

平成 30 年度 TIA 連携プログラム探索推進事業「かけはし」

調査研究報告書(公開版)

【研究題目】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

【整理番号】TK18-010

【代表機関】物質・材料研究機構

【調査研究代表者(氏名)】樋口 昌芳

【TIA 内連携機関：連携機関代表者】

産総研 長畑律子

高エネ研 阿部 仁

東大 南 豪

【TIA 外連携機関】

なし

【報告書作成者】樋口 昌芳

【報告書作成年月日】2019 年 3 月 17 日

【連携推進(具体的な連携推進活動内容とその活動の効果等)】

- 1) 樋口ら(NIMS)と長畑ら(産総研)は、マイクロ波を用いたメタロ超分子ポリマーの超効率合成に関する共同研究を継続した。合成したポリマーを用いてエレクトロクロミックデバイスを作製し、これを愛媛県総合科学博物館に展示し、本成果に関する一般の人々への周知を進めた。

展示施設：

愛媛県総合科学博物館

<http://www.i-kahaku.jp/>

- 2) 樋口ら(NIMS)と阿部(KEK)は、メタロ超分子ポリマーの電子構造解析を放射光施設を用いて行った。一部成果は、下記論文として発表した。

発表論文：

“Slow Magnetic Relaxation in a Tb(III)-Based Coordination Polymer”,

T. Yoshida, Y. S. L. V. Narayana, H. Abe, M. Higuchi,

Dalton Trans., 47, 16066-16071 (2018).

(Selected to outside back cover, Open access)

- 3) 樋口(NIMS)と南(東大)は、メタロ超分子ポリマーの吸収スペクトルの機械学習による解析に向けた準備を行った。
- 4) 代表者及び連携機関代表者による公開ワークショップを、2019年1月16日にNIMS内において実施し、一年の研究成果の報告と今後の方針について協議した。

【調査研究内容（実験等中心に背景・課題と実行された課題解決の内容と結果）】

下記3点について、調査研究を実施した。

- 1) メタロ超分子ポリマーのマイクロ波を用いた効率的合成法の開発
- 2) 放射光施設を用いたメタロ超分子ポリマーの電子状態解析
- 3) メタロ超分子ポリマーの吸収スペクトルに関する機械学習の可能性

研究内容の詳細については、未発表データを多く含むため割愛する。今後、順次、論文発表等を行う予定。

【今後の活動予定】

これまでの調査研究により、新しい知見や成果を得て、特許や論文を発表してきた。今年度の共同研究の結果、将来の実用化につながる成果を得た。

今後は、これまでの研究を更に発展させるために、競争的外部資金の獲得を目指すとともに、樋口（NIMS）が実用化に関するベンチャー会社を2019年度に立ち上げることで、研究成果をより素早く社会に還元することを目指す。

また、来年度もTIAかけはしに応募する予定。

以上