

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

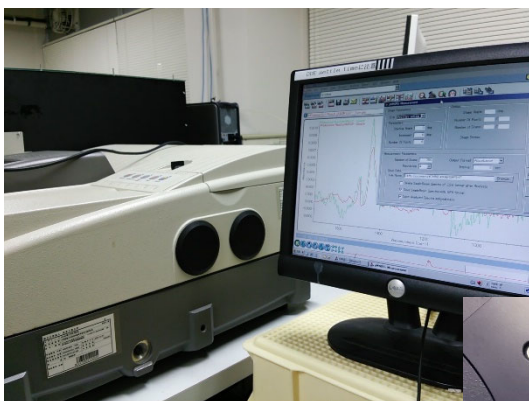
(京都大学化学研究所・分子環境解析化学研究領域)

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 8 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”として有名でした。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。

こうした集合構造を代表例とする階層構造や高次構造を理解するには、既存の実験手法では足りず、自分たちで新しい分光学的手法を開拓して挑んできました。当研究室で世界に先駆けて開発した方法に：

MAIRS 法：結晶のみならず非晶でも分子集合構造を解析可能にする

SEIRAS 法：超高感度な赤外分光法で時空間分解した解析が可能

があります。オリジナルに開発した極めて実用性の高い分光法に磨きをかけつつ、MAIRS は有機フッ素化学や有機半導体の科学に、SEIRAS は膜中タンパク質の動的フォールディング機構の解明を進めています。すなわち、「**新しい測定法が新しい科学を拓く**」を文字通り実践しています。最新の AFM-IR を用いた先端分析や、AI ベースの計算機科学も始めており、表面・界面に関する分子集合構造や高次構造の解明をもっともユニークなやり方で進めています。

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.)

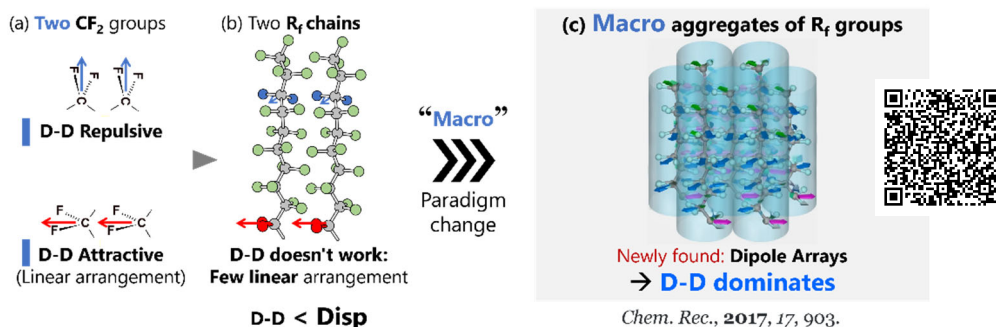


図 1 多重双極子アレーモデルの概念図

2. SDA 理論で炭化フッ素の基礎ができたことで、PTFE (いわゆるテフロン) のマテリアルリサイクルという難題に突破口を見出しました。原子レベルに分解するのではなく、分子としてほぐして再利用する、一見簡単そうで 80 年間誰もなし得なかった難題です。理学が工学の役に立つことを示す例であると同時に、赤外分光法が高分子材料の階層構造変化の議論に強力であることを示した成果です (*J. Phys. Chem. B*, **2025**, *129*, 4249.)

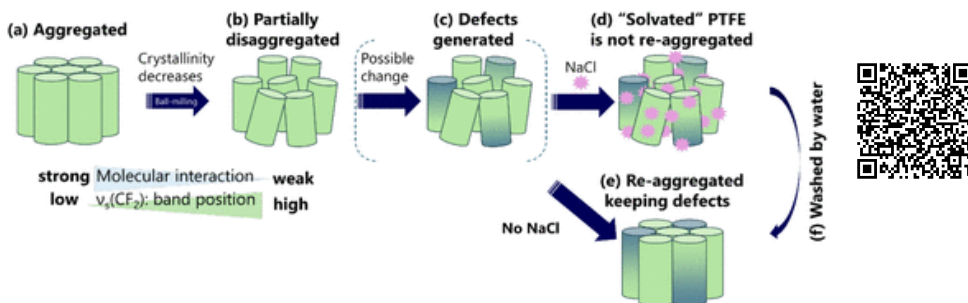


図 2 SDA 理論で突破口を開いた PTFE のマテリアルリサイクルについて「分子ほぐし」メカニズムを赤外分光法で解明

3. 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 3)。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 3 MAIRS の開発は XRD の不足を補い薄膜解析の世界を変える

4. 新たに参画される安宅先生は、細胞フリー発現と表面増強赤外分光 (SEIRAS) を組み合わせ、膜タンパク質ロドプシンの「作られながら膜に入り折りたたまれる」過程をリアルタイムで可視化しました。特にバクテリオロドプシンのみが膜内部へ十分に侵入し三次構造まで正しく形成される一方、他のロドプシンは膜界面で折りたたみが失敗することを明らかにし、膜タンパク質発現失敗の原因特定と条件最適化への新たな手法を示しています。SEIRAS 自体、安宅先生が開発して実用化した分光手法です (*Front. Mol. Biosci.*, **2022**, 9, 929285.)

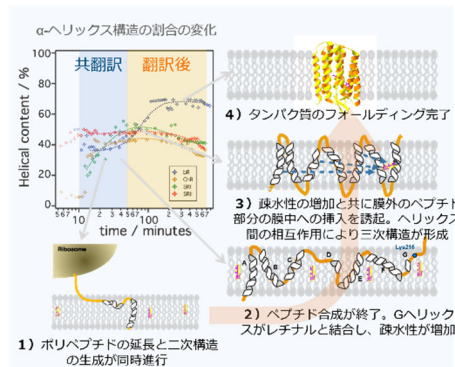


図 4 膜中でのタンパク質折りたたみ機構を初めて分光学で解明