



# 超秩序構造科学

NewsLetter No. 2(2号)

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

## ◆領域代表より◆

学術変革領域研究(A)「超秩序構造科学」の2年目の最初のニュースレターとなります。前回のニュースレター発刊日は1月28日でしたが、公募研究班のメンバーが揃うこのタイミングで第2号が発刊されることになりました。やはり、今回の大きなニュースは、新たに19名の公募研究班メンバーが加わったことです。9月25、26日の第2回報告会はそのキックオフーティングも兼ねましたが、多くの公募研究班の先生方にお会いすることができました。領域代表としては、大変、優秀な研究者に集って戴けたと考えており、新たな連携研究の枠組みができることを楽しみにしております。



領域代表 林 好一 (名古屋工業大学)

令和2年度上半期の主だった活動として、5月22、23日に若手の学校と6月22日に第2回国際ワークショップを行いました。いずれもオンラインでの開催となりましたが、若手の学校については124名の参加、国際ワークショップについては50名近くの参加があり、盛会となりました。その他にも、関連のイベントとして、9月1、2日の日本セラミックス協会におけるシンポジウム、9月13~17日のガラス構造解析のオンラインチュートリアルなども行いました。また、物理学会(9月20~23日)においても、領域10において「超秩序構造科学」関連の発表を多く行いました。領域特集号としては、日本物理学会の欧文誌"Journal of Physical Society in Japan"への企画が採択され、来年には発刊できると考えています。

研究面に関しては、多くの連携の内容が具体的になってきており、「超秩序構造」というキーワードも馴染んできているように思いました。これまでの主だった成果については、領域ホームページ等でも紹介しておりますが、一月に一本ほどの成果を紹介できるようになってきました。今のところ、手法班の成果紹介が多い状況ですので、他班や公募研究班についても情報をお寄せ戴ければと存じます。プレスリリースも、現在までに5本あります。今後は、領域連携のシナジー効果をより強く反映した成果が少しずつ増えてくるものと期待しております。

本研究領域はコロナ禍においてスタートし、十分に対面でのイベントが行えないことや若手の海外派遣が行えないことなど、制限の課せられた状況で運営を進めてきました。この原稿を書いている10月初旬においては、第5波は終息の様相を示していますが、今冬に第6波が起こることを専門家は予想しており、予断を許さない状況です。そのような中でも、今後は対面での会合の機会を増やしていく必要があると考えています。また、海外研究施設との連携も重要でありますが、同様に立ち遅れていることは否めません。渡航制限が緩和されるとともに、若手の海外派遣支援を強化していきたいと考えております。次年度は、海外での国際シンポジウムの開催を検討しており、是非、それが無事に達成できることを祈念しております。

#### ◆公募班が決まりました◆

本年9月から下記19名の方々を公募班としてお迎えすることになりました。9月25、26日の第2回成果報告会における公募班発表セッションにて、それぞれの研究課題の紹介を行い、報告会終了後には公募班メンバーと計画班メンバーとによる領域内での連携計画などについて打ち合わせました。今回の公募研究は1年半と通常より短い期間となりますが、計画班・公募班の強力な連携により超秩序構造科学のさらなる進展を目指してまいります。

# 学術変革領域 超秩序構造科学

A01	試料		
赤松	寛文	九州大学	層状ペロブスカイトの層間侵入アニオンが形成する超秩序 構造の解明と電気的秩序の制御
石松	直樹	広島大学	Fe-Fe 原子相関を超秩序構造とした不規則鉄合金の 構造可視化
岸本	史直	東京大学	ギガヘルツ帯電磁波が拓く固体酸触媒の動的超秩序構造
高津	浩	京都大学	応力を用いた酸素空孔相の制御
富永	依里子	広島大学	Bi 系Ⅲ-V 族半導体混晶の機能発現機構の解明に向けた 秩序構造の可視化と制御
中嶋	敦	慶應義塾大学	単一の原子数と組成に秩序化された合金担持触媒の 構造活性評価
中嶋	誠二	兵庫県立大学	強誘電性半導体におけるドーパント誘起超秩序構造の 外場印加下の機能解明
藤井	茉美	近畿大学	非晶質絶縁膜/ダイヤモンド単結晶界面極薄領域の超秩序構造
細川	伸也	熊本大学	放射光を用いた機能性ゼオライトの <mark>原子</mark> 配列・電子構造 そしてダイナミクスの研究
前田	和之	東京農工大学	金属ホスホネート MOF 類縁化合物の構造欠陥の解明と制御
燒山	佑美	大阪大学	ねじれ X 字型分子が作る結晶内一次元チャネルにおける 超秩序構造の化学
A02	手法		
江草	大佑	東京大学	電子顕微鏡直接観察に基づく Mg 合金中の溶質原子クラスター 解析
大山	研司	茨城大学	中性子ホログラ <mark>フィー</mark> の高分解能化による超秩序構造中の 軽元素挙動の観測
大窪	貴洋	千葉大学	超秩序構造が発現する原子ダイナミクスの解析
北浦	守	山形大学	環状ネットワーク侵入型発光中心と原子空孔のマルチプローブ 分光
千葉	文野	慶應義塾大学	高分子のホストゲスト共結晶構造・共アモルファス構造の探索
A03	理論		
旭」	<b></b> 包司	名古屋大学	局所構造記述子を用いた複合欠陥含有誘電体材料の解析と 設計手法の探索
小林	正人	北海道大学	大規模量子化学計算と結晶構造 DB を用いた超秩序構造の シナジー効果・動的特性の解明
渡邉	聡	東京大学	機械学習原子間ポテンシャルを用いた次世代電子素子中の 超秩序構造の解析

# ◆論文・受賞など◆

上記研究ピックアップの成果も含め、2021年9月までに60報の論文発表がありまし た。また3件の受賞がありました。詳細は領域ホームページ(研究成果ページは右 QR コード)をご覧ください。



## ◆イベント報告◆

## 1. 報告会

第1回成果報告会(2021年3月7、8日)、第2回成果報告会 (2021年9月25、26日)が、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 より行われました。計画班代表及び研究分担者による研究の 進捗報告、加えて第2回では公募班の研究紹介も行われ、



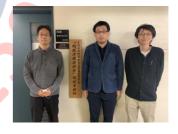
連携研究を進展させるための活発な議論が行われました。最後に、評価者の先生方から本ミーティ ングの講評をいただきました。第2回成果報告会では若手研究者の優れたポスター発表に対し 「Forest Award」が授与され、小玉翔平氏(埼玉大学)、吉岡達史氏(東京大学)が受賞しました。

## 2. 研究会・ワークショップ・チュートリアル

- ・日本物理学会第76回年次大会共催シンポジウム 【多様な物質に潜む「超秩序構造」~構造物性研究の新展開~】(2021年3月13日)
- ・日本セラミックス協会 第34回秋季シンポジウム協賛セッション 【ナノスケール原子相関~実験・理論・データ科学による無秩序の中に潜む秩序の抽出~】 (2021年9月1、2日)
- ・第1回、第2回国際ワークショップ"The 1st/2nd international workshop of hyper-ordered structures" (2021 年 3 月 26 日、6 月 26 日、オンライン)
- ・第1回 若手の学校 (2021年5月22、23日、オンライン) 中村祐輝氏(東北大学)、Harry Handoko Halim 氏(大阪大学)が若手ポスター発表賞 「Forest Award」を受賞しました。
- Online tutorial of quantum beam PDF analysis and topological analysis for disordered materials (2021年9月13~17日、オンライン)

## 3. その他

学術変革領域研究 A「超秩序構造科学」SPring8 拠点室が開所しました 2021 年 5 月 1 日に SPring8 に拠点室が開所いたしました。コロナ禍の ため開所式は行えませんでしたが、看板の設置と記念写真の撮影が 行われました。ここには名古屋工業大学の加藤達也特任助教が常駐し、 SPring-8 での領域のアクティビティを加速します。



### ◆今後の予定◆

### 1. 第 15 回 物性科学領域横断研究会 (領域合同研究会)

日時: 2021年11月26日(金)~11月27日(土)、オンライン開催 物性科学に関連した9つの新学術領域研究および学術変革領域研究(A)が合同で開催する研究会 です。本領域からも領域代表および若手研究者による発表が行われます。

http://www.ryoikioudan.mp.pse.nagoya-u.ac.jp/index.html

### 2. 第3回成果報告会

日時: 2022年3月5日(土)~3月6日(日) 会場: 宇宙航空研究開発機構(予定)

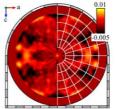
#### ▶ニュースレター担当より◆

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)

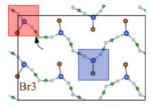
# ◆研究ピックアップ◆

1. X線照射で欠陥を生成させることにより、モット絶縁体-金属転移を起こす有機材料 κ-(BEDT-TTF)<sub>2</sub>Cu[N(CN)<sub>2</sub>]Br の欠陥構造を蛍光 X 線ホログラフィーを用いて解明しました A. K. R. Ang, R. Marumi, A. Sato-Tomita, K. Kimura, N. Happo, K. Akagi, T. Sasaki, K. Hayashi *Phys. Rev. B* 103, 214106 (2021).

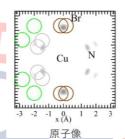
蛍光 X 線ホログラフィーは、特定元素周辺の 3 D 原子像を再生させ、超秩序構造決定に近づける強力な手法であり、領域の主要技術の一つとなっています。本研究では、X 線照射による欠陥により、モット絶縁体-金属転移を起こす有機材料  $\kappa$  -  $(BEDT-TTF)_2Cu[N(CN)_2]Br$  の欠陥構造を明らかにしました。試料には、放射線(白色 X 線)を照射した単結晶と未照射単結晶を準備しました。(東北大学金属材料研究所の佐々木研究室 提供) 当然、SPring-8 の強力な X 線で欠陥生成が進む可能性があったため、窒素吹き付け装置を用い、試料を冷却しながら銅原子周辺のホログラム測定を行いま



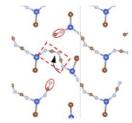
蛍光X線ホログラム



Bond-shiftモデル



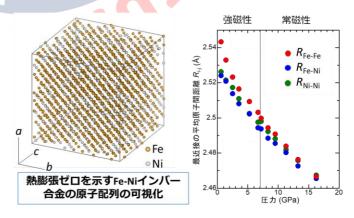
Bond-breakモデル



した。銅はアニオン層に存在しており、アニオン層が放射線の影響を受け、構造変性することがラマン測定から分かっていました。ホログラムから再生された原子像には、近接の窒素と臭素が再生され、欠陥生成が進むと臭素の原子像強度は変わらずに、窒素の原子像のみ減衰しました。欠陥構造モデルには、Bond-shift モデルと Bond-break モデルの 2 種類が提案されていましたが、分子動力学などとも組み合わせ、前者のモデルで原子像の変化が説明できることを証明しました。

2. Fe と Ni がランダムに配列する不規則合金の局所構造を逆モンテカル口法により解析し、Fe-Fe 原子間距離の伸長/収縮が、熱膨張ゼロのインバー効果の起源であることを解明しました N. Ishimatsu, S. Iwasaki, M. Kousa, S. Kato, N. Nakajima, N. Kitamura, N. Kawamura, M. Mizumaki, S. Kakizawa, R. Nomura, T. Irifune, and H. Sumiya *Phys. Rev. B* 103, L220102 (2021).

Fe-Ni 合金は、35-36at.%のごく狭い Ni 組成で「インバー効果」として知られるゼロ熱膨張を示すため、精密部品に広く利用されています。このインバー効果は、磁化の自乗に比例して体積が膨張する磁気体積効果によるものですが、原子配列(超秩序構造)とゼロ熱膨張の関係には不明な点が残されていました。そこで本研究では、X線回折と元素選択性のある広域 X 線吸収微細



構造を逆モンテカルロ法で解析し、実験データを矛盾なく説明できる合金構造を導出しました。この構造における Fe-Fe、Fe-Ni、Ni-Ni 原子間距離を調べた結果、常磁性の高圧相では 3 種類の原子間距離はほぼ同じでしたが、強磁性の低圧相では Fe-Fe の原子間距離が Fe-Ni と Ni-Ni と比べて約 0.02 Å も長いことが分かりました。このことから、Fe-Fe 原子間距離の磁化による伸縮がゼロ熱膨張の起源であることが明らかになりました。