

自己評価報告書

平成 23 年 4 月 13 日現在

機関番号：12601

研究種目：新学術領域研究

研究期間：2008～2012

課題番号：20111007

研究課題名（和文） 数十～数百成分一義構造体の創発的自己集合

研究課題名（英文）

Emergence in Self-assembly to Produce Well-defined Structures from Many Components

研究代表者 藤田 誠 (FUJITA MAKOTO)

東京大学・大学院工学系研究科・教授

研究者番号：90209065

研究分野：複合新領域

科研費の分科・細目：ナノ・マイクロ科学・ナノ材料・ナノバイオサイエンス

キーワード：創発化学 自己組織化

1. 研究計画の概要

ウイルス殻構造の生成過程に見られるように、生物は数百の（場合には千を超える）成分を弱い分子間相互作用のみで集合させ、巨大でかつ安定な一義構造体を構築している。このような自己集合は、構成成分の構造や外部環境(pH など)のわずかな変化に極めて敏感な創発性の高い現象である。人工系ではこれまで、たかだか 20～30 成分の自己集合が達成されているにすぎない。本研究では、金属イオン(M)と架橋配位子(L)の組み合わせを精査し、 M_nL_{2n} 組成(n :最大 60)のアルキメデス準正多面体の創発的自己組織化を達成する。

2. 研究の進捗状況

これまでの研究で、自己組織化は成分の数が増すにつれ、(1)一旦生成した M_nL_{2n} 球状錯体は速度論的に捕捉され、共有結合化合物にも匹敵する安定性を獲得すること、(2) M_nL_{2n} 半正多面体構造は魔法数 6, 12, 24, 30, 60 のみで収束可能であり、配位子構造のわずかな違いを反映して構造が $M_{12}L_{24}$ ($n = 12$)から $M_{24}L_{48}$ ($n = 24$)に不連続的に切り替わること、(3)複数の配位子が存在してもお互いの自己組織化を干渉しない「直交性」が顕著に現れ、異なる収束構造が独立に生成することなどを明らかにした。このように、成分の数が増すにつれ、自己組織化は単純な熱力学現象を離れ、創発性をともなった複雑な現象へと変化することがわかってきた。

3. 現在までの達成度

①当初の計画以上に進展している。

計画当初はひとつの数値目標として「～100 成分自己組織化」を掲げたが、挑戦的要素を除けば、そこに明確な意義は見いだせなかった。しかし、本研究を通じ、多数成分自己組織化は、生物が安定性、巨大な一義構造、非対称性（直交性）を獲得するしくみまでもが見えてきた。当初の期待をはるかに超える進展である。

4. 今後の研究の推進方策

(1)統計熱力学に基づくエントロピー計算など、理論研究を組み合わせることで、多数成分自己組織化における創発性を定量的に考察する。

(2)配位子のさらなる合理設計に基づき、未踏の $M_{30}L_{60}$ ($n = 30$)、 $M_{60}L_{120}$ ($n = 60$)の自己組織化を達成する。

5. 代表的な研究成果

(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 4 件) いずれも査読あり

- ① "Self-Assembled $M_{24}L_{48}$ Polyhedra and Their Sharp Structural Switch upon Subtle Ligand Variation" Q.-F. Sun, J. Iwasa, D. Ogawa, Y. Ishido, S. Sato, T. Ozeki, Y. Sei, K. Yamaguchi, and M. Fujita, *Science* **2010**, 328, 1144-1147.
- ② "Coronene Nanophase within Coordination Spheres: Increased Solubility of C_{60} " K. Suzuki, K. Takao, S. Sato, and M. Fujita, *J. Am. Chem. Soc.* **2010**, 132, 2544-2545.
- ③ "Template synthesis of precisely monodisperse silica nanoparticles within self-assembled organometallic

spheres"K. Suzuki, S. Sato, and M. Fujita, *Nature Chem.* **2010**, *2*, 25-29.

- ④ "Remarkable Stabilization of $M_{12}L_{24}$ Spherical Frameworks through the Cooperation of 48 Pd(II)-Pyridine Interactions"S. Sato, Y. Ishido, and M. Fujita, *J. Am. Chem. Soc.* **2009**, *131*, 6064-6065.

[学会発表] (計 17 件)

- ① 藤田誠、Emergent Self-assembly of Molecular Spheres、The 3rd Japan-Korea Joint Symposium on Transition Metal Complexes (Okinawa)、平成 23 年 2 月 12 日
- ② 藤田誠、多成分自己組織化における分子レベル創発現象、分子ナノシステムの創発化学第二回公開シンポジウム(東京)、平成 23 年 2 月 4 日
- ③ 藤田誠、Self-assembled Coordination Materials、2010The International Institute for Nanotechnology (Evanston, USA)、平成 22 年 10 月 21 日
- ④ 藤田誠、Nanoscale Coordination Architectures: Self-Assembled Molecular Spheres、2010 Gordon Research Conferences(Boston, America)、平成 22 年 8 月 4 日
- ⑤ 藤田誠、Crystalline Molecular Flasks、239th American Chemical Society National Meeting & Exposition(San Francisco, USA)、平成 22 年 3 月 22 日

[図書] (計 0 件)

[産業財産権]

○出願状況 (計 0 件)

名称：
発明者：
権利者：
種類：
番号：
出願年月日：
国内外の別：

○取得状況 (計 0 件)

名称：
発明者：
権利者：
種類：
番号：

取得年月日：
国内外の別：

[その他]
ホームページ
<http://fujitalab.t.u-tokyo.ac.jp/>