

テトラフルオロエチレンを用いた新規テトラフルオロスルファニル化合物の合成

(東大院工¹・AGC(株)²) ○安尾英修¹・相川光介¹・野崎京子¹・岡添隆^{1,2}

Synthesis of Novel Tetrafluoro- λ^6 -sulfanyl Compounds using Tetrafluoroethylene (¹*Graduate School of Engineering, The University of Tokyo*, ²*Material Integration Laboratories, AGC Inc.*)

○Eisuke Yasuo¹, Kohsuke Aikawa¹, Kyoko Nozaki¹, Takashi Okazoe^{1,2}

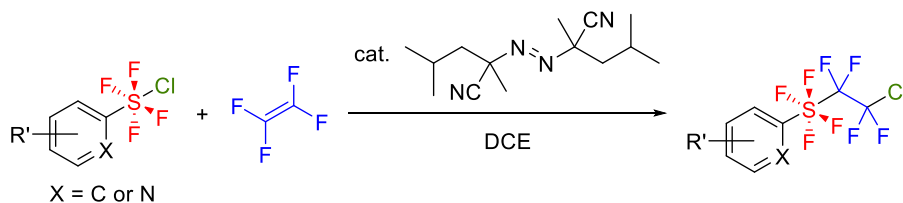
Fluorinated functional groups such as the trifluoromethyl (CF₃) group play an important role in drug discovery due to their high hydrophobicity. The pentafluorosulfanyl (SF₅) group has attracted much attention in recent years because of its increased hydrophobicity compared to the CF₃ group.¹⁾ SF₄CF₃ group is also known as a group with higher hydrophobicity.²⁾ However, there is still room for development of novel hydrophobic functional groups.

Herein, we report an even more hydrophobic SF₄R group bearing a polyfluoroalkyl chain as R. The radical addition reaction of ArSF₄Cl to tetrafluoroethylene in the presence of an azo-type radical initiator provided the corresponding novel tetrafluoro- λ^6 -sulfanyl compounds (ArSF₄CF₂CF₂Cl). The present reaction can be applied to ArSF₄Cl compounds with a variety of substituents (R') on the aromatic ring. The hydrophobicity of the functional groups obtained was also quantitatively evaluated.

Keywords : Tetrafluorosulfanyl; Hypervalent Sulfur; Lipophilicity; Tetrafluoroethylene

トリフルオロメチル (CF₃) 基をはじめとする含フッ素官能基はその高い疎水性から創薬において重要な役割を担っている。近年、ペンタフルオロスルファニル (SF₅) 基が CF₃ 基と比べ高い疎水性を有するとして注目されているが¹⁾、さらに高い疎水性を有する SF₄CF₃ 基も知られている²⁾。しかし、疎水性の含フッ素官能基にはまだ開発の余地がある。

そこで本研究では、より高い疎水性を与える含フッ素官能基として R にポリフルオロアルキル鎖を持つ SF₄R 基の合成に着手した。DCE 溶液中、アゾ系ラジカル開始剤のもとで ArSF₄Cl に TFE を作用させると対応するテトラフルオロスルファニル化合物 (ArSF₄CF₂CF₂Cl) を与えた。本反応は様々な置換基 R' を有する基質に適用できた。合成した官能基について疎水性の定量的な評価を行ったので、併せて報告する。



1) Savoie, P. R.; Welch, J. T. *Chem. Rev.* **2015**, 115, 1130.

2) Kirsch, P.; Hahn, A. *Eur. J. Org. Chem.* **2006**, 1125.