

【学術変革領域研究（A）】

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（イオン渋滞学）

	研究代表者	東京大学・理学系研究科・教授 一杉 太郎（ひとすぎ たろう） 研究者番号：90372416
	研究課題情報	課題番号：24A201 研究期間：2024年度～2028年度 キーワード：電池、触媒、渋滞学、数理学、電気化学、固体物理、固体化学

なぜこの研究を行おうと思ったのか（研究の背景・目的）

●研究の全体像

化学反応におけるイオンや分子の移動を、「クルマの流れ」という視点で考えることはできるだろうか？たとえば、Liイオン電池や全固体電池を充電する時には、正極から負極へイオンが移動する。これはまさにクルマの流れに似ており、社会ではその渋滞解消を目指している。電池においても様々な要因によりイオンの流れが滞り、望ましい性能が発揮されないことがしばしば起きる。



図1 異分野融合により、イオン渋滞学を構築する

このように分子やイオンの流れが滞る現象を、我々は「イオン渋滞」と捉えた。この問題は、電池反応、触媒反応、水素吸蔵、結晶成長など、さまざまな領域で起きており、その解決には、都市工学、土木工学、交通工学で発展してきた数理学の一分野である「渋滞学」が活用できると発想した。

そこで本研究では、材料科学（電池・触媒）と渋滞学を融合し、新学理である「イオン渋滞学」を打ち立てる。イオン渋滞現象を理解し、これを制御することにより、**カーボンニュートラル社会の実現**に向けて新材料（電池や触媒など）を創製する。さらに、実験とモデリングから生まれる新たな課題を通じて、**数理学の発展**に寄与する。

●イオンの集団運動「材料科学（電池・触媒）×数理学」

本研究領域では、イオン同士の相互作用に注目し、材料特性の向上を図る。近年、イオン流とその周囲にある原子や電子を**集団的に**制御し、良い特性の発現を目指す研究が発展してきている。結晶格子や原子・分子の集合体（クラスター）が素速く柔らかく変形し、イオンの流れを促進し、機能を強化する描像が得られつつある。

そのような学理を構築するにあたり、現在の理論だけでは不十分である。従来の理論は「イオンが各々独立して動くことができる」と仮定してきた。これはイオン密度が希薄であるときのみ成立するため、**高密度なイオンの流れ**を説明できない。イオン密度が高まると、イオン同士の相互作用が無視できなくなる。そのため、結晶格子や電子との相互作用（イオン-格子相互作用、イオン-電子相互作用）を適切に捉え、イオンの集団運動を記述する理論を構築することが望まれる。このような学術的な背景のもと、量子化学・固体化学・固体物理の理論と渋滞学を融合し、新たな学術を構築する。

渋滞学は、「クルマや人々の集団運動や流れを扱う科学」、つまり、輸送や物流を研究する数理学の一分野である。クルマや人を粒子として捉え、その粒子間の相互作用を取り入れた**非平衡統計力学**に立脚している。本研究領域と従来の材料・化学研究との根本的な違いは、**粒子間の相互作用**を取り入れ、より**動的なプロセス**を記述してイオンの流れを広い視点から制御する方法を開拓する点である。

分野	注目するもの	従来理論の課題	新しい学問領域	目標
材料科学 (電池・触媒)	電池・触媒材料の 化学反応	イオンが独立していると仮定 (一粒子近似)	両者を融合させたイオン渋滞学	新材料
数理学	非平衡統計力学	理論適用範囲の拡大		新数理学

●異分野融合に向けた領域運営方針：□□(図2)に込めた思い

- 9つの大きなキューブは、結晶や複合材料を表すとともに、3つの計画研究と3つの融合研究が織りなす本領域の体制を同時に示している。本領域は**三つの計画研究が横糸**となり、**三つの融合プロジェクトが縦糸**となり、一体となって研究を進める。
- 周囲の小さなキューブは触媒反応や材料合成過程を表現する。さらに、研究者が集まり、本領域が育っていく様子を表している。「**研究を楽しむ**」ことを最重要視して、領域運営を行う。
- これらの中に「**イオンの流れ**」という本領域の研究テーマが矢印という形で埋め込まれている。



図2 本領域の□□

理論家と実験家が密接に連携し、「理論と数理学からインスパイアされ、独創的な実験を行う」というスタンスを重視する。そして実験結果を理論と数理学にフィードバックして、**正のスパイラル**を生みだす。

この研究によって何をどこまで明らかにしようとしているのか

図3に示す全体構想のもと、A01、A02、A03全研究メンバーで以下の三つの融合プロジェクトを推進する。この融合プロジェクトを起点に、イオンの集団運動に関する学術を構築し、電池や触媒材料について、「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」の変革を成し遂げる。

【① イオン集団の流れ(マイクロ-メソ領域)】

結晶格子スケールでのイオンの集団運動を単結晶材料やモデル材料で実験的に検証し、数理モデルにフィードバックする。それにより、理論をブラッシュアップする。

【② 経路ネットワーク(メソ-マクロ領域)】

より広い空間スケールについて、分子動力学法や動的モンテカルロ法を利用して集団運動を詳細に解析する。実験では、高度な合成技術を用いて新材料を合成し、イオン流制御を行う。そして、先端計測技術によりイオン渋滞現象を定量的に解明する。

【③ 全体最適(マイクロ-メソ-マクロ領域)】

マクロスケールでの物性発現を目指し、粒界・界面設計や複合材料(結晶材料と非結晶材料等の混合体)の最適化を通じ、マイクロ-メソ-マクロをつなぐ(図4)。

上記を進めるため、三つの計画研究を進める。

- A01・計算・数理** 代表：東工大・安藤康伸
- A02・材料創製** 代表：理研・小林玄器
- A03・先端計測** 代表：名古屋大・中村崇司

具体的な材料として、HやLiイオン伝導体が挙げられる。たとえば、Ba_{1.75}LiH_{2.7}O_{0.9}の相転移は、イオン-イオン、イオン-格子相関が複合的に関与していることが予想され(図5)、イオン渋滞学のまたたない研究対象である。また、Li₁₀GeP₂S₁₂(LGPS)のイオン伝導性について、Liイオンの拡散経路や拡散係数を最先端計測技術により明らかにし、第一原理計算と数理モデル計算により、材料設計指針の構築を進める。

研究開始当初は無機材料を中心とした電池や触媒材料に注力する。後半には、様々な化学・材料分野に展開し、イオン渋滞学の適用範囲を広げる。

核心的な問い「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」
そして「その渋滞をいかに制御するの？」

材料科学 (化学、固体物) × **渋滞学** (非平衡物)

理論・数理研究者、材料合成、先端計測とコラボ

イオン渋滞学
イオンと周囲が**集団的に**運動して、イオンの**“流れ”**を制御する

カーボンニュートラル社会の実現

蓄エネ: Liイオン電池, Naイオン電池, 全固体電池
産業競争力強化
創エネ: 触媒, 水電解, アンモニア合成

図3 全体構想

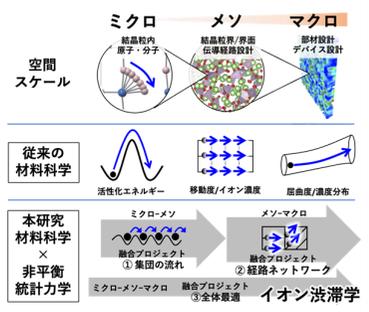


図4 ミクロからマクロまでをつなぐ

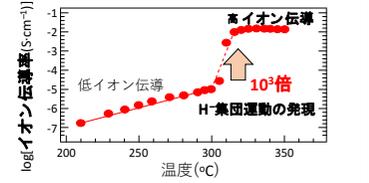


図5 Ba_{1.75}LiH_{2.7}O_{0.9}のイオン伝導率