

Organic square

NO.
37

オーガニック
スクエア

2011
September

■ 特別講座

- 創薬を指向した多様なベンゾオキサゾール類の触媒的合成法の開発
岐阜薬科大学創薬化学大講座薬化学研究室 助教 上田 聡・教授 永澤秀子 2
2-Phenylbenzoxazole 誘導体 4

■ グリーンケミストリー

- 1,2-Bis [bis [3,5-bis (trimethylsilyl) phenyl] phosphino] benzene 5
1,2-Bis [bis [3,5-di (t-butyl) phenyl] phosphino] benzene 5
選択的還元触媒セット II 6
1,3,5,7-Tetrakis [4- (diacetoxyiodo) phenyl] adamantane 8
CHIRAZYME Screening Set 3 22

■ 合成材料

- 脱酸素溶媒 8
超脱水溶媒 9
有機薄膜太陽電池材料合成用ビルディングブロック 10
重水素化ビルディングブロック 10
青色発光ポリマー 11
Luminescence Technology 社新製品紹介 12
インドール誘導体 14
ホスフィン系パラジウム触媒 17
ワコーケミカル新製品 18
BINAP 系キラルホスフィン配位子 19
不斉反応試薬 20
高発光性有機固体 24

■ 合成関連機器

- Presep® (Luer Lock) Silica Gel (HC-N) 16
CHIRALFLASH IA/IC 21

■ お知らせ

- Luminescence Technology 社ボロン酸関連品小冊子の発行案内 13
第6回“和光&富士通”計算化学セミナー 23

創薬を指向した多様なベンゾオキサゾール類の触媒的合成法の開発

岐阜薬科大学創薬化学大講座薬化学研究室 助教 上田 聡^a、教授 永澤秀子

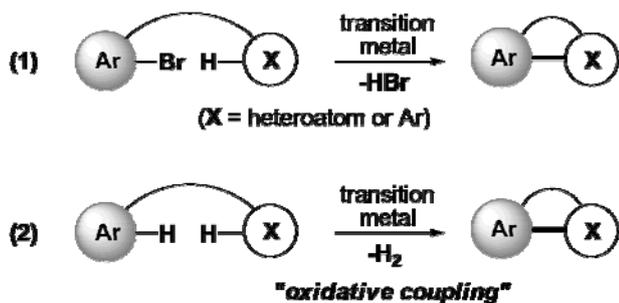
^a 現在の所属：マサチューセッツ工科大学化学科

はじめに

ゲノム、プロテオーム解析の急速な進展に伴い、今日、創薬標的タンパク質の構造データに基づく論理的医薬品分子設計や *in silico* スクリーニングによるリードジェネレーションが医薬品開発の主流になってきた。そこで、創薬プロセスの短縮、効率化を達成するためには、コンピューターケミストリーとハイスループットスクリーニング技術の進展に加え、ケミカルライブラリーを構成するドラッグライク化合物の優れた多様性指向合成法の開発が求められている。一方で、持続的社会的の実現のため、グリーンケミストリーに配慮した、安全、効率的かつ一般性の高い化学プロセスの実現も急務である。著者らはこのような社会的ニーズをふまえ、遷移金属の有するレドックス触媒サイクルを活用するクリーンで簡便な含窒素ヘテロ環構築法の開発に焦点を当てて研究を展開してきた。本稿では、著者らの研究室で開発された触媒的酸化結合形成反応に基づくベンゾオキサゾール類合成法について紹介する。

現在用いられている医薬品のほとんどが、多様なヘテロ環構造を有している。特にベンゼン環が連結した含窒素ヘテロ環は生理活性天然物や医薬品に見出される基本骨格であり、その効率的な合成法の開発は医薬品開発、供給における重要な課題である。従来、これらの骨格は、オルト位に置換基を持つ2置換ベンゼン誘導体を出発原料とする環化反応によって構築されている。こうした合成法は、結合形成容易な官能基を利用した信頼性の高い方法であるが、あらかじめハロゲンなどの活性な官能基によって置換された出発原料を必要とする (Figure 1, (1))。これに対して、近年、遷移金属触媒を用いて芳香族 C-H 結合を直接的に官能基化する方法論の開発が急速に進んでいる¹⁾。とくに、2つの水素原子の除去に伴い結合が形成される酸化的カップリング反応では予めハロゲン原子等で官能基化された基質を必要としないことから、直接的で原子効率の高い魅力的な分子変換といえる (Figure 1, (2))。こうした背景のもと、筆者らは医薬品化学上重要な基本骨格であるベンゾオキサゾールの新規な合成方法の開発を行った²⁾。

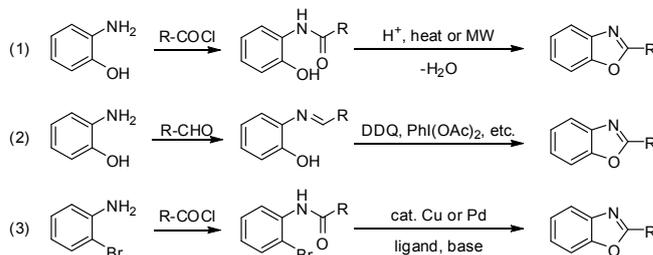
Figure 1



ベンゾオキサゾールは多くの医薬品、生理活性天然物、機能性物質に見出される基本骨格であり、種々の合成方法が開発されている³⁾。なかでも古くから用いられている手法として、2-アミノフェノールをアシル化して得られるベンズアニリドを酸性条件下加熱し、脱水の閉環反応を行うもの (Scheme 1. (1))⁴⁾ と、2-アミノフェノールとアルデヒドから得られる環状ヘミアミナルを酸化剤によって酸化す

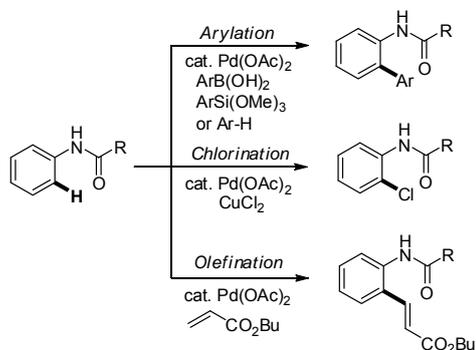
る方法が挙げられる⁵⁾ (Scheme 1. (2))。また、最近では2-ハロアニリドを基質としてパラジウムまたは銅触媒存在下、分子内 C-O 結合を形成することによってベンゾオキサゾールを合成する手法も開発されている⁶⁾ (Scheme 1. (3))。これらの手法により、多様なベンゾオキサゾールを高収率で得ることができるが、合成原料となるアニリンのオルト位に予め官能基 (水酸基またはハロゲン) を導入しておく必要がある。

Scheme 1. Synthesis of benzoxazoles



アニリドのアミド基は多くの C-H 活性化反応の配向性基 (directing group, DG) として利用されており、現在までに、パラジウム触媒によるオルト位の種々の直接官能基化反応が示されている。すなわち、アミド結合のカルボニル酸素原子を配向基とするオルトメタル化とリガンド交換、還元的脱離を経る C-H アリール化⁷⁾、C-H クロル化⁸⁾、C-H アルケニル化⁹⁾ 等の例が報告されている (Scheme 2.)。そこで筆者らは遷移金属による芳香環 C-H 結合の活性化とそれに引き続く分子内 C-O 結合形成により、オルト位が官能基化されていないベンズアニリドから直接ベンゾオキサゾール環を構築できるものと推測した。検討を開始した時点では、触媒的芳香環 C-H 結合の酸素官能基化に関する例は Yu らによる銅触媒によるヒドロキシ化のみであった¹⁰⁾。

Scheme 2. C-H functionalization of anilides



最適条件の探索

ベンズアニリド **1** を基質として一連の遷移金属、再酸化剤、溶媒、温度の検討を行った。その結果、20 mol% の Cu(OTf)₂ 存在下、キシレン中、酸素雰囲気下、140°C で反応を行うことで目的とするベンゾオキサゾール **2** が 81% の収率で得られた (Table 1, entry 1)。この際、空気雰囲気下では収率が低下したが (entry 2)、1,2-ジクロロベンゼン中、反応温度を 160°C に昇温すると酸素ガスを用いることなく、空気雰囲気下でも良好な収率が得られた (entry 3)。また、グラムスケ

ールにおいても同様に良好な収率で目的物が得られた (entries 1, 3)。本反応ではキシレンや 1,2-ジクロロベンゼンといった低極性溶媒を用いることが必須であり、DMF や DMSO といった極性溶媒中では反応は全く進行しなかった。Cu(OTf)、Cu(OAc)₂ や Cu(ClO₄)₂ を触媒として使用すると収率は低下した (entries 4-6)。また、CuCl₂ や CuBr₂ を使用すると閉環反応は全く進行せず、オルト位がハロゲン化されたベンズアニリド **3a,3b** が少量得られるのみであった (entries 7, 8)。同様の反応条件下でパラジウム触媒を用いた場合には環化体 **2** は生成せず、溶媒であるキシレンとの酸化的 C-C カップリング生成物 **3c** が確認された (entries 9, 10)。

Table1. Copper-catalyzed cyclization of N-phenylbenzamide.

entry	catalyst (20 mol%)	solvent	gas (1 atm)	temp (°C)	yield (%) ^a	
					2	3
1	Cu(OTf) ₂	<i>o</i> -Xylene	O ₂	140	81(77) ^b	-
2	Cu(OTf) ₂	<i>o</i> -Xylene	Air	140	39	-
3	Cu(OTf) ₂	<i>o</i> -Dichlorobenzene	Air	160	89(86) ^b	-
4	Cu(OTf)	<i>o</i> -Xylene	O ₂	140	22	-
5	Cu(OAc) ₂	<i>o</i> -Xylene	O ₂	140	11	-
6	Cu(ClO ₄) ₂ · 6H ₂ O	<i>o</i> -Xylene	O ₂	140	38	14 (3a)
7	CuCl ₂	<i>o</i> -Xylene	O ₂	140	0	10 (3a)
8	CuBr ₂	<i>o</i> -Xylene	O ₂	140	0	6 (3b)
9	Pd(OAc) ₂	<i>o</i> -Xylene	O ₂	140	0	14 (3c)
10	Pd(OCCF ₃) ₂	<i>o</i> -Xylene	O ₂	140	0	21 (3c)

^a 0.25 mmol scale. ^b Gram-scale reaction in parenthesis (6.0 mmol scale).

反応の基質一般性と環化位置選択性

続いて最適化した反応条件を用いて様々な置換様式をもつベンズアニリドの閉環反応を行った。アニリドパラ位にメチル、アルコキシ、フェニル、カルボニル基をもつ基質やハロゲンを有する基質から、目的とするベンゾオキサゾールが中程度から良好な収率で得られた (Table 2, entries 1-6)。これらの反応では、ケトンやハロゲンのような電子吸引性基が存在すると収率が低下する傾向が見られた。また、オルト位に置換基を持つアニリドの反応においても収率が低下した (entries 7, 8)。ベンゾオキサゾール 2 位に置換アリール基を有するベンゾオキサゾール類も概ね良好な収率で得ることができた (entries 11-17)。さらに、環化反応の位置選択性がアニリドの 3 位置換基に依存することが明らかとなった。すなわち、3 位置換基がメチル、またはメトキシ基の場合、立体障害の少ないアニリド 6 位で環化反応が進行し、5 位置換ベンゾオキサゾールが選択的に得られた (entries 9, 10)。

Table2. Synthesis of substituted 2-phenylbenzoxazoles.

entry	substrate	product	yield (%)
1			(R = Me) 92
2			(R = OEt) 91
3			(R = Ph) 72
4			(R = COPh) 63
5			(R = F) 80
6			(R = Cl) 76
7			(R = Me) 51
8			(R = OMe) 55
9			(R = Me) 86
10			(R = OMe) 93

entry	substrate	product	yield (%)
11			(R = Et) 85
12			(R = OMe) 89
13			(R = CO ₂ Me) 83
14			(R = F) 80
15			(R = Cl) 78
16			(R = Br) 72
17			(R = I) 81
18			42
19			44

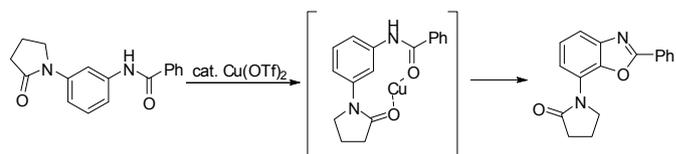
一方、非共有電子対を有する種々の官能基を 3 位にもつベンズアニリドの反応では、完全な位置選択性をもって 7 位置換ベンゾオキサゾールが得られた (Table 3)。すなわち、環状アミド (entry 1)、環状および鎖状ウレタン (entries 2,6,7)、カルボニル基 (entries 3-5)、インドール上の N-アセチル基 (entry 8)、ピラゾール基 (entry 9) などが DG として働き、立体的に混み込んだアニリド 2 位において環化反応が起きたものと考えられた。これは、Scheme 3 に示すように、DG が触媒の銅に配位して、2 座配位中間体を経て反応が進行したためであると予想される。また、3 位に DG をもつこれらの基質は、配向基をもたない基質に比べてより温和な条件 (110-120°C) で反応が進行する点も興味深い。

Table3. Regioselective synthesis of 7-substituted benzoxazoles.

entry	substrate	product	yield (%)
1			(X = CH ₂) 89
2			(X = O) 82
3			(R = Bz) 88
4			(R = Ac) 78
5			(R = CHO) 74 ^a
6			82
7			64
8			91
9			92

^a Reaction temperature = 140 °C.

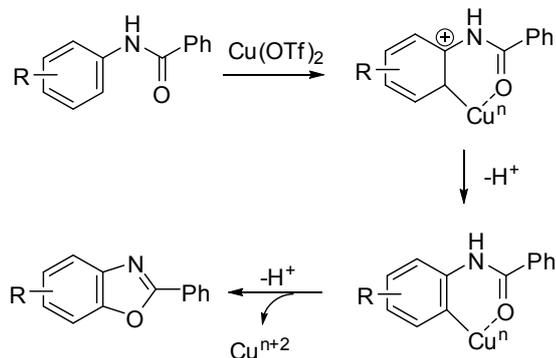
Scheme3. Possible route for the 7-substituted benzoxazoles.



反応機構に関する考察

本反応の推定反応機構を Figure 2 に示す。まず、ベンズアニリドのアミド酸素原子に銅が配位し、続く銅原子上での芳香族求電子置換反応、脱プロトン化を経て 6 員環メタラサイクルが形成する。ベンズアニリドの芳香環上の置換基効果はこの過程に大きく影響を及ぼすものと予測される。その後、還元的脱離によりベンゾオキサゾールと、還元された銅触媒が生成する。反応系内に存在する分子状酸素により銅触媒が再酸化され触媒サイクルが完結する。電子吸引性基がアニリド芳香環に存在すると反応効率が低下することや^{2b)}、重水素置換した基質を用いた同位体効果の結果も上述の機構を支持するものであるが^{2a)}、ベンズアニリドから銅触媒への一電子移動を経て開始されるラジカル的な反応機構も否定できない。

Figure 2. Plausible mechanism of oxidative cyclization.



おわりに

著者らは、銅触媒による位置選択的な C-H 活性化/C-O 結合形成反応を用いたベンゾオキサゾールの新しい合成法の開発に成功した。本反応はオルト位に官能基を持たないアニリドから直接的かつ位置選択的にベンゾオキサゾール環を構築することができる。また、分子状酸素を再酸化剤として用いているため、理論上の副生成物は水のみであり、原子効率の高い、簡便でクリーンな環境調和型の反応といえる。

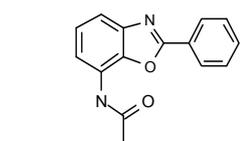
参考文献

1. a) 垣内史敏: 化学, **66**, 24(2011). b) R. J. Phipps, M. J. Gaunt: *Science*, **323**, 1593 (2009).
2. a) S. Ueda, H. Nagasawa: *Angew. Chem. Int. Ed.*, **47**, 6411 (2008). b) S. Ueda, H. Nagasawa: *J. Org. Chem.*, **74**, 4272 (2009).
3. a) M. S. Malamas, E. S. Manas, R. E. McDevitt, I. Gunawan, Z. B. Xu, M. D. Collini, C. P. Miller, T. Dinh, R. A. Henderson, J. C. Keith, Jr., H. A. Harris: *J. Med. Chem.*, **47**, 5021 (2004). b) H. Razavi, S. K. Palaninathan, E. T. Powers, R. L. Wiseman, H. E. Purkey, N. N. Mohamedmohaideen, S. Deechongkit, K. P. Chiang, M. T. A. Dendle, J. C. Sacchetti, J. W. Kelly: *Angew. Chem. Int. Ed.*, **42**, 2758 (2003). c) M. Taki, J. L. Wolford, T. V. O'Halloran: *J. Am. Chem. Soc.*, **126**, 712 (2004).
4. a) K. Bougrin, A. Loupy, M. Soufiaoui: *Tetrahedron*, **54**, 8055 (1998). b) D. W. Hein, R. J. Alheim, J. J. Leavitt: *J. Am. Chem. Soc.*, **79**, 427 (1957). c) R. S. Pottorf, N. K. Chadha, M. Katkevics, V. Ozola, E. Suna, H. Ghane, T. Regberg, M. R. Player: *Tetrahedron Lett.*, **44**, 175 (2002). d) M. Terashima, M. Ishii, Y. Kanaoka: *Synthesis*, 484 (1982).
5. a) Y. Kawashita, N. Nakamichi, H. Kawabata, M. Hayashi: *Org. Lett.*, **5**, 3713 (2003). b) K. Nakagawa, H. Onoue, J. Sugita: *Chem. Pharm. Bull.*, **12**, 1135 (1964). c) R. G. Srivastava, P. S. Venkataramani: *Synth. Commun.*, **18**, 1537 (1988). d) F. F. Stephens, J. D. Bower: *J. Chem. Soc.*, 2971 (1949). e) R. S. Varma, R. K. Saini, O. Prakash: *Tetrahedron Lett.*, **38**, 2621 (1997).
6. a) R. D. Viirre, G. Evindar, R. A. Batey: *J. Org. Chem.*, **73**, 3452 (2008). b) G. Evindar, R. A. Batey: *J. Org. Chem.*, **71**, 1802 (2006). c) N. Barbero, M. Carril, R. San Martin, E. Dominguez: *Tetrahedron*, **63**, 10425 (2007).
7. S. Yang, B. Li, X. Wan, Z. Shi: *J. Am. Chem. Soc.*, **129**, 6066 (2007).
8. X. Wan, Z. Ma, B. Li, K. Zhang, S. Cao, S. Zhang, Z. Shi: *J. Am. Chem. Soc.*, **128**, 7416 (2006).
9. M. D. K. Boele, G. P. F. van Strijdonck, A. H. M. de Vries, P. C. J. Kamer, J. G. de Vries, P. W. N. M. van Leeuwen; *J. Am. Chem. Soc.*, **124**, 1586 (2002).
10. X. Chen, X.-S. Hao, C. E. Goodhue, J.-Q. Yu: *J. Am. Chem. Soc.*, **128**, 6790 (2006).

2-Phenylbenzoxazole 誘導体

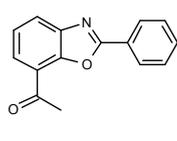


2-Phenylbenzoxazole 類は、医薬品、医薬中間体、化粧品、液晶ディスプレイなど機能性材料に使われている化合物です。この度 4 種の 2-Phenylbenzoxazole 誘導体を発売しました。合成用試薬としてご活用ください。



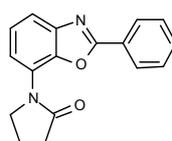
$C_{15}H_{12}N_2O_2 = 252.27$

N-(2-Phenylbenzoxazol-7-yl)acetamide



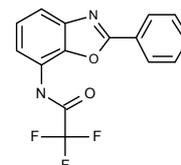
$C_{15}H_{11}NO_2 = 237.25$

1-(2-Phenylbenzoxazol-7-yl)ethanone



$C_{17}H_{14}N_2O_2 = 278.31$

1-(2-Phenylbenzoxazol-7-yl)pyrrolidone



$C_{15}H_9F_3N_2O_2 = 306.24$

2,2,2-Trifluoro-N-(2-phenylbenzoxazol-7-yl)acetamide

コード No.	品名	規格	容量	希望納入価格(円)
169-24961	N-(2-Phenylbenzoxazol-7-yl)acetamide	有機合成用	500mg	20,000
166-24971	1-(2-Phenylbenzoxazol-7-yl)ethanone	有機合成用	500mg	20,000
163-24981	1-(2-Phenylbenzoxazol-7-yl)pyrrolidone	有機合成用	250mg	7,000
169-24983			1g	20,000
206-18651	2,2,2-Trifluoro-N-(2-phenylbenzoxazol-7-yl)acetamide	有機合成用	500mg	20,000

(K.IW.)

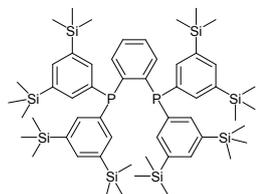
●●● 鈴木-宮浦カップリング他、各種鉄触媒クロスカップリング反応に有用

●●● **1,2-Bis [bis[3,5-bis(trimethylsilyl) phenyl] phosphino]benzene**

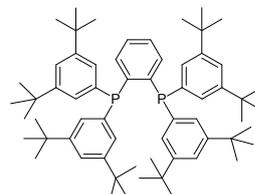
●●● **1,2-Bis [bis[3,5-di(*t*-butyl) phenyl] phosphino]benzene**



本品はジホスフィン型の配位子です。鉄ホスフィン錯体とすることで触媒能を発揮し、鈴木-宮浦カップリング反応などに有用です。



1,2-Bis [bis[3,5-bis(trimethylsilyl)phenyl]phosphino]benzene
[1203710-21-7]
C₅₄H₈₈P₂Si₈ = 1023.91



1,2-Bis [bis[3,5-di(*t*-butyl)phenyl]phosphino]benzene
[1203710-18-2]
C₆₂H₈₈P₂ = 895.31

反応例

表1 鉄触媒鈴木-宮浦カップリング反応の例

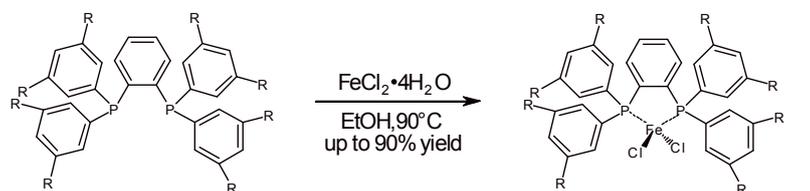


図1. ジホスフィン配位子とその鉄錯体の合成

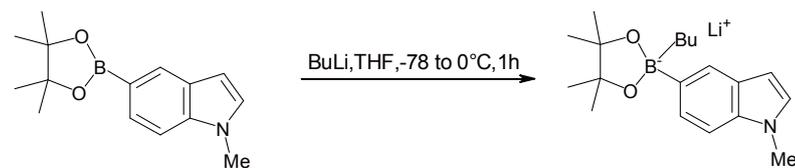
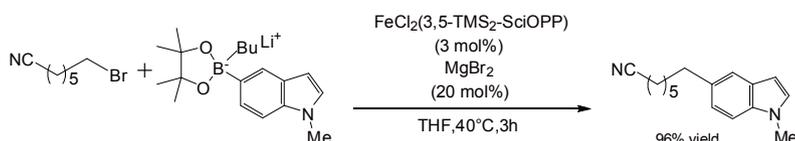


図2. ボロン酸ピナコールエステルのブチルリチウム処理



SciOPP : Spin-control-intended α -phenylenediphosphine

図3. 鉄ジホスフィン錯体を触媒とする鈴木-宮浦カップリング反応

脂肪族ハロゲン化合物	カップリング生成物	%収率
		93
		99 (R" = H) 98 (R" = OMe) 94 (R" = NMe ₂) 77 (R" = Cl) 90 (R" = CO ₂ Me)
同上		83
同上		73
		79
		90
		65
		83
		86

参考文献

- 1) T. Hatakeyama, T. Hashimoto, Y. Kondo, Y. Fujiwara, H. Seike, H. Takaya, Y. Tamada, T. Ono, M. Nakamura: *J. Am. Chem. Soc.*, **132**, 10674-10676 (2010).
- 2) 畠山 琢次、橋本 徹、中村 正治「塩化鉄-ジホスフィン錯体・FeCl₂-SciOPPを用いる鉄触媒クロスカップリング反応の開発」: 和光純薬時報, **79**(3), 10-14 (2011).

コード No.	品名	規格	容量	希望納入価格(円)
026-17091	1,2-Bis [bis[3,5-bis(trimethylsilyl)phenyl]phosphino]benzene	有機合成用	250mg	10,000
022-17093			1g	30,000
020-17094			5g	照会
029-17081	1,2-Bis [bis[3,5-di(<i>t</i> -butyl)phenyl]phosphino]benzene	有機合成用	250mg	10,000
025-17083			1g	30,000
023-17084			5g	照会

【関連品目】

コード No.	品名	規格	容量	希望納入価格(円)
095-00912	Iron (II) Chloride Tetrahydrate	S	25g	1,900
099-00915			500g	3,600
025-05851	1.6mol/l <i>n</i> -Butyllithium Hexane Solution	化学用	250mL	9,200

(K.IW.)

選択的還元触媒セットII Chemoselective Reduction Catalysts Set II

接触還元反応では、不均一触媒であるパラジウム炭素 (Pd/C) が、穏和な中性条件下様々な官能基を効率よく還元することから広く用いられていますが、Pd/C の持つ強い還元能のため官能基選択性や位置選択性を達成することは困難でした。当社ではこれらを解決するため、触媒毒として、エチレンジアミン (製品略名 [Pd/C(en)]¹⁾)、ジフェニルスルフィド (製品略名 [Pd/C[Ph₂S]])、フィブロイン (製品略名 [Pd/Fib]²⁾)、ポリエチレンジイミン (製品略名 [Pd/PEI]³⁾) を使用し官能基選択性を持たせた固定化触媒を販売しています。

またオスミウムと活性炭素を複合化したオスミウム-活性炭素は従来のパラジウム触媒とは異なる選択性 (オレフィン類より芳香族ニトロ基を優先して還元) を示します。

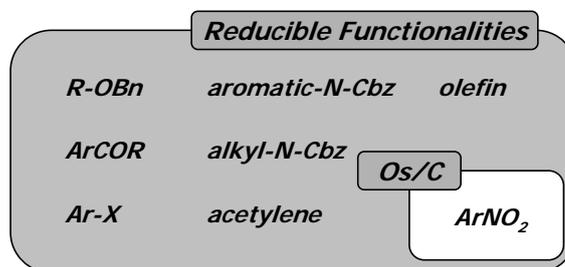
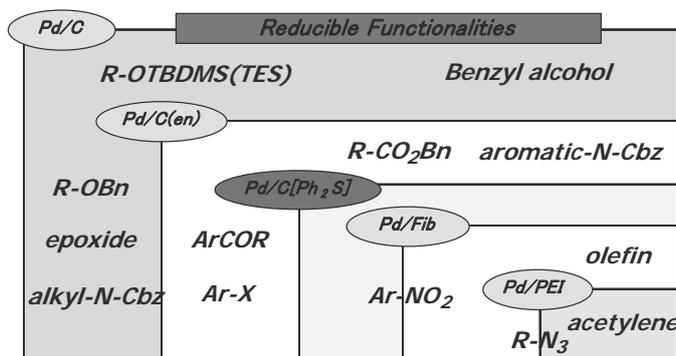
この度、これら 6 種類の選択的還元触媒をセットにして販売を開始致しました。様々な活性を持つ触媒をお試しいただくことで、目的に合う触媒を選択いただけます。

セット内容

品名	略名	容量
Palladium-Activated Carbon Ethylenediamine Complex (Pd3.5-6.5%)	5%Pd/C(en)	1g
Palladium-Activated Carbon Ethylenediamine Complex (Pd8.5-11.5%)	10%Pd/C(en)	1g
Palladium-Activated Carbon Diphenyl Sulfide Complex	Pd/C[Ph ₂ S]	1g
Palladium-Fibroin	Pd/Fib	1g
Palladium-Polyethyleneimine	Pd/PEI	1g
Osmium-Activated Carbon (Os 3.5-6.5%)	Os/C	1g

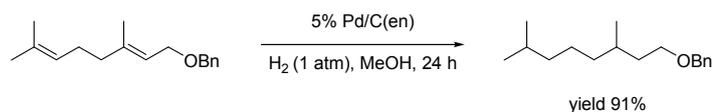
特長

- パラジウム炭素-エチレンジアミン複合体 (Pd/C(en))
 - 1) エチレンジアミンを Pd/C に配位させた官能基選択的還元触媒。
 - 2) 反応後はろ過するだけで簡単に除去可能。
 - 3) 通常の Pd/C に見られるような発火性を示さず、安定して長期保存が可能。
- パラジウム炭素-ジフェニルスルフィド複合体 (Pd/C[Ph₂S])
 - 1) ジフェニルスルフィドを Pd/C に配位させた官能基選択的還元触媒。
 - 2) 反応後はろ過するだけで簡単に除去可能。
 - 3) 通常の Pd/C に見られるような発火性を示さず、安定して長期保存が可能。
- パラジウム-フィブロイン (Pd/Fib)
 - 1) 絹フィブロインに約 2.5% の Pd を担持。
 - 2) 反応後はろ過するだけで簡単に除去可能。
 - 3) Pd/C(en) よりさらに水素還元反応に不安定な官能基の分解を抑制することが可能。
- パラジウム-ポリエチレンジイミン (Pd/PEI)
 - 1) ポリエチレンジイミンポリマーを担体として利用。
 - 2) アルキンからアルケンへの選択的部分水素化が可能。
- オスミウム-活性炭素 (Os/C)
 - 1) 芳香族ニトロ基を選択的に還元。
 - 2) 発火性が少ない。
 - 3) 毒性、揮発性のある四酸化オスミウムではない新たな触媒。

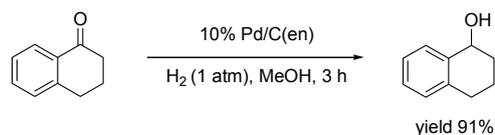


反応例

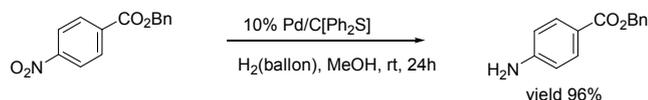
● 5% Pd/C(en)



● 10% Pd/C(en)



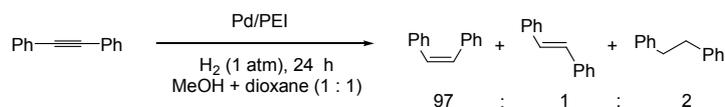
● Pd/C[Ph₂S]



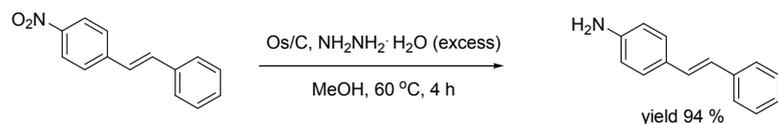
● Pd/Fib



● Pd/PEI



● Os/C



コード No.	品名	規格	容量	希望納入価格(円)
032-22141	Chemoselective Reduction Catalysts Set II	有機合成用	1セット	照会

【関連製品】

コード No.	品名	略名	規格	容量	希望納入価格(円)
161-15273	Palladium-Activated Carbon (Pd 10%)	10%Pd/C	和光一級	5g	4,900
163-15272				25g	17,500
165-15271				100g	56,000
163-07543	Palladium-Activated Carbon (Pd 5%)	5%Pd/C	—	5g	4,800
165-07542				25g	17,000
167-07541				100g	55,000
167-23301	Palladium-Activated Carbon Ethylenediamine Complex (Pd8.5-11.5%)	10%Pd/C (en)	有機合成用	1g	5,000
163-23303				5g	16,000
163-21441	Palladium-Activated Carbon Ethylenediamine Complex (Pd3.5-6.5%)	5%Pd/C (en)	有機合成用	1g	4,000
169-21443				5g	13,500
161-21442				25g	48,000
160-24131	Palladium-Activated Carbon Diphenyl Sulfide Complex	Pd/C[Ph ₂ S]	有機合成用	1g	5,000
166-24133				5g	15,500
167-22181	Palladium-Fibroin	Pd/Fib	有機合成用	1g	4,800
163-22183				5g	14,500
161-22221	Palladium-Polyethyleneimine	Pd/PEI	有機合成用	1g	8,600
167-22223				5g	27,500
151-02881	Osmium-Activated Carbon (Os 3.5%-6.5%)	Os/C	有機合成用	1g	5,000
157-02883				5g	16,000

参考文献

- H. Sajiki, K. Hattori, K. Hirota: *J. Org. Chem.*, **63**, 7990 (1998).
- H. Sajiki, T. Ikawa, H. Yamada, K. Tsubouchi, K. Hirota: *Tetrahedron Lett.*, **44**, 171 (2003).
- H. Sajiki, S. Mori, T. Ohkubo, T. Ikawa, A. Kume, T. Maegawa, Y. Monguchi: *Chem. Eur. J.*, **14**, 5109 (2008).

(K.IW.)

●● アダマンタン型酸化剤

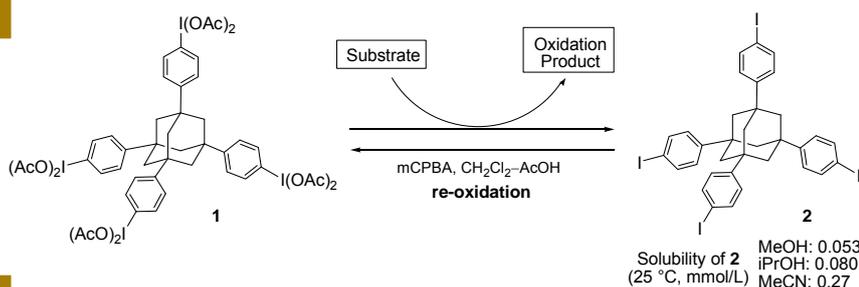
●●● 1,3,5,7-Tetrakis[4-(diacetoxyiodo)phenyl]adamantane



酸化反応は最も基本的な化学変換反応の一つで、産業や社会と密接に関連した重要なプロセスであるので、その反応設計には環境への影響や資源の有効利用などを十分に考慮する必要があります。3 価の有機超原子価ヨウ素反応剤は、重金属酸化剤と類似の反応性を示し、毒性が低く、爆発性のない取り扱い易い酸化剤で、環境調和型酸化反応の開発に有望視されています。これまでに、フェニルヨージンジアセテート (PIDA) やフェニルヨージンビストリフルオロアセテート (PIFA) に代表される 3 価の超原子価ヨウ素化合物は、多数の研究により多彩な反応性を示すことが明らかにされています。しかし、3 価の超原子価ヨウ素化合物は量論酸化剤であり、反応終了後に 1 価のヨードベンゼンを副生します。近年、医薬、農薬、電子材料等の化学合成に対し高品質・高純度が求められる中、多量に副生するヨードベンゼンの除去が実用化への課題とされています。

本品は、アダマンタンを核に持ち一分子に 4 つの活性ヨウ素部位を導入した新規リサイクル型超原子価ヨウ素 (Ⅲ) 反応剤 (1) です。アルコールの酸化反応に用いると高い収率でケトンを与えるだけでなく、反応終了後に反応液をろ過するだけで副生成物のヨードベンゼン (2) が回収できます。また、回収したヨードベンゼンを再酸化することで活性種に戻り、再度酸化反応に使用することができます。

特長



反応例

Oxidation of Alcohol with 1-cat. $\text{Et}_4\text{N}^+\text{Br}^-$ in water

Entry ^{a)}	Substrate	Time (h)	Product	Yield (%)
1		4		>99
2 ^{b)}		18		88
3		5		91
4		2		99

Entry	Substrate	Time (h)	Product	Yield (%)
5		4		>99
6 ^{c,d)}		4		91
7 ^{e)}		48		96
8 ^{d,f)}		24		97

a) 1.1x1/4 equiv of 1 and 0.5 equiv of $\text{Et}_4\text{N}^+\text{Br}^-$ were used. b) 0.2 equiv of $\text{Et}_4\text{N}^+\text{Br}^-$ were used. c) 1.5x1/4 equiv of 1 was used. d) 1 equiv of $\text{Et}_4\text{N}^+\text{Br}^-$ were used. e) With 3x1/4 equiv of 1. f) With 2x1/4 equiv of 1.

参考文献

- 1) H. Tohma, A. Maruyama, A. Maeda, T. Maegawa, T. Dohi, M. Shiro, T. Morita, Y. Kita: *Angew. Chem. Int. Ed.*, **43**, 3595 (2004).
- 2) T. Dohi: 薬学雑誌, **126**(9), 757 (2006).

コード No.	品名	規格	容量	希望納入価格(円)
204-18473	1,3,5,7-Tetrakis[4-(diacetoxyiodo)phenyl]adamantane	有機合成用	500mg	35,000 (T.M.)

合成材料

●●● 溶存酸素含量 1ppm 以下!

●●● 脱酸素溶媒

溶存酸素含量 1ppm 以下、水分含量 0.001% (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。本シリーズ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】 Toluene, Deoxidized

規格項目	規格値
含量	99.5%以上
密度	0.884~0.889g/mL
溶存酸素	1ppm 以下
水分	0.001%以下

コード No.	品名 (安定剤)	溶存酸素	水分	容量	希望納入価格(円)
080-09305	Hexane, Deoxidized	1ppm 以下	0.001%以下	500mL	4,200
208-18535	Tetrahydrofuran, Deoxidized, Stabilizer Free				4,800
209-18705	Tetrahydrofuran, Deoxidized, with Stabilizer (BHT about 0.03%)				4,900
202-18675	Toluene, Deoxidized				4,100

※脱酸素溶媒には有効期限がございます。

(K.K.)

●●● 100mL 容量追加しました！

●●● 超脱水溶媒



ご好評いただいております超脱水溶媒シリーズのラインアップを充実しました 【製品規格例】Diethyl Ether, Super Dehydrated (100mL、500mL、9L、18L 容量)。お客様の用途に合わせてお選び下さい。

100mL、500mL 容量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。

規格項目	規格値
含量	99.5%以上
密度	0.712~0.714g/mL
水分	0.001%以下

コード No.	品名 (安定剤)	水分含量	容量	希望納入価格(円)
016-23465	Acetone, Super Dehydrated	0.001%以下	500mL	3,300
012-23467			18L	照会
New 018-22901	Acetonitrile, Super Dehydrated	0.001%以下	100mL	2,400
010-22905			500mL	4,800
016-22907			18L	照会
023-16945	Benzene, Super Dehydrated	0.001%以下	500mL	3,800
034-21925	Chloroform, Super Dehydrated (Ethanol 0.3-1.0%)	0.001%以下	500mL	4,000
031-21935	Chloroform, Super Dehydrated, Amylene added (Amylene 150ppm)	0.001%以下	500mL	4,200
New 042-31231	Dichloromethane, Super Dehydrated (2-Methyl-2-butene 0.0005-0.005%)	0.001%以下	100mL	2,100
044-31235			500mL	3,800
040-31237			18L	照会
045-31645	Diethyl Ether, Super Dehydrated (BHT 0.0003%)	0.001%以下	500mL	6,100
043-31641			9L	照会
041-31647			18L	照会
042-31655	1,4-Dioxane, Super Dehydrated	0.001%以下	500mL	4,000
057-08175	Ethyl Acetate, Super Dehydrated	0.001%以下	500mL	3,400
086-09265	Heptane, Super Dehydrated	0.001%以下	500mL	5,500
New 086-09101	Hexane, Super Dehydrated	0.001%以下	100mL	1,700
088-09105			500mL	3,600
084-09107			18L	照会
135-16775	Methanol, Super Dehydrated	0.001%以下	500mL	3,550
131-16777			18L	照会
166-24395	Pentane, Super Dehydrated	0.001%以下	500mL	6,500
164-24391			9L	照会
161-24845	1-Propanol, Super Dehydrated	0.001%以下	500mL	4,200
168-24855	2-Propanol, Super Dehydrated	0.001%以下	500mL	3,600
New 205-17901	Tetrahydrofuran, Super Dehydrated, with Stabilizer (BHT about 0.03%)	0.001%以下	100mL	2,050
207-17905			500mL	4,300
203-17907			18L	照会
New 201-17763	Tetrahydrofuran, Super Dehydrated, Stabilizer Free	0.001%以下	100mL	2,000
207-17765			500mL	4,200
205-17761			9L	照会
203-17767			18L	照会
New 202-17911	Toluene, Super Dehydrated	0.001%以下	100mL	1,850
204-17915			500mL	3,500
200-17917			18L	照会
240-00865	Xylene, Super Dehydrated	0.001%以下	500mL	3,850

※9L、18L 容量はキャニスター缶のリンク容器を使用しています。

- ・キャニスター缶をご使用の際は別途接続配管が必要です。当社販売店、営業所にお問い合わせ下さい。
- ・ご使用後は当社販売店にご返却下さい。

※超脱水溶媒には有効期限がございます。有効期限内にご使用下さい。

※その他各種脱水溶媒を取扱っております。お問い合わせ下さい。

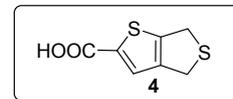
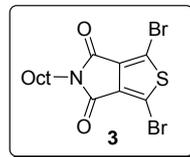
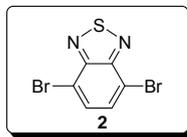
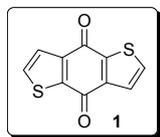
(K.K.)

有機薄膜太陽電池材料合成用ビルディングブロック



原子力発電に対する不安や自然エネルギー発電に関する買い取り制度の提案等により、新たな再生可能エネルギーの開発に注目が集まっています。太陽光発電はクリーンで再生可能なエネルギー源ですが、シリコンを基盤とした現在の太陽電池技術は製造工程で高温にしたり、真空蒸着を使う場合が多く、コストの点でまだ課題が残されています。そこで次世代の太陽電池として常温で塗布するだけで製造できる、有機物を用いた有機薄膜太陽電池に注目が集まっています。今回、有機薄膜太陽電池材料合成用の中間体をラインアップしました。

構造



番号	コード No.	品名	規格	容量	希望納入価格(円)
1	025-17321	Benzo[1,2- <i>b</i> :4,5- <i>b'</i>]dithiophene-4,8-dione	有機合成用	1g	照会
	021-17323			5g	照会
2	045-31961	4,7-Dibromo-2,1,3-benzothiadiazole	有機合成用	1g	照会
	041-31963			5g	照会
	043-31962			25g	照会
3	042-31971	1,3-Dibromo-5-octyl-4 <i>H</i> -thieno[3,4- <i>c</i>]pyrrole-4,6(5 <i>H</i>)-dione	有機合成用	1g	照会
	048-31973			5g	照会
4	049-31981	4,6-Dihydrothieno[3,4- <i>b</i>]thiophene-2-carboxylic Acid	有機合成用	1g	照会
	045-31983			5g	照会

(T.S.)

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

※ Phenyl- <i>d</i> ₅ -boronic Acid 167-24521 1g 22,000円 163-24523 5g 照会	※ <i>p</i> -Methylphenyl- <i>d</i> ₇ -boronic Acid 133-16651 500mg 70,000円	※ <i>o</i> -Methylphenyl- <i>d</i> ₇ -boronic Acid 130-16661 500mg 70,000円	※ 3-pyridine- <i>d</i> ₄ -boronic Acid 161-24781 500mg 70,000円	※ <i>p</i> -Methoxyphenyl- <i>d</i> ₇ -boronic Acid 139-16751 500mg 90,000円
※ <i>o</i> -Methoxyphenyl- <i>d</i> ₇ -boronic Acid 136-16761 500mg 90,000円	※ Methyl α-D-Glucopyranoside-2,3,4,6,6- <i>d</i> ₅ 138-16461 1g 60,000円	※ Methyl β-D-Glucopyranoside-2,3,4,6,6- <i>d</i> ₅ 135-16471 1g 60,000円	※ Methyl α-D-Galactopyranoside-2,3,4,6,6- <i>d</i> ₅ 132-16481 1g 60,000円	※ Methyl β-D-Galactopyranoside-2,3,4,6,6- <i>d</i> ₅ 139-16491 1g 60,000円
※ Methyl α-D-Mannopyranoside-2,3,4,6,6- <i>d</i> ₅ 132-16501 1g 60,000円	Carbazole-1,2,3,4,5,6,7,8- <i>d</i> ₈ 033-20971 1g 80,000円	2-Hydroxybenzimidazole-4,5,6,7- <i>d</i> ₄ 083-08991 1g 80,000円	7-Azaindole-2,3,4,5,6- <i>d</i> ₅ 014-22501 1g 80,000円	2-Aminopyridinium-3,4,5,6- <i>d</i> ₄ <i>p</i> -Toluenesulfonate 016-22441 1g 68,000円

参考文献

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

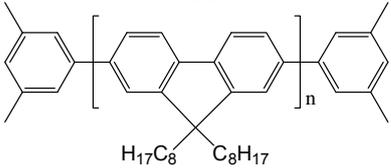
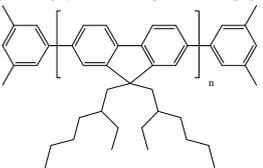
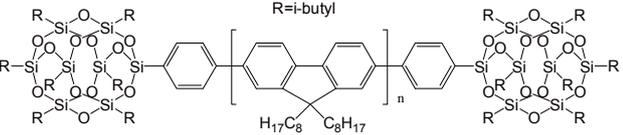
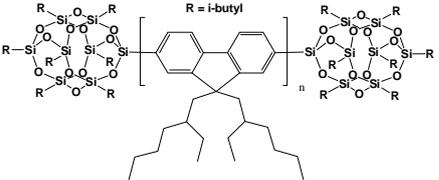
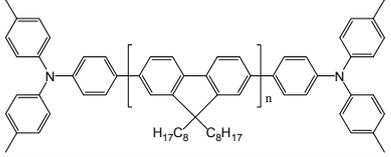
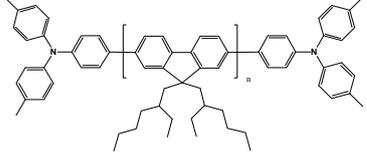
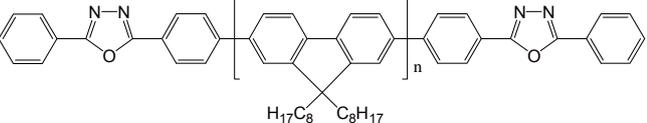
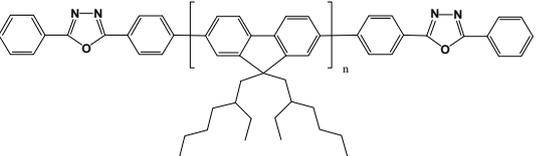
(T.S.)

合成材料

●●● 光材料・デバイスの開発・研究に
●●● 青色発光ポリマー



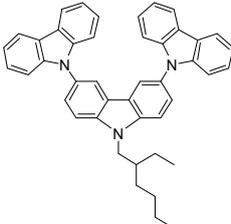
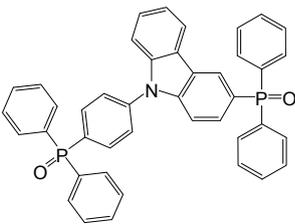
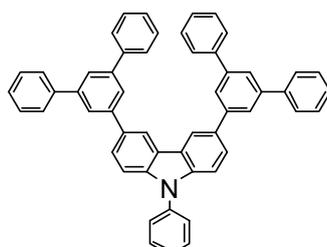
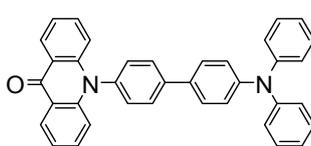
American Dye Source 社では、各種発光ポリマーを扱っております。今回はフルオレン誘導体から成る発光ポリマーの一部を紹介いたします。詳しくはメーカーHP をご覧下さい (<http://www.adsdyes.com/>)。

品名 / 構造	①λ _{Abs} ②λ _{PL} ③参考 M.W.	メーカーコード	容量	希望納入価格(円)
Poly[9,9-dioctylfluorenyl-2,7-diyl] - End capped with DMP 	①393 nm ②438 nm ③40,000~120,000	ADS129BE	100mg	27,600
			500mg	62,400
			1g	108,800
			2g	200,100
			5g	427,800
10g	797,500			
Poly[9,9-di-(2-ethylhexyl)-fluorenyl-2,7-diyl]- End capped with DMP 	①385 nm ②410 nm ③40,000~120,000	ADS131BE	100mg	27,600
			500mg	62,400
			1g	108,800
			2g	200,100
			5g	427,800
10g	797,500			
Poly[9,9-dioctylfluorenyl-2,7-diyl] - End capped with Polysilsesquioxane 	①390 nm ②415 nm ③40,000~120,000	ADS229BE	100mg	27,600
			500mg	62,400
			1g	108,800
			2g	200,100
			5g	427,800
10g	797,500			
Poly[9,9-di-(2-ethylhexyl)-fluorenyl-2,7-diyl] 	①385 nm ②410 nm ③40,000~120,000	ADS231BE	100mg	27,600
			500mg	62,400
			1g	108,800
			2g	200,100
			5g	427,800
10g	797,500			
Poly[9,9-dioctylfluorenyl-2,7-diyl] - End capped with N,N-Bis(4-methylphenyl)-aniline 	①390 nm ②413 nm ③70,000~150,000	ADS329BE	100mg	27,600
			500mg	62,400
			1g	114,600
			2g	200,100
			5g	427,800
10g	797,500			
Poly[9,9-di-(2-ethylhexyl)-fluorenyl-2,7-diyl] - End capped with N,N-Bis(4-methylphenyl)-aniline 	①385 nm ②410 nm ③40,000~120,000	ADS331BE	100mg	27,600
			500mg	62,400
			1g	114,600
			2g	200,100
			5g	427,800
10g	797,500			
Poly[9,9-dioctylfluorenyl-2,7-diyl] - End capped with 2,5-diphenyl-1,2,4-oxadiazole 	①390 nm ②410 nm ③40,000~120,000	ADS429BE	100mg	27,600
			500mg	62,400
			1g	114,600
			2g	200,100
			5g	427,800
10g	797,500			
Poly[9,9-di-(2-ethylhexyl)-fluorenyl-2,7-diyl] - End capped with 2,5-diphenyl-1,2,4-oxadiazole 	①385 nm ②410 nm ③40,000~120,000	ADS431BE	100mg	27,600
			500mg	62,400
			1g	114,600
			2g	200,100
			5g	427,800
10g	797,500			

(U.TN.)

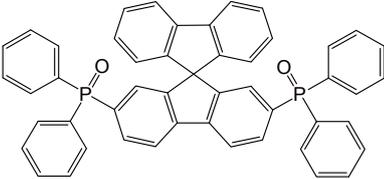
台湾にある Luminescence Technology 社では、新たに有機 EL 材料、有機太陽電池材料、DSSC 材料をラインアップしました。是非一度お試しください。詳しくはメーカーHP をご覧ください (<http://www.lumtec.com.tw/>)。

■新規有機 EL 燐光ホスト材料

メーカーコード	品名	容量	希望納入価格 (円)
LT-N4010	TCz1 6-(9H-carbazol-9-yl)-9-(2-ethylhexyl)-9H-3,9'-bicarbazole	1g	93,000
		Formula : C ₄₄ H ₃₉ N ₃ Molecular Weight : 609.8g/mole Absorption : 261nm(CH ₂ Cl ₂) Photoluminescence : 391nm(CH ₂ Cl ₂) Grade : Sublimed, >99% Reference: <i>Appl. Phys. Lett.</i> , 96 , 093304 (2010).	
LT-N4011	PPO21 3-(diphenylphosphoryl)-9-(4-(diphenylphosphoryl)phenyl)-9-carbazole	1g	128,700
		Formula : C ₄₂ H ₃₁ NO ₂ P ₂ Molecular Weight : 643.65g/mole CAS No. : 1226860-68-9 Glass Transition Temperature : 110°C Absorption : 294,338nm(CH ₂ Cl ₂) Photoluminescence : 364nm(CH ₂ Cl ₂) HOMO/LUMO : -6.25(eV)/ -2.68(eV) Bandgap : 3.57(eV) Grade : Sublimed, >99%	
LT-N4012	CzTP 3,6-bis[(3,5-diphenyl)phenyl]-9-phenyl-carbazole	1g	128,700
		Formula : C ₅₄ H ₃₇ N Molecular Weight : 699.88g/mole CAS No. : 1201649-79-7 Glass Transition Temperature : 135°C Absorption : 294,338nm(CH ₂ Cl ₂) Photoluminescence : 360nm(CH ₂ Cl ₂) HOMO/LUMO : -5.91(eV)/ -2.48(eV) Bandgap : 3.43(eV) Grade : Sublimed, >99%	
LT-N4014	ADB 10-(4'-(diphenylamino)biphenyl-4-yl)acridin-9(10H)-one	1g	107,000
		Formula : C ₃₇ H ₂₆ N ₂ O Molecular Weight : 514.62g/mole Thermal Gravimetric Analysis : 340°C Absorption : 375,394nm(CH ₂ Cl ₂) Photoluminescence : 408nm(CH ₂ Cl ₂) HOMO/LUMO : -5.41(eV)/ -1.66(eV) Bandgap : 3.75(eV) mp : 255°C Grade : Sublimed, >99%	

■新規有機 EL 燐光ホスト材料

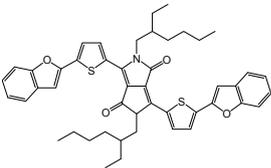
メーカーコード	品名	容量	希望納入価格 (円)
LT-N4015	SPPO13 2,7-bis(diphenylphosphoryl)-9,9'-spirobi[fluorene]	1g	124,000



Formula : C₄₉H₃₄O₂P₂
Molecular Weight : 716.74g/mole
Thermal Gravimetric Analysis : 125°C
Absorption : 325nm(CH₂Cl₂)
Photoluminescence : 365nm(CH₂Cl₂)
HOMO/LUMO : -6.56(eV)/ -2.91(eV)
Bandgap : 3.65(eV)
Grade : Sublimed, >99%

■新規有機太陽電池低分子材料

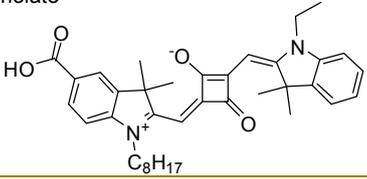
メーカーコード	品名	容量	希望納入価格 (円)
LT-S9040	DPP(TBFu)2 3,6-bis(5-(benzofuran-2-yl)thiophen-2-yl)-2,5-bis(2-ethylhexyl)pyrrolo[3,4-c]pyrrole-1,4(2 <i>H</i> ,5 <i>H</i>)-dion	1g	277,500



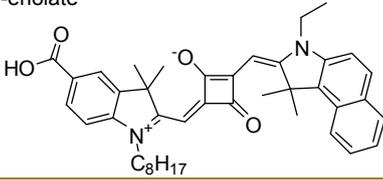
Formula : C₄₆H₄₈N₂O₄S₂
Molecular Weight : 757.01g/mole
HOMO/ LUMO : -5.2(eV)/ -3.4(eV)
Bandgap : 1.8(eV)
Grade : >98.5%

■新規 DSSC 材料

メーカーコード	品名	容量	希望納入価格 (円)
LT-S9037	SQ01 (<i>E</i>)-4-((5-carboxy-3,3-dimethyl-1-octyl-3 <i>H</i> -indolium-2-yl)methylene)-2-((<i>E</i>)-(1-ethyl-3,3-dimethylindolin-2-ylidene)methyl)-3-oxocyclobut-1-enolate	1g	217,000
LT-S9038	SQ02 (<i>E</i>)-4-((5-carboxy-3,3-dimethyl-1-octyl-3 <i>H</i> -indolium-2-yl)methylene)-2-((<i>E</i>)-(3-ethyl-1,1-dimethyl-1 <i>H</i> -benzo[<i>e</i>]indol-2(3 <i>H</i>)-ylidene)methyl)-3-oxocyclobut-1-enolate	1g	217,000



Formula : C₃₇H₄₄N₂O₄
Molecular Weight : 580.67g/mole
λ max : 647nm(DMF)
HOMO/ LUMO : -5.33(eV)/ -3.73(eV)
Bandgap : 1.6(eV)



Formula : C₃₇H₄₄N₂O₄
Molecular Weight : 580.67g/mole
λ max : 647nm(DMF)
HOMO/ LUMO : -5.33(eV)/ -3.73(eV)
Bandgap : 1.6(eV)

Luminescence Technology 社ボロン酸関連品小冊子の発行案内



Luminescence Technology 社ではこの度ボロン酸関連製品を掲載したカタログを発行致しました。

当社または当社販売店にご請求下さい。

●掲載品目

- ・ ボロン酸
- ・ ボロンエステル

(U.MX.)

天然のインドール誘導体は、古くからアルカロイドとして強い生理活性を示すことが知られています。また医薬品としても有用で、インドール環を基本骨格とする医薬品が数多く誕生しています。

Matrix scientific 社はビルディングブロック約 48,000 品目を有する有機試薬メーカーです。インドール誘導体に関しては約 1,700 品目あり、一般的なものから大変ユニークな構造まで、幅広く品揃えています。下記に代表的なものを示します。

また、Matrix scientific 社は全カタログ掲載品目の構造式及び物性データを SD ファイルで所有しており、これらのデータ提供が可能です。

Matrix scientific 社以外に、当社関連会社(株)ワコーケミカルも多数のインドール誘導体を品揃えしております。併せてご検討下さい。

5-(Trifluoromethoxy)indole-2-carboxylic acid 		3-(1 <i>H</i> -Indol-3-yl)-4-methyl-pentanoic acid 		2,3-Dihydro-5-nitro-(1 <i>H</i>)-indole 		4-(1 <i>H</i> -Indol-3-yl)-thiazol-2-ylamine 		Ethyl 7-nitroindole-2-carboxylate 	
コード No.	メーカーコード	コード No.	メーカーコード	コード No.	メーカーコード	コード No.	メーカーコード	コード No.	メーカーコード
-	5333	511-63081	20053	512-44211	6986	513-62681	19034	514-44031	6854
100mg	9,600 円	500mg	51,200 円	1g	10,800 円	500mg	51,200 円	1g	29,200 円
5-Chloro-2,3-dihydro-(1 <i>H</i>)-indole 		1-(<i>tert</i> -Butoxycarbonyl)indole-2-boronic acid 		4-Chloro-8-methoxy-5 <i>H</i> -pyrimido[5,4- <i>b</i>]indole 		<i>N</i> -Methylindole-5-boronic acid 		6-Bromo-1 <i>H</i> indole-2-carboxylic acid 	
コード No.	メーカーコード	コード No.	メーカーコード	コード No.	メーカーコード	コード No.	メーカーコード	コード No.	メーカーコード
515-44201	6985	516-60731	7410	-	18402	-	9798	-	32436
1g	8,300 円	1g	18,000 円	500mg	57,100 円	500mg	38,300 円	1g	22,800 円
Indol-1-yl-acetic acid 		Indole-4-carboxylic acid 		5-Indol-1-ylmethyl-furan-2-carboxylic acid 		1-Boc-indole 		4-(1 <i>H</i> -Indol-3-ylsulfanyl)-butyric acid 	
コード No.	メーカーコード	コード No.	メーカーコード	コード No.	メーカーコード	コード No.	メーカーコード	コード No.	メーカーコード
514-62971	19509	-	12612	515-62901	19355	518-43451	20025	518-63111	20190
500mg	45,400 円	5g	19,100 円	500mg	51,200 円	1g	5,600 円	500mg	51,200 円
(1 <i>H</i> -Indol-3-ylmethyl)-(tetrahydro-furan-2-ylmethyl)-amine 		2-(3-Formyl-indol-1-yl)-acetamide 		(1-Ethyl-1 <i>H</i> -indol-3-ylsulfanyl)-acetic acid 		6-Methoxy-1 <i>H</i> -indole-2-carboxylic acid 		3-(1-Ethyl-1 <i>H</i> -indol-3-yl)-propionic acid 	
コード No.	メーカーコード	コード No.	メーカーコード	コード No.	メーカーコード	コード No.	メーカーコード	コード No.	メーカーコード
519-62421	16794	517-62341	12797	512-63131	20203	516-62291	12222	513-62821	19201
500mg	57,600 円	500mg	50,300 円	500mg	51,200 円	500mg	50,000 円	500mg	51,200 円

【ワコーケミカル社製品】

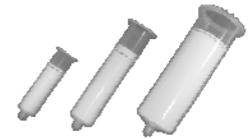
コード No.	品 名	純度	CAS No.	分子式	分子量	容 量	希望納入価格(円)
326-90021	(2 <i>S</i> ,3 <i>aS</i> ,7 <i>aS</i>)-Octahydro-1 <i>H</i> -indole-2-carboxylic Acid	97.0+%	80875-98-5	C ₉ H ₁₅ NO ₂	169.22	1g	10,000
322-90023		HPLC				5g	33,500
321-90071	(S)-(-)-Indoline-2-carboxylic Acid	97.0+%	79815-20-6	C ₉ H ₉ NO ₂	163.17	1g	6,000
327-90073		HPLC				5g	20,000
323-29461	1,1,2-Trimethylbenzo[e]indole	97.0+%	41532-84-7	C ₁₅ H ₁₅ N	209.29	5g	6,000
321-29462		HPLC				20g	20,000
325-24281	1-Acetyl-3-hydroxyindole	97.0+%	33025-60-4	C ₁₀ H ₉ NO ₂	175.18	100mg	5,000
321-24283		GC				500mg	15,000
328-24271	1-Acetyl-5-bromo-3-hydroxyindole	97.0+%	114165-30-9	C ₁₀ H ₈ BrNO ₂	254.08	100mg	5,000
324-24273		GC				500mg	15,000
325-24301	1-Acetylindole-3-carbaldehyde	97.0+%	22948-94-3	C ₁₁ H ₉ NO ₂	187.19	5g	8,000
323-24302		GC				25g	30,000
328-74042	1-Ethyl-2-phenylindole	97.0+%	13228-39-2	C ₁₆ H ₁₅ N	221.3	25g	3,300
322-74045		GC				500g	28,000
329-93551	1-Methylindole-2-carboxylic Acid	97.0+%	16136-58-6	C ₁₀ H ₉ NO ₂	175.18	1g	6,500
325-93553		HPLC				5g	21,000
323-79391	1-Methylindole-3-carbaldehyde	97.0+%	19012-03-4	C ₁₀ H ₉ NO	159.18	1g	5,000
329-79393		HPLC				5g	14,000
329-58631	2-(1,3,3-Trimethylindolin-2-ylidene) acetaldehyde	98.0+%	84-83-3	C ₁₃ H ₁₅ NO	201.26	5g	6,000
327-58632		HPLC				25g	19,000
327-83461	2,3,3-Trimethyl-5-nitro-3 <i>H</i> -indole	97.0+%	3484-22-8	C ₁₁ H ₁₂ N ₂ O ₂	204.23	5g	7,000
325-83462		HPLC				25g	25,500
325-73871	2,3-Dimethylindole	97.0+%	91-55-4	C ₁₀ H ₁₁ N	145.2	5g	4,500
323-73872		HPLC				25g	14,500
323-64521	2,5-Dimethylindole	97.0+%	1196-79-8	C ₁₀ H ₁₁ N	145.2	1g	7,000
329-64523		GC				5g	19,000
325-96392	2-Methylindole	97.0+%	95-20-5	C ₉ H ₉ N	131.17	25g	4,000
323-96393		HPLC				250g	22,000
328-52121	2-Methylindole-3-carbaldehyde	97.0+%	5416-80-8	C ₁₀ H ₉ NO	159.18	5g	6,000
326-52122		GC				25g	18,000
325-32971	4-Benzyloxyindole-3-carbaldehyde	97.0+%	7042-71-9	C ₁₆ H ₁₃ NO ₂	251.28	100mg	5,000
321-32973		GC				500mg	15,000
324-83471	5-Amino-2,3,3-trimethyl-3 <i>H</i> -indole	98.0+%	773-63-7	C ₁₁ H ₁₄ N ₂	174.24	1g	9,500
320-83473		HPLC				5g	33,000
322-32981	5-Benzyloxyindole-3-carbaldehyde	97.0+%	6953-22-6	C ₁₆ H ₁₃ NO ₂	251.28	1g	7,000
328-32983		HPLC				5g	25,000
327-33031	5-Benzyloxyindole-3-glyoxylamide	96.0+%	22424-62-0	C ₁₇ H ₁₄ N ₂ O ₃	294.3	100mg	5,000
323-33033		HPLC				500mg	15,000
324-35741	5-Bromoindole-3-acetamide	97.0+%	196081-79-5	C ₁₀ H ₉ BrN ₂ O	253.1	100mg	5,000
320-35743		GC				500mg	17,000
322-95121	5-Bromoindole-3-carbaldehyde	97.0+%	877-03-2	C ₉ H ₆ BrNO	224.05	5g	7,000
320-95122		HPLC				25g	22,000
323-22381	5-Chloroindole-2-carboxylic Acid	97.0+%	10517-21-2	C ₈ H ₅ NCICO ₂ H	195.6	1g	8,000
329-22383		HPLC				5g	28,000
329-32991	6-Benzyloxyindole-3-carbaldehyde	97.0+%	92855-64-6	C ₁₆ H ₁₃ NO ₂	251.28	100mg	5,000
325-32993		HPLC				500mg	15,000
326-93561	6-Nitroindoline	97.0+%	19727-83-4	C ₈ H ₈ N ₂ O ₂	164.16	1g	6,000
322-93563		HPLC				5g	18,000
325-26361	7-Azaindole	97.0+%	271-63-6	C ₇ H ₆ N ₂	118.14	1g	4,500
321-26363		GC				10g	23,000
326-33001	7-Benzyloxyindole-3-carbaldehyde	97.0+%	92855-65-7	C ₁₆ H ₁₃ NO ₂	251.28	100mg	4,000
322-33003		HPLC				500mg	12,000
321-75671	7-Chloro-2,3-indolinedione	96.0+%	7477-63-6	C ₈ H ₄ ClNO ₂	181.58	1g	5,000
327-75673		GC				5g	16,000
320-24231	Ethyl 5-Acetoxyindole-2-carboxylate	97.0+%	31720-89-5	C ₁₃ H ₁₃ NO ₄	247.25	100mg	5,000
326-24233		GC				500mg	15,000
328-35761	Ethyl 5-Bromoindole-2-carboxylate	97.0+%	16732-70-0	C ₁₁ H ₁₀ BrNO ₂	268.11	100mg	4,400
324-35763		GC				500mg	13,000
324-39761	Ethyl 5-Chloroindole-2-carboxylate	97.0+%	4792-67-0	C ₁₁ H ₁₀ ClNO ₂	223.66	1g	5,000
320-39763		GC				5g	15,000
321-42461	Ethyl Indole-2-carboxylate	97.0+%	3770-50-1	C ₁₁ H ₁₁ NO ₂	189.21	5g	5,000
329-42462		GC				25g	20,000
329-42381	Indole-3-acetamide	97.0+%	879-37-8	C ₁₀ H ₁₀ N ₂ O	174.2	1g	6,000
325-42383		GC				5g	20,000
328-73861	Indole-6-carboxylic Acid	97.0+%	1670-82-2	C ₉ H ₇ NO ₂	161.16	1g	6,000
324-73863		HPLC				5g	18,000
329-42401	Methyl Indole-3-acetate	97.0+%	1912-33-0	C ₁₁ H ₁₁ NO ₂	189.21	1g	5,000
325-42403		GC				5g	15,000
328-42471	Methyl Indole-5-carboxylate	97.0+%	1011-65-0	C ₁₀ H ₉ NO ₂	175.18	1g	7,400
324-42473		GC				5g	25,500

(U.N.)

Presep® (Luer Lock) Silica Gel(HC-N)は、比表面積の大きい球状シリカゲルを充てんしたフラッシュクロマトグラフ用カラムです。今回、条件検討などにご活用いただけるデータをご紹介します。

特長

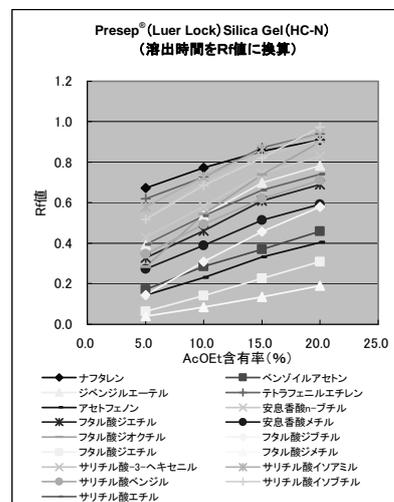
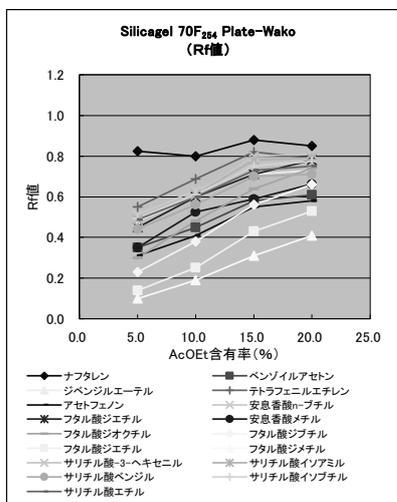
- サンプル負荷量が従来の3倍(当社同サイズカラム比)
- サンプル保持力が大きい
- 分離能が高い



溶出条件の検討

● Presep® (Luer Lock) Silica Gel (HC-N) と Silicagel 70F₂₅₄ Plate-wako との保持比較

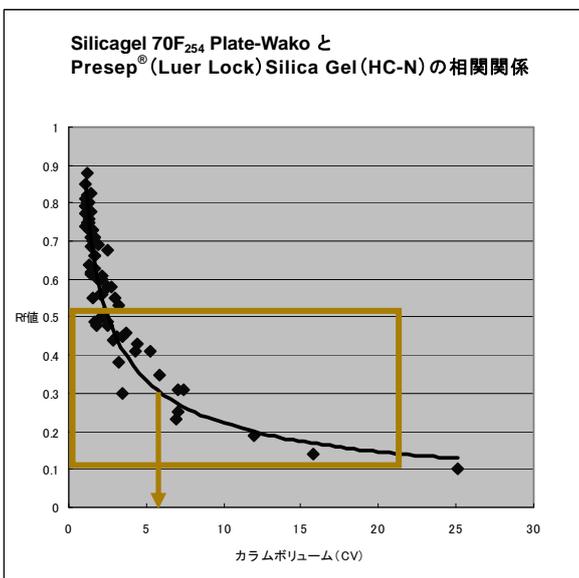
Presep® (Luer Lock) Silica Gel(HC-N)の分離条件の検討に TLC (使用プレート: Silicagel 70F₂₅₄ Plate-wako) が使用可能か保持特性を比較しました。*n*-ヘキサン/酢酸エチル混合液中の酢酸エチル含有率を変化させた時の、各化合物の Rf 値 (Presep® (Luer Lock) Silica Gel(HC-N)は溶出時間を Rf 値に換算) の挙動を示します。検討の結果、各化合物は似た挙動を示しました。



Presep® (Luer Lock) Silica Gel(HC-N)の分離条件の検討に、Silicagel 70F₂₅₄ Plate-wako をご利用いただけます。

● Silicagel 70F₂₅₄ Plate-wako の Rf 値による Presep® (Luer Lock) Silica Gel(HC-N)の溶出時間の推測

次に Silicagel 70F₂₅₄ Plate-wako で求めた溶出条件で Presep® (Luer Lock) Silica Gel(HC-N)により溶出を行いました。その時の Silicagel 70F₂₅₄ Plate-wako の Rf 値と Presep® (Luer Lock) Silica Gel(HC-N)での溶出に要した溶媒量をカラムボリューム(CV)に換算した値をプロットしました。両者には図のような相関関係が見られる事から、TLC で求めた Rf 値をグラフに当てはめて、おおよその溶出溶媒量および溶出時間を算出できると考えられます。



【例】 Rf 値=0.30 の化合物の、溶出に必要な溶媒量と溶出時間の推測

TLC で求めた Rf 値=0.30 の化合物の、溶出に必要な溶媒量は、図より **約 6CV** です。

Presep® (Luer Lock) Silica Gel(HC-N) TypeM を使用する場合、Presep® (Luer Lock) Silica Gel(HC-N) TypeM の **CV=15mL**

化合物の溶出に必要な推定溶媒量: **15ml × 6 = 90mL**

流速 10ml/min. で送液した場合の推定溶出時間: 90mL/10mL=9 となり、**約 9分**で溶出すると推測できます。

Rf 値が 1.0 に近い条件では溶出に必要な溶媒量が少なくなり、Rf 値 0.1 付近に近づく溶媒量が多くなります。分取には CV 値の差 (ΔCV) が大きい方が有利なことから、ΔCV を大きくしにくい Rf 値が 1.0 に近い条件よりも、目的の化合物の Rf 値が 0.1 ~ 0.5 になる溶離液条件を推奨します。

TLC Silicagel 70F₂₅₄ Plate-wako から求めた Rf 値をグラフに当てはめて、Presep® (Luer Lock) Silica Gel (HC-N) での溶出時間を推測することが可能です。

コード No.	品名	カラム容量参考値	容量	希望納入価格(円)
291-34041	Presep® (Luer Lock) Silica Gel (HC-N) Type M	13g/25mL	20本	35,000
297-34043			100本	照会
295-34061	Presep® (Luer Lock) Silica Gel (HC-N) Type L	35g/70mL	20本	45,000
291-34063			100本	照会
292-34071	Presep® (Luer Lock) Silica Gel (HC-N) Type 2L	50g/100mL	20本	60,000
298-34073			100本	照会
294-34031	Presep® (Luer Lock) Silica Gel (HC-N) Type 3L	115g/200mL	5本	28,000
290-34033			30本	照会
299-34081	Presep® (Luer Lock) Silica Gel (HC-N) Type 4L	230g/400mL	5本	38,000
295-34083			30本	照会

【関連製品】

コード No.	品名	膜厚	サイズ	容量	希望納入価格(円)
193-08401	Silicagel 70F ₂₅₄ Plate-wako	0.25mm	5cm × 10cm	10枚	2,800
193-08406			5cm × 10cm	200枚	23,100
197-08404			5cm × 20cm	100枚	21,000
199-08403			20cm × 20cm	25枚	15,000

(G.O.K.)

合成材料

●●● 塩化アリールとの鈴木-宮浦カップリング反応に使用可能！

●●● ホスフィン系パラジウム触媒



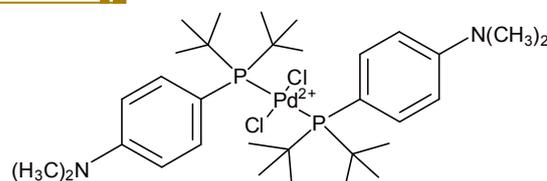
本品はジアルキルフェニルホスフィン骨格を持つパラジウム触媒です。

塩化アリールとのカップリング反応が効率的に進行します。

特長

- 塩化アリールとのカップリング反応が可能
- 空気中でも安定
- 高触媒効率

構造

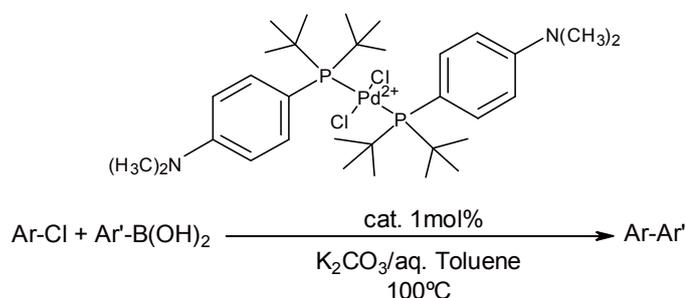


Dichlorobis[di-*t*-butyl(*p*-dimethylaminophenyl)phosphino]palladium (II)

CAS : 887919-35-9

C₃₂H₅₆Cl₂N₂P₂Pd=708.07

反応例



Ar-Cl	Ar'-B(OH) ₂	Ar-Ar' Yield (%)
		93%
		R=CF ₃ 92% R=OMe 93%
		98% (cat. 2mol%)

A. Guram, et al. : *J. Org. Chem.* **72**(14), 5104 (2007).

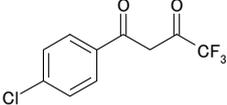
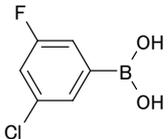
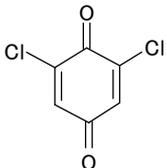
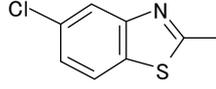
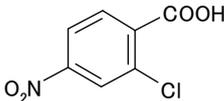
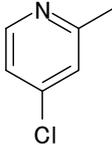
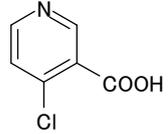
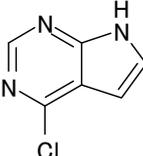
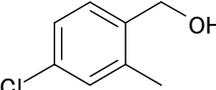
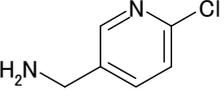
コード No.	品名	規格	容量	希望納入価格(円)
041-31701	Dichlorobis[di- <i>t</i> -butyl(<i>p</i> -dimethylaminophenyl)phosphino]palladium (II)	有機合成用	250mg	9,500
047-31703			1g	25,000
045-31704			5g	照会

(K.K.)

Aromatic Chloride Compounds

「Aromatic Chloride Compounds」パンフレットを発行しました！
875 品目の塩化アリアルを掲載しております。

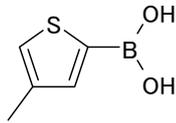
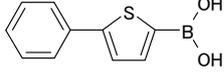
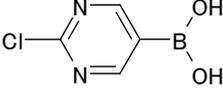
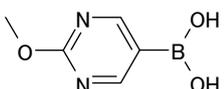
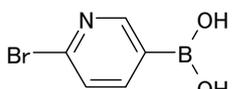
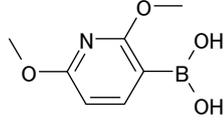
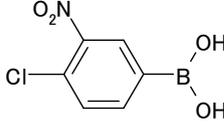
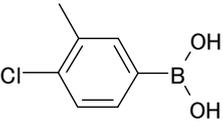
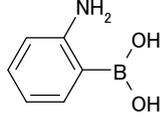
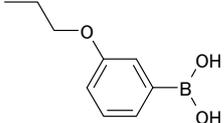
【化合物例】

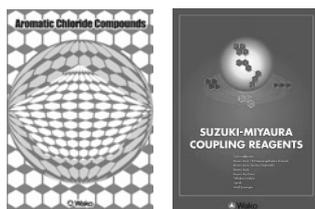
<p>1-(<i>p</i>-Chlorophenyl)-4,4,4-trifluoro-1,3-butanedione</p>  <p>[18931-60-7] 358-11981 1g 7,000 円 354-11983 5g 24,000 円</p>	<p>3-Chloro-5-fluorophenylboronic Acid</p>  <p>[328956-61-2] 358-13941 1g 8,000 円 354-13943 5g 22,000 円</p>	<p>2,6-Dichloro-1,4-benzoquinone</p>  <p>[697-91-6] 359-00781 1g 4,400 円</p>	<p>5-Chloro-2-methylbenzothiazole</p>  <p>[1006-99-1] 359-02442 25g 5,500 円</p>	<p>2-Chloro-4-nitrobenzoic Acid</p>  <p>[99-60-5] 359-04522 25g 12,000 円</p>
<p>4-Chloro-2-methylpyridine</p>  <p>[3678-63-5] 359-11151 1g 16,000 円</p>	<p>4-Chloro-3-pyridinecarboxylic Acid</p>  <p>[10177-29-4] 359-16531 1g 8,000 円 355-16533 5g 20,000 円</p>	<p>6-Chloro-7-deazapurine</p>  <p>[3680-69-1] 359-17491 1g 13,000 円 355-17493 5g 46,000 円</p>	<p>4-Chloro-2-methylbenzyl Alcohol</p>  <p>[129716-11-6] 359-19571 1g 9,000 円 355-19573 5g 29,000 円</p>	<p>5-(Aminomethyl)-2-chloropyridine</p>  <p>[97004-04-1] 359-19951 1g 7,000 円 355-19953 5g 24,000 円</p>

SUZUKI-MIYaura COUPLING REAGENTS

ボロン酸類化合物約 500 品目を収載したパンフレットをご用意しています。
Pd 触媒、リガンド、金属スカベンジャーなど、鈴木-宮浦カップリング反応関連試薬を網羅しています。

【化合物例】

<p>4-Methylthiophene-2-boronic Acid</p>  <p>[162607-15-0] 358-20391 1g 7,000 円 354-20393 5g 24,000 円</p>	<p>2-Phenyl-5-thiopheneboronic Acid</p>  <p>[306934-95-2] 350-19861 1g 12,000 円 358-19862 5g 44,000 円</p>	<p>2-Chloropyrimidine-5-boronic Acid</p>  <p>[1003845-06-4] 352-15661 1g 8,000 円 358-15663 5g 26,000 円</p>	<p>2-Methoxy-5-pyrimidineboronic Acid</p>  <p>[628692-15-9] 352-20431 1g 8,000 円 358-20433 5g 28,000 円</p>	<p>2-Bromo-5-pyridineboronic Acid</p>  <p>[223463-14-7] 351-20401 1g 8,000 円 357-20403 5g 28,000 円</p>
<p>2,6-Dimethoxy-3-pyridineboronic Acid</p>  <p>[221006-70-8] 353-18511 1g 8,000 円 359-18513 5g 27,000 円</p>	<p>4-Chloro-3-nitrophenylboronic Acid</p>  <p>[151169-67-4] 351-20381 1g 8,000 円 357-20383 5g 28,000 円</p>	<p>4-Chloro-3-methylphenylboronic Acid</p>  <p>[161950-10-3] 351-21001 1g 8,000 円 357-21003 5g 24,000 円</p>	<p><i>o</i>-Aminophenylboronic Acid</p>  <p>[5570-18-3] 350-19121 1g 8,000 円 356-19123 5g 28,000 円</p>	<p><i>m</i>-Propoxyphenylboronic Acid</p>  <p>[149557-18-6] 356-20951 1g 6,000 円 352-20953 5g 18,000 円</p>



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

各種有機化合物のパンフレットをご用意していますのでご請求下さい。

Acetylene Derivatives	Adamantane Derivatives
Aromatic Bromide Compounds	Aromatic Fluoride Compounds
Biphenyl Compounds	Thiol Compounds
Boronic Acid	Ionic Liquid
Heterocyclic Compounds	Thiophene Derivatives
Pyridine Compounds	Wittig & Horner-Emmons Reagents
<i>N</i> -BOC Protected Compounds	Iodide Compounds
Organic Electronic Materials	

(K.K.)

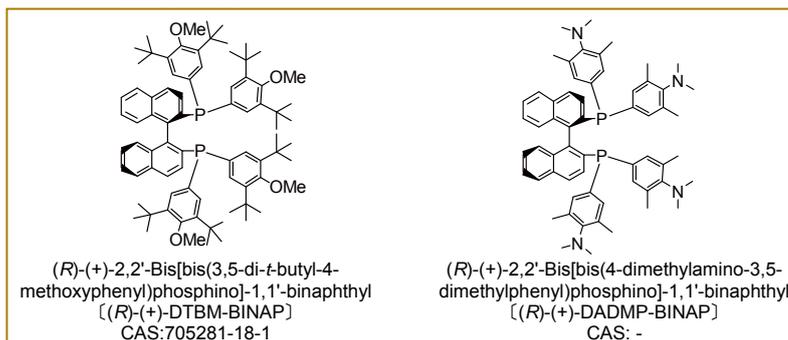
●● R 体を追加しました！不斉水素化反応に有用です
 ●●● **BINAP 系キラルホスフィン配位子**



光学活性物質の合成に使用する BINAP 系のキラルホスフィン配位子です。

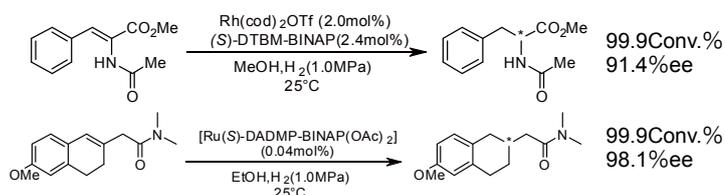
特長

- 多くの基質に対し BINAP に優る不斉誘起を示します。
- 空気中でも比較的安定です。
- 様々な溶媒で利用する事が可能です。



反応例

Rh、Ru を用いたオレフィンの不斉還元



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)
New 026-16991	(R)-(+)-2,2'-Bis[bis(3,5-di- <i>t</i> -butyl-4-methoxyphenyl)phosphino]-1,1'-binaphthyl	有機合成用	250mg	15,000
New 022-16993			1g	43,000
028-16951	(S)-(-)-2,2'-Bis[bis(3,5-di- <i>t</i> -butyl-4-methoxyphenyl)phosphino]-1,1'-binaphthyl	有機合成用	250mg	15,000
024-16953			1g	43,000
New 029-17341	(R)-(+)-2,2'-Bis[bis(4-dimethylamino-3,5-dimethylphenyl)phosphino]-1,1'-binaphthyl	有機合成用	250mg	16,000
New 025-17343			1g	49,000
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

当社は武田薬品工業(株)より本品のライセンスを受けて販売しております。

【関連品目】

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(diphenylphosphino)-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(diphenylphosphino)-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.)

様々な不斉反応で使用されている化合物をご紹介します。

反応名	備考(構造式: ☆, ★の化合物)	コードNo.	品名【略名】	規格	容量	希望納入価格(円)
不斉アリル位アミノ化反応 不斉水素化反応 不斉共役付加反応		☆ 139-15411	(R)-(-)-Me-BIPAM	有機合成用	200mg	28,000
		136-15421	(S)-(+)-Me-BIPAM		200mg	28,000
不斉アルキル化反応	 ☆: 1a (S,S)-1a: R ¹ =tBu, R ² =Me, Ar=C ₆ H ₄ -4-OMe, X ⁻ =F ⁻ (S,S)-1b: R ¹ =tBu, R ² =Me, Ar=C ₆ H ₄ -4-OMe, X ⁻ =BF ₄ ⁻ (S,S)-1c: R ¹ =R ² =Pr, Ar=C ₆ H ₄ -4-Me, X ⁻ =F ⁻ (S,S)-1d: R ¹ =R ² =Pr, Ar=C ₆ H ₄ -4-Me, X ⁻ =BF ₄ ⁻ ★: 1b	201-16141	TaDiAS-[(4 <i>R</i> ,5 <i>R</i>)-2- <i>t</i> -butyl-2-methyl- <i>N,N,N',N'</i> -tetrakis(4-methoxybenzyl)]Diiodide	有機合成用	100mg	8,500
		208-16151	TaDiAS-[(4 <i>S</i> ,5 <i>S</i>)-2- <i>t</i> -butyl-2-methyl- <i>N,N,N',N'</i> -tetrakis(4-methoxybenzyl)]Diiodide		100mg	8,500
		205-16161	TaDiAS-[(4 <i>R</i> ,5 <i>R</i>)-2,2-dipropyl- <i>N,N,N',N'</i> -tetrakis(4-methylbenzyl)]Bis(tetrafluoroborate)		100mg	8,500
		202-16171	TaDiAS-[(4 <i>S</i> ,5 <i>S</i>)-2,2-dipropyl- <i>N,N,N',N'</i> -tetrakis(4-methylbenzyl)]Bis(tetrafluoroborate)		100mg	8,500
不斉アルキル化反応 不斉アルドール反応 (Maruoka Catalyst)	 ☆ ☆	☆ 201-15921	(<i>R,R</i>)-3,4,5-Trifluorophenyl-NAS Bromide	有機合成用	100mg	30,000
		207-15923	(<i>R,R</i>)-3,4,5-Trifluorophenyl-NAS Bromide		500mg	照会
		201-16401	(<i>S,S</i>)-3,4,5-Trifluorophenyl-NAS Bromide	有機合成用	100mg	30,000
		207-16403	(<i>S,S</i>)-3,4,5-Trifluorophenyl-NAS Bromide		500mg	照会
		☆ 029-14921	(<i>R,R</i>)-3,5-Bistrifluoromethylphenyl-NAS Bromide	有機合成用	100mg	30,000
		025-14923	(<i>R,R</i>)-3,5-Bistrifluoromethylphenyl-NAS Bromide		500mg	照会
026-16251	(<i>S,S</i>)-3,5-Bistrifluoromethylphenyl-NAS Bromide	有機合成用	100mg	30,000		
022-16253	(<i>S,S</i>)-3,5-Bistrifluoromethylphenyl-NAS Bromide		500mg	照会		
不斉アルドール反応 不斉マイケル反応 不斉マンニッヒ反応	 ☆ ☆ ☆	☆ 155-02421	3,3'-[Oxybis(methylene)]bis-(1 <i>R</i> ,1' <i>R</i>)-1,1'-bi-2-naphthol [(<i>R,R</i>)-linked-BINOL]	有機合成用	200mg	25,000
		★ 152-02431	3,3'-[Oxybis(methylene)]bis-(1 <i>S</i> ,1' <i>S</i>)-1,1'-bi-2-naphthol [(<i>S,S</i>)-linked-BINOL]		200mg	25,000
不斉ヘテロ Diels-Alder 反応 不斉向山アルドール反応	光学活性ジルコニウムモレキュラーシーブス複合触媒	097-05271	(R)-3-I-ZrMS	有機合成用	1g	15,000
		093-05273			5g	55,000
不斉マンニッヒ型反応	 ☆ ☆ ☆	087-09011	(<i>R</i>)-Homodinuclear Ni ₂ -Schiff Base Catalyst	有機合成用	100mg	8,500
		083-09013	(<i>R</i>)-Homodinuclear Ni ₂ -Schiff Base Catalyst		500mg	31,000
		084-09021	(<i>S</i>)-Homodinuclear Ni ₂ -Schiff Base Catalyst	有機合成用	100mg	8,500
		080-09023	(<i>S</i>)-Homodinuclear Ni ₂ -Schiff Base Catalyst		500mg	31,000
不斉カルボアルミ化反応	 ☆	025-15981	(-)-Bis[1-((1' <i>S</i> ,2' <i>S</i> ,5' <i>R</i>)-2'-isopropyl-5'-methylcyclohexyl)indenyl]zirconium (IV) Dichloride [(<i>-</i>)-(NMI) ₂ ZrCl ₂]	有機合成用	200mg	8,000
		021-15983	(-)-Bis[1-((1' <i>S</i> ,2' <i>S</i> ,5' <i>R</i>)-2'-isopropyl-5'-methylcyclohexyl)indenyl]zirconium (IV) Dichloride [(<i>-</i>)-(NMI) ₂ ZrCl ₂]		1g	28,000
		022-16111	(+)-Bis[1-((1' <i>S</i> ,2' <i>S</i> ,5' <i>R</i>)-2'-isopropyl-5'-methylcyclohexyl)indenyl]zirconium (IV) Dichloride [(<i>+</i>)-(NMI) ₂ ZrCl ₂]		200mg	8,000
		028-16113	(+)-Bis[1-((1' <i>S</i> ,2' <i>S</i> ,5' <i>R</i>)-2'-isopropyl-5'-methylcyclohexyl)indenyl]zirconium (IV) Dichloride [(<i>+</i>)-(NMI) ₂ ZrCl ₂]		1g	28,000
不斉クロスカップリング反応 不斉水素移動反応 不斉ヒドロシリル化反応	 Pr	065-04331	ip-FOXAP	有機合成用	100mg	11,000
		061-04333			500mg	44,000
不斉ジヒドロキシル化反応	酸化オスmium固定化触媒	153-02081	Osmium(VIII)Oxide, Microencapsulated 【MC OsO ₄ 】	有機合成用	1g	15,000
		158-02411	Osmium(VIII)Oxide, PEM-Micro encapsulated 【PEM-MC OsO ₄ 】		1g	20,000
		153-02581	Osmium Oxide, Immobilized Catalyst I 【Os IC-I】	有機合成用	5g	13,000
		151-02582	Osmium Oxide, Immobilized Catalyst I 【Os IC-I】		25g	50,000

反応名	コードNo.	メーカーコード	品名	容量	希望納入価格(円)
不斉還元反応 (生体触媒)	300-37701	1005	Chiralscreen® OH トライアルキット	5mg × 5種 (1回用)	18,000
	308-85731	1115	Chiralscreen® OH-1 (ケトン用標準キット)	5mg × 15種 (1回用)	38,000
	304-85733	2115		50mg × 15種 (10回用)	180,000
	305-85741	1215	Chiralscreen® OH-2 (ケトン用拡張キット)	5mg × 15種 (1回用)	38,000
	301-85743	2215		50mg × 15種 (10回用)	180,000
	302-85751	1330	Chiralscreen® OH-3 (ケトン用フルキット)	5mg × 30種 (1回用)	75,000
	308-85753	2330		50mg × 30種 (10回用)	350,000
	309-85761	1408	Chiralscreen® OH-4 (α-ケト酸用キット)	5mg × 8種 (1回用)	30,000
	305-85763	2408		50mg × 8種 (10回用)	150,000
	300-85811	11116	Chiralscreen® 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 (1回用)	80,000
	306-85813	12116		50mg × 16種 (10回用)	400,000
	307-85821	11206	Chiralscreen® NH-2 (D-アミノ酸用キット (アセチル体タイプ))	5mg × 6種 (1回用)	32,000
	303-85823	12206		50mg × 6種 (10回用)	160,000
	304-85831	11314	Chiralscreen® NH-3 (D-アミノ酸用キット (アミノ酸タイプ))	5mg × 14種 (1回用)	72,000
	300-85833	12314		50mg × 14種 (10回用)	360,000
	301-85841	11404	Chiralscreen® NH-4 (L-アミノ酸用キット (アミノ酸タイプ))	5mg × 4種 (1回用)	24,000
307-85843	12404	50mg × 4種 (10回用)		120,000	

*各化合物の反応例を掲載した「グリーンケミストリーカタログ第5集」をご用意しています。当社販売店、営業所にお問い合わせ下さい。

(G.TK.)

合成関連機器

●●● 中圧用キラルカラム ●●● CHIRALFLASH IA/IC



ダイセル化学工業(株)のCHIRALFLASH IA/ICは、耐溶剤性のキラル充てん剤をフッ素樹脂カラムに充填した中圧クロマト用キラルカラムです。光学異性体の分取の新しいツールとしてご使用いただけます。

今回、HPLCカラムCHIRALPAKを用いた条件検討例を紹介させていただきます。

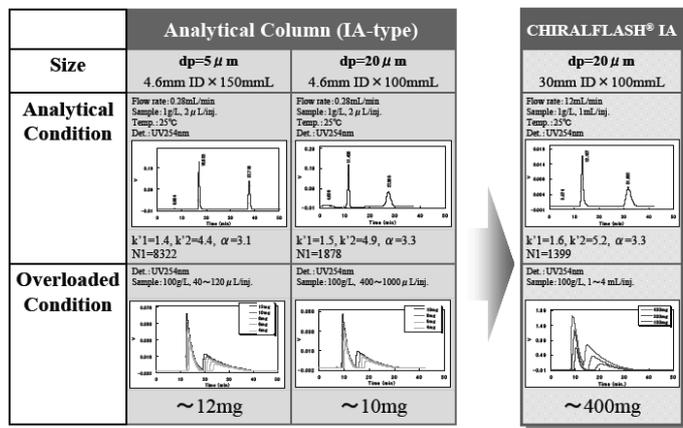
特長

- 光学異性体を数百mg分割可能
- 逆洗が可能
- 様々な有機溶媒を移動相として使用可能
- 繰り返し使用可能

条件検討例

CHIRALFLASHによる分取条件を、分離特性が同じタイプのHPLCカラムCHIRALPAKを用い検討した例を示します。

- Benzoin ethyl ether (BEE) (*n*-Hexane/EA = 90/10 (v/v))



製品仕様

カラムサイズ	内径×長さ (mm) 30×100 外径×長さ (mm) 38×150
カラム材質	フッ素系樹脂
充てん剤	IA、IC：各20μm 充てん剤量：40g
ベッド ボリューム	50 mL
耐圧	最大圧力 1.5 MPa
推奨流量	12 mL/min.
サンプル負荷量	数十mg～数百mg

コードNo.	メーカーコード	品名	粒子径	充てん量	カラムサイズ	希望納入価格(円)
306-95801	80M73	CHIRALFLASH IA	20μm	40g	30mm×100mm	300,000
303-95811	83M73	CHIRALFLASH IC	20μm	40g	30mm×100mm	300,000

CHIRALFLASH、CHIRALPAKは、ダイセル化学工業(株)の登録商標です。

(G.OK.)

光学分割反应用の各種酵素をセットにしご提供致します。

光学活性物質合成用の触媒のスクリーニング、及び光学分割反応のご研究に酵素ライブラリーとしてご利用下さい。

特長

- リパーゼ、エステラーゼ、プロテアーゼと多様な種類をセットでご用意
- 各酵素についてバルク供給が可能

酵素を用いた反応例

酵素名	由来	反応
Lipase	<i>Candida antarctica</i> , Type B	
Esterase	Porcine Liver	
Protease	<i>Bacillus licheniformis</i>	

酵素の種類と由来

Chirazyme No.	起源	IUB No.	形状
L-1	<i>Burkholderia cepacia</i>	EC3.1.1.3	powder
L-2	<i>Candida antarctica</i> , type B	EC3.1.1.3	liquid
L-3	<i>Candida cylindracea</i>	EC3.1.1.3	powder
L-5	<i>Candida antarctica</i> , type A	EC3.1.1.3	liquid
L-6	<i>Pseudomonas sp.</i>	EC3.1.1.34	powder
L-8	<i>Thermomyces lanuginosus</i> , wild	EC3.1.1.3	liquid
L-8.1	<i>Thermomyces lanuginosus</i> , mutant	EC3.1.1.3	liquid
L-8.2	<i>Thermomyces lanuginosus</i> , mutant	EC3.1.1.3	liquid
L-9	<i>Rhizomucor miehei</i>	EC3.1.1.3	liquid
L-20	<i>Aspergillus niger</i>	EC3.1.1.3	powder
L-21	<i>Pseudomonas fluorescens</i>	EC3.1.1.3	powder
L-22	Fungi (wild type)	EC3.1.1.74	liquid
L-22.1	Fungi (mutant)	EC3.1.1.4	liquid
E-1	Porcine liver	EC3.1.1.1	suspension
P-1	<i>Bacillus licheniformis</i>	EC3.4.21.62	liquid
P-2	<i>Bacillus licheniformis</i>	EC3.4.21.62	powder
P-20	<i>Bacillus clausii</i>	EC3.4.21.62	liquid
P-23	<i>Rhizomucor miehei</i>	EC3.4.23.4	liquid

メーカーコード	品名	容量	希望納入価格(円)
5914850	CHIRAZYME Screening Set 3	1セット	120,000

(KN.B.)

『新機能性材料 開発への挑戦』 ～ “電子材料” を計算化学で知り尽くす ～

新材料の開発手法は、急速に進歩しているナノテクノロジーやバイオテクノロジーなどの新技術も積極的に取り入れながら、発展し続けています。そしてその開発プロセスにおいては、各種機能を発現させるための原理となる物理・化学的なメカニズムを解明し、より高機能な材料設計につなげていくことがますます重要な要素となってきました。

近来、「計算化学」は効率の良い新材料開発に不可欠な手法として幅広く認知され、分子の物性計算法である“半経験的分子軌道法”や“密度汎関数法”は、Gaussian、ADFなどのプログラムパッケージの進展に伴って、世界中の研究機関で幅広く活用されるようになってきています。

この度 富士通(株)様のご協力を得まして、代表的な分子モデリングソフトウェアである「Spartan'10」と材料開発支援統合プラットフォーム「SCIGRESS」をご紹介します。

1. 「Spartan'10」 (分子モデリングソフトウェア) [Wavefunction, Inc. 日本支店]
2. 「SCIGRESS」 (材料開発支援統合プラットフォーム) [富士通株式会社]

■日 時：平成 23 年 10 月 4 日 (火) 13:00～17:00 (受付開始：12:30)

■場 所：富士通(株)武蔵小杉オフィス：定員 50 名 (先着順)

〒211-0012 神奈川県川崎市中原区中丸子 13-2 野村不動産武蔵小杉ビル；TEL：044-874-6222

<http://jp.fujitsu.com/facilities/musashikosugioffice/>

※定員になり次第締め切らせていただきますので、お早めにお申し込み下さい。

■主な講演内容：

●有機分子の電子特性と計算化学

東京大学 先端科学技術センター 特別研究員 (大阪大学名誉教授) 柳田 祥三 氏

あらゆる元素を含む有機分子の量子計算を可能にする密度汎関数法 (DFT 法) は、実験・観察結果を見事に説明することから、実験者にとって「革命的な分子軌道計算法」である。

化学反応を DFT 法で比較・解析すると、フロンティア軌道のエネルギー相関と軌道パターン概念が、分子内あるいは分子間軌道の再構築に重要な役割を果たすことが理解できる。

本講演では、最高占有軌道 (HOMO) と最低非占有軌道 (LUMO) の電子密度の広がりや節構造に着目し、有機分子の選択的な反応と電子的な特性の由来を比較検討する。

さらに、エネルギー変換に関係する色素分子や、また、電子輸送分子材料であるフラレーン誘導体、TPD 関連分子、チオフェン誘導体の DFT 構造を精査し、計算化学からの電子機能分子の設計を考える。

●それぞれの手法の使い分けについて ～ Spartan の機能紹介 ～

Wavefunction, Inc. 日本支店長 内田 典孝 氏

分子モデリング、特に分子軌道法にはいくつもの計算手法が並列的に現存するが、それはオールマイティな手法が存在しないことを意味している。計算手法のそれぞれの背景を知ることも重要であるが、むしろ手法ごとの振る舞い、それぞれの手法がどの程度実験を説明するかについて知ることは必要不可欠であるといえる。

本講演では、Spartan の機能を紹介しながら搭載した各手法のふるまい：実験値との比較について紹介する。

●材料開発支援統合プラットフォーム SCIGRESS のご紹介

富士通(株)TC ソリューション事業本部 計算科学ソリューション総括部

シニアマネージャー 高橋 篤也 氏、松本 大輔 氏

分子軌道法、密度汎関数法、分子動力学法など計算化学のあらゆる手法を用いて材料開発を支援する計算化学統合ソフトウェア「SCIGRESS」(サイグレス) の機能概要と、半導体、電池、有機 EL 等の材料開発における適用事例をご紹介します。

また機能をより具体的に理解していただくために簡単なデモンストレーションも実施する。

※セミナー内容は、若干変更になる場合がございます。

■参加費：無料

■参加申し込み：

弊社 HP 「セミナー・学会・展示」(<http://www.wako-chem.co.jp/siyaku/seminar.htm>) よりお申し込みください。

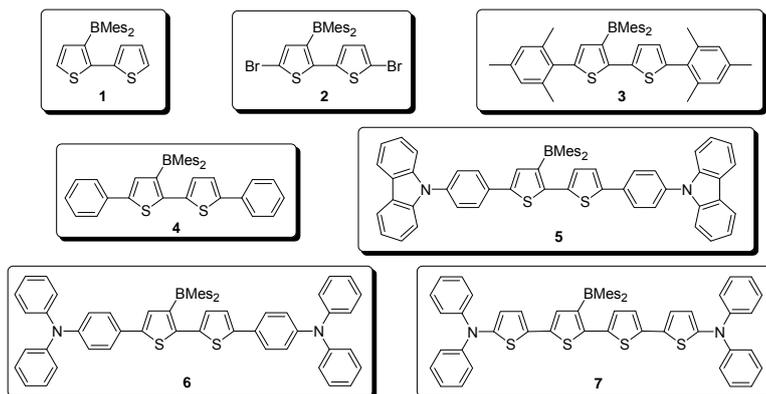
(G.M.)

高発光性有機固体

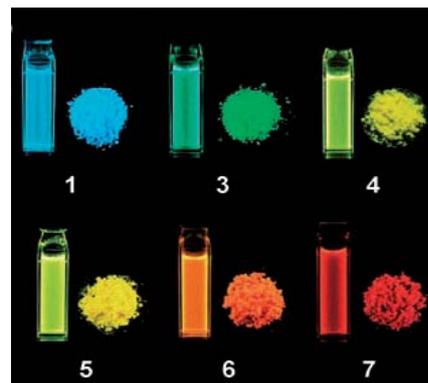
発光性の有機化合物は、緑色蛍光タンパク（GFP）などの生体標識材料や有機 EL ディスプレイの発光材料などの有機エレクトロニクス材料、化学センサー及び有機レーザーなどとして幅広い分野で用いられており、現在も様々な用途に応じた新たな発光性の有機π電子材料の開発研究が盛んに行われています。これらの用途のうち、有機エレクトロニクス材料では、発光性有機化合物は固体状態で用いる場合が多く、固体状態でも強い発光を示す材料の開発が求められます。

今回紹介する製品は、π電子受容性を持つ嵩高いホウ素置換基をオリゴチオフェン骨格の側鎖に導入した化合物であり、強い発光性を示す有機固体です¹⁾。オリゴチオフェン骨格の末端の置換基の種類によって電子供与性を制御することにより、青色から濃赤色まで望みの色の発光性を示します。

構造



発光色



photographs under irradiation at 365 nm.

参考文献

1) A. Wakamiya, K. Mori, S. Yamaguchi: *Angew. Chem. Int. Ed.*, **46.**, 4273 (2007).

番号	コード No.	品名	規格	容量	希望納入価格(円)
1	049-31741	3-Dimesitylboryl-2,2'-bithiophene	機能性有機材料用	250mg	7,500
	045-31743			1g	20,000
2	044-31791	5,5'-Dibromo-3-dimesitylboryl-2,2'-bithiophene	機能性有機材料用	250mg	8,000
	040-31793			1g	22,000
3	040-31771	5,5'-Dimesityl-3-dimesitylboryl-2,2'-bithiophene	機能性有機材料用	250mg	16,000
4	047-31781	5,5'-Diphenyl-3-dimesitylboryl-2,2'-bithiophene	機能性有機材料用	250mg	16,000
5	025-17201	5,5'-Bis[4-(N-carbazolyl)phenyl]-3-dimesitylboryl-2,2'-bithiophene	機能性有機材料用	250mg	18,000
6	022-17211	5,5'-Bis[4-(N,N-diphenylamino)phenyl]-3-dimesitylboryl-2,2'-bithiophene	機能性有機材料用	250mg	16,000
7	029-17221	5,5'''-Bis(N,N-diphenylamino)-4'-dimesitylboryl-2,2':5',2'':5'',2'''-quaterthiophene	機能性有機材料用	250mg	照会

(T.M.)

本文に記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) ●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>