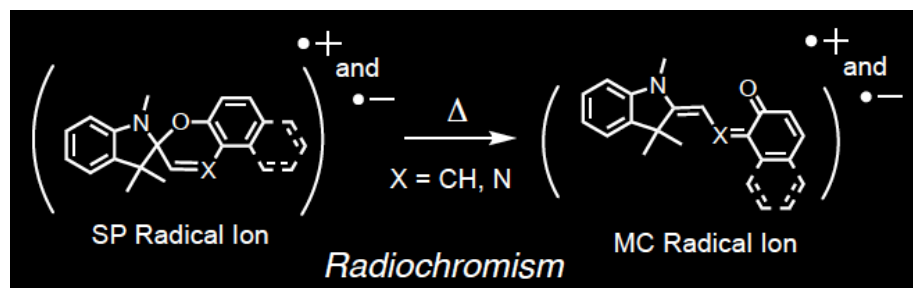


電子パルス照射法と量子化学計算を用いたスピロピランラジカルイオンのラジオクロミズム過程の研究

(群馬大院・理工) 山路 稔 (阪大産研) 小阪田泰子、藤乗幸子、藤塚 守

Radiochromism of Spiropyran via the Radical Ions Studied by Pulsed Electron Radiolysis and DFT Calculation

Minoru Yamaji, Yasuko Osakada, Sachiko Tojo, Mamoru Fujitsuka



2023年度成果報告書にこの研究に関するインタビュー記事が掲載されています (クリックすると記事に移動します)

Figure 1. Chromic reaction of spiropyran radical ions to merocyanine radical ions.

スピロピラン(SP)は光照射により呈色するメロシアニン(MC)へ変化するフォトクロミズム反応を示す化合物として知られています。我々は有機溶媒中での放射線照射によりSPのラジカルイオンを生成させ、その化学反応を過渡吸収測定法により追跡し、MCのラジカルアニオンに至る過程を世界で初めて観測しました。この反応をラジオクロミズムと名づけました (Figure1)。この反応の速度定数と熱力学定数を決定し、SPのラジカルイオン内で電子がどのように分布しているのかを量子化学計算により考察しました。

Spiropyran (Sp) are known to undergo photochromism to form merocyanines (MC). We performed radiolysis of SP in organic solvents to form the radical ions that show chromic reaction to form the MC radical ions (Figure 1) by transient absorption measurements. We named it as *Radiochromism*. Rates and enthalpy changes for the chromic process were determined.