

国際共同研究事業 共同研究報告書

令和 3 年 4 月 1 日

独立行政法人日本学術振興会理事長 殿

[代表者所属機関・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]

教授・石原 達己

1. プログラム名 国際共同研究教育パートナーシッププログラム (PIRE)

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 ~ 令和 3 年 3 月 31 日 (5 年 5 ヶ月)

4. 委託費総額 (研究経費 + 業務委託手数料等、返還額を除く)

本事業により執行した委託費総額		47,850,000 円
内訳	1 年度目執行経費	3,300,000 円
	2 年度目執行経費	9,900,000 円
	3 年度目執行経費	9,900,000 円
	4 年度目執行経費	9,900,000 円
	5 年度目執行経費	8,910,000 円
	6 年度目執行経費	5,940,000 円

5. 派遣・受入実績

- (1) 研究期間中に相手国又は相手国以外の国を訪問した日本側参加者（委託費から支出した出張のみ記載。相手国以外の国における用務先には下線を付すこと。）

氏名	旅行期間*	用 務 (用務先・用務内容)
石原 達己	27 年 12 月 6～9 日	イリノイ大学・キックオフミーティングへの参加・討議
Perry Nicola	27 年 12 月 6～9 日	イリノイ大学・キックオフミーティングへの参加・討議
Staykov Aleksandar	27 年 12 月 6～10 日	イリノイ大学・キックオフミーティングへの参加・討議
Tellez Helena	27 年 12 月 6～10 日	イリノイ大学・キックオフミーティングへの参加・討議
Druce John	27 年 12 月 6～10 日	イリノイ大学・キックオフミーティングへの参加・討議
松本 広重	28 年 12 月 4～9 日	イリノイ大学・オールハンズミーティングへの参加・討議
Perry Nicola	28 年 12 月 4～8 日、29 年 1 月 25～29 日	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
Staykov Aleksandar	28 年 12 月 4～10 日	イリノイ大学・オールハンズミーティングへの参加・討議
Wu Ji	28 年 12 月 4～10 日	イリノイ大学・オールハンズミーティングへの参加・討議
Kwati Leonard	28 年 12 月 4～9 日	イリノイ大学・オールハンズミーティングへの参加・討議
松本 広重	30 年 3 月 14～19 日	カリフォルニア大学・バー克利校（カリフォルニア）・オールハンズミーティングへの参加・討議
Wu Ji	30 年 3 月 14～19 日	カリフォルニア大学・バー克利校（カリフォルニア）・オールハンズミーティングへの参加・討議
Leonard Kwati	30 年 3 月 14～19 日	カリフォルニア大学・バー克利校（カリフォルニア）・オールハンズミーティングへの参加・討議

Wu Ji	29 年 6 月 16～25 日	イタリア (パドバ)・第 21 回固体イオニクス国際会議にて研究成果発表
Wu Ji	30 年 1 月 11～16 日	中国 (深圳)・Nature Conference on Materials Electrochemistry: Fundamentals and Applications にて研究成果発表
藤崎貴也	30 年 9 月 23～28 日	イリノイ大学・PIRE プロジェクトの NSF サイトビジット
Alexander Staykov	30 年 9 月 23～26 日	イリノイ大学・PIRE プロジェクトの NSF サイトビジット
松本広重	30 年 9 月 23～26 日	イリノイ大学・PIRE プロジェクトの NSF サイトビジット
Wu Ji	30 年 8 月 31 日～9 月 9 日	トリノ (イタリア)・MSSC2018 の学会発表のため
藤崎貴也	元年 5 月 11 日～6 月 1 日	イリノイ大学・Erif Ertekin の研究室を訪問し、クラスターエクспанション・モンテカルロシミュレーションを習得
藤崎貴也	元年 6 月 16 日～6 月 21 日	韓国 (平昌)・SSI-22 の参加のため
藤崎貴也	元年 10 月 14 日～10 月 18 日	フランス (モンペリエ)・PPCC2019 参加のため
藤崎貴也	元年 10 月 19 日～10 月 24 日	ノルウェー (オスロ)・PETITE 参加のため
藤崎貴也	元年 11 月 29 日～12 月 1 日	カナダ (モントリオール)・Kulbir 助教授との会合
計 24 名 (延べ人数)		

* 旅行期間の欄の記入例:「6 月 10～19 日」(旅行開始日～旅行終了日)

(2) 研究期間中に受け入れた相手国側参加者の氏名、来日期間、用務

氏名	旅行期間*	用 務 (用務先・用務内容)
Narayana Aluru	28 年 1 月 31 日～2 月 3 日	九州大学・プロジェクト進捗報告・打合せ
Ertekin Elif	28 年 1 月 31 日～2 月 5 日	九州大学・プロジェクト進捗報告・打合せ
Sofronis Petros	28 年 1 月 27 日～2 月 7 日	九州大学・プロジェクト進捗報告・打合せ
Dadfarnia Mohsen	28 年 1 月 31 日～2 月 7 日	九州大学・プロジェクト進捗報告・打合せ
Ertekin Elif	29 年 1 月 28～2 月 2 日	九州大学・プロジェクト進捗報告・打合せ
Sofronis Petros	29 年 1 月 17～2 月 4 日	九州大学・プロジェクト進捗報告・打合せ
Yuhang Jing	29 年 9 月 1 日～10 月 31 日	九州大学・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	29 年 8 月 5～11 日	九州大学・電気化学測定（ガス濃淡電池）
Bin Ouyang	29 年 8 月 5～11 日	九州大学・電気化学試験（ガス濃淡電池）
Ertekin Elif	30 年 1 月 29 日～2 月 2 日	九州大学・プロジェクト進捗報告・打合せ
Sofronis Petros	30 年 1 月 29 日～2 月 2 日	九州大学・プロジェクト進捗報告・打合せ
計 11 名 (延べ人数)		

* 旅行期間の欄の記入例：「6 月 10～19 日」（旅行開始日～旅行終了日）

6. 研究の成果

(1) 研究概要（全期間を通じた研究の目的・実施状況）

全世界的に脱炭素化の社会的要求が高まっている。風力や太陽光など、再生可能エネルギーの一次エネルギー利用には、その大きな変動や需要とのずれのため電力貯蔵技術が重要となるが、現在のところ、膨大な量のエネルギーを貯蔵する満足な技術は存在しない。固体酸化物形電解セル（SOEC）（図1）は(i) 高効率な化学燃料生産の手段を提供し、(ii) 電解と燃料電池モードの両方で作動することで蓄電の機能を備える。また、(iii) 水と二酸化炭素の共電気分解によるメタンやCOなどの化学燃料の生産を行うことも可能であり、作動条件や適用性における柔軟性をもつ。さらに、SOECは高価な金属触媒を必要としないため、大規模なエネルギー変換に適している。

本国際共同研究では、SOECの社会実装を可能にするという全体目標に対して、「新規電解質」、「新規電極」、「劣化」の3つの研究項目に分けて、日米の国際的な協力体制のもとで、コンピューティングと実験の融合による研究を実施した。

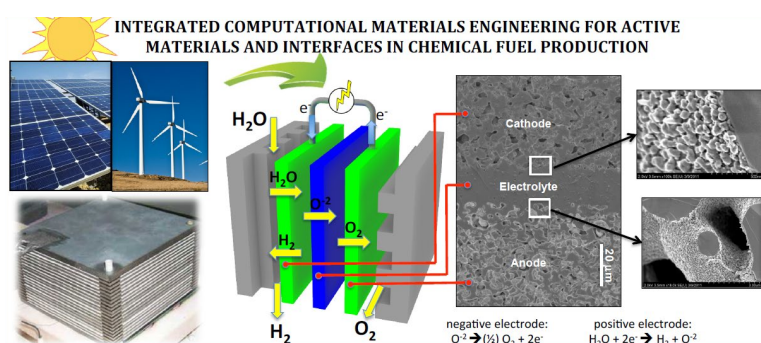


図1. 固体酸化物形電解セル（SOEC）の原理および実際のセルの外観や微構造：SOECは、2つの電極と中央部にある1つの固体電解質から成る。再生可能エネルギー由来の電気を用いて水から水素燃料を製造する。高安定かつ高伝導性の電解質、高活性電極の開発、および劣化抑制が大きな課題となる。

計算科学による検討は主にイリノイ大学が担当した。米国立スーパーコンピュータ応用研究所（NCSA）のブルーウォーター（Blue Water）ペタスケールコンピューティング・プラットフォーム上で、多くの計算リソースを駆使して実施された。九州大学カーボンニュートラル・エネルギー国際研究所（I²CNER）は、それまで培ってきた水蒸気電解による水素製造に関する検討をもとに、固体電気化学に関する知見を結集して実験側の実証にあたった。また、I²CNERや学内施設における先端的分析・測定機器を駆使した検討も行った。カリフォルニア大学バークレー校は、薄膜作製に先進的な技術を有しており、高品質薄膜モデルの合成と特性評価を担当した。ノースウェスタン大学は、インピーダンス分光法を含む電気化学的特性評価および解析に実績を有し、固体酸化物セルの製造と評価に関する実験を担当した。

教員とともに博士研究員がこれらの日米共同研究の活動を実施し、協働体制の統括・管理を行う体制により若手人材の育成を図った。また、日米双方の学生の交換を多年度に渡って実施し、交換学生が本課題に関連する研究に携わるとともに二国間の異なる文化を体験する機会を設け、学術と文化の交流を図った。

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

本国際共同研究のもっとも大きな特徴は、計算科学による材料の物性予測に基づく、Computer-drivenな電解質、電極材料およびSOECの研究・開発を進めるという研究方針により、新規材料や材料の新たな理解に到達するということであつた。実際には計算による物性予測だけでなく、実験結果を計算科学によって確かめることもまた有効であり、言い換えれば実験と計算の双方向の知見のやりとりによって学術的成果を得ることができた。電解質の検討に関しては、ランタンガレート系酸化物イオン伝導体の

伝導性が応力により変化することが予想され、これを実験的に実際に確かめ、さらに計算科学によってその導電率向上の機構を推定した。プロトン伝導性酸化物に関しては、水和エンタルピーの計算およびミクロスコピックな構造の精査により、構成元素の化学的な性質だけでなく「酸素空孔の大きさ」という新たな幾何的な因子の重要を指摘した。電極の検討においては、 $\text{Sr}(\text{Ti}, \text{Fe})\text{O}_3$ 系電極の鉄の量と電極活性の相関を実験的に明らかにするとともに、それが酸素の拡散係数の違いに帰着できることを計算化学的に示した。また、 La_2NiO_4 系電極について、表面が La により終端されていること、それにもかかわらず実験的に高い電極活性を示すのは La が酸素のレドックスに関与しているからであることを計算化学的に見いだすことができた。

本国際共同研究における以上の研究成果は、SOEC を含む固体酸化物セルの性能向上や材料の理解を促進するものであるとともに、実験と計算の間のやりとりによりそれらを導けたことは科学の方法論に対しても大きな価値を有する。

(3) 相手国との交流実績（本研究による国際共同研究の活性化や、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）

本国際共同研究は、日本側の九州大学とイリノイ大学を中心としたカリフォルニア大学、ノースウェスタン大学の米国側大学とが協働により進めた。本研究を活発に進めるために、下記の通り定期的なプロジェクトミーティングを日本または米国で開催し研究の方針や結果に関する討議を行った。また、マンスリーミーティングを Web 会議の形（日本時間午前 8:30～）で開催し、研究の進捗状況の共有を図った。

プロジェクトミーティングのリスト：

- H27. 12 キックオフミーティング（開催地：イリノイ大）
- H28. 1 プロジェクトミーティング（開催地：九州大）
- H28. 12 オールハンズミーティング（開催地：イリノイ大）
- H29. 1 プロジェクトミーティング（開催地：九州大）
- H30. 1 プロジェクトミーティング（開催地：九州大）
- H30. 3 オールハンズミーティング（開催地：カリフォルニア大）
- H30. 9 NSF サイトビジット（開催地：イリノイ大）

「A:新規電解質」、「B:新規電極」、「C:劣化」の3つの研究項目における研究の実施状況と成果を以下にまとめる。

研究項目 A. 新規電解質：

電解質の高伝導化の試みの一つとして、ひずみの効果を用いた中・低温作動型の酸素イオン伝導体材料設計について検討を行った。九州大学とカリフォルニア大学バークリー校との共同研究により、ランタンガレート系酸化物のエピタキシャル成長薄膜について電解質内部に引っ張り応力が生じている場合に導電率が增大することが実験的に示され、またこの結果について、イリノイ大学においては第一原理計算が実施され、結晶内の金属-酸素八面体の回転による導電率の向上の機構が示唆された（図 2）。これらの成果は、応力がイオン伝導性の向上に寄与することをその機構とともに例証したものである。

イオン伝導性の温度依存性が小さく、作動温度の低温化に有利なプロトン伝導性酸化物は次世代固体電解質材料として期待されているが、その材料原理には不明な点が多い。九州大学とイリノイ大学の共同研究によりプロトン伝導性酸化物のプロトン伝導性の起源である水和現象に関する第一計算が試み

られ、プロトン伝導性材料における水和エンタルピーが構成元素の化学的な性質とともに酸素空孔の大きさによって変化すること、体積圧縮率を勘案することによって化学膨張の傾向が説明できることを明らかにした (図3)。プロトン溶解の傾向をこれまでに無い幾何的な因子から洞察した物であり、材料設計の有力な手がかりとなり得る。

電解質内部界面のイオン伝導性に与える影響について、九州大学が第一原理計算による粒界の再現に取り組み、安定化ジルコニアの特定の界面の粒子配置モデルの構築に成功した。モデルにおいては、粒界とバルクとで金属の酸素配位数や結合距離に違いがあるという結果が示され、これまでその存在や起源が不確かであった結晶粒界における空間電荷層の生成を原子配置モデルによって示したものである。

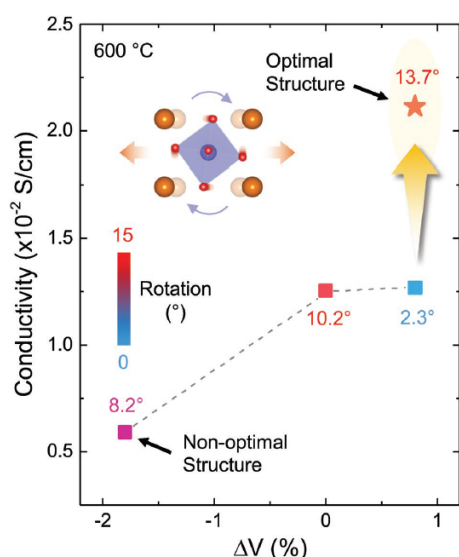


図2 ランタンガレート系酸化物 (LSGM9182) エピタキシャル膜において見積もられた酸素イオン伝導度と単位格子体積との関係

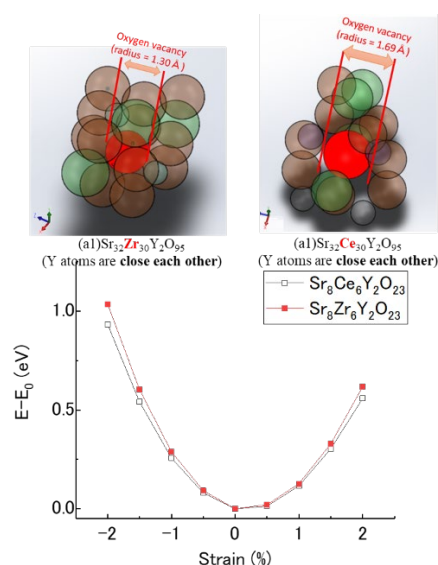


図3 ジルコニウム、セリウムを含むプロトン伝導体の酸素空孔の大きさの違いと応力-エネルギー相関

研究項目 B. 新規電極：

電極材料中の構成カチオンおよびその偏析は電極性能を大きく左右する因子である。Sr(Ti,Fe)O₃系材料の空気極への適用がイリノイ大学により検討され、Feの含有量が多いほど電極抵抗が小さくなることを示すとともに、第一原理計算により、ペロブスカイト型構造-ブラウンミラライト構造の間の転移、およびそれに伴う電子構造の変化が電極抵抗と関連付けられることが示された。実験的な決定が困難である酸化物イオン伝導性について、イリノイ大学により開発された原子拡散計算ソフトウェア「Onsager」を用いた検討が行われ、Feの含有量が多いほど酸素の化学拡散係数が大きくなることが示された。さらに、イリノイ大学および九州大学が共同で行った同材料の薄膜の光学特性の測定よりFeの+3価-+4価の間の価数変化に関連することが示された。これらの結果に関連して、ノースウェスタン大学では同材料へのCoの部分置換が試みられ、Coの置換により電極抵抗が低減されることが実験的に明らかにされた。

ルドレスデン・ポッパー相であるLa₂NiO₄およびPr₂NiO₄相についての第一原理計算が九州大学において実施され、表面がLaやPrで終端されていること、および、前者の場合にLaが酸素の酸化還元に関わっていることが明らかにされた (図4)。表面偏析の傾向の高いSrを含まない本相において、通常酸化還元に不活性 (関与しない) と考えられるLaが反応に関わることを示した初めての例である。

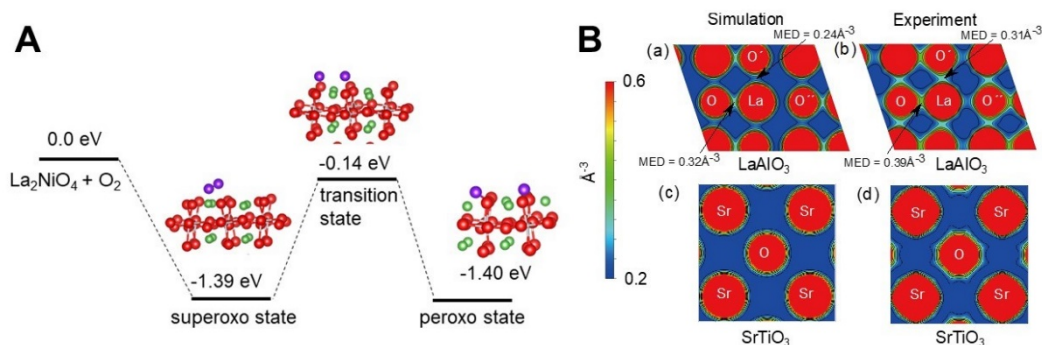


図4 La_2NiO_4 表面の ORR、A : La_2NiO_4 表面/気相 O_2 分子に対する反応エネルギー、B : DFT および実験的 XRD 法によって得られた LaAlO_3 および SrTiO_3 の AO 面における電子密度分布 (部分的な共有結合が La と O の間に観察され、La 表面の触媒活性に寄与することを示している) (T. Akbay, et al. J. Mater. Chem. A, 2016, 4, 13113-13124; J. Wu et al. J. Mater. Chem. A, 2018, 6, 11819-11829)

研究項目 C. 劣化：メカニズムの解明と軽減手法の確立

提案当初には、SOEC 劣化の一因として電解質中や電解質電極界面におけるボイド（空隙）の発生を予想し、その生成やメカニズムについての理論計算、実験および議論が繰り返された。その結果、想定するボイドは生成する場合があるものの、通常の運転条件を大きく逸脱した高過電圧状態に限られるという結論に達した。

一方、 $(\text{La}, \text{Sr})(\text{Fe}, \text{Co})\text{O}_3$ (LSCF) 電極の劣化がノースウェスタン大学によって検討され、劣化の挙動が作動温度によって異なることが明らかにされた。すなわち、 650°C 作動時には、電流密度の増大とともに劣化速度が上昇するが、 750°C 作動においては劣化そのものが小さいだけでなく、劣化速度が電流密度にも依存しなかった。これまで、電極の劣化速度は温度が高いほど大きいと考えられてきたが、運転に適する温度があることを示す重要な結果である。

以上の日米の共同研究体制により、高性能固体酸化物電解セル (SOEC) の実現に資する材料科学的成果を上げることができた。

(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広い意味での社会的貢献はどのようにあったか)

本国際共同研究においては、日米間で計算科学と実験科学の相互の知見のやりとりによる研究を通じて上記学術的成果を得ることができた。計算科学と実験化学の融合研究を国際協働体制により実現するという研究基盤を確立できた。

SOEC をはじめとする固体酸化物セルは、脱化石燃料・脱炭素社会の実現に向けた高効率エネルギー変換デバイスへの利用が期待される。再生可能エネルギー由来の水素製造は、今後の低炭素社会の実現に欠かせない技術である。水・水蒸気電解は電気エネルギー→化学エネルギーの変換を行える唯一の原理であり、本研究の成果はその材料・デバイス性能の向上を通じて、固体酸化物セルの応用を図るものであり、カーボンニュートラル社会の実現を促すものである。

若手人材の育成の面では、博士研究員や学生が派遣、交換を通じて日米双方の機関の特色を活かした教育および研究プログラムに参加させることができ、エネルギー分野の発展に寄与する若手人材の育成を図ることができた。

(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）

PIRE プログラムにおける共同研究は、米国大学研究者と日本側研究者が計算科学と実証実験を共同行うというユニークな取り組みであり、学生やポスドクがそれぞれの特色を活かした教育および研究プログラムに参加し、研究の進捗や専門知識の習得だけでなく、幅広い経験を積むことを意識してプログラムを進めた。

博士研究者の育成に関しては、本事業期間中に延べ2名の博士研究員を雇用し、国際共同研究の統括・管理にあたらせるとともに、実験・計算科学の研究を行ってもらった。米国への渡航を通じて現地での研究経験も積み、その結果2名とも、英国および国内国立大学にて研究者の職を得て、研究を発展させている。本プログラムにより頭脳循環と若手研究者の育成が図られたと言える。

本プログラムの枠組みを利用した、学生の育成にも取り組んだ。以下に示すように、米国側機関に属する学生延べ24名を2ヶ月間九州大学に受け入れ、九州大学側参加メンバーをホストとして研究活動を行ってもらった（渡航費用はNSF側のPIREにより負担された）。また、学内措置により延べ37名の九州大学の学生をイリノイ大学に約1ヶ月派遣し、研究活動を体験する取組も行った。日米間の人物交流により、異文化の環境下で幅広い視点を養い、様々な分野での学際的な知識・経験を得ることができ、次世代の科学者育成に役立つ取組であった。イリノイ大学からの交換学生に関しては、その成果報告を米国領事館内アメリカンセンターで実施し、日米の友好関係にも寄与した。

米国学生の九州大学での活動：X-FusionとしてH28-R1まで4カ年、合計24名の米国大学生の2ヶ月間の交換

H28年6-8月、イリノイ大生6名

H29年6-8月、イリノイ大生3名、カリフォルニア大生1名、ノースウェスタン大生1名

H30年6-8月、イリノイ大生5名、カリフォルニア大生1名

H31年6-8月、イリノイ大生6名、カリフォルニア大生1名

H32年はイリノイ大学で学生の募集を行ったが、コロナ感染症の影響で日本への交換は中止された

(6) 将来発展可能性（本事業を実施したことで、当初見込んでいた将来的な発展は認められたか。またその可能性はあるか）

本事業では、固体酸化物水蒸気電解（SOEC）の実用に資する材料開発を目標とした。電解質および電極材料の理解や新材料の開発に関して、多くの成果を挙げることができ、研究面での目標は十分に達成できたと考えられる。

日米連携の面でも十分な取組が行えた。Web会議の形態で実施した月例会議、ほぼ毎年開催したプロジェクトミーティング、博士研究員の日米間の相互派遣、日米の学生の相互交換といった複数の取組により、国際協働体制を確立することができた。

これらの成果や体制の確立を元に、今後さらに研究や人材育成に関する協働体制を維持・継続する。九州大学ーイリノイ大学間では、2019年8月にMoUを更新し、新たに戦略的パートナーシップを締結して相互の結びつきをさらに拡充した。また、九州大学で恒例としているエネルギーウィーク（毎年1-2月に開催）においても、本取組の成果の発表を今後行っていく予定であり、今回の共同研究を契機にして、さらに密な連携を図る。

(7) その他（上記(2)～(6)以外に得られた成果等があれば記述してください）

本取組は SOEC という特定の研究対象に対して行われたが、これを通じて国際協働により研究を進められるよい例となった。九州大学は国際連携の強化を図っているが、その取組に寄与できた。

また、X-Fusion で訪問した学生とは、帰国後も継続的にコンタクトがあり、研究等の相談を受けて間接的な指導を行う機会があった。国際的に関係を持つことのできる学生を持つことは、教育において、良い機会となった。

7. 今後の展望（今後の国際共同研究・協力体制の維持・発展に向けた展望について、具体性・実現可能性等を踏まえて、継続的に展開していくための計画を記述してください。）

今回の本事業を通して、参加した各大学との信頼関係を構築でき、電池や光触媒などの分野での派生的な共同研究に着手できた。これは、お互いの興味の下にできた共同研究体制であり、継続的に維持、発展できると考えている。一方で、今回、計算科学と材料科学の理論化学と実験科学の接点に関して、種々の検討を行ったが、この分野は、現在、非常に重要な分野になっており、とくにマテリアルインフォマティックスの盛り上がりから、継続的に発展できそうな分野である。カーボンニュートラルエネルギー国際研究所では、次の重要な研究課題として情報サイエンスとエネルギー科学の接点を極める課題を挙げて、国内外の研究者との連携を深める計画を立てて、活動を加速しようとしており、今回の成果のアウトプットに適合した動きをしていることから、本事業で構築した協力体制は、研究所および大学との支援の下に継続的に維持できると考えている。一方で、現在、世界はカーボンニュートラルな社会の構築に向けて、再生可能エネルギーの普及に尽力しようとしており、今回検討した固体酸化物燃料電池や高温電解への高い関心があることから、企業等の製品化に向けて、産業界との連携、支援の下で、継続的な発展を行っていく予定である。

8. 研究発表(本共同研究の一環として発表したもの、又は、発表予定のものについて記入してください。)

〔雑誌論文〕 計 (54) 件 うち査読付論文 計 (54) 件

通 番	共著の有無*1	論文名、著者名等*2
1		Aleksandar Staykov, Helena Tellez, John Druce, Ji Wu, Tatsumi Ishihara, John Kilner, Electronic properties and surface reactivity of SrO-terminated SrTiO ₃ and SrO-terminated iron-doped SrTiO ₃ . Science and Technology of Advanced Materials, 19, 221-230 (2018).
2		H. Razavi-Khosroshahi, K. Edalati, Ji Wu, Y. Nakashima, M. Arita, Y. Ikoma, M. Sada kiyu, Y. Inagaki, A. Staykov, M. Yamauchi, Z. Horita, M. Fuji, High-pressure zinc oxide phase as visible-light-active photocatalyst with narrow band gap. Journal of Materials Chemistry A, 5, 20298–20303 (2017).
3	◎	Namhoon Kim, Emily M. Turner, Yoonyoung Kim, Shintaro Ida, Hidehisa Hagiwara, <u>Tatsumi Ishihara, Elif Ertekin</u> , Two-Dimensional TiO ₂ Nanosheets for Photo and Electro-Chemical Oxidation of Water: Predictions of Optimal Dopant Species from First-Principles. J. Phys. Chem. C, 121, 19201–19208 (2017).
4	◎	Kara Kearney, Ashwathi Iyer, Angus Rockett, <u>Aleksandar Staykov, Elif Ertekin</u> , Multiscale Computational Design of Functionalized Photocathodes for H ₂ Generation. Journal of the American Chemical Society, 140, 50-53 (2018).
5	◎	Kara Kearney, Ashwathi Iyer, Angus Rockett, <u>Aleksandar Staykov, Elif Ertekin</u> , Multiscale Computational Design of Functionalized Photocathodes for H ₂ Generation. Journal of the American Chemical Society, 140, 50-53 (2018).
6		Ashwathi Iyer, Kara Kearney, Shohei Wakayama, Hiroto Odoi, Elif Ertekin, Design strategy for the Molecular Functionalization of Semiconductor Photoelectrodes: A Case Study of p-Si(111) Photocathodes for H ₂ Generation. Langmuir, 34, 2959–2966 (2018).
7		Ashwathi Iyer, Elif Ertekin, Asymmetric response of ferroelectric/metal oxide heterojunctions for catalysis arising from interfacial chemistry. Physical Chemistry Chemical Physics, 19, 5870-5879 (2017).
8		K. L. Kearney, Angus Rockett, Elif Ertekin., Computational Insights into Charge Transfer Across Functionalized Semiconductor Surfaces. Science and Technology of Advanced Materials, 18, 681-692 (2017).
9		Yang Yang, Tanner Culpitt, Sharon Hammes-Schiffer, Multicomponent Time-Dependent Density Functional Theory: Proton and Electron Excitation Energies. J. Phys. Chem. Lett (2018).
10		A. Staykov, S. Fukumori, K. Yoshizawa, K. Sato, T. Ishihara, J. Kilner, Interaction of SrO-terminated SrTiO ₃ surface with oxygen, carbon dioxide, and water. Journal of Materials Chemistry A, 45, 22662–22672 (2018).
11		J. Wu, K. Fujii, M. Yashima, A. Staykov, T. Akbay, T. Ishihara, J.A. Kilner., A systematic evaluation of the role of lanthanide elements in functional complex oxides; implications for energy conversion devices. Journal of Materials Chemistry A, 25, 6474-6482 (2018).
12		A Staykov, H Tellez, J Druce, J Wu, T Ishihara, J Kilner, Electronic properties and surface reactivity of SrO-terminated SrTiO ₃ and SrO-terminated iron-doped SrTiO ₃ . Science and Technology of Advanced Materials, 140, 6474-6482 (2018).
13		Yang, Yang. Culpitt, Tanner.Tao, Zhen. Hammes-Schiffer, Sharon, Stability conditions and local minima in multicomponent Hartree-Fock and density functional theory. Journal of Chemical Physics, 149, 84105 (2018).
14		Yang, Yang. Culpitt, Tanner. Hammes-Schiffer, Sharon, Multicomponent Time-Dependent Density Functional Theory: Proton and Electron Excitation Energies. Journal of Physical Chemistry Letters, 9, 1765-1770 (2018).
15		J. Railsback and S.A. Barnett, Multicomponent Time-Dependent Density Functional Theory: Proton and Electron Excitation Energies. Journal of Physical Chemistry Letters, 9, 1765-1770 (2018).

16	©	<u>Namhoon Kim, Nicola H. Perry, Elif Ertekin</u> ., Performance and stability of La ₂ NiO ₄ -infiltrated La _{0.9} Sr _{0.1} Ga _{0.8} Mg _{0.2} O ₃ oxygen electrodes during current switched life testing. Journal of Power Sources, 395, 1-7 (2018).
17	©	<u>Nicola H. Perry, Namhoon Kim, Elif Ertekin</u> , and Harry Tuller., Atomic Modeling and Electronic Structure of Mixed Ionic-Electronic Conductor SrTi _{1-x} FexO _{3-x/2+δ} Considered as a Mixture of SrTiO ₃ and Sr ₂ Fe ₂ O ₅ , Chem. Mater., 31, 233-243 (2018).
18		J. C. Agar, Y. Cao, B. Naul, S. Pandya, S. van der Walt, A. I. Luo, J. T. Maher, A. R. Damodaran, N., Origins and Control of Optical Absorption in a Nondilute Oxide Solid Solution: Sr(Ti,Fe)O _{3-x} Perovskite Case Study. Chem. Mater., 31, 1030-1041 (2018).
19		R. Xu, R. Gao, S. E. Reyes-Lillo, S. Saremi, Y. Dong, H. Lu, Z. Chen, X. Lu, Y. Qi, S.-L. Hsu, A. R., Machine detection of enhanced electromechanical energy conversion in PbZr _{0.2} Ti _{0.8} O ₃ thin films. Adv. Mater., 30, 1800701 (2018).
20		L. R. Dedon, Z. Chen, R. Gao, Y. Qi, E. Arenholz, L. W. Martin, Reducing coercive-field scaling in ferroelectric thin. ACS Appl. Mater. Inter., 12, 4736-4743 (2018).
21		S. Pandya, J. Wilbur, J. Kim, R. Gao, A. Dasgupta, C. Dames, L. W. Martin, Strain-driven phase competition near. ACS Appl. Mater. Inter., 10, 14914-14921 (2018).
22		S. Pandya, J. Wilbur, J. Kim, R. Gao, A. Dasgupta, C. Dames, L. W. Martin, Pyroelectric energy conversion with large energy and power density in relaxor ferroelectric thin films. Nature Materials, 17, 432-438 (2018).
23		S. Saremi, A. Dasgupta, R. Gao, L. W. Martin, New facets for the role of defects in ceramics. Am. Ceram. Soc. Bull., 97, 16-23 (2018).
24		S. Saremi, R. Xu, L. R. Dedon, L. W. Martin, Electronic transport and ferroelectric switching in ionbombarded, defected-engineered BiFeO ₃ thin films. Adv. Mater. Inter., 5, 1700991 (2018).
25		Y. Yang, T. Culpitt, and S. Hammes-Schiffer, Multicomponent time-dependent density functional theory: Proton and electron excitation energies. J. Phys. Chem. Lett., 9, 1765-1770 (2018).
26	©	Y. Jing, H. Matsumoto and N. R. Aluru, Mechanistic Insights into Hydration of Solid Oxides. Chemistry of Materials, 30, 138-144 (2018).
27	©	Kara Kearney*, Ashwathi I. Iyer*, Angus Rockett, <u>Aleksandar Staykov, and Elif Ertekin</u> , Multiscale Computational Design of Functionalized Photocathodes for H ₂ Generation. J. Am. Chem. Soc., 140, 50-53 (2018).
28		Ashwathi I. Iyer, Kara Kearney, Shohei Wakayama, Hirotoshi Odoi, and Elif Ertekin, Design strategy for the Molecular Functionalization of Semiconductor Photoelectrodes: A Case Study of p-Si(111) Photocathodes for H ₂ Generation. Langmuir, 34, 2959-2966 (2018).
29	©	Shintaro Ida, Kenta Sato, Tetsuya Nagata, Hidehisa Hagiwara, Motonori Watanabe, Namhoon Kim, Yoshihito Shiota, Michio Koinuma, Sakae Takenaka, Takaki Sakai, <u>Elif Ertekin, and Tatsumi Ishihara</u> , A Cocatalyst that Stabilizes a Hydride Intermediate during Photocatalytic Hydrogen Evolution over a Rhodium-Doped TiO ₂ Nanosheet. Angewandte Chemie, 57, 9073-9077 (2018).
30		Ryan T. Pekarek, Kara Kearney, Benjamin M. Simon, Elif Ertekin, Angus A. Rockett, and Michael J. Rose., Identifying Charge Transfer Mechanisms across Semiconductor Heterostructures via Surface Dipole Modulation and Multiscale Modeling. J. Am. Chem. Soc., 140(41), 13223-13232 (2018).
31		Kara Kearney, Gabseok Sao, Toshinori Matsushima, Chihaya Adachi, Elif Ertekin, and Angus Rockett., Computational Analysis of the Interplay between Deep Level Traps and Perovskite Solar Cell Efficiency. Am. Chem. Soc., 140(46), 15655-15660 (2018).

32		Ghuman K., Tozaki K., Sadakiyo M., Kitano S., Oyabeb T., Yamauchi M. (2019). Tailoring widely used ammonia synthesis catalysts for H and N poisoning resistance. <i>Physical Chemistry Chemical Physics</i> . 21: 5117-5122.
33		R. Gao et al., Designing Optimal Perovskite Structure for High Ionic Conduction. <i>Adv Mater</i> 32, e1905178 (2020).
34		E. Lupi et al., Large Polarization and Susceptibilities in Artificial Morphotropic Phase Boundary $\text{PbZr}_{1-x}\text{Ti}_x\text{O}_3$ Superlattices. <i>Advanced Electronic Materials</i> 6, (2020).
35	©	B. Ouyang, T.Chakraborty, <u>N. Kim</u> , <u>N. Perry</u> , T. Mueller, <u>N. Alure</u> and E. Ertekin, Cluster Expansion Framework for the $\text{Sr}(\text{Ti}_{1-x}\text{Fe}_x)\text{O}_{3-x/2}$ ($0 < x < 1$) Mixed Ionic Electronic Conductor: Properties Based on Realistic Configurations. <i>Chemistry of Materials</i> 31, 3144-3153 (2019).
36		J. Kim et al., Epitaxial Strain Control of Relaxor Ferroelectric Phase Evolution. <i>Adv Mater</i> 31, e1901060 (2019).
37		M. Y. Lu et al., Mechanisms of PrOx performance enhancement of oxygen electrodes for low and intermediate temperature solid oxide fuel cells. <i>Materials Today Energy</i> 14, (2019).
38		M. Y. Lu et al., Stable high current density operation of $\text{La}_{0.6}\text{Sr}_{0.4}\text{Co}_{0.2}\text{Fe}_{0.8}\text{O}_{3-\delta}$ oxygen electrodes. <i>Journal of Materials Chemistry A</i> 7, 13531-13539 (2019).
39	©	<u>N. H. Perry</u> , <u>N. Kim</u> , <u>E. Ertekin</u> , H. L. Tuller, Origins and Control of Optical Absorption in a Nondilute Oxide Solid Solution: $\text{Sr}(\text{Ti},\text{Fe})\text{O}_{3-x}$ Perovskite Case Study. <i>Chemistry of Materials</i> 31, 1030-1041 (2019).
40		R. Xu et al., Kinetic control of tunable multi-state switching in ferroelectric thin films. <i>Nat Commun</i> 10, 1282 (2019).
41		S. Pandya et al., Understanding the Role of Ferroelastic Domains on the Pyroelectric and Electrocaloric Effects in Ferroelectric Thin Films. <i>Adv Mater</i> 31, e1803312 (2019).
42		S. Pandya et al., New approach to waste-heat energy harvesting: pyroelectric energy conversion. <i>NPG Asia Materials</i> 11, (2019).
43		S.-L. Zhang et al., Electrochemical performance and stability of $\text{SrTi}_{0.3}\text{Fe}_{0.6}\text{Co}_{0.1}\text{O}_{3-\delta}$ infiltrated $\text{La}_{0.8}\text{Sr}_{0.2}\text{MnO}_3\text{Zr}_{0.92}\text{Y}_{0.16}\text{O}_{2-\delta}$ oxygen electrodes for intermediate-temperature solid oxide electrochemical cells. <i>Journal of Power Sources</i> 426, 233-241 (2019).
44		T. Chen et al., Modifying Grain Boundary Ionic/Electronic Transport in Nano-Sr- and Mg- Doped $\text{LaGaO}_{3-\delta}$ by Sintering Variations. <i>Journal of The Electrochemical Society</i> 166, F569-F580 (2019).
45	©	Y. Takamura, <u>K. Leonard</u> , A. Luo, <u>L. W. Martin</u> , H. Matsumoto, Platinum nanoparticle induced nanoionic effects on electrical conduction in strontium cerate and zirconate. <i>Journal of Solid State Electrochemistry</i> 23, 953-963 (2019).
46		T. A. Schmauss, J. G. Railsback, M. Y. Lu, K. Y. Zhao, S. A. Barnett, ZrO_2 atomic layer deposition into $\text{Sr}_{0.5}\text{Sm}_{0.5}\text{CoO}_{3-\delta}$ - $\text{Ce}_{0.9}\text{Gd}_{0.1}\text{O}_{2-\delta}$ solid oxide fuel cell cathodes: mechanisms of stability enhancement. <i>Journal of Materials Chemistry A</i> 7, 27585-27593 (2019).
47		Y. Kim, M. Watanabe, A. Takagaki, J. Matsuda, T. Ishihara, Spark Plasma Sintering Treatment for Introduction of Oxygen Vacancy in Pt Dispersed SrTiO_3 for Increasing Photocatalytic Water Splitting Activity. <i>ChemCatChem</i> 11, 6270-6274 (2019)
48		B. Kang, J. Matsuda, T. Ishihara, Cu-Fe-Ni nano alloy particles obtained by exsolution from $\text{Cu}(\text{Ni})\text{Fe}_2\text{O}_4$ as active anode for SOFCs. <i>Journal of Materials Chemistry A</i> 7, 26105-26115 (2019).

49		Y. Kim et al., Chemo-mechanical strain effects on band engineering of the TiO ₂ photocatalyst for increasing the water splitting activity. Journal of Materials Chemistry A 8, 1335-1346 (2020).
50	◎	Ran Gao, Abhinav C. P. Jain, Shishir Pandya, Yongqi Dong, Yakun Yuan, Hua Zhou, Liv R. Dedon, Vincent Thoréton, Sahar Saremi, Ruijuan Xu, Aileen Luo, Ting Chen, Venkatraman Gopalan, <u>Elif Ertekin</u> , <u>John Kilner</u> , <u>Tatsumi Ishihara</u> , <u>Nicola H. Perry</u> , Dallas R. Trinkle, and <u>Lane W. Martin</u> *, Designing Optimal Perovskite Structure for High Ionic Conduction, Adv. Mater. 32, 1905178(1-9) (2020)
51	◎	Ran Gao, Abel Fernandez, Tanmoy Chakraborty, Aileen Luo, David Pesquera, Sujit Das, Gabriel Velarde, Vincent Thoréton, <u>John Kilner</u> , <u>Tatsumi Ishihara</u> , Slavomír Nemšák, Ethan J. Crumlin, <u>Elif Ertekin</u> , and <u>Lane W. Martin</u> , Correlating Surface Crystal Orientation and Gas Kinetics in Perovskite Oxide Electrodes, Adv. Mater. 2100977(1-11)(2021)
52		P. Priya and N. R. Aluru, "A multiscale framework to predict electrochemical characteristics of yttrium doped Barium Zirconate based solid oxide cells", Journal of Power Sources, Vol. 481, Art. No. 228969, 2021.
53		J. Kim, M. Acharya, S. Saremi, G. Velarde, E. Parsonnet, P. Donahue, A. Qualls, D. Garcia, L. W. Martin, Ultrahigh capacitive energy density in ion-bombard relaxor ferroelectric films. Science 369, 81-84 (2020)
54	◎	<u>Takaya Fujisaki</u> , <u>Aleksandar Tsekov Staykov</u> , Yuhang Jing, <u>Kwati Leonard</u> , <u>Narayana R. Aluru</u> , <u>Hiroshige Matsumoto</u> , Understanding the effect of Ce and Zr on chemical expansion in yttrium doped strontium cerate and zirconate by high temperature X-ray analysis and density functional theory, Solid State Ionics 333 (2019) 1–8.

【学会発表】計 (41) 件 うち招待講演 計 (9) 件

通番	共著の有無*1	標題、発表者名等*2
1		Nicola Perry, Contact-free, continuous, in situ optical studies of thin film perovskite electrode performance, I ² CNER International Workshop (Molecular Photoconversion Device Division and Electrochemical Energy Conversion Division), Kyushu University, Japan, 2017/2/3
2		John Druce, Surface segregation of cathode, I ² CNER International Workshop (Molecular Photoconversion Device Division and Electrochemical Energy Conversion Division), Kyushu University, Japan, 2017/2/3
3		Ji Wu, Aleksandar Staykov, Taner Akbay, Tatsumi Ishihara, John A. Kilner, Understanding the role of A-site atoms in the catalytic activity of ABO ₃ perovskites, 21st International Conference on Solid State Ionics, Italy, June 2017
4		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 ABO ₃ perovskites, Nature Conference on Materials Electrochemistry: Fundamentals and Applications, China, Jan. 2018
5	◎	<u>N.H.Perry</u> , T.Chen, <u>N.Kim</u> , <u>E.Ertekin</u> , 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, The Materials Research Society, Boston, MA, USA, Nov. 26 - Dec. 1, 2017
6	◎	<u>N.H.Perry</u> , T.Chen, <u>N.Kim</u> , <u>E.Ertekin</u> , G.F.Harrington, K.Sasaki, H.L.Tuller, In situ optical studies of point defect chemistry and kinetics in thin film mixed conducting oxides, International Conference on Solid State Ionics, Padua, Italy, June 18-23, 2017
7	◎	<u>N.H.Perry</u> , <u>N.Kim</u> , <u>E.Ertekin</u> , H.L.Tuller, Understanding, controlling, and applying optical absorption of Sr(Ti,Fe)O _{3-x} : relationship to defect chemistry and kinetics, International Conference on Electroceramics, Nagoya Japan, May 28-31, 2017.

8	◎	<u>N.Kim ,N.H.Perry, E.Ertekin</u> , Composition, structure, and ionic-electronic conducting properties of $\text{SrTi}_{1-x}\text{Fe}_x\text{O}_{3-\delta}$ solid solutions: first-principles study, International Conference on Defects in Semiconductors, Matsue, Japan, July.31-Aug.4, 2017
9		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, 第13回固体イオニクスセミナー, 宮崎シーガイア, 2017/9/13
10		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, トークシャワー・イン・九州2017, 大分, 2017/9/14
11	◎	<u>藤崎 貴也</u> , <u>ステイコフ アレクサンダー</u> , <u>ジン ユーハン</u> , <u>アルール ナラヤン</u> , <u>松本 広重</u> , 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, 公益社団法人電気化学会第85回大会, 東京理科大学, 2018/3/11
12		Matthew Y. Lu, Justin G., Railsback, Scott A. Barnett, The Role of Temperature During Reversing Current-Switched Life-Tests of LSM-YSZ and LSC, the 42nd International Conference and Exposition on Advanced Ceramics and Composites, 15th International Symposium on Solid Oxide Fuel Cells (SOFC), Daytona Beach, Florida, January 24, 2018
13		N.Kim , B.Ouyang, N.Perry, E.Ertekin, Numerical evaluation of ionic conducting properties of $\text{SrTi}_{1-x}\text{Fe}_x\text{O}_{3-\delta}$ solid solutions, The Minerals, Metals and Materials Society, Phoenix, Arizona, USA, Mar. 11-15, 2018
14		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, International Conference on Defects in Semiconductors, Matsue, Japan, July31 - Aug.4, 2017
15		Vincent Thoréton, Matthew Niania, John Druce, Tatsumi Ishihara, John Kilner, Influence of steam and CO_2 on oxygen transport kinetics and surface chemistry of $\text{La}_{0.6}\text{Sr}_{0.4}\text{Co}_{0.2}\text{Fe}_{0.8}\text{O}_{3-\delta}$, EMRS Spring meeting, Strasbourg, France, 2018/6/18
16		Vincent Thoretton, John Druce, Tatsumi Ishihara, John Kilner, Influence of H_2O and CO_2 on the surface composition and oxygen exchange kinetics of IT-SOC air electrodes, 13th EUROPEAN SOFC & SOE FORUM 2018, Luzern, Switzerland, 2018/7/3
17		(invited) Scott A Barnett, High-Efficiency Electrical Energy Storage Using Reversible Solid Oxide Cells, Materials Day 2018, Boston University, USA, 2018年8月26日
18		(invited) Scott A Barnett, High-Efficiency Electrical Energy Storage Using Reversible Solid Oxide Cells, Chinese Academy of Engineering symposium, Shanghai, China, 2018年9月20日
19		(invited) Nicola H. Perry, Crystallinity and Microstructure Effects on Oxygen Surface Exchange Kinetics of Mixed Conducting Oxides, MS&T Conference, Columbus, OH, U.S.A, 2018年10月
20		(invited) Nicola H. Perry, Tailoring of surface exchange kinetics and associated expansion in mixed conducting perovskite oxides, Solid State Electrochemistry Workshop for Energy Storage and Conversion, Hamburg, Germany, 2018年11月
21	◎	Yを添加した SrCeO_3 と SrZrO_3 の化学膨張を理解するための酸素空孔の大きさについて <u>藤崎 貴也</u> ・ <u>アレクサンダー ステイコフ</u> ・ <u>クワティ レオナルド</u> ・ <u>松本 広重</u> , <u>ジン ユーハン</u> ・ <u>ナラヤン アルール</u> 『第15回固体イオニクスセミナー』2019年9月1日

22	◎	<u>Takaya Fujisaki , Aleksandar Tsekov Stavkov , Yuhang Jing , Kwati Leonard , Narayana R Aluru, Hiroshige Matsumoto</u> 「Roles of Oxide Ion Vacancies and Covalency to Explain Chemical Expansion Difference between Yttrium-Doped Strontium Cerate and Zirconate」 『5th International Workshop: Prospects on Protonic Ceramic Cells (PPCC 2019)』, Montpellier France, Japan, October 16-18 2019
23	◎	<u>Takaya Fujisaki , Aleksandar Tsekov Stavkov , Yuhang Jing , Kwati Leonard , Narayana R Aluru, Hiroshige Matsumoto</u> 「Chemical Expansion Difference between Y-doped SrCeO₃ and Y-doped SrZrO₃」 『11th Petite Workshop』, Tromsø Norway, October 19-22
24	◎	<u>Takaya Fujisaki , Aleksandar Tsekov Stavkov , Yuhang Jing , Kwati Leonard , Narayana R Aluru, Hiroshige Matsumoto</u> 「Oxide Ion Vacancies and Covalency Difference to Understand Volume Expansion by Hydration Reaction between Yttrium-Doped SrCeO₃ and SrZrO₃」 December 19-22, 2019
25	◎	<u>藤崎 貴也, アレクサンダー ステイコフ, ユーハン ジン, クワティ レオナルド, ナラヤン アルール, 松本 広重,</u> 「Yを添加したSrCeO₃とSrZrO₃の化学膨張を理解するための酸素空孔の大きさと共有結合性」 『第45回 固体イオニクス討論会』、福岡、2019年11月
26		Tatsumi Ishihara, SunJae Kim, Taner Akbay Metal Dispersed Pr₂NiO₄ as Active Cathode for Intermediate Temperature Solid Oxide Fuel Cells 22nd International Conference on Solid State Ionics Korea Oral 2019/6/21
27		Yoonyoung Kim, Motonori Watanabe, Atsushi Takagaki, Tatsumi, Ishihara Strain Effects Induced By Au Dispersion Into SrTiO₃ for Increasing Activity of Water Splitting 8th Asia Pacific Congress on Catalysis (APCAT-8) Thailand Poster 2019/8/5 Conference
28		Tatsumi Ishihara, Byeong Su Kang, Atsushi Takagaki Improved oxide ion diffusivity in Sm(Sr)CoO₃ by double columnar layer for active cathode of Solid Oxide Fuel Cells EU ROMAT2019 Sweden Oral 2019/9/3 Conference
29		Tatsumi Ishihara, Byeong, Su Kang, Atsushi Takagaki Double Columnar Interlayer for Increased Cathodic Activity of Intermediate Temperature Solid Oxide Fuel Cells 16th International Symposium on Solid Oxide Fuel Cells (SOFC-XVI) Japan Oral 2019/9/10 Conference
30		ByeongSu Kang, Atsushi Takagaki, Tatsumi Ishihara Exsolution of Nano Metal Particle on Anode for Increased Performance at Low Temperature Operation 16th International Symposium on Solid Oxide Fuel Cells (SOFC-XVI) Japan Oral 2019/9/13 Conference
31		Yoonyoung Kim, Motonori Watanabe, Atsushi Takagaki, Tatsumi Ishihara Improvement of photocatalytic activity of SrTiO₃ to water splitting by strain effect induced by Au dispersion 第124回触媒討論会 Japan Oral 2019/9/20 Conference
32		Tatsumi Ishihara, Sunjae Kim, Atsushi Takagaki Strain Effects on Oxygen Dissociation Activity of Pr₂NiO₄ for Low Temperature Solid Oxide Fuel Cells The 13th Pacific Rim Conference of Ceramic Societies (PACRIM13) Japan Oral 2019/10/28 Conference
33		Kang ByeongSu, Atsushi Takagaki, Tatsumi Ishihara Deposition of Y₂O₃ stabilized ZrO₂ film on Ni-Fe metal substrate by PLD for toughness solid oxide fuel cell 第45回固体イオニクス討論会 Japan Oral 2019/11/26 Conference
34		ByeongSu Kang, Atsushi Takagaki, Tatsumi Ishihara 低温作動型SOFCのためのダブルカラムナ界面相の作成とカソード活性の向上, 第28回SOFC研究発表会, Japan, 2019/12/13 Conference

35		(Invited) S. A. Barnett, S. L. Zhang, T. Zhu, M. Y. Lu, and L. V. Mogni, "Titanate-Based Electrodes for Solid Oxide Cells," 236th Electrochemical Society meeting, Atlanta GA, October 12-17, 2019.
36		(Invited) Scott A Barnett, High-Efficiency Electrical Energy Storage Using Reversible Solid Oxide Cells, West Virginia University, Department of Mechanical Engineering, August 30, 2019, Morgantown, WV
37		Yvonne A. Chart, Matthew Y. Lu, Scott A. Barnett, "High-Performance Oxygen Electrodes for Low Temperature Solid Oxide Cells," 235th Electrochemical Society meeting, Dallas, TX, May 26-30, 2019.
38		Matthew Y. Lu, Shan-Lin Zhang, Beom-Kyeong Park, Yvonne A. Chart, Scott A. Barnett, "Degradation of High-Performance Oxygen Electrodes for Solid Oxide Cells," 235th Electrochemical Society meeting, Dallas, TX, May 26-30, 2019.
39		(Invited) Scott A Barnett, "Electrochemical and Microstructural Studies of Degradation Mechanisms in Solid Oxide Cells," 235th Electrochemical Society meeting, Dallas, TX, May 26-30, 2019.
40		(Invited) Tatsumi Ishihara, Masahiro Kobayashi, Jun Tae Song, Atsushi Takagaki Effects of Cobalt Co-Doping on Mixed Ion Conductivity in La(Sr)Ga(Fe)O ₃ for Oxygen Separation, PRiME 2020 (ECS, ECSJ, & KECS Joint Meeting), Online, October 4-9, October 4 (2020).
41		(Invited) Hiroshige Matsumoto, Kwati Leonard, Young-Sung Lee, Takaya Fujisaki, Intermediate Temperature Steam Electrolysis Using Proton-Conducting Perovskites for Hydrogen Production, PRiME 2020 (ECS, ECSJ, & KECS Joint Meeting), Online, October 4-9, October 4 (2020).

【図 書】 計 (0) 件

通 番	共著の有無*1	題名、著者名等*2
1		

*1 相手国側参加者との共著（共同発表）がある場合は○、相手国側参加者との共著であり謝辞等に事業名を明記している場合は◎と記入。

*2 当該発表等を同定するに十分な情報を記載すること。例えば学術論文の場合は、論文名、著者名、掲載誌名、巻号や頁等、発表年（西暦）、学会発表の場合は標題、発表者名、学会等名、発表年（西暦）、著書の場合はその書誌情報、など（順番は入れ替わってもよい）。相手国側参加者との共著となる場合は、著者名が複数であっても省略せず、その氏名を記入し下線を付すこと。

*3 足りない場合は適宜行を追加すること。

10. 最終年度の研究実施状況

※当該年度実施計画書の「5. 本年度実施計画の概要」の内容と対応させつつ、当該年度の研究の実施状況を簡潔に記載してください。再委託又は共同実施を行った場合は、それぞれの研究の実施状況がわかるように記載してください。

※年度途中で当初計画を変更した場合にはその内容及び理由も記載してください。特に、各費目の増減が研究経費の 50%（この額が 300 万円を超えない場合は 300 万円）に相当する額を超えた場合は、変更理由と費目の内訳を変更しても研究の遂行に支障がなかった理由を記載してください。

研究項目 A（電解質の検討）については、高プロトン伝導性のための材料設計に向けたプロトン溶解の本質的原理の解明に関する検討を進めた。これまでに、プロトン伝導性の起源となる水和現象および水和による化学膨張のメカニズムに関するシミュレーションを実施し、酸素空孔の大きさが水和現象や化学膨張に大きな影響を与えることを明らかにした。本年度は、種々のプロトン伝導性材料の体積圧縮率を計算および実験の両方から算出し、これらがよく一致することを確認するとともに、体積圧縮率を加味して化学膨張を算出し、材料への依存の傾向を再現することに成功した。本成果は、国際会議 (PRiME 2020, 2020 年 10 月 4-9 日, オンライン) において公表した。なお、本検討の一部は九州大学よりポスドクを 1 ヶ月派遣し、イリノイ大学において実施する予定であったが、コロナウィルス感染症の影響で渡航は中止した。予定していた検討内容は九州大学における検討によって補完した。

研究項目 B（電極の検討）については、これまで、種々の空気・水蒸気電極材料としてペロブスカイト電極材料の表面におけるカチオンおよび不純物の移動と偏析とその軽減、および、表面反応や電極反応速度への影響の評価を行い、電極に含まれるストロンチウムの表面偏析およびその電極反応への寄与を明らかにしてきた。本年度はこの成果をプロトン伝導性電極に応用し、PrBaCoO 系、BaGdLaCoO 系などの材料に関して、その電極性能の実験的評価を行った。これらの電極は、従来の BaLaCoO 系の材料に比べて高い電極性能を示し、プロトン溶解性および表面に偏析する元素の電極反応への寄与から説明できる可能性が示唆された。

九州大学においては学術研究員 1 名を雇用し、計算および実験の両面にあたるとともに、各研究項目に関する個々のコミュニケーションをインターネットを通じてビデオ会議等により行い、共同研究を円滑に進めた。

九州大学において、令和 2 年 6 月より 2 ヶ月間、米国からの交換留学生の 6 名の受け入れを予定し、イリノイ大学にて留学生の選定までを行ったが、コロナ感染症の影響で残念ながら中止した。

11. 最終年度の主要な物品明細書（一品又は一組若しくは一式の価格が 50 万円以上のものを購入した場合は記載）

物品名	仕様 型・性能等	数量	単価(円)	金額(円)	設置研究機関名	備考
BaZr0.44Ce 0.36Yb0.20 3- δ (BZCYb54 2)		1 kg	532,400	532,400		消耗品

※本事業の委託費と他の経費とを合算使用する際は、合算使用した旨を備考欄に記載した上で、金額は本事業の委託費で負担した額のみ記載してください。

※再委託先/共同実施先における支出である場合は、備考欄にその旨を記載してください。