

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

電気化学的に遮光状態を変えることができる調光ガラスは、太陽光を効果的に遮断することで、オフィスや乗り物内の冷暖房にかかるエネルギーを低減すると期待される。本研究では、調光ガラスに用いるエレクトロクロミック超分子ポリマーに関して、機械学習に基づいた超高効率合成法を開発する。

方法 Method

- ・ マイクロ波を利用したメタロ超分子ポリマーの高効率合成
- ・ 合成したポリマーのエレクトロクロミック特性の分析
- ・ X線吸収分光法(XAFS)を用いたポリマー中の金属の価数、局所構造の解明
- ・ 実験データを基に計量化学を駆使したポリマーの超高効率合成法の提案

展望 Prospect

- ・ ポリマーの超高効率合成による大量供給の実現と生産コストの低減
- ・ メタロ超分子ポリマーを用いたエレクトロクロミック調光ガラスの作製
- ・ 企業連携による調光ガラスの生産
- ・ NIMS認定ベンチャー設立による調光ガラスの販売

メタロ超分子ポリマーのエレクトロクロミック機能

Electrochromism of metallo-supramolecular polymer

鉄やルテニウムなどの金属イオンとビス（ターピリジン）等の有機配位子を錯形成させることでメタロ超分子ポリマーを合成できる。得られたポリマーは、ポリマー中の金属イオンを電気化学的に酸化還元させることで可逆な色変化（エレクトロクロミック特性）を示すことを発見した（図1）。このポリマーを用いて、遮光と透明部分の割合を自由に変えることができる調光ガラスの作製に世界で初めて成功した（図2）。

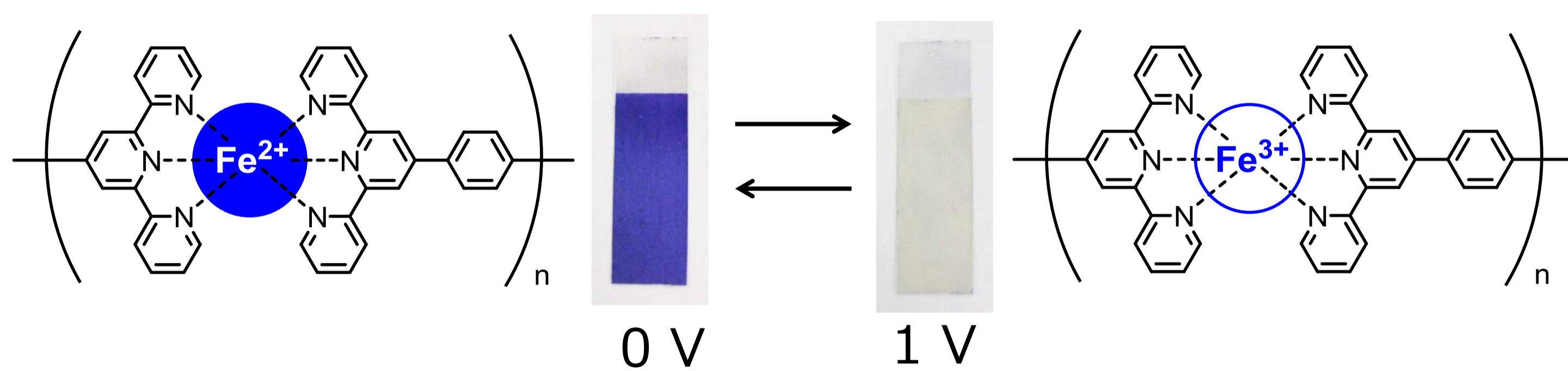


図1 鉄を含むメタロ超分子ポリマーにおけるエレクトロクロミック特性

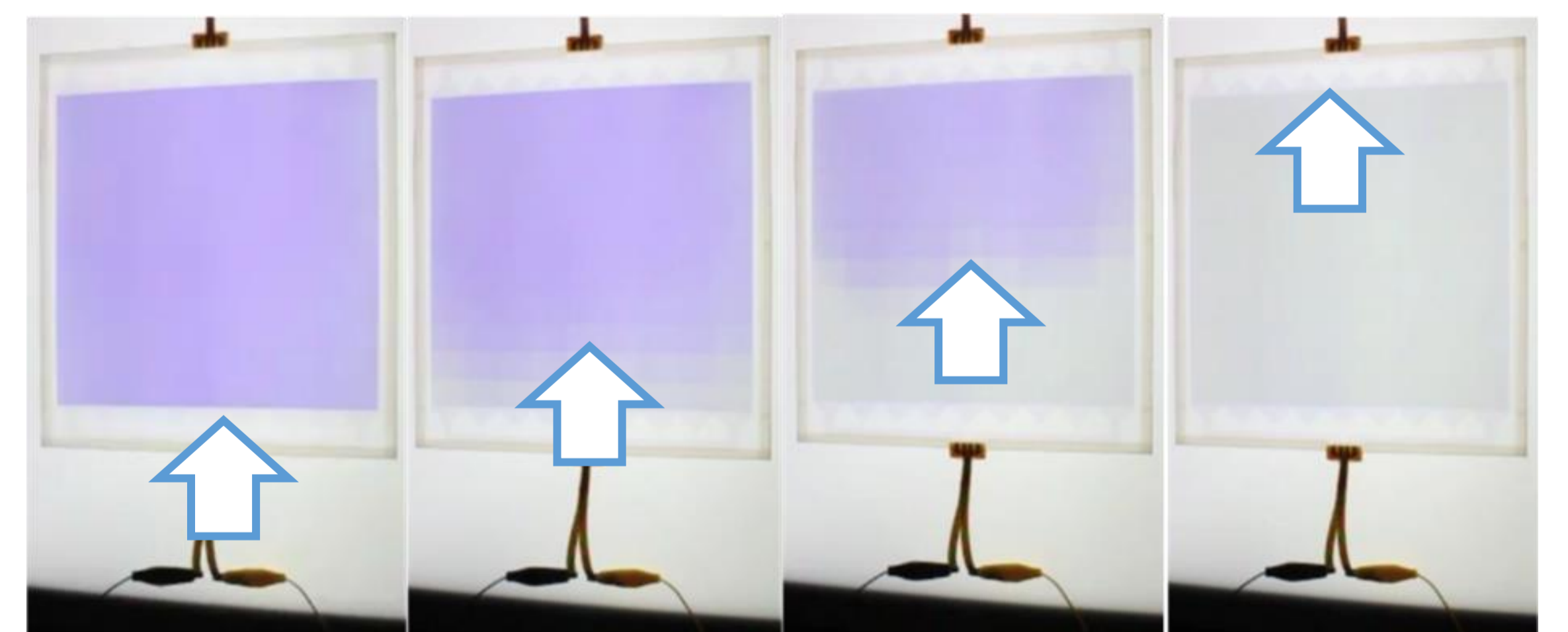




図2 メタロ超分子ポリマーを用いて作製した「グラデーション変化する調光ガラス」


機械学習に基づくエレクトロクロミック超分子ポリマーの超高効率合成に向けて

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

 **産総研** マイクロ波を利用したメタロ超分子ポリマーの高効率合成

 X線吸収分光法(XAFS)を用いたポリマー中の金属の価数、局所構造の解明

 **NIMS** 合成したポリマーのエレクトロクロミック特性の分析

 **東京大学** THE UNIVERSITY OF TOKYO 実験データを基に計量化学を駆使したポリマーの超高効率合成法の提案