

領域略称名：ハイパー物質
領域番号：6106

令和6年度科学研究費助成事業
「新学術領域研究（研究領域提案型）」
に係る研究成果報告書（研究領域）兼
事後評価報告書

「ハイパーマテリアル：補空間が創る新物質科学」

領域設定期間

令和元年度～令和5年度

令和6年6月

領域代表者 東京理科大学・先進工学部・教授・田村 隆治

目 次

研究組織

1 総括班・総括班以外の計画研究	2
2 公募研究	3

研究領域全体に係る事項

3 交付決定額	7
4 研究領域の目的及び概要	8
5 審査結果の所見及び中間評価結果の所見で指摘を受けた事項への対応状況	10
6 研究目的の達成度及び主な成果	12
7 研究発表の状況	17
8 研究組織の連携体制	22
9 研究費の使用状況	23
10 当該学問分野及び関連学問分野への貢献の状況	25
11 若手研究者の育成に関する取組実績	26
12 総括班評価者による評価	27

研究組織

(令和6年3月末現在。ただし完了した研究課題は完了時現在、補助事業廃止の研究課題は廃止時現在。)

1 総括班・総括班以外の計画研究

研究項目[1]	課題番号 研究課題名	研究期間	研究代表者 氏名	所属研究機関・部局・職	人数 [2]
X00 総	19H05817 ハイパーマテリアル：補空間が創 る新物質科学	令和元年度 ～ 令和5年度	田村隆治	東京理科大学 先進工学部 マテリアル創成工学科 教 授	7
A01 計	19H05818 ハイパーマテリアルの合成	令和元年度 ～ 令和5年度	田村隆治	東京理科大学 先進工学部 マテリアル創成工学科 教 授	5
A02 計	19H05819 ハイパーマテリアルの構造	令和元年度 ～ 令和5年度	高倉 洋礼	北海道大学工学研究院 応 用物理学部門 凝縮系物理 工学分野 准教授	6
A03 計	19H05820 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	令和元年度 ～ 令和5年度	吉田 亮	統計数理研究所 データ科 学研究系 教授	4
A04 計	19H05821 ハイパーマテリアルの物性と hidden order の探索	令和元年度 ～ 令和5年度	出口 和彦	名古屋大学大学院理学研究 科 物理学第一 講師	6
計		令和元年度 ～ 令和5年度			
計		令和元年度 ～ 令和5年度			
計		令和元年度 ～ 令和5年度			
計		令和元年度 ～ 令和5年度			
計		令和元年度 ～ 令和5年度			
総括班・総括班以外の計画研究 計 5 件（廃止を含む）					

[1] 総：総括班、国：国際活動支援班、計：総括班以外の計画研究、公：公募研究

[2] 研究代表者及び研究分担者の人数（辞退又は削除した者を除く。）

2 公募研究

研究項目[1]	課題番号 研究課題名	研究期間	研究代表者 氏名	所属研究機関・部局・職	人数 [2]
A01 公	20H05264 2次元ファンデルワールスハイパーマテリアルの創出と電荷輸送・光物性開拓	令和2年度 ～ 令和3年度	井手上 敏也	東京大学 大学院工学系研究科 附属量子相エレクトロニクス研究センター 助教	1
A01 公	20H05267 金属酸化物準結晶薄膜の創製と構造解明	令和2年度 ～ 令和3年度	柚原 淳司	名古屋大学 大学院工学研究科 エネルギー理工学専攻 エネルギー流体工学 准教授	1
A01 公	20H05269 ブロック共重合体の球状マイクロ相分離構造における準結晶および近似結晶の発現機構	令和2年度 ～ 令和3年度	山本 勝宏	名古屋工業大学大学院工学研究科 生命・応用化学専攻 生命・応用化学科 ソフトマテリアル分野 准教授	1
A01 公	20H05276 高圧急冷法を用いた酸化物系ハイパーマテリアルの探索	令和2年度 ～ 令和3年度	山浦 一成	国立研究開発法人物質・材料研究機構 国際ナノアーキテクトニクス材料研究センターグループリーダー	1
A02 公	20H05258 整合・不整合多重周期をもつ第13族元素ハイパーマテリアルの構造秩序	令和2年度 ～ 令和3年度	湯蓋 邦夫	九州大学 工学研究院 エネルギー量子工学部門 学術研究員	1
A02 公	20H05272 ソフト準結晶の形成機構の理論研究	令和2年度 ～ 令和3年度	松本 正和	岡山大学 異分野基礎科学研究所 准教授	1
A02 公	20H05273 Direct local structure determination of quasicrystals in physical space	令和2年度 ～ 令和3年度	Stellhorn Jens	広島大学大学院先進理工系科学研究科 助教	1
A02 公	20H05277 幾何学的位相解析による フェイゾンイメージング	令和2年度 ～ 令和3年度	吉澤 俊介	国立研究開発法人物質・材料研究機構先端材料解析研究拠点 極限計測分野 ナノプローブグループ 主任研究員	1
A03 公	20H05259 フェイズフィールドクリスタル法による準結晶の構造形成解析と目的構造のモデル推定	令和2年度 ～ 令和3年度	義永 那津人	東北大学 材料科学高等研究所 准教授	1
A03 公	20H05278 準結晶における機械学習分子シミュレーション手法の確立とその有限温度物性の解明	令和2年度 ～ 令和3年度	永井 佑紀	国立研究開発法人日本原子力研究開発機構 システム計算科学センター シミュレーション技術開発室 副主任研究員	1
A04 公	20H05260 ナノカーボン合成反応を利用し	令和2年度 ～	亀岡 聡	東北大学 多元物質科学研究所 教授	1

	た ハイパー物質表面の状態解析と 新奇触媒機能創出	令和3年度			
A04 公	20H05261 近似結晶を舞台とするトポロジカル電子物性の創出	令和2年度 ～ 令和3年度	那波 和宏	東北大学 多元物質科学研究所 無機材料研究部門 スピン量子物性研究分野 助教	1
A04 公	20H05262 クラスター多極子法による準結晶の磁気構造と物性現象の研究	令和2年度 ～ 令和3年度	鈴木 通人	東北大学 金属材料研究所 計算材料学センター 准教授	1
A04 公	20H05265 準結晶系における高次高調波発生と光誘起ダイナミクスの理論研究	令和2年度 ～ 令和3年度	村上 雄太	東京工業大学 理学院 物理学系 助教	1
A04 公	20H05266 ハイパーボリックスマター	令和2年度 ～ 令和3年度	大熊 哲	東京工業大学 理学院 物理学系 教授	1
A04 公	20H05270 (途中終了) 非エルミート・ハイパーマテリアルの理論	令和2年度 ～ 令和3年度	手塚 真樹	京都大学大学院 理学研究科物理学・宇宙物理学専攻 物理学第一教室 助教	1
A04 公	20H05271 強相関準・近似結晶の偏光制御光電子分光による電子物性における軌道対称性の役割	令和2年度 ～ 令和3年度	関山 明	大阪大学 基礎工学研究科 物質創成専攻 教授	1
A04 公	20H05274 ハイパーマテリアルで実現する新奇な量子スピン相を探索する理論的・計算科学的研究	令和2年度 ～ 令和3年度	坂井 徹	兵庫県立大学 理学部 物質科学科 教授	1
A04 公	20H05279 準結晶におけるフラクタル金属・超伝導の理論研究	令和2年度 ～ 令和3年度	酒井 志朗	国立研究開発法人理化学研究所 創発物性科学研究センター 上級研究員	1
A04 公	20H05280 ミスフィット層状カルコゲナイドにおける高次元電子状態の実空間分光	令和2年度 ～ 令和3年度	幸坂 祐生	国立研究開発法人理化学研究所 創発物性科学研究センター 上級研究員	1
A01 公	22H04583 (採択後辞退) 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	令和4年度 ～ 令和5年度	友利 ひかり	筑波大学 数理物質系 助教	1
A01 公	22H04584 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	令和4年度 ～ 令和5年度	井手上 敏也	東京大学 物性研究所 凝縮系物性研究部門 准教授	1
A01 公	22H04588 希土類酸化物ハイパーマテリアルの創製と機能開拓	令和4年度 ～ 令和5年度	柚原 淳司	名古屋大学大学院工学研究科 エネルギー理工学専攻 エネルギー流体工学 准教授	1

A01 公	22H04592 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	令和4年度 ～ 令和5年度	山本 勝宏	名古屋工業大学大学院工学研究科 生命・応用化学専攻 ソフトマテリアル分野 准教授	1
A01 公	22H04600 非磁性 Tsai 型ハイパーマテリアルの探索	令和4年度 ～ 令和5年度	鈴木 慎太郎	青山学院大学 理工学部 物理科学科 助教	1
A01 公	22H04601 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	令和4年度 ～ 令和5年度	山浦 一成	国立研究開発法人物質・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 グループリーダー	1
A02 公	22H04590 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	令和4年度 ～ 令和5年度	齋藤 晃	名古屋大学 未来材料・システム研究所 附属高度計測技術実践センター 電子顕微鏡計測部 教授	1
A02 公	22H04595 Advanced direct local structure determination of quasicrystals in physical space	令和4年度 ～ 令和5年度	Stellhorn Jens	京都大学 研究員	1
A03 公	22H04602 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	令和4年度 ～ 令和5年度	永井 佑紀	東京大学 情報基盤センター 学際情報科学研究部門 准教授	1
A04 公	22H04580 非整合チムニーラダー型化合物のフェイゾン歪とフォノン物性	令和4年度 ～ 令和5年度	宮崎 讓	東北大学大学院工学研究科 応用物理学専攻 応用材料物理学講座 教授	1
A04 公	22H04581 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	令和4年度 ～ 令和5年度	亀岡 聡	東北大学 多元物質科学研究所 無機材料研究部門 金属機能設計研究分野 教授	1
A04 公	22H04582 近似結晶・準結晶における磁気ダイナミクス	令和4年度 ～ 令和5年度	那波 和宏	東北大学多元物質科学研究所 無機材料研究部門 スピン量子物性研究分野 准教授	1
A04 公	22H04585 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	令和4年度 ～ 令和5年度	三宅 厚志	東北大学 金属材料研究所 材料プロセス・評価研究部 アクチノイド物質科学研究部門 准教授	1
A04 公	22H04586 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	令和4年度 ～ 令和5年度	根本 祐一	新潟大学 自然科学系 准教授	1
A04 公	22H04591 価数揺動ハイパーマテリアルの量子臨界現象	令和4年度 ～ 令和5年度	井村 敬一郎	名古屋大学教養教育院 講師	1

A04 公	22H04594 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	令和4年度 ～ 令和5年度	関山 明	大阪大学大学院基礎工学研 究科 物質創成専攻 教授	1
A04 公	22H04597 希土類系ハイパーマテリアルの結 晶場と磁性の理論	令和4年度 ～ 令和5年度	渡辺 真仁	九州工業大学 大学院工学 研究院 教授	1
A04 公	22H04599 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	令和4年度 ～ 令和5年度	小林 寿夫	兵庫県立大学 理学研究科 教授	1
A04 公	22H04603 準結晶における相関した金属状態 の研究	令和4年度 ～ 令和5年度	酒井 志朗	国立研究開発法人理化学研 究所 創発物性科学研究セ ンター 上級研究員	1
公募研究 計 39 件 (廃止を含む)					

[1] 総：総括班、国：国際活動支援班、計：総括班以外の計画研究、公：公募研究

[2] 研究代表者及び研究分担者の人数（辞退又は削除した者を除く。）

研究領域全体に係る事項

3 交付決定額

年度	合計	直接経費	間接経費
令和元年度	310,050 千円	238,500 千円	71,550 千円
令和2年度	221,650 千円	170,500 千円	51,150 千円
令和3年度	175,240 千円	134,800 千円	40,440 千円
令和4年度	159,380 千円	122,600 千円	36,780 千円
令和5年度	161,460 千円	124,200 千円	37,260 千円
合計	1,027,780 千円	790,600 千円	237,180 千円

4 研究領域の目的及び概要

研究領域全体を通じ、本研究領域の研究目的及び全体構想について、応募時の領域計画書を基に、具体的かつ簡潔に2頁以内で記述すること。なお、記述に当たっては、どのような点が「革新的・創造的な学術研究の発展が期待される研究領域」であるか、研究の学術的背景や領域設定期間終了後に期待される成果等を明確にすること。

本研究領域の研究目的と全体構想を以下に述べる。

【本研究領域の提案に至った学術的背景】

科学の目的は、自然界に潜む隠れた法則性を見出し、その法則性を取り込む新たなパラダイムを構築することである。1984年のShechtmanらによるAl-Mn系準結晶の発見以降、応募時までには100を超える合金系で準結晶が見出された。特に、高分子、コロイド、メソ多孔体シリカなど、合金を超えた多様な物質系で準結晶の存在が発見され、準結晶が物質界の普遍的な秩序形態の一つであることが確立した。準結晶の発見はまず結晶学にパラダイムシフトをもたらし、1992年に国際結晶学連合は、人類が何百年にもわたって慣れ親しんできた「周期性」の概念を結晶の定義から消し去り、準結晶を取り込むために、「ブラッグ回折を示す全ての物質」に結晶の定義を拡張したことは周知の事実である。しかしながら、準結晶の発見が人類に突き付けた根源的な問いは、結晶の定義変更で解決されるものでなく、今や、「周期性」に根差した既存の学問体系が揺らいでいる。言い換えると、**新たな学術領域を創造するフェーズ**に入っており、これが本研究領域の提案に至った直接の学術的背景である。

準結晶は正10回対称性や正20面体対称性など、「周期性」と相容れない幾何学的対称性を有するため、3次元空間では周期性を持ち得ない。しかし、高次元の周期結晶として捉えることができ、3次元準結晶は6次元周期結晶の3次元断面構造として記述することができる。従って、6次元空間の単位胞構造を決めることにより準結晶構造が決定される。準結晶発見後の高次元断面法と結晶学の「第一の学融合」が準結晶の構造解析を可能にし、2007年に高倉(A02班)らは、カドミウム-イッテルビウム($Cd_{57}Yb$)準結晶において、世界で初めて正20面体準結晶の構造決定に成功した(図1)。しかしながら、高次元空間を用いるメリットは原子位置に限るものでなく、3次元空間で周期性を持たないあらゆる秩序(原子ダイナミクス、磁気秩序、電子状態など)に威力を発揮するものであり、この**創造的な視点**が本領域の提案に直結している。



図1. 準結晶の3次元構造とX線回折像

【本研究領域の研究目的】



図2. 本領域の研究目的

本研究領域は準結晶の有する高次元性に着目し、準結晶のみならず、その兄弟物質である近似結晶をも含めて、高次元空間(ハイパースペース)で統一的に記述される物質群を「ハイパーマテリアル」と定義し、これらの物質群を対象とした**俯瞰的・包括的・革新的な学術体系の構築**を目指すものである(図2)。一般に、物質の性質は、電子やフォノン、スピンなどの空間的な分布(パターン)と密接に関係するため、周期性を持たないパターンを高次元で可視化することは、ハイパーマテリアルの構造・物性を記述・理解する上での基盤をなすものと考えられる。我が国は高倉(A02班)らをはじめ高次元構造解析において世界をリードしてきた。本領域は、この強みを最大限に活かし、原子位置のみならず準周期秩序一般を高次元空間で理解することで、**創造的で革新的な学術体系の構築**を目指すものである。

一方、新学理創成の駆動力をなす新物質創製に関しては、2000年の蔡らによる二元系 $\text{Cd}_{5.7}\text{Yb}$ 準結晶の発見以降、この $\text{Cd}_{5.7}\text{Yb}$ プロトタイプ準結晶に元素置換を施すことで様々な準結晶や近似結晶が次々と生み出された。この結果、高次元性(補空間自由度)に由来する特異な規則—不規則相転移や動的柔軟性、準結晶における非従来型量子臨界現象、準結晶における初の超伝導、近似結晶における初の磁気秩序や半導体など、従来の物質科学に無い多彩な現象や物質が次々に明らかにされ、その趨勢は留まることを知らない。このように、ハイパーマテリアルの様々な物性が明らかにされる一方で、その理論的枠組の構築は大きく立ち遅れている。その最たる理由は、準結晶には周期性がなく、Blochの定理に基づく既存の理論体系では太刀打ちできないためである。この状況を踏まえて、ハイパーマテリアルの新物質と新現象の発見を牽引してきた我が国が、その勢いを背に、異分野の専門家を広く取り込む“場”を実現することで新たな学融合を創出し、実空間の複雑な原子・電子・スピンの振舞いを高次元で記述・理解し、そこに潜む普遍性を明らかにするという、世界的にも類を見ない研究領域を創造することを目的とした。

この新たな研究領域の構築にあたり、本領域では以下に述べる二つの具体的目標を設定した。一つ目は、ハイパーマテリアル分野に世界で初めて**データ科学**を適用し機械学習予測に基づく新規ハイパーマテリアル合成も取り入れて、磁性準結晶・半導体準結晶・超伝導準結晶・量子臨界準結晶・異常高温比熱などを実現し、高次元性・準周期性・高対称性と密接に関連する物性を明らかにする。二つ目は、実空間では複雑怪奇なハイパーマテリアルの原子的構造やそのダイナミクス・磁気秩序・電子状態等を補空間で記述・理解し、そこに潜む規則性や法則性を見出す。この二つの目標のもと、特に次の三つの項目を重点的に推進する。(1)データ科学を駆使してハイパーマテリアルの形成条件と相安定性機構を明らかにするとともに新物質創製プロセスの加速を図る。(2)強相関係をはじめ異分野の視点を取り込んで、共働して、ハイパーマテリアルの物理を記述するための学術資源や学術基盤を創成する。(3)本領域が目指す物質観のパラダイムシフトを牽引する国際的リーダーとなる若手研究者を育成する。

【対象とする学問分野】

本領域は、二つの「**学融合**」を強く意識して構築されている。一つは、準結晶分野と強相関分野の学融合である。従来、準結晶研究者と強相関関係研究者の間には埋め難いギャップが存在していたが、出口(A04)らによる準周期量子臨界現象の発見を契機として初めて両者が合流した。本領域では、両者の融合研究により、実験・理論の両面から準結晶の強相関物性を解明し、また、高次元空間で理解する。もう一つは、準結晶分野とデータ科学分野の学融合である。準結晶が発見されて40年近く、準結晶になる物質・近似結晶になる物質・どちらにもならない物質の夥しい数のデータが文献や個々の研究室に眠っている。本領域は全てのデータを集約してデータベース化し、ハイパーマテリアル形成組成の予測や相安定性に関する記述子の探索に世界で初めて挑戦する。この第二の学融合により、ハイパーマテリアルの相安定性の隠れた規則を明らかにし、その設計指針を得る。これにより新物質の合成ペースを大幅に加速させる。

【領域設定期間終了後に期待される成果】

本領域は、実空間では一見複雑怪奇なハイパーマテリアルの構造・磁気秩序・電子状態等を「補空間」を用いて記述・理解することを試みる。期待される成果として、(1)実空間における複雑な秩序や振舞いの背後に隠れた規則性や法則性が明らかにされ、その法則性を記述・説明するための**新たな学理と学術基盤が創造される**。この新たな学理は、実空間あるいは波数空間で構築されてきたこれまでの固体物理学と一線を画し、高次元(あるいは補空間)における物質科学として我々の物質観にパラダイムシフトを引き起こし得るものである。加えて、本領域のもう一つの主要な柱である新物質探索においては、(2)磁性準結晶・半導体準結晶・超伝導準結晶・酸化物準結晶など、これまで存在しなかった物質が創製される。これまで一部の金属に限定されてきたハイパーマテリアルが、様々な物質系、すなわち、半導体・セラミックス・ポリマー分野へと拡大し、それぞれの分野が対象とする物質群が質的に拡張される。また、(3)「ハイパーマテリアル」概念の普及により、「周期」物質だけを対象とする限りは思いもよらない補空間(高次元)に、研究者の目を向けることの学術的および社会的意義は大きい。例えば、データ科学との学融合により、なぜある物質が「結晶」になるのかという、周期結晶ありきの物質科学では決して問われることのない問いが提起されること自体、**我々の物質観の革新的な進歩である**。このように、ハイパーマテリアル(hypermaterials)の概念は、我が国が世界に発信する既存の周期結晶をも含む次元を超えた物質概念であり、本領域終了後に、準結晶の発見に次いで、我々の物質観に二度目のパラダイムシフトを引き起こし得るものであり、ここに、**本領域の創造性と革新性がある**。

5 審査結果の所見及び中間評価結果の所見で指摘を受けた事項への対応状況

研究領域全体を通じ、審査結果の所見及び中間評価結果の所見において指摘を受けた事項があった場合には、当該指摘及びその対応状況等について、具体的かつ簡潔に2頁以内で記述すること。

(審査結果の所見において指摘を受けた事項への対応状況)

データサイエンスの活用による記述子の発見や新規の材料合成は必ずしも容易ではなく、特に実績の少ない非金属系に拡張する場合、材料固有の問題への取組が必要となることも想定されるため、構造解析、物性解析、予測の各計画研究間の連携やサイクルが適切に回るよう、更なる工夫が望まれる。

【データサイエンスの活用による記述子の発見や新規の材料合成が容易でないことへの対応】

本指摘を本領域の最重要課題に据えて、A03 班と A01 班が一体となって、ハイパーマテリアルの組成を予測する機械学習モデルの開発に集中的に取り組んだ。既報告の準結晶・近似結晶・周期結晶の膨大な化学組成を学習データとして組成予測モデルを開発し、予測性能の包括的な検証実験を実施した。その効果があって、領域の前半で、ハイパーマテリアルの予測精度 76%、結晶の予測精度 90%の実現に成功した(Liu *et al.*, Adv. Mater. (2021))。記述子の探索に関しては、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解析し、ハイパーマテリアルの相形成に関する法則を突き止めることに成功した。この法則は、ファンデルワールス半径や電気陰性度等に関する5つの単純な数式で表される。新規の材料合成に関しては、ハイパーマテリアルの候補組成で実際に物質合成を行い、幾つもの準結晶の発見に成功した。本領域発足以前は準結晶研究におけるデータ科学の活用は皆無であったが、データ駆動型アプローチがハイパーマテリアルの発見と形成ルールの解明に有効な手段となりうることが立証された。

【データサイエンスを実績の少ない非金属系に拡張することへの対応】

総括班で検討し、実績の少ないセラミックス系とポリマー系については、公募班と連携して、合成実験に注力することとした。一方半導体系に関しては、上記の学習モデルの検証を行い、学習データに含まれていない既報告の Al-Ru-Si 系半導体近似結晶が正しく半導体として予測されていること、従って、半導体ハイパーマテリアル予測が原理的に可能であることを見出した。ハイパーマテリアルは一般に電気伝導率(σ)が小さく、半導体的な物質まで存在することから、上記の学習モデルに σ の温度依存性を学習させ、 σ の大きい物質から小さい物質を経て半導体へと連続的に繋げることで外挿性を有する学習モデルの構築を図った。また、領域後半には、Al-Ru-Si 系半導体近似結晶の組成で急冷すると準結晶が得られること、また、準安定強磁性準結晶が多元素により安定化することが見い出されたことから、半導体候補の準安定準結晶を安定化する第4、5添加元素を予測するモデルの構築を行った。さらに、外挿領域への予測を可能にするメタ学習という機械学習の方法論の構築も行った。本領域ではこれら三つの機械学習モデルを完成し、半導体準結晶を探索するための学術基盤を整えた。

【構造解析、物性解析、予測の各計画研究間の連携やサイクルが適切に回るための取組】

研究面から領域内の連携サイクルを抜本的に加速させるために、A01 班と A03 班が連携して、多相の粉末 X 線回折図形からハイパーマテリアルを同定する機械学習モデルを開発し、実際にこのモデルを用いて新規準結晶の発見にも成功した(Uryu *et al.*, Adv. Sci. (2024))。このモデルにより、熟練者でも見落としがちな、混相試料に含まれる微量なハイパーマテリアルの存在検証が迅速かつ簡便に行えるようになり、物質合成・評価のサイクルに大きく貢献した。一方、運営面では、A01 合成 - A02 構造解析 - A04 物性解析間の連携サイクルの円滑な推進のために、班内・班間留学システム(のべ 33 名)、研究者循環システム(のべ 160 名)の積極的活用による連携の実質化を図った。また、領域全メンバーへのサイトビジット(計 2 回、のべ 82 名)による連携の企画・促進を実施した。これらの取組により、領域内に 141 件の共同研究が立ち上がり、そのうち 94 件が論文出版に至った。連携促進の更なるてこ入れとして、本領域予算により導入した全ての大型装置(計 16 件)の詳細情報・測定依頼方法を領域ホームページで公開し(<https://www.rs.tus.ac.jp/hypermaterials/kankeisyu/index.html#equipment>)、共用の実質化を図った。以上の取組に加えて、2019 年末からの COVID-19 への対応として、研究補助員を 4 名増員し、人が移動しなくとも領域内の依頼測定に常時対応できる体制を敷き、連携・共用の実質化を図ったことも取組の一つに挙げる。この取組では、総括班予算より依頼試料作製のための消耗品費を補助し、連携の促進を後押しした。特に、研究補助員が試料合成を請け負うことで、一部の研究者に負担が集中しないように配慮した。これらの取組の効果として、サンプル作製・測定の受注は 1300 件以上に及び、各計画研究間の連携の推進に大きく貢献するとともに、また、本サイクルを円滑に回す上でも大いに成果が挙げられた。

合金や酸化物のハイパー材料を中心に成果が上がっているが、異分野との積極的な融合によりソフト材料を含めた材料系へも展開し、新規物性の発現など、卓越した成果発表につながることを期待したい。

まず異分野との融合については、ハイパー材料アールセミナー（計 38 回）、準結晶研究会（計 5 回）、若手研究会（計 5 回）を「学融合の場」として積極的に位置付け、分野融合の実質化を図った。また、二回の公募では、募集要項を通じて非金属系ハイパー材料の合成テーマを広く募った。その効果もあって、A01 山本より優れた研究提案がなされ、二期連続で高分子ハイパー材料の研究が牽引された。その結果、ソフト材料準結晶の形成が特定の高分子によるものでなく、高分子の種類によらないという普遍性が明らかにされた。その他の非合金系に関しても、A01 井手上より優れた提案がなされ、2次元結晶を組み合わせた準周期界面において、特異な光起電力効果 (Akamatsu *et al.* Science (2021))、及び、円偏向光起電力効果 (Duan *et al.* Nat. Nanotechnol. (2023)) が相次いで発見された。さらに、A04 枝川らにより、全くの未踏領域であるファンデルワールス系準結晶が開拓され、Ta-Te 系準結晶において超伝導転移 ($T_c = 1$ K) が発見されたことは特筆すべき成果である (Tokumoto *et al.* Nat. Commun. (2024))。また、このファンデルワールス系準結晶の臨界磁場の振る舞いが従来の超伝導相と決定的に異なることも見出された (Terashima *et al.*, arXiv:2401.0209 (2024))。この成果は、安定準結晶における初の超伝導であるばかりでなく、二次元準結晶における初の超伝導でもあり、世界的に大きな注目を集めている。

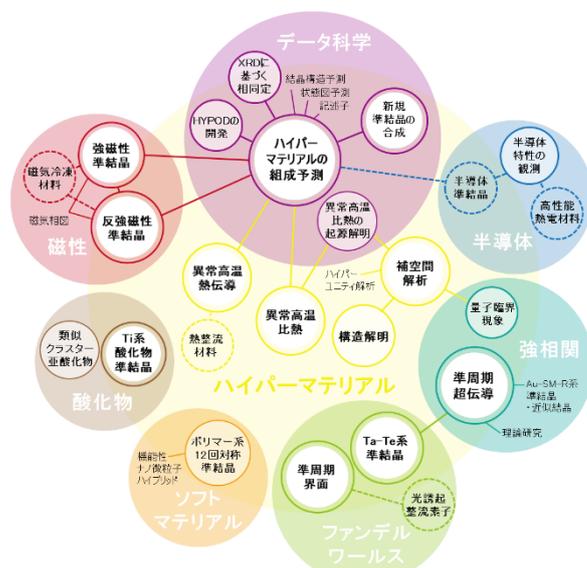


図 3. 異分野との融合とその成果

ハイパー材料の設計原理、高次元性と物性の関係、ハイパー材料ならではの機能を明確とし、補空間の考え方により新物質合成のみならず物性予測が可能となれば、学術領域として大きな発展が期待できる。概念の一般化とともに学理を構築し、国際的にも高く評価される学術の創成につながることを期待したい。

本指摘を受けて、領域の後半では、ハイパー材料固有の物性の追求に注力し、異常高温比熱、異常高温熱伝導、異常光起電力、階層的擬ギャップ、非相反伝導など、ハイパー材料固有の物性の特定に成功した。このうち、異常高温比熱に関しては、A01 班と A02 班の有機的な連携が功を奏し、機械学習アルゴリズムを駆使することで、それが補空間における原子変位（フェイズジャンプ）と直接関係していることが突き止められた (Nagai *et al.*, Phys. Rev. Lett. (2024))。また、異常高温熱伝導に関しては、A03 班と A04 班の有機的な連携により、A03 班桂らが構築したデータベース Starrydata を活用して、A04 班枝川らが数万ある物質のうちで準結晶・近似結晶の熱伝導率の温度係数が事実上トップであることを突き止めた。本領域により、世界で初めてハイパー材料最大の特異性が熱伝導にあることが確定した。それが補空間自由度とどのような関係にあるのか、新たな学術的問いが誕生するとともに、今後、熱整流素子をはじめ熱マネジメント素子としての応用が期待されている。一方、国際的な評価に関しては、一例を挙げると、本領域における強磁性準結晶の発見 (Tamura *et al.*, J. Am. Chem. Soc. (2021)) を受けて、国際結晶学会 (IUCr 2023) に "Magnetic order in aperiodic systems" というマイクロシンポジウムが新設され、田村がその議長に任命された。本領域で創製された磁性ハイパー材料が新たな学術分野として世界的に認知されている。

6 研究目的の達成度及び主な成果

(1) 領域設定期間内に何をどこまで明らかにしようとし、どの程度達成できたか、(2) 本研究領域により得られた成果について、具体的かつ簡潔に5頁以内で記述すること。(1)は研究項目ごと、(2)は研究項目ごとに計画研究・公募研究の順で記載すること。なお、本研究領域内の共同研究等による成果の場合はその旨を明確にすること。

(1) 何をどこまで明らかにしようとし、どの程度達成できたか

【研究項目 A01】

領域設定期間内に達成しようとした点:局在スピン系・強相関係・半導体系・酸化物系・ポリマー系・ファンデルワールス系の新規ハイパーマテリアルを創製し、様々な物質・材料系にハイパーマテリアルを水平拡大することを達成項目とした(図4)。なお非金属系については、特に公募班の協力を得て新物質創製を図ることとした。合成した新物質を研究項目 A02 の構造解析、A04 の物性測定・解析へと展開してその構造と物性を明らかにし、補空間を用いて隠れた法則性を突き止める本領域の目標に寄与することも達成項目とした。加えて、本領域の目玉である、研究項目 A03 が機械学習により予測した組成にもとづく新規ハイパーマテリアルの創製も達成項目とした。

達成できた点:【局在スピン系】A01 田村と A04 公募班那波らの共同研究により、強磁性および反強磁性準結晶の合成に世界で初めて成功した。いずれも 40 年の準結晶研究における初の長距離磁気秩序である。【強相関係】A01 田村・A01 室・A04 出口・A01 公募班鈴木らの共同研究により準結晶をも含む夥しい数の超伝導体の創製に成功した。【半導体系】高次近似結晶や準結晶において半導体特性の観測に成功し、真性半導体準結晶の実現に向けた基盤が築かれた。【酸化物系】A01 公募班柚原と A01 山田らの共同研究により、Ce 系および Yb 系において新たな酸化物ハイパーマテリアルの合成に成功した。また、A01 公募班山浦らが、準結晶に類似したクラスター構造を有する新規亜酸化物の合成に成功した。【ポリマー系】A01 公募班山本が、独自に合成した高分子を組み合わせることで 12 回対称準結晶の合成に成功した。【ファンデルワールス系】A01 公募班井手上が、対称性の異なる 2 次元結晶を組み合わせた準周期界面において、特異な光起電力効果および円偏光起電力効果を発見した。さらに、A04 枝川と A01 田村の共同研究により安定準結晶で初めての超伝導準結晶が発見された。【機械学習予測】A03 班の組成予測にもとづいて、数々の新規ハイパーマテリアルの発見がなされた。これは、40 年の準結晶研究の歴史において機械学習が発見した初めてのハイパーマテリアルである。

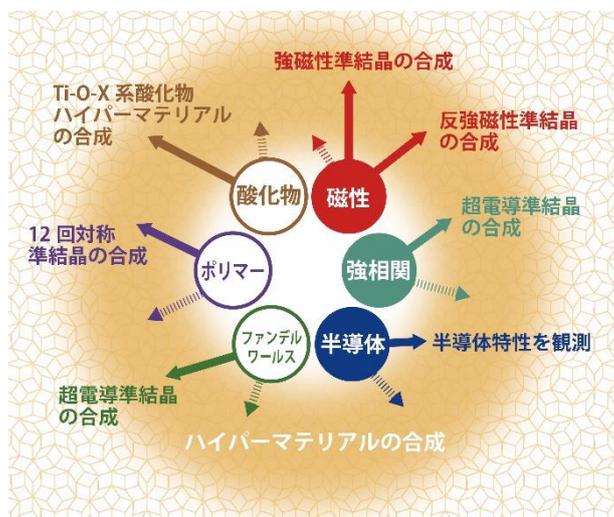


図4. A01 班の研究目的と達成状況

【研究項目 A02】

領域設定期間内に達成しようとした点:高次元と高対称で特徴づけられるハイパーマテリアルの構造的側面に焦点をあて、その原子スケールからマクロスケールまでの静的・動的構造を組織的に調べることにより、補空間構造及びフェイゾン・フォノンの特徴を明らかにすることを主たる目的とした。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に必要な構造情報を与えることが本研究項目の達成項目である。具体的には、既知および新規の準結晶・近似結晶の X 線・放射光・中性子散乱/回折による構造評価を進め、それらの構造を決定すること、相形成温度域における構造相転移およびダイナミクスを調べ形成メカニズムに関する知見を得ること、また、構造可視化のための学術基盤を整備することを達成項目とした。

達成できた点:【静的構造】A02 高倉らが構造未解明であった Bergman 型に分類される Zn-Mg-Tm 系正 20 面体準結晶の構造決定に成功し、その補空間構造を解明した。また A02 高倉と A01 田村らの共同研究により、多くの新規近似結晶の構造決定に成功した。A02 高倉と A01 木村・岩崎らの共同研究により、A03 班吉田らの機械学習により発見した Al-Si-Ru 系準結晶の近似結晶・関連結晶構造を明らかにした。そしてついに、A02 高倉と A01 山田との共同研究により唯一構造未解明となっていた Mackay 型の Al-Cu-Ru 系正 20 面体準結晶の構造決定に成功した。【動的構造】A02 松浦と A04 枝川の共同研究により、

Al-Pd-Mn 系正 20 面体準結晶の高分解能中性子散乱実験が行われ、黄金比 τ ($= (1 + \sqrt{5})/2$) でスケールされる階層的エネルギー擬ギャップ構造と非相反フォノン伝播を発見した。A02 綿貫と A02 藤田との共同研究である Al-Cu-Ru 系正 20 面体準結晶・近似結晶のコヒーレント X 線回折により、準結晶と近似結晶のダイナミクスの違いを明らかにした。【構造可視化】A02 門馬と高倉の共同研究により、高次元の対称性情報を保ち、磁気構造も含むハイパーマテリアルの構造可視化を可能とするソフトウェアを開発し公開した。以上により、静的構造・動的構造・構造可視化それぞれにおいて、当初の目標を達成した。

【研究項目 A03】

領域設定期間内に明らかにしようとした点: 本領域の開始当初、準結晶分野におけるマテリアルズインフォマティクス (MI) は完全なブルーオーシャンであった。そのため、研究項目 A03 は準周期物質群の 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ることを目的とし、データ科学や第一原理計算などを方法論の駆動力として領域内に知識循環をもたらすことを達成項目とした。

達成できた点: 新物質の発見プロセスを加速するために、機械学習の解析技術を導入した。準結晶研究で MI を実践する上での最大の壁は、体系的なデータベースの欠如であるため、ハイパーマテリアルの組成・物性・相図を網羅的に集積したオープンデータベース HYPOD を開発した (Fujita *et al.*, *submitted*)。次いで、新規準結晶を予測する機械学習の方法論 (準結晶・近似結晶の状態図予測、XRD に基づく相同定、結晶構造予測、記述子など) を整備し、それらの全てをオープンソフトウェアとしてコミュニティと共有した (Liu *et al.*, *Adv. Mater.* (2021), Uryu *et al.*, *Adv. Sci.* (2024), Kusaba *et al.*, *Phys. Rev. B* (2023)、他多数)。いずれも準結晶研究における初の成果として高い注目を集めた。また、これらの手法を用いて A01 班との共同により多くの新規準結晶を発見することに成功した (Liu *et al.*, *Phys. Rev. Mater.* (2023), Uryu *et al.*, *Adv. Sci.* (2024)) (図 5)。さらに、第一原理計算に基づく表面解析、触媒研究 (A04 班との共同研究)、バンド計算、高次元電子構造計算のアルゴリズム開発、分子動力学計算によるハイパーマテリアルの異常高温比熱の起源解明 (A04 班との共同研究) など、計算科学的手法に基づく斬新で多彩な研究を展開した。以上により A03 班は領域内の研究者らと協働して準結晶研究の新機軸を生み出した。

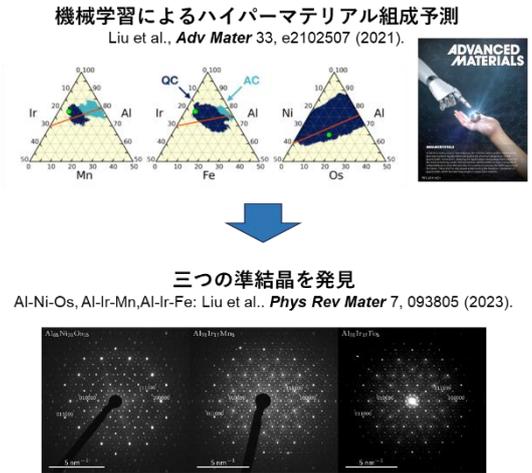


図 5. 機械学習による準結晶の予測と発見

【研究項目 A04】

領域設定期間内に明らかにしようとした点: 実験研究では、A01 班が合成する物質の物性測定を行い、高次元性 (補空間自由度)・準周期性・高対称性と関連する物性を明らかにすること、理論研究では、実空間では複雑なハイパーマテリアルの原子ダイナミクス・磁気秩序・電子状態等を補空間で理解し、そこに潜む規則性や法則性を見出すこと、さらに実験・理論の双方で得られた結果を融合して補空間における新物質科学の学術基盤の構築を達成目標とした。

達成できた点: A04 班の枝川と高際は、準結晶の定積比熱が高温域で Dulong-Petit 値の約 1.5 倍にも達することを示し、この大きな余剰比熱が高次元性(補空間自由度)に起因することを明らかにした。これは、高次元性に直接起因する準結晶の物性の顕著な例である。また枝川らは、A03 桂らが構築した大規模物性データベース(Starrydata)を用いて、ハイパーマテリアルの高温域における熱伝導度の正の温度係数の大きさがすべての固体物質のうち上位 0.2%に入ることを示し、異常高温熱伝導がハイパーマテリアルの最も特徴的な物性であることを確定した。さらに、この特長を生かせば、従来性能をはるかに超える熱整流材料が実現できることも明らかにした。A04 出口、A01 田村らは共同して、Au 系近似結晶において多数の超伝導体を発見するとともに、ついに、Au 系正 20 面体準結晶において超伝導相の実現に成功した。A04 枝川は、Ta-Te 系準結晶において転移温度約 1K の超伝導を発見した。これは安定準結晶における初めての超伝導であり、今後準周期超伝導の理解に大きく資することが期待される。さらに、A04 班の出口と井村らは、準結晶・近似結晶の磁性が、共通の高次元結晶の格子定数により整理できることを発見し、両者の物性が高次元結晶に基づいて説明できる可能性を切り拓いた。A4 古賀は、様々な準周期タイルを

用いて、準周期系特有の磁気秩序を補空間で明快に可視化することに成功し、また磁気秩序の補空間解析により、フラクタル構造を反映した超格子構造が現れることを見出した。一方、超伝導状態については、準周期系特有の不均一な秩序変数状態がトンネル顕微鏡で実験的に検出可能であることが示された。

(2) 本研究領域により得られた成果

【研究項目 A01】

計画研究 強磁性・反強磁性準結晶の発見：A01 田村と A01 山田らの共同研究により、1/1 近似結晶から一段準結晶に近づいた 2/1 近似結晶においてまず、強磁性転移の観測に成功し(Yoshida *et al.*, Phys. Rev. B (2019))、次いで、A01 田村と A04 那波らの共同研究により、液体急冷法により合成した Gd 系及び Tb 系準結晶が強磁性転移を示すことを発見し (Tamura *et al.*, JACS (2021))、また、Dy 系においては強磁性準結晶の単相化に成功した(Takeuchi *et al.*, PRL (2023), *Editors' suggestion*)。さらに A01 田村と A04 那波の共同研究により、Eu 系準結晶において、存在自体が疑われていた反強磁性相の発見について成功した(図 6) (Tamura *et al.*, *under review*)。40 年の準結晶研究の歴史で、初の強磁性秩序、初の反強磁性秩序の発見が相次いでなされ、準結晶の磁性研究が未踏のステージに入った。加えて、Tb 系近似結晶の磁気相図が解明され(Farid *et al.* Mater. Today Phys. (2024))、準結晶の磁気秩序理解のための学術基盤が整った。

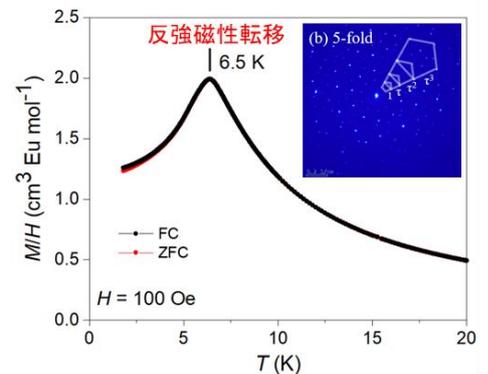


図 6. 反強磁性 Eu 系準結晶の発見

計画研究 超伝導ハイパーマテリアルの発見：A01 田村、A04 鈴木、A01 室、A04 出口らの共同研究で、Tsai 型 Au 系 1/1 近似結晶で多数の超伝導相が発見された(投稿準備中)。次いで、Au-(Al,Ga)-La 系で準結晶に一段近い 2/1 近似結晶で超伝導が発見され、ついに Au 系において、Tsai 型正 20 面体準結晶で初となる超伝導相が実現された(投稿準備中)。これは正 20 面体準結晶で史上二例目の超伝導体である。

計画研究 準結晶における半導体特性の観測と高性能熱電材料の開発：半導体準結晶の報告がこれまで一例も無く、そもそも半導体準結晶が可能かどうかといった原理的な問題が存在する中、A01 岩崎らは、1/0 半導体近似結晶の発見と 1/1 近似結晶での半導体化の検討(Iwasaki *et al.* Phys. Rev. Mater. (2019))に続き、2/1 近似結晶および準結晶において初めて半導体特性の観測に成功した。また、岩崎らは半導体ハイパーマテリアルを用いて、熱電材料として高い無次元性能指数 zT を得ることに成功した。本領域発足当時、ハイパーマテリアルで最高の zT は Al-Ga-Pd-Mn 系準結晶における 0.26(p 型)であったが、p 型(zT = 0.42)と n 型(zT = 0.28)の両方で史上最高の zT を達成し、高性能熱電材料創製に向けた基盤が築かれた。

【公募研究】

柚原は、Ti-O-Ce 系準結晶関連構造を発見し、A01 山田との共同研究により決定した Ti-O-Ba 準結晶薄膜の構造モデル (Li *et al.* Appl. Surf. Sci. (2021)) をもとに、Ti-O-Ce 系準結晶関連構造の構造モデル作成に成功した (Li *et al.* Phys. Chem. Chem. Phys. (2023))。また山本は、独自に作製した高分子の組み合わせで、Frank-Kasper σ 相をはじめとする近似結晶が形成されることを見出すとともに、 σ 相の形成過程で 12 回対称準結晶が中間構造として出現することを突き止めた。加えて、ポリマー準結晶の形成条件が特定の高分子に依らないという普遍性をも明らかにした。井手上は、異なる対称性をもつ 2 次元結晶を組み合わせた準周期界面を作製し、それが分極および光起電力効果を示すことを発見した(Akamatsu *et al.* Science (2021))。さらに、分極やキラリティーを反映した、円偏光依存する光起電力効果が発現することも発見した(Duan *et al.* Nat. Nanotechnol. (2023))。山浦は、A01 田村との共同研究により、Ti-M-Si-O 亜酸化物系において、準結晶に特徴的な 20 面体クラスターを有する新物質 Ti_3MSiO の合成に成功し、ハイパーマテリアル分野に亜酸化物系という新たな領域を切り拓いた(投稿準備中)。

【研究項目 A02】

計画研究 静的構造の解明：まず、構造未解明であった Bergman 型クラスターで特徴づけられる Zn-Mg-Tm 系正 20 面体準結晶の原子的構造の解明に成功した。従来のクラスターモデルによる解析に代えて、準周期タイリング (AKN タイリング) のタイルユニットを原子修飾するアプローチにより構造解析がなされ、その結果、3 つの大きな占有領域からなる補空間構造が決定された (図 7)。(Buganski *et al.* Acta. Cryst. A (2020))。続いて、A01 山田との共同研究により、唯一構造未解明として残された Mackay 型の Al-Cu-Ru 系正 20 面体準結晶において、まず詳細な高次元構造モデルを構築し (Yamada *et al.*, Acta Cryst.

A, *under review*)、このモデルを用いて世界で初めて、その原子的構造の決定に成功した(論文準備中)。

計画研究 動的構造の解明: A02 松浦らは A04 枝川らとの共同研究で、Al-Pd-Mn 系正 20 面体準結晶の格子ダイナミクスを、高分解能中性子分光器を用いて調べ、世界で初めて、黄金比 $\tau = (1 + \sqrt{5})/2$ でスケールされる階層的なエネルギー擬ギャップ構造と非相反フォノン伝播シグナルを同時に発見した (Matsuura *et al.*, *Phys. Rev. Lett.*, *under review*) (図 8)。

これらの結果は、フォノン物性において準周期系特有の性質が現れることを予言する成果である。

計画研究 構造可視化の学術基盤の構築: 高次元の対称性情報を保ち、磁気構造までも可視化できることは、補空間の新物質科学の創成のための重要な学術基盤となる。人口に膾炙した結晶構造可視化ソフトウェア VESTA に、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めるようにし、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の双方を可視化できるように拡張した (<http://jp-minerals.org/vesta/>にて公開)。今後特に、本領域で発見された強磁性・反強磁性準結晶における、世界初となる準結晶の磁気構造解明に大きく資することが期待される。

【公募研究】

A02 公募班の Stellhorn と A02 高倉らは、共同研究により、近年開発された新しい構造解析手法である X 線蛍光ホログラフィの有効性をモデル準結晶・近似結晶においてシミュレーションにより実証し、本手法が準結晶の局所構造解析に有効であることを明らかにした (Stellhorn *et al. Mater. Trans.* (2021))。

【研究項目 A03】

【計画研究】

A03 班は、ハイパーマテリアルを対象とする MI の学術基盤を構築した。まず、準結晶・近似結晶の組成・物性・相図を網羅的に集積したオープンデータベース HYPOD を開発した (Fujita *et al.*, *submitted*, <https://figshare.com/s/609fff971a91f9061756>)。これは、準結晶分野における世界初の包括的データベースである。このようなデータベース開発は研究そのものでなく軽視されがちであるが、データ駆動型研究の礎を担う極めて重要な学術資源である。次いで、このデータベースを用いて熱力学的に安定な準結晶を形成する組成を予測するモデルを構築し (Liu *et al.*, *Adv. Mater.* (2021))、実際に、三つの新規準結晶 (Al-Ni-Os, Al-Ir-Mn, Al-Ir-Fe) の発見に成功した。これらは、40 年に渡る準結晶研究の歴史で、機械学習により発見された初めての準結晶である (Liu *et al.*, *Phys. Rev. Mater.* (2023))。さらに A01 班と共同で、粉末 XRD パターンから準結晶の有無を判定する機械学習モデルを開発した。機械学習による XRD からの相同定の研究は周期結晶では為されているが、準結晶の同定に適用した初の事例である。このモデルを用いてラボに蓄積された埋蔵データをスクリーニングし、新しい準結晶を発見した (Uryu *et al.*, *Adv. Sci.* (2024))。

また、第一原理計算に基づく表面物理の解析を駆使し、準結晶の表面解析や触媒研究を推進した。成果の一例を挙げると、Ag-In-Yb 系正 20 面体準結晶の 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、近似結晶には存在しない準結晶固有の原子構造に優先的に吸着することを発見した (Sato *et al.*, *J. Phys. Conf.* (2023))。また、高次元電子構造計算のアルゴリズム開発を推進し、従来法では不可能であった準結晶の状態密度計算を行うために、周期系で知られるブロッホの定理を n 次元 ($n > d$) 周期結晶の d 次元切断断面構造に拡張し、Kohn-Sham 方程式の数値解析手法を開発した。これを用いて、2 次元フォトニック準結晶における光学的ギャップの解析を展開した。また、縮約密度行列の量子状態推定に関する量子アルゴリズムの開発として、準結晶の実空間基底での電子状態を取り扱うための高次縮約密度行列の推定アルゴリズムを開発した。さらに、A04 班と共同で、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 (Takemori *et al.*, *Phys. Rev. B* (2020)) を明らかにし、また、超伝導電流に現れる異常を発見した (Fukushima *et al.*, *Phys. Rev. Res.* (2023))。

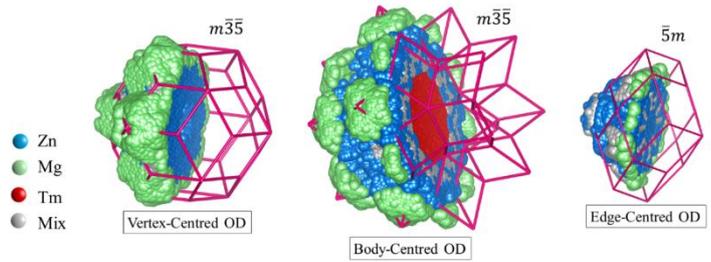


図 7 Zn-Mg-Tm 系正 20 面体準結晶の補空間構造

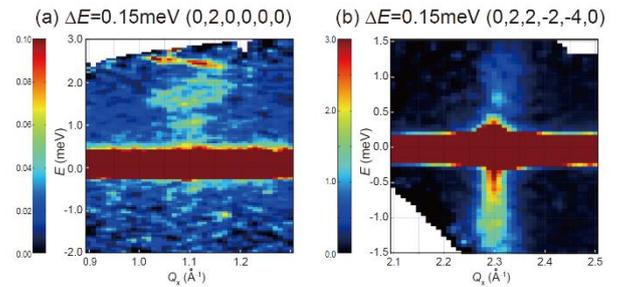


図 8 エネルギーに対して非対称な Al-Pd-Mn 正 20 面体準結晶のフォノンスペクトル

【公募研究】

永井らは、A04 班枝川・高際らが見出した準結晶の異常高温比熱について、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、高次元での原子ゆらぎが原因であることを突き止めた (Nagai *et al.*, Phys. Rev. Lett. (2024))。義永らは、フェーズフィールド法を用いてハイパーマテリアルの相形成や安定化のメカニズムに関する物理的知見を得た (Yoshinaga *et al.*, Phys. Rev. E (2022))。

【研究項目 A04】

計画研究 新規超伝導準結晶・近似結晶の発見と準結晶超伝導理論の発展：

Au 系近似結晶においてまず、夥しい数の超伝導体が発見され、Au-Ge-La 系では非従来型の超伝導の観測に成功した。また、Au 系準結晶において、正 20 面体準結晶で二例目となる超伝導が発見された(論文準備中)。さらに、Ta-Te 系フェンデルワールス系準結晶において $T_c \approx 1\text{K}$ の超伝導が発見された(図 9) (Tokumoto *et al.* Nat. Commun. (2024))。これは 40 年の準結晶研究において安定準結晶における初の超伝導である。また準結晶超伝導に関する理論研究より、従来の超伝導体には無い種々の特異なふるまいが明らかにされた (Fukushima *et al.* Phys. Rev. Research (2023), Ghadimi *et al.* JPS Conf. Proc. (2023), Hori *et al.* JPS Conf. Proc. (2023), Ghadimi *et al.* Phys. Rev. B (2021))。

計画研究 補空間マッピングによる準周期磁気秩序の可視化：

様々な準周期タイル(Penrose, Ammann-Beenker, Socolar タイル) を用いた解析により、準周期系特有の磁気秩序を補空間で明快に可視化することに成功した(図 10) (Matsubara *et al.* Phys. Rev. B (2024), Koga *et al.* Phys. Rev. B (2022), Koga Mater. Trans. (2021))。

計画研究 補空間と量子臨界現象や磁性を結ぶ端緒の発見：

量子臨界現象を示す様々な Yb 系準結晶・近似結晶を合成し、Yb 価数と磁性が両者に共通の高次元結晶の格子定数でスケールアップされることをまず発見した(Imura *et al.* Sci. Rep. (2020), Sato *et al.* J. Phys. Soc. Jpn. (2022))。結晶と準結晶という全く異なるカテゴリーに属する物質群の物性を共通の高次元構造を用いて理解する根拠が示された。また、新規 Yb 系中間価数近似結晶の高圧下価数転移の観測により、量子臨界性と価数感受率の発散が同時に起こることが発見され、臨界現象の起源の解明に成功した。さらに、高次近似結晶の価数転移の特徴を捉えることにも成功し、準結晶を含む量子臨界現象の統一的理解の基盤が構築された (Imura *et al.*, J. Phys. Soc. Jpn. (2023))。

計画研究 異常高温比熱と異常高温熱伝導：

準結晶の定積比熱が、高温域で Dulong-Petit 値の約 1.5 倍に達することを示し、この大きな余剰比熱が高次元性(補空間自由度)に起因することを明らかにした(Tamura *et al.*, Mater. Trans. (2021), Fukushima *et al.*, J. Phys. Commun. (2021))。また、A03 班が開発した大規模物性データベース(Starrydata)を用いて、準結晶・近似結晶の高温域における熱伝導度の正の温度係数の大きさがあらゆる固体物質のうちで上位 0.2%に入ることが発見され、これがハイパーマテリアルの最も特徴的な物性であることが判明した。さらに、この性質を利用すれば従来性能を遥かに超える熱整流材料が設計可能であることも示された(論文準備中)。

【公募研究】

那波は、A01 田村との共同研究により、中性子回折実験により Tsai 型近似結晶の特異な磁気秩序を次々と決定するとともに、中性子非弾性散乱実験により近似結晶における結晶場の解析や磁気励起の観測に初めて成功した(Farid *et al.*, Mater. Tod. Phys. (2024), Nawa *et al.*, Phys. Rev. Mater. (2023), Hiroto *et al.*, J. Phys.:Condens. Matter. (2021))。一方、渡辺は理論研究により、ハイパーマテリアル特有の多様な磁気秩序の解明と磁気励起の計算、結晶場の解析に初めて成功した(Watanabe, Sci. Rep (2023), Watanabe *et al.*, Phys. Rev. B (2023), Watanabe, Sci. Rep (2022))。酒井は、補空間解析をさらに発展させて、物理量の全域的な空間分布をハイパーユニフォーム性にもとづいて定量化する新たな解析手法を開発・確立し(Sakai *et al.*, Phys. Rev. Research (2022))、非一様空間構造の異なる電子相の存在を初めて発見した。この手法は、補空間解析と相補的な手法であるだけでなく、今後広く科学技術分野で利用される可能性がある。

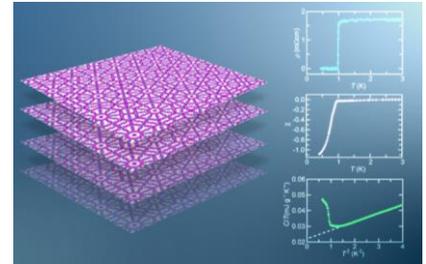


図 9. ファンデルワールス層状準結晶における超伝導の発見

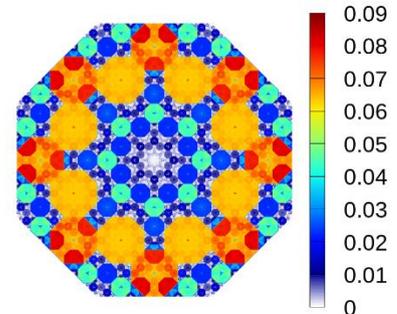


図 10. Ammann-Beenker タイル上の反強磁性秩序の補空間構造

7 研究発表の状況

研究項目ごとに計画研究・公募研究の順で、本研究領域により得られた研究成果の発表の状況（主な雑誌論文、学会発表、書籍、産業財産権、ホームページ、主催シンポジウム、一般向けアウトリーチ活動等の状況。令和6年6月末までに掲載等が確定しているものに限る。）について、具体的かつ簡潔に5頁以内で記述すること。なお、雑誌論文の記述に当たっては、新しいものから順に発表年次をさかのぼり、研究代表者（発表当時、以下同様。）には二重下線、研究分担者には一重下線、corresponding author には左に*印を付すこと。

研究項目 A01:ハイパーマテリアルの合成(計画班)

<雑誌論文> 計 77 件(査読有 74 件)の内、代表論文 10 編

1. “High-temperature atomic diffusion and specific heat in quasicrystals”, *Y. Nagai, *Y. Iwasaki, K. Kitahara, Y. Takagiwa, K. Kimura, and M. Shiga, *Physical Review Letters* **132**, 196301-1-6 (2024).
2. “Superconductivity in a van der Waals layered quasicrystal”, *Y. Tokumoto, K. Hamano, S. Nakagawa, Y. Kamimura, S. Suzuki, R. Tamura and *K. Edagawa, *Nature Communications* **15**, 1529 (2024).
3. “Unveiling exotic magnetic phase diagram of a non-Heisenberg quasicrystal approximant”, *F. Labib, *K. Nawa, S. Suzuki, H.C. Wu, A. Ishikawa, K. Inagaki, T. Fujii, K. Kinjo, T. J. Sato, and R. Tamura, *Materials Today Physics* **40**, 101321-1-9 (2024).
4. “Deep Learning Enables Rapid Identification of a New Quasicrystal from Multiphase Powder Diffraction Patterns”, H. Uryu, *T. Yamada, K. Kitahara, A. Singh, Y. Iwasaki, K. Kimura, K. Hiroki, N. Miyao, A. Ishikawa, R. Tamura, S. Ohhashi, C. Liu, and *R. Yoshida, *Advanced Science* **11**, 2304546-1-9 (2024).
5. “Atomic structure of the unique antiferromagnetic 2/1 quasicrystal approximant”, F. Labib, H. Takakura, A. Ishikawa, and R. Tamura, *Physical Review B* **107**, 184110-1-10 (2023).
6. “High Phase-Purity and Composition-Tunable Ferromagnetic Icosahedral Quasicrystal”, Ryo Takeuchi, F. Labib, T. Tsugawa, Y. Akai, A. Ishikawa, S. Suzuki, T. Fujii, and *R. Tamura, *Physical Review Letters* **130**, 176701-1-5 (2023).

Editors' Suggestion

7. “Emergence of long-range magnetic order from spin-glass state by tuning electron density in a stoichiometric Ga-based quasicrystal approximant”, F. Labib*, S. Suzuki, A. Ishikawa, T. Fujii, and R. Tamura, *Physical Review B* **106**, 174436-1-6 (2022).
8. “Experimental Observation of Long-Range Magnetic Order in Icosahedral Quasicrystals”, *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, and *T. J. Sato. *Journal of the American Chemical Society* **143**, 19938-19944 (2021).
9. “Machine learning to predict quasicrystals from chemical compositions”, C. Liu, E. Fujita, Y. Katsura, Y. Inada, A. Ishikawa, R. Tamura, *K. Kimura, and *R. Yoshida, *Advanced Materials* **33**, 2102507-1-12 (2021).
10. “Ferromagnetic 2/1 quasicrystal approximants”, K. Inagaki, S. Suzuki, A. Ishikawa, T. Tsugawa, F. Aya, T. Yamada, K. Tokiwa, T. Takeuchi, and *R. Tamura, *Physical Review B* **101**, 180405-1-5 (2021).

<学会発表> 計 349 件(招待講演 62 件)の内、代表的な学会発表 3 件

1. “Search for long-range magnetic order in icosahedral quasicrystals”, R. Tamura, The 15th International Conference on Quasicrystals, 国際学会, 招待講演, 2023, The Steinhardt Museum of Natural History, Tel Aviv University, Israel
2. “Atomic structure of F-type Al-Cu-Ru icosahedral quasicrystal”, T. Yamada, H. Takakura, A. Yamamoto, International Union of Crystallography 2023, 国際学会, 招待講演, 2023, Melbourne Convention and Exhibition Centre (MCEC), Australia
3. “学会賞受賞講演:熱電分野を含む「学融合」への挑戦”, 木村 薫, 第 20 回 日本熱電学会学術講演会, 国内学会, 招待講演, 2023, 北九州国際会議場

<産業財産権> 計 2 件

1. 発明等の名称:「金合金及び金合金の製造方法」, 出願番号:特願 2021-056093
2. 発明等の名称:「磁気冷凍材料」出願番号:特願 2021-050725

研究項目 A01:ハイパーマテリアルの合成(公募研究)

<雑誌論文> 計 54 件(査読有 54 件)の内、代表論文 3 編

1. “Berry Curvature Dipole Generation and Helicity-to-spin Conversion at Symmetry-mismatched Hetero-interfaces” 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, and H. Yuan, *Nature Nanotechnology* **18**, 867-874 (2023).

2. “Growth of Ba–O ultrathin films on Pt(1 1 1) followed by Ti incorporation to prepare oxide crystalline approximants and quasicrystals”, X. Li, K. Horiba, R. Sugiura, [T. Yamada](#), [J. Yuhara](#), *Applied Surface Science* **561**, 150099-1-7 (2021).
3. “A van der Waals interface that creates in-plane polarization and a spontaneous photovoltaic effect”, 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, *Science* **372**, 68-72 (2021).

<学会発表> 計 **123** 件(招待講演 19 件)の内、代表的な学会発表 1 件

1. “Anomalous thermal transport in insulators”, [T. Ideue](#), 2020 International Conference on Thermodynamics and Thermal Metamaterials (ThermoMeta2020), 国際学会, 招待講演, 2020, Online

研究項目 A02:ハイパーマテリアルの構造(計画班)

<雑誌論文> 計 **64** 件(査読有 **64** 件)の内、代表論文 10 編

1. “Formation and structure of 1/1 cubic approximants in the Cd-Mg-Ce system: The identification of a new structural variant”, *F. Labib, *[N. Fujita](#), [H. Takakura](#), S. Ohhashi, T. Shiino, A-P. Tsai, [R. Tamura](#), *Journal of Alloys and Compounds* **954**, 170151-1-11 (2023).
2. “Phase Equilibria in Aluminium–Ruthenium–Silicon System near 1200 Kelvin”, *K. Kitahara, [H. Takakura](#), [Y. Iwasaki](#), [K. Kimura](#), *Materials Transactions* **65**, 18-26 (2023).
3. “Canonical-Cell Tilings and their Atomic Decorations”, *[N. Fujita](#), M. Mihalkovič, C. L. Henley, *Israel Journal of Chemistry*, e202300130 (2023).
4. “Lattice strain visualization inside a 400 nm single grain of BaTiO₃ in polycrystalline ceramics by Bragg coherent X-ray diffraction imaging”, *N. Oshime, K. Ohwada, A. Machida, N. Fukushima, K. Shirakawa, S. Ueno, I. Fujii, S. Wada, K. Sugawara, A. Shimada, T. Ueno, [T. Watanuki](#), K. Ishii, H. Toyokawa, [K. Momma](#), S. Kim, S. Tsukada, Y. Kuroiwa, *Japanese Journal of Applied Physics* **62**, SM1022-1-6 (2023).
5. “Precipitation of stable icosahedral quasicrystal phase in a Mg-Zn-Al alloy”, *A. Singh, T. Hiroto, M. Ode, [H. Takakura](#), K. Tesar, H. Somekawa, T. Hara, *Acta Materialia* **225**, 117563-1-17 (2022).
6. “The Local Structure of the Fibonacci Chain and the Penrose Tiling from X-Ray Fluorescence Holography”, *[J. R. Stellhorn](#), [H. Takakura](#), S. Hosokawa, K. Hayashi, *Materials Transactions* **62**, 342-349 (2021).
7. “A Unified Geometrical Framework for Face-Centered Icosahedral Approximants in Al-Pd-TM (TM = Transition Metal) Systems”, *[N. Fujita](#) and M. Ogashiwa, *Materials Transactions* **62**, 329-337 (2021).
8. “Growth and *characterization* of single grain Al-Cu-Ru icosahedral quasicrystals from self-fluxes”, K. Toyonaga, R. Shibata, [T. Yamada](#), M. de Boissieu, O. Perez, P. Fertey, *[H. Takakura](#), *Philosophical Magazine* **100**, 2220-2243 (2020).
9. “Structural-transition-driven antiferromagnetic to spin-glass transition in Cd-Mg-Tb 1/1 approximants”, *F. Labib, D. Okuyama, [N. Fujita](#), [T. Yamada](#), S. Ohhashi, D. Morikawa, K. Tsuda, T. J. Sato, and A. P. Tsai, *J. Phys.: Condensed Matter* **32**, 485801-1-8 (2020).
10. “The atomic structure of the Bergman-type icosahedral quasicrystal based on the Ammann-Kramer-Neritiling”, *I. Buganski, J. Wolny, and [H. Takakura](#), *Acta Crystallographica Section A* **76**, 180-196 (2020).

<学会発表> 計 **128** 件(招待講演 14 件)の内、代表的な学会発表 3 件

1. “準結晶フォノンにおける特異連続性と非相反伝導”, [松浦直人](#), 日本物理学会 2024 年春季大会、国内学会、招待講演 2024, Online
2. “Cluster covering structure in a 3/2-2/1-2/1 rational approximant to Bergman type icosahedral quasicrystals”, [H. Takakura](#), The 15th International Conference on Quasicrystals, 国際学会, 招待講演, 2023, The Steinhardt Museum of Natural History, Tel Aviv University, Israel.
3. “Visualization of magnetic structures and quasicrystals”, [K. Momma](#), 国際学会, 招待講演, 2023, IUCr Crystallographic Computing School 2023, Melbourne, Australia.

研究項目 A02:ハイパーマテリアルの構造(公募研究)

<雑誌論文> 計 **15** 件(査読有 **15** 件)の内、代表論文 2 編

1. “Incommensurately modulated crystal structure of α' (O'3)-type sodium cobalt oxide Na_xCoO₂ (x~0.77)”, *[Y. Miyazaki](#), N. Igawa, [K. Yubuta](#), *Acta Crystallographica Section B* **77**, 371-377 (2021).
2. “The Local Structure of the Fibonacci Chain and the Penrose Tiling from X-Ray Fluorescence Holography”, *[J. R. Stellhorn](#), [H. Takakura](#), S. Hosokawa, K. Hayashi, *Materials Transactions* **62**, 342-349 (2021).

<学会発表>計 29 件(招待講演 4 件)の内、代表的な学会発表 1 件

1. “Investigation of the Local Atomic Structure of Quasicrystals by Atomic Resolution Holography”, **J. R. Stellhorn**, **K. Kimura**, K. Hayashi, N. Happo, **N. Fujita**, S. Ohhashi, F. Labib, M. de Boissieu, 国際学会, 招待講演, 2023, The Steinhardt Museum of Natural History, Tel Aviv University, Israel.

研究項目 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(計画班)

<雑誌論文> 計 39 件(査読有 38 件)の内、代表論文 10 編

1. “Deep learning enables rapid identification of a new quasicrystal from multiphase powder diffraction patterns”. 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**. *Advanced Science* **11**, 2304546 (2024).
2. “Quasicrystals predicted and discovered by machine learning” C. Liu, K. Kitahara, A. Ishikawa, T. Hiroto, A. Singh, E. Fujita, **Y. Katsura**, Y. Inada, ***R. Tamura**, ***K. Kimura**, ***R. Yoshida**. *Physical Review Materials* **7**, 093805 (2023).
3. “Supercurrent distribution in real-space and anomalous paramagnetic response in a superconducting quasicrystal” *T. Fukushima, ***N. Takemori**, **S. Sakai**, M. Ichioka, A. Jagannathan. *Physical Review Research* **5**, 043164 (2023).
4. “Representation of materials by kernel mean embedding” M. Kusaba, Y. Hayashi, C. Liu, A. Wakiuchi, ***R. Yoshida**. *Physical Review B* **108**, 134107 (2023).
5. “Crystal structure prediction with machine learning-based element substitution” M. Kusaba, C. Liu, ***R. Yoshida** *Computational Materials Science* **211**, 111496 (2022).
6. “First-principles study of the initial stage of Pentacene adsorption on the twofold surface of the Ag-In-Yb quasicrystal” M. Sato, T. Hiroto, **Y. Matsushita**, ***K. Nozawa** *Journal of Physics: Conference Series* **2461**, 012016 (2023).
7. “Doped Mott insulator on a Penrose tiling” **S. Sakai**, **N. Takemori**. *Physical Review B* **105**, 205138 (2022).
8. “Machine learning to predict quasicrystals from chemical compositions” C. Liu, E. Fujita, **Y. Katsura**, Y. Inada, A. Ishikawa, **R. Tamura**, ***K. Kimura**, ***R. Yoshida**, *Advanced Materials* **33**, 2102507 (2021).
9. “Physical properties of weak-coupling quasiperiodic superconductors” ***N. Takemori**, R. Arita, ***S. Sakai**. Physical properties of weak-coupling quasiperiodic superconductors. *Physical Review B* **102**, 115108 (2020).
10. “Predicting materials properties with little data using shotgun transfer learning” H. Yamada, C. Liu, S. Wu, Y. Koyama, S. Ju, J. Shiomi, J. Morikawa, **R. Yoshida**, *ACS Central Science* **5**, 1717-1730 (2019).

<学会発表>計 142 件(招待講演 69 件)の内、代表的な学会発表 3 件

1. “Photonic Band Gaps in 2D Photonic Hypermaterials” **N. Takemori**, 国際学会・招待講演, The 11th International Conference on Aperiodic Crystals, Caen, France.
2. “Beyond Data Limits: Innovations in Data-Driven Materials Science” **R. Yoshida**, 国際学会・招待講演, 2023, The 27th SANKEN International Symposium, Hyogo, Japan.
3. “Machine learning for quasicrystals” **R. Yoshida**, 国際学会・招待講演 2023, International Conference on Complex Orders in Condensed Matter (ICCOCM 2023), Evian, France.

<書籍> 計 2 件

1. 伊藤聡編 **吉田亮** 他著「マテリアルズインフォマティクス」共立出版 (2022) .
2. **Nayuta Takemori** and **Shiro Sakai**, “Correlated electronic states in quasicrystals” *Comprehensive Inorganic Chemistry III*, Third Edition vol.3 461-492 (2023).

<ホームページ等>

1. ハイパーマテリアルオープンデータベース HYPOD <https://figshare.com/s/609fff971a91f9061756>
2. マテリアルインフォマティクス Python ライブラリ XenonPy <https://xenonpy.readthedocs.io/en/latest/>

<主催シンポジウム>

1. 2024.3, 統計数理研究所ものづくりデータ科学研究センター感謝祭「SIM2REAL マテリアルズインフォマティクス」(一橋講堂, 参加者 176 名)
2. 第 1 回-第 4 回マテリアルズインフォマティクスセミナー(統計数理研究所, 参加者合計: 972 名)

研究項目 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(公募研究)

<雑誌論文> 計 4 件(査読有 4 件)の内、代表論文 2 編

1. “High-temperature atomic diffusion and specific heat in quasicrystals” ***Y. Nagai**, ***Y. Iwasaki**, K. Kitahara, **Y. Takagiwa**, **K. Kimura**, M. Shiga, *Physical Review Letters* **132**, 196301 (2024).

2. “Bayesian modeling of pattern formation from one snapshot of pattern” ***N. Yoshinaga**, S. Tokuda.. *Physical Review E* **106**, 065301 (2022).

<学会発表>計 18 件(招待講演 3 件)の内、代表的な学会発表 1 件

1. 「ベイズ推定を用いた画像パターンからの支配方程式の選択」 **義永那津人**, 第 2 回 東北大学知のフォーラム 実験家のためのデータ駆動科学オンラインセミナー, 国内学会, 招待講演, 2020, 東北大学 知の館, Online

研究項目 A04:ハイパーマテリアルの物性と hidden order の探索(計画班)

<雑誌論文> 計 81 件(査読有 78 件)の内、代表論文 10 編

1. “Superconductivity in a van der Waals layered quasicrystal”, Y. Tokumoto, K. Hamano, S. Nakagawa, Y. Kamimura, **S. Suzuki**, **R. Tamura**, and ***K. Edagawa**, *Nature Communications* **15**, 1529 (2024).
2. “Ferromagnetically ordered states in the Hubbard model on the H_{00} hexagonal golden-mean tiling”, *T. Matsubara, **A. Koga** and S. Coates, *Physical Review B* **109**, 104414-1-11 (2024).
3. “Effects of Electron Correlation and Geometrical Frustration on Magnetism of Icosahedral Quasicrystals and Approximants — An Attempt to Bridge the Gap between Quasicrystals and Heavy Fermions”, *N. K. Sato, T. Ishimasa, **K. Deguchi**, and **K. Imura**, *Journal of the Physical Society of Japan* **91**, 072001-1-31 (2022).
4. “Direct experimental evidence of phonon-phason coupling in an Al-Pd-Mn icosahedral quasicrystal”, J. Zhang, Y. Kamimura, Y. Tokumoto, and ***K. Edagawa**, *Philosophical Magazine* **102**, 1461-1480 (2022).
5. “Comparative study of high-temperature specific heat for Al-Pd-Mn icosahedral quasicrystals and crystal approximants”, K. Fukushima, H. Suyama, Y. Tokumoto, Y. Kamimura, **Y. Takagiwa**, and ***K. Edagawa**, *Journal of Physics Communications* **5**, 085002 (2021).
6. “High-temperature specific heat of Al-Cu-Ru icosahedral quasicrystals and 1/1 crystal approximants”, S. Tamura, K. Fukushima, Y. Tokumoto, **Y. Takagiwa**, and ***K. Edagawa**, *Materials Transactions* **62**, 356-359 (2021).
7. “Bulk electronic structure of high-order quaternary approximants”, S. Sarkar, P. Sadhukhan, V. K. Singh, A. Gloskovskii, **K. Deguchi**, **N. Fujita**, *S. R. Barman, *Physical Review Research* **3**, 013151-1-10 (2021).
8. “Classical and Quantum Magnetic Ground States on an Icosahedral Cluster”, **S. Suzuki**, **R. Tamura**, and ***T. Sugimoto**, *Materials Transactions* **62**, 367-373 (2021). **日本金属学会 第 70 回 論文賞 [物性部門]**
9. “Superlattice structure in the antiferromagnetically ordered state in the Hubbard model on the Ammann-Beenker tiling”, ***A. Koga**, *Physical Review B* **102**, 115125-1-10 (2020).
10. “Concomitant singularities of Yb-valence and magnetism at a critical lattice parameter of icosahedral quasicrystals and approximants”, *K. Imura, H. Yamaoka, S. Yokota, K. Sakamoto, Y. Yamamoto, T. Kawai, K. Namba, S. Hirokawa, **K. Deguchi**, N. Hiraoka, H. Ishii, J. Mizuki, T. Ishimasa and N. K. Sato, *Scientific Reports* **10**, 17116-1-10 (2020).

<学会発表>計 223 件(招待講演 35 件)の内、代表的な学会発表 3 件

1. “Ta-Te 系ファンデルワールス層状準結晶の超伝導”, **枝川圭一**, 日本物理学会 2024 年春季大会, 国内学会, 招待講演, 2024, Online
2. “Magnetism and superconductivity of quasicrystals and approximants”, **K. Deguchi**, Y. Nakamura, Y. Sakakibara, T. Kuwano, and H. Taniguchi, International Conference on Strongly Correlated Electron Systems 2023 (SCES2023), 国際学会, 招待講演, 2023, Songdo Convensia, 123 Central Street, Yeonsu-gu, Incheon 21998 Korea
3. “Magnetism and superconductivity of icosahedral quasicrystals and approximants”, **K. Deguchi**, 10th International Conference on Aperiodic Crystals (Aperiodic 2022), 国際学会, 招待講演, 2023, Hokkaido University, Sapporo, Hokkaido, Japan

研究項目 A04:ハイパーマテリアルの物性と hidden order の探索(公募研究)

<雑誌論文> 計 106 件(査読有 106 件)の内、代表論文 3 編

1. “Variation of pressure-induced valence transition with approximation degree in Yb-based quasicrystalline approximants”, ***K. Imura**, Y. Yoneyama, H. Ando, N. Kabeya, H. Yamaoka, N. Hiraoka, H. Ishii, T. Ishimasa and N. K. Sato, *Journal of the Physical Society of Japan* **92**, 093701-1-4 (2023).
2. “Hyperuniform electron distributions controlled by electron interactions in quasicrystals”, ***S. Sakai**, R. Arita, and T. Ohtsuki, *Physical Review B* **105**, 054202-1-16 (2022).
3. “Magnetic dynamics of ferromagnetic long range order in icosahedral quasicrystal”, ***S. Watanabe**, *Scientific Reports* **12**, 10792-1-9 (2022).

<学会発表>計 182 件(招待講演 27 件)の内、代表的な学会発表 1 件

1. “正 20 面体準結晶と近似結晶の磁性（理論）”, **渡辺真仁**, 日本物理学会 2024 年春季大会, 国内学会, 招待講演, 2024, Online

ホームページ

新学術領域「ハイパーマテリアル：補空間が創る新物質科学」:

<https://www.rs.tus.ac.jp/hypermaterials/index.html>

一般向け研究紹介ビデオ

1. YouTube オリジナル「わからないから面白い！」シリーズ
 - ・「わからないから面白い！ハイパーマテリアルってなに？」(2021 年)
 - ・「わからないから面白い！ハイパーマテリアルってなに？Ⅱ<クラスター編>」(2022 年)
 - ・「2011 年度ノーベル化学賞の受賞者、ダニエル・シェヒトマン博士にインタビューしました！」(2023 年)
 - ・「わからないから面白い！ハイパーマテリアルってなに？Ⅳ<物性編>」(2023 年) シリーズ総再生数 17490 回
2. YouTube ヨビのりたくみ予備校のノりで学ぶ「大学の数学・物理」シリーズ
 - ・学術対談「物質を高次元空間で統一的に記述する【ハイパーマテリアル】」(2022 年) 再生数 54000 回



主催シンポジウムの状況

1. キックオフミーティング 2019 年 9 月 参加者数 77 名
2. 領域会議 (第 2~11 回) 第 2 回:2020 年 2 月 参加者数 59 名, 第 3 回:2020 年 5 月 参加者数 54 名, 第 4 回:2020 年 7 月 参加者数 79 名, 第 5 回:2020 年 12 月 参加者数 59 名, 第 6 回:2021 年 7 月 参加者数 84 名, 第 7 回:2021 年 12 月, 第 8 回:2022 年 4 月 参加者数 88 名, 第 9 回:2022 年 12 月 参加者数 57 名, 第 10 回:2023 年 5 月 参加者数 61 名, 第 11 回:2024 年 3 月 参加者数 62 名
3. 準結晶研究会 (第 24~28 回) 第 24 回 [第 2 回領域会議]:2020 年 2 月, 第 25 回:2021 年 3 月参加者数 70 名, 第 26 回:2022 年 2 月参加者数 81 名, 第 27 回:2023 年 2 月 参加者数 53 名, 第 28 回:2023 年 12 月 参加者数 52 名
4. 若手研究会 (第 1~5 回) 第 1 回:2020 年 5 月 参加者数 70 名, 第 2 回[第 25 回準結晶研究会]:2021 年 3 月, 第 3 回[第 26 回準結晶研究会]:2022 年 2 月, 第 4 回:2022 年 12 月 参加者数 33 名, 第 5 回:2023 年 9 月 参加者数 19 名
5. 第 14 回物性科学領域横断研究会 2020 年 12 月 参加者数 152 名
6. 第 1 回領域国際会議 (Aperiodic2022), 2022 年 6 月 参加者数 114 名
7. 第 2 回領域国際会議 (International conference on complex orders in condensed matter: aperiodic order, local order, electronic order, hidden order), 2023 年 9 月 参加者数 123 名
8. MRM2021 (Materials Research Meeting 2021) 2021 年 5 月 B1 セッション

一般向けアウトリーチ活動

1. 第 1~38 回ハイパーマテリアルセミナー
2. ニュースレター(Vol. 1~8) 総発行部数 3200 部
3. 国立科学博物館イベント「わからないから面白い！ハイパーマテリアルってなに？~形と物質の不思議 物理・数学・工作体験~」岩崎祐昂, 廣戸孝信, 藤田絵梨奈, 木村薫, 国立科学博物館, 2023 年
4. TV 放映: BS フジ「ガリレオ X」2020 年 4 月 12 日「材料開発を加速させる MI」吉田亮
5. “福岡県立明善高等学校 出前講義「物質科学がおもしろい」”, **渡辺真仁**, 福岡県立明善高等学校, 2023“アクア・ライフ”, **松本正和**, 下北沢シアター711, 2022
6. ハイパーマテリアル宣伝用リーフレット作成 2023 年
7. 「ハイパーマテリアル塗り絵の作成」竹森那由多 2020 年
8. 「Facebook ページの作成」竹森那由多 2020 年
9. “オープンキャンパスでの Web 体験講義「準結晶の物理」”, **古賀昌久**, 東京工業大学, 2022 年
10. “模擬授業 in 愛知県立横須賀高等学校”, **出口和彦**, 愛知県立横須賀高等学校, 2022 年
11. “名大出前授業 in 豊橋 2020”, **出口和彦**, Online, 2020 年
12. “サイエンスフェス in 大分 2020”, **橋爪洋一郎** 他, J:COM ホルトホール大分, 2020 年

8 研究組織の連携体制

研究領域全体を通じ、本研究領域内の研究項目間、計画研究及び公募研究間の連携体制について、図表などを用いて具体的かつ簡潔に1頁以内で記述すること。

【研究項目間の連携体制】

本領域は、**A01 物質合成**、**A02 構造評価**、**A03 データ科学**、**A04 物性評価・解析**の四つの研究項目からなる。研究項目間の連携にあたっては、本領域の要である**二つの学融合**を二つの柱として、図 11 に示す連携体制を構築した。学融合の一つは、A01 班が合成するハイパーマテリアルを A02 班が構造評価・決定し、A04 班が物性評価・解析を行うサイクル、もう一つは、A01 班が提供する物質情報をもとに A03 班がハイパーマテリアルの機械学習予測を行い、その予測結果にもとづいて A01 班が物質合成を行い、A02 班および A03 班へと繋げるサイクルである。総括班はポストプレイヤーの役割を担い、この二大サイクルが円滑に回るように采配することで研究項目間の密接な連携体制の構築を図るとともに、同時に領域のメインの研究を推進した。実際、ハイパーマテリアルズインフォマティクスの創成は、この**研究項目間連携の花**であり、本領域が無ければ決して生まれることが無かった世界に誇る成果である。

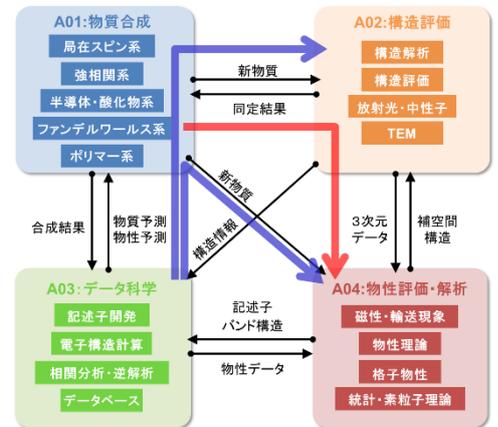


図 11. 各研究項目間の連携体制

【計画研究及び公募研究間の連携体制】

本領域が掲げる二つの学融合、及び、本領域の主要目的である高次元性・準周期性・高対称性に関連する物性の追求に公募班メンバーを組み込むために、総括班は、次の4つの取組を実施した。(1) 領域全メンバーへのサイトビジット(計2回、のべ82名)を行い、領域目的に沿う連携テーマの企画・提案を行った。(2) A01 合成 - A02 構造解析 - A04 物性解析間の連携サイクル推進のために、班内・班間留学システム(のべ33名)、研究者循環システム(のべ160名)の積極的活用による連携の実質化を図った。(3) 異分野研究者を対象とするハイパーマテリアルセミナー(計38回)、準結晶研究会(計5回)、若手研究会(計5回)を「学融合の場」として位置づけ、連携研究の実質化を図った。(4) 本領域予算により導入した全ての大型装置(計16件)の詳細情報・測定依頼方法を領域ホームページに公開し、共用の実質化を図った。以上の4つの取組に加えて、2019 年末からの COVID-19 蔓延への対応として研究補助員を4名増員し、人が移動しなくとも領域内の依頼測定に常時対応できる体制を敷き、連携・共用の実質化を図った。以上の取組により構築された連携状況を図 12 に示す。この連携体制により、領域内にのべ141件の共同研究が立ち上がり、そのうち94件が論文出版まで至った。

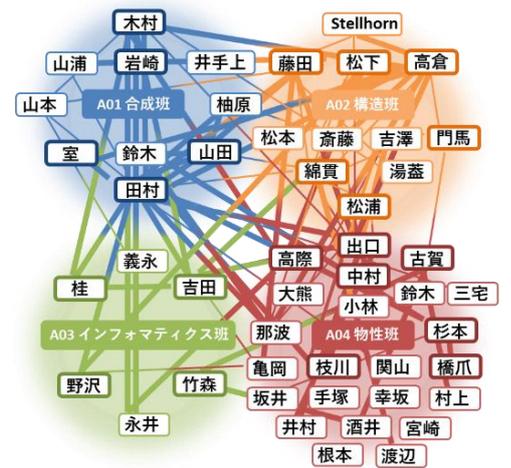


図 12. 領域内の連携状況
(太線は論文発表に至った連携を示す)

連携体制の実態としては、計画研究と公募研究間の共同研究は63件を数え、公募班一人あたり2.2件に上る。また、計画研究と公募研究間の共同研究により出版された論文数の推移を図 13 に示す。2020、2021 年度では同じ班内での連携論文がそれぞれ約4割と6割と比較的多かったのに対し、後半の2年間では約9割が班間の共同研究による論文となっている。その結果、実に、本領域から出版された約7割もの論文が班間の共同研究によってもたらされた。これは、プロジェクトの前半では、専門性の近い研究者との共同研究がメインだったのに対し、後半では、上述の取組により、本新学術領域を契機に知り合った研究者間の異分野融合型の共同研究が活性化したものとして理解できる。

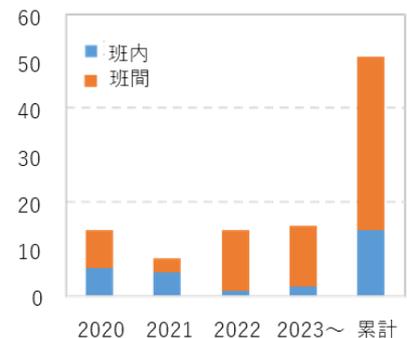


図 13. 計画研究—公募研究間の共同研究による論文数の推移

9 研究費の使用状況

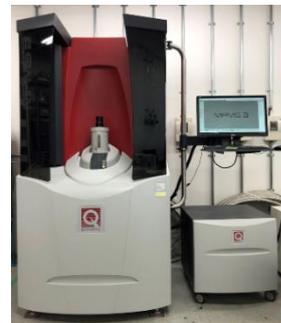
研究領域全体を通じ、研究費の使用状況や効果的使用の工夫、設備等（本研究領域内で共用する設備・装置の購入・開発・運用、実験資料・資材の提供など）の活用状況について、総括班研究課題の活動状況と併せて具体的かつ簡潔に2頁以内で記述すること。また、領域設定期間最終年度の繰越しが承認された計画研究（総括班・国際活動支援班を含む。）がある場合は、その内容を記述すること。

まず、本領域全体の研究費の大部分を占める設備備品費について活用状況とその効果について述べる。

【総括班予算で購入した主な設備備品】

●磁気特性測定システム(MPMS3)(ヘリウム再凝縮装置付属)(A01 田村・理科大)

本装置は、総括班主導のもと、領域内で合成された新物質の磁性評価を一手に引き受ける基幹装置とした。領域ホームページを通じて共用利用を促進するとともに、専任技術員を一名配置して試料郵送による依頼測定を常時受け付けることで、共用の実質化を図った。さらに本装置に、交流磁化測定・3ヘリウム冷凍機による極低温測定(0.4K~)・高圧測定(~1.3GPa)オプションが拡張され、様々なニーズにきめ細やかな対応が図られた。本装置は、ヘリウム再凝縮装置が付属しているため、ほぼ24時間フル稼働した。これまでの利用者数は42名、利用回数は940回、本装置を利用して得られた論文成果が17件と、領域内の共同研究の推進に多大な貢献をなした。本装置を利用した特筆すべき成果として、強磁性・反強磁性準結晶の発見、夥しい数の超伝導体の発見、ファンデルワールス準結晶の超伝導転移の発見が挙げられる。



【計画研究で購入した主な設備備品】

以下に挙げた設備備品を含め、本新学術領域予算で購入した全ての大型備品(16件)を領域ホームページを通じて共用機器利用を促進することにより、**共用の実質化**を図った。

●単結晶 X 線構造解析システム (A02 高倉・北大)

本装置は領域内で合成されるハイパーマテリアルの結晶学的な特性評価および結晶構造解析に活用された。試料郵送による依頼測定を常時受け付け、ハイパーマテリアル構造解析の世界的第一人者である A02 高倉による結晶構造解析まで、きめの細かい対応を図った。本装置は、約 10 μm までの微小結晶の測定が可能のため汎用性がすこぶる高く、通常の粉末 X 線回折では不可能な多相試料の相同定にも威力を発揮した。本装置で構造解析を行い発表された論文が7件に上り、領域内の連携研究の推進に大きく貢献した。



●物理特性測定システム(A04 出口・名大)

本装置 (PPMS9)は、低温・磁場下における比熱・輸送特性測定において領域内外で合成される新物質の物性評価に広く貢献した。また、本装置は自動測定が可能のため、試料郵送による依頼測定を常時受け付けることで、きめの細かな対応が図られた。これまでの利用者数は13名、利用回数は56回に達し、特に、準結晶・近似結晶の新物質開発の初期段階における試料物性評価において大きく貢献した。



●中性子背面反射型分光器クライオスタット(A02 松浦・CROSS)

本クライオスタットは J-PARC 内に設置されたため、**共用の実質化**を図るために、領域発足後ただちに、計画班メンバー(A01 田村・A02 高倉・A02 松浦・A04 枝川・A04 出口)でチームを組織し、J-PARC の長期課題(3年)に応募した。この申請が首尾よく採択され、十分なマシンタイムを確保することができた。その効果もあって、2021年度より、本装置は、ハイパーマテリアルのスピンドイナミクスをはじめ、領域内の連携研究に広く活用された。本装置を利用して得られた成果の代表例として、磁気秩序を示す近似結晶における史上初のマグノン検出や Al-Pd-Mn 系準結晶における低温でのフェイゾン検出が挙げられる。



●高温比熱測定装置(A04 高際・NIMS)

本装置は、広くハイパーマテリアルの高温比熱の測定に活用された。特に、ハイパーマテリアルの異常高温比熱の研究に大きく貢献し、準結晶の特異な余剰比熱の存在を決定づけるとともに、機械学習分子シミュレーションによる準結晶の異常高温比熱の解明にも実験面から大きく貢献した。



●高温型熱分析装置(A02 藤田・東北大)

本装置は、領域内から広く測定依頼を受け付け、特に、A01 物質合成班、A02 構造解析班との共同研究で頻りに利用された。本装置は付属の Ar ガスフローユニットを用いて酸素分圧を低減し、酸化の影響を排除した測定が可能であることが大きな特長である。このため、高温での相形成挙動の調査を通して効率的な試料作製に役立てられ、6 件の論文発表をはじめとする領域内の連携研究の推進に大きく貢献した。



次に、総括班予算の大部分を占める学会開催費とアウトリーチ活動について、その活用状況について述べる。

【国外・国内学会の主催による連携の活性化および若手研究者育成】

本領域主催の国際会議として、Aperiodic2022 (2022 年 6 月 20 日～24 日、北海道大学、旅費補助 4 名) と International conference on complex orders in condensed matter: aperiodic order, local order, electronic order, hidden order (ICCOCM) (2023 年 9 月 24 日～29 日、エビアン、フランス、旅費補助 8 名) を開催し、総括班予算により、領域内外の若手研究者をはじめ、関連研究者の学会参加を支援することで、領域内外の連携の活性化を図った。特に、ICCOCM は、学術変革(A)「超秩序構造科学」との共同開催であり、領域間連携研究を活性化できたことは大きな成果である。本領域主催の国内会議としては、領域会議(計 11 回、旅費補助計 38 名(うち、外国研究者招聘 1 名))、準結晶研究会(計 5 回、旅費補助計 40 名(うち、外国研究者招聘 1 名))、若手研究会(計 5 回、旅費補助計 29 名(うち、外国研究者招聘 3 名))を開催し、2011 年ノーベル化学賞受賞者のシェヒトマン教授をはじめ第一級の外国人研究者との対面での交流を通じて若手研究者の国際感覚を涵養し、また、最新の研究成果の共有を図ることで領域内および国際共同研究の芽を発掘する場を提供した。また、準結晶研究会においては若手賞(蔡安邦賞、受賞者数のべ 10 名)を新設し、優秀な発表をした若手研究者を表彰・奨励することで、若手研究者育成を図った。また、若手研究会は若手研究者が主体となって企画するものであり、若手研究者の異分野交流の実質化に大いに貢献した。

【アウトリーチ活動】

領域ホームページや領域ニュースレター(計 8 回、計 3200 部印刷・発送)による基幹的な成果配信はもちろんのこと、広く国民に向けた動画配信にも注力した。特に、小中学生向けには『わからないから面白いハイパーマテリアル』シリーズ(計 4 回)の動画作成を行い、高校・大学生・一般向けには『ヨビノリ学術対談』企画を通じて、ハイパーマテリアル研究の面白さを配信した。さらに、国立科学博物館との共催で、小中高生および一般向けの講演・工作企画を行い、『ヒンメリ工作体験』では正 20 面体の工作を通して、ハイパーマテリアルに親しみを持ってもらえるよう工夫した。

【研究費の効果的使用の工夫】

研究費の効果的使用の工夫としては、A01 合成 - A02 構造解析 - A04 物性解析間の連携サイクルの円滑な推進のために、班内・班間留学システム(のべ 33 名)、研究者循環システム(のべ 160 名)の積極的活用による**連携の実質化**を図ったことを挙げる。この取組により、領域内に 141 件以上もの共同研究が立ち上がり、そのうち 94 件が論文出版まで至った。また、更なる連携促進のてこ入れとして、本領域予算により導入した全ての大型装置(計 16 件)の詳細情報・測定依頼方法を領域ホームページに公開し(<https://www.rs.tus.ac.jp/hypermaterials/kankeisya/index.html#equipment>)、**共用の実質化**を図った。以上の取組に加えて、2019 年末からの COVID-19 の蔓延を受けて、研究補助員を 4 名増員し、人が移動しなくとも領域内の依頼測定に常時対応できる体制を敷き、**連携・共用の実質化**を図った。この取組において、総括班予算より依頼試料作製のための原料費や消耗品費を全額補助することで、さらに連携の促進を後押しした。特に、研究補助員が試料合成を請け負うことで、特定の研究者に負担が集中しないよう配慮した。これらの取組の効果として、サンプル作製・測定の受注は 1300 件以上にも及び、各計画研究間の連携の推進に著しく貢献するとともに、また、本サイクルを円滑に回す上でも大きな成果が挙げられた。

【最終年度繰越の内容】

本領域の最終年度に反強磁性準結晶や超伝導準結晶をはじめとする重要な発見が相次いで為されたため、総括班予算を繰越すことにより、翌年度に開催される主要な国際会議(Aperiodic2024、ICM2024 など)において本新学術領域の成果発表を行う旅費を計上した。

10 当該学問分野及び関連学問分野への貢献の状況

研究領域全体を通じ、本研究領域の成果が当該学問分野や関連学問分野に与えたインパクトや波及効果などについて、「革新的・創造的な学術研究の発展」の観点から、具体的かつ簡潔に1頁以内で記述すること。なお、記述に当たっては、応募時に「①既存の学問分野の枠に収まらない新興・融合領域の創成を目指すもの」、「②当該領域の各分野発展・飛躍的な展開を目指すもの」のどちらを選択したか、また、どの程度達成できたかを明確にすること。

【当該学問分野への貢献】 応募時には「①既存の学問分野の枠に収まらない新興・融合領域の創成を目指すもの」を選択したが、本頁で述べるようにこの目的は十分に達成された。まず、「ハイパーマテリアル」は、本領域が提起した新物質概念であり、本領域の研究・広報活動により、物質科学分野において広く市民権を得るに至っている。既存の学問分野「準結晶」に比して、ハイパーマテリアルは同一の高次元周期構造の実空間への射影によって得られる準結晶と近似結晶を統一した上位概念であり、本領域により、両者が一つの物質群として統一的に理解されるようになった。二つの例を挙げると、Tsai 型希土類系近似結晶の磁気秩序の平均価電子数依存性が明らかにされ、それを利用して準結晶の磁気秩序が発見された。準結晶・近似結晶・通常結晶の組成を学習した機械学習モデルでは、ハイパーマテリアルか通常結晶かどうかを判定する二値分類タスクにおいて、ハイパーマテリアルの予測精度が95%以上にも達した。

当該学問分野への貢献は顕著である。例を挙げると、Tsai 型希土類系近似結晶において、平均価電子数の増加と共に、反強磁性、強磁性、スピングラス相へと変化する磁気相図が明らかにされ、強磁性・反強磁性準結晶の両方が領域設定期間内に発見された。理論面では、正20面体クラスターの頂点を占める希土類スピンの特異な磁気構造が次々に明らかにされた。特筆すべきは、想定外にも、Ta-Te系フェンデルワールス準結晶の超伝導が発見されたことである。超伝導の理論に関しても、周期系のBCS超伝導状態とは質的に異なる状態が予言された。中性子回折実験では、準周期性に由来する、黄金比でスケールされる階層的擬ギャップ構造や非相反フォノンシグナルが初めて観測された。機械学習分子動力学計算により、高温異常比熱の原因がフェイゾン自由度と密接に関連したAlの原子拡散にあることが解明された。さらに準結晶・近似結晶の熱電性能において、n型でもp型でも世界記録が更新された。

【関連学問分野への貢献】 「ハイパーマテリアル」の概念は、高次元空間を用いて記述される非整合結晶にも拡張された。公募班の募集要項に不整合変調構造や複合結晶などを含む非周期結晶全般を対象に含めたが、それが功を奏して、第一期には、フェンデルワールス結晶のヘテロ界面、整合・不整合多重周期結晶、ミスフィット層状カルコゲナイドの研究者が加わり、第二期には、フェンデルワールス結晶のヘテロ界面の研究が継続すると共に、新たに非整合チムニーラダー型化合物の研究者が加わった。代表的な成果として、フェンデルワールス結晶のヘテロ界面における特異な光起電力効果の発見が挙げられる。

非整合結晶分野への貢献として、2021年12月に開催したMRM (Materials Research Meeting) 2021のB1セッションと2022年6月に開催したAperiodic2022 (第1回領域国際会議) の二つの国際会議を挙げる。MRM2021のB1セッションでは90件余の研究発表のうち本領域からの発表が60件を占め、総括班評価者からは『世界での我が国の本分野への貢献の大きさを示しており、高く評価すべきである(竹内)』、『本領域のメンバーが中心となり、海外から著名なスピーカーを迎え、MRM2021のシンポジウムが企画されたことを高く評価したい(石井)』、『余剰次元をもって記述することの出来る非周期系など、Aperiodic国際会議が対象としてきた分野への広がりが見られることを評価したい(石井)』などの高評価が相次いだ。2023年9月に開催したInternational conference on complex orders in condensed matter: aperiodic order, local order, electronic order, hidden order (第2回領域国際会議) は、学術変革領域(A)「超秩序構造科学」との共同開催であるが、「ハイパーマテリアル」概念がアモルファス分野にも有効であることが相互で認識された。特筆すべきこととして、本領域の強磁性準結晶の発見を受けて、国際結晶学会(IUCr2023)に領域代表の田村を議長とするシンポジウム“Magnetic order in aperiodic systems”が新たに創設され、磁性ハイパーマテリアルが新たな学問分野として国際的に認知されたことを挙げる。

本研究領域が、既存の学問分野を著しく拡張し関連領域に波及した成果として、データ科学分野との学融合がある。A03研究代表者にデータ科学の専門家を迎えて、世界初のハイパーマテリアル・インフォマティクス創成を推進し、ハイパーマテリアル組成を予測する機械学習モデル(TsAI: Tsai's Serendipity AI)と、粉末X線回折図形から混相試料中のハイパーマテリアルを判別できる機械学習モデルの構築に成功した。また、約1,400個の組成、43個の三元系状態図、約900個の物性の温度依存性を収録したハイパーマテリアル・データベース(HYPOD: Hypermaterials Open Database)も構築された。これらはいずれも、準結晶分野・データ科学分野への著しい貢献であるとともに、本領域が生んだ宝でもある。

11 若手研究者の育成に関する取組実績

研究領域全体を通じ、本研究領域の研究遂行に携わった若手研究者（令和6年3月末現在で39歳以下。研究協力者やポスドク、途中で追加・削除した者を含む。）の育成に係る取組の実績について、具体的かつ簡潔に1頁以内で記述すること。

若手研究者育成に係る取組としては、**領域申請書に掲げた取組と領域発足後に弾力的に導入した取組**の二つがある(図14)。前者としては、総括班主導の共同研究の提案、班内・班間留学システムおよび研究者循環システムの推進、後に詳述する若手研究会の開催がある。提案した共同研究テーマは60件以上に及び、また、班内・班間留学システムの利用者は33名、研究者循環システムの利用者は160名に上り、これらの取組が若手研究者の領域内共同研究へのダイナミカルな編成に大いに役立った。また、領域発足後に導入した取組としては、**ハイパーマテリアルセミナーを38回、機械学習ハンズオンセミナーを2回開催**し、若手研究者が領域内の様々な異分野の研究の最先端に触れられる場を提供し、特に後半では学生や若手研究者自身による発表を多く開催した。ハンズオンセミナーはハッカソン形式で開催され、領域内の6名の若手研究者が3日間に渡って議論しながら、準結晶の組成を予測する機械学習モデルを作成した。その内1名は、本セミナーで学んだ技能を生かして**粉末XRDからの準結晶の判別モデルを構築し、新規準結晶を発見**するなど卓越した成果を挙げている[Uryu *et al.*, *Advanced Science* **11**, 2304546 1-9 (2023).]。さらに、新たな若手育成プログラムとして、日仏独を中心とした国際スクールを2021年6月に企画・開催し、日欧から連日約40名の参加者を得て、国際感覚に富む広い視野をもった若手研究者の育成を後押しした。

若手研究会は、若手研究者が主体となって企画し、ふだん議論する時間の十分取れない、研究の細部や魅力について情報交換するインフォーマルな場を提供することを目的とした。第1回(2020年5月、参加者67名)、第2回(2021年3月、参加者70名)、第3回(2022年2月、参加者81名)はコロナ禍のためオンライン開催としたものの、第4回(2022年12月、KKR京都くに荘、参加者33名)、第5回(2023年9月、東京理科大学 北海道・長万部キャンパス、参加者19名)はオンサイトで開催し、寝食を共にしながら、学生を含む若手研究者の交流による異分野融合を図った。特に第4回は、海外から一流研究者を招聘し、発表や議論は原則英語で行い、学生の国際感覚の涵養を図った。加えて、総括班主導の新たな取組として、第2回若手研究会からは39歳以下の若手研究者を対象に**蔡安邦賞**(全4回)を創設した。本賞は、領域内に限定せず、広く当該分野の発展に貢献した若手研究者を奨励・鼓舞する目的で創設したものである。領域内外の審査員による厳正な審査の結果、これまでに若手研究者4名[領域内3名]、学生6名[領域内3名]に本賞を授与した。さらに国際支援活動の一環として、国際的な若手研究者育成プログラムを企画・実施した。特に、フランスで発足したIRN(International Research Network)-APERIODICとの連携を強め、IRN-theory session(2021年6月、参加者30名)を開催し、若手研究者の国際感覚の涵養および研究力の向上を図った。また、IRNおよび学術変革領域研究(A)「超秩序構造科学」との共催で、**第二回領域国際会議をフランス(エビアン)で開催**(2023年9月、参加者123名)し、口頭発表62件とポスター発表48件の中から、本領域から2名の学生[A01,A03]が若手奨励賞を受賞している。

本領域の若手研究者育成の成果として、就職状況に関しては、研究職(常勤・無期雇用)[令和元年度よりそれぞれ2,2,2,1,3名]、非常勤(有期雇用)[令和元年度よりそれぞれ3,0,3,0,0名]、研究職以外[令和元年度よりそれぞれ0,1,0,0,0名]となっており、特筆すべきは、**計画班メンバー3名、公募班メンバー4名が大学や研究所の無期雇用の主任研究員級の職を得た**ことである。また、ハイパーマテリアルをテーマとする博士学生が17名に上り、うち14名が学位取得に至るなど学術継承にも一定の成果が挙げられている。加えて、領域内の**若手研究者の受賞が50件に及び**、若手育成の面でも一定の効果が挙げられている。その内訳も、日本物理学会若手奨励賞(領域6)が5件、令和3年度文部科学大臣表彰若手科学者賞[井手上(A01)]、科学技術への顕著な貢献2020(ナイスステップな研究者)[桂(A03)]、第4回(2023年)米沢富美子記念賞[竹森(A03)]、COP21の表彰制度「ミッション・イノベーションチャンピオンプログラム」[高際(A04)]など、**権威ある賞が目立つ**。特筆すべきは、第1回(2024年)Ted Janssen and An-Pang Tsai Prize[山田(A01)](国際賞)の受賞であり、本領域の若手研究者の活躍が国際的にも評価されている。

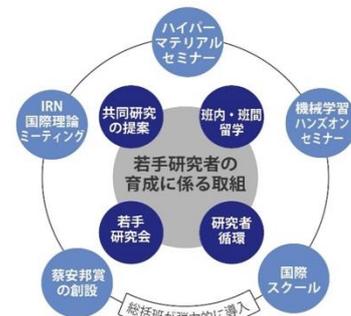


図14. 若手研究者育成の取組

12 総括班評価者による評価

研究領域全体を通じ、総括班評価者による評価体制（総括班評価者の氏名や所属等）や本研究領域に対する評価コメントについて、具体的かつ簡潔に2頁以内で記述すること。

本領域の評価をお願いした総括班評価者の氏名と所属は下記の通りである。

竹内 伸 東京大学 名誉教授、東京理科大学 元学長
石井 靖 中央大学 教授
伊藤 聡 公益財団法人計算科学振興財団 チーフコーディネータ
佐藤 憲昭 愛知工業大学 教授
石政 勉 北海道大学 名誉教授

上記の5名の評価者から、計11回の領域会議で、以下のような評価をいただいた。

【領域全体】

- ・コロナ蔓延による劣悪な研究環境の中で、当該分野の発展に貢献したことは評価すべきである。合成グループで作製された試料が他のグループに供給されて、様々な観点からの研究に用いられたことは評価できる。本プロジェクト以前の状況に比べて、確実に新たな知見が得られたが、「高次元物質科学の創成」という大目標に対してはさらなる発展を期待したい。(竹内)
- ・従来の準結晶研究を核にそれを大きく広げる形で計画された本新学術領域研究において最も大きな成果は、金属物理や材料科学を中心とした分野とは異なる分野の研究者が参入したことにより、新しい視点や方法論が導入され研究分野全体が活性化されたことである。f電子系を扱って来た研究グループがメスbauerや超音波測定など様々なツールを駆使してハイパーマテリアルの研究に取り組んだ。こうした新しい視点からの研究が、長く準結晶研究に取り組んで来た研究グループにも大きな刺激となった。また、研究グループが相互に連携しあい、試料や情報の提供を通して共同研究が進められた様子も伺え、そうしたネットワーク作りも大きな成果であった。そして、機械学習分野の研究者の奮闘によりデータ駆動型と呼ばれる研究が端緒についたことも大きな進展である。コロナ禍という困難な時期を経ながら、着実に研究を進めて来た研究者に心から敬意を表し、本研究を通じて培われたネットワークを活かして研究がさらに進展することを祈る。(石井)
- ・本領域で実施された研究から、準結晶が示す豊かな物性が明らかになったこと、さらにはポリマー系や触媒能といった、これまでの準結晶科学では取り込まれていなかったところにも優れた成果を得た。従来の研究開発アプローチとデータ駆動的アプローチの優れた協調が見られたこと自体が大きな成果である。(伊藤)
- ・若手研究者(大学院生)の報告は、いずれもしっかりした発表で、人材育成の面でも本事業は貢献していると感じた。領域会議のような場で“場数を踏む”ことが大事である。(伊藤)
- ・大変素晴らしい内容の研究であった。準結晶における磁気長距離秩序の発見だけでなく、Ta-Te準結晶の超伝導の発見に至ったことは高く評価され、さらに準結晶フォノンにおける特異連続性と非相反伝導の成果は当初の期待以上のものであり、「A+」の評価に値する。(佐藤)
- ・実験グループ間の連携については、AlPdMn準結晶試料が高エネルギー中性子分光器を用いたフォノン実験測定に提供され、磁性準結晶試料が単結晶中性子非弾性散乱実験に提供され、連携がうまくいった例である。実験と理論の連携については、異常高温比熱の実験と機械学習シミュレーションの連携は成功例である。磁性の理論と実験は、ハイパーマテリアルの磁気物理学にさらなる発展をもたらすと期待される。(佐藤)
- ・公募班は、計画班ではカバーしきれない領域をカバーする役割を担っている。特に、後期公募で選ばれたものは計画班と相補的な成果を出したことは評価に値する。(佐藤)
- ・領域代表のリーダーシップによって、コロナ禍にも関わらず科研費「新学術」として十分な成果があった。実験と理論が噛み合ってきたという印象を持った。特に、物質に寄り添った理論家が活躍されているのが良かった。物質の観点でいうと、まだTsai型正20面体準結晶が中心だが、少しずつ他の対称性の準結晶にも広がっているのも良い傾向だと思った。物性面での理解は進んできた。準結晶の形成に関する機械学習による構造予測は進んでいて素晴らしいが、準結晶がどうしてできるかに関する研究がもう少し欲しい。(石政)

【A01班：ハイパーマテリアルの合成】

- ・準結晶の磁性に関して磁性希土類元素を含む蔡型 20 面体相における特異なスピン配列による強磁性の発見と、A04 班での結晶場基底状態の解析に基づく理論的解明という大きな成果が得られた。(竹内)
- ・バンド計算と実験に基づいて半導体準結晶および近似結晶の探索が精力的に行われると共に、高い熱電変換性能実現の努力が強力に遂行されている。Al-Pd-Ru 準結晶および 2/1 近似結晶が縮退半導体であることが示唆された。また、Al-Si-Ru 合金について高性能熱電材料を根気よく追求し、半導体ハイパーマテリアルとして 700 °Cでの性能指数 ZT の値が 0.42 の高い値を得たことは評価に値する。(竹内)
- ・多相粉末 X 線回折図形から準結晶相を同定する機械学習モデルは、機械学習の一つの成果で、新学術領域の目玉とした方向性の成果として評価したい。(石井)

【A02 班：ハイパーマテリアルの構造】

- ・コヒーレント X 線を用いてハイパーマテリアル内部の原子構造のダイナミクスを測定する技術開発を進展させた。VESTA と名付けられた構造可視化のプログラムの次元の拡張が報告された。X 線発光原子分解ホログラフィー技術を発展させ 2nm 範囲の局所原子構造の観察が可能になった。この手法を用いて多くの準結晶で見られる chemical disorder の実態解明が期待される。超伝導が見出された Al-Zn-Mg 準結晶合金の原子構造解析を行い、2/1-1/1-1/1 近似結晶を発見したことなど、いずれも評価に値する。(竹内)
- ・精度が格段に向上した中性子 TOF 測定により、準結晶の振動スペクトルに擬ギャップ構造が見えたという報告は、興味深い成果である。フォノン異常とフェイゾン揺らぎの関連に言及されている点が興味を引いた。波数空間や周波数空間に非対称な信号が観測されるという報告が大変に興味深かった。従来あまり指摘されていなかった現象で、理論的な考察も新学術領域研究のグループから提案されることを期待したい。(石井)
- ・非常に複雑な近似結晶などの構造の解析(理解)にカノニカルセルタイリングのアイデアを適用している点が興味深い。この方法の有用性をさらに実証し、発展されることに期待したい。(石井)

【A03 班：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】

- ・データ科学的なアプローチを積極的に取り入れた結果、分別器・予測器を開発することに成功し、その結果、探索が効率化され、実際に新規準結晶が得られたことは大きな成果である。また、Hume-Rothery rule の再発見など、機械学習モデルの背後にある学理に迫るような結果も得られている。ここで強く指摘しておきたいことはこうしたデータ科学的アプローチが本事業で可能となった大きな要因として、関連する論文や領域内での実験から丹念にデータ収集し、これを機械学習に使える形に整備したことの重要性である。こうした作業は研究そのものではないので、軽んじられがちであるが、データ駆動型研究開発の基盤的な活動である。本データ基盤をさらに準結晶コミュニティで活用して、よりデータ・情報がリッチになる好循環を期待している。(伊藤)
- ・超伝導に関する発表で「周期系と準周期系でギャップ端の状態密度の形状が異なることから、これをトンネル電流の測定で検証できる」という指摘は、ペンローズ格子という模型の議論と実験的研究が結びつく可能性として興味深かった。(石井)

【A04：ハイパーマテリアルの物性と hidden order の探索】

- ・結晶場理論に基づく蔡型準結晶の磁気構造解析により、A01 班で発見された強磁性準結晶とメタ磁性転移が理論的に解明されたことは評価すべきである。(竹内)。
- ・準結晶、近似結晶中のフェイゾン自由度に関連して生じる以下の 3 種の実験の実施：(1) フェイゾン励起で生じる高温での熱膨張係数の増大、(2) 各種ハイパーマテリアル合金について 1/1 近似結晶、2/1 近似結晶、準結晶の順にフェイゾン励起によって生じる高温比熱の系統的な上昇、(3) フォノン・フェイゾン結合定数をフォノン歪みの導入によって変化する粉末 X 線回折の半値幅の変化から求める実験。これらの世界に先駆けたフェイゾンに関わる信頼性の高い実験結果の取得は、高品位の試料作製とともに高性能の測定装置の実現に負うところも大きい。(竹内)
- ・層状 2 次元準結晶合金 TaTe 単結晶の良質試料の作成とその超伝導の研究報告がなされた。今後、一群の遷移金属-カルコゲナイド合金系を探索することにより同種構造あるいは関連構造の新規準結晶の発見を期待したい。(竹内)
- ・Au-Al-Yb 系準結晶における量子臨界現象は本新学術領域研究の大きなテーマであった。正 20 面体の回転対称性だけが原因ではないはずで、低エネルギー磁気ゆらぎの研究に注目したい。(石井)