科学研究費助成事業

平成 30 年 6 月 3 日現在

研究成果報告書

機関番号: 12601
研究種目:新学術領域研究(研究領域提案型)
研究期間: 2013 ~ 2017
課題番号: 25102005
研究課題名(和文)分子表面の精密デザインに基づく人工系における自己組織化制御
研究課題名(英文)Controle of self-assembly in artificial systems based on precise design of moleular surfaces
研究代表者

平岡 秀一(Hiraoka, Shuichi)
東京大学・大学院総合文化研究科・教授

研究者番号: 10322538
交付決定額(研究期間全体): (直接経費) 78,600,000円

研究成果の概要(和文):分子自己集合における二つの未解決問題に取り組んだ。一つ目は「分子ほぞ」という 弱い分子間相互作用と疎水効果のみを使い一義自己集合体を形成するデザイン原理の確立で、二つ目は分子自己 集合過程を調べる新手法(QASAP)の開発とそれによる分子自己集合過程の解明である。分子ほぞとして歯車状両 親媒性分子をデザインし、これらを合成するための新規合成法の開発を経て、水中で130 °Cでも安定な箱型自 己集合体「ナノキューブ」を開発した。一方、QASAPを用いて14種類の自己集合性錯体の形成機構を解明し、自 己集合過程に見られる様々な特徴を見出し、さらにキラルセルフソーティングの機構も世界で初めて解明した。

研究成果の概要(英文): We carried out two unresolved issues in molecular self-assembly: (1) establishing design principle of "molecular hozo" for the construction of discrete self-assemblies only using very weak, non-directional intermolecular interactions (van der Waals and cation-pai interactions) and the hydrophobic effect in water and (2) revealing molecular self-assembly process by a novel method (QASAP), which was developed by us. In the first project, we designed gear-shaped amphiphiles, developed a novel method to synthesize C2v symmetric hexaphenylbenzene derivatives, and succeeded in developing a cubic assembly "nanocube" that is stable at 130 °C in water. In the second project, self-assembly processes of 14 coordination assemblies were revealed by QASAP, which shows several features in molecular self-assembly. Besides, chiral self-sorting processes where enantiomers are spontaneously sorted into homochiral assemblies were revealed by QASAP.

研究分野: 超分子化学

キーワード: 分子自己集合 van der Waals力 疎水効果 分子認識 超分子化学 自己組織化

1.研究開始当初の背景 分子自己集合において、二つの未解決問題が 存在した。

(1)分子自己集合では、可逆性のある化学 結合が用いられるが、これまで主に方向性を もつ比較的強い化学結合(水素結合、配位結 合など)が人工系の自己集合に利用されてき た。一方、生命系では、van der Waals(vdW) 力など、方向性に乏しくかつ結合力もとても 弱い分子間力が巧みに利用されており、生命 系と人工系の間にギャップがあった。方向性 をもつ化学結合では、ある元素の周囲に幾つ の元素がどのような空間配置に置かれるか が決まるが、vdW 力では、このような原子を 配置するための情報が欠けており、vdW 力を 使って秩序構造を形成するためのデザイン 原理が無いことが問題であった。

(2) 主に分子自己集合は化学平衡下にあり、 自己集合体は熱力学的に再安定な種である ことが多い。そのため、これまである自己集 合体がなぜ形成されるのかという点につい て、自己集合体の安定性に基づき議論されて きたが、ばらばらな構成要素がどのようにし て、秩序構造へ形成されていくのかという自 己集合過程について、人工系、生命系にかか らず、ほとんど理解されてこなかった。自己 集合過程を調べる上で最大の問題は自己集 合過程で一過的に生成する中間種を観測し、 これを定量することができないためである。 また、もし全ての中間体を観測することがで きたとしても、これらが全て同じ構成要素か らなるため、それぞれを区別して観測、定量 できない。このように、自己集合過程を調べ るためにはこれらの問題を根本的に解決す る新手法の開発が不可欠であった。

2.研究の目的

(1)人工系における分子自己集合では、方 向性をもつ化学結合や分子間相互作用が利 用されてきた。一方、生命系では、vdW 力に 代表される極めて弱い分子間力が効果的に 利用されている。このため、人類が、vdW 力 を積極的に活用し、物質開発を行うことがで きれば、これまでに構築されてきた物質とは 本質的に異なる新しい物質合成を行うこと ができる。そのため、結合力が弱く、方向性 に乏しい vdW 力をいかにして秩序構造の形成 に利用するかというデザイン原理の確立を おこなった。

(2)分子自己集合過程では類似した中間体 が多数生成し、これらを一つ一つ調べ上げ、 自己集合過程を調べることは、実質的に不可 能と言える。そこで、本研究では発想を転換 し、中間種以外の原系と生成系のすべてを定 量し、これらの差分から全中間種の平均組成 を調べ、この時間変化から自己集合過程に関 する情報が得られるのではないかと考えた。 この手法(Quantitative Analysis of Self-Assembly Process: QASAP)は様々な分 子自己集合に適用可能だが、人工系で多数の 例が存在する、自己集合性錯体に着目し、そ れらの形成過程を QASAP による調べることに した。

3.研究の方法

(1)全ての分子間相互作用は距離(r)のべ キ乗(r⁻ⁿ: n = 1 - 6)で表され、nが大きくな るほど、近距離まで近づかない限り有効な引 力が働かない相互作用である。したがって、 n = 6 の vdW 力は、分子間相互作用の中で最 も弱い。そのため、vdW 力を強く働かせるた めには、分子表面を密に接触させる必要があ る。また、生命系では疎水効果の役割もとて も大きい。疎水効果は分子表面を水和してい る水分子がどれだけ自己集合によってバル クヘ放出されるかに依存する。したがって、 vdW 力と疎水効果を最大限に利用するために は、凹凸の相補的な分子表面を用意し、これ らを密に噛み合わせれば良いことになる。こ れによって、大きな脱水和面積により疎水効 果と密な接触により強い vdW 力の両方が期待 される。このように凹凸をもつ物質を噛み合 わせて構造体を作る手法はマクロなスケー ルで指物に見られる「ほぞ」と似ている。ほ ぞは木材に凹凸の切り込みを入れ、これらを ぴたりと噛み合わせることで、釘やのりを使 うことなく、家具を組み立てる伝統工芸であ る。そこで本研究では、分子レベルで作るほ ぞ「分子ほぞ」を設計し、これらから一義構 造体の形成を行なった。

また、自己集合体における分子の噛み合い を評価することができれば、実験的に求めら れる安定性と比較することで、より詳細な議 論が可能になる。そこで、分子の噛み合いを 半定量的に評価する手法の開発も行った。コ ンピュータで分子の表面を計算する場合、プ ローブ球を使い、これが分子表面をなぞるこ とで求める。本研究ではこの手法をもとに、 プローブ球の直径(d)を少しずつ変化させ、 直径 dのプローブ球を使って求めた接触面積 と、*d*+∆dのプローブ球を使って求めた接触面 積の差から面間距離 dの接触面積を調べる方 法 (Surface Analysis with Varying Probe Radii: SAVPR)を考案した。これをd = 0か ら3Åまで行うことで、接触面積の面間距離 分布として、分子の噛み合いを可視化するこ とができる。

(2)遷移金属イオン(M)と多座配位子(L) から形成される自己集合性錯体の形成は、一 般的に次式で表される。

 $o MX_r + p L \qquad q M_o L_o + or \cdot X (1)$

ここで X は脱離配位子で、自己集合は X と L の間の配位子交換である。また、中間体は $M_a L_s X_c$ で表される。ここで、a, b, c から化学 的に意味のある 2 つのパラメーターを導入す る。

n = (4a - c)/b (2)

k = a/b (3)

ここで、nは一つの配位子あたりに結合する 金属イオンの数を表し、一方kは金属イオン と配位子の比率を表している。実験により得 られる情報は全中間体の平均組成から求め られる(n, k)値で、これを((n), (k))と表す。 ここで注意すべきことは、((n), (k))値をもつ 中間種が存在しているとは限らないことで ある。そこで、QASAPでは((n), (k))値の時間 変化から自己集合過程を明らかにする。

4.研究成果

(1) 歯車状両親媒性分子 (Gear-Shaped Amphiphile: GSA) はヘキサフェニルベンゼン (HPB) 骨格に、親水性基と疎水性基を結合さ せた C_{2v} 対称性をもつ分子である。本研究で は、GSA の合成のための新規合成法の開発、 ナノキューブの熱安定性に対する置換基効 果、SAVPR による分子のかみ合いと安定性と の相関、ナノキューブに対するゲスト分子の 包接特性、ナノキューブの速度論的安定性を 調べた。

*C*_{2√}対称性をもつ HPB 誘導体の簡便な合成 法を開発した。これは、リチウム-ハロゲン 交換反応が可逆であることに着目し、五つの 臭素が結合したヘキサブロモ HPB に対して、 不安定なリチウム試材を反応させ、ジリチオ 化すると、負電荷間の静電反発を抑えるよう に、二つのアニオンが交互に配置された種が 選択的に生成するというものである。これに より、三種類の置換基が導入された *C*_{2√} 対称 性をもつ HPB 誘導体を簡便に合成することが 可能になった。

上記の反応を利用し、置換基の異なる GSA を合成し、水中でナノキューブの形成を調べ た。その結果、いずれの場合も室温でナノキ ューブを形成していることが明らかになっ た。続いて、これらの熱安定性を調べるため に、温度可変 NMR 測定を行なった。その結果、 高温でナノキューブが解離し、単量体へ変化 することが明らかになった。また、この相互 変換は六量体と単量体間の二状態の変換で あり、高いアロステリック協同性があること が明らかになった。これらの置換基の効果か ら、ナノキューブの安定化には疎水効果 vdW 力、カチオン-π相互作用が重要であることが 明らかとなった。さらに、一つのナノキュー ブについてはその分解温度が 130 °C と水の 沸点をはるかに超え、ほとんどの超好熱菌タ ンパク質よりも安定であることが明らかに なった。ナノキューブの内部空間には 1 nm ほどの空隙が存在し、ここへ疎水性のゲス分 子を包接させると、熱安定性がさらに向上し、 150 °Cを超え、最も安定な超好熱菌タンパ ク質として知られるパイロコッカスホリコ シイ, CutA1 の 148.5 °C を超えた。これら の結果から、弱い分子間相互作用だけを利用 しても、人類が生命分子に匹敵する高い熱安 定性をもつ秩序構造を形成可能で、「分子ほ

ぞ」というデザイン原理が極めて有効である ことが実証された。

開発したナノキューブに対して、脱水和 面積を求め、疎水効果によりどの程度の安定 化があるかを見積もった。前述の通り疎水効 果は脱水和表面積と比例関係がある。驚くこ とに、熱安定性の高いナノキューブについて 脱水和表面積から見積もった自由エネルギ ーは実際の安定性よりも遥かに低く、これら のナノキューブが疎水効果以外の要因によ って安定化されていることが判明した。そこ で、これらに対して SAVPR を行なった結果、 熱安定性の高いナノキューブは共通して、1Å 以下の接触面積が多いことが明らかになり、 これらのナノキューブでは GSA の噛み合いが とても高いことが確認された。従って、vdW 力を効果的に利用するためには、1 Å 以下の 面間距離の接触面積を増やすことが重要で あることが明らかとなり、具体的なデザイン 指針が示された。また、ナノキューブ以外の 分子集合体についても SAVPR を行なったとこ ろ、脱水和表面積と自由エネルギーの間の直 線上に乗る自然界に見られる分子の噛み合 いは熱安定性の低いナノキューブと同程度 であり、自然界は vdW 力を最大限に利用して いるわけではないことも確認された。従って、 物質開発という観点から、分子を密に噛み合 わせれば、自然界の物質を超える人工分子を 構築できることを示唆している。

ナノキューブは GSA が噛み合って集合化し ているため、噛み合いを緩めて分子の大きさ をある程度変化させられる可能性がある。そ こで、ナノキューブに対して、大きさの異な る様々なゲスト分子の包接を試みたところ、 74 Å³から 535 Å³まで多様な大きさのゲスト を包接できることが判明した。さらに、ゲス ト分子の大きさに応答して、ナノキューブが 自分自身の大きさを変化させる (induced-fit)能力をもつことも明らかにな った。さらに、ゲスト分子として、アニオン 性の分子を用いると、いずれの場合もナノキ ューブの収縮が観測され、ナノキューブがゲ スト分子の大きさ、形状、電荷状態を認識し、 応答できることが明らかになった。

ナノキューブの速度論的安定性を調べた。 GSA の一部を重水素化した分子を新たに合成 し、軽水素のみを含む GSA からなるナノキュ ーブと部分的に重水素化された GSA からなる ナノキューブを混合し、両者で GSA の交換(ス クランブル)が起こるかを質量分析により調 べた。その結果、安定なナノキューブでは混ら 直後に交 換が完了するといった、熱安定性と高い相関 があることが明らかになった。続いてゲスト 分子がスクランブルに及ぼす効果を調べた ところ、利用するゲスト分子によって、スク ランブルを止めたり、逆に加速できることを 発見した。これにより、今後、複数種のナノ キューブを利用した複雑な分子システムの 構築にも応用できる可能性が明らかになっ た。

(2)本研究では 14 種類の自己集合性錯体 の形成過程を QASAP により明らかにした。こ れらの自己集合過程の解明を通して、分子自 己集合における以下の特性が見出された。

剛直な構造をもつ自己集合体では、最終 段階が自己集合における律速段階となる傾 向がある。

多くの場合、自己集合は 1 通りの経路の みを経由して進行するものではなく、複数の 経路を経ることが明らかになった。これによ り、自己集合がタンパク質の折れ畳みと同じ ように、エネルギーファネルにより理解でき ることが明らかになった。

自己集合過程の途中で最終生成物の 50 -100 倍近く大きな中間体が一過的に生成する 場合があることが明らかになった。この成果 により一過的に生成するマクロな中間種を 単離することで、材料として利用できる可能 性がある。

一方、最終生成物よりも小さな一義自己 集合体が中間種として得られることがある ことも明らかになった。しかしながら、QASAP によりこれらの小さい一義集合体を経由せ ずに最終自己集合体へ至る経路も存在する ことが明らかとなり、小さい一義集合体は中 間種というよりも一過的に生成する速度論 的トラップであることが明らかになった。

速度論的トラップを単離することに成功 した。これは、速度論的トラップが分子内反 応で変換できない場合に限られるが、このよ うな準安定な自己集合体の単離は本研究が 初めてである。

通常、速度論的トラップは深いエネルギ ーの井戸に閉じ込められているが、十分高い 反応性があるにもかかわらず速度論的にト ラップされるという、 energy-landscape-independent kinetic trap という変わった種が存在することを見 出した。

単離した速度論的トラップを使って、新たな自己集合を速度論支配下で行うことで、 複雑な自己集合体を形成できることが明ら かとなった。

キラルセルフソーティングと呼ばれる、 エナンチオマーが自他を認識し自発的に選 別する現象がどのように起こるのかを QASAP により世界で初めて解明した。自己集合性か ごがた錯体について、キラルセルフソーティ ングの過程を調べた結果、途中の中間体では 統計比よりも多くヘテロキラルな種を生成 し、その後ホモキラルソーティングが起こり、 最終的にホモキラルな自己集合体へ至ると いうとても複雑な過程を経ていることが明 らかとなった。

5.主な発表論文等 (研究代表者、研究分担者及び連携研究者に は下線)

[雑誌論文] (計23件)

<u>S. Hiraoka</u>, "Unresolved issues that remain in molecular self-assembly", *Bull. Chem. Soc. Jpn.* 査読有、in press. (Vol. 90 Commemorative Accounts: Self-Organization), DOI: 10.1246/bcsj.20180008

K. Ogata, T. Kojima, and <u>S. Hiraoka</u>, "Selective preparation of C_{2v} -symmetric hexaphenylbenzene derivatives through sequential Suzuki coupling", *Synlett*, 査読 有、DOI: 10.1055/s-0037-1610024

Y.-Y. Zhan, T. Kojima, T. Koide, M. Tachikawa, and <u>S. Hiraoka</u>, "A balance between van der Waals and cation- π interactions that stabilizes hydrophobic assemblies", *Chem. Eur. J.*, 査読有、DOI:10.1002/chem.201801376

T. Tateishi, S. Kai, Y. Sasaki, T. Kojima, S. Takahashi, and <u>S. Hiraoka</u>, "Two dominant self-assembly pathways to a Pd_3L_6 double-walled triangle", *Chem. Commun.*, 査読有、DOI: 10.1039/C8CC02608D

M. Nakagawa, S. Kai, T. Kojima, and <u>S.</u> <u>Hiraoka</u>, "Energy-landscape-independent kinetic trap of incomplete cage in the self-assembly of a Pd_2L_4 cage", *Chem. Eur. J.*, 査読有、DOI: 10.1002/chem.201801183

Y.-Y. Zhan, N. Tanaka, Y. Ozawa, T. Kojima, T. Mashiko, U. Nagashima, M. Tachikawa, and <u>S. Hiraoka</u>, "Importance of molecular meshing for the stabilization of solvophobic assemblies", *J. Org. Chem.*, 查請有、**83**, 5132–5137 (2018), DOI: 10.1021/acs.joc.8b00495

Y.-Y. Zhan, K. Ogata, T. Kojima, T. Koide, K. Ishii, T. Mashiko, M. Tachikawa, S. Uchiyama, and <u>S.</u> <u>Hiraoka</u>, "Hyperthermostable cube-shaped assembly in water", *Commun. Chem.*, 査読 有 、 1, 14 (2018), DOI: 10.1038/s42004-018-0014-2

N. Tanaka, Y.-Y. Zhan, Y. Ozawa, T. Kojima, T. Koide, T. Mashiko, U.

Nagashima, M. Tachikawa, and <u>S.</u> <u>Hiraoka</u>, "Semi-quantitative evaluation of molecular meshing by surface analysis with varying probe radii", *Chem. Commun.*, 査読 有、**54**, 3335–3338 (2018), DOI: 10.1039/c8cc00695d

S. Kai, T. Kojima, F. L. Thorp-Greenwood, M. J. Hardie, and <u>S. Hiraoka</u>, "How does chiral self-sorting take place in the formation of homochiral Pd_6L_8 capsules consisting of cyclotriveratrylene-based chiral tritopic ligands?", *Chem. Sci.*, 查読有、9, 4104 – 4108 (2018), DOI: 10.1039/C8SC01062E

T. Tateishi, T. Kojima, and <u>S.</u> <u>Hiraoka</u>, "Chiral self-sorting process in the self-assembly of homochiral coordination cages from axially chiral ligands", *Commun. Chem.*, 査読有、1, 20 (2018), DOI: 10.1038/s42004-018-0020-4

S. Kai, S. P. Maddala, T. Kojima, S. Akagi, K. Harano, E. Nakamura, and <u>S.</u> <u>Hiraoka</u>, "Flexibility of components alters the self-assembly pathway of Pd_2L_4 coordination cages", *Dalton Trans.*, 査読有、47, 3258–3263 (2018), DOI: 10.1039/C8DT00112J

Т Tateishi, Τ. Kojima, and S. Hiraoka, "Multiple pathways in the self-assembly process of а Pd₄L₈ coordination tetrahedron", Inorg. Chem., 查読有、57, 2686-2694 (2018), DOI: 10.1021/acs.inorgchem.7b03085

Τ. W. L. Tateishi, Zhu. Н Foianesi-Takeshige, T. Kojima, K. Ogata, and S. Hiraoka, "Self-assembly of a Pd₄L₈ double-walled square partly takes place through the formation of kinetically trapped species", Eur. J. Inorg. Chem., 查読 有 1192-1197 (2018),DOI: . 10.1002/ejic.201800037

S. Kai, M. Nakagawa, T. Kojima, X. Li, M. Yamashina, M. Yoshizawa, and S. Hiraoka, "Steric interaction between neighboring components favors the formation of large intermediates in the self-assembly process of a Pd₂L₄ capsule", Chem. Eur. J., 查読有、24, 3965-3969 (2018), DOI: 10.1002/chem.201705253

A. Baba, Τ. Kojima, S. and Hiraoka, "Quantitative analysis of self-assembly process of hexagonal Pt(II) macrocyclic complexes: effect of solvent and components", Chem. Eur. J. 查読有、24, 838-847 (2018).DOI: 10.1002/chem.201702955

S. Kai, V. Marti-Centelles, Y. Sakuma, T. Mashiko, T. Kojima, U. Nagashima, M. Tachikawa, P. J. Lusby, and <u>S. Hiraoka</u>, "Quantitative analysis of self-assembly process of a Pd_2L_4 cage consisting of rigid ditopic ligands", *Chem. Eur. J.*, 査読有、24, 663–671 (2018), DOI: 10.1002/chem.201704285

S. Kai, T. Shigeta, T. Kojima, and <u>S.</u> <u>Hiraoka</u>, "Quantitative analysis of self-assembly process of a $Pd_{12}L_{24}$ coordination sphere", *Chem. Asian* J., 査読有、**12**, 3203–3207 (2017), DOI: 10.1002/asia.201701351

S. Kai, Y. Sakuma, T. Mashiko, T. Kojima, M. Tachikawa, and <u>S. Hiraoka</u>, "The effect of solvent and coordination environment of metal source on the self-assembly pathway of a Pd(II)-mediated coordination capsule", *Inorg. Chem.*, 査読有、56, 12652–12663 (2017), DOI: 10.1021/acs.inorgchem.7b02152

10.1021/des.inorgenem./002152

<u>S. Hiraoka</u>, "What do we learn from the molecular self-assembly process?", *Chem. Rec.*, 査読なし、15, 1144–1147 (2015), DOI: 10.1002/tcr.201510005

A. Baba, T. Kojima, and <u>S.</u> <u>Hiraoka</u>, "Self-assembly process of dodecanuclear Pt(II)-linked cyclic hexagon", *J. Am. Chem. Soc.*, 査読有、137, 7664–7667 (2015), DOI: 10.1021/jacs.5b04852

- Y. Tsujimoto, T. Kojima, and <u>S.</u> <u>Hiraoka</u>, "Rate-determining step in the self-assembly process of supramolecular coordination capsules", *Chem. Sci.*, 查読有、 5, 4167–4172 (2014), DOI: 10.1039/C4SC01652A
- T. Kojima and <u>S. Hiraoka</u>, "Mesityllithium and *p*-(dimethylamino)phenyllithium for the selective alternate trilithiation of the hexaphenylbenzene Framework", *Chem. Commun.*, 査読有、50, 10420–10423 (2014), DOI: 10.1039/C4CC04520C
- ② Kojima and <u>S. Hiraoka</u>, "Selective alternate derivatization of the hexaphenylbenzene framework through a thermodynamically controlled halogen dance", Org. Lett., 查読有、16, 1024–1027 (2014), DOI: 10.1021/ol500041j

[学会発表](計12件)

<u>平岡 秀一</u>、「自己集合過程の解明と平衡 に支配されない自己集合」、日本化学会

第98春季年会、2018. "Coordination Shuichi Hiraoka, Self-Assembly Process Revealed by QASAP",新学術領域研究「動的秩序と 機能」第6回国際シンポジウム、2018. <u>Shuichi</u> Hiraoka, "How does coordination self-assembly take place?", New Frontiers of Chemistrv Supramolecular in Non-equilibrium Systems, 2018. Shuichi Hiraoka, "Coordination Self-Assembly Process and a Novel Method for the Formation of Coordination Self-Assemblies under Kinetic Control", 錯体化学会 第 67 回討論会,2017. <u>Shuichi Hiraoka</u>, "Nanocube: Ultra-thermostable Self-assemblies In Water", International Symposium on Pure & Applied Chemistry 2017, 2017. Sh<u>uichi Hiraoka</u>, "Nanocube: Ultra-Thermostable Self-Assemblies in Water", Frontier Bioorganization Forum 2017: Dynamical ordering and integrated functions of biomolecular systems, 2017. 平岡秀一、「超耐熱性自己集合体の秩序 形成」日本化学会第97春季年会、2017 <u>Shuichi Hiraoka</u>, "Self-assembly Process of Coordination Capsules and Cages", The 9th Japan-China Joint Symposium Functional on Supramolecular Architectures, 2016. Shuichi Hiraoka, "Self-Assembly Process of Coordination Rings, Cages, and Capsules", International Symposium on Polymer and Related Materials, 2016. 平岡秀一,「金属錯体型自己組織化のメ カニズム」,日本化学会第 95 春季年会, 2015年. 平岡秀一,「メカニズム指向の自己組織 化に挑戦! ~自己集合性金属錯体の形 成機構の解明~」,第5回CSJ化学フェ スタ2015.「技」を磨いて夢と可能性に 挑戦せよ! 有機合成化学者!」, 2015 年 Shuichi Hiraoka, "Self-Assembly Process of Coordination Cages and Capsules", 3rd Workshop of Center for Instrumental Analysis, Frontier of Instrumental Analysis using Magnetic Resonance Spectroscopy, 2015. 〔図書〕(計1件) 平岡 秀一、サイエンス社、溶液におけ る分子認識と自己集合の原理、2017、232

出願状況(計2件)

名称:ヘキサフェニルベンゼン骨格の位置選 択的交互修飾方法 発明者:<u>平岡 秀一</u>、小島 達央 権利者:同上 種類:特許 番号:特許願 2013-45547 出願年月日:2013 年3月7日 国内外の別:国内

名称: ヘキサフェニルベンゼン骨格の位置選 択的交互修飾方法 発明者: 平岡 秀一、小島 達央 権利者: 同上 種類:特許 番号:特許願 2014-45233 出願年月日: 2014 年 3 月 7 日 国内外の別: 国内

〔その他〕 報道関連情報

> 分子自己集合化の過程解析、化学工業日 報、208 年 3 月 16 日

> 熱安定性が高い集合体分子をかみ合わ せて開発,科学新聞2018年4月6日

> 東京大学・平岡教授らが150度Cでも安定な分子集合体を開発、噛み合わせを解析する計算手法確立・機能性分子の設計 指針に新概念、化学工業日報、2018年4月6日

> キラルセルフソーティングの機構を解 明、日本経済新聞電子版、2018 年 4 月 19 日

ホームページ等 http://hiraoka.c.u-tokyo.ac.jp/index.ht ml

アウトリーチ活動情報 <u>平岡 秀一</u>、「分子の自己集合:なぜ? そしてどうやって?集まるのか」、自 然科学カフェの集い 2014 年 10 月 18 日

6.研究組織

(1)研究代表者
 平岡 秀一(HIRAOKA, Shuichi)
 東京大学・大学院総合文化研究科・教授
 研究者番号:10322538

〔産業財産権〕