

新規ベンゾジアゼピンの合成

(城西大院理¹・城西大機器分析セ²) ○金子 遥香¹・鈴木 光明¹・富田 惇輝²
 Synthesis of a novel benzodiazepine (¹Graduate School of Science, Josai University,
²Instrumental analysis center, Josai University) ○Haruka Kaneko,¹ Mitsuaki Suzuki,¹ Junki
 Tomita²

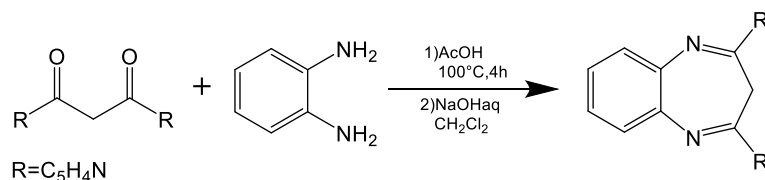
The benzodiazepine skeleton is known as a bio-active heterocycle and is an important molecular structure in biology and pharmacy. Several crystal structures have been reported for 2,4-dimethyl-1,5-benzodiazepine salts.¹⁾⁻³⁾ The molecular structure of the cation is almost flat because of electrons in the N-C-C-C-N part of the 7-membered ring delocalized. We are considering this 7-membered ring skeleton into fullerene as a substituent. In this study, we report the synthesis of 2,4-dipyridyl-3H-1,5-benzodiazepine.

2,4-dipyridyl-3H-1,5-benzodiazepine was synthesized by stirring 1,2-phenylenediamine and acetylacetone in acetic acid at 100 °C for 4 h and neutralizing the mixed solution by aqueous sodium hydroxide solution. The yellow crystal of 2,4-dipyridyl-3H-1,5-benzodiazepine was obtained by using the gas-liquid diffusion method with chloroform and hexane. The molecular structure of 2,4-dipyridyl-3H-1,5-benzodiazepine was elucidated by single crystal X-ray structural analysis.

Keywords : Fullerene; Benzodiazepines;

ベンゾジアゼピン骨格は、生理活性を有する複素環として知られており、生物学や薬学における重要な分子構造である。2,4-ジメチル-1,5-ベンゾジアゼピニウム塩について、いくつかの結晶構造が報告されている¹⁾⁻³⁾。カチオンの分子構造は7員環のN-C-C-C-N部分の電子が非局在化しているため、ほぼ平面である。当研究室ではこの7員環骨格を置換基としてフラーレンに導入することを検討している。本研究では、2,4-ジピリジル-3H-1,5-ベンゾジアゼピンの合成について報告する。

2,4-ジピリジル-3H-1,5-ベンゾジアゼピンは、酢酸中 100 °Cで 1,2-フェニレンジアミンとアセチルアセトンとを4h攪拌し、水酸化ナトリウム水溶液で中和することで合成された。2,4-ジピリジル-3H-1,5-ベンゾジアゼピンの黄色結晶はクロロホルムとヘキサンによる気液拡散法により得られた。単結晶 X 線構造解析により 2,4-ジピリジル-3H-1,5-ベンゾジアゼピンの分子構造を明らかにした。



1) A. J. Blake, *et al.*, *Z. Kristallogr.* **1991**, *194*, 148. 2) J. C. Speakman, F. B. Wilson, *Acta. Cryst.* **1976**, *B32*, 622. 3) P. L. Orioli, H. C. Lip, *Cryst. Struct. Commun.* **1974**, *3*, 477.