

〔国際会議発表〕

発表研究者	島根大学 材料エネルギー学部 助教 藤崎 貴也	2242009
国際会議名	The 2nd Annual CEMDI Symposium 2024	
国際会議主催者	Kulbir Kaur Ghuman	
開催地	モントリオール/カナダ	
渡航期間	2024年5月25日～2024年6月3日（10日間）	
発表論文名	Investigating Ni nanoparticles on CeO ₂ for methane dissociation: a comparative study of theoretical calculations and experimental insights	

〔国際会議の概要〕

本会議は、材料科学と人工知能（AI）の融合を主題とした国際的な学術会議であり、持続可能なエネルギー社会を目指した新しい研究手法を探索する場として開催された。会議では、AIを用いた材料設計や性能予測、触媒開発に関する最先端の研究成果が発表され、参加者同士の活発な議論が行われた。特に燃料電池や触媒の効率向上を目指した AI 活用の取り組みが重点的に議論された。

〔参加の目的・意義〕

目的：

1. 最新技術の把握：

AI を活用した材料探索分野の最新動向を把握し、自身の研究における理論計算手法の改良につなげる。研究者との交流：国内外の研究者と意見交換を行い、研究課題の共有と共同研究の可能性を模索する。

2. 日本への還元：

本会議で得た知見を日本国内の材料科学研究に還元し、分野の発展に寄与する。

3. 意義：

本会議は、燃料電池の性能向上を目的とする私の研究テーマと完全に一致している。特に、持続可能な社会構築を目指したエネルギー分野での AI 活用は、地球温暖化対策やエネルギー効率の向上という観点から極めて重要である。また、日本が欧米諸国に比べてこの分野で遅れを取っている現状を考慮すると、本会議で得られる最新知見は国内研究の推進において欠かせないものといえる。

〔自分の発表の状況・反応と得られた成果・効果〕

発表テーマ：

「バイオマス由来メタンの触媒的乾式改質における Ni ナノ粒子の特性解明」

本研究では、乾式メタン改質（DRM）反応における Ni ナノ粒子担持 CeO₂触媒の触媒特性を理論計算と実験の両面から検証した。第一原理計算（DFT）を用い、C-H 結合および CO₂の解離エネルギーを評価し、実験結果と一致するデータを得た。

参加者の反応：

1. 高い評価：

理論計算と実験結果の一致が高く評価され、複数の参加者から詳細な質問を受けた。特に、酸素空孔の役割や触媒表面の分子動力学的挙動に関する議論が深まった。

2. 共同研究の提案：

南アフリカおよびドイツの研究グループから共同研究の提案を受けた。これにより、異なる触媒構造や反応条件における特性解析の幅が広がる可能性がある。

3. 技術的議論：

酸素空孔の生成条件やナノ粒子サイズの制御方法について具体的な質問が寄せられ、新たな実験手法や計算モデルの適用可能性が示された。

得られた成果：

1. 研究の方向性明確化：

DRM 反応における律速段階が CO₂の解離であることを特定し、触媒性能向上のための具体的な設計指針を得た。特に、Ni ナノ粒子の正電荷を増加させる戦略が有効であることが示唆された。

2. 研究ネットワークの構築：

国際的な研究者との交流を通じて、将来的な共同研究の可能性を広げた。これにより、理論計算と実験を融合した新たな研究の展開が期待される。

3. 日本への貢献：

会議で得られた知見を日本国内の若手研究者に共有し、AI を活用した材料設計の普及に貢献する。

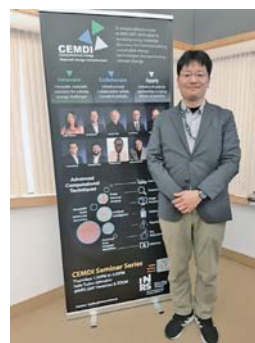


図1 会議案内板と申請者