



平田 秋彦 Akihiko HIRATA

TEL : 03-5286-2766

e-mail : ahirata@waseda.jp

URL : <https://ahirata.w.waseda.jp/>

1998年早稲田大学理工学部材料工学科卒、2003年早稲田大学理工学研究科資源及び材料工学専攻博士後期課程修了（博士（工学））、2003～2009年大阪大学産業科学研究所助手および助教、2009～2012年東北大学原子分子材料科学高等研究機構助教、2012～2018年東北大学原子分子材料科学高等研究機構准教授、2012年日本顕微鏡学会奨励賞、2014年日本金属学会村上奨励賞、2016～2018年産業技術総合研究所数理先端材料モデリングOIL主任研究者、2018～早稲田大学理工学術院教授

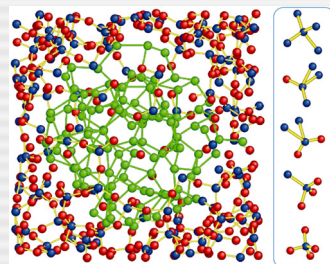
B.S. (1998, Waseda Univ.), Dr. Eng. (2003, Waseda Univ.), Res. Assoc. and Assis. Prof. (2003-2009, ISIR, Osaka Univ.), Assis. Prof. (2009-2012, AIMR, Tohoku Univ.), Assoc. Prof. (2012-2018, AIMR, Tohoku Univ.), Encouraging Prize (2012, The Japanese Society of Microscopy), Murakami Young Researcher Award (2014, The Japan Institute of Metals and Materials), Principal Investigator (2016-2018, MathAM OIL, AIST), Professor (2018-, Waseda Univ.)

材料の原子配列は結晶とアモルファスに大別されるが、周期的に原子が並ぶ結晶とは異なり、ランダムな原子配列を持つアモルファスの構造解析は極めて困難である。例えば代表的な実験手法であるX線回折では、広い領域からの平均的な構造情報が得ることができない。近年、アモルファス中のナノスケール不均一性が材料特性に影響を及ぼすことが指摘されているが、その詳細の解明のためには原子レベルでの構造情報の取得が必要不可欠である。我々の研究室では、サブナノメートル領域を直接観察できるオングストロームビーム電子回折法を計算機シミュレーションと併用することによりアモルファス構造の全容を捉える試みをこれまで行ってきた。さらに、結晶に見られる並進対称性や回転対称性などを一切持たないアモルファス構造を記述する新たな数理手法として計算ホモロジーの適用も試みており、アモルファス構造に隠れた秩序の抽出を目指している。最近の具体的なテーマとしては、(1) 金属ガラスの幾何学フラストレーション、(2) リチウムイオン電池用負極材アモルファスSi系の不均一構造、(3) 相変化記録材料Ge-Sb-Teの高速結晶化機構、などが挙げられる。今後は、これまでに開発したアモルファス構造に関する解析手法を、結晶材料に多く見られるランダム粒界構造にも適用し、ランダム構造の包括的な理解を目指す。

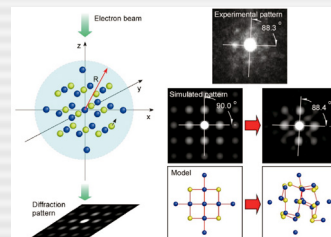
A series of amorphous materials having disordered atomic structures such as glasses is known to exist. A difficulty in analyzing amorphous structures prevents a deeper understanding of the underlying physics. In our laboratory, we make an attempt to reveal amorphous structures and unique physical phenomena in amorphous materials by complementarily using an angstrom-beam electron diffraction experiment and computational modeling methods. We also conduct a computational homology analysis on amorphous structures that do not have any translational and rotational symmetries unlike crystals to unravel the hidden structural order. The recent studies are as follows: 1. Geometric frustration in metallic glasses, 2. Inhomogeneous structure of Si-based anodes for Li-ion batteries, 3. Rapid crystallization mechanism in phase change recording materials. We pursue a comprehensive understanding of disordered structures by applying this technique also to the random grain boundaries in crystalline materials.

■代表論文および著書 / Representative publications

1. A. Hirata, S. Sato, M. Shiga, Y. Onodera, K. Kimoto, and S. Kohara, Direct observation of the atomic density fluctuation originating from the first sharp diffraction peak in SiO_2 glass, *NPG Asia Materials* 16, 25 (2024).
2. A. Hirata, S. Tokuda, C. Nakajima, and S. Y. Zha, Local structural modelling and local pair distribution function analysis for Zr-Pt metallic glass, *Scientific Reports* 14, 13322 (2024).
3. A. Hirata, T. Wada, I. Obayashi, and Y. Hiraoka, Structural changes during glass formation extracted by computational homology with machine learning, *Communications Materials* 1, 98 (2020).
4. A. Hirata, T. Ichitsubo, P. F. Guan, T. Fujita, and M. W. Chen, Distortion of Local Atomic Structures in Amorphous Ge-Sb-Te Phase Change Materials, *Physical Review Letters* 120, 205502 (2018).
5. S. Jiang, H. Wang, Y. Wu, X. Liu, H. Chen, M. Yao, B. Gault, D. Ponge, D. Raabe, A. Hirata, M. Chen, Y. Wang, Z. Lu, Ultrastrong steel via minimal lattice misfit and high-density nanoprecipitation, *Nature* 544, 460-464 (2017).
6. A. Hirata, S. Kohara, T. Asada, M. Arao, C. Yogi, H. Imai, Y. W. Tan, T. Fujita, M. W. Chen, Atomic-scale disproportionation in amorphous silicon monoxide, *Nature Communications* 7, 11591 (2016).
7. Y. Hiraoka, T. Nakamura, A. Hirata, E. G. Escobar, K. Matsue, Y. Nishiura, Hierarchical structures of amorphous solids characterized by persistent homology, *Proceedings of the National Academy of Sciences of the United States of America* 113, 7035-7040 (2016).
8. A. Hirata, K. Matsue, M. W. Chen, Structural Analysis of Metallic Glasses with Computational Homology, *SpringerBriefs in the Mathematics of Materials*, Vol. 2 (2016).
9. A. Hirata and M. W. Chen, Angstrom-beam electron diffraction of amorphous materials, *Journal of Non-Crystalline Solids* 383, 52-58 (2014).
10. A. Hirata, L. J. Kang, T. Fujita, B. Klumov, K. Matsue, M. Kotani, A. R. Yavari, M. W. Chen, Geometric frustration of icosahedron in metallic glasses, *Science* 341, 376-379 (2013).
11. A. Hirata, T. Fujita, C. T. Liu, M. W. Chen, Characterization of oxide nanoprecipitates in an oxide dispersion strengthened 14YWT steel using aberration-corrected STEM, *Acta Materialia* 60, 5686-5696 (2012).
12. A. Hirata, T. Fujita, Y. R. Wen, J. H. Schneibel, C. T. Liu, M. W. Chen, Atomic structure of nanoclusters in oxide dispersion strengthened steels, *Nature Materials* 10, 922-926 (2011).
13. X. Y. Lang, A. Hirata, T. Fujita, M. W. Chen, Nanoporous metal/oxide hybrid electrodes for electrochemical supercapacitors, *Nature Nanotechnology* 6, 232-236 (2011).
14. A. Hirata, P. F. Guan, T. Fujita, Y. Hirotsu, A. Inoue, A. R. Yavari, T. Sakurai, M. W. Chen, Direct observation of local atomic order in a metallic glass, *Nature Materials* 10, 28-33 (2011).
15. A. Hirata, Y. Hirotsu, K. Amiya, N. Nishiyama, A. Inoue, Fe_{23}B_5 -type quasicrystal-like structures without icosahedral atomic arrangement in an Fe-based metallic glass, *Physical Review B* 80, 140201(R) (2009).
16. A. Hirata, Y. Hirotsu, K. Amiya, A. Inoue, Nanoscale metastable state exhibiting pseudotenfold diffraction pattern in Fe-based bulk metallic glass, *Physical Review B* 79, 020205(R) (2009).
17. A. Hirata, Y. Hirotsu, K. Amiya, A. Inoue, Crystallization process and glass stability of an $\text{Fe}_{48}\text{Cr}_{15}\text{Mo}_{14}\text{C}_{15}\text{B}_6\text{Tm}_2$ bulk metallic glass, *Physical Review B* 78, 144205 (2008).



オングストロームビーム電子回折と放射光X線回折を用いた構造解析から得られたリチウムイオン電池用負極材アモルファスSiOの不均一構造モデル。



オングストロームビーム電子回折の解析に特化した局所逆モンテカルロ法による相変化記録材料用アモルファスGeTeSbの構造モデリング。