

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

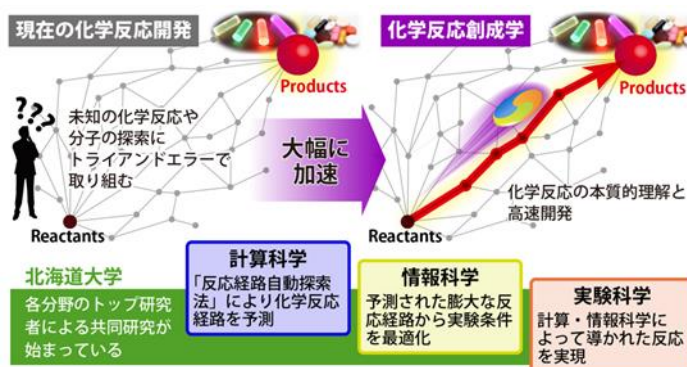
ホスト機関の長：寶金 清博、総長

拠点長：前田 理、大学院理学研究院、教授

事務部門長：石森浩一郎、大学院理学研究院、副学長

1) 拠点形成の全体像

化学反応創成研究拠点 (ICReDD) の究極の目標は、化学反応経路の複雑なネットワークを解析することによって化学反応を深く理解し、新しい化学反応の開発効率を加速することである。このような新しい化学反応は、先端材料を生み出し、エネルギーや天然資源の使用を削減するものであり、人類の豊かで持続可能な未来に不可欠なものである。私たちは、**計算科学、情報科学、実験科学を融合した研究環境で、この目的を達成する**。現在の試行錯誤な化学反応開発は、時間がかかり非効率的であることを考えると、ICReDDが開発する新しい化学反応開発手法は、科学分野全体を変革する重要な技術となる。量子化学計算に基づく最先端の反応経路探索手法を駆使し、情報科学者や実験科学者と連携することで、化学反応を本質的に理解し、先端的な化学反応や材料を効率的に開発できる新しい学問分野「化学反応創成学」を確立する。



2) 研究内容

化学反応創成学による新化学反応開発は、標的分子のサイズによって3つのカテゴリーに細分化される。カテゴリー1は、豊富で安価な資源（低分子；～100原子）に高付加価値を与える反応を創出する。例えばCO₂からのアミノ酸の合成などである。カテゴリー2は、高機能材料（高分子；～10,000原子）の合成に関するもので、例えば、高効率発光材料の合成や、宇宙エレベーター用の超高強度炭素材料の合成などである。カテゴリー3では、細胞や生化学反応の研究に使用され、カテゴリー2で開発された材料の一部は、新しい診断ツールや治療技術の確立など、先端医療（複雑分子；原子数10,000以上）に使用される。情報科学との共同研究により、前田の反応経路自動探索 (AFIR) 法は、標的構造への最適な合成経路を特定するために用いられる。そして、その理論予測に基づき、人類社会にとって重要であり、有望な物質が実験科学者によって合成される。

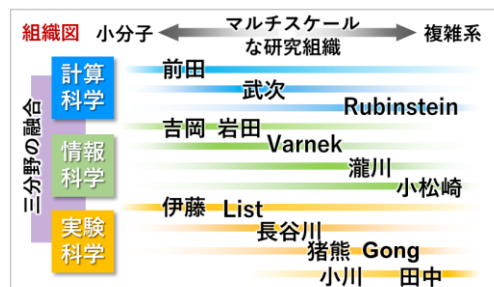
3) 融合研究

AFIRは、化学反応に重要な分子挙動を抽出することができる。しかし、AFIRをより現実的な系に適用する場合、複雑な計算に要する時間は長い。このことは、情報科学の高速アルゴリズムなどの技術を用いることで回避することができ、計算時間とコストを劇的に削減することができる。その後、実験科学者が提案された反応の検証を行い、実験結果は解析され、情報科学者の新たな洞察を引き出し、化学反応設計に応用するためのデータをフィードバックする。化学反応創成学の成功は、化学産業に直接関係する分野だけでなく、地球環境、生命科学、社会全般に恩恵をもたらす。したがって、ICReDDは、社会の

あらゆる側面に影響を与える化学反応に基づく、迅速で生産的かつ革新的な研究のためのイニシエーターおよびインキュベーターとして機能する。

融合研究を着実に推進するために、複数のグループからなるチームによって推進されるいくつかのフラッグシッププロジェクトとボトムアッププロジェクトを立ち上げた。ボトムアッププロジェクトのアイデアは、ICReDDの若手研究者によって提案される。これらのプロジェクトに取り組むことで、若手研究者を中心としたインパクトのある成果を継続的に進めることが可能になる。

さらに、拠点の国際的な認知度を高め、研究成果の迅速な実用化を図るため、3つの新たな取り組みを開始した。リスト教授が主導する「リスト共同研究プラットフォーム」、「三井化学-ICReDD化学反応イノベーション部門」、そして医学部と連携した「化学・臨床連携プラットフォーム」である。



4) 国際的研究環境

ICReDD には、海外の研究機関から世界をリードする 3 名の研究者が招聘されている。外国人主任研究者のために研究グループが設置され、外国人主任研究者が母国の研究機関でも勤務していることを踏まえ、外国人主任研究者と緊密に連携して研究グループを支援・管理するために、**Co-PI**と研究スタッフが雇用した。ICReDDでの研究者の採用は、競争的な国際公募により、研究者の**30%を外国人とするという目標は達成**されている。外国人研究者のための国際的なホスピタリティサポートシステムを確立した。研究領域「化学反応創成学」における世界トップレベルの研究者のグローバルな循環システムを実現するため、計算科学、情報科学、実験科学を融合した共同研究について若手研究者や大学院生を育成する「**MANABIYA (まなびや)**」システムをICReDD内に構築した。ICReDDの研究を通じて幅広い共同研究ネットワークを構築している。

5) 拠点運営・システム改革

拠点運営: 前田拠点長の任期は最低10年で、伊藤副拠点長が補佐する。拠点運営の中心的事項（人事や予算など）に関する決定権は、拠点長に属する。研究の進捗状況に応じて、各PIは拠点長によって定期的に見直され、評価され、適切なインセンティブや交代が実施される。大学執行部との連携を強化し、大学の決定がICReDDに速やかに反映されるようにするため、副学長をICReDD事務部門長に任命した。総長とは月1回面談を行い、将来計画を含めた運営について協議している。研究支援部門は、研究者や学生が研究に取り組めるよう、研究環境を常に整備している。

研究不正を防止するため、ICReDD内での倫理教育の徹底に加え、実験データを管理する部門を新設し、研究の透明性においてグローバルスタンダードとなるよう努める。

研究環境と独立研究所の設立: 創成研究機構 (CRIS) 内にMANABIYAシステムを含む共同研究スペースとインターサイエンスサロンスペースを設置。CRISグローバルファシリティセンターでは、ICReDDで購入した機器の管理を行っている。各PIが所属する部局のサポートシステムを利用することで、PIの事務作業の負担を軽減し、PIが研究・教育に専念できるよう保証している。発足にあたり、ICReDDは少なくともWPI補助金と同等の運営資金を大学から確保している。化学反応創成学とMANABIYAは、最終的には**新しい大学院「化学反応創成学院」**に生まれ変わる。また、産業界からの研究者の受け入れや研究コンソーシアムの設立など、民間資金獲得のための恒久的な組織を創設する。常に高い科学的レベルを維持するため、ICReDD は、優れた研究者が ICReDD 内にもグループを率いることができるようなダイナミックな人事制度を確立すると同時に、必要に応じて研究チームの構成を定期的に見直し、刷新する。ICReDD は、研究の推進と CRIS の改革に必要な人文・社会科学など、中核 3 分野以外の研究領域も取り込む。WPIで獲得した新しいマネジメントシステムを共有することで、ICReDDは最終的に大学の再編に貢献する。

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：寶金 清博、総長

拠点長：前田 理、大学院理学研究院、教授

事務部門長：石森浩一郎、大学院理学研究院、副学長

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。

[拠点概要]

化学反応創成研究拠点 (ICReDD) の究極の目標は、化学反応経路の複雑なネットワークを解析することにより化学反応を深く理解し、新しい化学反応の開発効率を加速し、「化学反応の設計と創成に革命を起こす」ことである。このような新しい化学反応は、先端材料を生み出し、人類の豊かで持続可能な未来のために不可欠な、エネルギーや天然資源の使用量削減に貢献する。私たちは、計算科学、情報科学、実験科学を統合した研究環境の構築により、この目標を達成することを目指している。しかし、現在の試行錯誤による化学反応開発は、時間がかかり非効率的であることを考えると、化学反応を高速かつ自在に設計する手法の開発は、科学分野全体を変革する重要な要素となる。量子化学計算に基づく最先端の反応経路探索法を駆使し、情報科学者や実験科学者と連携することで、化学反応を本質的に理解し、先端的な化学反応や材料を効率的に開発できる新しい学問領域「化学反応創成学」を確立する。また、ICReDD に MANABIYA システムを設け、若手研究者や大学院生に計算科学・情報科学・実験科学の融合研究を伝え、**融合研究領域「化学反応創成学」を通じた研究者の世界的循環と分野横断型研究体制を実現する。**

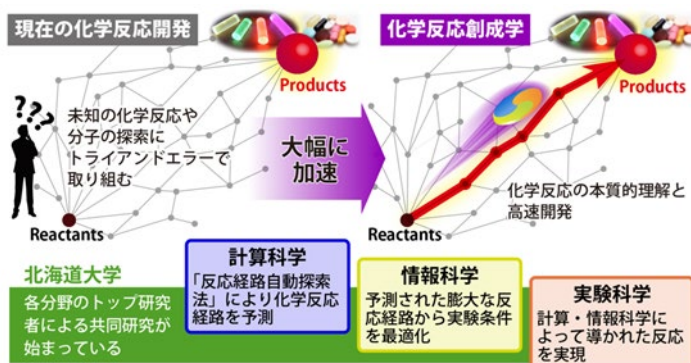
[拠点形成が必要な理由]

化学反応は、人類の繁栄を支えてきた数多くの化合物（農薬、医薬品、材料など）へのアクセスを提供する。しかし、新しい化学反応の開発には時間と手間がかかり、成功の確率は極めて低い。開発期間を短縮するため、近年まで多くの研究者が理論科学や計算科学を駆使し、化学反応の理解を深め、新しい反応を設計しようとしてきた。しかし、原子や分子の量子力学的な挙動に基づく化学反応を根源的に理解することは、依然として非常に困難である。さらに、従来の量子化学計算では膨大な計算資源を消費するため、このアプローチは効率的とは言えない。しかし、化学産業、世界的な資源開発、環境問題、ヘルスケアなど、新しい化学反応に対する需要はかつてないほど高まっている。**新しい化学反応を開発する桁違いに効率的な方法が確立されない限り、現在の生活水準を維持または向上させながら、人類の現在の成長を維持することは困難である。**

[拠点形成の戦略と達成すべき具体的目標]

このような問題を解決するために、計算科学、情報科学、実験科学を融合して、**新しい化学反応を効率的に理解・開発するための新分野「化学反応創成学」を確立する。**化学反応創成研究拠点 (ICReDD) の設立により、最先端の融合研究を推進し、化学反応創成研究の新時代を築く。実験的な試行錯誤に基づく化学反応の開発は、通常、新しい化学反応を 1 つ開発するのに数十年を要する。このことを回避

するため、ICReDD 拠点長の前田は、化学反応の計算科学的探索の新しい手法として「反応経路自動探索 (AFIR) 法」を開発した。この手法は高精度で目的の化学反応を予測する画期的なものであるが、膨大な計算資源を必要とする。そこで、北海道大学に集結している国際的なトップレベルの情報科学者のノウハウを活用し、重要な反応経路の計算を大幅に高速化する。北海道大学に所属する国際的なトップレベル実験科学者（例えば、トップ 1%論文や、高被引用数論文の研究者）が、化学反応開発の実験的検証を行う。実験科学者はまた、計算科学者や情報科学者に結果のフィードバックを行い、反応ネットワークの理解を深める。以上のような分野融合的な方法によって、有望な実験を事前に特定することが可能になる。すなわち、反応経路ネットワークの探索は、予測に基づき優先順位をつけることができるため、新しい反応の開発に要する時間は、試行錯誤に頼る従来の方法に比べて大幅に短縮できる。さらに、この方法を用いれば、多くの物質の複雑な変化を理解可能となり、これは化学反応に関連する他の学問分野への波及効果も大きい。特に、3つのコア領域（計算科学、情報科学、実験科学）において、北海道大学はすでに世界的に著名な研究機関としての地位を確立しており、化学反応創成学の目標を達成するための強固な基盤が整っている。ICReDD では、さらに MANABIYA システムを確立し、世界レベルの人材育成を確実なものとするための重要な戦略とした。MANABIYA システムを通じて、ICReDD は、i)新研究領域「化学反応創成学」の確立、ii)北海道大学の組織再編、iii)新大学院「化学反応成学院」の設置により、他の研究拠点との国内外連携を確立する。化学反応創成学の融合された研究により、高効率な化学反応開発を実現し、農芸化学、環境化学、薬学、材料科学、医療技術、エネルギー・資源開発などに応用可能な高付加価値化学品を創出する。ターゲットとなる反応や分子は、幅広い研究コミュニティや多くの企業との議論を通じて、社会へのインパクトを考慮して慎重に厳選される。



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。

[化学反応創成学の確立]

本拠点では、非常に複雑な量子力学的現象である化学反応の複雑さを根本から理解し、新しい化学反応を高速で開発するために、「化学反応創成学 (Chemical Reaction Design and Discovery : CReDD)」という新たな研究領域を確立し、「化学反応の設計と創成の革新」を図ることを目的としている。化学反応の開発は、産業廃棄物の増加や食糧不足などの深刻な社会問題を解決し、持続可能な未来社会の実現に貢献する。そのために、**計算科学、情報科学、実験科学の 3 分野が融合した研究を行う。これら 3 つの科学分野のうち、2 分野間の連携は比較的一般的であるが、3 分野の融合は依然として進んでいない。**ICReDD は、反応経路探索（計算科学）、数理・統計モデリング（情報科学）、そして提案されたモデルや経路の最先端の実験的検証という世界をリードする北海道大学の研究分野を完全に統合し、化学反応の予測に基づく自在設計と迅速な開発を実現する。

また ICREDD 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おいても中心的な役割を果たす。**ICReDD 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される。**これは、既存のインフォマティクス・プロジェクトとは対照的な、前例のないアプローチである。米国の Materials Genome Initiative、物質・材料研究機構（NIMS）の Materials Research by Information Integration Initiative、EU の Novel Materials Discovery (NOMAD) 研究所のようなマテリアルズインフォマティクスやケモインフォマティクスプロジェクトでは、一般に反応ではなくターゲットマテリアルを設計するが、これは AIMR（東北大学 WPI）に似ている。米国の PubChem、Reaxys (Elsevier)、SciFinder (American Chemical Society) などの文献ベースのプロジェクトは、既知の反応を検索する。

これに対し、ICReDD は様々な未知の反応を発見することに重点を置いており、分野統合や共同研究の仕組みを根本的に変えている。ITbM（名古屋大学 WPI）や MANA（NIMS WPI）のようないくつかの既存 WPI は、化学反応を利用した新しい目的指向の分子や材料を継続的に開発しているが、これらは古典的な試行錯誤的アプローチで得られている。これとは対照的に、ICReDD の統合的アプローチは、数多くの新しい反応を導き出し、それぞれが効率的に化学物質や材料を創出する。**共同研究を成功に導くこのアプローチの可能性は、非常に有望である。したがって ICReDD は、新しい化学反応に関する迅速で生産的、革新的な研究のベンチマークとなる。**ICReDD はまた、このような革新的で統合的な研究手法を、所属機関の枠を超えて成果を普及させることで、より高いレベルへと推進する重要な役割も担っている。

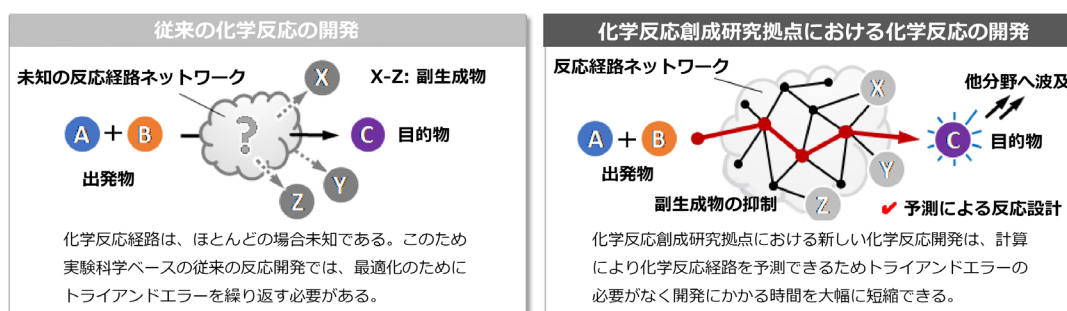
2) -2. 研究達成目標及び計画

- ・ 助成期間終了時（5 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。

[化学反応創成学の目的]

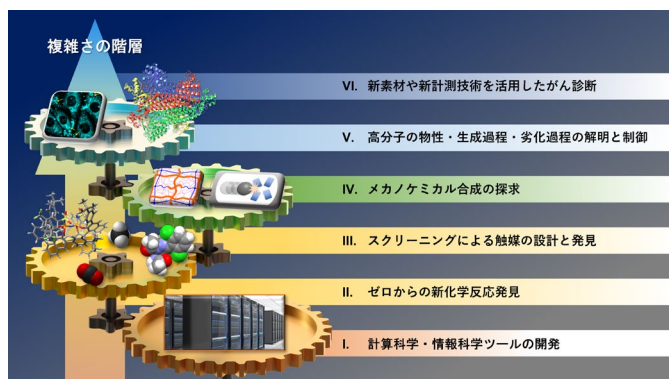
現代社会に必要なとされる最先端材料は、豊富な資源や原料の化学物質を化学反応により付加価値の高い化合物に変える化学プロセスの産物である。化学反応創成学の目的は、枯渇性資源（物質とエネルギー）の使用を最小限に抑えながら、目的化合物を効率的に合成できる新しい化学反応を開発することである。**化学反応創成学における新反応の開発は、標的分子のサイズによって 3 つのカテゴリーに細分化される。**カテゴリー1 では、豊富な資源および/または低価値物質（原子数 ~100 の小分子）に高付加価値を与える反応の創出を目指す。カテゴリー2 は、ハイテク材料（原子数 ~10,000 の高分子）の合成に関わる。カテゴリー3 は、細胞反応や生化学反応への化学反応創成学の利用に関するもので、カテゴリー2 で開発された材料の一部は高度医療に応用される（原子数 10,000 以上の複雑な分子）。初期段階では、概念実証のためにモデル反応を選択した。中期から後期にかけては、広く学界や企業との議論に基づき、社会に大きなインパクトを与える反応を厳選する。

化学反応創成学で用いられる重要な技術は、拠点長の前田が開発した反応経路自動探索 (AFIR) 法である。AFIR 法は、より単純な出発物質から付加価値の高い標的分子を生成するための様々な反応



経路を正確に予測することができる。この手法を比較的大きな分子に適用すると、従来では膨大な計算資源を要し、極めて複雑な実験データが得られる。これら大きな分子の化学反応予測を効率的に実現するために情報科学ツール（例えば数理モデルや統計解析技術）を適用する。このようなモデルや技術の複雑さは、対象分子のサイズが大きくなるにつれて増大するため、化学反応創成学ではまず比較的単純な分子系（カテゴリー1）を対象とし、その後、より複雑な分子系（カテゴリー2 および 3）へと進む。

前述の融合コンセプトに基づいて ICreDD の実際の研究を進めるため、いくつかのフラッグシッププロジェクトに継続的に取り組んできた。2022 年度現在、下図に示す 6 つのプロジェクトが並行して進行している。この 6 つのプロジェクトの中でも、Project-I は特別であり、ICReDD の基盤となっている。すべての計算科学と情報科学の PI は Project-I において開発したツールを他のプロジェクトへ提供している。月例会議では、すべての計算科学と情報科学のグループが集まり、他の主要プロジェクトへの貢献に基づいて、成功した事例と失敗した事例を共有する。このフィードバック・ループにより、これらのプロジェクトで使用されている最新で最先端の計算・情報科学ツールの情報を常に入手することができ、これらのツールをさらに進化させるのに役立っている。他のプロジェクトは階層的な複雑さを示し、プロジェクト番号の順に複雑さが増す。言い換えれば、各プロジェクトで扱われる反応に関与する原子の数が、この順番で増加する。複雑さの異なるこれらのプロジェクトに同時に取り組むことで、化学・材料科学の幅広い問題に適用できる包括的なツール群を確立することができる。以下、6 つの主要プロジェクトについて説明する。



プロジェクト-I：計算・情報科学ツールの開発 Project-I は、計算・情報科学ツールの他のプロジェクトへの応用の成功例と失敗例を共有し、さらなる発展についてのアイデアを議論する。Project-I と他のプロジェクトとの間のこのフィードバック・ループは、我々の基盤を強化し、すべてのプロジェクトを加速させるのに役立つ。このような努力によって、個々のケースに合わせた様々な計算支援反応設計戦略が生み出される。WPI 期間の前半では、プロジェクト I は QCaRA/AFIR アプローチの開発に貢献した。これは、AFIR 法とグラフ理論に基づく反応収率計算法を組み合わせたもので、これまで未開拓であった化学反応の第一原理発見につながった。また、有機触媒反応のエナンチオ選択性を予測するケモインフォマティクスに基づくアプローチは、新しい触媒反応の発見に貢献した。

WPI 期間の後半では、これらの取り組みを継続する。具体的には、与えられた化学変換に対して適切な有機金属触媒を設計するための統合計算・情報科学的手法（project-II）、官能基化されていない分子の不斉活性化を達成する高性能有機触媒を設計するための統合計算・情報科学的手法（project-III）を開発する、ボールミル反応環境で生成する未知の中間体を同定するシミュレーション手法（プロジェクト-IV）、機械的刺激の影響をモデル化する理論（プロジェクト-IV）、機械的伸張力により形成されるラジカルフラグメントの挙動を研究するシミュレーション手法（プロジェクト-V）、がん幹細胞を根絶する創薬を加速するインフォマティクス手法（プロジェクト-VI）である。

プロジェクト-II：ゼロからの新反応設計と発見 このプロジェクトは、量子化学計算を用いてゼロから新反応を予測するという非常に野心的な目標に取り組むものである。これまでのところ、我々は低分子合成（無触媒）の複数の成功例を実証している。

WPI 期間の後半では、触媒反応の発見に力を注ぐ。これは、WPI 期間前半に達成された非触媒反応の成果を基礎として部分的には可能であるが、より複雑な問題であり、計算および情報科学的ツールの

ルのさらなる開発が必要である。このプロジェクトの目標は、これまで未開拓の化学変換を達成できる有機金属触媒を発見するための体系的な設計フレームワークを確立することである。

プロジェクト-III：スクリーニングによる触媒設計と発見 このプロジェクトでは、計算によるスクリーニング・プロセスを通じて、触媒に最適な置換基を見出す。現在までに、触媒条件のスクリーニングと最適化にインフォマティクス・アプローチを用いることで、既知の化学変換に対する List グループの IDPi 触媒のエナント選択性を向上させることに成功した。

このプロジェクトの目標は、計算と情報科学的アプローチを用いて、官能基を持たない分子の不斉活性化を達成することである。このような変換は、有機触媒としては非常に野心的であり、WPI 期間の後半にふさわしい目標となる。

プロジェクト-IV：メカノケミカル合成の探求 このプロジェクトは、ボールミルを用いたメカノケミカル合成に焦点を当てている。この合成法は有機合成において非常に有望なツールとして浮上してきた。しかし、そのプロセスや応用可能性についての理解はまだ十分ではない。

このプロジェクトの目標は、その適用範囲を広げ、この合成に特有の予期せぬ化学種を解明し、機械的刺激の影響をモデル化する理論を構築することである。WPI 期間の前半では、固体状態のクロスカップリング反応開発やグリニャール試薬の固相調整など、新しいタイプのメカノケミカル反応を研究してきた。後半は、メカノケミカル反応の合理的な設計に基づき、その適用性をさらに拡大し、固相光酸化反応、有機カルシウム化合物の固相合成、高分子材料の分解とリサイクル、ボールミルでの高効率有機触媒反応などを実現する。

プロジェクト V：ポリマー特性、形成、分解の理解と制御 このプロジェクトでは、シミュレーションによるポリマー特性の設計、ポリマーメカノラジカルの可視化、ポリマーメカノラジカルの利用、所望の特性を最大化するためのポリマー配列の設計などを行う。現在までに、機械的延伸力によって形成されるラジカル断片を同定する計算手法を確立し、汎用ポリマーやダブルネットワークハイドロゲルに適用している。

WPI 期間の後半では、筋肉のような二重網目ハイドロゲルの性能を最大化する設計原理を見つける。これは、機械的延伸力によって形成されるラジカル断片の挙動を、実験的測定技術と反応経路探索の両方を用いて研究することによって行う。これらの測定と経路探索のツールは、機械的刺激によってプラスチック中の高分子材料を分解し、それを用いて有用な材料を合成するという別の応用にも使用される。

プロジェクト-VI 新しい材料と測定技術を利用した癌診断 WPI 期間の前半に、ハイドロゲル活性化リプログラミング (HARP) 現象を発見した。これは、PI が開発した二重網目ハイドロゲル材料を利用して達成された。国立がん研究センター研究所 間野 博行所長との共同研究により、HARP 現象を用いた迅速がん幹細胞作製法の有効性を確認した。その結果、この方法で得られたがん幹細胞は、従来の方法で得られたがん幹細胞と同等のプロファイルを有することが確認された。2022 年度には、医学部と連携して「化学・臨床連携プラットフォーム」というコンソーシアムを立ち上げた。このコンソーシアムを通じて、ICReDD の化学の医療診断・治療への活用を加速させることを目指す。化学と臨床医学の融合研究をさらに加速させるため、ICReDD では、2023 年度より実験科学の PI を澤村から小川 (ケミカルバイオロジー) に変更し、詳細な化学操作に基づく効率的ながん治療法の実現を目指す。

このプロジェクトには 2 つの方向性があり、1 つは HARP 現象を正しく理解すること、もう 1 つは臨床応用を実現することである。WPI プロジェクトの後半では、ケミカルバイオロジスト、材料科学者、情報科学者、腫瘍病理学者、臨床医、医学博士の融合チームにより、この 2 つのテーマに同時に取り組む。

ボトムアッププロジェクト： 毎年若手研究者からアイデアを募り、ボトムアッププロジェクト

として立ち上げている。有望なボトムアッププロジェクトはフラッグシッププロジェクトに昇格し、成績不振のフラッグシッププロジェクトは評価され、中止されることもある。このようなアプローチにより、若手研究者を中心としたインパクトのある研究成果を継続することが可能となる。

研究成果の社会実装に向けた産学連携戦略：ICReDD で開発された最新の計算手法を広く社会に提供するため、2021 年に北海道大学とのプログラムライセンス契約に基づき、AFIR 手法の最新機能を利用できる「GRRM20」が HPC システムズ株式会社から発売された。GRRM20 は、企業も必要とする「社会で必要とされる技術」であり、これを販売することが ICReDD の社会貢献の一つである。すでに、企業との共同研究用プログラムとして「MANABIYA（インダストリー）」での GRRM20 の利用体制を確立している。研究成果のさらなる社会実装を目指し、新棟の産学共同研究スペースを活用することで、WPI 補助期間後半は産学連携を加速させる。その成果は、すでに ICReDD における新たな産学連携として具現化している。2023 年度からは、ICReDD の強みである計算科学、情報科学、実験科学の 3 分野を融合した化学反応創成学と、三井化学の材料開発の知見をベースに、高機能材料の開発や循環型社会の構築に貢献する新反応の迅速・高精度設計を中心とした共同研究を行う「三井化学-ICReDD 化学反応イノベーション部門」を産業創出講座の一つとして立ち上げる。同様の産業創出講座の設立を検討している企業もある。また、新たな計算科学技術や情報科学技術の研究開発により、化学反応創成学のさらなる高度化を目指す。これらの取り組みにより、研究成果が社会的・産業的応用に迅速に実現される。

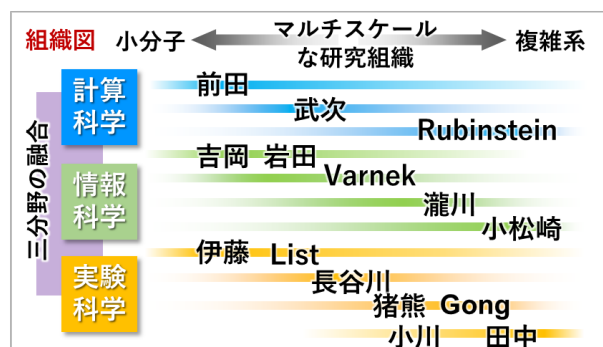
2) -3. 研究推進体制

- ・ 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。
- ・ 研究組織のジェンダーバランスの実現に係る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。その際、①拠点長や事務部門長を含めた当該拠点を管理運営する者（拠点構想に示される研究推進体制の中で、当該拠点の管理運営を行うことを想定されている者）、②主任研究者（教授、准教授相当）及びその他研究者、に分けてそれぞれの計画を記載するほか、次世代の人材育成に関する措置や人材獲得に向けた国内外へのプロモーション等の計画について記載すること。
- ・ 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 「主任研究者リスト」を添付すること。
- ・ 添付資料 「拠点を構成する人員」を添付すること。

[研究組織]

計算科学：ICReDD拠点長である前田は、計算化学に関する国際的に主導的な研究グループを率いている。前田は、様々な**化学反応の反応経路ネットワークを予測するために**使用される反応経路自動探索（AFIR）法（PCCP 2013；トップ1%論文）を開発した。反応経路ネットワークの確立は、本取り組みの統合性を高める上で極めて重要である。励起状態を伴う反応の場合、光反応過程の計算経験が豊富な**武次**が高精度の計算を行う。高分子モデルの計算科学を専門とする**Rubinstein**（デューク大学）は、高分子（ポリマーやゲル）を含む複雑な反応系を検討する。これらの主任研究者の他に、計算科学に精通した准教授や博士研究員を加え、低分子の反応に関する高精度計算の結果を基に、高分子や複雑系のモデル化を行う。

情報科学：化学反応はミクロ、メゾ、マクロの各レベルで広範囲に影響を及ぼすため、情報科学は統計的・数理的モデルを用いて、層間連携を伴う



複雑な多層階層システムを解明する。これにより、異なる階層間（量子化学、物理化学から生物物理学、細胞生物学まで）のギャップを埋め、前田の研究によって明らかになった化学反応ネットワークの複雑性を解明する。拡張性データマイニングの世界的第一人者である**有村**（データマイニング）は、ICReDDの横断的研究で蓄積された計算・実験データから情報を抽出するための効率的なアルゴリズムの設計を主導した。2019年度は、実験データベースや文献からの効率的な情報検索を実現するため、情報科学のPIを有村から**吉岡**（知識工学）に変更した（ビッグデータ・サイバーセキュリティGI-CoRE拠点長）。2020年度からは、東京大学大学院情報理工学系研究科の**岩田**（数理工学）をPIとして加えた。ICReDDで使用しているAFIR反応経路データベース(AFIR3M-DB)から化学反応創成学に有用な情報を抽出するインフォマティクスツールを開発し、効率的なデータベースの開発を支援する。**Varnek**（ケモインフォマティクス、ストラスブール大学）は、分子スクリーニングと反応設計のための最先端のケモインフォマティクス手法を用いて、カテゴリ1の計算科学と実験科学を統合している。**小松崎**（数理科学）は、化学反応ネットワークの解析に精通し、高分子や複雑系の数理モデリングに取り組んでいる。機械学習の専門家である**瀧川**は、機械学習とデータ科学に基づいてデータ駆動型の予測モデルを構築し、利用可能な多種多様なデータから最大限の情報を抽出する。このアプローチにより、最適な実験設計や、オーダーメイドの機能性材料やライフサイエンス関連分子の設計・発見に合理的な戦略を提供する。

実験科学： 実験科学者は、**様々な階層レベルの反応を実施する**。高付加価値反応（カテゴリ1）の開発では、医薬品から機能性材料まで幅広い分子を対象とする。副拠点長の**伊藤**（合成化学）とPIの**澤村**（触媒化学）は遷移金属触媒反応に取り組み、反応設計の世界的権威である**List**（反応設計、マックスプランク石炭化学研究所）は、試行錯誤に頼らない効率的な反応開発を目指し、触媒的有機反応を研究する。カテゴリ2では、**長谷川**（光学材料学）が武次の励起状態計算の予測に基づいて高性能発光材料を開発し、ゲル材料の専門家である**Gong**（高分子科学）は、機械的刺激を受けると強靱になるなど、分解や劣化を制御できる刺激応答性材料を創製する。**猪熊**（構造化学）は、得られた高分子の構造解析を行い、情報科学分野の共同研究者にフィードバックする。こうして得られた実験情報は、カテゴリ2の計算コストの削減に役立つ。カテゴリ3の実験検証では、化学と臨床医学の融合研究を加速するため、2023年度に実験科学PIを澤村から**小川**（ケミカルバイオロジー）に変更し、詳細な化学操作に基づく効率的なが

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

- **吉岡 真治**（知識工学）
知識マネージメント・情報検索・自然言語処理
Big Data and Cybersecurity GI-CoRE ディレクター
- **岩田 寛**（数理工学）
化学反応設計・離散最適化・劣モジュール関数
CREST・ERATO / *Nature Comm.* 等
- **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
さきがけ代表 / *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・さきがけ / NEXT/
Nature Chem., *Nature Comm.* 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・さきがけ / *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
- **小川 美香子**（ケミカルバイオロジー）
化学的操作による癌治療・分子標的治療
Am. J. Nucl. Med. Mol. Imaging 編集委員 / *Nature Medicine*, *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

ん治療法の実現を目指す。疾患機能解析の専門家である**田中**（腫瘍病理学）は、カテゴリ-2で得られた新材料を用いて複雑な細胞応答を調べる。情報科学研究者との共同研究により、疾患によって阻害される隠れた生化学反応系を効果的に見つけることを目指す。遺伝子工学を必要としない革新的な再生医療戦略や、細胞の変異を克服する新しいがん診断ツール、細胞応答を制御できる生体適合性材料を開発する。

融合研究拠点と連携組織：ICReDD は約 100 名のメンバーで構成されており、その中には約 30 名の研究支援サポートスタッフが含まれている。ICReDDは、クロスアポイントメント制度を用いて外国人PIを招聘し、北海道大学で常勤のCo-PIや博士研究員で構成される研究グループを主導している。PIは、化学反応創成学の 3 つの中核領域におけるの人材育成と共同研究を促進するために、外国人研究者を招聘し、受け入れている。**化学反応創成学を国際的に普及させるため、年間約20名の国内外の研究者・大学院生からなる短期ビジターを継続的に受け入れるMANABIYAシステムを実施している。**他機関の研究をリードし、加速させることができるため、ITbM（名古屋大学）、MANA（NIMS）などWPIの他拠点や、海外の研究機関、企業から研究者を招聘し、共同研究を実施する。また、この分野の研究に詳しい湊（京都大学）とも相談しながら、効率的に共同研究を進める。**このような共同研究の加速に注力することで、ICReDDが化学反応に関する計算・情報・実験が統合された国際的な研究拠点となる。**

リスト-プラットフォーム：2023年以降、ICReDDは、デジタルトランスフォーメーション（DX）による次世代有機触媒化学を推進するための国際共同研究プラットフォームを構築し、ICReDD発の研究の新たな展開を加速する。この研究プラットフォームは「List-Platform」と呼ばれ、ノーベル賞受賞者であるListが代表を務め、計算科学、情報科学、実験科学を融合したICReDDの先端技術を応用し、計算科学とロボット工学、機械学習、人工知能などのDX技術を融合した次世代有機触媒化学を推進する。本List-Platformでは、基礎理論研究から触媒開発・評価・最適化、創薬・材料開発、合成プロセス開発までの5つの研究グループを設置し、学内外のトップレベルの研究者の総力を結集する。さらに、国内外から世界トップレベルの研究者をフェローとして招聘し、研究に対する助言を得るとともに、研究成果を広く共有することで、持続可能なDX有機分子触媒化学研究の国際的交流拠点を目指す。

【ジェンダーバランスの実現】

拠点は、メンバーの多様性を確保するため、特に適切なジェンダーバランスを実現するため、様々な措置を講じる。2024年3月31日現在、主任研究者の数は外国人PI3名を含む15名、研究者全体の48%が外国籍で、19%が女性研究者である（外国籍40名、女性研究者16名を含む計84名）。これらの研究者は、計算分野（16名、19%）、情報分野（19名、23%）、実験分野（49名、58%）に分かれている。拠点における適切なジェンダーバランスの実現は、当拠点の最優先事項のひとつであり、できるだけ早期に女性研究者の割合を25%以上（①拠点長や事務部門長を含めた管理運営20%、②主任研究者13%、他研究者27%）にするために最大限の努力をする。この目標を達成するため、すべてのPIグループには少なくとも1名の女性研究者を配置することが求められている。ICReDDはすでに女性助教とテニユアトラック准教授のポジションを確保している。今後、女性のための教員の公募を数件行う予定である。これら役職を通じて、学生、博士研究員、助教、准教授（Jr. PI）から教授（PI）への女性研究者のキャリアパス制度が強化され、女性研究者のロールモデルとして注目されることが期待できる。最終的には、拠点PIとして定着し、拠点の研究の方向性とリーダーシップに新鮮で若い視点を注入する。教職員、学生等を対象に、ダイバーシティ、エクイティ、インクルージョン、ジェンダーバランスの推進に資するセミナー等を定期的実施する。また、大学のジェンダーバランス加速アクションプランやフェローシップ制度を利用して女性教員および学生を積極的に採用し、大学およびダイバーシティ・インクルージョン推進本部との強力な協力関係のもと、ジェンダーバランスの実現を推進する。

a) 主任研究者（教授、准教授相当）

・添付資料「拠点を構成する人員」の表 a)を貼り込むこと。

	事業開始時点	令和 5 年度末時点	最終目標 (2028 年 3 月頃)
ホスト機関内からの研究者数	11	12	12
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	15	15

b) 全体構成

・添付資料「拠点を構成する人員」の表 b)を貼り込むこと。

		事業開始時点		令和 5 年度末時点		最終目標 (2028 年 3 月頃)	
		人数	%	人数	%	人数	%
研究者		14		84		85	
	外国人	3	21	40	48	38	45
	女性	1	7	16	19	21	25
	主任研究者	14		15		15	
	外国人	3	21	3	20	7	47
	女性	1	7	2	13	2	13
	その他研究者	0		69		70	
	外国人	0		37	54	31	44
	女性	0		14	20	19	27
	研究支援員数	0		3		4	
事務スタッフ		6		20		19	
構成員の合計		20		107		108	

		事業開始時点		令和 5 年度末時点		最終目標 (2028 年 3 月頃)	
		人数	%	人数	%	人数	%
博士後期課程学生		67		64		80	
	うち雇用見込み	17	25	16	25	48	60

※b)全体構成の下表の博士後期課程学生の人数については b)全体構成の上表との重複計上を可とする。

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 30 年度～令和 4 年度）を記載すること。

2018 年度から 2022 年度までの PI が獲得した研究費総額の過去の記録：

197,667,491 円（2018 年度（半期））、590,484,235 円（2019 年度）、605,345,001 円（2020 年度）、406,725,491 円（2021 年度）、555,375,511 円（2022 年度）、2,355,597,729 円（2018 年度～2022 年度合計）。

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（令和 5 年度～令和 9 年度）。

ICReDD の主任研究者は、年間約 5 億 1,000 万円の研究資金を獲得している。PI の研究室に所属する若手研究者と大学の支援で採用された 4 名の Jr-PI が 2022 年度に獲得する研究費の年間総額は約 6.4 億円となる見込みであり、研究活動を推進するのに十分な額である。ICReDD では、化学・情報科学分野の若手研究者の研究費獲得を支援するため、競争的資金への申請書類をブラッシュアップするシステムを構築した。これにより、研究費申請の採択率が向上し、継続的な研究費の獲得が期待される。また、2023 年度には、企業との 5 年間の大型共同研究がスタートする。今後も産学・地域協働推進機構と連携し、積極的に民間資金を獲得していく予定である。これらの研究資金とホスト機関からの財政支援のコミットメントにより、WPI 補助金と同等以上のリソースを確保する。

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】

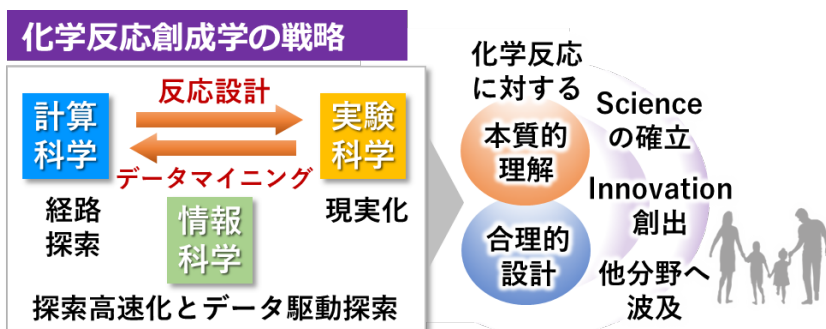
化学反応に関連する産業がトータルで年間 500 兆円（4 兆米ドル）規模のインパクトをもち、人類の活動や生存にとって特に重要である。化学反応がどのように起こるかをよりよく理解した上で、化学反応を合理的に設計すれば、効率的に行うことができる。しかし、**化学反応を調べるために量子化学を利用することは、可能な化学反応パターンの組み合わせが多数あるため、通常、長時間の計算を必要とし、非常に高価で時間がかかる。**前田の反応経路自動探索法は、近づいたり離れたりする分子間の仮想的な力（人工力誘起反応：AFIR）を計算することができ、化学反応に重要な分子挙動を抽出することができる。しかし、この方法をより複雑な "現実的な" 系に適用すると、複雑な計算を実行するのに必要な時間が長くなる。この時間の問題は、高速アルゴリズムやパターン解析など、情報科学的手法を活用することで解決でき、計算量を劇的に減らすことができる。その後、実験科学者が、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用的な検証を行う。さらに、実験結果を分析し、情報科学者へのデータフィードバックとして利用することで、新たな知見を引き出し、化学反応設計に応用する。

「化学反応創成学」という学問分野は、3 つの異なる研究分野を統合することによって、化学反

応を理解し、設計することを目的としている。化学反応創成学の成功は、化学反応に直接関係する分野だけでなく、地球環境、生命科学、そして社会全般に恩恵をもたらす。化学反応創成学を学術研究領域として創設し、化学反応創成学に特化した拠点を設定することは、社会のあらゆる側面に影響を与える研究のイニシエーター、インキュベーターとして機能する。北海道大学における ICReDD の PI の共同研究は、すでに ICReDD の基礎となる重要な予備的成果を生み出している。

例えば、ICReDD 拠点長の
前田（計算科学）と副拠点長の
伊藤（実験科学）は、すでに
AFIR 法を用いて高度に複雑な
反応の新しい反応機構を発見し
ている（JACS 2015）。武次（計
算科学）は、伊藤（実験科学）、
長谷川（実験科学）と共同で、す

で新しい機能性材料を開発している（JACS 2017）。瀧川（情報科学）は、北海道大学の実験科学者とともに計算科学と機械学習を用いた新しい触媒反応の開発で世界をリードしている（RSC Advances 2016）。しかし、これら 3 つの研究分野を真に統合し、化学反応創成学を確固たるものとするためには、共同研究者たちが ICReDD で協力し合い、成果を最大化する必要がある。この異分野融合型研究拠点では、画期的な研究を成し遂げるだけでなく、3 つの研究領域すべてに精通し、国際的な視野を持った次世代の研究者を育成することが可能となる。



[融合研究を進めるための具体的戦略]

MANABIYA システム：三つの分野の研究者が一つ屋根の下に集まり、情報交換や共同研究を行う。国内外の研究機関から若手研究者を 1～3 ヶ月間招聘し、ICReDD 新しい研究手法を活用し共同研究を行う。これを MANABIYA システムとよび、**年間約 20 名の外国人研究者や大学院生（MANABIYAN）を招聘する**。これら研究者は、新しい共同研究手法のトレーニングを受け、母国の研究機関に戻り、そこで活用する。**10 年後、MANABIYAN ネットワークは、経験豊富なグローバルリーダーと若手研究者がバランスよく混在する 200 人以上の研究者で構成**され、この新しい分野のさらなる発展を支える。さらに、海外の研究機関との交流や共同研究を促進するため、高品質なビデオ会議システムを常設している。

これまでの「MANABIYA (ACADEMIC・INDUSTRY)」は、共同研究の推進、若手研究者の育成、企業との共同研究の推進を目的としていた。ICReDD では、2023 年度より大学院生の教育カリキュラムとして「MANABIYA (EDUCATION)」を新設する。この MANABIYA(EDUCATION)は、ICReDD が構築する 2 つの主要な教育システムの中核となる。そのひとつが、本学の全大学院生を対象とした学際的学位プログラムである。このプログラムでは、複数の「MANABIYA」での OJT を中心とした様々なカリキュラムを修了することで、ICReDD の研究者としてのスキルや知識を習得し、自らの研究に活かしていくことが期待される。MANABIYA(EDUCATION)を修了した大学院生には、ICReDD が発行する修了証と卒業単位が授与される。

もうひとつの教育システムは、ICReDD 独自の大学院である。MANABIYA (EDUCATION) をベースに、ICReDD の理念やビジョンを反映した大学院の設立を目指す。この大学院は、5 年間の一貫したプログラムとして設計されており、入学した大学院生は、5 年間で異なる分野（実験科学、計算科学、情報科学）の MANABIYA (EDUCATION) コースを 3 つ履修する。また、ICReDD の外国人研究者による英語での PBL 型講義や短期留学を組み合わせた学際的・国際的な教育を受ける。本大学院は、ICReDD のビジョンを共有し、これからの Society 5.0 社会を牽引する人材の育成を行う。ICReDD は、MANABIYA (EDUCATION) をはじめとする MANABIYA システムの構築と効果的な運営を行うため、2023 年に「人材育成ユニット」を設置し、MANABIYA システムを活用した研究者・大学院生・産業界研究者の育成や、拠点の大学院教育・リカレント教育の戦略・ロードマップの作成を担当する。また、「化学反応創成学」「MANABIYA」は、「化学反応創成学院」の設置により、大学の組織として定着する。

MANABIYAシステム

◆ MANABIYAコース (OJT型のトレーニング) (PI、Jr-PIが指導)

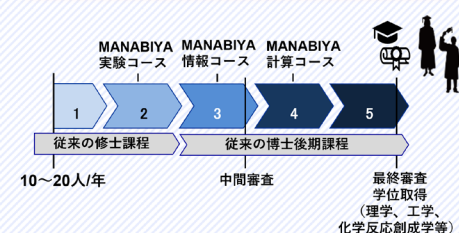


新大学院構想

ICReDDの明確なミッションに基づき、統一された方針とカリキュラムによる研究指導。

- ✓ 5年一貫制の統合型MS/PhDプログラム
- ✓ 国際色豊かな教員による教育
- ✓ 課題解決型アクティブラーニング
- ✓ MANABIYA3コースは必修(実験・情報・計算コース)

5年一貫制教育プログラム



融合研究戦略： 上述したように、ICReDD では、既にいくつかのフラッグシッププロジェクトに取り組んでいる。各プロジェクトには、2 つ以上の専門分野のグループが関わる。このようなフラッグシッププロジェクトを設定し、共に取り組むことは、ICReDD における融合研究を推進する強力な原動力となる。さらに、ICReDD の若手研究者からアイデアを募り、ボトムアッププロジェクトを主導する機会を提供する。これらのフラッグシッププロジェクトとボトムアッププロジェクトは毎年評価され、有望なものはボトムアップからフラッグシップに昇格する。逆に、うまく進んでいないものは打ち切られるか、ボトムアッププロジェクトとして再開される。これらのプロジェクトは、拠点長の主導で実施される。拠点長をサポートするため、融合研究コーディネーターを設けた。融合研究コーディネーターは、すべての研究プロジェクトの定期的な会議に参加し、その進捗状況を拠点長に報告する。必要に応じて、融合研究コーディネーターが自らプロジェクトに参加し、プロジェクトリーダーとともにプロジェクトを推進する。さらに、ICReDD のすべての研究者は、毎年 2 回、拠点長、事務部門長、融合研究コーディネーターに進捗状況を報告する。

研究成果： WPI 期間前半で 547 本の論文を発表しており、そのうち 37 本 (160 本) は ICReDD 内 (北大内) の 2 つ以上の研究グループの貢献による融合研究である。例えば、前田グループ (計算)

は美多（実験）と共に量子化学反応経路ネットワークを利用した新しい合成法の開発に関する複数の論文を発表した（*Chem. Sci.* 2020, *Nat. Synth.* 2022, *Nat. Commun.* 2022）。岩田グループ（情報）は、前田グループ（計算）と共に、化学空間の多様性に対処するための組み合わせ最適化手法を開発した（*Sci. Rep.* 2021）。List グループ（実験）と Varnek グループ（情報）は、インフォマティクス主導による新しい有機触媒反応の発見を達成した（*Angew. Chem.* 2023）伊藤グループ（実験）と前田グループ（計算）が、メカノケミカルグリニヤール試薬調整法を発見し、その構造を調べた（*Nat. Commun.* 2021）。Gong グループ（実験、材料）、伊藤グループ（実験、有機）および前田グループ（計算）が、ハイドロゲル材料中のメカノラジカルを迅速に検出する蛍光プローブを開発した（*J. Am. Chem. Soc.* 2023）。Gong グループ（実験、材料）と田中グループ（実験、医療）は、がん診断に革命をもたらす可能性のあるハイドロゲル活性化リプログラミング現象（HARP）を発見した（*Nat. Biomed. Eng.* 2021）。これらのアウトプットは、我々の戦略の有効性を証明し、「化学反応の設計と創成に革命を起こす」という我々の目標を達成するために、この戦略がうまく機能していることを証明している。

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（短期的なものを含む）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。

ICReDD には、海外の研究機関から世界をリードする 3 名の研究者を招聘した。Rubinstein（米国デューク大学）は、高分子理論物理学の研究者として世界的に高く評価されている。2016 年からは、国際連携研究教育局（GI-CoRE；北海道大学）の客員教授として勤務し、このほど卓越教授に任命された。現在、ソフトマター関連の共同研究を展開中。Varnek（ストラスブール大学、フランス）は、ケモインフォマティクスの世界的な研究者であり、化学情報科学の普及と教育にも力を注いでいる。List（マックス・プランク石炭研究所、ドイツ）は、反応設計、特に有機触媒に関する実験科学の第一人者である。外国人 PI は、ICReDD に十分な期間（例えば 2 ヶ月）滞在し、現地滞在の割合を増やすためにテレビ会議を頻繁に利用し、Co-PI と協力して融合研究に貢献している。外国人 PI は母国の研究機関と ICReDD を兼務しているため、当拠点内に外国人 PI のための研究グループを設置し、**外国人 PI と緊密に連携して研究グループを支援・管理する、Co-PI と研究スタッフ（特任准教授、特任助教、ポスドク）を雇用した。**ICReDD で採用される特任准教授・助教および博士研究員はすべて、競争的な国際公募によって選ばれ、ICReDD の **40%以上が外国人研究者**である。前述の Co-PI 制度は名古屋大学（ITbM）の WPI で大きな成功を収め、同様の制度はマサチューセッツ工科大学とシンガポール国立大学の SMART プログラムでも採用されている。この制度により、世界的に有名な外国人 PI が Co-PI と協力して研究チームを立ち上げ、学際的な交流を促進する優れた研究環境を作り出している。このような刺激的な環境は、未来を担う若手研究者の継続的な育成を可能にする。外国人 PI もまた、前述の MANABIYA システムを通じて ICReDD に参加する外国人若手研究者を招聘可能である。

北海道大学は 2014 年、中長期戦略の一環として、総長直轄の教育研究組織「**国際連携研究教育局（GI-CoRE）**」を設立した。本学の強みとされる 6 つの研究分野で GI-CoRE を立ち上げ、自主財源による組織的な国際共同研究を推進してきた。このうち、特にソフトマター GI-CoRE と情報科学 GI-

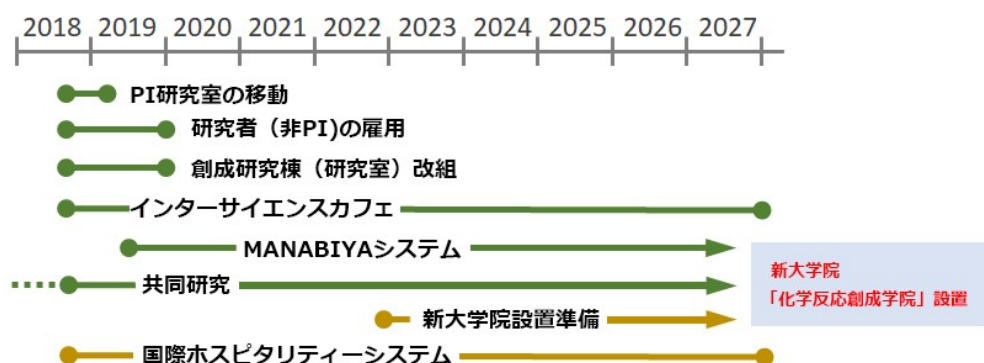
CoRE は、現在、ICReDD につながる共同研究拠点として活用されている。**これらの GI-CoRE は、重要な下部組織として ICReDD に慎重に組み込まれている。**ソフトマター-GI-CoRE では、Gong が代表として強力な共同研究を推進している。

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スト校（情報科学 GI-CoRE）との組織的な共同研究を推進・支援している。また、エモリー大学（計算化学）、スイス連邦工科大学チューリッヒ校（ETH チューリッヒ：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）とも共同研究や MANABIYA システムを通じて密接に

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	●	●	●

連携しており、研究者間の交流を図りながら国際的な共同研究を推進する環境を整えている。国内外の研究者と積極的に交流することで、共同研究ネットワークのさらなる拡大を図っている。対面でのコミュニケーションの減少を補うため、zoom 等を利用したオンラインミーティングを定期的に行い、自由にコミュニケーションやチャット、研究テーマについて議論できる環境を維持している。マックス・プランク研究所、ストラスブール大学、東京大学、中部大学とも協定を結んでいる。さらに、デューク大学、北京大学、ストックホルム大学、オスロ大学、クイーンズ大学、ICIQ（Institut Català d'Investigació Química：カタルーニャ化学研究所）は強力な共同研究機関であった。今後もこれらの研究機関との連携を継続し、本学の国際協力機構と連携しながら、計画的かつ具体的に交流や協定を締結していく予定である。

ICReDD の研究範囲を学内外に拡大し、次期 PI のインキュベーションシステムとして機能さ



せるため、ICReDD は 2023 年度より ICReDD フェローという新たなポジションを設置する。国内外から招聘した ICReDD フェローに ICReDD のリソースを提供し、共同研究を行う。

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。

スタートアップ研究費は、主に外国人研究者の研究グループ設立のために提供され、可能な限り摩擦のない研究活動の開始を可能にする研究環境を構築する。ICReDD では**英語が使用言語**であるため、研究活動、共同研究、論文発表、事務作業を十分にサポートするために、ICReDD の運営や管理業務を担当するスタッフ全員が英語に堪能でなければならない。すでに設置されている GI-CoRE や北海道大学の関連センターは、このような外国人研究者の支援を行ってきた実績を有する。さらに、移住を容易にし、研究の効率化を促進するために、ビザや住居など研究以外の問題に関して外国人研究者とその家族を支援する**国際ホスピタリティ支援システム**を確立した。この制度は、既に設立されている GI-CoRE と北海道大学国際連携機構のリソースを活用している。また、外国人研究者と日本人研究者やその学生との効果的な連携を可能にするため、**国際交流も促進**している。ICReDD では、世界トップレベルの研究者を頻繁に招聘し、毎年**国際シンポジウム**を開催している。**MANABIYA システム**の一部は、ICReDD 内の多様化を促進し、国際的なネットワークを構築・育成するために、海外の若手研究者と日本の大学院生との短期交換プログラムとして機能している。

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、若く世界をリードする計算科学者である前田が WPI 補助期間 10 年の間、責任をもって運営する。副拠点長には世界トップレベルの実験科学者で組織運営の経験も豊富な伊藤が就く。ICReDD は、創成研究機構（CRIS）に設置され、世界最先端の計算科学、情報科学、実験科学を融合し、国際競争力のある研究・教育環境を創出するための拠点を形成する。**人事や予算裁量など拠点運営に関する事項の決定権は、ICReDD 拠点長に一任され、拠点長が自由に使える年間 1,000 万円以上の拠点長裁量経費も拠点長が管理する。**プログラム開始と同時に、副拠点長の豊富な経験に基づき、ICReDD の拠点長をサポートする共同運営体制を構築した。中長期的には、拠点長がトップダウンで意思決定を行う体制を構築する。**拠点長の意思決定プロセスをサポートするため、副拠点長、事務部門長、大学研究アドミニストレーター（URA）で構成される運営委員会を設置した。**主任研究者が研究に専念できるよう、運営委員会への参加は不要とし、PI が必要な場合、拠点長に直接進言できる体制を整えた。**北海道大学で既に導入されている業績評価制度に基づき、研究業績と裁量評価を中心とした俸給システムを構築した。研究の進捗状況に応じて、拠点長によって定期的に見直され、評価され、適切なインセンティブが実施される。**

[研究支援部門]

大学執行部との連携を強化し、大学の意思決定を ICReDD に迅速に反映させるため、副学長を ICReDD 事務部門長に任命した。総長とは月 1 回ミーティングを行い、将来計画を含めた運営について協議している。また、プログラムの初期段階でのスムーズな移行と、継続的な研究活動をサポートするため、専任スタッフを配置し、研究支援部門を設置した。外国人 PI、研究者、学生を支援し、国際

シンポジウムを企画する「国際企画ユニット」を設置した。また、「広報担当」は、ホームページの運営やイベント運営等を行う。「研究戦略ユニット」は、MANABIYA への研究者や学生の受入や、産学官連携業務を行う。研究支援部門は、研究者や学生が管理運営に邪魔されることなく快適に研究に取り組めるよう、常に研究環境を整えている。

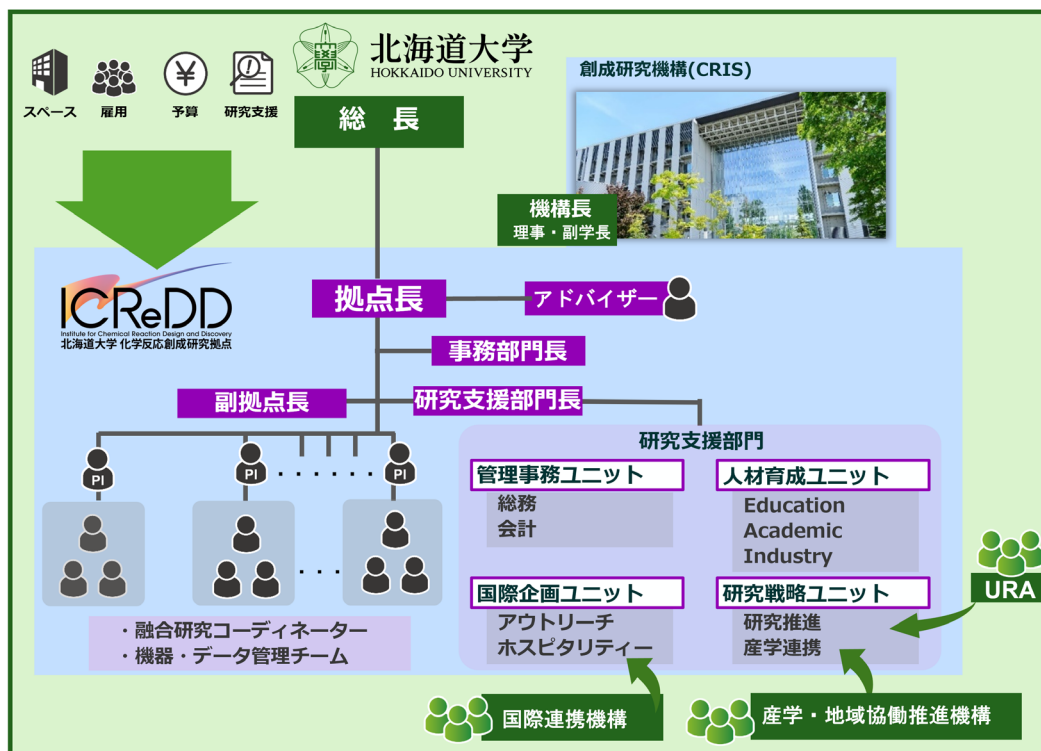
5) -2. 環境整備

- ・「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。
- ・ジェンダーバランスの実現に向けた、環境整備に対するホスト機関のサポート体制や取組を具体的に記載。
- ・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。

大学は既に創成科学研究棟に 2,600m² の ICRReDD スペースを提供し、光熱費を含む使用料を負担している。ICReDD の研究スペースは、2023 年 2 月に 2,600m² から 8,100m² に拡張された。大学は、創成科学研究棟と産学連携研究施設が集中するキャンパス北側に土地を提供し、新研究棟（4 階建て、約 5,500m²）が完成した、総勢 100 名を超える研究者がひとつ屋根の下で研究できる環境が整った。動物実験室、産学連携研究室、90 人の研究者が一つの空間で研究できる融合研究室などを備える。世界中から研究者や大学院生が集い、専門分野を超えた知を相乗的に融合し、共同研究を行うことで、世界をリードする研究機関を目指すという拠点長のビジョンを実現するため、MANABIYA システムやインターサイエンスサロンスペースを導入した。**国内外の研究機関から研究者や大学院生を 1～3 ヶ月の期間招へいし、ICReDD で確立された新しい反応開発手法を活用して育成する。**年間 20 名程度の外国人研究者・大学院生による短期ビジターを継続的に受け入れ、ICReDD の発見に基づく知的資源を提供する。インターサイエンスサロンは、研究者が気軽に集い、学際的な議論を促進するためのスペースである。このように拠点長は、研究者の継続的な交流を図りながら、国際的にリードする拠点の発展を主導している。国際ホスピタリティサポートシステムは、既に設立されている国際連携研究教育局（GI-CoRE）と国際連携機構のリソースを活用し、外国人研究者とその家族に対し、ビザや住居など研究以外の問題に関して支援を提供し、移住を容易にする。その結果、外国人研究者は日常生活から切り離され、研究活動の効率化が促進される。ICReDD の優秀な研究者は、競争的な選考プロセスを経てテニユアのポジションに就き、国際的に先導的な教育と研究の継続を保証される(様式 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）には現在約 160 台の最先端分析機器が設置され、拠点が利用する分析料金は大学から財政的支援されている。また、**GFC が拠点で購入した分析機器の維持・管理を行うことにより、研究者は研究に専念することができる。**国際連携機構

は、当センターで雇用されている外国人研究者とその家族の生活環境を支援している。

化学反応創成研究拠点組織図



ジェンダーバランスの実現 文部科学省補助事業「研究環境ダイバーシティ実現イニシアティブ（女性リーダー育成型）」（2023 年度～2028 年度）に採択された本学のプログラム「Accelerate Ambitious of All」に基づき、大学としてジェンダーバランスの改善方針（2028 年までに教員の女性比率 23%）を策定した。また上位職・管理職における女性比率増加の加速を目指し、「女子学生・大学院生の博士進学支援」・「女性研究者招へい支援」・「研究活動とライフイベント両立のための補助人材支援」・「上位職を目指す女性研究者のためのメンタリング・シャドウイング研修支援事業」・「女性研究者の採用および上位職への積極的な登用を促進する加速アクションプラン」といった施策に取り組んでいる。2023 年度に実施された加速アクションプランは、准教授クラス的女性教員を教授職へ昇任させるもので、34 件の応募があり、自然科学系 17 名、人文社会系 8 名、計 25 名が教授へ昇任した。その結果、全学の教授の女性比率は 7.4%から 10.4%に増加した。また、本学は 2028 年度までに女性教授比率 20%を目標としている。ICReDD では、2021 年度に「研究活動とライフイベント両立のための補助人材支援」を利用し、育休時に研究補助者を雇用した女性研究者がおり、復職後もスムーズに研究活動に復帰できている。

また本学は、北海道大学初的女性教授の名を冠した「桂田芳枝賞」を新設し、学術上優れた研究を展開するとともに次世代の管理職として活躍が期待される女性教員を表彰することとし、2023 年度には、ICReDD の PI1 名を含む 4 名が全学で受賞した。

また 2023 年度には、ICReDD 棟と創成研究棟に一時保育スペースが完備され、ICReDD の研究者が子の保育のために利用可能となっている。

研究不正の防止 ICReDD が過去に所属した研究者の研究不正を管理する重大な責任を負っていることを認識している。WPI 補助期間の後半には、拠点の研究者は、本学が提供する通常の研究倫

理教育研修に加え、ICReDD 独自の研究倫理セミナーを採用時に受講し、その後も毎年定期的に受講することが義務付けられている。論文不正の防止と拠点における適切なデータ管理を目的として、当該分野に精通した博士号を有する研究者を採用し、拠点内の機器データの管理、提出する全ての数値と生データの照合を行う機器管理センターを設置した。また、拠点内に計算・情報科学共通データベースを設置し、透明性の向上と情報共有の促進を図った。これらの取り組みにより、拠点が研究の透明性において世界標準となることを目指す。さらに、研究成果をオープンに議論できる環境を整備することで、不正行為を防止し、融合研究をさらに加速させる。

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。

ICReDD は、大学運営と連携した常設組織として設立する。そのために、部局横断的な研究を統括する全学組織である「創成研究機構(CRIS、2002 年設置)」の組織改革を活用し、将来的には ICReDD を大学組織の中に独立した機関として統合する。**6 年目以降、共同研究が十分に進展し社会実装が可能となった段階で、(i)ICReDD のコア領域（計算科学、情報科学、実験科学）以外の研究分野を取り込み、化学反応創成学の更なる推進・発展を図るとともに、(ii)創成研究機構の改革に着手する。**また、ICReDD の研究活動は、変化する現代社会における様々な喫緊の社会的課題に関連するものであることから、ICReDD の研究から得られる成果は、人文・社会科学、特に生命倫理や公共政策における関連研究をも触発するものであるべきである。**人文・社会科学と理工学の融合は、知的財産、安全性評価、科学技術倫理、国際的な技術運用基準など、北海道大学を再編することに直結する。**各 PI の所属部局の支援システムを利用することで、PI の事務作業の負担を軽減し、PI の研究と教育エフォートを確保する。ICReDD は、少なくとも WPI 補助金と同等の運営資金（PI の人件費や研究室費用・スペースチャージを含む）を大学から確保する。6 年目以降、大学の自主的な費用の比率を高めることで、ICReDD は徐々に独立し、継続的な研究活動を確保する（参考：様式 5：ホスト機関からのコミットメント）。化学反応創成学院の設置に向けた既存大学院の再編・統合を 2023 年度から実施し、「**化学反応創成学院**」と新設する「MANABIYA (EDUCATION)」を本学の教育組織として定着させる。世界最先端の研究を教育プログラムに還元するため、既存の研究所や大学院の枠組みにとらわれない分野横断的・学際的な教育体制を構築する。MANABIYA を利用する研究者、大学院生、産業界研究者の育成、および拠点の大学院教育やリカレント教育の戦略やロードマップの作成を担当する「人材育成ユニット」を設立した。本ユニットのために、教育・研究経験が豊富な正規教授や専門教員をすでに採用した。学内に人材育成ユニットを持つ国際研究機関は他になく、この組織改革は ICReDD の研究拠点としてのさらなる発展と全学への貢献につながる。また、**産業界からの研究者の受け入れや、産業界パートナーとの研究コンソーシアムの設立など、民間資金獲得のための恒久的な組織づくりも行う。**具体的には、北海道大学産学・地域協働推進機構のマネージャーが、ICReDD の研究者と研究コンソーシアムの企業メンバーの仲介を行い、研究連携を推進する。(様式 5-9-2 参照)。

WPI からの補助期間終了後、ICReDD は北海道大学の常設研究所として設立される。ICReDD には 10 名のシニア PI の研究室が設置され、各シニア PI に正規准教授 1 名と博士研究員 1 名が大学

からの人件費で配置される。これら 10 名のシニア PI はトップレベルの研究者であり、毎年評価を受け、拠点が最高レベルを維持できるよう、業績に応じて交代する可能性がある。さらに、関連分野の 6 名の若手 PI (Jr. PI) は、海外の一流研究機関から採用され、テニユアトラック准教授として採用される。当拠点は、2022 年 4 月現在、すでに 4 名のテニユアトラック准教授と 1 名の助教を確保している。さらに 2 名の若手 PI (Jr. PI) は 2023 年度に採用される予定である。若手 PI (Jr. PI) 6 名には、大学負担で博士研究員を 1 名ずつ配置する。現在、WPI 補助金で雇用されている特任准教授と博士研究員を、2023 年度から順次、大学の費用で雇用する予定であり、拠点常設後の人員配置を視野に入れている。最終的に ICRéDD は、10 名のシニア PI と 6 名の若手 PI によって、研究力を維持できる体制を整える。PI は所属部局の経費で雇用されるが、大学は、若手 PI (Jr. PI) 6 名、主任研究者グループの准教授 10 名、各研究グループの博士研究員 1 名（合計 16 名）を雇用する。また、融合研究コーディネーター、人材育成ユニット担当教員、その他研究支援要員を雇用する。今後の拠点での研究の進展により、主任研究者の交代や追加が必要となった場合には、ICRéDD フェローの中から新たな主任研究者を任命する。このダイナミックな人材循環システムにより、ICRéDD は常に最高レベルの科学的卓越性を維持する。

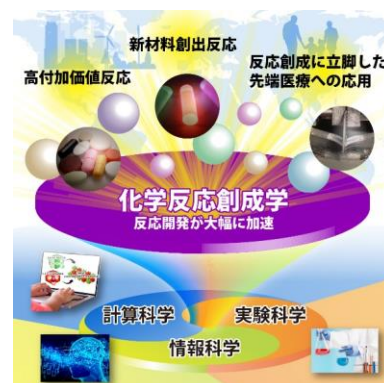
ICRéDD は、本学の近未来戦略である「世界最高水準の研究を行うグローバル頭脳循環拠点」を実現するためのフラッグシッププロジェクトであり、本学の第 4 期中期目標・中期計画の中核をなす。今後も ICRéDD は、北海道大学を真に国際的な教育研究拠点へと変貌させる原動力となる。

拠点長のビジョン

北海道大学・教授 前田 理

新しい化学反応の開発は、人類の繁栄や環境保全と密接に結びついている。前世紀に発見された最も注目すべき化学反応のひとつが、窒素 (N_2) と水素 (H_2) からアンモニア (NH_3) を触媒的に合成するハーバー・ボッシュ法である。「空気をパンに変える反応」としても知られるハーバー・ボッシュ法は、肥料の大量生産を可能にし、20世紀初頭の世界的な食糧不足の克服に貢献した。このような大きな影響を与える化学反応の最近の例としては、2010年のノーベル化学賞を受賞したクロスカップリング反応がある。これらの反応は、医薬品の約20%、液晶材料や有機EL材料のほとんどを製造するために使用されている。これらの化学反応の産業利用は、年間約60兆円規模の産業に関わっている。このように、**新しい化学反応の開発は、社会の発展に大きく影響している**。しかしながら、現在使用されている化学反応の設計・開発方法は非常に非効率的である。通常、これらの方法は試行錯誤に基づいており、非常に手間と時間がかかるだけでなく、真に革新的な反応を発見する確率は低く、**新しい化学反応の開発と実施には、現実には数十年を要する**。そのため、**根本的に新しい科学的アプローチが必要である**。

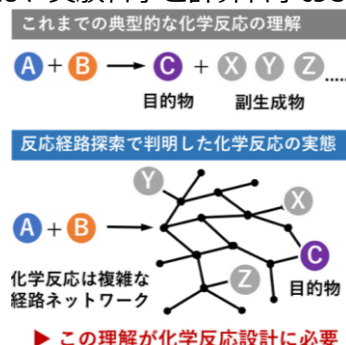
本拠点の目標は、**計算科学、情報科学、実験科学の融合により、化学反応の効率的な開発を可能にする「化学反応創成学 (Chemical Reaction Design and Discovery : CReDD)」という科学分野を確立することである**。化学反応創成学は、(1)量子化学計算に基づく化学反応設計指針の確立、(2)情報科学的手法による化学反応の複雑性の理解と新反応の設計、(3)理論的に提案された反応の実験的検証により、化学反応開発の最先端手法を次のレベルに引き上げるものである。化学反応創成研究拠点 (ICReDD) で実施されている量子化学計算は、既知の反応メカニズムを検証するために利用されてきたこれまでのアプローチとは異なる。未知の反応経路を明らかにすることができる量子化学計算は、科学的に大きな進歩を意味する。その計算を可能にするキーテクノロジーが、この分野の世界的パイオニアである前田が開発した「反応経路自動探索 (AFIR) 法」である。ほんの20年前までは、量子化学計算による化学反応経路の自動探索は不可能とされていた。しかし前田は、反応系に仮想的な力を加えることで、潜在的な反応経路を明らかにするというアイデアを提案した。このアイデアに基づいて、未知の反応経路を系統的に予測する世界初の一般的手法を開発した。この手法は学術的な興味だけではなく、現在、複数の企業が前田と共同研究を行っている。



AFIR法を化学反応の解析に用いると、当初予想された反応経路とは大きく異なる経路で反応が進行することがしばしば示されることは、非常に注目値する。単純な化学式は、反応物から主要生成物、副生成物までのすべての可能な経路を含む大量の未知の**反応経路ネットワーク**を示す。反応経路ネットワークを理解することは、最終的に、目的とする生成物への未知の経路を発見し、望ましくない副生成物への経路を阻止することができるようになる。したがって、化学反応の自在設計のためには、**反応経路ネットワークを理解し、制御可能な反応経路を特定することが重要である**。

さらに、AFIR法は「複雑さ」という大きな課題にも取り組んでいる。わずか数個の原子を含む単純な反応でさえ、非常に複雑な反応経路ネットワークを示すことがあり、重要な反応経路と重要でない反応経路の区別が非常に難しくなる。したがって、有望な反応経路を特定するためには、情報科学の助けが不可欠である。北海道大学には、パス列挙、データマイニング、機械学習などの分野で国際的に著名な研究者が多数在籍しており、このような複雑なネットワークの解析に役立つ。情報科学者の知見を取り入れることで、複雑な反応経路ネットワークを理解し、実験に先立って重要な要素を抽出することを目指す。同時に、過去に得られた大量の実験データを調査し、有意義なデータを計算科学者にフィードバックすることで、反応経路ネットワークを得るために必要な計算を簡略化する。

しかし、理論的予測は実験的に証明されて初めて意味を持つ。本拠点では、実験科学と計算科学および情報科学を、世界をリードするレベルで融合させることを目指している。化学反応は化学反応経路の広範なネットワークを介して進行するという概念的理解がこれまで不十分であったため、実験科学者は、手間がかかり、費用がかかり、非効率的な試行錯誤のプロセスを続ける以外に選択肢がなかった。これに対して化学反応創成学は、(1)AFIR法を用いて化学反応経路ネットワークを計算し、(2)情報科学の概念を応用して実験に意味のある情報を抽出し、最適な実験条件を絞り込む。このアプローチにより、有望な実験を「ピンポイント」で抽出することが可能となり、化学反応開発に要する時間を大幅に短縮することができる。本拠点の実験科学者の大半は、すでに計算科学者や情報科学者と共同研究を行っているため、異なるバックグラウンドを持つ科学者間のシナジー効果が得られている。さらに、情



報科学は、実験科学者が得たデータを計算科学者にフィードバックするループを提供し、3つの分野の組み合わせによる相乗効果が、化学反応創成学の改良と洗練につながっている。

化学反応創成学の開発により、(1)高付加価値化学品（小中分子）、(2)新素材（高分子）、(3)最先端医療技術（複雑系）を生み出す反応の発見が可能となる。(1)のタイプの反応は、例えばCO₂から生物学的に重要な分子を合成するなど、価値の低い物質から有用な化学物質を作り出す。(2)のタイプの反応は、高度な機能性を持つ材料、例えば高発光性材料や刺激応答性材料を作り出す。最後に、(3)のタイプの反応は、例えば、再生医療や診断のための試薬につながる改良された生物医学的材料など、臨床分野での応用のための高度な材料を提供する。これらの反応は、複雑さや反応する分子の環境において大きく異なる。この広い範囲をカバーするために、我々は戦略的に異なる分野の研究者からなるチームを編成した。

融合研究を実質的に推進するため、複数のグループからなるチームによって推進されるいくつかのフラッグシッププロジェクトを立ち上げた。2022年度現在、6つのプロジェクトが並行して進められている。これらのプロジェクトの中でも、ICReDDの基盤となるProject-Iは特別な位置を占める。すべての計算・情報科学グループがProject-Iと協力し、計算・情報科学ツールを他のプロジェクトへの応用にフィードバックを提供している。残りのプロジェクトは、低分子合成から高分子材料制御、癌診断に至るまで、階層的な複雑性を示す実用的な化学的ターゲットに取り組むことに重点を置いている。複雑さの異なるこれらのプロジェクトに同時に取り組むことで、化学・材料科学の幅広い問題に適用できる包括的なツール群を確立することができる。さらに、毎年若手研究者からアイデアを募り、ボトムアッププロジェクトとして立ち上げている。成功したボトムアッププロジェクトはフラッグシッププロジェクトに昇格し、成績不振のフラッグシッププロジェクトは評価され、中止もあり得る。このようなアプローチにより、若手研究者を中心としたインパクトのある成果を継続することができる。

ICReDDは、WPI申請当初のビジョンに沿った成果を着実に上げてきた。上述のAFIR法を用いた新反応の発見に加え、量子化学計算を用いた触媒最適化、ケモインフォマティクスとロボット合成を用いた新触媒の発見、量子化学計算を用いた機能性ゲルの開発などがICReDDの成果である。また、分子活性化の新たな技術として機械的刺激を用いたメカノケミカル合成や、ハイドロゲルを用いたがん幹細胞のリプログラミング技術に関するICReDDのPIによる革新的な研究開発も特筆に値する。もう一つ特筆すべきは、ICReDDのPIの一人であるベンジャミン・リスト教授がノーベル化学賞を受賞したことである。ICReDDのWPI補助期間の下半期には、こうした取り組みにICReDDの融合研究の視点を加え、より広い視野から研究を発展させていく。具体的には、固相合成や医療に応用される物質の合成など、複雑系への計算科学と情報科学の応用を加速させる。さらに、当拠点の国際的な認知度を向上させ、研究成果の迅速な実用化を促進することを目的として、3つの新しい部門を立ち上げた。リスト教授が主導する「リスト共同研究プラットフォーム」、「三井化学-ICReDD化学反応設計イノベーション部門」、そして医学部と共同で設置した「化学・臨床連携プラットフォーム」である。

本拠点のもう一つの目標は、計算科学、情報科学、実験科学の3つのテーマをすべて習得した新しい世代の研究者を育成し、将来化学反応創成学をさらに発展させることである。**化学反応創成学の意義は、「MANABIYA（まなびや）」システムの構築を通じて、拠点の成果を世界と共有することによって確保する。**具体的には、海外の実験研究者がMANABIYAに参加し、ICReDDとの共同研究を通じて、例えばAFIR法や機械学習について学ぶ。これらの研究者は、ICReDDで習得した知識や技術を母国の研究機関に帰国後も活用する。MANABIYAを通じて、ICReDDは世界中から研究者を継続的に受け入れるグローバルな研究ハブとなる。これにより、ICReDDは発展するだけでなく、化学反応を開発する他の大学や研究機関、企業の研究にも貢献できるようになる。**将来、MANABIYAシステムは、新たな大学院「化学反応創成学院」へと進化する。さらに、WPIで得た卓越したマネジメントシステムを共有することで、ICReDDは北海道大学を改革する。**

WPIからの補助期間を経て、ICReDDは北海道大学の常設研究所として設立される。従来の研究所とは異なり、ICReDDはダイナミックな人事制度を導入する。この制度は、北海道大学の他部局や学外のトップレベルの研究所からトップレベルの研究者を招聘し、彼らに十分な資源と予算を提供することで、ICReDDに研究室を増設する機会を提供するものである。これらの研究者は毎年評価を受け、センターが最高レベルを維持できるよう、業績に応じて交代することもある。さらに、若手の著名な研究者には、ジュニア主任研究者として自分のグループを持つ機会を提供する。このようなダイナミックな人材循環により、ICReDDは常に最高レベルの科学的卓越性を維持することができる。

その一方で、ICReDDは過去の研究者が犯した研究不正を管理する重大な責任を負っていると認識している。WPI補助期間の後半には、ICReDD内での倫理教育の徹底に加え、実験データの管理を行う部門を新設し、研究の透明性という点でグローバルスタンダードな拠点となるよう努力する。また、研究成果をオープンに議論できる環境を整備することで、不正行為を防止し、融合研究をさらに加速させる。

試行錯誤に頼った反応開発だけでは、エネルギーや資源の不足だけでなく、公害を含む現在の世界的な問題を解決するには時間がかかりすぎる。化学反応創成学は、計算科学、情報科学、実験科学を融合させることで、従来の反応開発のアプローチに革命を起こす。我々はグローバルなWPIを確立し、他分野を統合することで、このアプローチの恩恵を広めるよう努める。我々のWPIが、全人類の明るく豊かな未来に貢献できると考える。

ホスト機関のコミットメント

令和5年8月10日

文部科学省 宛

国立大学法人 北海道大学

総長・寶金清博

「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、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上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。

北海道大学の中長期戦略は、大学の国際化に向けた研究・教育に関するいくつかの先進的な計画に基づいている。2002年には、部局横断的な学際的研究を推進する創成研究機構（CRIS）が設立された。2014年、北海道大学は創基150周年（2026年）までの近未来ビジョンを「世界の課題の解決に貢献する北海道大学」と定め、「北海道大学近未来戦略150」を策定した。文部科学省WPI事業の支援を受け、北海道大学の研究成果を大幅に向上させるとともに、近未来ビジョンの実現に向けて最大限の研究を行うためのフラッグシップ・イニシアチブとして、「化学反応創成研究拠点（ICReDD）」を設立した。ICReDDはCRISに組み込まれており、WPI拠点を推進するために既存のインフラとリソースをフルに活用することができる。

ICReDDは、本学の近未来戦略である「世界最高水準の研究を行うグローバル頭脳循環拠点」の形成に向けたフラッグシップ研究プロジェクトとして、第4期中期目標・中期計画において中心的な役割を担う。

中期目標・中期計画（2022年度～2026年度）より抜粋

中期目標

世界トップクラスに比肩する研究大学を目指して、戦略的に国際的なプレゼンスを高める分野を定め、国内外の優秀な研究者や学生を獲得できる教育研究環境（特別な研究費、給与等）を整備する。併せて、データ基盤を含む最先端の教育研究設備や、産学官を越えた国際的なネットワーク・ハブ機能等の知的資産が集積する世界最高水準の拠点を構築する。

中期計画

世界トップレベルの研究拠点の形成を目指す「化学反応創成研究拠点（ICReDD）」や、人獣共通感染症研究などの本学の特色を活用した国際連携研究の拠点機能を中核として、国内外の優秀な研究者を獲得するとともに、拠点の最先端研究をカリキュラムに反映させた大学院教育を実施することを通して、教育と連動した世界最高水準の研究拠点を構築する。

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、自立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。

北海道大学は、この国際的な研究拠点を最大限支援するため、CRISの枠組みの中でICReDDを設立した。ICReDDは、世界をリードする研究拠点となり、人類の未来を変えるような成果を生み出すために、ICReDDのコア領域（計算科学、情報科学、実験科学）以外の研究協力を進め、研究実施を推進する。

1. ICReDD設立以来、大学はICReDDを強力に支援し、WPI補助金と同等以上の運営資金を確保してきた（2018 年度：358百万円、2019年度：1,026百万円、2020年度：1,388百万円、2021年度：1,904百万円、2022年度：2,657百万円）。ICReDDは、2023年度以降、大学の自主的な経費負担の割合を増やすことで、徐々に独立性を高め、継続的な研究活動を確保していく計画である。
2. ICReDD が持続的に独立した研究活動を継続できるよう、大学は、WPIの優秀な研究者に全学のテニュアポジションを措置した。これらの研究者は、インパクトのある論文発表や競争的資金の獲得などの研究活動に基づく厳格な選考プロセスを経て採用した。この計画に基づき、2022年4月現在、すでに4名のテニュアトラック准教授と1名の助教がICReDDに配置されており、大学は2027年度の補助期間終了までに必要なポジションを提供することで、ICReDDの永続性を確保する。また、大学は、ICReDDに対し、概算要求や部局横断的な競争的資金申請の権利を与えている。
3. 2023年度からは、「化学反応創成学院」を設置するため、既存の大学院の再編・統合を実施し、「化学反応創成学院」と「MANABIYA」を大学の教育組織として整備する。世界最先端の研究を教育プログラムに還元するため、既存の研究所や大学院の枠にとらわれない学際的・融合的な教育体制を構築する。ICReDDでは、「ICReDD人材育成ユニット」を設置し、国や地域にとらわれず、学生や社会人を対象とした多角的なアプローチにより、次世代高等教育のモデルケースとなる人材育成の仕組みを設備する。学内にこのような人材育成ユニットを持つ国際研究機関は他になく、この組織改革はICReDDの若手研究者育成のための研究拠点としてのさらなる発展にもつながり、大学全体の改革にも貢献するものである。
4. 産業連携を推進するため、ICReDDと連携する企業を巻き込んだコンソーシアムの形成を支援し、ICReDDの自主財源を獲得する体制を構築する。2023年度からは、企業との5年間の大型共同研究プロジェクトを開始した。ICReDDは、MANABIYA(INDUSTRY)を活用したリカレント教育を実施し、ICReDDの研究とこれらの産業とのベストマッチングを図るため、関連分野の企業を誘致し、ネットワークを拡大する。
5. 10 年後、ICReDDは大学内の恒久的な独立研究組織となる。大学は、ICReDDを評価し、研究システムや教育システムなど、成功したシステムを大学の他の部門に適用する。ICReDDは、将来の大学院設置を視野に入れ、「人材育成ユニット」を設置した。また、「化学反応創成学」と「MANABIYA」は、「化学反応創成学院」の設置により、大学の組織として定着する。現在の大学院とは異なる独自の大学院を持つことになるため、ICReDD大学院は、他の研究機関等の若手研究者の育成にも影響を与え、通常の大学院のカリキュラムに、異分野の研究室訪問であるMANABIYAなど、新しく魅力的なコンテンツが加わる。

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。

大学は、少なくともWPI補助金と同等の物的・財政的支援を、以下の施策を通じて行った。

1. 研究支援体制を強化するため、運営組織を研究支援部門に改組し、研究支援と運営をより明確にした。大学執行部との連携を強化し、大学の意思決定を速やかにICReDDの事業に反映させるため、副学長を新たにICReDD事務部門長に任命した。研究支援部門を以下の4つのユニットに再編した：総務・会計を担当する「管理事務ユニット」、海外の優秀な研究者や学生を招聘し、国際連携機構と連携して学界を超えた国際的なアウトリーチを行う「国際企画ユニット」、URAや産学・地域協働推進機構と連携し、大型資金の獲得や他機関との連携協定、企業との共同研究プロジェクトなどを推進する「研究戦略ユニット」、MANABIYAを活用した研究者・大学院生・産業界研究者の育成や、ICReDDの大学院教育・リカレント教育の戦略・ロードマップの作成を担当する「人材育成ユニット」。また、「融合研究コーディネーター」と「機器管理ユニット」は研究部門と直結しており、拠点長の方針に基づき実施し、研究者と密接に連携しながら進捗状況を確認している。このようにして、ICReDDを恒久的な研究機関とするために必要な人材を確保する計画である。円滑なプログラム運営を保証するため、また ICReDDの国際的な方向性を考慮し、大学はすでに、ICReDDのために英語に堪能な常勤の事務職員を採用し、2023年からは ICReDDの人材育成ユニットのために、教育・研究経験が豊富な教授および専門教員を採用した。
2. 大学は、ICReDDに創成科学研究棟の 2,600 m²のスペースを提供し、光熱水費等を含むスペースチャージを負担している。また、文部科学省に国立大学法人施設整備費を要求し、総事業費の半額を自己負担して「国際化学反応創成拠点棟」（新棟、地上4階、約5,500m²）を2022年度末に完成させた。今後は、定期的に研究者・研究テーマを入れ替える新たな適応型研究戦略に基づき、常に世界最先端の研究を推進するダイナミックな研究拠点として、ICReDDを恒久化していく。
3. 大学は、各PIの部局における教育的・事務的負担を軽減するため、PIが所属する部局に対し人件費相当（～5,000 万円/年）をサポート教員等支援経費として配分している。
4. 大学は、部局横断的な教育研究活動の支援体制を強化するため、学内各部局の技術職員を兼務させた統合技術職員組織「技術支援本部」を設置し、運営組織内の集中体制を強化した。技術支援本部は、ICReDDからの要請を受け、機器管理教員と連携して技術職員を派遣し、機器管理ユニットとの連携のもと、ICReDDの機器（核磁気共鳴装置）の維持管理業務を支援した。

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。

ICReDDは、大学運営と一体となった常設の組織として維持される。総長直轄の特別研究機関として位置づけ、継続的な研究活動を維持し、10年程度の研究活動の後、中期目標・中期計画等に位置づけられた新たな研究戦略に基づき、研究者の配置を固定化することなく、常に世界最先端の研究を推進する研究拠点として恒久化する。

1. 大学は、ICReDDの研究の新たな展開を強力に支援し、2022年度には、ICReDDの研究の更なる発展と国内外の研究拠点機能の充実のための「リスト連携研究プラットフォーム」の概算要求を受け入れ、予算要求し、2023年度から採択されスタートした。
2. 大学は、2022年4月時点でICReDDにテニュアトラック准教授4名、助教1名を確保した。補助期間終

了後、各PIに正規准教授1名、博士研究員1名を配置する。若手主任研究者6名には、大学負担で博士研究員を1名ずつ配置する。ICReDDが恒久的に設置された後の人員配置を視野に入れ、現在WPI補助金で雇用されている特任准教授および博士研究員は、2023年度から順次、大学の雇用経費で雇用される。

3. 研究成果の更なる社会実装を目指し、新棟の産学連携研究スペースを活用し、補助期間後半に産学連携を加速する。また、2022年度の産業界からの研究者受け入れや産業界との研究コンソーシアム設立を視野に入れ、産学連携体制を再編・強化した。これにより、ICReDDの民間資金獲得を組織的に支援できる体制となり、資金調達を推進しながら維持・恒久化できる。その成果は、すでにICReDDにおける新たな産学連携として具現化している。2023年度からは「三井化学-ICReDD化学反応設計イノベーション部門」を設置し、高性能材料の開発や循環型社会の形成に資する新反応の迅速かつ高精度な設計に焦点を当てた共同研究を行う。

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。

1. 総長とICReDD拠点長は毎月定期的にミーティングを行い、ICReDDを持続可能な研究拠点として確立するための将来計画を含め、運営について協議している。大学執行部との連携を強化し、大学の決定が速やかに ICReDDの運営に反映されるよう、副学長をICReDD事務部門長に任命した。大学は、拠点長に人事、予算、研究の優先順位などの決定権を与えた。拠点運営委員会は、拠点に関する重要事項を審議する場であり、アドバイザーとしての役割を果たし、拠点長の最終的な決定をサポートする。
2. 大学は、海外の優秀な研究者を採用するため、「国立大学法人北海道大学創成研究機構化学反応創成研究拠点に所属する特任教員の給与の取扱いに関する要項」を制定し、より高い給与を支給できるようにした。また、2022年度からは、「北海道大学創成研究機構化学反応創成研究拠点（ICReDD）特任教員の業績評価に関する内規」を制定し、拠点所属特任教員への業績評価制度を開始した。拠点長が、定量的な基礎評価に加え、業績評価報告書及び面談による裁量評価を行い、昇・降給（上下1～2号俸）の対象者を決定している。
3. 化学反応創成学を発展させるトップレベルの研究者を獲得するため、大学はクロスアポイントメント制度により、京都大学、東京大学の教授を主任研究者として採用した。また、東京大学大学院情報理工学系研究科とは、相互の学術連携を推進するための協定も締結した。

意思決定システム

大学は、拠点規程「北海道大学創成研究機構化学反応創成研究拠点規程」を制定した。拠点の運営・管理に関する一切の事項を拠点長の所掌とし、人事、予算執行等の重要事項について、拠点長が強力なリーダーシップを発揮できる体制としている。さらに、拠点長が自由に執行可能な拠点長裁量経費（年間1,000万円以上）を設けた。

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。

大学は、ICReDDのPIが拠点の研究に専念できる環境を整備した。研究担当理事とPIが所属する部局

長は、各部局におけるICReDD PIの教育・管理業務を軽減するための調整を行った。各PIの所属部局における教育・管理上の負担を軽減するため、各部局に対し人件費相当（～年間 5,000 万円）をサポート教員等支援経費として配分した。

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。

ICReDDは、2018年の発足以来、構成員が増加し、融合研究が着実に進展していることから、WPI補助期間の後半に向けて研究支援体制を見直した。ICReDDは、国際連携機構、産学・地域協働推進機構、URA、ダイバーシティ・インクルージョン推進本部等の学内組織との連携を強化することにより、アカデミアを超えた国際的なアウトリーチ活動を積極的に展開し、海外から多くの優秀な研究者や学生を招聘するための効果的な国際戦略を推進している。

1. 大学は、拠点長に、採用や予算裁量など拠点運営の重要事項に関するすべての決定権を既に与えている。ICReDDの意思決定プロセスにおいて拠点長をサポートするため、ICReDDは運営委員会を設置した。
2. 拠点のミッションは、拠点長が行う研究者との面談を通じて全メンバーに周知されている。研究室・オフィスが混在する場合は研究室長を置き、拠点長の方針が速やかに伝わるよう研究室運営を行っている。研究部門に直結した「融合研究コーディネーター」は、拠点長の方針に基づき、融合研究を積極的に企画・推進し、研究の進捗状況を助言する。将来計画WG、設備管理WGに権限を委譲し、拠点長の指示による拠点運営を行っている。
3. 2022年度には、これまで評価制度がなかった拠点所属特任教員の研究業績と裁量評価に基づくインセンティブを付与する規程を新設した。自己業績評価、拠点長との年1回の面談に基づく裁量評価の結果をもとに、次年度の基本年俸から1段階または2段階の昇・降給を決定するもので、学内の他部局ではまだ実施されていない。
4. 英語の堪能な事務職員を配置し、さまざまな分野で優れた能力と経験を持つ人材で構成されている。事務情報はすべて英語と日本語で提供されている。国際企画ユニットスタッフによる外国人研究者・PIとの面談が実施され、ワンストップのサポート体制が確立されている。事務部門では、英語と日本語の両方に対応できるスタッフが日々幅広いサポートを行っている。外国人研究者とその家族の日常生活や大学の事務手続きに関する書類の多くは、ICReDD事務部門が英訳している。外国人研究者の就職（来日）時や退職時のサポートを重視し、日本の税金や社会保険制度について英語で丁寧に説明している。外国人研究者が研究に専念できる環境づくりのため、民間アパートを探す際の契約や生活に必要な手続きなどの言語サポートを行い、札幌への移住を支援している。また、子どもの入学支援、学校とのコミュニケーション支援、日本語習得のための日本語講座の案内なども導入している。就学前の子どもに対しては、保育園や幼稚園の手続き、学校への問い合わせなどをサポートする。本人や家族の健康管理支援としては、病院選びのアドバイス、予約時の説明や付き添い、妊婦の出産時のサポートなどを行っている。また、新型コロナウイルス（COVID-19）への対応として、発熱時の状況確認、保健所への連絡、予防接種に関する最新情報の提供などを行った。

8) 拠点の活動に必要となるインフラ（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。

創成科学研究棟を含む大学キャンパスのインフラ利用など、ICReDDへ支援の概要は以下の通り。

1. 大学は、創成科学研究棟に ICReDD のスペース 2,600m²を提供し、光熱水費等を含むスペースチャージを提供した。また、産学連携研究施設が集中するキャンパス北側に土地を提供し、2022年度末までに新研究棟（5,500m²）を建設した。このように、大学はICReDDに対し、主任研究者の原籍部局の研究スペースも含め、十分なスペースを提供している。
2. ICReDD における合成試料の分析に必要な費用、および大学が管理する高分解能 NMR などの最先端機器を利用できるオープンファシリティの利用料を提供した（2019 年度：85 万円、2020 年度：100 万円、2021 年度：250 万円、2022 年度：230 万円）。
3. WPI の研究者全員が毎月集い、英語で異分野間の意見交換を行うスペース（ICReDD Salon）を設置し、特に若手研究者の研究成果の発信を促した。

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。

大学は、ICReDDの目標と計画を大学の第4期中期計画に組み込むことにより、ICReDDの計画実施を全面的に支援する。

1. 大学執行部との連携を強化し、大学の意思決定をICReDDに迅速に反映させるため、副学長をICReDD 事務部門長に任命した。総長とは月1回ミーティングを行い、将来計画を含めた運営について協議している。
2. 大学は、創成科学研究棟のインフラへのアクセスに加え、国際連携機構（2-1）、産学・地域協働推進機構（2-2）等の関連機関のリソースへのアクセスを提供し、ICReDD を支援している。
 - 2-1. マックス・プランク研究所、ストラスブール大学、東京大学、中部大学と協定を締結した。さらに、デューク大学、北京大学、ストックホルム大学、オスロ大学、クイーンズ大学、ICIQ（Institut Català d'Investigació Química：カタルーニャ化学研究所）は強力な共同研究機関であった。ICReDDは、今後もこれらの研究機関との協力を継続する予定である。大学は、国際連携機構と協力して交流や協定を支援している。
 - 2-2. 2021 年 6 月、HPC システムズ社が本学とのプログラムライセンス契約に基づき GRRM20 の提供を開始し、ライセンス収入は年々増加している。ICReDDは大学広報室と連携して国際広報を強化し、外部資金獲得の仕組みづくりなどファンドレイジング活動を開始した。

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。

拠点長と事務部門長のように研究組織と事務組織を明確に分離した運営体制、教員にインセンティブを与えるきめ細かな業績評価制度、外国人研究者の日常生活をサポートするホスピタリティ制度、研究不正を防止するための融合研究専門教員（融合研究コーディネーター）や機器管理教員の配置など、ICReDDの成果を高く評価し、学内の他部局への展開を計画している。自前の大学院を持つ研究機関の教育改革は、学内のみならず学外にも影響を与え、世界最先端の研究を担う人材を育成する試みとして注

目に値する。このように、ICReDDは、北海道大学を真に国際的な研究教育拠点に生まれ変わらせるための原動力となる。

- 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、2023年4月1日時点とする。
※ 2023年4月1日時点で、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。
※ 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。

	氏 名	現在の所属（機関、部局、専攻等）・役職	専 門	エフォート* （%）	備 考
1	拠点長 前田 理*	北海道大学・創成研究機構 化学反応創成研究拠点／理学研究院・教授	博士（理学）・ 計算化学	80	
2	武次 徹也*	北海道大学・創成研究機構 化学反応創成研究拠点／理学研究院・教授	博士（工学）・ 量子化学	80	
3	Michael Rubinstein*	Duke University・ Professor	Ph.D. ・ 物理学	20	
4	吉岡 真治*	北海道大学・創成研究機構 化学反応創成研究拠点／情報科学研究院・教授	博士（工学）・ 知識工学	20	
5	Alexandre Varnek*	University of Strasbourg・Professor	Ph.D. ・ 情報化学	20	
6	瀧川 一学*	北海道大学・創成研究機構 化学反応創成研究拠点・特任教授 京都大学・国際高等教育 院附属データ科学イノベーション 教育研究センター・特定教授	博士（工学）・ 機械学習	20	
7	小松崎 民樹*	北海道大学・創成研究機構 化学反応創成研究拠点／電子科学研究所 附属社会創造数学研究セン	博士（理学）・ 数理科学	80	
8	岩田 寛*	北海道大学・創成研究機構 化学反応創成研究拠点・特任教授 東京大学・大学院情報理工学系 研究科・教授	博士（理学）・ 数理工学	20	
9	伊藤 肇*	北海道大学・創成研究機構 化学反応創成研究拠点／工学 研究院・教授	博士（工学）・ 合成化学	80	
10	小川 美香子*	北海道大学・創成研究機構 化学反応創成研究拠点／薬学 研究院・教授	博士（薬学）・ 薬品分析化学・ 物理化学	80	
11	Benjamin List*	北海道大学・創成研究機構 化学反応創成研究拠点・特任教授 ／Max Planck Institute for Coal Chemistry・Professor and Director	Ph.D. ・ 反応設計	20	
12	長谷川 靖哉*	北海道大学・創成研究機構 化学反応創成研究拠点／工学 研究院・教授	博士（工学）・ 光材料化学	80	

13	猪熊 泰英*	北海道大学・創成研究機構 化学反応創成研究拠点 ／工学研究院・教授	博士（理学）・ 構造化学	80	
14	龔 劍萍*	北海道大学・創成研究機構 化学反応創成研究拠点 ／先端生命科学研究院・	博士（理学） 博士（工学）・ 高分子化学	80	
15	田中 伸哉*	北海道大学・創成研究機構 化学反応創成研究拠点 ／医学研究院・教授	博士（医学）・ 腫瘍病理学	80	

*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。）