

External Evaluation Committee Report 2018

and

Reply to the Comments

Institute for Catalysis, Hokkaido University

April, 2018

国際外部評価委員会名簿

◆ 委員長

ブルース ゲイツ  
Bruce C. Gates

米国 カリフォルニア大学デービス校 教授

◆ 委員

ハンス- ヨアヒム フロイント  
Hans-Joachim Freund

ドイツ フリッツ・ハーバー研究所 所長

カン リー  
Can Li

中国 中国科学院大連化学物理研究所  
大連クリーンエネルギー国家重点実験室 所長

たつみ たかし  
辰 巳 敬

製品評価技術基盤機構 理事長

たなか つねひろ  
田 中 庸 裕

京都大学 教授

ときとう のりひろ  
時 任 宣 博

京都大学 教授

ながはら はじめ  
永 原 肇

旭化成株式会社 顧問

ひらお きみひこ  
平 尾 公 彦

理化学研究所計算科学研究機構 機構長

やしま えいじ  
八 島 栄 次

名古屋大学 教授

(以上9名)

## Schedule

2018.3.26

09:10	Committee Meeting		Room BC (4F)
09:40	Activity Report: ICAT General	Kiyotaka Asakura	Main Hall (5F)
10:20	Activity Report: Catalytic Transformation	Atsushi Fukuoka	
10:45	Activity Report: Catalyst Material	Ken-ichi Shimizu	
11:10	Coffee Break		
11:25	Activity Report: Photocatalysts	Bunsho Ohtani	
11:50	Activity Report: Catalysis Theory	Jun-ya Hasegawa	
12:15	Lunch		Room BC (4F)
	Prof. Hirao's interview with young researchers	Akira Nakayama, Hiroko Miwa, Mai Takashima	Room A (3F)
13:30	Activity Report: Macromolecular Science	Tamaki Nakano	Main Hall (5F)
13:55	Activity Report: Molecular Catalyst	Tamotsu Takahashi	
14:20	Activity Report: Catalyst Surface	Kiyotaka Asakura	
14:45	Activity Report: Research and Development	Mayumi Nishida	
15:10	Activity Report: Catalysis Collaborative Research Center	Jun-ya Hasegawa	
15:35	Photo		
15:45	Poster Session		Science Plaza (2F)
17:00-18:00	Committee Meeting		Room BC (4F)
19:00	Dinner		HOTEL MYSTAYS Sapporo Aspen

2018.3.27

09:00	Young Researcher's Session	Ewa Kowalska	Main Hall (5F)
09:20		Hirokazu Kobayashi	
09:40		Akira Nakayama	
10:00	Coffee Break		
10:20	Lab Tour (10 min for each*7) From Top, 5F to 2F	Two groups. First group start 10:20, Second 10:30 Takahashi, Nakano, Hasegawa, Fukuoka, Shimizu, Ohtani, Asakura, Technical Division	
11:50	Lunch		Room BC (4F)
12:50	Discussion between Committee and ICAT		
14:30-15:30	Final Committee Meeting		

## スケジュール

2018.3.26

09:10	外部評価委員ミーティング		4階セミナー室 BC
09:40	業績説明：触媒科学研究所全般	朝倉清高 所長	5階大会議室
10:20	業績説明：物質変換研究部門	福岡淳 教授	
10:45	業績説明：触媒材料研究部門	清水研一 教授	
11:10	コーヒーブレイク		
11:25	業績説明：光触媒科学研究部門	大谷文章 教授	
11:50	業績説明：触媒理論研究部門	長谷川淳也 教授	
12:15	昼食会		4階セミナー室 BC
	平尾公彦先生による若手研究者インタビュー	中山哲 准教授, 三輪寛子 助教, 高島舞 助教	3階セミナー室 A
13:30	業績説明：高分子機能科学研究部門	中野環 教授	5階大会議室
13:55	業績説明：分子触媒研究部門	高橋保 教授	
14:20	業績説明：触媒表面研究部門	朝倉清高 教授	
14:45	業績説明：研究開発部門	西田まゆみ 教授	
15:10	業績説明：附属触媒連携研究センター	長谷川淳也 センター長	
15:35	写真撮影		
15:45	ポスターセッション		2階サイエンスプラザ
17:00-18:00	外部評価委員ミーティング		4階セミナー室 BC
19:00	夕食会		ホテルマイステイズ 札幌アспен

2018.3.27

09:00	若手研究者セッション	エバ コワルスカ 准教授	5階大会議室
09:20		小林広和 助教	
09:40		中山哲 准教授	
10:00	コーヒーブレイク		
10:20	研究所見学 (10分間×7研究部門) 5階から2階へ	2グループに分かれて実施 第1グループ 10:20 開始, 第2グループ 10:30 開始 高橋研究室, 中野研究室, 長谷川研究室, 福岡研究室, 清水研究室, 大谷研究室, 研究支援技術部	
11:50	昼食会		4階セミナー室 BC
12:50	外部評価委員会・ICATで議論		
14:30-15:30	外部評価委員最終ミーティング		

## Contents

1. How about the missions (policy, purpose) and strategies of Institute for Catalysis?	...6
2. How about the organization and management of Institute for Catalysis?	...8
3. How about the Research Activities of Institute for Catalysis?	...9
4. What are the strongest fields and what are recommendations for the future research activities?	...10
5. How about the hub activities of the international network?	...12
6. How about the Joint Usage / Research Activity?	...13
7. How about the ongoing database and catalyst informatics project?	...13
8. How about education and social contributions?	...14
9. How about logistics and technical support division activity?	...15
10. How about future plan and directions?	...16
11. Overall comments and mark	...16

# 1. How about the missions (policy, purpose) and strategies of Institute for Catalysis?

## 1.1. Average Mark

3.7 / 4.0

## 1.2. Comment/Assessment

ICAT is small but unique and as a flagship Japanese institute for catalysis has a significant impact. It has experienced a profound redefinition of mission and structural change in recent years, pursuing new opportunities in response to societal needs and the need for scientifically based information. The mission and strategy are significant and appropriate. In particular, human resources are important, and ICAT is on a good path. It is helpful that more than half of the ICAT members have turned over within the preceding five years, including only one retirement. The rate of turn-over number is almost constant year to year, and it is important to maintain the pattern. The committee judges that the public image of ICAT should be strengthened.

To broaden and strengthen its mission, it would be helpful if ICAT added expertise in chemical/processing engineering related to catalytic applications in technology.

The mission of the Institute is carried out through several departments covering fundamental and applied research, with a larger number of divisions on the more diverse fundamental side (8) and a one department on the applied side, complemented by five clusters targeted to research by younger researchers, combined into a third department. This organization is effective and appropriate. It combines stability and flexibility in a way that forms an excellent basis for the future development of the institute. Nonetheless, this number of divisions falls short allowing coverage of all fields of catalysis and the ability to catch up in all emerging fields related to catalysis; it is incumbent on young associate professors to be strongly committed to the development of new and innovative research fields.

Being unique in Japan as an institute focusing on catalysis, ICAT should be a hub of research on catalysis and catalytic materials and expected to lead and coordinate catalysis research conducted at universities in Japan.

ICATは小規模であるがユニークな研究所であり、触媒研究の中核的研究所として、触媒分野において大きな影響力を持っている。近年、ミッションの再定義と組織改編を行い、社会からの要請および学術領域からの触媒知提供への要請に応えるべく活発に活動をしている。このような観点からミッションとその戦略は、とても重要かつ適切である。人的資源の獲得と活用が特に重要であり、この点でICATは成功している。ICATの教員は、定年退職者を含め、過去5年間に半数以上が入れ替わっている。今後もこうした頭脳循環を続けることは重要であり、ICATの対外的印象が強められるであろう。

ICATのミッションを拡大強化するためには、触媒応用技術に関連する化学プロセス工学分野の専門家を加えることが勧められる。

研究所のミッションを遂行するのは基礎研究と応用研究をカバーするいくつかの系であり、より広範な基盤研究を担う基礎研究系8部門と実用化推進系1部門に加え、若手研究者がリードする5つのクラスターが第3の系として位置づけられている。これらの組織構築は効果的かつ適切であり、安定性と柔軟性を兼ね備えており、研究所の将来の発展のための優れた基盤となっている。しかしながら、触媒の全分野、また関連する全ての新興分野をカバーするためには部門数は不十分であり、若い准教授が新しく革新的な研究領域の開拓に関与することが強く望まれる。

ICATは日本国内におけるユニークな触媒研究機関であるので、触媒と触媒材料の研究拠点として役割、すなわち、日本国内大学で行われる触媒研究を牽引する役割、コーディネーターとしての役割を担うことが求められている。

Reply: Since there is a limitation in the number of faculty member, ICAT does not necessarily cover all of the fields in

catalysis. For newly emerging fields, ICAT should take a strategic management to acquire necessary human resources from outside the institutes such as researchers in the other departments and institutes inside Hokkaido University, guest researchers outside the university, and researchers in the collaborations. The flexible research organization should be established to maximize the actual research outcomes.

回答：触媒科学研究所における規模の制約があるので、触媒の全分野をカバーする必要はないと考えている。触媒に関連する新興分野に対しては、戦略的に研究所運営を考え、研究者を配置することが理想的である。その際は、他学部教員に兼任を依頼すること、研究所外の研究者を客員教員として招聘すること、共同研究を組織することなどを通して、柔軟に組織を構築し、実際上の研究成果を求めたいと考える。

### 1.3. Questions and suggestion

1.3.1. It would be helpful to communicate the outstanding performance of the institute to the international community, specifically through a website in English with more detailed and effective information about the activities and the interesting history of the institute than is now readily available. The website may provide a means to attract the attention of international researchers and encourage them to join the institute. Are there resources and staff to support the effort of international image building?

英語の Web サイトを通じて、顕著な活動の詳細や成果だけでなく、研究所の興味深い歴史を国際的に発信することで、国際的に研究者の注目を集め、研究所に誘引できると考えられる。こうした国際的なイメージづくりに必要な財源と専門正規職員は確保されているか？

Reply: We are preparing and going to open the web pages on our activities and our history in English and Japanese. It would be desirable if we had a permanent staff to build the international image. We will try to get the position by raising fund and changing the University policy.

回答：研究所の活動状況と沿革についてのウェブページを日本語と英語で公開する準備を進めている。国際イメージの向上に関する業務を担当する専門職員を配置できれば理想的であり、今後努力する。

1.3.2. Are there ways for the institute to broaden its base for assessment of the impact of its research, beyond citation information?

研究所は論文引用数によって表される質の高い研究を行っているが、そのような引用情報を超えて、研究所独自に研究を評価し、その優れた研究成果を国際的に展開しようとしているか？

Reply: Through domestic and international symposiums held in the institute, all divisions present their activities which are reviewed by the outside participants and ICAT members. These new activities are advertised through our web site and R & D Division.

回答：国内および国際シンポジウムの開催を通して、各部門の成果を公表し、所外の参加者と研究所の構成員からの評価を受けている。活動状況はウェブサイトや研究開発部門を通して周知されている。

1.3.3. With regard to attracting international researchers to join the institute, the Institute should consider salaries and cost of living issues to assess opportunities. In this connection the institute should consider issues connected to

researchers' salaries and be aware of competitive salary systems outside Japan.

国際的な優秀な研究者を誘致するためには、研究所は人事評価に基づいた国際水準の給与を考えないといけない。研究所は研究者の給与に関連する問題を検討し、人材獲得に関する国際競争力について考えるべきである。

Reply: This is a difficult issue for us because only the Hokkaido University headquarter can decide researchers' and professors' salary. We need many tough discussions with the University headquarter on this point.

回答：北海道大学の事務局が研究者と教授の給与を定めるので、これは困難な課題である。これを実現するには、大学の事務局と多くの難しい議論を重ねる必要がある。

1.3.4. Catalysis is a practical science, and fundamental research is important, but collaboration with industry involving chemical engineering should be promoted to facilitate practical applications of the research discoveries made in ICAT.

触媒は実用的な科学であり、その基盤研究は重視されるべきである。しかし、ICATで行われた新しい発見の実用化を促進するためには、化学工学などにおける産業界との協力が促進されるべきである。

Reply: We recognize the importance of chemical engineering division. We are thinking of a specially invited professor or a guest professor to assign this mission because of the strict limitation of the total number of staff members by university policy.

回答：研究所では化学工学の重要性を認識しているが、教員数に制限があり、恒常的なポジションを設置するのは困難な状況にある。特任教授や客員教授に化学工学に関する研究を担って頂くことを検討している。

1.3.5. Regarding the mission of the institute, it would be helpful to clarify what is meant by implementation of interactions with different fields of research. Does this mean within the natural sciences broadly or beyond that to include interactions with the social sciences and even humanities?

研究所のミッションに関して、異分野融合の対象を明示することが望ましい。広く自然科学の内側における異分野融合を意味するのか、自然科学の範囲内を超えた社会科学や人文科学との融合も考えているか？

Reply: We appreciate beneficial comments to have the interaction with researchers outside natural science. Sustainable catalyst may require the view point of economy and law. We are also thinking of Institute of Area Studies for collaboration of Asian countries.

回答：自然科学以外の分野の研究者と交流をもつというのは有用なコメントである。持続可能な触媒の研究には、経済学や法律の観点が必要かもしれない。アジア諸国との共同研究を推進するために、地域研究所との協力関係についても考えている。

## 2. How about the organization and management of the Institute for Catalysis?

### 2.1. Average Mark

3.1 / 4.0



## 2.2. Comment/Assessment

The institute is well organized, well led, and functioning well. The leadership has presented the mission and strategies of the institute well. The organization of the ICAT and the mobility of the researchers are clearly described and seem to ensure intellectual vigor, in part by continuing an inflow of well-qualified young researchers. The Cluster system is highly successful, and its continuation is encouraged, as are internal and external collaborations that will enhance the leadership of young professors.

Collaboration with other institutions such as AIST, KEK, NIMS, RIKEN, and IRCCS is worthy of mention.

A great asset of ICAT is the Catalysis Collaboration Research Center, through which the ICAT is linked to units dealing with a number of varied topics, including foreign institutions, legal issues, and specific research teams.

研究所はよく組織され、指導され、うまく機能している。研究所のミッションと戦略においてリーダーシップが発揮されている。研究者の流動性は高く、若手研究者が活発に出入りを続けている。これが知的活力を確保できる原因と考える。クラスターシステムは非常に成功している。若手教員のリーダーシップ能力を高める研究所内外の共同研究を促進する制度であり、今後も維持すべきである。

産総研, KEK, NIMS, 理研, IRCCS などの他の機関との共同作業は高く評価される。

ICAT の重要な組織として附属触媒連携研究センターがあり、海外機関や産学官など広い観点からの連携を推進している。

## 2.3. Questions and suggestion

2.3.1. It may be important to establish an improved structure that facilitates the recruitment of international researchers.

外国人研究者の応募は容易になっているか？

Reply: Thank you for your suggestion for recruiting the international researchers. At moment we are targeting younger researchers.

回答：海外の研究者のリクルートについてのご意見を頂き感謝する。現時点では、若手研究者を対象にしている。

2.3.2. ICAT has a rule not to promote the assistant and associate professors internally. Some of them might have fixed-term positions. Is it appropriate for them to move out before the ends of their terms? Should those with exceptional talent be promoted to keep rising stars?

ICAT は、助教や准教授を内部的に昇進させないというルールを持ち、任期が確定しているものもある。任期が切れる前に異動することは、キャリアにおいて適切であろうか？例外的に優秀な人については内部昇格を認めるべきでは？

Reply: Recently it is quite difficult in Japan to find academic position because of the government policy. In 2018 we have introduced a system to solve the end-of-term problem of assistant professors. They can stay at their position after the interview and investigation.

回答：政府の政策上、昨今の大学におけるポジションに就くことは極めて困難になっている。2018年に助教の任期切れの問題を解決するために、業績審査の上で任期の定めのない助教となる制度を導入した。

2.3.3. Development of human resources for the technical support division is important for future success. Do you have a plan?

将来の発展には、技術支援部門の人材育成が重要である。計画はあるか？

Reply: It is our most difficult and important problem. The overall reduction of staff members in Universities make us difficult to employ younger technicians and keep the technical division. We are now taking an initiative action to change the technician division system in the whole university.

回答：重要であるが難しい問題である。大学のスタッフを減らしているため、若い技術者を雇用することや技術部を保持することが難しくなっている。全学における技術部を変革するためのイニシアティブをとって活動している。

#### 2.3.4. Professors in the Institute seem to be very busy; should it be possible to add administrative assistants to few up time for professors to do more research and education?

研究所の教員たちはとても忙しいようであるが、教員の本来の仕事である研究と教育を行うための時間を確保するための補佐員を雇用すべきではないか？

Reply: We have one staff who helps the administration and taking care of the symposiums. But it is a hard work to take care whole institute business. Especially we need more staffs for international collaborations.

回答：研究所では運営業務とシンポジウム開催補助を担当するスタッフ 1 名を配置している。しかし、研究所全体の業務を担当することは困難である。特に、国際連携を担当するスタッフを配置することが必要である。

#### 2.3.5. Should each research cluster be complete with a professor, associate professor, and assistant professor to facilitate research activities?

研究活動を円滑に進めるために、各研究クラスターに教授、准教授、助教が配置されるべきではないか？

Reply: In order for associate processors to take a leadership, we made the research clusters which are composed of flexible research team dynamically changing according to research phase of associate professors.

回答：准教授がリーダーシップをとるために、クラスターは柔軟な組織であり、研究段階に合わせて流動的に変化することができる。

### 3. How about the Research Activities of Institute for Catalysis?

#### 3.1. Average Mark

**4.0 / 4.0**

#### 3.2. Comment/Assessment

ICAT is doing outstanding, internationally recognized research in catalysis, in some cases at a world-class level and involving high-level collaborations. ICAT is capable of engaging in still more multidisciplinary research and taking a leadership role in frontier research. In some cases, it may be possible to improve the collaboration between groups within the institute, and this would clearly raise the scientific level.

The international collaborations are well set up and established. The outstanding list of symposia and the invitation of guest professors already provide evidence of the commitment of the ICAT to interactions with the international community. The internationally inspired scientific setting in the institute contributes to an excellent basis for the education of students, and this may even be improved by implementation of the measures proposed above. The outreach to high school students is also applauded in this connection. Publications from ICAT on the whole are strong; the number of invited talks is increasing slightly over time, showing the growth in reputation of the members.

ICAT では際立って優れた国際的に認知度の高い研究が行われており、いくつかの研究は国際トップレベルであり、高度な国際共同研究が行われている。ICAT は、より多くの学際的研究に従事し、研究の最前線においてリーダーシップを果たす素地がある。研究所内のグループ間連携をさらに強化することで、研究水準を向上できることは明らかである。

優れた国際シンポジウムをいくつか開催し、国際的にすぐれた客員教授を招聘している。ICAT が触媒分野で国際交流を進め、その中心的役割を果たしているといえる。この研究所の国際的環境は、学生の教育のための優れた基盤をあたえ、さらに発展する余地を持っている。高校生へのアウトリーチも賞賛される。ICAT は数多くの質の高い発表をしており、招待講演数は増加傾向にあり、コミュニティの評価が高まっていることを示している。

### 3.3. Questions and suggestion

3.3.1. In the case of instrument development/theory, it is hoped that the research direction covering wave-function based techniques and other more innovative approaches, such as those based on renormalization group theory, may be sustained.

It would be helpful to strengthen the collaboration with outside groups by formally associating researchers directly with the institute via models used around the globe including adjunct Professorships. This would allow strengthening of areas that are not prominently represented within the institute at present, such as chemical engineering/catalyst development/process engineering/and scale-up. The prospect of more connections with industry are appealing, but success requires win-win relationships for efficient use of energy and labor.

測定手法開発や理論手法開発で、密度行列繰り込み群などのような波動関数理論の開発など、より革新的な研究の維持が期待される。

客員教授制度など世界で行われているやり方を用いて、世界各地の研究者との連携を強めることは望ましい。そのような連繋によって、化学工学/触媒開発/プロセス工学/スケールアップなど、現在研究所内で人的に不十分な分野を強化できよう。これに関連して、産業界との連携活動はとて将来楽しみである。これを成功させるには、負担と労力を効率化し、産業界と研究所がともに利益を得る工夫を考えることが必要である。

Reply: We have already accepted several adjunct professorships. We are going to reinforce our activities through adjunct professorship including the chemical engineering and industrial members.

回答：研究所では既に数名かの客員教員を受け入れている。化学工学や企業からの客員教授の力添えを得て、研究活動を強化しようとしている。

3.3.2. Would even more publications in high-impact journals be a worthy goal?

インパクトの高いジャーナルへの出版だけが学術における目標と考えているか？

Reply: Our real goal is to develop the catalyst for the sustainable society. The high impact journal is just a means to attain the goal by getting budget under the highly competitive situation.

回答：持続的社會を実現するための触媒の開発が研究所本来のゴールである。厳しい競争環境下において予算獲得するための手段として、高いインパクトファクターを持つ雑誌に論文が投稿されている。

## 4. What are the strongest fields and what are recommendations for the future research activities?

## 4.1. Average Mark

3.8 / 4.0

## 4.2. Comment/Assessment

Excellence in catalysis science overall; fundamental, curiosity-driven research conducted to discover truths about nature must play a central role in ICAT.

But as we have entered the 21st century, we are very aware that research institutes create opportunities for nations in part through the transfer of technology and innovation to the society.

ICAT is capable of engaging in more multidisciplinary research and taking a leadership role in frontier research. Theoretical/computational chemistry has seen significant advances in both methodology and applications in recent years, opening a world of new possibilities and becoming an integral part of chemistry research, particularly complex catalysis research; ICAT is part of this accelerating change and should strive to continue its efforts and be at the forefront.

ICAT is now performing leading edge research through strong collaborations between theoretical and experimental chemists. ICAT should promote further collaboration between theory and experiment.

Among the specific strong research activities, we find a number particularly appealing, with examples including catalytic transformations (notably the catalyst for refrigerators, which demonstrates effective interactions with industry)/photocatalysis/surface science and instrument development/theory, as well as the on-going collaborations among the researchers doing materials preparation and catalytic reaction testing, catalyst characterization by means of analytical methodologies, and theoretical and computational science. Although the vast area of catalysis is well covered, the field of energy and environmental science should be strengthened.

触媒科学全般において優秀な研究がなされており、触媒の本質を解明するための基礎的で自由な発想に基づく研究が、ICATで行われるべきである。

21世紀に入って研究所が技術移転と社会創造を通して国に貢献する要請を認知している。

ICATは、触媒の多分野にわたる学際的研究を行い、フロンティア研究においてリーダーシップの役割を果たすことができる。理論/計算化学は、近年、計算手法と応用の両方において大きな進歩を示しており、新しい可能性を開き、化学研究、特に複雑な触媒研究の不可欠な部分になってきた。ICATは理論/計算科学の急速な変化を先導しており、努力を続けて最先端レベルを維持しなければならない。

ICATは、理論化学者と実験化学者との強力な協力を通じ、最先端の研究を行っている。ICATは、理論と実験とのさらなる協力が求められる。

研究活動の中で、触媒変換（特に実用化に成功した冷蔵庫触媒）/光触媒/表面科学および測定手法開発/理論が優れていて、触媒のキャラクタリゼーションや理論的・計算科学に基づいた触媒調製と触媒反応が行われ、新触媒の開発が進んでいる。広範囲の触媒作用が十分にカバーされているが、エネルギーおよび環境科学の分野は強化されるべきである。

## 4.3. Questions and suggestion

4.3.1. More effective collaborations in the Institute would help to improve the research quality and effectiveness. Should the catalytic materials division conduct more investigations of the kinetics and mechanism of industrially important reactions?

Should kinetics be more broadly represented in ICAT research broadly as a central part of its mission that integrates all of the components?

Should engineering concepts be added to the mix and provide further integration of the activities?

より効率的な研究所内共同研究を行うことで研究の質と効率性の向上が期待できる。触媒材料部門は、工業的に重要な反応のメカニズムの研究を強化すべきかもしれないがどう考えられるか？速度論的検討が ICAT の研究の中心的役割を果たしてよいと思うが、どう考えるか？化学工学的発想も追加する必要があると思うがどうか？

Reply: We have made and are making kinetic research and mechanistic studies of industrially important reactions in the collaborations with researchers in our university and industry. We agree that the chemical engineering is a necessary part for our institute. We are now creating the activities by external collaborations and also by inviting professors as guest professors.

回答：研究所では、産業界において重要な反応について、速度論についての研究あるいは機構解明のための研究を行ってきている。化学工学が研究所で必要であることについては同意する。客員教授による研究活動を進めている。

4.3.2. Should organometallic catalysis for drug development and polymer synthesis be targets of future Institute research?

医薬品開発とポリマー合成のための有機金属触媒は将来の研究所の研究の標的にすべきか？

Reply: They are the target of ICAT at present, and the future design of ICAT is continuously under discussion.

回答：今日における研究所の研究対象であり、研究所の将来構想は継続的に議論を行っている。

4.3.3. Could research on chiral materials somehow be developed for applications?

キラル材料の研究はどういう応用を考えているか？

Reply: Since we started with curiosity-based research, we should have discussion and collaboration with industry.

回答：研究所では、研究者の好奇心に基づくものとして、研究を開始しているので、企業とのディスカッションや共同研究を行うべきである。

## 5. How about the hub activities of the international network?

### 5.1. Average Mark

3.0 / 4.0

### 5.2. Comment/Assessment

Further collaborations with international institutions in catalysis science would be highly welcome. Visits of several weeks or more by guest professors would stimulate mutual research and improve prospects for collaborations. Such outreach activities would facilitate a hub role, whereby ICAT would play a central role in research involving several institutions. These activities take lots of time and improved effectiveness is a worthy goal.

触媒科学における国際機関とのさらなる協力は大きいに進めてほしい。客員教員が数週間以上滞在することで、相互の研究を刺激し、共同研究への展望が開ける。このようなアウトリーチ活動は、ICAT が共同研究において中心的な役割を果たすハブの役割となることを促進する。これらの活動には多くの時間がかかり、効果的に行うことが必要であると考えられる。

### 5.3. Questions and suggestion

#### 5.3.1. How does ICAT think about future research plans related to SDGs, which might be of great importance in showing the abilities of ICAT in chemical transformations that are environmentally friendly?

ICAT は、SDG に関連する将来の研究計画（持続可能な発展目標）についてどう考えるか？これは環境に優しい化学変換における ICAT の能力を示す上で非常に重要な指標ではないか？

Reply: Our research goal is directly related to SDG Goal 7 and partially related to GOALS 6, 9, 13, 14.

The international collaboration to make the network is directly related to Goals 17.6, 17.8.

回答：研究所の目指すところは、SDG の 7 と直接関係があるし、6, 9, 13, 14 とも部分的に関係がある。ネットワーク形成のための国際共同研究は、直接 17.6 と 17.8 に直接関係する。

### 6. How about the Joint Usage / Research Activity?

#### 6.1. Average Mark

3.5 / 4.0

#### 6.2. Comment/Assessment

Interplay between the experimental and theoretical scientists is important for the sciences in ICAT, both internally and as part of the external collaborations. The proposal-based system for joint research in a program requiring open application is evidently quite good in facilitating fruitful collaborations (leading to multi-authored publications) and supporting the strategies of ICAT.

研究所内外の共同研究として、実験科学者と理論科学者の間の相互作用は、ICAT におけるサイエンスに重要である。公募型共同研究は有益な共同研究成果（多数の著者による出版物）を生んでおり、ICAT の戦略をサポートしている。

Reply: Open collaborations in the Joint Usage / Research activity are useful for promoting interdisciplinary researches.

ICAT will continuously put our effort on the collaborations as one of the most essential activities in the project.

回答：公募型共同研究の取り組みは、異分野融合研究を推進する上で有益であると認識している。研究所の発展を支えるアクティビティとして、今後とも拠点活動の最重要課題として取り組む。

### 7. How about the ongoing database and catalyst informatics project?

#### 7.1. Average Mark

2.75 / 4.0

#### 7.2. Comment/Assessment

Data science is ever more deeply dominating the entire field of science. This development presents an important opportunity for ICAT. ICAT should engage in further efforts to bridge the integration of simulation and data science. XAFS spectroscopy is a focus of current attention. A couple of databases for catalyst materials and other related subjects already exist. But the database is not easy to use for informatics at present, being limited in part because of the small size of the dataset.

It is important to point out that negative data are very important, and there are limitations in the collection and reporting of reliable negative data.

Potentially, many users may be expected, but time will tell. To encourage use, it will be useful to guide users and help with data mining.

データサイエンスは、科学の全領域により浸透し、ICATにおいても重要な機会といえる。ICATは、シミュレーションとデータサイエンスの統合を進めているが、さらに努力を継続するべきである。XAFS 分光データベースは注目に値する。触媒材料や他の関連するデータベースが既に世の中に存在している。しかし現時点ではデータベースのサイズが小さく、インフォマティクスに用いるのは容易でない。

失敗データは非常に重要である。困難であるが、信頼性の高い失敗データの収集を進めることが望まれる。

潜在的に、多くのユーザーが期待しており、ユーザーを使用ガイドやデータマイニングのマニュアルが必要である。今後が期待される。

### 7.3. Questions and suggestion

7.3.1. It is challenging to incorporate meaningful catalyst performance data (such as activities and selectivities) in the database, especially regarding catalyst lifetimes and stability; it will be a major challenge to develop a database that has high value for predicting practical catalyst performance.

The challenges of overcoming the limitations of the data set suggest an opportunity for the catalysis community broadly. One might consider the construction of new division of informatics in the Catalysis Society of Japan led by ICAT members to share the information.

Given the enormous literature of catalysis, the current databases appear to have relatively little substance; it may be ideal to establish a specialized unit for the informatics project, and focus and limited choices will be necessary because not every catalysis-related area can be covered.

特に触媒寿命と安定性に関して、意味のある触媒性能データ（触媒活性や選択性など）をデータベースに組み込むことは挑戦的な課題である。今後、実用的な触媒性能を予測するための高い価値を有するデータベースを開発することは大きな課題となる。

こうした課題は、触媒作用のコミュニティーに新しい可能性を示唆している。ICATメンバーが触媒学会に新しい情報科学分野構築することを検討するべきと思われる。

触媒の膨大な文献を考慮すると、現在のデータベースは、物質の量が比較的少ないように見える。情報科学プロジェクトに特化した部門を設置することが理想的である。すべての触媒関連分野を網羅するわけではないため、データベースの集中と選択が必要と思われる。

Reply: Thank you for your suggestion. We really think the collaborations with the communities to construct database. The creation of the division in Catalysis Society of Japan is one good idea that will help our establishment of Catalysis Informatics.

回答：ご意見に感謝する。研究所ではデータベースを構築するために研究者コミュニティーとの共同研究をまじめに考えている。触媒学会においてディビジョンを設けるのは良い提案であり、キャタリストインフォマティクスの確立に役立つであろう。

## 8. How about education and social contributions?



## 8.1. Average Mark

3.6 / 4.0

## 8.2. Comment/Assessment

The educational program is very strong. ICAT faces work force recruitment and retention challenges. It would be of value to establish high-profile programs: (i) a highly prestigious postdoctoral fellowship program; (ii) programs to engage more graduate students within the structure of ICAT; (iii) a robust visitor program.

Regarding APTCC, this trial is a good opportunity to bring public attention to ICAT; this is an educational and social contribution comparable to providing lectures to the public and to high schools.

The outstanding list of symposia and international conferences and the invitation of guest professors provide further evidence for the commitment of the ICAT to interact with the international community. The internationally inspired scientific setting is an excellent basis for the education of students. This has been augmented by Summer Schools and lectures by Prof. Takahashi and Prof. Ohtani. Beyond this, ICAT reaches out to high school students and the public by lectures and by accepting students for courses.

ICATにおける教育プログラムは非常に強力である。ICATでは研究実施者をいかに雇用し、ICATの繋がりを定着させるかが課題であり、次のような人目を引くプログラムを確立することは価値がある取り組みである。(i) 名声のある博士研究員プログラム、(ii) ICAT内の大学院生への育成プログラム、(iii) 外部研究者受け入れプログラムの設置などである。

(iii)の試みとして高度実践研究プログラムがあるが、ICATへの一般の関心を喚起する良い試みである。市民や高校に講義を提供するなど社会へ貢献する良いプログラムである。

優れた国際会議や国際シンポジウムを開催し、招待講演を行っているが、これは国際的な触媒研究コミュニティへの貢献を示している。こうした国際的な環境は、学生の教育の優れた基盤となる。さらにICATが主催する化学系大学院生のサマースクールや高橋教授、大谷教授による全1年生向け科目の講義などで教育活動が補完されている。更に、ICATでは高校生や一般への講義や学生の受入れなどによるアウトリーチ活動が行われている。

## 8.3. Questions and suggestion

8.3.1. We encourage ICAT to formulate, implement, and assess a public outreach strategy, as well as to broadcast ICAT's achievements more broadly and effectively. It would be helpful to strengthen the diversity of the Institute and send a message about the importance of that goal.

こうしたICATの社会貢献や教育を社会に広く知らしめるために、アウトリーチ戦略を策定・実行・評価すべきと思われる。また、ICATの研究成果をより広範かつ効果的に情報発信することを勧める。研究所の多様性を高め、研究所の目指すところをメッセージとして発信するとよい。

Reply: Thank you for your suggestion, and we are now strengthening English web site.

回答：ご提案に感謝する。研究所の英語ウェブサイトを充実するよう取り組んでいる。

8.3.2. Education and development of human resources having technical skills are major challenges going forward; what are ICAT's plans to influence education in the future?

技術支援部の人材の教育と育成は、今後の大きな課題である。ICATの技術支援部の教育計画はあるか？

Reply: We have two plans for technician's education. APTCC that we are now doing is an effective educational method through which we can transfer the technical skills to others. The other are making video to show our



activities.

回答：技術者教育について二つの計画がある。一つ目は触媒高度実践研究であり、技術伝承を行う上で効果的な教育方法である。もう一つは、研究所の活動状況を示すビデオを作成することである。

## 9. How about logistics and technical support division activity?

### 9.1. Average Mark

3.2 / 4.0

### 9.2. Comment/Assessment

Technical support in an institution such as ICAT is of enormous importance. By comparison with institutions worldwide, there is an evident need to strengthen this support activity. This point is particularly important with respect to the world-class efforts in instrument development at the institute. It appears that there is also a need to upgrade existing equipment for general use, including NMR facilities and in particular transmission electron microscopy. It is remarkable that ICAT continues to sustain support for two technicians for glassblowing and another two for metal working; continuing this level of support is worthy yet challenging. ICAT is commended for the generous offering of products to the outside through collaborations.

The committee deeply appreciates the presence of technicians and wishes to thank ICAT for the generous offer of their products to the outside community through collaborations and/or Joint Usage/Research.

Technical support in an institution such as ICAT is of enormous importance. Compared with international institutions worldwide, the present support could be strengthened.

ICAT のような研究機関での技術支援は非常に重要である。海外の諸大学における状況と比較すると、このような技術サポートを強化する必要性があることは明らかである。研究所における世界最高水準の装置開発においては、特に重要となっている。NMR 設備、特に透過型電子顕微鏡を含む一般的な分析機器はアップグレードする必要がある。多くの大学で技術部が減少傾向になる中、ICAT がガラス細工 2 人、装置試作 2 人の技術者の維持確保をしていることは注目に値する。技術部が共同研究を通じて、他大学に装置を提供していることは称賛に値する。

委員会では ICAT の技術部が維持されることを高く評価し、共同利用や共同研究を通して触媒研究コミュニティへと製作物を提供していることに対し、ICAT に感謝の念を表したい。

ICAT のような研究機関での技術支援は非常に重要であり、委員会は ICAT が技術部門を強化するに値すると考える。

### 9.3. Questions and suggestion

#### 9.3.1. Does ICAT have a long-range plan regarding new instruments and apparatus that will be needed in the future and the skills that will be needed to create new methods and instruments?

ICAT は、将来的に必要となる新しい機器と装置、そして新しい方法や機器を作成するために必要なスキルを維持発展させる長期計画を持っているか？

Reply: In 2017 we started to construct the instrument renewal plans. We are going to do strategic actions to get fund to improve the instrumentations.

回答：2017 年に、研究所では研究設備更新計画の策定を始めた。研究所では研究設備向上のための資金を獲得するために戦略的な活動をおこなっている。

## 10. How about future plan and directions?

### 10.1. Average Mark

3.7 / 4.0

### 10.2. Comment/Assessment

The quality of a research institute is determined by the quality of its scholars. ICAT must strive to attract, nurture, and empower the very best professors. Science can flourish only in an open, academically free environment. It is essential to give great freedom to young faculty to study and teach what they believe is important. The wisdom and perspective of senior scholars are important, but most dramatic new insights and innovations come from brilliant young people. In terms of diversity and gender balance, ICAT has 20% female researchers. Diversity and balancing gender is an important goal that will make ICAT strong and flexible. More efforts are needed to close the gender gap. It is important to recognize the need for researchers to be able to balance their regular curiosity-driven research with mission-oriented projects. It is a challenge to get the most from a limited budget and limited human resources.

研究機関の質は、そこに所属する研究者の質によって決まる。ICATは、最高の教員を引き付け、育成し、力を与えるよう努めなければならない。科学は、オープンで学問的に自由な環境でのみ発展する。若い教員に自由な環境を与え、彼らが重要であると考えることを研究し、教育できることが本質的に大切である。先輩教員の知恵と洞察は重要だが、劇的に新しい洞察と革新は優秀な若者が生み出すものである。多様性と男女比も重要である。ICATの女性研究者の割合が20%以上であることは注目に値するが、多様性の拡大と男女比のバランスは、研究所を強化し、柔軟性を向上する上で重要であり、更なる工夫をする必要がある。また、基礎研究とプロジェクト研究とのバランスを取る必要があることを認識することは重要であり、限られた予算と限られた人材を最大限に活用して、挑戦を続けてほしい。

Reply: We agree the comment from the committee. ICAT will employ young talented researchers and provide them research environment to conduct their curiosity-based researches such as Research Clusters in Department of Target Research. We also recognize the significance of the diversity of the researcher and the research area. ICAT will continue this governing policy which was initiated for many years.

回答：頂いたコメントに同意する。優秀な若手研究者をリクルートし、クラスターに代表される自由闊達に研究できる環境を整える。また、研究者構成と研究分野のダイバーシティが重要であることも認識しており、これまでの取り組みを続ける予定である。

## 11. Overall comments and mark

### 11.1. Average Mark

3.7 / 4.0

### 11.2. Comment/Assessment

ICAT is highly successful and one of the few successful examples of an institute of its kind, focused on fundamental research for the public good. It is one of the most attractive institutes in Japan that focuses on catalysis. Catalytic science and technology are keys to growing our society and escaping from a dependence on fossil energy and switching to renewable energy resources. The management of ICAT is making progress toward that ambitious ultimate goal. It is poised

for continued success, and implementation of some recommendations stated here can be expected to help lead to greater strength and recognition. ICAT is encouraged to maintain its atmosphere of collegiality and innovation and to incorporate more of a sense of practical (technological) chemistry to maximize the chances of fulfilling its goals in the future. The plan for the future and direction of the institute will be dominated by the fact that a number of professors will retire within the next few years. There are two possible strategies to keep ICAT at the level of a global hub for catalysis. One is to choose the fields that should be covered, another one is to identify the best people available without necessarily having a specific field in mind. Some of the committee prefer the latter because the best will always adapt to what is needed and outperform the others.

ICATは非常に成功している研究所であり、公益のための基盤研究を対象とする研究所の中では数少ない成功例の一つである。日本において最も注目されている研究所である。触媒科学は我々の社会が発展しつつ、化石燃料への依存から脱却し、再生可能エネルギー資源への転換を果たすうえでの鍵となる技術である。ICATにおける研究所組織のマネジメントは究極の目標に向けて進歩を続けている。持続的に発展するための体制は整えられており、ここに述べた改善策を実施していくことで、より研究所を強化し、世界的認知を向上できると考える。ICATが所内における協調と革新の雰囲気を保ち、未来の目標に到達するために実用的（技術的）な化学の手法を取り入れることを勧める。研究所の将来計画と方向性は、ここ数年内に多くの教授が退職することに強く影響を受けるであろう。ICATが触媒研究の世界的研究拠点であることを維持するには、二つの選択肢があると考えられる。一つは研究所が取り組むべき研究領域を選択すること、他方は特に研究領域を特定せず最良の研究者を見出すことである。最良の研究者は常に必要とされる研究対象を選択し、他を凌ぐ研究成果を上げるので、委員会では後者の選択を推奨する意見がある。

Reply: As ICAT received high recognition in both research and organizational management, we understood that the past efforts for the institution management has been working effectively. In order to reach the goals of ICAT, maintaining and improving the quality of research and techniques as international/domestic hub institute and producing excellent researchers, ICAT has to humbly accept and steadily execute the necessary tasks presented by the evaluation committee. In particular, since human resource has significant impact on the medium-term development of ICAT, we have recognized the necessity to have careful discussions and bold reforms when necessary.

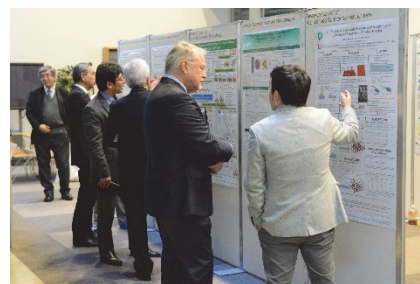
回答：触媒科学研究所が研究面と組織運営面の双方において高い評価を頂いたことから、これまでの研究所運営に対する取り組みが有効であったと理解した。また、研究所の目標に到達するためには、すなわち国内外の触媒研究教育拠点として相応しい研究・技術レベルを維持・向上し、優れた研究者を排出するためには、提示された課題を謙虚に受け止め、着実に改善を進める必要があると認識した。特に、指摘された人事の課題については、研究所の中長期的な発展を左右するものであり、慎重に議論しつつも、必要に応じて大胆な改革を厭わない運営方針を再認識した。



評価ミーティング



成果発表への質疑を行う Gates 教授



ポスター発表への質疑を行う Freund 教授