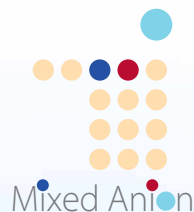


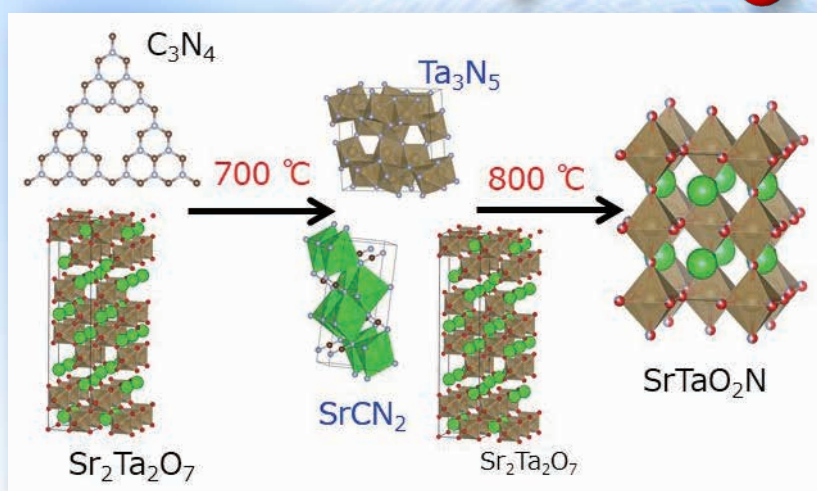
News Letter

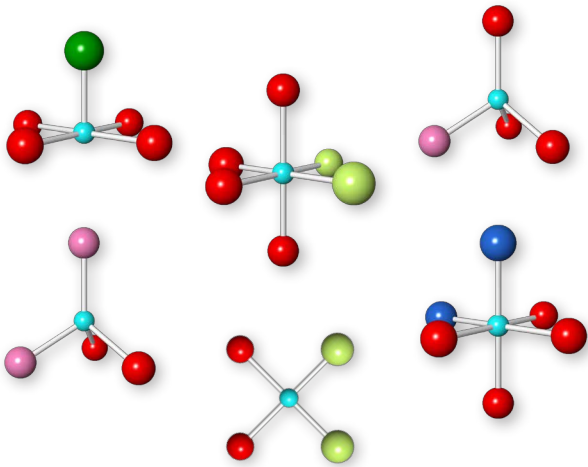


平成28年度-令和2年度
新学術領域研究
複合アニオン化合物の
創製と新機能

Vol.7

15th Jan., 2020





CONTENTS

目次		1
巻頭言	Houria KABBOUR	2
領域代表より	陰山 洋	4
研究紹介		
固体窒素源を用いた酸窒化物の新合成法	研究計画A01 北海道大学 鱒淵 友治	6
透過電子顕微鏡法による局所領域の結晶構造解析 — 原子配列の直接観察 —	研究計画A02 物質・材料研究機構 木本 浩司	8
固体NMRを用いた複合アニオン化合物における アニオン配置の解析	研究計画A02 京都大学 野田 泰斗	10
希少元素を含まない高移動度非晶質半導体の 開発とデバイス応用	研究計画A03 東京大学 廣瀬 靖 長谷川 哲也	12
領域ニュース		
複合アニオン新学術領域 第7回若手スクール		14
複合アニオン新学術領域 合同班会議		15
環太平洋セラミックス協会会議 (PACRIM-13)		16
第80回応用物理学会秋季学術講演会 シンポジウム		18
複合アニオン新学術領域 3rd LOBSTER School		20
国際活動支援報告—海外体験記		21
班内・班間留学報告		27
アウトリーチ活動報告抜粋 (2019.6-2020.1)		31
発表論文リスト (2019.6-2020.1)		34
受賞報告		38
会議開催情報		46
編集後記		48

表紙挿絵(上から) : 窒化炭素を用いた SrTaO₂N の生成過程 (p. 6)
複合アニオン新学術領域 合同班会議 (p. 15)
世界最年少の複合アニオン研究者 (p. 5)

■ 巻頭言

The search of new phases is an important primary task to face societal challenges such as sustainable energy. In that purpose, the emergence of innovative materials is necessary, beyond the state of the art and beyond the optimization of existing compounds. Mixed anions are systems of choice for innovation as they exhibit a rich chemistry reminiscent of the multiple anions contribution. While I had the chance to visit a few groups in Japan within the Mixed Anion project, I could appreciate the dynamism of Kyoto University in all aspects of this field that makes Kageyama group one of the most productive and impactful at the international level. At Kyushu University, I enjoyed how mixed anions are exploited for energy materials, a crucial societal area. The long trip I did from Lille to my first time in Japan was particularly emotional as I discovered in the meantime an extraordinary country and some of the best academics in my favorite field.

In Lille, we like predictive approaches. For such approaches, I have to mention Nantes that was a pioneer for inorganic compounds. The description of a crystalline structure as elementary building blocks assembly is of great interest to design functional materials. When this building blocks are put in relation with the electronic structure (and thus properties), as we do, it evidences their role and provides key tools for further functional materials prediction. Computational methods should also accelerate materials discovery in the field of mixed anion. *High-throughput*

University of Lille

Houria KABBOUR



methods allow probing thousands of compounds in databases to identify candidates for a given property while other methods such as evolutionary algorithm based codes allow predicting new phases. Theoreticians and experimentalists together combine their efforts to bring such designed materials to reality.

Different anions with different ionic radii, electronegativities, charges, polarizabilities *etc...* are responsible for versatile chemical bonding with metal cations leading to original structures with unique properties. In the case of Perovskite oxynitrides for instance, similar crystallographic sites are occupied by the anions leading to the possibility to tune properties while preserving the oxide structure type. On another hand, anions with significantly different radii may rather lead to new crystalline types and low dimensionality. Recently, a few examples of mixed anion phases were reported with enhanced properties usually found in oxides such as multiferroicity (Cu_2OCl_2). The later and over hot topics (topological phases such as BiTeI with the Rashba effect *etc...*) are less invested by mixed anion research and should benefit from it, in particular dealing with polarity. The acentric character is enhanced locally in heteroleptic building blocks. Enhanced non-linear optical properties can be reached in this way for instance.

In our group, we aim to elaborate original mixed anion phases. We also perform combined experimental/theoretical studies for their comprehension. For instance, we show

how band gap engineering can be achieved using distinct anionic contributions to the band gap region. This approach should be powerful for overall water-splitting photocatalytic materials development. Multiple anions should help to design band gap tuned photocatalysts, *i.e.* with a band gap in the range 3.1 eV – 1.23 eV while the potential of the conduction band and of the valence band encompass the reduction and oxidation potentials of water.

To produce innovative materials by taking advantage of mixed anions, an impressive and important Japanese collaborative consortium could be built with Hiroshi Kageyama as the main drive. I had the chance to notice it while participating to the mixed anion symposium of PACRIM13 in Okinawa Island that gathered many

researchers of the Mixed Anion project around a wide spectrum of topics. As a co-organizer with Prof. Kageyama of the Mixed Anion Symposium of the Spring EMRS Meeting in Nice-France, I have also to mention the success of such events at the international level. It is extremely important to maintain and support those meetings. As any participant could notice, very original mixed anion compounds, innovative synthetic routes, numerous properties and applications and state of the art computational techniques were presented and thoroughly discussed. Trough those meeting, connections and collaborations are continuously emerging or strengthened.



■ 領域代表より

今年も思い出に残る出来事がいろいろとありました。海外出張が増え今年には15回を数えました。大半は、基調・招待講演としての参加ですが、5月のE-MRS（フランス）の複合アニオンセッション（ANIM-3）など幾つかはオーナガイザーとして関わりました。林克郎先生が中心になって企画された11月のPACRIM-13（沖縄）での複合アニオンセッションでは、外部評価者のKenneth Poepfelmeier先生（米国ノースウェスタン大学、写真右から二番目）やANIM-3と一緒に運営したHouria Kabbour先生（仏国リール大学、写真右端）をはじめ、海外からも多くの方に参加していただき、会場では常に立ち見ができるなど盛況でした（Houriaさんには、本号の巻頭言をお願いしております）。



これらの活動を通じて感じるのは、複合アニオン（Mixed Anion）が日本だけでなく海外でも市民権を獲得しつつあることで、これは領域の開始当時を思うと隔世の感があります。最近では、国内外の企業の関心も高くなってきました。また、日本人が複合アニオンの研究を牽引していることは、世界の研究者からも認められていますが、彼らの多くはその源が「ワンチーム」をモットーに活動する我々の新学術

領域代表 陰山 洋



のアクティビティにあると知っており、その運営スタイルも評価されていると感じます。国際活動支援班では、海外に“ハブ拠点研究者”をおき、日本を中心とした国際的ネットワーク形成を目指していますが、こうした活動に共鳴する海外研究者が多く、参画したいという問い合わせが絶えません。本新学術領域は残すところ1年少しですが、日本がリードしながら国際ネットワークをより仮想的なものから強固な拠点として、維持・発展させることが今後肝要になると考えています。

8月27日～30日に弘法大師のいる高野山で開催した領域会議も印象に残っています。天徳院（宿坊）で、精進料理（一回は不精進料理）で三食をともし、複合アニオンの境地をもとめてみなで議論に没頭しました。朝食前、朝6時半からの御勤めも印象に残っています。「宗教」と「科学」とは一見無関係に思われますが、私はここ数年、大きな相関を感じるようになってきました（歳をとっただけかもしれませんが）。研究における発想の源はどこにあるのか、どうやって現象の本質を掴むのかと考えたとき、整然とした論理性やがむしゃらな根性論だけでは到達できないと。今年は、京大出身の数学者、岡潔の（に関する）書籍を何冊か読みました。岡潔は変人として世間では知られていると思いますが、芭蕉の俳句を崇拜し、ある時期からは仏教を信仰し、日本人のもつ情操・情緒を追求したようです。岡潔のいわゆる第三の発見を自身は、上から着想が舞い降りたのではなく、下から地道に積みあげていくうちに自己変容して視界が開けたと表現しています。従来型のカチオン偏重の科学がある中で複合アニオンの「こころ」を追い求めましょ

うと、最初のオープニングの挨拶で話した記憶がありますが、会議後、私の研究室では驚くべき発見が相次いでいることから、何らかの変化が自分（学生？）の中で起こっているように秘かに感じるこの頃です。

高野山では、初日に外部評価者の堂免一成先生と、二日目に班長3人（荻野さん、林さん、前田さん）と、奥の院を歩きながら将来についてもいろいろと話したことも印象深いです。まだ、「科学≠宗教」のはずの学生さんにはどうだったでしょうか。若手スクールの研究立案は、天徳院の100畳を超える大広間で各チームに別れて円陣を組んでリラックスした雰囲気で行われました（写真；国際会議でのプレゼンでは紹介しています）。実際に若手から出てきた研究企画はシニアが驚く（シニアを超える）ほどのレベルだったのは、畳スタイルが日本の情緒だからでしょうか。現在、学生企画の共同研究が進んでいると思いますので、1月のつくばでの領域会議では楽しみにしています。いまや、相当数の学生さんが主体的に研究を進めていることを頼もしく見えています。将来、どんな研究をするにせよ、この経験は活かされるものと信じています。

さらなる若手の育成も進んでいます。アウトリーチで公募研究をされている堀越亮先生（大阪産業大学）のプレゼ

ンテーションでは、今回の運営の補佐をしていただいた野尻さんの三歳の息子さんが、アシスタントとして活躍してくれました（写真左）。今でも自宅で、堀越さん自作の複合アニオンおもちゃで遊んでいるようです（写真右のおもちゃ箱に注目）。世界最年少の複合アニオン研究者です。

最後に、嬉しいニュースを紹介します。新学術のアウトリーチ活動として、毎年10月に出雲高校の関西研修での講演会・実験研修（京都大学）、毎年7月には京大の学生が出雲高校生とコラボして模擬実験（出雲科学館）を行なっています。小生は同校のSSH活動の外部評価委員をしておりますが、12月14、15日に開催された第17回高校生科学技術チャレンジ（JSEC）にて、2年生の片岡柁人君が、「オカダンゴムシのフンに常在するブレビバクテリウム属菌による揮発性抗カビ効果」の発表で最優秀の文部科学大臣賞に選ばれ、世界大会に進むことが決まったとの知らせが教頭先生よりありました。11年にもおよぶ片岡君の粘り強い研究のたまものですが、島根大学など地元のサポートもあったと聞いています。地域格差の拡大は日本が抱える大きな課題とは思いますが、このような未来のトップサイエンティストを育てる地域が一体となった活動は今後ますます重要になるのではないのでしょうか。



固体窒素源を用いた酸窒化物の新合成法

研究計画 A01 北海道大学 鱒沢 友治

金属酸窒化物は、可視光応答性の光触媒や無害顔料などへの応用のみならず、陰イオンの局所規則化に起因する新しい強誘電性が報告されるなど、基礎科学から応用にわたって活発に研究されている物質群である。従来の酸窒化物の合成手法は、主に酸化物原料をアンモニア気流中で加熱・窒化する手法であり、有害なアンモニアガスを用いない新しい合成手法の開発は重要な課題の一つであった。我々は最近、窒化炭素(C_3N_4)を用いることで従来よりも低温・短時間で酸窒化物が得られる手法を開発しました^[1]。ここでは、筆者らのこれまでの成果と今後について紹介します。

アンモニアを用いた窒化反応に代わる手法として、雰囲気中の窒素ガスを窒素源として窒化物や酸窒化物を合成する炭素熱還元窒化法が挙げられる。この手法では、酸化物前駆体と炭素の混合物を窒素雰囲気中で加熱することで、炭素による還元反応と窒化反応が同時に行われる。この反応では気体として最も安定な N_2 ガス分子の三重結合を切断して酸化物に窒素を導入する必要があるため、ある程度の高温が必要になる。そのため N_2 ガスを窒素源とする場合には窒化反応の低温化は困難と考えられた。そこで我々のグループでは炭素と窒素を同時に固体として供給することに着目した。炭素と窒素からなる化合物として、最近触媒活性や発光特性が報告され始めている窒化炭素 C_3N_4 が挙げられる。この化合物では C と N がグラファイト様の六面体平面

構造を形成している。全ての結合は C-N であり、窒素原子間の結合が無いことが特徴である。加熱することで N_2 分子を形成せずに、より容易に窒素を酸化物前駆体に供給することが期待できた。また、 C_3N_4 はメラミン樹脂の原料であるメラミン($C_3H_6N_6$)を大気中焼成するだけで得られ、合成の容易さもメリットの一つである。

この窒化炭素 C_3N_4 を酸化物前駆体である $Sr_2Ta_2O_7$ と混合して、窒素雰囲気中で $800^\circ C$ 、3 時間加熱することでペロブスカイト型構造をもつ $SrTaO_2N$ が得られた。この条件は同じ酸化物前駆体からアンモニアで窒化して $SrTaO_2N$ を合成する反応に必要な温度約 $1000^\circ C$ よりも $200^\circ C$ 低く、保持時間も大きく短縮できた。生成物中の窒素の由来を確認するために加熱雰囲気を Ar に代えても $SrTaO_2N$ が得られたことから、 C_3N_4 が窒素源として作用していることが確認できた。反応途中の生成相を確認するために $700^\circ C$ における結晶相を確認したところ $SrCN_2$ と Ta_3N_5 が前駆体酸化物 $Sr_2Ta_2O_7$ とともに観察された。そこで、 $SrCN_2$ と $1/3Ta_3N_5$ の混合粉に $Sr_2Ta_2O_7$ を半等量モル加えて窒素雰囲気中で $800^\circ C$ で加熱したところ、ほぼ単一相の $SrTaO_2N$ が得られた。このことから $Sr_2Ta_2O_7$ を C_3N_4 とともに加熱すると、 $Sr_2Ta_2O_7$ の一部が $SrCN_2$ と Ta_3N_5 を生成し、残留していた $Sr_2Ta_2O_7$ とそれらが $800^\circ C$ で反応することで $SrTaO_2N$ が生成したと考えられた(図1)。

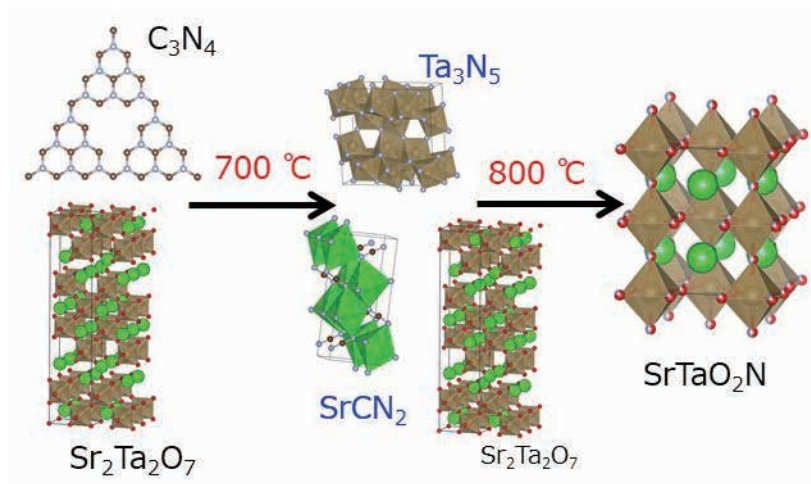


図1 窒化炭素を用いた SrTaO₂N の生成過程

この反応過程を調べるために、 $\text{Sr}_2\text{Ta}_2\text{O}_7$ と C_3N_4 の混合粉の TG-DTA-MS 測定を行った。熱重量曲線からは、 600°C 程度から急激な重量減少と同時にブロードな吸熱ピークがみられた。さらに 800°C を超えたくらいでわずかな重量減少も確認できた。最初の重量減少時には CO_2 と CO と思われるガスが、 C_2N_2 に相当するガスとともに検出された。 C_3N_4 のみを熱分解し、生成ガスを調べたところ、 C_2N_2 ガスと N_2 ガスが生成することを確認している。 C_3N_4 から生じた C_2N_2 ガスが $\text{Sr}_2\text{Ta}_2\text{O}_7$ と反応し、 SrCN_2 と Ta_3N_5 を生成する。その後、 800°C 程度の温度域で残留した $\text{Sr}_2\text{Ta}_2\text{O}_7$ とそれらが反応することで SrTaO_2N が生成したと考えられる。また、反応全体にわたって NH_3 ガスの生成は確認できていない。

この手法で作製した SrTaO_2N はその微細な粒子径に特徴がある(図2)。アンモニアを用いて酸化物前駆体を窒化する手法では、その粒子は sub- μm 程度であったが、 C_3N_4 を用いて合成した試料は数 10nm の粒子サイズであった。これは C_3N_4 を用いた窒化反応がアンモニア窒化法よりも数 100°C 低温であることと、反応過程で中間生成物を形成しながら前駆体酸化物が分解したことが原因と考えられる。このような微細な酸窒化物は触媒用途や、焼結体作製の前駆体粉体としての利用の際に有利になると思われる。

このように C_3N_4 を還元剤および窒素源として反応に用いることで、反応中間体に SrCN_2 と Ta_3N_5 を形成しつつ、最終的に SrTaO_2N をアンモニア窒化法よりも低温で得ることができた。酸窒化物の生成に関して、 CN_2^{2-} イオンを含むカルボジイミド化合物がその低温生成反応に寄与していることが他の化合

物でも明らかになりつつある。複合アニオンプロジェクトにおいて、広島大学の片桐 G が尿素を窒素源として LaTiO_2N や $(\text{Ga}, \text{Zn})(\text{O}, \text{N})$ 酸窒化物の低温合成に成功しており、その反応過程にも $\text{La}_2\text{O}_2\text{CN}_2$ や ZnCN_2 反応中間体の生成を報告している^[2,3]。また、最近の我々のグループでも、通常固相反応法で $1300 \sim 1400^\circ\text{C}$ で合成される $\text{Ba}_3\text{Si}_6\text{O}_9\text{N}_4:\text{Eu}$ や $\text{Ba}_3\text{Si}_6\text{O}_{12}\text{N}_2:\text{Eu}$ 蛍光体が、 BaCN_2 と SiO_2 との反応で 800°C もの低温で合成できることもわかってきた。

本稿では、酸窒化物の新しい低温合成手法として、固体窒素源である C_3N_4 を用いた SrTaO_2N の合成について紹介し、中間体であるカルボジイミド化合物 ($M\text{-CN}_2$) を経由することで他の酸窒化物の低温合成手法にも拡張できる可能性を示した。カルボジイミド化合物は NCN^{2-} という多原子アニオン化合物であり、この共存する炭素が低温還元反応に関係していると考えている。また、最近では BaCN_2 化合物のフラックスとしての機能を用いて BaTaO_2N 強誘電体の単結晶微粒子の合成や $\text{BaCN}_2:\text{Eu}$ 赤色感温蛍光体など、 $M\text{-CN}_2$ 自体のもつ機能面でも面白い成果が得られはじめている^[4,5]。

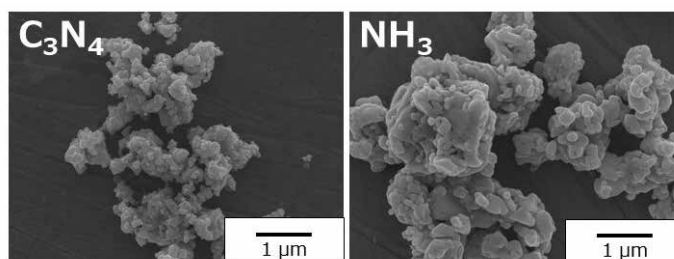


図2 C_3N_4 および NH_3 を用いて作製した SrTaO_2N の SEM 像

- [1] Y. Masubuchi, M. Tadaki, S. Kikkawa, *Chem. Lett.*, (2018) **47**, 31-33.
 [2] R. Okada, K. Katagiri, Y. Masubuchi, K. Inumaru, *Eur. J. Inorg. Chem.*, (2019) p. 1257-1264.
 [3] K. Katagiri, Y. Hayashi, R. Yoshiyuki, K. Inumaru, T. Uchiyama, N. Nagata, Y. Uchimoto, A. Miyoshi, K. Maeda, *Inorg. Chem.*, (2018) **57**, 13953-13962.
 [4] A. Hosono, Y. Masubuchi, S. Yasui, M. Takesada, T. Endo, M. Higuchi, M. Itoh, S. Kikkawa, *Inorg. Chem.*, 2019, in press
 [5] Y. Masubuchi, S. Nishitani, A. Hosono, Y. Kitagawa, J. Ueda, S. Tanabe, H. Yamane, M. Higuchi, S. Kikkawa, *J. Mater. Chem. C*, (2018) **6**, 6370-6377.

透過電子顕微鏡法による局所領域の結晶構造解析 —原子配列の直接観察—

研究計画A02 物質・材料研究機構 木本 浩司

透過電子顕微鏡法は、微小領域の解析手法として用いられている。我々は様々な透過電子顕微鏡法のうち、走査透過電子顕微鏡法 (scanning transmission electron microscopy, STEM) や電子エネルギー損失分光法 (electron energy-loss spectroscopy, EELS) などを使って解析している。当該新学術領域では、先生方からの試料をお預かりして評価を進めるとともに、計測手法についても「複合アニオン」識別のための基礎的な研究を行っている。本稿では、今後の共同研究の礎となるよう計測手法の概要を述べ、加えて元素識別のための計測法に関する研究結果を述べる。共同研究で解析した結果はまだ非公開のものも多々あり、ここでは公開されているものに限って一例を紹介する。

手法の概要

図1(a)にSTEM-EELSの模式図を示す。結晶構造解析においては、環状暗視野 (Annular Dark-Field, ADF) 像や環状明視野 (Annular Bright-Field, ABF) 像が観察される。ADF像では原子列が輝点となり、強度は原子番号 Z の n 乗に比例するとされ^[1] ている。例えば我々は SiAlON 蛍光体中の単原子 Eu ドーパントの検出などを行ってきた^[2]。一方 ABF 像は原子列が暗点として観察され、比較的軽元素の観察に適している。複合アニオン材料では、カチオンを中心として 8 面体や 4 面体など様々な配位を取るが、アニオンの原子サイトを直視できることから、結晶構造を直接観察できる。図1(b)に示すように ABF 像では酸素サイトを暗点として観察できる。STEM の空間分解能は現在 50pm 程度であるが、原子の位置はさらに高い精度 (数ピコメートルレベル) で決定できる^[3]。

EELS では軽元素分析が可能で、元素毎に原子列を可視化できる^[4]。さらに EEL スペクトルの微細構造から化学結合状態を解析できる。図1(c)では TiO_6 の 8 面体の結晶場分裂が観察でき、8 面体の歪も議論できる。この微細構造はルチル・アナターゼ・ブルックライトで異なることが知られており、電子回折だけでは判別が容易ではないチタン酸化物微粒子 (特にアナターゼとブルックライト) の識別に有効である。

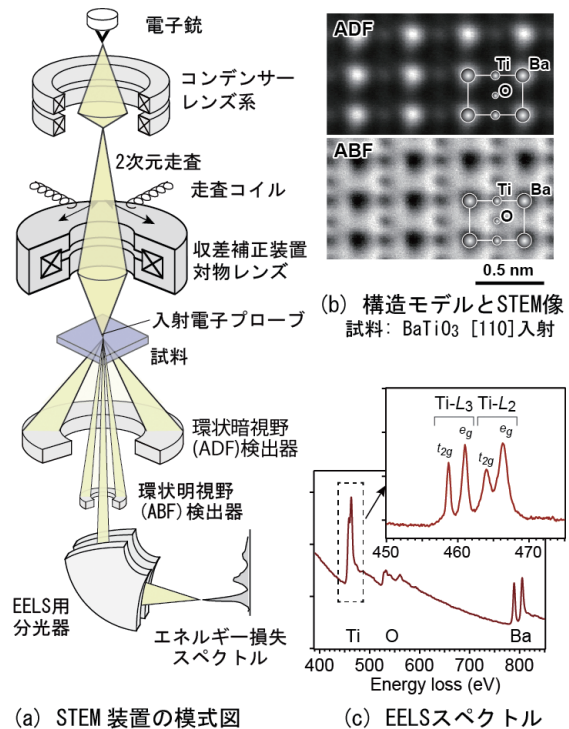


図1 STEMおよびEELS計測の概念図

走査透過電子顕微鏡手法の改良

ADF 像による結晶構造解析を目的とし、特に当該新学術領域では定量的に信号強度を検出して、原子番号を特定することを目指している。上述のように ADF 像は原子番号 Z の n 乗 ($n=1.5 \sim 1.7$) に比例することが教科書^[1]等に記載されている。林克郎先生とナノ材料で共同研究し、特に ADF 像によるドーパント識別の観点から原子番号依存性を調査した。すでに計測していたグラフェン^[5]やチタニアナノシート^[6]に加え、 MoS_2 や WS_2 などを計測した結果、 n 乗則が、原子番号が大きい場合や加速電圧が低い場合には成り立たないことが分かった^[7]。例えば図2で示す単層 2 次元材料の実験結果 (加速電圧 80kV) では、グラフェンと MoS_2 の間では Z の 1.7 乗に比例するのに、 MoS_2 と WS_2 では 1.3 乗に比例していた。これは運動学的近似では説明出来ず動学的回折に基づくシミュレーションが必要であることを意味しており、回折理論においては第 1 ボルン近似が、単原子でも破綻することを意味している。ADF 像での元素識別を目

的に研究を進めていく過程で、はからずも手法自体に関しても小さな進歩が得られたと言える。

STEM による像観察例

複合アニオン関連材料の解析は電子顕微鏡研究者にとって「道場」といってよい。例えば前田和彦先生からお預かりした材料の $\text{Li}_2\text{LaTa}_2\text{O}_6\text{N}^{[8]}$ 、 $\text{Rb}_2\text{NdNb}_2\text{O}_6\text{N}\cdot\text{H}_2\text{O}^{[9]}$ 、 SrTiO_3 系^[10] や Titania 系^[11,12] などで、結晶構造やドーパントの STEM 観察を行った。それぞれの観察例は論文を参照して頂くとし、本稿では論文には出せない結果の一例を紹介しよう。

結晶構造を観察するためには、極微小部に高密度に電子を照射するため、結果的に試料が損傷する。図3は $\text{Rb}_2\text{NdNb}_2\text{O}_6\text{N}\cdot\text{H}_2\text{O}$ を長時間観察した結果で、照射損傷により H_2O が無くなり一部 c 軸長が短くなっている。論文で報告した結果は、照射損傷を抑えるため加速電圧を変え、照射電流量を下げて観察したものである。また、高速に STEM 像を取得する自作ソフトウェアを使い、照射損傷による変化をモニターしながら実験している。さらに STEM 像観察に加え、EELS やエネルギー分散型 X 線分光法 (Energy Dispersive X-ray Spectroscopy, EDS) を使い、組成 (例えば N が含まれていること) なども確認している。新物質を解析するたび、如何に我々が普段使う標準試料 (SrTiO_3 等) が照射に強い「簡単な」材料かを痛感している。

おわりに

電子顕微鏡法には STEM 以外にもいろいろな計測手法がある。顕微鏡像の実空間情報、電子回折図形の逆空間情報、および EDS/EELS のスペクトル情報を合わせて、新材料の微細構造を解明できる。X 線回折ほどの精度は無いが、結晶構造や組成・局所構造を同一視野から解析でき、目的に応じて解析手法を選択できる。幸いにして我々は高空間・高エネルギー分解能の装置を運用しており、独自のソフトウェア等も有しているので、出し

惜しみ無く解析していく所存である。今後も領域内での共同研究を進め、複合アニオンの材料開発研究に幾ばくかでも貢献したい。

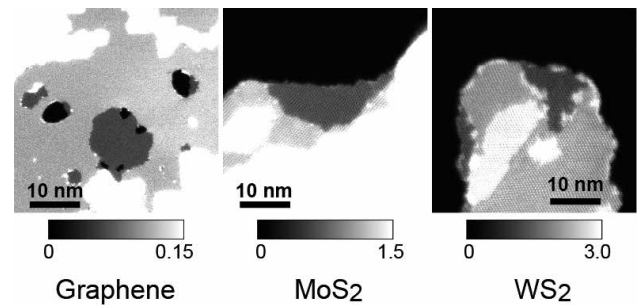


図2 2次元材料の ADF 像。
各 ADF 像下の強度バーは ADF 像の強度 (入射電子に対する%) を示す。例えば単層グラフェンは平均強度として入射電子の 0.5% 程度。

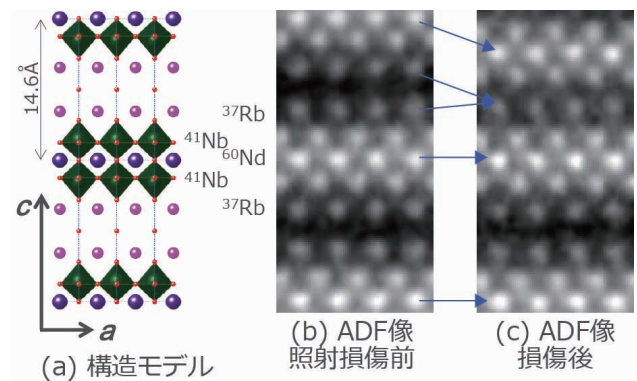


図3 $\text{Rb}_2\text{NdNb}_2\text{O}_6\text{N}\cdot\text{H}_2\text{O}$ の ADF 像観察。
(c) は長時間観察した結果 (一部 H_2O が無くなり) 結晶構造が変わっている。

- [1] E.J. Kirkland. *Advanced Computing in Electron Microscopy*. 2010, Springer.
- [2] K. Kimoto, et al. *Appl. Phys. Lett.* 2009, **94**, 041908.
- [3] K. Kimoto, et al. *Ultramicroscopy* 2010, **110**, 778.
- [4] K. Kimoto, et al. *Nature* 2007, **450**, 702.
- [5] S. Yamashita, et al. *Microscopy* 2015, **64**, 409.
- [6] S. Koshiya, et al. *Sci. Rep.* 2016, **6**, 24616.
- [7] S. Yamashita, et al. *Sci. Rep.* 2018, **139**, 18240.
- [8] T. Oshima et al. *Angew. Chem. Int. Ed.* 2018, **57**, 8154.
- [9] H. Wakayama et al. *Inorg. Chem.* 2019, **58**, 6161.
- [10] S. Nishioka, et al. *ACS Catal.* 2018, **8**, 7190.
- [11] A. Miyoshi, et al. *Sustainable Energy Fuels* 2018, **2**, 2025.
- [12] S. Nishioka, et al. *Sustainable Energy Fuels* 2019, **3**, 2337.

固体 NMR を用いた複合アニオン化合物におけるアニオン配置の解析

研究計画 A02 京都大学 野田 泰斗

複数種類のアニオンにより構成される物質は複合アニオン化合物とよばれている。複合アニオン化合物はアニオンの組み合わせ方と配置の仕方に高い自由度を有し、その制御と定量、物性や機能との関係の解明は重要な課題である。このような複合アニオン化合物の構造解析には、従来の回折現象を用いた手法と固体 NMR を相補的に用いると効果的である。というのは、回折現象を用いた手法からは原子座標の情報が得られるが、様々な原子の組み合わせと配置を長距離に渡り平均した構造である。また、電子との相互作用を用いる観測では同一周期のアニオンの判別

は困難である。一方で固体 NMR は、原子座標の情報は得られないが、局所的な構造を定量的に引き出すことができる。また、表 1 に示すように、主要なアニオンの同位体は互いに相対共鳴周波数が大きく異なり、NMR からは容易に区別がつけられる。互いの長所を組み合わせることで、より詳細に原子配置を決定できる。本稿では、回折現象を用いた手法から得られた平均構造を元に、固体 NMR により局所的なアニオン配置を解析した研究を紹介する。

表 1. 主要なアニオン元素における NMR 活性な同位体の特性^[1]

同位体	¹ H	² H	¹⁴ N	¹⁵ N	¹⁷ O	¹⁹ F	³¹ P	³³ S	³⁵ Cl	³⁷ Cl
スピン	1/2	1	1	1/2	5/2	1/2	1/2	3/2	3/2	3/2
天然存在比 (%)	99.99	0.01	99.63	0.37	0.04	100	100	0.76	75.78	24.22
相対共鳴周波数	100	15.35	7.23	10.14	13.56	94.09	40.48	7.68	9.80	8.16
相対感度	1	6.5e-3	1.0e-3	3.8e-6	1.1e-5	0.83	6.6e-2	1.7e-5	3.6e-3	6.6e-4

まず、超高压合成により得られた BaScO₂H の H⁻ 配置の解析について紹介する^[2]。BaScO₂H はペロブスカイト型構造を持つことが回折現象を用いた観測から判明している。Sc 周りの 8 つのアニオンサイトを H⁻ が配置する方法は、H⁻ が隣り合うシス型と、H⁻ が Sc を挟んで離れて対峙するトランス型があるが、どのような割合で存在しているか不明であった。

そこで BaScO₂H の局所構造を調べるために ¹H MAS NMR スペクトルを測定した。MAS とは Magic Angle Spinning の略記であり、試料を外部磁場に対して 54.7° 傾いた軸回りに高速

回転させることにより、外部磁場に対する異方的な相互作用を平均化しスペクトルを高分解能化する手法である。図 1 に示す ¹H MAS NMR スペクトルには太いピークと細いピークが同じ化学シフト値 4.4 ppm に現れた。これは水素が同一のサイト(もしくは極めて似たサイト)を占めていることを示唆しており、X 線・中性子回折結果と一致している。図 1 の挿入図に示すように、太い信号は太く裾を引いたスピニングサイドバンドを伴っているが、

細い信号はスピニングサイドバンドが認められない。裾を引くスピニングサイドパターンは MAS により消去しきれなかった近傍の水素との同種核双極子相互作用によるものである。つまり、細い信号成分は近接に水素が存在しない水素であり、太い成分は近接に水素が存在する水素であると考えられる。図 1 挿入図に示すように全スペクトルをフィッティングすることにより、スピニングサイドバンドも加えた太い信号に対する細い信号の割合は 2.7% と求まった。

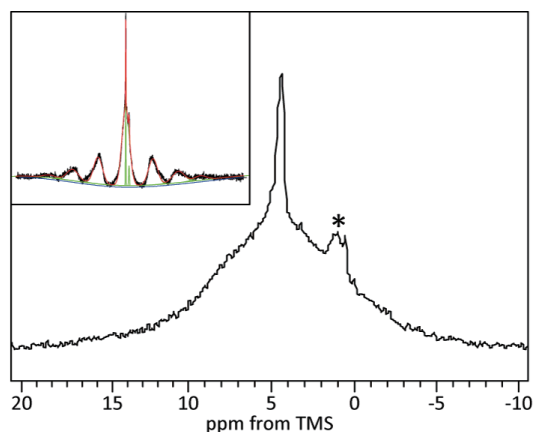


図 1 BaScO₂H の ¹H MAS NMR スペクトル。アスタリスクは試料管による信号。挿入図にスペクトル全体とフィッティング曲線を示した。

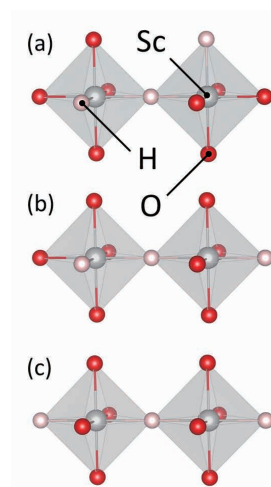


図 2 Sc 周りの H⁻ がとる (a) シス型、(b) シストランス、(c) トラントランス配置。

Sc 周りの局所構造を一辺が N 個の八面体からなる立方体セルを用いて数値計算により検証した。計算では必ず一つの八面体中に H がランダムに 2 つ分布するようにした。この場合、Sc を中心にした局所構造は、図2 に示すように、隣り合う八面体に属している H の配置により、(a)シス-シス配置、(b)シス-トランス配置、(c)トランス-トランス配置に分類できる。図1 の太い信号は (a) と (b)、細い信号は (c) に対応すると考え、 $N \times N \times N$ のセル中に占めるトランス-トランス配置の割合を数値計算したところ、図3 に示す結果を得た。 N が 100 を超えるとほぼ 5.3% に収束し、実験で得られた細い信号強度の割合は 2.7% よりも大きくなった。この結果はフィッティングエラーなどの影響も考えられるが、実際の BaScO_2H は部分的にシス優先的であることを示唆しており、別に実施された DFT 計算結果からも支持された。

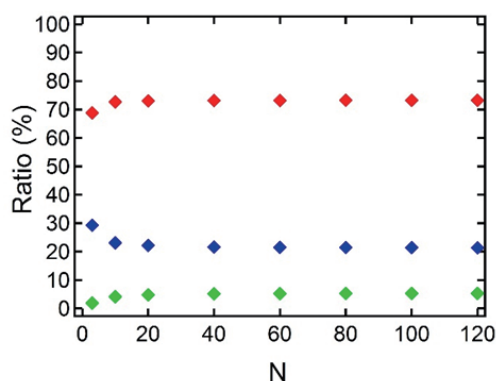


図3 シス-シス配置(赤丸)、シス-トランス配置(青丸)、トランス-トランス配置(緑丸)の割合。

次に、従来より低温で合成された Pb_2OF_2 のアニオン秩序の解析を紹介する^[4]。これまで 500–800℃ で合成されていた Pb_2OF_2 を 200℃ で合成に成功した。XRD より Pb_2OF_2 のアニオンサイトは $4d$ サイトと $8f$ サイトがあると判明しているが、低温で合成できたことからイオン拡散の活性化エネルギーは低く、アニオン配置が無秩序化している可能性があった。そこで固体 NMR を用いて秩序・無秩序を検証した。

図4 に Pb_2OF_2 の ^{19}F MAS NMR スペクトルを示す。-56 ppm を中心に主に 7 つに分裂した信号が観測された。 ^{19}F の

化学シフトは Pb-F 原子間距離と相関することが知られており^[5]、もし F が $4d$ サイトを占めているとすると平均 Pb-F 距離が 2.33Å となり、化学シフトは -20.8 ppm より大きくなると予想される。平均 Pb-F 距離が 2.57Å である $8f$ サイトを占めているとすると -56.0 ppm の信号位置は妥当であり、したがって $8f$ サイトを占めている F であると帰属できる。

信号の位置に加え信号の形状も O/F が秩序化していることを示している。F が似た結合長さで 4 つの Pb に配位されているとすると、 ^{19}F と ^{207}Pb (天然存在比 22.6% のスピン 1/2 核) との J 結合により ^{19}F の NMR 信号は強度比 0.02:0.45:4.7:21.9:45.1:21.9:4.7:0.45:0.02 で 9 つに分裂する。観測された分裂が J 結合によるものか、同一の半値幅を持つ 9 つのガウシアンを等間隔に配置してピークフィッティングを行った(図4 (b))。その結果、強度比 0.1:0.7:4.7:21.9:44.9:22.2:4.8:0.6:0.1 が得られ、計算値とよく一致した。また、ピーク間隔から得られた J 結合定数は 2.08 kHz となり、 $\alpha\text{-PbF}_2$ の F(1) サイトの値に近かった。一般に J 結合定数は結合長に依存するため、 PbOF_2 の平均 Pb-F 結合長は $\alpha\text{-PbF}_2$ の F(1) サイトの 2.52Å 程度であろう。さらに、もし $4d$ サイトと $8f$ サイトをランダムに占めていると結合長の分布が大きくなり、したがって J 結合の分布が大きくなるため信号形状は不明瞭になるであろう。したがってすべての F は $8f$ サイトを占めて秩序化している。

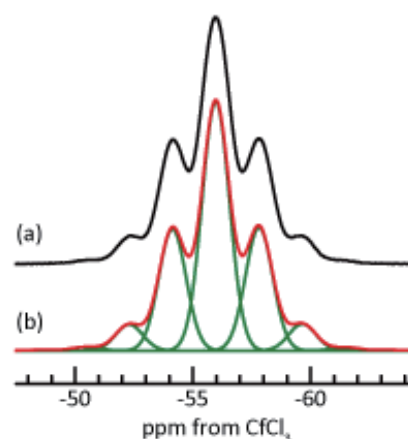


図4 (a) Pb_2OF_2 の ^{19}F MAS NMR スペクトル、(b) ピークフィッティング結果。

- [1] R. K. Harris, E. D. Becker, S. M. C. De Menezes, R. Goodfellow, and P. Granger, *Pure. Appl. Chem.* **73**, 1795 (2001).
 [2] Y. Goto, C. Tassel, Y. Noda, O. Hernandez, C. J. Pickard, M. A. Green, H. Sakaebae, N. Taguchi, Y. Uchimoto, Y. Kobayashi, and H. Kageyama, *Inorg. Chem.* **56**, 4840 (2017).
 [3] K. Hayashi, P. V. Sushko, Y. Hashimoto, A. L. Shluger, and H. Hosono, *Nat. Commun.* **5**, 3515 (2014).
 [4] Y. Inaguma, K. Ueda, T. Katsumata, and Y. Noda, *J. Solid State Chem.* **277**, 363 (2019).
 [5] B. Bureau, G. Sully, J.Y. Buzaré, and J. Emery, *Chem. Phys.* **249**, 89 (1999).

希少元素を含まない高移動度非晶質半導体の開発とデバイス応用

研究計画A03 東京大学 廣瀬 靖、長谷川 哲也

本研究グループでは、複合アニオン化合物薄膜の電子機能探索やデバイス応用に取り組んでいる。本稿では、希少元素を含まない高移動度の非晶質半導体である Zn-O-X (X=N, S) に関する最近の研究成果について紹介する。

非晶質半導体は大面積基板上に均一な薄膜を低温で作製可能なことから、フラットパネルディスプレイ用の薄膜トランジスタ (TFT) やプラスチックを基板に用いたフレキシブル素子に広く応用されている^[1]。実用材料としては水素化非晶質シリコンが用いられてきたが、キャリア移動度が低く ($< 2 \text{ cm}^2\text{V}^{-1}\text{s}^{-1}$) 動作速度に限界があった。この問題を解決する材料として、非晶質酸化物半導体の実用化が急速に進んでいる。非晶質酸化物半導体は s 電子ブロック金属の酸化物 (主に ZnO, Ga₂O₃, In₂O₃, SnO₂) の固溶体で、イオン性が強く等方的な金属 s 軌道で伝導帯が構成されるため、構造が乱れた非晶質でも高い電子移動度を示す (In-Ga-Zn-O (a-IGZO) では $> 10 \text{ cm}^2\text{V}^{-1}\text{s}^{-1}$ 、In-Zn-O では $100 \text{ cm}^2\text{V}^{-1}\text{s}^{-1}$)。しかし、これらの材料は希少金属である In を主成分に含むため、代替材料の開発が望まれている。

従来、非晶質酸化物半導体は、結晶構造の異なる金属酸化物の固溶による非晶質化を戦略として開発されてきた。しかし最近、ZnO (ウルツ鉱型構造) と Zn₃N₂ (逆ピックスバイト型構造) の固

溶体である非晶質酸化亜鉛 (a-ZnON) において、IZO を超える極めて高い電子移動度 ($> 100 \text{ cm}^2\text{V}^{-1}\text{s}^{-1}$) と優れた TFT 特性が報告された^[2,3]。我々は a-ZnON 薄膜の高い移動度に興味を持ち、非晶質複合アニオン酸化物薄膜の研究を開始した。従来、a-ZnON 薄膜は反応性スパッタリング法で作製されてきたが、ターゲットからの放射熱による基板加熱などによって、ZnO や Zn₃N₂ の微結晶が薄膜中に生成することが報告されていた。我々は、微結晶を含まない非晶質性の高い薄膜を合成できれば伝導電子の粒界散乱が抑制され、さらなる高移動度化が可能であると考えた。そこで、ターゲットからの放射の影響が小さいパルスレーザー堆積 (PLD) 法による a-ZnON 薄膜の合成に取り組んだ。ECR プラズマソースからの N ラジカル供給量とエキシマレーザーのフルエンスを最適化することで、薄膜は完全に非晶質化し、過去最高となる $> 200 \text{ cm}^2\text{V}^{-1}\text{s}^{-1}$ の電子移動度を実現した (図1)^[4]。

次に、高い移動度 (電気伝導度)、低プロセス温度、非晶質性に起因する低格子熱伝導といった a-ZnON の特性に注目し、フレキシブルな熱電変換素子への応用を着想した。a-ZnON の熱電変換特性は知られていなかったため、キャリア濃度とゼーベック係数および熱伝導率の関係を評価した^[5] (A03 森グループとの共同研究)。その結果、a-ZnON は a-IGZO をはじめとする非晶

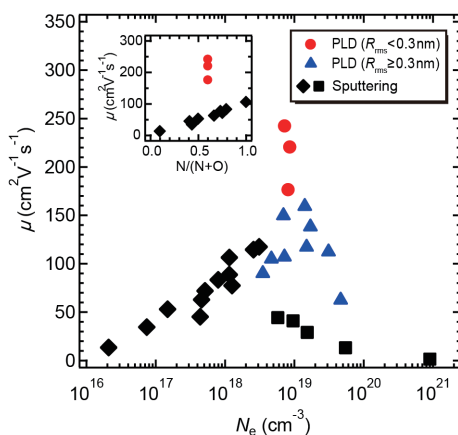


図1 PLD 法およびスパッタ法で作製した a-ZnON 薄膜の移動度 μ と電子濃度 N_e の関係^[4]。内包図は μ と組成の関係。

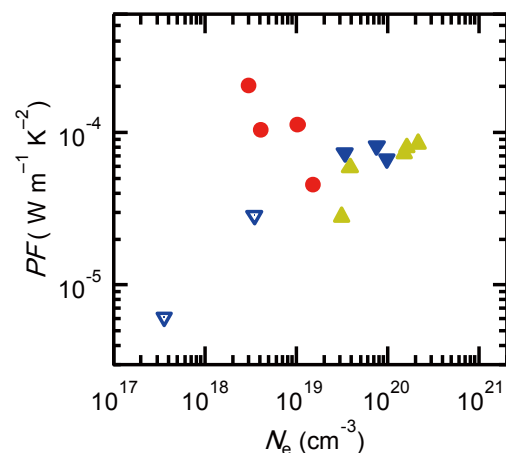


図2 a-ZnON 薄膜 (●)、IZO (▲)、IGZO (▼) のパワーファクター^[5]。

質酸化物半導体よりも低キャリア濃度領域で大きなゼーベック係数を有し、室温において非晶質酸化物半導体の約2倍のパワーファクター($\sim 200 \mu\text{V m}^{-1}\text{K}^2$)と無次元性能指数 ZT (~ 0.04)を示すことが明らかになった(図2)。高いゼーベック係数の起源としては、単一カチオンのみを含むために伝導帯下端の空間的なゆらぎが小さく、共有結合性の強い Zn-N 結合によって誘電率が增大するために、低キャリア濃度まで縮退状態を保つことがあげられる。

a-ZnON は非晶質半導体として優れた特性を示す一方で、大気中で徐々に酸化されて特性が悪化する。そこで、大気中でも安定な複合アニオン系非晶質半導体材料にも取り組んでいる。このような材料の候補として、ZnO と ZnS(閃亜鉛鉱型構造)の固溶体である非晶質酸硫化亜鉛(a-ZnOS)に注目した。ZnO と ZnS の焼結体を交互にレーザーアブレーションして薄膜を堆積することで a-ZnOS 薄膜の合成に成功した。さらに、低キャリア濃度(10^{17} - 10^{18} cm^{-3})でも a-IGZO に匹敵する電子移動度(10 - $15 \text{ cm}^2\text{s}^{-1}\text{V}^{-1}$)を示し、大気中で1年以上保管しても特性の劣化が見られないことを明らかにした^[6]。電子移動度は a-ZnON に比べると低い、 S^{2-} のイオン半径が N^{3-} に比べて大きく、伝導帯を構成する Zn 4s 軌道の重なりが減少するためと考えている。また、合成した a-ZnOS 薄膜をチャンネル層に用いた TFT を作製し、典型的な n 型電界効果トランジスタ動作を確認した(図3)。

非晶質複合アニオン酸化物半導体に関する研究は a-ZnON の TFT 応用が盛んに行われる一方で、構造と物性に関する詳細な研究や系統的な材料探索の例は未だ少ない。本新学術領域研究における共同研究を通じて、非晶質複合アニオン化合物の物性の理解や、新たな機能・応用の開拓を進めていきたい。

本稿では非晶質複合アニオン酸化物半導体に関する最近の研究成果を報告したが、我々のグループでは、複合アニオン化合物の単結晶/多結晶薄膜の合成やデバイス応用にも精力的に取り組んでいる。複合アニオン化合物の薄膜化に興味のある方はぜひご連絡いただきたい。

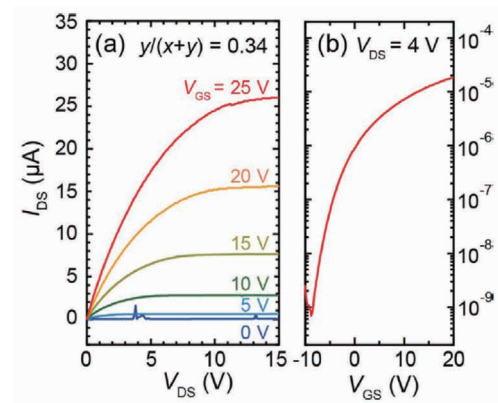


図3 a-ZnOS 薄膜をチャンネル層に用いた TFT の (a)出力特性と(b)伝達特性^[6]。明瞭な n 型 FET 特性が確認できる。

[1] T. Kamiya, et al., *Sci. Technol. Adv. Mater.* 2010, **11**, 044305.
 [2] Y. Ye et al., *J. Appl. Phys.* 2009, **106**, 074512.
 [3] H.-S. Kim et al., *Sci. Rep.* 2013, **3**, 1459.
 [4] T. Yamazaki et al., *Appl. Phys. Lett.* 2016, **109**, 262101.
 [5] Y. Hirose et al., *Appl. Phys. Lett.* 2016, **109**, 262101.
 [6] Y. Zhu et al., *Adv. Electron. Mater.* 2020, **6**, 1900602.

複合アニオン新学術領域 第7回若手スクール

令和元年8月28－30日、高野山大学 松下講堂黎明館にて開催された合同班会議と並行して、宿坊 天徳院にて第7回若手スクールを開催しました。本スクールでは、事前アンケートにより学生をグループ分けし、28日午前のショートプレゼンと共同研究企画立案を行いました。会場の都合により10名程度のグループ発表にせざるを得ず、質疑応答などに不安もありましたが、結果的に少人数でのプレゼンが良い効果をもたらしたようで、学生間での活発な質疑応答が見られ、共同研究企画立案に向けた情報収集を積極的に行えました。

堂免先生の特別講演の後、28日午後から共同研究企画立案を行いました。今回の共同研究企画では、この後二年間、実際に研究を行うことを使命としたため、グループ内のB4、M1、D1、D2を共同研究企画立案の対象者とし、M2、D3は全体会議に参加しました。共同研究企画を練るにあたり、インターネット環境が悪い状況だったため文献調査が満足にできないという悪条件でしたが、学生は熱心に話し合い、関連の研究者に積極的に質問に行くなど、できる範囲で情報を収集していました。2日目夕方の企画発表

では全てのグループがレベルの高いプレゼンを行い、先生方の関心を集めていました。発表が終わった2日目夜以降は、共同研究に協力してもらいたい先生方に声かけを行い、今後のスケジュールを詰める様子が見られました。各グループのテーマは次の通りです。

- A) フッ化物をベースとする新規複合アニオン化合物の合成
- B) ランタノイド種還元による新規酸水素化合物の合成
- C) 可視光水分解を目指した新規酸硫化物の合成と光触媒特性評価
- D) カチオン伝導に及ぼす混合アニオン効果の検証
- E) 複合アニオン化 POM 修飾による LDH の表面特性の制御と光触媒特性評価

学生が活発に議論する姿がとても頼もしく、素晴らしい研究成果が出ることを確信しました。本企画は次年度も継続しますので、引き続き先生方の積極的な参画をお願いいたします。



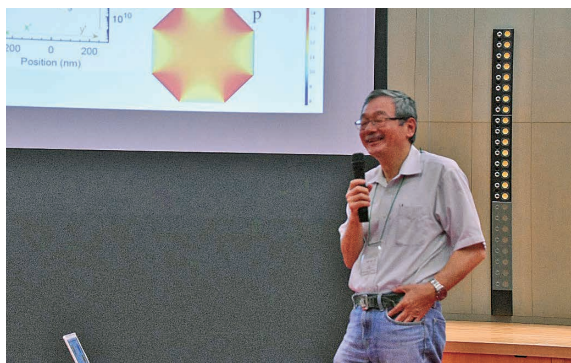
宿坊 天徳院における共同研究企画立案の様子

(文責：A02 九州大学 稲田 幹)

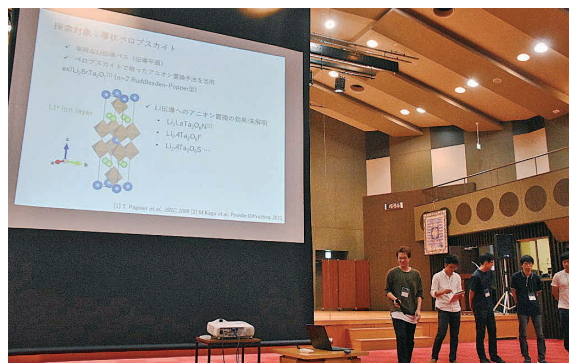
複合アニオン新学術領域 合同班会議

2019年9月28日から30日にわたり、高野山大学黎明館にて、本新学術領域研究の合同班会議が開催されました。今回の会議は新加入の公募研究者を含むA01、A02、A03の各研究領域のすべての計画・公募研究者による共同研究の進捗報告および今後の方針の策定を目的として行われました。山々に囲まれた「天空の聖地」高野山に113名（うち学生48名を含む）の領域参加者が集まり、活発な議論が行われました。28日の午後には評価委員の堂免一成先生から、高いエネルギー変換効率を有する粉末光触媒を用

いた水分解やパネル状光触媒を用いた太陽光照射下での大規模な水分解の実証についてご講演いただきました。また、翌日には若手スクールによってまとめられた学生による共同研究提案が行われました。本会議を起点として若手を中心とした新たな共同研究が始動されることになり、次回以降の会議では複合アニオン物質研究の新たな展開について報告があることが期待されます。



堂免評価委員による特別講演の様子



若手による共同研究提案の様子



宿坊での様子



参加者一同

(文責：A03 東京工業大学 元素戦略研究センター 松石 聡)

環太平洋セラミックス協会会議（PACRIM-13）報告

2019年10月27日～11月1日（講演会は10月31日まで）の会期で、沖縄コンベンションセンターにて環太平洋セラミックス協会会議（The 13th Pacific Rim Conference of Ceramic Societies, PACRIM-13）が開催されました。本複合アニオン会議からも、主催セッションとして、Symposium 14（Advanced structure analysis and characterization of ceramic materials セラミック材料の先進構造解析と評価、セッション委員長、八島 正知教授（A02 分担、東京工業大学））および Symposium 19（Mixed anion compounds for novel functionalities 新規機能性のための複合アニオン化合物、セッション委員長、林（A02 代表、九州大学））が実施されました。Symposium 14 では合計 7 件の招待講演、13 件の一般公演、20 件のポスター講演、Symposium 19 では、合計 8 件の基調・招待講演、20 件の一般公演、17 件のポスター発表があり、両セッションで合同セッション講演も実施し、参加者はのべ約 100 名でした。酸フッ化物、ペロブスカイト系化合物、合成戦略、エレクトライド・水素化物、光機能、電池材料、電子と構造設計、構造解析と拡散制御、回折法、誘電体、ガラス、光学材料、酸化物イオン伝導体、超伝導体に関わる課題について熱く議論が交わされました。加えて、領域アドバイザーの Prof. Poepellemaier からの特別講演も急遽実施されました。この件は、チタン酸ストロンチウムを担体としたプラスチック分解触媒に関連する成果で

あり、会議途中でも多数のマスコミからの引き合いを受けている注目案件でした。セッションへの参加者の出身国は日本、米国、フランス、香港、韓国、中国など多様であり、うち、新学術領域 複合アニオン領域の研究者が半数以上の発表を行っています。領域内外での協同研究の進展に関する協議を行い、また本領域がセラミックス研究の研究コミュニティ内で本領域が固体化学研究の受け皿として重要な役割を果たすべきことが確認されました。

温かな海岸沿いにある本会場は広大ですが、セッションの講演会場は、40 名ほどで席が全て埋まるほどのさほど大きくないので、時には立ち見の聴衆が廊下まで溢れる事になり、急遽テレビモニターを廊下に設置してプレゼンテーションを投影するなどの措置を取っていただきました。広大な展示ホールでのポスターセッションでは、賞を賭けて（?）、滑らかな英語での説明を用意している学生諸氏が印象的でした。

本会議には、筆者個人としては組織委員として 2 年以上準備に携わってきて、いろいろな立場での仕事を終える事ができて、一息ついているところでもあります。私の研究室や、複合アニオン領域に参画されている研究室の多くの学生諸氏にとっても、自身の発表のみならず、コミュニティの形成や、学会運営、および、学会諸々の事を楽しむことに関して得るものが多かったのではないのでしょうか。また、参加者数の観点だけでも 1500 余名の参加を得て大成

功と言えるものですが、とりわけ組織委員長や組織委員会の方々の意気込みやご尽力、よく組織建てられた運営には感銘を受ける程で大変勉強になりました。

今回の学会参加も含め、何度か沖縄を訪れる事で、沖縄の温かい気候と雰囲気、郷土料理が古酒とリンクするようになり、お酒を頂くごとに再度訪れたいと思うようになって

いたところなのですが、本会議の会期中に首里城の焼失という非常に残念でかつ驚くべき事件がありました。今後もPACRIM-13が焼失事件と共に常に思い起こされる事でしょう。再建された首里城を訪れる事ができるようになる頃には、現時点からの個々の研究や研究分野の進展が明快にアピールできますよう、尽力して参りましょう。



会議受付の様子



Session 19の様子
(Keynote: Prof. Kageyama, Chair: Prof. Poepellemaier)

第80回応用物理学会秋季学術講演会 シンポジウム開催報告

2019年9月19日に応用物理学会秋季学術講演会内シンポジウムとして、「複合アニオン化合物を用いた新機能性材料開発」を開催した。世話人は、松石聡（東工大）、近松彰（東北大）、笹川崇男（東工大）、荻野拓（産総研）（敬称略）である。本シンポジウムは、複合アニオン新学術領域及び、応用物理学会セッション9.5「新機能材料・新物性」共催によるシンポジウムとして企画された。本領域関係者には周知かと思うが、同一化合物中に複数のアニオンが含まれる物質は混合アニオン化合物と呼ばれ、物質自体以前から知られていたが最近になって「複合アニオン化合物」として一分野を形成するに至っている。複合アニオン化合物では、異なる特徴を持つ複数のアニオンが介在することで特異的な結晶構造や配位状態が得られるため、無機化合物における次世代の“機能の宝庫”となるポテンシャルを秘めている。既に光触媒特性、超伝導性、蛍光特性、イオン伝導性などが創発することが明らかとなっており、新学術領域研究を初めとして研究コミュニティも充実してきている。2018年3月の春季講演会でも同様のシンポジウムを開催したが、今回は応用に近い領域で研究をされている先生方を招いて最新トピックについて講演していただき、複合アニオン化合物の応用可能性や課題についてより詳細に議論することを意図して企画した。

シンポジウムはイントロダクトリートーク及び6件の招待講演により構成された。冒頭に世話人の荻野（産総研）より、本シンポジウムの趣旨説明及び新学術領域「複合アニオン化合物の創製と新機能」の現状説明がなされた。続いて今中信人先生（大阪大学）より、「複合アニオンを基軸とした新しいイオン伝導性固体の創成」と題して、複合アニオン化合物を用いたイオン伝導体開発について講演があった。従来塩化物や臭化物などハロゲンの伝導体としては、ハロゲン化合物が主流であったが、空気中での安定性や高温

での熱分解など様々な問題があった。そこで酸素との複合アニオン化合物をハロゲン化物伝導体として用いることで、これらの問題を解決できたとのことである。また様々な元素置換による欠陥導入と格子サイズの調整によりイオン伝導性は向上し、より高温での使用が可能になったこととも合わせて従来材料を上回る特性を実現できたとのことである。生田博志先生（名古屋大学）からは、「鉄ニクトゲン超伝導体の薄膜成長」と題し、複合アニオン化合物の薄膜成長について話題提供があった。鉄系超伝導体NdFeAs(O,F)は、相生成条件が狭く酸素量・ヒ素量を独立に制御しないと相自体が生成しないだけでなく、フッ素が酸素サイトを一部置換することで高温超伝導が発現するが、相生成と適切なフッ素置換が起こる条件が異なることから一段階で超伝導転移温度が高い薄膜を作製するのは原理的に困難とのことであった。一般的にアニオンはカチオンより制御が難しく、複数アニオンが共存する複合アニオン化合物ではこの辺りが実用化にあたっての障害になる可能性がある。桑原彰秀先生（JFCC）からは、「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」と題して、金属酸素化物の構造やイオン伝導パスを計算科学により明らかにした例について講演があった。複合アニオン化合物、中でも酸水素化物・酸窒化物・酸フッ化物は酸素・水素の配列自由度が存在する一方で、X線回折などの実験的手法での区別が困難である。ただし計算科学の進展により、様々な配位状態を仮定して安定構造を探索することで、理論的にアニオン配置や伝導パスの解析が可能になってきたとのことである。また最安定構造だけでなく、合成が高温で行われることも考慮することが重要とのことであった。大長久芳先生（(株)小糸製作所）は、「混合配位子場による新規蛍光体の開発」と題して、酸塩化物、酸フッ化物蛍光体の紹介があった。従来の蛍光体では、ストークスシフトを大きく

することは発光量の温度安定性と相反関係にあり、これらを両立することはできなかったが、複合アニオン化合物ではこれらが両立する物質が存在し、そのために近年主流になってきた青色励起でも、赤色のみを発色することで色調整が容易な蛍光体の開発に成功したとのことである。複合アニオン化合物は2種類（以上）の構造ユニットを持つことが、このような特徴を発現するポイントになっているとのことであった。岡研吾先生（近畿大学）からは、「酸フッ化物におけるアニオン秩序と機能の発現」と題して、新たに開発した酸フッ化物光触媒について発表した。ローンペアを持つ鉛の軌道の特異性と酸素・フッ素の配位状態により、酸化物よりフッ化物のバンドギャップが狭いという通常と異なる電子構造を持つこと、それにより可視光に対し光触媒活性を示すことが報告された。後藤陽介先生（首都大学東

京）からは、「層状アンチモン酸セレン化物の熱電輸送特性」と題して複合アニオン化合物の熱電特性について紹介があった。LaOSbSe₂という層状構造を持った酸セレン化物で、理論計算から非常に高い熱電特性を持つ可能性が報告されていること、この特性を実現するため、様々な元素置換を行った結果について報告された。複合アニオン化合物熱電材料はこれまで主な探索の対象となっていなかったこともあり、多くの可能性を持っていることが示唆された。

それぞれの講演に対して活発な質疑応答がなされ、また複合アニオン新学術のアクティビティを本シンポジウムで知り興味を持った、との声もいくつか寄せられた。このように盛況なシンポジウムとなったのは、ひとえにご講演いただいた講演者の先生方、及び聴講及び活発な議論に参加していただいた方々のおかげであり、この場を借りて感謝申し上げる。



複合アニオン新学術領域 3rd LOBSTER School

令和元年8月5日から7日の3日間にわたり、北陸先端科学技術大学院大学（JAIST）にて、化学結合計算用ソフトウェア LOBSTER (<http://www.cohp.de/>) の講習会、3rd LOBSTER school が当新学術領域の全面的なサポートにより開催されました。この LOBSTER School は2017年にドイツ、2018年に中国で開催されており、本開催が三度目になります（一度目・二度目の開催は当新領域とは無関係です）。講師として LOBSTER の開発者であるアーヘン工科大学の Richard Dronskowski 教授、Bernhard Eck 博士、Ryky Nelson 博士、Christina Ertural 氏、ケンブリッジ大学の Volker Deringer 博士が招かれ、国内外から25人（うち19名が学生、8名が外国人、19名が複合アニオン関係者）の生徒が講習に参加しました。3日間にわたり朝9:30から17:00まで、座学と実習が交互に行われました。生徒からは積極的に質問が出ており、休憩時間も直接講師と議論する姿も多々見られました。講習会は合宿形式で行われ、夜はテルメ金沢で宿泊し、交

流を深めました。三度目の講習ということもあり、講師陣は慣れた様子で分かりやすく実習を進めてくださいました。LOBSTER を利用することで結晶の化学結合を議論することが可能になり、複合アニオン化合物においては、カチオンと種々のアニオンの間の化学結合を理解することが可能になります。その意味において、今後ここで学んだことが今後の領域研究発展に活かされることを期待しています。

本講習は2018年7月にA02山本が、当領域の海外支援を受けてアメリカに滞在した際、Dronskowski 教授と知り合い、そこで開催の話が動き出したものです。これは複合アニオンを通じて、国際的な和が広がっていることを証明する端的な事例だと感じています。今後も複合アニオンを通じて、世界的なネットワークが広がっていくことを期待しています。最後に、当講習の講師に心より感謝を申し上げますとともに、講習の開催をサポートしてくださった JAIST、前園・本郷グループに感謝を申し上げます。

（文責：A02 山本）

国際活動支援報告－海外体験記:No.1

アメリカ ローレンス・バークレー国立研究所でのマテリアルインフォマティクス

A01公募 北海道大学大学院工学研究院 三浦 章

実験場所：アメリカ ローレンス・バークレー国立研究所（Lawrence Berkeley National Laboratory）

実験期間：令和元年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、アメリカのバークレー国立研究所にて、マテリアルインフォマティクスを主導している Ceder 教授のグループでの短期滞在をおこなった。Ceder 教授は、結晶構造や熱力学エネルギーのみならず、電子構造や合成手法も含めたデータベースである Materials Project を主導しており、近年はリテラチャーリーディングといった先進的なマテリアルインフォマティクスに関する研究を行っている。

バークレー国立研究所は、サンフランシスコ国際空港から列車に乗って約一時間、サンフランシスコ市街から対岸にある Berkeley Downtown 駅から、バスに乗って 15 - 20 分である。研究所は丘の上にあり、七面鳥や鹿に合うこともある。研究室から、ゴールデンブリッジが遠くに見え、乾季の時期であったため天気の良い日が続いた。放射線研究所が前身といった歴史的な背景があるが、現在はエネルギーやインフォマティクス、生物化学、ナノ化学などの広い分野の研究が盛んにおこなわれている。また、山を下ったところには、サンフランシスコ大学バークレー校があり、芸術や科学の研究が盛んである。シリコンバレーの中にあることもあり、街の中心部の家賃は高い。学生の多くは車で少し郊外から通っている。多様性・貧富の格差・研究教育のすばらしさなどアメリカのすべてが凝縮されたような場所であった。

Ceder 研究室は 30 人以上

の大所帯であり、私も含め常に数名の訪問研究員がいる。中国や韓国の学生や博士研究員が多く滞在しており、研究の主力を担っている。日本人の学生は私の滞在した時点ではいなかった。データの収集と解析を 8 - 10 名のグループで行っており、週に 1 度のサブグループミーティングでは進捗状況を確認し、次の問題点を洗い出していく。多国籍かつ大人数での研究の進め方を学ぶことは貴重な経験であった。計算化学やインフォマティクスのみではなく、少し実験をすることを実験予定時では考えていたのだが、実験を行うためのライセンスが手に入るのは帰国後になった。

アメリカの滞在では、Rational Synthesis といった概念を提案し、熱力学的データを用いてセラミックス合成反応の論理化を目指す研究をおこなった。試行錯誤の合成から論理化された合成への転換を目指す息の長い研究へとつなげていけそうである。得るものが非常に多い研究活動を行うことができ、筆者の体重も若干増えた。受け入れ先の Ceder 教授、Sun 博士、Bartel 博士および、このような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。



研究所からのサンフランシスコ湾の眺め



Sun 博士との記念写真

国際活動支援報告－海外体験記:No.2

フランス ICGM Montpellier (University of Montpellier)

A01公募 信州大学工学部 是津研究室 是津 信行、修士2年 藤々木 瞳、修士1年 原 健治朗

実施場所：フランス ICGM Montpellier (University of Montpellier)

実施期間：2019年10月12日(土)～2019年10月21日(月)

筆者が、モンペリエ大学での職務のために訪仏する期間にあわせて、国際活動支援のもと、本学大学院生（藤々木と原の両名）を帯同し、受入研究者の Louvain 先生（ICGM Montpellier）の研究室に約1週間滞在する予定でしたが、台風19号の上陸により渡航をキャンセルせざるをえませんでした。

結局、筆者のみが訪仏しました。モンペリエ大学での講義、博士論文審査、ICGMでのレクチャーと共同研究ミーティングを行いました。加えて、当初は帯同する学生に依頼する予定であったFT-IRのオペランド計測・解析を実施してきました。土日もなしの強硬スケジュールでしたが、大変有意義な渡航でした。

筆者は、電池材料表面の複合アニオン化による機能創発に関する研究に取り組んでいます。主に、電解液あるいは固体電解質界面で起こる副反応の能動的制御を目的としているため、異相界面で起こる副反応をその場計測し、原子・分子レベルの情報を収集することは反応全容の理解につながると考えています。加えて、異相界面で起こる副反応を能動的に制御することができれば、副反応を誘導し、より安全かつ高効率にイオンや電子を輸送可能な界面の設計が可能になるかもしれません。現行電池技術の多くは、これら界面の諸問題に関しては、どちらかという受動的なアクションが多いように思います。

受入研究者の Louvain 先生は、筆者とは異なるアプローチで、電池材料表面へのフッ素ドーピングによる機能創発に関する研究に取り組んでおられます。これはフランス電気化学エネルギーデバイス研究ネットワークの一つのプロジェクトと

して実施されており、改めて材料科学の常識を変える潮流として「複合アニオン」の注目度の高さを垣間見ました。

Louvain 先生の開発されたオペランド FT-IR 測定システムの特徴の一つとして、実験室で一般的に用いられるコインセルのジオメトリーに限りなく近いことが挙げられます。市販されている電気化学セルとは異なり、電極近傍での化学変化を計測することができます。セルはすべて自作で、細部まで工夫されている形跡がありました。充放電反応過程では溶媒とリチウムが電場の向きに応じて正・負極側に輸送されるため、IRのスペクトルは充放電により吸光度の単純な増減のみが計測されます。一方で、電極界面で電解液が分解されると、副産物由来のピークが現われて、スペクトルの変化は単純な増減ではなくなります。

酸化物表面では複雑な変化を示したIRスペクトルが、筆者らが合成した電池材料表面の複合アニオン化電極では、その変化が極めて単純化されることがわかりました。高電流密度下で充放電反応を何十サイクルと繰り返しても、スペクトル変化は常に単調であったことから、複合アニオン化によって電極表面の安定化、より正確にはルイス塩基性が極めて低くなったと言えます。これらの結果は、DFT計算や各種電気化学測定、光電子分光測定の結果と一致するものであり、筆者らのねらいを立証するものでした。1回の測定でスペクトルが300本くらい出てきます。再現性確認のために3回は測定をおこないますので、解析の手間はなかなか大変でしたが、久しぶりに興奮しました。

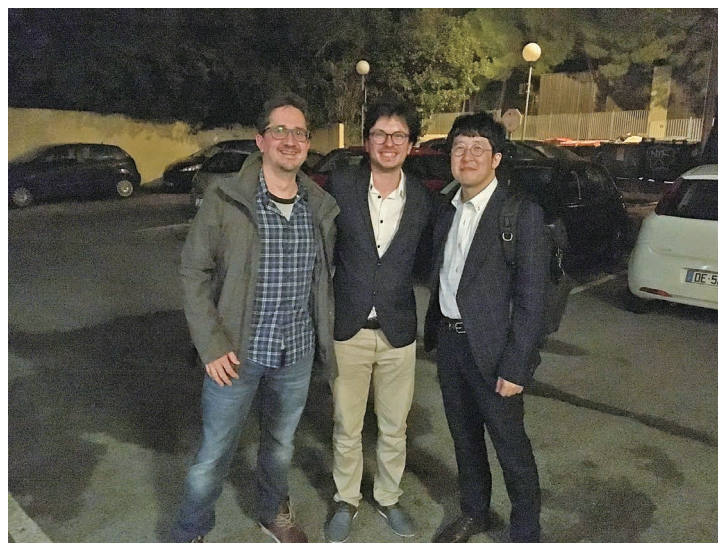
講義や講演は、ある意味想定範囲でした。一方的に講師が話す授業ではなく、双方向のやり取りで行われる講義スタイ

ルなので、日本とは違う雰囲気での講義は新鮮ではありませんでした。一方で、最も大きなカルチャーショックは博士論文審査でした。これまでも、海外の大学で博士論文審査をする機会に恵まれていきましたが、フランスが最もインパクトが高かったです。

フランス語で書かれた博士論文が郵送されてきて1ビックリ、Charlesさんの博士論文審査会が当然のようにフランス語だったことに2ビックリ、博士論文審査会の前にjury member（今回は8名）でランチ（当然、飲み物はワイン）を囲むことに3ビックリ、あらかじめ質問する順番を決めることに4ビックリ、審査会開始時間にわざと15分遅れて会場入りすることに5ビックリ、審査会に発表者の両親やフィ

アンセがいることに6ビックリ、会場の聴衆者含めて、起立・礼から始まることに7ビックリ、質疑が3時間もあることに8ビックリ。私の知る、これまでの常識が覆りました。他にもいろいろと大変だったのですが、終わってみれば、すべていい経験でした。台風の上陸がなければ、学生両名ともこの経験を共有できたとおもうと残念でなりません。次の機会には学生を帯同させたいですね。

最後に、旅券や概算払いなどの活動支援の様々な手続きをご協力いただきました、東京工業大学石谷前田研究室の千葉桂子様には深く感謝・お礼申し上げます。ありがとうございました。



お祝いパーティ後の写真：左から Louvain 先生、Charles 博士（2020年1月から博士研究員として筆者の研究グループに参画）、筆者

国際活動支援報告－海外体験記:No.3

イギリス キャベンディッシュ研究所

A02公募 北陸先端科学技術大学院大学 前園研 博士後期課程1年 内村 慶舟

実験場所：イギリス キャベンディッシュ研究所（Cavendish Laboratory）

実験期間：令和元年9月1日(日)～9月13日(日)

イギリス、ケンブリッジ大学のキャベンディッシュ研究所を訪問し、同センターの Alpha Lee 先生と、博士研究員の Yunwei Zhang 博士と研究打ち合わせを行った。

Lee 先生のグループは、物理学と機械学習を組み合わせた方法論研究を展開しており、我々グループが取り組んでいる「マテリアルズインフォマティクス」研究（データベースと機械学習等を組み合わせることで材料の設計や探索を加速させる研究）の、特に複合アニオン物質という実物質を対象とした展開に興味を寄せていた背景から、今回の訪問、および、共同研究打ち合わせに結びついた。Lee 先生のグループでは、データ科学的な予測に付いて回る「不確実性」に興味の中心をおいた研究課題に取り組んでいた。特にディープラーニングを適用した特性予測において、予測不確実性を定量的に評価する枠組みを開発されており、最終的には「そのモデルがどの程度優れているかを定量的に示すこと」を目標に据えた着眼点は非常に興味深かった。同グループ所属の Yunwei Zhang 博士は、中国・吉林大学の Yanming Ma 先生のグループ出身で、吉林大での大学院生時代から、粒子群アルゴリズムを用いた物質探索研究で我々グループと協働実績のある若手研究者である。Yunwei 博士には、滞在中後半、私が執筆に取り組んでいる「元素置換構造モデルの確率論的な取り扱い」に関する原著論文（arXiv:1911.08071）の内容構成に関して、互いに若手研究者であるという同じ高さの目線で、日々、議論につきあってもらい、内容の練り上げやフォーマリズムの構築において助力を頂いた。

この論文は、複合アニオン物質など、数%の元素置換を行った結晶系を対象とした第一原理計算のための構造モデルを考察の対象としたものである。元素置換の置換サイトに関する

場合の数は、普通に数え上げると天文学的数字になってしまうのだが、これらの構造の中には、対称性の観点から等価な構造が多く含まれており、実際に計算すべき構造（既約構造群）は数十から数百程度に減じられる。私は、このような既約構造群を効率良く探索する確率論的スキームを提案し、これをプログラム実装しパッケージ「SHRY」を開発している。置換構造の数え上げというのは、根気のいる作業であり、いわゆる順列組み合わせの数え上げから出発し、漸近展開を経て微分方程式に帰着させるという流れを構築した。しばしば頭脳を疲れさせる問題で、行き詰まったときなどは外に散歩に出かけた。ケンブリッジには、ニュートンが万有引力の法則を発見したきっかけになったと言われるりんごの木や、ワトソンとクリックが DNA の二重螺旋構造を思いついたと言われるパブなどが存在する。まさにこの地で科学が発展したのだと肌で感じることができ、少しばかり身震いがするのは初秋の寒さのせいもあるかもわからないが、しかしそれだけではないように思われた。今回の渡航は国際活動支援の援助を受けることで実現できたものであり、こういった機会を与えてくださった複合アニオン新学術領域に、この場を借りて感謝申し上げたい。



キャベンディッシュ研究所にあるマクスウェルセンター。各部屋には色の名前が付けられている。

国際活動支援報告－海外体験記:No.4

ポーランド ヴロツワフ大学での蛍光特性評価実験

A03公募 東北大学金属材料研究所 金属材料研究所 D2 小玉 翔平

実験場所：ポーランド ヴロツワフ大学 (University of Wrocław, Poland)

実験期間：令和元年9月7日(土)～9月14日(土)

新学術領域の国際活動支援をいただき、9月7日から14日までの1週間、ポーランドのヴロツワフ大学にて、無機光学材料の研究を行っている Eugeniusz Zych 教授、Malgorzata Guzik 准教授らの研究室を訪問し、共同実験を行った。また、滞在期間内に、Zych 教授が Chair を務めた国際ワークショップの International Conference on Excited States of Transition Elements (ESTE) にも参加させていただき、自己発光する複合アニオン蛍光体の研究成果について、『SELF-TRAPPED EXCITON LUMINESCENCE OF ANION-SUBSTITUTED CESIUM HAFNIUM CHLORIDE』の題で口頭発表を行い、活発な議論を行うことができた。

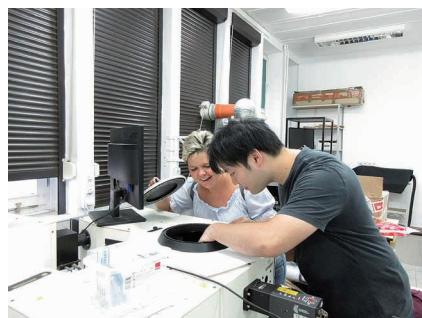
ヴロツワフはポーランド南東部ドルヌィ・シロンスク県の県都で、その西端で隣国のチェコ共和国に接する。県の面積自体は大きいですが、歴史的建造物やショッピングセンターが中心部にコンパクトにまとまっており、食事にも観光にも買い物にも困らない短期滞在にぴったりの街だった。残念ながら日本からの直行便はなく、今回の出張では成田空港から出発しワルシャワ空港で乗りついでヴロツワフへ向かった。中欧各国の都市は公共交通網、特に路面電車とバスが発達しており、ヴロツワフでも例にもれず、苦勞せず空港 - 都市部間を移動でき大変快適だった。

受け入れ教員の Guzik 准教授とは国際学会で何度かお会いしていたが、研究室を訪問し、ヴロツワフ大学での研究環境を実際に見学できたのは本滞在が初めてであり、非常に有意義な経験となった。特に印象的だったのが、今回の共同実験でも使用したフォトルミネッセンス励起-発光分光測定装置に、オリジナル設計のクライオスタットチャンバーを取り付け液体ヘリウム温度まで冷却できる環境を自作していた点

である。ラボスケールでも、工夫次第でどんな測定も可能にするという姿勢に大変刺激を受けた。

本共同研究は、有望な発光特性を有しながらもその発光メカニズムがいまだに結論付けられていないシンチレータ材料のセシウム・ハフニウム・ハロゲン化物 (Cs_2HfX_6 、X はハロゲン元素) に関するものである。実験では筆者が持ち込んだ塩臭化物の励起-発光特性を幅広い温度領域にて評価し、単一ハロゲン化物と複ハロゲン化物での発光の変化を議論できた。単一/複ハロゲン化物間で、特に 100K 以下の低温領域での発光に顕著な違いが確認され、極低温発光特性の網羅的な評価を行うことで当該材料の発光起源を解明する手掛かりをつかめる見通しを得られ、期待以上の成果になったと言える。

後日談だが、Zych 教授とは 10 月 27 日から沖縄で開催された The 13th Pacific Rim Conference of Ceramic Societies (PACRIM13) で再びお会いすることができた。Zych 教授に顔や研究を覚えていただいております。大変うれしかった。今後も交流を続けていければと思う。



Guzik 准教授 (左) と測定セットアップの調整を行う筆者 (右)

国際活動支援報告－海外体験記:No.5

オーストラリア ANSTO での中性子回折実験

A02分担 東京工業大学 八島研究室 修士2年 手島 広明、特任助教 村上 泰斗

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

実験期間：2019年11月4日(月)～11月8日(金)

今回我々は国際活動支援の経費を使用させて頂き、オーストラリア・シドニーにある ANSTO (Australian Nuclear Science and Technology Organisation) にて角度分散型の高温中性子粉末回折測定を行った。この場を借りてご支援に感謝したい。測定には Echidna (はりもぐら) という回折装置を使用し、最高 1000℃まで昇温して測定を行った。電子で散乱される X 線とは異なり中性子は原子核で散乱されるため、X 線回折測定とは異なる目線から結晶構造を見ることができる。特に X 線では見えにくい軽元素を捉えることにおいて、中性子回折は非常に強力である。

Echidna は高温および低温での測定を素早く行うことができるという点・かなりの高温での測定が可能な点で非常に有用である。実際の測定では 1 つの試料に対して室温～1000℃までの温度点 5 点を半日～丸一日で測定終了という、非常にハイペースな測定を行うことができた。マシンタイムは 5 日間あったため、多くの実験データを手に入れることができた。そのためオーストラリアまで出向いて測定することには大きな意義があったと言える。また試料のセッティングも自分たちの手で行える (もちろん装置担当者の方が教えてくれる) ので、どのような測定を行っているのか間近で見ることができると非常に勉強になった。

測定試料の準備は非常に大変である。中性子回折は透過能が高いため X 線回折測定と比べて多量の試料が必要であり、Echidna の場合は 15-20g 程度必要である (もちろん少なくとも測定はできるが回折強度は弱くなる)。同時に多量に合成しようとするれば不純物が出てしまい解析するのが難しいデータになってしまうため、少量ずつ合成する必要がある。普段はバラバラの実験をしている学生たちも、出張測定前にはお互い手伝ってなんとか試料を完成させた。また ANSTO で実験を行うた

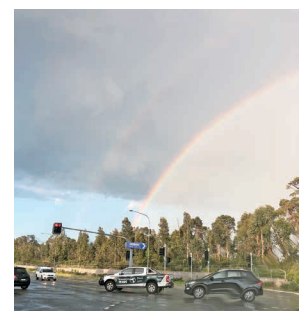
めの事務的な手続きも多い。実験のためのオーストラリアの滞在には VISA が必要であるが、この申請に意外と手間がかかる。それに加えて ANSTO の安全教育が複数あるため、早めに取り組むといいだろう。実験開始の 8 週間前までに手続きが完了していないと実験は不可能であるため注意が必要である。

実際の測定は装置担当者の方が親身になってくれる上に、測定の経過は外部からでも見ることができると、スムーズに進めることができた。前もって測定計画を綿密に練ることで時間にも心にも余裕ができ、近隣のショッピングモールでの買い物や食事を楽しむことができた。また作業スペースが広く確保できるため、測定が終わり次第すぐに解析をして次の計画をたてることも可能である。ある日には実験中に実験ホール内の別の場所で火災報知器が動作して全員外に避難するというアクシデントがあったが、その際には状況を把握できていない我々を装置担当者の方が助けてくださった。どうやらささいなトラブルだったようだが、ANSTO の危機対応はしっかりしていると再認識した。

今回の測定期間中に大雨が降った日があったのだが、雨の後に外に出るときれいな虹が見えた。よく見ると一次の虹 (主虹) だけでなく二次の虹 (副虹) までしっかりと見えている。虹のご利益があったのか、大きなトラブルもなく測定を終了でき、非常に意義のある出張実験であった。



Echidna の外観。128 本の 1 次元検出器が並んでいる



班内留学報告 No.1 : 八島研一石原研 (イオン伝導体のAIMD計算)

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

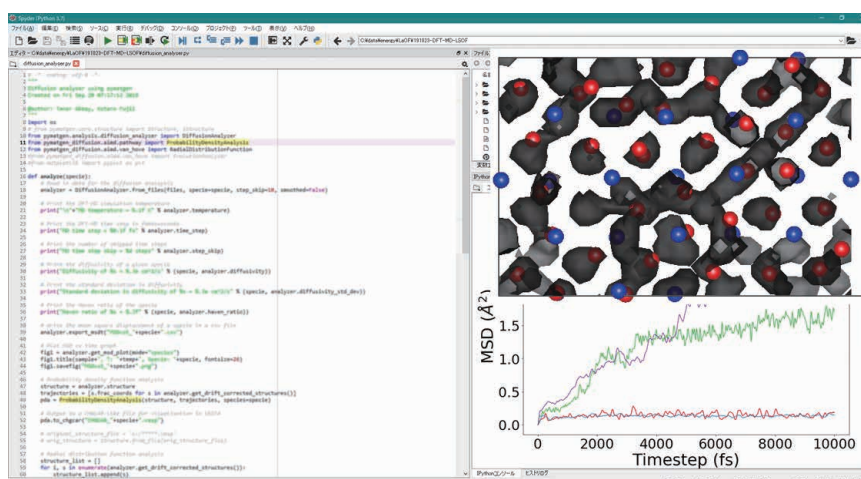
受入研究室 : 九州大学 工学研究院 石原達己教授、アクベイ タナー 教授

受入期間 : 令和元年5月29日(水)、令和元年10月2日(水)~10月3日(木)

このたび班間留学の支援を受け、九州大学 石原先生、アクベイ先生の元で第一原理分子動力学 (AIMD) 計算を学んで来ました。我々のグループが得意とする回折法に基づく構造解析では、結晶構造の平均的な描像は明らかにできるものの、局所的な原子の動きを明らかにすることは難しいのが現状です。そのため、計算科学は我々が明らかにしたい“メカニズム”を原子レベルの動きとして捉えることができるため非常に強力な手法となります。今回、あるイオン伝導体について、高温中性子回折から明らかにしたイオン伝導経路の妥当性を裏付けるために、高温状態における AIMD 計

算を実施しました。2 回目の訪問では仕掛けた計算結果を解析するツールとして Pymatgen の使い方を教わりました。Pymatgen の Diffusion Analyzer パッケージは、イオン拡散に関するモジュールが入っており、Python スクリプトで簡単に MD の結果を解析することができます。今回の訪問ではイオンの拡散経路などが計算でしっかり見えたため、今後細かい解析を進め、原子レベルのイオン伝導機構を明らかにする手がかりにしていきたいと考えています。

訪問に際しては、石原先生・アクベイ先生には大変お世話になりました。ありがとうございました。



SpyderにてPymatgenのDiffusion Analyzerモジュールを使ったPythonスクリプトを編集し、結果が出力された画面。右上の構造の図はVESTAでMD計算で得たイオンの確率密度分布。

班内留学報告 No.2 : 内田研ー陰山研 (アニオン置換型ポリ酸の合成)

東京大学 大学院総合文化研究科 広域科学専攻 博士課程 1年 下山 雄人

所属研究室 : 東京大学 大学院総合文化研究科 内田研究室

受入研究室 : 京都大学 工学研究科 陰山研究室

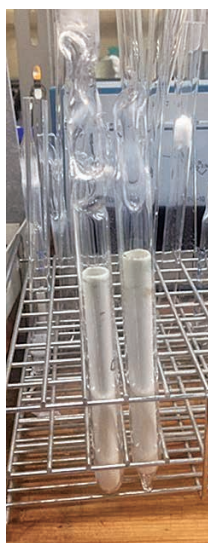
受入期間 : 2019年8月9日

2019年8月9日に新学術研究領域の班内留学制度を利用し、京都大学陰山研究室を訪問しました。陰山研では、アニオン置換型ポリ酸の合成に関するディスカッションと実際の固相合成を行いました。内田研究室では、液相合成を行っているため、固相合成によるポリ酸の合成は研究室としても初の試みとなりました。サンプル調製から、石英管の封止まで一連の流れを経験できたことは有意義なものでした。固相合成していただいたサンプルは後日受け取り、粉末X線回折測定を内田研にて行いました。測定の結果、目的化合物となるアニオン置換型のポリ酸由来の可能性のある回折ピークが観測されました。実際にカチオンとの複合化を行うためには、目的物の収率向上や単離が必要とな

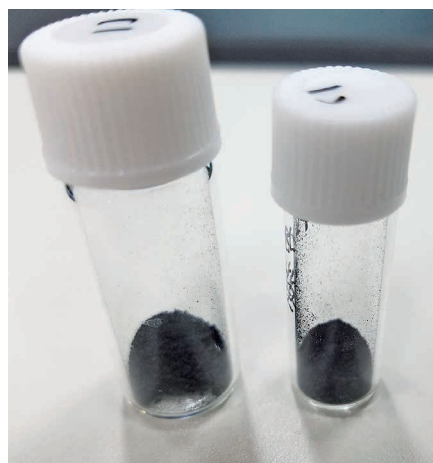
るため、複合化には至っていませんが、今後の研究につながる有用な知見が得られました。

陰山先生や所属学生の方々是非常にアクティブで、短期間の訪問とはいえその雰囲気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体感することができたのはとても良い経験となりました。また、本件とは別途で共同研究を行うこととなったことも、非常に有意義でした。

最後に、陰山先生および固相合成に関してご指導してくださった加藤さん、夏さんに感謝を申し上げます。



石英管に封入後の試料 (反応前)



固相合成で得られた粉末

班内留学報告 No.3 : 陰山研ー長谷川研 (EuVO₃薄膜の合成)

京都大学大学院 工学研究科 物質エネルギー化学専攻 修士課程1年 難波 杜人

所属研究室 : 京都大学 工学研究科 陰山研究室

受入研究室 : 東京大学 理学系研究科 長谷川研究室

受入期間 : 2019年10月30日~11月3日

2019年10月30日から11月3日の期間、新学術領域の班内留学制度により東京大学長谷川研究室を訪問させていただきました。訪問期間中はEuVO₃薄膜をパルスレーザー堆積法(PLD)により作成しました(図1)。合成した試料はCaH₂によるトポケミカル還元反応を行い、その後物性測定を行っていく予定です。

滞在期間中は実験だけでなく、お昼ご飯を食べながら最近の薄膜の研究について話し合ったり、自分の研究についてア

ドバイスをいただいたりすることができました。短い滞在期間ではありましたが、非常に多くの知識を身に着けることができ、実りある班内留学になったと思います。

今回受け入れをさせていただいた長谷川先生に深く感謝申し上げます。また、ディスカッションをさせていただいた近松先生、薄膜合成に付き添っていただいた丸山様には5日間大変お世話になりました。ありがとうございました。

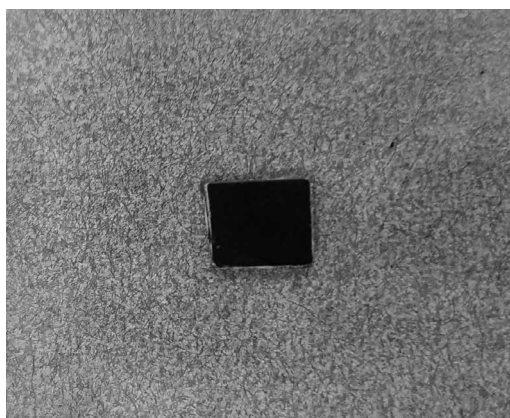


図 1. EuVO₃ 薄膜

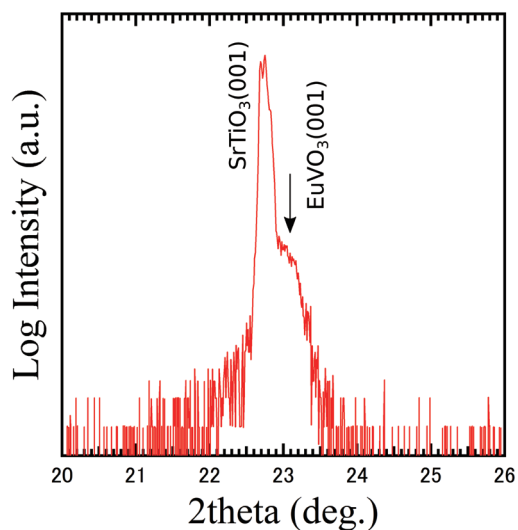


図 2. EuVO₃ 薄膜の X 線回折図

班内留学報告 No.4 : 林克郎研－林晃敏研
(硫化物系全固体電池の作製)

九州大学大学院 工学府 物質創造工学専攻 修士課程 2年 佐々木 直哉、1年 柏原 健宏

所属研究室 : 九州大学 工学研究科 林克郎研究室

受入研究室 : 大阪府立大学 工学研究科 林晃敏研究室

受入期間 : 2019年9月11日～13日

全固体電池は、電解液ではなく固体電解質を用いる事による高い安全性、使用可能な温度範囲の広さ、高エネルギー密度を兼ね備えており、現在普及しているリチウムイオン電池を超える次世代電池として注目されています。その固体電解質材料として硫化物系と酸化物系の主に2種類があります。それぞれ利点と課題がありますが、硫化物系は高イオン伝導度、密着性の良い電極 - 電解質界面の作りやすさの点で有利です。

新学術研究領域の班内留学制度を利用し、2019年9月11日から13日までの3日間、大阪府立大学林晃敏研究室を訪問しました。訪問期間中は主に硫化物系固体電解質材料である Li_3PS_4 ガラスの作製手法やそれを用いた全固体電池の一連の作製手法、また、その評価手法について学びました。

Li_3PS_4 ガラスの交流インピーダンス測定 (図1) を通して、導電率は $7.1 \times 10^{-3} \text{ S cm}^{-1}$ であると導くことができました。硫化物系全固体電池は作製プロセスがすべてグローブボックス内で行われるため、慣れない作業が多くありましたが、装置の取り扱いや試料の調整など、留意する点を丁寧に指導していただきました。

今回作製した硫化物系と私たちが主に取り扱っている酸化物系との作製プロセスにおける様々な違いを発見することができました。特に、空気中で作製することができる酸化物系の特徴を肌で感じることは大きな収穫となりました。またこれらの複合系にも大いに興味を持たれます。

最後に林晃敏先生、実験指導に多大なご尽力をいただきました林晃敏研究室の皆様へ深く感謝申し上げます。

Experimental

< In a dry Ar glove box >

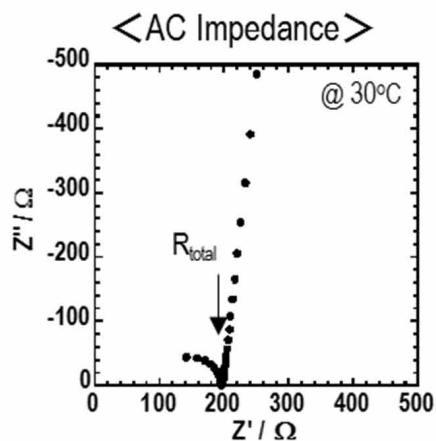
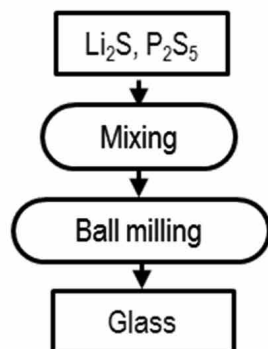


図1. Li_3PS_4 ガラスのナイキストプロット (30 °C)

アウトリーチ活動報告（抜粋、2019.6～2020.1）

2019-7-14 学都「仙台・宮城」サイエンス・デイ 2019

計画研究 A01 垣花真人氏らが、イベント「サイエンス・デイ」にて「いろいろな色。その正体を見つけよう！」と題し、光と色の科学について来場者参加体験型の出展を行った。（イベント全体の参加者は宮城県内の小学生を中心に一般参加者計 10,658 人来場）。

2019-7-20 産総研一般公開「お圧いのがお好き？ ～Some Like It Cold～」

計画研究 A01 代表 荻野拓氏らが、" お圧いのがお好き？ ～Some Like It Cold～" と題して、複合アニオン超伝導材料の紹介や、高圧力合成の体験学習などを行った（大人・小学生等 30 名参加）。

2019-8-1 神奈川大学子どもサマースクール2019

公募研究 A01 本橋輝樹氏が、神奈川大学子どもサマースクールにて「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った（小学生 26 名、親 5 名参加）。

2019-8-3 サイエンスカフェはりま No.53：夏休み特別科学アラカルト

公募研究 A02 堀越亮氏が、サイエンスカフェはりまにて“化学でひも解く世界遺産”、“ハーブティの色を操る魔術師実験”、そして“色と光のマジシャン実験”という題目の演示実験および体験実験を実施した。

2019-8-4 九州大学オープンキャンパス2019

公募研究 A02 辻雄太氏が、九州大学オープンキャンパス 2019 にて「コンピュータでみる分子の不思議」という題目でコンピュータを使ったシミュレーションの実演を行った。（高校生と保護者約 100 名参加）

2019-8-4～8-5 北海道大学オープンキャンパス体験入学

計画研究 A01 鱒淵友治氏が、高校生を対象にしたセラミックス合成の模擬講義および実験体験を行った。（高校生 6 名参加）

2019-8-5 東京大学本郷キャンパスで最先端の科学に触れてみよう

計画研究 A03 長谷川 G 廣瀬靖氏が、小学生と中高生をそれぞれ 30 名程度のグループに分け、研究内容を紹介した。また、東京大学理学部化学教室の共通実験室および長谷川哲也氏（A03 分担）の研究室を見学した。

2019-8-7 茨城県立土浦第一高等学校・東京大学研究室訪問

計画研究 A03 長谷川哲也氏が茨城県立土浦第一高等学校の学生（9 名）対象にした研究室を訪問、見学を実施した。共同実施者：近松彰（東京大学・助教）（A03 連携）

2019-8-7～8-9 愛知県立時習館高等学校 スーパーサイエンスハイスクール（SSH）特別実習

計画研究 A03 前田和彦氏が、愛知県立時習館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、“光で動く水の電解セル～”という題目の模擬講義および体験実習を行った。（高校生 2 名、教員 1 名参加）。

■ 領域ニュース

2019-8-8 2019年度理学部オープンキャンパス・研究室展示

計画研究 A03 長谷川哲也氏の研究室を、中高生を中心に 10 名程度のグループに分けラボツアー。共同実施者：近松彰（東京大学・助教）。計約 150 名が参加。（A03 連携）

2019-8-10 東京工業大学オープンキャンパス2019

計画研究 A03 前田和彦氏が、東京工業大学オープンキャンパス 2019 にて高校生 30 名を研究室に受け入れ、複合アニオン化合物の合成装置、機能評価装置の説明を行った。

2019-8-17 桐蔭学園高校生へのラボゼミ（講義・実験）

計画研究 A02 八島正知氏が、高校生を研究室に招き、複合アニオン系を含む材料科学・化学のおもしろさ伝える講義および実験を行った。

2019-9-11 出張講義

計画研究 A01 殷しゅう氏が、中国瀋陽師範大学に於いて「光応答機能材料の創製と機能」を題として、出張講義を行った。（研究者、大学院生、計 60 人出席）

2019-9-26 十日市場中学生と模擬実験

計画研究 A02 山本隆文氏が横浜市立十日市場中学校の三年生（4 名）を対象に模擬実験を行なった。

2019-9-28 埼玉県立浦和第一女子高等学校 スーパーサイエンスハイスクール（SSH）特別実習

計画研究 A03 前田和彦氏が、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った。（高校生 10 名、教員 2 名参加）。

2019-9-28 埼玉県立浦和第一女子高等学校 スーパーサイエンスハイスクール（SSH）特別実習

計画研究 A03 前田和彦氏が、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った。（高校生 10 名、教員 2 名参加）。

2019-10-1 島根県立出雲高校生へ向けての講演

領域代表・計画研究 A01 陰山洋氏が、「サイエンスの考え方」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った。

2019-10-2 島根県立出雲高校生を対象とした模擬実験

領域代表・計画研究 A01 陰山洋氏が、出雲高校生約 40 名を京都大学工学研究科の化学系へ受け入れ、京都大学桂キャンパスの陰山研究室（A01 陰山）、阿部研究室（A03 阿部）を含めた 5 研究室にて超伝導実験や光触媒実験により、研修を行なった。

2019-10-16	環境調和材料工学教育プログラム集中講義
公募研究 A03 今中信人氏が、室蘭工業大学にて、“循環型社会形成論”という演題の講義を行った。	
2019-10-26	学習院大学オープンキャンパス2019での模擬講義
計画研究 A01 稲熊宜之氏が、高校生およびその保護者を対象に“物質探索の醍醐味 一無機化合物を例として”と題して出張講義を行った（高校生および父兄約 40 名が参加）。	
2019-10-26	学習院大学オープンキャンパス2019での研究室見学
計画研究 A03 稲熊宜之氏および植田紘一郎氏が、大学オープンキャンパス 2019 にて、研究室見学を実施した（高校生および保護者のべ約 30 名参加）。	
2019-11-7	高校生見学会
計画研究 A03 前田和彦氏が、東京都立国分寺高等学校の生徒 16 名と教員 1 名の研究室見学を受け入れ、「人工光合成への化学的アプローチ」と題する講演を行った。	
2019-11-8	膳所高校スーパーサイエンスハイスクール講義
計画研究 A03 田部 勢津久氏が、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を行った。（参加者 25 名）	
2019-11-15	情報機構セミナー
計画研究 A01 垣花真人氏が、情報機構セミナーにおいて「蛍光体・触媒から電池材料・バイオマテリアルまで 材料探索・高機能化に向けた無機材料合成プロセス」と題して、複合アニオンを含む種々の化合物の合成手法に関する説明を講義形式で行った（一般 10 名参加）。	
2019-11-17	青少年のための科学の祭典 奈良大会
公募研究 A02 堀越亮氏が、青少年のための科学の祭典・奈良大会にて、“最先端のトピックス「ミックス・セラミックス」”というタイトルのブースを出展した。高校生以上の来場者には複合アニオン化合物の合成と構造、物性を解説し、小中学生にはピンポン玉を使った構造模型の作り方を紹介した。（高校生以上 11 名、そのほか 24 名）	
2019-11-22	サイエンス&テクノロジーセミナー
計画研究 A03 田部 勢津久氏が、サイエンス&テクノロジーセミナーにおいて「希土類蛍光体・セラミック蛍光体の基礎、特性と効率の支配因子と物性評価法」について 5 時間講演を行った。	

発表論文リスト (2019.6 ~)

1. H. Ubukata, T. Broux, F. Takeiri, K. Shitara, H. Yamashita, A. Kuwabara, G. Kobayashi, and H. Kageyama, Hydride Conductivity in an Anion-Ordered Fluorite Structure LnHO with an Enlarged Bottleneck, *Chem. Mater.*, **31**, 7360-7366, 2019. DOI:10.1021/acs.chemmater.9b01968
2. D. Kato, R. Abe, and H. Kageyama, Extended Layer-by-Layer Madelung Potential Analysis on Layered Oxohalides Photocatalysts and Other Layered Systems, *J. Mater. Chem. A*, **7**, 19846-19851, 2019, DOI: 10.1039/C9TA05201A.
3. H. Kageyama, T. Yajima, Y. Tsujimoto, T. Yamamoto, C. Tassel, and Y. Kobayashi, Exploring Structures and Properties through Anion Chemistry, *Bulletin of the Chemical Society of Japan*, **92**, 1349-1357, 2020, DOI: 10.1246/bcsj.20190095
4. W. A. E. Prabowo, Subagjo, Nugraha, M. K. Agusta, A. G. Saputro, S. Rustad, R. Maezono, W. A. Diño and H. K. Dipojono, Density functional study of methyl butanoate adsorption and its C–O bonds cleavage on MoS₂-based catalyst with various loads of Ni promoters, *Journal of Physics: Condensed Matter*, **31**, 365001 (12pp), 2019, DOI: 10.1088/1361-648X/ab2400.
5. H. Takagishi, T. Masuda, T. Shimoda, R. Maezono, and K. Hongo, Method for the Calculation of the Hamaker-constants of Organic Materials by the Lifshitz Macroscopic Approach With DFT, *The Journal of Physical Chemistry. A*, **123**, 8726-8733, 2019, DOI: 10.1021/acs.jpca.9b06433
6. R. Ohtani, R. Yamamoto, H. Ohtsu, M. Kawano, J. Pirillo, Y. Hijikata, M. Sadakiyo, L. F. Lindoy, and S. Hayami, Consecutive oxidative additions of iodine on undulating 2D coordination polymers: Formation of I-Pt-I chains and inhomogeneous layers, *Dalton Transactions*, **48**, 7198-7202, 2019, DOI: 10.1039/c8dt04624g.
7. F. Kobayashi, R. Ohtani, S. Teraoka, M. Yoshida, M. Kato, Y. Zhang, L. F. Lindoy, S. Hayami, and M. Nakamura, Phosphorescence at low temperature by external heavy-atom effect in zinc(II) clusters, *Chemistry A-European Journal*, **25**, 5875-5879, 2019, DOI: 10.1002/chem.201900343.
8. T. Hiraoka, R. Ohtani, M. Nakamura, L. F. Lindoy, and S. Hayami, Water induced breaking of the coulombic ordering in a room temperature ionic liquid metal complex, *Chemistry A-European Journal*, **25**, 7521-7525, 2019, DOI: 10.1002/chem.201900069.
9. F. Kobayashi, R. Ohtani, M. Nakamura, L. F. Lindoy, and S. Hayami, Slow Magnetic Relaxation Triggered by a Structural Phase Transition in Long-Chain Alkylated Cobalt(II) Single-Ion Magnets, *Inorganic Chemistry*, **58**, 7409-7415, 2019, DOI: 10.1021/acs.inorgchem.9b00543.
10. M. Saito, K. Arai, N. Uekusa, N. Tominaga, and T. Motohashi, Thermogravimetric and desorbed-gas analyses of perovskite-type Ba(Zn_xNb_{1-x})O_y(OH)_z, *Journal of the Ceramic Society of Japan*, 2019.
11. Y. Ishii, Y. Ouchi, S. Kawaguchi, H. Ishibashi, Y. Kubota, and S. Mori, Glassy anomalies in the lattice heat capacity of a crystalline solid caused by ferroelectric fluctuation, *Physical Review Materials*, **3**, 084414/1-5, 2019, DOI: 10.1103/PhysRevMaterials.3.084414.
12. S. Kitagawa, T. Kawamura, K. Ishida, Y. Mizukami, S. Kasahara, T. Shibauchi, T. Terashima, and Y. Matsuda, Universal relationship between low-energy antiferromagnetic fluctuations and superconductivity in BaFe₂(As_{1-x}P_x)₂, *Physical Review B*, **100**, 060503(R), 2019, DOI: 10.1103/PhysRevB.100.060503.
13. H. Wu, C. Chang, D. Lu, K. Maeda, and C. Hu, Synergistic Effect of Hydrochloric Acid and Phytic Acid Doping on Polyaniline-Coupled g-C₃N₄ Nanosheets for Photocatalytic Cr(VI) Reduction and Dye Degradation, *ACS Appl. Mater. Interfaces*, **11**, 35702-35712, 2019 DOI: 10.1021/acsami.9b10555.

14. J. Ueda, and S.Tanabe, Review of luminescent properties of Ce³⁺-doped garnet phosphors: New insight into the effect of crystal and electronic structure, *Opt. Mater. X*, **1**, 100018 (19p), 2019, DOI:10.1016/j.omx.2019.100018.
15. 上田純平、許健、田部勢津久, 透光性セラミック長残光蛍光体の開発と高性能化, *レーザー研究*, **47**, 428-432, 2019.
16. N. Nunotani, M.R.I.B. Misran, M. Inada, T. Uchiyama, T. Uchimoto, and N. Imanaka, Structural environment of chloride ion - conducting solids based on lanthanum oxychloride, *Journal of the American Ceramic Society*, **103**, 297-303, 2020, DOI: 10.1111/jace.16727.
17. N. Hirayama, M. Ochi, and K. Kuroki, Theoretical study of fluorine doping in layered LaOBiS₂-type compounds, **100**, 125201-(1-8), 2019, DOI: 10.1103/PhysRevB.100.125201.
18. M. Ochi and K. Kuroki, Comparative First-Principles Study of Antiperovskite Oxides and Nitrides as Thermo-electric Material: Multiple Dirac Cones, Low-Dimensional Band Dispersion, and High Valley Degeneracy, *Physical Review Applied*, **12**, 034009-(1-15), 2019, DOI: 10.1103/PhysRevApplied.12.034009.
19. T. Yamamoto, H. W. T. Morgan, D. Zeng, T. Kawakami, M. Amano-Patino, M. A. Hayward, H. Kageyama, and J. E. McGrady, Pressure-Induced Transitions in the 1-Dimensional Vanadium Oxyhydrides Sr₂VO₃H and Sr₃V₂O₅H₂, and Comparison to 2-Dimensional SrVO₂H, *Inorg. Chem.*, **58**, 15393-15400, 2019, DOI: 10.1021/acs.inorgchem.9b02459.
20. T. Murakami, Y. Nambu, T. Koretsune, G. Xiangyu, T. Yamamoto, C. M. Brown, and H. Kageyama, Realization of interlayer ferromagnetic interaction in MnSb₂Te₄ toward the magnetic Weyl semimetal state, *Phys. Rev. B.*, **100**, 195103/1-6, 2019, DOI: 10.1103/PhysRevB.100.195103.
21. S.Yin and Y. Asakura, Recent research progress on mixed valence state tungsten based materials, *Tungsten*, **1**, 5-18, 2019, DOI: 10.1007/s42864-019-00001-0.
22. Y.Asakura, Y.Nishimura, Y.Masubuchi, and S.Yin, Utility of ZnGa₂O₄ nanoparticles obtained hydrothermally for preparation of GaN:ZnO solid solution nanoparticles and transparent film, *Eur. J. Inorg. Chem.*, **2019**, 1999-2005, 2019,. DOI: 10.1002/ejic.201900045
23. Uyi Sulaeman, Richo Dwi Permadi, Dian Riana Ningsih, Hartiwi Diastuti, Anung Riapanitra, Shu Yin, The surface modification of Ag₃PO₄ using anionic platinum complexes for enhanced visible-light photocatalytic activity, *Mater. Lett.*, **259**, 126848, 2019. DOI: 10.1016/j.matlet.2019.126848.
24. J.W.WANG, Y.ASAKURA, and S.YIN, Preparation of (Zn_{1-x}Ge)(N₂O_x) nanoparticles with enhanced NOx decomposition activity under visible light irradiation by nitridation of Zn₂GeO₄, nanoparticles designed precisely, *Nanoscale*, **11**, 20151-20160, 2019, DOI: 10.1039/c9nr05244e.
25. P.Sauerschnig, K. Tsuchiya, T. Tanak, Y. Michiue, O. Sologub, S.Yin, A. Yoshikawa, T. Shishido, Takao Mori, On the thermoelectric and magnetic properties, hardness, and crystal structure of the higher boride YbB₆₆, *J. Alloys Compd.*, **813**, 152182, 2020, DOI: 10.1016/j.jallcom.2019.152182.
26. W.NING, Z.ZHAO, H.CHANG, Z.GU, B.ZHANG, S.YIN, and J.FAN, Photocatalytic degrade of ofloxacin by ZnO/Cs_xWO₃ composite synthesized by two step method: A kinetic study, *Funct.Mater. Lett.*, **12**, 1950068 , 2019, DOI: 10.1142/S1793604719500681.
27. Y. Masubuchi, S. Ohtaki, K. Fujii, M. Yashima, M. Higuchi, S. Kikkawa, Preparation and thermal stability of oxynitride perovskite solid solution Sr_{1-x}La_xTa_{1-x}Ti_xO₂N, *Journal of the European Ceramic Society*, **2019**, DOI: 10.1016/j.jeurceramsoc.2019.10.004. in press

28. K. S. Qin, T. Ichibha, K. Hongo, and R. Maezono, Inconsistencies in ab initio evaluations of non-additive contributions of DNA stacking energies, *Chemical Physics*, **529**, 110554, 2020, DOI: 10.1016/j.chemphys.2019.110554
29. T. Ichibha, A. Benali, K. Hongo, R. Maezono, Ti interstitial flows giving rutile TiO₂ reoxidation process enhancement in (001) surface, *Physical Review Materials*, **3**, 125801, 2019.
30. 岡 研吾, アニオンが秩序配列した酸フッ化物の創製とその機能, *セラミックス*, **54**, 625-628, 2019
31. S. Nishioka, T. Kanazawa, K. Shibata, Y. Tsujimoto, H. C. zur-Loye, K. Maeda, A Zinc-Based Oxysulfide Photocatalyst SrZn₂S₂O Capable of Reducing and Oxidizing Water, *Dalton Trans.*, **48**, 15778-15781, 2019, DOI: 10.1039/c9dt03699g.
32. T. Yatsui, Y. Nakahira, Y. Nakamura, T. Morimoto, Y. Kato, M. Yamamoto, T. Yoshida, K. Iida, and K. Nobusada, Realization of red shift of absorption spectra using optical near-field effect, *Nanotech.*, **30**, 34LT02, 2019, DOI: 10.1103/PhysRevMaterials.3.125801
33. H. Sudrajat, D. Dhakal, M. Kitta, T. Sasaki, A. Ozawa, S. Babel, T. Yoshida, N. Ichikuni, and H. Onishi, Electron Population and Water Splitting Activity Controlled by Strontium Cations Doped in KTaO₃ Photocatalysts, *J. Phys. Chem. C*, **123**, 18387, 2019, DOI: 10.1021/acs.jpcc.9b03640
34. T. Mitsudome, S. Fujita, M. Sheng, J. Yamasaki, K. Kobayashi, T. Yoshida, Z. Maeno, T. Mizugaki, K. Jitsukawa, and K. Kaneda, Air-Stable and Reusable Cobalt Ion-doped Titanium Oxide Catalyst for Alkene Hydrosilylation, *Green Chem*, **21**, 4566 – 4570, 2019, DOI: 10.1039/C9GC01981B
35. T. Murakami, Y. Nambu, T. Koretsune, G. Xiangyu, T. Yamamoto, C. M. Brown, and H. Kageyama, Realization of interlayer ferromagnetic interaction in MnSb₂Te₄ toward the magnetic Weyl semimetal state, *Phys. Rev. B*, **100**, 195103, 2019, DOI: 10.1103/PhysRevB.100.195103.
36. T. Yamamoto, H. W. T. Morgan, D. Zeng, T. Kawakami, M. A. Patino, J. E. McGrady, M. A. Hayward, H. Kageyama, Pressure-induced transitions in the 1-dimensional vanadium oxyhydrides Sr₂VO₃H and Sr₃V₂O₅H₂, and Comparison to 2-Dimensional SrVO₂H, *Inorg. chem.*, **58**, 15393-15400, 2019, DOI: 10.1021/acs.inorgchem.9b02459.
37. N. Hirayama, H. Nakata, H. Wakayama, S. Nishioka, T. Kanazawa, R. Kamata, Y. Ebato, K. Kato, H. Kumagai, A. Yamakata, K. Oka, and K. Maeda, Solar-Driven Photoelectrochemical Water Oxidation over an n-Type Lead-Titanium Oxyfluoride Anode, *J. Am. Chem. Soc.*, **141**, 17158–17165, 2019, DOI: 10.1021/jacs.9b06570.
38. S. Nishioka, T. Kanazawa, K. Shibata, Y. Tsujimoto, H. zur Loye, and K. Maeda, A zinc-based oxysulfide photocatalyst SrZn₂S₂O capable of reducing and oxidizing water, *Dalton Trans.*, **48**, 15778–15781, DOI: 10.1039/C9DT03699G.
39. J. J. M. Vequizo, S. Nishioka, J. Hyodo, Y. Yamazaki, K. Maeda, and A. Yamakata, Crucial impact of reduction on the photocarriers dynamics on SrTiO₃ powders studied by transient absorption spectroscopy, *J. Mater. Chem. A*, **7**, 26139-26146, 2019, DOI: 10.1039/C9TA08216F.
40. T. Kanazawa, M. Eguchi, S. Nozawa, K. Maeda, Improved Electrochemical Water Oxidation over Chromium-Substituted Cobalt Aluminate Spinels, *Bull. Chem. Soc. Jpn.*, **93**, 13-19, 2019, DOI: 10.1246/bcsj.20190272.
41. S. Nishioka, Y. Yamazaki, M. Okazaki, K. Sekizawa, G. Sahara, R. Murakoshi, D. Saito, R. Kuriki, T. Oshima, J. Hyodo, Y. Yamazaki, O. Ishitani, T. E. Mallouk, K. Maeda, Defect Density-Dependent Electron Injection from Excited-State Ru(II) Tris-Diimine Complexes into Defect-Controlled Oxide Semiconductors, *J. Phys. Chem. C*, **123**, 28310-28318, 2019, DOI: 10.1021/acs.jpcc.9b09781.

42. V. Castaing, A. D. Sontakke, J. Xu, A. J. Fernandez-Carrion, C. Genevois, S. Tanabe, and M. Allix, B. Viana, Persistent energy transfer in ZGO: Cr³⁺, Yb³⁺: a new strategy to design nano glass-ceramics featuring deep red and near infrared persistent luminescence, *Phys. Chem. Chem. Phys.*, **21**, 19458-19468, 2019, DOI: 10.1039/c9cp02927c.
43. Y. Iwasa, H. Ogino, D. Song, V. C. Agulto, K. Yamanoi, T. Shimizu, J. Ueda, K. Hongo, R. Maezono, S. Tanabe, and N. Sarukura, Synthesis, optical properties, and band structures of a series of layered mixed-anion compounds, *J. Mater. Sci. : Mater. Electron.*, **30**, 16827-16832, 2019, DOI:10.1007/s10854-019-01380-3.
44. M Back, J Ueda, E. Ambrosi, L. Cassandro, D. Cristofori, R. Ottini, P. Riello, G.Sponchia, K. Asami, S. Tanabe, E. Trave, Lanthanide-doped Bismuth-Based Fluoride Nanocrystalline Particles: Formation, Spectroscopic Investigation and Chemical Stability, *Chem. Mater.*, **31**, 8504 - 8514, 2019, DOI: 10.1021/acs.chemmater.9b03164.
45. M. Back, J. Ueda, J. Xu, D. Murata, M. G. Brik, and S. Tanabe, Ratiometric Luminescent Thermometers with Customized Phase-Transition Driven Fingerprint in Perovskite Oxides, *ACS Appl. Mater. Interfaces*, **11**, 38937-38945, 2019, DOI: 10.1021/acsami.9b13010.
46. Y. Zhu, T. Yamazaki, Z. Chen, Y. Hirose, S. Nakao, I. Harayama, D. Sekiba, and T. Hasegawa, High - Mobility and Air - Stable Amorphous Semiconductor Composed of Earth - Abundant Elements: Amorphous Zinc Oxysulfide, *Advanced Electronic Materials*, 2019, DOI: 10.1002/aelm.201900602.
47. S. Mo, Y. Kurauchi, T. Katayama, Y. Hirose, T. Hasegawa, Theoretical Investigation of the Role of the Nitride Ion in the Magnetism of Oxynitride MnTaO₂N, *J. Chem. Phys. C*, **123**, 25379-25384, 2019, DOI: 10.1021/acs.jpcc.9b07446
48. 由井樹人, 斎藤翔太, 池田隼人, 二次元層空間を用いた金属ナノ粒子の合成, *化学工業*, **70**(1), 2020.

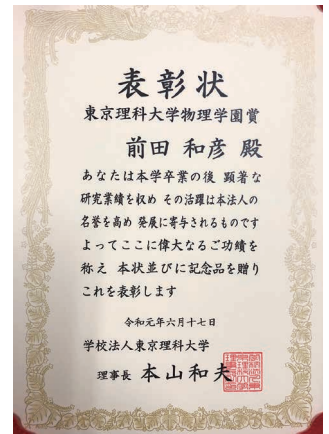
受賞報告

■ 東京工業大学の前田 和彦 准教授(A03代表)が第2回 東京理科大学物理学園賞を受賞

東京理科大学物理学園賞は、東京理科大学の卒業生及び専任教職員の退職者のうち、大学の名誉を高め、発展に寄与した人物に対し、その功績を称えることを目的として2018年に設立されました。前田氏は、独自に開発したエネルギー変換型光触媒に関する研究業績が高く評価され、第2回の受賞者に選ばれました。表彰式は2019年6月17日に東京理科大学神楽坂キャンパスで行われました。

前田先生からの受賞コメント

このたび学部時代を過ごした東京理科大学において、栄誉ある東京理科大学物理学園賞をいただくことができました。評価していただいたエネルギー変換型光触媒の研究の成果を得るにあたり、ご指導くださった先生方、そして一緒に実験に取り組んでくれた共同研究者と学生諸氏に感謝いたします。今回の受賞を励みに、今後も共同研究者の皆様・学生諸氏と協力し、本領域における研究推進に貢献できるよう努力していく所存です。



■ クラリベイト・アナリティクス社引用論文著者リストに前田和彦准教授(A03代表)

世界中で引用された論文が多い科学者を調べるクラリベイト・アナリティクス社の2019年版 Highly Cited Researchers (高被引用論文著者) リストが11月19日、発表され、東京工業大学から理学院 化学系の前田和彦准教授(選出分野: 化学)が選出されました。

クラリベイト・アナリティクス社によると、このリストは同社の学術文献データベース Web of Science (ウェブ・オブ・サイエンス) をもとに、世界のすべての論文のうち引用された回数が上位1%に入る論文を発表した著者を、高い影響力を持つ研究者として選出しています。2019年は計6,216名の著者が選ばれました。同リストによると、対象となった前田准教授の出版件数は208件、引用総件数は26,242件です。

前田先生からの受賞コメント

私が継続して行っている光触媒の研究に関連して、昨年に続き2年連続で Highly Cited Researchers に選出されたことを誇りに思います。選出の重要な要素でもある“Top1% 論文”を振り返ると、共同研究者と酒宴の席で交わした何気ない会話の中での気付き、あるいは学生の優れた着想に端を発して論文発表に至ったものが多数あります。素晴らしい環境で研究活動ができることに感謝し、国内外の共同研究者とうまく協働しながら、学生諸氏が自由な発想で研究に打ち込める環境を提供できる研究者・指導者であり続けたいと考えています。そしてこれからも、関連分野の研究者に使ってもらえる新しい物質や要素技術を生み出し、時として異分野の研究者や一般の方にもひらめきと感動を与える成果の創出を目指すことで、本学の(ひいては我が国の)研究力を世界にアピールしていく所存です。

受賞報告

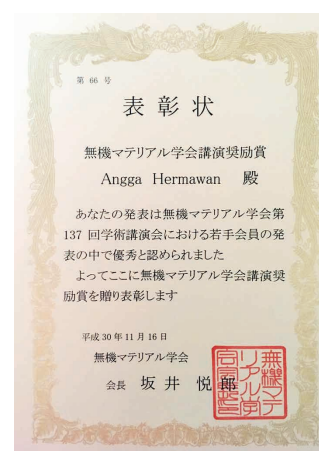
■ BEST ORAL PRESENTATION AWARD – 無機マテリアル学会第137回講演会

● Angga Hermawan (東北大学・殷G、D2)

「CuO ナノ粒子を修飾した SnO₂ マイクロ球状粒子のトルエンガス応答機能の向上 (Improvement of toluene gas sensing response of SnO₂ microspheres after CuO nanoparticles decoration)」

[受賞コメント]

I would like to present this award to my supervisor Prof. Shu Yin and Assist. Prof. Yusuke Asakura because without their great help and discussion in this gas sensing research, I would not possible to get this achievement. I got many experience and valuable comments from famous professor during the presentation session which could improve my research in the future.



■ The 2018 BEST PAPER AWARD – Journal of Asian Ceramics Society

● Angga Hermawan (東北大学・殷G、D2)

「A. Hermawan, H. Son, Y. Asakura, T. Mori, S. Yin “Synthesis of Morphology Controllable Alumunium Nitride by Direct Nitridation of γ -AlOOH in the Presence of N₂H₄ and their Sintering Behavior”, J. Asian Ceram. Soc., **6**, 63-69, 2018, DOI:10.1080/21870764.2018.1439611」

[受賞コメント]

It is such a great blessing to receive the 2018 Best Paper Award from Journal of Asian Ceramics Society. I actually do not expect this best paper award since it is my very first paper. I would like to deeply thank to my supervisor Prof. Shu Yin and Assist. Prof. Yusuke Asakura for their excellency to criticize important points in the manuscript. I would like to also thank to our collaborator from National Institute of Materials Science (NIMS), Dr. Hyoungwon Son and Prof. Takai Mori for their kind help in measuring sintering behavior of our samples. Without their support, it is not possible to receive this honorable award. Finally, the award has motivated me to perform better in research and publish more high-quality papers.

Journal of Asian Ceramic Societies Award Winners

	Author(s)	Article	Volume	Issue
2018	Angga Hermawan, HyounWon Son, Yusuke Asakura, Takao Mori & Shu Yin	Synthesis of morphology controllable aluminum nitride by direct nitridation of γ -AlOOH in the presence of N ₂ H ₄ and their sintering behavior	6	1

受賞報告

■ Award of the Outstanding Papers Published in the JCS-Japan in 2019 (2019/6/7)

● 保科 拓也 (東京工業大学・保科G)

「Effect of oxygen vacancies on intrinsic dielectric permittivity of strontium titanate ceramics」

[受賞コメント]

名誉ある優秀論文賞をいただき大変光栄に存じます。本研究はチタン酸ストロンチウム中に酸素欠陥を導入した際に本質的な誘電率がどのように変化するかをテラヘルツ分光測定・理論計算によって明らかにしたものです。本研究と同様の手法で様々な複合アニオン化合物を評価できることから、複合アニオン化合物誘電体に関する研究の進展に貢献する論文であると考えております。



■ 日本セラミックス協会2019年年会優秀ポスター発表賞優秀賞 (2019/5/24)

● 菊地 なつみ (東北大学・垣花G、M2)

「プロピレングリコール修飾シランを用いた合成による $\text{Lu}_{2-x}\text{Ca}_{1+x}\text{Mg}_{2-x}\text{Sc}_x\text{Si}_3\text{O}_{12}:\text{Ce}^{3+}$ の合成」

[受賞コメント]

この度、年会優秀ポスター発表賞優秀賞をいただき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員の垣花先生を始めとする多くの先生方及び研究室の皆さまのおかげです。心より感謝申し上げます。無機材料や合成法など、自分の好きなことを多くの方と討論させていただいた時間は本当に貴重で忘れられないものとなりました。今後も研究生活で学んだことを生かし精進していきたいと思っております。



受賞報告

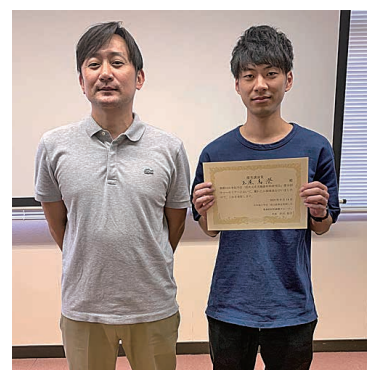
■ 低次元系光機能材料研究会第9回サマーセミナー 日本粘土学会「粘土鉱物を利用した革新的材料創生グループ」優秀講演賞（2019/9/14）

● 上原 真澄（新潟大学・由井G、M2）

「カチオン性 Pd ポルフィリンの clay との複合化及び特異的な光物性」

〔受賞コメント〕

この度、低次元系光機能材料研究会第9回サマーセミナーにおいて優秀講演賞を頂けたこと、大変光栄に思います。今回の受賞にあたり、指導教員である由井先生をはじめ、支えて頂いた研究室の方々に感謝致します。また、本学会では粘土に携わる各分野の先生方に議論やアドバイスを頂き、今後の自分の研究を進めるにあたり大変有意義な経験となりました。これを生かし、さらに精進を重ねることで慢心することなく研究を続けていきたいと思っております。



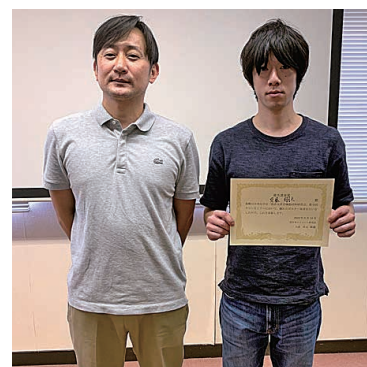
■ 低次元系光機能材料研究会第9回サマーセミナー 日本粘土学会「粘土鉱物を利用した革新的材料創生グループ」優秀講演賞（2019/9/14）

● 斎藤 翔太（新潟大学・由井G、M2）

「層状半導体 / 銀ナノ粒子複合膜の可視光触媒活性」

〔受賞コメント〕

低次元系光機能材料研究会第9回サマーセミナーにおいて、優秀ポスター賞を頂くことができました。評価していただきました諸先生方に感謝申し上げます。セミナーでは、層状半導体の層間に銀ナノ粒子が合成された複合膜を用いた有機色素の光分解について報告させていただきました。発表内容に関しまして様々なご意見を頂くことができ、また自身と近い研究をされている方が多かったためとても勉強になりました。今後も自身の研究を進展させられるよう、日々励んでいきたいと思っております。



受賞報告

■ 日本セラミックス協会2019年年会優秀ポスター発表賞優秀賞（2019/5/24）

● 手島 広明（東京工業大学・八島G、M2）

「新構造型酸化物イオン伝導体 $\text{BaLaZn}_3\text{GaO}_7$ の発見」

[受賞コメント]

この度はポスター発表優秀賞を頂くことができ、大変光栄に思います。この結果は指導教員の八島先生を始め、様々な方のご指導、ご協力があったからこそであり、この場をお借りして感謝申し上げます。発表の最中には見に来てくださった先生方や他の発表者と議論を行い、コメントや激励をいただくことができました。それらを踏まえて今後も研究に邁進しようと思えます。

■ 日本セラミックス協会年会優秀ポスター発表賞 優秀賞（日本セラミックス協会） （2019/5/21）

● 張 文鋭（東京工業大学・八島G、D3）

「結合原子価法と実験による新構造型酸化物イオン伝導体の発見」

[受賞コメント]

今回日本セラミックス協会年会で「優秀ポスター発表賞」をいただきましたこと、大変光栄に思っております。指導教員の八島先生、助教の藤井先生を始め、多くの先生方のご指導、ご協力のおかげで受賞することが出来ました。深く感謝申し上げます。私は卒業後も日本で研究の道に進みたいという意欲を持っています。今後もより一層研究に励んでいきたいと思えます。

■ 第40回光化学若手の会 学生講演賞（2019/6/16）

● 金澤 知器（東京工業大学・前田G、D3）

「水の酸化反応の触媒として働く新規材料 $\text{CoAl}_{2-x}\text{Cr}_x\text{O}_4$ の開発」

[受賞コメント]

この度は、発表機会を与えていただき、また学生講演賞を頂けたことを大変光栄に思います。本若手会では、自身の研究を他研究室の学生の皆様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にこの場をお借りし深く感謝申し上げます。

受賞報告

■ 第2019年光化学討論会 優秀学生発表賞

(Journal of Photochemistry and Photobiology C: Photochemistry Reviews Presentation Prize) (2019/6/16)

● 岡崎 めぐみ (東京工業大学・前田G、D1)

「Measurement of the photogenerated hole potential on a semiconductor photocatalyst for water oxidation with Ru(II) complex photosensitizers」

【受賞コメント】

この度、光化学討論会において優秀学生発表賞をいただくことができ、大変嬉しく思います。研究を進めていくにあたり、指導教員の前田先生、石谷先生をはじめ、多くの先生方からアドバイスやご助言をいただきました。感謝申し上げます。今後もより一層努力を重ね、研究を進めていくよう精進いたします。

■ 1st North American Summer School on Photonic Materials (NASSPM), Best Experimental Performance賞 (2019/6/16)

● 北川 裕貴 (京都大学・田部G、D1)

「Er³⁺:Silica Fiber Laser Assembly」

【受賞コメント】

この度は、Laval 大学 (Quebec, CANADA) で開催された 1st North American Summer School on Photonic Materials (NASSPM) において、Best Experimental Performance 賞を頂くことができ、大変光栄に思います。班のメンバーと協働して実習を進め、最終的に受賞に至ったのは、本領域主催の若手スクールなどで他分野の学生や先生方と交流した経験が生きた成果であると思います。この受賞を励みとし、今後もより一層研究に励んでまいりたいと思います。

■ 第80回応用物理学会秋季学術講演会 講演奨励賞

● 北川 裕貴 (京都大学・田部G、D1)

「YSiO₂N が有する低 / 高対称性 Y³⁺ サイト中における Eu³⁺ の ⁵D₀ → ⁷F₂ 電気双極子遷移確率の評価」

【受賞コメント】

この度は、応用物理学会秋季学術講演会において講演奨励賞を頂き、大変光栄に思います。この場をお借りして、指導教員である田部先生、上田先生、ならびに共同研究者である Tartu 大学の M. Brik 先生に深く感謝申し上げます。この受賞を励みとし、今後も研究に励んでまいります。

受賞報告

■ Phosphor Safari 2019 (International Symposium on Luminescent Materials) The Excellent Poster Presentation Award

● 北川 裕貴 (京都大学・田部G、D1)

「Intense hypersensitive luminescence of Eu^{3+} in distorted sites with mixed-anion coordination excitable by near-UV」

[受賞コメント]

この度は、国際学会 Phosphor Safari 2019 においてポスター発表賞を頂き、大変嬉しく思います。本研究は、領域会議の場でも多くの先生方および学生の方々とのディスカッションを通じて、このような成果をあげることができたと思います。この受賞を励みとし、今後も研究に励んでまいります。

■ 「旗野奨学基金」第18回多元物質科学研究奨励賞(2018.12.14)

● 中村 美珠々 (東北大学・殷G、M2)

「「複合イオンドープ酸化チタンの合成と光触媒活性評価」(2019/11/6 濟州島における口頭発表)」

[受賞コメント]

この度は、「旗野奨学基金」第18回多元物質科学研究奨励賞を頂くことができ、大変光栄に思います。海外学会発表の貴重な機会を得て、大変有意義な経験となりました。ご指導いただいた先生方をはじめ、研究に関わりました皆様に厚く御礼申し上げます。この経験を糧に、今後も精進して参ります。

■ 「旗野奨学基金」第18回多元物質科学研究奨励賞(2018.12.14)

● 西村 侑希保 (東北大学・殷G、M2)

「「酸化亜鉛の形態制御及び化粧品・無機顔料としての応用と評価」(2019/11/6 濟州島における口頭発表)」

[受賞コメント]

この度は第18回多元物質科学研究奨励賞をいただき、誠に光栄に思います。これもひとえに、先生方をはじめとする研究室のメンバーのご指導、励ましの賜物と心より感謝いたします。賞を頂いた発表は初めての海外、そして初めての口頭発表でしたが、他に代えられない貴重な経験となりました。この経験を糧に今後も精進して参りたいと思います。

受賞報告

■ 「籟野奨学基金」第18回多元物質科学研究奨励賞(2018.12.14)

● 王 靖雯 (東北大学・殷G、M2)

「可視光誘起光触媒としての亜鉛ゲルマニウム酸窒化物の形態制御」(2019/11/6 濟州島における口頭発表)」

[受賞コメント]

I'm very honored to receive Hatano Research Award in the 18th Tagen Research Symposium. It is a valuable opportunity to share and discuss research topics with other professors and students in the poster presentation. In addition, it is also an inspiration and encouragement for me to continue further research in the future. I would like to express my gratitude to all of the teachers and my laboratory members who support me without reservation.

■ 第57回セラミックス基礎科学討論会国際セッション優秀発表賞 (Good Presentation Award)

● 王 靖雯 (東北大学・殷G、M2)

「Zinc germanium oxynitride with various nanostructures synthesized through hydro/solvothermal reaction」

[受賞コメント]

I am very honored to receive the Good Presentation Award in the International Section at Symposium on Basic Science of Ceramics (2018) held in Sendai. I am grateful for the academic supervision of the all of the teachers and the great support of laboratory members. It is a great pressure for me to convey my sincerest gratitude to all of them. I'm pleased to have this opportunity to present my research work and have great discussion with many researchers in the same and similar filed of studies. This meaningful experience will encourage me to make further efforts in my futurre research.



会議開催情報 (本領域がオガナイザーとして関連している会議)

1. 2020年3月18日 日本物理学会第75回年次大会シンポジウム

「複合アニオン化合物の合成－評価－機能 物理の視点からみる最近の進展」(名古屋)

名古屋大学にて実施予定の日本物理学会年次大会中に表記シンポジウムを開催予定である。本シンポジウムでは、複合アニオン化合物研究が直面している最近の進歩および将来の展望と課題をレビューする。特に、合成・評価・物質機能において複数のアニオンが果たす重要な役割に着目し、局所構造と全体構造の両方の設計のための合成アプローチの最近の進

歩・ユニークな構造と化学状態を区別するための最先端のキャラクタリゼーション技術・および複数の陰イオンの相乗作用から生じる特性について物理の視点から広く議論する。京都大学・陰山洋(領域代表、A01計画)、産業技術総合研究所・荻野拓(A01計画班)らが発表予定である。

2. 2020年9月2～4日 日本セラミックス協会秋季シンポジウム特定セッション

「複合イオン化合物の創製とキャラクタリゼーション」(札幌)

表記特定セッションが日本セラミックス協会秋季シンポジウム内に開設される予定である。この特定セッションは2011年以来9期連続の開設であり、産業技術総合研究所・荻野拓(A01計画班)、京都大学・陰山洋(領域代表、A01計画班)、京都大学・上田純平(A03連携)らを中心に運営されてきたが、今回は神奈川大学・本橋輝樹(A01公募)がオーガナイザー代表を担当する。「複合イオン化合物」セッションでは、電子

物性および化学機能に関するさまざまな研究分野の研究者が集まり、複数のカチオンまたはアニオンを含む化合物の合成・キャラクタリゼーション・機能創出に関する最新の研究成果を議論する。本領域からは、大阪大学・今中信人(A03公募)による基調講演、東北大学・小林亮(A01連携)、物質・材料研究機構・辻本吉廣(A01公募)による招待講演も予定しており、領域構成員の積極的な参加を期待したい。

3. 2020年11月16～20日 領域主催の国際会議(神戸)

新学術領域研究「複合アニオン化合物の創製と新機能」が主催する複合アニオン化合物に関する国際会議を神戸商工会議所にて開催します。酸素、窒素、フッ素、水素など複数のアニオンが同一化合物に含まれる「複合アニオン化合物」では、酸化物などの単アニオン系にはない特異な配位構造や結晶構造が生じ、その結果として単アニオン系とは根源的に異なる革新的機能(光触媒特性、強誘電性、超伝導性など)が創発す

ることが近年明らかとなってきています。本国際会議では、複合アニオン化合物の「合成」「解析」「機能」に関する研究に携わる国内外の研究者を講演者として招き、基礎、応用、産学連携等の様々な立場から議論を深めることを目的としています。一般口頭講演およびポスター発表を募集しますので、領域内外から多数のご参加をお待ちしております。

【日時】2020年11月16日(月)～20日(金)

【会場】神戸商工会議所

【主催】新学術領域研究「複合アニオン化合物の創製と新機能」総括班

4. 環太平洋国際化学会議 (PACIFICHEM 2020)

環太平洋諸国の化学会が主催する、5年に一度の世界的な化学の祭典がハワイ、ホノルル島で2020年12月15-20の日程で開催されます。物質・材料研究機構・辻本 吉廣 (A01公募班)、シドニー大学・Christopher Ling 教授、NIST・Craig Brown 教授が世話人を務める無機化学分野のシンポジウム「Anion-directed Design of functional solid-state materials」(#226) が開催されます。本シンポジウムでは、

近年発展が著しいアニオン主導の無機固体物質の設計について議論及び意見交換を行う場を提供し、合成、キャラクターゼーション、機能、計算等の分野の最前線で活躍されている著名な先生方の招待講演も企画しています。本領域からは、京大・陰山洋教授(領域代表)と東工大・前田准教授(A02計画班)が招待講演を行う予定です。領域内外から、多数のご発表・ご拝聴をお待ちしています。

■ 編集後記

本領域のニュースレターの第7号を発刊することになりました。ニュースレターの編集作業は、今回の原稿の締め切りは年末の忙しい時期と重なったことにもかかわらず、皆様より、迅速にご対応していただいたことに感謝いたします。今回のニュースレターは計画班を中心とした研究紹介を掲載しました。また、複合アニオン化合物関連のイベントの

開催報告及び沢山の受賞記事が集まりまして、複合アニオン化合物領域研究のアクティビティの高さを改めて実感しました。「複合アニオン化合物」という新しい研究領域がますます発展するように、また、ニュースレターの内容も一層充実した情報発信に努めてまいります。

(S. Y.)

[領域全般に関するお問い合わせ]

陰山 洋 (領域代表 / A01 分担)

[領域事務に関するお問い合わせ]

林 克郎 (領域事務担当 / A02 代表)

[ホームページに関するお問い合わせ]

松石 聡 (東工大元素戦略センター・准教授 / A03 分担)

(連絡先)

[ニュースレターに関するお問い合わせ]

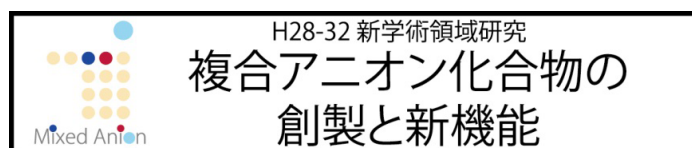
荻野 拓 (産総研)

稲熊 宜之 (学習院大)

桑原 彰秀 (ファインセラミックスセンター)

殷 澍 (東北大)

Yin.shu.b5@tohoku.ac.jp (Vol. 7 担当 殷)





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