安全衛生管理室

戸　村　正　章（助教）（2004 年 6 月 1 日着任）

A-1) 専門領域：有機化学，構造有機化学，有機固体化学

A-2) 研究課題：

a) 弱い分子間相互作用による分子配列制御と機能性分子集合体の構築

b) 新しい機能性電子ドナーおよびアクセプター分子の合成

A-3) 研究活動の概略と主な成果

a) 以前より，クロラニル酸を用いた新しい分子集合体の構築を検討してきたが，今回，クロラニル酸－ 4- クロロピリジン錯体の結晶構造中に分子間 O–H···O，N–H···O，N···Cl 相互作用により形成される二次元格子状分子ネットワーク構造を見出した。また，ビ (チアジアゾロピリジリデン) 誘導体とクロラニル酸との錯体では分子間 S···O ヘテロ原子相互作用と O–H···N 水素結合とによって結ばれた無限の一次元分子テープ構造が構築された。ヘテロ原子間相互作用の理論的研究はこれまでほとんど知られていないことから，上述の系やモデル化合物において MP2 法等の電子相関をも考慮した高いレベルの計算方法による S···O 相互作用の理論的解析を行いその本質を探った。

b) 4,5- ジアザフルオレン，1,3,4- オキサジアゾール，チオフェン，ナフタセンジオン，ペンタセンなどのヘテロ環および芳香環骨格を持つ新しい機能性分子を合成・開発し，その構造ならびに機能性について検討したところ，いずれも有用な知見を得た。1,3,4- オキサジアゾール誘導体は EL 素子の電子輸送材料としてすぐれた特性を示した。また，6,13- ジアリールペンタセン誘導体は光照射により効率良く酸素の付加・脱離反応を行い，有機半導体層作製技術への応用が期待される。

B-1) 学術論文

M. TOMURA, "(*E*)-2-(2,6-Dichlorophenyl)-2-(phenylimino)acetamide," *Acta Crystallogr., Sect. E: Struct. Rep. Online* **64**, o170–o171 (2008).

M. TOMURA, H. YAMAGUCHI, K. ONO, M. KAIDEN and K. SAITO, "6,11-Dihydroxynaphthacene-5,12-dione," *Acta Crystallogr., Sect. E: Struct. Rep. Online* **64**, o172–o173 (2008).

K. ONO, M. TOMURA and K. SAITO, "Diethyl 2,3-Dihydrothieno[3,4-*b*]-1,4-dioxine-5,7-dicarboxylate," *Acta Crystallogr., Sect. E: Struct. Rep. Online* **64**, o468–o468 (2008).

M. TOMURA and Y. YAMASHITA, "3,8-Bis(4-chlorophenyl)-4,7-dimethyltricyclo[4.2.2.0^{2,5}]deca-3,7-diene," *Acta Crystallogr., Sect. E: Struct. Rep. Online* **64**, o545–o545 (2008).

M. TOMURA and Y. YAMASHITA, "Crystal Structure of 4-Cyanopyridinium Hydrogen Chloranilate," *Anal. Sci.* **24**, x31–x32 (2008).

M. KUJIME, C. IZUMI, M. TOMURA, M. HADA and H. FUJII, "Effect of a Tridentate Ligand on the Structure, Electronic Structure, and Reactivity of the Copper(I) Nitrite Complex: Role of the Conserved Three-Histidine Ligand Environment of the Type-2 Copper Site in Copper-Containing Nitrite Reductases," *J. Am. Chem. Soc.* **130**, 6088–6098 (2008).

K. ONO, K. TSUKAMOTO, M. TOMURA and K. SAITO, "1,4-Bis[(2,6-dimethoxyphenyl)ethynyl]benzene," *Acta Crystallogr., Sect. E: Struct. Rep. Online* **64**, o1069–o1069 (2008).

K. ONO, H. ITO, A. NAKASHIMA, M. UEMOTO, M. TOMURA and K. SAITO, "Synthesis and Properties of Naphthalene Trimers Linked by 1,3,4-Oxadiazole Spacers," *Tetrahedron Lett.* **49**, 5816–5819 (2008).

K. ONO, T. HIEI, M. TAJIKA, M. TOMURA, K. SAITO, J. NISHIDA and Y. YAMASHITA, "Synthesis of 6,13-Dithienylpentacenes by Photolysis of Their Endoperoxides," *Lett. Org. Chem.* **5**, 522–526 (2008).

M. TOMURA, "Theoretical Study for a Complex of 1,2,5-Thiadiazole with Formic Acid," *THEOCHEM* **868**, 1–5 (2008).

K. ONO, M. TOMURA and K. SAITO, "5,5-Bis(4-methoxyphenyl)-2,8-bis[3-(trifluoromethyl)phenyl]-5*H*-cyclopenta[2,1-*b*:3,4-*b*']dipyridine," *Acta Crystallogr., Sect. E: Struct. Rep. Online* **64**, o2183–o2183 (2008).

M. TOMURA, K. ONO and Y. YAMASHITA, "Crystallographic and Theoretical Studies of 4,4'-Dimethyl-7,7'-bi([1,2,5]thiadiazolo[3,4-*b*]pyridylidene)–Chloranilic Acid (1/1) with Intermolecular O–H···N Hydrogen Bonds and S···O Heteroatom Interactions," *Struct. Chem.* **19**, 967–974 (2008).

B-7) 学会および社会的活動

学協会役員等

日本化学会コンピューター統括委員会CSJ-Web 統括的管理運営委員会委員 (2001–2002).

日本化学会広報委員会ホームページ管理委員会委員 (2003–).

C) 研究活動の課題と展望

有機固体における電気伝導性，磁性，光学的非線形性などの物性の発現には，その分子固有の特質のみならず，集合体内でどのように分子が配列しているかということが大いに関与している。そのために，このような機能性物質の開発には分子配列および結晶構造の制御，すなわち，「分子集合体設計」というコンセプトが極めて重要となってくる。しかしながら，現状では，簡単な有機分子の結晶構造予測さえ満足には成し遂げられていない。このことは，逆に言えば，拡張π電子系内に，水素結合などの分子間の弱い相互作用を導入し，種々の分子集合体を設計・構築するという方法論には，無限の可能性が秘められているということを示している。今後は，水素結合だけではなく，ヘテロ原子間相互作用・C–H···π 相互作用・立体障害といった新しいツールによる分子集合体設計，特に，格子状有機超分子構造体の構築に取り組みたい。さらに，合成された分子の分子配列を決定づけているこれらの分子間相互作用の理論的な精密解析を行い，得られた情報に基づいてその構造や機能を理解すると共に，これらの構造を再現しうる高速計算手法の開発を通じて，結晶構造の計算化学的な予測方法を探求することを最終的な目的としたい。また，この分野の研究の発展には，新規化合物の開発が極めて重要であるので，「新しい機能性電子ドナーおよびアクセプター分子の開発」の研究課題も続行する。加えて，以上のような研究活動と安全衛生管理業務の効率的な両立を常に念頭に置いている。