

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 29 年度実施報告書

平成 30 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 8 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
TwisTorr304FS ボン ブ (CF6)	X3500-69005	1 台	629,640 円	629,640 円	九州大学カーボン ニュートラル・エネルギー国 際研究所 第 1 研究棟 408 号室

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	4,723,350 円	平成 29 年 4 月 1 日 ～平成 30 年 3 月 31 日	学術研究員

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**
Perry Nicola	福岡市	長崎市	8 月 1～2 日	三菱重工総合研究所等・視察及び意見交換	有
Thoreton Vincent	福岡市	長崎市	8 月 1～2 日	三菱重工総合研究所等・視察及び意見交換	有
Ghuman Kulbir Kaur	福岡市	長崎市	8 月 1～2 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	8 月 1～2 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	宗像市	2 月 3～4 日	I2CNER 部門リトリートにて研究成果発表	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	カリフォルニア大学・バークリー校 (カリフォルニア)	3月14～19日、6日間	オールハンズミーティングへの参加・討議	有
Wu Ji	福岡	カリフォルニア大学・バークリー校 (カリフォルニア)	3月14～19日、6日間	オールハンズミーティングへの参加・討議	有
Leonard Kwati	福岡	カリフォルニア大学・バークリー校 (カリフォルニア)	3月14～19日、6日間	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***
Wu Ji	福岡	(イタリア・パドバ)	6月16日～25日 (10日間)	第21回固体イオニクス国際会議にて研究成果発表	有
Wu Ji	福岡	(中国・深圳)	1月11日～16日 (6日間)	Nature Conference on Materials Electrochemistry: Fundamentals and Applications にて研究成果発表	有

* 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
Yuhang Jing	九州大学	9月1日～ 10月31日、 61日間	プロトン伝導性電解質の調製実験、および電気化学測定
Nam-Hoon Kim	九州大学	8月5～11 日、7日間	電気化学測定（ガス濃淡電池）
Bin Ouyang	九州大学	8月5～11 日、7日間	電気化学試験（ガス濃淡電池）
Ertekin Elif	九州大学	1月29日～ 2月2日、 5日間	プロジェクト進捗報告・打合せ
Sofronis Petros	九州大学	1月29日～ 2月2日、 5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、プロトン溶解の原理についてのイリノイ大（以下、UIUC）・九大の共同研究により、九大にポスドク（Dr. Jing Yuhang、ほか2名）が滞在するなどしてその理解が進み、共著論文発表を行うとともに新規物質探索を継続している。また、UIUCにおいてひずみの導入によるイオン伝導性を調べるためのモデル材料として鉄をドーブした SrTiO_3 (STF) についてのシミュレーションを行われ、Fe の原子価の違いによる格子の膨張・収縮とそのイオン伝導性との違いが明らかになっている。これらの結果を受けて、平成30年3/15-16にカリフォルニア大学バークリー校において開催された All-Hands Meeting において、ひずみの効果に関する研究をより拡大して進めることで一致し、カリフォルニア大学およびノースウェスタン大も加えて次年度以降にさらに進捗を図る。

研究項目 B に関しては、前年度に続き電極材料の表面の LEIS による測定を実施するとともに、九大において電極反応のシミュレーションが行われ、電極に含まれるアルカリ土類金属の表面偏析およびその電極反応への寄与のモデルを確立しつつある。また、鉄をドーブした SrTiO_3 系、および、ルドレスデンポッパー層である La_2NiO_4 および Pr_2NiO_4 が電極のモデル材料として九大および UIUC による研究が実施され、前者では電極の酸化還元特性を分光により求めるというアプローチにより、結晶状態による表面反応速度の違いなどの知見が得られた。また、後者では第一原理計算により、表面の電極への関与の詳細が明らかになっている。H30年度に開始を予定していたプロトン-電子混合伝導性電極の探索については、九大において前倒して取り組み、ToF-SIMS 測定により既報の材料中にはプロトンが予想ほど含まれていないことなど、初期的な知見が得られた。

研究項目 C に関しては、UIUC において酸素ポテンシャルの増加に伴うボイド形成の計算に関する電気化学モデルの構築を行っている。また前記の通り、電極材料検討において、表面におけるアルカリ土類の偏析に関する研究結果が得られており、これが電極性能の劣化につながると考えている。上記 All-Hands Meeting では Sr 等の偏析による電極性能の経時劣化の実例が報告され、この結果について集中的に議論がなされた。その結果、アルカリ土類の偏析の駆動力や抑制法などを検討する必要性が指摘され、今後、カリフォルニア大によるパルスレーザーでポジション法による薄膜電極の検討を追加して行うこととした。

平成30年3月15日および16日に All-Hands Meeting をカリフォルニア大において開催し、九州大学からは松本、Wu、Leonard が出席した。上記の通り、研究の進捗報告を行い、その内容および今後の取り組みに関して討議を行った。

米国 NSF 側 PIRE プログラムの活動の一環として x-Fusion というタイトルで学部学生の交換留学を受け入れた。平成29年6月-8月の間の2ヶ月間、イリノイ大学から3名、カリフォルニア大学から1名、ノースウェスタン大学から1名、計5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、昨年に引き続き、8月1-2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30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 29 年度の研究成果）

〔雑誌論文〕 計（9）件 うち査読付論文 計（9）件

相手国研究代表者との共著の有無*	著 者 名	論 文 標 題					
	Aleksandar Staykov, Helena Tellez, John Druce, Ji Wu, Tatsumi Ishihara, John Kilner	Electronic properties and surface reactivity of Sr O-terminated SrTiO3 and SrO-terminated iron-doped SrTiO3					
有	雑 誌 名	査読の有無	巻	発 行 年		最初と最後の頁	
	Science and Technology of Advanced Materials	有	19	2	0	1	8
有	著 者 名	論 文 標 題					
	H. Razavi-Khosroshahi, K. Edalati, Ji Wu, Y. Nakashima, M. Arita, Y. Ikoma, M. Sadakiyo, Y. Inagaki, A. Staykov, M. Yamauchi, Z. Horita, M. Fuji	High-pressure zinc oxide phase as visible-light-active photocatalyst with narrow band gap					
	雑 誌 名	査読の有無	巻	発 行 年		最初と最後の頁	
	Journal of Materials Chemistry A	有	5	2	0	1	7
有	著 者 名	論 文 標 題					
	Namhoon Kim, Emily M. Turner, Yoonyoung Kim, Shintaro Ida, Hidehisa Hagiwara, Tatsumi Ishihara, Elif Ertekin	Two-Dimensional TiO2 Nanosheets for Photo and Electro-Chemical Oxidation of Water: Predictions of Optimal Dopant Species from First-Principles					
	雑 誌 名	査読の有無	巻	発 行 年		最初と最後の頁	
	J. Phys. Chem. C	有	121	2	0	1	7
有	著 者 名	論 文 標 題					
	Kara Kearney, Ashwathi Iyer, Angus Rockett, Aleksandar Staykov, Elif Ertekin.	Multiscale Computational Design of Functionalized Photocathodes for H2 Generation					
	雑 誌 名	査読の有無	巻	発 行 年		最初と最後の頁	
	Journal of the American Chemical Society	有	140	2	0	1	8
以下、日本側参加者を含まないPIRE共著論文							
	著 者 名	論 文 標 題					
	Kara Kearney, Ashwathi Iyer, Angus Rockett, Aleksandar Staykov, Elif Ertekin.	Multiscale Computational Design of Functionalized Photocathodes for H2 Generation					
	雑 誌 名	査読の有無	巻	発 行 年		最初と最後の頁	
	Journal of the American Chemical Society	有	140	2	0	1	8
	著 者 名	論 文 標 題					
	Ashwathi Iyer, Kara Kearney, Shohei Wakayama, Hirotoshi Odoi, Elif Ertekin	Design strategy for the Molecular Functionalization of Semiconductor Photoelectrodes: A Case Study of p-Si(111) Photocathodes for H2 Generation					
	雑 誌 名	査読の有無	巻	発 行 年		最初と最後の頁	
	Langmuir	有	34	2	0	1	8
	著 者 名	論 文 標 題					
	Ashwathi Iyer, Elif Ertekin	Asymmetric response of ferroelectric/metal oxide heterojunctions for catalysis arising from interfacial chemistry					
	雑 誌 名	査読の有無	巻	発 行 年		最初と最後の頁	
	Physical Chemistry Chemical Physics	有	19	2	0	1	7
	著 者 名	論 文 標 題					
	K. L. Kearney, Angus Rockett, Elif Ertekin.	Computational Insights into Charge Transfer Across Functionalized Semiconductor Surfaces					
	雑 誌 名	査読の有無	巻	発 行 年		最初と最後の頁	
	Science and Technology of Advanced Materials	有	18	2	0	1	7
	著 者 名	論 文 標 題					

	Yang Yang, Tanner Culpitt, Sharon Hammes-Schiffer	Multicomponent Time-Dependent Density Functional Theory: Proton 2 and Electron Excitation Energies				
	雑 誌 名	査読の有無	巻	発 行 年	最初と最後の頁	
	J. Phys. Chem. Lett	有		2 0 1 8		

〔学会発表〕計（12）件 うち招待講演 計（0）件

発 表 者 名		発 表 標 題	
Ji Wu, Aleksandar Staykov, Taner Akbay, Tatsumi Ishihara, John A. Kilner		Understanding the role of A-site atoms in the catalytic activity of ABO3 perovskites	
学 会 等 名		発表年月日	発 表 場 所
21st International Conference on Solid State Ionics		June 2017	Italy,
発 表 者 名		発 表 標 題	
Ji Wu, Kotaro Fujii, Masatomo Yashima, Taner Akbay, Aleksandar Staykov, Tatsumi Ishihara, John A. Kilner		Understanding the role of A-site atoms in the catalytic activity of ABO3 perovskites	
学 会 等 名		発表年月日	発 表 場 所
Nature Conference on Materials Electrochemistry: Fundamentals and Applications		Jan. 2018	China
発 表 者 名		発 表 標 題	
N.H.Perry, T.Chen, N.Kim, E.Ertekin, G.F.Harrington, K.Sasaki, H.L.Tuller		Optical and impedance spectroscopic investigation of factors impacting oxygen surface exchange kinetics in mixed conducting perovskite films	
学 会 等 名		発表年月日	発 表 場 所
The Materials Research Society		Nov. 26 - Dec. 1, 2017.	Boston, MA, USA
発 表 者 名		発 表 標 題	
N.H.Perry, T.Chen, N.Kim, E.Ertekin, G.F.Harrington, K.Sasaki, H.L.Tuller		In situ optical studies of point defect chemistry and kinetics in thin film mixed conducting oxides	
学 会 等 名		発表年月日	発 表 場 所
International Conference on Solid State Ionics		June 18-23, 2017.	Padua, Italy
発 表 者 名		発 表 標 題	
N.H.Perry, N.Kim, E.Ertekin, H.L.Tuller,		Understanding, controlling, and applying optical absorption of Sr(Ti,Fe)O3-x : relationship to defect chemistry and kinetics	
学 会 等 名		発表年月日	発 表 場 所
International Conference on Electroceramics		May 28-31, 2017.	Nagoya, Japan
発 表 者 名		発 表 標 題	
N.Kim ,N.H.Perry, E.Ertekin,		Composition, structure, and ionic-electronic conducting properties of SrTi1-x Fex O3-d solid solutions: first-principles study	
学 会 等 名		発表年月日	発 表 場 所
International Conference on Defects in Semiconductors		July.31-Aug.4, 2017.	Matsue, Japan
発 表 者 名		発 表 標 題	
Takaya Fujisaki, Yassuhiro Takamura, Alexander Staykov, Hiroshige Matsumoto		Theoretical Study for the Effect of Pt Nanoparticles on the Proton Conducting Properties of Strontium Cerate and Zirconate	
学 会 等 名		発表年月日	発 表 場 所
第13回固体イオニクスセミナー		2017/9/13	宮崎シーガイア
発 表 者 名		発 表 標 題	
Takaya Fujisaki, Yasuhiro Takamura, Aleksandar Staykov, Hiroshige Matsumoto		Theoretical Study for the Effect of Pt Nanoparticles on the Proton Conducting Properties of Strontium Cerate and Zirconate	

hige Matsumoto		
学 会 等 名	発表年月日	発 表 場 所
トークショー・イン・九州2017	2017/9/14	大分
発 表 者 名	発 表 標 題	
藤崎 貴也,ステイコフ アレクサンダー,ジン ユーハン,アルール ナラヤン,松本 広重	第一原理計算によるプロトン伝導性酸化物の化学膨張の評価	
学 会 等 名	発表年月日	発 表 場 所
公益社団法人電気化学会第85回大会	2018/3/11	東京理科大学
以下日本側参加者を含まないPIRE共著の学会発表		
発 表 者 名	発 表 標 題	
Matthew Y. Lu, Justin G. Railsback, Scott A. Barnett	The Role of Temperature During Reversing Current-Switched Life-Tests of LSM-YSZ and LSC	
学 会 等 名	発表年月日	発 表 場 所
the 42nd International Conference and Exposition on Advanced Ceramics and Composites, 15th International Symposium on Solid Oxide Fuel Cells (SOFC)	January 24, 2018	Daytona Beach, Florida.
発 表 者 名	発 表 標 題	
N.Kim , B.Ouyang, N.Perry, E.Ertekin	Numerical evaluation of ionic conducting properties of SrTi _{1-x} Fex O _{3-d} solid solutions	
学 会 等 名	発表年月日	発 表 場 所
The Minerals, Metals and Materials Society, Phoenix	Mar. 11-15, 2018	Arizona, USA
発 表 者 名	発 表 標 題	
E.Ertekin, H.Jeong, N.Kim, B.Ouyang, N.Aluru, E.Seebauer	Recent developments in modeling of defects in semiconductors: High-accuracy, diffusion, and stochastic error quantification	
学 会 等 名	発表年月日	発 表 場 所
International Conference on Defects in Semiconductors	July31 - Aug.4, 2017	Matsue, Japan

【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。

10. 研究成果による産業財産権の出願・取得状況

【出 願】 計 (0) 件

産業財産権の名称	発明者	権利者	産業財産権の種類、番号	出願年月日	国内・外国の別

【取 得】 計 (0) 件

産業財産権の名称	発明者	権利者	産業財産権の種類、番号	取得年月日	国内・外国の別

- 1 1. 本事業に対する要望等
特にありません。