

21世紀COEプログラム 平成14年度採択拠点事業結果報告書

機関名	東北大学	学長名	井上 明久	拠点番号	B01	
1. 申請分野	A<生命科学> B<化学・材料科学> C<情報・電気・電子> D<人文科学> E<学際・複合・新領域>					
2. 拠点のプログラム名称 (英訳名)	大分子複雑系未踏化学 (Giant Molecules and Complex Systems)					
研究分野及びキーワード	<研究分野: 複合化学>(超天然物)(有機金属)(ナノ金属錯体)(表面・界面)(巨大生命分子)					
3. 専攻等名	理学研究科化学専攻、工学研究科(応用化学専攻、化学工学専攻、生物工学専攻)、環境科学研究科環境科学専攻、多元物質科学研究所、未来科学技術共同研究センター					
4. 事業推進担当者	計 22名					
ふりがなくローマ字) 氏名	所属部局(専攻等)・職名	現在の専門 学位	役割分担 (事業実施期間中の拠点形成計画における分担事項)			
(拠点リーダー) YAMAMOTO YOSHINORI 山本 嘉則 (64)	理学研究科・化学専攻・教授	有機化学 工学博士	総括責任者 ガンビエロール全合成と分子触媒を用いる方法論開拓			
HIRAMA MASAHIRO 平間 正博 (59)	理学研究科・化学専攻・教授	有機化学・天然物合成化学 理学博士	総括分担者 シガトキシン全合成と同族体実践的合成			
ITAYA KINGO 板谷 謙悟 (59)	工学研究科・応用化学専攻・教授	電気化学・表面科学 工学博士	総括分担者 走査トンネル顕微鏡を用いた吸着分子構造の解析			
KIRA MITSUO 吉良 満夫 (63)	理学研究科・化学専攻・教授	有機金属化学 理学博士	高周期14族元素不飽和結合大分子の創製と機能			
NAKANISHI HACHIROU 中西 八郎 (64)	多元物質科学研究所・副所長・教授	有機固体化学 理学博士	大分子合成に向けた有機微結晶の作製			
MIYASHITA TORUJI 宮下 徳治 (59)	多元物質科学研究所・教授	有機材料化学 工学博士	有機機能分子群の自在集積			
YAMASHITA MASAHIRO 山下 正廣 (52)	理学研究科・化学専攻・教授	錯体化学 理学博士	次世代型高次機能性ナノ金属錯体の創製			
SHOUDA SHIN-ICHIROU 正田 晋一郎 (53)	工学研究科・生物工学専攻・教授	糖鎖工学 理学博士	人工多糖・オリゴ糖の合成過程における空間制御			
YAMADA MUNEYOSHI 山田 宗慶 (60)	工学研究科・応用化学専攻・教授	触媒化学 工学博士	ナノサイズクラスター触媒による超クリーン燃料合成			
ARAI KUNIO 新井 邦夫 (64)	環境科学研究科・環境科学専攻・教授	超臨界溶媒工学 工学博士	超臨界溶媒を用いる有機・無機ナノマテリアル創製			
UEDA MINORU 上田 実 (41)	理学研究科・化学専攻・教授	天然物有機化学・生物有機化学 農学博士	植物の運動を制御する生理活性物質の生物有機化学			
TOBITA HIROMI 飛田 博実 (52)	理学研究科・化学専攻・教授	有機金属化学 理学博士	典型元素-遷移金属複合型ナノクラスターの構築			
TERAMAE NORIO 寺前 紀夫 (58)	理学研究科・化学専攻・教授	分析化学 工学博士	集積化分子の作成と化学センサーとしての機能開拓			
KORAYASHI NAGAO 小林 長夫 (57)	理学研究科・化学専攻・教授	機能分子化学 理学博士・薬学博士	巨大芳香環金属錯体の合成と分子分光学			
KURIHARA KAZUE 栗原 和枝 (56)	多元物質科学研究所・教授	界面科学 工学博士	固-液界面の液体のナノ構造の研究			
KUMAGAI IZUMI 熊谷 泉 (58)	工学研究科・生物工学専攻・教授	生物化学・タンパク質工学 理学博士	抗体の遺伝子工学的選択・作製			
MATSUE TOMOKAZU 末永 智一 (53)	環境科学研究科・環境科学専攻・教授	生物工学 薬学博士	タンパク質の配向制御と局所機能探索			
MIYAMOTO AKIRA 宮本 明 (60)	未来科学技術共同研究センター・教授	分子材料設計学 工学博士	コンビナトリアル計算化学に基づく新材料の超高速スクリーニング			
OHNO KOUICHI 大野 公一 (61)	理学研究科・化学専攻・教授	物理化学 理学博士	分子表面の特性解析とナノ構造体の構築			
FUKUMURA HIROSHI 福村 裕史 (54)	理学研究科・化学専攻・教授	物理化学 理学博士	ナノ分光学による単一分子加工のメカニズム解析			
SHOEDA MIKA ITO 袖岡 幹子 (48)	多元物質科学研究所・教授	有機化学 薬学博士	タンパク質修飾酸素結合分子の合成と触媒反応開発			
ITO TATSUJI 伊藤 翼 (66)	理学研究科・化学専攻・教授	無機化学 理学博士	ナノサイズクラスター触媒による超クリーン燃料合成			
5. 交付経費(単位:千円)千円未満は切り捨てる () : 間接経費						
年度(平成)	14	15	16	17	18	合計
交付金額(千円)	140,000	177,000	171,000	176,000 (17,600)	163,840 (16,384)	827,840 (33,984)

6. 拠点形成の目的

基本的な考え方 科学と技術は連続性をもってこそ各々の意義が十分に発揮され科学技術の大きな発展が望める。現状では、両者は各々の分野で深化し、両者が乖離している嫌いがある。本拠点では理学工学一体となって「未踏化学」領域に取り組み、新現象の発見、新物質の創成から始まって、その解析および応用へと展開し、この分野での国際的拠点を形成する。

目的・必要性 化学における未踏分野はいくつかあるが、本拠点計画では複雑系大分子系領域を対象とする。化学は分子を基盤として成り立つ学術分野である。ひと昔まえは通常分子（1nmサイズ以下）を対象として合成・解析・機能発現・理論構築を行えばよかったが、現在では化学者にとって未踏領域の大分子や解析未踏の複雑系を対象とする時代を迎えた。代表的な複雑系は生物であり、材料は分子を超えたバルク系である。理学系化学が通常分子に基づく単純系で築いた体系から一歩踏み出し、工学系化学と共同で構造の明確な大分子や分子集合体などの複雑系の解析・構築・機能発現の研究を行い、interdisciplinaryな未踏領域の体系化と応用を行うことを目的とする（図1にイメージを示す）。

図1 物質のサイズと学術領域



拠点の特色と具体的内容 (1) 大分子複雑系未踏化学はボーダーレスの領域で、基礎から応用まで連続的に取り組む必要があり、理工一体化によりこの分野の国際拠点を形成する。材料や生物系分野とは異なり、あくまでも通常分子で構築した学術に基づいて未踏化学の解明と応用を推進する。(2) 具体的研究内容は次頁 7-(2) の図2を参照されたい。巨大天然物、分子触媒、有機微結晶、自己集積大分子、有機・無機クラスター、ナノ金属錯体、固液界面、タンパク質機能制御、コンビナトリアル計算化学などのキーワードで表される未踏化学領域に取り組む。(3) 国内外の第三者を含む評価委員会による厳正な評価の下、拠点リーダーのリーダーシップによる国際的研究教育拠点を形成する。(4) 未踏化学領域を目指す優秀な博士課程の学生を国内外より選抜し、本拠点において国

際的に最先端の研究を進めている事業推進担当者とマンツーマンの研究・教育を行う。基礎から応用まで広い範囲の実践的研究教育により、広い視野を持った将来有為の研究者を育成する。海外の一流研究員による英語での研究指導・研究推進・討論に日常的に接触することによって国際舞台で活躍できる人材を育成する。特に優秀な学生には経済的支援を行い研究に安心して専念できる環境を与える。

人材育成 大学院講義の充実・異分野交流・国際交流・経済支援の4本を軸に人材育成を強化し、人材育成面での成果を上げる。(1) 英語での講義・演習・国際学会でのプレゼンテーションの実習を行う。(2) 理学研究科及び工学研究科間での大学院講義の相互乗り入れを行う。(3) COEドクターが準備段階から進行まで中心的に携わる研究討論会を開催する。また他分野との研究交流を促進するための討論会を開催する。(4) 大学院生主体の国際ワークショップを開催する。(5) 大学院生を海外一流大学へ派遣し先端研究者による実践的研究指導を経験させる。(6) 優秀な博士課程大学院生に対してリサーチアシスタント経費を支給する。

国内外の現状と動向 大部分の化学者は、次は“大分子複雑系”が化学のcentral problemだとの認識は持っている。しかし、我々が提案しているような拠点の形成は国内外で例を見ない。我々のグループは各分野で国際的に最先端に行く人材を揃えており、大分子複雑系に関する世界をリードする拠点を形成できると考えている。

期待される成果 学術的には、未踏の大分子の構築に伴い、構築手法自身の革新的方法論の創成や物性解析新手法の開発、複雑系の理論構築、など化学系内での新境地の展開が期待されるのみならず、生物系や材料系との相互作用など周辺領域への波及効果は計り知れないものがある。社会的実用的には、新抗体の創成や生体内伝達物質開発を通して医薬分野への貢献、無機クラスターや有機微結晶を用いる新機能発現によりナノ材料分野への貢献が期待される。将来的には、本拠点は未踏化学国際研究フロンティアセンターに継続される予定であり、世界をリードする研究成果の発信と、それを通じた有為な人材の輩出が期待される。

7. 研究実施計画

(1) 拠点の立ち上げ、運営、評価

理・工・多元研と各研究室が分散しているため、各々の研究室以外に拠点となるべき場所を理・化学教室内に整備し、事務局、外国人研究員研究室、拠点ゼミ室等を設置する。総括責任者（山本）、事業推進代表（2名）、外部有識者（2名）で運営委員会を構成し、拠点運営に関わる重要事項を討議、決定する。事業担当者の研究教育成果の推進と評価のため、また拠点全体としての方向性と成果の評価のために、評価委員会を設置する（国内外の他大学研究者や民間の有識者5名で構成する）。以上を含む拠点事務処理のために事務補佐員（1名）を雇用する。

(2) 研究教育実施計画と内容

有機系、無機系、生物系大分子および理論解析の4つの研究グループを組織し、各グループのリーダーを中心に方向性を見極めて研究推進するとともに、理・工一体となって拠点を形成した意義を十二分に出すために、横のつながりの強化および基礎から応用への連携の強化を図る。その概念図を図2に示す。正四面体の頂点には4つの研究グループがあり、各々が有機的に繋がっている。正四面体は基礎部門を示している。その外の円周には応用面でのfinal goalが示されており、中心の基礎学術から円周の応用まで連続した広がりを目指す。もちろん、基礎学術での深化も目的とする。効率的に研究を推進するために、博士研究員を毎年10名程度雇用する（任期1年、再任可）。教育面では外国人教員の採用、スーパーDC、RAなどを積極的に導入する（教育実施計画で詳述）。海外研究教育連携拠点をハーバード、コロンビア、オックスフォード、ETH、ゲッティンゲンの各大学に設け、研究教育面での国際化を一層強化する。

(3) 大分子複雑系未踏化学研究教育拠点の将来像

大分子複雑系の未踏領域で効率的にしかも強力に研究推進するためには、理工の一体化が必要である。その一体化施策をもつ本拠点は、大分子複雑系で世界をリードする研究成果を発信し国際舞台で活躍する次代の若者を輩出することを目指すとともに、将来的には東北大学国際高等研究教育院とのリンクにより理工化学系のますますの融合化を推し進める。

年度別の具体的な研究拠点形成実施計画

平成14年度：

拠点の立ち上げと場所の整備、運営委員会設置、第3者評価委員会設置、事務補佐員雇用、国内外ポストドクターの雇用、外国人研究員の雇用、研究グループの立ち上げとグループリーダーの決定、スーパーDCやRA制度の導入と選抜、及び年度末には評価委員会による平成14年度研究教育評価

平成15年度：

拠点の本格的整備、運営委員会による拠点の運営、海外連携拠点の整備、スーパーDCやRAの選抜、外国人教員による英語での高等研究者育成教育の実施、国際シンポジウム開催、平成15年度研究教育評価

平成16年度：

15年度とほぼ同様の施策で拠点を運営する。

平成17年度：

16年度とほぼ同様の施策で拠点を運営する。

平成18年度：

17年度とほぼ同様の運営であるが、最終年度の取りまとめ、国際会議の開催、評価委員会による最終評価、および本研究教育拠点の未踏化学国際研究フロンティアセンターへの継続を図る。

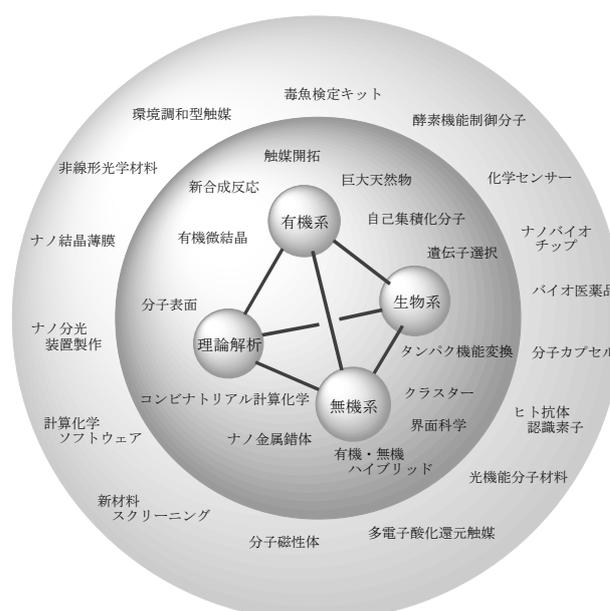


図2 大分子複雑系未踏化学研究内容の概念図

8. 教育実施計画

化学分野の世界の最前線に立って、独創的研究を推し進めることができる人材の育成には、大学院教育の改革が必要であり、本拠点では現状の大学院教育の改善に加えて新たなプログラムを発足させる。本拠点の大学院教育の方向性をまとめると次の4点になる。

- A 専門領域における深い学識、思考力、解析力、発想力、洞察力を身につけた人材の養成
- B 周辺領域への関心を深め、化学を広い視野で見渡す力量をもった人材の養成
- C 国際舞台で通用する語学力や討論力を身につけ、将来worldwide に活躍しうる人材の養成
- D 優れた素質を有する学生への十分な経済的支援

これらの項目の中で、Aについては既に現行の制度において、ある程度満たされているといえるが、発想力や洞察力については日本人の学生は必ずしも強いとはいえない。Bの点が、日本の大学院生と欧米の院生との差が最も大きい点であろう。余りにも細分化された専門領域に早くから入り、他分野への関心がうすくなり、広い視野を欠く傾向にある。自分の専門領域での発見を意義ある形で発展・展開させるためには、他分野を見渡す広い視野と力量とが必要であるが、本拠点形成により院生にこの力をつけるように努力したい。Cの点は、日本人全体の問題ともいえるが、グローバル化を迎え本拠点形成を機に改革したい。Dについては将来有為の後継者を残すためにも本拠点経費を活用したい。以下に具体的取り込みを示す。

(1) 現状大学院教育の改革。現状では大部分の講義は、教官の研究成果を主体とし知識伝達を一方的に行う傾向にあるが、これに加えて、より一般的な内容のものに基づき演習を行い、双方向的教育を実施する。欧米では、このtrainingがあとになり化学研究者の力となっていると思われる。このtrainingによりAの思考力、解析力、洞察力なども涵養されるであろう。

(2) 博士課程カリキュラムでの理学・工学研究科の相互乗り入れ。より広い視野をもった人材育成には、高度な専門知識に加えて、化学系の全体像を若いときに把握する必要がある。Bの問題点解決の一助となるであろう。

(3) 化学をテーマにしたディベートによる少人数語学教育。Cの問題点に対する取り組みは化学を専門とする外国人非常勤講師の雇用により行う。アジア地区の中では日本人学生の英語力(speakingとlistening)はかなり劣っているように思える。単に技術的な問題だとは言え、語学力は国際的に活躍するためには必須で、各研究室でも積極的に外国人研究者・留学生を受け入れる。

(4) 国内外での国際学会での研究成果発表及び討論。現状でもごく少数の博士課程学生は参加しているが、本拠点経費により参加を容易にし、大学院生を国際的な舞台に対応できるようにする。また外国人客員教授の招聘により日常的に外国人一流研究者と接触させることによりCの問題解決を図る。

(5) 経済的支援。現状ではごく少数の博士課程後期の学生に対してのみ、日本学術振興会特別研究員としての経済的支援がされている。実際には各学年の院生のうち1/2程度は研究者として極めて優れており、将来の日本を支える有為な青年たちである。彼等に対して本拠点研究費よりスーパーDCやRA型の経済的支援を行い、修士課程でやむなく社会に出ざるを得ない優秀な学生を博士課程に進むよう奨励する。また、Dの観点のみならずCの観点においても大学院生を国際会議に参加させるための制度の整備(博士課程学生の渡航費等援助)や大学院生の短期・長期の海外研究交流制度の整備(博士課程学生の渡航費等援助)が必要である。

教育実施計画と研究実施計画とは密接に関連している。毎年本拠点の研究教育評価を行うとともに、国際シンポジウムを開催するが、その際大学院生に発表・討論を行わせ、上記(4)の目的達成の一助とする。最終年度には本拠点の最終評価のための成果取りまとめと同時に事業担当者全員による研究発表及びCOE支援を受けている大学院生によるポスター発表を開催し、拠点の研究成果および高等研究者育成の達成度を確認する。

9. 研究教育拠点形成活動実績

①目的の達成状況

1) 世界最高水準の研究教育拠点形成計画全体の目的達成度

(1) 巨大分子であるポリ環状エーテル海産天然物 (~3nmサイズ以上) の世界的研究拠点を築くことができた。院生は今や自由自在に複雑な構造を持つこの種の天然物を取り扱い全合成を達成できる。(2) 従前では考えられない複雑な結合状態を持つシリコン多重結合の形成に世界で初めて成功し、この分野の世界的研究拠点形成を達成した。(3) 従前では固体表面のSTM観測は真空化の超清浄表面のみで可能であったが、本拠点において溶液中の固体表面をSTM観測できる世界初の手法を確立し、この分野の世界的拠点を形成し、今や院生は自由自在に固液表面を目で見ることができるようになった。以上が本拠点の代表的な研究達成状況であり、世界で唯一無比の研究成果を達成し、それに伴う教育を通して人材輩出(次の人材育成面での寄与参照)も行っており、想定以上の成果を挙げた。

2) 人材育成面での成果と拠点形成への寄与

(1) 卒業生・在校生

ブレトキシシン合成の高村浩由(平成16年修了、名古屋大学助手、東北大学総長賞)、電気化学顕微鏡研究の梶弘和(平成18年修了、東北大学助手、東北大学総長賞)、メリラクトンA全合成の佐藤隆章(平成17年修了、UC Irvine研究員、東北大学総長賞)、就眠運動解明の中村葉子(DC2在学中、日本農芸化学会東北支部若手奨励賞)。



高村浩由



梶弘和



井上将行



吉本惣一郎



佐藤隆章



中村葉子

学生・リサーチアシスタントの受賞、日本化学会春季年会学生講演賞[受賞件数;第86春季年会:6件(研究機関別第5位)、第85春季年会:5件(研究機関別第5位)、第84春季年会:5件(研究機関別第2位)、第83春季年会:4件(研究機関別第6位)]日本分析化学会東北支部奨励賞、日本農芸化学会東北支部若手奨励賞、天然有機化合物討論会奨励賞、中華人民共和国駐日本国大使館 中国留学生賞、日本分析化学会年会優秀発表賞、日本分析化学会年会学生奨励賞、応用物理学会講演奨励賞、表面科学講演大会スチューデント奨励賞、分析化学討論会新人賞、レーザー学会優秀論文発表賞、有機金属化学討論会ポスター賞、ケイ素化学協会シンポジウムポスター賞、錯体化学討論会ポスター賞、電気化学会大会ポスター賞、配位化合物の光化学討論会ポスター賞、コロイドおよび界面化学討論会ポスター賞、創薬工学シンポジウムベストポスター賞、植物化学調節学会優秀ポスター賞、Outstanding poster paper award-The 13th International Display Workshop, The Best Poster Award, Symposium J in European Materials Society Spring、 μ TAS 2002 Micro Chemical Process Technology Poster Award他。

(2) 若手教員

シガトキシシンなど天然物全合成の井上将行(元理学研究科助教、東京大学薬学研究科教授に就任、日本化学会進歩賞)、STMによる固液界面研究の吉本惣一郎(元工学研究科助手、産業技術総合研究所研究員、日本化学会進歩賞)。

若手教員の受賞など、さきがけ研究(岩本武明、井上将行、山口央、久保百司)、文部科学大臣表彰若手科学者賞(宮坂等、久保百司)、日本化学会進歩賞4件(井上将行、吉本惣一郎、岩本武明、笠井均)、日本薬学会奨励賞(浜島義隆)、日本生化学会奨励

賞(津本浩平)、日本分析化学会奨励賞(西澤精一、山口央)、有機合成化学協会奨励賞(寺田真浩)、有機合成化学協会研究企画賞件4件、(瀬高渉、中村達、塚田直史、濱島義隆)、ケイ素化学協会奨励賞2件(岩本武明、橋本久子)、錯体化学会研究奨励賞(梶原孝志)、高分子研究奨励賞(水上雅史)、触媒学会奨励賞(久保百司)、電気化学会進歩賞・佐野賞(吉本惣一郎、珠玖仁)、石油学会奨励賞(久保百司)、日本エネルギー学会進歩賞(小俣光司)、シクロデキストリン学会奨励賞(早下隆士)、日本膜学会研究奨励賞(高羽洋充)、天然物談話会奨励賞2件(井上将行、大栗博毅)、日本化学会BCSJ賞2件(坂本健吉、梶原孝志)、日本分光学会賞論文賞(岸本直樹)、堀場雅夫賞(陶究)、Merck Banyu Lectureship Award(井上将行)、Thieme journal Award2件(井上将行、濱島義隆)

3) 研究活動面での新たな分野の創成と、学術的知見等
上記1)で述べた例が代表的な3つの例である。(1)巨大分子の全合成の一般化・単純化と生理活性研究、(2)14族元素の多重結合構造の多様性、(3)固液界面科学への新しいアプローチ、等である。

4) 事業推進担当者相互の有機的連携

図2で示した有機的連携については、例えば有機系と界面科学の連携などは進展したが、全ての分野で十分に連携が推し進められたとは云いがたく、この問題はグローバルCOEでさらに推し進めたい。

5) 国際競争力ある大学づくりへの貢献度

この拠点形成後、ESIのcitation analysisによる世界の大学ランキングの中の化学分野で、東北大学化学系は5年前は世界で21位(国内5位)であったが終了時点(2007年5月のデータ)では世界で18位(国内4位)に向上している。国際競争力のある化学系構築のために21世紀COEが貢献したものである。

6) 国内外に向けた情報発信

国内外に向けて本拠点の情報誌を配布しているし、インターネットのホームページを用いて情報発信も活発に行っている。国際会議の主催や海外の連携校との交流、共同研究センターの設置を通して情報発信を積極的に行った。

7) 拠点形成費等補助金の使途について(拠点形成のため効果的に使用されたか)

主として院生の経済的支援に使用し、院生のモチベーションの向上、落ち着いた環境での研究教育遂行上の環境整備に大きく役立った。外国人教員(2名)による英語の講義や研究遂行のためや、国際会議開催のために事業推進費として使用し、院生は今や英語に対する強い自信と免疫力を身につけた。必要不可欠な設備備品購入及び旅費として残りを使用した。総じて拠点形成のために有効に利用し1)で述べたように想定以上の成果を収めたと考えている。

②今後の展望

理工の融合を目的として掲げた21世紀COEプログラムは、以上述べたような成果を収めて当初の目標を達成して終了した。引き続きグローバルCOEへと引き継がれる予定である。グローバルCOEでは、理工連携をさらに拡大し、理工薬農の化学系(すなわち東北大学化学系の全て)の連携と融合化を図る予定である。これにより、化学系学生全てに対して修士課程から系統的に大学院化学の基礎を幅広く身につけさせ、幅広い視野と識見を持った人材育成を推し進める予定である。さらに2007年4月から発足した東北大学国際高等研究教育機構とも密接に連携して、分野融合に基づく研究展開と幅広い分野の基礎知識習得のための高等教育を推し進めていく予定である。

③その他(世界的な研究教育拠点の形成が学内外に与えた影響度)

この拠点形成中に21世紀COE事業担当推進者等が受賞した国内外の賞のリストと大型外部研究資金のリストを以下に示す。(1)国際的な賞:A.C.Cope Scholar Award(米国)(山本嘉則)、フンボルト賞(ドイツ)(山本嘉則)、ワッカーシリコン賞(ドイツ)(吉良満夫)、アルプゾブ国際賞(ロシア)(吉藤正明)、Slovakia 化学会Memorial Medal(スロバキア)(伊藤翼)。(2)国内褒章:紫綬褒章2件(山本嘉則、板谷謹悟)(3)国内学会賞:日本化学会賞3件(吉良満夫、平間正博、板谷謹悟)、日本化学会学術賞11件(寺前紀夫、福村裕史、山下正廣、小林長夫、齋藤正男、袖岡幹子、佐々木誠、河野裕彦、京谷隆、山内清語、阿尻雅文)、高分子学会功績賞(中西八郎)、化学工学会学会賞(新井邦夫)、日本分析化学会学会賞(寺前紀夫)、石油学会賞(山田宗慶)、日本エネルギー学会学会賞(山田宗慶)、セルロース学会賞(正

田晋一郎) (4) 大型外部研究資金: 特別推進研究3件(山本嘉則、吉良満夫、三上直彦)、ERATO(板谷謹吾)、SORST 1件(平間正博)、CREST 5件(平間正博、板谷謹悟、寺前紀夫、山下正廣、栗原和枝)、NEDO 3件(宮下徳治、山田宗慶、熊谷泉)、NEDO国際共同研究1件(栗原和枝)、科学研究費補助金学術創成研究1件(山下正廣)、科学研究費補助金基盤(S) 5件(宮下徳治、山田宗慶、熊谷泉、末永智一、宮本明、平間正博)、科学技術振興調整費(宮本明)、産学官

連携イノベーション創出事業(末永智一)。以上の指標は目に見える形での影響度の一つの尺度になるであろう。

また日本政府の国際広報誌 The Japan Journal に、本拠点の紹介記事が2006年12月に掲載された。化学・材料系のCOEでは我々の拠点のみが紹介されている(全ての21世紀COE拠点の中で4つだけが紹介されたと聞いている)。これも目に見える形の影響力があつたことの一つと考えられる。

CENTERS OF EXCELLENCE

They Might Be Giant...

A Center of Excellence Program at Tohoku University is yielding important breakthroughs in the academic field of giant molecule research.

C caused by eating fish or other seafood native to coral reefs in the South Seas, ciguatera poisoning is a form of natural food poisoning that was mentioned in the diary of James Cook, who traveled around the world in the eighteenth century, and still affects more than 20,000 people around the world every year today. Ciguateroxins, the agents that cause ciguatera poisoning, are produced by dinoflagellates called *Gambierdiscus toxicus*, which accumulate inside marine species that eat algae. Ciguateroxin poison is 100 times stronger than that found in fugu blowfish and retains its toxicity even if heated or dried. To make matters worse, whereas some fish carry the toxins, others belonging to same species do not, making it exceedingly difficult to distinguish one from the other.

launched a Twenty-first Century Center of Excellence (COE) Program entitled Giant Molecules and Complex Systems. "Reasonable progress has been made in terms of molecular research into ordinary molecules, which vary in size from 0.1 nm to 1 nm, and macromolecules measuring between 10 nm and 100 nm due to their simple structures. As a result of the structural complexity of giant molecules measuring between 1 nm and 10 nm however, very little research has been carried out to date," explains COE Leader Professor Yamamoto Yoshinori from the Tohoku University Faculty of Science. "The aim of this COE Program is to conduct intensive research in this unexplored field."

Until recently, chemistry had not advanced to a sufficient level to enable giant molecules to be included within the scope

down barriers and says Yamamoto. Initiatives such significant results to date. In 2003 for example, a research team led by Organic Group member and Faculty of Science professor Kira Mitsuo successfully developed a new synthetic silicon compound. Called trisilaallene, the compound in question consists of three silicon molecules joined by double bonds and has the potential to be used to develop new materials in the field of electronics, such as electro-conductive polymers with metallic properties for example. In 2004, a research team led by Inorganic Group member and Faculty of Science professor Teramae Norio succeeded in developing a new sep-

The Japan Journal
DECEMBER 2006 Vol. 3 No. 8
Enter Abe

学術的には主なもの2件のみを紹介する。次図に示すようにNatureのハイライトおよびアメリカ化学会のC&E Newsのハイライト紹介記事で我々の研究成果が特別に取り上げられている。

1) Nature RESEARCH HIGHLIGHT, July 2006.

Up the toxin ladder

J. Am. Chem. Soc. doi:10.1021/ja06304h (2006)

Chemists have mastered the making of ciguateroxin, the exceptionally large and highly toxic molecules responsible for some forms of seafood poisoning. By increasing the amount of the toxin available to test, this work could help biologists to probe how the toxin works in vivo and find drugs to combat ciguatera poisoning. Ciguateroxins are produced by the dinoflagellate *Gambierdiscus toxicus*, which is eaten by fish and to which it is then consumed by the occasional hapless human. The toxin presents a daunting challenge to synthetic chemists both because of the molecular size and their complex ladder-like architecture (pictured).

Mitsuyuki Inoue, Masahiko Horike and their co-workers at Tohoku University in Japan report the total synthesis of the first model toxic members of this family: ciguateroxin and Si-hydroxyC13AC.

2) Chemical & Engineering News, Dec 22, 2003, "Chemistry Highlights 2003".

CHEMISTRY HIGHLIGHTS 2003

INORGANIC CHEMISTRY. Novel structures continue to be a mainstay of inorganic chemistry research. For example, the first thermally stable, crystalline trisilaallene derivative (shown) containing a formally sp²-hybridized silicon atom was synthesized by chemistry professor Mitsuo Kira and coworkers at Tohoku University, Sendai [Nature, 421, 725 (2003)]. The Si=Si=Si skeleton is bent (with a bond angle of about 136°) and remarkably flexional, in contrast to the rigid linear framework of carbon allenes. Such trisilaallene derivatives could be useful as synthetic reagents and building blocks for functional materials.

機 関 名	東北大学	拠点番号	B01
拠点のﾌﾟﾛｸﾞﾗﾑ名称	「大分子複雑系未踏化学」		
<p>1. 研究活動実績</p> <p>①この拠点形成計画に関連した主な発表論文名・著書名【公表】</p> <p>山本嘉則 I.Kadota, A. Ohno, K. Matsuda, Y. Yamamoto, Convergent Synthesis of Polycyclic Ethers via the Intramolecular Allylation of α-Acetoxy Ether and Subsequent Ring-Closing Metathesis: Synthesis of the CDEFG Ring System of Gambierol. <i>J. Am. Chem. Soc.</i>, 123, 6702-6703 (2001). I.Kadota, A. Ohno, K. Matsuda, Y. Yamamoto, Convergent Synthesis of Polycyclic Ethers via the Intramolecular Allylation of α-Acetoxy Ethers and Subsequent Ring-Closing Metathesis. <i>J. Am. Chem. Soc.</i>, 124, 3562-3566 (2002). I. Kadota, H. Takamura, K. Sato, A. Ohno, K. Matsuda, Y. Yamamoto, Total Synthesis of Gambierol. <i>J. Am. Chem. Soc.</i>, 125, 46-47 (2003). I. Kadota, Y. Yamamoto, Synthetic Strategies of Marine Polycyclic Ethers via Intramolecular Allylations: Linear and Convergent Approaches. <i>Acc. Chem. Res.</i>, 38, 423-432 (2005). I. Kadota, H. Takamura, H. Nishii, Y. Yamamoto, Total Synthesis of Brevetoxin B. <i>J. Am. Chem. Soc.</i>, 127, 9246-9250 (2005).</p> <p>平岡正博 H. Oguri, M. Hiram, T. Tsumuraya, I. Fujii, M. Maruyama, H. Uehara, and Y. Nagumo, Synthesis-Based Approach toward Direct Sandwich Immunoassay for Ciguatoxin CTX3C. <i>J. Am. Chem. Soc.</i>, 125, 7608-7612 (2003). M. Inoue, K. Miyazaki, H. Uehara, M. Maruyama, and M. Hiram, First and Second Generation Total Synthesis of Ciguatoxin CTX3C. <i>Proc. Natl. Acad. Sci. USA</i>, 101, 12013-12018 (2004). M. Inoue, M. Hiram, Evolution of a Practical Total Synthesis of Ciguatoxin CTX3C. <i>Acc. Chem. Res.</i> 37, 961-968 (2004). M. Hiram, Total Synthesis of Ciguatoxin CTX3C: A Venture into the Problems of Ciguatera Seafood Poisoning. <i>Chem. Rec.</i>, 5, 240-250 (2005). M. Inoue, K. Miyazaki, Y. Ishihara, A. Tatami, Y. Ohnuma, Y. Kawada, K. Komano, S. Yamashita, and M. Hiram, Total Synthesis of Ciguatoxin and 51-HydroxyCTX3C. <i>J. Am. Chem. Soc.</i>, 128, 9352-9354 (2006).</p> <p>板谷謹悟 Soichiro Yoshimoto, Koji Suto, Akinori Tada, Nagao Kobayashi, Kingo Itaya, "Effect of Adlayer Structure on the Host-Guest Recognition between Calcium and Crown-ether-Substituted Phthalocyanine Arrays on Au Single Crystal Surfaces". <i>J. Am. Chem. Soc.</i> 2004, 126(25), 8020-8027. Junji Inukai, Mitsuru Wakisaka, Kingo Itaya, "p-Xylene Adlayers Formed on Rh(111) and Pt(111) Surfaces in Vacuum". <i>Jpn. J. Appl. Phys.</i> 2004, 43(7B), 4549-4553. Junji Inukai, Mitsuru Wakisaka, Kingo Itaya, "An STM study on growth process of vapor-deposited hydroquinone adlayers on Rh(111) and Pt(111)". <i>Chem. Phys. Lett.</i> 2004, 399(4-6), 373-377. Masashi Kunitake, Tetsuro Hattori, Sotaro Miyano, Kingo Itaya, "Two-dimensional Supramolecular Arrangements of Enantiomers and Racemic Modification of 1,1'-Binaphthyl-2,2'-Dicarboxylic Acid". <i>Langmuir</i> 2005, 21(20), 9206-9210. Koji Suto, Soichiro Yoshimoto, Kingo Itaya, "Electrochemical Control of the Structure of two-dimensional Supramolecular Organization Consisting of Phthalocyanine and Porphyrin on a Gold Single-Crystal Surface". <i>Langmuir</i> 2006, 22(25), 10766-10776.</p> <p>吉良満夫 S. Ishida, T. Iwamoto, C. Kabuto, and M. Kira, A stable silicon-based allene analogue with a formally sp-hybridized silicon atom. <i>Nature</i>, 421, 725-727 (2003). Y. Kon, J. Ogasawara, K. Sakamoto, C. Kabuto, and M. Kira, A stable silicon congener of highly strained bicyclo[3.2.0]hepta-1,3,6-triene. <i>J. Am. Chem. Soc.</i>, 125 (31), 9310 - 9311 (2003). W. Setaka, K. Hirai, K. Sakamoto, H. Tomioka, and M. Kira, Stannaacetylene (RSn\equivCR') showing carbene-like reaction mode. <i>J. Am. Chem. Soc.</i>, 126 (9), 2696-2697 (2004). H. Hashimoto, K. Suzuki, W. Setaka, C. Kabuto, and M. Kira, Iron complexes of (E)- and (Z)-1,2-dichlorodisilenes. <i>J. Am. Chem. Soc.</i>, 126 (42), 13628-13629 (2004).</p> <p>中西八郎 Eunsang Kwon, Hidetoshi Oikawa, Hitoshi Kasai, and Hachiro Nakanishi, "A Fabrication Method of Organic Nanocrystals Using Stabilizer-Free Emulsion". <i>Crystal Growth & Design</i>, 7, 600-602 (2007). Hae-Ryong, Eunsang Kwon, Hidetoshi Oikawa, Hitoshi Kasai, and Hachiro Nakanishi, "Effect of Solvent on Organic Nanocrystal Growth Using the Re-precipitation Method". <i>J. Crystal Growth</i>, 294, 459-463 (2006). Takashi Tachikawa, Hae-Ryong, Akito Masuhara, Hitoshi Kasai, Hidetoshi Oikawa, Hachiro Nakanishi, Mamoru Fujitsuka, and Tetsuro Majima, "In Situ and Ex Situ Observations of the Growth Dynamics of Single Perylene Nanocrystals in Water". <i>J. Amer. Chem. Soc.</i>, 128, 15944-15945 (2006).</p> <p>宮下徳治 Jun Matsui, Kosuke Kubota, Yuko Kado, and Tokuji Miyashita, Electroless Copper Plating onto Polyimide Using Polymer Nanosheet as a Nano-Adhesive. <i>Polym. J.</i>, 39, 41-47 (2007). Hiroshi Endo, Yuko Kado, Masaya Mitsuishi, and Tokuji Miyashita, Fabrication of Free-Standing Hybrid Nanosheets Organized with Polymer Langmuir-Blodgett Films and Gold Nanoparticles. <i>Macromolecules</i> 39, 5559-5563 (2006). Jun Matsui, Shinsuke Yoshida, Takeshi Mikayama, Atsushi Aoki, and Tokuji Miyashita, Fabrication of Polymer Langmuir-Blodgett Films Containing Regioregular Poly(3-hexylthiophene) for Application to Field-Effect Transistor. <i>Langmuir</i> 21, 5343-5348 (2005).</p> <p>山下正廣 D. Kawakami, M. Yamashita, S. Matsunaga, S. Takaishi, T. Kajiwar, H. Miyasaka, K. Sugiura, H. Matsuzaki, H. Kishida, H. Okamoto, Y. Wakabayashi, and H. Sawa, Halogen-Bridged Two-Leg Ladder Pt^{II}-Pt^{IV} Mixed-Valence Complexes: Syntheses, Structures and Optical Properties. <i>Angew. Chem. Int. Ed.</i>, 45, 7214-7217 (2006). H. Miyasaka, T. Izawa, N. Takaishi, M. Yamashita, and K. Dunbar Long-Range Ordered Magnet of a Charge-Transfer Ru₂⁴⁺/TCNQ Two-Dimensional Network Compound. <i>J. Am. Chem. Soc.</i>, 128, 11358-11359 (2006). S. Wang, M. Ferbinteanu, M. Yamashita A Cyanide-bridged Fe(III)-Mn(III) Zigzag Chain with Metamagnetic Properties and Significant Magnetic Anisotropy. <i>Inorg. Chem.</i>, 46, 610-612 (2007).</p> <p>正田晋一郎 S. Shoda, M. Fujita, C. Lohavisavapanich, Y. Misawa, K. Ushizaki, Y. Tawata, M. Kuriyama, M. Kohri, H. Kuwata, T. Watanabe, Efficient Method for the Elongation of the N-Acetylglucosamine Unit by Combined Use of Chitinase and β-Galactosidase. <i>Helv. Chim. Acta</i>, 85, 3919-3936 (2002). S. Shoda, M. Moteki, R. Izumi, M. Noguchi, An environmentally benign and practical synthesis of sugar orthoesters promoted by potassium fluoride. <i>Tetrahedron Lett.</i>, 45, 8847-8848 (2004).</p> <p>新井邦夫 Sue K, Suzuki A, Suzuki M, Arai K, Hakuta Y, Hayashi H, Hiaki T, One-pot synthesis of nickel particles in supercritical water. <i>IND. & ENG. CHEM. RES.</i> 45 (2): 623-626 (2006). Kiwamu Sue, Kazuhito Kimura, Maki Yamamoto and Kunio Arai, Rapid hydrothermal synthesis of ZnO nanorods without organics. <i>Materials Letters</i>, 58, 3350-3352 (2004). Sue K, Murata K, Kimura K, Arai K, Continuous synthesis of zinc oxide nanoparticles in supercritical water. <i>GREEN CHEMISTRY</i> 5 (5): 659-662 (2003).</p> <p>山田宗慶 Wensheng Ning, Naoto Koizumi and Muneyoshi Yamada, "Improvement of promoters on the Fischer-Tropsch activity of mechanically mixed Fe catalyst". <i>Catalysis Communications</i>, 8, 275-278 (2007). Takehisa Mochizuki, Takeshi Hara, Naoto Koizumi and Muneyoshi Yamada, "Novel preparation method of highly active Co/SiO₂ catalyst for Fischer-Tropsch synthesis with chelating agents". <i>Catalysis Letters</i>, 113, 3-4 (2007). Takehisa Mochizuki, Takeshi Hara, Naoto Koizumi and Muneyoshi Yamada, "Surface structure and Fischer-Tropsch synthesis activity of highly active Co/SiO₂ catalysts prepared from the impregnating solution modified with some chelating agents". <i>Applied Catalysis A: General</i>, 317, 97-104 (2007).</p> <p>上田実 Y. Manabe, T. Sugimoto, T. Kawasaki, and M. Ueda, Nanometer-scale Direct Observation of the Receptor for Leaf-movement Factor in the Plant Cell by Using Novel</p>			

- TEM Probe, *Tetrahedron Lett.*, 48, 1341-1344 (2007).
- E. Kato, T. Sasaki, T. Kumagai and M. Ueda, Affinity Purification of the Key Enzyme of Nyctinasty Controlling the Leaf-movement by Using Gluconoamidine Ligand, *Tetrahedron Lett.*, 48, 2409-2413 (2007).
- M. Ueda, Y. Nakamura, and M. Okada, Endogenous factors involved in the regulation of movement and "memory" in plants, *Pure and Applied Chemistry*, 79, 513-521 (2007)
- 飛田博実**
K. Ueno, T. Watanabe, H. Tobita, and H. Ogino, Synthesis and Structure of the First Dinuclear Complex Bridged by a Substituent-Free Gallium Atom, *Organometallics*, 22, 4375-4377 (2003).
- T. Watanabe, H. Hashimoto, and H. Tobita, Hydrido(hydrosilylene)tungsten Complex with Strong Interaction between the Silylene and Hydrido Ligands. *Angew. Chem. Int. Ed.*, 43, 218-221 (2004).
- M. Okazaki, K. A. Jung, K. Satoh, H. Okada, J. Naito, T. Akagi, H. Tobita, and H. Ogino, Phosphasilaferracyclopropane: An Activator of Small Molecules Having Polarized Single, Double, and Aromatic Unsaturated Bonds. *J. Am. Chem. Soc.*, 126, 5060-5061 (2004).
- M. Takano, M. Okazaki, and H. Tobita, Stepwise Bromination of Two Acetylene Molecules on a Butterfly-Type Tetrairon Core and Reactivity of the Resulting Bromoacetylene Fragment Toward Nucleophiles. *J. Am. Chem. Soc.*, 126, 9190-9191 (2004).
- 寺前紀夫**
C. Zhao, Q. Dai, T. Seino, Y.-Y. Cui, S. Nishizawa, and N. Teramae "Strong and Selective Binding of Amiloride to Thymine Base Opposite AP Sites in DNA Duplexes: Simultaneous Binding to DNA Phosphate Backbone" *Chem. Commun.*, (11), 1185-1187 (2006).
- N. B. Sankaran, S. Nishizawa, T. Seino, K. Yoshimoto, and N. Teramae "Abasic Sites-Containing Oligodeoxynucleotides as Aptamers for Riboflavin" *Angew. Chem. Int. Ed.*, 45 (10), 1563-1568 (2006).
- A. Yamaguchi, F. Uejo, T. Yoda, T. Yamashita, T. Uchida, Y. Tanamura, and N. Teramae "Self Assembly of Silica-Surfactant Nanocomposite in Porous Alumina Membrane" *Nature Mater.*, 3 (5), 337-341 (2004)
- K. Yoshimoto, S. Nishizawa, M. Minagawa, and N. Teramae "Use of Abasic Site Containing DNA Strands for Nucleobase Recognition in Water" *J. Am. Chem. Soc.*, 125 (30), 8982-8983 (2003).
- 小林長夫**
J. Mack, Y. Asano, N. Kobayashi, and M. J. Stillman The Application of Magnetic Circular Dichroism Spectroscopy to the Electronic Structure of Sterically Hindered Non-Planar Porphyrin Ring System. *J. Am. Chem. Soc.*, 127, 17697-17711 (2005).
- Y. Nakamura, N. Aratani, H. Shinikubo, A. Takagi, T. Kawai, T. Matsumoto, D. Kim, A. Muranaka, N. Kobayashi, and A. Osuka, A Directly Fused Tetrameric Porphyrin Sheet and Its Anomalous Electronic Properties That Arise from the Planar Cyclotetraene Core. *J. Am. Chem. Soc.*, 128, 4119-4127 (2006).
- Y. Asano, A. Muranaka, A. Fukasawa, T. Hatano, M. Uchiyama, and N. Kobayashi *anti*-[2,2](1,4)Phthalocyaninophane: Spectroscopic Evidence for Transannular Interaction in the Excited States *J. Am. Chem. Soc.*, 129, 4516-4517 (2007)
- 栗原和枝**
T. Miyahara and K. Kurihara, Electroconductive Langmuir-Blodgett Films Containing Carotenoid Amphiphile for Sugar Recognition, *J. Am. Chem. Soc.*, 126, 5684-5685 (2004).
- M. Mizukami, Y. Nakagawa and K. Kurihara, Surface Induced Hydrogen-Bonded Macrocluster Formation of Methanol on silica Surfaces, *Langmuir*, 21, 9402-9405 (2005).
- T. Suzuki, Y.-W. Zhang, T. Koyama, D. Y. Sasaki and K. Kurihara, Direct Observation of Substrate-Enzyme Complexation By Surface Force Measurement, *J. Am. Chem. Soc.*, 128, 15209-15214, (2006).
- 熊谷泉**
Watanabe, H., Tsumoto, K., Taguchi, S., Yamashita, K., Doi, Y., Nishimiya, Y., Kondo, H., Umetsu, M., and Kumagai, I. A Human Antibody Fragment with High Affinity for Biodegradable Polymer Film. *Bioconjug Chem.* (2007) in press
- Tanaka, Y., Sasaki, T., Kumagai, I., Yasutake, Y., Yao, M., Tanaka, I., and Tsumoto, K. Molecular properties of two proteins homologous to PduO-type ATP:cob(II)alamin adenosyltransferase from *Sulfolobus tokodaii*. *Proteins* (2007) in press
- Shiroishi, M., Tsumoto, K., Tanaka, Y., Yokota, A., Nakanishi, T., Kondo, H., and Kumagai, I. Structural consequences of mutations in interfacial Tyr residues of a protein antigen-antibody complex. The case of HyHEL-10-HEL. *J. Biol. Chem.* 282, 6783-6791 (2007)
- Shiroishi, M., Kuroki, K., Rasubala, L., Tsumoto, K., Kumagai, I., Kurimoto, E., Kato, K., Kohda, D., and Maenaka, K. Structural basis for recognition of the nonclassical MHC molecule HLA-G by the leukocyte Ig-like receptor B2 (LILRB2/LIR2/ILT4/CD85d). *Proc. Natl. Acad. Sci. U S A* 103, 16412-16417 (2006)
- 末永智一**
In Situ Control of Cellular Growth and Migration on Substrate Using Microelectrodes. *H. Kaji*, K. Tsukidate, T. Matsue, M. Nishizawa, *J. Am. Chem. Soc.*, 126, 15026-15027 (2004).
- Patterning the Surface Cytophobicity of an Albumin-Physisorbed Substrate by Electrochemical Means. *H. Kaji*, K. Tsukidate, M. Hashimoto, T. Matsue, M. Nishizawa, *Langmuir*, 21, 6966-6969 (2005)
- Topographic, Electrochemical, and Optical Images Captured Using Standing Approach Mode Scanning Electrochemical/Optical Microscopy. *Y. Takahashi, Y. Hirano*, Patterning and Encapsulation with Colloidal Particles into Hydrogel using Negative-Dielectrophoretic Method. *M. Suzuki*, T. Yasukawa, H. Shiku, T. Matsue, *Langmuir*, 23, 4088-4094 (2007)
- 宮本明**
A. R. Shaikh, M. Ismael, H. Tsuboi, M. Koyama, A. Endou, M. Kubo, C. A. Del Carpio, E. Broclawik, A. Miyamoto, Three-dimensional quantitative structure activity relationship (3D-QSAR) and docking studies on (benzothiazole-2-yl) acetonitrile derivatives as c-Jun N-Terminal kinase-3 (JNK3) inhibitors, *Bioorganic and Medicinal Chemistry Letters*, 16, 5917-5925 (2006).
- A. R. Shaikh, E. Broclawik, M. Ismael, H. Tsuboi, M. Koyama, M. Kubo, C. A. Del Carpio, A. Miyamoto, Hyperconjugation with lone pair of morpholine nitrogen stabilizes transition state for phenyl hydroxylation in CYP3A4 metabolism of (S)-N-[1-(3-morpholin-4-yl phenyl) ethyl]-3-phenylacrylamide, *Chemical Physics Letters*, 419, 523-527 (2006).
- G. Agalya, C. Lv, X. Wang, M. Koyama, M. Kubo, A. Miyamoto, Theoretical Study on the Electronic and Molecular Properties of Ground and Excited States of Ethylenedioxythiophene Styrenesulphonic Acid, *Applied Surface Science*, 244, 195-198 (2005).
- 大野公一**
T. Horio, M. Yamazaki, S. Maeda, T. Hatamoto, N. Kishimoto, and K. Ohno Development of a Cooled He*(2³S) Beam Source for Measurements of State-Resolved Collision Energy Dependence of Penning Ionization Cross Sections: Evidence for a Stereo Specific Attractive Well around Methyl Group in CH₃CN. *J. Chem. Phys.* 123, 194308-(1,13) (2005).
- T. Horio, T. Hatamoto, S. Maeda, N. Kishimoto, and K. Ohno Probing Anisotropic Interaction Potentials of Unsaturated Hydrocarbons with He*(2³S) Metastable Atom: Attractive-Site Preference of σ -Direction in C₂H₂ and π -Direction in C₂H₄. *J. Chem. Phys.* 124, 104308-(1,14) (2006).
- S. Maeda and K. Ohno Conversion Pathways between a Fullerene and a Ring among C₂₀ Clusters: Remarkable Difference in Local Potential Energy Landscapes around the Fullerene and the Ring. *J. Chem. Phys.* 124, 174306-(1,7) (2006).
- K. Ohno and S. Maeda Global Reaction Route Mapping on Potential Energy Surfaces of Formaldehyde, Formic Acid, and their Metal Substituted Analogues. *J. Phys. Chem. A* 110(28), 8933-8941 (2006).
- T. Horio, S. Maeda, N. Kishimoto, and K. Ohno Anisotropic Interaction and Stereo Reactivity in a Chemi-Ionization Process of OCS by Collision with He*(2³S) Metastable Atoms. *J. Phys. Chem. A* 110(38), 11010-11017 (2006).
- 福村裕史**
H. Fukumura, D. I-i, H. Uji-i, S. Nishio, H. Sakai, A. Ohuchi, Image Contrast Analysis of STM Images of Self-Assembled Dioctadecyl Chalcogenides on Graphite at the Liquid-Solid Interface, *ChemPhysChem*, 6, 2383-2388 (2005)
- H. Uji-i, S. Nishio, H. Fukumura, Electronic properties of a p-stacked pyrene derivative at a liquid-solid interface studied with scanning tunneling spectroscopy, *Chem. Phys. Lett.* 408, 112-117 (2005)
- M. Kasuya, K. Hatanaka, J. Hobbly, H. Fukumura, H. Sevcikova, Density Changes Accompanying Wave Propagation in the Cerium-Catalyzed Belousov-Zhabotinsky Reaction, *J. Phys. Chem. A*, 109, 1405-1410 (2005).
- L. Zhao, H. Odaka, H. Ono, S. Kajimoto, K. Hatanaka, J. Hobbly, H. Fukumura, Dynamics of Re(2,2'-bipyridine)(CO)₂Cl MLCT formation and decay after picosecond pulsed x-ray excitation and femtosecond UV excitation, *Photochem. Photobiol. Sci.*, 4, 113-117 (2005).
- J. Hobbly, S. Kajimoto, A. Takamizawa, H. Fukumura, Experimentally determined growth exponents during the late stage of spinodal demixing in binary liquid Mixtures, *Phys. Rev. E*, 73, 011502 (2006)

②国際会議等の開催状況【公表】

(事業実施期間中に開催した主な国際会議等の開催時期・場所、会議等の名称、参加人数(うち外国人参加者数)、主な招待講演者(3名程度))

- ・平成15年5月28日、東北大学青葉記念会館、International Symposium of Theoretical Methods for “Giant Molecules and Complex Systems”、54名(15名)、E. J. Baerends、S. J. A. van Gisbergen、S. J. A
- ・平成15年11月21~22日、仙台、PROCEEDINGS OF THE FIRST INTERNATIONAL COE SYMPOSIUM GIANT POLYETHER NATURAL PRODUCTS -ISOLATION AND SYNTHESIS-、210名(22名)、Craig J. Forsyth、Frederick G. West、P. Andrew Evans
- ・平成15年11月27日、東北大学多元物質科学研究所(3号館)、1st International COE Symposium on: “Large-Scale Computing Methods for Materials Chemistry and Bioscience”、12人(4人)、Kwong-Yu Chan、河野裕彦、Vijay Kumar
- ・平成16年6月10~11日、仙台エクセルホテル東急、“Chemistry of Nano-sized Transition Metal Complexes toward Unexplored Science” 75名(10名)、Milan Melnik、Erik Larsen、Clifford P. Kubiak
- ・平成16年8月3日~6日、長陵会館、第12回有機金属および配位化学に関する日韓合同シンポジウム、50名(18名)、Prof. Il Num Jung、Sung-Jin Kim、Myong Lee
- ・平成16年8月7日、仙台、1st International Symposium on Combinatorial Computational Chemistry、31名(17名)、Yi Luo (RIKEN)、Takashi Tokumasu (Institute of Fluid Sciences, Tohoku University)
- ・平成16年11月2日、東北大学多元物質科学研究所(1号館)、2nd International COE Symposium on: “Large-Scale Computing Methods for Materials Chemistry and Bioscience”、12人(6人)、皿井明倫、Michael R. Philpott、Anton Kokalij
- ・平成16年11月20日、仙台、2nd International Symposium on Combinatorial Computational Chemistry、35名(17名)、Rajappan Vetrivel (GE India Technology Center, India)、Ewa Broclawik (Institute of Catalysis, Poland & Tohoku University, Japan)、Akira Takada (Asahi Glass, Japan)
- ・平成16年11月22~23日、仙台、The 2nd International COE Symposium for “Giant Molecules and Complex Systems” 98名(20名) Johan Hofkens、Stephen G. Withers、Sandra Smith-Gill
- ・平成17年9月11~15日、仙台、IMEBORON-XII (12th International Conference on Boron Chemistry)、288名(155名)、William N. Lipscomb、M. Frederick Hawthorne、Warren E. Piers
- ・平成17年10月2日、東北大学 多元物質科学研究所材料(物性総合研究棟)、JST/CREST Symposium “International Symposium on Organic, Inorganic, and Hybridized Nanomaterials” 参加者数: 70名(25名)、Prof. Gerhard Wegner [Max Planck Institute for Polymer Research, Germany]、Prof. Marie-Paule Pileni [University P & M Curie (Paris VI), France]、Prof. Soo Young Park [Seoul National University, Korea]
- ・平成17年10月2~6日、仙台、The 12th International Conference on Unconventional Photoactive Systems、133人(35人)、Prof. Gerhard Wegner, Max Planck Institute, Germany、Prof. Michael R. Wasielewski, Northwestern University, USA、Prof. Thomas W. Ebbsen, University Louis Pasteur, France
- ・平成17年10月24日~25日、仙台国際センター、動的錯体に関する国際シンポジウム(The International Symposium on Dynamic Complexes 2005)、90名(8名)、Prof. Guy Bertrand、Yitzhak Apeloig、Christopher Reed
- ・平成18年2月17日(金)東北大学大学院理学研究科化学専攻 化学教室第4講義室(化学大学院講義棟1階)、International COE symposium on “Computational Nanoscience”、17人(7人)、田中一義、塚田捷、Hannes Loeffler
- ・平成18年6月16、17日 鹿児島、Antibody Engineering Conference、約250名(約50名)、Gregory Winter、K Dane Wittrup、Hennie R Hoogenboom
- ・平成19年3月5~6日、松島センチュリーホテル、International Mini-Symposium on Surface Forces 第7回表面力セミナー、38人(8人)、Raj Rajagopalan、Ludmila Boinovich、Roger Horn、吉川研一

2. 教育活動実績【公表】

博士課程等若手研究者の人材育成プログラムなど特色ある教育取組等についての、各取組の対象（選抜するものであればその方法を含む）、実施時期、具体的内容

(1) 双方向英語教育（博士後期課程大学院生、前期）

外国人教員（COE助教授2名を採用）による英語の講義は、単に日本語の代わりに英語で化学の専門分野を一方（教員→院生）に向けて講義するものではない。双方向英語教育を実施した。すなわち、講義に出席した院生の専門分野（例えば、有機、無機、物理化学、分析化学等）から最近の重要な論文を院生自身がピックアップしてCOE助教授に渡す。次の週末までの1週間にCOE助教授（専門分野は有機金属化学と計算化学）はこの論文を読んできてその内容及び何故重要な論文なのかを勿論英語で発表し、それに対して論文をピックアップした院生がCOE助教授の発表内容（もし間違っていれば）の間違いや追加点などを補足する。院生の方が自分の専門分野の論文を取り上げているので、COE助教授の専門以外の分野の論文であれば、より詳しく正確な理解と判断ができるはずで両者の議論が深まり双方向教育の有効性が高まる。

(2) 国際学会発表英語教育（博士後期課程大学院生、後期）

各院生の研究内容や成果を国際学会で発表するという前提でパワーポイントに要約させて発表させる。COE助教授のみならず講義に出席している院生からの質問に対して発表者が対応するというスタイルの英語のトレーニングを行った。英語で発表したり質問したりすることに対する免疫力を強めるのみならず、その化学的内容にまで踏み込んで議論することにより化学そのものの力も向上すると思われる。

(3) 理工融合のための講義及び単位取得の相互乗り入れ

理学研究科及び工学研究科の化学系の院生（修士、博士とも）が、自分に属する研究科の講義のみならず相手方の研究科の講義も聴講しその単位も取れるように仕組みを改革した。これにより、院生の化学分野の基礎から応用まで幅広く知識及び考え方を習得して視野が広がったものと考えている。

(4) 外国人留学生（理学研究科IGPAS）に対しては教員が特別コースを設定し（英語による講義）全ての化学の領域をカバーして講義を行い、化学の基礎課程の理解を深めレベルを向上できるよう努めた。

(5) 博士後期課程の特段に優れた院生（及び若手研究者）に対しては欧米のパートナー校（ハーバード、MIT、イリノイ、オックスフォード、ゲッチンゲン、ハイデルベルグ、ETHなど）に派遣し（約3ヶ月）諸外国の先端研究の場に身を置き、国際化及び先進諸国の事情習得の経験を積ますことを推進した。

(6) 院生が主催するCOE討論会および研究発表会を開催した。企画、立案、運営、発表者選定等、すべてを院生にゆだねた。これにより、学生時代から学会運営や講演題目選定等一連の手続きと会議のスムーズな運営方法を身につけた。また、COE関連の国際会議では常に運営の補佐として、開催に参画し国際会議の立ち上げから運営までそのノウハウを身につけ、国際化に対応できる一助となった。

21世紀COEプログラム委員会における事後評価結果

(総括評価)

設定された目的は概ね達成され、期待どおりの成果があった

(コメント)

研究教育拠点形成全体としては、理工一体化と横断型研究グループの設定を通じて活発な研究と教育の活動がなされ、ケミカルサイエンスで世界に存在感を示す拠点が形成できた。

人材育成では、学生および若手研究者に、分野融合、自主性、国際性を与える工夫が多くなされ、良い成果があがっている。

研究活動面では、本拠点で扱っている程度の大分子は、国内外の研究室で普通に扱っている範囲を超えているものではなく、本拠点が大分子という特長をもって国内外で認知されるには一層の努力が必要である。大分子領域というコンセプト確立も未解決の課題として残っており、物質のサイズをテーマとしたプロジェクトを更に展開されるにあたっては留意していただきたい。また、添付された論文のうち、採択時にすでに結果の大半が得られていたものが含まれており、このプログラムの直接の成果としては、評価できなかった。しかしながら、事業結果報告書からは期間中の成果は読みとれ、拠点のアクティビティーは評価できる。

補助事業終了後の持続的展開についても、継続、発展させ、このプログラムでの成果を基盤として、更なる飛躍を期待する。

事後評価結果に対する意見申立て及び対応について

意見申立ての内容	意見申立てに対する対応
<p>【申立て箇所】 <u>また、添付された論文のうち2つまでが、採択時にはすでに投稿されていたか、結果の大半が得られていたものであり、このプログラムの成果としては、評価できなかつた。</u></p> <p>【意見及び理由】 2002年の春に公募があり、2002年10月から本プログラムはスタートしている。本来研究は<u>連続的なもの</u>であり、2002年10月から<u>新たに立ち上げた成果のみ</u>を本プログラムの成果とするのであれば最初にそのようにアナウンス頂きたい。私は、評価や成果を言及する際に通常認められるであろう、論文の発表年度をその年の成果と考えました。確かにB01-1の論文（吉良教授）は、2002年10月21日投稿、12月17日受理、2003年2月公表ですので、“結果の大半が得られていた、”とは言えますが“採択時に投稿されていた”の表現は誤りです。他の2つの論文、B01-2（山本）とB01-3（平間）は2005年および2006年公表であり、“添付された論文うち2つまでが…”は誤りです。両論文とも以前からの研究に連続した内容でさらに発展させたものです。勿論、最初にいったように、2002年10月から全く新しいテーマでスタートしなければならず、<u>連続性を認めない</u>のであれば、コメントのとおりですが。ある程度成果があがっていることに基づき提案書を書き、その後の発展とさらなる飛躍を推し進めれば良いと思っていましたので、評価意見の上記申し立て部分には納得しがたきところがあります。ご検討くだされば幸せに存じます。</p>	<p>【対応】 以下の通り修正する。 <u>また、添付された論文のうち、採択時にすでに結果の大半が得られていたものが含まれており、このプログラムの直接の成果としては、評価できなかつた。</u></p> <p>【理由】 申立てのとおり、研究の連続性を否定するものではないが、B01-1については、このプログラムの直接の成果として記載するのにふさわしいとは認められない。ただし、申立てを踏まえ、事実関係に即して一部表現を修正した。</p>