

新規チオキサンチリウム塩の合成と特性

(福岡大理) ○渡邊 悠月・長洞 記嘉

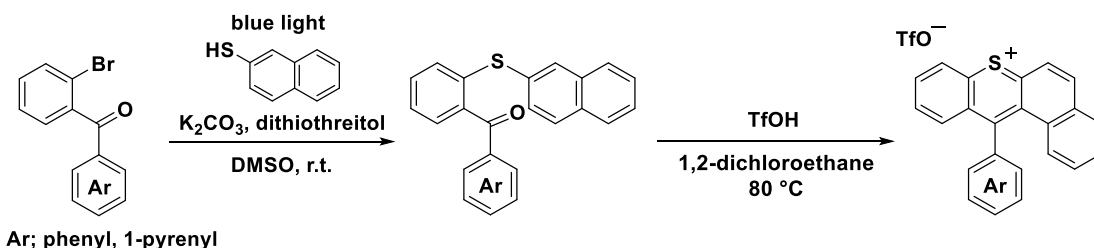
Synthesis of New Thioxanthylum Salts and Their Properties (*Faculty of Science, Fukuoka University*) ○Yuzuki Watanabe, Noriyoshi Nagahora

Synthesis and characterization of new thioxanthylum salts was carried out. Cyclization reactions of the corresponding diarylthioether precursors bearing a benzoyl group were investigated. When trifluoromethanesulfonic acid was used, the desired thioxanthylum salts were obtained. Molecular structures of these thioxanthylum salts were determined by their NMR and mass spectroscopy. The electronic structures of these new thioxanthylum salts were examined by NMR and UV-vis spectroscopy in conjunction with DFT calculations.

Keywords : Thioxanthylum salt; Lewis acid; UV-vis absorption spectroscopy; Electronic structure

キサンチリウム骨格を有する化合物は色素や蛍光材料に用いられており、広く研究されている。一方、その硫黄誘導体であるチオキサンチリウム塩に関する研究は進展が遅れている。近年、演者らはホルミル基を有するジアリールチオエーテルにルイス酸もしくはブレンステッド酸を作用させることで、チオキサンチリウム塩類の効率的な合成法を開発した¹⁾。しかしこの反応では、チオキサンチリウム塩の9位には水素原子以外の官能基を導入することは困難であった。本研究では、9位にアリール基を導入するため、近接位にベンゾイル基をもつチオエーテル前駆体の合成と環化反応によるキサンチリウム塩の合成を検討した。

文献²⁾を参考に、アリールチオール化合物とブロモベンゾフェノン類とのカップリング反応を行い、近接位にベンゾイル基を有するジアリールチオエーテル類を合成した。続いてブレンステッド酸を用いた環化反応を検討し、新規なチオキサンチリウム塩を得た。合成したチオキサンチリウム塩の分子構造は、NMR および質量分析により決定した。合成した新規なアリール基を有するチオキサンチリウム塩の電子構造を明らかにするために、紫外可視吸収スペクトルで解析したところ、有するアリール基により異なる電子構造を示すことが明らかになった。さらに、それらの分子軌道計算の結果も併せて報告する。



1) N. Nagahora *et al.*, *Org. Lett.* **2020**, 22, 6192–6196.

2) G. M. Miyake *et al.*, *J. Am. Chem. Soc.* **2017**, 139, 13616–13619.