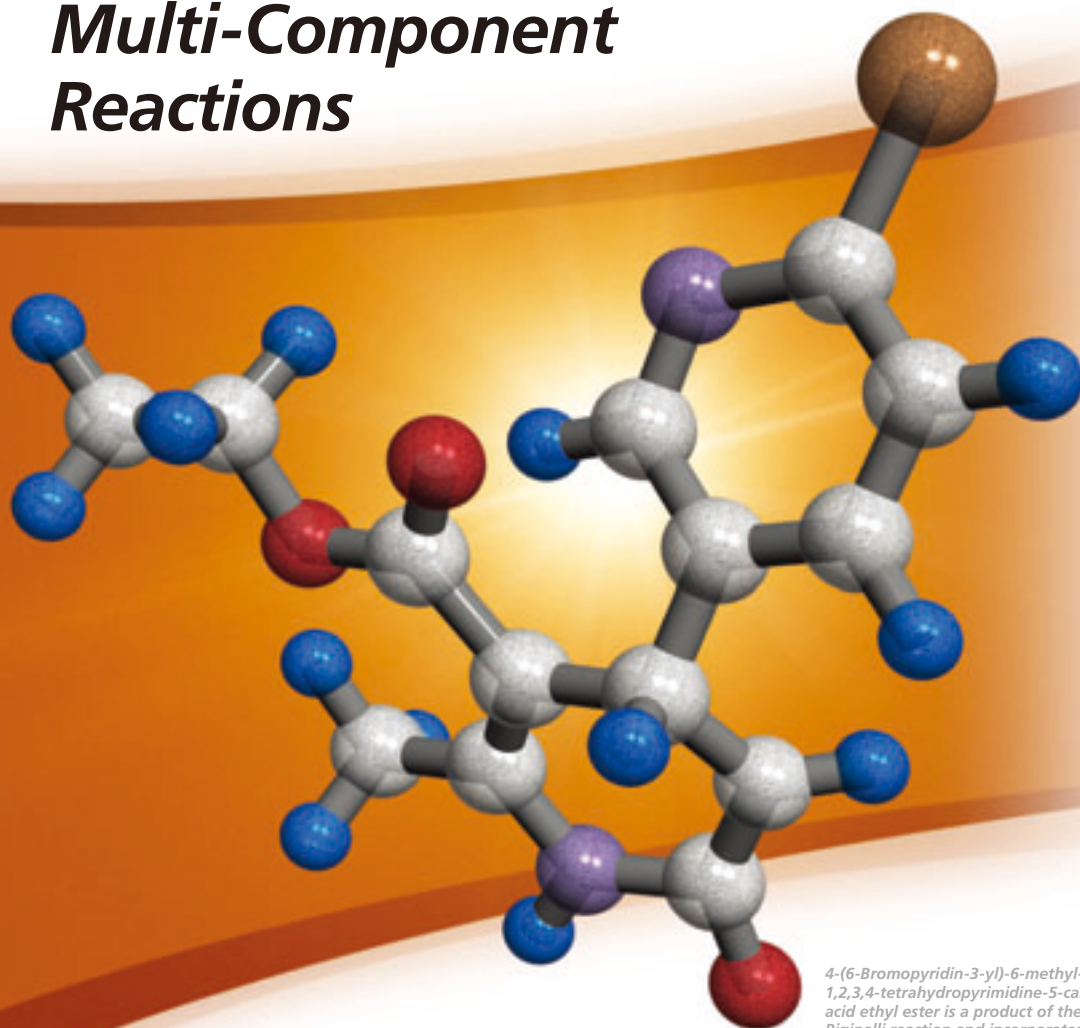


## 多成分反応

## Multi-Component Reactions



UGI REACTION

PASSERINI REACTION

BIGINELLI REACTION

*4-(6-Bromopyridin-3-yl)-6-methyl-2-oxo-1,2,3,4-tetrahydropyrimidine-5-carboxylic acid ethyl ester is a product of the Biginelli reaction and incorporates a heterocyclic pyridine ring that is a common pharmacophore.*

## はじめに

多成分反応(Multi-Component Reactions; MCR)は、ある程度の構造多様性を持つドラッグライクな小分子を合成できることから、コンビナトリアルケミストリーにおいて重要な役割を果たしています。MCRとは、3種類以上の出発物質を用いて化合物を合成する反応で、全部ではありませんが、大部分の原子が最終生成物に取り込まれます。MCRを用いれば、数段階の反応で化合物をワンポット合成できます<sup>1</sup>。ほとんどの試薬が最終生成物に取り込まれるので、精製が容易であることも、MCRの魅力です。

Sigma-Aldrichは、お客様に選ばれる多成分反応用ビルディングブロックのサプライヤーとなるべく努力しています。お客様のニーズを確実に満たす各種ビルディングブロック製品を豊富に取り揃えています。ビルディングブロック製品の詳細な一覧は、当社のホームページ [sigma-aldrich.com/buildingblocks](http://sigma-aldrich.com/buildingblocks) でご覧ください。お客様のご要望に合う製品が見つからない場合は、テクニカルサポートまで、メール([sialjpts@sial.com](mailto:sialjpts@sial.com))またはお電話(03-5796-7330)でお問い合わせください。

## Announcing Sigma-Aldrich's Newest Web-Based Seminar



### Trost Bis-ProPhenol Ligands

- Featuring the latest innovative chemical synthesis technologies and products
- Access directly via your desktop browser
- Convenient navigation
- Highly interactive

To check out Sigma-Aldrich's new Web-based chemistry seminar series, please visit [sigma-aldrich.com/cheminars](http://sigma-aldrich.com/cheminars).

## 表紙について

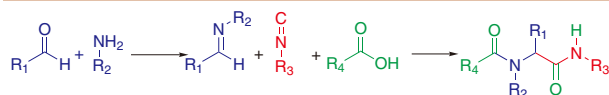
表紙のイラストは、Sigma-Aldrich 研究開発グループが開発した Biginelli 化合物の構造図です。Biginelli 反応は、ジヒドロピリミジン骨格に由来する薬理特性により、最近になって再び注目を集めています。Biginelli 化合物は、抗ウイルス剤、抗腫瘍剤、抗菌剤と同様の生理活性を持つことが証明されています。

## Ugi 反応

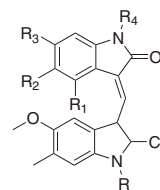
Ugi 反応は (Scheme 1) イソニトリルを基質とする多成分反応で、 $\alpha$ -アミノアシルアミド誘導体の速やかな合成を可能にします。Ugi 反応によるアミン、オキソ化合物、カルボン酸、イソニトリルの 4 化合物縮合は、文献が豊富で用途の広い多成分反応です。

Musonda らは、コンビナトリアルケミストリーと Ugi 反応を組み合わせ、既知の抗マalariaファルマコフォアと照合してスクリーニングするための、新規化合物ライブラリーを作製しました。アミノキノリンを含む  $\alpha$ -アミノアシルアミドで構成されるライブラリーを用いて、構造活性相関 (SAR) の解析が行われました。このアプローチにより、数段階の反応で多くの化合物を合成でき、速やかなスクリーニングが可能になりました<sup>2</sup>。

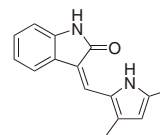
Ugi 反応を縮合後反応と組み合わせ、薬理的に重要な骨格の数を増やすことが可能です。その一例が Heck 反応です。近年、Umkehrer らは、Ugi 反応と Heck 反応を組み合わせると、4 点の多様性を持つインドール-2-オンのハイスループットなコンビナトリアルライブラリー作成に有用であることを証明しました。この骨格は、抗腫瘍作用 (1) やチロシンキナーゼ阻害作用 (2) などの生理活性を示すことで注目されています<sup>3</sup>。



Scheme 1



1



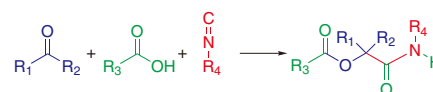
2

## Passerini 反応

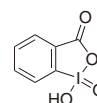
Passerini 反応も、イソニトリルを基質とする多成分反応で、ワンポット合成でアルデヒド、イソニトリル、カルボン酸から  $\alpha$ -アシロキシカルボキサミドを生成します。カルボニル基の C(sp<sup>2</sup>) 求電子中心に対し、2 価のイソニトリル炭素原子の反応性が非常に高いことから、この 3 種類の化合物のうち最も重要な反応物がカルボン酸です。

この反応においては、強いカルボン酸や求電子性の強いカルボニル化合物を使わなければ、反応速度は遅くなり、低収率となります<sup>4</sup>。

従来の Passerini 反応は、ワンポット合成にアルデヒドを用います。しかし、条件によっては、アルデヒドは不安定で取り扱いが困難です。そこで、最近、Ngouansavanh らは、アルデヒドの代わりに、対応するアルコールと 2-イオドキシ安息香酸 (IBX) (3) を用いる改良法を報告しました (661384)。この改良法によって Passerini 反応の用途が広がり、生成できる化合物が増えました<sup>5</sup>。



Scheme 2

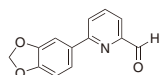


3

## Aldehydes

### 6-(1,3-Benzodioxol-5-yl)-2-pyridinecarboxaldehyde, 97%

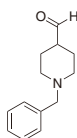
C<sub>13</sub>H<sub>9</sub>NO<sub>3</sub>  
FW: 227.22  
[834884-78-5]



655813-1G	1 g	¥11,200
655813-5G	5 g	¥43,000

### N-Benzylpiperidine-4-carboxaldehyde, 96%

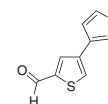
C<sub>13</sub>H<sub>17</sub>NO  
FW: 203.28  
[22065-85-6]



664081-1G	1 g	¥13,500
664081-5G	5 g	¥47,500

### [3,3'-Bithiophene]-5-carboxaldehyde, 97%

C<sub>9</sub>H<sub>6</sub>OS<sub>2</sub>  
FW: 194.27  
[137320-59-3]



657824-1G	1 g	¥11,200
657824-5G	5 g	¥37,400

### 2,5-Dibromo benzaldehyde

C<sub>7</sub>H<sub>4</sub>Br<sub>2</sub>O  
FW: 263.91  
[74553-29-0]



661899-1G	1 g	¥7,400
661899-5G	5 g	¥24,800

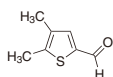
バルク供給/スケールアップのご相談は…

ファインケミカル事業部 Tel:03-5796-7340 Fax:03-5796-7345 E-mail:sialjpcf@sial.com



**4,5-Dimethylthiophene-2-carboxaldehyde, 97%**

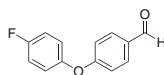
C<sub>7</sub>H<sub>8</sub>OS  
FW: 140.2  
[5928-48-3]



668354-1G 1 g ¥10,800

**4-(4-Fluorophenoxy)benzaldehyde, 97%**

C<sub>13</sub>H<sub>9</sub>FO<sub>2</sub>  
FW: 216.21  
[137736-06-2]



661287-1G 1 g ¥10,500  
661287-5G 5 g ¥37,500

**2-Fluoro-3-pyridinecarboxaldehyde, 97%**

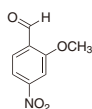
C<sub>6</sub>H<sub>4</sub>FNO  
FW: 125.1  
[36404-90-7]



664111-5G 5 g ¥13,000

**2-Methoxy-4-nitrobenzaldehyde, 97%**

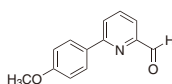
C<sub>8</sub>H<sub>7</sub>NO<sub>4</sub>  
FW: 181.15  
[136507-15-8]



658324-1G 1 g ¥6,700  
658324-5G 5 g ¥23,300

**6-(4-Methoxyphenyl)-2-pyridinecarboxaldehyde, 97%**

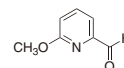
C<sub>13</sub>H<sub>11</sub>NO<sub>2</sub>  
FW: 213.23  
[502925-47-5]



655783-1G 1 g ¥13,000  
655783-5G 5 g ¥50,100

**6-Methoxy-2-pyridinecarboxaldehyde, 97%**

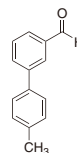
C<sub>7</sub>H<sub>7</sub>NO<sub>2</sub>  
FW: 137.14  
[54221-96-4]



662933-1G 1 g ¥8,100  
662933-5G 5 g ¥27,000

**3-(4-Methylphenyl)benzaldehyde, 97%**

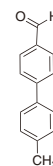
C<sub>14</sub>H<sub>12</sub>O  
FW: 196.24  
[116470-54-3]



664790-250MG 250 mg ¥6,500  
664790-1G 1 g ¥17,800

**4-(4-Methylphenyl)benzaldehyde, 97%**

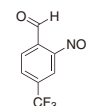
C<sub>14</sub>H<sub>12</sub>O  
FW: 196.24  
[36393-42-7]



664782-250MG 250 mg ¥6,500  
664782-1G 1 g ¥17,800

**2-Nitro-4-(trifluoromethyl)benzaldehyde, 97%**

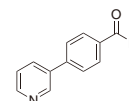
C<sub>8</sub>H<sub>4</sub>F<sub>3</sub>NO<sub>3</sub>  
FW: 219.12  
[109466-87-7]



664952-1G 1 g ¥4,500

**4-(Pyridin-3-yl)benzaldehyde, 98%**

C<sub>12</sub>H<sub>9</sub>NO  
FW: 183.21  
[127406-55-7]



668303-1G 1 g ¥24,000  
668303-5G 5 g ¥90,000

## Amines

**3-Amino-2-bromopyridine, 97%**

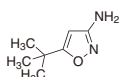
C<sub>5</sub>H<sub>5</sub>BrN<sub>2</sub>  
FW: 173.01  
[39856-58-1]



661228-1G 1 g ¥5,000

**3-Amino-5-tert-butylisoxazole, 97%**

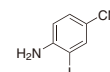
C<sub>7</sub>H<sub>12</sub>N<sub>2</sub>O  
FW: 140.18  
[55809-36-4]



666580-5G 5 g ¥8,400  
666580-25G 25 g ¥32,000

**4-Amino-3-iodobenzonitrile**

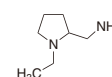
C<sub>7</sub>H<sub>5</sub>IN<sub>2</sub>  
FW: 244.03  
[33348-34-4]



657123-1G 1 g ¥3,500  
657123-5G 5 g ¥12,800

**2-(Aminomethyl)-1-ethylpyrrolidine, 97%**

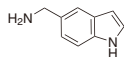
C<sub>7</sub>H<sub>14</sub>N<sub>2</sub>  
FW: 128.22  
[26116-12-1]



655600-5G 5 g ¥4,300  
655600-25G 25 g ¥15,800

**5-(Aminomethyl)indole, 95%**

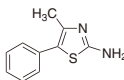
C<sub>9</sub>H<sub>10</sub>N<sub>2</sub>  
FW: 146.19



655864-1G	1 g	¥10,000
655864-5G	5 g	¥36,000

**2-Amino-5-methyl-4-phenylthiazole, 97%**

C<sub>10</sub>H<sub>10</sub>N<sub>2</sub>S  
FW: 190.26  
[30709-67-2]



658480-1G	1 g	¥4,400
658480-10G	10 g	¥24,200

**3-Amino-2-methylpyridine, 97%**

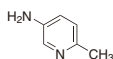
C<sub>6</sub>H<sub>8</sub>N<sub>2</sub>  
FW: 108.14  
[3430-10-2]



662690-250MG	250 mg	¥11,000
662690-1G	1 g	¥30,000

**5-Amino-2-methylpyridine, 97%**

C<sub>6</sub>H<sub>8</sub>N<sub>2</sub>  
FW: 108.14  
[3430-14-6]



662704-250MG	250 mg	¥11,000
662704-1G	1 g	¥30,000

**4-Amino-3-(trifluoromethyl)pyridine, 97%**

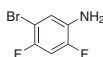
C<sub>6</sub>H<sub>5</sub>F<sub>3</sub>N<sub>2</sub>  
FW: 162.11  
[387824-61-5]



661090-100MG	100 mg	¥11,300
661090-500MG	500 mg	¥39,600

**5-Bromo-2,4-difluoroaniline, 97%**

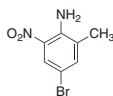
C<sub>6</sub>H<sub>4</sub>BrF<sub>2</sub>N  
FW: 208  
[452-92-6]



656372-5G	5 g	¥6,600
656372-25G	25 g	¥22,700

**4-Bromo-2-methyl-6-nitroaniline, 97%**

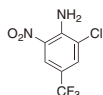
C<sub>7</sub>H<sub>7</sub>BrN<sub>2</sub>O<sub>2</sub>  
FW: 231.05  
[77811-44-0]



655988-1G	1 g	¥5,700
655988-5G	5 g	¥20,000

**2-Chloro-6-nitro-4-(trifluoromethyl)aniline, 97%**

C<sub>7</sub>H<sub>4</sub>ClF<sub>3</sub>N<sub>2</sub>O<sub>2</sub>  
FW: 240.57  
[57729-79-0]



656038-1G	1 g	¥9,800
656038-5G	5 g	¥34,300

**2-Chloro-4-(trifluoromethoxy)aniline, 97%**

C<sub>7</sub>H<sub>5</sub>ClF<sub>3</sub>NO  
FW: 211.57  
[69695-61-0]



655929-1G	1 g	¥11,500
655929-5G	5 g	¥40,600

**3,5-Dibromo-4-methylaniline, 97%**

C<sub>7</sub>H<sub>7</sub>Br<sub>2</sub>N  
FW: 264.95  
[13194-73-5]



658367-1G	1 g	¥7,300
658367-5G	5 g	¥25,600

**2,4-Dichloro-6-(trifluoromethyl)aniline, 97%**

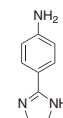
C<sub>7</sub>H<sub>4</sub>Cl<sub>2</sub>F<sub>3</sub>N  
FW: 230.01  
[62593-17-3]



656011-1G	1 g	¥8,500
656011-5G	5 g	¥30,000

**4-(4,5-Dihydro-1H-imidazol-2-yl)phenylamine, 97%**

C<sub>9</sub>H<sub>11</sub>N<sub>3</sub>  
FW: 161.2



666084-1G	1 g	¥12,000
-----------	-----	---------

**4-Iodo-2-nitroaniline, 97%**

C<sub>6</sub>H<sub>5</sub>IN<sub>2</sub>O<sub>2</sub>  
FW: 264.02  
[20691-72-9]



654108-1G	1 g	¥2,700
654108-10G	10 g	¥14,900

**2-Morpholinoaniline, 97%**

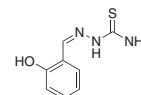
C<sub>10</sub>H<sub>14</sub>N<sub>2</sub>O  
FW: 178.23  
[5585-33-1]



663204-5G	5 g	¥9,800
663204-25G	25 g	¥34,500

**Salicylaldehyde thiosemicarbazone, 95%**

C<sub>8</sub>H<sub>9</sub>N<sub>3</sub>OS  
FW: 195.24  
[5351-90-6]



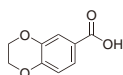
658774-1G	1 g	¥3,000
658774-10G	10 g	¥17,000



## Carboxylic Acids

## 1,4-Benzodioxane-6-carboxylic acid, 97%

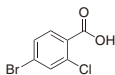
C<sub>9</sub>H<sub>8</sub>O<sub>4</sub>  
FW: 180.16  
[4442-54-0]



658375-5G	5 g	¥7,200
658375-25G	25 g	¥25,000

## 4-Bromo-2-chlorobenzoic acid, 97%

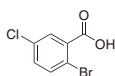
C<sub>7</sub>H<sub>4</sub>BrClO<sub>2</sub>  
FW: 235.46  
[59748-90-2]



664014-5G	5 g	¥9,500
664014-25G	25 g	¥33,000

## 2-Bromo-5-chlorobenzoic acid, 96%

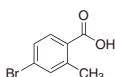
C<sub>7</sub>H<sub>4</sub>BrClO<sub>2</sub>  
FW: 235.46  
[21739-93-5]



664022-5G	5 g	¥11,100
664022-25G	25 g	¥39,000

## 4-Bromo-2-methylbenzoic acid, 97%

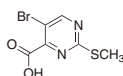
C<sub>8</sub>H<sub>7</sub>BrO<sub>2</sub>  
FW: 215.04  
[68837-59-2]



665126-5G	5 g	¥11,000
665126-25G	25 g	¥41,500

## 5-Bromo-2-(methylthio)pyrimidine-4-carboxylic acid, 97%

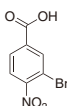
C<sub>6</sub>H<sub>5</sub>BrN<sub>2</sub>O<sub>2</sub>S  
FW: 249.09  
[50593-92-5]



656739-1G	1 g	¥7,000
-----------	-----	--------

## 3-Bromo-4-nitrobenzoic acid, 97%

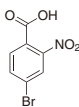
C<sub>7</sub>H<sub>4</sub>BrNO<sub>4</sub>  
FW: 246.01  
[101420-81-9]



659304-1G	1 g	¥10,500
659304-5G	5 g	¥37,200

## 4-Bromo-2-nitrobenzoic acid, 97%

C<sub>7</sub>H<sub>4</sub>BrNO<sub>4</sub>  
FW: 246.01  
[99277-71-1]



664855-1G	1 g	¥5,200
664855-5G	5 g	¥18,000

## 2-Chloro-3-methoxybenzoic acid, 97%

C<sub>8</sub>H<sub>7</sub>ClO<sub>3</sub>  
FW: 186.59  
[33234-36-5]



657905-1G	1 g	¥7,200
657905-10G	10 g	¥39,500

## 4-Chloronicotinic acid, 96%

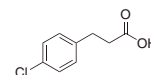
C<sub>6</sub>H<sub>4</sub>ClNO<sub>2</sub>  
FW: 157.55  
[10177-29-4]



660396-1G	1 g	¥11,000
-----------	-----	---------

## 3-(4-Chlorophenyl)propionic acid, 97%

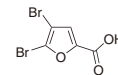
C<sub>9</sub>H<sub>9</sub>ClO<sub>2</sub>  
FW: 184.62  
[2019-34-3]



656151-1G	1 g	¥4,200
656151-5G	5 g	¥10,400

## 4,5-Dibromo-2-furoic acid, 97%

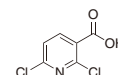
C<sub>5</sub>H<sub>2</sub>Br<sub>2</sub>O<sub>3</sub>  
FW: 269.88  
[2434-03-9]



656291-5G	5 g	¥10,200
656291-25G	25 g	¥36,700

## 2,6-Dichloronicotinic acid, 97%

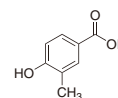
C<sub>6</sub>H<sub>3</sub>Cl<sub>2</sub>NO<sub>2</sub>  
FW: 192.00  
[38496-18-3]



658219-1G	1 g	¥8,300
658219-5G	5 g	¥29,100
658219-25G	25 g	¥77,000

## 4-Hydroxy-3-methylbenzoic acid, 97%

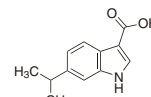
C<sub>8</sub>H<sub>8</sub>O<sub>3</sub>  
FW: 152.15  
[499-76-3]



659282-1G	1 g	¥3,400
659282-10G	10 g	¥18,500

## 6-Isopropylindole-3-carboxaldehyde, 97%

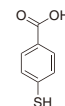
C<sub>12</sub>H<sub>12</sub>NO  
FW: 187.24  
[870703-65-4]



659800-1G	1 g	¥15,000
-----------	-----	---------

## 4-Mercaptobenzoic acid

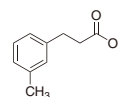
C<sub>7</sub>H<sub>6</sub>O<sub>2</sub>S  
FW: 154.19  
[1074-36-8]



662534-5G	5 g	¥9,600
662534-25G	25 g	¥34,000

## 3-(3-Methylphenyl)propionic acid, 97%

C<sub>10</sub>H<sub>12</sub>O<sub>2</sub>  
FW: 164.2  
[3751-48-2]



656178-1G	1 g	¥4,600
656178-5G	5 g	¥12,500

**4-Methylpyridine-3-carboxylic acid, 97%**

C<sub>7</sub>H<sub>7</sub>NO<sub>2</sub>  
FW: 137.14  
[3222-50-2]



656410-1G 1 g ¥39,400

**1,2,4-Triazole-3-carboxylic acid, 97%**

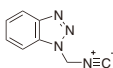
C<sub>3</sub>H<sub>3</sub>N<sub>3</sub>O<sub>2</sub>  
FW: 113.07  
[4928-87-4]



658472-1G 1 g ¥4,800  
658472-10G 10 g ¥26,400

**Isocyanides****1H-Benzotriazol-1-ylmethyl isocyanide, 94%**

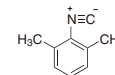
C<sub>8</sub>H<sub>6</sub>N<sub>4</sub>  
FW: 158.16  
[87022-42-2]



367990-1G 1 g ¥9,700  
367990-5G 5 g ¥19,100

**2,6-Dimethylphenyl isocyanide, 96%**

C<sub>9</sub>H<sub>9</sub>N  
FW: 131.17  
[2769-71-3]



594881-1G 1 g ¥10,600  
594881-5G 5 g ¥35,200

**Benzyl isocyanide, 98%**

C<sub>8</sub>H<sub>7</sub>N  
FW: 117.15  
[10340-91-7]



133299-250MG 250 mg ¥400  
133299-1G 1 g ¥1,500  
133299-5G 5 g ¥6,900

**Isopropyl isocyanide, 97%**

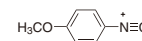
C<sub>4</sub>H<sub>7</sub>N  
FW: 69.11  
[598-45-8]



553344-500MG 500 mg ¥3,800

**4-Methoxyphenyl isocyanide, 97%**

C<sub>8</sub>H<sub>7</sub>NO  
FW: 133.15  
[10349-38-9]



594458-1G 1 g ¥10,900

**tert-Butyl isocyanide, 98%**

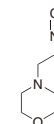
C<sub>5</sub>H<sub>9</sub>N  
FW: 83.13  
[7188-38-7]



260630-250MG 250 mg ¥2,200  
260630-1G 1 g ¥5,800  
260630-5G 5 g ¥19,100

**2-Morpholinoethyl isocyanide, 98%**

C<sub>7</sub>H<sub>12</sub>N<sub>2</sub>O  
FW: 140.18  
[78375-48-1]



69893-10ML 10 ml ¥17,500  
69893-50ML 50 ml ¥68,700

**2-Chloro-6-methylphenyl isocyanide, 97%**

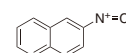
C<sub>8</sub>H<sub>6</sub>ClN  
FW: 151.59  
[118923-96-9]



594342-1G 1 g ¥11,400

**2-Naphthyl isocyanide, 97%**

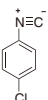
C<sub>11</sub>H<sub>7</sub>N  
FW: 153.18  
[10124-78-4]



594784-1G 1 g ¥11,400

**4-Chlorophenyl isocyanide, 97%**

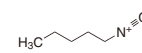
C<sub>7</sub>H<sub>4</sub>ClN  
FW: 137.57  
[1885-81-0]



594229-1G 1 g ¥13,500

**1-Pentyl isocyanide, 97%**

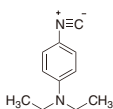
C<sub>6</sub>H<sub>11</sub>N  
FW: 97.16  
[18971-59-0]



536202-1G 1 g ¥6,700  
536202-5G 5 g ¥22,300

**4-Diethylaminophenyl isocyanide, 97%**

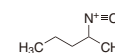
C<sub>11</sub>H<sub>16</sub>N<sub>2</sub>  
FW: 174.24  
[42549-09-7]



594555-1G 1 g ¥11,400

**2-Pentyl isocyanide, 97%**

C<sub>6</sub>H<sub>11</sub>N  
FW: 97.16  
[355377-26-3]

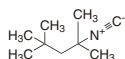


536199-1G 1 g ¥9,200  
536199-5G 5 g ¥30,600



**1,1,3,3-Tetramethylbutyl isocyanide**

C<sub>9</sub>H<sub>17</sub>N  
FW: 139.24  
[14542-93-9]



226491-1G	1 g	¥3,800
226491-5G	5 g	¥11,700

**2-Tolylisocyanide, 95%**

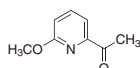
C<sub>9</sub>H<sub>7</sub>N  
FW: 117.15  
[10468-64-1]



593907-1G	1 g	¥11,400
-----------	-----	---------

**Ketones****2-Acetyl-6-methoxypyridine, 97%**

C<sub>8</sub>H<sub>9</sub>NO<sub>2</sub>  
FW: 151.16  
[21190-93-2]



662542-1G	1 g	¥11,000
662542-5G	5 g	¥38,000

**6-Chloro-1-indanone, 96%**

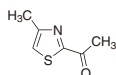
C<sub>9</sub>H<sub>7</sub>ClO  
FW: 166.6  
[14548-38-0]



656828-1G	1 g	¥9,000
656828-5G	5 g	¥30,000

**2-Acetyl-4-methylthiazole, 97%**

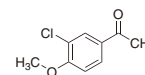
C<sub>6</sub>H<sub>7</sub>NOS  
FW: 141.19  
[7533-07-5]



656313-1G	1 g	¥4,900
656313-5G	5 g	¥17,000

**3'-Chloro-4'-methoxyacetophenone, 99%**

C<sub>9</sub>H<sub>9</sub>ClO<sub>2</sub>  
FW: 184.62  
[37612-52-5]



648809-1G	1 g	¥8,200
648809-5G	5 g	¥28,400

**3-Bromo-2-butanone, 97%**

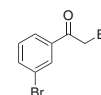
C<sub>4</sub>H<sub>7</sub>BrO  
FW: 151.00  
[814-75-5]



662747-1G	1 g	¥7,800
662747-5G	5 g	¥27,500

**2,3'-Dibromoacetophenone, 97%**

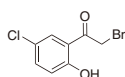
C<sub>8</sub>H<sub>6</sub>Br<sub>2</sub>O  
FW: 277.94  
[18523-22-3]



654787-1G	1 g	¥2,800
654787-5G	5 g	¥9,900

**2-Bromo-5'-chloro-2'-hydroxyacetophenone, 97%**

C<sub>8</sub>H<sub>6</sub>BrClO<sub>2</sub>  
FW: 249.49  
[52727-99-8]



663689-1G	1 g	¥7,900
663689-5G	5 g	¥27,500

**4,4-Dimethylcyclohexanone, 97%**

C<sub>8</sub>H<sub>14</sub>O  
FW: 126.2  
[4255-62-3]



663654-250MG	250 mg	¥4,900
663654-1G	1 g	¥13,500

**4-Bromo-1-indanone, 97%**

C<sub>9</sub>H<sub>7</sub>BrO  
FW: 211.06  
[15115-60-3]



644366-1G	1 g	¥7,100
644366-5G	5 g	¥23,300

**6-Fluoro-1-indanone, 96%**

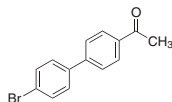
C<sub>9</sub>H<sub>7</sub>FO  
FW: 150.15  
[1481-32-9]



663123-1G	1 g	¥10,700
663123-5G	5 g	¥37,500

**4'-(4-Bromophenyl)acetophenone, 97%**

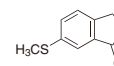
C<sub>14</sub>H<sub>11</sub>BrO  
FW: 275.14  
[5731-01-1]



640468-25G	25 g	¥11,000
640468-100G	100 g	¥31,000

**6-(Methylthio)-1-indanone, 96%**

C<sub>10</sub>H<sub>10</sub>OS  
FW: 178.25  
[138485-82-2]



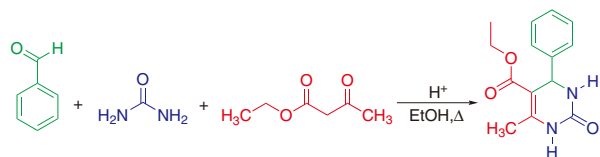
656143-1G	1 g	¥15,000
-----------	-----	---------

## Biginelli 反応

Biginelli 反応は (Scheme 3) 酸触媒によるアルデヒド、β-ケトエステル、尿素の 3 成分反応で、医薬品用途の可能性のあるテトラヒドロピリミドンを生成します。

この反応が最初に報告されたのは 1893 年で、最終生成物が臨床的に重要なジヒドロピリミジンと構造的に相関していたことから、注目が高まりました<sup>6</sup>。ジヒドロピリミジンは様々な生理活性を持つことが知られており、抗ウイルス剤、抗腫瘍剤、抗菌剤、抗炎症剤の他、最近では抗高血圧剤としても知られています<sup>7</sup>。

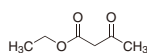
Biginelli 反応のメカニズムは、アルデヒドと尿素の縮合で始まると考えられています。この縮合で求電子性のイミニウム中間体が生成し、ケトエステルエノールの求核付加反応が起こります。生成したケトンカルボニルは尿素の NH<sub>2</sub> と縮合します。これにより環化した最終生成物が得られます。



Scheme 3

### Ethyl acetoacetate, 99%

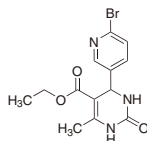
C<sub>6</sub>H<sub>10</sub>O<sub>3</sub>  
FW: 130.14  
[141-97-9]



537349-1KG	1 kg	¥7,600
537349-3KG	3 kg	¥18,300

### 4-(6-Bromopyridin-3-yl)-6-methyl-2-oxo-1,2,3,4-tetrahydropyrimidine-5-carboxylic acid ethyl ester, 98%

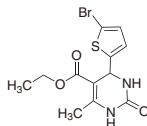
C<sub>13</sub>H<sub>14</sub>BrN<sub>3</sub>O<sub>3</sub>  
FW: 340.17



668087-1G	1 g	¥20,000
668087-5G	5 g	¥80,000

### 4-(5-Bromothiophen-2-yl)-6-methyl-2-oxo-1,2,3,4-tetrahydropyrimidine-5-carboxylic acid ethyl ester, 98%

C<sub>12</sub>H<sub>13</sub>BrN<sub>2</sub>O<sub>3</sub>S  
FW: 345.21



668133-1G	1 g	¥19,700
668133-5G	5 g	¥78,000

### Urea, 98%

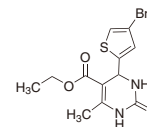
CH<sub>4</sub>N<sub>2</sub>O  
FW: 60.06  
[57-13-6]



208884-1KG	1 kg	¥3,800
208884-5KG	5 kg	¥8,600
208884-10KG	10 kg	¥15,600

### 4-(4-Bromothiophen-2-yl)-6-methyl-2-oxo-1,2,3,4-tetrahydropyrimidine-5-carboxylic acid ethyl ester, 98%

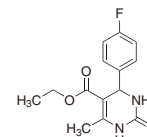
C<sub>12</sub>H<sub>13</sub>BrN<sub>2</sub>O<sub>3</sub>S  
FW: 345.21



668095-1G	1 g	¥19,700
-----------	-----	---------

### Ethyl 4-(4-fluorophenyl)-1,2,3,4-tetrahydro-6-methyl-2-oxo-5-pyrimidinecarboxylate, 97%

C<sub>14</sub>H<sub>15</sub>FN<sub>2</sub>O<sub>3</sub>  
FW: 278.28  
[5937-24-6]



631183-5G	5 g	¥12,800
-----------	-----	---------

## References

- (1) Xu, L. et al. *J. Org. Chem.* **2004**, 69, 8482–8484.
- (2) Musonda, C. et al. *Bioorg. Med. Chem. Lett.* **2004**, 14, 3901–3905.
- (3) Umkehrer et al. *Tetrahedron Lett.* **2006**, 47, 2391–2393.
- (4) Xia, Q.; Ganem, B. *Org. Lett.* **2002**, 4, 1631–1634.
- (5) Nguansavanh, T. et al. *Angew. Chem. Int. Ed.* **2006**, 45, 3495–3497.
- (6) Kappe, C.O. *J. Org. Chem.* **1997**, 62, 7201–7204.
- (7) Rafiee, E.; Jafari, Hadi. *Bioorg. Med. Chem. Lett.* **2006**, 16, 2463–2466.

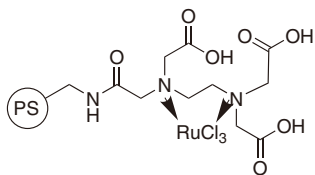
バルク供給/スケールアップのご相談は…

ファインケミカル事業部 Tel:03-5796-7340 Fax:03-5796-7345 E-mail:sialjpcf@sial.com

# The Strecker Reaction Catalyzed by Polymer-Supported Ruthenium Complex

アルデヒド、アンモニア、シアン化水素の反応による $\alpha$ -アミノニトリルのワンポット合成は、Strecker反応としてよく知られています<sup>1</sup>。最近、従来のStrecker反応に改良が加えられ、毒性のあるシアン化水素の代わりに比較的穏やかなシアン化トリメチルシリルが用いられるようになりました<sup>2,3</sup>。ルテニウムもStrecker反応を触媒することが証明されています<sup>4</sup>。

Sigma-Aldrich では、穏やかな Strecker 反応用触媒として高分子担持ルテニウム触媒を提供しています。

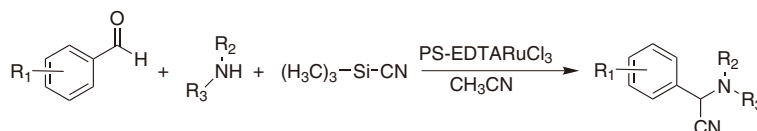


## Ethylenediaminetriacetic acid-ruthenium(III) chloride complex, polymer-bound

668079-1G	1 g	¥11,600
668079-5G	5 g	¥59,500

(1) Strecker, A. *Ann. Chem. Pharm.* **1850**, 75, 27. (2) Yadav, J. S. et al. *Tetrahedron* **2004**, 60, 1767. (3) Mai, K.; Patil, G. *Tetrahedron Lett.* **1984**, 25, 4583. (4) De, S. K. *Synth. Commun.* **2005**, 35, 653.

## Scheme 1



## 実験例

高分子結合エチレンジアミントリ酢酸-塩化ルテニウム(III)錯体(15 mg, 0.005 mmol)を反応容器に入れ、アセトニトリル(2.0 mL)、アルデヒド(1.0 mmol)、アミン(1.15 mmol)、シアン化トリメチルシリル(1.5 mmol)を加えた。混合液を室温で一晩攪拌した後、ろ過してろ液を回収した。樹脂をアセトニトリルで数回洗浄し、合わせたろ液を蒸発乾固させた。残渣をフラッシュカラムクロマトグラフィー(シリカゲル 20 g、カラム 1.5 × 20 cm、溶離液酢酸エチル:ヘキサン=(1:9))で精製し、目的とする生成物を得た。単離した生成物の構造を<sup>1</sup>H NMRと質量分析にて確認した。

## Isolated Percent Yields of Substituted $\alpha$ -Amino Nitriles

	<i>N</i> -Boc-amino-piperidine	Morpholine	Phen-ethylamine
4-Bromobenzaldehyde	83	95	95
4-Cyanobenzaldehyde	70	62	53
3,5-Dimethoxybenzaldehyde	86	92	51

For more information, please visit us at [sigma-aldrich.com](http://sigma-aldrich.com).

# MacMillan Imidazolidinone OrganoCatalysts™

## Metal-Free Asymmetric Catalysis

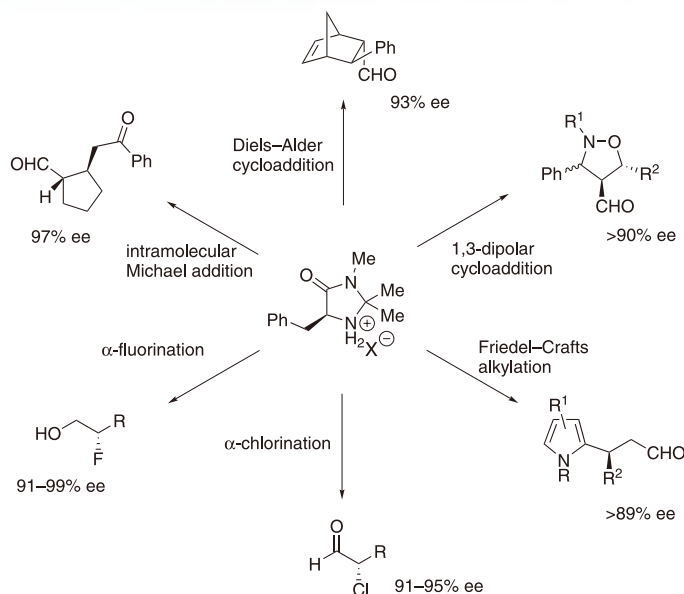
### 製品の特長

- 数々の合成反応での高エナンチオ特異性
- 触媒量が少なくても高活性
- 卓越した官能基耐性

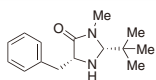
MacMillanらは、Diels-Alder反応や1,3-双極性付加環化反応などの直接的なエナンチオ特異的有機反応をはじめ、 $\alpha$ -フッ素化反応、 $\alpha$ -塩素化反応、Friedel-Craftsアルキル化反応などの共役付加反応、エポキシ化反応、水素移動反応、有機カスケード反応の要として機能するキラルなイミダゾリジノン有機触媒を開発しました。Sigma-Aldrichは、Materia社との共同開発により、迅速かつエナンチオ特異的なC-C結合やC-X結合(X = H、O、ハロゲン)の形成可能な10品目のイミダゾリジノン有機触媒を提供しています。

### References

(1) For a review on organocatalysis, see Lelais, G.; MacMillan, D. W. C. *Aldrichimica Acta* **2006**, 39, 79. (2) Ahrendt, K. A.; Borths, C. J.; MacMillan, D. W. C. *J. Am. Chem. Soc.* **2000**, 122, 4243. (3) Northrup, A. B.; MacMillan, D. W. C. *J. Am. Chem. Soc.* **2002**, 124, 2458. (4) Huang, Y.; Walji, A. M.; Larsen, C. H.; MacMillan, D. W. C. *J. Am. Chem. Soc.* **2005**, 127, 15051. (5) Paras, N. A.; MacMillan, D. W. C. *J. Am. Chem. Soc.* **2001**, 123, 4370.

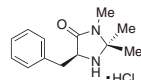


**(2R,5R)-(+)-2-tert-Butyl-3-methyl-5-benzyl-4-imidazolidinone, 97%** NEW  
 [390766-89-9]  
 $C_{15}H_{22}N_2O$   
 FW: 246.35



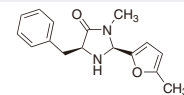
663093-500MG 500 mg ¥12,000  
 663093-1G 1 g ¥19,000

**(5S)-2,2,3-Trimethyl-5-phenylmethyl-4-imidazolidinone monohydrochloride, 97%** NEW  
 [278173-23-2]  
 $C_{13}H_{18}N_2O \cdot HCl$   
 FW: 254.76



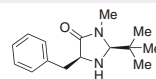
569763-500MG 500 mg ¥6,000  
 569763-2G 2 g ¥18,600

**(2S,5S)-5-Benzyl-3-methyl-2-(5-methyl-2-furyl)-4-imidazolidinone** NEW  
 [415678-40-9]  
 $C_{16}H_{18}N_2O_2$   
 FW: 270.33



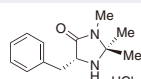
668540-250MG 250 mg ¥15,900  
 668540-1g 1 g ¥43,000

**(2S,5S)-(-)-2-tert-Butyl-3-methyl-5-benzyl-4-imidazolidinone, 97%** NEW  
 [346440-54-8]  
 $C_{15}H_{22}N_2O$   
 FW: 246.35



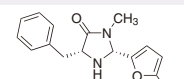
663107-500MG 500 mg ¥12,000  
 663107-1G 1 g ¥19,000

**(5R)-(+)-2,2,3-Trimethyl-5-phenylmethyl-4-imidazolidinone monohydrochloride, 97%** NEW  
 [323196-43-6]  
 $C_{13}H_{18}N_2O \cdot HCl$   
 FW: 254.76



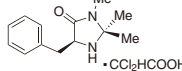
663069-500MG 500 mg ¥6,000  
 663069-2G 2 g ¥16,000

**(2R,5R)-5-Benzyl-3-methyl-2-(5-methyl-2-furyl)-4-imidazolidinone** NEW  
 $C_{16}H_{18}N_2O_2$   
 FW: 270.33



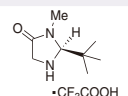
668842-250MG 250 mg ¥15,900  
 668842-1g 1 g ¥43,000

**(5S)-(-)-2,2,3-Trimethyl-5-benzyl-4-imidazolidinone dichloroacetic acid, 97%** NEW  
 $C_{15}H_{20}Cl_2N_2O_3$   
 FW: 347.24



663085-500MG 500 mg ¥11,000  
 663085-2G 2 g ¥30,000

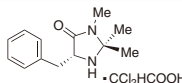
**(5)-2-(tert-Butyl)-3-methyl-4-oxoimidazolidinium trifluoroacetate** NEW  
 $C_{10}H_{17}F_3N_2O_3$   
 FW: 270.25



661902-500MG 500 mg ¥10,000  
 661902-2G 2 g ¥33,000

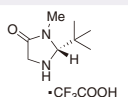
**MacMillan Organocatalyst Kit I** NEW  
 Kit contains: 569763-500mg, 661902-500mg, 663085-500mg, 663107-500mg, 668540-250mg, 674575-1KT  
 1 KT ¥49,400

**(5R)-(+)-2,2,3-Trimethyl-5-benzyl-4-imidazolidinone dichloroacetic acid, 97%** NEW  
 $C_{15}H_{20}Cl_2N_2O_3$   
 FW: 347.24



663077-500MG 500 mg ¥11,000  
 663077-2G 2 g ¥30,000

**(R)-2-(tert-Butyl)-3-methyl-4-oxoimidazolidinium trifluoroacetate** NEW  
 $C_{10}H_{17}F_3N_2O_3$   
 FW: 270.25



661910-500MG 500 mg ¥10,000  
 661910-2G 2 g ¥33,000

For more information,  
 please visit us at  
[sigma-aldrich.com/catalysis](http://sigma-aldrich.com/catalysis).



# Sigma-Aldrich 新サーチエンジンのご紹介

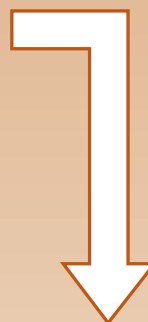
(<http://www.sigmaaldrich.com/>)

さまざまな Key Word や...



ぜひご利用下さい!

ご不明な点は  
テクニカルサポート  
までどうぞ!



Substructure を選んで  
構造式から



必要な試薬をお探しいただけます

MSDS、ロット試験成績表、NMR/IRスペクトル、  
国内在庫状況、価格を公開!

The screenshot shows the product page for '(R)-(+)-Styrene oxide' (Aldrich: 97%). It includes a chemical structure, a table of inventory, and various product details.

製品番号	JPY	在庫/出荷状況	数量	アクション
540099-50	32,400	11/06/2005	status	
540099-250	84,700	24/08/2005	status	

**Properties**

mp (°C)	-117	lit.
ee	97%	(D.L.C)
enr. lit.	-22	%
n <sub>D</sub> 20	1.534	(lit.)
bp	69-80	°C/20 mm Hg (lit.)



**SIGMA-ALDRICH**

**シグマ アルドリッチ ジャパン株式会社**

〒140-0002 東京都品川区東品川2-2-24 天王洲セントラルタワー4F

製品に関するお問い合わせは、弊社テクニカルサポートへ  
TEL:03-5796-7330 FAX:03-5796-7335  
E-mail : sialjpts@sial.com

在庫照会・ご注文方法に関するお問い合わせは、弊社カスタマーサービスへ  
TEL:03-5796-7320 FAX:03-5796-7325

<http://www.sigma-aldrich.com/japan>

お問い合わせは下記代理店へ