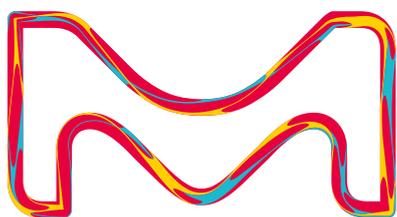


KitAlysis™

ハイスループット触媒スクリーニングキット



The life science
business of Merck
operates as
MilliporeSigma in
the U.S. and Canada.

Sigma-Aldrich®
Lab & Production Materials

KitAlysis

ハイスループット触媒スクリーニングキット

多様な触媒スクリーニングを、迅速に、手軽に、コストダウン

現代の創薬において求められているのは、研究開発のスピードです。触媒技術は進歩しているものの、多様な基質に対して、最適な反応条件を予測することは困難で時間のかかるステップです。また、少量の中間体しか使えない状況で、短期間で膨大なケミカルスペースをカバーしなければならないことも多いのが現実です。

「KitAlysis ハイスループット触媒スクリーニングキット」は、少量の基質で、触媒反応の条件検討を迅速かつ効率的に最適化したい研究者へお勧めするツールです。このキットは、創薬化学で最もよく使用される触媒をセレクトしています。24の異なる反応条件を同時に実施でき、迅速な触媒スクリーニングを実現します。

キットの特長

- 約 100mg の基質で、24 種の異なる反応を同時に実施可能 (1 バイアルあたり 3 – 4 mg の基質を使用)
- 創薬化学で使用頻度の高い触媒、塩基、溶媒をセレクト
- 必要な試薬や器具がすべて含まれている、オールインワンキット
- 専用の KitAlysis イナートボックスがあれば、グローブボックス内での操作は不要
- グローバル製薬企業のメディシナルケミストやプロセスケミストのアドバイスをもとに、キット試薬の選定や反応プロトコルを設計
- 3 バッチ実施する場合、KitAlysis でコストダウン可能



反応ブロックは気密性が高く、高温条件 (<math><150^{\circ}\text{C}</math>) でも使用可能



KitAlysis-イナートボックスがあれば、グローブボックスは不要です

分析用
内部標準物質



攪拌子と秤量済み触媒入りのガラス製バイアル24本

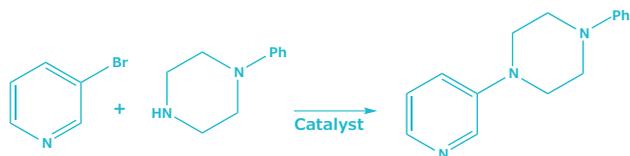


秤量済みの塩基 (Cs_2CO_3 微粉末) と基質用のバイアルと攪拌子

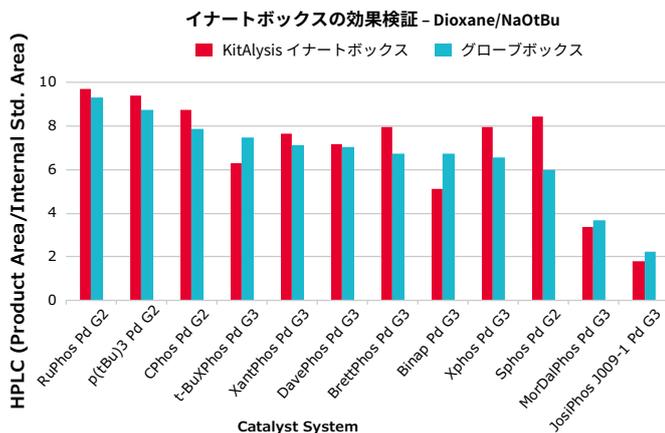


グローブボックスとの比較

以下に示す反応 (Scheme 1) において、KitAlysis イナートボックスとグローブボックスを使用した場合の収率を比較した結果、良好な相関が得られました。



Scheme 1

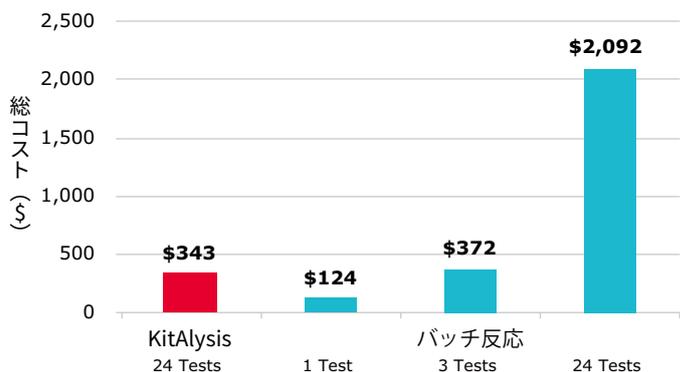


コスト比較

KitAlysis ハイスループット触媒スクリーニングキットを使用した24反応の実施と、通常の反応をコスト比較 (US\$ ベース) した場合、3バッチ実施するならKitAlysisでコストダウンが可能です。

	KitAlysis	バッチ反応のコスト		
	24 Reactions	1 Reaction	3 Reactions	24 Reactions
試薬コスト	—	\$75 ¹	\$225	\$916 ²
人件費 ³	\$98	\$49	\$147	\$1,176
KitAlysis コスト	\$245	—	—	—
コスト合計	\$343	\$124	\$372	\$2,092
コスト削減	\$1,749	—	—	—

1. 最小容量の試薬を新たに購入する場合のコスト
2. キットに含まれる12種の触媒の最小容量を購入した場合のコスト (溶媒と塩基は除く)
3. 実験計画、セットアップ、反応後の分析・評価にかかる時間を1反応は1時間、24反応は2時間として、アメリカ化学会の年取データに基づき人件費を試算 (<http://cen.acs.org/articles/93/i44/American-Chemical-Societys-Members-Earn.html>)



KitAlysis ハードウェア製品

カタログ番号	製品名
Z742108-1KT	KitAlysis 24ウェル反応ブロックとイナートボックスの組合せスターターセット
Z742107-1KT	KitAlysis 24ウェル反応ブロックと専用ドライバーセット
Z742064-1EA	KitAlysis イナートボックス
Z742110-2EA,-4EA	KitAlysis 24ウェル反応ブロック用カバーフィルム
Z744039-1EA	KitAlysis 適合バイアル (96本入り)

専用のスクリードライバー



Sure/Seal™ 無水グレード溶媒と塩基 (液体) はそれぞれアンプル包装されています



キットの使い方を、順を追って紹介!
KitAlysis早わかり動画はこちら
<https://bit.ly/kytalysis-movie>



KitAlysis 反応キット

各反応スクリーニング用のキット製品は、反応に必要な試薬（触媒・溶媒・塩基など）が揃っているオールインワンで、ご用意いただくのは基質のみです。キットに含まれている各触媒やリガンドは単体で試薬製品として販売しているため、スムーズにスケールアップをご検討いただけます。

反応キット製品情報、
プロトコールやスケールアップの
ポイントなど情報満載！

KitAlysisに関する詳細はこちら▼

[www.sigmaaldrich.com/
kitalysis-jp](http://www.sigmaaldrich.com/kitalysis-jp)



反応キットの主な内容物*

- 秤量済み触媒・リガンド
（複数種類、ガラス製バイアル入り、攪拌子つき）
- 溶媒・塩基（複数種類、アンプル入り）
- 反応ブロック用カバーフィルム
- 内部標準物質（Biphenyl）
- 基質分注用バイアル、攪拌子付き

* 反応キットにより、触媒・溶媒・塩基の数や反応補助剤など内容物が異なります。

KitAlysis 反応キット製品一覧

カタログ番号	製品名
KITALYSIS-CN-1KT	KitAlysis Buchwald-Hartwigアミノ化反応キット (4パック入り)
KITALYSIS-SM-4PAK	KitAlysis 鈴木-宮浦クロスカップリング反応キット (4パック入り)
KITALYSIS-RCM-2PAK	KitAlysis (5, 6, 7) 員環 閉環メタセシス反応キット (2パック入り)
KITALYSIS-24PD-2PK	KitAlysis 24Pd触媒前駆体反応キット (2パック入り)
KITALYSIS-CUCN-2PK	KitAlysis 銅C-Nクロスカップリング反応キット (2パック入り)
KITALYSIS-BOR-2PAK	KitAlysis 宮浦ホウ素化反応キット (2パック入り)
KITALYSISBASE-2PK	KitAlysis 塩基スクリーニングキット (2パック入り)

各KitAlysis 反応キットの紹介

Buchwald-Hartwigアミノ化反応キット [カタログ番号:KITALYSIS-CN-1KT]

アミノ化反応キットでは、4パターンのスクリーニングが可能です（触媒各 1 μ mol 秤量済み）。

溶媒 2 種 × 弱塩基 (Cs_2CO_3)

溶媒 2 種 × 強塩基 (NaOtBu)

溶媒 (Dioxane) × 塩基 2 種

溶媒 (DMAc) × 塩基 2 種



アミノ化反応の実施例: 溶媒 2 種 × 強塩基

	1	2	3	4	5	6
A	●	●	●	●	●	●
B	●	●	●	●	●	●
C	●	●	●	●	●	●
D	●	●	●	●	●	●

1. Add to each vial: 100 μ L Dioxane mixture

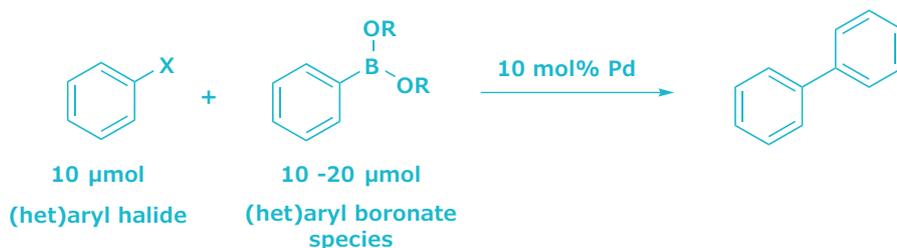
2. Add to each vial: 100 μ L DMAc mixture

3. Add 15 μ L NaOtBu 2M THF solution to all 24vials using pipette

製品名	製品番号	Vial ポジション
BrettPhos Pd G3	761605	A1, C1 ●
CPhos Pd G3	763004	A2, C2 ●
DavePhos Pd G3	804959	A3, C3 ●
P (tBu) ₃ Pd G2	756482	A4, C4 ●
Josiphos SL-J009-1 Pd G3	747130	A5, C5 ●
MorDalPhos Pd G3	792357	A6, C6 ●
rac-BINAP Pd G3	804967	B1, D1 ●
RuPhos Pd G2	753246	B2, D2 ●
SPhos Pd G2	753009	B3, D3 ●
tBuXPhos Pd G3	762229	B4, D4 ●
XantPhos Pd G3	763039	B5, D5 ●
XPhos Pd G3	763381	B6, D6 ●

鈴木-宮浦クロスカップリング反応 [カタログ番号:KITALYSIS-SM-4PAK]

クロスカップリング反応キットでは、触媒 6 種 × 溶媒 4 種のスクリーニングが可能です (触媒各 1 μmol 秤量済み)。



製品名	製品番号	Vial ポジション
XPhos-Pd-G3	763381	A1, B1, C1, D1 ●
SPhos-Pd-G2	753009	A2, B2, C2, D2 ●
cataCXium® A Pd G3	761435	A3, B3, C3, D3 ●
APhos-Pd-G3	764183	A4, B4, C4, D4 ●
P(Cy3)-Pd-G3	764175	A5, B5, C5, D5 ●
PEPPSI-IPENT	732117	A6, B6, C6, D6 ●

(5, 6, 7)員環 閉環メタセシス反応キット [カタログ番号:KITALYSIS-RCM-2PAK]

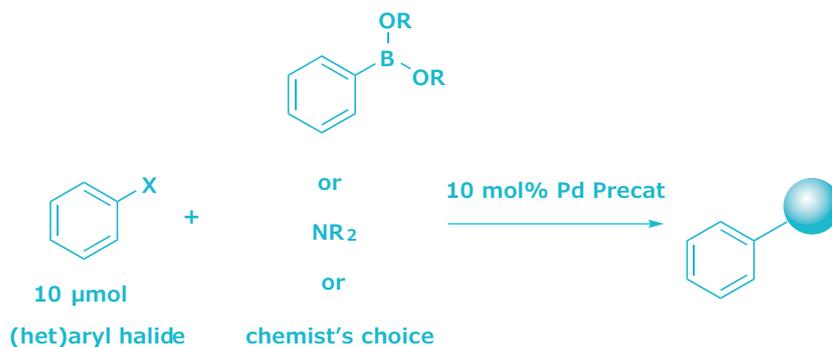
閉環メタセシス反応キットでは、触媒 6 種 × 溶媒 4 種のスクリーニングが可能です (触媒各 1 μmol 秤量済み)。反応オプシオンとして添加する TFA もキットに含まれています。



製品名	製品番号	Vial ポジション
Grubbs Catalyst™ 2nd Generation	569747	A1, B1, C1, D1 ●
Hoveyda-Grubbs Catalyst™ 2nd Generation	569755	A2, B2, C2, D2 ●
Grubbs Catalyst™ C571	682373	A3, B3, C3, D3 ●
Grubbs Catalyst™ C711	729345	A4, B4, C4, D4 ●
Grubbs Catalyst™ 1st Generation	579726	A5, B5, C5, D5 ●
Grubbs Catalyst™ C827	682365	A6, B6, C6, D6 ●

24Pd触媒前駆体反応キット [カタログ番号:KITALYSIS-24PD-2PK]

24Pd 触媒前駆体反応キットでは、触媒 24 種を用いて、鈴木-宮浦反応、Buchwald-Hartwig 反応、根岸反応、菌頭反応、Heck 反応などのスクリーニングが可能です (触媒各 1 μmol 秤量済み)。



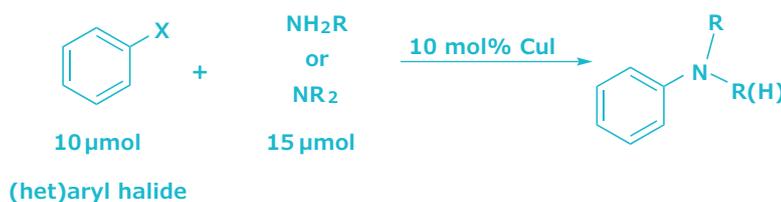
		触媒 24 種					
		1	2	3	4	5	6
A		●	●	●	●	●	●
B		○	○	○	○	○	○
C		●	●	●	●	●	●
D		○	○	○	○	○	○

製品名	製品番号	Vial ポジション
AdBrettPhos Pd G3	776106	A01 ●
APhos Pd G3	764183	A02 ●
rac-BINAP-Pd-G3	804967	A03 ●
BrettPhos Pd G4	804355	A04 ●
cataCXium® A Pd G3	761435	A05 ●
CPhos Pd G3	763004	A06 ●
CyJohnPhos Pd G3	900621	B01 ○
DavePhos-Pd-G3	804959	B02 ○
DPPF Pd G3	804983	B03 ○
JackiePhos Pd G3	762830	B04 ○
Josiphos SL-J009-1 Pd G3	747130	B05 ○
meCgPPH Pd G3	762822	B06 ○

製品名	製品番号	Vial ポジション
Me4tBuXPhos Pd G3	900620	C01 ●
MorDalphos Pd G3	792357	C02 ●
P(Cy3) Pd G3	764175	C03 ●
P(t-Bu)3 Pd G2	756482	C04 ●
Pd-PEPPSI™-IPent catalyst	732117	C05 ●
RuPhos Pd G4	804290	C06 ●
SPhos Pd G4	804282	D01 ○
tBuBrettPhos Pd G3	745979	D02 ○
tBuXPhos Pd G3	762229	D03 ○
XantPhos Pd G3	763039	D04 ○
XPhos Pd G4	804274	D05 ○
PdCl2(PPh3)2	412740	D06 ○

銅C-Nクロスカップリング反応キット [カタログ番号:KITALYSIS-CUCN-2PK]

銅 C-N クロスカップリング反応キットでは、リガンド 6 種×溶媒 4 種のスクリーニングが可能です (リガンド各 4 μmol 秤量済み)。銅ソースとして CuI もキットに含まれています。



		触媒 6 種					
		1	2	3	4	5	6
A		●	●	●	●	●	●
B		●	●	●	●	●	●
C		●	●	●	●	●	●
D		●	●	●	●	●	●

溶媒 4 種

製品名	製品番号	Vial ポジション
2,6-Dimethylanilino(oxo)acetic acid	806412	A1, B1, C1, D1 ●
2,6-Dimethoxyanilino(oxo)acetic acid	806455	A2, B2, C2, D2 ●
2,6-Difluoroanilino(oxo)acetic acid	806439	A3, B3, C3, D3 ●
2,3,4,5,6-Pentafluoroanilino(oxo)acetic acid,	806447	A4, B4, C4, D4 ●
3,5-Bis(trifluoromethyl)anilino(oxo)acetic acid	806420	A5, B5, C5, D5 ●
2-Fluoro-6-(piperidine-1-sulfonyl)anilino(oxo)acetic acid	805491	A6, B6, C6, D6 ●

宮浦ホウ素化反応キット [カタログ番号:KITALYSIS-BOR-2PAK]

ホウ素化反応キットでは、触媒 6 種×溶媒 4 種のスクリーニングが可能です (触媒各 1 μmol 秤量済み)。ホウ素化試薬としてビス (ピナコラート) ジボロン、テトラヒドロキシジボロンもキットに含まれています。



		触媒 6 種						
		1	2	3	4	5	6	
溶媒 4 種	A	●	●	●	●	●	●	
	B	●	●	●	●	●	●	
	C	●	●	●	●	●	●	
	D	●	●	●	●	●	●	

製品名	製品番号	Vial ポジション
SPhos Pd G4	804282	A1, B1, C1, D1 ●
XPhos Pd G4	804274	A2, B2, C2, D2 ●
CataCXium Pd G4	900349	A3, B3, C3, D3 ●
RuPhos Pd G4	804290	A4, B4, C4, D4 ●
P (Cy ₃) Pd G3	764175	A5, B5, C5, D5 ●
DTBPF Pd G	804975	A6, B6, C6, D6 ●

光レドックス触媒反応もKitAlysis

光レドックス触媒反応におけるスクリーニングに対応した、Photo KitAlysis™ の取扱いもございます。光源はスターターキットに含まれる青色光 (470nm) の他、オプションとして緑色光 (527nm) や白色光に変更可能!

※ 反応ブロックは、スターターキットに含まれる光レドックス触媒反応専用のものをご使用下さい。

カタログ番号	製品名
KITALYSIS-PHO-2PK	Photo KitAlysis High-Throughput Reaction Screening Kit
Z742612-1KT	Photo KitAlysis Starter Kit: LED Photoreactor Controller with Blue LED Array and 24-well reaction block for LED and screwdriver for LED array
Z742608-1EA	Photo KitAlysis 24-Green LED Array
Z742609-1EA	Photo KitAlysis 24-White LED Array
Z742064-1EA	KitAlysis Benchtop Inertion Box



Photo KitAlysisを含む、光レドックス触媒反応関連製品はこちら

www.sigma-aldrich.com/photocatalysis-jp



ご存知ですか？ シグマ アルドリッチの試薬は バルク供給が可能です



- 研究用試薬のカatalog掲載品と同様の約 25 万品目を、ニーズに合わせた容量と品質にてお届けします
- バルク価格としてコストダウンのご提案をいたします（一部製品を除く）
- Catalog掲載最大容量の 20 倍よりバルクのご相談が可能です
- 供給製品については品質プログラム M-Clarity™ に基づいて、各種ドキュメントや品質情報提供、監査対応などサポート致します。

※品質プログラム M-Clarity の詳細はこちらから資料をダウンロードください。

<https://bit.ly/3hVM0Eg>



バルクのお問い合わせはこちら

バルク専用メールアドレス：
mj_bulk@merckgroup.com

お問い合わせの際は下記を記載いただけますとスムーズです

- 用途 (原料用、研究用) ● Catalog番号
- 数量 ● ご希望の納期 ● ご予算



サイエンス系
お役立ちメディア
M-hub



かんたんCatalog検索
**カタログ
ファインダー**



メルクライフサイエンス - メールニュース
www.merckmillipore.com/wm



メルクライフサイエンス公式
SNS、動画コンテンツをご覧ください。

本紙記載の製品は試験・研究用です。ヒト、動物への治療、もしくは診断目的として使用しないようご注意ください。掲載価格は希望販売価格（税別）です。実際の価格は弊社製品取扱販売店へご確認ください。なお、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。予めご了承ください。記載内容は2020年9月時点の情報です。Merck, the vibrant M, and Sigma-Aldrich are trademarks of Merck KGaA, Darmstadt, Germany or its affiliates. All other trademarks are the property of their respective owners. Detailed information on trademarks is available via publicly accessible resources. ©2020 Merck KGaA, Darmstadt, Germany. All rights reserved.

シグマ アルドリッチ ジャパン リサーチ事業部

〒153-8927 東京都目黒区下目黒 1-8-1 アルコタワー 5F

製品の最新情報はこちら www.sigmaaldrich.com/japan

製品に関するお問い合わせは、テクニカルサービスへ

E-mail: jpts@merckgroup.com Tel: 03-6756-8245

在庫照会・ご注文に関するお問い合わせは、カスタマーサービスへ

E-mail: sialjpcs@merckgroup.com Tel: 03-6756-8275 Fax: 03-6756-8301

シグマ アルドリッチ ジャパン合同会社はメルクのグループ会社です。

CHM083-2009-2K-E