



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.5

CONTENTS

特集 半導体ハイパーマテリアルへの道 2

木村 薫

物質・材料研究機構 エネルギー・環境材料研究拠点 熱電材料グループ
NIMS特別研究員

新メンバー研究紹介(2022年4月－2024年3月) 6

会議・研究会等報告 16

2022年度上半期 活動記録 19

受賞

開催セミナー・イベント

特集

半導体ハイパーマテリアルへの道



木村 薫 (A01計画班 研究分担者)

物質・材料研究機構 エネルギー・環境材料研究拠点 熱電材料グループ NIMS特別研究員

本稿では、私が本新学術領域「ハイパーマテリアル」において担当している、半導体ハイパーマテリアル探索に至った経緯について、私が大学院に進学して研究を始めた頃に遡って紹介する。私は、東京大学理学部物理学科を卒業後、1979年に大学院理学系研究科物理学専攻に進学し、1984年から物性研究所の助手、1989年から工学部金属材料学科の講師、1992年から大学院工学系研究科材料学専攻の助教授、1999年から大学院新領域創成科学研究科物質系専攻の教授を順に務めてきた。そして2022年3月に東京大学を定年退職して、4月から現職に就いた。

固体物理学の教科書では、最初に結晶構造の分類が説明され、その後にバンド理論の結果として金属、半金属、半導体、絶縁体の分類が述べられている。バンド理論は、結晶の周期性を使って展開されるので、周期性の無いアモルファスには適用できない。そのため、私が大学院に進学する直前の1970年代には、物性物理学の分野でアモルファスの研究が盛んだった。さらに、アモルファスにも半導体や絶縁体が存在することから、強結合近似の有用性が強調された。一方、より大面積の太陽電池を、より安価に製造するため、キャリア制御が可能となった水素化アモルファス・シリコンが期待された。また、液体急冷技術の進歩により、強度の高いアモルファス金属の製造が可能となった。これらの事情から、当時は、応用でもアモルファスの研究が盛んだった。私は、東京大学大学院理学系研究科物理学専攻の二宮敏行先生の研究室で、1979年から1984年までの5年間、アモルファス半導体の研究を行った。そんな中、1983年の4月に修士1年生として二宮研に入学してきた仙場浩一さんが、ペンローズスタイルについて書かれた本を持って来たのが、私のペンローズスタイルとの出会いであった。二宮先生は、ペンローズスタイルが理想アモルファスのモデルになると考え、仙場さんは強結合近似を使ってペンローズスタイル上の電子状態を研究し、後に Confined State と呼ばれる状態を発見した。そして仙場さんが修士での研究を終えつつあり、私が博士課程を終えて物性研究所の竹内伸先生の研究室の助手に着任した直後の1984年11月、Shechtman 先生による準結晶発見の論文^[1]が出版され、その直後には Steinhardt

先生が準結晶と名付けた論文^[2]も出版された。それは、我々にとって大変な驚きだった。Steinhardt 先生達は、準結晶の概念を詳細に解説する論文も出版した^[3,4]。私は、この2報で51ページある論文を、感動しながら読んだ。

アモルファス金属の研究もされていた竹内先生は、すぐに準結晶の研究を始めるとのことで、とても幸運なことに、当時助手だった私も、発見直後から準結晶の研究を始めることになった。そして、その結果日本で最初の準結晶に関する投稿論文を出すことが出来た^[5]。準結晶は、結晶、アモルファスと並ぶ固体構造の概念の一つである。その構造の上で電子状態がどうなるかに多くの科学者が興味を持ち、既に一次元では厳密に明らかにされていた。状態密度は、結晶では絶対連続で、アモルファスでは離散的なのに対して、準結晶では特異連続（一見連続のように見えるが、至る所で微分が発散する）である。一方、波動関数は、結晶では広がった状態で、アモルファスでは局在状態であるが、準結晶では臨界状態（中心から離れるに従っての減衰が、局在状態では指数関数的であるが、臨界状態ではべき的）である。したがって、理論からは準結晶の電気伝導は、結晶とアモルファスの中間的であると予想された。ところが、最初に見つかった安定相準結晶である Al-Li-Cu 正20面体準結晶の単結晶の電気抵抗率は、予想に反して多くのアモルファス金属より遥かに大きくなった^[6]。この結果に対し、Al と Li と Cu の合金が、そんなに高い抵抗率を持つはずがないと、なかなか信用されなかった。しかも、Al の自己フラックス法で作った単結晶粒の中には微細に Al 相が入り込んでおり、アメリカの研究グループからは Al-Li-Cu 準結晶の単結晶の電気抵抗率は低く、1K 付近で超伝導になるとの報告までされた。我々は、偶然、Al-Li-Cu 準結晶の単結晶粒に入り込んだ Al 相だけを取り除くエッチング方法を見つけていた。Al 相を取り除くと電気抵抗率は跳ね上がり、超伝導も消失した。そんな中、当時東北大学の大学院生であった故蔡安邦先生が発見された、やはり安定相で、Al-Li-Cu 準結晶より遥かに質の高い Al-Cu-Fe 正20面体準結晶^[7]や続いて発見された安定相の電気物性測定が進み、安定相準結晶の電気抵抗率は高いことが世界中で報告されるようになった。蔡先生による

安定相準結晶の発見は、まだ準結晶の存在自体に一部の著名な科学者が疑問を持つ当時の状況を打ち破り、その存在を確定的なものとした。それに続き安定相準結晶の電気抵抗率が高いことも確定的なものとしてくれた。我々は、幾つかのグループとの共同研究により、Al-Li-Cu 準結晶が高圧でアモルファスに転移し、それに伴って電気抵抗が低下し、温度依存性も非金属的なものから金属的なものに変化することを明らかにした^[8]。また、Al-Cu-Ru 正20面体準結晶の電気抵抗率が、液体急冷直後より熱処理して欠陥を減らすと、跳ね上がることも報告した^[9]。金属準結晶の電気抵抗率が、同じ組成のアモルファスより高く、欠陥を減らすほど高くなる事実は、金属の電気伝導の常識を覆す振る舞いであった。当時、東京大学工学系研究科物理工学専攻におられた藤原先生のグループは、この異常な高電気抵抗率の原因として、周期性の無い準結晶にはバンド計算が適用できないため、近似結晶に対する第一原理バンド計算から、準結晶・近似結晶では、普遍的にフェルミ・エネルギー (E_F) が非常に深い擬ギャップに位置するという事を明らかにした^[10]。この深い擬ギャップの起源は、正20面体対称性が結晶で最も高い対称性である立方対称より高いことによる Hume-Rothery 機構 (擬等方的な電子干渉効果)^[11] と、Al の正20面体クラスターが共有結合性を持つことによると考えられる^[12]。そして、擬ギャップによる E_F での小さい状態密度 ($D(E_F)$) に加えて、非周期性による波動関数の局在傾向によって高電気抵抗率と非金属的な温度依存性が生じていると考えられる (図1)^[13]。

私は、大学院時代にアモルファス半導体を研究し、助手時代に金属準結晶を研究した。そして、Al 系金属準結晶の電気抵抗率が半導体に近づいていたことと、B が正20面体クラスターを構造単位とした様々な半導体結晶を作ることを知って、東京大学工学部金属材料学科の講師に着任した後、研究室の大学院生と一緒に、Al 系準結晶の半導体化と B 系結晶の準結晶化という二つのアプローチで、半導体準結晶の探索を始めた。Al 系準結晶では、ホール効果の測定により温度上昇によるキャリア密度の増加と移動

度の減少^[14]や、光伝導の観測^[15]という、半導体的な振る舞いが見つかった。一方、純ボロンの α 菱面体晶と β 菱面体晶の単位胞は、正20面体準結晶の二つの単位胞の一つである prolate と考えることができ、両結晶は低次の近似結晶である 0/1-2/0 菱面体晶近似結晶である。prolate と整合する相方の oblate の構造を決めて、第一原理分子軌道法で凝集エネルギーを見積もると α 型の準結晶が準安定相として存在可との結果を得た^[16]。実験的には、正20面体クラスターや単位胞の歪を減少させる C を添加したアモルファスからの結晶化で、準安定相として、 α 菱面体晶に比べて単位胞の体積が4倍となる 1/0-1/0-0/1 直方晶近似結晶を見つけた^[17]。

また一般に、金属から半導体や絶縁体になると、金属結合成分よりも共有結合やイオン結合の成分が多くなる。そこで、結合の性質を調べるためにクラスターの研究を開始した。そして、第一原理分子軌道法により、Al や B の正20面体クラスターが、中心原子の有無で金属結合的や共有結合的になることを見出した^[18]。我々は、これを金属結合-共有結合転換と呼んだ。中心原子の無い正20面体クラスターは水素化によってダングリング・ボンドを終端すると安定化するが、水素が無く中心原子がある正20面体クラスターは、Al では安定だが、B では不安定で平面三角格子のクラスターになる。この原因が、Al では最外殻の 3p 軌道の内側に 2p 軌道があるのに対して、B では 2p 軌道の内側に p 軌道が無いいため p 軌道径が s 軌道径と同程度になっていることであることを明らかにした^[19]。実験では、四重極イオントラップという特殊な装置を使って、水素化ボロンのクラスターを作製し、水素数の制御によってクラスター構造を制御した^[20]。

固体中のクラスターの結合を調べるためには MEM/Rietveld 法を採用した。この方法は、固体中の電子密度分布を可視化でき、Al の正20面体クラスターが、上記の孤立クラスターと同様に、中心原子の有無で金属結合-共有結合転換を起こすことを明らかにした (図2)^[12]。MEM/Rietveld 法は、やはり周期性が必要なため準結晶には適用できないが、共有結合的正20面体クラスター中心の構造型空孔は、陽電子消滅で捉えることができた^[21]。固体中の B の正20面体クラスターは中心の構造型空孔の容積が小さいので原子が入ることは無いが、 β 菱面体晶ボロンの結晶構造中には多くの構造型空孔サイトがある。特に、正20面体クラスター中心と同様に12個のボロン原子で囲まれた空孔サイト (A サイトと呼ばれる) にバナジウム (V) 原子が占有すると、金属結合-共有結合転換が起こることを、第

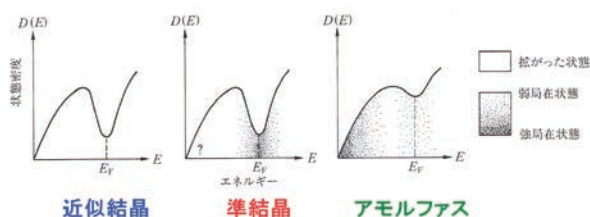


図1 近似結晶、準結晶、アモルファスの電子状態密度と電子状態の局在の程度を示す模式図^[13]

一原理分子軌道法と電子局在インジケーターを使って明らかにした^[22]。 β 菱面体晶ボロンのクラスターの多重殻構造で空孔となっている A サイトは、Bergman クラスター型の Al 系近似結晶では第二殻の一部として正 12 面体クラスターを形成している。半導体である β 菱面体晶ボロンの A サイトに原子が占有して行き、クラスター構造が Al 系近似結晶に（したがって準結晶にも）近づくと、電気伝導率も上昇し温度依存性も平坦になって行き、Al 系準結晶に近づいて行く。これらのことから、私は、正 20 面体クラスターを構造単位とする B 系と Al 系の正 20 面体クラスター固体としての統一の描像を構築してきた（図 2）^[23,24]。アモルファス B も正 20 面体クラスターが構造単位となっていることから、V 添加により金属結合—共有結合転換が起き、アモルファス Si に比べて遥かに少ない添加量で金属に転移することを明らかにした^[25]。

上記二つの段落の研究は、東京大学工学系研究科材料学専攻から新領域創成科学研究科物質系専攻に跨ったものとなっている。半導体分野の B 系結晶と金属分野の Al 系準結晶の学融合を進めていたことから、学融合を理念とする新領域創成科学研究科に移り、物理学、化学、材料工学から集まって来る助教や大学院生と共に、研究室内学融合を実施できる多様性に富んだ研究室を作ることができた。

B 系結晶の準結晶化に関しては、B-Ti-Ru の液体急冷により、世界で初めて B 系準結晶の創製に成功した^[26]。これは準安定相の正 10 角形準結晶であったが、B 組成が 40% 程度であったため、擬ギャップであって真ギャップを持った半導体では無かった。純ボロンで構造を予想した準結晶の生成エネルギーの再計算では、第一原理バンド計算によると、以前の分子軌道法で準安定となった α 菱面体晶型の準結晶は準安定とはならず、 β 菱面体晶型の準結晶が準安定相として実現可能となった（図 3）^[27]。

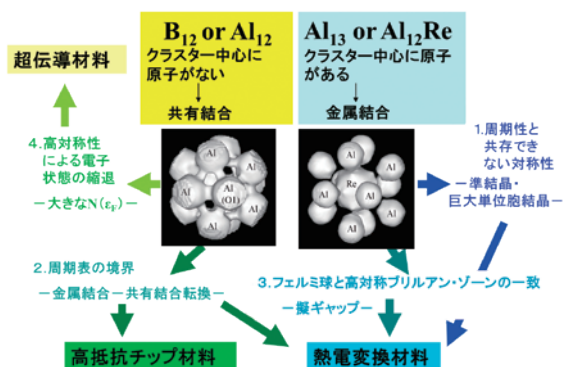


図 2 B と Al の正 20 面体クラスター固体の統一の描像とその特徴を利用した材料開発^[24]

これを確かめるために、融点が 2,000°C を超える B を静電浮遊法で浮かした状態で溶かすことにより核生成が抑えられ、過冷却液体状態からハンマークエンチによる急冷を行っている。安定相の β 菱面体晶ボロンと準安定相の α 正方晶ボロンの他に未知相のピークが観測されている。

Al 系準結晶の半導体化に関しては、第一原理計算が可能な近似結晶においてバンド・エンジニアリングによって、Al-Ru-Si 1/0 立方晶近似結晶で、世界で初めて半導体近似結晶の創製に成功した（p6、岩崎の記事の図 1 参照）^[28]。別の合金系では、さらに近似度の高い 2/1 近似結晶や準結晶で、縮退半導体的な物性を観測しており、キャリア密度制御により半導体化を目指している（図 4）。最近、別のアプローチとして、Al-遷移金属系において、精度良く準結晶や近似結晶の組成を予測できる機械学習モデルの構築に成功した^[29]。このモデルで、新規の正 10 角形準結晶を三つ発見することに成功した。さらに電気抵抗率の温度依存性を学習させ、半導体準結晶の組成予測に取り組んでいる。

半導体準結晶の存在の有無は、固体物理学の基本的な問題の一つであると共に、実現すれば実用材料としても期待できる。正 20 面体の対称性は、結晶で最も対称性の高い立方体の対称性より、2.5 倍高い。構造の対称性が高いと、電子状態の縮重度が高くなる。B 系半導体準結晶では、縮重度が高いことにより状態密度が高いエネルギー領域に ϵ_F を調整できれば、高い転移温度の超伝導が期待できる。Al-遷移金属系半導体準結晶では、キャリア・ポケットの数を多くできれば、高性能の熱電材料が期待できる。以上、半導体ハイパーマテリアルの内、半導体近似結晶は B 系と Al 系の両方で実現しているが、半導体準結晶の実現は、基礎と応用の両面で、非常に重要な意味を持っている。

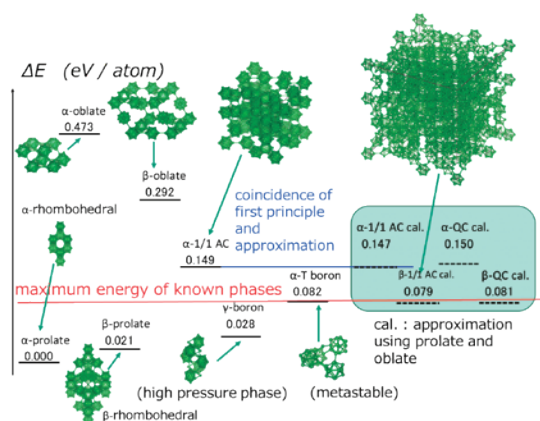


図 3 単体 B の各構造の形成エネルギーと B 系準結晶・近似結晶の存在可能性^[27]

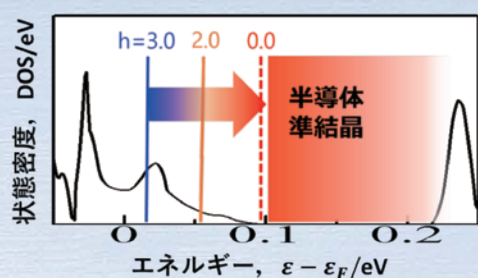


図4 ある Al 系 2/1 近似結晶の状態密度。単位胞当たりのホール数 (h) に対応するフェルミエネルギーの位置を縦線で示している。 $h=3.0$ が1/2近似結晶、 $h=2.0$ が準結晶の熱電物性を説明できる位置なので、単位胞当たり2個の電子を準結晶にドーピングできれば半導体準結晶が実現できることを示す。

参考文献

- [1] D. Shechtman, I. Blech, D. Gratias, and J. W. Cahn, *Metallic Phase with Long-Range Orientational Order and No Translational Symmetry*, Phys. Rev. Lett. **53**, 1951 (1984).
- [2] D. Levine, and P. J. Steinhardt, *Quasicrystals: A New Class of Ordered Structures*, Phys. Rev. Lett. **53**, 2477 (1984).
- [3] D. Levine, and P. J. Steinhardt, *Quasicrystals. I. Definition and structure*, Phys. Rev. B **34**, 596 (1986).
- [4] J. E. S. Socolar, and P. J. Steinhardt, *Quasicrystals. II. Unit-cell configurations*, Phys. Rev. B **34**, 617 (1986).
- [5] K. Kimura, T. Hashimoto, K. Suzuki, K. Nagayama, H. Ino, and S. Takeuchi, *Stoichiometry of Quasicrystalline Al-Mn*, J. Phys. Soc. Jpn. **54**, 3217 (1985).
- [6] K. Kimura, H. Iwahashi, T. Hashimoto, S. Takeuchi, U. Mizutani, S. Ohashi, and G. Itoh, *Electronic Properties of the Single-Grained Icosahedral Phase of Al-Li-Cu*, J. Phys. Soc. Jpn. **58**, 2472 (1989).
- [7] A. P. Tsai, A. Inoue, and T. Masumoto, *A Stable Quasicrystal in Al-Cu-Fe System*, Jpn. J. Appl. Phys. **26**, L1505 (1987).
- [8] Y. Akahama, Y. Mori, M. Kobayashi, H. Kawamura, K. Kimura, and S. Takeuchi, *Pressure-Induced Phase Transformation of Quasicrystals*, J. Phys. Soc. Jpn. **60**, 1988 (1991).
- [9] U. Mizutani, Y. Sakabe, T. Shibuya, K. Kishi, K. Kimura, and S. Takeuchi, *Electron transport properties of thermodynamically stable Al-Cu-Ru icosahedral quasicrystals*, J. Phys.: Cond. Mat. **2**, 6169 (1990).
- [10] T. Fujiwara, and T. Yokokawa, *Universal Pseudogap at the Fermi Energy in Quasicrystal*, Phys. Rev. Lett. **66**, 333 (1991).
- [11] U. Mizutani, *Hume-Rothery Rules for Structurally Complex Alloy Phases*, CRC Press (2011).
- [12] K. Kiriwara, T. Nagata, K. Kimura, K. Kato, M. Takata, E. Nishibori, and M. Sakata, *Covalent bonds and their crucial effects on pseudogap formation in α -Al(Mn,Re) Si icosahedral quasicrystalline approximant*, Phys. Rev. B **68**, 014205 (2003).
- [13] K. Kimura and S. Takeuchi, *Chapter 11: Experimental Studies of Electronic Transport in Quasicrystals*, in QUASICRYSTALS: THE STATE OF THE ART, ed. by D.P. DiVincenzo and P.J. Steinhardt, World Scientific, Singapore, **313** (1991); (Second Edition), **325** (1999).
- [14] R. Tamura, A. Waseda, K. Kimura, and H. Ino, *Semiconductorlike transport in highly ordered Al-Cu-Ru quasicrystals*, Phys. Rev. B **50**, 9640 (1994).
- [15] M. Takeda, R. Tamura, Y. Sakairi, and K. Kimura, *Photoconductivity of Icosahedral $Al_{70.5}Pd_{21}Re_{8.5}$: Semiconductorlike Behavior of Quasicrystals*, J. Phys. Soc. Jpn. **66**, 1924 (1997).
- [16] M. Takeda, A. Hori, H. Yamashita, and K. Kimura, *Possibility of Semiconducting Quasicrystal in Boron-rich Solids - Cohesive Energy Calculation and Transformation from Amorphous Phase -*, Mater. Trans. JIM **34**, 128 (1993).
- [17] M. Takeda, K. Kimura, A. Hori, H. Yamashita, and H. Ino, *Approximant phase of an icosahedral quasicrystal in a boron-carbon semiconducting system*, Phys. Rev. B **48**, 13159 (1993).
- [18] M. Fujimori, and K. Kimura, *The Bonding Nature of Icosahedral Clusters of the Group III Elements*, J. Solid State Chem. **133**, 310 (1997).
- [19] H. Yamamura, Y. Ohishi, Y. Katsura, K. Kimura, N. Uchida, and T. Kanayama, *Stability and bonding nature for icosahedral or planar cluster of hydrogenated boron or aluminum*, AIP Advances, **9**, 115117 (2019).
- [20] Y. Ohishi, K. Kimura, M. Yamaguchi, N. Uchida, and T. Kanayama, *Synthesis and formation mechanism of hydrogenated boron clusters $B_{12}H_n$ with controlled hydrogen content*, J. Chem. Phys. **133**, 074305 (2010).
- [21] Y. Takagiwa, J.T. Okada, K. Kimura, H. Kitahata, Y. Matsushita, and I. Kanazawa, *Structural vacancies in Al-Pd-Mn quasicrystal and its (1/1, 2/1)-AlPdMnSi approximant crystals: positron lifetime studies*, Phil. Mag. **88**, 1929 (2008).
- [22] M. Yamaguchi, Y. Ohishi, S. Hosoi, K. Soga, and K. Kimura, *Metallic-covalent bonding conversion in boron icosahedral cluster solids studied using electron localizability indicator*, J. Phys.: Conf. Ser. **176**, 012027 (2009).
- [23] K. Kimura, M. Takeda, M. Fujimori, R. Tamura, H. Matsuda, R. Schmechel, and H. Werheit, *A Unified Picture for Icosahedral Cluster Solids in Boron-Based and Aluminum-Based Compounds*, J. Solid State Chem. **133**, 302 (1997).
- [24] Y. Takagiwa and K. Kimura, *Metallic-covalent bonding conversion and thermoelectric properties of Al-based icosahedral quasicrystals and approximants*, Sci. Tech. Adv. Mater. **15**, 044802 (2014).
- [25] K. Tanabe, K. Soga, S. Hosoi, K. Osumi, H. Yamaguchi, T. Uruga, and K. Kimura, *Low Critical Concentration of Metal-Insulator Transition of Vanadium Doped Amorphous Boron*, J. Phys. Soc. Jpn. **80**, 024709 (2011).
- [26] Y. Miyazaki, J. T. Okada, E. Abe, Y. Yokoyama, and K. Kimura, *Quasicrystalline Tenfold Symmetry Order in Boron Compounds*, J. Phys. Soc. Jpn. **79**, 073601 (2010).
- [27] T. Takahashi, K. Kitahara, Y. Katsura, J. Okada, Y. Matsushita and K. Kimura, *Search for the boron quasicrystal by first-principle-calculation*, Solid State Sci. **108**, 106377 (2020).
- [28] Y. Iwasaki, K. Kitahara, and K. Kimura, *Experimental realization of a semiconducting quasicrystalline approximant in Al-Si-Ru system by band engineering*, Phys. Rev. Mater. **3**, 061601 (2019).
- [29] C. Liu, E. Fujita, Y. Katsura, Y. Inada, A. Ishikawa, R. Tamura, K. Kimura, and R. Yoshida, *Machine Learning to Predict Quasicrystals from Chemical Compositions*, Adv. Mater. **33**, 2102507 (2021).

計画研究 A01 班の新メンバー、そして2022年4月よりスタートした公募班第二期のメンバーおよびそれぞれの研究課題をご紹介します。

計画班

A01

半導体ハイパーマテリアルの合成と熱電素子開発

研究分担者 **岩崎 祐昂** 物質・材料研究機構 エネルギー・環境材料研究拠点 研究員

専門分野 材料科学

役割分担 半導体ハイパーマテリアルの合成と熱電素子開発



これまでに100種類以上の準結晶が発見されたが、それらは全て金属で、半導体や絶縁体的な性質を持ったものは見つかっていない。半導体準結晶の有無は、固体物理学における基本的かつ重要な未解決問題の一つである。また、もし半導体準結晶が見つければ、高性能熱電材料としても期待される。これまでに、バンドエンジニアリングによって Al-Si-Ru 系 1/0 近似結晶を合成し、半導体となることを示した (図1)。これは半導体ハイパーマテリアルの創製に成功した初めての例である。この成果を受けて、本計画研究では、半導体ハイパーマテリアルの創製と熱電材料への応用を目指し、第一原理計算を用いて半導体ハイパーマテリアルを設計し、実験的に合成すること、また、その熱電性能を向上させ、熱電素子を開発することを目指す。

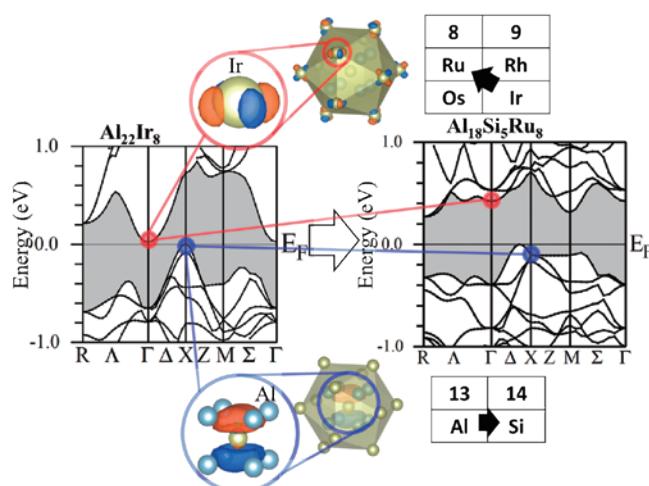


図1 バンドエンジニアリングによる半導体ハイパーマテリアル Al-Si-Ru 系 1/0 近似結晶の創製

公募班

A01

高次対称性を持つひずみ誘起ゲージ場によるグラフェンのハイパーマテリアル化

研究代表者 **友利 ひかり** 筑波大学 数理物質系 助教

専門分野 低温実験



グラフェンは炭素原子が蜂の巣格子状に並んだ原子層物質である。原子一個分の厚みしかないことに起因して、荷電不純物の存在や下地基板の凹凸などの周囲の環境に電気伝導特性が敏感に反応する。研究代表者はこれまで、外界からの影響を受けやすいというグラフェンの特徴に注目し、グラフェンに周期的な格子ひずみを導入することによって、電気伝導特性を制御する研究に取り組んできた。

本研究では、格子ひずみの周期性を拡張し、フィボナッチ列やペンローズタイリングなどのように準周期的に分布する格子ひずみをグラフェンに導入する。さらに、格子ひずみによって付与された準周期的なポテンシャル変調の効果を電気伝導測定によって検出することで、グラフェンのハイパーマテリアル化の可能性を探る。

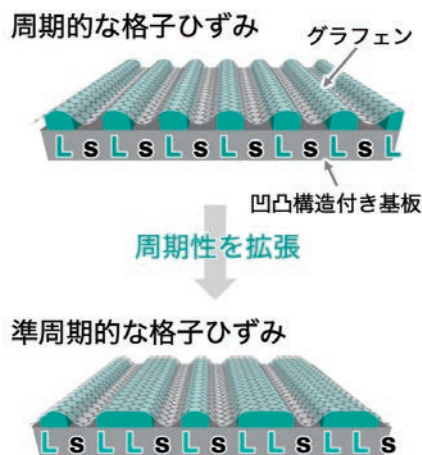
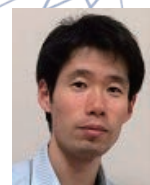


図1 周期ひずみ構造は、電子ビームリソグラフィーを用いて作製した凹凸構造基板上にグラフェンを転写することによって実現する。本研究では、フィボナッチ列やペンローズタイリングなどの準周期構造を凹凸構造パターンとして取り入れることで、グラフェンに準周期的なポテンシャル変調を加える。

公募班
A01

エキゾチック量子秩序を持つ ファンデルワールスハイパーマテリアルの創出

研究代表者 井手上 敏也 東京大学 物性研究所 准教授
専門分野 ファンデルワールス結晶ナノ構造における輸送現象および光物性



層状物質を剥離して得られる2次元結晶同士の界面であるファンデルワールス界面は、任意の2次元物質の組み合わせを用いて、自由な積層角度で作製することが可能であり、一般に並進対称性の破れた準周期2次元系となっているため、ハイパーマテリアルとして捉えることができる。

本研究では、これまで主に非磁性半導体ファンデルワールス結晶界面で開拓してきた対称性のアイ

デアを発展させ、磁性や超伝導といったエキゾチックな量子相を持つ2次元結晶に拡張することで、特徴的量子相を持つファンデルワールスハイパーマテリアルの作製とそのユニークな物性の探索に取り組む。2次元準周期系における磁性や超伝導に関する新しい知見を得ることでファンデルワールスハイパーマテリアルの新潮流創出を目指す。

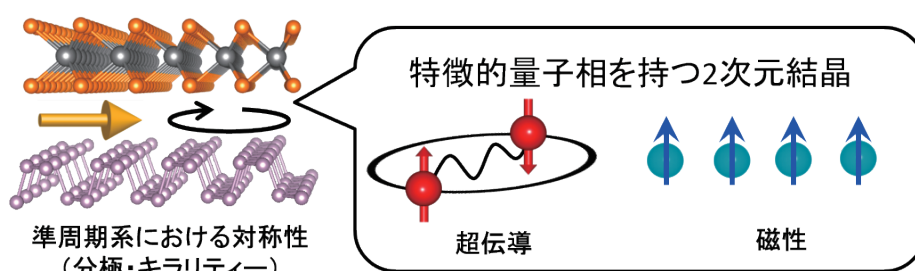


図1 エキゾチック量子秩序を持つファンデルワールスハイパーマテリアルの模式図。特徴的量子相を持つ2次元結晶のヘテロ界面や捻り積層界面において、元々の2次元結晶とは異なる電気伝導特性や光学特性が生じることが期待される。図はVESTA (J. Appl. Crystallogr. **44**, 1272-1276 (2011).)を用いて作成した。

公募班
A01

希土類酸化物ハイパーマテリアルの 創製と機能開拓

研究代表者 柚原 淳司 名古屋大学 大学院工学研究科 准教授
専門分野 表面科学



2013年に白金単結晶表面上のBa-Ti-O超薄膜において金属酸化物準結晶が発見されて以来、金属酸化物準結晶の創製研究及びその構造解明の研究が盛んにされている。本研究では、酸化物ハイパーマテリアルの機能創発を目指して、希土類酸化物ハイパーマテリアルを創製することを目的としている。さらに、希土類酸化物近似結晶及び準結晶の構造モデルの提案や磁氣的、電気的、誘電特性について知見を得ることを目標としている。

本研究計画では、初年度に希土類酸化物ハイパーマテリアル超薄膜の創製条件を明らかにする。実験は、セリウムおよびチタンの蒸着、真空および酸素雰囲気での加熱により創製条件を網羅的に調べる。酸化物ハイパーマテリアルの構造モデルは、表面敏感な分析手法(低速電子回折、オージェ電子分光、

光電子分光、吸収分光、走査型トンネル顕微鏡、ラザフォード後方散乱)を組み合わせ、また、計画班A01の山田先生の協力のもと明らかにする予定である。そして、構造モデルの妥当性を補空間と実空間の関係性から議論する予定である。また、希土類酸化物ハイパーマテリアル超薄膜を積層させることも機能創出という観点で重要であるので、その作製条件について系統的に調べる予定である。さらに、物性評価のために、白金単結晶基板ではなく、絶縁基板上に作製した白金超薄膜表面上にて希土類酸化物ハイパーマテリアルを創製する。計画班A01の田村先生や計画班A04の出口先生との共同研究により、磁氣的、電気的性質や誘電特性を明らかにし、また、公募班の齋藤先生との共同研究により、ハイパーマテリアルの原子配列の元素識別を目指す。

公募班

A01

ブロック共重合体球状マイクロ相分離構造の準結晶およびその近似結晶の発現メカニズム

研究代表者 山本 勝宏 名古屋工業大学 大学院工学研究科 准教授

専門分野 高分子科学、小角X線散乱



互いに非相溶な二種類の高分子鎖の方末端同士が化学結合で連結した高分子ブロック共重合体 (BCP) が相分離により形成する球状マイクロ相分離構造は、一方の構成高分子の体積分率が10%程度るとき、その成分からなる球状ドメインを形成する。多くの場合、この球状ドメインの空間配列は秩序性を持つ場合、体心立方格子状に配列することが知られている。二種類の BCP (構成成分は同じで、割合の異なる) を混合することで、通常の BCP の相分離構造としては極めて珍しい、hcp、A15、FK σ 相、および準結晶 (DDQC) の発現を確認した。なお DDQC は σ 相を形成する過程で発現する構造であった。本研究では、複雑な球状ドメインのパッキング様式 (特に σ 相や準結晶) が発現するメカニズムについて理解することを目指している。

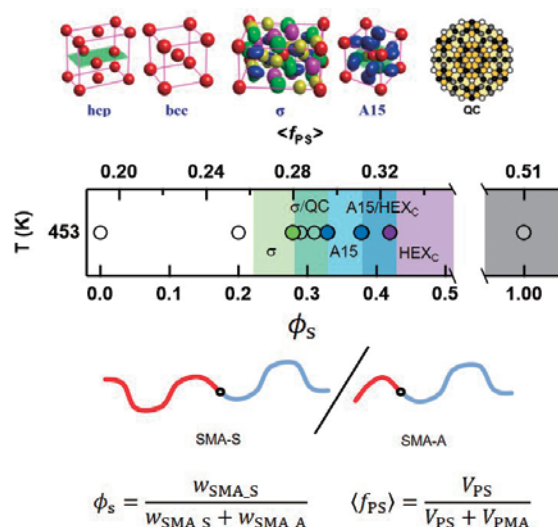


図1 ポリスチレン-b-ポリメチルアクリレート共重合体 SMA-S (PS 50 vol%) と SMA-A (PS 19vol%) を重量分率 ϕ_s で混合した時の相図 (f_{PS} は全体における PS の体積分率)。 σ 相を形成する過程で準結晶 DDQC の形成を確認した。hcp 構造は異なる組成のブロック共重合体の組み合わせで発現することを確認している。

公募班

A01

非磁性 Tsai 型ハイパーマテリアルの探索

研究代表者 鈴木 慎太郎 東京理科大学 先進工学部 助教

専門分野 強相関電子物性



2018年に報告された初の準結晶における超伝導は、周期性の破れから波数が良い量子数でないにも関わらず発現する振る舞いとして非常に大きな注目を集めた。そのためこの起源や、超伝導準結晶特有の物性について強く興味を持たれる。しかし、現在においても準結晶超伝導体の報告はこの Al-Mg-Zn 系のみに残っている。またこの転移温度は $T_c \sim 50$ mK と非常に低く、基礎物性以外の物性評価が難しい。

この Al-Mg-Zn 系では1/1近似結晶での超伝導も報告されており、Al 濃度の変化に伴い転移温度が上昇する。この振る舞いより Tsai 型ハイパーマテリアルでの磁性研究と同様、広い単相領域を活かした単原子当たりの価電子濃度 (e/a) のチューニングに伴った物性変化、とりわけ転移温度の向上が期待される。非磁性 Tsai 型ハイパーマテリアルでは磁性系と同様広い単相領域を持つことが予想されるが、実際に発見された超伝導を示す Tsai 型ハイパーマ

テリアルの報告は1/1近似結晶における2例のみであり、単相領域も広いとは言い難い。これは Tsai 非磁性系探索が十分に行われてこなかったことがその一因と考えられる。

そこで本研究では磁性研究における Tsai 型ハイパーマテリアルの物質探索経験を基に、非磁性系の探索を行う。既報告系の磁性希土類を非磁性元素に置換することで、 e/a がコントロール可能な非磁性系を探索する。領域の協力が得られればこれらの系に対し極低温測定を行い、超伝導転移を実際に起こすか否か、またその転移温度が実際に e/a に基づき変化するかを確かめる。磁性探索と同様、比較的作成しやすい1/1近似結晶をまずは対象とし、その後高次近似結晶や準結晶へと進展させていきたいと考えている。

公募班
A01

高圧急冷法によるチタン系亜酸化物の新規創製と準周期性の探索

研究代表者 山浦 一成

物質・材料研究機構 国際ナノアーキテクトニクス研究拠点 (MANA) グループリーダー

専門分野 固体化学



金属亜酸化物は、電気陰性度が比較的小さな金属同士が多数結合したクラスターとそのクラスター間に挿入された酸素を特徴とする特異な酸化物だ。かつては Cs_{11}O_3 や Rb_9O_2 のように大気中で不安定な亜酸化物が多かったが、近年では大気中でも安定な3元系亜酸化物 $\text{Ti}_7\text{Ga}_2\text{O}_6$ 、 Ti_3GaO 、 $\text{Ti}_5\text{Ga}_3\text{O}$ が合成されるなど (図1)、さらには新規超伝導体 $\text{Nb}_5\text{Ir}_3\text{O}$ ($T_c = 10.5 \text{ K}$) や $\text{Ti}_4\text{M}_2\text{O}$ ($M = \text{Co}, \text{Rh}, \text{Ir}$)

($T_c = 2.3\text{--}5.4 \text{ K}$) が合成されるなど、金属亜酸化物の新物質開発が進展している。

我々は、特にこの金属クラスターのな特徴に着目して新物質探索を進め、正20面体的構造を備える、かつ大気中でも安定な新規亜酸化物の創製を目指してTi系亜酸化物の周辺物質・関連物質の合成、および新物質探索を進める。実験手段として、新物質開発に有効と思われる高圧合成法を用いる。

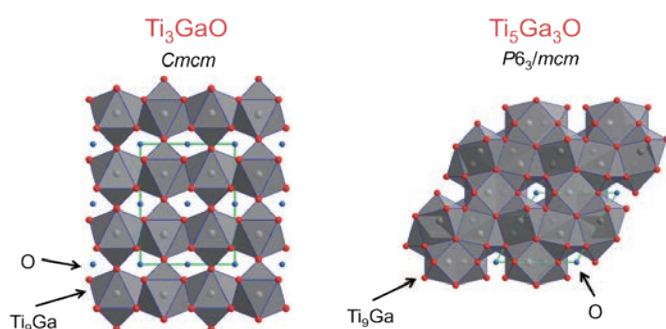


図1 Ti系亜酸化物の結晶構造の模式図 (H. Yamane, S. Amano, Inorg. Chem. 57, 9941, 2018)。9個のTiに配位されたGaを核とする多面体が辺や面を共有しながら3次的に連なっている。酸素元素はこれらの多面体間の隙間に位置している。

公募班
A02

表面電子顕微鏡法によるBa-Ti-O系準周期単層膜の構造解析

研究代表者 齋藤 晃 名古屋大学 未来材料・システム研究所 教授

専門分野 電子線結晶学、電子線物理学、電子顕微鏡法



2009年のnature誌で、Y. Zhuにより走査型電子顕微鏡 (SEM) による単原子観察が初めて報告された。この報告はSEMの分解能の常識を超えるものとして大変大きな衝撃を与えたが、その一方で「単原子のSEM像形成に十分な2次電子はどこから放出されるのか?」「SEM像には走査透過型電子顕微鏡 (STEM) のような元素弁別性を有するコントラストが現れるのか?」などの多くの問題が未解明のままである。これらの問題を解明し、さらなるSEMの可能性を模索するために、種々の単原子を異なる基板上に分散した試料のSEM像を取得し、その定量的かつ系統的な解析を行う必要がある。本研究では、この問題を明らかにして原子分解能SEMを次世代の表面構造解析法に昇華させ、世界で初めてBa-Ti-O系準周期単層膜の構造を原子レベルで明らかにすることを目的とする。

まず、単原子分散試料および2次元原子層物質の系統的かつ定量的なSEM観察を行い、原子分解能SEMの空間分解能およびコントラストの原子番号依存性を明らかにする。この際、微弱な2次電子信号から真の情報を得るための統計的データ科学の手法も検討する。

Ba-Ti-O系準周期単層膜の作製は、研究協力者であり既にBa-Ti-O系準周期単層膜の作製およびその走査型プローブ顕微鏡観察の経験がある名古屋大学の柚原氏に協力していただく。Pt基板およびアルミナ基板上に作製した試料をSEM観察用に加工し、装置に導入する。試料作製チャンバーから電子顕微鏡装置までトランスファーする際に生じる試料酸化の問題についても検証し、電子顕微鏡内での加熱処理等による対策を検討する。

公募班

A02

Advanced direct local structure determination of quasicrystals in physical space

研究代表者 Jens R. Stellhorn 広島大学 大学院先進理工系科学研究科 助教

専門分野 X線ホログラフィーによる物理空間の構造決定



My project investigates the local atomic structure of hypermaterials by Atomic Resolution Holography. This method can directly visualize the atomic scale structure in 3D physical space. The experimental data can be interpreted as a 3D pair correlation

around a specific emitter element. The project aims to provide a complementary way to analyze atomic disorder and to study the relationship between local order and material properties, like magnetic effects, in particular in the icosahedral phase.

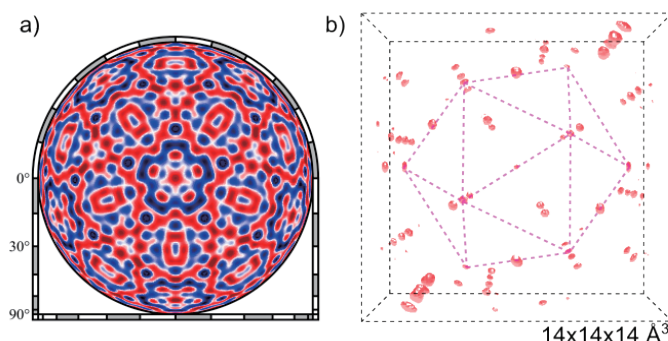


Fig.1

An exemplary Yb hologram of i-AgInYb (a) and the corresponding real-space reconstruction (b). Yb-Yb connections between Yb icosahedra connections are highlighted by the violet dashed lines in (b).

公募班

A03

機械学習分子シミュレーションによる準結晶の高次元性の解析：異常高温比熱の解明

研究代表者 永井 佑紀 日本原子力研究開発機構 システム計算科学センター 副主任研究員

専門分野 物性理論、超伝導



準結晶や近似結晶においては、異常高温比熱と呼ばれる、通常の固体では現れない大きな比熱が観測されることが知られている。本研究では、我々が開発した高精度な機械学習分子シミュレーションを用いて、この異常高温比熱の値を定量的に再現する方法を確立する。

通常、固体の高温比熱はデュロンブティの法則により3次元方向の振動の自由度から1原子あたり3k (k: ボルツマン定数) 程度になることが知られている。一方、準結晶では、高温比熱が3kを大きく上回り5k近くまで上昇する場合がある。この現象は準結晶の高次元性によって理解されるというシナリオが存在する。もし、実空間に直交する次元方向への振動の自由度(フェイゾン自由度)が存在するとすれば、この追加の自由度が高温比熱に寄与するだろうというシナリオである。しかしながら、実際の物質が本当にこの自由度を持つかどうかは理論的に

確認できていなかった。なぜなら、比熱の計算には長時間(100ps以上)の第一原理分子動力学シミュレーションが必要であり、時間ステップごとに第一原理計算を行う必要があるため、近似結晶ですら計算を行うことが困難だからである。

前回の公募研究では、第一原理分子動力学法と厳密に同じ精度を保証する高速な機械学習分子シミュレーション手法「自己学習ハイブリッドモンテカルロ法(SLHMC)」を準結晶及び近似結晶に適用することに成功した。本公募研究においては、開発した手法を用いることでAl-Rn-Pd系などの近似結晶における高温比熱を計算し、実験値を再現するかどうかを見る。もし再現することができれば、時間発展を追いかけて実際にどのように原子が動いているかを見ることで、何が比熱に寄与しているかを解明することができる。

公募班
A04

非整合チムニーラダー型化合物の フェイズ歪とフォノン物性

研究代表者 宮崎 譲 東北大学 大学院工学研究科 教授
専門分野 無機固体化学



Nowotny chimney-ladder (NCL) 相 MX_γ は、遷移金属部分構造 [M] と典型元素部分構造 [X] が、正方晶の ab 軸を共有し、 c 軸方向に異なる周期 (c 軸長比 $\gamma = c_M/c_X$) を持って積層した非整合複合結晶である。熱電材料として有望な $MnSi_{-1.74}$ においては、 γ 値の異なる歪ドメインが [Si] 内に生成し、温度とともにその存在形態が変化する。このドメイン分裂のサイズは、フォノンの平均自由行程と同程度であることから、そのサイズや分布状態を制御することができれば、極めて低い格子熱伝導率が実現できる可能性がある。V で部分置換した $MnSi_{-1.74}$ においては、図 1 に示すように、歪みドメインの存在形態と格子熱伝導率には相関があることがわかっていく。本研究では、超音波を用いた音速測定や比熱測定を通して種々の NCL におけるフォノンダイナミクスを解明し、最低熱伝導率と高電力出力を両立する新規熱電変換材料の創製を目指す。

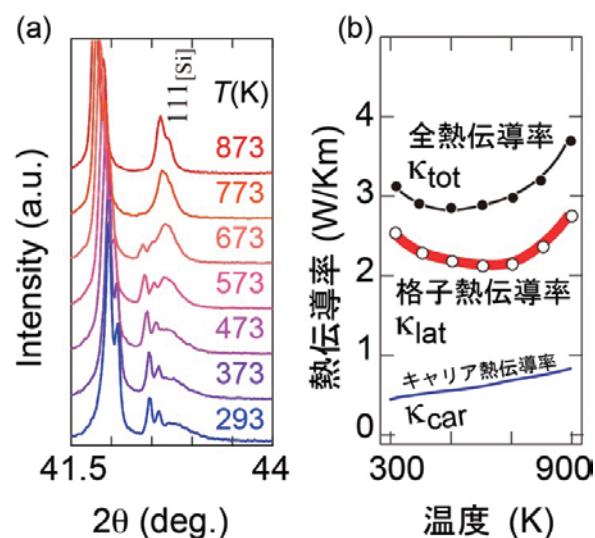


図1 (Mn_{0.97}V_{0.03})Si_γ における111SiX線回折ピーク形状 (a) および熱伝導率 (b) の温度変化

公募班
A04

ハイパーマテリアルをプラットフォームとした 新奇触媒機能の創出

研究代表者 亀岡 聡 東北大学 多元物質科学研究所 教授
専門分野 金属触媒材料



本研究では、ハイパーマテリアルの触媒材料への応用展開を目指し、“実条件下”でのハイパーマテリアル合金の表面状態評価・解析とその表面をプラットフォームとした新奇触媒機能の創出に取り組む。ナノカーボン（カーボンナノチューブやカーボンナノファイバー等の総称）合成反応は活性サイトとなる触媒金属種の状態に非常に敏感であり、形成したナノカーボンの構造・形態が触媒表面の活性点構造ならびに自身の反応履歴を見事に反映する。そこで、前回の公募研究に引き続きナノカーボン合成反応をプローブとしてハイパーマテリアル合金表面

の状態解析を行うと伴に生成したナノカーボンの構造・形態との因果関係を直接検証する。また、今回新たにハイパーマテリアル合金が均質かつ従来の結晶性合金とは異なるユニークな表面構造（アンサンブル）を持ったプラットフォームと捉え、表面構造敏感（structure sensitive）な各種触媒反応（ C_2H_2 、 C_2H_4 水素化・脱水素反応など）をターゲットとして、ハイパーマテリアル（準結晶・近似結晶合金）と結晶合金との相違の有無を詳細（具体的）に検証しハイパーマテリアル由来の新奇な特性の発現（hidden order）と新奇触媒材料への展開を図る。

公募班

A04

近似結晶・準結晶における 磁気ダイナミクス

研究代表者 **那波 和宏** 東北大学 多元物質科学研究所 助教
専門分野 磁性、中性子散乱



準結晶や近似結晶はその独特のクラスター構造とクラスター内における磁氣的相互作用の競合によって興味深い磁性を示します。複数の近似結晶において非共線的な磁気構造が発見されておりますが、その起源はほとんど明らかになっていません。本研究では中性子散乱を利用した物性研究によって近似結晶や準結晶の磁気構造、磁気異方性、磁気ダイナミクスを明らかにし、準結晶や近似結晶固有の磁性を明らかにすることを目指します。特に現在のところ準結晶や近似結晶において磁気ダイナミクスの観測がなされておらず、磁気準粒子が他の周期系の物質群と同様に伝搬するのが分かっています。近似結晶のみならず準結晶の磁気ダイナミクスも明らかにできれば、高次元空間において定義された新しいタイプの準粒子の発見につながると期待されます。

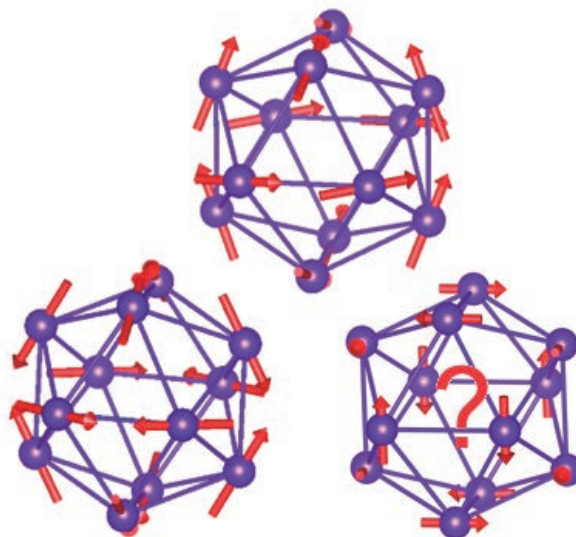


図1 近似結晶・準結晶における磁気構造の模式図

公募班

A04

パルス強磁場を用いたハイパーマテリアルの 電子状態の解明

研究代表者 **三宅 厚志** 東京大学 物性研究所 助教
専門分野 極限物性



近年、準結晶、近似結晶の周期性の有無、幾何学的フラストレーションなどハイパーマテリアル構造に特有の性質に由来する特異な物性・電子状態について、急速に理解が進んできています。

本研究では、世界最高峰のパルス強磁場環境・測定技術を駆使し、ハイパーマテリアルの本性を明らかにすることを目指しています。本領域員によって、希土類原子を含む近似結晶では、組成比によって反強磁性・強磁性・スピングラスと異なった基底状態を取ることが明らかにされてきました。それらに磁場をかけると、飽和までに磁場誘起磁気相転移が起きるのではないのでしょうか。異なる基底状態から出発し、全磁化過程を明らかにすることで、磁性近似結晶を俯瞰的に理解することを目指します。今まで格子の非調和性や、非磁性参照物質がないこと、残留エントロピー測定の難しさに起因して、磁氣的

エントロピーにおける近似結晶・準結晶の違いは明らかにされていません。磁気熱量効果測定によって、エントロピーの絶対値評価が可能であり、両者の違い、つまり準周期性に由来するエントロピー（スピンの秩序度）を解明できないかと考えています。さらには100 Tを超える超強磁場領域では、サイクロトロン直径を格子定数と同程度にすることが可能です。その領域では、近似結晶における周期性は無視でき、副格子を基準とした量子振動や近似結晶・準結晶クロスオーバー、金属・絶縁体転移が起き、波動関数の臨界性や疑ギャップなどの特異性が現れることを期待しています。

以上のような研究のためには、本領域メンバーとの強力な連携が不可欠です。どうぞ、よろしくお願い致します。

公募班
A04

超音波による準結晶と近似結晶における電子格子物性の解明

研究代表者 根本 祐一 新潟大学 理学部 准教授
専門分野 超音波、低温物性



通常、モノは冷やせば硬くなることを私たちは経験的に知っています。原子の振動が調和的ならば、物質の硬さを表す弾性定数は温度に依存しませんが、小さな非調和性があることで、モノは冷やせば単調に硬くなります。ところが、物質中の電子系や原子系が電気四極子 O_F をもつと、超音波により入射された同じ既約表現の歪み ϵ_F と直接結合するため、弾性定数は低温になるほど減少を示すソフト化が期待されます。弾性定数は圧力すなわち単位体積あたりに蓄えられるエネルギーの次元をもつので、ソフト化は低温ほど系のエネルギー利得が増すことを示しています。私たちはこれまで、結晶における超音波実験を行い、希土類化合物における四極子秩序、電荷秩序、ラットリング、鉄系超伝導体における構造相転移と超伝導、シリコン結晶中の原子空孔軌道の解明など幅広く研究を進めてきまし

た。これら結晶での物性理解の到達点が、準結晶や近似結晶にどこまで適用可能でどんな新しい発想や展開をもたらすのか大いに興味があります。価数揺動系とされる準結晶 $Au_{51}Al_{34}Yb_{15}$ と 1/1 近似結晶 $Au_{51}Al_{35}Yb_{14}$ の縦波と横波に対応する弾性定数の測定結果には、それぞれ特徴的なソフト化が観測され、類似する点と相違する点が見られます。Yb 原子の価数揺動が起源なのか軌道自由度が起源なのか、準結晶構造に特有の性質が弾性異常に反映されているのか、実験を進めていく中で理解を深めていきたいと思っています。最終的にハイパーマテリアルの学術領域の発展に少しでも貢献できることを目指しています。準結晶の研究では素人ですから、みなさんとの共同研究は必要不可欠です。何卒よろしくお願いし

公募班
A04

価数揺動ハイパーマテリアルの量子臨界現象

研究代表者 井村 敬一郎 名古屋大学 教養教育院 講師
専門分野 強相関電子物性



価数揺動とは、局在電子と伝導電子との強い相互作用により、イオンの価数が時間的・空間的に揺らぐ現象です。周期結晶である重い電子系においては、こうした価数揺動に由来する数多くの新規物性が開拓されてきました。価数揺動ハイパーマテリアルにおいても、一様磁化率のべき発散といった量子臨界現象が見出され、希土類イオンの価数がオーダーパラメータとなり得ることが明らかになっています^[1]。こうした価数と磁性の相関は、準結晶・近似結晶に共通のクラスター構造の特性を反映したものである一方、準結晶には、「外場（物理的圧力や元素置換）に強固な量子臨界性」という、従来の重い電子系の常識を覆す性質を有している可能性があります。本研究では、エックス線散乱実験（発光分光・回折）や低温物性測定を通し、こうした特異な結晶構造に由来する新規物性の創出を目指します。

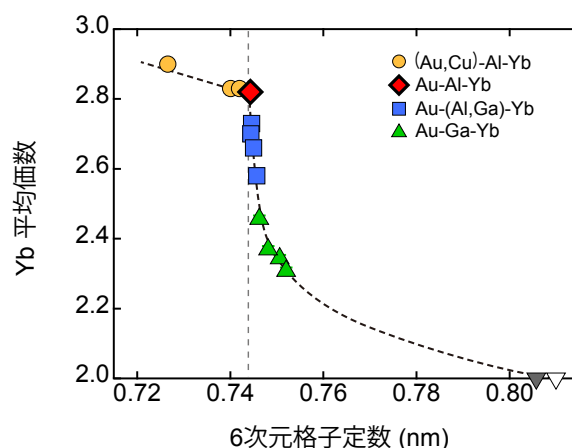


図1 Yb系準結晶における6次元格子定数とYb平均価数の相関。量子臨界現象（一様磁化率のべき発散）は、図中の点線で示した臨界格子定数を中心に、有限の領域に広がっている。

参考文献

[1] K. Imura et al., Sci. Rep. **10**, 17116 (2020).

公募班

A04

準・近似結晶の偏光制御電子分光による 実・波数空間変数の電子物性への本質的寄与

研究代表者 関山 明 大阪大学 大学院基礎工学研究科 教授
専門分野 固体光電子分光、強相関電子物性



前回に引き続き今回も公募研究に採択いただきましてありがとうございます。準結晶・近似結晶の研究は前回の公募研究から始めさせていただきました。成果も上がりつつあり、それを形にすべく奮闘中です。引き続きよろしくお願いします。本公募研究では光電子分光、特にバルク敏感性が内殻励起でも十分高い硬X線光電子分光を中心とした手法で希土類近似結晶の電子構造を微視的に解明しようとしています。これまで様々な強相関電子系の結晶で同様な測定をしてきましたが、この2年間ではAu-Ga-Ce 近似結晶の光電子分光で、本当に過去に見たことがないくらい内殻ピークがブロード、かつ混成効果がすごく弱いことを示すスペクトルが得られました。この系のCe 4f 電子は(口語表現で恐縮ですが)ものすごく局在的です。しかし、ブロードなピークは得てして混成が強い時に混成効果として現

れる(しかしこのブロードさは感覚的には「測定装置壊れてないか?」と心配するレベルでした)ところで不思議な結果でもありました。そこで別の近似結晶Cd-Ce系の測定を行ったところ、今度はブロードニングもなく局在4f系の特徴である終状態多重項構造が観測できました。これらによりAu-Ga-Ce系におけるディスオーダーによるポテンシャルの乱れが電子状態に本質的な影響を与えていることがわかりました。

ところで、硬X線光電子分光では、かつて禁忌とされていた磁場をかけながらの測定も可能なことがわかってきました。今後は、これまでの研究を引き続き進化させるとともに、準結晶磁性体の磁場中光電子分光による磁気円二色性といった新たな方向も開拓してきたいと思います。

公募班

A04

希土類系準結晶と近似結晶の結晶場と 磁性の理論

研究代表者 渡辺 真仁 九州工業大学 大学院工学研究院 教授
専門分野 物性理論



希土類系準結晶と近似結晶は、強相関電子系の新しい研究の舞台として注目を集めている。これまで3次元準結晶において磁気長距離秩序が実現するか否かは未解決の重要な問題であった。最近準結晶Au-Ga-R (R=Tb, Gd)において磁気長距離秩序が観測され、準結晶研究は新たな局面を迎えている。理論的には、これまで希土類系準結晶と近似結晶の結晶場の理論が存在せず、4f 電子状態、特に磁性の理解が妨げられていた。

最近、点電荷モデルに基づいて希土類系準結晶と近似結晶の結晶場の理論を等価演算子法により定式化することに成功した。この理論を準結晶Au-SM-Tb (SMはSi, Ge, Gaなどの元素)と近似結晶に適用し、Tbの4f結晶場エネルギー準位と固有状態を解析した結果、結晶場基底状態はユニークな磁気異

方性を示すことがわかった。さらに、この磁気異方性の効果を取り入れた有効磁気模型を構築し、20面体の磁気相図を決定した。その結果、磁気異方性と交換相互作用を変化させることで、ヘッジホッグ状態やフェリ磁性状態、渦巻き状態などの様々な磁気構造が実現することを見出した。

この磁気模型を1/1近似結晶Au-SM-Tbに適用した結果、実験で観測されたAu₇₀Si₁₇Tb₁₃のフェリ磁性の強磁性秩序ならびにAu₇₂Al₁₄Tb₁₄の渦巻き・反渦巻きの反強磁性秩序を説明できることがわかった。さらにこの磁気模型を準結晶Au-SM-Tbに適用した結果、基底状態相図において強磁性長距離秩序が存在することを見出した。本研究では、これらの理論を発展させ、希土類系準結晶と近似結晶の結晶場と磁性の理論的解明に取り組む。

公募班
A04

放射光メスバウアー分光法を用いた 価数不安定性を持つ準結晶の基底状態の研究

研究代表者 小林 寿夫 兵庫県立大学 大学院物質理学研究科 教授
専門分野 多重極限下放射光、強相関電子物性



最近、準結晶においても超伝導やチューニングなしで量子臨界現象を示す物質が発見された。これらの量子現象と準結晶の特徴である準周期性（局所構造）がどのように関係しているかに興味をもたれる。しかし、この量子現象に直接関係している原子を観測した研究は、準結晶においてほとんど行われていない。すなわち、元素選択の実験手法を用いた準結晶の物性研究が必要である。

研究代表者は、放射光 X 線を用いる ^{174}Yb メスバウアー分光法を確立し、本手法を用いて Yb 4f 電子状態を直接観測することが可能であることを示してきた。さらに、この手法に最適化した世界最高の多重極限環境（1.5 K、20 GPa、8 T）を放射光施設に構築している。これらの成果から、価数揺動（価数不安定性）Yb 系準結晶において観測されている量子

臨界現象の研究に ^{174}Yb 放射光メスバウアー分光法を用いることで、Yb 4f 電子状態と量子臨界性の機構を実験的に明らかにすることを目指す。

本公募研究では、 ^{174}Yb 放射光メスバウアー分光法を用いて Yb 4f 電子状態を直接観測することにより、価数揺動 Yb 系準結晶における量子臨界現象をその近似結晶と対比して解明することを目的としている。具体的には、近似結晶の Yb 4f 電子状態の近似度依存から、補空間上での局所構造と Yb 4f 電子状態との相関を求める。次に、この補空間上での相関を利用して、準結晶の複雑な局所構造から得られる Yb 4f 電子状態と量子臨界性との関係を明らかにする。得られた結果から、価数揺動 Yb 系準結晶での量子臨界性を引き起こす量子揺らぎの原因を解明する。

公募班
A04

準結晶における相関した金属状態の研究

研究代表者 酒井 志朗 理化学研究所 創発物性科学研究センター 上級研究員
専門分野 強相関電子系、超伝導



準結晶構造上で互いに相互作用しながら動き回る電子系が示す性質を、数値シミュレーションを通して研究する。特に以下の3つの課題に取り組む。

- 電子間の相互作用が比較的弱い場合に準結晶の電子状態を数値計算により調べ、準結晶金属物性のフェルミ液体論的解釈の妥当性について検証する。
- 強相関電子状態の典型であるキャリアドーピングされたモット絶縁体を準結晶構造上で考え、準周期性と強相関の協奏が生み出す新しい電子状態を開拓する。
- 準結晶構造上の電子密度の分布は非一様ながら規則性を持っており、その規則性は平均電子数や電子間相互作用の強さ等によって大きく変化する（図1）。この規則性の変化を捉え定量化することのできるハイパーユニフォーミティという概念を応用し、非一様電子状態の分類や新しい電子相の開拓を目指す。

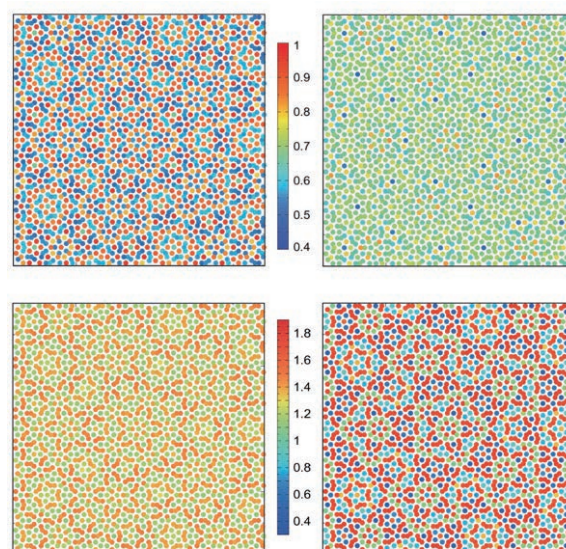


図1 ペンローズ格子上の電子密度の実空間分布。上段（下段）は平均電子数が0.7（1.3）個の場合。左側は電子間相互作用がない場合、右側はある場合。S. Sakai, R. Arita, and T. Ohtsuki, Phys. Rev. B **105**, 054202 (2022) より。

会議・研究会等報告

第26回準結晶研究会(第3回若手研究会を兼ねる)

Zoomにて開催

開催日:2022年2月21日~23日

出口 和彦(名古屋大学)



第26回準結晶研究会(第3回若手研究会を兼ねる)をオンラインで開催し、領域内外から81名の研究者・学生の皆様にご参加いただきました。今回も準結晶研究会の中に若手セッションを作り、多くの学生や若手研究者(39歳以下)の方々に発表していただきました。その中から優秀な発表をされた方に「第2回蔡安邦賞」を授与しました。2日目には東京大学の木村薫教授より「準結晶発見前夜とその後のエピソード、そして学融合: 剣、光構造変化、準結晶、直観、

結合転換、MI」、3日目には東北大学の佐藤卓教授より「準結晶と近似結晶の磁性」についてご講演いただきました。最近発見された強磁性準結晶の磁区構造の観察、新たな物性発現を目指した準結晶・近似結晶の探索、希土類元素を含む酸化物近似結晶の作製、準結晶探索における組成予測に加えデータ解析への機械学習の導入の報告は準結晶の研究が新しいフェーズに入りつつあることを予感させるものでした。ご参加いただいた皆様、ありがとうございました。

第8回領域会議

Zoomにて開催

開催日:2022年4月18日~20日

出口 和彦(名古屋大学)



第8回領域会議をオンラインで開催し、総勢88名の研究者・学生の皆様にご参加いただきました。A01班からA04班までの計画班と第一期公募班の先生方より研究の現状を発表していただきました。2日目にはブレイクアウトルームを使用し、ポスターセッションを行いました。また、第二期公募研究に新規採択された先生方からは研究紹介をしていただきました。理論分野では具体的な準結晶構造、原子配置に基づいた磁性の議論が展開され、蔡型準結晶・近似結晶に関する磁気構造の系統的研究が進

められていました。準周期系の電子状態に関して“hyperuniformity”の概念を取り入れた研究が出てきたのも印象的でした。実験ではカルコゲナイド系の層状2次元準結晶合に関する発表があり、遷移金属カルコゲナイドにおける多様な物性やヘテロ・ファンデルワールス結晶界面における新奇物性とながりそうな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。

第5回国際非周期結晶スクール

ISAC5 (Fifth International School on Aperiodic Crystals) に参加して

開催場所：Hotel U Kata, Kutna Hora, Czechia

開催日：2022年5月23日～27日

高倉 洋礼(北海道大学)

今年5月末にチェコ共和国において、第5回国際非周期結晶スクールが開催されました。前回に続き(第4回国際非周期結晶スクールについては、ニューズレター Vol.1をご覧ください)、私は講師の一人として参加しました。今回の会場はプラハから電車で約1時間の距離にあるクトナー・ホラのホテルでした。スクールを主催したのはチェコ科学アカデミー物理学研究所の Michal Dusek 博士と Vaclav Petricek 博士の研究グループです。同グループは Jana2020 という結晶構造解析ソフトウェアの開発で有名です。スクールには私を含めて9名の講師と、22カ国から53名の生徒が参加しました。

主催者が Jana2020 の開発グループとあって、変調構造関係の内容は Jana2020 を利用したデモンストレーションとチュートリアルに重点が置かれていました。最初の2日は非周期結晶の概論につづいた変調構造関係の講義とチュートリアル、次の2日は準結晶関係の講義とチュートリアル、そして、最終日にはより高度な内容として、磁気超空間群・磁気構造の講義、磁気構造解析のデモンストレーションでした。沢山の質問が生徒から寄せられ、大変活気のあるスクールでした。私自身も多くのことを学ぶことができた非常に有意義な5日間でした。



第5回国際非周期結晶スクールの集合写真

第1回領域国際会議

10th International Conference on Aperiodic Crystals (Aperiodic 2022)

開催場所：オンサイト(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) 及び Zoom によるハイブリッド開催

開催日：2022年6月20日～24日

高倉 洋礼(北海道大学)

2022年6月20日から24日の5日間にわたり、本学術領域「ハイパーマテリアル」の第1回領域国際会議と位置付けられた、第10回非周期結晶国際会議(10th International Conference on Aperiodic Crystals, 略称: Aperiodic 2022, <https://wcp2-ap.eng.hokudai.ac.jp/aperiodic2021/>)が開催されました。今回は北海道大学 工学部 フロンティア応用科学研究棟 鈴木章ホールでの現地開催に加え、オンライン参加の可能なハイブリッド開催となりました。

この会議の共同議長は私、高倉と本領域の田村代表(東京理科大学)が務めました。Aperiodic 2022

はハイパーマテリアルのほかに、不整合変調構造や不整合複合結晶を含む非周期結晶分野全般に関する最新の研究成果を発表討論する国際会議です。2018年にアイオワ州立大学(USA)で Aperiodic 2018が開催されて以来、4年ぶりの開催となりました。会議の参加人数は114名で、参加者の国別の内訳は、日本からの60名を筆頭に、以下多い順にフランス12名、ドイツ6名、UK 6名、ポーランド5名、スウェーデン5名、インド4名、イスラエル4名、韓国2名、スペイン2名、オマーン2名、USA 2名、チェコ共和国1名、メキシコ1名、フィリピン1名、スイス1名でした。発表件数は94件(招待講演14件、

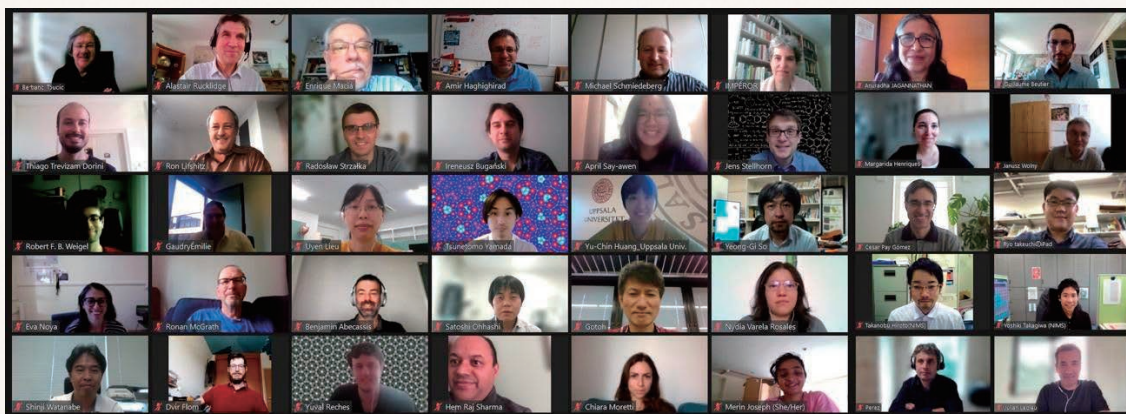
一般講演36件、オンラインポスター発表36件、オンサイトポスター発表8件)でした。

この会議では、海外からのオンライン参加者の多くがヨーロッパ在住であることから、日本とヨーロッパの7時間の時差を考慮し、日本時間13:00から口頭発表を開始するという変則的なプログラムで実施されました。オンラインのポスターセッションはZoomのブレイクアウトルーム機能を用いて、20日から22日の3日間にかけて、日本時間の20:30から23:00まで開催されました。このポスターセッションでは、最初に5分間の質疑応答なしのショートプレゼンテーションが実施されました。口頭発表、ポスター発表ともに、会場およびオンライン上で活発な質疑討論がなされました。また、Aperiodic 2022では、優秀な口頭発表をした学生を表彰するための学生優秀発表賞が設けられており、厳正な審査の結果、“Self-assembly of nanoparticles: from periodic superlattices to quasicrystalline phases”というタイトルで口頭発表をした、リヨン高等師範学校 (ENS de Lyon) 博士課程学生の Chiara Moretti さんが受賞し、彼女には賞状と賞金30,000円が授与されました。

Aperiodic 国際会議は過去3年おきに開催されており、予定では昨年の6月に Aperiodic 2021 として開催されるはずのものでした。しかし、2020年に開催される予定だった第25回国際結晶学連合会議 (開催地プラハ) が2021年8月に開催されることになったこと、および新型コロナウイルス感染症 (COVID-19) の感染拡大防止のため、2022年に開催されることとなりました。一年間の延期を経て、直前まで完全な対面式での開催を目指しましたが、日本への入国制限とビザ取得が困難な状況は変わらず、海外からはオンラインで参加いただくこととなりました。もっとも De Boissieu 博士 (CNRS, SiMaP, フランス) はこの困難な状況の下でビザ取得に成功し、ただ一人海外から現地参加していただきました。同博士には会議の閉会時に Concluding remarks も行っていただきましたこと、感謝に堪えません。また、この会議の実施に当たってご尽力いただいた実行委員の皆さま、プログラム委員の皆様ほか関係者各位に深く感謝申し上げます。次回の Aperiodic 国際会議の開催地はこの原稿の執筆時には決まっておりませんが、順番からするとヨーロッパで開催される予定です。



現地参加の集合写真



オンライン参加者の集合写真 (一部)

2022 年度上半期 活動記録

受賞



日本物理学会 2021 年秋季大会において、日本物理学会学生優秀発表賞(領域6)を受賞しました。

受賞者：前垣内 舜
東京工業大学 理学院 物理学系 物理学コース
博士課程 2 年
指導教官：大熊 哲 (A04 班)
東京工業大学 理学院 教授
受賞題目：超伝導渦糸系における横モードロック共鳴
受賞日：2021 年 10 月 9 日



国際超伝導シンポジウム (ISS2021) において、奨励賞を受賞しました。

受賞者：前垣内 舜
東京工業大学 理学院 物理学系 物理学コース
博士課程 2 年
指導教官：大熊 哲 (A04 班)
東京工業大学 理学院 教授
受賞題目：周期的せん断力下の渦糸系における 2 つの可逆相の観測
受賞日：2021 年 12 月 1 日



第 26 回準結晶研究会 (第 3 回若手研究会を兼ねる) において、第 2 回 蔡安邦賞 (若手研究者の部) を受賞しました。

受賞者：杉本 貴則 (A04 班)
大阪大学 量子情報・量子生命研究センター
特任准教授 (受賞時の所属は、東京理科大学 理学部第一部 応用物理学 特別講師)
受賞題目：Tsai 型近似結晶における磁気秩序
受賞日：2022 年 2 月 23 日



第 26 回準結晶研究会 (第 3 回若手研究会を兼ねる) において、第 2 回 蔡安邦賞 (学生の部) を受賞しました。

受賞者：岩田 健史
東京大学 大学院工学系研究科 修士課程 2 年
指導教官：柴田 直哉
東京大学 大学院工学系研究科 教授
受賞題目：DPC STEM による強磁性準結晶の局所磁区構造観察
受賞日：2022 年 2 月 23 日



American Physical Society Outstanding Referees 2022 を受賞しました。

受賞者：義永 那津人 (A03 班)
東北大学 材料科学高等研究所 准教授
内容：APS ジャーナルに掲載する論文の査読に非常に役立った科学者として表彰されました。
受賞日：2022 年 3 月 2 日



日本物理学会 第 77 回年次大会において、学生優秀発表賞(領域6)を受賞しました。

受賞者：前垣内 舜
東京工業大学 理学院 物理学系 物理学コース
博士課程 2 年
指導教官：大熊 哲 (A04 班)
東京工業大学 理学院 教授
受賞題目：超伝導渦糸系における横ディピニング転移
受賞日：2022 年 3 月 15 日



令和 3 年度 東京大学 大学院新領域創成科学研究科長賞 学業部門 (博士課程) を受賞しました。

受賞者：岩崎 祐昂 (A01 班)
物質・材料研究機構 エネルギー・環境材料研究
拠点 熱電材料グループ 研究員 (受賞時の所属は、
東京大学 大学院新領域創成科学研究科 物質系専攻 博士課程 3 年)
受賞題目：半導体準結晶・近似結晶の探索に関する研究
受賞日：2022 年 3 月 31 日

開催セミナー・イベント

第 19 回 ハイパーマテリアル・セミナー

開催日時：2022 年 3 月 10 日
開催方法：Zoom によるビデオ会議
講演題目：近似結晶に対する機械学習分子シミュレーションの現状と異常高温比熱解明への試み
講師：永井 佑紀 氏 (日本原子力研究開発機構 副主任研究員)

第 20 回 ハイパーマテリアル・セミナー

開催日時：2022 年 3 月 28 日
開催方法：Zoom によるビデオ会議
講演題目：準結晶励起子絶縁体における平衡秩序と非平衡ダイナミクス
講師：稲吉 健 氏 (東京工業大学 博士後期課程 1 年)

第 8 回 領域会議

開催日時：2022 年 4 月 18 日～20 日
開催方法：Zoom によるビデオ会議
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 21 回 ハイパーマテリアル・セミナー

開催日時：2022 年 5 月 7 日
開催方法：学会会館 210 号室
講演題目：半導体ハイパーマテリアルへの道ー4 つの感動と 7 つの学融合ー
講師：木村 薫 氏 (物質・材料研究機構 エネルギー・環境材料研究拠点 NIMS 特別研究員)

第 22 回 ハイパーマテリアル・セミナー

開催日時：2022 年 6 月 17 日
開催方法：東北大学 片平キャンパス 多元研西 1 号館 (B06) セミナー室
講演題目：Thermal conductivity and lattice dynamics in structurally complex materials
講師：M. de Boissieu 氏 (Université Grenoble Alpes, CNRS, Grenoble INP, SIMaP, Grenoble France)

第 1 回 領域国際会議 (Aperiodic2022)

開催日時：2022 年 6 月 20 日～24 日
開催方法：北海道大学 工学部 フロンティア応用科学研究棟 鈴木章ホール及び Zoom によるハイブリッド開催
内容：非周期的結晶の分野での最新成果の発表及び研究者同士の交流促進を目的として開催



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.5**

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9月30日

