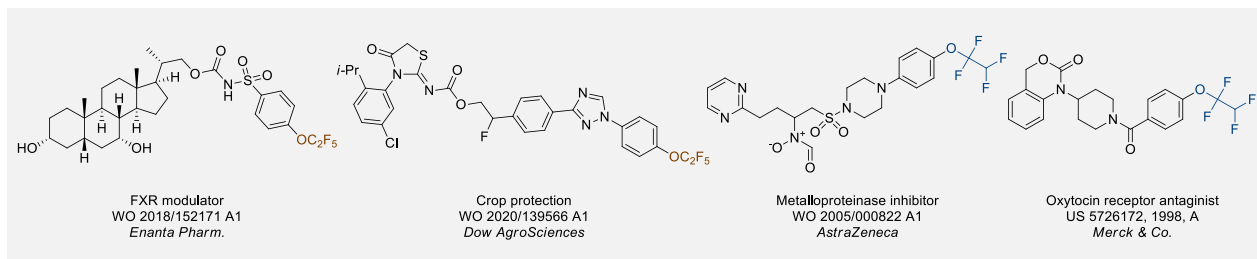


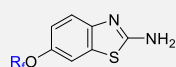
Fluoroalkyl ethers for Drug Design

Introduction

More than 20% of all modern pharmaceuticals and up to 30% of agrochemicals contain at least one fluorine atom. As a typical fluoroalkoxy group, trifluoromethoxy ($-\text{OCF}_3$) is prevalent in bioactive compounds. Compared to the well-studied $-\text{OCF}_3$ group, its bulkier analogue, pentafluoroethoxy ($-\text{OC}_2\text{F}_5$) group, has been much less explored. In fact, $-\text{OC}_2\text{F}_5$ and $-\text{OCF}_3$ groups have similar electronic properties, lipophilicity and metabolic stability.¹⁻⁴ In this context, *Enamine* offers a library of various fluoroalkyl-substituted ethers for drug design.



Case studies



Riluzole ($R_1 = \text{CF}_3$)
(treatment of neurological diseases)

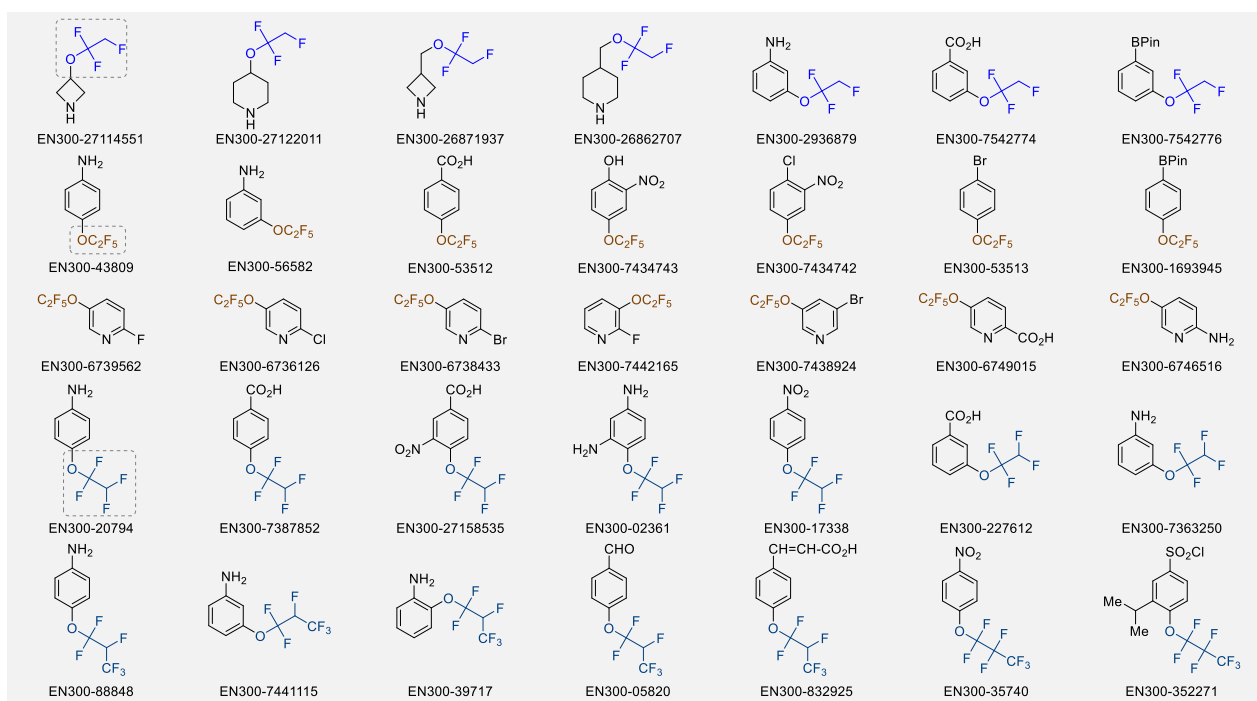
R_1	CF_3	CF_2H	CH_2CF_3	CF_2CF_3	$\text{CF}_2\text{CF}_2\text{H}$
ED ₅₀	3.2	7.5	6.5	2.5	8.5

"Antiglutamate" activities of 6-fluoroalkoxy-2-benzothiazolamines.³

Properties

- ↑ lipophilicity;
- ↑ electron-withdrawing ability;
- ↑ chemical and thermal stability;
- ↑ metabolic stability.

We offer: more than 50 of fluoroalkyl ethers from stock on a 5-10 g scale.



References

1. T. Besset et al. *Org. Chem. Front.* **2016**, 3, 1004.
2. M.-L. Fu et al. *J. Org. Chem.* **2017**, 82, 7, 3702.

3. P. Jimonet et al. *J. Med. Chem.* **1999**, 42, 15, 2828.
4. A. Granados et al. *J. Org. Chem.* **2020**, 85, 16, 10378.



ご興味があるものがあれば、こちらまでお問い合わせ下さい!!



E-mail : info@namiki-s.co.jp
TEL(本社) : 03-3354-4026
TEL(大阪支店) : 06-6231-5444



ご希望条件に合う試薬を無料で抽出&データ化!

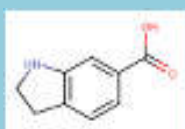
試薬絞り込みサービス

こんなお悩みを
解決致します!!

テーマを進めていく上で、特定のBuilding Blocksが
まとめて必要になる時があるが、市販データベース等
から選択するのは手間が掛かる。

ご興味がある母核等やご希望条件(価格、在庫量)に基づき、
Enamine社最新データから絞り込んだ結果を無償で提供致します!!

■参考例■

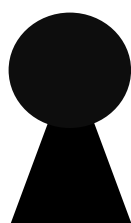


C原子の部分はN, O, Sでも可能
5員環 = 芳香環 or 脂肪環
・6員環からオルト位にNが置換
6員環 = 芳香環
・パラ位にCO₂H基を配置

在庫量: 1g 以上
価格: 50,000円/g以下

お奨めポイント

在庫量/価格を指定可能
ご予算内で購入できる製品のみが
データで届くので便利です!!

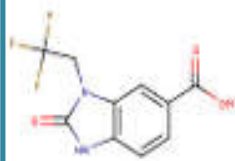


Enamine社試薬コレクション

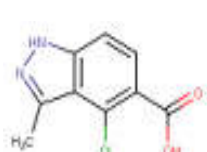
- 在庫品 (納期:10営業日)
約**19万品目**
- バーチャル品 (納期:1-2カ月)
約**2,000万品目**

<在庫品19万品目からの絞り込み結果>

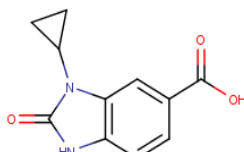
参考例での結果:109品目



EN300-266689



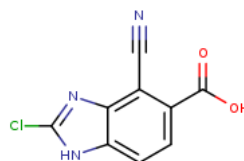
EN300-6360531



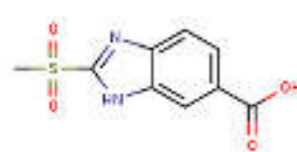
EN300-304699

<バーチャル品2,000万品目からの絞り込み結果>

参考例での結果:9,437品目



BBV-78488619



BBV-95777641

⇒絞り込み結果よりご興味のある品目を選択頂きお問い合わせ下さい

サービスの特徴

手間と時間を省きながら、ユニークな試薬を効率よくご選択頂けます!!

- 市販データベースにない試薬も検索対象となります。

Enamine社最新データから検索するため、ACDやSciFinder等市販データベースに
収載されていない、新しい試薬が見つかる場合がございます。

- ご希望条件に沿った試薬のみをご提案します。

在庫量や価格でも絞り込めるため、試薬を入手できず何度も探す手間が省けます。



E-mail : info@namiki-s.co.jp
TEL(本社) : 03-3354-4026
TEL(大阪支店) : 06-6231-5444