

JST news

未 来 を ひ ら く 科 学 技 術

88年の常識を覆す電子顕微鏡を開発
世界で初めて磁力の起源を捉える

インフォマティクスが拓く
触媒科学のパラダイムシフト

2022

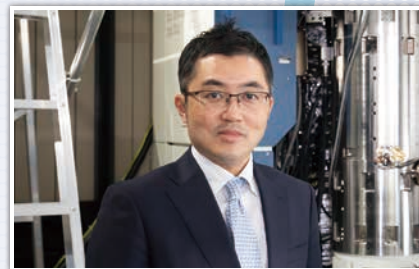
6

June



03 — 特集1

88年の常識を覆す電子顕微鏡を開発
世界で初めて磁力の起源を捉える



09 — 特集2

インフォマティクスが拓く
触媒科学のパラダイムシフト



14 — NEWS & TOPICS

- ◆「食べられる培養肉」の作製に成功
- ◆ 人文・社会科学系
有識者が語る現状と未来

ほか



16 — さきがける科学人

「認知のゆがみ」をなくしたい
機械学習で評価をフラットに

筑波大学 システム情報系 准教授
馬場 雪乃



主体的に学習できるドラマ形式の研究倫理映像教材「倫理の空白 理工学研究室編」公開

昨今、^{ねつぞう}捏造・改ざん・盗用に代表される研究不正行為が相次いで発生しています。このたびJSTの法務・コンプライアンス部は、研究者が日々の研究活動で求められる倫理意識を高めることを目的に、主体的に学習できるドラマ形式の研究倫理映像教材「倫理の空白 理工学研究室編」を制作・公開しました。

この教材は国内大学の理工学研究室を舞台に、准教授と博士課程の学生を主人公とした2本のドラマで構成されています。視聴者は研究不正に至る過程を2者の視点から疑似体験することで、研究者としてあるべき姿を考え、倫理的判断力や態度を養えます。

1本約30分で視聴できる教材です。理工学系以外の研究室や企業の方も、ぜひ講義や講習などでご活用ください。

【視聴時間】

約1時間(准教授編:約33分 学生・若手研究者編:約33分)

【URL】

https://www.jst.go.jp/kousei_p/measuretutorial/mt_movie.html



JSTは、シンクタンク機能、研究開発、産学連携、次世代人材育成、科学と社会との対話など、多岐にわたる事業を通じて、持続可能な開発目標(SDGs)の達成に積極的に貢献していきます。



▶ P.3



▶ P.14上



▶ P.14上



▶ P.14上



▶ P.15下

編集長：安孫子 満広

科学技術振興機構(JST)広報課

制作：株式会社エフピーアイ・コミュニケーションズ

印刷・製本：株式会社丸井工文社

88年の常識を覆す電子顕微鏡を開発 世界で初めて磁力の起源を捉える

柴田 直哉 Shibata Naoya

東京大学 大学院工学系研究科 附属総合研究機構 機構長・教授
2014年より先端計測分析技術・機器開発プログラム チームリーダー

河野 祐二 Kohno Yuji

日本電子株式会社 EM事業ユニット スペシャリスト
2014年より先端計測分析技術・機器開発プログラム サブリーダー

特集 1

OVERVIEW ■

電子顕微鏡は試料を強い磁場中に置くため、外部磁場の影響を強く受ける磁石や鉄などの磁性材料の原子観察は、極めて困難であると考えられてきた。この88年にわたる常識を覆したのは、東京大学大学院工学系研究科附属総合研究機構の柴田直哉機構長・教授だ。試料に磁場がかからない新構造のレンズを組み込んだ「原子分解能磁場フリー電子顕微鏡(MARS)」を開発するとともに、磁力の起源である原子磁場の直接観察にも世界で初めて成功した。今後、MARSはさまざまな材料・デバイスの開発に大きく貢献することが期待されている。

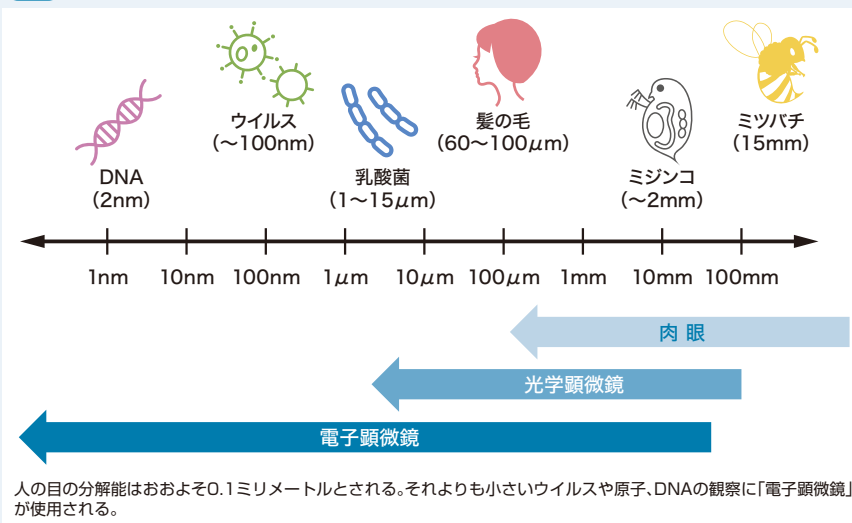
計測機器が支える科学の発展 分解能向上への飽くなき追求

レンズを使えば物が大きく見えることは2世紀頃から知られていたが、1590年に2枚のレンズを組み合わせた光学顕微鏡が発明され、性能が向上した結果、細胞や赤血球の発見につながった(図1)。「これまでの歴史を見ると、画期的な計測機器の発明をきっかけに、さまざまな領域で科学が爆発的に発展してきました。科学の発展は、計測機器によって支えられてきたといっても過言ではありません」と語るのは、東京大学大学院工学系研究科附属総合研究機構の柴田直哉機構長・教授だ。

一般に顕微鏡の性能は、識別できる2点間の最短距離である分解能で表すことができる。光学顕微鏡の場合、可視光を利用するため、光の波長0.4~0.7マイクロ(マイクロは100万分の1)メートル程度だ。19世紀末に、より波長の短いX線や電子が発見されると、1931年に電子線を用いた顕微鏡、透過型電子顕微鏡(TEM)がドイツで開発された。電子線の波長は可視光の10万分の1以下なので、顕微鏡の性能は飛躍的に向上した。

また、電子顕微鏡では光学レンズの代わりに強力な磁界レンズを用い

図1 各種観察手段の分解能



る。強磁場中に電子線を入射するとローレンツ力という力が働いて電子線が曲がる現象を利用することで、対物レンズの役割を果たす。電子顕微鏡は、試料を透過した電子線を検出して拡大像を得るTEMと、試料表面をスキャンして表面から出る二次電子や反射電子を用いて拡大像を得る走査型電子顕微鏡(SEM)に大別される(図2)。

2000年代に入ると、極めて細く絞った電子線で試料をスキャンすることで超高分解能像を得る、走査型透過電子顕微鏡(STEM)の性能が著しく向上した。1オングストロー

ム(100億分の1メートル)を下回る超高分解能を実現し、原子レベルで試料の構造や組成を直接観察することが可能になった。こうして原子スケールでの観察が可能になると、原子の配列だけでなく、物性に影響をもたらす物質界面の電場や磁場を原子レベルで観察したいという声が高まっていった。

世界初、原子の電場を可視化 原子磁場観察に残る3つの課題

現時点での世界最高性能を誇る電子顕微鏡の開発にも参画している柴田さんだが、元はセラミックスなどの無機材料が専門で、電子顕微鏡をツールとして利用してきた一人だった。博士課程を終えた柴田さんは03年に米国オークリッジ国立研究所の研究者となり、最新のSTEMを使って窒化ケイ素やアルミナなどのセラミックスの界面原子構造の観察に取り組んだ。

日本に戻ってからは、新たにエネルギー材料や触媒の研究に取り組んでいたが、機能発現のメカニズムを本質的に解明するためには原子の構造だけでなく、原子構造が生み出す電氣的、磁氣的な性質を直接観察・解析する必要があると考えた。「当時の顕微鏡では、このような観察は難しかったので、それなら自分の手で開

図2 光学顕微鏡と電子顕微鏡(TEM、SEM)の仕組み

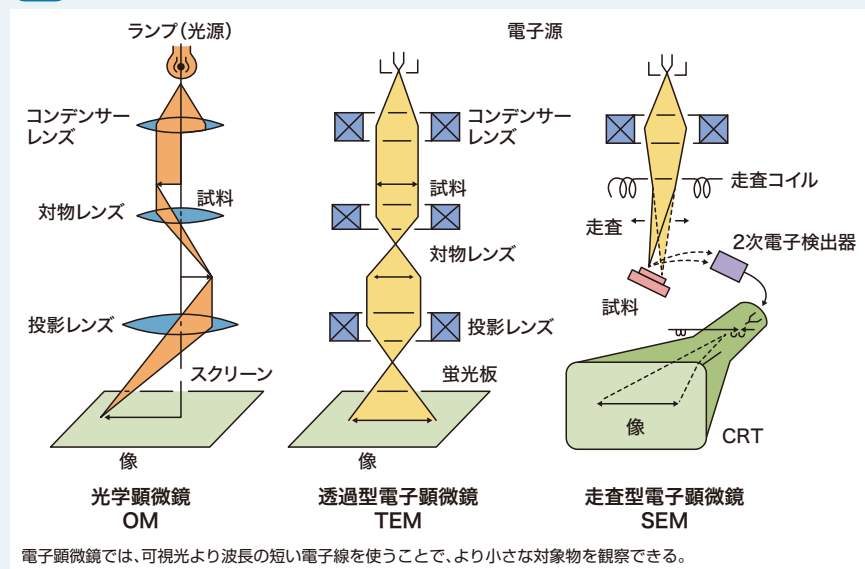
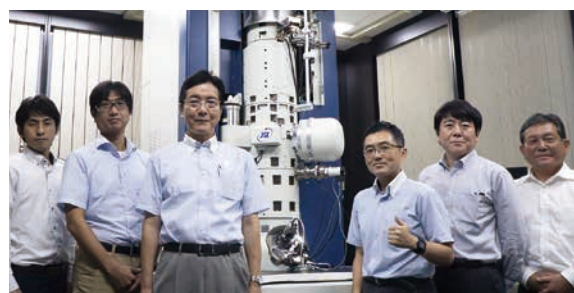


図3 東京大学・日本電子産学連携室



研究開発だけでなく、セミナーや見学会を開催するなど、人材育成にも力を入れてきた。2020年からは次世代電子顕微鏡法社会連携講座も発足させた。写真は現在の連携室メンバー。左から日本電子・熊本明仁卓越研究員、東京大学・石川亮特任准教授、東京大学・幾原雄一室長、東京大学・柴田直哉教授、日本電子・斎藤光浩副室長、日本電子・高野清副室長。

発しようと考え、JSTのさきがけに応募しました」と柴田さんは装置開発の動機を語る。

この研究では、電子の透過散乱現象を高精度に捉えるため、検出器の検出面を16分割し、試料内部の電場によって影響を受けた電子線の進行方向の角度や位置などの変化がわかるようにした。得られた信号から電場の寄与によるものを抽出する計算・解析手法を確立した。そして、12年に原子内部の電場分布の可視化に世界で初めて成功した。

続いて、より困難な原子磁場の観察への挑戦が始まった。柴田さんは「電子顕微鏡で原子の磁場を見るには、3つの大きな技術課題がありました」と振り返る。第1に、根本的なレンズの問題だ。電子顕微鏡で磁性を持つ材料を観察する場合、磁界レンズの強磁場と試料が強く相互作用し、物質の磁気構造が大きく変化したり、破壊されたりしてしまう。試料の構造を壊さない程度に磁界レンズを弱めると分解能が極端に低下して、原子レベルの観察はできなくなる。電子顕微鏡を使う研究者の間では「磁石の原子観察は難しい」というのが常識で、それを覆す必要があった。

第2に、原子レベルの磁場信号は極めて微弱であり、鉄の単原子の場合、原子磁場は原子電場に比べて1000分の1程度の信号強度しかないことだ。この極微弱な原子磁場を捉える方法を開発しなくてはならない。第3

に、検出した信号の中に電場と磁場の信号が共存しているために、極微弱な磁場信号だけを効果的に抽出する方法を開発する必要があった。

この3つの難問にチャレンジしたのが、東京大学と日本電子の共同研究チームだ。両者は05年に東京大学大学院工学

系研究科の幾原雄一教授を中心に産学連携室を創設し、次世代の電子顕微鏡開発に向けてさまざまな実績をあげてきた(図3)。原子レベルで磁場を観察するために、柴田さんがチームリーダー、日本電子EM事業ユニットの河野祐二スペシャリストがサブリーダーとなって、14年からJST先端計測分析技術・機器開発プログラム「原子分解能磁場フリー電子顕微鏡の開発」をスタートさせた。

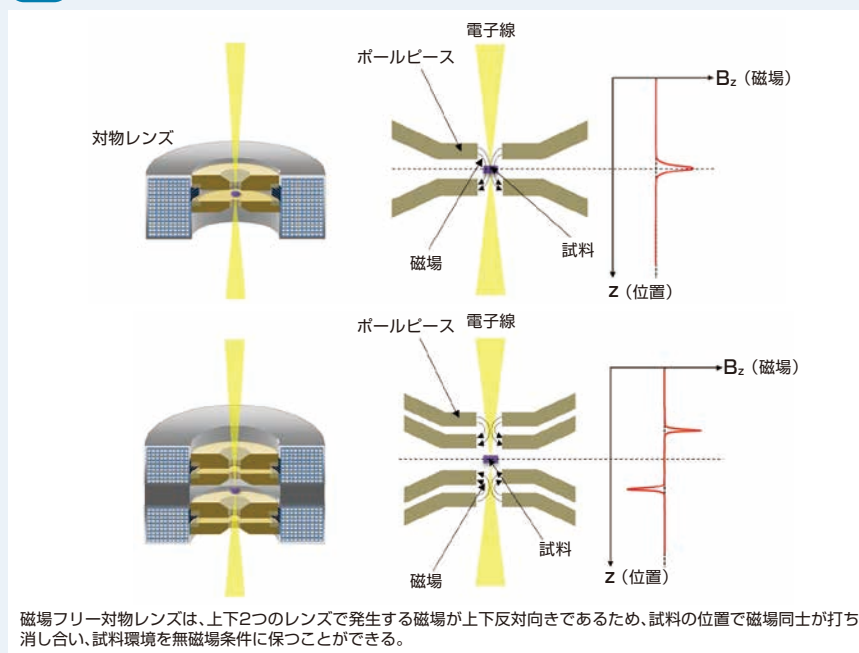
未踏技術への飽くなき挑戦 新構造の対物レンズを開発

研究チームは、電子顕微鏡の「常

識」を覆すために、全く新しい磁場フリー対物レンズの開発を目指した。電子顕微鏡では通常、対物レンズで電子線を絞るため、試料室には強力な磁場が印加されている。これに対して、柴田さんらは磁場が逆向きに発生する2枚の磁界レンズを上下に組み合わせ、試料室のところでお互いの磁場が相殺するという斬新な対物レンズ構造を提案した(図4)。「さらなる未踏技術への挑戦でしたが、理論的には可能だと確信していました。しかし、実際に試作装置で磁場フリー環境を実現するための細かい調整が本当に大変でした」と振り返る。

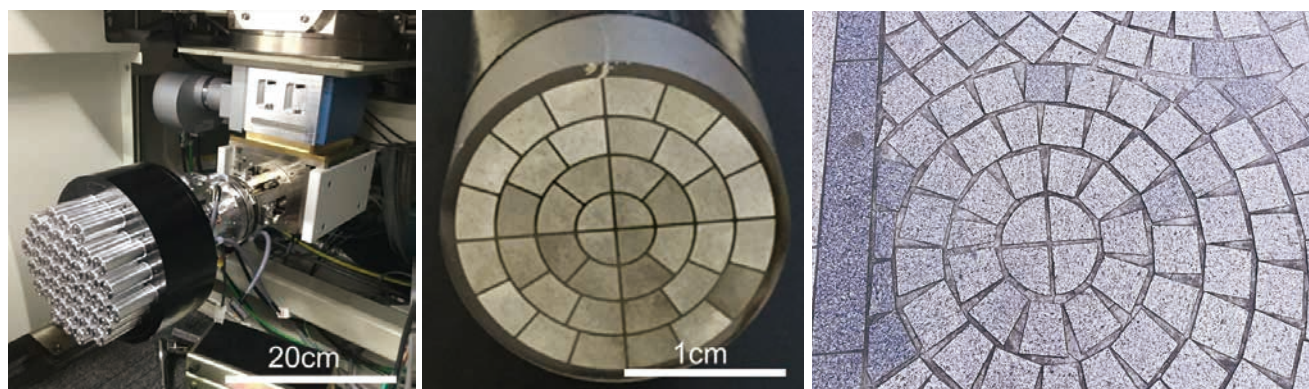
ここで活躍したのが、サブリーダーの河野さんだ。しかしもともとはSEMが専門で、TEMのレンズ開発をしたことがなかったというから驚きだ。「既存概念にとらわれずに取り組んだのが良かったかもしれません」と語る。日本電子が培ってきた電子顕微鏡に関する基盤技術を礎に、柴田さんの描く電子顕微鏡を追い求めた。試作装置において磁場フリー環境を阻害している要因を1つ1つ取り除いていくために、ネジ1本に至るまで部品の材質、形などを徹底的にチェックしたという。

図4 従来の対物レンズ(上)と新開発の磁場フリー対物レンズ(下)の断面比較図



磁場フリー対物レンズは、上下2つのレンズで発生する磁場が上下反対向きであるため、試料の位置で磁場同士が打ち消し合い、試料環境を無磁場条件に保つことができる。

図5 本研究独自の40分割型STEM検出器



原子の磁場信号を捉えるため、分割検出領域の面積をそろえた超高感度検出器と新規計測手法を開発した。右は開発のヒントとなったタイルの写真。

高真空中で観察を行う電子顕微鏡は、超精密かつデリケートな装置だ。一口に分解・組み立てといっても容易ではない。ある部品を調整すれば、他の部品に影響が出てやり直しになることもしばしばだった。河野さんは膨大な部品を試すために50回近く分解・組み立てを繰り返し、試行錯誤を重ねた。そしてついに、試料室の磁場フリー環境と原子分解能観察の両立を実現した。

次の課題は、原子レベルの極微弱な磁場を捉えることだ。原子の磁場と入射電子との相互作用は極めて弱い。そのため、磁場信号の検出は非常に難しいことが予想されていた。微弱な磁場信号を捉えるためには、超高感度・高速検出器を開発しなければならない。検

出器の性能は先の研究で分割数を増やせば良いとわかっていたと柴田さん。「ヒントはたまたま街を歩いていて見かけたタイルの模様です。すぐ河野さんに写真を送りました」。河野さんとともに各分割領域の面積がほぼ同じになるように工夫した40分割の検出器は、極微弱な磁場信号を正確に捉えることに成功した(図5)。

第3の課題は、電場と磁場の信号の分離である。原子近くには電場と磁場が共存しているため、得られた画像から電場による寄与を差し引いて、磁場のみの信号

を抽出しなければならない。そこで、柴田さんの研究室の関岳人助教が中心となり、原子磁場像の理論シミュレーション技術を新たに開発し、河野さんと試行錯誤しながら電場による寄与を相殺し、磁場信号のみを抽出する画像処理技術を開発した。

こうして主要な3つの課題を解決

図6 MARS全景写真



中央の円柱に新開発の対物レンズと最新の収差補正装置(DELTA型コレクター)が導入されている。試料ホルダーをセットし、材料などの観察を行う。



し、磁性材料の原子レベルでの観察が可能となる原子分解能磁場フリー電子顕微鏡(Magnetic-field-free Atomic Resolution STEM。通称MARS^{マーズ})が完成した(図6)。この命名にも柴田さんの込めた思いがある。「人類が火星に行くくらい難しい挑戦だ」という思いを込めて、この顕微鏡に火星を意味するMARSという名前を付けました。後日談になりますが、火星には地磁気がない、つまり磁場フリーだと聞き、何という偶然かと驚きました」と笑顔で語る。

産学連携の二人三脚で歩む 新材料開発への貢献も期待

共同研究チームは、MARSでの原子磁場観察を実証するため、鉄鉱石の一種であるヘマタイトの結晶中の鉄原子の磁場観察を行った(図7)。その結果、鉄原子自体が原子磁石と呼ばれる微小な磁石であることを実証するとともに、ヘマタイトが示す磁性の起源を原子レベルで観察することに成功した。この成果は、20年7月に英国科学誌『Nature』に投稿したというが、実際に掲載されたのは22年2月だった。

誰も観察していないことを正しいと証明するのは難しい。論文とともに公開されている査読者との応答

履歴から、公開までの様子をうかがい知ることができる。「公開までに、通常の論文を10本書くくらいの労力がかかりました。室温での原子磁場の可視化は評価されたものの、低温下で磁気構造が変化する『モーリン転移』を示すように、といった追加データを求められました。低温測定は私たちも考えていたことだったので、JSTの追加支援で低温測定用の試料ホルダーを急ピッチで導入し、低温での磁気構造変化を捉えることができました。この粘りやあきらめない気持ちこそが、新たな研究を切り開くには絶対に必要です」と柴田さんは振り返る(図8)。

極微の世界を見るために進化してきた顕微鏡の歴史において、MARSが原子の磁場観察を達成したことは、産業界にとっても極めて大きな成果だ。例えば磁性材料は、発電機や変圧器、電気自動車や家電、産業用のモーターなどに幅広く使われている。また、磁性材料の高性能化に貢献できれば、こうした機器の高効率化、省エネ化にも大きく寄与できると期待されている。また、IT社会のカギとなる磁気デバイス、磁気メモリー、磁性半導体、量子デバイスなどの先端素材やデバイスの研究開発を先導する有力な計測手法ともなるだろう。

MARSは、電場・磁場の観察だけ

図7 ヘマタイト結晶

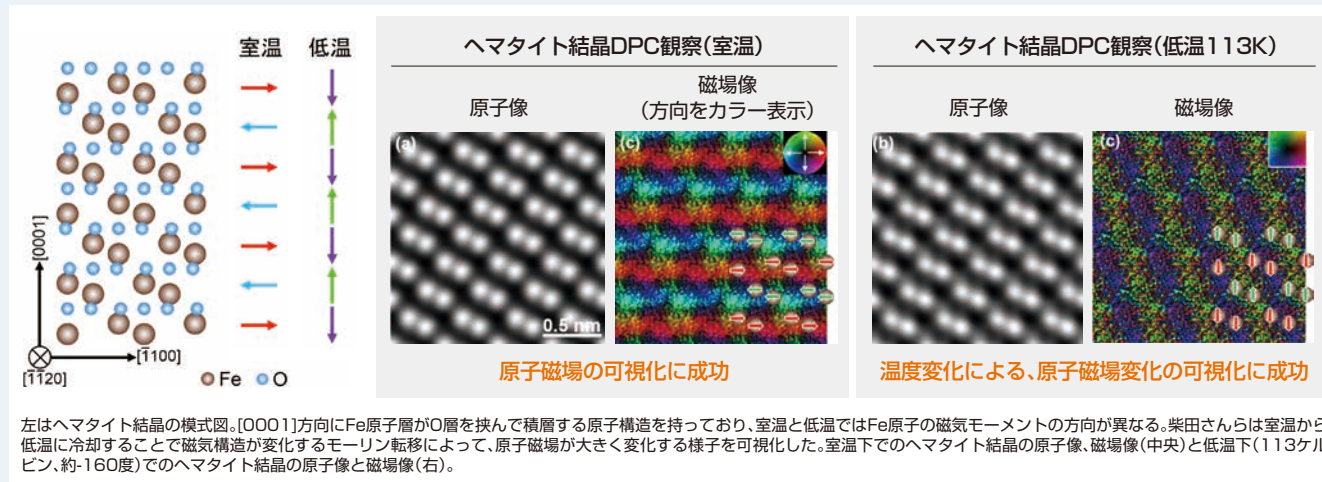


でなく、無機・有機・金属材料を原子レベルで観察できる汎用性の高い電子顕微鏡としても期待されている。今回製作したMARSの加速電圧は200キロボルトだが、柴田さんたちは、その潜在能力をさらに引き出す300キロボルトのMARSの開発も目指している。

産業に活用するためには、装置の利用しやすさも重要だ。MARSは磁性体専用の顕微鏡ではなく、従来通りの電子顕微鏡としての利用も可能だ。「私たちしか使えない装置では意味がありません。いずれ汎用性の高い装置にしたいということは、常に頭に置いていました」と柴田さん。将来的には、世界中の全ての電子顕微鏡を置き換えたいと期待を語る。産学連携を通じて二人三脚で歩んできた柴田さんと河野さんの挑戦は、これからも続いていく。

(TEXT:森部信次、PHOTO:石原秀樹)

図8 ヘマタイト結晶の原子像、磁場像



MARSによる「原子スケール観察」 産業界でも強力なツールに

MARSは、学術分野だけでなく産業にも革新をもたらすことが期待されている。現在、共同研究パートナーとしてさまざまな分野の企業がMARSを利用している。今回、その中の1つである日本製鉄のお二人に産業分野での活用や展望を聞き、柴田先生に締めくくってもらった。



■ 河野 佳織

日本製鉄株式会社
技術開発本部 フェロー

これまでのご研究や電子顕微鏡との関わりについてお聞かせください。

河野 油井管などの鋼管、自動車用鋼板などの材料設計や組織制御の研究に携わってきました。高強度・耐食性に優れた製品開発では、合金元素をどの程度入れるか、析出物をいかに分散させるかということが重要です。電子顕微鏡は、材料が結晶化する際の塑性変形や転位が起きる過程、結晶粒界の析出物の存在などを観察する上で欠かせないツールとなっています。

谷山 大学時代から、超高压TEMやX線回折などを使って材料解析を行ってきました。入社後は、TEMや放射光を駆使し、加熱による結晶の成長や磁場変化に伴って材料が変形していく様子をリアルタイムで捉える「その場観察」を通じて、新材料の開発だけでなく、製品トラブルの原因究明などに生かしています。

実際にMARSによる解析結果をご覧になっていかがでしたか。

河野 これまで磁性を持つ鉄の観察では、レンズ磁場の影響を抑えるために試料を可能な限り薄くしてき



■ 谷山 明

日本製鉄株式会社
先端技術研究所 解析科学研究部 室長

した。そうすると試料の表面だけを観測しているのと同じ状態になってしまい、実際に厚みを持った試料の物性データは得られないという問題がありました。MARSは、この難題を打ち破る画期的なブレイクスルーです。例えば、鉄鋼材料開発の根幹である粒界構造の解析に使いたいですね。これまでは現象が起きた後の材料を解剖学的に分析することが主体でしたが、MARSにより原子レベルで観察や解析が可能になりましたから、高機能な材料開発に大きな道筋が見えてきました。

谷山 柴田先生とは長年共同研究をしてきましたが、MARSを使い始めたのは2年ほど前からです。鉄鋼材料を原子レベルで観察し、手応えを感じています。今後は、強力な磁性を持つ材料も原子レベルでの観察が可能になると期待しています。

今後の産学連携に向けて、どのようなことを期待されますか。

河野 今後も共同研究でさまざまな鉄鋼材料を解析していきたいと思えます。その過程で新たにチャレンジ



■ 柴田 直哉

東京大学 大学院工学系研究科
附属総合研究機構 機構長・教授

ングなテーマが生まれ、次の開発につながると期待しています。

谷山 鉄と一口に言ってもその中には多様な原子が含まれていますから、原子の配列だけでなく、原子の種類も見分けられるといいですね。

柴田 原子の種類を見分けることは可能です。すでに、粒界にたまりやすい不純物元素を見分ける取り組みを始めています。

少し個人的な話になりますが、私はたたら製鉄の本場の島根県出身です。郷土が生んだ依国一先生をはじめ、KS鋼の本多光太郎先生、MK鋼の三島徳七先生など、日本の鉄鋼研究はそうそうたる先生方によって築き上げられてきました。人類の新文明を築いたのは鉄であり、鉄の研究は「古くて新しい」テーマです。鉄の分野で、未だ解明されていない重要な問題を新しい電子顕微鏡を使って原子レベルから解き明かすことが大学の役割であると思っています。そして、産業分野との連携による相乗効果を高め、若手研究者の育成にもつなげたいと考えています。

(TEXT:森部信次)

インフォマティクスが拓く 触媒科学のパラダイムシフト

高橋 啓介 Takahashi Keisuke

北海道大学 大学院理学研究院 化学部門 准教授
2017年よりCREST研究代表者

高橋 ローレン Takahashi Lauren

北海道大学 大学院理学研究院 化学部門 特任助教



特集2

OVERVIEW ■

近年、人工知能(AI)や情報科学(インフォマティクス)の発展により、さまざまな分野でデータ科学との融合による効率的な研究手法を模索する動きが活発になっている。触媒探索の分野でいち早く実験・計算・データ科学を統合した「触媒インフォマティクス」の確立に取り組むのは、北海道大学大学院理学研究院の高橋啓介准教授だ。資源量が豊富なメタンを、工業的により有用な物質に変換する触媒開発を軸に、触媒科学のパラダイムシフトを目指す。

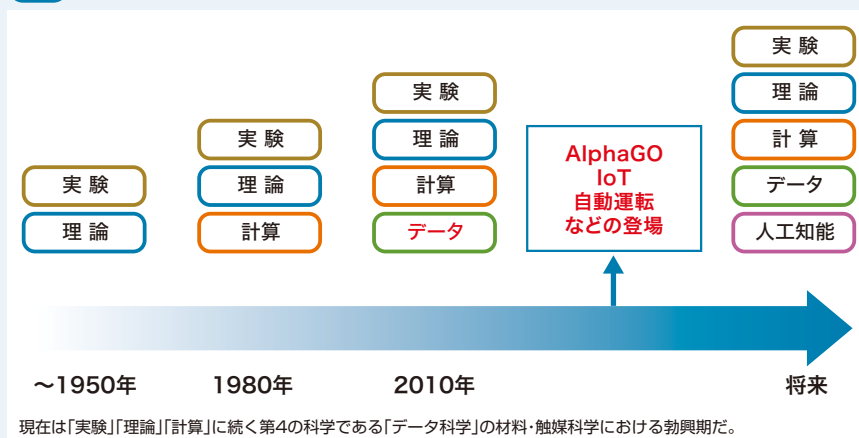
経験や直感頼みから脱却 開発が効率化、高速化

計算機やAIの発展、実験データベースの整備の進展などに後押しされ、多くの分野で融合が近年急速に進んできた。化学分野も例外ではない(図1)。一方「触媒研究にはインフォマティクスが十分に活用されていない」と指摘するのは、北海道大学大学院理学研究院の高橋啓介准教授だ。CREST「多様な天然炭素資源の活用」に資する革新的触媒と創出技術」研究領域で「実験・計算・データ科学の統合」によるメタン変換触媒の探索・発見と反応機構の解明・制御」を率いる。

化学分野におけるインフォマティクスには、これまで蓄積されてきた実験データなどを基に法則性を見いだしたり、物質情報を探索しやすい形に統合したりして、研究を加速することが期待されている。高橋さんはこれまでも、機械学習を活用した物質探索の手法「マテリアルズ・インフォマティクス(MI)」で、ある種の太陽電池の物質候補5400万件から望んだ性能を持つ11件に候補を絞り込むといった効率化を図る研究を手掛けてきた。

ではMIを触媒の探索にもすぐに応用できるかというと、そう単純ではない。一般的に、触媒は反応の前でそれ自体は変わらないと定義される。しかし実際には、反応中に状態がダイナミックに変化するので、物質の最初の情報を基に研究を進めて

図1 材料・触媒科学の歴史



も、良い結果は得られないと高橋さんは指摘する。「触媒は反応中、まるで生き物のように変化し、状態を捉えることはとても難しいのです。だからこそ、触媒インフォマティクスが確立できれば、経験や直感頼みから脱却し、触媒開発が劇的に効率化、高速化するはずだ」と語る。

一番難しい課題に挑戦したい 重要さを増すメタン酸化反応

高橋さんが目をつけたのは、触媒研究の難問として残るメタン酸化カップリング反応(OCM)の触媒の開発だ(図2)。メタンは、天然ガスの主成分で、以前から燃料としてはもちろん、メタノールや水素ガスといった化成品の原料として工業的にも用いられてきた。構造の単純さや私たちにとっての身近さとは裏腹に、メタンは炭素原子と水素原子の結びつきが強く、化学反応の制御は難しいとされる。

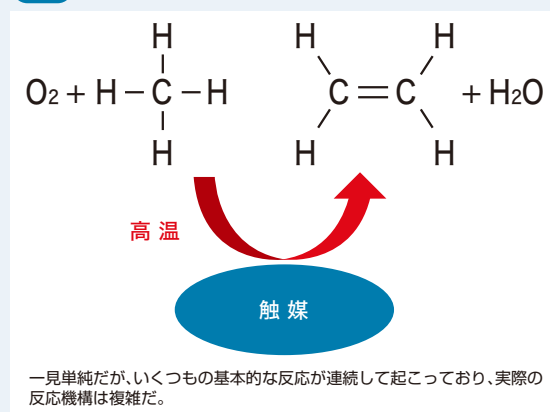
例えば、OCMIは酸素との反応を通してメタン同士をつなぎ、エタンやエチレンといった工業的により有用な物質を得るのが目的だ。化学反応を仲立ちする物質である触媒を混ぜた上、数百度の熱を加える(図2)。このとき、狙っていない複雑な反応まで

起こりやすく、結果として副生成物が多くできるという問題もある。「一番難しい課題に挑戦したいと考えました。有用な技術や方法論、知見はそういった研究に取り組むことで生まれます」。

世界中の研究者が精力的にこの課題に取り組み始めて30年以上経つものの、いまだに十分な性能を持った触媒は見つかっていない。また、2000年代後半にアメリカで起こったシェール革命の影響や、ある種の微生物の代謝からメタンガスを得る技術の進展により、OCMをはじめとしたメタンに関連する化学反応の制御の重要性はますます増している。CRESTでも革新的触媒の研究領域が発足し、まさに求めていたテーマだと迷うことなく応募した。

採択後すぐに取り組んだことの1つが、エチレンを生成するOCMに関する文献データの収集と分析だった。過去30年分、1868件のデータを機械学習で分析し、工業的に求められる30パーセント以上のエチレン収率が得られる触媒を探索した。すると、これまでに報告されたことのない56種の触媒が候補として浮上した。機械学習を活用した触媒の探索の有効性が示された形だ。また、収率の良い触媒と悪い触媒を決定づける元素の組み合わせも、傾向が大まかに把握できた。大量の実験データを深く探ることで、触媒設計が可能となる成功イメージをつかんだときだった。

図2 エチレンを生成するメタン酸化カップリング反応



実験装置は自分たちで設計 3日で1万件以上のデータ

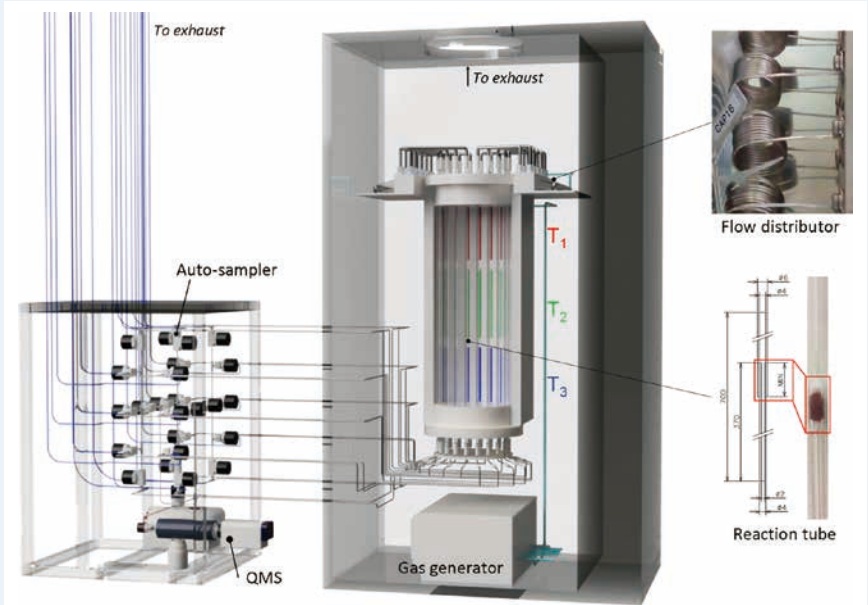
一貫性のある手順や条件で、大量の実験を行うのに欠かせないのが「ハイスループット実験装置」だ。実験に必要な種々の操作や測定を高速かつ自動的に行う装置で、すでに創薬の研究などでは広く活用されている。しかし、実験条件が広範囲に及び触媒研究において、オーダーメイドのハイスループット装置を開発するのは、技術面でも金銭面でも容易ではない。

例えば、数百度といった過酷な条件では、触媒が燃えたり溶けたりして装置にダメージを与えることもある。研究チームの1人でもある北陸先端科学技術大学院大学先端科学技術研究科の谷池俊明教授を中心に、研究の大黒柱となるこの装置を全員で意見を出し合いながら、自作することにした。できあがった装置は、20種類の触媒を異なる条件で一度に反応させることができるという(図3)。数千件以上のデータを1日で、自動的に集めることも可能だ。

実際に、装置の完成後に投稿した20年の論文では、59種類の触媒を用いて1万2708件のデータを得たことを報告した。過去30年分のデータより1桁多く、そして手法が厳密に制御され、一貫した質の高いデータをたった3日で得られることを証明したのだ。ただし、これほどのデータ量になると新たな苦労も生じる。

機械学習というと、データがあれば簡単に結果を手に行けるというイメージを持たれがちだ。しかし、機械が学習できる形にデータを前処理する必要があり、それを担うのは人間だ。高橋さんはやや困ったような笑顔を浮かべ、こう話す。「私は出てきたデータを全て読み、不適切なデータがないか、適切な分析手法になっているかを見極めていきます。ですが、これほどの量のデータとなると簡単ではありません。ハイスループット実験装置

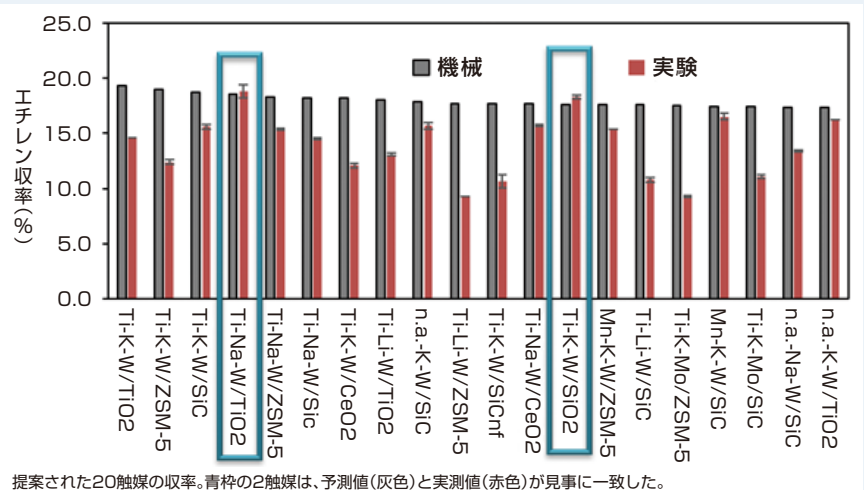
図3 ハイスループット実験装置



右側の装置の円筒部分には20本の管が入っていて、それぞれに触媒をセットし、自動的に実験を行うことができる。

Reprinted (adapted) with permission from ACS Catalysis. Copyright 2022 American Chemical Society.

図4 ハイスループット実験データとディープラーニングによって発見された触媒



提案された20触媒の収率。青枠の2触媒は、予測値(灰色)と実測値(赤色)が見事に一致した。

を導入したゆえの大変さですね」。

自前の実験装置で大量のデータを取得できるメリットは、偏りを除くことができる点にもある。従来は研究者が試行錯誤の末に、独自に編み出したノウハウや知見を駆使した実験の結果データを利用するより方法がなかった。しかし、機械学習に使うデータとしては、どうしても偏りが生じてしまう。研究者が気付くことができない、あるいは見落としているような意外な触媒を見いだすためには、偏りのあるデータはなるべく少ない方がよい。

データベースを無料公開 世界の研究者の右腕に

そこで高橋さんらは、3種類の金属が原子の数では1:1:1の比で混ざっているような固体の触媒について、考えられ得る36万通り以上の組み合わせからランダムに抽出した291種類を135条件で評価した。得られた4万件近いデータを機械学習で分析し、触媒として正常に機能すると予想された20種類の触媒を見いだした。さらに詳細な検討を行ったところ、8割にあたる16種類が良好な

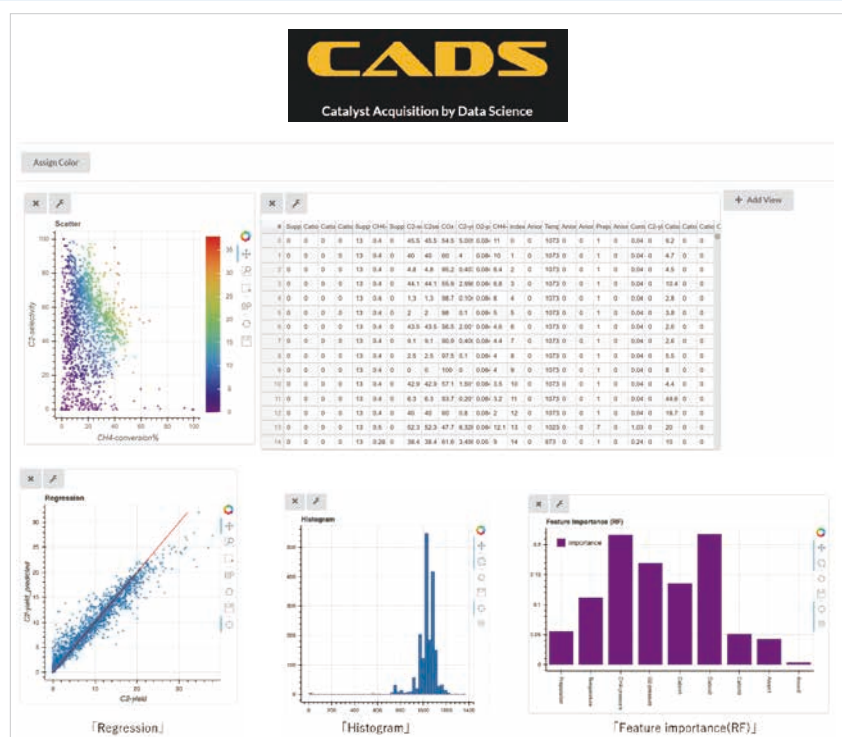
結果を示した。中には未報告の触媒も含まれており、改めて手法の有用性が示された(図4)。

OCMの触媒探索に有用なビッグデータを生み出し、有効性を示すことに成功した高橋さんは、そのデータベースを誰もが使いやすい形で無料公開することにした。開発したのは「CADS(<https://cads.eng.hokudai.ac.jp/>)」と名づけたプラットフォームだ(図5)。ユーザー自身がAIや機械学習に詳しくなくとも、クリック1つで、必要なデータを図表で表示させたり、それらに関連づけたり、機械学習を行うこともできる。現在、日本だけでなく米中独といった触媒研究が盛んな国々でも活用されており、総利用人数は4000人にも及ぶ。

データの公開に際しては、慎重な声もあったという。その中でもチーム内で対話を重ねて公開に至った背景には、データや技術のオープンソース化に対する高橋さんの熱意がある。Linuxはオープンソースのプログラムを理念とするオペレーティングシステム(OS)として有名だが、このユーザーコミュニティに高橋さんは若い頃から身を置いてきた。ユーザー間での活発な議論が、科学技術の発展に重要だと感じてきたという。

また、化学の分野でも特許などを取らなかったことが後続の研究や産業での応用につながり、革新を起こした研究もある。10年に触媒研究でノーベル化学賞を受賞した北海道大学の鈴木章名誉教授がその代表例だ。「触媒研究の新たな方法として定着するためには、ユーザーが議論でき、よりよいアイデアがあれば改良もできるオープンソース化が重要です。有用なデータを提供する人もいでしょうし、CADSが研究者の右腕に育ってくれたらうれしいですね」と高橋さんは語る。

図5 触媒プラットフォーム「CADS」



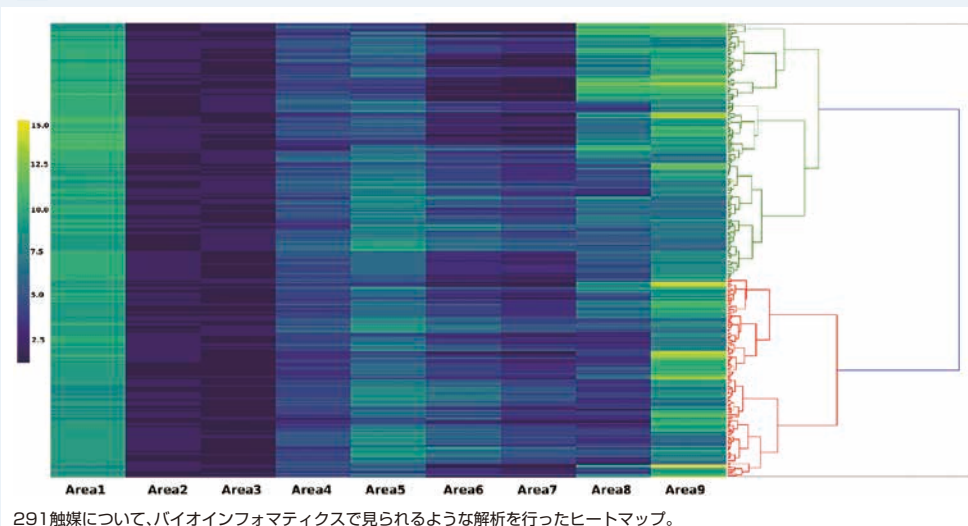
CADSにはOCMをはじめとしたさまざまなデータが登録されている。誰もがデータを公開・管理・利用できる、触媒研究のデータセンターを目指している。

「遺伝子」も設計に有用 自然言語処理などを駆使

続いて高橋さんらは「触媒遺伝子」というユニークな成果を生み出した。生物の遺伝子のように、触媒の機能を規定する因子を指す概念だ。「従来の元素記号による表記では、組成が異なる触媒同士は、同じ機能を持っていたり、全くの別物として扱われてきました。触媒遺伝子は、同じ機能を持つ触媒は同じ遺伝子を持つとします。この特有の遺伝子を塩基配列のような形で表現することができれば、触媒開発に応用できると考えました」と話す。

例えば、OCM触媒のFe-Nd-Tb-

図6 高橋さんが提案した触媒遺伝子



291触媒について、バイオインフォマティクスで見られるような解析を行ったヒートマップ。

Reprinted (adapted) with permission from Journal of Physical Chemistry Letters. Copyright 2022 American Chemical Society.

研究成果

未来社会創造事業
研究領域「持続可能な社会の実現」
研究課題「3次元組織工学による次世代食肉生産技術の創出」

「食べられる培養肉」の作製に成功

培養ステーキ肉の実用化へ前進

世界的な人口増加やライフスタイルの変化により、将来、地球規模で食肉消費量の増加が見込まれています。一方、畜産に必要な大量の穀物、水や放牧地確保のために行われる森林伐採、家畜由来の温室効果ガスなどによる地球環境負荷を懸念する意見もあります。そんな中、食肉の新たな選択肢の1つとして、細胞を体外で培養して作る「培養肉」が期待されています。

東京大学大学院情報理工学系研究科の竹内昌治教授と日清食品ホールディングスの共同研究グループは、産学連携の培養肉研究において日本で初めて「食べられる培養肉」の作製に成功しました。研究グループは、2019年に世界で初めてサイコロステーキ状の培養肉を作ることには成功していましたが、技術的な問題から食用として認可されていない材料も使用せざるを得ず、試食には至っていませんでした。今回独自に開発した「食用血清」と「食用血漿ゲル」を使用することで、実際に食べられる材料のみで培養肉を作れるようになり、東京大学の倫理審査専門委員会の承認を得て、試

食が実現しました。研究関係者からは「しっかりとしたかみ応えで、あっさりとしたうまみも感じました」という感想が聞かれました。

従来の機器を使った分析に加え、人による官能評価が可能になり、肉本来の味・香り・食感を持つ「培養ステーキ肉」の実用化に一歩近づきました。研究グループは、25年3月までに厚さ2センチ×幅7センチ×奥行7センチの大型立体筋組織の作製や、おいしさと低コストを両立する大量生産技術の確立を目指して研究を進めていきます。



提供: 東京大学

食用可能な材料のみで作られた培養肉

話題

日本発のプレプリントサーバー始動

全ての研究分野を受け入れ

JSTは、未発表のプレプリント(査読前論文)をオープンアクセスで公開するプレプリントサーバー「Jxiv」の運用を、2022年3月24日から開始しました。研究成果の多くは査読付き学術誌から出版・公開されますが、公開までに長い時間が必要となる場合があります。プレプリントは専門家の査読を経ているが、オープンサイエンスが支持を得てきた背景もあり、研究コミュニティと早急に情報を共有する方法として幅広く活用されています。

日本にはこれまで本格的なプレプリントサーバーがありませんでしたが、研究成果の迅速な公開とオープンサイエンスの推進を目的にJSTは自然科学分野のみならず、全ての研究分野のプレプリントを日本語でも投稿できる日本発の「Jxiv」を構築しました。例えば、人文学や社会科学分野では、特定の文化の哲学、歴史、文学、社会、法律、経済などに特化した研究が多く、日本においては日本語で記述することにより、さらに深い理解と知識の共有が期待できます。また、JSTが実施した学協会へのヒアリングによると、学際科学、特に人

文学・社会科学と工学の融合分野などの日本独自の分野や災害に関する研究分野などでプレプリントサーバーへのニーズがあることがわかり、こちらでも活用が期待できます。

投稿されたプレプリントはJSTによるスクリーニングののち、数日以内に速やかに公開されます。幅広い分野からの投稿をお待ちしています。ぜひ、「Jxiv」をご覧ください。

「Jxiv」サイト <https://jxiv.jst.go.jp/>



プレプリントサーバーは、専門家の査読を経ません。閲覧される際には、その点を十分にご注意・ご配慮ください。

人文・社会科学系有識者が語る現状と未来

「総合知」の創出と活用をさぐる報告書を公開

2021年4月に始まった「第6期科学技術・イノベーション基本計画」では、「総合知」の創出と活用がますます重要になるとうたわれています。総合知とは、人文・社会科学の「知」と自然科学の「知」の融合を意味する概念です。また、今回初めて科学技術の振興対象に人文・社会科学が追加されたことでも、大きな注目を集めました。法学、経済学、社会学といった多様な研究者を交えて、人間や社会の総合的理解と複雑化した社会課題解決に取り組むことが期待されています。

このたび、JSTの「科学と社会」推進部は、2020年度にJSTの社会技術研究開発センター(RISTEX)がまとめた「コロナ禍を踏まえた主要社会問題の抽出・整理に関する調査(Big Picture)」を基に、経済・生活・環境・行政分野などの社会問題解決の糸口を探り、目指すべき2050年のビジョンを明確にするために作成した報告書を公開しました。この報告書ではBig Pictureで掲げられた47の社会問題に精通し、人文・社会科学のバックグラウンドを持つ15人の有識者へ連続インタビューを実施し、提言を取りまとめまし



「15人の人文・社会科学系有識者が語る現状と未来－2050年の日本へ、そのプロセスを問う。」報告書

<https://www.jst.go.jp/sis/co-creation/items/15jinsha.pdf>

た。例えば、京都精華大学のウズビ・サコ前学長は自己認識を高めるために「観察力」を育む教育を、千葉大学の神里達博教授はさまざまな専門知を編集し、社会に真のユニバーサルデザインを実現することを提案しています。

世界的な人口増大や新型コロナウイルス感染症が蔓延する中、私たちの未来は不確実さを増しています。今後も「科学と社会」推進部は「ありたい未来」を実現するためにはどのようなアクションが必要なのか、多様な方々と一緒に考えていきます。

研究成果

戦略的創造研究推進事業ERATO
上田生体時間プロジェクト

大規模解析から睡眠を16パターンに分類

睡眠健診の実現や睡眠障害の診断に活路

動物にとって睡眠は重要な生理現象です。睡眠パターンはある程度遺伝的に決まっていますが、環境によっても大きく影響を受けます。ライフスタイルが多様化した現代では、睡眠に問題を抱える人が増えています。

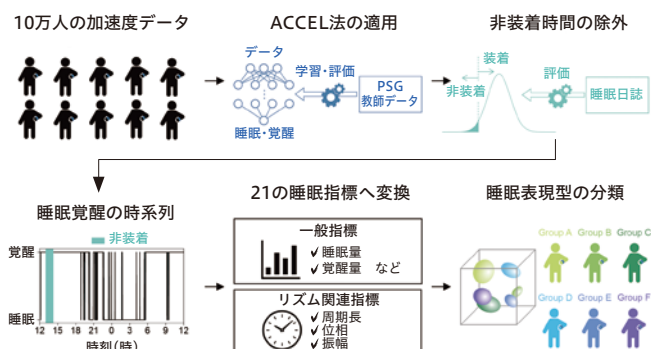
このたび東京大学大学院医学系研究科の上田泰己教授らの研究グループは、成人の睡眠を16パターンに分類することに成功しました。研究グループはまず、腕の加速度データから、眠っているのか目覚めているのかを高精度に判別できるアルゴリズム「ACCELL」を用い、腕時計型のウェアラブルデバイスで得られた成人男女約10万人の加速度データを睡眠データに変換し、詳細な解析を行いました。

その結果、例えばシフトワークのような勤務体系が原因で平日と休日の睡眠時間が異なる「社会的時差ぼけ」や、中途覚醒による不眠症、睡眠障害などに関連するクラスターを抽出できました。また、一般的な睡眠から大きく外れるデータを分析し、従来とは異なる新しい指標に基づいて不眠症に関連する睡眠パターンを見いだしました。最終的に、

10万人の睡眠データが16パターンに分類できることを明らかにしました。

睡眠を簡便に測定する環境が整い、自動的に睡眠パターンを判別する技術が生まれることで、睡眠健診の実現や睡眠障害の診断など、睡眠の問題に対する新しい治療法の開発につながる事が望めます。また、この成果は睡眠と深く結び付いた心身の健康状態、例えば精神疾患の原因究明を促進する上でも有益な情報となると期待されます。

リストバンド型加速度センサーから21の睡眠の指標を抽出するまでの流れ



英国を中心に30代から60代までの男女約10万人に対し、最長7日間にわたって測定した英国バイオバンクが持つ加速度データから、睡眠データを生成した。

さきがける 科学人

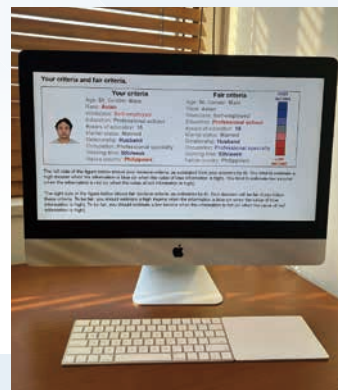
vol.116

馬場 雪乃 Baba Yukino

筑波大学 システム情報系 准教授

Profile

東京都出身。2012年東京大学大学院情報理工学系研究科創造情報学専攻修了。博士(情報理工学)。国立情報学研究所特任助教、京都大学大学院情報学研究科助教などを経て、18年より現職。16～19年ACT-I研究者、19年よりさきがけ研究者。



機械学習を用いて、公平な人物評価の方法を人間に教えるツールを開発しています。

Q1. どんなことに興味がありましたか？

A1. 小学生からプログラミングに関心 中学生では「2ちゃんねる」に夢中

父親がエンジニアだったので、幼少期から家にコンピューターがある環境で育ちました。小学生の頃からプログラミングに関心を持ち、図書館で調べながら自分でゲームを作って遊んでいるような子どもでした。中学生になるとインターネットが普及し始めたことでますますコンピューターに没頭し、特に匿名で見知らぬ人と手軽にコミュニケーションが取れる「2ちゃんねる」に夢中になりました。

現実の世界では、社会的に地位のある人の発言に影響を受けやすいという認知のゆがみが発生しがちですが、匿名という環境下ではこのバイアスが排除されやすくなります。しかしインターネット上でも、人は多数派の意見に誘導されてしまうというケースがよくあります。こうした現象から認知バイアスに興味を持つようになり、研究対象として向き合い始めました。人が意思決定をする場面に機械学習が積極的に関わることで、ゆがみのない真の判断ができるのではないかと考え、さまざまな角度からアプローチを続けています。

Q2. 認知のゆがみを是正するには？

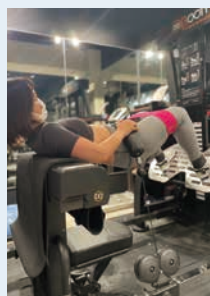
A2. 他者に対して想像力を働かせ その場で判断をしないこと

認知のゆがみは、誰にでも起こる現象です。固定観念にとらわれない多様な考え方をもち、自分の価値観が全てではないことを認め、他者に対して想像力を働

かせること。そして、その場ですぐに結論づけようとしなことがゆがみのない判断には重要です。

例えば「人事評価」は、属人性が高くゆがみが生じやすい業務の1つです。人種や性別に対する無意識のバイアスは、不公平な判断につながりやすくなります。機械学習を利用して評価者の判断を補正できれば、埋もれていた人材の発掘や適材適所に人を配置することが可能になるかもしれません。こうした研究は認知科学の専門家と進めていくことで、より具体性のある内容に高めていけるのではないかと考えています。

また今後は、行動変容を機械学習でサポートできる仕組みづくりにも取り組んでいきたいと思っています。人は頭ではわかっていても、衝動的な行動を止めることができない生き物です。ダイエット中に



研究をやり遂げるには心身ともにタフである必要があると思います。定期的にトレーニングをしています。

「甘いものを食べちゃダメだ…」と書いていても、つい食べてしまう。そんな行動を抑制する仕組みにも、機械学習を効果的に取り入れていきたいです。

「認知のゆがみ」をなくしたい
機械学習で評価をフラットに

Q3. これから研究者を目指す人に一言

A3. あらゆるアンテナを張り巡らせ 独自の感性を磨き上げよう

「こういう技術がかっこいい」「こんな考え方が面白い」といった独自の感性を持っている人は研究者としても魅力的で、他の人がたどり着けない境地まで行けると感じます。感性が育まれる若いうちに、いろいろなことに興味を持ち、あらゆるアンテナを張り巡らせ、知識の引き出しを増やしておくことが大切だと思います。

新型コロナウイルス感染症というこれまでにない経験の中で、新しい技術や考え方も生まれています。いいなと感じたことは積極的に取り入れ、私自身も感性を磨き上げながら、時代の

流れを先取りするような研究にチャレンジしていきたいです。

(TEXT:
JST広報課
小倉一恵)

