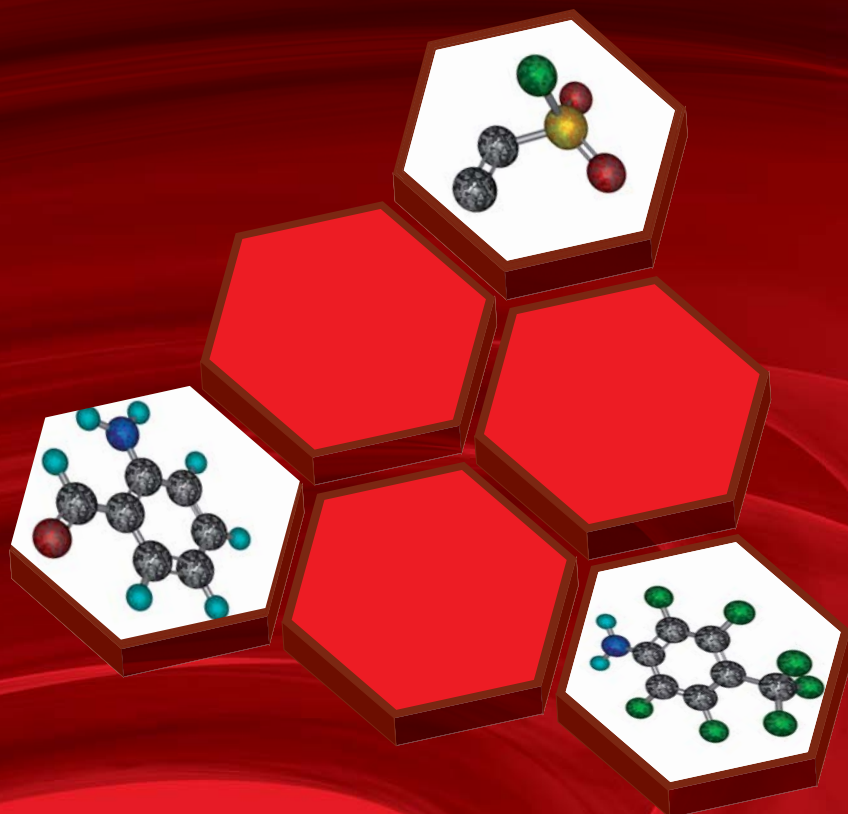




テクノロジー ハイライト
2015 Vol.1, No.1

Add **Aldrich**TM

C-H 活性化反応に有用な Yu-Wasa 補助剤

Li-Yu 配位子

スルホニルフルオリド (SuFEx)

新規フッ素化剤 PhenoFluorTM

Stahl 酸化試薬

不斉アシル化反応用有機触媒 (HBTM)

簡便で選択的な塩素化剤 Palau'ChlorTM

SAJ1942

C-H 活性化反応

近年、C-H 活性化反応の進展は目覚しく、C(sp²)-H 結合の活性化については、多くの配位子-金属の触媒系が報告されています。一方、立体障害の大きな C(sp³)-H の活性化手法は今後の検討課題として新規合成手法の開発が求められています。

本号では、最近の C-H 活性化反応のハイライトとして、Jin-Quan Yu 研究室で開発されたテクノロジー 2 例、C(sp³)-H 結合活性化のための Yu-Wasa 補助剤と Li-Yu キノリン配位子をご紹介します。

C(sp³)-H 活性化のための Yu-Wasa 補助剤

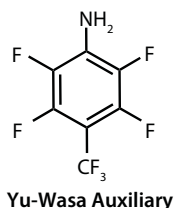
はじめに

立体障害の大きな C(sp³)-H の活性化手法は報告例が少なく、パラジウム触媒へ強く配位するホスフィンやピリジン補助剤を用いる方法が知られています。しかし、この場合、C-H 結合へのパラジウムの挿入効率が低下してしまうことが課題でした。

近年、Jin-Quan Yu らにより開発された Yu-Wasa 補助剤 (製品番号 **791806**) は弱配位の *N*-アリールアミド補助剤で、環状および非環状 β-メチレン C(sp³)-H 結合の活性化が改善されています。

利点

Yu-Wasa 補助剤はその Pd 触媒への弱配位性により、基質-触媒錯体の配座が最適化され、C(sp³)-H 結合へ金属が効果的に挿入されます。Pd(II)/Pd(0)、Pd(II)/Pd(IV)、Pd(0)/Pd(II) など、異なる触媒サイクルの広範囲な転換反応に利用可能で汎用性が高いことが利点です。Yu 研究室では、低分子医薬品や生物活性ペプチドの有用な中間体ビルディングブロックである非天然アミノ酸の合成に適用しました。安価に入手可能なアラニンを出発物質として、アリール化、オレフィン化、アルキル化、アルキニル化により多種多様な非天然アミノ酸合成を達成しています。



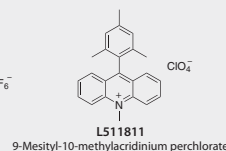
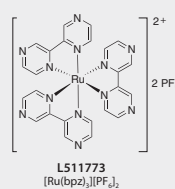
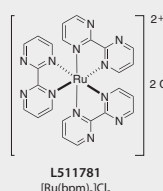
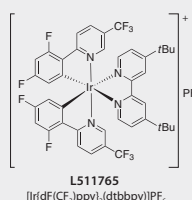
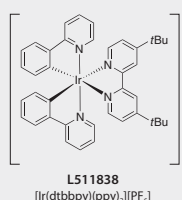
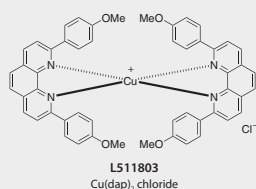
可視光応答型光触媒

ラジカル反応を利用した有機合成は古くから研究され、数多くの反応がこれまでに開発されてきました。しかし、毒性のあるラジカル開始剤を紫外光照射下で当量あるいはそれに近い量を使うことが多く、安全性やエネルギーの観点で課題があります。近年、可視光によりラジカルを発生する遷移金属錯体と有機触媒が数多く開発され、新たな化学変換反応が報告されています。

- 可視光で活性化可能
- 触媒量で反応が進行
- 新たな合成手法

Stephenson, Yoon 研究室の研究成果はアルドリッチの Web サイトで紹介しています

Aldrich.com/prof-prod-portal

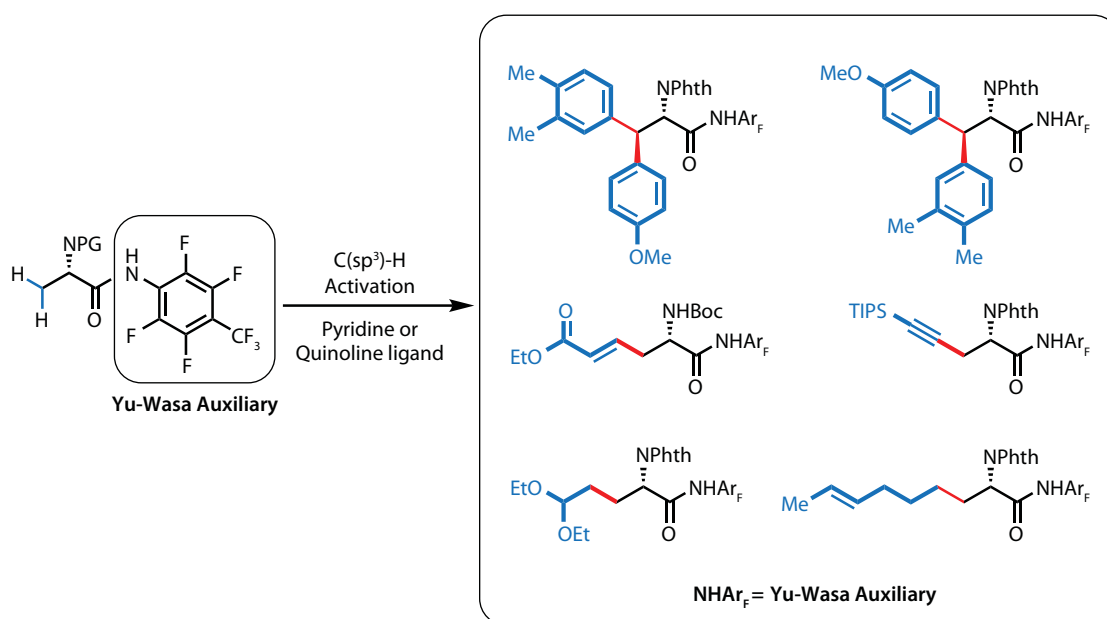


光触媒の製品一覧は Web をご覧ください

Aldrich.com/photocatalysis

主な利用例

Yu-Wasa 補助剤は非天然アミノ酸合成に限らず、他のカルボン酸の多様な誘導体合成にも有用です。



製品リスト

Product Description	Prod. No.
Yu-Wasa Auxiliary 97%	791806-1G 791806-10G

References

- (1) Wasa, M.; Chan, K.S.L.; Zhang, X.-G.; He, J.; Miura, M.; Yu, J.-Q. *J. Am. Chem. Soc.* **2012**, *134*, 18570.
- (2) He, J.; Li, S.; Deng, Y.; Fu, H. Laforteza, B.N.; Spangler, J.E.; Homs, A.; Yu, J.-Q. *Science* **2014**, *343*, 1216.
- (3) Zhu, R.-Y.; He, J.; Wang, X.-C.; Yu, J.-Q. *J. Am. Chem. Soc.* **2014**, *136*, 13194.

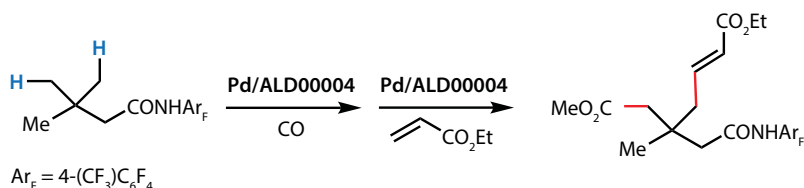
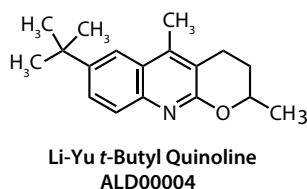
Pd 触媒 C-H 活性化反応のためのキノリン配位子

はじめに

Pd 触媒 C-H 活性化反応は、生物活性分子に官能基を導入するための有力な手法ですが、C(sp³)-H 結合の活性化にはまだ課題が残されています。金属触媒の反応性や選択性は配位子に左右されるため、これらの変換反応には配位子の選択とチューニングが重要です。最近、これまでに報告された配位子よりも高効率なキノリン系配位子（製品番号 **ALD00004** および **ALD00002**）が Jin-Quan Yu 研究室で開発されました。

利点

Yu らのキノリン系配位子は、様々な変換反応に適用可能です。たとえば、Li-Yu *t*-ブチルキノリンは γ -C(sp³)-H 結合を活性化し、オレフィン化、アリール化およびアルキル化に適しています。



試薬のさらさらをキープ！ Redi-Dri™

固体試薬を使おうとしたら、固まっていた困った！ —— こんな経験はありませんか？

吸湿を防ぐ新ボトル「Redi-Dri」なら、無機塩類などの固体を吸湿から防ぎ、長期間にわたり、試薬の「さらさら」をキープします。

Redi-Dri おすすめ製品

Prod. No.	Description
746398	Sodium chloride, anhydrous, free-flowing, Redi-Dri, ACS reagent, ≥99% 500g ¥1,100
746436	Potassium chloride, anhydrous, free-flowing, Redi-Dri, ACS reagent, ≥99% 500g ¥1,600
793523	Zinc chloride, anhydrous, free-flowing, Redi-Dri, reagent grade, ≥98% 500g ¥3,100
791776	Potassium carbonate, anhydrous, free-flowing, Redi-Dri, ACS reagent, ≥99% 500g ¥3,200
746452	Magnesium sulfate, anhydrous, free-flowing, Redi-Dri, ReagentPlus®, ≥99.5% 500g ¥2,600
791768	Sodium carbonate, anhydrous, free-flowing, Redi-Dri, ACS reagent, ≥99.5% 500g ¥1,400
746363	Sodium sulfate, anhydrous, free-flowing, Redi-Dri, ACS reagent, ≥99% 500g ¥1,300
792519	Sodium bicarbonate, anhydrous, free-flowing, Redi-Dri, ACS reagent, ≥99.7% 500g ¥1,400
746495	Calcium chloride, anhydrous, free-flowing, Redi-Dri, ≥97% 500g ¥2,600
791725	Citric acid, anhydrous, free-flowing, Redi-Dri, ACS reagent, ≥99.5% 500g ¥1,800

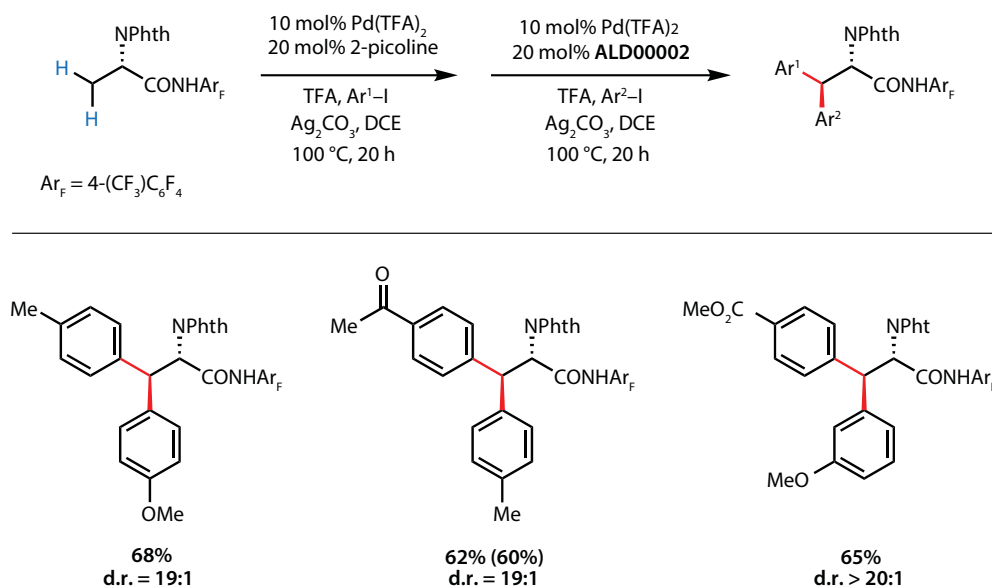
さらさらをキープする Redi-Dri の製品一覧は Web をご覧ください

Aldrich.com/japan/chemistry/redi-dri.html



利用例

さらに、Li-Yu キノリンはメチレン結合の活性化を促進し、 β -C(sp³)-H 結合の連続的アリール化を可能にします。 β -アリール- α -アミノ酸の合成にも成功しています。



製品リスト

Product Description	Prod. No.
Li-Quinoline Ligand	ALD00002-1G
Li-Yu <i>t</i> -Butyl Quinoline 95%	ALD00004-1G

References

- (1) Li, S.; Chen, G.; Feng, C.-G.; Gong, W.; Yu, J.-Q. *J. Am. Chem. Soc.* **2014**, 136, 5267.
- (2) He, J.; Li, S.; Deng, Y.; Fu, H.; Laforteza, B.N.; Spangler, J.E.; Homs, A.; Yu, J.-Q. *Science*. **2014**, 343, 1216.

Jin-Quan Yu 研究室で開発された試薬は、Web でご覧ください

Aldrich.com/yu

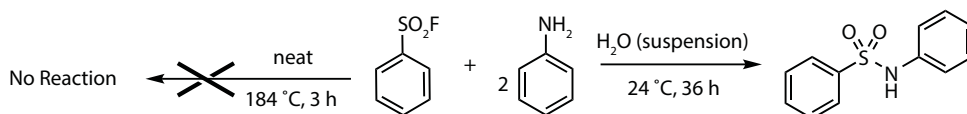
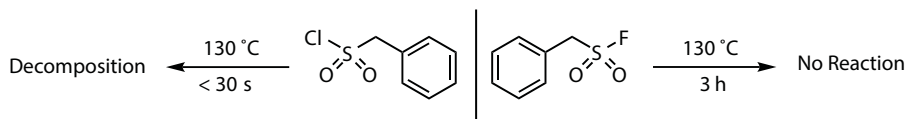
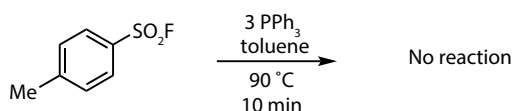
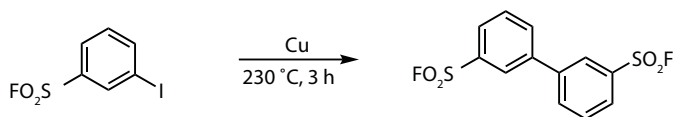
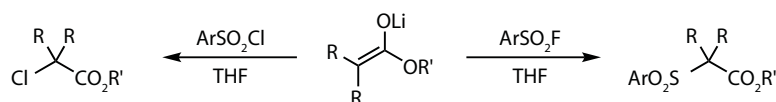
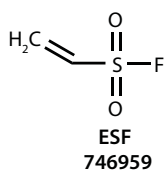
SuFEx: 次世代クリック反応に利用可能な スルホニルフルオリド

-SO₂F 基を容易に導入できる ESF

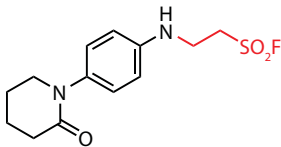
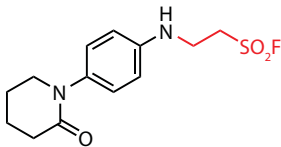
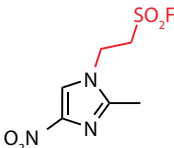
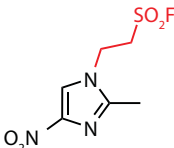
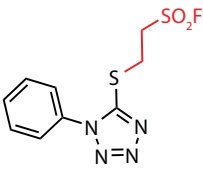
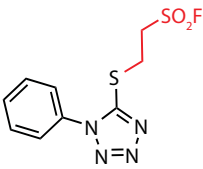
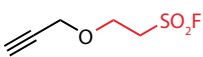
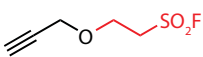
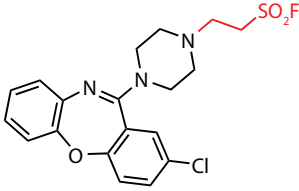
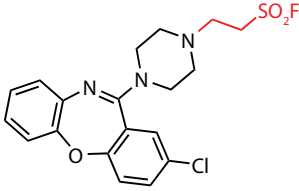
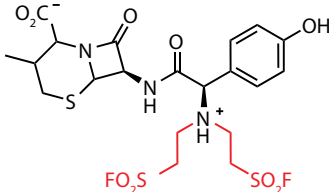
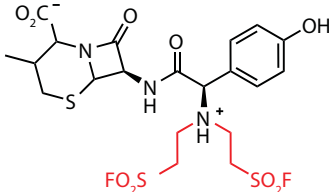
はじめに

次世代クリック反応の手法として K. Barry Sharpless らにより硫黄-フッ素交換反応 (SuFEx) の有用性が提案されています。スルホニルフルオリド類 (R-SO₂F) は反応性が高く、スルホニル化体のみを化学選択的に与えます。相当する塩化物 (R-SO₂Cl) と比べ、酸化・還元反応、高温反応など様々な条件下で使用でき、水中でも反応が進行するなどの利点があります。極めて安定で、アニリン中での加熱還流も可能です。

エテニルスルホニルフルオリド ESF (製品番号 **746959**) は、求核剤に対する Michael アクセプターとなり -SO₂F 基を容易にリード化合物へ導入できるため、創薬化学やケミカルバイオロジー分野で有用です。



主な利用例

Nucleophile	ESF	Product	Yield
			99%
			91%
			71%
			60%
			100%
			86%

References

- (1) Dong, J.; Krasnova, L.; Finn, M.G.; Sharpless, K.B. *Angew. Chem. Int. Ed.* **2014**, 53, 9430.
- (2) Krutak, J.J.; Burpitt, R.D.; Moore, W.H.; Hyatt, J.A. *J. Org. Chem.* **1979**, 44, 3847.

Sharpless 研究室で開発された試薬は Web でご覧ください。

Aldrich.com/sharpless

製品リスト

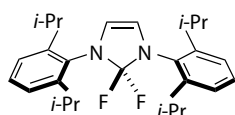
Product Description	Prod. No.
4-(Acetylamino)benzenesulfonyl fluoride 95%	ALD00176-1G ALD00176-10G
1,3-Benzenedisulfonyl fluoride 95%	ALD00172-1G ALD00172-10G
[1,1'-Biphenyl]-4-sulfonyl fluoride 95%	ALD00126-1G ALD00126-10G
4-Bromo-benzenesulfonyl fluoride 95%	ALD00146-250MG ALD00146-1G ALD00146-10G
4-Bromo-2-fluorobenzenesulfonyl fluoride 95% (NMR)	ALD00224-1G ALD00224-10G
5-Bromo-2-methoxybenzenesulfonyl fluoride 95%	ALD00058-1G ALD00058-10G
2-Chlorobenzenesulfonyl fluoride 95%	ALD00192-1G ALD00192-10G
4-Chlorobenzenesulfonyl fluoride 95%	ALD00128-1G ALD00128-10G
2-Chloro-5-fluorosulfonyl-4-fluorobenzoic acid 95%	ALD00204-1G ALD00204-10G
4-Chloro-3-nitrobenzenesulfonyl fluoride 95% (HPLC)	ALD00052-1G ALD00052-10G
5-Chloro-2-thiophenesulfonyl fluoride 95%	ALD00158-1G ALD00158-10G
2-Cyanobenzenesulfonyl fluoride	ALD00190-1G ALD00190-10G
3-Cyanobenzenesulfonyl fluoride 95%	ALD00214-1G ALD00214-10G
4-Cyanobenzenesulfonyl fluoride 98% (GC)	ALD00096-1G ALD00096-10G
2,5-Dibromobenzenesulfonyl fluoride 95%	ALD00054-1G ALD00054-10G
2,5-Dichlorobenzenesulfonyl fluoride 95% (GC)	ALD00060-1G ALD00060-10G
3,4-Dichlorobenzenesulfonyl fluoride 95%	ALD00138-1G ALD00138-10G
2,5-Difluorobenzenesulfonyl fluoride 95%	ALD00062-1G ALD00062-10G
2,5-Dimethoxybenzenesulfonyl fluoride 95%	ALD00064-1G ALD00064-10G
Ethanesulfonyl fluoride 95%	ALD00142-1G ALD00142-10G
Ethanesulfonyl fluoride 95%	746959-250MG 746959-1G
2-Methylbenzenesulfonyl fluoride 95%	ALD00180-1G ALD00180-10G
2-Naphthalenesulfonyl fluoride 95%	ALD00056-1G ALD00056-10G
2-Nitrobenzenesulfonyl fluoride 95%	ALD00048-1G ALD00048-10G
2-Phenylethanesulfonyl fluoride 95%	ALD00044-1G ALD00044-10G
2,4,6-Trichlorobenzenesulfonyl fluoride 95%	ALD00196-1G ALD00196-10G
2,3,4-Trifluorobenzenesulfonyl fluoride 95%	ALD00220-1G ALD00220-10G

PhenoFluor™: 取り扱い容易な脱酸素的フッ素化剤

はじめに

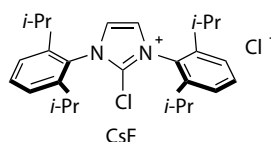
Ritter らが開発した PhenoFluor は、フェノール類から一段階でフッ化アリールが得られる新規フッ素化剤です¹。官能基許容性が高い、事前の活性化を必要としない、合成終盤での位置選択的なフッ素化が可能などの利点があります。Ritter 研究室との共同開発により、

安定性の高い PhenoFluorMIX (797537) と、ready-to-use のトルエン溶液 (795291) の 2 タイプの PhenoFluor を新発売しました。いずれも、グローブボックスが不要で取り扱いが簡単です。



**PhenoFluor™ Solution
795291**

0.1 M トルエン溶液
25mL Sure/Seal ボトル包装



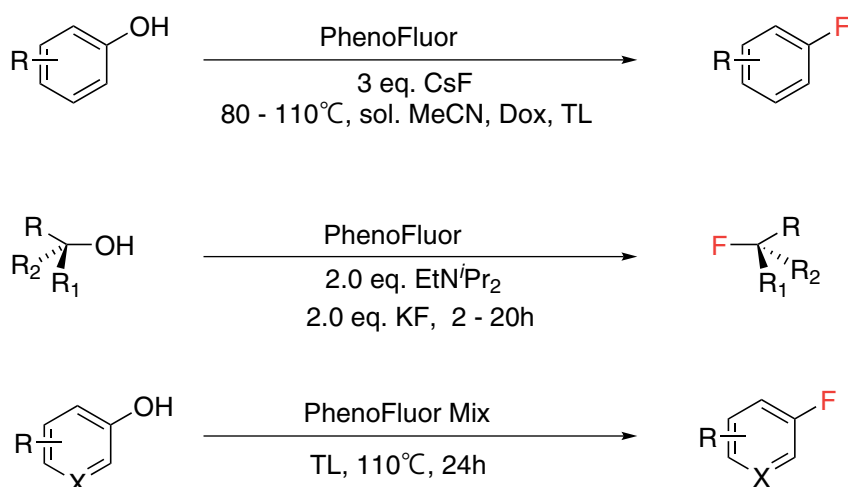
**PhenoFluor™ Mix
797537**

実験室レベルで安定
操作が容易
スケールアップ可能

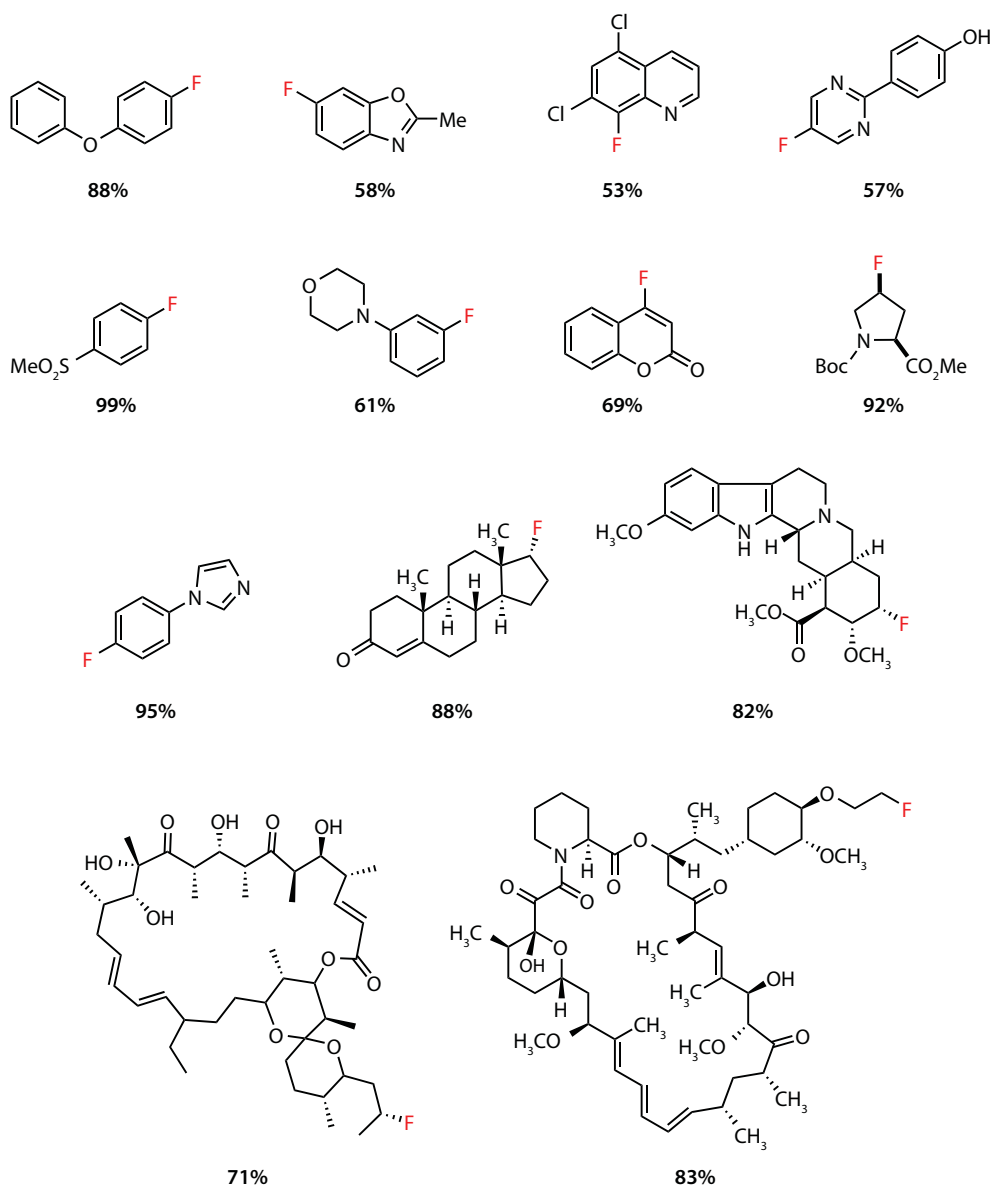
一般的な反応例

PhenoFluor は熱に安定な脱酸素的フッ素化剤で、フェノール類から一段階で *ipso*-位置換により高収率でフッ化アリールを与えます。位置特異的かつスケールアップ可能で、アミン、アルデヒド、ヘテロ環化

合物などの様々な官能基に対して幅広く適用できます。また、最近、天然物やドラッグライクな化合物への合成の終盤でのフッ素導入の事例が報告されています。



利用例



製品リスト

Product Description	Prod. No.
PhenoFluor Mix	797537-250MG
PhenoFluor Solution 0.1 M in toluene	795291-10ML

Ritter 研究室の成果は Web でご覧ください

Aldich.com/ritter

References

- (1) Tang, P.; Wang, W.; Ritter, T. *J. Am. Chem. Soc.* **2011**, *133*, 11482.
- (2) Sladojevich, F.; Arlow, S.; Tang, P.; Ritter, T. *J. Am. Chem. Soc.* **2013**, *135*, 2470.
- (3) Fujimoto, T.; Becker, F.; Ritter, T. *Org. Proc. Res. Develop.* **2014**, *18*, 1041.
- (4) Fujimoto, T.; Ritter, T. *Org. Lett.* **2015**, *17*, 54.

Stahl 試薬：アルコールの空気酸化

はじめに

アルコールを酸化してアルデヒドやケトンを得る酸化反応は、有機化学で最も頻繁に実施される反応のひとつです。得られたアルデヒドやケトンは、より複雑な構造の分子を合成するための有用な中間体となるからです。酸化反応において、酸素ガスは理想的な酸化剤ですが、合成の適用範囲が狭いことと特に安全性で懸念があるため、空気酸化は試験研究段階ではあまり実施されません。Stahl らは、TEMPO または ABNO ラジカルと銅塩 $[\text{Cu}(\text{MeCN})_4]\text{OTf}$ (製品番号 685038) の存在下で、空気を酸素源としてアルコール酸化を達成する方法を見出しました。

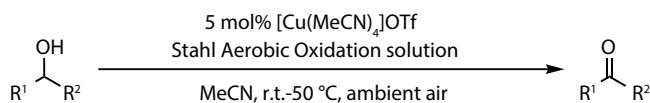
アルドリッチでは、この反応をさらに簡単に利用できるよう、必要な試薬を調整した混合試薬を Stahl 空気酸化溶液として 2 種発売しました (TEMPO: 製品番号 796549、ABNO: 製品番号 796557)。

銅塩と Stahl 試薬があれば、基質のアルコールを高収率、高選択的かつ安全に空気酸化して目的のアルデヒドやケトンが得られます。

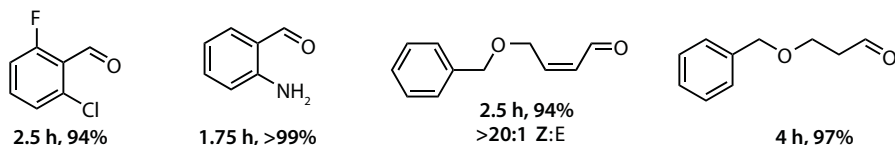
利点

- 基質と銅触媒を加えるだけの簡便な反応操作
- 多くの反応は室温、開放系で実施可能
- 反応の終点を目視で確認可能 (赤 / 褐色から緑 / 青へ)
- TEMPO は第一級アルコールの化学選択的酸化反応に利用可能
- ABNO は、第一級および第二級アルコールの迅速な酸化反応に利用可能
- 基質適用範囲が広い

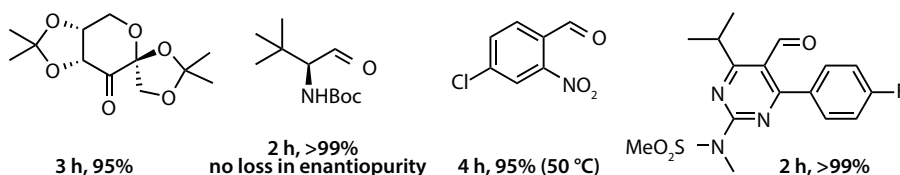
主な利用例



TEMPO



ABNO



製品リスト

Product Description	Prod. No.
Stahl Aerobic Oxidation TEMPO solution 0.2 M in Acetonitrile	796549-25ML
Tetrakisacetonitrile copper(I) triflate	685038-1G 685038-5G

Stahl 研究室で開発された試薬は Web でご覧ください

Aldrich.com/stahl

References

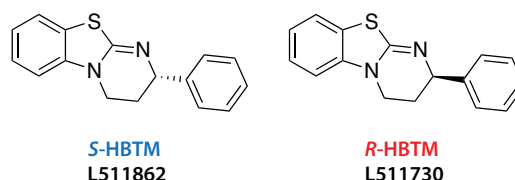
- (1) Miles, K. C.; Stahl, S. S. *Aldrichimica Acta* **2015**, 48, 8.
- (2) Hoover, J. M.; Stahl, S. S. *J. Am. Chem. Soc.* **2011**, 133, 16901.
- (3) Hoover, J. M.; Steves, J. E.; Stahl, S. S. *Nat. Protoc.* **2012**, 7, 1161.
- (4) Steves, J. E.; Stahl, S. S. *J. Am. Chem. Soc.* **2013**, 135, 15742.
- (5) Greene, J. F.; Hoover, J. M.; Mannel, D. S.; Root, T. W.; Stahl, S. S. *Org. Process Res. Dev.* **2013**, 17, 1247.

寄稿していただいた Janelle Steves 氏と Shannon Stahl 教授に感謝いたします。

HBTM: 不斉アシル化反応のための有機触媒

はじめに

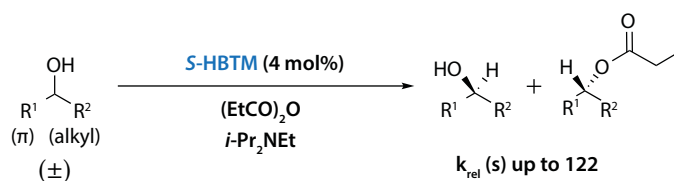
イソチオ尿素系有機触媒であるホモベンゾテトラミゾール (HBTM: homobenzotetramisole) は、少量で様々な官能基のエナント選択的転換反応や速度論的光学分割を可能とする有機触媒として利用が広がっています。アルドリッチでは、(R)-体、(S)-体の両エナントマーを提供しています。



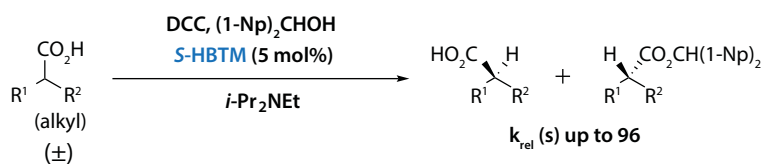
主な利用例

速度論的分割

S-HBTM は Birman らによって最初に開発され、酵素法の代替として第2級アルコールの速度論的光学分割に利用されていました¹。s-factor=122 と高い値が報告されています。HBTM 触媒は、様々な有機溶媒と温度条件でアリル、プロパルギル、ベンジルの第2級アルコールの速度論的光学分割に利用されており、反応は通常数時間で完了します。反応条件は、0 ~ -55℃の低温条件、およびトルエン、クロロホルム、*tert*-アミルアルコールなどの溶媒で最適化されています^{1,2}。

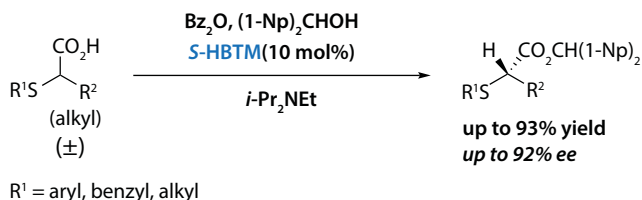


HBTM は α -アリーールアルカン酸、 α -アリーールオキシアルカン酸、 α -アルコキシアルカン酸、 α -ハロアルカン酸、保護 α -アミノ酸の速度論的光学分割に有用です^{3,4}。s-factor の最大値は 96 と報告されています。通常、トルエン溶媒中、低温、24 時間以上の条件で実施されています。



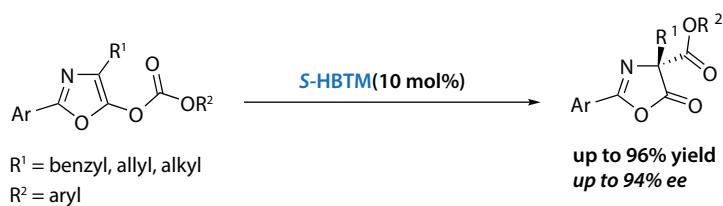
R¹ = aryl, alkoxy, aryloxy, halide, protected amine

HBTM を用いた動的速度論的分割 (DKR) によるエナンチオ選択的な α -チオアルカン酸生成が報告されています^{4,5}。広範な基質に対して高収率、高エナンチオ選択的に転換反応が進行します。

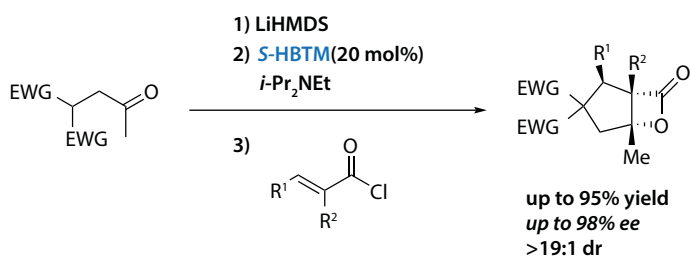


エナンチオ選択的転換反応

HBTM はエステルのカルボキシル基の転換に利用できます⁶。様々な基質に対して、通常ジクロロメタン溶媒、低温、16 時間の反応条件で高収率、高エナンチオ選択的に進行します。

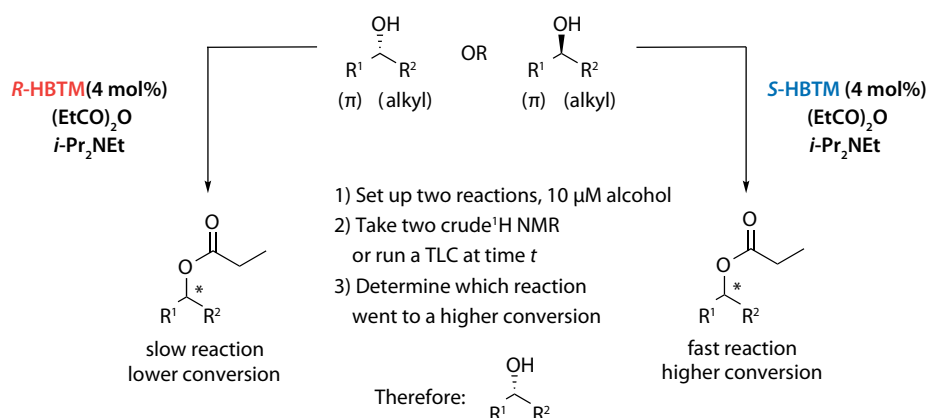


また、HBTM はエナンチオ選択的な求核的 Michael-aldol- β -ラクトン化 (NCMAL) 反応にも用いられています⁷。この反応は THF/DCM 溶媒、24 時間以上の条件で高ジアステレオマー比、高収率、高エナンチオ選択的に進行します。

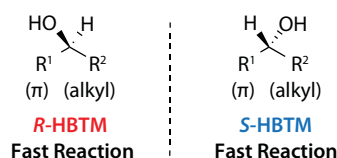


絶対配置の決定

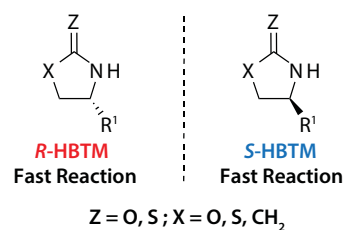
HBTM は競争的エナンチオ選択的転換法 (CEC: Competing Enantioselective Conversion) に有用な触媒であり、立体中心の絶対配置の決定に利用されています。HBTM を用いた CEC 法は、わずか 1-3 mg の第 2 級アルコールに対して実施され、 ^1H -NMR⁸ と TLC⁹ によって確認されています。なお、この TLC 分析は学生実験にも取り入れられました¹⁰。反応は、室温で 30 分から数時間で進行します。



R -HBTM と S -HBTM の両触媒による第 2 級アルコールの絶対配置の相関を示します⁸⁻¹⁰。



オキサゾリジノン、ラクタム、チオラクタムの絶対配置の決定にも、HBTM による CEC 法が報告されています¹¹。反応は、通常室温から 50°C、数時間で完了します。 R -HBTM/ S -HBTM 触媒によるこれらのシステムの絶対配置の相関を示します。



その他の研究

ベンズヒドリリウムイオンによる実験系で、反応速度定数と平衡定数に基づいた HBTM の求核性および Lewis 塩基性の研究が進められています¹²。さらに、HBTM を触媒とする第 2 級アルコールのエステル化反応について詳細な速度論的分析が行われ、この転換反応の触媒サイクルが提案されました¹³。

寄稿していただいた Alex Wagner、Prof. Scott Rychnovsky の両氏に感謝いたします。

Birman 研究室の成果詳細は Web でご覧ください。

Aldrich.com/birman

製品リスト

Product Description	Prod. No.
(2R)-2-Phenyl-2,3-dihydroimidazo[2,1-b][1,3]benzothiazole	RNI00144-250MG
(2S)-2-Phenyl-2,3-dihydroimidazo[2,1-b][1,3]benzothiazole	RNI00145-250MG
(2R)-2-Phenyl-3,4-dihydro-2H-pyrimido[2,1-b][1,3]benzothiazole	L511730-100MG
(2S)-2-Phenyl-3,4-dihydro-2H-pyrimido[2,1-b][1,3]benzothiazole	L511862-100MG

References

- (1) Birman, V. B.; Li, X. *Org. Lett.* **2008**, *10*, 1115.
- (2) Li, X.; Jiang, H.; Uffman, E. W.; Guo, L.; Zhang, Y.; Yang, X.; Birman, V. B. *J. Org. Chem.* **2012**, *77*, 1722.
- (3) Yang, X.; Birman, V. B. *Adv. Synth. Catal.* **2009**, *351*, 2301.
- (4) Yang, X.; Birman, V. B. *Chem.-Eur. J.* **2011**, *17*, 11296.
- (5) Yang, X.; Birman, V. B. *Angew. Chem., Int. Ed.* **2011**, *50*, 5553.
- (6) Joannes, C.; Johnston, C. P.; Concellón, C.; Simal, C.; Philp, D.; Smith, A. D. *Angew. Chem., Int. Ed.* **2009**, *48*, 8914.
- (7) Liu, G.; Shirley, M. E.; Van, K. N.; McFarlin, R. L.; Romo, D. *Nature Chem.* **2013**, *5*, 1049.
- (8) Wagner, A. J.; David, J. G.; Rychnovsky, S. D. *Org. Lett.* **2011**, *13*, 4470.
- (9) Wagner, A. J.; Rychnovsky, S. D. *J. Org. Chem.* **2013**, *78*, 4594.
- (10) Wagner, A. J.; Miller, S. M.; Nguyen, S.; Lee, G. Y.; Rychnovsky, S. D.; Link, R. D. *J. Chem. Educ.*, **2014**, *91*, 716.
- (11) Perry, M. A.; Trinidad, J. V.; Rychnovsky, S. D. *Org. Lett.* **2013**, *15*, 472.
- (12) Maji, B.; Joannes, C.; Nigst, T. A.; Smith, A. D.; Mayr, H. *J. Org. Chem.* **2011**, *76*, 5104.
- (13) Wagner, A. J.; Rychnovsky, S. D. *Org. Lett.* **2013**, *15*, 5504.

季刊誌 Aldrichimica Acta

最新号からバックナンバーまで Web で公開しています

Aldrich.com/jp-acta

- 研究者による化学合成の最新のテーマに関するレビュー
- 最先端の合成手法、触媒、反応試剤を紹介
- Web の製品情報へすぐにアクセス可能

iPad® アプリもご利用ください

Aldrich.com/acta-app

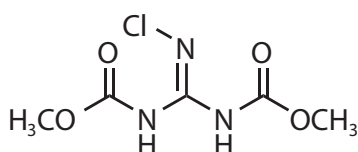
インパクトファクター=17.083、有機化学部門の国際学術誌
54 誌中 1 位を 11 年連続で獲得しています *



Current issues
now available

*Thomson Reuters; Journal Citation Reports® 2014 Science Edition

Palau'Chlor® 簡便で選択的な塩素化剤



Palau'Chlor
792454

1g ¥5,400 / 10g ¥32,100 / 100g ¥107,000

塩化アリールはクロスカップリング反応によく利用される化合物であり、医薬品候補物質や天然物の合成において重要な中間体です。そのため、塩素化反応の開発により様々な塩化物中間体が効率的に得られれば、多様な官能基化合物を合成できることになります。

現在使用されている塩素化試薬のうち、 SO_2Cl_2 や Cl_2 などは反応性が高いものの安全性に問題があり、また *N*-chlorosuccinimide (NCS) は取り扱いより安全であるものの反応性が劣ります。

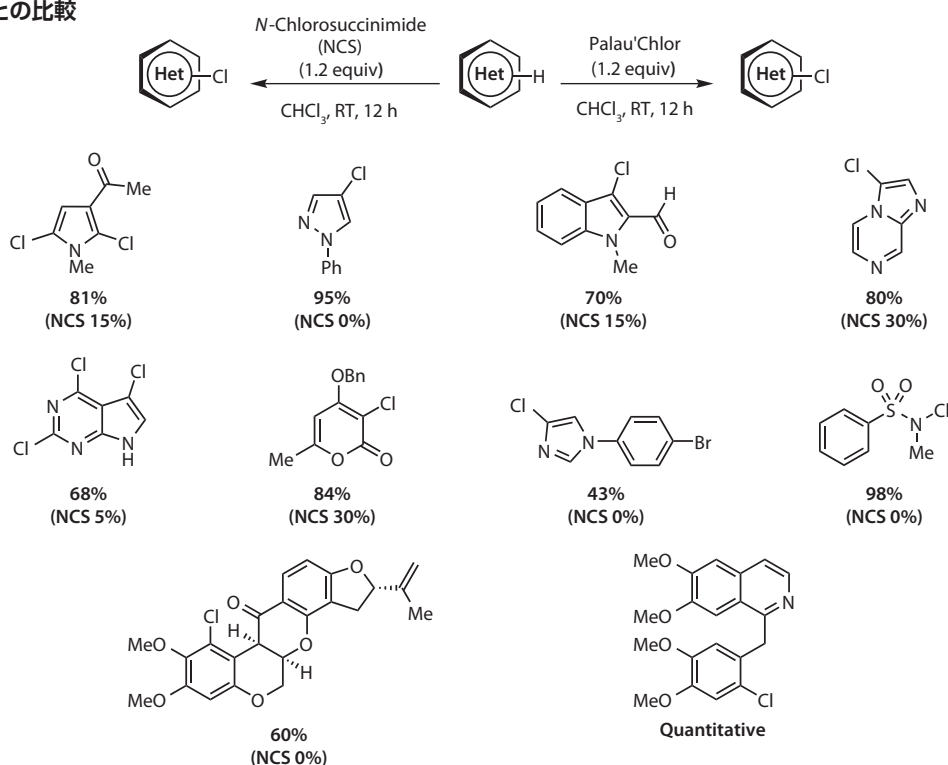
Baran グループによって開発された Palau'Chlor (**792454**) は、十分な反応性と高い選択性を有する、実験室レベルで安定な塩素化試薬です。

利点

簡単かつ高収率でヘテロ環化合物を塩素化できます。

- ・高い反応性
- ・簡便な反応操作
- ・予測可能な位置選択性
- ・高い官能基許容性

反応例/NCSとの比較



References : Rodriguez, R.A.; Pan, C.-M.; Yabe, Y.; Kawamata, Y.; Eastgate, M. D.; Baran, P.S. *J. Am. Chem. Soc.* **2014**, 136, 6908.

化学合成向け装置のご紹介

Kugelrohr 蒸留装置

クーゲルロール蒸留装置は、熱に不安定な物質の蒸留精製、昇華精製に最適です。



オープン温度 : < 230℃
フラスコ容量 : 25mL ~ 2L
サイズ (WxDxH) : 64 x 28 x 46 (cm)
* ガラス器具は別売です

【クーゲルロール蒸留装置】

製品番号 **Z683477**
希望納入価格 **¥818,000**

クーゲルロール蒸留装置の詳細は、Web サイト Aldrich.com/kugelrohr をご覧ください。

Q-Tube™ リアクター

Q-Tube リアクターは、封かん反応を安全かつ簡便に実施できるリアクターです。特殊設計のアダプターとセプタムにより、一定圧を超えると自動的に内圧を開放します。

封かん反応をすぐに実施できる便利なスターターキットをご用意しています。

【Q-Tube スターターキット】

12 mL ディスポーザブルチューブ用	製品番号 Z567671	¥86,900
35 mL チューブ用	製品番号 Z567736	¥89,900



◆スケールアップ用の QianCap™ シリーズ、Q-tube 専用ヒートブロック、防爆シールドも取り扱っています。

Q-Tube シリーズの詳細は、Web サイト Aldrich.com/qtube-jp をご覧ください。

© 2015 Sigma-Aldrich Co. LLC. All rights reserved. SIGMA, SAFC, SIGMA-ALDRICH, ALDRICH, and SUPELCO are trademarks of Sigma-Aldrich Co. LLC, registered in the US and other countries. FLUKA is a trademark of Sigma-Aldrich GmbH, registered in the US and other countries. SAFC brand products are sold through Sigma-Aldrich, Inc. Purchaser must determine the suitability of the product(s) for their particular use. Additional terms and conditions may apply. Please see product information on the Sigma-Aldrich website at sigma-aldrich.com. Palau'Chlor is a registered trademark of Sigma-Aldrich Co. LLC. Redi-Dri is a trademark of Sigma-Aldrich Co. LLC. PhenoFluor is a trademark of SciFluor Life Sciences, LLC. QianCap and Q-Tube are trademarks of Q Labtech LLC.

本記載の製品および情報は2015年12月1日現在の情報であり、収載の品目、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。／最新の情報は、弊社Webサイト (sigma-aldrich.com/japan) をご覧ください。／掲載価格は希望納入価格(税別)です。詳細は販売代理店様へご確認ください。／弊社の試薬は試験研究用のみを目的として販売しております。医薬品原料並びに工業用原料等としてご購入の際は、こちらのWebサイト (sigma.com/safc-jp) をご覧ください。

SIGMA-ALDRICH®

シグマ アルドリッチ ジャパン

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

SAJ1942 2015.12

SIGMA-ALDRICH®