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.8

CONTENTS

巻頭言 …… 2
領域代表　田村 隆治　東京理科大学 教授

特集
準周期磁気秩序の探索 …… 3
田村 隆治　東京理科大学 教授

研究報告
ハイパーマテリアルの合成 …… 7
田村 隆治　東京理科大学 教授

ハイパーマテリアルの構造 …… 10
髙倉 洋礼　北海道大学 准教授

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 …… 12
吉田 亮　統計数理研究所 教授

ハイパーマテリアルの物性と hidden order の探索 …… 14
出口 和彦　名古屋大学 講師

会議・研究会等報告 …… 16

2023年度下半期 活動記録 …… 18
受賞
開催セミナー・イベント
今後の予定

巻頭言

時は満ちた！

The best is yet to come.

領域代表 田村 隆治
（東京理科大学 先進工学部 教授）

2019年夏の領域発足から早いもので4年半が経った。“まさにこれから！”というときに本新学術領域「ハイパーマテリアル」は幕を閉じようとしている。ま、そういうものなのかもしれない。しかし喜ばしいことに、領域発足前には存在しなかった多数の新物質が今手元にある。強磁性／反強磁性準結晶、正12角形／正20面体超伝導準結晶、多数の超伝導近似結晶をはじめ、夥しい数の新物質が発見された。ハイパーマテリアルにおける超伝導ラッシュも今や時間の問題であろう。また本領域の発足が契機となり、「ハイパーマテリアル」初の機械学習モデルが開発された。組成のみからの準結晶予測アルゴリズム、さらに、多相粉末X線回折図形からの準結晶相同定アルゴリズムの開発まで目覚ましい進展を見せている。特筆すべきは、機械学習が実際に新しい準結晶をいくつも発見していることである。今後が楽しみである！

もちろん、新学術領域研究の強みを最大に生かして、異分野からの多くの若手研究者の参入により我が国の準結晶研究が著しく活性化されたことも重要な事実である。今や、日本が世界の準結晶研究の拠点になっていることは世界中の誰もが認めるところであろう。準結晶分野はなかなか新規参入者にはとっつきにくい分野であったが、35回以上にも及ぶハイパーマテリアルセミナー等を通じて確実に学問の継承がなされつつあることは喜ばしいことである。その意味で、“まさにこれから”が、我が国の、いや、世界の準結晶研究の新たな時代の幕開けである。新学術領域「ハイパーマテリアル」を通じてすでに十分な種が蒔かれている。また、新たな物質、新たな解析、新たな理論の芽があちこちで芽吹き始めている。さらに、全国・世界にまたがる盤石な共同研究ネットワークも構築された。後は収穫を待つばかりで、今後が楽しみである！　今振り返れば、新学術領域研究の本当の目的は、この新たな地平に若手研究者をいざなうことにあったと思える。本領域で育った若手研究者のさらなる飛翔を期待するとともに、次の新しい一頁を託して筆をおきたい。

さいごに、評価者の先生方、計画・公募研究メンバーの皆様、本学理事会および学長室の先生方、領域秘書の奥山様をはじめ、実に多くの方に支えていただいた。この場を借りて、厚く御礼申し上げたい。ご支援ありがとうございました！

特集

準周期磁気秩序の探索

田村 隆治　東京理科大学 先進工学部 教授

はじめに

私たちの身の回りの固体は周期結晶（以下、結晶）かアモルファスのいずれかである。このうち、アモルファスは熱力学的準安定相で、ブラッグ回折を示さず長距離秩序を持たない。このため長い間、“結晶だけが熱力学的安定相である”、また、“物質のとり得る回転対称性は周期性と共存できる2回、3回、4回、6回の4つに限られる”、さらに、“結晶だけがブラッグ回折を示す”と信じられてきた。物質科学における神話である。

1982年にShechtmanは、液体急冷法により作製したAl-Mn合金の透過電子顕微鏡観察を行っていたところ、驚くべきことに、図1に示すような10回対称性（正確には5回対称性）を有する相を発見した。次いでその幾何学的対称性を調べたところ、“正20面体”と同じ対称性をもつことが判明し、その二年後の1984年、正20面体相の発見を報じる論文を発表した[1]。神話の崩壊の始まりである。

この正20面体相は5回対称性を有することから結晶でないことは自明である。同年（1984年）にLevineとSteinhardtは、結晶に許されない回転対称性を持つ物質群を“準結晶（quasicrystal）”と命名した[2]。その後、正10角形相や正12角形相が次々と発見され、それまで深いベールに覆われていた準結晶の存在が次第に明らかにされていった。なお、Shechtmanが発見した正20面体相は超急冷により得られる準安定相であり、熱を加えると安定な結晶に相変態するものであった。ところが1987年、TsaiらはAl-Cu-Fe合金において正20面体相が熱力学的平衡相として存在することを発見し[3]、再び世界を驚愕させた。ここに至って、準結晶が結晶に比肩する、固体の基本的な存在形態であることが確立した。以上の学術的功績に対して2011年、準結晶の第一発見者であるShechtmanにノーベル化学賞が贈られたことは周知の通りである。

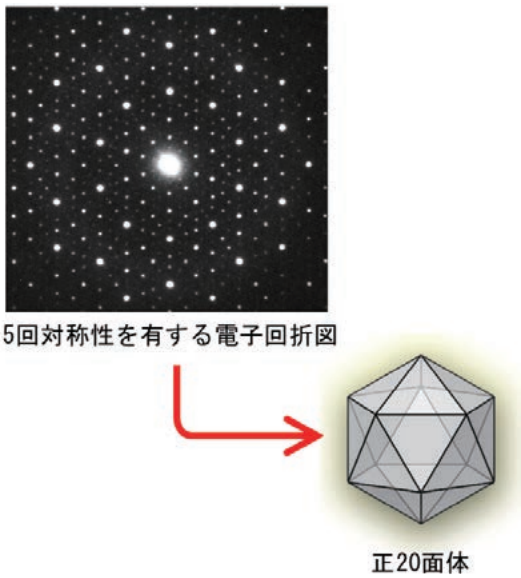


図1　正20面体準結晶の電子回折図形と正20面体（6本の5回軸を有する）

準結晶の発見は、“結晶だけが熱力学的平衡相である”、“2、3、4、6回以外の回転対称性は許されない”といった神話を覆しただけでない。当時、ブラッグ回折は結晶の専売特許であった。準結晶の発見は、結晶以外にもブラッグ回折を示す秩序物質が存在することを世界に知らしめたのである。これを受けて1992年、国際結晶学連合は結晶の定義を「ブラッグ回折を起こす物質」へと拡張し、準結晶を結晶に呑み込んだ（現在の結晶の定義には準結晶も含まれるので、従来の結晶は周期結晶とよぶのが正確である）。

準結晶はブラッグ回折を示すことから何らかの並進秩序を有しており、それは準周期性とよばれる（正確には、逆格子点を記述する基本ベクトルの数が空間次元数に等しい場合は周期結晶、それよりも多い場合は準周期結晶とよばれる）。したがって、準結晶の発見は原子の並びの準周期性の発見とも言うことができる。しかし、準周期性の概念そのものは原子の並びに限るものでなく、遥かに広範で、何らかの空間的局在性を有するあらゆる秩序変数に対して準周期性を考えることができる。これまでに約100種類もの安定な準結晶が発見されているが、本稿の主題にとって特に重要なのは、Zn-Mg-*R*系[4]およびCd-Mg-*R*系[5]準結晶の発見である。これらの準結晶は希土類元素（*R*）を含むために準周期配列した局在スピンの研究を初めて可能にしたからである。ここに、局在スピンがつくる準周期秩序探索に向けた本格的な実験研究が始まった。本稿では、この挑戦が辿った二つの道筋と現時点における到達点について紹介する。

直接ルートからの準周期磁気秩序の探索

全角運動量（*J*）がゼロでない希土類原子は一般に局在スピンを有する。局在スピンは高温では熱的に揺らいでおり（常磁性状態）、温度を下げるとスピン間の相互作用により磁気秩序を形成する。Zn-Mg-*R* 系および Cd-Mg-*R* 系希土類準結晶の低温磁化測定の結果、いずれの準結晶においても磁気転移は見られず、スピングラス転移を示すことが判明した [6]。スピングラスとは、常磁性状態から温度を下げたとき、局在スピンが秩序化できず、ランダムな向きを向いたまま凍結した状態である。その磁化の温度依存性には、図2に示すように、磁場をかけながら冷やしたとき（磁場中冷却）と無磁場下で冷やしたとき（ゼロ磁場冷却）に分岐が見られることが特徴である。磁場中冷却の場合、各スピンが磁場方向に幾分配向した状態で凍結するために磁化が大きくなるわけである。実際、希土類準結晶の磁化曲線にはこの分岐が明瞭に観測された [6]。

スピングラス転移は、互いに両立し得ない相互作用が働くためにスピンが最安定配置を見いだせずにランダムに凍結する現象である。このようなスピンが最安定配置を見いだせない状況をフラストレーションとよぶ。準結晶中の局在スピンにはフラストレーションが働き、それが秩序化を妨げているわけである。一般に、フラストレーションの原因には相互作用の乱れ（結晶の乱れ）と幾何学的な要因があるが、それに加えて、準結晶においてはそもそも準周期性と反強磁性秩序は共存できるのかという原理的な問題が存在する。前者のうち、準結晶構造の乱れとしてはケミカルディスオーダーの存在が挙げられる。上述の希土類準結晶はいずれも三元合金であり、異なる元素によって統計的に占められるサイト（ミックスサイトとよぶ）が存在する。ところが、Cd-Mg-*R* 準結晶（Tsai 型準結晶とよぶ）では Zn-Mg-*R* 準結晶（Bergman 型準結晶とよぶ）と異なって、希土類元素は特定のサイト（正20面体サイト）を排他的に占め、非金属元素がミックスサイトを占めていることが判明した。そのような事情から、次に述べる二元系の Tsai 型希土類準結晶の発見によりこの問題は解消されることになった。

2013年、Goldman らは Cd-*R* 系二元系準結晶を発見し [7]、その磁化測定の結果、当時の予想に反してスピングラス転移のみが観測され、ケミカルディスオーダーがフラストレーションの原因でないことを明らかにした。そこで内因的な要因の一つ、準周期性と反強磁性秩序が共存できないことが原因として浮上した。しかし後述するように、同様のフラストレーションは周期系においても観測されることから、現在では、両者に共通の局所構造である正20面体クラスターにフラストレーションの起源がある（幾何学的要因）と考えるのが自然である。

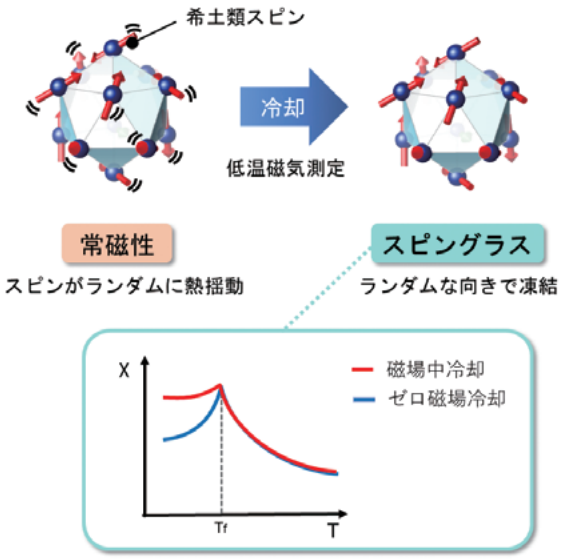


図2　（上）常磁性状態とスピングラス状態（下）スピングラス転移における典型的な磁化曲線

間接ルートからの準周期磁気秩序の探索

筆者らは準結晶の兄弟物質である近似結晶に着目し、一見遠回りなルートで磁気秩序形成条件の探索をすすめてきた。近似結晶の正確な定義は他書 [8] に譲るとして、近似結晶は準結晶と同じ局所構造を有する結晶である [9]。また、準結晶構造に対する「近さ」を表す近似度を定義することができ、それは、黄金比 τ（=1.618…）の近似有理数（1/1, 2/1, 3/2, 5/3, …, 1.618…）で与えられ、数学的には無

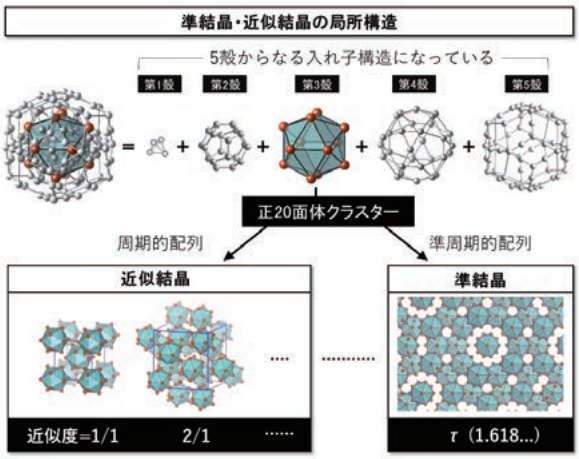


図3　準結晶と近似結晶の共通の局所構造（正20面体クラスター）とその配列様式

限に存在する。図3に示すように、準結晶と近似結晶は同じ正20面体クラスターを有し、近似結晶ではそれが周期配列しているのに対し、準結晶では準周期配列している。また、近似度を上げると数学的にはいくらでも準結晶に近い構造を考えることができる。興味深いことは、一見数学的な産物でしかない近似結晶が現実に存在することである。筆者らは2010年に、Cd-Tb 系近似結晶において反強磁性転移を見いだした [10]。第一のブレークスルーは、この Cd-*R* 近似結晶の Cd を Au と Al で置換した Au-Al-Gd 系において広い単相域、すなわち、Au 濃度が49 ~ 73 at% の範囲にわたって単相域が存在することが見いだされたことである。広い単相域の存在は磁性制御を可能にし、実際、Au 濃度の変化に対して、反強磁性・強磁性・スピングラスと様々な磁気秩序を取ることが発見された [11]。

その後、20以上もの合金系で近似結晶の磁性が調べられ、第二のブレークスルーを迎えることになった。それは、図4に示す平均価電子数 (e/a) に対する磁気相図の発見である [12]。平均価電子数とは1原子あたりの価電子数のことで、Au であれば1、Al や Gd は3として、各元素の価電子数に組成の重みをかけて平均した値である。Au 濃度といった物質に従属する変数でなく、より普遍的な変数で近似結晶の磁性が統一的に記述できることが発見されたのである。この磁気相図によれば、e/a の増加に伴い、反強磁性・強磁性・スピングラス相と磁気秩序が移り変わる様子が見て取れる。そればかりでなく、ワイス温度 (常磁性キュリー温度) がユニバーサルな曲線を描いて正負に振動する様子も見て取れる。ここでワイス温度は、各スピンに働く有効磁場を表す量であり、それが正であれば強磁性的な、負であれば反強磁性的な相互作用が働く。興味深いことは、ワイス温度が負の領域ではほとんどの物質がスピングラス相となっていることである。このことは、正20面体クラスター上のスピン間に反強磁性的な相互作用が働くとフラストレーションが生じることを意味している。このように、周期系 (近似結晶) の磁性を調べることにより、幾何学的フラストレーションの存在が示唆されたわけである。

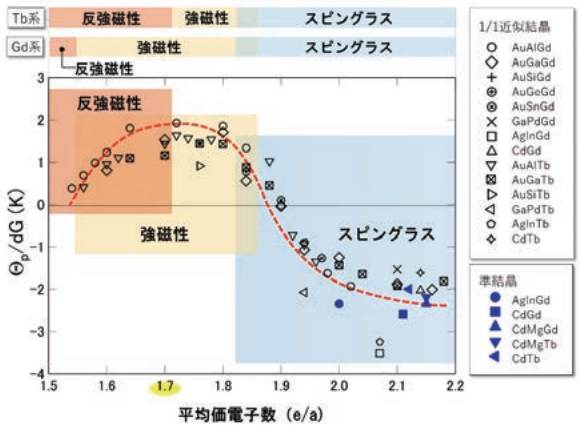


図4　近似結晶の平均価電子数 (e/a) に対する磁気相図

図4には準結晶のデータもプロットしてあり、例外なく、いずれもスピングラス領域にあることが明らかである。このように近似結晶のフラストレーションは準結晶にも引き継がれており、共通の正20面体クラスターがフラストレーションの原因と考えるのが自然であろう。また、この磁気相図の重要な点はその予言性にあり、強磁性や反強磁性領域で準結晶を合成すれば磁気秩序が得られることを示唆している。そこで筆者らは、液体急冷法により準安定準結晶の探索を行った。その結果、Au-Ga-Gd、Tb 系 [13]、次いで、Au-Ga-Dy 系 [14] において、平均価電子数 e/a=1.70のとき、すなわち、図4の強磁性領域において、正20面体準結晶が得られることを突き止めた。またその磁化測定を行ったところ、期待通り、強磁性転移特有の磁化の発散的振舞いを示す結果が得られたのである。

長距離磁気秩序の証明には磁気ブラッグ反射を捉える必要がある。強磁性転移の場合、キュリー点 (T_C) 以下で核反射位置に磁気ブラッグ反射が現れる。図5に Au-Ga-Tb 系準結晶の粉末中性子回折図形を示す。核反射位置である111000において、T_C 以下でピーク強度が増大する様子が見て取れる。図5には111000ピーク強度の温度依存性を示す。T_C 以下で磁気回折強度が急峻に発達する様子が観測され、強磁性転移が起きていることが証明された。なお、強磁性準結晶の磁気構造は自明と思えるかもしれないがそうではない。希土類元素 Tb の4f 電子雲は球形でないため、局在スピンの向きは周囲の原子がつくる電子雲からの静電場 (結晶場とよぶ) の影響を受ける。このため全てのスピンが平行に揃う単純な強磁性構造 (共線磁気構造とよぶ) とならず、全スピンの方向が同一平面にのらない特異な非共面磁気構造をつくる。どのような磁気構造が実現しているのか、大変興味が持たれる。

以上、局在スピンが準周期配列した強磁性秩序発見に至った経緯を紹介した。直接ルートではフラストレーションの壁に突き当たって難航したのに対し、近似結晶から攻める間接ルートは、一見遠回りながら強磁性準結晶の発見につながった。直接法でダメ

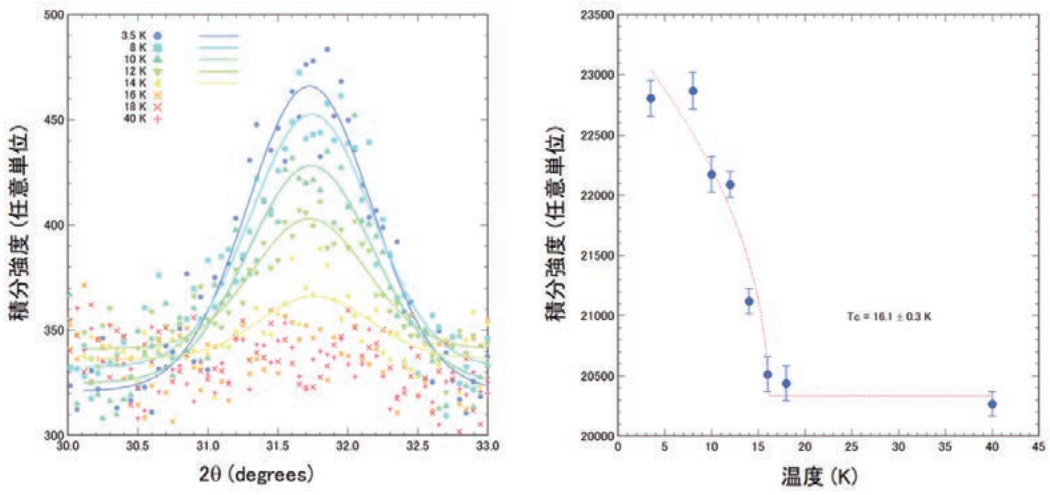


図5　Au-Ga-Tb 系準結晶の粉末中性子回折測定の結果　(左)111000位置における回折ピークプロファイル
(右)111000ピーク強度の温度依存性

なら外堀を埋めることが有効であることの一例である。次の課題はもちろん反強磁性準結晶の実現であるが、すでに居場所は分かってきたので、いかに準結晶を合成するかにかかっている。これにも準安定相を介した新物質探索が威力を発揮するであろう。

まとめと今後の展望

Shechtman による準結晶の発見は原子の並びの準周期性の発見である。準周期性は何も原子の配列に限るものではなく、本稿では、局在スピンがつくる準周期秩序探索の冒険と強磁性準結晶の発見に至った最近の成果を紹介した。この強磁性準結晶は、通常凝固法では得られず、液体急冷法により初めて得られる準安定相である。磁性準結晶の探索においても準安定相を足掛かりとした新物質合成が有効であることが証明された。物質科学においては、一つあればたくさんあることが多い。最初の準結晶が超急冷法により発見され、その後、続々と安定な準結晶が発見されたことはいかにも教訓的である。準安定相の近くには安定相が眠っていることが期待される。この意味で、準周期磁気秩序を有する新物質探索の冒険はまさに始まったばかりである。結晶には到底不可能な、高い幾何学的対称性や準周期並進秩序を舞台にどのような世界が繰り広げられるのか、どのような特異な磁気構造や磁気特性が出現し、どのような新しい学理と応用研究に結実していくのか、ますます目が離せない分野である。

さいごに、今回取り上げた局在スピンは原子に紐づいているので、準周期秩序を実現する試みとしては直接的なアプローチの部類に入る。しかし、準周期性の概念自体はより広範であり、原子に紐づかない様々な準周期秩序を想像することができる。その意味で今後、どのような準周期秩序が物質科学の表舞台に顔を出すのか楽しみである。科学には真理（もっともなこと）と神話（もっともそうなこと）がある。次世代を担う若い研究者の方々には、想像力をたくましくして、慣れ親しんだ神話を覆し、新たな扉を開いていただきたい。

参考文献

[1] D. Shechtman, I. Blech, D. Gratias, J. W. Cahn, *Phys. Rev. Lett.* **53** 1951 (1984).

[2] D. Levine, P. J. Steinhardt, *Phys. Rev. Lett*. **53** 2477 (1984).

[3] A. P. Tsai, A. Inoue, T. Masumoto, *Jpn. J. Appl. Phys*. **26** L1505 (1987).

[4] A. Niikura, A. P. Tsai, A. Inoue, T. Masumoto, *Phil. Mag. Lett.* **69** 351 (1994).

[5] J. Guo, E. Abe, A. P. Tsai, *Jpn. J. Appl. Phys*. **39** L770 (2000).

[6] 次の総説が詳しい。A. I. Goldman, *Sci. Technol. Adv. Mater*. **15** 044801 (2014).

[7] A. I. Goldman, T. Kong, A. Kreyssig, A. Jesche, M. Ramazanoglu, K. W. Dennis, S. L. Bud'ko, P. C. Canfield, *Nat. Mater*. **12** 714 (2013).

[8] V. Elser, C. L. Henley, *Phys. Rev. Lett.* **55** 2883 (1985).

[9] 竹内伸，枝川圭一，蔡安邦，木村薫，準結晶の物理，朝倉書店，2012年.

[10] R. Tamura, Y. Muro, T. Hiroto, K. Nishimoto, T. Takabatake, *Phys. Rev.* B **82** 220201 (2010).

[11] A. Ishikawa, T. Fujii, T. Takeuchi, T. Yamada, Y. Matsushita, R. Tamura, *Phys. Rev.* B **98** 220403 (2018).

[12] S. Suzuki, A. Ishikawa, T. Yamada, T. Sugimoto, A. Sakurai, R. Tamura, *Mater. Trans.* **62** 298 (2021).

[13] R. Tamura, A. Ishikawa, S. Suzuki, T. Kotajima, Y. Tanaka, T. Seki, N. Shibata, T. Yamada, T. Fujii, C. W. Wang, M. Avdeev, K. Nawa, D. Okuyama, T. J. Sato, *J. Am. Chem. Soc*. **143** 19938 (2021).

[14] R. Takeuchi, F. Labib, T. Tsugawa, Y. Akai, A. Ishikawa, S. Suzuki, T. Fujii, R. Tamura, *Phys. Rev. Lett*. **130** 176701 (2023).

Hypermaterials

研究報告

5年の軌跡と今後の展望

A01

ハイパーマテリアルの合成

田村 隆治　東京理科大学 先進工学部 教授

A01班は、本新学術領域内にあって「新規ハイパーマテリアルの合成」を担当し、前人未踏の物質探索に挑戦するとともに、A02班（構造）・A03班（機械学習）・A04班（物性）に試料／データを提供することを通じて領域内における有機的な連携研究のトリガーをかけることが主なミッションとなっている。主な研究成果を以下に述べる。

磁性ハイパーマテリアル

磁性ハイパーマテリアルに関しては、すでに述べたように、強磁性準結晶の合成およびその単相化に成功している [1、2]。この成功の背景には近似結晶の磁性理解の進展があることを述べたが、ここでは磁性近似結晶の研究の最新の進展について紹介する。Tsai 型近似結晶においては、領域の前半で、その磁性（磁気秩序）が平均価電子数（e/a 値）により統一的に記述できることが明らかにされた。またあわせて、Heisenberg 系（Gd）と非 Heisenberg 系（Tb,Dy）では反強磁性／強磁性相境界をはじめ、両者の磁性に顕著な相違があることも判明した。この結果を踏まえて、領域の後半では、中性子実験が可能な非 Heisenberg 系（Tb 系）の磁気相図の決定を行った。図1に、最近明らかにされた Au-Ga-Tb 系 1/1 近似結晶の磁気相図を示す [3]。e/a 値の増加に伴って反強磁性相⇒強磁性相⇒スピングラス相と相変化するが、反強磁性相と強磁性相のそれぞれの磁気構造が解明された。1/1近似結晶中で bcc 配列する Tb 原子20面体をもとに考えると、反強磁性相においては Tb スピンが4本ある [111] 方向のまわりに渦を巻いた構造を有しており、かつ、20面体クラスターの対極のスピン同士が互いに反平行となって磁化を打ち消しあうという特異な磁気構造をとっていることが明らかになった。一方、強磁性相も1本の [111] 方向のまわりに渦を巻いた磁気構造を有しており、反強磁性相の12本のスピンのうち半数のスピンの向きが反転した構造として理解できる。これは、Tb 由来の強い1軸異方性の存在を示唆する結果でもある。この Tb 系の磁気相図および磁気構造は今後 Tb 系準結晶の磁性を解明する上で決定的な役割を果たすものである。

半導体ハイパーマテリアル

木村らは、物性データベース Starrydata を使って過去の論文から集めた準結晶・近似結晶および結晶（熱電材料）の電気抵抗率の温度依存性のデータ約3,000点および熱伝導率の温度依存性のデータ約1,200点をもとに、A03班において Al- 遷移金属3元相図上に、準結晶・近似結晶の生成、電気抵抗率の値、その温度係数の値、ヴィーデマン・フランツ則からのズレの値を予測した。その結果、6つの合金系を半導体ハイパーマテリアルの候補として選定した。このうち3つの合金系においては正10角形準結晶相がすでに報告されていること、さらに別の1つの合金系では正20面体準結晶の1/1近似結晶が存在することが見いだされた。それぞれ単相試料を作製してその熱電物性を測定したところ、一つの正10角形準結晶で非金属的な電気抵抗率の温度依存性が見られたものの、4つの合金系とも擬ギャッ

プ中にフェルミ準位がある金属であることが判明した。残りの２つの合金系においては、安定相の準結晶・近似結晶は報告されておらず、開発した機械学習プログラム [4] により、得られた X 線回折パターン中に準結晶・近似結晶が存在する可能性を判定する予定である。

酸化物・強相関系ハイパーマテリアル

酸化物ハイパーマテリアルの研究は2013年の Föster らによる Pt (111) 面上に形成された Ti-O-Ba 正12角形準結晶の発見に端を発する。この準結晶の合成には高度な成膜技術を要するが、幸い、Ti-O-Ba 準結晶の合成に成功している柚原が A01 班公募班として参画した。柚原らは、希土類元素であるセリウムを含む酸化物超薄膜が Pt (111) 表面上において準結晶関連構造を形成することを見いだした。希土類酸化物ハイパーマテリアルの創製はこれまで先行例はなく、世界に先駆けての発見である。また、複合的な解析手法 (STM-LEED-AES-XPS-PES-XAS) を駆使して、その構造モデルを提案した [5]。現在、光電子ホログラフィーによりセリウム酸化物超薄膜準結晶関連構造の構造解明に向けて、学術変革領域研究 (A)「超秩序構造科学」の研究者との共同研究をスタートしている。一方、山田は、Cockayne らによる第一原理計算結果をもとに Ti-O-Ba 準結晶の4次元構造モデルを構築し、さらに、様々なフェイゾン歪みを与えることで各種近似結晶の構造の構築に成功した [6]。またこれにより、酸化物ハイパーマテリアルを合成する上で重要な情報である化学組成が得られた。また山田らは、多相回折パターンから準結晶・近似結晶を検出する機械学習モデルの開発を行い [4]、多相中から酸化物ハイパーマテリアルをスクリーニングする手法を構築した。山浦らは、Ti-Cr-Si-O 系亜酸化物の研究において、酸化物イオンを含むバルク近似結晶の合成に成功した。さらに、これらの試料の品質を、特に不純物相の縮減、酸素含有量の増加という点で向上させることにも成功している。特に重要な進展は、Cr の代わりに Rh と Ir を使った系で類似物質を合成できる可能性を示したことである。まだ正確な結晶構造、化学組成は明らかでないが、これらの結果は今後、酸化物準結晶の新規開発と特性開発につながることが期待される。

強相関ハイパーマテリアルに関しては、室らは、Tsai 型 Au-Al-Ce 系近似結晶において、電子相関効果の代表である近藤効果を観測し、Au 濃度の増加とともに電子相関が抑制されて Ce 磁気モーメントが磁気秩序化しやすくなる一方、低温でのスピングラス転移温度も抑制されるという、従来の Ce 化合物と相反する振る舞いを見いだした。また、日本原子力研究開発機構の芳賀研究員と共同で、Tsai 型で初めての U 系1/1近似結晶 $Au_{62}Al_{22}U_{16}$ の創製に成功した。その物性測定から、強相関電子系の代表である重い電子的挙動を示すこと、さらに4K 以下で U5f 電子に起因した磁気異常を起こすことを見いだしている。

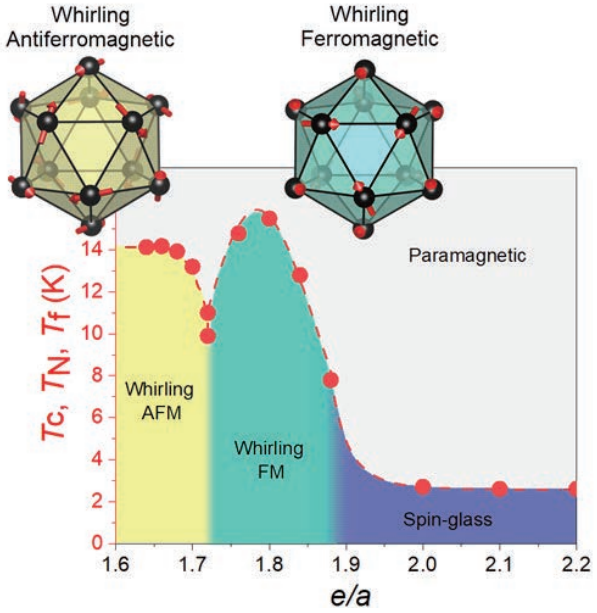


図１　Au-Ga-Tb 系1/1近似結晶の平均価電子数 (e/a) - 磁気相図 [3]。磁性 Tb 原子は、bcc 配列した20面体の頂点にあり、図中にその磁気構造を示す。e/a = 1.72では非平面渦巻き状の反強磁性秩序が、e/a = 1.80では非平面渦巻き状の強磁性秩序が基底状態として安定化している。なお、反強磁性相の伝搬ベクトルは [111] で、原点と体心位置のスピンの向きは逆向きとなっている。

ポリマーハイパーマテリアル

互いに非相溶な二成分の高分子鎖からなるブロック共重合体のミクロ相分離構造においては、成分比に応じて多様な構造が形成される。近年、球状ミクロ相分離構造を中心に新しい球状ドメインの充填構造（準結晶を含む）が発見されている。これらは金属系結晶やコロイド結晶などによる結晶形成機構に類似する点に加えて、高分子特有の性質が絡んでいる。それは、高分子球状ミセルが凝集する際に、個々の高分子鎖のコンフォメーションに対するフラストレーション（エントロピー）が大きく寄与し、特異的な相分離構造（準結晶、近似結晶など）形成を困難にしている。そのフラストレーションを軽減させることが複雑相分離構造の発現の鍵となることが明らかになってきた。山本らは、この観点で、数種の構成高分子の異なる新規なブロック共重合体を合成し、高分子系相分離構造の準結晶構造形成が普遍的であることを見いだすとともに、2種のブロック共重合体ブレンド系にすること、構成するブロック共重合体鎖間の屈曲性の非対称性（マイナー成分を剛直）を大きくすることが準結晶構造やその近似結晶形成に有効であることを発見した。また一連の研究過程で、これまでブロック共重合体単独では未発見であった新規相分離を見いだすに至っている。

ファンデルワールス系ハイパーマテリアル

井手上らは、一般に準周期2次元系となるファンデルワールスヘテロ界面（ファンデルワールスハイパーマテリアル）における対称性制御を基軸とした物性開拓の研究を推進した。特に、異なる対称性を持つ2次元結晶界面において、特徴的極性構造やキラル構造が実現され、スピン自由度に依存した整流現象である円偏光光起電力効果が発現することを見いだした [7]。また、円偏光光起電力効果の照射光エネルギー依存性等の振る舞いから、本現象が波動関数の幾何学的性質を起源とする機構によって上手く説明できることを明らかにした。さらに、類似のアイデアを2次元磁性体界面に適応して特徴的対称性を持つ磁性体界面を作製し、光電流応答を観測することに成功した。

以上、A01班の特に後半の研究成果の紹介をさせていただいた。紙面の都合上、すべての研究に触れることができなかったことにご容赦いただきたい。

参考文献

[1] R. Tamura, A. Ishikawa, S. Suzuki, T. Kotajima, Y. Tanaka, T. Seki, N. Shibata, T. Yamada, T. Fujii, C-W. Wang, M. Avdeev, K. Nawa, D. Okuyama, T. J. Sato, *J. Am. Chem. Soc.* **143** (2021) 19938.

[2] R. Takeuchi, F. Labib, T. Tsugawa, Y. Akai, A. Ishikawa, S. Suzuki, T. Fujii, R. Tamura, *Phys. Rev. Lett*. **130** (2023) 176701.

[3] F. Labib, K. Nawa, S. Suzuki, H-C. Wu, A. Ishikawa, K. Inagaki, T. Fujii, K. Kinjo, T. J. Sato, R. Tamura, *Mater. Today Phys*. **40** (2024) 101321.

[4] H. Uryu, T. Yamada, K. Kitahara, A. Singh, Y. Iwasaki, K. Kimura, K. Hiroki, N. Miyao, A. Ishikawa, R. Tamura, S. Ohhashi, C. Liu, R. Yoshida, *Adv. Sci.* **11** (2024) 2304546.

[5] X. Li, L. H. Chan, S. Takakura, M. Nakatake, T. Yamada, R. Tamura, J. Yuhara, *Phys. Chem. Chem. Phys.* **25** (2023) 26065.

[6] T. Yamada, *Acta Cryst.* **B78** (2022) 247.

[7] S. Duan, F. Qin, P. Chen, X. Yang, C. Qiu, J. Huang, G. Liu, Z. Li, X. Bi, F. Meng X. Xi, J. Yao, T. Ideue, B. Lian, Y. Iwasa, H. Yuan, *Nat. Nanotechnol*. **18** (2023) 867.

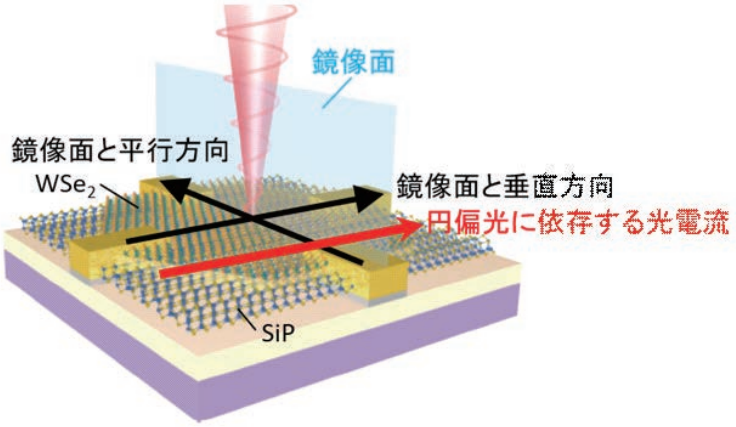


図2　WSe_2/SiP ヘテロ界面における円偏光光起電力効果 [7]。対称性が低下した界面では鏡像面が一枚存在し、それと垂直な方向へ円偏光に依存した光電流が流れる。（井手上敏也氏提供）

A02 ハイパーマテリアルの構造

髙倉 洋礼　北海道大学 工学研究院 准教授

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典型系である準結晶は、３次元空間では周期秩序をもたずに準周期秩序をもちます。したがって、その原子配列は3次元では一見複雑で理解不能ですが、補空間を通して理解することができます。たとえば、正20面体準結晶の準周期な原子配列秩序は、６次元周期結晶を無理数の傾きで断面をとって得られる構造に対応します。一方で、有理数の傾きの断面から3次元の周期をもつ構造（近似結晶）が得られます。準結晶とこれらの近似結晶は同一の補空間構造をもつ高次元結晶から得られることはすでに皆さんはよくご存じのことと思います。普通の結晶には許されない回転対称性と準周期な長距離秩序を反映した鋭いブラックピークで特徴づけられる準結晶の回折パターンは、多くの研究者を虜にしてきました。このような回折パターンを示す物質中の原子配列がどのようになっているのかは準結晶の発見以来の大問題であり、また物質の原子スケールでの構造解明は現代の物質科学における基本的課題とも位置づけられます。A02班ではハイパーマテリアルの静的構造だけでなく、動的構造やエネルギースペクトラム構造の特徴を明らかにし、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ことを目的とします。そのために、実験室系 X 線、中性子・放射光大型施設の最先端計測法を駆使して構造を組織的に解明することを目指して研究を推進してきました。

まず静的構造では、Bergman 型クラスターで特徴づけられる Zn-Mg-Tm 系正20面体準結晶を、AKN-tiling に基づいた実空間解析法により、補空間構造に関する知見を得ることに成功しました [1]。これにより、さらに進んだより完全な高次元構造モデル構築への道が拓けました。また、A01班およびA04班との連携により、新しい Tsai 型近似結晶の構造 [2]、機械学習を用いて発見されたマッカイ型クラスターで特徴づけられる Al-Si-Ru 系準結晶の近似結晶構造 [3] を明らかにしました。さらに、準結晶の構造を3次元空間でボトムアップから理解するアプローチであるカノニカルセルタイリングにもとづき、Al 系高次近似結晶の構造を統一的に理解できることが分かりました [4]。

いっぽう 動的構造では、Al-Pd-Mn 正20面体準結晶の格子ダイナミクスを J-PARC MLF に設置されている高分解能中性子分光器で調べることにより、階層的で黄金比 τ（$=(1+\sqrt{5})/2$）でスケールされるエネルギー擬ギャップ構造や非相反フォノンシグナルが観測されています [5]。τ でスケールされるダイナミクスは今回のフォノンデータが初めてであり、フォノンを介した熱物性において準周期系特有の性質が現れる可能性を示唆する重要な結果と位置付けられ、今後の発展が大いに期待されます。

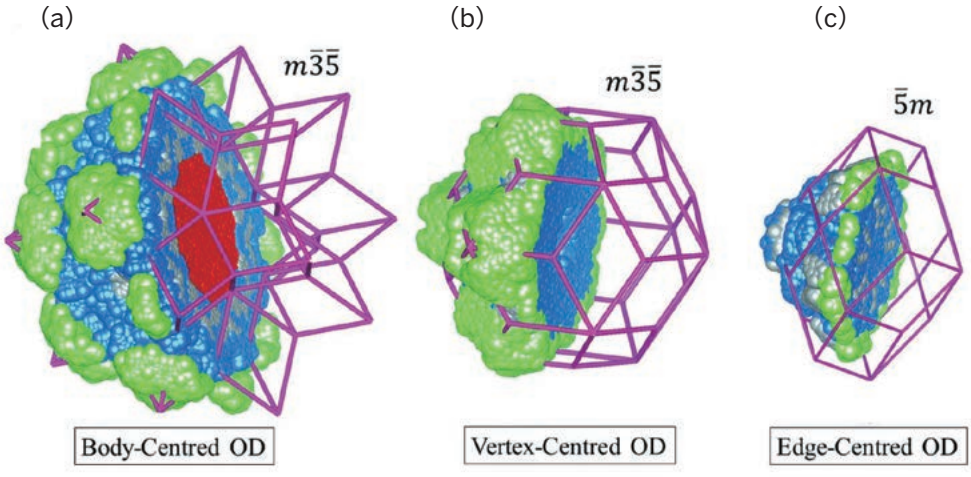


図１　Bergman 型 Zn-Mg-Tm 正20面体準結晶の補空間構造 [1]
(a) (1,1,1,1,1,1)/2, (b) (0,0,0,0,0,0), (c) (1,0,0,0,0,0)/2

ハイパーマテリアルの構造を対称性の情報を保存したままで可視化することは、今後構造だけでなく構造と物性の相関を解明することにおいても重要となります。例えば、本学術領域研究では最近、強磁性を示す Tsai 型正20面体準結晶が発見され大きな注目を集めています。その磁気構造の解明は今後の課題の一つです。A02班では結晶構造可視化ソフトウエア VESTA を拡張し、準結晶の構造解析プログラムの入力ファイルをそのまま読み込むことで、準結晶の対称性情報を失うことなく、補空間構造と物理空間構造を可視化できるようにしました [6]。すでにテストバージョンは Web で公開されており、次期バージョン VESTA 4としてリリースが予定されています [7]。

そのほかに、ここで紹介できなかったさまざまな成果や現在進行中の研究があります。以下、いくつかの具体例を簡単にご紹介します。

1. 最初の安定相準結晶として報告がなされ、盛んに研究されてきた F 型 Al 基正20面体準結晶群に対しては、いまだに確立した高次元構造モデルがありません。Al-Cu-Ru 系正20面体準結晶をプロトタイプとした高次元結晶構造解析が進められています。
2. Al-Cu-Ru 系正20面体準結晶および近似結晶のコヒーレント X 線回折法を用いたメゾスケール観察により、準結晶と近似結晶で異なるダイナミクスが観測され、準結晶におけるフェイゾンやドメインのダイナミクスの理解につながる結果が得られつつあります。
3. 自然界で発見された準結晶の放射光 X 線回折実験によるキャラクタリゼーション。これは準結晶の形成やフェイゾン、ならびに準結晶の安定化機構に関する重要な知見を与えてくれることが期待されます。最近、天然 Al-Cu-Fe 正20面体準結晶は変調相であることが明らかとなりました。
4. 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相において見いだされた擬メロヘドラル双晶の発現機構に関して、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た解析が進められています。

参考文献

[1] I. Buganski, J. Wolny, H. Takakura, The atomic structure of the Bergman-type icosahedral quasicrystal based on the Ammann-Kramer-Neritiling, Acta Crystallogr. Sec. A 76, 180–196 (2000).

[2] F. Labib, N. Fujita, H. Takakura, S. Ohhashi, T. Shiino, A.P. Tsai, R. Tamura, Formation and structure of 1/1 cubic approximants in the Cd-Mg-Ce system: The identification of a new structural variant, Journal of Alloys and Compounds, 954, 170151-1-11 (2023).

[3] K. Kitahara, H. Takakura, Y. Iwasaki, K. Kimura, Phase Equilibria in Aluminium-Ruthenium-Silicon System near 1200 Kelvin, Mater. Trans., 65, 18–26 (2024).

[4] N. Fujita, M. Ogashiwa, A Unified Geometrical Framework for Face-Centered Icosahedral Approximants in Al-Pd-TM (TM = Transition Metal) Systems, Mater. Trans., 62, 329-337 (2021).

[5] M. Matsuura, J. Zhang, Y. Kamimura, M. Kofu, K. Edagawa, paper in preparation.

[6] 門馬綱一, ハイパーマテリアルの可視化, Hypermaterials News Letter, Vol.7, 2-5, (2023).

[7] http://jp-minerals.org/vesta/

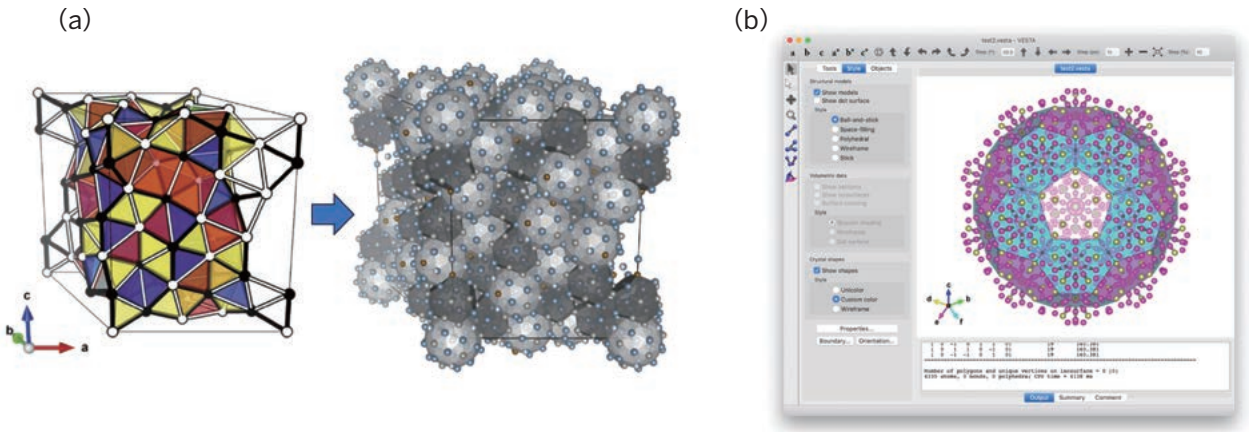
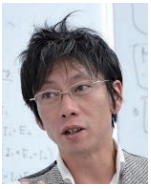


図2 (a) アルミ・遷移金属合金系に見いだされた高次 (3/2) 近似結晶の結晶構造 [4]
(b) 準結晶の構造可視化ソフトウエア (VESTA Ver.4) [6]

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

吉田 亮　統計数理研究所 データ科学研究系 教授



A03班は、ハイパーマテリアルズインフォマティクスという準結晶研究の新しい方法論を構築することを目的に設置されました。物質の空間は非常に広大です。例えば、元素の種類が約100個とすれば、それらの組み合わせの数は三元系では100万、四元系では1億、五元系では100億種類以上になります。マテリアルズインフォマティクス（Materials Informatics: MI）では、データ科学や計算科学、ロボットによる自動実験などを駆使して、このような広大な未踏物質空間から所望の特性を有する新物質を予測・発見します。MIという分野に注目が集まるきっかけとなったのは、2011年に米国で始動したマテリアル・ゲノム・イニシアティブという国家事業でした。その後、これに触発されるように欧州・アジア諸国にて、MIを中核に据えたデータ駆動型材料開発プログラムが次々と立ち上がりました。日本では、2015年に始動したJSTイノベーションハブ構築支援事業「情報統合型物質・材料開発イニシアティブ」（MI²I）が旗艦プロジェクトとなり、物質科学、材料工学、計算科学、データ科学などの分野から多彩な研究者が集結し、MIという分野の学術創成に取り組みました。A03班の吉田と桂はMI²Iの中核メンバーでした。当時の研究活動が本領域への参画につながったわけです。

本領域は2019年7月に発足しました。その当時、準結晶研究のMIは完全なブルー・オーシャンでした。そこで、準周期物質群のMI（ハイパーマテリアルズインフォマティクス）の学術基盤を構築すべく、本領域にA03班が設置されました。吉田グループは、機械学習を駆使して準結晶の発見を加速することを図りました。しかしながら、2019年当時、準結晶分野はデータ駆動型研究の未踏の地であったため、体系的な学習データが存在しませんでした。そこで、桂グループは、準結晶や近似結晶の組成、構造、相図、物性に関する情報を網羅的に集めたデータベースを構築しました。この仕事がハイパーマテリアルズインフォマティクス学術創成に向けた出発点となりました。後述するように、吉田グループと桂グループはこのデータを用いて準結晶を形成する化学組成を予測するモデルを構築し、A01班と共同で新規準結晶の発見を実現しました。野澤グループは、表面物理の理論解析を駆使して、準結晶の表面や触媒の研究を推進しました。例えば、Ag-In-Yb準結晶2回表面におけるペンタセンの吸着構造を解析し、ペンタセンが準結晶特有の原子構造に優先的に吸着していることを明らかにしました。また、A04班の亀岡らとの共同研究では、Al-Fe準結晶に微量添加した金属原子の吸着位置や触媒特性を解析しました。竹森グループは、高次元電子構造計算法の開発を推進しました。従来法では不可能であった準結晶のバンド計算を行うために、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

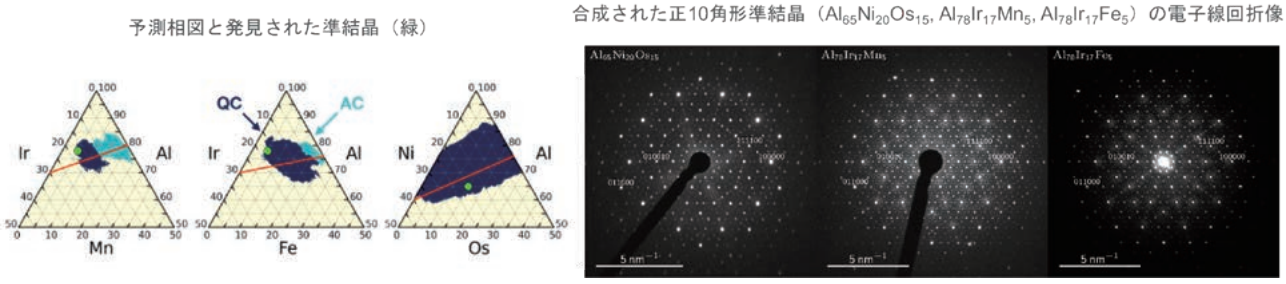


図1　機械学習の予測相図（紺の領域が準結晶相、緑が合成された準結晶）と
合成された準結晶（$Al_{65}Ni_{20}Os_{15}$, $Al_{78}Ir_{17}Mn_5$, $Al_{78}Ir_{17}Fe_5$）の電子線回折像

d 次元断面構造に拡張し、Kohn-Sham 方程式の数値解析手法を開発しました。さらに、3 次元フォトニ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、準結晶におけるフォノンの機構の解明など、多彩な研究を展開してきました。また、竹森は A04 班の酒井と共同で準結晶における超伝導と周期結晶における超伝導を区別する指標を開発しました。公募研究ではハイパーズマテリアルズインフォマティクスの未踏領域を切り拓く野心的なテーマを2件採択しました。永井グループは、機械学習ポテンシャルを用いた分子動力学シミュレーションを駆使して、準結晶・近似結晶における異常高温比熱の起源を解明しました。義永は、フェーズフィールド法を用いてハイパーマテリアルの構造形成解析を推進しました。

ここで、機械学習を用いた準結晶の探索研究を紹介します。1984年にダン・シェヒトマン博士らが最初の準結晶を発見して以来、これまでにおよそ100個の熱的に安定な準結晶が合成されてきました。新しい準結晶の発見は、電子物性の異常、絶縁体的な振る舞い、価数揺らぎ、量子臨界性、超伝導、強磁性などの新しい物理現象の発見をもたらしてきました。一方、物質空間には依然として広大な未踏領域が残されており、研究者らはそこにはいまだ発見されていない半導体準結晶や反強磁性秩序を持つ準結晶が存在していると予想しています。しかしながら、準結晶の形成や安定化のメカニズムがあまり分かっておらず、新物質探索の設計指針の欠如が準結晶研究の進展を著しく阻害しています。そこで A03 班と A01 班の共同研究グループは、機械学習による準結晶発見の加速を図りました。モデルの入力は化学組成、出力はその物質が準結晶を形成するか否かを表すクラスラベルです。吉田グループは、桂グループが収集したこれまでに合成されてきた準結晶、近似結晶、通常の周期結晶の化学組成を学習データとして用い、準結晶か否か判定する分類器を構築しました。その結果、ハイパーマテリアルか通常の周期系かどうかを判定する二値分類タスクにおいて、予測精度が95％以上に達することが分かりました。そこで、このモデルを用いてアルミニウム3元系合金の全組成空間に相当する1,080種類の合金系を網羅的にスクリーニングしました。その結果、185種類の合金系に準結晶相が存在すると予測されました。この中から過去の研究で相図が報告されているものを除外し、最終的に30種類の候補に絞り込みました。そして、最初の試みとして、Al-Ni-Os，Al-Ir-Mn，Al-Ir-Fe を選定し、合成実験を行った結果、全ての系において準結晶相（$Al_{65}Ni_{20}Os_{15}$, $Al_{78}Ir_{17}Mn_5$, $Al_{78}Ir_{17}Fe_5$）が形成されました。これら三つの準結晶はいずれも、長時間のアニーリングプロセスの後に観察されたため、熱力学的に安定な物質と考えられます。また、透過型電子顕微鏡の電子線回折パターンから、三つの物質はいずれも正10回対称の準結晶構造を持つことが明らかになりました。合成された三つの準結晶は、40年に渡る準結晶研究の歴史において、機械学習により発見された初めての物質です。

A01 班の山田らと A03 班の共同チームは、深層学習を利用して粉末 X 線回折パターンに基づく相同定を自動化する手法を開発しました。粉末 X 線回折は結晶性物質の同定や構造解析に欠かせない分析手法です。しかしながら、多相試料の回折パターンは非常に複雑であるため、新規物質相の有無を判定するには熟練研究者の高度な知識と経験が必要となります。この研究では、人工的に作製した多相混合物の回折パターンで深層ニューラルネットワークを学習することで、実際の回折パターンから92% 以上の精度で準結晶の存在を判定することができました。さらに、この分類器を用いて、実際の粉末 X 線構造解析から得られた440個の回折パターンをスクリーニングし、Al-Si-Ru 合金において新たな正20面体準結晶相（$Al_{43}Si_{32}Ru_{25}$ や $Al_{44}Si_{31}Ru_{25}$）を発見しました。Al-Si-Ru 合金系での準結晶の発見の報告は本研究が初めてとなります。

このように、A03 班は領域内外の研究者らとの協働でハイパーマテリアルズインフォマティクスという準結晶研究の新機軸を創生しました。データ駆動型研究のためのオープンデータを創出し、機械学習の実践をデモンストレーションし、電子状態計算などの解析技術を駆使しながら、領域内に知識循環をもたらしました。しかしながら、ハイパーマテリアルズインフォマティクスという分野は依然として萌芽的な段階にあります。本領域で芽生えたシーズや人的ネットワークが領域終了後もさらに発展し続け、世界的な広まりにつながっていかなければ、A03 班の挑戦は成功したとは言えないでしょう。持続的発展のためにいま何をすべきかを考えていく必要があります。

A04 ハイパーマテリアルの物性と hidden order の探索

出口 和彦 名古屋大学 理学研究科 講師

本新学術領域の中で A04 班は「ハイパーマテリアルの物性と hidden order の探索」を担当している。ハイパーマテリアルの物性について極低温から高温に至る、強磁場・高圧下も含めた物性測定を行い、フォノン－フェイゾン物性、超伝導、磁性、量子臨界現象、熱電物性と応用を中心に、ハイパーマテリアルの物性を丹念に調べ、特有の物性について新しい知見を得るための研究を進めた。ハイパーマテリアルに潜む法則性（hidden order）について超伝導・磁気秩序・電子状態等を補空間で記述することに加えて、新たにマルチフラクタル性とハイパーユニフォーム性に着目した研究を進めている。

高温比熱異常とフェイゾン

実空間の原子変位の自由度を反映した通常の弾性（フォノン弾性）の他に、補空間方向の変位の自由度を反映したフェイゾン弾性、またそれら 2 つからなるフォノン－フェイゾン結合弾性が存在する。前者について Al-Cu-Ru 系正 20 面体準結晶について高温比熱測定を行った結果、高温域で Dulong-Petit の値（$3k_B$）から大きくはずれて上昇し、その上昇分が以前に報告された Al-Pd-Mn 系と同程度の大きさであることが示された。同じ補空間構造を有する Al-Pd-Mn 系正 20 面体準結晶と、その一連の近似結晶（2/1, 1/1, 1/0 近似結晶）について系統的な高温比熱測定を行い、高温域における比熱上昇が、1/0、1/1、2/1、準結晶の順で大きくなることが示された。後者のフォノン－フェイゾン結合弾性に関して、Al-Pd-Mn 系・Ag-In-Yb 系正 20 面体準結晶と Al-Ni-Co 系正 10 角形準結晶について単準結晶・一軸圧縮・X 線回折を組み合わせた実験によりフェイゾン歪と結合弾性定数を調べることに成功した。また、A03 班の機械学習分子シミュレーションや A02 班の中性子非弾性散乱実験により高温比熱異常と原子拡散の関係が明らかになりつつあり、フェイゾンの物性の研究が大きく進展したと考えている。

ハイパーマテリアルの超伝導

準結晶の超伝導に関する理論研究が進められ、弱相関領域で現れる準周期系超伝導は、周期系の BCS 超伝導状態とは質的に異なる超伝導状態が発現する場合があることが予言されている。バルクの物理量のだけではなく超伝導秩序変数や超伝導電流の空間分布について調べることにより準周期系超伝導に特徴的な性質が現れる状況について研究が進展した。準周期系におけるトポロジカル超伝導について超流動秩序の空間分布がフラクタル性を示す場合があることやトポロジカル相転移が起こる可能性が理論的に見いだされた。実験でハイパーマテリアルの超伝導の探索を行った結果、Au 系正 20 面体準結晶の近似結晶について多くの超伝導体が発見され、超伝導転移温度 T_C が 1 K を超える物質が出てきた。特に Au-Ge-La 系近似結晶では T_C が 1 K を超えており、超伝導状態を調べることが可能になり、非従来型超伝導と考えられる超伝導が発現している可能性が高いことがわかった。特に大きな進展として、Ta-Te 系ファンデルワールス準結晶（正 12 角形準結晶）の発見が挙げられる。超伝導転移温度が約 1K まで上

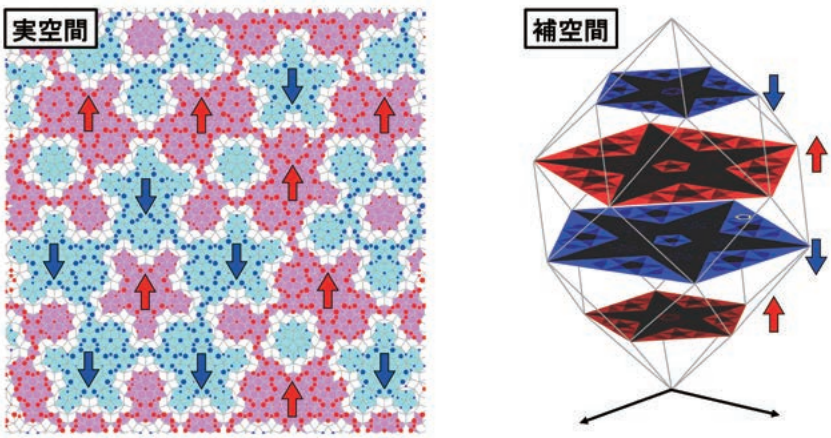


図 1

ペンローズタイル上における磁化分布を実空間と補空間に表示したもの。⬆スピン（赤）と⬇スピン（青）で色分けし、円の大きさは、磁化の大きさを表している。補空間で見るとそれぞれに分かれ、フラクタル構造が見えている。（古賀昌久氏提供）

昇し、正20面体準結晶やその近似結晶以外で初めての超伝導を発現する準結晶である。ツイストグラフェン準結晶の超伝導との関連も含めて今後の研究の発展が期待される。

磁性と量子臨界現象

様々な2次元の準周期タイル（Penrose、Ammann-Beemker、Socolar タイル）を解析し、準周期系特有の磁気秩序を補空間マッピングにより明快に可視化することが可能になった。正20面体準結晶とその近似結晶における局在スピン系の磁性について、理論的に結晶場効果の解析が可能になり、様々な磁気秩序状態が発現する可能性がわかってきた。また、RKKY 相互作用を考慮した古典磁気模型の解析により、平均価電子数を調節することで様々な磁気秩序が現れる Tsai 型近似結晶で観測される多彩な磁気秩序を定性的に説明することに成功した。中性子を用いた弾性散乱の実験から正20面体準結晶とその近似結晶の多様な磁気秩序状態の存在が明らかになり、非弾性散乱の実験から結晶場の解析や磁気励起の観測が可能になった。多極子による分類と群論を用いた磁気構造の解析から予想される物理現象を観測するために Hall 効果を通じたトポロジカル物性の探索やパルス強磁場を用いた新奇物性探索の研究が現在も進められている。電子状態と磁性の関係を調べるために硬 X 線光電子分光による内殻・価電子帯硬 X 線光電子分光を行い、局在スピン成分を担う 4f 電子および磁気的相互作用を媒介する伝導電子の電子状態を調べた。また、準結晶に特徴的な電子状態と考えられているフェルミ面近傍の状態密度の擬ギャップの存在について硬 X 線光電子分光で準結晶・高次の近似結晶を用いた系統的研究も進めた。量子臨界現象を示す Yb 系準結晶・近似結晶について磁性と Yb の価数の関係について調べた結果、Yb 系準結晶・近似結晶の磁性を両者に共通の高次元結晶の格子定数により整理することに成功した。結晶と準結晶という結晶学的には全く異なるカテゴリーに分類される物質群の物性を両者に共通の高次元構造を用いた理解の端緒になると考えている。量子臨界現象については準結晶と結晶の違いが表れている点に注目して研究を進め、超音波を用いて弾性定数を調べる実験ではソフト化について準結晶と近似結晶で明確な違いの観測に成功し、Yb についてメスバウアー効果を調べる実験では圧力依存性で明確な違いが明らかになった。中性子非弾性散乱の実験から準結晶の構造を反映していると考えられるスケールレスな磁気励起が観測され、準結晶特有の量子臨界性を理論的に解明するために、フラクタルなスピン模型を構築し、古典・量子系の両方について調べる研究を進めた。

ハイパーマテリアルの応用

熱電材料への応用に関して、熱電π型発電モジュールを開発するには、p 型と n 型の両方の熱電材料が必要であり、元素置換による Al-Pd-Re 系と Al-Cu-Ru 系正20面体準結晶とその近似結晶をベースとした材料の探索とその高性能化を行った。その結果、今までの Al 基正20面体準結晶とその近似結晶の中で最高の性能を示す熱電材料を見つけ出すことに成功した。触媒材料への応用に関して、正20面体 Al-Pd-Mn 準結晶に関連する高次 Al-Pd-（Ru,Fe）近似結晶はアセチレンの選択的水素化のための合金触媒として有望視されていた。そこで Al-Pd-Ru 系準結晶・近似結晶に着目し、組成及び相の触媒特性への影響を調べた結果、準結晶・近似結晶いずれもアセチレンの選択的水素化に対して活性を示すことが明らかとなった。中でも準結晶は他と比較して活性が高く、準結晶の特異な構造によって活性が生じていることが考えられる。

ハイパーユニフォームとマルチフラクタル

非一様な空間パターンを特徴付けるマルチフラクタル性とハイパーユニフォーム性に着目したハイパーマテリアルの解析がスタートしたのはこの新学術領域が生み出した新たな学術の芽と考えている。マルチフラクタル性は、物理量の空間的変調パターンに見られるフラクタル性を定量化し、ハイパーユニフォーム性は、物理量の値の空間的な密度分布を大域的なスケールに注目して定量化する。補空間に着目して物理量の分布を解析するということから始まった研究から物理空間とその逆空間におけるマルチフラクタル性とハイパーユニフォーム性に着目した物理量の解析に発展しているのは新たな学理構築の一歩のように感じられる。理論を中心としたメンバーで自発的に小研究会を立ち上げて、現在発展しつつあることから、今後特に注目すべき研究課題の一つだと考えている。

ここですべての研究を紹介するのは困難であったため、紹介できなかった研究については過去のニュースレターと領域の web ページを参照していただきたい。

会議・研究会等報告

Twenty-Sixth Congress and General Assembly of the International Union of Crystallography (IUCr-2023)

開催場所：Melbourne Convention & Exhibition Centre, Melbourne, Australia
開催日：2023年8月22日～29日

山田 庸公（東京理科大学）

国際結晶学会議は、3年ごとに開催される国際結晶学連合（IUCr）の最も大規模な総会です。世界中から結晶学に携わる様々な分野の研究者が一堂に会し、基調講演や学術セッション、各種ワークショップなどが開催されます。2023年8月22日～29日に第26回目となる会議がメルボルン（オーストラリア）にて行われました。前回はCovid-19の影響により対面・オンライン方式によるハイブリッド形式でしたので、実に6年ぶりに完全対面方式で開催されました。今回は準結晶に関連する2つのMicrosymposium が企画され、本新学術領域から Farid Labib 氏、鈴木慎太郎氏、室裕司氏、筆者の山田庸公（以上 A01班）、門馬綱一氏、Jens R. Stellhorn 氏（以上 A02班）が講演を行いました。28日夜には、メルボルン博物館にて “Night at the Museum” が開催され、参加者と親睦を深めることができました。

会場近くで撮影した記念写真
（左から Farid Labib 夫妻、Jens R. Stellhorn 氏、田村 隆治 氏、鈴木 慎太郎 氏、筆者）

第5回若手研究会

開催場所：東京理科大学 北海道・長万部キャンパス
開催日：2023年9月6日～8日

橋爪 洋一郎（東京理科大学）

2023年9月6日から9月8日にかけて、第5回 ハイパーマテリアル若手研究会が開催されました。この研究会は若手の育成・交流を主目的として2020年度から実施されてきており、レクチャーと学生を含む若手研究者の研究紹介を行っています。今回のレクチャーでは、理論／技術の両面から近年の発展を紹介していただくことを目的として、3名の先生に講師としてお力添えいただきました。山本勝宏先生（名工大）よりソフトマターにみられるハイパーマテリアルについてのご紹介を、酒井志朗先生（理研）よりマルチフラクタリティとハイパーユニフォーミティについての基礎理論のご紹介を、岩﨑祐昂先生（NIMS）より半導体的なハイパーマテリアルにおける熱電効果についてのご紹介をそれぞれ頂きました。また、若手の研究紹介として9件の口頭発表と2件のポスター発表がなされました。参加者は総勢19名で、2組に分かれてのグループワークも行いました。

長万部キャンパスの前で最終日に撮影した集合写真

第2回領域国際会議

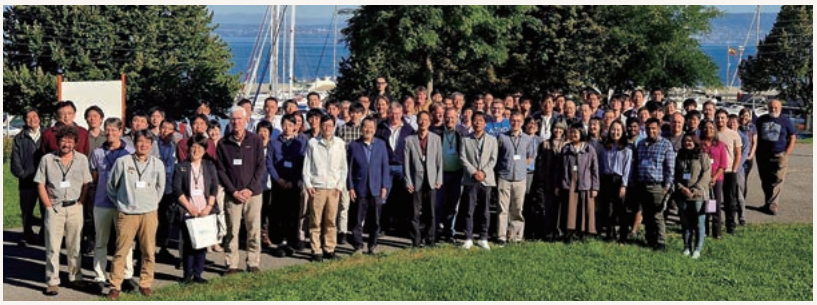
COMPLEX-ORDERS – International conference on complex orders in condensed matter: aperiodic order, local order, electronic order, hidden order

開催場所：VVF Lac Léman Évian-les-Bains, Évian, France

開催日：2023年9月24日～29日

室 裕司（富山県立大学）

第2回領域国際会議を兼ねたInternational conference on complex orders in condensed matter: aperiodic order, local order, electronic order, hidden order が、2023年9月24日から29日にエビアン（フランス）で開催されました。この国際会議は本領域に加えて学術変革領域研究（A）「超秩序構造科学」およびIRN Aperiodic との共同開催で、ハイパーマテリアルだけでなく非周期系、強相関電子系、非晶質系、ガラス系など、多彩なテーマにおける最新の研究成果が報告されました。会議には合計122名が参加し、そのうち日本から81名、また本領域から41人参加しました。口頭発表は62件（うち本領域から17件）で、1日の中で各テーマの発表が満遍なくプログラムされており、異分野交流が活発になるよう配慮されていました。ポスター発表は25日と28日の2日に分けて計48件（うち本領域から17件）の発表があり、こちらでも分野をまたいで活発な議論が行われました。会議の最後にICCOCM Young Scientist Award が発表され、本領域から佐藤壮紀さん（鹿児島大学）と廣木寛太さん（東京理科大学）が受賞しました。おめでとうございます。最後に、本会議を取り仕切っていただいたSIMaPのMarc de Boissieu 先生と運営委員の皆様には、この場を借りて深く感謝申し上げます。



国際会議 ICCOCM の集合写真

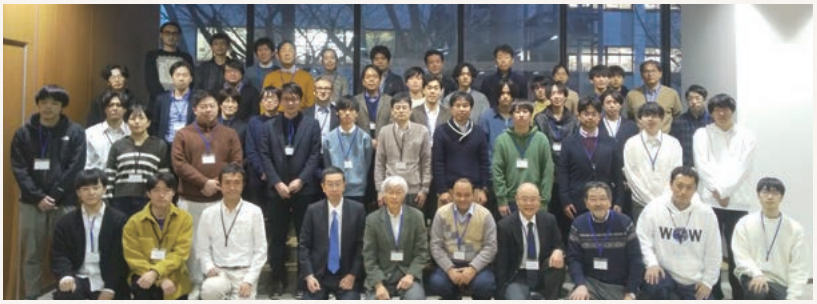
第28回準結晶研究会

開催場所：北海道大学 工学部 フロンティア応用科学研究棟2F セミナー室

開催日：2023年12月18日～20日

髙倉 洋礼（北海道大学）

第28回準結晶研究会が2023年12月18日～20日に北海道大学工学部フロンティア応用科学研究棟2F セミナー室にて開催されました。今回も多くの若手研究者（39歳以下）や学生の方々が発表され、その中でも特に優秀な発表をされた3名に「第4回蔡安邦賞」が授与されました。受賞者は、若手研究者の部で、岩崎祐昂氏（NIMS）、学生の部で、堀眞弘氏（東京理科大学）と松原虎之介氏（東京工業大学）です。また招待講演として、豊田理化学研究所の松下裕秀先生より「ブロック共重合体が織る超常周期・準周期構造」の題目で、またリバプール大学のHem Raj Sharma 先生からは「Surface and thin film studies of quasicrystals and related approximants」の題目で、それぞれご講演いただきました。総勢52名にご参加いただき、活発な議論と情報交換の機会となりました。



総勢52名に参加いただき、活発な議論と情報交換の機会となりました。

2023 年度下半期 活動記録

受賞

第78回 日本物理学会年次大会 学生優秀発表賞（領域9）を受賞しました。

受賞者： **李 旭**
名古屋大学 工学研究科 エネルギー理工学専攻
博士後期課程 2 年

指導教官： **柚原 淳司（公募班 A01）**
名古屋大学 工学研究科 准教授

受賞題目： Pt（111）基板上の X-Ti-O（X=Ce,Ti）準結晶関連構造超薄膜の創製と構造評価

受賞日： 2023年9月17日

ICCOCM Young Scientist Award を受賞しました。

受賞者： **佐藤 壮紀**
鹿児島大学 理工学研究科 総合理工学専攻
博士後期課程2年

指導教官： **野澤 和生（計画班 A03）**
鹿児島大学 理工学研究科 准教授

受賞題目： Adsorption structures of Pentacene on the fivefold surface of the Tsai-type Ag-In-Yb quasicrystal

受賞日： 2023年9月27日

ICCOCM Young Scientist Award を受賞しました。

受賞者： **廣木 寛太**
東京理科大学 先進工学研究科 物理工学専攻
修士課程 1 年

指導教官： **山田 庸公（計画班 A01）**
東京理科大学 先進工学部 講師

受賞題目： A phase identification technique using deep learning

受賞日： 2023年9月27日

東京都功労者 技術振興功労を受賞しました。

受賞者： **田村 隆治（計画班 A01）**
東京理科大学 先進工学部 教授

受賞題目： 革新的金属材料の開拓と新学術創成

受賞日： 2023年10月2日

第17回 物性科学領域横断研究会 最優秀若手奨励賞を受賞しました。

受賞者： **福嶋 拓海**
東京大学 理学系研究科 物理学専攻 修士課程 1 年

指導教官： **竹森 那由多（計画班 A03）**
大阪大学 量子情報・量子生命研究センター 准教授

受賞題目： 準結晶超伝導体における超伝導電流分布

受賞日： 2023年11月24日

2023年 日本表面真空学会 学術講演会 講演奨励賞を受賞しました。

受賞者： **李 旭**
名古屋大学 工学研究科エネルギー理工学専攻
博士後期課程 2 年

指導教官： **柚原 淳司（公募班 A01）**
名古屋大学 工学研究科 准教授

受賞題目： Growth of oxide quasicrystal-related structures of ultrathin Ce-Ti-O films on Pt（111）

受賞日： 2023年12月2日

第4回 蔡安邦賞（若手研究者の部）を受賞しました。

受賞者： **岩﨑 祐昂（計画班 A01班）**
物質・材料研究機構 ナノアーキテクトニクス材料研究センター 研究員

受賞題目： 半導体近似結晶の欠陥制御による zT>0.4の実現

受賞日： 2023年12月20日

第4回 蔡安邦賞（学生の部）を受賞しました。

受賞者： **堀 眞弘**
東京理科大学 理学研究科 応用物理学専攻
博士後期課程2年

指導教官： **遠山 貴巳**
東京理科大学 先進工学部 教授

受賞題目： 乱れのある準周期ボーズハバード模型におけるマルチフラクタル特性とハイパーユニフォーム特性

受賞日： 2023年12月20日

第4回 蔡安邦賞（学生の部）を受賞しました。

受賞者： **松原 虎之介**
東京工業大学 理学院 物理学系 修士課程2年

指導教官： **古賀 昌久（計画班 A04班）**
東京工業大学 理学院 物理学系 准教授

受賞題目： 準結晶と不整合変調構造を繋ぐ近似準結晶

受賞日： 2023年12月20日

開催セミナー・イベント

第32回 ハイパーマテリアル・セミナー

開催日： 2023年11月15日
開催方法： Zoom によるビデオ会議
講演題目： 準結晶におけるトポロジカル超伝導
講師： 堀 眞弘 氏（東京理科大学 博士後期課程2年）

第17回 物性科学領域横断研究会

開催日： 2023年11月24日～25日
開催場所： 名古屋工業大学
目的： 物性科学に関連した14件の新学術領域研究、学術変革領域研究（A）および学術変革領域研究（B）が合同で開催する研究会。各領域の研究内容を専門外の研究者や大学院学生に対し解説し、領域間のシナジー効果を高めるとともに、物性科学のホットな話題を2日間で概観することを目的とする。

第33回 ハイパーマテリアルセミナー

開催日： 2023年11月30日
開催方法： Zoom によるビデオ会議
講演題目： 準結晶超伝導体における超伝導電流分布
講師： 福嶋 拓海 氏（東京大学 修士課程１年）

第34回 ハイパーマテリアルセミナー

開催日： 2023年12月5日
開催場所： 東京理科大学 葛飾キャンパス
講演題目： Aperiodic Crystals: atomic structure and dynamics
講師： Marc de Boissieu 氏
（Université Grenoble Alpes, CNRS, Grenoble INP, SIMaP, Grenoble France Emeritus, Researcher）

第28回 準結晶研究会

開催日： 2023年12月18日～20日
開催場所： 北海道大学
目的： 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する。

第35回 ハイパーマテリアルセミナー

開催日： 2023年12月22日
開催場所： 東京理科大学 葛飾キャンパス
講演題目： Quasicrystalline thin films of single elements and molecules
講師： Hem Raj Sharma 氏（リバプール大学 上級講師）

第２回 理論研究会「準周期電子状態とマルチフラクタリティ・ハイパーユニフォーミティ」

日時： 2024年1月16日（火）～1月18日（木）
場所： 盛岡・網張温泉
目的： 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する。

第36回 ハイパーマテリアルセミナー

開催日： 2024年2月21日
開催場所： 大阪大学
講演題目： Exotic magnetism in quasicrystals
講師： Junmo Jeon 氏
（KAIST Ph.D. candidate / 6th grade）

第37回 ハイパーマテリアルセミナー

開催日： 2024年2月26日
開催方法： Zoom によるビデオ会議
講演題目： 強相関 Tsai 型近似結晶の先端電子分光
講師： 野末 悟郎 氏（大阪大学 博士後期課程2年）

第38回 ハイパーマテリアルセミナー

開催日： 2024年2月29日
開催方法： Zoom によるビデオ会議
講演題目： ヘテロ積層系への誘い：超伝導相への拡張に向けて
講師： 吉井 真央（東京大学 博士課程2年）

第11回 領域会議

開催日： 2024年 3月5日～7日
開催場所： 東京理科大学 葛飾キャンパス
目的： 全ての計画班と公募班の研究代表者と研究分担者が新学術領域に関する研究の現状を発表することで、領域内の交流を促進することを目的とする。

今後の予定

2024 年 The 11th International Conference on Aperiodic Crystals

開催日：6月24日～28日
開催場所：カーン（フランス）
目的：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する。

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.8**

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：2024年3月8日