

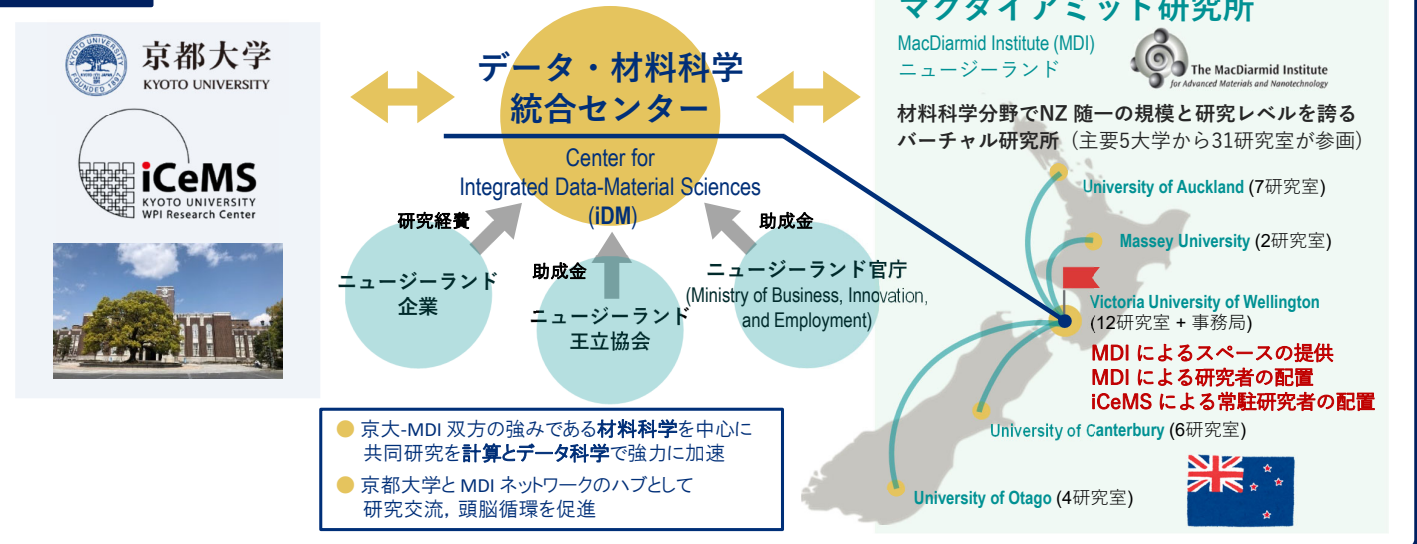
## 基本情報

- ◆ 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

## 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水素伝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。
- 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



## 2023年度の主な活動実績

### ① iDMワークショップ

- *The 1st MacDiarmid Institute-Kyoto University Workshop on Integrated Data-Material Sciences.* 京都大学 楽友会館(8月29日、30日) ニュージーランドから8名、京都大学から10名(うち2名はiCeMS外の所属)
- *MacDiarmid Institute-iCeMS Symposium.* Victoria University of Wellington(2月19日、20日)iCeMSから6名、ニュージーランドから22名(産業界1名、外務省1名、学生5名を含む)

### ② 有機太陽電池材料におけるデータ収集プロトコルの確立

- 有機太陽電池における半導体材料を迅速に評価するための新しい計算フレームワーク
- MacDiarmid Instituteのデータを励起子輸送シミュレーションの新展開による高い精度で再現できた。
- 計算時間を大幅に短縮化し、有機半導体設計における仮想データライブラリーを生成することを可能にした。

