

キーワード

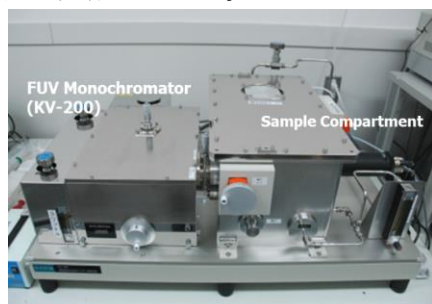
分子分光、分析化学、遠紫外分光法、近赤外分光法、スペクトル定量分析、溶液化学、ポリマー、

Molecular Spectroscopy, Analytical Chemistry, Far-UV Spectroscopy, Near Infrared Spectroscopy Quantitative Analysis on Spectra, Solution Chemistry Polymer

研究内容

[1] 遠紫外分光法を用いた分光分析法の開発

電子遷移を用いた分光分析法として、可視領域（波長 800 ~ 400 nm）紫外領域（400 ~ 200 nm）の吸光度法は一般的に広く用いられている。この可視・紫外では共役した多重結合をもつ分子や遷移金属を含む錯体や酸化物が選択的に吸収を持つ。一方、遠紫外領域（120~200 nm）では、ほとんどすべての分子が許容電子遷移をもち、その吸収が強すぎるため、これまで固体・液体では計測・分析応用が不可能であった。当研究室では、固体・液体の遠紫外スペクトルを簡便に計測できる、減衰全反射遠紫外分光法（ATR-FUV）を世界に先駆けて開発し、量子化学計算を用いた基礎研究や、分光分析応用への可能性を開拓している。



- ・単結合のみで構成されている分子（アルカン、アルコール、エーテル等）において、これまで明らかにされてこなかった、分子間相互作用による電子状態の変化の研究。
 - σ 電子からの遷移が固一液相転移において大きな電子状態変化を示すことを発見
 - シクロヘキサン分子に対するアキシシャル位へのメチル基導入による電子状態変化の観測と超共役による影響
 - ポリエチレングリコール分子におけるエーテル基と末端アルコール基の n 軌道の違い
- ・水溶液中の分子間相互作用の研究。特に次世代の二次電池電解質として注目される、ハイドレートメルト中の水および構成イオンの電子状態の研究。ハイドレートメルト中での水の電位窓拡張に対する水の電子状態変化の実証に成功
- ・細胞表面における生体分子の電子状態解析に向けた、基礎研究。糖・脂質・アミノ酸などの電子遷移を詳細に解析

[2] 近赤外領域に現れる倍音振動遷移の研究

近赤外分光法は光センサーによる選果や酸素飽和度の計測などすでに多くの実用例のある分光分析法である。その一方で、近赤外領域に観測される吸収の遷移強度に関する研究はあまりされていない。OH の倍音振動の水素結合による変化は基本音では水素結合により吸収強度が増大するが、第一倍音では減少することが知られている。これらのバンドの吸収強度と水素結合の関係を高次倍音に至るまで体系的に明らかにすることを目的に研究を進めている。理論的な考察を加えることで、OH 伸縮振動倍音の水素結合による変化が、電気的非調和性によるものであることを明らかにした。

[3] バイオコークスの分光分析

バイオマス廃棄物を高密度固体燃料化したバイオコークスについて、分光分析研究を進めている。バイオコークス化によって、バイオマス中の分子変化を分析し、バイオコークス物性のコントロールに関する基礎研究および品質管理に関する研究を進めている。

最近の業績

- [1] "Solvent effect on the competition between weak and strong interactions in phenol solutions studied by near-infrared spectroscopy and DFT calculations", Czarneck, M.A.; Morisawa Y.; Katsumoto Y.; Takaya T.; Singh S.; Ozaki Y., *Phys. Chem. Chem. Phys.* **2021**, *23*, 319188-19194. (cover article)
- [2] "Far-Ultraviolet Spectroscopy and Quantum Chemical Calculation Studies of the Conformational Dependence on the Electronic Structure and Transitions of Cyclohexane, Methyl and Dimethyl Cyclohexane, and Decalin; Effects of Axial Substitutions on the Electronic Transitions", Morisawa Y.; Higaki, Y.; Ozaki Y., *J. Phys. Chem.* **2021**, *125*, 8205-8214. (cover article)
- [3] "Advances, challenges and perspectives of quantum chemical approaches in molecular spectroscopy of the condensed phase", Ozaki, Y.; Bec, K.B.; Morisawa Y.; Yamamoto S.; Tanabe I.; Huck C.W.; Hofer T.S., *Chem. Soc. Rev.* **2021**, *50*, 10917-10954.
- [3] "Experimental verification of the increased electronic excitation energy of water in hydrate-melt via ATR-far ultraviolet spectroscopy", Ueno, N.; Takegoshi, M.; Zaitseva A.; Ozaki, Y.; Morisawa Y. *J. Chem. Phys.* **2022**, *156*, 074705.
- [5] "Attenuated Total Reflection Far-Ultraviolet (ATR Far-UV) Spectroscopy as a Sensitive Tool for the Investigation of Protein Adsorption", Hashimoto, K.; Morisawa Y.; Tortora M.; Rossi B.; Ozaki Y.; Sato H. *Appl. Spectrosc.* **2022**, *76*, 793-800.

■ NIR Advanced Award (近赤外研究会 2020 年度) .

■ 科学研究費 基盤研究 (C) (2021-2023 年度 330 万円) .