

テラヘルツ分光による高分子構造の解明と操作

研究機関名：理化学研究所
所属名：量子工学研究センター テラヘルツイメージング研究チーム
代表研究者：上級研究員 保科宏道、終了2014年度（平成26年度）
共同研究者：尾崎幸洋（関西学院大学）、矢嶋摂子（和歌山大学）、高羽洋充（東北大学）

研究・成果概要

プロジェクトの概要

① 実験
THzで見た構造は従来のように定量化できなかった
THz波 (0.1-10 THz) → 検出 (検出機) → 検出 (検出機) → 検出 (検出機)

② 理論計算 (数値シミュレーション)
高分子の分子構造の定量化
分子構造の定量化 → 分子構造の定量化 → 分子構造の定量化

③ 応用 (2015-2016)
サイエンスの確立
応用 (2015)

高次構造とTHzスペクトル

高次構造
振動 along helix structure → lateral vibration (spring, rotation?)
振動 between helix structure → also no hydrogen bonding

振動 along helix structure → lateral vibration (spring, rotation?)
振動 between helix structure → also no hydrogen bonding

低周波数ラマンの活用

THz-FTIR
FT-IR
Raman(1)
Raman(2)

6.2THzまでの低周波ラマンが可視
構造が異なるため、検出モードが異なる
Anti-Symmetricモードは、構造異性体の検出が可能な
THz帯域分光より高周波ラマンが可視可能
スベクトル解析による構造異性体の検出が可能!

THzスペクトル計算手法の開発

THzスペクトル
Frequency/THz
CAC (single helix)
CAC (with interhelix interaction)
Dipole moment

THz-ラマン、計算によるスペクトルのアサインに成功

結晶性のモニタリング

結晶性モニタリング
結晶性
Amorphous content
Dipole moment

二次元相関分光法による詳細なスペクトル解析

二次元相関分光法による詳細なスペクトル解析
THz帯域基底温度: 100°C
異なる基底モードが異なるTHz帯域が観測される
二次元相関分光法による解析
スベクトル解析精度の向上を示した

ナイロンの構造相転移

ナイロンの構造相転移
X-ray diffraction of Nylon 6
THz spectra of Nylon 6
B-II transition
B-I transition

ゲルの構造相転移

ゲルの構造相転移
Sol
Gel
THz spectra
Gel formation

THz励起による高分子構造の変化

THz励起による高分子構造の変化
Polymer formation with THz radiation
THz-FTIR (Oxane-10)
FED-FTIR (200 μm)
Drying
Polymer film
Without THz irradiation
With THz irradiation
Crystallinity = 27%
Crystallinity = 51%

想定する分野・用途

- 高分子製品の品質管理、製造法などへの活用。
(プログラム期間中：高分子製品メーカーA社、プログラム終了後：高分子素材メーカーB社、日用品メーカーC社、電気部品メーカーD社との共同研究)

最終目標

- 高分子の詳細な高次構造やダイナミクスを明らかにする物性研究手法の確立
- 高次構造制御への挑戦、新たな物性や機能を持つ高分子材料の創造

産業界への期待・要望

本プログラム終了後、THz分光の産業応用を進めた結果、従来手法では見えない（見えにくい）高分子構造のわずかな違いが判別できる事が実証されつつある。今後、様々な分野で製品の開発や品質管理に活用してもらいたい。