



文部科学省科学研究費補助金「学術変革領域研究(A)」(令和2~6年度)

超秩序構造科学

NewsLetter No. 1 (1号)

URL: <http://www.hyperordered.org/>

◆代表挨拶◆

学術変革領域「超秩序構造科学」領域代表 名古屋工業大学 教授 林 好一



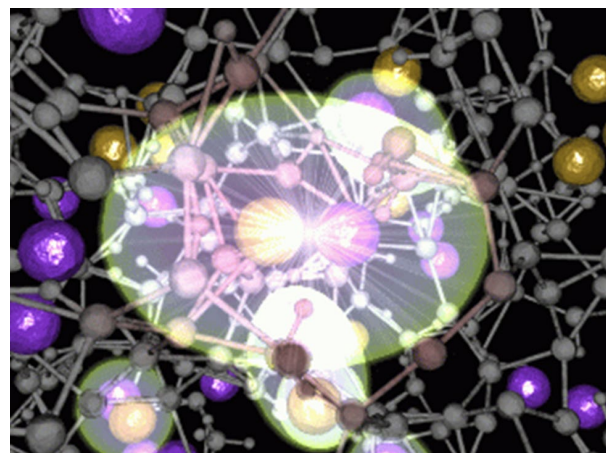
科学技術立国を目指す日本において、材料科学は国内屈指の得意分野の一つであり、世界の科学界を牽引してきました。しかしながら、近年、アジア諸国の台頭によって、その存在感は急速に失われつつあります。このような状況を脱却するためには、現在でも世界最高水準レベルである分析・解析技術に立脚し、未開拓であった材料科学分野への挑戦が重要だと考えています。様々な材料における機能性の根幹は、母物質と添加元素(ドーパント)の組み合わせによる協調・協奏現象と言っても過言ではありません。そのような中、前プロジェクトの新学術領域「3D活性サイト科学」で代表されるように、結晶中のドーパント解析に基づく欠陥構造と物性発現の機序の理解も大きく進んできました。そして、学術変革領域「超秩序構造科学」では、その先のサイエンスを開拓し、世界トップを目指します。我々の有する高度な量子ビーム技術を用いれば、異種元素ドーパントや空孔から構成されるナノ構造体を発見でき、実際にその観測例がいくつもあります。これらは周期表にない新元素とも見なすことができ、添加元素の組み合わせや立体配置の自由度により、新次元の機能性を創出できると考えています。

本変革領域のもう一つの方向性は非晶質材料への展開です。非晶質中のドーパントの解釈は、結晶で用いられる置換または格子間サイトなどと呼ぶものほど明確ではありません。もともと原子配列の乱れている非晶質では、そのようなサイトの定義が難しいためです。そこで本領域ではトポロジー解析を用いて、その体系化に取り組みます。また、ガラスの物性は、トポロジー的に特徴を抽出できるナノスケール秩序、すなわち、「超秩序構造」とも相関があり、その理解はガラス材料開発の今後の指針にもなる筈です。このような「超秩序構造」

は、誘電体や機能性ガラス、ゼオライト、超伝導体、生体材料等の幅広い材料群に存在しており、まさしく材料機能性の宝庫とも捉えられます。理論的には、「超秩序構造」の機能を解明できる大規模第一原理計算、効率良く「超秩序構造」を探索できる材料機械学習などが重要な役割を果たすと考えています。

ここに我々は、「超秩序構造」を正確に決定できる計測、深く理解するための理論、構造制御のための合成プロセスを融合した学術変革領域「超秩序構造が創造する物性科学」を立ち上げ、材料開発に新たなブレークスルーをもたらし、日本科学のプレゼンス強化に貢献します。

超秩序形成による機能発現



◆領域概要◆

本領域の対象である「超秩序構造」とは、ドーパントや空孔・空隙によって形成される特異ナノ構造体を指します。具体例として、点として見なされる格子欠陥ではなく異種元素や空孔による複合欠陥、また、アモルファス中でもトポロジカル的なオーダーを示すナノスケール原子配列などが考えられます。このようなナノスケール秩序、すなわち「超秩序構造」は、「完全秩序」と「完全無秩序」との間に存在する中間的な構造状態としても捉えられます。「超秩序構造」は結晶やアモルファスに高機能性を付与する重要な鍵因子、つまり、材料機能性の宝庫となりうるため、その構造を高度に制御することにより無限の可能性を創出できます。本領域では、「超秩序構造」の観測・理解・制御の研究に取り組むことで、新しい材料設計のアプローチを開拓し、高機能材料を探索します。

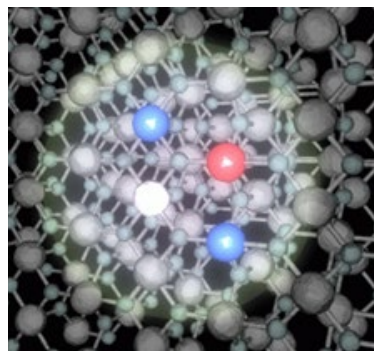
◆何を明らかにするのか◆

- ① **新「超秩序構造」設計・創製**：「超秩序構造」の知見を基に、大規模第一原理計算・機械学習を駆使し、機能性「超秩序構造」のデザインや合成プロセスを提案し、新規材料創製に取り組みます。
- ② **対象材料・物質拡大化**：0.01%以下の低濃度試料、数 μm サイズの微小結晶などの従来適用の難しかった試料に対する装置高度化を行い、対象試料の拡大化を目指します。また、電場・磁場等の外場印加や高圧などのセルを作製し、特殊環境下でも計測できることを目指します。
- ③ **計測・解析プラットフォーム創設**：建設した大型計測施設を誰でも簡単に利用できるインターフェースの構築、その場で、観測データから原子配列のモデリング等を行える統合解析ソフトウェアの開発を行います。海外に対しても広く公開し、国際共同研究を加速させます。
- ④ **「超秩序構造」学理構築**：得られた情報を一元化できる活性サイト原子構造データベース（逐次web公開）を構築し、新規材料創製に役立てると共に統合的な物質科学理解の礎を構築します。

◆重点研究対象◆

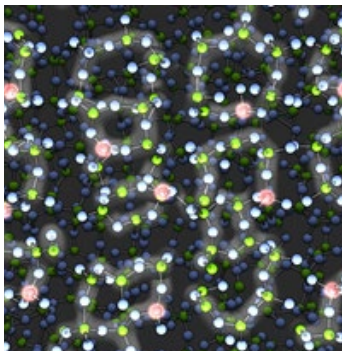
本研究領域の重点研究対象を、**①「ドーパント誘起超秩序構造」**、**②「空孔・空隙を含む超秩序構造」**、**③「結晶/アモルファス境界の超秩序構造」**と設定し、プロジェクトを推進します。これら以外にも、想定を超えた「超秩序構造」が発見されることを期待しています。

①ドーパント誘起
超秩序構造



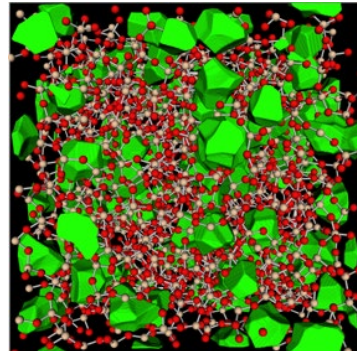
酸化チタンの In-Nb-Ti ナノ構造体

②空孔・空隙を含む
超秩序構造



ゼオライト前駆体

③結晶/アモルファス境界の
超秩序構造



世界一秩序のあるガラス

◆領域の研究体制◆

総括班 (X00)：領域の運営を効率的に進めるために、重点試料の決定・融合研究の立案などの領域全体の研究戦略を策定し、観測・解析に必要な大型装置の建設・管理・運営を行います。また、若手育成、国際交流を推進します。

試料班・創製 (A01-1)：「超秩序構造」によるエマージェント物性を創出します。「超秩序構造」の精密解析および「超秩序構造」と物性の相関解明の為の高品質試料を合成します。外部刺激に応答する「超秩序構造」の設計、また、超秩序構造に基づく新奇な超伝導物質・電子デバイスの基幹材料等を探索します。

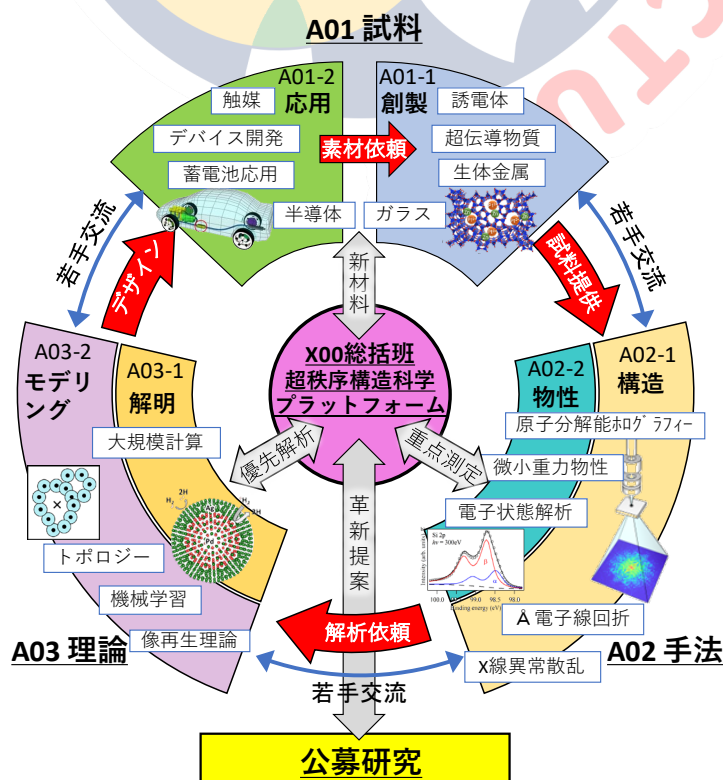
試料班・応用 (A01-2)：「超秩序構造」の正確な計測・理論を活用し、構造制御のための合成プロセスを深化させます。他班との連携による超秩序材料の設計、物質ライブラリーに基づくデバイスの試作、ターゲット材料のスケールアッププロセス合成を行います。

手法班・構造 (A02-1)：本領域で合成・開発される「超秩序構造」物質の機能発現に資する構造の観測を担います。放射光 X 線・中性子・電子線を駆使して、極微量・極小領域の計測技術、マルチスケール元素選択構造計測、高温・高圧等の特別環境の計測等の「超秩序構造」観測技術を開発します。

手法班・電子 (A02-2)：非晶質材料などの多様な高機能性材料中に存在する「超秩序構造」を、微小重力下及び地上での物性計測装置や原子分解能ホログラフィー等の複数の高精度分析技術を駆使して計測して、「超秩序構造」とその電子状態を基に、そのマクロスケール物性の発現機構を解明します。

理論班・解明 (A03-1)：大規模第一原理計算により、「超秩序構造」を持つ物質の詳細な構造・電子状態を高精度に解明・予測します。さらに、理論計算や機械学習との連携により、超秩序構造と物性の相関を予測し、得られる知見に基づいた新規超秩序構造物質のデザインを目指します。

理論班・モデリング (A03-2)：原子分解能ホログラフィーや電子線回折から機械学習に基づいて、「超秩序構造」を持つ材料の原子配列を推定します。また、原子配列から「超秩序構造」の特徴を記述する手法、さらに、「超秩序記述子」からの物性を予測し、効率的な材料設計・合成に寄与します。



◆イベント報告◆

1. キックオフミーティング（令和2年12月20日）

令和2年12月20日（日）に現地（名古屋工業大学4号館1階ホール）とオンライン（Zoom）でのハイブリッド形式によるキックオフミーティングが開催されました。領域のメンバー計41名が参加し、活発な議論が交わされました。はじめに領域代表から領域の概要と総括班の活動方針について説明があり、各研究計画班から構成員の紹介、研究の目的、計画および活動方針などについての発表がありました。各班の発表の後にはZoomのブレイクアウトルームを用いた個別のディスカッションタイムが設けられ、オンラインで参加するメンバーも含めた共同研究の議論が積極的に行われました。最後に、評価者の先生方から本ミーティングの講評をいただきました。



◆今後の予定◆

1. 公募説明会

日時： 第一回 2021年2月11日（木）10:00～12:00 オンライン（Zoom）

第二回 2021年2月下旬～3月上旬（予定）、2時間程度 オンライン（Zoom）

領域代表及び各研究計画班代表者による領域や研究内容の紹介、公募班への期待が語られます。発表後には、現地での個別相談のほかZoomブレイクアウトルームを用いた個別相談にも応じます。オンライン開催のため事前の参加申し込みが必要です。下記のフォームからお申し込みください。

https://docs.google.com/forms/d/1tTAwo2_WH3Wmsnhv88uLEfqqToUF5FxrPQbBeX54h7w/

また、当日の発表を記録して、領域HPで公開する予定です。

2. 第1回報告会

日時： 令和3年3月7日（日）、8日（月）

会場：名古屋工業大学4号館1階ホールおよびZoom（ハイブリッド形式）

◆ニュースレター担当より◆

本ニュースレターでは本領域での活動をできるだけ発信していきたいと考えております。重要な研究成果、関係する研究会の開催予定や活動報告などありましたら、ニュースレター担当までお知らせください。

（志賀元紀・岐阜大学）（中田彩子・物質・材料研究機構）