

## 採択拠点の概要等

|  |            |
|--|------------|
| ホスト機関名   | 北海道大学      |
| 拠点構想名  | 化学反応創成研究拠点 |
| ホスト機関の長  | 名和 豊春      |
| 拠点長候補者   | 前田 理       |
| <p>&lt;拠点構想の概要&gt;</p> <p>本拠点では、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による融合研究を行う。これ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。</p> <p>新しい化学反応の開発の難しさは物質科学全体のボトルネックとなっている。そこで量子化学計算による最新の反応経路探索、情報科学との連携、実験科学による実証で、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。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の高度なデザインと迅速開発を実現する。</p> <p>「化学反応創成学」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の実現を目指す。</p> <p>&lt;採択理由&gt;</p> <ul style="list-style-type: none"> <li>・計算科学・情報科学・実験科学の統合が素晴らしい相乗効果を持つと期待される</li> <li>・MANABIYA システムが若手研究者育成に役立つ</li> </ul> |            |

## 拠点長

氏名：前田 理（まえだ さとし）

所属・職名：北海道大学大学院理学研究院・教授

学位：博士（理学）

専門分野：理論化学、計算化学、反応経路自動探索法の開発と応用

生年月日：1979年8月30日（39歳）



## 学歴

2007年3月 博士（理学）取得（東北大学大学院理学研究科）  
2007年3月 東北大学大学院理学研究科博士課程後期 修了  
2004年3月 東北大学大学院理学研究科博士課程前期 修了  
2002年3月 東北大学理学部化学科 卒業

## 職歴

2017年－ 北海道大学大学院理学研究院 教授  
2017年－ 国立研究開発法人物質・材料研究機構 招聘主席研究員  
2017年－ 京都大学元素戦略研究拠点 特定教授  
2014年－ JST-CREST「新機能創出を目指した分子技術の構築」領域 研究代表  
2014年－2017年 北海道大学大学院理学研究院 准教授  
2014年－2017年 京都大学元素戦略研究拠点 特定准教授  
2012年－2013年 北海道大学大学院理学研究院 助教  
2010年－2012年 京都大学白眉プロジェクト 特定助教  
2007年－2010年 日本学術振興会特別研究員 PD

## 受賞歴

2018年 北海道大学教育研究総長表彰  
2017年 北海道大学研究総長賞奨励賞  
2016年 平成28年度分子科学研究奨励森野基金  
2016年 Merck-Banyu Lectureship Award (MBLA) 2015  
2016年 北海道大学研究総長賞奨励賞  
2015年 日本学術振興会賞  
2015年 Thieme Chemistry Journals Award 2016  
2015年 Banyu Chemist Award (BCA) 2015  
2014年 ナイスステップな研究者（科学技術・学術政策研究所）  
2013年 日本化学会進歩賞  
2012年 PCCP賞（日本化学会, Royal Society of Chemistry）  
2010年 京都大学白眉研究者

## 代表的な業績

量子化学計算に基づき、コンピュータによって化学反応の経路を自動探索できる一般的な反応経路自動探索法の開発に、世界で初めて成功した。その後、反応経路自動探索法による有機化学反応の機構解析を実施し、世界に先駆けて多くの成功例を示してきた。最近では、反応経路自動探索法の汎用化に努め、小分子の変換反応のみでなく、光反応、有機触媒、有機金属触媒、クラスター触媒、固体触媒、光触媒、酵素反応、結晶相転移など、様々な化学反応を計算対象とすることを達成している。さらに、反応経路自動探索法によって得られる超複雑な反応経路ネットワークの解析技術の開発も進め、反応経路ネットワークに基づく化学反応の理解と予測を実現した。

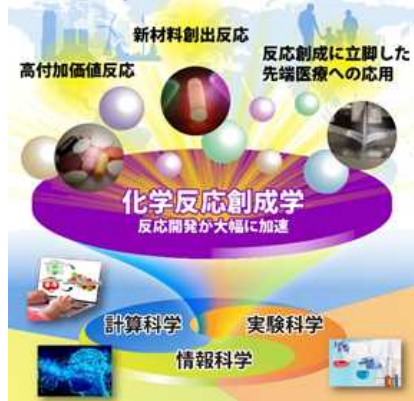


拠点長: 前田 理

コンピュータ上で仮想的な力で操作し、疑似的に化学反応を引き起こすことで、反応経路を自動的に見つけ出すことを可能とした。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。

## 目標

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難しさは物質科学全体のボトルネックとなっている。そこで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、実験科学による実証で、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。これ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。



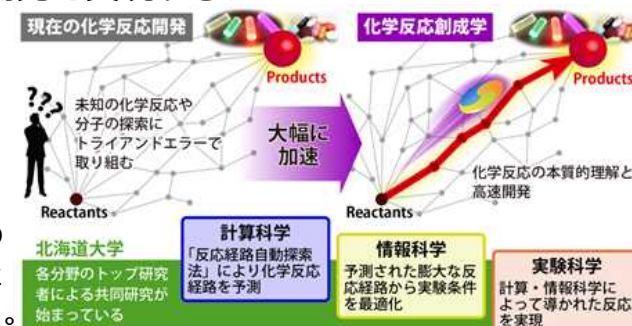
## 特徴

- 計算科学・情報科学・実験科学の三分野融合を行い、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。
- 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「MANABIYA (学び舎) システム」を構築し、国内外の研究協力拠点との連携体制を確立する。
- 新大学院「化学反応創成学院」の設立を軸に大学の組織改革を実行する。

## 研究内容

本拠点では、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実験条件を絞り込み化学反応の開発速度を大幅に向上させる。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、三分野が一体となって化学反応の高度なデザインと迅速開発を実現する。

1. 社会に有用な高付加価値反応を設計し創出する。
2. 発光性材料、力学応答材料など新材料を化学反応に基づき創出する。
3. 生体内反応など複雑系の化学反応創成に立脚した先端医療応用を実施する。



## 連携

**MANABIYA (学び舎) システム**：国内外連携拠点の若手研究者や学生が本拠点に3か月程度滞在し、共同研究を通して新しい反応開発手法を習得し、それぞれの研究者が、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が所属する数百人が参画する巨大ネットワークが完成し、新分野の更なる発展を支える。