



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. 8 (8号)

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

## ◆領域代表より◆

令和2年11月から始まった「超秩序構造科学」ですが、いよいよ残り数か月となりました。来年度には事後評価も控えておりますので、そろそろ、意識しながら活動を進めている状況です。領域研究の主たる活動として学理構築がありますが、我々は、秩序—無秩序の「不変量」を表現するためにトポロジー解析を一貫して利用してきました。これについては、メンバーへの理解も浸透し、秋の報告会(東北大)ではトポロジー解析を利用した成果が増えてきたように思います。これらをうまく集約・整理できれば最終ヒアリングに自信をもって臨むことができる筈です。学理関連では、昨年、SpringerNature から英文専門書である“Hyperordered Structures in Materials -Disorder in Order and Order within Disorder”が発刊されました。ダウンロード数が化学・材料系の全タイトルのうち上位5%程度に位置しているとのことで、「超秩序構造科学」の世界的な普及に大きく役立っております。国際ワークショップの開催もコロナ以降加速しており、7月にカナダのサチュカチュワン大学で開催した際には若手を中心に企画を立てました。イベントや企画については、当初の目標を超えて達成してきました。残り期間は、学理構築に向けて全力を傾けていきます。



領域代表 林好一  
(名古屋工業大学)

## ◆計画班紹介：A03-2 理論（モデリング）班◆

A03-2班では、応用数学やデータ科学の技術に基づいて、「超秩序構造」を記述および同定し、実現象との相関を解明するためのデータ駆動型アプローチの研究に取り組んでいます。新規の材料探索を行うためには、材料の構造や特性の計測、シミュレーションによる材料の構造解析・物性予測、そして、より高性能な物性・材料特性を実現するための構造や合成条件の最適化などの様々なステップがあり、それぞれのステップにおいて、関連データの取り扱いや解析が重要となります。しかしながら、ドーパントに起因する特異的な原子配列を持つ材料や非晶質のように、本領域で取り扱う「超秩序構造」をもつ材料に対しては、従来のアプローチで十分な情報を引き出せないため、本計画班では、新しいデータ解析法を研究・開発しています。具体的には、以下の3つの課題に取り組んでいます。



A03-2班代表 志賀元紀  
(東北大学)

- ① 材料計測のデータ解析法：手法班 (A02-1 および A02-2) が取り組む最先端の計測機器 (例えば、原子分解能ホログラムやオングストローム電子回折) から原子配列や超秩序構造を高精度に同定するための手法を開発しています。
- ② 超秩序構造の記述法：幾何学などの数理基盤技術 (パーシステントホモロジー、ネットワークトポロジーなど) を用いて、「超秩序構造」を記述する手法を開発しています。
- ③ 超秩序構造と物性の相関解析法：試料班 (A01-1 および A01-2) との連携によって、課題①や②で同定・記述した構造秩序と物性との相関を解析し、新奇の高性能材料を探索するためのアプローチを研究・開発しています。

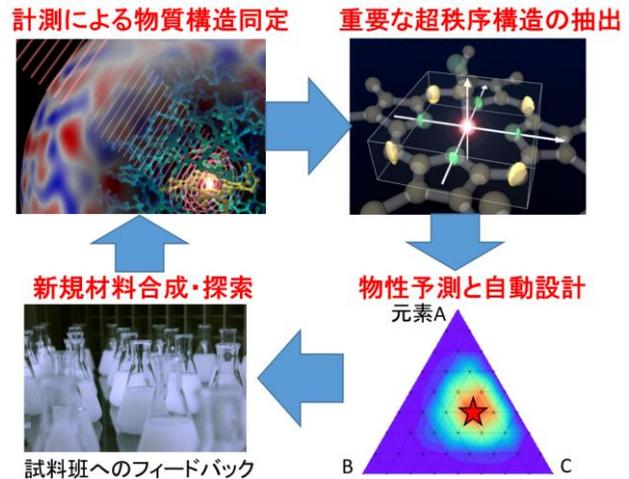
また、本計画班は、他班との連携による材料構造解析によって、ドーパントに誘起された特異構造の同定、ガラスに内在する異方性の同定、さらに、合成条件の違いによる超秩序構造変化や物性との相

関解析などの成果に寄与してきました。

計画班で開発した超秩序構造解析法の一部は、様々な研究者が広く活用できるように、ソフトウェアとして公開されています。代表的なものとして、本計画班の松下が中心で開発している原子分解能ホログラフィー解析のための [3D-AIR-IMAGE](#)、大林・平岡が中心で開発しているパーシステントホモロジー

(PH) 計算のための [Homcloud](#)、中島・大林が開発しているパーシステントホモロジーの概念を拡張した連結パーシステント図(連結PD)を計算するソフトウェア [RuCPD](#)、志賀が中心で開発している構造秩序の可視化・定量解析のための [SOVA](#) や [sovapy](#) などがあります。

これらのソフトウェアを介して領域内の連携が進み、原子分解能ホログラフィーの解析にリバースモンテカルロ法の適用も試みられたり、PD やリング構造評価などの解析が行われたり、さらに、領域外の研究者のデータ解析に取り入れられたりしています。今後も超秩序構造に関わるデータ解析の研究を進めるとともに、研究によって開発された新規の手法をソフトウェアに実装し、データ解析の観点から研究分野の発展に広く寄与したいと考えています。



「超秩序構造」に基づくデータ駆動型材料探索

### ◆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年度前半には42報の論文発表がありました。また5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8回成果報告会(2024年9月24~26日)が東北大学のさくらホールにて開催されました。100名近いメンバーが参加し、大変盛り上がりしました。



最終日には東北大学のキャンパス内に新しく建設された放射光施設ナノテラスの見学会が行われました。世界のトップを走る施設を実際に見ることができ期待が膨らみました。評価者の先生方からは、学理の構築が評価のポイントになる点、プロジェクトが終了しても領域で培った人的ネットワークを大切にしてほしい点、長く引用されるような成果を残してほしい点など、非常に有益なコメントをいただきました。残り期間でラストスパートをかけていきたいと思います。フォレスト賞(若手の優秀ポスター賞)には Anh Khoa Augustin Lu 氏(物質・材料研究機構(現:東京大学))と隅 琢磨 氏(山形大学)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

##### 蓼科国際ワークショップ

日時: 2024年6月11日(火)~6月13日(木)

会場: 蓼科東急ホテル

岡山大学とイタリアのナポリ大学の交流協定に基づいて開催されている国際ワークショップで、今回は本領域もサポートを行いました。2次元物質を基礎にした最先端の研究成果が報告されるとと

もに、本領域の主要な研究手法である蛍光X線ホログラフィーやX線光電子回折などを使ったグラフィット超伝導物質や強磁性体の構造研究に関する興味深い報告も行われました。

### 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)

日本と北アメリカを中心に約70名の研究者と学生が集まりました。内容は、半導体、磁性体、誘電体、二次元物質、超伝導、準結晶、トポロジー、非ユークリッド幾何学など、非常に多岐にわたっており、異分野同士で活発な交流ができました。また、若手研究者や学生も多く参加し、若手間の横のつながりも作られたと思っています。ワークショップの最後にはCanadian Light Source(CLS)のツアーも企画し、CLSならではのビームラインを見学することができました。本領域ではこれまでヨーロッパでワークショップを行ってきましたが、現地オーガナイザーのSteven Rayan先生、田中佳織先生、John Tse先生のご助力のもと今回は初めての北アメリカでの開催となりました。新しい国際ネットワーク構築のきっかけになったと感じています。



### 日本物理学会第79回年次大会・企画シンポジウム

日時： 2024年9月17日(火) 会場： 北海道大学

本研究領域企画のシンポジウム「超秩序構造が拓く材料科学～"Disorder in Order"と"Order within Disorder"の物理～」を開催しました。海外から講演者を迎えるなど意欲的に企画した甲斐があり、領域内外から50名を超える方に参加いただき、活発な議論が交わされました。領域企画の国内シンポジウムとして最後を飾るにふさわしいものになったと思います。

### 第18回物性科学領域横断研究会(領域合同研究会)

日時： 2023年11月24日(金)～11月25日(土) 会場： 神戸大学

物性科学に関連した11件の新学術領域研究、学術変革領域研究(A)および学術変革領域研究(B)が合同で開催する研究会で、今回は学術領域研究(A)「散乱透視学」が主催しました。本領域からは領域代表および計画班の脇原、森川による口頭発表や若手研究者によるポスター発表が行われました。

## ◆今後の予定◆

### 1. 国際ワークショップ

#### Symposium on Hyper-Ordered Structure Sciences in London

日時： 2025年1月29日(水)～1月30日(木)

会場： Japan House London (UK)

「秩序の中の秩序／秩序の中の秩序」に関し、材料合成、特性評価、理論計算の最近の進歩により、これら2つの概念の関係が明らかになりつつあります。今回の会議では、これらに関連した講演を通じ、英国の著名な研究者と今後の共同研究について話し合いたいと思います。

### 2. 第9回成果報告会

日時： 2025年3月8日(土)～3月9日(日)

会場： 名古屋工業大学

掲載内容に関するご連絡はニュースレター担当までお願いいたします  
(志賀元紀・東北大学、中田彩子・物質・材料研究機構)

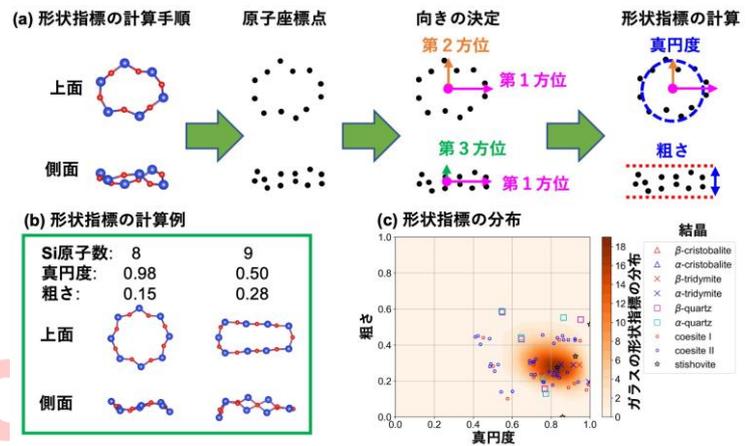
◆研究ピックアップ◆

1. リングに基づく新たな定量分析法を提案し、シリカ（二酸化ケイ素）ガラスの局所構造秩序のリングに起因する異方性を明らかにしました

M. Shiga, A. Hirata, Y. Onodera, H. Masai

*Commun. Mater.* **4**, 91 (2023).

ガラスは、その原子配置が一見無秩序で複雑なために、構造の理解や制御が難しく、合理的な材料設計には多くの課題が残されています。これらの課題を解決するためにガラス構造の定量的な評価技術が必要とされています。本研究成果では、シリコンと酸素だけからなるシリカガラスのネットワークに内在するリング構造に着目して、「真円度」および「粗さ」という新たな指標を提案し、さらに、リング構造の3次元



的な定量化に成功しました。従来の解析では、リングの構成原子数のみが解析に用いられてきたが、本指標を用いることによって、ガラスを構成するリングには、数種のシリカ結晶と同様なものとガラス独特の形状のリングが共存することを初めて明らかにしました。さらに、リング周辺における原子分布を定量化することによって、ガラスの局所構造は結晶と同様に異方性を持ち、強い秩序が存在することを明らかにしました。最近では、開発した解析法を様々な研究者が容易に用いられるようにソフトウェア化 ([SOVA](#) および [sovapy](#)) を進めています。

2. チタン石型酸化物における新しい反強誘電体と、反強誘電体のドメイン壁近傍に生じる局所的な極性領域に起因する新奇な誘電率増強効果を発見しました。

H. Taniguchi, T. Watanabe, T. Kuwano, A. Nakano, Y. Sato, M. Hagiwara, H. Yokota, and K. Deguchi

*ACS Nano* **18**, 14523 (2024).

反強誘電体は蓄エネルギー材料やパワーエレクトロニクス用キャパシタとして、近年大きな注目を集めています。しかしながらこれまでに報告されている反強誘電体の数は少なく、新しい反強誘電体物質系の開発が重要な課題となっています。

本研究では、チタン石型酸化物  $\text{CaTiSiO}_5$  が新しい反強誘電体であることを実験的に示しました。またその起源として、結晶構造中の酸素八面体一次元鎖が重要な役割を果たしていることを明らかにしました。さらに、Si を部分的に Ge で置換することによって反強誘電体中に局所的な極性領域が生じ、それによって誘電特性が飛躍的に向上することを見出しました。

本研究の成果は、新たな反強誘電体物質系の開拓を通して誘電体材料開発を大きく加速するとともに、局所構造制御による物性設計の新たな指導原理を創製するものです。

