

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

News Letter

Vol.13
Jun. 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

◆ オフキャンパスプロジェクト

海外研究活動体験記: P.2,P.3



◆ 2023年度春期登録学生紹介:P4

◆ 物質情報異分野研究スキル

ラボ・ローテーション研究紹介:P5



◆ 2022年度卓越教育院修了式:P.6,P.7

◆ TAC-MIニュース 学生の受賞ニュース: P.8



オフキャンパスプロジェクト海外研究活動体験記



張葉平

物質理工学院
材料系 材料コース
博士後期課程2年(留学時)

2022年4月から10月の半年間、Imperial College LondonのJames Durrantグループで研究活動をしました。Durrantグループは時間分解過渡吸収分光法を利用して太陽電池や光触媒の励起キャリア動力学を追跡する測定に精通した世界



研究室のDurrant教授と



研究室の食事会で

留学先：インペリアル・カレッジ・ロンドン（イギリス）
留学時期：2022年4月～2022年10月

で著名なグループです。そこに自分の興味である光触媒の温度依存性を調べさせていただきました。実験装置の構成、正しい結果を得るための適切なパラメータの設定など、実験自体が難しく現地の学生とディスカッションしながら進めました。また、得られた結果が何を意味するのかを指導教員とディスカッションし、研究を進めました。同じ光触媒を研究しながらも全く違うアプローチで進めており、異なる考え方、異なる専門用語などを理解し、ディスカッションすることはゼロベースで考えさせられ新鮮でした。特に、この測定法に長く携わっている指導教員の知識の豊富さと引き出しの多さに深く感銘を受けました。

研究室では、多くの歓送迎会やゼミ合宿などに参加させていただき、研究のことからプライベートのことまでたくさん話しました。キャリアステージやライフワークバランスなど、共通する部分や異なる考え方に触れることができました。自分も取り入れられて有意義なものも多く、大変貴重な機会でした。



本間千柊

物質理工学院
材料系 材料コース
博士後期課程2年(留学時)

今回のオフキャンパスプロジェクトは、自分が今後研究者として生きていく上で大事な素養を身につけることができた非常に充実した7ヶ月間でした。私の指導をしてくださったDr. Pachauri氏は、私を客としてではなく、研究室の一研究者として扱ってくださり、時に厳しく、そして真剣に私の研究テーマと向き合ってくださいました。アーヘン工科大学での研究の成果は私の博士論文の主目的にも非常に密接に関わっており、非常に意味のある研究となりました。

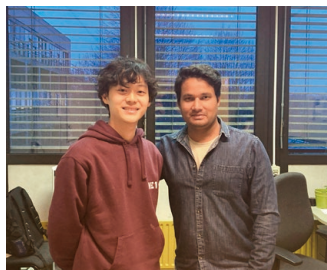
研究は現地の博士課程の学生とポスドクの方とともに行いました。英語を話すことについてはある程度の自信がありました。しかしながら、研究計画や実験条件について議論する際にうまく自分の意見を伝えることができず、わからないことがあってもうまく質問することができず、苦戦する場面がありました。これを機に、なぜ自分の英語では伝わらないのか、どうすればもっとスムーズに相手と意見を共有できるのかを考えるようになりました。それ以降は、相手と議論するときにどういった準備が必要で、どう伝えれば相手に伝わりやすいかを常に考え、また、わからないことがあったらそのままにせず、積極的に質問するようにしました。この経験は、英語でのコミュニケーションや研究実行能力を一層向上させるものとなりました。

また、今回の留学ではアーヘン工科大学での研究活動にとどまらず、ヨーロッパで開催された国際学会にも参加しました。指導教員や学生もいない、1人で学会

留学先：アーヘン工科大学（ドイツ）
留学時期：2022年5月～2022年12月

に参加するのは初めてで多少不安はありましたが、無事発表を終え、様々な国や大学の研究員の人たちと話す中で、海外での研究活動の楽しさを実感し、これからも研究活動を続けていきたいと強く思うようになりました。

辛いことや不安なことがたくさんありましたが、今は留学に行き行って本当に良かったと思っています。これからは研究していく上でたくさん分岐点があると思いますが、自分にとって険しくも有意義な道を選んでいきたいと思っています。



指導してくれたDr. Pachauri氏(右)と



研究室のクリスマスパーティーにて



横地浩義

物質理工学院
応用化学系 応用化学コース
博士後期課程2年(留学時)

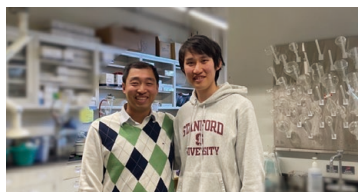
2022年9月1日から2023年3月1日の6か月間、アメリカ・スタンフォード大学化学専攻、Yan Xia先生のグループに滞在して研究を行いました。研究では2つの大きなプロジェクトに従事し、Xiaグループで開発された力学的刺激により導電性を示す力学応答性分子であるフルオロラダーモノマーの合成およびXiaグループで開発された「CANAL」と呼んでいる一連の反応を利用した n 共役拡張ラダー型分子の合成に取り組みました。Xiaグループでは、私が日本で行っている研究テーマの一部であるメカノケミストリーに関するユニークな研究が行われており、関連研究に従事できたことでこの分野に関する視野を大きく広げることができました。また、世界TOPの大学に在籍する博士課程の学生たちとの共同研究やディスカッションを通して、実験技術や語学力、思考力など様々な面で自分を

留学先：スタンフォード大学（アメリカ）
留学時期：2022年9月～2023年3月

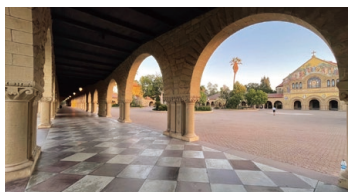
成長させる良い機会を得ることができました。

生活面では学士課程3年時にカナダ・バンクーバーに短期留学をした経験があったため、大きな問題もなく研究に集中することができました。コロナ禍の留学となりましたが、滞在中に一度もコロナウィルスに感染しなかったことは幸運でした。スタンフォード大学が位置するカリフォルニア州は一年を通して温暖で雨も少なく過ごしやすい気候で知られていますが、留学開始直後には歴史的な熱波に襲われ、帰国間際には歴史的な寒波および強風による大規模な停電が起きました。停電時は電気も電波も使用できない不便な生活を強いられました。貴重な経験ができたのではないかと思います。

最後に、留学生活で自分にとって最もかけがえのない「日本人との出会い」について記します。留学で日本人?と思う方もいると思いますが、海外に行かないと出会うことのない日本人と出会えるのも留学をする上での大きな利点であることを強調します。留学中に会った友人は超越した行動力を備えており、多くのポジティブな刺激を受けただけでなく、研究者にとって大事な人的ネットワークを広げる大きな助けになることも実感しました。今回の海外オフキャンパスプロジェクトを通して、様々な貴重な体験をするだけでなく、研究者としても大きな成長を遂げられたことを確信しています。今後、少しでも多くの学生の皆さんに留学の機会が与えられ、留学生活を通して多くの学びがあることを祈って、本体験記の結びとさせていただきます。



スタンフォード大学のXia先生(左)と筆者



スタンフォード大学キャンパス(メインウッドと回廊)



Yang Yue

物質理工学院
材料系 材料コース
博士後期課程2年(留学出発時)

I visited Prof. LiuMin's laboratory at Central South University in July and stayed for four months. Prof. LiuMin's group specializes in the design of electrocatalysts for energy conversion and environmental purification. Their group is good at combining first principles calculations and advanced experimental techniques to discuss reaction mechanisms in depth and guide future catalyst designs in this field.

Our lab once conducted a joint online workshop with people from Prof LiuMin's lab. However, an offline internship is a very different experience. Prof. LiuMin's lab includes five knowledgeable postdoctoral fellows from different backgrounds and many talented doctoral and master's students. All of the students work hard and actively communicate with each other. As their working time is quite long, they spend a lot of time together in the laboratory. For this reason, students have a strong relationship of trust with each other and always exchange frank opinions and suggestions.

During this internship, I aim to deepen my research on how residual strain influences photocatalytic performance. Since we have different research backgrounds, the lab members gave me many valuable suggestions that I didn't consider before. At first, I was bewildered by their frank communication style, and sometimes communication did not go well. Gradually, I got accustomed to this kind of communication style and noticed the valuableness of their frankness. With their generous help and refreshing suggestions, I conducted both first principles calculations for the catalytic surface and came to understand the importance of morphology control for my research topic.

Except research topics, I also communicated with the senior students about their

留学先：中南大学（中国）

留学時期：2022年6月～2022年10月

ideas on research and future plans. I was greatly impressed by their positive and realistic attitude toward their research, their strength and fearlessness of failure, and their strong drive to accomplish nice works. Although I am Chinese, my scientific training has been primarily in Japan. I had heard from friends how competitive the academic world in China was, but it was completely different when I actually experienced it. Their positive spirit under high pressure left a strong impression on me.

I am very grateful for the support of TAC-MI program to let me participate in this overseas campus project that allowed me to experience a different research lifestyle. Through this project, I got to know many knowledgeable and robust researchers. They kindly shared their knowledge with me and encouraged me to think more deeply. More importantly, their valuable personality and unwavering perseverance inspired me a lot. I hope to use this experience to further improve myself in the future.



研究室メンバー全員との夕食後の集合写真



大学構内から見た空



An Niza El Aisnada

物質理工学院
材料系 材料コース
博士後期課程1年(留学出発時)

For about six months, from mid-August 2022, I conducted off-campus project at the Materials Chemistry and Catalysis group of Debye Institute for Nanomaterials Science, Utrecht University, the Netherlands. There, I primarily worked under the supervision of Professor Nong Arirth, as their group developed a software package to accelerate material simulation using machine learning of artificial neural networks. I found this to be very useful for my research, which mainly focused on exploring highly potential energy materials for CO₂ conversion using an electrochemical system.

留学先：ユトレヒト大学（オランダ）

留学時期：2022年8月～2023年2月

Despite having previously studied abroad, the research environment was slightly different. Furthermore, the diversity of the group, with people from different backgrounds and countries, created a welcoming and helpful atmosphere. This allowed me to concentrate on my research without encountering major issues. Additionally, I had the opportunity to attend a workshop in Germany held by a growing community in machine learning for material simulation, which was a valuable experience for me as a newcomer to the field. I believe that these activities considerably expanded my research horizons.

Aside from research, the Netherlands is a fascinating and beautiful country with lots of nature and historical museums. It is also close to several neighboring countries that are affordable by integrated transportations. One of the memorable places that I visited was the place where Albert Einstein was born in Ulm, Germany. If given another chance, I would like to visit during the spring or summer seasons as there are many interesting nature activities.

Overall, this overseas off-campus project was a valuable experience for me, and I intend to use this experience to continue my research.



チューリップの日に私の親友(左)と



ザーネセスカンス (Zaanse Schans) 風車村



水落 隆介

理学院
化学系 エネルギーコース
博士後期課程2年(留学時)

クイーンズランド大学のLianzhou Wang教授の研究室に10か月間研究留学し、「ハイブリッドペロブスカイト太陽電池材料を用いた光電気化学的CO₂還元」という研究テーマに取り組みました。Wang研究室では近年高効率かつ低コストの次世代太陽電池材料として注目されているハイブリッドペロブスカイトを研究し、多くの成果を上げています。それを光エネルギー変換へ応用することを考えており、私がこれまで光電気化学を専門として光エネルギー変換に取り組んできたことから、このテーマ立て、研究を進めることになりました。

研究に取り組もうとすると、すべての作業に英語でのコミュニケーションが必要で、また自身の英語力も十分ではなかったため、かなりストレス感じました。しかし、滞在期間は10か月で長かったため、2~3か月かけて少しずつ英語に慣れるとともに研究室のメンバーとも積極的に意思疎通が取れるようになりました。それから3~4か月後には主体的に研究を推し進めることができるようになり、同時に友人関係など研究室に限らず身の回りの関係性を広げることができました。実際に、研究室とは関係のない友人たちとタスマニア旅行に行き、羽を伸ばすことができました。10か月の長い期間のおかげで研究だけでなく、今後の人生にとって財産となるコミュニティを作ることができたと考えています。もちろん研究に関しても、これまで経験したことがなかった測定装置や実験手法を習得することができ、また、Wang研究室が30人近くの大きなグループで研究テーマの異なる複数のサブグループを抱えることから、それぞれのグループの様々な研究報告を聞き、

留学先：クイーンズランド大学（オーストラリア）

留学時期：2022年6月～2023年3月

議論をすることで、自身の研究に対して多角的な視点を持つことができるようになりました。研究でもプライベートでも日本では経験できないよりスケールが大きく、グローバルな環境に身を置いたことで狭い視点に偏らず、より広い視点でものを見ることができるようになったと思います。



友人たちとタスマニア旅行



Wang研究室のメンバーと

2023年度春期登録学生紹介

M2



物質理工学院
材料系
材料コース
修士課程2年

小菅 大輝

私は現在、主に時分割のX線回折装置(XRD)を用いることで、無機化合物の結晶構造が変化していく様子をミリ秒スケールで追跡しています。一回の測定で数千点のデータが得られるため、データ解析が難しいです。

物質・情報卓越教育院では、ベイズ推定や機械学習を始めとする情報の知見を用いることで、膨大なデータから種々の化合物の反応メカニズムを明らかにしていきたいと考えています。

M2

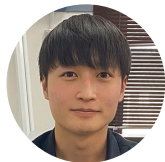


物質理工学院
応用化学系
ライフエンジニアリングコース
修士課程2年

川口 慎司

私は、がん細胞で高発現する代謝物質を用いた生体内高分子合成、および高分子のがん診断・治療への機能化について研究を行っています。物質・情報卓越教育院で学べるプログラミング技術や解析技術を用い、情報科学の知識をフル活用して研究の効率化へとつなげたいと思います。そして、患者さんの負担を軽減できるがん診断・治療の実現に貢献できるように頑張りたいです。

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

長谷川 史穂

私は現在、ペプチドをセンサーとして用いることで様々な高分子材料を表面特性に基づき、分類・識別をする研究を行っています。

物質・情報卓越教育院では、自身の研究に活かせるような情報分野の知識を習得するのはもちろんのこと、異分野の学生や企業の方々と共に課題を解決するなどの交流を通して、自身の分野にとらわれない、幅広い視野を養っていきたく考えております。

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

Song Yunyi

My research is about the development of the d-n-A emissive molecules with diboyl/benzene units to systematically study the excited-state behavior. By combining material science of my major with information science I will learn about in TAC-MI, new functional emissive materials are expected to be realized.

By the aid of state-of-the-art computational technique, I hope to unveil the detailed ground- and excited-state structures and properties of designed D-A(donor-acceptor) system. Based on theoretical simulation, including donor selection phenomenon prediction, I hope to synthesize new D-A molecules and polymers, investigate the properties of them, and the obtained results will be again fed back into the computer simulation. Also, I will try to theoretically investigate the unexpected phenomenon while experiments, trying to clarify their mechanisms. Through the study, I hope to find new design strategies for high-performance organic opto-electronic materials.

Home country China

M2



物質理工学院
材料系
材料コース
修士課程2年

Zhang Wenhao

My research focuses on investigating energy transfer mechanisms in self-assembled nanofibers, which are dependent on solvent polarity. I employ atomic force microscopy (AFM) and fluorescence microscopy techniques for mechanical manipulation and analysis of these nanofibers. A key aspect of this research is understanding the influence of molecular structure on intermolecular energy transfer behaviors.

In the TAC-MI project, I aim to delve deeper into the effects of side chain structures on intermolecular energy transfer. I plan to train machine learning models using existing research data from fields such as organic solar cells. These models will help predict optimal molecular structures for enhanced energy transfer. Subsequently, I will verify the predictions using fluorescence microscopy and AFM to determine their accuracy and potential applications.

I am confident that the TAC-MI project will significantly contribute to my ongoing research by providing valuable insights into machine learning applications for advancing our understanding of molecular energy transfer mechanisms in nanofibers.

Home country China

M2



工学院
電気電子系
電気電子コース
修士課程2年

松永 尚樹

私は、トランジスタの次世代のチャンネル材料である遷移金属ダイカルコゲナイドの成膜に関する研究を行っています。

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、不純物がどのように電気特性に影響を与えるかを研究したいと思っています。具体的には、半導体材料中の不純物がキャリア密度や移動度に与える影響を計算し、理論的な予測と実験結果の比較を行い、デバイス設計に役立て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

是石 和樹

次世代パワー半導体材料として注目されている酸化ガリウムという物質が研究対象です。結晶構造が歪んだ薄膜を成長させ、酸化ガリウムの電子状態がどのように変化するか調査しています。研究を進展させ、高性能なパワー半導体の実現を目指します。

物質・情報卓越教育院では、TSUBAMEを使った第一原理計算で論文が書けるくらいの実力を身につけたいと思います。あとプラクティススクールがとても楽しみです!

M2



物質理工学院
材料系
材料コース
修士課程2年

Yi Xianzhe

Since my research is about glass simulation and potential function. I'd like to deal with machine learning and have started from the second year of undergraduate. In another word, I witness the sharp development of machine learning these years and I am totally fascinated by the possibilities inherent in ML. Although the concept of ML was proposed many years ago, not until these years, the application was limited by the hardware of computer. However, the breakthrough is happening these days under the development of basic materials science. As a student in materials science, there are still many unsolved problems in simulation of materials, especially the potential function. I think this is where the algorithm technology comes in.

Home country China

M2



物質理工学院
材料系
材料コース
修士課程2年

Zhang Wenhao

My research focuses on investigating energy transfer mechanisms in self-assembled nanofibers, which are dependent on solvent polarity. I employ atomic force microscopy (AFM) and fluorescence microscopy techniques for mechanical manipulation and analysis of these nanofibers. A key aspect of this research is understanding the influence of molecular structure on intermolecular energy transfer behaviors.

In the TAC-MI project, I aim to delve deeper into the effects of side chain structures on intermolecular energy transfer. I plan to train machine learning models using existing research data from fields such as organic solar cells. These models will help predict optimal molecular structures for enhanced energy transfer. Subsequently, I will verify the predictions using fluorescence microscopy and AFM to determine their accuracy and potential applications.

I am confident that the TAC-MI project will significantly contribute to my ongoing research by providing valuable insights into machine learning applications for advancing our understanding of molecular energy transfer mechanisms in nanofibers.

Home country China

M2



理学院
物理学系
物理学コース
修士課程2年

鈴木 和歩

私は、量子可積分系と呼ばれる可解な多体模型を用いて、非平衡状態にある系の巨視的な性質を研究しています。物質・情報卓越教育院では、ラボ・ローテーションやプラクティススクールの経験を通して、自分の専門に加え異分野への理解を持つ人材になる事を目指します。

M1



物質理工学院
材料系
材料コース
修士課程1年

宮下 和聡

私は、水素貯蔵のためのアンモニア分解反応における高機能な触媒の合成を目指し、窒素含有化合物の検討および反応機構の解明を行っています。窒素含有化合物では既存の触媒と異なる反応機構で反応が進行していると考えられており、それらを実験だけでなく第一原理計算によっても明らかにしたいと考えています。さらに得られた知見からマテリアルズインフォマティクスを用いた新材料の探索も目指し実用可能な触媒の合成を目指します。

M1



物質理工学院
材料系
材料コース
修士課程1年

唐 若娜(トゥルワナ)

私の研究テーマは酸素を含むTiAl(チタンアルミ)合金の相平衡です。TiAl合金は優れた高温比強度を持ちながら、密度は現在航空材料で使われているニッケル系合金の半分しかありません。しかし、粉末冶金では、酸素の混入は避けられず、酸素を含むTiAl系の相平衡は合金設計においても大切です。状態図に関する実験データはとても取りづらいため、私は少量の実験データでも、より実際と合う結果を出せる方法を物質・情報卓越教育院で探索したいです。

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、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/>

TAC-MI登録学生数 2023年4月時点

博士後期課程

D3 24名

D2 22名

D1 19名

修士課程

M2 23名

M1 2名

物質情報異分野研究スキル ラボ・ローテーション 研究紹介

物質・情報卓越教育院では、物質と情報の両分野にまたがる新しい方法や考え方を生み出す独創力を涵養するため、選択するコースとは異なる専門の研究室に2週間滞在して研究を行う、ラボ・ローテーションを実施しています。昨年度、物質情報異分野研究スキル(ラボ・ローテーション)を履修した学生の研究を紹介します。



物質理工学院 材料系 材料コース

小池 剛大

研究室での研究テーマ:
負熱膨張物質の探索

ラボ・ローテーション配属先研究室:

物質理工学院 材料系 大場研究室

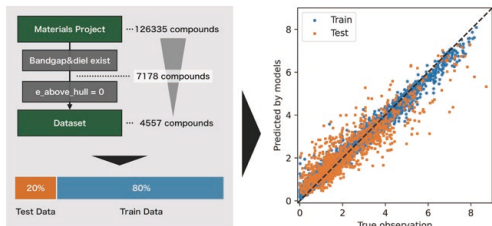
ラボ・ローテーションでの研究テーマ:

第一原理計算データベースを活用した機械学習によるバンドギャップ予測

私は所属研究室において、温めると縮む「負の熱膨張」特性を持った物質を高温高圧下で合成し、X線回折装置(XRD)を用いて格子定数の温度変化を解析することで、熱膨張評価を行っています。

ラボ・ローテーションでは大規模な材料データベースであるMaterials Projectからデータセットを取得し、組成中の各元素の特性値から計算した化合物の特性値を説明変数にすることで、組成からバンドギャップを教師あり機械学習によって予測しました。

4000を超える化合物のデータセットを実験によって得ることは難しく、MIにおけるデータベースの重要性を強く感じました。また、組成から物質特性を予測する事ができれば、実験的な組成探索の前段階として機械学習による絞り込みができると期待されます。現在研究している物質を足がかりに、負熱膨張材料のデータベースの作成にも挑戦したいと考えています。



Materials Project から取得したデータセットと予測されたバンドギャップ



環境・社会理工学院
土木・環境工学系 土木工学コース

波多野 雄大

研究室での研究テーマ:
紫外線消毒後の大腸菌を対象とした水質マトリックスに基づく再増殖能の評価

ラボ・ローテーション配属先研究室:

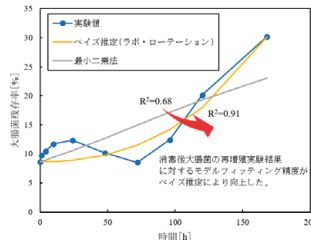
物質・材料研究機構(NIMS) 出村・永田研究室

ラボ・ローテーションでの研究テーマ:

推定精度の向上を目的とした、細菌実験における、モデルフィッティング方法のベイズ化

水環境分野の実験では、モデル式を結果にフィッティングさせて評価します。細菌を扱う実験において最小二乗法でフィッティングを行うと、軽視される部分が生じやすく、精度が低くなりがちでした。そこでラボ・ローテーションでは、二乗誤差の代わりに計測対象が数の数え上げであることを利用したポアソン分布を活用し、自身の実験データに対するフィッティング精度の向上を図りました。その結果、最小二乗法では上手くフィッティングできていなかったデータに対してもモデル式を上手くフィッティングさせることができました(決定係数:0.68→0.91など)。

これまで研究に用いるだけであった統計手法について、ラボ・ローテーションを通して深く触れることができました。出村先生、永田先生がとても丁寧にご指導くださり、先生方とフィッティング精度の向上を模索した経験は非常に新鮮で楽しかったです。今回学んだ手法を、今後の研究でも活用していきたいです。



二乗誤差の代わりにポアソン分布を活用したベイズ推定によるモデルフィッティング精度の向上



物質理工学院 材料系 材料コース

丸井 莉花

研究室での研究テーマ:
絶縁性高熱伝導性樹脂開発に向けたエポキシ樹脂の合成および物性解析

ラボ・ローテーション配属先研究室:

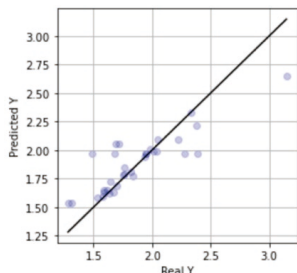
情報理工学院 数理・計算科学系 金森研究室

ラボ・ローテーションでの研究テーマ:

機械学習を用いた樹脂の熱拡散率予測

私は、所属研究室において高熱伝導性樹脂の開発に取り組んでいます。高分子エポキシ樹脂の化学構造と熱伝導性について構造物性相関を明らかにすることを目的に、多様なモノマーを設計し、その合成および物性評価を行っています。しかしながら、最適な化合物の設計に至るには合成および解析に膨大な時間を要し、その相関解明も限られた時間内では十分な達成が見込めません。ラボ・ローテーションでは、高熱伝導な樹脂の分子構造を探索することを目的に、化学構造・熱伝導性の相関を明らかにし、データセットの化学構造を元にランダムに生成した分子構造の熱拡散率を得られた相関を用いて予測しました。

計算科学を取り入れた実験化学研究は、上記のような目的達成を加速することが期待されます。ラボ・ローテーションでは、計算科学における基本的な考え方を十分に理解し、実際に進める上で自身の研究に適切なデータセットの作り方を勉強しました。このような初期段階をラボ・ローテーションの中ではとても丁寧にご指導頂きました。今後の研究に向けて、より予測精度を上げるためのデータ数の追加と共に、ピンポイントでより効率的に実際の合成に取り組める仕組みづくりに発展させて参りたいと考えています。ラボ・ローテーションでご指導いただきました先生に深く御礼申し上げます。



ランダムフォレストによる推定結果(縦軸予測した熱拡散率、横軸測定した熱拡散率)



物質理工学院 材料系 材料コース

山本 昌尚

研究室での研究テーマ:
鉄系ペロブスカイト酸化物を用いた低級アルカンの液相酸化反応

ラボ・ローテーション配属先研究室:

物質理工学院 応用化学系 山口・黒木研究室

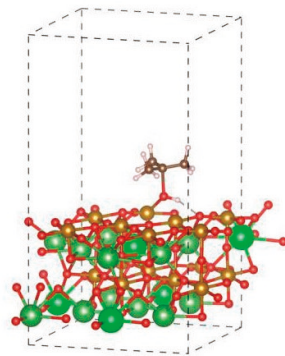
ラボ・ローテーションでの研究テーマ:

第一原理計算を用いたペロブスカイト酸化物表面におけるイソブタンの吸着状態計算

所属研究室では鉄原子を含んだペロブスカイト酸化物を用い、イソブタンなどの低級アルカンをアルコールへと直接変換する研究を行っています。しかし、実験的な解析のみで酸化物表面上の複雑な反応挙動を逐次解析するのは困難であり、推定した反応機構の実証が出来ずにいました。

そこで、ラボ・ローテーションにおいては、第一原理計算を用いて酸化物表面上のイソブタン分子の吸着状態計算を行いました。計算が複雑な強相関電子系である鉄を対象としたため、慣れない計算やデータの解釈には大きな苦勞を伴いましたが、最終的にはイソブタン分子のC-H結合が触媒表面の酸素イオン上で開裂するという、これまでの実験結果から考えられてきた仮説をフォローする計算結果を得ることが出来ました。

今後は、より広範な材料に対して計算を適用し、新しい触媒開発に生かすことで今の研究を掘り下げた新たなテーマに取り組んでいきます。



吸着状態計算のため構築した酸化物の表面スラブモデル

2022年度卓越教育院修了式を開催

～13名が物質・情報卓越教育課程を修了～

東京工業大学は、2023年3月27日(月)に2022年度リーディング大学院・リーダーシップ教育院・卓越教育院合同修了式を、大岡山キャンパスのTaki Plazaにて行いました。

物質・情報卓越教育院では、今春、13名がプログラムを修了しました。合同修了式には、卓越教育院からは物質・情報卓越教育院(TAC-MI)12名と超スマート社会卓越教育院(WISE-SSS)3名、リーディング大学院からはグローバルリーダー教育課程(AGL)2名と情報生命博士教育課程(ACLS)2名、リーダーシップ教育院(ToTAL)からは4名の合計23名が出席し、修了生には、記念品のメダルが贈られました。



卓越教育院の修了生と益学長、佐藤総括理事・副学長、井村理事・副学長、卓越教育院の関係者ら



お祝いのメッセージを贈る益一哉学長



物質・情報卓越教育院の修了生を紹介



修了生に祝辞を述べる物質・情報卓越教育院の山口猛央教育院長



物質・情報卓越教育院の修了代表者としてあいさつする廣畑智紀さん

修了式では、はじめに、益一哉学長と佐藤勲総括理事・副学長、井村順一理事・副学長(教育担当)が、修了生へ向けにお祝いの言葉を贈りました。続いて、各プログラム主査および教育院長から修了生の紹介と祝辞があり、最後に、物質・情報卓越教育院の廣畑智紀さんを始め、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、各教育課程所属中の印象に残った活動・苦労話や今後の抱負などを語りました。

修了生は今後、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卓越博士人材として、それぞれの新天地での活躍が期待されます。

13名の修了生の声



物質理工学院 材料系 ライフエンジニアリングコース

田原 寛之

TAC-MIでは講義や演習、ラボローテーションやブラクティクススクールを通じて情報科学の基礎から実践まで幅広く学ぶことができました。また学内外の先生方、企業の方、そして多くの学生さんたちと、分野の垣根を越えて交流を深めることができました。このような貴重な経験をするのができたのも、TAC-MIの先生方や事務室の方々の手厚いサポートがあったからこそ実感しています。

私は卒業後に民間企業に就職しますが、TAC-MIで培った知見を活かして社会に貢献していけるように努力していきたいです。

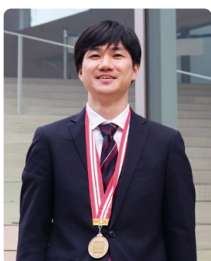


物質理工学院 材料系 材料コース

李 智

TAC-MIを通して、自分の専門分野である物質分野の知識を学ぶだけでなく、情報科学も勉強することができました。そして、企業メンター及び異分野の研究者との議論により、広い視野を養い、将来のキャリア決定にも非常に参考となりました。

卒業後はTAC-MIの会員企業に就職しますが、今まで得られた知識や価値観を基に、ものをつくって人々に幸せを提供する立場として、より良いサービスを生み出したいと思っています。



物質理工学院 応用化学系 応用化学コース

小松 遊矢

TAC-MIでは、専門家や企業との議論を通じて、シミュレーションや情報科学などの幅広い技術を実践的に身につけることができました。特に、現実の課題に機械学習を適用し、手厚いサポートの下で集中的に取り組んだ企業の課題解決プログラムは、TAC-MIならではの刺激的かつ貴重な経験でした。

卒業後は、産業界での研究開発に取り組みます。アカデミックなスキルを実社会の課題解決に活かし、世の中に求められる製品を送り出したいです。



物質理工学院 応用化学系 応用化学コース

齊藤 彰吾

私はTAC-MIに採択されるまでは情報科学分野に疎かったのですが、授業等により知見を増やしていくことで、自分の研究分野に機械学習やプログラミング技術を用いることができました。これはTAC-MIによってきっかけが、博士課程で得られた大きなスキルであると感じています。

私は今後、アカデミックポストに残り研究を続けていくことになりました。今後の研究生活においても、TAC-MIで得られた知見を利用して、物質・情報分野で活躍できる化学者を目標したいと思います。



物質理工学院 応用化学系 エネルギーコース

大久保 辰哉

TAC-MIでは、演習授業やラボローテーション、自主設定論文、その他発表会など、様々なイベントを経験し、物質科学と情報科学の融合分野に挑戦することができました。特にプラクティススクールは自分の博士人生の大きな転換点の一つにも感じ、社会サービスを見据えた研究開発の重要性を学びました。

私は卒業後コンサルティング会社に就職し、エネルギーに関わるソフトウェアの研究開発を行います。TAC-MIで培った物質科学や情報科学、社会サービスに関わる知識や経験を最大限活かし、地球温暖化などの社会課題の解決や新たな融合分野の開拓に挑戦します。



物質理工学院 応用化学系 応用化学コース

佐々木 遼馬

TAC-MIでは、通常の博士課程では体験できないような多種多様な経験を積むことができました。特に、プラクティススクールでは、貴重な経験をしたと思います。こうしたTAC-MIでの多忙な活動において、気さくすぎる専任教員の先生方や忘れっぽい私にも親身に対応してくださるTAC-MI事務室の皆さまには、大変お世話になりました。

今後は、TAC-MIで磨き上げられた「物質・情報」の専門性を活用し、社会実装まで見据えた「材料・素材」の開発に貢献する研究をしていきたいと思っています。



物質理工学院 応用化学系 エネルギーコース

Gekko Patria Budiutama

The TAC-MI program has enriched my doctoral studies immensely. It allowed me to study, explore, and experiment in different cross-interdisciplinary fields, providing me with diverse tools to approach my research. I especially enjoyed the chance to present my works and interact with students from universities across the world at the first, second, and third TAC-MI International

Forum. I also enjoyed my time at the Materials Informatics Practice School. Inspired by the different things I learned in this program, I shall embark on research related to quantum machine learning that might be useful for different fields of application including material science. And in the future, I wish to build my own startup company related to this field.

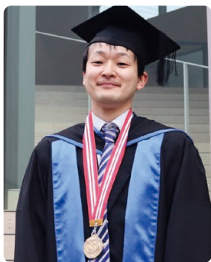


理学院 物理学系 物理学コース

北 玲男

物質・情報卓越教育院では、実際に実験や機械学習など自身の専門分野では学ぶ機会が少ない手法を習得できたことや、これらを実際に習得した同期と議論を行ったことは非常に良い経験になったと思います。これらの経験は、実際に自身の進路設計に大いに役に立ちました。

来年度は、産業技術総合研究所に所属し、機械学習を用いた磁性物質探索を行う研究室に所属します。実際に機会学習を学ぶことにより、これを自身が興味を持っているに炭素系に応用したいという一つの野望を物質・情報卓越教育院での学びを通じて構築できたかと思っています。

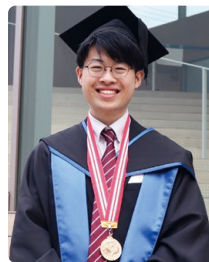


理学院 化学系 化学コース

小林 柊司

TAC-MIのプログラムを通して、私は自身の強みを伸ばしながら物質と情報の複合領域における知見を養うことができました。TAC-MIで得た知見は、博士論文の研究にも活用することができました。さらに、プラクティススクールなどで得た経験は、自身のキャリアプランを考えていく上で非常に有意義でした。また、イベントの運営などを通して、他系の同期と交流を持てたことも良い経験でした。

卒業後は民間企業に就職しますが、企業でも複合的な知見を活かした研究開発を進めていきたいです。



物質理工学院 応用化学系 応用化学コース

井上 恵希

TAC-MIを通して、情報の基礎から化学と情報を組み合わせた課題解決の方法まで学んだ結果、複眼的な視点で着想できるようになりました。所属研究室では実験を中心とした研究に取り組んでいますが、実験と情報を組み合わせることにより、実験のみもしくは情報のみでは解明できない事実を明らかにできるようになりました。

今後、私は民間企業で材料開発に取り組む予定です。蓄積データの多い複合材料を扱うため、TAC-MIで培ったスキルでデータをうまく活用し、より良い材料の創製に努めます。

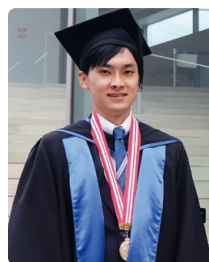


物質理工学院 応用化学系 応用化学コース

廣畑 智紀

TAC-MIでの3年間で、非常に貴重な経験をさせていただきました。カリキュラムを通じて、情報分野の基礎から応用展開までを体系的に学ぶことができ、実際に自身の博士研究にも取り入れることができました。さらに、自身の専門とは異なる情報科学の先生方や同期、企業研究者の方々と密にディスカッションする機会に恵まれ、自身の視野が広がったと思います。

卒業後は民間企業で、社会実装に近いフェーズの研究開発を行う予定です。TAC-MIで得た知識や経験を活かしながら、持続可能な社会構築に貢献できるような研究に進進していきたいです。



物質理工学院 応用化学系 応用化学コース

渡部 拓馬

TAC-MIでは、機械学習や量子化学計算、プログラミングの基礎を学び、実際に企業の課題に取り組むプラクティススクールや自身の研究での実践を通じて身につけることができました。その他にも、専門や立場、視点異なる科学者と関わる多くの機会を通じて、専門分野に固執することなく広い視野を持つことができたと実感しています。

今後は化学メーカーで材料開発に従事しますが、専門知識とTAC-MIで培った情報科学の双方を活用して新たな製品を生み出していきたいです。



物質理工学院 応用化学系 応用化学コース

岸野 真之

情報科学の知識がOの状態から、TAC-MIの授業、ラボローテーション、プラクティススクールを通じて、プログラミングや機械学習等を学びました。培った情報科学の知識を活用することで、自身の物質科学の研究を進展させることに成功しました。また、ビジネス討論合宿では、学術的な研究を社会へ還元する視点を獲得することができました。

このようにTAC-MIに所属することで、研究者として大きく成長できたと感じています。

今後は企業において、物質科学と情報科学の知識を駆使しながら、社会を豊かにする製品を開発していきたいと思っています。



物質・情報卓越教育院の修了生との記念写真

修了生の皆様、ご卒業おめでとうございます!

TAC-MI学生9名が日本学術振興会 (JSPS) の特別研究員に採用

2023年4月新たに下記の学生がDC1、DC2に採択されました!

DC1 巽 由奈さん、橋本 陽太さん、
山崎 翔太さん、他1名

DC2 石濱 圭佑さん、片岡 大志さん、桜井 勇太さん、
村松 央教さん、Lee Koomokさん

2022年度 学生の受賞ニュース ※学年は受賞当時

2022.4.6~9

橋本 陽太 (修士課程2年、生命理工学院 生命工学系 生命工学コース)
アメリカで開催されたKeystone symposia Micropeptides: Biogenesis and Function
学会にて発表し、EUNICE KENNEDY SHRIVER NATIONAL INSTITUTE OF CHILD
HEALTH AND HUMAN DEVELOPMENT (NICHD) SCHOLARSHIPを受賞。

2022.5.14~15

福永 悠 (博士後期課程2年、理学院 化学系 化学コース)
第82回分析化学討論会にて、若手ポスター発表賞を受賞。

2022.5.18

巽 由奈 (修士課程2年、物質理工学院 応用化学系 応用化学コース)
2022年度粉体工学会春期研究発表会にて、口頭発表を行い、ベストプレゼンテー
ション賞を受賞。

2022.5.24~26

小池 剛大 (修士課程2年、物質理工学院 材料系 材料コース)
粉体粉末冶金協会2022年度春季大会にて発表し、優秀講演発表賞を受賞。

2022.6.9

石濱 圭佑 (博士後期課程2年、物質理工学院 材料系 材料コース)
日本セラミックス協会にて、2021年度JCS-Japan優秀論文賞を受賞。

2022.6.10~11

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)
第43回光化学若手の会にて、最優秀ポスター発表賞 (Chemical Science Award) を
受賞。

2022.7.17~22

Song Subin (博士後期課程2年、物質理工学院 応用化学系 エネルギーコース)
アメリカで開催された23rd International Conference on Solid State Ionics学会に
て、ポスター発表を行い、OUTSTANDING POSTER AWARDを受賞。

2022.8.3~6

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)
The 5th International Union of Materials Research Societies International
Conference of Young Researchers on Advanced Materials (IUMRS-ICYRAM
2022)にて、口頭発表を行い、ICYRAM2022 Student Presentation Award を受賞。

2022.8.5~7

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)
第33回配位化合物の光化学討論会にて、ポスター賞を受賞。

2022.8.5~7

細川 直輝 (博士後期課程1年、理学院 化学系 化学コース)
第33回配位化合物の光化学討論会にて、学生講演賞を受賞。

2022.9.15~18

丸井 莉花 (修士課程2年、物質理工学院 材料系 材料コース)
韓国で開催されたPOLYCONDENSATION 2022にて、Best poster awardを受賞。

2022.9.16~18

巽 由奈 (修士課程2年、物質理工学院 応用化学系 応用化学コース)
化学工学会第53回秋季大会にて、口頭発表を行い、基礎物性部会シンポジウム最
優秀賞を受賞。

2022.9.25~28

Lee Koomok (博士後期課程1年、物質理工学院 材料系 材料コース)
韓国で開催されたThe 13th Korea-Japan Conference on Ferroelectricity
conferenceにて発表し、KJC-FE13 Excellent Presentation Awardを受賞。

2022.10.18~22

飯塚 忠寿 (博士後期課程1年、物質理工学院 応用化学系 応用科学コース)
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)
日本化学会秋期事業 第12回CSJ化学フェスタにて、優秀ポスター発表賞を受賞。

2022.10.28

木村 大輔 (博士後期課程2年、物質理工学院 材料系 材料コース)
第32回高分子加工技術討論会にて発表し、学生優秀発表賞を受賞。

2022.11.13~16

Chen Xiao (博士後期課程3年、工学院 情報通信系 情報通信コース)
日本光学会2022年次学術講演会にて発表し、第8回OPI優秀講演賞を受賞。

2022.11.25~26

Chon Seoungmin (博士後期課程3年、物質理工学院 応用化学系 応用科学コース)
第16回物性科学領域横断研究会にて発表し、若手奨励賞を受賞。

2022.12.16

張 葉平 (博士後期課程2年、物質理工学院 材料系 材料コース)
第27回シンポジウム「光触媒反応の最近の展開」にて、奨励賞を受賞。

2022.12.17

高橋 希 (博士後期課程1年、物質理工学院 材料系 材料コース)
大学院教育改革フォーラムのワークショッププログラムで他大学の卓越大学院生と
ともにチームを組み、最優秀発表賞を受賞。

2023.3.23~25

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)
日本化学会第103春季年会にて、学生講演賞を受賞。

おめでとうございます!



会員企業制度

物質・情報卓越教育院では「会員企業制度」というユニークな制度を導入しています。会員企業からの意見を活動に反映させていただくと共に、メンター役をお願いすることにより、本教育院の登録学生の社会的視野を広め、複素人材としての成長に役立ちます。一方、会員企業にとっては、研究者の方々为本教育院での講義、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6月15日現在)

AGC株式会社 / 旭化成株式会社 / 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 / 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 / 日本化薬株式会社 / 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

(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。)

