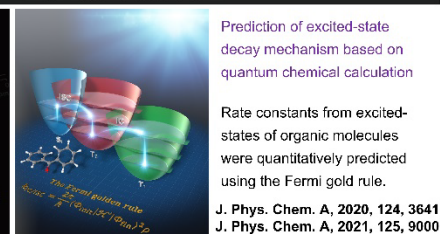
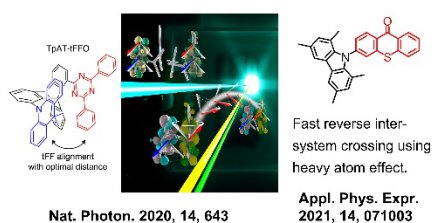
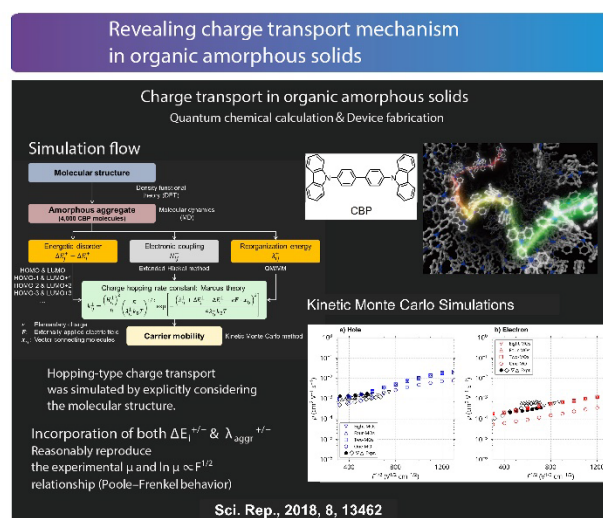
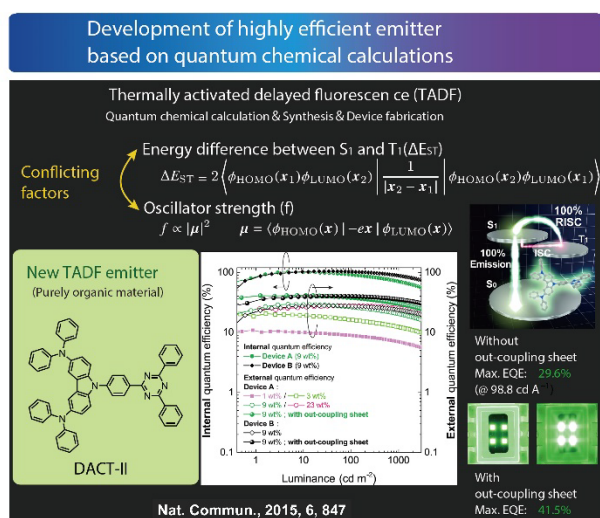


分子材料化学研究領域の研究紹介

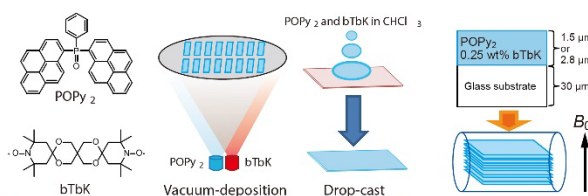
分子材料化学

有機材料の機能を電子、分子レベルから理解することを目的とした基礎研究を進めています。有機合成により得た材料を用いてデバイスを創製し、優れた光・電子特性を発現させるとともに、固体核磁気共鳴法（固体 NMR 法）・量子化学計算による精密構造解析を行い、機能と構造の相関解明を行っています。



DNP-Enhanced Solid-State NMR Analysis of Molecular Orientation in Organic Thin Films

Sample preparations



Legendre moment expansion approach

$$p(\theta) = \sum_{N=0}^{\infty} \frac{2N+1}{2} \langle P_N(\cos\theta) \rangle P_N(\cos\theta)$$

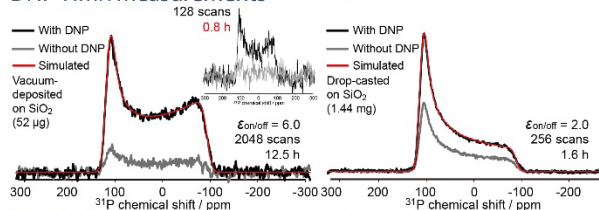
$$2\langle P_0 \rangle = \int_0^\pi p(\theta) \sin\theta d\theta = 1$$

$$\langle P_N \rangle = \frac{\int_0^\pi p(\theta) P_N(\cos\theta) \sin\theta d\theta}{\int_0^\pi p(\theta) \sin\theta d\theta}$$

Fitting results for least squares minimization

Sample	$\sigma_{ }$ (ppm)	$\sigma_{\perp}$ (ppm)	BF (ppm)	$\langle P_0 \rangle$	$\langle P_2 \rangle$	$\langle P_4 \rangle$	$\langle P_6 \rangle$
Sublimed	114.3	-93.4	8.4	0.5	0.15	0.031	-0.0010
Drop-casted	110.1	-88.4	7.2	0.5	-0.019	0.0059	-0.0014

DNP-NMR measurements



Distribution of molecular orientations

