

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

News Letter Vol.8

Nov. 2021

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

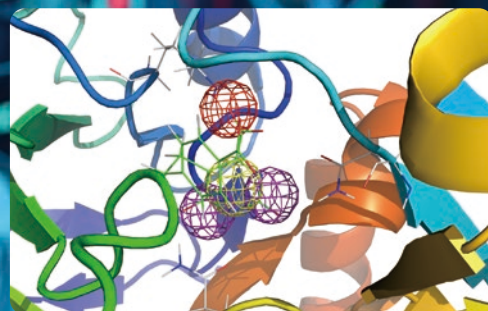
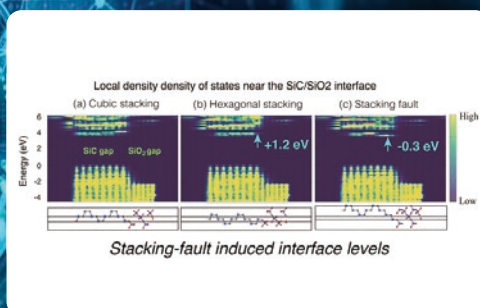
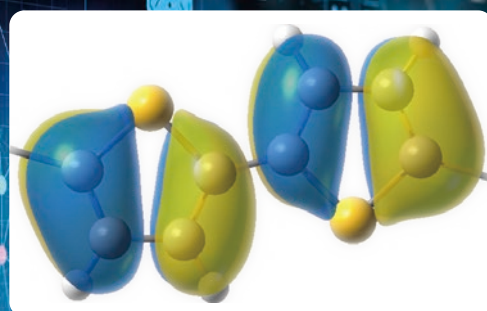
TAC-MIセミナー「物質科学×情報科学」
入門開催報告：P.2, P.3

2021年度秋期登録学生紹介：P.4

2021年度成果発表会
開催報告：P.5

企業アドバイザーからの
メッセージ：P.6, P.7

第2回 最先端研究セミナー
開催報告：P.8





TAC-MIセミナー「物質科学×情報科学」入門開催報告

物質・情報卓越教育院(TAC-MI)では、2021年6月9日(水)、6月16日(水)、6月23日(水)に、本学の学士課程学生向けに、TAC-MIセミナー「物質科学×情報科学」入門を、オンラインで開催しました。本セミナーでは、TAC-MIの専任教員が「マテリアルズシミュレーション」と「マテリアルズインフォマティクス」について、実際に進められている研究を例にとり、基本から分かりやすく解説しました。最終日には、セミナーに参加した学士課程学生が、TAC-MIの登録学生に研究生活などについて質問する機会を設けた交流会を開催しました。本セミナーは、学士課程の学生にも物質科学と情報科学を融合した研究手法について理解を深めてもらうことを目的として、今年度初めて開催しました。初の試みとなる本セミナーには、3日間で延べ約170名の学生が参加しました。

第1回 マテリアルズシミュレーションって何?～有機・高分子材料編～ 2021年6月9日(水)16:00～17:30

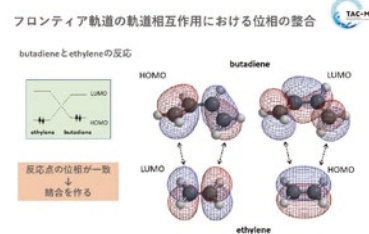


講師:川内 進
物質・情報卓越教育院 特任教授

本セミナーの前半では、ノーベル化学賞受賞者である福井謙一先生と白川英樹先生の受賞対象の研究が、いずれも偶然と必然が織りなすものであったことを紹介しました。そして、受賞対象となったフロンティア軌道理論とポリアセチレンを取り上げて、有機・高分子材料のマテリアルズシミュレーションという視点から簡単に解説を行いました。

後半では、学士課程学生が本学の教育用電子計算機システムで自由に使えるマテリアルズシミュレーション関連ソフトとして、分子構造描画ソフト「ChemDraw」、量子化学計算ソフト「Spartan」および「GaussView/Gaussian」を紹介しました。残念ながら、今回のセミナーはオンライン開催だったため、これらのソフトを使った実習は行えませんでした。代わりに、以前我々の研究室で作成したSpartan実習マニュアルをセミナー参加者に公開しました。また、

webで無料利用できるシステムとして、分子構造描画システム「ChemDraw JS Sample Page」、半経験的量子化学計算システム「MolCalc」、量子化学計算システム「WebMO」を紹介しました。セミナーではMolCalcで量子化学計算の実習を行いました。限られた時間ではありましたが、マテリアルズシミュレーションの感触がつかめたのではないかと思います。



ポリアセチレンのフロンティア軌道

ポリエン (n=6)

エネルギー ユニット数 n	E_{HOMO}/eV	E_{LUMO}/eV	E_{HOMO}/eV	E_{LUMO}/eV	$\Delta E_{HOMO}/\text{eV}$
1	217	-9.48	2.63	12.11	
2	257	-8.30	1.38	9.68	
3	290	-7.66	0.69	8.35	
4	318	-7.26	0.26	7.52	
5	344	-6.99	-0.04	6.95	
6	368	-6.80	-0.24	6.56	
7	386	-6.65	-0.40	6.25	

吸収度大深見 (λ_{max}) は実験値 (J. Polym. Sci. Macromol. Light Absorption of Organic Colorants, Springer-Verlag (1980)
7.71 eV (200 nm) 程度と推定 (計算値は 7.6 eV 程度)





第2回 マテリアルズシミュレーションって何?～無機固体材料編～ 2021年6月16日(水)16:00～17:30



講師:松下 雄一郎
物質・情報卓越教育院 特任准教授

学生課程学生向けに材料シミュレーションの重要性と将来展望に関して紹介を行いました。SDGs達成のために、新材料の開発は欠かせないものとなっています。そのような背景の中、近年新材料開発において大きな期待が寄せられているのが材料シミュレーションの活用になっています。材料シミュレーションを有効活用することにより、効率的に候補材料をスクリーニングすることができ、デバイス開発速度を上げることができることを説明しました。さらには、現在の最先端材料シミュレーションは、計算機ハード、計算機科学、材料科学、物理学、化学、数学の知識とプログラミング技術を総動員した総合格闘技状態になりつつあることを説明しました。CPUに加えて、GPUやFPGA、ASIC、量子コンピュータと様々なハードウェアが出現し、それらを状況に応じて適切に使いこなす必要も出てきています。これから社会に出る学生には、これまでに以上に、「計算機」を自由自在に使いこなす力が必須な時代になり

つつあることを説明しました。材料開発を行うにも、材料科学だけを知っていれば良い時代ではなくなりつつあります。

学生の皆さんには、これ
を苦しい状況と捉えずに、
是非興味の枠を計算機や
シミュレーションにも広げ
て勉強・研究活動を楽しん
で進めて行ってもらいた
いと考えています。計算機
を使いこなせれば、若者の
可能性は飛躍的に向上する
ことを強調しました。加えて、
学部時代において、仲間
との「出会い」も大事にし、
社会問題にも研究活動に
もビジネスにも様々なこと
に興味を持って新しいこと
に飛び込み、チャレンジで
きる人材になって欲しいと
話をしました。TAC-MIは
学生の皆さんに最高の教育
機会の提供を行っている場
の1つであることを紹介し
ました。

図体無機物質ってなんなの？

無機元素から構成される物質群

製品（周期表連動型）、アモルファス物質

SIGs（持続可能な開発目標）
（国連の2030年までの未来の目標）

SUSTAINABLE DEVELOPMENT GOALS

電池、磁石、電子デバイス、量子デバイス材料、超伝導物質、半導体人工光合成材料、（コンピュータだけは無機材料）。

未来実現の鍵は新材料開発

Googleと共同などの重要度の高い研究分野に参入し、競争が激化！





講師:安尾 信明
物質・情報卓越教育院 特任講師

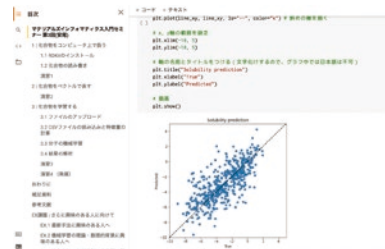
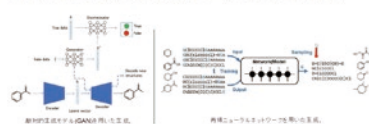
「物質科学×情報科学」入門第三回では、「マテリアルズインフォマティクスって何? ~AIで考える材料開発~」と題して、AI、特に機械学習技術を用いて材料開発を行う手法について解説しました。

本セミナーは、講義→演習→講義の3パートに分れており、最初の講義パートでは機械学習とはどのような技術で何ができるのか、深層学習とはどのような技術かといったAI分野について簡単に解説したのち、有機低分子を題材としてどのように分子をコンピュータが扱える形式にするのか、そして、分子の機械学習を利用した先端的研究例を紹介しました。演習パートでは、Google colab上でのpythonを用いて分子から特徴量を計算し、機械学習を行うコードを用意しました。このコードはブラウザから実行することができ、実際に

各学生に有機低分子の水溶性を予測してもらいました。プログラムを書いたことのない学生でも演習が行えるよう、pythonの最低限の文法も解説しました。最後の講義パートでは、総括として今後のAIを用いた材料開発の展望に関する私見を述べました。入門セミナーということで簡単な内容しか話していませんでしたが、さらに興味のある学生に向けて、演習資料にはより深く学習するための課題(最大で大学院レベル)も記載しました。

化合物の生成

近年、生成モデルを用いて化合物(を素文字列)を生成する研究が進ん、画像生成や文章生成に用いられていたニューラルネットワークモデルを利用。



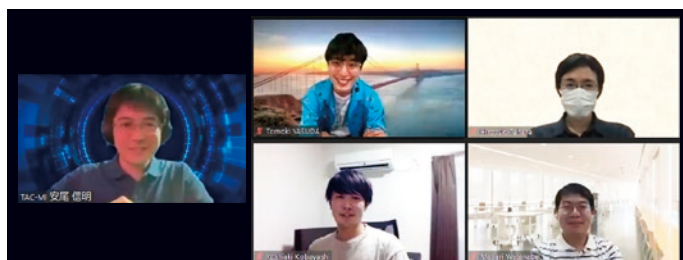
参加学生の声

- ・理論の発展により、未知物質の推定に計算理論の応用が活用できるのはすごかったです。
- ・シミュレーションをどのように行っているのかを、自分でも実際にやってみることで、なんとなく理解することができて良かったです。
- ・無機材料の分析におけるマテリアルズシミュレーションについて、今までより深く知ることができて良かったです。
- ・量子コンピュータの仕組みや今の科学的手法を知ることができ、興味深かったです。
- ・機械学習がどのように物質科学に応用されているか知ることができて良かったです。
- ・直接データを用いて計算する体験ができて楽しかったです。

交流会 TAC-MI博士後期課程学生との交流会~研究生活について聞いてみよう~ 2021年6月23日(水) 17:45~19:00

最終日第3回セミナーの後に、TAC-MI学生との交流会をオンラインで実施しました。

交流会には、TAC-MI登録学生的小林吉彰さん、田原寛之さん、保田知輝さん、渡邊正理さん(全員博士後期課程3年生)がパネリストとして登壇しました。交流会では、物質・情報卓越教育院の安尾信明特任講師がファシリテーター役を務め、博士後期課程進学のかきかけや研究生活、今後のキャリアプランなど、参加者から事前に受け付けた質問も含め、博士後期課程の学生たちから生の声を聞くことができました。



パネリストの博士後期3年生4名とファシリテーターの安尾先生

博士後期課程学生に質問

Q1. 博士後期課程への進学(博士進学)のかきかけは?

学生: 自分の研究テーマをやり遂げたいという思いがありました。修士課程の時に学会で賞をいただき、認められて、研究が楽しいと思えるようになりました。

学生: 研究テーマを解き明かしたい。研究がとても好きになりました。研究テーマについては、いくつかの研究テーマから自分のやりたい研究を提案して取り組むことになりました。

Q2. いつ頃博士進学を決めましたか?

学生: 研究室の先輩がみんな博士に進学しており、進学率が高かったこともあり、就活前の修士課程1年の終わりに決まっています。

学生: 修士課程4年の終わるころには、指導教員の先生に進学について相談しました。修士課程1年の春には指導教員の先生に「博士後期課程に進学するか」と伝えていました。修士課程1年の夏にインターンに参加しましたが、就活はせずに博士進学を決めました。

Q3. 博士進学と就職で迷った人は、何が進学の決め手になりましたか?

学生: 化学メーカーは修士課程卒の学生が多いが、これからは博士取得者をとると聞きました。国際的に活躍するには博士の学位が必要になります。

Q4. 研究室選びの決め手は?

学生: コアタイムが少なく、自分の好きなようにやれる研究室であること、また、研究室の先生との相性も大切です。研究室は事前に先生と面談してから決めました。研究室選びはうまくいったと思います。博士でDC1、DC2(日本学術振興会特別研究員)に採択されることも重要です。成果が早く出せそうな研究室がDC採択には有利だと思いました。

Q5. 学士課程のうちにやっていた良かったことは?

学生: サークルでのものづくりの経験が役に立ちました。学内外の自主ゼミやインターンに参加して、専門分野の違う人と出会えたことも良かったです。投資の勉強をしておけば良かったと思います。金融リテラシーの勉強は必要。工学系の人は投資について講義で学ぶ機会はありませんが、どの分野がこれから伸びるか、世界がどうしているかを求めているか、どういふ人が研究にお金をだしてくれるか、知っておくことだと思います。

学生: 化学系でも、物理や数学も勉強しておいたほうが良いと思います。学士課程3年までは部活動に動んでいたが、もっと勉強しておけば良かったと思います。

Q6. 最後に学士課程の学生に向けてメッセージをお願いします。

学生: 全力で遊んで、全力で勉強してください。

学生: TAC-MIに入るとお金の心配をしなくてよくなります。複数の手段(経済支援)を用意しておくことだと思います。

2021年度秋期登録学生紹介

M2



情報理工学院
情報工学系
知能情報コース
修士課程2年

安納 爽響

私は現在、GPS位置履歴などを用いた都市動態のモデリング・都市群集混雑予測の研究をしています。物質・情報卓越教育院では、1) マテリアルサイエンスの知識を身に付ける、2) 身に付けたマテリアルサイエンス、特に分子動力学・流体力学の知識などを、都市における人流・群集動態のモデリングの研究に応用する、3) 物質と情報の融合で論文を書く、以上を頑張りたいと考えています。

M2



生命理工学院
生命理工学系
ライフエンジニアリングコース
修士課程2年

西村 開

私は、ホウ素を利用したがん治療法であるBNCTをテーマに日々研究を進めています。血清タンパク質アルブミンをキャリアに用いて、患部へと薬剤を送達させる戦略を志向しているので、アルブミンと相性の良い低分子ホウ素化合物をいかに探索していくかが今後の課題です。

物質・情報卓越教育院では、分子間相互作用に関するシミュレーションツールを習得し、将来的に、新たな低分子ホウ素化合物の開発へと繋げていきたいと考えています。

M2



物質理工学院
応用化学系
応用化学コース
修士課程2年

Aparna Chitra Sudheer

In the view of producing more viable and efficient energy resources, designing cost effective, more durable and enhanced active catalysts are highly relevant in the current scenario.

My research is based on developing core-shell Pt-based catalysts with high oxygen-reduction (ORR) performances for polymer electrolyte fuel cells.

I believe that TAC-MI program will give me the opportunity to widen my research perspectives by gaining new knowledge of informatics which I will employ in my specialization. Utilizing the wide range of qualities and experience that I will gain through this program, I look forward to making meaningful contributions to the advancement of Fuel cell vehicles and society as a whole in developing clean energy devices and thereby in the development of a sustainable society in the future.

Home country India

M2



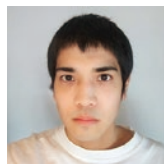
物質理工学院
応用化学系
応用化学コース
修士課程2年

飯塚 忠寿

クラスター触媒は、ナノ粒子やバルクとは異なり、原子数によって触媒活性が異なる構成原子数依存性や、原子が流動的に動く原子流動性が報告されています。私の研究では、クラスターの触媒活性と原子流動性の関係性について調査しています。

物質・情報卓越教育院では、計算化学や機械学習を修め、クラスター化学の新しい領域を切り開きたいと考えています。

M2



理学院
化学系
化学コース
修士課程2年

細川 直輝

私の研究内容は、光増感錯体の一電子還元種の生成過程の解明です。様々な要因を系統的に変化させることで、効率的に一電子還元種が生成する条件を決定することを目指しています。しかし、実験的事実のみですべてを解明することはできず、憶測でしか議論ができない部分が生じてしまいます。

そこで、物質・情報卓越教育院では、計算科学を学び、実験的事実だけでは説明できない部分の解明に挑戦していきたいです。

M2



物質理工学院
材料系
材料コース
修士課程2年

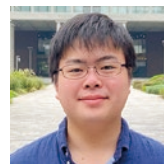
高橋 希

私は、鉄鋼材料で広く利用されるマルテンサイト変態についての研究を行っています。マルテンサイト変態は、原子が集団、かつ、せん断的に移動する現象であり、変態前と変態後の位置の情報を幾何学的に解析することで、マルテンサイト変態の理解をより深化させることが私の研究目標です。

物質・情報卓越教育院では、高度な材料シミュレーション法を習得し、上記の幾何学的解析と融合することで、独創的な研究を目指します。

M2

M1



物質理工学院
材料系
材料コース
修士課程1年

小池 剛大

ナノテクノロジーの進展に伴い、熱膨張が材料応用の問題となっています。私は、熱膨張を抑制するための、温めると縮む“負熱膨張”を有害な鉛を用いずに実現する材料の研究をしています。

物質・情報卓越教育院で情報・計算科学の知識を学び、実験的手法と組み合わせることで、より優れた特性を持つ材料の開発に繋げたいと考えています。

M1



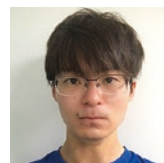
理学院
化学系
化学コース
修士課程1年

成田 直生

カテキンやアントシアニンに代表されるポリフェノールは、天然資源が豊富で、様々な生理作用があるため、医薬リードとしての可能性を秘めています。私は、これらポリフェノール類の天然物の全合成研究に携わっており、現在は、フローリアクターを用いたカテキン多量体の選択的合成法を確立するため、日々実験に励んでいます。

本教育院では、情報科学について深く学び、そこで得た知識を有機合成に活かして新たなもののづくりに挑戦したいと考えています。

M1



物質理工学院
材料系
材料コース
修士課程1年

樋口 龍生

私の研究は、半導体の電子物性を利用した材料開発で、特に、熱電効果を利用した材料を研究しています。高真空装置を用いて、基板上にナノメートルの薄膜を作製し、物性を評価する研究をこれまで行ってきました。

材料開発の分野では、計算機に支援された設計指針が用いられるようになっており、本教育院において、材料開発と情報科学を連動させるノウハウを習得し、自身の研究をより発展させたいと考えています。

M1

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、大学の物質・情報に関する研究・教育力を結集し、さらに産業界、国立研究開発法人およ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・情報分野の高度な「知のプロフェッショナル」として、社会のリーダーを目指す方は、是非ご応募ください。

登録選抜について

選抜試験の対象は、大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、7月と12月に募集します。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/>

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、大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的な課題に対する施策を提案する合宿など、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。

TAC-MI登録学生数 2021年10月時点

博士後期課程

D3 10名

D2 19名

D1 24名

修士課程

M2 22名

M1 3名

2021年度博士後期課程学生の成果発表会 開催報告

物質・情報卓越教育院では、2021年6月30日(水)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。3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140名が参加しました。

当日のプログラム	9:00~14:37	<第1部>	博士後期課程1年の学生による成果発表会
	14:37~14:55	<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
	15:10~16:40	<第3部>	企業メンターと学生との面談
	16:50~17:50	<第4部>	企業アドバイザー連絡会
	17:50~18:50	<第5部>	意見交換会

第1部 博士後期課程1年の学生による成果発表会

第1部では、博士後期課程2年の学生による司会進行により、博士後期課程1年の登録学生21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。1人あたりプレゼンテーション6分、質疑応答4分の持ち時間で進められました。企業関係者や教員、先輩学生より活発な質疑があり、発表学生にとっては、自身の研究をアピールする良い機会となりました。様々な研究分野の参加者が集まるこの発表会は、異分野の方に対し、自身の研究の伝え方を考え、工夫する良い機会となりました。

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2部では、物質・情報卓越教育院の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1名が自主設定論文に関する進捗の発表を行いました。

自主設定論文では、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します。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「ラボ・ローテーション」や、海外インターンシップなど、TAC-MIで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付けることが目的です。登録学生は、博士後期課程2年の6月の成果発表会もしくは12月の国際フォーラムで、研究の進捗状況を英語で発表した後、博士後期課程修了時までに、実施した研究結果を論文としてまとめます。



成果発表会 参加学生集合写真

2021年度 修士課程学生の成果発表会および産学交流イベント 開催報告

物質・情報卓越教育院では、2021年9月28日に、修士課程学生の成果発表会および産学交流イベントを、オンラインで開催しました。午前の第1部では、修士課程の学生21名による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110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25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	9:20~12:00	<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~
	13:20~14:20	<第2部>	企業メンターと学生との面談
	14:30~17:10	<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~
	17:15~18:15	<第4部>	全体交流会

第1部 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部では、修士課程の登録学生21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。発表ルームとして11個のブレイクアウトルームを作り、前半10名、後半11名の発表者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。各ルームでは、博士後期課程2年生7名と本教育院の専任教員が司会やタイムキーピングなどを担当しました。

発表学生たちは、参加者が見やすくなるようにポスターを拡大、縮小しながら、工夫して説明を行いました。また、様々な分野の参加者に配慮し、研究の背景、課題、研究成果、情報科学をどのように使ったか、今後の研究の進め方などについて、分かりやすく説明しました。



成果発表会で発表した修士課程の学生と運営担当の博士後期課程2年生

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~

第3部では、本教育院の会員企業25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。本イベントは、第1部と同様に、Zoomのブレイクアウトセッションを使い、各ルームに分かれて企業紹介を行いました。

学生からは、「多くの企業の紹介に参加することができて、非常に良かった」「少人数で企業の方と対話できるのがとても有意義だった」「各企業で自分の専門分野を生かして活躍できるフィールドがあることを知ることができた」との声が寄せられ、大変好評でした。

会員企業からも、「企業の業務内容や博士のキャリアパスについて学生から積極的な質問があり、大変よいイベントだった。今後も学生との交流の頻度を増やして欲しい」との感想がありました。

企業交流イベントでは、各企業の事業紹介に加え、企業で求められる人材や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。

参加企業 25社

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 / 出光興産株式会社 / JFEスチール株式会社 / JX金属株式会社 / 株式会社カネカ / 花王株式会社 / LG Japan Lab株式会社 / 三菱ケミカル株式会社 / 三菱ガス化学株式会社 / 三井金属鉱業株式会社 / 日本電子株式会社 / 日本ゼオン株式会社 / 日産自動車株式会社 / パナソニック株式会社 / 昭和電工株式会社 / 住友電気工業株式会社 / 住友化学株式会社 / 太陽誘電株式会社 / 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 (ローマ字アルファベット順)

今年度も昨年度に引き続き、新型コロナウイルス感染症の感染予防のため、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。面談や交流会、発表後のフィードバックシートを通じて、企業の方からアドバイスを受ける機会は、学生にとって貴重な経験となりました。

お忙しい中、成果発表会にご参加いただいた皆様へ心より感謝申し上げます。

企業アドバイザーからのメッセージ

太陽誘電株式会社



開発研究所
評価解析技術部
主任研究員

岩崎 誉志紀 様



R&Dセンター外来用入口(左)と入口正面にある礎石に刻まれた「源泉」という言葉(右)。この言葉には「世界に通用する技術と商品を泉のごとく生み出し、世の中に貢献する。」という太陽誘電の思いが込められています。

太陽誘電グループの創業者である「佐藤彦八」は、会社設立前から誘電体セラミックスを研究していました。新しく設立する会社の主力事業も誘電体を利用したものにしたいと考えていたため、社名は誘電体から「誘電」とり、それに「太陽」を加えて1950年に「太陽誘電株式会社」を設立しました。それ以来、太陽誘電株式会社は素材の開発から出発して製品化を行うことを信条とし、創業以来培ってきた独自の要素技術にさらに磨きをかけ、エレクトロニクス機器の進化に貢献する電子部品を創出するための研究開発活動を進めています。

現在の研究開発では、スマートフォンに代表される通信機器や、自動車、基地局通信装置、データセンターなどの情報インフラを支える最先端商品の開発を推進しています。特に主力となる誘電体応用製品では、小型・大容量・高信頼性の特徴を持つ世界最先端の積層セラミックコンデンサ (MLCC) 製品を開発し続けています。磁性体応用では小型電子機器や自動車・情報インフラをターゲットとした次世代インダクタの開発を、また、圧電体応用製品としてはモバイル通信用弾性波フィルター (FBAR/SAW) や5G対応の次世代商品開発などを進めています。

今後の世界はあらゆる分野で電子化・電装化が進み、電子部品の需要はより一層高まると予想されています。この世界を支える最先端電子部品・デバイスの実現に向けた革新的な新規材料の実現は極めて重要であり、データサイエンス的な手法(マテリアルズ・インフォマティクス)も活用しながら、優れた特性を持つ新材料を効率的に開発する事が必須となります。これらのスキルを持つ物質・卓越教育院で「物質×情報」をしっかりと身につけた人材の重要性は今後も高まると考えております。この場から、自らが積極的に将来の新技術、新材料を作ってゆく気概を持った多くの研究者が育ってゆく事を期待しております。

花王株式会社



マテリアルサイエンス研究所
第6研究室
室長

桑原 一夫 様



すみだ事業場東京研究所(東京都墨田区)

花王は1887年の創業の日用品・化学メーカーです。1890年に高級化粧品「花王石鹸」を発売以来、「人々の豊かな生活文化の実現に貢献」することを使命として活動してきました。

花王は、皆さんの生活の中でお使いいただいている、洗剤、身体洗浄剤、化粧品などの日用品メーカーという側面に加え、油脂科学を基盤とした、高級アルコール、界面活性剤のメーカーという側面も持っております。特に植物由来の油脂を原料とする高級アルコールにおいては世界でトップクラスの製造規模のメーカーでもあります。我々花王ではSDGsへの企業活動として、2019年にESG戦略を発表しました。「ESGよきモノづくり」としてESG視点で商品設計や反応設計を行っております。具体例として、これまで油脂中に豊富に含まれながらも界面活性剤への使用が難しかったオレイン系油脂を原料に、新界面活性剤「バイオIOS」を開発し(2021年度GSC経済産業大臣賞受賞)、環境負荷の低い衣料用洗剤を商品化しました。また、包装容器のリサイクルや感染予防を含む衛生領域の研究にも力を入れております。

また、昨年末に発表した中期経営戦略(K25)では、「豊かな持続的社會への道を歩む」というビジョンを掲げました。その中で打ち出した、サステナブル社会をリードする、もうひとつの花王始動と基盤花王を強くする、社員活力の最大化、という3つの方針の下、上記ESG戦略を加速しております。

花王では、2017年より反応・処方設計にデータサイエンスの活用を行っております。始めたばかりではありますが、材料科学と情報科学を融合できる人材の必要性を強く感じております。その点からも卓越大学院の学生の皆様には非常に可能性を感じております。

プログラムを通じて皆様及び企業アドバイザーの方としっかり議論し、お互いを高め合って、次代の社会、世界、地球を担っていく人材となっていきたいと思っております。

出光興産株式会社



次世代技術研究所
主任研究員

原田 洋介 様

2030年ビジョン

エネルギーの安定供給と共に社会課題の解決に貢献することが当社の責務と認識。

私たちは、

責任ある変革者

を2030年ビジョンとして掲げ、

- 地球と暮らしを守る責任：
カーボンニュートラル・循環型社会へのエネルギー・マテリアルランジョン
- 地域のつながりを支える責任：
高齢化社会を見据えた次世代モビリティ&コミュニティ
- 技術の力で社会実装する責任：
これらの課題解決を可能にする先進マテリアル

3つの責任を事業活動を通じて果たしていく。

出光興産は1911年の創業から110年、石油精製および石油製品・基礎化学品の製造販売、潤滑油や電子材料等の高機能材料の開発・製造・販売、再生可能エネルギー事業等を手掛ける会社です。エネルギーの確保と安定供給を実現しながら、環境対応型の素材提供・事業展開を進めています。

創業以来、「人間尊重」を経営の原点として、社員一人ひとりが「真に働く」ことを企業理念としています。多様な事業に呼応して幅広く研究開発にも取り組んでいますが、どの分野においても理念に基づき、技術を磨き社会に貢献することを目指しています。

人々の暮らしが益々多様化し、同時に環境に優しくあろうという現在、企業の材料開発にかかる期待と責任はとても大きなものです。実装までのスピード感も求められ、従来通りの開発では追いつけなくなっています。出光興産では先に挙げた理念と共に、「責任ある変革者」として社会課題を解決することをビジョンとしています。研究開発も変革が求められています。その大きな柱が、これまで企業として積み重ねた経験や知見と情報科学との融合であり、マテリアルズ・インフォマティクスの実践であると認識しています。

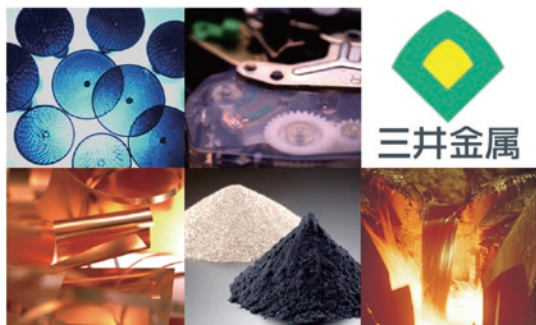
物質・情報卓越教育院が掲げる「物質×情報=複素人材」は、まさしくこれからの企業に必要な変革を担う人材です。学生の皆様には、その高度な専門性を活かし、社会に真に貢献していただくことを期待します。その学びの過程で、皆様と様々な交流させていただくことを楽しみにしています。

三井金属鉱業株式会社



事業創造本部
総合研究所
主幹研究員

田平 泰規 様



三井金属は、「マテリアルの知恵を活かす」というスローガンのもと、素材から新たな機能を創り出すことでお客様に新たな価値を提供する「総合素材メーカー」です。主な事業は、機能材料・電子材料の製造・販売、資源開発、貴金属リサイクル、自動車用機能部品の製造・販売であり、亜鉛地金（国内シェア43%）、プリント配線用極薄銅箔（世界シェア95%）、二輪用排ガス浄化触媒（同50%）、HV車用電池材料（同40%）、液晶用ITOターゲット（同35%）、MLCC用銅粉（同30%）など高いシェアを有しております。

また、当社は2020年4月の組織改編により、自社の研究開発と社外パートナーとの共創を促進し、成長商品・事業をより多く、より効率的に創出する為に新たに「事業創造本部」を創設しました。当本部では、カーボンニュートラル社会の実現へ向けた、燃料電池、全固体電池を含む数多くの研究開発テーマに取り組んでいます。尚、当社では、近年特に情報科学と材料科学を融合した研究開発に力を注いでおり、大学、国研、スタートアップとの連携や、本プログラムを通して人材育成を図りたいと考えています。

本教育院に登録されている学生さんには、20世紀には考えられなかった規模×精度で問題を扱える能力を基盤に、卓越博士として高い視座から明るい人類社会の未来像を描いて、その実現のために必要な新たな価値を物質機能の発現を通して創造できる人材となることを期待します。とともに私自身は、このプログラムに参加させていただくことで古い20世紀の頭をリフレッシュして一緒に楽しみたいと思います。

日本ガイシ株式会社



製造技術統括部
検査・解析技術グループ
グループマネージャー

惣川 真吾 様



日本ガイシはファインセラミックスを得意とする素材メーカーです。電力の安定供給に不可欠な「がいし」の製造を祖業とし、1919年の設立以来100年以上にわたり電力インフラを支えています。モータリゼーションの発展や加速する情報化社会など、時代が求め、世界が直面するグローバルの課題に、ナンバーワンやオンリーワンのセラミック技術で応えてきました。2050年の未来社会を見据えた注力分野は「カーボンニュートラル」と「デジタル社会」。これらの分野に貢献するために、長年培ってきたキーマテリアル（セラミックス）とキーテクノロジー（材料技術、プロセス技術など）を駆使して、社会に新しい価値を提供し、地球規模の課題解決に挑み続けます。

日本ガイシのセラミックス製造は、多様な材料（元素の組み合わせ）と複雑なプロセス（粉体→成形/乾燥→脱脂/焼成→加工）をあわせもつ「擦り合わせ型」のものづくりです。古くから伝わる製造手法を、当社では最新の技術で見直し、製品ごとに最適な工程条件の組み合わせを見いだしてきました。この蓄積が日本ガイシの強みです。これらのノウハウを活かした開発のスピードアップを目指し、マテリアルズ・インフォマティクス（MI）とプロセス・インフォマティクス（PI）の構築にも取り組んでいます。

本プログラムが提供する実践的な教育カリキュラムにより、大学の最先端の知識や発想が学べることを期待しています。一方で産業界の視点で、大学教育や研究に貢献できることを願っています。意欲ある学生のみなさんと活発に議論できることを楽しみにしています。

京セラ株式会社



ものづくり研究所
課責任者

石田 秀幸 様



ものづくり研究所 上段:現研究棟
下段:新研究棟完成予想図(2022年9月操業開始予定)

京セラは1959年の創業以来、「全従業員の物心両面の幸福を追求すると同時に、人類、社会の進歩発展に貢献すること」という経営理念のもと、着実に事業を展開してきました。京セラが事業活動を通じて社会課題に取り組み、持続的に企業価値の向上と社会への貢献を果たし、これからも経営理念を実現し続けるためには、従来の考え方や慣習にとらわれず、さらなるチャレンジを続けていくことが必要だと考えます。時代の変化に即応するスピード感を持ち、京セラの有する技術力と経営資源を活用し、全従業員それぞれが能力を最大限に発揮することで、さらなる企業価値の向上と持続可能な社会の実現を目指しています。

私の在籍するものづくり研究所(旧・総合研究所)は京セラの材料開発のメッカとなるべく、1979年に開設され、現在では、材料を始め、プロセス、それを用いた部品、デバイスまで、その範囲は多岐に渡ります。

本プログラムへ参加することで、学生の皆さんが、企業との技術ディスカッション、課題解決の活動を通して、将来、新産業創出を担う人材となり、世界で活躍されることは、弊社の企業理念に合致するものと考えています。加えて、講義やセミナー等に参加し、最先端の教育を受講する機会をいただき、企業という立場でこれまで以上に社会に貢献できると確信しています。

今回のプログラムを通して、チャレンジ精神溢れる学生の皆さんと密度の濃い時間を過ごし、心を通わせながら、ともに成長することができたら幸いです。そして、皆さんには京セラのことを少しでも知っていただき、近い将来、一緒に課題解決する機会ができれば、これ以上嬉しいことはありません。新研究棟で皆さんにお会いできることを楽しみにしています。

第2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、2021年7月21日(水)に、オンラインにて「東工大 物質・情報卓越教育院 第2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。

昨年に続き、第2回目となる本セミナーでは、鈴木 賢治教授(東京工業大学 科学技術創成研究院 未来産業技術研究所)と関嶋 政和准教授(東京工業大学 情報理工学院)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250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 「メディカルAIイメージングとAI支援画像診断」



東京工業大学
科学技術創成研究院
未来産業技術研究所
教授
鈴木 賢治 先生

第1部では「メディカルAIイメージングとAI支援画像診断」と題し、鈴木先生が20年以上研究を続けられているMTANNと呼ばれる最初期のディープラーニング(深層学習)による医用画像処理と、AI支援画像診断の研究開発と実用化についてご紹介いただきました。

セミナーでは、胸部レントゲン画像の骨と軟組織を分離するための画像処理技術、仮想高線量CT画像の生成による放射線被曝の低減、医用画像中の病変のディープラーニングセグメンテーション手法などについて分かりやすく解説していただきました。これらの研究の一部は、既に米国FDAの承認を経て実用化されています。

MTANNは、少ない学習データでも高い予測精度を達成できるディープラーニングの手法です。医療分野では、大量の症例を収集することは極めて困難であり、これが医療AIの最大のボトルネックとなっていました。MTANNは、このボトルネックを解決し、様々な疾患に対する医療AIの構築に道を開きました。

一方、AIの実用化においては、ブラックボックス問題が残されており、説明可能なAI(XAI)の開発が強く望まれています。XAIによれば、AIの失敗の原因を知ることができ、研究者がAIをコントロールすることができるようになります。

AIイメージングやAI画像解析技術は、汎用性の高い基盤技術であり、非破壊検査や物質科学においても活用が大いに期待されます。



第2部 「機械学習とシミュレーションによる新型コロナウイルス感染症治療薬の探索」



東京工業大学
情報理工学院
准教授
関嶋 政和 先生

第2部では、機械学習とシミュレーションによる新型コロナウイルス感染症(COVID-19)治療薬の探索など、創薬研究についてご紹介いただきました。

本セミナーでは、新型コロナウイルスの3CLプロテアーゼ(メインプロテアーゼ)を標的に、薬が持っていることが望ましいと考えられる立体的な性質であるファーマコフォアの研究を始め、シミュレーションや機械学習を用いたヒット化合物探索手法について、詳しく解説していただきました。

セミナー冒頭では、先日公開されたばかりのタンパク質の構造予測を実行するAIプログラム「AlphaFold2」についても触れ、「これまで構造が複雑で予測が難しかったタンパク質構造も解くことができる、革新的なプログラムである」とご紹介がありました。また、新薬の開発においては「薬市場は売り上げに対して投資額が大きい。1つの薬を開発するのに費用が数千億円かかる。現在も世界で7000以上の薬が開発中である。薬が承認されるまでも10年以上時間がかかる。開発費用を削減し、開発期間を縮めるためには、AIを活用した技術を用いることが大きなカギとなる。」との見解を示されました。

今後、バイオインフォマティクスを活用した創薬研究のより、より早く有効な治療薬が開発されることが期待されます。

機械学習とシミュレーションによる
新型コロナウイルス感染症治療薬の探索



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頂くと共に、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め、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。

会員企業一覧(2021年11月15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 / 出光興産株式会社 / JFEスチール株式会社 / JX金属株式会社 / 株式会社 カネカ / 花王株式会社 / 京セラ株式会社 / LG Japan Lab株式会社 / 三菱ケミカル株式会社 / 三菱ガス化学株式会社 / 三井金属鉱業株式会社 / 長瀬産業株式会社 / 日本電子株式会社 / 日本ガイシ株式会社 / 日本特殊陶業株式会社 / 日本ゼオン株式会社 / 日産自動車株式会社 / パナソニック株式会社 / セイコーエプソン株式会社 / 昭和電工株式会社 / 住友電気工業株式会社 / 住友化学株式会社 / 太陽誘電株式会社 / 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。)

