

28L-am09

1,5-ベンゾチアゼピン-4-オン S-オキシド誘導体の立体化学

○田畑 英嗣¹, 米田 哲也¹, 忍足 鉄太¹, 高橋 秀依¹, 夏苺 英昭¹(¹帝京大薬)

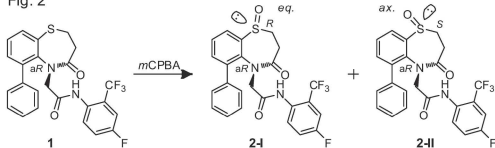
【目的】医薬品の基本母核として活用されている 1,5-ベンゾチアゼピン-4-オン骨格 (Fig.1) には、ベンゼン環とアミド結合間の sp^2-sp^2 軸に基づく不斉が存在する。これまでに軸不斉異性体を単離し、立体構造、熱力学的安定性、および生物活性との相関等を明らかにした^{1,2)}。今回、S-オキシド誘導体を合成して、中心不斉と軸不斉に基づく立体化学の解明を目指した。

Fig. 1



【結果及び考察】化合物 **1** を *m*CPBA で酸化し、ジアステレオマーの混合物として S-オキシド体 (**2-I**, **2-II**) を得た (Fig. 2)。これらを分離し、HPLC、X線結晶構造解析、CD スペクトル等を用いて、立体構造及び物理化学的性質を検討した。

Fig. 2



1) *J. Org. Chem.* **2011**, *76*, 5123–5131. 2) *Chem. Eur. J.* **2012**, *18*, 1572–1576.