

世界トップレベル研究拠点プログラム

拠点構想の概要

※A4 2ページ以内で作成すること。

拠点名：化学反応創成研究拠点

ホスト機関名：北海道大学

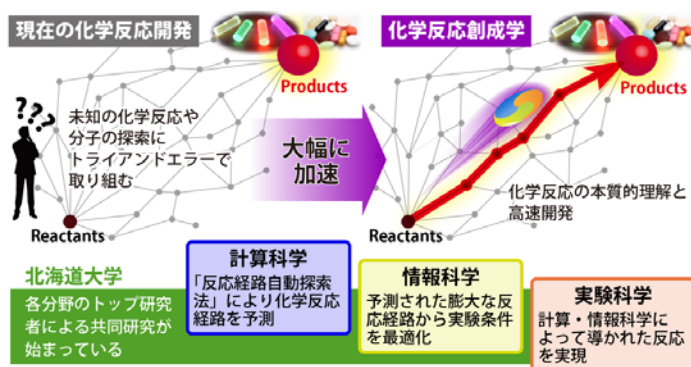
ホスト機関の長：名和 豊春・学長

拠点長：前田 理・大学院理学研究院・教授

事務部門長：山本 靖典・大学院工学研究院・特任准教授

1) 拠点形成の全体像

化学反応創成研究拠点では、**計算科学・情報科学・実験科学の三分野融合**により、人類が未来を生き抜く上で必要不可欠な化学反応を、新たに複雑なネットワークとして理解し、自在に制御することを目指す。新しい化学反応の開発の困難さは人類発展のボトルネックとなっている。これまでの計算科学では、化学反応の現象を説明することは可能であるが、予測や設計には適用できなかった。本拠点では拠点長の前田が開発した、最新の反応経路探索法と、北海道大学がトップレベルを走る情報科学、さらに世界最高レベルの実験科学者による実証研究とフィードバックを融合し、**化学反応を本質的に理解し、新しい反応を合理的な予測に基づいて、効率よく開発することを可能にする学問領域「化学反応創成学」を確立し、今後人類が必要とする化学反応や新材料を創出する。**また、計算・情報・実験の融合研究を世界中の研究者や大学院生に伝える「**MANABIYA(学び舎)システム**」を構築し、高度人材の世界的循環と分野横断型共同研究体制を実現する。化学反応に関係する産業はトータルで年間500兆円規模のインパクトをもち、人類の活動のなかでも特に重要である。その深い理解に基づく合理的設計が実現すれば、恩恵は極めて大きい。



2) 研究内容

「化学反応創成学」を実現するためには、計算科学による化学反応経路の導出、情報科学による反応経路の選別や知識統合、有機化学から材料化学、医療分野にまで及ぶ実験科学による実証と理論へのフィードバックが必要である。計算科学・情報科学・実験科学のうち、二分野間の連携は盛んであるが、三分野の融合は現在でも実現しておらず、反応を自在にデザインするには至っていない。「化学反応創成学」では、北海道大学が世界に誇る反応経路探索、数理モデル化と統計モデル化、そして最先端の実験的検証の三つを融合し、世界に類を見ない化学反応の高度なデザインと迅速開発を実現する。

- 1. 高付加価値反応 (小分子区分: 原子数 ~100)** 豊富で安価な原料、例えば、産業廃棄物、空気、海水などから、食料や医薬など付加価値の高い低分子量化合物を与える化学反応を創出する。
- 2. 新材料創出反応 (マクロ分子区分: 原子数 ~10,000)** 化学反応創成の手法を原子数10,000程度にまで拡張し、発光性材料、力学応答性材料、宇宙エレベーター用超高強度炭素材料など新材料の開発を行う。
- 3. 反応創成に立脚した先端医療への応用 (複雑系区分: 原子数 $\geq 10,000$)** 細胞や生体内で様々な分子が関与する複雑系の化学反応を取り扱うモデルや新素材、実験系を作り出すことで、革新的かつ挑戦的な先端医療(診断・治療)へ応用する。

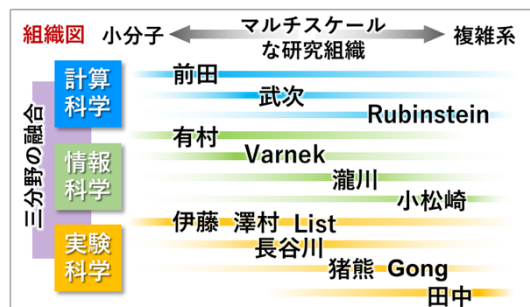
研究体制：計算科学分野・情報科学分野・実験科学分野におけるトップ研究者を国内外から集めて共同研究を実施する。少分子から複雑系まで、上記の各区分をカバーしつつ、高い研究レベルでの分野融合が可能となるようなチームを編成した。

3) 融合研究

化学反応には無限に近い組み合わせがあるため、これまでの計算科学・量子力学の方法で化学反応を理解しようとする、計算時間が膨大となり不可能であった。前田が開発した「反応経路自動探索法」は、仮想的な力を計算上で発生させ、分子同士を近づける、引き離すという操作を行うことにより、化学反応に重要な分子の挙動のみを抽出しネットワーク化できる。しかし、より複雑な現実系では、前田の方法でも計算量が大き

世界トップレベル研究拠点プログラム

くなり実行が難しい。本拠点では前田の方法に情報科学の手法を組み合わせ、高速化アルゴリズムを組み込み、計算をパターン化することで、計算量を劇的に低減する。さらに、実験科学による予測の実証と、実験データの科学的に処理することにより、予測に基づく合理的な反応設計を可能にする。これら三分野の融合によって化学反応の高度な理解と合目的・高速開発が世界で初めて可能となる。この完成を目指す学問が「化学反応創成学」である。この「化学反応創成学」は、物質の生産や産業活用にとどまらず、地球環境や生命分野など、化学反応が関係する分野すべてがその恩恵を受け、多大な波及効果が得られる。



4) 国際的研究環境

本WPI拠点では、海外の研究機関から招聘する3名の世界トップ研究者が融合研究に参画する。本拠点内に海外PIの研究グループを設置し、**Co-PI**（特任准教授・特任助教などのスタッフ）を配置する。北海道大学では、総長直轄の六つのGI-国際連携研究教育局（略称GI-CoRE）を2014年に設置し、大学の自主的な経費をもとに組織的な国際共同研究の推進・支援を行ってきたが、特に**ソフトマターGI-CoREと情報科学GI-CoREの二つが本WPIの重要なサブ組織**として有機的に組み込まれる。外国人研究者に関しては2割以上（スタート時14人中3人）とし、本拠点で新たに雇用する特任教員、博士研究員はいずれも国際的公募により選考、**研究者全体の30%程度を外国籍とする**。海外PIの研究チームにはスタートアップのための研究資金を提供、スムーズに研究を開始できる環境を整える。**WPI内での言語は英語**とし、英語により拠点の管理運営業務や研究支援業務を実施できるスタッフを配置、さらに北海道大学国際連携機構を通じた外国人研究者への多面的なサポートを実施する。拠点内に新たに**国際支援ホスピタリティシステム**を構築し、海外PIや研究者とその家族の生活支援を行い、安心して研究に専念できるよう配慮する。日本人研究者や関連学生が外国人研究者と効率的に協働できるように、**国際化促進プログラム**を実施する。連携研究機関を中心に世界トップレベルの研究者を定期的に招聘し、国際シンポジウムを年次ごとに開催する。計算・情報・実験の融合研究を世界中の研究者や大学院生に伝える「**MANABIYA(学び舎)システム**」により、3か月程度の期間で共同研究を行う海外の若手研究者、大学院生を循環させ、拠点内の国際化・多様化を進めるとともに国際的な人的ネットワークを形成する。

5) 拠点運営・システム改革

前田が専任の拠点長として、10年以上の長期にわたり責任を持って拠点を運営する。三分野の融合領域の創出、国際的な研究・教育環境の整備を実現するため、「**化学反応創成研究拠点**」を全学組織である創成研究機構内に創設する。事業開始時は拠点長を経験豊富な副拠点長の伊藤が支える共同マネジメント体制とし、中長期的には拠点長がトップダウン的に意思決定する体制に移行する。拠点長の意思決定を支援するため、副拠点長、事務部門長および大学本部組織から出向するURAによる運営会議を随時開催する。大学で既に導入されている成果評価システムを基に、研究成果や能力に応じた俸給システムを再構築し、研究者を適切に評価する制度を整える。拠点長主導で研究の進展や方向性により定期的に各PIの役割の再検討や評価を行い、インセンティブの付与、PIの交代等を実施する。

研究支援部門：事務部門長として、共同研究と知財化、マネジメント等の経験豊かな山本を置き、補佐として本部から出向するURAを配置する。本部にWPI対策室を設置し大学と直結した事務組織とする。国際企画・広報・研究戦略ユニットを設置し研究者が快適に研究できる環境を常に提供する。

環境整備：研究室、居室等の施設・設備環境：PI研究室に加え、本拠点の中核となるスペースを創成科学研究棟内に整備し、融合研究を推進する。「**MANABIYA(学び舎)システム**」「**インターサイエンスカフェスペース**」を整備し、人々が循環する世界に開いた研究拠点を拠点長主導で構築する。**創成研究機構グローバルファシリティセンター（GFC）**が保有する共用機器の利用・分析料金の大学からの支援に加え、本拠点で整備する分析機器の維持・管理をGFCが担い、研究者が研究に専念できる環境を整える。

自立化に向けた既存組織の再編と一体的な拠点構築：大学からのコミットメントにより、「創成研究機構」の組織改革を推進し、本拠点との融合を図り大学組織として維持する。PIの本籍部局が整えるサポート体制により管理運営業務負担を軽減し、PIの研究・教育エフォートを確保する。大学からWPI補助金と同程度の運営資金を確保し、本拠点を自立化する。「化学反応創成学」、「MANABIYAシステム」を大学院教育に組み込み新大学院「**化学反応創成学院（仮称）**」の設置を目指し、企業研究者の受入れや企業との研究コンソーシアムによる民間資金の獲得により恒久化を図る。将来的には他の分野と連携し大学改革をリードする。

世界トップレベル研究拠点プログラム

拠点構想

※A4 20ページ以内で作成すること。

拠点名：化学反応創成研究拠点

ホスト機関：北海道大学

ホスト機関の長名：名和 豊春・学長

拠点長：前田 理・大学院理学研究院・教授

- ・添付資料1 「拠点長候補者個人票」を添付すること。
- ・添付資料2 「拠点が対象とする研究分野で世界的な業績のある研究者からの拠点長候補者の推薦状」を添付すること。

事務部門長：山本 靖典・大学院工学研究院・特任准教授

- ・添付資料3 「事務部門長候補者個人票」を添付すること。

1) 拠点形成の全体像

- ・WPI 拠点としてのミッションステートメント、拠点のアイデンティティ及び本プログラムにより達成すべき目標を、明確かつ簡潔に記載すること。

[拠点の概要]

化学反応創成研究拠点では、新しい化学反応の開発の効率化を促進するために、計算科学・情報科学・実験科学の三分野融合により、人類が未来を生き抜く上で必要不可欠な化学反応を、新たに複雑なネットワークとして理解し、自在に制御することを目指す。新しい化学反応は、先進的な材料を生み出し、豊かで持続可能な人類の未来に欠かせないエネルギーと天然資源の使用を軽減する。計算科学・情報科学・実験科学を統合した研究環境の確立を通じ、この目標を達成することを目指す。しかし、新しい化学反応の開発に対する現在の試行錯誤のアプローチは時間がかかり、非常に非効率である。そのため化学反応の高速開発は、科学全体に革命を起こす重要な要素となる。本拠点では、量子化学計算による最新の反応経路探索と、情報科学との連携、さらに実験科学者による実証で、化学反応を本質的に理解し、新しい反応を合理的かつ大幅に効率よく開発する。さらに、これを可能にする新学問領域「化学反応創成学」を確立し、今後人類が必要とする化学反応や新材料を創出する。また、計算科学・情報科学・実験科学の融合研究を世界中の研究者や大学院生に伝える「MANABIYA(学び舎)システム」を構築し、高度人材の世界的循環と分野横断型共同研究体制を実現する。

[拠点形成が必要な理由]

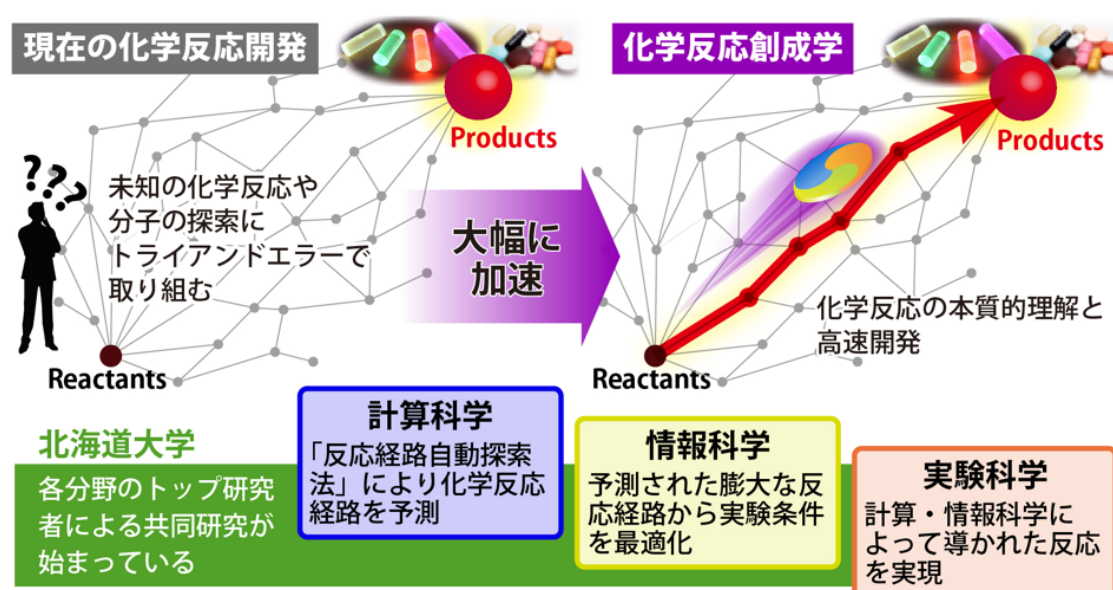
人類は化学反応によって有用な新しい物質を作り出し、豊かな社会を築いてきた。しかし、化学反応の開発は長い時間を必要とする。これまで、理論科学と計算科学を応用した化学反応の理解と設計の試みが長年検討されて来たが、化学反応は原子・分子の量子力学的挙動が元になる極めて複雑な現象であるため、根源的な理解が難しい。また、通常の量子力学的計算では計算量が膨大となり、今に至るまでその効率的な開発には成功していない。しかし、新しい化学反応のニーズは、既存の化学産業のみならず、地球規模の資源・環境・医療の分野でも著しく高まっており、**桁違いに効率的な開発方法が見つからない限り人類文明の維持は困難である。**

世界トップレベル研究拠点プログラム

[拠点形成の戦略と達成すべき具体的目標]

この問題を解決するため、**計算科学・情報科学・実験科学の三つの分野融合を行い、人類存続に必要な新しい化学反応を理解し、効率よく開発する新分野「化学反応創成学」を構築する。**さらに、**世界でも例のない拠点形成により最先端の融合研究を推進し、化学反応研究の新時代を開く。**

実験科学ベースの化学反応開発は、トライアンドエラーを繰り返す必要から、一つの化学反応を開発するまでに数十年を要する。拠点長の前田は、最近、この問題を解決する鍵となる「計算科学」の新手法「反応経路自動探索（AFIR）法」を世界に先駆けて開発した。この方法は、望みの化学反応を高い精度で予測できる画期的手法である。この方法は非常に革新的であり、高い精度で所望の化学反応を予測するが、依然として膨大な計算資源を必要とする。この問題を解決するために、北海道大学にトップ研究者が集まっている「情報科学」（特別推進、CRESTなど大型研究費多数）を活用することにより、重要な反応経路を絞り込み、計算をパターン化して大幅に高速化することができる。この予測した新反応を、北大に在籍している最高レベルの「実験科学」者（トップ1%論文保有、Highly Cited Researcher選出など）が計算・情報科学に結果のフィードバックを行いながら、効率的な反応開発をする。この方法により、実験絞り込みが事前にできるため、試行錯誤に頼る過去の方法に比べて物質の開発にかかる時間を大幅に短縮できる。また、反応開発だけでなく、物質の複雑な変換現象全体の理解が可能となり、化学反応が関連する他の学問領域への波及効果も大きい。この三分野の研究者の集結は、北海道大学が世界でも突出しているため、化学反応創成学は本学でしかなし得ない融合研究である。さらに**本拠点では、北海道大学創成科学研究棟を中心とした国際共同研究環境整備と世界スケールの高度人材育成の戦略的仕組みである「MANABIYA(学び舎)システム」の構築、国内外の研究協力拠点との連携体制を確立することで、世界初の研究領域「化学反応創成学」を切り拓き、新大学院「化学反応創成学院（仮称）」の設立を軸に大学の組織改革を実行する。**この融合研究をもとに、医薬・食品・機能材料などの高付加価値資源を入手するための効率の高い化学反応や、資源・環境問題を解決するための新材料創成反応、さらには先端医療を指向した新物質の開発を目標とする。ターゲットとなる化学反応や分子は、産官学の連携を通して、社会的要請に基づき決定される。



世界トップレベル研究拠点プログラム

2) 研究内容

2) -1. 研究領域

- ・ 研究領域の名称を記載すること。
- ・ 研究対象として取り組む重要性（当該研究領域及びその周辺領域における国内外の動向、科学的及び社会的意義）について記載すること。
- ・ 当該研究領域に WPI 拠点として取り組むに価する理由について記載すること。（我が国の優位性、科学技術上の世界的な課題に挑戦し、国際的な魅力があること、当該学問分野の将来性等）
- ・ 対象研究領域ないしは関連研究領域における他の世界的研究拠点を列挙し（5 機関まで）、それとの比較でどのようなレベルにあるかを評価すること。
- ・ 添付資料 4 「拠点構想に関係が深い英文の論文（10 件以内、レビュー論文も可）とそのリスト」を添付すること。

[化学反応創成学の確立]

「化学反応創成学」は、非常に複雑な量子力学的現象である化学反応の本質的理解と高速開発を可能とする新しい研究分野であり、そのための学理確立が本拠点の目的である。化学反応の発達は、産業廃棄物や食糧不足などの深刻な社会問題を解決し、持続可能な将来の社会に貢献する。これを実現するためには、計算科学による化学反応経路の導出、情報科学による反応経路の選別や知識統合、有機化学から材料化学、医療分野にまで及ぶ実験科学による実証と理論へのフィードバックが必要である。**計算科学・情報科学・実験科学のうち、二分野間の連携は盛んであるが、三分野の融合は現在でも実現しておらず、反応を自在にデザインするには至っていない。**「化学反応創成学」では、北海道大学が誇る反応経路探索（計算科学）、数理モデル化と統計モデル化（情報科学）、そして最先端の実験的検証の三つを融合し、世界に類を見ない化学反応の高度なデザインと迅速開発を実現する。

さらに本拠点では、計算科学・情報科学・実験科学の技術を習得した世界をリードする若手研究者の育成に中心的な役割を果たす。**本拠点では、原料化学物質から標的化合物を合成するためのすべての反応経路を系統的に研究する。これは既存の情報科学プロジェクトとは異なる革新的なアプローチとなる。**米国のマテリアル・ゲノム・イニシアチブ（MGI）の様なマテリアルインフォマティクス・ケモインフォマティクスプロジェクト、国立研究開発法人物質・材料研究機構（NIMS）の「情報統合型物質・材料開発イニシアチブ」および欧州の新材料開発（NoMaD）研究所やAIMR（東北WPI）は、反応の創出ではなく、分子設計や材料設計に留まっている。また、米国のPubChem、Reaxys（Elsevier）およびSciFinder（American Chemical Society）などの文献データベースプロジェクトは、既知の反応の検索およびそれらの類似反応の提案を行うのみである。これとは対照的に、本拠点は未知の化学反応の高速開発を目指し、分野融合と共同研究のシステムを根本的に変える取り組みである。ITbM（名古屋WPI）やMANA（NIMS WPI）など既存WPI拠点では、化学反応を用いて新しい分子および材料を既に開発しているが、古典的な試行錯誤の手法に留まる。**本拠点の計算科学・情報科学・実験科学の三分野融合研究は、多くの新しい反応をもたらし、新しい化学物質および材料を効率的に創出する。**これにより本拠点は、新しい化学反応の高度なデザインと迅速開発の世界トップレベル研究拠点となり、成果を世界に広めることによって、革新的な融合研究をより高いレベルに深化させる。

世界トップレベル研究拠点プログラム

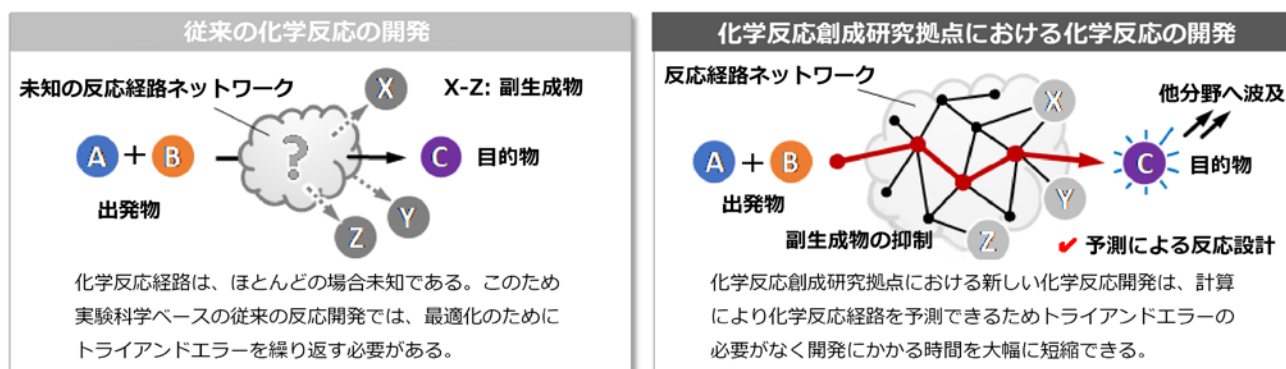
2) -2. 研究達成目標及び計画

- ・ 助成期間終了時（10 年後）の研究達成目標を一般国民にも分かり易い形で明確に記載すること。その際、どのような科学技術上の世界的な課題の解決に挑戦するのか、またその実現により、将来、どのような社会的インパクトが期待できるのか、をできるだけ分かり易く記載すること。
- ・ 上記目標を達成するための研究活動面の具体的計画及び関連するこれまでの実績を記載すること。

[化学反応創成学を通して目指すこと]

現代社会に必要とされる最先端材料は、豊富な資源や原料化学物質を化学反応により付加価値の高い化合物に変える化学プロセスの産物である。化学反応創成学の目的は、枯渇性資源（物質とエネルギー）の使用を最小限に抑えながら、標的化合物の効果的な合成を可能にする新しい化学反応の開発にある。**化学反応創成学では、社会ニーズの高い化学反応を、取り扱う分子の大きさにより以下の三つのカテゴリーに分けて開発する。**第1カテゴリーでは、豊富な資源および/または低価値物質（**～100原子の小分子**）に高い価値を付加する反応を創出することを目指す。カテゴリー2は、ハイテク材料（**～10,000個の原子**）。カテゴリー3（～8年後）は、細胞および生化学反応のための化学反応創成学の利用であり、カテゴリー2で開発された材料のいくつかは高度医療（**複雑な分子 > 10,000個の原子**）に適用される。初期段階では、概念証明のためのモデル反応を選択し、中期から後期にかけて、社会に大きな影響を及ぼす反応へと展開する。このとき、対象とする反応は、産官学の連携を通して、社会的要請に基づき決定する。

化学反応創成学で使用される重要な技術は、拠点長の前田によって開発された自動反応経路探索（AFIR）法である。AFIR法は、様々な反応経路の正確な予測を可能にし、単純な出発物質から付加価値のある標的分子の生成を可能にする。しかし、本手法を比較的大きな分子にそのまま適用すると、計算コストが非常に高くなり、さらに、極めて複雑な反応経路ネットワークがアウトプットとして生成されるため、適切な情報科学的手法（例えば、数学モデルおよび統計解析技術）が必要となる。分子量の増大に伴う計算コストの爆発的増大や計算データの複雑化といった問題を、情報科学による数理モデル化と統計的手法によって解決し、そのフェイズを深化させる。10年間の研究を経て、構成原子数が膨大で複雑な生体系の化学反応までを取り扱えるレベルにまで融合研究によって学理を高める。



カテゴリー1. 高付加価値反応（小分子カテゴリー：原子数 ～100）

豊富で安価な原料、例えば、産業廃棄物、空気、海水などから、食料や医薬など付加価値の

世界トップレベル研究拠点プログラム

高い低分子量化合物を与える化学反応を創出する。既に、拠点長の前田らが予測したCO₂からアミノ酸を合成する化学反応経路が実験科学的に実現された例が存在する。この手法を拡大し、CO₂からのペプチド合成、原油成分からの医薬品合成など、社会に有用な高付加価値反応のデザインと創出を行う。

カテゴリー2. 新材料創出反応 (マクロ分子: 原子数 ~10,000)

化学反応創成の手法を原子数10,000程度にまで拡張し、発光性材料、排ガスの浄化触媒、力学応答性材料および超高強度材料など新材料の開発を行う。触媒開発では、活性中心での反応経路を詳細に探索し、正確な反応モデルの構築を行い性能向上に繋げる。また、光、熱、圧力などの外部刺激に応じて内部で化学反応を引き起こし、硬さや色、発光性などを自在に変化させられる自己進化性ゲルや高分子材料の創出を目指す。このカテゴリーで開発された化学反応は、ポリペプチド医薬品、無事故・無公害車用材料や超軽量高強度宇宙材料を提供し得る。

カテゴリー3. 反応創成に立脚した先端医療への応用 (複雑系: 原子数 ≥10,000)

細胞や生体内で様々な分子が関与する複雑系の化学反応を取り扱うモデルや実験系を作り出すことで、革新的かつ挑戦的な先端医療への応用を目指す。生命はDNAの化学修飾による膨大な生体反応の制御に立脚しており、この複雑な反応システムの破綻が疾患や疾病を引き起こす。本拠点がカテゴリー2で開発した新しい材料を用いて複雑な細胞応答データを解析、情報科学により反応系を効率化し、細胞応答を制御可能とする新しい生体適合材料を創出し、メカニカルゲノミクスによる疾患の診断・治療への応用を助成期間の終了までに目指す*。

*がん細胞は本カテゴリーの主要な標的の1つであり、がんの迅速かつ完全な根絶のために、カテゴリー2で開発されたハイドロゲルによって誘導されたがん幹細胞 (CSC) の機序は、AFIR法によって理解される。国立がん研究センター (東京) の研究者と協力して、がんの早期発見と診断につながる血中腫瘍細胞を標的とした液体生検の新しい戦略を開発する。臨床がん治療法として、腫瘍学グループを含む北海道大学病院では、Marc Ladanyi博士 (Memorial Sloan-Kettering Cancer Center, MSKCC, New York, USA) と協力してMSK-IMPACTなどの癌遺伝子パネルを使用した高精度医療を実現する。さらに北海道大学で開発された化合物ライブラリーは、CSCを標的とした抗がん剤のスクリーニングに利用する。最終的には化学反応創成学による疾患や疾病の予測・予防を目指す。

2) -3. 研究推進体制

- ・ 研究組織、支援組織、事務組織等の研究体制を、構築の考え方及び人員構成を含め記載すること。
- ・ 組織構築の最終目標を達成するための具体的計画 (時期・手順など) を併せて記載すること。
- ・ サテライト的な組織を設置して国内外の他の機関との連携を行う場合は、当該連携先機関の名称、拠点構想における役割、人員構成・体制、ホスト機関と当該連携先機関の間の協力の枠組み (協定等の締結、資金のやりとりの考え方等) 等について記載すること。
- ・ サテライト的な組織を設置しないものの、国内外の他の機関との連携を行う場合は、当該機関の名称、拠点構想における役割、連携の概要等について記載すること。
- ・ 添付資料5 「主任研究者リスト」を添付すること。(一次審査から変更があった場合は、変更理由とともに変更点を明記すること)
- ・ 添付資料6 「主任研究員個人票」を添付すること。
- ・ 添付資料7 「拠点を構成する人員」を添付すること。
- ・ 添付資料8 「海外、国内他機関から招へいする研究者の拠点構想参加の意思を示した書簡」を添付すること。

世界トップレベル研究拠点プログラム

【研究体制】

計算科学分野： 拠点長を務める前田は、世界的に注目を集めている反応経路自動探索法 [AFIR法; PCCP 2013 (トップ1%論文)]の開発者である。この自動探索法は、多様な化学反応の反応経路ネットワークを描き出す。この反応経路ネットワーク構築が本拠点の融合研究の要となる。励起状態が関与する反応は、光反応過程の計算経験が豊富な武次が高精度計算を行う。また、高分子やゲルを取り扱う際に生じる複雑性の問題を解決しマクロ分子や複雑系カテゴリーに展開するため、高分子モデルの計算科学を専門とするRubinstein (米・デューク大) がPIとして参画する。これらPIに加え、計算科学に精通した特任教員 (特任准教授、特任助教) と博士研究員を配置し、小分子反応の高精度計算から、巨大分子のモデル化、複雑系の取り扱いを実現する。

情報科学分野： 計算科学・実験科学が生み出すミクロからマクロまでの広範囲におよぶ反応に関する膨大なデータを精査・選別し、巨大分子や複雑系を計算するための適切な数理モデルを構築することで、計算科学と実験科学のギャップを埋め、両者の間の橋渡しを可能にし、反応開発を高速化する。データマイニング研究の第一人者である有村は、本拠点の横断研究で蓄積される計算および実験上の大規模データの効率的な統計的処理を先導する。Varnek (情報化学、仏・ストラスブール大学) は、分子スクリーニングおよび反応設計のための最先端の化学情報学的方法を用いて、小分子カテゴリーの計算科学および実験科学の融合を行う。数理科学を専門とする小松崎は、高分子や複雑系の数理モデル化を行う。機械学習の専門家である瀧川は、多様な種類の利用可能なデータから最大限の情報を抽出するために、機械学習とデータ科学に基づく予測モデルを構築する。これらアプローチは、実験の最適化ならびに機能材料および生命科学関連分子の設計・発見のための合理的な戦略を提供する。

実験科学分野： 計算科学・情報科学が導出する反応を、多様な分子スケールの合成・分析に秀でた実験科学者が実証し、化学反応創成学のアウトプットを創出する。小分子が関わる高付加価値反応カテゴリーの開発では、医薬品から機能材料まで広範な分子を標的とし、副拠点長の伊藤 (合成化学) と澤村 (触媒化学) が遷移金属触媒反応を、反応設計の世界的権威であるList (反応設計、独・マックスプランク石炭化学研究所) が有機触媒反応を駆使して取組み、試行錯誤に頼らない効率的な反応開発を行う。マクロ分子カテゴリーでは、武次がもつ励起状態の計算手法を組み込み、長谷川 (光学材料化学) の発光性材料に関する反応開発に適用する。ゲル材料の専門家であるGong (ポリマー科学) は、外部刺激によって強靱化する材料、劣化部位が可視化される材料など、環境応答性材料の創出を行う。猪熊 (構造化学) は、マクロ分子の構造解析と情報科学へのフィードバックを行い、マクロ分子カテ

化学反応創成学

計算科学

- **拠点長 前田 理** (計算化学)
反応経路自動探索法の高性能化・反応探索
日本学術振興会賞・CREST 研究代表 / *Science*, *JACS*, *Angew. Chem.* 等
- **武次 徹也** (量子化学)
励起状態計算による発光材料開発
NIMS ナノ材料科学環境拠点 (GREEN) リーダー / *Science*, *JACS*, *Adv. Mater.* 等
- **Michael Rubinstein** (物理学)
デューク大学、北大卓越教授
高分子物理による大スケール計算
Co-chair, Gordon Research Conference / *Nature*, *Nature Materials*, *Science* 等

情報科学

- **有村 博紀** (データマイニング)
小分子の反応経路列挙・選別・探索高速化
GCOE 拠点リーダー・特別推進研究
- **Alexandre Varnek** (情報化学)
ストラスブール大学
反応データベース・分子スクリーニング
Vice-president of the French Society of Chemoinformatics
- **瀧川 一学** (機械学習)
反応ネットワークモデル化・データ駆動予測
さががけ代表 / *Nature Comm.* 等
- **小松崎 民樹** (数理科学)
巨大分子系の数理モデル化・データ駆動科学
Sci. Rep. 編集委員・CREST 代表 / *PRL*, *PNAS*, *Nature Comm.*, *Nature Chem. Bio.* 等

実験科学

- **副拠点長 伊藤 肇** (合成化学)
多元素を含む新反応開発・小分子
日本化学会学術賞・さががけ・NEXT / *Nature Chem.*, *Nature Comm.* 等
- **澤村 正也** (触媒化学) 北大卓越教授
遷移金属 / 新触媒反応開発・小分子
日本化学会学術賞・名古屋メダル (シルバーメダル)・ACT-C・さががけ / *Nature*, *Nature Chem.*, *Science* 等
- **Benjamin List** (反応設計)
マックスプランク石炭化学研究所
有機触媒による新反応開発・小分子
Thomson Reuters Highly Cited Researcher / *Nature*, *Science*, *Nature Chem.*, *Chem. Rev.*, *JACS* 等
- **長谷川 靖哉** (光材料科学)
高輝度・高耐久発光材料の開発・マクロ分子
日本化学会学術賞・文部科学大臣賞 / *JACS*, *Sci. Rep.*, *Angew. Chem.* 等
- **猪熊 泰英** (構造化学)
機能性結晶・高分子材料の開発・マクロ分子
永瀬賞特別賞・文部科学大臣表彰・さががけ / *Nature*, *Nature Chem.*, *JACS*, *Angew.* 等
- **Jian Ping Gong** (高分子化学) 北大卓越教授
生体適合性・自己進化ゲル開発・マクロ分子
RSC フェロー・日本化学会学術賞・高分子学会賞・基盤研究 (S)・特別推進研究代表 / *Science*, *Nature Mater.*, *Nature Comm.* 等
- **田中 伸哉** (腫瘍病理学)
新材料による細胞制御・機械学習・複雑分子
日本病理学会理事・日本癌学会奨励賞・日本病理学会奨励賞・Brain Tumor Pathol. 副編集長 / *Nature Str. Mol. Biol.* 等

アドバイザー・共同研究者

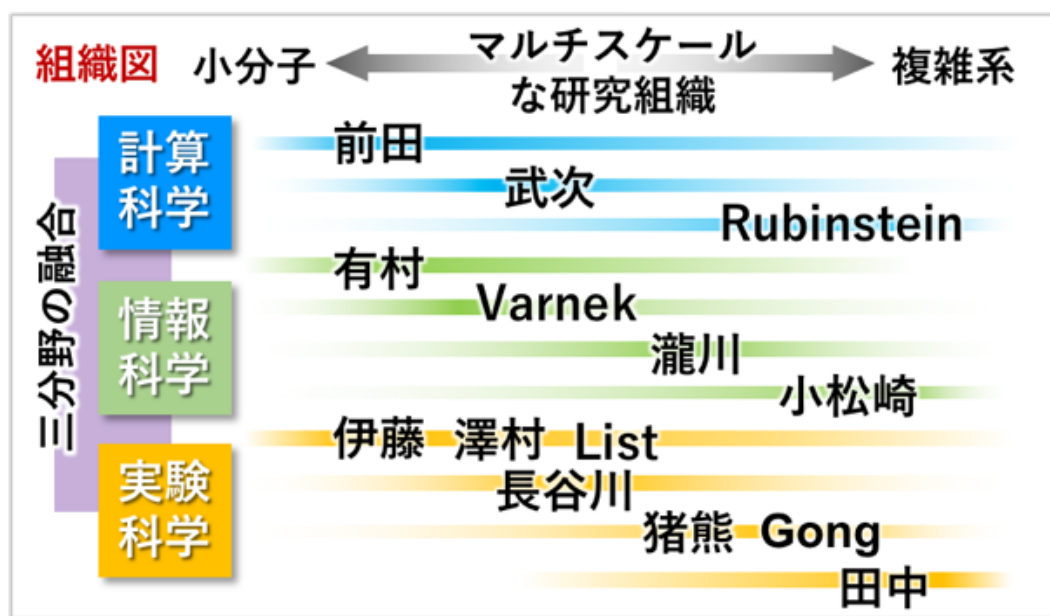
- **湊 真一** (情報科学) 京都大学
ERATO 代表・北海道大学客員教授

世界トップレベル研究拠点プログラム

ゴリーにおける情報科学的な計算量の低減を検討する。複雑系カテゴリーの実験的実証では、疾患機能解析を得意とする**田中**（腫瘍病理）がマクロ分子カテゴリーで得られた新しい材料を用いて複雑な細胞応答を解析し、疾患で破綻している反応系を情報科学と共同で効率的に導出する。そして、実験科学者が遺伝子操作を必要としない革新的再生医療や、がん細胞の多様性を克服する新規がん診断治療など、先駆的医療の実現化に必須となる細胞応答制御が可能な生体適合材料の開発を目指す。

融合研究拠点および連携組織： 本拠点では三分野の研究者に加え、事業全体に関わるコーディネーター、サポートスタッフ約30名を含めた計100人規模で研究を推進する。クロスアポイントメント制度などを用いて海外PIを招へいし、Co-PIのスタッフ、博士研究員が北大に常駐するサブ研究室の設置を促すと共に、次世代若手リーダー育成にも貢献する。PI研究者がホストとして海外からの研究者を積極的に受け入れ、融合領域三分野の研究を教授し、人材育成と共同研究の強化を図る。

「MANABIYA（学び舎）システム」と称する反応開発に関する共同研究と学びの場を創設し、海外研究者20名、大学院生50名程度の短期滞在者が常に循環する状態を目指す。小分子およびマクロ分子カテゴリー研究では、それぞれ名古屋大学ITbM、国立研究開発法人物質・材料研究機構（NIMS）など他のWPI拠点や海外の研究所、企業と連携するとともに、本研究に関連の深い湊（京都大）からのアドバイスも受けつつ共同研究を実施する。このような加速化された化学反応創成研究拠点が生み出す連携研究にも注力し、世界的な計算科学・情報科学・実験科学融合の拠点としての役割を果たす。



世界トップレベル研究拠点プログラム

a) 主任研究者（教授、准教授相当）

- 添付資料 7 の表 a) を貼り込むこと。

(人)

	事業開始時点	平成30年度末時点	最終目標 (平成35年3月頃)
ホスト機関内からの研究者数	11	11	11
海外から招へいする研究者数	3	3	3
国内他機関から招へいする研究者数	0	0	0
主任研究者数合計	14	14	14

b) 全体構成

- 添付資料 7 の表 b) を貼り込むこと。

		事業開始時点		平成30年度末時点		最終目標 (平成35年3月頃)	
		人数	%	人数	%	人数	%
研究者	研究者	14		32		53	
	外国人	3	21.4	10	31.3	16	30.2
	女性	1	7.1	2	6.3	6	11.3
	主任研究者	14		14		14	
	外国人	3	21.4	3	21.4	3	21.4
	女性	1	7.1	1	7.1	1	7.1
	その他研究者	0		18		39	
	外国人	0	-	7	38.9	13	33.3
	女性	0	-	1	5.6	5	12.8
研究支援員数		3		15		28	
事務スタッフ		6		10		10	
構成員の合計		23		57		91	

2) -4. 研究資金等の確保

過去の実績

- 拠点構想に参加する主任研究者が過去に獲得した競争的資金等の研究費の年度別合計（平成25年度～29年度）を記載すること。

2013年度から2017年度までの11国内PI（総PI数：14）が取得した研究資金の総額の過去の実績：
 471,573,750円（2017年度）；525,511,632円（2016年度）；359,291,752円（2015年度）；
 361,013,030円（2014年度）；463,468,450円（2013年度）；2,180,858,614円（2013～2017年
 度）

世界トップレベル研究拠点プログラム

拠点設立後の見通し

- ・ 上記実績を踏まえつつ、本プログラムからの支援額と同等程度以上のリソースを、どのようにして確保するのか、具体的な見通しについて記載すること。
- ・ その際、競争的資金等の研究費については、拠点に参画する研究者の獲得した研究費のうち、当該拠点の研究活動に充てる額を参入すること。また、研究費の獲得の見通しについては、上記実績を踏まえた現実的なものとする（平成 30 年度～平成 34 年度）。

【研究資金等の確保に関する方策】

本WPI構想では、最大5.6億円程度の研究資金の確保を予定している。本拠点の国内PIは、平成29年度実績で約4.7億円の研究資金等を獲得している。ここに、PIの研究室に所属する若手研究者(29年度実績で約1.4億円)と海外PIが獲得する外部資金を加えることで、研究活動が十分に推進できる。ホスト機関からの現物供与を含むコミットメントを併せ、WPI補助金と同程度の運営資金を確保する（充当計画を参照）。当該WPI拠点ではPIの年齢が若手（30代）から50歳前後まで幅広く分布しており、継続的に数億円規模の研究費が確保できる。また、化学分野や情報科学分野で公募される事業費への応募を促進し、研究資金を確保する。加えて企業との共同研究コンソーシアムを立ち上げ、民間の資金を積極的に獲得する。

3) 融合研究

- ・ 研究対象において融合される研究領域と、異分野融合の必要性と重要性、この異分野の融合等によりどのような新領域の開拓が期待されるのかについて記載すること。また、異分野融合とそれによる新たな領域の開拓を推進する戦略についても具体的に記載すること。

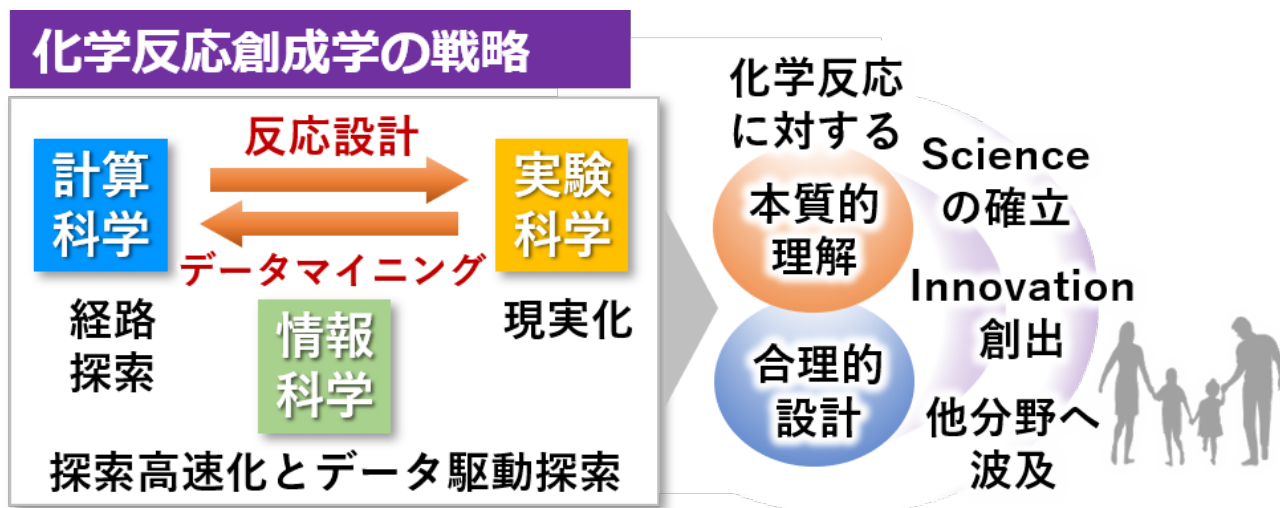
【異分野融合研究の必要性と意義について】

化学反応に関係する産業はトータルで年間500兆円規模のインパクトをもち、人類の活動のなかでも特に重要である。その深い理解に基づく合理的設計が実現すれば、恩恵は極めて大きい。しかし、量子力学をベースとした計算科学を用いて化学反応を理解しようとすると、化学反応パターンには無限に近い組み合わせが生じ、計算時間が膨大になる。拠点長の前田が開発した「反応経路自動探索法」は、仮想的な力を計算上で発生させ、分子同士を近づける、または引き離すという操作を行うことにより、化学反応に重要な分子の挙動のみを抽出しネットワーク化できる。**しかし、より複雑な現実系では、計算量が大きくなり実行が難しいことから、情報科学の手法を組み合わせ、高速化アルゴリズムや、計算をパターン化することで、計算量を劇的に低減する。**実験科学者は、計算科学者や情報科学者と協力して提案された反応の実証検証を行う。さらに、実験科学からのフィードバックに加えて実験データを情報科学的に処理することにより、新たな洞察を抽出して設計に生かす。**この三分野の融合によって化学反応の高度な理解と合目的・高速開発を目指す学問が「化学反応創成学（CReDD）」である。**この「化学反応創成学」の実現により、物質の生産や産業活用にとどまらず、地球環境や生命分野など、化学反応が関係する分野すべてがその恩恵を受けられるため、多大な波及効果が得られる。北海道大学内の共同研究では大きな成果が得られており、融合研究拠点の素地はすでに整っている。

例えば、拠点長の前田(計算科学)と副拠点長の伊藤(実験科学)は、反応経路自動探索法によってこれまでの実験科学の知見からは想像がつかなかった新しい反応機構の説明に成功している(JACS **2015**)。また、武次(計算)は、伊藤(実験)・長谷川(実験)と共同で、それぞれ新しい機能材料の開発に成功している(JACS **2017**)。瀧川(情報)は、学内の実験科学者との共同研究で、計算科学

世界トップレベル研究拠点プログラム

と機械学習を用いた新しい触媒反応の開発に世界に先駆けて成功している(RSC Advances **2016**)。しかし、この三分野の融合研究を成功させるためには、個別の二分野間共同研究を続けているだけでは達成できず、拠点形成を通じて一箇所で同時に活動する事が必要である。本拠点では、融合研究の中で、各研究者が新しい段階に達して画期的研究成果を得るだけでなく、三分野を全てマスターした若手人材を育成し、その成果や人材を世界中に広げることを同時に遂行する。



【融合研究をすすめるための具体的な戦略】

三つの分野の研究者が「**北海道大学 創成科学研究棟 (CRIS)**」に集まり、一つの建物の中で密接な研究交流を行う。異分野の研究者が定期的に集まるティーミーティングの場を設け（**インターサイエンスカフェ**）日常的な交流を促すと共に、高品質・常時接続のTV会議室を設置し海外のサテライト等との交流・連携を密に行う。さらに海外や国内にある連携拠点の若手研究者や学生を、本拠点に招致して3か月程度滞在させ、共同研究を通して新しい反応開発手法を習得させる。これを**MANABIYA（学び舎）システム**とよび、**海外研究者20名、大学院生50名の参加者(MANABIYANとよぶ)**を招致する。共同研究のなかで習得した新しい手法を、それぞれの研究者が、反応開発において将来に渡って活用する。**10年後には、世界中のトップ研究者から若手研究者まで500人が所属する巨大なMANABIYANネットワークが完成し、新分野の更なる発展を支える。**

北海道大学は一つのキャンパスに大半の大学院や研究所等が集まっており、他の分野の研究者との協働が容易である。この利点を生かして、本拠点を中心とした大学全体での協働を推進する。

世界トップレベル研究拠点プログラム



世界トップレベル研究拠点プログラム

4) 国際的研究環境

4) -1. 国際的研究推進体制(拠点を構成する研究者等)

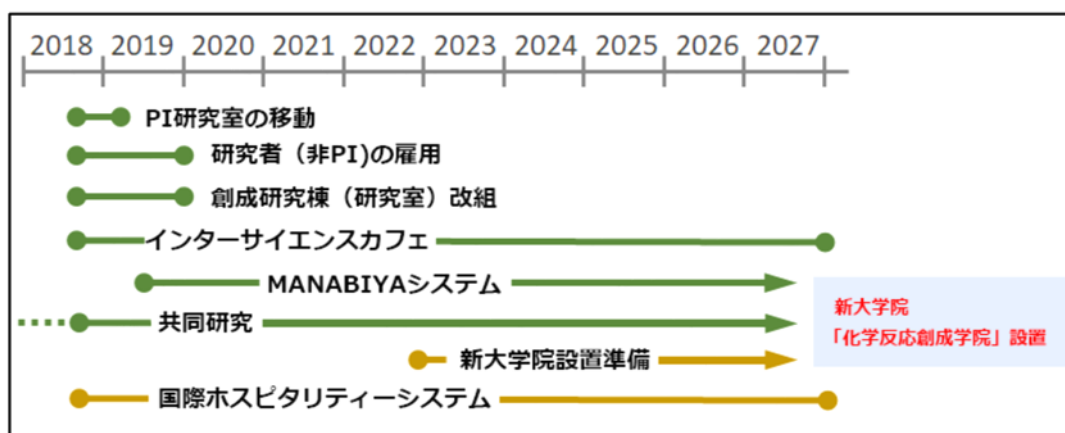
- ・ 拠点における外国人研究者の構成、海外機関へのサテライト的な機能の設置等、国際的研究拠点の構築に向けた具体的計画（時期的なものを含む）を記載すること。
- ・ 研究者（ポスドク等）を国際公募により採用するためどのような措置をとるのか、手順も含め具体的に記載すること。

本WPI拠点では、海外の研究機関から招聘する3名の世界トップ研究者が融合研究に参画する。PIの一人であるアメリカ・デューク大学のRubinsteinは、高分子理論物理学の世界的研究者である。Rubinsteinは、2016年より後述の北大国際連携教育局（GI-CoRE）の招聘教員として北海道大学からの称号も付与され（Distinguished Prof.）、ソフトマターに関する連携研究を展開中である。本拠点でさらに融合研究を強力に推し進める。また、フランス・ストラスブール大学のVarnekは、情報化学の専門家として教科書の執筆をはじめ、教育を含む専門分野の普及にも力を入れている情報化学の世界的リーダーであり、情報科学分野のPIとして招聘し融合研究に参画する。実験科学分野では、ドイツ・マックスプランク研究所のListが参画する。Listは、有機触媒という新しい分野を切り開いた反応設計の第一人者である。海外PIは自身が所属する研究機関と本WPIを兼任し十分な期間本拠点に留まる（約2ヶ月）。さらに、**本拠点内に海外PIの研究グループを設置し、それぞれ海外PIと密接に協力して研究グループを取り仕切るCo-PI（特任准教授・特任助教などのスタッフ）を配置する。**海外PIはCo-PIと共同で研究を推進するために、頻繁にテレビ会議を利用して本拠点へのエフォートを確保する。Co-PI制度は名古屋大WPI(ITbM)で大きな成功を収めており、類似の制度は、米国MITとシンガポール大学とのSMARTプログラムなどで実のある成果をあげている。世界トップクラスの海外PIとCo-PIが連携して本WPI拠点に研究チームを形成し、チーム間の相互交流を含めた高水準の研究環境を構築し、技術国日本の将来を担う人材を継続的に育成・輩出する。また、前述の外国人PIは、前述のMANABIYAシステムの中核として、海外所属研究機関から若手参加者の派遣を推し進める。

北海道大学では、中長期戦略として、総長直轄の**国際連携研究教育局（略称GI-CoRE）**を2014年に設置し、本学が強みとする研究分野において、これまで六つのGI-CoRE拠点を立ち上げ、大学の自主的な経費をもとに組織的な国際共同研究の推進・支援を行ってきた。その中で**特にソフトマターGI-CoREと情報科学GI-CoREの二つは、本WPIにつながる共同研究の場として有効に機能しており、本WPIにおいても重要なサブ組織として有機的に組み込む。**ソフトマターGI-CoREでは、PIのGongが拠点代表者を務めており、強力に連携研究を推進する。さらにデューク大学（ソフトマターGI-CoRE）、マサチューセッツ大学アマーフト校（情報科学GI-CoRE）との組織的連携を継続的に推進する。その他にも、エモリー大学（計算科学）、スイス連邦工科大学チューリッヒ校（実験科学）、北京大学（実験科学）、ストックホルム大学（実験科学）とも共同研究およびMANABIYA(学び舎)システムを通じて緊密に連携し、相互の研究者交流を図りながら本拠点の国際的研究環境を構築する。

世界トップレベル研究拠点プログラム

国際連携先	国	学び舎システム	共同研究	大学間協定など
ストラスブール大学 【海外PI】	仏	●	●	●
マックスプランク研究所 【海外PI】	独	●	●	
デューク大学 【海外PI】	米	●	●	● ソフトマターGI-CoRE
ESPCI	仏	●	●	● ソフトマターGI-CoRE
マサチューセッツ大学	米	●	●	● 情報科学GI-CoRE
スイス連邦工科大学	スイス	●	●	●
ストックホルム大学	スウェーデン	●	●	●
エモリー大学	米	●	●	
北京大学	中国	●	●	●



4) -2. 国際標準の研究環境

- ・ 国際的な研究環境および事務体制の整備、海外からの研究者支援の方策（例：英語による職務遂行が可能なスタッフ機能の整備、スタートアップのための研究資金の提供など）を具体的に記載すること。
- ・ 研究者から教育研究以外の職務を減免するとともに、研究者が快適に研究できるような環境を提供するため、どのような措置をとるのか（例：種々の手続き等管理事務をサポートするスタッフ機能を充実させる）、時期・手順も含めて具体的に記載すること。
- ・ 世界トップレベルの研究者を集めた国際的な研究集会を定期的（少なくとも年1回）に開催するため、どのような措置をとるのか、時期・手順も含めて具体的に記載すること。

外国人 PI が可能な限り障害なく研究環境の確立と研究活動の開始を実現するために、グループ設立のための**スタートアップ研究資金**を提供する。**英語が拠点内の言語になる**ため、研究活動、コラボレーション、出版物、および管理作業の十分なサポートを確保するために、管理運営業務や研究支援業務を実施する英語に堪能なスタッフを配置する。また、研究の効率化を図るため、外国人 PI や研究者とその家族にビザや住居などの研究以外の生活支援を行う**国際的なホスピタリティ**

世界トップレベル研究拠点プログラム

支援システムを構築する。このシステムは、既に設立されている GI-CoRE と北海道大学国際連携機構の資源を活用する。また、外国人研究者と日本人研究者および学生との効果的な連携を可能にする国際化促進プログラムを実施する。世界トップクラスの研究者を本拠点に頻繁に招へいし、国際シンポジウムを開催する。MANABIYA システムの一部は、拠点内の多様化を促進し、国際ネットワークを構築し育成するために、若手外国人研究者と日本の大学院生との短期交流プログラムとなる。

- ・ 外国人研究者に関しては2割以上（スタート時14人中3人）とし、本拠点で新たに雇用する特任教員、博士研究員はいずれも**国際的公募により選考、研究者全体の30%程度を外国籍とする。**
- ・ **海外PIの研究チームにはスタートアップのための研究資金を提供し、採択後スムーズに研究を開始できる環境を整える。**
- ・ **WPI内での言語は英語**とし、英語により拠点の管理運営業務や研究支援業務を実施できるスタッフを配置。
- ・ **すでに設立されている北海道大学国際連携機構を通じた外国人研究者への多面的なサポートを実施する。**
- ・ さらに拠点内に**国際支援ホスピタリティシステム**を構築し、海外PIや研究者とその家族の生活支援を行い、安心して研究に専念できるよう配慮する。日本人研究者や関連学生が外国人研究者と効率的に協働できるように、国際化促進プログラムを実施する。
- ・ 連携研究機関を中心に**世界トップレベルの研究者を定期的に招聘し、国際シンポジウムを年次ごとに開催**
- ・ **「MANABIYA(学び舎)」システムにより、3か月程度の期間で海外の若手研究者、大学院生を循環させ、拠点内の国際化・多様化を進めるとともに国際的な人的ネットワークを形成する。**

5) 拠点運営・システム改革

5) -1. 運営

- ・ 拠点長、事務部門長の役割について記載すること。
- ・ 事務部門の構成の考え方、拠点内の意思決定システム、拠点長とホスト機関側の権限の分担等について具体的に記載すること。
- ・ 研究成果に関する厳格な評価システムと能力に応じた俸給システム(例えば年俸制等)を導入するため、どのような措置をとるのか、時期・手順も含め具体的に記載すること。

WPIプログラムを中核とした本拠点構想を持続的に発展させるため、計算科学の分野で世界をリードする若手教授の前田が専任の拠点長として、10年以上の長期にわたり責任を持って拠点を運営する。また組織運営の経験が豊富な世界トップレベルの実験科学者である伊藤を副拠点長に据える。拠点長が思い描く世界最高水準の計算科学・情報科学・実験科学の融合領域の創出、世界の頭脳が集い循環する国際的な研究・教育環境の整備を実現するため、「化学反応創成研究拠点」を全学の組織である創成研究機構（CRIS）の建物内に設置する。**拠点長は拠点の運営にかかわる重要な事項（例えば、人事や予算の執行について）に関する意思決定権を有し、拠点長の裁量により自由に使用できる経費（年間1,000万円以上）を大学より措置される。**事業開始時は若い拠点長を経験豊富な副拠点長が支える共同マネジメント体制とし、中長期的には拠点長がトップダウン的に意思決定する体制に移行する。**拠点長の意思決定を支援するため、副拠点長、事務部門長および大学本部組織から出向するURAによる運営委員会を設置する。**PIが研究に専念できる環境とするため、PIの運営会議への参加は不要とし、必要に応じてPIが拠点長へ運営について直接進言できる体制を整える。大学で既に導入されている成果評価システムをベースに、**研究成果や能力に応じた俸給システムを再構築し、研究者を適切に評価する制度を整える。**本拠点の最終目標を達成すべく、**拠点長主導で研究の進展や方向性により定期的に各PIの役割の再検討や評価を行い、インセンティブの付与、**

世界トップレベル研究拠点プログラム

PIの交代等を実施する。

研究支援部門

事務部門長として、大学での研究と企業との共同研究・知財化とマネジメント、教育プログラムのマネジメント等の経験豊かな山本を置く。補佐として本部から出向するURAを配置することで、大学本部と直結した組織として機能させる。WPI対策室を設置し正規職員を担当者として置くことにより、事業開始時よりスムーズな研究支援を行う。海外PIや外国人研究者・学生の支援・国際シンポジウムの運営等を行う「国際企画担当」、Web管理・イベント運営等を行う「広報担当」、研究者・学生の受入れや産学官連携業務等を行う研究企画担当を配置した「研究戦略ユニット」を設置し研究者が快適に研究できる環境を常に提供する。

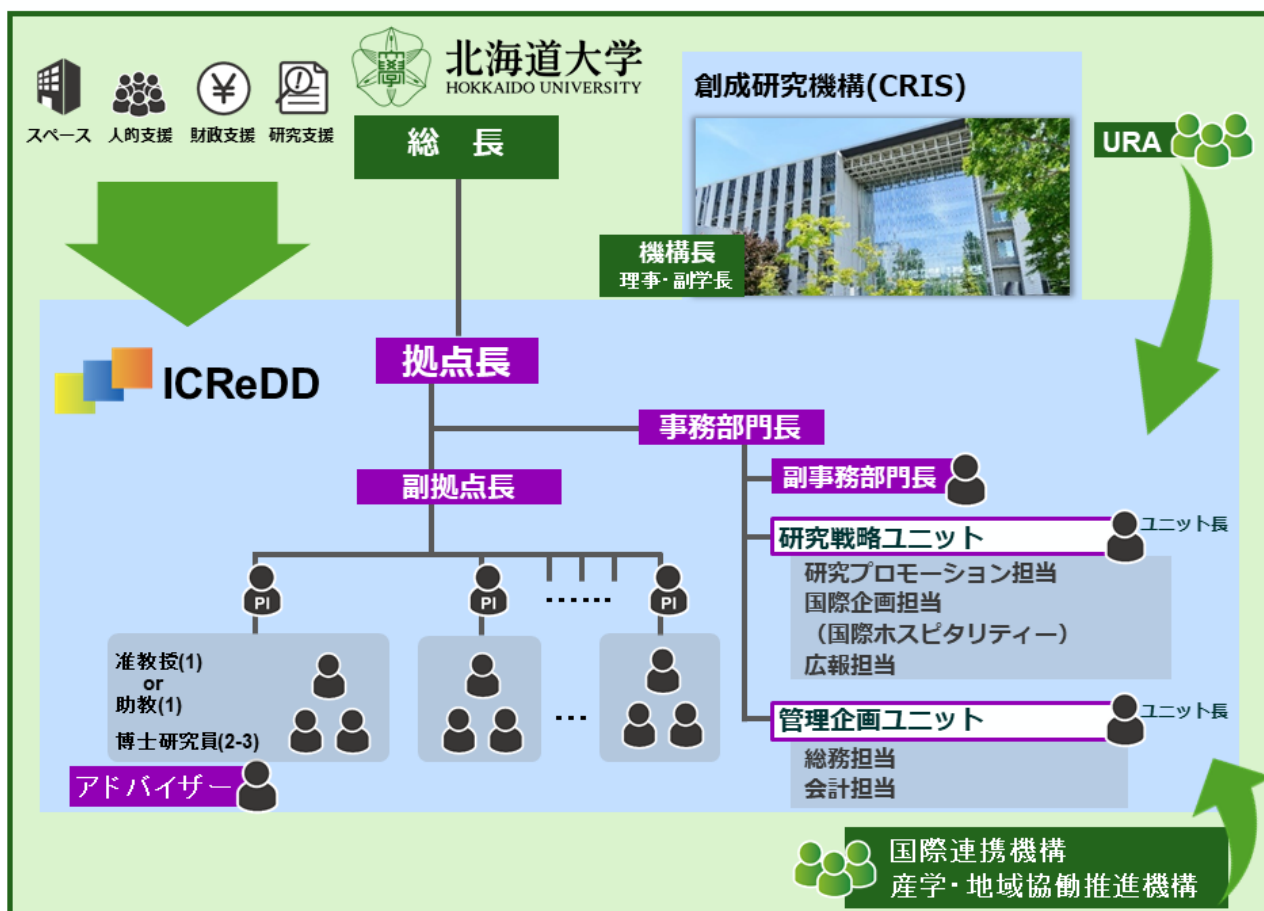
5) -2. 環境整備

- ・「世界トップレベル拠点」としてふさわしい研究室、居室等の施設・設備環境を整備するため、どのような措置をとるのか、時期・手順も含めて具体的に記載すること。
- ・研究者の大学院教育への参画について、どのような配慮に努めるのか具体的に記載すること。
- ・上記のほかに、世界から集まるトップレベルの研究者が、国際的かつ競争的な環境の下で快適に研究に専念できるようにするための取組があれば記載すること。

事業開始時はPIの研究室に加えフロンティア応用科学研究棟に共同研究スペースを確保すると共に、創成科学研究棟のスペースを改修し、確保された1000 m²を本拠点の中核となるスペースとして研究者を集め、融合研究を推進する。2年目以降に順次創成科学研究棟内のスペースを拡充する。また、分野を越えて研究者が集まり軽食をとりながら異分野間で研究ディスカッションを行う「インターサイエンスカフェ」、**国内外の若手研究者や学生を本拠点に招致して1～3か月程度滞在することで本拠点内の三分野の手法を習得すると同時に共同研究を実施する「MANABIYA(学び舎)システム」**など、拠点長のビジョンにある世界中の研究者が集い、垣根を越えて知識を融合して共同研究を行い、人々が次々と循環する世界に開いた研究拠点を拠点長主導で構築する。本拠点は、MANABIYAに訪れる20人の外国人研究者と50人の大学院生からなる短期ビジターの継続的な循環を目指し、本拠点で開発した知的リソースを提供する新しい大学院設立を目指す。北海道大学で既に設立されているGI-CoREと国際連携機構のリソースを活用した国際的なホスピタリティ支援システムは、外国人PIや研究者およびその家族に対して、研究以外のビザなど多面的な生活支援を行う。結果として、外国人研究者は安心して研究に専念でき、研究の効率化が促進される。本拠点に所属する優秀な研究者は、競争的な審査を経て選ばれたのちテニユアのポジションに就き、国際的に最前線の教育と研究の継続を確約される。(フォーム5-4-2参照)。創成研究機構グローバルファシリティセンター(GFC)が保有する共用機器や最先端機器160台の利用・分析料金の大学からの支援に加え、**本拠点で整備する分析機器の維持・管理業務をGFCが担い、研究者が研究に専念できる環境を整える。**国際連携機構が本拠点で雇用する外国人研究者とその家族のための住環境を整備する。

世界トップレベル研究拠点プログラム

化学反応創成研究拠点組織図



5) - 3. 自立化に向けた既存組織の再編と一体的な拠点構築

- ・当該拠点が 10 年間の支援終了後に自立化するよう、新たな研究拠点形成に際して、本プログラムによる支援と既存組織の再編をどのように一体的に進めていくのか、具体的に記載すること。
- ・ホスト機関内で十分に調整の上、自立化のために必要となる、既存組織の再編・外部資金獲得等を含むホスト機関の中長期的な組織運営の計画・スケジュールについて、具体的に記載すること。

大学本部からの十分なコミットメントにより、拠点の恒久的な組織化を進める。本拠点を将来的に大学の組織として浸透・維持するため、部局横断的な研究体制を運営するための全学組織である「創成研究機構」の組織改革を推進し、本拠点との融合を図る。**6年目以降、化学反応創成学をさらに深化・発展させるために、i) 化学反応創成学の中心領域（計算、情報、実験科学）を超えた研究分野を取り入れ、ii) 創成研究機構の改組を開始する。**本拠点の研究活動から得られた成果は、様々な社会的課題、特に生命倫理と公共政策など人文・社会科学の研究に波及する。**その結果、知的財産、安全性評価、科学技術倫理、および国際的な技術の運用基準などの人文・社会科学と科学・工学の融合により本学組織が再編される。**PIの本籍部局が整えたサポート体制によりPIの管理運営業務負担等を軽減し、PIの研究・教育エフォートを確保する。プログラムの立ち上げ時に本拠点は、大学から少なくともWPI補助金と同程度の運営資金（PIおよび研究スペースの研究費を含む）を確保

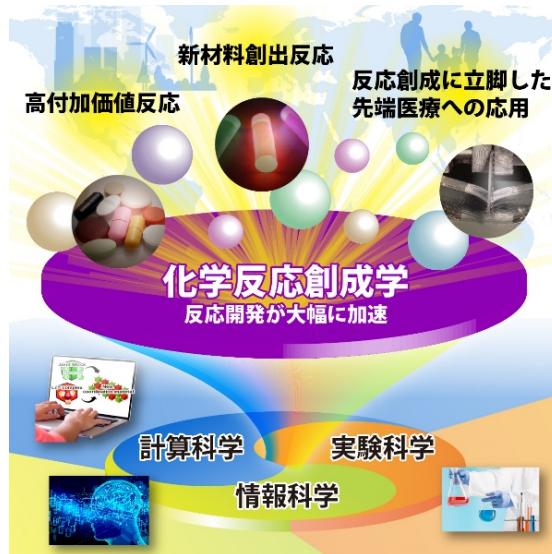
世界トップレベル研究拠点プログラム

し、本拠点を自立化する（6.充当計画参照）。6年目以降、大学の自主的な費用の割合を増やすことにより、本拠点は徐々に独立して拠点運営を継続する（フォーム5：ホスト機関の約束を参照）。さらに6年目以降、本拠点で確立した「化学反応創成学」、「MANABIYAシステム」を大学院教育に組み込み**新大学院「化学反応創成学院（仮称）」の設置を目指し、企業研究者の受入れや企業との研究コンソーシアムによる民間資金の獲得により恒久化を図る。**具体的には、創成研究機構のインフラの使用に加えて国際連携機構や産学・地域共同推進機構といった関連組織のリソースを活用して、企業共同研究を促進する（フォーム5-9-2参照）。本拠点は、「世界に誇るグローバルな頭脳循環拠点を構築する」という大学の近未来戦略の目標を達成するためのフラグシッププロジェクトとして、第三期中期目標・中期計画の中核を担い、北海道大学が真に国際化された教育・研究拠点へと変革する駆動力となる。

拠点長のビジョン

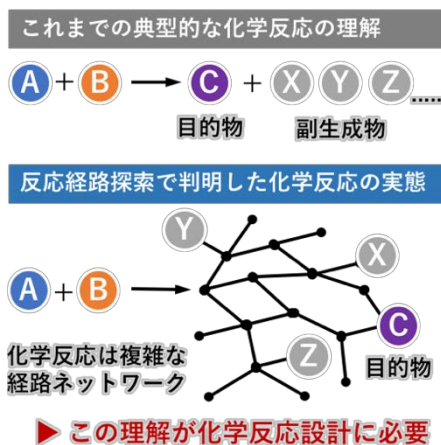
北海道大学・教授 前田 理

化学反応は人類を豊かにする鍵である。代表的な例は20世紀に発見されたハーバー・ボッシュ法であろう。窒素と水素から肥料の原料であるアンモニアを得るこの反応は、空気からパンを作る反応とも言われ、当時の世界的な食糧難を乗り切る鍵となった。もっと最近では、2010年ノーベル化学賞の対象となったクロスカップリング反応が有名である。この反応は、医薬品の約20%、ほぼ全ての液晶や有機EL材料に使用されており、年間60兆円規模の産業に関わっている。このように、**一つの革新的化学反応を開発することの意義は絶大であり、人類文明のありかたを左右する**。しかし、人類は今でも、化学反応を自在に設計し、発見できるだけの知識や技術を獲得できていない。新しい反応の開発は実験的なトライアンドエラーに頼っており、一つの反応を開発するためには数百数千回もの実験を繰り返すのが常套手段である。しかし、試行錯誤の努力を繰り返しても、真に革新的な反応が発見される確率は低く、**現状では有用な化学反応が開発されるまでには数十年単位の時間を要する**。そのため、これを解決する根本的な新しい科学の確立が必要である。



そこで本拠点では、**計算科学・情報科学・実験科学の融合によって、世界の反応開発をリードする「化学反応創成学」を構築する**。化学反応創成学とは、量子化学計算に基づく化学反応の本質の解明と、情報学的手法による化学反応の持つ複雑さに対する理解、実験的な実証とフィードバックを通じて**化学反応の自在設計を目指す新学問領域**である。本拠点において実施する量子化学計算は、計算者が仮定した反応機構を検証するだけの従来の量子化学計算とは異なる。未知の反応経路を予測できる量子化学計算こそが、科学の発展において真に求められてきた。この化学反応創成学では、拠点長の前田が世界に先駆けて開発した「反応経路自動探索法」をコア技術として用いることによって、「予測」のための量子化学計算を実施する。10年前は、化学反応の経路を量子化学計算に基づいて自動的に探索することは不可能と言われていた。前田は、「コンピュータ上で反応系を仮想的な力で操作し、疑似的に反応を引き起こす」という独自アイデアで、これまでできなかった「反応経路を自動的に見つけ出す」ことを可能とした。また、このアイデアに基づき、世界初の一般的な反応経路自動探索法である人工力誘起反応（AFIR）法の開発に成功している。このAFIR法は、学界だけでなく、産業界からも注目され、複数の企業が前田との共同研究を実施している。

さらに驚くべきことは、この新しい反応経路自動探索法で解析した「化学反応」は、これまで科学者が持っていたイメージとは全く異なるということである。単純な化学式の背後には、これまで明らかになっていない膨大な**反応経路ネットワーク**が存在したのである。反応経路ネットワークには、目的物へとつながる反応経路だけでなく、すべての副生成物とそれらに至る経路が含まれる。すなわち、そのような反応経路ネットワークを理解することによって、未知の反応を予測することに留まらず、必要としない副反応を阻止して目的物を選択的に得るための反応設計を行うことも可能となる。したがって、化学反応を自在に設計するためには、この**反応経路ネットワークを理解し、制御することこそが本質的に重要である**。



一方、前田が開発した反応経路自動探索法は、「複雑性」という重大な問題をはらんでいる。数原子のシンプルな反応であっても、その反応経路ネットワークは極めて複雑で、現実的には意味のな

世界トップレベル研究拠点プログラム(WPI)

いマイナーな反応経路と重要な経路との区別が容易ではない。したがって、反応経路ネットワークを理解するためには、情報科学の力を活用することが必要不可欠である。北海道大学には、経路列挙、データマイニング、機械学習など、複雑ネットワークの解析に関連する分野で世界トップレベルの研究者が揃っている。本拠点では、この情報科学者の力を結集して、量子化学計算による複雑な反応経路ネットワークの把握と、実験的実証に向けた重要な検討要素の絞り込みを行う。同時に、実験科学から得られた膨大な実験データを抽出し、意味のある実験データを計算科学側に引き渡すことで、反応経路ネットワークを得る計算を簡略化する役割も担う。

理論的な予測は、実証があつて初めて意味をなす。本拠点では世界トップレベルの実験科学者を集結し、計算科学、情報科学との融合を図る。これまでは、広大な化学反応ネットワークのもとで化学反応が進行するという概念が不足していたため、実験科学者は、膨大な試行錯誤を強いられてきた。これに対し、化学反応創成学では、まず反応経路自動探索により化学反応経路ネットワークを算出し、情報科学によって、実験的に検討する意味のある情報を抽出して実験条件を絞り込む。このため「決め打ち」的な実験が可能となり、化学反応の開発速度が大幅に向上する。本拠点に参画する実験科学者の多くが、計算科学もしくは情報科学との接点をすでに持っており、融合研究に障壁なく取り組むことができる。さらに実験科学のデータを、情報科学を通じて計算科学へとフィードバックすることにより、三つの分野が一体となって化学反応の設計手法を向上、洗練させる。

本拠点では、現実に存在する化学反応の課題を解決することを通して、「化学反応創成学」を完成形に導く。**現実的課題のターゲットとして（１）高付加価値反応（小中分子系）、（２）新材料創出反応（高分子系）、（３）反応創成に立脚した先端医療への応用（複雑系）、の三つを設定する。**

（１）は、CO₂から生体関連分子を合成する反応など、価値の低い材料から有用な物質を作り出す反応、（２）は、強発光性材料や刺激応答性材料など、先端的な機能を有する材料を創出する反応、

（３）では、開発した化学反応を活用して、人工関節などの生体材料の高機能化、再生医療やがんの診断治療など先端医療に臨床応用する先駆的材料の創成などに取り組む。これらは反応する分子の複雑さと環境に大きなバリエーションがあるが、本拠点ではそれらをカバーするために、幅広い研究対象を得意とする研究者を戦略的に集めた体制を構築し、これらのターゲットに取り組む。反応経路自動探索による反応予測例として、CO₂からのアミノ酸合成（高付加価値反応）が挙げられる。前田らによる 2004 年の予測経路が、2016 年に実験グループの手で実現された。一方、2004 年の予測が 2016 年まで実現されなかったのは、「化学反応創成学」がなかったためである。「化学反応創成学」は、AFIR 法によって得られる複雑な反応経路ネットワークから、価値の高い反応経路を情報科学的手法によって迅速に抽出し、実験科学者へとスムーズに提示することによって、社会的要請に基づいて人類が必要とする反応をタイムリーに発見することを可能にする。

さらに「化学反応創成学」を将来に渡って発展させるため、計算科学・情報科学・実験科学の三つの学問を使いこなす新世代の若手研究者を育成するシステムを構築する。**分野融合の成果を本拠点の中だけにとどめず、全世界へと広げる。そのために、計算科学・情報科学・実験科学の研究者が集い共同研究・教育を行う MANABIYA（学び舎）システムを構築する。**具体的には、おもに海外の実験研究者が 3 か月程度滞在し、本拠点内の計算科学や情報科学の研究者との実践的な共同研究を通じて、反応経路自動探索法や機械学習を習得した後、自国に戻り実験的な実証を行う。これにより、世界中の研究者が集い、人が次々と循環する世界に開かれた研究拠点となる。本拠点の発展だけでなく、世界中の化学反応を開発している大学、研究所（他の WPI 拠点を含む）、および企業の強力な後押しとなる。**将来的には、この MANABIYA システムを発展させ、新大学院「化学反応創成学院」を設置する。さらに、WPI を通じて獲得した様々な新しい運営システムを共有することによって、大学全体のシステム改革にも貢献する。**

人類は、様々な化学反応の発見を積み重ねることでその生活を豊かにしてきた。一方で、トライアンドエラーに立脚した反応開発では、エネルギーや資源の枯渇、汚染といった、大きな課題の解決には時間が足りない。「化学反応創成学」は、計算科学・情報科学・実験科学の融合によって反応開発の進め方を一新し、現在および将来の人类的課題を解決する。また、世界中に開かれた拠点の形成によって、その効果を全世界および他分野へと波及させることにより、豊かな未来社会の創造に貢献すると考える。

世界トップレベル研究拠点プログラム

ホスト機関のコミットメント

2018年6月1日

文部科学省 宛

国立大学法人 北海道大学

総長 名和 豊春

署名

「世界トップレベル研究拠点プログラム」に申請した「化学反応創成研究拠点」に関し、同申請が採択された際は、以下の事項について責任をもって以下のとおり具体的に措置していくことを確認する。

＜具体的措置＞

※ 以下のそれぞれの事項について、具体的措置を記載すること。

- 1) 当該拠点が真に「世界トップレベル研究拠点」となり、支援終了後に自立化できるよう、ホスト機関は、当該拠点をホスト機関の中長期的な計画に明確に位置付けた上で、助成期間中から機関を挙げて全面的な支援を行うこと。

※当該拠点のホスト機関の中長期的な計画における位置づけについて記載すること。

本学の中長期的な戦略は、大学の国際化に向けた教育と研究に関する先進的な計画に基づいている。2002年に、部局横断的な方法で境界領域研究を推進するために、創生研究機構（CRIS）が設立された。2014年には、2026年の創基150周年を記念して近未来戦略ビジョン150を策定し、その一部として差し迫った世界的な課題解決への貢献をビジョンとして設定した。このビジョンの目的を達成するために、本学の強みと特色を活かして国際共同研究教育を推進するための新たな機関として、国際連携研究教育局（GI-CoRE）を設立した。GI-CoREの短期目標は世界クラスの研究者のハブとなる優れた研究所となることで、GI-CoREの最終目的は、文部科学省の定める第三期の終わりまでに本学の再編と国際化を果たすことである。その目的を果たすために、本学はWPI研究拠点としての化学反応創成研究拠点の設立を提案し、GI-CoREとの連携を通して研究力を顕著に向上させる旗艦研究所として位置づけ、近未来戦略の実現のために最大限の支援を行う。本拠点はCRISという既存の枠組みを利用することで、既存のシステムとリソースを最大限に活用し、WPIへの本提案を推進させる。

本拠点が承認されたのち、WPI機関へのコミットメントを明らかにするために、第三期の中期目標と中期計画を見直し、本学を世界的課題解決に貢献する国際的な傑出した研究教育拠点へと改編させる原動力として本拠点を活用する。

- 2) ホスト機関は、当該拠点をホスト機関内の恒久的な組織として位置付け、自主的に運営していくために必要となる既存組織の再編等を含むホスト機関の中長期的な組織運営の方向性に係る基本方針の表明及び今後の具体的な計画・スケジュールの策定を行い、それを着実に実行すること。

※ホスト機関の中長期的な組織運営の方向性に係る基本方針と今後の具体的な計画・スケジュールの両方について記載すること。

本学はCRISの枠組みを基に本拠点を設置し、情報科学GI-CoREとソフトマターGI-CoREとの緊密な協力関係を築き、国際的研究拠点としての確立に向けて最大限の支援を行う。将来的に、人間

社会を変えるような成果を生み出す世界最先端の研究拠点となるために、WPIは研究の社会実装や本拠点の主要な3分野（計算科学、情報科学、実験科学）以外の研究分野とのさらなる共同研究を行う。そうした本拠点の先鋭的な成果を運営するために、CRISは新たな境界領域研究を先駆ける研究機関へ再編される。近く行われる既存組織の再編を通して本拠点の成果を最大限にするために、以下の内容を行う。

1. 提案した計画の実行にあたり、北海道大学はWPIプロジェクトの補助金と同じかそれ以上の物理的・金銭的リソース（研究スペースや、使用料を含む）を提供する。本拠点の独立性を徐々に高め、本学の一部として恒久的な機関とするために、6年目以降、本学は本拠点の予算への貢献の比率を高めることを計画する。
2. 本拠点が独立して持続的な活動が続けるために、6年目以降は優秀なWPI研究者に独自の資本を使ってテニユアの職を与える。そうした優秀な研究者はインパクトのある論文や大型の競争的資金の獲得のような研究活動に基づく厳格な審査によって選考される。また、拠点が活動が続けられるように、本学が本拠点に概算要求と部局横断型の外部資金の申請を行う権利を与える。
3. 6年目以降は、拠点で得られた知見を基にした大学院、「化学反応創成大学院」の設立を実行に移す。本学はWPIとの関連部局と協力して、既存の大学院の再編・統合を開始する。
4. 本学は企業との共同研究を推進し、本拠点独自の資金獲得システムを確立するために、本拠点と共同研究する企業や研究所との産学連携コンソーシアムの設立を支援する。
5. 拠点開設10年後、本拠点は本学において恒久的に独立した研究組織になる。大学評価委員会は本拠点の取組を評価し、そのシステムや方法論（研究・教育システム）を他部局へ応用する。

3) 当該拠点の運営及び研究活動の実施のために必要な人的、財政的及び制度的支援を行うこと。

本学はWPI補助金と同じかそれ以上の物理的、金銭的支援を、以下の方法で提供する。

1. 2017年10月にWPI対策室を設置し、専任の事務職員及び2名のURAを配置した。本申請の採択後には、WPI対策室員を順次増員し、WPI採択後は対策室をWPI運営の事務組織へと移行する。さらにスムーズな事業運営を確実にし、本拠点の国際的な方針を定めるために、英語が堪能な正規事務職員を雇用する。
2. 本学は拠点長候補者に1,000万円の研究費と120m²の研究スペースを無償で提供しており、異分野融合の研究をする環境を整えている。事業開始後に、創成研究棟を中心に1,000m²のスペースを用意し、採択後に占有面積を順次拡大させる。
3. PIの本籍部局における教育負担や管理運営業務負担を軽減することを目的として、関連部局に対し補償人員相当の件費（年間約5,000万円）を措置する。また、全学を挙げて取り組む大型プロジェクトに参画する教員の教育負担を補填することを目的とした「特任教授（退職教員活用型）制度」を創設した。さらに多様な財源を活用した研究者の雇用等、必要に応じて関係事業のための特別な規程等を認めるなどの措置を講じている。
4. WPI拠点の研究者が本学の共用機器を利用する際には、その利用料金を本学が負担し、拠点に着任した研究者がすぐに研究を開始できる環境を提供する。

4) 本プログラムの実施期間が終了した後も、当該拠点が自立化し、「世界トップレベル研究拠点」であり続けるために必要な支援を行うこと。

補助事業終了後も、本拠点は独立の研究部局として運営を続け、拠点主導で結果を残し、化学反応創成学に従事する人的資源の継続的な開発を行っていく。さらに、本拠点で得られた結果を基に産学連携を生み出し、促進させる。その目的のために以下のような段階が踏まれる。

1. 本学は5年目から本拠点に概算要求の権利を与え、本拠点は独自の財政基盤の確立を行う。
2. 助成期間の終了後、本拠点に所属する優秀な研究者は、競争的な審査を経て選ばれたのちテニユアのポジションに就き、国際的に最前線の教育と研究の継続を確約される。
3. 共同研究の促進と独自の財政基盤の獲得のために、本学は化学反応創成研究に取り組む研究所や

企業の間でコンソーシアムの設立を支援する。

5) 拠点運営に一定の独立性を確保するため、「拠点構想」実施にあたって必要な人事や予算執行等に関し、拠点長が実質的に判断できる体制を整えること。

本拠点が独立の機関となるまでは、本拠点はCRISの一部となるが、本学は例外的な規則を作り、本拠点の拠点長に拠点の運営にかかわる重要な事項（例えば、人事や予算の執行について）に関する意思決定権を与える。拠点長の意思決定を支援するため、本学は副拠点長、事務部門長、URAを含む運営委員会を設置する。さらに、本学は拠点長の裁量により自由に使用できる経費（年間1,000万円以上）を確保する。

6) 機関内研究者を集結させ、必要な環境整備を実現するにあたり、ホスト機関内の他の部局における教育研究活動にも配慮しつつ、調整を積極的に行い、拠点長を支援すること。

学内の他部局から本拠点に参画しているPIがWPIの研究に集中できる環境を整える。当該部局との調整は総長と副学長によって行われる。

1. PIの本籍部局における教育負担や管理運営業務負担を軽減することを目的として、補償として教育に係る各部局の人件費を措置する。さらに、特任教授（退職教員活用型）制度を創設する。
2. 本拠点の恒久的な継続に必要となる、パーマネントの研究者を雇用する様々な資金的リソースを使うためのシステムを構築する。

7) 機関内の従来の運営方法にとらわれない手法（英語環境、能力に応じた俸給システム、トップダウン的な意思決定システム、大学院教育との連携 等）を導入できるように機関内の制度の柔軟な運用、改正、整備等に協力すること。

本拠点での世界最先端の研究者の国際的な頭脳循環を実現するために、研究を最優先できる柔軟な運営に基づく組織体制とする。必要となる組織の再編は、拠点長、副拠点長や事務部門長に加えて、副学長の助言を受けて本拠点で働くURAからなる運営委員会の主導の下で実行される。

1. 本拠点はGI-CoREの活動を通して得られたソフトのインフラを駆使する、例として、他部局や海外の研究所との共同研究の枠組み、企業との国際的連携のノウハウ、新しい教育制度の開発手法、海外の研究者やその家族の日本での生活支援などが含まれる。
2. 本拠点では拠点長による意思決定と、異分野の研究背景を持つ運営経験豊富な副拠点長の支援を組み合わせた運営システムから始動させ、中長期的には境界領域研究でのトップ・ダウンの意思決定システムを確立させる。
3. 本拠点は、拠点長が主導する成果の進捗評価システムを導入する。そのシステムは、機関の予算の柔軟な運営同様に、研究成果に関する指標を中心とした自己評価システムからなる。
4. 総長は、共同研究の状況如何によって必要な際に人事組織の再編等を含む権限を本拠点の拠点長に委任する。
5. 英語が堪能な運営スタッフを本拠点に常勤させることで、事務環境における英語の使用を促進する。

8) 拠点の活動に必要なインフラ（施設（研究スペース等）、設備、土地等）を確保、提供、拠出すること。

本拠点への、CRIS建屋を含む学内インフラの提供は以下の通り。

1. プロジェクト開始時、CRIS内に1,000m² のスペースを用意し、使用に先駆けて改装後する。研究スペースはWPI期間に順次拡充する。

2. 本拠点の研究で合成された物質の分析にかかる費用と、世界に一つしかないアイソトープ顕微鏡システムや高分解能NMRといったオープンファシリティ内の先端機器の使用料は本学が負担する。
3. 異なる分野の研究者が英語で意見交換が行えるように、毎月英語で異分野の意見交換を行うランチミーティングの際に、WPIの研究者が集まれるような共通スペース（インターサイエンスカフェ）を用意することによって、特に若手の研究者が研究成果を広めていけるようにする。

9) その他、当該拠点が「拠点構想」を着実に実施し、名実ともに「世界トップレベル研究拠点」となるために最大限の支援をすること。

本拠点の目標を本学の第三期中期目標・中期計画へ組み込みつつ、本拠点の計画の実現に向けて、本学からの十分な支援を行うことにより、拠点は大学の恒久的で統合された機関となる。

1. 拠点と大学間の発展的かつ統合的な運営を進めるためにURAを副事務部門長として配置し、総長と副学長の情報交換を進める。
2. CRISのインフラの使用に加えて国際連携機構や産学・地域共同推進機構といった関連組織のリソースを活用して、本拠点を支援する。
3. 本学の再編に関与するプロジェクトとの協力とその成果を最大化させることで本拠点の計画を実現させることに協力する。そこには、研究大学強化促進事業（2013年度開始）による若手研究者の文部科学省の競争的資金獲得を促すセミナーや、スーパーグローバル大学創成事業（2014年度開始）を通じて培ってきた国際連携室の広報との協力を最大限に生かせるプロジェクトとの協働が含まれる。

10) ホスト機関は、当該拠点が達成した成果を自己評価し、ホスト機関自らが優れた取組として評価したもののについて、ホスト機関全体への展開・波及を図ること。

本学の評価委員会が本拠点の成果を評価し、例えば研究や教育のシステム（例、MANABIYAシステム）の中でも、成功したシステムや手法を本学の他の部局に還元していく。中でも、関連部局との連携を通して行われた教育活動で得られた本拠点の研究成果を反映して、重要な課題解決を担う次世代のリーダーを養成する。MANABIYAシステムのような本拠点の教育活動から得られた教育資源に基づいて、基礎科学・創薬・医療技術・素材やエネルギー科学といった境界領域問題を扱う学部の新設や再編を行う。それによって、本拠点は本学を真に世界最先端の研究教育拠点へ改革するきっかけかつ原動力となる。

11) すでにWPIプログラムによって形成された拠点を持つホスト機関については、既存の拠点を世界トップレベル拠点として維持・発展させるための十分な支援を行い、また、新たな拠点への十分な支援と、既存の拠点への支援の継続を両立させること。

※既存のWPI拠点を有するホスト機関のみ記載すること。

該当しない

12) すでにWPIプログラムによって形成された拠点を持つホスト機関については、既存の拠点の優れた成果を、自主的かつ積極的にホスト機関全体に波及させ、機関自らの改革につなげること。

※既存のWPI拠点を有するホスト機関のみ記載すること。

該当しない

主任研究者リスト

※ 主任研究者が10名を超える場合は、適宜行を追加してよい。

※ 「世界トップレベル」と考えられる研究者については、その氏名の右側に「＊」印を付す。

※ 年齢は、2018年4月1日時点とする。

※ プログラム開始時点で、当該構想に参加できないものについては、備考欄に、参加予定時期を明記する。

※ 一次審査から変更があった場合は、変更理由と共に変更点を備考欄に明記すること。

※ サテライト所属PIの場合は、備考欄にサテライト名を明記。

また、それぞれの主任研究者の業績等を「主任研究者個人票」に記載する。

	氏 名	年齢	現在の所属（機関、部局、専攻等）・役職	専 門	エフォート *（%）	備 考
1	前田 理＊	38	北海道大学 大学院理学研究院 化学部門、教授	計算化学	80%	拠点長
2	伊藤 肇＊	50	北海道大学 大学院工学研究院 応用化学部門、教授	有機金属化学	80%	副拠点長
3	有村 博紀＊	52	北海道大学 大学院情報科学研究科 情報理工学専攻、教授	計算機科学（アルゴリズム）	80%	
4	Jian Ping Gong＊	56	北海道大学 大学院先端生命科学研究院 先端融合科学研究部門、教授	ソフトマター・高分子科学	80%	
5	長谷川 靖哉＊	49	北海道大学 大学院工学研究院 応用化学部門、教授	光材料化学、錯体化学	80%	
6	猪熊 泰英	36	北海道大学 大学院工学研究院 応用化学部門、准教授	構造有機化学、錯体高分子化学	80%	
7	小松崎 民樹＊	53	北海道大学 電子科学研究所附属社会創造数学研究センター、教授	数理科学、情報理論	80%	
8	Benjamin List*	50	マックスプランク研究所、教授	有機化学、有機触媒	20%	
9	Michael Rubinstein*	61	デューク大学、教授	ポリマーの理論科学、ソフトマター科学	20%	
10	澤村 正也＊	56	北海道大学 大学院理学研究院 化学部門、教授	触媒化学 有機金属化学	80%	
11	武次 徹也*	53	北海道大学 大学院理学研究院 化学部門、教授	量子化学（AIMD法）	80%	
12	瀧川 一学	41	北海道大学 大学院情報科学研究科 情報理工学専攻、准教授	機械学習、データマイニング、ケモ/バイオインフォマティクス	80%	
13	田中 伸哉*	53	北海道大学 大学院医学研究院 病理系部門、教授	腫瘍病理学	80%	
14	Alexandre Varnek*	62	ストラスブール大学、教授	ケモインフォマティクス	20%	

*研究者の年間の全仕事時間（研究活動の時間のみならず教育・医療活動や兼業部分等、全ての業務等を含む）を100%としたとき、本WPI拠点の研究活動等を実施している時間の配分率（競争的資金等による活動であっても、本WPI拠点の目的に合致し、当該拠点において実施するものであれば、エフォートに含めることができます。）