

国際共同研究事業
国際共同研究教育パートナーシッププログラム
平成27年度実施報告書

平成28年 3月31日

独立行政法人日本学術振興会理事長 殿

所属機関・部局 九州大学・カーボンニュートラル・エネルギー国際研究所

(ふりがな) (いしはら たつみ)
職・氏名 教授・石原 達己

1. 事業名 国際共同研究事業国際共同研究教育パートナーシッププログラム
2. 研究課題名 (和文) 化学燃料製造における活性な材料・界面の計算材料工学による設計
(英文) Integrated Computational Materials Engineering for Active Materials and
Interfaces in Chemical Fuel Production
3. 共同研究実施期間 (全採用期間)
平成 27 年 11 月 16 日 ~ 平成 32 年 11 月 15 日 (5 年 0 ヶ月)
4. 研究参加者
(1) 日本側参加者 6 名 (2) 米国側参加者 9 名
5. 主要な物品購入状況 (一品又は一組若しくは一式の価格が50万円以上のもの)

物品名	仕様 型・性能等	数量	単価(円)	金額(円)	設置研究機関名
なし					

備考：50万円以上の物品を購入等した場合のみ記入してください。

6. 人件費使用状況

氏名	金額	雇用期間	専門および本研究における役割
なし			

備考： 研究者及び専門技術員・研究補助者を雇用した場合のみ記入してください。
雇用期間の欄の記入例：「平成25年6月1日～平成27年5月31日」

7. 渡航実施状況

(a) 日本側参加者（代表者を含む）の国内出張

出張者 (氏名)	出発地 (都市名)	用務先 (都市名)	旅行期間*	用 務 (用務先・用務内容)	経費負担**
なし					

* 旅行期間の欄の記入例：「6月10～19日、10日間」

** 本経費使用予定の有無を記入すること

(b) 当該年度に米国を訪問した日本側参加者

出張者 (氏名)	出発地 (都市名)	用務先 (都市名)	旅行期間*	用 務 (用務先・用務内容)	経費負担**
石原 達己	福岡	アーバナ・シャン ペーン	12月6～9 日、4日間	イリノイ大学・キックオフ ミーティングへの参加・討 議	有
松本 広重	福岡	アーバナ・シャン ペーン	12月6～9 日、4日間	イリノイ大学・キックオフ ミーティングへの参加・討 議	無
Perry Nicola	福岡	アーバナ・シャン ペーン	12月6～9 日、4日間	イリノイ大学・キックオフ ミーティングへの参加・討 議	有
Staykov Aleksandar	福岡	アーバナ・シャン ペーン	12月6～10 日、5日間	イリノイ大学・キックオフ ミーティングへの参加・討 議	有
Tellez Helena	福岡	アーバナ・シャン ペーン	12月6～10 日、5日間	イリノイ大学・キックオフ ミーティングへの参加・討 議	有
Druce John	福岡	アーバナ・シャン ペーン	12月6～10 日、5日間	イリノイ大学・キックオフ ミーティングへの参加・討 議	有

* 旅行期間の欄の記入例：「6月10～19日、10日間」

** 本経費使用予定の有無を記入すること

(c) 当該年度に米国以外の国を訪問した日本側参加者*

出張者 (氏名)	出発地 (都市名)	用務先 (国名・都 市名)	旅行期間**	用 務 (用務先・用務内容)	経費負担***
なし					

* 外国出張の渡航先は原則として、米国のみを渡航先とします。ただし、当該共同研究の研究成果発表を目的とする学会等への出席や、フィールドワーク等で当該第三国へ行くことが必須である研究上の理由がある場合に限り、米国以外の国を訪問することは可能です。

** 旅行期間の欄の記入例：「6月10～19日、10日間」

*** 本経費使用予定の有無を記入すること

(d) 当該年度に受入れた米国側参加者

出張者 (氏名)	用務先	旅行期間*	用 務
Narayana Aluru	九州大学	1/31～2/3、 4日間	プロジェクト進捗報告・打合せ
Ertekin Elif	九州大学	1/31～2/5、 6日間	プロジェクト進捗報告・打合せ
Sofronis Petros	九州大学	1/27～2/7、 12日間	プロジェクト進捗報告・打合せ
Dadfarnia Mohsen	九州大学	1/31～2/7、 8日間	プロジェクト進捗報告・打合せ

* 旅行期間の欄の記入例：「6月10～19日、10日間」

8. 研究実施状況

※ 申請書の内容および当該年度実施計画書の「6. 本年度実施計画の概要」と対応させつつ、当該年度の研究の実施状況を簡潔に日本語にて記入してください。

キックオフミーティングをイリノイ大学において平成 27 年 12 月 7 日に開催した。九州大学からは、石原、松本、Perry、Staykov、Tellez、Druce が参加した。米国側からは Aluru、Gabrielle、Mohsen、Ertekin、Hammes-Schiffer、Sofronis、Dallas、Martin、Barnett、および、本プロジェクトにかかわる研究員、ポストドクが参加した。各研究項目 (A. 新規電解質、B. 新規電極、および、C. 劣化) に関して、科学的背景と検討すべき課題の概要の説明と討議、研究体制・役割分担と進め方等に関する討議を行った。日米の研究データ受け渡しに関するデータインフラストラクチャー、および、本プロジェクトに関する学生教育活動に関しての説明と討議を行った。後者は、米国側 NSF の PIRE プロジェクトが研究とともに国際教育をその目的として含むことによる。平成 28 年 6、7 月に米国側学部学生 (5 名の予定) が九州大学にて活動する計画が説明され、九州大学側での受け入れ態勢について討議した。

研究進捗報告・打ち合わせを平成 28 年 2 月 1 日に九州大学において開催し、電解質および電極に関する研究内容の打ち合わせを石原、松本、Aluru、Ertekin で行った。

日米間の月例ミーティングを行うこととし、第 1 回を平成 28 年 1 月 29 日 (米国 1 月 28 日)、第 2 回を同 2 月 26 日 (米国 2 月 25 日) に行った。今後も月に一度の頻度で、プロジェクト全体の議題および各研究者の研究報告を本ミーティングにおいて行う。

研究項目 A に関しては、プロトン伝導体の組成・構造と導電率、プロトン濃度の相関に関する検討例を整理してイリノイ大に提供した。これをもとにイリノイ大において Aluru を中心として、スーパーコンピューター (Blue Water) を用いたシミュレーションが開始し、プロトンの溶過程に関する原子レベルでの情報が得られつつある。

研究項目 B に関しては、電極材料の表面の情報を得るべく LEIS による測定を実施した。今後、解析結果を九大-イリノイ大で共有し、シミュレーションに展開する。また、SrTiO₃ 系のモデル材料に関して、酸素分圧に対する組成の変化の実験を実施した。そのコンピュータシミュレーションに関する議論を開始し、これについても、今後計算を行う。また、定義のよい酸化物表面の作製のため九州大学と UC バークリーとの間で議論を開始した。

研究項目 C に関しては、現在のところ、イリノイ大がノースウェスタン大学と協力して検討を開始している。

9. 研究発表（平成 27 年度の研究成果）

【雑誌論文】 計（0）件 うち査読付論文 計（ ）件

相手国研究代表者との共著の有無*	著者名	論文標題			
	雑誌名	査読の有無	巻	発行年	最初と最後の頁
				⋮	
	著者名	論文標題			
	雑誌名	査読の有無	巻	発行年	最初と最後の頁
				⋮	
	著者名	論文標題			
	雑誌名	査読の有無	巻	発行年	最初と最後の頁
				⋮	

【学会発表】 計（0）件 うち招待講演 計（ ）件

発表者名	発表標題	
学会等名	発表年月日	発表場所

【図書】 計（0）件

相手国研究代表者との共著の有無*	著者名	出版社	
	書名	発行年	総ページ数
		⋮	

*相手国研究代表者との共著がある場合は○、相手国研究代表者との共著であり論文内に事業名を明記している場合は◎と記入した上で、明記されている箇所（頁、巻頭、巻末等）を記入。

*足りない場合は適宜行を追加して下さい。