

情報科学と電極触媒開発

近年、機械学習などに代表される情報科学を用いた材料開発(マテリアルインフォマティクス)が盛んに行われている。私が専門としている電気化学反応も例外ではないが、学生時代から一貫して実験屋であり、機械学習はおろか第一原理計算も経験がない、コンピュータといえばデータの解析くらいにしか使ってこなかった身としてはどこか一歩下がってこの流れを見ていた。しかしながら、やはり今後の材料開発を進めて行く上で非常に重要なツールであるということを認識し、一念発起してマテリアルインフォマティクスに片足を突っ込んだ研究を始めた。まだまだこの分野(というか研究者の世界全体)では新参者の私が、試行錯誤を繰り返しながらなんとかマテリアルインフォマティクスの真似事をして形のある成果を出せるようになったので、この場を借りて紹介したいと思う。・・・