

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

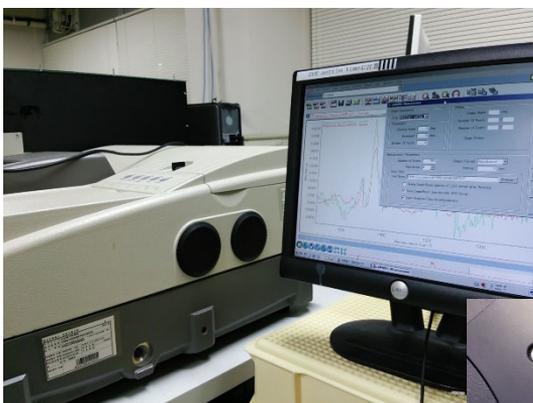
(京都大学化学研究所・分子環境解析化学研究領域)

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 6 年度版



## 研究室の理念

理学らしい化学をしたい！

長谷川研では、未開の地を拓くような研究に魅力を感じる、理学らしい分子科学を研究の方針に掲げて、実は世の中の役に立つ新しい理学研究をしています。

昔に比べて、新しい手つかずの基礎研究のテーマを探すのがだんだん難しくなっているように見えるかもしれません。しかし、よく見てみると「実はよくわからないまま」になっている現象や物性が非常に多く、そのほとんどがわからないまま放置されているのです。

理学は「神のパズル」を探して解くところに最大の面白さがあります。このパズルは、そもそも探すのが難しいのです。神のパズルを探し当てた段階で、もう勝負は半分以上勝ったようなものです。あとは解くだけ！

さて、長谷川研で扱っているふたつのパズルをご紹介します。

- 1) 非晶の分子集合構造を解明する
- 2) 長年のミステリー「フッ素の謎」を解く

長谷川研は、分子の二次元集合（つまり薄膜）の解析で知られる研究室です。ペロブスカイト型有機薄膜太陽電池などでおなじみの有機薄膜の構造は、長らく X 線回折を使った構造解析が主体でした。しかし、これでは結晶化した部分しか解析できません。「非晶の解析をどうするか？」は長年の謎。このパズルを、分光学と多変量解析の組み合わせで解いて構築した MAIRS 法<sup>メアーズ</sup>という分光解析手法は、誰も考えたことのなかった縦波電磁波という仮想的な光を考えて実用までたどり着いた方法です。

もうひとつのフッ素の謎は、もっと化学らしくて面白いです。

テフロンは皆さんご存じでしょう。大雑把に  $(CF_2)_n$  と書ける、ポリエチレンの水素を F で置き換えた高分子です。これが水も油もはじく理由がわかりますか？実は 80 年近くもの間、この理由が説明できないままたくさんの関連化合物が作られて利用されてきました。化学にはこんな未解決問題があるのです。これは、私たちが世界で初めて解き、その結果、環境適合性があるリサイクルも可能な材料への新しい設計指針などが次々に研究室内で生まれています。

神のパズルを探し出して解き、その先にある新しい化学の世界を一緒に作りましょう。

## 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.)

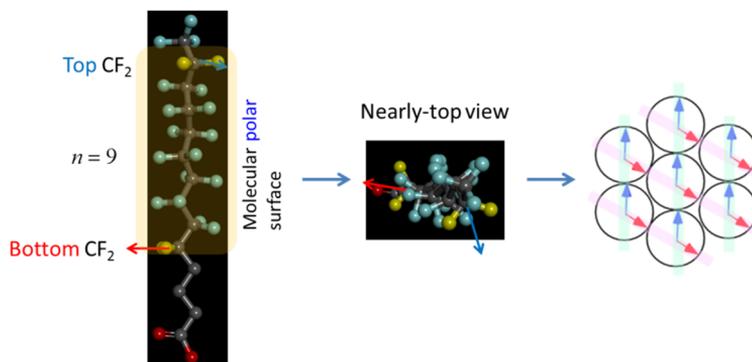


図1 多重双極子アレーモデルの概念図

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.)

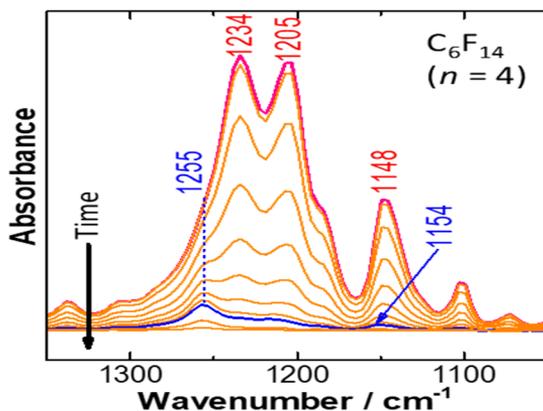


図2 フォノン・ポラリトンの表面モードからモルフォロジーを突き止める

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.)

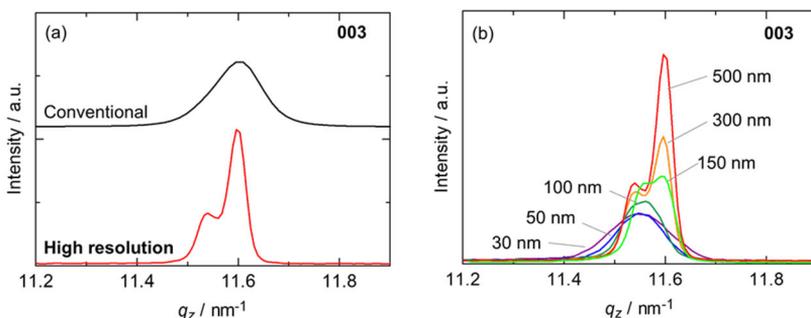


図 3 高分解 XRD により DNNT の薄膜相を発見

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