

時間分解電子線回折法の液晶分子ダイナミクスへの展開

岡山大学大学院自然科学研究科・羽田真毅

E-mail: hadamasaki@okayama-u.ac.jp

次世代の光応答性を有する分子組織体の創出のためには、光照射下における過渡的な分子構造・ダイナミクスを理解することが一つの重要課題である。我々は、物質と光との相互作用を分子位置の動的变化から計測することが可能なテーブルトップ型の「時間分解電子線回折装置」の開発を行っている¹。電子線は軽元素物質に感度が高く、結晶から液晶・液体・気体試料も測定可能であり、様々な有機系試料にフレキシブルに対応できる計測方法である。我々は、結晶から液晶へと測定する対象を広げ、通常観測することができなかった光応答性の液晶分子の立体構造を決定し、ピコ秒の時間スケールに生じる構造ダイナミクスの観測を行った。

π -シクロオクタテトラエン骨格を持つ液晶分子 (π -COT 分子: 京大・齊藤尚平先生から提供) の構造を図 1 に示す。液晶分子は機能を発現するメソゲンコアと、分子に流動性を持たせる炭素鎖によって構成される。液晶分子の機能は、このコアの持つ配向秩序が柔軟に動くことによって生じる。したがって、コアの配向秩序構造を決定することが液晶分子の機能を考えるうえで重要となる。一般に、液晶分子の電子線回折像は炭素鎖によるハローパターンの中に埋もれてしまい、構造決定が困難である。特に光応答・機能で特に重要な構造である π スタッキング構造は、3~5 Å 程度であり、これは炭素鎖の持つ面間距離と一致するため、静的な回折法では決定することが困難である。我々は、時間分解電子線回折法により、分子の光応答による電子線回折像の差分を解析する手法を考案し、 π -COT 分子の π スタッキング構造の詳細を明らかにした。また、この分子のコアは基底状態ではサドル型の構造をとり、光照射により平面化することが予想されているが、我々はこのサドル・平面変化の構造ダイナミクスを実験的に追跡することに成功した (図 2)。研究会では、他の液晶や無機物質にわたる時間分解電子線回折実験についても言及する。

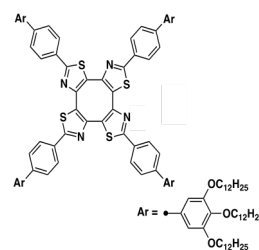


図 1. π -COT 分子

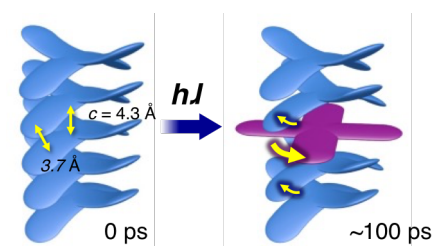


図 2. π -COT 分子の π スタッキング構造と光応答構造ダイナミクス

1. M. Hada et al., Sci. Rep. 5, 13530 (2015).