



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

# News Letter

Vol.11  
Nov. 2022

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

- ◆ 2022年度成果発表会開催報告 : P.2-3
- ◆ 2022年度秋期登録学生紹介 : P.4-5
- ◆ TAC-MIプログラム担当教員研究最前線 : P.6
- ◆ 第3回最先端研究セミナー開催報告 : P.7
- ◆ TAC-MIセミナー「物質科学×情報科学」入門開催報告 : P.7
- ◆ TAC-MIニュース、企業アドバイザーからのメッセージ : P.8



# 2022年度 博士後期課程学生の成果発表会開催報告

物質・情報卓越教育院は、2022年6月30日（木）に、大岡山キャンパス デジタル多目的ホールで、博士後期課程学生の成果発表会を開催しました。4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。今回は、新型コロナウイルス感染症の感染予防のため、企業関係者の対面参加は1社あたり2名までの制限を設け、対面とZoomのハイブリッド形式で開催しました。



成果発表会 発表学生集合写真

## 第1部 博士後期課程1年の学生による成果発表会

第1部の開会式では、物質・情報卓越教育院の山口猛央教育院長が開会の挨拶を行いました。続いて、博士後期課程2年の学生の司会進行により、博士後期課程1年の登録学生23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、先輩学生からは活発な質疑があり、学生たちは自身の研究をアピールすることができました。この発表会は、様々な研究分野の参加者に対して自身の研究内容を発表し、フィードバックを受ける良い機会となりました。

当日のプログラム	時間	内容
	9:00~14:42	<第1部> 博士後期課程1年の学生による成果発表会
	14:50~15:31	<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 TAC-MI 優秀特別賞の表彰
	15:45~17:15	<第3部> 企業メンターと学生との面談
	17:25~18:25	<第4部> 企業アドバイザー連絡会
	18:30~19:00	<第5部> 意見交換会



デジタル多目的ホールでの発表会開会式



山口猛央教育院長による開会挨拶

## 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

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年の登録学生による自主設定論文に関する進捗の発表を英語で行いました。

自主設定論文は、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で得た学修成果なども活用します。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。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、英語で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、実施した研究結果を論文にまとめます。



D2学生が司会進行、運営を担当



博士後期課程1年生による発表



博士後期課程2年生による発表



参加者による活発な質疑応答

## TAC-MI優秀特別賞の表彰



TAC-MI 優秀特別賞を受賞した（左から）山本さん、山口教育院長、Haoさん、横地さん



第1部、第2部に続き「TAC-MI 優秀特別賞」の表彰を行いました。この賞は、今年度から新たに始まった制度で、特筆すべき成果（受賞成績や顕著な研究業績）を挙げた学生に対して年1回表彰するとともに、副賞として追加の経済支援を行います。厳正なる審査の結果、5名の学生が受賞しました。

Hao Yingquan（物質理工学院 応用化学系 博士後期課程3年）  
張 葉平（物質理工学院 材料系 博士後期課程2年）  
横地 浩義（物質理工学院 応用化学系 博士後期課程2年）  
山本 拓実（物質理工学院 応用化学系 博士後期課程1年）  
巽 由奈（物質理工学院 応用化学系 修士課程2年）

# 2022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・情報卓越教育院は、2022年9月27日(火)に、大岡山キャンパス西9号館3階講義室で、修士課程学生の成果発表会および産学交流イベントを開催しました。

午前の第1部では、修士課程の登録学生14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、学内外からオンライン参加者も含め、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修士課程の学生との面談を実施し、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29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	9:30~12:10 <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~
	13:00~14:00 <第2部>	企業メンターと学生との面談
	14:10~17:10 <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~
	17:20~18:30 <第4部>	意見交換会

## 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部の開会式では、物質理工学院の関口秀俊学院長及び物質・情報卓越教育院の山口猛央教育院長が開会の挨拶を行いました。続いて、各ブースに分かれ、修士課程の登録学生14名がポスター発表を行いました。企業関係者や企業プログラム担当者は学生一人一人のポスターをじっくりと見て回り、ポスターを囲みながら、発表学生と活発な意見交換を行いました。また、対面でのポスター発表と並行し、オンライン参加者向けにZoomでのポスター発表も行いました。

参加者からは「学生の皆様がDXを用いつつ材料開発の研究されており、産業界にとって非常に有用な人材が育成されていると感じた」「専門分野以外の人に対して伝えるようにわかりやすく説明している人が多かった」などの感想が寄せられました。また、発表学生からも「異分野の先生や企業の方の視点からコメントをいただけるのは新鮮だった」「企業の方とのディスカッションを通して、企業で重要視している点を知ることができ、研究の意義や利点を見つめ直す良い機会にすることができた」などの感想が寄せられ、企業や異分野の方に対し、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。



成果発表会で発表した修士課程の学生と博士課程の参加学生



ポスターセッションの様子

## 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29社が本教育院の登録学生に向けて、各ブースに分かれ、企業紹介を行いました。

学生からは「博士学生に特化した話が聞いてよかった」「企業ごとに特色が強くなる説明をしていただいたため、自身のキャリアプランに合う企業のイメージがより固まった」「自分の研究手法が社会でどんな問題を解決できるか、ヒントを得ることができた」との声が寄せられ、好評を博しました。

会員企業からも「今回、対面で学生と直接話をするのができ、オンラインよりも学生が考えていることや関心度を知ることができ、大変有意義な時間だった」との感想がありました。

産学交流イベントは、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、学生が知ることのできる良い機会となりました。



各ブースでの企業紹介の様子

## 参加企業 29社

AGC株式会社 / 旭化成株式会社 / ENEOS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 /  
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 インダストリー株式会社 /  
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 / 戸田工業株式会社 /  
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)

今年度は3年ぶりに対面で成果発表会を開催することができました。イベントの後には、意見交換会を開催し、企業の方と学生、教員が交流を深めました。また、面談や意見交換会だけでなく、発表後に寄せられた学生へ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。

# 2022年度秋期登録学生紹介

## M2



理学院  
化学系  
化学コース  
修士課程2年

## M2

### 大高 勝太郎

私は、アミノ酸の一種であるシステインとシグナル伝達物質との反応で生成する活性中間体の動きを解明するために、活性中間体のモデルとなる化合物を用いた有機化学的手法で解析していく研究を行なっています。

今までは実験を通じたアプローチで解析を行なってきましたが、今後は物質・情報卓越教育院で学ぶことになるマテリアルズシミュレーションや情報技術等を取り入れ、研究能力をさらに向上させていきたいと考えています。



理学院  
化学系  
化学コース  
修士課程2年

## M2

### 森田 悠斗

シクロペンタジエニル配位子を有するレニウム錯体(CpRe)は高い反応性を有しており、炭化水素分子の炭素-水素結合を切断することが知られています。私はこのCpReにケイ素を複数配位させた錯体を合成し、これを触媒とする分子変換反応の開発を目指しています。

物質・情報卓越教育院では、情報科学・計算科学について深く学び、物性や反応性を予測し、効率的な錯体触媒開発へ応用していきたいと考えています。



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

## M2

### 登倉 大貴

私は、精密合成高分子のプラットフォームに、薬剤担持機能、標的細胞選択的に結合する機能、細胞内環境に反応して構造を変化させる機能を創り込むことによって生体内で高度な機能を発現するナノ医薬品(ナノメディシン)の研究を行っています。生体内でこうしたナノメディシンの機能を最大限に発揮させるためには、サイズ、形状、表面機能化などのさまざまなパラメータを最適化する必要があります。これらの作業には多くの時間を要します。

物質・情報卓越教育院では、シミュレーションやマテリアルインフォマティクスをナノメディシンの設計に取り入れることで、ナノメディシン設計のための新しいパイプラインを確立したいと考えております。



物質理工学院  
材料系  
材料コース  
修士課程2年

## M2

### 後藤 祐己

私は、電子・エネルギー材料応用に向けた、層状構造をもつ酸化物薄膜について研究を行っています。薄膜のより最適な合成法を確立し、構造や結合・化学状態を制御した新材料創成を目指しています。

物質・情報卓越教育院では、計算科学・情報科学を用いた研究手法を身に付け、自身の研究をより高度なものにするのと同時に、私自身のスキルアップを目指します。



物質理工学院  
応用化学系  
応用化学コース  
修士課程2年

## M2

### 山下 浩輝

私は、抗体という病原物質を認識する生体分子を用いた簡便かつ高感度なバイオセンサの設計に取り組んでいます。在宅で誰でも簡単にいろいろな病気を診断できることを目標にしており、人々が病院に行かなくてもいいような社会サービスを作ることが目標です。

TAC-MIの活動を通して、情報科学を用いた材料設計の技術を習得し、物質研究と情報技術の両方を使いこなせる研究者を目指したいと思います。



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

## M2

### Yang Yinghui

My research focuses on developing the novel fluorescent-dye-labeled immunosensor, Quenchbody (Q-body). The dyes are quenched by antibodies and released when antigens appear, which leads to a convenient tool for rapid and sensitive detection. I am going to develop the general method for constructing Q-body based on camelid-derived antibody fragment, nanobody. It is vital to pick exact positions for dye labeling. However, the small size of nanobody makes it challenging to choose two sites on it. It is feasible that I can compare the structures and try to find them, which is probably not efficient enough. Consequently, I would like to ask for the help of computer science technology. I am thinking if the simulation can show the guidance to accelerate the process. I believe that TAC-MI would provide me with the opportunity to inspect my research from a different perspective.

Home country China



物質理工学院  
応用化学系  
応用化学コース  
修士課程2年

## M2

### 于 佳彤 (ウ カトウ)

私は福島・庄子研究室で、トリプチセンという分子の自己集合性を用いて、温度や光といった刺激に応答する高分子の開発を行っています。

物質・情報卓越教育院では、ブラクティクススクールなど、異分野の研究者と交流する機会がたくさんあるので、広い視野を持ち、社会に貢献できるように頑張ります。自分の研究に繋がるようなシミュレーションを頑張るとともに、メンターの方に、社会で今、求められるスキルを教えてくださいたいと思っています。

Home country China

## M1



物質理工学院  
応用化学系  
ライフエンジニアリングコース  
修士課程1年

## M1

### 今井 恭祐

私は、生体内での金属触媒反応を利用したがん現地での抗がん剤合成、それによる副作用を抑えたがん治療について研究を行っています。TAC-MIには「TSUBAME」を自由に使える環境が整っていると聞いたときから興味を持っていました。この大学に入る前から知っていた「TSUBAME」を使いこなせるようになって、早く友達に自慢したいです。これから研究室との両立が大変になりそうですが、現在所属している陸上部での活動も合わせて元気に頑張ってきてたいです。



工学院  
機械系  
エネルギーコース  
修士課程1年

## M1

### 北野 智己

近年、地球大気中のCO2濃度は劇的に増加しており、化石燃料を用いた発電所等から排出されるCO2の高性能な回収法の開発が求められています。私の研究では、低熱容量、軽量で高い安定性を有する革新的な固体CO2吸収材の開発を目指しています。

しかし、実験のみの研究開発では膨大な時間を要する可能性が高く、社会実装が遅れてしまいます。そこで、計算科学や情報科学についてTAC-MIで学び、活用することで、材料開発の効率化を図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1年

M1

清水 篤

私の研究内容は、アモルファス酸化半導体を用いた革新的なガスセンサ開発です。ナノスケール薄膜の電子状態や欠陥を上手く活用することで、ガスセンサの劇的な性能向上を試みています。

物質・情報卓越教育院では、機械学習や第一原理計算を習得し、ガスセンサの性能向上の起源の解明や材料探索の研究に繋げていくことで、物質と情報の二つの視点から研究できる複素人材を目指し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

福井 秋宙

私は有機無機ハイブリッド型強誘電体を研究対象としています。有機無機ハイブリッド型強誘電体は高い圧電定数を示すことから非常に注目されていますが、合成プロセスに課題があり、現在、私は再現性の高い単相試料合成手法の確立に取り組んでいます。

分子性強誘電体分野の材料開発を飛躍させるため、本教育院にて計算・情報科学の素養を身に付け、さらに自身の研究に援用することで圧電特性等の制御因子解明に挑戦します。



物質理工学院  
材料系  
材料コース  
修士課程1年

M1

吉川 桜良

私は、パワーエレクトロニクス分野で期待されている超ワイドギャップ酸化物の薄膜新材料を探索し、パワーデバイスの性能向上に挑戦しています。

物質・情報卓越教育院のカリキュラムを通して、第一原理計算を用いた電子構造解析やシミュレーションの技術を身に付け、実験と計算科学の両方のアプローチから材料の特性を本質的に理解し、新材料開発へと生かしていきたいです。



物質理工学院  
材料系  
材料コース  
修士課程1年

M1

高木 虎之介

私は、半導体量子ドットの一つであるペロブスカイトナノ結晶の表面配位子交換による発光特性の変化について、単一ナノ結晶レベルで研究しています。ペロブスカイトナノ結晶は、結晶表面を低分子有機化合物で保護されており、これを適切に選択することで表面欠陥が抑制され発光効率が上昇します。

物質・情報卓越教育院では、シミュレーションや機械学習を駆使して、新規表面配位子の探索を行いたいと考えています。



理学院  
化学系  
エネルギーコース  
修士課程1年

M1

小野寺 丈

透過性のあるp型半導体のNiOの上に可視光吸収を有するRu光増感部とOs光増感部をポリマーにして担持し、CO<sub>2</sub>還元能を有するRu触媒部を光増感部と炭素鎖で繋いだ分子光カソード電極の作製および活性評価を行っています。

物質・情報卓越教育院では、計算科学と情報科学を学んでいながら、それを研究に取り入れていくのは勿論、俯瞰力を養うことで、社会のニーズやサービスへの発展を理解し、研究や自分自身の立ち位置を再認識しようと思っています。



理学院  
化学系  
化学コース  
修士課程1年

M1

鈴木 啓朗

私の研究室で研究されてきた細孔性ネットワーク錯体の配位子の類似分子について、その複雑なレドックス挙動を主に電気化学測定を用いて多角的に調べています。将来的にはこの分子を用いた機能性材料開発を行おうと考えています。

物質・情報卓越教育院では、計算化学や機械学習を学習します。広い意味で異分野融合にも力を入れていきたいです。



理学院  
化学系  
化学コース  
修士課程1年

M1

本間 寛治

私は金属電極に単一の分子が架橋した"単分子接合"についての研究を行っています。単分子接合の電子輸送特性や光学特性を明らかにすることで、単一分子サイズのデバイスの開発を目指しています。

物質・情報卓越教育院(TAC-MI)では最先端の情報科学の手法を勉強し、従来の解析手法では発見できなかった単分子接合の性質を明らかにしたいと考えています。さらに、TAC-MIの対外的な活動を通して、社会を取り巻く問題の解決に活かす総合力を養うことを目標に研究生生活に取り組みます。



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

富士田 李紗

私は、コーヒー豆に含まれるカフェ酸から誘導されるビニルカテコールを用いて、多分岐ポリマーの合成について研究しています。カテコールは自然界で水中での接着などの機能を担っており、材料への展開が期待されています。

本教育院で計算科学を学び、重合条件と物性、機能の相関についてシミュレーション等を活用しながら知見を深めていきたいと考えています。



理学院  
化学系  
化学コース  
修士課程1年

M1

祝 伊穎(シュクイン)

私の研究内容は、デザインした複数の相互作用点を有するPCNを合成し、環境応答性動的構造分子の包接を行い、ホスト-ゲスト相互作用を分析することにより、PCNの骨格構造とゲストを取り込める細孔環境の相関を体系的に明らかにすることを目標としています。

物質・情報卓越教育院では、基礎的な計算科学を学び、実験の結果と組み合わせ、PCN細孔部分の空間特性を計算・予測できるように予測モデルを構築し、より高い確度での解析法へと昇華させたいと考えております。

Home country China



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

于 佳芸(ウカゲイ)

私は、様々な湾曲高分子フィルム表面のひずみの経時変化を解析し、湾曲クリーブ現象を理解する研究を行っています。湾曲挙動の理解に基づき、フレキシブルデバイス基板の設計指針提案を目指しています。

物質・情報卓越教育院では、マテリアルズインフォマティクスについて学び、自身の専門である物質科学の研究に活かしたいと考えています。さらには、プラクティクススクールや未来社会サービス創出ワークショップ等を通じて、研究を社会へ還元させる実践的な経験を積みたいと考えています。

Home country China

## 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、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、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、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クススクール、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 2022年10月時点

博士後期課程			
D3	20名	D2	23名
		D1	25名
修士課程			
M2	15名	M1	12名

## 有機デバイスの高性能化に向けたオペランド計測技術の開発

Development of operand measurement for high-performance organic devices



間中 孝彰  
工学院 電気電子系 教授

近年、オペランド計測とよばれる計測技術が注目されています。これは、例えば電子デバイスであれば、デバイス内部を動作下で直接観測する計測技術です。我々は、研究が活発化している有機エレクトロニクス素子の動作解析を目的として、分光学的手法によるオペランド計測技術の開発を進めています。電子デバイスの動作は、デバイス内部でのキャリアの動きで決まります。通常の電気測定では、例えば入力（電圧）と出力（電流）の関係から、デバイスの動作モデルに従って解析を行います。しかし、新しいデバイスではモデルが不完全な場合もあり、デバイスの動作をより深く知るためには、材料の中を流れるキャリアの様子を直接可視化することが有効です。我々はキャリアの動きを可視化するために、電界誘起光第2次高調波発生 (EFISHG) を中心とする様々な手法を用いています。

図1は、円形電極から注入されたホールがTIPSペンタセン薄膜中を輸送される様子を可視化した画像です。この画像からは、様々な情報が得られます。光の強度は電界強度と直接関係するため、画像を解析することで電界強度が得られ、キャリアの移動速度や移動度が求められます。また、円形の電極から、楕円形状にキャリアが拡がる様子を確認できますが、これはTIPSペンタセン単結晶薄膜における移動度異方性を表しています。また、キャリア分布からはトラップ密度なども直接評価できます。我々は、有機電界効果トランジスタ (OFET) の研究からスタートしたこの評価手法を有機ELや有機太陽電池の研究に展開していきました。さらに、有機デバイスに限らず、無機のデバイスにおいても本手法が有効であることも示しました。

光学的手法を用いることで、従来の電気的手法では見えなかった現象を観測することができます。我々はこのSHG法だけでなく、様々な分光学的手法 (図2) を駆使したオペランド計測技術の開発を通して、有機デバイスの性能向上に資することができると考えています。

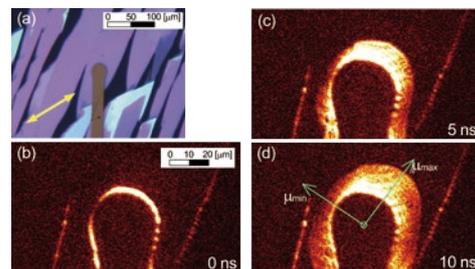


図1 円形の電極から輸送されるキャリアをSHG法で直接可視化した様子

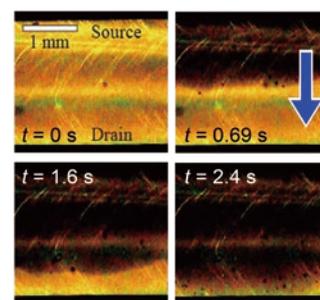


図2 蛍光減衰法によるキャリア輸送の可視化

- (1) T. Manaka, M. Iwamoto, Light Sci. Appl., 5, e16040 (2016).  
 (2) T. Manaka, D. Taguchi, T. C. Chiang, Phys. Status Solidi A, 217, 1901031, (2020).

## 電子構造計算に基づくナノ構造体とその固体相の物性解明と新物質探索・新物質設計 Electronic and structural properties of nanostructured materials and their solid phases based on the quantitative electronic-structure study



斎藤 晋  
理学院 物理学系 教授

当研究室では、量子力学の第一原理に基づく電子構造計算手法を中心に、環境非依存 (transferable) タイプのバンド構造モデル法も用いて新物質の物性解明、さらには、新物質の探索と設計を中心に研究を展開しています。研究対象としている物質系は、有限個の原子集団であるマイクロクラスターおよびフラクレン系 (0次元系)、原子層からなる物質 (グラフェン、六方晶BNシート、遷移金属ダイカルコゲナイド等) がナノメートルスケールの直径を持つ円筒を構成した種々のナノチューブ系 (1次元系)、そして、それら2次元原子層物質そのものなど、いわゆる低次元系とナノ構造体が中心となっています。さらに、それら低次元系が残された次元方向に集合して3次元固体を形成した系 (固体C60系、ナノチューブ固体相、原子層物質が積層した系など) も、その電子構造にも階層構造が現れる大変興味深い系であり、研究対象としています。そして、それら各種物質系の静的な安定相のみならず、加圧下での構造相転移、加熱/冷却による物性変化、さらには、2軸性の応力下での新相の結晶成長の可能性探索なども研究対象に含めています。それらの中で、ここでは、ホウ素に関する新しいタイプバンド構造法の開発と、そのアモルファス相の原子レベルでの構造解析への応用研究について紹介します。

環境非依存 (transferable) タイプのバンド構造法では、原子軌道を基底関数として用いており、比較的小さいサイズの正方行列の対角化計算を一度だけ行えばよい、という利点があります。第一原理計算では、物性物理学分野でよく用いられている平面波を基底関数とする場合、遥かに大きな正方行列の対角化計算を繰り返す必要があります。そのため、タイプバンド構造法は非常に大きな系の計算にも適用できる利点があります。もちろん、第一原理計算で求められる様々な系の全エネルギーを精度よく再現できるタイプバンド構造法の構築ができるかは自明ではなく、その構築のためには非常に多くの計算時間を用いて多数のパラメータを最適化する必要があります。ただ、一旦、よいタイプバンド構造モデルを構築できれば、その効用は計り知れない程大きいものがあります。当研究室では、以前、化学結合のみならずsp<sup>2</sup>平面間の弱い相互作用も再現できるタイプバンド構造モデルを炭素に対して構築済みでしたが、今回、そのホウ素への拡張に成功しました。そして、昇温と冷却に温度制御分子動力学法を用いてアモルファスホウ素のモデル構造 (図1) を構築し、その構造解析から、三角形が線状に連なる局所構造 (図2) が、通常のホウ素各結晶相では見られないアモルファスホウ素に特徴的なものであることを突き止めました。

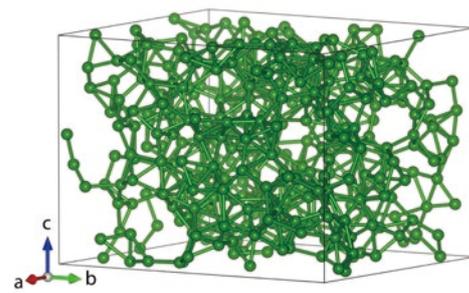


図1 432原子からなるアモルファスホウ素の構造モデル



図2 5つの三角形が連なる構造

- C.M. J. Chan, M. Toyoda, and S. Saito, J. Non-Cryst. Solids 590, 121670 (2022)

## 第3回 最先端研究セミナー開催報告

物質・情報卓越教育院は、2022年7月26日(火)に、オンラインにて「東工大 物質・情報卓越教育院 第3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3回目となる本セミナーでは、瀧ノ上正浩教授(東京工業大学 情報理工学院)と一杉太郎教授(東京大学 大学院理学系研究科 化学専攻)にご講演をいただきました。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200名以上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 「リビングシステムズ材料学を目指した情報分子DNAによる分子ロボティクス」



東京工業大学  
情報理工学院  
教授  
瀧ノ上 正浩 先生

第1部では、「リビングシステムズ材料学(LiSM)を目指した情報分子DNAによる分子ロボティクス」と題し、瀧ノ上先生が取り組まれているDNAから人工細胞や分子ロボットをつくる最先端の研究について紹介いただきました。

近年、生体分子を用いたナノ構造や分子反応ネットワークを用いて、分子コンピュータや分子ロボットを構築する研究が加速しており、それらをシステム化して、人工的な細胞をボトムアップ的に構築する研究まで発展しています。これは、コンピュータを用いて生体分子の構造や反応を大規模に精度良く予測できるようになったことがきっかけとなっており、まさに物質×情報によって研究が加速している分野です。

「人工物と生物の違いとは何か。」人工物の場合、情報がモノを制御するのに対し、生物は情報とモノが一体化し、相互に制御合っています。知性を持ち、情報を記憶し、学習する内部状態を持つのが生物らしさです。瀧ノ上教授の研究室では、DNAナノテクノロジーの技術を使い、内部状態を持つ自律システムをボトムアップ的に構築し、より生物らしい物質(人工細胞・分子ロボット)の開発に取り組んでいます。本セミナーでは、情報分子であるDNAを用いた人工細胞やがんマーカーのmiRNAのパターンを検出する新規の分子コンピュータの構築などについて分かりやすく解説いただきました。

また、近年開発に成功したDNAオリガミを集積させたカプセル状の人工細胞の研究についてもご紹介いただきました。この膜カプセルはDNAナノ構造により形状や機能が設計可能で、膜の機能を設計することで、アプリのように追加・入れ替えができるといいます。このような革新的な技術により、新たな人工細胞や細胞型分子ロボットの開発が進むことで、生命科学や医療分野、ナノマイクロマシンなど幅広い分野において応用・発展されることが期待されます。



### 第2部 「マテリアルDX(デジタルトランスフォーメーション)の現状と展望、そして、それを切り拓く人材像」



東京大学  
大学院理学系研究科 化学専攻 教授  
東京工業大学  
物質理工学院 特任教授  
一杉 太郎 先生

第2部では、機械学習やロボットを活用したマテリアルDX(デジタルトランスフォーメーション)の実現に向けて、世界の動向や研究室での最先端の取り組みについてご紹介いただきました。

「これからの実験室は実験装置(ロボット)がコンピュータとつながり、自動で実験を行うようになる。実験装置はクラウド上で操作を行い、実験結果のデータは自動的に保存される。実験室はクラウド化し、実験装置だけでなく、ノウハウやデータも共有する。これからの新物質の探索では、これまでの研究者の勘・コツ・知識、ロボットによる自動化・自律型実験を融合させることが重要なカギになる」と強調されました。

新物質の探索において、計算シミュレーションやビックデータにより予測するためには、大量のデータが必要です。データの収集には機械学習やロボットを活用した自動・自律実験を行い、大量の実験データを蓄積する必要があります。しかし、日本では、まだこのようなマテリアルDXが進んでいないのが現状です。なぜマテリアルDXが進まないのか。研究を加速するためにはどうしたらよいのか。本セミナーでは、「創造性がより高い研究」に取り組むために必要なことや、「そのような時代を切り拓く人材像」について参加者と共に考えました。

ロボットを用いた実験室の自動化、ベイズ最適化を含むAIアルゴリズムを使った自律化が研究のスピードと質を変え始めている現状について、多くの実例を用いて説明いただき、世界の潮流を理解することができました。また、データの蓄積と共有が、研究分野、応用分野にて非常に重要で、そのためのプラットフォーム作りが進んでいる状況と、改善すべき課題を知ることができました。



## 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)は、2022年5月25日(水)、6月1日(水)、6月15日(水)に、オンラインにて「TAC-MIセミナー『物質科学×情報科学』入門」を本学の学士課程・修士課程学生向けに開催しました。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知ってもらうことを目的として、TAC-MI特任教員が「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一部実習を交えて解説するものです。昨年に引き続き開催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。

より多くの学生に「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」について知ってもらうため、本セミナーは10月、11月にも開催します。

#### 全3回

- 第1回 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~  
講師: 安尾 信明 (物質・情報卓越教育院 特任講師)
- 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~  
講師: 松下 雄一郎 (物質・情報卓越教育院 特任准教授)
- 第3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~  
講師: 川内 進 (物質・情報卓越教育院 特任教授)



## 令和4年度9月卓越教育院・リーダーシップ教育院 修了式を開催

東京工業大学は、2022年9月22日(木)に令和4年度9月卓越教育院・リーダーシップ教育院修了式を、大岡山キャンパスのTaki Plazaで行いました。物質・情報卓越教育院の修了生1名、超スマート社会卓越教育院の修了生2名とリーダーシップ教育院の修了生3名が出席しました。修了式は対面とZoomのハイブリッド形式で開催されました。

修了式では、はじめに、益一哉学長、佐藤勲総括理事・副学長及び井村順一理事・副学長(教育担当)が、修了生へ向けてお祝いの言葉を述べました。続いて、物質・情報卓越教育院の山口猛央教育院長、超スマート社会卓越教育院の阪口啓教育院長及びリーダーシップ教育院の木山ロリンダ副教育院長が各教育院の修了生の紹介と祝辞を述べ、最後に物質・情報卓越教育院のHAO YINGQUANさんをはじめ各教育院の修了生代表者が謝辞を述べました。

修了生たちは、プログラムを支えてきた教員、事務担当者に見守られる中、各卓越教育院所属中の印象に残った活動や今後の抱負などを語りました。今後は、これまで物質・情報卓越教育院で学んだ「物質×情報」の高度な専門性に加え、課題解決力や国際性、リーダーシップ力を備えた博士人材として、新天地での活躍が期待されます。



修了生と学長、総括理事・副学長、理事・副学長、東工大の4つの教育院の関係者ら

### ご卒業おめでとうございます!

## 企業アドバイザーからのメッセージ

### 戸田工業株式会社



創造本部  
商品開発グループ  
課長  
**植本 真次 様**

当社は、創業1823年(文政6年)と江戸時代に遡ります。磁器の絵付けや漆器、歴史的建造物などに欠かせない顔料であるベンガラ製造業として創業以来、およそ200年の歴史を有する化学素材メーカーです。酸化鉄のトップメーカーでもあり、多様なニーズに応じた酸化鉄の製造はもちろん、磁石材料や誘電体材料等の様々な無機材料の特性を活かした素材やパーツを世界の先進企業へ提供しています。世界的なマーケットの広がりに対応し、アジア・北米での生産体制を強化するとともに、アジア・ヨーロッパに販売拠点を設け、グローバルな事業展開も積極的に推進しております。

近年は、社会の課題やニーズにスピーディーな対応をする必要があります。本プログラムに参加させて頂き「情報」を活用することにより、弊社のコアコンピタンスである微粒子制御技術と合わせて、新規商品開発のスピードを上げていきたいと考えております。弊社の実験を主とした知見に加えて、シミュレーションやマテリアルズインフォマティクスによる微粒子合成の最適化は、技術のブレークスルーをおこすことができるのではと考え、非常に期待しております。

「物質」と「情報」の両方のスキルをもつ人材は、社会にとって非常に求められている人材と考えており、皆様と会話させて頂きたいと思っております。また、学生の皆様に弊社を少しでも知って頂ければと思いますので、よろしくお願いたします。



創造センター外観

## 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 / 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 / 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 インダストリー株式会社 / 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 / 戸田工業株式会社 / 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。)

