

京都大学大学院理学研究科化学専攻・機能性界面解析分科

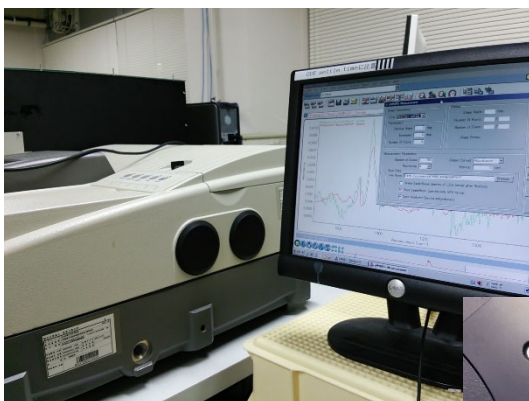
(京都大学化学研究所・分子環境解析化学研究領域)

長谷川研究室

E-mail: htakeshi@scl.kyoto-u.ac.jp

<http://www.scl.kyoto-u.ac.jp/~yoeki/>

(B5 版)



令和 5 年度版



## 研究室の理念

大学で学ぶ化学では、一分子のイメージで材料の物性や反応を説明してしまう例がほとんどです。実際には、分子集合系での分子の配列や相互作用などを考慮しないと、物性や反応がまったく読み解けない例がたくさんありますが、いつしか我々の思考は一分子イメージで考えることが当たり前になっていて、大切なことを見落とします。

当研究室で解明した重要な発見の一つに、有機フッ素材料(PFAS)の物性を、分子構造から読み解く研究があります。皆さんがよく知るテフロンは、水も油もはじく性質が有名ですが、この性質は長年に渡り、化学の未解明問題と考えられてきました。C-F 結合には大きな極性がありますから、同じく極性の大きな水分子を引きつけるならわかります。でも、テフロンに代表されるフッ素樹脂は撥水性を示しますので矛盾しており、説明困難な物性でした。

実はこれ、一分子の絵だけで物性を理解しようとするところに問題があります。我々が“物性”と呼んでいるものの多くは、そもそも一分子の物性ではなく、分子集合系の物性なのです。それを一分子の絵だけで一足飛びに説明しようとするから、論理が破綻するのです。実際には、分子が自然に形成する集合構造を理解して、初めて解明できました。

燃料電池を作動させるのに必要なナフイオンという材料は、この有機フッ素材料の性質を巧みに利用したものですが、機能するメカニズムがわからないまま実用に使われています。意外とこういう危うい例が現実にはたくさんあります。当研究室では、こうした化学の未解明課題を完全解明する取り組みを行っています。これらを一言でまとめると：

### 分子集合系を可視化して自在に制御できる科学を確立する

世界中の人が群がって研究している有機薄膜デバイスの研究も、こうした分子集合系をとことん理解することが不可欠です。長谷川研では、これに必要な分析手法や解析手法を取り揃え、足りない手法は自ら開発して、薄膜の制御法の研究、新しいコンセプトの開拓などを行っています。これには、学部時代に勉強した、みなさんの様々な背景が非常に役立ちます。

見逃しがちな化学の本質に関わりたいという、若い意欲的な頭脳にぜひ研究参画して欲しいと、研究室一同楽しみにお待ちしております。

## 最近の研究成果の例

長谷川研では、機能性高分子や分子集合系の性質を、分子論的に解き明かすため、つぎのようなテーマで研究を進めています。

1. 長年、フッ素化合物の物性は“異常”と思われてきたことを“当たり前”に変える“SDA 理論” (図 1) は、融点・撥水撥油性・低誘電率などを史上初めて一網打尽に説明する我々オリジナルの統一理論です。含フッ素有機化合物にまつわる化学および分光学を根本から書き換え、分子設計や合成にもつなげていく研究です。 (*Chem. Rec.* **2017**, *17*, 903.)

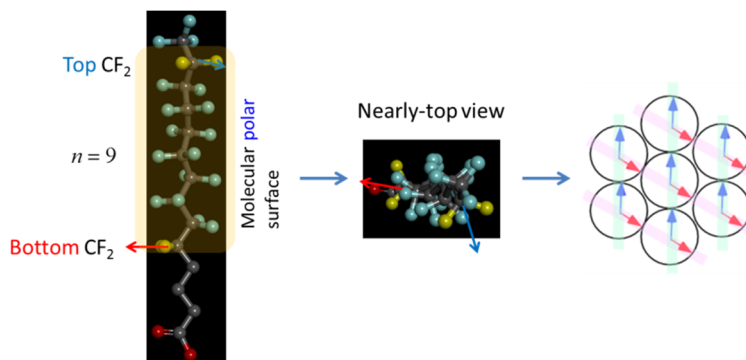


図 1 多重双極子アレーモデルの概念図

2. パーフッロアルキル化合物は、C-F 結合の大きな電気双極子を反映して、分子振動が分子集合系に伝播し、一分子のときとはまったく違う、モルフォロジーを反映したスペクトルを与えます (図 2)。これは非晶の構造を解明する重要な一歩です。 (*J. Chem. Phys.* **2020**, *153*, 044703.)

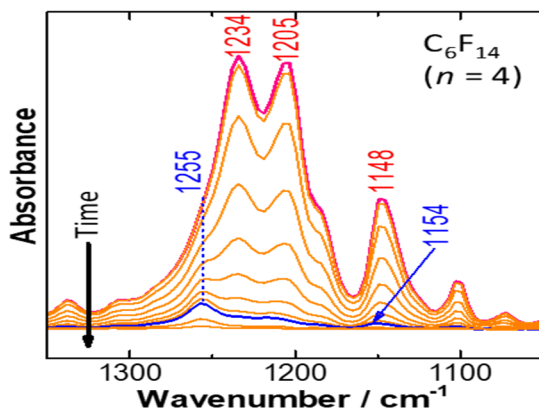


図 2 フォノン・ポラリトンの表面モードからモルフォロジーを突き止める

3. ペンタセンに代わる次世代の有機半導体 Dinaphthothienothiophene (DNNT) は、薄膜化してもいわゆる単結晶相と呼ばれる均一な相できていると思われていました。しかし、薄膜の成長過程を高分解の X 線回折 (XRD) で追ったところ、基板界面に接した部分だけ、単結晶とは異なる結晶多形をもつことがわかりました (図 3)。実はこの研究、先にヒントを与えたのは赤外分光だったのです！薄膜の構造解析において、当研究室は世界でもトップの拠点であると自負しています。(Appl. Phys. Express 2020, 13, 095505.)

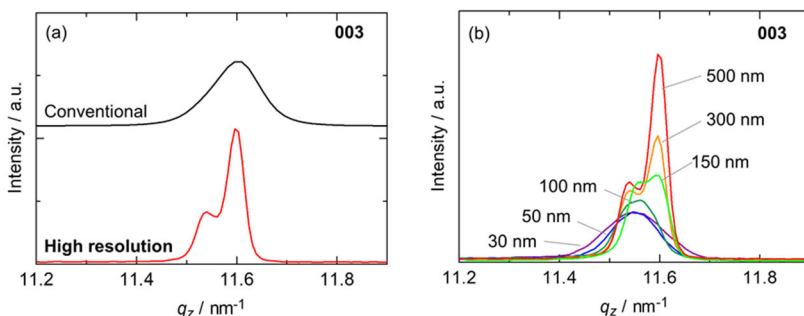


図 3 高分解 XRD により DNNT の薄膜相を発見

4. 当研究室の重要な看板研究に“MAIRS 法”の開発があります。MAIRS はフーリエ変換赤外分光器 (FT-IR) と組合せて使うと、薄膜中での官能基ごとの向き (配向) が、膜の結晶化度に関係なく正確に決まる強力な手法です。XRD を一つの歯車だとすれば、MAIRS は探し求めていた欠けた歯車がようやく揃ったことを意味します (図 4)。薄膜中の反応解析ができるようになったのも MAIRS の成果です。(総説 Bull. Chem. Soc. Jpn. 2020, 93, 1127.)

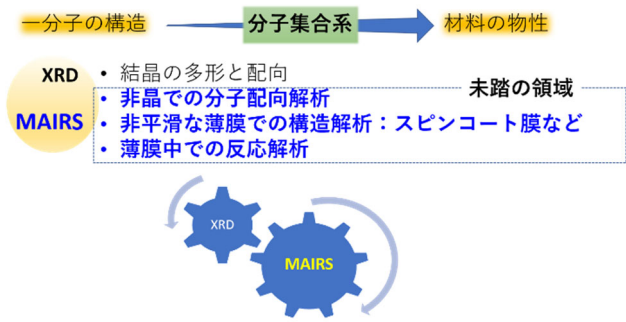


図 4 MAIRS の開発は XRD の不足を補い薄膜解析の世界を変える