

様 式 F - 7 - 2

科学研究費助成事業（学術研究助成基金助成金）実績報告書（研究実績報告書）

1. 機関番号 

1	4	6	0	3
---	---	---	---	---

 2. 研究機関名 奈良先端科学技術大学院大学

3. 研究種目名 挑戦的萌芽研究 4. 補助事業期間 平成26年度～平成27年度

5. 課題番号 

2	6	6	2	0	0	6	7
---	---	---	---	---	---	---	---

6. 研究課題名 10000%を超える電流効率を有する高度連鎖型電子移動クロミック反応系の構築

7. 研究代表者

研究者番号	研究代表者名	所属部局名	職名
4 0 2 2 1 1 9 7	カワイ ツヨシ 河合 壯	物質創成科学研究科	教授

8. 研究分担者

研究者番号	研究分担者名	所属研究機関名・部局名	職名

9. 研究実績の概要

10000%を超える電流効率を有する新しいエレクトロクロミック分子の創出に向けて分子材料開発を進めてきた。特に微小電力で着色、消色が可能となれば新しいスマートウィンドウなどへの応用が期待される。100段以上の連鎖過程により一度、酸化反応が進行すると多数の分子がエレクトロクロミック反応を示す分子を設計、開発した。平成27年度には前年度に得られた知見をもとに新しい分子設計を行い高分子材料や低分子材料などの合成を行いその連鎖異性化反応を検討した。その結果、高分子量化においては、予想に反して連鎖反応性が低下することを見出した一方で、低分子化合物において置換基の選択的な導入により連鎖反応性を大きく増強できることを見出され、1電子酸化により1000段の連鎖反応が可能となり、異性化反応の電気化学効率が10000%を超える分子を達成した。この場合、酸化開始後の反応分子数は時間経過とともに線形に増加することを見出された。これは、律速段階が1分子反応であることを示している。さらにその異性化速度は初期の酸化量に比例することを見出された。このことから、1電子酸化によって形成されたC<sup>+</sup>型ラジカルから0<sup>+</sup>型ラジカルへの異性化反応が律速過程であることを見出された。このことは高分子量化によって加速がもたらされなかった観測事実と良い一致を示している。量子科学計算などから、それぞれの異性体およびそのラジカル種の相対安定性を詳細に調べ、観測結果をラジカル種の相対安定性から説明できることを明らかにした。これらを通じて、高クーロン効率をしめす新しい分子材料の設計指針を明らかにした。

10. キーワード

(1) 異性化                      (2) エレクトロクロミズム                      (3) 電気化学効率                      (4) 連鎖反応

(5) \_\_\_\_\_                      (6) \_\_\_\_\_                      (7) \_\_\_\_\_                      (8) \_\_\_\_\_

(注)・印刷に当たっては、A4判(縦長)・両面印刷すること。

## 11. 研究発表

(雑誌論文) 計(1)件/うち査読付論文 計(1)件 (最終年度分)

/うち国際共著論文 計(0)件 (最終年度分) /うちオープンアクセス 計(0)件 (最終年度分)

著者名		論文標題【掲載確定】				
J. P. Calupitan, T. Nakashima, Y. Hashimoto, T. Kawai		Fast and Efficient Oxidative Cycloreversion Reaction of a <i>pai</i> -Extended Photochromic Terarylene				
雑誌名	査読の有無	巻	発行年	最初と最後の頁	国際共著	
Chemistry A-European Journal	有	22	2 0 1 6	印刷中	-	
掲載論文のDOI(デジタルオブジェクト識別子)						
なし						
オープンアクセス						
オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難						

(学会発表) 計(0)件/うち招待講演 計(0)件 (最終年度分) /うち国際学会 計(0)件 (最終年度分)

発表者名		発表標題	
学会等名	発表年月日	発表場所	

(図書) 計(0)件 (最終年度分)

著者名		出版社	
書名		発行年	総ページ数

(課題番号: 26620067)

(注)・印刷に当たっては、A4判(縦長)・両面印刷すること。

(2/4)

## 12. 研究成果による産業財産権の出願・取得状況

(出願) 計(0)件 (最終年度分)

産業財産権の名称	発明者	権利者	産業財産権の種類、番号	出願年月日	国内・外国の別

(取得) 計(0)件 (最終年度分)

産業財産権の名称	発明者	権利者	産業財産権の種類、番号	取得年月日	国内・外国の別
				出願年月日	

## 13. 科研費を使用して開催した国際研究集会

(国際研究集会) 計(0)件 (最終年度分)

国際研究集会名	開催年月日	開催場所

## 14. 本研究に関連して実施した国際共同研究の実施状況

(1) 国際共同研究: 国際共同研究である

共同研究相手国	相手方研究機関			
フランス国	Universite de Toulouse, III	-	-	-
-	-	-	-	-
-	-	-	-	-
-	-	-	-	-
-	-	-	-	-
-				

15. 備考

