

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

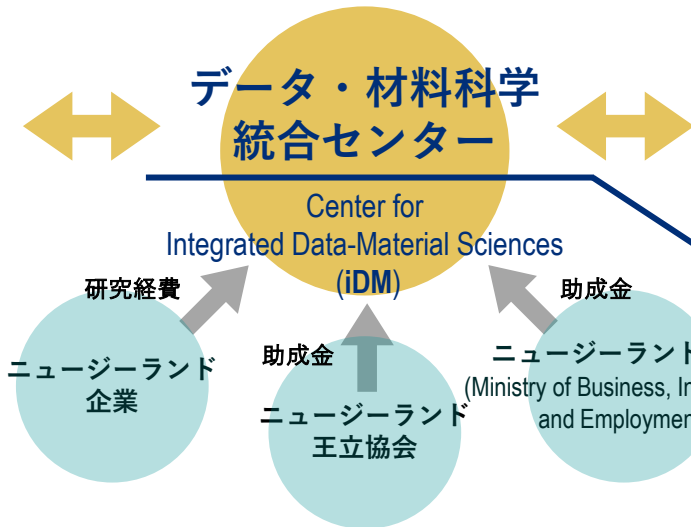
- データ科学と材料科学の融合領域開拓
 - 京都大学発材料の国際的産業応用
 - 学生・若手研究者への基礎研究による国際社会還元という視点の涵養
 - オセアニア地域での京大ブランドの向上
- 現地研究機関と脱炭素社会で期待される半導体材料や多孔性材料の研究に関して研究方針を固めるなどして、現地研究ネットワークを拡大し、京都大学と高等研究院のブランド認識を高めること。
- 現地企業および日本企業との共同研究に繋がるネットワーク形成。
- 若手研究者、留学生の交流の活性化。
- マオリ族(ニュージーランドの先住民)の信念と慣習を強く尊重した研究計画による文理融合の促進。

活動概要




京都大学
KYOTO UNIVERSITY

iCeMS
KYOTO UNIVERSITY
WPI Research Center

- 京大-MDI 双方の強みである材料科学を中心に共同研究を計算とデータ科学で強力に加速
- 京都大学とMDI ネットワークのハブとして研究交流、頭脳循環を促進

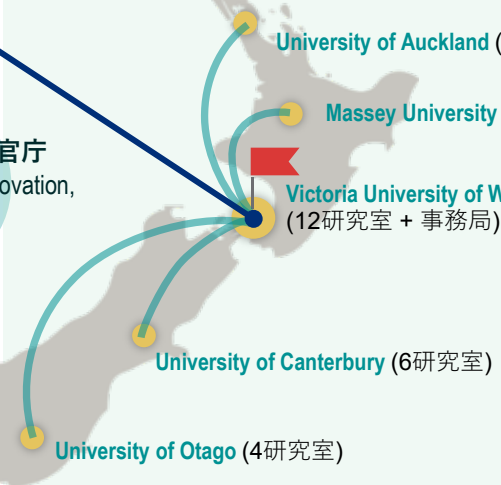

マクダイアミッド研究所
MacDiarmid Institute (MDI)
ニュージーランド



To Mana Tangata Whakawhanako
MacDiarmid Institute
Advanced Materials & Nanotechnology

材料科学分野でNZ 随一の規模と研究レベルを誇るバーチャル研究所 (主要5大学から31研究室が参画)

- University of Auckland (7研究室)
- Massey University (2研究室)
- Victoria University of Wellington (12研究室 + 事務局)
- University of Canterbury (6研究室)
- University of Otago (4研究室)

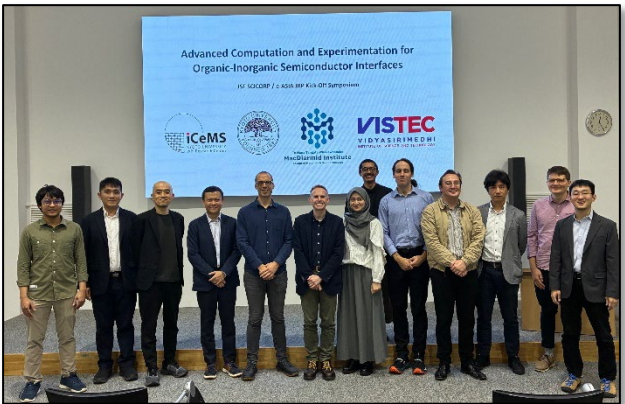
2025年度の主な活動実績

① e-ASIA JRP 国際共同研究の開始

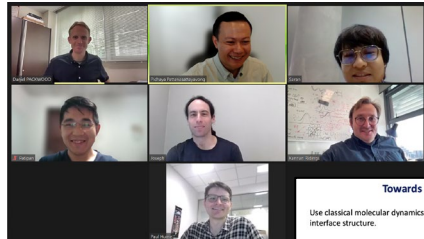
- 計算・シミュレーションによる半導体の界面構造の設計 (京都大学のチーム、MacDiarmidのチーム)
- 新規半導体の合成、デバイス作成 (VISTECのチーム)

【国際交流】

- キックオフシンポジウム (*Advanced Computation and Experimentation for Organic-Inorganic Semiconductor Interfaces*) (5月26日)。講演者: 京都大学の4名 (iCeMS 3名)、MacDiarmid Instituteの4名、VISTECの3名、外部の2名。
- チームの間のオンラインミーティング(毎月)
- MacDiarmid Instituteの若手研究者・学生による短期滞在(6名)、iCeMS若手研究者によるMacDiarmid Instituteへの短期滞在(2名)

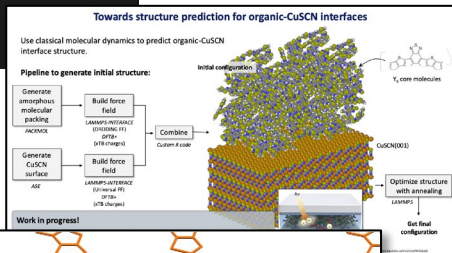


e-ASIA JRP キックオフシンポジウム



オンラインミーティング

機械学習を活かした励起子拡散のシミュレーション



② 半導体における計算・実験の共同研究

- 配位高分子半導体における分子再編成のシミュレーション・実験データの解説 (*Inorg. Chem.* 2026. In press.)
- グラフニューラルネットワークに加速された励起子拡散シミュレーション (*J. Chem. Phys.* 163, 2025, 024125)

