

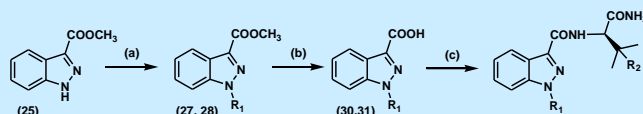
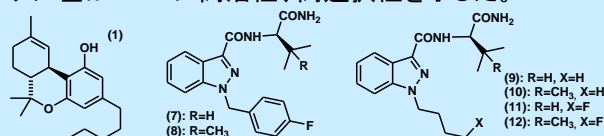
1-Bromo-5-fluoropentane

1-ブロモ-5 フルオロペンタン



Purity	97%
CAS Number	407-97-6
Molecular Formula	C5H102BrF
Molecular Weight	169.04

大麻草には 60 種以上の天然カンナビノイド(CB)が含まれ、1980 年代にガン化学療法の嘔吐抑制効果が認められた。ここから合成 CB(SC)の医療的な関心が高まり、CB 受容体(CB-1, CB-2)が見つけられた。2009 年の Pfizer からの特許にインスピレーションを得て、インダゾール骨格での SC 誘導体を検討。モノフルオロペンチル基が CB1 に高活性、高選択性を示した。



(a) (25) in THF + t-BuOK, Br(CH₂)₅X, 0~r.t.*48hr., wash, EtOAc extract, evaporate

(b) (27, 28) in MeOH + 1M aq-NaOH, r.t.*48hr, evaporate, H₂O, EDC extract

(c) (30, 31) in DMF + EDC + HOBt + DIPEA, r.t.*24hr, H₂O, EtOAc extract

Indazole SCs 構造と CB1、CB2 受容体への活性

No.	CB compounds	CB1-EC50 (nM)	CB2-EC50 (nM)	CB1 selectivity
1	Δ ⁹ -THC (1)	172	–	–
2	AB-FUBINACA (7)	1.8	3.2	1.8
3	ADB-FUBINACA (8)	1.2	3.5	2.9
4	AB-PINACA (9)	1.2	2.5	2.1
5	ADB-PINACA (10)	0.52	0.88	1.7
6	5F-AB-PINACA (11)	0.48	2.6	5.4
7	5F-ADB-PINACA (12)	0.24	2.1	8.8

CB1; 多幸感、鎮痛作用を発現。中枢神経に分布。PTSD などのトラウマによる疾患治療目標

CB2; 長期記憶、運動活性、不安にかかわる。抹消の免疫細胞に発現。

CB1 selectivity; CB2-EC50/CB1-EC50

J. Med. Chem., 2016, 59, 7, p.3515–3531

Properties:

Appearance	Liquid
Boiling point, °C	162