

WAKO

Infomatic

World

実験化学者のための
IT活用誌

2007

July No.2

目 次

有機合成反応の開発研究と分子モデリング
～実験の飛躍的な効率化と理論武装強化のために～ 2

京都大学 化学研究所 附属元素科学国際研究センター 教授 中村 正治

分子モデリングソフトウェア “Spartan【スパルタン】”
ITスキルアップ応援キャンペーン 6

平成19年10月末まで

分子モデリングソフトウェア
Spartan【スパルタン】For Windows 8

有機合成反応の開発研究と分子モデリング

～実験の飛躍的な効率化と理論武装強化のために～

京都大学 化学研究所 附属元素科学国際研究センター 教授 中村 正治

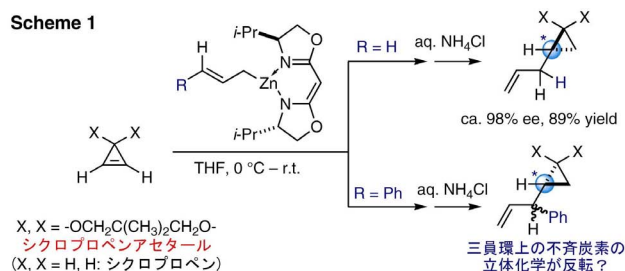
プラスチック製の分子模型、これは役に立つ。ちょっと複雑な有機分子でも、骨格タイプの分子模型を使えば、ものの1分で分子構造を組み上げることができ、そして、その分子の形状や可能な配座、官能基の空間配置や配向が「手に取るよう」に判る。スペースフィリングタイプのものなら、置換基の込み具合など分子の空間的な広がりも「一目瞭然」である。有機化学者にとって、とても便利な道具であり心強い味方である。研究・教育の現場において、今後もこの有用性が色あせることは無かろう。一方で、このところ身近になった感の強い分子モデリングソフトウェアは、これらの模型に比べてどのような利点があるのだろうか？

最近では有機合成の実験研究室でも、研究者または学生さんが一人一台（以上の）デスクトップやノート型のパソコンをもっている。大方の分子モデリングソフトウェアはこれらの個人用のパソコンの上で走らせることができる。これらのソフトウェアの殆どは、分子構造を組み立てるビルダー部分と、その構造に対して種々の計算を行う計算部分からなり立っている。プラスチック製の分子模型を使って分子を組み立てるように、研究対象である分子構造をスクリーンの上で組み立て、さらにその構造に対して、分子力場計算や、量子化学計算（半経験的および非経験的分子軌道計算、密度汎関数法計算など）を用いて各種のエネルギー計算や、電子状態計算を行う。この第2段階目がプラスチック製の分子模型との本質的な違いである。ここ10年ほどのパソコンの高速化は著しく、有機合成化学者が実際に興味をもつような大きさの分子に対しても、種々の物性値を見積もるのに必要な精度での量子化学計算が可能となり、IR やラマンスペクトルのみならず、NMR スペクトルなどもシミュレーション可能となりつつある¹。

これらのシミュレーションが、実際には存在しない分子、安定に存在し得ない分子構造、に対しても実行可能であることが、実験化学的な研究手法と分子モデリングとの大きな違いである。特に選択的有機反応の開発を行っている研究者にとっては、出発原料と生成物を結ぶ反応経路や遷移状態に関する情報は喉から手が出るほど欲しいものである。本稿では、分子モデリングソフトウェアの有機合成化学への応用例の一つとして、筆者らがこれまで行った不斉炭素-炭素結合生成反応について概説し²、反応開発の観点からその有効性の一端を紹介したいと思う。

筆者が分子モデリングの反応開発への有効性を初めて認識したのは、博士課程の学生の頃である。東京工業大学で中村栄一先生（現東京大学教授）と新規の不斉アリル化反応の

開発を行っていたときであり、15年程も昔である。実験の内容は、配位子によるエナンチオ選択的なオレフィンカルボメタル化反応の開発である。アニオン型の光学活性ビスオキサゾリン配位子を導入したアリル亜鉛反応剤を、歪みによって反応性の高まっているシクロプロペンアセタールの二重結合に、エナンチオ選択的に付加させる反応であった（スキーム1）³。種々の有機金属反応剤のシクロプロペン類への付加反応はシクロプロパン化合物の不斉合成法として現在でも検討されているが⁴、当時としては配位子制御による不斉カルボメタル化の初めての例であった。

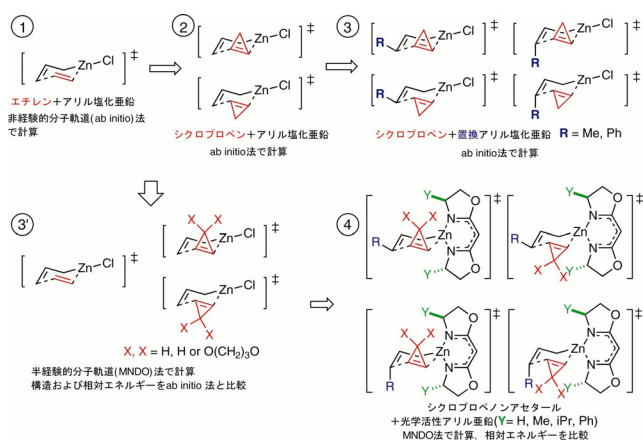


前任者の実験結果からスキーム1に示すように、アリル基上にフェニル基を導入することで、エナンチオ面（場）選択性が逆転することが示唆され、この選択性の逆転現象に関して研究を進めることとなった。アリル基および不斉配子上の置換基が異なるものを種々合成し選択性の向上および制御をする実験を行いながら、同時並行で、分子モデリングによって立体選択性発現機構の解析を試みることにした⁵。当時の計算機環境はワークステーションに1GBのハードディスクを付けたもの（300万円超）を学生2名で使用しており、計算機は休む間もなく回っていた。

同反応は、シクロプロペンの約28kcal/molの二重結合歪みの解放⁶を駆動力とする、炭素-炭素二重結合に対するアリル亜鉛のシス付加であり、逆反応はまず起こらない。エナンチオ選択性をシミュレーションするには、この付加の遷移状態においてジアステレオマーの関係にある遷移構造のエネルギー差を検討すればよい。まずエチレンに対するアリル塩化亜鉛の付加の六員環遷移構造を種々の計算手法を用いて求めた。検討対象の系において水素以外の重原子の数が30個を超えるため、最終的に半経験的分子軌道法を用いざるを得ないと判断した。種々の半経験的分子軌道法による遷移構造と ab initio 計算（HF レベル）による遷移構造の比較検討からMNDO法が最もHFレベルの計算に近い結果を与えることが判明した（図1、ステップ3'）。定石に従い、次第に置換

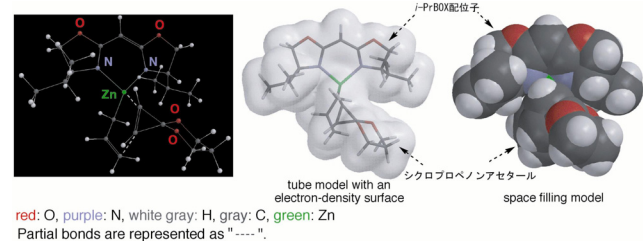
基を追加し、それによって生じる配座異性体の相対安定性を考慮しながら、実際の反応系に近いモデルへと検討を進めていった (図1、ステップ2, 3, 4)。溶媒効果に関しては、

図1.



類似した遷移構造間のエネルギー比較では相殺し合うことを期待して、とにかく遷移構造の最適化を進めた。大変手荒いモデル化ではあったが、無置換アリル基の付加反応において、実験的に観察されたエナンチオ選択性を良く再現することが判明した。アリル化のモデリングにおいて最も安定であった遷移構造を図2に示す。スペースフィリングモデルから不斉配位子上の二つのイソプロピル基によってできる C₂ 対称性を持つ不斉空間に六員環遷移構造がうまく収まっていることが見て取れる。

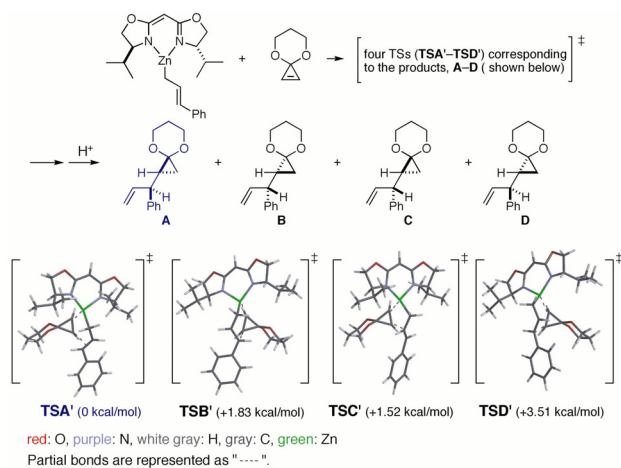
図2. 光学活性アリル亜鉛のシクロプロペンアセタールへの付加の遷移構造 (MNDO 法による構造最適化による、グラフィックは Spartan 04 for Macintosh を使用)



フェニル置換アリル亜鉛の付加反応に対して、求めた4つの遷移構造とそのエネルギー差を図3に示す。スペースフィリングモデルを用いても分子模型を使ってよく議論される置換基同士の立体反発の有無は判然とせず、すべての遷移構造で六員環遷移構造は不斉空間の中に収まっている。この理由は、結合の「緩い」反応中心周りの構造変化 (電子状態変化) によって、過大な VDW コンタクトの解消が起こるためと考えられ、それぞれの相対安定性を議論するには、やはり相対エネルギーを比較する必要がある。モデリングの結果は、フェニル置換アリル化反応の立体選択性に関しても主生成物の不斉炭素の立体化学は無置換アリル基の場合と同

じであり、前任者の実験結果とは逆の選択性の発現を示唆するものとなった。

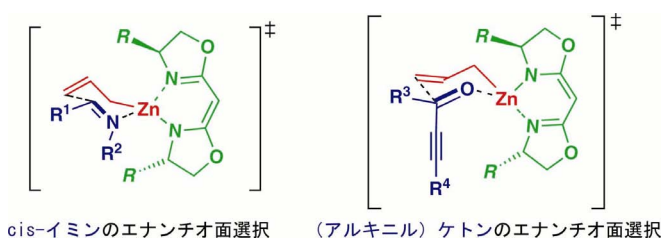
図3. 光学活性シナミル亜鉛のシクロプロペンアセタールへの付加の遷移状態モデリング (3D 図は Spartan 04 for Macintosh を使用)



上述の計算に4ヶ月以上の時間を要したが、種々の置換基をもつ光学活性アリル亜鉛反応剤の付加反応の実験を同時に進めており、結果が出ていた。この実験結果から、配位子の不斉点の立体化学がシクロプロパン環上の不斉炭素の立体化学を制御しており、アリル基上の置換基によってこのエナンチオ選択性は逆転しないことが確認された。前任者の実験に誤謬があったことよりも、分子モデリング (非常に粗い化学および理論モデルではあるが) によって正しい選択性が予測できたことに驚き、喜んだことを今でも鮮明に思い出す。

図2の遷移構造をパソコン画面上で「くるくる」と回している時に、環状イミン類およびケトン類への光学活性アリル亜鉛の付加反応の遷移状態モデル (図4) を思いついた。環状イミンはシクロプロペンアセタールとの類似性からも高エナンチオ選択性の発現が直観可能だったかもしれない。一方、ケトンにおいて、アルキニル基が六員環いす型遷移状態で axial 位を占め、さらに遠隔位で配位子との立体反発を解消することで不斉空間に収まるということは分子模型では考えつかないであろう。合成実験を行い種々置換基の最適化をしたところ、高エナンチオ選択的なアリル化反応となることが明らかとなった (図5)⁷。アルキニルケトンのアリル化反応では、配位子上の置換基がフェニル基の場合、特異的に高いエナンチオ選択性が発現するが、剛直なアルキニル基とフェニル平面との遠隔的な立体反発がその理由であることが、ON10M 法を用いた検討から明らかとなった (図6)。この遷移状態モデリングは、並列計算機⁸で Gaussian 98 と Gaussian 03 (いずれも Linux 版)⁹を用いて3日間ほどで行った。これらの検討結果も、遷移構造モデリングを基盤にした反応開発手法の有効性を示すひとつの例といえよう。

図4. 光学活性アリル亜鉛のイミンおよびケトンへのエナンチオ選択的付加反応の遷移状態モデル



cis-イミンのエナンチオ面選択 (アルキニル) ケトンのエナンチオ面選択

図5. 環状イミン及びアルキニルケトンの不斉アリル化反応

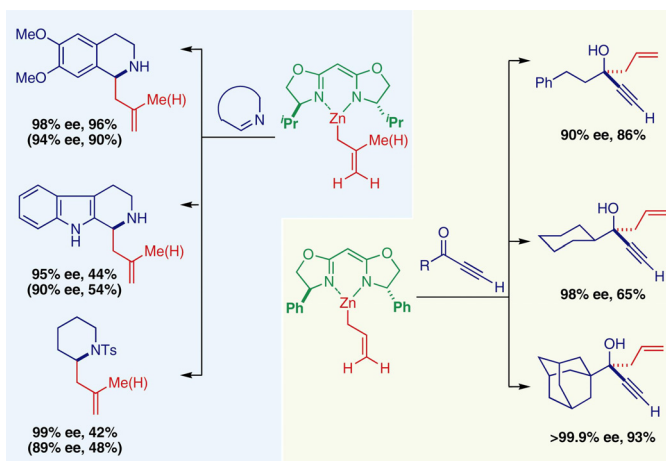
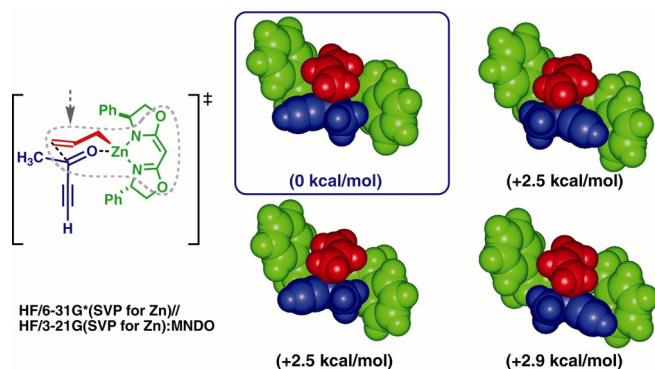


図6. アルキニルケトンの不斉アリル化反応の遷移状態モデリング (ONIOM法を用いて Gaussian 03で計算、グラフィック作成には Weblab™ Viewer Lite¹⁰ を使用)



さて、前記の計算機化学実験を現在のパソコン環境で行ったらどれくらいの時間がかかるのだろうか？ワードプロセッサで本稿を書きながら、同じパソコン上で分子モデリングソフトを立ち上げ、図2のシクロプロペノアセタールの不斉アリル化反応の遷移構造を求めることを試みた。パソコン環境はPower Mac G5 quadにSpartan[®] 04 for Macintosh (V1. 1.0)でメモリーは2GBを割り振っている¹¹。アリル塩化亜鉛のエチレンへの付加反応の遷移構造をまず求め、次にエチレンをシクロプロペンに置き換えて遷移構造を求めていく。さらに亜鉛上の塩素配位子を不斉配位子に置き換えた上で遷移構造の最適化を進めてゆく。当時と同様に半経験的分子軌道法(MNDO法)を用いると、1時間ほどで図2の遷移構造が得ら

れた。パソコンが昔のワークステーションを凌ぐ性能を持つに至ったことに加え、分子構造を組み立てるビルダーの使い勝手が良くなったこともモデリングの高速化の一つの要因であろう。手元のパソコンを使って、この程度の所要時間ならば、多くの研究者の方が反応をかけた後に、さて遷移構造でも求めてみようと思うのではないだろうか？

化学反応の遷移構造を求めることは、分子の安定構造を求めるのに比べると簡単ではない。結合の生成・切断がまさに起ころうとしている(超)分子種の電子状態を求めなければならないことに加えて、ポテンシャルエネルギー曲面上の極大であり、さらに反応経路上のエネルギー極大でもある「安定な不安定構造」を求めなければならないことがその原因である。遷移構造の最適化には安定構造の最適化に比べて数倍手間と時間がかかる。

前者の問題は理論モデルの選択に関わるものであり、電子相関などを考慮した精度の高い計算手法を用いれば、原理的には正しい結果に近づくはずだが、研究対象の分子の大きさによっては手元のパソコンの能力を遥かに超えてしまう。上述の不斉アリル化の遷移状態モデリングに要する時間は、MNDO法(またはその他の半経験的分子軌道法)を用いれば数時間~数日のオーダーであるが、これをハートリーフォックレベルのab initio計算で行うと、小さな基底関数系を用いたとしても(例えば、HF/3-21Gレベル)数週間のオーダーの検討時間が必要となろう。現在、有機金属化合物の構造および反応の検討に最も汎用されている密度汎関数法計算(B3LYP法に代表される)と適当な大きさの基底関数系を用いると、さらに計算時間がかかることとなる¹²。

後者の問題に関しては、著しいソフトウェアの進化とデータベースの充実が、実験研究者の遷移構造モデリングを助けてきている。10年程前には、アリル金属のオレフィンやケトンへの付加の六中心遷移状態のような、複数の結合の生成・切断・再編成を含み、かつ自由度の大きな遷移構造をパソコン上の分子モデリングソフトウェアで最適化することは殆ど不可能であった。計算機センターの共有計算機や高価なワークステーションを使って得られた、大量かつ複雑なテキスト形式の計算結果とにらめっこしながら、これらの遷移構造の構造最適化を行わねばならなかった。実験と同じく試行錯誤の繰り返しである。最近のモデリングソフトウェアは、遷移構造を求める構造最適化アルゴリズムの改良に加え、文献などに報告された遷移構造をデータベースとして搭載している。これらの情報を活用することで、より良い初期構造からの遷移構造最適化が出来るようになり効率化に繋がっている。このような遷移構造データベースの構築の試みは各方面でなされ、その一部にはweb上で利用可能なものもある¹³。

計算化学的手法をブラックボックスとして使い、そして得られた計算結果を盲信することは、もちろん正しいことではない。実験値との比較検討の出来ない遷移構造を議論する場合には、特に問題が多いであろう。分子モデリングを行う際には、設定した反応系の化学モデルが正しいかどうか、その

電子構造を求めるための理論モデルが適切かどうかを常に検証しながら進める必要がある¹⁴。その一方で、分子模型からは絶対に得ることが出来ない、不安定分子種の構造や電子状態、相対安定性に関する情報は実験化学者にとって大きな魅力である。今後もパソコンはさらに高速になってゆき、理論手法と計算プログラムは洗練されてゆくであろう。分子モ

デリングは、実験化学者にとって欠くことの出来ない道具になることに疑いを容れる余地はない。傍らの入門書をめぐりめぐり、理論の勉強をしながらでも¹⁵、まずは画面の上で分子構造を組み立てて、試しに計算を走らせてみるべきであろう。

注 釈

1. モデリングソフトウェアを用いた計算機化学実験の教科書：
(a) 「計算機化学ガイドブック 3大分子軌道計算プログラムの解説」 Tim Clark, 大澤映二ら訳丸善株式会社、1988年
(b) 「電子構造論による化学の探究 第二版」 Foresman and Frisch, 田崎健三訳 ガウシアン社 1998年 (c) 「Gaussianプログラムで学ぶ 情報化学・計算化学実験」 堀憲次、山本豪紀 著 丸善株式会社 2006年 (d) 「すぐできる量子化学計算 ビギナーズマニュアル」 平尾公彦監修 武次徹也編 講談社サイエンティフィック 2006年 など
2. 有機反応機構解析の例：「有機量子化学」 藤本博ら著、朝倉書店 2001年や季刊化学総説 No. 46 「高精度分子設計と新素材開発、機能化学の新展開をめざして」 日本化学会編 学会出版センター2000年 など
3. “Carbometalation of Cyclopropene. Ligand-Induced Enantioselective Allylzincation” Nakamura, M.; Arai, M.; Nakamura, E. *J. Am. Chem. Soc.* **1995**, *117*, 1179-1180.
4. “Enantioselective, Facially Selective Carbomagnesation of Cyclopropenes” Liu, X.; Fox, J. M. *J. Am. Chem. Soc.* **2006**, *128*, 5600-5601.
5. “Computational Studies on Diastereo- and Enantio-selectivities of Allylmetalation of Cyclopropenone Acetals” Nakamura, M.; Nakamura, E. *Electron. Conf. Heterocycl. Chem.*, [Proc.] (1997), Editor(s): Rzepa, H. S.; Snyder, J. P.; Leach, C. Publisher: Royal Society of Chemistry, Cambridge, UK.
6. 例えば Carey “Advanced Organic Chemistry, Part A: Structure and Mechanism” pp162-166.
7. イミンの不斉アリル化：“Enantioselective Allylzincation of Cyclic Aldimines in the Presence of Anionic Bis-oxazoline Ligand” Nakamura, M.; Hirai, A.; Nakamura, E. *J. Am. Chem. Soc.* **1996**, *118*, 8489-8490.
ケトンの不斉アリル化：“Enantioselective Addition of Allylzinc Reagent to Alkynyl Ketones” Nakamura, M.; Hirai, A.; Sogi, M.; Nakamura, E. *J. Am. Chem. Soc.* **1998**, *120*, 5846-5847.
8. (株) エッチ・アイ・ティー (現 HPC システムズ 株式会社、<http://www.hpc.co.jp>) 社製 Pentium 4 静音クラスター計算機 (2003年購入) を使用。
9. Gaussian 98, Revision A.11.4, M. J. Frisch, G. W. Trucks, H. B. Schlegel, G. E. Scuseria, M. A. Robb, J. R. Cheeseman, V. G. Zakrzewski, J. A. Montgomery, Jr., R. E. Stratmann, J. C. Burant, S. Dapprich, J. M. Millam, A. D. Daniels, K. N. Kudin, M. C. Strain, O. Farkas, J. Tomasi, V. Barone, M. Cossi, R. Cammi, B. Mennucci, C. Pomelli, C. Adamo, S. Clifford, J. Ochterski, G. A. Petersson, P. Y. Ayala, Q. Cui, K. Morokuma, N. Rega, P. Salvador, J. J. Dannenberg, D. K. Malick, A. D. Rabuck, K. Raghavachari, J. B. Foresman, J. Cioslowski, J. V. Ortiz, A. G. Baboul, B. B. Stefanov, G. Liu, A. Liashenko, P. Piskorz, I. Komaromi, R. Gomperts, R. L. Martin, D. J. Fox, T. Keith, M. A. Al-Laham, C. Y. Peng, A. Nanayakkara, M. Challacombe, P. M. W. Gill, B. Johnson, W. Chen, M. W. Wong, J. L. Andres, C. Gonzalez, M. Head-Gordon, E. S. Replogle, and J. A. Pople, Gaussian, Inc., Pittsburgh PA, 2002.
Gaussian 03, Revision C.02, M. J. Frisch, G. W. Trucks, H. B. Schlegel, G. E. Scuseria, M. A. Robb, J. R. Cheeseman, J. A. Montgomery, Jr., T. Vreven, K. N. Kudin, J. C. Burant, J. M. Millam, S. S. Iyengar, J. Tomasi, V. Barone, B. Mennucci, M. Cossi, G. Scalmani, N. Rega, G. A. Petersson, H. Nakatsuji, M. Hada, M. Ehara, K. Toyota, R. Fukuda, J. Hasegawa, M. Ishida, T. Nakajima, Y. Honda, O. Kitao, H. Nakai, M. Klene, X. Li, J. E. Knox, H. P. Hratchian, J. B. Cross, C. Adamo, J. Jaramillo, R. Gomperts, R. E. Stratmann, O. Yazyev, A. J. Austin, R. Cammi, C. Pomelli, J. W. Ochterski, P. Y. Ayala, K. Morokuma, G. A. Voth, P. Salvador, J. J. Dannenberg, V. G. Zakrzewski, S. Dapprich, A. D. Daniels, M. C. Strain, O. Farkas, D. K. Malick, A. D. Rabuck, K. Raghavachari, J. B. Foresman, J. V. Ortiz, Q. Cui, A. G. Baboul, S. Clifford, J. Cioslowski, B. B. Stefanov, G. Liu, A. Liashenko, P. Piskorz, I. Komaromi, R. L. Martin, D. J. Fox, T. Keith, M. A. Al-Laham, C. Y. Peng, A. Nanayakkara, M. Challacombe, P. M. W. Gill, B. Johnson, W. Chen, M. W. Wong, C. Gonzalez, and J. A. Pople, Gaussian, Inc., Wallingford CT, 2004.
10. WebLab™ Viewer Lite 3.2.r, Copyright© 1998 by Molecular Simulation Inc.
11. Spartan を用いた計算では現在の所、同程度の計算能力 (≒同価格) のパソコンを用いる場合、Windows 環境の方が Macintosh 環境より高速な計算が可能である (筆者の研究室における比較)。
12. PowerMac G5 quad に Spartan'04 for Macintosh (V1.1.0) * でメモリー2GB、スクラッチディスク領域 20GB という設定で、図 2 に対応する遷移構造を種々のレベルの計算で求め計算時間を比較した。エネルギーの一点計算に、MNDO 法で 5 秒、HF/3-21G*レベルの ab initio 計算で 3分 30秒、B3LYP/6-31G*レベルの密度汎関数計算で 26分 30秒が必要であった。初期構造によるが遷移構造の最適化には、これらの計算を数十～百回ほど繰り返すのが普通なので、上述の計算環境ではハートリーフォックレベルの計算が実際上利用可能な最高精度と判断できよう。
* Wavefunction, Inc. 18401, Von Karman Ave., #370, Irvine CA 92612 USA
13. 例えば文献 1(a) の 19 頁を参照のこと。遷移構造の情報に限らず、広範な量子化学計算の研究成果データベースが “QCLDB II” として自然科学研究機構 計算科学研究センターで公開されている。
(Web サイト、<http://qcldb2.ims.ac.jp/>)
14. 現在のところ広く用いられている B3LYP/6-31G*レベルの密度汎関数法計算が反応熱解析においては期待するほど精度の良い結果を与えず、その使用に関して注意を促す論文が報告されている。Grimme, S.; Steinmetz, M.; Korth, M. *J. Org. Chem.*, ASAP Article, Web Release Date: February 8, 2007.
15. 1(b) 付録 A pp. 253-282 や 1(d) など。1(d) では Gaussian や GAMESS といったソフトを使う計算環境のセットアップについても詳述がある。

“Infomatic World” 創刊記念

分子モデリングソフトウェア “Spartan 【スパルタン】” IT スキルアップ応援キャンペーン

平成 19 年 10 月末まで

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



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

分子構築ツール ● Spartanには直感的に使用できるさまざまな分子構築ツールを内蔵しています。それぞれのツールを組み合わせて任意の構造を作れるほか以下の様々なファイル互換を持っています。2Dビルダーは起動するとChemDrawで作業したものを自動的に3次元化するもので、別途ChemDrawを必要とします。

● 読み取り可能書式
CIF (従来書式), CSD
MacroModel
Sybyl Mol/Mol2
Brookhaven
MDL SD/SKC/TGF
XYZ, SMILES, ChemDraw

● 書き出し可能書式
MacroModel
Sybyl Mol/Mol2
Brookhaven
MDL SD/SKC/TGF
XYZ, SMILES
BMP, JPEG, PNG, AVI

シクロヘキサノの立体選択性 ● シクロヘキサノの求核攻撃を受けやすい部位として知られているケトン構造において、求核攻撃の方向性をLUMOを表示することで検証できます。

● 静電ポテンシャルマップと双極子モーメント ● 相違をもつ分子の静電ポテンシャルマップ (分子表面上の赤い領域は電子が取りやすい) と双極子モーメントの表示を比較しています。

● カルボン酸の酸解離度 ● IIC (イオン化) の相違を調べる。IIC (イオン化) の相違を調べる。IIC (イオン化) の相違を調べる。

● Diels-Alder付加反応 ● 遷移状態の探索のための反応のデータベースを内蔵しています。電子の移動を検索条件として入力し、ヒットした構造を出力結果として遷移状態の構造を出力します。基質構造のうち振動数が変化するものが一つだけ見れば、遷移状態であるといえます。

● スペクトルチャートの作成 ● IR, UV/Vis, NMRの計算値のスペクトルを作成します。実験値 (IR:12,000件, UV/Vis:1,500件, NMR:15,000件) をWEBアップせよ。計算値に重ねて表示します。同系物シクロヘキサノの化学シフトの計算値と¹³CのNMRスペクトルチャートです。

● 塩化メチルと臭化物イオンのS_N2反応 ● 塩化メチルの炭素原子に臭化物イオンを接近させると、C-C結合が切れると同時にC-Br結合が生成され、立体配置の反転する様子がよくわかります。

おもな可視化プロパティとその組合せ

分子軌道

ベンゼンカチオンのLUMOを表示。平面構造の場合は、ベンゼン位、オルト位、パラ位に非局在化しているのに対して、CH₂基を合わせた構造ではLUMOがベンゼン位に局在化していることが分かります。更に知見と一致していることが分かります。

電子密度

シクロヘキサノの全電子の密度の等値面を表示。その値によって原子の位置、結合の状態、分子の大きさを表すことができます。

静電ポテンシャル

分子と正の電荷のポテンシャルエネルギーを表示。その分子の静電的性質について調べる。ベンゼンとシクロヘキサノでは求電子化学的傾向の違いが異なることが分かります。

分子軌道マップ

シクロヘキサノの電子密度面にLUMOマップを表示。分子表面上の求核攻撃の起こりやすい部位について調べる。

静電ポテンシャルマップ

ベンゼンカチオンの電子密度面に静電ポテンシャルマップを表示。CH₂基をベンゼン環に対してつけた場合、分子内に大きな電荷の分極が表れることが分かります。

その1 もれなく……

“Spartan Full Ed., Essential Ed., Student Ed.” をご購入いただいた皆様に、もれなく、販売書籍 1~3 冊をプレゼント!!



その2 抽選で……

実験化学者向け IT 活用誌 “Infomatic World” の購読をお申しいただいた皆様の中から、抽選で 10 名様に、ご希望の販売書籍 1 冊をプレゼント!!

⇒ ご応募方法: 購読お申込みフォームの「コメント」欄に、ご希望の販売書籍番号 (右ページ参照) をご記入ください。

☆ キャンペーン対象商品

コードNo.	メーカーコード	品名	容量	希望納入価格(円)	プレゼント書籍
305-32011	S6F-CW	Spartan'06 Full Edition for Corporate (Windows) スパルタン'06 フル、企業向け (ウィンドウズ版)	1セット	600,000	①②③
302-32021	S6E-CW	Spartan'06 Essential Edition for Corporate (Windows) スパルタン'06 エssenシャル、企業向け (ウィンドウズ版)	1セット	350,000	①②
309-32031	S6F-GW	Spartan'06 Full Edition for Government (Windows) スパルタン'06 フル、政府系機関向け (ウィンドウズ版)	1セット	440,000	①②③
306-32041	S6E-GW	Spartan'06 Essential Edition for Government (Windows) スパルタン'06 エssenシャル、政府系機関向け (ウィンドウズ版)	1セット	280,000	①②
303-32051	S6F-EW	Spartan'06 Full Edition for Education (Windows) スパルタン'06 フル、教育機関向け (ウィンドウズ版)	1セット	228,000	①②③
300-32061	S6E-EW	Spartan'06 Essential Edition for Education (Windows) スパルタン'06 エssenシャル、教育機関向け (ウィンドウズ版)	1セット	138,000	①②
304-32081	SSU-DW01	Spartan Student Edition, Single Pack USB Dongle Set (Windows) スパルタン、大学向け、1ライセンス (ウィンドウズ版)	1セット	40,000	③

●希望納入価格には消費税等が含まれておりません。

☆ プレゼント対象販売書籍

① ヒーリー「有機化学のための分子モデリングワークブック」(フルカラー)

W. J. Hehre, A. J. Shusterman, J. E. Nelson 著 幅田揚一訳 4,725 円(税込)



有機化学の授業を分子モデリング主導で実施するのに必要なすべてを網羅している。副読本として使用できるように、21章 200 以上の問題から構成され、それぞれの問題は 1 つ以上の分子モデルを使用している。

- エネルギーの熱力学的および速度論的なデータへの換算方法
- 分子軌道：絵で見る量子力学
- 電子密度と分子の大きさと形
- 静電ポテンシャルマップと分子の電荷分布

② 「計算有機化学入門」

W. J. Hehre 著 幅田揚一訳 2,625 円(税込)



Spartan Student Edition の日本語マニュアル。
Student Ed. 以外の Spartan シリーズを使用した演習書としても利用可能。

③ 「分子モデリング演習 初歩の初歩」

米国法人 WAVEFUNCTION, INC 日本法人編 2,100 円(税込)



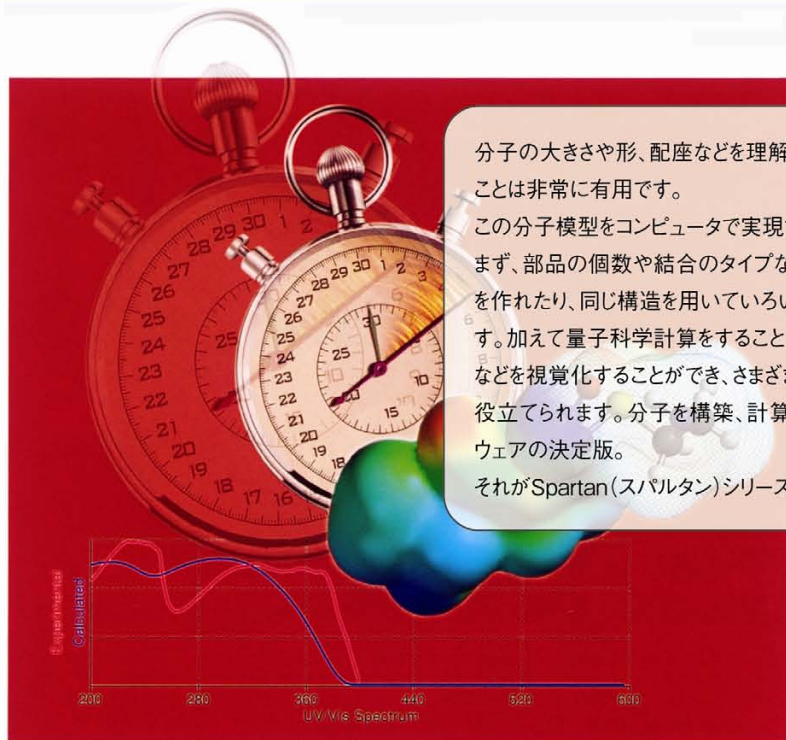
Spartan ワークショップの内容を画面イメージを多用して説明。
演習内容の画面動画を Flash 化した CD-ROM 添付。
ビギナー向け。

☆ 機能比較表

	Full	Essential	Student	Model		Full	Essential	Student	Model
有機ビルダー	○	○	○	○	プロパティ				
無機ビルダー	○	○	○	○	ESP, Mulliken, Natural	○	○	○	○*
ペプチドビルダー	○	○	○	○	双極子モーメント	○	○	○	○*
核酸ビルダー	○	○	○	○	四極子モーメント	○	—	—	—
置換ビルダー	○	—	—	—	多極子モーメント	○	—	—	—
2Dビルダー*	○	○	—	—	溶媒エネルギー	SM5.4	SM5.4	—	—
MMIによる最適化	○	○	○	○	NMR 化学シフト	○	—	—	—
MO計算					UV/Vis	○	—	—	—
1点エネルギー	○	○	○	—	スペクトル				
構造最適化	○	○	○	—	IR	○	○	○	○*
遷移状態	○	○	○	—	NMR化学シフト	○	—	—	○*
配座解析	○	○	—	—	UV/Vis	○	—	—	○*
プロファイル	○	○	○	—	内蔵データベース				
半経験	300原子	300原子	50原子	—	SMD	○	○	○	○
HF	200原子	200原子	30原子	—	SRD	○	○	○	—
DFT	○	—	—	—	外部DBとのインターフェイス				
MP2	○	—	—	—	CSD	○	○	—	—
グラフィックス					NIST (IR)	○	○	—	—
電子密度	○	○	○	—	NIST (UV/Vis)	○	—	—	—
分子軌道	○	○	○	—	Colohne大学 (NMR)	○	—	—	—
静電ポテンシャル	○	○	○	—	PDB	○	○	—	—
MOマップ	○	○	○	—					
ESPマップ	○	○	○	○*					

* SMDのデータを使用
注) Spartan Modelは、書籍ヒーリー「Spartan Modelによる有機化学演習」(5,000円)に添付のSpartanシリーズのブラウザソフトです。

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



分子の大きさや形、配座などを理解するのにプラスチック製の分子模型を使うことは非常に有用です。

この分子模型をコンピュータで実現するとどんなメリットが考えられるでしょうか？
まず、部品の個数や結合のタイプなど汎用性が高くなり、いくらでも大きな構造を作れたり、同じ構造を用いているいろいろなタイプで表示することが可能になります。加えて量子科学計算をすることで、電荷分布やフロンティア軌道の局在化などを視覚化することができ、さまざまな分子の振る舞いや反応機構の理解に役立てられます。分子を構築、計算し結果の表示を行う分子モデリングソフトウェアの決定版。

それがSpartan(スパルタン)シリーズの製品群です。

動作環境システム

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

価格表

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

●希望納入価格には消費税が含まれておりません。

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」などとして使用できません。
価格はすべて希望納入価格であり、消費税等が含まれておりません。

和光純薬工業株式会社

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

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

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

■ご意見・お問合わせ、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

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: 1-617-354-6773

Wako Chemicals GmbH

European Office

<http://www.wako-chemicals.de>

Tel: 49-2131-311-0

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