

まえがき

“測る”ことが鍵である分析化学の中で、光を使って物質を測る分光法は、分析化学の主要な柱のひとつである。分光法は、化学にとって欠かせぬ第一歩である分子構造の理解に、大きな威力を発揮する。ひとくちに分子構造と言っても、その意味は一次構造、高次構造、分子集合構造、結晶多形、溶媒和構造などの階層構造からなり、1つの分光法ですべてを網羅的に理解することはできない。

各階層構造の分光法による解析を、現在の視点で比べてみよう、分子の一次構造解析にはNMRと質量分析法の組み合わせが決定的な威力を発揮している。一方、高次構造や分子集合構造の解析には、本書で扱う赤外・ラマン分光法がもっとも強力な解析手段のひとつである。結晶多形の解析には言うまでもなくX線回折(XRD)法が必須である。しかし、結晶子のサイズが非常に小さくなるとXRDのピークはブロードになって解析が困難となり、単分子膜レベルではむしろ赤外・ラマン分光法の方が結晶多形に関しても明快な知見を与える。このように、目的に応じた適切な分析手法を知っておくことは重要である。本書では、赤外・ラマン分光法でやれることを、最新の理解に基づいてできるだけ実用的に使いやすくなるように解説することを心掛けた。

赤外・ラマン分光法はいずれも日本で長い研究の歴史を持ち、とくに初期の基礎研究である“分子振動の解析”に、日本が与えた影響は非常に大きい。たとえば、東大の水島・島内研究室では、アルキル鎖の全体振動のひとつである縦アコードイオンモード(縦波音響モード; LAM)について理論と実験の両面で詳しく研究した。その結果、ラマンスペクトルに現れるこのモードの波数とアルキル鎖長との相関が定式化された(1949年)。これにより、高分子であるポリエチレンは有限長のアルキル鎖が折り返したラメラ構造を持つことを見

出し、ラメラ長も判明した。こうした発見は、XRDの方が先行しそうなイメージがあるが、XRDでは結晶化していることはわかっても、分子鎖が直鎖なのか折り返しているのかまでは判断できず、ラメラ構造の特定にはラマン分光法が適切だった好例である。

赤外・ラマン分光法は分子や結晶の固有振動を測る手法で、振動分光法の代表格である。近年は、振動分光法の中でも、和周波発生（SFG）に代表される非線形分光法への注目度が高く，“界面選択性”という言葉に魅力を感じる人も多い。事実、SFGには他の方法では得られない有用な情報が得られる大きなメリットがある。しかし、赤外・ラマン分光法でも平滑界面では界面の情報を豊富に取り出せることを忘れては理解のバランスが大いに欠ける。SFGの選択律が赤外およびラマン分光法の選択律の積であることを知っていれば、得られる分子情報は線形分光法である赤外・ラマン分光法の方が圧倒的に多いことはすぐにわかるだろう。先のXRDとラマン分光法の比較の例で示したように、ここでも目的に応じた分光法の選択が重要なのである。

多くの優れた分析手法が選び放題な時代だからこそ、それぞれの手法の深い理解と、それに基づく手法の選択に、自信に満ちた判断力が問われる。赤外・ラマン分光法は歴史こそ長いが、決して古めかしい手法ではない。むしろ、最先端の材料化学や生体分子分析などに圧倒的な分子情報を提供してくれる、発展が続く分光法である。あとは、これらを活かして、スペクトルから定性・定量的に分子情報を読み解く力が求められており、そのエッセンスを本書で感じていただければ幸いである。

コストパフォーマンスが高く、ラボで手軽にスペクトルを測定して、手元にある試料の詳細な分子構造情報が得られる赤外・ラマン分光法を研究の現場で活かせれば、化学者が求める研究はいずれも大いに加速するだろう。習うより慣れろ。本書を片手に、ぜひ身近にある赤外・ラマン分光器をまずは使ってみてほしい。そして、1つのバンドだけを見るのではなく、可能な限り多くのバンドの波数位置や強度を粘り強く議論してほしい。そのとき必ず道が開け、研究が大いに加速することを実感できるであろう。

2020年8月

長谷川 健