



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.4





巻頭言

新しい地平線をめざして ————— *Towards a New Horizon*

研究領域代表者
田村 隆治
東京理科大学 先進工学部 教授

2011年に、準結晶の発見に対して Dan Shechtman 氏にノーベル化学賞が贈られてから、はや10年が経ちました。受賞理由はもちろん新たな物質秩序の発見ですが、この Shechtman 氏の受賞の舞台裏で、我が国の準結晶研究、特に、蔡らによる熱力学的に安定な準結晶の発見、高倉 (A02班) らによる初の準結晶構造決定などが、この新たな物質秩序の確立に大きく貢献したことは“知る人ぞ知る”事実です。本新学術領域は、我が国のこの輝かしい準結晶研究を土台に、準結晶とその関連結晶(近似結晶)を高次元空間で一括りにする新たな物質観「ハイパーマテリアル」を打ち立てるものです。(なお余談ですが、2020年ノーベル物理学賞の受賞者の一人である Roger Penrose 氏は準結晶分野ではむしろ Penrose タイリングで有名で、三次元準結晶の構造は Penrose タイリングの三次元版である Ammann-Kramer-Neri タイリングに原子修飾を施すことで解かれました。)

我が国の準結晶分野の現在を少し述べますと、準結晶発見のほぼ直後から研究に携わってきた第一世代の研究者のほとんどがリタイアし、本領域メンバーの中では木村 (A01班) と枝川 (A04班) の二名を残すのみとなりました。このように本領域では、第二・第三世代および新規参加者がほとんどで、学術の継承も重要なミッションの一つとなっております。温故知新という諺にあるように、科学の進歩は決して一直線ではなく、以前の研究が見直されて新たな展開に繋がることがしばしば起こります。準結晶研究も、構造安定性やその準周期性・高次元性をはじめ数多くの未解決問題があり、この新学術領域で新たな光を当てることで未解決問題の解決の糸口が見つかることが楽しみです。

本領域が発足してはや2年半が経ち、すでに折り返し地点を過ぎました。領域前半では、機械学習による準結晶予測の成功、強磁性準結晶をはじめとする新たな物質群の発見など、様々な成果が挙がり、中間評価では「A(研究領域の設定目的に照らして、期待どおりの進展が認められる)」との評価をいただきました。これも、皆様のご協力・ご支援の賜物であり、この場を借りてお礼申し上げます。領域後半では、新学術領域研究ならではの一体性のある学理の構築が求められます。「補空間には何が潜むのか？」領域の叡智を結集して追究してまいりたいと思います。特に、異分野の研究者がアイデアを出し合う開かれた領域として、スケールの大きな共同研究の実現に向けて舵取りを行ってまいります。

今後ともご指導・ご鞭撻のほど、何卒よろしくお願い申し上げます。

CONTENTS

巻頭言

- 2 新しい地平線をめざして
田村 隆治 (東京理科大学 先進工学部 教授)

研究報告

- 4 **計画班 A02** ハイパーマテリアルの構造への幾何学的アプローチ
藤田 伸尚 (東北大学 多元物質科学研究所 講師)
- 6 **計画班 A03** ハイパーマテリアルにおける相関効果と高次元電子構造計算
竹森 那由多 (大阪大学 量子情報・量子生命研究センター 特任准教授)
- 8 **計画班 A04** ハイパーマテリアルの高温異常比熱
枝川 圭一 (東京大学 生産技術研究所 教授)
- 10 **公募班 A01** ファンデルワールス結晶界面におけるハイパーマテリアル研究
井手上 敏也 (東京大学 工学系研究科 助教)

若手研究者紹介

- 12 廣戸 孝信 (物質・材料研究機構 技術開発・共用部門 エンジニア)
- 13 Liu Chang (情報・システム研究機構 統計数理研究所 特任助教)

会議・研究会等報告

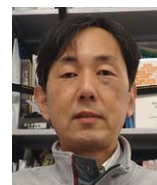
- 15 IRN Theory Session
- 16 1st International School on Hypermaterials (第1回国際ハイパーマテリアルスクール)
- 17 第6回領域会議
- 17 IRN-APERIODIC キックオフミーティング
- 18 Materials Research Meeting 2021 (MRM2021)

2021年度 活動記録

- 18 受賞
- 19 開催セミナー・イベント
- 19 今後の予定

ハイパーマテリアルの構造への 幾何学的アプローチ

藤田 伸尚 東北大学 多元物質科学研究所 講師



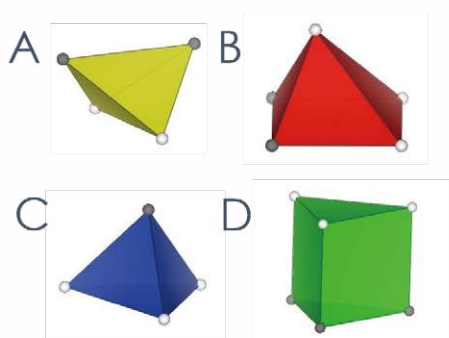
準結晶とは合金をはじめ様々な物質系において自発的に生成する準周期的構造秩序と非結晶学的点群対称性を併せ持つ固体物質の総称です。また、ある有限スケールの範囲では準結晶と共通の構造を持ちながら、より長距離のスケールでは周期性を持つものが近似結晶です。これらは高次元空間（ハイパー空間）に置かれた共通の上位構造に対して異なる方位を持つ3次元部分空間上の断面をとることで統一的に記述することが可能です。本新学術領域ではこれらの物質を総称してハイパーマテリアルと呼んでいます。高次元結晶学はハイパーマテリアルにおける構造秩序を逆空間の視点から理解する上で重要なツールですが、一方で実空間における原子配列を理解する上で重要な役割を果たすのがタイリング幾何学です。本新学術領域における私の研究ミッションは、高次元結晶学の理論的枠組みとタイリング幾何学に関する最新の知見を組み合わせ、現実のハイパーマテリアルの構造についての未解明の問題を解き明かすことです。

私と準結晶との出会いは大学院で物性理論を専攻していた約25年前に遡ります。当時、理論物理の一問題として1次元準周期格子上的電子の挙動を調べていました^[1]が、現実の物質としての準結晶への興味はさほど強くなく、博士号取得後は別の研究分野に進むことを考えていました。しかし、その頃に日本の準結晶研究を牽引されてきた故蔡安邦教授と出会い、その後のご縁の影響もあり約16年前に東

北大学 蔡グループのスタッフとして研究を続ける幸運に恵まれたことが、私の研究の方向性を「現実の物質としての準結晶」へと強力に引き寄せる結果となりました。

蔡グループで行ってきた研究として、カノニカルセルタイリング（正20面体準結晶や近似結晶におけるクラスタの空間配列を記述するためにコーネル大学の C. L. Henley 教授により導入された、4種類の多面体胞[図1(a)]を基本タイルとするタイリング模型^[2]）の理論的研究と、この模型を高次の近似結晶の構造解析に応用した実験的研究をご紹介します。きっかけは、2008年ころに「準周期カノニカルセルタイリングの存在証明」という当時は未解決であった理論の問題に興味を持ったことに始まります。数年がかりで理論的な検討を重ねた結果、ようやくこの問題への解を得ること（即ち、存在証明）に成功したのが2017年でした[図1(b)]^[3]。一方、同じ時期に偶然、面倒を見ていた学生さんが約40Åもの巨大な単位胞をもつアルミ・遷移金属合金系近似結晶を新たに発見しました。そこで、単結晶X線構造解析の勉強がてらその構造解析に着手し、構造解析の面白さには直ぐにのめり込んだものの、複雑な構造のため数か月の悪戦苦闘が続きました。ある時、この結晶がカノニカルセルタイリングを用いて精緻に記述できる非常に美しい結晶構造[図2]を持っていることに気が付き、それを手掛かりとして構造解析を進めると面白いように原子の並びが浮かび上がって

(a)



(b)



図1

(a) カノニカルセルタイリングを構成する4種類の多面体胞
(b) 準周期カノニカルセルタイリング

きました。この結果を報告できたのは1年半ほどたってからでしたが^[4]、その後も関連合金系において新規近似結晶や微細双晶発現等の新規現象が次々に見つかり、カノニカルセルタイリングがこれらの新規物質の構造特性や双晶発現機構を理解する重要な鍵であることが分かってきました^[5]。

本新学術領域ではカノニカルセルタイリングを応用してこれらの新規近似結晶の構造解明や微細双晶発現機構の解明に取り組んでいるところです。またこれ以外にも、より一般にハイパーマテリアルにおける様々な未知構造の解明や構造モデリングに関する課題開拓も行っています。さらに、班内共同研究も積極的に進め、現実の物質に忠実な構造理解を土台として、構造生成や物性発現に関する様々な問題の解明へとつなげていくことを目指して研究を推進しています。以下、現在推進中の課題からいくつかの具体例を簡単にご紹介します。

1. アルミ・遷移金属合金系における正20面体ハイパーマテリアルの構造モデリングを効率的に行うため、既存の高次近似結晶の構造的知見からカノニカルセルタイリングの原子装飾規則を同定し、それを未知の結晶構造のモデリングに応用しています^[6]。
2. Al-Pd-Mo-Fe 系高次近似結晶において温度上昇によるクラスタの配列変化を見出し、熱分析による構造相転移の特徴抽出や、高温相・低温相の結晶構造解析を進めています^[6]。
3. Al-Pd-Ru 系における二種類の高次近似結晶(P40相、P20相)の結晶構造解析を行うとともに、P20相において見出された擬メロヘドラル双晶の発現機構をカノニカルセルタイリングを用いた構造モデリングを手掛かりとして説明しようと試みています。

4. 既知の Al-Cu-Ru 系近似結晶の構造に対して、擬メロヘドラル双晶としての再解釈を行い、結晶構造解析や構造モデリングを進めています。
5. 実験相図と第一原理計算を相補的に用いて、Al-Pd-M (M:3d, 4d, 5d 遷移金属) 合金系におけるハイパーマテリアルの相形成に対する電子的・幾何学的要因の抽出を試みています。
6. 単成分粒子系の分子動力学シミュレーションにより形成することが報告されている体心型正20面体準結晶の構造モデリングを行うため、格子点密度可変な体心型正20面体準格子の1パラメータ族を構築しました。
7. Ammann-Kramer-Neri タイリング (= 3次元 Penrose タイリング) の厳密な自己相似性の数理的解明を進めています。
8. 2次元準周期タイリングの相互局所導出類による分類と電子状態の局在性の関係を理論的に調べています。

参考文献

- [1] N. Fujita & K. Niizeki, *New classes of quasicrystals and marginal critical states*, Phys. Rev. Lett. **85**, 4924–4927 (2000).
- [2] C. L. Henley, *Cell geometry for cluster-based quasicrystal models*, Phys. Rev. B **43**, 993–1020 (1991).
- [3] N. Fujita, *Quasiperiodic canonical-cell tiling with pseudo icosahedral symmetry*, Annals of Physics **385**, 225–286 (2017).
- [4] N. Fujita, H. Takano, A. Yamamoto & A.-P. Tsai, *Cluster-packing geometry for Al-based F-type icosahedral alloys*, Acta Crystallogr. Sec. A **69**, 322–340 (2013).
- [5] 藤田伸尚, カノニカルセルタイリング—正20面体ハイパーマテリアルへの幾何学的アプローチ—, 固体物理 vol. **56**, no. 11, 5–22 (2021).
- [6] N. Fujita & M. Ogashiwa, *A unified geometrical framework for face-centered icosahedral approximants in Al-Pd-TM (TM=transition metal) systems*, Materials Transactions **62**, 329–337 (2021).

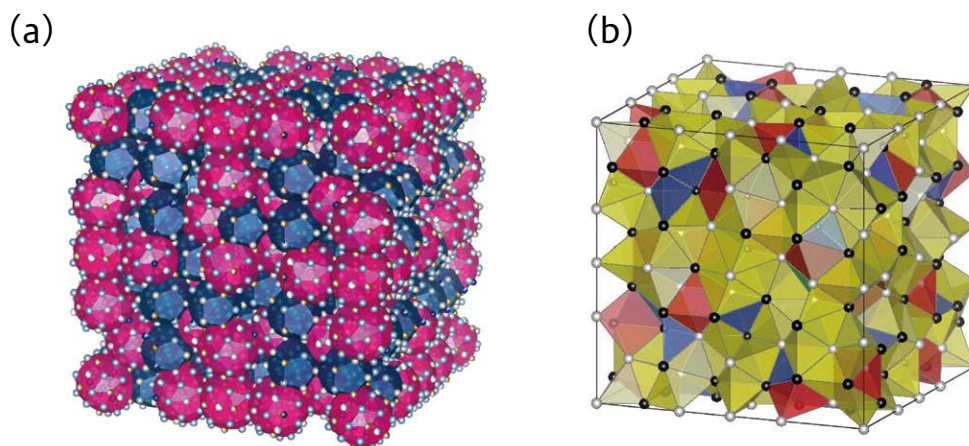
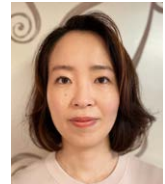


図2
(a) アルミ・遷移金属合金系に見出された高次近似結晶の結晶構造
(b) (a)におけるクラスタ配列を表すカノニカルセルタイリング

ハイパーマテリアルにおける 相関効果と高次元電子構造計算

竹森 那由多 大阪大学 量子情報・量子生命研究センター 特任准教授



私は現在、「高次元電子構造計算法の開発(固体)」を目指し、従来の方法では不可能であった準結晶のバンド計算を、周期系で知られるブロッホの定理とブリルアンゾーンを n 次元 ($n > d$) 周期結晶の d 次元断面構造に拡張し、Kohn-Sham 方程式の数値解析手法の開発に取り組んでいます。本稿では、私の研究の略歴とともに、ハイパーマテリアルの何に注目して研究しているかということについてご紹介申し上げます。

私は **A04班**の研究分担者の古賀昌久先生の研究室の出身で、もともとは強相関電子系の量子多体系の数理モデルの理論解析を行っていました。修士課程のときには冷却原子系の研究を行っていて、準結晶のことは全く知りませんでした。博士課程に進むことを考える上で、何か良いテーマはないか考えていたころ、**A04班**研究代表者の出口和彦先生のセミナーで、Au-Al-Yb 準結晶で現れる圧力に堅牢な量子臨界性^[1]の話に拝聴し、準結晶のこと、そして強相関準結晶の興味深い低温物性に興味を持ちました。しばらくはもともと馴染みのあったハバードモデルや拡張周期アンダーソンモデルなどの量子多体系モデルを準周期系に対して用いて、現実の準結晶中で起こりうる現象からエッセンスを取り出して計算す

るということに興味を持っていました。これらの一連の理論解析の結果、モット転移点近傍で電子の局所量が準周期構造を反映した分布を示すこと^[2]や、周期系では価数転移を引き起こすことが知られている軌道間クーロン相互作用を導入した場合にも、準周期系において価数転移は現れないという知見^[3]を得ました。

しかしながら、現実の準結晶の物性を理解する上では、結晶構造や組成の違いにより、電子状態やフェルミエネルギーなどが大きく異なります。このような性質を理論的に予言・理解する上では、結晶の構造から出発して、一体近似に落とし込んだ範囲内で量子多体問題を解く第一原理計算などの手法が有効です。そこで、学位取得後の進路として、第一原理計算を専門としておられる有田亮太郎先生の実験室に移りました。まずは、第一原理計算を用いて薄膜鉄系超伝導体の熱電特性などについて調査しました。後に試験的に近似結晶の電子構造計算にも挑戦してみましたが、やはり通常の周期結晶と比べて、様々な困難が存在することがわかりました。また、同じ研究室の酒井さん(**A04班**公募研究)とは、大学院生時代の量子多体系モデルの手法を拡張して準周期系の超伝導状態の解析に着手し、この共同研究

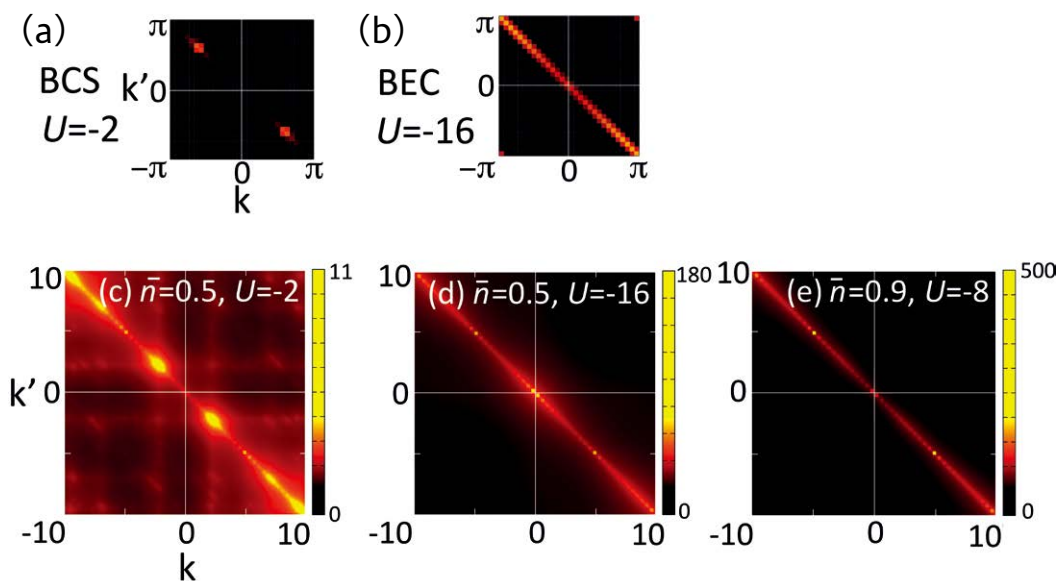


図1 秩序変数 $|\text{OP}_{kk'}|$ の強度図。(a)、(b) 正方格子の場合 (c)–(e) ペンローズ構造での計算結果^[4]。

により準周期弱相関超伝導状態はBCS超伝導と異なるクーパー対を組むこと(図1)^[4]や、準周期弱相関超伝導体では、フェルミ面が存在しないことに起因して、比熱の跳びや、電流-電圧特性曲線の傾きに異常が現れることを明らかにできました(図2)^[5]。

その後岡山大学では鉄系超伝導体をターゲットとした第一原理計算による研究を行っている Jeschke 研究室に異動し、そのころに本領域が発足しました。本領域では、**A03班**の「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」のメンバーの一人として、高次元周期構造から出発することにより、近似結晶から近似度を上げて準結晶に近づくにつれて変化する、物性値や定性的な振る舞いを系統的に説明することを目指しています。特に、これまで直接解析不可能であった3次元フォトリック準結晶における光学的ギャップの予言、準結晶の擬ギャップに関連する物性や半導体準結晶の探索、周期結晶から準結晶への近似度を変えた場合の電子構造の変化、準結晶におけるフォノンの機構を系統的に議論することに興味があります。また、機械学習により探索した準結晶安定化や所望物性の記述子を用いて第一原理計算を行い、電子構造計算を行うことで、新物質開発にフィードバックすることも可能となるはずです。

実は、この研究は故蔡安邦先生が本領域の始まる1年前に元 NIMS の山本昭二先生と議論する機会を与えてくださったことに端を発しています。これまでツールとして使うばかりであったバンド構造計算のプログラムを自分で開発するのは、私にとっては新しい挑戦であり、(特に Fortran 言語に) 苦労することも多いですが、準結晶の電子構造計算だけではなく計算科学の上でも重要なマイルストーンになる研究であるので、気が引き締まる思いで取り組んでいます。

昨年の12月に大阪大学量子情報・量子生命研究センターに移り、量子多体系のための量子アルゴリズムの開発も始めています。ゲート式量子コンピュータのハードウェアの開発としては Noisy Intermediate-Scale Quantum device (NISQ) と呼ばれる小～中規模(量子ビット数～数百個程度)の量子コンピュータしか現状では実用化されていません。このため、大量の量子ビットを必要とする量子誤り訂正を行うことができず、計算途中で起こるノイズの影響を避けられないという状況です。将来的には多数の量子ビットが利用可能、かつ誤り訂正が可能という仮定のもと、量子多体系のモデル計算や

第一原理計算などに適用できる量子アルゴリズムを開発することで、それぞれの手法でボトルネックとなっている不純物解法や一般化固有値問題を古典計算機よりも効率よく解く方法を模索し、準結晶を含む量子計算機の物性応用分野に貢献したいと考えております。

参考文献

- [1] K. Deguchi, S. Matsukawa, N. K. Sato, T. Hattori, K. Ishida, H. Takakura, and T. Ishimasa, *Quantum critical state in a magnetic quasicrystal*, Nat. Mater. **11**, 1013 (2012).
- [2] N. Takemori, and A. Koga, *Local electron correlations in a two-dimensional hubbard model on the Penrose lattice*, J. Phys. Soc. Jpn. **84**, 023701 (2015).
- [3] S. Takemura, N. Takemori, and A. Koga, *Valence fluctuations and electric reconstruction in the extended Anderson model on the two-dimensional Penrose lattice*, Phys. Rev. B **91**, 165114 (2015).
- [4] S. Sakai, N. Takemori, A. Koga, and R. Arita, *Superconductivity on a quasiperiodic lattice: Extended-to-localized crossover of cooper pairs*, Phys. Rev. B **95**, 024509 (2017).
- [5] N. Takemori, R. Arita, and S. Sakai, *Physical properties of weak-coupling quasiperiodic superconductors*, Phys. Rev. B **102**, 115108 (2020).

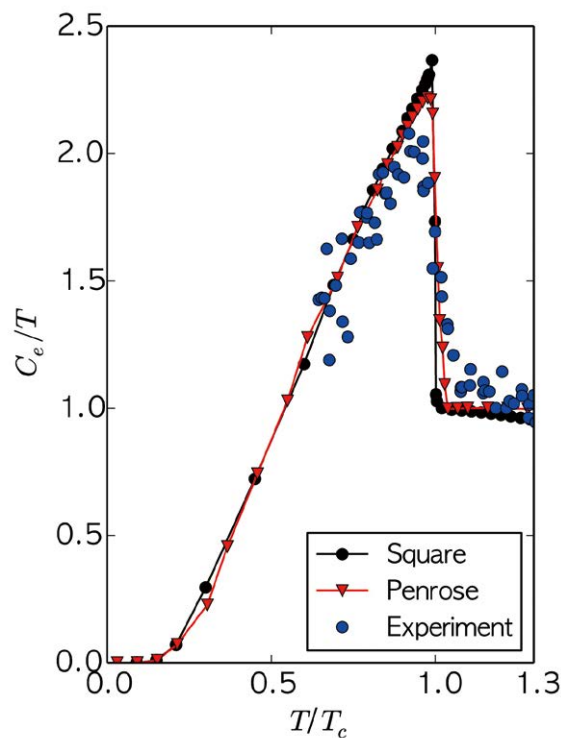


図2 正方格子とペンローズ・タイリングでの比熱の温度依存性^[5]

ハイパーマテリアルの高温異常比熱

枝川 圭一 東京大学 生産技術研究所 教授



筆者は、1986年に東大工学系の大学院に進学して、修士論文研究として準結晶の研究を始めた。それ以来、準結晶の構造秩序や物性に関する研究を現在まで続けている。準結晶は、準周期的並進秩序をもち、これに起因して準結晶構造は一般に、適当な高次元の周期構造の断面として記述できる。そこで本領域では準結晶を（同様に高次元周期構造を用いて記述できる一連の近似結晶を含めて）、「高次元空間（ハイパースペース）のマテリアル」つまり「ハイパーマテリアル」とよんでいる。本領域の重要課題の一つは、ハイパーマテリアルの特異な構造秩序を真に反映したハイパーマテリアル特有の物性を明らかにすることである。我々は、2000年代の初頭に、幾つかの準結晶の比熱が、高温域で Dulong-Petit (DP) の値、すなわち1原子あたり $3k_B$ (k_B : ボルツマン定数) からはずれて $5k_B$ 程度の大きな値を示すことを見出した^[1]。準結晶には、構造秩序の高次元性を反映して、フェイゾンとよばれる準結晶特有の弾

性自由度が存在する。当時、準結晶の大きな余剰比熱がフェイゾン自由度に起因して生ずる可能性を指摘したが、その詳細なメカニズムは明らかになっていない。最近筆者らは、本領域研究への参画を機に、この問題に再度取り組んでいる。

Al-Pd-Mn 系正20面体準結晶 (i-QC 相) とその一連の近似結晶 (CA 相) (1/0, 1/1, 2/1 タイプ) を作製して、室温から融点の高温域で示差走査熱量測定法 (DSC 法) により、比熱の測定を行った^[2]。ここで i-QC 相と一連の CA 相それぞれに対して、組成の異なるものを含め多数の試料を作製して測定を行った。測定には、本領域研究で新たに購入した NETSCH 社製の DSC 装置 (DSC404F3 Pegasus) (図1) を用い、昇温速度 20 K/min とした。この装置は特製の酸素トラップシステムを有し、低酸素濃度 (<1ppm) 下の測定が可能で、酸化による発熱が抑えられ、高精度の測定ができる。図2 (a) は、定圧比熱 c_p の測定結果である。図2 (b) に、熱力学の関係式 $c_V = c_p - 9VB\alpha^2T$ を用いて、図2 (a) の c_p を定積比熱 c_V に変換した結果を示す。ここで V は原子体積、 B は体積弾性率、 α は線熱膨張係数であり、 V と B は文献値^[3]、 α は準結晶相に対して高温 X 線回折法により測定した格子定数の温度依存性から算出した結果を用いた。図2 (b) において、700 K 以下では、すべての試料の c_V が DP 則をよく満たしている。700 K を越えると、 c_V が $3k_B$ からはずれて上昇しているが、その上昇の大きさには i-QC 相と一連の CA 相で系統的なふるまいが見られている。つまり、最も大きく上昇しているのが i-QC 相で、 c_V は 1100 K で $5k_B$ に達している。2/1-CA 相の c_V は、i-QC 相の c_V と同程度か若干小さい上昇を示し、1/1- と 1/0-CA 相はそれらよりはるかに小さい上昇を示している。i-QC の幾つかの試料について 1000 K 付近にピークが見られているが、これは Al_6Mn 結晶相の融解ピークである。ピークの面積から、この相の含有量が 0.5-1% と見積もられた。含有量は十分小さく、ピーク以外の部分は i-QC 相の c_V を表すものとしてよい。



図1 比熱測定に用いた DSC 装置

以上のように余剰比熱 Δc_V の大きさは、低次から高次の CA 相、i-QC 相の順に系統的に大きくなっており、i-QC 相の大きな Δc_V の原因には、準結晶の特異な構造秩序、すなわち準周期性、すなわちフェイゾン自由度の存在が関わっていると思われる。一般に、フェイゾンは高温でのみ活動する。Coddens ら^[4]は Al-Pd-Mn 系 i-QC 相中のフェイゾンダイナミクスを中性子非弾性散乱法により調べ、集団的なフェイゾンの原子ジャンプに起因する準弾性散乱の強度が 700 K 以上の温度で急に大きくなることを見出した。これは、i-QC 相の Δc_V が 700 K 以下で $\Delta c_V \approx 0$ であり、それ以上の温度で急激に増大する我々の結果とよく合っており、i-QC 相の余剰比熱がフェイゾンに起因することを示唆している。現在、フェイゾンが余剰比熱を生むメカニズムを明らかにする目的で計算機シミュレーションを進めている。

本研究は、東大生産研の我々のグループの福島健人、須山裕生、徳本有紀、上村祥史の各氏と物質・材料研究機構の高際良樹氏との共同研究で進めている。

参考文献

- [1] K. Edagawa and K. Kajiyama, *High Temperature Specific Heat of Al-Pd-Mn and Al-Cu-Co Quasicrystals*, Mater. Sci. Eng. **A294-296**, 646 (2000).
- [2] K. Fukushima, H. Suyama, Y. Tokumoto, Y. Kamimura, Y. Takagiwa and K. Edagawa, *Comparative Study of High-Temperature Specific Heat for Al-Pd-Mn Icosahedral Quasicrystals and Crystal Approximants*, J. Phys. Commun. **5**, 085002 (2021).
- [3] K. Tanaka, Y. Mitarai and M. Koiwa, *Elastic Constants of Al-based Icosahedral Quasicrystals*, Philos. Mag. **73**, 1715 (1996).
- [4] G. Coddens, S. Lyonnard, B. Hennion and Y. Calvayrac, *Triple-Axis Neutron-Scattering Study of Phason Dynamics in Al-Mn-Pd Quasicrystals*, Phys. Rev. **B62**, 6268 (2000).

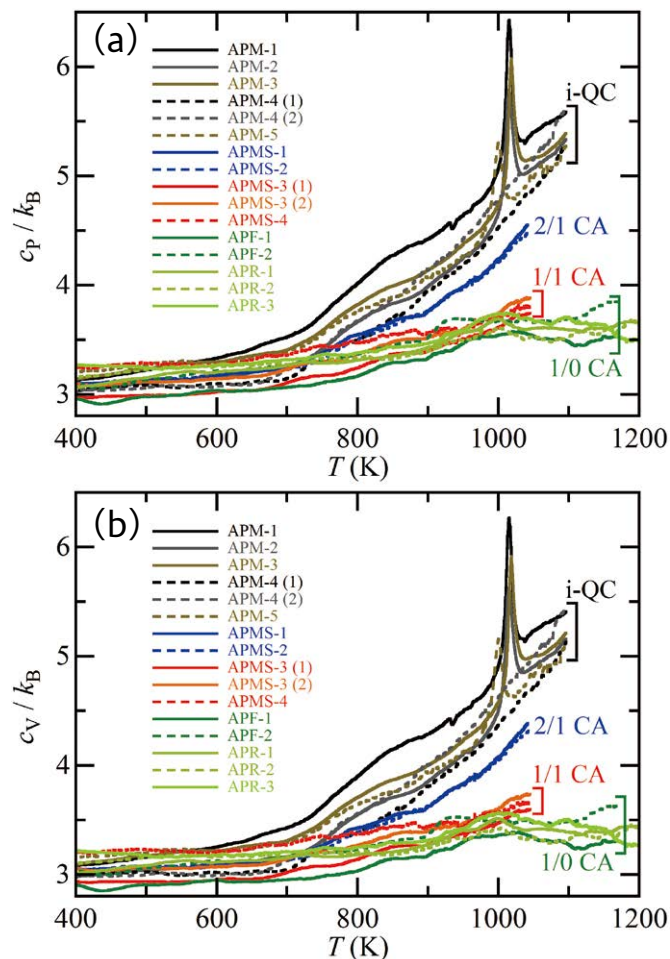


図2 定圧比熱 c_p の温度依存性の測定結果 (a) と、それらを変換して求めた定積比熱 c_v の温度依存性 (b)^[2]

ファンデルワールス結晶界面における ハイパーマテリアル研究

井手上 敏也 東京大学 工学系研究科 助教



私たちは、2次元ファンデルワールス結晶の界面において生じるユニークな構造や電子状態、物性に興味を持って研究を進めています。3次元ファンデルワールス結晶をスコッチテープ等によって劈開して得られる2次元結晶の研究は、炭素からなる2次元シート状の物質であるグラフェンの発見を契機として飛躍的に発展してきた分野です。3次元結晶を原子層数層からなる薄膜試料にするだけで、元の物質とは全く異なる電子状態や特性が得られることが多く、特異な物性の探索や解明が進んできました。加えて最近では、そのような2次元結晶の界面の構造や物性にも大きな注目が集まっています。ファンデルワールス結晶の特徴の一つは、層間がファンデルワールス力で結合するため、結晶構造や格子定数に関係なく、時には角度をつけて積層する等して、自在に界面を作製できる点です(図1(a))^[1]。これは、格子整合が要求される従来の半導体や酸化物の界面とは大きく異なる点で、このようにして得られた2次元ファンデルワールス結晶の界面は、一般に結晶の持つ並進対称性が破れた準周期系になっているた

め、ハイパーマテリアル研究の魅力的な舞台となります。

例えば、ハニカム格子を持つ2次元結晶を少し捻って積層した界面では、図1(b)に示すようなモアレ構造が現れ、電子状態や半導体光物性に大きく影響を与えることが明らかとなり、現在世界中で精力的に研究が行われています^[2]。また、同じくハニカム格子を持つ2次元結晶を30度だけ捻って積層した界面では、歯車のような模様が準周期的に並んだ12回回転対称性を持つ特徴的構造が実現されていることも知られています(図1(c))^[3]。これらは、回転対称性を有するファンデルワールスハイパーマテリアルの例ですが、私たちは最近、鏡像対称性に着目した新しいタイプのファンデルワールスハイパーマテリアルとそこにおける特徴的光電荷応答を報告しました^[4]。

対象とした物質は、2次元半導体である WSe_2 と黒リンの界面です(図2)。 WSe_2 はグラフェンと類似のハニカム格子構造を持つ2次元半導体で、3回回転対称性を持ち、黒リンは2回回転対称性を有する

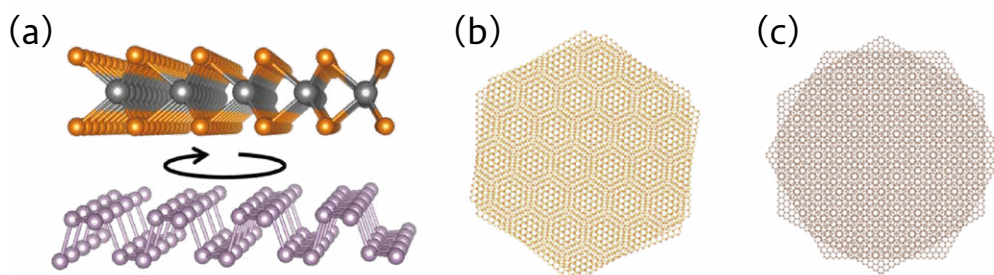


図1 (a) ファンデルワールス結晶界面の模式図と(b,c)界面で生じる様々な非周期構造の例。
(b)モアレ構造と(c)12回回転対称界面結晶構造の図はVESTA^[5]を用いて作成した。

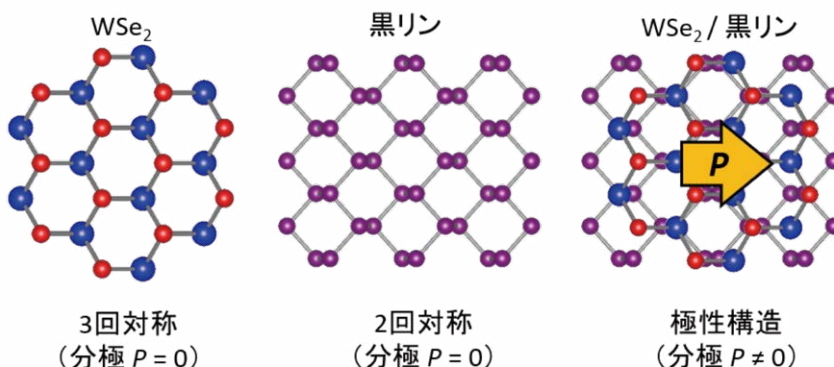


図2 WSe_2 と黒リンおよびその界面の模式図

異方的な2次元半導体です。これらの界面を考えると、3回回転対称性と2回回転対称性が両立しないため、各々の結晶が持っている回転対称性は消失することが分かります。一方で、鏡像対称性に着目し、2つの2次元結晶の鏡像面が平行になるように積層させると、準周期的界面においても鏡像対称性が残り、従ってこの鏡像面に平行に分極が発現することが期待されます(図2)。この界面の設計指針で面白いのは、元々の2次元結晶(WSe_2 と黒リン)が分極を持たないにも関わらず、界面を作製するだけで極性構造を実現でき、かつその界面は並進対称性が失われた準周期系になっているという点です。

私たちは、この WSe_2 と黒リンの準周期界面において発現が期待される分極を反映した物性として、バルク光起電力効果という現象の観測に取り組みました。バルク光起電力効果とは、空間反転対称性の破れた物質に光を照射した場合に、半導体pn接合のような構造がなくても、対称性破れを反映して自発的に光電流が流れるような現象のことです。特に分極を持つような物質では、分極方向に光電流が流れることが、様々な強誘電体や極性物質で報告されています。 WSe_2 /黒リン界面では、前述した議論から面内の鏡像面の方向に分極が発現するので、その方向へのバルク光起電力効果が観測されることが期待されます(図3(a))。実際に、作製した WSe_2 /黒リン界面の中心部(電極から離れた位置)に532 nmの波長をもつ光(直線偏光、1.44 mW)を照射した場合の鏡像面方向の電流-電圧特性が図3(b)(緑)になりますが、光を照射しない場合(黒)には無かったゼロバイアス電流が光照射下で明瞭に観測されていることが分かります。これは、分極を反映したバルク光起電力効果がこの界面で期待通りに発現していることを示唆しています。文献[4]では、このような光電流応答の光照射位置依存性を調べるとともに、 WSe_2 や黒リンだけのデバイスおよび界面デバイスの鏡像面と垂直な方向では光電流が消失するこ

とも確認して、観測された現象が確かにバルク光起電力効果であることを明らかにしました。さらに、光電流の照射光パワー依存性や波長依存性から、準周期的界面における電子状態やバルク光起電力効果の微視的起源に関して考察を深めました。この成果は、ファンデルワールス結晶ヘテロ界面における機能性開拓の新しい方向性を示しただけでなく、準周期系において初めて分極の概念を提唱し実際にそれを反映した物性を観測したという点において、ハイパーマテリアル研究としても大きな意義があったのではないかと考えています。

この研究で見出した界面の設計原理や研究の方向性は、様々なファンデルワールス結晶に広く適応可能であると期待できます。現在までに超伝導体や磁性体、強誘電体、非自明なトポロジカル相を持つもの等、様々な2次元ファンデルワールス結晶が見つかっており、今後そのようなエキゾチックな量子相を持つ2次元結晶に界面の対称性制御の手法を用いることで、新奇物性や機能性の開拓に取り組んでいきたいと考えています。

参考文献

- [1] A. K. Geim, and I. V. Grigorieva, *Van der Waals heterostructures*, *Nature* **499**, 419 (2013).
- [2] E. Y. Andrei, D. K. Efetov, P. Jarillo-Herrero, A. H. MacDonald, K. F. Mak, T. Senthil, E. Tutuc, A. Yazdani, and A. F. Young, *The marvels of moiré materials*, *Nature Rev. Mater.* **6**, 201 (2021).
- [3] S. J. Ahn, P. Moon, T.-H. Kim, H.-W. Kim, H.-C. Shin, E. H. Kim, H. W. Cha, S.-J. Kahng, P. Kim, M. Koshino, Y.-W. Son, C.-W. Yang, and J. R. Ahn, *Dirac electrons in a dodecagonal graphene quasicrystal*, *Science* **361**, 782 (2018).
- [4] T. Akamatsu, T. Ideue, L. Zhou, Y. Dong, S. Kitamura, M. Yoshii, D. Yang, M. Onga, Y. Nakagawa, K. Watanabe, T. Taniguchi, J. Laurienzo, J. Huang, Z. Ye, T. Morimoto, H. Yuan, Y. Iwasa, *A van der Waals interface that creates in-plane polarization and a spontaneous photovoltaic effect*, *Science* **372**, 68 (2021).
- [5] K. Momma and F. Izumi, *VESTA 3 for three-dimensional visualization of crystal, volumetric and morphology data*, *J. Appl. Crystallogr.* **44**, 1272-1276 (2011).

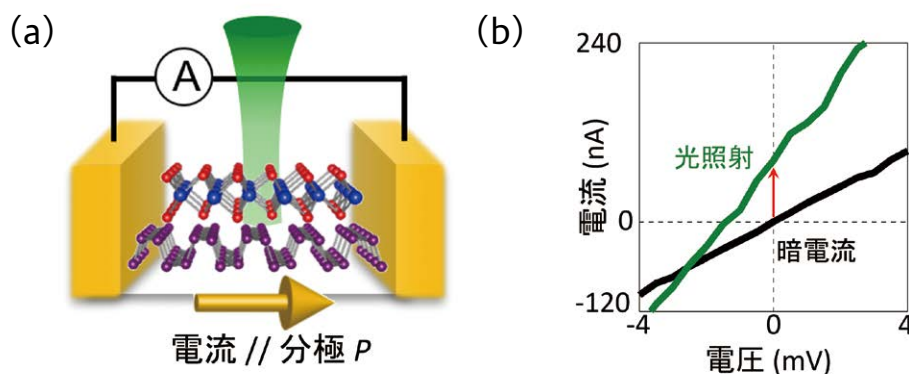
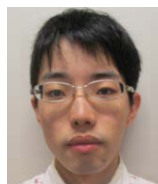


図3 (a) WSe_2 /黒リン界面におけるバルク光起電力効果の模式図
(b) 光照射下の電流-電圧特性

廣戸 孝信

物質・材料研究機構
技術開発・共用部門 エンジニア



このたびは、若手紹介の機会を頂きありがとうございます。まずは、簡単に研究略歴を紹介させていただきます。

私は学部4年より、東京理科大学 基礎工学部 材料工学科（現先進工学部 マテリアル創成工学科）田村研究室に在籍し、博士課程修了まで、Tsai 型正20面体クラスター（以下、Tsai クラスター）を有する物質群の磁性について特に興味を持って研究を行ってきました。Tsai クラスターの特徴の一つは、磁性を担う希土類元素が正20面体の頂点位置を占めることにあります（図1上部）。

研究を始めた当初は、準結晶にはおろか、結晶であるはずの近似結晶においてすらも長距離にわたる磁気秩序の存在は知られていませんでしたが、研究により、Tsai 型1/1近似結晶（図1左下）においてスピングラス的なふるまいのみならず、反強磁性・強磁性といった多様な長距離磁気秩序が存在することを明らかとしました^[1,2]。詳細は前号（Vol.3, p12）の鈴木先生の若手研究者紹介のページをご覧ください。今日では、1原子あたりの伝導電子数（ e/a ）を手掛かりとして磁性のチューニングができることも明らかとなり^[3]、それらの指標を用いて高次の近

似結晶（2/1近似結晶）^[4]や準結晶^[5]においても長距離磁気秩序が存在することが明らかとなりました。また、それらの磁気構造も正20面体を反映したユニークな磁気構造を示すことが明らかとされています^[6,7]。そのため、ハイパーマテリアルにおいても多様な磁性や磁気秩序の発現が期待できます。

本研究領域の「ハイパーマテリアル」は、実空間に補空間を加えた「高次元空間（Hyperspace）」を通じて新たな「物質科学」観を創出することを目的として名付けられたことばです。そのためには、ハイパーマテリアルそのものをより深く理解するとともに、「材料＝マテリアル」としての機能創出を目指すアプローチも必要ではないかと考えています。

試みの一つとして、最近、『水素液化のための磁気冷凍材料』として使うことが出来ないか？との観点から検討を行いました^[8]（図1右下）。現状では、Auを多量に含む合金ですので、コストや経済性の点ではすぐさま社会実装となる材料とはなりません。希土類元素あたりに換算した磁気冷凍材料としての能力は、精力的に研究がされているラーベス相化合物と比べても遜色はありません。材料の機能としての視点から眺めても、「ハイパーマテリアル」が大きなポテンシャルを持っていることの良い例だと思います。

さらに広い視点で、 B_{20} からなる正20面体クラスターで結晶構造が整理される β 菱面体晶ホウ素の低温構造相転移（ホウ素の融点2350 Kに比べればはるかに“低温（550 K）”で起こります！）にも興味を持っています。詳細は論文^[9]をご覧ください。今日では、1原子あたりの伝導電子数（ e/a ）を手掛かりとして磁性のチューニングができることも明らかとなり^[3]、それらの指標を用いて高次の近

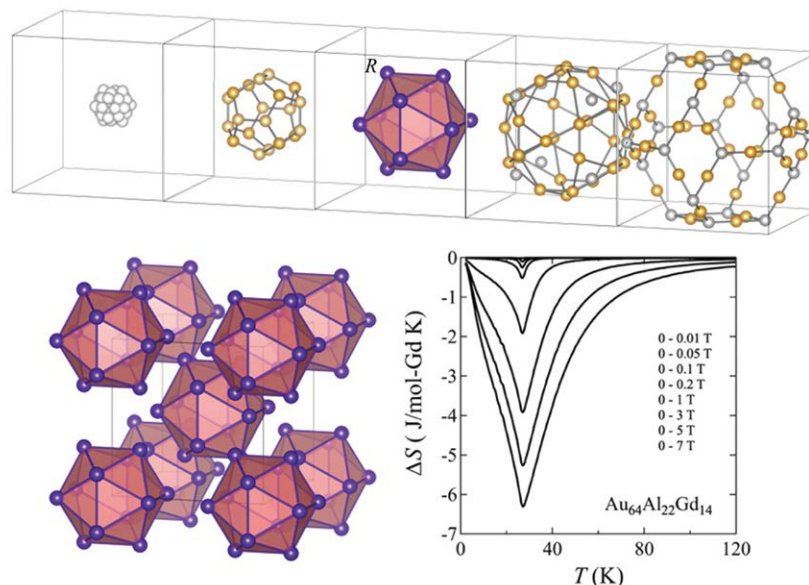


図1
Tsai クラスターの入れ子構造（上図）。正20面体の頂点に磁性を担う希土類（R）原子が占有し、1/1近似結晶ではそれらが BCC 配列となる（左下図）。強磁性を示す Au-Al-Gd 1/1 近似結晶の磁気熱量効果（右下図）。

本相転移は光照射による構造変化とも密接に関係しているらしいことも明らかとなりつつあります。現在、研究を進めていますが、温度や光照射によって構造が変わるユニークなハイパーマテリアルの実態を解明したいと思っています。

現在は、物質・材料研究機構 技術開発・共用部門 材料分析ステーションでX線回折を用いた物質や材料評価に従事しています。解析する多くの材料はハイパーマテリアルそのものではありませんが、多種多様な材料に触れるにつれて、「ハイパーマテリアル」の裾野の広がりを少しずつ感じています。もちろん、これまでに人類が明らかにしてきたハイパーマテリアルはまだまだ氷山の一角です。そのため、「いかに効率的にハイパーマテリアルを見出すか？」という点も、インフォマティクス力を借りてX線回折が大きな威力を発揮できる分野だと思います。

もちろん、「なぜハイパーマテリアルが形成されるのか？」といった根源的な問題も残っています。これらの問題へのアプローチの一つとして、実験室系の装置において、2.6 K から 1773 K の温度範囲での粉末 X 線回折測定が可能な環境が整備されている

点も特色の一つです。例えば、Tsai 型クラスターの中心に存在する四面体が関与する配向相転移や、分相現象の解明、ハイパーマテリアルにおける高温比熱の増大などの諸問題に適用できないかと考えています。

とりとめのない内容ではありますが、領域の先生方にはご指導・ご鞭撻を頂ければと思います。

- [1] T. Hiroto, et al., *J. Phys.: Condens. Matter* **25** (2013) 426004.
- [2] T. Hiroto, et al., *J. Phys.: Condens. Matter* **26** (2014) 216004.
- [3] A. Ishikawa, et al., *Phys. Rev. B* **93** (2016) 024416.
- [4] Yoshida et al., *Phys. Rev. B* **100** (2019) 180409, and Inagaki et al., *Phys. Rev. B* **101** (2020) 180405.
- [5] Tamura et al., *J. Am. Chem. Soc.* **143**, **47**, (2021) 19938–19944.
- [6] T. J. Sato, et al., *Phys. Rev. B* **100** (2019) 180409(R).
- [7] T. Hiroto, et al., *J. Phys.: Condens. Matter* **32** (2020) 415802.
- [8] N. Kikugawa, et al., *Journal of Alloys and Compounds* **882** (2021) 160669.
- [9] T. Hiroto, et al., *Solid State Sciences* **104** (2020) 106195.

若手研究者紹介

Liu Chang

情報・システム研究機構 統計数理研究所
特任助教



この度は若手紹介ということで、このような機会をいただきありがとうございます。まずは、簡単にこれまでの研究歴を紹介いたします。

大学院時代は静岡大学星野研究室に在籍し、第一原理計算を用いて合金の安定性を研究してきました。この研究では、金属中の不純物による格子歪効果と不純物原子間相互作用を高精度計算で解いて、合金相図を予測しました。また、合金安定性に関する熱力学パラメータの同定も行いました^[1,2]。博士号を取得した後は、物質・材料研究機構が推進した国プロ「情報統合型物質・材料開発イニシアチブ(MI²I)」に参加し、このことが縁となり統計数理研究所の吉田亮教授が率いているものづくりデータ科学研究センターに異動する機会を得て、現在はマテリアルズ・インフォマティクスに関する多彩な研究を推進しています^[3-6]。本稿では、本新学術領域で

推進している機械学習による新規準結晶の探索^[7]を紹介します。

イスラエルの冶金学者 Dan Shechtman 博士による最初の準結晶の発見以来、およそ35年間で約100個の熱力学的に安定な準結晶が発見されてきました。準結晶の探索では、Hume-Rothery の電子濃度則 e/a が広く活用されてきました^[8-10]。しかしながら、Hume-Rothery の電子濃度則だけでは準結晶の化学組成を同定することが困難な局面も多々あります。一方、新しい物質・材料の発見を加速するために、近年では材料研究の様々な分野において機械学習の応用が活発化しています。本研究のねらいは、機械学習の解析技術を準結晶研究に導入し、新しい準結晶の発見のペースを大幅に加速することです。

我々が準結晶研究に参入した際、当該分野における機械学習の応用は全くの未踏領域でした。機械学習は準結晶の発見に貢献できるのか。この問いに答えることが本研究の出発点でした。まず我々は、非常にシンプルな教師あり学習を適用して準結晶を予測することに取り組みました。モデルの入力変数は化学組成、出力変数は、「準結晶」、「近似結晶」、通常の周期結晶を含む“その他”を示すクラスラベルと

します。学習データには、これまでに発見された準結晶、近似結晶、結晶の化学組成を用いました。このデータを用いて訓練したモデルの3クラス分類問題における予測能力を系統的に調べました。アルミニウムと遷移元素を含む三元合金系を対象に予測相図と文献から抽出した実験相図と比較したところ、我々のモデルは非常に高い予測精度を持つことが分かりました。

さらに、機械学習のブラックボックスモデルに内在する入出力のルールを抽出することで、準結晶と近似結晶の相形成に関する法則が明らかになりました。この法則は、原子のファンデルワールス半径や価電子数の分布に関する5つの単純な式で表されます(図1)。これらの条件は、準結晶研究において長年求められてきた新しい準結晶を探索するための設計指針になるかもしれません。

今回の研究によって、我々はデータ科学による準結晶の発見を実現するための第一歩を踏み出しました。現在、このモデルを用いて、領域内の多くの

研究者が新しい準結晶の合成に取り組んでいます。1984年に初めて準結晶が発見されてから35年近くが経過したにもかかわらず、準結晶の形成条件や安定化のメカニズムはよく分かっていません。データ科学が準結晶研究の未解決問題の解決に大きく貢献することを期待しています。

本稿で紹介した研究成果は、東京大学の木村薫先生、藤田絵梨奈さん、大学院生の稲田祐樹さん、東京理科大学の田村隆治先生、石川明日香さん、ならびに、物質・材料研究機構の桂ゆかり先生との共同研究によるものです。ここに深く御礼申し上げます。

- [1] Liu, C. et al. *Mater. Trans.* **59**, 1669–1676 (2018).
- [2] Liu, C. et al. *Mater. Trans.* **59**, 883–889 (2018).
- [3] Torres, P. et al. *J. Phys. Condens. Matter* (2022).
- [4] Ju, S. et al. *Phys. Rev. Mater.* **5**, 053801 (2021).
- [5] Wu, S. et al. *Mol. Inform.* **39**, 1900107 (2020).
- [6] Yamada, H. et al. *ACS Cent. Sci.* **5**, 1717–1730 (2019).
- [7] Liu, C. et al. *Adv. Mater.* **33**, 2102507 (2021).
- [8] Tsai, A. P. et al. *Jpn. J. Appl. Phys.* **26**, L1505–L1507 (1987).
- [9] Tsai, A. P. et al. *Mater. Trans., JIM* **30**, 463–473 (1989).
- [10] Tsai, A. P. et al. *Mater. Trans., JIM* **31**, 98–103 (1990).

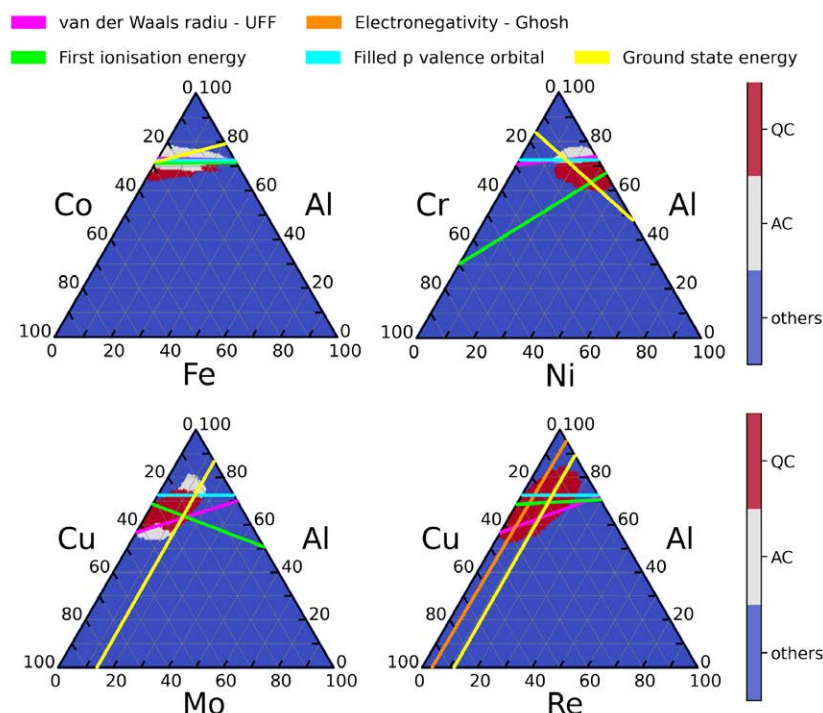


図1
機械学習による準結晶の形成ルールの発見。8種類の三元系に対する機械学習の予測相図(赤：準結晶、灰色：近似結晶)。直線は機械学習が同定した五つのルールを表す。これらの合流点に準結晶相が現れる。

会議・研究会等報告

IRN Theory Session

Zoomにて開催

開催日：2021年6月7日、8日

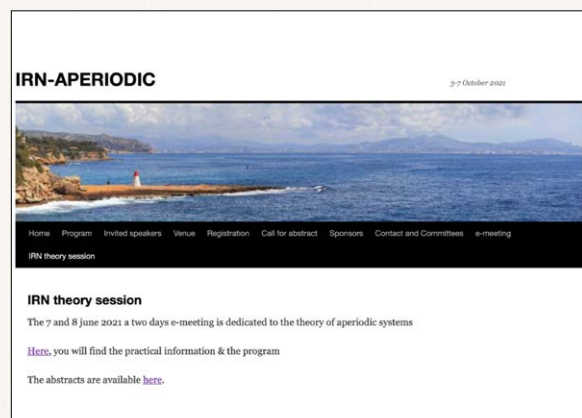
杉本 貴則（東京理科大学）

昨年6月に2日間の日程で、IRN Theory Session がオンライン開催されました。本研究会は、新学術領域「ハイパーマテリアル」と、非周期系の物質科学に関する国際研究プロジェクト「IRN (International Research Network)-APERIODIC」の最初の橋渡しを目的として、まずは理論研究者が主として集まって行われたものです。研究会のホストは、フランスのパリ＝サクレ大学 A. Jagannathan 教授にご担当いただき、ドイツのアーヘン工科大学や米国の南カリフォルニア大学、日本からは東京工業大学の古賀准教授や岡山大学の竹森特任助教（現在、大阪大学特任准教授）、理化学研究所の酒井氏等が参加・発表されました。合計で10件の講演が行われ、30名弱の方が参加されました。また、時間調整が難しい中にもかかわらず、予め用意されたトピックや当日に共有された問題提起

などを中心に、情報共有や討論の時間も多く設けられました。

準結晶の理論をテーマにした研究会が開催された背景には、量子臨界性や超伝導、磁性など、準結晶物性に関する昨今の大きな実験的発見が挙げられます。これまでの準結晶の理論研究は、こうした準結晶特有の物性を、周期系やランダム系から如何に特徴を切り分けて分類するかに主眼が置かれたものが多く、理論的な扱い易さから、相互作用を単純化した低次元（1、2次元）の有効模型の中で議論されてきました。一方、昨今発見された実験的な観測結果を説明するためには、物質中の複雑な相互作用や高次元（3次元）性をどのようにに取り扱い、これまでの理論的な結果とどう摺り合わせていくかを考える必要があります。この共通する課題に対し、理論家が各々で取り組んできた有効模型の解析結果や個別知を持ち寄り、準結晶の性質を総合的に議論することで、より大きな複合知へと醸成させたいという思いが共有されていたと思います。

本研究会では、この共通認識をベースにして、多くの質疑応答や意見交換がなされたこと記憶しています。コロナ禍に入り、いくつかのオンライン研究会に参加してきましたが、個人的には、どれも時間調整や議論・討論の難しさといった課題を感じさせられました。一方、本研究会では、時差の問題で時間調整がより困難な状況にありましたが、本質的に近い課題に取り組む研究者が少人数でコンパクトに集まることで、焦点がボケることがなかったため、コロナ禍のオンライン研究会が抱える一般的な課題を乗り越え、新しい時代の研究会のあり方の一つの成功例を見た気がします。今後、益々このような研究会が増え、国際共同研究のネットワークがより盤石なものになることで、これまで単独では到達できなかったハイパーマテリアルの複合知の創出がなされることを楽しみにしています。



IRN Theory Session のホームページ：
研究会のプログラムや概要は、本ページから参照できます。



<http://irn-aperiodic.grenoble.cnrs.fr/index.php/irn-theory-session/>

1st International School on Hypermaterials (第1回国際ハイパーマテリアルスクール)

Zoom にて開催

開催日：2021年6月21日～25日

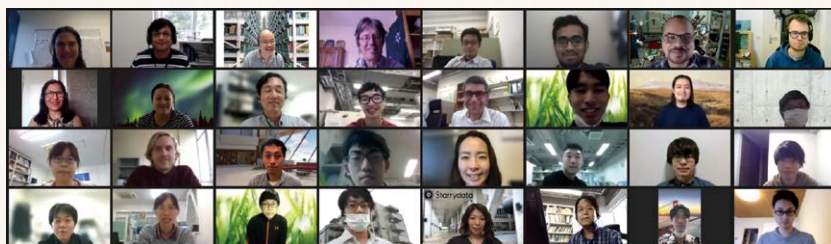
高倉 洋礼 (北海道大学)

ハイパーマテリアルの基本的な理解を望んでいる本領域に関係する学生・若手研究者や、異分野の学生・研究者を対象とした、第1回国際ハイパーマテリアルスクール (<https://wcp2-ap.eng.hokudai.ac.jp/hypermaterials/ish/>) が、IRN-APERIODIC (<http://irn-aperiodic.grenoble.cnrs.fr> ニュースレター Vol.1 参照) との共催で、2021年6月21日～25日に Zoom を用いたオンラインにて開催されました。日欧の9名の講師がそれぞれの専門分野の入門的な講義を行い、国内から56名、国外から22名の研究者・学生が参加しました。本スクールは日欧の時差を考慮して、日本時間の午後14:30からスタートし、1日あたり90分の講義が2回というスケジュールで実施されました。

初日の冒頭には領域代表の田村先生(東京理科大)による本新学術領域の短い紹介が行われました。引き続き、de Boissieu 先生(CNRS、SiMaP、フランス)からハイパーマテリアルを含む非周期結晶全体についてのチュートリアルが行われ、そして **A02班**の私、高倉(北大)が準結晶の高次元構造についての講義を行いました。2日目は van Smaalen 先生(Bayreuth 大学、ドイツ)による不整合変調構造の超空間モデルの基礎と、**A02班**の藤田先生(東北大)によるハイパーマテリアルの幾何学的構造を記述する上で重要なタイリングについての講義でした。3日目は Grin 先生(MPI for Chemical Physics of Solids、ドイツ)によるハイパーマテリアルの合成とその評価に関する講義と、初日にチュートリアルをして下さった de Boissieu 先生によるハイパーマテリアルのフォノンとフェイゾンについての講義でした。引き続きこの日は、参加者によるポスターセッション

が開催されました。発表件数は8件と少なめでしたが、このポスターセッションは本領域での初めての試みとして、Gather というプラットフォームを利用して行われました。Gather とはロールプレイングゲームのような外観と UI で、ウェブブラウザから参加することができ、アバターを操作して参加者同士でコミュニケーションできるツールです。4日目は Gaudry 先生(Lorraine 大学、CNRS、フランス)が、ハイパーマテリアルの表面電子構造について、**A03班**の吉田先生(統計数理研究所)が、機械学習の基礎とハイパーマテリアルへの応用について、それぞれ講義されました。またこの日は、引き続き昨日のポスターセッションと同じ Gather によるバーチャル会場で、オープンディスカッションも開催されました。そして最終日には、Jagannathan 先生(Paris-Sud 大学、フランス)が、モデル系準結晶の電子物性の理論について、佐藤先生(愛工大)が、最近実験によって明らかになってきた準結晶の強相関電子系としての物性をそれぞれ講義されました。

5日間にわたる長丁場のスクールでしたが、参加者からの活発な質問もあり、また、幸い大きな運営上のトラブルもなく終了することができました。オンラインの開催ならば本来可能であったはずの参加者に対する課題演習が実施できなかったのは残念でした。今後同様なスクールを継続して本新学術領域と IRN-APERIODIC の協力のもと、できればオンラインにおいて開催できればと考えています。その際には、再び領域の皆様のご協力を仰ぐこととなりますが、よろしくお願いいたします。最後に、忙しいなか講義内容を準備していただいた講師の皆様、そして参加者の皆様、ほかすべての関係者の皆様に感謝申し上げます。



第1回 国際ハイパーマテリアルスクール(オンライン)の集合写真(一部)

第6回領域会議

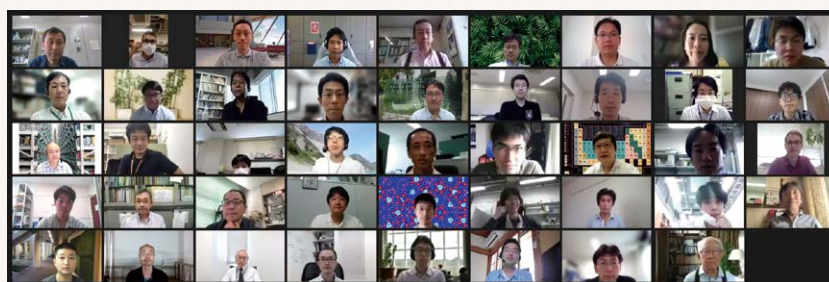
Zoomにて開催

開催日：2021年7月13日～15日

出口 和彦 (名古屋大学)

第6回 Web 領域会議を開催し、総勢84名の研究者・学生の皆様にご参加いただきました。**A01**から**A04**までの計画班と公募班の先生方より新学術領域に関する研究の現状を発表いただくことで、領域内の交流の促進を図りました。各日の午前・午後の発表後には、Zoomによる個別ディスカッション・セッションを行いました。口頭発表での各発表者が一人一室に入り、その他の参加者が発表者の部屋を訪ねて、質疑応答や議論をしました。

強磁性準結晶の発見を含む蔡型準結晶・近似結晶に関する磁気構造の系統的研究、低エネルギー磁気ゆらぎの研究、Al-Pd-Mn 準結晶に関するフォノン、フェイゾン弾性や高温比熱の研究など多くの注目すべき報告がありました。また、組成から準結晶とそうでないものの分類問題に関する機械学習モデルについての報告は新準結晶合金の合成につながる新しい流れが生まれつつあることを実感できました。ご参加頂いた皆様、ありがとうございました。



IRN-APERIODIC キックオフミーティング

オンサイト (フランス Carry le Rouet) 及び Zoom によるハイブリッド開催

開催日：2021年10月3日～7日

藤田 伸尚 (東北大学)

準結晶を含む非周期結晶の研究コミュニティと関連物質に関心を持つ化学・物理分野のエキスパートとの連携を発展的に強化するため、フランス・ドイツ・日本の関連研究機関の間の合意に基づく5年間の人的交流プロジェクト：International Research

Network: Open space between aperiodic order and physics & chemistry of materials (IRN-APERIODIC)」が2020年から始まり、本新学術領域からも多数がコアメンバーとして活動しています。このプロジェクトのキックオフミーティングが



2021年10月3日～7日に Carry le Rouet(フランス)を会場としてハイブリッド形式で行われました。この研究会は同時に、名古屋(2015年)、Annecy(2017年)、仙台(2019年)と過去三回にわたり行われてきた非周期結晶分野と強相関電子系分野の合同国際会議を引き継ぐものです。当初は2020年9

月に予定されていましたが、新型コロナウイルスの流行のため現地開催が1年延期されました。日本からはオンライン参加のみとなりましたが、本新学術領域からも多数が招待講演(19件中5件)や口頭発表(26件中10件)を行い、遠隔にもかかわらず密度の濃い討論が繰り広げられました。

Materials Research Meeting 2021 (MRM2021)

オンサイト(パシフィコ横浜)及び Zoom によるハイブリッド開催
開催日: 2021年12月14～16日

高際 良樹(物質・材料研究機構)

一般社団法人日本 MRS (MRS-J) が主催する国際会議、Materials Research Meeting 2021 (MRM 2021) は、2021年12月13日～16日の日程でパシフィコ横浜での現地開催とオンラインによるハイブリッド開催となりました。今回、B. Fundamentals of Novel Structure of Materials の大セッションの中に、B-1 Hypermaterials のサブセッションが12月14～16日に設けられました。新学術領域研究の第7回領域会議を兼ねる形式であったこともあり、オーラルセッション・ポスターセッションも含めて数多くのバラエティに富んだ研究成果が発表されました。

Cluster Keynote は、領域に関連するテーマとして M. Engel によって“Building Block Design for Complex Structure and Chirality”という題目で講演がありました。Symposium Keynote としては、M. de Boissieu により“Atomic Structure and Dynamics of Hypermaterials”という題目でレビュー講演がなされ、ハイパーマテリアルのフェイゾン由来のダイナミクスに関わる研究成果が主題

でした。また同様に、A. Goldman により“Physical Properties of Quasicrystals”という題目で、ハイパーマテリアルの超伝導や磁性を中心に最近の研究成果がレビューされました。2件の Keynote Lecture はまさに本研究領域のアクティビティの高さを理解するのに十分な講演でした。

執筆者は、12月16日午後の1セッションの座長を仰せつかりましたが、このセッションだけでも国内外からの2件の Invited Talk と3件の一般講演からなる国際学会にふさわしい構成でした。ハイパーマテリアルの分類や表面研究、薄膜形成から光起電力・触媒効果に至るまで、幅広いテーマに関わる研究成果が報告されました。

本新学術領域の発足からわずか3年足らずでこのような大きな国際会議を通じて研究のアクティビティを示すことができた点が大変素晴らしく、プロジェクトとしては折り返しを迎えた後半戦でも数多くのインパクトのある研究成果が創出されることを願っています。

2021 年度 活動記録

受賞



令和3年度科学技術分野の文部科学大臣表彰において、若手科学者賞を受賞しました。

受賞者: 井手上 敏也(A01班)
東京大学 工学系研究科 助教
対象研究: 空間反転対称性の破れた物質における量子流制御の研究
受賞日: 2021年4月6日



第16回(2022年)日本物理学会において、若手奨励賞を受賞しました。

受賞者: 竹森 那由多(A03班)
岡山大学 異分野基礎科学研究所 特任助教
[現職]大阪大学 量子情報・量子生命研究センター 特任准教授
対象研究: 準周期系に特有な電子相関と超伝導状態に関する理論研究
受賞日: 2021年10月



日本材料科学会において、奨励賞(末澤賞38号)を受賞しました。

受賞者：金昇炫(共同研究者：A02班 松下 能孝)
九州大学 総合理工学府 博士課程2年
指導教官：張 炳國
九州大学 総合理工学研究院 教授
対象研究：Corrosion Behavior of Sintered YSZ with
Volcanic Ash for Thermal Barrier Coatings
受賞日：2021年5月21日



日本物理学会2021年秋季大会において、学生優秀発表賞を受賞しました。

受賞者：堀 真弘
東京理科大学 理学研究科 修士課程2年
指導教官：遠山 貴巳
東京理科大学 理学研究科 教授
杉本 貴則
東京理科大学 理学研究科 講師
対象研究：二次元準結晶におけるトポロジカル超伝導
受賞日：2021年10月9日

開催セミナー・イベント

IRN theory session

開催日時：2021年6月7日(月)～8日(火)
開催方法：Zoomによるビデオ会議
会議内容：理論家による研究会

1st International School on Hypermaterials

開催日時：2021年6月21日(月)～25日(金)
開催方法：Zoomによるビデオ会議
会議内容：新学術領域への若手研究者・異分野の研究者の
参画を目的として開催

第6回領域会議

開催日時：2021年7月13日(火)～15日(木)
開催方法：Zoomによるビデオ会議
会議内容：新学術領域に関する研究の現状の発表及び領域
内の交流促進を目的として開催

Kick-off meeting of the International Research Network APERIODIC

開催日時：2021年10月3日(日)～7日(木)
開催方法：オンライン及びZoomによるハイブリッド開催
会議内容：非周期的結晶の研究者と材料の化学的および物
理的特性に取り組む研究者との交流促進を目的
として開催

第16回ハイパーマテリアル・セミナー

開催日時：2021年11月1日(月)
開催方法：Zoomによるビデオ会議
講演題目：ハイパーマテリアルを利用した新奇触媒材料の
創製
講師：亀岡 聡氏(東北大学 多元物質科学研究所 金属機
能設計研究分野 教授)

第17回ハイパーマテリアル・セミナー

開催日時：2021年11月8日(月)
開催方法：Zoomによるビデオ会議
講演題目：準結晶の格子ダイナミクスにおける準周期的な
ギャップ構造
講師：松浦 直人氏(総合科学研究機構 副主任研究員)

第18回ハイパーマテリアル・セミナー

開催日時：2022年1月21日(金)
開催方法：Zoomによるビデオ会議
講演題目：拡散的 Nambu-Goldstone モードと動的臨界現象
講師：中村 真氏(中央大学 理工学研究科物理学専攻 素
粒子理論研究室 教授)

第15回物性科学領域横断研究会

開催日時：2021年11月26日(金)～27日(土)
開催方法：Zoomによるビデオ会議
会議内容：物性科学に関連した9つの新学術領域研究および
学術変革領域研究(A)が合同で開催した研究会。
領域間のシナジー効果を高めると共に、物性科
学のホットな話題を概観することを目的とする。

MRM2021 シンポジウム B-1 ハイパーマテリアル(第7回領域会議)

開催日時：2021年12月14日(火)～16日(木)
開催方法：オンライン及びZoomによるハイブリッド開催
会議内容：新学術領域に関する研究の現状の発表及び領域
内の交流促進を目的として開催

第26回準結晶研究会(第3回若手研究会を兼ねる)

開催日時：2022年2月21日(月)～23日(水)
開催方法：Zoomによるビデオ会議
会議内容：領域内外の研究者及び若手研究者による研究発
表と交流促進を目的として開催

今後の予定

2022年 4月18日(月)～20日(水)

第8回領域会議【ハイブリッド方式】
現地参加：神戸ポートピアホテル
<https://www.portopia.co.jp>
リモート参加：Zoomによるビデオ会議

6月19日(日)～24日(金)

第1回領域国際会議(Aperiodic2022)
北海道大学工学部 フロンティア応用科学研究棟
鈴木章ホール



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.4**

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 先進工学部 マテリアル創成工学科 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：2022年3月15日

