ハイパーマテリアル：補空間が創る新物質科学

領域略名称：ハイパー物質

領域番号：6106

令和元年度～令和5年度

科学研究費助成事業（科学研究費補助金）

（新学術領域研究（研究領域提案型））

研究成果報告書

令和７年６月

領域代表者　田村　隆治

東京理科大学・先進工学部・教授

はしがき

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 による Al-Mn 系準結晶の発見以降、100 を超える合金系で準結晶が見い出された。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見い出され、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、人類が何百年にも渡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。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消されるものでなく、**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背景である。

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。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記述・理解する上での基盤をなす。我が国はこれまで高次元構造解析において世界を牽引してきたが、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。

この新たな研究領域を構築する上で本領域では次の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いて新規ハイパーマテリアルを合成するとともに、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、また、高次元と密接に関連する物性を明らかにすること。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とである。本報告書で述べる通り、この二つの目標に対して多数の顕著な成果が得られたとともに、本研究領域が提唱する新物質概念が国内外で広く認知され、ここに新たな学術領域「ハイパーマテリアル」が誕生したことを申し上げる。

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。）

領域代表　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）

総括班

研究代表者　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）

研究分担者　木村 薫（物質・材料研究機構 エネルギー・環境材料研究拠点　NIMS 特別研究員）
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）
竹森 那由多（大阪大学・量子情報・量子生命研究センター・准教授）
出口 和彦（名古屋大学大学院理学研究科 物理学第一 講師）
吉田 亮（統計数理研究所 データ科学研究系 教授）
岩﨑 祐昂（物質・材料研究機構 ナノアーキテクトニクス材料研究センター 研究員）
高際 良樹（国立研究開発法人物質・材料研究機構・エネルギー・環境材料研究拠点・グループリーダー）（2019-2022）

計画班

A01「ハイパーマテリアルの合成」

研究代表者　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）

研究分担者　木村 薫（物質・材料研究機構 エネルギー・環境材料研究拠点・NIMS 特別研究員）
室 裕司（富山県立大学 工学部 教授）
山田 庸公（東京理科大学 先進工学部物理工学科 講師）
岩﨑 祐昂（物質・材料研究機構 ナノアーキテクトニクス材料研究センター 研究員）
石政 勉（公益財団法人豊田理化学研究所・フェロー事業部門・フェロー）（2019）

A02「ハイパーマテリアルの構造」

研究代表者　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）

研究分担者　藤田 伸尚（東北大学 多元物質科学研究所 講師）
門馬 綱一（独立行政法人国立科学博物館 地学研究部 研究主幹）
綿貫 徹（国立研究開発法人量子科学技術研究開発機構 関西光量子科学研究所 副所長）
松浦 直人（一般財団法人総合科学研究機構 中性子科学センター 主任研究員）
松下 能孝（国立研究開発法人物質・材料研究機構, 技術開発・共用部門
ユニットリーダー）

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」

研究代表者　吉田 亮（統計数理研究所 データ科学研究系 教授）

研究分担者　桂 ゆかり（国立研究開発法人物質・材料研究機構 統合型材料開発・情報基盤部門 主任研究員）
竹森 那由多（大学院理学研究科 物理学専攻 物理学専攻 准教授）
野澤 和生（鹿児島大学 理工学域理学系 准教授）

A04「ハイパーマテリアルの物性と hidden order の探索」

研究代表者　出口 和彦（名古屋大学大学院理学研究科 物理学第一 講師）

研究分担者　枝川 圭一（東京大学 生産技術研究所 教授）
古賀 昌久（東京工業大学 理学院 准教授）
杉本 貴則（大阪大学 量子情報・量子生命研究センター 特任准教授）
中村 真（中央大学 理工学部 教授）

橋爪 洋一郎（東京理科大学 教養教育研究院北海道・長万部キャンパス教養部 准教授）
高際 良樹（国立研究開発法人物質・材料研究機構・エネルギー・環境材料研究拠点・グループリーダー）（2019-2022）

公募班（第一期）

A01「ハイパーマテリアルの合成」

公募研究者　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）
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）
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）
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）

A02「ハイパーマテリアルの構造」

公募研究者　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）
松本 正和（岡山大学 異分野基礎科学研究所 准教授）
Stellhorn Jens Rüdiger（広島大学大学院先進理工系科学研究科　助教）
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）

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」

公募研究者　義永 那津人（東北大学 材料科学高等研究所 准教授）
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）

A04「ハイパーマテリアルの物性と hidden order の探索」

公募研究者　亀岡 聡（東北大学 多元物質科学研究所 教授）
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）
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）
村上 雄太（東京工業大学 理学院 物理学系 助教）
大熊 哲（東京工業大学 理学院 物理学系 教授）
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）
関山 明（大阪大学 基礎工学研究科物質創成専攻 教授）
坂井 徹（兵庫県立大学 理学部 物質科学科 教授）
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）
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）

公募班（第二期）

A01「ハイパーマテリアルの合成」

公募研究者　友利 ひかり（筑波大学 数理物質系 助教）
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）
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）
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）
鈴木 慎太郎（青山学院大学　理工学部 物理科学科　助教）
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）

A02「ハイパーマテリアルの構造」

公募研究者　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）
Stellhorn Jens Rüdiger（京都大学　研究員）

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」

公募研究者　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）

A04「ハイパーマテリアルの物性と hidden order の探索」

公募研究者　宮﨑 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）
亀岡 聡（東北大学 多元物質科学研究所 教授）
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）
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）
根本 祐一（新潟大学 自然科学系 准教授）
井村 敬一郎（名古屋大学教養教育院 講師）
関山 明（大阪大学 基礎工学研究科物質創成専攻 教授）
渡辺 真仁（九州工業大学 大学院工学研究院 教授）
小林　寿夫（兵庫県立大学 理学研究科 教授）
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）

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

研究発表

（代表論文は全て査読有り。研究代表者は二重下線、研究分担者は一重下線、公募研究者は太字、corresponding author には左に*印を付す。）

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,** 196301-1~196301-6 (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 (2023).
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* 2304546**, 2304546-1-9 (2023).
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 (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).
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(36)**, 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

研究項目 A01：ハイパーマテリアルの合成（公募研究班）

＜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 2024, 64,*** e202300130-1-30, (2023).
4. "Lattice strain visualization inside a 400 nm single grain of $BaTiO_3$ 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. "*T*he atomic structure of the Bergman-type icosahedral quasicrystal based on the Ammann-Kramer-Neri tiling", *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, Israrel.
3. "Visualization of magnetic structures and quasicrystals", **K. Momma**, 国際学会, 招待講演, 2023, IUCr Crystallographic Computing School 2023, Melborune, 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_xCoO_2 (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, Israrel.

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 回ー第 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 Revew 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］受賞**
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 (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リで学ぶ「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～」岩﨑祐昂, 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
13. 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 2020 年

産業財産権

研究項目 A01：ハイパーマテリアルの合成（計画班）

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

研究成果

【研究項目 A01】

本研究項目では、局在スピン系・強相関系・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目標とした(図 1)。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目標とした。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目標とした。得られた主な成果を以下に記す。

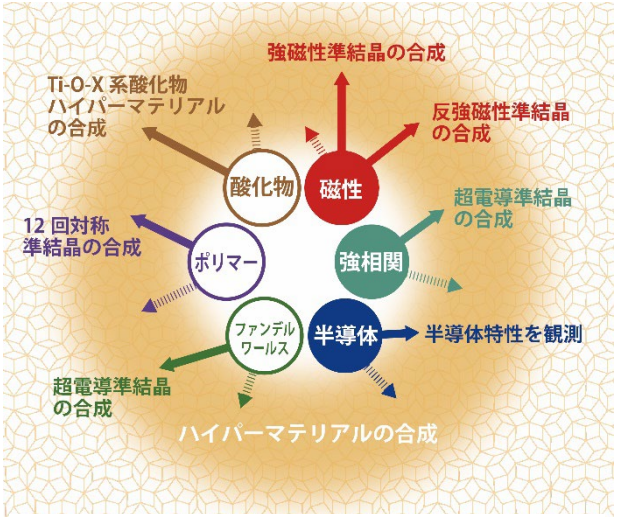

図 1. A01 班の研究目的と達成状況

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.,* J. Am. Chem. Soc. (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.,* Phys. Rev. Lett. (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に成功した(図 2) (Tamura *et al.,* Nat. Phys. (2025))。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新たなステージに入った。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えられた。

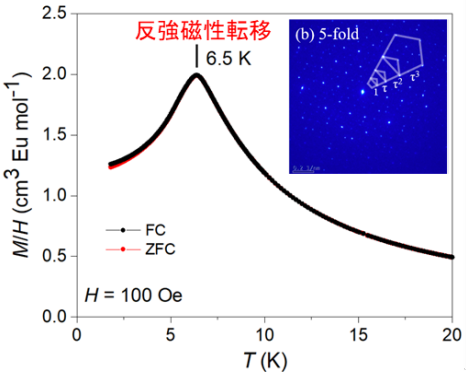

図 2. 反強磁性 Eu 系準結晶の発見

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。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。これは正 20 面体準結晶で史上二例目の超伝導体でもある。

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 岩﨑らは、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、岩﨑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、n 型の両方でハイパーマテリアル史上最高の 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(Li *et al.*, Inorg. Chem. (2025))。

【研究項目 A02】

本研究項目では、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、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に関する情報を与えることも本研究項目の達成目標である。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、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目標とした。得られた主な成果を以下に示す。

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 3）。(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 (2024)）、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。

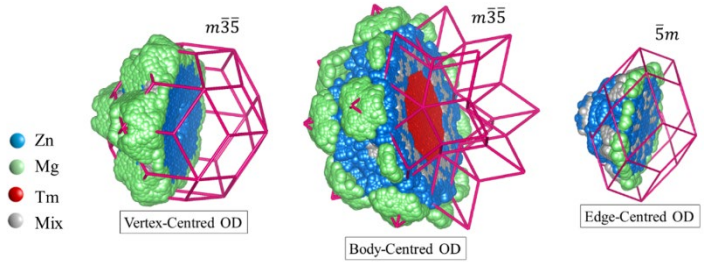

図 3　Zn-Mg-Tm 系正 20 面体準結晶の補空間構造

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 τ $\left(=(1+\sqrt{5})/2\right)$ 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. (2024)）（図 4）。これらは、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結果である。

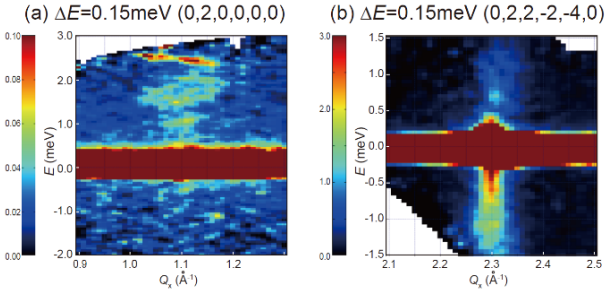

図 4 エネルギーに対して非対称な Al-Pd-Mn 正 20 面体準結晶のフォノンスペクトル

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、磁気構造までを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。結晶構造可視化ソフトウエア 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ものと期待される。

【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】

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。そこで、本研究項目では、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主たる目的として、データ科学や第一原理計算などを方法論の駆動力とし、領域内に知識循環をもたらす役割を担った。得られた主な成果を以下に記す。

【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.*, Sci Data (2024)）。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となる。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))。

【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】

本研究項目では、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）や準周期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。得られた主な成果を以下に記す。

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。さらに、Ta-Te 系フェンデルワールス系準結晶において $T_c \approx 1$K の超伝導が発見された(図 5) (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))。

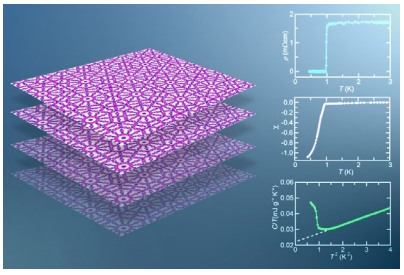

図 5. ファンデルワールス層状準結晶における超伝導の発見

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 6) (Matsubara *et al*., Phys. Rev. B (2024), Koga *et al*., Phys. Rev. B (2022), Koga, Mater. Trans. (2021))。

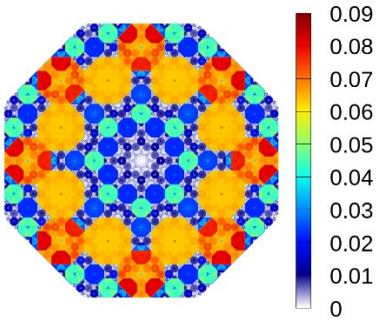

図 6. Ammann-Beenker タイル上の反強磁性秩序の補空間構造

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・近似結晶が合成され、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リングされることがまず発見された(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 1.5 倍程度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%に入ることを示し、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を明らかにした。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実現可能であることも示した(Kurono *et al*., Sci. Technol. Adv. Mater. Meth. (2025))。

【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、物理量の大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))、この手法により、非一様空間構造の異なる電子相の存在を発見した。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。