

自動自律ロボットシステムを活用した次世代プロトン伝導材料の研究開発

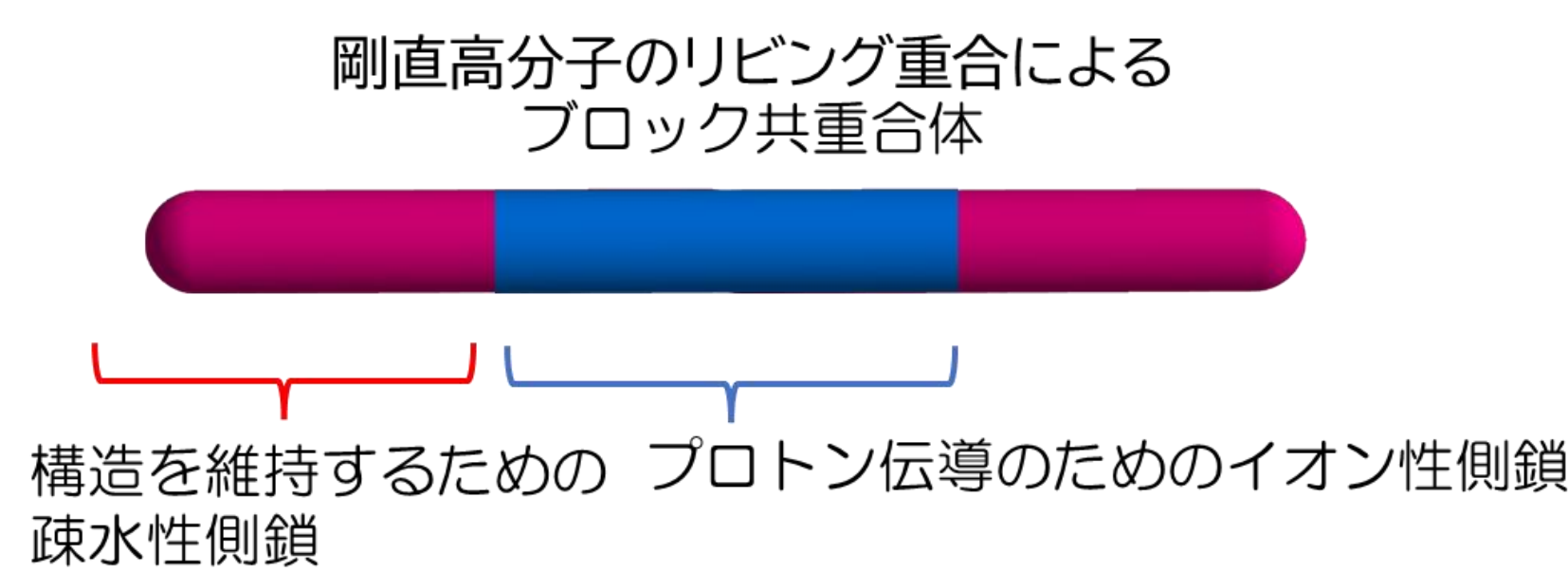
団体名 : (国研) 物質・材料研究機構

発表日 : 2026年7月22日

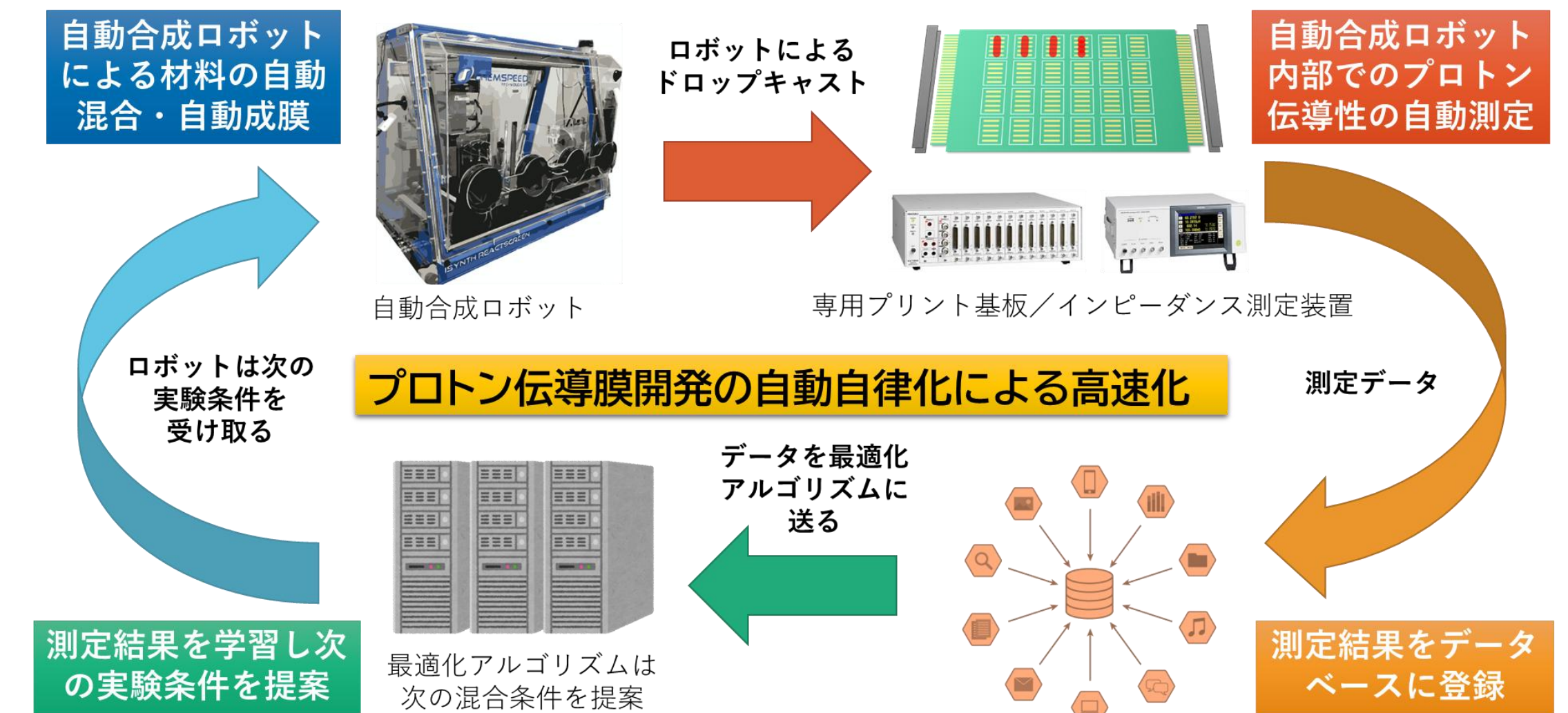
■ 事業の目的・目標

目標設定: 本提案では、高温型プロトン伝導燃料電池の高性能化、高耐久化、低コスト化を目的として、自動自律ロボットシステムを用いた次世代プロトン伝導材料の開発を行う。(1)剛直高分子を基盤とした革新的材料の探索及び、(2)ロボットによる実験・評価の自動化によってデータ駆動型材料開発を推進する。

(1)剛直高分子を基盤とした革新的材料の探索



(2)ロボットによる実験・評価の自動自律化

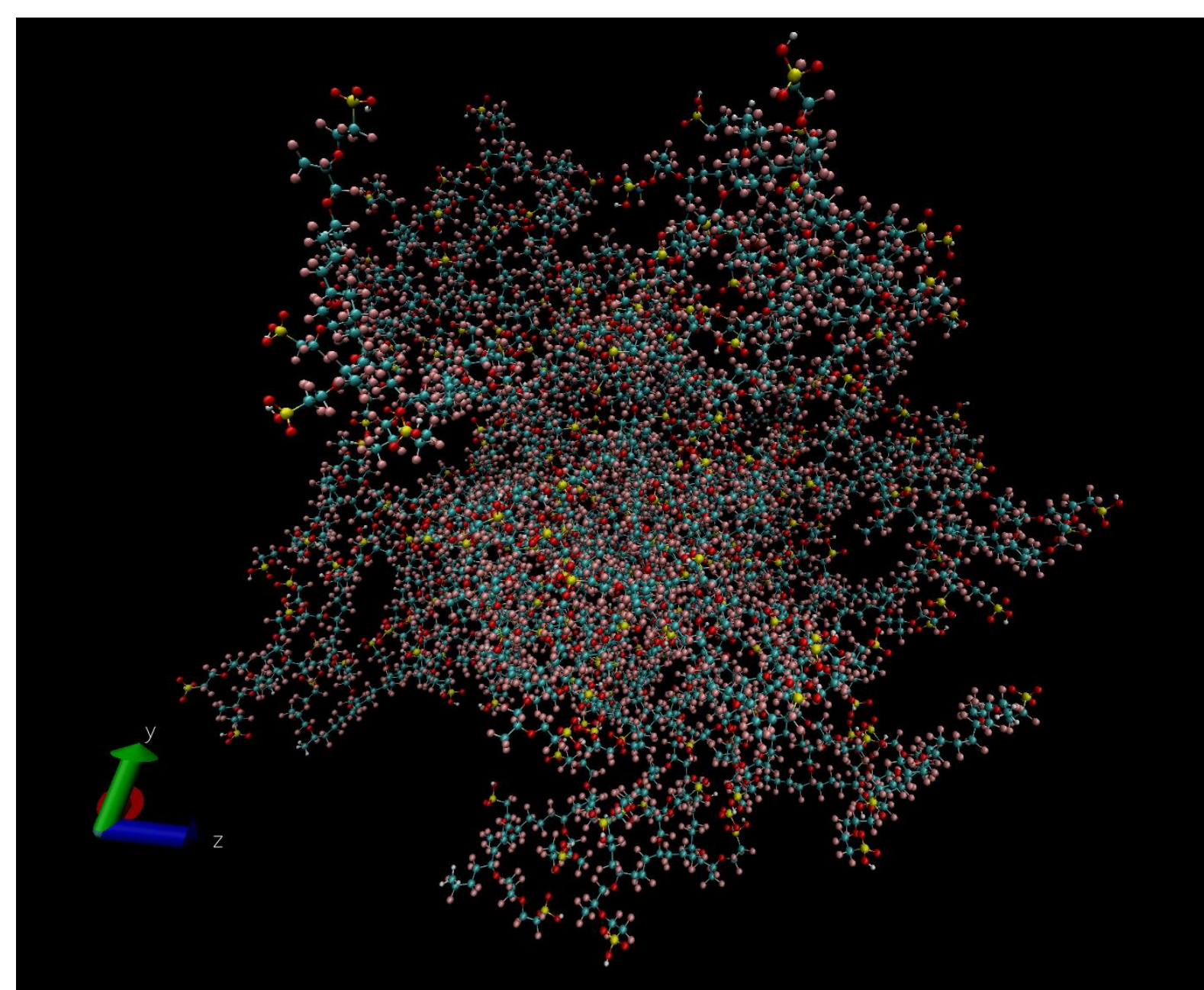


■ 2025年の主な成果

理論科学計算による検討



秋山 世治
(理研TRIP-AGIS,
ポリマーオミクスチーム)



既知のプロトン伝導材料について
計算した構造の例 (ナフィオン)

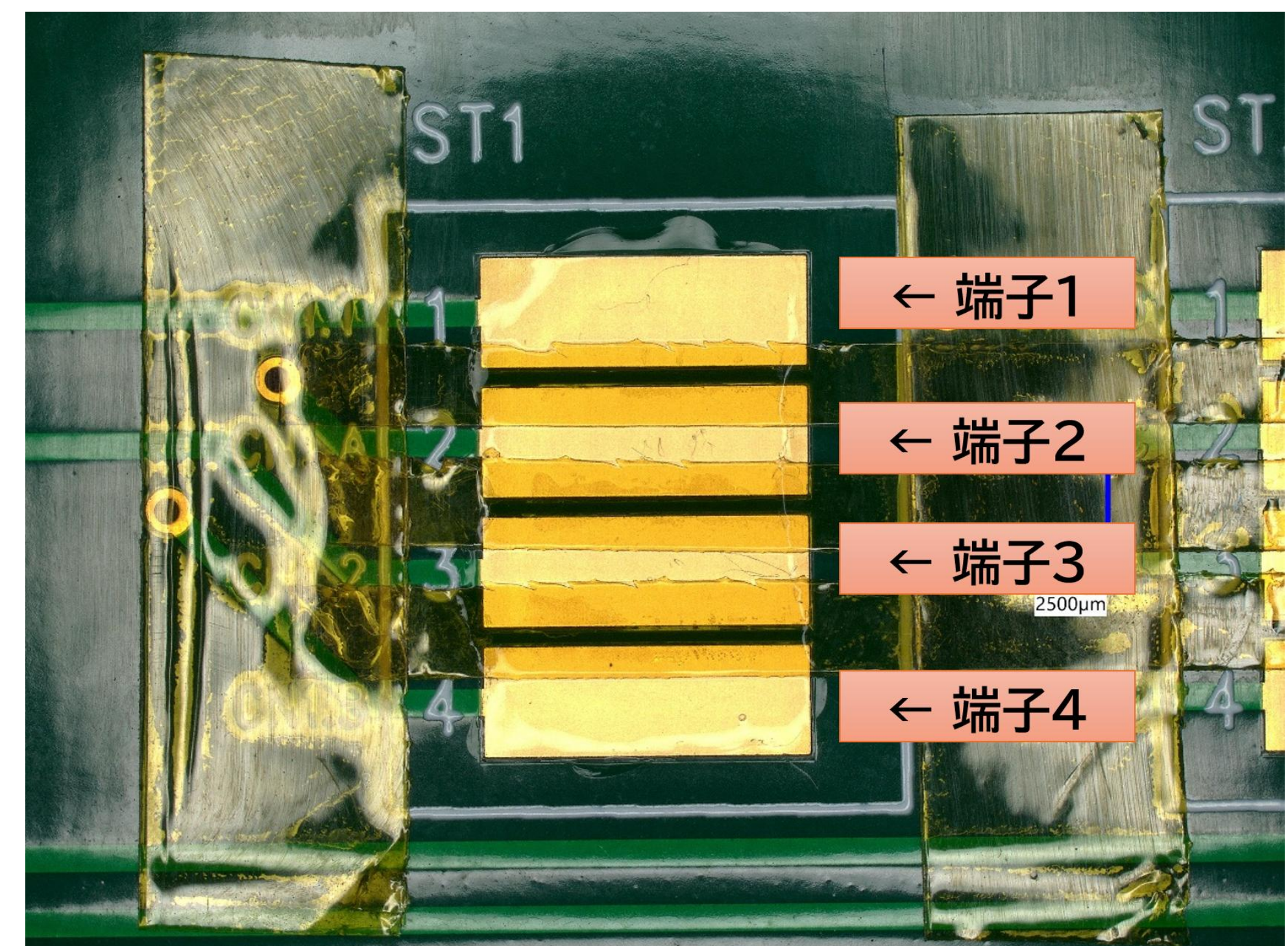
RadonPy: 全原子分子動力学(MD)シミュレーションにより、ポリマーの物性を計算するためのPythonライブラリ。高分子の繰り返し単位とその化学構造、重合度、温度等の計算条件を入力とし、**平衡・非平衡MDシミュレーション、平衡化完了の自動判定、収束失敗時の再スタートのスケジューリング、ポストプロセス段階での物性計算等、MDシミュレーションの全工程を自動で行う。**

現在RadonPyを用いて、全自動で以下のようなパラメータを推定できる。

回転半径, 自己拡散係数, 定圧比熱, 定積比熱, 等温圧縮率, 等エントロピー圧縮率, 体積弾性率, 等エントロピー体積弾性率, 体積熱膨張係数, 線膨張係数, 平均二乗変位, 静的誘電率, ネマティック秩序パラメータ

これらを記述子として用いることで、プロトン伝導性の予測について検討している。

自動測定用基板に関する検討



- 2mm 幅のカプトンテープを端子間に貼り付けることで端子間距離を調整した。端子1と端子4の間の距離が 8 mm になるよう調整した。
- ナフィオン分散液を塗布し、加熱して乾燥させることで**基板上に薄膜を形成**させることに成功した。
- ナフィオン膜について無加湿常温状態にて、10kHz, 10 mV でのインピーダンス測定を行ったところ 22.1kΩ となった。
- このときのプロトン伝導度を推定すると 約 4.8 mS cm⁻¹となり**自動測定用基板による測定が可能**であることが確認できた。

■ 課題と今後の取組

- 今後の主要課題は、**高温低湿条件において高いプロトン伝導率、薄膜化、機械的強度、化学的耐久性を同時に満たす材料候補**を効率的に見いだすことである。初年度に自動成膜、膜厚計測、インピーダンス測定の基本経路は確立したが、**多成分系材料への適用、測定データの再現性確認、成膜条件の標準化、長期耐久性評価**への展開が必要である。
- また、自動評価系と自動合成ロボットを接続し、**実験条件の設計、試料作製、評価、解析を一体化したDBTLループ**として稼働させることが次段階の課題である。今後は、**剛直高分子材料の合成と評価を進めるとともに、多階層理論計算**により酸性度、分解耐性、自由体積、水分子配置などの設計指標を抽出する。さらに、ベイズ最適化等を用いて組成探索を自律化し、1日12サンプル以上の自動測定を目標に、実用候補材料の抽出と評価基盤の拠点化を進める。

■ 実用化・事業化の見通し

- 本研究開発で構築する自動自律評価基盤は、高温低湿条件で作動する次世代燃料電池用プロトン伝導膜の材料探索に活用される。自動成膜、膜厚計測、交流インピーダンス測定、データ解析を一体化することで、**候補材料の評価を高スループット化し、実用候補を短期間で抽出**することが可能となる。
- 今後は、ポリキノキサリン類を中心とする剛直高分子材料の合成・評価を進めるとともに、多階層理論計算とベイズ最適化を組み合わせ、**120℃、30%RHにおいて高いプロトン伝導率を示す材料**の創出を目指す。
- さらに、自動合成ロボットと自動評価系を接続したDBTLループを確立し、材料組成、成膜条件、評価条件を自律的に最適化する。これにより、**燃料電池の高性能化、高耐久化、低コスト化に資する共通基盤技術**として、将来的な企業連携、技術移転、評価システムの外部利用へ展開できる見通しである。