

6. 拠点形成の目的

本拠点のメンバーは、コンパクトで精鋭を揃えた化学教室を形成し、本21COE開始以前にも、既に活発な研究活動を行ってきた。その研究水準の高さは、平成13-17年度に化学分野の先頭を切って、科研費COE拠点形成研究に採択され「分子不斉の基礎と応用に関する研究」を遂行し、その成果が認められて物質科学国際研究センターが発足(H10)したこと、野依同センター長が文化勲章(H12)、ノーベル化学賞(H13)を受賞したことにも現れている。教育面でも、平成12,13年度に教育研究拠点支援経費(教育COE)を得、大学院教育の充実に成果を挙げた。また化学測定機器センターでは化学の先端機器を整備して全学の利用に供し、上記組織と連携して研究を行ってきた。本拠点プログラムでは、構成メンバーが世界を先導してきた分子機能研究のポテンシャルを全面的に展開して「化学を中心とする物質科学のCOE」を形成し、名古屋大学憲章が謳う「世界屈指の知的成果」の創出と、世界をリードする「勇気ある知識人」の資格をもつ次世代研究者の育成を目的とする。

具体的な研究主題としては、「分子機能の解明と創造」を取り上げる。分子は明確な内部構造を持つと共に、種々の集合体・高次構造計性能を持ち、多彩な反応性・材料機能・生体機能を示す。その解明や開発は、ナノ・バイオサイエンスを含む諸分野の先端課題となっている。本プログラムでは、これらの物質の自在な合成と、材料機能、生命機能という物質科学の二大分野への展開を念頭に、次の三つの大きな柱で研究を展開する：

- (1) **精密化学・分子触媒の反応設計**：分子触媒研究等の反応開拓・機構解明およびこれらの手法の応用、
- (2) **物性化学のフロンティア**：ナノサイズからマクロに至る分子性物質が示す多彩な物性・機能研究、
- (3) **化学の視点を貫く生命科学**：生体内分子性物質の働きをキーに生体機能発現に迫る。

また、野依のノーベル化学賞受賞を機に、野依記念物質科学研究館の建設や人員の手当がなされており、これらを基に「野依分子触媒研

究ユニット」を形成して活動する。国内でこの分野を対象とする他の拠点に比べ、本構想は合成から諸機能の研究までの先端を広くカバーするのが特色であり、世界的にもユニークな拠点形成といえよう。

これらについての実際の諸施策については、次の7項で述べる。

また若手育成に関して、大学院生については、(1) 院生による研究の活性化、(2) 国際的視点の獲得、(3) 社会との接点の強化、等を念頭に諸施策を講じる。また若手研究者についても、国際会議への派遣、海外共同研究先への派遣・来訪外国人研究者との交流等を通じて国際的視野を養う他、若手中心の研究集会の組織などで自主的意欲の発現を促す。これらの諸施策により、世界をリードする次世代研究者を育成する。これら教育・若手育成関連の具体的施策については、以下の8項で述べる。

組織としては、関を拠点リーダー、野依を顧問とし、その下に「研究教育推進チーム」を設置し、(1) 国際連携、(2) 情報の収集・発信、(3) 化学測定機器センターを中心とした機器の集中管理、などの支援体制を整える。また国際会議や諸行事、刊行物、ホームページなどで情報発信を行う他、透明な評価とそれに基づいて改善を行う体制を構築する。

施設面でも、独法化による適用法令の変更等を考慮し、環境課題に対応した施設設備の整備を推進し、海外の一流研究者の宿舍等の整備に向け、全学的な取り組みを進める。

これらの研究から、(1) 高効率、高選択性、環境調和型の反応開発による高度な物質創造、(2) 分子性物質の特徴を活かす機能の解明と新規・高度な機能の開発、(3) 機能性分子・タンパク質レベルからの生体现象への深い理解、などの成果が期待される。これらは学術的に貴重なだけでなく、医薬、ナノテクノロジー、バイオサイエンスなどの広汎な分野に大きなインパクトを与え、社会的意義も大きい。これらの研究での交流の成果の強力な発信、優れた若手研究者の排出によって世界の研究者に認知され、さらに国内外の連携と交流を深めることで世界的拠点の形成が成ると期待される。

7. 研究実施計画

本プログラムの推進担当者は、プログラム発足以前より分子機能の解明や創造において活発な研究を行ってきた。本プログラムでも中核となるのはこれらの推進であるが、従来の研究を深化させるだけでなく、各人のポテンシャルを複合的に活かすことにより、新しい視点を導入し、新たな分野の発展に結びつけることを促進する。具体的には次のように研究を実施する。

(1) 研究推進体制の整備：

(a) 共同研究体制の構築：本チームは精鋭集団たることを旨としてきたが、世界的拠点としての存在を示すため、また分子機能の広汎な局面をカバーするに、ある程度の人的規模が必要である。この実現のため、外部より適切な協力研究者を組織し、人的補強を行うと共に異分野の要素を導入し、研究に幅と深みを加える。また新しい芽を出す共同研究、野依ユニットの活動には、経費や博士研究員の配置等で配慮する。

(b) 海外研究者の招致：海外の第一線研究グループとの共同研究、情報交換、人的交流を図る一環として海外研究者を招致し、院生への講義、研究指導、講演等での若手との交流を図る。さらに、当該グループの院生や若手研究者の帯同も奨励し、若手同士の交流や、将来への人的ネットワークの構築を図る。

また、海外研究者の長期的参画を求め、ホスト研究者との共同研究を図る。成果によっては、これらの研究者から本組織職員への採用も視野におく。

(c) 成果発信・社会との接点強化：これまで本構想メンバーは学内外講演会、定期的国際会議、機動的な国際集会の開催、ホームページ開設などで学界・社会への情報発信や社会との接点強化を積極的に行ってきた。この活力を維持発展させ「化学の知」の発信拠点としての存在感を示していく。野依ユニットは産官学連携等も含め、この種の活動でもコアとなって活動する。

(2) 具体的研究内容

次の3グループ組織で研究活動を行う。(○

印はグループ責任者、*は遂行中の転出者、**は転入者、+は協力研究者)：

(a) 精密化学・分子触媒の反応設計 (○異、野依、北村、渡辺、舟橋、高木、大熊*、伊丹**、齊藤(進)*、早川+)：ノーベル化学賞を受けた分子触媒研究を始め、世界を先導する有機・無機合成研究を行い、医薬、農薬、香料などの工業生産、創薬研究への貢献を含む活発な研究を展開してきた。本プログラムでは、各種分子触媒反応の開発、分子触媒設計の指導原理の確立、新規金属錯体触媒の開発、反応機構解明、人工酵素構築等の研究を行い、また各種の配位子ライブラリーや触媒ライブラリーの作成、自動合成装置等を活用した効率良い反応探索法の開発も行う。

また、野依分子触媒研究ユニットでは、特に分子触媒による不斉水素化、選択的酸化などの反応を深く追求する。

(b) 物性化学のフロンティア (○関、篠原、阿波賀、今栄*、山口**、大内)：フラーレン、ナノチューブ等の新規カーボン材料、分子磁性体、有機電子材料等の物性や材料機能研究で世界の注目を浴びてきた。本プログラムでは、カーボン材料を用いたナノ電子デバイス開発、ナノレベルからマクロにわたる新規分子磁性体・機能性分子集合体の開発等の研究を展開し、また大気下電子構造測定装置や逆光電子分光装置を開発して電子機能性物質の系統的測定を行う。

(c) 化学の視点を貫く生命科学 (○上村、渡辺、遠藤、大峯、異、小谷、吉久、西川+、有本*、齊藤(真)*、吉田+)：蛋白質操作により希望する反応を触媒する人工酵素の開発、細胞内でのタンパク質の機能制御やシグナル伝達の解明、蛋白質との相互作用で機能発言を制御する天然生理活性物質の解明を行っている。更に分子触媒グループが窒素固定化酵素の活性中心燃えるの研究を行う等、複眼的に蛋白質科学の本質に迫っている。本プログラムでは、分子触媒の蛋白質内への組込による人工酵素設計の新方法論構築、合成した生理活性物質化学種が細胞内に取り込まれ、蛋白質との相互作用によりシグナルを発信する機構の解明等、各チームの高度な研究を複合的に展開することで新たな領域を創造する。

8. 教育実施計画

次世代を担い世界を先導する若い研究者の育成は、研究教育拠点の責務である。本プログラム発足以前より本専攻では、COE形成プログラムや教育拠点形成支援費（教育 COE）で、院生指導体制の強化、優秀な院生顕彰制度の整備、IT対応等を行ってきた。本プログラムではこれらを発展させ、卓越した教育拠点形成を目指す。これは、高度な研究の遂行と一体で初めて実現し、7項の研究実施計画と密接な関係を持つ。

現在の大学院教育では「第一級研究者・高度職業人・優れた教育者の育成」が目的とされることが多いが、本構想では、(A) 国際的視野の獲得、(B) 社会との接点の重視、という視点を新たに加え、自ら考え、独創的研究で世界をリードできる「勇気ある」研究者の育成を図る。具体的には、次の施策を実施していく。

(1) 院生の研究の活性化と支援体制充実

(a) RA 採用と研究特別援助金：博士課程後期院生に研究指導者と協議した研究計画を申請させ、RAに採用して経済支援すると共に研究特別援助金を支給し、研究を活性化する。報告を課して成果を確認する。

(b) 若手自立的研究：特に優秀な博士課程後期院生（一学年数名程度）について、申請と審査に基づいて、特別の研究費を支給し、研究指導者の指導下に自主性を最大限尊重した研究を展開させる。報告を課して成果を確認する。

(c) 院生短期国際研究交流：後期課程院生を、共同研究を行っている海外研究室に数ヶ月から半年程度派遣して共同研究を活性化し、外国体験や異なる研究室文化等の体験を積ませる。先方からの派遣も受入れる。

(d) 院生の国内学会派遣：院生がRA等として行った研究の成果を国内外で発表する場合の費用を援助し、実施後に報告を求める。

(e) 院生の研究活動の基盤強化：世界的な情報収集手法の充実に対応し、情報検索システム SciFinder 等の情報収集体制を維持充実させる。

(2) 国際的視野の獲得

(a) 海外からの入学の促進：国外の入学希望者に門戸を開くと共に、上記の経済的援助を行い、院生の多様化を図る。出入国の手配、ルートを担当する支援職員の配置も検討する。

(b) 外国人研究者による授業など：本プログラムでは多くの海外第一線研究者が来訪する。この研究者らに大学院教育への関与を求め、並行してレクチャーシップ制度を整備し、これらを授業の一部とすることで、世界を先導する研究者の研究や発想に触れる機会を与える。また、これら研究者に対し院生の帯同を奨励し、院生間での交流を行うことにより、自発的研究意欲の刺激、将来にわたる交流の芽の育成を図る。

(c) 外国人チューター制度の導入：外国からの留学生、研究生、教官等が日本語や日本文化に対応して十分に能力を発揮できるよう、専攻にチューター制度を導入する。これにより院生の体験を豊富にすると共に、対価による院生の経済援助を充実させる。

(3) 社会との接点の強化

(a) 社会的活動のリテラシー教育：将来世界をリードする研究者には、研究の社会的役割、国内外での資金獲得、人的ネットワーク構築、知的財産権、研究活動での環境への配慮等の知識が欠かせない。このような21世紀の研究教育についての基本的知識と知恵を与える大学院教育の構築を目指す。具体的には、専攻教官や国内外から招く研究者による講義や指導を行う。

(b) 地域や企業との接点強化：研究活動での産官学連携で企業や地域の公的組織との接点をもつ他、周辺関連企業等と連携し、インターン制も試行する。岡崎高校のスーパーサイエンス・ハイスクール計画の支援に院生も理科教育の機会として参画させる。

以上の博士課程後期への施策の他、前期でも(1)初期教育の充実、(2)体系的なカリキュラムの整備、(3)初期での集中的講義実施、等を検討しており、(a) 実験教育費用の充実、(b) 研究活動スペース確保、(c) TA採用による教育経験と経済支援、等の施策を行い、前後期一貫体制を築く。以上を専攻内外に発信して周知し、学生による評価を含めた評価改善体制を整備して向上に努める。

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, 想定以上の成果を挙げた。」

研究活動では、3) 項のように目標を十分に以上に達成し、世界での存在感を高めた。人材育成面でも、博士後期院生に多様な施策を実施し、研究面、国際化、社会との接点での刺激を与え、多くの有為の若手が巣立った。

平成19年1月実施の本プログラムを構成する両部局の外部評価（委員：村井眞二阪大名誉教授、齊籐軍治京大教授、M. T. Reetz マックス・プランク石炭研究所長）では、国内委員より「全体としては非常によい。活動的で、スペースに恵まれている。ただ、教員（特に教授の）雑用が多すぎる」、海外委員より「過去10～12年間の広範な再編成の結果、国際的に好位置に付けており、優秀な科学者を引付ける能力がある。世界的に高名な教育機関となっており、今後も財政的支援に値する」との評価を得た。

2) 人材育成面での成果と拠点形成への寄与

8項の教育実施計画を順調に実施し、新しい施策も行った。具体的には以下の通り：

(i) RA, PDの採用：博士後期院生で一定の水準を満す者をRAに採用して研究活性化と経済支援を行い、終了後には報告書を提出させて成果を確認した。また国内外から博士研究員を採用し、研究の活性化、若手育成や国際化に資した。海外からの学生には支給額に研究特別援助金の要素を加えた。

(ii) 若手自立研究：博士課程後期院生から各学年2名を名古屋大学の選考要領に則って選考して年間100万円の経費を支給し、毎年度の報告と発表会で成果を確認した。研究提案の良いトレーニングともなった。

(iii) 若手主催研究会：院生、PD、助手層が各回50万円の予算で企画、講師人選等の運営全部を行う研究会を計8回開催した。若手はこの種の企画を行う機会を得た他、同世代研究者から刺激を受け、日本の関連研究分野の動向を知り、キャリアパスにも資する等、多角的な視点から良い交流の機会となった。

(iv) 海外派遣・海外からの若手との交流：博士後期院生の国際会議出席、共同研究先訪問、短期滞在を支援した。また海外研究者招致で若手帯同を奨励し、若手間の交流を図った。これらは院生の研究意識を高め、基礎学力・英語能力の必要性の自覚に貢献した。海外学生へのチューターは文部科学省の制度で対応できたので、拠点独自には実施しなかった。

(v) 化学教室セミナー：学内外から一流講師を招き、最先端の研究成果を紹介願う会を年6件程度開催し、院生が諸分野の先端を知る好機となった。このシリーズは国内向けレクチャーシブの役割を果たしている。博士課程前期で授業化し、出席とレポートを評価して単位を出した。

(vi) 「社会と科学」：博士後期院生を対象に、毎年10名程度の多彩な講師を招き、科学者として生きていく上で有用な知識を教授して頂いた。内容は、論文執筆、化学史、環境問題、研究室設計、留学事情、研究資金獲得、男女共同参画等多岐にわたる。講演終了後、院生と講師の交流の場を設け、一流講師との直接の交流も深める機会を与えた。このシリーズは、21COEプログラム中間評価できわめて高い評価を得た。

(vii) 科学英語：博士後期院生を対象に、国際的な場での英語発表能力向上のための少人数（10名程度）英語授業を週2回（各90分）実施した。経験豊富な米国人講師により、平成15年度はパイロット事業として1組、16年度からは初級・中級3組で実施した。17年度よりTOEIC試験で実力を把握させた（のべ54名、前期院生ものべ13名）。同時期より学位論文審査冒頭に英語サマリーを義務付けた。

(viii) 外国人研究者による講義など：平成15年度以降、外国人著名教授による英語での集中講義を博士課程前後期院生に行った。18年度より授業化し、4回の講義（一回3-6時間）への出席とレポートで単位を与えた。また海外の若手一流化学研究者を招く平田メモリアルレクチャーシブを毎年開催した。

(ix) キャリア形成など：博士の学位を取得して、諸分野で活躍されている若手の方々に学位取得後の体験を講演頂く「博士の生き方」セミナーを平成18年に開催した。外部も含め150名以

上が参加し、名大のキャリア形成教育のモデルとなった。また日本メルク萬有（株）と協議してインターンシップを実施した。

また、優秀な博士後期院生獲得には、（1）前期からの人材確保と、（2）前期での体系的な教育を、という見地から、平成18年度進学より、前期入試験の一部を外部に限定した自己推薦入試とした。これにより3年間に25名の入学者を得た。また、前期のカリキュラムを整備し、無機・有機・生物・物理化学のコア講義を置くと共に、英語での講義に対応できるように準備している。

以上のような教育研究活動の結果、院生から助教への採用8、PDから助教7、準教授4、教授6、助教から准教授4（うち3は教授に昇進）、産総研主任研究員1、準教授から教授3を数える。学内昇任は2件であり、大半が他機関、海外へ羽ばたいた。

また、若手の受賞として、井上科学振興財団研究奨励賞、錯体化学研究会奨励賞、有機合成化学公開研究企画賞等35件があった。また招待講演として日本化学会における「若い世代の特別講演会」等3件がある。

3) 研究活動面での新たな分野の創成と、学術的知見等

期間中、メンバーの大型競争的資金獲得は科研費特別推進1、学術創成研究費4、特定領域研究3、CREST2、さきがけ1、SORST1に及び、活発な分子機能研究を展開した。成果は学術誌原著論文（171報）、総説解説（46報）や書籍（29件）の他、国際会議（337件）等で発表した。国際会議招待講演は194件（内基調・特別講演12）に及ぶ。

これらの活動を通じ、「精密合成・分子触媒」では、不飽和結合への水素添加反応を高効率で行う触媒を実現し、生体内で重要な反応を担う金属酵素活性中心のモデル構築や配位不飽和化学種を用いた酵素モデル反応構築が達成された。またイオン液体中での錯体の配位子交換反応におけるゲート現象の解明、緑膿菌などのバイオフィルム形成の鍵物質である天然核酸関連物質の合成などの成果もあげられた。

「物性化学のフロンティア」では、金属内包

フラーレンをカーボンナノチューブに入れたピーポット（さやえんどう）の合成とその電子デバイスへの展開、有機電子デバイス用新規材料の開発やデバイス関連界面の電子構造の解明と制御など、有機・分子エレクトロニクスの進展に寄与する種々の研究が行われた。さらに超分子や dendroliamer 類の構造制御と機能開発、イオン液体の表面構造の解明、ナノ球殻磁性体の開発などの新規物質群の創成と機能開発が行われた。

「化学の視点を貫く生命科学」では、共生藻由来の超炭素鎖分子を種々発見することで生物現象鍵物質の化学的研究の新局面が切り開かれ、タンパク質の細胞内トラフィックと品質管理の分子機構の解明により、オルガネラ工学の可能性が示された。また酵素活性部位を金属錯体で置換した人工酵素を創成し、有機金属蛋白質・酵素という新たな研究領域を開拓した。さらに理論計算により、水素結合ネットワークの構造変化を通して水の多様性の発現機構が解明され、膜透過機構についての本格的理論計算が達成された。

以上のように、「分子機能」の諸局面で新たな分野の創成が行われ、この分野の広がりや深さを改めて示すことができた。特に触媒、膜など、分子が外界と接する微視的界面の科学に新しい局面を開くことができた。

4) 事業推進担当者相互の有機的連携

担当者は本拠点の組織運営で協力し、研究教育推進チーム（関、阿波賀、上村、渡辺と事務支援者）が毎週拠点運営を討議した他、学科定例会で拠点関連情報を交換した。また人事、広報、科学英語等の担当を決めて運営を円滑化した。また毎年の成果発表会、国際研究集会開催等で互いに研究成果に触れる等、教室の一体感が向上した。

共同研究も盛んに行われ、篠原と阿波賀の金属内包フラーレンの磁気物性研究、吉田と遠藤のデルフィニウム青色花卉発色機構の研究、高木と柏原の含リン配位子金属錯体の研究等が行われ、国内会議講演23回、国際会議講演11回、共同論文14篇を産んだ。

5) 国際競争力ある大学づくりへの貢献度

本拠点に属する研究者の研究活動は論文や国際会議発表などを通じて国際的に良く認知され、期間中に集計された1994-2004年の論文引用は18.56回/論文に達する。また多くの国際的な受賞・栄誉・客員・レクチャーシップなどを受け、期間中に野依については19件、その他のメンバーについても、異のフンボルト賞受賞等、9件を数える。

また期間中に若手の海外派遣、海外研究者招致（院生帯同含む）、海外からのPD雇用、国際研究集会開催等、さらに他資金での努力（例えばミュンスター大（独）との日本学術振興会共同大学院事業（平成17年度より））も併せ、若手を含む国際的な人的ネットワークの構築に注力した。このような活動により、研究活動・情報発信・人的交流の諸側面において、国際拠点としての名古屋大学の地位向上に資した。

6) 国内外に向けた情報発信

研究成果は論文、書籍、学会で発表した他、毎年度に成果発表会と国際会議を開催し、成果報告書で発信した。この他メンバー主催の国際研究集会は平田義正先生追悼国際シンポジウム、IUPAC第25回天然物化学国際会議・第5回生物多様性国際会議のような大規模集会を含め30件、組織に関与したものは51件に及ぶ。研究室や化学教室のウェブサイトでの情報発信も行った。

さらに一般社会への発信として、平成14年度にノーベル化学賞受賞者3名による国際フォーラム「未来への伝言」（名大；参加者約1000名）、「大学と科学」公開シンポジウム「化学：自然と社会へのかかわり」（東京；参加者780名）を開催した。また期間中の報道機関による報道は89件に及ぶ。

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）

本経費の使途として、RA、PD、研究支援者の採用がまず挙げられる。経理、庶務、機器管理、広報情報担当の研究支援者による支援は重要であった。また情報環境整備（教室共用サーバー等の強化、SciFinder 購入）、環境適合性のドラフト等の設備整備も有益であった。また、研究関係では若手自立的研究費の他、国内外へ

の派遣、海外研究者の招致、国際会議等の研究集会、セミナー類経費、さらに若干の備品、消耗品費に用いた。基盤的資金が確保でき、施策遂行に費用面からの心配が無かったこと、さらに計画的に教室の諸設備が充実できたことも大きく、経費は有効に利用できた。

②今後の展望

この5年間の諸施策の実行により、本教室での研究教育体制は大きく整備された。研究面では、従来より高いレベルを達成しており、本プログラムを通じて世界への存在感の発信がさらに行えたと思われる。また、拠点内部での共通認識として、分子機能の概念が浸透し、教室が一体となって新分野を開拓する姿勢が醸成された。

今後の大きな問題点は、教育面における真の国際化であろう。英語能力の強化や外国人研究者、院生との日常的接触により、内部の院生が国際的シーンでの活動を行える姿勢と実力が身に付くようになったが、海外から優秀な学生を惹きつけ、育成して送り出す体制の構築を行う必要がある。幸いこれについては、科学技術振興機構のテニュアトラック制度により外国人准教授（Prof. S. Irle）を採用し、また国際担当特任准教授（Prof. B. Fischer）を採用し、大学院カリキュラムの整備と併せて体制を整備した。引き続き応募中のグローバルCOEでの達成をめざしたい。

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）

学内においては、本プログラムの実施に加えて物質科学国際研究センターの客員枠（3名）、ミュンスター大学との共同大学院事業なども併用することで、外国人研究者、博士研究員が日常的に拠点内に滞在、活動するようになり、海外への派遣の効果と併せて、国内外を区別せず、世界を相手に、あるいは世界と共同して研究を行う姿勢が浸透した。学外にあっても、21COE拠点は海外で日本を知る研究者を含めて良く認知されており、拠点独自、名古屋大学が学外で行った諸行事を通じて情報発信の機会を得ることができた。

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	名古屋大学	拠点番号	B11
拠点のプログラム名称	物質科学の拠点形成：分子機能の解明と創造 Establishment of COE on Materials Science		
<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><精密化学・分子触媒></p> <ul style="list-style-type: none"> • Y. Ohki, <u>Y. Sunada</u>, M. Honda, M. Katada, and K. Tatsumi <u>Synthesis of the P-Cluster Inorganic Core of Nitrogenases</u> <i>J. Am. Chem. Soc.</i>, 125, 4052-4053 (2003). • Z. Li, Y. Ohki, and K. Tatsumi Dithiolato-Bridged Dinuclear Iron-Nickel Complexes [Fe(CO)₂(CN)₂(m-SCH₂CH₂CH₂S)Ni(S₂CNR₂)]- Modeling the Active Site of [NiFe] Hydrogenase <i>J. Am. Chem. Soc.</i>, 127, 8950-8951 (2005). • R. Noyori Asymmetric Catalysis: Science and Opportunities (Nobel Lecture) <i>Angew. Chem. Int. Ed.</i>, 41, 2008-2022 (2002). • R. Noyori Pursuing Practical Elegance in Chemical Synthesis <i>Chem. Commun.</i>, 1807-1811 (2005). • H. Saburi, <u>S. Tanaka</u>, and M. Kitamura Catalytic Dehydrative Allylation of Alcohols <i>Angew. Chem. Int. Ed.</i>, 44, 1730-1732 (2005). • <u>Y. Ishibashi</u>, Y. Bessho, M. Yoshimura, M. Tsukamoto, and M. Kitamura Origin of the Minor Enantiomeric Product in a Noyori Asymmetric Hydrogenation: Evidence for Pathways Different to the Major Mechanism <i>Angew. Chem. Int. Ed.</i>, 44, 7287-7290 (2005). • K. Baba, H. Ono, E. Itoh, S. Itoh, K. Noda, T. Usui, K. Ishihara, M. Inamo, H. D. Takagi, * and T. Asano* Kinetic Study of Thermal Z to E Isomerization Reactions of Azobenzene and 4-Dimethylamino-4'-nitroazobenzene in Ionic Liquids, 1-R-3-methylimidazolium Bis(trifluoromethylsulfonyl)imide (R = butyl, pentyl, and hexyl) <i>Chemistry A European J.</i>, 12, 5328-5333 (2006). • S. Itoh, K. Noda, R. Yamane, N. Kishikawa, and H. D. Takagi* First Investigation at Elevated Pressures to Confirm Exact Nature of the Gated Electron Transfer Systems: Volume Profiles of the Gated Reduction Reaction and Non-Gated Reverse Oxidation Reaction Involving [Cu(dmp)₂(solvent)]²⁺/[Cu(dmp)₂]⁺ Couple (dmp = 2,9-dimethyl-1,10-phenanthroline),” <i>Inorg. Chem.</i>, 46, 1419-1425 (2007). • S. Yanagisawa, T. Sudo, R. Noyori, and K. Itami Direct C-H Arylation of (Hetero)arenes with Aryl Iodides via Rhodium Catalysis <i>J. Am. Chem. Soc.</i>, 128, 11748-11749 (2006). • K. Itami and J. Yoshida Multisubstituted Olefins: Platform Synthesis and Applications to Materials Science and Pharmaceutical Chemistry <i>Bull. Chem. Soc. Jpn.</i>, 79, 811-824 (2006). <p><物性化学のフロンティア></p> <ul style="list-style-type: none"> • <u>T. Nishi</u>, K. Kanai, Y. Ouchi, M. R. Willis, and K. Seki Oxygen Effects on the Interfacial Electronic Structure of Titanyl Phthalocyanine Film: p-Type Doping, Band Bending, and Fermi Level Alignment <i>Chem. Phys.</i>, 325, 121-128 (2006) • H. Ishii, <u>N. Hayashi</u>, E. Ito, Y. Washizu, K. Sugi, Y. Kimura, M. Niwano, Y. Ouchi, and K. Seki Kelvin Probe Study of Band Bending at Organic Semiconductor/metal Interfaces: Examination of Fermi Level Alignment <i>Phys. Stat. Sol. a</i> 201, 1075-1094 (2004) • J. Lee, H. Kim, S.-J. Kahng, Y.-W. Son, J. Ihm, <u>H. Kato</u>, Z. W. Wang, T. Okazaki, H. Shinohara and Y. Kuk <u>Bandgap Modulation of Carbon Nanotubes by Encapsulated Metallofullerenes</u> <i>Nature</i> 415, 1005-1008 (2002). • <u>T. Shimada</u>, T. Sugai, Y. Ohno, S. Kishimoto, T. Mizutani, H. Yoshida, T. Okazaki and H. Shinohara Double-Wall Carbon Nanotube Field-Effect Transistors: Ambipolar Transport Characteristics <i>Appl. Phys. Lett.</i>, 84, 2412-2414 (2004). • K. Awaga, T. Tanaka, T. Shirai, M. Fujimori, Y. Suzuki, H. Yoshikawa, W. Fujita Multi-dimensional Crystal Structures and Unique Solid-state Properties of Heterocyclic Thiaryl Radicals and Related Materials <i>Bull. Chem. Soc. Japan</i>, 79, 25-34 (2006). 			

- K. Okamoto, T. Tanaka, W. Fujita, K. Awaga and T. Inabe
Low-field Negative Resistance Effect in a Charge-ordered State of Thiazyl Radical Crystals
Angew. Chem. Int. Ed. **45**, 4515-4518 (2006).
- C. Li and T. Imae
Electrochemical and Optical Properties of the Poly(3,4-ethylenedioxythiophene) Film Electropolymerized in an Aqueous Sodium Dodecyl Sulfate and Lithium Tetrafluoroborate Medium
Macromolecules, **37**, 2411-2416 (2004)
- D. J. Wang and T. Imae
Fluorescence Emission from Dendrimers and Its pH Dependence
J. Am. Chem. Soc., **126**, 13204-13205 (2004).
- C. Zhao, A. Wakamiya, Y. Inukai, and S. Yamaguchi
Highly Emissive Organic Solids Containing 2,5-Diboryl-1,4-Phenylene Unit
J. Am. Chem. Soc., **128**, 15934-15935 (2006).
- C. Xu, A. Wakamiya, and S. Yamaguchi
Ladder Oligo(p-phenylenevinylene)s with Silicon and Carbon Bridges
J. Am. Chem. Soc., **127**, 1638-1639 (2005).
- T. Iimori, T. Iwahashi, H. Ishii, K. Seki, Y. Ouchi, R. Ozawa, H. Hamaguchi, D. Kim
Orientational Ordering of Alkyl Chain at the Air/Liquid Interface of Ionic Liquids Studied by Sum Frequency Vibrational Spectroscopy
Chem. Phys. Lett., **389**, 321-326 (2004)
- J. Sung, Y. Jeon, D. Kim, T. Iwahashi, T. Iimori, K. Seki and Y. Ouchi
Air-liquid Interface of Ionic Liquid + H₂O Binary System Studied by Surface Tension Measurement and Sum-frequency Generation Spectroscopy
Chem. Phys. Lett., **406**, 495-500(2005)

- <化学の視点を貫く生命科学>
- M. Kita, Y. Nakamura, Y. Okumura, S. D. Ohdachi, Y. Oba, M. Yoshikuni, H. Kido, and D. Uemura
Blarina Toxin, A Mammalian Lethal Venom from the Short-tailed Shrew *Blarina brevicauda*: Isolation and Characterization
Proc. Natl. Acad. Sci. U.S.A. **101**, 7542-7547 (2004).
- M. Kita, M. Kondo, T. Koyama, K. Yamada, T. Matsumoto, K. -H. Lee, J.-T. Woo, and D. Uemura
Symbioimine Exhibiting Inhibitory Effect of Osteoclast Differentiation, from the Symbiotic Marine Dinoflagellate *Symbiodinium* sp.
J. Am. Chem. Soc. **126**, 4794-4795 (2004).
- A. Takano, T. Endo, and T. Yoshihisa
tRNA Actively Shuttles between the Nucleus and Cytosol in Yeast
Science **309** 140-142 (2005).
- T. Yoshihisa, K. Yunoki-Esaki, C. Ohshima, N. Tanaka, and T. Endo
Possibility of Cytoplasmic Pre-tRNA Splicing: the Yeast tRNA Splicing Endonuclease Mainly Localizes on the Mitochondria
Mol. Biol. Cell **14** 3266-3279 (2003).
- T. Ueno, N. Yokoi, M. Unno, T. Matsui, Y. Tokita, M. Yamada, M. Ikeda-Saito, H. Nakajima, and Y. Watanabe
Design of Metal Cofactors Activated by Protein-Protein Electron Transfer System
Proc. Natl. Acad. Sci. USA, **103**, 9416-9421 (2006).
- T. Ueno, T. Koshiyama, M. Ohashi, K. Kondo, M. Kono, A. Suzuki, T. Yamane, and Y. Watanabe
Coordinated Design of Cofactor and Active Site Structures in Development of New Protein Catalysts
J. Am. Chem. Soc., **127**, 6556-6562 (2005).
- M. Matsumoto, S. Saito, and I. Ohmine
Molecular Dynamics Simulation of the Ice Nucleation and Growth Process Leading to Water Freezing
Nature, **416**, 409-413 (2002).
- S. Saito and I. Ohmine
Off-Resonant Fifth-Order Response Function for Two-Dimensional Raman Spectroscopy of Liquid CS₂ and H₂O
Phys. Rev. Lett. **88**, 207401-4(2002).
- O. Yamauchi, A. Odani, M. Takani
Metal-Amino Acid Chemistry. Weak Interactions and Related Functions of Side Chain Groups
J. Chem. Soc., Dalton Trans., 3411-3421 (2002).
- A. Hanaki, Y. Funahashi, A. Odani
Ternary Cu(II) complexes, Cu(H-1L)(ACys-) and Cu(H-2L)(ACys-); L=peptides, ACys- = N-acetyl-cysteinate.
Analogous Complexes to the Intermediates in the Transport of Cu(II) from Cu(H-2L) to Cysteine.
J. Inorg. Biochem., **100**, 305-315 (2006).
- Y. Tamura, Y. Harada, K. Yamano, K. Watanabe, D. Ishikawa, C. Ohshima, S. Nishikawa, H. Yamamoto, and T. Endo
Identification of Tam41 Maintaining Integrity of the TIM23 Protein Translocator Complex in Mitochondria
J. Cell Biol. **174**, 615-623(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))

2004年1月13日、14日 名古屋大学野依記念学術交流館

「Frontier of Physical Chemistry on Molecular Materials」 500名(70名)

Prof. Thomas Elsaesser (マックスボルン研究所)、Prof. Stephen R. Forrest (プリンストン大学)、
Prof. Jos de Jongh (ライデン大学)

2005年1月11日、12日 名古屋大学野依記念学術交流館

「Metal in Biology」 500名(70名)

Prof. Tom Poulos (カリフォルニア大学)、Prof. Tom R. Rauchfuss (イリノイ大学)、
Prof. Tom R. Ward (ニューシャテル大学)

2006年1月26日、27日 名古屋大学野依記念学術交流館

「Chemistry for Life」 500名(70名)

Prof. C. Crudden (クイーンズ大学)、山本尚教授(シカゴ大学)、Prof. L. Ghosez (ボルドー大学)

2007年1月10日、11日 名古屋大学野依記念学術交流館

「Elucidation and Creation of Molecular Functions」 500名(70名)

Prof. E. J. Sorensen (プリンストン大学)、Prof. F. U. Hartl (マックスプランク研究所)、
Prof. J. Okuda (RWTH アーヘン工科大学)

2002年11月26日 名古屋マリオットアソシア

「Hirata Memorial International Symposium on Organic Chemistry 平田義正先生追悼国際シンポジウム」
700名(50名)

中西香爾(コロンビア大)、岸義人(ハーバード大)、野依良治(名古屋大)

2007年1月18日、19日 名古屋大学野依記念学術交流館

「第18回名古屋コンファレンス 医療に役立つ新技術開発・新化合物創製を目指す核酸化学」

500名(70名)

関根光雄(東工大院生命理工)、和田健彦(阪大院工)、吉崎美和(タカラバイオ)

2006年7月23日、28日 京都国際会議場

「IUPAC 5th International Conference on Biodiversity & 25th International Symposium on Natural Products
IUPAC第25回天然物化学国際会議・第5回生物多様性国際会議」

1,300名(200名)

岸義人(ハーバード大)、David MacMillan(米国CIT)、大村智(北里研究所)

2005年8月5日、6日 IB電子情報館大講義室

21世紀COEシンポジウム「自然の叡智に学ぶ“ものづくり”」

The 21st Century COE Symposium on “The Nature-Guided Materials Processing”

500名(70名)

加藤信吾(楯ブリヂストン)、原田明(大阪大学)、長谷川真理子(早稲田大学)

2006年8月16日、17日 名古屋大学野依記念学術交流館

21世紀COEシンポジウム「自然に学ぶ“ものづくり”の新展開」

Proceedings of the 21st Century COE Symposium on “Evolution of Nature-Guided Materials Processing”

500名(70名)

山極寿一(京都大学)、石田秀輝(東北大学)、宇山浩(大阪大学)

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

(i) **RA, PDの採用**：博士課程後期院生に指導者との討議を経た研究計画を提出させ、一定水準以上の者をRAに採用し、研究の活性化と経済支援を図った。成果は報告書により確認した。また、博士研究員を国内外より採用し、研究を活性化させ、若手研究者の育成や国際化にも資することができた。

(ii) **若手自立研究**：博士後期課程の学生が、教員の指導下で最大限自立的に研究を進める計画を募集し、各学年2名を基準に一件年間100万円の経費を支給した。採否は名古屋大学の統一基準に則り、選考委員会を設けて書面評価と面接により決定した。学生にとっては、研究提案を考える良いトレーニングともなった。毎年度末に成果発表会を開催して研究が高水準であることを確認した。

(iii) **若手主催研究会**：大学院生や助手層が中心になり、企画から講師人選、運営までを行う若手主催研究会を合計8回開催した。研究交流によって同世代の研究者から大いに刺激を受けるとともに、研究会のような研究に関連する企画の立案と実施に携わる機会を与えた。

(iv) **海外派遣・海外からの若手との交流**：博士後期院生の国際会議出席、共同研究先への訪問、短期滞在を積極的に奨励、支援（他資金も含め）した。また海外からの研究者招致で院生等の若手の帯同を奨励し、来訪した若手と院生が交流するようにした。院生の研究への意識を高め、基礎学力・英語能力の必要性の自覚に大きく貢献した。

(v) **化学教室セミナー**：学内外講師に最先端の研究を紹介して頂く会合を年6件程度開催した。院生が諸分野のフロンティアを知る好機となった。大学院授業にも組み込み、レポート評価で単位を出した。

(vi) **「社会と科学」**：専門リテラシー教育的な内容で、博士後期学生を対象に、毎年10名程度の多彩な講師を招聘し、科学者として生きていく上で有用な知識を教授した。内容は、論文の書き方、化学史、環境問題、研究室設計、留学事情、研究資金獲得、男女共同参画等多岐にわたった。この企画は、21COE中間評価で極めて高い評価を得た。

(vii) **科学英語**：博士課程後期院生を対象に、国際的な場での研究に不可欠な英語コミュニケーション能力を養う少人数(10名程度)の英語授業を週二回（各90分）実施した。英語学・コミュニケーションを専門とする経験豊富なアメリカ人を講師とし、平成15年度は1クラス、16年度以降は、D1全員とD2・D3の希望者に、初級2クラスと中級1クラスを実施した。また17年度後期より半年毎にTOEIC試験（過去問題を利用）を実施し、自己の実力を把握させた（受験者数のべ54名。前期課程希望者ものべ13名受験）。また同時期より、学位論文審査会の冒頭、5分間の英語サマリー発表を義務付けた。

(viii) **外国人研究者による講義** 外国人教授による英語の授業を受けることは、国際的研究者としての飛躍に有益である。平成15年度以降毎年、外国人著名教授を招聘した英語による集中講義を博士課程前期後期院生に行った。18年度より授業化し、講師4名のシリーズ講義（一人3－6時間）として、出席とレポートで評価して単位を与えた。

(ix) **「博士の生き方」セミナー**：学位取得後のキャリアパス形成の参考に、学位をもち、諸分野で活躍する若手研究者や教育者を招聘し、学位取得後の体験談をご講演頂く会を平成18年6月に開催した。外部からも多くの院生が参加し（総人数150名以上）、学内キャリア形成教育のモデルとなった。

また、優秀な博士課程後期院生の獲得には、前期課程からの人材確保と、前期課程での体系的教育が重要という見地から、平成18年度進学より、前期課程入学試験の一部を外部者限定の自己推薦入試とし、3年間に24名の入学者を得ている。また、前期課程カリキュラムを整備し、無機化学、有機化学、生物化学、物理化学のコア講義を設置すると共に、英語での講義に対応できるよう準備している。

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)

設定された目的は十分達成され、期待以上の成果があった

(コメント)

本研究教育拠点形成計画は、基礎化学を中心としているが、機能性や生物系などへの発展を意図しており、わが国の化学の各領域を代表する研究者の集団によって遂行されたものである。優れた研究成果を基にして、若手研究者養成に関しても十分な計画の下に実行され、目的達成度は極めて高い。

人材育成面については、単なる経済支援ということだけではなく、大学院生の国際化教育、若手研究者の自立的研究の育成、若手中心の研究会の開催などの計画が十分実行され、若手の自律的意欲や近接分野間の交流を加速し、他大学へのキャリアアップなど流動性を高めたことなど、さまざまな成果を得たことは高く評価できる。また、「社会と科学」に関する教育プログラムは大変ユニークな視点であり、今後の継続性とモデルとして広く普及することが期待される。

研究活動面については、「精密合成・分子触媒」「物性化学のフロンティア」「化学の視点を貫く生命科学」の3分野とも非常に大きな研究成果を挙げ、分野の広がりや新たな分野の創成に寄与している。これは、本プログラム実施期間中にも多くの競争的研究資金を得ていることや、活発な論文・学会発表、国際会議の主催などの研究情報発信などからも示されている。

補助事業終了後の持続的展開については、高等研究院、物質科学国際研究センター、総長裁量経費による若手支援など具体性のある条件が整えられており、今後の更なる発展が期待できる。