

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28年度実施報告書

平成 29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

職・氏名 ^(ふりがな) 教授・石原 達己 ^(いしはら たつみ)

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 9 名 (2) 米国側参加者 10 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
WU JI	4,196,640 円	平成 28 年 5 月 16 日 ～平成 29 年 3 月 31 日	専門：無機電気化学、実験的研究を担当

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**
石原 達己	福岡市	長崎市	7 月 15～16 日	三菱重工総合研究所等・視 察及び意見交換	有
Tellez Helena	福岡市	長崎市	7 月 15～16 日	三菱重工総合研究所等・視 察及び意見交換	有
Druce John	福岡市	長崎市	7 月 15～16 日	三菱重工総合研究所等・視 察及び意見交換	有
Staykov Aleksandar	福岡市	長崎市	7 月 15～16 日	三菱重工総合研究所等・視 察及び意見交換	有
Wu Ji	福岡市	長崎市	7 月 15～16 日	三菱重工総合研究所等・視 察及び意見交換	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

(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**
松本 広重	福岡	アーバナ・シャン ペーン	12月4～9 日、6日間	イリノイ大学・オールハン ズミーティングへの参 加・討議	有
Perry Nicola	福岡	アーバナ・シャン ペーン	12月4～8 日、1月25 ～29日、 10日間	イリノイ大学・オールハン ズミーティングへの参 加・討議及び研究打合せ	有
Staykov Aleksandar	福岡	アーバナ・シャン ペーン	12月4～10 日、7日間	イリノイ大学・オールハン ズミーティングへの参 加・討議	有
Wu Ji	福岡	アーバナ・シャン ペーン	12月4～10 日、7日間	イリノイ大学・オールハン ズミーティングへの参 加・討議	有
Kwati Leonard	福岡	アーバナ・シャン ペーン	12月4～9 日、6日間	イリノイ大学・オールハン ズ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」(現地到着日～現地出発日)

*** 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
Ertekin Elif	九州大学	1/28～2/2、 6日間	プロジェクト進捗報告・打合せ
Sofronis Petros	九州大学	1/17～2/4、 19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」（来日日～離日日）

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。

研究項目 A に関しては、プロトン伝導体の DFT シミュレーションがイリノイ大において Aluru により進捗しており、実際に近い材料に関する計算が進みつつある。九州大学からは松本がこの計算への実験データの提供を行った。酸素空孔への水蒸気の取り込み、および、取り込みに伴う格子の変化に関する計算が、イリノイ大学と九州大学の双方において進行中である。九州大学では Staykov、Ghuman が計算を実施している。石原は、ひずみを導入した際の酸化物イオン伝導体の導電率変化について計測を行った。今後、イリノイ大学においてシミュレーションの材料として扱う。

研究項目 B に関しては、電極材料の表面の情報を得られる LEIS による測定を実施している (Druce, Kilner, Thoreton)。また、Perry は電極の酸化還元特性を分光により求めるというユニークなアプローチをとり、鉄をドーピングした SrTiO₃ 系のモデル材料に関して、酸素分圧に対する酸素非化学量論を吸光度の変化と関連づけることに成功した。イリノイ大学の Ertekin と連携し、Ertekin がこの実験と関連する SrTiO₃ のバンド構造の計算を実施中であり、今後、実験との関連付けを行う。

研究項目 C に関しては、イリノイ大の Sofronis が酸素ポテンシャルの増加に伴うボイド形成の計算を開始し、初歩的な成果が得られつつあるが、これに関する議論をイリノイ大学において行い、今後松本が再現実験を行う予定である。

平成 28 年 12 月にオール・ハンズ・ミーティングをイリノイ大学において開催し、松本、Perry、Staykov、Wu、Leonard が出席した。上記の研究の進捗報告および討議を行った。

米国 NSF 側 PIRE プログラムの活動の一環として x-Fusion というタイトルでイリノイ大学の学部学生の交換留学を受け入れた。平成 28 年 6 月-7 月の 2 ヶ月間、6 名の学生を研究室に受け入れ、実験研究を実施した。また、工学・文化の他面における日本の紹介を行い、7 月 15-16 日には三菱重工業総合研究所を見学した。

個別の研究進捗報告・打ち合わせを平成 29 年 1-2 月に九州大学において実施し、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、Ertekin、Sofronis で行った。

日米間の月例ミーティングを月に一度の頻度で開催した（日本時間で朝の 8:30 より実施）。全体打ち合わせと各研究者の報告を行い、研究テーマや進捗状況の共有を図った。

9. 研究発表（平成 28 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（ 2 ）件 うち招待講演 計（ 0 ）件

発表者名	発表標題		
Nicola Perry	Contact-free, continuous, in situ optical studies of thin film perovskite electrode performance		
学会等名	発表年月日	発表場所	
I ² CNER INTERNATIONAL WORKSHOP (MOLECULAR PHOTOCONVERSION DEVICE DIVISION AND ELECTROCHEMICAL ENERGY CONVERSION DIVISION)	2017年2月3日	九州大学	
発表者名	発表標題		
John Druce	Surface segregation of cathode		
学会等名	発表年月日	発表場所	
I ² CNER INTERNATIONAL WORKSHOP (MOLECULAR PHOTOCONVERSION DEVICE DIVISION AND ELECTROCHEMICAL ENERGY CONVERSION DIVISION)	2017年2月3日	九州大学	

【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。