



TAC-MI Tokyo Tech Academy for  
Convergence of Materials and Informatics

# News Letter

Vol.5  
Nov. 2020

東京工業大学 物質・情報卓越教育院

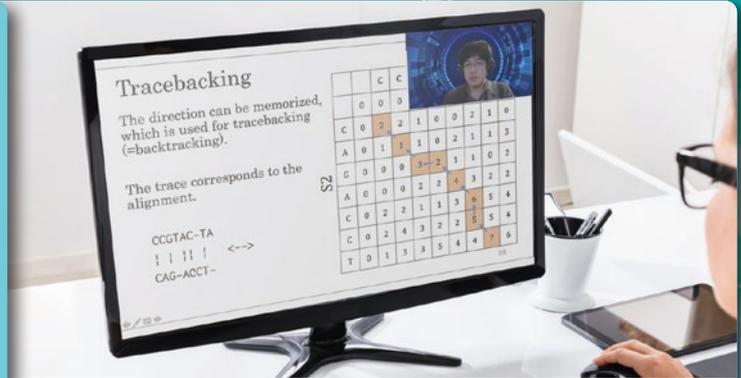
文部科学省平成30年度卓越大学院プログラム

「物質 × 情報 = 複素人材」育成を通じた持続可能社会の創造

## Contents

### 特集 コロナ禍における オンライン教育

- TAC-MI授業科目紹介  
物質情報基礎 : P.2, P.3  
マテリアルズシミュレーション : P.4
- 第1回最先端  
研究セミナー開催報告 : P.5
- 2020年度秋期登録学生紹介 : P.6, P.7
- 企業アドバイザーからのメッセージ :  
P.8 ~ P.10
- 2020年度成果発表会・産学交流  
イベント開催報告 : P.11, P.12



# TAC-MI授業科目紹介「物質情報基礎」

物質・情報卓越教育課程独創力涵養科目群の必修科目「物質情報基礎」では、物質科学と情報科学をいかに融合し、研究開発に活かしていくかについて、マテリアルズインフォマティクスおよびマテリアルズシミュレーション分野の専門家が、実例を取り上げて概説します。

今年度は第3Q(10月~11月)に、物質・情報卓越教育院の専任教員を含む本教育院のプログラム担当教員7名がオムニバス形式でオンラインでの講義を行います。

授業情報	科目名	物質情報基礎
	科目コード	TCM.A401
	開講クォーター	3Q



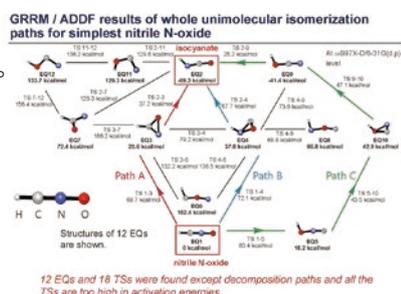
## 第2回 量子化学計算の実際:反応経路探索と物性予測を例として



物質・情報卓越教育院  
特任教授  
川内 進

本講義の第一部では、量子化学計算の基礎として、学部で習う量子化学の復習から始めて、そこで教えられた概念が量子化学計算にどのように結びつくかを説明します。さらに、現在の量子化学計算の基本になる理論的近似手法と基底関数系を解説し、量子化学計算に必要な用語の解説に加えて、計算を行う上で気をつけるべき点も解説を行います。

第二部では、このような量子化学計算を具体的にどのように研究に役立てるかを我々の最近の研究から三つ選んで解説します。まず、反応経路探索への応用として、不活性C-H結合の触媒による活性化反応とクリック反応試薬として有望なニトリルオキシドの異性化反応を取り上げます。次に物性予測への応用として、導電性高分子のバンドギャップ予測を取り上げ、我々が提案した新しい記述子を用いたニューラルネットワークによるバンドギャップ予測について紹介します。



## 第1回 マテリアルズインフォマティクス概論: コロナウイルス創薬、化合物の生成モデルを例として

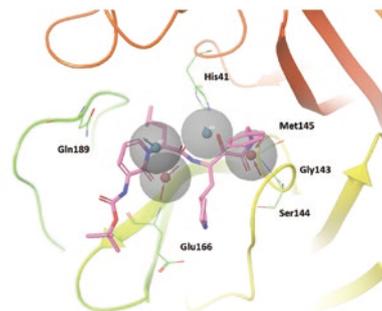


情報理工学院  
准教授  
関嶋 政和

一般的に、一つの薬が市場に出るまでにおおよそ3000億円と12-14年の期間が必要であるとされており、IT技術を用いてこれらのコストの削減が期待されています。

しかし、新型コロナウイルス感染症(COVID-19)のように、予期せずパンデミックとなった感染症について、事前に薬の開発を行うことが出来ないために、通常と異なるアプローチが必要となります。

ここでは、リポジショニングという既存の承認薬や開発中の薬を他の疾病に適用するアプローチについて、特に薬の標的となる蛋白質と薬候補化合物を3次元の立体構造で扱うシミュレーション手法について解説を行い、SARS-CoV-2のMain Proteaseを阻害する薬剤に求められる官能基群をモデル化したファーマコフォアについて議論を行います。さらに、機械学習を用いた任意の化合物を出発点として任意の評価関数に基づく最適化手法についても概略を説明します。



## 第3回 固体物理学計算の実際:DFT計算に基づいた電子デバイス設計と新材料探索



物質・情報卓越教育院  
特任准教授  
松下 雄一郎

第3回では、密度汎関数理論(DFT)の固体周期系への適用の基礎的な話題を紹介し、講義では、DFTの基礎から説明をし、DFT計算を固体系に適用することで何が出来るようになるのか、DFT計算を用いるとどのように電子デバイス開発を加速させることができるのか、を適用事例3つを示しながら紹介します。講義で扱った内容は以下の通りです。

- (1) DFTの基礎
- (2) 適用事例1:DFT計算によりSiC-MOSデバイスの10倍の品質化を実現
- (3) 適用事例2:結晶中の点欠陥計算と量子センサ
- (4) 適用事例3:マテリアルデータベースとの組み合わせによる新規バレートロンクス材料探索
- (5) DFTの適用限界とDFTを超えた最近のアプローチ

また、これら紹介事例はマテリアルズシミュレーションの演習授業とも互いに連動しており、類似計算が演習授業で体験できるように組み込まれています。

材料計算からSiC-MOSFETの性能を向上させる技術を開発  
(京都大学(実験)と東工大(理論)とのコラボ)

Improvement of SiC-MOS device performance based on materials simulations



Yahoo! ニュースに掲載(8/20発表)  
EE Times誌, OPTRONICS誌, 日経XTECH誌, 電産新開発,  
化学工業日報誌, マイナビニュース誌  
Reported in mass media.

SiC-MOSデバイスの性能が10倍、コストが1/10に  
10 times higher device performance in SiC-MOS



DFT計算の応用例1(Example1):SiC-MOS devices

## 第4回 バイオインフォマティクスの実際:ゲノム、タンパク質、創薬への応用

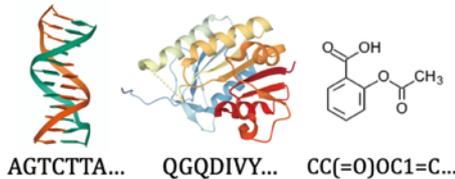


物質・情報卓越教育院  
特任講師  
安尾 信明

本講義では、生体内に存在する情報を保持・伝達する分子であるゲノムやタンパク質を対象とし、ゲノム配列やタンパク質構造の比較の手法などを通してバイオインフォマティクスの概要について理解することを目指します。

本講義は生命科学に習熟していない学生を主な対象とするため、基礎的な生命科学の知識の導入から始めますが、DNAの塩基配列やタンパク質の構造を表すためのデータ構造を紹介するほか、代表的な配列アライメント手法であるSmith-Watermanアルゴリズムをはじめとして、マルチプルアライメント、RMSDといった基礎的なアルゴリズムや、バイオインフォマティクスの研究で実際に用いられているデータベースについても紹介し、一部については手で計算する簡単な演習も行います。また、これらの内容に加えて、低分子化合物を取り扱うケモインフォマティクスや、これらを応用した新規薬剤開発の研究についても簡単に紹介します。

Practical bioinformatics:  
genome, protein, and drug design



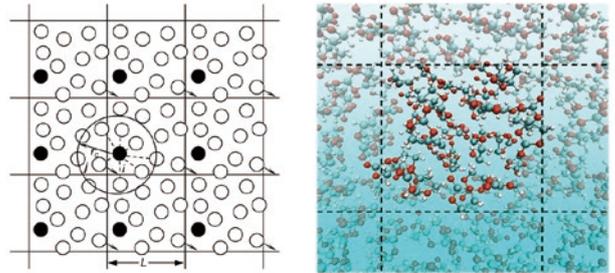
## 第5回 分子動力学計算の実際:有限温度下の材料現象の統計力学



物質・情報卓越教育院  
特定教授 / NIMS  
エネルギー・環境材料研究拠点  
グループリーダー  
館山 佳尚

本講義では、分子動力学(Molecular Dynamics :MD)計算による材料研究の紹介を目的に、その基礎および計算事例について概説します。

まず(1)運動方程式と統計アンサンブル、周期境界条件について解説し、次に(2)力場や第一原理計算による原子間力について議論します。続いて、(3)溶液中の動径分布関数などの平衡状態における統計平均、(4)自己拡散係数など、相関関数から求められる動的物性の計算について解説します。そして、(5)化学反応自由エネルギー曲線計算についても紹介します。計算事例としては、水溶液系に加えて、リチウムイオン二次電池等に関連した有機電解液反応や固体電解質内のリチウムイオン輸送などについて紹介します。



## 第6回 GPUスーパーコンピューティング: GPUによる大規模計算と流体-粒子シミュレーション



学術国際情報センター  
先端研究部門  
教授  
青木 尊之

GPUはプロセッサとしての単体性能が非常に高く、うまく使うことにより計算の可能性が大きく広がります。1GPU当たり数1000以上のコアを搭載し、階層的な並列化と効率的なメモリアクセスが重要となります。

実問題への応用として、さまざまな空間スケールの流体-粒子シミュレーションを紹介します。マイクロメートルのスケールでは表面張力が卓越し、固体と液体の接触角が重要になります。身近なスケールでは、構造物と流体の相互作用の解明にGPU計算を用います。階層的に計算格子を細分化することにより計算の解像度を現象に適合させることができるようになり、飛躍的な計算効率の向上が期待できます。これらを通し、物質情報分野でのGPUパソコン活用の糸口を見出してもらいたいことを期待します。



## 第7回 AIとロボットを活用した材料科学: 条件最適化から科学的原理発見まで



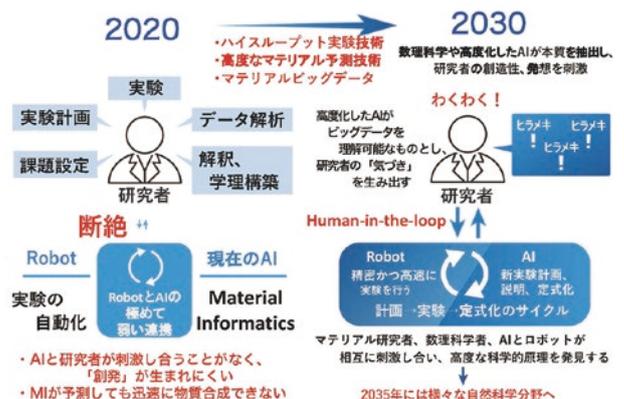
物質理工学院  
教授  
一杉 太郎

「マテリアル分野における研究の進め方を変革し、研究を加速する」ために何をすべきか。それを本講義で議論したいと思います。

単に条件最適化を高速に行うのではなく、「研究の質」を転換することを目指しています。

これまでの延長線上にない新マテリアルや科学的原理を多数発見するにはどうすれば良いのか、あるいは、AIやロボットをどのように活用すればこの目標を達成できるのか、皆と考えたいと思います。

### 科学研究の進め方: パラダイムシフト



# TAC-MI授業科目紹介「マテリアルズシミュレーション」

コンピュータシミュレーションは、物質の構造や反応性、その機能を理解する手法として不可欠になっています。また、マテリアルズインフォマティクスの発展に伴って、コンピュータシミュレーションは大量なデータ生成の手法としても重要性を増しています。本講義では、量子力学の基本原則に基づいた第一原理計算により、分子や固体の原子・電子レベルでの構造と基礎特性を理解するための理論及びシミュレーション手法について講述するとともに演習を行います。本講義のねらいは、第一原理計算の修得を通じて、現代の材料開発に要求される原子・電子レベルで物質・材料を理解・設計する能力を涵養することです。

講義は分子系と周期系に分けて行い、最後にマテリアルズシミュレーションの最前線に関する講義を行います。分子系と周期系に分ける理由は、いずれの対象も第一原理に基づいて計算するものの、適用する理論的解法やアルゴリズムが異なるため、一般に用いるソフトウェアが異なるためです。本年度は、オンライン授業として受講生のPCからTSUBAME3.0スーパーコンピュータに接続した演習を行います。

授業情報

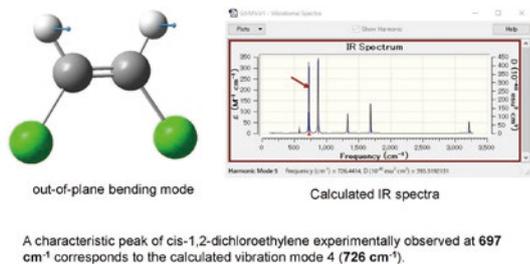
科目名	マテリアルズシミュレーション
科目コード	TCM.A402
開講クォーター	3Q
授業担当教員	大場 史康、川内 進、 松下 雄一郎、安尾 信明

## 分子系

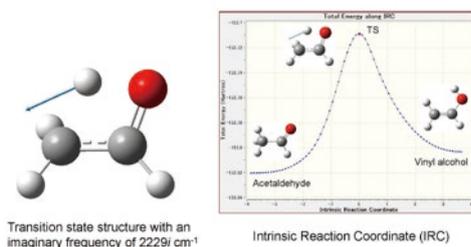
分子系の講義で用いたソフトウェアは、量子化学計算の標準ソフトであるGaussian16です。計算に用いる近似理論や基底関数系については「物質情報基礎」の講義で説明しているため、この演習で用いる密度汎関数法の汎関数と基底関数系に絞って簡単に説明を行います。分子系では、対象分子や応用が幅広いため、どのように量子化学計算を適用すれば良いか、演習を通じて学ぶことを目的としました。そのため、分子の構築から計算の設定、ジョブのTSUBAME3.0への投入は、Gaussian16のグラフィックユーザーインターフェースであるGaussViewをX-Windows経由で使いました。分子系では以下の3つのテーマについて演習を行います。

(授業担当:川内 進)

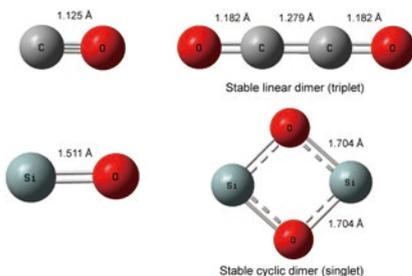
- (1) 1,2-ジクロロエチレンのシス体の特異的安定性と赤外吸収特性ピークの解明



- (2) ビニルアルコールのアセトアルデヒドへの異性化反応経路探索



- (3) 一酸化炭素と一酸化ケイ素の二量体の構造安定性の比較



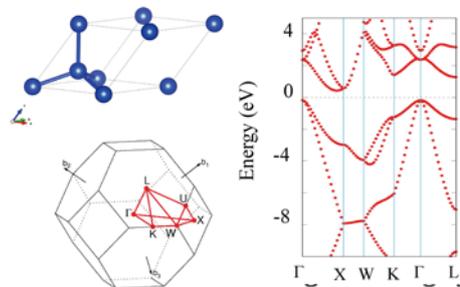
## 周期系

固体周期系の講義で用いたソフトウェアは、VASP、Quantum Espresso、RSDFTの3つです。講義の中では、密度汎関数理論の理論的背景の説明から入り、構造最適化と構造決定、電子バンド構造と結晶中の点欠陥計算、さらには第一原理分子動力学(Car-Parrinello Molecular Dynamics; CPMD)計算まで演習形式で授業を実施しました。Linuxコマンドを使ってのファイル操作とジョブの投入を行いました。固体周期系では以下の4つのテーマについて演習を行います。

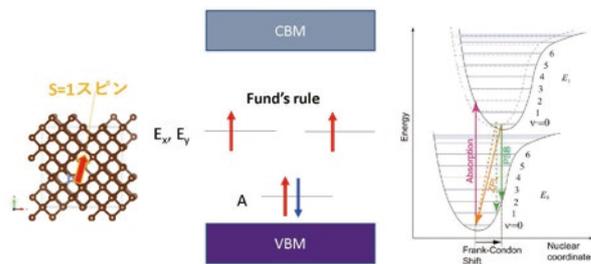
(授業担当:松下 雄一郎)

- (1) シリコン・ダイヤモンド・鉄の構造最適化計算

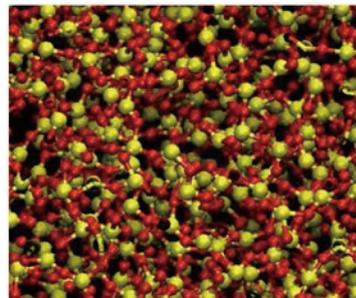
- (2) シリコン・ダイヤモンド・鉄の電子バンド構造計算



- (3) ダイヤモンド中の点欠陥(NVセンタ)の電子状態計算



- (4) 水・ガラス(液体)・Liイオン拡散のCPMD計算



# 物質・情報卓越教育院 第1回最先端研究セミナー開催報告

物質・情報卓越教育院では、2020年8月27日(木)に、オンラインにて「東工大 物質・情報卓越教育院 第1回最先端研究セミナー」を開催しました。

最先端研究セミナーは、第一線の研究者の方をお招きして、情報科学と物質科学の最先端の話題を基本から分かりやすく解説していただくシリーズ企画です。第1回目となる本セミナーでは、高安美佐子教授(東京工業大学 科学技術創成研究院)と森川淳子教授(東京工業大学 物質理工学院)にご講演いただきました。

本セミナーは、情報科学と物質科学の最先端を広く一般の方に知っていただくため、一般公開セミナーとして開催されました。セミナー当日は、企業関係者や学内の学生・教職員、学外の研究者など約300名の方にご参加いただき、盛況のうちに終了しました。



## 第1部 「ビッグデータで見る社会現象」



東京工業大学 科学技術創成研究院  
教授  
高安 美佐子 先生

第1部では、「ビッグデータで見る社会現象」と題し、ビッグデータ解析を通じて、自然現象と同じように社会の現象について科学的に解析した研究事例についてご紹介いただきました。

セミナーの中では、今の21世紀において、インターネットや情報機器等の発明によりデータが精密に取られるようになり(“データの観測手段”が確立したことにより)、社会現象が新しく科学の土台が上がってきたことをご説明いただきました。詳細なビッグデータを解析することにより数理モデルを構築し、予測や制御につなげていくといった、科学の手法を社会や経済の現象に対してもそのまま適用できることを、金融市場、企業の取引ネットワーク、ブログなどのSNSなど、様々な分野における具体的な事例を通して、分かりやすくご紹介いただきました。

世の中の様々な社会現象が想像以上にモデリングされ、理論化されていることや、物理や化学などの法則と類似性があることについて、物質科学を研究する学生や研究者からも驚きの声が多く寄せられました。

ビッグデータ解析を使いこなすことで、社会が直面している様々な問題を解決出来ることを知る事ができ、大変魅力的なセミナーでした。



### 参加者の声

- 想像以上に社会の色々なものがモデリングされ、理論化されていることに驚きました。(大学院生)
- 様々な社会現象が物理法則と高い類似性があり、その関係性が社会現象の予測にも使えることは、今後の世界にきわめて大きなインパクトを与えることは間違いない。(教員)
- 身近な具体例を挙げて紹介いただき、大変分かりやすく興味深かったです。(会社員)

## 第2部 「機械学習による高熱伝導高分子の設計と測定法開発による熱物性検証」



東京工業大学 物質理工学院  
教授  
森川 淳子 先生

第2部では、情報統合型物質・材料開発イニシアティブで、統計数理研究所(ISM)や物質・材料研究機構(NIMS)と共同で取り組んだ研究についてご紹介いただきました。

本セミナーでは、所望の特性を持つ化学構造を設計する機械学習アルゴリズム*i*QSPRと転移学習という解析技術を組み合わせた最新の機械学習の手法を用いることで、新しい高分子を開発する手法について詳しく解説していただきました。

この研究では、新規に分子設計された高熱伝導高分子について、可視化超高速熱分析やマイクロ温度波法の測定法を開発することにより、従来、高温では熱分解が生じるため観測不能とされてきた高温のガラス転移温度、融点を測定することに成功しました。

「マテリアルズインフォマティクスは、材料科学と工学における突破口の鍵になる。アルゴリズムと開発手法の研究はまだこれから。新しい材料の開発は、既存のものでは不可能であるため、新しい機器と測定法の開発が必要となる。」とご説明いただきました。

今後、マテリアルズインフォマティクスの手法を用いることで、従来の常識を覆すような新しい高分子材料が発掘されることが期待され、参加者にとって非常に有益なセミナーでした。



### 参加者の声

- マテリアルズインフォマティクスにおけるデータの少なさを転移学習で補うという方法に大変感銘を受けました。(会社員)
- 私自身もこのような機械学習を身につけないと、将来研究員という立場を失う危機感を感じました。(研究員)
- 熱伝導率予測のマテリアルズインフォマティクス、大変興味深い内容でした。データのオープン化も素晴らしい試みだと思います。(会社員)

## 本セミナーにご参加いただいた皆様へ

この度は、定員を超える多くの方にご参加いただき、誠にありがとうございました。

本セミナーはシリーズ企画であり、来年度以降も定期的で開催いたします。物質と情報の最先端の情報を、第一線でご活躍する著名な先生方にご講演いただきます。今後も、皆様にとって有益で且つ、最新の話題を提供して参りますので、次回以降も是非最先端研究セミナーにご参加ください。

# 2020年度秋期登録学生紹介

## M2



物質理工学院  
応用化学系  
エネルギーコース  
修士課程2年

浅野 翔

## M2

私は、アークプラズマ堆積法を用いたリチウムイオン電池用負極材料となるLi-Siナノ複合体の合成、電気化学特性評価に関する研究を行なっています。電極特性の向上だけでなく、中性子反射率や放射光のその場観察を取り入れて、電極特性向上のメカニズム解明を目指しています。

物質・情報卓越教育院では、分子動力学シミュレーションを取り入れて、Li-Siナノ複合体膜の形成過程を調査したいと考えています。また、ラボローテーションや企業の方との関わりを通して、広い視野を持った研究者を目指します。



工学院  
電気電子系  
電気電子コース  
修士課程2年

梶山 健一

## M2

ダイヤモンドは様々な物性に優れており、高感度磁気センサやパワー半導体など、幅広い分野での応用が期待されています。私は、ダイヤモンド基板の面積化に向けて、3C-SiC/Si(111)基板上へのヘテロエピタキシャル合成の研究に取り組んでいます。

物質・情報卓越教育院でシミュレーション技術を学び、実験にシミュレーションを組み合わせることで、合成メカニズムを明らかにし、ダイヤモンドデバイスの社会実装に繋がりたいと考えています。



物質理工学院  
材料系  
材料コース  
修士課程2年

石濱 圭佑

## M2

環境問題が注目されている現在、過去70年にわたって圧電体応用の先端に立ってきたPZTなどの鉛圧電体材料を代替するような、環境に優しく、優れた特性を持つ非鉛圧電体薄膜の開発を目指して研究を行っています。

情報系のデータ解析技術を用いた網羅的な研究の進め方が、より良い材料開発のドライビングフォースになることを信じ、複合的な専門性を身につけるべく、未知なる学問に邁進していきたいと考えています。



物質理工学院  
材料系  
材料コース  
修士課程2年

本間 千柊

## M2

グラフェンと生体分子を用いたバイオセンサに関する研究を行っています。本年度から物質・情報卓越教育院に所属することになり、シミュレーションやインフォマティクスに関する講義を受けたり、情報系の研究室に訪問して実際の研究に触れてみたり、非常に刺激的で楽しい研究生生活を送っています。

卓越教育院を通して学んだ情報のスキルを活かし、自身の研究を更に洗練されたものにできるよう、精一杯努力します。



物質理工学院  
応用化学系  
応用化学コース  
修士課程2年

横地 浩義

## M2

私は現在、動的共有結合の一つであるビス(ヒンダードアミノ)ジスルフィド結合を利用した動的な八の字型分子の開発及び、新規高分子トポロジー変換の開発を行っています。

物質・情報卓越教育院では、シミュレーション・機械学習に関する実践的なスキルを学び、情報系のスキルを駆使して、自身の研究である高分子トポロジー変換の本質的理解につなげたいと考えています。



工学院  
機械系  
機械コース  
修士課程2年

大友 泰輝

## M2

私は、ECF(電界共役流体:Electro conjugated fluid)マイクロポンプを内蔵した肺機能チップの開発に関する研究を行っています。

これまで登録されている先輩方とは畑違いの人間ではありますが、本プログラムで主催されている基礎科目や、プラクティススクールを通して、機械、物質、情報という三つの分野にわたり、高度な専門性を兼ね備えた人材になりたいと考えています。



物質理工学院  
応用化学系  
応用化学コース  
修士課程2年

真鍋 護

## M2

私は、非平衡開放系である化学反応系の複数のパラメータに、ホワイトノイズを入れた非線形確率微分方程式の数値解析をすることで、原始地球に存在したと思われる単純な代謝系の挙動をシミュレーションしています。

物質・情報卓越教育院では、機械学習を含めた多様な計算スキル・知識を身につけることで、実験的な視点を取り入れつつ、より多くの意義のある研究成果を生み出していきたいと考えています。

## 本教育院を希望する学生の皆様へ

物質・情報卓越教育院では、本学の物質・情報に関する研究・教育力を結集し、さらに産業界、国立研究開発法人及び海外大学の方々のご協力のもと、国際的にも卓越した修博一貫の博士教育を実施しています。

「物質」とは、分子・材料・デバイスに限らず、生命体や建造物など、広く「もの」を含み、全六学院の学生が対象です。本教育院での活動を通し、情報技術を駆使して、または新しい情報技術を生み出して「ものづくり」を進化・深化させ、社会のサービスに繋げ、持続可能な社会に貢献する「複素人材」を目指してください。物質・情報分野の高度な「知のプロフェッショナル」として、新産業や、それを支える新学問を開拓し、社会のリーダーを目指す方は、是非、応募ください。

選抜試験の対象は、本学の修士課程に所属している全ての学院の学生です。毎年2回、6~7月と12月に募集します。

## 卓越したカリキュラムと充実した経済支援

本教育課程では、本学のスーパーコンピュータ Tsubame を用いた演習科目や、企業に滞在してチームで最先端の課題を解決するプラクティススクール、海外の学生とチームを組み未来の技術や社会を提案するワークショップなど、卓越したカリキュラムを用意しています。

また、奨励金等の経済的支援も充実しています。

詳しいカリキュラム・支援・選抜方法は、TAC-MI のホームページをご覧ください。

<https://www.tac-mi.titech.ac.jp/>



## TAC-MI登録学生数 2020年10月時点

博士後期課程 D2	10名	修士課程 M2	24名
D1	19名	M1	8名

# M1



理学院  
化学系  
化学コース  
修士課程1年

## M1

### 猪股 海渡

私は主に、有機遷移金属触媒を新たに設計・合成し、これを利用した不活性なC-H結合を官能基化する有機合成反応の開発を目指し、研究に取り組んでいます。

物質・情報卓越教育院では、有機反応開発の分野で重要な役割を果たしてきた計算化学への理解を深め、より実践的な能力を身につけた、世界の中で活躍できる研究者へと成長していきたいと思っています。



物質理工学院  
材料系  
材料コース  
修士課程1年

## M1

### 木村 茂

私は、高性能熱電変換材料に応用が期待される、環境低負荷な遷移金属窒化物の合成を行っています。結晶内に二次元電子ガスを内包させることで、熱電性能の向上を目指しています。

物質・情報卓越教育院で計算科学の手法を学び、理論的予測を行い、実験結果と比較しながら自身の研究を進展させたいです。また、企業の方々と実践的な課題に取り組むことで、社会に目を向けた広い視野を持つ人材になりたいです。



物質理工学院  
材料系  
材料コース  
修士課程1年

## M1

### Lee Koomok

私は強誘電性と強磁性性を併せ持つBiFeO<sub>3</sub>の機能に注目しています。BiFeO<sub>3</sub>にCoを置換することで室温で弱強磁性を持ち、電場印加による磁化を反転させることが実験的に検証されています。この物質を次世代の低消費電力メモリーとして応用に向けた研究を行っています。

大学院に入学する前に3年間ソフトウェア開発に携わった経験があります。本教育院を通して実験のみならず、シミュレーションやプログラミングを活用した材料開発に興味があります。

Home country and region Korea



物質理工学院  
応用化学系  
応用化学コース  
修士課程1年

## M1

### 片岡 大志

私は、アミン水溶液を用いた二酸化炭素吸収剤に関する研究を行っており、相変態を伴うゲルを利用することで、吸収プロセスの省エネルギー化を目指しています。

物質・情報卓越教育院を通して、量子化学計算による物性予測と機械学習を組み合わせたデータサイエンス手法を身につけ、実験データなしに優れた吸収剤を探索できるような手法を考案したいです。



物質理工学院  
材料系  
材料コース  
修士課程1年

## M1

### 木村 公俊

私は高性能な酸化物熱電変換材料の創製に向けて、ヒドリド置換によるペロブスカイト型酸化物薄膜の低熱伝導率化の研究を行っています。試料合成や構造解析、物性評価といった実験的な側面に加えて、物質・情報卓越教育院で第一原理計算などの計算科学の知識を学び、理論的な側面からも研究を深めていきたいと考えています。また、幅広い視野を持ち、自身の研究と社会を結び付けられる力を身につけたいと思います。



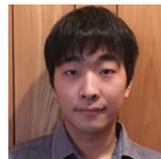
物質理工学院  
応用化学系  
応用化学コース  
修士課程1年

## M1

### 山本 拓実

高分子材料の破壊・劣化を可視化することを目的として、高分子鎖切断時に生じるメカノラジカルを定量評価可能な蛍光分子プローブの開発に取り組んでいます。

物質・情報卓越教育院では、計算化学と自身の専門とする合成化学を組み合わせることで、新規蛍光性分子プローブの設計指針を確立したいと考えています。また、企業の方々と関わる機会も多いということで、社会問題を解決するための俯瞰力も培っていききたいと考えています。



理学院  
物理学系  
物理学コース  
修士課程1年

## M1

### 貝沼 凌

私は磁性材料における超高速現象の観測を目指し、超短パルスレーザーを用いたイメージング測定を行っています。測定データの解析にスパース回帰を取り入れることで、物理的な特徴を抽出する効率が上がったため、解析手法への理解をもっと深めたいと考えています。

物質・情報卓越教育院では計算・情報科学系の研究室で学べる機会が設けられているため、解析手法やシミュレーション技術を身につけ、実験に取り入れていきたいと考えています。



物質理工学院  
応用化学系  
応用化学コース  
修士課程1年

## M1

### 桜井 勇太

私は現在、酵素反応を利用したセルロースの人工合成と、その集合構造の制御・マテリアル応用に関する研究を行っています。

物質・情報卓越教育院では、データサイエンスや計算科学といった情報科学を物質科学へ応用するスキルを身につけ、自身の研究テーマをより充実したものにしていきたいです。本教育院での学びを通じて、情報技術を駆使したものづくりに広く精通していきたいと思っています。

## 物質・情報卓越教育院について もっと詳しく知りたい方は パンフレットをご覧ください。

[日本語]

[https://www.tac-mi.titech.ac.jp/pdf/TAC-MI\\_pamphlet\\_jp.pdf](https://www.tac-mi.titech.ac.jp/pdf/TAC-MI_pamphlet_jp.pdf)



[English]

[https://www.tac-mi.titech.ac.jp/pdf/TAC-MI\\_pamphlet\\_en.pdf](https://www.tac-mi.titech.ac.jp/pdf/TAC-MI_pamphlet_en.pdf)



# 企業アドバイザーからのメッセージ

## AGC株式会社



先端基盤研究所  
共通基盤技術部長

志堂寺 栄治 様



AGC横浜テクニカルセンター新研究棟（2020年竣工）のエントランス

1907年創業の旭硝子は、2019年に「AGC」へ社名変更しました。グローバルカンパニーとしてブランドを統一するとともに、ガラスだけではない総合素材メーカーであることを明確にしています。創業の精神「易きになじまず難きにつく」を受け継ぎ、「社会の役に立つものをつくること」が活動の原点です。長年培ってきた技術を結集し、「ガラス」「電子」「化学品」「セラミックス」の事業領域で、世界トップレベルの多様な素材技術、幅広いお客様基盤、高度な生産技術を強みにしています。これらコア事業を深掘りしながら、「モビリティ」「エレクトロニクス」「ライフサイエンス」を戦略事業とし、高付加価値ビジネスの拡大による高収益事業の確立を目指す、「両利きの経営」を実践しています。

東工大には2019年に「AGCマテリアル協働研究拠点」を設置し、組織対組織の総合的な連携を開始しました。卓越教育院は、このマテリアルと、今後ますます価値創造の中心となる「情報」の接点で複素人材を育成するという、時宜を得た取り組みです。AGCはあらゆる業務でDXを積極推進し、データサイエンティスト育成プログラムも構築していますが、マテリアルの深い理解とともにこの変化を加速することのできる人材は、世界の課題解決の立役者としての活躍が期待されます。

物質・情報卓越教育院の学生さんは、本プログラムを最大限に活用し、知識を学ぶだけでなく、高い視野で将来を見据えて、社会を牽引する研究者に育って欲しいと思います。そのために、企業が参画するイベントに積極的に参加し、色々な意見を聞き、刺激を受ける事も役に立つと思います。

## 日本ゼオン株式会社



総合開発センター基盤技術研究所  
主席研究員

小野 裕己 様



1950年の創業から間もなく70年、日本ゼオンは幾多の変遷を経て、大きな変貌を遂げてきました。企業理念は「大地の永遠と人類の繁栄に貢献するゼオン」。ギリシャ語の大地（ゼオ）と永遠（エオン）の造語からなる社名「ゼオン」の持つ大きな意味を私たちは企業理念に織り込みました。

事業に目を向けると、C4留分から合成ゴムの原料となるブタジエンを抽出するプロセスであるGPB法は、技術輸出のリーダーとして世界を席巻、技術のゼオンの橋頭堡を築きました。続いてイソプレン抽出法のGPI法は、C5留分の総合有効利用として世界でも唯一の総合展開を成し、そこから産まれる製品は高機能樹脂、光学フィルム、RIM配合液、熱可塑性エラストマー、合成香料と、枚挙にいとまがありません。この二つのプロセスを基軸に、エラストマー素材事業、高機能材料事業の両輪で事業展開を推し進め、化学工業界での特異な位置を築くに至りました。一方、世界各国での事業展開に積極的にチャレンジを続け、国内外のグループ企業数は40社を超え、全従業員数は3,000名を超えるに至りました。

また、新しい事業展開としては、夢の素材といわれるカーボンナノチューブ（CNT）を産業技術総合研究所（産総研）との研究により、世界初の量産化に成功。山口県徳山工場に製造プラントを竣工し、次の大型素材として大きく期待されております。ゼオンの歴史はイノベーションの歴史であり、これからも次の世代への持続的な発展を視野に、グループ全員でチャレンジを続けていきます。ゼオンに是非、ご期待ください。

弊社においても注目しているMIですが、実験・計算によるデータ創出に始まり、モデリング、解析、次の実験計画へと多くの要素があり、その実践には多様な複素人材が有機的に連携する必要があります。

学生のみなさんには産業界での複素人材例を見ていただき、ご自身のキャリアデザインのヒントにいただければと思います。

## 昭和電工マテリアルズ株式会社



イノベーション推進本部  
先端技術研究開発センタ  
高度解析研究部  
部長

田中 直敬 様



当社は1962年に日立製作所の化学部門が独立して創業し、日立創業時のモーターに関わるワニス（絶縁材料）、カーボンブラシ（導電材料）、そして積層板（樹脂材料）を源流製品として、エレクトロニクス向け高機能性材料を中心に、モビリティ、エネルギー、ライフサイエンス分野へと事業分野を発展させてきました。今年度は、日立グループを離れて、昭和電工（株）と共に「世界トップレベルの機能性化学メーカーを目指す」という新たなビジョンのもと、両社統合へ向けた変革の最中にあります。

機能性材料分野は未だ日本に残されている強みの一つと言われていますが、昨今のデジタル化進展の中で、ノウハウの塊としての強みが永続的に維持されるものではなく、既存の強みである材料技術に積極的にデジタル技術を融合して、従来の業務プロセスを変革しつつ、新たなビジネスモデルを模索していくことが今後の成長には必須であると考えています。そこで、当社でも一般に「MI（マテリアルズインフォマティクス）」と呼ばれるデータ駆動型開発の全社普及を目指した取組みを推進しています。MIの現場定着には、AIやシミュレーションといった基盤技術の高度化だけでなく、現場でデータ活用できる人の育成が鍵であり、化学×統計スキルを持つ二刀流人材育成にも力を入れています。

東京工業大学 物質・情報卓越教育院で掲げるコンセプトは、当社の課題感にダイレクトに繋がるものであり、AI解析の専門家が多数いるだけでは機能せず、材料の本質を理解し、その課題解決や目標達成に如何にデジタル技術を活用できるかという発想が大変重要だと思います。当たり前を疑問視し、アウトサイダー的視点で日頃の研究開発に取り組んでいただくことを期待しています。



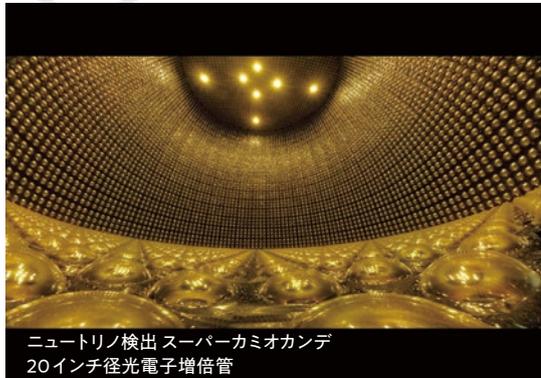
# 企業アドバイザーからのメッセージ

## 浜松ホトニクス株式会社



電子管事業部 電子管技術部  
設計第1グループ  
グループ長

下井 英樹 様



ニュートリノ検出 スーパーカミオカンデ  
20インチ径光電子増倍管

浜松ホトニクスは「人類未知未踏に挑む」を掲げて「受光」と「発光」の両デバイスを扱う企業です。「受光」では、光電子増倍管やフォトダイオードをはじめとする幅広い光センサを、「発光」では、レーザ、LED、計測用ランプなど各種の光源を開発・製造しています。また、それらデバイスは目に見える光だけでなく、極微弱光と呼ばれる非常に弱い光や、紫外線、赤外線、X線など目には見えない波長領域の光にも対応しています。

さらに、光センサや光源といったデバイスだけでなく、デバイスに専用回路を付加したモジュールやユニット、さらには、それらを組み込んだ光計測システム、イメージングシステム、画像解析システムなど各種のシステムを開発・製造しています。これらは、スマートフォンなど人々の暮らしに身近な製品から最先端の学術研究を支える計測装置や各種の医療機器や産業機器まで幅広い分野で活躍しています。

弊社が開発する、「受光」「発光」デバイスは、高度な薄膜技術・材料技術が必要です。これまでのノウハウに加えて、ベイズ最適化など人工知能(AI)を用いて、もっと効率良く、かつ、そこから得られる未知の知見を取り入れることで、性能の向上、新製品開発に活かしたいと考えています。その人材の育成と、同じ方向を目指す意欲のある人材との交流を楽しみにしています。

本プログラムは、学生が日々研究している段階から産学の人材交流を持てる、これまでにない画期的な仕組みと考えています。学ばれる学生の皆さんは、研究成果を上げるのはもちろん、その研究に向かわれる姿勢を恩師より吸収し、是非とも、既知の知識だけでなく、人類未知未踏の領域を開拓する知恵と気概を身につけていただくことを期待しています。

## ENEOS株式会社



機能材カンパニー  
機能材研究開発部  
副部長

戸井田 康宏 様

本年6月25日をもって、JXTGエネルギー株式会社は「ENEOS株式会社」に社名を変更し、新たな第一歩を踏み出しました。当社は、エネルギー業界のリーディングカンパニーとして、石油、電力、ガス、化学品など多岐にわたる事業を通じて、エネルギーの安定供給という社会的使命を果たしています。また、変化し続ける社会の課題やニーズに向き合い、私たちは、「エネルギー・資源・素材」における創造と革新を通じて、社会の発展と活力ある未来づくりに貢献します。

ENEOSの研究開発部門では、デジタル、低炭素、機能材、潤滑油、リサイクル、ケミカル、石油精製などの研究開発領域において、日々「挑戦」しています。変化する社会に対応する、あるいは変化を先取りして対応するためには、私たち自身が変化することが重要と考えており、これがすなわち「挑戦」です。

機能材カンパニーでは、安全・環境・健康に貢献する高機能材料を開発しています。特に、自動運転やEV化など、安全・環境が求められる次世代自動車の領域や、健康食品用素材などのニュートリション領域に注力しています。主な研究開発分野は、モノマー開発、光学部品開発、高分子・加工品開発、健康食品用素材開発と、それらを商品として実現するための生産プロセス開発です。これらの高機能素材の開発を通じて、新たな価値を創り出すことに「挑戦」しています。

本プログラムに参加することも、当社の「挑戦」の一つです。本プログラムにおいて、諸先生方や学生のみなさん、企業の皆様との交流を通じ、新たな価値を共創していくことができれば幸いです。

学生のみなさんには、複眼的・俯瞰的視点から発想することで、将来を予想することが難しい社会において、新たな未来を創造することに「挑戦」する人材になっていただくことを期待します。



## 会員企業の方々と共に創る 産学協創教育

物質・情報卓越教育院では社会サービスの実装を見据え、地球規模の視野を持った、産業界が期待する卓越博士育成のために、会員企業からのアドバイスを教育、イベント内容に反映させています。また、学生の研究成果やグループワークの発表、面談の機会に、会員企業の皆様から学生に、プレゼンテーションの構成や内容について、企業の視点からのアドバイスを直接頂くことにより、社会軸の育成に役立てています。



企業アドバイザー連絡会での意見交換



ビジネスモデル討論での助言



国際フォーラムでの学生の研究発表



企業メンターと学生の面談

# 物質・情報卓越教育院 2020年度 博士後期課程学生による成果発表会開催報告

東京工業大学物質・情報卓越教育院 (TAC-MI) では6月30日に、博士後期課程学生の成果発表会をオンラインで開催しました。2019年4月に大学院教育プログラムとして本格的に始動してから2年目となる今回の成果発表会には、本プログラムの連携協力機関である企業関係者や本教育院のプログラム担当者、協力教員、学生など、学内外から約120名の参加がありました。

当日の プログラム	10:00~12:40 <第1部> 博士後期課程1年の学生による成果発表会
	13:10~13:50 <第2部> 博士後期課程2年の学生による自主設定論文進捗発表会

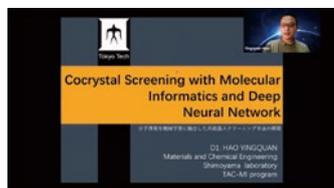
## 第1部 博士後期課程1年の学生による成果発表会

プログラム前半の第1部は、物質・情報卓越教育院の山口猛央教育院長の開会の挨拶より始まり、松下雄一郎特任准教授の進行により、博士後期課程1年の登録学生16名が、これまでの研究成果と、今後の物質と情報を融合させた研究への発展等について発表を行いました。

説明6分、質疑応答2分の持ち時間に対し、説明スライドの枚数が多い学生も見受けられましたが、それぞれの研究の状況と得られた成果を参加者にアピールすることができました。特に、研究分野の異なる方々に、自身の研究をどのように伝えるかを考え直す良い機会となりました。教育院では、学生が修士課程から博士後期課程へと進学し、必要とされる研究能力の進化を会員企業の皆様と共に支援していきます。



松下特任准教授による司会進行



第1部：博士後期課程1年の学生による  
成果発表



第1部：博士後期課程1年の学生への  
質疑応答

## 第2部 博士後期課程2年の学生による自主設定論文進捗発表会

プログラム後半の第2部では、午前引き続き、松下雄一郎特任准教授の進行により、博士後期課程2年の登録学生4名が自主設定論文に関する進捗の発表を行いました。

自主設定論文は、TAC-MIの修了要件の一つとなるもので、自らの博士論文研究とは異なる課題を自主的に設定して研究を行い、博士後期課程2年の6月の成果発表会若しくは12月の国際フォーラムにて、研究の進捗状況を発表した上で、博士後期課程修了時までに実施した研究の結果を報告書にまとめます。自身の専門と異なる研究室に2週間程度滞在して研究を行う「物質情報異分野研究スキル(ラボ・ローテーション)」や、海外インターンシップなどのTAC-MIのプログラムを通して得た学修成果を活用します。専門分野の枠を超え、物質と情報を用いた複素的な新しい考え方を持つ独創的な研究を自立的に行う能力を身につけることが目的です。

今回の博士後期課程2年の登録学生4名の発表では、課題設定の背景や目的が導入部分で説明され、参加者が理解しやすいように工夫がなされていました。2019年6月の成果発表会や12月の国際フォーラムでのプレゼンテーションの経験が生かされ、学生たちの成長を感じることができました。



第2部：博士後期課程2年の学生による  
論文進捗発表

## 連携する企業関係者からのアドバイス

発表会後には、ご参加をいただいた教員や企業関係者に、発表学生へのご意見、ご感想、アドバイスなどをフィードバックシートにご記入していただきました。多くのご回答より、特に企業関係者から寄せられたご感想と期待の声を紹介いたします。

### 参加者の感想

- 「物質×情報」のプレゼンテーションは、萌芽期から実用期に入った技術の力強さをまざまざと実感でき、意義深いものでした。先生方が拓かれ、今日の学生たちが展開するこの技術は、ぜひ今後の日本の産業を支える強い武器になってほしいと思います。
- 各々のテーマの「物質×情報」の組み合わせについて、意識して情報科学を組み合わせ導入した研究も見られたように思います。最適な手法を選択する上での、学生の研究手法の選択肢を広げることに繋がり、素晴らしい事と思います。
- 高いレベルでのプレゼンテーションだったと思います。これまで培った専門性を軸に物質・情報卓越教育院のプログラムの様々な環境下の元、異なる視点やアドバイスから新たな価値創造を起こす人財を生み出している期待を持ちました。

### 学生へのアドバイス

- 研究分野が多岐にわたるため、イントロダクション、研究の新規性をより強調すると、企業研究者には理解しやすいと思います。
- 取り組まれている研究によって、どのようなよいことがあるのか、社会にどのように貢献できるのか、といった視点の「研究の価値、目的」を冒頭で明確に示してもらえるととってもよかったです。

今年度は、新型コロナウイルスの感染予防のためオンライン開催となりましたが、多くの企業関係者、教員、学生の皆様のご協力により、有意義な発表会を開催することができました。ご参加いただいた皆様へ心より感謝申し上げます。

# 物質・情報卓越教育院 2020年度 修士課程学生による 成果発表会および産学交流イベント開催報告

東京工業大学物質・情報卓越教育院(TAC-MI)は9月28日に、修士課程学生の成果発表会及び産学交流イベントをオンラインで開催しました。2020年6月に開催した博士後期課程学生による成果発表会に続く、今年度2回目の成果発表会となります。

第1部の成果発表会では、修士課程の学生20名がポスター発表を行い、本教育院の連携協力機関である企業関係者や本教育院のプログラム担当者、協力教員、学生など、学内外から約100名が参加しました。

午後の第2部では、企業メンターと学生との面談を実施しました。続く第3部では、産学交流イベントとして、本教育院の会員企業のうち22社が本教育院の登録学生に向けて、キャリア教育のための企業紹介を行いました。

当日の プログラム	10:00~12:45	<第1部>	修士課程の学生による成果発表会 ポスタープレゼンテーション
	13:30~15:00	<第2部>	企業メンターと学生との面談
	15:30~18:30	<第3部>	産学交流イベント 会員企業によるキャリア教育のための企業紹介 全体交流会

## 修士課程の学生による成果発表会 ~ポスターセッション~

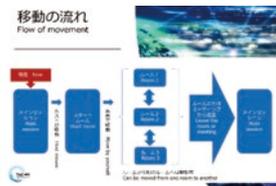
第1部の開会式では、物質・情報卓越教育院のプログラム責任者である須佐匡裕物質理工学院長及び山口猛央教育院長が開会の挨拶を行いました。続いて、川内進特任教授よりポスターセッションの進め方について説明があった後、修士課程の登録学生20名が自身の研究についてのポスタープレゼンテーションを行いました。

今回のポスターセッションはZoomのブレイクアウトセッションを使って実施しました。各学生の発表の場として10個のブレイクアウトルームを作り、前半、後半10名ずつが各ブレイクアウトルームに分かれ、一人あたり20分3回のプレゼンテーションを行いました。

学生の発表は、最初に研究の背景を説明し、専門以外の聴衆にも研究の意義が理解しやすいよう配慮がなされたものが多く、研究内容の説明もしっかりしたものでした。聴衆が見やすいよう説明箇所を拡大する等の工夫がなされている学生と、投影画面をそのまま説明する学生がいました。しかし、うまく操作すれば発表全体も把握できるので、オンラインでのポスター発表のポテンシャルを感じました。また、対面でのポスター発表では、聴衆が群がるとよく見えない、聞こえない等、不便な場合もあります。オンラインではじっくり話を聞くことができ、メリットを感じた方も多かったようです。



成果発表会で発表した修士課程の登録学生20名



ポスターセッションの進め方

## 産学交流イベント ~会員企業によるキャリア教育のための企業紹介~

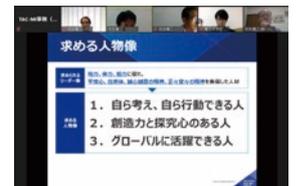
プログラム第3部となる産学交流イベントでは、本教育院の会員企業24社のうち22社が本教育院の登録学生に向けて、企業紹介を行いました。第1部と同様に、Zoomのブレイクアウトセッションを使用し、前半11社、後半11社のルームを設けて実施しました。

会員企業からは「博士後期課程の学生を採用する際のスタンスや、採用後の業務について説明する機会が得られ、学生からも多くの質問を受け、大変有意義だった。」とのご意見をいただきました。また学生からも、「いろいろな企業の話を受けて、参考になった。」との感想がありました。

企業交流イベントでは、各企業からの事業紹介に加え、学生が企業理念や求める人材、企業における博士人材の活躍の場について知ることのできる良い機会となりました。今後も物質・情報卓越教育では、企業との交流イベントを通して、社会サービスの実装を見据え、地球規模の視野を持った、産業界が期待する卓越した人材を育成していきます。



各ルームでの企業紹介の様子



## 会員企業一覧(2020年11月1日現在)

- AGC株式会社 / 旭化成株式会社 / ENEOS株式会社 /  
 浜松ホトニクス株式会社 / JFEスチール株式会社 / JX金属株式会社 /  
 株式会社カネカ / LG Japan Lab 株式会社 / マツダ株式会社 /  
 三菱ケミカル株式会社 / 三菱ガス化学株式会社 / 長瀬産業株式会社 /  
 日産自動車株式会社 / 日本ゼオン株式会社 / パナソニック株式会社 /  
 昭和電工株式会社 / 昭和電工マテリアルズ株式会社 /  
 住友電気工業株式会社 / 住友化学株式会社 / TDK株式会社 /  
 株式会社 東芝 / 東ソー株式会社 /  
 東洋製罐グループホールディングス株式会社 / トヨタ自動車株式会社

(ローマ字アルファベット順) (引き続き、参加会員企業を募集しています。)

## 会員企業制度

物質・情報卓越教育院では「会員企業制度」というユニークな制度を導入しています。会員企業からの意見を活動に反映させていただくと共に、メンター役をお願いすることにより、本教育院の登録学生の社会的視野を広げ、複素人材としての成長に役立てます。一方、会員企業にとっては、研究者の方々が本教育院での講義、演習を受講できる機会ができ、物質・情報の分野での人材育成を進めることができます。

