

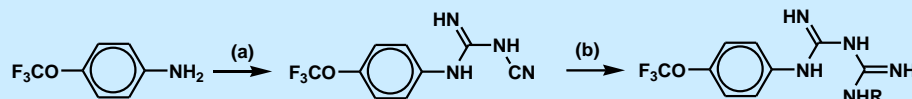
4-(Trifluoromethoxy)aniline

4-トリフルオロメトキシアニリン(略号 ; TFMA)



Purity	97%
CAS Number	461-82-5
Molecular Formula	C7H6F3NO
Molecular Weight	177.13

1. ビグアニド構造を持つマラリア予防剤 Progranil は同時に膀胱がん、大腸がん細胞に対し強い抗がん作用を示すことが報告されている。この Progranil 構造に脂肪親和性の-OCF₃基導入、アルキル側鎖長変更を試み、膀胱がん細胞群、卵巣がん細胞群でおおよそ 1/10 の IC₅₀へ改善。



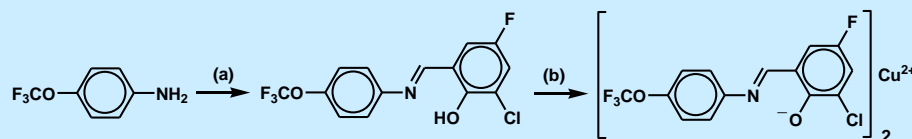
化合物	R	膀胱がん細胞群			卵巣がん細胞群	
		J82	UMUC3	T24	OVCAR3	SKOV3
Proguanil	H	65.6±5.1	24.5±2.3	32.6±2.9	23.1±1.5	43.5±3.5
C5	C5H11	2.1±0.2	3.9±0.4	1.4±0.2	1.9±0.2	9.1±0.9
C6	C6H13	3.3±0.3	2.3±0.2	4.3±0.5	2.2±0.2	7.2±0.6
C7	C7H15	3.3±0.3	3.5±0.3	3.3±0.2	2.1±0.1	7.4±0.5
C8	C8H17	2.6±0.2	3.3±0.2	3.1±0.2	3.2±	5.5±0.5
C9(比較例)	C9H19	>100	32.3±2.5	25.5±2.2	96.6±7.4	>100

Application

(a) NaN(CN)₂, HCl, H₂O, reflux*1hr, (b) CuSO₄·5H₂O, 40°C*3hr,

Molecules 2021, 26, p5775-

2. トリフルオロメトキシ基の特異な脂肪親和性に着目。TFMA のシッフ塩基の遷移金属錯体の抗がん性を検討。Cu 錯体が良化したがん細胞増殖阻害効果を示す。白金錯体抗がん剤の低価格品代替を目的。



化合物	IC ₅₀ (μM) A549(肺腺癌細胞)	IC ₅₀ (μM) MCF-7(乳癌細胞)
1	38±0.9	34±0.7
Cisplatin	24±1.1	28±0.6

(a) MeOH, reflux+40°C*3hr, (b) Cu(AcO)₂·H₂O, MeOH, reflux+60°C*6hr

J. Molecular Structure 1249, 2022, 131601

Properties:

Appearance -
Boiling point, °C 73-75/10torr

Packing: -
UN, PG: -