

世界トップレベル研究拠点プログラム（WPI）

令和 5（2023）年度拠点構想進捗状況報告書

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：

※令和6(2024)年3月31日現在の内容で作成すること。

※文中で金額を記載する際は円表記とすること。この際、外貨を円に換算する必要がある場合は、使用したレートを併記すること。

拠点構想進捗状況の概要（2 ページ以内に収めること）

1. 世界最高水準の研究

Society 5.0 の実現による SDG s の達成のためには、新しい機能性分子や高機能材料、さらには難病の治療法などを生み出す新しい化学反応が必要となる。しかし、新しい化学反応の設計や発見は、これまでセレンディピティや経験に基づく直感に頼っており、新しい社会のためのイノベーションのボトルネックとなっている。ICReDD では、様々な化学反応のシミュレーションが可能な計算科学チームが、情報・実験チームと密接に連携しながら、実用的な化学反応設計手法の開発に取り組んでいる。高度に複雑な化学プロセスの問題に対処するため、ケモおよびマテリアルインフォマティクスから組合せ最適化、知識工学、数理モデリングなど多様な分野をカバーする情報科学チームにトップ情報科学者が結集している。実験科学チームも、有機合成、材料化学、高分子、医学など、多様なバックグラウンドを持つトップ実験科学者で構成されている。これらチームが持つ計算・情報・実験技術を高度に融合させた研究により、さまざまな応用分野での「化学反応設計・創成」戦略の開発に取り組み、化学反応設計・創成に革新をもたらす。

2023 年度の実績：査読付き雑誌に掲載された論文 166 報（IF > 10：47 報）、*Science*（IF: 56.9）1 報、*Nature Chemistry*（IF: 21.8）2 報、*ACS Nano*（IF: 17.1）2 報。国際会議における招待講演 84 件、受賞 10 件。研究費獲得総額は 12.73 億円（代表的な研究費：JST-ERATO、JST-CREST、AMED-P-PROMOTE 等）

2. 融合領域の創出

融合研究の推進：拠点長が主導し、融合研究コーディネーターが各プロジェクトリーダーと連携をとりながら、フラッグシップ・プロジェクトとボトムアップ・プロジェクトを推進した。これらのプロジェクトに対しては毎年評価を行い、ボトムアップ・プロジェクトのうち将来性が見込まれるものは、フラッグシップ・プロジェクトに拡大・昇格させた。

2023 年度の融合研究成果：複数のプロジェクトに関わる計算と情報の融合研究が進展した（*J. Chem. Phys. A*、*J. Chem. Inf. Model.*、*Mol. Inf.*）。Gong グループと前田グループは、ダブルネットワークハイドロゲルにおけるメカノフォア活性化の効率と選択性を、相対的結合破断力の関数として研究した（*J. Am. Chem. Soc.*、*Nat. Chem.*）。また、腫瘍の悪性度を評価する Cancer GPS 法、画像解析による混合物の組成分析、結晶性分子機械に関するボトムアッププロジェクトに取り組んだ（*Sci. Rep.*、*Industrial & Engineering Chemical Research*、*J. Am. Chem. Soc.*）。

融合研究へのスタートアップ支援：新任教員スタートアップ支援（3 名 800 万円）、融合研究スタートアップ支援 18 件（1,662 万円）、グループ課題 1 件（1,000 万円）、合計 2,662 万円が採択された。これらのプロジェクトが科学研究費補助金の獲得につながり、5 件（5,960 万円）が採択された。

助成金申請時の事前チェック体制：科研費等の申請書を提出前に審査・修正するプレチェックシステムを実施した。これにより、2024 年度の科学研究費補助金の採択率は 36.0%（大学平均 34.7%）であった。科研費の獲得額は年々増加している。2023 年度：2.88 億円、海外 PI・Jr-PI も科研費の獲得に成功している。

3. 国際的な研究環境の実現

研究者数：2023 年度は、特任教員及び博士研究員計 16 ポジションについて国際公募を行い、国内外から 90 名の応募があった。その結果、2024 年 3 月 31 日現在、拠点の研究者数は 84 名に上り、

そのうち 48%(40 名)が外国籍、19%(16 名)が女性研究者である。なお、PI 15 名のうち 3 名が外国籍である。また、3 分野の構成割合は、計算 16 名(19%)、情報 19 名(23%)、実験 49 名(58%)。
シンポジウムやセミナーの開催：ICReDD 国際シンポジウムを開催し、国内外から研究者による講演や、拠点のビジョンや研究内容の紹介を行っている。2023 年 9 月 10, 11 日に開催した第 3 回鈴木章賞授賞式&第 6 回 ICRReDD 国際シンポジウムにおいて、総参加者数 350 名(オンサイト 222 名、オンライン 128 名)、海外からの参加者 17 名(9 カ国)、ポスターセッション 38 件であった。10 月 5 日には「リストプラットフォーム」キックオフシンポジウムを開催し、95 名が参加した。さらに、2024 年 1 月 18, 19 日に「ライジングスター・プログラム」と題した第 7 回 ICRReDD 国際シンポジウムを開催し、165 名(オンサイト 100 名、オンライン 65 名)が参加した。2023 年度には、18 の国際セミナー、共催シンポジウム 7 件、ICReDD セミナー 7 件(研究倫理セミナー 2 件、ダイバーシティセミナー 2 件、NNP-AFIR チュートリアルセミナー 1 件、日本語研究講演会 2 件)を開催した。
MANABIYA による若手研究者の育成：MANABIYA システムによる研究者の受入を実施した。2023 年 4 月に募集を行った"MANABIYA(ACADEMIC)"には 22 名の応募があり、21 名(国内：13 名、海外：8 名)を受け入れ、ICReDD の技術を習得させた。新型コロナ渡航制限解除に伴い、2023 年度は海外からの応募が増加した。

4. 研究組織の改革

教員の評価制度：学内他部局では実施されていない特任教員の業績評価を実施した。研究実績と拠点長との年 1 回の面談による裁量業績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した。業績評価 (S,A,B,C,D) は、2023 年度中に着任・退任した教員を除いた 16 名のうち 15 名について実施した。評価 S で 2 段階昇給した教員は 1 名、評価 A で 1 段階昇給した教員は 7 名、評価 B で改定なしとなった教員は 7 名、評価 C または D で 1 段階または 2 段階減給した教員はいなかった。

ICReDD フェロー制度の創設：2023 年度、ICReDD の研究活動を学内外に拡大し、新規 PI のインキュベーション体制とするため、ICReDD フェローという新たな職位を設置し、5 名の教授が就任した。

機器・データ管理ユニットの設置：この分野に精通した博士号を持つ研究者を雇用して設立された機器・データ管理ユニットは、拠点の機器の測定データを管理し、論文として提出する数値データをすべて生データと照合するシステムを構築した。

人材育成ユニットの設置：化学反応創成学と MANABIYA を活用した大学院を設置準備を開始した。既存の大学院のカリキュラムに、異分野の研究室との短期研究交流である「MANABIYA」など現代社会に必要とされる魅力的なコンテンツを加える。

研究不正の防止：研究不正を防止するため、拠点内での倫理教育の徹底(独自の研究倫理教育セミナーを採用時および年 1 回定期的に受講)に加え、拠点内の機器データを管理し、論文に掲載する数値と生データの照合を行う体制を整えた。また、研究成果をオープンに議論できる定期的な交流会「ICReDD 懇親会」を 6 回開催し、若手研究者、学生、PI が交流・意見交換を行った。

5. 拠点の中長期的な発展を確保するための取り組み

北海道大学は、WPI 助成金と同等以上の運営費(2023 年度：18.3 億円)を確保した。定期的な研究者・研究テーマの入れ替えを伴う研究戦略に基づき、ICReDD を常に世界最先端の研究を推進する常設研究拠点とする。2023 年度には「List サステナブル DX 触媒連携研究プラットフォーム(List-Platform)」と「三井化学-ICReDD 化学反応設計イノベーション部門(三井化学-ICReDD ラボ)」を立ち上げた。大学からは、拠点長・事務部門長など研究組織と事務組織を明確に分けた運営体制、きめ細かな業績評価制度、ホスピタリティ制度、融合研究専門教員(融合研究コーディネーター)、研究不正防止のための機器・データ管理教員の配置、ICReDD フェロー制度など、ICReDD の実績を高く評価された。

6. その他

ICReDD の最新パンフレットと ICRReDD 棟のパンフレットを作成した。イベントでの注目を集める目的でノベルティグッズを作成した。研究プレスリリース 18 本、研究ニュース 6 本の計 24 本の研究関連記事をウェブに掲載。SNS での研究関連投稿に注力し、新着情報を X(旧 Twitter)の@機能で定期的に学術雑誌にメンションすることで、学術雑誌がリツイートするようにした結果、ICReDD ウェブサイトの研究ニュースへのクリック数が昨年比 52%増(1,093 件)、ICReDD ウェブサイトの研究ニュース記事を読覧したユーザー数が 35%増(6743 人)となった。11 月 23 日に中高生を中心とした一般市民を対象とした第 12 回 WPI サイエンスシンポジウム「インフォマティクスを活用した研究の最前線～情報を味方に付けたトップレベル研究～」を開催し、270 名(会場参加 117 名、オンライン参加 153 名)の参加があった。また、オープンキャンパス、研究室体験、拠点見学会、特別授業など、様々な一般向けアウトリーチイベントを開催し、ICReDD のビズビリティを向上した。