

未踏探索空間における革新的物質の開発  
2022 年度採択研究代表者

2022 年度  
年次報告書

田村 隆治

東京理科大学 先進工学部  
教授

フェイゾンエンジニアリング: 構造タイル組み換えに基づく新物質創製

主たる共同研究者:

枝川 圭一 (東京大学 生産技術研究所 教授)

亀岡 聡 (東北大学 多元物質科学研究所 教授)

吉田 亮 (情報・システム研究機構 統計数理研究所 教授)

## 研究成果の概要

(田村 Gr) Ga-Pd-R(R=Gd,Tb,Dy,Ho)系において、プロセス・フェイゾンエンジニアリングの概念実証を行った。具体的には、同じ組成の4種の合金  $Ga_{50}Pd_{36}R_{14}$ (R=Gd,Tb,Dy,Ho)において、熱処理温度を変えるだけで、1/1 近似結晶と2/1 近似結晶の作り分けに成功し、熱処理温度によるフェイゾン自由度の制御が可能であることを実証した<sup>1)</sup>。また、Au-Ga-Dy 系において、超急冷法により新規準結晶の合成を行った。その結果、完全単相の準結晶が得られ、強磁性転移を示すことを発見した。また、この強磁性準結晶が広い単相域を有することを突き止め、磁性の組成依存性を調べたところ、近似結晶の磁気相図と良く一致するという新たな知見が得られた<sup>2)</sup>。

(枝川 Gr) Al-Pd-Mn 系、Ag-In-Yb 系正 20 面体準結晶、Al-Ni-Co 系正 10 角形準結晶についてフォノン-フェイゾン結合の存在を実証し、外場制御によるフェイゾン歪導入法を確立した<sup>3)</sup>。また、Ta-Te 系 2 次元ファンデルワールス準結晶について、単相試料の作製に成功した。さらに電気抵抗、磁化率、比熱の各測定を行い、臨界温度 1 K のバルク超伝導を発見した。

(亀岡 Gr) 組成制御ならびに元素置換(Fe, Cr)を利用してフェイゾン歪を導入した新規な Al-Pd-Ru 系準結晶・近似結晶(IQC, P40, C1 相)を創製した。また、本系試料(IQC, P40, C1 相)の $C_2H_2$ 水素化反応特性を評価し、構成クラスターによって触媒活性が支配されることを突き止めた。

(吉田 Gr) フェイゾンエンジニアリングの基盤となる次の 4 種類の機械学習モデルを構築した: ① 準結晶・近似結晶を形成する化学組成を予測するモデル; ② 混合相の粉末 XRD スペクトルから準結晶・近似結晶の有無を判定するモデル; ③ 任意の化学組成から準安定・安定な結晶構造を予測するアルゴリズム<sup>4)</sup>; ④ 組成や構造から熱電特性や熱伝導率の温度依存性関数を予測するモデル<sup>5)</sup>。

### 【代表的な原著論文情報】

- 1) “Competition between spin-glass and antiferromagnetic states in Tsai-type 1/1 and 2/1 quasicrystal approximants”, PHYSICAL REVIEW MATERIALS vol.6 pp.124412-1-12, 2022.
- 2) “High Phase-Purity and Composition-Tunable Ferromagnetic Icosahedral Quasicrystal”, PHYSICAL REVIEW LETTERS vol.130 pp. 176701-1-5, 2023.
- 3) “Phonon-Phason Coupling Strength in a Tsai-Type Ag-In-Yb Icosahedral Quasicrystal”, MATERIALS TRANSACTIONS Vol.64 No.5 pp.945-949, 2023.
- 4) “Functional output regression for machine learning in materials science”, Journal of Chemical Information and Modeling vol.62 pp. 4837-4851, 2022.