

世界トップレベル研究拠点プログラム (WPI) 平成30(2018)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	名和豊春
拠点名	化学反応創成研究拠点 (ICReDD)	拠点長名	前田 理

全様式共通の注意事項：

※特に指定のない限り、平成31(2019)年3月31日現在の内容で作成すること。

※フォローアップは最新の拠点構想に則して行うため、本報告書は最新の拠点構想に基づいて記述すること。

※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。

・本報告書(添付様式を除く)は10ページ~20ページ(拠点構想進捗状況の概要(2ページ以内)も含む)の範囲で作成すること。

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の推進

化学反応創成研究拠点(ICReDD)では、計算科学・情報科学・実験科学の高度な融合により、これまでの試行錯誤による反応開発から脱却し、よりスマートなやり方での反応創出が可能になります。初年度(2018年10月末から2019年3月末の期間)は、各PI独自の世界最高水準研究に加えて、計算科学および情報科学分野の要素技術の開発や統合を進め、それらを用いた共同研究テーマの探索を行った。その成果として、拠点内において複数の共同研究が開始されている。

2018年度の特に関心すべき研究成果として、以下の三つが挙げられ、具体的な共同研究へと発展しつつある。

(1) 代謝反応によって成長する全く新しい材料の開発 (*Science*, 2019)

Gongらは、伸縮の繰り返しによって強度が増すゲル材料を見出した。この材料は、引っ張ることで断裂したポリマー鎖が材料内に導入したポリマー原料を取り込んで成長するように設計されている。今後、材料の汎用性を向上させるには、ポリマー鎖がポリマー原料を取り込む過程で起こる化学反応の制御がカギとなる。ICReDD内で、制御に向けた融合研究を実施する。

(2) 固体中における触媒的有機合成反応の開発 (*Nat. Commun.*, 2019)

伊藤らは、通常は溶液内において取り扱われるクロスカップリング反応を、原料粉末を混合するだけで引き起こす手法を発見した。この新しい方法は、デバイスや医薬品の製造コストの大幅に削減する可能性がある。今後、共同研究において、より効果的な新しい化学反応を発見するために、なぜ反応が粉末の混合によって起こったのかを解明する。

(3) メチレン C-H 結合の触媒的不斉ホウ素化反応の開発 (*J. Am. Chem. Soc.*, 2019)

澤村らは、エナンチオ選択的な C-H 結合活性化が極めて困難なメチレン C-H 結合をエナンチオ選択的にホウ素化するキラル遷移金属錯体触媒の開発に、世界に先駆けて成功した。キラルホウ素化合物は、クロスカップリングの一種である鈴木カップリングの原料となる。更なる触媒設計に向けて前田らとの共同研究を実施し、選択性が発現する原因を前田らの反応経路自動探索法(AFIR法)によって突き止めた。

他にもいくつかの新しい技術を開発した(例えば、前田ら *Chem. Lett.*, 2019; 瀧川ら *J. Phys. Chem. C*, 2018; Varnekら *Mol. Inf.*, 2019)。合成ルート列挙システムなど、ICReDD内での将来の融合研究に向けた多くの未公表の新しい計算手法が既に完成しており、現在立ち上げ段階の融合研究において使用される。

2. 融合領域の創出

計算化学・情報科学・実験科学の融合研究を開始するための準備として、以下の取り組みを行った。

- (1) ICReDD 拠点ミーティングを開催し、各 PI が自身の研究を紹介（2018 年 12 月）
- (2) MIX ラボ形成の準備
 - ・実験系 MIX 研究室、交流スペース（ICReDD サロン）、および、測定機器室の整備。
 - ・化学反応予測用高性能コンピュータ、400MHz 核磁気共鳴測定装置、単結晶 X 線構造解析装置、ドラフトチャンバーなどを設置。
 - ・MIX 研究室のシステムを加速するため、25 名のメンバー（Co-PI、特任准教授、講師、助教授、ポスドク研究員）を採用することを決定した。
- (3) 全分野の若手研究者とシニア研究者の週 1 回、月 1 回の交流会を通じたボトムアップ型の共同研究の創出に努める。
- (4) PI 間の共同研究を促進する研究戦略ユニットを設置

これらにより、前田—伊藤、前田—澤村、前田—List、武次—伊藤—長谷川、Rubinstein—Gong—田中、瀧川—伊藤、小松崎—Gong—田中、などといった組み合わせで、具体的な共同研究が始まっている。

3. 国際的な研究環境の実現

研究体制：特任教員、博士研究員を国際公募により選考し、研究者全体の約 30%（2019 年 4 月 1 日現在で研究者総数 43 人に対し外国籍研究者 13 人）が外国籍となる。また、海外 PI を 3 月に招へいして議論を実施した他、スカイプ会議による打ち合わせも行った。海外 PI の研究を遂行する Co-PI（特任准教授・特任助教などのスタッフ）の人選も進め、2019 年度には研究が本格化する見込みである。

外国人ホスピタリティ制度：拠点内の使用言語を英語とするため、研究戦略ユニット（国際企画・広報）、管理企画ユニット（総務・会計）、さらに大学 URA による支援体制を確立した。

国際交流：2019 年 3 月 12、13 日に国内外の研究者を招聘して第 1 回国際シンポジウムを開催し、本拠点の目的や本拠点で行われる融合研究を紹介した。

その他、海外からのビジターの来訪者は 6 名。

4. 研究組織の改革

融合研究促進のための環境整備：本拠点を全学組織である創成研究機構内に設置し、創成科学研究棟の改修整備を開始した。さらに、分析機器について、創成研究機構グローバルファシリティセンター（GFC）と連携して維持・管理し、研究者が研究に専念できる環境を整備した。

拠点における研究をスムーズに開始できるように、新任教員スタートアップ支援制度及び融合研究スタートアップ支援制度を整備した。

システム改革：「MANABIYA(学び舎)」システムの制度構築を開始した。MANABIYA システムでは、拠点内の国際化や多様化、および、計算・情報・実験の融合研究を世界中の研究者に伝える役割を担う。

マネジメント体制の整備：拠点に関する重要事項を審議するため、運営委員会を設置した（特任教員の採用、スタートアップ支援実施要項等を決定）。また、拠点長の意思決定を支援する拠点長ミーティングや、若手研究者を集めて意見交換する若手ワーキングを設置し、円滑な拠点運営のためのマネジメント体制を確立した。

5. 拠点の中長期的な発展を確保するための取組

中長期的な発展を目指し、概算要求プロジェクト「フォトエキサイトニクス研究拠点～光励起状態制御の予測と高度利用～」(2019 年度予算：125,784,000 円) など、学部・大学院の枠を越えた共同研究を推進しています。また、大学内の組織やプロジェクトとの連携を進めている。