文部科学省科学研究費助成事業
新学術領域研究（2019年度－2023年度）

Hypermaterials News Letter

Vol.1

CONTENTS

領域代表からのメッセージ 2
研究組織と評価委員 3
領域の研究体制 4
会議・研究会などの報告 8
キックオフミーティング
XenonPyのハンズオンセミナー
第４回 国際非周期結晶スクール
国際交流 12
リバプール滞在記
International Research Network
2019年度 活動の記録 14
受賞
ハイパーマテリアルセミナー
今後の予定

新たな挑戦へ

God doesn't require us to succeed;
he only requires that you try.
Mother Teresa

研究領域代表者
田村 隆治
東京理科大学　基礎工学部・教授

総括班メンバーをはじめ、多くの方々のお力添えのもと、新学術領域「ハイパーマテリアル：補空間が創る新物質科学」がこのたび発足いたしました。木村薫先生、蔡安邦先生から領域代表のバトンを引き継いで挑戦した新学術領域申請がこうして日の目を見ることができたことは、準結晶分野の一員として大変嬉しい限りです。このたびの申請では、新たな学術の構想にあたり、議論を重ね、物質の新概念「ハイパーマテリアル」を領域名称に据えました。「ハイパーマテリアル」は、準結晶や近似結晶など補空間を含む高次元空間（ハイパースペース）で統一的に記述される物質群（マテリアル）を指します。この新学術領域には、データ科学をはじめ分野外の新進気鋭の研究者が多く参画し、また令和二年度からは公募によりさらに異分野の研究者が拡充されることになります。これまで世界を先導してきた日本の輝かしい準結晶研究の歴史に新たなページを刻むべく、学融合を推進していきたいと考えております。

この新学術領域が目指すことは、一言で「挑戦」です。準結晶が発見されてから35年が経ちましたが、準結晶の発見はまず、原子の準周期配列の発見でした。この新学術領域では、スピンなどの準周期配列の実現にチャレンジします。準結晶の発見はまた、合金準結晶の発見でした。この新学術領域では、合金を超えた様々な準結晶の創製にチャレンジします。準結晶の発見はさらに、準結晶構造を周期近似した一群の近似結晶の発見につながりました。この近似結晶は、高次元でなければ認識できるものではありません。この新学術領域では、高次元で物質を眺める新たな視点をもたらすことで新物質科学の創成にチャレンジします。「結晶ファースト」から「準結晶ファースト」へと既存の物質科学にパラダイムシフトを引き起こすことが私たちの究極の目標です。

科研費の審査では実現可能性が問われます。しかし、この新学術領域では、インパクトの極めて大きな「挑戦」を敢えていくつも掲げました。領域メンバーは生みの苦しみに直面することが容易に想像されます。しかし、総括班の舵取りのもと、チームの総力を結集して果敢に挑戦し、新たな知を開拓する領域を目指したいと思います。メンバーの皆様にはこの点、ご理解とご協力をお願いいたします。また、領域外の皆様にはこれを機にハイパーマテリアルの魅力を知っていただき、何らかの形で私たちの挑戦に加わっていただければ望外の喜びです。今後ともご支援・ご鞭撻のほど、よろしくお願いいたします。

研究代表者
田村 隆治
東京理科大学 教授

研究分担者
木村 薫
東京大学 教授

研究分担者
高際 良樹
物質・材料研究機構
主任研究員

研究分担者
高倉 洋礼
北海道大学 准教授

研究分担者
竹森 那由多
岡山大学 特任助教

研究分担者
出口 和彦
名古屋大学 講師

研究分担者
吉田 亮
統計数理研究所 教授

竹内 伸
東京理科大学 元学長

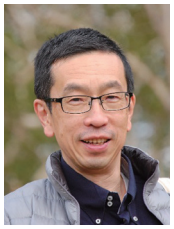
石井 靖
中央大学
理工学部 教授

寺倉 清之
産業技術総合研究所
名誉リサーチャー

伊藤 聡
物質・材料研究機構
統合型材料開発・情報基盤部門
情報統合型物質・材料研究拠点長

佐藤 憲昭
名古屋大学
理学研究科 教授

A01 研究代表者
田村 隆治
東京理科大学
基礎工学部 教授
専門分野▶金属物性
役割分担▶研究の総括／3次元局在スピン系ハイパーマテリアルの合成



A01 研究分担者
木村 薫
東京大学
新領域創成科学研究科 教授
専門分野▶材料物性学
役割分担▶半導体ハイパーマテリアルの合成

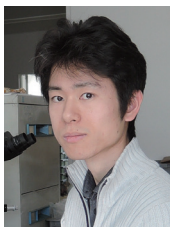
A01 研究分担者
石政 勉
公益財団法人
豊田理化学研究所 フェロー
専門分野▶結晶工学
役割分担▶強相関系ハイパーマテリアルの合成

A01 研究分担者
室 裕司
富山県立大学
工学部 准教授
専門分野▶強相関実験
役割分担▶フラストレート系・酸化物系ハイパーマテリアルの合成

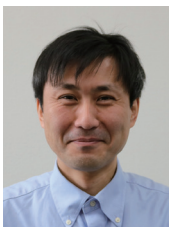
A01 研究分担者
山田 庸公
東京理科大学
理学部第一部 助教
専門分野▶材料工学
役割分担▶酸化物系ハイパーマテリアルの合成

A02 研究代表者
高倉 洋礼
北海道大学
工学研究院 准教授
専門分野▶結晶物理
役割分担▶研究の総括／高次元結晶構造解析

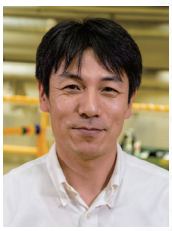
A02 研究分担者
藤田 伸尚
東北大学
多元物質科学研究所 助教
専門分野▶物性理論
役割分担▶構造解析と補空間モデリング



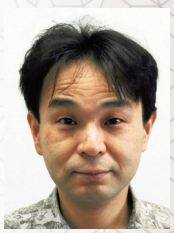
A02 研究分担者
門馬 綱一
国立科学博物館
地学研究部 研究主幹
専門分野▶結晶学
役割分担▶構造可視化とトポロジー探索



A02 研究分担者
綿貫 徹
量子科学技術研究開発機構
量子ビーム科学部門 次長
専門分野▶固体物理
役割分担▶相転移とX線回折・散乱



A02 研究分担者
松浦 直人
総合科学研究機構
中性子科学センター
グループリーダー
専門分野▶凝縮系物理
役割分担▶補空間ダイナミクスと低エネルギー励起



A02 研究分担者
松下 能孝
物質・材料研究機構
技術開発・共用部門
グループリーダー
専門分野▶構造物性
役割分担▶粉末X線回折による構造評価

A03 研究代表者
吉田 亮
統計数理研究所
データ科学研究系 教授
専門分野▶データ科学
役割分担▶研究の総括、高次元記述子の開発

A03 研究分担者
桂 ゆかり
東京大学
新領域創成科学研究科 助教
専門分野▶マテリアルズインフォマティクス
役割分担▶実験値データベース

A03 研究分担者
竹森 那由多
岡山大学
異分野基礎科学研究所
特任助教
専門分野▶物性理論
役割分担▶高次元電子構造計算法の開発（固体）

A03 研究分担者
野澤 和生
鹿児島大学
理工学域理学系 准教授
専門分野▶物性理論
役割分担▶高次元電子構造計算法の開発（表面）

A04 研究代表者
出口 和彦
名古屋大学
理学研究科 講師
専門分野▶強相関電子物性
役割分担▶研究の総括／ハイパーマテリアルの磁性・超伝導・輸送現象

A04 研究分担者
枝川 圭一
東京大学
生産技術研究所 教授
専門分野▶材料科学
役割分担▶ハイパーマテリアルの格子物性

A04 研究分担者
古賀 昌久
東京工業大学
理学院 准教授
専門分野▶物性理論
役割分担▶ハイパーマテリアルの磁性・量子臨界現象

A04 研究分担者
高際 良樹
物質・材料研究機構
エネルギー・環境材料研究拠点
主任研究員
専門分野▶材料科学
役割分担▶ハイパーマテリアルの熱電物性

A04 研究分担者
杉本 貴則
東京理科大学
理学部第一部 講師
専門分野▶物性理論
役割分担▶ハイパーマテリアルの強相関磁性

A04 研究分担者
中村 真
中央大学
理工学部 教授
専門分野▶素粒子理論
役割分担▶ハイパーマテリアルの輸送現象

A04 研究分担者
橋爪 洋一郎
東京理科大学
理学部第一部 講師
専門分野▶数理物理・統計物理
役割分担▶ハイパーマテリアルの統計物理

計画研究
A01
ハイパーマテリアルの合成

研究代表者
田村 隆治
東京理科大学 教授

研究分担者
木村 薫 東京大学 教授
石政 勉 公益財団法人豊田理化学研究所 フェロー
室 裕司 富山県立大学 准教授
山田 庸公 東京理科大学 助教

A01班は、金属はもちろんのこと、金属の枠を超えた様々な材料分野にわたって新規ハイパーマテリアルを探索・合成し、人類が対象とする物質の枠を大きく拡大することを目的としている。対象とする物質群は、図１に示すように、金属・半導体・セラミックス・ポリマーハイパーマテリアルと多岐にわたり、磁性・半導体・超伝導・酸化物ハイパーマテリアルなど、これまで存在しなかった新物質の創製に挑む。領域内の研究連携体制を図２に示す。新物質の合成にあたり、平均価電子濃度にもとづく従来型のシンプルな設計指針に加えて、**A03班**が機械学習により予測する候補物質を取り入れて探索をすすめていく。合成したハイパーマテリアルの構造解析を**A02班**が、物性測定を**A04班**が受け継ぎ、すみやかに構造と物性の双方を明らかにする。これにより、高次元性や高対称性、準周期性などと密接に関連した現象を追求する。さらに、**A04班**と協働して高次元構造と物性の間に潜む関係性を追究することにより隠れた法則性（Hidden order）を明らかにし、本新学術領域の目的である補空間における新学理構築の一端を担う。

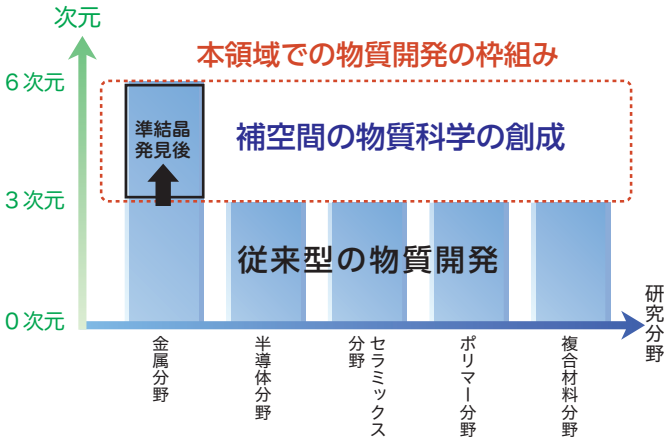


図１ 本研究で対象とする物質群

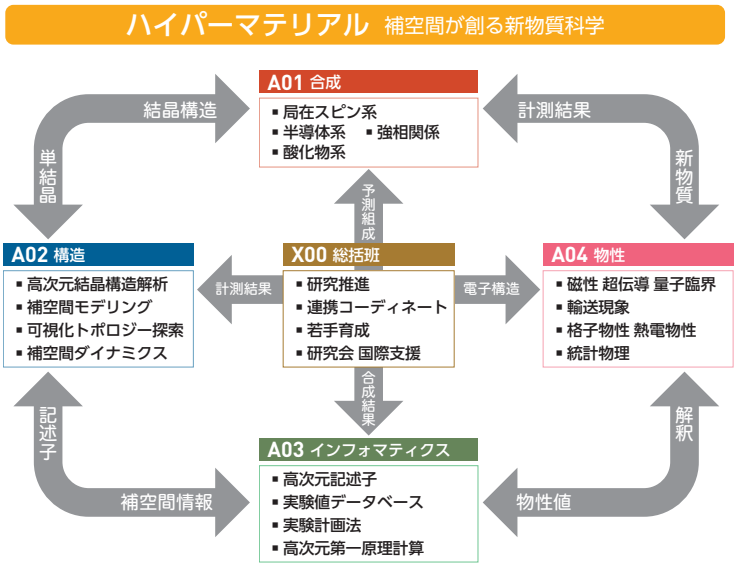


図２ 領域内における連携体制

計画研究
A02

ハイパーマテリアルの構造

研究代表者
高倉 洋礼
北海道大学 准教授

研究分担者
藤田 伸尚 東北大学 助教
門馬 綱一 国立科学博物館 研究主幹
綿貫 徹 量子科学技術研究開発機構 次長
松浦 直人 総合科学研究機構 副主任研究員
松下 能孝 物質・材料研究機構 グループリーダー

本計画研究では高次元と高対称で特徴づけられるハイパーマテリアルの構造的側面に焦点をあて、その原子スケールからマクロスケールまでの静的・動的構造の組織的な解明を目指す。そして、その構造的知見にもとづいて、個々の物質群を越えて、ハイパーマテリアルが普遍的に示す安定化機構や、特異な物性機能を理解するための補空間物質科学の構築の基礎を与えるのが目的である。他の計画研究と協働し構造情報・補空間情報を共有することにより、本新学術領域が目指す、「実空間では複雑怪奇なハイパーマテリアルの原子的挙動、磁気・電子・フォノン状態等を補空間で明快に記述することで、複雑な秩序に潜む隠れた法則性を高次元空間において描き出し、新たな物質科学を創出する」という目標達成に寄与する。

ハイパーマテリアルの評価・構造解析、構造可視化と結晶構造データベースを用いた記述子・トポロジー探索により、ハイパーマテリアルの複雑な構造の理解を容易にするとともに、高次元と直接関連がないと考えられていた「周期」結晶の間に補空間を介した共通構造を見出し（図１および図2）、補空間物質科学における新たな方向性を打ち出す（**A01班**、**A03班**との連携）。また、放射光・中性子大型施設の最先端計測手法を駆使して、ハイパーマテリアルの相転移・補空間ダイナミクス・低エネルギー励起・スピン相関を明らかにし、ハイパーマテリアルが普遍的に示す安定化機構や、特異な物性機能を理解するための補空間物質科学の構築の基礎を与えるという目的を達成するとともに領域全体の研究推進に貢献する（**A04班**との連携）。

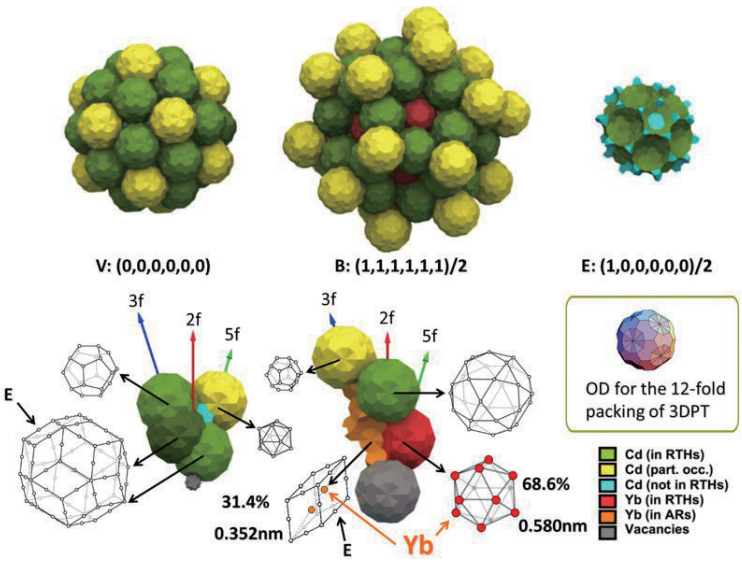


図１　YbCd 正20面体準結晶の補空間構造
（H.Takakura *et. al*., *Nat. Mat.* **6** (2007) 56.）

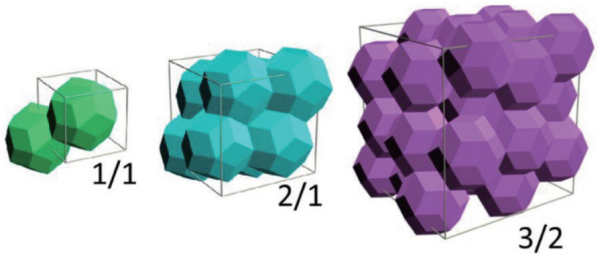


図2　準結晶と同じ補空間構造をもつ異なる結晶群（近似結晶）

計画研究
A03

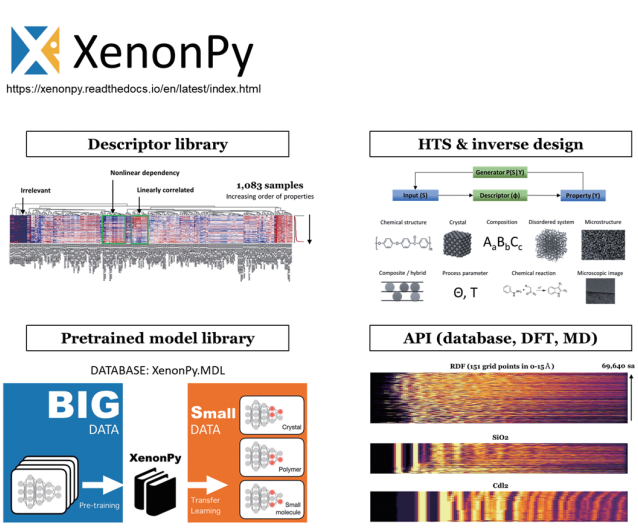
ハイパーマテリアルのインフォマティクスと hidden order の探索

研究代表者
吉田 亮
統計数理研究所 教授

研究分担者　**桂 ゆかり**　東京大学 助教
竹森 那由多　岡山大学 特任助教
野澤 和生　鹿児島大学 准教授

A03班は、ハイパーマテリアル（準結晶・近似結晶等）を対象とするマテリアルズインフォマティクス（MI）の学術基盤を構築する。近年、様々な物質・材料を対象に MI の学術基盤が急速に形成されつつある。しかしながら、ハイパーマテリアルの MI は全くの未踏領域であり、学術創成に向けた動きは国内外ともにみえてこない。**A03班**はこの未踏領域を開拓する。

本グループの役割は、データ科学と計算科学を技術面の柱とし、領域内の様々な研究をつなぐ循環系を構築することである。これを実現する要素技術の一つは、機械学習によるハイスループットスクリーニングである。機械学習で組成から物質の構造（準結晶・近似結晶・その他）や目標物性を予測する。この超高速スクリーニングモデルを用いて大量の候補組成からハイパーマテリアルの候補を絞り込み、実験系グループ（**A01: 合成**、**A02: 構造解析**、**A04: 物性測定**）に実験計画を提案する（図1）。さらに、追加されたデータを用いてモデルの予測精度を改善し、次のステージの実験に移行する。このサイクルを繰り返しながら、新しいハイパーマテリアルを発掘し、構造物性相関分析により補空間上の隠された法則性（hidden order）を発見する。



XenonPy による三元系化合物の状態図の作成
（左上の赤の領域：準結晶組成の予測）

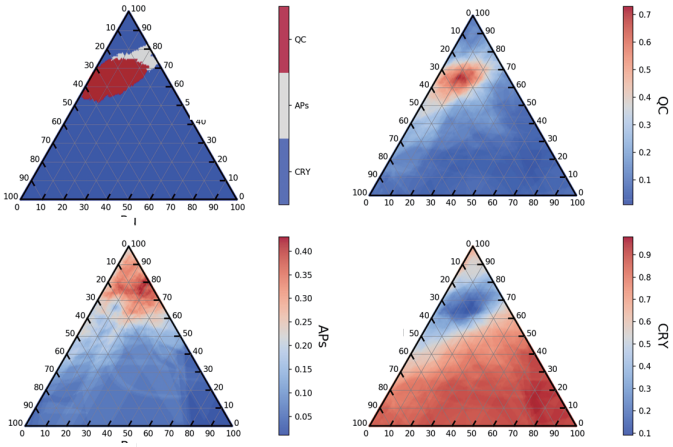


図1　MI オープンプラットフォーム XenonPy（左）とハイパーマテリアルの組成予測（右）。右図は、機械学習を適用して任意の組成が準結晶・近似結晶・通常の結晶になる確率を算出し、ある三元系状態図にマッピングした結果を示す。

計画研究
A04

ハイパーマテリアルの物性と hidden order の探索

研究代表者
出口 和彦
名古屋大学 講師

研究分担者
枝川 圭一　東京大学 教授
古賀 昌久　東京工業大学 准教授
高際 良樹　物質・材料研究機構 主任研究員
杉本 貴則　東京理科大学 助教
中村 真　中央大学 教授
橋爪 洋一郎　東京理科大学 講師

準結晶や近似結晶など、補空間を含む高次元空間で統一的に記述される物質群を高次元空間（ハイパースペース）のマテリアル、すなわち「ハイパーマテリアル」とする。ハイパーマテリアルは、その高次元性に起因して「補空間」という実空間と直交する隠れた空間の構造自由度を有する特徴がある。

本計画研究では磁性・超伝導、熱電物性、格子物性、輸送現象を中心に据えて、実空間では複雑怪奇なハイパーマテリアルの原子的挙動、磁気・電子・フォノン状態等を補空間で明快に記述することで、複雑な秩序に潜む隠れた法則性を高次元空間において見出すことを目指す。例として、古賀（A04班）によるペンローズ格子における磁性・超伝導の秩序変数の直交補空間解析が明快である。図１のように補空間で見て初めて規則性が明らかになることがわかる。また、異常高温比熱や異常熱伝導を始め、結晶では不可能な、高次元や高対称と密接に関連する諸物性について研究項目間での連携を生かして実験・理論の両面から追究する。準結晶の特殊な規則性が高次元の補空間を用いて記述可能になったように、ハイパーマテリアルの補空間に潜む法則性（hidden order）やダイナミクスについて理解の枠組みを作るために、A01班と連携して物質を開発し、A02班・03班と協力して実験による特徴的な物性探索と理論による物性記述と理解の枠組み作りを進める。

高次元や高対称と密接に関連する新奇物性の探索や新しい測定手法の開発、数学分野も含めた理論研究、ハイパーマテリアルの特徴を活かした応用・実用研究も視野に入れ、他分野との共同研究により分野の垣根を越えた学際的な研究を進めて領域全体の研究推進に貢献し、新しい学理の構築と物質観の創出を目指す。

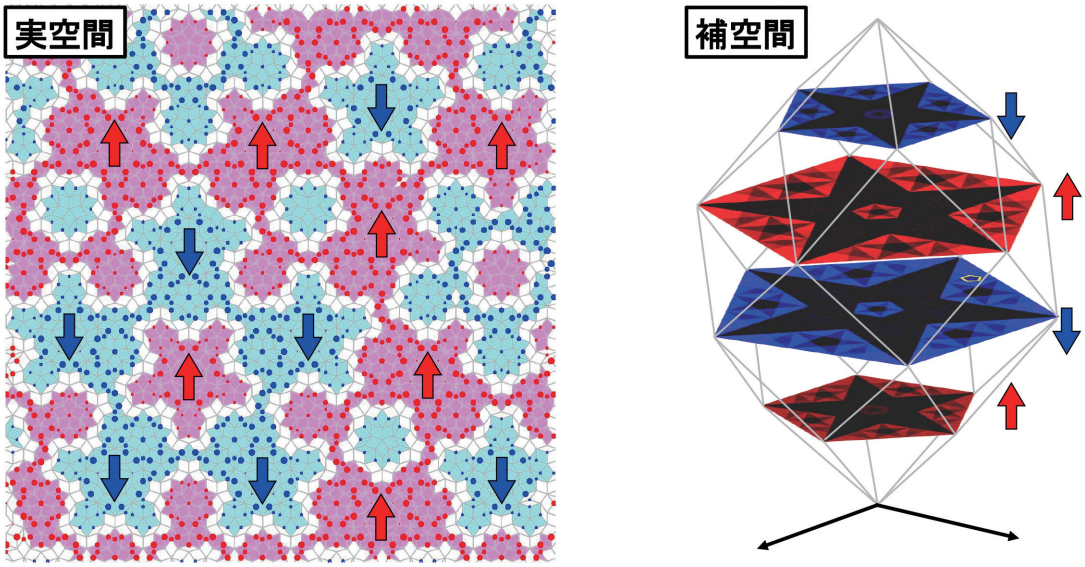


図１　２次元ペンローズ格子上のスピンの反強磁性磁気秩序を実空間（２次元）から補空間（３次元）にマッピングした図。補空間の赤色の濃度は↑スピン密度、青色の濃度は↓スピン密度を表しており、実空間ではとらえにくかった規則性が補空間では明瞭に色分けされ、視覚的にも規則性をとらえやすくなっていることがわかる。A. Koga and H. Tsunetsugu, *Phys. Rev. B* **96**, (2017) 214402.

会議・研究会等報告

キックオフミーティング

本新学術領域の開始にあたり、2019年9月29日～30日に東京理科大学葛飾キャンパスにおいて、総勢77名の方にご参加いただきキックオフミーティングを開催しました。田村領域代表の全体説明に続いて、研究計画班の代表者・分担者の研究紹介、領域外からのショートプレゼンテーション、公募研究の説明がありました。また、評価者の先生からの貴重なご講評もいただき、良い船出となりました。

プログラム（敬称省略）
9月29日（日）

12:30 – 12:45　開会の挨拶・領域説明
（領域代表 田村 隆治）

ハイパーマテリアルの合成（A01班）
座長：高倉 洋礼（北大工）

12:45 – 13:00　田村 隆治（東理大基礎工）
「Magnetic hypermaterials: current status and outlook」

13:00 – 13:15　木村 薫（東大新領域）
「Search for semiconducting quasicrystal and high-performance thermoelectric material」

13:15 – 13:30　石政 勉（豊田理研）
「Unresolved issue: What are the key factors governing quasicrystal formation ?」

13:30 – 13:45　室 裕司（富山県立大）
「Development of rare-earth based SCES and application to quasicrystal」

13:45 – 14:00　山田 庸公（東理大理）
「Higher-dimensional structure models for ternary quasicrystals in alloy and oxide systems」

14:00 – 14:15　Coffee break

ハイパーマテリアルの物性と hidden order の探索（A04班）　座長：木村 薫（東大新領域）

14:15 – 14:30　出口 和彦（名大理）
「Strongly correlated electrons in hypermaterials」

14:30 – 14:45　枝川 圭一（東大生産研）
「Phasons and thermal properties of quasicrystals」

14:45 – 15:00　高際 良樹（NIMS）
「Thermoelectric properties of quasicrystals and approximants」

15:00 – 15:15　古賀 昌久（東工大理）
「Magnetic order in the strongly correlated electron systems on the Penrose lattice」

15:15 – 15:30　杉本 貴則（東理大理）
「RKKY Magnetism in Tsai-Type Approximants」

15:30 – 15:45　橋爪 洋一郎（東理大理）
「Effective spin interactions on a regular icosahedron」

15:45 – 16:00　中村 真（中央大理工）
「Physics in Higher Dimensions」

16:00 – 16:15　Coffee break

16:15 – 18:05　ショートプレゼンテーション（19件）
集合写真撮影

18:05 – 18:20　公募研究説明会

18:30 – 20:30　懇親会（会場：東京理科大学 葛飾キャンパス内食堂）

9月30日（月）
ハイパーマテリアルの構造（A02班）
座長：田村 隆治（東理大基礎工）

9:00 – 9:15　高倉 洋礼（北大工）
「High-dimensional structure of hyper-materials」

9:15 – 9:30　藤田 伸尚（東北大多元研）
「Geometrical approach to the formation and structural transformations of hyper-materials」

9:30 – 9:45 **門馬 綱一（国立科学博物館）**
「Future plan of the VESTA program for visualization and topological analysis of quasicrystals」

9:45 – 10:00 **綿貫 徹（QST）**
「Structural study of quasicrystals by coherent X-ray diffraction」

10:00 – 10:15 **松浦 直人（CROSS）**
「Study of lattice and spin dynamics using neutron near backscattering TOF spectrometer DNA」

10:15 – 10:30 **松下 能孝（NIMS）**
「XRD facilities in NIMS」

10:30 – 11:00 **Coffee break**

ハイパーマテリアルのインフォマティクスと hidden order の探索（A03班）
座長：出口 和彦（名大理）

11:00 – 11:15 **吉田 亮（統計数理研）**
「Machine learning for hypermaterials informatics」

11:15 – 11:30 **桂 ゆかり（東大新領域）**
「Starrydata: a database of experimental data on literature for materials informatics」

11:30 – 12:00 **評価者による講評**
座長：田村 隆治（東理大基礎工）
竹内 伸先生（東理大）、伊藤 聡先生（NIMS）、石井 靖先生（中央大理工）

12:00 **閉会の挨拶**（領域代表 田村 隆治）

第1回 XenonPy ハンズオンセミナー

開催場所：情報・システム研究機構 統計数理研究所
開 催 日：2019年12月23日 – 24日、2020年1月7日

統計数理研究所　吉田 亮

2019年12月23日–24日及び2020年1月7日、統計数理研究所（東京都立川市）にて、第1回 XenonPy ハンズオンセミナーを開催しました。領域内の計6名の若手研究者（学部生・大学院生・ポスドク）が参加し、**A03班**の吉田らが開発しているマテリアルズインフォマティクス・オープンプラットフォーム XenonPy を用いた機械学習の講義・演習ならびにハッカソン形式のプログラム開発を実施しました。

初日の12月23日の午前は「マテリアルズインフォマティクス概論」という題目でマテリアルズインフォマティクスの基礎（記述子、教師あり学習、転移学習、実験計画法、ベイズ推論による逆解析など）から最新の解析技術を概説し、午後からは XenonPy のハンズオンセミナーを実施しました。二日目の12月24日は、ハッカソン形式の短期集中型のプログラム開発イベントを実施しました。参加者はグループ及び個人に分かれ、各々でテーマを設定し、互いに議論しながらアルゴリズムの実装・高度化、予測結果の評価・考察、モデルの改良等の作業を進めていきました。数理科学やプログラミングの知識がない参加者には、**A03班**のスタッフがマンツーマンで指導にあたりました。あるグループは、任意の組成を入力とし、準結晶・近似結晶・結晶のいずれになりうるかを予測する機械学習モデルを開発しました。他にも、物性予測の機械学習モデル、組成から空間群を予測するアルゴリズム、結晶データベースから類似構造を自動抽出するためのプログラム等を構築しました。さらに最終日の年明け1月7日、解析結果の

レビューと今後の課題の抽出、さらなる発展の可能性等について皆で議論を行いました。

参加者のほとんどが機械学習の経験がゼロに等しいという中、脱落者もなく、中には極めて有望な予測手法の開発に成功したグループも現れました。従来のハッカソンは、プロフェッショナルのプログラマーやエンジニアを対象としたオープンイノベーションの手法です。今回は「ほぼ未経験者によるハッカソン」という極めて斬新な企画であったため、正直なところ大失敗に終わることも覚悟していました。にもかかわらず、サイエンスとしても十分に期待を持てる結果と今後の発見が期待できる共同研究のシーズが生まれるに至ったことは、参加者のモチベーションの高さと若さゆえの柔軟性・吸収力の賜物と言えるでしょう。

A03班のミッション定義の一つである「準結晶領域におけるマテリアルズインフォマティクスの学術創成」に向けて大きな一歩を踏み出す。そんな三日間を過ごせたと思います。この場を借りて、参加者ならびにご支援いただいた関係者各位に心より御礼申し上げます。**A03班**は今後もこのようなイベントを継続的に開催していきます。今回参加できなかった方々も次回以降に奮ってご参加ください。

第1回 XenonPy ハンズオンセミナー：ハッカソン形式による短期集中型プログラム開発

第4回国際非周期結晶スクール ISAC4（Fourth International School on Aperiodic Crystals）に参加して

開催場所：VVF Club Intense Les Iles Anglo-Normandes Port-Bail-sur-Mer, France
開 催 日：2019年9月8日～14日

北海道大学　高倉 洋礼

2019年9月にフランス・ノルマンディ地方ポールバイユにおいて、第4回非周期結晶国際スクール（https://isac4.sciencesconf.org/）が開催されました。私は講師の一人として同スクールに参加したので、それについて簡単にご紹介いたします。この国際スクールは国際結晶学連合（IUCr: International Union of Crystallography）の非周期結晶委員会（CAC: Commission on Aperiodic Crystals）が主催となり、IUCr の支援のもとで過去3年ごとにヨーロッパ各地で開催されています。現在の CAC の委員長は、Laboratoire de Cristallographie et Sciences des Matériaux（Caen, フランス）の Oliver Perez 博士です。したがって、今回の国際スクールは彼が主催しました。第1回目のスクールは2010年のフランス・カルクイランヌ、第2回目は2013年にドイツ・バイロイト大学、第3回目は2016年にベルギー・アントワープ大学にて開催されました。ちなみに、私は第1回目から講師としてこの国際スクールに参加しています。

このスクールの目的は、結晶の非周期的秩序の概要、変調構造と準結晶の両方の超空間を用いた記述の基礎、非周期結晶の物理的性質と結晶化学的理解、および構造解析の実用的な知識をスクール参加者に提供することです。参加者として想定されているのは非周期結晶に関する非専門家で、結晶学、化学、材料科学、または固体物理学の分野で研究を行っている、非周期結晶の基本的な理解を望んでいる博士課程の学生や他分野の研究者です。この第4回目のスクールには、全部で32名の生徒（フランス、ドイツ、デンマーク、スウェーデン、UK、イタリア、スロベニア、クロアチア、ポーランド、アルゼンチン、USA、コスタリカ、日本）の参加がありました。また講師は私を含めて9名で、フランス、イスラエル、ドイツ、チェコそして日本からの参加でした。

9月8日はレジストレーションが行われ、スクール本体は翌日の9月9日から13日までの5日間にわたって実施されました。朝9:00から19:30まで、かなりタイトなスケジュールが組まれていました。

スクールは、非周期結晶に特有の様々な概念を、段階を追って紹介する目的で、日程の最初の方に入門的な講義が配置され、徐々に高度な内容が講義されるという構成でした。またチュートリアルやディスカッションタイムが用意されるなど、生徒の理解に配慮されたものとなっていました。生徒によるポスターセッションも実施されました。

スクール初日の9日午前は、変調構造や準結晶を含む非周期結晶全般についての概論と、変調構造の構造記述に用いられる超空間の入門から始まりました。そして、午後は高次元を用いない、ランダウ理論に基づいた準結晶入門が講義されました。午後の残りの時間は超空間を用いた変調構造の構造記述の全体チュートリアルでした。

翌日の10日の午前は、再び超空間の対称性と超空間群の講義、続いて、変調構造に関連した電子線回折の講義でした。そして午後の前半は、変調構造の超空間を用いた構造解析の例が Dusek 博士（Institute of Physics ASCR, チェコ）により示されました。彼は Petricek 博士（Institute of Physics ASCR, チェコ）とともに Jana2006ソフトウエアを開発しているチームの1人です。午後の後半は変調構造分野と準結晶分野に分かれてチュートリアルが実施されました。変調構造分野は Jana2006ソフトウエアの基本的な使用法の実習、準結晶分野では準周期タイリングと近似結晶に関する実習でした。その後、夕食前まで参加者によるポスターセッションが行われました。15件ほどのポスターが掲示され、その前では参加者同士の活発な議論が交わされていました。

3日目の11日の午前前半は準結晶構造について、そして、午前後半は変調構造からの回折についての講義でした。午後は、昨日と同様に変調構造分野と準結晶分野の２つに分かれて、それぞれでチュートリアルが行われました。変調構造分野は Jana2006ソフトウエアを用いた実習、準結晶分野は CrysAlisPro ソフトウエアを用いた正20面体準結晶の指数づけの実習が行われました。そして、そのチュートリアルの後にもう一度全体で集まり、生徒の質問に答えるオープンディスカッションの時間がとられました。

12日の午前は、変調構造と複合結晶の実際の構造解析例の講義と非周期結晶におけるフェイゾンの入門が講義されました。午後はエクスカージョンが実施され、ポールバイルの湾岸を現地のガイド付きで徒歩で周遊しました。日本ではなかなか見られない干満差の大きい遠浅の海岸線からなる独特の風景を見ながら、ポールバイユ近郊の自然を体感することができ、リフレッシュすることができました。その日の夜はガラディナーで締め括られました。

そして最終日の13日は、より高度な内容である、非周期結晶の物理的性質、電子状態や表面、そして磁気変調構造が講義されました。2つの分野に分かれて行われたチュートリアルでは、当初、準結晶に興味をもつ参加者が少ないのではないかと私は危惧していましたが、結果としてそれぞれの分野に分かれた生徒はほぼ半分半分といったところでした。準結晶分野のチュートリアルは、de Boissieu 博士（CNRS, フランス）、Lifshitz 教授（Tel Aviv 大学，イスラエル）、そして高倉が担当しました。

スクールの会場となった VVF Villages Port-Bail は、周りにほとんど何もない、海辺に面した広大なエリアに、レストランや会議室を備えた中央管理棟と100棟ほどのコテージからなる宿泊施設でした。各コテージ内には自炊が可能な設備が備えられたキッチンと、ベッドルーム、子供用ベッドルーム、シャワー・トイレがありました。フランスでは、小さい子供がいる家族が長期の休日を過ごす場合に、この様な場所をよく利用するそうです。

我々の新学術領域「ハイパーマテリアル：補空間が創る新物質科学」が立ち上がった直後ということもあり、日本からの同スクールへの参加者が私の他に１名というのは少し残念でした。今後、本新学術領域において、同様なスクールの日本での開催が計画されています。その際には、領域のみなさまのご協力を仰ぐこととなりますが、よろしくお願い申し上げます。

第４回国際非周期結晶スクールの集合写真

Liverpool 滞在記

鹿児島大学　野澤 和生

2018年度に採択された国際共同研究加速基金（国際共同研究強化（A））により、2019年5月から、途中の一時帰国を挟んで2020年1月末まで、英国 University of Liverpool, Surface Science Research Centre で R. McGrath 教授、H. R. Sharma 博士と共同研究を行っている。研究は現在も進行中であるためここに書けることはあまりないが、折角機会をいただいたので、これまでの滞在を振り返って、見たり感じたりしたことなどをご報告したいと思う。

リバプールはイングランド北西部の都市である。大英帝国の繁栄を支えた海商都市として、あるいはビートルズの出身地やプレミアリーグの強豪リバプール FC の本拠地としてご存知の方も多いと思う。今期、リバプール FC に南野拓実選手が移籍したので、今後日本で「リバプール」という単語を聞く機会が増えそうである（実は、移籍のきっかけになったと言われている UEFA チャンピオンズリーグのリバプール対ザルツブルク戦は、Sharma 博士とアンフィールドで観戦していた）。

大学では、理論のポスドク４名がいる部屋に机を用意していただいた。全員理論の研究者なので出勤すれば一日中同じ部屋にいるわけだが、出退勤時に挨拶をする以外、彼らはほとんど話をしない（仲が悪いわけではなくて、仕事に集中しているから）。日中に集中して仕事をし、17時を過ぎると次々に帰っていく。研究所全体を見ても、土日はほとんど誰もオフィスに来ない。帰宅時間が早いという話はヨーロッパで在外研究をした先輩たちから聞いてはいたが、研究所内に人影がなくなるような状況だとは思っていなかった。土日にオフィスに行こうものなら廊下の灯りのセンサーも切られていて、帰りに部屋を出ると廊下が真っ暗で何も見えず、携帯電話をライト代わりに洞窟探検をするような状態になった。ただし、図書館だけは土日も活況だった。利用者はもちろん教員ではなく学生である。図書館は基本的に曜日に関わらず24時間開いているが、休日も勉強やレポートに取り組む学生が大勢いて、オフィスがダメならと図書館に行っても、人が少なく静かな区画を探し回る必要があった。図書館の利用者数だけで比較はできないが、日本の大学生は休日もこんなに勉強しているだろうか。日本に帰ったら学生に聞いてみたいと思う。

さて、この原稿を執筆しているのは2020年１月。ご存知の通り、英国の冬は暗くて寒い。気象データを調べると降水日数は月14日程度であるが、感覚的にはもっと降っている気がする。５月に鹿児島からやって来た時はあまりの寒さに慌ててダウンジャケットを着込んだが、結局、ダウンジャケットを一度も着なかったのは７月と８月だけだったような気がする。ただ、この夏の期間は本当に過ごしやすい季節であり、平日にも関わらず庭に拡げたシートに座り込み、日が沈むまで（といっても、21時過ぎまで明るい）この短く美しい季節を楽しむ人々を度々見かけた。我々家族も、McGrath 教授、Sharma 博士それぞれのご自宅にお招きいただき、素晴らしい庭を眺めながら贅沢な時間を過ごさせていただいた。写真はつい先日のディナーの時のものである。

研究室のメンバーと

リバプール大学のメインキャンパスは、市中心部から徒歩でアクセスできる丘の上にある。今回は妻と３歳の息子を伴っての滞在であったが、大学周辺に学生や単身者向けのアパートがたくさんあったので、我々も大学のすぐそばにアパートを借りたのだが、その隣がたまたま Nursery school（保育園）だった。イングランドの３～４歳の子供は保育施設を無料で週15時間利用することができ、これは私のような短期滞在者（かつ英国内で無収入）にも適用される。ある日、同室のポスドクのアドバイスを受けてこの Nursery に飛び込み、「うちの子を入れてもらえないか」と聞いてみたら、「今空きがあるから来週から来て良い」とのことで、息子は多国籍の子供達と一緒に、園内で育てた果物を食べたり、マッチをすって起こした火でパンケーキを焼いたりと、日本ではなかなかできない体験をさせてもらうことができた。ちなみに、こうした Nursery での様子は、保護者専用のページに掲載される画像や動画付のレポートで確認することができた。日本にもあったら良いのに、と思うシステムだが、子供と職員の比が日本とは違うので、安易に真似すべきではないと思う。先述した図書館の開館時間についてもそうだが、今回の滞在中、教育にかけている予算が日本とはだいぶ違うのではないかと感じることが度々あった。自分の話で恐縮だが、今年度私が大学から受けた、科研費絡みでない研究費（運営費交付金）は、月額にすると２万５千円に満たない。サラリーマンのお小遣い（新生銀行の調査によれば平均で月額3万６千円ほど）より少ないのである。私の（科研費のプロジェクトと関係ない）出張費、講義資料の購入費や印刷費、研究室に在籍する学生（現在、修士２名、４年生３名）が使用するパソコンや消耗品、什器類の購入費など、全てここから出る。私が着任した６年前の時点で、もう運営費交付金は危機的な状況だと言われていたが、今はその半分しかない。いや、当時は研究室に大学院生がおらず、指導する大学院生の人数に応じた配分がなかったから、それを含めて考えればベース部分は６年で３分の１になった。配属された研究室での研究活動は、理系の学生に対するもっとも重要な教育の一つではないだろうか。その重要な教育の予算としてこの額が十分でないのは、誰が見ても明らかだろ

う。もはや、研究ができないどころではなく、教育ができないレベルである。運営費交付金の削減は今後も続くそうなので、近い将来、学生実験や卒業研究の一部を動画視聴で済ます（エアー実験？）という話が笑い話ではなくなる日が来るだろう。理系学部にとって、これは大学が教育機関としての存在意義を失う瞬間である。大きな研究予算でなければできないことは確かにある。今回の新学術の採択によってハイパーマテリアルの理解は進み、この分野は確実に発展するものと思う。ただ、このような大きな予算の陰で、大学教育が成り立たなくなるような状況が作り出されていることも、残念ながら事実である。このような話を新学術のニュースレターに書くことにはご批判があるかもしれないが、大きな予算を受けた今だからこそ、忘れてはならない問題であると思う。この新学術領域が本当の意味で「我が国の学術水準の向上・強化につながる」ものになるよう、気を引き締めて取り組んでいきたいと思う。

International Research Network
Open space between aperiodic order and physico-chemistry properties of materials の紹介

北海道大学　高倉 洋礼

近年、準結晶およびその近似結晶において特異な量子臨界現象や超伝導現象が次々と発見されてきています。それに伴って、重い電子系などのいわゆる強相関電子系の分野と準結晶分野との共通点に関心が高まりつつあります。表題のInternational Research Network（IRN）は、フランス–ドイツ–日本の3カ国の研究機関に属すこれらの分野の研究者ネットワークの構築を目指し、準結晶研究の初期から準結晶のフォノン・フェイゾンなどのダイナミクスの分野を先導してきたMarc de Boissieu 博士（CNRS, SiMaP, フランス）が提案者となって、現在準備が進められている5年間のプロジェクトです。

IRN の目的は、準結晶や不整合変調構造および複合結晶を含む、いわゆる非周期結晶の研究コミュニティと、物質・材料の化学的および物理的特性に取り組んでいる研究コミュニティとのコラボレーションを促進することです。まず、2つのフィールド（i）非周期的秩序と強相関電子系（SCES）、および（ii）非周期秩序と金属間化合物の特性に関するコラボレーションに注力することが予定されています。

一つ目の SCES は非常に活発な研究分野であり、重い電子、非従来型超伝導、非フェルミ液体など、多くの興味深い電子状態が発見されています。量子臨界点の存在も近年注目を集めています。これらは固体中の電子状態についての非常に基礎的な問題ですが、高温超伝導体の理解に関連する重要な問題です。背景にある格子と構造の複雑さ、および SCES の電子の特性との相関関係を明らかにする研究は、最近になってようやく取り上げられるようになってきました。たとえば、不整合な電荷密度波がどのように超伝導状態へ影響するのかは、最近多くの注目を集めている問題です。また、2012年の準結晶における量子臨界現象の発見により、2つの研究分野の境界に新しい分野が開かれました。準結晶の量子臨界現象は、一方では非周期性という構造の特徴を持ち、他方では強相関電子系の特性を示すことから、「非周期的強相関電子系（Apeirodic-SCES）」と名付けられています。これらに関して、すでに過去3回のワークショップが2015年（名古屋）、2017年（アヌシー・フランス）および2019年（仙台）にて開催されています。

二つ目のフィールドは、金属間化合物の1つです。金属間化合物、特に準結晶の研究で得られた知識は、触媒や熱電材料の分野で応用が期待される、構造的に複雑な金属間化合物の研究などへ拡がりを見せています。非周期結晶のコミュニティと物理学または化学のコミュニティ間の接点の例として、たとえば Ge ベースのクラスレート化合物が挙げられるでしょう。IRN は、このような物質の熱輸送特性を真に理解する上で非常に重要です。複雑な構造をもつ金属間化合物の物理化学的性質の理解は、現在でも開かれた分野のままです。

この研究ネットワーク構築における最も重要なステップとして、さまざまな分野を統合し共通の相互理解に到達し、新しい分野を発展させてゆくことが謳われています。これは、本学術領域の掲げる目標と共通する内容でもあります。プロジェクトの5年間で、3回の総会や博士課程の学生とポスドクのトレーニングを目的とした一連のスクール、そして特定のトピックに関するワークショップの開催が予定されています。より具体的なトピックに向けて、焦点と目的を絞った専用のワークショップ（2～3日）の開催も提案されています。 また、さまざまな分野の国際会議（Aperiodic 国際会議、ICS、SCES会議など）の機会を利用して、学際的なワークショップやアドホックワークショップが提案されています。これらについて、本学術領域が積極的に関わり、共同で進めてゆくことで、我々にとっても、より実り多い国際共同研究の成果が得られるものと期待されます。

IRN は、固体物理学と化学のいくつかの重要な領域のフロンティアに新しい研究コミュニティを構築します。そして将来このコミュニティから学際的なアプローチが成功の鍵となるような、新しいプロジェクトが生まれることを期待してスタートします。初年度の2020年9月には南フランスのマルセイユの近くのカリー＝ル＝ルエ（Carry le Rouet）でキックオフミーティングが開催されます。本新学術領域関係者の皆様は、奮って同会合にご参加いただけるようお願いいたします。

そして、日本からの IRN のメンバーの現在のリストは「コアメンバー」リストであり、このリストには他の多くの大学・研究所が参画してゆくことが予定されています。

2019年度活動記録

受賞

第32回ヨーロッパ結晶学会 32nd European Crystallographic Meeting（ECM32）において、ポスター賞を受賞

北海道大学大学院博士課程学生が第32回ヨーロッパ結晶学会 32nd European Crystallographic Meeting（ECM32）において、ポスター賞を受賞しました。

受賞者： 北海道大学 大学院工学院 博士課程3年
Ireneusz Buganski
指導教官： 北海道大学 大学院工学研究院
高倉 洋礼（A02班）
受賞題目： The real space refinement of the icosahedral quasicrystal
受賞日： 2019年8月23日

第16回日本熱電学会学術講演会において、優秀論文賞を受賞

東京大学 大学院新領域創成科学研究科　桂ゆかり助教（A03班）、木村薫教授（A01班）らが第16回日本熱電学会学術講演会において、優秀論文賞を受賞しました。

受賞者： Y. Katsura, H. Takagi, and K. Kimura
受賞題目： Roles of Carrier Doping, Band Gap and Electron Relaxation Time in the Bolzmann Transport Calculations of a Semiconductor's Thermoelectric Properties
受賞日： 2019年9月2日

第16回日本熱電学会学術講演会において、進歩賞を受賞

東京大学 大学院新領域創成科学研究科　桂ゆかり助教が第16回日本熱電学会学術講演会において、進歩賞を受賞しました。

受賞者： 東京大学 大学院新領域創成科学研究科
桂 ゆかり（A03班）
受賞題目： 実験・第一原理計算・データ科学を駆使した熱電材料の学融合研究の構築
受賞日： 2019年9月2日

第16回日本熱電学会学術講演会において、優秀講演賞を受賞

東京大学 大学院新領域創成科学研究科 博士課程学生が第16回日本熱電学会学術講演会において、優秀講演賞を受賞しました。

受賞者： 東京大学 大学院新領域創成科学研究科
博士課程1年　岩崎 祐昂
指導教員： 東京大学 大学院新領域創成科学研究科
木村 薫（A01班）
受賞題目： バンドエンジニアリングによる Al-Si-Ru 系近似結晶半導体の創製
受賞日： 2019年9月4日

第14回（2020年）日本物理学会若手奨励賞を受賞

東京理科大学理学部第一部応用物理学科 山田庸公助教が第14回（2020年）日本物理学会若手奨励賞を受賞しました。

受賞者： 東京理科大学 理学部第一部応用物理学科
山田 庸公（A01班）
対象研究： Tsai 型正二十面体準結晶の原子的構造の解明
受賞日： 2019年11月5日

第14回（2020年）日本物理学会若手奨励賞を受賞

東京大学 大学院新領域創成科学研究科 北原功一助教が第14回（2020年）日本物理学会若手奨励賞を受賞しました。

受賞者： 東京大学 大学院新領域創成科学研究科
木村（A01班）研究室　北原 功一
対象研究： 準結晶およびその関連物質の電子状態に関する研究
受賞日： 2019年11月5日

開催セミナー

第１回ハイパーマテリアル・セミナー

日時： 2019年9月20日(金) 15:00 – 16:00
場所： 東京大学 柏キャンパス 新領域基盤棟 共通セミナー室(2C5,7号室)
講演題目： Boron: Enabling Metal-rich Structures and Rare-Earth-Free Magnetic Materials
講師： Prof. Dr. Boniface P. T. Fokwa (CMFs in Materials Science & Chemical Engineering, University of California)

第２回ハイパーマテリアル・セミナー

日時： 2019年11月18日(月) 17:30 – 18:30
場所： 東京理科大学 葛飾キャンパス研究棟8 F 第2セミナー室
講演題目： Strong electron correlation effects on physical properties in Ce-based quasicrystal approximant
講師： 鈴木 慎太郎 氏
(東京理科大学 基礎工学部 材料工学科 助教)

第3回ハイパーマテリアル・セミナー

日時： 2019年12月5日(木)
講演【1】13:30 – 15:00
講演【2】15:20 – 16:50
場所： 中央大学 (後楽園キャンパス)
5号館3階 5335教室
講演題目： 【1】素粒子物理学における高次元と低次元のつながり
講師： 中村 真 氏 (中央大学 教授)
講演題目： 【2】人工次元におけるトポロジカル量子物質
講師： 小澤 知己 氏
(理化学研究所 数理創造プログラム 上級研究員)

第4回ハイパーマテリアル・セミナー

日時： 2019年12月12日(木) 16:30 – 18:00
場所： 名古屋大学 東山キャンパス理学館415室
講演題目： AKN タイリングの12配位頂点配列に基づく正20面体準結晶の構造モデル
講師： 高倉 洋礼 氏
(北海道大学 大学院工学研究院 准教授)

第5回ハイパーマテリアル・セミナー

日時： 2019年12月16日(月) 14:00 – 15:00
場所： 東京理科大学 葛飾キャンパス研究棟9F 材料工学科ゼミ室2
講演題目： The atomic and electronic structure of two-dimensional oxide quasicrystals
講師： Dr. Stefan Förster (University of Bayreuth)

第6回ハイパーマテリアル・セミナー

日時： 2019年12月17日(火) 14:00 – 15:30
場所： 名古屋大学 東山キャンパス理学館506室
講演題目： 準結晶を含む正20面体クラスター・固体・液体における結合転換と熱電変換、自己補償と超伝導
講師： 木村 薫 氏
(東京大学 大学院新領域創成科学研究科 教授)

第7回ハイパーマテリアル・セミナー

日時： 2020年1月15日(水) 16:30 – 18:00
場所： 名古屋大学 東山キャンパス理学館415室
講演題目： クラスターに基づいた正10角形準結晶の構造モデル
講師： 高倉 洋礼 氏
(北海道大学 大学院工学研究院 准教授)

第8回ハイパーマテリアル・セミナー

日時： 2020年3月16日(月)
場所： 東北大学 片平キャンパス B エリア 東北大学本部棟 1 知の館
講演題目： 遠き昔のカムチャッカにて：天然準結晶を追う奇想天外な旅
講師： Prof. Paul J. Steinhardt
(Princeton University)

今後の予定

2020年 2月18日～ 2月20日	第2回領域会議(第24回準結晶研究会)を東北大学 片平キャンパスで開催予定。
2月26日～ 2月28日	第1回ハイパーマテリアル若手研究会をレクトーレ湯河原で開催予定。
3月16日	第8回ハイパーマテリアルセミナー(Prof. Paul J. Steinhardt)を東北大学　片平キャンパスで開催予定。
3月16日	日本物理学会(名古屋大学 千種キャンパス)で佐藤 憲昭 教授がチュートリアル講演を予定。
3月17日	日本物理学会(名古屋大学 千種キャンパス)で Prof. Paul J. Steinhardt がチュートリアル講演を予定。

Hypermaterials

新学術領域研究「ハイパーマテリアル：補空間が創る新物質科学」

ハイパーマテリアル News Letter **Vol.1**

編集委員　出口 和彦
松浦 直人
山田 庸公
室　裕司
藤田 伸尚
吉田 亮
枝川 圭一

発行：新学術領域研究「ハイパーマテリアル」事務局
〒125-8585 東京都葛飾区新宿6-3-1 東京理科大学 基礎工学部 材料工学科 田村研究室
TEL. 03-5876-1410
Email　hyper-office@rs.tus.ac.jp
領域ウェブサイト　https://www.rs.tus.ac.jp/hypermaterials/index.html
発行日：2020年3月7日