

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開発

A-3) 研究活動の概略と主な成果

- a) 以前より，新しい機能性電子ドナーとして1,2,5-チアジアゾール環が縮合した非対称なテトラチアフルバレン分子の開発を行ってきたが，今回，いくつかの誘導体を合成し，その構造について検討したところ，結晶構造中に分子間の短いS...S相互作用により形成されるジグザグ状分子テープ構造を見出した。
- b) ハロゲン原子と π 電子系との間のノンコバレントな相互作用(C-X... π)は結晶工学上有用なツールとなり得る可能性を秘めているが，水素結合系と比較してその報告例は少ない。そこで，結晶構造中に多く見られる塩素原子とアセチレン三重結合間の相互作用の理論的解析を電子相関をも考慮した高いレベルの計算方法により行いその本質を探った。その結果，分散力の寄与が大きいことが明らかになった。
- c) 1,3,4-オキサジアゾール，オリゴチオフェン，テトラ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-オキサジアゾール環を含む大環状分子では，その自己組織化により，水の一次元ネットワークを包接する超分子ナノチューブの構築に成功した。また，パーフルオロテトラセン骨格を有するホウ素錯体はすぐれたn型半導体特性を示した。

B-1) 学術論文

K. ONO, K. TSUKAMOTO, R. HOSOKAWA, M. KATO, M. SUGANUMA, M. TOMURA, K. SAKO, K. TAGA and K. SAITO, "A Linear Chain of Water Molecules Accommodated in a Macrocyclic Nanotube Channel," *Nano Lett.* **9**, 122–125 (2009).

K. ONO, K. NAKAGAWA and M. TOMURA, "1,4-Bis[(3,5-dimethoxyphenyl)ethynyl]benzene," *Acta Crystallogr., Sect. E: Struct. Rep. Online* **65**, o346–o346 (2009).

M. TOMURA and Y. YAMASHITA, "5-Isopropylidene-1,3-dithiolo[4,5-d][1,3]dithiole-2-thione," *Acta Crystallogr., Sect. E: Struct. Rep. Online* **65**, o1050–o1050 (2009).

M. TOMURA and Y. YAMASHITA, "5-(1,3-Dithiolo[4,5-d][1,3]dithiol-2-ylidene)-1,3-dithiolo[4,5-c][1,2,5]thiadiazole: An Unsymmetrical Tetrathiafulvalene with Fused 1,2,5-Thiadiazole and 1,3-Dithiole Rings," *Acta Crystallogr., Sect. E: Struct. Rep. Online* **65**, o1082–o1082 (2009).

M. TOMURA, "Theoretical Study of Noncovalent Interactions between Triple Bonds and Chlorine Atoms in Complexes of Acetylene and Some Chloromethanes," *Chem. Phys.* **359**, 126–131 (2009).

K. ONO, K. TSUKAMOTO and M. TOMURA, “5,5'-Di-4-pyridyl-2,2'-(5-*tert*-butyl-*m*-phenylene)bis(1,3,4-oxadiazole),” *Acta Crystallogr., Sect. E: Struct. Rep. Online* **65**, o1873–o1873 (2009).

K. ONO, O. TOKURA and M. TOMURA, “(3*Z*,3'*Z*)-3,3'-(Ethane-1,2-diylidene)diisobenzofuran-1(3*H*)-one,” *Acta Crystallogr., Sect. E: Struct. Rep. Online* **65**, o2118–o2118 (2009).

K. ONO, J. HASHIZUME, H. YAMAGUCHI, M. TOMURA, J. NISHIDA and Y. YAMASHITA, “Synthesis, Crystal Structure, and Electron-Accepting Property of BF₂ Complex of a Dihydroxydione with a Perfluorotetracene Skeleton,” *Org. Lett.* **11**, 4326–4329 (2009).

M. TOMURA and Y. YAMASHITA, “Unsymmetrical Tetrathiafulvalene with a Fused 1,2,5-Thiadiazole Ring and Methylthio Groups,” *Molecules* **14**, 4266–4274 (2009).

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。