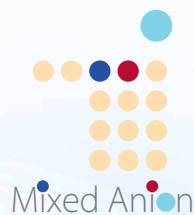


News Letter

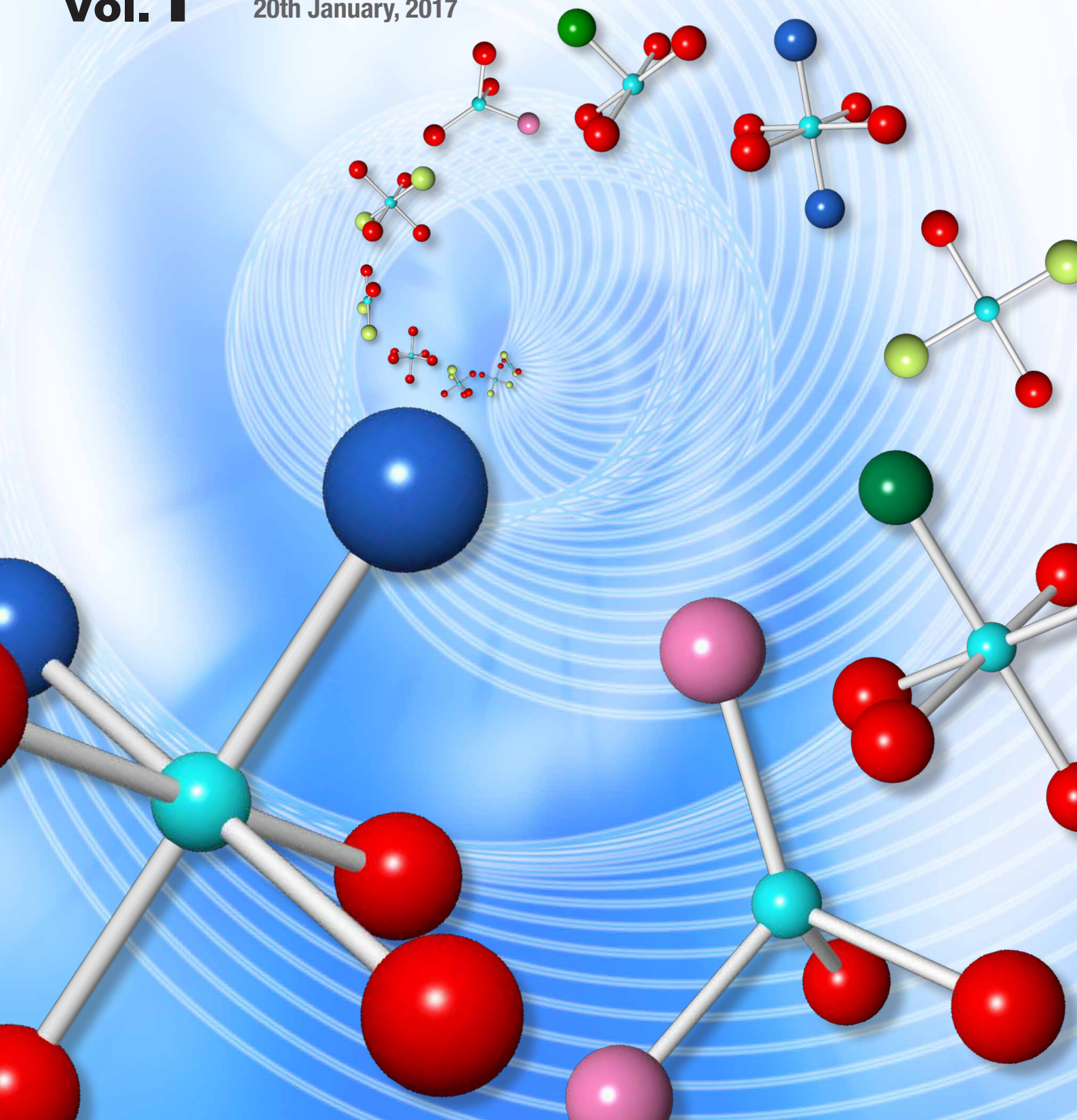
Vol.1

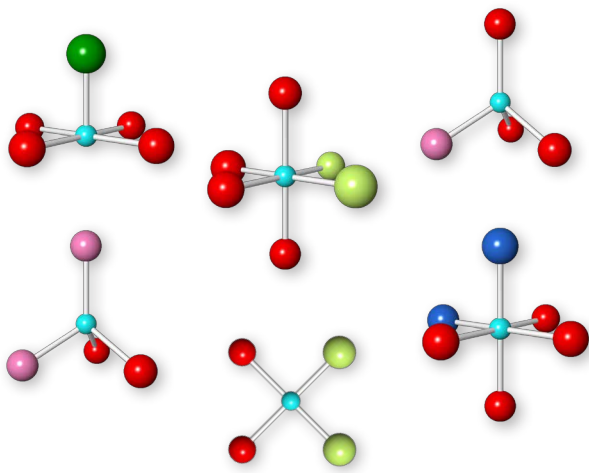
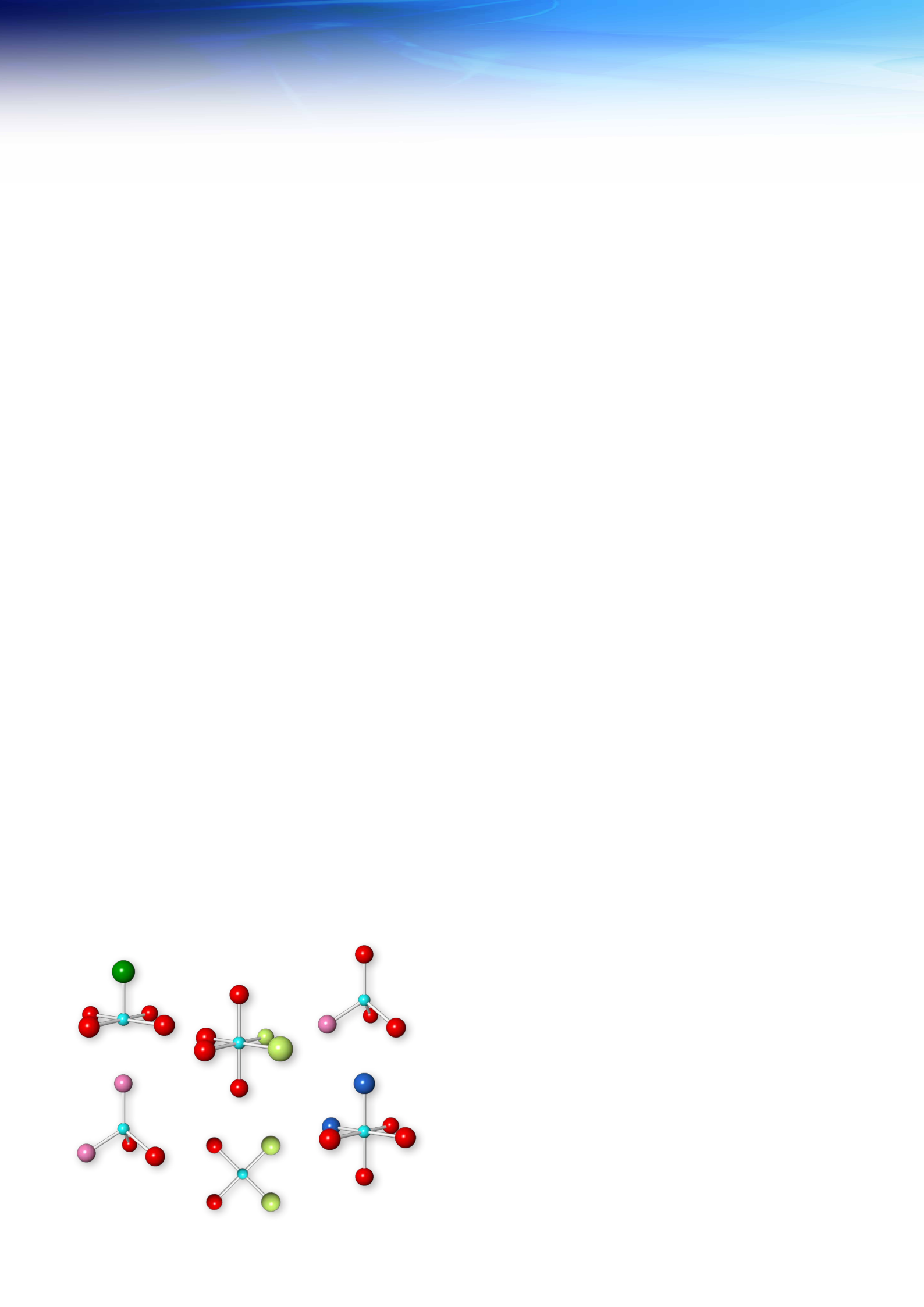
20th January, 2017

平成28年度-平成32年度
文部科学省科学研究費補助金
新学術領域研究(研究領域提案型)



平成28年度-平成32年度
新学術領域研究
複合アニオン化合物の
創製と新機能





CONTENTS

目次	1
巻頭言	2
全体概要と組織	5
メンバー紹介&グループ研究内容概略	6
研究項目 A01 : 新規複合アニオン化合物の創製 : 物質合成と設計指針の確立	10
研究項目 A02 : 複合アニオン化合物の理解 : 化学・構造・電子状態解析	17
研究項目 A03 : 複合アニオン化合物の新規化学 機能の創出	25
領域ニュース	
キックオフミーティング	34
トピカル会議	38
Workshop on "Solid-state chemistry for oxide and mixed-anion systems"	39
物性科学領域横断研究会	40
レクチャーツアー	41
班間連携強化会議	43
班内留学報告	44
アウトリーチ活動報告抜粋 (2016.6-2016.11)	47
領域ロゴマークについて	50
発表論文リスト (2016.6-)	51
受賞報告	52
国際会議情報	54
その他の情報	55
編集後記	56

「複合アニオン」の頂を目指そう

領域代表 陰山 洋



新学術領域研究「複合アニオン化合物の創製と機能開拓」がスタートしました。複合アニオン化合物は、ほぼ未開といってよい物質系ですので新学術の名に相応しいテーマと確信しています。来年度からは公募研究も加わりますが、まずは「合成」、「解析」、「機能」からなる計画研究のメンバーの一人一人が、大きな夢をもち、独自の切り口や思い入れを大切にしながら、この未開物質のベールを一つずつ剥がしていただければと願っています。

しかし、複合アニオン化合物の科学は、既存の様々な物質科学のコミュニティを巻き込んで展開していく新しい分野であるからこそ、班内・班間で共同研究を推進していくことが何よりも大切であると考えています。私はこれまで、合成、磁性、超伝導、触媒、電池、と物理と化学をまたがって様々な共同研究を経験してきたつもりです。しかし、それでもなお、異分野の研究者の共同研究は容易にはいかなことを知っています。計画研究のメンバーは、まさに異

分野の研究者の集合体であり、複合アニオンにはこれまでの常識が通用しないことも多々有るはずですが。また、サイエンス以上に、各コミュニティの「慣わし」が邪魔する可能性もあります。今までキックオフミーティングを含め本領域で開催した会議では、お互い遠慮している傾向があると感じました。本領域では、「慣わし」は取っ払いましょう。そのかわりに、「なぜ？」という好奇心を「共通言語」にして遠慮なくガンガン議論しましょう。特に、学生を含む若手には、元気一杯に活躍してほしいと願っています。新しい学問だからこそ、若い人に大きなチャンスがあると思っています。もちろん、シニアであっても若い気持ちさえあれば大丈夫でしょう。

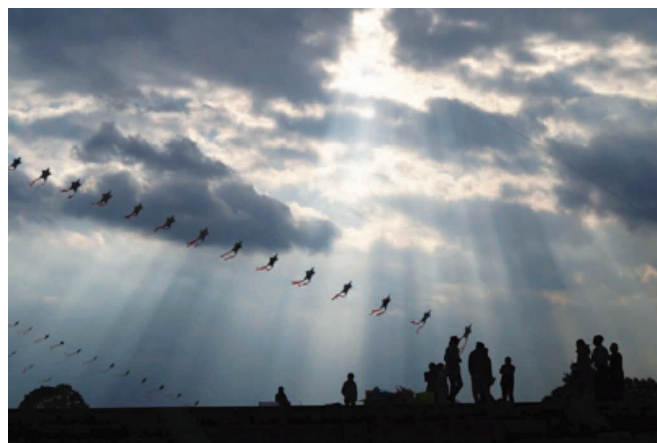
新学術の運営は大変なことも多いですが、嬉しいことも幾つかありました。三つ紹介します。まず一つ目は、計画研究のメンバーの中では、「自発的」に共同研究のミーティングが企画されるなど積極的な活動がみられることです（全

員ではありませんが)。少なくとも私はそうですが、大抵のアイデアは失敗に終わります。しかし、大なり小なり5個、10個アイデアを持ち寄って議論し、実際に試してみても初めて気づくことがあったり、失敗であったとしてもブレークスルーに繋がる次の展開が見えたりするのではないのでしょうか。このような自発的な活動が班内・班間でどんどん広がっていくことを期待しています。

二つ目は、昨年9月にオスロで開催されたプロトン伝導体の国際会議（Solid State Protonic Conductors 18 ; SSPC18）にて、初めて「ヒドリド（ H^- ）伝導」のセッションが設けられたことです。小生は、基調講演としてこのセッション内で講演する機会をいただきました。チタン系ペロブスカイト酸化物におけるヒドリドの存在は、20世紀からの大問題で懐疑的な人も多かったと聞きますが、今回のセッションでの活発な議論を通じて市民権を得たと同時に、イオン伝導体としての大きな可能性を参加者とシェ

アすることができました。酸水素化物は、本領域で集中的に取り組む物質ですので大きな励みになりました。

最後に、凝縮系科学賞の第11回受賞者に、計画研究（機能班）の代表の前田さんが選ばれ、12月に神戸大学で開催された第10回物性科学領域横断研究会に合わせて、受賞



講演と表彰式が行なわれました。同研究会と同賞の組織委員は、ともに固体物理学のコミュニティによって構成されていますので、触媒化学の前田さんのご受賞は、異例ともいえるでしょう（しかし、圧倒的な成果ですので当然だと思います）。複合アニオンはこれまで固体物理では殆ど知られていませんので、加藤愛梨さん（内本先生の学生）のポスター賞の受賞とともに、認知してもらう良いきっかけになったと確信しています。

本領域では、アウトリーチ活動も積極的に進めていきま

す。研究の醍醐味を一般の人にも伝えましょう。添付した絵は、10月に行なった出雲学校（小生の母校）の一年生向けの講演で使ったスライドで、勉強（受験勉強）と研究の違いを表したつもりです。研究が進むにつれ、道がどんどんでき、最後には整備される（左図）わけですが、複合アニオンの研究は、まだ足跡のない未開の山といえるでしょう。今後5年間、みんなで道無き道を進んでいきながら（迷いながら）頂点を目指して登っていき、基礎学理を構築しましょう！！

勉強



研究



■ 全体概要と組織

21世紀に入って、複数のアニオンが同一化合物に含まれる「複合アニオン化合物」が、新しいタイプの無機材料として注目を集めはじめています。酸化物や窒化物など既存の無機材料と比べ、複合アニオン化合物では特異な配位構造や結晶構造が得られるため、根源的に異なる革新的機能が現れる可能性が秘められています。異なる電気陰性度や分極率をもつ複数のアニオンを利用することで、化学結合と電子構造の卓越した制御能を活用し、革新的機能をもつ物質の創出が期待されます。さらにアニオンとなる元素にはクラーク数上位のものが多く、複合アニオン化合物は元素戦略の駆動の一輪を担う材料になる可能性があります。

複合アニオン化合物の殆どは、制御された条件の下で生み出される人工化合物であり、地球上にありふれた形で存在する酸化物をはじめとする単アニオン化合物とは全く異なる物質群です。そのため複合アニオン化合物の化学は鉱

物学を基礎として発展してきた従来の結晶化学の延長線上ではなく未開拓な領域が数多く存在し、基礎学理の確立もまだ十分とは言えません。しかしこのことは、複合アニオン化合物の研究を通じて未だ見ぬ全く新しい新現象が発見される可能性が高いことの裏返しでもあります。

そこで本新領域研究では、第一に新物質を創製し、複合アニオン化合物の基礎学理を確立することで、将来の実用へとつながる材料の設計概念、方法論を確立します。第二に新しい機能性を創出することより、将来の一般社会の要請に応える化学・物理機能の芽を発見し、発展させることを目指します。研究項目 A01 と研究項目 A02 は、複合アニオン化合物の基礎研究を担当し、それぞれ「合成」と「分析」を主目的としています。研究項目 A03 は、応用研究を視野に複合アニオンならではの新しい「化学機能・物理機能」を探究します。

領域代表者

陰山 洋 (京大院工・教授)

■ A01「新規複合アニオン化合物の創製：物質合成と設計指針の確立」

無機化合物の構成元素は数十種類に限られており、革新的な新規材料の創成のためには従来と異なる新たな物質の設計・合成アプローチが求められています。アニオンは周期表で近い位置にあっても化学的な性質が大きく異なるため、複数のアニオンを同一化合物中に含む「複合アニオン化合物」は、単一アニオン化合物にはない特異な電子構造や結晶構造が得られ、物質設計に新たな次元を加えることが可能です。一方で、アニオン間で大きく異なる性質に由来した合成の困難さや、複合アニオン化合物の特異性に着目した研究組織がなく、これまでは全体を俯瞰した系統的な研究が欠如していました。そこで本計画研究では、様々な実験手法と計算科学を駆使して合成を行い、複合アニオン化合物の合成手法の確立、アニオンの組成・配列の制御及び新構造の開拓を目指します。

本計画研究の研究者は無機化合物合成のエキスパートであり、これまでに様々なアニオンを用いた物質を合成してきました。これら研究者を複合アニオン化合物の物質設計

という観点から結集し、各合成手法を用いて徹底的に複合アニオン化合物の探索をすると同時に、各手法を組み合わせた多重合成法を開発します。これによりアニオンの組成・局所構造、アニオン秩序度などが自在に制御された斬新な結晶構造および電子構造を創り出し、革新的な新機能を導きだします。

酸水素化物、酸窒化物、酸ハロゲン化物や三種アニオン系を主たるターゲットとし、ペロブスカイト構造、スピネル構造などの既存の構造の複合アニオン化合物のほか、異種アニオンブロックが交互積層した新規構造の創製も目指します。複合アニオン化合物には、局所構造に新しい自由度（cis、trans など）があり、それらが集積することで結晶の中に新しい配列秩序が現れる可能性があります。本研究では、アニオンの組成だけでなく、アニオン局所構造、アニオン秩序度、アニオン積層形式を自在に制御することによって、導電性、光学特性、誘電率などの化学・物理機能に複合アニオンならではの革新的な機能を創出します。

研究代表者	
荻野 拓	（産総研・主任研究員・無機固体化学・総括、複合アニオン化合物の物質設計）
研究分担者	
陰山 洋	（京大院工・教授・無機固体化学・低温還元法などを用いた新物質合成）
垣花 真人	（東北大多元研・教授・無機材料化学・複合的手法による新物質合成）
稲熊 宜之	（学習院大理・教授・無機固体化学・高圧力を用いた物質合成）
殷 しゅう	（東北大多元研・教授・無機材料化学・環境応答機能材料の創製）
鱒淵 友治	（北大院工・准教授・無機工業材料・機能性酸窒化物の創製と精密合成）
本郷 研太	（北陸先端大・助教・情報科学・計算科学を用いた物質設計）
連携研究者	
岡本(桂)ゆかり	（東大院新領域・助教・無機化学・多元系化合物の設計と合成）
小林 亮	（東北大学多元物質科学研究所・助教・水溶液プロセスを基盤とした複合アニオン化合物の合成と創製）
朝倉 裕介	（東北大学多元物質科学研究所・助教・環境応答機能材料の創製）
前園 涼	（北陸先端大学・准教授・計算材料科学・計算科学を用いた物質設計）

■ A02「複合アニオン化合物の理解：化学・構造・電子状態解析」

複合アニオン化合物は、近年、急速発展している物質群であり、固体化学とその応用分野の革新と「元素戦略」の基軸となるポテンシャルを有しています。しかし、この物質群に対しては、酸化物等を対象とした従来の研究手法が通用せず、その結晶構造を決定するための評価・解析手法すら確立していない状態です。例えば、酸フッ化物 ($\text{O}^{2-}\text{-F}^-$) 系の複合アニオン化合物では X 線回折・中性子回折いずれにおいても散乱断面積が近接するため、回折法でアニオン配置が決定できません。また、酸化物中に水素化物イオン H^- が安定に存在するという事実は、結晶回折法、固体核磁気共鳴法および理論計算を駆使した研究成果を受けて、最近ようやく常識として認知されるようになりました。

新物質合成の折には、その「構造」が分からなければ先に進めません。物質機能は、その「状態」が分からなければ、機能発現の起源が分かりません。そこで、本研究班では、複合アニオン化合物の新物質探索と機能開拓の鍵となる、複合アニオン系に固有の構造情報を明らかにし、物質機能の理解と予測に繋げることを目的としています。複合アニオン系に

展開することで直面する物質評価の問題をテーラードで解決し、手法の汎用化を図り、物質探索の加速を狙います。原子分解能の分析電子顕微鏡法、単結晶回折法と粉末回折法の最新計測法と向度解析に関する第一人者を取りそろえ、迅速な結晶構造決定と、酸素とフッ素の判別問題、混合水素化物、異常原子価のアニオンの検出等に取り組む。放射光 X 線吸収法、電子エネルギー損失分光法や固体核磁気共鳴法、吸着法、質量分析法等に深い経験を有する研究者が結集し、低次元物質、表面吸着、脱離など動的現象や低結晶性の物質や触媒表面の元素の状態分析に取り組みます。理論計算による裏付けや系統化の手段を取り入れます。また、理論計算の専門家を中心として A01、03 班と本班で蓄積された電気的・磁氣的・化学的実験データと理論計算を融合し物性予測を行います。特に、電子状態・熱力学変数・機械特性に加えて、誘電性や熱電性等の格子振動を取り扱う計算負荷の高い解析手法にも対応できる体制を整え、研究項目 A03 と協同して新奇物性と機能性を発掘します。方法論の汎用化を図り、研究項目 A01 で創出される新物質の評価を効率化させます。

研究代表者		
林 克郎	(九大院工・教授・無機物理化学・総括)	
研究分担者		
八島 正知	(東工大院理工・教授・結晶科学・回折法・材料科学)	
木本 浩司	(物材料機構・ユニット長・電子顕微鏡・局所化学構造分析)	
桑原 彰秀	(ファインセラミクスセンター・主任研究員・計算材料科学・第一原理動力学計算)	
吉田 朋子	(大阪市大複合先端研究機構・教授・触媒化学・X線吸収分光)	
稲田 幹	(九州大学・中央分析センター・准教授・無機材料科学・化学状態分析・吸着法)	
野田 泰斗	(京大院理・助教・固体物理化学・核磁気共鳴)	
山本 隆文	(京大院工・助教・無機固体化学・固体物性計測・回折法)	
連携研究者		
熊谷 悠	(東工大元素戦略センター・講師・計算材料科学・分光シミュレーション)	
吉田 寿雄	(京都大学人間環境学・教授・触媒化学・X線吸収分光)	
藤井 孝太郎	(東工大・理学院・化学系 助教・材料科学・結晶構造解析)	
丹羽 栄貴	(東工大・理学院・化学系 特任助教・材料科学・熱分析・結晶構造解析)	

■ A03「複合アニオン化合物の新規化学物理機能の創出」

酸素、窒素、フッ素、水素など複数のアニオンが同一化合物に含まれる「複合アニオン化合物」では、酸化物などの単アニオン系にはない特異な配位構造や結晶構造が生じ、その結果として単アニオン系とは根源的に異なる革新的機能（光触媒特性、強誘電性、超伝導性、蛍光特性、電気化学特性など）が創発することが近年明らかとなってきました。例えば、GaN と ZnO の固溶体酸窒化物では、単アニオン系で実現できなかった可視光吸収が可能となり、水分解光触媒研究 40 年以上の歴史で誰も成し得なかった、単一の粉末光触媒上での水の可視光完全分解を成し遂げられました。また、SrTaO₂N 薄膜では酸窒化物では初の強誘電性の発現が報告されています。さらに、鉄酸ヒ化物超伝導体の酸素サイトの一部を水素アニオンで置換すると大量の伝導電子がドーピングされ、新たな超伝導領域が現れることも報告されています。このように複合アニオン化合物は、“機能の宝庫”と呼ばれるペロブスカイト型酸化物を超える高

い機能創発のポテンシャルを秘めています。

本研究班では、機能創発の観点から我が国のアキレス腱であるエネルギー問題の解決を大きな目標として、創エネルギー・省エネルギーに資する複合アニオン化合物からなる新機能材料を開発します。具体的には、光触媒・光電極（前田）、イオン伝導（石原）、二次電池活物質（内本）、蛍光体（田部）、誘電体・磁性体・薄膜材料（長谷川）、熱電材料（森）、超伝導（松石）、理論計算（牛山）の計 8 チームによる有機的連携に基づき研究をおこない、複合アニオン化合物に特有の革新的機能を創出します。さらには、材料の高機能化に不可欠な高い合成技術をもつ研究項目 A01 と構造物性や機能発現機構の解明を専門とする研究項目 A02 と連携することで、それまで他分野の研究者との相互作用なしに単発的な研究がなされてきた現状を変え、複合アニオンを旗印とした新物質化学の発展を目指します。

研究代表者	
前田 和彦	（東工大理工・准教授・不均一系光触媒・総括及び光触媒機能の開拓）
研究分担者	
内本 喜晴	（京大院人環・教授・電気化学、計測科学・二次電池正負極材料の開発）
長谷川 哲也	（東大院理・教授・固体化学・薄膜調製及び電子機能探索）
牛山 浩	（東大院工・准教授・理論化学、触媒化学・理論計算による新機能探索）
田部 勢津久	（京大院人環・教授・無機材料科学・光電物性探索）
森 孝雄	（物材機構・グループリーダー・無機材料合成、固体物性・熱電機能探索）
松石 聡	（東工大元素戦略センター・准教授・無機材料、超伝導・新電子機能探索）
連携研究者	
石原 達己	（九大院工・教授・無機電気化学・酸素イオン伝導能と触媒作用の開拓）
阿部 竜	（京大院工・教授・光電気化学・光電極の開発）
廣瀬 靖	（東大院理・准教授・固体化学・薄膜調製、電子機能探索）
近松 彰	（東大院理・助教・固体化学・薄膜調製、電子機能探索）
上田 純平	（京大・助教・無機材料化学・光電物性探索）

総括班			
陰山	洋	(領域代表)	全体統括
荻野	拓	(A01 代表)	渉外、若手育成
垣花	真人	(A01 分担)	国際会議、若手育成
林	克郎	(A02 代表)	事務担当
八島	正知	(A02 分担)	若手育成、国際企画
山本	隆文	(A02 分担)	領域代表補佐
前田	和彦	(A03 代表)	国内研究会
田部	勢津久	(A03 分担)	知的財産
長谷川	哲也	(A03 分担)	広報
国際班			
複合アニオン化合物の創製と新機能に関する研究の国際活動支援			
陰山	洋	(領域代表)	国際支援活動全体の統括
前田	和彦	(A03 代表)	渉外と A03 における国際支援活動の統括
荻野	拓	(A01 代表)	A01 における国際支援活動の統括
林	克郎	(A02 代表)	A02 における国際支援活動の統括
八島	正知	(A02 分担)	国際支援活動の企画、海外大型施設利用支援の統括

■ メンバー紹介&グループ研究内容概略 (A01)

産業技術総合研究所

National Institute of Advanced Industrial Science and Technology (AIST)
H.Ogino Group

領域所属 研究項目A01 計画研究代表
研究代表者 荻野 拓 主任研究員
研究メンバー 伊豫 彰 上級主任研究員
鬼頭 聖 主任研究員

専門分野・キーワード 層状複合アニオン化合物 / 多元系化合物 / 高压合成 / 超伝導 / 光学材料

SPECIALIZED FIELD・KEYWORD

Layered Mixed-anion Compounds / Multicomponent Materials / High Pressure Synthesis / Superconductor / Optical Materials



Dr. H. OGINO

▶ 機能性層状複合アニオン化合物の創製

アニオンの特徴の一つとしてイオン半径や電気陰性度などの化学的性質が相互に大きく異なるものが多いことが挙げられ、これらを複数用いれば、それぞれが独立したサイトを占めることで、自然超格子などの複雑な構造が容易に形成できます。一方でこのような多元アニオン系である“複合アニオン化合物”は、カチオンで確立された酸化数やイオン半径と言った指標が多くのアニオンには適用できないなど、未だ手探りで物質探索が主流です。そこで本研究

グループでは、高温・高压下での合成や低温合成など様々な合成技術を組み合わせ、新学術領域研究を通じた計算科学や解析、他の合成グループとの共同研究により、複合アニオン化合物の生成指針の確立と、従来にない配位構造・積層構造の構築を目指しています。また、このような特異な構造に立脚した、超伝導や熱電特性、イオン伝導性や蛍光特性など新たな機能性を開拓します。

1. 層状複合アニオン化合物の合成技術・相生成指針の確立
2. 高特性鉄系超伝導体の開発
3. トポケミカル反応を用いた新物質・新超伝導体の探索
4. 特異な配位構造を持つ蛍光材料の開発
5. 低次元熱電材料の探索

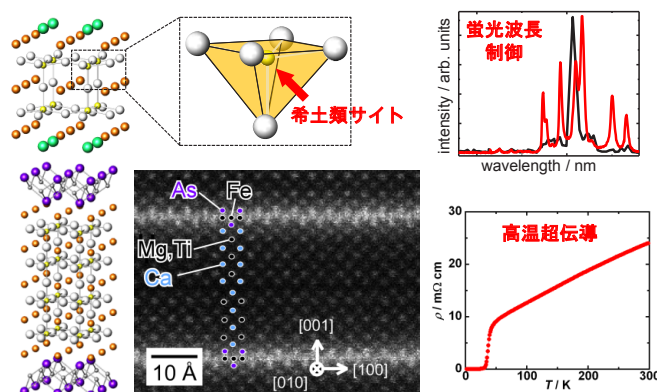


図 層状複合アニオン化合物の結晶構造・配位構造と応用例

新学術への情熱・メッセージ

卒業研究で酸硫化物を取り扱って以来、複合アニオン化合物の研究に携わって来ましたが、今回の新学術領域はこれらの化

合物に日の目を当て、これまで見えてこなかった新たな機能性を引き出して行く絶好の機会なので全力で取り組んで行きます。

■ メンバー紹介&グループ研究内容概略（A01）

東北大学 多元物質科学研究所 垣花研究室

IMRAM, Tohoku University
M. KAKIHANA Lab

領域所属 研究項目A01 計画研究
研究分担者 垣花 真人 教授

専門分野・キーワード フォトセラミックス / 新規物質探索 / 複合的手法 / 水溶液 / 結晶成長

SPECIALIZED FIELD・KEYWORD

Photoceramics / Exploration of New Materials / Advanced Chemical Methods / Aqueous Solution / Crystal Growth



Prof. M. KAKIHANA

▶ 複合無機化学的手法による複合アニオン化合物の合成

酸窒化物・酸硫化合物・リン酸塩・酸フッ化合物・酸水素化合物など多様な化合物を対象として、固体材料化学の観点からセラミックスを構成する元素の種類や組成を制御することで新しい複合アニオンの開発を目指します。また、複合アニオン化合物の創製や高機能化を可能にする新たな“複合無機化学的手法”の構築を狙い、溶液法を基盤とした精密合成法の開発および複合アニオン化合物創製につながる高純度前駆体の合成や原料創製にも注力します。さらには共同研究により、得られた複合アニオン化合物の構造と機

能の関係の解明を通じた材料設計指針の構築、および、それに基づいた革新的複合アニオン化合物の創製を試みます。

1. 複合アニオン化合物創製手法の開拓
2. 種々のプロセスを併用することによる複合アニオン化合物の創製
3. 複合アニオン化合物の創製を可能にする原料の開発

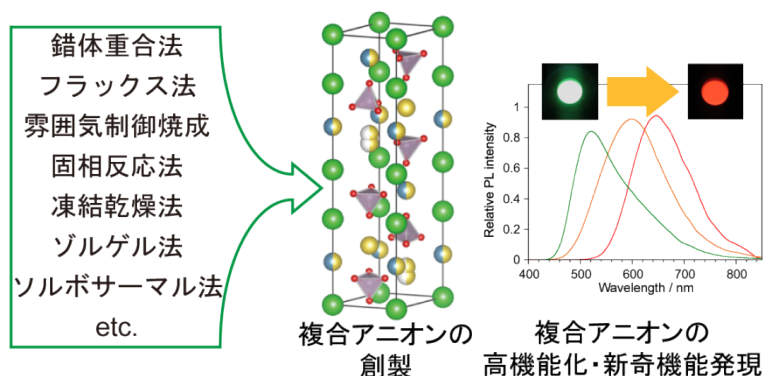


図 研究概念。原料と種々の手法を駆使し、固体材料化学に基づいた元素の選択や組成制御を行うことで、複合アニオン化合物の創製と高機能化・新規機能発現を実現する。

新学術への情熱・メッセージ

「一つでも多くの複合アニオン化合物の発見を目指し、合成法・探索手法の開拓に注力したいです。」（垣花）

「“複合アニオン” が、科研費キーワードになるように尽力します。」（小林）

■ メンバー紹介&グループ研究内容概略（A01）

東北大学 多元物質科学研究所 殷研究室

IMRAM, Tohoku University
S.YIN Lab

領域所属 研究項目A01 計画研究
研究分担者 殷 澍 教授

専門分野・キーワード 環境調和材料 / ソルボサーマルプロセス / 形態制御 / 環境応答機能

SPECIALIZED FIELD・KEYWORD

Environmental Harmony Materials / Solvothermal Process / Morphological Control / Environmental Responsive Functionality



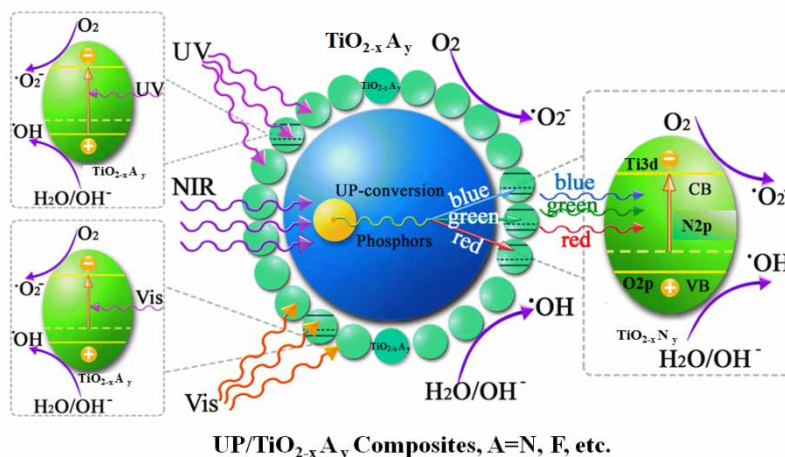
Prof. S. YIN

▶ ソルボサーマル反応による環境応答性無機機能材料の創製

環境応答性セラミックス材料の形態制御による無機ナノ材料の機能性の高度発現について研究を行っています。主に環境に優しいソフトケミカル手法による材料合成を行い、特に高温水や非水溶媒を利用するソルボサーマル反応等の溶液化学反応を用い、複合アニオン化処理し、電子構造制御を行い、環境に優しい反応条件で環境応答性複合アニオン化合物の形態・結晶化度・結晶相・粒子サイズの精密制御を行い、環境調和・エネルギーの高効率利用・光子や化学物質による環境応答機能の創製及び機能性の高度発現に関する研究を行っております。

1. 環境に優しいプロセスによる機能性無機機能材料の開発
2. 高感度アニオン型ドープ可視光応答性光触媒の合成と環境浄化機能
3. 無機紫外線 / 赤外線遮蔽及び透明導電性材料の開発、複合アニオン構造との関連性解明
4. マルチ機能性複合アニオンナノ材料の創製
5. 窒化物・酸窒化物のナノ構造制御と機能性

図 アップコンバージョン蛍光体 (UP) /TiO_{2-x}A_y コンポジットの赤外線照射による光触媒活性発現メカニズム



新学術への情熱・メッセージ

環境に優しいプロセスを利用し、無機機能材料合成から環境応答機能評価まで、多岐にわたる研究と多くの共同研究を展開し、複合アニオン化合物の新機能探索・マルチ機能性開拓を行い、

複合アニオン型光触媒による環境浄化、紫外線・赤外線遮蔽による快適空間・省エネルギーの実現等、フォトンエンジニアリングを立脚した学術創出を目指したい。

■ メンバー紹介&グループ研究内容概略 (A01)

北陸先端科学技術大学院大学・情報科学系・前園グループ

School of Information Science, JAIST,
Maezono group

領域所属 研究項目A01 計画研究
研究分担者 本郷 研太 助 教

専門分野・キーワード 計算材料科学 / マテリアルズ・インフォマティクス /
ハイパフォーマンス・コンピューティング

SPECIALIZED FIELD・KEYWORD

Computational Materials Science / Materials Informatics / High Performance Computing



Assist. Prof.
K. HONGO

▶ 大規模並列第一原理電子状態計算による系統的物質合成指針の確立

1. 大型並列計算機を利用したハイスループット
第一原理計算
金属・アニオンの置換・固溶・欠陥などの組成制御
異種複合アニオンの配列制御
層状化合物の積層可能性
第一原理フォノン解析による結晶構造安定性予測
2. データ駆動による系統的合成指針の確立
データ科学・統計科学による知識獲得
3. 班内外の共同研究事業
データ科学・統計科学による知識獲得
4. 第一原理計算の技術移転推進



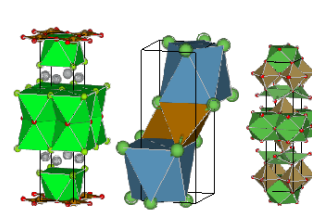
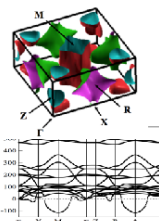
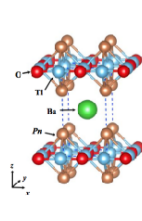
CRAY XC30
(5760-core)



JAISTスパコン群
SGI Altix UV3000
(1536-core)



Fujitsu CX250
(2160-core)



大規模第一原理計算の実例

対象となる複合アニオン系

図 現在利用可能な本学所有のスパコン設備。CRAY XC30 は今年度中に、CRAY XC40 (19656-core) にリプレイスされる予定です。他にも、国内外の外部機関所有の、京コンピュータや米国国立研究所のスパコン群 (Titan/Mira 等) を利用しています。

新学術への情熱・メッセージ

多体電子論を専門基盤として、第一原理計算研究を展開してきた強みに、新たにインフォマティクスを加え、系統的な物質

合成指針の確立に挑戦します。また共同研究を通じた第一原理計算の技術移転に取り組むと考えております。

■ メンバー紹介&グループ研究内容概略 (A01)

京都大学 工学研究科 陰山研究室

Graduate School of Engineering, Kyoto University
H.KAGEYAMA Lab

領域所属 研究項目A01 計画研究
研究分担者 陰山 洋 教授

専門分野・キーワード 固体化学 / 低温トポケミカル合成 / 高圧合成 / 遷移金属複合アニオン系

SPECIALIZED FIELD・KEYWORD

Solid State Chemistry / Low-temperature Topochemical Synthesis / High-pressure Synthesis / Transition-metal Mixed Anion Systems



Prof. H. KAGEYAMA

▶ アニオンを主役とした新規合成法の開発と機能開拓

遷移金属化合物において、遷移金属の局所配位構造とそれらが連なった様々な格子が、諸物性の根源といえます。しかし、固体化学者にとり「配位環境と格子を自在な設計」は困難だと考えられてきました。我々は、ここ10年に渡り低温トポケミカル反応を中心にこの壁に挑戦した結果、ヒドリドの活性を利用した低温アニオン交換反応や高圧による固相の安定化というコンセプトで新規複合アニオン化合物の合成にも成功しました。本研究では、アニオンを主役にした物質合成を飛躍させるとともに、複合アニオン系でなければ決して生まれない機能発現を目指します。

1. 平面四配位をもつ鉄酸化物の合成と機能開発
2. ヒドリドを大量に含有するチタン酸バリウムの合成と機能開発
3. 酸水素化物中のヒドリドの活性を活かした低温アニオン交換反応
4. 層状酸二クタイトの新奇超伝導現象
5. 層状燐テルル化物における選択的重金属挿入反応

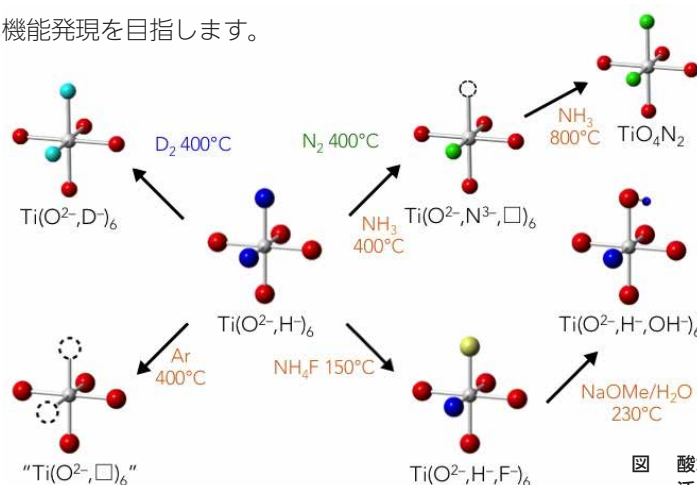


図 酸水素化物のヒドリドの高い反応性（交換活性）を活かした低温アニオン交換反応 (Labile Hydride Strategy)

新学術への情熱・メッセージ

複合アニオン化合物の発展には、「ものづくり」を大きく飛躍させる必要があるのは間違いありません。従来型の合成法には限界があるのは明らかです。本領域研究では様々な背景をもつ

研究領域 A01 の研究者と知恵を出し合い新しい合成法を開拓していきたいです。多重合成を初めとして色々な合成にチャレンジしていきたいと思っています。

■ メンバー紹介&グループ研究内容概略 (A01)

学習院大学 理学部化学科 稲熊研究室

Department of Chemistry, Gakushuin University
Y.INAGUMA Lab

領域所属 研究項目A01 計画研究
研究分担者 稲熊 宜之 教授
研究メンバー 森 大輔 助教

専門分野・キーワード 無機固体化学 / 機能性無機化合物 / 高压合成

SPECIALIZED FIELD・KEYWORD

Inorganic Solid State Chemistry /
Functional Inorganic Materials / High-pressure Synthesis



Prof. Y. INAGUMA



Assist. Prof.
D. MORI

▶ 複合アニオン化合物の合成、化学結合の理解および新機能の創出

固体化学の立場から複合アニオン化合物の合成、結晶構造、物性に関する研究を行っています。高压を用いたハードな手法からイオン交換反応等のソフトな手法に至るまで、さまざまな手法を駆使しながら新規化合物の合成をおこなひ、複合アニオン化合物の構成元素、結晶構造、化学結合およびイオン伝導性、電子伝導性、磁性、誘電性（極性、強誘電性）および発光等の物性の相関を明らかにしようとしています。

1. 高压を用いた新規複合アニオン化合物の合成と物性
2. イオン交換等による無機化合物への異種陰イオンの導入と機能性の付与
3. アニオンの複合化のための新しい合成手法の開発
4. 複合アニオン化合物におけるアニオン組成および配列の制御と機能開拓
5. 複合アニオン化合物の化学結合の理解

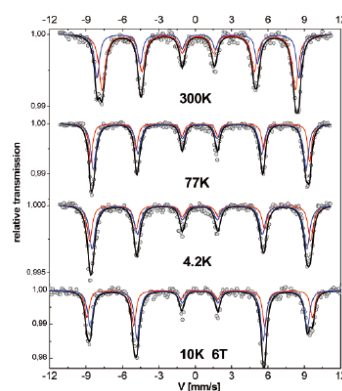
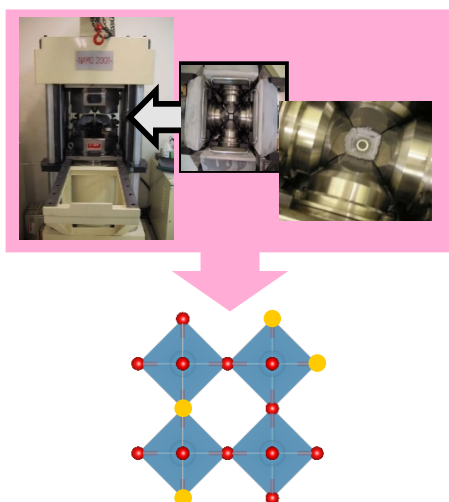


図 高压を用いた複合アニオン化合物の合成

新学術への情熱・メッセージ

これまで我々の研究の中心は酸化物であり、複合アニオン化合物はサブ的存在でした。新学術では複合アニオン化合物の新しい合成手法の開発に取組み、新規複合アニオン化合物の合成

と化学結合の理解、そして新機能の創出に寄与したいと考えています。内海から外海へと目指すように、複合アニオン化合物の世界へ、今漕ぎ出そう。

■ メンバー紹介&グループ研究内容概略 (A01)

北海道大学 大学院 工学研究院 構造無機化学研究室

Faculty of Engineering, Hokkaido University,

領域所属 研究項目A01 計画研究
研究分担者 鱒淵 友治 准教授

専門分野・キーワード 酸窒化物 / 結晶構造 / アンモニア窒化反応

SPECIALIZED FIELD・KEYWORD

Oxynitrides / Crystal Structure / Ammonolysis Reaction



Assoc. Prof.
Y. MASUBUCHI

▶ アンモニア窒化反応を用いた新規機能性酸窒化物の合成と機能

無機固体のナノ構造が示す物性を有用な機能性として利用することを目指して、機能性無機材料の創製と用途開発に関する研究を行っています。特に新しい物質群として注目されている酸窒化物と窒化物の両陰イオンを含む酸窒化物無機材料を開発しています。主にアンモニアガスと固体酸窒化物との反応（アンモニア窒化反応）を用いた物質創製と機能解明のための結晶構造評価を行い、無機材料として必須の焼結や微構造制御まで実施しています。最近は新しい

酸窒化物超伝導体、非希土類窒化物磁性体、非鉛系誘電体酸窒化物、酸窒化物光学材料などの研究を進めています。

1. 新規機能性酸窒化物のアンモニア窒化反応による合成
2. 酸窒化物誘電体や蛍光体などの構造解析
3. 液相を用いた新規酸窒化物合成手法の開発
4. 非鉛系酸窒化物誘電体などの機能化プロセスの開発

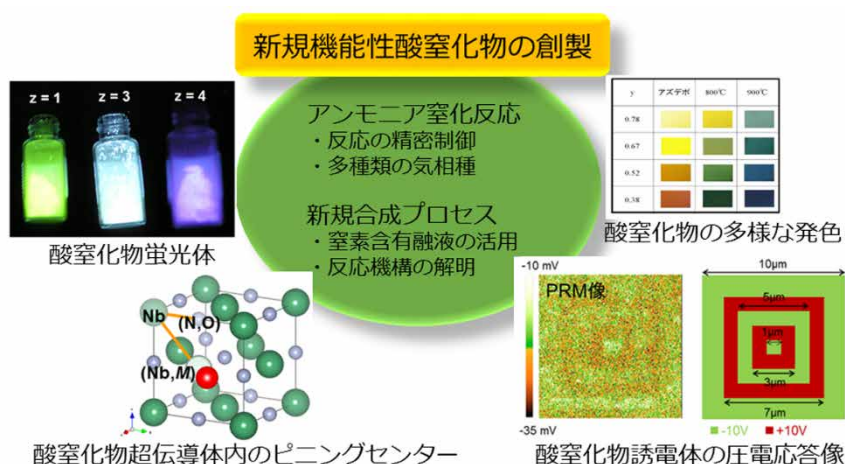


図 アンモニア窒化反応により様々な機能性酸窒化物を合成してきました。新しい合成プロセスも組み合わせて新規酸窒化物の創製を目指します。

新学術への情熱・メッセージ

アンモニアガスを用いた窒化反応を制御することで誘電体や蛍光体、超伝導体などの様々な機能性酸窒化物を合成してきました。新学術領域研究では、アンモニア窒化反応の可能性を更

に広げるとともに、融液などを活用して新しい窒化反応プロセスなどを開発し新しい機能性酸窒化物を創製します。

■ メンバー紹介&グループ研究内容概略 (A02)

九州大学 工学研究院 応用化学部門

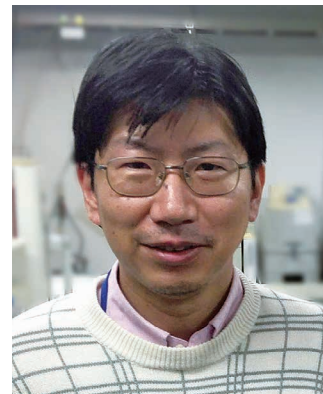
Department of Applied Chemistry, Kyushu University
Hayashi Lab

領域所属 研究項目A02 計画研究
研究代表者 林 克郎 教授

専門分野・キーワード 無機物理化学 / セラミックス材料 / 電気化学材料 / 汎用元素

SPECIALIZED FIELD・KEYWORD

Inorganic Physical Chemistry / Ceramic Materials / Electrochemical Materials / Abundant Elements



Prof. K. HAYASHI

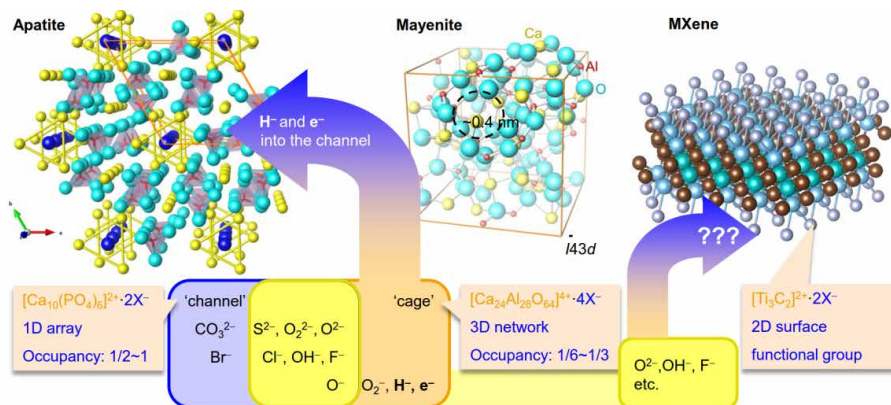
▶ 汎用元素でこそ可能となる新機能の開拓

多機能性セラミックス材料 $12\text{CaO} \cdot 7\text{Al}_2\text{O}_3$ (C12A7) では、その籠構造中に種々のアニオンが包接されることで (例えば H^- イオン)、光誘起永続的電子伝導性が得られるなど、希少元素 = 機能性といった固定観念を振り払い、ありふれた元素でこそ可能となる物質や応用に興味を持っています。蓄電デバイスへの展開を目指して、特に Na 系に着目して固体電解質材料、成形技術、空気電池等の革新電池への展開のための研究を行っています。固体化学的アプローチで得られる複合アニオン化合物の他、近年出現した二次元シート状化合物 MXene の研究も行っています。この材料は、前期遷移金属炭化物もしくは窒化物組成をもち、電気化学用途に有望であるだけでなく、主に無機アニオンからな

る表面官能基が機能性の鍵である等、複合アニオンの発展分野として興味深いと考えています。

1. アニオン包接化合物、C12A7 系、エレクトライド
2. 微粒子材料：微構造炭素材料、磁性粒子
3. Na 系固体電解質および Na 系蓄電デバイス
4. MXene 系材料：表面のアニオン制御、ドーピングによる機能付与
5. 酸化物系材料の固相還元法による機能性付与と応用、評価法

図 ホスト材料内や表面でのアニオンの制御：マイエナイト (C12A7)、アパタイト、MXene での関連性



新学術への情熱・メッセージ

実験的・理論的解析を担当する研究領域 A02 の中で、高度解析に加え「汎用」解析のインテグレーションで得られる知見の

獲得にも注力いたします。

■ メンバー紹介&グループ研究内容概略 (A02)

物質・材料研究機構 先端材料解析研究拠点 電子顕微鏡グループ

National Institute for Materials Science (NIMS), Research Center for Advanced Measurement and Characterization, Electron Microscopy Group

領域所属 研究項目A02 計画研究
研究分担者 木本 浩司 副拠点長
研究メンバー 山下 俊介 ポストドク

専門分野・キーワード 先端電子顕微鏡 / ナノ材料 / 電子エネルギー損失分光法

SPECIALIZED FIELD・KEYWORD

Advanced Transmission Electron Microscopy / Nano-structured Materials / Electron Energy-loss Spectroscopy



Dr. K. KIMOTO

▶ 先端的な電子顕微鏡法の開発研究と複合アニオン系材料への展開

先端的な電子顕微鏡手法の開発と、各種先端材料への評価を行っています。球面収差補正装置を用いた走査透過電子顕微鏡法 (STEM) により、試料損傷を抑えて局所的な結晶構造を解析し、モノクロメーターを用いた電子エネルギー損失分光法 (EELS) により化学結合状態の解析を行っています。複合アニオン系材料や2次元物質系の先端的な結晶構造解析を進めています。

1. 低加速高分解能透過電子顕微鏡法の開発
2. 定量的な環状暗視野像の観察と結晶構造解析
3. 高エネルギー分解能電子エネルギー損失分光法の開発と材料展開
4. グラフェン・酸化物ナノシート等への展開
5. Li 二次電池材料・色素増感太陽電池材料等への展開
6. 遷移金属ドーブ MXene の構造解析

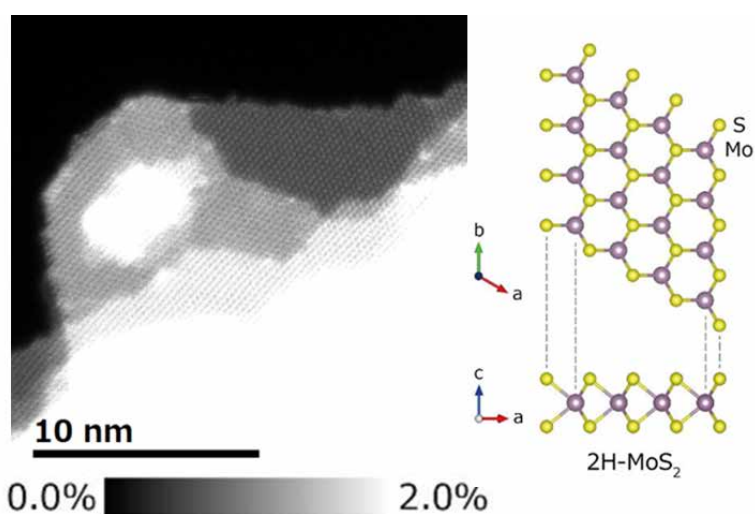


図 MoS₂ の低加速高分解能 STEM 観察
試料温度 600℃で観察。シミュレーションと定量的に比較することで、2H 構造の MoS₂ であることを確認しました。

新学術への情熱・メッセージ

先端電子顕微鏡を使って先端材料の微細構造に関する決定的な知見を得られるようにしたいと思います。特にドーパントの

直接観察や、窒素 / 酸素の識別、水素の分析などにチャレンジしたいと思っています。

■ メンバー紹介&グループ研究内容概略（A02）

大阪市立大学 複合先端研究機構

OCARINA, Osaka City University
T. Yoshida Lab

領域所属 研究項目A02 計画研究
研究分担者 吉田 朋子 教授

専門分野・キーワード 光触媒 / 触媒化学 / X線吸収分光

SPECIALIZED FIELD・KEYWORD
Photocatalyst / Catalyst Chemistry / X-ray Absorption Spectroscopy



Prof. T. YOSHIDA

▶ 太陽光応答型光触媒の創製と放射光・電子分光融合分析の構築

様々なエネルギーの光と固体材料相互作用を利用した機能性材料に関する研究を行っています。最近では特に人工光合成（二酸化炭素の還元反応や水の分解反応）を進行させる太陽光応答型不均一系光触媒の開発にかかわる研究に重点を置いています。光触媒の理解と高機能・高性能化のためには、光触媒の物性を詳細に分析評価し、その知見に基づいて原子レベルで合理的に設計することが重要な鍵となっています。これまで放射光分光（XAFS）を主軸とした触媒材料の局所構造・電子状態解析を行ってきましたが、最近では、電子分光（TEM, EELS）と融合させた分析手法の構築、更には各種 in-situ 分光技術を組み合わせた反応環境中の触媒材料観察へと研究を展開しています。

1. 人工光合成を可能とする固体光触媒の開発
2. アニオン種添加による光触媒の可視光応答化
3. 複合アニオン光触媒の合成とアニオン種の局所構造・電子状態解析
4. 複合アニオン触媒動作時の operando 計測システムの構築
5. 機能発現元素を対象とした放射光・電子分光融合分析

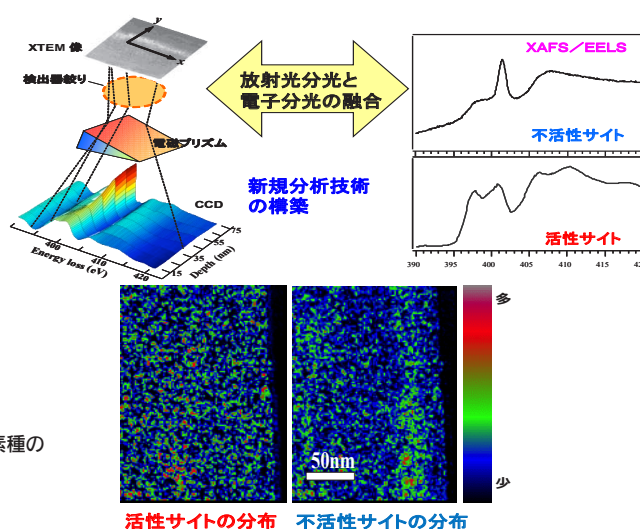


図 XAFS/EELS による触媒活性窒素種及び不活性窒素種の空間分布マッピング

新学術への情熱・メッセージ

固体光触媒への複合アニオン導入によって、可視光照射下での二酸化炭素還元反応を一段階で進行させる究極の光触媒を創製したいです。放射光分光と電子分光を融合した定量的高空間

分解化学状態分析を実現し、様々な機能性材料に応用できる汎用性の高い分析法として構築したいです。

■ メンバー紹介 & グループ研究内容概略 (A02)

京都大学大学院 理学研究科 化学専攻 分子構造化学研究室

Molecular Chemical Physics Laboratory,
Division of Chemistry, Graduate School of Science, Kyoto University

領域所属 研究項目A02 計画研究
研究分担者 野田 泰斗 助 教

専門分野・キーワード 固体核磁気共鳴 / クラスター科学 / 固体物性化学

SPECIALIZED FIELD・KEYWORD

Solid-State Nuclear Magnetic Resonance / Cluster Science / Solid-State Chemistry



Assist. Prof.
Y. NODA

▶ 固体核磁気共鳴法の手法開発とその応用研究

固体核磁気共鳴 (NMR) の手法の開発と、その応用研究を主に行っています。手法開発では、実材料の開発に貢献できることを強く意識して研究しています。実際にデバイスが作動できる状態や触媒が機能している環境下で高分解能に測定を行えることが重要と考えています。応用研究では、他の解析手法では困難な系や、固体 NMR ならではの情報を引き出すことを選んで行っています。

1. 大気非暴露に試料調製から測定まで可能とする固体高分解能 NMR 法の開発
2. 雰囲気制御した固体高分解能 NMR 法の開発
3. アニオン配位状態、特にシス配置・トランス配置の判別法の開発
4. H⁻イオン伝導機構の解析

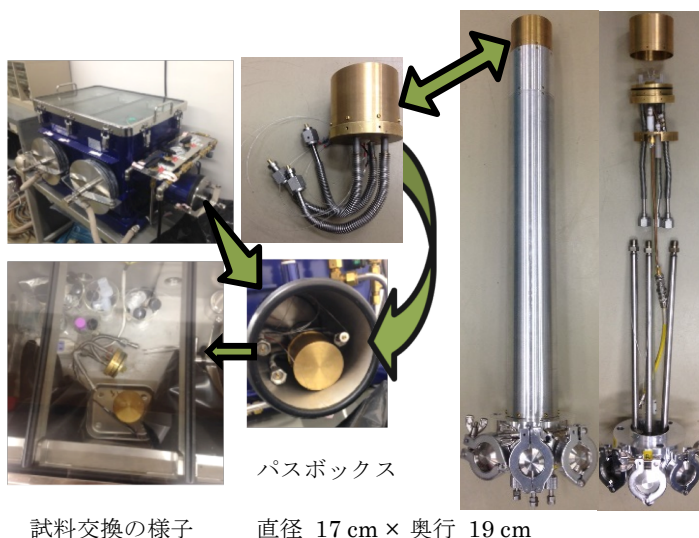


図 大気非暴露を保ち試料調製から測定まで可能にする固体高分解能 NMR プローブ。大気中の水分による水和を排除し、複合アニオン化合物を正確に測定できる。

新学術への情熱・メッセージ

NMR は原子核のスピンを観察するため、イオンの正負よりもスピンの数が測定の可否を握ります。また、結晶でもアモルファスでも解析可能です。開発してきている手法により、複合アニ

オン化合物を合成している状態変化や、X 線では区別がつかないアニオンの配位状態、機能発現機構の解明を行ってまいります。

■ メンバー紹介&グループ研究内容概略 (A02)

東京工業大学 八島研究室

Tokyo Institute of Technology
M. YASHIMA Lab

領域所属 研究項目A02 計画研究
研究分担者 八島 正知 教授

専門分野・キーワード 結晶構造 / 構造物性 / 中性子および放射光 X 線回折 / イオン伝導体 / 誘電体 / セラミック材料科学 / 触媒 / 不規則性

SPECIALIZED FIELD・KEYWORD

Crystal Structure / Structure-Property Correlation / Neutron and Synchrotron X-ray Diffraction / Ionic Conductor / Dielectrics / Materials Science of Ceramics / Catalysts / Disorder



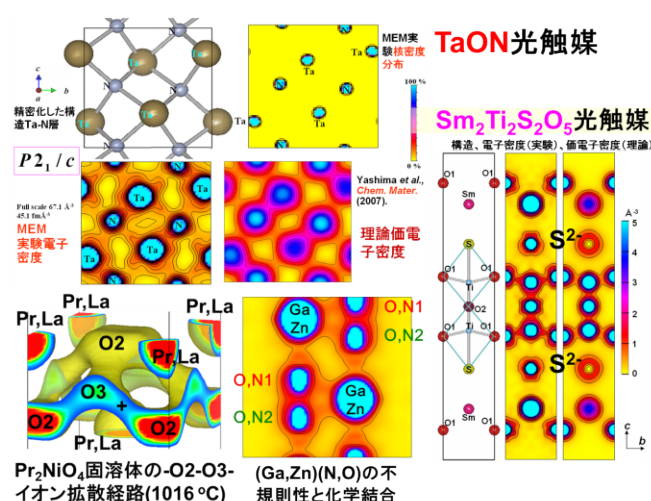
Prof. M. YASHIMA

▶ 複合アニオン化合物の結晶構造解析と構造物性

エネルギー・環境・エレクトロニクス・医療分野の新しいセラミック材料の結晶構造解析、合成、新物質探索及び物性評価を行っている。特に、X 線・放射光 X 線・中性子回折を用いた精密構造解析により様々な新しい知見を見出した。さらに、高温下での中性子散乱長密度解析によりイオン拡散経路と不規則性を可視化し、放射光 X 線回折データの電子密度解析により化学結合を可視化するなど、これまでの構造解析とは違ったアプローチを行っている。例えば複数種のアニオンと陽イオンの間の化学結合（共有結合、イオン結合）を可視化している。可視光応答型光触媒 TaON の精密結晶構造解析により、原子の中心付近に局在した核（中性子散乱長）密度分布、MEM および DFT 電子密度分布により Ta-N 間の共有結合がわかった。Sm₂Ti₂S₂O_{4.9} の MEM 電子密度分布図から Ti-O は共有結合が強いに対し、Ti-S はイオン結合が強いことを見出した。また、中性子回折により複数種のアニオンを判別して占有率、原子位置、熱振動状態を解析している。さらに、中性子回折、放射光 X 線回折、結合原子価法と第一原理計算により、構造不規則性とイオン拡散経路を研究している。Ga₂N-ZnO 光触媒における構造不規則性と化学結合を明らかにした。

図 可視光応答光触媒 TaON、Ga₂N-ZnO と Sm₂Ti₂S₂O_{4.9} の精密化した結晶構造、MEM 電子密度分布、構造不規則性、DFT 価電子密度分布、核密度分布。K₂NiF₄ 型 Pr₂NiO₄ 固溶体における酸化物イオン拡散経路（MEM 核密度分布）。

1. 可視光応答型光触媒能を示す複合アニオン化合物の構造解析と構造物性
2. 誘電性を示す複合アニオン化合物の構造解析と構造物性
3. 蛍光特性を示す複合アニオン化合物の構造解析と構造物性
4. イオン伝導体あるいは触媒活性を示す複合アニオン化合物の構造解析と構造物性と新物質探索。イオン伝導経路と構造不規則性の解析
5. 単結晶 X 線構造解析および粉末法による未知構造解析



新学術への情熱・メッセージ

電子・原子レベルの精密結晶構造解析で複合アニオン化合物の科学を開拓します。単結晶から多結晶やナノ結晶までどんな結晶でも構造解析します。高温での中性子および放射光 X 線回

折測定も可能であり、2016 年度末に単結晶 X 線回折装置も導入予定です。共同研究、大歓迎、お気軽にご相談ください。

■ メンバー紹介&グループ研究内容概略 (A02)

ファインセラミックスセンター ナノ構造研究

Nanostructures Research Laboratory,
Japan Fine Ceramics Center

領域所属 研究項目A02 計画研究
研究分担者 桑原 彰秀 主任研究員
研究メンバー 設楽 一希 研究員
西藤 哲史 研究員

専門分野・キーワード 第一原理計算 / 点欠陥 / 界面 / フォノン / 固体イオニクス

SPECIALIZED FIELD・KEYWORD

First Principles Calculation / Point Defect / Interface / Phonon / Solid State Ionics



Senior Researcher
A. KUWABARA

▶ 第一原理計算を用いたセラミック材料における欠陥構造解析

セラミックス材料は一般的に異種元素の固溶添加（ドーピング）と添加物の電荷を補償するために生成する点欠陥やキャリア電子（ホール）を由来として様々な機能を発現する。また表面や異相界面など粒内とは異なる配位環境もまた触媒における反応活性点となる。我々のグループでは点欠陥や界面のような結晶の周期構造が乱れた特異点がどのような原子配置を有しているのか第一原理計算を用いて解析し、その電子構造解析、エネルギー状態の解析を通じて物性発現メカニズムを明らかにしている。

1. 固体イオニクス材料における欠陥形成エネルギーとイオン拡散過程の解析
2. 半導体材料における点欠陥および伝導キャリアの熱平衡濃度評価
3. 格子動力学計算によるフォノン熱物性解析
4. 表面、粒界、異相界面の原子構造および電子構造
5. 新規誘電体材料の材料設計

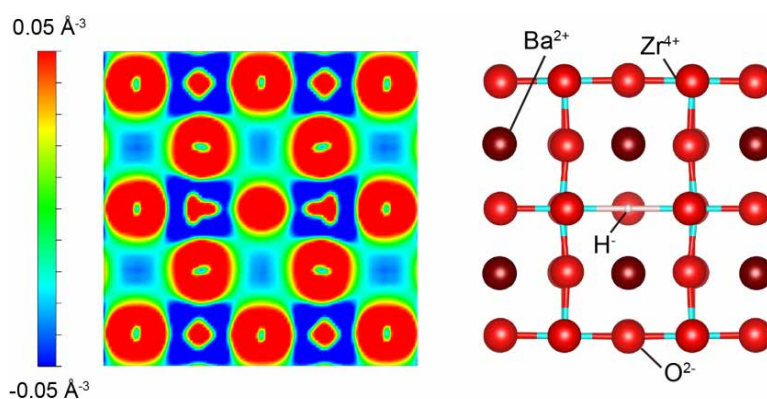


図 BaZrO₃における水素化物イオン欠陥 (H^+) 近傍の緩和構造と孤立原子状態との差電子密度分布

新学術への情熱・メッセージ

アニオンサイトへの異種元素の添加によって合成される複合アニオン化合物には、カチオンサイトだけを添加サイトとして考慮していた従来の材料設計指針の限界を打破する可能性が極めて高いと思われます。しかし、複数種のアニオンが結晶中にどのように存在するのか、また複合アニオン化合物における電

子構造や化学結合状態についてはまだ十分な知見が確立していません。我々が有する第一原理計算による解析技術を用いて複合アニオン化合物の機能発現機構を解明し、新たな学理の構築に貢献したいと思います。

■ メンバー紹介&グループ研究内容概略 (A02)

九州大学 中央分析センター

Center of Advanced Instrumental Analysis, Kyushu University

領域所属 研究項目A02 計画研究
研究分担者 稲田 幹 准教授

専門分野・キーワード 溶液化学に基づいた環境浄化材料開発 / 機能性セラミックス粒子の形態制御 / 吸着・光分解

SPECIALIZED FIELD・KEYWORD

Fabrication of Environmental Purification Materials Via Liquid Phase Reaction / Morphological Control of Functional Ceramics Particles / Adsorption-photodecomposition

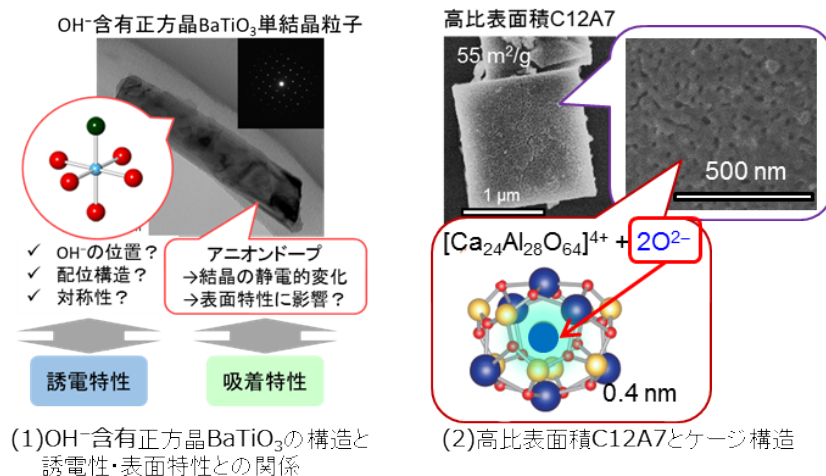


Assoc. Prof.
M. INADA

▶ 高比表面積材料の液相合成と表面特性評価

環境浄化、エネルギー、エレクトロニクス関連セラミックス粒子の液相合成に関し、高比表面積化などの形態制御と表面特性に着目して研究を行っています。反応場を制御した『液相合成』により、結晶内の原子の配列から粒子形態に至るまでの高次構造を制御し、XRD、SEM、TEM による表面・結晶構造解析、固体 NMR による配位構造解析や吸着測定による細孔構造解析に着目して『構造解析』を行っています。『構造』と、光触媒能や電気容量のような表面機能に関する『特性』との関係を明らかにし、得られた知見を合成にフィードバックして特性向上を図っています。

1. 単結晶 BaTiO₃ 水熱合成粒子に対するアニオン置換と構造解析
2. C12A7 への F⁻ 導入とドーピング量増加のための骨格構造制御
3. 酸化チタンへのアニオンドーピングによる表面特性変化と光触媒能との関係解明



新学術への情熱・メッセージ

これまで酸化物を中心としたセラミックス粒子開発を行ってきたが、新学術研究ではアニオンドーピングや置換が特に表面特性に及ぼす影響に着目して材料開発研究を行っていきたい。アニ

オンドーピングによって生じる結晶の静電的变化を、CO₂、水、トルエン、ピリジンなどの種々な吸着種を用いた吸着特性評価により調べ、特に光触媒特性と関連づけて性能向上を目指す。

■ メンバー紹介&グループ研究内容概略 (A02)

京都大学 大学院 工学研究科

Graduate School of Engineering, Kyoto University

領域所属 研究項目A02 計画研究
研究分担者 山本 隆文 助 教

専門分野・キーワード 高圧 / 構造解析 / 酸水素化物 / 酸窒化物 / カルコゲナイド / ニクタイト

SPECIALIZED FIELD・KEYWORD

High Pressure / Structural Analysis / Oxyhydride / Oxynitride / Chalcogenide / Pnictide



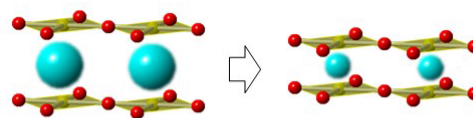
Assist. Prof.
T. YAMAMOTO

▶ 超高压下でのアニオンの振舞いと制御

超高压下でのアニオンの振舞いについて研究を行います。アニオンはイオン半径がカチオンに比べて大きく、圧力効果が大きいことが期待されます。そのことを利用して複合アニオン化合物の構造や物性を制御したいと考えています。特にダイヤモンドアンビルセルを用いたX線回折測定によって、複合アニオン化合物の高圧下での構造を明らかにします。また抵抗測定などを用いた研究を展開します。さらにアニオン種における圧縮率の違いを利用した新物質合成を行います。PDF 解析などを用いて、アニオン秩序による Correlated Disorder を明らかにする実験にも挑戦したい。

1. 酸水素化物の圧縮挙動
2. 酸水素化物の高圧下での物性
3. 高圧下におけるオキシニクタイトの超伝導
4. アニオンの圧縮率を利用した超高压合成
5. 層状化合物における圧力誘起構造相転移
6. アニオン秩序による Correlated Disorder の解析

アニオン秩序相における異方的な圧縮



アニオンの圧縮率の違いを使った構造制御

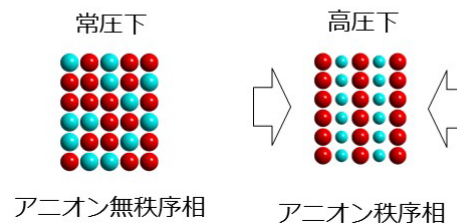


図 アニオン秩序相における異方的な圧縮とアニオンの圧縮率の違いを使った構造制御

新学術への情熱・メッセージ

合成・測定・機能と多岐にわたる計画研究の先生方と多くの共同研究を展開したい。その中から複合アニオン化合物ならではの新事実を見出し、アニオンの面白さを広く発信していきたい。

高圧下の中性子回折測定など新しい実験にも積極的にチャレンジしたい。

■ メンバー紹介&グループ研究内容概略 (A03)

東京工業大学 理学院

School of Science, Tokyo Institute of Technology

領域所属 研究項目A03 計画研究
研究代表者 前田 和彦 准教授

専門分野・キーワード 半導体光触媒 / 人工光合成 / 層状化合物 / ナノ材料

SPECIALIZED FIELD・KEYWORD

Semiconductor Photocatalyst / Artificial Photosynthesis / Layered Materials / Nanomaterials



Assoc. Prof.
K. MAEDA

▶ 半導体光触媒を中核とした人工光合成系の構築

石油や石炭に代表される化石資源、そして原子力に依存した我々の社会は、将来のエネルギー確保の観点から転換期を迎えています。我々は、無尽蔵な太陽光エネルギーを化学的に変換する“人工光合成系”を創製することを目指しています。また、まだよく分かっていない「半導体光触媒の化学」の分野に、理学の立場から新しい知見を加えていくことも重要な目的としています。

1. 太陽エネルギー変換を目的とした新しい半導体粉末光触媒の創製
2. 格子欠陥を制御した半導体光触媒の開発
3. 水の酸化還元を促進するナノ構造触媒の開発
4. 金属錯体 / 半導体融合材料を光触媒とした二酸化炭素の常温常圧固定化

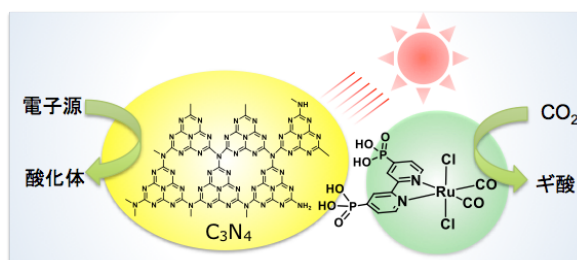
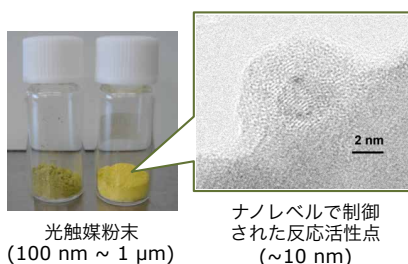
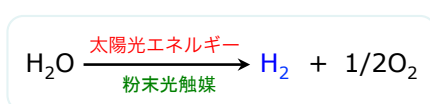


図 可視光で水を水素と酸素に直接分解する粉末半導体光触媒および金属錯体 / 半導体融合材料を光触媒とした二酸化炭素固定化

新学術への情熱・メッセージ

これまで一貫して取り組んできたエネルギー変換型半導体光触媒の研究で培った経験を生かし、複合アニオン系新物質の合

成から既知複合アニオン材料の光触媒機能創出まで幅広く手掛けていきます。

■ メンバー紹介&グループ研究内容概略 (A03)

京都大学 大学院 人間・環境学研究科

Kyoto University, Graduate School of Human and Environmental Studies

領域所属 研究項目A03 計画研究
研究分担者 内本 喜晴 教授

専門分野・キーワード 電気化学エネルギー変換 / 水電解 / 蓄電池 / オペランド計測

SPECIALIZED FIELD・KEYWORD

Electrochemical Energy Conversion / Water Electrolysis / Battery / Operando Analysis



Prof. Y. UCHIMOTO

▶ 新規複合アニオン材料の開発と高性能電気化学エネルギー変換デバイスの創製

これまで、電気化学に立脚して、主に放射光を用いた operando 解析手法の開発と、それを用いた蓄電池、燃料電池材料の開発を行ってきました。エネルギー・環境問題解決のためには「電気エネルギー」をいかに有効に使うことが出来るかが重要であり、「電気エネルギー」を蓄えることが出来る「蓄電池」、高効率で「電気エネルギー」を創ることが出来る「燃料電池」が問題解決に重要な役割を果たします。私たちの研究室では、使い勝手の良い電気エネルギーと貯蔵性の良い化学エネルギーの相互変換を行う「電気化学」を基盤として、これら将来の電気化学エネルギー

変換デバイスの開発を行い、エネルギー・環境問題解決に貢献したいと考えています。

1. 電気化学デバイスのオペランド解析を用いた反応機構解明
2. 先進的リチウムイオン二次電池の開発
3. 高エネルギー密度革新電池の開発
4. 固体高分子形燃料電池 (PEFC) 触媒の反応機構解明と高活性化
5. 固体酸化物形燃料電池 (SOFC) 触媒の反応機構解明と高活性化

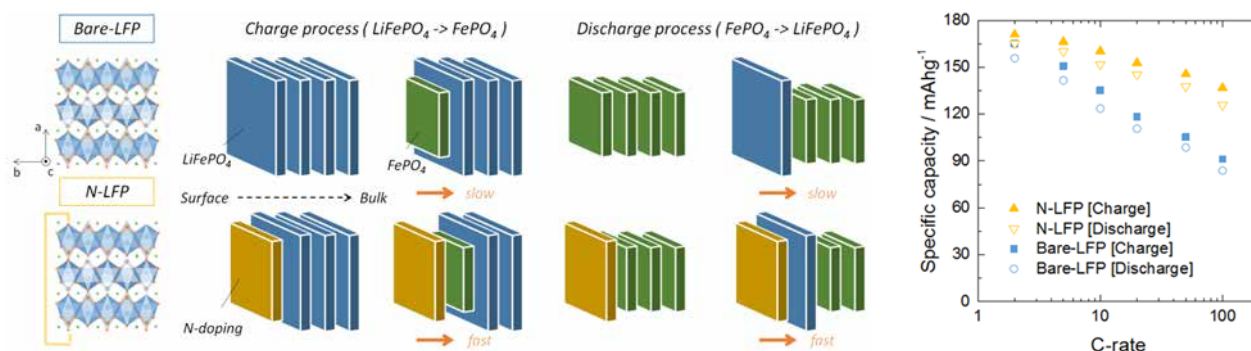


図 窒素ドーピング LiFePO₄ リチウムイオン二次電池正極活性物質のレート特性 (Bare-LFP: LiFePO₄, N-LFP: 窒素ドーピング LiFePO₄)

新学術への情熱・メッセージ

これまでの電気化学エネルギー変換デバイスの材料は、酸化物が主に用いられてきました。複合アニオン材料により、これまでに無い特性の発現が可能になります。(図に示したように、

例えばレート特性の向上が可能です) また、班内、班間の共同研究を積極的に進め、新たな電気化学分野を開拓していきます。既にいくつかの共同研究を開始しています。

■ メンバー紹介&グループ研究内容概略 (A03)

東京大学 大学院 理学系研究科 化学専攻 固体化学研究室

Department of Chemistry, The University of Tokyo
SOLID STATE CHEMISTRY Lab

領域所属 研究項目A03 計画研究
研究分担者 長谷川 哲也 教授
研究メンバー 廣瀬 靖 准教授
近松 彰 助教

専門分野・キーワード パルスレーザー蒸着 / エピタキシャル薄膜 / トポタクティック反応 / 電子機能

SPECIALIZED FIELD・KEYWORD

Pulsed Laser Deposition / Epitaxial Thin Film / Topotactic Reaction / Electronic Functionality



Prof. T. HASEGAWA

▶ 複合アニオン化合物の薄膜合成と新規電子機能探索

気相からの直接成長法やトポタクティック反応を用い、複合アニオン化合物の単結晶薄膜を合成しています。基板からエピタキシャル力を利用することで、準安定相が得られる、アニオンが配列するなどのメリットがあります。このエピタキシャル膜を舞台として、超伝導を含めた導電性や磁性、誘電性など電子機能の探索を目指しています。結晶だけでなくアモルファスの物性にも興味を持って研究を行っています。薄膜はまたデバイスの作製にも有利です。積層構造の作製や微細加工技術を駆使し、デバイスとしての機能発現にも取り組んでいます。

1. 複合アニオン化合物エピタキシャル薄膜の気相成長と物性探索
2. 複合アニオン化合物エピタキシャル薄膜のトポタクティック合成と物性探索
3. アモルファス複合アニオン化合物の合成と物性探索
4. デバイス構造の試作と機能発現
5. 界面を使った新規物性の創出
6. イオン伝導の第一原理シミュレーション

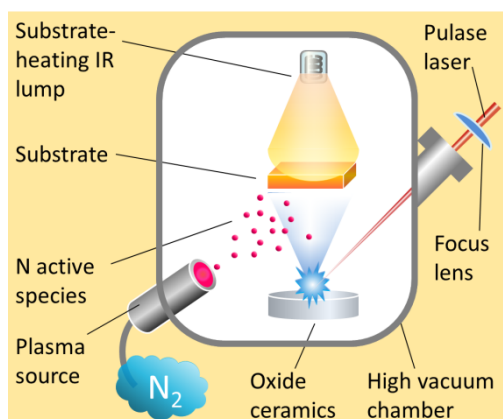


図 窒素プラズマ支援パルスレーザー蒸着法 酸窒化物エピタキシャル薄膜の合成に使用

新学術への情熱・メッセージ

これまで培ってきた薄膜合成を通して本新学術に広く貢献したい。物質化学の追及だけでなく、メカニズムの解明や電子状

態の評価など物理化学的なアプローチにもどんどんチャレンジしたい。

■ メンバー紹介&グループ研究内容概略 (A03)

東京大学 大学院 工学系研究科 化学システム工学専攻 山下・牛山研究室

Department of Chemical System Engineering
The University of Tokyo Yamashita-Ushiyama LAB

領域所属 研究項目A03 計画研究
研究分担者 牛山 浩 准教授

専門分野・キーワード 理論化学 / 触媒 / 表面化学 / 化学反応動力学

SPECIALIZED FIELD・KEYWORD
Theoretical Chemistry / Catalysis / Surface Science / Chemical Dynamics



Assoc. Prof.
H. USHIYAMA

▶ 理論化学手法による新規物質デザインと触媒反応機構の解明

我々のグループでは、理論化学アプローチによる化学反応ダイナミクスの解明と制御を目指して、ナノマテリアルにおける電子物性や触媒表面の化学反応、等に対して、計算量子化学、化学反応理論などの理論化学手法を発展させ、その学問体系を確立することに取り組んでいます。特に、

光触媒や自動車触媒等で用いられる材料の探索や材料設計に力を注いでいます。具体的には、以下のようなテーマで研究を進めています。こうした研究を通し、複合アニオン系化合物の一般的な性質を明らかにしていこうと考えています。

1. 光触媒材料としてのタンタル酸窒化物の構造と複合アニオン化合物特有の電子状態に関する理論的研究 (光触媒)
2. Na イオン電池正極材料 $\text{Na}_2\text{MPO}_4\text{F}$ (M= Mn, Fe, Co, Ni) におけるフッ素ドーピングの影響に関する理論的研究 (Na イオン電池)
3. 金属担持触媒における担体酸化物へのアニオンドーピングが触媒作用に及ぼす効果に関する理論的研究 (自動車触媒)

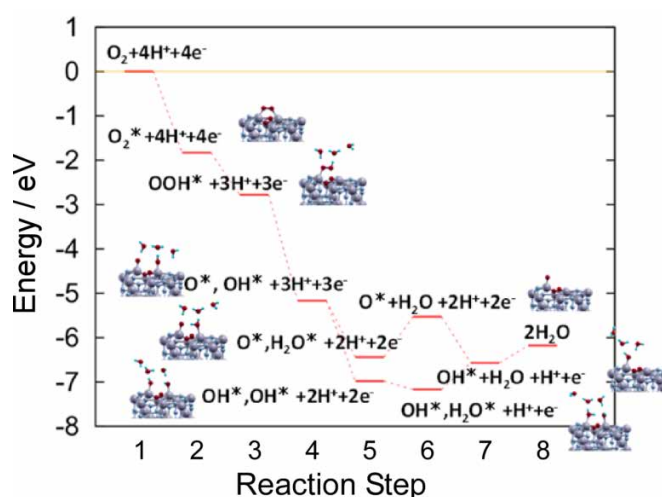


図 酸素ドーピングタンタル窒化物電極表面での酸素還元反応機構

新学術への情熱・メッセージ

本領域のターゲットとなる材料は、現状の理論・計算化学で取り扱うことが非常に難しい物質である。共同研究を通して、様々な材料にチャレンジし、理論・計算化学の幅を広げるよう

な研究を展開しつつ、実際のものづくりに貢献していきたいと考えている。

■ メンバー紹介&グループ研究内容概略 (A03)

京都大学 大学院 人間・環境学研究科 田部研究室

Graduate School of Human and Environmental Studies,
Kyoto University S.Tanabe Labs

領域所属 研究項目A03 計画研究
研究分担者 田部 勢津久 教授

専門分野・キーワード 光機能性材料 / 発光材料 / 固体電子構造制御による機能発現 /
蓄光型蛍光体 / LED 用蛍光体 / 長残光蛍光

SPECIALIZED FIELD・KEYWORD

Photonic Materials / Luminescent Materials /
Functionalization by Electronic Structure of Solids /
Storage Phosphors / LED Phosphors / Persistent Luminescence



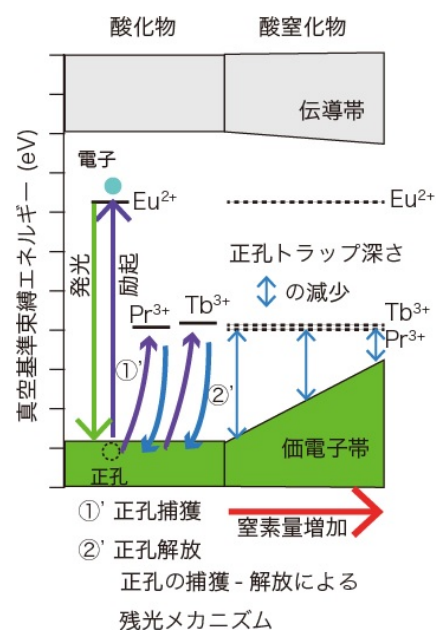
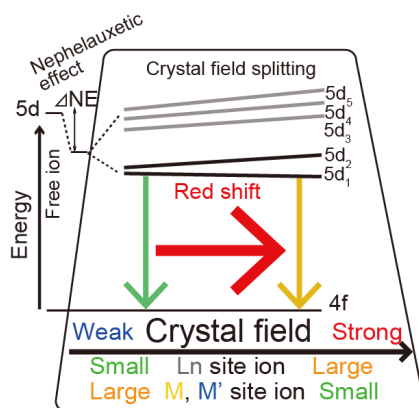
Prof. S. TANABE

▶ 固体電子構造・配位子場の制御による新規光機能発現

光機能性セラミックスの固体電子構造制御による機能性発現について研究を行っています。固相反応、パルスレーザ蒸着法、フローティングゾーン法、熔融法によるセラミッ

クスやガラス材料合成を行い、光ファイバ増幅器、量子切断波長変換材料、LED用蛍光体、蓄光型セラミックス蛍光体とその機能発現に関する研究を展開しています。

1. 複合アニオン結晶化ガラスの形態制御と光学活性イオンの光機能発現
2. 価電子帯制御によるホールトラップ機構新規光物性の機能開拓
3. 希土類添加酸窒化物の合成と電子構造制御による新規光物性発現
4. 遷移金属・希土類イオン賦活酸水素化物の光機能探索
5. 特異な配位構造を持つ希土類化合物の光学的機能の開拓



新学術への情熱・メッセージ

これまで培ってきた薄膜合成を通して本新学術に広く貢献したい。物質化学の追及だけでなく、メカニズムの解明や電子状

態の評価など物理化学的なアプローチにもどんどんチャレンジしたい。

■ メンバー紹介&グループ研究内容概略 (A03)

物質・材料研究機構 国際ナノアーキテクトニクス研究拠点 森 熱エネルギー変換材料グループ

MANA, National Institute for Materials Science (NIMS)
T. Mori Thermal Energy Materials Group

領域所属 研究項目A03 計画研究
研究分担者 森 孝雄 MANA 主任研究者
研究メンバー Anastasiia Prytuliak ポスドク研究員

専門分野・キーワード 固体物性 / 無機材料科学 / 熱電材料 / 磁性

SPECIALIZED FIELD・KEYWORD

Solid State Physics / Inorganic Materials Science / Thermoelectric Materials / Magnetism



MANA PI
T. MORI

▶ 複合アニオン化合物の熱電・熱物性の評価・解析・開発

広範囲実用化を目指して、熱電材料の高性能化原理と新規材料の開発について研究を行っています。例えば、ホウ素系ネットワーク物質において少量の炭素や窒素原子の導入によって、それらが架橋サイトとして作用し、新規なクラスター配列の複合アニオン化合物を形成したために、セレンディピティーとして、結果的に劇的な物性の変化が得られ、今までp型しか存在しないと考えられていた熱電化合物群に世界で初めてのn型を見出した。その他、複合アニオン系のホウケイ化物やホウ硫化物などにおいて、熱電的性質の有望な化合物を見出した。本領域での連携を通して、上記の、混合アニオンに由来する架橋サイトによるネットワー

ク構造の制御指針や、構造由来物性の解明の、より高度なマテリアル・デザインのレベルでの研究展開を図る。また、他グループで合成された混合アニオン化合物の熱電特性の評価、物性解明による合成へのフィードバックを担う。

1. B、C、N、Sなどを含む多元系複合アニオン化合物の設計創製、物性解明
2. 複合アニオン化合物の輸送特性（電気伝導、熱電）・熱伝導に関する基礎学理構築
3. 実用化に資する複合アニオン熱電材料の開発

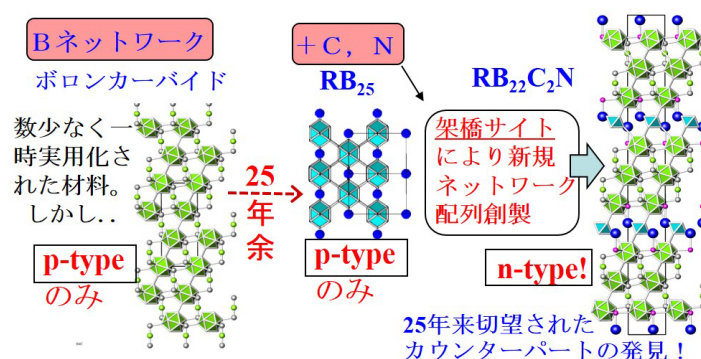


図 複合アニオンによる新規熱電性能発見の例

新学術への情熱・メッセージ

ゼーバック効果が発見されてから2世紀、現在は熱電発電の初めての広範囲実用化を目指して世界的に激しい競争が行われている。複合アニオンの科学は、本分野のこれまでにない展開

につながる可能性を有しており、ぜひ本領域の新しい仲間と共に世界に先駆けて実現したい。

■ メンバー紹介&グループ研究内容概略 (A03)

東京工業大学 元素戦略研究センター 松石研究室

MCES, Tokyo Institute of Technology
S. Matsuishi Lab

領域所属 研究項目A03 計画研究
研究分担者 松石 聡 准教授

専門分野・キーワード 無機固体化学 / 鉄系超伝導体 / 酸水素化物 / 電子伝導性酸化物

SPECIALIZED FIELD・KEYWORD

Solid State Inorganic Chemistry / Iron-based Superconductor / Oxyhydride / Electro-conductive Oxide



Assoc. Prof.
S. MATSUISHI

▶ 水素化物イオン置換による複合アニオン化合物の物性制御

最もありふれた元素である水素は、+1 から -1 の価数を取ることができ、多くの元素と様々な化合物を作ります。酸化物などのイオン性固体中では、水素はいつもカチオン H^+ として存在すると考えがちですが、電気陰性度が小さい元素との化合物では水素化物イオン H^- になることもできます。近年、 H^- と酸化物イオン O^{2-} の両方を含む酸水素化合物が合成され、その性質が注目されています。これまでは主に超高压合成法を用いて H^- を含む酸水素化合物および複合アニオン化合物を合成してきました。 O^{2-} を H^- で置換すると、(1) 形式電荷 -2 の O^{2-} を形式電荷 -1 の H^- で置換することによる電子ドーピング、(2) 金属元素の d 軌道と水素 1s 軌道が π 結合をつくらないことによる結合の次元性制御、(3) 金属カチオンとの共置換による新物質の形成など様々な効果があります。これらの効果を生かすことで、酸（水素）化物に新しい物性を付与することを狙っています。

1. 新しい超伝導母物質の探索
2. 水素化物置換による磁気相互作用の制御
3. ペロブスカイト型酸水素化物誘電体の探索
4. 希土類・遷移金属賦活酸水素化物蛍光体の探索

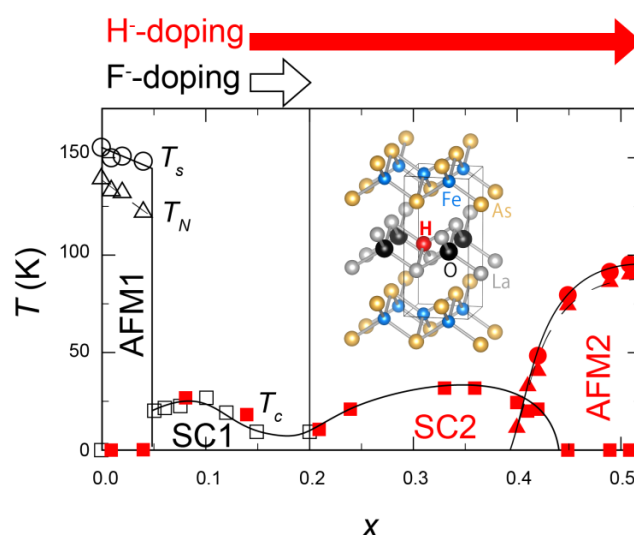


図 水素アニオン置換による高濃度電子ドーピングを用いた鉄系超伝導母物質 $LaFeAsO_{1-x}H_x$ の電子物性制御。従来のフッ素置換 ($LaFeAsO_{1-x}F_x$) では Fe 一個当たり 0.2 個程度の電子ドーピングが限界でしたが、水素置換 ($LaFeAsO_{1-x}H_x$) により 0.5 個を超える高濃度のドーピングが可能になりました。

新学術への情熱・メッセージ

複合アニオン化合物のことなら、電子状態計算を援用した物質設計から合成、評価までカバーします。高压装置を使って組

成をうまくコントロールしながら合成することで、複合アニオン化合物の真の性質を引き出していきます。

■ 連携研究者



研究項目 A01

桂 ゆかり

東大院新領域 助教
無機材料化学

多元系化合物の設計と合成

研究項目 A01

小林 亮

東北大多元研 助教
無機材料科学

水溶液プロセスを基盤とした
複合アニオン化合物の合成と創製



研究項目 A01

朝倉 裕介

東北大多元研 助教
無機材料化学

環境応答機能材料の創製

研究項目 A01

前園 涼

北陸先端大学 准教授
計算材料科学

計算科学を用いた物質設計



研究項目 A02

吉田 寿雄

京都大学人間環境学 教授
触媒化学

X線吸収分光

研究項目 A02

熊谷 悠

東工大元素戦略センター 講師
計算材料科学

分光シミュレーション





研究項目 A02

藤井 孝太郎

東工大・理学院・化学系 助教
材料科学

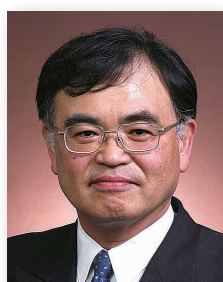
結晶構造解析

研究項目 A02

丹羽 栄貴

東工大・理学院・化学系 特任助教
材料科学

結晶構造解析



研究項目 A03

石原 達己

九大院工 教授
無機電気化学

酸素イオン伝導能と
触媒作用の開拓

研究項目 A03

阿部 竜

京大工 教授
光電気化学

光電極の開発



研究項目 A03

廣瀬 靖

東大院理 准教授
固体化学

薄膜調製、電子機能探索

研究項目 A03

近松 彰

東大院理 助教
固体化学

薄膜調製、電子機能探索



研究項目 A03

上田 純平

京都大学 助教
無機材料化学

光電物性探索

第一回公開シンポジウム（キックオフミーティング）

新学術領域研究（平成 28 ～ 32 年度）

第一回公開シンポジウム（キックオフミーティング）

複合アニオン化合物の創製と新機能

日時：2016 年 8 月 29 日（月）

会場：京都大学桂キャンパス・ローム記念館（大ホール）



12:00 – 13:00	受付
13:00 – 13:05	はじめに
13:05 – 13:10	福井 賢一（学術調査官：大阪大学基礎工学研究科） 「複合アニオン新学術領域への期待」
13:10 – 13:50	陰山 洋（領域代表：京都大学工学研究科） 「複合アニオン新学術領域研究の概要」
13:50 – 14:30	荻野 拓（研究領域 A01 代表：産業技術総合研究所） 「複合アニオン化合物の合成」
14:30 – 15:10	林 克郎（研究領域 A02 代表：九州大学工学研究院） 「複合アニオン化合物の解析」 — 休憩 —
15:25 – 16:05	前田 和彦（研究領域 A03 代表：東京工業大学理工研究科） 「複合アニオン化合物の機能」
16:05 – 16:30	八島 正知（総括班：東京工業大学理工研究科） 「国際活動支援について」
16:30 – 16:55	垣花 真人（総括班：東北大学多元物質科学研究所） 「連携の活性化のために」
16:55 – 17:35	吉川 信一（評価委員：北海道大学工学研究院） 「複合アニオン化合物研究の過去、現在、未来」
17:35 – 17:40	上田 寛（評価委員：豊田理化学研究所） 「複合アニオン新学術領域の将来を見据えて」
17:40 – 17:50	終わりに

お問い合わせ：領域事務担当 林 克郎（九州大学工学研究院）
電話：092-802-2859
電子メール：k.hayashi@cstf.kyushu-u.ac.jp

新学術領域研究「複合アニオン化合物の創製と新機能」の第一回公開シンポジウム（キックオフミーティング）が、2016年8月29日（月）13:00～17:50の日程で、京都大学桂キャンパス・ローム記念館（大ホール）で開催された。

プログラムは左記に参考。

シンポジウムには、台風第10号直撃の元、41名の参加

者が参集した。計画班の研究者や、学術調査官や評価委員の先生方や関係者だけでなく、「複合アニオン」という新規概念に興味のある研究者が集まって、活発に議論など行われて、悪天候に関わらず、キックオフとして盛況なシンポジウムであった。新学術領域に異分野から研究者が集結しただけに、最初は初対面の人も多く、名刺交換など緊張している雰囲気だったが、シンポジウムが進むにつれて、打ち解けて活気のある実のある交流が行われた。



各講演の概要に関して以下に記す。

（敬称略）

陰山 洋（領域代表：京都大学工学研究科）

複合アニオン新学術領域研究の概要を話した。

複合アニオンのイントロ、従来の配位で考えた化学・材料を大きく超える可能性を話し、3班の概要を紹介した。領域HPが本日から<http://mixed-anion.jp>で公開、また、連携に関して、新学術領域の果たすべき重要な責務を伝え、積極的な連携活動を奨励した。

詳細な運営に関して、次が紹介された：運営委員を設置、全体スケジュールのオーバービュー（国際シンポジウム、トピカル会議、学会活動）、若手育成（班内・班間留学、若手育成スクール、若手ポスドクなど）、国際活動支援班（国際ネットワーク形成）、公募研究の詳細の紹介、拠点化による共用促進（総括班で2装置購入、そのほか）、見える化の促進（オープンキャンパス、高校生研修、アウトリーチ活動、データベース化）など。

福井 賢一（学術調査官：大阪大学基礎工学研究科）

複合アニオン新学術領域への期待を話した。材料・化学の新しい学問を切り拓いてほしい旨をお伝えになった。

■ 領域ニュース

荻野 拓（研究領域 A01 代表：産業技術総合研究所）

研究領域 A01 が担う役割：複合アニオン化合物の物質設計と合成を主に担うこと。構成メンバーの紹介、また、研究領域 A01 代表のこれまでの複合アニオン化合物の新規な合成や結晶育成に関する研究の紹介があった。

林 克郎（研究領域 A02 代表：九州大学工学研究院）

研究領域 A02 が担う役割：複合アニオン化合物の解析を主に担うこと。構成メンバーの紹介、また、研究領域 A02 代表のこれまでの環境・エネルギー分野やエレクトロニクス分野におけるセラミックス材料の研究開発の紹介があった。

前田 和彦（研究領域 A03 代表：東京工業大学理工研究科）

研究領域 A03 が担う役割：複合アニオン化合物の機能の発掘と開発を主に担うこと。構成メンバーの研究内容の詳細

な紹介、また、研究領域 A03 代表のこれまでの水を分解する光触媒や二酸化炭素固定化のための光触媒に関する研究開発の紹介があった。

八島 正知（国際活動）

国際共同研究に関する取り組みに関して講演した。複合アニオンという新規な学術領域において、国際的な研究コミュニティをリード、存在感を上げるための具体的な方策を講演した。

レクチャーツアーに加えて、若手の海外派遣、海外の若手研究者の受け入れなどに関する新学術領域内の施策への積極的な応募を呼び掛けた。

垣花 真人（連携活動）

異分野連携は時間がかかる難しいことなので、工夫が必要であることを伝えた。自分の研究を知ってもらう努力、他



会場の様子



を知ろうとする努力、手の内をオープンにすること、意見交換会・懇親会の積極的な利用の重要性などを話した。

吉川 信一

〔評価委員：「複合アニオン化合物研究の過去、現在、未来」〕

酸窒化物などの創製や物性解明・開発のこれまでの研究開拓の歴史をご講演された。

2017年にWileyで出版予定の、複合アニオンの総合的な学問的な知見を集めたHandbook of Solid State Chemistry (Wiley) のご紹介もあった。

複合アニオン領域が新規な材料科学技術を切り拓くことへの期待を話された。

上田 寛

〔評価委員：「複合アニオン新学術領域の将来を見据えて」〕

複合アニオン化合物の設計的な創製に関して。有機材料に

比べる難しさと具体例を挙げながら合成の工夫に関してご講演された。難しいことであるが、領域内で築くべき真に実のある連携をとおして、挑戦的な材料科学技術課題の解決につなげることへの期待を話された。

シンポジウムの後に、懇親会が開催されて（各自負担）、主に、異分野から参集した計画班研究者のお互いの顔合わせや詳細な自己紹介が行われた。

2日目は、全体での綿密な議論、複合アニオン新学術領域を盛り上げて発展させるための作戦会議が行われた。また、その後、各計画班に分かれて、計画班各研究者のそれぞれの学術的な詳細な内容の講演などが行われて、今後への具体的な連携可能性が活発に議論された。実際に、本活動と議論を通して、有益な新しい共同研究が複数スタートした模様である。



（文責：A03 NIMS, 森 孝雄；写真提供：A02 京都大学 野田 泰斗）

トピカル会議

平成 28 年 10 月 24 日、産業技術総合研究所つくば中央にて、本新学術領域研究の第一回トピカル会議が開催されました。今回のトピカル会議は「新物質合成」を副題として、A 01（合成）から 3 件、A 02（解析）と A 03（機能）から 1 件ずつ、そして 1 件の招待講演の計 6 件の講演がありました。領域内外から約 45 名の参加者があり、そのうち学生は 15 名の参加がありました。領域代表である陰山先生から「複合アニオンの合成の現状と展望」というタイトルで、新物質合成の心構え、複合アニオン化合物合成に特有の難しさと、さらに本領域がこれから目指していく展望が紹介されました。続いて、物質・材料研究機構の広崎フェローから「酸窒化物蛍光体の材料設計と LED への応用」のタイトルで招待講演がありました。これまでのサイアロン系蛍光体の開発と応用に関する内容から最新の単粒子診断法による多くの新規化合物合成まで、幅広い話題を提供していただきました。また、A 01 代表の荻野先生からは「多元系複合アニオン化合物の合成」、A 03 の廣瀬先生か

らは「複合アニオン化合物の薄膜合成」、A 02 の松石先生からは「酸水素化物複合アニオン化合物の高圧合成」に関する講演があり、A 01 分担者の私は「新規酸窒化物の合成」というタイトルで講演させて頂きました。それぞれの複合アニオン化合物合成の難しさや失敗例そして今後の様々な可能性について紹介され、個人的にも非常に勉強になりました。

また、新学術領域研究として、ある意味で最も重要な研究者交流を兼ねた懇親会も産総研内厚生センターで 32 名の参加者を集めて行われました。皆さん新しいネットワーク形成や研究の芽を見つけようと非常に盛り上がった会となりました。参加者の 3 分の 1 が学生だったこともこれからの新学術領域の発展のために非常に頼もしく思いました。

新学術領域研究がスタートして 3 か月程度ですが、既に多くの共同研究が始まっています。今回のトピカル会議を経て更に連携が加速するものと期待します。



広崎フェローによる招待講演の様子



陰山領域代表による乾杯の挨拶

（文責 A 01 北海道大学 鱒淵 友治）

Workshop on "Solid-state chemistry for oxide and mixed-anion systems"

平成 28 年 12 月 6 日から 8 日の三日間、京都大学宇治キャンパスにて、Workshop on "Solid-state chemistry for oxide and mixed-anion systems" が京都大学島川グループの JSPS Core-to-Core Program と複合アニオン新学術領域の共催で開催されました。このワークショップでは、三日間にわたり 30 件の講演があり、本新学術領域から 6 件の発表がありました。全体で約 40 名の参加者があり、本領域からは 9 名の参加がありました。領域代表である陰山先生から「Introduction of "Mixed Anion" Project」というタイトルで、複合アニオンに関して本領域の紹介がありました。続いて、北陸先端科学技術大学の郷先生から「Large-scale first-principles simulations using massively parallel computers」のタイトルで第一原理計算による複合アニオン化合物に対するアプローチ方法が示されました。また、A 01 代表の荻野先生からは「Control of structure and oxygen content in iron-based superconductor with thick blocking layers」で

複合アニオン層状化合物の超伝導体に関する講演で、ペロブスカイト層を制御することにより FeAs 超伝導相の転移温度を制御する手法が紹介されました。A 02 の私からは「High compressibility of hydride ion oxyhydrides」でヒドリドイオンにおける高圧下での特異的な挙動に関する講演を行いました。さらに、領域代表の陰山先生のグループの学生から、酸フッ化物、酸水素化物に関する講演もなされました。いずれも本領域以外の参加者から様々な質問があり、活発な議論が行われました。今後も様々な会議で複合アニオンを国内外に発信し、益々領域が発展していくことを期待します。



陰山領域代表による講演の様子



集合写真

(文責 A 02 京都大学 山本 隆文)

「物性科学領域横断研究会（領域合同研究会）」

去る2016年12月8日と9日、神戸大学百年記念館にて、第10回物性科学領域横断研究会が開かれました。本研究会は物性科学に関連した7つの新学術領域研究が合同で年に1回開催しているもので、各領域の研究内容を専門外の研究者や大学院生に対し解説し、領域間のシナジー効果を高めると共に、物性科学のホットな話題を2日間で概観することを目的としています。また、凝縮系科学に従事する優れた若手研究者を奨励することを目的とした凝縮系科学賞の受賞式・講演が、本研究会の中で毎年行われています。本年度（第11回）は、可視光水分解が可能な光触媒の開発に関する成果が認められ、本領域の前田（A03代表）が受賞しました。受賞おめでとうございます。

研究会では各領域およびゲスト参加の特定・新学術領域から計28件の口頭発表があり、複合アニオン領域からは、陰山（領域総括）による領域の狙いと展望についての説明に続き、山本（A02分担）による酸水素化物の高圧特性に関する講演、林（A02代表）による酸化物ホスト中のH⁺

イオンの検出・同定法に関する講演がありました。ポスターセッションには85件の発表があり、「表面窒化LiFePO₄正極の界面反応機構解明」と題して発表を行った加藤愛梨さん（京大修士2年生、内本（A03分担）研究室）がポスター賞に選出されました。受賞おめでとうございます。

研究会全体を通じ、最近の物性研究の動向として注目される、電子の電荷、スピンそして軌道自由度の相互変換による新物性に関する発表が多くみられました。複合アニオン物質の強みである構造の多様性は、これら自由度を制御するうえでも有用であると考えられ、本領域での機能性物質創製に期待が持たれます。



（文責 A03 東京工業大学 元素戦略研究センター 松石 聡）

レクチャーツアー（英国）

領域代表 陰山 洋

今年度からの新学術領域研究では国際活動支援班による活動が認められ、「複合アニオン」新学術でも、領域内の若手研究者（学生を含む）の派遣、海外からの研究者の招聘、海外の大型施設利用の促進などを推進します。これに加えて、本領域のアクティビティを海外研究者に紹介し、複合アニオン化合物の科学を世界に普及させ、発展させることを目的として領域代表（毎年）と計画班代表（次年度以降）が海外の大学や研究所を訪問して講演会を行います。これを「レクチャーツアー」と名付けました。

今年度は、複合アニオン化合物の研究の固体化学的な研究に関して進んでいる英国を選び、ユニバーシティカレッジロンドン（10月31日）、グラスゴー大学（11月2日）、エジンバラ大学（11月3日）、セントアンドリュース大学（11月4日）、オックスフォード大学（11月7日）にて「Creation of Mixed Anion Systems with Novel Functions」、または、「Novel Functionalities Driven by Mixed Anion Coordination in Extended Solids」という演題のレクチャーを行いました。オックスフォード大学は、世界初の遷移金属酸水素化物 $\text{LaSrCoO}_3\text{H}_{0.7}$ を報告した Michael Hayward 先生、エジンバラ大学は、酸窒化物に関して、局所自由度（cis 選択性）に起因する特異な秩序状態を発見した Paul Attfield 先生、グラスゴー大学は、非酸化物で様々な新物質を合成している Duncan Gregory 先生、セントアンドリュース大学では、長年にわたり酸化物ハライドを合成している Philip Lightfoot 先生、ユニバーシティカレッジロンドンでは、新進気鋭の、そして将来間違いなく大物

になる第一原理計算屋の David Scanlon 先生に受け入れ先となっていただきました。訪問大学の決定等に関しては、本領域の海外ハブ拠点研究者である Attfield 教授には多大なサポートと助言を受けました。具体的には、オックスフォード大以外の全ての予定は Attfield 教授にアレンジしていただきました。お蔭さまで、一週間強で五大学をまわるとい超強行日程にも関わらず、無事に終えることができました。例えば、エジンバラ駅前のホテルを拠点に、セントアンドリュース、グラスゴーを日帰りで訪問することを勧めてもらいました。

レクチャー（セミナー）では、訪問大学の相手に合わせて内容を調整したこともあり、概ね満足していただける講演ができたのではないかと考えています（そのかわり毎晩、講演準備で大変でした）。多くの質問や貴重なコメントを受けました。英国は、構造科学（X線回折、中性子回折）についても大規模施設があることもあり、複合アニオン系での共同研究にはうってつけです。上述した日本人若手の派遣や外国人学生の招聘を通じての共同研究の可能性についても宣伝しましたので、今後の交流が楽しみです。Brexitの影響もあるのですが、英国の研究予算は一部のスーパーを除くとかなり厳しい状況になるようで、新学術の予算を有効に利用して研究の輪を広げていくことができれば、両国にとっても大きなメリットがあると感じました。

Attfield 教授と Hayward 教授には上述した日以外にも時間を割いてくださり、より具体的な共同研究やコミュニティの将来について話し合うことができました。Scanlon

■ 領域ニュース

先生、Gregory 先生、Littlefoot 先生とは今回初めてお会いしましたが、やはりいくつかの共同研究や学生交流を開始する予定です。割愛しますが、講演以外でも、上述した先生以外にも多くの研究者や学生さんと話すことができました。時間の都合上、駆け足の滞在ではありましたが、本領域の海外展開について具体化することができましたので、中味の濃い、大変実りある滞在となりました。



エジンバラ大の Attfield 教授と

平成28年度 第1回班内・班間連携強化会議

日時：平成 28 年 10 月 20 日（木）13:15 ～ 17:00

場所：京都大学吉田南キャンパス

出席者：吉田朋子（大阪市立大学、A02 分担）・桑原彰秀（JFCC、A02 分担）・内本喜晴（京都大学、A03 分担）・前田和彦（東京工業大学、A03 代表）・陰山洋（京都大学、領域代表、A01 分担）

内本教授の発案で領域メンバー 5 名が集まり、共同研究に関する打ち合わせを行った。各メンバーが自身のこれまでの研究を 30-40 分程度で説明しながら、研究の進捗状況を報告した。極めて活発な議論が交わされ、様々な共同研究提案が生まれた。（前田和彦）

平成28年度 第2回班内・班間連携強化会議

日時：平成 28 年 11 月 29 日（火）13:00 ～ 17:15

場所：東京工業大学大岡山キャンパス

出席者：林克郎（九州大学、A02 代表）、稲田幹（九州大学、A02 分担）、八島正知（東京工業大学、A02 分担）、藤井孝太郎（東京工業大学、A02）、前田和彦（東京工業大学、A03 代表）、長谷川哲也（東京大学、A03 分担）、牛山浩（東京大学、A03 分担）、松石聡（東京工業大学、A03 分担）、荻野拓（産業技術総合研究所、A01 代表）、小林亮（東北大学、A01 連携）

林教授・前田准教授の発案で、A02・A03 のメンバーを中心として共同研究に向けた打ち合わせを行った。これまでの研究内容及びスキル、複合アニオン化合物に関する現在進めている研究テーマについてそれぞれ発表を行い、今後の共同研究計画について話し合いを行った。また会議終了後には意見交換会も開催された。（前田和彦）

班内留学報告 No.1：荻野研－陰山研（新規酸フッ化物の構造解析）

東京大学大学院工学系研究科応用化学専攻 修士二年 北村 拓也

指導教官：産業技術総合研究所 主任研究員（兼東大特任講師） 荻野 拓

受入教官：京都大学工学研究科 陰山 洋 教授

受入期間：平成 28 年 10 月 4 日（火）～ 10 月 7 日（金）

新学術領域の班内留学の一環として、10 月 4 日から 10 月 7 日の 4 日間、京都大学工学系研究科物質エネルギー化学専攻の陰山研究室を訪問し、研究室で合成した新規酸フッ化物の構造解析を中心とした実験を行った。短い期間ではあったものの学んだことを挙げればキリがないが、印象に残った点をいくつかまとめたいと思う。

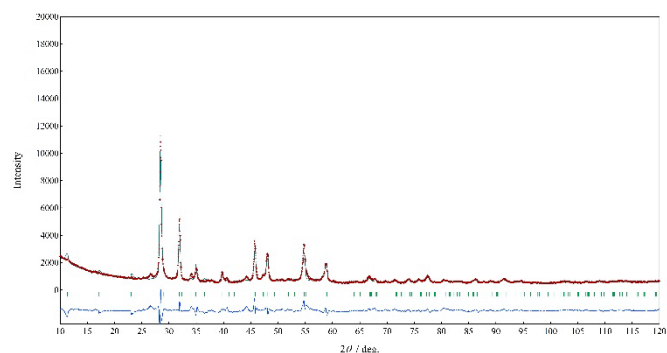
まず一つ目としては、新しい環境に身を置くことで、現在所属している東大の研究室の研究環境を改めて見つめなおす良い機会になったことだ。他大学の環境や人々と関わり、同じである点、異なる点を感じることが出来た。何よりも非常に優秀な方々と触れ合うことで、負けていられないと大きな刺激を受けた。

二つ目としては、先生や学生の方々と非常に多くのディスカッションをすることが出来たことである。教授の陰山先生は、自分の研究で躓いている点について質問すると、様々なアイデアや可能性を提案して下さり、関連する物理的な背景について詳しく教えていただいた。その回答の引き出しの多さに驚いたとともに、ディスカッションを非常に楽しそうに進める姿がとても印象的で、もっとディスカッションをしたいと感じ、また自分の研究を進める大きな励みになった。実際の研究面では、多くの方々に助けてもらったが、その中でも特に助教の山本先生、博士課程 2 年の竹入さんにお世話になった。山本先生には、経験に基づいた的確なアドバイスを頂き、自分の研究を進める上で盲点となっていたポイントに気付くきっかけを頂いた。実際に山本先生のアドバイスがなければ、研究が袋小路に迷い込んでいた可能性が高い。生活面、実験・解析面では竹入さんに頼りっぱなしであった。特に、Rietveld 解析について手

取り足取り教えて頂いた。これまでの東大の研究室は応用物性の評価が中心で、構造解析にはそれほど力を入れていなかったが、新規物質の開発に当っては最も基本となる部分なので、大きな収穫を得られた。

研究室の雰囲気としては、各人が比較的自由に研究を進めているように感じたが、実験設備が整っており、また近隣の様々なバックグラウンドを持つ研究室と活発な共同研究を行っており、色々な実験が不自由無く進められる環境であったのが印象深い。人数が多かつフレンドリーな雰囲気ですタッフ・学生と気軽にディスカッションできるのも非常に優れた点だと感じた。

構造解析の技術を学べたこと以上に、このように他の研究室の雰囲気、研究レベル、研究スタンスを体感できたことは、今後の研究生活に当って大きな財産となった。また班内班間留学を通して新しいコネクションが生まれたことで、自分の実験で躓いた時に相談することが出来るようになったのも大きい。このプログラムが継続され、研究の輪が広がることを願っている。最後だが、このような素晴らしい機会を提供してくださった方々に改めて感謝したい。



班内留学報告 No.2：田部研 - 松石研（希土類イオン賦活酸水素化物の合成）

京都大学 田部研 助教 上田 純平

2016年11月1-2日の日程で、東京工業大学松石研に班内留学を行ったので報告する。酸水素化物は、希土類や遷移金属の発光性イオンの母体材料として、発光中心イオンの配位環境に水素アニオンが存在するため、新規な光機能性の発現が期待される。蛍光体分野において、酸化物、ハロゲン化物、硫化物材料の研究はあるが、酸水素化物の光機能性材料への展開の研究例はほとんどなく、田部研と松石研は、“遷移金属・希土類イオン賦活酸水素化物の光機能探索”の研究テーマで共同研究を行い始めた。本留学で

は、松石研で実際に酸水素化物の作製を通し、作製方法を学ばせて頂いた。具体的には、希土類賦活イットリウム水酸化物と金属イットリウムをアルゴン封入した密閉金属管内で反応させる新しい合成プロセスで、酸水素化物の作製を試みた。残念ながら、今回の条件では酸水素化物を得ることはできなかったが、松石研究室の設備を見学させて頂き、実験における工夫やノウハウに触れることができ、非常に刺激になった。今回学んだ酸水素化物作製方法を活かして、共同研究をより一層進めていきたいと思う。



焼成前サンプル



密閉金属管の様子

班内留学報告 No.3：林研－垣花研（グリコール錯体法による $\text{TiO}_2(\text{B})$ の合成）

九州大学大学院工学府物質創造工学専攻 修士 1 年 田中 萌子

指導教官：九州大学大学院工学研究院応用化学部門（機能） 林 克郎 教授

受入教官：東北大学多元物質科学研究所 垣花 真人 教授

受入期間：平成 28 年 9 月 26 日（月）～ 9 月 28 日（水）

$\text{TiO}_2(\text{B})$ は、酸化チタン結晶相の中でも空隙を多く持つ結晶構造を有しており、より多くのイオンを取り込むことができます。しかし、アナターゼ相やルチル相と比較し、合成手法が限定されています。これまで、 $\text{TiO}_2(\text{B})$ へのイオンのインターカレーション特性を検討するため、グリコール錯体法による $\text{TiO}_2(\text{B})$ の合成に取り組んでいましたが、結晶性のよい単相の $\text{TiO}_2(\text{B})$ は得られませんでした。そこで、東北大学多元物質科学研究所垣花研究室に 3 日間滞在し、グリコール錯体法による $\text{TiO}_2(\text{B})$ の合成技術を習得しました。

これまで林研究室では、グリコール錯体法による合成は行われておらず、論文を読みながら手探りで合成を行っていました。しかし今回、小林先生に基本的な実験手順からしっかりと教えていただいたことで、グリコール錯体法による $\text{TiO}_2(\text{B})$ 合成のノウハウを習得することができ、大き

な収穫となりました。加えて、自身の合成技術を見直すよい機会となりました。研修では、自身で合成した試料と比較し、ほぼ単相で結晶性の高い $\text{TiO}_2(\text{B})$ を合成しました。研修終了後、林研究室で再度合成を行ったところ、研修中に合成した試料と酷似した $\text{TiO}_2(\text{B})$ を再現することができました。

小林先生にはグリコール錯体法や $\text{TiO}_2(\text{B})$ に関する質問にも答えていただき、研究を進めることはもちろん、自身の研究に関する知見や今後の展開を考えるための手がかりを得ることができました。また、他の研究室の実験風景・技術を拝見し、自分の視野が広がりました。

最後に、研修にご協力くださり、懇切丁寧にご指導を賜りました、垣花先生、小林先生、及び研究室の皆様にご心より感謝申し上げます。

アウトリーチ活動報告抜粋（2016.6～2016.11）

2016-07-23 2016 年産総研つくばセンター一般公開

A01 荻野、鬼頭らが、“2016 年産総研つくばセンター一般公開”にて“力持ち and 激寒研究室”という題目の体験実習を行った（約 40 名参加）。

2016-07-31 学習院大学オープンキャンパス 2016

A01 稲熊が学習院大学“物質探索の醍醐味—セラミックスを例として—”という題目の模擬講義を実施した（113 名参加）。

2016-08-01 茨城県立土浦第一高等学校・東京大学研究室訪問

A03 長谷川・近松が東京大学において、茨城県立土浦第一高等学校の学生の OB 訪問を兼ねた見学会を実施した（参加者は高校生）。

2016-08-03 家族でナットク！理系最前線「東大工学部をのぞいてみよう！」

A03 牛山が東京大学において、東京大学オープンキャンパスの工学部企画で、男女共同参画委員として女子学生の理系進学促進イベント“家族でナットク！理系最前線「東大工学部をのぞいてみよう！」”を企画・実施した（女子中高生 128 名・保護者 29 名参加）。

2016-08-04 2016 年度理学部オープンキャンパス・研究室展示

A03 長谷川・近松が東京大学において、中高生を中心に 10 名程度のグループに分けたラボツアーを実施した。

2016-08-06 九州大学工学部オープンキャンパス 2016『理系女子のためのキャリアパス講演会』

A02 稲田が九州大学伊都キャンパスにおいて、“理系女子のためのキャリアパス講演会”を開催し、パネルディスカッションを行った（参加者は高校生、保護者、高校教員）。

2016-08-09 京都大学オープンキャンパス 2016

A01 陰山が、京都大学オープンキャンパス 2016 において「物質の中の宇宙」という題目の模擬授業を行った（高校生 104 名参加）。また、A02 山本隆文が、模擬実験を行った（高校生 211 名参加）。

2016-08-10 京都大学オープンキャンパス 2016

A02 野田が京都大学において、理学部化学教室の教室企画として固体 NMR を用いた分子の構造解析の体験学習を開催した。パルスで核スピンを操るという高度な内容であったが、体験学習後のアンケートでは分かりやすかったという回答が挙げられた（参加者は高校生）。

■ 領域ニュース

2016-08-11 東京工業大学オープンキャンパス 2016

A03 前田が東京工業大学理学院化学系石谷・前田研究室において、主に高校生をターゲットとし、「大学の化学実験を体験！光触媒で水を分解して水素を作る！」と題する講義および体験実習を企画、実施した。参加者からは多くの質問が出て、活発な議論が交わされた。光エネルギーだけで水を分解する光触媒技術に驚きの声が上がっていた（参加者は高校生 17 名）。

2016-08-14 研究室見学会

A02 吉田が大阪市立大学において、郡山第二中学校の学生に対し、ラボツアーを行った（参加者は中学生、引率教員）。

2016-08-26 高校生一日体験化学教室

A03 長谷川・近松らが、東京大学における化学会主催のイベントで、太陽電池を作製する実験を実施した（参加者は高校生）。

2016-09-17 スーパーサイエンスハイスクール（SSH）特別実習

A03 前田が東京工業大学理学院化学系 石谷・前田研究室において、SSH 指定校埼玉県立浦和第一女子高等学校の生徒および教員を受け入れ「光で促進する水の電気分解～光触媒で水を分解してみよう！～」とした講義および体験型実習を行った。参加した高校生らに実際に半導体光電極を作成してもらい、これをアノードとした光電気化学セルを構築し、水の光分解を行った。（参加者は高校生 7 名、教員 1 名）。

2016-09-30 第 4 回理工系女性研究者シンポジウム『理工系の働き方』

A02 稲田が九州大学伊都キャンパスにおいて講演会を行った（参加者は学生 23 人、一般 27 人）。詳細は以下の通り。
<http://www.westwomanwind.org/wcubic/activitylog/wcubicactivitylog6.html>

2016-10-04 島根県立出雲高等学校での講演・模擬実験

A01 陰山が、10/3-10/4 に島根県立出雲高等学校の一年生（320 名）を対象に「物質の中の宇宙：サイエンスの魅力」という題目の講演を行った。翌日には京都大学にて A01 陰山 洋、A02 山本 隆文、A03 阿部 竜らによる模擬実験を行った。

2016-10-07 研究室公開（東工大 科学技術創成研究院 設立記念式典）

A03 松石が、酸水素化合物の合成及び実験施設の公開を行った（参加者は一般 5 名）。
詳細は次の URL の通り。<http://www.iir.titech.ac.jp/sikiten1007/>

2016-10-14

講演・模擬実験

A01,02,03 陰山、山本、阿部が島根県立出雲高等学校において「物質の中の宇宙：サイエンスの魅力」という題目の講演と模擬実験を行った（高校生 320 名が参加）。

2016-10-28 ~ 11-3 東北大学—中国内陸部大学交流プロジェクト

A01 殷が、駐日本中国総領事館（新潟）の要請・支援によって中国内陸部の大学との交流プロジェクトを実施した。日本側講師として東北大学教授 4 名が起用され、A01 殷しゅうは、ソルボサーマル反応プロセス、ソフトケミカルプロセスによる複合アニオン光触媒の創製について 3 件の講演を行った（参加者は各大学の学部・大学院学生と教員計 150 名）。

詳細は：<http://www.tohoku.ac.jp/japanese/2016/11/news20161115-01.html>

2016-11-11

一般財団法人 化学物質評価研究機構（CERI）寄付講座

A02 林が福岡市産学連携センターにおいて「セラミックス材料化学」という題目で、複合アニオン化合物を含むセラミックス合成・応用を授業・発信した（参加者は一般及び大学生）。

2016-11-14

英国の 5 大学でのレクチャーツアー

領域代表陰山が、ユニバーシティカレッジロンドン（10/31）、グラスゴー大学（11/2）、エジンバラ大学（11/3-11/5）、セントアンドリュース大学（11/4）、オックスフォード大学（11/7-11/8）を訪れ「Creation of Mixed Anion Systems with Novel Functions」と「Novel Functionalities Driven by Mixed Anion Coordination in Extended Solids」について講演を行い、本新学術領域の取り組みの紹介や、国際共同研究の話し合いを行った。レクチャーツアーは、領域代表、計画班代表によって毎年各国で行う予定である。

2016-11-22

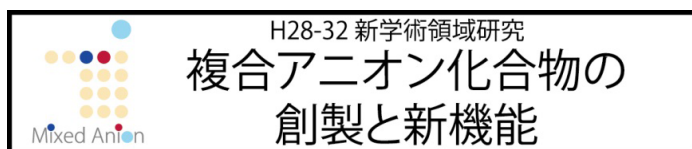
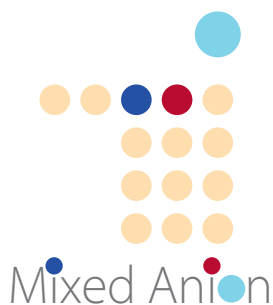
情報機構セミナー

A01 垣花が東京都王子北とぴあにおいて「新規蛍光体材料・新規セラミック材料開発に向けた無機材料の合成技術」と題して、一般向けのセミナーを実施した（参加者は一般 20 名）。

領域ロゴマークについて

元素のうちアニオンになりやすいPブロック元素および水素Hの周期表での位置を意匠化したものです。紺色の丸は窒素N、赤色は酸素Oを表し、水色はHを表しています。従来、水素Hは一番左上、アルカリ金属（Li, Na,...）の列

の最上段に配置されてきましたが、化学的性質がハロゲン（F⁻, Cl⁻,...）に近いことから、フッ素Fの上に配置されることもあります。



発表論文リスト (2016.6 ~)

1. A. NAKADA, S. NISHIOKA, J. J. M. VEQUIZO, K. MURAOKA, T. KANAZAWA, A. YAMAKATA, S. NOZAWA, H. KUMAGAI, S.-I. ADACHI, O. ISHITANI and K. MAEDA, Solar-driven Z-scheme water splitting using tantalum/nitrogen co-doped rutile titania nanorod as an oxygen evolution photocatalyst. *J. Mater. Chem. A* 2017 in press. DOI: 10.1039/C6TA10541F.
2. H. LI, X. WU, S. YIN, K. KATSUMATA, and Y. WANG, Effect of Rutile TiO_2 on the Photocatalytic Performance of $\text{g-C}_3\text{N}_4/\text{brookite-TiO}_{2-x}\text{N}_y$ photocatalyst for NO decomposition, *App. Surf. Sci.* **392**, 531–539, 2017
3. X. WU, J. WANG, G. ZHANG, K. KATSUMATA, K. YANAGISAWA, T. SATO and S. YIN, Series of $\text{M}_x\text{WO}_3/\text{ZnO}$ ($\text{M} = \text{K}, \text{Rb}, \text{NH}_4$) Nanocomposites: Combination of Energy Saving and Environmental Decontamination Functions. *Appl. Catal. B: Environ.* **201**, 128–136, 2017.
4. F. TAKEIRI, Y. MATSUMOTO, T. YAMAMOTO, N. HAYASHI, Z. LI, T. TOHYAMA, C. TASSEL, C. RITTER, H. KAGEYAMA, High pressure synthesis of layered iron oxyselenide $\text{BaFe}_2\text{Se}_2\text{O}$ with strong magnetic anisotropy, *Phys. Rev. B*, **94**, 184426, 2016.
5. Y. KUNO, C. TASSEL, K. FUJITA, D. BATUK, A. M. ABAKUMOV, K. SHITARA, A. KUWABARA, H. MORIWAKE, D. WATABE, C. RITTER, C. M. BROWN, T. YAMAMOTO, F. TAKEIRI, R. ABE, Y. KOBAYASHI, K. TANAKA, H. KAGEYAMA, ZnTaO_2N : Stabilized High-Temperature LiNbO_3 -type Structure, *J. Am. Chem. Soc.* **138**, 15950–15955, 2016.
6. K. WADA, M. EGUCHI, O. ISHITANI, and, K. MAEDA, Activation of the Carbon Nitride Surface by Silica in a CO Evolving Hybrid Photocatalyst, *ChemSusChem*, 2016, in press. DOI: 10.1002/cssc.201600661.
7. T. ONOZUKA, A. CHIKAMATSU, T. KATAYAMA, Y. HIROSE, I. HARAYAMA, D. SEKIBA, E. IKENAGA, M. MINOHARA, H. KUMIGASHIRA, and T. HASEGAWA, Reversible resistance modulation induced by fluorine substitution in perovskite nickelate NdNiO_3 thin films, submitted.
8. T. YAJIMA, M. KOSHINO, Y. ZHANG, T. OHUCHI, W. YU, D. KATO, Y. KOBAYASHI, Y. ORIKASA, T. YAMAMOTO, Y. UCHIMOTO, M. A. GREEN, and H. KAGEYAMA, Selective and Low Temperature Transition Metal Intercalation in the Layered Tellurides, *Nat. Commun.* **7**, 13809, 2016.

受賞報告

東京工業大学の前田和彦准教授（A03 代表）が第 11 回凝縮系科学賞を受賞

凝縮系科学賞は、凝縮系科学に従事する優れた若手研究者を奨励することを願い、岡山大学の秋光 純教授と東京理科大学の福山 秀敏教授が私費を投じて 2006 年より創設した賞です（<http://prize.condmat.net/>）。毎年、実験分野と理論分野で優れた研究成果を挙げた各 1 名の



気鋭の研究者に授与されます。前田氏は、業績題目「可視光水分解を実現する新たな光触媒系の開発」に関する顕著な業績によって、実験分野の受

賞者に選ばれました。授賞式は 12 月 8 日に第 10 回物性科学領域横断研究会で行われました。

前田先生からの受賞コメント

栄えある凝縮系科学賞を受賞することができ、大変光栄に思います。受賞対象となったエネルギー変換型光触媒の研究は、私が大学院生の頃から継続して行っているものです。受賞にあたり、大学院時代お世話になった指導教員の先生方、共同研究者の皆様、そして日々支えてくれた家族・友人らに感謝いたします。今回の受賞を励みとして、今後も研究・教育活動に励んで参ります。

京都大学の加藤愛梨さんが第 10 回物性科学領域横断研究会ポスター賞を受賞

12 月 9 日から 10 日にかけて行われた、第 10 回物性科学



領域横断研究会において、内本喜晴（A03 分担）研究室の修士 2 年生、加藤愛梨さんが「表面窒化 LiFePO_4 正極の界面反応機構解明」の題目でポスター発表を行い、優秀賞に選出されました。

加藤愛梨さんからの受賞コメント

名誉ある賞をいただき大変光栄に存じます。これも指導教官の内本喜晴先生を初めとする多くの方々からのご指導あってのものと深く感謝申し上げます。本研究会では専門分野外のお話も聞くことができ、研究目的へのアプローチ法など多くのことを勉強できました。今後も専門問わず議論する機会を大切にしていきたいです。

（文責 A 03 東京工業大学 元素戦略研究センター 松石 聡）

その他の受賞（2016.6～2016.11）

研究領域 A01 研究分担者 **垣花 真人** (M. KAKIHANA, 東北大学多元物質科学研究所 教授)

研究領域 A01 連携研究者 **小林 亮** (M. KOBAYASHI, 東北大学多元物質科学研究所 助教)

- 竹田 洋平, 加藤 英樹, 小林 亮, 小林 久芳, 垣花 真人, 優秀発表賞, Mn^{4+} を賦活したタンタル系ペロブスカイト型酸化物の発光特性, 平成 28 年度日本セラミックス協会東北北海道支部研究発表会, (27, 28 Oct., 2016, 北海道大学)
- 小林 亮, 第 70 回 (平成 27 年度) 日本セラミックス協会賞進歩賞, 多形・形態を制御した酸化チタンの合成とその展開, 日本セラミックス協会, (3, June, 2016)

研究領域 A01 研究分担者 **殷 澍** (Shu YIN, 東北大学多元物質科学研究所 教授)

- Shu YIN, Rare Earth Resource Utilization Research Award, ISRERU-4 & ISFM-7, (16-19 Aug., 2016, Changchun, China)

研究領域 A02 研究分担者 **稲田 幹** (Miki INADA, 九州大学中央分析センター 准教授)

- 稲田幹, 21 世紀記念個人冠賞 倉田元治賞 (日本セラミックス協会), 2016 年 6 月 3 日
- 稲田幹, 第 9 回資生堂女性研究者サイエンスグラント, 2016 年 7 月 8 日

研究領域 A02 研究分担者 **八島 正知** (M. YASHIMA, 東京工業大学理学院化学系 教授)

- 中村 圭吾, 藤井 孝太郎, 丹羽 栄貴, 八島 正知, 最優秀講演賞, 日本セラミックス協会 第 29 回秋季シンポジウム, (2016 年 9 月 7 日～9 日, 広島大学, 広島)

研究領域 A03 研究代表者 **前田 和彦** (K. MAEDA, 東京工業大学理学院 准教授)

- 前田 和彦, 第 11 回凝縮系科学賞「可視光水分解を実現する新たな光触媒系の開発」, (2016 年 12 月 9 日)

国際会議情報（本領域がオガナイザーとして関連している国際会議）

1. ISEPD2017 エコマテリアル国際会議 （2017.2.17-02.20（沖縄））

<http://www.isepd2017.org/>

複合アニオンスペシャルセッション

（Session S; Session Chairs: 林 克郎（A02）、陰山 洋
（領域代表）、前田 和彦（A03）、荻野 拓（A01））

多数のご参加をお待ちしております。

2. 窒化物系国際会議 ISNT2017&ISSNOX5 （2017.8.27-（札幌））

9th International Symposium on Nitrides (ISNT2017)
& 5th International Symposium on SiAlONs and Non-
oxides (ISSNOX5)

<http://ceramics.ynu.ac.jp/isnt2017-issnox5/index.html>

酸窒化物関連のセッションを本領域の協賛で開催。

2017年8月27日（日）～9月1日（金）
北海道大学 フロンティア応用科学研究棟

[https://www.oia.hokudai.ac.jp/maps/?x=43.077764
&y=141.340571&z=18](https://www.oia.hokudai.ac.jp/maps/?x=43.077764&y=141.340571&z=18)

発表申込締め切り：2017年1月31日（火）

ポスター発表も可能ですので、学生さんも含めて関連する
研究をされている方はぜひ発表をご検討ください。

その他の情報

国際班情報

複合アニオン化合物の学理の追及には、国際的に活躍し、次世代を担う若手の育成が重要です。本新学術領域研究「複合アニオン化合物の創製と機能開拓」では各研究代表者、各研究分担者ならびに各連携研究者のグループの若手が海外で共同研究を行い、研鑽を積むお手伝いをしています。また、複合アニオン化合物の構造を評価するためには、海外の中性子や放射光などの施設を利用することが鍵になります。本新学術領域研究では、若手が海外の研究施設を利用

するお手伝いも行っています。また、レクチャーツアーや海外の若手を日本に派遣することも行っています。是非、積極的に本学術領域研究支援をご活用いただき、皆で次世代を担う若手を育成しようではありませんか！具体的には、新学術領域研究『複合アニオン化合物の創製と新機能』国際活動申請書を記入してご応募ください。審査の上、旅費等を一部補助します。皆様の積極的なご応募を待っています。

複合アニオン 領域ホームページ : <http://www.mixed-anion.jp/group>

領域ホームページをご活用ください。

■ 編集後記

新学術複合アニオン研究発足に伴い、情報発信の場としてニュースレターを年2回程度のペースで発行する予定です。研究内容だけでなく、領域における人のつながりが見える形で進めていきたいと思っています。本号は記念すべき第1号として領域メンバーの研究概要を伝えるために、

研究分担者の先生方全員に簡単な概要をご執筆いただきました。今号は準備期間が短く構成が十分練れたものでない点を反省しておりますが、今後はより詳細な研究紹介を執筆していただき、内容を充実させ、科学的にも面白く、読める冊子づくりを心がけてまいります。(S. Y.)

【領域全般に関するお問い合わせ】

陰山 洋（領域代表 / A01 分担）

【領域事務に関するお問い合わせ】

林 克郎（領域事務担当 / A02 代表）

【ホームページに関するお問い合わせ】

松石 聡（東工大元素戦略センター・准教授 / A03 分担）

（連絡先）

【ニュースレターに関するお問い合わせ】

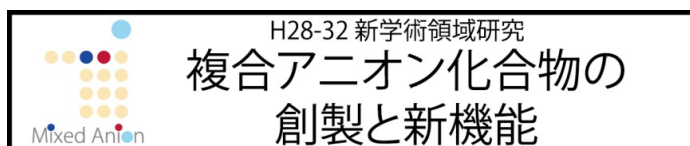
荻野 拓（産総研）

稲熊 宜之（学習院大）

殷 しゅう（東北大）

桑原 彰秀（ファインセラミックスセンター）

shuyin@tagen.tohoku.ac.jp（Vol.1 担当 殷）





<http://www.mixed-anion.jp/>