

知られざる第三の固体「準結晶」 —ハイパーマテリアルへの期待—



三井物産戦略研究所
フォーサイトセンター
阿部 裕

Summary

- 1984年の発見から40年が経過し、第三の固体「準結晶」の研究開発も新たな段階に入りつつある。準結晶の研究においては、日本が大きな成果を幾つも上げており継続的な投資とプロジェクト推進が重要。
- 特異な内部構造を有する準結晶は、従来の結晶やアモルファスでは得られない機能や特性を利用することで、超電導、メタマテリアル、レーザーなど高性能な装置開発を容易にする可能性がある。
- 高機能な新規素材の開発は、多様化する社会課題の解決に向け、さまざまな技術の社会実装の際に重要な役割を果たすコア技術であり、その重要性は高まりを見せており、「準結晶／近似結晶」はその期待を担っている。

1. はじめに

19世紀以降、物質に関するさまざまな探究がなされ、気体、液体、固体の3つの状態があるとされ、「**固体**」に関しては、原子が秩序正しく配列する「**結晶**」と、無秩序で明瞭な秩序が見られない「**非結晶**（以下**アモルファス**）」の2種類に分類されてきた。「結晶」を代表する物質には「**ダイヤモンド**」がある。よく知られている通り、炭素原子が秩序正しく、世界で一番硬い物質となっている。「**アモルファス**」を代表するのは「**ガラス**」である。ケイ酸などの成分がランダムに凝集する物質である。この**固体**に関する概念は、誰も疑うこともなく、長らく科学的常識として定着してきた。しかし、1984年、突如として**結晶**でもなく、**アモルファス**でもない物質を「**Al-Mn（アルミニウム－マンガン）合金**」から発見したという論文が発表され科学界に衝撃を与えた¹。発見された物質は、結晶のように秩序正しいパターンの繰り返しは見られないものの、ある一定の秩序構造は観察されることから「**準結晶**」（Quasicrystal）と名付けられた。

本稿は、2024年4月のマンスリー「**ハイエントロピー物質**」²に続き、日本がトップランナーとして、大きな研究貢献を果たしている「**準結晶**」を取り上げ、その研究開発の動向を概観する。

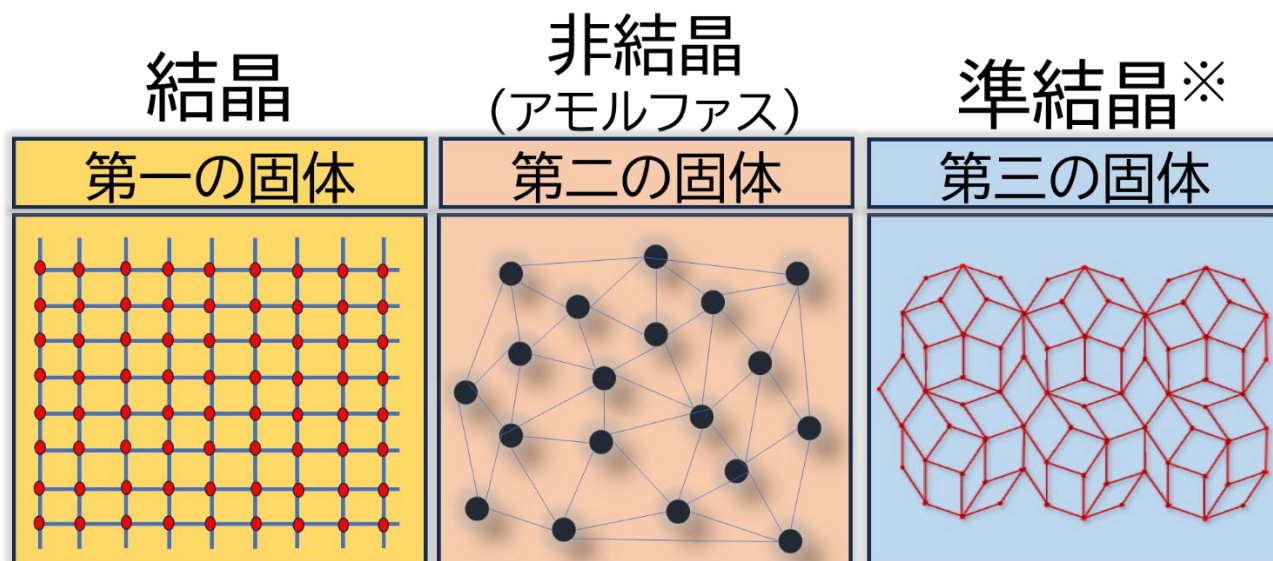
¹ Dan Shechtman, Blech, Gratias, Cahn et al. Phys. Rev. Lett. 53, 1951-1953 (1984) 「Metallic Phase with Long-Range Orientational Order and No Translational Symmetry」

² 三井物産戦略研究所「[ハイエントロピー物質の開発と利用—多元素による新機能素材時代の幕開け—](#)」（2024年4月）

2. 第三の固体「準結晶」

準結晶は、結晶のような同じ原子配列のパターン（周期）の繰り返し（長距離秩序）は見られないものの、その原子配列を全体俯瞰すると、一定の秩序が観察される物質である。**準結晶**は、固体内部の原子配列により、秩序正しく原子が三次元に配列する「結晶」（第一の固体）と、原子が完全にバラバラになっている「非結晶」（第二の固体）またそのいずれでもない**第三の固体**として分類される（図表1）。

図表 1：固体の種類



※準結晶の欄に図示されている図形は、数学的に「ペンローズ・タイル」（Penrose tiling）と呼ばれている。本稿注釈16に概要を記載しているが、詳しくはA.コンヌの『非可換幾何学入門』（岩波書店）、谷岡一郎、荒木義明の『ペンローズの幾何学』（講談社）参照。

出所：各種資料から三井物産戦略研究所作成

この準結晶は1984年当初から、その存在を疑問視する見解に翻弄された。既に物質科学の基盤として確立している「固体物理学」の常識（物質は結晶とアモルファスの2分類論）を覆す準結晶発見の影響は大きく、特にノーベル賞授賞者で「結晶学」の大家であるライナス・ポーリング（Linus Pauling）が、否定的見解を示したこともあり、正否を巡る議論が展開されることとなった。最終的に、この準結晶に関する論争を終息させたのは、東北大学・多元物質科学研究所の故蔡安邦（さい あんぼう）教授とその研究チームである³。彼らは、発表論文を基に実際に準結晶の合金を作製した。その内部構造には、結晶やアモルファスではあり得ない**正20面体相**⁴を発見したことで、準結晶の実在を立証した。この結果により1992年には、国際結晶学連合が従来の「結晶」の定義に「非周期的結晶」（Aperiodic crystal）として「準結晶」を含

³準結晶の論争に決着をつけたのは、2007年のNature Materials(6, pages58-63 : 2007)に掲載された論文「Atomic structure of the binary icosahedral Yb-Cd quasicrystal」であるとNatureダイジェスト（DOI:10.1038/ndigest.2011.111204）は述べている。蔡教授は、準結晶研究の貢献によりデュボア賞の第1回受賞者となった。2019年逝去。

⁴平面を1種類の正多角形で隙間なく埋め尽くすことができるのは、正三角形、正方形、正六角形の3つ。正五角形で埋め尽くされる結晶は存在しない。これは、現在まで人類に認識されてこなかった新しい固体の構造、すなわち準結晶の発見につながった。数学的な観点から正20面体を理解するにはJ. グレイ『抽象代数学史 概論』（丸善出版）の「14.6 Kleinの正20面体」と「E.3 幾何学的な群：正20面体群」が参考になる。

む定義の変更を行い、固体の新しい形態（**第三の固体**）としての地位を確立した⁵。これにより準結晶を発見した**ダン・シェヒトマン**（Dan Shechtman）教授にノーベル化学賞（2011年）が授与された⁶。準結晶には発見直後から、結晶学、材料科学、固体物理学など多くの研究組織と研究者らが関わりを持ってきた。特に日本の研究が跳び抜けており、現在に至るまで約80種類の準結晶を得ているが、その9割は実に東北大学の発見である（図表2）。合金以外でも、2007年に世界で初めて京都大学と名古屋大学の研究チームが「**高分子準結晶**」を作製するなど、日本の準結晶研究は世界のトップランナーとしての地位を確立している。

図表2：準結晶の組成例

種別	準結晶の組成 表記：元素記号（数字は含有割合）	備考
準結晶	Al ₈₅ Mn ₁₄	1984年に初めて発見された準結晶
	Al ₆₅ Cu ₂₀ Fe ₁₅	メタノール改質触媒（3-3「準結晶の種別と適用技術」で言及）
	Cd ₈₅ Ca ₁₅	合金準結晶（正20面体準結晶）※
	Ag ₄₂ In ₄₂ Ca ₁₆	
	Zn ₇₄ Mn ₁₀ Sc ₁₆	
	Cu ₄₈ Ga ₃₄ Mg ₃ Sc ₁₅	
	Al ₆₅ Ni ₂₀ Os ₁₅	初めて機械学習アルゴリズムが発見した準結晶
	Al ₇₈ Ir ₁₇ Mn ₅	
	Al ₇₈ Ir ₁₇ Fe ₅	
	Au ₆₅ Ga ₂₀ Gd ₁₅	強磁性の準結晶
【表中の元素記号】 Al:アルミニウム、Mn:マンガン、Cu:銅、Fe:鉄、Cd:カドミウム、Ca:カルシウム、Ag:銀、In:インジウム、Sc:スカンジウム、Ga:ガリウム Mg:マグネシウム、Ni:ニッケル、Os:オスミウム、Ir:イリジウム、Au:金、Gd:ガドリニウム		

※：『準結晶の科学 構造と物性』（名古屋大学出版会）、佐藤憲昭、石政勉、付録 I.1 蔡型正20面体準結晶 図表より転載

出所：各種資料から三井物産戦略研究所作成

3. 研究開発動向

3-1. 世界の動向

準結晶の研究は、図表1で簡易表現している通り構造が複雑であり、高い精度で分析を行える高価な装置が必要であり研究のハードルは高い⁷。主な課題としては、①不安定な原子構造を持つ準結晶はなぜ安定し

⁵ [International Union of Crystallography](http://www.iucr.org/Quasicrystal)（国際結晶学連合）「Report of the Executive Committee for 1991」Acta Cryst. (1992). A48, 922-946. <https://dictionary.iucr.org/Quasicrystal>

⁶ [The Nobel Prize in Chemistry 2011](http://www.nobelprize.org/prizes/chemistry/1991/)：ノーベル賞は、シェヒトマンの単独受賞となったが、「準結晶」という名称を付与し数学的構造を明らかにしたドヴ・レヴィン（Dov Levine）とポール・スタインハート（Paul Steinhardt）また、準結晶を実際に作製し内部構造を明らかにした蔡教授の3名が重要な貢献を果たしたと評価されている。

⁷ 日本における準結晶の研究では「大型放射光施設SPring8」<http://www.spring8.or.jp/ja/> を利用した分析などが行われ

て存在するのか、②準結晶に特有の物性特性にはどのようなものがあるのか、③準結晶の応用分野は何かの3点がある。しかし、秩序ある結晶の研究とは異なり21世紀に入った現在でも、これらの解決は道半ばであり、まだ基礎的研究が必要と認識されている。特に準結晶の応用（産業利用）に関しては、実績が乏しく、当初は、フッ素系樹脂（テフロン）に替わるコーティング材として期待されたが、高価で重量が増すため、製品としては成功しなかった⁸。また、アルミ合金系の準結晶は、一般のアルミ合金よりはるかに硬度が高いことで知られているが、その利用は進んでいない。その理由は、硬い金属ではあるが、同時に脆い性質があり、構造材料などへの適用には実証検証が必要なためである。

この他には、磁性や水素吸蔵、耐摩耗性と低い摩擦係数を活用する素材開発や、準結晶の極めて高い電気抵抗性を活用した熱電変換材料としての研究などが行われている⁹。

3-2. 日本の動向

日本は、準結晶にかかわる研究開発を促進するため「ハイパーマテリアル (Hypermateral)」と呼ばれる独自のプロジェクトを立ち上げて、新しい学術領域の開拓を目指し戦略的な取り組みを進めてきた¹⁰。このプロジェクトリーダー（研究領域代表者）である東京理科大学の田村隆治教授は「既存の物質概念の一段上を行く新たな物質概念を提唱するとともに、異分野との積極的な学融合によりハイパーマテリアルを取り込む新たな学理を創出することを本学術領域の目的」とすると述べている¹¹。

対象とする物質群は幅広く、金属、半導体、セラミックス、ポリマーなどで、これまでに存在しなかった物質の創製に挑戦した。この結果、ハイパーマテリアル・プロジェクトからは、世界初となる「強磁性準結晶」の合成や、準結晶の化学組成を予測する機械学習アルゴリズムの開発、および予測アルゴリズムに基づいて新規に準結晶を4つ創成するなど、目覚ましい成果をあげている¹²。2023年には、東京大学の研究チームが「半導体の近似結晶」の存在を立証した。

近似結晶は、原子配列が、正20面体など多面体クラスター形状をした原子配列で構成される結晶に類似した物質である。産業技術総合研究所のプレスリリースによれば、この研究の進展により「半導体準結晶の創製につながれば、固体物理学の基本的問題の一つ¹³が解決され、結晶ではあり得ない高性能熱電材料の

ている。また準結晶ではないが有機分子結晶の構造解析を数カ月から数時間に短縮して予測する「CrystalMeth protocol」が開発されるなど改善が行われている。<https://www.nature.com/articles/s41467-024-53596-5>

⁸ 準結晶は、フッ素系樹脂材料（テフロン）と同様に熱伝導率と摩擦係数が低い。最近では欧米を中心としてフッ素樹脂化合物（PFAS）の規制が強化されており、フッ素樹脂代替材料が求められている。

⁹ 準結晶の電気抵抗率は結晶やアモルファス金属と比較して2桁から4桁ほど大きい特徴がある。AlPdRe（アルミ・パラジウム・レニウム）準結晶の場合、常温で10000～20000 $\mu\Omega\text{cm}$ であることが知られている。

¹⁰ 文部科学省科学研究費助成事業 新学術領域研究（2019年度-2023年度）「ハイパーマテリアル補空間が創る新物質科学」東京理科大学 先進工学部 田村研究室

¹¹ <https://www.rs.tus.ac.jp/hypermaterials/outline/index.html>

¹² 東京大学の研究チームは、80個の準結晶、78個の近似結晶、10090個の結晶の組成を訓練用データとして機械学習に入力し新規の準結晶探索を実施。

¹³ 固体は、金属、半導体、絶縁体にも分類される。人類が知る準結晶は金属のみ。準結晶に半導体・絶縁体が存在するかどうかは固体物理学の基本的な問題の一つ。

開発が促進される」としている¹⁴（図表3）。

図表3：近似結晶の組成例

種別	近似結晶の組成 表記: 元素記号 (数字は含有割合)	備考
近似結晶	Au ₆₅ Ga ₂₀ Tb ₁₅	強磁性の近似結晶 (3-3「準結晶の種別と適用技術」で言及)
	Al _{67.6} Si _{8.9} Ru _{23.5}	はじめて創製されたアルミ系近似結晶の半導体※ ¹
	Au _{63.5} Ga _{20.5} Gd ₁₆	近似結晶の超伝導体※ ²
	Au ₆₄ Ge ₂₂ Yb ₁₄	
【表中の元素記号】 Au: 金、Ga: ガリウム、Tb: テルビウム、Al: アルミニウム、Si: シリコン、Ru: ルテニウム、Gd: ガドリニウム、Ge: ゲルマニウム、Yb: イットルビウム		

※1：https://www.aist.go.jp/aist/j/press_release/pr2019/pr20190611/pr20190611.html

※2：『準結晶の科学 構造と物性』（名古屋大学出版会）、佐藤憲昭、石政勉、10. 3 近似結晶の超電導（P.247）より転載

出所：各種資料から三井物産戦略研究所作成

3-3. 準結晶の種別と適用技術

準結晶の種別としては、①合金準結晶、②高分子準結晶、③フォトニック準結晶、④近似結晶の4つが挙げられる。（図表4）以降においてそれぞれの適用技術のいくつかをピックアップして説明する。

①合金準結晶の適用技術としては触媒がある。現在工業用途で使われている銅触媒よりも触媒活性が高い「アルミニウム－銅（Al-Cu）準結晶触媒」やメタノールを改質する触媒として「アルミニウム－銅－鉄（Al-Cu-Fe）準結晶触媒」が開発されている。近年、銅触媒は、水素ガスを生成するために利用されており、次世代のエネルギーとして注目されている水素需要の拡大により、より高性能な銅触媒が重要性を増している。また、合金準結晶には非常に強い磁性を示すものがあり磁気メモリや、脳神経細胞を模倣した人工知能（AI）向け計算素子¹⁵への適用が想定される。もしこの計算素子が実用化されれば、従来の電力の100分の1以下で、生成AIの学習エンジンを構築可能となることから、安価で高性能なAIの利用が拡大するものと期待される。

②高分子準結晶の適用技術としては「光学迷彩」がある。準結晶の中には、メタマテリアルと呼ばれる物質と同様に光を反対方向に屈折する特性を有するものがあり、物体を視認できなくする効果が知られている。軍事用途が先行しているが民生用途の開発も行われている。

③フォトニック準結晶については、NTTが社会実装を目指して開発している「光電融合技術」を構成する制御装置や電子部材として利用される可能性があるほか「フォトニック準結晶レーザー」などの光学装置がある。この「光電融合技術」は、サイバー攻撃に耐性を持ち、安全で超大容量の高速通信サービスを実現

¹⁴ 産業技術総合研究所プレスリリース（2019年06月11日）[産総研：アルミ系近似結晶で半導体を創製](#)

¹⁵ この計算素子は、スピンメモリスタ（Spin-memristor）と呼ばれTDKが開発。ニューロンの機能を模倣するアナログ計算素子で、現在の人工知能（機械学習・強化学習）を計算する素子よりも、消費電力を大幅に低減できるとして注目。
https://www.tdk.com/ja/news_center/press/20241002_01.html

する日本発の基盤技術である。

④**近似結晶**については「**金・ガリウム・テルビウム(Au-Ga-Tb) 近似結晶**」において、磁性（強力な磁力）と反磁性（強力な反発力）を示すことが判明し、この磁気特性を応用した「**磁気冷却装置**」が考えられている。**磁気冷却**は、磁性を有する近似結晶に磁界をかけると発熱し、磁界を消去すると温度が下がる現象を利用した冷却方法である。既存の冷蔵庫のようなコンプレッサーや冷媒物質などが不要となり大幅な省エネとなるメリットがある。

図表 4：準結晶／近似結晶の概要と利用想定

No.	種別	概要	利用想定	想定される製品
1	合金準結晶	「合金準結晶」は、複数の元素を溶融するハイエントロピー物質と同様の作製手法が多用される。用途としては、触媒、軟磁性材、高性能熱電材、超電導材、熱性粒材など多岐にわたる。	準結晶触媒 記憶素子、超電導材	銅触媒の代替品 メタノール改質触媒 記憶装置
2	高分子準結晶	高分子は、炭素、水素などが共有結合でつくる巨大分子。ソフトマターである高分子にも準結晶構造が存在し、通常の高分子とは異なる物性を発揮すると期待されている。	メタマテリアル※1 スーパーレンズ※2	軍用光学迷彩※5 (透明マント)
3	フォトニック準結晶	屈折率が準周期的に変化するように作製されたナノ物質で、フォトニック結晶の光制御機能を補強すると期待されている。フォトニック準結晶レーザーの他、光メモリや光スイッチなどへの応用が想定。	光電融合技術 光制御素子 準結晶レーザー	オール光通信装置 光コンピュータ レーザー装置
4	近似結晶	正20面体クラスターなどの原子配列構造が、周期的に並んだ結晶。近似結晶による半導体の創製と超電導近似結晶が生み出されている。希土類による近似結晶など新規物質の発見などに期待。	近似結晶半導体 スピントロニクス※3 磁気冷却装置※4	省電力型記憶装置 磁気冷蔵庫※6

※1：自然界に存在する物質では、発現しない振る舞いをする人工的に創製された物質。光を反対方向に屈折させる光学迷彩の実用化が進んでいる。
※2：準結晶物質の構造設計を工夫して、光の波長より小さい物質を解像する（レンズを用いる光学系顕微鏡では見えない）ように作製したレンズ。
※3：物質を構成する電子の性質（①電気に係る性質、②磁石に関わる性質の2つ）、②磁石の性質を利用する技術で省電力・超大容量メモリなどが研究されている。
※4：磁性を有する準結晶物質に、磁界をかけると発熱し、磁界を消去すると温度が下がる現象を利用した冷却方法。
※5：光学迷彩を開発している企業には、カナダの軍服メーカーであるハイパーステルス・バイオテクノロジー社（Hyperstealth Biotechnology Corporation）がある。
※6：磁気冷凍技術を開発している企業には、東芝、中部電力、ダイキンがある。

出所：各種資料から三井物産戦略研究所作成

4. 今後の展望

1984年の準結晶発見から40年が経過した。当初から数学は準結晶の構造研究において重要な役割を果たしてきた¹⁶。発見の1カ月後には、早くも準結晶の構造に関する数学論文が発表されている。数学観点から準結晶を分析すると、高次元では結晶と見なせるため、今では結晶学を「**高次元結晶学**」呼ぶようになっている。準結晶／近似結晶はまだ発見数が少ないものの、普遍的に存在するポテンシャルを有しているとされている。今後は、さまざまな社会課題を解決するために必要とされる素材開発の探索領域として、準結晶／近似結晶が注目され、応用研究が加速することに期待したい。

¹⁶ 1984年11月に準結晶発見の論文が発表された翌12月には、ドヴ・レヴィン（Dov Levine）とポール・スタインハート（Paul Steinhardt）が論文を提出し、準結晶の構造は、ロジャー・ペンローズ（Roger Penrose）が発見した「ペンローズ・タイル」（Penrose tiling）の3次元拡張版であるとの見解を示した。ペンローズは、平面を隙間なく埋める「タイルング問題」のうち、同じパターンを繰り返さない（準周期的）2種類のタイルを発見（ペンローズ・タイルング）した。2次元平面のペンローズ・タイルを立体世界の3次元に数学的に拡張したものが準結晶の準周期的構造と同じであることが示されている。