大阪大学

大学院ナノサイエンスナノテクノロジー社会人教育プログラムについて

実社会でナノ分野に現在従事、または将来従事することを志す企業の研究者、技術者を対象とする大学院レベルの講義と実習を組み合わせた1年間9単位の社会人教育プログラムで、履修生が幅広くナノ分野の最先端高度知識を基礎から学び直し、ナノ科学技術を生かした新しい産業を自ら切り開く知識と挑戦力を身につけることを目的とする。

【概要】

- (1) 夜間講義(講義時間:18:00~21:00、3 時間/回、30 回/年)
- (2)オンラインで各地のサテライト教室に講義を双方向ライブ配信
- (3)講義資料の事前配信、復習および欠席時の補講として利用可能な講義録画のストリーミング配信
- (4)大学キャンパスでのスクーリングによる最先端短期実習
- (5)ナノテクノロジーの社会受容問題と技術デザイン問題に関する参加型土曜集中講座
- (6)産学連携相互人材育成組織「大阪大学ナノ理工学人材育成産学コンソーシアム」主催によるナノ理工学情報交流会・セミナーの開催など

コース 1 ナノマテリアル・ナノデバイスデザイン学

【目的•概要】

機能性材料開発、新規デバイス開発において、大規模計算機を使った材料安定構造のシミュレーションやデバイス機能予測は、実際の開発にとって現実的で極めて有用な指針を与える。計算機ナノマテリアル・ナノデバイスデザインは量子シミュレーションを基礎に、それを高度に使いこなすことによって、量子シミュレーションの逆問題である量子デザインを実行し、それによって新機能性ナノ材料・デバイス開発を行うことを意味する。これらの手法によって得られる各種データは実験結果と対比されるのみならず、ビッグデータとしてマテリアルズインフォマティクスに活用される。

春・夏学期は、主として量子デザインで必要となる基礎的概念について紹介する。量子力学と固体電子論の 復習、密度汎関数理論、具体的な電子状態計算手法、物性を理解する上で重要な基礎概念について系統的 に学ぶ。秋・冬学期では、主として量子デザインの具体的事例について紹介する。高圧物性、半導体デバイス、 光物性、太陽電池、磁性、強誘電体、カーボン系材料、有機デバイス、触媒、電極化学反応など、新材料創成 の成功例も含めて応用例について紹介する。さらに、マテリアルズインフォマティクス(人工知能ディープラーニ ングによる材料設計)についても最先端事例を含めて紹介する。

秋と春にはCMD ワークショップを開催し具体的なプログラムを使って実際に電子状態計算の実習を行う。

【修得目標】

- ・量子デザインに必要な基礎的概念の習得
- ・密度汎関数理論の習得
- •量子化学分野の分子計算手法の学習
- •固体電子論の基礎的概念の習得
- ・電子状態計算手法の原理・特長の学習
- ・量子デザインの具体的応用事例の学習
- ・人工知能、ディープラーニングによる材料設計(MI)の学習
- ・計算機マテリアルデザインワークショップ(CMD-WS) による実習

以上を学ぶことにより、新規ナノ材料・デバイス開発に向けて計算科学、MI の手法の理解と応用力を身に付ける。