研究課題別事後評価結果

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．研究代表者名及び主たる共同研究者名（研究機関名・職名は研究参加期間終了時点）

研究代表者

山崎　仁丈　（九州大学エネルギー研究教育機構　教授）

主たる共同研究者

奥山　勇治　（宮崎大学工学教育研究部　教授）

桑原　彰秀　（(一財）ファインセラミックスセンターナノ構造研究所　主席研究員）

３．事後評価結果

〇評点：

A+　非常に優れている

〇総合評価コメント：

本プロジェクトは、実験と理論・計算・データ科学の融合によるプロトン伝導性無機化合物と電極材料の創製手法を開発し、中温度域（300～ 450℃）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を開発、それを用いた革新的プロトン伝導性デバイスの動作を実証することを目的とするものである。

本チームは水和実験と機械学習の融合によるデータ駆動型材料探索手法、解釈可能な非ペロブスカイト系プロトン伝導性無機化合物の探索機械学習モデル、有限温度・高濃度欠陥導入試料における欠陥分布計算手法等を開発した。これらを活用し 300℃にて高いプロトン伝導性と化学的安定性を兼ね備えた新電解質材料を発見、300℃で動作する燃料電池デバイスを実現したことは、技術分野においても重要な成果である。PCT 出願２件を含め６件の特許を出願、開発した高プロトン伝導体の燃料電池応用が企業と連携した NEDO のプロジェクトに採択され、実用化に向けた取り組みを進めていることも、高く評価できる。複雑な組成を有する金属酸化物の膨大なデータとの格闘と徹底した実験との連携、飛躍した組成の合成への果敢な挑戦により大きな成果を得ており、研究代表者の優れたマネジメントによる研究チームが有機的に機能したものとも評価する。

一方、電解質に組み合わせる電極については研究が進展しなかったこと、プロジェクト後半で非ペロブスカイト酸化物に物質探索空間を広げたものの、まだ成果に繋がっていないことは、残念な点である。しかしながら、このような挑戦こそが次の大きな飛躍に繋がり得るものであり、継続して挑戦を続ける努力を期待する。