

テクノロジー ハイライト

Volume 2.1 2016

Add Aldrich

ALDRICH

クロスカップリング反応

Fro-DO:四級炭素-炭素結合生成反応のための新規配位子

光レドックスイリジウム触媒による一電子移動クロスカップリング

幅広く応用可能な**Doyle**ニッケル触媒前駆体

Buchwald触媒前駆体 **G3/G4**

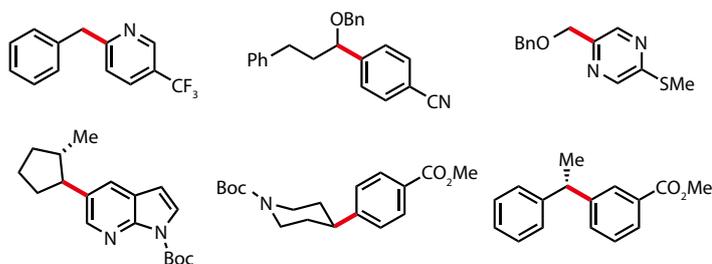
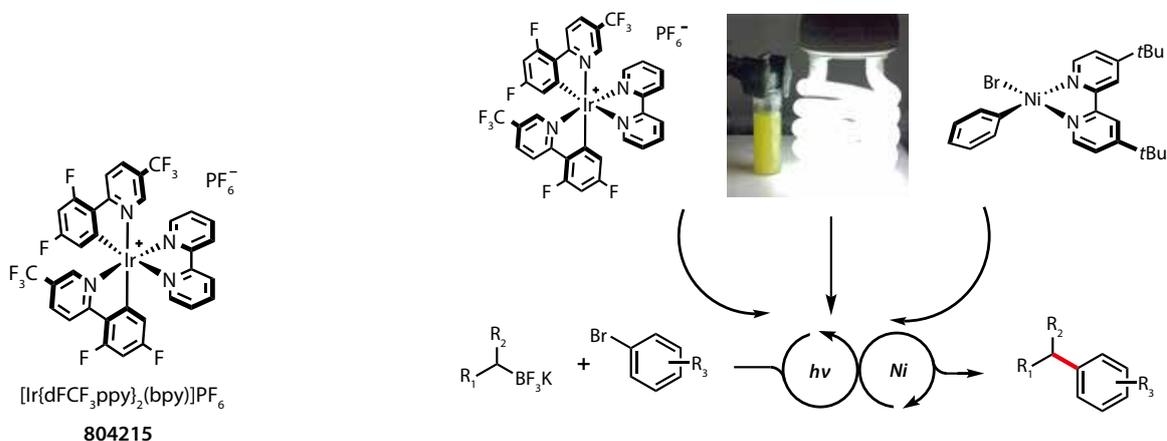
クロスカップリング反応の強力な触媒**PEPPSI™-IPENT**

光レドックスイリジウム触媒による一電子移動クロスカップリング

C(sp²) および C(sp) の触媒的カップリング反応はよく研究され、十分に確立された分野です。しかしながら、ボロン酸および関連誘導体を用いた C(sp³) と C(sp²) のカップリング反応は、二電子の関わる効率の良くないトランスメタル化反応を経由するため、いまだ多くの制約があります。旧来のカップリング手法では、有機ホウ素化合物の C-B 結合の強さに、反応の成否が左右されます。C(sp³) とホウ素の結合は強く、このためアルキルホウ素化合物はアルケニルホウ素化合物やアリールホウ素化合物に比べ、トランスメタル化を起こしにくいことがわかっています。このことが、C(sp³) とクロスカップリング反応の進展を妨げてきました。しかし最近になり、ニッケル触媒 (244988) とイリジウム触媒 (804215) のデュ

アル触媒システムによる効果的なアルキルクロスカップリング反応が大きく進展しています。この触媒は、可視光照射によって有機トリフルオロボウ酸カリウムを酸化的に開裂させ、アルキルラジカルを発生させる能力があります。発生したラジカルはニッケル錯体にトラップされ、クロスカップリング反応が進行します。

このメカニズムによる反応は、C-B 結合のホモリティックな開裂しやすさに依存するものであり、アルキルホウ素化合物によるクロスカップリングに新たな領域を拓きます。アルドリッチは、Gary Molander 教授の協力のもと、この高収率をもたらす新たな一電子移動 (SET; Single Electron Transfer) クロスカップリングのための触媒を提供いたします。



Molander研究室の成果は
Webで紹介しています

Aldrich.com/Molander

特長

- 従来は困難とされていたC(sp³)クロスカップリング反応を効率的に実現
- 室温で反応が進行
- 不斉カップリングへの可能性
- 不斉ニッケル触媒を用いる還元的脱離による立体収束的反応(ラセミ体の有機トリフルオロボウ酸類から光学純度の高い生成物が得られる)

この記事の作成にご協力いただいた、
John Tellis氏およびGary Molander教授に感謝いたします。

製品リスト

製品名	CAT.NO.
Bis(1,5-cyclooctadiene)nickel(0)	244988
<chem>[Ir](dFCF3ppy)2(bpy).PF6</chem>	804215

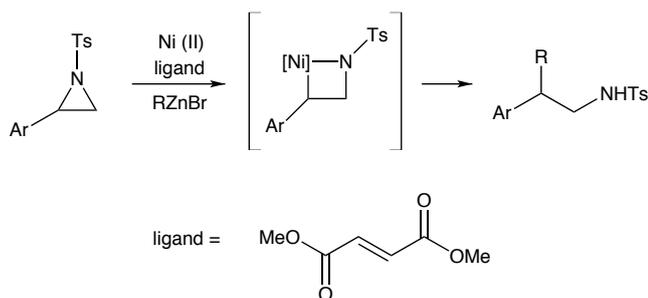
References

- (1) Tellis, J. C.; Primer, D. N.; Molander, G. A. *Science* **2014**, *345*, 6195.
- (2) Primer, D. N.; Karakaya, I.; Tellis, J. C. *J. Am. Chem. Soc.* **2015**, *137*.
- (3) Gutierrez, O.; Tellis, J. C.; Primer, D. N.; Molander, G. A.; Kozlowski, M. C. *J. Am. Chem. Soc.* **2015**, *137*, 4896.
- (4) Karakaya, I.; Primer, D. N.; Molander, G. A. *Org. Lett.*, **2015**, *17*, 3294.

Fro-DO:四級炭素-炭素結合生成反応のための新規配位子

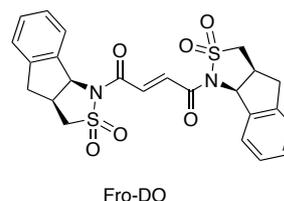
クロスカップリング反応を始めとする遷移金属触媒反応の研究においては、中心金属に結合する配位子の開発が大きな割合を占めてきました。これら配位子は、ホスフィン類、アミン類、含窒素ヘテロ環カルベン類などσ供与性の配位子がほとんどですが、これは、電子豊富なこれらの配位子から中心金属に電子が供給されることにより酸化的付加が促進される、という考え方によるものです。このアプローチは大きな成功を収め、それまで不可能であった反応を数多く実現してきました。もうひとつの重要なステップである、中心金属原子からの還元的脱離の促進は、配位子をかさ高くする方法が主に採用されてきました。

一方、電子不足の配位子を用いることによって、還元的脱離を起こしやすくするという方法論は、これまであまり注目されていませんでした。こうした中、プリンストン大学の Abby Doyle らのグループは、1-アリールアジリジンと有機亜鉛化合物、ニッケル触媒カップリング反応において、フマル酸ジメチルが効果的にこの反応を促進するユニークな配位子であることを見出しました¹。フマル酸ジメチルは電子不足のπ電子性配位子としてはたつき、ニッケルからの還元的脱離を促進します。



そこで、これをさらに改良して創出された配位子が、Fro-DO (804371) です。フマル酸の中心骨格にスルタム部分が結合した配位子であり、中央のオレフィン部分で中心金属へ配位します。

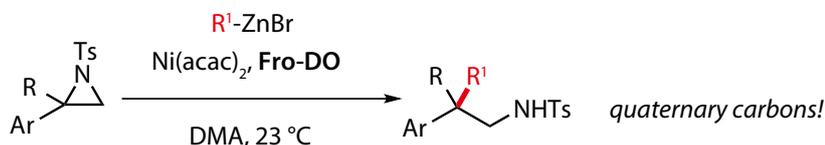
Fro-DO のニッケル錯体は、1,1-二置換アジリジンと有機亜鉛化合物とのカップリング反応の触媒としてはたつき、通常の条件では難しい四級炭素中心の構築が、この反応によって可能になります。電子不足な配位子によって還元的脱離が促進されているため、β-ヒドリド脱離反応よりも目的のカップリングが素早く進行し、副生成物が大幅に抑えられたと考えられます。アルドリッチでは、プリンストン大学の Abby Doyle グループの協力の下、ニッケル触媒反応を革新する、この新たな配位子を提供いたします。



特長

- 電子的、構造的に、これまでの配位子とは全く異なる新しいタイプの配位子
- 今までにない、新しい反応性を引き出す可能性
- 実験室環境での取り扱いや計量が可能な安定な結晶

適用例



この記事の作成にご協力いただいた、Dennis Huang氏に感謝いたします。

Abby Doyle研究室の研究成果をWebで紹介しています

[Aldrich.com/Doyle](https://www.aldrich.com/Doyle)

製品リスト

製品名	CAT.NO.
Fro-DO	804371

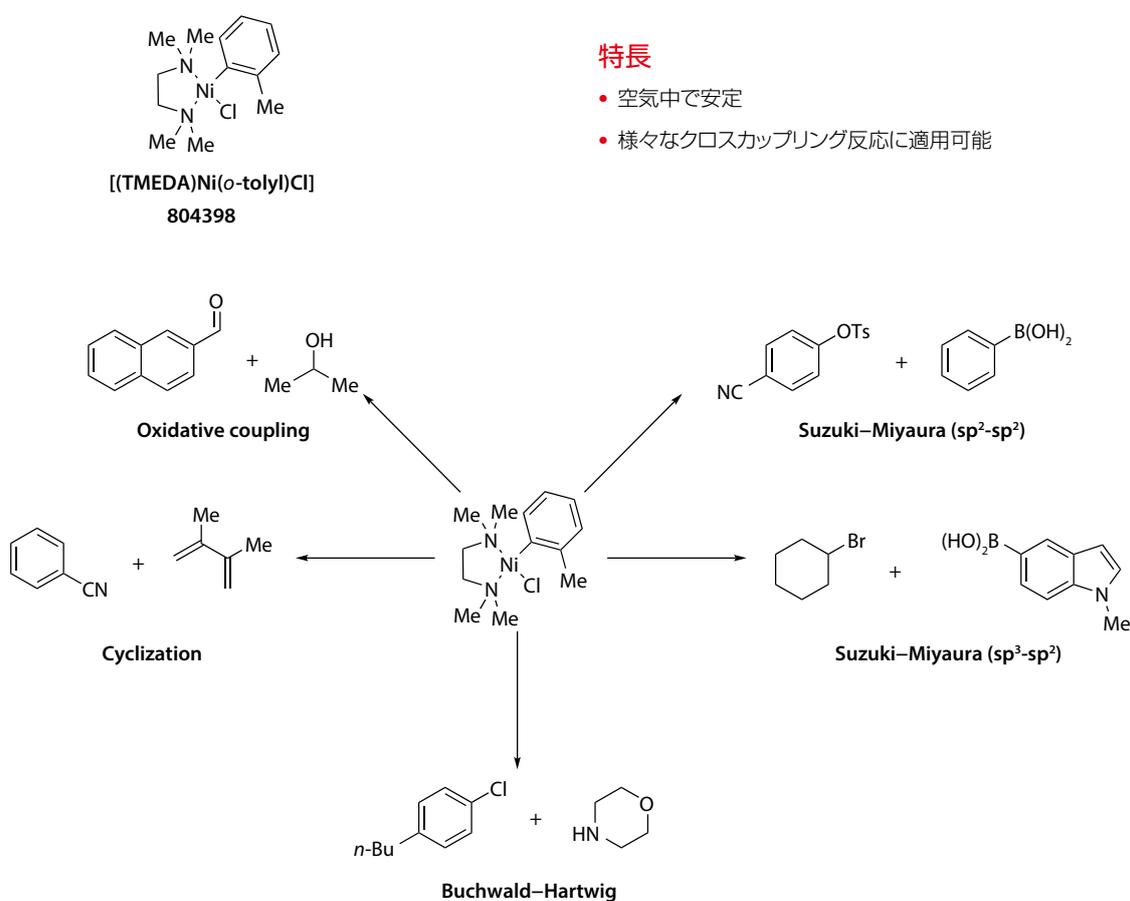
Reference

(1) Huang, C.-Y.; Doyle, A. G. *J. Am. Chem. Soc.* **2015**, *137*, 5638.

幅広く利用可能なDoyleニッケル触媒前駆体

現代化学の花形である遷移金属触媒反応において、ニッケルの化学はこの分野を切り拓く大きな力となりました。0価ニッケルはパラジウムに比べてより電氣的に陽性であり、原子半径も小さいため、酸化的付加が速いというユニークな特性があります。たとえばパラジウム触媒では通常難しいとされる塩化アリールを用いたクロスカップリング反応も、ニッケル触媒を用いればスムーズに進行します。またニッケルはパラジウムよりも原子量が小さく、はるかに安価なので、経済的なメリットも大きいといえます。ただし、Pd₂(dba)₃のような優れた触媒前駆体が知られていない

のが、ニッケル触媒の大きな難点でした。たとえば Ni(cod)₂ は最も広く利用されている触媒前駆体ですが、空気などに敏感であるため、取り扱いにはグローブボックスが必要になります。しかし最近になり、パラジウム触媒に代わりうる性能を持つ、ニッケル触媒の優れた前駆体が、Abby Doyle らのグループによって開発されました。[(TMEDA)Ni(o-tolyl)Cl] (804398) は、適用範囲の広いニッケル触媒前駆体であり、空気にも安定であるため、通常の実験設備で秤量・保存できる利点を有します。



特長

- 空気中で安定
- 様々なクロスカップリング反応に適用可能

この触媒前駆体は、TMEDAのニッケルに対する配位力が弱く容易に他の配位子（単座あるいは二座のホスフィン、ジイミン、含窒素ヘテロ環カルベン）に置き換わるため、鈴木-宮浦カップリング、Buchwald-Hartwigカップリング、熊田-玉尾-Corriuカップリング、根岸カップリング、菌頭カップリング、Heck反応、付加環化反応、アルデヒドとアルコールの酸化的カップリングなど、様々な反応に利用可能です^{1,2}。反応は、基質及び触媒前駆体、配位子を溶媒中で混合するのみで進行し、グローブボックスは必要ありません。また反応の収率は、これまで使われていた触媒前駆体である、Ni(cod)₂ や NiCl₂(dme) を用いた場合に比べて遜色ないか、優れています。

この記事の作成にご協力いただいたJason Shields氏に感謝いたします

製品情報

Product Description	Molecular Formula	CAT.NO.
[(TMEDA)Ni(o-tolyl)Cl]	C ₁₃ H ₂₃ ClNi ₂	804398

References

- (1) Shields, J. D.; Gray, E. E.; Doyle, A. G. *Org. Lett.* **2015**, *17*, 2166.
- (2) Magano, J.; Monfette, S. *ACS Catal.* **2015**, *5*, 3120.

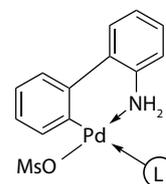
Abby Doyle 研究室の成果はWebで紹介しています
Aldrich.com/doyle

Buchwald触媒前駆体G3/G4

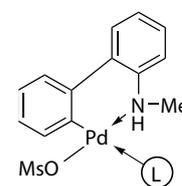
Buchwaldのグループは、高活性かつ適用範囲の広い、一連のパラジウム触媒前駆体及びビフェニルホスフィン配位子を開発しています。これらはクロスカップリング反応に用いられ、C-C、C-N、C-O、C-F、C-CF₃、C-S結合の生成に威力を発揮します。配位子は電子豊富な構造であり、広い適用範囲、高い安定性と反応性を持つよう、さまざまに性能を調整できます。

初期に開発された第一世代 (G1)、第二世代 (G2) もそれ以前の触媒システムに比べれば十分に高効率でしたが、Buchwaldらはさらに開発を進めより高性能の第三世代 (G3) を見出しました。G3ファミリーは、迅速かつ定量的に活性な0価のパラジウムを生成します。多くの溶媒によく溶解し、極めてかさ高い配位子群も利用可能です³。さらに、これら触媒は、溶液中で分解されにくく、長い寿命を保ちます。

まれに、脱離基となるカルバゾールが、触媒の反応性を妨害することがあります。また、第一級アミノビフェニルの少量の残渣が医薬品用途での安全性に懸念があります。この問題を回避するため、BuchwaldグループはG3触媒前駆体を改変し、ビフェニル骨格に結合したアミノ基をメチル化したG4触媒前駆体を創生しました⁴。これらG4触媒前駆体はG3触媒前駆体よりもさらに溶解性が高く、クロスカップリング反応の間も卓越した反応性を維持します。



G3 Precatalyst



G4 Precatalyst

特長

- 活性なPd(0)を高効率的に生成
- 多様な配位子を適用可能
- G3はBrettPhosやt-ブチルホスフィンなどのかさ高い配位子へ適用可能
- G1, G2よりも高い溶解性
- G4はN-メチルカルバゾールの生成を抑制

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

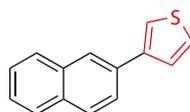
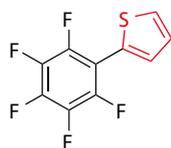
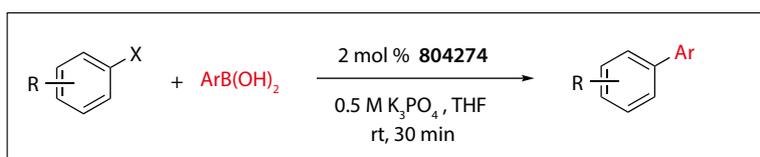
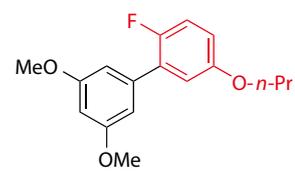
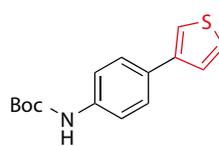
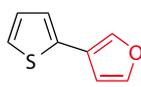
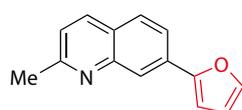
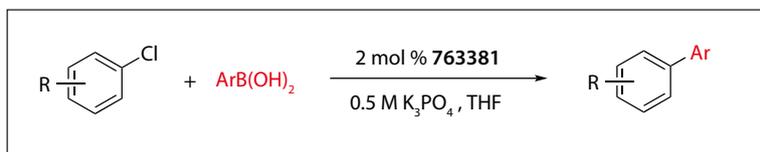
主な利用例

G3 および G4 ファミリーは、非常に迅速に活性化されるため、脱ホウ素化しやすい不安定なボロン酸の鈴木-宮浦反応に有用です。

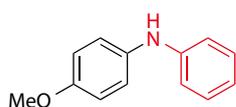
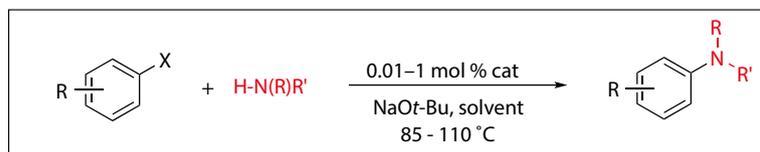
XPhos Pd G3 (763381) を用いると、電子豊富でかさ高い不安定なボロン酸と塩化ヘテロアールのクロスカップリング反応がおだやかな反

応条件（室温～40℃）で短時間（30分）で進行し、高収率で生成物が得られます。

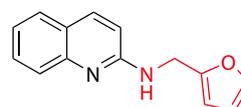
同様に、**XPhos Pd G4 (804274)** も高収率でビアリールを与えます¹⁻²。



さらに、**BrettPhos (G3: 761605, G4: 804355)**は、第一級および第二級アミンの*N*-アリール化に極めて有用です。4-ハロアニソールのアリール化では、0.01 mol% の触媒量で高収率を実現しています^{1,2}。



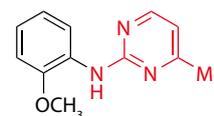
X = Cl; 0.01 mol % **761605**, toluene, 5 min, **96%**
 X = I; 0.01 mol % **804355**, dioxane, 5 min, **94%**



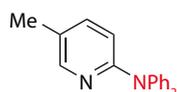
X = Cl; 0.1 mol % **761605**, dioxane, 24 h, **97%**



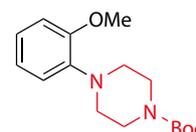
X = Cl; 0.1 mol % **761605**, dioxane, 12 h, **89%**



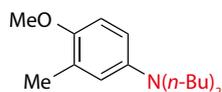
X = Cl; 0.25 mol % **761605**, dioxane, 8 h, **93%**



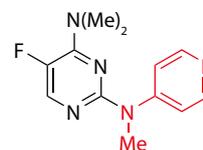
X = Cl; 0.1 mol % **761605**, THF, 24 h, **88%**



X = Cl; 0.2 mol % **761605**, THF, 4 h, **92%**

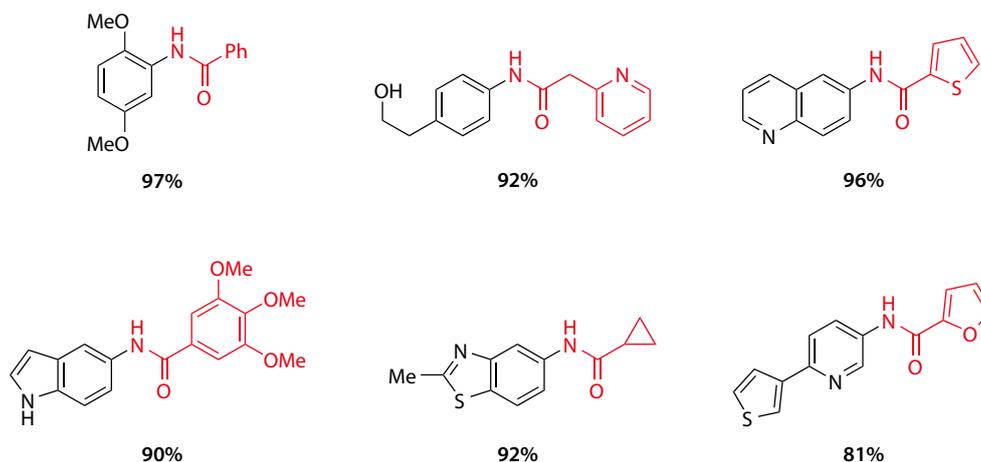
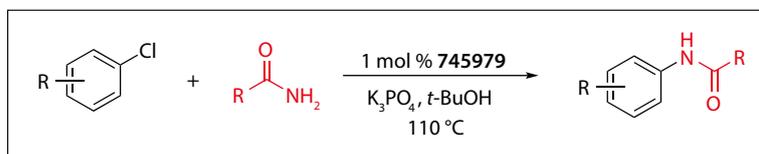


X = Br; 0.5 mol % **761605**, THF, 4 h, **94%**

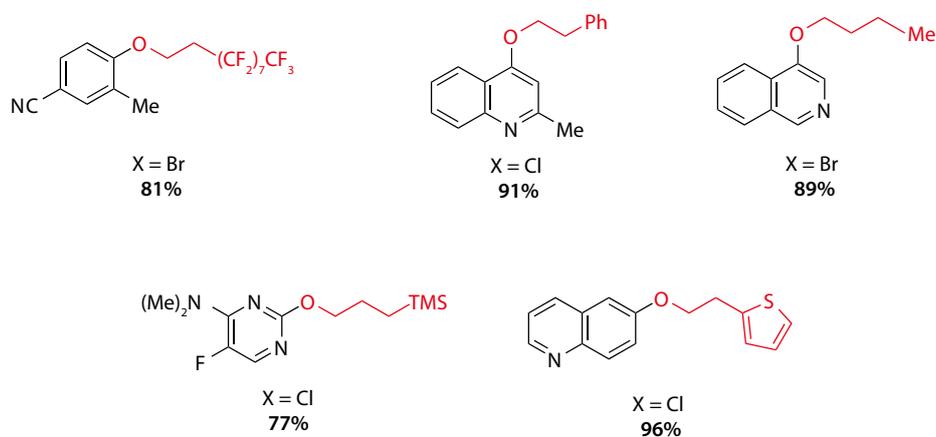
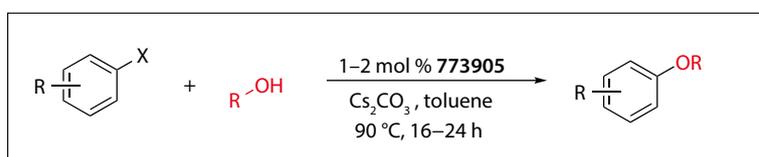


X = Cl; 1 mol % **804355**, dioxane, 24 h, **88%**

さらにかさ高い **tBuBrettPhos Pd G3** (745979) は第一級アミドのアリール化に高活性で、広い官能基適用性を示します。アミドのアリール化は容易に進行しますが、インドールや無保護のアルコールはアリール化されません³。



RockPhos Pd G3 (773905) は、第一級脂肪族アルコールとハロゲン化アリールの C-O 結合生成反応で良好～高収率を与えます³。



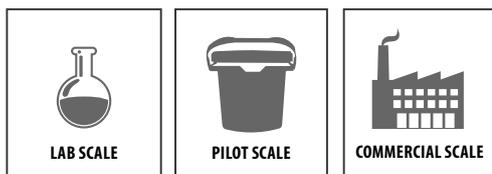
References

- (1) Bruno, N. C.; Tudge, M. T.; Buchwald, S. L. *Chem. Sci.* **2013**, 4, 916.
- (2) Bruno, N. C.; Niljianskul, N.; Buchwald, S. L. *J. Org. Chem.* **2014**, 79, 4161.
- (3) Bruno, N. C.; Buchwald, S. L. *Org. Lett.* **2013**, 15, 2876.

Buchwald ポートフォリオ

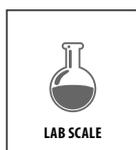
Name	Ligand	G1 Complex	G2 Complex	G3 Complex	G4 complex
BrettPhos	718742	718750	—	761605	804355
AdBrettPhos	768154	—	—	776106	—
tBuBrettPhos	730998	—	—	745979	807877
DavePhos	638021	—	RNI00181	804959	—
tBuDavePhos	695874	—	—	—	—
PhDavePhos	695882	—	—	—	—
JohnPhos	638439	—	—	—	—
CyJohnPhos	638099	—	747807	RNI00192	—
MePhos	695262	—	—	—	—
tBuMePhos	695211	—	—	—	—
RuPhos	663131	707589	753246	763403	804290
SPhos	638072	704946	753009	776246	804282
sSPhos	677280	—	763314	—	—
XPhos	638064	704954	741825	763381	804274
tBuXPhos	638080	708739	—	762229	804266
Me ₃ (OMe)tBuXPhos	792470	—	—	804193	—
Me ₄ tBuXPhos	675938	—	—	RNI00184	—
(2-Biphenyl)di-1-adamantylphosphine	767689	—	—	—	—
2'-Dicyclohexylphosphino-2,4,6-trimethoxybiphenyl	707430	—	—	—	—
Select Non-Buchwald Ligands					
APhos	677264	—	764299	764183	—
rac-BINAP	481084	—	—	804967	—
P(t-Bu) ₃	570958	—	756482	—	—
(tBu) ₂ PMe	642629	—	RNI00183	RNI00185	—
(tBu) ₂ PPh	682411	—	RNI00182	RNI00188	—
cataCXium A	671479	—	761311	761435	—
CPhos	759171	—	763012	763004	—
PCy ₃	261971	—	756741	764175	—
DPPF	177261	—	—	804983	—
DTBPF	695149	—	—	804975	—
JackiePhos	731013	—	—	762830	—
Josiphos SL-J009-1	88733	—	—	747130	—
MorDalPhos	751618	—	792349	792357	—
Neopentyl(tBu) ₂ P Pd G3	676187	—	—	794201	—
RockPhos	791016	—	—	773905	—
1,3,5,7-Tetramethyl-6-phenyl-2,4,6-trioxa-6-phosphaadamantane	695459	—	—	762822	—
(R)-Tol-BINAP	693049	—	—	RNI00178	—
TrixiePhos	710342	—	—	796530	—
XantPhos	526460	—	763047	763039	—
N-XantPhos	666564	—	—	794228	—

バルク供給や製造原料用途にも対応しています。E-mail : sialjpf@cial.com へお問い合わせください。



試験研究から原料バルクまで
触媒テクノロジーをサポート

Add Aldrich™



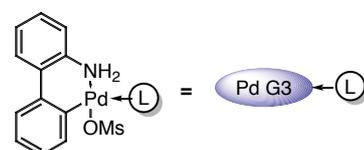
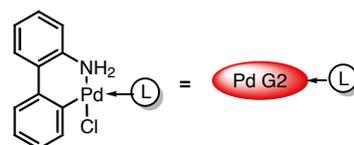
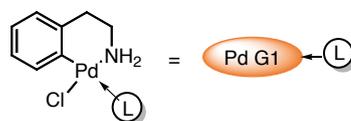
触媒スクリーニングを加速
カプセル化 Pd 触媒 新発売

触媒量:0.025mmol /1カプセル
セルロース製カプセルは、反応系中で崩壊し、
反応終了後にろ過して除去します



Buchwald GT カプセル (5 個入り)

CAT.NO.	製品名	価格(¥)
805661-5EA	BrettPhos-Pd-G3 GT capsule	15,000
807850-5EA	DTBPF-Pd-G3 GT capsule	15,000
805653-5EA	RuPhos-Pd-G3 GT capsule	15,000
805483-5EA	SPhos-Pd-G2 GT capsule	15,000
805645-5EA	SPhos-Pd-G3 GT capsule	15,000
805688-5EA	tBuBrettPhos-Pd-G3 GT capsule	15,000
805513-5EA	P(tBu) ₃ -Pd-G2 GT capsule	15,000
805696-5EA	tBuXphos-Pd-G3 GT capsule	15,000
807869-5EA	P(o-Tolyl) ₃ -Pd-G2 GT capsule	15,000
805637-5EA	XPhos-Pd-G2 GT capsule	15,000
805629-5EA	XPhos-Pd-G3 GT capsule	15,000



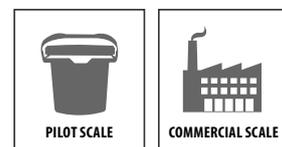
大容量も迅速に供給
汎用の触媒と配位子

スケールアップにもすぐに対応できるよう、大容量も
ご用意しています

- Pd₂dba₃ (328774) 100g
- XPhos (638064) 100g など

グローバルでバルク供給
Buchwald 触媒と配位子

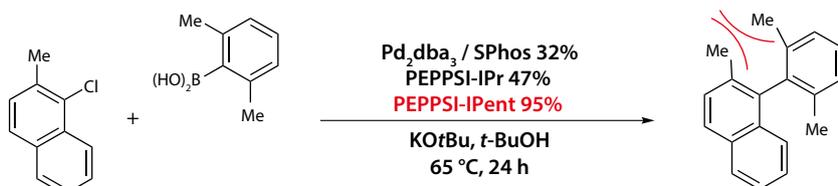
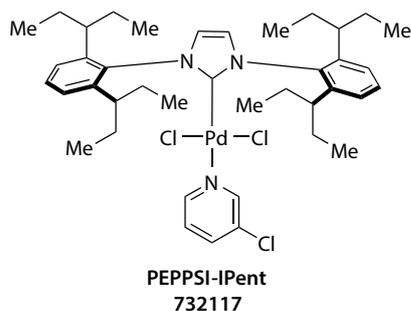
- mg からkgスケールまで対応
- グローバル供給により低コストを実現
- G1~G4まで触媒と配位子の豊富なラインナップ
- MITとのライセンス契約を締結しています



クロスカップリング反応の強力な触媒PEPPSI™-IPENT

Mike Organ らが開発したパラジウム錯体 PEPPSI (Pyridine Enhanced Precatalyst Preparation Stabilization and Initiation) は、かさ高い *N*-ヘテロ環カルベン錯体と電子供与性の 3-クロロピリジンに結合させて安定性を向上させたクロスカップリング反応の触媒であり、現在、パラジウム-ホスフィン錯体に代わる高効率的な触媒前駆体として

利用が拡大しています。最近開発された PEPPSI-IPent (732117) は、PEPPSI シリーズの中でも極めて高活性でありながら空気中で安定であり、さらに使いやすい触媒となっています¹。アルドリッチでは、PEPPSI 触媒シリーズを独占的に供給しています。



特長

- 空気中で安定でありグローブボックスでの操作は不要
- Pd触媒毒は認められない
- ピロール類とのクロスカップリングが可能
- ほとんどの場合にPEPPSI-IPrを上回るカップリング収率
- かさ高い基質に対しても適用可能²

Professor Product Portal

Add Aldrich™

卓越した試薬とその開発者たち

アルドリッチは、世界中の化学者が開発した最先端の触媒、ビルディングブロック、反応試剤をいち早く市販して、科学者の皆様へお届けしています。

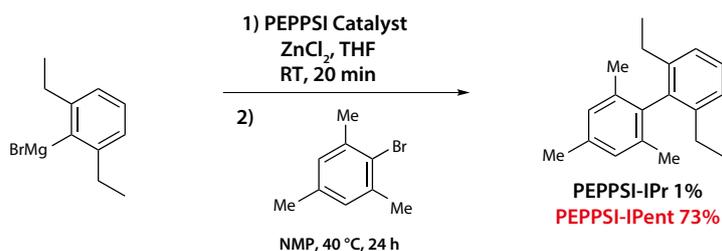
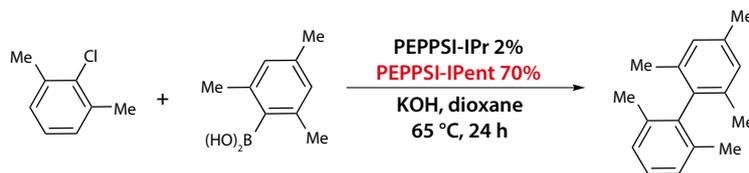
優れた試薬を開発した研究室と、製品化されたアルドリッチの試薬を Web ページ "Professor Product Portal" でご紹介します。各研究室の研究成果や論文で発表された反応試剤が入手可能かどうかすぐに確認できます。



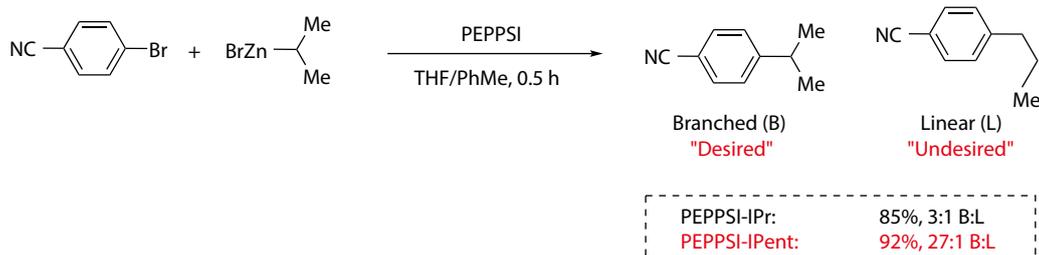
Aldrich.com/prof-prod-portal

代表的な適用例

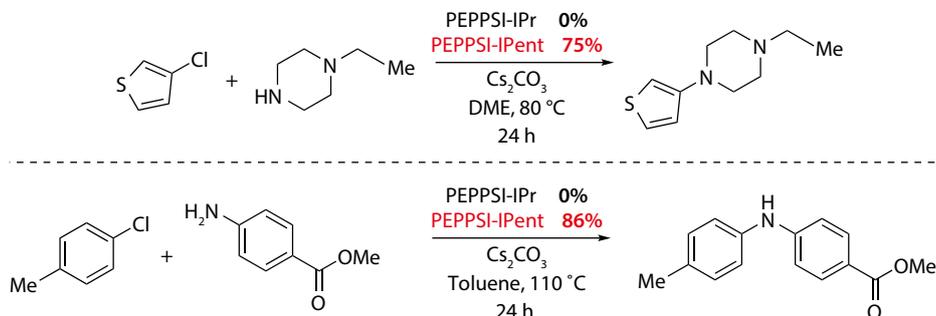
PEPPSI™-IPent (732117) は、これまで困難とされてきた鈴木-宮浦カップリング、根岸カップリングに対しても比較的穏やかな条件下で高活性です。PEPPSI-Pr (669032) に比べ、テトラ-*o*-置換（ヘテロ）ビアリール化合物を高収率で与えます。また、かさ高い酸性基質に対しても適用可能です^{1,2}。



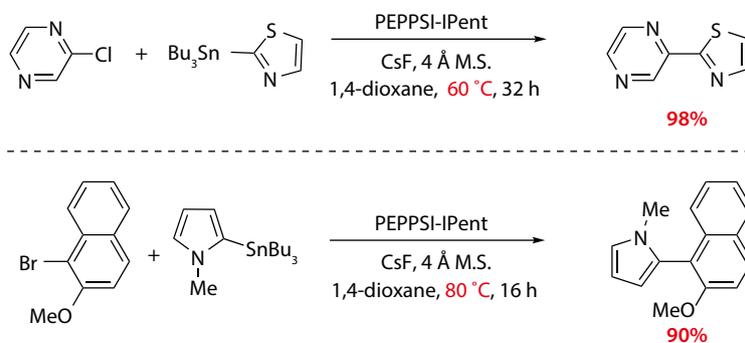
以下に示す第 2 級アルキル亜鉛塩化物と塩化アリールの根岸カップリングでは、PEPPSI-IPr を大幅に上回る高い選択性で目的の枝分かれ構造の生成物が得られました^{1,3}。



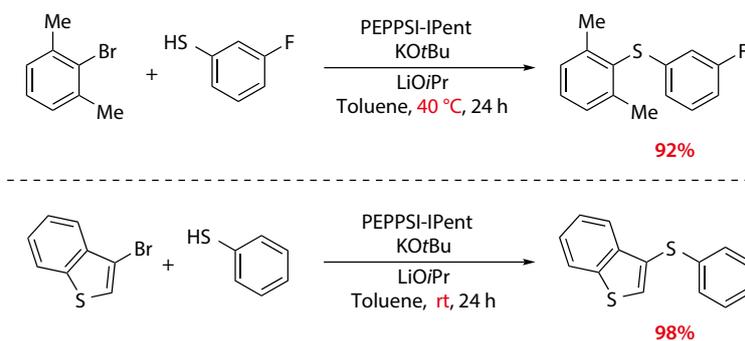
Buchwald-Hartwig-Yagupol'skii アリールアミノ化反応は、反応を加速するために通常は強塩基性条件下で反応を実施する必要がありますが、その結果として基質適用範囲が狭くなるのが欠点です。一方、PEPPSI-IPent を用いればおだやかな条件下で様々な塩化アリールと第 2 級アミンとのカップリング生成物が得られます。さらに、電子不足アニリンと電子豊富な塩化アリールとの反応にも効果的です。これらの反応において、IPent の収率は PEPPSI-IPr を常に上回っています^{1,4,5}。



ヘテロアリアルスズ化合物と塩化アリアルの Still-Migita クロスカップリング反応では、PEPPSI™-IPent の存在下、100°C以下で反応が進行し、温度に不安定なクロスカップリングの基質にも適用可能であることが示されました。Organらは、様々な基質に対して 30-80°Cで良好な反応収率が得られることを報告しています^{1,6}。



一般に C-S 結合形成反応はしばしば高温を要しますが、PEPPSI-IPent の存在下ではおだやかな反応条件下、金属触媒スルフィン化反応によりチオールが得られます。硫化アリアル、アルキルチオールをはじめそのほかのかさ高い基質と（ヘテロ）アリアル塩化物とのスルフィン化が報告されています^{1,7}。



製品リスト

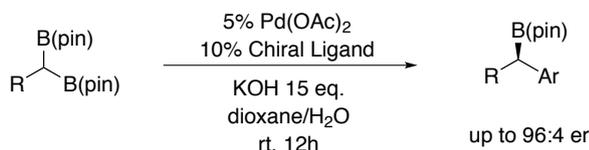
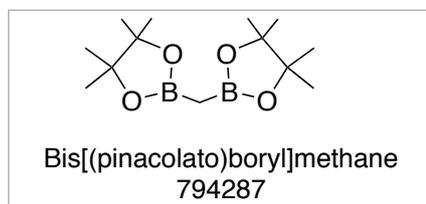
製品名	CAT.NO.
Pd-PEPPSI-IPent catalyst ≥95%	732117
PEPPSI-IPr catalyst 98%	669032
PEPPSI-SIPr catalyst	674702

References

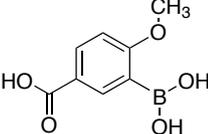
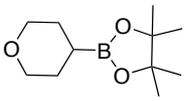
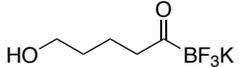
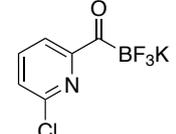
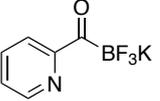
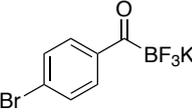
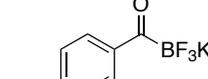
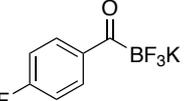
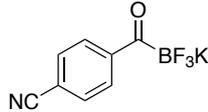
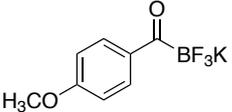
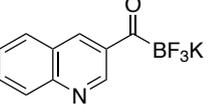
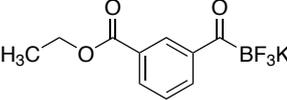
- (1) Valente, C.; Calimsiz, S.; Hoi, K. H.; Mallik, D.; Sayah, M.; Organ, M. G. *Angew. Chem. Int. Ed.* **2012**, *51*, 3314.
- (2) Organ, M. G.; Calimsiz, S.; Sayah, M.; Hoi, K. H.; Lough, A. J. *Angew. Chem. Int. Ed.* **2009**, *48*, 2383.
- (3) Calimsiz, S.; Organ, M. G. *Chem. Commun.* **2011**, *47*, 5181.
- (4) Hoi, K. H.; Calimsiz, S.; Froese, R. D. J.; Hopkinson, A. C.; Organ, M. G. *Chem. Eur. J.* **2011**, *17*, 3086.
- (5) Hoi, K. H.; Calimsiz, S.; Froese, R. D. J.; Hopkinson, A. C.; Organ, M. G. *Chem. Eur. J.* **2012**, *18*, 145.
- (6) Dowlut, M.; Mallik, D.; Organ, M. G. *Chem. Eur. J.*, **2010**, *15*, 4279.
- (7) Sayah, M.; Organ, M. G. *Chem. Eur. J.* **2011**, *17*, 11719.

ボロン酸類 新製品

キラルボロン酸合成の鍵となるビルディングブロックです。エナンチオ選択的鈴木-宮浦反応に用います¹。



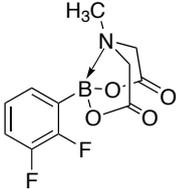
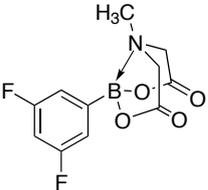
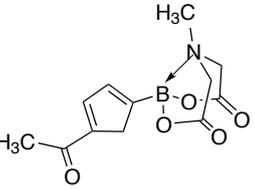
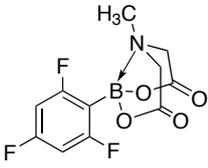
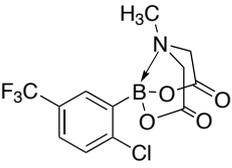
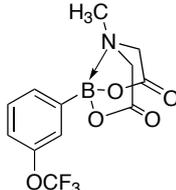
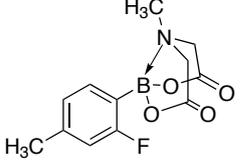
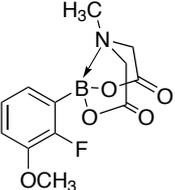
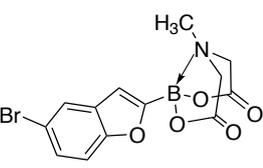
ボロン酸およびその誘導体 新製品

794155 	753602 	804681 	804436 	804509 
804444 	804525 	804711 	804887 	804363 
804991 	804452 	2,000 以上のボロン酸とその誘導体の一覧は Web からご覧ください。 Aldrich.com/boron-jp		

MIDAボロネート 新製品

N-methyliminodiacetic acid(MIDA) で保護されたボロン酸エステルで、空気や水に安定で取り扱いが容易、かつクロマトグラフィー精製も可能です。温和な塩基性水溶液中で脱保護できますが、無水のクロスカップリング条件では不活性であるというユニークな性質を有します。この性質を利用した反復クロスカップリングによりポリエー天然物合成や自動合成などが報告されています²。

アルドリッチでは約 200 種類の MIDA ボロネートを提供しています。

805025 	804800 	804134 	805270 	802433 
805327 	805289 	805262 	804940 	

References

- (1) A Catalytic Enantioselective Suzuki Reaction for the Construction of Chiral Organoboronates, Sun, C.; Potter, B.; Morken, J.P. *J. Am. Chem. Soc.*, **2014**, *136* (18), pp 6534–6537.
- (2) Synthesis of many different types of organic small molecules using one automated process, Li, J.; Ballmer, S.G.; Burke, M.D. et al. *Science* **2015**, Vol. 347, Issue 6227, pp. 1221–1226

Accelerate the joy of your discovery

Add **Aldrich**TM

KitAlysisTM は、クロスカップリング反応の触媒スクリーニングを効率アップするユニークなキットです

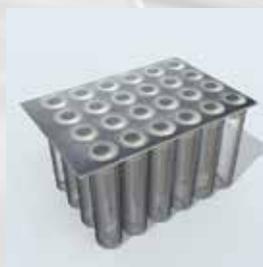
- 100mg程度の基質で24種のクロスカップリング反応を実施
- 触媒 (1 μ mol, 12種x2)、塩基、溶媒を含むオールインワンのキット
- グローブボックス内での操作は不要
- 操作マニュアル、デモンストレーションビデオ、計算用のツールなどをオンラインでサポート
- グローバル製薬企業のメディシナル/プロセスケミストとの共同開発

KitAlysisの詳細はWebをご覧ください

Aldrich.com/KitAlysis



キットの内容



秤量済み触媒と攪拌子を含む
ガラスバイアル(4セット)



アンプル入りの Sure/SealTM
脱水グレード無水溶媒と塩基

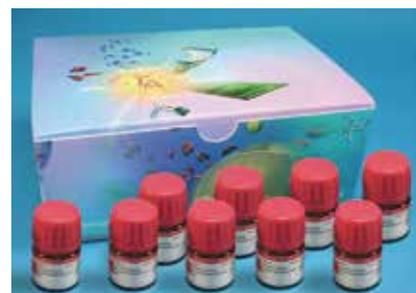


秤量済みの粉末塩基試薬(攪
拌子つき)



評価用の内部標準試薬

触媒・配位子キット



Buchwald 配位子キット I	659932-1KT	¥51,900
Buchwald 配位子キット II	687243-1KT	¥94,700
Buchwald 配位子キット III	698903-1KT	¥148,200

キット内容	CatNo	容量	単品価格	キット I	キット II	キット III
DavePhos	638021	1g	¥13,700	✓	✓	✓
Xphos	638064	1g	¥9,000	✓	✓	✓
Sphos	638072	1g	¥10,400	✓	✓	✓
tBuXPhos	638080	1g	¥8,100	✓	✓	✓
cyclohexyl JohnPhos	638099	1g	¥6,400	✓	✓	✓
JohnPhos	638439	1g	¥7,500	✓	✓	✓
RuPhos	663131	1g	¥11,000	✓	✓	✓
tetramethyl di-tBuXPhos	675938	250mg	¥14,700		✓	✓
^s SPhos	677280	500mg	¥19,900		✓	✓
tBuMePhos	695211	1g	¥16,100			✓
MePhos	695262	1g	¥14,700			✓
tBuDavePhos	695874	1g	¥14,700			✓
PhDavePhos	695882	1g	¥11,500			✓

Buchwald パラダサイクル触媒前駆体キット 741868-1KT ¥60,600

キット内容	CatNo	容量	単品価格
Xphos Pd G1	704954	250 mg	¥12,300
RuPhos Pd G1, MTBE adduct	707589	250 mg	¥19,700
BrettPhos Pd G1, MTBE adduct	718750	100 mg	¥11,700
Sphos Pd G1, MTBE adduct	704946	250 mg	¥10,200
tBuXPhos Pd G1	708739	250 mg	¥10,500

有機触媒キット (674575)、メタセシス触媒キット (687944) もございます

©2016 Sigma-Aldrich Co. LLC. All rights reserved. SIGMA, SAFC and SIGMA-ALDRICH are trademarks of Sigma-Aldrich Co. LLC, registered in the US and other countries. FLUKA is a trademark of Honeywell Specialty Chemicals Seelze GmbH. Sigma-Aldrich, Sigma and SAFC brand products are sold by affiliated Sigma-Aldrich distributors. 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 www.sigmaaldrich.com. PEPPSI is a trademark of Total Synthesis Ltd.

本記載の製品および情報は2016年6月1日現在の情報であり、掲載の品目、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

〒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