



研究領域名 配位アシンメトリー：
非対称配位圏設計と異方集積化が拓く新物質科学

東京大学・大学院理学系研究科・教授 塩谷 光彦

しおのや みつひこ
塩谷 光彦

研究課題番号：16H06508 研究者番号：60187333

【本領域の目的】

化学の究極目標の一つは、あらゆる元素の絶対配置と相対配置を制御し、元素間の結合を自在設計することにある。したがって、周期表の約8割を占める金属元素について、金属中心の絶対配置や非対称性を制御することは、新しい物質科学を拓くための重要な鍵となる。

本研究領域は、金属元素ならびにその配位圏を立体制御、反応、物性発現の場と捉え、金属錯体における非対称配位圏の設計・合成と異方集積化法を理論・実験・計測により開拓することを目的とする。すなわち、金属錯体の配位圏の分子レベル制御に基づき、金属錯体およびそのナノ～マイクロレベルの集積化により得られる集積型錯体や配位空間において、構造や電子状態の非対称性・キラリティーを構築する方法論を開拓することにより、新しい学理「配位アシンメトリー」を創出する。具体的には、プロキラル金属錯体の不斉誘起などを含むキラル金属錯体の構築法、ならびにアシンメトリック構造集積のための新手法などを確立し、構造・機能・物性の異方性や指向性を有する新機能分子・材料へ展開する。「配位アシンメトリー」は、配位化学を基盤とする物質創成研究に新機軸を打ち出し、有機化学におけるキラル物質化学と双璧を成す新学術分野を拓く。

【本領域の内容】

本研究領域では4つの研究項目を設定し、理論・実験・計測グループの有機的連携体制をとりながら研究を推進する。

研究項目 A01（分子アシンメトリー）：金属中心の非対称配位圏の設計・合成法を確立し、溶液、結晶、界面における非対称金属錯体の構造、物性、反応性、動的挙動を分子レベルで解明する。

研究項目 A02（集積アシンメトリー）：分子からマイクロサイズにおよぶ配位・ナノ金属材料のマルチスケール自己組織化により、非対称集積構造を構築する方法論を開拓する。

研究項目 A03（空間アシンメトリー）：配位結合の柔軟性、方向性、電子状態を活用した非対称空間を構築し、指向性・異方性空間機能の増幅や動的制御を目指す。

研究項目 A04（電子系アシンメトリー）：機能単位である金属錯体やナノ結晶を、非対称配位子による架橋や非対称界面・空間による転写等で異方集積し、この集積構造に特異なキラル物質変換、キラル物性、指向性電子機能の創出を目指す。

これらの項目において、各計画研究を補強する理

論ならびに実験的研究、複数の計画研究を横断する研究、本領域の基盤技術や連携組織を活用する研究の公募を行う。



【期待される成果と意義】

本領域研究により、非対称配位圏の設計法やマルチスケールの異方集積化法に関する新しい学理が創出され、その分子構築や階層構造構築に関する基礎概念が、配位化学のみならず、物質創成に関わるあらゆる分野に浸透し、パラダイムシフトをもたらすであろう。構成単位となる金属含有物質の全原子の絶対配置と相対配置を合理的に設計し（単位設計）、それらが集積するときの相対位置を精密に制御すること（集積設計）により、独創的な新物質群が具体化される。このような化学の根幹を見据えつつ、「配位アシンメトリー」という配位化学の最も核となる部分に軸足を置き、あらゆる関連分野を俯瞰して挑戦的融合研究を強力に推進したい。

また、本領域研究により、異分野間の共同研究、国際共同研究、国際ネットワーク形成が促進され、俯瞰的な視野と複数の専門性を持つ国際的に第一級の若手研究者が育成されると期待される。

【キーワード】

配位アシンメトリー：金属錯体の非対称配位圏の設計・合成と異方集積化の基盤となる理論と原理

【研究期間と研究経費】

平成28年度～32年度
1,168,000千円



**Title of Project : Coordination Asymmetry:
Design of Asymmetric Coordination Sphere
and Anisotropic Assembly for the Creation of
Functional Molecules**

Mitsuhiro Shionoya
(The University of Tokyo, Graduate School of Science, Professor)

Research Project Number : 16H06508 Researcher Number : 60187333

[Purpose of the Research Project]

One of the final goals in chemistry is to control absolute/relative configurations of every element and to precisely design their bonding. It is therefore of key importance for developing new material science to construct metal-centered chirality and asymmetric coordination spheres.

This project aims at developing constructive methods for asymmetric coordination spheres and anisotropically assembled structures of metal complexes by theory, experiment, and instrumentation, focusing on metal elements and their coordination spheres as platforms for steric control, reactions, and functional expression. Namely, methods to create asymmetric and steric/electronic structures of metal complexes and their nano- to micron-size assembled structures will be developed by the molecule-based control of the coordination spheres to establish a scientific principle of "coordination asymmetry". In particular, constructive methods for chiral metal complexes, including asymmetric induction of prochiral metal complexes, and asymmetric assembled structures are expected to develop new molecules and materials with anisotropic and directional structures and functions. This principle would open new research comparable to asymmetric organic synthesis by making innovations for metal coordination-based advanced materials.

[Content of the Research Project]

In this research area, the following four research items collaborate closely with each other between research groups of theory, experiment, and instrumentation. A1 (molecular asymmetry): construction of asymmetric coordination spheres of metal complexes, elucidation of structure, reactivity, dynamic property of asymmetric metal complexes in solution and the solid states and at the interface. A2 (organization asymmetry): nano- to micron-size anisotropic self-assembly of coordination nanomaterials leading to assembled structure-based functions. A3 (space asymmetry): construction of asymmetric spaces based on the natures of coordination bonding directed toward amplification and dynamic control of directional and anisotropic space functions. A4 (electronic asymmetry): anisotropic assembly of coordination compounds by bridging with chiral ligands and

asymmetry transfer at the interface or space directed toward asymmetric molecular transformation and chiral/directional functions.

Proposals with supportive, transversal, and applied perspectives will be openly recruited for these research items.



[Expected Research Achievements and Scientific Significance]

This project will establish a new scientific principle regarding constructive methods for coordination spheres and anisotropic assembly of metal complexes, which will result in the paradigm shift not only for coordination chemistry but also for material science. A new class of materials will be created by the precise design of absolute/relative configurations of metal complexes and their assembled materials (unit/organization design). With a view to such an essential part of chemistry and every related field, we promote this project with a principle of "coordination asymmetry".

We also focus on international collaboration between different fields leading to international network development, looking for young players to develop with a higher viewpoint and expertise.

[Key Word]

Coordination asymmetry: a scientific principle regarding constructive methods for asymmetric coordination spheres of metal complexes and their anisotropically assembled structures

[Term of Project] FY2016-2020

[Budget Allocation] 1,168,000 Thousand Yen