

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

2019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や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 0.01Scm^{-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。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。

本年度の代表的な成果として、396°C以上の温度域において、 0.01Scm^{-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プロトン伝導性酸化物を見出し、そのプロトン伝導度は 400°Cにおいて 200 時間以上安定であることを実証した(図)。本材料を電解質として用いたプロトン伝導性デバイスを創製することが期待される。

一方、第一原理計算を用いた研究では、高濃度のドーパント、プロトン、酸素空孔などの格子欠陥が材料中に存在する環境をモデル化し、プロトンとドーパントの配位環境や、プロトン移動による局所構造情報を収集した。また、スーパーコンピュータを活用した大規模熱力学サンプリングにより、有限の温度における酸素欠陥とドーパント配置を計算した。これらの手法を用いた計算結果は、実験結果と整合した。開発した計算手法を活用し、新しく見出した高濃度プロトン導入酸化物における拡散機構を解明することで、理論計算に基づいた新材料開発指針を提唱できるものと期待している。

機械学習を用いたプロトン伝導性セラミック燃料電池の発電特性予測では、燃料電池の発電特性のデータベースを構築し、元素情報を基にした記述子を用いて予測を行った。その予測精度は、プロトン濃度やプロトン伝導度などの材料物性予測に比べて大幅に低く、発電特性がデバイス作製プロセスに大きく影響されたことを示唆している。今後、プロセスを反映した記述子を導入することで、燃料電池作製条件推薦システムの予測精度を向上させる。

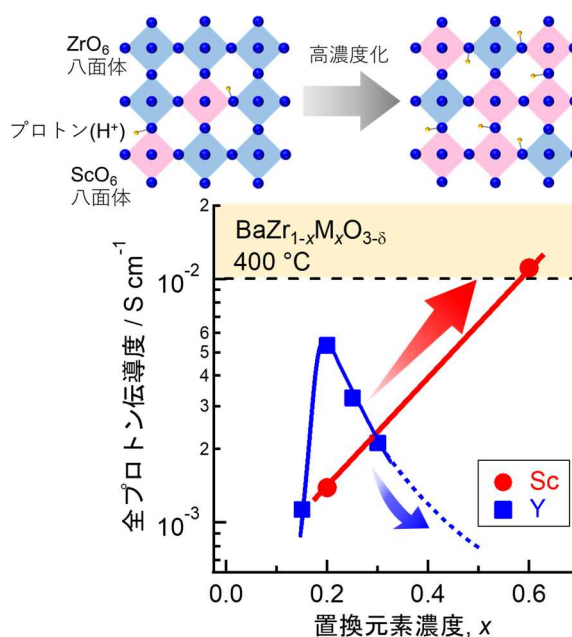


図 ジルコン酸バリウムにおける置換元素量依存性

【代表的な原著論文】

なし

§ 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