

二国間交流事業 共同研究報告書

令和5年4月21日

独立行政法人日本学術振興会理事長 殿

[日本側代表者所属機関・部局]
東北大学・学際科学フロンティア研究所
[職・氏名]
助教・馬淵拓哉
[課題番号]
JPJSBP 120208102

1. 事業名 相手国: インドネシア (振興会対応機関: DGHE) との共同研究

2. 研究課題名

(和文) 高CO₂吸着性および化学的安定性を有するランタン系金属有機構造体の設計および開発(英文) Design and Development of Lanthanide Metal-Organic Frameworks with High CO₂ Uptake and Chemical Stability3. 共同研究実施期間 令和2年4月1日 ~ 令和5年3月31日 (共同研究:3年0ヶ月)【延長前】 年 月 日 ~ 年 月 日 (年 ヶ月)

4. 相手国側代表者(所属機関名・職名・氏名【全て英文】)

University of Indonesia · Professor · Nasruddin

5. 委託費総額(返還額を除く)

本事業により執行した委託費総額	7,125,000 円	
内訳	1年度目執行経費	2,375,000 円
	2年度目執行経費	2,375,000 円
	3年度目執行経費	2,375,000 円

6. 共同研究実施期間を通じた参加者数(代表者を含む)

日本側参加者等	6名
相手国側参加者等	5名

* 参加者リスト(様式 B1(1))に表示される合計数を転記してください(途中で不参加となった方も含め、全ての期間で参加した通算の参加者数となります)。

7. 派遣・受入実績

	派遣		受入
	相手国	第三国	
1年度目			()
2年度目			()
3年度目	2		3(2)

* 派遣・受入実績(様式 B1(3))に表示される合計数を転記してください。

派遣:委託費を使用した日本側参加者等の相手国及び相手国以外への渡航実績(延べ人数)。

受入:相手国側参加者等の来日実績(延べ人数)。カッコ内は委託費で滞在費等を負担した内数。

8. 研究交流の概要・成果等

(1)研究交流概要(全期間を通じた研究交流の目的・実施状況)

世界規模での CO2 排出量を削減するため、工場や発電所から放出される排ガス中の CO2 回収技術としての応用が期待されている金属有機構造体(Metal Organic Framework: MOF)は、金属イオンと有機配位子の自己組織化によって得られるナノスケールの細孔を持つ多孔性材料である。本申請課題の目的は、日本側において分子動力学法を用いて高 CO2 吸着性・高安定性を有する MOF の理論的設計指針の提案を行い、さらにインドネシア側により実験的に同設計指針に基づいた MOF の合成および性能評価を行うことである。

(2)学術的価値(本研究交流により得られた新たな知見や概念の展開等、学術的成果)

MOF の構造安定性評価に関して、「化学反応」をナノスケールの流動現象内で取り扱うことの困難さから、従来は専ら化学変化を考慮しない古典的な拡散・吸着特性の解析が行われてきた。しかし本研究においては、「化学反応」という分子の量子的な性質と「拡散・吸着」という動的な性質を融合させ新しい学術領域を構築するという学術的価値の高い成果が得られたと考えている。

(3)相手国との交流(両国の研究者が協力して学術交流することによって得られた成果)

両国の参加者全員が参加する隔週に1度のオンラインミーティングを行うことで、スムーズに研究を進めることができた。新型コロナウイルス感染症の拡大が収まってきた令和 3 年度および令和4年度には、日本側研究代表者がインドネシアを訪問し、研究進捗の報告および研究情報の交換を行った。また、令和 4 年 9 月にインドネシア側参加者が 3 ヶ月間日本に滞在し、プログラミングおよび理論的解析を実施することで、学生間の活発な交流も実施できた。

(4)社会的貢献(社会の基盤となる文化の継承と発展、社会生活の質の改善、現代的諸問題の克服と解決に資する等の社会的貢献はどのようにあったか)

今後エネルギー需要の急激な増加が見込まれるインドネシアを含めた東南アジア諸国にとって、MOF のような CO2 回収技術の開発は必要不可欠である。我々のシミュレーション技術とインドネシア側の実験的アプローチを組み合わせた MOF の設計指針の最適化は、効率的な材料設計という観点からも大きく貢献したと考えている。

(5)若手研究者養成への貢献(若手研究者養成への取組、成果)

研究代表者である馬淵拓哉を含めいずれの参加者も博士号取得後 3 年以内の研究者であり、本研究グループは若手研究者のみで構成されているため、本研究の発展自体が直接的に若手研究者養成への貢献に繋がったと考えている。また、インドネシア側参加者が東北大学に 3 ヶ月ほど滞在して日本側の研究グループと共同で研究を進めることができた。それにより、学生間の交流も活発に行うことができ、複眼的で国際性に富んだ若手研究者の育成という観点からも大きく貢献したと考えている。

(6)将来発展可能性(本事業を実施したことにより、今後どのような発展の可能性が認められるか)

材料工学の分野では困難であった時空間スケールの異なる「化学反応」と「拡散・吸着」の現象を効率的に融合させた独自のマルチスケール解析手法を用いて解明したもので、当該分野で重要課題である「ナノスケール動的挙動の理解」と「マルチスケール解析手法の確立」に大きく貢献する。また本研究で得られた知見は、高機

能な MOF の理論的設計指針として役立つものであり、ナノ材料の産業化への多大な貢献が期待できる。

(7)その他(上記(2)～(6)以外に得られた成果があれば記載してください)

例:大学間協定の締結、他事業への展開、受賞など

本交流事業をきっかけにインドネシア大学工学研究科長および東北大学工学研究科長を交えて今後の交流事業の活発化に関する議論を行うまでに至った。今後、部局間協定の締結にむけてより具体的な議論を進めていく予定である。