

領域略称名：ハイパー物質
領域番号：6106

令和3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）」
に係る中間評価報告書

「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3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 研究領域の目的及び概要	5
4 審査結果の所見で指摘を受けた事項への対応状況	7
5 研究の進展状況及び主な成果	9
6 研究発表の状況	14
7 研究組織の連携体制	19
8 若手研究者の育成に関する取組状況	20
9 研究費の使用状況・計画	21
10 今後の研究領域の推進方策	22
11 総括班評価者による評価	24

研究組織

(令和3年6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	4
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 物質理学専攻 講師	7
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、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 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 機能性材料研究拠点 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たハイパー物質表面の状態解	令和2年度 ～ 令和3年度	亀岡 聡	東北大学 多元物質科学研究所 教授	1

	析と 新奇触媒機能創出				
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 ハイパーボルテックスマター	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 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 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た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
公募研究 計 20 件 (廃止を含む)					

[1] 総：総括班、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 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。

【研究の学術的背景】

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、現在までに100を超える合金系で準結晶が見出されている。特に近年、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が存在することが発見され、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」に結晶の定義を変更したことは周知の事実である(図1)。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これで解決されるものではなく、今や、「周期性」に根差した既存の学問体系を超える**新たな学術領域を創造する**フェーズに入っており、それが本領域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できる。従って、6次元空間の単位胞構造を決めることで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最初の「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($Cd_{5.7}Yb$)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。しかしながら、高次元空間を用いることの本質的な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)に威力を発揮すべきものであり、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

【領域の研究目的】



図2. 本領域の研究目的

本研究領域で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・命名し、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(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物性を理解・解明する上で鍵を握ると考えられる。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記述し理解することで、**創造的で革新的な学術体系の構築を目指す。**

一方、物質創製の次元では、2000年の蔡らによる二元系 $Cd_{5.7}Yb$ 準結晶の発見以降、この $Cd_{5.7}Yb$ 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てきた。この結果、珍しい規則-不規則相転移の発見をはじめ、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性体や初の半導体など、これまで物質科学に無かった多彩な現象や物質が明らかにされ、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無く、Bloch の定理に基づいた既存の理論体系では全く太刀打ちできないためである。これらの状況を踏まえて、ハイパーマテリアルにおける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・スピンの秩序を高次元で明解に記述し、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初めてデータ科学を適用し、その予測に基づいて新規ハイパーマテリアルを合成し、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可視化し、そこに潜む法則性を見出すことである。特に次の三つの実施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相安定性機構と設計原理を明らかにし、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フレームワークを構築する。(3)本領域が目指す物質観のパラダイムシフトを牽引し、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電子系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はじめて両者が合流した。そこで、準結晶の強相関物性を高次元空間で捉えるという両者の組織的な共同研究を実現する。もう一つは、準結晶分野とデータ科学分野との学融合である。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および個々の研究室に蓄積されている。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の相安定性に関与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メカニズムを明らかにし、体系的な設計指針を得る。これにより新物質の合成ペースを大幅に加速させる。

【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」で可視化することを試みる。期待される成果として、(1)実空間における複雑な秩序の背後に隠れた規則や法則性を明らかにし、その法則性を説明するための**新たな学理が創造される**ことである。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、高次元における物理学として我々の物質観にパラダイムシフトを引き起こすものである。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。これまで金属に限定されてきたハイパーマテリアルが、あらゆる物質系、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)「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無い問いに対して一つの解答が得られることも我々の**物質科学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すものであり、ここに、**本領域の創造性と革新性がある**。

4 審査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とその対応状況を下記に記す。

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。

本ご指摘を踏まえて本領域では、(1)データ科学とハイパーマテリアルの学融合の速やかな推進、及び、(2)A01 合成 - A02 構造解析 - A04 物性解析間の連携および連携サイクルの円滑な推進、の二つを領域の最重要課題に定め、総括班主導で以下に述べる取組を行った。

【データサイエンスの有効性・有効範囲の見極めに関する取組】

最重要課題の一つである「データ科学とハイパーマテリアルの学融合」に関しては、実験・計算系グループが一体となってデータ駆動型研究を実践し、本領域の始動から約2年間、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できた。これまでに発見された準結晶・近似結晶・周期結晶の膨大な化学組成を学習データとし、ハイパーマテリアルの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。その結果、ハイパーマテリアルの予測精度はおよそ76%、結晶の予測精度は90%に達することを突き止めた。現在、このモデルを用いてハイパーマテリアルの候補組成を予測し、新材料の合成に取り組んでいる。特にA01班の山田らは、Sc-Zn-Ti系でハイパーマテリアルの発見に成功している。

また、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することで、準結晶と近似結晶の相形成に関するある法則が明らかになってきた(図3)。このルールは原子のファンデルワールス半径や電気陰性度等に関する五つの単純な数式で表される。これらの条件は新しい準結晶を探索するための新しい設計指針になる可能性がある。また、モデルには他にも多くのルールが隠されている可能性がある。機械学習のブラックボックスモデルに埋め込まれたルールセットを網羅的に調べることで、準結晶の形成メカニズムを解き明かしたい。本領域が始動するまではデータ科学の活用は準結晶研究における未踏課題であったが、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メカニズムの解明に有効な手段となりうる可能性が明らかになった。

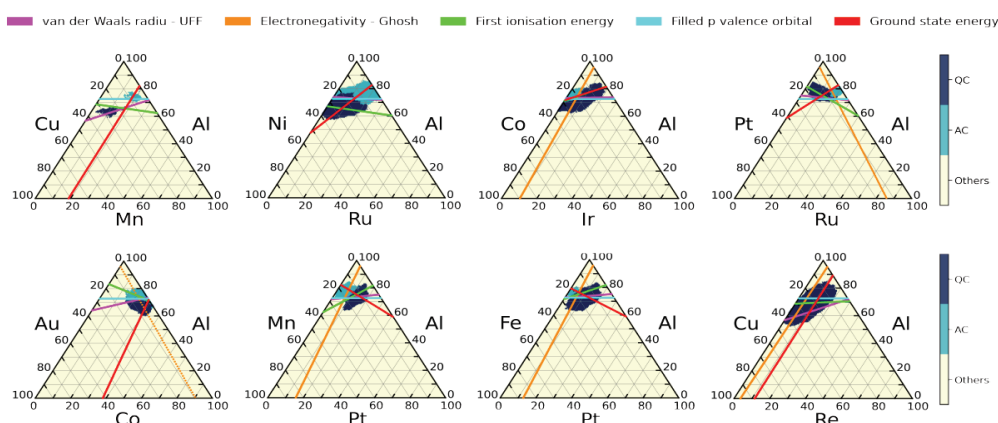


図3. 機械学習による準結晶の形成ルールの発見。8種類の三元系合金に対する機械学習の予測相図(紺:準結晶、水色:近似結晶)。直線は機械学習が同定した五つのルールを表す。これらの五つの直線の合流点に準結晶相が存在している。

【データサイエンスを実績の少ない非金属系に拡張するための工夫と見通し】

以上の重点的取組により、実績の少ない非金属系(半導体・セラミックス・ポリマー)のうち、半導体系に対しては、上記の学習モデルを拡張できる見通しを得ている。金属はバンドギャップを持たないが、

ハイパーマテリアルは一般にフェルミ準位における状態密度が小さく、半導体に近いものまでである。この点に関し、最近、A02 藤田と A04 出口らの共同研究(Sarkar *et al.*, Phys. Rev. Research 3 (2021))により、Al-Pd-TM系においてフェルミ準位の状態密度が顕著に落ち込んだ半導体に近いハイパーマテリアルが発見された。従って、バンド計算が可能な近似結晶に対して負のバンドギャップを導入することが一つの選択肢であるが、準結晶に対してはバンド計算ができないという問題がある。そこで最良の選択肢として、電気伝導率(σ)の温度依存性の実験データを採用すれば、 σ の大きい金属から小さい金属を経て、半導体へと連続的に繋げることが可能となる。上記の学習モデルは、現時点で純ボロン以外で初めての半導体ハイパーマテリアルである Al-Ru-Si 系近似結晶の予測にも成功している。従って、半導体ハイパーマテリアル予測が可能と考えている。上記の学習モデルに σ の温度依存性を学習させ、実験計画法によって外挿領域に探索を広げることが特に有効と考えており、是非実施したい。一方、セラミックス系やポリマー系ハイパーマテリアルの探索には、新たな学習モデル構築の必要性を正直感じている。従って、新規のセラミックスやポリマー系ハイパーマテリアルの創製にあたっては、機械学習のみならず、ご指摘にあるように、合成→構造解析→物性評価のサイクルを効率的に回し、ハイパーマテリアル生成の実験的条件を見出すことが新たな学習モデルを構築する上で重要な知見を与えるものと考えている。

【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】

最重点課題の二つ目は、A01 合成 - A02 構造解析 - A04 物性解析間の連携および連携サイクルの円滑な推進であり、そのための取組として、班内・班間留学システム(のべ 23 名)、研究者循環システム(のべ 41 名)の積極的活用による**連携の実質化**、および、領域全メンバーに対する一斉サイトビジットによる**連携の企画・促進**を実施した(図 4)。これらの取組により、領域内にすでに 60 件以上の共同研究が立ち上がっており、そのうち 21 件が論文出版にまで至っている。また、連携の更なる促進を目的として、領域ホームページを通して、本新学術領域予算で購入した全ての大型装置を共用化し、全装置(計 16 件)の詳細情報・測定依頼方法を領域に公開している (<https://www.rs.tus.ac.jp/hypermaterials/kankeisya/index.html>

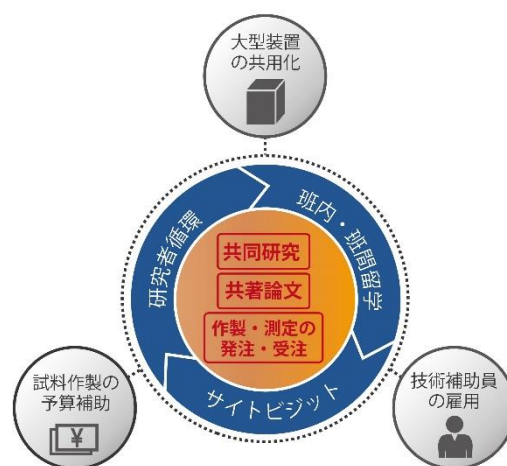


図 4. 各計画研究間連携の取り組み

[//www.rs.tus.ac.jp/hypermaterials/kankeisya/index.html](https://www.rs.tus.ac.jp/hypermaterials/kankeisya/index.html) #equipment)。さらに、2019 年末から始まった COVID-19 のために人の移動が大きく制限される中で研究補助員を 4 名増員し、人の移動が無くとも領域内の依頼測定に常時対応できる体制を敷いた。また、総括班予算より依頼試料作製のための原料費や消耗品を全額補助し、連携の一層の促進を後押しした。特に、研究補助員が試料合成を行うことで、特定の研究者に負担が集中しないように配慮した。これらの取組の結果、サンプル作製・測定の受注は 700 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一定の成果が挙げられている。

次に、留意事項において指摘を受けた事項とその対応状況を下記に記す。

総括班が磁気特性測定システム、ヘリウム再凝縮装置を導入し、領域全体で共有する試みはユニークだが、有効な共同利用体制の構築が課題とおもわれる。総括班の舵取りの下、高額機器の共用を実質化させる運用が望まれる。

本領域では、本磁気特性測定システムを含め、本新学術領域予算で購入した全ての高額機器(全 16 件)の詳細情報および利用方法を、機器導入後速やかに領域ホームページ (<https://www.rs.tus.ac.jp/hypermaterials/kankeisya/index.html#equipment>) に公開し、領域全メンバーに周知している。総括班主体の高額機器共用の実質化の取組は主に三つあり、一つは、班内・班間留学システム(のべ 23 回)、研究者循環システム(のべ 41 回)を活用した共用設備の利用支援、二つ目は、一斉サイトビジットにおける共用装置利用を含む共同研究の企画・提案、三つ目は、COVID-19 対応策も兼ねているが、研究補助員(4 名)の増強による依頼測定への常時対応である。以上の三つの取組により、2021 年 6 月末現在、本磁気特性測定システムの利用者数は 25 名、利用回数はのべ 213 回に達している。

5 研究の進展状況及び主な成果

(1) 領域設定期間内及び中間評価実施時までには何をどこまで明らかにしようとし、中間評価実施時までにはどこまで研究が進展しているのか、(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、どこまで研究が進展しているのか

【研究項目 A01】

研究項目 A01 は、**領域設定期間内**において、新規の局在スピンスピン系・強相関係系・半導体系・酸化物系・ポリマー系ハイパーマテリアルを創製し、様々な物質系にハイパーマテリアルを拡張することを通じて、人類が対象とする物質群を拡大することが主たる目的である(図 5)。特に、酸化物系・ポリマー系、そして新たに加わったファンデルワールス系ハイパーマテリアルについては、公募班と密接に連携して推進を進める。合成したハイパーマテリアルを研究項目 A02 の構造解析、研究項目 A04 の物性測定・解析へと展開し、新規ハイパーマテリアルの構造と物性を明らかにするとともに、補空間を用いて隠れた法則性を突き止めるという本領域の目標達成に寄与する。なお、ハイパーマテリアルの合成にあたっては、本領域内連携の目玉である、研究項目 A03 の機械学習が予測した組成に基づいて新規ハイパーマテリアルの創製も行う。

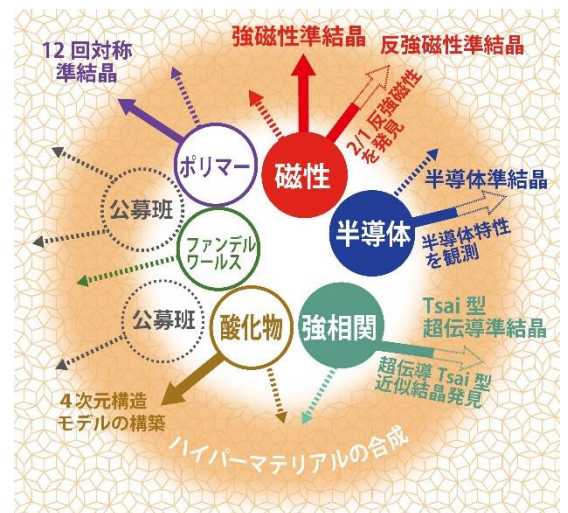


図 5. A01 班の研究目的と進捗状況

中間評価実施時には、局在スピンスピン系に関しては初の強磁性準結晶の合成に既に成功しており、これは準結晶で初めての長距離磁気秩序でもあり、ご報告したい。また強相関係系ハイパーマテリアルに関しては、A01 田村・A01 室・A04 出口らの共同研究で幾つもの超伝導体の創製に成功しており、あわせて報告したい。半導体系ハイパーマテリアルについては、2/1 近似結晶や準結晶において半導体特性の観測に成功しており、半導体準結晶の実現に向けて大きく弾みがついている。そもそも半導体準結晶が存在するかどうかという原理的問題がある中、中間評価では半導体準結晶の存在可能性について言及したい。酸化物系に関しては、A01 公募班の柚原と A01 山田の共同研究により、Ti-O-Ba 準結晶の一部を元素置換した系での探索が進んでおり、新たな酸化物準結晶の合成に挑戦している。ポリマー系に関しては、A01 公募班の山本が精力的に研究をすすめており、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、ポリマー準結晶の生成が高分子の種類に依らないことを予想しつつある。

【研究項目 A02】

研究項目 A02 は、高次元と高対称で特徴づけられるハイパーマテリアルの構造的側面に焦点をあて、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解明する。得られた構造的知見にもとづいて、個々の物質群を越えて、ハイパーマテリアルが普遍的に示す安定化機構や、特異な物性機能を理解するための補空間物質科学構築の基礎を与えるのが本研究項目の目的である。そして、A03 班および A04 班と協働し構造情報・補空間情報を共有することにより、本領域が目指す、「実空間では複雑怪奇なハイパーマテリアルの原子的挙動、磁気・電子・フォノン状態等を補空間で明快に記述することで、複雑な秩序に潜む隠れた法則性を高次元空間において描き出し、新たな物質科学を創出する」という目標達成に寄与する。**領域設定期間内**に、既知および A01 班を中心に領域において新たに創製される準結晶・近似結晶の X 線・放射光・中性子散乱回折による構造評価・決定を行うとともに、ハイパーマテリアルの形成温度領域における構造変態や構造相転移およびダイナミクスを調べ、形成メカニズムの解明に挑む。

中間評価実施時までには、今まで見出されている正 20 面体準結晶は三種類(Mackay 型、Bergman 型、Tsai 型)に大別されるが、既に構造が解かれている Tsai 型に続き、Bergman 型正 20 面体準結晶の構造決定に世界で初めて成功した。さらに、唯一構造未決定の Mackay 型準結晶の構造解析を進めている。一方、放射光・中性子大型施設を利用した研究は COVID-19 のために採択課題が延期やキャンセルされている

が、予備実験がすでに終了するなど、着実に進展している。研究項目間の共同研究のこれまでの成果としては、A03 班の予測に基づいて A01 班が合成したハイパーマテリアルの構造決定を行い、新規のハイパーマテリアルが得られていることを明らかにした。(論文投稿準備中)

【研究項目 A03】

データ科学と計算科学を技術面の柱とし、本領域内に知識循環をもたらすことを目的として、ハイパーマテリアルを対象としたデータ駆動型研究の学術基盤を構築する。研究を推進する上で最も重要な要素技術の一つは、機械学習アルゴリズムによるハイスループットスクリーニングである。機械学習で組成から物質の構造(準結晶・近似結晶・その他)や物性を予測する。このモデルを用いて大量の候補からハイパーマテリアルが形成される組成を絞り込み、A01・A02・A04 班に実験の提案を行う。A03 班の吉田らは、これまでに発見された準結晶・近似結晶・周期結晶の化学組成を学習データとし、ハイパーマテリアルの組成予測モデルを開発し、A01 班の木村・田村らと共同研究を通じて、予測性能の包括的な検証実験を実施した。その結果、ハイパーマテリアルの予測精度はおおよそ 76%、結晶の予測精度は 90%にも達することが分かった(Liu *et al.* Adv. Mater. (2021))。現在、本モデルの予測精度の向上を図るとともに、本モデルの予測結果に基づいて A01 班が物質合成を実施している。例えば、A01 班の瓜生ら(東理大・大学院生)は、Sc-Zn-Ti 系の Tsai 型 1/1 近似結晶の発見に成功している(論文投稿準備中)。これは機械学習のアルゴリズムが発見した世界で初めてのハイパーマテリアルである。また、A04 班の竹森は A04 公募班の酒井との共同研究により、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の発見に成功した(Takemori *et al.* Phys. Rev. B (2020))。以上が中間評価実施時までの成果である。領域設定期間内には、半導体準結晶・超伝導準結晶・磁性準結晶などの革新的特性を有するハイパーマテリアルの発見を実現したい。また、整備したデータとソフトウェアのオープン化を推進し、次世代のデータ駆動型準結晶研究の学術資源を創出する。

【研究項目 A04】

研究項目 A04 は、「ハイパーマテリアルの物性と hidden order の探索」を担当し、実験研究では、A01 班が合成するハイパーマテリアルの物性測定を行い、高次元性や準周期性と関連する物性を明らかにする。また、実空間では複雑なハイパーマテリアルの原子のダイナミクス・磁気秩序・電子状態等を補空間で記述し、そこに潜む法則性(hidden order)を見出すために、実験・理論両面から一斉に物性にアプローチする(図 6)。領域設定期間内には、実験研究では、補空間と物性を結び付けるために、高温比熱をはじめとする準結晶と近似結晶で違いの現れる物性に特に注目し、物性を高次元と関係する物理量で記述し、物性から高次元にアプローチする研究を展開する。一方、理論研究では、補空間と物性を直接結びつける理論的枠組を構築する。

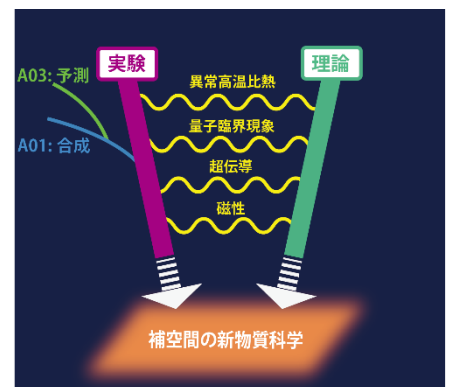


図 6. A04 班の協力体制概念図

中間評価実施時までに、実験では、高次元性が関係する物性について A04 枝川と A04 高際らの共同研究により、準結晶の 1 原子当たりの定積比熱が高温域で Dulong-Petit の値 $3k_B$ (k_B : ボルツマン定数)から大きくはずれ、 $4.5k_B - 5k_B$ 程度の値を示すことを確かなものとした(Tamura *et al.* Mater. Trans. (2021))。さらに、同じ補空間構造をもつ 2/1、1/1、1/0 近似結晶を用いた系統的な実験により、準結晶の高温域における比熱上昇が補空間自由度、すなわち、高次元性に起因したフェイゾン弾性に関連して生ずる可能性を強く示唆する結果を得た(論文投稿中)。また、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、結晶学的分類では全く異なるカテゴリーに属する物質群の示す物性について、高次元結晶を用いて説明できる可能性が開けている。理論では、二次元準周期構造の磁気秩序について、フラクタル構造を反映した超格子構造が現れることを補空間解析で解明した。これにより、A01 班が現在創製に挑んでいる磁性準結晶の磁気秩序の補空間マッピングのための素地が整いつつある。一方、超伝導状態については、転移点近傍では相関関数が発達し、より大域的な構造が局所的な秩序に影響し、一般に自己相似性が補空間で観察できることが期待される。具体的には、超伝導状態の場合、準周期系に特徴的な不均一な超伝導状態が Bogoliubov ピークとして STM や STS で観察可能であることを明らかにした。また補空間解析により、補空間で明瞭な自己相似性が観測されれば系が臨界的であり、系の局所・大域構造が理解できることを明らかにした。

(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 近似結晶で強磁性転移の観測に成功した(Yoshida *et al.* Phys. Rev. B (2019))。のみならず、新たに合成した Tsai 型準結晶が、磁化・比熱測定および中性子回折実験により強磁性相であることを突き止めた(図 7)(Tamura *et al.*, Nature Portfolio)。これは、1984 年に準結晶が発見されて 40 年近く経つが、準結晶における初の長距離磁気秩序でもあり、準結晶の物性研究における一里塚となった。さらに、準結晶における磁気秩序発現の条件が判明したことも極めて大きな成果である。強磁性準結晶については今後構造良質化を行い、A02 班および A04 班との共同研究で詳細な構造・物性解析を行い、その特徴を解明する予定である。加えて、科学史上初の反強磁性準結晶の創製に向けた研究が進展している。

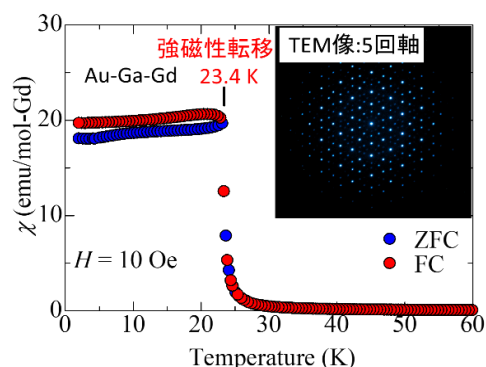


図 7. 強磁性準結晶の発見

計画研究 超伝導ハイパーマテリアルの発見: A01 室、A01 田村、A04 出口らの共同研究により、研究開始二年目に入ってから Tsai 型近似結晶で幾つもの超伝導相が発見され始めており(論文執筆中)、ハイパーマテリアルにおける超伝導相実現のための物質条件が明らかになりつつある。また、この発見は、Tsai 型準結晶で初めての超伝導相実現に向けて大きな足掛かりともなっている。

計画研究 準結晶における半導体特性の観測: 半導体準結晶の報告がこれまでに一例も無く、そもそも半導体準結晶が可能かどうかの原理的な問題が存在する中、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。半導体準結晶の存在可能性が一段と高まっている。

公募研究 酸化物準結晶における構造モデルの構築: Ti-O-Ba 準結晶薄膜の構造モデルをベースに 4 次元構造モデルを作成した(投稿準備中)。

公募研究 新規高分子ハイパーマテリアルの作製に成功: 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発現することを突き止めた(投稿準備中)。

公募研究 ファンデルワールスハイパーマテリアルにおける光起電力効果の発見: 異なる対称性をもつ 2 次元結晶を組み合わせた準周期的界面を作製し、分極および光起電力効果が発現することを発見した(Akamatsu *et al.* Science (2021))。

【研究項目 A02】

計画研究 Bergman 型準結晶の構造決定に世界で初めて成功: 現在までに知られている正 20 面体準結晶は三つの型(Tsai 型・Bergman 型・Mackay 型)に大別される。このうち、Tsai 型準結晶は 2007 年に A02 高倉らによりその構造が決定されているが、残りの二つについては未だに構造が未決定のままである。本研究項目の第一の成果として、Bergman 型の Zn-Mg-Tm 系正 20 面体準結晶の構造決定に世界

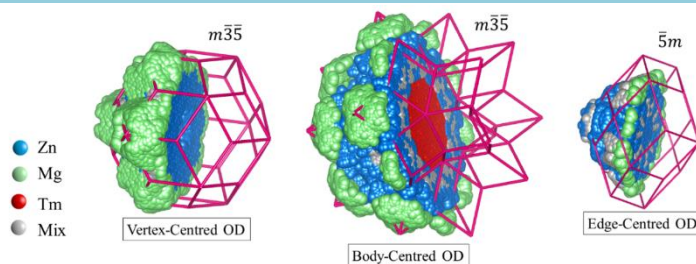


図 8. Zn-Mg-Tm 系正 20 面体準結晶の補空間

で初めて成功したことが挙げられる(図 8)(Buganski *et al.* Acta Cryst. (2020))。3 つの大きな占有領域から構成される補空間構造が解明されるとともに、Tsai 型準結晶との構造の違いが明らかにされた。この世界的成果は、準結晶で唯一超伝導が観測されている Al-Mg-Zn 系正 20 面体準結晶が Bergman 型であることから、その構造解明に向けての大きな足掛かりともなっている。

計画研究 Al-Cu-Ru 型準結晶の純良単結晶の育成に成功:

現在、唯一構造未決定の Mackay 型正 20 面体準結晶の構造解明に向けて、Al-Cu-Ru 系正 20 面体準結晶を Al-遷移金属系におけるプロトタイプとして位置づけ、その構造解明に取り組み始めたところである。この Al-Cu-Ru 系準結晶の形成条件を詳細に調べることで、純良な単準結晶が得られる条件を突き止

めることに成功した(Toyonaga *et al.*, Phil. Mag. (2020)). この知見にもとづいて作製した単準結晶試料は、高次元構造解析、X線非弾性散乱およびコヒーレント X線回折イメージングに供されており、今後、ハイパーマテリアルの構造・ダイナミクスだけでなく、その形成メカニズムにまで迫る詳細な知見が得られることが期待される。Mackay 型準結晶の構造が解明されれば、木村(A01)らが半導体特性の観測に成功した Mackay 型ハイパーマテリアルの研究に構造面から大きく寄与することになる。

公募研究 X線蛍光ホログラフィー測定に向けたシミュレーションの実施: 近年開発された新しい手法である X線蛍光ホログラフィーを準結晶の局所構造解析に活用すべく、モデル準結晶・近似結晶を用いたシミュレーションを行い、その有効性を実証した(Stellhorn *et al.*, Mat. Trans. (2021)). これは A02 公募班の J.R.Stellhorn と A02 高倉らの共同研究による成果である。今後、Al-遷移金属系ハイパーマテリアルの局所構造の解明に応用する予定である。

【研究項目 A03】

計画研究 機械学習による準結晶組成の予測と実証:

領域の始動から約 2 年、A01 班の木村・田村らとの共同研究で準結晶の化学組成を予測する機械学習モデルの開発に取り組んできた(Liu *et al.* Adv. Mater. (2021))。モデルの入力変数は化学組成であり、出力変数は、“準結晶”、“近似結晶”、“通常の周期結晶”を表すクラスラベルである。学習データとしては、これまでに報告された準結晶、近似結晶、結晶の化学組成を用いて、3 クラス分類問題を解く機械学習モデルを訓練した(図 9)。アルミニウムと遷移元素を含む三元合金系の全ての探索空間を対象に仮想スクリーニングを実施し、予測された準結晶相と文献から抽出した実験相図を比較したところ、ハイパーマテリアルの予測精度は 76%、結晶の予測精度は 90%にも達することが分かった。

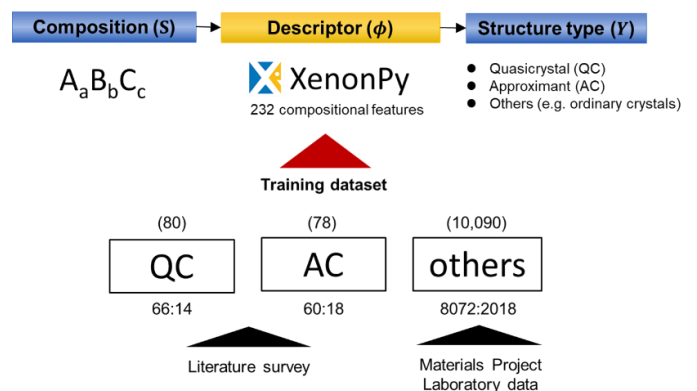


図 9. 機械学習による準結晶の組成予測フロー

さらに、機械学習のブラックボックスモデルに内在する入出力のルールを解析することで、準結晶と近似結晶の相形成に関するある法則が明らかになった。このルールはファンデルワールス半径や電気陰性度等に関する五つの単純な数式で表される。これらの条件式は新しい準結晶を探索するための新しい設計指針になる可能性がある。また、モデルには他にも多くのルールが隠されている可能性があり、データ科学を技術的な駆動力として準結晶の発見プロセスを加速する。我々が知る限り、この研究成果は準結晶研究に機械学習を導入した初めての試みである。現在は、モデルの予測結果に基づき A01 班の木村・田村らのグループが物質合成を実施している。特に A01 班の山田・瓜生ら(瓜生は東理大・大学院生)は、Sc-Zn-Ti 系の Tsai 型 1/1 近似結晶の発見に成功している(論文投稿準備中)。これは機械学習のアルゴリズムが発見した世界で初めてのハイパーマテリアルである。

計画研究 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予言: 竹森(A03 班)と酒井(A04 公募班)は、弱相関領域で現れる準周期超伝導と周期系の BCS 超伝導状態が本質的に異なることに起因して、観測量に違いが現れることを明らかにした。局所超伝導秩序変数は補空間で記述すると、長距離の幾何学的構造を反映して自己相似性を示す。超伝導転移で現れる比熱の跳びは、BCS 理論での値よりも小さくなる傾向が Al-Mg-Zn 準結晶の実験結果と一致することや、電流-電圧特性曲線の傾きが準周期系においてはなだらかになることを予言した(Takemori *et al.* Phys. Rev. B (2020)). これらの結果は周期性の欠如に起因するため、Penrose タイリングのみならず一般の準周期系、ひいては弱相関準結晶超伝導において相互作用や電子密度によらず成り立つ一般的な性質であると考えられる。

計画研究 量子格子模型プログラムパッケージ DCore の開発: 動的平均場理論(DMFT)を実装した新しい国産オープンソースのプログラム DCore を開発した。DCore は、テキストと HDF5 ファイルをベースにしたユーザーフレンドリーなインターフェースを備えていることが特徴で、量子モンテカルロ法や厳密対角化ソルバーなど、多くの高度な量子不純物ソルバーへのインターフェースを提供している。Wannier90 パッケージを介して外部の密度汎関数理論コードによって構築された有効モデルを実行することができる。本計画研究で開発中の高次元電子構造計算法の開発と組み合わせることで、高次元 DFT+DMFT の解析が半導体や絶縁体、遷移金属を含む準結晶の予言を可能にする。

【研究項目 A04】

計画研究 高温比熱測定による補空間自由度の観測：A04 枝川とA04 高際らの共同研究として、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(図 10) (Tamura *et al.* Mater. Trans. (2021))。ま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。この結果は準結晶の高温域における比熱上昇が補空間の自由度に結び付いたフェイゾン弾性に関連して生じている可能性を強く示唆するものである(論文投稿中)。また、分子動力学(MD)シミュレーションを用いて準結晶の成長機構を詳しく調べた(Ida *et al.* J. Phys. Soc. Jpn. (2021))。さらに、A02 班との共同研究として、中性子非弾性散乱実験により準結晶のフォノンを調べ、準結晶に特徴的な格子物性の端緒を掴むことに成功した。

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：

準周期系特有の磁気秩序を明らかにするため、様々な準周期タイル(Penrose、Ammann-Beemker、Socolar タイル)を解析し、弱結合領域における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した(図 11) (Koga Mater. Trans. (2021))。なお、強結合領域においては、磁気秩序は主に最近接サイト数に影響されるため準周期系の特徴は見えない。

計画研究 有効磁気模型により 1/1 近似結晶の磁気秩序の再現に成功：A01 班の田村らが Tsai 型近似結晶の平均価電子数を調節することで様々な磁気秩序の実現に成功しているが、その発現機構を解明するために、A04 杉本が A01 田村らとの共同研究として、RKKY 相互作用を考慮した古典磁気模型の理論解析を行った。その結果、1/1 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(Miyazaki *et al.* Phys. Rev. Mater. (2020))。

計画研究 補空間と量子臨界現象や磁性を結び付ける端緒の発見：

量子臨界現象を示す Au-Al-Yb 準結晶・近似結晶の Au を Al で同形置換した 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、元素置換により Yb の磁性が顕著に変化することを突き止め、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(Imura *et al.* Sci. Rep. (2020))。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て理解する根拠が得られたものと考えている。また、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た結果、古典模型でフラクタル性を測る熱力学的な共役量を提案し、その応答を明らかにすることに成功した(Hashizume *et al.* Mater. Trans. (2021))。

計画研究 超伝導秩序変数の補空間マッピングと準結晶に特徴的な物性の理論的予言：

準結晶の超伝導に特徴的な性質に関する理論研究が A03 班の竹森、A04 公募班の酒井らにより進められ、弱相関領域で現れる準周期超伝導は、周期系の BCS 超伝導状態とは本質的に異なり、有限の重心運動量を持つクーパ対が形成されること、補空間で自己相似性を示す準周期構造を反映した超伝導状態であることが明らかになった。また、2次元準結晶格子におけるモット転移やトポロジカル超伝導などを調べ、ボーズ・ハバード模型におけるモット転移点近傍では、超流動秩序の空間分布がフラクタル性を示すことが明らかになり、系の臨界性の指標を与えることに成功した(Ghadimi *et al.* Phys. Rev. B (2020))。

公募研究 準周期系特有の強相関効果・超伝導・非平衡現象の理論的予言：

A03 計画班、A04 計画班と A04 公募班の共同研究により準周期系の強相関効果・超伝導について実験との対応を目指した理論研究の成果が得られた(Sakai *et al.* Mater. Trans. (2021) / Takemori *et al.* Phys. Rev. B (2020))。また、当該分野にこれまで無かった新たな視点として、光照射などの時間依存する外場によって誘起される非平衡現象が着目され、光誘起相転移や高次高調波発生における準周期構造の効果に関する新たな理論展開が進んでいる(Murakami *et al.* Phys. Rev. B (2020))。

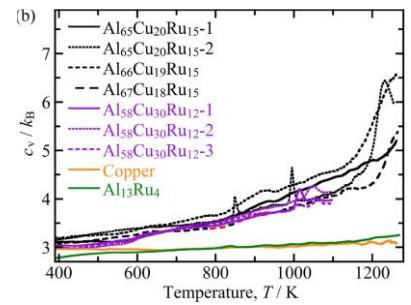


図 10. 準結晶および近似結晶の高温域での比熱の測定結果

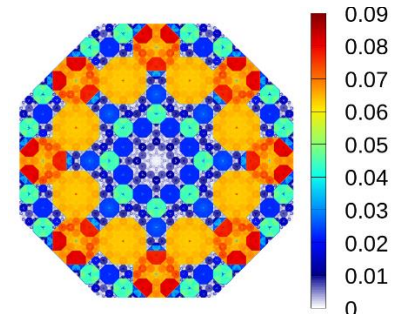


図 11. Ammann-Beemker タイル上の反強磁性秩序の補空間構造

6 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、一般向けのアウトリーチ活動等の状況。令和3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 37 件(査読有 36 件)の内、代表論文 10 編

1. “Magnetocaloric effect in ferromagnetic 1/1 quasicrystal approximants $Au_{64}Al_{22}R_{14}(R=Gd, Tb, \text{ and } Dy)$ ”, *N. Kikugawa, T. Hiroto, A. Ishikawa, S. Suzuki, H. Sakurai, and R. Tamura, *Journal of Alloys and Compounds* **882**, 160669 (2021).
2. “Magnetism of Tsai-type quasicrystal approximants”, S. Suzuki, A. Ishikawa, T. Yamada, T. Sugimoto, A. Sakurai, and *R. Tamura, *Materials Transactions* **62**, 298-306 (2021).
3. “High Dimensional Approach to Antiferromagnetic Aperiodic Spin Systems”, *S. Coates and R. Tamura, *Materials Transactions* **62**, 307-311 (2021).
4. “Possibility of Semiconducting Electronic Structure on Al-Pd-Co 1/1 Cubic Quasicrystalline Approximant”, *Y. Iwasaki, T. Kashimura, K. Kitahara, and K. Kimura, *Materials Transactions* **62**, 317-320 (2021).
5. “Composition Effect of Kondo Behavior in Au-Al-Ce Quasicrystalline Approximants”, *Y. Muro, T. Fukuhara, T. Namiki, T. Kuwai, A. Sakurai, A. Ishikawa, S. Suzuki, R. Tamura, *Materials Transactions* **62**, 321-324 (2021).
6. “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 (Rapid Communication)* **101**, 180405-1-5 (2020).
7. “Noncoplanar ferrimagnetism and local crystalline-electric-field anisotropy in the quasicrystal approximant $Au_{70}Si_{17}Tb_{13}$ ”, T. Hiroto, *T. J. Sato, H. Cao, T. Hawaii, T. Yokoo, S. Itoh, and R. Tamura, *Journal of Physics: Condensed Matter* **32**, 415801-1-11 (2020).
8. “Atomic structure of the (111) surface of the antiferromagnetic 1/1 Au-Al-Tb approximant”, *S. Coates, K. Nozawa, M. Fukami, K. Inagaki, M. Shimoda, R. McGrath, H. R. Sharma, and R. Tamura, *Physical Review B* **102**, 235419-1-9 (2020).
9. “Whirling spin order in the quasicrystal approximant $Au_{72}Al_{14}Tb_{14}$ ”, *T. J. Sato, A. Ishikawa, A. Sakurai, M. Hattori, M. Avdeev, and R. Tamura, *Physical Review B* **100**, 054417-1-6 (2019).
10. “Antiferromagnetic order survives in the higher-order quasicrystal approximant”, S. Yoshida, S. Suzuki, T. Yamada, T. Fujii, A. Ishikawa, and *R. Tamura, *Physical Review B (Rapid Communication)* **100**, 180409-1-5 (2019).

<学会発表> 計 88 件の内、代表的な学会発表 3 件

1. “The Japanese Hypermaterials project”, R. Tamura, European C-MetAC Days 2019, 国際学会, 招待講演, 2019, Max Planck Institute for Chemical Physics of Solids, Dresden, Germany
2. “Magnetism of Tsai-type compounds”, R. Tamura, European C-MetAC Days 2019, 国際学会, 招待講演, 2019, Max Planck Institute for Chemical Physics of Solids, Dresden, Germany
3. “Search for semiconducting quasicrystal and high-performance thermoelectric material”, K. Kimura, Y. Iwasaki, T. Takahashi, K. Kitahara, Y. Katsura, Y. Takagiwa, and J.T. Okada, The 38th International Conference on Thermoelectrics (ICT2019), 国際学会, 招待講演, 2019, Hwabaek International Convention Center (HICO), Gyeongju, Korea

<一般向けアウトリーチ活動> 計 5 件の内、代表的なアウトリーチ活動 1 件

1. 「高校生へのハイパーマテリアル・磁性に関する説明」 田村隆治, 東京理科大学基礎工学部材料工学科田村研究室(東京都・葛飾区), 2019

<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 5 件(査読有 5 件)の内、代表論文 2 編

1. "Frank-Kasper σ and A-15 Phases Formed in Symmetry and Asymmetry Block Copolymer Blend System", *K.

[Yamamoto](#) and H. Takagi, *Materials Transactions* **62**, 325-328 (2021).

2. "Growth and composition of an ultra-thin Ba-Ti-O quasicrystal film and its crystalline approximant on Pt(111)", *[J. Yuhara](#), K. Horiba, R. Sugiura, X. Li, and T. Yamada, *Physical Review Materials* **4**, 103402 (2020).

<学会発表> 計 8 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 18 件 (査読有 18 件) の内、代表論文 10 編

1. "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).
2. "Pressure-Volume Relationship of a Au-Al-Yb Intermediate Valence Quasicrystal and Its Crystalline Approximant", *[T. Watanuki](#), A. Machida, and T. Ishimasa, *Materials Transactions* **62**, 338-341 (2021).
3. "Accuracy of Cluster Model Calculations for Quasicrystal Surface", M. Sato, T. Hiroto, [Y. Matsushita](#), and *[K. Nozawa](#), *Materials Transactions* **62**, 350-355 (2021).
4. "Growth and characterisation of single grain Al-Cu-Ru icosahedral quasicrystals from self-fluxes", K. Toyonaga, R. Shibata, [T. Yamada](#), M. de Boissieu, O. Perez, P. Fertey, and *[H. Takakura](#), *Philosophical Magazine* **100**, 2220-2243, (2020).
5. "Noncoplanar ferrimagnetism and local crystalline-electric-field anisotropy in the quasicrystal approximant $Au_{70}Si_{17}Tb_{13}$ ", T. Hiroto, *T. J. Sato, H. Cao, T. Hawaii, T. Yokoo, S. Itoh, and [R. Tamura](#), *Journal of Physics: Condensed Matter* **32**, 415802-1-14 (2020).
6. "Dodecagonal Quasicrystals in Mesoporous Silica: A New Route from Hard- to Soft-Sphere Packings", Y. Wang, Q. Deng, *[N. Fujita](#), and *L. Han, *Chemistry of Materials* **32**, 5236-5245 (2020).
7. "Magnetic properties of icosahedral quasicrystals and their cubic approximants in the Cd-Mg-RE (RE = Gd, Tb, Dy, Ho, Er, and Tm) systems", *F. Labib, D. Okuyama, [N. Fujita](#), [T. Yamada](#), S. Ohhashi, T. J. Sato, and A. P. Tsai, *Journal of Physics: Condensed Matter* **32**, 415801-1-11 (2020).
8. "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.: Condens. Matter* **32**, 485801-1-8 (2020).
9. "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).
10. "Icosahedral quasicrystals and their cubic approximants in the Cd-Mg-RE (RE = Y, Sm, Gd, Tb, Dy, Ho, Er, Tm) systems", *F. Labib, *[N. Fujita](#), Satoshi Ohhashi, and A. P. Tsai, *Journal of Alloys and Compounds* **822**, 153541-1-13 (2019).

<学会発表> 計 12 件の内、代表的な学会発表 4 件

1. "A novel quasicrystalline approximant to icosahedral quasicrystals" [H. Takakura](#), T. Kurahashi, International Research Network: IRN-APERIODIC, Open space between aperiodic order and physics & chemistry of materials, 国際学会, 招待講演, 2020, Online
2. "Canonical-cell geometry: a renewed perspective", [N. Fujita](#), M. Mihalkovic, 14th International Conference on Quasicrystals, 国際学会, 招待講演, 2019, Kompas Hotel (Kranjska Gora, Slovenia)
3. "Canonical-cell geometry: a practical framework for describing the packing of icosahedral clusters", [N. Fujita](#), M. Mihalkovic, Interdisciplinary Symposium for Quasicrystals and Strongly Correlated Electron Systems, 国際学会, 招待講演, 2019, 東北大学 知の館
4. 「F 型 Al-Cu-Ru 正 20 面体準結晶の 6 次元構造」[高倉洋礼](#), 第 13 回物性科学領域横断研究会, 国内学会, 招待講演, 2019, 東京大学 本郷キャンパス 小柴ホール

<一般向けアウトリーチ活動> 計 4 件の内、代表的なアウトリーチ活動 3 件

1. "Online 授業 (愛媛県立西条高校)「X 線回折法を用いた物質評価の紹介」", [松下能孝](#), Online, 2020
2. "第 7 回ハイパーマテリアル・セミナー「クラスターに基づいた正 10 角形準結晶の構造モデル」", [高倉洋礼](#), 名古屋大学 東山キャンパス理学館 415 室 (愛知県・名古屋市), 2020
3. "第 4 回ハイパーマテリアル・セミナー「AKN タイリングの 12 配位頂点配列に基づく正 20 面体準結晶の構造モデ

ル」, 高倉洋礼, 名古屋大学 東山キャンパス理学館 415 室(愛知県・名古屋市), 2019

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 7 件(査読有 1 件)の内、代表論文 1 編

1. “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 6 件の内、代表的な学会発表 1 件

1. 「シリコン表面インジウム原子層の結晶構造と超伝導状態」 [吉澤俊介](#), 物性研ワークショップ「ナノスケール物性科学の最先端と新展開」, 国内学会, 招待講演, 2020, Online

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 16 件(査読有 16 件)の内、代表論文 8 編

1. “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).
2. “Boosting the thermoelectric performance of Fe₂VAl-type Heusler compounds by band engineering”, *F. Garmroudi, A. Riss, M. Parzer, N. Reumann, H. Muller, E. Bauer, S. Khmelevskiy, R. Podloucky, T. Mori, K. Tobita, [Y. Katsura](#), and [K. Kimura](#), *Physical Review B* **103**, 085202-1-14 (2021).
3. “Accuracy of cluster model calculations for quasicrystal surface”, M. Sato, T. Hiroto, Y. Matsushita, and *[K. Nozawa](#), *Materials Transactions* **62**, 350-355 (2021).
4. “Search for the boron quasicrystal by first-principle-calculation”, T. Takahashi, K. Kitahara, [Y. Katsura](#), J. Okada, Y. Matsushita, and *[K. Kimura](#), *Solid State Sciences* **108**, 106377-1-6 (2020).
5. “Atomic structure of the (111) surface of the antiferromagnetic 1/1 Au-Al-Tb approximant”, *S. Coates, [K. Nozawa](#), M. Fukami, K. Inagaki, M. Shimoda, R. McGrath, H. R. Sharma, and [R. Tamura](#), *Physical Review B* **102**, 235419-1-9 (2020).
6. “Physical properties of weak-coupling quasiperiodic superconductors”, *[N. Takemori](#), R. Arita, and *S. Sakai, *Physical Review B* **102**, 115108-1-8 (2020).
7. “Predicting materials properties with little data using shotgun transfer learning”, H. Yamada, C. Liu, S. Wu, Y. Koyama, S. Ju, J. Shiomi, J. Morikawa, and *[R. Yoshida](#), *ACS Central Science* **5**, 1717-1730 (2019).
8. “Phase stability and thermoelectric properties of semiconductor-like tetragonal FeAl₂”, *K. Tobita, K. Kitahara, [Y. Katsura](#), N. Sato, D. Nishio-Hamane, H. Gotou, and [K. Kimura](#), *Science and Technology of Advanced Materials* **20**, 937-948 (2019).

<学会発表> 計 55 件の内、代表的な学会発表 6 件

1. 【基調講演】「マテリアルズインフォマティクス概説」 [吉田亮](#), 日本化学会 第 101 春季年会(2021), ウェブ開催
2. 【招待講演】“Advances in Polymer Informatics: Challenges and Potentials”, [R. Yoshida](#), NSF-JST joint workshop on Thermal Transport, Materials Informatics and Quantum Computing", online
3. 【基調講演】「材料研究を変革する統計的機械学習の先進技術」 [吉田亮](#), 2020.10. SciPy Japan 2020, ウェブ開催
4. 【基調講演】「マテリアルズインフォマティクス: 機械学習による設計と合成の自動化」 [吉田亮](#), 2020.10. CBI 学会 2020 年大会「科学実験の自動化が拓く AI 時代の創薬研究」, ウェブ開催
5. 【招待講演】"Breaking the curse of small data in materials informatics", [R. Yoshida](#), Materials Research Meeting 2019 (MRM2019), Yokohama, Japan
6. 【招待講演】"Machine Learning for Manufacturing", [R. Yoshida](#), The Asian Conference on Machine Learning 2019 (ACML2019), Nagoya, Japan

<書籍> 計 2 件

1. 「次世代熱電変換材料・モジュールの開発ー熱電発電の黎明ー」, 第I編 総論、第1章 熱電変換材料の変遷とこれから, [木村薫](#), [桂ゆかり](#), pp.1-22 (2020)
2. 「次世代熱電変換材料・モジュールの開発ー熱電発電の黎明ー」, 第II編 材料開発・探索、第3章 計算科学及びマテリアルズ・インフォマティクスによる材料設計 6. 熱電特性データベースの構築, [桂ゆかり](#), pp.197-206, (2020)

<一般向けアウトリーチ活動> 計 3 件の内、代表的な一般向けアウトリーチ活動 2 件

1. 「ハイパーマテリアル塗り絵の作成」 **竹森那由多** (2020)

「Facebook ページの作成」 竹森那由多 (2020)

2. 【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**

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1件(査読有 1 件)

1. “Topological defects of dipole patchy particles on a spherical surface”, *U. T. Lieu and ***N. Yoshinaga**, *Soft Matter* **16**, 7667-7675 (2020).

<学会発表> 計 5 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 32 件(査読有 31 件、査読無 4 件)の内、代表論文 10 編

1. “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).
2. “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).
3. “Growth Mechanism of a Long-Range Ordered Quasicrystal in Molecular Dynamics Simulations”, K. Ida and ***K. Edagawa**, *J. Phys. Soc. Jpn.* **90**, 044603-1-7 (2021).
4. “Antiferromagnetically Ordered State in the Half-Filled Hubbard Model on the Socolar Dodecagonal Tiling”, ***A. Koga**, *Materials Transactions* **62**, 360-366 (2021).
5. “Classical and Quantum Magnetic Ground States on an Icosahedral Cluster”, S. Suzuki, **R. Tamura**, and ***T. Sugimoto**, *Materials Transactions* **62**, 367-373 (2021).
6. “A toy model approach to fractal nature: thermodynamics on a Cantor-lattice Ising model”, ***Y. Hashizume** and **T. Sugimoto**, *Materials Transactions* **62**, 374-379 (2021).
7. “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).
8. “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).
9. “Mean-field study of the Bose-Hubbard model in the Penrose lattice”, *R. Ghadimi, **T. Sugimoto**, and T. Tohyama, *Physical Review B* **101**, 144407-1-9 (2020).
10. “準結晶における強相関効果の発見—数学を具現化する物質で見つかった非従来型量子臨界現象”, *佐藤憲昭, ***出口和彦**, *井村敬一郎, *日本物理学会誌* **74**, 774-779 (2019).

<学会発表> 計 58 件の内、代表的な学会発表 3 件

1. “Magnetic Au-Al-Yb Quasicrystals and Approximants with Yb icosahedron”, **K. Deguchi**, International Research Network: IRN-APERIODIC kick off meeting "Open space between aperiodic order and physics & chemistry of materials", 国際学会, 招待講演, 2020, Online
2. “Cluster-Based Haldane States in Quantum Spin Cluster Chains”, **T. Sugimoto**, K. Morita, and T. Tohyama, 7th Euro-Asian Symposium: Trends in Magnetism (EAST-MAG 2019), 国際学会, 招待講演, 2019, M. N. Miheev Institute of Metal Physics, Ekaterinburg, Russia
3. “Magnetic order in the strongly correlated electron systems on the Penrose lattice”, **A. Koga**, Interdisciplinary Symposium for Quasicrystals and Strongly Correlated Electron Systems, 国際学会, 招待講演, 2019, 東北大学 知の館

<一般向けアウトリーチ活動> 計 13 件の内、代表的な一般向けアウトリーチ活動 3 件

1. “名大出前授業 in 豊橋 2020”, **出口和彦**, Online, 2020
2. "材料の微細組織と機能性第 133 委員会 第 246 回研究会"「ハイパーマテリアル の新物質科学」, **出口和彦**, Online, 2020
3. "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

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 22 件(査読有 22 件)の内、代表論文 3 編

1. “Effect of Electron-Electron Interactions on Metallic State in Quasicrystals”, *[S. Sakai](#) and [A. Koga](#), *Materials Transactions* **62**, 380-385 (2021).
2. “Physical properties of weak-coupling quasiperiodic superconductors”, *[N. Takemori](#), R. Arita, and [S. Sakai](#), *Physical Review B* **102**, 115108-1-8 (2020).
3. “Collective modes in excitonic insulators: Effects of electron-phonon coupling and signatures in the optical response”, *[Y. Murakami](#), D. Golež, T. Kaneko, [A. Koga](#), A. J. Millis, and P. Werner, *Physical Review B* **101**, 195118-1-17 (2020).

<学会発表> 計 31 件の内、代表的な学会発表 1 件

1. 「非平衡グリーン関数法とその応用: 励起子相の非平衡誘起」, [村上雄太](#), 物性研究所短期研究会「量子多体計算と第一原理計算の新展開」, 国内学会, 招待講演, 2020, Online

<一般向けアウトリーチ活動> 計 1 件

1. 自然科学カフェ "水の七不思議", [松本正和](#), 2020

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

YouTube ビデオ「わからないから面白い! ハイパーマテリアルってなに?」

領域ホームページ



※つくば市の全小学校児童にパンフレットを配布予定。今後、啓蒙活動を継続。

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29日~30日 東京理科大学葛飾キャンパス講義棟 6F 607 教室 参加者数 77 名
2. 第 2 回領域会議(第 24 回準結晶研究会) 2020年2月18日~20日 東北大学 片平キャンパス 知の館 3 階 講義室 59 名
3. 第 3 回領域会議(オンライン) 2020年5月19日 参加者数 54 名
4. 第 4 回領域会議(オンライン) 2020年7月15日~17日 参加者数 79 名
5. 第 5 回領域会議(オンライン) 2020年12月8日~10日 参加者数 59 名
6. 第 1 回若手研究会(オンライン) 2020年7月15日~17日 参加者数 67 名
7. 第 25 回準結晶研究会 (第 2 回ハイパーマテリアル若手研究会)(オンライン) 2021年3月3日~5日 参加者数 70 名
8. 第 14 回物性科学領域横断研究会(オンライン) 2020年12月4日~12月5日 参加者数 152 名
9. 第 1 回マテリアルズインフォマティクスセミナー(主催:統計数理研究所, 参加者:139 名)
10. 第 2 回マテリアルズインフォマティクスセミナー(主催:統計数理研究所, 参加者:214 名)
11. 第 3 回マテリアルズインフォマティクスセミナー(主催:統計数理研究所, 参加者:147 名)
12. 第 4 回マテリアルズインフォマティクスセミナー(主催:統計数理研究所, 参加者:472 名)
13. 第 5 回 XenonPy ハンズオンセミナー(主催:統計数理研究所, 参加者:領域内 6 名)
14. 第 6 回 XenonPy ハンズオンセミナー(主催:統計数理研究所, 参加者:49 名)

7 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】

各研究項目間の連携体制を図12に示す。各研究項目はそれぞれ、一つの計画研究からなるため、各計画研究間の連携体制でもある。研究項目間の連携体制として、本領域では二つの連携サイクルを二大柱として掲げている。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、A03班が機械学習により予測した組成にもとづきA01班が合成し、A02、A04班に新規ハイパーマテリアルを提供するサイクルである。この二つの主要なサイクルが円滑に回ることで、領域の主たる研究が推進される仕組みとなっている。これらの連携サイクルに加え、総括班では各種の仕掛けを戦略的に導入して、新学術領域研究ならではの異分野融合の有機的な連携を推進している。具体的な取組については次の項目で述べる。

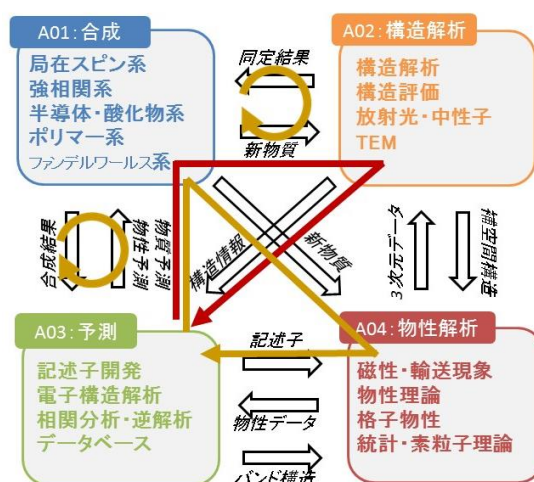


図12. 各研究項目間の連携体制

【計画研究及び公募研究間の連携体制】

以下に述べる取組を通じて、公募班を含む領域内の連携体制の構築を図っている。

●一斉サイトビジット 領域内の連携を生み出す仕掛けとして2020年9月に計画班全メンバー21名、2021年2月～3月に公募班全メンバー20名に対してオンラインでサイトビジットを実施した。サイトビジットには総括班メンバーのみならず当該研究課題に関連の深い領域メンバーにも参加を要請した。領域メンバー全員より研究内容・研究上の問題・希望する連携内容を詳しく聞き取り、図13に示すような連携の橋渡しを行った。

●ハイパーマテリアルセミナー 本セミナーは、領域内連携のシーズを見出すための取組であり、これまでに15回実施した。領域内連携の推進が主たる目的であるため、セミナーの内容は異分野の研究者向けとした。本セミナーは、ハイパーマテリアルのチュートリアルと各メンバーの研究紹介の二本柱からなり、総括班で戦略的に毎回の講師を選定した。本セミナーにより領域全体で各メンバーの研究内容や現状を共有することで領域全体に連携シーズを提供し、シナジー効果の創出を図った。

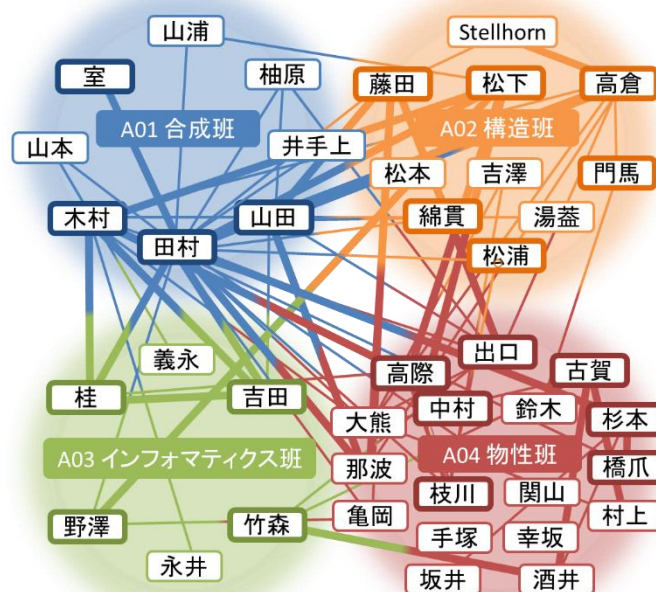


図13. 本領域内連携の全体像。太枠は計画班研究者を、太線は論文発表に至った共同研究を示す。

以上の取組により構築された本領域内連携の全体像を図13に示す。この総括班主体の組織的な取組が功を奏して、6月末現在、60件以上に及ぶ共同研究が立ち上がっている。このうち、計画研究と公募研究間の共同研究は29件を数え、また、連携研究数は公募班一人あたり約1.5件に及ぶ。図中の太線は、すでに論文発表まで至った共同研究を表し、計画研究と公募研究間の共同研究により11報の論文がすでに出版されており、上述の取組の成果が形に現れている。

8 若手研究者の育成に係る取組状況

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3年3月末現在で39歳以下。研究協力者やポストドク、途中で追加・削除した者を含む。）の育成に係る取組状況について、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)。前者の取組としては、若手研究者を含む共同研究テーマの設定・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、若手研究会の開催がある。設定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のべ23名、研究者循環システムの利用者はのべ41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ている。また、新規に導入した取組として、ハイパーマテリアルセミナーを15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ように配慮した。特に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日間に渡ってオンサイトで議論しながら、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、本セミナーで作成したモデルを用いて実際に準結晶の組成を予測し、新しいハイパーマテリアルの合成に成功した(論文投稿準備中)。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21～25日に企画・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。

年一度の若手研究会は、若手が主体となって企画し、領域会議等で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が目的である。2020年5月に第1回目(テーマ「ハイパーマテリアルの構造」：参加者67名)を、2021年3月に第2回目(テーマ：「ハイパーマテリアルのインフォーマティクスと電子物性」：参加者70名)を開催し、若手研究者の視野を広げ、研究モチベーションの向上を図った。総括班主導の新たな取組として、第2回若手研究会から39歳以下の若手研究者を対象に**蔡安邦賞**を創設したことが挙げられる。本賞は、領域内に限らず、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、候補者21名から、若手研究者1名(竹森(A03))と大学院生1名に第一回蔡安邦賞を授与した。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・実施することも、本領域における重要な若手育成取組の一つである。本領域では、フランスで発足したIRN(International Research Network)-APERIODICとの連携を強め、IRNと共催で国際理論ミーティングを6月7～8日に開催した。両日とも約30名の参加者があり、ほとんどが若手研究者であった。参加者による20分ないし40分の研究紹介のあと、連日40分間の円卓討論を行い、国際的な研究の融合を促進した。

本領域の若手育成の成果として、まず雇用状況に関しては、令和元年度は研究職(常勤・無期雇用)に3名、非常勤(有期雇用)に3名、研究職以外に6名が就職、令和2年度には研究職(常勤・無期雇用)に5名、非常勤(有期雇用)に6名、研究職以外に15名が就職している。特に、本領域に分担者として参画する研究者2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は特筆すべきことである。加えて、領域内の若手研究者がこれまで計16件も受賞している。特に、Tsai型正二十面体準結晶の原子的構造の解明を行った山田(A01)、ハイパーマテリアルの電子状態に関する研究を行った北原(A01)が第14回(2020年)日本物理学会若手奨励賞(領域6)を同時に受賞している(2名中2名)。また、桂(A03)は、熱電材料における学融合の構築と計算科学による熱電材料設計に関する研究が高く評価され、日本熱電学会2019年進歩賞及び日本熱電学会2019年第12回優秀論文賞を受賞している。さらに、高際(A04)は、IoT社会を支える微小温度差発電技術の研究に対して、第41回本多記念研究奨励賞、および、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」を受賞している(我が国で1名)。

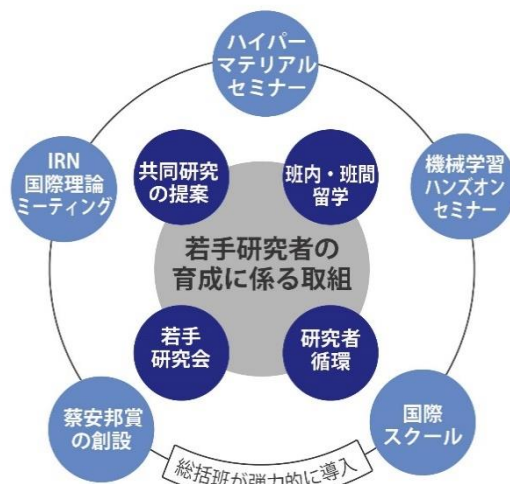


図14. 若手研究者育成に係る取組

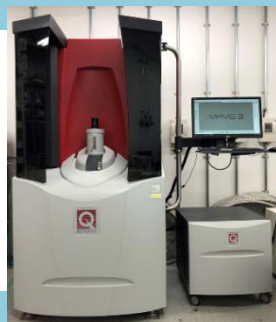
9 研究費の使用状況・計画

研究領域全体を通じ、研究費の使用状況や今後の使用計画、研究費の効果的使用の工夫、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1頁以内で記述すること。

【総括班予算で購入した設備備品】

●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、領域ホームページを通じて共用機器利用を促進するとともに、専任の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促進のための配慮を行っている。本装置はヘリウム再凝縮装置付きであり液体ヘリウムが不要なため24時間フル稼働しており、これまでの利用者数は25名、利用回数は213回と領域内の共同研究の推進に多大に貢献している。



【計画研究で購入した設備備品】

計画研究で購入した主な設備備品を以下に挙げ、その活用状況について記す。なお、本新学術領域予算で購入した全ての大型備品(16件)を共用化し、その詳細情報を領域ホームページに掲載している。

●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全ての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ている。試料郵送による依頼測定を常時受け付けており、結晶構造解析までを含めたきめの細かい対応を図っている。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ており、領域内の多くの共同研究の推進に貢献している。



●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の共同研究に広く貢献している。特に、本装置は自動測定可能なため、試料郵送による依頼測定を行うことで領域内の共同研究の推進に貢献している。



●中性子背面反射型分光器クライオスタット(A02 松浦・CROSS)

本装置はJ-PARCに設置されているため、領域内の連携研究に広く活用されることを目的として、計画班メンバー(A01 田村・A02 高倉・A02 松浦・A04 枝川・A04 出口)でチームを結成し、J-PARCの長期課題(3年)に応募し採択された。2021年度から始まるこの長期課題において、本クライオスタットは、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ることになる。



●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ている。特に、本領域の最重要課題の一つであるハイパーマテリアルの異常高温比熱の研究(A04 枝川)に大きく貢献しており既に一定の成果が挙げられている(Tamura *et al.* Mater. Trans. (2021))。



●高温型熱分析装置(A02 藤田・東北大)

本装置はこれまで領域内から広く測定依頼を受け付けており、特に、東北大の領域メンバー、A02班、A01班との共同研究で頻りに利用されている。本TG-DTA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。特に、A02班の綿貫らとの共同研究では少量のアルミ合金微粒子内部における相形成、相変態の調査に大きく貢献している。



【研究費の効果的使用と今後の使用計画】

2019年末より始まったCOVID-19の影響により、領域内の研究者交流に大きく制限がかかる状況が続いている。研究費の効果的使用として、共同研究および共用設備利用を促進するために領域内に研究補助者を4名増員し、試料提供や依頼測定に即座に対応できるよう配慮している。また、依頼試料作製のための原料代や消耗品費を総括班予算により全額補助し、共同研究の一層の促進を図った。今後もオンライン会議が併用される見通しであることから、総括班予算の旅費を人件費や消耗品等に弾力的に組み替えて本取組を継続し、領域内共同研究の一層の活性化を図る。



10 今後の研究領域の推進方策

研究領域全体を通じ、今後の本研究領域の推進方策について、「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2頁以内で記述すること。なお、記述に当たっては、今後公募する公募研究の役割を明確にすること。また、研究推進上の問題点がある場合や、国際的なネットワークの構築等の取組を行う場合は、その対応策や計画についても記述すること。

【領域全体】

本領域の目玉であるデータ科学とハイパーマテリアルの学融合をさらに形にする。すでに、化学組成のみからのハイパーマテリアル予測が76%、結晶予測が90%という高い精度で可能なことを実証し(Liu *et al. Adv. Mater.* (2021))、本領域が掲げる学融合の一つが達成されつつある。現在、A03班が予測した組成に基づいて、A01班が新規ハイパーマテリアルを合成するフェーズに入っており、A01班山田らが新規系の合成に既に成功している。本合成は多大な人的労力を伴うため、今後研究補助員を増強し、領域としてこの学融合をバックアップしたい。また、A01班木村らが合成に成功したAl-Ru-Si系半導体近似結晶がA03班の機械学習によって予測されていたことが判明した。A03班の機械学習データに電気抵抗率とその温度依存性を実装し、半導体ハイパーマテリアル予測を行い、A01班で実験により検証する。

【研究項目 A01】

A01班の目的は、磁性・超伝導・半導体・酸化物・ポリマーハイパーマテリアルの創製にある。磁性ハイパーマテリアルに関しては、世界で初めて、強磁性準結晶の創製に成功した。これは、準結晶の発見以来約40年にして初めての長距離磁気秩序の発見でもある。今後の課題は試料の構造良質化であり、これは多元化により可能と考えており、速やかに実現したい。次いで、A02班・A04班と連携して、詳細な構造・物性解析を展開し、強磁性準結晶の特徴を解明する。これに並ぶ大きな成果として長距離磁気秩序発現の条件が今や手に入りつつあることである。反強磁性準結晶の創製といった物質科学の難題に挑むフェーズに入っている。また、超伝導ハイパーマテリアルに関しては、そもそも準結晶における超伝導の報告は準安定なAl-Mg-Zn準結晶の一例のみであったが、Tsai型近似結晶においてすでに幾つもの超伝導相が見つかっており、初の熱力学的に安定な超伝導準結晶の実現が視野に入っている。一方、半導体ハイパーマテリアルについては、準結晶において半導体的特性の観測に成功しており、半導体準結晶の実現が現実味を帯びてきている。今後、集中して、超伝導準結晶や半導体準結晶の実現にあたりたい。酸化物ハイパーマテリアルについては、公募班の柚原と山田が密接に連携して、希土類系磁性酸化物準結晶の合成に取り組んでおり、A04班出口らと連携して酸化物準結晶初の磁気特性の共同研究を展開する予定である。ポリマーハイパーマテリアルについては、独自の新規の高分子の組み合わせにより近似結晶や正12回対称準結晶の合成に成功しており、今後、高分子の種類によらない普遍性を突き止めたい。

【研究項目 A02】

A02班の目的は、ハイパーマテリアルの静的・動的構造を組織的に解明することである。このうち静的構造については、正20面体準結晶の三つの型(Tsai型・Bergman型・Mackay型)のうち、未だにBergman型とMackay型は構造未決定であったが、本研究で、Zn-Mg-Tm系正20面体準結晶において、Bergman型の原子的構造の解明に世界で初めて成功した。この世界的成果に加えて、Cd系およびAl系準結晶の相形成挙動、Al-Pd-Mn系正20面体準結晶の高分解能中性子散乱、Al-Cu-Ru系正20面体準結晶のX線非弾性散乱、Cd-Yb系準結晶のコヒーレントX線回折イメージングにおいて新たな知見を与える予備的な結果が得られている。また、構造可視化のためのソフトウェア開発も順調に進んでいる。今後の方策として、これらの研究を着実に進めるとともに、正20面体準結晶で唯一構造未解明のMackay型準結晶の構造解析をAl-Cu-Ru系プロトタイプ準結晶において遂行する。動的構造については、準周期構造を反映したフォノンのギャップ構造の解明、およびコヒーレントX線回折イメージングを用いた高温その場観察を行い、準周期系に特有なダイナミクスを明らかにする。特に、コヒーレントX線回折イメージングでは高温測定が可能になったことから、ハイパーマテリアルの構造相転移を融点付近まで観察することにより準結晶の相形成と安定性に関する重要な知見が得られることが期待できる。また、3次元の結晶構造可視化ソフトウェア(VESTA)の高次元化を行ったものは、新しいバージョンとして近々リリースされる予定である(<http://www.jp-minerals.org/vesta/en/>)。

【研究項目 A03】

組成予測モデルの更なる精度向上を図るとともに、A01班との連携体制を強化し、候補組成の実験検証のペースを加速させる。これにより、研究期間内にできるだけ多くの新しいハイパーマテリアルを発

掘する。ここで、合成に要する体制強化が鍵になる。さらに、A01 班の山田らと共同で多相材料の粉末 X 線回折(XRD)図形から準結晶相の有無を予測する機械学習アルゴリズムを開発し、合成実験の効率化を図る。モデルの訓練には、A01 班の木村、田村らのグループに蓄積されたデータと A03 班の桂らが収集した約 2000 試料の粉末 XRD データを利用する。また、プロジェクトの後期は、半導体準結晶、超伝導準結晶などの革新性の高いハイパーマテリアルの探索を重点的に推進する。特に半導体準結晶の予測については、A01 班の木村らがハイパーマテリアルや周期結晶の電気抵抗および抵抗温度係数の包括的データセットを収集しており、これを用いてモデルを構築する。また前期は 3 元系を対象にハイパーマテリアルの探索を推進してきたが、今後は多元系の組成空間を重点的に探索する。

準結晶研究でデータ駆動型研究を実践する上で最も大きな壁になっているのは、系統的なデータが不足していることである。データの集合体を創出し、準結晶研究のコミュニティで共有することが学術創生の出発点となる。前期は組成や相図のデータ収集に注力してきたが、後期はこの取り組みを拡大し、粉末 XRD データや物性データの収集にも注力する。

【研究項目 A04】

格子物性のうち異常高温比熱に関しては、枝川らにより、準結晶、2/1、1/1、1/0 近似結晶の順で Dulong-Petit 則($3k_B$)からの著しいずれが系統的に小さくなる様子が明らかにされた。今後シミュレーションを援用して、補空間を含む高次元性との関係を協働して追求する。加えて、補空間と密接に関連するフォノン・フェイゾン結合弾性に着目し、フェイゾン歪や結合弾性定数を調べることで補空間自由度の寄与を明らかにする。超伝導と強相関物性に関しては、A01 班の田村らとの共同研究ですでに新規の熱力学的に安定な超伝導ハイパーマテリアルの合成に成功し、世界初の安定な超伝導準結晶が得られる可能性が一段と高まっている。この超伝導ハイパーマテリアル探索を推し進め、A03 班の竹森、A04 公募班の酒井らが予言した準結晶に特徴的な超伝導物性を突き止めることを狙う。さらに、ハイパーマテリアルの磁性に関しては、杉本らが構築した近似結晶における磁気秩序と有効模型に関する理論を A01 班が新規に合成する初の磁性準結晶に展開・適用する。また、A04 班の古賀らが行っている準周期系特有の秩序構造の理論研究をさらに推し進め、2次元準周期系を中心に、様々な準周期構造についてその補空間構造を詳しく調べ、普遍性と特殊性を明らかにし、統一的な学術へと昇華させる。研究項目間の連携としては、A01・A02・A04 班で共同申請して採択された J-PARC の3年間の長期課題「Spin correlations and lattice dynamics in quasicrystals」(2020L0300)が本年度より走っており、新学術領域に相応しい大型の共同研究として、協働して、準結晶特有のフォノン・磁気励起を突き止める。

【今後公募する公募研究の役割】

公募研究の役割は、計画研究でカバーできていない相補的な研究を行い、計画研究と連携して、領域の目的を達成することにある。従って、計画研究の中で研究者の少ないもしくはいない研究提案が最重要となる。特に、研究項目 A01 における酸化物系や高分子系ハイパーマテリアルなどの合成に関する提案、ハイパーマテリアルの特徴を生かした応用研究の提案、研究項目 A04 における高次元や高対称性と関連する新奇物性の探索や新しい測定手法に関して本領域に無いアイデアを有する提案を期待したい。

【国際的なネットワークの構築等の取組】

国際的なネットワーク構築の取組(図 15)としては、ヨーロッパの研究ネットワーク International Research Network: IRN-APERIODIC(<http://irn-aperiodic.grenoble.cnrs.fr/>)との連携の一層の強化を図る。このネットワークは、今まで接点のなかった、非周期秩序物質分野と強相関電子系分野の連携・共同研究を促進し、新たな研究分野の開拓を目指すものであり、本領域の目的と良く整合する。今後の計画としては、2021 年 10 月 3 日～7 日に IRN-APERIODIC 主催、本領域共催で、”Open space between aperiodic order and physics & chemistry of materials”会議(Carry le Rouet, France)を予定している。また、2021 年 12 月 13 日～17 日に横浜で開催される Materials Research Meeting 2021 において、本領域主催のシンポジウム B-1:Hypermaterials(<https://mrm2021.jmru.org/program/symposium/B/B-1>)を企画・提案し、採択されている。本シンポジウムに 21 名もの世界の一流研究者を招待し、国際的なネットワークの拡大を図る。さらに、日仏独を中心とした国際スクールを通じて、若手研究者を含む国際的な融合研究を推進する。



図 15. 国際的なネットワーク構築

11 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。

評価をお願いしている総括班評価者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、2019年9月のキックオフミーティング、2020年2月の第2回領域会議(準結晶研究会)、7月の第4回領域会議、12月の第5回領域会議で、以下のような評価いただいた。

【領域全体】

- ・ハイパーマテリアルという概念について、その概念を定着させるためにはハイパー性(高次元性)がどういいう物性をもたらすかを主張できると良い。(竹内)
- ・大型研究プロジェクトの下に特定テーマの研究活動を行うメリットは、同一分野の研究者間の緊密な情報交換、研究協力の下に効率的に研究を遂行できること、また、新規に購入または構築した大型実験装置を共同で利用できることにある。幾つかの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ていることは評価できる。(竹内)
- ・高価な実験装置の購入により、高精度の実験が可能になり物性解明に寄与できるようになった例として、約20年前前に発表された高温での準結晶のフェイゾン励起に伴う高温比熱の異常が、今回高精度の測定で明確になったことが挙げられる。(竹内)
- ・新しい研究者が多く参入し、新しい視点での取り組みに期待したい。準結晶分野では長い間価電子制御をただ一つの主導原理としてきたが、新しい眼で物質系を眺める必要がある。6次元には何が潜んでいるのか、余剰次元に何があるかが興味深い。(石井)
- ・それぞれの研究グループが着実に成果を上げつつあることに敬意を表す。この新学術領域の核となった準結晶分野の研究に加えて、余剰次元をもって記述することの出来る非周期系(不整合系および渦糸系や冷却原子系なども含む)など、本領域で次回の開催が計画されている非周期結晶に関する国際会議(Aperiodic 2021)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。また、新しい実験手法の開発・提案(コヒーレント X線イメージング、X線非弾性散乱、Atomic-scale holography, 準粒子干渉のSTM観察等々)も、新たな切り口での現象の理解につながると期待する。(石井)
- ・準結晶という複雑な構造を持つ物質を補空間を通して理解することが本領域の重要なポイントである。物理空間に実空間と逆空間があるように補空間にも実空間と逆空間がある。今議論されているのは補空間における実空間である。補空間の逆空間の役割を解明することが今後重要なポイントになる。(石政)
- ・研究成果の論文としての発信が順調に進んでいる。メディア等への発信(アウトリーチ活動)も重要である。(佐藤)

【A01班：ハイパーマテリアルの合成】

- ・磁性希土類を含む Tsai 型準結晶、1/1、2/1 近似結晶の磁性について系統的な測定が行われ、磁性が e/a の値で整理できることを示すと共に、35 年来の悲願であった強磁性準結晶の発見に至ったことに敬意を表す。本プロジェクト直前の半導体近似結晶の発見と共に世界的成果である。(竹内)
- ・「結晶場効果の小さい Gd 型準結晶においては、単純強磁性は自明な解」とする意見に対し、答えを準備すべきである。Gd よりも Tb の方が面白い。(佐藤)
- ・価電子濃度による磁性制御では RKKY 相互作用が念頭にあるが、深い擬ギャップの存在する系におけるフェルミ面とは何か、 $2k_F$ とは何か、といった議論の前提となる概念を再検討する必要がある。(石井)
- ・物質科学の研究分野では新物質の発見が最も重要な役割を果たすので、A01 班の役割が最も重要である。興味あるものとして、ファンデルワールス結晶のヘテロ界面、BaTiO₃ の超薄膜、高分子ブロック

重合体のデカゴナル準結晶、磁性希土類元素を含むシャストリーサザーランド格子の合成、Al-Si-Ru系で初めての直方晶系近似結晶、がある。ハイパー性を持つ構造が、ハイパー性を反映した特性を持つことを明らかにして初めてハイパーマテリアルと言える。(竹内)

- ・準結晶の分野では新物質発見が重要な役割を果たしてきた。新物質が準結晶なのかランダムタイリングなのかは重要なポイントで、12回対称など違った対称性が出てきたときに重要になる。(石政)
- ・Pt単結晶上に形成される準結晶構造の酸化物蒸着膜は物性の測定が不可能なことから、Ba-Ti-O系でのバルクの準結晶合成の試みが注目される。ファンデルワールス結晶でのヘテロ界面で生じる光起電力効果は興味深く、応用の可能性からも注目される。(竹内)

【A02班：ハイパーマテリアルの構造】

- ・ブラッグコヒーレント X線回折イメージング開発等、今後の研究発展への貢献が期待される。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。準結晶に関する高温での X線横モード非弾性散乱実験によりフォノン異常が観測された。極低温から 1500 °C までの広い温度範囲の高真空下 X線回折装置を用いて準結晶のフェイズ歪、ボロンの構造相転移などが観測された。(竹内)
- ・コヒーレントな X線を使う話が印象に残った。スペックルに関しては準結晶研究の早い段階でディスクオーダーの情報が期待されたが発展しなかった。今回は新しい情報が得られることを期待したい。(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】

- ・マテリアルズ・インフォマティクスは外から見ると何でもできる印象を持たれるが、ツールの一つで、上手く使っていくべきである。実験データとシミュレーションデータを組み合わせると良い。(伊藤)
- ・データ科学については、今回のプロジェクトで集まる様々なデータを共有できる形にすると A03 班が上手く活用できる。構造解析の結果を cif ファイル化すると便利である。材料の特性や構造のデータはあるが、プロセスのデータが世の中に無い。プロセス・データが集められるのは材料系を限定している本プロジェクトの強みである。(伊藤)
- ・機械学習については、発見された準結晶がいまだに 100 に満たない状況で非常に困難かと思われたが、かなり正しく予測が可能なのがわかり、AI の能力の高さに感心した。新準結晶合金の開発が期待されるが、この種の探索にはマンパワーが必要である。この 1 年はコロナ禍の影響で十分発揮できなかったと思われることは残念である。このプロジェクトでの新規準結晶合金の発見は、是非実現されることを期待したい。(竹内)
- ・Mackay 型、Tsai 型は盛んに研究されているので、Bergman 型に新しい展開の可能性がある。Tsai 型は Zn を置き換え、Cd の代わりに Ag、あるいは Au で置き代えて新しい発展があった。Bergman 型は、機械学習による新準結晶、新近似結晶の探索の一つの大きなオープンスペースになっている。(石政)

【A04：ハイパーマテリアルの物性と hidden order の探索】

- ・Au-Al-Yb 近似結晶・準結晶における特異な量子臨界現象などが元素置換の実験により Yb の価数揺らぎと強く関係していることが実験的に示され、また、Al-Zn-Mg に続いて新たなハイパーマテリアル超伝導合金が発見された。準結晶のフェイズ励起に伴って生じる高温比熱の上昇について、定量的な解釈が試みられた。ハイパーマテリアルの準結晶・近似結晶がその電子構造、原子構造の特徴から熱電材料に有利である事実が報告された。理論研究は、Tsai 型近似結晶の磁性に関して、正 20 面体スピクラスタの磁気基底状態の計算による解釈が試みられた。(竹内)
- ・新しい超伝導物質(近似結晶)の発見は今後につながる成果である。(佐藤)
- ・準周期性を示す輸送特性は不明である。平均ではなく、準周期配置中での輸送現象を調べるために、実験的にはメゾスコピックな測定が必要だ。理論的には、準周期中ではフェルミ液体で良いか考える必要がある。準結晶ではありとあらゆるウムクラッププロセスがあるから、運動量保存則は必ず緩和され、フェルミ液体である理由の土台が揺らぐ。フェルミ面はあるのか、 $2k_F$ とは何かが問われる。(石井)