

超均質非周期物質：膨大な潜在的構造自由度の制御による機能開拓

	研究代表者	上智大学・理工学部・准教授 酒井 志朗（さかい しろう）	研究者番号：80506733
	研究課題 情報	課題番号：25B204 キーワード：ハイパーユニフォーミティ、アモルファス、準結晶、フォトニック物質	研究期間：2025年度～2027年度

なぜこの研究を行おうと思ったのか（研究の背景・目的）

●研究の全体像

従来の固体物理学は、原子が繰り返しの配列で並んだ結晶（以下、周期結晶と呼ぶ）を主な対象としてきた。しかし、固体の中には、原子が周期性とは異なる別の規則に従って配列した準結晶や不規則に並んだアモルファスと呼ばれる物質もある。これらをまとめて非周期物質と呼ぶ。これらの物質は周期結晶には見られない特性を示すと考えられるが、周期性がないために理論的扱いが難しく、その理解はあまり進んでいない。理論的理解が進まないとその特性を制御するための指針が立たず、材料としても活用しきれない。本研究領域は、非周期物質の構造や電子状態について、**ハイパーユニフォーミティ(HU)**[Torquato and Stillinger, Phys. Rev. E **68**, 041113 (2003)]と呼ばれる枠組みによる分類を導入し、分類ごとの系統的な研究によって、物性理解・制御のための基礎学理を築くと共に、それぞれの分類における特徴的物性を最大化し、非周期物質がもつ材料としての可能性を拡大することを目指す（図1）。

●研究の背景と位置付け

周期結晶はその構造がもつ対称性によって細かく分類され、分類ごとの系統的な解析によって実験結果が解釈されることで、物性研究・応用が進展している。一方で、周期性は物質の構造に対して非常に強い制約を課しており、**その制約を外したところには膨大な可能性が眠っている**。特に、対称性だけでは区別できない構造自由度が存在する。非周期物質がもつこれらの自由度を分類せずに一括りに物性を議論するのは困難であり、このことが非周期物質の理論が遅れている大きな原因の一つである。

近年、統計物理学分野で発展してきたHUの枠組みは、空間中の多数の点の「**分布の規則度**」を分類・定量化することを可能にする。HUに基づく、これまで単に「不規則」と呼ばれていた点分布の中にも、質的に異なる複数の種類があることがわかる。例えば図2の(a)と(b)の点分布はいずれも不規則であるが、(b)のほうが(a)よりも点が様に分布している。(b)のように、（例えば短距離では不規則であっても）大きなスケールで見ると様な分布を**ハイパーユニフォーム分布**と呼ぶ。HUはこのような分布の一様性の強弱を（単なる見た目ではなく）数式に基づいて区別し分類する枠組みである。特に、図3に例示したように、質的に異なる複数の非一様分布のクラスが定義される。

本研究領域は、HUを非周期物質中の原子や電子の分布、さらにはメソスケール構造に応用する**理論・計算・実験融合プロジェクト**である。HUによって分類し、分類ごとに物性を系統的に研究することで、非周期物質の基礎学理を構築すると共に、その応用展開を目指す。

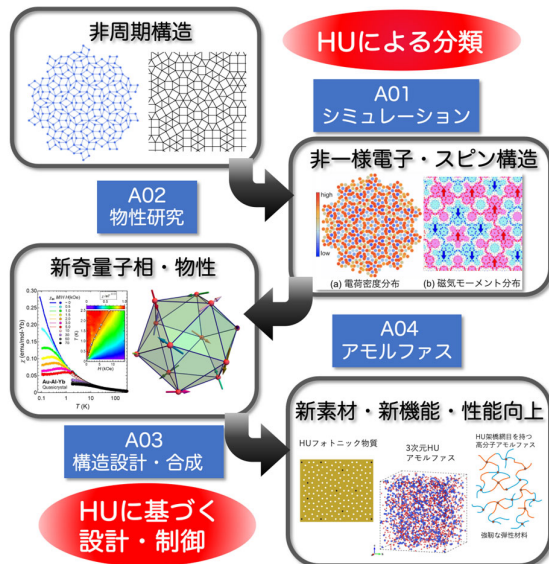


図1 領域全体のイメージ図

●具体的課題

- 様々な非周期構造をコンピュータシミュレーションによって生成し、HUに基づいて分類する教師あり機械学習を行う。訓練されたニューラルネットワークを実験データの解析に活用する。
- 非周期構造上では電子やスピンは非一様に分布する。その空間分布の規則度をHUにより定量化し分類することで、質的に異なる非一様分布をもった電子・スピン相を探索する。また、異なる非一様相間の相転移やそれに伴う臨界現象を解明する。
- 各電子・スピン相が示す特徴的物性、及び物性と空間分布の規則度との関係を明らかにする。
- 望ましい物性を持つ非周期物質を理論設計し、構造制御性の高い高分子材料やフォトニック物質などのメソスケール構造体で実現する。
- HUはアモルファス物質の均質さの尺度としても利用できる。実験データに基づいた構造解析法を確立し、均質さが質的に異なるアモルファス相や相転移の発見、ハイパーユニフォームな3次元アモルファス物質を合成することを目指す。

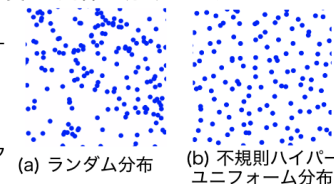


図2 種類が異なる2つの不規則点分布。

この研究によって何をどこまで明らかにしようとしているのか

●領域全体の目標

ハイパーユニフォーミティの枠組みによって非周期物質の構造や電子状態を系統的に分類(図3)・理解し、**非一様分布の制御**(図4)による新しい物質相・現象・機能の探索及び設計を行う。

●各計画研究の具体的な目標

- A01 シミュレーション班（酒井・古賀）
非周期構造の生成・機械学習/非周期系の電子状態計算/実験データ解析アルゴリズムの開発
- A02 物性研究班（杉本・出口）
非周期物質の物性実験と理論構築/非周期系の相転移・臨界現象の解明、新奇物性の発見
- A03 構造設計・合成班（竹森・山本・太田）
メソスケール非周期構造の設計/フォトニック物質での実現/HUに基づくソフトマター新素材開発
- A04 アモルファス班（Stellhorn・雨海・池田）
3次元HUアモルファスの合成/HUに基づく構造解析と分類/不規則HU構造の生成機構解明

●期待される波及効果

非周期物質についての基礎理論の確立は、新しい機能性材料の開発を通して社会基盤の構築にも貢献する。特に、不規則HU分布は**等方性と高い均質性**を兼ね備えた分布であり、建築材に用いられる高強度材料や防音・断熱材料、透明度の高いガラス、あるいはフォトニック物質を用いた光デバイスの省エネ化などへの応用が考えられる。また、超伝導体・磁性体・半導体・太陽電池などの機能性材料において、不純物や添加原子の空間分布の制御による性能向上という新しい設計指針を生み出している。

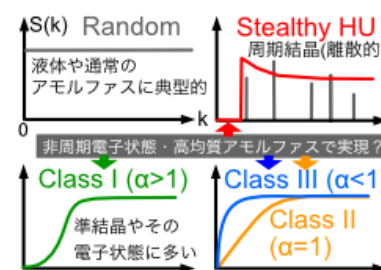
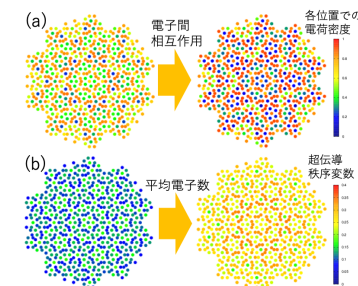
図3 HUの枠組みによる構造の分類。構造を特徴づける関数 $S(k)$ の長波長領域($k \sim 0$)の振る舞いによる分類。

図4 準結晶構造上の(a)電子密度の空間分布が電子間相互作用の強さによって、(b)超伝導秩序変数の空間分布が平均電子数によって、大きく変化する様子。