世界トップレベル研究拠点プログラム (WPI)

エグゼクティブサマリー (中間評価用)

ホスト機関名	北海道大学	ホスト機関長名	寶金清博
拠点名	化学反応創成研究拠点 (ICReDD)		
拠点長名	前田 理	事務部門長名	石森 浩一郎

作成上の注意事項：

このサマリーは、自己点検評価報告書に記載された内容に基づいて、以下の項目についての概要を4ページ以内の記述で作成してください。

I. 概要

ICReDD は、実験化学、計算化学、情報科学の分野を融合し、「化学反応設計・発見の革新」を目指している。その研究活動は順調に進展し、406本の論文を発表し、そのうち22本はIF20.0以上のジャーナルに掲載された。融合研究を推進するために、7つのフラッグシッププロジェクトが設立され、これらのプロジェクトはインパクトのある融合研究成果を生み出すことに成功している。ICReDDの組織も安定に運営されており、総勢69名(外国人比率39%)の研究者が在籍している。2,600m²のスペース(2022年度末には新棟5,500m²を追加する。)を使用し、WPI予算と同等以上の独自財源を確保した。ICReDDは、ホームページやSNSなどを通じて、積極的に活動情報を発信している。さらに、MANABIYAシステムを通じてアカデミアと産業界の両方から研究者を受け入れている。ICReDDは、大学執行部との連携をさらに強化した。ICReDDを恒久的な組織と位置付け、大学から5名(准教授3名、女性助教1名、女性准教授1名)のポストを確保した。人材と資金を確保するための更なる努力は現在進行中である。このように、ICReDDは「化学反応設計・発見の革新」とその恒久的な確立に向けて、具体的な一歩を踏み出した。

II. 各論

1. 拠点構想の概要

本拠点は、実験化学、計算化学、情報科学の分野を融合し、「化学反応設計・発見の革新」を目指す。その研究活動は順調に進展し、IF20.0以上のジャーナルに掲載された22本を含む406本の論文を発表している。この拠点研究活動を強力に推進するために、7つのフラッグシッププロジェクトを立ち上げた。プロジェクトは階層的に組織され、プロジェクトIを基盤とし、プロジェクトII~VIIでは、関わる化学プロセスの複雑さが徐々に増していくようになっている。このように複雑さの異なるプロジェクトを同時に進めることで、プロジェクト固有の課題と共通の課題を共有し、化学反応を包括的かつ迅速に理解する手法の開発が可能になる。すべてのプロジェクトについて、2021年度末に評価を行い、延長するかどうか、延長した場合の最終目標を再設定した。

2022年3月31日現在、主任研究者数は15名、外国人研究者は全体の39%、女性研究者は13%(合計69名、計算18(26%)、情報14(20%)、実験37(54%))である。ICReDDは、融合研究に必要な実験装置やコンピュータを備えた2,600m²のスペースを活用してきた。また、ICReDD新棟(5,500m²)の建設が始まった(2022年度末に完成予定)。ICReDDは、WPI予算と同等以上の大学独自の財源で運営されている。ICReDDの研究者は、競争的研究資金を安定に獲得し続けている。

ICReDDは、拠点のウェブサイト、SNS、「月刊ポストカード」、「季刊ニュースポスター」、「年次報告書」を通じて、拠点の活動に関する情報を提供している。さらに、MANABIYAシステムを通じてアカデミアと産業界の双方から研究者を受け入れた。

融合研究のさらなる推進と、ICReDDの恒久的な設立に向けた発展のために、研究支援部門が設置された。ICReDDは、大学の意思決定が速やかに拠点運営に反映されるよう、副学長を新たに事務部門長とし、大学執行部と強い連携をとっている。ICReDDにおける融合研究を強化するため、「融合研究コーディネーター」を設置した。また、国際的な視点から拠点の将来の方向性について提言を受ける「アドバイザリーボード」を設置した。

この3年半の間に、WPI申請時に提案した拠点の当初のビジョンを上回る研究・運営体制を構築することができた。また、北海道大学からは、新棟建設のための資金援助や、テニョアトラックのジュニアPIポスト設置のための資金援助など、あらゆるレベルで拠点ビジョン遂行に欠かせない支援があった。ICReDDは、「化学反応の設計と発見に革命を起こす

"ために、具体的な一歩を踏み出した。

2. 拠点の研究活動

本拠点は、実験化学、計算化学、情報科学の融合により、化学反応設計・発見の加速化を目指している。そのために、1 分子系から複雑な物質・生体系まで、私たちの生活や社会の幅広い領域で重要な役割を担う化学プロセスに貢献できる 7 つのフラッグシッププロジェクトを立ち上げた。その成果は、以下のように現れている。今後は、新たに設置された融合研究コーディネーターの役割のもと、フラッグシッププロジェクトの進捗状況を見ながら、方向性を調整する。

(1) 高度計算・情報科学技術の開発・統合 (プロジェクト I)

本拠点の研究の根幹となるプロジェクト。AFIR による逆合成解析法 (QCaRA) を提案し、実践的に適用した。プロトタイプデータベースプラットフォーム SCAN を開発し、情報科学の可視化・分類技術 (RePathDB、SubMo-GNN) と統合した。これらにより、新しい化学反応の予測につながる。また、ニューラルネットワークのポテンシャルを利用した AFIR 検索の高速化も取り組み始めている。また、新規化学反応の設計のために、CGR、GNN、データベースに基づくいくつかのインフォマティクスツールが開発された。

(2) 新規合成法の設計と発見 (プロジェクト II、III、IV、V)

ジフルオログリシン、非対称二座ホスフィン誘導体などの合成で QCaRA 法の適用性を証明した。計算と実験の回帰的アプローチにより、N- α,α -ジフルオロ複素環の合成、CO₂ を用いた脱芳香族的ジカルボキシル化反応などを実現した。AFIR は遷移状態の探索能力を発揮し、不斉有機分子触媒の反応機構の解明や、遷移金属触媒のさらなる最適化につながった。また、新しい記述子 CircuS を開発し、高エナンチオ選択性触媒の予測に応用した。溶媒中での化学反応に代わるものとして、メカノケミカル合成を検討し、反応性の向上、不溶性化合物の反応、メカノドックス反応、メカニカルフォースを利用したグリニャール試薬の合成を実現した。

(3) 新材料の設計・探索 (プロジェクト VI)

力による分解は、化学反応制御や高分子材料の機能化に利用された。結合の切断と新たなネットワークの再構築により強化されるダブルネットワークハイドロゲル (DN ゲル) の開発を実現した。アゾ系架橋剤を用いた DN ゲルを開発し、理論計算に基づいて高濃度のメカノラジカルを発生させることに成功した。また、プレ蛍光プローブを用いて汎用高分子中のメカノラジカルをセンシングする技術も実証した。

(4) 革新的な計測・診断法の創出 (プロジェクト VII)

がんの簡易診断に焦点を当て、HARP 現象 (DN ゲルを用いてがん細胞ががん幹細胞になる現象。) を確立した。その後、膨大な実験から治療薬を同定する効率的なドラッグスクリーニングのために、バンディットアルゴリズムとともにハイドロゲルプレートキットを設計した。

適切な施設・設備が整備された。創成科学研究棟の改修が完了し、2,600m² のスペースを有効活用して融合研究を推進した。2023 年度より利用する「化学反応創成研究棟 (ICReDD 棟)」の設計を完了し、融合研究のさらなる推進を図った。また、海外 PI を含む拠点研究者による研究助成金の獲得は、2021 年度時点で 24 億 6 千万円に達した。

これらの取り組みにより、インパクトのある学術誌 (IF>20: 22 誌、Nature (×3)、Science (×5)、Nature Nanotech (×1)、Adv. Mater (×4)、Nat. Biomed. Biomed. Eng. (×1))、TOP10%論文 74 本、研究プレスリリース 30 本を発表した。また、国内外の研究者との共同研究も行い、北海道大学内の共同論文 121 件、国内共同論文 162 件 (WPI 間共同論文 9 件)、国際共同論文 134 件となった。また、拠点研究者は、ノーベル賞 (リスト)、H.C. ブラウン賞 (リスト)、長倉三郎賞 (前田)、ディラック・メダル (前田)、日本化学会賞 (グン)、文部科学大臣表彰科学技術賞 (グン、澤村) など 39 件の受賞をした。

3. 研究成果の社会還元

ICReDD の研究成果は、特許出願を含め着実に結実した。主な成果は以下の通り。1) 2021 年 6 月に株式会社 HPC システムズからリリースしたソフトウェアパッケージ「GRRM20」で、拠点の最新版 AFIR が使用できるようになった。2) メカノケミカル合成法により、不溶性基質を用いたクロスカップリング反応を実現した。この成果は、従来の溶液中での合成では実現できなかった発光材料や電子材料の開発につながると期待される。3) 北海道大学口バス農林水産工学国際連携研究教育拠点との連携により、特殊な光変換材料を植物の生育向上に応用した。4) HARP 現象を利用し、新規がん幹細胞マーカーの同定など、がん診断の臨床応用に取り組んだ。また、効率よく実験を行うためのハイドロゲルキットを設計した。

ICReDD は、毎年度、国際シンポジウムを開催し、ビジョンや研究内容を紹介した。2021 年には「鈴木章・ICReDD 賞」を創設し、受賞者やその所属機関と ICReDD の連携を強化した。また、鈴木章賞と第 4 回国際シンポジウムの両方の認知度を高めるために、主に北

米と欧州の地域をターゲットとしたデジタル広告キャンペーン（Nature、Science など）を実施し、グローバルな認知度を最大化させた。ICReDD のユニークな取り組みとして、高校生レベルの非科学者向けに研究を紹介するニュースポスター「The CATALYST」を季刊で発行した。リスト教授の2021年ノーベル化学賞受賞を記念した特別版第6号を含め、計7号を作成した。最近、ホームページやツイッターで、より積極的に研究をアピールするように努めている。ツイートでジャーナルに言及することで、著名なジャーナルが拠点 Twitter アカウントをフォローし、リツイートしてくれるようになり、国際的な読者への知名度が向上した。

4. 異分野融合

ICReDD のスローガンを掲げた拠点長のリーダーシップのもと、新たな挑戦的テーマを決定し、7つのフラッグシッププロジェクトを立ち上げた。各プロジェクトの進捗会議には拠点長と融合研究コーディネーターが参加し、短期的視点と長期的視点の両面から議論を行った。また、毎月のPIミーティングでは、進捗状況をPIと共有した。これにより、ICReDD のミッションを拠点内の全メンバーで共有することができた。

資金面では、若手研究者が ICReDD のスローガンのもと、自由な発想で新しい研究に挑戦できるよう、スタートアップ支援制度を整えた。新任教員19名に6,025万円、24件の融合研究プロジェクトに6,820万円を割り当てた。また、本制度により支援可能な新しい融合研究を推進するため、各種セミナー（フランクスタイルセミナー、融合セミナー、ステアセミナー、シーズ・ニーズセミナー、マンスリーセミナー）を開催した。

インキュベーションスペースとして、mix-lab、mix-office、ICReDD サロンなどを用意し、異分野間のコラボレーションを加速させるべく、日々のコミュニケーションやディスカッションを行った。また、COVID-19の状況から、オンラインサロンを開催し、コミュニケーションの確保を図った。

拠点のキーテクノロジーであるAFIRについては、4000CPUコアの計算機クラスターを用意し、実験者が計算を行えるようにした。また、理論・情報科学者を対象に、AFIRの利用・開発に関するチュートリアルセミナーを開催し、AFIRの利用による研究開発の加速を図った。

5. 国際的な研究環境の実現

ストラスブル大学とは協定を締結した。さらに、マックス・プランク研究所、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、ノースカロライナ大学などが強力な協力機関であることがわかった。今後は、北米・欧州を中心とした各海外の北海道大学のオフィスでの国際広報活動や、産学官連携活動も行っていく予定である。

人員はこの3年半で着実に増えている。2022年3月末現在、研究者69名のうち27名（39%）が外国人、9名（13%）が女性である。研究分野の比率は、計算・情報科学と実験科学がそれぞれ50%ずつとなっている。世界トップレベルの国際的な研究活動をさらに推進するため、国際的に優れた若手外国人研究者3名を北海道大学のテニュアトラック制度により准教授として採用した。また、女性助教を1名採用し、女性テニュアトラック准教授1名を公募した。国際企画ユニットスタッフによる外国人研究者及び主任研究者への生活環境ヒアリングを実施し、ワンストップでのホスピタリティサポート体制を構築した。

6. 組織の改革

ICReDD は、フラッグシッププロジェクトとして、北海道大学の第4期中期目標・計画の中核となる。ICReDD の設立以来、北海道大学は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た（2018年度：363百万円、2019年度：1,026百万円、2020年度：1,388百万円、2021年度：1,989百万円）。拠点の運営・経営に関するすべての事項の最終的な意思決定は拠点長に委ねられている。長期的（WPI 補助期間後）な将来を見据えた事務体制を再編し、副学長を事務部門長とすることで北海道大学本部との連携を強化した。毎月1回、総長とミーティングを行い、将来計画を含めた運営について議論している。優秀な研究者を採用するため、北海道大学の給与規程を改定し、より高い給与を支払うことが出来るようにした。また、化学反応設計・探索分野を発展させるトップレベルの研究者を獲得するため、クロスアポイントメント制度を導入し、理研の研究者と東京大学の教授を主任研究者として雇用することに活用した。さらに、主任研究者等への拠点手当の支給規程を整備した。2022年度には、拠点教員の研究業績・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。北海道大学では、技術職員統合組織「技術支援室」を設置し、北海道大学の各部門の技術職員が兼任することとした。技術支援管理システムの統合により、部門横断的な教育・研究活動の支援が強化された。同室は、ICReDD のNMRの維持・管理を支援するため、技術スタッフを派遣した。北海道大学は2022年度より、産業界からの研究者の受け入れや産業界との研究コンソーシアムの設立を中心に、産学連

携体制を再編・強化した。これにより、ICReDD の民間資金獲得と恒久的な設立を組織的に支援できる体制が整った。

7. 今後の展望

次の課題は、WPI 補助期間が終了した後、研究成果をどのように活用し、永続的に運営を維持していくかである。2021 年度末に全プロジェクトの進捗状況を確認・評価した。その評価をもとに、各プロジェクトについて、メンバーの追加、期間の延長、範囲の拡大、方向性を見直し、廃止などを検討する。学内組織との連携を強化し、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するとともに、海外から多くの優秀な研究者・学生を招聘するための効果的な国際戦略を推進する。そのために、2023 年に向けて、人材育成ユニットと研究戦略ユニットを新設する。人材育成ユニットは、MANABIYA システムを活用し、大学院教育、リカレント教育、科学界・社会への貢献に関する戦略やロードマップを策定する。研究戦略ユニットは、MANABIYA を活用して関連分野の企業を集め、その産業とのベストマッチングを図るためのネットワークを拡充する。

8. 拠点の自立に向けた以後 5 年間（6 年目以降）にわたるホスト機関の具体的取組計画

ICReDD は、総長直轄の特別研究機関として位置づけられる。新たな北海道大学の研究戦略に基づき、研究テーマの柔軟性を保ちながら、常に世界最高水準の最先端研究を推進する恒久的な研究拠点とする。ICReDD の最先端研究を学内外の多くの研究者とともに大きく発展させる枠組みとして、優れた研究成果に基づく研究開発を支援・推進し、拠点外の研究者との共同研究を実現する「連携研究プラットフォーム」を構築する。このプラットフォーム構想により、北海道大学発の最先端研究をベースにした国際的な研究拠点が飛躍的に発展・確立される。また、WPI 補助期間終了後は、本学の既存の大学院を再編・統合して「化学反応創成学」大学院を設置し、「化学反応創成学」と「MANABIYA」を本学の教育組織として定着させる。また、世界トップレベルの先端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分野横断的・学際的な教育システムを構築し、「ICReDD 人材育成ユニット」を立ち上げる予定である。国際的な研究機関において人材育成ユニットが存在することは珍しく、この組織改革は ICReDD の研究拠点としてのさらなる発展と北海道大学への貢献につながるものと考えている。

9. その他特筆すべき事項

ICReDD の研究者全員を対象に、多様性、安全性、技術輸出管理、研究倫理に関する教育を充実させる。5 月に Queen's Univ の専門家を招いたダイバーシティに関するワークショップを予定した。2020 年に Science に掲載された ICReDD の論文が撤回された。この事態を極めて深刻に受け止め、今後同様の事態を防止し、信頼を回復するために、6 月の拠点全研究員に対する研究倫理の再教育を皮切りに、万全を期す。

10. 令和 3(2021)年度フォローアップ結果（現地視察報告書を含む）への対応

- 1) ICReDD は、フラッグシッププロジェクトを再編し、より強力で戦略的な研究遂行体制に再構築する予定です。
- 2) 学生、ポスドク、助教、准教授 (JrPI) から教授 (PI) までの女性研究者のキャリアパス制度を確立し、ロールモデルを示す予定である。
- 3) ICReDD は、拠点外の研究者との共同研究を実現するために、新たな国際共同研究プラットフォームを構築する予定である。さらに、教員の給与体系を国際競争力のあるものにするため、ICReDD では 2022 年度から業績評価に基づくインセンティブを付与できる給与体系を導入しています。
- 4) 医学部との合同シンポジウムを開催し、両分野の理解と議論を深め、新たな学際的協力の機会を見出した。また、2022 年度には、ICReDD が臨床志向の化学コンソーシアムを実施する予定である。
- 5) ICReDD はアウトリーチをさらに強化する。研究者向け月例ポストカード、高校生・学部生向け季刊ニュースポスター、高校生や一般市民向け講演会、プレスリリース、記者会見などを積極的に行う。また、国際シンポジウムや鈴木章賞のプロモーションのため、Science、Nature、ACS、RSC、Wiley などを利用した戦略的な国際広報を行い、認知度を高めていく。
- 6) 北海道大学は ICReDD を恒久的に維持する（項目 8 参照）。北海道大学の決定事項が速やかに拠点事業に反映されるよう、副学長を事務部門長に新たに配置した。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編し、事務ユニット、国際企画ユニット、研究戦略ユニット、人材育成ユニットの 4 つのユニットを設置した。また、融合研究コーディネーターという役割も設け、研究部門と直結し、研究者と密接に連携しながらセンター長の方針を管理し、進捗を確認することができるようにした。また、北大は 2023 年度予算要求で 8 名の教員を要求する予定である。