

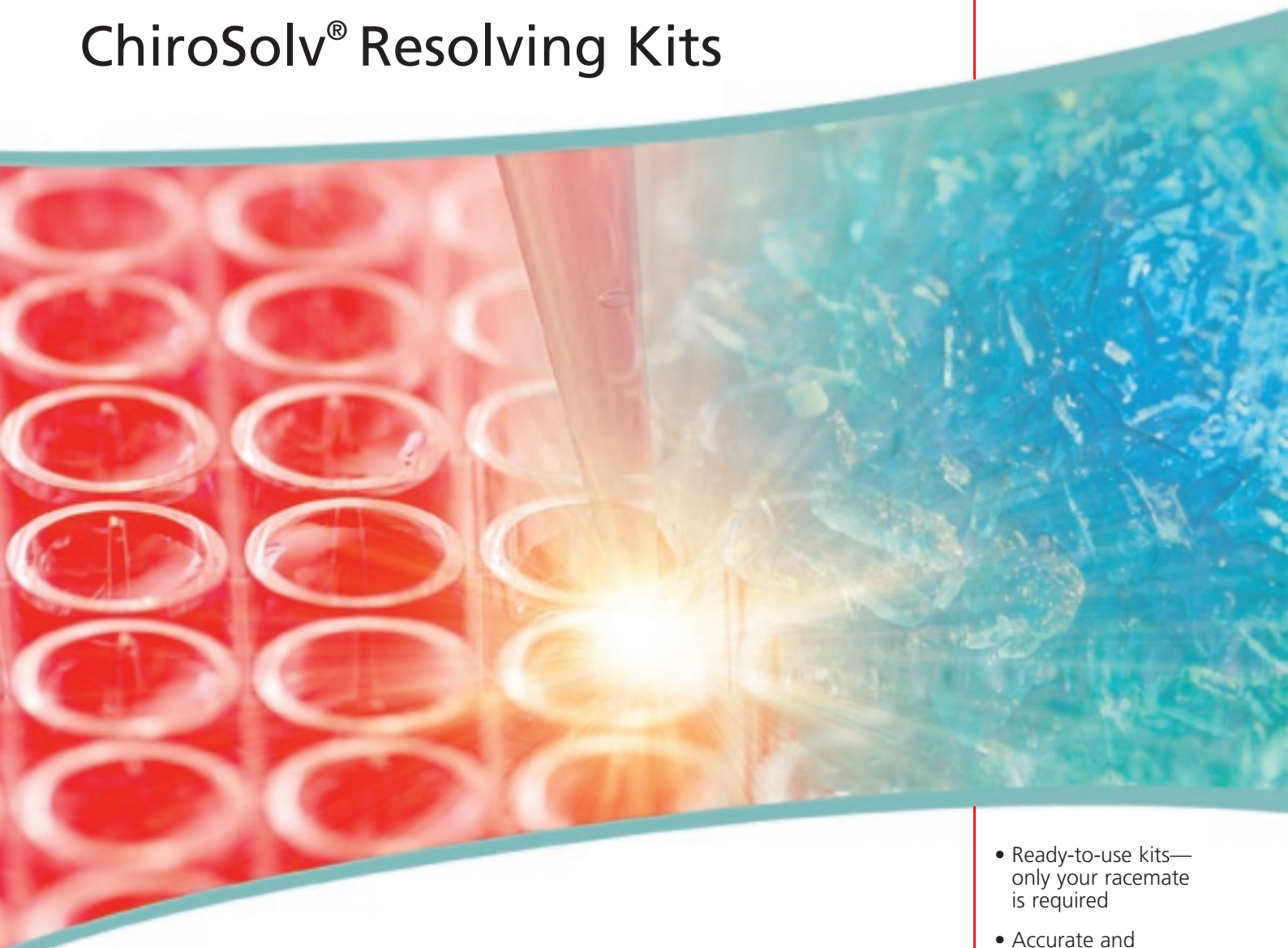
ChemFiles

Supplement I, 2008

 **ALDRICH**
Chemistry

ChiroSolv[®] 光学分割キット

ChiroSolv[®] Resolving Kits



*Sigma-Aldrich and ChiroSolve, Inc.
are partnering to bring facile and
rapid chiral resolution to you.*

- Ready-to-use kits—only your racemate is required
- Accurate and consistent results
- Increased likelihood of project success
- Tremendous time and money savings

SIGMA-ALDRICH[®]

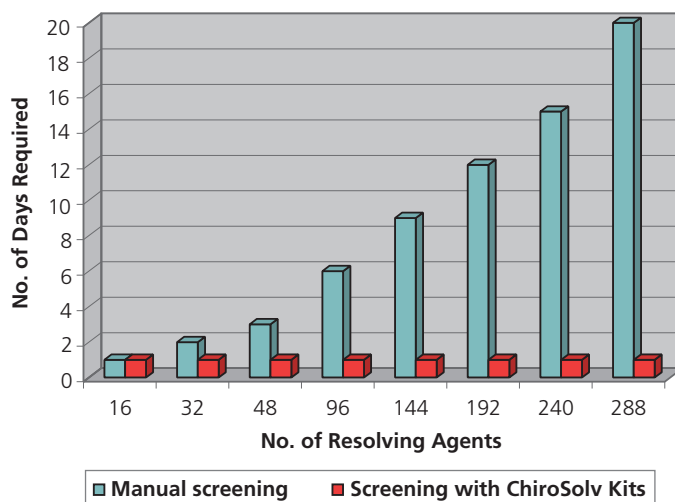
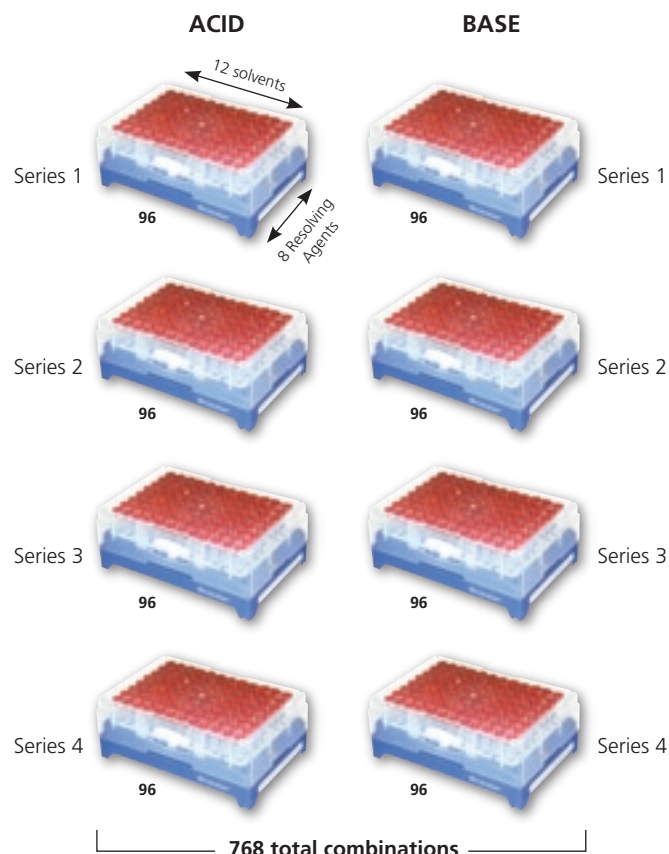
ChiroSolv® Kits 簡単に迅速な光学分割を実現

ChiroSolv® キットは、ラセミ体の光学分割をスクリーニングするための ready-to-use のキットです。分割剤と溶媒の最適な組み合わせを迅速にスクリーニングし、ラセミ体から一方のエナンチオマーを分離するための反応条件の最適化にも役立ちます。酸、塩基、アルコール、アミノ酸、アルデヒド、ケトンなどのラセミ体に利用できます。

キットは Acid シリーズと Base シリーズが各 4 種類あり、それぞれ個別にも販売しています。1 キットは、ハイスループットフォーマットの 96 バイアルから成り、ready-to-use タイプですのでバイアルを取り出す作業は不要です。材質はポリプロピレン製で -20 ~ 120°C の耐熱性があるため、オープン内でも氷浴上でも問題なく使えます。

キットには、固体試料用と液体試料用の 2 つのタイプがあります。液体試料用キットは、異なる分割剤と溶媒の組み合わせが各バイアルに秤量されており、ラセミ体試料を加えるだけでスクリーニングを開始できます。試料が固体の場合には、試料を揮発性溶媒に溶解した溶液を分割剤入りの各バイアルに分注します。この揮発性溶媒を蒸発させた後に、別プレートからスクリーニング用の溶媒を各バイアルに分注します。

製造用途を想定して、分割剤には、比較的安価で分割後の回収率の高いものを選択しています。Acid シリーズ・Base シリーズの全 4 キットにより、単一試料に対して 384 通りの分割剤-溶媒の組み合わせを試験できることとなります。通常は 2 ヶ月近くかかる光学分割の最適化を 24 時間で達成することも可能なハイスループット設計です。



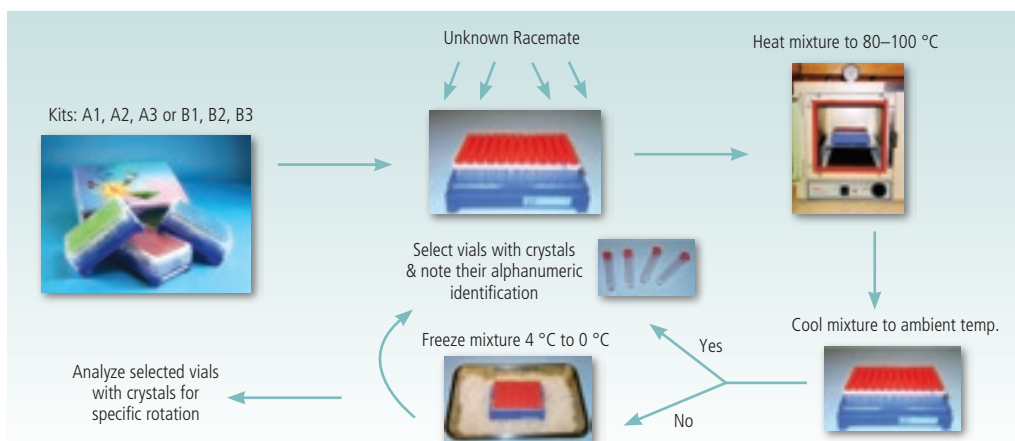
ChiroSolv® の原理

ChiroSolv キットはジアステレオマー塩法を利用しています。ジアステレオマー塩法は、ラセミ体に光学活性な酸または塩基を分割剤として加えてジアステレオマーの塩を生じさせ、化学的にエナンチオマーを分離する手法です。ジアステレオマー塩は互いに化学的・物理的に異なる性質を持っているため、分離が可能です。一見、古典的な技術のようですが、不斉合成、バイオ触媒、酵素分割法、速度論的分割法、キラルクロマトグラフィーなどの新しい技術よりもしばしば現実的な解決策となり、現在でも不斉生成物の 65% がこの手法により工業生産されていると言われています。すべての化合物が錯形成や結晶化するわけではありませんが、製造プロセスへの導入が容易なことから、多くの研究者がまずこの方法を検討し、うまくいかない場合にその他の手法を検討することが多いようです。この手法の主な欠点のひとつは、理想的な分割剤と溶媒の組み合わせの選択に非常に時間と人手がかかることです。

- パロキセチンは、Novo Nordisk の子会社である Ferrosan により開発され、GlaxoSmithKline から発売されている選択的

セロトニン再取り込み阻害剤です。うつ病、不安症、強迫性障害の治療薬として Paxil® の名で塩酸塩が販売されています。(-)-di-*p*-toluoyl-L-tartaric acid を用いて分割されています。

- セルトラリンは中枢神経系においてセロトニン取り込みを阻害する抗うつ剤で、Pfizer から Zoloft® の名で販売されています。(R)-mandelic acid によるジアステレオマーの結晶化が利用されています。
- 2-Amino-5-methoxytetralin は、パーキンソン病治療に有効とされ現在臨床試験中であるドーパミン D₂ アゴニスト N-0923 の合成中間体(長瀬産業)です。この中間体は(S)-mandelic acid によりジアステレオマー塩を形成します。不要の異性体はラセミ化され、再利用されます。
- AG-7404 (Pfizer) の合成において、鍵となる中間体は(-)-norephedrine により分割されています。最終化合物は、ジアステレオマー混合物から酵素分割により得られます。

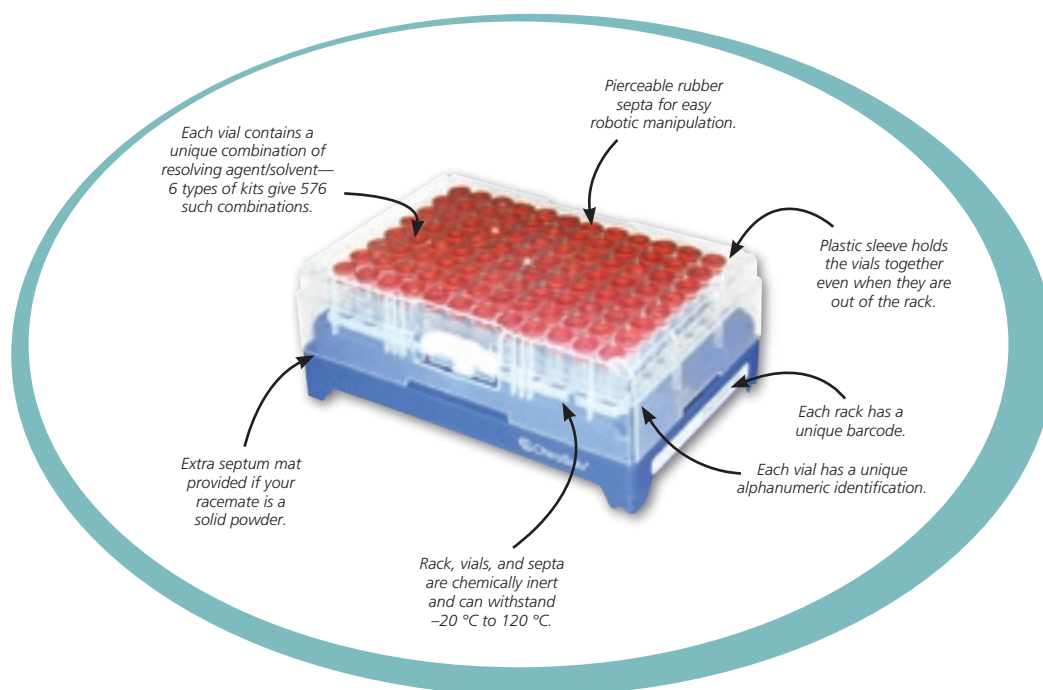


ChiroSolv キットの使い方

- ラセミ体に応じて Acid Series または Base Series のいずれかの正しいキットを選択します。
- ラセミ体がアルコール、アミノ酸、アルデヒド、ケトンの場合、前処理が必要になります。前処理操作については、Web サイト <http://www.chirosolve.com/typesofkit.html> をご覧ください。
- ラセミ体試料 0.03 mmol を 96 well バイアルに加え、自動分注装置を使用したり、ラセミ体の状態(液体・固体)によってはバイアルキャップをはずしてください。キャップは液体分注器から直接注入できるように、穿孔可能です。
- オープンまたは水浴で 80°C または混合液が均一になるまでバイアルラックごと加温します。(これまでのほとんどの試料に対して、80°C が最適温度となっています)
- 室温まで冷却します。必要であれば、4°C もしくは 0°C までさらに冷却し、結晶の析出を観察します。結晶の析出したバイアルは positive として、さらに検討を進めることとなります。
- 器壁をひっかくなどの一般的な結晶化操作によって結晶化することがしばしばあります。このような操作を行っても結晶化が認められない場合は negative とみなせます。
- positive のバイアルをラックから取り外し、バイアル底の記号を記録します。
- ジアステレオマー塩からエナンチオマーを遊離させ、旋光度を測定します。通常、最大の旋光度を与えるのは一つか二つに絞られます。

特徴

- 8種類の ready-to-use のキットにより、分割剤と溶媒の 768 通りの組み合わせを試験できます。
- 1キットあたりに必要なラセミ体試料は 3 mmol と極めて少量です。
- 分割剤の濃度はキャリブレーション済みであり、結晶化を最適化し正確な結果が得られます。
- 穿刺可能なキャップ構造なので、ラセミ体試料の分注が容易です。プラスチック製のバイアルホルダによって、全てのバイアルを一度にラックから取り出せるので、結晶化の確認に便利です。
- わかりやすい取り扱い説明書と結果を記録するチャート付きです。
- ロボット操作に対応した設計です。
- キットとバイアルには識別可能なバーコードやアルファベット - 数字の記号が付いています。
- 室温での保存期間は約 2 年です。



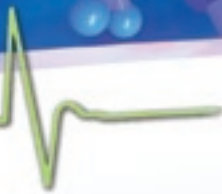
液体試料用

Prod.	No. Prod. Name/Description
681431	ChiroSolv Resolving Kit, Acid Series 1
681423	ChiroSolv Resolving Kit, Acid Series 2
681415	ChiroSolv Resolving Kit, Acid Series 3
699217	ChiroSolv Resolving Kit, Acid Series 4
700363	ChiroSolv Resolving Kit, Complete Acid Series
681407	ChiroSolv Resolving Kit, Base Series 1
681393	ChiroSolv Resolving Kit, Base Series 2
681377	ChiroSolv Resolving Kit, Base Series 3
699241	ChiroSolv Resolving Kit, Base Series 4
700371	ChiroSolv Resolving Kit, Complete Base Series

固体試料用

Prod.	No. Prod. Name/Description
698881	ChiroSolv Resolving Kit, Acid Series 1
699527	ChiroSolv Resolving Kit, Acid Series 2
698873	ChiroSolv Resolving Kit, Acid Series 3
699225	ChiroSolv Resolving Kit, Acid Series 4
700398	ChiroSolv Resolving Kit, Complete Acid Series
699233	ChiroSolv Resolving Kit, Base Series 1
698938	ChiroSolv Resolving Kit, Base Series 2
698946	ChiroSolv Resolving Kit, Base Series 3
698954	ChiroSolv Resolving Kit, Base Series 4
700401	ChiroSolv Resolving Kit, Complete Base Series

詳細は、Web サイト <http://www.sigma-aldrich.co.jp/aldrich/organic/chs/> をご覧ください。
ご不明の点は、テクニカルサポート sialjpts@sial.com へお気軽にお問い合わせください。



試薬の秤量や準備が、 研究のボトルネックになっていませんか？



Sigma-Aldrichのカスタムパッケージ試薬が 研究の生産性を向上させます！

Discovery^{CPR}の特徴

Flexibility：柔軟性！

- ・ Sigma-Aldrichの豊富な試薬に加え、100社を超えるベンダー製品を含めたご希望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）
- ・ ご希望のバイアルタイプ、ラベルやバーコード添付、包装形態が選べます

Efficiency：効率性！

- ・ 在庫がある製品は、ご注文から最短5日でお届けします（品目や本数により異なる場合がございます）
- ・ 試薬をすぐに使用できる状態でお届けします。時間短縮、廃棄削減、生産性拡大に寄与します

Convenience：利便性！

- ・ 過剰在庫が発生せず、在庫管理の必要がありません
- ・ 試薬のワンストップショッピングが可能です
- ・ 試薬の製品番号、CAS/MDL番号リストをいただければ、すぐにお見積りをお返しいたします

テクニカルサポート sialjpts@sial.com へまずはお相談ください。

Aldrichimica Acta

季刊誌 Acta は無料でお届けしています

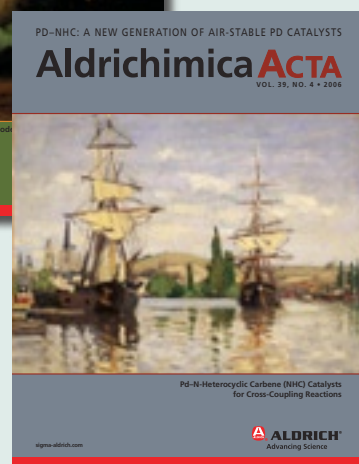
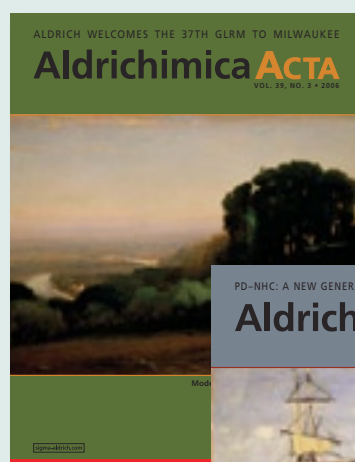
Aldrichimica Acta (アクタ) は、化学者の国際的な研究討論の場として 40 年間にわたり皆様にご愛読いただいております。世界各国の研究者が執筆者となり、主に、有機、有機金属、生物有機、無機化学の合成に関するテーマについて幅広い内容の記事を掲載しています。

Aldrichimica Acta に掲載されているのは専門的な記事・論文ばかりではありません。たとえば実験のちょっとしたコツやアイデアを化学者同士で交換し合う“Lab Notes”のようなコーナーもあります。また、アルドリッチの最新化合物、実験器具、書籍などもご紹介しています。

アクタは年に 3～4 回発行され、現在世界各国 12 万人の研究者の皆様にご愛読いただいております。

アクタをご希望の方、また、過去に発行されたバックナンバーをご覧になりたい方は、下記 URL へアクセスしてください。

<http://www.sigma-aldrich.co.jp/aldrich/acta/>



ChemFiles

最新情報は別冊カタログ ChemFiles にてお知らせします

有機合成およびドラッグディスカバリー関連の技術情報は、別冊カタログ ChemFiles でお知らせしています。触媒、不斉合成、炭素-炭素結合形成といった合成に関するトピックス、ボロン酸、ヘテロ環化合物などのビルディングブロックなど、テーマ別に特集していますので、是非ご活用ください。

ChemFiles は弊社季刊誌 Aldrichimica Acta に読者登録していただいた方にはアクタと一緒にお届けしています。ご希望の方は、上記アクタの登録ページから ChemFiles もお申し込みください。

また、バックナンバーは Web でも公開しています。

Sigma-Aldrich の有機合成サイト www.sigma-aldrich.co.jp/aldrich/organic/chs/ へアクセスしてください。



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

Register for additional site benefits. | Login | Your Profile | Order Center | Search | Oligos & Peptides | Support | Help

Chem Product Central™

Sigma-Aldrich

Catalog Index

Visit the Chemical Synthesis Center - Click Here -

Substructure Search X→Y Reaction Database

Beta Version

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！

<p>Building Blocks</p> <ul style="list-style-type: none"> ▶ Organic Building Blocks ▶ Heterocyclic Building Blocks ▶ Amino Acid Derivatives ▶ Unnatural Amino Acid Derivatives ▶ Monosaccharides ▶ Nucleosides ▶ Chiral Building Blocks 	<p>Organometallic Reagents</p> <ul style="list-style-type: none"> ▶ Boronic Acids and Derivatives ▶ Grignard Reagents ▶ Reike and Organozinc Reagents ▶ Organosilicon ▶ Organotin ▶ Organolithium ▶ Organoaluminum ▶ Others 	<p>Synthetic Reagents</p> <ul style="list-style-type: none"> ▶ 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 	<p>Specialty Synthesis</p> <ul style="list-style-type: none"> ▶ Lewis Acids ▶ Organic Acids ▶ Inorganic Acids ▶ Phosphazene Bases ▶ Organic Bases ▶ Inorganic Bases ▶ Inorganic Salts ▶ Dehydrating Reagents ▶ Compressed and Liquefied Gases 	<p>Asymmetric Synthesis</p> <ul style="list-style-type: none"> ▶ Chiral Catalysts, Ligands, and Reagents ▶ Chiral Auxiliaries ▶ Chiral Building Blocks ▶ Chiral Resolution Reagents 	<p>Catalysis & Inorganic Chemistry</p> <table border="0"> <tr> <td style="vertical-align: top;"> <ul style="list-style-type: none"> ▶ All Metals ▶ Palladium ▶ Ruthenium ▶ Rhodium ▶ Nickel ▶ Platinum ▶ Titanium ▶ Gold ▶ Silver ▶ Copper ▶ Zinc </td> <td style="vertical-align: top;"> <ul style="list-style-type: none"> ▶ Aluminum ▶ Boron ▶ Chromium ▶ Cobalt ▶ Iridium ▶ Iron ▶ Manganese ▶ Molybdenum ▶ Osmium ▶ Rare Earth Metals </td> <td style="vertical-align: top;"> <ul style="list-style-type: none"> ▶ Rhenium ▶ Tin ▶ Tungsten ▶ Vanadium ▶ Zirconium ▶ Phosphorus Compounds ▶ NHC Ligands ▶ Porphyrins ▶ Other Ligands ▶ Metal Scavengers </td> </tr> </table>	<ul style="list-style-type: none"> ▶ All Metals ▶ Palladium ▶ Ruthenium ▶ Rhodium ▶ Nickel ▶ Platinum ▶ Titanium ▶ Gold ▶ Silver ▶ Copper ▶ Zinc 	<ul style="list-style-type: none"> ▶ Aluminum ▶ Boron ▶ Chromium ▶ Cobalt ▶ Iridium ▶ Iron ▶ Manganese ▶ Molybdenum ▶ Osmium ▶ Rare Earth Metals 	<ul style="list-style-type: none"> ▶ Rhenium ▶ Tin ▶ Tungsten ▶ Vanadium ▶ Zirconium ▶ Phosphorus Compounds ▶ NHC Ligands ▶ Porphyrins ▶ Other Ligands ▶ Metal Scavengers 	<p>Ionic Liquids</p> <ul style="list-style-type: none"> ▶ Ammonium ▶ Choline ▶ Imidazolium ▶ Phosphonium ▶ Pyrazolium ▶ Pyridinium ▶ Pyrrolidinium ▶ Sulfonium
<ul style="list-style-type: none"> ▶ All Metals ▶ Palladium ▶ Ruthenium ▶ Rhodium ▶ Nickel ▶ Platinum ▶ Titanium ▶ Gold ▶ Silver ▶ Copper ▶ Zinc 	<ul style="list-style-type: none"> ▶ Aluminum ▶ Boron ▶ Chromium ▶ Cobalt ▶ Iridium ▶ Iron ▶ Manganese ▶ Molybdenum ▶ Osmium ▶ Rare Earth Metals 	<ul style="list-style-type: none"> ▶ Rhenium ▶ Tin ▶ Tungsten ▶ Vanadium ▶ Zirconium ▶ Phosphorus Compounds ▶ NHC Ligands ▶ Porphyrins ▶ Other Ligands ▶ Metal Scavengers 							

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2008年8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。なお、掲載価格には消費税は含まれておりません。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。弊社の試薬は試験研究用のみを目的と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

E-mail: sialjpcs@sial.com

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

お問い合わせは下記代理店へ

