

# 機械学習に基づいたエレクトロクロミック超分子ポリマーの 超高効率合成法の開発

## Development of super-highly efficient synthesis of electrochromic supramolecular polymer based on machine learning

### 目的 Purpose

- ・ 空調を省エネ化できる調光ガラスを開発する
- ・ 調光をつかさどるエレクトロクロミック材料を簡便に合成する手法を開発する
- ・ エレクトロクロミック変化が起こる過程を解明する
- ・ Development of smart window for energy-saving of air-conditioner
- ・ Quick synthesis of electrochromic materials used in smart window
- ・ Detailed investigation of the electrochromic behavior

### 概要 Outline

- ・ マイクロ波を用いたメタロ超分子ポリマーの超高効率製造方法を開発する
- ・ 機械学習を利用してポリマー合成の反応条件の最適化を実現する
- ・ 合成したポリマーのエレクトロクロミック特性を放射光を用いて分析する
- ・ Microwave-assisted synthesis of metallo-supramolecular polymers
- ・ Optimization of reaction conditions using machine learning
- ・ Analysis of electrochromism of the polymer by synchrotron

### ① マイクロ波を用いた超高効率合成

#### Microwave-assisted super-highly efficient synthesis

メタロ超分子ポリマーは、図1に示すように、金属イオンと有機モジュールが錯形成により交互に連結した構造を有する超分子型ポリマーである。金属と有機部位との間の電子的相互作用に基づく、新奇な機能の発現が期待される。研究代表者らは、メタロ超分子ポリマーの優れたエレクトロクロミック特性などをこれまでに報告している (M. Higuchi et al., Chem. Rec. 2007等)。

TIAかけはしプロジェクトにおいて、昨年、ルテニウムイオンを含むメタロ超分子ポリマーが、マイクロ波による加熱により、短時間で効率的に合成できることを発見した (特許出願中)。本年度は、様々な金属イオンを含むメタロ超分子ポリマー合成への本手法の適用を検討する。

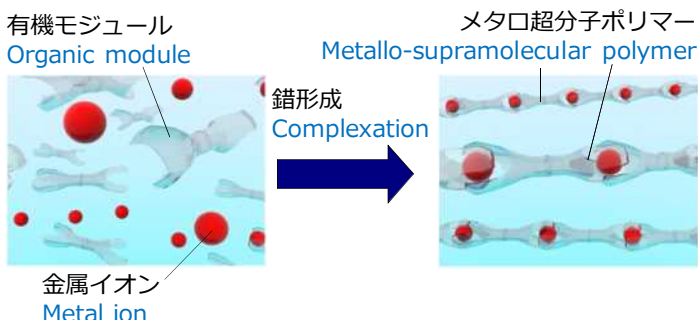


図1 メタロ超分子ポリマーの形成

Fig. 1. Formation of metallo-supramolecular polymer

### ② 機械学習を用いた合成条件の最適化

#### Optimization of reactions with machine learning

マイクロ波を用いて合成したメタロ超分子ポリマーについて、実験化学的データ (反応時間, 分子量, 粘度, 収率, エレクトロクロミズム特性など) をもとに計量化学を駆逐することで、合目的な超分子ポリマーの合成条件の最適化を行う。

### ③ 放射光を用いたポリマー物性の解析

#### Analysis of electrochromism by synchrotron

マイクロ波を用いて合成したメタロ超分子ポリマーを用いて、図2に示すようなエレクトロクロミックデバイスを作製する。放射光を用いて、本デバイスへの電圧印加に伴って生じる、メタロ超分子ポリマーの金属及び錯体部位の電子状態変化、及び構造変化を明らかにする。

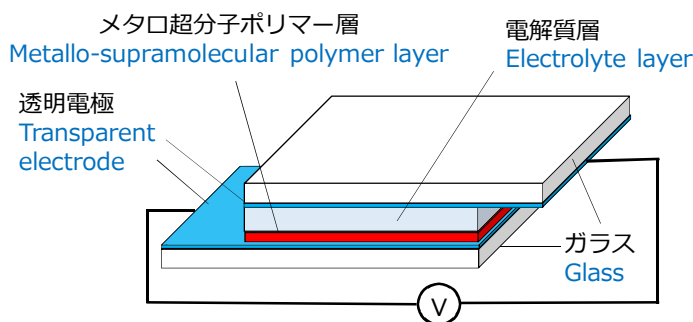


図2 エレクトロクロミックデバイス  
Fig. 2. An electrochromic device

共同  
研究者

産業技術総合研究所

長畑 律子



高エネルギー加速器研究機構

阿部 仁



東京大学

南 豪

