

# 分子環境解析化学研究領域

協力講座：理学研究科・化学専攻

## 研究室概要

- 材料の物性を一分子の構造だけで理解することはできない。分子の並び、すなわち分子集合系が物性に決定的な影響を与え、集合構造が変われば物性も用途も変わる。
- 本研究領域では、一分子の構造と材料物性を結ぶ“二次元分子集合系”に関わるサイエンスを、全方位的に深掘している。集合構造を紐解く“分析法の開発”から、“分子集合構造の制御”まで、トータルに研究する世界的フロンティアを維持している。
- 必要とする分野は、振動分光学、有機合成、結晶学、数学的データ解析、電磁気学、固体物理など幅広く、あらゆる化学分野を背景とする学生が力を発揮できる研究室である。
- 有機薄膜半導体の分子の並びを“見る”・“創る”・“操る”を自在にやれる科学の基礎を構築する。

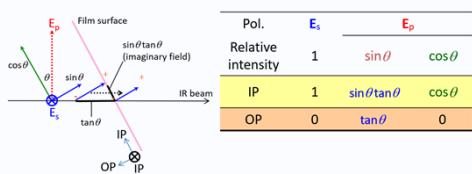
## 突破したい課題

1. **見る**：当研究室オリジナル開発の多角入射分解分光法(MAIRS)を駆使し、薄膜結晶学の武器である微小角入射X線回折(GIXD)と組合せたMAIRS-GIXDにより、世界最高位の薄膜構造の可視化に取り組んでいる。また、MAIRSの深化に関する研究も継続中。
2. **創る**：薄膜の集合構造を大面積の製膜に適したトップダウン式（スピノコート、蒸着など）で、設計通りの分子集合構造を創りだすための物理化学に取り組んでいる。
3. **操る**：MAIRS-GIXDで明らかにした配向、結晶多形などの構造パラメータをもとに、一分子の構造設計にフィードバックし、合成化学的アプローチも重視している。

有機薄膜半導体、有機フッ素材料、膜中タンパク質の構造解析、ナノワイヤ表面を利用した化学センサーなど多岐に渡る応用

## “MAIRS”という魔法で薄膜の分光分析の限界突破

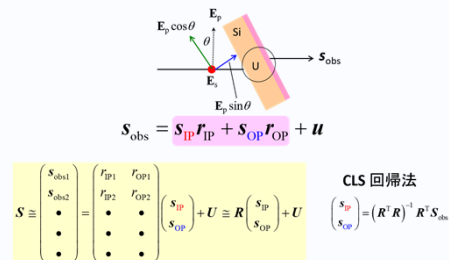
### 物理計測の限界を突破するアイデア



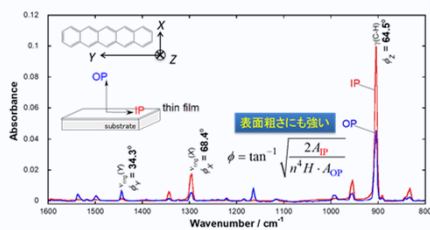
$$1 + \sin^2 \theta \tan^2 \theta + \cos^2 \theta : \tan^2 \theta$$

T. Hasegawa, *J. Phys. Chem. B* **2002**, *106*, 4112.

### 多変量解析：数学マジックで不可能を可能に



### 仮定なしで有効数字3桁の分子配向解析を実現

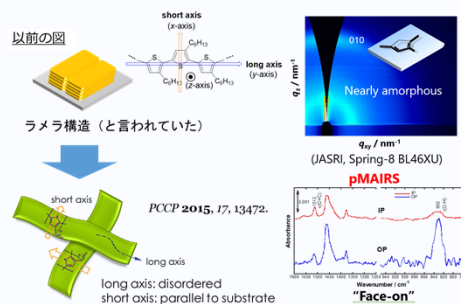


$$\cos^2 \phi_X + \cos^2 \phi_Y + \cos^2 \phi_Z = 1.00$$

方向余弦の式 (ピタゴラスの定理の3次元版)

(総説) T. Hasegawa, N. Shioya, *Bull. Chem. Soc. Jpn.* **2020**, *93*, 1127.

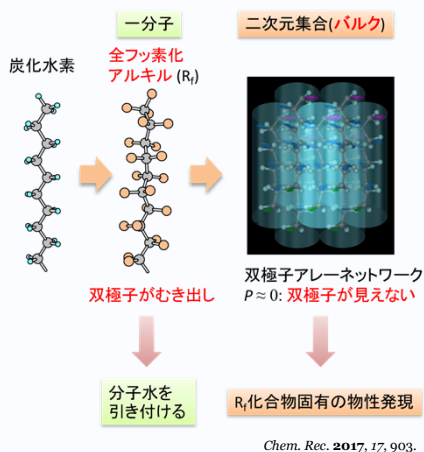
### MAIRS-GIXDで高分子材料の非晶構造を見る



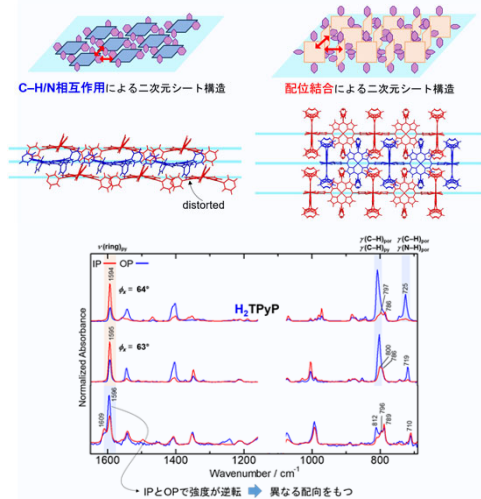
*Phys. Chem. Chem. Phys.* **2015**, *17*, 13472.

## “MAIRS”という魔法で薄膜の分光分析の限界突破

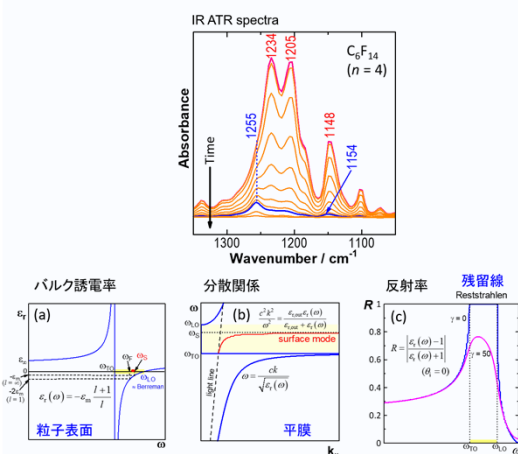
### 水も油もはじく？ 有機フッ素材料の謎の完全解明



### 分子設計による 分子間相互作用の制御



### MAIRSの新たな機能： 非晶のモルフォロジーの解析



*J. Chem. Phys.* **2020**, *153*, 044703.