

6-9 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
- c) 分子研化学物質管理システムの構築とその運用管理

A-3) 研究活動の概略と主な成果

- a) 我々は、以前より、1,2,5-チアジアゾール環を含む化合物の結晶構造において、van der Waals 半径の和より短い分子間 S...N 相互作用による二量体や分子テープなど興味ある分子集合体構造を見出してきた。そこで今回、周辺部に硫黄および窒素原子を持ち水素原子を含まないという興味深い分子構造である [1,3]ジチオロ [4,5-c][1,2,5]チアジアゾール-5-チオンを合成し、その分子・結晶構造を X線結晶構造解析により決定した。その結果、分子はほぼ平面で、結晶構造中に数多くの短い分子間 S...S, S...N 相互作用を見出した。
- b) 我々は先に、オキサジアゾール環を構成要素とする大環状四量体が超分子ナノチューブを形成することを *Nano Letters* 誌に報告した。ここ数年、この化合物における置換基効果を種々検討し続けており、分子集合体配列が置換基に大きく依存することを X線結晶構造解析により明らかにした。
- c) 高等研究機関における総合的かつ安全適正な化学物質管理の必要性は増大している。分子研における化学物質の電子的一元管理を目的として、2014年に化学物質管理システムが導入され、一貫してその運用に携わってきた。また、管理システムのデータを利用して有害物質等の使用・保管状況を迅速かつ効率的に把握、管理する手法も開発した。今年度からは基生研でも運用が開始され、適宜アドバイスをを行っている。

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 (2003–2012).