

# インターンシップ報告書

東京大学大学院 理学系研究科 物理学専攻  
近藤研究室 博士課程2年  
MERIT6期生  
國定 総

インターン先企業名	(株) 日産アーク
研修部門・部署	デバイス解析部
実習期間	2019年9月2日(月)～2019年10月31日(木)
実施テーマ	「2元系合金表面の安定原子配置における特徴抽出(構造探索)」

## 目的

私は今回のインターンシップで以下の3点を目標に掲げた。

- ・ 実験だけではなく理論もある程度、理解出来るようになることで、実験と理論の溝を埋めていけるような人材になりたい。
- ・ 企業の研究者の生活を体感したい。
- ・ 自分自身の成長という意味では新しいことに挑戦していきたい。そのため、理論計算、機械学習を始めることで、自身の研究分野の幅を広げたい。

今回の二ヶ月間のインターンシップでは、実践的に計算を学ぶことができ、非常に実りのある結果となった。

## 背景

近年、「エネファーム」や燃料電池車用電源として利用されている固体高分子形燃料電池は、高い触媒機能を有する合金を正極及び負極の両極で使用している。これらの触媒反応は合金がよく使われるが、実際には欠陥による構造の変化や触媒反応中に起きる溶解現象などが生じるため、計算から基底と異なる安定する構造を予測できるか、ということ調べることは非常に重要であると考えられる。

## 内容

機械学習とDFT計算を用いて二元系合金の最安定構造の探索を行った。自身の研究は実験系であり、理論系は門外漢であったため、大体は初めて触れるものであったが、実践の中で様々なことを習得できたと考えている。特に力を入れて取り組んだことはPythonを用いた機械学習の習得と、DFT計算の習得である。どちらも完全に習得できたとは言えないが、一

人で自習して進められる程度には基礎を収められたと思っている。また最後に出た結果は、完全に満足いくものではなかったが、2ヶ月間という縛りの中である程度形になったと考えている。2ヶ月間というインターンシップの期間としては、業務がちょうど軌道に乗り始めた直後に終わってしまったため、非常に短いと感じた。また、実際に会社で働いてみて感じたこととしては、日産アークが特殊なのかもしれないが、意外と基礎研究よりだなと感じた。残念なこととしては、企業の研究スパンは短いということを感じたかったが、自身のインターンシップが終了することの方が早く、いまいち時間スパンは分からなかった。またインターンシップなのであまり関係なかったが、日産アークではフレックス制も導入されており、生活スタイルに自由度があるなと感じた。さらに国際色も豊かであり、非常に多様性に富んでいるなと感じた。

企業の立地場所としては、最寄駅は横浜と横須賀の間にある追浜という京急の沿線であり、そこから会社への直通バスが出ており、非常に驚いた。ハロウインの時期には祭りに参加するなど、地域の振興も行っていたことも印象深く感じた。

また、今まで実家に住んでいた人が追浜（地方？）に一人暮らしで住んでみて感じたこととしては、初の一人暮らし兼就労でもなんとかなるものだなと感じた。引っ越して一週間後に台風、停電と災害に見舞われたが、一人暮らしの生活としてなかなか得難い経験だったなと考える。

最終日の報告会には役員の方々にも出席して頂き、報告内容や質疑応答での私の対応についてお褒めの言葉を頂けたことは、自信に繋がった。

今回のインターンシップでは自身の今までの研究で培ってきた知識は、ほとんど使う機会はなかったが、論理的に物事を考えることや、研究の筋道を立てることなどの大学院で学んだ基礎的なことが役に立った。また、企業であるので、如何にわかりやすく自分の研究を専門外の人に知ってもらうか、という訓練を実践的に行えたことも非常に勉強になった。

## 謝辞

最後にインターンシップ前から大変お世話になった大脇さん、石野さんをはじめとした計算科学チームと量子ビーム解析チームの方々、またその他業務内外でいろいろとお世話になった日産アークの社員の方々に感謝いたします。また、このインターンシップを快諾してくださった、指導教官の近藤先生、副指導教官の芝内先生に感謝いたします。最後になりましたが、インターン先の紹介や宿舎の手配に尽力してくださった計算物質科学人材養成コンソーシアム（PCoMS）、このインターン機会を与えていただき、大学院生活の支援を受けております統合物質科学リーダー養成プログラム（MERIT）に感謝いたします。