

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

# News Letter Vol.12

Mar. 2023

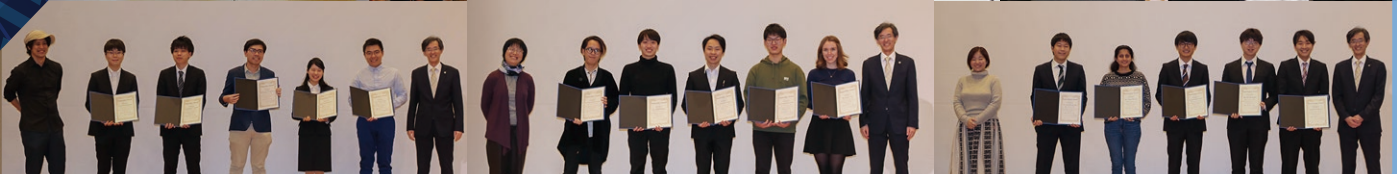
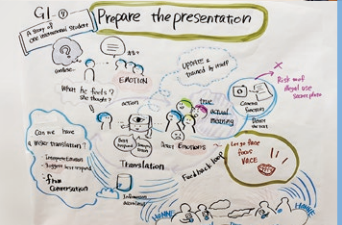
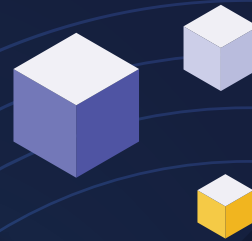
東京工業大学 物質・情報卓越教育院

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.2-3
- ◆ 2022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 : P.4-9
- ◆ TAC-MIプログラム担当教員研究最前線 : P.10,11
- ◆ TAC-MI授業科目紹介 新産業創出最前線 : P.12



# 2022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、企業訪問に先だって、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。2022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（田町ステーションタワー内オフィス）と花王株式会社和歌山工場の2カ所で実施いたしました。両社のご厚意により本年も各社拠点内で対面実施することができ、学生はオフィスでの過ごし方や通勤・昼食など、企業で働く生活スタイルについても体験することができました。

旭化成株式会社と花王株式会社和歌山研究所から出された課題は、いずれも産業に密接に関わる、期待されるアウトプットが明確な課題でした。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マテリアルズインフォマティクスやマテリアルズシミュレーションのテクニックを駆使して目覚ましい成果を出しました。学生たちは、各社の担当研究者と物質・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密接に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。未だに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花王株式会社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18日～9月29日の6週間、旭化成株式会社にて、AUGIE ATQA、GAO CHENGUANG、梶山健一、貝沼凌、木村茂、片岡大志、山本拓実、田口裕太、前田翔一、高橋希、飯塚忠寿、西村開の12名の学生が参加し、5テーマの課題について、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4年連続のプラクティススクールになりました。2021年初めから田町ステーションタワー N棟に開設されたデジタル共創ラボ「CoCo-CAFE」が今年も実施拠点になりました。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、残念なことに今年もコロナ禍の影響を受けてリモートワークも併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マテリアルズシミュレーション、そして最先端の機械学習手法などを駆使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29日、田町ステーションタワー S棟会議室を会場とし、対面とオンラインのハイブリッド開催にて、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。報告会は、物質・情報卓越教育院山口猛矢教育院長および旭化成株式会社久世和資専務執行役員の開会のご挨拶で始まり、続いて5つの学生グループがそれぞれの成果を報告しました。学生たちの発表後、井村順一理事・副学長（教育担当）、物質理工学院関口秀俊学院長及び旭化成株式会社デジタル共創本部インフォマティクス推進センター河野禎市郎センター長より講評のお言葉をいただきました。

### 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。

依然としてコロナ禍が続く中、出社日数制限をはじめとした様々な制約もございましたが、リモートと対面の機会を効果的に使い分けて実施いただきました。年々テーマの難易度が増しているにも関わらず我々の期待を超えた成果や知見に繋げていただき深く感銘を受けました。

複雑な課題に対して果敢にチャレンジしていただいた学生の皆様と、終始細やかなサポートをいただきました教職員の皆様に、改めて感謝申し上げます。

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



前田 翔一  
博士後期課程1年  
物質理工学院 材料系 ライフエンジニアリングコース

私はPythonや機械学習の経験がほとんど無く、このプラクティススクール第二で課題解決に取り組むことができるかとても不安でした。そのような状況の中で、卓越教育院の先生方や企業の方々に基礎から丁寧に教えていただき、またチームメンバーと協力することで、最終的に目的とする深層学習を用いた分類モデルを構築することができました。

普段は大学で基礎研究を行っている私にとってこの6週間は、実社会における課題発見から解決までのプロセスを学ぶことができるとも貴重な時間となりました。今後の社会におけるMIの重要性やそれに精通した人材の必要性をより強く感じたことで、より一層情報科学の修得に励みたいと思うようになりました。

## プラクティススクール 第二 (花王株式会社)

10月11日～11月18日の6週間、花王株式会社 和歌山工場にて、李邱穆、桜井勇太、WEIFENG、林正丹、鴨川径、大見拓也、LIU QIUMIN、杉浦開、細川直輝、安納爽響の10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。各課題は解決が望まれる最先端の骨のある題材でした。学生たちは6週間和歌山に滞在し、研究所内に場所を提供していただき、常に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マテリアルズシミュレーションを駆使するとともに、さらに最先端の機械学習手法も駆使して試行錯誤を繰り返しながら課題解決に取り組みました。また、各課題に関係する研究所内の見学もさせていただくことで課題の意義などの理解が深まりました。遠隔地での長期滞在だったため、学生たちの健康管理にも配慮していただきました。学生たちは休日の和歌山を楽しんだようです。コロナ禍で制限があるなかで、和歌山工場内にこのような素晴らしい環境を提供していただいた花王株式会社の皆様には感謝申し上げます。

11月17日、花王株式会社 和歌山研究所大会議室にて、対面およびオンラインのハイブリッド開催により、本学と花王株式会社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。参加学生10名の報告に対し、本学教員および企業関係者ら約50名が参加しました。報告会では、3つの学生グループがそれぞれの成果を報告し、参加者から活発な質疑が行われました。学生たちの発表後、東京工業大学 益一哉学長、物質理工学院 関口秀俊学院長及び花王株式会社 マテリアルサイエンス研究所 青木克敏所長より講評のお言葉をいただきました。

### 花王株式会社 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す。取り組んで頂きましたテーマは、データ数が少なく、実施にあたって不安に思っておりましたが、今後に繋がる提案を数多く頂きました。これは、学生の皆様の熱意と高い専門性、及び先生方の丁寧なご指導のお蔭様でございます。

また、今回対面で実施できるよう、ご配慮、ご対応頂きました教職員の皆様に重ねて御礼申し上げます。弊社社員も皆様の熱意や能力の高さに触れ、新たな気持ちで研究に向き合うことが出来ました。

プラクティススクールを経験された学生の皆様が世界をリードする研究者となられること、そしてTAC-MIの益々のご発展を心より祈念しております。



プラクティススクールに 花王エコラボミュージアム(和歌山工場) 見学  
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(花王株式会社 和歌山事業場)

### 参加学生のコメント



鴨川 径  
博士後期課程1年  
理学院 化学系 エネルギーコース

プラクティススクールでは、機械学習や量子化学計算を駆使して企業課題の解決に努めました。大学での研究との違いに最初は戸惑いましたが、豊富なドメイン知識を有する“物質”の学生とデータ分析に秀でた“情報”の学生が協力することで、6週間という短期間で成果を残すことができました。

このような専門分野の異なる同期や企業の研究者との共同作業を通して、他では得られない経験をする事ができました。この経験を今後の研究生活に活かしていこうと思います。

## 2022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)

どちらのスクールでも、大学では経験できない実践的なテーマが課題となり、参加学生はチームで課題解決に挑戦し、解決するだけでなく新しい提案をすることに成功していました。情報工学的な技術により大量のデータを処理し全体を見渡す俯瞰力、シミュレーションも併用しその中から本質を捉える独創力、新しい提案をする勇気など多くの力を磨くことができました。一緒に課題解決を進めてくださった企業の皆様、参加くださった卓越教育院の先生のお陰です。

実世界の複雑で重要な課題に対して、異なる専門の博士学生が集まり、短期間にチームで解決するので、学生は見違えるほど成長していきます。各研究室では、学生が戻ってきて大きく成長したことに驚いているのではないのでしょうか。

本プラクティススクールは学生からの評価も極めて高く、企業の皆様のおかげで、産学連携した高いレベルの博士教育が進んでいると実感します。また、私を含め教員も、普段知ることのない生産現場や企業研究に接することができ、大変勉強になります。

これからも産学連携した新しい博士教育を実践する、物質・情報卓越教育院を皆様と一緒に作り上げていきたいと思っております。今後とも、どうぞ、よろしくお願いたします。

# 2022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開催報告

物質・情報卓越教育院 (TAC-MI) では、12月5日(月)～9日(金)まで東京ベイ幕張ホール(千葉県千葉市)にて、2022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開催しました。

この国際フォーラム・未来社会サービス創出ワークショップは、本教育院が目指す「物質×情報=複素人材」の育成のため、国際コミュニケーション力の向上と俯瞰力・リーダーシップ力を涵養することを目的とし、毎年1回開催しています。

前半12月5日～7日の国際フォーラムでは、博士後期課程1年22名と博士後期課程2年17名が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いました。また、物質・情報卓越教育院の海外プログラム担当者(海外アドバイザー教員)が指導する博士課程学生8名も海外から参加し、研究発表を行いました。

後半12月8日～9日の未来社会サービス創出ワークショップでは、博士後期課程の学生22名が海外の学生8名とともにグループを編成し、それぞれの研究における知識・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・提案しました。

本イベントは2019年度に対面で開催して以来、2020年度と2021年度は新型コロナウイルス感染拡大防止のためオンラインでの開催となりましたが、今年度は体温チェックや座席の間隔を空けるなどの感染対策を講じることで、3年ぶりに対面で開催いたしました。



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5日(月)から12月9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。本年は3年ぶりに対面での開催を行うことができ、より白熱した議論を行うことができたと感じています。昨年度に引き続き、学生の皆さんがお互いのことをよく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、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。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)の一部でもあり、大変緊張されたのではないかと思います。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、「物質×情報」を自分のものとした先進的な研究内容が多く見られました。また、未来社会サービス創出ワークショップは、海外から招待した8人の学生と共に、グループワークも発表も全て英語で実施しました。初対面のメンバーと英語で討論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。5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。

## タイムスケジュール

	12月5日(月)	8:30	12月6日(火)	8:30	12月7日(水)	9:00	12月8日(木)	9:00	12月9日(金)
9:30		9:20	海外アドバイザー講演 2名		海外アドバイザー講演 3名				
10:00	集合			10:00	国際フォーラム D2学生による自主設定論文進捗発表		未来社会サービス創出ワークショップ グループワーク		未来社会サービス創出ワークショップ グループワーク
	国際フォーラム 開会挨拶 D1学生による研究発表		国際フォーラム D1学生による研究発表	11:30	表彰式				
12:00	昼食	12:00	写真撮影	11:50		12:00	昼食	12:00	昼食
13:00		12:10	昼食	13:00	昼食	13:00	昼食	13:00	昼食
	国際フォーラム D1学生による研究発表	13:20	国際フォーラム D2学生による自主設定論文進捗発表	13:30	海外メンター・企業メンターとの面談		未来社会サービス創出ワークショップ グループワーク		発表準備
		15:30	海外学生による研究発表	14:00	企業アドバイザー連絡会			14:00	未来社会サービス創出ワークショップ 発表会
17:00	海外メンター・企業メンターとの面談	17:00	海外メンター・企業メンターとの面談	15:00	国際外部評価委員会			15:45	審査
		18:30		16:30	学生エクスカージョン			16:30	表彰式 閉会式
18:30	ウェルカムディナー		産学協創交流会	19:00				17:00	解散
20:00		20:00		20:00	夕食	19:00	夕食	20:00	夕食

# 国際フォーラム Day1,Day2,Day3 (12/5~12/7)

前半12月5日~7日の国際フォーラムでは、学生が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いました。3日間のフォーラムは、対面とZoomのハイブリッド形式で開催し、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。



国際フォーラム参加者集合写真

## 博士後期課程1年の学生による研究発表

12月5日と6日午前には、博士後期課程1年の学生22名が研究発表を行い、司会進行、タイムキーピングは博士後期課程2年生が担当しました。発表は1人あたりプレゼンテーション15分、質疑応答5分の持ち時間で進行了ました。

国際フォーラムでの博士後期課程1年の研究発表は、本教育院登録学生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。この発表を行う学生は、それぞれの研究の意義と成果についてのプレゼンテーションを行い、発表後には活発な質疑応答が行われました。



博士後期課程の学生による研究発表

## 博士後期課程2年の学生と海外学生による研究発表

12月6日午後と7日午前には、博士後期課程2年の学生17名と海外学生8名が研究発表を行いました。発表は1人あたりプレゼンテーション6分、質疑応答4分の持ち時間で進行了ました。

博士後期課程2年の学生はTAC-MIで得た学修成果を活用して、専門分野の枠を超え、自らの博士論文研究とは異なる課題を自主的に設定する自主設定論文の研究の進捗状況を発表しました。自身の専門とは異なる研究室に2週間程度滞り研究を行う「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を活用して論文を作成し、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は研究結果を報告します。今回は6月に報告を行った学生を除く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。

## 企業メンターとの面談

本教育院では、1人の学生に対して1人の企業メンターがつき、教育院登録当初から修了まで継続的に見守っていく制度があります。このフォーラムの研究発表後に、学生たちは企業メンターと面談し、研究や発表、キャリアパスなど様々なアドバイスを受けました。また、面談だけでなく、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。

## 海外メンターとの面談

本教育院では、海外アドバイザー教員との面談により自身の強み弱みを把握することを目的とした海外メンター制度があります。今回のフォーラムでは、5名の海外アドバイザー教員が参加し、学生は発表後に海外アドバイザー教員との面談を行いました。面談の中で、研究発表を行った博士後期課程の学生に対して、海外アドバイザー教員からアドバイスと励ましの言葉がありました。時差などの関係で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、発表の様子を録画で見えただき、オンラインで学生との面談を行いました。

## 授賞式



博士後期課程1年の学生の研究発表および海外の学生の研究発表に対し、すべての発表を聞いた参加者による投票を行い、最も票の多かった学生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にグッドプレゼンテーション賞 (Good Presentation Award) が、7日の授賞式で贈られました。



山口猛央教育院長と受賞者

## 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



安納 爽響  
博士後期課程1年  
情報理工学院 情報工学系  
知能情報コース

今回受賞できたことを大変光栄に感じています。私の研究分野は情報処理であるため、TAC-MIの先生方・企業の方の専門分野とは少なからず乖離があるという前提に立ち、発表準備を行いました。特に、数理的な背景だけでなく実際のデータの可視化に基づく考察やアナロジーも踏まえることで、異分野の方にも伝わりやすい発表を目指しました。情報処理、殊更データ解析分野では、技術の応用先が多岐にわたるため、研究価値・課題を伝える困難さが必ず存在します。今回の経験を、困難を伴う場面を渡り歩くための糧として、今後も研究活動に励んで参ります。



### Best Presentation Award



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

この度は Best Presentation Award をいただき、大変光栄です。異分野の研究者が多くいる発表の機会であったため、社会的背景と課題・研究目的を明瞭にすることを意識しました。発表を終えて、伝えるスキルがまだまだ足りないことを痛感しましたが、英語での口頭発表を経験したことで度胸がついたように感じます。

また国際フォーラムを通して、専門の異なる友人ができたことが大きな財産になると思います。発表や研究への取り組み方に関して見習いたい点も多く、今後も自分に足りない箇所に向き合いながら精進してまいります。



### Good Presentation Award



貝沼 凌  
博士後期課程1年  
理学院 物理学系  
物理学コース

国際フォーラムでの発表では、通常の学会発表よりも聴衆のバックグラウンドが多様であることを意識しつつ、できるだけ自身の研究と社会のつながりを表現できるようなプレゼンを目指しました。結果として Good Presentation Award をいただけたことは誠に光栄です。今回の発表で、私自身の研究テーマの社会的な位置づけを俯瞰し言葉にする訓練ができたと思います。発表後も多くのフィードバックをいただき、実りある機会となりました。これらの経験を励みに今後も研鑽を積んでまいります。



### Good Presentation Award



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

国際フォーラムは、聴講者の専門分野が多岐に渡るということもあり、発表する情報の取捨選択に苦労しました。6月に開催された成果発表会の反省も活かし、できる限り「研究の意義」と「計算化学を導入した目的」が伝わるような構成で発表を行いました。結果として、Good Presentation Award を受賞することができたことを大変嬉しく思っています。今回は、計算化学、高分子化学、光化学の融合領域に関する発表でしたが、今後はマテリアルズインフォマティクスやケモインフォマティクスなど、よりTAC-MIらしさを出した研究を推進していきたいと考えています。

## 海外学生の研究発表・受賞者のコメント



### Best Presentation Award



Chenyun Yuan  
Cornell University (アメリカ)

It was very exciting and surprising to receive news of the award. At the forum, there were many young researchers from Tokyo Tech and other institutions around the world sharing their research, which was all fantastic works. Learning the work done by the outstanding researchers around the world was enjoyable, and besides that, it was very exciting to share our work with the field and to see our research work about polypeptoid-based photoresists being acknowledged by the community.

I would also like to thank my advisor, Prof. Christopher Ober, and my peers in the group for encouraging me to present our group's findings at the forum.



### Good Presentation Award



Megan Cowie  
McGill University (カナダ)

I am very grateful for the opportunity I had to travel to Tokyo and meet Tokyo Tech PhD students. I thought that the student presentations were really impressive for 1st year and 2nd year students, particularly those who were able to present their own work after such a short time in the program. I find that the broad scope of research included in the forum, spanning many different fields of physics, engineering, etc. sometimes made the talks hard to follow, since my background in some of these fields is limited. I thought it would be better if very short tutorials in each field by senior PhD students were embedded in the program.

I am also grateful that I had the opportunity to present my own research at TAC-MI. My favourite part of the forum was definitely the social components. The food was all incredibly delicious, and it was a great way to engage in conversations with professors and students.

## 海外アドバイザー教員による講演



12月6日と7日午前には、学生の研究発表が始まる前に、TAC-MI連携機関の海外アドバイザーである5名の先生方にご講演いただきました。



Michael Gromiha教授による講演

Michael Gromiha教授  
Indian Institute of Technology  
Madras (インド)  
[講演タイトル]  
Mutational effects on protein  
structure and function:  
implications to diseases



Peter Grutter教授による講演

Peter Grutter教授  
McGill University (カナダ)  
[講演タイトル]  
What can you learn about  
defects using AFM?



Sergei Kazarian教授による講演

Sergei Kazarian教授  
Imperial College London (イギリス)  
[講演タイトル]  
Recent applications of  
spectroscopic imaging to  
polymers and biomaterials



Christopher Kemper Ober教授による講演

Christopher Kemper Ober教授  
Cornell University (アメリカ)  
[講演タイトル]  
Mixed Ionic/Electronic  
Conductors (MIECs) Based  
on  $\pi$ -Conjugated Thiophene  
Liquid Crystals



Natt Leelawat准教授による講演

Natt Leelawat准教授  
Chulalongkorn University (タイ)  
[講演タイトル]  
Why do data and information  
systems play vital roles in  
disaster management?

## エクスカージョン Day3 (12/7)

国際フォーラムの後、12月7日午後に、翌日から始まるワークショップに向けて、グループのメンバーの仲を深めることを目的として、東京でのエクスカージョンを実施しました。参加者は6グループに分かれ、皇居外苑、東京駅周辺、浅草寺、東京スカイツリーを巡りました。エクスカージョンで様々な場所を訪れる中で、学生たちは翌日のワークショップに向けて、街中にある様々な課題を探しました。



## エクスカージョン 旅程

- 13:30 ホテル出発 → バスで皇居外苑へ
- 14:00 皇居外苑到着  
皇居外苑とその周辺を見学
- 15:30 東京駅近くで集合 → バスで浅草寺へ
- 15:45 浅草寺到着  
浅草寺、東京スカイツリー、その周辺を見学
- 18:00 東京スカイツリー集合 → バスで幕張のホテルへ

START!



バスで皇居外苑へ



皇居外苑楠公像



浅草寺雷門



浅草寺仲見世通り



東京スカイツリー展望台

# 未来社会サービス創出ワークショップ

## Day4,day5 (12/8,12/9)

4日目の12月8日(木)と5日目の12月9日(金)は、未来社会サービス創出ワークショップを開催しました。

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学生22名と海外学生8名、合計30名が参加し、「物質と情報で切り拓くAIと共存する社会」をテーマに、株式会社リバネスの協力のもと、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、「課題を解決する2032年に普及するであろう何らかのデバイスや設備等を用いるサービス」を考案しました。

各グループには、グラフィックファシリテーターが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AIと共存する社会

Innovating society with AI by materials and informatics

### ワークショップ前日(12/7)

## 1. エクスカーションで課題探し

翌日から始まるワークショップに向けて、グループのメンバーの仲を深めることを目的として、東京でのエクスカーションを実施しました。

参加者は6グループに分かれ、皇居外苑、東京駅周辺、浅草寺、スカイツリーを巡りました。



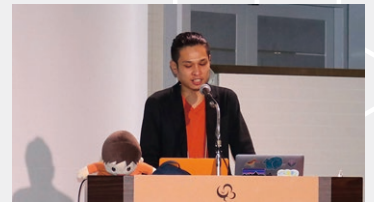
後のワークショップで取り組む「社会課題」に目を向けるためにも、国内外からの学生が入り混じったグループでのエクスカーションの中で自分たちが直面した課題や世の中にある課題を探しました。

### ワークショップ1日目(12/8)

## 2. 起業家から学ぶ(特別講演)

2日間のワークショップについて、趣旨説明の後、特別講演がありました。

介護ベンチャー企業であるザ・ハーモニー株式会社の高橋和也代表取締役CEOが介護に携わるすべての人を幸せにするための取り組みとして、AIを活用した認知症コミュニケーションロボットの開発について話しました。



ザ・ハーモニー株式会社 高橋和也氏

### ワークショップ1日目(12/8)

## 3. 集めてきた課題の共有とチームで取り組む課題の選定

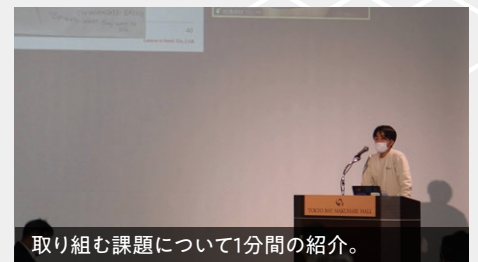
各グループに分かれてグループワークを行いました。各グループはエクスカーション中などに見つけた課題を付箋に書き出しました。出てきた課題について意見を出し合い、チームで取り組む課題を選定しました。



集めてきた課題を共有。



課題について意見を出し合います。



取り組む課題について1分間の紹介。

## 4. 課題が解決された理想の未来を描く

課題について分析し、課題が解決された理想の未来を実現するための方法について考えました。



課題についてさらに分析。

## 5. 中間発表(ポスター発表)

1日目の最後には、各グループがポスター発表を行い、教員やファシリテーターのリバネスからフィードバックをもらいました。



各グループの中間発表。フィードバックをもらいました。





## 6. アイデアのブラッシュアップ～最終発表準備

中間発表にてフィードバックを受けた後、各グループは追加調査を行い、アイデアをブラッシュアップしました。

2日目は、どんなシーンでどのように使われるのかについて考え、サービスとプロダクトについてさらに深掘りして考え、午後の最終発表に向けて準備を進めました。



中間発表後、フィードバックを受け、アイデアをブラッシュアップ。



## 7. 最終発表会

2日目午後の最終発表会では、各グループが課題を解決する2032年に普及するであろう何らかのデバイスや設備等を用いるサービスの提案を発表しました。

発表会は、対面とオンラインのハイブリッドで開催し、本学教職員のほか、本プログラムの連携企業関係者、TAC-MIの博士後期課程2年の学生など約90名が参加しました。



各グループが未来社会における課題を解決するサービスを提案しました。

## 8. 授賞式

各チームの発表後、発表を聞いた学生以外の参加者による投票を実施し、5名の審査員による審査を経て、賞が決定しました。表彰式では、井村順一理事・副学長（教育担当）より、受賞チームが発表され、各チームの発表に対する講評とともに賞が授与されました。



井村順一理事・副学長



Originality Awardを受賞した Group6 Sugar lush 「Anyone, Any food, Anywhere」

**受賞理由：**  
このグループの提案したどんな人も食べ物を楽しむことができるシステムはアイデアと解決方法が非常にユニークで、現在のブレインマシンインターフェース技術（BMI）に一石を投じるものでした。現在のBMIは脳に情報を読むことはできますが、脳に書き込むことはできません。この技術が開発されれば、他の用途にも利用することができるでしょう。



Practicability Awardを受賞した Group5 ACS Corporation, Alcohol for Life 「Alcohol Communication System」

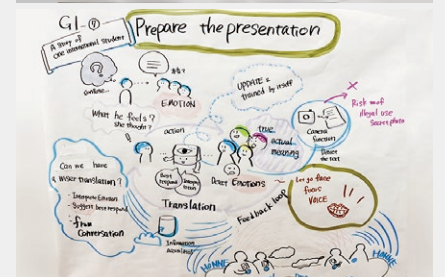
**受賞理由：**  
このグループの提案したアルコールコミュニケーションシステムの最も印象的な部分は、アイデアを実現するための分子検出メカニズムの科学的説明が含まれていることです。この技術が、スマートウォッチに搭載される日も近いでしょう。



Social Impact Awardを受賞した Group2 Masketeers 「When & which mask should we wear? Mask 2.0」

**受賞理由：**  
COVID-19の影響を最も受けた学生たちにとって、立ち向かった課題は非常に重要なものです。彼らが提案した、空気は通過できるがウイルスは通過できない素材は、コロナウイルスだけでなく、大気汚染用のマスクなど、他の産業分野への応用も期待できます。

## Graphic Recording



## 計算・データ科学に立脚した新規無機材料の開拓 Exploration of novel inorganic materials based on computational and data science



**大場 史康**  
科学技術創成研究院 フロンティア材料研究所 教授

昨今のエネルギー・資源情勢や環境問題を背景に、卓越した機能はもちろんのこと、豊富に存在する元素から構成され無毒で環境調和性が高いことなど、新材料開発における要望は厳しくなっています。このような多様なニーズを満たす新材料を見出すには、的確な材料設計・探索の指針に基づいて、可能な限り広い探索範囲から有望な材料の候補を効率的に絞り込む必要があります。また、物質・材料の設計や探索を行う際、多くの機能が格子欠陥に由来することを踏まえて、基礎物性のみならず、格子欠陥の特性を考慮することが重要となります。理論計算や機械学習モデルにより高精度かつ系統的な物性・欠陥特性の予測ができれば、材料設計に関する有益な知見が得られるだけでなく、一般に難題であります新材料の開拓を加速できる可能性があります。

我々は電子デバイスや電子セラミックス等に用いられる様々な無機材料の基礎物性・欠陥特性の高精度・高速予測のための第一原理計算手法の開発を進め、物質・材料の俯瞰的な理解や新物質・新材料の開拓に向けた系統的なデータ生成並びに機械学習を取り入れたハイスループットスクリーニングを進めています。このような理論計算・データ科学手法を駆使し、学内外の実験グループと連携することで、図1に示す窒化物半導体の例のように新物質の開拓へと展開しています。多様な観点からの理論計算・データ科学の支援により、高機能な新規無機材料の開発を効率化することを目指しています。

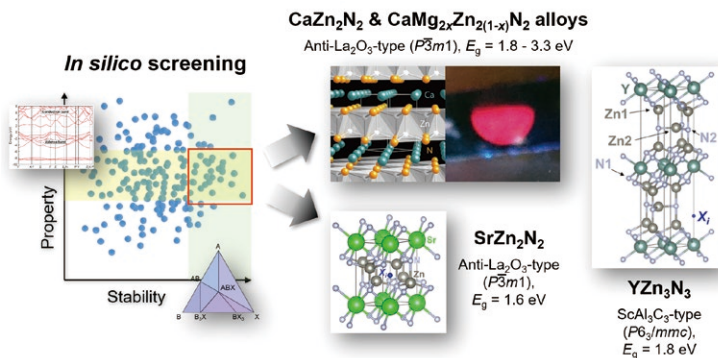


図1 第一原理計算に基づいた計算機中スクリーニングにより選出され、予測された結晶構造と光学特性が共同研究者の実験により実証された新規窒化物半導体 CaZn<sub>2</sub>N<sub>2</sub> 及び CaMg<sub>2</sub>Zn<sub>2(1-x)</sub>N<sub>2</sub> [1]、SrZn<sub>2</sub>N<sub>2</sub> [2]、YZn<sub>3</sub>N<sub>3</sub> [3]。

- [1] Y. Hinuma, T. Hatakeyama, Y. Kumagai, L. A. Burton, H. Sato, Y. Muraba, S. Iimura, H. Hiramatsu, I. Tanaka, H. Hosono, and F. Oba, Nat. Commun., 7, 11962(2016).
- [2] R. Kikuchi, K. Ueno, T. Nakamura, T. Kurabuchi, Y. Kaneko, Y. Kumagai, and F. Oba, Chem. Mater., 33, 2864 (2021).
- [3] R. Kikuchi, T. Nakamura, T. Kurabuchi, Y. Kaneko, Y. Kumagai, and F. Oba, Chem. Mater., 33, 8205(2021).

## 単分散PEGを利用した機能分子の開発 Development of Functional Molecules Consisting of Monodisperse Poly(Ethylene Glycol)s



**金原 数**  
生命理工学院 生命理工学系 教授

ポリエチレングリコール (PEG) は、親水性が高く、強い相互作用部位を持たないことから生体親和性の高いポリマーとして、様々な分野で利用されています。また PEG には水溶性に加え熱応答性を有するという特徴があり、刺激応答性材料としても高いポテンシャルを有しています。しかしながら、これまで PEG は分子量分布を持つポリマーが主として用いられており、機能性小分子への応用や詳細な構造-機能相関の解析には適さない等の問題点もありました。このような背景のもと、当研究室では、短鎖単分散 PEG の簡便な大量合成法を確立し、これを利用して様々な機能性 PEG 誘導体の開発を行ってきました [1]。

一例として、PEG を部品として用いて2次元状にした構造化 PEG 分子を開発し、このような分子がタンパク質の熱凝集を抑制する優れた効果を示すことを見いだしています。同等の PEG 鎖長を有する1次元状の分子は、ほとんど凝集抑制効果を示さないことから、構造化 PEG 分子のトポロジーが分子の熱凝集抑制能に大きく影響していると考えられます。一方、PEG 鎖を主とする分子骨格に適度に芳香環を導入することにより、小分子ながら水性二相分離を示す分子や、ユニークな熱転移移動を示す分子など [2]、熱応答性機能分子の開発も行っています。このような機能性 PEG 誘導体については、親水部-疎水部のバランス、分子のトポロジー、PEG 鎖長など様々な因子が物性に影響を与えます。しかしながら、分子設計において事前にこれを予測することは容易ではありません。単純な水溶性ですら、分子構造から正確に予測することは困難です。情報科学的手法を用いて既存分子の構造と物性の相関を網羅的に解析し、物性予測を可能とすることが、今後の方向性として極めて重要であるとと考えています。

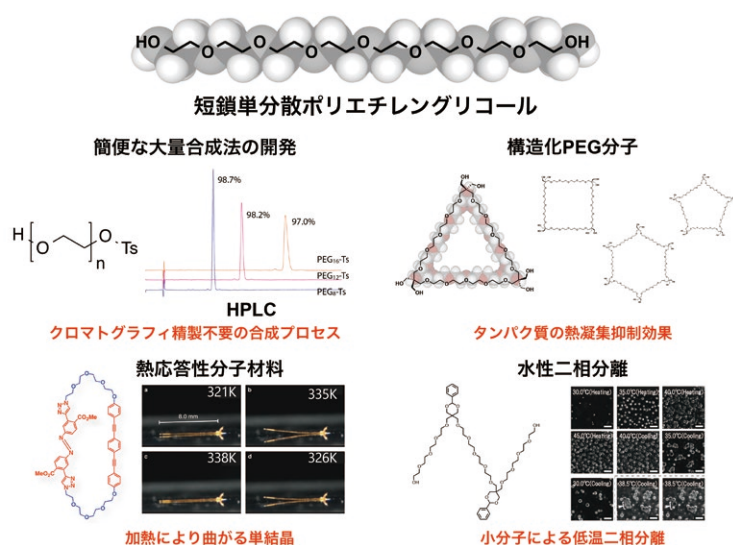


図1. 短鎖単分散ポリエチレングリコールを利用した機能分子

- [1] K. Kinbara, Polym. J., 50, 689-697 (2018).
- [2] T. Muraoka, T. Shima, T. Kajitani, N. Hoshino, E. Morvan, A. Grélard, E. J. Dufourc, T. Fukushima, T. Akutagawa, K. Nabeya, K. Kinbara, Chem. Asian J. 14, 141-148 (2019).

# ゼロカーボン材料創製技術および原子力システムの安全性確立への冶金技術の活用 Utilization of metallurgy to zero-carbon materials creation and safety, reliability and sustainability of nuclear systems



**小林 能直**  
科学技術創成研究院  
ゼロカーボンエネルギー研究所 教授

当研究室では、物質循環システムの創製によるゼロカーボン材料技術の創出に取り組んでいます。ゼロカーボン社会の構築・創出のためには、構造材料・機能性材料創製技術においても、カーボンニュートラルループでの製造プロセスを考案することが不可欠です(図1)。鉄鋼は建築、輸送、エネルギー創出におけるベースマテリアルであり、従来の鉄鉱石と石炭からの二酸化炭素排出が不可避な製造プロセスから、リサイクル鉄およびゼロカーボンエネルギーの活用によりゼロカーボン製鉄を実現し、物質循環型社会構築を先導します(図2)。ゼロカーボンエネルギーの鍵を握るのが、原子力などをはじめとする次世代革新炉や、持続可能な再生可能エネルギー創出システムの開発です。そしてそのボトルネックの解決の一環として重要な材料信頼性向上のため、原子力システムを長期間にわたり安全にオペレートするために必要な、信頼性の高い健全な金属材料に関する研究を行っています。

安全性を担保しながら、カーボンニュートラル社会実現に不可欠なエネルギーシステムを構築・展開していく上では、やはり福島第一原子力発電所の安全、迅速な廃炉が重要です。沸騰水型軽水炉過酷事故後の燃料デブリ取り出しアクセス性評価のための、燃料デブリと炉心下部構造物の反応による材料損傷状況評価を行っています(図3)。そしてこれら材料開発・材料解析・評価には、物質・情報の活用が肝要です。燃料開発・デブリ解析に必要な熱力学データ集積のための OECD/NEA の国際プロジェクトに参画し、実験での再現が極めて難しい事故時の過酷環境解析にも取り組んでいます。

教育院の目指す複素人材は、実験と計算の両輪を携える研究者でもあり、その活躍があらゆるグローバル課題の解決につながると期待しています。

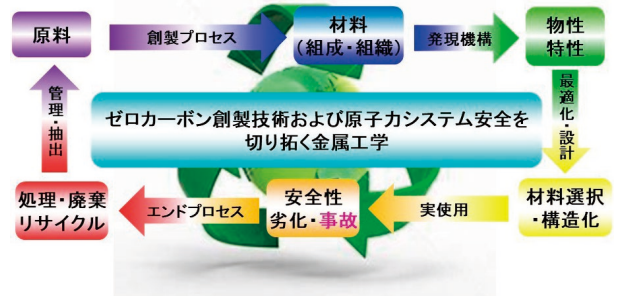


図1 材料開発概念図



図2 リサイクル鉄製造プロセス例

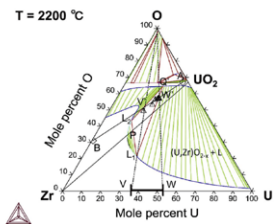


図3 炉心溶融物(U-Zr-O)系の相安定図の計算結果例

- [1] (K. Urata, Y. Kobayashi, R. Endo and M. Susa; ISIJ International, 55, No.1, 103-108 (2015).  
[2] Itoh A., Andrew N., Luxat D., Gauntt R., Kurata M., Kobayashi Y.; Journal of Nuclear Science and Technology 58.6 (2021): 676-689.

## ポリマーラジカルのQ-e値の初めての算出 First estimation of Q-e values for polymer radicals



**川内 進**  
物質・情報卓越教育院 特任教授

ビニルモノマーのQ-e値は、高分子化学において重要な指標です。表1に代表的モノマーのQ-e値( $Q_G$ - $e_G$ )をまとめました。Q値はラジカル重合におけるモノマーの一般的反応性を表し、Q値が大きいほど共役が高くラジカルとの高い反応性を示します。一方で、e値はモノマーの極性を表し、一般に、正値はアクセプター性を、負値はドナー性を表します。このため、Q-e値はラジカル共重合性だけでなく、ビニルモノマーのカチオン重合性やアニオン重合性の解釈にも用いられます。モノマーのQ-e値は、スチレンを基準モノマーとしてラジカル共重合の反応性比から、モノマーとポリマーラジカルのe値を等価と仮定して求められます。特にこの仮定はQ-e値の大きな欠点とされてきました。

このような背景から、我々はDFT計算によるQ-e値の解釈や予測を目指した研究を行ってきました。その考察から、Q-eスキームは、活性化自由エネルギーの差をモノマー固有の非極性項(Q値)と置換基の極性交差項(e値)に分割表現した数理モデルであると解釈しました。そこで、モノマーとポリマーラジカルのQ-e値を個別に扱えるようにQ-eスキームを拡張し、2つの基準モノマーを適用することで固有Q-eスキームを導出しました。固有スキームによるモノマーとポリマーラジカルのQ-e値の表式を図1に示します。これで先に述べた仮定は不要となり、モノマーとポリマーラジカルのQ-e値を任意性無く個別に求められます[1]。表1にスチレンとアクリロニトリルを基準モノマーとして算出した結果を記しました。ポリマーラジカルのQ-e値( $Q_R$ - $e_R$ )の算出に成功したのは、1947年のAlfreyとPriceによるQ-eスキームの提案以来これが初めてです。得られたポリマーラジカルとモノマーのQ値の間には比較的相関が見られましたが、図2に示したように、ポリマーラジカルとモノマーのe値には相関は見られません。したがって、モノマーとポリマーラジカルのe値を等しく置く仮定は必ずしも成立しないことがわかります。また、固有Q-eスキームによる反応性比の予測能はオリジナルのQ-e値より優れていることが明らかとなりました。

DFT計算は反応性予測や物性予測へ応用できるため、実験研究者にとって今や必須の技術になりました[2]。今後は、ここで紹介したように、新たな数理モデルの創出にも活用されて行くことでしょう。

表1. GreenleyのQ-e値( $Q_G$ ,  $e_G$ )と固有Q-eスキームによるモノマーとポリマーラジカルのQ-e値( $Q_M$ ,  $Q_R$ ,  $e_M$ ,  $e_R$ ).

モノマー	$Q_G$	$e_G$	$Q_M$	$Q_R$	$e_M$	$e_R$
Isoprene	1.99	-0.55	1.80	1.44	-0.56	-1.02
Butadiene	1.70	-0.50	1.20	0.83	-0.32	-1.10
Styrene	1.00	-0.80	1.00	1.00	-0.80	-0.80
Methacrylic acid	0.98	0.62	2.37	0.30	-0.10	-0.80
Maleic anhydride	0.86	3.69	0.26	0.04	2.17	0.42
Methyl methacrylate	0.78	0.40	0.93	0.55	0.15	0.20
Acrylonitrile	0.48	1.23	0.51	0.54	1.26	1.26
Methyl acrylate	0.45	0.64	0.29	0.42	1.10	0.44
Vinyl chloride	0.06	0.16	0.03	0.04	-0.07	-0.42
Vinyl acetate	0.03	-0.88	0.01	0.02	-0.35	0.13
Vinyl ethyl ether	0.02	-1.80	0.02	0.06	-1.67	-0.23

$$Q_M(1) = \frac{1}{r_{S1}} \exp \left[ \frac{-0.8 \ln(r_{A1}/0.04r_{S1})}{2.03} \right]$$

$$Q_R(1) = r_{1S} \exp \left\{ -0.8 + \frac{\ln(r_{1A}/0.38r_{1S})}{2.03} \right\} \left[ \frac{\ln(r_{A1}/0.04r_{S1})}{2.03} \right]$$

$$e_M(1) = -0.8 + \frac{1}{2.03} \ln \frac{r_{A1}}{0.04r_{S1}}$$

$$e_R(1) = -0.8 + \frac{1}{2.03} \ln \frac{r_{1A}}{0.38r_{1S}}$$

図1. 固有Q-eスキームによるモノマーとポリマーラジカルのQ-e値の表式 (rは反応性比、添え字1はモノマーやポリマーラジカル、Sはスチレン、Aはアクリロニトリルを表す)

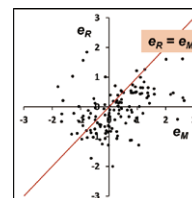


図2. モノマー(M)とポリマーラジカル(R)のe値の相関関係。図中の赤色の直線は $e_R = e_M$ を表す。

- [1] S. Kawachi, A. Akatsuka, Y. Hayashi, H. Furuya, T. Takata, Polymer Chemistry 13 (8), 1116-1129 (2022).  
[2] J. B. Foresman, A. Frisch著 川内進訳「電子構造論による化学の探求 第3版」Gaussian Inc. (2017).

# TAC-MI授業科目紹介「新産業創出最前線」

## ～2022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「2022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 「最先端技術の社会実装におけるベンチャーキャピタルの役割について」



株式会社みらい創造機構  
代表取締役  
岡田 祐之

2022年12月16日(金) 13:30～15:00

研究成果を社会実装する上での、スタートアップとスモールビジネスの違い、資金調達における投資と融資の違いが明確化され、その中のベンチャーキャピタルの役割と、みらい創造機構が重視している観点がわかりやすく説明された。

### 第2回 「インフォマティクスと電子状態計算を活用した機能材料設計」



中央大学  
理工学部 応用化学科  
教授  
森 寛敏

2022年12月16日(金) 15:15～16:45

分子集合体機能と、構成要素の分子の波動関数の関係をインフォマティクスする、という基本コンセプトを、CO<sub>2</sub>物理吸収液体、マゼンタ発色エレクトロクロミック材料といった機能材料設計に適用した場合の実例が整理された形で説明された。その中で、機械学習での特徴量の選び方が非常に重要であることも示された。

### 第3回 「データ時代の材料研究:NIMSの取り組みを中心として」

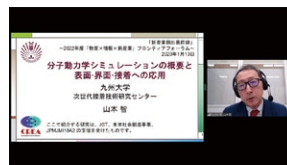


物質・材料研究機構  
統合型材料開発・情報基盤部門  
部門長  
出村 雅彦

2023年1月13日(金) 13:30～15:00

物質・材料研究機構(NIMS)でのデータ戦略:実験、計算からのデータを「つくる」、「ためる」業務、論文から抽出し「ためる」業務、そして、所望性能を実現する材料を設計するという逆問題を解くために設計ツール(MInt)とデータベースを「つかう」業務について、実例を交えて説明がなされた。

### 第4回 「分子動力学シミュレーションの概要と表面・界面・接着への応用」



九州大学  
次世代接着技術研究センター  
教授 / 副センター長  
山本 智

2023年1月13日(金) 15:15～16:45

全原子分子動力学法、粗視化分子動力学法の計算原理が、力場の種類とニュートン方程式から見通しよく説明された。応用例として、ゴム弾性、吸着鎖の形態変化、ブロックポリマー界面、エポキシ接着剤に適用し、実験値が計算結果でよく説明できることが示された。

### 第5回 「デジタルテクノロジーの民主化がもたらす変化～今後の研究・事業・キャリアの考え方～」

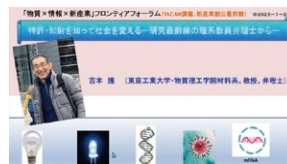


株式会社Iroribi  
代表取締役  
下山 輝昌

2023年1月20日(金) 13:30～15:00

大学、企業での材料/デバイス研究の経験をベースに、起業した会社にて、デジタルテクノロジーから取得できるデータを活用してビジネス展開してきた応用分野についての説明がなされた。その中で、重要と思われる新規事業プロセスの有り方が力説された。

### 第6回 「特許・知財を知って社会を変える～研究最前線の理系教員弁理士から～」



東京工業大学  
物質理工学院 材料系  
教授 / 弁理士  
吉本 護

2023年1月20日(金) 15:15～16:45

特許の歴史や知的創造サイクルの社会的意義、および特許の基本(出願前の研究準備、成立要件、出願、公開、審査、登録の流れ、登録後の権利概要、国際出願)について、論文発表との違いや、著作権の説明を含め、大学研究者の視点から事例を交えながら解説された。また、知財最前線で活躍する弁理士の資格取得に関する情報にも触れられた。

## 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(2023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 / 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 / 株式会社レゾナック / セイコーエプソン株式会社 / 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。)

