

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，4,4'-ビピリジン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，1,2,5-チアジアゾール-3,4-ジカルボン酸-4,4'-ビピリジン (2:1) 錯体の結晶構造中に分子間 O-H $\cdots$ N と S $\cdots$ O 相互作用により形成されるユニークな二次元ラダー型分子ネットワーク構造を見出した。この分子ラダーはインターペネトレーションが見られず二次元的にスタックしている。これは分子間ヘテロ原子相互作用で構築された分子ラダー構造の初めての例である。
- b) ジフェニルアミノフェニル基と *tert*-ブチル基を持つシアノアクリル酸誘導体とピチオフェンあるいはターチオフェン骨格を持つホウ素錯体を合成・開発し，その構造ならびに有機電子材料としての応用について検討した。前者の分子は *tert*-ブチル基を持たないものより効率の高い色素増感型太陽電池を与えた。後者は新しいタイプの電子アクセプター分子であり，これを用いた OFET デバイスにおいて優れた n 型半導体特性を示した。

B-1) 学術論文

M. TOMURA and Y. YAMASHITA, "A Two-Dimensional Ladder-Type Network in the 2:1 Co-Crystal of 1,2,5-Thiadiazole-3,4-dicarboxylic Acid and 4,4'-Bipyridine," *Struct. Chem.* **21**, 107–111 (2010).

K. ONO, T. YAMAGUCHI and M. TOMURA, "Structure and Photovoltaic Properties of (*E*)-2-Cyano-3-[4-(diphenyl-amino)phenyl]-acrylic Acid Substituted by *tert*-Butyl Groups," *Chem. Lett.* **39**, 864–866 (2010).

K. ONO, A. NAKASHIMA, Y. TSUJI, T. KINOSHITA, M. TOMURA, J. NISHIDA and Y. YAMASHITA, "Synthesis and Properties of Terthiophene and Bithiophene Functionalized by BF₂ Chelation: A New Type of Electron Acceptor Based on Quadrupolar Structure," *Chem. –Eur. J.* **16**, 13539–13546 (2010).

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 $\cdots$ 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ヒューリスティックな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。