

# Реагенты для определения оптической чистоты методом ЯМР

## Технические характеристики

По вопросам продаж и поддержки обращайтесь:

Алматы (7273)495-231  
Ангарск (3955)60-70-56  
Архангельск (8182)63-90-72  
Астрахань (8512)99-46-04  
Барнаул (3852)73-04-60  
Белгород (4722)40-23-64  
Благовещенск (4162)22-76-07  
Брянск (4832)59-03-52  
Владивосток (423)249-28-31  
Владикавказ (8672)28-90-48  
Владимир (4922)49-43-18  
Волгоград (844)278-03-48  
Вологда (8172)26-4159  
Воронеж (473)204-51-73  
Екатеринбург (343)384-55-89  
Иваново (4932)77-34-06  
Ижевск (3412)26-03-58  
Иркутск (395)279-98-46  
Казань (843)206-01-48

Калининград (4012)72-03-81  
Калуга (4842)92-23-67  
Кемерово (3842)65-04-62  
Киров (8332)68-02-04  
Коломна (4966)23-41-49  
Кострома (4942)77-07-48  
Краснодар (861)203-40-90  
Красноярск (391)204-63-61  
Курск (4712)77-13-04  
Курган (3522)50-90-47  
Липецк (4742)52-20-81  
Магнитогорск (3519)55-03-13  
Москва (495)268-04-70  
Мурманск (8152)59-64-93  
Набережные Челны (8552)20-53-41  
Нижний Новгород (831)429-08-12  
Новокузнецк (3843)20-46-81  
Ноябрьск (3496)41-32-12  
Новосибирск (383)227-86-73

Омск (3812)21-46-40  
Орел (4862)44-53-42  
Оренбург (3532)37-68-04  
Пенза (8412)22-31-16  
Петрозаводск (8142)55-98-37  
Псков (8112)59-10-37  
Пермь (342)205-81-47  
Ростов-на-Дону (863)308-18-15  
Рязань (4912)46-61-64  
Самара (846)206-03-16  
Саранск (8342)22-96-24  
Санкт-Петербург (812)309-46-40  
Саратов (845)249-38-78  
Севастополь (8692)22-31-93  
Симферополь (3652)67-13-56  
Смоленск (4812)29-41-54  
Сочи (862)225-72-31  
Ставрополь (8652)20-65-13  
Сургут (3462)77-98-35

Сыктывкар (8212)25-95-17  
Тамбов (4752)50-40-97  
Тверь (4822)63-31-35  
Тольятти (8482)63-91-07  
Томск (3822)98-41-53  
Тула (4872)33-79-87  
Тюмень (3452)66-21-18  
Ульяновск (8422)24-23-59  
Улан-Удэ (3012)59-97-51  
Уфа (347)229-48-12  
Хабаровск (4212)92-98-04  
Чебоксары (8352)28-53-07  
Челябинск (351)202-03-61  
Череповец (8202)49-02-64  
Чита (3022)38-34-83  
Якутск (4112)23-90-97  
Ярославль (4852)69-52-93

Россия +7(495)268-04-70

Казахстан +7(7172)727-132

Киргизия +996(312)96-26-47

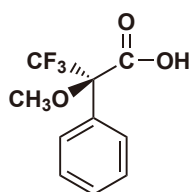
Адрес: <https://tci.nt-rt.ru/> || эл.почта: [tic@nt-rt.ru](mailto:tic@nt-rt.ru)

# Reagents for the Determination of Optical Purity by NMR

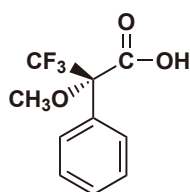
## Mosher's Acids and Derivatives

MTPA esters or amides, which are afforded by the condensation of Mosher's acid (MTPA) and alcohols or amines are frequently used to spectroscopically (<sup>1</sup>H-NMR) estimate the optical purity of a compound. Through the synthesis of diastereomers of (+) and (-)-MTPA and subsequent chemical shift analysis, absolute stereochemistry of chiral compounds can be readily determined.

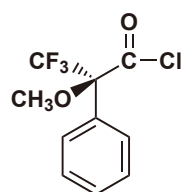
References 1) J. A. Dale, H. S. Mosher, *J. Am. Chem. Soc.* **1973**, 95, 512. <https://doi.org/10.1021/ja00783a034>  
2) I. Ohtani, T. Kusumi, Y. Kashman, H. Kakisawa, *J. Am. Chem. Soc.* **1991**, 113, 4092. <https://doi.org/10.1021/ja00011a006>



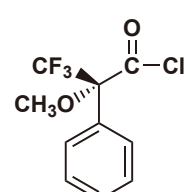
**(-)-MTPA**  
1g / 5g [M0831]



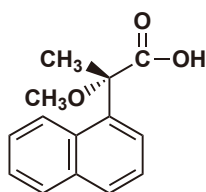
**(-)-MTPA**  
1g / 5g [M0832]



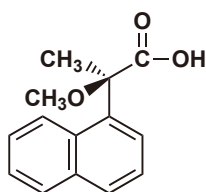
**(S)-(+)-MTPA-Cl**  
100mg / 1g [M1103]  
(ca. 18% in Dichloromethane)  
5g [M2214]



**(R)-(-)-MTPA-Cl**  
100mg / 1g [M1104]  
(ca. 18% in Dichloromethane)  
5g [M2215]



**(S)-(+)-MaNP Acid**  
100mg [M1367]

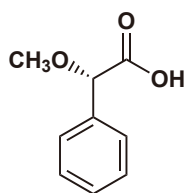


**(R)-(-)-MaNP Acid**  
100mg [M1366]

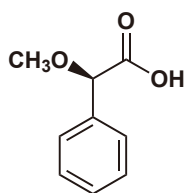
## Mandelic Acid Derivatives

The determination of absolute chemistry by using α-methoxyphenyl acetic acids is referred to as The Trost method. Absolute stereochemistry of a secondary alcohol can be determined from the corresponding esters.

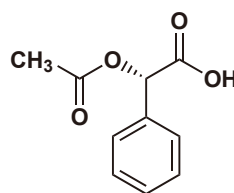
Reference B. M. Trost, J. P. Springer, *et al.*, *J. Org. Chem.* **1986**, 51, 2370. <https://doi.org/10.1021/jo00362a036>



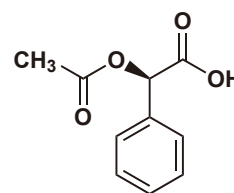
**(S)-(+)-α-Methoxyphenylacetic Acid**  
1g / 5g [M0829]



**(R)-(-)-α-Methoxyphenylacetic Acid**  
100mg / 1g / 5g [M0830]

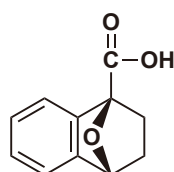


**(+)-O-Acetyl-L-mandelic Acid**  
5g / 25g [A1454]

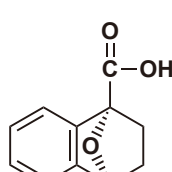


**(-)-O-Acetyl-D-mandelic Acid**  
5g / 25g [A1453]

## THENA



**(S)-THENA**  
100mg [T3002]



**(R)-THENA**  
100mg [T3001]

The absolute chemistry of alcohols can be determined by NMR of esters from the alcohol and THENA. THENA is effective for alcohols which don't readily react with MTPA.

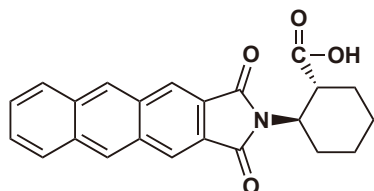
Reference S. Sungsuwan, T. Thongpanchang, *et al.*, *Tetrahedron Lett.* **2010**, 51, 4965. <https://doi.org/10.1016/j.tetlet.2010.07.062>

# Reagents for the Determination of Optical Purity by NMR

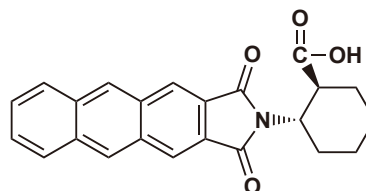
## Highly Potent Chiral Derivatizing Reagents

These acids, developed by Ohruí *et al.*, are particularly useful for alcohols whose chiral center is far away from the hydroxy group.<sup>1,2)</sup>

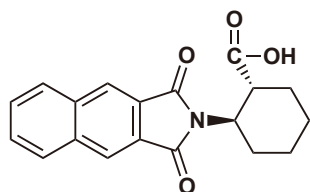
**References** 1) H. Ohruí, H. Terashima, K. Imaizumi, K. Akasaka, *Proc. Jpn. Acad., Ser. B* **2002**, 78, 69. <https://doi.org/10.2183/pjab.78.69>  
2) K. Imaizumi, H. Terasima, K. Akasaka, H. Ohruí, *Anal. Sci.* **2003**, 19, 1243. <https://doi.org/10.2116/analsci.19.1243>



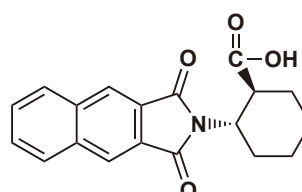
(1*R*,2*R*)-2-(Anthracene-2,3-dicarboximido)-  
cyclohexanecarboxylic Acid  
100mg [A1657]



(1*S*,2*S*)-2-(Anthracene-2,3-dicarboximido)-  
cyclohexanecarboxylic Acid  
100mg [A1658]



(1*R*,2*R*)-2-(Naphthalene-2,3-dicarboximido)-  
cyclohexanecarboxylic Acid  
100mg [N0713]

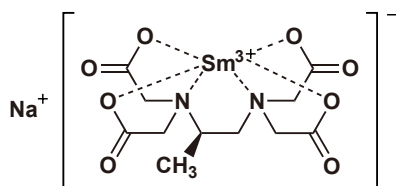


(1*S*,2*S*)-2-(Naphthalene-2,3-dicarboximido)-  
cyclohexanecarboxylic Acid  
100mg [N0714]

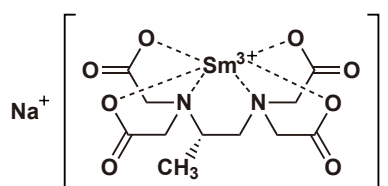
## Water-soluble Chiral Shift Reagents

Samarium complexes developed by Kabuto *et al.* are used as chiral shift reagents for optical purity and absolute chemistry determination of  $\alpha$ -amino acids and  $\alpha$ -hydroxy acids.

**Reference** K. Kabuto, Y. Sasaki, *J. Chem. Soc., Chem. Commun.* **1987**, 670. <https://doi.org/10.1039/C39870000670>



Sodium [(*R*)-1,2-Diaminopropane-  
*N,N,N',N'*-tetraacetato]samarate(III)  
100mg [S0473]



Sodium [(*S*)-1,2-Diaminopropane-  
*N,N,N',N'*-tetraacetato]samarate(III)  
100mg [S0474]

## По вопросам продаж и поддержки обращайтесь:

Алматы (7273)495-231  
Ангарск (3955)60-70-56  
Архангельск (8182)63-90-72  
Астрахань (8512)99-46-04  
Барнаул (3852)73-04-60  
Белгород (4722)40-23-64  
Благовещенск (4162)22-76-07  
Брянск (4832)59-03-52  
Владивосток (423)249-28-31  
Владикавказ (8672)28-90-48  
Владимир (4922)49-43-18  
Волгоград (844)278-03-48  
Вологда (8172)26-4159  
Воронеж (473)204-51-73  
Екатеринбург (343)384-55-89  
Иваново (4932)77-34-06  
Ижевск (3412)26-03-58  
Иркутск (395)279-98-46  
Казань (843)206-01-48

Калининград (4012)72-03-81  
Калуга (4842)92-23-67  
Кемерово (3842)65-04-62  
Киров (8332)68-02-04  
Коломна (4966)23-41-49  
Кострома (4942)77-07-48  
Краснодар (861)203-40-90  
Красноярск (391)204-63-61  
Курск (4712)77-13-04  
Курган (3522)50-90-47  
Липецк (4742)52-20-81  
Магнитогорск (3519)55-03-13  
Москва (495)268-04-70  
Мурманск (8152)59-64-93  
Набережные Челны (8552)20-53-41  
Нижний Новгород (831)429-08-12  
Новокузнецк (3843)20-46-81  
Ноябрьск (3496)41-32-12  
Новосибирск (383)227-86-73

Омск (3812)21-46-40  
Орел (4862)44-53-42  
Оренбург (3532)37-68-04  
Пенза (8412)22-31-16  
Петрозаводск (8142)55-98-37  
Псков (8112)59-10-37  
Пермь (342)205-81-47  
Ростов-на-Дону (863)308-18-15  
Рязань (4912)46-61-64  
Самара (846)206-03-16  
Саранск (8342)22-96-24  
Санкт-Петербург (812)309-46-40  
Саратов (845)249-38-78  
Севастополь (8692)22-31-93  
Симферополь (3652)67-13-56  
Смоленск (4812)29-41-54  
Сочи (862)225-72-31  
Ставрополь (8652)20-65-13  
Сургут (3462)77-98-35

Сыктывкар (8212)25-95-17  
Тамбов (4752)50-40-97  
Тверь (4822)63-31-35  
Тольятти (8482)63-91-07  
Томск (3822)98-41-53  
Тула (4872)33-79-87  
Тюмень (3452)66-21-18  
Ульяновск (8422)24-23-59  
Улан-Удэ (3012)59-97-51  
Уфа (347)229-48-12  
Хабаровск (4212)92-98-04  
Чебоксары (8352)28-53-07  
Челябинск (351)202-03-61  
Череповец (8202)49-02-64  
Чита (3022)38-34-83  
Якутск (4112)23-90-97  
Ярославль (4852)69-52-93

Россия +7(495)268-04-70

Казахстан +7(7172)727-132

Киргизия +996(312)96-26-47

Адрес: <https://tci.nt-rt.ru/> || эл.почта: [tic@nt-rt.ru](mailto:tic@nt-rt.ru)