

領域略称名：配位プログラム
領域番号：2107

平成26年度科学研究費補助金「新学術領域研究
(研究領域提案型)」に係る事後評価報告書

「配位プログラミング
— 分子超構造体の科学と化学素子の創製」

(領域設定期間)

平成21年度～平成25年度

平成26年6月

領域代表者 東京大学・大学院理学系研究科・教授・西原 寛

目 次

1. 研究領域の目的及び概要	2
2. 研究組織（公募研究を含む）と各研究項目の連携状況	4
3. 研究領域の設定目的の達成度	6
4. 研究領域の研究推進時の問題点と当時の対応状況	9
5. 研究計画に参画した若手研究者の成長の状況	10
6. 研究経費の使用状況（設備の有効活用、研究費の効果的使用を含む）	11
7. 総括班評価者による評価	12
8. 主な研究成果（発明及び特許を含む）	14
9. 研究成果の取りまとめ及び公表の状況（主な論文等一覧、ホームページ、公開発表等）	17
10. 当該学問分野及び関連学問分野への貢献度	22

1. 研究領域の目的及び概要（2 ページ程度）

研究領域の研究目的及び全体構想について、応募時に記述した内容を簡潔に記述してください。どのような点が「我が国の学術水準の向上・強化につながる研究領域」であるか、研究の学術的背景（応募領域の着想に至った経緯、これまでの研究成果を進展させる場合にはその内容等）を中心に記述してください。

化学結合を自由度高く可逆に制御できる配位化学を武器として、金属原子やイオンを自在にかつ精密に配置し、特異な物理・化学特性を持つ機能階層的な超構造体を設計通りに組み上げる方法 = 「配位プログラミング」を探求し、さらに超構造体から革新的な化学素子を創製する。

【研究の学術的背景】

光合成や酵素反応などの巧妙でしかも重要な生体现象は、すべて分子機能が連動・増幅・出力する一連の高効率システムで構築されている。そこでは、物性のみならず、化学特性や機械的動作も分子機能として複合的に活用されており、そのメカニズムは古くから科学者の探究心を刺激してきた。電子移動過程に限ってみても、半世紀にわたる Marcus 理論、長距離電子移動、Hush, Taube の混合原子価などの基礎研究が、その本質である電子移動の速度、方向、確率を左右する様々な要因を解明し、高効率、高速の電子移動システムの構築に設計指針を与えるまでに至っている。しかし未だに、電子・光デバイスは低分子、液晶、導電性高分子などの極めて単純な分子系からしか作られていない。また我々が取り扱える物質は、巨大分子、集積分子、超分子、分子組織などサイズも大きくなり形態も多岐にわたり、分子間の機能連動を起こす場が拡がってはいるが、それらの機能を効率よく増幅・連動させて取り出すには至っていないのが現状である。

一方、固体表面（電極）も電子ビーム（EB）リソグラフィや走査型プローブ顕微鏡（SPM）などを用いてナノ微細構造の観察や加工デバイス技術が確立され、その制御域はナノを凌駕してサブナノオーダーに突入した。これら物質科学と微細加工学の領域の潮流の融合の先には、今世紀の重要課題の一つである分子による人工ニューラルネットワーク素子の実現が確実に捉えられている。しかし、超構造体とデバイスとの間には未だに深い谷が存在する。この谷を飛び越えるには幅広い分野の最高のスキルを持ち、活力に溢れた研究者を集結させ、機動力ある連携による新研究領域の創成が必要である。現在、欧米では進歩した微細加工デバイス技術を用いて単純な分子1個の素子作製が着手され始めているが、本プロジェクトでは、この単分子素子潮流の先を更に先取りし、世界に先駆けた機能階層的な精密超構造体からなる物性・化学特性・機械的動作を複合的に包含した化学素子の創製を目指す（図 1-1）。

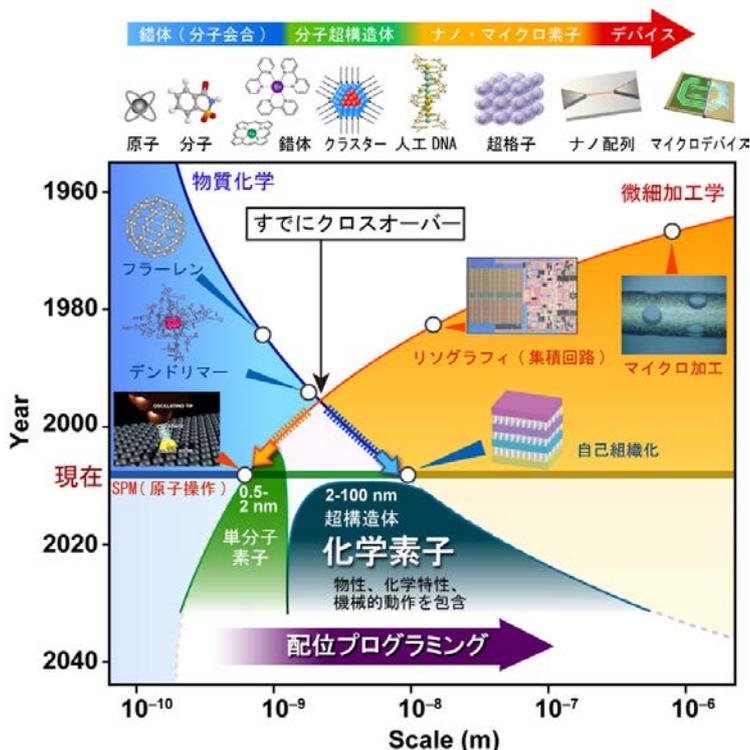


図 1-1. 本領域の位置づけ(応募時).

【研究期間内に明らかにすること】

外部刺激に応答する分子の出力をいかに連動・増幅して取り出すかの難問を解決できると、ナノサイズの超構造体が一箇の素子となる。自然界は機能分子を精密に組み上げた超構造により機能を連動・増幅してその難問を見事に解決している。「視覚」や「光合成」は、光を電気に変換する生体系の化学素子といっても良い。そのような機能階層分子システムを人工的に構築する上で、光、電子、磁気、化学ポテンシャルを思い通りに操ることができる分子超構造体を自在に組み上げる「プログラミング」は、最重要課題である。この課題解決に挑戦するには様々な物質や方法論の組合せが必要だが、その中でも「配

位化学」は無機・有機物質の広範囲をカバーし、プログラミングの中軸となる基盤科学として注目される。なぜなら金属と有機・無機配位子の無限の組合せによって、様々な化学的・物理的特性を発現させ、設計どおりの幾何構造・電子状態の金属錯体を生み出せるからである。さらに、結合の強さを自在に操作できる配位結合は、分子間の接合、固体表面における接脱着の制御を可能とし、ダイナミックな構造・物性変換が可能な分子システムを創出する。

我々は第一段階で、この配位化学を武器として、多機能を集約したヘテロ分子組織体を構築する界面ボトムアップ合成法、金属間電子・磁気相互作用等を操作する分子集積・階層構造をつくり出すクラスター化法、規則的な化学ポテンシャル制御構造をつくる精密超分子合成法、高次の分子集合体間の機能応答・連動・連鎖系をつくるバイオインスパイアード分子組織化法によって、**特異な物理・化学特性を持つ、機能階層的な超構造体を設計通り精密に組み上げる方法** = 「配位プログラミング」にまで到達させる事を目論んでいる。第二段階で、「配位プログラミング」を駆使して創製した精密超構造体から革新的な化学素子を創製するステージへ展開する。以上の着実なアプローチにより、分子機能を組織化して高効率出力するナノサイズ化学素子の開発を視野に入れ、配位プログラミングを基盤とする精密超構造分子システム構築の科学技術を創発し、そこで生まれる新現象や新機能を探求する新しい学問分野を創出する。具体的な目標項目は以下の通りである (図 1-2)。

1. **界面プログラミングによる分子回路システム構築**：配位プログラミングにより電子基板などの固体表面と機能階層的な超構造体とを接合した**超構造界面**を構築し、分子の持つ物理・化学・生物機能を制御、光・電子・化学機能を高感度に出力する化学素子を創製する。
2. **クラスタープログラミングによる電子・磁気機能システム構築**：外部刺激により電子やスピンを始めとする分子量子状態を自在操作できる**金属クラスター系** (錯体、ナノ粒子など) を創製し、**光・電子・磁気物性**が相乗的に機能する分子システムを構築する。
3. **超分子プログラミングによるエネルギー・化学変換システム構築**：超分子プログラミングにより金属イオン、分子、高分子などの精密自在配列法を確立する。高速・高効率電子・エネルギー移動など特異な分子機能をロスなく 連動・増幅させた**エネルギー・化学変換系**の構築を行う。
4. **生体化学プログラミングによる化学空間機能システム構築**：生体で実現されているような3次元分子組織からなる新規**メゾスコピック化学空間**を構築し、その物理・化学構造を利用する多様な**分子間コミュニケーションの動的制御**を行う。

【新学術領域研究「対象」要素】

本領域では、様々な分子機能が連動した独創的な超構造体をつくり出してきた合成研究者たちと、単一分子系の計測・理論、ナノサイズデバイス作製の先陣を切っている研究者たちが合流して計画班を構成し、「精密超構造分子システム」の構築を目指した機動力あるタッグチームを組む。意欲的な公募班員を積極的に仲間に入れ、分野間の革新的クロスオーバーによる研究体制を実現して、世界に先駆けた日本発の科学分野創出へ導く。

【本領域の発展がもたらすもの】

本領域の成果は、新しい高次構造＝機能物質の基礎科学を深化させ、学術水準を飛躍的に向上させるだけでなく、電子工学、光科学、材料科学、情報科学および生命科学へ幅広く波及し、次世代の電子・情報、エネルギー、環境、および生活、医療の基盤と成る新しい科学技術分野を創出する。

配位プログラミング

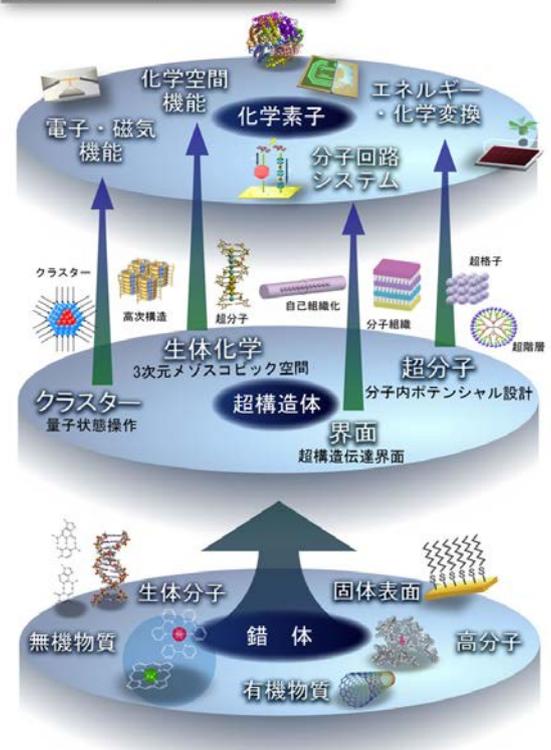


図 1-2. 本領域の戦略とコンセプト.

2. 研究組織（公募研究を含む）と各研究項目の連携状況（2ページ程度）

領域内の計画研究及び公募研究を含んだ研究組織と領域において設定している各研究項目との関係を記述し、どのように研究組織間の連携や計画研究と公募研究の調和を図ってきたか、組織図や図表などを用いて具体的かつ明確に記述してください。

【研究組織と研究項目の関係】

本領域は総括班評価者7名、領域アドバイザー6名、A01班15名（後半2年間13名）、A02班10名（後半2年間12名）、A03班13名、A04班10名、研究分担者17名、連携研究者23名、班友9名の計110名の体制で推進されてきた。本領域では、分子機能を組織化して高効率出力するナノサイズ化学素子の開発を視野に入れ、配位プログラミングを基盤とする精密超構造分子システム構築の科学技術を創発し、そこで生まれる新現象や新機能を探求する新しい学問分野を創出する事を目指している。以下の目標項目ごとに4班の体制を取った。

1. 界面プログラミングによる分子回路システム構築
2. クラスタプログラミングによる電子・磁気機能システム構築
3. 超分子プログラミングによるエネルギー・化学変換システム構築
4. 生体化学プログラミングによる化学空間機能システム構築

本領域研究のアプローチは（1）配位プログラミングによる超構造体の精密構築法の探求、（2）超構造体の精密構造解析および化学・物理特性解析、（3）電子基板などへの超構造体の配列による化学素子の創製、の3段階からなる。まず超構造体の構築においては、オリジナルな材料をもつ合成化学者間の連携が重要である。さらに化学素子への展開においては、**合成、測定、理論、素子化技術などを得意とする異分野研究者間の連携**が必要である。これを踏まえて次元やサイズの異なる、「界面・計測系」、「クラスター系」、「超分子系」、「生体化学系」を対象とした4班で領域を構成されており、班長の計画研究組織には、異なる得意技をもつ他機関の研究者を研究分担者として加え、グループ内、班内、班間の研究連携がスムーズに行える組織を構築している事が特徴である。このため、班内、班間の物質連携や構造・物性解析、さらには素子化を効率よく推進できる体制として機能した（図2-1）。また、研究代表者や分担者に新進気鋭の若手研究者を積極的に加えることにより、視点の異なる斬新な研究が推進できる連携体制となっている。これに公募班員を加えて、活発に研究活動を展開し、あわせて領域への積極的な参加を希望している若手研究者を班友として加えて、活発な研究交流の出来る組織を整えることができた。この体制により、異なるスキルを持つ研究者間の連携による緻密なネットワークが形成され、新学術領域の定着を計かることに成功した。これは、共同研究の大きな広がりの実績（後述）からも裏付けられる。

本領域の成功には、異分野間の交流を含む領域内外での密接な連携が鍵となるため、これを加速するための更なる研究連携を促進する努力を行ってきた。

領域内で共同研究を希望する研究者のアンケートをとり、共同研究のきっかけをつくる打ち合わせの旅費や共著論文表紙掲載料を総括班経費から支援する仕組みを構築し、更なる有機的な連携の強化を行ってきた事も本領域独自のものである。更に、若手研究者間の研究交流が斬新な発想を生むので、若手研究者による研究集会の企画・運営を促進することにより、共同研究の促進を計る事にも力を入れてきた。

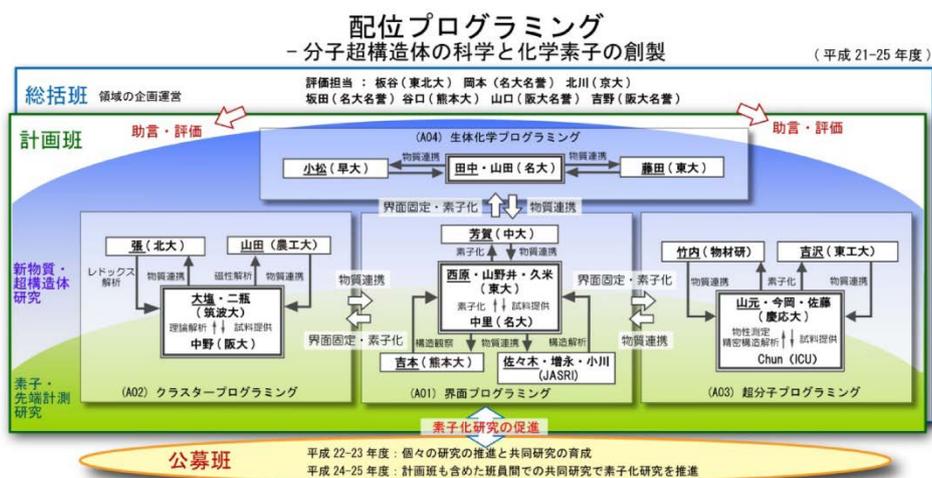


図2-1. 本領域の組織と連携図

本領域の研究組織の特徴は (1) 領域発足当時、平均年齢がおよそ40歳の若い数多くの研究分担者や連携研究者が積極的に研究に参画している事である。(2) この様な若い研究者の多い本領域へ学術的、人的支援体制を組むために、2010 年度から総括班評価者以外にも錯体、機能材料、高分子、生物等幅広い分野に跨る「配位」に関連した最先端の研究プロジェクトを推進している6名の研究者を領域アドバイザーとして新たに加えた。この結果、本領域に関連する研究分野の第一人者のである総括評価者とあわせ、全国に広がる人的ネットワークを活用する事ができ、若手研究者のプロモーション(項目5)を活発に行うことができた判断している。

【研究組織間の連携】

領域内では中間報告(2011年6月)の段階で68テーマ(2グループで1テーマ)、交渉中が36件、領域外とは155件の共同研究が展開されていた。延べ136件(68テーマ×2)は領域の班員代表者が48名であるので、1人あたり3件近い共同研究に関わっていることになり、研究者間の大きなネットワークが構築されたことを意味している。

この連携が結実し、延べ75件(領域全体の1割弱)もの共同研究論文を報告することができた(図4、表10-1を参照)。これは本領域が順調に展開できた実績を極めて高い信頼性をもって示すデータである。共同研究は現在も進行中で着々と共同論文の作成が行われ今後も増える見込みである。本領域研究期間内に共同研究の6割近くが論文としてまとめることができ、さらに、共著論文が総論文数に占める事は、領域内での連携が上手く機能し、高効率で研究が進行し、新しい研究成果が連続と誕生してきている事実を示すものとして、極めて高く評価できる。また連携は班内に留まらず、班を越えてネットワークが広がっており(図2-2)、さらに領域外研究者とも積極的な共同研究、研究交流を行った。

合宿形式の班会議や、分野間交流を促すための合同班会議、若手シンポジウムなど積極的に若手班員が交流出来る場を提供する努力は行なってきたが、当初期待した以上に、極めて活発な研究連携が展開されてきた。若い研究者が多い本領域において、このような多数の親密な連携実績は、若い研究者各人が将来成長し活躍していくための大きな財産となることはいうまでもなく、領域として重要な責務の1つを果たしたと考えている。

本領域では密接な研究交流と活発な共同研究を基盤に、研究期間後半でも格段の研究進捗がみられた。また、予想以上の研究連携が構築されたのは、研究交流を促進する工夫を絶えず行なってきた事と、活発な研究展開を行なっている若い研究者を計画班員、公募班員として積極的に参画させている本領域の方針によるものと高く評価している。

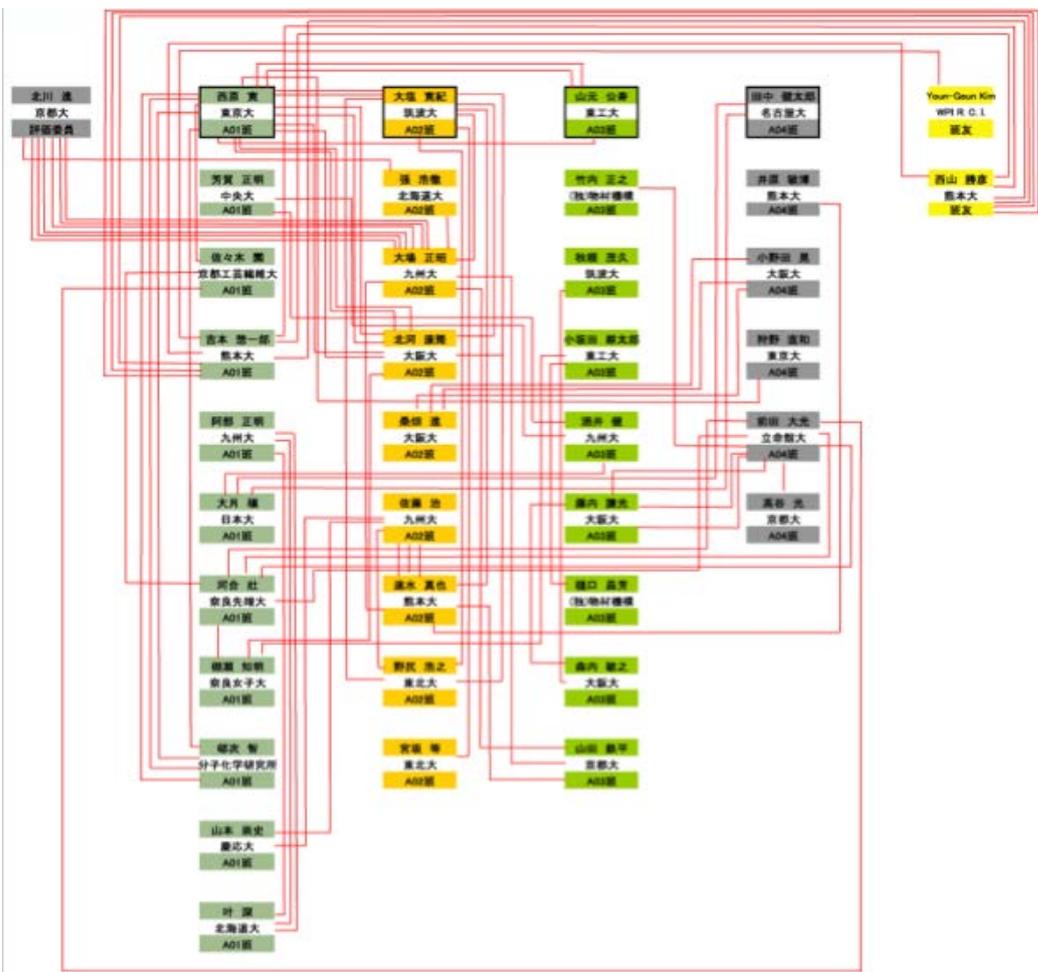


図 2-2. 領域内の共同研究相関図 (共同論文出版済みのみ)

3. 研究領域の設定目的の達成度（3 ページ程度）

研究期間内に何をどこまで明らかにしようとし、どの程度達成できたか、また、応募時に研究領域として設定した研究の対象に照らしての達成度合いについて、具体的に記載してください。必要に応じ、公募研究を含めた研究項目毎の状況も記述してください。

領域全体

本領域は A01-A04 班からなる。各班では界面超構造体（A01 班）、双安定性分子超構造体（A02 班）、超分子超構造体（A03 班）、擬生体超構造体（A04 班）の合成が第 1 段階であり、化学素子の創製が第 2 段階である。進捗度は表 3-1 に示す 5 段階 I-V に分け、個々の班員の達成度を集計した。ただし、測定・構造解析、理論解析を専門とする班員は別枠（A）に分類した。

この研究進展状況は、中間報告時にも調査しており、その後の 2 年間で、**化学素子に関する成果が出た班員数が 7 名から 33 名に増加**するなど、達成度が大きく格段に増大したことを示している。すべての班員が化学素子の作製まで達しているわけではないが、これは達成目標が班員により差があり、化学素子ではなく新規超構造体の創製に重点をおいた研究計画も含まれているためである。それを踏まえると、領域全体としての達成度は極めて高いと言える。

本領域全体を評価する更なる重要な指標として共同研究による領域目標の達成度がある。本領域では、班員の個々の研究に加えて、班員間の共同研究等の連携によって、新たな研究テーマやの創出や研究ステージへの展開が行われることを目論んで施策を行った。その結果、上記項目 2 で示したように、多くの領域内のネットワークが構築され、高質の共同研究の成果が生まれてきた。その中では、西原と山元の共同研究による、高活性な dendrimer 包含 heterometal cluster 触媒など、化学素子としての成果も生まれている。また、本領域が主催・支援した若手シンポジウム、若手国際会議等を通して、**若手研究者間の密なネットワーク**ができたことは、本領域終了後に、さらに新しい領域を構築する基盤ができたことを示している、以上のように、当初は**想定していなかった成果が共同研究等や研究連携を通して生まれてきた**ことは、達成度が十分に満足できるものであることを示している。

表 3-1 班員の研究進展状況

進捗度	状況	班員数（中間報告時）	班員数（最終報告時）
I	超構造体を設計し、現在合成中である。	4	0
II	超構造体の合成に成功した。	4	0
III	超構造体の機能発現を見出した。	19	5
IV	化学素子作製を試みている。	6	13
V	化学素子に関する成果が出た。	7	33
A	測定・構造解析、理論解析を担当。	5	5

次に、各班の達成度を具体的に記す。

A01 班 界面プログラミングによる分子回路システムの構築

本班では、固体・分子界面での配位プログラミングで光・電子・化学機能をもつ分子ワイヤやネットワークなどの超構造体を自在に作製する方法やそれらの構造解析法を開発して、その構造の特徴や動的挙動を解明するとともに、物性・化学機能の解明を行い、さらにその超構造機能に基づく信号を高感度で出力する化学素子を開発することを目標とした。これらの路線に乗った研究成果が十分に得られると

ともに、新発見が行われたと考えている。以下に具体的成果を抜粋して記述する。西原は、配位結合を用いてレドックスユニットを末端に持つ錯体分子ワイヤを固体界面に自在に構築する方法論を金表面 (Au-S 結合) からシリコン表面 (Si-C 結合) へ拡張するとともに、分子ワイヤの電子輸送特性への表面接合分子ユニット (図 1) および末端レドックス分子ユニットの役割を評価し、各分子ユニットの効果を加算することにより全体の電子移動現象を定量的に評価できるところまで到達した。また光合成コンポーネント PSI と金ナノ粒子の single electron transfer 現象を利用する少数フォトン検出においては、二重界面活性効果を用いた感度増強にも成功した。さらに、液液及び気液界面での配位プログラミングによって、初めてのレドックス活性で導電性の錯体ナノシートであり、トポロジカル絶縁体の可能性を秘めた π 共役ニッケララジチオレンナノシートの合成に成功し、新たなエレクトロニクス、スピントロニクスへの展開を示した。計画班員の佐々木は放射光を利用した有機/高分子薄膜の動的階層構造評価技術としてマイクロビーム GISWAXS 時間分解計測システムを構築し、有機金属錯体、有機高分子、そして無機化合物の薄膜構造を解明するとともに、X 線異常分散効果を利用した時間分解小角 X 線散乱実験法を確立した。また吉本は金属配位結合や錯体の自己電析、超分子形成を軸とした独自の界面構築法により、分子エレクトロニクスやクラスター触媒へ繋がる機能材料を創製した。公募班員の化学素子の創製に関する成果として、猪股は、人工シデロフォアを水晶振動マイクロバランス法 (QCM) 用チップ上に固定化した新しい微生物検出素子の開発や人工シデロフォア鉄錯体修飾 AFM プローブによる微生物の表面観察に成功した。また小柳津は高分子錯体複合電極による光蓄電 (光空気二次電池) の開発に成功した。さらに河合は分子組織構造を利用した増強円偏光蛍光システムや希土類錯体を利用した円偏光蛍光セキュリティ分子システムを創製した。以上の成果は、高質の論文として発表されているだけでなく、新聞記事や国際ニュースとしても取り上げられている。

A02 班 クラスタープログラミングによる電子・磁気機能システム構築

本領域開始時、外部刺激により電子やスピンを始めとする量子状態を自在操作できる金属錯体及びその集合系を創製し、光・電子・磁気物性が相乗的に機能する分子システムを構築することを達成目標とした。本研究設定については「配位プログラミング」により原子や分子をサブナノスケールで集積化・階層化したクラスターシステムにおいて、その電子的・磁氣的機能を制御する目的を十分達成したと考える。大塩は、複数の双安定性部位を有する多重双安定性化合物の合理的合成法を確立と、光による選択的スピン状態変換および電場による電子状態変換を目指した。その結果、混合原子価 Fe(II/III) スピン平衡四核錯体において選択的光状態変換に成功し、混合原子価 [FeCo] 一次元錯体において、金属間電子移動による磁性と電気伝導性のスイッチングに成功した。張は、酸化還元活性金属及び配位子が創り出すソフトな電子と「ソフトなマクロ構造」を共存・連動させた多重双安定系の構築と外場応答による物性制御を目指し、光による固体・液晶相転移を示す外場応答型酸化還元分子モジュールを合成できた。大場は、機能性分子ユニットを合理的に配列し、分子単独では発現しない機能現出を目的とし、多孔性配位高分子鉄錯体において、ゲスト分子の吸脱着による反磁性・反磁性変換を達成した。佐藤は、刺激応答型金属錯体クラスターと光応答性低次元錯体を配位プログラミングに基づき合理的に設計・合成することを目指し、金属間電子移動により可逆な光磁気特性を示す三核鉄コバルト錯体の開発など、ほぼ当初の予定通り研究を進めることができた。速水は、機能性金属錯体の液晶化技術を実際のデバイス作成に生かすことのできるレベルまで引き上げることを目指し、強誘電性金属錯体液晶材料を開発し、基板上に強誘電性金属錯体をスピコートにより膜化したデバイスにおいて、メモリ機能性が発現することができた。

A03 班 超分子プログラミングによるエネルギー・化学変換システム構築

金属イオン、分子、高分子などを自在・精密に配列させた超構造体を設計通りに組み上げる方法を確立することが研究の支柱である。さらにこの独自の構築法を駆使し、エネルギー・化学変換などの機能をロスなく連動・増幅させる物質構築へと展開する事を目標とした。研究課題は当初の計画通り進化した。具体的なものを取り上げる。

山元は dendrimer で配位プログラミングを制御する新しいコンセプトを提案した。ポテンシャル勾配を構築して、電子移動のベクトルを制御する事に成功し、この原理を用いて高効率光電変換素子を組み上げて、その有用性を実証した意義は大きい。吉澤・穂田らは、配位プログラミングにより、 π 空間を持つ独自の超構造体の構築に成功しており、この特殊空間を利用した新規機能の創出を可能としている。また、穂田らは、分子素子回路の配線の必須の部品となるジャンクションを配位プログラミングによる構造体でえられた意義は大きい。竹内らは、配位プログラミングによる超分子のリビング重合に成功しており、新しい重合法の分野を切り開いたものである。公募班員で特筆すべきは、樋口らは、配位プログラミングによるメタロポリマー超分子の合成に成功し、実際に素子を組み上げてこの構造体が種々の色を発色するエレクトロクロミック素子の実現や、これらがメモリ素子として有用である事を実証した。この他のすべての課題も、素子化や、素子化へ展開できる道筋をつけた成果となっている。これらの成果は質の高い数多くの論文として発表しており、新聞記事としても取り上げられている。以上の様に、A03 班の当初の目標であった、配位プログラミングによる超構造体の構築と化学素子に向けた新しい機能化は十分に達成されており、当初目論でいた成果が得られていると判断している。

A04 生物化学プログラミングによる化学空間機能システム構築

本領域は、生体分子が持つ高い組織性と、配位化学がもたらす自在なプログラム性を組み合わせることにより、高次の分子間、集合体間の機能的コミュニケーションの動的制御を達成することを目的とした。「配位プログラミング」の概念に基づき、タンパク質や DNA などの生体高分子を化学的に改変することや、生体化学システムから発想を得た超分子系を構築することによって、電子情報やスピン情報、光学的機能を動的に制御する基礎的な機構、新しい物質変換システムの構築、生体情報の増幅、変換などの機能素子が多岐にわたり創出することができた。本研究設定については、その目的を十分に達成できたと考える。田中は、プログラムした配列・空間配置で組織化した多種多数の金属錯体ユニット間に動的な分子間コミュニケーションを生み出す分子組織化学を展開した。酸塩基による可逆的なスピン間相互作用し超分子的にマルチインターロックしたポルフィリン-フタロシアニン組織や、ペプチド二重鎖中に電子的相互作用の制御が可能な異種金属ポルフィリンを自在配列化した分子組織の構築を行った。小松は、タンパク質とポリマーの電荷による交互積層ナノチューブを構築し、ヒト B 型肝炎ウイルスを選択的に補足するシステムを構築した。藤田は、直径が 10 nm にもおよぶ大環状金属錯体を一義的に合成し、これらがチューブ状に組織化すること、金属錯体の酸化還元によりそのナノチューブ形成を可逆的にスイッチできることを見出した。菊地は、 ^{19}F ラベル化分子を埋包したメソポーラスシリカを作成し ^{19}F MRI プロブとすることで、免疫担当細胞のトラッキングや薬物情報剤のモニタリングに成功した。原野は、低毒性の薬剤輸送システムとして有効な水溶性フラレンと si-RNA 複合体を構築した。古川は、多孔性構造体の結晶サイズをメソスコピック領域まで小さくすることで、分子を取り込んだ状態の構造を「記憶」し、加熱により「消去」可能な、形状記憶ナノ細孔の合成に成功した。前田は、 π 電子系イオンの積層型配列を構築し、電荷積層型、電荷分離積層型の組織構造の選択的形成に合わせた分子構造設計モデルを提示した。

4. 研究領域の研究推進時の問題点と当時の対応状況（1ページ程度）

研究推進時に問題が生じた場合には、その問題点とそれを解決するために講じた対応策等について具体的に記述してください。また、組織変更を行った場合は、変更による効果についても記述してください。

研究推進時に生じた問題は、計画班員の止むを得ずの離脱と交代であった。各問題と対応策について、時系列で具体的に記述する。

本領域発足時から、吉沢道人氏（東工大資源研）は「アントラセン環を有する金属架橋ナノカプセルの機能開拓」をA03 班の計画班員として展開していた。平成23年4月より最先端・次世代研究開発支援プログラムに採択され、計画班員の資格が消失した。平成22年7月から1年半の短期間ではあるが、研究課題を強かに推進し、金属架橋カプセルの合成と機能分子の内包に既に成功し、更に化学素子への展開に向けて、特異な発光機能を見出している。吉沢氏は23年度からは班友として領域に加わり、さらに、共同研究者であった同じ所属の穂田宗隆氏（東工大資源研）が平成24年4月より計画班員として参画し、共同研究を通じて当初の計画を完成させている。これに加えて、穂田氏独自の新しい研究課題も平行して推進し、成果を上げている。24年度から吉沢氏の共同研究者を計画班員として加える事により、研究継続させて支障無く研究を推進することができた。

本領域発足時から、山田真実氏（東京農工大）は「ナノ粒子ポテンシャル制御界面の創製—電子移動とその光制御」をA02班の計画班員として展開し、2009年度は活発に研究を進展させていたが、2010年夏、突如体調を崩した。氏は手術後にリハビリを続けていたが、研究継続が体力的に無理と判断して、2011年3月末をもって職を辞し、自宅静養をすることとなった。それに伴い、A02班の計画班員の資格が消失した。ナノサイズの精密構造体を対象とした研究はA02班のクラスタープログラミングでは不可欠であり山田氏の離脱は大きな痛手であるが、この研究についてはナノ構造体研究者（西原，山元）らが成果を挙げている。ナノサイズの精密超構造体の電子移動を対象とする研究はA02班のクラスタープログラミングでは不可欠であり、24年度からの後半2年は山田氏に代わるナノ金属錯体と低次元錯体の導電性・磁性のエキスパートである計画班員の補充が必要であると判断し、公募班員であった大場正昭氏（九大院理）を計画班員として申請して認められ、平成24年4月より計画班員として参画した。大場氏は独自の多孔性磁性金属錯体を創製し、ゲスト分子を利用した磁気特性の自在変換に成功するなど、顕著な成果を挙げた。

本領域発足時から、芳賀正明氏（中央大）は「階層的ボトムアップ法による機能性分子結合ナノ界面の構築」をA01班の計画班員として展開し、2013年度までの4年間活発に研究を進展させ、強い金属間相互作用をもつ二核ルテニウムおよびオスミウム錯体の薄膜上での電位パルス印加に伴うメモリ効果を発見するなど、成果を挙げた。しかしながら2014年度、個人的な事情により、領域を離脱することとなった。最終年度で班員の交代や補充はできないため、他の班員、特に、基板表面の錯体分子ワイヤの研究を行っている西原が、関連テーマをカバーすることとした。論文数等が最終年度に著しく増加するなど、芳賀氏の離脱を補充する研究成果が得られたと考えている。

5. 研究計画に参画した若手研究者の成長の状況（1ページ程度）

研究領域内での若手研究者育成の取組及び参画した若手研究者の研究終了後の動向等を記述してください。

本領域では、若手研究者育成の取組として、**若手シンポジウム**、**若手国際会議**等を主催や後援をして若手研究者間の密なネットワークの構築を支援した。2011年5月20、21日 第1回若手講演会（東京）、2011年6月16～19日 配位プログラム 第1回若手国際シンポジウム The 1st China-Japan Joint Inorganic Chemistry Symposium for Young Scientist: Supramolecular Science and Nanomaterials, Nanjing, China)、2012年5月13～16日配位プログラム 第2回若手国際シンポジウム Canada-Japan Joint Symposium on Supramolecular Nanomaterials Science (Whistler, Canada)、2012年12月20、21日若手合同シンポジウム「配位プログラム」×「融合マテリアル」（東京）、2013年6月14～15日分子研研究会「日中合同若手シンポジウムー革新的配位材料」（分子研、岡崎）、2013年12月15～17日配位プログラム 第3回若手国際シンポジウム NZ-Japan Symposium on Supramolecular Nanomaterials。これらの全てのシンポジウムや国際会議は、領域内の40前半までの若手研究者が企画、運営したものであり、30代を中心とする国内の若手研究者間の活発な仲よし交流を語るだけでなく、同世代の研究者が厳しい議論を交わし、良い意味のライバルとして意識し切磋琢磨して、成長を促すことも意図した。さらに中国、カナダ、ニュージーランドの若手研究者との意見交換や交流によって、**国際的な若手研究者のソサイエティ**を作ることに成功した。

参画した若手研究者の活躍は下記のようなものである。計画班員であった吉沢氏は新進気鋭の若手研究者で大きく成長した1人である。文部科学大臣表彰 若手科学者賞、第3回 リサーチフロントアワードを受賞する等研究が高く評価されている。2011年より最先端・次世代研究開発支援プロジェクトに採用されて、領域よりステップアップしている。班員の主な受賞は、久米氏（東大）錯体化学会奨励賞、邨次氏（分子研）井上研究奨励賞、牧浦氏（阪府大）日本化学会女性化学者奨励賞、文部科学大臣表彰若手研究者賞、小柳津氏（早大）文部科学大臣表彰科学技術賞、二瓶氏（筑波大）錯体化学会奨励賞、文部科学大臣表彰若手研究者賞、帯刀氏（山形大）高分子学会研究奨励賞、吉川氏（名大）分子科学会奨励賞、秋根氏（筑波大）HGCS Japan Award of Excellence 2010、中藪氏（東工大）第23回有機合成化学協会研究企画賞、手島精一記念研究賞、樋口氏（NIMS）第3回 ドイツ・イノベーション・アワード、山田氏（九大）錯体化学会奨励賞、日本化学会進歩賞、内田氏（東大）、触媒学会奨励賞、日本化学会女性化学者奨励賞、文部科学大臣表彰若手研究者賞、狩野氏（東大）文部科学大臣表彰若手科学者賞、菊池氏（阪大）日本化学会学術賞、井上学術賞、大阪科学賞、前田氏（立命館大）文部科学大臣表彰若手科学者賞ならびに Society of Porphyrins and Phthalocyanines Young Investigator Award、古川氏（京大）日本化学会進歩賞である。特に女性研究者の牧浦氏、帯刀氏、中園氏、内田氏の活躍は目覚ましい。領域内での研究成果の高い評価により、吉本氏（熊大特任助教）が准教授へ、張氏（北大准教授）が中央大教授へ、大久保氏（産総研主任研究員）が東大准教授へ、久米氏（東大助教）が広島大准教授へ、帯刀氏（山形大助教）が講師へ、猪股氏（名工大助教）が准教授へ、今岡氏（東工大助教）が准教授へ、秋根氏（筑波大准教授）が金沢大教授へ、山田氏（京大助教）が九大准教授、藤田氏（東大講師）が名城大准教授へ、小松氏（早大准教授）が中央大教授へ、小野田氏（阪大助教）が准教授へ、前田氏（立命館大准教授）が教授へ昇進を果たしている。

さらに、外部資金として4名が科研費若手研究A、2名が最先端・次世代研究開発支援プログラム、2名がCREST、3名がさきがけ研究に採択された。

以上のように、**数多くの若手研究者が領域で大きく成長し活躍している。**

6. 研究経費の使用状況（設備の有効活用、研究費の効果的使用を含む）（1 ページ程度）

領域研究を行う上で設備等（研究領域内で共有する設備・装置の購入・開発・運用・実験資料・資材の提供など）の活用状況や研究費の効果的使用について総括班研究課題の活動状況と併せて記述してください。

総括班研究課題の活動状況

会議開催：本領域では、総括班経費の多くを総括班研究課題の柱である会議の運営に使用した。具体的には、国内では、本年1月に開催した**本領域を総括する国際会議（International Conference on Coordination Programming）**、9回の領域全体会議、13回の班会議（班連携会議も含む）、4回の公開講演会、2回の若手シンポジウム、3rd Japan-Korea Joint Symposium on Coordination Chemistry（沖縄）、Japan-China Cluster Meeting（福岡）、Japan-France Coordination Chemistry Symposium（奈良）、国外では、11th Eurasia Conference “Coordination Programming - Science of Molecular Superstructures”（Jordan）、PacifiChem 2010（Honolulu）、France-Japan Symposium on Coordination Chemistry（Rennes, France）、14th IUPAC International Symposium on Macromolecular Complexes, Session: Coordination Programming（Helsinki, Finland）、12th Eurasia Conference on Chemical Sciences, Mini symposium “Coordination Programming”（Corfu, Greece）、Japan-Germany Bilateral Meeting on Coordination Programming（Münster, Germany）の会議費として用い、名簿、研究成果報告書、会議要旨集などの出版を行い、外国人研究者を招へいし、国内若手研究者を支援した。

共同研究の推進：総括班経費から、班員間の**共同研究のディスカッションのための旅費**を支援し、また**共同研究の論文がジャーナルの表紙**を飾った場合には、その経費を支援した。

国際広報とジャーナル特集号：本領域のコンセプトや活動、成果を国際的に広報するために、3種の**国際ジャーナルに特集号**を組んだ（Journal of Inorganic and Organometallic Polymers and Material Volume 23, issue #1(2013年1月)、Themed Issue on “Coordination Programming: Science of Molecular Superstructures towards Chemical Devices”, Dalton Transactions(2013年12月)、Chemistry Letters（バーチャル特集号、2024年4月号のHighlight Reviewに本領域の総説を下記、その後、班員の論文を順次掲載）。

領域運営：上記のような領域全体の活動をアクティブにかつ効率よく運営するために、領域代表（西原）と事務局（山元）のもとに総括班経費で雇用する**研究支援員**を1名ずつおき、また**領域ホームページの管理運営費**を支援した。

設備等の有効活用と研究費の効果的使用

本領域で購入した500万円以上の領域内共用設備として、高分解能走査型プローブ顕微鏡システム（アジレント・テクノロジー社、26,095,650円、H22年度）西原 寛（A01班、領域代表、東大院理）、一体型高速分子量測定装置（東ソー、6,999,300円、H21年度）竹内正之（A03班、物質材料研究機構）、示差走査熱量計（TAインスツルメンツ社、9,200,000円、H21年度）田中健太郎（A04班、名大院理）を、**ホームページにリストを掲載**し、それをもとに、班員間での機器・設備の共同利用を進めた。

本領域には、**分析、測定、理論を担当する班員**が含まれている。例えば、佐々木（京工繊大）はSPring8でのシンクロトン放射光を利用した有機/高分子薄膜の動的階層構造評価技術として、マイクロビームGISWAXS、時間分解計測システムを開発し、領域内の多くの研究者との共同研究を行った（T. Kambe, R. Sakamoto, K. Hoshiko, K. Takada, Ji-H. Ryu, S. Sasaki, J. Kim, K. Nakazato, M. Takata, H. Nishihara, *J. Am. Chem. Soc.*, **135**, 2462-2465 (2013))。同様に北河（阪大）は理論化学者として、西原、大塩、野尻グループとの共同研究成果を行って論文発表し、研究費の効果的利用に貢献した。

その他、**メーリングリストを班ごとに作成**、**情報交換を活発にできる研究ネットワーク**を強化し、班員間で互いに所有する**装置等の相互利用**ができる状況を作った。

7. 総括班評価者による評価（2ページ程度）

総括班評価者による評価体制や研究領域に対する評価コメントを記述してください。

本領域には総括班評価者7名（板谷謹悟、岡本佳男、北川 進、坂田 誠、谷口 功、山口 兆、吉野勝美）に領域アドバイザー6名（北川 宏、巽 和行、田中晃二、西出宏之、増田秀樹、山下正廣）を加えて、領域の運営、戦略、研究の方向性、各研究の評価や助言をいただいた。ここでは、13名から戴いた評価コメントを各項目ごとにまとめる。

1) 領域の運営について

西原領域代表の優れたリーダーシップのもと、班会議、合同班会議、全体会議、国際会議、若手による会議等が、評価委員、アドバイザー、班友も加わって活発に開催されており、その努力が多数の共同研究論文の発表に繋がったと考えられる<板谷、岡本、谷口、北川宏、西出、増田、山下>。若手の交流を重視した運営は非常に効率よく機能したと思われる<北川進、増田、吉野>。特に、2日間にわたる班会議や合同班会議は、十分な討議の時間を確保することができ、領域の運営にも寄与することができたものと考えている<坂田、増田>。広報活動も熱心に行われ、月二回の定期的なニュースレター配信は、班員の情報共有を充分促し、領域全般の円滑な運営に大きく貢献をしたと思われる<板谷、岡本、坂田、谷口、吉野、北川宏、西出、増田>。総じて、領域の運営は、極めて適切で、効果的であったと判断できる<吉野、谷口>。

2) 研究の成果（領域の設定目的の達成度を含む）について

配位化学を基盤として、分子回路、磁気機能、光機能、触媒機能、生体機能システム等の分子システムの構築等が各班でなされ、それらの成果はそれぞれ一流の国際誌に多数の論文として報告されている<板谷、岡本、谷口、山下>。48名の班員で1013報、一人当たり5.2報という数字はかなりの成果と考えられる。しかも、IF>10の論文数が15%であるということは全体的な質の高さを示している<坂田、増田>。中でも注目すべきは、本領域の国際性を示すと思われる、国際学会での講演数であろう。初年度を除くと、全講演数は年間300件に及び、招待講演数も年平均100件を超えている。これは、本領域の活動が国際的な舞台で行われていたことを示しており、大いに評価できる。その他、特許出願数が43件、受賞した数が196件ということも、本領域の研究成果が高かったことを反映したものとして、高く評価できるものと考えている<坂田、谷口>。これらを総合的に考えれば、領域の研究目標は十分に達成されたと判断できる<板谷、谷口、西出>。特に「配位プログラミング」という全く新しい学問分野を日本で創成した意義は大きい<北川進、北川宏、田中、山下>。

3) 共同研究について

同一研究班の研究員間のもとより、異なる研究班の班員にまたがった共同研究に基づく論文が75件と多数発表されており、領域横断的な研究の推進も極めて活発であったことが、研究成果から明らかであり、共同研究は広くかつ活発に行われたと思われる。また、このことが、極めて質の高い研究成果に繋がったと考えられる<板谷、岡本、坂田、谷口、吉野、北川宏、田中、西出、増田、山下>。

4) 国際活動について

新学術領域研究「配位プログラム」が主体となって、日本国内および国外で数多くの二国間会議（ドイツ、フランス、米国、カナダ、中国）が開催された<板谷、岡本、北川進、谷口、吉野、北川宏、田中、西出、増田、山下>。「配位プログラム」から選出された班員の研究発表に対応して、各国ともその国を代表する研究者が研究発表を行っていた。それらの国際会議を通して各国のトップレベルの研究者に我が国の研究レベルの高さを十二分に認識させたと思われる<谷口、田中>。最も注目すべきは、2014年1月20-22日の三日間、東京大学伊藤国際学術研究センターにて、121人の内外の研究者が参加した本領域の締めくくりとなる国際会議「International Conference on Coordination Programming」が開催されたことである。著名な内外研究者のKeynote Lectureを初め、極めて魅力のあるプログラムの下、

活発な議論が、会場の内外で展開したことが、極めて印象的であった<坂田、山下>。特に領域代表、各班の班長が国際会議の場を利用して、「分子構造体の科学と化学素子の創製」を目指すための“Coordination programming”の概念の普及に勤められ、本プロジェクトを起源として世界に発信されたことは非常に喜ばしいことである<田中、西出、山下>。国際誌特集号(*Dalton Trans, J. Inorg. Organomet. Polym. Mater., Chem. Lett.*)は有効であった<岡本、谷口、西出、増田>。非常に多くの国際会議での発表、多数の特別講演、招待講演を行っており、また受賞、表彰なども受けており、本配位プログラムが大きな成果をあげたことが証明されていると云える<岡本、谷口、吉野>。極めて活発な国際活動が遂行されたと評価できる<岡本、坂田、谷口、山下>。

5) 若手・女性研究者の成長について

多数の女性研究者を含む数多くの若手研究者が研究分担者として参加しており、本領域研究の推進の中で女性研究者、若手研究者の育成にも寄与できたことは高く評価できる<板谷、岡本、坂田、谷口、吉野、北川宏、西出、山下>。本領域での研究活動を通して、今後も女性研究者、若手研究者の参画が期待できる。本領域では様々の会議を通じて研究者間の意見交換が活発に行われたので、この領域に参画した研究者間のネットワーク形成を通して、研究の幅と人脈が大きく広がり、若手研究者は、将来に繋がる極めて貴重な経験を積んだと判断される<板谷、岡本、谷口>。受賞等の実績を見ると、若手研究者および女性研究者の多大の活躍が伺える<坂田、北川宏、増田>。本領域の8名の女性研究者(連携研究者1名を含む)が、12件の受賞をしている<坂田>。合計8名の方が、助教から講師・準教授に昇進されている。本領域の活動が当該分野の発展に寄与し、その結果として多数の若手研究者の成長がみられたことになり、本領域の果たした役割が大きかったことは疑いようのないところである<坂田、北川宏>。

6) 総合評価

配位化学を基盤として種々の金属原子や金属イオンを含む新しい構造体が多数合成されている。機能は多岐にわたっているが、その多くは配位化学の特徴を生かした新規な階層的な構造体の創製によるものであり、本領域が目標とする配位化学に基づく新しい領域の開拓は、十分に達成されている。さらに、これらの機能の化学素子への展開も着実にはかられている<板谷、岡本、谷口、吉野>。現時点で直ちに実用展開できるものは、限られ解決すべき技術的な課題も残っているものの、研究成果は、極めて高い技術シーズに繋がるもので、今後の実用化を見据えた発展を含めて着実な展開の先には、磁気機能、光機能、触媒機能、生体機能等の関する分子レベルでの機能素子化など、幅広い新分野での応用展開が大いに期待できる<谷口>。共同研究の状況と領域の展開に関しても、領域の内外の研究者間の共同研究を活性化することにより、領域の展開を図ってきた<板谷、岡本、坂田、谷口、増田、山下>。国際活動に関しても、関連する国際会議において多くの講演を行っている。さらに、独自の国際会議を企画し、内外の著名な研究者を集め、それらを成功裡に終えるなど、活発な活動を行ってきた<板谷、岡本、坂田、谷口、増田>。若手・女性研究者の成長に関しても、順調な展開を見せてきた<板谷、岡本、坂田、谷口、増田、山下>。以上の状況により、新学術領域研究「配位プログラム」を極めて高く評価するものである<坂田、谷口、北川宏、山下>。この新しい学術領域が学問として体系化され、さらなる拡がり見せることを期待している<谷口、西出>。Coordination programming を基本とする新規化学素子の創製は、次世代の化学が進むべき一つの方向性を示しており、その発展に大きな貢献を行ったと思われる。A<田中>。本領域研究は当初の期待をはるかに超える成果をあげたものと判断する<吉野、北川宏>。多数のメンバーが参加する新領域研究としての意義は高いと判断される<板谷、岡本、谷口>。西原領域総括、各班長の研究グループの運営は大変高く評価される。このため素晴らしい成果がえられたものと考えられる<北川進、吉野>。全体としてハイスコアを与えたい<北川進>。

8. 主な研究成果（発明及び特許を含む）〔研究項目毎または計画研究毎に整理する〕

（3 ページ程度）

新学術領域研究（公募研究含む）の研究課題を元に発表した研究成果（発明及び特許を含む）について、現在から順に発表年次をさかのぼり、図表などを用いて研究項目毎に計画研究・公募研究の順に整理し、具体的に記述してください。なお、領域内の共同研究等による研究成果についてはその旨を記述してください。

A01 班 界面プログラミングによる分子回路システムの構築

計画研究：西原は、「刺激応答分子の創製とその精密配列による化学素子の開発」を推進した。Au、Si 電極表面で多彩な物性・機能を持つレドックス界面固定分子ワイヤを創製し、電子移動現象の解析を行った (*J. Am. Chem. Soc.* 2010)。分子ワイヤを二次元に展開し、 π 共役ニッケラジチオレン錯体等で構成される金属錯体ナノシートを創製した (佐々木、中里との共同研究: *J. Am. Chem. Soc.* 2013)。化学素子への応用として生体コンポーネント、PSI を分子配線した光検出系を開発した (*Chem. Commun.* 2010)。レドックスや磁性と光応答性が連動するフォトクロミック金属錯

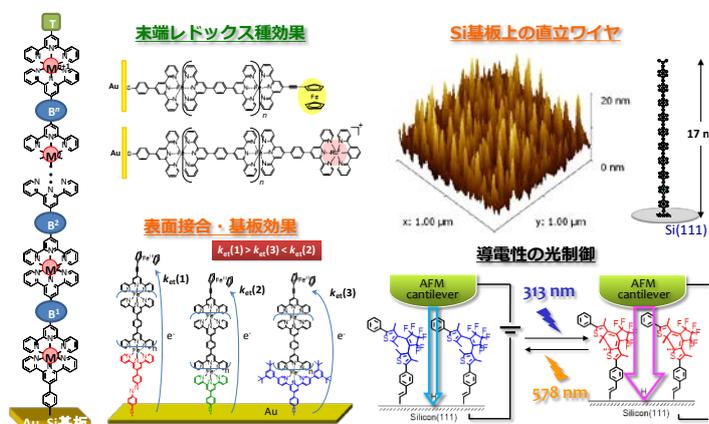


図 8-1. 多彩な物性・機能を持つレドックス界面固定分子ワイヤ創製 (西原)

体等の合成に成功した (*J. Am. Chem. Soc.* 2010)。佐々木は、マイクロビーム GISWAXS 時間分解計測システムや時間分解小角 X 線散乱実験法を確立し、スピンコート成膜過程における有機・高分子薄膜の結晶化挙動の追跡等に成功した (*Dalton Trans.* 2013)。吉本は、基板表面上でのピリジン誘導体の金属配位結合形成と分子レベル可視化に成功した (*Phys. Chem. Chem. Phys.* 2010)。

公募研究：阿部は大環状多核レドックスクラスター錯体の単離、配列化、電子状態の解明を行った (*Dalton Trans.* 2011)。猪股は人口シデロフォア修飾材料を開発し、培養操作なしに選択的に微生物を捕集・検出できる微生物センシングシステムを構築した (*Dalton Trans.* 2013)。大月は人工ピリジン結合亜鉛クロロフィルを開発し、光捕集アンテナを作るための分子集積法の指針を確立した (*J. Am. Chem. Soc.* 2013)。小柳津は有機メディエータが色素増感太陽電池の光電変換効率の向上を実現した (*Angew. Chem. Int. Ed.* 2012)。河合はキラル配位子を有する希土類錯体の円偏光蛍光を利用し、新たな高度偽造防止技術を確立した (*J. Am. Chem. Soc.* 2011)。高見は酸化セリウムナノ結晶の配列複合化を実現した (*ChemCatChem* 2011)。棚瀬は多座ホスフィンで被覆された Pd 8 核錯体の光及び電気化学特性を明らかにした (*Dalton Trans.* 2013)。中川は金属上に形成した熱可塑性高分子グラフト層による電気化学シールド効果を実現した (*Langmuir* 2012)。中島は転写制御タンパク質が示す DNA に対する結合/解離を電気シグナルに変換することに成功した。牧浦は気液界面における配位高分子ナノシートの形成において、界面反応制御によるナノシートサイズの拡大に成功した (*Sci. Rep.* 2013)。邨次は γ -Al₂O₃ 固定化 Ir ダイマー錯体と酸化物表面間の固定化結合が反応活性化にも寄与することを見出した (*Phys. Chem. Chem. Phys.* 2012)。山本はボロンドープ超伝導ダイヤモンドの表面修飾により、超伝導特性の可逆制御を実現した (*phys. status solidi* 2013)。叶は不斉物質のキラリティが測定できる優れた手法を開発した (*BBA Biomembranes* 2013)。

A02 班 クラスタープログラミングによる電子・磁気機能システム構築

計画研究：大塩は、複数の双安定性部位をもつ「多重双安定性金属錯体分子の概念」を一般化し、これを推進した。金属間電子移

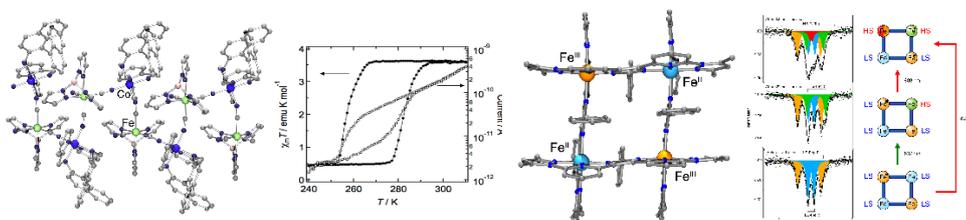


図 8-2. 磁性と伝導性がカップルした [Fe^{III}/Co^{II}] 錯体と選択的光状態変換が可能な [Fe^{II/III}] 錯体 (大塩)

動により磁性と電気伝導性が連動して変換できるシアン化物イオン架橋一次元混合原子価[FeCo]錯体や（野尻との共同研究：*Nat. Chem.* 2012）、光による選択的スピン状態変換を示す混合原子価スピン平衡Fe(II/III)錯体を実現した（速水教授との共同研究：*Nat. Comm.* 2014）。張は σ -フェニレンジアミン鉄(II)錯体が紫外光照射により水素を発生することを見出し、光反応を駆動する触媒分子を設計する新方法を提案した（*J. Am. Chem. Soc.* 2013）。大場はスピン平衡鉄(II)錯体を有する配位高分子において、ゲスト分子を用いた磁氣的転移の制御に成功した（*J. Am. Chem. Soc.* 2013）。

図 8-3. 光による水素発生（張）

公募研究：大久保はコアシェル構造を有するプルシアンブルー類似体を用いて、リチウムイオン電極特性の耐久性の向上に成功した（*J. Am. Chem. Soc.* 2013）。佐藤は光誘起電子移動に基づく可逆な磁性変化を示すシアノ架橋三核鉄コバルト錯体を開発した（速水教授との共同研究：*Angew. Chem. Int. Ed.* 2012）。立間は銀ナノ粒子を用い局在表面プラズモン共鳴に基づく散乱光を多色変化させることに成功した（*Nano Lett.* 2012）。速水は電子状態変換に伴う金属錯体の電気双極子の変化を利用し、スピנקロスオーバー錯体に長鎖アルキル基を導入することにより、強誘電性スピנקロスオーバー金属錯体液晶の開発に成功した（*Eur. J. Inorg. Chem.* 2013）。吉川はポリオキソメタレート（POM）をグラフェン（RGO）上にプログラミングした POM/RGO ナノ複合体を正極活物質とすることにより、大容量リチウム二次電池の作成が可能であることを見出した（*J. Mater. Chem. A* 2014）。

A03 班 超分子プログラミングによるエネルギー・化学変換システム構築

計画研究：山元は独自の dendrimer を利用して分子内のポテンシャル勾配をプログラムした超構造体を構築、金属集積のバリエーションの拡張に成功している。さらに dendrimer のポテンシャル勾配制御により逆電子移動を抑制した新型の電子輸送材料を開発、この新規なポテンシャルプログラム型整流素子により、光電効果の20倍以上の増幅に成功した（*J. Am. Chem. Soc.* 2012）竹内は超分子がリビング的に生成する事を世界で初めて発見し、リビング超分子ポリマーという新物質群を開拓した（*Nature Chem.* 2014）。穂田・吉沢は、芳香環に囲まれたナノサイズの π 電子系空間をもつ超分子構造体への機能分子の集積を実現した（*Angew. Chem. Int. Ed.* 2013）。穂田らは、分子回路路配線に有用な有機金属分子ワイヤやジャンクションを開発した。

公募研究：秋根は複数の金属を意図的に配列して、多段階でのヘリシティの変換を実現、新型の光素子へ期待される（*J. Am. Chem. Soc.* 2013）。内田は触媒機能を示す結晶性複合体の合成に成功した（*Angew. Chem. Int. Ed.* 2010）。小坂田は、フェロセニル基を有する擬ロタキサンとアルキルピリジニウム塩から、温度感応性ゲルを合成した（*J. Am. Chem. Soc.* 2012）。ロタキサン部位の運動性による従来とは異なる機構により光機能をスイッチングすることに成功している。酒井は独自の白金(II)錯体を構築し、史上初のZスキーム光水素発生デバイスとして機能する事を実証した（*Angew. Chem. Int. Ed.*

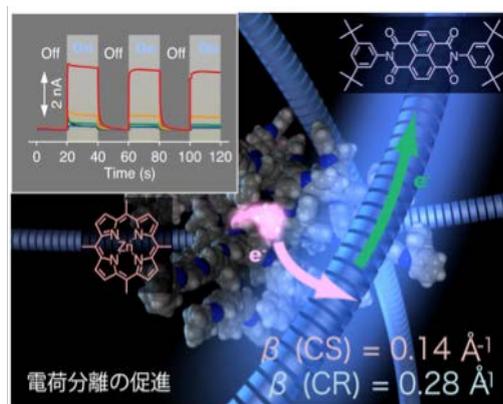


図 8-4. dendrimer を利用した光電変換（山元）

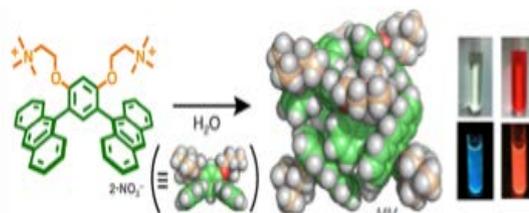


図 8-5. π 電子ナノ空間（穂田・吉沢）

2012）。藤内は種々の有機塩によるゲスト応答発光を示す超分子クラスター多孔性結晶を開発した（*Angew. Chem. Int. Ed.* 2012）。分子やガスの高感度ケモセンサーとしての利用が期待される。中藪は側鎖に光学活性なロタキサンを導入した新規ポリアセチレンを合成、輪成分の距離制御によるらせん構造の

可逆的制御に成功した (*Chem. Commun.* 2012)。樋口はテルピリジンなどからなる架橋配位子と金属イオンのメタロ超分子ポリマーを開発し、これを不揮発性メモリデバイス、エレクトロクロミック素子として組み上げる事にも成功した (*J. Am. Chem. Soc.* 2011)。舟橋は環状オリゴシロキサンを骨格として用いて、リチウムイオンと複合化可能な液晶性半導体の開発に成功した (*Dalton Trans.* 2013)。森内は、核酸塩基の自己組織化に基づく発光スイッチング機能を有する白金(II)錯体の開発に成功した (*Chem. Commun.* 2013)。山田は配位高分子内に酸点を導入することにより伝導度が1000倍以上変化するプロトン伝導体の開発に成功した。燃料電池などのエネルギーデバイスへの応用が期待される (*J. Am. Chem. Soc.* 2011)。

A04 生物化学プログラミングによる化学空間機能システム構築

計画研究：田中は、プログラムした配列・空間配置で組織化した多種多数の金属錯体ユニット間に動的な分子間コミュニケーションを生み出す分子組織化学を展開した。酸塩基による可逆的なスピン相互作用変換を示す超分子的にマルチインターロックしたポルフィリン-フタロシアニン組織や (*Angew. Chem. Int. Ed.* 2012)、ペプチド二重鎖中に金属ポルフィリンを自在配列化した分子組織 (*J. Am. Chem. Soc.* 2014)を構築した。小松は、タンパク質とポリマーの交互積層ナノチューブを構築し、ヒトB型肝炎ウイルスを選択的に補足するシステムを構築した (*J. Am. Chem. Soc.* 2011)。

藤田は、直径が10 nmにも及ぶ大環状金属錯体が酸化還元に基づく可逆なナノチューブ形成を示すことを見出した (*Science* 2014)。

公募研究：井原は、シクロデキストリンと蛍光色素認識を組み合わせ合わせた人工DNAを構築し、DNAの塩基配列プローブとなるシステムを構築した (*Chem. Eur. J.* 2013)。

上野は、人工的に金属錯体を導入した修飾タンパク質からなる多孔性結晶を構築し、長寿命の電荷分離システムの構築に成功した (*Angew. Chem. Int. Ed.* 2011)。

小野田は、apo-ヘムタンパク質に人工リガンドを特異的に挿入して構築した階層型光応答性タンパク質修飾電極を用いたバイオ電極の構築に成功した (*Angew. Chem. Int. Ed.* 2012)。

狩野は、アゾベンゼンにホスフィン配位子を組み込んだ多座配位子を合成し、金属イオンの種類による分子構造スイッチング特性を見出した (*Dalton Trans.* 2012)。

菊地は、¹⁹Fラベル化分子を埋包したメソポーラスシリカを作成し、免疫担当細胞のトラッキングや薬物情報剤のモニタリングに成功した (*Angew. Chem. Int. Ed.* 2014)。

杉本は、モリブデン酵素モデルを構築し、配位原子の相乗効果で原子移動速度が飛躍的に変化することを見出した (*Chem. Commun.* 2013)。

高谷は、金属錯体の自在配列化を目指し、ゲル化特性を持つジペプチドに担持した金属錯体を構築し、その構造やゲル生成メカニズムを明らかにした (*Dalton Trans.* 2013)。

原野は、低毒性の薬剤輸送システムとして有効な水溶性フラレンと si-RNA 複合体を構築した (*Sci. Rep.* 2014)。

古川は、多孔性構造体の結晶サイズをメソスコピック領域まで小さくすることで、分子を取り込んだ状態の構造を「記憶」し、加熱により「消去」可能な、形状記憶ナノ細孔の合成に成功した (*Science* 2013)。

前田は、 π 電子系イオンの組織構造の選択的形成に合わせた分子構造設計モデルを提示した (*Angew. Chem. Int. Ed.* 2010)。

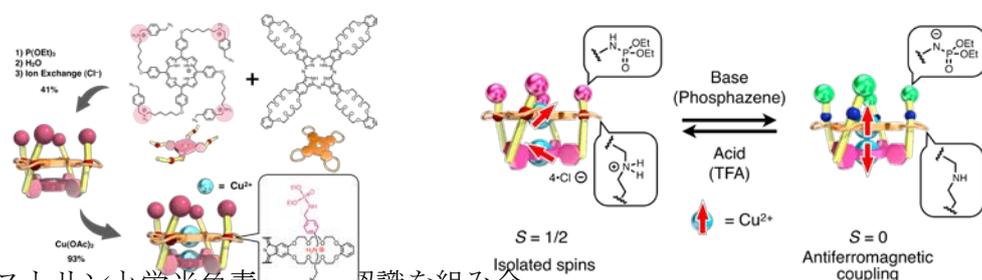


図 8-6. マルチインターロックしたポルフィリン-フタロシアニン組織 (田中)

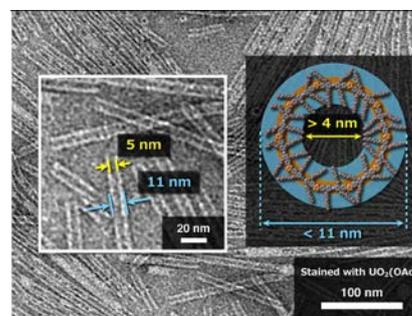


図 8-7. 大環状金属錯体ナノチューブ (藤田)

9. 研究成果の取りまとめ及び公表の状況（主な論文等一覧、ホームページ、公開発表等）（5ページ程度）

新学術領域研究（公募研究含む）の研究課題を元に発表した研究成果（主な論文、書籍、ホームページ、主催シンポジウム等の状況）について具体的に記述してください。論文の場合、現在から順に発表年次をさかのぼり、計画研究・公募研究毎に順に記載し、研究代表者には二重下線、研究分担者には一重下線、連携研究者には点線の下線を付し、corresponding authorには左に*印を付してください。また、一般向けのアウトリーチ活動を行った場合はその内容についても記述してください。

下記リストのうち、高被引用論文（TOP1%）に相当するものを太字で記す。

2014年計画班

1. **Coordination Programming-A Concept for the Creation of Multifunctional Molecular Systems**, *H. Nishihara, *Chem. Lett.* **43**, 388-395 (2014).
2. Photo-electric Signal Conversion by Combination of Electron-Transfer Chain Catalytic Isomerization and Photoisomerization on Benzodimethyldihydropyrenes, M. Kishida, T. Kusamoto, *H. Nishihara, *J. Am. Chem. Soc.* **136**, 4809-4812 (2014).
3. Sequential and Spatial Organization of Metal Complexes inside a Peptide Duplex, Y. Yamada, T. Kubota, M. Nishio, and *K. Tanaka, *J. Am. Chem. Soc.* **136**, 6505-6509 (2014).
4. Programmable spin-state switching in a mixed-valence spin-crossover iron grid, T. Matsumoto, G.N. Newton, T. Shiga, S. Hayami, Y. Matsui, H. Okamoto, R. Kumai, Y. Murakami, *H. Oshio, *Nature Commun.* **5**, 3865/1-3865/8 (2014).
5. Lability-Controlled Syntheses of Heterometallic Clusters, G.N. Newton, K. Mitsumoto, R.-J. Wei, F. Iijima, T. Shiga, H. Nishikawa, *H. Oshio, *Angew. Chem., Int. Ed.* **53**, 2941-2944 (2014).
6. Manipulation of Discrete Nanostructures by Selective Modulation of Noncovalent Forces, T. Fukino, H. Joo, Y. Hisada, M. Obana, H. Yamagishi, T. Hikima, M. Takata, N. Fujita, *T. Aida, *Science* **344**, 499-504 (2014).

2014年公募班

7. **Linkage control between molecular and supramolecular chirality in 21-helical hydrogen-bonded networks using achiral components**, T. Sasaki, I. Hisaki, T. Miyano, N. Tohnai, K. Morimoto, H. Sato, S. Tsuzuki, *M. Miyata, *Nature Commun.* **4**, 1787 (2014).
8. An Antiaromatic Electrode-Active Material Enabling High Capacity and Stable Performance of Rechargeable Batteries, *J.-Y. Shin, T. Yamada, *H. Yoshikawa, *K. Awaga, and *H. Shinokubo, *Angew. Chem. Int. Ed.* **53**, 3096-3101 (2014).

2013年計画班

9. **π -Conjugated Nickel Bisdithiolene Complex Nanosheet**, T. Kambe, R. Sakamoto, K. Hoshiko, K. Takada, M. Miyachi, J. H. Ryu, S. Sasaki, J. Kim, K. Nakazato, M. Takata, *H. Nishihara, *J. Am. Chem. Soc.* **135**, 2462-2465 (2013).
10. Macromolecular semi-rigid nanocavities for cooperative recognition of specific large molecular shapes, T. Imaoka, Y. Kawana, T. Kurokawa, *K. Yamamoto, *Nature Commun.* **4**, 2581 (2013).
11. Magic Number Pt13 and Misshapen Pt12 Clusters: Which One is the Better Catalyst?, T. Imaoka, H. Kitazawa, W.-J. Chun, S. Omura, K. Albrecht, *K. Yamamoto, *J. Am. Chem. Soc.* **135**, 13089-13095 (2013).
12. Triply Stacked Heterogeneous Array of Porphyrins and Phthalocyanine through Stepwise Formation of a Fourfold Rotaxane and an Ionic Complex, Y. Yamada, N. Mihara, S. Shibano, K. Sugimoto, and *K. Tanaka, *J. Am. Chem. Soc.* **135**, 11505-11508 (2013).
13. **Proton-Conductive Magnetic MOFs, {NR₃(CH₂COOH)}[MaIIIMbIII(ox)₃]: Effect of Carboxyl Residue upon Proton Conduction**, *H. Okawa, T. Yamada, M. Maesato, M. Ohba, *H. Kitagawa, *J. Am. Chem. Soc.* **135**, 2256-2262 (2013).
14. **Intermolecular Aminotrifluoromethylation of Alkenes by Visible-Light-Driven Photoredox Catalysis**, Y. Yasu, *T. Koike, *M. Akita,

- Org. Lett 15, 2136-2139 (2013)
15. Non-precious-Metal-Assisted Photochemical Hydrogen Production from ortho-Phenylenediamine, M. Takeshi, *H.-C. Chang, M. Wakizaka, S. Ueno, A. Kobayashi, A. Nakayama, T. Tetsuya, *M. Kato, *J. Am. Chem. Soc.* **135**, 8646-8654 (2013).
16. Stimuli-responsive Folding and Unfolding of a Polymer Bearing Cerium(IV)Bis(porphyrinate)s Multiple Joints: Mechano-imitation of an Action of a Folding Ruler, M. Shibata, S. Tanaka, T. Ikeda, *S. Shinkai, S. Ogi, *M. Takeuchi, *Angew. Chem. Int. Ed.* **52**, 397-400 (2013).

2013 年公募班

17. **Shape-Memory Nanopores Induced in Coordination Frameworks by Crystal Downsizing**, Y. Sakata, *S. Furukawa, M. Kondo, K. Hirai, N. Horike, Y. Takashima, H. Uehara, N. Louvain, M. Meilikhov, T. Tsuruoka, S. Isoda, W. Kosaka, O. Sakata, *S. Kitagawa, *Science* **339**, 193-196 (2013).
18. A light-induced spin crossover actuated single-chain magnet, *T. Liu, H. Zheng, S. Kang, Y. Shiota, S. Hayami, M. Mito, O. Sato, K. Yoshizawa, S. Kanegawa C.Y. Duan, *Nature Commun.* **4**, 7 (2013).
19. Carrier Concentration Dependent Conduction in Insulator-Doped Donor/Acceptor Chain Compounds, M. Nishio, N. Hoshino, W. Kosaka, T. Akutagawa, *H. Miyasaka, *J. Am. Chem. Soc.* **135**, 17715-17718 (2013).
20. Stepwise Helicity Inversions by Multisequential Metal Exchange, *S. Akine, S. Sairenji, T. Taniguchi, *T. Nabeshima, *J. Am. Chem. Soc.* **135**, 12948-12951 (2013).
21. Double-Decker-Type Dinuclear Nickel Catalyst for Olefin Polymerization: Efficient Incorporation of Functional Comonomers, *D. Takeuchi, Y. Chiba, S. Takano, *K. Osakada, *Angew. Chem., Int. Ed.* **52**, 12536-12540 (2013).

2012 年計画班

22. Reversible Copper(II)/(I) Electrochemical Potential Switching Driven by Visible Light-Induced Coordinated Ring Rotation, M. Nishikawa, K. Nomoto, *S. Kume, *H. Nishihara, *J. Am. Chem. Soc.* **134**, 10543-10553 (2012).
23. A New Method to Generate Arene-Terminated Si(111) & Ge(111) Surfaces via a Palladium-Catalyzed Arylation Reaction, *Y. Yamanoi, J. Sendo, T. Kobayashi, H. Maeda, Y. Yabusaki, M. Miyachi, R. Sakamoto, *H. Nishihara, *J. Am. Chem. Soc.* **134**, 20433-20439 (2012).
24. Three-way switching in a cyanide-bridged [CoFe] chain, N. Hoshino, F. Iijima, G. N. Newton, N. Yoshida, T. Shiga, H. Nojiri, A. Nakao, R. Kumai, Y. Murakami *H. Oshio, *Nat. Chem.* **4**, 921-926 (2012).
25. A Light-Induced Phase Exhibiting Slow Magnetic Relaxation in a Cyanide-Bridged [Fe₄Co₂] complex, M. Nihei, Y. Okamoto, Y. Sekine, N. Hoshino, T. Shiga, I. P.-C. Liu, *H. Oshio, *Angew. Chem. Int. Ed.* **51**, 6361-6364 (2012).
26. Enhancing the Photoelectric Effect with a Potential-Programmed Molecular Rectifier, T. Imaoka, H. Ueda, *K. Yamamoto, *J. Am. Chem. Soc.* **134**, 8412-8415 (2012).
27. Switchable Intermolecular Communication in a Four-Fold Rotaxane, Y. Yamada, M. Okamoto, K. Furukawa, T. Kato, *K. Tanaka, *Angew. Chem. Int. Ed.* **51**, 709-713 (2012).
28. **Three-component Oxytrifluoromethylation of Alkenes: Highly Efficient and Regioselective Difunctionalization of C=C Bonds Mediated by Photoredox Catalysts**, Y. Yasu, *T. Koike, *M. Akita, *Angew. Chem. Int. Ed.* **51**, 9567-9571 (2012).

2012 年公募班

29. **Visible Light-induced Water Oxidation Catalyzed by Molybdenum-based Polyoxometalates with Mono- and Dicobalt(III) Cores as Oxygen-Evolving Centers**, S. Tanaka, M. Annaka and *K. Sakai, *Chem. Commun.* **48**, 1653-1655 (2012)

30. Photocurrent Generation of Hierarchical Zinc-substituted Hemoprotein Assemblies Immobilized on Gold Electrode, A. Onoda, Y. Kakikura, T. Uematsu, S. Kuwabata, *T. Hayashi, *Angew. Chem. Int. Ed.* **51**, 2628-2631 (2012).
31. Heterogeneous nucleation of organic crystals mediated by single-molecule templates, K. Harano, T. Homma, Y. Niimi, M. Koshino, K. Suenaga, L. Leibler, *E. Nakamura, *Nat. Mater.* **11**, 877-881 (2012).
32. Nitroxide Radical Molecules as Highly Reactive Redox Mediators in Dye-sensitized Solar Cells, F. Kato, A. Kikuchi, T. Okuyama, K. Oyaizu, *H. Nishide, *Angew. Chem. Int. Ed.* **124**, 10324-10327 (2012).
33. Efficient Oxidative Cycloreversion Reaction of Photochromic Dithiazolylthiazole, T. Nakashima, Y. Kajiki, S. Fukumoto, M. Taguchi, S. Nagao, S. Hirota, *T. Kawai, *J. Am. Chem. Soc.* **134**, 19877-19883 (2012).
34. Anodic Oxidation on a Boron-Doped Diamond Electrode Mediated by Methoxy Radicals, T. Sumi, T. Saitoh, K. Natsui, T. Yamamoto, M. Atobe, *Y. Einaga, *S. Nishiyama, *Angew. Chem. Int. Ed.* **51**, 5443-5446 (2012).

2011 年計画班

35. **Controlled Intramolecular Electron Transfers in Cyanide-bridged Molecular Squares by Chemical Modifications and External Stimuli**, M. Nihei, Y. Sekine, N. Suganami, K. Nakazawa, A. Nakao, H. Nakao, Y. Murakami, *H. Oshio, *J. Am. Chem. Soc.* **133**, 3592-3600 (2011).
36. A Uniform Bimetallic Rhodium/Iron Nanoparticle Catalyst for the Hydrogenation of Olefins and Nitroarenes, I. Nakamura, Y. Yamanoi, T. Imaoka, *K. Yamamoto, *H. Nishihara, *Angew. Chem. Int. Ed.* **50**, 5830-5833 (2011).
37. Reversible On/Off Conductance Switching of Single Diarylethene Immobilized on a Silicon Surface, K. Uchida, Y. Yamanoi, T. Yonezawa, *H. Nishihara, *J. Am. Chem. Soc.* **133**, 9239-9241 (2011).
38. Double Lactonization in Triarylamine-Conjugated Dimethyl Diethynylfumarate: Formation of Intensely Colored and Luminescent Quadrupolar Molecules Including a Missing Structural Isomer of Pechmann Dye, M. Hayashi, F. Toshimitsu, R. Sakamoto, H. Nishihara, *J. Am. Chem. Soc.* **133**, 14518-14521 (2011).

2011 年公募班

39. **Wide Control of Proton Conductivity in Porous Coordination Polymers**, A. Shigematsu, T. Yamada, *H. Kitagawa, *J. Am. Chem. Soc.* **133**, 2034-2036 (2011).
40. **Chemical-Stimuli-Controllable Circularly Polarized Luminescence from Anion-Responsive π -Conjugated Molecules**, *H. Maeda, Y. Bando, K. Shimomura, I. Yamada, M. Naito, K. Nobusawa, H. Tsumatori, T. Kawai, *J. Am. Chem. Soc.* **133**, 9266-9269 (2011).
41. Extra-Low Temperature Oxygen Storage Capacity of CeO₂ Nanocrystals with Cubic Facets, J. Zhang, H. Kumagai, K. Yamamura, S. Ohara, S. Takami, A. Morikawa, H. Shinjoh, K. Kaneko, *T. Adschiri, *A. Suda, *Nano Letters*, **11**, 361-364 (2011).
42. Tetrapalladium Complex with Bridging Germylene Ligands. Structural Change of the Planar Pd₄Ge₃ Core, M. Tanabe, N. Ishikawa, M. Chiba, T. Ide, *K. Osakada, T. Tanase, *J. Am. Chem. Soc.* **133**, 18598-18601 (2011).
43. Highly Crystalline Nanofilm by Layering of Porphyrin Metal–Organic Framework Sheets, S. Motoyama, *R. Makiura, O. Sakata, *H. Kitagawa, *J. Am. Chem. Soc.* **133**, 5640-5643 (2011).
44. Redox-Controlled Magnetic {Mn₁₃} Keggin Systems, G. N. Newton, S. Yamashita, K. Hasumi, J. Matsuno, N. Yoshida, M. Nihei, T. Shiga, M. Nakano, H. Nojiri, W. Wernsdorfer, *H. Oshio, *Angew. Chem., Int. Ed.* **50**, 5716-5720 (2011).
45. Tuning of Nonvolatile Bipolar Memristive Switching in Co(III) Polymer with an Extended Azo Aromatic Ligand, A. Bandyopadhyay, S. Sahu, *M. Higuchi, *J. Am. Chem. Soc.* **133**, 1168-1171 (2011).

2010 年計画班

46. Surface Junction Effects on the Electron Conduction of Molecular Wires, T. Kurita, Y. Nishimori, F. Toshimitsu, S. Muratsugu, S. Kume, *H. Nishihara,

- J. Am. Chem. Soc.* **132**, 4524-4525 (2010).
47. Cyclization of TEMPO Radicals Bound to Metalladithiolene Induced by SOMO-HOMO Energy-Level Conversion, T. Kusamoto, S. Kume, *H. Nishihara, *Angew. Chem. Int. Ed.* **49**, 529-531 (2010).
48. Double Protonation of 1,5-Bis(triarylaminoethynyl)anthraquinone To Form a Paramagnetic Pentacyclic Dipyrylium Salt, K. P. Rao, T. Kusamoto, F. Toshimitsu, K. Inayoshi, S. Kume, R. Sakamoto, *H. Nishihara, *J. Am. Chem. Soc.* **132**, 12472-12479 (2010).
49. Controlled Storage of Ferrocene Derivatives as Redox-Active Molecules in Dendrimers, Y. Ochi, M. Suzuki, T. Imaoka, M. Murata, H. Nishihara, Y. Einaga, *K. Yamamoto, *J. Am. Chem. Soc.* **132**, 5061-5069 (2010).
50. Multiple Bistability and Tristability with Dual Spin-State Conversions in [Fe(dpp)₂][Ni(mnt)₂]₂ · MeNO₂, M. Nihei, H. Tahira, N. Takahashi, Y. Otake, Y. Yamamura, K. Saito, *H. Oshio, *J. Am. Chem. Soc.* **132**, 3553-3560 (2010).
51. Oriented Salts: Dimension-Controlled Charge-by-Charge Assemblies from Planar Receptor-Anion Complexes, Y. Haketa, S. Sasaki, N. Ohta, H. Masunaga, H. Ogawa, N. Mizuno, F. Araoka, H. Takezoe, *H. Maeda, *Angew. Chem. Int. Ed.* **49**, 10079-10083 (2010).
52. Molecular Capture in Protein Nanotubes, X. Qu, *T. Komatsu, *ACS Nano* **4**, 563-573 (2010).

2010 年公募班

53. Nanostructured Liquid Crystals Combining Ionic and Electronic Functions, S. Yazaki, M. Funahashi, J. Kagimoto, H. Ohno, *T. Kato, *J. Am. Chem. Soc.*, **132**, 7702-7708 (2010).
54. Creation of Type 1 Blue Copper Site within a de Novo Coiled-Coil Protein Scaffold, D. Siga, D. Nakane, T. Inomata, Y. Funahashi, H. Masuda, A. Kikuchi, M. Oda, M. Noda, S. Uchiyama, K. Fukui, K. Kanaori, K. Tajima, Y. Takano, H. Nakamura, *T. Tanaka, *J. Am. Chem. Soc.* **132**, 18191-18198 (2010).
55. Photoinduced Metastable-to-Metal Charge Transfer toward Single-Chain Magnet, Tao Liu, Yan-Juan Zhang, S. Kanegawa, *O. Sato, *J. Am. Chem. Soc.* **132**, 8250-8251 (2010).
56. Zeotype Organic-Inorganic Ionic Crystals by Facile Cation-Exchange and the Controllable Sorption Properties, S. Uchida, R. Eguchi, *N. Mizuno, *Angew. Chem. Int. Ed.* **49**, 9930-9934 (2010).
57. Photocontrolled Compound Release System Using Caged Antimicrobial Peptide, S. Mizukami, M. Hosoda, T. Satake, S. Okada, Y. Hori, T. Furuta, *K. Kikuchi, *J. Am. Chem. Soc.* **132**, 9524-9525 (2010).

2009 年計画班

58. Size-specific catalytic activity of platinum clusters enhances oxygen reduction reactions, *K. Yamamoto, T. Imaoka, W. Chun, O. Enoki, H. Katoh, M. Takenaga, A. Sonoi, *Nature Chem.* **1**, 397-402 (2009).
59. Counterion-Dependent Valence Tautomerization of Ferrocenyl-Conjugated Pyrylium Salts, M. Kondo, M. Uchikawa, K. Namiki, W.-W. Zhang, S. Kume, E. Nishibori, H. Suwa, S. Aoyagi, M. Sakata, M. Murata, Y. Kobayashi, *H. Nishihara, *J. Am. Chem. Soc.* **31**, 12112-12124 (2009).

他 954 件

アウトリーチ活動について

2012/12/8 平成 24 年度日本化学会関東支部群馬地区地域懇談会

「配位プログラミングによる光・電子機能分子ネットワークの創製—異分野研究連携の楽しみ—」西原 寛

2013/7/24 東大理学部 高校生のための春休み講座 2013

「ケミカルデバイス～分子の積み木細工で光や電子を操る～」西原 寛

2012/6/26 愛知県立明和高等学校 平成 24 年度 SSH 理科特別講座

「分子組織をプログラムする」田中健太郎

2014/3/17 第7回日本化学連合シンポジウム
「化学コミュニティのビジョンをとらえる」山元公寿
その他多数

主催した学会 国際学会

2014/1/20-22 International Conference on Coordination Programming (第10回全体会議、公開講演会を兼ねる) (伊藤国際学術研究センター、東大、東京)

2013/12/15-17 配位プログラム 第3回若手国際シンポジウム NZ-Japan Symposium on Supramolecular Nanomaterials (Queenstown, New Zealand)

2013/11/24-28 Japan-France Coordination Chemistry Symposium (奈良)

2013/6/14-15 分子研研究会「日中合同若手シンポジウムー革新的配位材料」(分子研、岡崎)

2012/10/25-27 Japan-Germany Bilateral Meeting on Coordination Programming (Münster, Germany)

2012/8/13-14 Japan-China Cluster Meeting (福岡)

2012/5/13-16 配位プログラム 第2回若手国際シンポジウム Canada-Japan Joint Symposium on Supramolecular Nanomaterials Science (Whistler, Canada)

2012/4/16-21 12th Eurasia Conference on Chemical Sciences, Mini Symposium "Coordination Programming" (Corfu, Greece)

2011/8/14-17 14th IUPAC International Symposium on Macromolecular Complexes (MMC-14) "Coordination Programming" (Helsinki, Finland)

2011/6/28-7/2 France-Japan Symposium on Coordination Chemistry (Rennes, France)

2011/6/16-19 配位プログラム 第1回若手国際シンポジウム The 1st China-Japan Joint Inorganic Chemistry Symposium for Young Scientist: Supramolecular Science and Nanomaterials (Nanjing, China)

2011/2/10-12 3rd Japan-Korea Joint Symposium on Coordination Chemistry (沖縄)

2010/12/15-20 Pacificchem 2010 (Honolulu, USA)
Symposium ID: #187 "Electron Transfer and Electrochemistry of Transition Metal Containing Inorganic and Organometallic Materials"
Symposium ID: #82 "Hybrid Conjugated Polymer Materials"

2010/10/6-10 11th Eurasia Conference on Chemical Sciences (EuAsCS-11) "Coordination Programming – Science of Molecular Superstructures" (Dead sea, Jordan)

国内学会

2013/6/10-11 第9回全体会議 (東京)

2013/1/28-29 第8回全体会議、第4回公開講演会 (つくば)

2012/12/20-21 若手合同シンポジウム「配位プログラム」×「融合マテリアル」(東京)

2012/6/4,5 第7回全体会議 (東京)

2012/2/2-3 第6回全体会議、公開講演会 (横浜)

2011/6/20,21 第5回全体会議 (東京)

2011/5/20,21 第1回若手講演会 (東京)

2011/2/4,5 第4回全体会議、公開講演会 (名古屋)

2010/6/4,5 第3回全体会議 (東京)

2009/1/18,19 第2回全体会議、公開講演会 (つくば国際会議場)

2009/10/10 第1回全体会議 (東京大学)

配位プログラミングホームページ : <http://coord-prog.chem.nagoya-u.ac.jp/>

コンテンツ : 日本語、フランス語、韓国語、中国語 ニュースレター : 和文、英文

10. 当該学問分野及び関連学問分野への貢献度（1 ページ程度）

研究領域の研究成果が、当該学問分野や関連分野に与えたインパクトや波及効果などについて記述してください。

国際会議・国内会議等によるインパクトや波及効果：国内外会議等で新概念「配位プログラミング」“Coordination Programming”を国内外で広めるための施策を行った。まず、相手国を絞った二国間会議として、日韓(2010)、日仏(2011, 2013)、日中(2012)、日独(2012)の各シンポジウムを開催した。特にMünsterで開催した日独会議は**ドイツ化学会のニュース**として報道された。また、大きな国際会議のプログラムに“Coordination Programming”のシンポジウムを企画、実行した。例えば、11th Eurasia Conference “Coordination Programming - Science of Molecular Superstructures” (Jordan, 2010), 14th IUPAC International Symposium on Macromolecular Complexes, Session: Coordination Programming (Helsinki, Finland, 2011), 12th Eurasia Conference on Chemical Sciences, Mini symposium “Coordination Programming” (Corfu, Greece, 2012)である。さらに国内においても、日本化学会や高分子学会等で「配位プログラミング」をテーマにしたシンポジウムを行った。特に、2013年3月に**応用物理学会**でシンポジウムプログラム構築された精密分子デバイス—単分子系からメゾスコピック系まで—を開催し、関連学問分野の研究者との活発な意見交換を行った。

論文によるインパクトや波及効果：48名の班員により1013報の論文が印刷され、**班員1人あたり1年間で平均5.2報**の論文を報告した(表10-1)。このようにアクティビティー極めて高く、幅広く成果を発信できた事は、1つの新しい領域の形成に貢献したと考えている。トムソンロイターが集計する全世界の科学雑誌に占める**IF10以上**の割合(159/8471=1.88%)に比べ、本領域内でのIF10以上雑誌の割合は、領域では15.4%と**10倍近い値**を示している。さらに領域内で出版された論文の被引用回数を調査した結果、**TOP 1%の高い被引用回数を持つ論文が、23報、TOP10%が181報も報告されている。領域内ではTOP 1%の高被引用論文が2.2%も存在しており、倍以上高い割合である。**このように高質のジャーナルに注目される高質の論文を数多く出版できた事実は、研究領域から発信した研究成果が研究の最先端に位置しており、当該学問分野や関連分野に大きなインパクトと波及効果を与えたものと考えている。*Dalton Transactions* 誌や *Chemistry Letters* 誌に**配位プログラミングの特集**が掲載できたことも、新しい領域として認められたことを示している。

なお、**共同研究論文が全体の1割弱**を占めており、領域での密接な連携の成果を示すものであり、本領域が人的ネットワークの形成に貢献できたことを示す成果である。特に**若手研究者らで形成された人的ネットワーク**は、彼らの将来にわたって大きな財産になるもので、今後若手研究者が担っていく錯体化学の分野の発展に貢献できたものと考えている。

表10-1. 班員の研究成果

	原著論文	総説・解説	著書	国際会議 発表	国内講演 発表	特許出願	報道	表紙掲載	受賞	共同論文
21年度	47	15	15	60	89	0	6	5	13	0
22年度	210	39	19	305	398	12	11	10	41	2
23年度	231	35	16	233	532	13	1	16	32	24
24年度	225	39	22	318	508	11	24	22	47	20
25年度	300	46	26	350	579	7	11	24	63	29
計	1,013	174	98	1,266	2,106	43	53	77	196	75