## 計算物質科学高度人材育成・産学マッチングプログラム 2023年度研究インターンシップ実施企業・テーマ一覧

企業名	受入可能人	時期	期間	実施部門	実施テーマ	テーマ提 案	必須または望ましいスキル・知識	キャリア 採用	中途採用者に求めるスキル
オムロンサイ ニックエックス (株)	2	通年	2ヶ月 以上 (応相談)	インタラクション グループ	のDFT、MD、テンソルネットワークのような物理シミュレーションが専門で、手法の精度改善・計算高速化・大量のシミュレーション結果解析のために、機械学習をの知見を応用する研究開発と、成果を議文執筆(Nature/Science, Physical Reviewなどの論文誌もしくはSC、ICMLなどの情報系国際会議)を行う。 ②時系列データ上での因果解析や、説明性のあるAIなど、データ間の注明を明らかにしつつ何らかの予測を行う研究が進んでいる。例えば、科学における関数同定問題の研究などがある。本プロジェクトでは、新たな切り口でこうした法則を発見する手法に関する研究開発と、機械学習分野におけるトップシャーナル採録を目指した論文執筆を行う。	可	①必須:物理シミュレーション手法の知識・経験 歓迎・機械学習(pytorchによる実装等)の知識・経験、 GitHub, Docker等のツール ②必須:Python, GitHub, Dockerに関する知識・経験 歓迎:自然言語処理や信号処理に関する知識・経験	あり	JST未来社会創造事業「共通基盤」領域 本格研究課題「マテリアル探索空間拡張ブラットフォームの構築に参画して、無機材料におけるマテリアルズインフォマティクスに対するより挑戦的な機械学習やパターン認識の応用を目指す。
京セラ(株)					ТВА		ТВА		
太陽誘電(株)	1	10月~ 1月頃	1ヶ月 程度	開発研究所評価解析技術部	・マテリアルズ・インフォマティクス、理論計算を用いた電子部品材料 設計 ・理論計算による材料特性予測と合成実験の実施 ・分析機器(走査型電子顕微鏡、等)による材料評価と、解析・シミュ レーション による解釈 ・その他、第一原理計算、合成実験や分析評価技術との融合テーマ	可	- 第一原理計算の基礎知識、実施経験 - Linuxの操作 - 材料合成経験 - 分析機器の操作経験	あり	·第一原理計算の基礎知識、実務経験 ·Linuxの操作 ·AI·機械学習等の知識 ·分析、材料評価技術
東京エレクトロン(株)	1~2	10月~ 3月頃	1ヶ月 程度	成膜技術開発センター	①MIを利用した半導体プロセス材料の開発 high-k/low-k材料、イオン液体の探索等 ②半導体製造装置・プロセスのシミュレーション 気相/表面反応解析、物性値計算、プラズマSim., CFD, システム Sim/表面反応解析、物性値計算、プラズマSim., CFD, システム 3半導体プラズマプロセスの実験 電子密度/温度、イオン電流等 ④半導体製造装置・プロセスのデータ解析 機械学習等を用いた製造装置・プロセスの機差/ドリフトの解析	可	【望ましいスキル・知識】 ・①②・化学、固体物理、流体力学 ・③:プラズマ物理 ・④・統計、機械学習、Python	あり	詳細につきましてはキャリア採用の募集要項 からご確認ください。 https://careers-tel.jp/
(株)豊田中央 研究所	2	8月22日 ~	2ヶ月 程度	エマージングエレ クトリフィケーショ ン研究部門	①「機械学習を摂用する電解質/電極界面シミュレーションモデルの 構築」:燃料電池内部の酸素瓊元反応(ORR)、水電解内部の酸素発 生反応(OER)等を対象に、電解質 種界面での電気化学触媒反 あり支配因子となる物性と、そのダイナミフスを加味して等一原理 的に予測するモデル・手法を構築する、本テーマは、機械学習力場 を中心とするインフォマティクス技術を活用し、物ピア測を効率的 に実現する方法の検討を含む。 ②「シミュレーション・機械学習に基づく燃料電池触媒層最適化アル ゴリズムの構築」:燃料電池のミクロ電極構造体内の物質輸送シミュ レーション技術ならびに機械学習を用いた最適構造探索アルゴリズ 人構築をし、性能向上に向けてボトルネックを解消する電極構造の 提案を目指す。	可	①Python, Fortran, C等のプログラミング技術 分子シミュレーション, 第一原理計算等の計算技術に関する基本知識 ②Linux, Fortranコード, Python等を用いた、連続体モデルの範疇におけるnm-μmスケールの構造・拡散・反応の連成シミュレーション技術。	なし	
日本ゼオン(株)	2	通年	2ヶ月 程度	総合開発センター 基盤技術研究所、 生産技術研究所	①操業データを用いたプロセスインフォマティクス ②研究開発データを用いたマテリアルズインフォマティクス ③高分子材料の数理モデリング、プログラミング、シミュレーション ④成形加工に関わる構造解析 ⑤樹脂流動解析 など、 具体的なテーマは、ご本人の希望に基づき、相談し決めて行きま す。	可	基本的なスキル・知識は十分に有していると考えています。 自分で課題を設定し、研究計画を立て、やり遂げる気持を 持って取り組んでいただける方を期待いたします。	あり	求める人材の条件など ・協調性があり、建設的な議論が出来る方・相手に合かせて説明が出来る方・自ら主体的に提案でき、他部署に入り込んでリーダーシップを発揮できる。・ポスドク等研究経験のみの方も歓迎いたします。 ・予定業務範囲・研究開発業務(データ解析的アプローチにより研究開発生産を支援)・データ解析、MI(マテリアルズ・インフォマティクス)・担当分野は、経歴、適正、構成などを考えて判断します。
パナソニック ホールディン グス(株)	1	8月下旬~	1ヶ月 程度	テクノロジー本部	マテリアルズインフォマティクス及びシミュレーションを活用した新 規材料開発(有機または無機材料)	不可	・第一原理計算(量子化学計算および密度汎関数法)、分子動力学シミュレーションなどの計算科学に関する知識と経験があること。 ・Pythonなどのプログラム言語を習得していること ・Support Vector MachineやRandom Forest等の機械学習を理解していること ・材料科学に関する実験論文が読めること ・実験科学者との共同研究経験があればなお可	あり	

企業名	受入可能人 数	時期	期間	実施部門	実施テーマ	テーマ提 案	必須または望ましいスキル・知識	キャリア 採用	中途採用者に求めるスキル
(株)村田製作 所	1	通年		技術·事業開発本部 部期技術で20ター 先端技術研究開発 部	第一原理計算・MIを活用した新規誘電体開発および誘電物性制御 に関する研究	可	・第一原理計算の経験があること ・プログラミングの経験があること (以上の項目において、レベルは問いません。)	05.0	・第一原理計算、または、分子動力学計算の経験があること ・プログラミングの経験があること (以上の項目において、レベルは問いません。)