

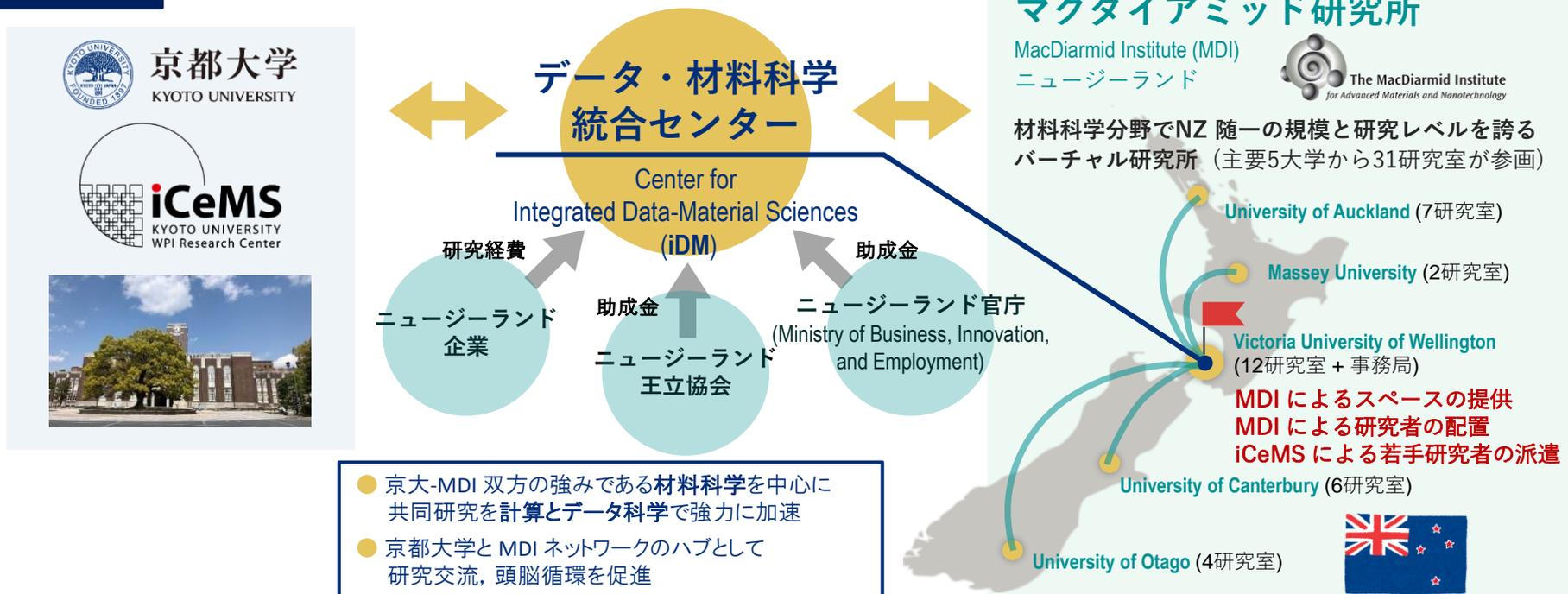
基本情報

- ◆ 認定年度: 2021(令和3)年
- ◆ 設置時期: 2022(令和4)年1月
- ◆ 実施部局: 高等研究院物質-細胞統合システム拠点(iCeMS)
- ◆ 相手方機関: The MacDiarmid Institute for Advanced Materials and Nanotechnology (ニュージーランド)
- ◆ 設置タイプ: アウトバウンド型
- ◆ 設置目的: データ科学と材料科学の融合研究を行うこと
- ◆ 設置場所: ウェリントン大学(ニュージーランド・ウェリントン)
- ◆ 活動内容: 計算科学とデータ科学を用いた材料科学の深化を目指し、若手研究者・学生の交流を促進すること

活動による大学全体への波及効果

- データ科学と材料科学の融合領域開拓
 - 京都大学発材料の国際的産業応用
 - 学生・若手研究者への基礎研究による国際社会還元という視点の涵養
 - オセアニア地域での京大ブランドの向上
- 現地研究機関と脱炭素社会で期待される半導体材料や多孔性材料の研究に関して研究方針を固めるなどして、現地研究ネットワークを拡大し、京都大学と高等研究院のブランド認識を高めること。
- 現地企業および日本企業との共同研究に繋がるネットワーク形成。
- 若手研究者、留学生の交流の活性化。
- マオリ族(ニュージーランドの先住民)の信念と慣習を強く尊重した研究計画による文理融合の促進。

活動概要



2024年度の主な活動実績

① 若手研究者・学生の派遣・受け入れ

【京大 → MacDiarmid Institute】

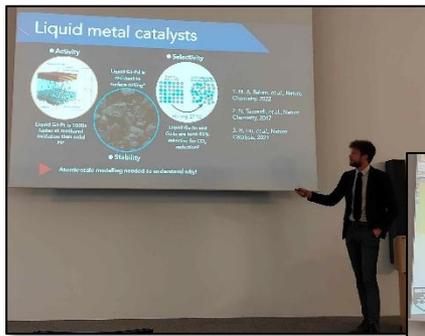
- 教員の1名、ポスドク(研究員)の2名、MacDiarmidの研究グループに短期滞在(1ヶ月程度)
- ポスドクによるMacDiarmid年次シンポジウムの参加・発表(2名)
- 京都大学の学部生(1名) MacDiarmid発の企業(Advento)へのインターンシップ(1ヶ月)

【MacDiarmid Institute → 京大】

- MacDiarmidによる若手研究者(4名)の派遣 iCeMSと理学部の研究グループと共同研究(1ヶ月程度)
- MacDiarmidのPI(2名) iCeMSへの訪問(2週間程度)
- JSPS外国人特別研究者での採択(1名、ホスト機関: iCeMS)

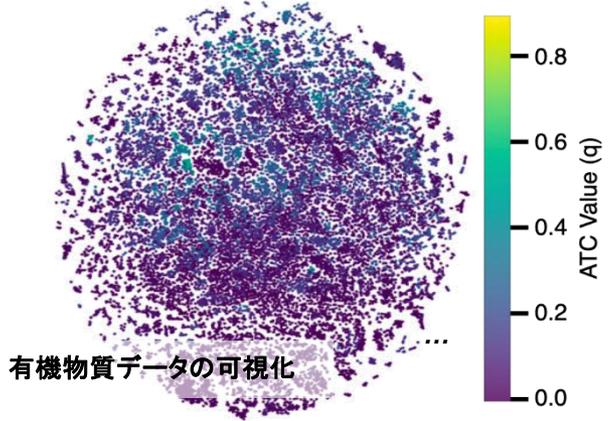
② データ科学による有機半導体の研究

- ニュージーランドの物質データによる高い普遍性を持つグラフニューラルネットワークを学習し、有機半導体材料の中の励起子移動を高い精度で再現できた。
- 新規半導体物質を見つけるためのバーチャルスクリーニングへ道を切り拓いた



MacDiarmid PIによる講義

若手MacDiarmid研究者による講義



有機物質データの可視化

グラフニューラルネットワークによる原子レベルの物性値の再現

