

# チアゾロ[2, 3-*a*]イソキノリン-4-イウム-3-オラート誘導体およびヨウ素複合体の電気伝導性発現

(千葉大院工) ○石井 惟斗・赤染 元浩・松本 祥治

Electric Conductivity of Thiazolo[2, 3-*a*]isoquinolin-4-ium-3-olate Derivative and Its Iodine Complex (*Graduate School of Engineering, Chiba University*) ○Yuito Ishii, Motohiro Akazome, Shoji Matsumoto

We reported the synthesis of iodoisoquinolinium salts from 4-ethynyl-2-thiazolylbenzene by iodine-mediated cyclization, and their electric conductivity under I<sub>2</sub> vapor.<sup>1)</sup> When 1-iodo-2-thiazolylbenzene was treated with 1,1-dimethylpropargylalcohol under Sonogashira coupling conditions, we obtained mesoionic thiazoloisoquinolinumolate (**1**). The columnar structures with anti-parallel stacking of mesoionic part were observed in both of **1** and **1** · CHCl<sub>3</sub> in the single-crystal X-ray structures. We also found that CHCl<sub>3</sub> was included among columns. The complex of **1** and iodine was obtained by the reaction of **1** with I<sub>2</sub> in CHCl<sub>3</sub>. **1** showed the electric conductivity ( $1.3 \times 10^{-7}$  S/cm) under I<sub>2</sub> vapor. We also revealed that the complex of **1** and iodine gave  $2.5 \times 10^{-6}$  S/cm even under atmospheric conditions.

**Keywords** : Iodine; Electric Conductivity; Mesoionic Compounds; Thiazoloisoquinolinium; Iodine Complex

オルト位にチアゾール環を持つエチニルベンゼンのヨウ素環化反応によるヨードイソキノリニウム塩の合成とヨウ素による電気伝導性について報告している<sup>1)</sup>。今回、1,1-ジメチルプロパルギルアルコールとの菌頭カップリング反応による環化反応前駆体の合成により、メソイオン化合物であるチアゾロイソキノリニウムオラート(**1**)が得られた。**1**の単体およびクロホルム共結晶の結晶構造は、いずれもメソイオン部位が逆向きに積層したカラム構造を有していた(図1)。また、クロホルムはカラム同士の間が存在していた。**1**をヨウ素と作用させることでヨウ素複合体が固体として析出し、元素分析の結果**1**:I<sub>2</sub>=1:0.89であった。電気伝導度測定の結果、**1**の単体は大気下で電気伝導性を示さなかったが、ヨウ素雰囲気下で  $1.3 \times 10^{-7}$  S/cm の電気伝導度を示した。一方、ヨウ素複合体は大気下においても  $2.5 \times 10^{-6}$  S/cm の電気伝導度を示した。

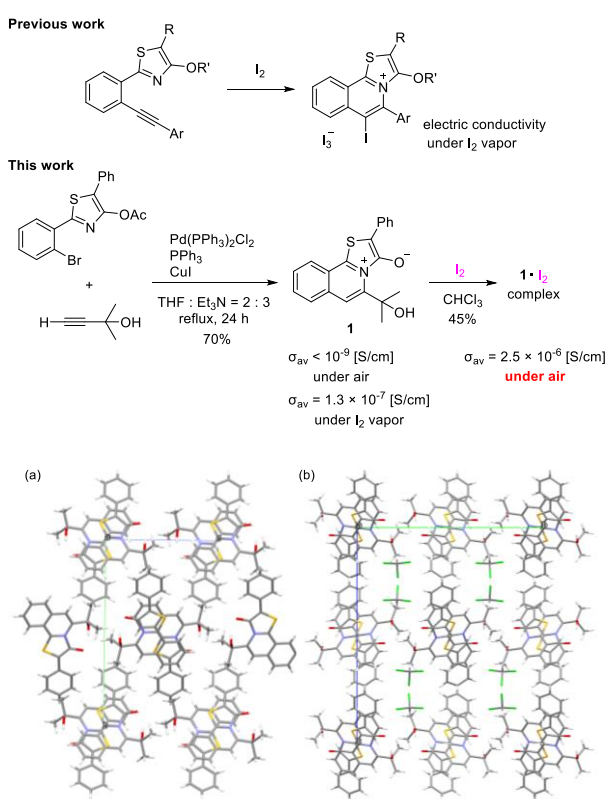


Figure 1. Crystal structures of (a) **1** and (b) **1** · CHCl<sub>3</sub>.

1) S. Matsumoto, *et al.*, *Heterocycles* **2018**, 97,755; S. Matsumoto, *et al.*, *J. Mol. Struct.* **2022**, 1264, 133306.