

News Letter

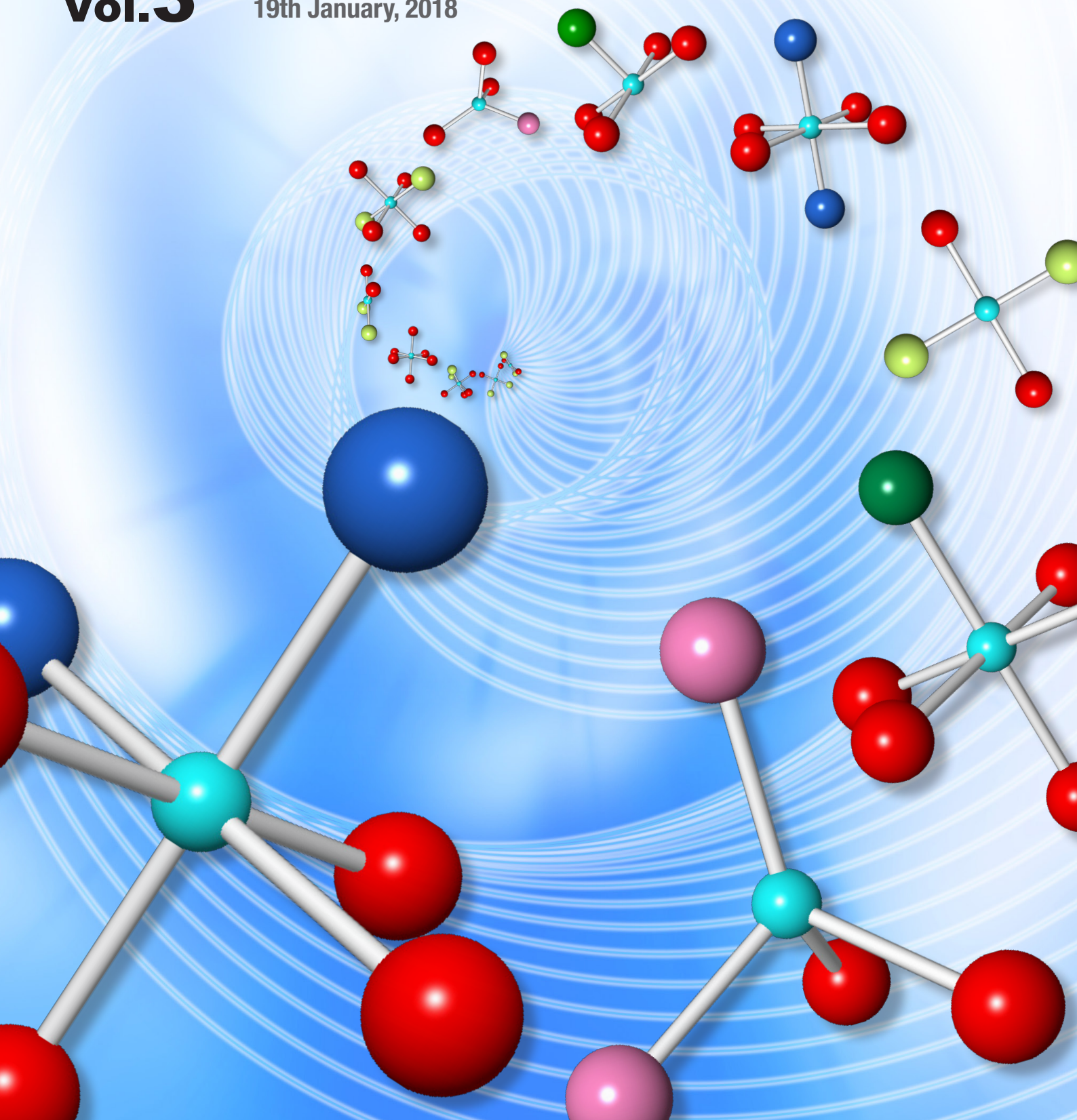
平成28年度-平成32年度
文部科学省科学研究費補助金
新学術領域研究(研究領域提案型)

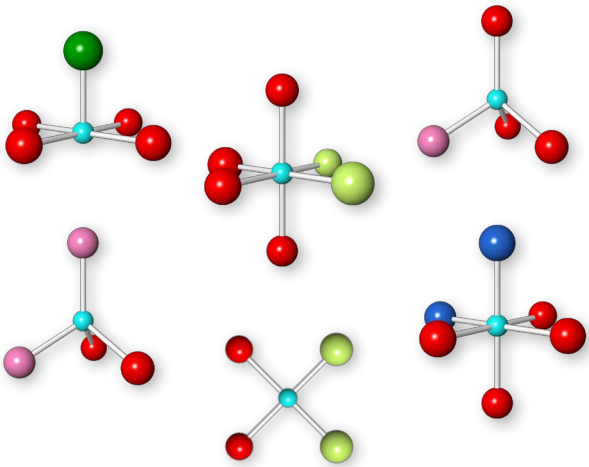


平成28年度-平成32年度
新学術領域研究
複合アニオン化合物の
創製と新機能

Vol.3

19th January, 2018





CONTENTS

目次	1
巻頭言	2
領域代表より	4
研究紹介	
固体材料化学に基づいた複合アニオン化合物の開発	垣花 真人、小林 亮 6
アニオン空孔制御によるヒドリド交換反応の促進	竹入 史隆、陰山 洋 8
微量の H ⁻ イオンを取り込んだ酸化物の評価と可能性	林 克郎 10
第一原理計算による複合アニオン化合物の局所構造探索	桑原 彰秀、設楽 一希 12
熱電材料の発掘、高性能化および熱評価技術の開発	森 孝雄 14
領域ニュース	
新学術領域「複合アニオン」第2回トピカル会議	16
新学術領域「複合アニオン」第2回若手スクール	17
新学術領域「複合アニオン」合同班会議（松島）	21
レクチャーツアー開催報告	22
XXVI International Materials Research Congress (IMRC 2017) 開催報告	24
窒化物系国際シンポジウム ISNT2017&ISSNOX5 開催報告	25
日本セラミックス協会 第30回秋季シンポジウム 「複合イオン化合物の創製と機能」特定セッション開催報告	26
Mixed Anion Seminar III & IV 開催報告	27
日本化学会秋季事業 第7回 CSJ 化学フェスタ 2017 特別企画 “複合アニオン化合物が拓く新しい材料科学と夢” 開催報告	28
日本磁気学会 化合物新磁性材料専門研究会開催報告	29
豊田理化学研究所 第6回国際ワークショップ 開催報告	30
第11回 物性科学領域横断研究会	42
第7回希土類フォトルミネッセンス：光学材料とデバイス国際会議 2017 (PRE'17) - 複合アニオンセッション開催報告	43
国際活動支援報告ー海外体験記	44
班内・班間留学報告	45
アウトリーチ活動報告	50
発表論文リスト（2016.6-2017.12）	55
受賞報告	66
記事紹介	67
編集後記	68

■ 巻頭言

“Mixed Is Different” を合言葉に



評価委員 上田 寛

年末にニュースレターの「巻頭言」を依頼され、まだ正月気分が抜けきらないままにこの原稿を書いているので、的外れなことを書くかもしれませんが、ご容赦いただきたい。

さて、新学術領域研究「複合アニオン化合物の創製と新機能」ですが、振り返って見ると、陰山代表から新学術領域研究に応募するので採択されたときは評価委員をお願いしたいとの連絡を受け、「ああいいですよ」と気安く引き受けましたが、正直言ってその時はあまり真剣には考えていませんでした。従って、採択されたと聞いたときはびっくりしたぐらいです。複合アニオン物質自身は古くから合成され、研究もされてきました。酸化物において酸素の一部をフッ素や窒素で置き換えるといった研究は古くからあります。どのような切り口で、古くからある複合アニオン物質に挑むのか非常に興味があります。これまで何回か会議や成果発表会に参加させていただき、この新学術領域研究の背景に、水素がヒドリド陰イオンとして存在する酸水素化合物や特異な配位形態を持つ酸窒化物の開発があるということがわかり、そこに大いに可能性を感じています。

ところで、「新物質開発」という言葉がキャッチコピー的に広く使われるようになったのは超伝導フィーバーを引き起こした銅酸化物高温超伝導体の開発以降であるように思います。私は平成元年に、東京大学物性研究所の新設された新物質開発部門に着任し、このときから強く新物質開発

を意識するようになりました。その前は京都大学理学部の金相学研究室にいて、銅酸化物高温超伝導体の研究に携わる以前は、遷移金属酸化物・カルコゲン化物の合成と構造・物性研究をしていましたが、新物質開発という意識はあまりありませんでした。金相学とは英語の metallurgy の意で、金属の相図の研究に端を発しているとのことでした。恩師の可知先生が、「上田君、相図には宇宙がある。」とよく言っていました。その意味が未だによくわからない不肖の弟子ですが、物質開発はまさに相図（状態図）の研究のような気がします。どのような成分をどのような温度でまた環境（雰囲気）下で反応させるとどのような物質ができ、それらがどのような性質を示すかは、まさに相図（状態図）の研究に帰着します。

物質は様々な元素で構成されているので、無限の組み合わせが考えられ、新物質開発は容易に思われるかもしれませんが、元素は物理的、化学的性質の似た族で分けられ、また、陽イオンとなりやすいもの、陰イオンになりやすいものなどに分けられ、組み合わせはかなり狭まります。それに、熱平衡下で合成される無機結晶性物質の場合“熱力学の壁”があり、有機化学における物質（分子）設計のようにはゆきません。無機結晶性物質のある元素（イオン）の一部を他の元素（イオン）で置き換えたような置換系（固溶系）は、ある有機分子の一部を他の元素で置き換えたよ

うな新分子と違って、関連物質、誘導体とみなされ、新物質と言えるのかといった疑問もあります。また、20世紀以降世界中で物質開発が盛んになり、次々に新物質が創製される中でさらに新物質を創製するのは、ほとんど荒らされた山で宝を見つけるようなもので、かなり難しいとも言えます。仮に新物質の合成に成功しても、それが平凡な機能を持った物質であれば、注目を浴びず、大手を振って新物質開発に成功とは言えないような側面（遠慮）があります。そもそも新物質開発という言葉には、単に新物質の合成のみならず新奇な性質や新機能を持った物質の開発という意味もあるように思います。このように新物質開発は苦勞の多い道ですが、例えば、これだけ物質が開発されているにもかかわらず、銅酸化物高温超伝導体のように、びっくりするようなものが残されていたように、まだまだ宝の山が隠されているかもしれません。また、既知の物質でも、新たな機能が見出される場合もあります。だからこそ、新物質開発は面白いということも言えます。今までにないものを創製し、それが有用な機能を持っていれば、最上の喜びとなります。まさにここに新物質開発の醍醐味があると言えます。近年、様々な合成手法の開発や進歩で、準安定な物質の合成が可能となってきているのも新物質開発にとって明るい希望です。将来3Dプリンターで新物質が合成されるかもしれません。

この新学術領域研究には、固体物理、固体化学、触媒やセンサーなどの材料科学、構造、理論など多彩な分野の研究者が**混合**しています。それらが一丸となって**複合**アニオンの創製、新機能の開発に取り組んでいます。すなわち、この新学術の特色は“Mixed”にあります。P.W. Anderson（1977年ノーベル物理学賞）は科学誌 Science において多体系に創発する驚くべき世界を“More Is Different”と表しました。この新学術領域研究は「複合アニオン物質の新しい学理を構築する」を目指しています。これはまさに、“Mixed Is Different”の新世界の創成を意味します。それには一層の複合アニオン物質の開発が鍵となるでしょう。“Mixed Is Different”の新世界実現に向けて皆様の活躍に大いに期待しています。

■ 領域代表より

複合アニオン新学術は始まって早くも2年度目の終盤になりました。ニュースレター2号が出版されてからのちに、領域代表の私にとって感慨深い重要なイベントが3つありましたので、今回はこの話を中心に書きたいと思います。

まず、昨年の8月上旬に仙台に2泊3日で開催された新学術関連会議（若手スクール、トピカル会議、全体会議）です。本プロジェクトがスタートしてから、「新しい共同研究」をとにかく立ち上げる（一人20個！）ように繰り返し叫んできました。昨年1月の全体会議、5月のキックオフ会議と徐々に活性化してきた雰囲気は、あくまで好意的にみて、あるいは希望的観測として感じていましたが、8月の会議でこれが確信へと変わり、ホッとしたと同時に今後、どうなっていくか楽しみになってきました。成果発表を聞きながら、大なり小なり、いろいろと巻いた種（新共同研究）の中から、芽がどんどんとでてきており、その中には革新的な成果となりうるものもいくつかありました。公募メンバーからもわずか数ヶ月とは思えないほどの共同研究の報告がありました。また、他大学の学生さん同士で真剣にサイエンスを議論するのが当たり前になってきて、いよいよ研究が新たな次元に進んだ感じがしました。さらには、一見バラバラに見える各メンバーの成果が有機的につながっていく感覚も随所で覚えました。新学術ですから、「学理の構築」はプロジェクトを申請するための当然のお約

領域代表 陰山 洋



束事だとは思いますが、言うは易し行うは難いこの目標が少しは達成されつつあるのかなと感じました。しかしながら、研究成果は原著論文として報告しなければ成果としては認められません。妄想や希望的シナリオが認められるかどうかは、その成果が独創的であればあるほど認めてもらうことが容易ではないことはどの分野でも同じだとは思いますが、これからが本当の勝負です。是非ともさらに気合をいれて頑張ってください。なお、仙台会議のうち「トピカル会議」の講演の動画は、ネットで公開していますので、ご興味がある方は御覧ください。

次に、11月に名古屋で開催された固体化学の国際会議「New Trends in Solid State Chemistry: from Oxides to Mixed Anion Compounds」です。我々の新学術と豊田理研と共催（小生と評価委員の上田寛先生がチェア）で、海外から9名を含む12名の招待講演者をお呼びしました。新学術からも多数の参加者がありました。会議の成功は、講演者とともに参加者のレベルで決まると信じていますが、素晴らしい講演（一般講演のレベルも相当高いものでした）に加え、質疑応答も大いに盛り上がり、会議は大成功に終わったのではないかと思います。小生もついつい主催者であることを忘れてサイエンスに集中してしまいました。前回のニュースレターでもとりあげた（そして、今回の巻頭言にもある）上田先生のフレーズ「Mixed is Different」

は、初日の Welcome Party のときに評価委員の Kenneth Poeppelmeier 先生から紹介され、また、Miguel Alario-Franco 先生の 2 日目の Banquet のときのスピーチでは、「固体化学 Gordon 会議のようである。是非アジアでこれを続けてほしい。」と褒めていただきました。この他にも、国内、国外で本新学術に関わったシンポジウムがいくつか開催され、来年度以降も企画しています。複合アニオン研究を日本が積極的にリードして、活性化させていく所存です。

最後は行事ではありませんが、複合アニオン化合物に関するレビュー論文（タイトル：Expanding frontiers in materials chemistry and physics with multiple anions）を本新学術のメンバーが中心（写真）となって Nature Communication (DOI: 10.1038/s41467-018-02838-4) に執筆したことです。採択が年末に決まり、このニュースレターが出るころにはすでに出版されているはずです。7月から10

月までこの執筆に全精力をつぎこみました（前田さん、林さんにも大変なご苦勞をおかけしました）。複合アニオン系に関する狭い範囲（例えば、酸窒化物）でのレビュー論文はこれまでいくつもありますが、化学と物理全体を網羅したレビュー論文は世界初となります。この論文では、（現状でわかる限りの）「複合アニオン科学のコンセプト」をベースにまとめるスタイルを取りました。上述したように複合アニオンの学理はまだわからないことは多いですが、このコンセプトが皆様のご研究に役に立つことになれば幸いです。特に、複合アニオン化合物にまだ関わっていない方には良い導入になると信じています。



複合アニオン科学のレビュー論文の著者 7 名のうち 5 名（左から陰山、前田、Poeppelmeier、林と東大の広井先生）。11 月の名古屋会議のときに撮影。

固体材料化学に基づいた複合アニオン化合物の開発

計画研究 A01 東北大学多元物質科学研究所 垣花 真人、小林 亮

当研究グループでは、酸・硫・窒化物などのセラミックスに対して、固体材料化学の観点から構成元素の種類や組成を制御することで新しい複合アニオン化合物を発見することを目指しており、同時に、新規複合アニオン合成を可能にする技術の開発にも注力している。本稿では、当研究グループが得意とする液相法によるセラミックス合成が複合アニオン開発に貢献できるであろうこと、および、本領域研究で見出した複合アニオン化合物を紹介する。

●液相法を利用した原子レベルで均一な材料合成

セラミックスの合成手法は、固相法、液相（溶液）法、気相法に大別される。その中で液相法は、目的物質の構成元素を含む溶液を用意し、加熱や化学処理によりそこから固体を取り出す手法のため、理想的には、溶液の原子レベルの均一性が保持された材料が合成される。しかしながら実際には、元素の溶解

度などの性質が異なるために、加熱や化学処理中にある成分だけが先に固体として析出し、溶液が持つ原子レベルの均一性が活かされた材料合成を行うことに困難が伴うことが多い。当研究グループでは、元素を錯体化することで元素ごとの“個性”を最小限に抑え、溶液の原子レベルの均一性を保持したセラミックス合成が可能となる錯体重合法やアモルファス金属錯体法を駆使した材料合成を世界に先駆けて展開し、セラミックスの低温合成や高機能化を実現してきた（図1）^[1,2]。最近では、錯体重合法を用いることによつてのみ得られる酸窒化物系複合アニオン光触媒の開発に成功しており、液相法の有用性と特異性を改めて示した^[3]。これらの技術を領域内で共有することで、高機能な複合アニオン化合物の開発に成功しており^[4,5]、今後更なる革新的な複合アニオン化合物の開発が達成されるものと期待している。

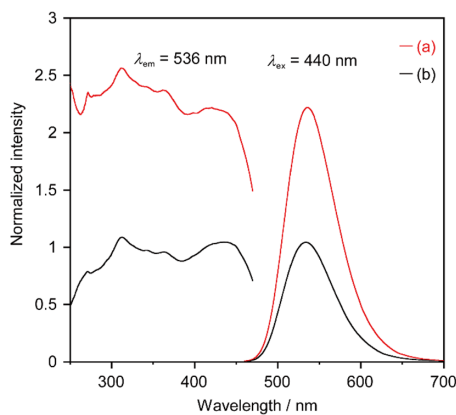


図1 (a)液相法または(b)固相法を利用して作成したEu²⁺賦活Ba₃Si₆O₁₂N₂の励起発光スペクトル。液相法を用いることで発光強度が2.2倍に。

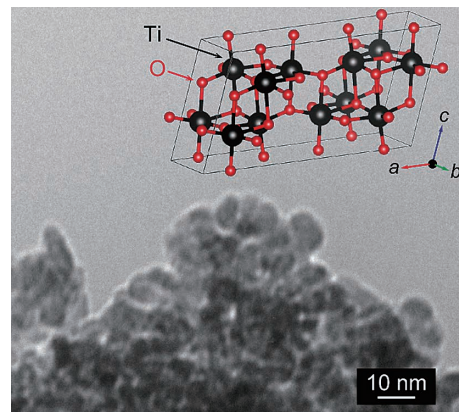


図2 水溶性チタン錯体を原料として用いて合成したTiO₂(b)粒子のTEM写真とTiO₂(b)の構造。高相純度TiO₂(b)ナノ粒子の合成に成功。

一方で、安定な溶液原料の開発も実施している。とくにチタンの水溶性錯体の開発に注力しており、従来では困難であった強塩基性水溶液としても安定に扱うことのできるチタン化合物の創製に成功している。この安定性を利用することで、高機能なセラミックスの合成を達成していることに加え、酸化チタンの合成において、anatase型やrutile型酸のみならず、単相での合成が困難なbrookite型や単斜晶系酸化チタンであるTiO₂(B)

が得られることを見出した（図2）^[6]。とくにTiO₂(B)の合成においては、本法により初めてナノ粒子の合成が達成された。さらには本法により、各種金属をドーピングした酸化チタン多形の合成や形態制御も可能である^[7]。このように結晶構造というナノと形態というマクロ構造を制御した粒子は、複合アニオン化合物の原料として応用が期待でき、複数の共同研究を推進している。

●元素置換による新規複合アニオンの開発

セラミックスの機能の拡張を狙う際、元素置換（例えば、ABOという酸化物に対し、B元素にC元素置換し、 $AB_{1-x}C_xO$ となる物質を合成する）が試みられる。本研究グループにおいて、蛍光体の発光波長制御を目的としたさまざまな化合物に対する元素置換を行っていたところ、 $Ba_4Al_2S_7$ ($P2_1/m$) や $NaBaPO_4$ ($P-3m1$) のBaをSrやCaで置換することで、未置換体とは異なる結晶構造を有する $(Ba_{1-x}Sr_x)_4Al_2S_7$ ($P2_1/c$) や $Na_3Ba_2Ca(PO_4)_3$ ($P3_1c$)

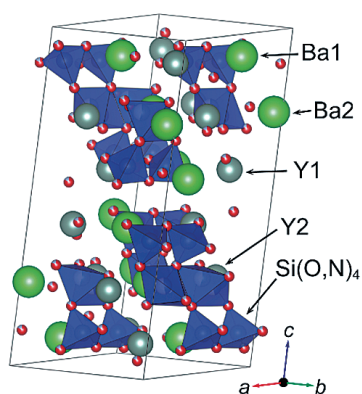


図3 単結晶 XRD 測定により決定した新規化合物 $BaYSi_2O_5N$ の結晶構造

Ba、Y および Si を同時に含む酸窒化物はこれまでに知られていないことから、本化合物が初めての例である。新規酸窒化物 $BaYSi_2O_5N$ を母体として Ba に Eu^{2+} を、Y に Ce^{3+} をそれぞれ賦活すると蛍光体として機能した（図4）。これらの蛍光体としての特性は、ほかの化合物と比較して特異的ではない。一方で、蛍光体母体として機能しない化合物が存在することから、Ba、Y、Si をすべて含む酸窒化物が蛍光体の母体として機能することを見出したことに大きな意義があるといえる。

さらに最近、酸化物をわずかに複合アニオン化することで、その構造が劇的に変化しうることを見出した。 $SrSiO_3$ と $BaSiO_3$ は古くから知られる酸化物であり、 $SrSiO_3$ は Si_3O_9 ユニットから構成される構造（ α 型）のみをとる一方で、 $BaSiO_3$ は、 SiO_4 ユニ

という新規化合物の合成に成功してきた^[8,9]。後者においては、イオン半径の大きな Ba の配列が、小さな Ca により乱されることにより新しい構造を形成していた。このことから、大きさの異なるカチオンを共存させることで、複合アニオンにおいても新しい化合物が生成すると考えた。そこで種々の組成において探索を行ったところ、 $BaO-Y_2O_3-SiO_2-Si_3N_4$ (Ba と Y の大きさにコントラストがある) において、新規化合物 $BaYSi_2O_5N$ (図3) を見出すに至った^[10]。

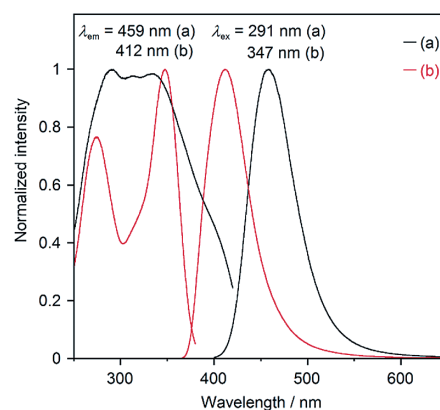


図4 (a) Eu^{2+} または (b) Ce^{3+} 賦活 $BaYSi_2O_5N$ の励起発光スペクトル

ットが頂点共有した鎖状構造（ β 型）も形成することが報告されている。 $Ba_xSr_{1-x}SiO_3$ 固溶体では β 型は X がおよそ 0.8 より大きい領域でのみ形成し、 β 型を形成するためには、サイズの大きな Ba が必要であるといえる。ところが $SrSiO_{3-3x}N_{2x}$ という Ba を含まない酸窒化物が、X が 0.1 程度で β 型を形成することを見出した。Ba という大きなイオンが多量に存在しないと現れない相が、わずかな窒素の存在により形成したことは、複合アニオン化合物のポテンシャルを示しているといえる。

以上のように、複合アニオン化合物の開発とそれを可能にする技術開拓に関する研究を進めており、更なる共同研究へと展開させることで、革新的な成果を挙げていきたい。

[1] 例えば、M. Kakihana, *J. Ceram. Soc. Jpn.*, **117** (2009) 857.
 [2] C. Yasushita et al., *J. Inf. Disp.*, **13** (2012) 107.
 [3] H. Kato et al., *J. Mater. Chem. A*, **3** (2015) 11824.
 [4] K. Maeda et al., *ACS Appl. Mater. Interfaces*, **9** (2017) 6114.
 [5] M. Okazaki, *Dalton Trans.*, **46** (2017) 16959.

[6] M. Kobayashi et al., *Chem. Mater.*, **19** (2017) 5373.
 [7] 例えば、M. Kobayashi, *J. Ceram. Soc. Jpn.*, **124** (2016) 863.
 [8] T. Hasegawa et al., *ECS J. Solid State Sci. Technol.*, **2** (2013) R3107.
 [9] M. Kim et al., *Dalton Trans.*, **44**, (2015) 1900.
 [10] M. Kobayashi et al., *Chem. Lett.*, **46** (2017) 795.

アニオン空孔制御によるヒドリド交換反応の促進 —速度論に基づく物質設計—

計画研究 A01 京都大学 竹入 史隆、陰山 洋

我々は最近、CaH₂を用いたチタン酸水素化物の合成において、アニオン空孔の導入による反応促進を発見した。他の結果とあわせ、今までトポケミカル反応で軽視されてきた速度論的因子の重要性が明らかになりつつある。他の遷移金属系との比較も交えて紹介したい。

イオン交換反応、インターカレーション反応などに代表されるトポケミカル反応は、結晶構造の基本骨格を保ちつつ一部の原子を置換、挿入、脱離させる手法のことである。特に CaH₂を用いた低温でのヒドリド/酸素交換は、遷移金属を含む酸水素化物の合成に威力を発揮することが知られている。我々の研究室ではこれまで、チタン系ペロブスカイトにおける CaH₂還元反応と、そこで得られた酸水素化物を用いたアニオン交換反応の開発をおこなってきた。そのはじめは、チタン酸水素化物 BaTiO_{3-x}H_x^[1]である。前駆体のチタン酸バリウム BaTiO₃を CaH₂と混合し、500–600℃にて焼成すると、O²⁻の一部がランダムに H⁻に置換され、酸水素化物が得られる。A サイトが Sr, Ca^[2], Eu^[3]の場合も同様の反応が進行する。ここでヒドリドは酸素サイトをランダム

に占有する。これらのヒドリド置換によって、優れた電子伝導^[4,5]のほか、アンモニア合成触媒としての高い活性^[6]など、酸水素化物の機能性材料としてのポテンシャルが明らかになってきた。また、得られた酸水素化物におけるヒドリドを交換活性配位子とみなし、窒素やフッ素といった異種アニオンとの低温交換 (Labile Hydride Strategy と命名) にも成功している^[7,8] (図1)。

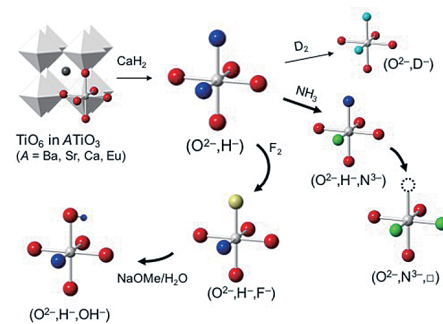


図1 ATiO₃を起点としたトポケミカルな複合アニオン化反応

これらのチタン酸水素化物の特性に関しては、いずれもヒドリド量が重要な役割を果たしており、さらなる研究の展開のためには、ヒドリド固溶域の拡大が求められる。しかしながら、ATiO_{3-x}H_xにおけるヒドリド量 x を決定する因子は自明ではなく、その指針は示されていなかった。例えば、x は反応条件によって連続的に変化し、その最大値は A サイト種によって異なる (Ba>Sr~Eu>Ca)。この傾向は、A サイト種が電気的陽性であるほど、H-1s 軌道を安定化しやすく、ヒドリド固溶に有利であることを示唆するが、この序列は格子サイズを反映しているのかもしれない。加えて、前駆体の粒径もヒドリド置換量に顕著な影響を与えることがわかっている^[2]。

このような背景のもと、我々はチタンペロブスカイトの CaH₂還元に関して、速度論的な視点から反応を設計することで、ヒドリド置換量を増大させることに成功した。そのヒントになったのは、固体イオニクス分野の研究である。代表的な酸化物イオン伝導体である Zr_{1-x}Y_xO_{2-y/2} (YSZ) や La_{1-x}Sr_xGa_{1-y}Mg_yO_{3-δ} (LSGM) では、それぞれの母体 (ZrO₂, LaGaO₃) に対し、異価カチオン置換を施し酸素欠損を導入することによって、アニオン伝導が向上することが知られている。この固体イオニクス分

野の物質設計指針を、固体化学分野 (合成反応) に適用することで、CaH₂反応におけるヒドリド固溶域の拡大を試みた^[9]。

具体的には、SrTiO₃中の Ti⁴⁺を Sc³⁺で部分的置換により酸素欠損を導入した Sr(Ti_{1-y}Sc_y)O_{3-y/2} (y = 0, 0.02, 0.05, 0.1) を前駆体として CaH₂還元処理を施した。その結果、いずれの試料においてもヒドリド/酸素交換反応が進行し、酸水素化物 Sr(Ti_{1-y}Sc_y)(O_{3-x-y/2}H_x) が得られた。注目すべきはその交換量である。反応前後の体積増加率 (還元反応率に相当) と生成物中のヒドリド量 x を y に対してプロットすると (図2)、わずかな量のアニオン欠損の導入に対し、ヒドリド置換量が顕著に増大していることがわかる。例えば、y = 0.1 においては、欠損量 0.05 (= y/2) はアニオンサイトの 2% にも満たないにもかかわらず、ヒドリド置換量は y = 0 に比べて 2 倍以上増加した。この結果は、チタン酸水素化物の生成に際して、アニオン拡散性 (アニオン欠損の導入で向上することが期待される) がヒドリド置換量に顕著に反映されることを示唆している (図3)。

このような特徴は、CaH₂還元によって合成されている他の酸水素化物とは明確に異なる。LaSrCoO₃H_{0.7}^[10] や SrVO₂H^[11] のようなコバルト・バナジウム系の酸水素化物では、ヒドリドが秩

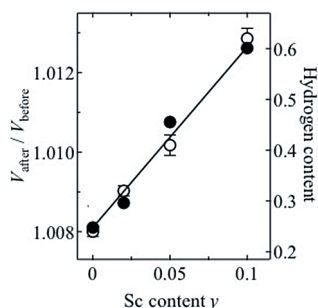


図2 Sr(Ti_{1-y}Sc_y)O_{3-y/2}のCaH₂還元による体積変化(黒丸・左軸)とヒドリド挿入量(白丸・右軸)の y 依存性。

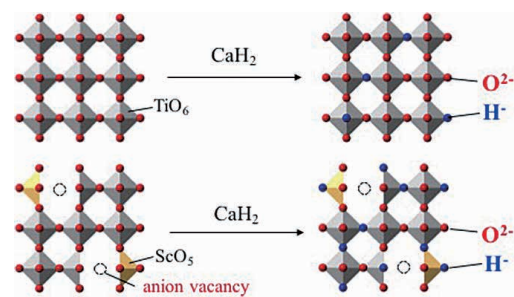


図3 SrTiO₃(上)およびSr(Ti_{1-y}Sc_y)O_{3-y/2}(下)とCaH₂との反応。下の方がヒドリド(青玉)置換量が増大する。

序的に配列しており、また、その生成過程で前駆体との間の中間組成を持たない(図4)。すなわちLaSrCoO₃H_{0.7}やSrVO₂Hでは、アニオン組成は自由度のないdiscreteな値をとる。例えば、SrVO₂Hでは、SrVO₃から一気に反応が進む。反応途中では、SrVO₂HとSrVO₃が二相共存する意味において、一次転移的な反応と見ることができる。そのため、SrVO₃相中の多数のアニオン(そしてカチオン)を巻き込んで、SrVO₂H相へと転移することが、このトポケミカル反応の駆動力となっていると考えられる。それに対して、ヒドリド組成がゼロから連続的に進行するチタン系では、アニオンの拡散性といったローカルな環境、つまり、速度論的な因子が、反応性に反映されると考えられる。

このような速度論的な因子は、我々のチタン系でみられるヒドリド置換量の粒径依存性から示唆される(このような粒径依存性はLaSrCoO₃H_{0.7}やSrVO₂Hでは顕著でない)。また、LaTiO₂NとSrTiO₃との固溶体La_xSr_{1-y}TiO_{3-y}N_y(0 ≤ y ≤ 1)をCaH₂還元した結果も関係がありそうである。この系では、わずかな窒素量 y でもヒドリド/酸素交換反応が劇的に抑制され、その量が10%程度に達すると、反応が完全に進行しなくなることを見出した^[12]。酸化物イオンやヒドリドと比べ拡散能が低いと考えられるN³⁻がアニオン交換反応を抑制しているのかもしれない。

本稿では、チタン系のCaH₂還元反応におけるアニオン拡散の重要性を紹介した。従来のトポケミカル反応では、熱力学的な因子(つまり、最終生成物や副生成物の安定性)が議論されることが殆どであり、速度論的な因子については議論されないか、付加的に述べられることが多かった。しかし、EuTiO₂Nを合成^[13]を含んだ我々の研究によって、速度論的な因子が本質的に重要

性であることが明らかになってきた。このような側面は、本系にとどまらず他の様々なトポケミカル反応において顔を出すと考えられ、今後の物質開発に活かされると考えている。

本稿では、酸水素化物の「合成」に特化した、酸水素化物の「機能」として重要なヒドリド伝導についても新学術での共同研究を展開しているとともにその「解析」法を開発している。その一つが、Kissinger法を用いた法である。この手法では、ヒドリド伝導の活性化エネルギーを簡便に見積もりことができる。DFT計算(AO2班・桑原先生らによる)の結果を組み合わせ、いくつかの酸水素化物における拡散機構を提案した^[13]。今後も領域での共同研究を推し進め、複合アニオンの反応理解・開拓に挑みたい。

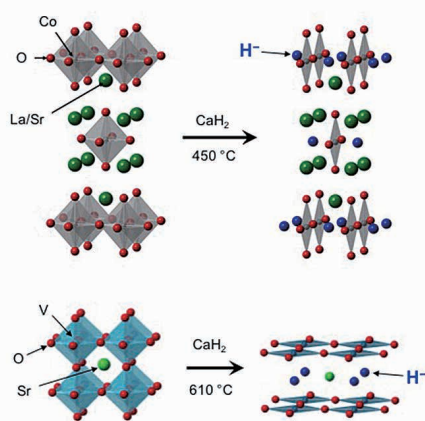


図4 LaSrCoO₃H_{0.7}(上)とSrVO₂H(下)の合成反応。

[1] Y. Kobayashi, *et al. Nat. Mater.* 2012, **11**, 507.
 [2] T. Sakaguchi, *et al. Inorg. Chem.* 2012, **51**, 11371.
 [3] T. Yamamoto, *et al. Inorg. Chem.* 2015, **54**, 1501.
 [4] T. Yajima, *et al. J. Am. Chem. Soc.* 2012, **134**, 8782.
 [5] G. Bouilly, *et al. Chem. Mater.* 2015, **27**, 6354.
 [6] Y. Kobayashi, *et al. J. Am. Chem. Soc.* 2017, **139**, 18240.
 [7] T. Yajima, *et al. Nat. Chem.* 2015, **7**, 1017.

[8] N. Masuda, *et al. J. Am. Chem. Soc.* 2015, **137**, 15315.
 [9] F. Takeiri, *et al. Inorg. Chem.* 2017, **56**, 13035.
 [10] M. A. Hayward, *et al. Science* 2002, **295**, 1882.
 [11] F. D. Romero, *et al. Angew. Chem.* 2014, **53**, 7556.
 [12] F. Takeiri, *et al. J. Solid State Chem.* 2017, **256**, 33.
 [13] R. Mikita, *et al. J. Am. Chem. Soc.* 2016, **138**, 3211.
 [14] Y. Tang, *et al. Chem. Mater.* 2017, **29**, 8187.

微量の H⁻ イオンを取り込んだ酸化物の評価と可能性

計画研究 A02 九州大学 林 克郎

近年、H⁻ を主要なアニオンの一つとする化合物が多数報告されるに至り、「複合アニオン」水素化物は完全に認知されたといえる。これら物質系開拓は本領域でも重要な課題の一つです。この中で、H⁻ が「微量」成分として導入されている酸化物では、H⁻ の存在を証明するのは意外に難しい一方で、特徴的な材料特性もありますので、H⁻ の存在の示唆や評価法にもなります。ここでは筆者らのこれまでのアプローチと今後について述べたいと思います。

これまでに、ケージ構造中に種々の無機アニオン種を包接するマイエナイト ([Ca₂₄Al₂₈O₆₄]⁴⁺ · 4X⁻, C12A7) 系やチャンネル構造中に陰イオンを包接する水酸化アパタイト ([Ca₁₀(PO₄)₆]²⁺ · 2X⁻) 系で (図 1)、H⁻ の導入とそれらの特性を調べてきました。図 2 に C12A7 および Ca の Sr による完全置換体の S12A7 系で H⁻ お

よび OH⁻ (水素は形式的に H⁺) を導入した試料での ¹H-NMR の化学シフトのデータと、過去の水素化物系のデータを合わせて示します。NMR は、高い感度や化学状態を決定できる点で有力な手法ですが、過去の文献では金属水素化物の化学シフトの理解に多少の混乱が見られ、整理が必要でした。図 2 で示す通り H⁺ については、水素結合を介した酸素-酸素距離 d_{O-H...O}、H⁻ については、配位する陽イオン距離 d_{M-H} に対する依存性があり、未知化合物中の水素の化学シフトが推定できます。このような単純な依存性は、特別な効果が無い場合は、化学シフトは核近傍の電子密度に起因する磁場遮蔽効果で単純に決定されることが要因となっています。水酸化アパタイトの NMR では、複数の状態の OH⁻ に起因する「妨害」シグナルが存在しましたが、その中から低濃度 (~ 10¹⁹ cm⁻³) の H⁻ の同定が可能でした。

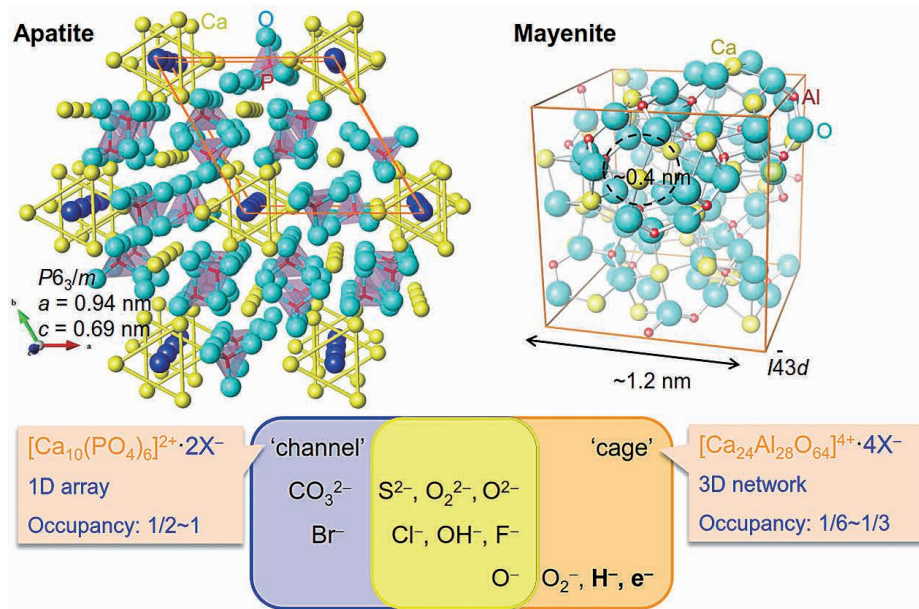
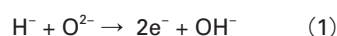


図 1 アパタイトとマイエナイト結晶の構造と、取り込まれるアニオン種。

通常バンド吸収端近傍に形成される H⁻ に起因する吸収帯を光励起すると、H⁻ が酸化物中で H⁺ に変換され OH⁻ として安定化

されることがあります。これにより光誘起の永続的な電子ドーピングが可能になります。



元来絶縁体であるマイエナイト系では、電子がケージ内に捕獲されそのホッピングによる電子伝導性により、10桁以上の伝導度変化として観測されます。一方H⁻を導入したアパタイト系でも(1)式の光化学反応が生じるが、電子伝導性は発現しませんでした。その理由は、チャンネル内に生成した電子のホッピングが一次元チャンネル内に残留するO²⁻に妨害されるためであると考えられます。また、(1)式は、H⁻をトラップするO²⁻の存在を前提としている事が分かります。実際、マイエナイト系の4X⁻ = 2O²⁻を全てH⁻に置換した高濃度系では、室温での永続的な電子生成は逆に得られません。

微量のH⁻イオンの証明の最も明快な手法は、低温での電子スピン共鳴 (ESR) であると考えられます。光励起で過渡的に生成

するH⁰を凍結して観測できれば、H⁻イオンの存在の証明となります。実験リソースの点と、観測がH⁻の存在に対してほぼ十分な証明であるのに対して、逆は必ずしも可ではない点が問題と言えます。また、(1)の逆反応の速度論からも、H⁻イオンの存在を間接的に証明できます。

図2では、電気陽性陽イオンのみに配位したH⁻イオンの系に限定して、今後より一般化が望まれます。その為にも、現在、遷移金属とも同時に配位し得るペロブスカイト型酸化物に立ち返り、H⁻ドーピングを試みています。これらの系はNMRによる評価法の一般化のみならず、新しい機能性も見出すことが出来る魅力的な場であると言えます。

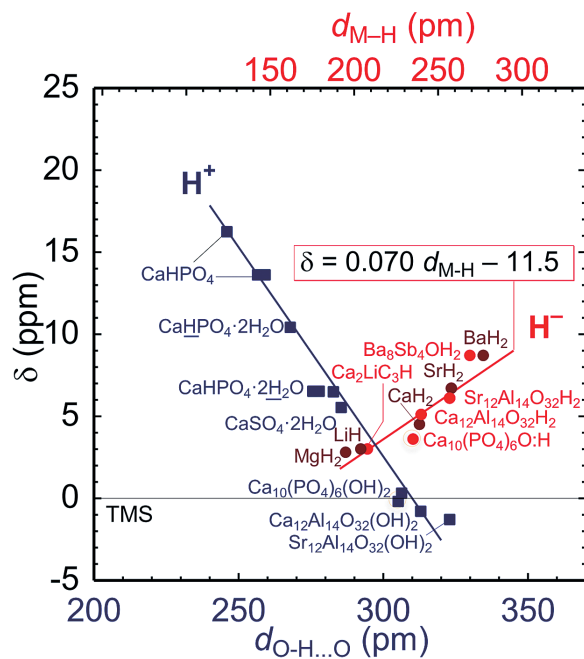


図2 種々の酸化物結晶およびガラス中のH⁺および電気陽性カチオンに配位したH⁻の¹H-NMRの等方性化学シフト。

第一原理計算による複合アニオン化合物の局所構造探索

計画研究 A02 ファインセラミックスセンター 桑原 彰秀、設楽 一希

複合アニオン化合物は単純酸化物や窒化物と異なり、複数種のアニオンを同時に結晶格子中に含む。その特異な配位環境、特にアニオンサイトをX線回折等の実験手法を用いて区別することは場合によっては困難を要する。これに対して、近年の計算機性能の飛躍的な向上により、第一原理計算による高精度なエネルギー計算を多数の構造モデルに対して実施し、各原子配置でのエネルギー状態の定量評価を通じて最安定構造を決定することが現実的な時間で可能となっている。第一原理計算による複合アニオン化合物における特異な局所構造や特徴的な化学結合状態を解析した研究例を紹介する。

酸窒化物 $\text{BaTiO}_{3-3x/2}\text{N}_x$ における欠陥構造

チタン酸バリウム (BaTiO_3) は強誘電性を有する代表的なペロブスカイト型機能性酸化物である。この BaTiO_3 を強力な還元剤である CaH_2 との共存下で熱処理することで、水素化物 (H^-) イオンが結晶中内に侵入し、酸水素化物 $\text{BaTiO}_{3-x}\text{H}_x$ を合成することが可能である^[1]。さらに $\text{BaTiO}_{3-x}\text{H}_x$ を出発物質としてアンモニア気流中で熱処理することで結晶内の窒素と水素の交換反応が起こり、酸窒化物 $\text{BaTiO}_{3-3x/2}\text{N}_x$ が生成可能である。この酸窒化物もまた強誘電性を示すことも明らかとなっているが^[2]、窒素のアニオンサイトにおける固溶状態も不明である。そこで、平面波基底 PAW 法である VASP code による第一原理計算を系統的に実施し、全エネルギーを評価することで正方晶 $\text{BaTiO}_{3-3x/2}\text{N}_x$ における酸素サイトを置換した窒化物イオン (N'_0) 酸化物イオンの空孔 (V''_0) の安定配置の探索を実施した。具体的には、正方晶 BaTiO_3 の単位格子をベースとして原子数が $\text{Ba}_8\text{Ti}_8\text{O}_{24}$ となるような種々の並進対称性を有するスーパーセルを構築し、このスーパーセル内に電気的中性条件を満たすように2個の N'_0 、1個の V''_0 を導入する。 $\text{Ba}_8\text{Ti}_8\text{O}_{21}\text{N}_2$ モデルの全配置約 20000 種類のうち 600 構造の第一原理計算を行い、クラスター展開法^[3]により全配置

のエネルギーを評価することで安定構造の探索を行った。図1は計算で得られた $\text{Ba}_8\text{Ti}_8\text{O}_{21}\text{N}_2$ の最安定構造における局所配置を示している。ペロブスカイト型構造は B サイトの BO_6 配位多面体で特徴づけられるが、N を含む 5 配位の Ti が V''_0 を共有しており、 $\text{N}'_0\text{-V}''_0\text{-N}'_0$ という鎖状の複合欠陥を形成している。 N'_0 同士は同じ電荷を有しており、クーロン相互作用の観点からは分散している状態の方が安定であると考えられる。それにもかかわらず、このように局所的に3つの点欠陥が集中する要因についてはまだ解明には至っていないが、 N'_0 と V''_0 の相互作用によりこのような特異な配位環境の固溶状態が安定になっていると予想される。また最安定構造では無いが、準安定配置として N'_0 と V''_0 の特徴的な配置を見出した。図2はそのような複合欠陥配置の例である。これらの配置の中では (a) が最安定であり、図1の $\text{N}'_0\text{-V}''_0\text{-N}'_0$ よりも 0.3 eV 程度エネルギーが高い。(b) ~ (d) はそれぞれ (a) よりも 4 meV、34 meV、60 meV エネルギーが高い。いずれの配置においても、同一の TiO_6 配位多面体中に2個の N'_0 、1個の V''_0 が共存しており、 TiO_3N_2 という配位多面体を構成し、いずれも N'_0 は cis 型の配置となっている。

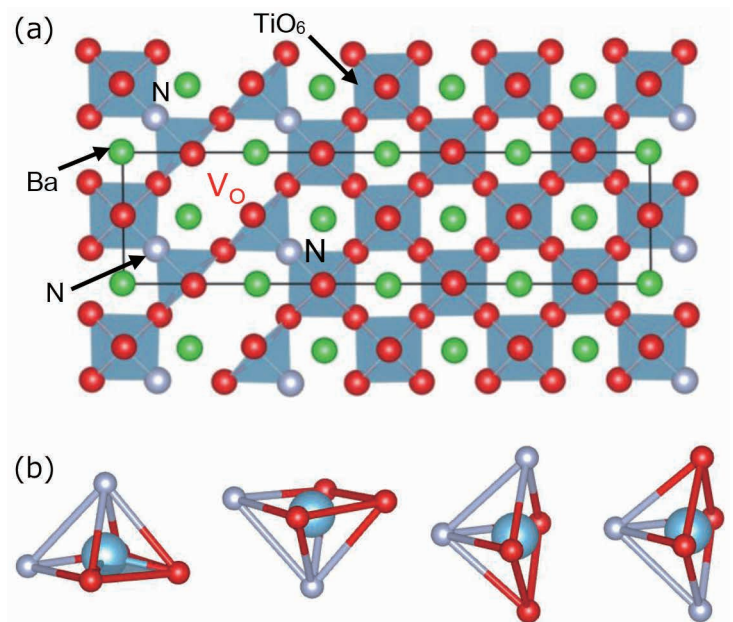


図1 $\text{Ba}_8\text{Ti}_8\text{O}_{21}\text{N}_2$ における2個の N'_0 、1個の V''_0 の複合欠陥のうち (a) 第一原理計算で得られた最安定構造、(b) 準安定構造。

酸水化物 $\text{BaVO}_{3-x}\text{H}_x$ におけるヒドライドイオンのサイト選択性

複合アニオン化合物の1つに、高圧下で合成された六方晶系 $\text{BaVO}_{3-x}\text{H}_x$ ($0.3 \leq x \leq 0.8$) が存在する。この化合物は、図2 (a) に示すように結晶構造中に2つのアニオンサイト (6h サイト、12k サイト) を有しており、水酸化物イオンが低濃度域 ($x \leq 0.33$) では6h サイトを優先的に占有する。一方水素量が $x \geq 0.33$ の領域では、水酸化物イオンの増加は6h サイトと比較して12k サイトを優先的に占有する。本研究グループでは網羅的第一原理計算と回帰分析を用いて、六方晶系 $\text{BaVO}_{3-x}\text{H}_x$ 中のサイト選択性の違いを調べた。図2 (a) に示す $\text{BaVO}_{3-x}\text{H}_x$ ユニットセル中の酸素全18サイトに水素を1~6個導入した全配置1496構造を構築し、網羅的第一原理計算を行った。

網羅的第一原理計算によって得られた $\text{Ba}_6\text{V}_6\text{O}_{16}\text{H}_2$ の ($x = 0.33$) の最安定構造を図2 (b) に示す。構造中の2つの水素は異なるV八面体に位置し、6hサイトを占有していることがわかる。これは水酸化物イオンが低濃度域で6hサイトを優先的に占有するという実験結果をよく再現する。

さらに、網羅的第一原理計算からエネルギーと局所構造との関係を抽出するため、LASSO回帰分析^[4]を行った。局所構造の特徴量として、各サイトの水素数、水素がcisおよびtrans配置となるV八面体数、八面体の歪みなどを考慮した。図3に得られた回帰式中の係数を示すが、6hサイトの水素数 (N_{6h}) とtrans配置の数 (N_{trans}) が大きな負の係数を持つことがわかった。これらは6hサイトの水素数が多い場合およびtrans配置の数が多い場合にエネルギー的に安定であることを示している。前者は $x \leq 0.33$ の6hサイトの優先的な占有に対応する。一方で後者は、 $x \geq 0.33$ での12kサイトの占有に対応する。図2 (b) 中の6hサイトにさらに水素が導入されていく場合、水素配置はcis型となる。しかしながら、回帰分析で示されるようにcis型より

もtrans型が安定なため、6hサイトよりも12kサイトを占有した方がエネルギー的には有利となる。

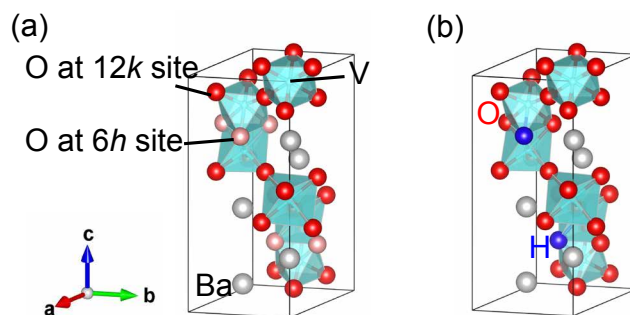


図3 (a)六方晶系 $\text{BaVO}_{3-x}\text{H}_x$ の結晶構造
(b)第一原理計算により得られた $\text{Ba}_6\text{V}_6\text{O}_{16}\text{H}_2$ の最安定構造

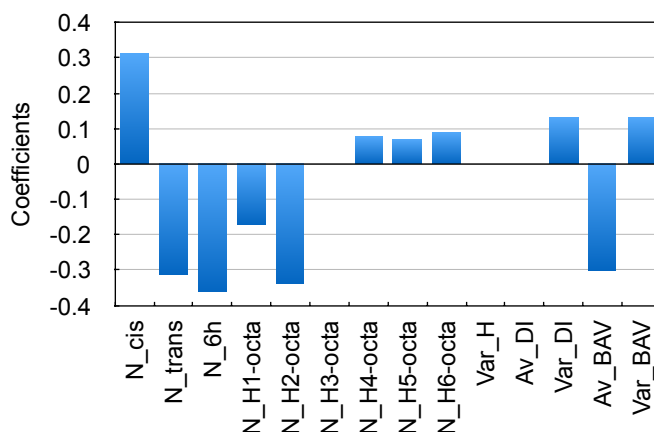


図3 LASSO回帰により得られた各特徴量の係数。
各特徴量の重要度の定量化を行った。

以上のような多数の構造モデルに対する第一原理計算や回帰分析により、複合アニオン化合物における特異な局所構造が示唆された。実験的に決定が困難な配位環境や化学結合状態につ

いて、第一原理計算により情報を得ていくことで、新規複合アニオン化合物の発見に貢献していきたい。

[1] Y. Kobayashi, et al., *Nature Mater.*, **11** (2012) 507-511.
[2] T. Yajima, et al., *Nature Chem.*, **7** (2015) 1017-1023.
[3] A. Seko, Y. Koyama, I. Tanaka, *Phys. Rev. B*, **80** (2009) 165122.
[4] R. Tibshirani, *Stat. Soc. Ser. B*, **58**, 267 (1996).

熱電材料の発掘、高性能化および熱評価技術の開発

計画研究 A03 物質・材料研究機構 森 孝雄

本研究グループでは、機能性発掘・発展のために、新学術領域内で、熱電材料の発掘、高性能化、Pn 制御および熱評価技術の開発を行っている。本稿では複合アニオン化合物の研究例と、熱評価技術を活用した研究例について報告する。

人類は 20 世紀において、電子、スピン、フォトンなどに関して非常に高いレベルの制御に成功しているが、フォノン、あるいは熱エネルギーに関してはまだ成し得てなく、消費する一次エネルギーの約半分が廃熱として失われている現状を考えれば、フォノン、あるいは熱エネルギーを高度に制御することは、21 世紀の最重要な科学技術課題の一つと考えられる。ゼーベック効果によって固体素子として廃熱を直接電気に変換し得る熱電変換材料は、エネルギー問題の解決に大きく貢献し得る。熱電材料の性能を示す指標として性能指数 $ZT = S^2\sigma/\kappa$ (S : ゼーベック係数、 σ : 電気伝導率、 κ : 熱伝導度、 T : 温度) が使われ、変換効率は ZT の関数で、大きい程、理想的なカルノー効率に近づく。 S 、 σ 間には通常トレードオフがあり、 $S^2\sigma$ を大きくすることは容易でなく、電気を良く流すが熱をブロックするという要請も困難なものである。しかし、近年、高性能化の新原理が発見されている^[1]。

一方で、複合アニオンは、熱電材料の研究開発において強力な武器となる^[2]。その一つの例を取り上げるが、BiCuSeO は、ZrSiCuAs 型の層状構造を取り、Se と O のアニオンを含む複合アニオン系であるが、構造的な特徴として、c 軸に沿って、 $(\text{Cu}_2\text{Se}_2)^{2-}$ の層と $(\text{Bi}_2\text{O}_2)^{2+}$ の層が交互に積層した構造を取っている (図 1)^[2]。 $(\text{Cu}_2\text{Se}_2)^{2-}$ は伝導層で、酸化物 $(\text{Bi}_2\text{O}_2)^{2+}$ は絶縁層で、 Bi^{3+} を Sr などの 2 価の土類アルカリ金属で置換することで、ホールを生成し、それが伝導層の (Cu_2Se_2) に移り、キャリア濃度調整を容易に進めることができる^[2]。高性能の最も大きな要因は、この系の特に低い熱伝導率 (ノンドープの BiCuSeO に関して高温 900 K において $\sim 0.45 \text{ Wm}^{-1}\text{K}^{-1}$) にある^[2,4]。低熱伝導率の起源としては、弱いボンディングを指し示す BiCuSeO の酸化物としての比較的低いヤング率 ($\sim 77 \text{ GPa}$) とそれに伴う低い音速 ($\sim 2,100 \text{ ms}^{-1}$) によると考えられる^[2,5]。弱いボンディングは、特徴的な層状構造に起因していると考えられ、複合アニオン系であるために形成された特色の異なる層が交互に積層した直接的

な結果であるといえる^[2]。本化合物をさらに高性能化するために、次のことを試行した。我々は、磁性、磁気相互作用による、熱電的性質の高性能化の研究を進めている^[1,6,7]。例えば、参考文献 7 にあるように、非磁性な系に磁性イオンをドーピングすることにより、その系が、希薄磁性半導体になった時、電荷キャリアと磁気モーメントが相互作用を持った場合、熱電的性質を高性能化できることがあることを示している^[7]。我々は、BiCuSeO への Nd ドーピングにより、キャリアの有効質量が増大し、結果的に熱電性能指数を増強した結果が得られた^[8]。

こうして、複合アニオン、あるいは、磁性の制御などという多彩な切り口より、熱電的性質の高性能化が行われている。いずれにしても、BiCuSeO のベースとなる高い性能指数 ZT は、複合アニオンにより得られたものである。

次に、開発している熱計測による研究に関して紹介する。領域内の測定依頼による共同研究は歓迎な状況である。我々の研究グループでは、ピコ秒レーザーを用いた時間領域サーモリフレクタンス (time-domain thermoreflectance, TD-TR) 法を活用して (図 2)、ナノ薄膜の熱拡散率の評価や、集光システムにより、マイクロ結晶などの場所選択的な測定も行え得る (図 3)。数十マイクロンの長さスケールのマイクロ結晶の各結晶面に垂直な方向の熱伝導率を測定することも簡単ではないけれども、原理的には可能である。非常に小さい結晶というわけではないが、層状化合物における例を示す^[9]。

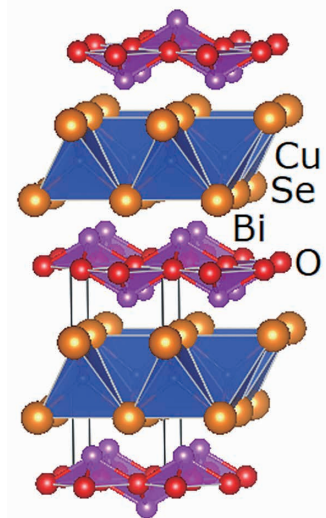


図 1 BiCuSeO の結晶構造。Bi(紫丸)、Cu(青丸)、Se(黄丸)、O(赤丸)^[2]。

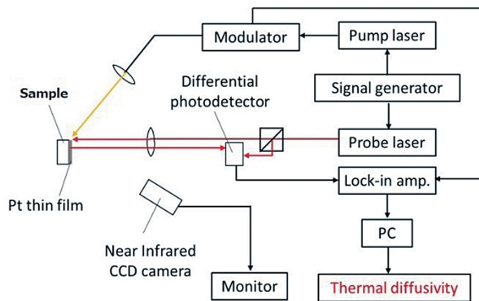


図2 時間領域サーモリフレクタンスのセットアップ^[9]。

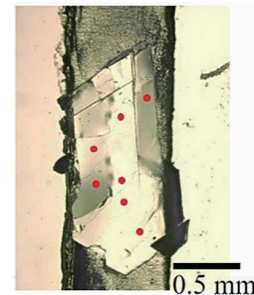


図3 場所選択測定用のイメージ(赤点がプローブ点)。

$\text{PrRh}_{4.8}\text{B}_2$ は、 PrRh_3B_2 層のブロックに Rh 層が挿入されたような特徴的な層状構造を有している(図4)。c 軸方向(面間方向)の熱伝導率を評価した結果、熱伝導率は $1.39 \text{ W}/(\text{m} \cdot \text{K})$ と求められた。この値は、以前報告された類似の層状構造を持つホウ化物化合物 AlB_2 や $\alpha\text{-TmAlB}_4$ ^[10] と比較してそれぞれ 50 倍、10 倍以上低い値である(図5)。特徴的な結晶構造から由来していると考えられ、欠陥を有する Rh のカゴメ格子層が特に強力な phonon blocker として作用していることが示唆された^[9]。

以上のように、小さな結晶であっても、熱の輸送に関する興味深い性質が明らかになっており、今後、領域内の先生方の様々な材料に関して、こうした測定・解析を共同研究で提供できたらと思う。

本研究は Andrei Novitskii, Yury Khovaylo, Gabin Guelou, 掛札洋平、馬場哲也、湯蓋邦夫、穴戸統悦、吉川彰、川本直幸、荻野拓、岡田繁、尾形和夫、Andrei Vasiliev, Alexei Voronini (敬称略) 各氏と共同で行ったものです。

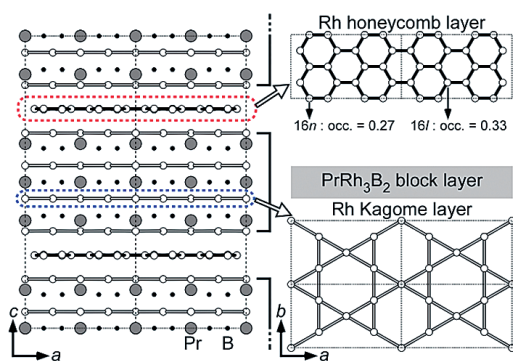


図4 $\text{PrRh}_{4.8}\text{B}_2$ の結晶構造^[9]。

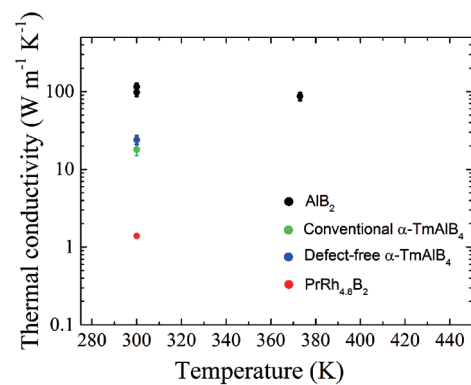


図5 層状ホウ化物の熱伝導率^[9,10]。

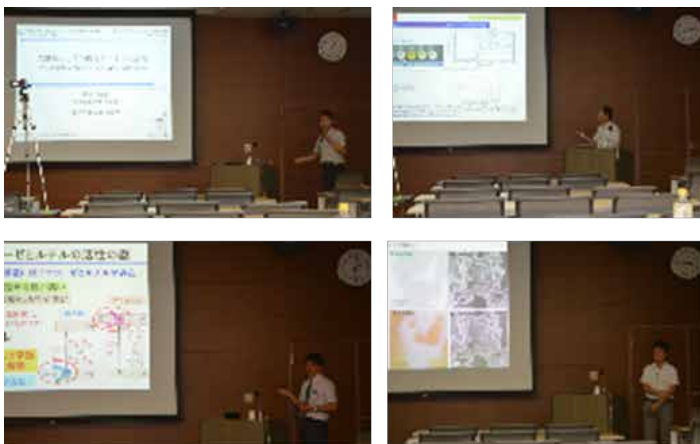
- [1] T. Mori, *Small* **13** (2017) 1702013.
- [2] 森孝雄, *セラミックス* Vol. 52, **825-828** (2017).
- [3] L. D. Zhao, D. Berardan, Y. L. Pei, C. Byl, L. Pinsard-Gaudart, and N. Dragoë, *Appl. Phys. Lett.* **97** (2010) 092118
- [4] C. Barreteau, D. Berardan, E. Amzallag, L. D. Zhao, and N. Dragoë, *Chem. Mater.* **24** (2012) 3168
- [5] Y.-L. Pei, J. He, J.-F. Li, F. Li, Q. Liu, W. Pan, C. Barreteau, D. Berardan, N. Dragoë, and L.-D. Zhao, *NPG Asia Mater.* **5** (2012) e47.
- [6] R. Ang *et al.*, *Angew. Chem., Int. Ed.* **54** (2015) 12909.
- [7] F. Ahmed, N. Tsujii, T. Mori, *J. Mater. Chem. A* **5** (2017) 7545.
- [8] A. P. Novitskii *et al.*, "Reactive spark plasma sintering and thermoelectric properties of Nd-doped BiCuSeO oxyselenides" submitted.
- [9] Y. Kakefuda *et al.*, *APL Mater.* **5** (2017) 126103.
- [10] X. J. Wang *et al.*, *APL Mater.* **2** (2014) 046113.

複合アニオン新学術領域 第2回トピカル会議

平成29年8月7日、東北大学片平キャンパス 片平さくらホール2F会議室にて、本新学術領域研究の第二回トピカル会議（機能）が開催されました。今回のトピカル会議は「光触媒」をキーワードとして、計画班と公募班から計4件の講演、加えて1件の特別講演の計5件の講演がありました。領域内外から約30名の参加者がありました。会議のはじめに、A03計画研究班長東京工業大学前田和彦先生から、開催趣旨についての説明と「光触媒としての複合アニオン化合物：その特性を引き出すための設計指針」というタイトルで、太陽光エネルギーを効率良く化学エネルギーに変換する複合アニオン化合物系光触媒、特に酸窒化物系複合アニオン光触媒研究の現状・設計指針・展開について分かりやすく講演をいただきました。続いて、A02公募班豊田工業大学の山方啓先生からは「金属酸窒化物複合アニオン型光触媒のキャリアダイナミクス」、A03公募班熊本大学伊田進太郎先生からは「N-doped 酸化物ナノシートの合成と光触媒への応用」に関する講演があり、A01計画班

分担の私からは「ソルボサーマル反応によるマルチ機能性アニオンドーピング光触媒の合成」というタイトルで講演させて頂きました。

休憩時間を挟んで、トピカル会議と同時に片平キャンパス南総合研究棟2-1F大会議室の会場で進行した若手スクールから、学生中心とする参加者約50名が合流し、A03計画班連携研究者の京都大学阿部竜より「複合アニオン化合物におけるバンド制御と可視光分解」のタイトルで特別講演がありました。様々な高性能水分解光触媒及び複合アニオン化合物の合成が紹介され、安定なハロゲン化合物光触媒のバンド制御及び優れた可視光励起光触媒活性等、幅広い話題を提供していただき、非常に内容が充実した講演であり、個人的にも非常に勉強になりました。また、今回は新しい試みとして、全ての講演をビデオで録画し、後日、YouTubeにて一般公開する予定をしており、領域における最新の研究成果を社会に還元する姿勢を鮮明に打ち出しています。



A03計画班班長前田和彦先生、A02公募班山方啓先生、A01計画班殷澍、A03公募班伊田進太郎先生による講演の様子



京都大学阿部竜先生による特別講演の様子

(文責：A01 東北大学 殷澍)

複合アニオン新学術領域 第2回若手スクール

平成29年8月7日に東北大学片平キャンパスにて、複合アニオン新学術領域の第2回若手スクールが開催されました。講演二件とポスターセッションが行われ、その後公開シンポジウムと合流しました。また夜は懇親会でも交流と研究に関する討論が行われました。若手スクールでは学生約30名を含む約50名の参加者がありました。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A01 解析班の鱒淵先生に、「機能性酸窒化物の合成手法—アンモニア窒化法から最新の手法まで—」と題して、酸窒化物の様々な合成手法について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酸窒化物は最も重要な化合物の一つであり、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。次に第一回の若手スクー

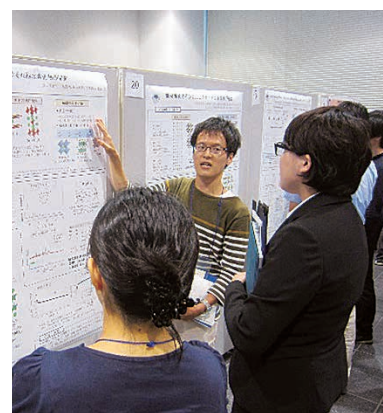
ルにおいて最優秀ポスター賞を受賞した嶋さん（A02 林研・D2）から「金属炭化物ナノシート MXene への遷移金属ドーピングと表面官能基制御」という内容で若手講演をしていただきました。その後、非公開のポスター発表を行いました。学生参加者にはポスターを見ながら領域内での共同研究を企画してもらい、そのアイデアを投票してもらいました。二回目の企画ということもあり、前回よりも積極的に質問している姿が見られました。懇親会では最優秀賞ポスター賞1人、優秀ポスター賞4人、優秀研究企画賞4名が表彰を受けました（別ページ参照）。研究企画はどれもよく考えられており、実際にすぐに具体化できる案があると感じました。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に発展していくものと思います。



鱒淵先生による講義の様子



講義で質問する学生



ポスター会場の様子

(文責：A02 京都大学 山本 隆文)

ポスター賞 受賞者

■ 最優秀賞

- 白岩 大裕 (東京工業大学・D2)
「酸塩化物 Ruddlesden-Popper 相の単結晶 X 線構造解析」

[受賞コメント]

栄えある賞を頂き大変嬉しく思います。指導教員の八島先生をはじめ、快くサンプル提供をしてくださった荻野先生と辻本先生、また指導してくださった多くの方々のおかげです。深く御礼申し上げます。ポスター発表では様々な研究分野の方と意見を交わすことができ、自分の研究の立ち位置など研究への理解を深めることができました。今回得られた知見を自分の研究に役立てていきたいと思っております。



■ 優秀賞

- 金澤 知器 (東京工業大学・D1)
「ホウ素系ネットワーク状化合物 $YB_{22}C_2N$ を用いた光触媒反応」

[受賞コメント]

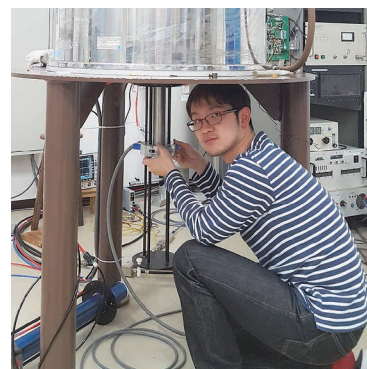
この度は、発表機会を与えていただき、またポスター賞を頂けたことを大変光栄に思います。本若手スクールでは、自身の研究を著名な先生方と議論を交わすことが出来、大きく視野を広げる貴重な場となりました。またこの名誉ある賞を頂くことが出来たことに際し、指導教員である前田和彦先生、そして試料を提供して頂いた森孝雄先生にこの場をお借りし深く感謝申し上げます。



- 栗原 拓也 (京都大学・D2)
「温度可変 NMR を用いた $La_{2-y}Sr_yLiH_{1+y}O_{3-y}$ 中の H^- の運動性の解析」

[受賞コメント]

この度優秀ポスター賞を頂くことができ、大変光栄に思っております。指導教官である野田先生をはじめ、様々な方のご指導やご協力があったからこそこの受賞であり、この場を借りて深く感謝申し上げます。今後も私の専攻する固体 NMR 法の技能や知識の習得に更に励み、新学術領域の研究の進展に少しでも貢献できればと思います。

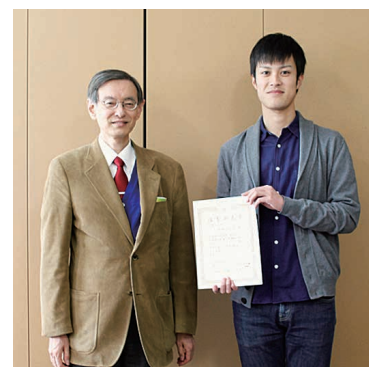


● 安永 拓矢 (東北大学・M1)

「Sr-Si-O-N 系新規化合物の合成と Eu^{2+} 賦活による発光特性」

[受賞コメント]

この度、優秀ポスター賞を頂くことができ大変光栄に思います。賞を頂くことができたのは指導教員の垣花先生を始め、多くの先生方のご指導のおかげです。この場をお借りして、感謝申し上げます。ポスターセッションで、議論を通して貴重な意見を頂くだけでなく、自分の研究に興味をもってくださる方がいるという自信を得ることができました。これを機に、より一層研究に励みたいと思います。

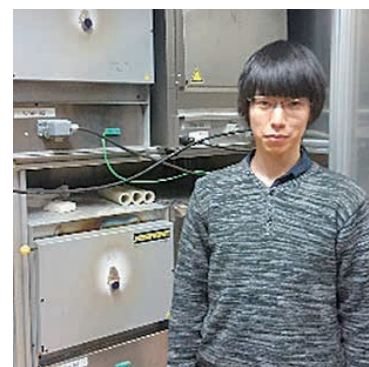


● 村上 泰斗 (京都大学・D2)

「超原子価一次元鎖を持つ新規ビスマス化物 La_3MBi_5 (M = Ti, Zr, Hf)」

[受賞コメント]

優秀ポスター賞を受賞できたことに、驚くと同時に大変光栄に思っております。このような賞をいただくことができたのも、指導教官である陰山洋先生、山本隆文先生をはじめとする多くの方々のご指導の賜物です。今回の若手スクールでは他研究室の方々の研究発表を聞き、また他分野の方々から様々な指摘を受けたことで、自身の研究を見直し新しい研究の足掛かりとする良いきっかけとなりました。これからも新学術領域での交流・議論を通し、研究で成果を挙げられるように精進していきたいと思っております。



研究企画賞 受賞者

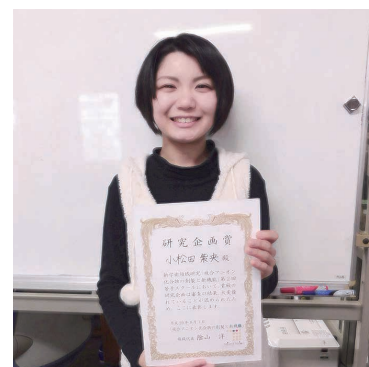
■ 優秀賞

● 小松田 紫央 (東北大学・M2)

「スパッタリング法を用いた $\text{N-TiO}_2/\text{F-TiO}_2$ コンポジット光触媒薄膜の提案」

[受賞コメント]

この度は、第2回若手スクールにおいて研究企画賞を頂き、大変光栄に思います。このような名誉ある賞を頂いたのは、指導教官である殷澗先生、朝倉裕介先生、そして若手スクールを通して出会った皆様のご指導の賜物でございます。僣越ながらこの場を借りて、心より感謝申し上げます。



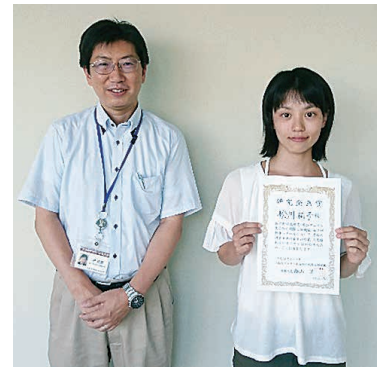
■ 領域ニュース

● 松川 祐子 (九州大学・M2)

「N-TiO₂/F-TiO₂ ナノコンポジットによる光触媒反応の速度論的解析」

[受賞コメント]

他大学の方と新しい研究を企画するという、貴重な経験をさせていただきありがとうございました。研究企画賞を頂き、大変嬉しく存じます。本提案は、日頃よりいただいているご指導並びにご支援と、複合アニオントピカル会議という機会にていただいた刺激の賜物です。研究室の皆様や複合アニオン関係者の皆様への感謝の気持ちを忘れず、今後も研究活動に励んで参ります。



● 浅見 一喜 (京都大学・D2)

「光デバイス応用に向けた希土類添加複合アニオン結晶化ガラスの提案」

[受賞コメント]

研究企画賞を頂くことができ、大変嬉しく思っております。今回のミーティングを通して、様々な研究グループの合成・解析手法や考え方に触れることができ、非常に刺激を受けました。指導教員の田部先生をはじめ、協力して下さった先生方、アイデアを授けて下さった皆様のおかげでこの素晴らしい賞を頂くことができた実感しております。心から感謝を申し上げます。この受賞を励みにして、研究に精進してまいります。

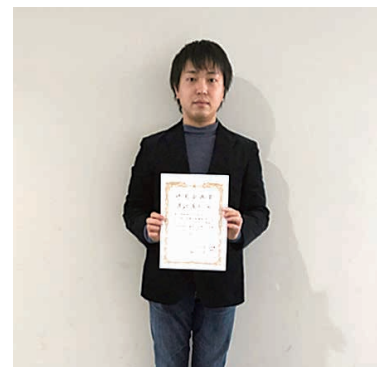


● 渡辺 有人 (京都大学・D1)

「高圧合成法による酸窒化物正極材料の合成とその電気化学特性評価」

[受賞コメント]

この度研究企画賞を戴き、非常に嬉しくまた光栄に思います。複合アニオン化合物の電極材料への応用例は少なく、次世代正極材料実現へ大きな可能性を秘めています。日頃から熱心に議論していただいた内本喜晴教授並びに研究室の皆様へ改めて感謝致します。また、新学術領域の多彩な研究分野の先生方と議論や交流ができることは大変貴重な機会であり、今後の研究への大きな励みとなりました。この場を借りて御礼申し上げます。



新学術領域研究「複合アニオン」合同班会議（松島）

平成29年8月8日、9日に、同7日に東北大学で開催された第2回トピカル会議および第2回若手スクールに続き、本新学術領域研究の合同班会議が開催されました。前回の九州での会議と同様に、より密な研究討論を行うために、合宿形式での開催を企画し、皆様をホテル松島大観荘にお迎えしました。8日はまず、陰山領域代表より、本領域が目指す学術についての紹介が改めてなされました。加えて、新学術創成に向けた研究、とくに、共同研究の進め方や成果の発信の仕方についての説明がありました。続いて、13研究グループより口頭にて共同研究を含む研究進捗状況の報告をして頂きました。その後、会場を囲むように設置したポスターを利用したフリーディスカッションの時間を設けました。全体写真撮影、昼食後、14研究グループからの口頭発表とフリーディスカッション、休憩をはさんで、13研究グループからの口頭発表とフリーディスカッションを行いました。い

ずれにおいても活発な質疑がなされ、共同研究に向けた話し合いが進んでいました。9日は、東京工業大学前田先生（A03班長）より、次回以降の会議についての説明を頂いたのち、評価委員である吉川信一先生より、ご講評を頂戴しました。続いて、フリーディスカッションの時間としました。参加者の半数を占める学生間でも討論が行われ、学生発信の共同研究が多く産まれることを予感させました。最後に荻野先生より総括として、領域の益々の発展が期待される旨、ご挨拶を頂戴し、本合同班会議は盛会の内に終了しました。8日には台風5号が日本を縦断したために悪天候となり、8日からご参加頂いたメンバーおよび8日に帰路に就いたメンバーの交通に大きな支障が出ましたが、それらをもとせぬ領域の勢いを感じました。本会議から多くの共同研究の芽が出て、それらが領域、ひいては、科学の発展に寄与することを、現地実行員一同心より願っております。



全体写真

(文責：A01 連携 東北大学 小林 亮)

レクチャーツアー開催報告

平成 29 年 7 月 7 日、物質・材料研究機構（NIMS）の並木地区にて、オックスフォード大学の Michael Hayward 教授による講演が行われました。先生にお会いするのは 2016 年 9 月オックスフォード大学に訪問したとき以来で、此度は陰山拠点長のアレンジの元、つくばに招待することになりました。タイトルは「topochemical reduction and anion exchange as a route to new electronic materials」で、主に酸化物の異常配位、特に平面 4 配位に関するトピックが紹介されました。物性分野では超電導と低次元磁性の観点から平面 4 配位構造は非常に興味もたれていますが、この配位状態を安定状態として取ることができる遷移金属は限られていることから、平面四配位の物性化学は現在も未知数でエキサイティングな領域です。Hayward 先生は金属水素化物を使った低温還元法を発見した研究者として名を馳せており、その手法を用いることにより非従来型の平面 4 配位複合アニオン化合物の合成に成功しています。今回の講演では、やはり低温還元法を用いて合成された 3d 遷移金属と 4d 遷移金属の両方を含む新奇無限層構造複合酸化物の構造と磁気物性についてお話しされました。金属の組み合わせを変えることにより、強磁性、スピングラス、スピントランスポールなど多様な物性が現れることを示され、平面 4 配位の面白さを再認識した次第です。当日は他のセミナーと

時刻が被ってしまうアクシデントがありましたが、それでも 20 人程の聴衆が集まり、質疑応答も活発に行われました。講演以外の時間では、NIMS の森グループおよび産総研の荻野グループの研究室に案内し、荻野先生も交えて非公開のディスカッションを行いました。また、学生達とのディスカッションも喜んで引き受けてくださり彼らをエンカレッジして頂きました。どんな質問に対しても 10 倍ぐらいの勢いで答えてくださる先生の気質は相変わらずで、それは歓迎会の席においても多分に発揮されていました。つくばでの滞在は 2 日間だけでしたが、互いの親交を深めることができました。



Hayward 先生、荻野先生と筆者

Letter from Prof. Michael Hayward

Last July I had the great pleasure of undertaking a lecture tour, arranged by Prof. Kageyama, visiting and speaking at some institutions in Tokyo and Kyoto. Although I had visited Japan once before, this did not prepare me for the weather during my trip. Summers in Oxford are mild, so to step off the aeroplane into 35 °C heat was a real challenge!

After a day acclimatising and seeing the sights in the Akihabara district of Tokyo, my first scientific visit was to the Department of Applied Physics at the University of Tokyo, hosted by Prof. Shintaro Ishiwata. It was very interesting to see the exciting high pressure work his group are working on, and to meet with other members of faculty there, and enjoy some excellent sushi in the evening.

After a free day where I took in some of the sights of Tokyo, including the National Museum, my next academic visit was to ISSP, hosted by Prof. Zenji Hiroi. It was nice to see Zenji again and members of his group whom I had met previously at conferences, and catch up on their recent work.

The following day I travelled to NIMS in Tsukuba to visit the Quantum Materials Group hosted by Yoshihiro Tsujimoto and Kazunari Yamaura. Again I was very impressed by the high-pressure synthesis work and equipment. I also had the pleasure of a long discussion with Prof. Takao Mori and a

chance to see the very impressive thermal measurements that can be performed at NIMS.

My final day in the Tokyo area was another day of tourism, with my very able tour guide: Prof. Hiroi. He showed me some very interesting parts of the city from the temple at Asakusa to a very unusual ramen noodle restaurant!

For the second part of my tour I took the Shinkansen to Kyoto. My first visit was to Prof. Yuchi Shimakawa at the Uji campus of Kyoto University. Here I was reunited with two of my former students who have JSPS fellowships in the Shimakawa group. As ever I was impressed by the wide variety of projects and complex synthesis being performed.

For the remainder of my visit I was hosted in the group of Prof. Hiroshi Kageyama at the Katsura campus of Kyoto University. It was great to catch up and discuss joint projects with Hiroshi and his group. There was also plenty of time for more social activities, with preparations for the Gion festival occurring during my stay in Kyoto.

I am very thankful for the excellent hospitality shown to me by all my hosts – excellent food and excellent company! It was great to meet so many people, friends both old and new, and I look forward to welcoming them on return visits to Oxford.



XXVI International Materials Research Congress (IMRC 2017)開催報告

8月20日～25日の日程でメキシコ・カンクンにて行われたXXVI International Materials Research Congress (IMRC 2017) 内にて、複合アニオン新学術領域関連のセッションとして“F2 Functional Materials Based on Perovskite-Type Oxides and Mixed Oxide-Anion Solids—Ferroics, Superconductors and Related Materials”が開催された。

IMRCはメキシコ材料学会とアメリカ材料学会が主催して毎年カンクンで開催されるもので、約60カ国から1700人の参加者を集めている。セッションF2は、複合アニオン新学術領域評価委員のノースウェスタン大学・Kenneth Poeppelmeier教授ら4人がオーガナイザーとなり、本新学術領域も講演者の旅費支援を行った。二日間に渡ってのべ50件の講演を集め、主にペロブスカイト酸化物と複合アニオン化合物を対象物質として、これらの物質を舞台とする強誘電、イオン伝導、磁性、超伝導、発光など多岐に渡る物性・機能性に関する発表が行われた。複合アニオン化合物に関連する発表としては、層状ペロブスカイト構造を持つ複合アニオン化合物の構造と磁性に関する報告、OとF

がオーダーした酸フッ化物の構造相転移と誘電性、水酸基を持つ酸フッ化物の新物質、Liイオンバッテリー材料として用いられる $(\text{PO}_4)_x(\text{SO}_4)_y$ などのポリ酸の磁性に関する報告などのトピックについて議論が行われた。領域からは分子研小林准教授と私荻野が参加して、それぞれ新規ヒドリド導電体の構造と特性、層状複合アニオン化合物の発光特性についての講演を行った。一方本学会でも、複合アニオン化合物に該当する物質の発表自体は非常に多いものの電池、光学、ハイブリッド材料など様々なセッションに分散しており、“複合アニオン”を主題とするセッションの必要性はまだそれほど認識されていないようにも感じた。日本では本新学術領域や日本セラミックス協会の特設セッションを中心として、“複合アニオン”の重要性が認知されつつあるが、国際的な学会での認知度向上は今後の課題である。

なお会場となったJW Marriott Cancunは、ホテルゾーンと呼ばれるカリブ海に突き出た30kmほどの砂州の中央付近にある。会場周辺は一面に砂浜が広がっており、8月ということもあり多くの観光客を集めていた。



会場入り口の学会ロゴ



会場からの日没

(文責：A01 産業技術総合研究所 荻野 拓)

窒化物系国際シンポジウム ISNT2017&ISSNOX5 開催報告

平成 29 年 8 月 27 日から 9 月 1 日の 6 日間にわたり、窒化物系材料に関する国際シンポジウム 9th International Symposium on Nitrides and 5th International Symposium on SiAlONs and Non-oxides (ISNT2017&ISSNOX5) が、北海道大学フロンティア応用科学研究棟において開催されました。窒化物系国際シンポジウム ISNT は第一回がフランスのレンヌで開催されてから、これまでの 8 回は全て欧州で開催されてきました。今回はこれらに続く 9 回目として初めて欧州を離れて日本で開催することになりました。複合アニオン化合物である金属酸窒化物は蛍光体・光触媒・誘電体などの分野で注目され始めており、いくつかは金属酸化物を凌駕する機能性を発現するまでになってきました。これらの成果は日本の研究機関で得られたものが多く、世界の機能性酸窒化物材料研究を牽引している日本で、初めて ISNT を開催する機会となりました。一方の ISSNOX はサイアロンや非酸化物材料に関連した国際シンポジウムで日本やトルコでの開催実績があります。今回、ISNT と ISSNOX を日本で始めて共催することで、両者の先導的な研究実績と幅広い研究者コミュニティの融合が期待できました。

参加者総数は 125 名で、海外からは 11 ヶ国から 54 名

の参加者がありました。学生の参加者は 27 名で、海外および学生参加比率の比較的高い国際シンポジウムになりました。

セッションの内容は、非酸化物構造材料や焼結技術、酸窒化物の新物質合成、光触媒、蛍光体、熱電材料、超高压合成など非常に多岐にわたっており、これらの分野で招待講演 31 件、一般講演 58 件、ポスター 33 件の総数 122 件の発表がありました。学生発表者の中から特に優秀な発表者には、学生優秀発表賞が贈られました。喜ばしいことに、本新学術領域研究のメンバーからは 7 名が受賞者に選ばれました。

30 日の晩に開催したバンケットには 100 名を超える方に参加して頂き、皆さん北海道の食とお酒を楽しみつつ、活発な議論とネットワーク形成の輪が随所に見られました。バンケットの最後には、本領域の評価委員であり、長年日本の窒化物研究を牽引してこられた吉川信一先生への感謝の意を込めて先生の胴上げも行われました。

次回の ISNT は 2019 年にバルセロナで開催する予定です。本領域からも多くの新しい成果が生まれ、多数の方が参加されることを期待しています。



学生受賞者と陰山領域代表、評価委員の幾原先生と吉川先生、中央は次回開催地のアンパロ先生（バルセロナ）



胴上げされる吉川信一先生

(文責：A01 北海道大学 鱒淵 友治)

日本セラミックス協会 第30回秋季シンポジウム 「複合イオン化合物の創製と機能」特定セッション開催報告

日本セラミックス協会 第30回秋季シンポジウムにおいて、本新学術領域に関連した特定セッション「複合イオン化合物の創製と機能」が、2017年9月19日（火）～21日（木）の日程で神戸大学六甲台地区にて開催された。他セッションとの合同セッションを含めた本セッションにおける発表数は、開催された特定セッション中最大級であり、基調講演1件、招待講演8件、一般公演36件、ポスター7件を数え、秋季シンポジウムの全期間に渡って発表が行われた。この特定セッションは本領域の荻野・陰山・本橋・上田らがオーガナイザーとなって主催しているものであるが、初めて開催された2011年の講演件数29件・開催期間約一日から近年は講演件数が急激に増加して来ており、このことから「複合アニオン」が新学術領域採択を機に非常にホットな研究トピックとなってきたことがうかがえる。

基調講演は、九州大学 林 克郎先生による「マイエナイト結晶を起点とした活性アニオンの評価と機能発現」で、籠状構造を有するC12A7 (12CaO・7Al₂O₃) 発見の歴史から電子ドーピング、酸素イオン伝導やO⁻放出など本化合物の特異的な特性についてご紹介頂いた。本化合物に存在する様々な酸素種に関する講演においては、途中、聴講者へ問題を交えながらお話しいただき、聴講者としては理解を深める上で非常にあり難い内容であった。招待講演は、九州大学・山崎 仁丈先生による「電気化学計測と第一原理計算

の融合によるプロトン伝導性酸化物の理解と設計」、信州大学・手嶋 勝弥先生による「超イオン伝導パスを拓く階層構造による結晶相界面デザイン～酸化物系全固体型LIBへの挑戦～」、ファインセラミックスセンター・桑原 彰秀先生による「第一原理計算を用いた複合アニオン化合物における固溶状態探索」、名古屋大学・岡本 佳比古先生による「複合イオンの秩序による幾何学的フラストレート磁性体の構造・物性制御」、産業技術総合研究所・篠崎 健二先生による「フッ化物導入によるガラスの構造制御と高効率蛍光」があった。また合同セッションでは複合イオン化合物の創製と機能からの推薦で東京大学・木村 剛先生による「マルチフェロイック機能材料の物質展開」の講演があった。ここですべてのご講演に関して、ご紹介することはできないが、講演題目からも分かるように、複合イオン化合物（特に複合アニオン）の応用先や研究対象の学問は多岐に渡っており、「複合アニオン」は非常に学際的なトピックであると再認識させられた。また、セッション会場の大講義室には、多くの聴講者が詰めかけ、活発な議論が行われた。1日目開催終了後には、三の宮で東工大藤井先生の主催する「先進的な構造科学と分析技術」セッションと合同で50人超の意見交換会が催され、研究者同士の交流により大いに盛り上がった。今後もこの研究者同士の連携を軸に、複合アニオンの研究が益々発展するのを期待する。

(文責：A03 京都大学 上田 純平)

Mixed Anion Seminar III & IV 開催報告

平成 29 年 10 月 3 日と 10 月 25 日において、それぞれ、物質・材料研究機構並木キャンパスにて、Mixed Anion Seminar III と Mixed Anion Seminar IV が A03 班分担、森孝雄、熱エネルギー変換材料グループの主催で開催されました。このセミナーは、それぞれ、フランスとドイツの著名な先生の講演を 2 件と 1 件をフィーチャーしていました。A03 班分担、森による複合アニオン化合物の熱電的性質に関する講演も 1 件ずつ話題を変えてありました。全体で本領域参画者を含めて約 20 名ずつの参加者がありました。Mixed Anion Seminar III においては、Rennes 大学の Regis Gautier 先生から、「Towards the Prediction of the Transport Properties of Cluster-based Chalcogenides and Binary Gallium Intermetallics」というタイトルで、カルコゲナイド複合アニオン化合物などの熱電物性の理論的解析と高性能化の予測のお話がありました。続けて、CNRS の Jean Francois Halet 先生から、「Understanding the formation of structural motifs, electronic structure and properties of

ternary metal borides」というタイトルで、複合アニオン化合物である金属ホウ炭化物などの三元系ホウ化物の構造構築原理、電子状態、物性のお話がありました。A03 班分担、森は、本領域を簡単に紹介し、Oxyselenides や Oxytellurides の結晶化学や熱電物性を紹介しました。

Mixed Anion Seminar IV においては、ドイツのマックスプランク固体化学物理研究所の Yuri Grin 先生から「Utilizing phase diagrams to develop thermoelectric materials」のタイトルで複合アニオン化合物を含む多彩な多元系の化合物における相図の研究や熱電物性との相関のお話がありました。A03 班分担、森は、本領域を簡単に紹介し、複合アニオン化合物 BiCuSeO のドーピングによる熱電高性能化の講演を行った。いずれのセミナーでも本領域以外の参加者から様々な質問があり、活発な議論が行われました。今後も様々なセミナーで複合アニオンを国内外に発信し、益々領域が発展していくことを期待します。



Halet 先生による講演の様子



Grin 先生と森

(文責：A03 物材機構 森 孝雄)

日本化学会秋季事業 第7回 CSJ 化学フェスタ 2017 特別企画 “複合アニオン化合物が拓く新しい材料科学と夢” 開催報告

平成 29 年 10 月 17 日から 19 日の三日間、タワーホール船堀にて、日本化学会第 7 回 CSJ 化学フェスタ 2017 が開催されました。その初日にあたる 17 日に特別企画講演会“複合アニオン化合物が拓く新しい材料科学と夢”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、領域メンバーの六名の先生のご講演を頂きました。まずは領域代表である陰山洋先生から「複合アニオン化合物の化学」というタイトルで、本領域の紹介と複合アニオン化合物合成に関する現状と今後の展望について講演がありました。続いて、A01 の垣花真人先生から「複合アニオン化合物が拓く蛍光体開発」というタイトルで、複合アニオン蛍光体開発指針と見出された複合アニオン蛍光体について概括して頂きました。また、A02 の木本浩司先生は「先端的な電子顕微鏡による微小領域の材料評価の現状」という講演の中で、最近の電子顕微鏡法の著しい進歩と、複合アニオンプロジェクト関連材料の解析の可能性を示されました。

また、若手研究者として A03 の小林玄器先生からは「ヒドリドイオン導電体の開発と電気化学反応への応用可能性」、A02 の南部雄亮先生からは「複合アニオン研究に中性子が貢献できること」というタイトルでそれぞれ、新規複合アニオン化合物の開発経緯と応用可能性、これら化合物内部の静的構造や動的挙動の微視的情報を与える中性子散乱の威力を伝える講演がありました。さらに、A03 の田部勢津久先生からは「複合アニオン化による発光材料の機能発現」というタイトルで、複合アニオン化により、新たな光物性が出現した最新の研究成果に関するご講演を頂きました。最後に A03 代表の前田和彦先生が挨拶をされ、複合アニオン化合物の学理創成に対する夢を語られました。約 50 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。



第 7 回 CSJ 化学フェスタ会場の様子

(文責：A02 大阪市立大学 吉田 朋子)

日本磁気学会 化合物新磁性材料専門研究会開催報告

2017年11月1日、東京都千代田区にある中央大学駿河台記念館にて、日本磁気学会化合物新磁性材料専門研究会が開催されました。本研究会は日本磁気学会とその専門研究会である化合物新磁性材料専門研究会のそれぞれ第215回/第61回研究会として、本新学術領域の協賛で行われました。今回の研究会テーマは「複合アニオン化合物磁性材料の最前線」で、複合アニオン化合物の中でも磁性・超伝導物質に焦点を当て、新物質合成・新物性および磁性測定法の観点から、本新学術領域に所属する5名の先生にご講演いただきました。

産総研の荻野先生（A01 代表）から「112、1144 構造を持つ鉄系超伝導体の構造と物性」というタイトルで、近年発見された新しい構造を有する 112、1144 型鉄系超伝導体の結晶構造、超伝導特性および応用の可能性が紹介されました。東工大の松石先生（A03 分担）からは「複合アニオン強磁性体 $\text{LaMnAsO}_{1-x}\text{H}_x$ の高圧合成」のタイトルで、1111 型酸水素化物 $\text{LaMnAsO}_{1-x}\text{H}_x$ が $x = 70\%$ まで酸素を水素に置換できることを示され、水素置換により 200 K を超えるキュリー温度をもつ強磁性体金属に変化することが紹介されました。続いて、京大の山本先生（A02 分担）か

ら「異方的な配位を持つ遷移金属化合物における圧力誘起相転移」のタイトルで、 FeO_4 平面四配位をもつ鉄酸化物と $\text{trans-VO}_4\text{H}_2$ 八面体配位をもつバナジウム酸水素化物の圧力誘起相転移について、ヒドリドの有無と電子配置の観点から両者の違いを講演いただきました。中央大の岡先生（A01 公募）からは「酸フッ化物層状ペロブスカイト $\text{Pb}_3\text{Fe}_2\text{O}_5\text{F}_2$ の磁気転移」のタイトルで、層状ペロブスカイト酸フッ化物 $\text{Pb}_3\text{Fe}_2\text{O}_5\text{F}_2$ が酸素とフッ素の完全な秩序配列をもち、磁場に依存する複雑な転移挙動を示すことが紹介されました。最後に、東北大の南部先生（A02 公募）から、「中性子を用いた複合アニオン化合物の磁性研究」というタイトルで、複合アニオン化合物に適用可能な中性子散乱法を用いた磁性研究の実例として、鉄系超伝導体の類似物質である BaFe_2Se_3 の磁気構造解析や三角格子反強磁性体 NiGe_2S_4 の磁気揺らぎ時間測定の結果を紹介されました。

今回の研究会は学生の参加者も多く、すべての講演で活発な議論がなされました。全体を通して多くの新物質・新物性および磁性計測手法が紹介され、複合アニオン磁性体・超伝導体研究の益々の発展を期待させる研究会となりました。

豊田理化学研究所 第6回国際ワークショップ New trends in solid state chemistry: from oxides to mixed anion compounds 開催報告

平成29年11月10日から12日までの3日間、愛知県名古屋市にあるトヨタ産業技術記念館において、豊田理化学研究所が主催、本領域が共催となって「豊田理化学研究所 第6回国際ワークショップ」を開催しました。本ワークショップのチェアマンは領域評価委員でもある豊田理化学研究所 上田寛フェロー、領域代表の京都大学 陰山洋 教授が務めました。会期中は12件の招待講演（海外8件、国内4件）、16件の一般講演（海外1件、国内15件）が行われ、2日目のポスターセッションでは26件の発表が行われました。聴講のみの参加者を含めた全参加申込者数は82名にのぼり、3日間を通じて非常に活気にあふれたワー

クショップとなりました。「複合アニオン化合物」という分野への関心の高さを改めて実感できました。ワークショップの副題である“New trends in solid state chemistry: from oxides to mixed anion compounds”に掲げるように、複合アニオン化合物に関する研究の最先端の研究から、今後複合アニオン化合物の研究に適用されることが期待される解析技術や合成方法、さらには固体化学および物性物理に関する最近の研究テーマにわたって幅広い講演が行われました。招待講演者と一般講演者の方々を以下に紹介させていただきます。

招待講演	一般講演
廣井 善二 (東京大学)	島川 祐一 (京都大学)
Kenneth Poeppelmeier (Northwestern Univ.)	野原 実 (岡山大学)
前田 和彦 (東京工業大学)	林 克郎 (九州大学)
Peter Sushko (PNNL)	Joke Hadermann (Univ. Antwerp)
Robert J. Cava (Princeton Univ.)	森 孝雄 (物材機構)
Artem Abakumov (Skoltech)	小林 玄器 (分子研)
高木 英典 (東京大学)	岡本佳比古 (名古屋大学)
Chris J. Pickard (Univ. Cambridge)	桑原 彰秀 (ファインセラミックセンター)
James R. Neilson (Colorado State Univ.)	東 正樹 (東京工業大学)
Andrew L. Goodwin (Univ. Oxford)	荻野 拓 (産総研)
Miguel Ángel Alario-Franco (Univ. Complutense)	中島 智彦 (産総研)
大場 史康 (東京工業大学)	上田 寛 (豊田理化学研究所)
	山本 隆文 (京都大学)
	石井 悠衣 (大阪府立大学)
	加藤 大地 (京都大学)
	中埜 彰俊 (名古屋大学)

一般講演の中でも、京都大学 山本隆文助教、大阪府立大学 石井悠衣助教、名古屋大学 博士課程 中埜彰俊さん、京都大学 修士課程 加藤大地さんの4名の方の発表はポスター発表申込の中から特に興味深い内容であるとして主催者から口頭発表枠に推薦された講演でした。複合アニオン化

合物研究における日本の若手研究者の活躍をアピールすることができたのではないかと思います。

今回のワークショップでは主に「特異な構造と電子の振る舞い」「機能と構造解析」「合成と機能発現」というトピックに分けることができたかと思います。廣井教授は、ル

チル型構造の VO_{2-x} を例として挙げ、結晶中で陽イオン同士が分子における dimer のような状態を形成することで電子が局在化する「分子軌道結晶」という概念を紹介しました。野原教授の発表では、鉄ヒ素系超伝導化合物における As-As dimer 形成と As の形式電荷変化に伴う超伝導材料探索の指針についての議論がなされました。特異な電子状態に関しては、島川教授による Fe あるいは Cu 系化合物における電荷分離効果と異常原子価、高木教授による 5d 遷移金属酸化物における層間スピン軌道相互作用、Cava 教授によるカゴメ格子であるパイロクロア型構造の希土類酸化物および遷移金属フッ化物の磁気特性に関する研究など多くの講演が行われました。

電子の振る舞いは結合状態や結晶構造と密接に関係するために、注目する物質の「構造解析」というのは非常に重要な意味を持ちます。Abakumov 教授、Hadermann 教授は透過型電子顕微鏡 (TEM) による非常に精緻な格子像や原子分解能での EDX による組成分析などを発表され、Sushko 博士は TEM による構造解析と第一原理計算による構造の理論計算を組合せた研究を発表されました。TEM による構造直接観察の重要性を改めて実感しました。解析技術に関しては、その他にも林教授からは酸水素化合物における NMR を用いたヒドリドイオン (H^-) の解析について、東教授からは磁気力顕微鏡と圧電応答顕微鏡による $\text{BiFe}_{1-x}\text{Co}_x\text{O}_3$ 薄膜の分極ドメインと磁気ドメイン構造の観察についての発表が行われ、最先端解析技術の物性発現メカニズムへの展開が示された。理論計算に関しては、Pickard 教授による大域的な安定結晶構造の探索アルゴリズムの開発、大場教授からは第一原理計算による未知の新規窒化物半導体の予測から実際の合成までの研究が紹介されました。製薬における分子設計と同様に、無機結晶材料においても、計算機による未知化合物の探索と物性予測、それに基づいた実験による合成と発見を行う時代がいよいよ到来しつつあると感じました。

「合成と機能」のトピックに関する発表として、Poepelmeier 教授は Mg 蓄電池の活物質としての実用を目指したモリブデン酸フッ化物の合成、前田准教授は酸窒化物を用いた可視光応答型光触媒の合成、森博士と岡本助教からは熱電材料開発、荻野博士からは層状構造を有する酸塩化物化合物による発光材料開発、小林玄器准教授は酸水素化合物における H^- イオン伝導性に関する発表が行われました。速度論による反応経路の制御と合成に関する Neilson 教授の発表では、反応生成過程における生成物の構造解析を in situ 測定により確認していたのが強く印象に残っています。Alario-Franco 教授は酸化物超伝導材料のこれまでの研究経緯を振り返りながらナノ粒子における磁性と超伝導特性の関係に関する発表を行いました。中島博士の講演では、植物の成長に悪影響を及ぼす色成分を減らした白色 LED の開発に関する研究が紹介されました。個人的には白色 LED というのは民生品としても普及しておりあまり基礎研究のテーマというは残っていないと思っていただけに、社会にはまだまだニーズの多様性があるのだという思いを新たにしました。私からは結晶中で点欠陥同士がある種の会合 (clustering) 状態にいることがエネルギー的に安定であるということを示す第一原理計算による網羅的構造探索に関する内容で発表を行ったのですが、奇しくも私の一つ前の Goodwin 教授による発表が複合アニオン化合物における “Correlated Disorder (相関を持った無秩序状態)” に関する内容であり、とても興味深く聞かせてもらいました。チェアマンである上田寛フェローからホランダイト構造を有する 3d 遷移金属酸化物の磁性に関する研究発表が行われ、3 日間のワークショップが締めくくられました。ワークショップ終了後は会場であるトヨタ産業技術記念館の見学ツアーに希望者は参加しました。トヨタグループ誕生の源流である自動織機の開発と発展の歴史、豊田自動織機から自動車部門が誕生する経緯、これまでのトヨタの販売した自動車の展示など、とても楽しめるツアーで 1 時間 30 分はあ

っという間に過ぎました。外国人参加者には英語によるツアーガイドも行われたこともあり、皆さんとても楽しまれた様子でした。

Neilson 教授から本ワークショップに関するコメントを送っていただいたので、この開催報告の後に掲載しました。また、ポスター発表に関しては招待講演の方々による投票の結果、最優秀ポスター賞を 1 件、優秀ポスター賞を 4 件選ばせて頂きました。受賞者の方々も併せて紹介しておりますので、是非そちらもご覧頂ければと思います。

終了後、多くの参加者の方から非常に充実した素晴らし

いワークショップだったというコメントをもらい、運営スタッフとして大変喜ばしく思います。当日の運営サポートをしてくれた京都大学陰山研究室のスタッフおよび学生の皆さん、豊田理化学研究所およびトヨタ産業技術記念館のスタッフの方々、ワークショップの盛り上がりにとって最も重要な口頭発表およびポスター発表をして頂いた発表者の方々、そして様々な形で協力して頂いた新学術領域「複合アニオン化合物」の関係者の皆様に、この場を借りて心から感謝申し上げます。今後、益々この学術領域が発展していくことを期待しております。

(文責：A02 分担 ファインセラミックスセンター 桑原 彰秀)

Letter from Prof. James R. Neilson

Coincident with the changing leaves of the season, the Nagoya Solid-State Chemistry Conference certainly highlighted the New Trends in Solid-State Chemistry. The meeting showcased the strength of mixed anion chemistry on a world stage with presentations from 10 visiting international and 18 domestic speakers. Looking back on the conference, there were many interesting new trends in mixed-anion chemistry woven throughout the conference.

Where are the electrons? A marvel of solid-state chemistry is illustrated by how electrons organize themselves in crystals. This was elegantly summarized by Prof. Ueda in his work on mixed-valence Hollandite structures; the crystals prepared under high pressure display a rich diversity of solutions to organize the non-integer charge deposited in the lattice, ranging from charge order with metal-insulator transitions to itinerant ferromagnets. While Prof. Ueda delivered the last word of the conference, this theme arose in mixed valence Fe-based perovskite oxides (Prof. Shimakawa) and the rich nature of As-As bonding in Fe-based superconductors (Prof. Nohara). Using NMR, Prof. Hayashi

shared insight to providing clues of where the electrons might be in mixed-anion hydrogen compounds (e.g., H^- vs H^+), which resonated with the challenges faced by Prof. Kobayashi in understanding mixed ionic and electronic conduction in hydride materials. Prof. Hiroi discussed the notion that a better description of the electrons in correlated materials could be in 'molecular orbital crystals'. Using chemistry and geometry to yield competing interactions, Prof. Cava shared recent results on new mixed-cation pyrochlore halides, with the goal of achieving degenerate ground states in these materials: a quantum spin liquid. Though, Prof. Takagi reminded us of how the search for these phases relies on the search for nothingness – an intersection of chemistry, physics, and the Zen state. We were also reminded how pushing the limits of synthesis enables new science, be it under pressure (Prof. Azuma, Yamamoto, Shimakawa, and Ueda), or in solution as to study nanoscale effects on high-T superconductors (YBCO, Prof. Alario-Franco).

Structures galore! I particularly enjoyed learning about the rich crystallography afforded by mixed anion systems.

Though initially thought to be disordered, vacancies in oxides (a type of mixed anion system!) exhibit elegant correlated disorder order and superstructures, which can be understood and predicted by theory (Dr. Shusko, Dr. Kuwabara) and visualized with transmission electron microscopy (Prof. Abakumov, Prof. Hadermann). Prof. Pickard offered simple insights to complex problems of predicting entirely new structures with a random search, while Prof. Goodwin showed us how complex correlated chemical disorder can map onto exciting physical models for correlated electrons (e.g., the Kitaev model). Reminding us that structures are not static, Dr. Ishii described how phonons underlie structural phase transitions.

Putting mixed anions to work! As a theme pervading throughout the meeting, mixed anion systems are providing numerous advantages for energy storage and conversion. In one of the first talks of the meeting, Prof. Poeppelmeier shared insight on how we might think about putting mixed-anion systems to work for next-generation cathodes in Mg-based batteries. Oxynitride (Prof. Maeda) and oxyhalide (Mr. Kato) semiconductors are providing significant advantages for photocatalysis by aligning the frontier electronic states

for maximum efficiency and stability. The synthesis of new boride (Prof. Mori) and the prediction of new nitride (Prof. Oba) based semiconductors highlighted exciting new opportunities in energy materials. Lighting up other future prospects, Prof. Nakajima and Prof. Nakano shared work on new phosphor materials that among other things, may help to give plants some needed sleep by not interrupting interfering with chlorophyll absorption.

To describe my personal experience, I had an extremely warm and inviting first trip to Japan. Some highlights also included the amazing food, which included a long wait for ramen with Profs Poeppelmeier and Alario-Franco. I enjoyed meeting the people in Japan who have written so many papers I have enjoyed reading, as well as seeing many great talks and posters from students and postdocs. As someone who teaches inorganic chemistry and d orbitals, I look forward to teaching the example presented by one of the poster winners, Dr. Diagorou Hirai, which showed how the absorption of light can be anisotropic due to the orbital alignment in the pleochromic crystal, $\text{Ca}_3\text{ReO}_5\text{Cl}_2$. In summary, the organizers hosted a fantastic conference, and I hope to return to Japan in the near future!



ポスター賞 受賞者

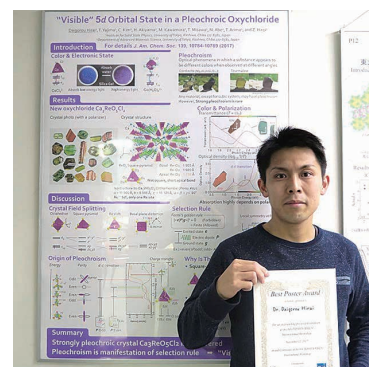
■ 最優秀賞

- 平井 大悟郎 (東京大学 物性研究所・助教)
「“Visible” 5d Orbital States in a Pleochroic Oxychloride」

[受賞コメント]

私は、物性研究所廣井研究室で、5d 遷移金属化合物の物性研究をおこなっています。ワークショップには日本の先生方に加え、海外の著名な先生方も多数参加されており、バラエティーに富んだお話を聞き、大変勉強になりました。また、口頭発表されていた学生さん達もみな堂々とした発表をされており、大きな刺激を受けました。ポスターセッションでも活発な議論がなされており、私自身もさまざまなコメントをいただきました。発表者と聴衆の距離感が近く、非常に密度の高いワークショップだったと思います。

多数のすばらしいポスター発表があった中で、Best Poster Award をいただき、大変うれしく思っております。ポスターでは、最近合成に成功した、新奇複合アニオン化合物 $\text{Ca}_3\text{ReO}_5\text{Cl}_2$ が示す特殊な光学特性について発表をおこないました。この物質は見る方向によってまったく異なる色を示すという面白い性質を示します。光学測定と電子状態の計算によって、この光学特性がレニウム (Re) の 5d 軌道間の光学遷移の選択則によって説明できることを明らかにしました。研究を行うにあたりお世話になった共同研究者の皆様に、この場をお借りして深く感謝申し上げます。



■ 優秀賞

- 岡 研吾 (中央大学・助教)
「Synthesis, Structure and Physical Properties of Pb containing Oxyfluorides」

[受賞コメント]

A01 公募班として新学術領域に参加させていただいている中央大学の岡です。簡便かつ安価な固相反応法を用いた複合アニオン化合物の合成をテーマとして、主に酸フッ化物に着目して研究を行っております。今回、名古屋で開催された第6回豊田理研国際ワークショップにて、本研究に関する発表でポスター賞をいただくことが出来たことを大変うれしく思います。上田寛先生が主催なされたこの会議は、世界に名だたる固体化学の大御所の先生方が多数ご参加になられており、その中でポスター賞に選ばれたことは今後の研究を推進するにあたり大きな自信になりました。本会議の中でも、先生方のレクチャー及びディスカッションの中で、いくつか今後の研究に関するヒントが得られたので、それらを活かしてさらに研究を発展させていく所存です。



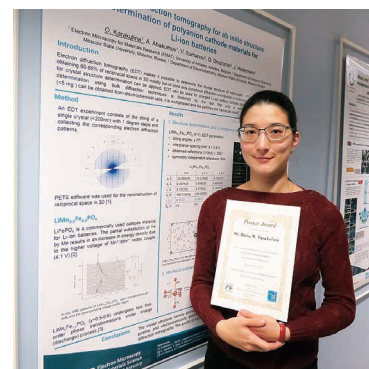
■ 優秀賞

● Olesia Karakulina (University of Antwerp • PhD student)

「Antisite Disorder and Bond Valence Compensation in $\text{Li}_2\text{FePO}_4\text{F}$ Cathode for Li-ion Batteries」

[受賞コメント]

It was a pleasure to attend the 6th TOYOTA Riken International Workshop. Amazingly, all talks were given by leading professors from all over the world. The presentations were very interesting and were given in an easily understandable way. I learned a lot about new compounds and materials. Moreover, I presented my work dedicated to the crystal structure changes in cathode materials for Li-ion batteries. I have been doing this research as a PhD student at University of Antwerp, Belgium. It was a great honor for me that my work was awarded a poster prize.



■ 優秀賞

● 竹入 史隆 (京都大学 • D3)

「Promoted Hydride/Oxide Exchange in SrTiO_3 by Introduction of Anion Vacancy via Aliovalent Cation Substitution」

[受賞コメント]

お名前を幾度となく目にしたことのある先生方と議論できる機会に恵まれた、夢のような3日間でした。ポスター発表では、トポケミカル反応における速度論的な因子に関して、James Neilson先生と議論できたことが特に印象に残っています。本ワークショップを通して、固体化学の面白さを再認識するとともに、10年後にはこのような場に招待される研究者になりたい、とモチベーションを大いに高めることができました。上田先生・陰山先生をはじめ本ワークショップ事務局の方々と、日頃からご指導頂いている皆様に深く感謝いたします。ありがとうございました。



■ 優秀賞

● 松井 直喜 (東京工業大学・D1)

「 H^+ Conduction in $La_2LiO_{3.5}$ synthesized by anion exchange reaction」

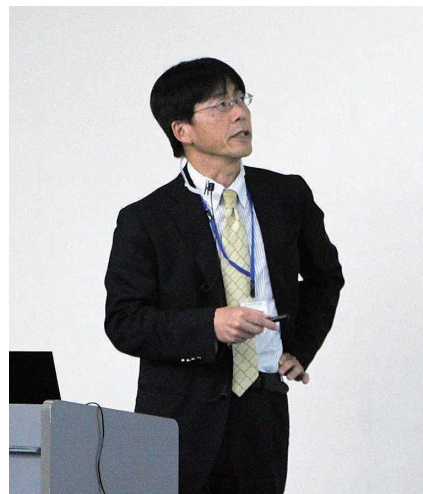
[受賞コメント]

この度は Poster award を頂き大変嬉しく、光栄に思います。本発表では、ヒドリド導電体を前駆体としたプロトン導電体の合成を発表しました。発表中に頂いたご意見を今後の研究に還元して、よりいっそう研究活動を邁進していき、少しでも複合アニオン化合物の学問の発展に貢献できればと思います。ワークショップでは多様な分野の講演を聞くことができ、自身の視野を広げることができたと思います。本研究は小林玄器特任准教授(分子研)、米村雅雄准教授(高エネ研)との共同研究です。ここに感謝申し上げます。また、私の研究発表にお立ち寄り頂いた皆様、本ワークショップを企画運営して頂きました幹事の皆様に深く感謝申し上げます。

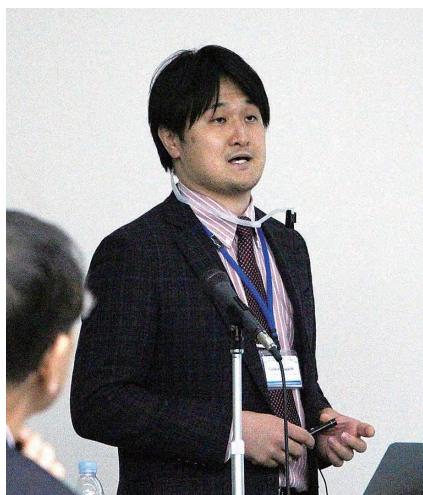
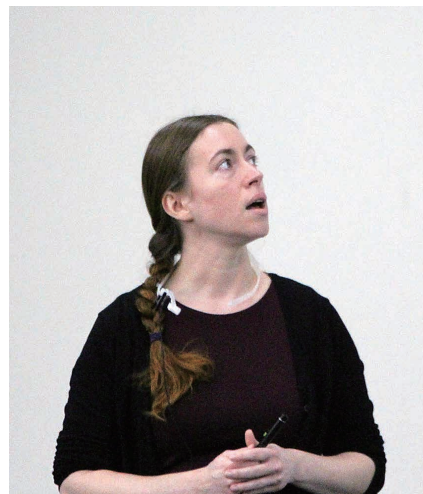




■ 領域ニュース

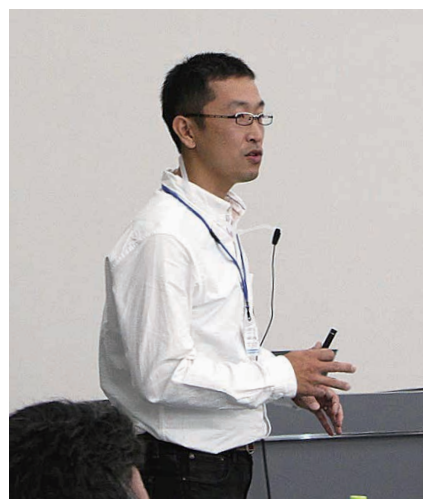
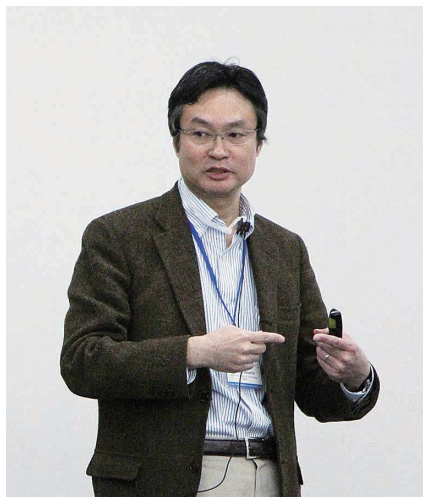


(上段左→右→中段左→右…の順に) 廣井善二 教授、Kenneth Poepelmeier 教授、島川祐一 教授、前田和彦 准教授、Peter Sushko 博士、野原美 教授、Robert J. Cava 教授、Artem Abakumov 教授、林克郎 教授



(上段左→右→中段左→右…の順に) 高木英典 教授、Chris J. Pickard 教授、Joke Hadermann 教授、森孝雄 博士、小林玄器 准教授、James R. Neilson 教授、岡本佳比古 准教授、Andrew L. Goodwin 教授、桑原彰秀 博士

■ 領域ニュース



(上段左→右→中段左→右…の順に) Miguel Ángel Alario-Franco 教授、東正樹 教授、石井悠衣 助教、加藤大地さん、大場史康 教授、荻野拓 博士、山本隆文 助教、中埜彰俊さん、中島智彦 博士



2017/11/11 11:55:35

第 11 回 物性科学領域横断研究会

平成 29 年 11 月 17 日から 18 日の二日間、東京大学柏の葉キャンパスにて、第 11 回 物性科学領域横断研究会が開催されました。この研究会は物性科学に関連した 9 つの新学術領域研究が合同で開催する研究会であり、各領域の研究内容を専門外の研究者や大学院学生に対し解説し、領域間のシナジー効果を高めると共に、物性科学のホットな話題を 2 日間で概観することを目的としています。当領域には二日目の 18 日午後に時間が割り当てられました。まずは領域代表である陰山先生から「領域紹介」が行われ、その後 A02 分担の桑原先生から「第一原理計算による複合アニオン化合物の特異な配位環境の解明」というタイトルで、第一原理計算を使った複合アニオン化合物に対する研究結果の紹介がありました。続いて A03 分担の長谷川先生から「複合アニオン化合物薄膜におけるアニオン配列制御

とその評価」というタイトルで、薄膜を使った複合アニオン化合物に対する研究結果の紹介が行われました。桑原先生、長谷川先生どちらの講演も、特に複合アニオンの配位環境に着目した研究であり、複合アニオン新学術領域が重要視している観点を他領域に紹介するよい機会になったと感じました。また 17 日午後にはポスター発表も開催され、全体で 100 件ほどのポスター発表のうち 9 件当領域からの発表がありました。また A02 分担の山本助教によるポスター発表「遷移金属酸水素化物の物性： π ブロッカーとして働くヒドリド」は優秀ポスター賞に選ばれました。全体で約 200 名の参加者があり、活気あふれる研究会でした。今後も様々な会議を通して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。



陰山領域代表による講演の様子



長谷川先生（A03 分担）による講演の様子

（文責：A02 京都大学 山本 隆文）

第7回希土類フォトルミネッセンス：光学材料とデバイス国際会議 2017 (PRE'17) - 複合アニオンセッション開催報告

第7回希土類フォトルミネッセンス国際会議：光学材料とデバイス国際会議（7th International Workshop on Photoluminescence in Rare Earths: Photonic Materials and Devices、通称 PRE'17）が、2017年11月30日から12月2日の3日間の会期で、イタリア、ローマにあるローマ大学サピエンツァ校にて開催された。講演内容は、希土類元素のフォトルミネッセンスの基礎と応用に関して、幅広い分野にわたり、先端研究者による基調・招待講演16件、一般口頭発表61件、ポスター発表60件が行われた。なお、参加者数は、28ヶ国、計140名であった。

希土類元素の4f・5d電子の光学遷移に基づくフォトルミネッセンス現象を利用した材料は、光ファイバ通信、カラー

ディスプレイや照明（蛍光灯や白色LED）分野、長残光蛍光体、固体レーザー、赤外線検出素子、放射線検出素子、太陽電池の高効率化のための波長変換素子など光技術において幅広い応用分野を有しており、発光現象の基礎や材料開発に関する研究のアクティビティは年々高まっている。しかしながら、希土類元素の特徴である4f・5d電子の基礎物理学、光物性、ホストである固体結晶構造やガラス構造と諸物性との関係は、まだまだ未知の部分が多く、研究発展途上の段階にあり、基礎分光学、量子化学、結晶成長、ガラス化学、固体構造解析など幅広い分野の研究者の間での情報交換、最新成果の議論ができる本会議の開催は非常に重要である。



学会会場入り口と看板（複合アニオンのロゴあり。）



Mixed Anions セッション参加者の集合写真
(議長の Dr. G. Righini と)

さらに、今回は複合アニオン材料における希土類イオンの光学特性という切り口で、新たなセッション（Mixed Anions）の開設に至った。なお、本セッションは新学術領域研究「複合アニオン化合物の創製と新機能」との共催にて行われた。本セッションは、2日目の午前中から、セッションオーガナイザーである京都大学・田部教授の開幕の挨拶とともに始まった。本セッションは、全部で7件の口頭発表と複合アニオンに関する5件のポスター発表があった。セッション講演者と参加者らは、複合アニオンという共通のテーマを有していたためか、セッションの意義が反

映されたアニオン視点の質問も多く見受けられ、ひとまず本セッションの目的は果たされたのではないと思う。また、講演にあったホスト化合物は、酸フッ化物、酸窒化物、酸塩化物など幅広く、酸化物では見られない光学特性やアニオンにより効果的に光物性をチューニングした報告など、希土類イオン添加発光材料としての複合アニオンホストのポテンシャルを十分に感じさせるものであった。発光材料のみならず、光触媒、磁性材料、超伝導材料などすべての応用において、今後の複合アニオン化合物の更なる発展に期待する。

(文責：A03 連携研究者 京都大学 上田 純平)

国際活動支援報告－海外体験記

アメリカ オークリッジ国立研究所での中性子回折実験

A01 公募班 中央大学理工学部応用化学科 岡 研吾

実験場所：アメリカ オークリッジ国立研究所 (Oak Ridge National Laboratory)

実験期間：平成 29 年 11 月 27 日 (月) ～ 11 月 30 日 (木)

国際活動支援の経費を使用させていただき、アメリカのオークリッジ国立研究所にて、A03 公募班の南部先生のグループとの共同研究として、酸フッ化物試料の中性子回折実験を行った。今回の実験では主に磁気構造および結晶構造の温度変化に着目し、High Flux Isotope Reactor (HFIR) の HB-2A ビームラインにて 550 ～ 4K の温度範囲における粉末中性子回折パターンを測定した。

オークリッジ国立研究所に訪問するにあたっては、ノックスビルにあるマックギータイソン空港が最寄りの空港となる。日本からは直行便は出ていないので、アメリカのどこかの空港から乗り換える必要がある。今回の私の旅程では、シカゴから乗り換えるルートを選択した。本研究課題は A03 公募班南部先生のグループとの共同研究であったのだが、この日程では南部先生のご都合がつかないということで、私一人が参加することとなった。さらに私自身も大学の授業があり初日からは参加できず、事前に試料を送り実験条件を伝えて、先方に私の到着に先駆けて実験を行ってもらう形になった。

オークリッジ国立研究所の第一印象は、とにかく広い、ということである。なんと入出構管理ゲートから、研究所内の宿舎まで車で 20 分ほどかかる。宿舎から HFIR までも同程度の時間がかかる。試しに一度だけ徒歩で移動してみたが、HFIR から宿舎に戻るのに一時間半もかかってしまった。軽いハイキングである。オークリッジ国立研究所の HP に『レンタカーを借りることを強く推奨する』と書いてあった理由が体感として理解出来た。では車の免許を持っていない場合などレンタカーを借りられないときは、毎日強制ハイキングになってしまうのか、ということはなく、ちゃんと救済措置がある。研究所内を無料タクシーが走っており、電話で呼び出すことによって車で移動可能である。なお、もしレンタカーも現地ですで使える電話 (通話 SIM カード) を持っていない場合、かな

り移動に不便を強いられる事態になることは申し添えておきたい。

タクシーサービスを利用できるとはいえ、このサービスは 16 時で終わってしまう。つまりは 16 時までには宿舎へ移動するか、気合いで歩くか、それとも実験施設で夜を明かすかを決めなくてはならない。しかし、さすがは合理主義のアメリカ、装置のオペレーションおよびデータの取得は研究所内のネットワークを用いればどこでも可能なように整備されていた。今回の実験は試料を入れ替えはなく温度を変化させるだけなので、現地のビームライン担当者と昼間に打ち合わせをすれば、あとは宿舎に戻っていても問題なかった。

現在、南部先生と得られたデータを元に共に構造解析を行っている。中性子回折のスペシャリストである南部先生との共同研究の機会を得られたことで、悩まされていた結晶構造の一つが解くことができた。固体化学研究において、物性を理解するには結晶構造の決定が肝要である。本国際活動を経て、ようやく私の合成した新物質の全容を解明する光が見えてきた。本新学術領域に参加し、このような共同研究の機会および国際活動の支援をいただけたことに対し心より感謝する。



オークリッジ国立研究所の景色。緯度は日本の東京と近いので、違和感なく過ごしやすい気候だった。

班内留学報告 No.1：前田研－陰山研（新規層状ペロブスカイト酸窒化物の合成）

東京工業大学大学院 理学院 化学系 博士課程 2年 大島 崇義

所属研究室：東京工業大学 理学院化学系 石谷・前田研

受入研究室：京都大学 工学研究科 陰山研究室

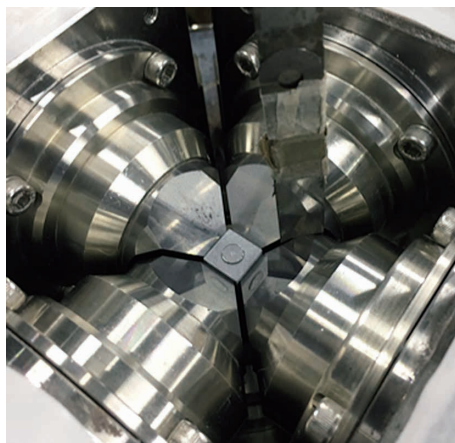
受入期間：2017年5月22～26日

半導体光触媒として金属酸化物が広く研究されていますが、その多く可視光を利用できないという課題を抱えています。一方、酸窒化物半導体は可視光応答型光触媒の代表例として認識されています。当研究室では半導体光触媒の中でも層状ペロブスカイト構造を有する化合物に着目し、イオン交換反応といったの層状化合物のユニークな特性を生かした光触媒の研究を行ってきました。しかし、層状ペロブスカイト型半導体光触媒の多くが酸化物であり、同様の問題を抱えています。そこで可視光応答化を目指し、層状ペロブスカイト型構造を有する酸窒化物の合成を検討してきました。

層状ペロブスカイト型酸窒化物は従来のアンモニア気流下での合成はうまくいかないことが多いため、層状ペロブスカイト酸化物とペロブスカイト酸窒化物を反応させる、少しトリッキーな方法を試みました。この反応は比較的高温を要するため、金属の還元や窒素の脱離が起こりやすい

環境にあります。これらを抑制するために、陰山研究室にご助力いただき高压合成を試しました。超高压を用いた実験のため、試料の調製や装置の取り扱いなど、細心の注意を払って実験する必要性がありましたが、丁寧に指導していただき無事に実験を終了することができました。初めは目的化合物を得ることができませんでしたが、各反応結果や次の反応条件に関して一緒に議論していただきました。当研究室は合成が専門の研究室ではないため、僕にとって議論の内容は非常に新鮮で有意義なものとなりました。このような綿密な議論のおかげで、最終的に新規の層状ペロブスカイト酸窒化物を合成に成功しました。

ご指導いただいた陰山先生や山本先生、実験を丁寧に教えてくれた松本君および陰山研究室の皆様、さらにこのような貴重な機会を与えていただいた新学術プロジェクトに心から感謝申し上げます。



高压合成の実験風景

班内留学報告 No.2 : 本橋研 - 陰山研 ($K_xV_{10}O_{16}$ 単結晶の電気抵抗率測定)

神奈川大学大学院 工学研究科 応用化学専攻 修士課程 2年 千葉 裕介

所属研究室 : 神奈川大学 工学研究科 本橋研究室

受入研究室 : 京都大学 工学研究科 陰山研究室

受入期間 : 2017年 5月 22日 ~ 26日

新学術研究領域の班内留学制度を利用し、2017年 5月 22日から 26日までの 5日間、京都大学陰山研究室を訪問しました。訪問期間中は自身が所属する研究室から持参した、熔融 KVO_3 を様々な印加電圧下で電解することにより育成した $K_xV_{10}O_{16}$ 単結晶 (図 1) の電気抵抗率測定を行いました。測定の結果、約 165K で急激な抵抗率の上昇が観測され、本物質における金属 - 絶縁体 (MI) 転移の存在が示唆されました (図 2)。今後さらなる試料の作りこみと物性測定を行っていく予定です。

陰山研にはこれまでも何度か訪れたことがありました

が、陰山先生のご厚意により今回初めて雑誌会に参加させていただきました。教員・学生問わず積極的な議論がなされ、陰山研の活発な雰囲気を感じることができたのはとても良い経験となりました。

今回評価したのは酸化物結晶でしたが、今後は電解結晶育成法を用いた酸窒化物・酸フッ化物などの複合アニオン化合物の大型結晶の育成を試み、新規化合物・物性の探索を行っていきたいと考えています。

最後に陰山先生、測定に多大なご尽力をいただきました高津先生に深く感謝申し上げます。

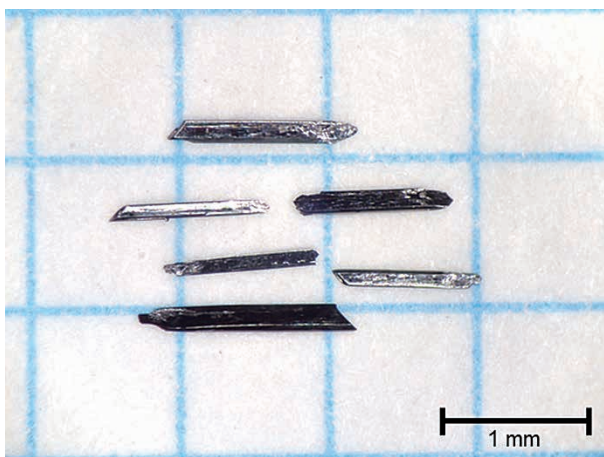


図 1. $K_xV_{10}O_{16}$ 単結晶の顕微鏡写真。

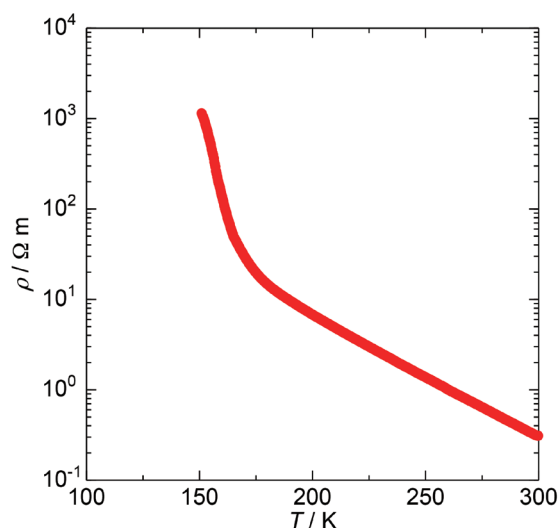


図 2. $K_xV_{10}O_{16}$ 単結晶の抵抗率の温度依存性。

班内留学報告 No.3 : 内本研 – 前田研 (RuO₂/TiO₂:Ta/N 合成法と触媒活性評価方法)

京都大学 人間・環境学研究科 相関環境学専攻 修士課程 1年 川上 望美

指導教官 : 京都大学人間・環境学研究科 内本 喜晴 教授

受入教官 : 東京工業大学理学院化学系 前田 和彦 准教授

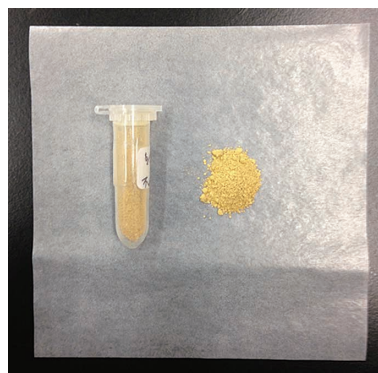
受入期間 : 平成 29 年 6 月 27 日～ 29 日

代表的な半導体光触媒である TiO₂ は主に紫外光下で光触媒特性を示すため、その吸収波長領域の拡大が求められています。有効な手法の一つとして、窒素などのアニオンドープによるバンドギャップの狭窄が知られています。さらに、半導体表面に金属微粒子を担持させることで電子-正孔対の再結合抑制効果についても報告されています。当研究室では、TiO₂ への窒素ドープによって生じる欠陥を抑制するため、電荷補償アニオンとしてフッ素との共ドープを試みています。

そこで、TiO₂ 光触媒合成の合成法や作製した光触媒の窒素処理および活性評価法を学ぶため、東京工業大学の前田研に班内留学させていただきました。前田研では当研究室で所有していない触媒合成ラインや分析装置があり、多くのことを学ぶことができました。まず、水熱合成法ならび

に含浸法による TiO₂ への Ta、窒素ドープや RuO₂ の担持法を学びました。当研究室では、PLD チャンバー内の雰囲気ガスを変えることで TiO₂ 薄膜にアニオンドープを行っていたため、液相での合成法は初めてでしたが、新しい合成技術を習得する良い機会となりました。また、触媒評価方法について不明なことが多かったのですが、評価法を実際に体験することができたのは大きな収穫でした。

3 日間の班内留学を通じ、共同研究に関する有意義な議論を進めることができました。この経験を生かし、より深く研究を進めていくことができるよう精進していく所存です。お忙しい中、触媒合成法および評価法をご教授頂きました西岡様、田中様、三好様、そして前田先生に心より御礼申し上げます。



合成した RuO₂/TiO₂:N

班内留学報告 No.4 : 八島研 – 田部研 (新蛍光体の蛍光特性評価)

東京工業大学 理学院 化学系 助教 藤井 孝太郎

所属研究室 : 東京工業大学 理学院 化学系 八島研

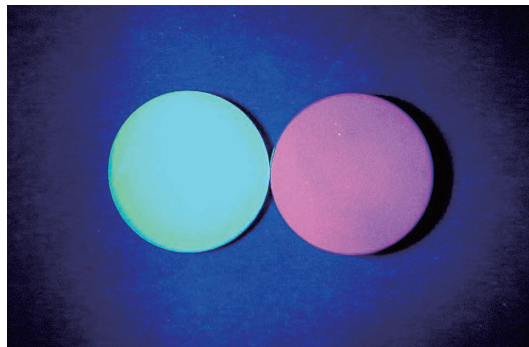
受入研究室 : 京都大学人間・環境学研究科 田部勢津久 教授、上田純平 助教

受入期間 : 平成 29 年 7 月 18 日 (火) ~ 7 月 19 日 (水)

10 年ほど前にセラミックス材料の蛍光体について未知構造解析の依頼を受けたことがある。そこで光り輝く蛍光体を見たときから蛍光体の研究に憧れがあった。最近、八島研では主に新しいイオン伝導体の開拓を目指し、新しい構造型の材料探索を進めている。得られた新構造材料は、当然新しい材料であることから、イオン伝導以外の特性を示す可能性もあるのではないかと常々考えていたが、なかなか実際に調べるに至らなかった。そんな折、この新学術領域研究が始まり、田部先生・上田先生にお願いして、我々が見つけた新構造材料をベースとした蛍光体の探索という共同研究を始めることができた。

田部先生と上田先生の適切なお助言のお陰で、蛍光母体として適切な組成への最適化と賦活元素のドーピングを効率良く進めることができ、狙い通り可視域で光る蛍光体をつくることに成功した(下図)。平成 29 年 7 月の訪問では、私と 2 人の学生で伺い、いよいよ作製した新構造型の蛍光

体について蛍光特性の評価を実施した。蛍光特性の評価は初めてであったため、上田先生や学生の北川さんの丁寧な説明を受け、持っていたサンプル(20 試料ぐらい)について励起・発光スペクトルの測定を行った。測定に慣れていないことと、サンプル数が多かったことがあり、測定は遅い時間までかかってしまったが、評価したいことは一通り調べることができた。実は今回作製した新構造型の蛍光体は、私が見たことがある蛍光体に比べて発光強度が弱く、価値が低い結果なのではないかと少し自信がなかった。しかし、上田先生に「しっかり光っているので充分価値がある」と言ってもらったことが、とても嬉しく、これからも頑張ろうという気持ちにさせて下さいました。人も光らせることも上手いところが、さすがプロだと感じました。田部先生、上田先生、浅見さん、北川さん、研究上のご助言や訪問時の対応では大変お世話になりました。ありがとうございます。



我々が作製した蛍光体が発光している様子

班内留学報告 No.5 : 八島研 - 石原研 (イオン伝導体の酸素透過率測定)

東京工業大学 理学院 化学系 博士課程 2年 白岩 大裕

所属研究室 : 東京工業大学 理学院 化学系 八島研

受入研究室 : 九州大学 石原達己 教授、酒井孝明 助教

受入期間 : 2017年7月18日~2017年7月20日

八島研究室では新構造型酸化物イオン伝導体の開拓を目指し、結晶構造の情報から結合原子価法を用いた材料探索を進めている。本研究室では、酸化物イオン伝導体の導電率測定を実施してきたが、酸化物イオン-電子混合伝導体における酸化物イオン伝導度を測定することは難しい。そこで、酸素透過率測定法を学ぶために、九州大学の石原達己研究室へ班間留学させていただいた。自分を含む学生2名と助教1名で訪問させていただき、石原教授と酒井孝明助教の丁寧なご指導の下、酸素透過率を測定した。酸素透過率測定においては、2室装置の片側から酸素、もう片方からカウンターガスを流し、カウンターガスの流量と装置下流に設置したガスクロマトメータからガス種とその量を調べ、サンプルからの透過率を見積もる。サンプルの厚さを変化させて酸素透過率を測定することで酸素拡散定数を算出することも可能である。教えていただいたノウハウを元に、八島研究室でも酸素透過率測定が出来るように現在、

環境を整えているところである。

また酸素ポンプによる酸素分圧制御についても教えていただいた。八島研では、 O_2/N_2 や H_2/H_2O など混合ガスを用いて酸素分圧を制御している。この方法では、制御しにくい 10^{-10} atm から 10^5 atm の範囲で酸素分圧を精度良く制御する方法をご教授いただいた。

八島研究室には無い設備も見学することができ、貴重な経験をさせていただきました。石原教授、酒井助教及び滞在中にご同行いただきました M2 の小堺さん、丁寧に教えていただきまして、誠にありがとうございました。今回の留学では、そのほかに電池材料開発で有名な林克郎研究室やプロトン伝導体の研究で有名な松本広重研究室も見学させていただきました。この場をお借りして、厚く御礼申し上げます。



酸素透過率測定装置



実験中の様子

アウトリーチ活動報告

2017.6.23	日本化学会低次元系光機能材料研究会 第 6 回研究講演会
一般向け研究講演会（日本化学会低次元系光機能材料研究会 第 6 回研究講演会）にて、由井樹人が、「層状化合物をテンプレートとする金属ナノ粒子の合成」という演題の応援を行った（参加者約 80 名）。	
2017.6.23	UTRIP lecture “Introduction to Science Frontiers”
短期留学プログラム（UTRIP）で滞在中の海外大学生（20 名）に向けて廣瀬靖氏（連携、A03）が研究内容の紹介を行いました。	
2017.7.4	第 34 回先端光量子科学アライアンスセミナー
田部 勢津久（計画研究分担者 A03）が第 34 回先端光量子科学アライアンスセミナーにおいて「ガーネット蓄光型蛍光体の電子構造と光機能設計」について講演しました。	
2017.7.6	化学工学会開発型企業連携研究会
大阪市立大学にて吉田朋子氏（計画研究分担者 A02）が化学工学会開発型企業連携研究会見学会として、産官学研究者（24 名参加）を対象とする人工光合成研究センター及びラボツアーを行ないました。	
2017.7.11	出張講義
A01 班 殷しゅうが中国北京科技大学で、「光応答機能材料の創製」についての講義を実施した（参加者は中国北京科技大学及び中国科学院材料関連研究者・大学院生 50 名）。	
2017.7.11	福岡県立福岡高等学校での講義
福岡県立福岡高等学校 2 年生 55 名に対して「大学研究セミナー I」として「工学部の仕事って？～セラミックスを化学する～」という題目で講義を行いました。	
2017.7.11	第 19 回 JFCC 計算材料セミナー
桑原彰秀（A01）がファインセラミックスセンターにて第 19 回 JFCC 計算材料セミナーを開催した。セミナーではフォノン解析コードである phonopy の開発者である京都大学 東後准教授による講演と参加者からの質疑応答が行われた。（参加者は企業 24 名、大学・研究機関 9 名）。	
2017.7.13	機能性酸窒化物に関する講演会
昭和電工株式会社本社会議室において、鱒淵友治氏（計画研究分担者 A01）が、「ペロブスカイト型酸窒化物の結晶構造と誘電特性」と題して講演した。技術系職員 20 名が参加。	
2017.7.13	デルフト工科大学学生団見学会
中高生を中心に 10 名程度のグループに分け、長谷川哲也氏（分担者、A03）の研究室をラボツアー。共同実施者：近松彰（東京大学・助教）。計約 150 名が参加。（A03 連携）。	
2017.7.17-26	Japan-Asia Youth Exchange Program in Science 2017 “Simulation Science on Nano-Technology using Super Computers”
JST 平成 29 年度日本・アジア青少年サイエンス交流事業（さくらサイエンスプラン）の支援を受け、訪日経験のないアジア地域の大学生を対象に、「スパコンを用いたナノテクシミュレーション科学」のチュートリアルを実施した。参加者 6 名に加えて、領域内研究グループ（東工大）から大学院生 1 名が参加した。実施者は、前園涼（代表者・JAIST・准教授；A02 公募）、本郷研太（協力者・JAIST・助教；A01 計画）である。	

2017.7.19	東大寺学園中学 3 年生と模擬実験
東大寺学園中学 3 年生 5 名が、京大陰山研究室を訪問。陰山教授とのディスカッション及び、研究室見学、超伝導実験等を行ないました。	
2017.7.22	産総研一般公開 見学ツアー
産総研荻野拓（研究代表、A01 荻野）・竹下直（研究メンバー、A01 荻野）が、産総研一般公開内の見学ツアーとして、“圧寒の実験室”と題して、超伝導材料の紹介や、高圧力の体験学習などを行った（大人・小学生・中学生等 30 名参加）。	
2017.7.25	つくば市立春日学園義務教育学校夏休み職場見学
産総研伊豫彰（研究メンバー、A01 荻野）「超伝導と新物質探索」と題した講演と実験室見学ツアー、並びに簡単な圧力と低温の実験を行いました。講演では、新しい超伝導物質の合成について実際の手順を説明しました。実験では、液体窒素を使った超伝導体浮上を体験し、興味を示していました。（中学生 2 名参加）	
2017.7.25	産総研ミニ出前講座
産総研鬼頭聖（研究メンバー、A01 荻野）が、産総研つくばセンターにて、伊奈学園総合高等学校サイエンスプロジェクトの一環として、“機能性材料の開発を目指して”という題目で超伝導体の応用、現状に加えて複合アニオン APX 系化合物の材料開発紹介のミニ出前講座を行いました。（高校生 38 名参加）	
2017.7.27-28	KID'S のための SUPER SCIENCE
KID'S のための SUPER SCIENCE にて山本隆文氏（A02）と学生四名（A01 陰山グループ）が、出雲科学館にて超伝導の模擬実験を二日間にわたり行いました（中学生約 500 名参加）。	
2017.7.28	企業への出張講演
陰山教授が京セラ（鹿児島）で講演会。講演タイトルは「複合アニオン結晶の可能性」（50 名参加）	
2017.7.28	島根県立出雲高等学校での講演
山本隆文氏（A02）と学生四名（A01 陰山グループ）が、島根県立出雲高等学校の三年生（180 名）を対象に講演を行ないました。	
2017.7.28	神奈川大学子どもサマースクール 2017
神奈川大学子どもサマースクールにて、本橋輝樹氏（公募研究、A01）が「魔法の石ころで遊ぼう」と題し、身の回りで活躍する複合アニオン材料の体験実習を行いました（小学生 30 名、親 15 名参加）。	
2017.8.3	2017 年度東京大学理学部オープンキャンパス・研究室展示
中高生を中心に 10 名程度のグループに分け、長谷川哲也氏（分担者、A03）の研究室をラボツアー。共同実施者：近松彰（東京大学・助教）。計約 150 名が参加。（A03 連携）	
2017.8.3-4	夢・化学-21「北海道大学化学系への二日体験入学」
鱒淵友治氏（計画研究分担者、A01）が、北海道の高校生を対象としたセラミックス合成の模擬講義および体験実習を行います（高校生 2 名、修士学生 3 名、教員 1 名参加）	
2017.8.4	茨城県立土浦第一高等学校・東京大学研究室訪問
茨城県立土浦第一高等学校の学生（15 名）が、OB の所属する研究室として長谷川哲也氏（分担者、A03）の研究室を訪問、見学。共同実施者：近松彰（東京大学・助教）（A03 連携）。	

■ 領域ニュース

2017.8.6 九州大学オープンキャンパス

九州大学オープンキャンパス 2017 にて、林克郎氏（計画研究代表 A02）が、高校生を対象（約 80 名）に様々なセラミックス物質の紹介を行いました。

2017.8.9-10 新潟大学オープンキャンパス 2017

新潟大学オープンキャンパスにて、由井樹人（公募 A03 班）が、機能材料専攻の紹介という題目の体験実習を運営しました（のべ参加者約 300 人）。

2017.8.10 JSPS ひらめき☆ときめきサイエンス

信州大学にて是津信行（公募研究代表者、A01）が、“水をキレイにする化学”という題目で、体験実習を行いました（小中高校生あわせて、48 名参加）。

2017.8.10 東京工業大学オープンキャンパス 2017

東京工業大学オープンキャンパス 2017 にて前田和彦氏（計画研究代表者、A03）が、“大学の化学実験を体験！光触媒で水を分解して水素を作る！”という題目の模擬講義および体験実習を行いました（高校生 19 名、保護者 1 名参加）。

2017.8.17-18 広島大学オープンキャンパス 2017

広島大学オープンキャンパス 2017 にて片桐清文氏（A01）が所属する研究グループが、演示実験を行いました（高校生等 260 名参加）。

2017.8.18 高校教員研修受け入れ

A01 班 殷しゅうが人財育成プログラム「みやぎグラフとマン 21」の一環として、学校での学習内容と社会との関連性についての理解を深めるため、大学での高校教員の研修受け入れ、アニオンドープ酸化チタン光触媒の合成とその応用について実施を行った。（参加者は宮城県石巻工業高等学校化学技術室教諭他 2 名）。

2017.8.21 平成 29 年度 学習院一貫教育 理科研究体験

稲熊宜之（A01）が学習院男子中等科の学生を対象に“蛍光体をつくってみよう”と題して研究体験を実施しました（中学生 3 名参加）。

2017.8.25 高校生一日体験化学教室

化学会主催のイベントで、長谷川哲也氏（分担者、A03）の研究室にて太陽電池を作製する実験を実施。共同実施者：近松彰（東京大学・助教）、中尾祥一郎（東京大学・特任研究員）（A03 連携）。

2017.9.14 出張講義

A01 班 殷しゅうが長岡科技大学極限エネルギー密度工学研究センター講演会にて、「ソルボサーマル反応場による環境応答機能材料の創製」の演題による講演会を行った。（参加者は長岡科技大学極限エネルギー密度工学研究センター留学生約 40 名）。

2017.10.2 島根県立出雲高等学校での講演

陰山洋氏（領域代表、A01）が、「物質の中の宇宙：サイエンスの魅力」というタイトルで、島根県立出雲高等学校の一年生を対象に講演を行ないました。

2017.10.3 島根県立出雲高等学校 1 年生と模擬実験

陰山洋氏（領域代表、A01）、山本隆文氏（A02）と学生（A01 陰山グループ）が、島根県立出雲高等学校の一年生を対象に研究体験による研修として、超伝導実験等を行ないました。

2017.10.7-8 東北大学片平まつりに出展

A01 班 殷しゅう・垣花真人が東北大学片平まつりにて「光のふしぎ」について出展を行うと共に、複合アニオンにより光機能性創出についてポスター展示も行い、新学術領域の研究成果の一部を宣伝した。(参加者は宮城県小中学生及び一般参加者延び 5000 人来場)。

2017.10.12 CO₂ 有効利用技術と人工光合成の研究開発動向

一般企業向け講演会(於 連合会館)に赴き、「半導体、錯体、ナノ粒子で創る二酸化炭素還元光触媒システム」と題する講演会を行った。企業研究者から大きな注目を集めた。

2017.10.14-15 出雲高校生と研究実習

陰山洋教授(A01)、山本隆文助教(A02)と学生四名(A01 陰山グループ)が田部勢津久教授(A03)の協力のもと、島根県立出雲高等学校の一年生と二年生(4名)とともに新規蛍光体の開発を行いました。高校生は実際に、高圧合成など最先端の手法を使って新規物質の合成を試み、X線回折測定による分析を行いました。

2017.10.19 産総研出前講座

産総研鬼頭聖(研究メンバー、A01 荻野)が、青森県立弘前中央高等学校にて、研究者の立場による“機能性材料の開発を目指して”という題目で超伝導体の応用、磁気浮上実験デモ等に加え、複合アニオン化合物超伝導体 APX 系の物質開発についての出前講座を行った。(高校生約 40 名参加)

2017.10.21 東京都理化教育研究会

稲熊宜之氏(A01)が、中学・高校教員を対象に“物質科学と照明”と題して講演を行ったあと、研究室のメンバーのサポートのもと、無機蛍光体の合成の実験実習を行いました(中学・高校教員 11 名が参加)。

2017.10.21 九州大学保護者向けオープンキャンパス

「在学生保護者のためのオープンキャンパス 2017」にて、林克郎氏(計画研究代表 A02)が、在学生の保護者を対象に各コースの説明及び研究室の紹介を行いました。(全体約 70 名、機能コース約 20 名)

2017.10.25 第 1 回 Tokyo Tech Research Festival

前田和彦氏(計画研究代表者、A03)が、東京工業大学で開催された第 1 回 Tokyo Tech Research Festival に参加し、“エネルギー変換型光触媒”という題目の展示およびポスター発表を行いました(企業関係者 170 名参加)。

2017.10.28 学習院大学オープンキャンパス 2017

大学オープンキャンパス 2017 にて稲熊宜之氏(A01)が研究室見学を実施しました(高校生および保護者約 40 名参加)。

2017.10.31 アカデミックオープンカフェ

大阪市立大学にて吉田朋子氏(計画研究分担者 A02)が一般公開型(43 名参加)のオープンカフェ研究発表を行いました。

2017.11.16 企業での講演会

八島正知、藤井孝太郎、丹羽栄貴「イオン伝導体、排ガス浄化触媒、強誘電体の構造物性およびジルコニアセラミックスの状態図と相変態」という題目で講演を行った。

■ 領域ニュース

2017.11.17 膳所高校スーパーサイエンスハイスクール講義

田部 勢津久（計画研究分担者 A03）が膳所高校スーパーサイエンスハイスクール講義において「グリーンフォトニクスのための無機光機能性材料」について高校生向けに講演（参加者 25 名）。

2017.11.18 埼玉県立浦和第一女子高等学校でのスーパーサイエンスハイスクール（SSH）特別実習

前田和彦氏（計画研究代表者、A03）が、埼玉県立浦和第一女子高等学校の高校生を対象としたスーパーサイエンスハイスクール（SSH）特別実習を実施し、“光で促進する水の電気分解～光触媒で水を分解してみよう！～”という題目の模擬講義および体験実習を行いました（高校生 12 名、教員 2 名参加）。

2017.11.21 「時代を刷新する会」講演会

前田和彦氏（計画研究代表者、A03）が、衆議院第一議員会館で開催された政策シンクタンク「時代を刷新する会」の月例検討会にて、“人工光合成による二酸化炭素の有用化学物質変換”という題目の講演を行いました（技術者、学者等約 10 名参加）。

2017.11.30 技術交流会

桑原彰秀（A02）と設楽一希（A02）がファインセラミックスセンターと日本特殊陶業の技術交流会に参加し、同社にて第一原理計算を用いた複合アニオン化合物における局所構造解析に関する口頭発表とポスターによる解説を行った（参加者 50 名程度）。

2017.12.16 出張講義

A01 班 殷しゅが中国北京科技大学材料科学院に於いて、グリーンケミカルプロセスによる環境応答ナノ機能材料創製について、出張講義を行った。（大学院生、学部生、教員計 40 人出席）。

2017.12.19 出張講義

A01 班 殷しゅが中国華僑大学材料科学院に於いて、ソルボサーマルプロセスによる環境機能材料創製について、出張講義を行った。（大学院生、教員計 50 人出席）。

2017.12.22 出張講義

A01 班 殷しゅが中国武漢理工大学資源環境科学学院に於いて、ソフトケミカルプロセスによる光触媒ナノ機能材料創製について、出張講義を行った。（大学院生、学部生、教員計 30 人出席）。

2017.12.25 2017 年度兵庫県立豊岡高等学校「東大研修」

兵庫県立豊岡高等学校の学生（8 名）が、長谷川哲也氏（分担者、A03）の研究室を訪問、見学。共同実施者：近松彰（東京大学・助教）（A03 連携）。

2017.12.27 高校生のための冬休み講座 2017

理学に興味のある中学生、高校生（約 150 名）を対象として廣瀬靖氏（連携、A03）が研究内容の紹介を行いました。

発表論文リスト (2016.6 ~ 2017.12)

1. Kato, D.; Hongo, K.; Maezono, R.; Higashi, M.; Kunioku, H.; Yabuuchi, M.; Suzuki, H.; Okajima, H.; Zhong, C.; Nakano, K.; et al. Valence Band Engineering of Layered Bismuth Oxyhalides toward Stable Visible-Light Water Splitting: Madelung Site Potential Analysis., *J. Am. Chem. Soc.*, **2017**, *139* (51), 18725–18731 DOI: 10.1021/jacs.7b11497.
2. Hosono, A.; Masubuchi, Y.; Endo, T.; Kikkawa S., Molten BaCN₂ for the sintering and crystal growth of dielectric oxynitride perovskite Sr_{1-x}Ba_xTaO₂N (x = 0.04 ~ 0.23), *Dalton Trans.*, **2017**, *46*, 16837-16844 DOI: 10.1039/C7DT03765A
3. Wu, X.; Li, M.; Li, J.; Zhang, G.; Yin S., A Sillenite-type Bi₁₂MnO₂₀ Photocatalyst: UV, Visible and Infrared Lights Responsive Pphotocatalytic Properties Induced by the Hybridization of Mn 3d and O 2p Orbitals, *Appl. Catal. B: Environ.*, **2017**, *219*, 132-141 DOI: 10.1016/j.apcatb.2017.07.025
4. Kagomiya, I.; Hirota, Y.; Kakimoto, K.; Fujii, K.; Shiraiwa, M.; Fuwa, A.; Nakamura S., Weak fromagnetic ordering in brownmillerite Ca₂Fe₂O₅ and its effect on electric field gradients, *Phys. Chem. Chem. Phys.*, **2017**, *19*, 31194-31201 DOI: 10.1039/C7CP04520D
5. Kaniwa, S.; Yoshino, M.; Niwa, E.; Yashima, M.; Hashimoto, T., Analysis of chemical reaction between Li₄SiO₄ and CO₂ by thermogravimetry under various CO₂ partial pressures—Clarification of CO₂ partial pressure and temperature region of CO₂ absorption or desorption, *Mater. Res. Bull.*, **2017**, *94*, 134-139 DOI: 10.1016/j.materresbull.2017.05.054
6. Fujii, K.; Shimada, K.; Yashima, M., Crystal-structure and electron-density analyses of the perovskite-type oxynitrides BaNbO₂N and SrNbO₂N through synchrotron X-ray powder diffraction, *J. Ceram. Soc. Jpn.*, **2017**, *125*, 808-810 DOI: 10.2109/jcersj2.17177
7. Shiraiwa, M.; Fujii, K.; Esaki, Y.; Kim, S. J.; Lee, S.; Yashima, M.; Crystal Structure and Oxide-Ion Conductivity of Ba_{1-x}Nd_{1-x}InO_{4-x/2}, *J. Electrochem. Soc.*, **2017**, *164*, F1392-F1399 DOI: 10.1149/2.0411713jes.
8. Ochi, M. ; Usui, H.; Kuroki, K., Prediction of the High Thermoelectric Performance of Pnictogen Dichalcogenide Layered Compounds with Quasi-One-Dimensional Gapped Dirac-like Band Dispersion, *Phys. Rev. Appl.*, **2017**, *8*, 064020-(1-12) DOI: 10.1103/PhysRevApplied.8.064020
9. Ogura, D.; Aoki, H.; Kuroki, K., Possible high-Tc superconductivity due to incipient narrow bands originating from hidden ladders in Ruddlesden-Popper compounds, *Phys. Rev. B*, **2017**, 184513-(1-8) DOI: 10.1103/PhysRevB.96.184513
10. Mizuno, R.; Ochi, M.; Kuroki, K., DMFT Study on the Electron-hole Asymmetry of the Electron Correlation Strength in the High Tc Cuprates, *J. Phys. Soc. Jpn*, **2017**, *86*, 119, 26002-(1-5) DOI: 10.7566/JPSJ.86.114706
11. Mizuguchi, Y.; Hijikata, Y.; Abe, T.; Moriyoshi, C.; Kuroiwa, Y.; Goto, Y.; Miura, A.; Lee, S.; Torii, S.; Kamiyama, T.; Lee, C. H.; Ochi, M.; Kuroki, K., Crystal structure, site selectivity, and electronic structure of layered chalcogenide LaOBiPbS₃, *EPL*, **2017**, *119*, 26002-(1-5) DOI: 10.1209/0295-5075/119/26002
12. Vequizo, J. J. M.; Kamimura, S.; Ohno, T; Yamakata, A., Oxygen Induced Enhancement of NIR Emission in Brookite TiO₂ Powders: Comparison with Rutile and Anatase TiO₂ Powders, *Phys. Chem. Chem. Phys.*, **2017**, in press DOI: 10.1039/C7CP06975H

13. Hojamberdiev, M.; Kawashima, K.; Kumar, M.; Yamakata, A.; Yubuta, K.; Gurlo, A.; Hasegawa, M.; Domen, K.; Teshima, K., Engaging the Flux-Grown $\text{La}_{1-x}\text{Sr}_x\text{Fe}_{1-y}\text{Ti}_y\text{O}_3$ Crystals in Visible-Light-Driven Photocatalytic Hydrogen Generation, *Int. J. Hydrogen Energy*, **2017**, in press DOI: 10.1016/j.ijhydene.2017.09.036
14. Ranasinghe, C. S. K.; Vequizo, J. J. M.; Yamakata, A., Fabrication of Robust TiO_2 Thin Films by Atomized Spray Pyrolysis Deposition for Photoelectrochemical Water Oxidation, *J. Photochem. and Photobiol. A: Chemistry*, **2017**, in press DOI: 10.1016/j.jphotochem.2017.09.006
15. Vequizo, J. J. M.; Hojamberdiev, M.; Teshima, K.; Yamakata, A., Role of CoO_x Cocatalyst on Ta_3N_5 Photocatalysts Studied by Transient Visible to Mid-Infrared Absorption Spectroscopy, *J. Photochem. and Photobiol. A: Chemistry*, **2017**, in press DOI: 10.1016/j.jphotochem.2017.09.005
16. Yamakata, A; Osawa, M., Cation-dependent restructure of the electric double layer on CO-covered Pt electrodes: Difference between hydrophilic and hydrophobic cations, *J. Electroanal. Chem.*, **2017**, *800*, 19-24 DOI: 10.1016/j.jelechem.2016.12.034
17. Ishimaki K.; Uchiyama T.; Okazaki M.; Lu, D.; Uchimoto, Y.; Maeda, K., Influence of TiO_2 Support on Activity of $\text{Co}_3\text{O}_4/\text{TiO}_2$ Photocatalysts for Visible-Light Water Oxidation, *Bull. Chem. Soc. Jpn.*, **2017**, available online DOI: 10.1246/bcsj.20170373
18. Motaneeyachart, V.; Hirose, Y.; Suzuki, A.; Nakao, .; Harayama, I.; Sekiba, D; Hasegawa, T., Epitaxial Growth of Baddeleyite NbON Thin Films on Ytria-stabilized Zirconia by Pulsed Laser Deposition, *Chem. Lett.*, **2017**, *47*, 65-67 DOI: 10.1246/cl.170914
19. Kobayashi, K.; Khan, A. U.; Mori, T., Electronic structures of Si- and Te-doped CoSb_3 compounds under high pressures, *Jpn. J. Appl. Phys.*, **2017**, *56*, 05FB07 1-7 DOI: 10.7567/JJAP.56.05FB07
20. Maeda, K., CO_2 reduction using oxynitrides and nitrides under visible light. *Progress in Solid State Chemistry*, **2017**, *46*, 16959-16966 DOI: 10.1016/j.progsolidstchem.2017.11.003.
21. Okazaki, M.; Eguchi, M.; Uchiyama, T.; Lu, D.; Kato, H.; Uchimoto, Y.; Kakihana, M.; Maeda, K. Effects of SrTiO_3 support on visible-light water oxidation with Co_3O_4 nanoparticles., *Dalton Trans.*, **2017** DOI: 10.1039/C7DT03444J
22. Hongo, K.; Maezono, R. A Computational Scheme To Evaluate Hamaker Constants of Molecules with Practical Size and Anisotropy. *J. Chem. Theory and Comput.*, **2017**, *13* (11), 5217–5230 DOI: 10.1021/acs.jctc.6b01159.
23. Takeiri, F.; Aidzu, K.; Yajima, T.; Matsui, T.; Yamamoto, T.; Kobayashi, Y.; Hester, J.; Kageyama, H. Promoted Hydride/Oxide Exchange in SrTiO_3 by Introduction of Anion Vacancy via Aliovalent Cation Substitution., *Inorg. Chem.*, **2017**, *56* (21), 13035–13040 DOI: 10.1021/acs.inorgchem.7b01845.
24. Eguchi, M.; Momotake, M.; Inoue, F.; Oshima, T.; Maeda, K.; Higuchi, M. Inert Layered Silicate Improves the Electrochemical Responses of a Metal Complex Polymer., *ACS Appl. Mater. & Interfaces*, **2017**, *9* (40), 35498–35503 DOI: 10.1021/acsami.7b13311.
25. Fujimoto, A.; Yashima, M.; Fujii, K.; Hester, J. R., New Oxide-Ion Conductor SrYbInO_4 with Partially Cation-Disordered CaFe_2O_4 -Type Structure., *J. Phys. Chem. C*, **2017**, *121* (39), 21272–21280 DOI: 10.1021/acs.jpcc.7b07911.

26. Akune, T.; Morita, Y.; Shirakawa, S.; Katagiri, K.; Inumaru, K., ZrO₂ Nanocrystals as Catalyst for Synthesis of Dimethylcarbonate from Methanol and Carbon Dioxide: Catalytic Activity and Elucidation of Active Sites., *Langmuir*, **2017**, DOI: 10.1021/acs.langmuir.7b01294.
27. Ueda, J.; Maki, R.; Tanabe, S. Vacuum Referred Binding Energy (VRBE)-Guided Design of Orange Persistent Ca₃Si₂O₇:Eu²⁺ Phosphors., *Inorg. Chem.*, **2017**, *56* (17), 10353–10360 DOI: 10.1021/acs.inorgchem.7b01214.
28. Lu, H.; Hayashi, N.; Matsumoto, Y.; Takatsu, H.; Kageyama, H. Mixed-Spin Diamond Chain Cu₂FePO₄F₄(H₂O)₄ with a Noncollinear Spin Order and Possible Successive Phase Transitions., *Inorg. Chem.*, **2017**, *56* (15), 9353–9360 DOI: 10.1021/acs.inorgchem.7b01533.
29. Katagiri, K.; Narahara, M.; Sako, K.; Inumaru, K. SiO₂ shell formation mechanism and enlargement on hydrophobized nanoparticles via a reverse microemulsion process. *Journal of Sol-Gel Science and Technology* **2017** DOI: 10.1007/s10971-017-4479-8.
30. Kato, D.; Herve, C.; Yamamoto, T.; Kunioku, H.; Higashi, M.; Abe, R.; Kageyama, H. Valence Band Engineering by a Layer Insertion to Sillén–Aurivillius Perovskite Oxyhalides. *Chem. Lett.*, **2017**, *46* (8), 1083–1085 DOI: 10.1246/cl.170301.
31. Wada, K.; Ranasinghe, C. S. K.; Kuriki, R.; Yamakata, A.; Ishitani, O.; Maeda, K., Interfacial Manipulation by Rutile TiO₂ Nanoparticles to Boost CO₂ Reduction into CO on a Metal-Complex/Semiconductor Hybrid Photocatalyst., *ACS Appl. Mater. & Interfaces*, **2017**, *9* (28), 23869–23877 DOI: 10.1021/acsami.7b07484.
32. Virtudazo, R. V. R.; Guo, Q.; Wu, R.; Takei, T.; Mori, T. An alternative, faster and simpler method for the formation of hierarchically porous ZnO particles and their thermoelectric performance. *RSC Adv.* **2017**, *7* (51), 31960–31968 DOI: 10.1039/C7RA05067D.
33. 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⁺. *Chem. Lett.* **2017**, *46* (6), 795–797 DOI: 10.1246/cl.170144.
34. Xu, J.; Ueda, J.; Tanabe, S. Toward tunable and bright deep-red persistent luminescence of Cr³⁺ in garnets., *J. Am. Ceram. Soc.*, **2017**, *100*, 4033-4044 DOI: 10.1111/jace.14942
35. Zhao, Z.; Fan, J.; Chang, H.; Asakura, Y.; Yin, S. Recent progress on mixed-anion type visible-light induced photocatalysts. *Science China Technological Sciences*, **2017**, *60*, 1447-1457 DOI: 10.1007/s11431-016-9022-9.
36. Electronic structures of Si- and Te-doped CoSb₃ compounds under high pressures. *Jpn. J. Appl. Phys.* **2017**, *56* (5S3), 05FB07 DOI: 10.7567/JJAP.56.05FB07.
37. 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.
38. Khan, A. U.; Orabi, R. A. R. A.; Pakdel, A.; Vaney, J.-B.; Fontaine, B.; Gautier, R.; Halet, J.-F.; Mitani, S.; Mori, T. Sb Doping of Metallic CuCr₂S₄ as a Route to Highly Improved Thermoelectric Properties., *Chem. Mater.*, **2017**, *29* (7), 2988–2996 DOI: 10.1021/acs.chemmater.6b05344.

39. 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**, *8*, 4242–4249 DOI: 10.1039/C7SC00940B.
40. 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. *Chem. Lett.*, **2017**, *46* (4), 583–586 DOI: 10.1246/cl.170077
41. Yang, L.; Liu, B.; Liu, T.; Ma, X.; Li, H.; Yin, S.; Sato, T.; Wang, Y. A., P25/(NH₄)_xWO₃ hybrid photocatalyst with broad spectrum photocatalytic properties under UV, visible, and near-infrared irradiation. *Scientific Reports* **2017**, *8*, 45715 DOI: 10.1038/srep45715.
42. 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**, *30*, 065004 DOI: 10.1088/1361-6668/aa6850.
43. 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) 014517 DOI: 10.1103/PhysRevB.95.014517.
44. 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) 014303 DOI: 10.1103/PhysRevB.95.014303.
45. 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.
46. 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.
47. 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.
48. 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.
49. 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.
50. 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.

51. Takase, K.; Nishizawa, H.; Onda, A.; Yanagisawa, K.; Yin, S., Synthesis and characterization of glycolate precursors to MTiO_3 ($M = \text{Ni}^{2+}, \text{Co}^{2+}, \text{Zn}^{2+}$). *Journal of Asian Ceramic Societies* **2017**, *5* (4), 482–488 DOI: 10.1016/j.jascer.2017.10.007.
52. Yamamoto, T.; Zeng, D.; Kawakami, T.; Arcisauskaitė, V.; Yata, K.; Patino, M. A.; Izumo, N.; McGrady, J. E.; Kageyama, H.; Hayward, M. A., The role of π -blocking hydride ligands in a pressure-induced insulator-to-metal phase transition in SrVO_2H_x , *Nature Communications*, **2017**, *8* (1) DOI: 10.1038/s41467-017-01301-0.
53. Ichiba, T.; Hou, Z.; Hongo, K.; Maezono, R. New Insight into the Ground State of FePc: A Diffusion Monte Carlo Study., *Sci. Rep.*, **2017**, *7* (1) DOI: 10.1038/s41598-017-01668-6.
54. Zhao, Z.; Lei, Y.; Liu, W.; Fan, J.; Xue, D.; Xue, Y.; Yin, S., Fly ash cenospheres as multifunctional supports of $\text{g-C}_3\text{N}_4/\text{N-TiO}_2$ with enhanced visible-light photocatalytic activity and adsorption., *Adv. Powder Technology*, **2017**, *28* (12), 3233–3240 DOI: 10.1016/j.appt.2017.09.035.
55. Takeiri, F.; Yajima, T.; Yamamoto, T.; Kobayashi, Y.; Matsui, T.; Hester, J.; Kageyama, H. Suppression of H^+/O^{2-} exchange by incorporated nitride anions in the perovskite lattice., *J. Solid State Chem.*, **2017**, *256*, 33–37 DOI: 10.1016/j.jssc.2017.08.025.
56. Sekimoto, Y.; Ohtani, R.; Nakamura, M.; Koinuma, M.; Lindoy, L. F.; Hayami, S. Tuneable pressure effects in graphene oxide layers., *Sci. Rep.*, **2017**, *7* (1) DOI: 10.1038/s41598-017-12444-x.
57. Wu, X.; Li, M.; Li, J.; Zhang, G.; Yin, S. A sillenite-type $\text{Bi}_{12}\text{MnO}_{20}$ photocatalyst: UV, visible and infrared lights responsive photocatalytic properties induced by the hybridization of Mn 3d and O 2p orbitals., *Applied Catalysis B: Environmental*, **2017**, *219*, 132–141 DOI: 10.1016/j.apcatb.2017.07.025.
58. Shi, A.; Li, H.; Yin, S.; Liu, B.; Zhang, J.; Wang, Y., Effect of conjugation degree and delocalized π -system on the photocatalytic activity of single layer $\text{g-C}_3\text{N}_4$., *Appl. Catalysis B: Environmental* **2017**, *218*, 137–146 DOI: 10.1016/j.apcatb.2017.06.017.
59. Ueda, J.; Hashimoto, A.; Takemura, S.; Ogasawara, K.; Dorenbos, P.; Tanabe, S. Vacuum referred binding energy of 3d transition metal ions for persistent and photostimulated luminescence phosphors of cerium-doped garnets., *J. Lumin.*, **2017**, *192*, 371–375 DOI: 10.1016/j.jlumin.2017.07.006.
60. Goto, Y.; Tassel, C.; Noda, Y.; Hernandez, O.; Pickard, C. J.; Green, M. A.; Sakaebe, H.; Taguchi, N.; Uchimoto, Y.; Kobayashi, Y.; Kageyama H., Pressure-Stabilized Cubic Perovskite Oxyhydride BaScO_2H_x ., *Inorg. Chem.*, **2017** DOI: 10.1021/acs.inorgchem.6b02834.
61. Chiba, Y.; Saito, M.; Hagiwara, T.; Takatsu, H.; Kageyama, H.; Motohashi, T., High-Temperature Electrochemical Crystal Growth of Hollandite-Type $\text{Cs}_x\text{Ti}_{8-x}\text{O}_{16}$ with Controlled Electronic Properties. *Crystal Growth & Design* **2017**, *17* (11), 5691–5696 DOI: 10.1021/acs.cgd.7b00587.
62. Xu, J.; Cherepy, N. J.; Ueda, J.; Tanabe, S., Red persistent luminescence in rare earth-free $\text{AlN}:\text{Mn}^{2+}$ phosphor., *Mater. Lett.*, **2017**, *206*, 175–177 DOI: 10.1016/j.matlet.2017.07.015.
63. Wu, X.; Zhang, K.; Zhang, G.; Yin, S., Facile preparation of BiOX ($X = \text{Cl}, \text{Br}, \text{I}$) nanoparticles and up-conversion phosphors/ BiOBr composites for efficient degradation of NO gas: Oxygen vacancy effect and near infrared light responsive mechanism., *Chem. Engineering J.*, **2017**, *325*, 59–70 DOI: 10.1016/j.cej.2017.05.044.

64. Yang, Y.; Wang, Y.; Yin, S., Oxygen vacancies confined in SnO₂ nanoparticles for desirable electronic structure and enhanced visible light photocatalytic activity. *Applied Surface Science* **2017**, *420*, 399–406 DOI: 10.1016/j.apsusc.2017.05.176.
65. Kikkawa, S.; Hosono, A.; Masubuchi, Y., Remarkable effects of local structure in tantalum and niobium oxynitrides., *Progress in Solid State Chemistry*, **2017** DOI: 10.1016/j.progsolidstchem.2017.08.001.
66. Kikkawa, S.; Masubuchi, Y., Magnetic iron nitrides inspired by historic research on α'-Fe₁₆N₂., *Progress in Solid State Chemistry*, **2017** DOI: 10.1016/j.progsolidstchem.2017.06.001.
67. 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.
68. 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.
69. Ohashi, T.; Miyoshi, Y.; Katagiri, K.; Inumaru, K. Photocatalytic reduction of carbon dioxide by strontium titanate nanocube-dispersed mesoporous silica. *Journal of Asian Ceramic Societies* **2017** DOI: 10.1016/j.jascer.2017.04.008.
70. Murakami, T.; Yamamoto, T.; Takeiri, F.; Nakano, K.; Kageyama, H. Hypervalent Bismuthides La₃MBi₅(M = Ti, Zr, Hf) and Related Antimonides: Absence of Superconductivity., *Inorg. Chem.*, **2017**, *56* (9), 5041–5045 DOI: 10.1021/acs.inorgchem.7b00031.
71. Setthaya, N.; Chindaprasirt, P.; Yin, S.; Pimraksa, K., TiO₂-zeolite photocatalysts made of metakaolin and rice husk ash for removal of methylene blue dye., *Powder Technology*, **2017**, *313*, 417–426 DOI: 10.1016/j.powtec.2017.01.014.
72. 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.
73. 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.
74. 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.apt.2016.12.014.
75. 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.
76. 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., *J. Molecular Liquids*, **2017**, *230*, 429–436 DOI: 10.1016/j.molliq.2017.01.056.

77. 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.
78. 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.
79. 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.
80. 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.
81. 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.
82. 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.
83. 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.
84. 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.
85. Okazaki, M.; Eguchi, M.; Uchiyama, T.; Lu, D.; Kato, H.; Uchimoto, Y.; Kakihana, M.; Maeda, K., Effects of the SrTiO₃ support on visible-light water oxidation with Co₃O₄ nanoparticles. *Dalton Transactions* **2017**, *46* (48), 16959–16966 DOI: 10.1039/C7DT03444J.
86. Tsujimoto, Y., Crystal Chemistry of New Layered Oxyhalide Perovskites with Anion Order. *Nihon Kessho Gakkaishi*, **2017**, *59* (5), 223–229 DOI: 10.5940/jcrsj.59.223.
87. Hosono, A.; Masubuchi, Y.; Endo, T.; Kikkawa, S., Molten BaCN₂ for the sintering and crystal growth of dielectric oxynitride perovskites Sr_{1-x}Ba_xTaO₂N (x = 0.04–0.23)., *Dalton Trans.*, **2017** DOI: 10.1039/C7DT03765A.
88. Tang, Y.; Kobayashi, Y.; Shitara, K.; Konishi, A.; Kuwabara, A.; Nakashima, T.; Tassel, C.; Yamamoto, T.; Kageyama, H., On Hydride Diffusion in Transition Metal Perovskite Oxyhydrides Investigated via Deuterium Exchange., *Chem. Mater.*, **2017** DOI: 10.1021/acs.chemmater.7b02240.
89. Hibino, K.; Yashima, M.; Oshima, T.; Fujii, K.; Maeda, K., Crystal structure, electron density and characterization of novel photocatalysts, (BaTaO₂N)_{1-x}(SrWO₂N)_x solid solutions. *Dalton Trans.*, **2017**, *46* (43), 14947–14956 DOI: 10.1039/C7DT02873C.

90. Katayama, Y.; Kayumi, T.; Ueda, J.; Dorenbos, P.; Viana, B.; Tanabe, S. The role of Ln³⁺ (Ln = Eu, Yb) in persistent red luminescence in MgGeO₃:Mn²⁺, *J. Mater. Chem. C*, **2017**, *5* (34), 8893–8900 DOI: 10.1039/C7TC03151C.
91. Xu, J.; Murata, D.; Katayama, Y.; Ueda, J.; Tanabe, S., Cr³⁺/Er³⁺ co-doped LaAlO₃ perovskite phosphor: a near-infrared persistent luminescence probe covering the first and third biological windows., *J. Mater. Chem. B*, **2017**, *5* (31), 6385–6393 DOI: 10.1039/C7TB01332A.
92. Hojamberdiev, M.; Bekheet, M. F.; Hart, J. N.; Vequizo, J. J. M.; Yamakata, A.; Yubuta, K.; Gurlo, A.; Hasegawa, M.; Domen, K.; Teshima, K., Elucidating the impact of A-site cation change on photocatalytic H₂ and O₂ evolution activities of perovskite-type LnTaON₂ (Ln = La and Pr), *Phys. Chem. Chem. Phys.*, **2017**, *19* (33), 22210–22220 DOI: 10.1039/C7CP03714G.
93. Kobayashi, F.; Ohtani, R.; Teraoka, S.; Kosaka, W.; Miyasaka, H.; Zhang, Y.; Lindoy, L. F.; Hayami, S.; Nakamura, M., Syntheses, structures and magnetic properties of tetranuclear cubane-type and heptanuclear wheel-type nickel(ii) complexes with 3-methoxysalicylic acid derivatives., *Dalton Trans.* **2017**, *46* (26), 8555–8561 DOI: 10.1039/C7DT01757J.
94. Itahara, H.; Wu, X.; Imagawa, H.; Yin, S.; Kojima, K.; Chichibu, S. F.; Sato, T., Photocatalytic activity of silicon-based nanoflakes for the decomposition of nitrogen monoxide. *Dalton Trans.* **2017**, *46* (26), 8643–8648 DOI: 10.1039/C7DT01682D.
95. Kanazawa, T.; Maeda, K., Chromium-substituted hematite powder as a catalytic material for photochemical and electrochemical water oxidation., *Catal. Sci. Technol.* **2017**, *7* (14), 2940–2946 DOI: 10.1039/C7CY00580F.
96. Asami, K.; Ueda, J.; Tanabe, S. Flicker Suppression of AC Driven White LED by Yellow Persistent Phosphor of Ce³⁺-Cr³⁺ Co-doped Garnet., *J. Sci. & Tech. in Lighting*, **2017** DOI: 10.2150/jstl.IEIJ160000599.
97. Miura, A.; Oshima, T.; Maeda, K.; Mizuguchi, Y.; Moriyoshi, C.; Kuroiwa, Y.; Meng, Y.; Wen, X.-D.; Nagao, M.; Higuchi, M.; et al. Synthesis, structure and photocatalytic activity of layered LaOInS₂, *J. Mater. Chem. A*, **2017**, *5* (27), 14270–14277 DOI: 10.1039/C7TA04440B.
98. Mori, T., Utilizing nanotechnology and novel materials & concepts for advanced thermoelectric and thermal management technology development, *Semiconductors*, **2017**, *51* (7), 965–967 DOI: 10.1134/S1063782617070272
99. 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.
100. 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.
101. Yajima, T.; Koshiko, M.; Zhang, Y.; Oguchi, T.; Yu, W.; Kato, D.; Kobayashi, Y.; Oriyasa, 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.
102. 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.

103. 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.
104. Takeiri, F.; Matsumoto, Y.; Yamamoto, T.; Hayashi, N.; Li, Z.; Tohyama, T.; Tassel, C.; Ritter, C.; Narumi, Y.; Hagiwara, M.; Kageyama, H., High-pressure synthesis of the layered iron oxyselenide BaFe₂Se₂O with strong magnetic anisotropy., *Phys. Rev. B*, **2016**, *94* (18) DOI: 10.1103/PhysRevB.94.184426.
105. 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.
106. 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, *International Journal of Quantum Chemistry* **2016**, *116* (16), 1205–1213 DOI: 10.1002/qua.25156.
107. 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.
108. Kuroki, A.; Ushiyama, H.; Yamashita, K., Proton-Transfer Dynamics in Protonated Benzene. *Bull. Chem. Soc. Jpn.*, **2016**, *89* (7), 804–809 DOI: 10.1246/bcsj.20150365.
109. 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.
110. 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.
111. 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.
112. 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.
113. Kuno, Y.; Tassel, C.; Fujita, K.; Batuk, D.; Abakumov, A. M.; Shitara, K.; Kuwabara, A.; Moriwake, H.; Watabe, D.; Ritter, C.; Brown, C. M.; Yamamoto, T.; Takeiri, F.; Abe, R.; Kobayashi, Y.; Tanaka, K.; Kageyama, H., ZnTaO₂N: Stabilized High-Temperature LiNbO₃-type Structure., *J. Am. Chem. Soc.*, **2016**, *138* (49), 15950–15955 DOI: 10.1021/jacs.6b08635.
114. 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.
115. 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.

116. 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 (Ti_5Si_3) Powder at High Temperature. *Materials Science Forum* **2016**, *868*, 38–42 DOI: 10.4028/www.scientific.net/MSF.868.38.
117. 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.
118. 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 $\text{F-TiO}_2\text{-K}_x\text{WO}_3$ nanocomposites with heat shielding, ultraviolet isolating, hydrophilic and photocatalytic performance. *Scientific Reports* **2016**, *6* (1) DOI: 10.1038/srep27373.
119. Sulaeman, U.; Febiyanto, F.; Yin, S.; Sato, T., The highly active saddle-like Ag_3PO_4 photocatalyst under visible light irradiation. *Catalysis Communications* **2016**, *85*, 22–25 DOI: 10.1016/j.catcom.2016.07.001.
120. Sontakke, A. D.; Ueda, J.; Tanabe, S., Significance of host's intrinsic absorption band tailing on Ce^{3+} luminescence quantum yield in borate glass. *Journal of Luminescence* **2016**, *170*, 785–788 DOI: 10.1016/j.jlumin.2015.09.024.
121. Sontakke, A. D.; Ueda, J.; Tanabe, S., Effect of synthesis conditions on Ce^{3+} luminescence in borate glasses. *Journal of Non-Crystalline Solids* **2016**, *431*, 150–153 DOI: 10.1016/j.jnoncrysol.2015.04.005.
122. 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.
123. Kobayashi, M., *Journal of the Ceramic Society of Japan*, **2016**, *124* (9), 863–869 DOI: 10.2109/jcersj2.16117.
124. 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.
125. Mahlik, S.; Lazarowska, A.; Ueda, J.; Tanabe, S.; Grinberg, M., Spectroscopic properties and location of the Ce^{3+} energy levels in $\text{Y}_3\text{Al}_2\text{Ga}_3\text{O}_{12}$ and $\text{Y}_3\text{Ga}_5\text{O}_{12}$ at ambient and high hydrostatic pressure. *Phys. Chem. Chem. Phys.* **2016**, *18* (9), 6683–6690 DOI: 10.1039/C5CP07732J.
126. 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.
127. Xu, J.; Murata, D.; Ueda, J.; Tanabe, S., Near-infrared long persistent luminescence of Er^{3+} in garnet for the third bio-imaging window. *J. Mater. Chem. C* **2016**, *4* (47), 11096–11103 DOI: 10.1039/C6TC04027F.
128. Ueda, J.; Yagi, M.; Tanabe, S., Editors' Choice—Investigation of Luminescence and Photoacoustic Properties in Ce^{3+} -Doped $\text{Ln}_3\text{Al}_5\text{O}_{12}$ ($\text{Ln} = \text{Lu}, \text{Y}, \text{Gd}$) Garnet. *ECS Journal of Solid State Science and Technology* **2016**, *5* (12), R219–R222 DOI: 10.1149/2.0241612jss
129. 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.

130. 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.
131. 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.
132. 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.
133. 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.
134. 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.
135. 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.
136. 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.

受賞報告

■ 広島大学の片桐 清文 准教授(A01公募)が広島大学第16回(平成29年度)学長表彰を受賞

広島大学では、全学が一丸となって広島大学の理念を堅持しつつ、到達目標に向け邁進するための一助となるように「学長表彰」の制度を設け、教育・研究や社会貢献等で特色ある顕著な業績を挙げ、広島大学の発展に貢献した教職員や団体及び学外の個人や団体に対し、顕彰を行っています。(https://www.hiroshima-u.ac.jp/about/awards/presidents_awards) 片桐氏は、文部科学省研究振興局の学術調査官として科研費に関する調査・指導などを行って制度運営に大きく寄与し、さらに広島大学における科研費に関する活動に尽力し、広島大学の発展に顕著な貢献をしたことなどが評価され、受賞者に選ばれました。表彰式は11月4日に広島大学で行われました。

片桐先生からの受賞コメント

このたび所属する広島大学において、栄誉ある学長表彰をいただくことができました。科研費は我が国の学術研究の基幹をなす制度であり、その重要性は年々高まっています。なかでも新学術領域研究は、我が国が世界をリードする新しい学術領域の創成をめざすもので、この「複合アニオン」領域にも大きな期待が寄せられています。この表彰を励みに、今後も領域の皆様と協力し、本領域における研究推進に貢献できるよう、日々励んでいきたいと考えております。



■ 京都大学の山本 隆文 助教(A02分担)が第11回物性科学領域横断研究会優秀ポスター賞を受賞

物性科学領域横断研究会は物性科学に関連した9つの新学術領域研究が合同で開催しており、各領域の研究内容を専門外の研究者や大学院学生に対し解説し、領域間のシナジー効果を高めると共に、物性科学のホットな話題を概観することを目的としています。平成29年11月17日～18日に開催された第11回物性科学領域横断研究会において、山本隆文助教(A02計画)が「遷移金属酸水素化物の物性： π ブロッカーとして働くヒドリド」の題目でポスター発表を行い、優秀賞に選出されました。

山本先生からの受賞コメント

優秀ポスター賞を頂き大変光栄に思います。本発表では複合アニオン新学術領域研究で得られた成果である金属酸水素化物の物性に関する内容を発表させていただきました。物性科学領域横断研究会は9つの新学術領域が合同で開催する研究会でありますので、このように他新学術領域でも当研究が評価されるのは大変うれしいことです。この受賞を弾みにして、さらにより研究を行っていきたいと思います。また、当研究は陰山洋領域代表をはじめとして、複合アニオン新学術領域の多くのメンバーとの共同研究による成果でした。ご指導・ご協力を頂いた皆様に深く感謝申し上げます。



記事紹介

■ 日本セラミックス協会協会誌に「複合アニオン」の特集記事が掲載

日本セラミックス協会が毎月発行している協会誌「セラミックス」の2017年12月号に「複合アニオン化合物が拓く新奇機能性材料開発」というタイトルで特集記事が組み込まれました。各記事のタイトルと執筆者を以下に紹介します。

- 複合アニオン化合物と物質科学のフロンティア 陰山 洋
- 酸窒化物セラミックスにおいて酸素と窒素が共存して現れる新機能性 吉川 信一
- 層状複合アニオン化合物の設計と発光特性 荻野 拓
- 酸窒化物を光触媒とした可視光水分解と CO₂ 還元 前田 和彦
- 複合アニオン化合物を母体とする新規蛍光体の探索 小林 亮・加藤 英樹・垣花 真人
- 複合アニオン化合物が拓く発光材料の世界—白色 LED 用蛍光体を中心に— 三上 昌義
- 複合アニオンによって生み出される高性能、高制御性の熱電変換材料 森 孝雄
- ヒドリドイオン導電性酸水素化物 小林 玄器
- ZrCuSiAs 型金属酸ヒ化物への水素アニオン置換 松石 聡
- アニオン包接マイエナイト系化合物の展開 林 克郎
- 複合アニオン化合物の結晶構造と化学結合 八島 正知
- 複合アニオン化合物における安定な欠陥配位構造の第一原理計算 桑原 彰秀・設楽 一希

本学術領域のメンバーに加えて、評価委員である吉川信一先生、そして企業からは三菱ケミカル(株)の三上昌義 主任研究員が記事を寄稿しています。「複合アニオン化合物」

に関する新しい物質開発、分析手法、機能開拓に関する興味深い内容が記載されておりますので、是非一読していただければと思います。

(文責：A02 ファインセラミックスセンター 桑原 彰秀)

■ 編集後記

本領域のニュースレターの3号を発刊することになりました。ニュースレターの掲載内容の決定や原稿依頼を行う時期に、ちょうど国際ワークショップの運営が重なったこともあり、2017年の年末は非常に慌ただしくなりました。今回のニュースレターは前号までよりもかなり多くの複合アニオン化合物関連のイベントの開催報告が集まりました。この領域のアクティビティの高さを改めて実感した次

第です。原稿の執筆をして頂いた方々のご尽力のおかげで、ニュースレターの内容も一層充実したものにすることができました。関係者の皆様にこの場を借りてお礼を申し上げます。

「複合アニオン化合物」という新しい領域がますます発展するように、今後も魅力的な情報の発信に努めてまいります。

(A. K.)

[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)

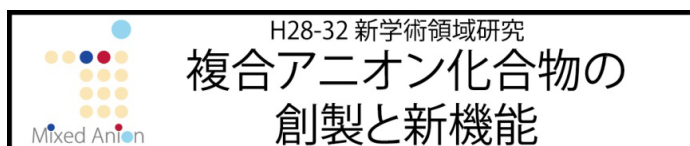
[ニュースレターに関するお問い合わせ]

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/>