

# Cubanes

## 特有の化学的、物理的特性

- 構造上安定
- あらゆる位置に結合が可能
- 特有の親油性
- 特有の反応性
- UV 透過性

## Cubane の特性

分子式：C<sub>8</sub>H<sub>8</sub>  
 形状：球状  
 融点：130-130°C  
 沸点：133°C  
 分解：>220°C  
 密度：1.29g/cm<sup>3</sup>  
 毒性：Non-toxic

## 既存化合物のベンゼン環との代替で新しいケミカルを…！

医薬品や農薬の新規有効成分の開発は市場からの様々な要求に答えるため、常に創意工夫が求められています。古くから知られている炭化水素の土台は市場に新しい分子を持ちこむことに貢献してきましたが、プラトンの立体（正四面体）ともいわれるキュバンは明らかに除外されてきました。

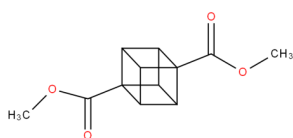
キュバンは分子式 C<sub>8</sub>H<sub>8</sub> のサイコロ状炭素骨格を持つ炭化水素で、1964年にシカゴ大学のフィリップ・イートン (Philip Eaton) 教授が初めて合成に成功しました。

フィリップ教授は25年以上前にキュバンがベンゼン環の生物学的等価体 (Bioisostere) となり得ることを提議していましたが、この仮定はキュバンの生物学的に重要な5種類の誘導体の合成とそれらの化合物の評価によって証明され、現在、新規医薬品や農薬の開発における分子デザインの幅が広がることから注目されています。



**BM440**

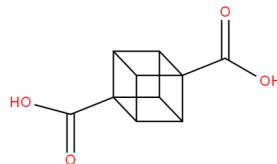
Dimethyl 1,4-Cubanedicarboxylate



C<sub>12</sub>H<sub>12</sub>O<sub>4</sub>  
220.22

**BM540**

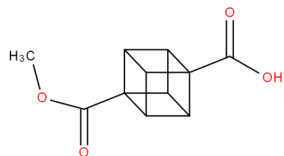
1,4-Cubanedicarboxylic acid



C<sub>10</sub>H<sub>8</sub>O<sub>4</sub>  
192.17

**BM541**

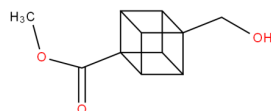
4-Methoxycarbonylcubane  
carboxylic acid



C<sub>11</sub>H<sub>10</sub>O<sub>4</sub>  
206.197

**BM543**

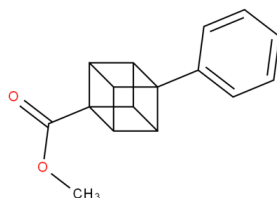
Methyl 4-Hydroxy  
methylcubanecarboxylate



C<sub>11</sub>H<sub>12</sub>O<sub>3</sub>  
192.214

**BM544**

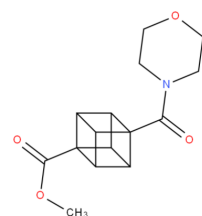
Methyl 4-  
Phenylcubanecarboxylate



C<sub>16</sub>H<sub>14</sub>O<sub>2</sub>  
238.285

**BM545**

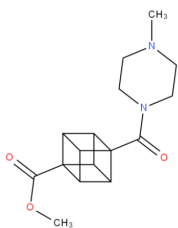
Methyl 4-(Morpholinocarbonyl)  
cubanecarboxylate



C<sub>15</sub>H<sub>17</sub>NO<sub>4</sub>  
275.303

**BM546**

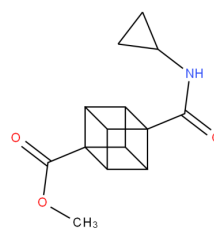
Methyl 4-(4-Methylpiperazin-1-  
yl)cubanecarboxylate



C<sub>16</sub>H<sub>20</sub>N<sub>2</sub>O<sub>3</sub>  
288.345

**BM547**

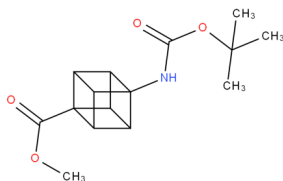
Methyl 4-(N-  
Cyclopropylaminocarbonyl)  
cubanecarboxylate



C<sub>14</sub>H<sub>15</sub>NO<sub>3</sub>  
245.277

**BM548**

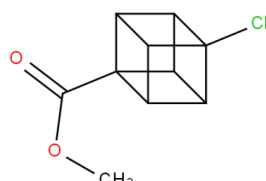
Methyl 4-(tert-  
Butylcarbonylamino)  
cubanecarboxylate



C<sub>15</sub>H<sub>19</sub>NO<sub>4</sub>  
277.319

**BM549**

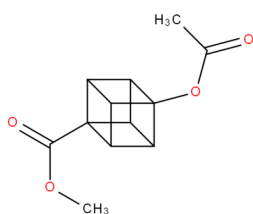
Methyl 4-  
Chlorocubanecarboxylate



C<sub>10</sub>H<sub>9</sub>ClO<sub>2</sub>  
196.632

**BM551**

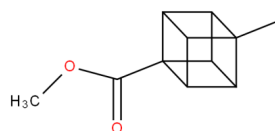
Methyl 4-  
Acetoxycubanecarboxylate



C<sub>12</sub>H<sub>12</sub>O<sub>4</sub>  
220.224

**BM566**

Methyl 4-Iodocubanecarboxylate



C<sub>10</sub>H<sub>9</sub>IO<sub>2</sub>  
288.084



重松貿易株式会社 化学品部

Shigematsu & Co., Ltd.

<大阪本社>

〒541-0047 大阪府大阪市中央区淡路町2丁目2番5号

TEL:(06)6231-6146 FAX:(06)6231-6149

WEB: www.shigematsu-bio.com/ Mail: info@shigematsu-bio.com

<つくばライフサイエンスオフィス>

〒300-2655 茨城県つくば市万博公園西F26街区1インプレス103

TEL:(029)848-3220 FAX:(029)848-3221