

## 谷池 俊明

Taniike Toshiaki

東京大学 理学博士。2006年、北陸先端科学技術大学院大学 助手（2007年4月より助教）、2013年より同大学准教授。専門は、ハイスループット材料実験、マテリアルズインフォマティクス、実験と計算化学の相互利用。



## 研究室訪問

物質化学領域  
谷池研究室

不均一系触媒、ポリマーナノコンポジット、グラフェン、逆浸透膜、第一原理計算、プログラミング

# 探索・学習・予測のシナジーによる次世代マテリアル設計で社会の課題打開に貢献する

## 科学者のミッションとは

谷池研究室が目指すのは、社会に役立つ材料の開発を最小投資（人・資源・時間）で実現することです。世界は、環境・エネルギー問題や食料・水不足など人類存続に係る問題が山積みされ、科学者はその解決に総力を挙げて取り組むべきです。日本も資源無きグローバル化、少子高齢化に伴う生産年齢人口の縮小などの課題を抱えつつも、持続的な成長と国際貢献の術を探らなくてはならない。こうした現状を前に、世界的な問題の打開を日本において実現したいと私は考えています。

従来、材料設計には、仮説を検証する実験に膨大な時間とマンパワーを浪費してきましたが、私たちは、探索・学習・予測という三つの方法論を駆使した、新たなマテリアルサイエンスを展開しています。

## 探索・学習・予測を相乗的に実践

マテリアルサイエンスでは、様々な元素や物質の最適な組合せや最適なプロセスを発見し、優れた材料を

創製することが目標の一つです。私たちの「探索」は、膨大な候補材料

の検証に「ハイスループット実験」を用います。実験の回転数（スループット）を飛躍的に加速させるため、自動化・並列化された実験装置を自ら設計し、例えば、1日に4000点もの検証実験を実現しました。スループットの最大化により、専ら思考や情報収集に時間を使うという研究スタイルを取ることができます。

ハイスループット実験では、大量の材料とともに、各材料の合成条件、構造、性能という大量データが得られます。材料性能は数多くの構造因子が複雑に関わった結果であり、そうした構造性能相関を明らかにするため、大量データの解析に機械学習を用います。データから「学習」した知見は、続くハイスループット実験に反映させます。

コンピュータを使って新しい高性能材料を「予測」することは、計算科学の最たる目標といえます。私たちは、実験と計算科学を相互支援的に組み合わせることで、数多くの実験結果を再現できる高精度な分子モ

デルを提案し、E.ON材料設計に取り組んでいます。

昨今、注目を集めるマテリアルズインフォマティクスではデータの質と量が重要ですが、材料科学研究の実験データは非常に少ない。例えば、ある触媒反応に関する30年分の論文を検索したところ、触媒の調製法や評価条件がそれぞれ異なり、機械学習に必要なデータ数としては全く足りません。そういう観点から、ハイスループット実験と、その実験から均質な条件下で自家生成される大量データは、マテリアルズインフォマティクスに有益であろうと考えます。

## 社会を変革する材料を、高速かつ最小投資で創出

最近の研究成果を一部紹介します。ポリエチレンテレフタレート（PET）の工業的合成は、非常にエネルギー効率の悪い高温真空プロセスを要しますが、私たちは、その工業触媒の70倍の活性を有する固体触媒を開発しています。

また、ポリマー材料は酸化劣化で寿命を迎え、焼却処分されています



が、今、海洋プラスチックゴミが問題となっています。リサイクルやリユース性の向上には十分な寿命を確保する必要がありますが、寿命を1個測る実験には1週間から1カ月を要します。そこで私たちは、有機物や高分子の酸化に伴う化学発光を捉える技術を用い、ハイスループット評価ができる化学発光イメージング装置を開発。通常の寿命測定実験の2000倍速を可能にしました。これによって新規材料の寿命開発の研究を多く手がけています。例えば、極めて高強度で伸縮性に富む人工クモ糸について、その脆弱性の改良に向けた劣化解析に取り組んでいます。私たちが重視していることは、特定の材料に限らないということ、そして社会の課題に対する最善手を高速で研究すること。社会に役立つ材料ということを特に意識しており、ゆえに、その出口が絶対にはない。そのように考えています。

触媒インフォマティクスの実現へ

