

NEWS
LETTER

vol.

2

July
2025



イオン渋滞学 ion jamology

イオン流の非平衡性と集団運動の理解
による材料デザイン変革

Materials design transformation by understanding
non-equilibrium and collective ion flow

CONTENTS

1. 巻頭言 領域代表コメント（一杉太郎）	2
2. 各 WG の活動報告	
イオン伝導体 WG（小林玄器）	3
複合イオン伝導体 WG（中村崇司）	4
触媒 WG（北野政明）	5
3. 領域ニュース	
第二回領域会議（藪内直明）	6
第二回若手研究会（長谷川源）	7
第二回領域会議のポスター賞	8
国内・国外留学の報告	11
4. 受賞紹介	
アウトリーチ活動	17
5. 公募研究者紹介	
A01 / A02 / A03	19
6. 今後のイベント案内	
第 4 回領域会議	34
第 90 回固体イオニクス研究会	34
MRM2025	34

領域全般に関するお問い合わせ：一杉太郎（領域代表 A01 分担）
領域事務に関するお問い合わせ：「イオン渋滞学」事務局 清水（代表）・齊藤

ニュースレターに関するお問い合わせ
小林玄器（理研）
梅垣いづみ（KEK）
杉本俊樹（分子研）
問い合わせ先：office@ion-jamology.jp



イオン渋滞学、田植え完了！

領域代表 一杉 太郎

一年が経ちました！ 学術変革(A)・イオン渋滞学のスタートから。
この一年で、研究の「解像度」がぐんと上がった気がします。

特に、ワーキンググループでの議論は非常に有益だと思います。

議論の中で何度も出てくるキーワードがありました。

それこそがまさに未解決課題であり、我々がしっかりと取り組むべき課題だと認識することができました。

その際、A01、A02、A03 という縦割りではなく、

横断的に議論して研究を進めることが重要だと思っています。

そして、公募研究の採択者 15 名が 2025 年 4 月に新たに加入しました。

4 月 11 日にキックオフミーティングを開催し、全員が東大・本郷キャンパスに参集しました。

さらに計画研究のメンバーも 21 名が現地に集まり、大いに交流しました。

公募研究者が加入することにより、本学術変革領域内に新たな化学変化が起きることを期待しています。

自分とは違う視点からの意見を聞くこと。これが化学変化のきっかけです。

その意見が自分自身にとって新鮮で、そこから発想を広げることが、ワクワクする源となります。

若手の会も非常に活発に議論していると聞いており、大変うれしく思います。

本巻頭言は、ゴールデンウィーク休暇中に山中湖畔の芝生上でリラックスしながら書いています。

初夏の風と穏やかな日の光が心地良いです。

山中湖までの道中で見た田植えと富士山が印象的でした。

イオン渋滞学もまさに田植えが終わった状況だと思います。

一年間の議論により、ビジョンがはっきりとし、

公募研究者も加入して、苗がしっかりと地面に植え付けられました。

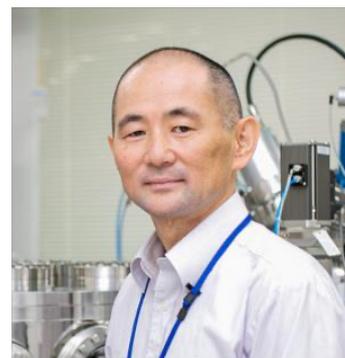
いよいよこれから成長という段階です。

多くの意見交換を通じて皆さんの発想に栄養を与え、

ぐんぐんと成長できるよう研究環境を整備し、多くの実りを得たいと思います。

そしてこの一年間、本領域の「田植え」に尽力していただいた皆様に、心より御礼申し上げます。

次のステップに向かって、前へ！



イオン伝導体 WG

代表 小林 玄器 (理化学研究所)



2024年度の9月と3月にイオン伝導体WGの研究会を2回開催しました。第1回は、理化学研究所の東京分室でハイブリッド形式での開催となり、全メンバーに各自の研究紹介をしていただきました。各々が手持ちの材料の特徴や計測手法と計算手法の原理や強みを説明し、WGとして取り組むべき物質系と数理科学を活用すべき研究対象について意見交換をしました。当所、顔合わせ的な位置づけになると予想していましたが、想定よりも議論が盛り上がり、イオン伝導体WGにおける研究の方向性が決まる機会になりました。また、領域開始数ヶ月にも関わらず単純な数理モデルでイオニクス現象を再現する試みがいくつか始まっており、一部で成果が出始めているというスピード感には驚かされました。領域内で分野融合を進めるためには、合成(A02)、計測(A03)から計算・数理(A01)に良質なデータを提供し、未解決問題に双方向で取り組む体制をいかに早く構築できるかが鍵になると痛感しました。

第2回研究会は、安藤先生(科学大・A01)にご尽力いただき、科学大のすずかけ台キャンパスにてハイブリッド形式で開催いたしました。桑田先生(NIMS・A03)から「PFG-NMRによるガーネット固体電解質単結晶のリチウム核酸解析」と題した講演、山室先生(東大・A03協力)から「研究炉JRR-3におけるAGNES分光器の高度化とLiおよびMgイオン伝導体のダイナミクス研究」と題した講演、川崎先生(大阪大・A01)から「超イオン伝導体の物理モデル構築」と題した講演、小林(理研・A02)から「超イオン導電体のイオン拡散機構解明」と題した講演があり、最後に総合討論も設けるプログラムとなりました。講演件数と研究内容を絞ったことで議論の時間を長く確保できたこともあり、各発表に対して専門分野の枠を越えた意見交換がしっかりとできました。

イオン伝導体WGについては、本領域の申請段階から議論を重ねてきた研究テーマも複数あり、それらについては順調に連携が進められていると感じています。今まで取り入れていなかった計測手法や計算手法を活用した研究も始まっており、今後の研究進捗が非常に楽しみです。一方、学術変革領域研究は予想していなかった研究展開があってこそそのプロジェクトです。今年度から参画された15名の公募研究のメンバーとも密な連携をとることで新たな展開を見だしていきたいです。WGの最も重要な役割は、研究の方向性を皆で確認し、共同研究を進めるきっかけづくりの場を提供することにあると考えております。本領域は各々の興味(研究者としての本能)に基づいて研究を推進できる強力なメンバーが集まっておりますので、今後の研究進捗が楽しみです。



混合伝導体 WG

代表 中村 崇司 (名古屋大学)



本領域では、3つの計画研究 (A01 計算・数理、A02 材料創製、A03 先端計測) の班間連携を促進するため、3つの WG を設立している。以下では、イオン-電子混合伝導体を対象とした混合伝導体WGの活動について報告する。混合伝導体WGでは、ヒドリド-電子混合伝導体、プロトン-電子混合伝導体、リチウムイオン-電子混合伝導体などを対象として、イオン-イオン相関だけでなく、イオン-電子相関やイオン-格子相関を解明することを目標に A01、A02、A03 の垣根を越えて活動している。

第1回会議はオンラインにて開催し、メンバーの交流・連携のきっかけを探るため各メンバーが得意とする技術シーズの紹介、課題と感じているトピックについての問題提起・情報共有することでメンバー間の連携を深めた。16名の研究者が参加し、A01より1件、A02より3件、A03より3件の発表があった。発表後の議論は非常に活発なものとなり、会議参加者からは「もっと議論の時間があると良かった」というフィードバックを受けたほどである。

第2回会議は名古屋大学にてハイブリット形式で開催した。第2回の会議では混合伝導体中 WG をどのように進めるべきかの方向性を議論するため、研究の核となる材料を有する研究者に研究発表を依頼し、課題となっている現象、それを解明するために必要な計測、理論、数理について議論を深めた。発表は、中村 崇司 (A03 名古屋大学) 「Li-電子混合伝導性層状酸化物の単純化、イオン-欠陥相互作用の評価、イオン-電子相関について」、藪内 直明 (A02 横浜国立大学) 「リチウムインサージョン材料におけるイオン渋滞」、大久保 将史 (A02 早稲田大学) 「プロトン混合伝導体の渋滞学」、小林 玄器 (A02 理化学研究所) 「水素・電子混合伝導体の開発」の4件だった。「議論の時間が足りなかった」という第1回の反省を踏まえて、ひとつの発表・議論のスロットを40分と長めに設定したが、それでもなお議論の時間が足りないほどに議論が盛り上がった。

本領域が発足してから、混合伝導体を対象とした連携研究が精力的に進められている。しかし、A02 材料創製と A03 先端計測の連携、A01 の中でも DFT 計算など材料開発分野においてすでにある程度認知されている技術との連携にとどまっている。数理科学の導入やイオン-電子相関、イオン-格子相関の真の姿に迫る新たな計測については具体的な筋道を立てられていないのが現状である。今後、さらにWG内外の情報収集を強めることで、混合伝導体を対象とした新しい基礎学理の構築に取り組んでいきたい。

固体触媒 WG 活動報告

代表 北野 政明



2024年9月13日に第1回、2025年3月31日に第2回固体触媒WGを開催しました。両会議とも東京科学大学すずかけ台キャンパスにて実施し、各研究グループのPIの先生方や学生を含め20名程度の方々に参加頂きました。計2回の会議で、固体触媒WGに参画している先生方全員に発表して頂けるように講演者を選定し、各講演者からそれぞれの技術紹介を行ってもらうと共に、イオン流を制御した触媒材料設計やそのような材料の解析技術、数理モデル構築などに関して総合討論を行いました。

第1回WGでは、杉本敏樹先生（分子研・A03）から「オペランド分光法による触媒反応場における界面水の分子科学」と題した講演、阿部仁先生（KEK・A03）から「XAFSで見えること」と題した講演、白澤徹郎先生（産総研・A03）から「モデル表面/界面構造のオペランド観察（SXRD）、ナノ材料のオペランド観察（XAS/SAXS）」と題した講演、石黒志先生（東北大・A03）から「X線タイコグラフィ法による固体触媒粒子の化学状態イメージング」と題した講演、中村崇司先生（名古屋大・A03）から「欠陥機能を活用したエネルギー材料開発」と題した講演、小林玄器先生（理研・A02）から「水素・電子混合導電体の電極触媒機能開拓」と題した講演、そして最後に北野（科学大・A02）から「固体表面アニオンが機能するアンモニア合成触媒」と題した講演を行いそのまま総合討論を行いました。

第1回WGでは、斎藤晃先生（分子研・A03）から「非熱的メタン転換触媒反応のオペランド分光計測」と題した講演、清水亮太先生（分子研・A02）から「薄膜表面・界面技術を活用したイオン渋滞の解明」と題した講演、吉田秀人先生（阪大・A03）から「アンモニア合成触媒や水素吸蔵材料のオペランドETEM観察」と題した講演、近藤剛弘先生（筑波大・A02）から「水素放出と触媒表面のイオン渋滞」と題した講演、山内美穂先生（九州大・A03）から「Ru担持ペロブスカイト型酸化物触媒の作製とアンモニア合成への応用」と題した講演、多田朋史先生（九州大・A01）から「イオン拡散と触媒反応活性との相関に関する動的モンテカルロ計算のご紹介」と題した講演、江崎貴裕先生（東大・A01）から「自己駆動粒子を用いた粗視化数理モデルによる課題提起から実モデリングへ」と題した講演、小林玄器先生（理研・A02）から「水素・電子混合導電体の電極触媒機能開拓」と題した講演、そして最後に北野（科学大・A02）から「固体触媒におけるイオン流」と題した講演を行いそのまま総合討論を行いました。いずれの講演に対しても、予定していた講演時間では足りないぐらい活発な議論が行われ大盛況となりました。固体触媒においては、共通課題等に関してまだはっきりしていない部分もありますが、触媒反応の数理モデル構築や触媒界面におけるイオンのその場観察などA01, A02, A03が連携した研究も開始しており、今後より活発な連携により固体触媒における新たな学理構築につなげていきたいと考えています。



第二回領域会議開催報告

藪内直明 (横浜国立大学)



2024年11月15日(金)~16日(土)の二日間に渡り、箱根湯本天成園において第2回領域会議が開催されました。計画メンバー、領域評価・アドバイザー・学術調査官、若手研究者・学生を含め、100名の参加者が集まり、活発に議論を行いました。当日は一杉領域代表の会場を盛り上げた挨拶に引き続いて、イオン渋滞学における重要な研究課題となっている、イオン伝導体ワーキンググループ(WG)、混合伝導体WG、触媒WGからそれぞれの代表の発表が行われ、その後、活発な質疑・討論が行われました。

若手研究者による合計28件のポスター発表も行われ、全員の参加者によって一時間以上に渡り活発な議論が繰り広げられました。また、ポスター発表の内、三件がポスター賞として選出され、領域代表より賞状と景品が授与されました。15日の夜の部でも引き続き活発な議論が日付けが変わるまで行われました。領域会議の最後には評価委員の先生方からも貴重なご意見をいただき、盛況のうちに閉幕となりました。



第二回領域会議で撮影された集合写真

第二回若手セミナーG

長谷川 源 (物質・材料研究機構)



2024年11月14日(木)、第2回イオン渋滞学若手セミナーを東京科学大学すずかけ台キャンパスにて実施いたしました。本セミナーは学生・若手研究者にフォーカスした催しとなっており、第2回では学生22名、若手研究者16名、総勢38名の方々に参加いただきました(図a,b)。今回はイオン渋滞学に関わるトピックを若手の皆さまにも深く議論していただくこと目的とし、3名の方にご講演いただきました。

1件目は江崎貴裕先生(東京大学/A01 計算・数理)の基調講演で、「渋滞モデリング入門〜からモデルを作ってサイエンスにする方法」と題して、本領域で重要な位置づけとなっている数理モデリングの基礎とイオン伝導体への応用例に関してご講演いただきました(図c)。2件目は佐々木雄平さん(東北大学/A03 先端計測)の若手講演で「オペランド硬X線タイコグラフィによる薄膜型全固体電池のナノスケール化学状態イメージング」と題して、最新の放射光計測技術によるリチウムイオン電池のその場観察法に関してご講演いただきました(図d)。3件目は宮崎雅義先生(東京科学大学/A02 材料創生)の若手講演で「窒素アニオンを用いたアンモニア分解と塩基触媒作用」と題してアンモニア分解における触媒反応に関してご講演いただきました(図e)。

3講演とも活発な議論が行われ大盛況となりました。特に佐々木さんの実験における苦労話では多くの学生・若手研究者が共感し、本セミナーで1番の盛り上がりを見せておりました。今後とも本セミナーを若手同士の“率直な思い”をぶつけ合える熱い場にしていきたいと思える1シーンとなりました。

2025年度から公募班が合流し、イオン渋滞学のさらなる発展が期待される中、若手が秘める熱量と素朴な目線・疑問はブレイクスルーを生む重要なキッカケになるはずです。本セミナーが学生・若手研究者にとって、自身の秘める思いを見つめ直し、それをさらけ出せる機会になればと願っております。



図. (a) 集合写真。世話人はシャッターの瞬間に間に合わず見切れる。(b) 当日の会場の様子。(c) 江崎貴裕先生(特任講師/東京大学)。(d) 佐々木雄平さん(D1/東北大学)。(e) 宮崎雅義先生(助教/東京科学大学)。



第二回領域会議ポスター賞

第二回領域会議では、学生を対象にしたポスター賞を下記の3名が受賞しました。

宮下和聡さん(東京科学大学 D1)「BaZrO₃-xNyHz 担持 Ni 触媒によるアンモニア分解」

木原開さん(東京大学工学系研究科 M2)「多レーン完全非対称単純排他過程における欠陥サイトの影響」

楠本恵子さん(理化学研究所 D1)「メカノケミカル法による新規岩塩型酸水素化物の合成と評価



宮下 和聡 (東京科学大学 北野研究室) 博士後期課程 2 年

現在、私は酸化物ペロブスカイトのアニオンサイトに N³⁻や H⁻を導入した材料を用いた高性能アンモニア分解触媒の開発および原理解明を行っています。第二回領域会議においては特に BaZrO₃-xNyHz に焦点をあてた発表にて、ポスター賞をいただき大変光栄に思います。発表内の先生方とのディスカッションは、普段の学会発表の質疑応答では得られない視点からご意見をいただき、研究の新たな切り口を得ることができました。

領域会議では、先生方のエキサイティングな発表と意見交換に刺激を受けました。また食事や休憩時には多くの先生方や学生の皆様とお互いの研究を紹介して、それを踏まえて共同で面白いことができるのではないかと語り合い、最終的には深夜3時頃まで盛り上がるなど、研究に熱意を持つ方々での交流を通して非常に楽しく刺激になる時間を過ごすことができました。このような体験から、イオン渋滞学において国内・国外ラボ留学や領域会議・ワーキンググループにさらに積極的に参加し、イオン渋滞学の更なる発展に貢献していきたいと考えています。

最後になりますが、このような貴重な機会をアレンジいただいた横浜国立大学の藪内直明先生を始めとするイオン渋滞学の先生方、ご議論いただいた皆様に厚く御礼申し上げます。





木原 開（東京大学工学系研究科）博士課程1年

【研究テーマ】

本研究では、離散格子モデルを用いて固体電解質中のイオンの移動現象を説明します。固体電解質の物性、結晶構造がマクロなイオン輸送に与える影響を調べます。領域会議のポスターでは、欠陥をもつ多レーン完全非対称排他過程(TASEP)の解析を行い、結晶中に点在する欠陥やバイパス（多次元経路）とイオン流の渋滞の関係について検証しました。その中で、欠陥数が多くバイパスが少ないほど粒子密度に空間的なゆらぎが生じ、全体の流量が激減することがわかりました。

【領域会議の感想】

領域会議では、様々な専門領域についての発表をきくことで、計算・数理のみならず材料の創成・計測についても知識を深めることができました。また、ポスター発表では、違う視点をもつ多くの方々からご助言をいただき貴重な経験となりました。懇親会においてはより率直に意見を交換することができ、非常に楽しかったです。

【イオン渋滞学への期待や意気込み】

私にとってなじみのなかった固体電解質の研究は、大きな挑戦になります。しかし、日々の研究や領域会議を経て、非常に面白いものなるとわくわくしています。様々な方々と議論を交わし、意義のある研究にしていきたいと感じています。



楠本恵子(理化学研究所、総合研究大学院大学) D2



第二回領域会議のポスター賞を受賞することができ、大変うれしく思います。私は博士論文のテーマとして、ヒドリド(H⁻)を含むリチウムイオン電池の電極材料の探索を行っています。先の領域会議では、開発した新規岩塩型酸水素化物 Li_2NbHO_2 の結晶構造と充放電特性について発表させていただきました。参加者が多い中での発表で緊張していましたが、開催が温泉地での合宿形式だったため、リラックスしてポスター発表や他の参加者との交流に臨むことができました。また、他の方の発表を見て自分が思いつかないような発想に基づく研究と出会って大変刺激を受けた2日間でした。イオン渋滞学では数理科学と材料科学の協働によってイオン渋滞の支配因子を明らかにしようとしています。本領域の研究活動を通じ、両分野に詳しい新世代の研究者を目指していきたいと思います。

国外ラボ留学の報告

研究計画 A03 望月達人さん（分子科学研究所 D1）

受入者：Prof. Dr. Franz Josef Giessibl（University of Regensburg）

期間：2025年3月6日～14日(金)9日間

場所：レーゲンスブルク大学(ドイツ)

現在、私は走査プローブ顕微鏡(SPM)と非線形分光の一種である和周波発生(SFG)振動分光を組み合わせた探針増強 SFG 分光の開発研究を進めており、触媒表面における吸着分子の構造・配向情報を従来法では達成できない高い空間分解能で取得できる手法の開発を目指しています。既に自己組織化単分子膜や CO 等を飽和吸着させた表面分子系の信号取得には成功しており、現在は探針増強 SFG 分光法の空間分解能をサブナノメートル程度まで向上させて、触媒等の表面における分子系の振る舞いを観測することに挑戦する段階にあります。

このような挑戦において、SPM による観測技術の一つである非弾性トンネル分光(IETS)の基礎技術を習得することは重要な位置づけにあります。IETS は、表面の単一分子の振動情報を取得できる手法として確立されています。探針増強 SFG 分光による単一分子系観測の取り組みの中で、手法として確立している IETS 信号が見えているという条件下で探針増強 SFG 信号を観測し、局所観測の可能性を示すことが本質的になります。IETS は電流信号の 2 階微分を取るものであるため、これまで自分たちの装置で高い精度の IETS 計測することは技術的に困難でした。

ドイツのレーゲンスブルク大学の Giessibl 先生は、qPlus センサーという現在、広く用いられている新規の SPM 装置も開発された方です。今回訪問させていただいた Giessibl 先生率いる研究室では IETS をはじめとした高度な SPM 技術を駆使しています。現地では、金沢大学の岡林先生と共に実験を行い、Cu(110)基板表面上に吸着した CO 分子の単一分子振動を IETS で観測するための要素技術を学ぶことができました。また、安定した測定に必要なノイズ低減のための装置開発にも携わらせていただき、今後の装置開発・改良に向けた知見も得ることができました。

ここで得られた知見は、自分の SPM 装置で探針増強 SFG 分光と共に IETS 測定を今後展開する上で非常に参考になり、触媒表面における分子の構造・配向情報を高い空間分解能で得るという目標に向けた大きな一歩となりました。今回の訪問を受け入れてくださり、ご指導いただきました岡林先生、Giessibl 研究室の皆様にはこの場をお借りして深く御礼申し上げます。





国内ラボ留学の報告

研究計画 A02 M2 森 翔也さん（東京科学大 北野研究室）

受入者：研究計画 A03 大阪大学 吉田秀人准教授

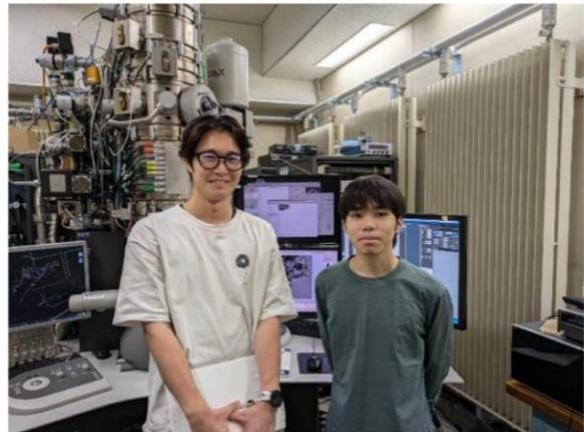
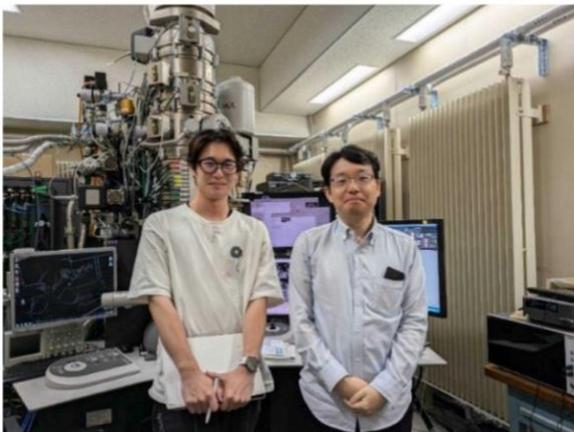
期間：2024 年 9 月 24 日～9 月 28 日 5 日間

場所：大阪大学 吉田研究室

吉田研究室のその場観察可能な TEM を用いて、北野研究室のアンモニア合成・分解触媒の観察を行いました。これらの触媒では、担持金属と担体表面の界面サイトを反応場とする反応経路と、担体からの電子供与効果によって担持金属上での反応を促進する反応経路が考えられますが、反応系内での局所構造や化学状態は不明瞭な部分が多く、活性点近傍の詳細な解析が必要でした。

本測定では、反応条件下(in-situ)での触媒の原子分解能での観察と EELS スペクトルの取得による局所的な電子状態解析により触媒の反応機構を明らかにすることを目的としました。吉田研究室が所有している TEM では原子分解能での観察可能であるため、各材料の局所構造を詳細に明らかにすることができました。また、担持金属触媒を用いて in-situ 観察を行ったところ、大気中で酸化された担持金属種が、還元によって金属ナノ粒子が生成したことを観察できました。今後得られた STEM-EELS データを解析し、反応前、反応雰囲気での担持金属、界面、担体の電子状態の違いを明らかにしていきたいと考えています。

吉田先生、吉田研究室の皆様、心よく迎え入れてくださり、TEM の操作や解析方法まで教えていただきありがとうございました。とても楽しく実験することができ、貴重なデータもたくさん取得できました。この場を借りて厚く御礼申し上げます。



国内ラボ留学の報告

研究計画 A01 和泉 智也さん（東京大学 M1 一杉研究室）

受入者：研究計画 A03 分子科学研究所 杉本 敏樹准教授

期間：2025 年 2 月 4 日 1 日間

場所：分子科学研究所 杉本研究室

私はイオン伝導体材料の研究を行っており、その現象理解を深めるために、杉本研究室で開発されている非線形ラマン分光を活用したいと考えている。しかし、電池系にこの手法を適用するためには、大気非曝露で測定できる新しいセルの設計が不可欠である。そこで、私たちの材料計測の知見と、分子研の先端計測の知見を融合し、最適な大気非曝露セルをデザインすることを目的として、杉本研究室を訪問し、ディスカッションを行った。

まず、実際の測定環境を確認するため、分子研の実験室を見学した。特に、非線形ラマン分光の測定セットアップを詳細に観察し、光学系の設計やレーザーの配置、測定プロセスを学んだ。

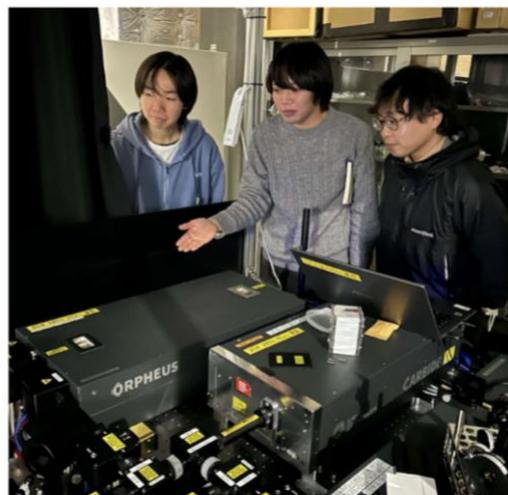
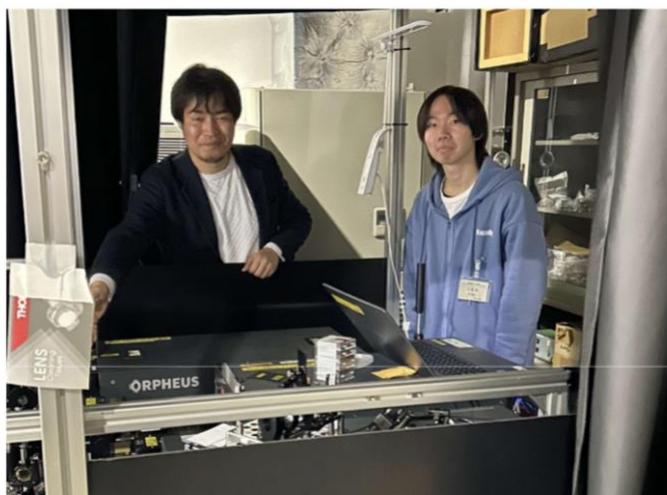
続いて、事前はこちらで作成した大気非曝露セルの設計図をベースに、どのような改良が必要かを議論した。具体的に以下の点で新たな視点を得ることができた：

- セル内部のサンプル位置調整のためのティルト機構の必要性
- 観察用レンズの焦点距離を考慮したビューポートの設計
- 部品の選定に関する提案

今回のディスカッションをもとに、大気非曝露セルの設計図を改良し、試作へと進める。

その後、実際にセルを作製し、非線形ラマン分光による測定を実施する。最終的には、この先端計測手法を活用することで、イオン伝導材料における新たな現象理解を深めることを目指す。

本ラボ留学を通じて得られた知見は、今後の研究において非常に大きな意味を持つものであり、ディスカッションいただいた杉本敏樹先生、金井恒人先生、吉澤龍さんに心より感謝申し上げます。





国内ラボ留学の報告

研究計画 A02 成田翔海さん（東京科学大学 M2 北野研究室）

受入者：研究計画 A03 KEK 阿部 仁 准教授

期間：2025 年 3 月 4 日～5 日(水) 2 日間

場所：高エネルギー加速器研究機構（KEK）

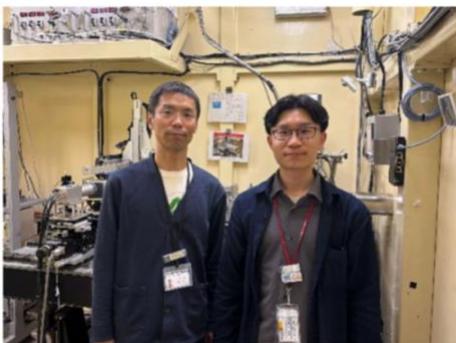
高エネルギー加速器研究機構の BL-12C にて XAFS 測定を行い、北野研究室で開発している複合アニオン材料を用いた触媒について、電子状態および局所構造を調査しました。このような触媒を用いたアンモニア合成・分解では、触媒担体によって反応機構が変化することが報告されており、多面的な特性評価が欠かせません。

本ラボ留学では、担持金属に対して XAFS 測定を行い、XANES 領域から担体の電子供与効果を、EXAFS 振動から担持金属の粒子径を推定することが目的です。大気非曝露で測定するため、各サンプルは事前にグローブボックス内で脱酸素剤と共にラミネート加工しました。測定においては、サンプルの濃度に応じて検出器を選択し、電離箱、Lytle 検出器、シリコンドリフト検出器を使い分けました。また、重原子の測定ではクライオクーラーを利用し、Debye-Waller 因子を小さくすることで EXAFS 振動の減衰を抑制しました。

今回測定したサンプルは、担体として用いる酸化物の O^{2-} を部分的に H^- や N^{3-} で置換することによって、アンモニア分解反応の触媒活性が大きく向上することが確認されています。一方で、担持金属の XANES 領域を比較した結果、担持金属の電子状態はアニオン置換で変化しないことが明らかとなりました。また、EXAFS 振動のフィッティング結果から推定される粒子径にも、大きな差は確認されませんでした。これらの結果は、担体中のアニオンや欠陥が反応に直接関与する機構を支持するものであり、これまで北野研究室で得られた実験結果と整合します。

今後は、反応機構の異なる触媒について同様に XAFS 測定を実施し、担体の電子供与効果が触媒活性に与える影響を検討する予定です。触媒活性の支配因子を明らかにすることで、更なる高活性化へ向けた触媒設計指針の構築に貢献したいと考えております。

複数ビームラインのご担当で大変お忙しい中、各装置の操作法や原理を丁寧にご教示くださり、また測定中も長時間サポートいただきました阿部仁先生、丹羽尉博先生に、心より感謝申し上げます。そして、安定した放射光の供給や装置運用にご尽力くださったスタッフの皆様に、この場を借りて厚く御礼申し上げます。



国内ラボ留学の報告

研究計画 A03 齋藤晃さん（分子科学研究所 杉本研究室特別研究員）

イオン渋滞学固体触媒ワーキンググループ第2回会議

期間：2025年3月31日(月)1日間

場所：東京科学大学すずかけ台キャンパス

杉本研究室では固体イオニクスと半導体エレクトロニクスを融合させた触媒反応の研究を行っています。特に、触媒反応メカニズムの解明や更なる高性能触媒の設計に不可欠な活性種の情報を得るために、動作中の触媒反応場を観測するオペラント分光計測に取り組んでいます。

これまで、私はイオニクス材料である CeO_2 ベースの触媒による非熱的なメタン転換反応に関して、赤外・可視・軟 X 線といった様々なオペラント分光研究を行ってきました。この研究内容について、2025年3月31日に東京科学大学すずかけ台キャンパスで開催されたイオン渋滞学固体触媒ワーキンググループの第2回会議にて研究発表を行いました。本発表を通して、多くの先生方と活発な意見交換を行うことで、自身の研究をさらに深めるための触媒反応に関する専門的な意見だけでなく、電子や正孔、イオンといったキャリアの伝導について材料や数理モデルの観点から広範に研究アイデアをいただくことができました。

今後、得られた知見を踏まえた波及効果の高い研究を展開することで、イオン渋滞学の発展へと更に貢献していきたいと考えています。最後に、このような貴重な発表の機会をアレンジいただいた東京科学大の北野政明先生を始めとする固体触媒ワーキンググループの先生方に厚く御礼申し上げます。





受賞の紹介

2024 年度船井学術賞

受賞者：計画班 A01 江崎貴裕（東京大学）

対象となった課題：「ネットワーク型物流システムの基礎理論の構築」

受賞日：2025/3/1



計画班 A01 の江崎貴裕特任講師（東京大学先端科学技術研究センター）が、2024 年度船井情報科学振興財団・船井学術賞を受賞しました。同賞は情報科学・理工系分野で顕著な業績を挙げた若手研究者に贈られるもので、江崎氏は物流ネットワークにおけるトポロジーの影響を明らかにしたほか、各リンクの重要度を定量化し、実データ解析によってその効果を実証するなど複合的なアプローチを確立し、理論的基盤を築いた点が高く評価されました。さらに、こうしたネットワーク物流科学の手法をイオン渋滞学への応用へと展開する試みも高く評価されました。

・第 18 回物性科学領域横断研究会「最優秀若手奨励賞」(ポスター賞)

受賞者：佐々木遼馬 氏（東京科学大学）

講演題目：「イオンの協働運動を考慮したイオン伝導度計算高速化のための非平衡分子動力学法開発」

受賞日：2024 年 11 月 26 日

アウトリーチ紹介

計画班 A01 一杉太郎

日時：2024年5月10日

対象：神奈川県立柏陽高等学校「東大 in 柏陽」参加者: 84名

内容：世界で自分にしかできないことはありますか？と問いかけ、社会人としての個性をどのようにして創るのか皆で考えました。その題材に、最先端の物質科学について話しました。特に、超伝導発見の物語やイオン渋滞学が関わる全固体電池研究を例に挙げ、研究者のオリジナリティについて、議論しました。

計画班 A01 一杉太郎

日時：2024年8月5日

対象：小中高生とその保護者

対面 200名、オンライン 300名超

場所：東京大学・本郷キャンパス

内容：研究者ってどんな仕事？ 研究者って楽しいぞ。(東京大学メタバース工学部ジュニア講座)

研究者になりたい人！と呼びかけ、多くの方が応募されました。対面での参加希望者は1000人を越えました。会場の大きさから200名が対面で参加しました。超伝導発見の物語やイオン渋滞学が関わる電池研究を題材にして、自分の経験も踏まえて研究者普段何を考えて研究をしているのか語りました。とくに、他の人と同じことで満足することなく、個性を発揮することを強調しました。

計画班 A01 安藤康伸

実施日：2024年8月8日

対象：岐阜県立大垣北高等学校 高校1, 2年生, 30名程度

内容：東大卒で活躍をする講師5名を招聘し、高校生の進路設計につながるようなキャリアセッションを実施しました。その中で安藤は研究者としての生き方や本学術変革領域の意義を語り、高校生の勉強に対するモチベーションの持っていき方などを議論しました。

計画班 A01 一杉太郎

実施日：2024年8月23日(金)

対象：中学生・高校生

場所：東京大学

内容：公益社団法人 日本化学会主催 東京大学 1 日体験化学教室 「先端化学にふれてみよう」 「化学者ってどんな仕事？化学者は楽しいぞ！」について講義・実験を行いました。

<https://www.chemistry.or.jp/event/calendar/2024/07/post2407-17.html>



計画班 A03 杉本敏樹

実施日：2024年10月19日

対象：小中高生及び保護者など（申込者数千人規模）

場所：分子科学研究所

内容：分子科学研究所一般公開 2024 において『最先端のレーザー技術で解き明かす表面界面科学』と題して研究室公開を実施しました。小中高生及び保護者など一般の方々に対して、比較的危険性が少ないクラスのレーザーにも触れてもらい、分光法や分光を用いた表面界面科学研究について身近に感じてもらえるように解説し、環境・エネルギー問題の解決につながる研究取り組みであることを知ってもらいました。<https://www.ims.ac.jp/koukai2024/>

計画班A02 清水 亮太

実施日：2024年10月19日（土） 対面

場所：東京大学理学部

イベント：東京大学理学部ホームカミングデイ2024 ～家族で体験 理学のワンダーランド～

対象：小・中・高校生と保護者

内容：「ロボット化学者の誕生と共生」についての講演

<https://www.s.u-tokyo.ac.jp/ja/event/10393/>

計画班A02 大久保 将史

実施日：2024年11月6日（水） 対面

場所：湘南白百合学園高校

対象：湘南白百合学園高校 高校生

内容：「カーボンニュートラル社会にむけた蓄電デバイスへの期待」についての出張授業

計画班A01 一杉太郎

実施日：2024年12月25日（水）

場所：東京大学

対象：兵庫県立 豊岡高校 高校生

内容：研究室見学～どんな研究をしているの？～

計画班A03 森一広、梅垣いづみ

実施日：2025年4月27日(日)

対象：一般

場所：ニコニコ超会議2025（幕張メッセ国際展示場）

内容：高エネルギー加速器研究機構が上記イベントに出展したブース『超KEK』にて、「超レアな量子ビームで蓄電池を切る！」と題して、中性子とミュオンによる蓄電池研究の講演を実施しました。

<https://www2.kek.jp/outreach/chokaigi/2025/>

A01

春山潤

所属: 理化学研究所 開拓研究所 小林固体化学研究室

研究メンバー

・ Shibghatullah Muhammady 研究員

専門分野・キーワード: 第一原理計算, 計算電気化学, 表面科学



【第一原理機械学習力場と分子動力学法による超イオン伝導体の拡散・相転移挙動の研究】

本研究では従来型の超イオン伝導体(AgI や PbF₂ など)が示すイオン伝導度の非アレニウス性や副格子融解現象に着目することで超イオン伝導状態の発現機構について理解し、その知識を電気化学デバイスへの応用が期待される固体電解質材料の開発に活かすことが目標です。具体的には第一原理機械学習力場と分子動力学法を用いて微視的な拡散ダイナミクスをシミュレーションすることで、上記の課題解決に向けて研究を進めています。

- ・ イオン伝導度の非アレニウス性
- ・ 超イオン伝導体の副格子融解
- ・ 超イオン伝導状態の液体様ダイナミクスと集団運動
- ・ ヒドリド超イオン伝導体

現段階で得られている2物質の拡散係数を下図に掲載しました。両物質とも各温度帯での見かけの活性化エネルギーが実験値を再現できており、シミュレーションの軌跡などを解析することでその微視的起源の解明に貢献できると考えます。しかしながら、現状どのような性質に着目するのが有効か不明であり、中性子実験などの解析の方々のデータと比較するなどの議論を通して(平均構造等の平衡状態の性質を超えた)ダイナミクスの理解を進めたいと考えています。また従来型の超イオン伝導物質以外にも近年開発が進むヒドリド(H), Li, Fの超イオン伝導体について解析を広げ、超イオン伝導状態の発現とその低温化について考察していきたいです。

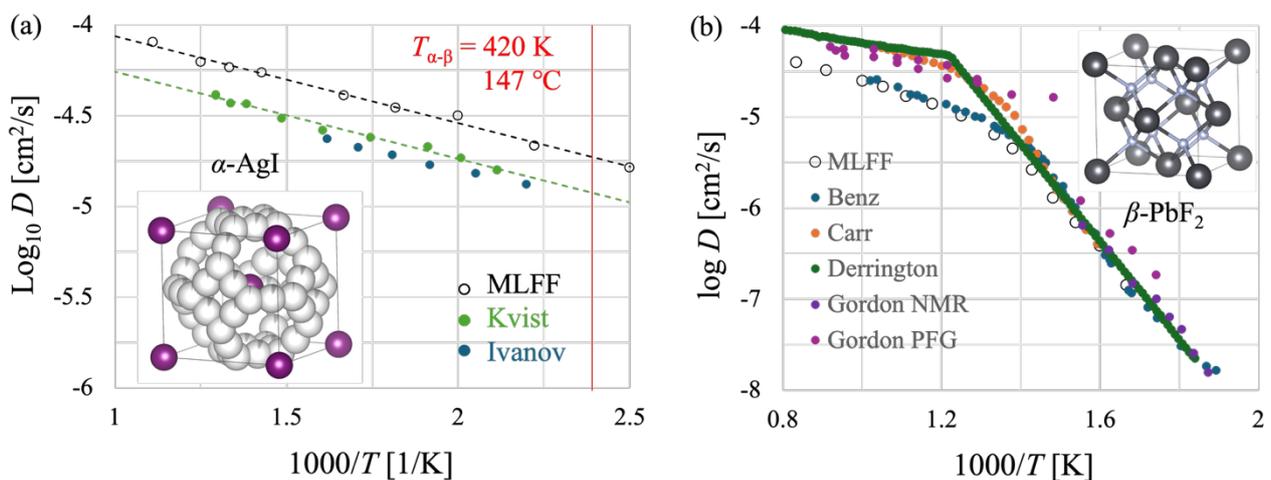


図. (a) ヨウ化銀(α -AgI)と(b)フッ化鉛(β -PbF₂)の拡散係数-逆温度プロット



A01

佐々真一

所属：京都大学理学研究科



【大域熱力学アプローチによるイオン流の制御】

ミクロとメソとマクロをつなぐ非平衡統計力学のひとつのアプローチとして、大域熱力学があります。それは熱力学を非平衡定常状態に自然に拡張する試みとして提案され、その予言能力やミクロやメソの記述との整合性から、現象論の枠を超えて発展している。本研究課題では、イオン流を大域熱力学の視点から制御することを目指します。

大域熱力学の対象として、実験系としては、熱伝導下の気液転移、熱伝導下の液晶のネマティックアイソトロピック転移、固体の構造相転移が検討されており、理論的には、こうした非平衡流による準安定状態の安定化について様々なモデルで検討するだけでなく、より広い非平衡現象に対して有効な予言を与えるアプローチを熟成させています。この状況で「イオン流」を研究対象に選んだのは、固体中のイオン流が格子気体模型と関係するからです。非平衡格子気体模型は、もっとも単純な模型として数理的によく研究されており、現象の本質的な機構を抽出するときには有用です。その一方、非平衡格子気体と直接対応する実験系は知られていません。ただし、固体中のイオン流は定性的には格子気体模型の振る舞いと似ていると考えられているので、単なる類似ではなく、ゆらぐ連続場ダイナミクスによるメソスケールでの普遍的な記述によってイオン流を定量的に議論したいと考えました。大域熱力学の発展によってメソスケール記述の理解が大きく進展しつつある今、その問題に取りくむよい機会だと判断しました。

さらに、本領域の趣旨から、非平衡複合材料の最適化問題という材料科学のフロンティアと大域熱力学の考え方の親和性を意識したことも大きいです。大域熱力学では、部分系を組み合わせるときの規則を整合的につくることから一貫した体系を構築します。この考えを複合材料の非平衡輸送問題に関係させることは現時点で全くの未開拓であり、挑戦的ですが自然な課題だと考えました。

本研究課題では、イオン流の輸送特性および熱力学性質を決める普遍的なメソスケール記述があるかどうかを問います。このメソスケール記述が、非平衡統計力学によって、よりミクロな記述、および、マクロな記述と関係し、階層をまたぐ定式化になっているのでしょうか。そして、これらの定式化によって、定量的に実験と比べうる新しい現象を予言したいです。つまり、イオン流のメソスケール記述、イオン流のマクロスケール記述、イオン流の非平衡相転移の3つの問題を掲げ、大域的記述との整合性を拠点とした非平衡統計力学によって、ミクロ=メソ=マクロの階層をまたぐ研究を推進し、非平衡物理として重要な問題を解決するのみならず、数理科学としても材料科学としても有意義な結果につなげることを目指します。

A01

小林 亮

所属: 名古屋工業大学大学院工学専攻 応用物理プログラム



専門分野・キーワード: 計算材料科学, 分子動力学, 機械学習ポテンシャル

【研究タイトル】

- ① 高速な機械学習ポテンシャルの開発
- ② 記述子空間におけるイオン流観測

分子動力学 (MD) 法はイオン伝導体内部におけるイオンの拡散機構を解析するのに適したシミュレーションツールのため、現在広く活用されています。長い歴史を持つ MD 法ですが、近年でも機械学習ポテンシャルなど、機械学習や AI 技術を取り入れて著しく発展しています。しかしながら、未だに改善の余地があります。一つは、機械学習ポテンシャルの計算負荷です。機械学習ポテンシャルは、非常に計算負荷の重い第一原理計算を機械学習モデルで置き換えることで劇的に計算負荷を減じるもので、近年は非常に精度の高いモデルが多く開発されていますが、その計算負荷は第一原理計算に比べれば軽いものの、非常に多くの MD ステップを必要とするイオン伝導体の MD シミュレーションを行う際には十分に負荷が軽いとは言えません。そこで本研究の課題①では、現在の機械学習ポテンシャルに匹敵する精度で、従来用いられていた古典ポテンシャルと同等の計算負荷の新しい機械学習ポテンシャルの開発を行います。軽量かつ高速な機械学習ポテンシャルを用いることで、欠陥を含むような大規模イオン伝導体モデルにおけるイオンダイナミクスの MD シミュレーションができるようになります。

MD シミュレーションを行うことで、物質内のイオン拡散機構を直接観測できるようになります。多くのイオンが乱雑な動きをしているため、その機構を理解することは簡単ではありません。実際多くの研究において、MD シミュレーションから得られた情報を如何に人間が理解できるデータに変換するかがイオン伝導体の MD 解析において重要なプロセスとなっています。本研究の課題②では、機械学習ポテンシャルにおいて使って捨てられている構造記述子データを活用し、拡散イオンと周辺構造、拡散イオン同士の相互作用を解析する方法の開発を行います。これまでの科学史において新しい観測手法が新しい現象や構造を解明してきたように、MD シミュレーションデータの新しい観測手法を用いることで新しいイオン伝導機構解明につなげ、イオン渋滞学に新しい視点を提供することを目指しています。



A01

高江恭平

所属: 鳥取大学大学院工学研究科

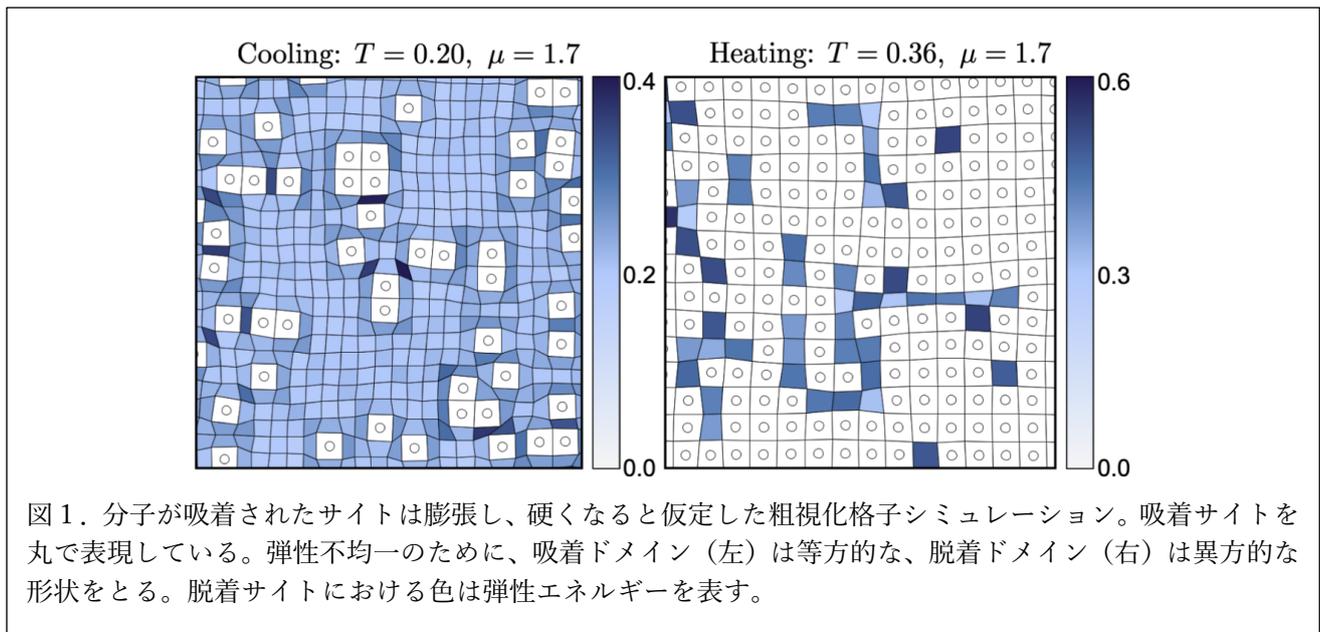


専門分野・キーワード: 相転移ダイナミクス、ソフトマター物理学、粗視化シミュレーション

【研究タイトル】 弾性不均一による協同的かつ不均一なイオン輸送の制御

弾性不均一が結晶内部のイオン輸送に与える影響を明らかにすることを目的としています。弾性不均一とは、イオンの運動により、結晶が不均一に変形し、また局所的な弾性率が変化することをいいます。合金、ゲル、金属有機構造体などでは、弾性不均一により特徴的なパターン形成が起こることが知られています(図1) [1,2,3]。イオン輸送においても、弾性不均一が自発的に生ずることで、イオンの協同的かつ不均一な輸送を制御する可能性を、格子モデル・連続体モデル・分子モデルのシミュレーションを用いて探索します。材料において、イオンや水素の含有率に依存した弾性率変化、とくに、分布の不均一性に由来した不均一な弾性率の役割は、さほど注目されておりませんが、大きな格子変形を伴う結晶では重要になると予想しています。とくに、リチウムイオン電池やナトリウムイオン電池の電極材料、水素吸蔵合金などで、不均一な格子変形・弾性率変化を組み込んだ粗視化モデルの提案と、その数値シミュレーションを通じて、弾性不均一を測定すること、および、弾性不均一を軸に組み込んだ材料設計の重要性を提唱します。

- [1] Akira Onuki, "Phase Transition Dynamics" (Cambridge University Press, 2002).
- [2] Kota Mitsumoto and Kyohei Takae, Proc. Natl. Acad. Sci. **120**, e2302561120 (2023).



- [3] Kota Mitsumoto and Kyohei Takae, Phys. Rev. Res. **6**, L012029 (2024).

A02

堀 智

所属: 東京科学大学 総合研究院 全固体電池研究センター
特任准教授

専門分野・キーワード: 固体化学、固体イオニクス
電気化学、全固体電池



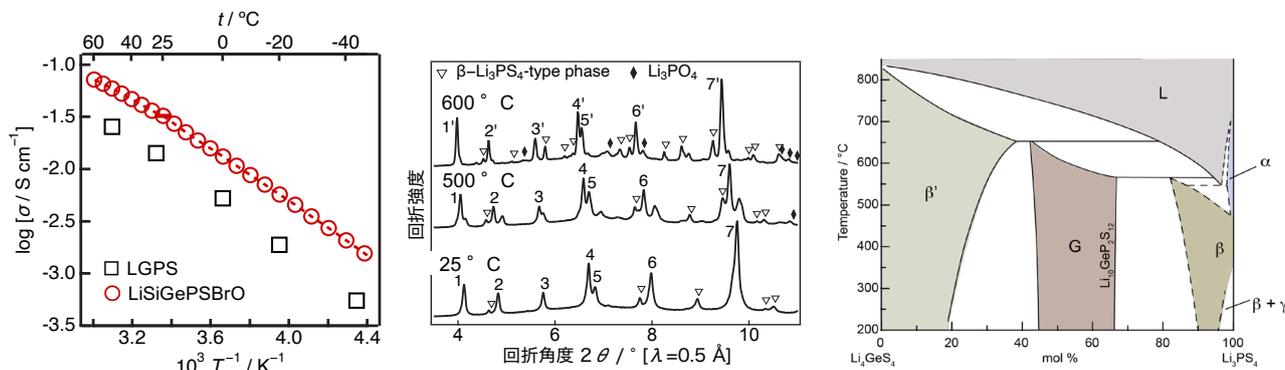
【研究タイトル】

・イオンの長距離輸送場を拓く超 Li 導電体—多相情報分析による探索—

本研究では全固体電池への応用上重要な硫化物系の Li イオン導電体で、最高のイオン導電率を示す物質を探索し、複合電極中でのイオン輸送特性の向上を目指します。物質探索の対象を超イオン導電性が発現する構造型に絞ると、多種の元素が固溶する条件で目的の構造型の物質を合成することは、イオン導電性を高める上で有効な指針であると提案されています [Y. Deng *et al.*, *ACS Appl. Mater. Interfaces* **9**, 2017; Y. Zeng *et al.*, *Science* **378**, 2022]。例えば、この指針に沿った物質として筆者が報告した、超イオン導電相 $\text{Li}_{10}\text{GeP}_2\text{S}_{12}$ (LGPS) を基にした七元系の物質 LiSiGePSBrO [$\text{Li}_{9.54}[\text{Si}_{0.6}\text{Ge}_{0.4}]_{1.74}\text{P}_{1.44}\text{S}_{11.1}\text{Br}_{0.3}\text{O}_{2.04}$; Y. Li *et al.*, *Science* **381**, 2023] は -50°C から 55°C の範囲でオリジナルので 2.3–3.8 倍のイオン導電率を示します (図左)。

七元系のような多元系での物質探索で大きな課題になるのは、相関係の把握と考えられます。例えば、図中央の 5 元系の LGPS 型の固溶相 ($\text{Li}_{9.42}\text{Si}_{1.02}\text{P}_{2.1}\text{S}_{9.96}\text{O}_{2.04}$) の高温 XRD 図形が示す通り、高温で当該物質は、同結晶型ではあるが組成の異なる相へと分解します。オリジナルの LGPS の探索では、このような相変化は図右に例示した相図を用いて整理され、探索に利用されましたが、多元系では相関係の把握が困難です。

イオン渋滞学の下に本研究では、LGPS 型相の探索を通じて、多くの相が生成し得る多成分系において、従前の相図のアプローチに相当するデータベース技術を検討し、新物質探索に活用します。さらにイオン輸送性能を際立たせる専用の電気化学測定系を構築し、イオン導電率の向上が電極複合体の特性に与える影響を明示します。





A02

氏名 松井 直喜

所属: 東京科学大学 総合研究院 全固体電池研究センター



専門分野・キーワード:

- ・ 固体化学
- ・ 電気化学
- ・ 固体イオニクス

本研究では、約 30 年間イオン導電率の最高値が更新されていないフッ化物超イオン導電体の開拓に取り組みます。特に価電子に孤立電子対を持つ元素に着目し、「孤立電子対がイオン輸送をどのように促進/阻害するか」という問いを明らかにするために、メカニズム解析とそのメカニズムに基づく実際の材料設計に取り組みます。

研究では計算科学的手法と実験的材料探索の二つのアプローチを採用します。第一原理分子動力学計算等を用いて、孤立電子対の性質と配置がイオン輸送に与える影響を詳細に調査します。特に、これまで見過ごされてきたイオン渋滞という阻害要因の解消に注目し、材料設計に展開します。一例として、2次元格子のランダムウォークモデルで、孤立電子対の配列がイオン輸送特性に及ぼす影響を調査したところ、孤立電子対が不規則配列した場合にフッ素導電経路が途切れ、長距離拡散が不可能であることが確認されました。本領域内の連携を通じて、メカニズム解析やモデル化、イオン流を最大化させる材料設計の議論を重ね、電子-イオン相関のダイナミクスという未開拓分野の理解と超フッ化物イオン導電体の実現に挑戦します。

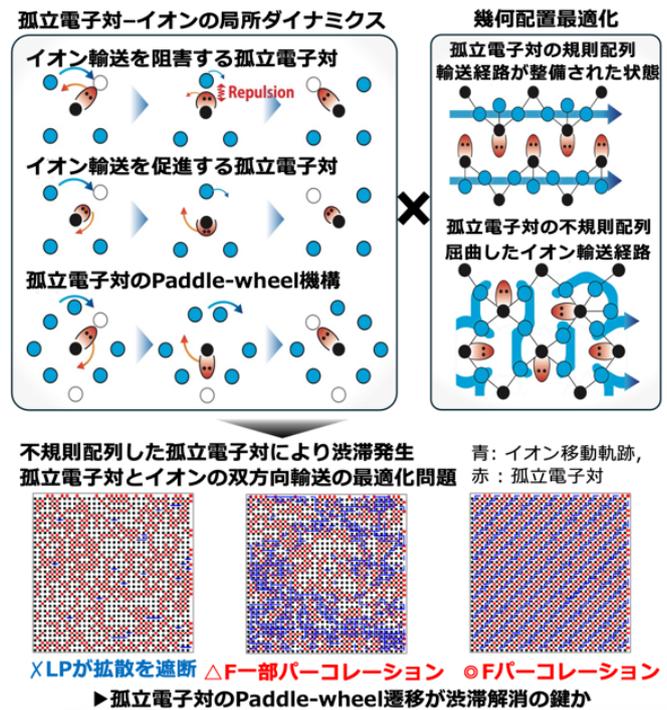


図. イオンと孤立電子対の相関. 孤立電子対の阻害/促進因子を理解することで、イオン輸送を最大化する孤立電子対の配置最適化（材料設計）へ繋げる

A02

石井 暁大

所属: 東北大学 大学院工学研究科 知能デバイス材料学専攻・助教

専門分野・キーワード: 電子分極、屈折率、エリプソメトリー、誘電関数



【イオン伝導体におけるイオン流と電子分極の定量的理解】

本研究では、イオン伝導体の電子分極の大きさを屈折率に基づいて定量評価し、イオン流に対する電気分極の寄与を理解して、分極を制御したイオン伝導体の材料設計に挑みます。

- ・イオン伝導体の屈折率評価
- ・イオン流への電子分極の寄与理解
- ・分極を制御した材料設計

イオン伝導の促進には大きな分極が有効なことは、固体化学の教科書にも記載されています。しかし、イオン・電子分極のどちらがどの程度イオン伝導の促進に寄与しているかは定かではありません。もし、イオン分極の寄与が大きいのなら、強誘電性物質や極性構造物質がイオン伝導性の高い材料の有力候補になります。一方で、もし電子分極の寄与が大きいのなら、電子分極により屈折率は決定されるので、高屈折率物質がイオン伝導性の高い材料の有力候補です。イオン・電子分極それぞれの影響度合いは、可動イオン種や構造フレームワークに依存することも予想されます。

そこで、本研究では様々なイオン伝導体の屈折率を評価して、電子分極がどの程度どのようなイオン流に影響するか理解し、分極を制御したイオン伝導体の材料設計に挑みます。この知見により、本領域の目標の一つであるイオン流を制御した材料の全体最適指針の構築へ貢献を目指します。

研究の具体的なアプローチとして、まず、様々なイオン伝導体の屈折率と、イオン伝導の活性化エネルギーを定量的関係を明らかにします(図)。イオン伝導性に影響する因子は屈折率以外にも多くありますので、屈折率以外の因子を揃えたシンプルなモデルを理論計算して、屈折率と活性化エネルギーを得ます。この際、理論計算の妥当性や効率性について、本領域の計算化学に精通した研究者からご助言を頂きながら進めたいと考えています。理論計算によって、イオン流への屈折率の影響が強い系が見出された後には、その系を実際に合成して屈折率とイオン伝導性の関係を実験的に評価します。屈折率は、エリプソメトリーを用いて得られる誘電関数から決定します。この際には、これまで私がエリプソメトリーを用いて金属・半導体・絶縁体・サーメット・ポリマーなど多様な材料の誘電関数を評価してきた知見と技術を活用します。

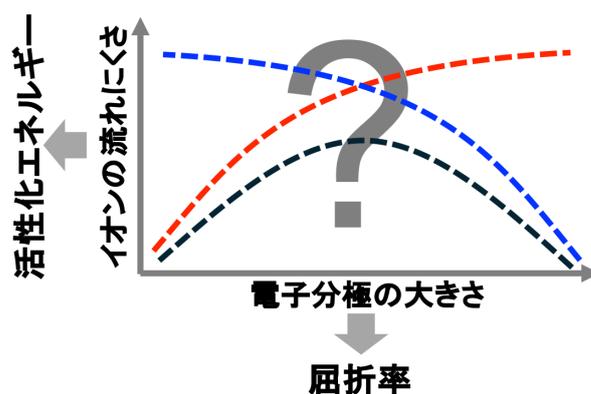


図 イオン流と電子分極の関係を評価するアプローチ。

エリプソメトリーによる誘電関数評価では、物質中の電子の遍歴性やその濃度まで分析可能な場合があります。そこで、本領域内での共同研究によって、誘電関数評価がイオン-電子混合導電体の開発にも有用と示したいです。



A02

上野 和英

所属: 横浜国立大学 大学院工学研究院



専門分野・キーワード:

- ・電気化学
- ・高分子化学
- ・イオン液体
- ・有機系電解質材料

【研究タイトル】

イオン運動相関の理解と制御に基づく高 Li 伝導性ソフトマター電解質の創製

本研究では、高イオン伝導性と高Li輸率 ($t_{Li} \sim 1$)を両立するソフトマター電解質の創出のため、材料科学的な見地から行われてきた従来の電解質探索にイオンの集団運動や運動量・体積保存則を考慮した濃厚電解液理論を融合した新しい電解質設計指針を確立することを目指します。すなわち、濃厚電解液やその擬固体(ゲル化)電解質を含むソフトマター電解質を主な検討対象として、これまで考慮されていない各イオン間の運動相関を精緻に理解し、電解質材料の分子レベルの情報との相関性を解明することで、高速かつ選択的なLiイオン伝導を発現するための条件を明らかにします。

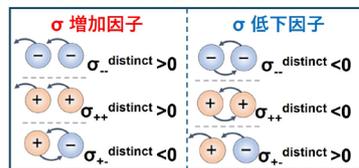
液体・非晶性材料であるソフトマター電解質は(結晶性)固体イオニクス材料とは性状・原子分子の配列構造が異なりますが、それぞれのイオン伝導機序や材料設計指針の相互理解が進めば、材料探索に新たな方向性を示すことができると考えています。また、複雑なイオン間の相互相関の理解には計算・数理科学が欠かせず、高度計測技術はソフトマター電解質中の構造・ダイナミクスの解明に必要不可欠です。本学術変革領域の研究者との情報交換や積極的な共同研究を通して、革新的なイオン伝導材料の創出に繋がる新しい電解質設計指針を確立できればと考えています。

◆濃厚電解液理論によるイオン伝導の考え方

$$\begin{aligned} \text{イオン伝導率: } \sigma &= \sigma_{++} + \sigma_{--} - 2\sigma_{+-} \\ &= \underbrace{\sigma_{++}^{\text{self}} + \sigma_{--}^{\text{self}}}_{\text{自己相関項}} + \underbrace{\sigma_{++}^{\text{distinct}} + \sigma_{--}^{\text{distinct}} - 2\sigma_{+-}}_{\text{同・異符号の相互相関項}} \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} \text{Li輸率: } t_{Li} &= (\beta^2 - 4\alpha + 4\alpha^2)/4(1-\alpha)(\beta-1) \\ \alpha &= \sigma_{++}/(\sigma_{++} + \sigma_{--}), \quad \beta = 2\sigma_{+-}/(\sigma_{++} + \sigma_{--}) \end{aligned}$$

◆イオン伝導における相互相関項



◆濃厚電解液理論に基づくリチウムイオン輸率

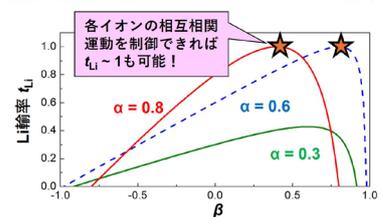


図1 濃厚電解液理論によるイオン伝導理論式(左)、イオン伝導に係わるイオン-イオン相互相関(中央)、および濃厚電解液理論に基づく Li 輸率と Onsager 係数の関係(右)。

A02

谷端 直人

所属: 名古屋工業大学



専門分野・キーワード: 混合伝導体・電子流・イオン流・促進性

【研究タイトル】

電子流によるイオン流高促進性高速イオン流材料の設計指針と創製

本研究は、「電子流によるイオン流の促進性」という新たな視点から、高速イオン流材料の創製に挑むものであり、エネルギー変換デバイスや固体触媒反応といった先端材料分野における根源的な課題解決に寄与することを目的としています。具体的には、 $\text{Na}_{10}\text{Sn}_4$ などにおいて観測された超高速Naイオン流現象に注目し、その背後にある電子-イオン相関の実証的な理解と、電子流がイオン流を促進する効果の定量的評価を進めます。この知見を基に、より高性能な電子-イオン混合伝導材料の設計指針を確立し、実用材料への展開を図ってまいります。

本研究では、これまで電子流とイオン流の干渉効果が主に理論的あるいは界面現象として扱われてきたのに対し、化合物単相中での電子流によるイオン流促進を新たに実験的に検証することを目指します。その実現には、電子伝導を制御した測定手法の確立が不可欠です。申請者は、熱力学および電子-イオン伝導性の観点から適切な材料組み合わせを既に見出しており、実験準備は整っています。これにより、電子ブロッキング電極を用いた直流分極測定などを通じて、電子流によるイオン流の促進性の評価が可能となると見込まれます。

共同研究の面では、材料合成・構造解析・計算科学・電気化学評価といった多分野の専門性を結集し、学際的な連携を通じて課題解決に取り組んでまいります。特に、計算グループと連携し、第一原理計算や分子動力学法によって、イオンと電子の流路分布の空間的相関を詳細に解析していきたいと考えています。これにより、材料中における電子流とイオン流の協奏的關係性を明らかにし、促進効果の本質的理解に迫ります。さらに、得られた設計指針に基づき、電子流による促進性を最大限に引き出せる新規材料の創製に取り組みます。特に、別途検討を進めている塩化物系電極材料への応用も視野に入れ、将来的には触媒材料への展開も検討しています。

本研究に対する意気込みとして、電子流によるイオン流促進の新原理に基づく材料設計という未踏領域に果敢に挑戦し、エネルギー・環境問題の解決に貢献することを志しております。この分野における新たな学術的潮流を創出し、研究コミュニティに新しい視座を提供することを目指してまいります。



A02

多々良 涼一

所属: 横浜国立大学 大学院工学研究院

専門分野・キーワード: 電気化学、電池、電解質溶液



【濃厚ソフト電解質におけるイオン渋滞現象の理解】

リチウムイオン電池の電解液には通常1 mol/L程度の電解液が使用されていますが、近年3 mol/L以上まで濃くした濃厚電解液が注目されています。濃厚電解液の中でも、特定の条件下ではリチウムイオンが固体電解質のようにホッピング伝導することが報告されています。この発現のためには液体電解質中で「キャリアイオン同士が近傍に位置しイオンパスを形成している」、すなわちイオン渋滞的に振る舞う必要があると考えられます。本研究では、液体電解質中及びこれをゲル化した高分子ゲル電解質中において、固体電解質のようなホッピング伝導が起こるメカニズムについて、イオン渋滞現象と関連付けることで更なる理解を得ることを目的とします。固体電解質は濃度分極が起こらないためデバイス的高速充放電が可能であることが期待されていますが、現行蓄電池に搭載される液体電解質でも、ホッピング伝導により濃度分極を抑制できるような設計指針の獲得に繋がりたいと考えています。

- ・濃厚電解液とそのゲル化
- ・非水系電解液中のホッピング伝導機構の解明
- ・蓄電池の高速充放電への展開

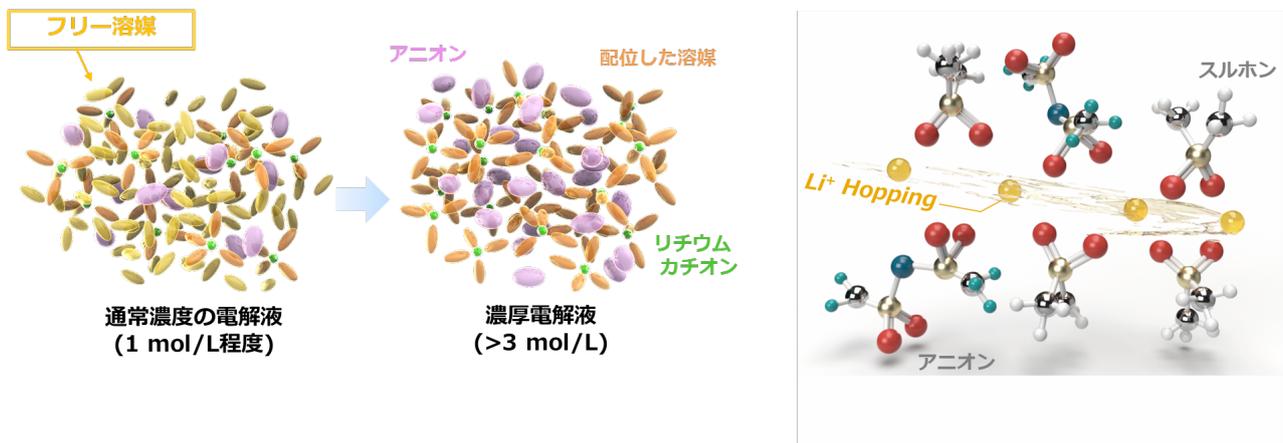


図 (左)濃厚電解液の模式図 (右)ホッピング伝導の模式図

A03

尾原 幸治

所属: 島根大学 材料エネルギー学部



研究メンバー

- ・ 廣井 慧 助教
- ・ 小林 健太郎 特任助教

専門分野・キーワード:

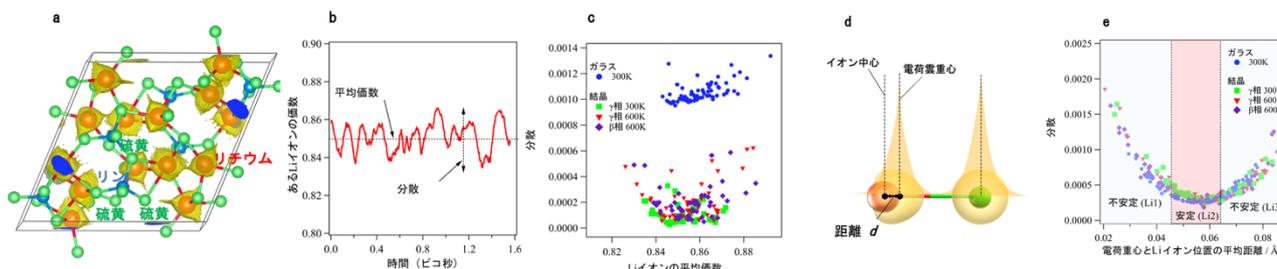
- ・ 放射光 X線回折
- ・ PDF
- ・ イオン伝導ガラス

【研究タイトル】

高度 PDF 計測・分析によるイオン伝導ガラス中のイオン渋滞現象の解明

本研究では、次世代の全固体電池に不可欠な固体電解質材料として注目されるLi/Na系硫化物ガラスにおいて、イオンの移動が妨げられる「イオン渋滞」のメカニズムを原子・分子レベルで明らかにすることを目指しています。全固体電池用ガラス電解質の性能を飛躍的に向上させるには、高速かつ安定したイオン伝導が不可欠であり、ガラス中でのアニオンの振動やイオンのジャンプ運動といった動的構造の理解が重要な鍵となります。中性子準弾性散乱やPDF解析といった先進的な実験手法を駆使し、ガラス骨格とイオンの相互作用をピコ～ナノ秒スケールで観測・解析することで、その本質に迫ります。こうした静的・動的構造両方に踏み込むアプローチは、従来の研究には見られない本研究ならではの特徴です。

今後は、本学術変革領域の構造分析計測や理論計算を専門とするメンバーと連携し、ガラス構造とイオンダイナミクスの因果関係をより深く理解するための共同研究も積極的に展開していきます。本研究は固体電解質開発に新たな視点をもたらすとともに、非晶質材料に対する理解を大きく前進させる研究になると考えています。



図：Bader電荷分析法で評価したLiイオンの環境。(a) $\text{Li}_2\text{S-P}_2\text{S}_5$ 結晶のBader法から得られたLiイオンの電荷密度。(b) Liイオンの1.6psの間の平均価数振動と分散。(c) ガラス相、結晶 β 相、結晶 γ 相のLiイオンの平均価数と分散の相関。(d) Bader解析で得られる距離情報。(e) ガラス相、結晶相各々のLiイオン位置と電荷雲重心の平均距離と分散の相関関係。



A03

木村 勇太

所属: 東北大学 多元物質科学研究所



専門分野・キーワード:

固体イオニクス、電気化学、放射光 X 線イメージング

【研究タイトル】

蓄電池電極内のイオン渋滞起因の不均一充放電反応の 3D オペランドマルチスケール実測

リチウムイオン電池や全固体電池をはじめとする蓄電池の合剤電極には、活物質、電解質、導電助剤などの複合材料が用いられており、その内部では、膨大な数の構成材料の粒子が3次元的に無秩序に分布し、極めて複雑なイオン/電子伝導経路を形成しています。そのため、特に高レートでの充放電時に、合剤電極内でイオン/電子の流れが部分的に停滞し、活物質へのイオン・電子の供給が局所的に不十分になる場合があります。さらに、上記蓄電池の代表的な正極活物質である層状酸化物材料のリチウムイオン拡散は極めて異方的であるため、高速なイオン伝導パスが粒界において遮断された際に、活物質二次粒子内部でもイオン・電子流が停滞する可能性があります。このような異なる空間スケールで生じるイオン・電子流の渋滞は、合剤電極及び各活物質粒子内に不均一な充放電反応を生じさせ、蓄電池の性能を大きく劣化させる要因となりえます。したがって、高性能な蓄電池を開発するためには、電極内に不均一な充放電反応を生じさせる、イオン・電子流渋滞の要因を明らかにし、その発生を抑制することが求められます。そこで本研究では、結像/投影型コンピュータ断層撮影-X線吸収微細構造法(CT-XAFS)法を基盤とする当研究者独自の技術を用いて、イオン・電子流渋滞によって生じる合剤電極および各活物質粒子内の不均一な充放電反応を3次元・オペランド・マルチスケールで実測するとともに、それによって得られる充放電反応の空間分布の大規模時系列データを解析することで、電極内でイオン・電子流渋滞が生じるメカニズムをデータ駆動的に明らかにすることを目指します。このようなアプローチは、従来の特定の物理モデル/仮説を元にしたトップダウン的なアプローチとは大きく異なり、イオン同士の相互作用といった、従来のモデルが想定していなかった新現象の発見を可能とするため、イオン渋滞学の学理創出に貢献できると考えています。

A03

小板谷 貴典

所属: 京都大学大学院理学研究科化学専攻

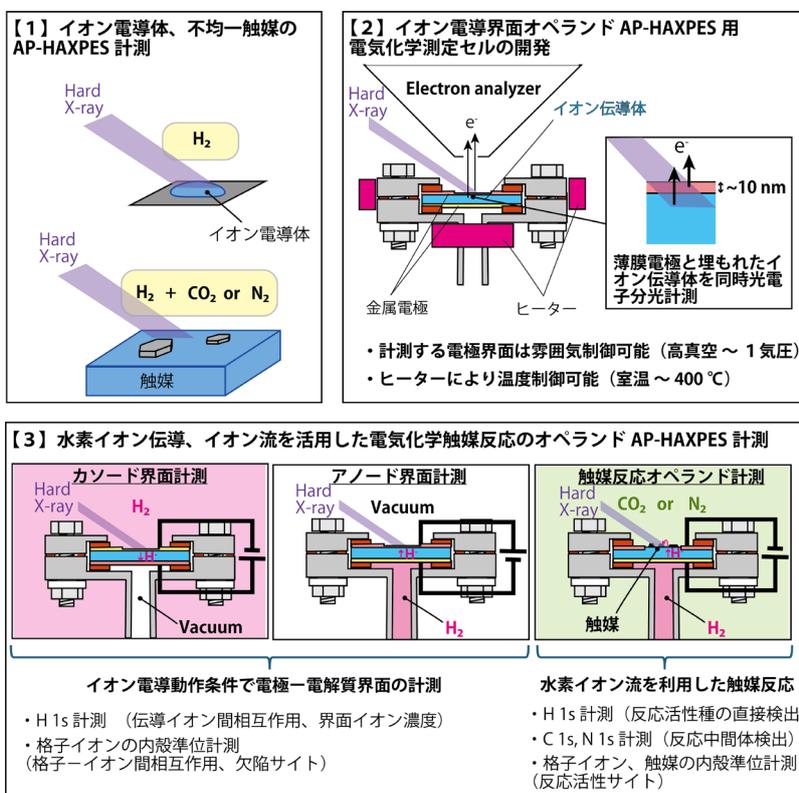
専門分野・キーワード: 表面・界面化学、オペランド分光



【オペランド光電子分光による水素イオン電導の機構解明と不均一触媒反応への応用】

水素イオン伝導体をベースとした不均一触媒表面、あるいはイオン伝導体-電極界面をオペランド光電子分光計測することにより、触媒反応機構やイオンが流れている状態の界面の化学状態を明らかにすることを目指します。触媒動作中の試料の内殻準位や価電子状態を光電子分光によって詳細に計測することで、水素イオンや格子イオンの化学状態に関する知見を得ます。光電子分光計測と同時に質量分析法で触媒反応活性評価を行うことにより、どのような要因が反応活性を左右するのかを明らかにして、触媒材料開発に関する指針を得ます。さらには、水素イオン流を反応活性種として活用する電気化学反応セルを作製し、窒素や二酸化炭素といった不活性分子の転換反応のその場分光計測にも挑戦します。一連の研究の知見をもとに、電気化学的に水素イオン流を制御してイオン伝導体と触媒が接する界面の電子状態や組成を能動的に変化させ、オペランド分光にて電気化学反応機構の解明を目指します。

- ・ オペランド分光による不均一触媒反応機構の解明
- ・ 電気化学反応のオペランド分光計測





A03

古府 麻衣子

所属: 東京大学物性研究所附属中性子科学研究施設

研究メンバー

- ・*秋葉 宙 助教



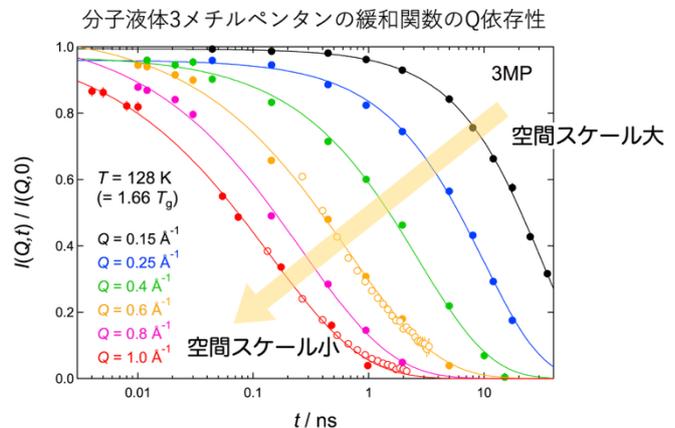
専門分野・キーワード: 化学物理、中性子散乱、水素化合物、ダイナミクス

【中性子散乱によるヒドリドイオン伝導体の微視的拡散機構の解明と手法の確立】

- ・ ヒドリドイオン伝導体の微視的拡散機構の解明
- ・ 中性子散乱によるイオンの協働的拡散の計測法の確立

私が専門とする中性子散乱法では、空間 (1~100 Å) と時間 (0.01ps~100ns) 領域でのミクロスコピックなダイナミクスを調べることができます。X線や電子線と比べると、軽元素、とくに水素の観測に適しており、これまでもさまざまな物質中の原子やイオン、分子の拡散が調べられてきました。過去に行われてきたイオン伝導体の中性子散乱研究では、イオンの多体相関を考慮していない研究がほとんどです。つまり、空孔サイトにジャンプするシンプルなランダムウォークモデルを仮定して議論されてきました。しかし、イオンの密度が高くなるとイオン同士の相関は無視できなくなります。本研究では、中性子散乱を用い、多体相関するイオンの拡散の計測を行います。

まず、空間スケールを変えながら緩和関数の詳細を調べたいと考えています。図に示したのは、液体の拡散挙動を実際に測定した例です。中性子散乱では、逆格子ベクトル Q の関数としてデータを取得します。 Q の大きい (分子間距離程度の空間スケール: 1-10 Å) ところでは、分子間の短距離相関を反映し、緩和関数は単純な指数関数に従いません。これは、個々の分子が、過去の位置情報を記憶した複雑な運動をしていることを示唆しています。 Q の小さい領域 (空間スケール: ~50 Å) では、運動は平均化され、あたかも“普通の”ブラウン運動のように振る舞います。同様の挙動がイオン伝導体でも見られるのではないかと期待しています。また、最近実用化されはじめた偏極中性子を用いた測定では、特定の距離にあるイオン同士の運動を捉えることができます。つまり、イオンの集団運動が検知可能です。これらの手法を用いて、ヒドリドイオン伝導体 (Ba,Sr)_{1.75}LiH_{4.5-2x}O_x の拡散メカニズム解明に取り組みます。ヒドリドイオン伝導体以外にも、本領域の研究者の方々と協力して、さまざまなイオン伝導体 (リチウム伝導体や他の超イオン伝導体) の計測も行いたいと考えています。



A03

麻生 亮太郎

所属: 九州大学 大学院工学研究院



研究メンバー（他にいれば *若手研究者を明示）

- ・佐野 弘貴 M2
- ・田中 友基 B4

専門分野・キーワード:

- ・電子顕微鏡学
- ・ナノ構造解析
- ・その場観察
- ・位相解析
- ・電圧印加計測

【研究タイトル】

先端ナノ構造評価によるイオンダイナミクスのオペランド解析

本文

イオンの集団運動（イオン流）は、機能性材料（電池、触媒など）の高性能化や新物質創製の実現を担う重要な現象です。イオン流を解明することで物質設計の指針を構築するため、協働的な研究が進められています。本研究では、最先端の電子顕微鏡法を用いたナノスケール局所構造解析のアプローチによって貢献します。具体的には、蓄電固体デバイス（電池材料）を対象とし、その場で電圧を印加することでイオン流を誘起し（能動的に制御）、観測を行い、ナノレベルでイオンダイナミクスを解明します。この際、新技術である「ナノシールド」を用いた電子線照射ダメージレス観測技術を活用することで、本質的なイオン流を区別・特定することが可能です。さらに、金属ナノ粒子触媒（触媒材料）を対象として、ナノ領域へのその場電圧印加を行い、金属表面におけるガス反応や金属-担体界面での電荷移動・イオン移動をその場解析します。先端ナノ構造評価技術を総動員したオペランド解析を活用することで、機能性材料の内部構造や表界面におけるイオンダイナミクスを解明し、基礎的な学理の構築に貢献します。



今年度のイベント紹介

第4回領域会議

第4回領域会議を開催します。

研究会ホームページ：準備が整い次第共有予定

開催日時・場所（対面のみで実施）

日時：2025年11月14日(金)~15日(土)

場所：筑波山ホテル青木屋

〒300-4352 茨城県つくば市筑波753-1 筑波山ホテル 青木屋

交通アクセス：TX秋葉原駅からTXつくば駅下車「筑波山」行きシャトルバスにて約40分。常磐道土浦北IC筑波山方面へ向かい約30分。（*つくば駅やその他の場所への送迎バスの用意を検討中）

第90回固体イオニクス研究会

研究会テーマ 「イオニクス計算・理論の最新動向」

「富岳」などのスーパーコンピュータの利活用により、より大規模かつ高精度なイオン伝導シミュレーションが可能となり、また機械学習力場の台頭もあって、イオンダイナミクスに関する新しい知見が得られるようになってきました。それに合わせて、イオニクス理論の再検証や数値モデルによる解析といった新たな動きも出てきています。このような方向性を牽引する講師の先生方にご講演いただきます。

研究会ホームページ：<https://www.cd-mach.cls.iir.titech.ac.jp/ssi90/>

主催：日本固体イオニクス学会

協賛：公益社団法人電気化学会、公益社団法人日本セラミックス協会、科研費学術変革領域研究(A)「イオン渋滞学」、文部科学省「富岳」成果創出加速プログラム「富岳」材料物理化学課題

開催日時・場所（対面のみで実施）

日時：2025年6月16日（月） 13:00~17:50

場所：東京科学大学 大岡山西9号館2階デジタル多目的ホール

〒152-8550 東京都目黒区大岡山2丁目12-1

東急目黒線・大井町線大岡山駅中央改札より徒歩5分

アクセス：<https://www.liberal.ila.titech.ac.jp/hall/about/>

お問合せ先：東京科学大学 総合研究院 化学生命科学研究所 館山佳尚

E-mail: tateyama@cls.iir.isct.ac.jp

MRM2025

開催日時：2025年12月8日(月)-13日(土)

場所：パシフィコ横浜

〒220-0012 神奈川県横浜市西区みなとみらい1-1-1

みなとみらい駅から徒歩5分、桜木町駅から徒歩12分

学術変革領域(A)「イオン渋滞学」事務局

TEL: 03-5841-4353

E-mail: office@ion-jamology.jp

<https://ion-jamology.jp/>

