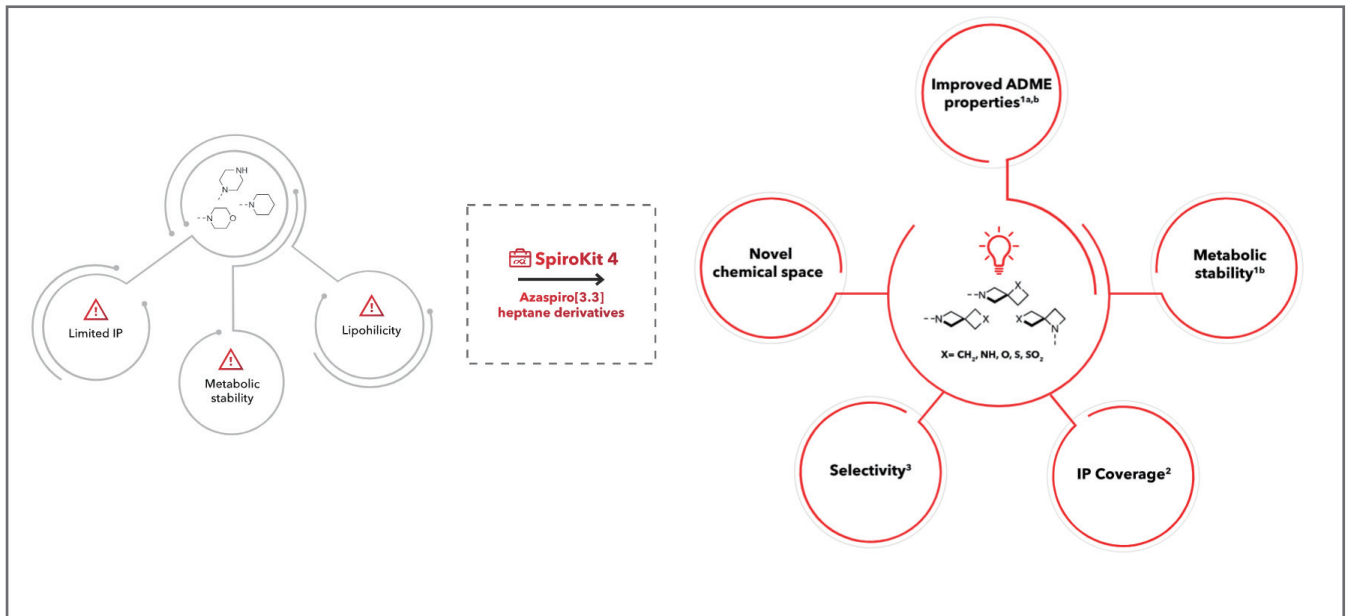


SpiroKit 4

SpiroKit 4 : 6 員環アイソスター、アザスピロ [3.3] ヘプタン

一般的に創薬化学におけるビルディングブロックでは、ピペリジン、ピペラジン、モルホリン、およびチオモルホリンなどの骨格が使われています。SpiroKit 4 は、これらの骨格代替として使用可能なアザスピロ [3.3] ヘプタン誘導体を採用しています。

創薬分子に含まれる単環系複素環部分を、スピロ [3.3] ヘプタン誘導体に置き換えることで、その創薬分子の物理化学的および生化学的特性を独自に調整することができます。そして、これらの調整によって新しい化学空間の探索が可能になります。また、この手法を用いることで、代謝安定性や ADME を改善できた例も報告されています。



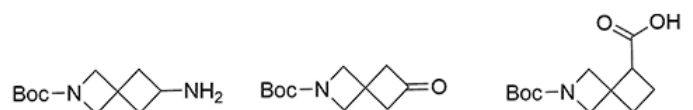
SPIROKIT 4a: 置換基を有するピペリジンの等価体

このキットは、6 位に置換基を導入した 2-アザスピロ [3.3] ヘプタン類縁体で構成されており、これらの骨格はピペリジンの等価体として取り扱うことができます。



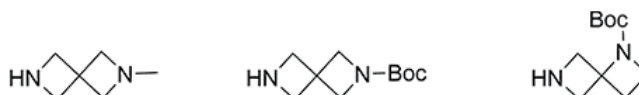
SPIROKIT 4b: 反応点を有するピペリジンの等価体

このキットは、6 若しくは 5 位に反応点を有する 2-アザスピロ [3.3] ヘプタン類縁体の Boc 保護体で構成されています。



SPIROKIT 4c: ピペラジン等価体

このキットは、2,6-ジアザスピロ [3.3] ヘプタン類縁体で構成されており、これらの骨格はピペラジンの等価体として取り扱うことができます。



SPIROKIT 4d: モルホリン等価体

このキットは、オキソ-,チア-,チアジオキソ-アザスピロ [3.3] ヘプタン類縁体で構成されており、これらの骨格はモルホリン、チオモルホリン、チオモルホリンジオキソの等価体として取り扱うことができます。



関連文献、特許公報：

Improved ADME properties
Angew. Chem. Int. Ed. 2008, 47, 4512
Angew. Chem. Int. Ed. 2010, 49, 3524

Metabolic stability
Angew. Chem. Int. Ed. **2010**, 49, 3524

IP coverage
WO2020165062

Selectivity
WO2016055394

詳細情報やお問い合わせはこちらから



重松貿易株式会社 化学品部
Shigematsu & Co.,Ltd.

<大阪本社>
〒541-0047 大阪市中央区淡路町 2 丁目 2 番 5 号
TEL : (06)6231-6146 FAX : (06)6231-6149

<つくばライフサイエンスオフィス>
〒300-2655 茨城県つくば市万博公園西 F26 街区 1 インプレス 103
TEL : (029)848-3220 FAX : (029)848-3221

WEB : www.shigematsu-bio.com/ Mail : info@shigematsu-bio.com