


東京工業大学 物質・情報卓越教育院

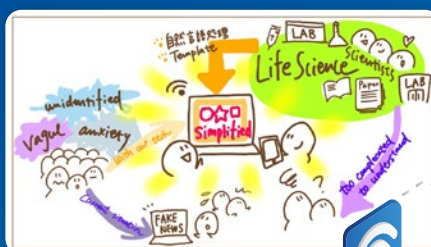
文部科学省平成30年度卓越大学院プログラム

「物質×情報=複素人材」育成を通じた持続可能社会の創造



## Contents

- プラクティススクール実施報告 : P.2, P.3
  - 未来社会サービス創出 ワークショップ開催報告 : P.4, P.5
  - 国際フォーラム開催報告 : P.6, P.7
  - プログラム担当教員研究最前線 : P.8, P.9
  - TAC-MI授業科目紹介「新産業創出最前線」 : P.10
  - 企業アドバイザーからのメッセージ  
TAC-MIニュース : P.11
  - Hot Topics : P.12
- 





# 2021年度プラクティススクール実施報告

プラクティススクールは博士後期課程1年の科目です。物質・情報卓越プラクティススクール第一では、企業訪問に先立って、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の復習と実習を行いました。2021年度の物質・情報卓越プラクティススクール第二は、旭化成株式会社と産業技術総合研究所 東北センターの2カ所で開催いたしました。

旭化成株式会社から出された課題は産業に密接に関わるアウトプットが明確な課題である一方で、産業技術総合研究所から出された課題はマテリアルズシミュレーションやマテリアルズインフォマティクスを駆使した、より研究的要素のある課題でした。いずれも骨のある課題でしたが、学生たちは、6週間という限られた期間の中でインフォマティクスやシミュレーションのテクニックを有効に用いることで、目覚ましい成果を出しました。学生たちは、各担当研究者と物質・情報卓越教育院(TAC-MI)の教員を交えたディスカッションを適宜行いながら改善を繰り返し、果敢に課題解決に挑戦していました。異なるバックグラウンドを持つ学生たちが協力し合って、課題解決に取り組む姿は素晴らしく、今回もTAC-MIの学生たちの能力の高さを認識させられる機会になりました。コロナ禍という特殊な状況が続く中、細やかなご配慮をいただきながら絶好の教育の機会を与えていただいた旭化成株式会社と産業技術総合研究所に深く感謝申し上げます。

(物質・情報卓越教育院 川内進特任教授、松下雄一郎特任准教授、安尾信明特任講師)

## プラクティススクール第二(旭化成株式会社)

8月16日～9月24日の6週間、旭化成株式会社にて、CHEN XIAO、CHUNG YING、村松 央教、尾宮 哲也、浅野 翔、伊藤 耕太郎、CHON SEOUNGMIN、LIAO QIANCHENG、渡邊 真也、陳 正豪、横地 浩義、木村 大輔の12名の学生が参加し、3分野6テーマの課題について、3つのグループに分かれてそれぞれの課題に取り組みました。旭化成株式会社では一昨年、昨年度に引き続いてのプラクティススクールでしたが、今年度は田町ステーションタワーN棟に新たに開設されたデジタル共創ラボ「CoCo-CAFE」が拠点になりました。DX推進の加速を目的とした非常に快適な環境だったのですが、残念なことにコロナ第5波の影響を受けてリモートワークも活用せざるを得ませんでした。旭化成株式会社には学生たちが普段触れることのない、企業として重要な課題を用意していただきました。リモートワークの難しさはありましたが、企業の担当の方の手厚い指導を受けながらチームメンバーとも協力して数理モデルや最先端の機械学習手法などを応用して課題解決に取り組みました。コロナ禍で制限があるなかで、このような素晴らしい環境を提供していただいた旭化成株式会社の皆様には感謝申し上げます。

これらの成果は、9月24日、田町ステーションタワーN棟会議室を会場としオンラインを組み合わせ、本学と旭化成株式会社によるプラクティススクール最終報告会で報告されました。参加学生12名の報告に対し、本学教員および企業関係者ら50名を超える参加者から活発な質疑が行われました。

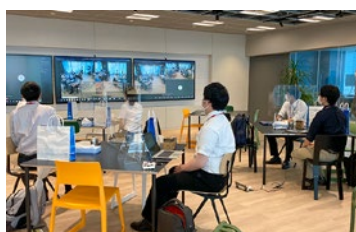
### 旭化成株式会社 からのメッセージ

今年度も弊社にてプラクティススクールを実施いただき、誠にありがとうございました。

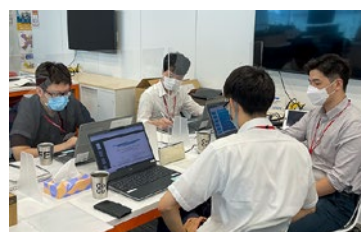
一昨年から続くコロナ禍の影響により、出社日数制限など、昨年以上に厳しい制約下での実施となりましたが、リモートを上手く活用し、これまで以上の素晴らしい成果を創出いただきました。今回のテーマは比較的挑戦的なものが多かったですが、最新の技術も取り入れ大きな前進に繋げて頂いたことに社員一同感服しております。

これもひとえに、真剣にテーマと向き合っていたいただいた学生の皆様、および手厚くサポートいただいた教職員の皆様のおかげで、改めて感謝申し上げます。

最後に、今後のTAC-MIの益々の発展と皆様のご活躍を心より祈念いたします。



プラクティススクールに取り組む学生たち



プラクティススクール最終報告会での発表



プラクティススクール最終報告会(旭化成株式会社 田町ステーションタワー)

### 参加学生のコメント



Chon Seoungmin

博士後期課程2年(9月入学)

物質理工学院 応用化学系 応用化学コース

In the summer of 2021, I accomplished the 6-weeks long practice school program at Asahi Kasei. At the beginning, I was not sure if I could finish the project on time because of a lack of knowledge and skills in the field. However, the project was based on state-of-the-art technology, thus the entry barrier was not very high. My partner and I first understood the concept in detail and planned how the overall flow of the project moved ahead. Therefore, we progressed the project gradually and we could discuss progress with professors and staffs. As a result, I believe I left satisfactory results at Asahi Kasei. The practice school was a great opportunity to confirm my potential ability.



## プラクティススクール 第二 (産業技術総合研究所)

10月11日～11月19日の6週間、産業技術総合研究所 東北センター (宮城県仙台市) にて、福永 悠、SONG SUBIN、中西 優馬、大友 泰輝、石濱 圭佑、本間 千柊、酒向 正己の7名の学生が参加し、3つのグループに分かれてそれぞれの課題に取り組みました。学生たちは6週間仙台に滞在し、マテリアルズシミュレーションや機械学習を用い、高機能材料の探索やプロセスの最適化に取り組みました。全学生がプログラムを自分で書いたりシミュレーションを自分で行ったりし、試行錯誤を繰り返しながら課題を進めてくれました。

進めていくうちに新たな課題が見つかり、学生たちは産業技術総合研究所 材料・化学領域 化学プロセス研究部門の研究者たちと協力して臨機応変に対応していました。プラクティススクールも後半に入ると、学生が自分でコードを改良して利用できるようになる、主体的に大規模なシミュレーションを行えるようになるなど、学生が短期間で急成長する様を見ることができました。最後まで学生に付き合い、このような環境を作っていただいた産業技術総合研究所の皆様には大変感謝申し上げます。

得られた成果の発表の場として、11月19日、産業技術総合研究所 東北センターにて、対面およびオンラインのハイブリッド開催により、本学と産業技術総合研究所によるプラクティススクール最終報告会を開催しました。3グループ (学生7名) からの報告に対し、本学教員および関係者ら約40名が参加し、参加者から活発な質疑が行われ、大きな成果があったことを確認し、終了しました。

### 産業技術総合研究所からのメッセージ

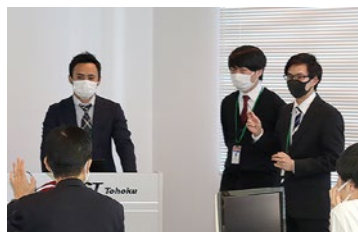
この度はプラクティススクールを実施して頂きありがとうございました。学生の皆様には、産総研が取り組んでいる社会課題

の1つであるCCU (CO<sub>2</sub>回収・有効利用) に寄与する材料探索やプロセスの最適化を実施して頂きました。6週間という短期間でしたが、学生の皆様の熱意と先生方のご指導の甲斐あって、成果報告会では課題解決に向けた新たな提案を行って頂きました。また、産総研から参加した若手研究員の研究が今後大いに進展していく可能性ができましたことに、改めて感謝申し上げます。

本来ですと期間中に仙台の街も楽しんで頂ければ良かったのですが、生憎コロナ禍のため叶いませんでした。今回参加された学生の皆様におかれましては、将来様々な分野でご活躍されることを祈念しますと共に、共同研究等で再び産総研東北センターにお越し頂ければ幸いに存じます。



プラクティススクールに取り組む学生たち



プラクティススクール最終報告会での発表

山口猛央教育院長より課題に取り組んだ学生たちを表彰



プラクティススクール最終報告会 (産業技術総合研究所 東北センター)

### 参加学生のコメント



大友 泰輝  
博士後期課程1年  
工学院 機械系 機械コース

バックグラウンドの異なる学生や学外の研究者と協力し、情報技術を駆使して「チーム」で課題解決に取り組むことは、プラクティススクールならではの体験でした。私は機械学習の経験が浅く、情報技術に精通する特任の先生方のご支援やチームメンバーの協力のもと、最適化問題に関する理解や予測モデルの構築などを試行錯誤しながら進め、何とか計画通りに研究を進めることができました。

6週間という短い期間でしたが、研究室から遠く離れた宮城に長期滞在し、博士後期課程の同期や外部の研究者とのネットワークを築けたことは、私にとって大きな財産になりました。

## 2021年度プラクティススクールを終えて



物質・情報卓越教育院長  
山口 猛央  
(科学技術創成研究院 / 物質理工学院・教授)

チームとなり、専任の先生と一緒に課題解決に取り組み、6週間の短い期間で素晴らしい成果を出しました。成果に関しては、それぞれの機関から高い評価を頂いていると思います。また学生は専門外であるからこそ、過去の研究のバイアスがかからない状況で、多くの情報を客観的に解析し、意見や議論を取捨選択するうちに、専門家が驚くような新しい発見や提案をしていました。多くの情報から本質を見抜く力、新しいアイデアを提案する勇気を身につけたと確信しました。是非、身につけた力を、これからの皆さんの研究に活かしてください。

2021年度も、8月16日～9月24日に旭化成株式会社で、10月11日～11月19日に産業技術総合研究所東北センターで、それぞれ物質・情報プラクティススクールを実施できました。新型コロナの影響がある中、実施して下さった関係者の皆様に、心よりお礼申し上げます。理学院、工学院、情報理工学院、物質理工学院など、異なる分野の学生が



# 2021年度未来社会サービス創出ワークショップ開催報告

物質・情報卓越教育院 (TAC-MI) は、12月9日と10日の2日間、2021年度の未来社会サービス創出ワークショップをオンラインで開催しました。

未来社会サービス創出ワークショップは、俯瞰力・リーダーシップ力を涵養することを目的として、毎年1回開催しています。

TAC-MIの学生が海外の学生あるいは企業の若手社員とともにグループを編成し、それぞれの研究、業務における知識・経験等を生かしながら、未来社会における課題を設定し、その解決策を討論・提案します。

今年度は、本教育院の博士後期課程1年の学生21名と企業の若手研究者4名、合計25名が参加し「物質と情報で切り拓く人権と福祉の未来」をテーマにワークショップを実施しました。参加者は6グループに分かれ、人権と福祉に現存する問題について、TAC-MIで培った物質科学・情報科学を用いた解決策を考案しました。

各グループには、ファシリテーターとグラフィックレコーダーが1名ずつつき、議論の活性化を促し、話し合いの内容やアイデア構想をその場で分かりやすくイラストにまとめ可視化しました。

## ワークショップテーマ

物質と情報で切り拓く人権と福祉の未来  
Materials and Informatics for the Human Rights and Public Well-being

## ワークショップ1日目

### 2日間のワークショップについての趣旨説明

#### 特別講演

宇井 吉美氏  
(株式会社aba. 代表取締役 CEO)

### グループごとにブレイクアウトルームに分かれてグループワーク開始

### 各グループが問題を解決する方法について発表

各グループには3つのサブテーマ (Refugee Crisis・Privacy・Workers Life) が割り振られました。

人工知能やロボット技術を用いた排泄センサー付きベッドの開発や実際の介護現場での人権と福祉の問題についてご講演いただきました。

解決すべき問題を見つけ、問題に直面している人々と、その周囲の人々の気持ちと状況について理解し、個人の幸せ (人権) と大勢の幸せ (福祉) についての問題を解決する方法について考えました。

教員やファシリテーターからフィードバックをもらいました。

## ワークショップ2日目

### 問題を解決するための方法についてさらに検討、最終発表に向けて準備

### 最終発表会

### 審査

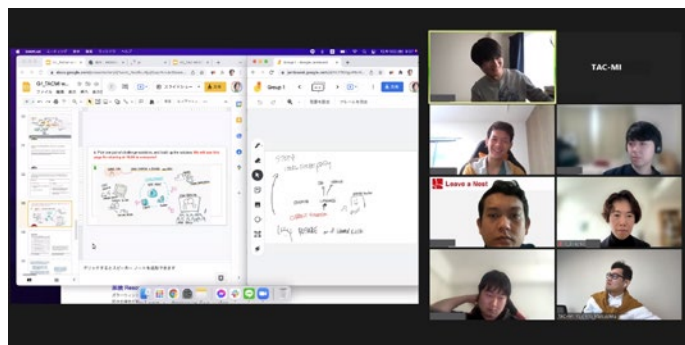
### 表彰式

苦しんでいる人々とその周りの大勢の幸せについての問題を解決するための未来のテクノロジーや実際に使用するためのシステムやルール、その応用について考え、意見を出し合いました。

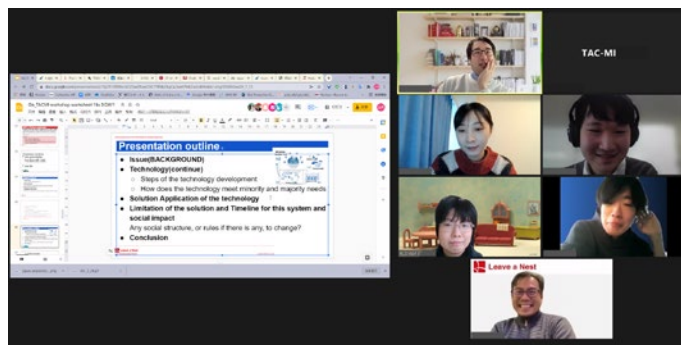
各グループが人権と福祉の問題を解決するための未来社会のサービスについて提案し、発表しました。

4名の審査員による審査が行われました。

受賞チームの発表



苦しんでいる人々とその周りの大勢の人々の両方を幸せにする理想的な未来を考える



人権と福祉の問題を解決するための新技術とその応用について検討

## 最終発表会

最終発表会にて、各グループが人権と福祉の問題を解決するための未来社会のサービスについての提案を発表しました。発表会には、本学教職員、本プログラムの連携企業関係者、博士後期課程2年のTAC-MI登録学生など約90名のほか、水本哲弥理事・副学長 (教育担当)、上田紀行リベラルアーツ研究教育院長にも特別にご参加をいただきました。

## 表彰式

表彰式では、審査員により選出されたOriginality Award、Practicality Award、Social Impact Awardの3つの賞が、審査委員長の須佐匡裕教授 (物質・情報卓越教育院プログラム責任者) より授与されました。最後に、水本哲弥理事・副学長 (教育担当) と一杉太郎物質・情報卓越教育院副教育院長より講評の言葉をいただきました。



## 受賞チーム

### <Originality Award>

#### グループ2「Construction Smart City for Refugees」

受賞理由: 移民にとって大きな問題になる住居に関して、物質と情報を駆使することにより、短期間で簡単にカスタマイズするサービスは独創性があり、社会的な意義も大きいと判断されました。この技術は災害時にも利用できる点も名案です。

### <Practicality Award>

#### グループ5「Care-Share」

受賞理由: 子育てにいきなりテクノロジーを取り入れていくかは、今の時代にとっても重要な課題です。子供と母親の関係を深く考えかつ、全てをロボットに置き換えようとしていない点も評価され、実現性も高いと判断されました。

### <Social Impact Award>

#### グループ3「Guide In the Right Direction (GIRD)」

受賞理由: 今の高度情報化社会にとって、フェイクニュースを抑制し、安全安心な情報の普及に努めることは重要な課題です。一次情報と自然言語処理を結びつけ、情報の受け手に合わせて、絵や図で情報を変換するアイデアは高く評価されました。



# 物質と情報で切り拓く人権と福祉の未来

## グループ1 トピック: Refugee Crisis Communication using Cyberspace

メンバー: 木村 大輔、尾宮 哲也、SONG SUBIN、張 凡

私たちのグループ1では、難民問題の課題を教育や就労面の改善であると設定し、「人種や国籍のバイアスをなるべく緩和し、意思疎通を円滑に行う場を作る」ことを解決策として提案しました。具体的には、VRデバイスを用いてバーチャルな空間で人々が集まって交流可能な場である「サイバースペース」を作ることで、就労支援や教育支援のための情報が行き交うような場を確立し、難民が抱える問題解決につなげることを考えました。

今回のワークショップでは、メンバーの専門分野の知見を合わせることで解決策を提案する貴重な経験ができたと感じています。  
(尾宮 哲也)



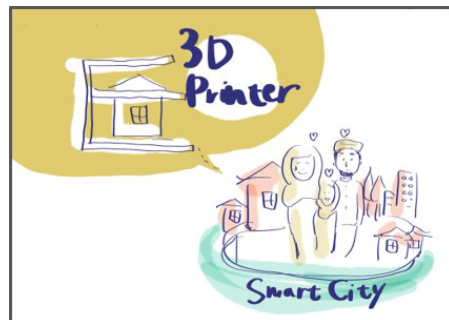
## グループ2 トピック: Refugee Crisis Construction Smart City for Refugees



メンバー: 渡邊 真也、浅野 翔、GAO CHENGUANG、鍋谷 俊太

私たちのグループでは、難民キャンプにおける居住施設の不足と生活の安定化にアプローチしました。これを達成する技術として、3Dプリントによる迅速な居住施設の生産と、ドローンやAIを用いたスマート社会の構築を提案しました。これにより、難民が快適な生活を送れるだけでなく、難民受け入れ国の経済活動サイクルの一助となることが期待されます。

ワークショップでは、専門の異なるメンバーが、多角的なアプローチを議論する良い機会となりました。また、論点の可視化によって非常に円滑・論理的に議論を進めることができ、とても有意義な時間となりました。  
(渡邊 真也)



## グループ3 トピック: Privacy Guide In the Right Direction (GIRD)

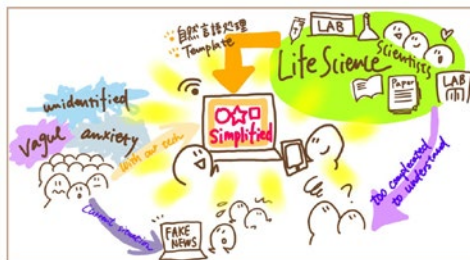


メンバー: 伊藤 耕太郎、陳 正豪、AUGIE ATQA、大友 泰輝

「非」科学的なフェイクニュースに惑わされる人々を少なくするにはどうすれば良いのか、という考えの下、私たちは、査読論文などの科学的根拠のある文章から、日常的に科学に触れない人でも理解できるグラフィックアブストラクトを作成するシステムを提案しました。

提案に至るまで紆余曲折がありましたが、ファシリテーター、教員、グラフィックレコーダーの方々から都度助言をいただき、最終発表までに、無事議論をまとめることができました。短い時間ではありましたが、自身の研究ばかりでなく、普段から社会の問題を考える契機となったワークショップでした。

(伊藤 耕太郎)



## グループ4 トピック: Privacy Deepfake Technology

メンバー: 本間 千枝、AISNADA ANN NIZA EL、中西 優馬、WEI FENG、山内 弘樹

ディープフェイクは、拡張現実や動画作成などのエンターテインメントの発展に貢献する一方で、個人のプライバシーを侵害してしまう危険性をはらんでいます。こういったテクノロジーの発展に伴って生じる問題をいかにして取り除くかを、私達はテクノロジーから個人を「守る」方法と、ディープフェイクに代わる新たな技術を「創る」方法の2つのアプローチで考えました。

今回取り上げたディープフェイクが抱える問題は、デジタル社会が広く普及した今、非常に重要なテーマです。新規提案の段階でなかなかスムーズにいかない時もありましたが、お互いが積極的にアイデアを出し合えたおかげで、最後は満足のいく仕上がりになったと思います。  
(本間 千枝)



## グループ5 トピック: Workers Life Care-Share



メンバー: CHUNG YING、横地 浩義、張 葉平、幌岩 真理

育休休暇後に仕事復帰することの困難さが現在問題となっています。リモートワークの活用により、仕事の中断を防ぐことは考えられますが、実態としては、在宅勤務中の育児の負担が大きいことが課題です。そこで、私たちは「防音半自動育児システム」を考えました。これは、まずは機械でできる部分を自動化し、遠隔操作可能なものは出勤している親が行うというもので、在宅勤務中の親はリモートワークに集中できるというものです。

今回のイベントでは、これまでに深く考えたことのないテーマを考えることができました。また、他の分野の学生や企業の方との議論の中で、違った考えと触れることができ、貴重な経験となりました。

(張 葉平)



## グループ6 トピック: Workers Life Mimamori Ransel ~Monitoring School bag~

メンバー: 村松 央教、石濱 圭佑、林 正丹、福永 悠

私たちは、「元専業主婦の人たちが仕事に復帰できる割合が非常に低い」という社会的な問題に注目し、どのようなサービスがあれば、子育てに忙しい夫婦と雇い主との間に存在する時間や意識のギャップを解消することができるかについて議論を行い、リアルタイムで子供の行動を視覚的に確認することができる子育てモニタリングサービス「見守りランドセル」を提案しました。

英語でのグループディスカッションには自分の意見や提案がなかなか伝わらない難しさがありましたが、グラフィックレコーダーの方が議論の可視化や意見の集約をしてくださったこともあり、最終的には魅力的なアイデアをまとめることができました。

(石濱 圭佑)





# 2021年度国際フォーラム開催報告

物質・情報卓越教育院 (TAC-MI) は、12月7日と8日に2021年度の国際フォーラムを開催しました。TAC-MIでは、海外アドバイザー教員や企業関係者、本学プログラム担当教員を前に英語での研究発表を行うことで、国際コミュニケーション力の向上を図ることを目的として、毎年1回、国際フォーラムを開催しています。発表のほか、司会進行や質疑応答等もすべて英語が用いられます。

今年度は、博士後期課程1年の登録学生23名と、博士後期課程2年の登録学生のうち17名が、自身の研究内容や自主設定論文の進捗について、英語でのプレゼンテーションを行いました。また、博士後期課程2年の登録学生全員 (計19名) が、フォーラム全体の運営を担い、当日の司会も担当しました。2日間のフォーラムには、本プログラムの連携企業関係者や本学プログラム担当教員、TAC-MI学生など約120名が参加しました。

今年度の国際フォーラムも、新型コロナウイルス感染防止のため、昨年度に引き続きオンライン開催となりました。時差の関係で当日参加できなかった海外アドバイザー教員の先生方には、後日、担当する学生の発表の様子を録画で見ていただき、オンラインで学生との面談を実施しました。

## 博士後期課程1年の学生による研究発表

12月7日と8日午前、博士後期課程1年の登録学生23名の研究発表を1人あたり20分 (質疑応答含む) で進めました。

国際フォーラムにおける博士後期課程1年の研究発表は、本教育院の関門の一つである「博士論文研究基礎力審査 (Qualifying Examination)」の一部を兼ねています。発表を行う学生は緊張の面持ちの中、自身のこれまでの研究の意義と成果についてのプレゼンテーションを熱心に行い、発表後には活発な質疑応答が行われました。

## 博士後期課程2年の学生の自主設定論文進捗発表

12月8日午前の博士後期課程1年の登録学生の研究発表に続き、博士後期課程2年の登録学生17名が自主設定論文の進捗発表を行いました。

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「物質情報異分野研究スキル」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。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研究結果を報告します。今回は6月に報告を行った1名を除く17名が進捗発表を行い、出席者からのフィードバックを受けました。



国際フォーラムに参加したTAC-MI登録学生

## 当日のプログラム

8:45	12月7日 (火)	8:45	12月8日 (水)
	国際フォーラム 研究発表 (D1)	11:15	国際フォーラム 研究発表 (D1)
12:15		12:20	自主設定論文進捗発表 (D2)
13:15	昼食	13:20	昼食
	国際フォーラム 研究発表 (D1)	15:30	国際フォーラム 自主設定論文進捗発表 (D2)
16:55		17:00	企業メンターと学生の面談
18:00	基調講演	17:30	閉会式、表彰式
		18:30	ブレイクアウトルームによる 交流会

## 海外アドバイザー教員による講演

12月7日午後には学生の研究発表の後、今年度から新しく本プログラムの海外アドバイザーに就任したチューラーロンコーン大学のNatt Leelawat助教とインド工科大学マドラス校のMichael Gromiha教授にご講演いただきました。

### 講演タイトル

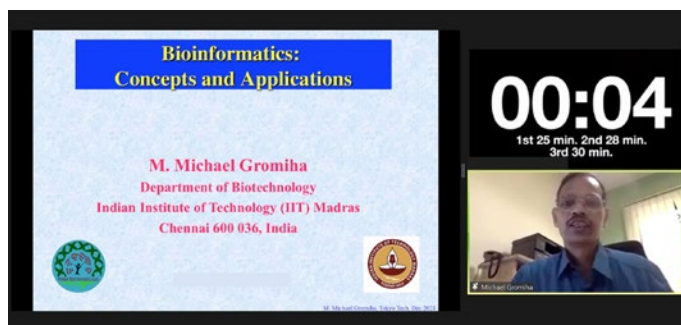
### Data Science and Simulation in Disaster Risk Management

Natt Leelawat助教 チューラーロンコーン大学 (タイ)

### 講演タイトル

### Bioinformatics: Concepts and Applications

Michael Gromiha教授 インド工科大学マドラス校 (インド)

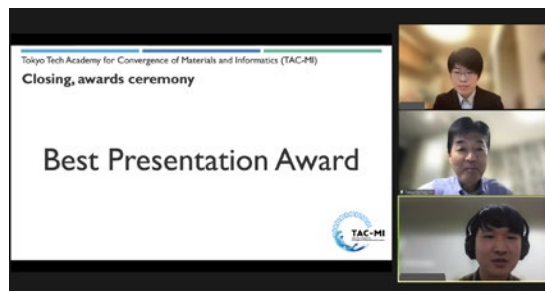




## 表彰式



博士後期課程1年の学生の研究発表に対し、博士論文研究基礎力審査とは別に、全ての研究発表を聞いた参加者による投票が行われ、8日午後の閉会式にて、最も票の多かった学生1名にベストプレゼンテーション賞 (Best Presentation Award) が、続いて票が多かった学生1名にグッドプレゼンテーション賞 (Good Presentation Award) が贈られました。



表彰式・Best Presentation Award受賞者の発表  
(司会のD2井上さん、山口教育院長、受賞者のD1福永さん)

## 博士後期課程1年生の研究発表・受賞者のコメント



### Best Presentation Award



福永 悠  
博士後期課程1年  
理学院 化学系  
化学コース

これまでTAC-MIで養ってきた俯瞰力を活かして、

- ①情報的手法を取り入れた課題解、
- ②異分野の研究者とのコミュニケーション

という二つの観点から研究成果における本質となることを取捨選択し、発表することを意識しました。英語での口頭発表は苦手意識があり不安でしたが、TAC-MIの教育の多くは日ごろから英語で行われることもあり、開き直って落ち着いて発表できたと思います。

教員方からの熱意あるご指導の下、結果として、Best Presentation Awardを受賞することができ、大変光栄です。受賞を励みに、今後も研究活動に精進していきたいです。



### Good Presentation Award



An Niza El Aisnada  
博士後期課程1年  
物質理工学院 材料系  
材料コース

I am always grateful to be part of TAC-MI program. In the International forum, I was glad to listen on various kind of interesting presentations from my colleagues with different disciplines. Additionally, I received valuable discussions and comments from the audience. I think this is a precious experience for everyone. Moreover, I feel very pleased to receive the good presentation award among many great presentations. This is a motivation for me to continue my study and to challenge myself to be better on material computation.

## 企画運営を担当したD2学生からの感想



渡部 拓馬  
博士後期課程2年  
物質理工学院 応用化学系  
応用化学コース

普段は学会に参加する立場として研究発表や聴講を行っていますが、今回は初めて運営側の立場となって進行や企画を担当しました。国際フォーラムの運営は、司会やタイムキープ、質疑の活発化など役割が多く、運営の大変さを痛感しました。しかし、当日は同期の仲間が各々の役割を確実に果たしてくれたので、非常に円滑にフォーラムを進めることができました。

今回の経験から、研究発表会が多くのサポートの下に開催されていることを肌で感じる事ができ、今後、研究発表の機会に際しては、これまで以上に真摯に向き合おうと思いました。



齊藤 彰吾  
博士後期課程2年  
物質理工学院 応用化学系  
応用化学コース

私は交流会の企画・司会を担当しました。運営側の事前打ち合わせで、交流会では皆様が話に参加できるように、との目標から、一つの話題を全体に提供し、話していただくという企画を実施しました。この中で、プライベートな会話(趣味や休日の過ごし方等)を伺うことができ、親睦を深めることが出来たと思います。

さらに、博士課程修了後の進路について、ポスドク研究員を経てから中途採用として企業へ就職するという例が多数あることを企業の方からお伺いし、将来の選択肢を増やす情報が聞けたと感じております。

## 2021年度国際フォーラム・未来社会サービス創出ワークショップを終えて



物質・情報卓越教育院  
企画・実施委員会委員長  
関嶋 政和  
(情報理工学院・准教授)

12月7日(火)から12月10日(金)にわたって、国際フォーラム・未来社会サービス創出ワークショップを開催し、盛況のうちに終わることが出来ました。未来社会サービス創出ワークショップにおいて学生の皆さんがお互いに知った上でグループワークに取り組めるようにとの観点から、今年度は、未来社会サービス創出ワークショップを国際フォーラムの後に実施することといたしました。国際フォーラムでは、2日間にわたり博士後期課程1年生の

学生の研究発表と博士後期課程2年生の学生さんによる自主設定論文進捗状況報告がありましたが、博士後期課程1年生の学生さんにとっては発表がQE(Qualifying Examination)の一部であるため、大変緊張されたのではと思います。博士後期課程2年生の学生さんはさすが先輩ということもあり、より情報の技術を使いこなした先進的な研究内容ばかりでした。また、未来社会サービス創出ワークショップは、昨年度は日本語で実施しましたが、今年度はグループワークも発表も全て英語で実施しました。今回扱ったトピックスはいずれも大変難しく、オンライン上で、初対面のメンバーと英語でディベートすることはとても難しかったと思いますが、皆さんよく頑張っていたと思います。4日間のイベントが大変素晴らしい会となりましたこと、お力添えを賜りました全ての皆様に厚く御礼を申し上げます。



## 電圧駆動磁気メモリの開発

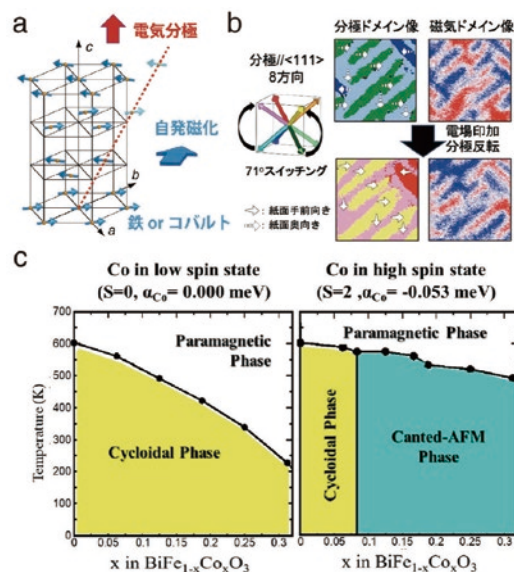
## Development of voltage-driven magnetic memory



東 正樹

科学技術創成研究院 フロンティア材料研究所 教授

HDDなどの磁気メモリは、私達の身の回りで広く使われていますが、情報の書き込みのためにコイルに電流を流して磁場を発生する必要があることから、消費電力が大きくなってしまいう問題があります。強磁性と強誘電性が共存するマルチフェロイック物質において、電場を印加して分極を反転する際に磁化も反転してくれるなら、書き込みのための電力を大幅に低減できると期待できます。しかしながら、室温でそうした現象が起こることが明確に示された物質はありませんでした。自発磁化はスピン(イオンが持つ小さな磁石)が同じ方向に揃った強磁性体を持ちますが、スピンの互いに並んだ反強磁性体でも、隣合うスピンの互いに傾くことで、弱強磁性と呼ばれる小さな自発磁化が発現する事があります。我々が発見した $\text{BiFe}_{1-x}\text{Co}_x\text{O}_3$ は、図aの様にBiイオンの変位による強誘電性と、 $\text{Fe}^{3+}$ の持つスピン5/2の弱強磁性が共存するペロブスカイト型の酸化物です。パルスレーザー蒸着法で作製した単結晶薄膜において、プローブ顕微鏡を用いて、局所的に電場を印加して電気分極を反転すると、面外方向の磁化が反転する事を明らかにしました(図b)。この現象を超低消費電力の磁気メモリに応用するためには、 $0.03\mu\text{B}$ (ボーア磁子)程度と小さい磁化を増大させると共に、高感度の磁気センサーを開発することが必要です。TAC-MI登録学生で修士課程2年のLee Koomokさんは、FeへのCo置換が自発磁化を生み出す機構を解明し、磁化増大の指針を構築するための計算科学研究と、磁気センサーとして用いる半導体薄膜成長の実験的研究の両方に取り組んでいます。まさにTAC-MI生ならではの研究活動です。Leeさんの第一原理計算とモンテカルロシミュレーションによると、高スピン状態の $\text{Co}^{3+}$ が自発磁化発現に寄与すると示唆されており(図c)、今後SPRING-8で放射光X線分光法を行い検証する予定です。我々はこの他にも、全固体電池のための固体電解質や、温めると縮む負熱膨張材料などの開発を、計算科学を活用しながら行っています。



a:  $\text{BiFe}_{1-x}\text{Co}_x\text{O}_3$ における自発分極と自発磁化の関係

b: 電場印加磁化反転の観察

c: 理論計算による自発磁化発現機構の解明

1) H. Hojo et al., *Adv. Mater.*, **29**, 1603131 (2017).

2) K. Shimizu et al., *Nano Lett.*, **19**, 1767 (2019).

## ボロファンの電子構造と光機能

## Electronic structure and photo-function of borophane



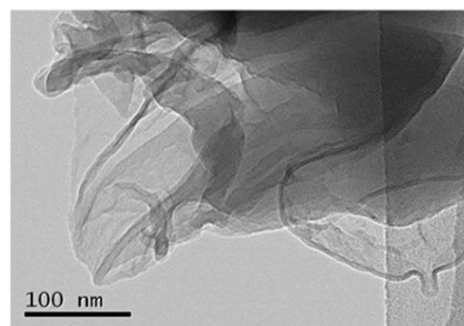
宮内 雅浩

物質理工学院 材料系 教授

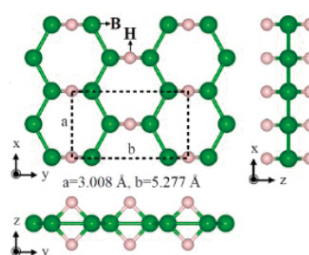
“Beyond Graphene”となる新たな二次元物質の創製が期待されるなか、筑波大学の近藤剛弘准教授が新物質ボロファン(ホウ化水素シート)の合成に成功しました。<sup>1)</sup> このホウ化水素シートの化学組成は「HB」で質量水素密度が8.5%と高く、軽量・安全な水素キャリアとして期待されています。当研究室では、ホウ化水素シートの電子構造を解析し、その構造由来の光機能創出を検討した結果、紫外線の照射のみで水素を放出できる特性を見出しました。<sup>2)</sup> ホウ化水素シートの構造モデルをもとにして第一原理計算をおこなうと、半導体的なバンドギャップを有し、紫外線の照射によって基底状態から水素とホウ素からなる反結合性軌道への電子遷移( $\alpha \rightarrow \gamma$ )が可能であることがわかりました(図1(c))。こうした計算科学からの予想をもとに、実際にホウ化水素シートに紫外線を照射すると、自身のもつ水素の90%以上の水素分子を放出できました。<sup>2)</sup>

従来の水素キャリアである高圧水素ガス、水素吸蔵合金、有機ハイドライドは、爆発の危険性、高重量、水素放出に高温の加熱を要するなどの課題がありました。一方、ホウ化水素シートは固体状態で爆発や火災の危険がなく安全で、高い水素密度を有しているため軽量、そして、紫外線照射といった簡便な操作で水素を放出することができます。当研究室では、ホウ化水素シートの社会実装に向け、可視光応答化による水素生成の省エネルギー化、水素再貯蔵による繰り返し利用の可能性、そして、低コスト製造<sup>3)</sup>などの研究開発を進めています。

(a)



(b)



(c)

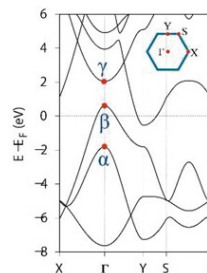


図1 ホウ化水素シートの電子顕微鏡写真(a)、構造モデル(b)、電子構造(c)

1) H. Nishino, T. Kondo et al., *J. Am. Chem. Soc.*, **139**, 13761, (2017).

2) R. Kawamura, T. Kondo, M. Miyauchi et al., *Nature Commun.*, **10**, 4880, (2019).

3) R. Kawamura, T. Kondo, M. Miyauchi et al., *Chem. Lett.*, **49**, 1194, (2020).



# 分子情報と機械学習による相分離型CO<sub>2</sub>吸収剤の設計

Design of phase-separation CO<sub>2</sub> absorbent using machine-learning with molecular information



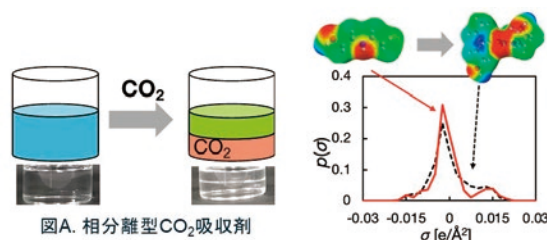
下山 裕介

物質理工学院 応用化学系 教授

発電所や鉄鋼プラントから排出されるCO<sub>2</sub>の回収技術として、放散過程での消費エネルギーの抑制が期待される相分離型吸収剤が注目されています。相分離型吸収剤とは、化学吸収液であるアミン系溶媒と、物理吸収液であるアルコール系やグリコール系溶媒の混合溶媒であり、図Aに示すように、均一な液相を形成しますが、CO<sub>2</sub>の吸収により二液相に相分離する吸収剤であります。相分離型吸収剤によるCO<sub>2</sub>回収プロセスを実用化するには、吸収剤に含まれるアミン系溶媒とグリコール系溶媒の組み合わせを選択するだけでなく、CO<sub>2</sub>の吸収後の相状態を予測することも必要となります。

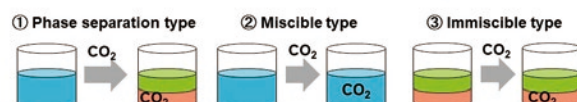
私たちは、分子情報を入力した機械学習を用いて、相分離型吸収剤の設計指針の確立に取り組んでいます。分子情報として、量子化学計算から取得される分子表面における電荷分布を用いています。図Bに示すように、分子表面における正・負電荷が占める表面積を分布図として表すことで、アミン系溶媒やグリコール系溶媒分子の極性を定量的に表現することができます。この分子表面における正・負電荷における表面積を入力データとした機械学習により、アミン系溶媒、アルコール系溶媒、ならびにグリコール系溶媒を組み合わせた61個の吸収剤について、CO<sub>2</sub>吸収における相分離、均一相形成に関する相状態の予測手法を構築しました。CO<sub>2</sub>吸収により、相分離を生じる吸収剤、均一相を形成する吸収剤、非混和性の吸収剤(図C)に対して、約90%の正解率で相状態を予測することができました。ここで構築した相分離型吸収剤の相状態の予測手法を駆使して、相分離型吸収ゲルの開発に取り組んでおり<sup>1) 2)</sup>、CO<sub>2</sub>回収プロセスの効率化、消費エネルギーの低減を目指しています。

分子情報と機械学習を駆使した予測手法を、CO<sub>2</sub>吸収剤の開発に利用することで、吸収剤の相状態の予測に留まらず、吸収剤を構成する成分選定にも応用することで、迅速な研究展開が今後期待されます。



図A. 相分離型CO<sub>2</sub>吸収剤

図B. 分子表面電化分布



図C. CO<sub>2</sub>吸収における相状態

- 1) Taishi Kataoka, Yasuhiko Orita, Yusuke Shimoyama, Analysis of CO<sub>2</sub> mass transfer on gas absorption into phase-separated gel, *Industrial & Engineering Chemistry Research*, **60**, 8236 – 8243, (2021).
- 2) Taishi Kataoka, Yasuhiko Orita, Yusuke Shimoyama, CO<sub>2</sub> absorption and desorption using phase-separation gel, *Chemical Engineering Journal*, **428**, 131126, (2022).

# 水素キャリア製造プロセス設計のための半経験的予測モデルの構築

Development of semi-empirical prediction model for process design for production of hydrogen carrier



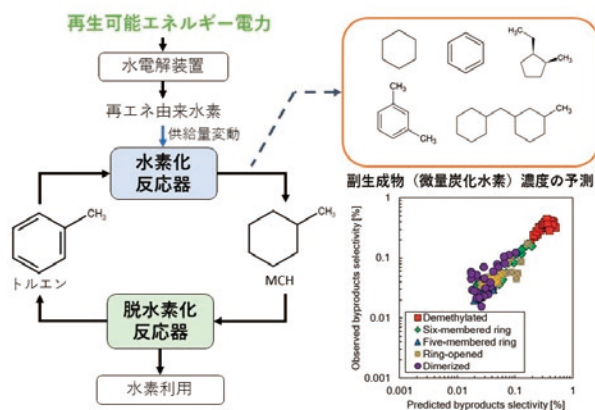
松本 秀行

物質理工学院 応用化学系 准教授

低炭素社会の実現に向けた、再生可能エネルギー(以下、「再エネ」)由来水素の貯蔵物質(水素キャリア)の製造プロセスの設計においては、再エネ由来水素の供給量の変動操作下で変動しやすい水素キャリアの品質やシステム全体のエネルギー消費量を安定的に制御するための触媒・プロセス技術の開発が注目されています。本稿では、水素キャリアとしてのメチルシクロヘキサン(MCH)の製造において、生成MCH溶液の品質に影響をもたらす微量炭化水素生成反応の予測手法の構築を紹介します。

私たちは、ベンチスケールのトルエン水素化反応試験において確認されている反応管出口の最大約80種類の炭化水素系化合物濃度を効率よく予測する手法として、トルエン水素化反応器の物理モデル(触媒表面の化学種吸着を伴う反応速度式に基づく流通式反応器モデル)を組み合わせた半経験的予測モデルの適用を提案しています。半経験的予測モデルは指数則型反応速度式モデルに類似した式で表され、主鎖の構造に基づいて分類されたグループ(例:脱メチル化物、5員環類など)について代表的な生成速度の予測モデルを構築しました。モデルの構築過程で、化合物の分類方法がモデルの予測精度に影響を及ぼすことを明らかにし、部分的最小二乗(PLS)回帰モデルに基づく試験データとシミュレーションデータの解析によって予測精度の改善をもたらす化合物構造の新たな特徴量の導入とグルーピングを見出しています。

このように、私たちは、化学プロセス内外の時間的変動に対応しうる高効率な触媒・プロセスの開発に取り組み、物質開発⇒デバイス開発⇒システム開発を通観できるデータ・情報のマルチスケールモデリングと、粒度の異なるモデルの統合的利用についての方法論の構築を追及しています。



MCH製造プロセスの変動操作設計のための副生成物生成予測

- 1) X. Cui et al.; *J. Jpn. Petrol. Inst.*, **62** (2), 67-73 (2019).
- 2) 松本秀行ら; 石油学会熊本大会, 2A04 (2020).



# TAC-MI授業科目紹介 「新産業創出最前線」

## ～2021年度「物質×情報×新産業」フロンティアフォーラム～

マテリアルズ・インフォマティクス(MI)の実社会への応用や、データ科学をもとにした新産業分野の創出等、物質・情報科学と社会サービスを結びつける取り組み例を、企業、大学、研究機関の第一線で活躍する講師陣がオムニバス形式でオンラインでの講義を行いました。

本講義は、オープンセミナー「2021年度「物質×情報×新産業」フロンティアフォーラム」として、学内教職員・学生・会員企業関係者向けにも公開されました。



### 第1回 「Data Drivenな素材・材料開発の重要性」



住友化学株式会社  
技術・研究企画部  
担当部長  
木全 修一

2021年12月17日(金)  
14:30～16:00

Society5.0実現のための政府の科学技術・イノベーション基本計画を紹介し、日本の強みである素材・材料分野について、企業でのマテリアルズインフォマティクス、プロセスインフォマティクスの進め方について説明。

### 第2回 「Hyperfluorescence<sup>TM</sup>: 有機ELの未来を創るゲームチェンジャー、大学発ベンチャー」



株式会社Kyulux  
取締役/最高戦略責任者  
安達 淳治

2021年12月17日(金)  
16:15～17:45

高効率に蛍光を発生できるHyperfluorescenceの原理発明と、それを究極の有機EL発光技術と位置付けて、産官学連携を利用して世界でも稀な先端材料のファブレスベンチャーとして成長を続けている現状を紹介。

### 第3回 「有機合成のデジタル化は実現するか」



京都大学  
大学院工学研究科  
教授  
松原 誠二郎

2022年1月14日(金)  
14:30～16:00

既存のデータベースを元に設計した有機分子構造を入力すると、その合成反応経路を探索し、反応条件の自動設定が可能となる「逆合成解析」について解説。得られた合成反応候補について、実際に合成実験による検証を自動で行える実験装置「chemputer」を紹介。

### 第4回 「量子化学計算に基づく化学反応の発見：計算・情報・実験の融合」



北海道大学  
大学院理学院  
教授  
前田 理

2022年1月14日(金)  
16:15～17:45

ポテンシャルエネルギー曲面の解析により反応経路の自動探索を可能とするAFIR法と、反応経路ネットワークの速度論解析(RCMC法)を組み合わせて、可能性のある反応経路を予測、抽出する手法を解説。予測された化学反応のデータベース化により、所望の化学変換を実現する化学反応を提案できるAIの構築を目指す。

### 第5回 「クラウドによるデータ科学～AIと量子コンピュータ技術を活用した研究・産業応用～」



アマゾン ウェブ サービス  
ジャパン合同会社  
技術統括本部  
シニアソリューション  
アーキテクト  
宇都宮 聖子

2022年1月21日(金)  
14:30～16:00

前半は、研究開発にクラウドを使う利点(必要な時に必要なリソースを必要な量だけ確保)とAWSの機械学習機能について、創業・MI分野の実例を交えて紹介。後半は、量子コンピューティング研究動向とAWSの量子コンピューティング技術について解説し、NISQ (Noisy Intermediate Scale Quantum)として知られる量子・古典ハイブリッド計算による量子化学・材料分野への適用について説明。

### 第6回 「マイクロ波プロセスのグローバルスタンダード化～C NEUTRAL 2050 design」



マイクロ波化学株式会社  
取締役CSO  
塚原 保徳

2022年1月21日(金)  
16:15～17:45

会社の立ち上げ(ビジネスモデルとその軌道修正の推移)と事業内容、テクノロジー(複素誘電率のデータベースを蓄積し、マイクロ波プロセスによる反応系デザイン、反応器のデザイン)、ベンチャーにおける個々人の在り方について経験を交えて説明。



# 企業アドバイザーからのメッセージ

## 日本特殊陶業株式会社



研究開発本部  
研究部  
部長

大塚 淳 様



変革の象徴・拠点として21年8月に完成した「N-FOREST」(小牧工場内)

私たち日本特殊陶業は、1936年に日本碍子(現日本ガイシ(株))の自動車エンジン着火用のスパークプラグ部門が独立した会社です。独立後は、自動車排ガス用の各種センサの他、産業用セラミック製品、情報通信機器や半導体製造プロセスに使用されるセラミックパーツなど、セラミックス技術をコアとした各種製品へと事業拡大してきました。現在、スパークプラグや排ガス用センサなどいくつかの製品が高い世界シェアを誇っていますが、逆にそれは当社の事業の中心がエンジン自動車用製品であることも示しています。

そのような状況の中、今、当社を取り巻く環境は大きく変わりつつあります。その一つがEVなど自動車の電動化の加速であり、それが象徴するサステナブルな社会の到来です。今後、当社はそのような新しい社会に貢献すべく、事業ポートフォリオの転換をはかっていく方針で、“Change with Will”をキーワードに新しい事業領域にチャレンジしていこうとしています。私たち研究開発本部には、新しい事業のコアとなる新材料や新技術の開発が期待されており、日々研究開発に取り組んでいます。

もう一つの大きな流れが研究開発へのDXの浸透で、材料探索・開発で言えばマテリアルズ・インフォマティクス(MI)の広がります。セラミックスを含む素材産業は比較的日本が強い分野で、これまでの技術と経験の蓄積で日本がリードを守ってきました。しかし、経験や勘をデジタルに置き換えるDXはその差を解消する脅威になりかねず、我々はMIでもリードを保っていく必要があると考えています。それが、当社がTAC-MIに参加するモチベーションです。素晴らしい人材の創出と人的・技術的ネットワークの構築が日本の競争力向上につながるものと信じており、当社もそこに少しでも貢献できればと考えています。

学生の皆様には、世界の科学の発展と日本の産業競争力向上のため、高い志を持って取り組んでいただきたく、当社もそれを応援します。

## セイコーエプソン株式会社



技術開発本部  
分析CAEセンター  
課長

小澤 欣也 様

環境ビジョン2050

EPSON

2050年に「カーボンマイナス」と「地下資源<sup>\*1</sup>消費ゼロ」を達成し、持続可能で豊かな社会を実現する

達成目標

- 2030年：1.5℃シナリオ<sup>\*2</sup>に沿った総排出量削減
- 2050年：「カーボンマイナス」、「地下資源<sup>\*1</sup>消費ゼロ」

アクション

- 商品・サービスやサプライチェーンにおける環境負荷の低減
- オープンで独創的なイノベーションによる循環型経済の牽引と産業構造の革新
- 国際的な環境保全活動への貢献

エプソンは、2008年に2050年をゴールとした「環境ビジョン2050」を策定し、10年後の2018年にスタートメントを見直し、進めるべき3つのアクションを定めました。そして、2021年3月には、脱炭素と資源循環という大きな社会課題に対するエプソンの強い意志を示す具体的な達成目標を設定するなど、さらなる改定を行いました。

\*1 原油、金属などの枯渇性資源

\*2 SBTイニシアチブ(Science Based Targets initiative)のクライテリアに基づく科学的な知見と整合した温室効果ガスの削減目標

セイコーエプソングループは1942年創業以来培ってきた「省・小・精の技術」をベースにお客様の期待を超える商品・サービスをお届けするべく、創造と挑戦を重ねてきました。今年、当社は創業80周年を迎えます。過去の歴史を振り返りながら、私たちの将来に向けてなすべきことをしっかりと考えて、「持続可能で豊かな社会を実現する」という「ありたい姿」に向け、ぶれることなくしっかり前を向き果敢にチャレンジしていきたいと思っています。

我々の事業活動はすべて、「ありたい姿」の実現に向けて進んでいます。これまでの、性能のいい商品を作って売る、という方法から、「社会課題」を起点に私たちの技術でその課題を解決していく、という発想に変えようとしています。私たちのすべての事業活動がどう社会課題と向き合っているのか、どう解決していこうとしているのか、常に考え続けています。

また2021年3月に制定した『Epson 25 Renewed』では、「環境」、「DX」、「共創」を重点ポイントに置いています。その中で、特に「環境」について、「環境ビジョン 2050」では、2050年までに「カーボンマイナス」と「地下資源<sup>\*1</sup>消費ゼロ」とすることを宣言しました。

本プログラムにより我々が向き合う社会課題解決に向けて、共に創造し、解決できる人材が育成されていくものと期待しております。特に環境技術に関しての大きなチャレンジ目標の達成には、本教育院が掲げる「物質×情報」が鍵になってくると思います。

我々もこのプログラムに参加させていただくことにより、本院先生方、学生、参加企業の皆様とともに一緒に学ばせていただき、「共創」を実現したいと考えております。

特に学生の皆様にはぜひ気軽に議論をしていただければありがたく思っております。どうぞよろしくお願いいたします。

## TAC-MIニュース

### 受賞ニュース

横地浩義さんが環太平洋国際化学会議2021にてStudent Research Competition Winnerに選ばれました

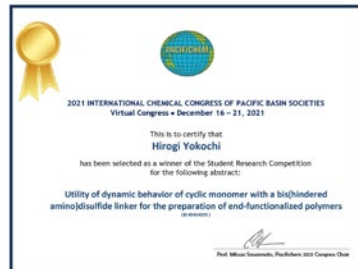


物質理工学院  
応用化学系  
応用化学コース  
博士後期課程1年  
横地 浩義

TAC-MI登録学生の横地浩義さんが2021年12月16日~21日に日本(ホストソサイエティ)、アメリカ、カナダ、ニュージーランド、オーストラリア、韓国、中国の7学会の共同主催で開催された国際学会、環太平洋国際化学会議2021にてStudent Research Competition Winnerに選ばれました。

会期中に開催されたStudent Research Competitionでは、講演申込を行った学生を対象とした1,400名の応募者の中から2分間の事前録画の講演動画を視聴した参加者による選考投票が行われ、最終的に40名のWinnerが決定され、横地さんがその一人に選ばれました。

横地さんは、物質理工学院の青木大輔先生、大塚英幸先生の指導の下で、動的な大環状分子を用いた高分子の末端構造制御に関する研究を推進しています。所属する研究室では、簡便な実験操作で、所望する分子骨格の形状を環状のトポロジーへと変換する手法を開発しており、今回の発表では、この手法で得られる大環状分子を利用することで高分子の末端構造や分子量など様々な一次構造を制御可能であることを口頭発表し、その研究成果が評価されました。発表した研究成果は2020年にイギリス王立化学会の「Polymer Chemistry」誌に掲載されており、Front Coverにも選出されています。





## AlphaFold2とオープンサイエンス

2020年、AlphaGoなどで有名なDeepMind社のAlphaFold2(以下AF2)が生命科学に激震をもたらしました。タンパク質立体構造予測問題の国際的コンテストCASPで他のチームに圧勝したのです。タンパク質はアミノ酸が鎖のようにつながった分子で、それらが折りたたまれて複雑な立体構造を取り、生体内で代謝などの化学反応や物質輸送、筋肉の収縮などの機能を発揮しています。タンパク質の立体構造を理解することで、生命現象がどのような分子メカニズムで起きているかを理解し、疾患の原因タンパク質の構造を理解することで創薬にも役立てることができますが、立体構造を実験的に決定するにはX線結晶構造解析やクライオ電子顕微鏡などの手法を用いる必要があり時間と費用がかかるため、計算による予測の需要が高いと言えます。

これまで類似した構造が過去に知られていないタンパク質の構造を予測するのは難しいとされてきましたが、AF2はCASP14コンテストで約3分の2のタンパク質について実験で決定した構造と区別が難しいほど高精度な予測結果を出力しました(例:図1、青:AF2の予測結果、緑:実験で決定した構造)。2020年にCASP14の結果が出た際には詳細は非公開でしたが、2021年7月にNatureに論文が公開されると同時にgithubにソースコードや学習済みモデルが公開され、第三者が利用可能となり再び大きな話題となりました(なお、公開当時は商用利用が不可能なライセンスでしたが、現在は商用利用も可能となっています)。論文によれば、AF2は最新の深層学習技術であるtransformerを応用した非常に複雑なモデルになっており(図2)、また従来よりもはるかに大規模な遺伝子配列データベースを学習したことにより高い精度を達成しています。

AF2の手法と実装の公開とともに、興味を持った世界中の生命科学研究者がインターネット上でその手法の詳細や利活用法について議論を始めました。特にTwitterでの議論が活発で、公開翌日にはインストールや実行の方法が共有されることに始まり、本来AF2が想定していなかったタンパク質複合体の予測も可能であるという報告がなされ、そのツイートが論文にも引用されました。(bioRxiv 2021.07.27.453972)



東京工業大学  
情報理工学院  
准教授  
関嶋 政和



東京工業大学  
物質・情報卓越教育院  
特任講師  
安尾 信明

そのほか、2021年7月21日に行われたTwitter上のライブ配信では関嶋・安尾のほか、情報理工学院の大上雅史助教、東大農学部森脇吉隆助教などが登壇し700人以上の聴衆を集めるなど、研究活動のあり方やスピード感が変わろうとしている様子が見られました。

一方、AF2も万能ではありません。一部のタンパク質では予測がうまくいかないことが知られているほか、タンパク質の立体構造の水中でのゆらぎ、AF2がタンパク質の折りたたみに関して何を学習しているのかなど、多くの解明すべき点が残っており、今後の進展に期待が持たれます。

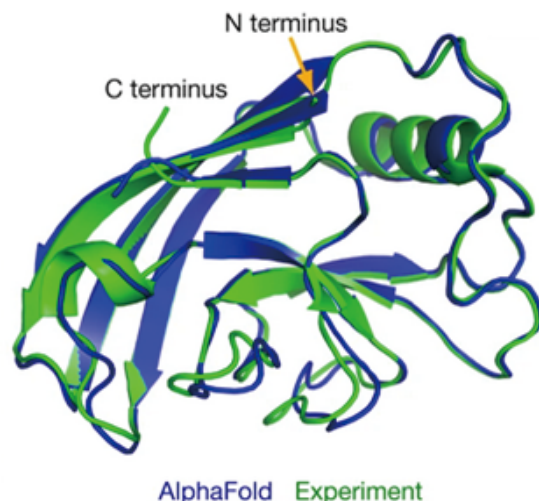


図1: AlphaFold2の予測構造の例

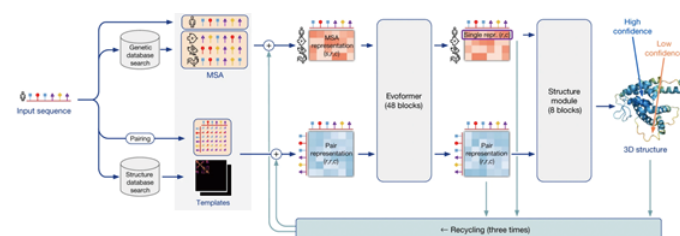


図2: AlphaFold2のモデル

## 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(2022年3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 / 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。)

