

実験と理論・計算・データ科学を融合した材料開発の革新  
2018 年度採択研究代表者

2018 年度 実績報告書
------------------

山崎 仁丈

九州大学 稲盛フロンティア研究センター  
教授

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

## § 1. 研究成果の概要

本研究の目標は、実験と理論・計算・データ科学を融合したプロトン伝導性無機化合物とそれに適した電極材料の創製手法を開発し、中温度域(300~450°C)において $0.01\text{Scm}^{-1}$ 以上の高いプロトン伝導度と高い安定性を兼ね備えた革新的プロトン伝導性無機化合物及びそれを用いた革新的プロトン伝導性デバイスを創製することである(図1)。実験データと理論計算を活用したバーチャルまたは理論的材料スクリーニングにより、革新的無機材料やデバイスの開発スピードを劇的に加速させることを狙う。

本年度は材料やデバイスの開発スピードを劇的に加速させる方法論の開発および理論構築を山崎グループ、桑原グループ、奥山グループの連携により行った。代表的な成果の一つとして、実験結果とデータ科学を駆使して仮想ペロブスカイト材料におけるプロトン濃度を簡便かつ効率的に予測できる手法の開発に成功した。実験データで構築される66化合物のプロトン濃度データベースから、約100万組成のデータベースには含まれていない元素を有する仮想材料におけるプロトン濃度を予

測し、さらに予測値を実証した。開発した手法の特徴は、限られた実験結果から人間には把握できない広大な化学組成空間へ外挿し、さらにその仮想材料における物性を予測できる点であり、実験を主体とした機能性材料開発に革新を与える方法論となり得ると期待している。

もう一つの代表的な成果として、実験と理論・計算の融合により、プロトン伝導性を高めるドーパント選択指針を見出した。プロトン濃度を決定する水和エネルギーとプロトン移動度を決定する会合エネルギーの関係を定式化した。導出された関係に基づき、第一原理計算によるドーパントのスクリーニングを行い、ジルコン酸バリウムにおける最適ドーパントとされていたイットリウムより、高いプロトン伝導度を有するドーパントを見出した。実験によりその化合物を合成、伝導度実験を行い、イットリウム置換ジルコン酸バリウムより3倍高いプロトン伝導度を得ることに成功した。

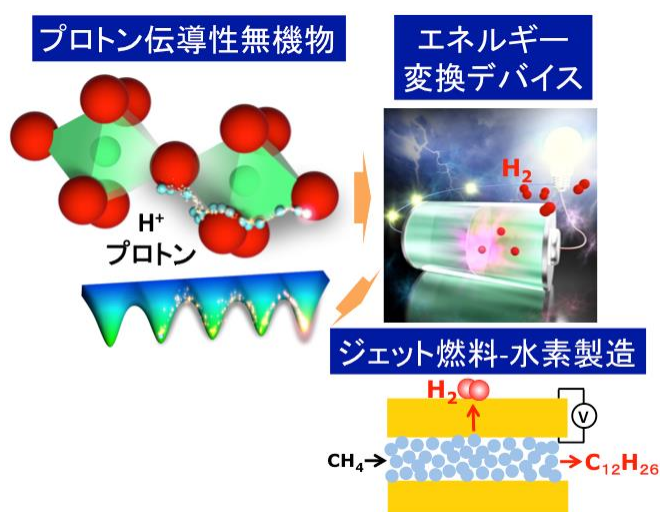


図1 革新的プロトン伝導性無機物およびデバイスの創製

## § 2. 研究実施体制

### (1)「革新材料創製」グループ

① 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・エネルギー研究教育機構・大学院工学府 教授)

② 研究項目

- ・実験データを活用したバーチャルスクリーニングと材料開発
- ・理論的材料スクリーニングと材料開発
- ・実験データを活用した理論的材料スクリーニングと材料開発
- ・高性能プロトン伝導性無機化合物の根源的理解に基づく材料開発

### (2)「計算材料開発」グループ

① 主たる共同研究者:桑原 彰秀(ファインセラミックスセンターナノ構造研究所 主任研究員)

② 研究項目

- ・実験データを活用したバーチャルスクリーニングと材料開発
- ・理論的材料スクリーニングと材料開発
- ・実験データを活用した理論的材料スクリーニングと材料開発
- ・高性能プロトン伝導性無機化合物の根源的理解に基づく材料開発

### (3)「デバイス実証」グループ

① 主たる共同研究者:奥山 勇治 (宮崎大学工学教育研究部 准教授)

② 研究項目

- ・実験データを活用したバーチャルスクリーニングと材料開発
- ・高性能プロトン伝導性無機化合物の根源的理解に基づく材料開発