

## 研究課題別中間評価結果

1. 研究課題名： 実験と計算科学の融合による革新的プロトン伝導性無機化合物の創製
2. 研究代表者： 山崎 仁丈（九州大学稲盛フロンティア研究センター 教授）
3. 中間評価結果

山崎チームは、計算・データ科学手法に実験科学者の知識を組み込み、効率的に材料探索を推進、300℃付近の温度域において高性能/化学的安定性に優れたプロトン伝導物質を見出すに至っている。データ科学の活用により高プロトン伝導性の新物質を次々に見いだしていること、当初のターゲットである電解質の他に電極をも研究テーマに加え電池全体の高性能化に研究目標を上方修正していること、現時点で発表論文は少ないが高インパクトの雑誌へ投稿しつつあることから、プロジェクト前半の進捗は良好であると評価できる。

プロジェクト後半の焦点は、300～450℃の中温度域でより高いプロトン伝導性・安定性を達成し、デバイス性能を実証することである。プロトン伝導機構の詳細解明、合成可能性を含めたプロトン伝導物質のスクリーニング手法の開発、これらに基づく新材料の探索推進と併せ、電極界面の物性をも考慮した科学的な材料開発指針の確立をお願いする。また、他チームと連携し、プロトン伝導物質の新規の応用分野を開拓することも期待する。