



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. 4 (4号)

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

◆領域代表より◆

変革領域研究「超秩序構造科学」も残り2年半となり、プロジェクトの折り返し地点となる第4回目の報告会を物質・材料研究機構で行いました。多くの発表から連携研究が着実に進んでいることが確認でき、各講演に対するメンバーからの質問も極めて活発でした。対面を中心にしたためとも思いますが、会議は熱気を帯びたまま、盛会のうちに閉会を迎えることができました。前半期の活動を振り返ると、JPSJ 誌などの特集号や各種学会でのシンポジウム、国際ワークショップなどの活動も積極的に行い、その甲斐もあって領域の概念について大きく浸透したと感じます。それらの一連の手応えから、領域の前半期は順調に進めることができたのだと結論付けられます。一方、今後の後半期はこれまでの活動の延長では不十分です。より融合研究を加速させ、領域の目玉となる成果の創出が重要となってきます。ここでは「超秩序構造」を活かした新規材料合成への道筋を、理論的に設計することも含め果敢に取り組む必要があります。幸い、コロナによる制限も緩和されてきましたので、対面での議論の機会が増え、後半期の研究は加速度的に進むと期待しています。



領域代表 林 好一
(名古屋工業大学)

◆計画班紹介：A01-2 試料（応用）班◆

「超秩序構造」の制御が達成できていないがために、構造・物性・機能の制御が頭打ちになっている材料群が多く存在しています。A01-2 班は、高機能材料創製プロセスを開発することを目的とし、さらにその成果を社会実装につなげる一貫通貫型の新しい学問を立ち上げ、日本の科学技術及び産業の発展に貢献することを目指しています (図 1)。



A01-2 班代表 脇原 徹
(東京大学)



図 1 超秩序構造物質のライブラリー構築と社会実装

我々は特にゼオライト（脇原徹、伊與木健太：東京大学）、蓄電池材料（北村尚斗：東京理科大学）、ガラス（増野敦信：弘前大学、小野円佳：AGC株式会社/北海道大学）、半導体材料（若林整：東京工業大学）に着目し研究を進める計画班に加え、公募班を含めた他班との連携研究を進めることで、以下の研究課題を遂行しています。

- ① 超秩序材料の設計
- ② 超秩序構造物質のライブラリーを基にしたデバイス試作
- ③ 社会実装に向けたターゲット材料のスケールアップ合成プロセス開発

これにより、産業を革新するキーマテリアルに対して超秩序構造という新たな特性を付与することで各応用に対し従来限界を超える性能を実現すること、超秩序構造物質に特化した合成プロセスを開発することで超秩序構造物質の社会実装に向けて合成プロセスを最適化することが期待されます。これまでの特筆すべき成果として、小細孔ゼオライトの新規組成チューニング法の開発、超高耐久ゼオライトの機械的特性の解明と制御、無容器法による硬く割れにくいガラスの作製、二次元半導体の結晶性向上、リチウムイオン電池負極材料の局所構造解析、超低損失ガラスの開発、などといった成果が挙げられます。さらに、A03-1班、A03-2班との連携研究では、温室効果がCO₂の300倍であるN₂Oを特異的に吸着するMOR型ゼオライト中の局所構造を実験、計算の両面から検討し、低濃度においても吸着可能な吸着材の開発に成功しました。これらの成果はいずれも社会でも求められている材料において優れた物性を示す超秩序構造物質の可能性を示すものであり、産学連携による超秩序構造の学理の普及と併せて社会実装へと展開していきます。

◆論文・受賞など◆

後述の研究ピックアップで紹介する成果も含め、2022年度前半には68報の論文発表がありました。また2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4回成果報告会（2022年10月1、2日）が、物質・材料研究機構（つくば市）にて行われました。現地参加者が約80名、オンライン参加者が約10名と、領域発足以降初めて対面を主とした開催となりました。

講演時間中はもちろん、休憩時間も含め参加者同士で議論や共同研究の打ち合わせが活発になされ、対面での開催の重要性を改めて感じました。評価者の先生方からも前向きなコメントを頂くとともに、ブレイクスルーとなるような成果の創出に努めるよう激励の言葉も頂きました。

ポスター発表も対面で実施され、活発な情報交換や深い議論がなされていました。フォレスト賞（若手の優秀ポスター賞）には手跡雄太氏（物質・材料研究機構）と佐々木俊太氏（弘前大学）が選ばれました。

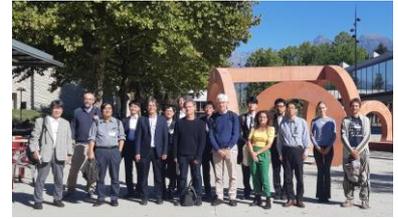


2. 研究会・ワークショップ・チュートリアル

- ・国際ワークショップ

【International Workshop on Exploration of Atomistic Disorder in Long-Range Ordered Systems and of Order in Disordered Materials】（2022年9月19～21日、フランス・グルノーブル）

現地を拠点とする SIMaP の研究者と本領域による共同開催で、現地参加者 17 名を含む約 50 名が参加しました。過去にフォレスト賞を受賞した長尾正昭氏、中村祐輝氏、星翔太氏、吉岡達史氏を現地に招待し、若手講演が行われました。海外の研究者に“Disorder in Order and Order within Disorder”のコンセプトが浸透する良い機会になるとともに、我々にとっても刺激となる貴重なワークショップになりました。海外共同研究につながるような議論も多く見られました。放射光施設 ESRF と中性子施設 ILL の見学も行われました。



- ・第 2 回若手の学校 (2022 年 5 月 21、22 日、オンライン)
領域内外から約 100 名が参加し、基礎講座 4 件およびチュートリアル 4 コースを実施しました。試料班からは、若手の皆さんに向けて最新の研究に関する 3 件の講演を行いました。ポスター発表では星翔太氏 (茨城大学)、仲吉朝希氏 (広島市立大学) がフォレスト賞を受賞しました。
- ・SPring-8 Seminar (第 302 回) (2022 年 10 月 12 日、Spring8 およびオンライン)
“New Insights to Old Proposals”
Prof. John S. Tse (University of Saskatchewan, Canada, 領域海外アドバイザー)

3. その他

領域に関連した特集号が出版されました：

特集号：Journal of the Physical Society of Japan, vol. 91

【SPECIAL TOPICS: Hyper-Ordered Structures: Recent Progress and Future Perspectives】

<https://journals.jps.jp/toc/jpsj/2022/91/9>

特集号：日本放射光学会誌「放射光」

【放射光を用いたガラス研究の最近の進展 —国際ガラス年 2022 を記念して—】

<http://www.jsrr.jp/journal/35-5.html>

◆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： 2022 年 11 月 25 日(金)～11 月 26 日(土)、オンライン開催

物性科学に関連した 10 件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計画班メンバー、若手研究者数名による発表が行われます。

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

2. 第 5 回成果報告会

日時： 2023 年 3 月 13 日(月)～3 月 14 日(火)

会場： 名古屋大学 (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・東北大学) (中田彩子・物質・材料研究機構)

◆研究ピックアップ◆

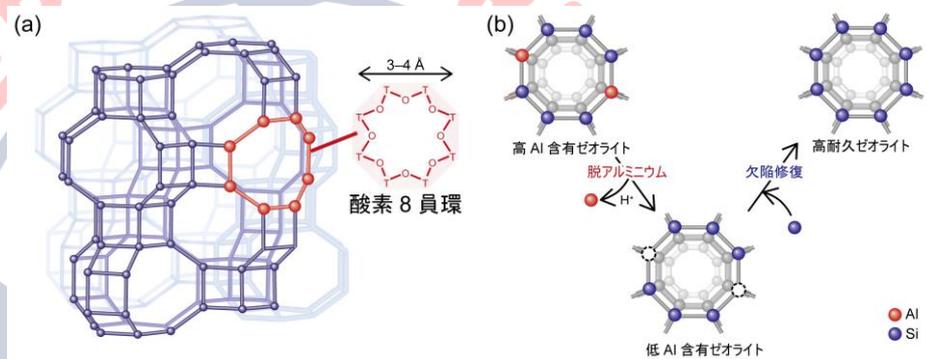
1. 新しく小細孔ゼオライトの組成チューニング法を開発し、耐久性向上を実現しました
環境問題の解決へ向け、窒素酸化物を浄化する触媒応用に期待できます

T. Yoshioka, **K. Iyoki**, Y. Hotta, Y. Kamimura, H. Yamada, Q. Han, T. Kato, C. A. J. Fisher, Z. Liu, R. Ohnishi, Y. Yanaba, K. Ohara, Y. Sasaki, A. Endo, T. Takewaki, T. Sano, T. Okubo, **T. Wakihara**
Sci. Adv. **8**, eabo3093 (2022).

触媒や吸着材として注目を集めるゼオライトの耐久性を高めるために重要なのがシリコン (Si) とアルミニウム (Al) の比率 (Si/Al 比) を用途に応じて最適化することです。このため、比較的容易に合成できる Al 含量の多いゼオライトから、合成後に Al を除去するという組成チューニング法が広く用いられています。しかし、小細孔ゼオライトでは Al の除去が難しいとされてきました。これは、Al 種が小細孔ゼオライトの狭い細孔 [図 (a)] を通り抜けることができず、細孔内にとどまりゼオライトの構造自体を破壊するためです。

これに対し本研究では、ゼオライト細孔内に有機物が入っている状態であれば Al を除去し、骨格構造も保つことができることを見出し、これに独自に開発している欠陥修復処理技術を組み合わせることにより、安定性の

向上が可能であることを示しました。[図 (b)]。この際に、細孔が拡大することで物質移動が可能になる新規メカニズムを提案しています。



2. アモルファス構造のトポロジーから熱伝導率を予測する技術を開発し、その高低を決める
ミクロな構造の同定を実現しました

E. Minamitani, T. Shiga, M. Kashiwagi, **I. Obayashi**
J. Chem. Phys. **156**, 244502 (2022).

アモルファスは原子レベルでの複雑な構造が特徴的で、結晶のような繰り返し構造を持っていません。一方完全に無秩序というわけでもなく、中距離秩序と呼ばれる構造があると考えられています。この中距離秩序を定量化し物性と関連づけることは重要な課題ですが、まだ決定的な方法はありません。本研究では太陽電池などで利用されるアモルファス Si の熱伝導率をその構造から予測する手法を開発しました。分子動力学法で計算したアモルファスの構造を数学のトポロジーを応用したパーシステントホモロジーによって定量化し、そこからリッジ回帰という統計的手法によって熱伝導率を予測するモデルを得ました。さらにパーシステントホモロジーと主成分分析の組み合わせによって熱伝導率に寄与しているミクロ構造を具体的に特定することに成功しました。本研究の手法はアモルファスに限らず、様々な乱れた構造に対する数理科学を応用した新たな解析方法としての汎用化が期待されます。(図は本論文より改変して利用, CC-BY4.0)

