



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. 7 (7号)

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

◆領域代表より◆

「超秩序構造科学」も残すところ、あと1年弱となりました。今年度は、5年間の活動を総括する時期ですが、これまでに形になっていない成果を論文に仕上げるのが、まずは肝要と考えております。私自身も、これまでの活動で得られてきた知見を学理として整理・統合するべく、日々試行錯誤しております。ライブラリーのデータ登録数や Order/Disorder の記述化については明確な目標があり、定期的に関係者で議論も進めておりますが、最終的には領域の総力を上げて仕上げていく所存です。令和5年度は、ほぼ中間評価の準備に明け暮れていましたが、メンバーのご協力もあり、報告書やヒアリング動画、補足資料など大変良いものが完成したと思います。中間評価の結果は「A」でしたが、最終評価では「A+」を目指します。一方、昨年度は多くの領域イベントが執り行われました。その中で特に、5月のドイツ・バートホンネフにおける国際シンポジウム、9月のフランス・エビアンでの国際会議(新学術領域研究「ハイパーマテリアル」との共催)は苦勞を伴いましたが印象深い企画であったと思います。今年7月には、領域国際アドバイザーの Tse 教授の所属されるカナダ・サチュカチュワン大学で国際ワークショップが開催されます。偶然にもエビアンの会議に参加されたサチュカチュワン大学の準結晶の先生がオーガナイザーの一人として重要な役割を果たしております。このような領域間のイベントは一度限りのものでなく、その後が続くことがよく分かる事例です。コロナが終息し、領域を中心とした和が着実に広がっていることが実感できます。



領域代表 林 好一
(名古屋工業大学)

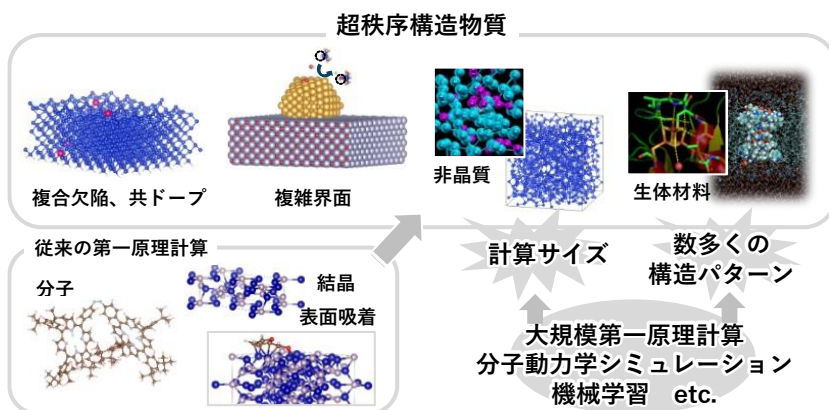
◆計画班紹介：A03-1 理論（解明）班◆

A03-1 班では「超秩序構造」を持つ物質の詳細な構造、物性や反応性を、理論計算により高精度に解明、予測することを目指しています。「超秩序構造」は結晶中の複合欠陥や非晶質の中距離秩序のようなナノスケールの構造であり、また非常に数多くの準安定構造を持つという複雑さを抱えています。そのような複雑・不規則なナノスケール物質に対し、領域内の他班と連携しながら従来の計算手法を超えたアプローチによって構造や電子状態を解明し、超秩序構造と機能との関係を明らかにすることが、本班の目的です。

- ①大規模第一原理計算による「超秩序構造」の構造・電子状態計算
 - ②「超秩序構造」がもたらす機能発現機構の解明
 - ③新規機能性超秩序構造物質のデザイン
- という3つの課題に対し、スーパーコンピュータを用いた大規模第



A03-1 班代表 中田 彩子
(物質・材料研究機構)



一原理計算や、第一原理分子動力学シミュレーションによる反応解析、機械学習や統計解析との連携など多彩な手法によって取り組んでいます。メンバーは、中田、森川良忠（阪大・研究分担者）、鷹野優（広島市立大学・研究分担者）、宮崎剛（物質・材料研究機構・研究協力者）から構成されており、公募班にも3名の心強いメンバーが参画しています。

領域が扱う多岐に渡る材料をターゲットとしています。例えば、A01-1班との連携では、 TiO_2 中にNbをドーピングすることにより生じるポーラロンに関して、低温ではNbの最近接サイトに束縛される一方、極低温においても外部電場に応答して動くことが可能であることを精密な計算から示しました。これは誘電材料における異種元素ドーピングによる極低温での新たな巨大誘電応答の機構であるといえます。また、金属含有タンパク質内の超秩序構造が生み出す機能の解明にも取り組んでいます。植物型フェレドキシン内の $[2\text{Fe}-2\text{S}]$ クラスターに関して、量子化学計算およびアンブレラサンプリングシミュレーションにより、還元時に起こる立体構造変化過程とそれに伴うエネルギー変化を明らかにしました。A01-2班との連携では、ゼオライト骨格における環境汚染分子 N_2O の吸着・回収に関連して、ゼオライト内カチオンやサイトによる吸着性能の違いと電子状態、分子構造変化の関連性を示しました。また、大規模第一原理分子動力学を用いたシリカ系材料のアモルファス構造解析にも取り組んでいます。大規模計算により複雑なアモルファス構造を構築しながら、添加物や圧力印加過程の影響によりアモルファス構造内でどのような局所構造の違いが生じるか、独自の教師なし次元削減手法なども用いて解析しています。これらの研究は、A02計測班やA03-2理論（モデリング）班との連携とも密接に結びついています。このように、領域内の合成や計測、トポロジカル解析と連携することで、幅広い材料における超秩序構造と物性との関連、機能発現メカニズムを明らかにし、超秩序構造の学理構築に貢献していきたいと思っています。

◆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、2024年度後半には58報の論文発表がありました。また21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

2024年3月4日（月）～5日（火）に岡山大学五十周年記念幸田応（金光ホール）にて第7回成果報告会が開催されました。96名のメンバーが参加し、活発に議論が交わされました。特に公募班の連携研究が軌道に乗ってきていると感じられました。また、若手の海外派遣報告では渡航先で充実した時間を過ごした様子が伝わってきました。評価者の先生方からは、連携研究や国際的なアクティビティーについて高く評価いただいた一方、多様な材料を統一理解できる学理の構築と材料開発に使える知見の創出が重要というコメントもいただきました。残り一年でそれらに注力していきたいと思っています。フォレスト賞（若手の優秀ポスター賞）には佐藤 柊哉氏（東京理科大学）と萱野 琉輝氏（千葉大学）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

超秩序構造科学若手の学校

日時：2024年4月27日(土)～4月28日(日)

会場：大阪大学中之島センター

第4回目となる若手の学校を開催しました。学生を中心に62名が参加し大変盛況となりました。

4件の基礎講座および4件のチュートリアル（演習）に加え、元パナソニック株式会社の山田昇先生による光ディスク開発、東京工業大学の若林整先生による次世代半導体に関する講演が行われました。若手参加者を中心に31件のポスター発表もあり、現地ならではの活発な議論がなされました。若手の優秀ポスター発表に送られるForest賞を魚橋 毅也氏(名古屋大学)、早船 紫野氏(東北大学)が受賞しました。若手研究者にとって、最先端の研究に触れながら将来の展望を描く良い機会となってくれたことを願います。



◆今後の予定◆

1. 国際ワークショップ

(Japan-Italy joint workshop) Workshop on physics and electronics of 2D doped materials

日時：2024年6月11日(火)～6月13日(木)

会場：蓼科東急ホテル (Japan)

岡山大学とナポリ大学の協定に基づく国際ワークショップで、本領域もスポンサーを務めます。二次元材料に関して多岐に渡る議論を行い、本領域と関連の深いテーマも取り扱われます。

2. 国際ワークショップ

The International Workshop on Hyperordered Structures and Quantum Materials

日時：2024年7月7日(日)～7月10日(水)

会場：University of Saskatchewan (Canada)

理論と実験の両面から超秩序構造と量子材料に関する発表、議論を行います。日本と北米との量子材料研究に関する国際交流の場となることを期待しています。

3. 第8回成果報告会

日時：2024年9月24日(火)～9月25日(水)

会場：東北大学（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。

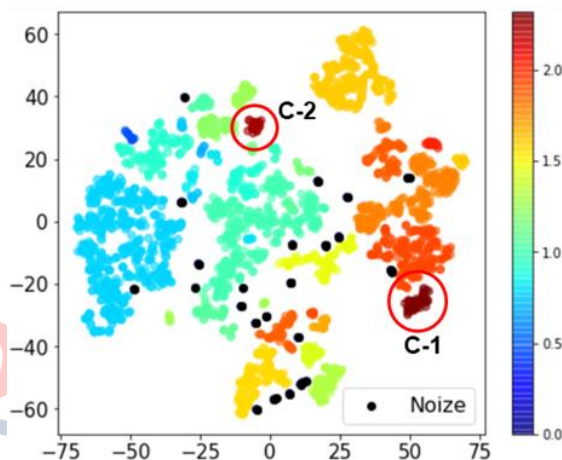
(志賀元紀・東北大学) (中田彩子・物質・材料研究機構)

◆研究ピックアップ◆

1. ドープした酸化物について、DFT 計算と機械学習により、高い誘電率につながる局所的な構造の特徴を同定しました。

Y. Shimano, A. Kutana, R. Asahi, *Sci. Rep.* **13**, 22236 (2023).

ハイスループット DFT 計算により、ルチル構造やペロブスカイト構造の酸化物材料に様々なドーピングした時の誘電率をデータベース化し、構造情報から誘電率を予測するための機械学習モデルを構築しました。図 1 に機械学習の記述子空間で材料を分類し、各グループの平均誘電率（対数値）をカラーマップで示しました。その結果、 CaTiO_3 ペロブスカイト系 (C-1) と TiO_2 ルチル構造 (C-2) がドーピングによって大きな誘電率を示すことを見出しました。また、学習した畳み込みニューラルネットワークより、これらの誘電率の増大が、Ti-O 結合距離の変化と大きな相関があることが分かりました。以上の結果は、ドーピングによる局所的な歪の導入によって巨大な誘電率材料の設計が可能であることを示します。



現在、A03 理論班と誘電率のドーピング濃度や温度依存性の計算手法の構築を進めるとともに、A01 試料班との連携で新規材料の実現を目指して取り組んでいます。

2. お椀型分子フルオロスマネンが示す「お椀反転運動」を利用して、単一分子のみから結晶化溶媒を変えるだけで誘電応答性が顕著に異なる結晶の作成に成功しました

Y. Yakiyama, M. Li, D. Zhou, T. Abe, C. Sato, K. Sambe, T. Akutagawa, T. Matsumura, N. Matubayasi, H. Sakurai
J. Am. Chem. Soc. **146**, 5224 (2024).

純有機物からなる誘電応答性材料の開発が近年世界中で精力的に行われています。しかしながら、そのほとんどにおいて、誘電率は無機材料に比べ顕著に小さく、誘電率の制御はチャレンジングなテーマであり続けています。

我々のグループでは、お椀型構造をもつ分子フルオロスマネン (FS) が示す「お椀反転運動」に着目し、結晶化溶媒を適切に選択することで、FS 結晶中で形成される一次元カラム構造内部のフッ素原子の配向を

コントロールすることに成功しました。得られた結晶は、フッ素配向に応じて、4 桁（10 以下～数万）にも至る顕著な誘電率の違いを示しました。本研究成果は、精密な分子設計や有機合成を経由することなく、シンプルに結晶化溶媒を変換するだけで、物性を多様に調節できる単一分子結晶材料としてのお椀型分子の高いポテンシャルを明確に示すものです。今後、フッ素配向の精密制御や結晶の薄膜化により、多様な誘電・圧電材料の開発・応用展開が期待できます。

