

# 会社紹介・インターンシップ概要

三菱ケミカル株式会社

Science & Innovation Center

Materials Design Laboratory

白鳥 和矢

## 世界をもっとKAITEKIに。

気候変動、人口増加、資源・エネルギー、海洋プラスチックごみ等、  
世界は今、数々の大きな課題に直面し、大きな変化を迫られています。

私たち三菱ケミカルグループは、これまで培ってきた  
総合化学のチカラで、世界規模の環境・社会課題を解決し、  
未来のKAITEKI を実現します。

人だけでなく、社会や地球にとっての心地よさがずっと続くように。  
世界に、そしてあなたに、私たちにしかできないソリューションを提供していきます。

Basics

## ベーシックマテリアルズ/MMA



オレフィン・アロマ



ケミカルズ



炭素



MMAモノマー/アクリル樹脂

## ポリマーズ & コンパウンズ



パフォーマンスポリマーズ



アセチルポリマーズ



サステイナブルポリマーズ



コーティング材



添加剤・ファイン

Specialities

Moldings

## フィルムズ & モルディングマテリアルズ



パッケージング



工業フィルム



ポリエステルフィルム



炭素繊維



アドバンストマテリアルズ



アルミナ・繊維

## アドバンストソリューションズ



アクア・インフラ



ライフソリューション



半導体



エレクトロニクス



電池材料

Solutions

白鳥 和矢

・北海道大学（修士） → 総合研究大学院大学（分子科学研究所; 博士）

時間依存密度汎関数理論による電子の実時間実空間シミュレーション  
金クラスターの吸収スペクトル解析  
化学ポテンシャルを指定した電子状態計算手法開発

・東北大学（ポスドク：4年間）

界面和周波発生分光スペクトルのシミュレーション、基礎理論構築

・三菱ケミカル Science & Innovation Center, Materials Design Laboratory

材料系のシミュレーションとインフォマティクスを用いて様々な部署が抱えている課題を解決。入社9年目



引用：  
[https://www.ism.ac.jp/ism\\_info\\_j/labo/project/147.html](https://www.ism.ac.jp/ism_info_j/labo/project/147.html)

博士が活躍できる  
場があります！

# インターンシップの実施場所



三菱ケミカルグループの中長期研究開発拠点であり、  
短中期R&Dを担う7研究所とも連携して、研究開発の  
スドアップを図るとともに、国内外のユーザー、アカデミア、ベン  
チャー等との Open Innovationも進めています

**Science & Innovation Center**



地図の引用：CraftMAP  
<http://www.craftmap.box-i.net/>

## Materials Design Laboratory

三菱ケミカルにおける、計算化学と物性解析の専門家組織  
様々な商品についての設計、解析を行っています

博士、キャリア入社 多数在籍

# 普段の業務例とインターンシップ内容

## 商品開発部門

望んだ物性を持つ新しい  
分子構造の材料を設計したい



どんな構造  
が良いだろう  
か・・・？

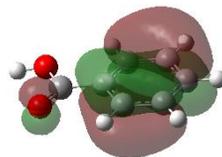


実験・評価

設計する材料は低分子に限らず、  
無機固体やポリマーなど多岐にわ  
たります

## 当 Materials Design Laboratory

シミュレーションによる予測



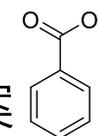
電子状態計算（孤立系・  
周期系）やMD計算など  
材料系シミュレーション

機械学習による予測



高速な予測を活かした  
構造発生（逆問題）

有望構造を提案



ディスカッション

商品開発部門と連携して  
新しい材料を開発

予測技術の構築、インフラ整備

# 普段の業務例とインターンシップ内容

## 商品開発部門

望んだ物性を持つ新しい  
分子構造の材料を設計したい



どんな構造  
が良いだろう  
か・・・？

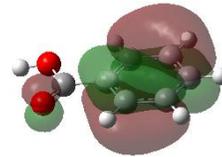


実験・評価

ディスカッション

## 当 Materials Design Laboratory

シミュレーションによる予測



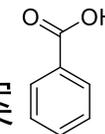
電子状態計算（孤立系・  
周期系）やMD計算など  
材料系シミュレーション

機械学習による予測



高速な予測を活かした  
構造発生（逆問題）

有望構造を提案



- ・インターンシップでは普段の業務の一部をご担当いただきます
- ・具体的な内容は参加者のバックグラウンドも考慮し相談の上決定します
- ・昨年度オンラインによるインターンシップ実績あり

予測技術の構築、インフラ整備

# 研究棟を新設しています

## Science & Innovation Center における研究棟新設について ～デジタル化と知の融合によりイノベーション創出を加速～

- ① ビッグデータやAIの活用を可能とする最新鋭デジタルインフラ（ハイパフォーマンスコンピュータや実験データ電子化システムを含む）導入
- ② 試薬管理の自動化システムや生体認証等による最新のセキュリティシステム導入
- ③ コラボレーションエリアやウェブ会議システム等社内外のパートナーとリアル／バーチャルに繋がる設備の導入とオフィス環境の改善
- ④ 研究オフィスと実験設備の機能統合によるコミュニケーションの推進と業務効率化

2021年末竣工予定



建物外観イメージ



建物内部イメージ

# シミュレーションとインフォマティクスによる材料開発



## ハイパフォーマンスコンピューターを導入



KAITEKI Value for Tomorrow

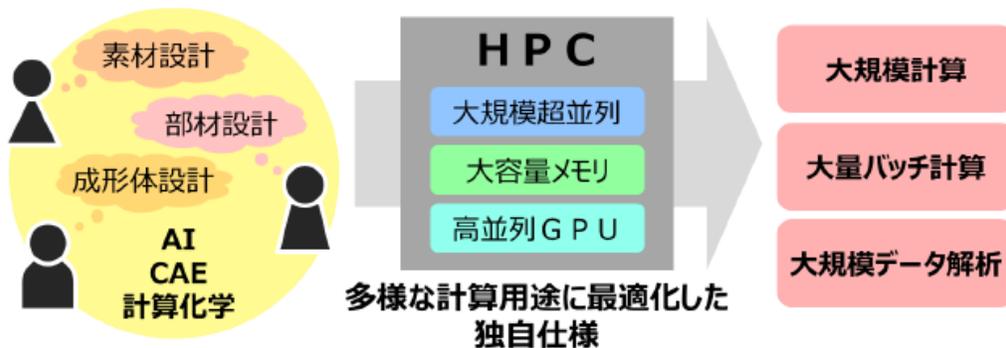
三菱ケミカルホールディングスグループ

2020年3月23日

高性能計算機の導入について  
～デジタルトランスフォーメーションを加速～

三菱ケミカル株式会社

三菱ケミカル株式  
分野におけるデジ  
の化学業界におい  
Computer、以下



引用  
[https://www.m-chemical.co.jp/news/2020/\\_icsFiles/afiedfile/2020/03/23/20200323\\_HPC.pdf](https://www.m-chemical.co.jp/news/2020/_icsFiles/afiedfile/2020/03/23/20200323_HPC.pdf)

## 統計数理研究所 吉田亮教授と共同研究部門を設置



2019年6月10日

統計数理研究所と三菱ケミカルの共同研究部門設置について



組織 統計数理研究所  
三菱ケミカル株式会社

所在地：東京都立川  
本社：東京都千代田  
インフォマティクスの  
部門「ISM-MCCフ

引用  
[https://www.ism.ac.jp/ism\\_info\\_j/abo/project/147.html](https://www.ism.ac.jp/ism_info_j/abo/project/147.html)



ISM-MCCフロンティア  
材料設計研究拠点

計算化学とインフォマティクスを用いた材料設計技術で先端を走り、  
革新的な材料開発に挑戦しています

# 量子コンピューティングへの取り組み

国内外と協業して量子化学、AI分野への応用研究を進めています

## 協業体制

IBM Q Hub@Keio  
東大発国内スタートアップQunaSys

## 研究プロジェクト

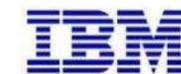
### AI

- 1)分類問題:  
2分類手法開発
- 2) リザーブ学習:  
脳の模倣
- 3)分子構造探索:  
Material Info

### 量子化学

- 1)化学反応:  
リチウム空気電池
- 2)励起エネルギー:  
有機EL
- 3)発光スペクトル:  
色素

## 共著論文 & 特許



JSR Corporation



pubs.acs.org/JPCA

Article

### Computational Investigations of the Lithium Superoxide Dimer Rearrangement on Noisy Quantum Devices

Qi Gao,\* Hajime Nakamura, Tanvi P. Gujarati, Gavin O. Jones, Julia E. Rice, Stephen P. Wood, Marco Pistoia, Jeannette M. Garcia,\* and Naoki Yamamoto\*

Quantum Machine Intelligence (2020) 2:9  
<https://doi.org/10.1007/s42484-020-00020-y>

RESEARCH ARTICLE

### Analysis and synthesis of feature map for kernel-based quantum classifier

Yudai Suzuki<sup>1</sup> · Hiroshi Yano<sup>2</sup> · Qi Gao<sup>3,5</sup> · Shumpei Uno<sup>3,6</sup> · Tomoki Tanaka<sup>3,7</sup> · Manato Akiyama<sup>4</sup> · Naoki Yamamoto<sup>3,8</sup>

Received: 25 October 2019 / Accepted: 21 May 2020 / Published online: 28 July 2020  
© Springer Nature Switzerland AG 2020



### Applications of Quantum Computing for Investigations of Electronic Transitions in Phenylsulfonyl-carbazole TADF Emitters

Qi Gao<sup>1,2,\*</sup>, Gavin O. Jones<sup>3,+</sup>, Mario Motta<sup>3</sup>, Michihiko Sugawara<sup>2</sup>, Hiroshi C. Watanabe<sup>2</sup>, Takao Kobayashi<sup>1</sup>, Eriko Watanabe<sup>1,2</sup>, Yu-ya Ohnishi<sup>2,4</sup>, Hajime Nakamura<sup>2,5</sup>, and Naoki Yamamoto<sup>2,6</sup>

【発明者】

【住所又は居所】 東京都千代田区丸の内一丁目1番1号 三菱ケミカル株式会社内

【特許出願人】

【氏名又は名称】 三菱ケミカル株式会社

【特許出願人】

【氏名又は名称】 学校法人慶應義塾

【発明の名称】 ロボット制御システム、ロボット制御方法及びロボットシステム

【技術分野】

【0001】

本発明は、ロボット制御システム、ロボット制御方法及びロボットシステムに関する。

企業におけるシミュレーションや機械学習を使った材料設計を体験してみませんか？