

新しい医薬品候補化合物：トリフロンの合成

柴田哲男（未来材料創成工学専攻）

有する芳香族化合物の合成はお任せ
電子吸引性が高いトリフリル基を

技術概要

thia-Fries 転位や双極子環化付加反応を用いて、様々なヘテロアリールトリフロンを合成した。

背景・従来技術

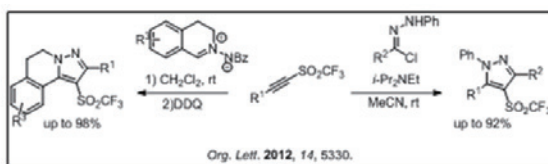
トリフルオロメチルスルホニル（トリフリル）基は非常に強力な電子求引性基であり、化合物内に導入することによって、親化合物の生理活性などの物性を大きく変化させることが期待される。トリフリル基を有する芳香族化合物、すなわち芳香族トリフロンは、医薬品や農薬合成において頻繁に用いられている母骨格の一つとして挙げられ、またキラル触媒や機能性材料の分野においても利用されている。

特徴

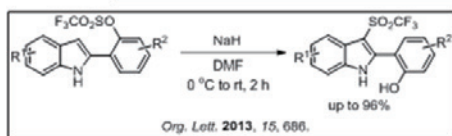
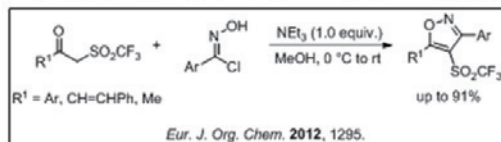
thia-Fries 転位を用いるトリフロンの合成では、ヘテロアレンに対する [1,3] および [1,5] 転位を用いて、ヘテロアリールトリフロンを合成した。また、双極子環化付加反応を用いてピラゾールトリフロンを、タンデム反応を用いてイソキサゾールトリフロンを合成した。現在は、今までほとんど報告例のなかったオレフィン部位への立体選択的なトリフリル基の転位によるビニルトリフロンの合成を行っている。

実用化イメージ

生理活性を示す化合物にトリフリル基を導入し、アッセイにより生理活性の変化を図り、有望な化合物が発見された場合、その構造最適化を図る。



1,3-双極子環化付加反応を用いてピラゾールトリフロン(スキーム上)を、タンデム反応を用いてイソキサゾールトリフロン(スキーム下)を合成した。



thia-Fries転位を用いて、ヘテロアリールトリフロンを合成した(スキーム左)。

企業への提案

研究者から企業へのメッセージ

柴田研究室では有機フッ素化合物の合成の研究を行っています。医薬品や機能性材料(フタロシアニン)、サリドマイドなど幅広く研究をしています。フッ素のことやフッ素化合物に関することは何でもご相談ください。

文献・特許

- ・ Xu, X.-H.; Liu, G.-K.; Azuma, A.; Tokunaga, E.; Shibata, N. Org. Lett. 2011, 13, 4854.
- ・ Kawai, H.; Yuan, Z.; Tokunaga, E.; Shibata, N. Org. Lett. 2012, 14, 5330.
- ・ Xu, X.-H.; Wang, X.; Liu, G.-K.; Tokunaga, E.; Shibata, N. Org. Lett. 2012, 14, 2544.
- ・ Kawai, H.; Sugita, Y.; Tokunaga, E.; Shibata, N. Eur. J. Org. Chem. 2012, 1295.
- ・ Xu, X.-H.; Taniguchi, M.; Azuma, A.; Liu, G.-K.; Tokunaga, E.; Shibata, N. Org. Lett. 2013, 15, 686.

利用可能な設備・装置

- ・ NMR
- ・ HPLC
- ・ LCMS
- ・ GC
- ・ IR

共同研究を希望するテーマ

- ・ 医薬品中間体の合成法の開発
- ・ 合成プロセスの開発
- ・ 新規医薬品候補化合物の合成
- ・ 機能性材料の開発
- ・ 環境にやさしい合成法の開発
- ・ 不斉合成法の開発

試作品状況

無 提示 提供
可 可