方に、その活用のコツなどを具体的かつわかりやすく解説していただきます。計算化学を“身近”に感じ、実験を効率化し、理論的に理解するために、当セミナーで計算化学をご体感下さい。

実験室の既存環境を活かして高度なセキュリティシステム作りを可能にします。

- スタンドアローン型で、導入も簡単、開閉操作も簡単
 - ・ 設定が簡単で、取付けは短時間で OK。また周辺機器の増設も簡単に行えます。
 - ・ PC の電源が OFF でも開閉操作ができます。
 - ・ 電子鍵ボックス、電子保管庫などの新設（増設）が、最大 20CH まで OK。作業も簡単です。
- 既存設備を含む一元管理が可能
 - ・ ご使用中の冷蔵庫、デシケータなどに電子錠を取付けることができます。
 - ・ 冷蔵庫などへは強力な接着剤で固定しますので、穴あけなどの加工の必要がありません。
 (引張り強度：約 300kg/cm²；耐熱温度：300℃)
- 個人認証方法の選択が可能
 - ・ ①RF-ID カード (FeliCa 形式の社員カードや、SUICA など)、②バーコードのいずれかを選択できます。
 - ・ LAN 接続により PC から開閉制御ができます。
- 使用者ごとに開錠権限の設定、開閉履歴の記録が可能
 - ・ 使用者ごとに開錠権限が設定でき、開錠・施錠の履歴も一目瞭然です。(権限設定と履歴の閲覧は PC 上で行います)



| コード No. | 品名 | 形式 | 容量 | 希望納入価格(円) | 備考 |
|---------|---------------------|---------|-----|-----------|--------------------------|
| — | Labo Lock II コントローラ | LLC-LAN | 1 式 | 383,000 | FeliCa カードもしくはバーコードリーダー付 |
| — | 電子薬品庫・3 列引き出し | NSC-3 | 1 式 | 430,000 | 床固定用金具付 |
| — | 電子薬品庫・5 列引き出し | NSC-5 | 1 式 | 650,000 | 床固定用金具付 |
| — | 電子鍵ボックス・6CH | NKB-6 | 1 式 | 128,000 | 6CH 扉ロックなし |
| — | 電子鍵ボックス・12CH | NKB-12 | 1 式 | 195,000 | 12CH 扉ロックなし |
| — | 電子鍵ボックス・20CH | NKB-20 | 1 式 | 270,000 | 20CH 扉ロックなし |

● その他周辺機器、施工も承ります。お問い合わせ下さい。

(G.TK.)

開催日時：2011 年 6 月 14 日 (火) 10 時 30 分～17 時 00 分

開催場所：和光純薬工業 (株) 東京支店 6F セミナー室

[〒103-0023 東京都中央区日本橋本町 4-5-13

参加費：無料

TEL：03-3270-8243 (学術部)]

定員：40 名

内容：「Chemdraw ステップアップ講座」
 (講演順) 「分子モデリングソフトって何だろう」
 ・「ソフトウェアによる分子力場計算」
 ・「分子現象の分子モデリング解析」
 ・「分子構造の予測とその応用」

ケンブリッジソフト社 久枝 秀次 様
 Wavefunction, Inc. 内田 典孝 様
 インフォコム株式会社 吉留 大輔 様
 大阪大学 先端科学イノベーションセンター 柳田 祥三 特任教授
 国立医薬品食品衛生研究所 栗原 正明 室長

* 詳細・お申し込み方法は 4 月に当社ホームページにてご案内致します。



溶存酸素含量 1ppm 以下！

テトラヒドロフラン（脱酸素）（安定剤不含）

溶存酸素含量 1ppm 以下、水分含量 10ppm 以下を保証した高品質な有機合成用溶媒です。

酸素・水分を嫌う有機合成反応にご使用下さい。

本品は開栓せずにシリンジで直接溶媒を採取できる特殊キャップを使用しています。

【製品規格（例）】

| 規格項目 | 規格値 |
|----------------------|-----------------|
| Assay (capillary GC) | min.99.5% |
| Density (20°C) | 0.884~0.889g/mL |
| Dissolved oxygen | max. 1ppm |
| Water | max. 10ppm |

| コード No. | 品名 | 溶存酸素量 | 水分含量 | 容量 | 希望納入価格(円) |
|-----------|--|---------|----------|-------|-----------|
| 208-18535 | Tetrahydrofuran, Deoxidized, Stabilizer Free | 1ppm 以下 | 10ppm 以下 | 500mL | 4,800 |

*脱酸素溶媒には使用期限がございます。

【関連品目】

水分含量を 10ppm 以下まで抑えた超脱水グレード溶媒のラインアップを充実しました。

使いきりの 500mL 容量から大入り 18L 容量まで、幅広く品揃えしております。用途に合った容量をお選び下さい。

| コード No. | 品名（安定剤） | 水分含量 | 容量 | 希望納入価格(円) |
|---------------|--|-------|-------|-----------|
| 010-22905 | Acetonitrile, Super Dehydrated | 10ppm | 500mL | 4,800 |
| 016-22907 | | | 18L | 照会 |
| 044-31235 | Dichloromethane, Super Dehydrated (2-Methyl-2-butene 0.0005-0.005%) | 10ppm | 500mL | 3,800 |
| 040-31237 | | | 18L | 照会 |
| NEW 045-31645 | Diethyl Ether, Super Dehydrated (BHT 0.0003%) | 10ppm | 500mL | 6,100 |
| NEW 043-31641 | | | 9L | 照会 |
| NEW 041-31647 | | | 18L | 照会 |
| NEW 057-08175 | Ethyl Acetate, Super Dehydrated | 10ppm | 500mL | 3,400 |
| 088-09105 | Hexane, Super Dehydrated | 10ppm | 500mL | 3,600 |
| 084-09107 | | | 18L | 照会 |
| NEW 135-16775 | Methanol, Super Dehydrated | 10ppm | 500mL | 3,550 |
| NEW 131-16777 | | | 18L | 照会 |
| 164-24391 | Pentane, Super Dehydrated | 10ppm | 9L | 照会 |
| 207-17905 | Tetrahydrofuran, Super Dehydrated, with Stabilizer (BHT 0.03%) | 10ppm | 500mL | 4,300 |
| 203-17907 | | | 18L | 照会 |
| 207-17765 | Tetrahydrofuran, Super Dehydrated, Stabilizer Free | 10ppm | 500mL | 4,200 |
| 205-17761 | | | 9L | 照会 |
| 203-17767 | | | 18L | 照会 |
| 204-17915 | Toluene, Super Dehydrated | 10ppm | 500mL | 3,500 |
| 200-17917 | | | 18L | 照会 |

*超脱水溶媒には使用期限がございます。

*9L、18L 容量は容器にキャニスター缶を使用しています。

*キャニスター缶はリンク容器です。ご使用後は当社代理店までご返却下さい。

(K.K.)

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」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 大阪府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) ●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