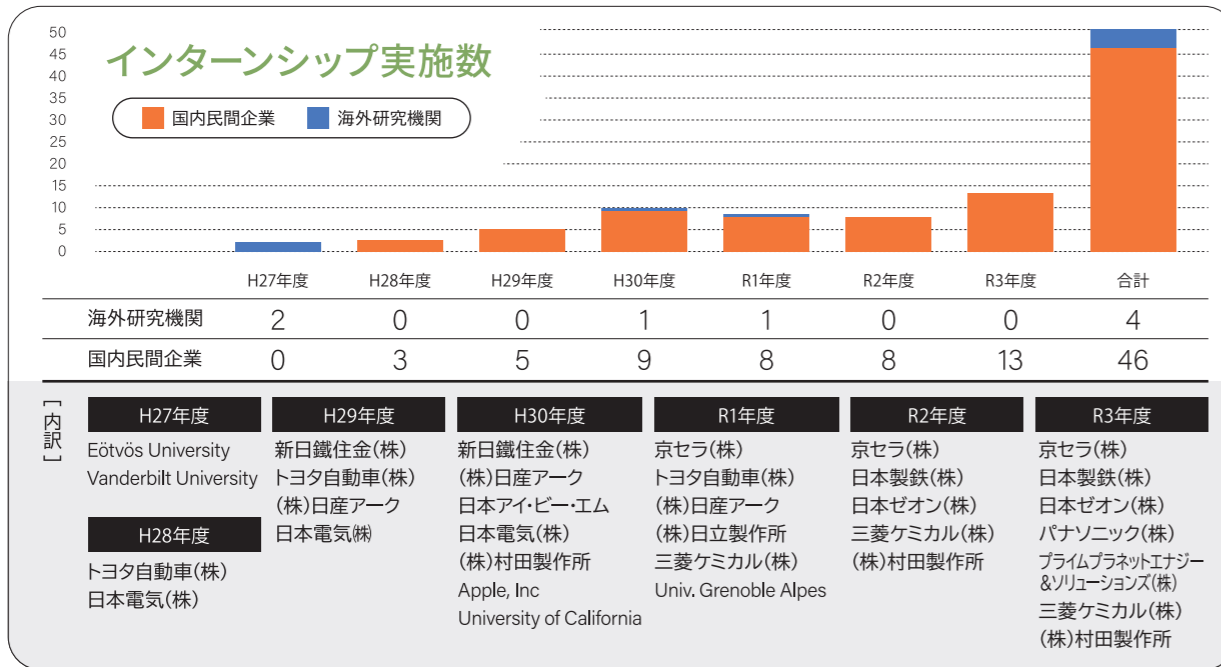


## インターンシップの実績

※H27-R1年度は、IPDプログラムの実績



## 2022年度参画機関一覧

※産学マッチング事業に参加する企業(全8社)

京セラ株式会社 東京エレクトロン株式会社 プライムプラネットエナジー&ソリューションズ株式会社  
 太陽誘電株式会社 日本ゼオン株式会社 三菱ケミカル株式会社  
 パナソニック ホールディングス株式会社 株式会社村田製作所

## よくある質問

その他のFAQはwebサイトをご参照ください

- Q. MERITコース生ですが、コース修了要件としてのインターンシップに認定されますか？
- A. はい。国際卓越大学院、リーディング大学院のコース生の方は、選択必修となるインターンシップとして認定されます。ただし、ご所属のプログラムにインターンシップの申請が必要です。
- Q. インターンシップのテーマを自分から企業へ提案することはできますか？
- A. ほとんどの企業において可能です。実施テーマは企業との面談の上、決定します。
- Q. 期間はどのくらいですか？
- A. 1~3ヶ月の間で調整可能ですが、実際のインターンシップ参加者の多くが研究インターンシップは最低1ヶ月、理想は2か月以上が望ましいと回答しています。
- Q. 企業への就職は考えていませんが、インターンシップには興味があります。参加できますか？
- A. はい。アカデミア志向の方にとっても企業でのインターンシップは、自身の研究を俯瞰してみるためにも貴重な経験となるはずです。

## お問い合わせ窓口

<http://mp-coms.issp.u-tokyo.ac.jp>

東京大学物性研究所計算物質科学研究センター  
 計算物質科学高度人材育成・産学マッチングプログラム事務局

〒277-8589 千葉県柏市柏の葉5-1-5  
 Tel: 04-7136-3279  
 Email: adm-ccms@issp.u-tokyo.ac.jp



# 産学の

# 垣根を超える

# 博士人材の

# 育成を目指す

東京大学物性研究所計算物質科学研究センター

計算物質科学高度人材育成・産学マッチングプログラム



Matching Program for Computational Materials Scientists in Industry and Academia  
 計算物質科学高度人材育成・産学マッチングプログラム



## 代表挨拶

計算物質科学は量子力学の基本原則と我々の日常をつなぐ学際的な学問領域です。我々は日常的にスマートフォンや電気機器を便利に使って生活していますが、そこでは様々な機能性材料が活用されています。計算物質科学は新しい材料を理論的に設計する手段となっています。スーパーコンピュータを活用し、量子力学の基本原則に基づきシミュレーションを行うことで、新しい原理に基づく機能を創出し、さらにその新機能を具現化する材料設計が盛んに行われています。また最近ではデータ科学の手法を組み合わせることで、より効率的に機能予測や材料設計が行われるようになってきました。

本プログラムでは、「計算物質科学」の分野に関心を持つ博士後期課程学生が、既存の専攻や実験・理論の枠組みを超え、自身の専門分野を活かしながら企業における研究開発の現場を体験する「研究インターンシップ」を促進しています。

本プログラムの前身である、「イノベーション創出人材育成プログラム」では、2015年度から2019年度の5年間で、累計29件の研究インターンシップを支援しました。研究室を飛び出し、企業の研究開発の現場を体験した学生は、必ず将来のキャリアに活かせる「何か」を持ち帰っています。それはきっと自身の適性や今後の進路を見極める上で、大切な材料になるはずです。

「階層を超える人材の育成」をテーマに、博士人材の可能性をさらに広げ、広い視野を持つ次世代のリーダーの育成を目指します。意欲的な大学院生、若手研究者の参加を期待しています。

東京大学物性研究所計算物質科学研究センター  
計算物質科学高度人材育成・産学マッチングプログラム  
代表 尾崎 泰助

### 学内協力組織

東京大学統合物質・情報国際卓越大学院 (MERIT-WINGS)  
東京大学フロンティアサイエンス国際卓越大学院 (XPS)  
東京大学フロンティアサイエンス・リーディング大学院 (ALPS)  
東京大学知能社会国際卓越大学院プログラム (IIW)  
東京大学計算科学アライアンス



## MP-CoMS とは

### 概要

「計算物質科学高度人材育成・産学マッチングプログラム」は、東京大学物性研究所主催の下、本プログラムに賛同いただいた企業および団体との共同事業として実施します。

前身である「計算物質科学人材育成コンソーシアム」イノベーション創出人材育成プログラムで培われたノウハウおよび産学連携基盤を引き継ぎ発展させ、産学が協力・共同して、計算物質科学分野における高い専門性および職業意識を有する博士人材の育成ならびに、高度計算技術を企業の研究者などにも幅広く普及・展開を図ることを目的に、以下の活動を行ってまいります。

1 高度人材育成事業

2 産学マッチング事業

### 設立の趣旨

本プログラムは、2015年8月に文部科学省「科学技術人材育成のコンソーシアムの構築事業(次世代研究者プログラム)」の採択を受け、東北大学・東京大学・自然科学研究機構分子科学研究所・大阪大学によって設立された、「計算物質科学人材育成コンソーシアム」の事業のうち、イノベーション創出人材育成プログラム(通称:IPDプログラム)の継続事業として、東京大学物性研究所が独自に設立するものです。

日本の持続的な成長には、博士号取得者である高度専門人材の活用が必要不可欠であることが認識されつつあり、博士人材に対する民間企業の期待が高まっています。しかしその一方で、多くの博士人材が将来のキャリアパスに対して、不安を抱えています。博士人材がそういった不安を払拭し、将来のビジョンを持てるようになるためには、研究室から一歩踏み出してビジネスの世界を体感し、視野を広げて自身の適性を知ることが重要です。

本プログラムでは、博士人材を積極的に登用する企業に参画いただき、「研究インターンシップ」の形で企業の研究開発の現場を実際に体験できる機会を提供しています。産学が連携・協力し、博士人材の社会の多様な場での活躍の促進に向けた取り組みの一端を担えることを願っています。

## 2 産学マッチング事業

計算科学・物質科学・材料科学の素養を持つ本学の博士人材(博士後期課程学生および若手研究者)と、参画機関(産学マッチング事業に参加する企業)との橋渡しを行い、学生の研究インターンシップや、産業界で活躍を希望する若手研究者のキャリア採用の入り口となる機会を提供します。

### 入会のメリット

これまで、実際に研究インターンシップを受け入れていただいた企業様より、インターン生を受け入れたメリットとして挙げていただいたものを掲載します。



2019年度企業人材ニーズvs博士人材シーズマッチングワークショップの様子

## 事業内容

### 企業の皆様へ

## 1

### 高度人材育成事業

企業および、大学・国立研究機関等に所属する研究者や学生を対象に、大学教員等による計算科学分野の講義を実施。理論計算の専門家だけでなく、実験家や企業の研究者などにも幅広く高度計算技術の普及・展開を図ると同時に、産学の垣根を超えた人材交流の場を提供します。

### 入会のメリット

第一原理計算やマテリアルズ・インフォマティクスを活用し、有用な性質を持つ新規材料を実験に先立ってデザインする研究が盛んに行われています。高度人材育成事業では実践的に物質デザインに活用できる高度な第一原理計算やマテリアルズ・インフォマティクスの基礎と応用を体系的に学ぶ機会を提供します。

密度汎関数理論に基づく第一原理計算は物質科学シミュレーションの基盤技術となっています。近年はソフトウェアが整備され、シミュレーションを専門とする研究者だけでなく、実験を専門とする方々も実験結果を解釈するために第一原理計算を自ら実行するケースも増えています。また、マテリアルズ・インフォマティクスにおいても第一原理計算は基盤となる要素技術です。

一方、第一原理計算のブラックボックス化が進み、計算の内容を十分に理解しないままに第一原理計算の結果だけを利用するケースも見受けられます。物質科学の深化を図るためには第一原理計算やマテリアルズ・インフォマティクスの原理や解釈の方法を十分に理解し、研究を進めることが望ましいと考えられます。

本高度人材育成事業では第一原理計算とマテリアルズ・インフォマティクスの基礎と応用に関して段階を追って講義を行います。物質科学シミュレーションの基盤技術を深く学ぶ機会となることを期待しております。また座学に加えて、第一原理計算ソフトウェアのハンズオン講習会も予定しています。第一原理計算とマテリアルズ・インフォマティクスの基礎と応用を深く学び、ご自身の研究に役立てることを計画されている多くの方々のご参加を期待しております。

開講年度毎に講義の内容は異なりますので、詳しい講義内容はシラバスをご覧ください。

### 入会方法



- 「計算物質科学高度人材育成・産学マッチングプログラム規約」の内容を確認・承諾の上、「入会申込書」に必要事項を記入
- 上記申込書を E-mail および、押印版原本を下記事務局まで郵送
- 当プログラムにて入会審査の後、承認の通知および請求書の送付
- 会費を納入、会員登録完了

※お申込みは年度単位となります。

### 参加費

- 1 高度人材育成事業 — 受講者 1 名あたり 10 万円
- 2 産学マッチング事業 — 1 社あたり 20 万円

※消費税は別途課税。

# 学生の皆様へ

## インターンシップ参加のメリット

理系大学院生の民間企業におけるインターンシップへの参加者が年々増加する一方で、「どの企業に応募して良いかわからない」「貴重な学業(研究)の時間を割くことに不安がある」「企業への就職は考えていない」という声も多数聞かれます。

大学の研究室を飛び出し、企業における研究開発の現場を体験することは、学生が自身のキャリアパスを考える上で非常に有益であると考えています。いつもと異なる環境、限られた時間の中で、最大限の成果を出すために新しいテーマと向き合うことは、今後の進路に関わらず、貴重な経験となるはずです。

本プログラムの特色は、参加企業様に計算科学・計算化学・情報科学・物性科学分野に特化したインターンシップのテーマを設定いただくことで、学生が大学での研究を活かしながら企業における研究活動を体験し、視野を広げることができる点です。また、自分の研究内容とマッチするテーマがない場合、ご自身で企業側にテーマを提案することも可能です。インターンシップの受入れが決定した場合の企業との協定書の締結や、条件面の確認など、一連の事務手続きは当事務局が代行しますので、安心してインターンシップにご参加いただけます。

インターンシップでは、博士課程の貴重な時間を費やすこととなります。ミスマッチとならないために、本プログラムでは学生と企業がWin-Winの関係となるよう最善を尽くします。アカデミアかインダストリーか、今後の進路を模索中の方は、自身の可能性を広げるためにもまずは一歩、踏み出してみませんか。

## 参加方法

まずは年に一度開催される「企業人材ニーズvs博士人材シーズマッチングワークショップ」(例年5~6月頃開催)にご参加ください。終了後のアンケートにて、参画機関における研究インターンシップへのエントリー希望の有無をご回答いただきます。エントリーをご希望の方のみ、当プログラムにご登録いただけます。

(※登録フォームは当プログラムのHPよりダウンロード)

当事務局が参画機関への橋渡しを行い、インターンシップが終了するまで責任を持ってサポートします。

### インターンシップ実施にあたっての諸注意

- インターンシップ参加前に、指導教員の許可を得てください。  
「研究インターンシップに関する協定書」の締結が完了しましたら、当事務局より指導教員の先生へ、協定書の写しを送付します。
- 国際卓越大学院コース生、日本学術振興会特別研究員などの方は、本プログラムに対する申請とは別途、ご所属のプログラムに対し、インターンシップ参加のための手続きを行っていただく必要があります。
- 学研災付帯賠償責任保険(略称「付帯賠償」)の下記いずれかのコースに加入ください。  
保険料は自己負担、加入手続きの窓口は、ご所属研究科の教務/学務課となります。  
A コース: 学生教育研究賠償責任保険(略称「学研賠」)  
B コース: インターンシップ・就職資格活動等賠償責任保険(略称「インターン賠」)  
※A コースはB コースの活動範囲を含みます。詳細は下記を参照。  
<http://www.jees.or.jp/gakkensai/opt-baisho.htm>

## インターンシップ参加者の声

一部抜粋



八日市屋 朋子さん

工学系研究科  
化学システム工学専攻

パナソニック株式会社  
テクノロジー本部

実施年度: 2021年度

### テーマ: 「古典分子動力学を活用した 溶媒和自由エネルギー計算の実応用に向けた検討」

本インターンシップでは、材料の溶解性予測を目指した、溶解度計算手法の比較・評価を行った。比較対象とした手法は、計算コストが低く、計算精度も低いとされるHSP計算、計算精度が高いが計算コストも高いBAR法、そしてコスト・精度が3つの中で共に中程度とされるエネルギー表示(ER)法であり、私はER法による計算を担当して行った。計算対象として、小分子系・有機分子系・高分子系の3種類の系についてシミュレーションを行い、溶解度を求めた結果、ER法は低コストで高精度な結果を与えることが分かった。特に、有機分子系においては、HSP計算では再現できなかった溶解性実験結果をER法で再現することに成功した。

博士課程では自分の専門分野に特化していく事が多いと思いますが、インターンシップにおいて普段とは異なるテーマに参加することで、専門の幅を広げることができると思います。また、異なる環境で研究を行うことで、研究の進め方等においても、新たな視点を得ることにつながると感じました。普段の環境から離れて研究を行う経験は、今しかできない貴重なチャンスだと思います。企業就職するかどうかに関わらず、是非余裕があれば参加してみると良い経験になると思います。



大瀧 貴史さん

新領域創成科学研究科  
物質系専攻

日本製鉄株式会社  
技術開発本部  
先端技術研究所  
基盤メタラジ研究部

実施年度: 2020年度

### テーマ: 「計算材料科学と情報科学の融合による材料物性の予測 -fcc 鉄の磁性と固溶元素の状態 -」

本インターンシップでは、911°C以上の高温で熱力学的に安定となるfcc鉄における不純物添加の第一原理計算を行った。fcc鉄は室温のbcc鉄と異なり磁気秩序が消失しており、磁気モーメントがランダムな方向を向く常磁性を示す。このランダムさを適切に取り入れるために、スーパーセルを用意し、各鉄原子の磁気モーメントの向きを擬似的な無秩序状態であるSpecial Quasirandom Structure(SQS)に従って設定した。この計算コストはスーパーセルのサイズに依存し、本研究では先行研究よりも一回り小さなサイズに設定することで計算コストを約1/10倍に減少させた。その際に、スーパーセルサイズが小さいことに起因した有限サイズ効果が問題になり得るが、以下で述べるようにSQSを吟味することでその問題を回避した。約40億通り存在する純鉄のスピン配置に対して総当たりを実行し、多体相関関数に基づいて系統的な分類を行うことで、数十個のSQSの作成と評価を行った。得られた全てのSQSに対して不純物原子を添加したときの固溶エネルギーを計算したところ、計算結果のばらつき具合とSQSの質(多体相関関数のエラー)の間に相関があること、および質の高いSQSを用いると先行研究と同じスーパーセルサイズでの計算結果を再現することを見出した。また、不純物原子近傍の磁気構造に注目することで、得られたSQSを数種類のグループに分類し、最も有限サイズ効果の影響が小さいグループに属するSQSを「不純物添加に適したSQS」と判定した。計算結果のSQS依存性の一部については、鉄が遍歴磁性体であることに由来して磁気モーメントの大きさが空間的に揺らぎ、この揺らぎを介した相互作用が多体相関の形ではたらくという描像で物理的な考察を行った。以上の研究を進める際には、研究員の方々と頻りに議論させていただき、約一ヶ月間という短期間で上記のようなまとまった成果をあげることができた。

インターンシップ開始前のある程度事前準備をしておくと思えます。私が大学院の研究室で扱う対象はもっぱら分子性結晶やその光学応答でして、インターン先のテーマである鉄や磁性とは少し離れていましたので、事前に勉強して知識をつけた上でインターンシップに臨みました。インターンシップを始めてみると1ヶ月という期間はあっという間に過ぎ去っていき、事前準備の大切さを感じました。インターンシップは企業での研究を目で見て肌で感じる事ができる貴重な機会です。博士課程の学生は将来に対する不安を持ちがちですが、この機会に企業で自身の力が発揮できるか試してみませんか?



横森 創さん

理学系研究科 化学専攻

三菱ケミカル株式会社  
Science & Innovation  
Center, Organic Materials  
Laboratory 有機A

実施年度: 2019年度

### テーマ: 「OLED 材料に向けた化合物合成」

OLEDの発光層材料となる“化合物”の合成を行った。これまでのインターン先の知見をもとに商品化に適した性質を示すことが期待できる分子を設計し、市販品の化合物から十数段階、10~20gスケールの合成を逐次行った。合成の結果としては、OLEDの発光層材料の目的化合物の合成およびその精製に成功した。また、並行して進めていた他の目的化合物についても合成過程の約70%が完了するに至った。現在の大学での研究分野において、目的化合物を市販品から合成できるということは大変強みになるスキルであるので、合成能力の向上といった基礎的な成果も得られた。さらに研究の進め方という点でも、大学では一つのことじりに打ち込むのに対して、企業ではできそうなものから行い、そうでないものは早く見切りをつけるという研究姿勢を実際に体験し、自身の研究の進め方を見直す良い機会となった。

特に進路をアカデミックにするか、民間企業に就職するかを迷っている方は、参加して損をするということはないので参加をお勧めする。また、私自身は合成実験という完全には専門ではない分野での実習を希望したこともあり、実際に研究業務に慣れたのはおよそ1ヶ月かかったため、可能であれば1ヶ月以上インターン期間を取った方が良いように思う。