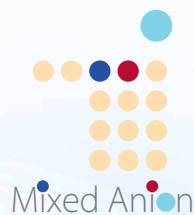


News Letter

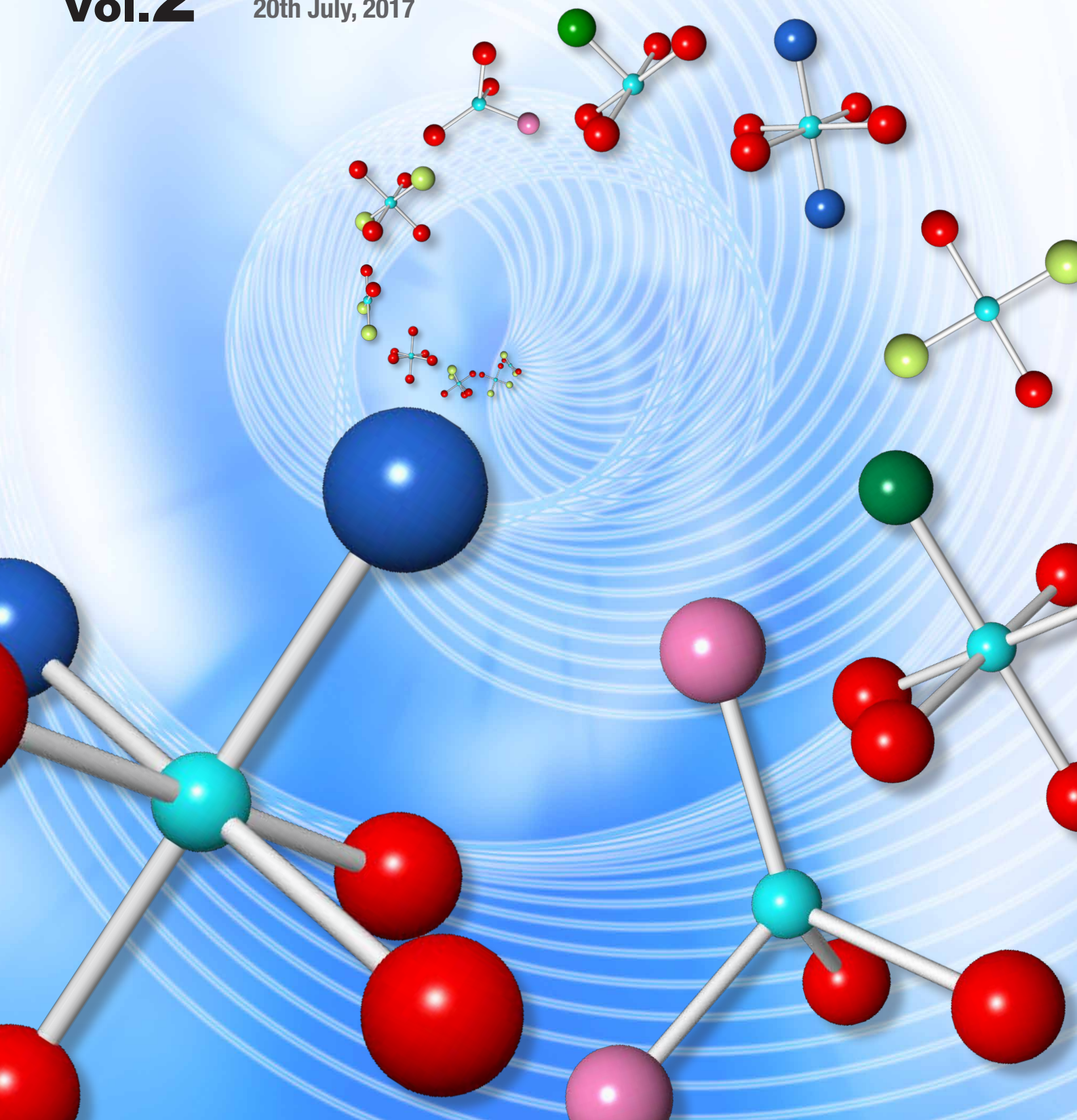
Vol.2

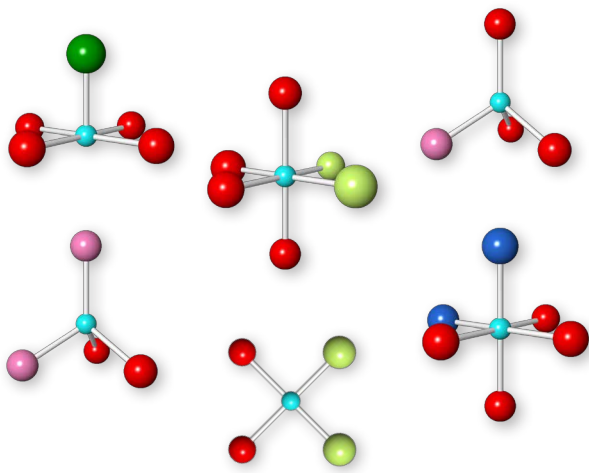
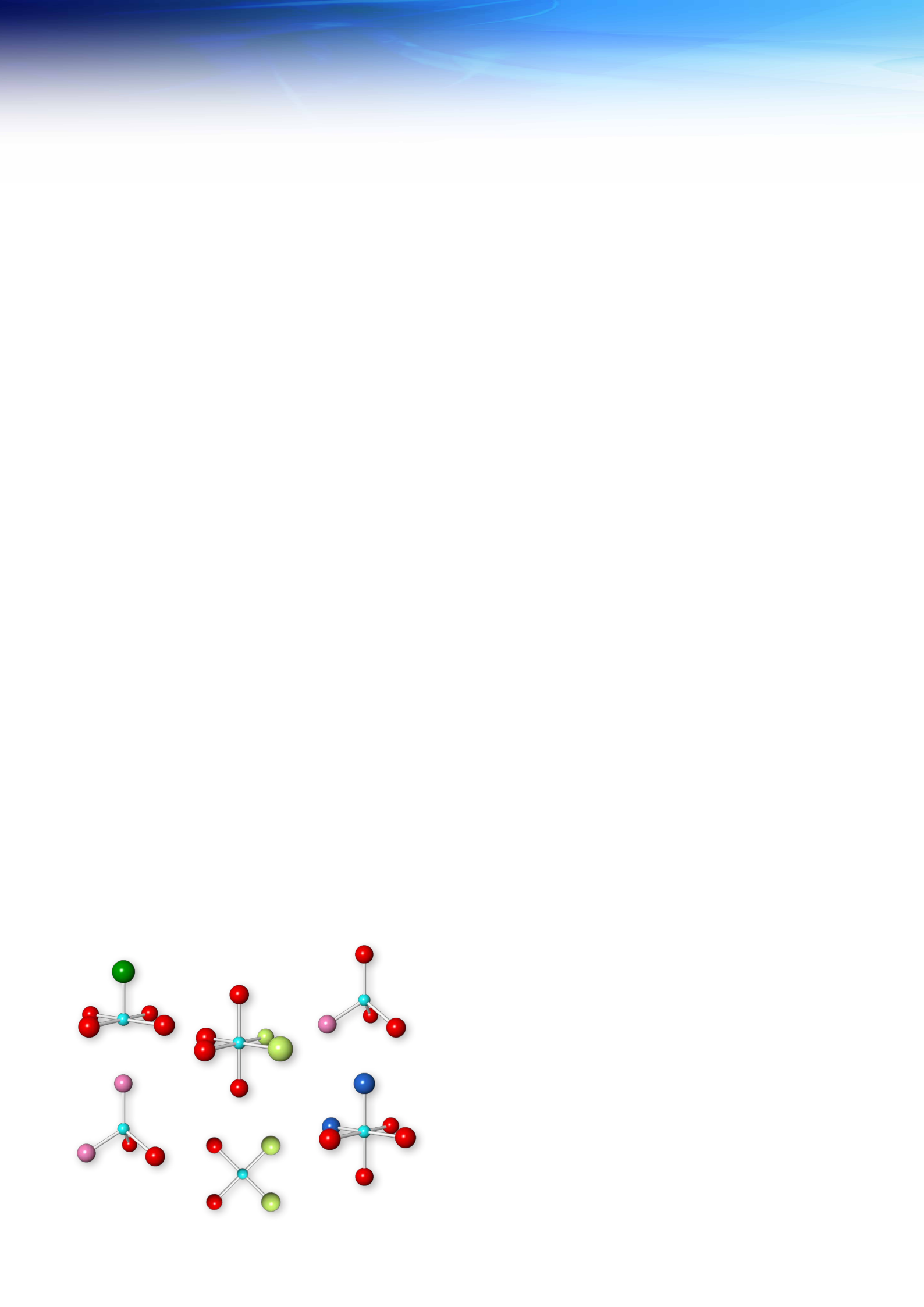
20th July, 2017

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
領域代表からのメッセージ	4
評価委員および公募研究代表者の紹介	5
評価委員紹介	6
公募研究メンバー紹介	
公募研究 A01	7
公募研究 A02	13
公募研究 A03	19
研究紹介 A01	25
研究紹介 A02	27
研究紹介 A03	30
領域ニュース	
第一回領域内会議報告	32
日本化学会 第97 春季年会	33
第二回公開シンポジウム(キックオフミーティング)	34
複合アニオン新学術領域 第一回若手スクール	40
理論スクール開催報告	44
国際活動支援報告ー海外体験記・留学体験記	47
班内留学報告	51
アウトリーチ活動報告	54
発表論文リスト (2016.6-)	57
受賞報告	64
国際会議情報	66
編集後記	68

複合アニオン新物質への期待

評価委員 吉川 信一



永年慣れ親しんだ無機系新物質の創製に関する研究の最前線を離れて、既に数か月が経つ。幸いこれまでにお付き合い頂いた様々な方々と、更なるご縁に恵まれて相変わらず貧乏暇なしの生活が続いている。これまでの研究成果に興味を持って頂いた様々な民間との共同研究や、本新学術領域への評価委員としての参画などが一例である。とはいえ考える時間が少しは多くなったので、これまでの経験を思い出してニュースレターへ寄稿させていただきます。

新しい化合物や新物質ができると、ワクワクした楽しい気分になる。喜び勇んで構造と性質の関係を調べて研究成果を発表する。学生が学会で講演すると、前の方に座った先生が、「いったい何の役に立つのですか」と野暮な質問されて答えに窮する。新物質創製の楽しさは指導されているものの、その奥にある概念の広がりとはもとよりその利用までには、学生君は思いが至らない。瓢箪からコマのように生まれた新物質はとにかく面白い。発見した当初はセレンディピティで稀有なものであるが、必ず関連した新物質が群れをなして潜んでいる。それを探り当てそれらを包括する新しい概念を世に広めることが重要である。

若い頃に今でいう層間化合物いわゆるインタカレーションを、層状無機有機複合体と呼んで永らく研究した。多くの無機化合物は高温焼成で合成されるのに対して、ホストとなる層状無機化合物をゲスト物質に接触させておけば室

温付近の低温でインタカレーションが起き、新しい層間化合物を合成できる。現在ではごくあたりまえな「インタカレーション」や「ソフト化学」といった新しい概念を導入するとともに、現実的な成果としてリチウムイオン電池の電極反応においては既に必須の要素になっている。ハイドロタルサイトに始まる層状複金属水酸化物 LDH は、光触媒をはじめとしたさまざまな触媒担体など多くの研究者の研究対象として貢献している。

このたび複合アニオン化合物を、新学術研究領域として陰山先生が立ち上げられたことは大変意義深いと思っている。我々の研究グループは最近の十数年間にわたって、金属窒化物および酸窒化物に熱中して研究を進めてきた。陰イオンが複数種類共存することの意味は何か。しかも酸素と窒素の組み合わせではサイズは似ているものの、化学結合性かなり異なる。従って結晶学的には同一のサイトを統計的に占めているように見えるが、局所的にはそれぞれの化学結合性、特に窒素の共有結合性を反映した配位構造をとる。SrTaO₂N などの酸窒化物ペロブスカイトではシス型配位した TaO₄N₂ 八面体が連なる -N-Ta-N- 鎖に図のように時計および反時計回りの 2 種類が共存するところから、強誘電性が現れる。また平均構造は岩塩型の酸窒化ニオブ (Nb_{0.87}Si_{0.09}□_{0.04}) (N_{0.87}O_{0.13}) 中ではアモルファス SiO₂ 様のクラスターが生じ、超伝導フラックスの揺らぎをピン止

めして臨界電流値が大きくなる。ここで□は陽イオン欠損を表す。アニオンを複合化することによって、バンドギャップが連続的に変化すると考えるのは少し短絡的と思われる。組み合わせるアニオンのサイズが大きく異なる場合には、それらは明らかに別の結晶学サイトを占めて、層状化合物を形成する。似たサイズのアニオン同士で化学結合性が異なる組み合わせではどのような効果を生み出せるか、

新しい学理が明らかになることを期待している。様々なユニークな研究手法を持った研究者が素早く連携する研究体制が整った本新学術領域では、複合アニオン新物質をたくさん生み出すとともに、総力を挙げてその後ろにある「複合アニオンの新しい考え方」を見出して欲しい。面白い科学には大きな広がりがあり、将来的には新たな産業を生み出すと信じている。

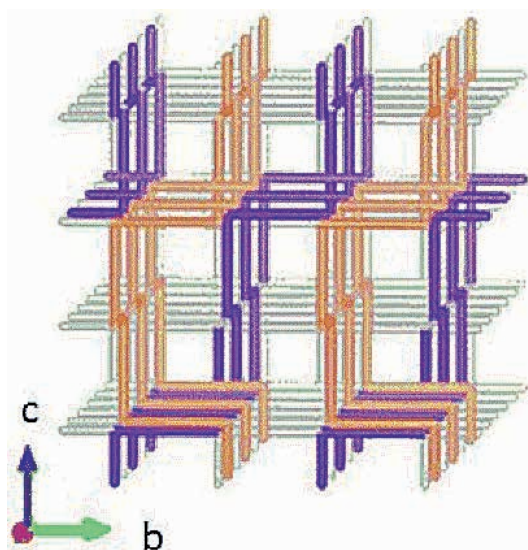


図 SrTaO₂N 酸窒化物ペロブスカイト中に存在する二種類の -N-Ta-N- 鎖

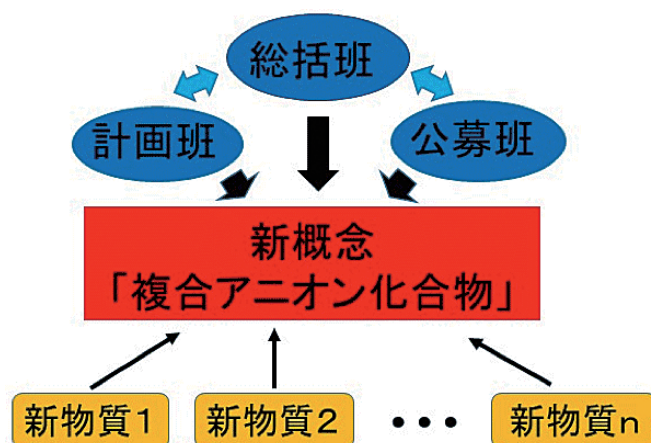


図 新学術領域「複合アニオン化合物」に期待する新概念と新物質の創出

■ 領域代表からのメッセージ

複合アニオン新学術プロジェクトが二年目に入りました。公募研究者が18名加わり、計画研究者の27名（うち連携研究者は5名）と合わせると45名の大所帯となりました。プロジェクトの開始当初、「複合アニオン」の知名度はまだまだと思っていましたので、公募研究にいったいどれだけの応募があるのかと内心案じておりましたが、その心配が吹き飛ぶほどの数の応募があっただけでなく、研究提案も優れたものが大変多く、これには複合アニオンの科学に明るい未来を感じ、多いに励まされました。今回、採択された先生の提案はどれも複合アニオンの特色を活かした独創性の高いもので、今後の展開を楽しみにしています。また、計画研究と組み合わせて、今後、各研究分野にわたって独創的な研究をダイナミックに展開できるチームができたと確信しています。ただ、不採択となった提案のなかにも甲乙つけがたいものも多くあったことも書き添えておきます。本新学術では、まだ“得体の知れない”複合アニオン化合物の研究を推進するためにとことんまでコラボを進める（初める）よう促しています。本新学術に直接関わりない方でも、もし、複合アニオン系にご興味があればできるだけなんらかの支援ができたかと考えておりますのでお気軽にお問い合わせください。

5月28、29日に、九州大学でキックオフ会議が開催されました。公募研究メンバーが加わって初の合同会議となります。林さん、稲田さん、西之園さんやその研究室の皆さんには、開催までの準備、当日の運営にはご尽力いただき、お蔭様で盛会となりました。初日にあった公開シンポジウムでの評価者である幾原雄一先生の招待講演には、電子顕微鏡に関する先生の圧倒的な成果で感銘を受けると同時に、電子顕微鏡を使った複合アニオン系の新しい展開についてあれこれと妄想が膨らみました。他の評価者の先生方からも励ましとともに喝を入れていただきました。評価者の紹介欄にもありますが、この会議で上田寛先生からいただいた「Mixed is different」はいいですね。このもととなるノーベル賞物理学者のPhillip Andersonの「More is different」は、物理学者なら誰でも知っている言葉です。複合アニオン化合物は物理分野ではまだ認知度が少ないためこれから皆で使って広めていきませんか？！

さて、初日の夕方からのクローズドの打ち合わせでは、昨年8月のキックオフ会議の反省（初対面の研究者が多いため

比較的静かだった）から、学生を含め全ての参加者になるべくざっくばらんに話せる雰囲気を作ろうとしました。その狙いがうまくいき、研究やそれ以外の話（人間を知ることが共同研究の第一歩！）で大いに盛り上がったと感じています。その後、総括班が把握している範囲で97件の新しい共同研究が立ち上がりました。すでに進んでいるものが150件ほど（これも総括班が把握する限り）ありますので、これから成果が続々とでていくのではないかと期待しております。新しいプロジェクトの中には、学生からのできたものも含まれます。キックオフ会議の直前に開催された若手スクールでは、参加した学生全員に新しいプロジェクトを提案してもらい、優秀な提案は表彰しました。領域代表ということで賞状を渡す役を仰せつかりましたが初めての経験で、緊張しました。

そのほかにも本新学術ならではの活動を展開しています。申請書に書いたお約束ごとにとらわれず良かれと思ったことはどんどん推進しています。その1つが、第一原理計算を実験（合成）家が自分でできるようにする試みです。これは前園さんによる昨年のキックオフ会議での提案です。前園さん、本郷さん、桑原さんのご尽力もあり、予想以上にうまく進んでいるように思います。参加した学生さんからもとても良かったとの声を聞いていますし、実際、小生の研究室でも参加学生の研究へのアプローチがわかりつつあることを肌で感じています。本ニュースレターにも関連記事がありますのでご覧ください。もう1つは、オックスフォード大学のMichael Hayward教授（写真左）の日本滞在の一部をレクチャーツアーと称して日本各所を回っていただいたことです。昨年の英国でのレクチャーツアーが思いの外プロダクティブでした（ニュースレターの第一号で記載）ので、その逆バージョンを日本でやったらどうか、という思いつきから提案しました。Hayward教授ご本人にも大変喜んでいただけましたし、レクチャーに参加した人の評判も上々のようです。詳しくはニュースレターの次号で報告する予定です。

（領域代表 京都大学 陰山洋）



■ 評価委員および公募研究代表者の紹介

本領域の評価委員の先生方および、今年度から新たに加わった公募研究代表者を紹介します。

評価委員	
幾原 雄一	(東大・院工・総合研究機構・教授)
上田 寛	(豊田理研・フェロー)
吉川 信一	(北大・名誉教授)
武田 保雄	(三重大・院工・名誉教授・特任教授)
堂免 一成	(東大・院工・教授)
Kenneth Poeppelmeier	(Morrison Professor of Chemistry, Department of Chemistry, Northwestern University)

公募研究

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」

是津 信行	(信州大・工・准教授・固体化学・コロイド界面科学・原子論的結晶育成技術から挑むガーネット型混合アニオン固体電解質材料の開発)
片桐 清文	(広島大・院工・准教授・無機材料化学・層状複水酸化物を前駆体とする GaN:ZnO 固溶体酸窒化物の新規合成法の開拓)
大谷 亮	(熊本大・助教・錯体化学・極性錯体分子の異方的集積を利用した一次元金属窒化物の創成)
岡 研吾	(中央大・理工・助教・無機固体化学・簡便かつ安価な合成法を用いた新規 Pb,Bi 含有酸フッ化物の物質探索)
本橋 輝樹	(神奈川大工・教授・無機固体化学・アニオン不定比性酸水酸化物の合成と結晶構造化学)
辻本 吉廣	(物材機構・主任研究員・無機固体化学・異常磁気相を示す複合アニオン二次元正方格子磁性体の探索と物性評価)

A02「複合アニオン化合物の理解：化学・構造・電子状態解析」

前園 涼	(北陸先端科技大・准教授・物性理論・第一原理電子状態計算・量子モンテカルロ法第一原理電子状態計算・量子化学・実験グループへの技術移転を目指した新規複合アニオン物質の電子状態計算協働教育)
石井 悠衣	(大阪府立大・工学系研・助教・無機固体化学・構造揺らぎと伝導電子の相互作用による新機能の創出)
南部 雄亮	(東北大・金研・准教授・中性子散乱・中性子散乱を用いた複合アニオン化合物の構造解析)
関場 大一郎	(筑波大・数理物質・講師・表面・界面物理学・イオンビーム分析・複合アニオン薄膜分析用水素検出効率 100%の重イオン ERDA 開発)
越智 正之	(大阪大学・理学系・助教・計算物質科学・強相関物性の理論計算)
山方 啓	(豊田工大・工学系研・准教授・表面分光学・金属酸窒化物光触媒の光励起ダイナミクス)

A03「複合アニオン化合物の新規化学物理機能の創出」

青山 拓也	(東北大・理学系・助教・強相関電子物性・高圧物理・複合アニオンの配置自由度を利用した高機能磁性絶縁体の探索)
由井 樹人	(新潟大・自然科学系・准教授・界面光化学・複合アニオン交互積層体を用いたフォトン・アップコンバージョン膜)
今中 信人	(大阪大学・工学系研・教授・無機材料化学・希土類科学・複合アニオン効果を利用した新規ハロゲン化物イオン伝導性固体の創製)
伊田 進太郎	(熊本大・院工・教授・無機材料化学・窒素ドーパ酸化物ナノシートの作製と光誘起プロトン伝導の探索)
林 晃敏	(大阪府立大学・工学系研・教授・無機材料化学・全固体電池にむけたリチウムイオン伝導性硫窒化物の創成)
小林 玄器	(分子研・准教授・無機固体化学・電気化学・ヒドリド超イオン導電体の物質探索)

■ 評価委員紹介



幾原 雄一

所 属 東京大学大学院工学系研究科 総合研究機構・教授

専門分野 先端電子顕微鏡法、セラミック材料

領域へ一言 若い力を結集し、世界トップを目指した取り組みに期待しています。



上田 寛

所 属 豊田理化学研究所・フェロー

専門分野 固体物性化学

領域へ一言 複合アニオンの新展開に期待する。
「Mixed Is Different」の実現を目指してください。



吉川 信一

所 属 北海道大学・名誉教授

専門分野 無機材料化学

領域へ一言 研究者同士が十分に複合化して、素晴らしい複合アニオン化合物を目指してください。
Handbook of Solid State Chemistry 全6巻 Wiley より本年8月には出版されます。



武田 保雄

所 属 三重大学大学院工学研究科 名誉教授・特任教授

専門分野 固体化学

領域へ一言 研究を楽しんでください。



堂免 一成

所 属 東京大学工学系研究科・教授

専門分野 エネルギー変換型光触媒

領域へ一言 エットと思うような新材料の開発を期待します。



Kenneth Poeppelmeier

Morrison Professor of Chemistry

Department of Chemistry, Northwestern University

“Mixed-Anion chemistries are assuming a new and important prominence in solid state materials chemistry and Kyoto is a leading center of research in this area.”

公募研究メンバー紹介 (A01)

信州大学 環境・エネルギー材料科学研究所 手嶋・是津研究室

Center for Energy & Environmental Science, Shinshu University
Teshima-Zettsu Lab

領域所属 A01 班 公募研究

研究代表者 是津 信行 准教授

研究協力者 山田 哲也 助教

簾 智仁 助教

西川 慶 主任研究員

(物質・材料研究機構 (NIMS) エネルギー・環境材料研究拠点)

専門分野・キーワード 電池材料 / フラックス成長 / 電気化学 / コロイド・表面科学 / 自己組織化

SPECIALIZED FIELD・KEYWORD

Energy Storage Materials / Flux growth / Electrochemistry / Colloid & Surface Science / Self-assembly



Assoc. Prof.
N. ZETTSU

▶ 原子論的結晶育成技術から挑むガーネット型混合アニオン固体電解質材料の開発

JST-CREST、JST-ALCA などの大型資金研究内での取り組みで積み重ねてきた知見を基軸に、①フラックス育成による単結晶粒子の結晶外形制御育成、②第一原理 / 古典力場分子動力学計算による構造・物性予測、③終端原子層アニオン置換、④単粒子測定技術をそれぞれ駆使した【原子論的

結晶育成技術】により、二律背反する 10^{-2} S/cm に迫るリチウムイオン伝導度と長期にわたる大気安定性を兼ね備えた、ガーネット型混合アニオン固体電解質材料の開発に挑戦します。

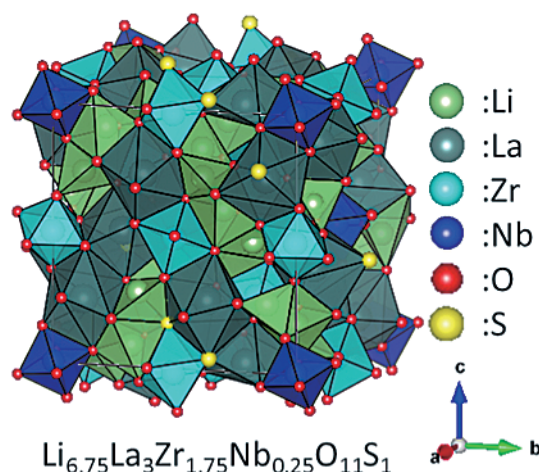


図 アニオン配列制御による超イオン伝導経路形成にむけた新材料開発：
酸硫化ガーネット型固体電解質材料の構造モデル

新学術への情熱・メッセージ

晶相・晶癖制御した単結晶育成、単粒子測定、イオン伝導度計測を強みとした新材料開発を通して、複合アニオン化合物の構

造因子と機能の因果関係の学術的体系化に貢献したいです。

公募研究メンバー紹介 (A01)

広島大学 大学院工学研究科

Graduate School of Engineering, Hiroshima University

領域所属 A01 班 公募研究
研究代表者 片桐 清文 准教授

専門分野・キーワード 有機-無機ハイブリッド / ナノ粒子 / 分子集合体 / ソルゲル法 / 水熱合成法

SPECIALIZED FIELD・KEYWORD

Organic Inorganic Hybrid Materials / Nanoparticles / Molecular Assembly / Sol-Gel Method / Hydrothermal Synthesis



Assoc. Prof.
K. KATAGIRI

▶ 液相プロセス・自己組織化を活用した機能性 ナノハイブリッドの創製

無機物質、有機物質などの区分にとらわれず、様々な機能を有する材料をビルディングブロックとし、それらを自己組織化などを駆使して集積化し、単独の材料で得られる機能を超越する革新的な機能を発現するナノハイブリッドの創成を目指して研究を進めています。ビルディングブロックとなる材料のうち、無機材料では、ソルゲル法や水熱合成法などの液相プロセスを活用し、ナノ粒子などとして合成しています。有

機材料には色素や合成高分子などに加え、脂質やタンパク質などの生体由来分子も活用しています。ターゲットは、光触媒、蛍光材料などから、構造色、ドラッグ・デリバリーなどのバイオメディカル分野まで多岐に渡ります。そのようなビルディングブロックとしての無機材料の新たなツールとして、複合アニオン化合物を取り入れることで、その可能性はさらに拡がると確信しています。

1. 層状複水酸化物と尿素を前駆体とする GaN:ZnO 固溶体の新規合成法の開拓
2. 固体窒素源を用いた酸窒化物ペロブスカイト光触媒の合成法の開拓
3. 液相プロセスを活用した酸フッ化物蛍光ナノ粒子の新規合成法と機能開拓
4. 水溶性金属錯体を用いた複合アニオン化合物の形態制御合成
5. 泳動電着法を用いたシリカ粒子集積体による構造色コーティング法の開拓
6. 無機ナノ粒子を用いたナノハイブリッドのバイオメディカル応用
7. 無機ナノ粒子-メソポーラスシリカ複合体の機能開拓

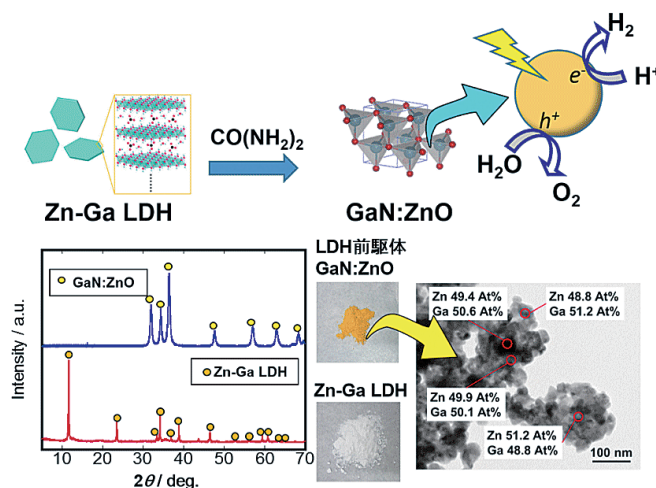


図 層状複水酸化物と尿素を前駆体とする GaN:ZnO 固溶体光触媒の合成

新学術への情熱・メッセージ

これまでの無機材料・ハイブリッド材料の液相合成などの経験を活かし、従来の複合アニオン化合物の研究にはない発想を取り入れていきたいと思っています。

本領域に参画し、メンバーの方々と異分野連携を推進することで、複合アニオン化合物の新学理を日本から世界に向けて発信していきたいと思っています。

公募研究メンバー紹介 (A01)

熊本大学 大学院 先端科学研究部

Department of Chemistry,
Graduate School of Science and Technology, Kumamoto University

領域所属 A01 班 公募研究
研究代表者 大谷 亮 助教

専門分野・キーワード 錯体化学 / 配位高分子

SPECIALIZED FIELD・KEYWORD
Metal Complex Chemistry / Coordination Polymer



Assist. Prof.
R. OHTANI

▶ 極性錯体分子の異方的集積を利用した一次元金属窒化物の創成

ナイトライドアニオン (N^{3-}) とシアノアニオン (CN^-) を有し、歪んだ四角錐形構造を持つ極性金属錯体分子を最小単位として異方的に集積させることで、新しい複合アニオン型一次元金属窒化物・配位高分子を創成します。圧力、熱、電場、磁場などの外場応答性について、また、一次元鎖の長さによる物性変化を調べることで、一次元化合物ならではの機能を創出します。

1. マイルドな合成条件下での自己集積を利用した機能性無機材料の開発
2. 一次元配位高分子の誘電応答および高圧物性解析
3. 二次元配位高分子の熱応答性の理解と制御

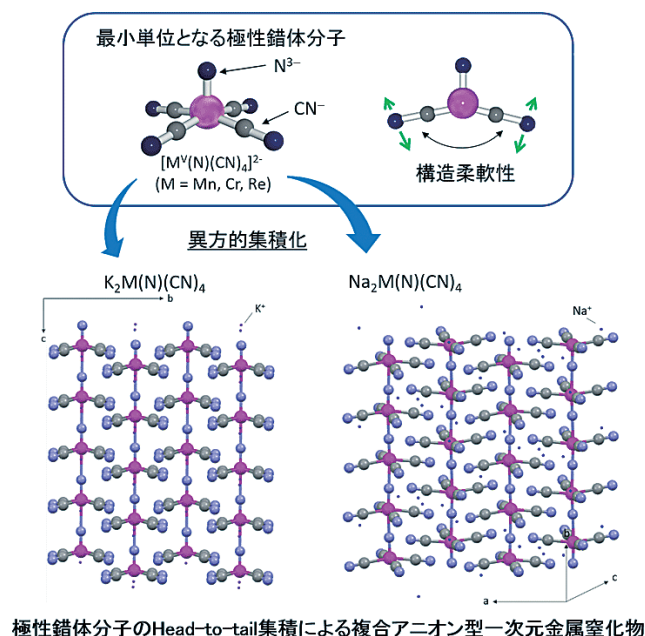


図 分子設計と集積化により得られる一次元化合物の例

新学術への情熱・メッセージ

錯体化学のアプローチが複合アニオン化合物創出に一躍買うと信じています。得意とする分子集積を利用して従来の無機合

成手法では得られない複合アニオン化合物を合成します。

公募研究メンバー紹介 (A01)

中央大学 理工学部 応用化学科 大石研究室

Department of Applied Chemistry, Chuo University
Oh-ishi Lab

領域所属 A01 班 公募研究
研究代表者 岡 研吾 助 教

専門分野・キーワード 無機固体化学 / アニオン秩序配列 / 鉛・ビスマス含有アニオン複合物 / 低温合成

SPECIALIZED FIELD・KEYWORD

Solid State Chemistry / Anion Order / Pb/Bi Containing Mixed Anion System / Low-temperature Synthesis



Assist. Prof.
K. OKA

▶ 簡便かつ安価な合成法を用いた Pb, Bi 含有アニオン複合物の物質探索

Pb, Bi といった元素の持つ $6s^2$ 孤立電子対の示す特異的な性質とアニオン複合化を組み合わせ、新しい結晶構造と物性を示す新物質の合成を行っています。 $6s^2$ 孤立電子対の存在により、異方的な化学結合が安定化され、それが異種アニオンの秩序配列を助けるのではないかと着想し、研究をしています。アニオンの秩序構造は、誘電特性やバンド状態、イオン伝導特性などと密接に結びついており、ア

ニオン複合物の機能発現のカギの一つと考えられます。研究対象としては、特に酸フッ化物に着目しています。これらは空气中で安定かつ比較的低温で反応する PbF_2, BiF_3 粉末をフッ素源として使用できるため、従来のセラミック合成と同様の、簡便かつ安価な固相反応による合成が可能であり、応用を見据えた上で非常に大きな利点を持っています。

1. Pb, Bi を含むアニオン複合物の低温合成
2. $6s^2$ 孤立電子対を利用したアニオン秩序配列の実現
3. 異種アニオンの（部分）秩序配列による誘電特性の発現
4. アニオン秩序構造中におけるアニオン伝導
5. 酸フッ化物における光触媒機能
6. 価数の異なるアニオンを組み合わせることによる新規構造の安定化

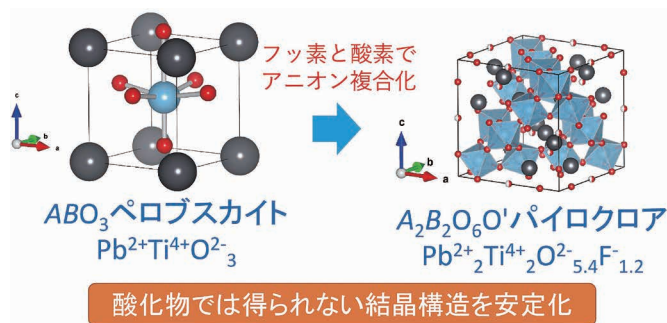


図 Pb 含有酸化物に対するアニオン複合化の一例。価数の異なる O^{2-} と F^- を複合化することにより、結晶構造の支配因子であるカチオン / アニオン比が変化する。その結果、酸化物では得られなかったような結晶構造が安定化する。この Pb-Ti 酸フッ化物パイロクロア中においては、 $Ti(O/F)_6$ 八面体に *fac* 型配位する形で O/F のアニオン秩序配列が存在している。

新学術への情熱・メッセージ

従来の酸化物を対象とした固体化学では主にカチオン組成にのみ着目し研究が行われてきました。しかしながら、アニオン組成を変化させることでも同様に様々な新しい構造や機能の発現が出来るはずです。そして、両者を組み合わせることによって、

従来のカチオンのみに着目した一次元的な研究から、カチオンとアニオンの両者に着目した二次元的な研究へと、文字通り固体化学研究の次元を一つ上げていきたいと考えています。

■ 公募研究メンバー紹介 (A01)

神奈川大学 工学部 物質生命化学科 本橋研究室

Department of Materials and Life Chemistry, Kanagawa University
Motohashi Lab

領域所属 A01 班 公募研究
研究代表者 本橋 輝樹 教授
研究協力者 齋藤 美和 特別助教 (登録予定)

専門分野・キーワード 固体化学 / 無機材料化学 / 物性化学 / 遷移金属酸水酸化物

SPECIALIZED FIELD・KEYWORD

Solid State Chemistry / Inorganic Materials Chemistry / Chemistry of Electronic Materials / Transition-Metal Oxyhydroxides



Prof.
T. MOTOHASHI

▶ アニオン不定比性酸水酸化物の合成と結晶構造化学

酸化物 (O^{2-}) と水酸化物 (OH^-) が共存する酸水酸化物 (oxyhydroxides) に着目しています。酸水酸化物は古くから知られる化合物群であり、固体化学的には正真正銘の複合アニオン系ですが、アニオン不定比性を積極的に意識した研究はほとんど行われてきませんでした。本研究では、このような不定比性酸水酸化物について、結晶構造化学の構築・機能性材料の創出を目指して以下に列挙するような研究を推進し、複合アニオン系機能性材料としての酸水酸化物の地位の確立を図ります。

1. O^{2-}/OH^- 比の制御に基づく精密合成法の確立
2. 熱重量 (TG) / ガス分析を駆使した化学組成分析
3. 両アニオンの配置を議論するための精密な結晶構造解析
4. イオン伝導性、電極触媒活性など機能性の開拓

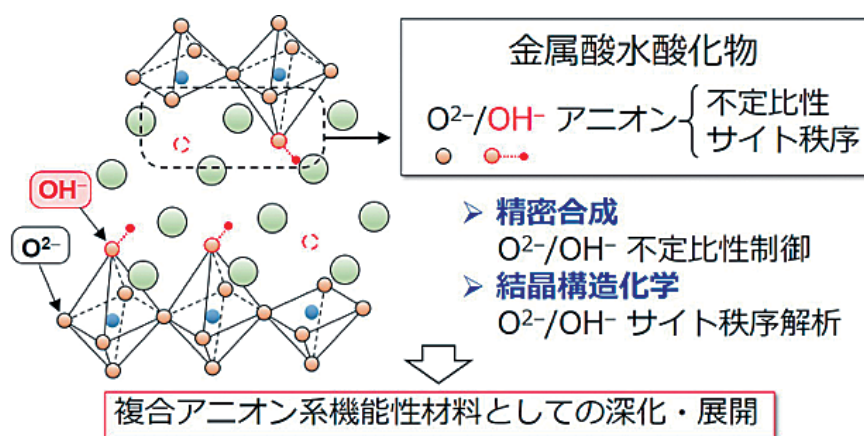


図 酸水酸化物における結晶構造化学・機能性開拓の研究コンセプト

新学術への情熱・メッセージ

過去に典型的な複合アニオン系である酸窒化物の研究に携わってまいりました。自身の異動に伴う研究事情により酸窒化物の研究を休止していますが、代わりに別の複合アニオン系とし

て酸水酸化物に着手した次第です。本研究領域において、複合アニオン化合物のエキスパートの先生方と議論を交わせることを大変喜ばしく思っております。

公募研究メンバー紹介 (A01)

物質・材料研究機構

National Institute for Materials Science (NIMS)

領域所属 A01 班 公募研究
研究代表者 辻本 吉廣 主任研究員

専門分野・キーワード 固体物性化学 / 高压合成 / 低温合成 / 低次元磁性 / 強相関物質 / 高压物性

SPECIALIZED FIELD・KEYWORD

Solid State Chemistry / High Pressure Synthesis / Low Temperature Reaction /
Low Dimensional Magnetism / Strongly Correlated Materials



Senior Researcher
Y. TSUJIMOTO

▶ アニオン格子工学に基づいた新規複合アニオン物質の創成

化学的性質が大きく異なるアニオンを複数組み合わせることにより、新しいアニオン格子または配位環境が得られ、非従来型の機能・物性の発現が期待されます。複合アニオン物質の研究における関心事の一つとして、アニオンサイトの秩序構造の制御であり、その方法を確立することは構造と特性の関係を理解する上で極めて重要になります。本研究では、アニオンサイトの配位環境が明確に異なる層状構造物質に注目し、アニオンサイトの秩序配列と自由度の戦略的制御に基づいて、新奇な配位構造と電子状態、異常高原子価状態の創出に取り組んでいます。

1. アニオンサイトの秩序配列と自由度の確立
2. 複合アニオンによる異常配位状態の創出
3. 新奇低次元物性の探索
4. 配位構造変換による電気・磁気状態の制御
5. 放射光・中性子回折法による（磁気）構造解析

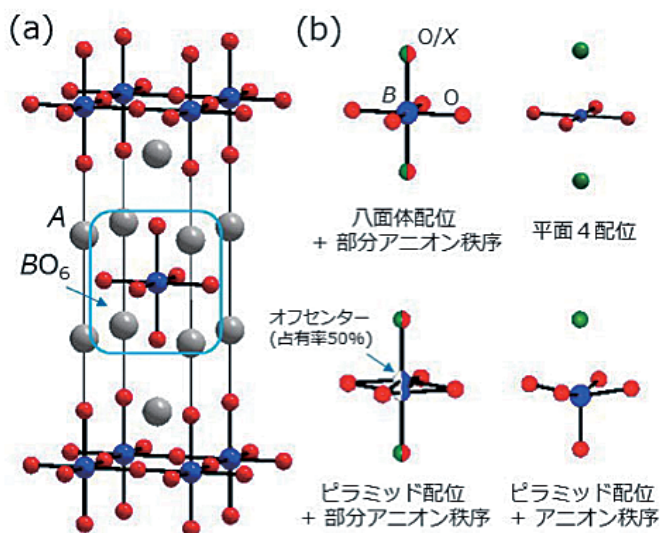


図 (a) Ruddlesden-Popper 型層状ペロフスカイト物質 A_2BO_4 の構造
(b) 金属 B 中心周りの配位構造とアニオンサイトの秩序配列の様子

新学術への情熱・メッセージ

従来に無い新規材料の合成に情熱をもって取り組んでいます。アニオンよりも個性豊かな本研究領域のプロフェッショナルとの

交流・共同研究を通じ、複合アニオンの物性科学に貢献いたします。

公募研究メンバー紹介 (A02)

北陸先端科学技術大学院大学情報科学系 前園研究室

School of Information Sci., JAIST Maezono Lab

領域所属 A02 班 公募研究
研究代表者 前園 涼 准教授
研究協力者 本郷 研太 助教 (登録予定)

専門分野・キーワード 物性理論 / 第一原理計算 / 多体電子論 / マテリアルインフォマティクス

SPECIALIZED FIELD・KEYWORD

Condensed matter theory / Ab initio / Many-body theory / Materials informatics



Assoc. Prof.
R. MAEZONO

実験グループへの技術移転 / 複合アニオンの電子状態計算協働教育

産学連携や外部協働で培ってきた遠隔サーバ利用促進と実験実務者向けの教程を活用し、領域内で合成に取り組む若手研究者を対象に第一原理計算の遠隔利用技術を指導 / 普及させ、当該領域で期間中に期待される新規複合アニオン物質に対し、現場の合成実験家が、いち早く自らの手で電子状態計算解析も含めて世界で最初に発信できるよう技術移転を図る。基盤研究的性格との徹底した差別化を意識し、理論方法論としての独創性追求は別資金プロジェクトに押し込め、定形の基礎物性計算 (全協働に共通するバンド分散 / フェルミ面 / フォノン分散 / 構造安定性評価) を「理

論研究からスピナウトすべきツール」とプラグマティックに捉え、「理論家の手を離れても自律的に回る技術移転」を目標に据える。別主務 (実験) を持つ研究者が、副テーマとして計算に携わる際のモチベーション維持の重要性を考慮し、そのための仕掛けや、サーバ・ログ管理教育に一定の重点を置いて研究を遂行する。「領域内大学院生の、申請者グループへの訪問 / 習得」という一方向ではなく、「申請者らが協働先に出張し遠隔サーバ利用のためのサーバ環境整備を行う」という逆方向の展開も行う。

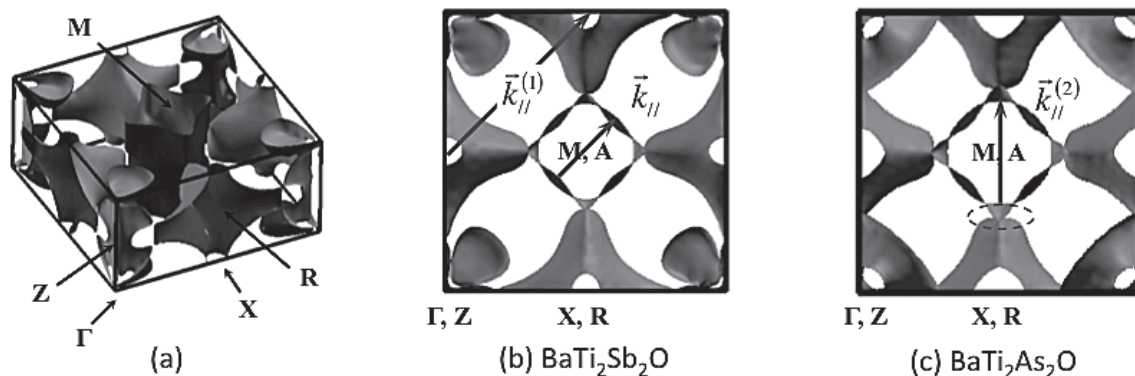


図 チタンニクタイト酸化物のフェルミ面 (合成実験出身者による大型スパコン利用成果)
N.Nakano, K. Hongo, and R. Maezono, Sci. Rep. 6, 29661 (2016)

新学術への情熱・メッセージ

既に領域内の幾つかのグループと第一原理シミュレーションで協働を開始しています。先方からの大学院生も当方グループに滞在して、手法を習得し、JAISTの大型スパコン上でシミュ

レーションが廻り始めています。公募研究での予算は、本領域での大学院生滞在 (領域内留学) に関わるものを目的としていますので、是非、お気軽にお声がけ下さいませ。

公募研究メンバー紹介 (A02)

大阪府立大学 大学院工学研究科 森研究室

Graduate School of Engineering, Osaka Prefecture University
Mori Lab

領域所属 A02 班 公募研究

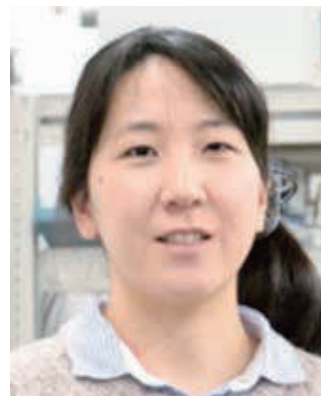
研究代表者 石井 悠衣 助 教

連携研究者 河川 彰吾 研究員

専門分野・キーワード 無機固体化学 / 新物質探索 / 透過型電子顕微鏡

SPECIALIZED FIELD・KEYWORD

Solid State Chemistry / New Materials / Transmission Electron Microscopy



Assist. Prof.
Y. ISHII

▶ 構造揺らぎと伝導電子の相互作用による新機能の創成

酸素四面体などの多面体が頂点共有により連結したネットワーク構造を持つ物質においては、一般に、多面体自体は歪まずに、多面体の連結角度が曲がることにより生じる低エネルギーの格子振動モードの存在が指摘されています。これらは構造相転移の引き金となることがあり、 SiO_2 の多形が示す不整合相転移等がその例です。しかしながら、こうした低エネルギーモードを示す物質は典型元素主体の化合物が多く、これまで機能性電子材料やとりわけ強相関電子系の枠組みからは外れてきました。最近我々は、充填トリジマイト型酸化物 $\text{Ba}_{1-x}\text{Sr}_x\text{Al}_2\text{O}_4$ において構造不安定性が解消されず、 AlO_4 四面体からなる骨格構造が、広範な温度

(800 ~ 15 K) で低エネルギー振動を続ける新奇な現象を見出しました。本研究では、複合アニオン化を用いて電子状態を制御し、構造揺らぎと伝導電子の相互作用を利用した新規伝導現象の発現を目指します。

1. 4面体を基本とする新規強誘電体の合成と物性
2. 放射光 X 線熱散漫散乱を利用した低エネルギーフォノンの解析
3. 電子線回折、透過型電子顕微鏡観察と結晶構造解析
4. 複合アニオン化を利用した新規機能性の開拓

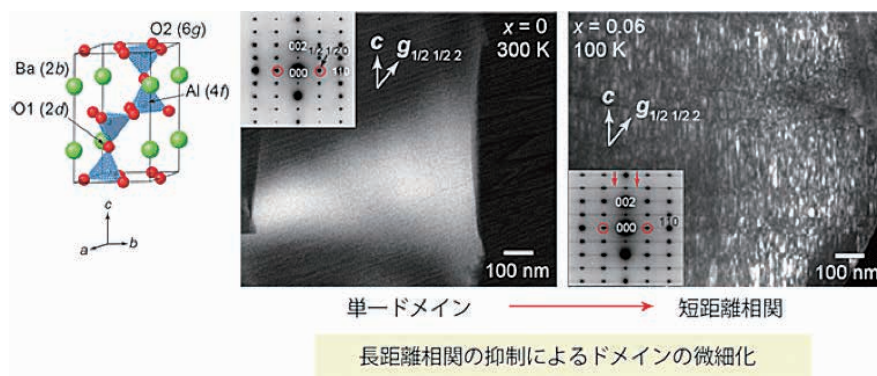


図 $\text{Ba}_{1-x}\text{Sr}_x\text{Al}_2\text{O}_4$ の暗視野 TEM 像。Sr 置換量の増加に伴い長距離相関が抑制され、短距離相関からなるドメイン構造が発達する。

新学術への情熱・メッセージ

これまでスポットライトが当てられて来なかった物質群ですが、シンプルな結晶構造かつフレキシブルな元素選択性を有します。複合アニオン化を利用し、面白い物性を引き出したいと

考えています。また、新しい合成手法にもチャレンジして行きたいと思っています。

公募研究メンバー紹介 (A02)

東北大学 金属材料研究所

Institute for Materials Research, Tohoku University
M.FUJITA Lab

領域所属 A02 班 公募研究
研究代表者 南部 雄亮 准教授

専門分野・キーワード 中性子散乱 / 結晶・磁気構造解析 / 対相関関数 / 偏極中性子

SPECIALIZED FIELD・KEYWORD

Neutron Scattering / Crystal, magnetic structure analysis / Pair Distribution Function / Polarized Neutron



Assoc. Prof.
Y. NAMBU

▶ 中性子を用いた結晶・磁気構造解析と新奇酸窒化物の合成

複合アニオン化合物が示す新機能の解明には構造同定が基本となりますが、通常の構造解析法によるアニオン位置の決定は容易ではありません。還元条件下で合成される試料では磁気モーメントが小さいこと、構造の複雑性ゆえに磁気相関長が短距離であることなども予想され、複雑な磁気構造の決定は一般的には困難であると考えられます。これらの問題を解決するため、中性子散乱法を駆使した構造同定を提案します。結晶構造については粉末回折結果に対する Rietveld 解析に加え対相関関数測定や偏極中性子を用いた水素位置の同定を、磁気構造解析については群論的考察に基づいた解析を行っています。また、複合アニオンが織りなす軌道自由度の変化に注目し、新奇酸窒化物の合成とその構造解析

も行います。A01 班との連携の元で試料合成も行い、構造同定の結果を即座にフィードバックすることで、A01 班と A02 班の橋渡しの役割を務めたいと考えています。

1. 絶縁体－金属転移近傍に位置する鉄系化合物の磁気構造解析
2. Ruddlesden-Popper 型層状ペロブスカイト物質の磁気構造解析
3. 鉄系梯子型物質群の磁性と超伝導
4. ペロブスカイト型アニオン欠損秩序構造物質の磁気構造解析

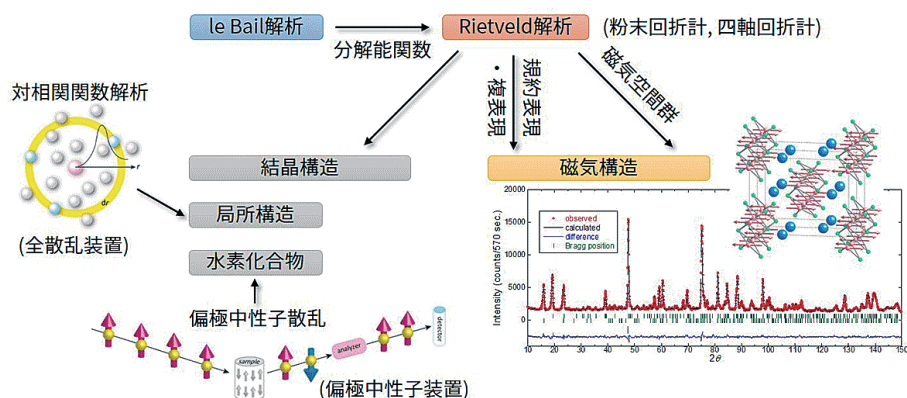


図 中性子を用いた複合アニオン化合物の結晶・磁気構造解析の流れ

新学術への情熱・メッセージ

中性子を用いた構造解析と物理的な観点に基づいた物質合成で貢献していきたいと考えています。敷居が高いと思われがち

な中性子の研究について、その有用性や威力を知っていただけるよう頑張ります。

公募研究メンバー紹介 (A02)

筑波大学 数理物質系物理工学域

Institute of Applied physics, University of Tsukuba

領域所属 A02 班 公募研究
研究代表者 関場 大一郎 講師

専門分野・キーワード イオンビーム分析 / 水素分析 / 表面・界面物理 / ラザフォード後方散乱 / 反跳原子検出法 / 共鳴核反応法

SPECIALIZED FIELD・KEYWORD

Ion beam analysis / Hydrogen analysis / Surface and interface science / Rutherford backscattering spectrometry / Elastic recoil detection analysis / Nuclear reaction analysis



Lecturer
D. SEKIBA

▶ 元素依存のない検出効率を持つ飛跡分析型 RBS/ERDA の開発

これまで単結晶金属表面と単純な 2 原子分子 (O_2 や N_2 など) の相互作用について研究してきました。主に酸素が解離吸着した well-defined な再構成表面について角度分解光電子分光法や操作トンネル顕微鏡などを用いて化学物理的な視点から研究していました。何回目かのポストドクのと看、与えられたテーマがイオンビームを用いた金属表面およびサブサーフェスの水素分析でした。水素ほど身近で、かつ実験的な観察の難しい 2 原子分子はないと認識したのはこの頃からです。以降、薄膜では酸素や窒素の絶対定量も決して簡単ではないと再認識し、共同研究による装置開発を通して知らぬ間に複合アニオンの世界に足を踏み入れていました。新学術領域のスタートと共にいろいろな系の存在を知り、ますますその魅力に引きつけられています。

1. H や Li でも検出効率の落ちない TOF-E telescope ERDA の開発
2. dE-E telescope ERDA の深さ分解能向上
3. 高感度・高分解能 ERDA の開発とそれに向けた多チャンネル SSD の開発
4. 埋もれた界面における高感度・軽元素分析技術の開発

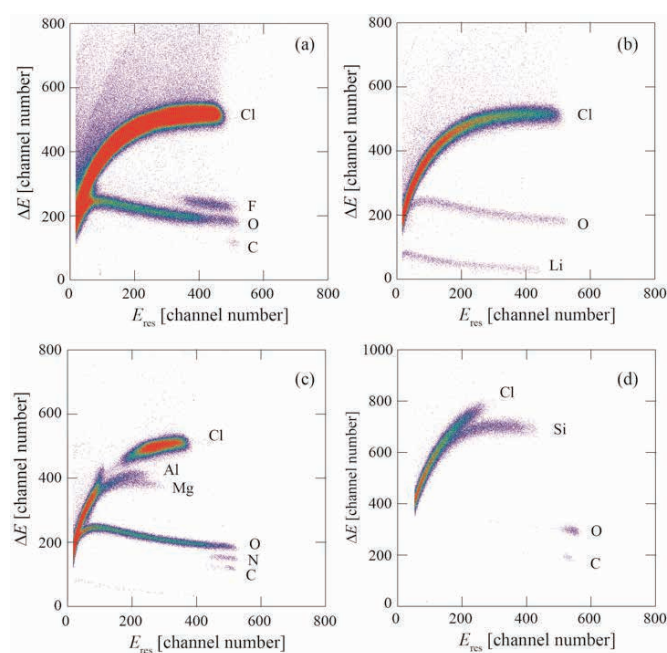


図 $(\Delta E-E)$ histograms taken on (a) the InO_xF_y film ($t = 125$ nm) on the $Y:ZrO_2$ substrate, (b) the thick $LiTaO_3$ plate, (c) the CoO_xN_y film ($t = 90$ nm) on the $MgAl_2O_4$ substrate and (d) the SiO_2 film ($t = 47$ nm) on the Si wafer.

新学術への情熱・メッセージ

固体物理学として研究や装置開発をしていた頃は、パラメータに対する物性変化を傾向、もしくは相対的な尺度で観察して満足していました。幸いなことに開発した装置を化学者や企業の研究者に使っていただく機会が増えて以降、いかに絶対値や

他の物質系や装置との整合性が大事かを痛感しました。今後も様々なバックグラウンドを持つ方々との共同研究を通して視野を広げていきたいと思っています。

公募研究メンバー紹介 (A02)

大阪大学 大学院理学研究科 黒木研究室

Department of Physics, Osaka University K. KUROKI Lab

領域所属 A02 班 公募研究

研究代表者 越智 正之 助 教

連携研究者 黒木 和彦 教 授

専門分野・キーワード 第一原理計算 / 物性物理学 / 電子相関効果

SPECIALIZED FIELD・KEYWORD

First-principles Calculation / Condensed Matter Physics / Electron Correlation Effects



Assist. Prof.
M. OCHI

▶ 第一原理計算と動的平均場理論を組み合わせた強相関物性の研究

複合アニオン化合物は、その設計自由度の高さから、従来材料を超えた機能の発現が期待されています。しかしその一方で、従来の酸化物研究での常識が必ずしも通用しないような複合アニオン化合物において、その多自由度性をより有効に活かすための設計指針を見出すことは容易ではありません。そこで本研究では、特に強相関物性に注目して、電子状態計算による解析を行い、物質探索の道標を見出すことを目指します。ここで動的平均場理論という計算手法を第一原理計算と組み合わせて用いることで、現実の物質との対応関係を保ちながら、超伝導秩序や磁気秩序などの物質機能発現のために望ましい条件を見出します。さらに

は、そのような解析を通して得た知見を用いて、高機能性材料の設計指針の理論的提案も目指します。また、本領域における実験グループとの共同研究を通して、新規アニオン化合物の機能解明も目指します。

1. 複合アニオン化合物における結晶場と物性との相関解明
2. 高機能性材料の設計指針の理論的提案
3. 実験グループとの連携による新規アニオン化合物の機能解明

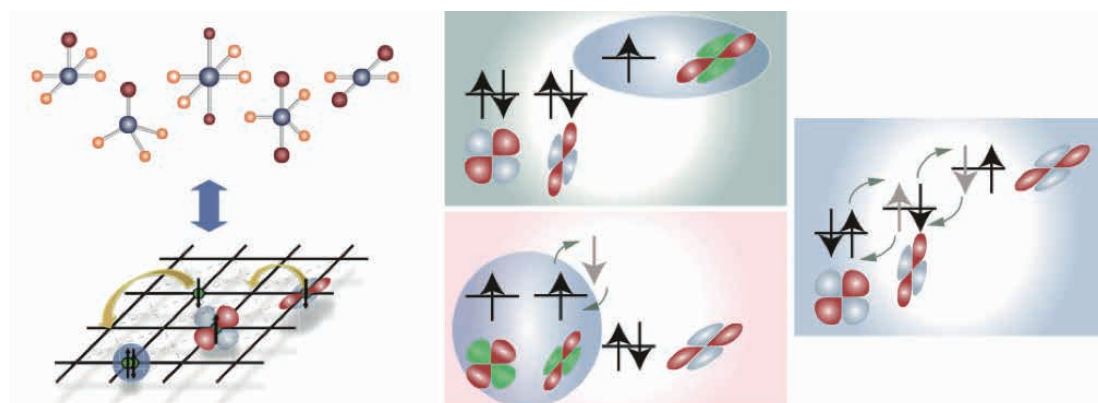


図 複合アニオン場の多自由度性

新学術への情熱・メッセージ

これまで様々な物性機能の研究を電子状態計算によって行ってきた経験を活かし、理論研究の立場から、未知の可能性の広

がっている複合アニオン化合物に関する新しい知見を見出していきたいと思います。

■ 公募研究メンバー紹介 (A02)

豊田工業大学 大学院 工学研究科

Graduate School of Engineering, Toyota Technological Institute

領域所属 A02 班 公募研究

研究代表者 山方 啓 准教授

研究協力者 Junie Jhon M. Vequizo PD

Chandana Sampath Kumara Ranasinghe PD

専門分野・キーワード 表面分光 / 触媒・電気化学 / レーザー分光 / 光触媒 / 光励起キャリアダイナミクス

SPECIALIZED FIELD・KEYWORD

Surface Spectroscopy / Catalysis & Electrochemistry / Laser Spectroscopy / Photocatalysts / Carrier Dynamics

▶ レーザー分光を用いた光触媒反応メカニズムの解明



Assoc. Prof.
A. YAMAKATA

金属酸化物や金属酸窒化物半導体材料を用いた光触媒反応のメカニズムを調べる研究を行っています。光触媒反応は、半導体のバンドギャップを光で励起して生成した電子と正孔がそれぞれ還元反応と酸化反応を引き起こすことで進行します。したがって、その活性は、光励起電子と正孔が再結合によって失活する速度と実際に反応分子へ電荷が移動速度の比で決まります。よって、活性を上げるためには、光励起キャリアの動きを理解し、その動きを制御する必要があります。我々は最新の時間分解レーザー分光測定技術を駆使して、触媒の組成や構造の違いによって再結合速度や電荷移動速度がどのように変わるかを理解し、電子と正孔の動きを制御することで光触媒の活性を向上させることを目標に研究を行っています。固体表面の触媒作用を利用して化学反応を制御することで、エネルギー問題や環境問題の解決に貢献したいと考えています。

1. 時間分解可視中赤外レーザー分光を利用した金属酸窒化物光触媒反応メカニズムの解明
2. 電場を印加した光電極中におけるキャリアダイナミクスの解明
3. ヘテロ接合界面における光励起電子と正孔の分離過程の解明
4. 発光材料や電極材料におけるキャリアダイナミクスの解明
5. 高性能光触媒・光電極材料の開発

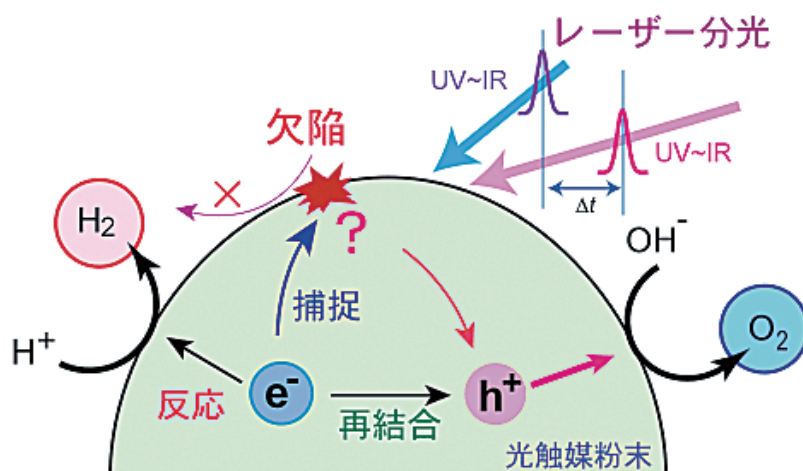


図 時間分解時間分光測定を利用した光励起キャリアの観察と光触媒反応のメカニズム解明

新学術への情熱・メッセージ

これまでに様々な材料が開発されてきました。これらの材料は光触媒や、発光材料、あるいは、電極材料として、様々な用途に利用されてきました。しかし、これらの材料は、開発者の

使用目的を超えた新しい機能を有している可能性があります。光と電子をキーワードに、その材料が有する新しい潜在能力を発掘することが本研究の目標です。

公募研究メンバー紹介 (A03)

東北大学 理学研究科 巨視的量子物性研究室

Graduate School of Science, Tohoku University Ohgushi Lab

領域所属 A03 班 公募研究
研究代表者 青山 拓也 助 教

専門分野・キーワード 高圧物理 / 磁性体 / 強誘電体 / マルチフェロイクス

SPECIALIZED FIELD・KEYWORD

High pressure physics / Magnetic materials / Ferroelectrics / Multiferroics

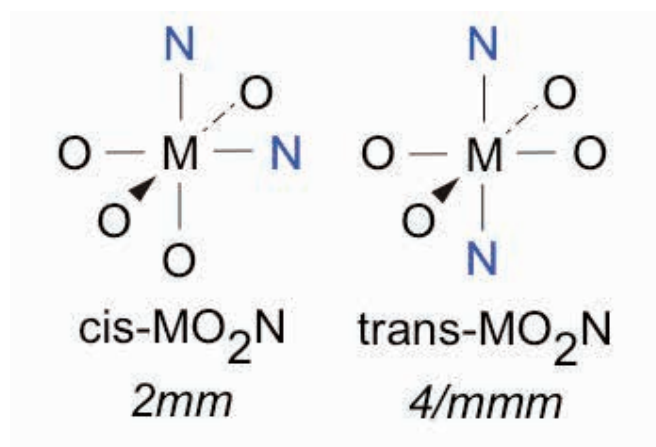


Assist. Prof.
T. AOYAMA

▶ 複合アニオンの配置自由度を利用した高機能磁性絶縁体の探索

複合アニオン化合物のなかでも、二種類のアニオンを MX_6 配位多面体中に 2:1 の割合で含む場合にはアニオン空間配列の cis-trans 自由度が現れ、母物質の配位子の対称性が $m-3m$ と高対称な場合であっても、アニオン配置によって $2mm(cis)$ や $4/mmm(trans)$ に低下します。この局所対称性の低下を機能性につなげるべく研究を進めます。

また、遷移金属サイトを中心に考えると複合アニオンの導入は配位子場の非対称性・異方性の導入と考えられます。圧力印加による体積減少は遷移金属-配位子の混成や配位子場分裂を増強することから複合アニオンの効果が高圧力下では顕著に現れると期待しています。



1. フラストレート磁性体における磁気誘起強誘電性と電気磁気効果
2. Kitaev 相互作用を持つ磁性体における巨視的量子物性の開拓
3. 低温・高圧力下・磁場中における基礎物性測定

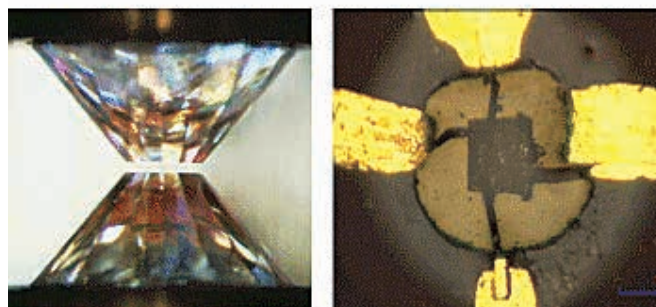


図 MX_6 配位多面体における cis-trans 自由度 (上)
ダイヤモンドアンビルセルを用いた電気磁気測定 (下)

新学術への情熱・メッセージ

極限環境測定技術を生かして領域に貢献できるよう頑張っています。

公募研究メンバー紹介 (A03)

新潟大学 大学院 自然科学系 由井研究室

Graduate School of Science and Technology, Niigata University YUI Lab

領域所属 A03 班 公募研究
研究代表者 由井 樹人 准教授

専門分野・キーワード 光エネルギー移動 / 無機層状化合物 / ナノシート / 光触媒

SPECIALIZED FIELD・KEYWORD

Photoinduced Energy Transfer / Inorganic Layered Materials / Nanosheets / Photocatalysts



Assoc. Prof.
T. YUI

▶ 層状化合物を鋳型とする光機能材料の創生

無機層状化合物は、結晶性の板状無機結晶が積層した構造を有しており、その層間に様々な機能性化学種を導入可能である。そのため無機結晶と層間分子との相乗効果が期待できる。また層間に取り込まれた化学種は、無機化合物の規則性を反映し、層間で規則構造をとることが多い。光反応は、時間と距離に強く依存する反応であり、分子の固定化・配列化に伴う光機能の高機能化にとって無機層状化合物は極めて有用な物質群である。さらに無機層状化合物は、適切な条件で処理をすると透明な薄膜を得ることも可能である。多くの化学反応は、溶液や粉体を分散させた系

で行われているが、膜状の形態はデバイス化にとって極めて有用である。これらの特徴を利用した、光機能性膜の構築を目的としております。

1. 無機層状化合物 / アニオン色素との積層化
2. 積層体の透明膜化
3. 積層膜の構造解析と機能の相関
4. 光機能性アニオン色素の開発
5. フォトンアップコンバージョン膜への展開

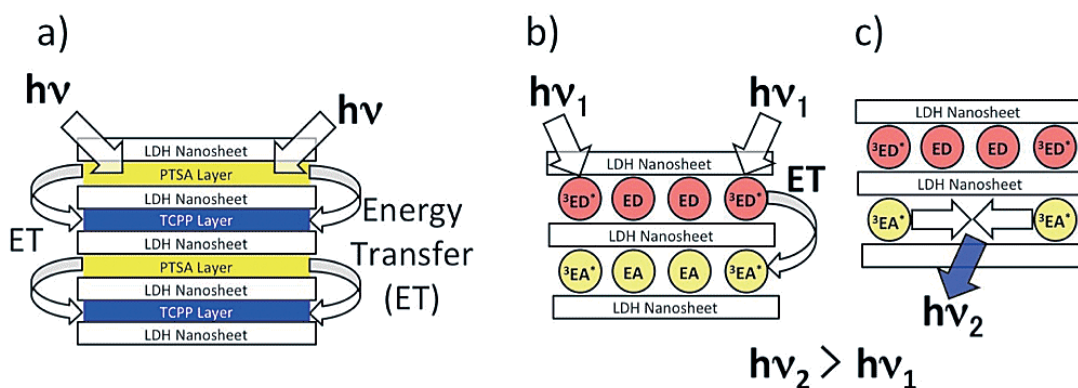


図 (a) 層状化合物 (LDH) を鋳型とするアニオン色素交互積層膜のエネルギー移動 (Yui, J. Porphyrin Phthalocyanine 2007)
(b) LDH 膜内での三重項エネルギー移動
(c) 三重項-三重項消滅による短波長発光

新学術への情熱・メッセージ

無機層状化合物を鋳型とすることで、複数のアニオン性分子の集積・積層・膜化が可能です。多数の機能を配列させること

でシナジー的な効果が期待され、この効果を活用した新規機能性材料の創生に取り組みたいと思います。

公募研究メンバー紹介 (A03)

大阪大学 大学院 工学研究科 今中研究室

Osaka University IMANAKA Lab

領域所属 A03 班 公募研究
研究代表者 今中 信人 教授

専門分野・キーワード 無機材料 / 希土類科学 / 固体電解質 / ガスセンサ / 顔料 / 環境触媒 / 蛍光体

SPECIALIZED FIELD・KEYWORD

Inorganic materials / Rare Earths Science / Solid electrolyte / Gas sensor / Pigment / Environmental catalyst / Phosphor



Prof.
N. IMANAKA

▶ 複合アニオン効果を利用した新規ハロゲン化物イオン伝導体の創製

単純なハロゲン化物は、多くの場合、対応する酸化物と比較して化学的・熱的安定性に劣るため、デバイスとしての利用が困難です。一方で、複合アニオンであるオキシハロゲン化物は、耐熱性・耐水性に優れているため、デバイスへの応用が期待できます。これまでに我々は、オキシ塩化物に着目し、新規塩化物イオン伝導体 ($\text{La}_{0.8}\text{Ca}_{0.2}\text{OCl}_{0.8}$) を創製したところ、単純塩化物と比較して高い耐熱性・耐水性に加え、高い導電率を有することを見出しています。さらに、これを用いて塩素ガスセンサを作製したところ、塩素ガス濃度を精度良く計測することも可能にしています。

本研究グループでは、このような特殊な性質を有する複合アニオン化合物について、複合アニオン効果を明確にすることで、斬新なハロゲン化物イオン伝導性固体の創製ならびに機能性材料化への展開を行います。

1. 新規なイオン伝導性固体の開発
2. 一酸化炭素を始めとしたガスセンサの開発
3. 揮発性有機化合物やメタンを浄化する環境触媒の創成
4. 優環境型の無機顔料の創成
5. 新しい無機蛍光体の創成

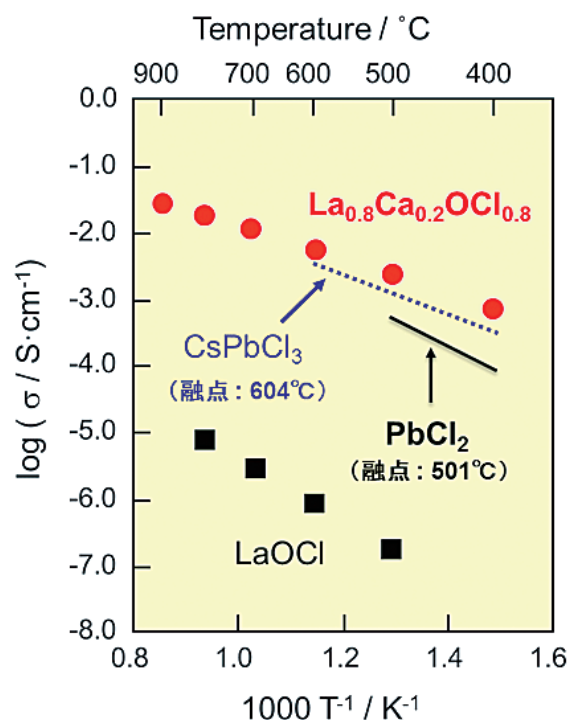


図 塩化物イオン伝導性固体の導電率の温度依存性

新学術への情熱・メッセージ

これまでに、複合アニオン化合物を活用した新しい固体電解質やガスセンサの創製を行ってきました。今回の新学術領域では、これらの特性に大きく影響を及ぼしていた複合アニオン効

果についてさらに言及し、さらなる特性の向上および機能性材料化への展開を目指して取り組んでいきます。

公募研究メンバー紹介 (A03)

熊本大学 大学院 先端科学研究部 伊田研究室

Graduate School of Science and Technology, Kumamoto University S.IDA Lab

領域所属 A03 班 公募研究
研究代表者 伊田 進太郎 教授

専門分野・キーワード 無機材料化学 / 二次元材料 / プロトン伝導 / 光触媒

SPECIALIZED FIELD・KEYWORD

Inorganic Materials Chemistry / 2D-Materials / Proton conductor / Photocatalyst



Prof.
S. IDA

▶ 2次元材料を用いた機能性材料の開発とその応用

層状化合物のホスト層の単層剥離によって得られる二次元 (2D) 材料は、厚さ約 1 ナノメートル、四方の広さが数マイクロメートルの形状を持っています。このような 2D 材料を用いると、これまでにない触媒構造、発光材料、電子デバイスなどを設計できる可能性があります。本研究では、このような 2D 材料の基礎的な研究を主軸に、新規 2D 材料の合成やそれらを用いたエネルギー変換・貯蔵を指向した応用研究等を実施しています。その他、鉄系酸化物半

導体を用いた光電気化学水分解も実施しています。

1. 2D 材料を用いた光触媒の開発
2. 光誘起プロトン伝導体の探索
3. ナノシート蛍光体の開発
4. 窒素ドーパ酸化物ナノシートの合成
5. 鉄系酸化物半導体を用いた光電気化学水分解

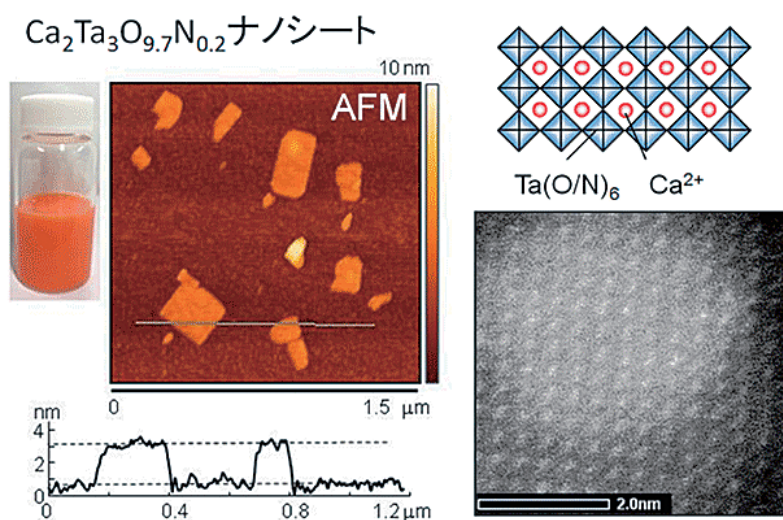


図 層剥離を用いた窒素ドーパ酸化物ナノシートの合成

新学術への情熱・メッセージ

この新学術領域で、二次元材料ならではの物性を発見したいと思っています。また、層状体の剥離を得意としております

ので、それらの関連分野で共同研究が実施できたらと期待しています。

■ 公募研究メンバー紹介 (A03)

大阪府立大学 大学院 工学研究科 応用化学分野

Department of Applied Chemistry, Graduate School of Engineering,
Osaka Prefecture University

領域所属 A03 班 公募研究
研究代表者 林 晃敏 教授

専門分野・キーワード 無機材料化学 / メカノケミストリー / イオン伝導体 / 全固体電池

Inorganic Materials Chemistry / Mechanochemistry / Ionic Conductor /
All-Solid-State Battery



Prof.
A. HAYASHI

▶ 全固体電池にむけたリチウムイオン伝導性硫窒化物の創成

安全性と高エネルギー密度を有する全固体電池の実現に向けて、イオン伝導性や成形性、化学安定性を兼ね備えた多機能性固体電解質の開発が必要です。これまでに、主にメカノケミカル法を用いて、様々な硫化物および酸化物ガラス系電解質を開発し、全固体電池へ適用してきました。導電率の観点で優れている硫化物電解質の最大の弱点である化学安定性を改善する上で、硫黄の一部を酸素や窒素に置換する複合アニオン化が有効です。本研究では、 Li_3N を窒素源かつリチウム源として用いたメカノケミカル処理によって、これまでほとんど検討されていない硫窒化物固体電解質の探索を行います。

1. メカノケミカル法を用いた機能性無機材料の開発
2. 硫化物および酸化物ベース固体電解質の探索と全固体電池への応用
3. 液相法や気相法を用いた固体界面の構築と評価

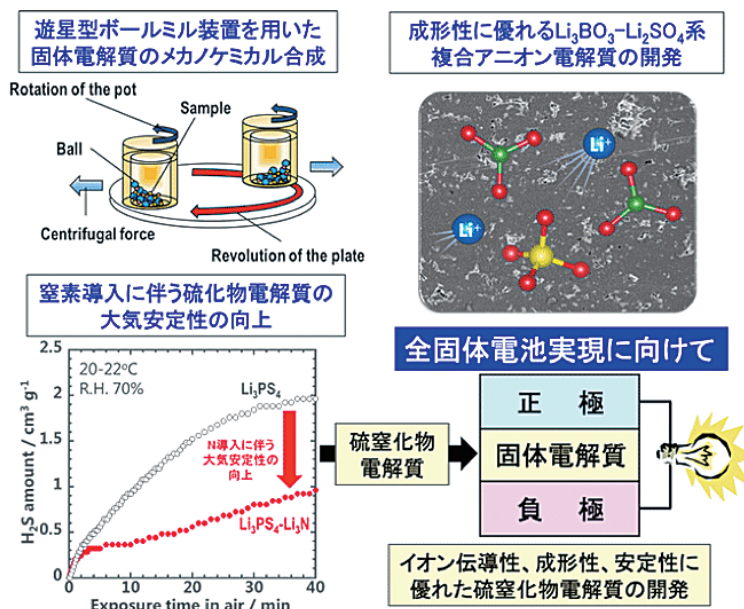


図 メカノケミカル法を用いた複合アニオン系固体電解質の開発

新学術への情熱・メッセージ

本プロジェクトには、様々な機能材料や構造解析に精通された多くの研究者が集っています。プロジェクト内での研究連携

を通じて、新しい知見や解析手法を取り込みながら、新規な硫窒化物材料の作製と機能創出を進めていきたいと考えています。

公募研究メンバー紹介 (A03)

分子科学研究所 協奏分子システム研究センター 小林グループ

CIMoS, Institute for Molecular Science, G. Kobayashi Lab

領域所属 A03 班 公募研究
研究代表者 小林 玄器 准教授

専門分野・キーワード 固体化学 / 固体イオニクス / 電気化学 / 酸水素化物 / ヒドリドイオン導電 / 高圧合成

SPECIALIZED FIELD・KEYWORD

Solid State Chemistry / Solid State Ionics / Electrochemistry / Oxyhydrides / Hydride Ion Conductors / High-pressure Synthesis

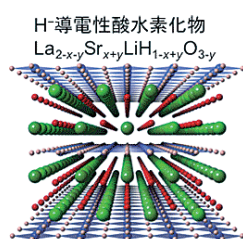


Assoc. Prof.
G. KOBAYASHI

▶ ヒドリド超イオン導電体の創成と導電機構解明

ヒドリド (H^-) は酸化物イオン (O^{2-}) と同程度のイオン半径をもつ 1 価のアニオンであり、サイズと価数の観点から高イオン導電が期待できます。さらに、 H^- は Mg と同程度の卑な酸化還元電位 ($E(\text{H}^-/\text{H}_2) = -2.25 \text{ V vs. SEH}$) と、1 価でありながら H^- から H^+ への 2 電子反応が可能な電荷の自由度を有することから、 H^- のイオン導電現象と酸化還元反応を利用した電池反応を実現することができれば、高エネルギー密度が得られる可能性があります。我々は、この H^- の電荷担体としての魅力的な特徴に着目し、 H^- と O^{2-} が結晶格子内に共存する酸水素化物を対象にした物質探索から、 H^- 導電性の固体電解質 $\text{La}_{2-x-y}\text{Sr}_{x+y}\text{LiH}_{1-x+y}\text{O}_{3-y}$ を見いだしました。本研究では、これまで取り組んできた H^- 導電性酸水素化物の物質探索から得られた知見を基に、中低温域で H^- 超イオン導電性を示す新物質の創成と H^- 導電機構の解明を目指します。

1. H^- 超イオン導電体の創成と、高速 H^- 拡散につながる物質設計指針の確立
2. H^- 導電性酸水素化物における H^- 導電機構の解明
3. H^- インターカレーション反応を利用した新物質合成と新機能の創出
4. H^- ・電子混合伝導体の創成
5. H^- 導電、 H^-/H_2 酸化還元反応を利用した新しい化学反応



- H^- 導電機構の解明
- 物質設計指針の確立
- 構造・組成の最適化

H⁻超イオン導電体

H⁻の電荷担体としての特徴

- 一価のアニオン
 - 導電に適したイオン半径
 - 卑な酸化還元電位: $\text{H}_2 + 2\text{e}^- \rightarrow 2\text{H}^-$ (-2.25 V vs. SHE)
 - 水素の電荷自由度を活かした2電子反応 ($\text{H}^- \rightleftharpoons \text{H}^+ + 2\text{e}^-$)
- 高速イオン導電の可能性

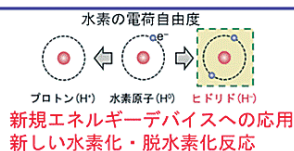


図 H⁻の電荷担体としての特徴と H⁻超イオン導電体の創成に向けた研究方針

新学術への情熱・メッセージ

酸水素化物は複合アニオン化合物の中でも新しい研究対象であり、合成方法、組成・構造・物性の関連性など、明らかになっていないことが数多く存在します。本領域での共同研究を通し

て酸水素化物に対する本質的な理解を深め、新機能の発現に繋がる物質設計指針を確立していきたいと思います。

■ 研究紹介 (A01)

トポケミカル反応を利用した新物質探索

産業技術総合研究所 荻野 拓

本研究グループでは、多元系化合物の物質設計及び超高圧・トポケミカル反応など特異環境を利用し、複合アニオン化合物の新物質探索と機能開拓を行っている。本稿ではトポケミカル反応を用いた物質開発の研究状況について報告する。

トポケミカル反応は、母体と酸化・還元剤とを低温で反応させ、母体構造を維持したまま挿入・置換・脱離等の反応を起こす手法で、高温合成では生成し得ない準安定構造や、高いキャリア量を実現する手法として最近注目を集めている。特にフッ化物を用いたトポケミカル反応は、酸化反応 (F^- の格子間サイトへの挿入又はインターカレーション)、還元反応 (O^{2-} サイトへの F^- の置換)、酸化数に変化しない反応 (O^{2-} が脱離し、 F^- が2個挿入) 等様々なバリエーションが存在する。

我々は、新しい超伝導体である BiS_2 層を持つ層状化合物ヘトポケミカルフッ化反応を試み、 Bi_2OS_2 と XeF_2 と反応させることにより酸素サイトのフッ素置換が起こり超伝導が発現することを報告している^[1]。 BiS_2 層を持つ化合物では他に $REOBiS_2$ でもフッ素置換が起こり、様々な母体でトポケミカル反応によるキャリアドープが可能である。通常、 XeF_2 は酸化的フッ化剤として作用することが多いがここでは還元的に働いており、これは BiS_2 層を持つ化合物が本質的に還元されやすい状態にあることを示している。

一方比較的良く知られたトポケミカル反応として、Ruddlesden-Popper 系列化合物のフッ化反応が挙げられる。岩

塩層間にフッ素が挿入されて蛍石構造を形成し、物質によっては同時に酸素サイトへのフッ素置換が起こる^[2~4]。Ruddlesden-Popper 化合物である $Sr_{n+1}Ru_nO_{3n+1}$ ($n = 1, 2, 3, \dots$) は $n = 1$ の Sr_2RuO_4 は超伝導を、 $n = 2$ の $Sr_3Ru_2O_7$ は反強磁性を示すなどわずかな構造の違いで物性が大きく変化する。また $Sr_3Ru_2O_7$ に対しトポケミカル反応を適用することで、 $Sr_3Ru_2O_7F_2$ の合成が報告されている^[5]。 $Sr_3Ru_2O_7F_2$ は $Sr_3Ru_2O_7$ の二枚の SrO 層間にフッ素層が挿入された構造を持ち強磁性を示す。この手法の適応候補は数多く存在し、母体とフッ化剤を検討することで様々な物質の合成が期待できる。ここでは層状ルテニウム酸化物 Sr_2RuO_4 へのトポケミカル反応について報告する。

Sr_2RuO_4 (図1(a)) に対し、フッ化剤 Polyvinylidene Fluoride (PVDF) もしくは MF_2 ($M = Cu, Zn$) と $250 \sim 350^\circ C$ の低温で反応させることでトポケミカル反応を行った。固相反応法で合成した Sr_2RuO_4 とフッ化剤 PVDF、又は MF_2 ($M = Cu, Zn$) を混合し、 $250 \sim 350^\circ C$ 、 $24 \sim 36$ h の条件でトポケミカル反応を行った。図2のようにいずれのフッ化剤を用いた場合でもX線回折パターンが大きく変化し、フッ素が導入／置換された $Sr_2Ru(O,F)_{6-\delta}$ が生成することが分かった。 MF_2 でフッ化した場合フッ化剤に由来する MO が残存した以外は、ほぼ単相の試料が得られた。 SrO 層間にフッ素層が導入されることで c 軸長が約 $12\text{\AA}$ から $15\text{\AA}$ 程度へと大きく伸長した。 Sr_2RuO_4 とフッ化剤との反応はごく最近薄膜で報告されているが^[6]、この場合には c 軸長が $16.9\text{\AA}$ と本研究とは大きく異なる値が報告されている。フッ

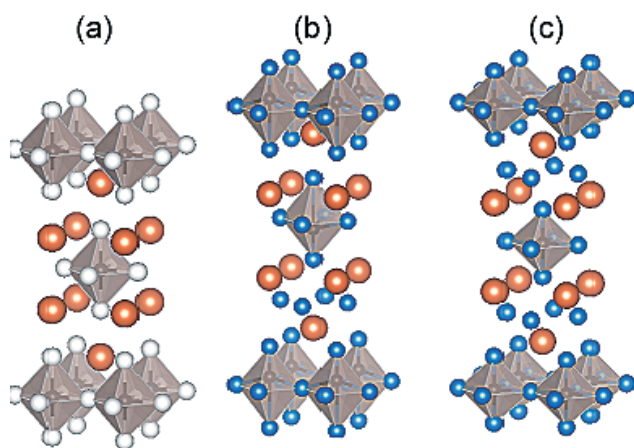


図1 Sr_2RuO_4 (a) 及びフッ化処理後に想定される二種の構造 (b,c)

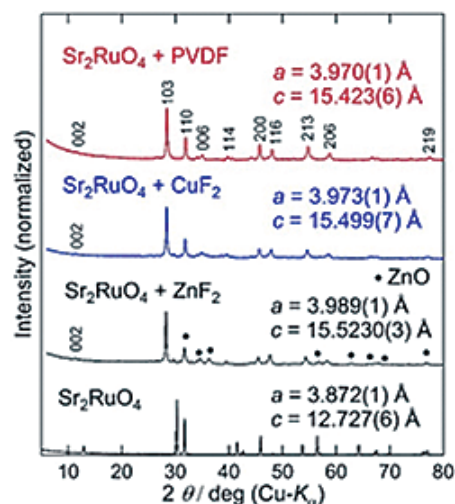


図2 各試料のX線回折パターン

素の挿入にはいくつかのパターンが考えられる (図 1 (b,c))、Rietveld 解析を行った結果、(b) 構造では収束せず (c) 構造の妥当性が高いことが分かった。これは [6] で提案されている構造と同様であるが、 c 軸長が $1\text{\AA}$ 以上異なる理由については不明である。また各フッ化剤を用いた試料はそれぞれ a 軸長、 c 軸長に有意な違いが見られ、フッ化剤の種類により化合物中の F 量が異なる可能性があることが分かった。それぞれのフッ化剤の酸化力の違いを反映した結果と考えられる。

$\text{Sr}_2\text{RuO}_3\text{F}_2$ は図 4 のように反強磁性的な転移を示し、各フッ化剤でその転移温度が異なっていた。また磁場中冷却 (FC) とゼロ磁場冷却 (ZFC) でヒステリシスを持つ挙動を示した。印加磁

場の増加に伴いヒステリシスが消失したことも考慮に入れると、スピングラス的な相互作用を持つと考えられる。また、PVDF でフッ化した試料の磁化率を Curie-Weiss 則 $\chi = \chi_0 + C / (T - \theta)$ でフィッティングしたところ、 $\theta = -267.7\text{ K}$, $C = 0.720\text{ emu K/mol}$ ($S = 0.80$) の値が得られた。 θ の値は Ru の価数がおおよそ +4 であることを示しているが、O/F 量の厳密な決定には至っておらず、今後の検証が必要である。PVDF でフッ化した試料の電気抵抗率は室温で $40\ \Omega\text{ cm}$ と比較的高く、半導体的な温度依存性を示した。RuO₆ 八面体の歪みや O²⁻ サイトへの F⁻ の置換による電子伝導経路の変化が原因として考えられる。

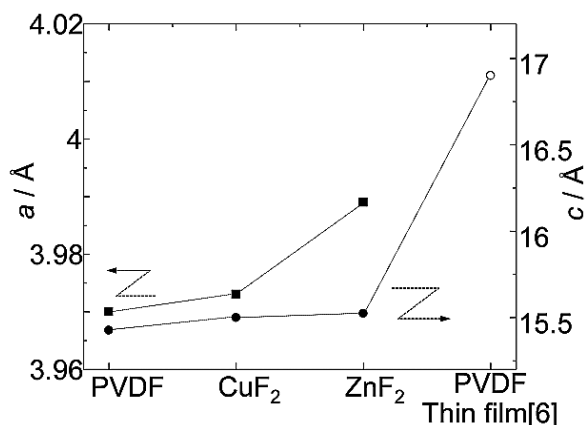


図 3 各フッ化剤でフッ化した試料及び薄膜試料の格子定数

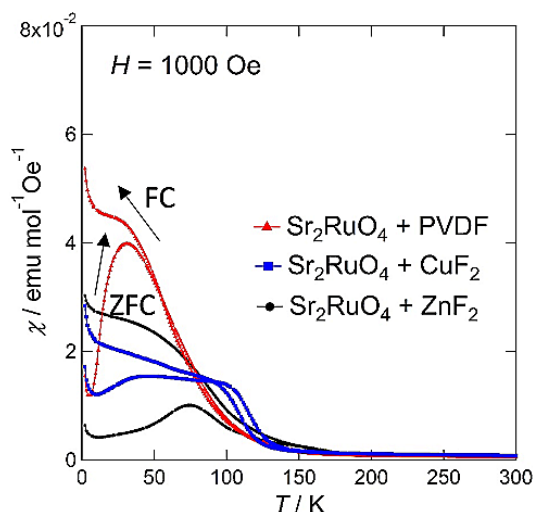


図 4 各試料の磁化率の温度依存性

本研究では、トポケミカル反応による新規酸フッ化物 $\text{Sr}_2\text{RuO}_3\text{F}_2$ の合成に成功した。磁化率はスピングラス的、抵抗率は半導体的な挙動を示し、いずれも母物質と大きく異なっていた。また格子定数が薄膜試料と大きく異なっており、フッ化剤の種類によっても有意な差が見られた。

トポケミカル反応は高いキャリア濃度が実現できること、母

体と反応剤との組み合わせにより新たな物質を生み出せることから、特異な配位構造や化学状態を持つ化合物の合成が期待できる。引き続き様々な化合物へのトポケミカル反応及び、新しい反応式の探索を進めている。

本研究は北村拓也、永崎洋、伊豫彰、下山淳一、岸尾光二、陰山洋 (敬称略) 各氏と共同で行ったものです。

- [1] T. Okada et al., *Appl. Phys. Express* **8** (2015) 023102.
- [2] L. D. Aikens et al., *Chem. Commun.* **21** (2000) 2129
- [3] P.R. Slater and R.K.B. Gover, *J. Mater. Chem.* **11** (2001) 2035
- [4] P. R. Slater, *J. Fluorine Chem.*, **117** (2002) 43
- [5] R. K. Li and C. Greaves, *Phys. Rev. B* **62** (2000) 3811.
- [6] K. Kawahara et al., *Cryst. Eng. Comm.* **19** (2017) 313.

■ 研究紹介 (A02)

中性子と X 線回折による複合アニオン化合物の構造解析

東京工業大学 理学院 化学系 八島 正知

新学術領域研究「複合アニオン化合物の創製と新機能」において、新しい複合アニオン化合物を合成し (A01 班)、新しい機能を見つけること (A03 班) が重要である。合成した新物質がどのような結晶構造を有するのか?なぜ機能が発現するのか?そのような課題を解決するのに結晶構造解析が最も有力な手段

である。平成 29 年 5 月 29 日 (月) 10:05 ~ 11:00、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 1 回若手スクールにおいて行った招待講演の内容を報告しながら、我々の研究についても紹介したい。講演では以下の 5 つの内容 (1) ~ (5) について説明した。

(1) 回折から何がわかるか?

無機結晶には様々なスケールの構造があるが、その中で回折法 (X 線回折、中性子回折、電子回折) からは、結晶性材料の最も基本的な情報である結晶構造、すなわち単位胞の平均構造がわかる。複合アニオン化合物の研究者は粉末回折を利用することが多いだろう。粉末回折データのピーク位置には格子定数と格子歪、ピーク幅には結晶子サイズと格子歪の情報が含まれる。ピークの面積である積分強度は構造因子の絶対値の二乗に比例し、積分強度は構造パラメーター (占有率、原子座標、原子変

位パラメーター) および電子・核密度分布の情報を含む。講演では粉末回折データを用いた結晶構造解析の手順について説明した。特に重要なことは化学組成が均一な試料を合成すること、化学組成などをあらかじめ化学分析等で精確に決めておくことである。中性子回折実験では比較的大量の試料を準備する必要があり、組成が均一で純度が高い、できれば単相の試料を合成するのが好ましい。

(2) X 線 (放射光) と中性子で何が違うか? ^[1]

回折装置は、線源、光学系、検出器から構成されている。線源として X 線、放射光 X 線、中性子あるいは電子を用いる。結晶構造解析には通常 X 線または中性子を使う。結晶構造解析において、X 線と中性子では何が違うのであろうか?最も大きな違いは、X 線原子散乱因子と中性子散乱長である。中性子回折法を用いると原子番号の大きい原子と共存する原子番号の小さい原子の構造パラメーターを正確に調べることができる場合が多い。また、原子番号が近接している原子を区別することが

できる場合がある。複合アニオン化合物である酸窒化物における酸素原子と窒素原子を区別するのは、X 線粉末回折法では難しい。一方、窒素原子の中性子散乱長が 9.36 fm であるのに対し、酸素原子は 5.803 fm と差があるため、同じ席に窒素原子と酸素原子が存在するときの占有率を決めることができる。例えば、 $(\text{Ga}_{0.87}\text{Zn}_{0.13})(\text{N}_{0.83}\text{O}_{0.16})$ における窒素原子と酸素原子は同じ位置 (空間群 $P6_3mc$ の $2b$ 席) に存在しており、それぞれの席占有率は $g(\text{N}) = 0.84(2)$, $g(\text{O}) = 0.16(2)$ であると見積もられた ^[2]。

(3) 最大エントロピー法による電子・核密度解析

最大エントロピー法 (MEM) は与えられた情報とその誤差から、わかっていない情報を推定する手法である。MEM を結晶構造解析に応用することによって、中性子回折データから原子核密度分布 (正確には散乱振幅密度分布) が、X 線回折データから電子密度分布が得られる。空間群の対称性を満たす限り、任意の分布が許されるので、原子や電子の複雑な空間分布を調べて、化学結合、原子位置のディスオーダー、異方性原子変位パラメー

ター、イオンの拡散経路などを研究できる。図 1 は TaON の (a) 精密化した結晶構造、(b) MEM 中性子散乱長密度分布、および (c) MEM 電子密度分布を示す ^[3]。中性子回折データのリートベルト解析により精密化した結晶構造と、放射光 X 線回折データのそれと良く一致する。図 1 (b) の中性子散乱長密度分布は原子の中心付近に局在するのに対して、図 1 (c) の電子密度分布は Ta と N 原子の間に広がり、共有結合を示している。

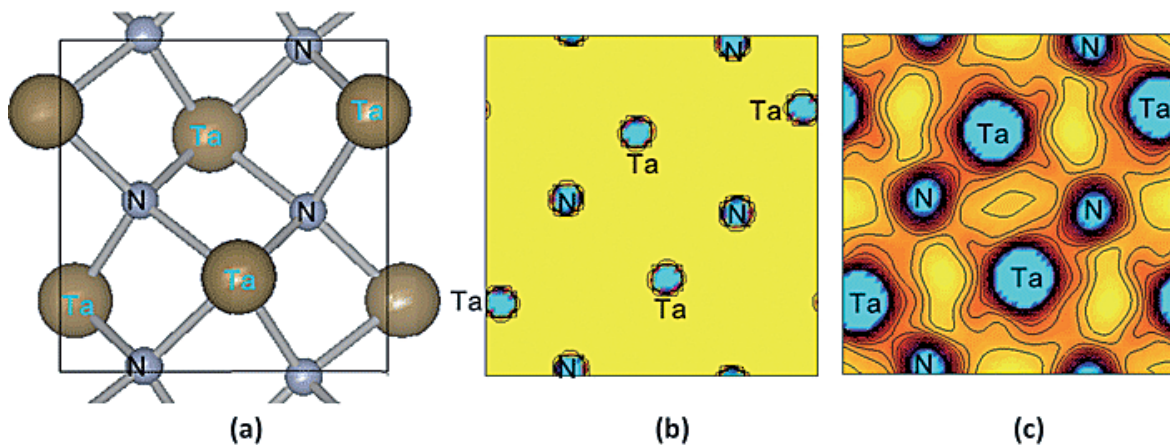


図1 TaONの(a)精密化した結晶構造、(b)MEM 中性子散乱長密度分布、および(c)MEM 電子密度分布

(4) 中性子とX線回折による複合アニオン化合物の結晶構造の研究

いくつかの可視光応答型光触媒の結晶構造と電子密度分布を説明した。

可視光応答型光触媒である酸硫化物 $\text{Sm}_2\text{Ti}_2\text{S}_2\text{O}_{4.9}$ は Ruddlesden-Popper 型構造を有している。硫黄 S 原子の結合原子価の総和 BVS が 2 であること、S がイオニックであることから S 原子が硫化物イオンとして存在することがわかった^[4]。Ti—O 間には Ti 3d と O 2p 軌道の重なりによる共有結合が存在する。S 原子の存在と Ti—O 共有結合のために、 $\text{Sm}_2\text{Ti}_2\text{S}_2\text{O}_{4.9}$ が可視光に応答すると考えられる。

可視光応答型光触媒であるペロブスカイト型酸窒化物 LaTiO_2N は斜方晶系、空間群 Imma に属することがわかった。電子密度分布は Ti—N 間および Ti—N 間の共有結合を示した^[5]。窒素 N の存在と、これら Ti—N 間および Ti—N 間の共有結合のために、

LaTiO_2N が可視光に応答するようになると考えられる。フラックス法により成長させた LaTiO_2N 粒子の空間群を、電子回折で決定したことが正確な構造解析と新しい発見につながった。また、中性子および放射光 X 線回折データのリートベルト解析による占有率の精密化、化学分析、赤外分光などいくつかの評価法により化学組成を確認する必要があった。

可視光応答型光触媒である酸窒化物 $(\text{Ga}_{0.885}\text{Zn}_{0.115})(\text{N}_{0.885}\text{O}_{0.115})$ はウルツ鉱型構造（空間群： $P6_3mc$ ）を有する。電子密度分布は (Ga,Zn)—(N,O) 間の共有結合とアニオン位置の不規則性を示した（図2）^[6]。N 2p または O 2p と Zn 3d 軌道の間で強い結合が生じ、価電子帯の上端が押し上げられ、価電子帯の分散が広がることでバンドギャップは狭まったと考えられる。

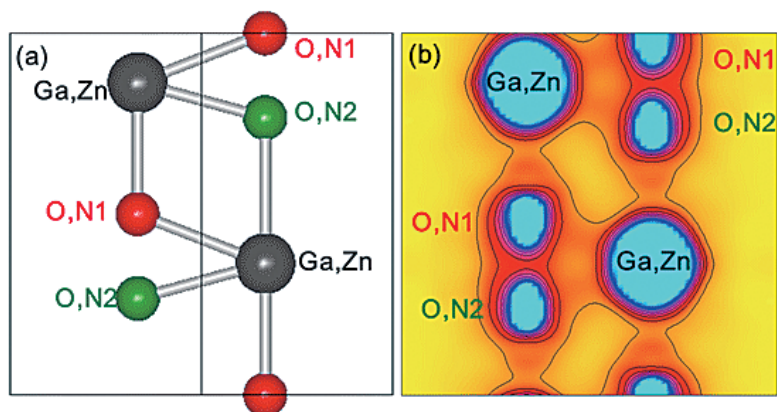


図2 (110) 面上に射影した $(\text{Ga}_{0.885}\text{Zn}_{0.115})(\text{N}_{0.885}\text{O}_{0.115})$ の(a)精密化した結晶構造および(b)MEM 電子密度分布

(5) 単結晶 X 線回折測定、中性子・放射光 X 線回折測定と結晶構造解析への招待

中性子・放射光 X 線粉末回折測定およびその解析に興味のある方はご相談下さい。また、単結晶 X 線回折装置を昨年度末に導入し、本格稼働させています（写真）。興味のある方はぜひご利用下さい。20 μ m 程度の単結晶でも測定できる可能性があります。したがって焼結体を砕いた破片の中から単結晶を拾って構造解析を行うことができます。また、100K 程度の低温まで測定

が可能です。試料高温加熱装置は今年度導入予定です。初めてご利用の方は可能な限り 1 度はご来訪いただきたいと思います。調整が難しければ、まずはサンプルをお送りいただくだけでも構いません。まずは試してみる精神で、積極的にご利用いただけると幸いです。下記に詳細がありますので、ご覧のうえお気軽にお問い合わせ下さい。

単結晶 X 線回折測定と構造解析の手引き

<https://docs.google.com/document/d/1eM9etqWOvEjQYTzjb3JwFHFYSkig4FtYKLyUxP-ZRo4>

中性子回折の手引き

<https://docs.google.com/document/d/1kpOnc2QTYAwVoJWFwGUrjUrivxzIO5-yp1TyfvrwVTI>



写真 単結晶 X 線回折装置 Rigaku XtaLAB Pro MM007 ぜひご利用下さい

謝辞

ここで紹介した多くの成果は東大の堂免先生および東工大の前田先生をはじめとする数多くの研究者および学生諸氏との共同研究である。単結晶 X 線回折装置は本新学術領域により導入した。

参考文献

- [1] 例えば八島正知、「中性子回折によるセラミックスの構造解析」、セラミックス、**41**, [12] 1014-1019 (2006); 八島正知、「8 章 構造解析のための回折データを測定する、8.5 中性子粉末回折測定」、粉末 X 線解析の実際 第 2 版、中井泉、泉富士夫編、朝倉書店、東京、pp.147-148 (2009)。この書籍には粉末回折測定を行うときのノウハウやリートベルト解析の進め方が丁寧に記述されている。
- [2] M. Yashima, K. Maeda, K. Teramura, T. Takata and K. Domen, "Crystal Structure and Optical Properties of $(\text{Ga}_{1-x}\text{Zn}_x)(\text{N}_{1-x}\text{O}_x)$ Oxynitride Photocatalyst ($x=0.13$)", *Chem. Phys. Lett.*, **416**, 225-228 (2005).
- [3] M. Yashima, Y. Lee and K. Domen, "Crystal Structure and Electron Density of Tantalum Oxynitride TaON, a Visible Light Responsive Photocatalyst", *Chem. Mater.*, **19**, 588-593 (2007).
- [4] M. Yashima, K. Ogisu and K. Domen, "Structure and Electron Density of Oxysulfide $\text{Sm}_2\text{Ti}_2\text{S}_2\text{O}_{4.9}$ as a Visible Light Responsive Photocatalyst", *Acta Crystallogr. B*, **64**, 291-298 (2008).
- [5] M. Yashima, M. Saito, H. Nakano, T. Takata, K. Ogisu and K. Domen, "Imma Perovskite-Type Oxynitride LaTiO_2N , Structure and Electron Density", *Chem. Comm.*, **46**, 4704-4706 (2010).
- [6] M. Yashima, H. Yamada, K. Maeda and K. Domen, "Experimental Visualization of Covalent Bonds and Structural Disorder in a Gallium Zinc Oxynitride Photocatalyst $(\text{Ga}_{1-x}\text{Zn}_x)(\text{N}_{1-x}\text{O}_x)$, Origin of Visible Light Absorption", *Chem. Comm.*, **46**, 2379-2381 (2010).

■ 研究紹介 (A03)

水の可視光分解を指向した Ta/N 共ドーピングルチル型 TiO₂ 光触媒の開発

東京工業大学理学院・准教授 前田 和彦

はじめに

酸化チタン (TiO₂) は最も広く研究されている半導体光触媒のひとつであり、その用途は有害物質の分解無害化から水の分解などのエネルギー変換反応まで多岐に渡る。しかし TiO₂ はバンドギャップが大きく、400 nm 以上の可視光を吸収できないため、半導体光触媒の中心課題である太陽光エネルギー変換には適さない。それでも、TiO₂ はエネルギー変換型光触媒として他の半導体にはない、いくつかの有用な特性を有している。たとえば、ルチル型 TiO₂ (以下 R-TiO₂ と表記) は水分解の逆反応である酸素の光還元到低活性であり、この特性により水の完全分解が可能となる¹⁾。また、R-TiO₂ は水の酸化に特異的な高活性を示す光触媒でもある²⁾。そのため、R-TiO₂ をベースとした可視光応答型光触媒の開発には興味を持たれる。

本研究では、R-TiO₂ のバンドギャップ内に不純物準位を形成させ、その不純物準位由来の光吸収に基づく可視光応答化を試みた (図 1)。具体的には、窒素 (N³⁻) とタンタル (Ta⁵⁺) の共ドーピングにより窒素単独ドーピングの際に問題となる電荷不均衡

に起因した格子欠陥生成を解消しつつ、可視光応答化と光触媒作用の発現を狙った。

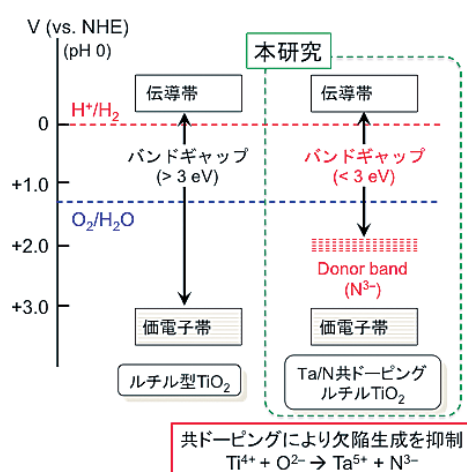


図 1 Ta/N 共ドーピングによるルチル型 TiO₂ の可視光応答化

TiO₂:Ta/N の合成とキャラクタリゼーション

チタンイソプロポキシドとタンタルエトキシドをヘキサン/塩酸混合溶媒中に溶解させ、423 K で 4 時間マイクロ波加熱を行った。XRD 測定の結果、このようにして得た酸化物では、Ta ドーピング量 1 mol% までは単一相の R-TiO₂ 構造を維持できていることが確認された。また ICP 発光分析からは、投入したすべての Ta が構造内に取り込まれていることが明らかとなった。電子顕微鏡観察の結果、TiO₂:Ta はロッド状のナノ粒子となっていた。

次に、得られた材料 (TiO₂:Ta 1 mol%) をアンモニア気流中で 623–873 K、1 時間加熱し、TiO₂:Ta/N の合成を試みた。窒化処理の結果、着色した生成物が得られ、これらの X 線回折パターンは処理前後でほぼ同一だった。図 2 に、723 K で合成した各試料の紫外可視拡散反射スペクトルを示す。TiO₂:Ta の吸収端は 410 nm 付近にあり、これは R-TiO₂ とほぼ同じ位置である。したがって、Ta ドーピングは R-TiO₂ のバンドギャップ構造に影響を与えていないと判断できる。この TiO₂:Ta を窒化して得た材料は 550 nm 付近にまで達する新たな可視光吸収帯を示し、これは Ta をドーピングせず、同様な方法で合成した TiO₂ を窒化した場合よりもやや強い吸収挙動である。この結果は、Ta の共ドーピングにより電荷補償が実現し、窒素の導入がより容易になったことを示唆

している。一方で、200–300 nm 程度の粒径をもつ市販の R-TiO₂ を窒化してもこのような明瞭な可視光吸収帯は生じないことから、酸化物ナノ粒子を前駆体として用いることは効率的な窒化に不可欠であることがわかった。

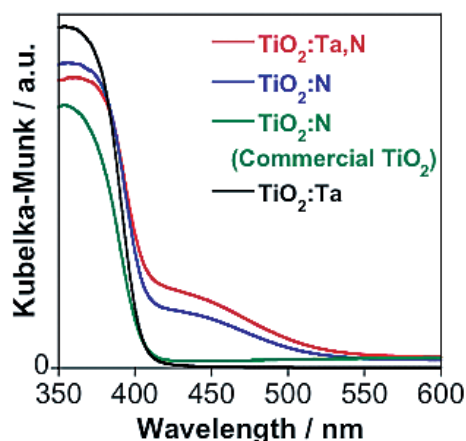


図 2 TiO₂:Ta/N (窒化温度: 723 K) および関連化合物の紫外可視拡散反射スペクトル

TiO₂:Ta/N を酸素生成光触媒とした可視光水分解

TiO₂:Ta/N を用いて、Fe³⁺ または IO₃⁻ を電子受容剤として含む水溶液からの酸素生成反応を可視光照射下 ($\lambda > 420$ nm) で試みた。TiO₂:Ta/N のみでは酸素生成活性が非常に低い一方で、RuO₂ ナノ粒子を TiO₂:Ta/N 表面に導入すると活性は飛躍的に向上した。ここで、RuO₂ ナノ粒子は還元/酸化の両方を促進する助触媒として働く³⁾。しかし、N のみを単独でドーピングした TiO₂ を用いた場合、RuO₂ 担持の有無によらず酸素生成は一切確認されなかった。時間分解赤外吸収分光測定の結果、TiO₂:Ta/N は TiO₂:N と比べて励起キャリアのトラップサイト（酸素欠陥など）の密度が低く、励起電子が長寿命化していることが明らかとなった。このことが高い酸素生成光触媒活性に結びついたと考えられる。さらに、RuO₂ 担持 TiO₂:Ta/N を酸素生成光触媒として用いて、水素生成光触媒 Ru 助触媒担持 SrTiO₃:Rh⁴⁾ との連結による Z スキーム型水分解を試みた。その結果、Fe³⁺/Fe²⁺ を

電子伝達剤として用いた系で、水の水素と酸素への完全分解を可視光照射下で達成した（図 3）。

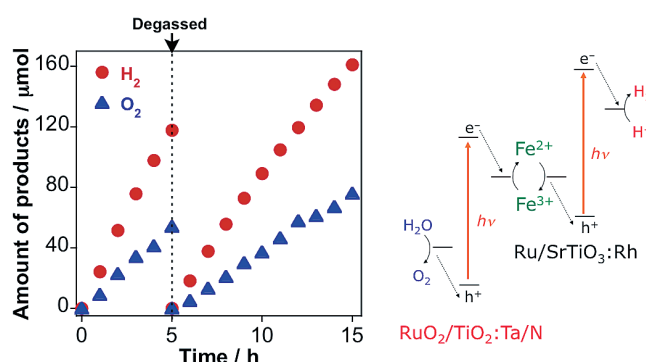


図 3 RuO₂/TiO₂:Ta/N と Ru/SrTiO₃:Rh を光触媒とした Fe³⁺/Fe²⁺ 共存下での Z スキーム型可視光水分解

今後の展望

これまで、このような Z スキーム型水分解に有効な酸窒化物光触媒は Ta 系を中心に複数知られていたが、本成果は Ti 系酸窒化物材料を用いてはじめて水の完全分解を達成した例である⁵⁾。また本研究で得られた知見を応用することで、アナタースやブ

ルッカイトのような TiO₂:Ta/N 多形が合成できる可能性もある。このような新物質の結晶構造と光触媒活性の相関の解明は興味深く、領域内の計画研究、公募研究メンバーと連携しつつ、さらなる研究の進展を図りたい。

参考文献

- 1) K. Maeda, *Chem. Commun.* **2013**, 49, 8404.
- 2) R. Abe, K. Sayama, H. Sugihara, *J. Phys. Chem. B* **2005**, 109, 16052.
- 3) K. Maeda, R. Abe, K. Domen, *J. Phys. Chem. C* **2011**, 115, 3057.
- 4) R. Konta, T. Ishii, H. Kato, A. Kudo, *J. Phys. Chem. B* **2004**, 108, 8992.
- 5) A. Nakada, S. Nishioka, J. J. M. Vequizo, K. Muraoka, T. Kanazawa, A. Yamakata, S. Nozawa, H. Kumagai, S. Adachi, O. Ishitani, K. Maeda, *J. Mater. Chem. A* **2017**, in press. DOI: 10.1039/C6TA10541F.

第一回領域内会議報告

平成 29 年 1 月 17 日（火）、18 日（水）に学習院大学の学習院創立百周年記念会館で、本新学術領域研究の第一回領域内会議が開催されました。はじめての領域内会議は、これまでの研究の成果を共有するとともに班間・班内の連携を促進するために企画されました。評価委員の上田寛先生（豊田理化学研究所）、文部科学省学術調査官の福井賢一先生（大阪大学）、田中優実先生（東京理科大学）にもご出席いただき、合計約 50 名の参加者があり、そのうち学生はのべ 20 名でした。各研究グループの成果発表が行われましたが、その内容はすでに連携が行われ成果が出始めているものから、これからの連携の提案に至るまで幅広く、学生からも多く質問が出るなど活発に行われました。一日目の締め言葉として田中先生からいまは様々な連携研究

が走っていてよいが、最後には繋がって領域として何か骨格となる成果ができてくることを期待している旨のお言葉をいただきました。一日目の会議後に学習院大学の学生食堂で懇親会が行われました。約 50 名の参加者のうち学生が約 20 名を数え、若さあふれる賑やかな懇親会になりました。手前味噌ではありますが私の研究室の学生も参加し、ずいぶん刺激を受けたようです。懇親会では、上田先生が、田中先生のお言葉に触れられ、最後にはおそらく美しい研究となるはずとのお言葉をいただきました。二日目は、班内で、そして班間で、メンバー全体、そして個別に話し合いの場をもち、具体的に連携の進め方について議論しました。この領域内会議をきっかけに本格的な連携研究が始まりました。



懇親会にて

（文責：A01 学習院大学 稲熊 宜之、写真提供：A02 京都大学 野田 泰斗）

日本化学会 第 97 春季年会 特別企画講演会 “複合アニオン化合物が拓く新しい物質化学”

平成 29 年 3 月 16 日から 19 日の三日間、慶応大学日吉キャンパスにて、日本化学会第 97 春季年会が開催されました。その最終日にあたる 19 日に特別企画講演会“複合アニオン化合物が拓く新しい物質化学”が本領域の企画で行われました。この特別企画講演会では、領域メンバーの講演の他に、固体材料分野において大変著名な三名の先生のご講演を頂きました。まずは A03 代表の前田先生から趣旨説明があり、次に領域代表である陰山先生から「複合アニオン系合成の展望」というタイトルで、本領域の紹介と複合アニオン化合物における合成と今後の展望に関する講演がありました。続いて、東京大学の堂免一成先生から「アニオンとカチオン制御による高活性光触媒の開発」というタイトルで、世界的に著名な酸化窒化物を使った水分解光触媒に関する講演がありました。また、三菱化学の瀬戸山亨様は「機能性素材としての無機材料:何を作る?どう作る?」

という講演の中で、企業の立場から複合アニオン化合物の新物質開発に対しどのようなビジョンを持って取り組むべきかを示されました。さらに、東京工業大学の菅野了次先生からは「ヒドリドイオンが固体中を動く一新物質創製と電気化学デバイスへの期待」というタイトルで、最近注目を集めている酸水素化物におけるヒドリド伝導に関する研究に関するご講演を頂きました。また、A01 代表の荻野先生からは「異種アニオン利用による新物質開発」、A02 代表の林先生からは「酸化物中の微量の水素化物イオンの特定法」というタイトルで複合アニオン化合物の面白さを伝える講演がありました。領域内外から約 80 名の参加者があり、いずれの講演においても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発信し、益々領域が発展していくことを期待します。



堂免一成先生による講演の様子



陰山領域代表による講演の様子

(文責：A02 京都大学 山本 隆文)

第二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：2017 年 5 月 29 日（月）13:00 ～ 17:00

会場：九州大学 伊都キャンパス・稲盛財団記念館



13:00 – 13:20	陰山 洋（京都大学） 「はじめに 領域について」
13:20 – 14:00	特別講演 幾原 雄一（東京大学） 「原子直視 STEM 法による材料界面の究極観察・解析」
14:00 – 14:40	「複合アニオン領域研究報告」 司会 陰山 洋
14:00 – 14:10	研究代表者 A01 荻野 拓（産総研）
14:10 – 14:20	研究代表者 A02 林 克郎（九州大学）
14:20 – 14:30	研究代表者 A03 前田 和彦（東京工業大学）
14:30 – 14:40	総合討論
14:40 – 15:00	—休憩—
15:00 – 15:20	研究紹介 1 今中 信人（大阪大学） 「複合アニオン効果を有効活用した無機材料創成」
15:20 – 15:40	研究紹介 2 是津 信行（信州大学） 「複合アニオン化合物“結晶”材料の創成と新機能」
15:40 – 16:00	研究紹介 3 片桐 清文（広島大学） 「異分野連携による領域研究の推進 ～融合マテリアルと複合アニオン～」
16:00 – 16:10	学術調査官 福井 賢一（大阪大学） 「領域研究へのアドバイス」
16:10 – 16:30	おわりに

9:00 – 受付

10:00 – 12:00 若手スクール

10:00 – 10:05 山本 隆文 (京都大学)
「はじめに」

10:05 – 11:00 招待講演 八島 正和 (東京工業大学)
「中性子と X 線回折による複合アニオン化合物の構造解析」(公開)

11:00 – 12:00 非公開ポスターセッション & 若手討論会

13:00 – 16:30 公開シンポジウム キックオフミーティング

13:00 – 13:20 陰山 洋 (京都大学)
「はじめに 領域について」

13:20 – 14:00 特別講演 幾原 雄一 (東京大学)
「原子直視 STEM 法による材料界面の究極観察・解析」

14:00 – 14:40 「複合アニオン領域研究報告」 司会 陰山 洋

14:00 – 14:10 研究代表者 A01 荻野 拓 (産総研)

14:10 – 14:20 研究代表者 A02 林 克郎 (九州大学)

14:20 – 14:30 研究代表者 A03 前田 和彦 (東京工業大学)

14:30 – 14:40 総合討論

14:40 – 15:00 ー休憩ー

15:00 – 15:20 研究紹介 1 今中 信人 (大阪大学)
「複合アニオン効果を有効活用した無機材料創成」

15:20 – 15:40 研究紹介 2 是津 信行 (信州大学)
「複合アニオン化合物“結晶”材料の創成と新機能」

15:40 – 16:00 研究紹介 3 片桐 清文 (広島大学)
「異分野連携による領域研究の推進 ～融合マテリアルと複合アニオン～」

16:00 – 16:10 学術調査官 福井 賢一 (大阪大学)
「領域研究へのアドバイス」

16:10 – 16:30 おわりに

17:00 – 大観荘 (〒818-0058 福岡県筑紫野市湯町 1-12-1)

19:00 – 21:00 懇親会

21:00 – 22:30 ポスター発表表彰
学生ショートプレゼンテーション

2017 年 5 月 30 日 (火) 午前 場所: 大観荘会議室

09:00 – 12:00 非公開領域ミーティング
学術調査官 田中 優実 (東京理科大)
「領域研究へのアドバイス」
領域メンバー間 研究紹介と討論 共同研究マッチング

2017 年 5 月 30 日 (火) 午後 場所: 九州大学筑紫キャンパス中央分析センター

13:00 – 14:00 中央分析センター見学

■ 領域ニュース

2017年5月29日(月)、九州大学 伊都キャンパス・稲盛財団記念館にて、新学術領域「複合アニオン化合物の創製と新機能」の第二回公開シンポジウム(キックオフミーティング)が開かれました。

天候にも恵まれ、気持ちのいい快晴の中、計画班の研究グループの関係者に加え、新しく公募班に加わられた先生方もお集まりいただき、約90名の方にご参加いただきました。

若手スクール

同日午前中には、シンポジウムに先立ち、A02班の東京工業大学・八島正和先生を講師にお迎えし、領域内外の学生・若手研究者向けの若手スクールを開催いたしました。「中性子とX線回折による複合アニオン化合物の構造解析」と題したご講演で、結晶構造解析のためのX線回折法と中性子回折法の違いについて、それぞれの特徴を踏まえながら分かりやすく解説され、それらの使い分けについてご教授いただきました。複合アニオン化合物中の O^{2-} と N^{3-} などの似通ったアニオンの識別についてのテクニックについてもご紹介いただきました。会場からは、リートベルト解析などについての質問がされ、活発な議論がなされました。

その後、非公開ながら、領域内の学生によるポスターセッションと若手討論会が開催されました。領域内の学生・若手研究者の間で、活発な討論が展開され、実のある交流が行われました。

公開シンポジウム

はじめに、領域代表である京都大学・陰山先生から、公募班の研究者を加えた本新学術領域の新体制についてご紹介があり、改めて本領域の存在意義と目標について明確に示されました。さらに、積極的な領域内連携研究活動に加え、若手研究者育成・アウトリーチ活動を通じた社会への貢献の重要性について述べられました。

その後、東京大学・幾原雄一先生をお招きし、「原子直視STEM法による材料界面の究極観察・解析」という題目で、

ご講演いただきました。従来の透過型顕微鏡(TEM)とは異なり、新たに走査型機能が加わった走査型透過電子顕微鏡(STEM)の登場で可能になった、新しい顕微鏡観察手法についてご紹介いただきました。X線回折法などでは困難な、複雑な複合アニオン化合物の構造解析に関し、STEMによる直接観察が強力な手法であることを明確に示されました。会場からは、学生からの積極的な質疑がなされ、有意義な講演会となりました。

引き続き、A01～A03班の各代表から、それぞれの計画班における2016年度の研究報告がなされました。

A01班：荻野拓先生(産業技術総合研究所)

F-を導入した新規複合アニオン化合物の作製など

A02班：林克郎先生(九州大学)

NMRを利用した複合アニオン化合物中の H^{-} の同定など

A03班：前田和彦先生(東京工業大学)

酸窒化物系新規複合アニオン化合物の光触媒機能など

休憩をはさみ、新しく公募班として領域に加わられた研究者のうち3名から、これまでの研究と今後の研究計画についてのご紹介がありました。

(A03班) 今中信人先生(大阪大学)

希土類酸化物の複合アニオン化と新たな機能発現に関して、これまでの研究と今後の展開について紹介されました。会場からは、実際の合成法に関する質問などがあり、議論が交わされました。

(A01班) 是津信行先生(信州大学)

原料を高温で熔融塩に溶解させ、その融液内で反応させて目的物を得る合成法である、フラックス法の紹介と、それによる結晶サイズ・形態制御について解説いただきました。さらに、フラックス法による新規複合アニオン化合物の作製について、今後の展望が述べられました。

(A01班) 片桐清文先生(広島大学)

過去に、別の新学術領域で連携研究された際の、生体材料関連の研究成果についてのご紹介を交えて、領域内連携研究のもつ可能性に関して、分かりやすくお示しいただきました。また、本領域における、今後の連携研究計画についてもご提案いただきました。

その後、学術調査官の大阪大学・福井賢一先生から、中間報告へ向けて、領域研究へのアドバイスをいただきました。最後に、評価委員である東京大学・堂免一成先生と北海

道大学・吉川信一先生から、公募班を加えてさらに大きくなった本新学術領域への期待と激励をいただき、公開シンポジウムは盛況のうちに幕を閉じました。

(文責：A02 九州大学 長谷川丈二、写真提供：A02 京都大学 野田泰斗、A02 九州大学 長谷川丈二)



■ 領域ニュース





複合アニオン新学術領域 第一回若手スクール

平成29年5月29日に九州大学伊都キャンパスにて、複合アニオン新学術領域の第一回若手スクールが開催されました。午前中に講演とポスターセッションを行い、午後は公開シンポジウムと合流しました。また夜は懇親会の後ショートプレゼンを含む研究の討論を行いました。全体で約80名の参加者があり、そのうち学生約30名を含む若手約60名が参加しました。まず世話人である私（A02 山本）が、開会のあいさつと合わせて若手スクールを含めた領域における若手育成の意気込みを伝えました。次にA02解析班の八島先生に、「中性子とX線回折による複合アニオン化合物の構造解析」と題して、回折法による構造解析に関する講義をしていただきました。複合アニオン化合物においては正しい構造を知ることが重要であり、第一回目の若手

スクールの講義として、最適の内容であったと感じました。次に非公開のポスター発表を行いました。同時に学生参加者にはポスターを見ながら領域内での共同研究を企画してもらい、そのアイデアを投票してもらいました。共同研究の企画もあったため、ポスター会場では活発な議論が行われました。懇親会では最優秀賞ポスター賞1名、優秀ポスター賞4名、優秀研究企画賞3名が表彰を受けました（別ページ参照）。いずれのポスター、研究企画もレベルが高く、今後の領域の発展に期待が持てるものでした。これらポスター発表・研究企画を通して、若手発の新しい共同研究の種がまかれたと思っています。今後も年に数回若手スクールを開催する予定であり、今回まかれた種が芽を出し、実際の成果につながっていくことを期待します。



八島先生による講義の様子



講義で質問する学生(上)とポスター会場の様子(下)

(文責：A02 京都大学 山本隆文)

ポスター賞 受賞者

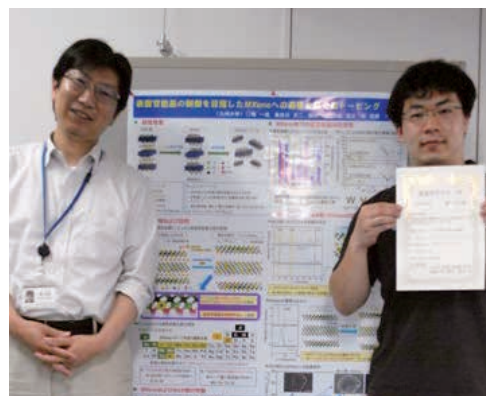
■ 最優秀賞

● 嶋 一成（九州大学・D2）

「表面官能基制御を目指した MXene への遷移金属元素ドーピング」

【受賞コメント】

名誉ある賞を頂き大変光栄に思います。今回の賞を励みにして、研究領域内でのディスカッションや共同研究の機会を大切にしながら、自身の研究がより価値のあるものになるように、より一層奮起して参ります。また、指導教員の林克郎先生をはじめ、日頃の研究活動にご指導、ご協力を頂いた研究室メンバーの方々に深く感謝申し上げます。



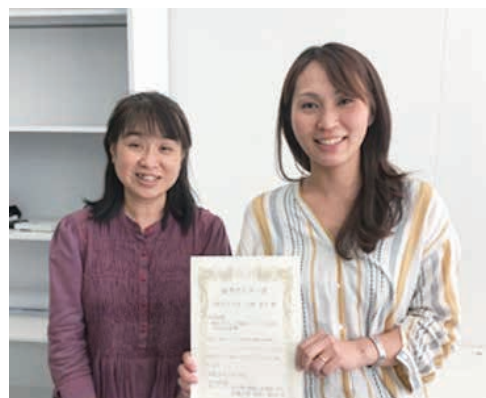
■ 優秀賞

● 小澤 晃代（大阪市立大学・D1）

「酸化チタンの窒素ドーピングに及ぼす合成法の影響」

【受賞コメント】

「この度は発表する貴重な機会を与えて頂き、ありがとうございます。優秀ポスター賞を受賞させて頂き、大変光栄に思っています。本ポスター発表では複合アニオン化合物への様々な角度からの報告があり、非常に勉強になりました。今後さらに精進を重ね、より良い研究を続けていきたいと思えます。今回の受賞にあたり、指導教員である吉田朋子教授をはじめ、支えて頂いた沢山の方々に感謝致します。」



● 加藤 大地（京都大学・M2）

「安定な酸塩化物光触媒 $\text{Bi}_4\text{NbO}_8\text{Cl}$ の特異なバンド構造の起源」

【受賞コメント】

この度は、ポスター賞を頂けたことに驚くとともに、大変光栄に思います。このような賞を頂けたのも、指導教官の陰山先生に加え、阿部教授、前園教授、本郷助教授を始め、様々な先生方に新学術を通してご指導を頂き、大きく視野を広げることができたおかげであります。この場を借りて、心から感謝を申し上げます。これからも新学術領域を通して、研究に励んで行きたいと思えます。



グローブボックスで実験中

● 北川 裕貴（京都大学・M1）
「 YSiO_2N における Eu^{3+} イオンの赤色発光増強と
真空基準結合エネルギーダイアグラムの構築」

〔受賞コメント〕

この度、若手スクールにおいて優秀ポスター賞を頂くことができ光栄に思います。ポスターセッションでは多彩な分野の先生方や学生の方々と有意義な議論を交わすことができ、このような会議への参加経験の浅い私にとって非常に良い経験となりました。特に他研究班に所属する参加者の方からの鋭い指摘を受け、自分の視野の狭さを思い知るとともに、研究への新たな手掛かりを得ることができました。今後もこの議論で得た新たな知見を活かし、研究に励みたいと思います。



● 日比野 圭佑（東京工業大学・D2）
「新光触媒 $\text{Ba}_{1-x}\text{Sr}_x\text{Ta}_{1-x}\text{W}_x\text{O}_2\text{N}$ 固溶体の結晶構造と
電子構造と電子密度分布」

〔受賞コメント〕

優秀ポスター賞をいただくことができ大変嬉しく思います。このような名誉ある賞をいただくことができたのは指導教員の八島正知先生をはじめとする多くの方々のご指導のおかげです。また、酸窒化物の光触媒活性の測定では前田和彦先生にお世話になりました。この場を借りて感謝申し上げます。若手スクールでは様々な分野の方々と議論をすることで、今後研究を進めるにあたり貴重なお意見をいただくことができました。今後も他分野の方々と議論を恐れずに研究を進めてまいりたいと思います。



研究企画賞 受賞者

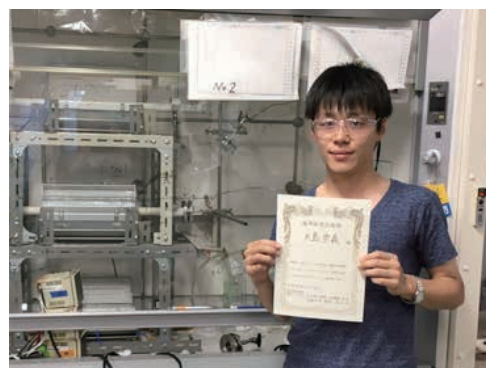
■ 優秀賞

● 大島 崇義（東京工業大学・D1）

「層状ペロブスカイト酸窒化物のフラックス合成に関する提案」

【受賞コメント】

研究企画賞をいただきありがとうございます。異なる専門を持った方々と共同研究できる素晴らしいプロジェクトに参加でき、大変嬉しいです。この受賞を励みにし、研究で成果を上げられるように精一杯精進します。



アンモニア窒化管状炉の前で

● 岡田 凌輝（広島大学・M1）

「LPFの尿素を使った窒素化の提案」

【受賞コメント】

このような素晴らしい賞をいただき、大変光栄に思います。今回のキックオフミーティングでは、様々な研究グループの方々と議論することができて、大変勉強になりました。今後もこのような立案ができるよう、学会などの議論できる機会に積極的に参加し、そして研究にも励んでまいります。

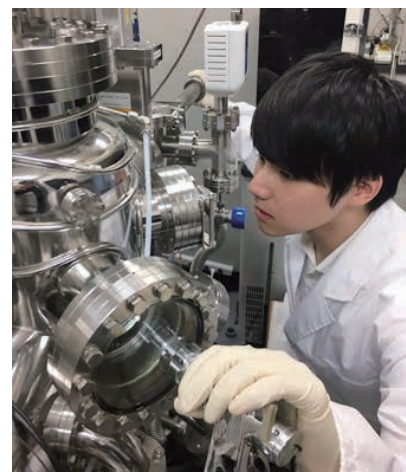


● 濱口 直也（京都大学・M2）

「LPFの尿素を使った窒素化の提案」

【受賞コメント】

この度は、優秀研究企画賞を頂けたことを非常に嬉しく、また光栄に思います。今回提案させて頂いたのは一般的なアンモニアガスによる電極表面だけの複合アニオン化でなく、尿素を用いて電極内部まで複合アニオン化することでリチウムイオン二次電池のさらなるレート特性向上を目指すという企画です。電極を複合アニオン化することでこれまで見られなかった電気化学特性の向上がみられるのではないかと期待しております。今回このような賞を頂けたのも常日頃から熱心に御指導下さった内本先生をはじめとする研究室のスタッフの皆様のおかげです。この賞を励みに今後もより一層努力を重ねていきたいと思っております。



理論スクール開催報告

- ・「JAIST-IITGN workshop2017: Frontier Scientists/Engineers with Global Sense/Ser. II」
'Materials Science and High Performance Computing'
2017/01/09/Sun-2017/01/16/Mon 於 北陸先端科学技術大学院大学
受講者総数 19 名 [うち日本人学生 9 名。領域からの学生 11 名 (京大陰山研 (修士 3 名)、京大阿部竜研 (博士 1 名)、東大木村研 (博 2/ 修 1/ 学部 1)、本学前園研 (修 2/ 博 1)、インド工科大ガンディナガル校学生 4 名、デリー大学生 1 名)]
- ・「JAIST-India Workshop2016/Materials Science simulations」
2016/12/12/Mon-2016/12/17/Sat 於 インド工科大 (IIT) マドラス校
受講者総数 30 名 [うち日本人学生 5 名。領域からの学生 3 名 (京大陰山研 (修 1)、本学前園研 (修 2)、IIT マドラス校学生 20 名、IIT ボンベイ校、アンナ大学、マドラス大学各 1 名、Sandvick Sci.Tech. (Pune)、GE Global Res. (Bangalore) からの企業参加者各 1 名]

【開催内容と成果】

「第一原理電子状態計算 (エンタルピー評価) → フォノン計算 (エントロピー評価) → 計算熱力学 / 状態図計算 (自由エネルギー構築からの演繹) → 計算熱力学 / 組織ダイナミクス (自由エネルギー構築からの演繹)」という近年に形を成してきた「材料シミュレーション大系」をチュートリアル実習形式で学ぶ国際的にも特色ある教程で理論スクールを開催し、領域内の実験主務大学院生が各研究室から参加した。本教程は 2013 年あたりから国際教育協働に関する文科省外部資金事業の形で取り組みを進め、継続的に現地開催を重ねて形を成したものである。JAIST 開催はもとより 2015 年にインド / コルカタで現地開催した取り組みはインド国内コミュニティの口コミで評判を高め 2016 年 6 月にはインド工科大マドラス校金属材料学科がインド自前の資金で当方チームに開催を要請し、

殺到する参加希望者の多くを断る形で成功裏に現地開催形式を完成させたものである。

材料科学分野での「シームレスなマルチスケールシミュレーション」については提唱されて久しく、同様の取り組みを狙った企画は多いが、夫々が物理学 / 化学 / 材料学といった互いに異なり、かつ、個別に長い歴史と誇りを持つコミュニティからの持ち寄りとなる。コミュニティの違いを束ねあげて、参加者にとって連続性ある一枚岩の教程を提供する事は決して容易ではなく、どうしても「整合性の取れないパッチワーク」となりがちである。此の点、我々チーム (JAIST&IIT マドラス) の取り組みは、真のプロジェクト協働を契りとした気の置けない関係性を基にしており、整合性の取れた教程提供によく成功している。



参加者受講の様子
日本人とインド人がペアになりチュートリアル実習を行う



ラボツアーでは金属材料の圧延シミュレータや
熱圧着加工のラボを視察した

インド開催分については特にサイクロン直撃被害というハプニングをフレキシブルに乗り越え、最終的には全日程で教程を欠く事なくこなし終えた。こうした即決即断の柔軟な対応は、主催国際チームの結束故の賜物である。通常、「インターネットに接続できる端末」を持ち込んで「初学の内容を英語で受講」となると日本人学生参加者は内職に走りがちであるが、今回の参加者は熱心にノートを取り、夫々の隣席のインド人参加者と協力しながらシミュレーション実習を一つも漏らすことなく取り組んでいた。

本スクールは明確な方針として、「漠然とした国際交流」に陥りがちなポスターセッションや講演セッションという「有りがちな開催形式」は徹底的に避け、日本人学生はインド人参加者と必ずペアになり、端末を操って相談しながら具体的な作業を進めていくというチュートリアル実習形式を採る事で「逃げ場のない国際交流機会」を意識している。実験系グループからの参加者が殆どとなったが、これら学生からの質を射た質

問が英語で頻発されるなど、どの学生も積極的に受講内容に取り組んでいた。バンケットでも参加者は事前の通告指示をよく守り、日本人で固まらず「自分から相手に話しかける」という事に徹底した努力を図っており、国際経験という観点からも教育が機能していた。教程の継続的開催を通じて、インド国内の当該コミュニティ人的ネットワークを通じ宣伝波及して、開催地機関や周辺の大学や企業からも現地参加希望者が増加／殺到する傾向にある。インド現地参加者にとって本スクールが「狭き門」となる事で、現地参加者のレベルや士気が高まり、日本人参加者への刺戟という意味でも、よく機能している。現地学生が「付き合いで参加しているイベント」ではなく、「習得への真剣な緊張感」を伴った厳選された上位層のインド人学生を隣席とする事で、「教程に随いてくる事」に対して支障なく、呑込みも速い同年代の彼らの能力を目の当たりにして「国際的に活躍する事」をより生々しく肌身で感じる事のできる「上級レベルの研修機会」に発展しつつある。

【余談 / サイクロン直撃 / インド現地開催分】

到着日翌日をピークに「2年に1度規模」の大きなサイクロンが直撃し、学内、市内は倒木／浸水／停電だらけとなり混乱を極めた。初日（月曜）午後から学内は停電に見舞われ、予定に沿ったチュートリアルセッションは不可能となり座学講義を繰り上げて対処した。現地 IIT マドラス校は、自然原生林の中に作られメインゲートまで 3km の距離を持つ巨大なキャンパスで、普段、構内バスが通るメイン通りも路面が落葉で

隠れ、倒木が折り重なると原生林にしか見えず、初日の参加者帰宅、及び、翌日の来学／帰宅は夥しい倒木を乗り越え、膝まで浸かる浸水をかき分ける、さながら藪漕ぎ状態が 1 時間以上続く状況となった。学生らは此の非常事態をむしろ愉しみ、互いの結束を強めながら行動し、別の意味で「たくましく活躍できる人材育成」の教育機会となった。



サイクロン被害による倒木の様子。メインゲートまでの 3km を、倒木をくぐり抜け、浸水を渡河して進む。いずれの写真も普段は構内バスが通る 2 車線道路である。

2 日目は朝、再度、倒木をかき分けて参集するも学内バス運行 / 電気 / 通信が全く不通となっており何も行うことが出来ないため散会とした。サイクロン被害により、市内通信回線が被害を受け、持参した携帯 wifi 端末も不通、ホテルの回線も不通の上、クレジットカードが使えない状況となった。たまたまサイクロン直撃翌日はイスラムの祭日となっていたため復旧は進まず難儀した 1 日を過ごした。インドの突然の通貨切替により国内に慢性的に紙幣が不足しており、キャッシング現金引出しも市内外貨両替も叶わぬ状況で、到着直後に数名の学生が空港で行った外貨両替が命綱となった。3 日目以降、会場電源と学内ネットワークが復旧し、無事、電子状態計算のチュートリアルまでを完了することが出来た。予期出来ない災難に見舞われても、ダイナミック / フレキシブルな決断で愉しみながら事に当たる」という、インド文化の強みの一面を、は

からずも強烈に体験する事が出来たものいえる。互いに別大学・別研究室から参集した学生達にとって恐らく「一生ものの結束」と「思い出の共有」を築く事が出来たものである。大雨に打たれ、汗だくでジャングルの藪かきで会場まで到達するような過酷な経験にも関わらず体調不良を訴える学生もなく、教程への取組姿勢を含めて大変よくやっていたと評価している。今回の参加学生のうち 3 名は海外渡航初となる学生であった。治安がそれほど確保できない新興国で、海外渡航に慣れない学生が滞在する場合、ともすれば「ホテルに閉じこもり / ホテルと会場の往復」という実のない滞在となりかねない側面があるが、学生同士で協力して公共交通機関などを使いこなし活発に歩き回るなど積極的で、地図や携帯ツールに頼るのではなく現地の人々に積極的に聞いて回り、そつなく値段交渉を取りまとめるなど実に頼もしい姿を目にする事が出来た。

(文責 : A02 北陸先端科学技術大学院大学 前園 涼)

「JAIST-India Workshop2016 体験記」

京都大学工学研究科 陰山研究室 M1 加藤 大地

私は混合アニオン光触媒について研究しており、光触媒においては固体のバンド構造が重要であるため、第一原理計算によるバンド構造計算にかねてより興味がありました。そこで、12 月 12 日～ 17 日にインドのチェンナイで開かれた理論計算のワークショップに参加させて頂きました。ワークショップには自分を含む日本からの学生 7 名の他に、現地の学生やポスドクの方々が十数名ほど参加しており、講義の際には周りのインド人学生とお互いに教え合いながら理論計算の実践を進めました。最初の 3 日間が JAIST の前園先生、本郷先生による Quantum Espresso を用いた第一原理計算に関する内容で、Quantum Espresso を用いたエネルギー計算や計算 (収束) 条件の設定方法、さらには Phonopy を組み合わせたフォノン分散の計算など、基本的な計算から少し発展的なものまで、実際に自らの手で行うことができました。ワークショップの後半の 3 日間は Hari Kumar 先生による Thermo-Calc を用いた相図の計算と、Phanikumar 先生による Phase Field を用いた結晶成長のシミュレーションを行いました。私には馴染みのない計算手法ではありましたが、多形や結晶成長面によって光触媒活性が大きく影響されることがあるため、このようなシミュレーションは強力なツールに成り得ると感じました。

ワークショップの一日の流れとしては、午前中は理論計算の原理に関する講義を受け、昼ごはんを挟んだ後、午後は実際

に自分のパソコンを用いて理論計算にトライするというものでした。講義は基本 18 時までで、晩御飯は一緒に行った日本からの学生でレストランを探して食べに行きました。3 日目の夜には、講義を受けている学生、講義をしてくださっている先生の方々も含めて、懇親会が開催され、非常に楽しい時間を過ごせました。写真はこの懇親会の時に撮ったものです。

6 日間という長くは無い時間ではあったが、実際に自らの手で理論計算を行う事ができ、しかも講義で用いられたのは全てフリーのソフトウェアであったため、帰国後の研究にもすぐに活かすことができました。また、ワークショップの講義の時間以外では、講義の合間のティーブレークや懇親会などで現地のインド人学生や研究者と交流することができ、インドの文化を学ぶ良い機会となりました。

最後に、今回のセミナーを開催するとともに、新学術研究領域において、普段から丁寧な指導を頂いている JAIST の前園先生、本郷先生、現地で受け入れてくださった Hari Kumar 先生、Phanikumar 先生、指導教官である陰山先生に心から感謝の気持ちと御礼を申し上げます。



国際活動支援報告－海外体験記

オーストラリア ANSTO での中性子回折実験

東京工業大学理学院化学系 八島研 助教 藤井 孝太郎、石谷・前田研 D2 大島 崇義

実験場所：オーストラリア ANSTO (Australian Nuclear Science and Technology Organisation)

実験期間：平成 28 年 12 月 8 日 (木) ～ 12 月 15 日 (木)

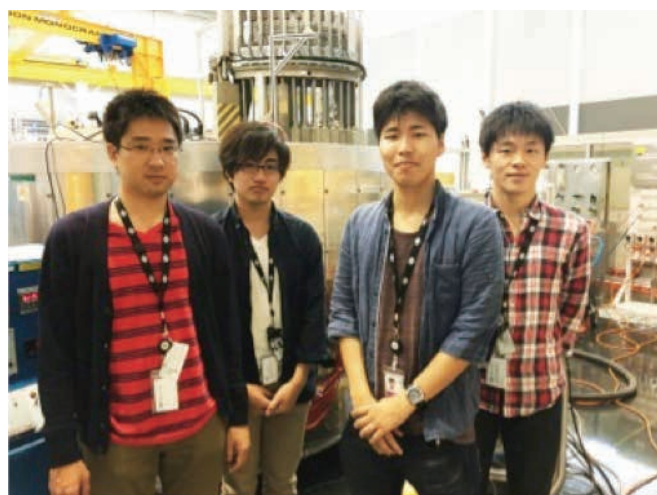
電子数に比例して散乱能が大きくなる X 線と異なり、中性子は電子の少ない元素でも重たい金属元素に負けない散乱能を示す。そのため、無機材料において、“アニオン”の情報を得るために、中性子は非常に重要なプローブである。震災の影響等もあり、日本では安定した中性子源の確保が難しい時期が続いたため、八島 G ではオーストラリアの ANSTO にある研究用原子炉 OPAL を利用するようになった。最近では、三年間有効な課題も採択され、半年に一度は ANSTO での中性子回折実験を行っている。

この新学術領域が発足したことを受け、東工大 八島 G と前田 G の共同研究が開始し、昨年 12 月には ANSTO での中性子回折実験を共同で実施した。羽田からシドニーまでのフライトは、約 10 時間と長い、時差が少ないこと、施設がシドニー国際空港から車で 30 分と近いことなどから、そこまで大きなダメージがなく移動できた。また、オーストラリアは南半球であるため、12 月の寒い日本を離れて温かい場所で過ごせることにちょっとした楽しさを感じた。

今回利用した高分解能粉末回折計は、Echidna (エキドナ) という名前が付いている。OPAL にある装置の多くは、オーストラリアに生息する動物の名前がついており、Echidna は“ハリモグラ”と呼ばれる動物である。見た目と呼び名はハリネズミに近いが、生物的にはカモノハシに近い単孔類で、卵を産む哺乳類である。この装置は、強度よりも分解能を優先した設計になっており、時間はかかるが構造解析に適したデータ測定ができる。今回の実験は、室温での測定を 2 日間、高温での測定を 5 日間行った。サンプルは、中性子の散乱が少ないバナジウム製のホルダーに入れ、モノクロメーターで単波長化したビームを用いて実験を行った。装置担当者か

ら使って良いと言われたホルダーは、大事なサンプルを入れたくないぐらい汚れていたため、最初の清掃作業は大変な作業となった。高温測定は、1600℃程度まで昇温させることができる真空加熱炉を用いて実施した。高温での結晶構造や核密度分布の解析を得意とする八島 G としては、加熱システムが用意されていることがありがたい。他にも冷凍機やマグネットなど、サンプルまわりの環境を変化させる設備が整っていた。また、測定操作やデータ処理を行うソフトもわかりやすくできており、ユーザーの使いやすいシステムになっているところに良さを感じた。

今回は、大きなトラブルもなく測定が進められ、測定操作の間には構造解析のやり方を教えたり(教わったり)、研究内容について相談したりと、実験だけではなく充実した出張となった。複合アニオンの学理を築くための貴重な卵を産んでくれる Echidna で皆様も実験してみたいはいかがでしょうか？



装置前にて撮影 左から八島 G 藤井、中村、海野、前田 G 大島

国際活動支援報告－海外体験記

新規酸フッ化物試料の中性子回折実験

産業技術総合研究所 荻野 拓

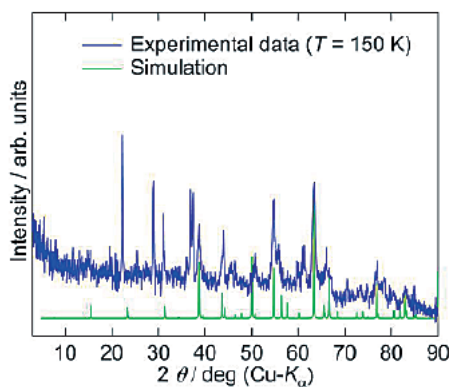
出張期間:平成 29 年 1 月 22 日 (日) ～ 1 月 30 日 (月)

国際活動支援の経費を使用させていただき、1 月 22 日から 1 月 30 日までの 9 日間アメリカワシントン DC の NIST を訪問して、我々の研究室で合成した新規酸フッ化物試料の中性子回折実験を行った。中性子回折は申し込みや事前準備、実験方法、データの解釈など未経験者には敷居が高い部分が多く、これまで他グループからの依頼で試料を提供したことがあるのみであったが、今回は京大陰山先生のマシンタイムに同行させていただくことで非常にスムーズに実験に携わることができた。

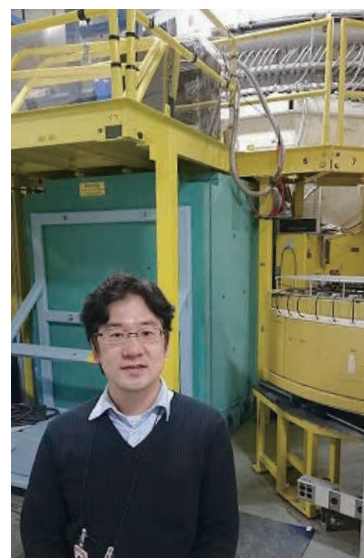
使用する試料が通常合成しているよりも量が多いことから、余裕を持って作製に取り掛かったはずが、一バッチの量を大幅に増やしたことで合成条件が変わってしまい不純物が多量に生成するなど、出発前からのドタバタもあったがなんとか試料を準備して実験に参加することができた。実験は陰山研の試料測定に参加させてもらうところから始まったが、予め決められた条件の測定をするだけでなく、測定を開始したらすぐに予想される回折ピークと合っているか、出て欲しいピークの有無の確認や、バックグラウンドとの強度比などについてその場でデータをすぐに解析しながら、次の測定条件を議論して決めて行くのが非常に印象的であった。また装置の手配状況や次の測定の準備時間、測定が成功した場合に予想される成果とインパクトなど様々なことを考慮に入れつつ、次の試料の測定計画を練っていくなど、与えられたマシンタイムを最大限有効に活用するには多くの工夫が必要になることを学ぶことができた。この点では、自分の試料のシミュレーションや大量に試料を合成した場合の純度の確保など、事前準備が不十分な点が多々あ

り、非常に反省している。NIST で受け入れ研究者となっていた Brown 氏をはじめ、測定の補助をしてくれた方々は非常に親切であったが、測定状況がネットで常に公開されており、マシンタイムを空けることが許されないなど、国の資金で運営されている施設の厳格さも随所に感じられた。

ちょうど大統領がトランプ氏に変わった直後ということもありテレビニュースはトランプ氏一色で、日本でもワシントンでのデモなどが報じられていたが、郊外にある NIST は平穏で想像していたような喧騒は感じられなかった。ただ、今後の科学行政については研究者の間でも大きな関心事のようである。NIST には訪問者も多く、受け入れ研究者の Brown 氏や測定に関係した方々だけでなく、NIST に勤める日本人研究者の方や陰山研出身で現在アメリカでポスドクを務めている方など、様々な研究者と交流する機会も持つことができた。依頼測定では体験できない多くのことを学ぶことができ、このような非常に貴重な機会を与えていただいた陰山先生はじめ関係者の皆様に深く感謝している。



解析中の測定データ



高解像度中性子回折装置 BT1 前にて

国際活動支援報告－海外体験記

イギリス、ISIS 中性子施設へ訪問

物質・材料研究機構 辻本 吉廣

滞在期間：平成 29 年 4 月 30 日（日）～ 5 月 4 日（木）

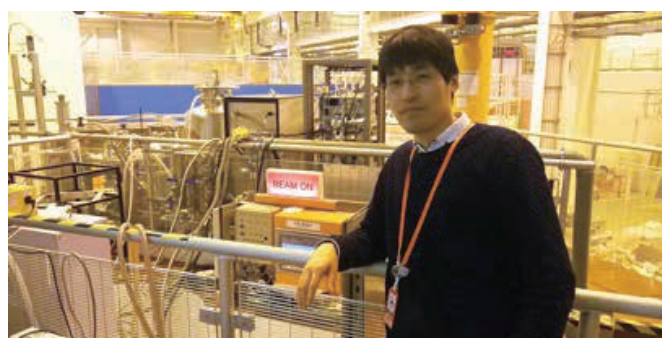
新学術領域の海外実験旅費支援を受けて、4 月 30 日から 5 月 4 日の 5 日間、イングランド、オックスフォードシャー州のハーウェル（Harwell）にあるラザフォード・アップルトン研究所（Rutherford Appleton Laboratory, RAL）に訪問した。来所の目的は、施設内の ISIS パルス中性子源実験施設のビームラインの 1 つ、WISH にて粉末中性子回折実験を行ない、筆者本人が合成した層状酸ハロゲン化物の磁気構造の解明を行なうことであった。ちなみに、ISIS という施設名は、オックスフォード大学近くでテムズ川と合流する ISIS River に由来するそうである。しかし、ISIS の語源については現地の人ですらよく分からないらしい。さて、今回の共同研究者は、去年平成 28 年の夏頃に訪問したオックスフォード大学物理学科の Andrew Boothroyd 教授、そして WISH の装置責任者、Pascal Manuel と Dmitry Khalyavin の両博士である。実は装置責任者とは共著として論文を出版したことがあったのだが、実際にお目にかかれたのは今回が初めてであった。

筆者自身は角度分散型の粉末中性子回折装置しか使用経験がなかったのだが、今回、初めてパルス中性子線を用いたエネルギー分散型回折装置を用いた実験を行い、データの解析法を学ぶ貴重な機会を得た。いざ実験が始まると、これまで使用した装置よりも短時間で格段に高強度、かつ高分解能のデータが得られることを目の当たりにし大変感銘を受けた。しかしながら、

今回持ち込んだ試料はあまりにも強敵であることを思い知らされた。本試料では磁性イオン一つ当たり、たった一つのスピン（磁石の成分）しか持たないため磁気由来の回折強度は大変小さくなるとは思ってはいたが、想定を越えてそれらを観測すること叶わなかった。しかしながら、本試料を初めて中性子回折実験で測定できたため、結晶構造の精密構造解析を完遂することができた。

実験以外のことについて少し報告したい。イギリスといえば飯が美味しくないと良く言われる。昔はそうだったかも知れないが、グローバルな今の世の中、もはや都市伝説と言っていいだろう。実際に、オックスフォード大学周辺のレストランは地元のファストフード店含めて美味しい料理を提供していた。しかし、RAL のゲストハウスが提供する夕飯の料理は噂通りの味であった。偶然時期が重なり ISIS に実験で来られていた日本人研究者と食事内容の話になったところ、朝ご飯の Full English Breakfast（卵焼き、ベーコン、マッシュルーム、ハッシュドポテト等がセットの朝食）が一番まともという意見で一致した。

今回の旅で、初めて訪れた海外大型施設での実験と解析技術の習得、さらに現地の共同研究者とのディスカッションという素晴らしい経験を得ることができた。旅費支援をしてくださった京大 陰山教授代表、並びに書類申請の手続きを迅速に処理して下さった東工大 千葉様に感謝を申し上げる次第である。



ISIS 中性子実験施設、WISH の装置の側に立つ筆者



ゲストハウスでの朝食メニュー

留学体験記

PhD Exchange to Kyoto University

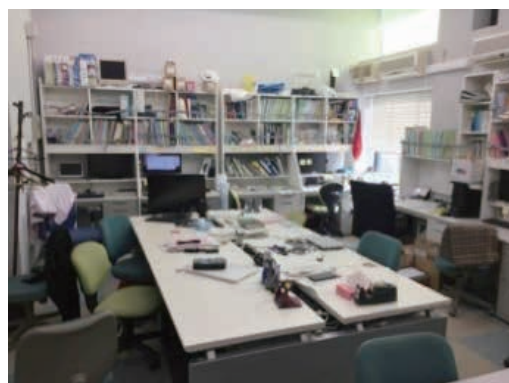
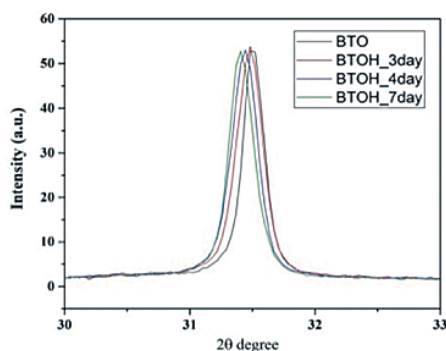
My name is Xin, from Truls Norby's lab in University of Oslo. I really appreciate Prof. Kageyama's host for my three month PhD exchange. Oxyhydrides have been discovered and studied for several years. Prof. Kageyama's lab has been

continuously working on this area. A visit to this research group in Kyoto fit perfectly my scientific focus. I had a great time there.



All members in Prof. Kageyama's lab are polite, friendly and helpful. The office is quite crowded, but infrastructure and instrument in lab are quite well-organized. Such as, small drawers on each table contain some useful office and lab supplies, such as, label paper, pen and scissors. The

instrument booking system, such as XRD which cannot book over 1 hour during daytime, also maximized its efficiency to every member in the lab. Those details in the lab impress me a lot.



Scientifically, I had much quite a lot discussions with both professors and students in the lab, especially, the synthesizing oxyhydride through CaH_2 method. Even for the well-known $\text{BaTiO}_{3-x}\text{H}_x$ oxyhydride, there are quite many things I need to pay attention, such as, grinding and washing sample. In addition, the normal techniques would help me to have more structural knowledge on oxyhydrides' structure.

The most useful tool I have learned during the exchange is the refinement of XRD. The slight change in the XRD pattern can be really useful for diagnosing hydride content in $\text{BaTiO}_{3-x}\text{H}_x$. Lastly, I really enjoyed the life in Kyoto. Food is stunning. Thanks again to all people in the group. Best wishes for everyone.

班内留学報告 No.1：吉田研－陰山研（チタン酸バリウムのヒドリド化および窒化）

大阪市立大学大学院 工学研究科 化学生物系専攻 D1 小澤 晃代

所属研究室：大阪市立大学 複合先端研究機構 吉田研

受入研究室：京都大学 工学研究科 陰山研究室

受入期間：2016年12月～2017年3月 うち6日間

酸化物や複合酸化物半導体光触媒は紫外光しか吸収しないため、可視光応答化のために窒素などのアニオンドーピングが広く研究されています。当研究室でもこれまで酸化物への窒素ドーピングを検討してきましたが、光触媒反応中に容易に窒素が脱離するため、アニオンのチャージバランスを整えるため一価のアニオンとの複合化を検討したいと考えていました。

そこで低温での窒素やフッ素のドーピングが可能な水素化手法を学ぶため、京都大学 陰山研に班内留学させて頂きました。具体的にはチタン酸バリウムを CaH_2 と共に真空封入し焼成することで水素化し、その後アンモニア中で焼成することでチタン酸バリウムの酸窒化物を得ることができ

ました。グローボックスでの操作や真空封入は経験がなく、実験操作を丁寧に教えて頂き大変貴重な経験でした。最終日にはリートベルト解析により、酸水素化物の水素ドーピング量の見積もり方もご教授いただき、大変勉強になりました。また滞在中には2度雑誌会にも参加させて頂き、活発な陰山研の雰囲気を見学し、とても良い刺激となりました。今回習得した合成・解析手法を活かして、研究を推進していきたいと思っています。

陰山先生や山本先生、実験を丁寧に指導して下さい了三木田さん、また滞在中温かく迎えて下さった陰山研究室的皆様に心より感謝申し上げます。



チタン酸バリウムの酸水素化物

班内留学報告 No.2: 木村研 - 前園研 (「Materials Science and High Performance Computing」ワークショップ)

東京大学新領域研究科物質系専攻 木村研究室 修士2年 小谷 拓史

指導教官：東京大学 木村 薫 教授

受入教官：北陸先端科学技術大学院大学 前園 涼 准教授

受入期間：平成29年1月8日～13日

平成29年1月8日～16日までの9日間、北陸先端科学技術大学院大学にて、「Materials Science and High Performance Computing」ワークショップが北陸先端前園研究室、インド工科大学と複合アニオン新学術領域の共催で開催され、東大木村研からも新学術領域の班内留学の一環として1月8日～13日までの6日間4人の学生で参加させていただきました。

このワークショップでは材料科学において用いられるシミュレーション技法として、経験的計算熱力学シミュレーション、第一原理密度汎関数法、第一原理量子モンテカルロ法をそれぞれフリーで利用できるCALPHAD、Quantum_Espresso、CASINOという計算プログラムで学びました。Linux Terminalの初歩的な使用方法から実習形式で講習が行われたため、コンピュータを使ったシミュレーションの経験がなくても計算プログラムを利用することができ、今後個人でもシミュレーション計算を用いた研究が行えるよ

うになる講習内容になっていました。また、講習は日本人学生とインド工科大学の方で2人1組になり、わからないところを教え合いながら行われました。3日目の夜には懇親会も開催され国際交流にも力を入れたワークショップになっていました。

複合アニオン化合物はその合成の難しさのため、作製前に合成の可能性についてシミュレーションによる設計がされることが望ましいと考えられ、またその物質特性の起源についてもシミュレーションによる解明が必要になると考えられます。したがって本新学術領域研究者が物理状態のシミュレーションの知識を身に付けることは必須であり、このような班内留学による実習の機会は今後も設けていきたいと思いました。

最後に、本ワークショップを主導していただいた前園先生、本郷先生、Hari先生、及び研究室の皆様にご心より感謝申し上げます。



ワークショップの様子



懇親会の様子

班内留学報告 No.3：稲熊研－田部研（酸フッ化ガラスの合成と蛍光寿命測定）

学習院大学大学院自然科学研究科化学専攻 修士1年 山根 麻衣子

指導教官：学習院大学理学部化学科 稲熊 宜之 教授

受入教官：京都大学人間・環境学研究科 田部 勢津久 教授、上田 純平 助教

受入期間：平成29年2月6日（月）～2月8日（水）

新学術領域の班内留学の一環として、京都大学人間・環境学研究科相関環境学専攻の田部研究室を訪問し、酸フッ化物ガラスの合成を行いました。ガラスの合成は勿論のこと、他大での実験自体初めてだったため、現在所属している稲熊研究室とは異なる実験設備を前に新鮮な気持ちで実験を行うことができました。ルツボに入れた試料を高温下で溶解させ、素早く炉から取り出し溶解した試料を金属板に流しこむ作業は、慣れないことで大変でしたが助教の上田先生の指導のもと、無事試料を取り出すことができました。しかし除歪前にガラスは破裂し、また、Crの蛍光も観測できませんでしたが、ガラスの合成を通じた他研究室での実験は自分の視野を広げることができ、良い経験となりました。

また持参した蛍光体の蛍光寿命測定もさせていただきました。

自身の所属する研究室ではレーザーによる測定しか行えなかったため、田部研でのキセノンフラッシュランプでの寿命測定を行うことができ、ペレット表面と内部で発光強度が異なる可能性を見出すことができました。また蛍光体の発光機構について田部先生や上田先生、田部研の学生の方々と多くのディスカッションをさせていただいたことも今後の研究を見直す良いきっかけとなりました。ディスカッションを通じて新たな知見や今後の方向性を見つける手がかりを得ることができ、自身の所属する研究室の中だけでは得られない良い刺激を受けました。

最後に、研修にご協力くださり、丁寧にご指導を賜りました田部先生、上田先生、及び研究室の皆様にご心より感謝申し上げます。



合成した酸フッ化物ガラス

アウトリーチ活動報告

2016.11.07	JFCC 技術交流会
A02 桑原が、JFCC が中部地区の企業と実施している技術交流会において、第一原理計算を用いた複合アニオン化合物における点欠陥構造の解析結果について紹介した。	
2016.11.10	JST さくらサイエンス・インド学部学生研究室見学
A03 長谷川・近松が東京大学において、JST さくらサイエンスプランで招聘したインドの高校生の研究室訪問、見学会を実施した。	
2016.11.14	新電池構想部会
A03 内本が、新電池構想部会（東京理科大学森戸記念館）において、“operando 蓄電池反応解析を用いた高エネルギー密度・高出力材料開発”と題する講演を行った。（一般参加者 30 名）	
2016.11.15	中国科学院長春応用化学研究所【無機化学シリーズ講義】講師
A01 殷が、中国科学院長春応用化学研究所において、「酸化物粉体と薄膜の形態制御及び機能性創出」についての講義を行った。（参加者は中国科学院長春応用化学研究所職員と院生 50 名）	
2016.11.18	第 1 回フロンティア太陽電池セミナー
A03 田部が、「ペロブスカイトの結晶化学：多彩な電子機能を有する驚異の材料」という題目で 60 分のチュートリアル講義を行った。	
2016.12.03	第 10 回海の星学寮懇話会
A02 山本が、公益財団法人海の星学寮にて、“大学研究者としての挑戦：無機化学のすすめ～新物質の合成を目指して”という題目で講演を行った。（大学生 30 名参加）	
2016.12.04	出張講義
A01 殷が、華僑大学廈門キャンパスにて、「赤外線応答機能材料の創製」についての講義を実施した。（参加者は中国華僑大学材料関連大学院生 80 名）	
2016.12.08	佐賀大学シンクロトロン光応用研究センター講演会
A03 内本が、佐賀大学シンクロトロン光応用研究センター講演会（サンメッセ鳥栖）において、“シンクロトロン放射光を用いた蓄電池反応機構解明”と題する講演を行った。（一般参加者 30 名）	
2016.12.12～17	JAIST-India Workshop 2016/Materials Science simulations
A02 前園、A01 本郷、Hari Kumar（代表者・IITM・教授）が、IITM 校冶金・物質工学科の支援を受け、2016 年 7 月実施の「India-Japanese ICME workshop」に引き続き、計算材料科学に関するチュートリアルを実施した。参加者は 17 名で、JAIST と IITGN の大学院生に加えて、領域内研究グループ（京大）から大学院生が参加した。	
2016.12.14	機能性窒化物・酸窒化物に関する講演会
A01 鱒淵が、TDK 株式会社 テクニカルセンターにおいて、“機能性材料として注目される金属窒化物・酸窒化物”と題して講演した。（TDK 職員 60 名が参加）	

2016.12.16 パナソニック 先端研究本部コロキウム講演

A01 陰山が、企業での研究者向けに複合アニオン系に関するレクチャーを行なった。多くの部門から聴講する人が集まり、同社の通常のセミナーでの出席者を大幅に上回る約 100 名もの参加者があった。

2016.12.26 2016 年度兵庫県立豊岡高等学校「東大研修」

A03 長谷川・近松が東京大学において、兵庫県立豊岡高等学校の学生の OB 訪問を兼ねた研究室訪問、見学を実施した。

2017.01.09 ~ 16 JAIST-IITGN Workshop 2017: Frontier Scientists/Engineers with Global Sense/Ser. II 'Materials Science and High Performance Computing'

A02 前園、A01 本郷が、「平成 26 年度大学の世界展開力強化事業」による支援を受け、計算材料科学におけるチュートリアルを実施した。参加者は 18 名で、JAIST と IITGN の大学院生に加えて、領域内研究グループ（東大・京大）から大学院生が参加した。

2017.01.13 滋賀県立膳所高校 SSH 特別講義

A03 田部が、「グリーンフォトンクスのための無機光機能性材料」という題目で 90 分の特別講義を行った。

2017.01.18 ~ 19 "Hands-on session: Constructing MPI parallel simulation using hand-made PC cluster"

A02 前園、A01 本郷が、タイ・プーケットで開催された Third Asian Conference on Defense Technology (ACDT2017) のハンズオンセッションとして、自作 PC クラスターの構築、及び、それを使った MPI 並列シミュレーションについてのチュートリアルを実施した。（参加者は 10 名）

2017.01.19 PF 研究会

A03 内本が、PF 研究会（高エネルギー加速器研究機構）において、“電気化学エネルギー変換デバイス特性の理解 ～電流・電位と量子ビーム計測結果との融合～”と題する講演を行った。（一般参加者 50 名）

2017.02.13 シンガポール国立大学、ラ・トローブ大学ナノテク専攻学部学生研究室見学

A03 長谷川・近松が東京大学において、シンガポール国立大とラ・トローブ大のナノテク専攻学部学生の研究室訪問、見学会を実施した。

2017.02.14 Nanotechnology Study Tour 2017

A03 森のグループが、オーストラリアとシンガポールの若い学部学生に対して（20 名）、開発している複合アニオン化合物を含む先端的な熱電材料に関して講習と実演を行った。

2017.02.18 研究室見学

A02 八島が、東京工業大学大岡山キャンパスで開催された研究室見学会にて、一般の大学生に複合アニオン系を含む材料科学・化学のおもしろさを説明した。

2017.02.28 第 44 回 ニューセラミックスセミナー

A03 内本が、第 44 回ニューセラミックスセミナー（大阪産業創造館）において、“多価カチオン系およびアニオン系革新蓄電池への期待”と題する講演を行った。（一般参加者 80 名）

■ 領域ニュース

2017.03.07 先端分析設備活用講演会

A02 野田が、名古屋工業大学 大型設備基盤センター主催の「先端分析設備活用講演会・設備見学会」でナノスケールの構造解析や物性解析手法の開発に関する研究事例について招待講演を行った。聴衆は名古屋近郊の企業人と名工大の先生方・学生であった。

2017.03.09 情報機構セミナー

A03 田部が、「量子切断蛍光体の特徴と応用～原理・現象の基礎・展望～」という題目で4時間講義を行った。

2017.03.25 研究室見学

A02 八島が、東京工業大学大岡山キャンパスで開催された研究室見学会にて、一般の大学生に複合アニオン系を含む材料科学・化学のおもしろさを説明した。

2017.03.29 サイエンス&テクノロジー セミナー

A03 田部が、「希土類蛍光体・セラミック蛍光体の基礎と課題、発光特性・量子効率・光源効率の評価法～白色LED、透光性セラミック、結晶化ガラス、高演色性～」という題目で6時間の講義を行った。

2017.04.06 ノルウェー学生団見学会

A03 森のグループが、ノルウェーの若い学部学生（40名）を対象に、開発中の複合アニオン化合物を含む先端的な熱電材料に関する講習と実演を行った。

2017.04.15 筑波大学物質・材料専攻オープンキャンパス 2017

A03 森がラボ紹介として、若い学部学生を対象に（予想20名程度）、開発中の複合アニオン化合物を含む先端的な熱電材料に関する講習と実演を行った。

2017.04.23 平成29年度科学技術週間—一般公開

A03 森とグループメンバーが、老若男女一般国民を対象に（予想100名程度）「人類最大の未利用エネルギー源：熱エネルギーの活用」という題目で、開発中の複合アニオン化合物を含む先端的な熱電材料および断熱材料に関する実演を行った。

2017.5.11, 18 出張講義

A03 前田が、東京工業高等専門学校での授業「先端理工学研究特論」の一環で出張講義を実施し、“化学の力で人工光合成に挑戦する”と題する講義を2週に渡って行った。初回の1週目は人工光合成の学問的な基礎を中心に解説し、2週目は演者の経験を中心とした研究内容を紹介した。聴講した高専学生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。

発表論文リスト (2016.6 ~)

1. Kobayashi, M.; Yasunaga, T.; Sato, H.; Kato, H.; Fujii, K.; Yashima, M.; Kakihana, M., Synthesis, Structure, and Photoluminescence of a Novel Oxynitride BaYSi₂O₅N Activated by Eu²⁺ and Ce³⁺. *Chemistry Letters* **2017**, 46 (6), 795–797 DOI: 10.1246/cl.170144.
Tags: A01 垣花
2. Kuriki, R.; Yamamoto, M.; Higuchi, K.; Yamamoto, Y.; Akatsuka, M.; Lu, D.; Yagi, S.; Yoshida, T.; Ishitani, O.; Maeda, K., Robust Binding between Carbon Nitride Nanosheets and a Binuclear Ruthenium(II) Complex Enabling Durable, Selective CO₂ Reduction under Visible Light in Aqueous Solution. *Angewandte Chemie International Edition* **2017**, 56 (17), 4867–4871 DOI: 10.1002/anie.201701627.
Tags: A02 吉田, A03 前田
3. Kumagai, H.; Sahara, G.; Maeda, K.; Higashi, M.; Abe, R.; Ishitani, O., Hybrid photocathode consisting of a CuGaO₂ p-type semiconductor and a Ru(II)–Re(I) supramolecular photocatalyst: non-biased visible-light-driven CO₂ reduction with water oxidation. *Chem. Sci.* **2017** DOI: 10.1039/C7SC00940B.
Tags: A03 前田, A03 阿部
4. Kunioku, H.; Higashi, M.; Tassel, C.; Kato, D.; Tomita, O.; Kageyama, H.; Abe, R., Sillén–Aurivillius-related Oxychloride Bi₆NbWO₁₄Cl as a Stable O₂-evolving Photocatalyst in Z-scheme Water Splitting under Visible Light. *Chemistry Letters* **2017**, 46 (4), 583–586 DOI: 10.1246/cl.170077.
Tags: A01 陰山, A03 阿部
5. Zhang, Q.; Zhang, X.; Yao, C.; Huang, H.; Wang, D.; Dong, C.; Ma, Y.; Ogino, H.; Awaji, S., Enhanced transport critical current density in Sn-added SmFeAsO_{1-x}F_x tapes prepared by PIT method. *Superconductor Science and Technology* **2017** DOI: 10.1088/1361-6668/aa6850.
Tags: A01 荻野
6. Zhao Z.; Fan J.; Chang; Asakura Y.; and Yin S., Recent Progress on Mixed-anion Type Visible-Light Induced Photocatalysts, *Science China Technological Sciences* **2017**, 60, 1-11. doi: 10.1007/s11431-016-9022-9.
Tags: A01 殷
7. Ishida, S.; Song, D.; Ogino, H.; Iyo, A.; Eisaki, H.; Nakajima, M.; Shimoyama, J., Eisterer, M. Doping-dependent critical current properties in K, Co, and P-doped BaFe₂As₂ single crystals. *Physical Review B* **2017**, 95 (1) DOI: 10.1103/PhysRevB.95.014517.
Tags: A01 荻野
8. Ueda, J.; Meijerink, A.; Dorenbos, P.; Bos, A. J. J.; Tanabe, S., Thermal ionization and thermally activated crossover quenching processes for 5d – 4f luminescence in Y₃Al_{5-x}Ga_xO₁₂:Pr³⁺. *Physical Review B* **2017**, 95 (1) DOI: 10.1103/PhysRevB.95.014303.
Tags: A03 田部
9. Wada, K.; Eguchi, M.; Ishitani, O.; Maeda, K., Activation of the Carbon Nitride Surface by Silica in a CO-Evolving Hybrid Photocatalyst. *ChemSusChem* **2017**, 10 (1), 287–295 DOI: 10.1002/cssc.201600661.
Tags: A03 前田
10. Nakada, A.; Nishioka, S.; Vequizo, J. J. M.; Muraoka, K.; Kanazawa, T.; Yamakata, A.; Nozawa, S.; Kumagai, H.; Adachi, S.; Ishitani, O.; et al., Solar-driven Z-scheme water splitting using tantalum/nitrogen co-doped rutile titania nanorod as an oxygen evolution photocatalyst. *J. Mater. Chem. A* **2017** DOI: 10.1039/C6TA10541F.
Tags: A02 山片, A03 前田

11. Miki, I., セラミックスナノ多孔体 水熱炭化法によるカーボンスフィアの合成：細孔構造とキャパシタ特性．セラミックス **2017**, 52 (1), 38.
Tags: A02 稲田
12. Onozuka, T.; Chikamatsu, A.; Katayama, T.; Hirose, Y.; Harayama, I.; Sekiba, D.; Ikenaga, E.; Minohara, M.; Kumigashira, H.; Hasegawa, T., Reversible Changes in Resistance of Perovskite Nickelate NdNiO₃ Thin Films Induced by Fluorine Substitution. *ACS Appl. Mater. Interfaces* **2017**, 9 (12), 10882–10887 DOI: 10.1021/acsami.7b00855.
Tags: A03 長谷川
13. Maeda, K.; Ishimaki, K.; Okazaki, M.; Kanazawa, T.; Lu, D.; Nozawa, S.; Kato, H.; Kakihana, M., Cobalt Oxide Nanoclusters on Rutile Titania as Bifunctional Units for Water Oxidation Catalysis and Visible Light Absorption: Understanding the Structure–Activity Relationship. *ACS Appl. Mater. Interfaces* **2017**, 9 (7), 6114–6122 DOI: 10.1021/acsami.6b15804.
Tags: A01 垣花, A03 前田
14. Ikeuchi, Y.; Takatsu, H.; Tassel, C.; Goto, Y.; Murakami, T.; Kageyama, H., High-Pressure Synthesis of Fully Occupied Tetragonal and Cubic Tungsten Bronze Oxides. *Angew. Chem. Int. Ed.* **2017**, 56 (21), 5770–5773 DOI: 10.1002/anie.201701732.
Tags: A01 陰山
15. Goto, Y.; Tassel, C.; Noda, Y.; Hernandez, O.; Pickard, C. J.; Green, M. A.; Sakaebe, H.; Taguchi, N.; Uchimoto, Y.; Kobayashi, Y.; et al., Pressure-Stabilized Cubic Perovskite Oxyhydride BaScO₂H. *Inorg. Chem.* **2017** DOI: 10.1021/acs.inorgchem.6b02834.
Tags: A01 陰山, A02 野田, A03 内本
16. Kurauchi, Y.; Kamisaka, H.; Katayama, T.; Chikamatsu, A.; Hasegawa, T., First-Principles Calculations on the Crystal/Electronic Structure and Phase Stability of H-Doped SrFeO₂. *J. Phys. Chem. C* **2017**, 121 (13), 7478–7484 DOI: 10.1021/acs.jpcc.6b12863.
Tags: A03 長谷川
17. Innocent, J.-L.; Portehault, D.; Gouget, G.; Maruyama, S.; Ohkubo, I.; Mori, T., Thermoelectric properties of boron carbide/HfB₂ composites. *Materials for Renewable and Sustainable Energy* **2017**, 6 (2) DOI: 10.1007/s40243-017-0090-8.
Tags: A03 森
18. Onyancha, R. B.; Shimoyama, J.; Singh, S. J.; Ogino, H.; Srinivasu, V. V., Temperature Dependence Low-Field Microwave Absorption in a Powder Sample of SmFeAs(O,F) Iron Pnictide Superconductor. *Journal of Superconductivity and Novel Magnetism* **2017**, 30 (4), 1097–1102 DOI: 10.1007/s10948-016-3845-z.
Tags: A01 荻野
19. Katayama, Y.; Hashimoto, A.; Xu, J.; Ueda, J.; Tanabe, S., Thermoluminescence investigation on Y₃Al_{5-x}Ga_xO₁₂:Ce³⁺-Bi³⁺ green persistent phosphors. *Journal of Luminescence* **2017**, 183, 355–359 DOI: 10.1016/j.jlumin.2016.11.074.
Tags: A03 田部

20. Enomoto, N.; Hirata, S.; Inada, M.; Hayashi, K., Crystallization behavior of iron-based amorphous nanoparticles prepared sonochemically. *Ultrasonics Sonochemistry* **2017**, *35*, 563–568 DOI: 10.1016/j.ultsonch.2016.04.033.
Tags: A02 林
21. Inada, M.; Enomoto, N.; Hojo, J.; Hayashi, K., Structural analysis and capacitive properties of carbon spheres prepared by hydrothermal carbonization. *Advanced Powder Technology* **2017**, *28* (3), 884–889 DOI: 10.1016/j.appt.2016.12.014.
Tags: A02 林
22. Inada, M.; Enomoto, N.; Hojo, J.; Hayashi, K., Structural analysis and capacitive properties of carbon spheres prepared by hydrothermal carbonization. *Advanced Powder Technology* **2017**, *28* (3), 884–889 DOI: 10.1016/j.appt.2016.12.014.
Tags: A02 稲田
23. Kamura, A.; Masubuchi, Y.; Motohashi, T.; Kikkawa, S., Preparation and optical property of gallium zinc oxynitride powder and nanocrystals with sawtooth-like appearance. *Materials Research Bulletin* **2017**, *87*, 130–134 DOI: 10.1016/j.materresbull.2016.11.013.
Tags: A01 鱒淵
24. Chang, H.; Cui, Y.; Wei, W.; Li, X.; Gao, W.; Zhao, X.; Yin, S., Adsorption behavior and wettability by Gemini surfactants with ester bond at polymer-solution-air systems. *Journal of Molecular Liquids* **2017**, *230*, 429–436 DOI: 10.1016/j.molliq.2017.01.056.
Tags: A01 殷
25. Onyancha, R. B.; Shimoyama, J.; Singh, S. J.; Hayashi, K.; Ogino, H.; Srinivasu, V. V., Anomalous non-resonant microwave absorption in SmFeAs(O,F) polycrystalline sample. *Physica C: Superconductivity and its Applications* **2017**, *533*, 49–52 DOI: 10.1016/j.physc.2016.07.019.
Tags: A01 荻野
26. Hosono, A.; Masubuchi, Y.; Kikkawa, S., Sintering behavior of dielectric SrTaO₂N under high pressure of nitrogen. *Ceramics International* **2017**, *43* (2), 2737–2742 DOI: 10.1016/j.ceramint.2016.11.101.
Tags: A01 鱒淵
27. Ma, X.; Li, H.; Liu, T.; Du, S.; Qiang, Q.; Wang, Y.; Yin, S.; Sato, T., Comparison of photocatalytic reaction-induced selective corrosion with photocorrosion: Impact on morphology and stability of Ag-ZnO. *Applied Catalysis B: Environmental* **2017**, *201*, 348–358 DOI: 10.1016/j.apcatb.2016.08.029.
Tags: A01 殷
28. Wu, X.; Wang, J.; Zhang, G.; Katsumata, K.; Yanagisawa, K.; Sato, T.; Yin, S., Series of M_xWO₃/ZnO (M = K, Rb, NH₄) nanocomposites: Combination of energy saving and environmental decontamination functions. *Applied Catalysis B: Environmental* **2017**, *201*, 128–136 DOI: 10.1016/j.apcatb.2016.08.030.
Tags: A01 殷
29. Zhao, Z.; Fan, J.; Liu, W.; Xue, Y.; Yin, S., In-situ hydrothermal synthesis of Ag₃PO₄/g-C₃N₄ composite and their photocatalytic decomposition of NO_x. *Journal of Alloys and Compounds* **2017**, *695*, 2812–2819 DOI: 10.1016/j.jallcom.2016.12.001.
Tags: A01 殷

30. Liang, F.; Watanabe, T.; Hayashi, K.; Yao, Y.; Ma, W.; Bin Yang; Dai, Y., Liquid exfoliation graphene sheets as catalysts for hybrid sodium-air cells. *Materials Letters* **2017**, *187*, 32–35 DOI: 10.1016/j.matlet.2016.10.054.
Tags: A02 林
31. Li, H.; Wu, X.; Yin, S.; Katsumata, K.; Wang, Y., Effect of rutile TiO₂ on the photocatalytic performance of g-C₃N₄/brookite-TiO_{2-x}N_y photocatalyst for NO decomposition. *Applied Surface Science* **2017**, *392*, 531–539 DOI: 10.1016/j.apsusc.2016.09.075.
Tags: A01 殷
32. Oshima, T.; Yokoi, T.; Eguchi, M.; Maeda, K., Synthesis and photocatalytic activity of K₂CaNaNb₃O₁₀, a new Ruddlesden–Popper phase layered perovskite. *Dalton Trans.* **2017**, DOI: 10.1039/C6DT04872B.
Tags: A03 前田
33. Su, Y.; Tsujimoto, Y.; Miura, A.; Asai, S.; Avdeev, M.; Ogino, H.; Ako, M.; Belik, A. A.; Masuda, T.; Uchikoshi, T.; et al., A layered wide-gap oxyhalide semiconductor with an infinite ZnO₂ square planar sheet: Sr₂ZnO₂Cl₂. *Chem. Commun.* **2017**, *53* (27), 3826–3829 DOI: 10.1039/C7CC01011G.
Tags: A01 荻野
34. Yajima, T.; Koshiko, M.; Zhang, Y.; Oguchi, T.; Yu, W.; Kato, D.; Kobayashi, Y.; Orikasa, Y.; Yamamoto, T.; Uchimoto, Y.; et al., Selective and low temperature transition metal intercalation in layered tellurides. *Nature Communications* **2016**, *7*, 13809 DOI: 10.1038/ncomms13809.
Tags: A01 陰山, A02 山本, A03 内本
35. Back, M.; Trave, E.; Ueda, J.; Tanabe, S., Ratiometric Optical Thermometer Based on Dual Near-Infrared Emission in Cr³⁺-Doped Bismuth-Based Gallate Host. *Chemistry of Materials* **2016**, *28* (22), 8347–8356 DOI: 10.1021/acs.chemmater.6b03625.
Tags: A03 田部
36. Zhuang, Y.; Lv, Y.; Li, Y.; Zhou, T.; Xu, J.; Ueda, J.; Tanabe, S.; Xie, R.-J., Study on Trap Levels in SrSi₂AlO₂N₃:Eu²⁺,Ln³⁺ Persistent Phosphors Based on Host-Referred Binding Energy Scheme and Thermoluminescence Analysis. *Inorganic Chemistry* **2016**, *55* (22), 11890–11897 DOI: 10.1021/acs.inorgchem.6b01971.
Tags: A03 田部
37. Takeiri, F.; Matsumoto, Y.; Yamamoto, T.; Hayashi, N.; Li, Z.; Tohyama, T.; Tassel, C.; Ritter, C.; Narumi, Y.; Hagiwara, M.; et al., High-pressure synthesis of the layered iron oxyselenide BaFe₂Se₂O with strong magnetic anisotropy. *Physical Review B* **2016**, *94* (18) DOI: 10.1103/PhysRevB.94.184426.
Tags: A01 陰山, A02 山本
38. Hamanaka, M.; Imakawa, K.; Yoshida, M.; Zhao, Z.; Yin, S.; Wu, X.; Huang, Y.; Wu, J.; Sato, T., Synthesis and gas sensing properties of SnO₂ nanoparticles with different morphologies. *J Porous Mater* **2016**, *23* (5), 1189–1196 DOI: 10.1007/s10934-016-0177-0.
Tags: A01 殷

39. Kunisada, T.; Ushiyama, H.; Yamashita, K., A new implementation of ab initio ehrenfest dynamics using electronic configuration basis: Exact formulation with molecular orbital connection and effective propagation scheme with locally quasi-diabatic representation: FULL PAPER. *International Journal of Quantum Chemistry* **2016**, *116* (16), 1205–1213 DOI: 10.1002/qua.25156.
Tags: A03 牛山
40. Sontakke, A. D.; Ueda, J.; Xu, J.; Asami, K.; Katayama, M.; Inada, Y.; Tanabe, S., A Comparison on Ce³⁺ Luminescence in Borate Glass and YAG Ceramic: Understanding the Role of Host's Characteristics. *The Journal of Physical Chemistry C* **2016**, *120* (31), 17683–17691 DOI: 10.1021/acs.jpcc.6b04159.
Tags: A03 田部
41. Kuroki, A.; Ushiyama, H.; Yamashita, K., Proton-Transfer Dynamics in Protonated Benzene. *Bulletin of the Chemical Society of Japan* **2016**, *89* (7), 804–809 DOI: 10.1246/bcsj.20150365.
Tags: A03 牛山
42. Katayama, Y.; Kobayashi, H.; Ueda, J.; Viana, B.; Tanabe, S., Persistent luminescence properties of Cr³⁺-Sm³⁺ activated LaAlO₃ perovskite. *Optical Materials Express* **2016**, *6* (5), 1500 DOI: 10.1364/OME.6.001500.
Tags: A03 田部
43. Watanabe, E.; Rossmeisl, J.; Björketun, M. E.; Ushiyama, H.; Yamashita, K., Atomic-Scale Analysis of the RuO₂/Water Interface under Electrochemical Conditions. *The Journal of Physical Chemistry C* **2016**, *120* (15), 8096–8103 DOI: 10.1021/acs.jpcc.5b12448.
Tags: A03 牛山
44. Katayama, Y.; Viana, B.; Gourier, D.; Xu, J.; Tanabe, S., Photostimulation induced persistent luminescence in Y₃Al₂Ga₃O₁₂:Cr³⁺. *Optical Materials Express* **2016**, *6* (4), 1405 DOI: 10.1364/OME.6.001405.
Tags: A03 田部
45. Fan, J.; Zhao, Z.; Liu, W.; Xue, Y.; Yin, S., Solvothermal synthesis of different phase N-TiO₂ and their kinetics, isotherm and thermodynamic studies on the adsorption of methyl orange. *Journal of Colloid and Interface Science* **2016**, *470*, 229–236 DOI: 10.1016/j.jcis.2016.02.045.
Tags: A01 殷
46. Kuno, Y.; Tassel, C.; Fujita, K.; Batuk, D.; Abakumov, A. M.; Shitara, K.; Kuwabara, A.; Moriwake, H.; Watabe, D.; Ritter, C.; et al., ZnTaO₂N: Stabilized High-Temperature LiNbO₃-type Structure. *J. Am. Chem. Soc.* **2016**, *138* (49), 15950–15955 DOI: 10.1021/jacs.6b08635.
Tags: A01, A02, A03
47. Asami, K.; Ueda, J.; Tanabe, S., Trap depth and color variation of Ce³⁺-Cr³⁺ co-doped Gd₃(Al,Ga)₅O₁₂ garnet persistent phosphors. *Optical Materials* **2016**, *62*, 171–175 DOI: 10.1016/j.optmat.2016.09.052.
Tags: A03 田部
48. Kang, Y.; Liang, F.; Hayashi, K., Hybrid Sodium–Air Cell with Na[FSA–C₂C₁im][FSA] Ionic Liquid Electrolyte. *Electrochimica Acta* **2016**, *218*, 119–124 DOI: 10.1016/j.electacta.2016.09.113.
Tags: A02 林
49. Matsushita, J.; Satsukawa, T.; Iwamoto, N.; Wang, X. L.; Yang, J. F.; Goto, T.; Sekino, T.; Wu, X. Y.; Yin, S.; Sato, T., Oxidation of Pentatitanium Trisilicide (Ti₅Si₃) Powder at High Temperature. *Materials Science Forum* **2016**, *868*, 38–42 DOI: 10.4028/www.scientific.net/MSF.868.38.
Tags: A01 殷

50. Kuroki, A.; Ushiyama, H.; Yamashita, K., Theoretical studies on ammonia borane dehydrogenation catalyzed by iron pincer complexes. *Computational and Theoretical Chemistry* **2016**, *1090*, 214–217 DOI: 10.1016/j.comptc.2016.06.017.
Tags: A03 牛山
51. Liu, T.; Liu, B.; Wang, J.; Yang, L.; Ma, X.; Li, H.; Zhang, Y.; Yin, S.; Sato, T.; Sekino, T.; et al., Smart window coating based on F-TiO₂-K_xWO₃ nanocomposites with heat shielding, ultraviolet isolating, hydrophilic and photocatalytic performance. *Scientific Reports* **2016**, *6* (1) DOI: 10.1038/srep27373.
Tags: A01 殷
52. Sulaeman, U.; Febiyanto, F.; Yin, S.; Sato, T., The highly active saddle-like Ag₃PO₄ photocatalyst under visible light irradiation. *Catalysis Communications* **2016**, *85*, 22–25 DOI: 10.1016/j.catcom.2016.07.001.
Tags: A01 殷
53. Sontakke, A. D.; Ueda, J.; Tanabe, S., Significance of host's intrinsic absorption band tailing on Ce³⁺ luminescence quantum yield in borate glass. *Journal of Luminescence* **2016**, *170*, 785–788 DOI: 10.1016/j.jlumin.2015.09.024.
Tags: A03 田部
54. Sontakke, A. D.; Ueda, J.; Tanabe, S., Effect of synthesis conditions on Ce³⁺ luminescence in borate glasses. *Journal of Non-Crystalline Solids* **2016**, *431*, 150–153 DOI: 10.1016/j.jnoncrysol.2015.04.005.
Tags: A03 田部
55. Mahlik, S.; Lazarowska, A.; Ueda, J.; Tanabe, S.; Grinberg, M., Spectroscopic properties and location of the Ce³⁺ energy levels in Y₃Al₂Ga₃O₁₂ and Y₃Ga₅O₁₂ at ambient and high hydrostatic pressure. *Phys. Chem. Chem. Phys.* **2016**, *18* (9), 6683–6690 DOI: 10.1039/C5CP07732J.
Tags: A03 田部
56. Xu, J.; Ueda, J.; Tanabe, S., Novel persistent phosphors of lanthanide–chromium co-doped yttrium aluminum gallium garnet: design concept with vacuum referred binding energy diagram. *J. Mater. Chem. C* **2016**, *4* (20), 4380–4386 DOI: 10.1039/C6TC00802J.
Tags: A03 田部
57. Xu, J.; Murata, D.; Ueda, J.; Tanabe, S., Near-infrared long persistent luminescence of Er³⁺ in garnet for the third bio-imaging window. *J. Mater. Chem. C* **2016**, *4* (47), 11096–11103 DOI: 10.1039/C6TC04027F.
Tags: A03 田部
58. Ueda, J.; Yagi, M.; Tanabe, S., Editors' Choice—Investigation of Luminescence and Photoacoustic Properties in Ce³⁺-Doped Ln₃Al₅O₁₂ (Ln = Lu, Y, Gd) Garnet. *ECS Journal of Solid State Science and Technology* **2016**, *5* (12), R219–R222 DOI: 10.1149/2.0241612jss.
Tags: A03 田部
59. 山下俊介 ; 石塚和夫 ; 木本浩司 . Quantitative Measurement and Analysis of Annular Dark-Field STEM Image for Crystal Structure Analysis. 顕微鏡 = *Microscopy* **2016**, *51* (3), 181–184.
Tags: A02 木本
60. Inada, M.; Kurata, S.; Enomoto, N.; Hayashi, K., Hydrothermal Synthesis of Tetragonal Barium Titanate Rod-like Crystal. *Journal of the Society of Powder Technology, Japan* **2016**, *53* (12), 804–809 DOI: 10.4164/sptj.53.804.
Tags: A02 稲田

61. Yoshida, T.; Minoura, Y.; Nakano, Y.; Yamamoto, M.; Yagi, S.; Yoshida, H., XAFS study on a photodeposition process of Pt nanoparticles on TiO₂ photocatalyst. *J. Phys.: Conf. Ser.* **2016**, *712* (1), 012076 DOI: 10.1088/1742-6596/712/1/012076.
Tags: A02 吉田
62. Akatsuka, M.; Yoshida, T.; Yamamoto, N.; Yamamoto, M.; Ogawa, S.; Yagi, S., XAFS analysis for quantification of the gallium coordinations in Al₂O₃-supported Ga₂O₃ photocatalysts. *J. Phys.: Conf. Ser.* **2016**, *712* (1), 012056 DOI: 10.1088/1742-6596/712/1/012056.
Tags: A02 吉田
63. Yamamoto, M.; Yoshida, T.; Yamamoto, N.; Nomoto, T.; Yamamoto, A.; Yoshida, H.; Yagi, S., Ag K- and L₃-edge XAFS study on Ag species in Ag/Ga₂O₃ photocatalysts. *J. Phys.: Conf. Ser.* **2016**, *712* (1), 012074 DOI: 10.1088/1742-6596/712/1/012074.
Tags: A02 吉田
64. Ogawa, S.; Suzuki, H.; Tsukada, C.; Yoshida, T.; Yagi, S., Hydrogen Storage of Pd/Mg composite Nanoparticles Fabricated by Gas Evaporation Method. *e-Journal of Surface Science and Nanotechnology* **2016**, *14*, 150–153 DOI: 10.1380/ejssnt.2016.150.
Tags: A02 吉田
65. Inada, M.; Kurata, S.; Enomoto, N.; Hayashi, K., Hydrothermal Synthesis of Tetragonal Barium Titanate Rod-like Crystal. *Journal of the Society of Powder Technology, Japan* **2016**, *53* (12), 804–809 DOI: 10.4164/sptj.53.804.
Tags: A02 林
66. Yamamoto, T.; Kageyama, H., Pressure-Induced Transitions in Square Planar Coordinate Metal Oxides. *Nihon Kessho Gakkaishi* **2016**, *58* (6), 261–266 DOI: 10.5940/jcrsj.58.261.
Tags: A01 陰山, A02 山本
67. 鱒淵友治; 吉川信一. Locally ordered structure and dielectric property of perovskite type oxynitrides. 日本結晶成長学会誌 *Journal of the Japanese Association for Crystal Growth* **2016**, *43* (3), 176–182.
Tags: A01 鱒淵
68. Matsushita, J.; Tsuchiyama, T.; Hamaguchi, K.; Iwamoto, N.; Wang, X. L.; Yang, J. F.; Sekino, T.; Wu, X. Y.; Yin, S.; Sato, T., Anatase Type Titanium Dioxide Prepared by Oxidation of Titanium Carbide. *Materials Science Forum* **2016**, *860*, 92–96 DOI: 10.4028/www.scientific.net/MSF.860.92.
Tags: A01 殷
69. 稲田幹. 光触媒酸化チタンナノ粒子の構造機能制御とその応用 (特集 高機能セラミックスと粉体技術の最新潮流をさぐる). *工業材料* **2016**, *64* (12), 56–60.
Tags: A02 稲田

受賞報告

■ 京都大学の陰山 洋 教授(領域代表)が第34回(平成28年度)日本化学会学術賞を受賞

このたび当研究領域代表 陰山洋教授が第34回日本化学会学術賞を受賞されました。この賞は、化学の基礎または応用のそれぞれの分野において先導的・開拓的な研究業績を挙げた者に授与される大変名誉ある賞です。陰山教授は「機能性を有する酸化物および複合アニオン化合物の開拓」に関する顕著な業績が評価され、今回受賞するに至りました。3月17日の日本化学会第97春季年会で行われた受賞講演は多くの聴衆で賑わい、陰山教授の学生時代の研究から今日の複合アニオン研究に至る道筋が裏話を交えながら紹介されました。

陰山先生からの受賞コメント

この度、「機能性を有する酸化物および複合アニオン化合物の開拓」という内容で化学会学術賞をいただきました。複合アニオン化合物も受賞内容には一部含まれておりますが、まだ「学術」賞をいただくレベルに達しているかと考えるとまだまだだと感じています。今後、真の学術を創ったと胸を張っていえるように、新学術領域の仲間と頑張っていきたいと決意を新たにしています。

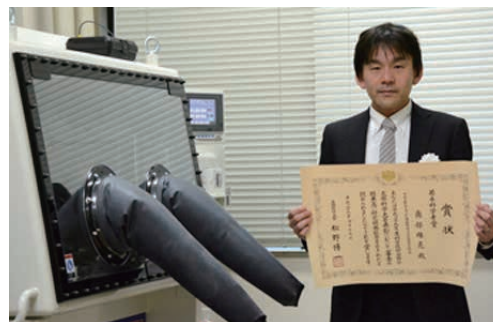


■ 東北大学の南部 雄亮 准教授(A02公募)が平成29年度科学技術分野の文部科学大臣表彰若手科学者賞を受賞

科学技術分野の文部科学大臣表彰若手科学者賞は、萌芽的な研究、独創的視点に立った研究等、高度な研究開発能力を示す顕著な研究業績をあげた40歳未満の若手研究者を対象とした賞です(http://www.mext.go.jp/b_menu/houdou/29/04/1384228.htm)。南部氏は、「中性子散乱を用いた強相関電子系物質の研究」を通して次元性の異なる物質からの鉄系超伝導へのアプローチやフラストレート磁性体の磁気空間相関の解明などについて顕著な業績を挙げ、受賞者に選ばれました。授賞式は4月19日に文部科学省で行われました。

南部先生からの受賞コメント

名誉ある文部科学大臣表彰若手科学者賞を受賞することができ、大変光栄に感じます。中性子散乱を本格的に始めたのはアメリカで博士研究員になったときからですが、これまでに中性子散乱を教えてくれた共同研究者の方々に感謝いたします。今後も中性子を活用した研究に邁進していきたいと考えております。



■ 東京工業大学の前田 和彦 准教授(A03代表)が第13回(平成28年度)日本学術振興会賞を受賞

日本学術振興会賞は、独立行政法人日本学術振興会が、優れた研究を進めている若手研究者を見い出し、早い段階から顕彰してその研究意欲を高め、独創的、先駆的な研究を支援することにより、我が国の学術研究の水準を世界のトップレベルにおいて発展させることを目的に2004年に創設されたものです。受賞対象者は、人文・社会科学及び自然科学の全分野において、45歳未満で博士又は博士と同等以上の学術研究能力を有する者のうち、論文等の研究業績により学術上特に優れた成果をあげている研究者となっています。

前田氏は、業績題目「半導体光触媒を中核とした人工光合成系の開発」に関する顕著な業績によって、受賞者に選ばれました。受賞式は2月8日に日本学士院で行われました。

前田先生からの受賞コメント

栄えある日本学術振興会賞を受賞することができ、大変光栄に思います。受賞対象となった半導体光触媒を用いた人工光合成に関する研究は、私のライフワークともいえるもので、複合アニオンからなる新物質開発と光触媒機能創出も含まれます。10年以上継続して取り組んできた一連の成果が認められたことに大きな喜びを感じています。受賞にあたり、学生時代にお世話になった指導教員の先生方、共同研究者の方々、共に実験に取り組んだ学生諸氏、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。



国際会議情報

● 豊田理化学研究所 第6回国際ワークショップ(2017.11.10(金)~11.12(日))

<http://www.mixed-anion.toyotariken.jp/index.html>

トヨタ産業技術記念館 (愛知県名古屋市)

主催: 豊田理化学研究所

共催: 新学術領域「複合アニオン化合物の創製と新機能」

Chair person: 上田 寛フェロー (豊田理研)、陰山 洋 (京都大学)

Local organizer: 桑原 彰秀 (JFCC)

New trends in solid state chemistry: from oxides to mixed anion compounds

The quest for new materials is perpetual, and it is therefore necessary to continuously develop new inorganic materials. To do this, bringing together front-line solid state chemists from various subfields to exchange their perspectives on materials development is vital. This meeting, encompassing

magnetism, superconductivity, energy storage, and many others, will serve as a forum to provide the necessary discussion for taking materials forward to the next step into the future.

【暫定プログラム】

11/10 (金)

09:30 ~	受付開始
10:20 ~ 10:30	Opening remarks
10:30 ~ 17:20	招待講演&一般講演
17:30 ~ 19:30	ウェルカムパーティー

11/11 (土)

09:00 ~ 15:40	招待講演&一般講演
16:00 ~ 18:00	ポスター発表
18:30 ~	バンケット

11/12 (日)

09:00 ~ 13:50	招待講演&一般講演
13:50 ~ 14:10	Closing remarks
14:30 ~ 16:00	トヨタ産業技術記念館ツアー

【Invited talk (承諾済み)】

Kenneth Poeppelmeier	USA
James Neilson	USA
Peter V. Sushko	USA
Andrew Goodwin	UK
Robert J. Cava	USA
Artem Abakumov	Russia
Miguel Á. Alario-Franco	Spain
Chris Pickard	UK
大場史康	Japan
高木英典	Japan
前田和彦	Japan

【Contributed talk】

現在事務局より候補者にコンタクト中

【ポスター】

一般申し込みを受け付け 40 件程度



■ 編集後記

本格的な夏を迎え、ニュースレター第2号が発行となりました。

本号では、評価者の先生方と公募により今年度新たにメンバーとして加わった先生方全員の紹介記事を掲載しました。また、本号から新たに研究紹介の記事も加わり、これから順次、領域の研究成果を発信していく予定です。そして、

若手セミナー、海外渡航体験記、班間班内留学など、若手、特に学生さんからの記事も多く、親しみやすい冊子になったと思います。今後も領域のサイエンス、そして参画している研究者や学生さんの意気込みが感じられる記事づくりをしていきたいと思います。ご意見、感想お待ちしております。
(Y.I)

【領域全般に関するお問い合わせ】

陰山 洋（領域代表 / A01 分担）
kage@scl.kyoto-u.ac.jp

【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）
k.hayashi@cstf.kyushu-u.ac.jp

【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）
matsuishi.s.aa@m.titech.ac.jp

（連絡先）

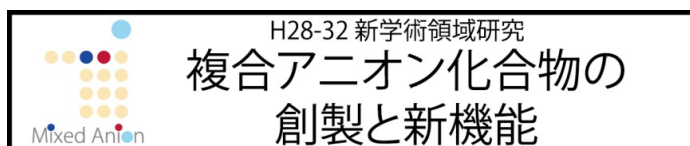
【ニュースレターに関するお問い合わせ】

荻野 拓（産総研）
h-ogino@aist.go.jp

稲熊 宜之（学習院大）
yoshiyuki.inaguma@gakushuin.ac.jp

殷 しゅう（東北大）
shuyin@tagen.tohoku.ac.jp

桑原 彰秀（ファインセラミックスセンター）
kuwabara@jfcc.or.jp





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