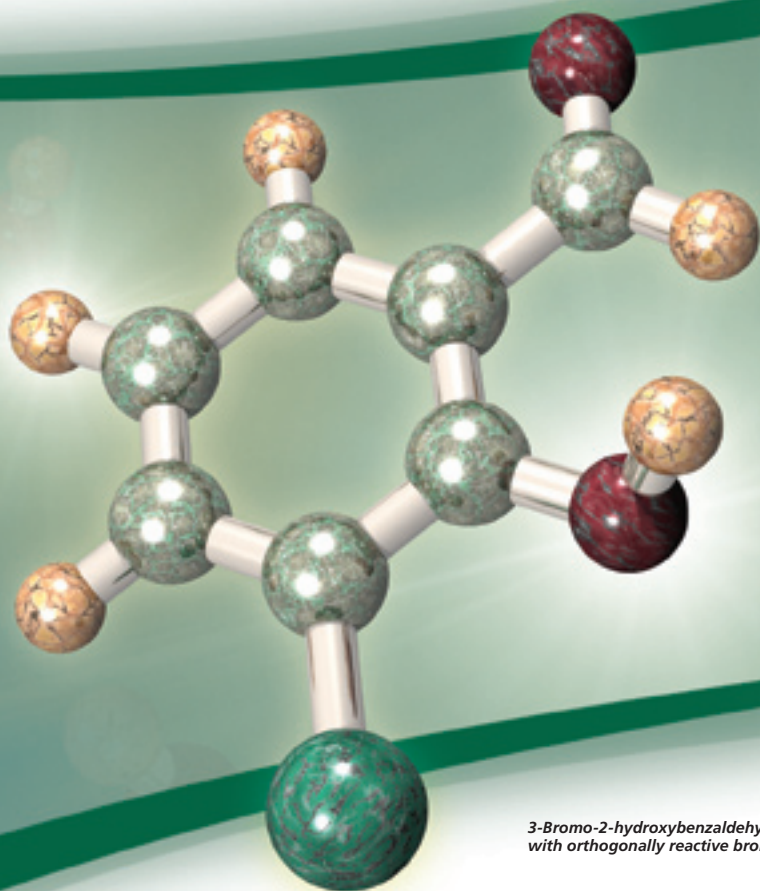


有機ビルディングブロック

Organic Building Blocks



*3-Bromo-2-hydroxybenzaldehyde: aryl aldehyde
with orthogonally reactive bromine*

ALDEHYDES

THIAZOLES

PIPERIDINES

PYRROLIDINES

SULFONYL CHLORIDES
AND SULFONAMIDES

はじめに

一般に、合成化学における最も刺激的な進歩と発見は、新たな触媒や反応剤に関するものであって、変換反応を受ける基質については、とかく見過ごされがちです。しかし、適切なビルディングブロックを得ることは、目的の標的分子に変換するツールを得ることと全く同様に科学者にとって重要な問題です。

Sigma-Aldrichは、研究に役立つ15,000品目以上の有機ビルディングブロック類を取り扱っています。今号では、弊社製品に追加された最新試薬の一部をご紹介します。アルデヒドは、さまざまな求核試薬と容易に反応可能なため、長年にわたり魅力的なビルディングブロックとして利用されています。チアゾール誘導体は、阻害剤として治療に応用される機会が増大しつつあります。ピペリジンとピロリジンは、広範な目的物質の化学合成にきわめて広く用いられているビルディングブロックです。スルホンアミドは、重要な生物活性を有する数多くの化合物に共通する構造単位のひとつです。

ビルディングブロックの一覧は、弊社Webサイト sigma-aldrich.com/bb でご覧ください。皆様の研究に必要なビルディングブロックや試薬が見つからない場合は、テクニカルサポート sialjpts@sial.com へ日本語でお気軽にお問い合わせください。

Discovery^{CPR} で実験操作の生産性を向上させましょう！

創薬化学・有機合成用試薬管理の新しいスタンダード

柔軟性 | 効率性 | 利便性

- 広範囲・多様な試薬のコレクションです
- 他社製品も含め、ご希望の試薬のセット化が可能です
- 注文単位は μmol から g までご希望の容量を指定できます (1mg ~ 25g まで対応可能)
- 廃棄物を低減し、過剰在庫や在庫管理の必要がありません
- ご希望のバイアルタイプ、ラベルバーコード添付、包装形態が選べます
- 20本以上からお見積り致します
- 製品番号、MFCD番号、CAS番号、または構造式(SDファイル)のいずれかをご用意ください



Discovery^{CPR}

Custom Packaged Reagents from Sigma-Aldrich puts high throughput back into your chemistry!

When projects demand custom arrays of reagents, Discovery^{CPR} can meet the challenge.

見積りのご依頼やお問い合わせは、弊社テクニカルサポートまで：

sialjpts@sial.com

About Our Cover

表紙の図は、3-ブロモ-2-ヒドロキシベンズアルデヒドの構造を三次元的に表したものです。臭素原子がアルデヒド基に対してオルソゴナルな反応部位となり、鈴木カップリングもしくはStilleカップリング反応によりさらに分子変換が可能です。

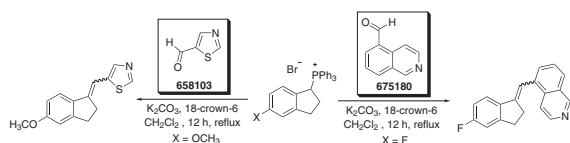
Aldehydes

Hartmannらは、アルドステロンシンターゼ(CYP11B2)の強力な選択的阻害剤となる一連の化合物の合成を報告しました。この反応において鍵となる合成反応段階となったのは、種々のヘテロ環アルデヒド類を用いた Wittig 反応です (Scheme 1)。なかでも、インキノリン付加体は、CYP11B2のきわめて強力な選択的な阻害剤として作用しました。CYP11B2の阻害は、うつ病、心不全や心筋線維症の治療方法の一つとしてかねてから提唱されています¹。

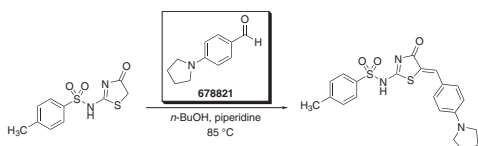
C型肝炎ウイルスのNS5Bポリメラーゼ改良型阻害剤の合成反応において4-(1-ピロリジノ)ベンズアルデヒドが鍵となるビルディングブロックの一つとなることが、最近報告されました (Scheme 2)²。この基質から得られた生成物の力価は、もとのHTSによるリード化合物と比較して有意に改善されました (Figure 1)。

Jørgensen教授のグループは、不安症などの精神障害の治療に用いられるセロトニン再取り込みの選択的阻害剤のひとつである(-)-paroxetineの不斉合成を最近報告しました³。鍵となる反応段階は、有機触媒によるマロン酸ジベンジルのtrans-4-フルオロシナムアルデヒドへの共役付加反応でした (Scheme 3)。同様に、Wangの研究グループは、Jørgensenの有機触媒をMichael-aldolタンデム反応に使い、キラルなチオクロメンを高収率で得ています (Scheme 4)⁴。

References: (1) Ulmschneider, S. et al. *J. Med. Chem.* **2005**, *48*, 1563. (2) Ding, Y. et al. *Bioorg. Med. Chem. Lett.* **2007**, *17*, 841. (3) Brandau, S. et al. *Angew. Chem. Int. Ed.* **2006**, *45*, 4305. (4) Wang, W. et al. *J. Am. Chem. Soc.* **2006**, *128*, 10354.



Scheme 1



Scheme 2

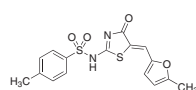
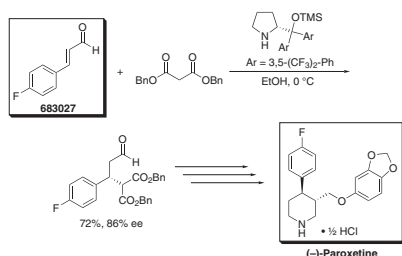
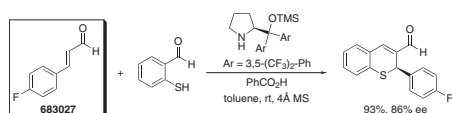


Figure 1



Scheme 3

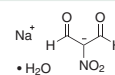


Scheme 4

Sodium nitromalonaldehyde monohydrate, 97%

NEW

C₃H₂NNaO₄ · H₂O
FW 157.06
[34461-00-2]



681253-500MG

500 mg

5-Thiazolecarboxaldehyde, 95%

NEW

C₄H₃NOS
FW 113.14
[1003-32-3]

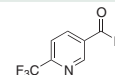


658103-1G

1 g

6-(Trifluoromethyl)pyridine-3-carboxaldehyde, 95%

C₇H₄F₃NO
FW 175.11
[386704-12-7]



640085-1G

1 g

640085-5G

5 g

3-Bromo-2-hydroxybenzaldehyde, 97%

NEW

C₇H₅BrO₂
FW 201.02
[1829-34-1]



674036-1G

1 g

3-Chloro-2-hydroxybenzaldehyde, 97%

NEW

C₇H₅ClO₂
FW 156.57
[1927-94-2]



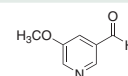
673722-1G

1 g

5-Methoxy-3-pyridinecarboxaldehyde, 96%

NEW

C₇H₅NO₂
FW 139.15
[113118-83-5]



676489-1G

1 g

2-Chloro-6-methylbenzaldehyde, 96%

NEW

C₈H₇ClO
FW 154.59
[1194-64-5]



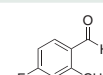
680133-1G

1 g

4-Fluoro-2-methylbenzaldehyde, 97%

NEW

C₈H₇FO
FW 138.14
[63082-45-1]



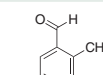
684953-5G

5 g

5-Fluoro-2-methylbenzaldehyde, 96%

NEW

C₈H₇FO
FW 138.14
[22062-53-9]



685003-1G

1 g

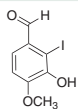
バルク供給/スケールアップのご相談は...

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

3-Hydroxy-2-iodo-4-methoxybenzaldehyde, 97%

NEW

$C_8H_7IO_3$
FW 278.04
[138490-94-5]

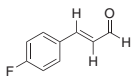


680907-5G 5 g

trans-4-Fluorocinnamaldehyde, 97%

NEW

C_9H_7FO
FW 150.15
[51791-26-5]



683027-500MG 500 mg

Methyl 3-formyl-4-hydroxybenzoate, 97%

NEW

$C_9H_8O_4$
FW 180.16
[24589-99-9]

673706-1G 1 g

Indoline-7-carboxaldehyde, 97%

NEW

C_9H_9NO
FW 147.17
[143262-21-9]



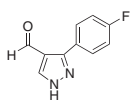
681903-250MG 250 mg

681903-1G 1 g

3-(4-Fluorophenyl)-1H-pyrazole-4-carboxaldehyde, 97%

NEW

$C_{10}H_7FN_2O$
FW 190.17
[306936-57-2]



683272-1G 1 g

Isoquinoline-5-carboxaldehyde, 96%

NEW

$C_{10}H_7NO$
FW 157.17
[80278-67-7]

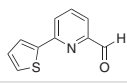


675180-1G 1 g

6-(2-Thienyl)-2-pyridinecarboxaldehyde, 97%

NEW

$C_{10}H_7NOS$
FW 189.23
[208111-00-6]



655767-1G 1 g

655767-5G 5 g

N-Boc-pyrrole-2-carboxaldehyde, 97%

NEW

$C_{10}H_{13}NO_3$
FW 195.22



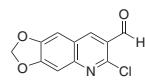
685658-5G 5 g

685658-25G 25 g

6-Chloro[1,3]dioxolo[4,5-g]quinoline-7-carboxaldehyde, 97%

NEW

$C_{11}H_6ClNO_3$
FW 235.62
[332382-81-7]



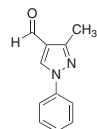
683728-1G 1 g

683728-5G 5 g

3-Methyl-1-phenyl-1H-pyrazole-4-carboxaldehyde, 97%

NEW

$C_{11}H_{10}N_2O$
FW 186.21
[21487-48-9]

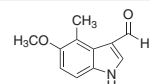


680745-5G 5 g

5-Methoxy-4-methylindole-3-carboxaldehyde, 97%

NEW

$C_{11}H_{11}NO_2$
FW 189.21

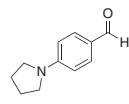


677973-1G 1 g

4-(1-Pyrrolidino)benzaldehyde, 97%

NEW

$C_{11}H_{13}NO$
FW 175.23
[51980-54-2]



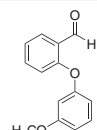
678821-5G 5 g

678821-25G 25 g

2-(3-Methoxyphenoxy)benzaldehyde, 97%

NEW

$C_{14}H_{12}O_3$
FW 228.24
[122283-23-2]



664162-1G 1 g

N-Boc-indoline-7-carboxaldehyde, 97%

NEW

$C_{14}H_{17}NO_3$
FW 247.29
[174539-67-4]

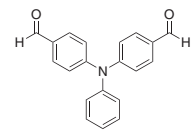


681911-1G 1 g

4,4'-Diformyltriphenylamine, 95%

NEW

$C_{20}H_{15}NO_2$
FW 301.34
[53566-95-3]



680400-1G 1 g

Your work is unique...innovative...groundbreaking

**The New 2008-2009
Sigma Life Science Catalog
is the perfect match**

(Available January 2008)

Thiazoles

2,4-ジブromoチアゾールは、いくつかの興味深い標的物質の合成用ビルディングブロックとして近年利用されることが多くなっています。Bachらは、チアゾールペプチドGE2270 Aのフラグメントを得る反応経路において、このビルディングブロックの位置選択的メタル化反応を報告しました (Scheme 1)¹。

(-)-mycothiazoleのエナンチオ選択的な合成においても、2,4-ジブromoチアゾールの2位の臭素の化学選択的置換反応から出発する経路が検討されました (Scheme 2)²。18段階の反応を経て、総収率5%でラセミ体生成物が得られています。同様に、Panekは、cystothiazole AおよびBの全合成反応において、2,4-ジブromoチアゾールの2位の臭素の位置選択的な根岸クロスカップリング反応を報告しました (Scheme 3)³。

いくつかの研究グループから、種々の阻害剤の合成反応に2-アミノ-4,5,6,7-テトラヒドロベンゾチアゾールを用いた例が報告されています。ごく最近、Kraus, Mainaらは、2-アミノ-4,5,6,7-テトラヒドロベンゾチアゾールを出発材料とする数種のpifithrin-β類縁体を合成しました (Scheme 4)^{4a}。これらの類縁体は強力なp53阻害剤であり、種々の神経変性疾患の治療に有効であると考えられています。

References: (1) Delgado, O. et al. *J. Org. Chem.* **2006**, *71*, 4599. (2) Le Flohic, A. et al. *Org. Lett.* **2005**, *7*, 339. (3) Shao, J.; Panek, J. S. *Org. Lett.* **2004**, *6*, 3083. (4)(a) Pietrancosta, N. et al. *J. Med. Chem.* **2006**, *49*, 3645. (b) Barchéchath, S. D. et al. *J. Med. Chem.* **2005**, *48*, 6409. (c) Costanzo, M. J. et al. *J. Med. Chem.* **2005**, *48*, 1984.

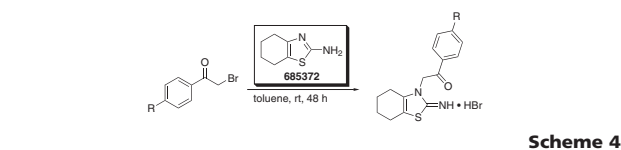
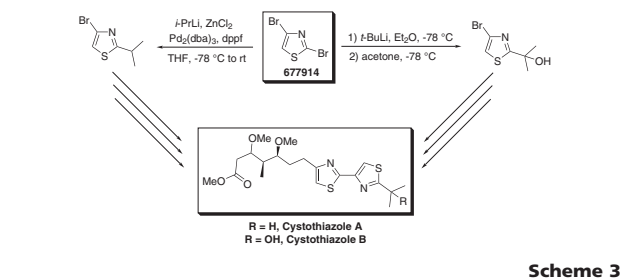
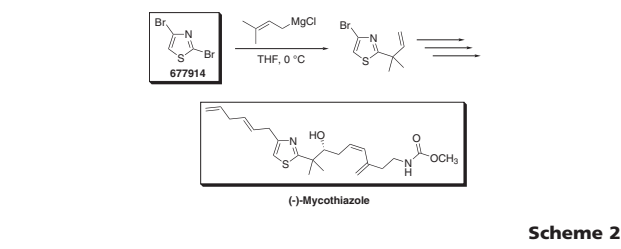
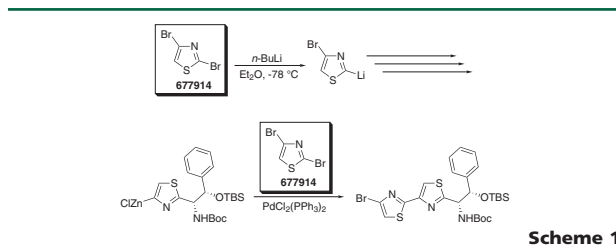
Presenting...

Sigma-Aldrich's ChemBlogs

An industry-first for open scientific discussion.



Visit chemblogs.com.



2,4-Dibromothiazole, 97%

C₃HBr₂NS
FW 242.92
[4175-77-3]

677914-1G 1 g
677914-5G 5 g

5-Bromothiazole, 95%

C₃H₂BrNS
FW 164.02
[3034-55-7]

642517-1G 1 g
642517-5G 5 g

2-Acetamido-5-chlorothiazole, 96%

C₅H₅ClN₂OS
FW 176.62
[20256-39-7]

673129-10G 10 g

2-Amino-4,6-difluorobenzothiazole, 97%

C₇H₄F₂N₂S
FW 186.18
[119256-40-5]

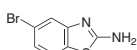
683337-1G 1 g
683337-5G 5 g

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:safcjp@sial.com

2-Amino-5-bromobenzothiazole, 97%

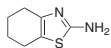
C₇H₆BrN₂S
FW 229.10
[20358-03-6]



647683-1G 1 g
647683-5G 5 g

2-Amino-4,5,6,7-tetrahydrobenzothiazole, 97% NEW

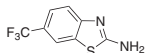
C₇H₁₀N₂S
FW 154.23
[2933-29-1]



685372-500MG 500 mg

2-Amino-6-(trifluoromethyl)benzothiazole, 96% NEW

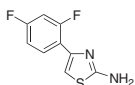
C₈H₅F₃N₂S
FW 218.20
[777-12-8]



683329-1G 1 g

2-Amino-4-(2,4-difluorophenyl)thiazole, 97% NEW

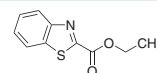
C₉H₆F₂N₂S
FW 212.22



683280-1G 1 g

Ethyl benzothiazole-2-carboxylate, 97% NEW

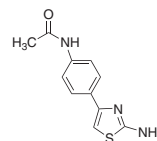
C₁₀H₉NO₂S
FW 207.25
[32137-76-1]



681040-5G 5 g

4-(4-Acetamidophenyl)-2-aminothiazole, 97% NEW

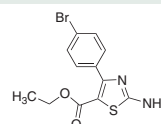
C₁₁H₁₁N₃O₂S
FW 233.29



653527-1G 1 g
653527-5G 5 g

Ethyl 2-amino-4-(4-bromophenyl)thiazole-5-carboxylate, 90% NEW

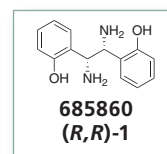
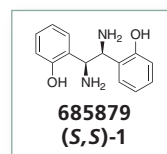
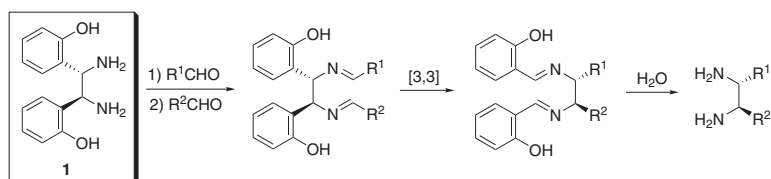
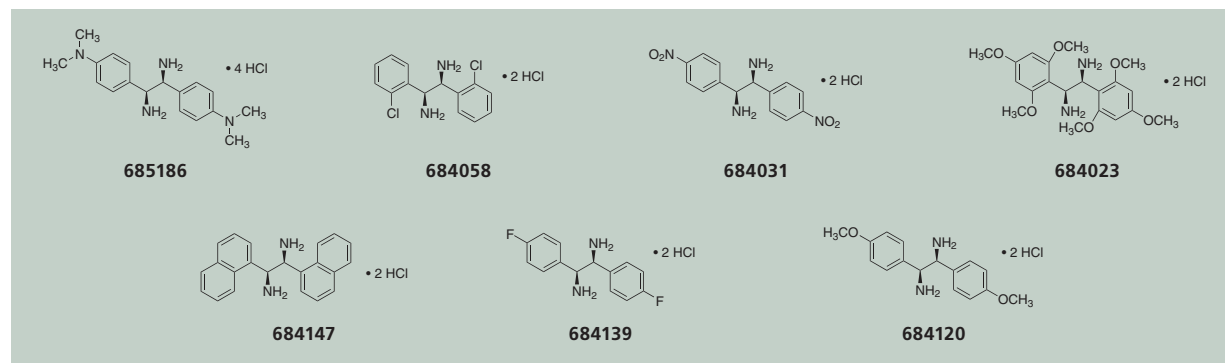
C₁₂H₁₁BrN₂O₂S
FW 327.20



653500-1G 1 g
653500-5G 5 g

NEW Chiral Vicinal Diamines for Asymmetric Synthesis

キラルな隣接ジアミン類は、多数の不斉触媒や医薬品中に見出されるため、合成化学者にとってはきわめて興味深いものです。現時点でこれらのキラルな隣接ジアミン類を合成する一般化された手法はなく、その合成は、とりわけ非対称置換体の場合しばしば挑戦的な課題となっています。Jik Chinらは、親化合物のジアミン (1) を他のキラルな隣接ジアミン類に変換するための予備的な理論および実験研究の一部を最近報告しました¹。これらのジアミン類は、不斉触媒の配位子として利用することもできれば、さらに閉環反応を行ってキラルなヘテロ環やβ-ラクタムを得ることもできます。

**Other NEW Chiral Vicinal Diamines**

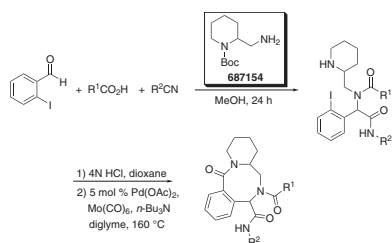
References: (1) (a) Chin, J. et al. *J. Am. Chem. Soc.* **2003**, 125, 15276. (b) Kim, H.-J. et al. *J. Am. Chem. Soc.* **2005**, 127, 16370. (c) Kim, H.-J. et al. *J. Am. Chem. Soc.* **2005**, 127, 16776.

Piperidines

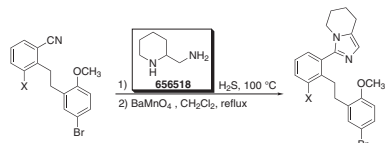
ピペリジンは、多岐にわたる合成法においてビルディングブロックとしての利用が広がっています。1-Boc-2-(アミノメチル)ピペリジンは、post-Ugiカルボニル化/分子内アミド化反応により複数の反応点を有する一連の8員環マクロラクタム化合物を得るのに用いられました(Scheme 1)¹。一方、melanocortin 4レセプターアンタゴニストの合成反応においては、保護化していない類縁体が用いられました(Scheme 2)。これらのアンタゴニストは、非自発的体重減少(involuntary weight loss)の治療に役立つ可能性があります²。

フツ化ピペリジンもまた、医薬品化学の領域で興味が高まってきている物質です。3-および4-フルオロピペリジンは、いずれもジペプチジルペプチダーゼII (DPP II)の選択的阻害剤の合成反応に用いられました(Scheme 3)。特に3-フルオロ類縁体は、力価を損なうことなく、高い選択性を示しました。

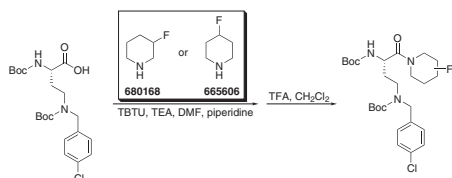
References: (1) Vasudevan, A.; Verzal, M. K. *Tetrahedron Lett.* **2005**, *46*, 1697. (2) Marsilje, T. H. et al. *Bioorg. Med. Chem. Lett.* **2004**, *14*, 3721. (3) Senten, K. et al. *J. Med. Chem.* **2004**, *47*, 2906.



Scheme 1



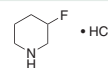
Scheme 2



Scheme 3

3-Fluoropiperidine hydrochloride, 97%

C₅H₁₀FN · HCl
FW 139.60
[116574-75-5]



680168-250MG 250 mg
680168-1G 1 g

4-Fluoropiperidine hydrochloride, 97%

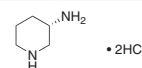
C₅H₁₀FN · HCl
FW 139.60
[57395-89-8]



665606-250MG 250 mg
665606-1G 1 g

(S)-(+)-3-Aminopiperidine dihydrochloride, 96%

C₅H₁₂N₂ · 2HCl
FW 173.08
[334618-07-4]



674109-250MG 250 mg
674109-1G 1 g

(R)-(-)-3-Piperidinecarboxylic acid, 97%

C₆H₁₁NO₂
FW 129.16
[25137-00-2]



656356-1G 1 g
656356-10G 10 g

2-(Aminomethyl)piperidine, 97%

C₆H₁₄N₂
FW 114.19
[22990-77-8]



656518-25G 25 g

1-Trifluoroacetyl piperidine, 97%

C₇H₁₀F₃NO
FW 181.16
[340-07-8]



683035-5G 5 g
683035-25G 25 g

(R)-2-Piperidineethanol hydrochloride, ≥98.0% (GC)

C₇H₁₅NO · HCl
FW 165.66
[787622-24-6]



670057-250MG 250 mg

(S)-2-Piperidineethanol hydrochloride, ≥98.0% (GC)

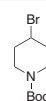
C₇H₁₅NO · HCl
FW 165.66
[786684-21-7]



670170-250MG 250 mg

1-Boc-4-bromopiperidine, 97%

C₁₀H₁₈BrNO₂
FW 264.16
[180695-79-8]



687448-5G 5 g

(R)-1-Boc-3-hydroxypiperidine, 95%

C₁₀H₁₉NO₃
FW 201.26
[143900-43-0]



687278-1G 1 g

(S)-1-Boc-3-hydroxypiperidine, 97%

C₁₀H₁₉NO₃
FW 201.26
[143900-44-1]



687367-1G 1 g

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:safcjp@sial.com

(S)-1-Boc-4-oxopiperidine-2-carboxylic acid, 97% NEWC₁₁H₁₇NO₅
FW 243.26

676322-1G 1 g

N-Boc-piperidine-2-methanol, 97% NEWC₁₁H₂₁NO₃
FW 215.29
[157634-00-9]

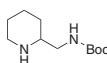
681296-1G 1 g

681296-10G 10 g

N-Boc-piperidine-3-methanol, 97% NEWC₁₁H₂₁NO₃
FW 215.29
[116574-71-1]

681318-1G 1 g

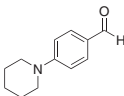
681318-10G 10 g

2-(Boc-aminomethyl)piperidine, 97% NEWC₁₁H₂₂N₂O₂
FW 214.30
[141774-61-0]

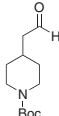
683515-1G 1 g

1-Boc-2-aminomethylpiperidine, 95% NEWC₁₁H₂₂N₂O₂
FW 214.30
[370069-31-1]

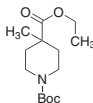
687154-1G 1 g

4-(1-Piperidinyl)benzaldehyde, 97% NEWC₁₂H₁₅NO
FW 189.25
[10338-57-5]

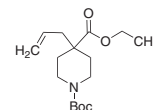
678953-5G 5 g

N-Boc-4-piperidineacetaldehyde, 97% NEWC₁₂H₂₁NO₃
FW 227.30
[142374-19-4]

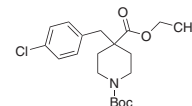
680214-1G 1 g

Ethyl N-Boc-4-methylpiperidine-4-carboxylate, 97% NEWC₁₄H₂₅NO₄
FW 271.35
[189442-87-3]

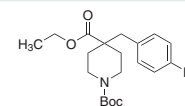
673927-1G 1 g

Ethyl N-Boc-4-allylpiperidine-4-carboxylate, 90% NEWC₁₆H₂₇NO₄
FW 297.39

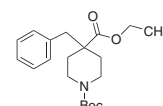
673730-1G 1 g

Ethyl N-Boc-4-(4-chlorobenzyl)piperidine-4-carboxylate, 97% NEWC₂₀H₂₈ClNO₄
FW 381.89

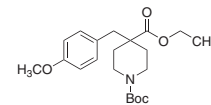
673900-1G 1 g

Ethyl N-Boc-4-(4-fluorobenzyl)piperidine-4-carboxylate, 97% NEWC₂₀H₂₈FNO₄
FW 365.44

673919-1G 1 g

Ethyl N-Boc-4-benzylpiperidine-4-carboxylate, 96% NEWC₂₀H₂₉NO₄
FW 347.45

673749-1G 1 g

Ethyl N-Boc-4-(4-methoxybenzyl)piperidine-4-carboxylate, 97% NEWC₂₁H₃₁NO₅
FW 377.47

673897-1G 1 g

Pyrrolidines

(R)-2-メチルピロリジン基は、最近報告されたいくつかの阻害剤やアンタゴニストに共通する構造単位となってきました。ある研究グループは一連のHIV-1逆転写酵素阻害剤を合成しましたが、このうち最大の阻害活性を示したのは(R)-2-メチルピロリジン誘導体でした(**Figure 1**)¹。別のグループは、nM以下の力価を示す一連のヒスタミンH₃レセプターアンタゴニストの合成に、(R)-2-メチルピロリジンを鍵となるビルディングブロックとして用いました(**Scheme 1**)²。N-Boc-4-オキソ-L-プロリンは最近、キメラアミノ酸残基であるS-プロリン-メチオニン残基の合成反応においてビルディングブロックとして用いられました(**Scheme 2**)³。このアミノ酸残基は一連のN-ホルミルトリペプチド類縁体に取り込まれ、ホルミルペプチドレセプターのアゴニストまたはアンタゴニストとしての活性が分析されています。

1-ベンジル-3-アミノピロリジンは、D₂およびα₁レセプターと比較してD₄レセプターにより高い選択性を示す一連の強力なドーパミンD₄レセプターアンタゴニストを得るために用いられました(**Scheme 3**)⁴。これらのアンタゴニストは、ADHD(注意欠陥多動性障害)、パーキンソン病、および性機能障害など種々の疾患の治療に有望です。

References: (1) Krajewski, K. et al. *Bioorg. Med. Chem. Lett.* **2006**, 16, 3034. (2) Sun, M. et al. *J. Med. Chem.* **2005**, 48, 6482. (3) Mollica, A. et al. *Bioorg. Med. Chem.* **2006**, 14, 2253. (4) Egle, I. et al. *Bioorg. Med. Chem. Lett.* **2004**, 14, 4847.

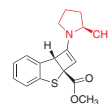
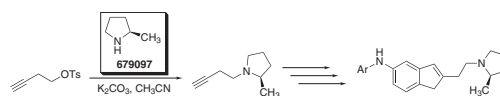
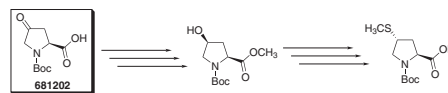


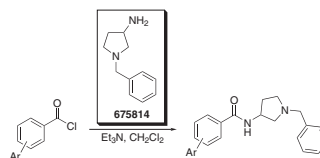
Figure 1



Scheme 1



Scheme 2



Scheme 3

(R)-(-)-2-(Trifluoromethyl)pyrrolidine, 97% NEW

C₅H₈F₃N
FW 139.12
[119618-29-0]



680087-250MG
680087-1G

250 mg
1 g

(S)-(+)-2-Methylpyrrolidine

C₅H₁₁N
FW 85.15
[59335-84-1]



649147-1G

1 g

(R)-(-)-2-Methylpyrrolidine NEW

C₅H₁₁N
FW 85.15
[41720-98-3]



679097-1G

1 g

N-Boc-4-oxo-L-proline, 97% NEW

C₁₀H₁₅NO₅
FW 229.23
[84348-37-8]

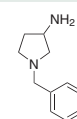


681202-500MG

500 mg

1-Benzyl-3-aminopyrrolidine, 95% NEW

C₁₁H₁₆N₂
FW 176.26
[18471-40-4]



675814-5G

5 g

Monthly Chemistry E-Newsletter
Got ChemNews?
sigma-aldrich.com/chemnews



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:safcjp@sial.com

(S)-(-)-1-Boc-3-acetamidopyrrolidine, 97%

NEW

C₁₁H₂₀N₂O₃
FW 228.29
[114636-37-2]



665088-1G	1 g
665088-5G	5 g

1-Z-3-Pyrrolidinone, 96%

NEW

C₁₂H₁₃NO₂
FW 219.24
[130312-02-6]



661201-1G	1 g
661201-5G	5 g

(R)-N-Boc-2-phenylpyrrolidine

NEW

C₁₅H₂₁NO₂
FW 247.33
[174311-02-5]

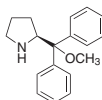


685291-250MG	250 mg
685291-1G	1 g

(S)-2-(Methoxydiphenylmethyl)pyrrolidine, 95% (HPLC)

NEW

C₁₈H₂₁NO
FW 267.37
[118971-03-2]

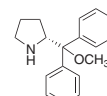


670197-100MG	100 mg
670197-500MG	500 mg

(R)-2-(Methoxydiphenylmethyl)pyrrolidine, 95% (HPLC)

NEW

C₁₈H₂₁NO
FW 267.37

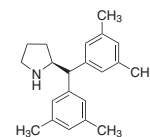


670308-100MG	100 mg
670308-500MG	500 mg

(S)-2-[Bis(3,5-dimethylphenyl)methyl]pyrrolidine, ≥98.0% (HPLC)

NEW

C₁₉H₃₆N₂O₈
FW 420.50
[553638-66-7]

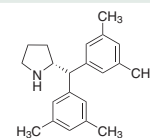


669520-100MG	100 mg
669520-500MG	500 mg

(R)-2-[Bis(3,5-dimethylphenyl)methyl]pyrrolidine, ≥98.0% (HPLC)

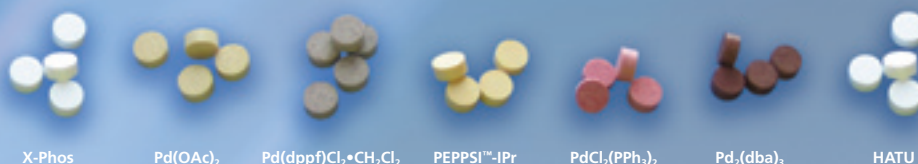
NEW

C₂₁H₂₇N
FW 293.45



670405-100MG	100 mg
670405-500MG	500 mg

ChemDose® 試薬と触媒のタブレット



X-Phos

Pd(OAc)₂Pd(dppf)Cl₂·CH₂Cl₂

PEPPSI™-IPr

PdCl₂(PPh₃)₂Pd₂(dba)₃

HATU

簡単！ 正確！ 迅速！

ChemDose®は、試薬や触媒を錠剤として使用可能にした新しい技術です。Reaxa社との共同開発により実現した約5mm大のタブレットは、化学的に不活性な酸アルミニウム酸マグネシウムのマトリクスに試薬や触媒を吸着させて形成されています。溶媒に加えると、試薬や触媒はただちに溶出し、残った不溶のタブレットは簡単に除去できます。

- 取り扱いが簡便で正確に秤量可能
- mmol, μmol スケールの少量試薬を秤量する煩わしさから解放
- 反応の後処理が簡単：反応終了後に、不活性タブレットは簡単に除去可能
- 反応の迅速な最適化：自動合成とマイクロ波合成に利用可能
- タブレット中の試薬含量の一貫性、制御された溶出速度

詳細は Web サイトをご覧ください

www.sigma-aldrich.co.jp/aldrich/organic/chemdose/

Reference (1) Ruhland, T. et al. *J. Comb. Chem.* **2007**, 9, 301.

PEPPSI is a trademark of Total Synthesis Ltd. (Toronto, Canada). ChemDose is a registered trademark of Reaxa Ltd.

ALDRICH
Chemistry

Sulfonyl Chlorides and Sulfonamides

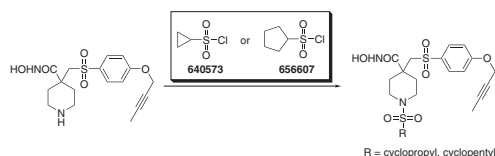
スルホニルクロリドは、ヘテロ環アミンと容易に反応して複雑なスルホンアミドを与えるため、医薬品化学においてしばしばビルディングブロックとして選ばれます。一例として、シクロプロパンスルホニルクロリドとシクロペンタンスルホニルクロリドをビルディングブロックとして用いたTNF- α 変換酵素(TACE)阻害剤の合成反応を示します(**Scheme 1**)¹。シクロプロピル体は、MMP-2およびMMP-13と比較してTACEに対して高い選択性を示しました。

また最近、ヒトのグルココルチコイドレセプター (hGR)リガンドの合成も報告されています²。このスルホンアミドは α -メチルトリプタミンと2,4,5-トリクロロベンゼンスルホニルクロリドから合成され(**Scheme 2**)、hGRへの結合力は μ Mレベルでした。この研究においては、hGRとの効果的な結合においてもスルホンアミド部分がきわめて重要な役割を果たしていることが明らかになりました。

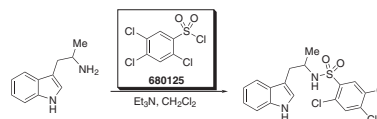
(2-トリメチルシリル)エタンスルホンアミド(SES-NH₂)は、保護した窒素官能基を分子中に直接導入するのに有効であることが明らかになりました。その一例がBolmとMancheñoの研究で、鉄触媒によるスルホキシドのイミノ化反応にSES-NH₂を用いてスルホキシミンを得たと報告しています(**Scheme 3**)³。

Lamatyらは、aza-Baylis-Hillman反応にSES-NH₂を用いて、一連のSES保護化 β -アミノエステルを合成しました。これらの β -アミノエステルにさらに閉環メタセシス反応を行い、2,3-二置換ピロール化合物を得ました(**Scheme 4**)⁴。

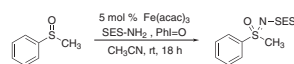
References: (1) Condon, J. S. et al. *Bioorg. Med. Chem. Lett.* **2007**, 17, 34. (2) Marshall, D. R. et al. *Bioorg. Med. Chem. Lett.* **2007**, 17, 315. (3) Mancheño, O. G.; Bolm, C. *Org. Lett.* **2006**, 8, 2349. (4) Declerck, V. et al. *J. Org. Chem.* **2004**, 69, 8372.



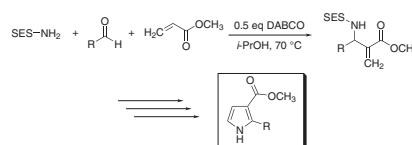
Scheme 1



Scheme 2



Scheme 3

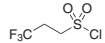


Scheme 4

3,3,3-Trifluoropropane-1-sulfonyl chloride, 95%

NEW

C₃H₄ClF₃O₂S
FW 196.58



680117-250MG

250 mg

Cyclopropanesulfonyl chloride, 95%

C₃H₅ClO₂S
FW 140.59



[139631-62-2]

640573-100MG

100 mg

640573-500MG

500 mg

Cyclopropanesulfonamide

NEW

C₃H₇NO₂S
FW 121.16



[154350-28-4]

674060-1G

1 g

674060-5G

5 g

Cyclopentanesulfonyl chloride, 90%

C₅H₉ClO₂S
FW 168.64



[26394-17-2]

656607-1G

1 g

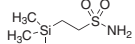
656607-5G

5 g

2-(Trimethylsilyl)ethanesulfonamide, 90%

NEW

C₅H₁₅NO₂SSi
FW 181.33



[125486-96-6]

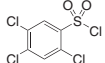
681326-1G

1 g

2,4,5-Trichlorobenzenesulfonyl chloride, 95%

NEW

C₆H₂Cl₃O₂S
FW 279.96



[15945-07-0]

680125-5G

5 g

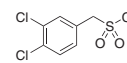
680125-25G

25 g

3,4-Dichlorobenzylsulfonyl chloride, 97%

NEW

C₇H₅Cl₂O₂S
FW 259.54



[85952-30-3]

678627-500MG

500 mg

4-Chlorobenzylsulfonyl chloride, 97%

NEW

C₇H₆Cl₂O₂S
FW 225.09



[6966-45-6]

664774-1G

1 g

2-Chlorobenzylsulfonyl chloride, 97%

NEW

C₇H₆Cl₂O₂S
FW 225.09



[77421-13-7]

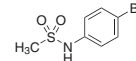
678643-1G

1 g

N-(4-Bromophenyl)methanesulfonamide, 97%

NEW

C₇H₈BrNO₂S
FW 250.11



[4284-50-8]

680508-1G

1 g

680508-10G

10 g

4-Methylbenzylsulfonyl chloride, 96%

NEW

C₈H₉ClO₂S
FW 204.67



[51419-59-1]

664766-1G

1 g

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:safcjp@sial.com

Chemistry サイトの Web カタログ Chem Product Central をクリック!

4万点の有機化学用試薬を用途・構造別に分類

製品名、キーワード、CAS 番号、MDL 番号、分子式その他の検索も、もちろん可能!

Building Blocks

- Organic Building Blocks
- Heterocyclic Building Blocks
- Amino Acid Derivatives
- Unnatural Amino Acid Derivatives
- Monosaccharides
- Nucleosides
- Chiral Building Blocks

Organometallic Reagents

- Boronic Acids and Derivatives
- Grignard Reagents
- Reike and Organozinc Reagents
- Organosilicon
- Organotin
- Organolithium
- Organoaluminum
- Others

Synthetic Reagents

- Coupling
- C-C Bond Formation
- C-X Bond Formation (Halogen)
- C-X Bond Formation (Non-halogen)
- Oxidation
- Reduction
- Protection and Derivatization
- Radical Chemistry
- Phase Transfer Catalysts
- Chelation/Complexation Compounds

Specialty Synthesis

- Peptide Synthesis
- Carbohydrate Synthesis
- Oligonucleotide Synthesis
- Phosphazene Bases
- Organic Bases
- Inorganic Bases
- Inorganic Salts
- Dehydrating Reagents
- Compressed and Liquefied Gases

Asymmetric Synthesis

- Chiral Catalysts, Ligands, and Reagents
- Chiral Auxiliaries
- Chiral Building Blocks
- Chiral Resolution Reagents

Catalysis & Inorganic Chemistry

- All Metals
- Palladium
- Ruthenium
- Rhodium
- Nickel
- Platinum
- Titanium
- Gold
- Silver
- Copper
- Zinc
- Aluminum
- Boron
- Chromium
- Cobalt
- Iridium
- Iron
- Manganese
- Molybdenum
- Osmium
- Rare Earth Metals
- Rhenium
- Tin
- Tungsten
- Vanadium
- Zirconium
- Phosphorus Compounds
- NHC Ligands
- Porphyryns
- Other Ligands
- Metal Scavengers

Ionic Liquids

- Ammonium
- Choline
- Imidazolium
- Phosphonium
- Pyrazolium
- Pyridinium
- Pyrrrolidinium
- Sulfonium

各製品番号ごとに、MSDS、ロット試験成績表、NMR/IR スペクトル、在庫状況、価格を公開しています。

ご不明の点はテクニカルサポートへお気軽にお問い合わせください。

在庫状況と価格をご覧になるには、Your Profile メニューから、1) Web language=Japanese 2) MSDS language=English 3) Country=Japan の3つを選択して Submit してください。(次回よりこの設定が保存されます)

本カタログに掲載の製品及び情報は2007年11月1日現在の内容であり、取扱いの品目、製品情報、価格等は予告なく変更される場合がございますので、予めご了承ください。製品のご注文に際し価格、在庫は弊社カスタマーサービスにお問い合わせください。また、弊社日本語サイト (sigma-aldrich.com/japan) 上で「カタログ訂正」「検索」より、ご確認ください。なお、掲載価格には消費税は含まれておりません。弊社の試薬は試験研究用のみを目指して販売されています。医薬品、家庭用その他試験研究以外の用途には使用できません。

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

