研究活動に関する不正行為(改ざん・捏造) の認定について

- I. 経緯
- ||. 調査専門委員会の調査方法
- |||. 調査専門委員会の調査と認定
- Ⅳ. 公正研究委員会の判定

1. 経緯

- 令和2年(2020年)8月17日
 - 伊丹健一郎教授

(トランスフォーマティブ生命分子研究所(ITbM))

伊藤英人准教授

(大学院理学研究科)

両人が責任著者である科学論文において、一部 のデータが捏造された疑いがある旨の申立て

- 令和2年(2020年)8月18日 「名古屋大学における研究上の不正行為に関す る取扱規程」に基づき予備調査を実施
- 令和2年(2020年)9月2日 公正研究委員会のもとに調査専門委員会を設置し、令和2年9月30日~令和3年8月5日まで 本調査を実施

- 令和3年(2021年)2月26日 本調査の進行とともに研究不正の嫌疑は様々な データに拡大
- 令和3年(2021年)5月31日 調査対象論文や調査対象者を拡大したことに伴い、調査専門委員会委員も増員
- 令和3年(2021年)11月29日 調査専門委員会の調査結果をもとに、公正研究 委員会判定をまとめる
- 令和4年(2022年)1月18日 伊丹教授及び伊藤准教授から異議申立て 不服審査委員会において再審理なしの判定と、 判定文記述を一部変更を決定
- 令和4年(2022年)2月1日 公正研究委員会判定が確定

I-1. 調査専門委員会

阿波賀 邦夫(名古屋大学大学院理学研究科教授) 委員長(内部委員)

内部委員 忍久保 洋 (名古屋大学大学院工学研究科教授)

山本 浩史 (自然科学研究機構分子科学研究所教授)(令和3年(2020年)5月 内部委員

30日までは外部委員として参加)

坂口 浩司 (京都大学エネルギー理工学研究所教授)(令和3年(2020年)5月 内部委員

31日から参加)

(愛知工業大学工学部教授) 外部委員 森田 靖

外部委員 難波 孝一(森・濱田松本法律事務所客員弁護士)

北 和尚 (森・濱田松本法律事務所法人シニア・アソシエイト)(令和3年(2021

年) 5月30日までは調査補助者。5月31日から外部委員として参加。)

(京都大学名誉教授)(令和3年(2021年)5月31日から参加) 野田亮

上垣外 正己 (名古屋大学大学院工学研究科教授)(令和3年(2021年)3月2

日から参加)

調査補助者※ 大野 雄高 (名古屋大学未来材料・システム研究所教授)(令和3年(2021年)3

月4日から参加)

※調査専門委員会の調査について、専門的知見から補助する者

外部委員

外部委員

調査補助者※

- I-2. 調査対象者 A元大学院生に加えて、調査対象論文において、自立して研究を行った研究者
- A 元大学院生 (被申立者)伊丹研究室の元学生 2020年3月に学位取得 第一著者(Nature誌、JACS誌、JOC誌、Synlett誌)共著者(ACS Nano誌)
- 伊丹 健一郎 (申立者)名古屋大学トランスフォーマティブ生命分子研究所 教授 責任著者(Nature誌、JACS誌、ACS Nano誌、JOC誌、Synlett誌)
- 伊藤 英人 (申立者)名古屋大学大学院理学研究科 准教授 責任著者(Nature誌、JACS誌、ACS Nano誌、JOC誌)共著者(Synlett誌)
- B 名古屋大学大学院理学研究科 元博士研究員・元特任助教 第一著者(ACS Nano誌) 共著者(Nature誌、JACS誌、JOC誌)
- C 名古屋大学大学院理学研究科 元特任准教授 責任著者(ACS Nano誌) 共著者(Nature誌、JACS誌)
- D 名古屋大学物質科学国際研究センター元助教、ERATO伊丹プロジェクト 元グループリーダー・研究総括補佐 共著者(Synlett誌)

I-3. 調査対象論文

英文学術誌

● A元大学院生が著者となったすべての論文

- 英文誌5を除き、著者の判断により撤回/修正あるいは撤回申請中
- 1. "Living annulative π-extension polymerization for graphene nanoribbon synthesis" *Nature*, 571, 387-391 (2019). (「Nature論文」と略記)
- 2. "Step-Growth Annulative π-Extension Polymerization for Synthesis of Cove-Type Graphene Nanoribbons" *J. Am. Chem. Soc.*, 142, 1686-1691 (2020). (「JACS論文」と略記)
- 3. "Graphene Nanoribbon Dielectric Passivation Layers for Graphene Electronics" ACS Appl. Nano Mater., 2, 4825-4831 (2019). (「ACS Nano論文」と略記)
- 4. "A Quest for Structurally Uniform Graphene Nanoribbons: Synthesis, Properties, and Applications" *J. Org. Chem.*, 85, 4-33 (2020). (「JOC論文」と略記)
- 5. "Helically Twisted Tetracene: Synthesis, Crystal Structure, and Photophysical Properties of Hexabenzo [a,c,fg,j,l,op] tetracene"
 Synlett, 27, 2081-2084 (2016). (「Synlett論文」と略記)

和文学術誌

- 1. 「研究物語 世界初! グラフェンナノリボンの完全精密合成: 8年間の集大成「リビングAPEX重合」の実現と研究裏」 *化学*, 75, 39-44 (2020).
- 2. 「縮環 π 拡張(APEX)反応による多環芳香族化合物の精密合成」 有機合成化学協会誌, 78, 671-682 (2020).

I-4 調査した疑義

- 1. 研究情報の喪失
- 2. 各論文における疑義
 - (i) Nature論文: SECチャートの捏造、IRスペクトルの捏造、Ramanスペクトルの捏造、MALDI-TOF/MSデータの捏造、紫外・可視吸収スペクトルの捏造、発光スペクトルの捏造。
 - (ii) JACS論文:NMRスペクトルの改ざん/捏造、SECチャートの捏造、IRスペクトルの捏造、MALDI-TOF/MSデータの捏造。
 - (iii) ACS Nano論文:SECチャートの捏造、1H-NMRスペクトルの改ざん/捏造、IRスペクトルの捏造。
 - (iv) その他の調査対象論文: 疑義は申し立てられていないが、不正がないことの確認のために調査
- 3. HPLCデータのすり替え
- 4. Nature論文におけるモノマー分子の同定の誤り
- 5. 質量分析測定試料に関する研究不正の疑い

||. 調査専門委員会の調査方法

1. 申立の吟味

伊丹教授および伊藤准教授よりなされた申し立て(計6回)を精査

2. 投稿論文精査

調査対象論文に掲載されているすべての図表データを評価 Nature論文については、編集者と責任著者のやり取りについても調査

3. データファイル精査

伊丹研究室共用である Dropbox および Fujixerox プリンター 化学測定機器室や伊丹研究室の測定機器に付属するパソコンに残されていたデータ A元大学院生に研究室から貸与した MacBookPro および本人が提出した USB A元大学院生が伊丹教授および伊藤准教授に提出した MALDI-TOF/MSファイル

4. 質問状の送付および回答の精査

伊丹教授および伊藤准教授に対して12回、A元大学院生に対して2回など

- 5. 関係者へのヒアリング
- 6. 現地調査と MALDI-TOF/MS の依頼測定
- 7. 画像データの依頼評価

|||. 調査専門委員会の調査と認定

Ⅲ-1. 研究情報の喪失について

事実

A元大学院生の実験ノートや、一部の実験データの喪失

A元大学院生の主張

研究室プリンターでスキャンして pdf ファイルを作成し、USB に直接保存した後に、研究室貸し出しの PC を介して dropbox に upload した。

調査

A元大学院生から提出された、実験ノートのコピーを一時保存したとされる USB 3点の保存履歴

研究室プリンターにおけるスキャン履歴

伊丹研究室ルール

- 卒業時には実験の生データや研究 試料を担当スタッフ(A元大学院生 の場合は伊藤准教授)に引き継ぐ。
- 実験ノートは、紙媒体の現物を残すか、ノートをスキャンして pdf ファイルを作成し、研究室スタッフに引き継ぐ。なお、スキャン後には、スタッフの許可を得たうえでノートの現物廃棄が認められていた。

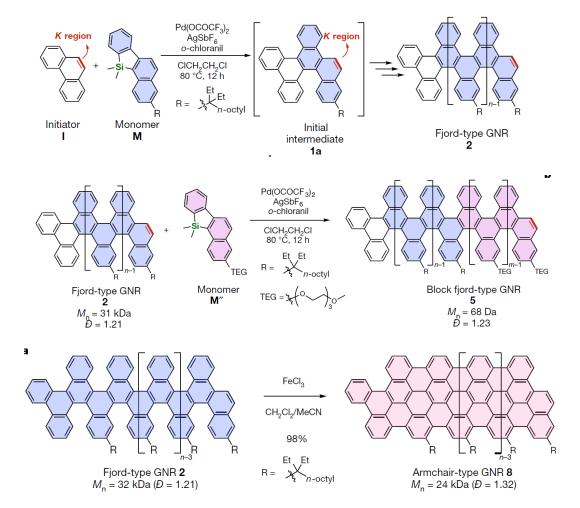
認定

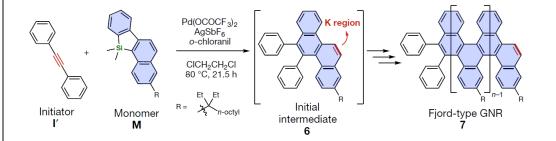
- A元大学院生の主張を裏付ける証拠はなく、同元院生が研究室ルールに反して実験ノートを一方的に破棄
- 研究不正隠ぺいを目的とした可能性が高い

Ⅲ-2. 各論文における疑義について

1. Nature論文について

■ 研究内容





- ・ GNR(グラフェンナノリボン)のボトムアップ合成
- ・具体的には、開始剤分子 | とモノマー分子 M を用いた APEX重合(I-M-M-M-M-…)による フィヨルド型 GNRの 合成が報告されている
- ・実験データとしては、SEC チャート、IR および Raman スペクトル、紫外・可視吸収および蛍光スペクトル、STM および AFM、MALDI-TOF/MS
- ・分子幅と分子長においても均一な試料が得られたことが 報告されている

■ 各著者の役割

A元大学院生(第一著者)

- ・物質合成から試料同定に至るほとんどすべての実験を担当
- ・初稿を作成

F元大学院生(共著者)

・2018年度理学部4年生で、A元大学院生を研究室内メンターとして、GNR合成実験とそのSEC測定を実施

伊藤准教授(責任著者)

- ・ A元大学院生の実験について助言・監督
- 実験の生データのチェック
- ・ A元大学院生とともに初稿に基づいて論文原稿を作成

伊丹教授(責任著者)

- ・実験データを確認しつつ、研究全体を統括
- A元大学院生および伊藤准教授と議論しながら最終稿を作成

B元博士研究員とC元特任准教授を含むその他の著者(共著者)

・ AFMおよびSTM測定と物性データに関する議論を担当

■ 研究不正の認定

- ・明らかな研究不正が含まれる図の枚数 10
- ・明らかな研究不正が含まれるパネルの枚数 34
- ・SECチャート、IRおよびRamanスペクトル、紫外・可視吸収および蛍光スペクトル、MALDI-TOF/MSのデータにおいて、A元大学院生による明らかな捏造が見られる。
- ・STMおよびAFMデータ自体に不正はなく、B元博士研究員およびC元特任准教授の研究不正への関与は認定できない。
- ・研究不正ではないが、GNRのモノマー物質Mの分子構造が 論文に記載されているものとは異なる。

表中の「分類」

S: 化学反応式を記したスキームなど

T:表など

SEC: SECチャート

TF:分子量の変換など、表から作成した図など

IR: IRスペクトル

UV-Vis: 紫外・可視吸収スペクトル

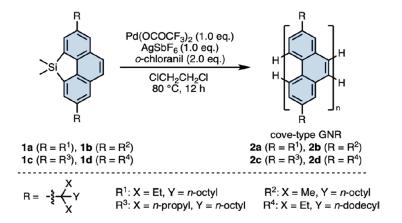
E: 発光スペクトル

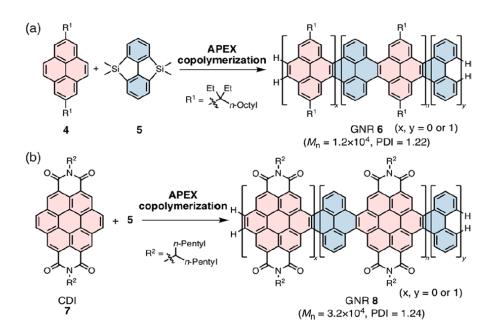
Raman: Ramanスペクトル MS: MALDI-TOF/MSデータ H-NMR: ¹H-NMRスペクトル C-NMR: ¹³C-NMRスペクトル

表1 Nature 論文に見いだされた研究不正							
図番号とパネル	/名	試料名	分類	不正の態様			
Fig. 4	b	GNR 2	T	捏造			
	С	GNR 2	SEC	捏造			
Fig. 1	d	GNR 2	TF	捏造			
	f	GNR 2	IR	捏造			
	а	GNR 5	S	捏造			
	b	GNR 2, GNR 5	SEC	捏造			
Fig. 3	С	GNR 5	S	捏造			
	d	GNR 5	SEC	捏造			
	f	GNR 7	T	捏造			
	а	GNR 8	S	捏造			
Fig. 4	b	GNR 8	T	捏造			
	С	GNR 8	IR	捏造			
	а	GNR 2	MS	捏造			
Ev Doto Fig. 1	b	GNR 2	T	捏造			
Ex. Data Fig. 1	С	GNR 2	S	捏造			
	d	GNR 2	SEC	捏造			
Ex. Data Fig. 4	a	GNR 5	IR	捏造			
	a	GNR 7	SEC	捏造			
Ex. Data Fig. 5	b	GNR 7	TF	捏造			
EX. Data Fig. 5	d	GNR 7	IR	捏造			
	е	GNR 7	Raman	捏造			
Ev Doto Fig 6	а	GNR 7	MS	捏造			
Ex. Data Fig. 6	b	GNR 7	T	捏造			
	а	GNR 7	MS	捏造			
	b	GNR 7	MS	捏造			
Ev Doto Fig. 7	С	GNR 7	MS	捏造			
Ex. Data Fig. 7	d	GNR 7	MS	捏造			
	е	GNR 7	T	捏造			
	f	GNR 7	T	捏造			
	a	GNR 8	SEC	捏造			
Ev Doto Fig 0	b	GNR 8	UV-Vis	捏造			
Ex. Data Fig. 8	С	GNR 8	E	捏造			
	d	GNR 8	IR	捏造			
Suppl. Fig. 19		GNR 8	MS	捏造			

2. JACS論文について

■ 研究内容





- APEX法によるコーブ型と呼ばれるGNRや、共重合体構造をもつGNRの合成が報告されている
- 記載された実験データはNature論文とほとんど同様で、 SEC、IRおよびRamanスペクトル、紫外・可視吸収おび 蛍光スペクトル、STMおよびAFM、MALDI-TOF/MS

■ 各著者の役割

Nature論文のものとほぼ同一

■ 研究不正の認定

- ・明らかな研究不正が含まれる図の枚数 13
- ・明らかな研究不正が含まれるパネルの枚数 16
- A元大学院生による、モノマー分子のNMRスペクトル、GNRのSECチャート、IRスペクトル、MALDITOF/MSデータに明らかな改ざん/捏造がある。
- ・ただし、AFMデータ自体には不正はない。

表2 JACS 論文に見いだされた研究不正						
図番号とパネル名		試料名	分類	不正の態様		
Figure 1	a	GNR 2a	MS	捏造		
Figure 1	b	GNR 2a	IR	捏造		
Scheme 2	b	GNR 8	S	捏造		
Figure S2		GNR 2a	SEC	捏造		
Figure S4		GNR 2a	IR	捏造		
Figure S12		GNR 8	SEC	捏造		
Figure S13		GNR 8	IR	捏造		
	a	GNR 2a	MS	捏造		
Figure S15	b	GNR 2a	MS	捏造		
	С	GNR 2a	T	捏造		
Figure S21		分子	H-NMR	改ざん/捏造		
Figure S23		分子	H-NMR	改ざん/捏造		
Figure S25		分子	H-NMR	改ざん/捏造		
Figure S27		分子	H-NMR	改ざん/捏造		
Figure S29		分子	H-NMR	改ざん/捏造		
Figure S30		分子	C-NMR	改ざん/捏造		

3. ACS Nano論文について

■ 研究内容

- ・ JACS論文で合成されたコーブ型のGNRをグラフェン上 に配した系の電界効果トランジスタ(FET)の特性
- FET 特性のデータに加え、Supporting Information に GNR の合成根拠資料としてSEC、IRスペクトル、STMお よび AFM データが掲載されている。
- ・なお、JACS論文では 4種類コーブ型 GNRの合成をまとめた内容とした関係で、本 ACS Nano論文の方が先に発表された。

■ 各著者の役割

B元博士研究員(第一著者)

- ・A元大学院生が合成したGNR試料(JACS論文と同一のもの)とグラフェンとの複合系をつくり、その電界効果トランジスタを作製して特性を計測
- ・初稿の本文を作成

C元特任准教授(責任著者)

- ・B元博士研究員を監督しながら、GNR/Graphene複合系の作製とそのデバイス化、さらにそのトランジスタ特性などの性能評価の測定に責任を負う
- ・この部分の論文作成を担当

A元大学院生(第二著者)

- ・GNR試料を合成
- Supporting Informationを作成

伊藤准教授および伊丹教授(責任著者)

・Nature論文あるいはJACS論文における役割と、それ ぞれ同一

■ 研究不正の認定

表3 ACS Nano 論文に見いだされた研究不正							
図番号およびパネル名 試料名 分類 不正の態様							
Figure 1	a	GNR 2	S	捏造			
Figure S1		分子	H-NMR	改ざん/捏造			
Figure S4		GNR 2	SEC	捏造			
Figure S5		GNR 2	IR	捏造			

- ・明らかな研究不正が含まれる図の枚数 4
- ・明らかな研究不正が含まれるパネルの枚数 4
- A元大学院生が測定したとされる試料合成の根拠 (Supporting Information中の¹H-NMRスペクトル、 SECチャート、IRスペクトル)に明らかな改ざん/捏造が 見られる。
- ・トランジスタ特性やAFMデータ自体に不正はなく、B元博士研究員およびC元特任准教授の研究不正への関与は認定できない。

4. JOC論文について

総説論文であり、オリジナルデータは含まれていない。研究不正とは呼べないが、論文の後半には、APEX法によるGNR合成にも言及されており、この部分は真実ではない。

5. Synlett論文について

Tetracene誘導体の合成、結晶構造と光学的な性質を報告した論文である。A元大学院生が取得したデータだが、不審な点はなかった。したがって、D元助教は研究不正に関与していないと結論される。

6. 和文学術誌について

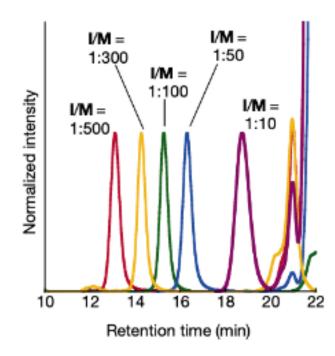
解説あるいは総説論文でありオリジナルデータは含まれていない。研究不正とは呼べないが、APEX法によるGNR 合成に言及されており、この部分は真実ではない。

研究不正なし、あるいはオリジナルデータを含まない総説や解説記事

Ⅲ-3. 個別データにおける研究不正の内容

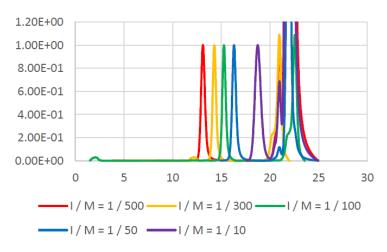
1. SECチャート

■ Nature論文の Fig. 1c



5種類の開始剤 I/モノマーM 比において合成されたフィヨルド型 GNR 2 の SEC チャート

■ 作図データの調査



黄色チャート

強度

Retention

time

	CIIIIO	CIIII O					
4	С	D	Ε				
1	М	I/M = 1/300	С				
674 0	14.384	0.8166700					
675 7	14.373	0.8469100					
6768	14.363	0.8756000					
677 5	14.352	0.9022000					
678 5	14.341	0.9268300					
679 0	14.331	0.9477800					
680 O	14.32	0.9672800					
681 0	14.309	0.9816900					
682 0	14.299	0.9918700					
683 0	14.288	0.9967200					
684 0	14.277	1.0000000					
685 O	14.267	0.9972300					
686 0	14.256	0.9908500					
687 0	14.245	0.9784900					

緑色チャート

強度

Retention

	time				
⊿ D	Е	F			
1 1/300	С	I/M = 1/100	E		
396 6483900	15.376	0.81667			
397 6172000	15.365	0.84691			
398 5874700	15.355	0.8756			
399 5593600	15.344	0.9022			
400 5340700	15.333	0.92683			
401 5089000	15.323	0.94778			
402 4851300	15.312	0.96728			
403 4626600	15.301	0.98169			
404 4418900	15.291	0.99187			
405 4211900	15.28	0.99672			
406 4039000	15.269	1			
407 3864100	15.259	0.99723			
408 3680600	15.248	0.99085			
409 3552000	15.237	0.97849			

■ 評価結果

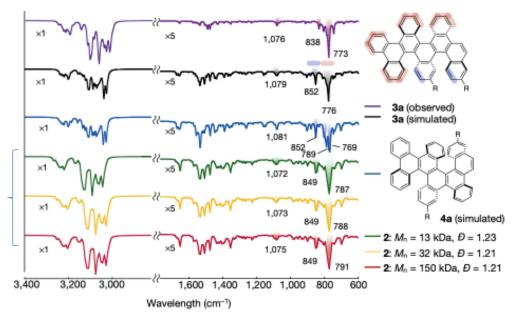
- 一方のデータを平行移動して他方を作成したことによる捏造
- ・同様なデータ捏造 Nature論文の Fig. 3b,d、Ex. Data Fig. 1d、Ex. Data Fig. 5a、Ex. Data Fig. 8a、 JACS論文のFig. S2、Fig. S12、ACS Nano論文のFig. S4
- これらの不正データをもとに求めた考えられる分子量データを記載した図表
 Nature 論文のFig. 1b、Fig. 1d、Fig. 3a、Fig. 3c、Fig. 3f、Fig. 4a、Fig. 4b、Ex.
 Data Fig. 1c、Ex. Data Fig. 5b、JACS論文のScheme 2b、ACS Nano論文のFig. 1a

2. IR スペクトル

■ 作図データの調査

3者は同一スペクトル

■ Nature論文のFig. 1f



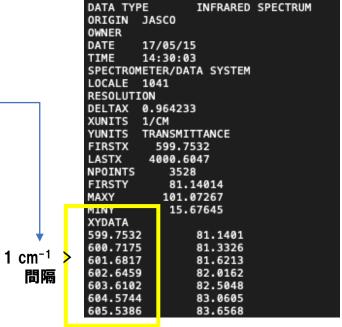
GNR 2の合成の根拠として、ダイマー分子や異性体分子とともに、分子量の異なるGNR 2のIRスペクトルを報告

■ 評価結果

GNR

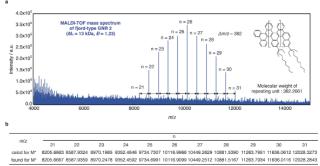
- ・捏造: 緑、黄、赤は同一データから捏造されている。量子化学計算の結果を用いて 実験データとして捏造した可能性が高い
- ・図中ではピークの波数値が異なるが、作図データでは同一
- ・同様なデータ捏造 Nature論文のFig. 4c、Ex. Data Fig. 4a、Ex. Data Fig. 5d、Ex. Data Fig. 8d、 JACS論文のFig. 1b、Fig. S4、Fig. S13、ACS Nano論文のFig. S5

赤色スペクトル 緑色スペクトル 黄色スペクトル 波数 cm-1 2 (Mn=150kDa) 波数 cm-1 2 (Mn=13kDa) 2 (Mn=32kDa) 波数 cm-1 604 -2027.3604 -27.31504 -1027.3量子化学計算に -2017.7-17.69-1017.7よるシミュレー 612 612 620 -2016.4ション結果であ 620 -16.36520 -1016.4628 -2021.7ることを示唆 628 -21.74628 -1021.7636 -2017.7636 -17.67636 -1017.78 cm⁻¹ 644 -2016.7-1016.7644 -16.73544 間隔 652 -2024.9652 -24.86652 -1024.9660 -2023.3-1023.3660 -23.33550 668 -2009.2-1009.2668 -9.16668 676 -2009.8-9.81676 -1009.8684 -2018.7684 -18.72584 -1018.7692 -2048.6692 -48.65692 -1048.6



測定装置の通常測定でセーブされる内容

3. MALDI-TOF/MS データ



Extended Data Fig. 1 in Nature:

GNRの質量分析スペクトル。GNRの繰り返し部位の数 n = 21-31の化学種のシグナルが等間隔に現れている。各シグナルの位置(m/z)が、理論値と完全に一致する。

- 誤った理論との完全一致: 炭素の同位体として12Cのみを考慮し、天然 に 1% 程度含まれる13C同位体の存在を無視した理論計算
- A元院生から提出された2種類のGNRの数値データ: ノイズ部分が一致
- 同一のバックグラウンドデータから線を書き足すように捏造
- 同様の不正: Ex. Data Figs. 6a & 6b, Ex. Data Figs. 7a, 7b, 7c, 7d, 7e & 7f, Suppl. Fig. 19 in Nature, and Fig. 1a, Figs. S15a, S15b & S15c in JACS

1.40E+06

1.20E+06

1.00E+06

8.00E+05

6.00E+05

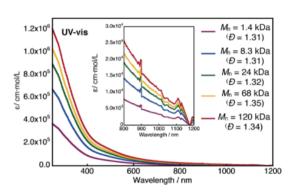
4.00E+05

2.00E+05

0.00E+00

-2.00F+05

5.紫外・可視吸収スペクトル



■ 規格化すると完全に一致

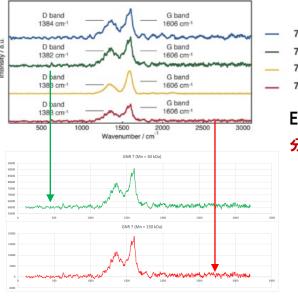
■ 高さを変えて異なるスペクトルのように見せた捏造

600

——系列1 ——系列2 ——系列3 ——系列4 ——系列5

800

4. Raman スペクトル



7: $M_n = 12 \text{ kDa}$, D = 1.04

7: $M_n = 30 \text{ kDa}$, D = 1.04

7: $M_n = 96 \text{ kDa}, \mathcal{D} = 1.03$

7: $M_n = 150 \text{ kDa}, D = 1.04$

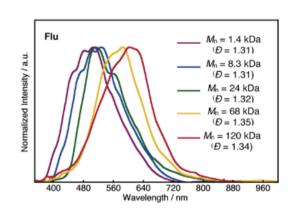
紫スペクトル

Extended Data Fig. 5e in Nature:

分子量の異なるGNRのラマンスペクトル。

- 規格化すると完全に一致
- 高さを変えて異なるスペクトルのように見せた捏造

6. 発光スペクトル



Extended	Data	Fig.	8c	in	Nature:
----------	------	------	----	----	---------

異なる分子量のGNRの発光スペクトル。

D	Mn=1.4 kDa	F	G	Mn=8.3 kDa	I
350	0.0027764		370	0.0027764	
351	0.0035141		371	0.0035141	
352	0.0042023		372	0.0042023	
353	0.0050491		373	0.0050491	
354	0.0061246		374	0.0061246	
355	0.0069434		375	0.0069434	
356	0.0075916		376	0.0075916	
357	0.0079466		377	0.0079466	
358	0.0082327		378	0.0082327	
359	0.0083779		379	0.0083779	
360	0.0083858		380	0.0083858	
361	0.0085079		381	0.0085079	
362	0.0087333		382	0.0087333	
363	0.0089172		383	0.0089172	
364	0.0091386		384	0.0091386	

青スペクトル

■ 全く同一のデータ

365 0.0096752

■ 横軸を平行移動させた捏造

385

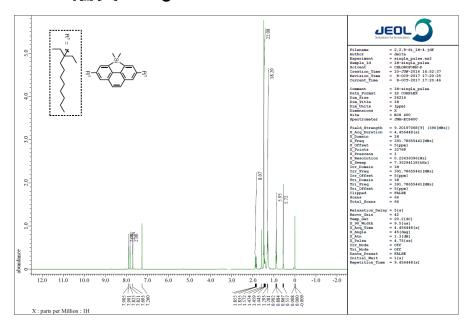
0.0096752

Extended Data Fig. 8b in Nature:

異なる分子量のGNRの紫外・可視吸収スペクトル。

7. NMRデータ

■ JACS論文のFig. S21



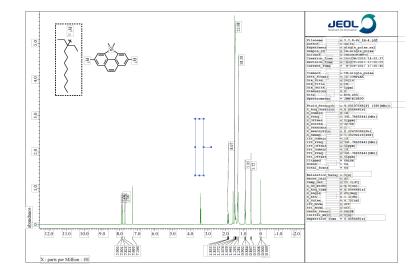
GNR合成の原料となるモノマー物質1aの¹H-NMRとして報告されている。

■ 評価結果

- ・ pdf編集ソフトによる改ざん 改ざんに使用たPCのOSと使用ソフトは、当時、A元大学院生が使用していたものと一致
- ・1つのスペクトルを使い回した捏造
- ・分子構造に合わせたプロトン数の恣意的な改ざん
- ・同様の不正: JACS論文のFig. S29、Fig. S30、ACS Nano論文のFig. S1

■ pdf データの調査

pdf編集ソフトにより、化学シフト δ = 3.5付近のシグナルが隠されている



1c Filename

Author

Experiment

Creation Time

Revision Time

Sample Id

Solvent

■ JACS論文のFig. S21 (試料1a)、 Fig. S23(1b)、Fig. S25 (1c)、Fig. S27(1d) は同一データ



1a $(R = R^1)$, 1b $(R = R^2)$

$$R = -\frac{1}{2} \frac{X}{X}Y$$

 R^1 : X = Et, Y = n-octyl

 R^2 : X = Me, Y = n-octyl

 R^3 : X = n-propyl, Y = n-octyl

1c (R = R³), 1d (R = R⁴) R^4 : X = Et, Y = *n*-dodecyl

書き換えができない Creation_Time(NMR測定 後初めてファイルがつくられ た日時を表す)が同一。

同一スペクトルにもかかわらず、プロトン数が 1a: 60H、 1b: 73H、1c: 62H、1d: 76Hと恣意的に改ざん。 1a Filename = 2,2,8-Si 1H-4.jdfAuthor Experiment = single pulse.ex2 Sample Id = 1H-single pulse Solvent = CHLOROFORM-D Creation Time = 10-JUN-2016 14:52:37 Revision Time = 8-OCT-2017 17:20:25 Current Time = 8-OCT-2017 17:20:46 = 1,1,8-silole 1H CDCL3-3.jd Filename Author = delta Experiment = single pulse.ex2 Sample Id = 1H-single pulse Solvent = CHLOROFORM-D Creation Time = 10-JUN-2016 14:52:37 = 8-OCT-2017 16:23:28 Revision Time Current Time = 8-OCT-2017 16:23:53

= delta

= 3,3,8-Sifin_1H-3.jdf

= 10-JUN-2016 14:52:37

= 9-OCT-2017 21:12:44

= single pulse.ex2

= 1H-single pulse

= CHLOROFORM-D

Current Time = 9-OCT-2017 21:13:11 1d Filename = 2,2,12-Sifin2_1H-3.jdf Author = delta Experiment = single_pulse.ex2 Sample Id = 1H-single pulse Solvent = CHLOROFORM-D Creation Time = 10-JUN-2016 14:52:37 Revision Time = 9-OCT-2017 21:25:59 Current Time = 9-OCT-2017 21:26:42

III-4. Nature論文におけるモノマー分子の同定の誤り

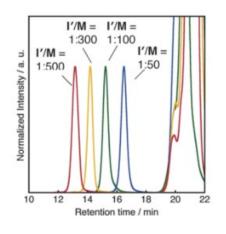
Nature論文のモノマー物質Mについては、論 文の表記とは異なり複数の異性体の混合物 であることが分かった。この同定ミス自身は 研究不正ではないが、化合物同定について 伊藤准教授および伊丹教授に検討不足が あったことは否定できない。

III-6. 質量分析測定試料に関する研究不正の疑い

伊丹教授、伊藤准教授およびA元大学院生の3者によるZoom会議の中で、伊藤准教授がA元大学院生に対して論文記載とは異なる試料の質量分析を行なうように指示したように聞こえるやり取りがあるとの指摘が委員からなされた。この件に関して、伊藤准教授に説明を求めたところ、試料を勘違いして発言していたことが分かり、またこの代用試料が合成された形跡もないことなどから、今回の研究不正には関連しないと結論した。

研究不正には該当しない

Ⅲ-5. HPLCデータの差し替えと隠ぺい工作



■ Nature論文のExtendedData Fig. 5a 捏造を認定したSECチャート

F元大学院生(2018年度理学部4年生。 A元大学院生を研究室内メンターとして、 GNR研究に参加。)の結果を含む。

- HPLC測定装置に付属したPC内のデータを検証
 - ・F元大学院生が測定したとされるSECチャートの多くが、A元大学院 生のデータに差し替えられていた。

HPLC測定装置に付属PCに残されたデータ

ファイル名	分析日時	サンプル名	サンプルID	サンフ°	編集 コ	更新日時
22	2017/09/02 16:04	465-2		未知	Adm	2018/10/10 17:41

F元大学院生のものと分かるファイル名 同院生の実験ノートには2018年5月19日 の測定と記載 A元大学院生のものと分かる試料名 同元院生が2017年9月に別の開始剤を 用いたAPEX重合の結果として報告

- ・このようなデータすり替えは、F元大学院生がGNR合成について再 現実験をするたびに繰り返されており、その件数は10件に及ぶ。
- ・これらのすり替えはF元大学院生によるものではなく、A元大学院生による隠ぺい工作であったと考えられる。

Ⅲ-7 A元大学院生の責任について

・ GNR合成の根拠となるデータについて、多数の捏造/改ざん、さらにすり替え

Nature論文とJACS論文の全体、そしてACS Nano論文の試料作製部分には、多くの研究不正データが掲載されている (GNR合成のモノマーやAPEX重合反応の生成物に関する¹H-NMRスペクトル、SECチャート、IRおよびRamanスペクトル、紫外・可視吸収および発光スペクトル、MALDI-TOF/MSデータ)。また、GNR合成の根拠の一つであったF元大学院生のデータの多くも差し替えられている。

・A元大学院生の単独行為

その手口には共通点があり、作図ソフトを使い、同じデータを加工して何回も使い回すようなものだった。これらのことを成し得るものは、不正データのすべてを測定し、一連のデータを把握して自由に操作することができたA元大学院生以外にあり得ない。また、F元大学院生が測定したデータのすり替えも、A元大学院生の行為と考えざるを得ない。

・自らの関与は合理的な説明なく否定

A元大学院生に対してヒアリングを行い説明を求めたが、不正データであることやデータがすり替えられていることは認めるものの、自らの関与は合理的な説明なく否定した。なお、ヒアリングの後、NMRデータにおけるプロトン数の恣意的な算出だけは書面で認める。

Ⅲ-8. 責任著者の責任について

- 1. 研究不正に対する直接の関与
- ・3名の責任著者(伊丹教授、伊藤准教授、C元特任准教授)が、A元大学院生に対し指示を出すなど、研究不正に直接関与した可能性は認められない
- 2. 研究情報の喪失について
- ・A元大学院生による研究不正隠ぺいを目的とした行為である可能性が極めて高い
- ・電子化が前提とはいえ、実験ノートの現物破棄を認めていた研究室ルールが遠因となった可能性あり
- ・実験ノート電子化や試料受け渡しのチェックがA元大学院生の卒業時までに行われていなかったが、新型コロナウイルス感染症が拡大した当時の状況を考えると、担当スタッフ(伊藤准教授)に過失があったとまでは言えない
- 3. 各調査対象論文における責任について
- ・伊藤准教授と伊丹教授が、GNR合成の部分について再現実験の実行やデータに対する十分な吟味を行っていれば、 その研究不正を見抜くことは可能であった → 注意義務を怠っている
- ・ C元特任准教授は、提供されたGNR試料のSTMおよびAFM測定、トランジスタ測定に責任を負ったが、これらのデータ に不正は見いだせず、共著者としての注意義務を尽くしている

- 4. 研究室主宰者としての監督責任
- ・伊丹教授と伊藤准教授は、A元大学院生を指導する立場にあり、研究不正を未然に防ぐ監督責任があったが、A元大学院生の不正行為は、2015年度(博士前期課程1年生)の10月頃から繰り返し行われている
- ・研究室内での研究不正防止のための取り組みが不十分であったと考えられる。
- 5. 研究不正の認知とその後の対応
- ・伊丹教授と伊藤准教授は、2020年1月ごろより、Nature論文のGNR合成の再現がとれない状況を把握、再現実験を開始 → A元大学院生の研究不正を強く疑わせる事実を確認し、2020年8月17日に自ら研究不正の申立てを行う
- ・調査専門委員会の指示に基づいて自らも調査を継続し、研究不正やデータすり替えに関する申立てを繰り返す(計6回)
- ・調査専門委員会に対して、研究室に残された各種測定データを提供して調査に協力

Ⅳ. 公正研究委員会の判定

調査専門委員会の評価に基づき

- 〇認定した特定不正行為の種別 規程第2条第2号イおよびロに規定する不正行為(捏造および改ざん)に該当すると認定する。
- 〇特定不正行為に係る研究者
- (1)不正行為に関与したと認定した研究者

A(名古屋大学元大学院生)研究者番号:なし

(2)不正行為に関与していないものの、不正行為のあった研究に係る論文等の責任を負う著者として認定した研究者

伊丹 健一郎(名古屋大学トランスフォーマティブ生命分子研究所教授) 研究者番号:80311728

伊藤 英人(名古屋大学大学院理学研究科准教授) 研究者番号:70706704

■ A(名古屋大学元大学院生)

・一連の研究不正は、長期に渡って繰り返し行われ、 不正データ数も極めて多く、隠ぺい工作さえも行われていることから、行為の悪質性は高い。さらに、当該分野の研究の進展への影響は大きく、社会的影響も大きい。

■ 伊丹健一郎 教授 伊藤英人 准教授

・ A元大学院生の不正行為について、責任著者として 果たすべき確認等を怠ったことにより、複数の論文 において、不正行為を防止することができなかった。

注意義務違反があり、A元大学院生の不正行為の程度から考えると、研究不正に対する責任は「高」いと認定する。

「競争的資金の適正な執行に関する指針」 別表2

不正行為 (4.)	為に係る応募制	削限の対象者	不正行為の和	程度	応募制 限期間
	為を行うこ	があから不正行とを意図してい 、特に悪質な			10年
不正行為に関	2. 不正行	当該論文等の 責任を負う著 者(監修責任 者、代表執筆	の影響や社会	研究の進展へ 会的影響が大 為の悪質性が :れるもの	5~7年
与した 者(4. (2))	為があっ た研究に 係る論文 等の著者	者又はこれら のものと同等 の責任を負う と認定された もの)	の影響や社会	研究の進展へ会的影響が小 会の悪質性が れるもの	3~5年
		上記以外の著 者			2~3年
	3.1.及び2 為に関与し	2. を除く不正行 ,た者			2~3年
不正行為に関与していないものの、不 正行為のあった研究に係る論文等の 責任を負う著者(監修責任者、代表執 筆者又はこれらの者と同等の責任を 負うと認定された者)(4.(3))			当該分野の研究の進展へ の影響や社会的影響が大 きく、又は行為の悪質性が 高いと判断されるもの		2~3年
			の影響や社会	研究の進展へ会的影響が小為の悪質性がはんるもの	1~2年

- 〇特定不正行為に係る経費、特定不正行為と認定した研究活動に対して支出された競争的研究費およびそ の使途
- ・8件の競争的研究費が、研究不正を認定したデータを含む3報の論文の謝辞に挙げられている。
- ・このうち6件の競争的研究費を特定不正行為に係る研究課題であると認定した。
- ・ 競争的研究費3件から、論文掲載料、論文英文校閲費、成果発表のための学会参加費・旅費の支出があった。

〇本学がこれまでに行った措置の内容

- ・伊丹教授および伊藤准教授に対して、本調査結果に鑑み、科学コミュニティへの説明等、誠意をもって対応するよう勧告した。
- ・A元大学院生に対する学位授与の正当性、審査の手続および体制の妥当性等について検証し、対策を講じるよう、理 学研究科に対して勧告を行った。さらに修士論文についても調査するように勧告した。
- ・伊丹教授および伊藤准教授を特定不正行為に係る研究者として認定したことを踏まえ、学内規則に則して、懲戒処分に関する調査・審議を進めている。なお、A元大学院生は、既に本学学生ではないため、本学の規則上処分の対象とはならない。
- ・不正データに基づいて獲得したと考えられるA元大学院生、伊丹教授および伊藤准教授の顕彰や研究助成金に関連して、今回の研究不正を、それらを与えた学会や団体等に対して通知した。

〇発生要因

- A元大学院生に関して
- ・本来研究者として当然わきまえるべき研究倫理が欠如していると言わざるを得ない。
- 伊藤准教授および伊丹教授に関して:
- ・日ごろからの研究指導において、再現実験の実施や、普段から処理前の生データと実験ノートに向き合って実験結果等を慎重に検討する姿勢に欠けていた。
- ・ A元大学院生を信頼していたこともあり、科学的コミュニケーションが十分に取られておらず、<mark>指導・監督が十分でなかっ</mark> た。

〇再発防止策

・研究倫理教育のさらなる徹底

全研究者と全学生に対して、従来の内容に加えて、本件などの深刻な実例をとりあげ、研究不正に関与した場合に自らが被るペナルティについても説明する。また、研究不正の通報窓口・相談窓口について再度周知する。

・研究情報の保管の重要性を改めて周知徹底

実験ノートの作成・保管、生データの保管や試料の管理など、研究情報の保管の重要性を改めて周知徹底する。研究室ごとに明文化・マニュアル化し、機会あるごとに学生に周知する。各研究室で取り決めた内容を部局で把握し、助言や指導を行う。

・再現性の確認の徹底

日頃から、実験データにおいてはその再現性の確認を徹底させる。論文公表にあたって責任著者は共著者と協力して公表するすべてのデータの基となる生データ・実験ノートを再度確認し、公表しようとする内容の正確性を担保する。また、教授、准教授と院生、学生は、研究について率直な意見交換を重ねるなどコミュニケーションを図る。

・定期的な研究資料保存・管理チェック

部局の研究倫理教育責任者は、定期的に研究資料等が適切に保存・管理されているかを確認し、その結果を研究倫理推進総括責任者に報告する仕組みを整備し、再発防止を図ることを求める。

・学位論文や修士論文審査法の検証

学位論文審査や修士論文審査に問題がなかったか検証し、問題があれば改善する。

略号の説明

J. Am. Chem. Soc. = Journal of American Chemical Society

ACS Appl. Nano Mater. = ACS Applied Nano Materials

J. Org. Chem. = Journal of Organic Chemistry

GNR = Graphene Nano Ribbon:グラフェンナノリボン

APEX 重合 = annulative π - extension polymerization: 一段階π拡張反応(エイペックス重合)

HPLC = High performance liquid chromatography: 高速液体クロマトグラフィー

SEC = Size Exclusion Chromatography: サイズ排除クロマトグラフィー

IR = Infrared: 赤外

Raman = Raman : ラマン

MALDI-TOF/MS= Matrix Assisted Laser Desorption/Ionization Time-of-Flight Mass Spectrometry

:マトリックス支援レーザー脱離イオン化 飛行時間型 質量分析

NMR = Nuclear Magnetic Resonance: 核磁気共鳴

UV-Vis = Ultraviolet - Visible:紫外一可視

STM = Scanning Tunneling Microscope :走査型トンネル顕微鏡

AFM = Atomic force Microscope:原子間力顕微鏡