

機関番号：14301

領域設定期間：平成28年度～令和2年度

領域番号：2807

研究領域名（和文）複合アニオン化合物の創製と新機能

研究領域名（英文）Synthesis of Mixed anion Compounds toward Novel Functionalities

領域代表者

陰山 洋 (KAGEYAMA Hiroshi)

京都大学・工学研究科・教授

研究者番号：40302640

交付決定額（領域設定期間全体）：（直接経費）1,034,800,000円

**研究成果の概要：**開始時には、複合アニオン化合物が、セラミックス分野ですら、知らない研究者が多い状態であり、合成、解析、機能のどれをとっても体系化しておらず、指針のない未踏の学問とっていい状態であった。しかし、領域メンバーがワンチームとなった徹底的な共同研究を通じた5年間で大きく景色が一変し、複合アニオン科学の基礎学理が確立されただけでなく、既存の材料にはない特徴を持つ革新的材料として幅広い研究分野で注目を集め、一つの学術領域として確固たるものにし、世界初の複合アニオンの教科書の出版にも至った（2022年に英語版出版）。「アニオンを制御して新機能材料を創成する」という本領域で得られた新しい概念の中には、当該分野を大きく変えるものや関連分野に新たな展開を創出するものが多い。例えば、リチウム二次電池を凌駕する高容量のフッ素正極材料は、電気化学業界に新しい流れを与えるものである。また、無毒の固体窒素源を用いた窒素化合物の合成は、触媒、誘電体、顔料など多くの機能分野への展開が可能となった。領域研究者の有機連携によって開発した局所構造の決定手法（理論・実験）やその他のアニオン解析の新技术は世界中の研究者に利用されはじめている。さらに、錯体・有機の研究者を公募で採択したことで、複合アニオン化合物をボトムアップ的に合成する新しい融合研究が芽をだしてきた。また、当初予期しえなかった研究展開があることから、今後、創造的な学問分野として、様々な分野に波及しながら大きく発展していくと考えている。また、産業界でも領域開始当初は全く注目を集めていなかったが、期間内に企業との多くの共同研究が新たに始まり、新たな展開をみせている。

**研究分野：**無機化学、機能科学、物質材料科学

**キーワード：**複合アニオン、新物質、新機能、セラミックス

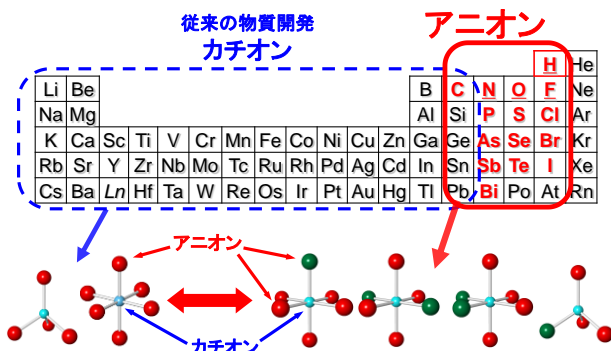
### 1. 研究開始当初の背景

資源が乏しい日本にとってもものづくりは産業競争力の生命線であり、世界に対し優位性を確保するためには、その源流である新物質開拓を基軸とした研究推進が必要である。無機材料科学の歴史で、大勢を占める酸化物、窒化物、フッ化物などの各系では多くの物質が合成され合成法も確立している。金属元素の種類や比により膨大な物質が合成されたが、構造の基本ユニットとなる配位構造は、共通する場合が多く、得られる機能には大きな制約があった。

このような状況の中で21世紀に入り注目を集めているのが、酸素  $O^{2-}$ 、窒素  $N^{3-}$ 、水素  $H^-$  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」である（上図）。複合アニオン化合物は、特異な配位構造や結晶構造をもつため根源的に新しい革新的機能が触媒、磁性、超伝導、電池など様々な化学・物理分野に現れうると考えた。日本の研究者による先駆的成果により、開始時では若干の優位性はあったが、その研究は世界的にも緒に就いたばかりであり、様々な分野で今後大きく発展する可能性があった。しかし、物質設計の指針がない、通常解析のノウハウが通用しない、各研究者の分野がバラバラという3つの大きな壁が立ちはだかっていた。

### 2. 研究の目的

#### 本研究の物質開発



以上の背景のもと、複合アニオン化合物の研究の大きな飛躍には、出口（応用）により細分化、縦割り化されている無機材料科学の従来の研究組織の枠組みを超えて、関連研究者を結集させることが不可欠と考え、本研究領域「複合アニオン化合物の創製と新機能」を立ち上げた。異分野の研究者が、“化学結合”を作りながら、新物質創製、新機能創発とともに、合成法・設計指針を確立し、分析解析手法を開発することで、複合アニオン化合物を材料科学の物質科学の一学術分野として築き上げることを目的とした。これを通じて、国際的な研究のネットワークを形成し、そこで活躍できるグローバルな若手人材の育成を目指した。

### 3. 研究の方法

上記の目的を達成するため、計画研究として「A01 新規複合アニオン化合物の創製：物質合成と設計指針の確立」、「A02 複合アニオン化合物の理解：化学・構造・電子状態解析」、「A03 複合アニオン化合物の新規化学物理機能の創出」という項目を設定し、更に公募研究を加えた体制をとった。各計画班では、それぞれの目標を設定し、計画的に研究を推進した。共通して取り組む主たるアニオン（酸窒化物、酸水素化物、酸フッ化物、三種複合アニオン系）を定めて領域内（班内・班間）の有機的連携を強化し、最終的に複合アニオン科学を支配するコンセプトを探求し、確立することを目指した。

### 4. 研究の成果

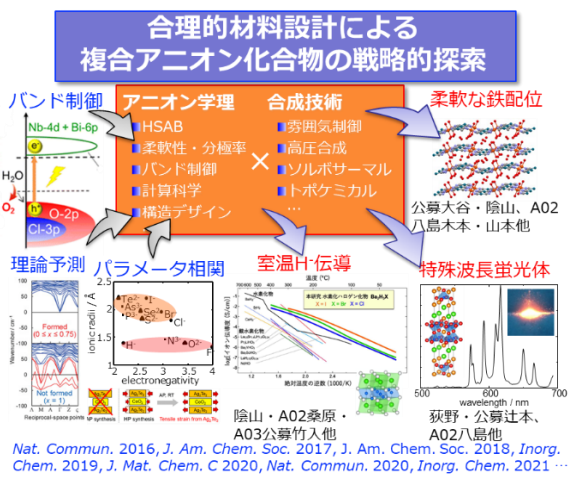
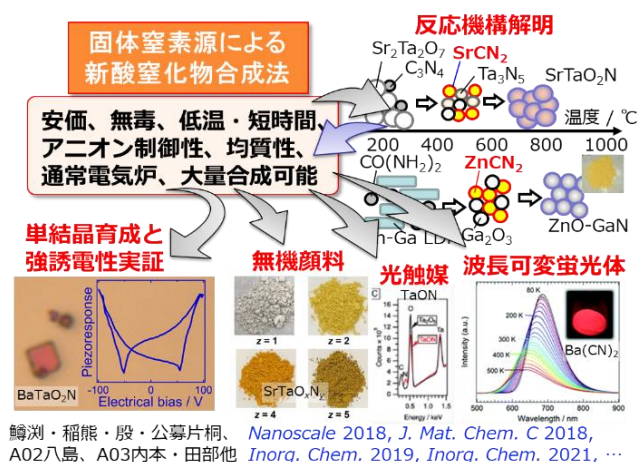
#### ■計画研究 A01 荻野(合成班)

合成班 (A01) では、新合成技術の開発、及びそれらを活用した新規な局所構造を持つ化合物の探索やアニオン自由度の制御を試みた。

□酸窒化物新合成法：計画研究 A01 の最重要成果は酸窒化物の新合成法の開発である。従来酸窒化物の合成は、毒性・危険性が高くアニオン制御も困難なアンモニア雰囲気下での高温焼成が主流であった。そこでアンモニア不要の合成手法として固体窒素源を用いる手法の開発を試み、非常に安価かつ安全な窒化炭素  $C_3N_4$  を原料とする酸窒化物合成法の開発に成功した(鱒淵)。最先端の解析手法により相生成過程も解明され、中間体のシアナミドが決定的な役割を果たしていることが明らかになった(公募 片桐、A03 内本・前田)。従来より圧倒的に簡便かつ温和な条件での酸窒化物の合成が可能となったことで、アニオン自由度の精密制御や大量合成、単結晶育成が可能となった。この手法の領域内での共有、活用に取り組んだ結果、 $AE\text{TaO}_2\text{N}$  の単結晶作製と強誘電性の観測(鱒淵)、光触媒(殷、稲熊、鱒淵他)、波長可変赤色蛍光体(鱒淵、A03 田部)、環境調和無機顔料(鱒淵、公募 片桐)といった成果が次々と実現した。

□新化合物の戦略的探索：アニオンのサイズ差や柔軟性・分極率といったパラメータとその相関など、これまでの無機固体化学で考慮されていなかった複合アニオン化合物の基礎学理と、高压合成・トポケミカル反応・ソルボサーマル反応など各グループの得意とする合成技術と知見を結集し、本郷らを中心とした計算科学による理論予言も考慮した上で系統的かつ徹底的な新物質探索を行い、80 種以上の新物質を発見した。研究前半では、 $Pb_2Ti_2O_5.4F_{1.2}$ 、 $BaScO_2H$  (後述) など酸フッ化物・酸窒化物・酸水素化物に重点を置き、後半では非酸化物系化合物や錯体・金属クラスターといった系へ探索を広げ、 $Ba_2H_3X$ 、 $A_3HCh$  や  $Fe$  錯体(後述) などが見出された。中でも層状化合物では、前述のような新たな概念を考慮することで、熱電材料( $Sr_2MCu_2Te_2O_2$ : 荻野、A03 森・越智)、蛍光体( $Ba_3Y_2O_5Cl_2$ : 荻野・辻本、A02 八島他)、光触媒( $Bi_4MO_8X$ : 陰山・本郷、A02 前園)などが次々と発見された。 $Bi_4MO_8X$  では、バンド構造がアニオンの組み合わせではなくマードルングエネルギーにより制御可能であることを見出した。

□アニオン自由度制御：A02 で NMR や ERDA、網羅的シミュレーションといった最先端解析手法が開発されたことで、アニオン比率、サイト選択性や *cis-trans* 配位選択性といったアニオン自由度が計測・制御可能となった。これを活用することで  $SrTaO_2N$  の O/N 比制御による新規無機顔料(公募 片桐・鱒淵)、 $SrVO_2H$  の基板応力による準安定相の生成(山本、木本、八



鱒淵・公募片桐・鱒淵)の基板応力による準安定相の生成(山本、木本、八

島ほか)などに成功した。また  $\text{SrV}(\text{O,N})_{3.5}$  は基板応力をパラメータとして用いることで欠損面を系統的に制御できることが明らかになった (A01 陰山、A02 山本・八島・野田、公募 関場・A03 長谷川・公募越智他3名)。

■公募研究 A01: 公募研究によりフラックス法・薄膜などの最先端合成技術を有する研究者も加わり、新たな展開が齎された。是津らは、硫黄を含む炭素複合体でリチウム電池正極材料の表面処理を行うことで、結晶の形態変化やサイクル性、電気特性の劇的な改善が見出された (是津、*J. Mat. Chem. A* 2020)。辻本らは、フラックス法が複合アニオン化合物の新物質合成に有効であることを見出し、 $\text{SrZn}_2\text{S}_2\text{O}$  (辻本、A02 八島) などの酸硫化物が有力な非線形光学材料であることを見出した。本橋らは、超高水蒸気圧で酸水酸化物を合成する手法の開発に成功した (本橋、特開 2020-070203)。また計画・公募研究者の連携により金属酸化物クラスターや高分子錯体などの物質系に固体化学の概念を導入した新たな複合アニオン化合物設計の方向性が見いだされ、大谷らは、水分子の脱吸着により四配位という特異な  $\text{Fe}(\text{II})$  の配位状態を有するシアノ錯体を見出した (大谷・陰山、A02 木本・桑原他、*Angew. Chem.* 2020)。

### ■計画研究 A02 林(解析班)

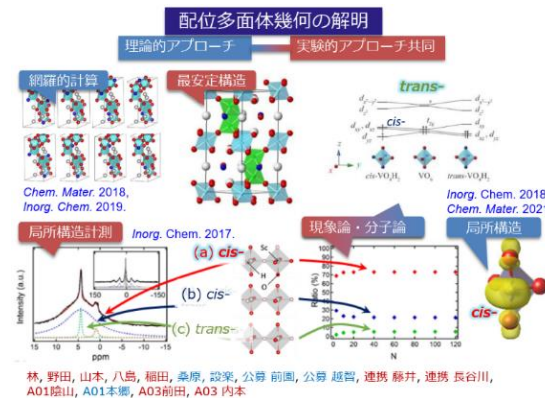
□解析手法の採配: 分担 八島、協力 藤井、公募 南部らによる、放射光 X 線回折、中性子回折、単結晶回折、最大エントロピー法解析、磁気構造解析による構造解析基盤を採配し、高度構造解析の敷居を下げた。当初課題とした  $\text{O}^{2-}/\text{N}^{3-}$  や  $\text{O}^{2-}/\text{F}^-$  識別など系に応じた解析スキームを確立した。初のカチオンとアニオン両規則化ルチル型構造  $\text{LiTeO}_3(\text{OH})$  など道標となる化合物 (八島・藤井、*Chem. Commun.* 2020) ほか、A01 班の合成、A03 班の機能に関わる多数の系を受け渡した。走査型電子顕微鏡法において環状暗視野 (ADF) 像による高精度定量理論を世界に先駆けて確立して (木本、*Sci. Rep.* 2018)、軽元素アニオンの単原子特定、ミスフィット応力由来の欠陥配列の決定を可能とした。薄膜系の軽元素アニオンの同時非破壊分析法として公募 関場による反跳原子検出法 (ERDA) が決定的に有効である事を示した (*Nat. Commun.* 2020)。

□ $\text{H}^-$ イオンの秘められた性質の証明: 酸水素化物  $\text{SrVO}_2\text{H}$  の圧力応答その場計測で、 $\text{H}^-$  は極めて圧縮されやすく、 $\text{O}^{2-}$ と比較して約二倍の圧縮率をもち「柔らかい」こと、 $\pi$ 結合を拒否する「 $\pi$ ブロッカー」として機能する (山本、A01 陰山、海外協力 Hayward、*Nat. Commun.* 2017) ことを明らかにした。この発見が契機となり、高圧下での  $\text{LnHO}$  ( $\text{Ln}$  = ランタノイド) における圧力誘起配位数変化による規則-不規則相転移の新発見や、次元制御物質設計の指針確立、高速イオン伝導性発見につながった。



山本、海外連携Hayward  
桑原、設楽、八島、連携 藤井、連携 村上、A02陰山、A03公募 小林、A03連携 竹入

□未踏概念の配位多面体幾何の証明: 超高圧合成法による新規酸水素化物  $\text{BaVO}_{3-x}\text{H}_x$  では、 $\text{H}^-$  配位選択性について、網羅的第一原理計算と回帰分析に基づく機械学習法を用いた理論計算によって、 $\text{H}^-$  が配位八面体中で *trans* 配位を明らかにした (山本・桑原、A01 陰山、*Chem. Mater.* 2018)。また、 $\text{BaScO}_2\text{H}$  では高分解能  $^1\text{H}$ -核磁気共鳴測定により、配位多面体の *cis* 配位を実験結果と現象論解析を基に明らかにしている (野田、A03 内本、A01 陰山、*Inorg. Chem.* 2017) ほか、複数の系で理論計算との共同による *cis-trans* 幾何の決定により、局所幾何の評価に関する新しい方法論を開拓した。  $\text{BaSn}_{0.7}\text{Y}_{0.7}\text{O}_{2.85}:\text{H}^-$  においてメスバウアー分光と第一原理計算解析を複合的に用いて *cis* 配置の二つの酸素空孔による電子状態を解明し (林・稲田、A03 前田、*Chem. Mater.* 2021)、アニオン空孔も加えた *cis-trans* 幾何に概念拡張した。



林、野田、山本、八島、稲田、桑原、設楽、公募 前田、公募 越智、連携 藤井、連携 長谷川、A01陰山、A01本郷、A03前田、A03内本

□非結晶系・プロセスのダイナミクス: 酸水酸化物系の脱水過程でのアンモニア合成触媒向けメソクリスタル形成のプロセス評価を行い、他の複合アニオン系へ波及展開している (林・稲田、A03 松石、*Chem. Mater.* 2018)。A02 公募辻は A01 陰山と共同で  $\text{TiH}_2$  におけるアンモニア合成の触媒過程を理論計算によって明らかにしている (*J. Phys. Chem. C.* 2021)。また、非晶質の炭硫化物生成と  $\text{Na}^+$ イオン電池活物質への応用 (林、*Eur. J. Inorg. Chem.* 2019)、水素化物プロセスによって得られる B 型チタニアのナノ粒子の時間分解光キャリア解析 (林、公募山方、A01 小林、A01 垣花、*Nanoscale* 2019) など、低結晶・非晶質の機能材料の解析を開拓した。

□イオン移動のダイナミクス: 高速  $\text{Cl}^-$ イオン伝導  $\text{LaOCl}$  について理論計算から伝導機構を明らかにした (設楽・桑原・八島、A03 公募 今中、*Dalt. Trans.* 2021)。  $\text{LnHO}$  (*Chem. Mater.* 2019)、  $\text{Ba}_2\text{MHO}_3$  ( $M = \text{Sc}, \text{Y}$ ) (*Inorg. Chem.* 2019)、  $\text{A}_3\text{HCh}$  ( $A = \text{Li}, \text{Na}$   $\text{Ch} = \text{S}, \text{Se}, \text{Te}$ )、  $\text{BaH}_3\text{X}$  ( $X = \text{I}, \text{Br}, \text{Cl}$ ) 系 (桑原、A01 陰山、*Nat. Commun.* 2021) での  $\text{H}^-$ 伝導の実験観測に応じて、第一原理計算解析により空孔媒介  $\text{H}^-$  伝導機構を解明した。逆ペロブスカイト型  $\text{A}_3\text{HCh}$  では、第一原理計算によ

てソフトなアニオン (H<sup>-</sup>とカルコゲン) 格子に起因した低エネルギーのソフトフォノンの出現に基づく Li<sup>+</sup>、Na<sup>+</sup>イオンの易動性を予測し、これを実験的実証に繋げた。

■公募研究 A02: 公募・計画研究者の共同によって、実験グループへの計算技術移転、公募 堀越による複合アニオン化合物の教材開発 (*Chem. Teach. Int.* 2021) など、独自の取り組みを行った。公募研究者間連携の共同計測と解析によって、BaFe<sub>2</sub>(S<sub>1-x</sub>Se<sub>x</sub>) 系で完全な電子相図を得た (公募 南部、A03 公募 青山、*Phys. Rev. B* 2020)。

■計画研究 A03 前田 (機能班)

□酸フッ化物の革新的蓄電・光触媒機能の発見: A03 班における最大の発見は、合成、解析、機能の各研究項目の効果的な連携により、マンガン系の層状ペロブスカイト酸フッ化物が、リチウム電池に匹敵するほどの高容量をもつことを発見したことである (内本、A01 陰山、A02 桑原)。充放電で結晶構造の異なるコンバージョンタイプの電池では、「高容量が得られるもののサイクル特性にやや劣る」という問題があったが、フッ化物イオンの出入りにより、マンガンイオンだけでなく酸化イオンもレドックスに関与することで飛躍的な高容量化に成功した。この発見により、従来のリチウム電池からフッ素電池へのパラダイムシフトをもたらし展開も見えつつある。

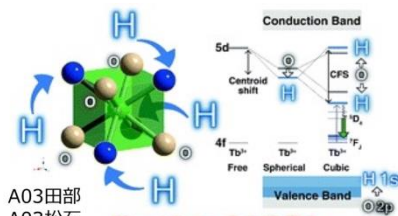
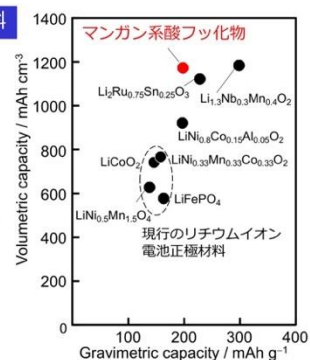
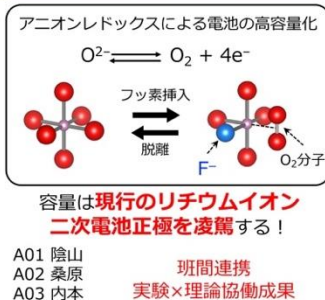
酸フッ化物系材料におけるもう一つの大きな発見は、新たな可視光応答型光触媒の開発である。可視光応答光触媒の開発の代表的な指針は、酸素よりも電気陰性度の小さいアニオン種を導入し金属酸化物のバンドギャップを縮めることで、この観点からは、高い電気陰性度をもつフッ素を導入した酸フッ化物は不適と考えられてきた。そのような背景において、パイロクロア構造を有する酸フッ化物 Pb<sub>2</sub>Ti<sub>2</sub>O<sub>5.4</sub>F<sub>1.2</sub> が特異的に狭いバンドギャップ (2.4 eV) を有し、更に可視光下での水の分解、二酸化炭素還元 to 有効な光触媒・光電極となることを見出した。可視光領域に明瞭なバンドギャップをもち、かつ光触媒機能を発現する酸フッ化物を見出した世界初の例である (前田、A01 本郷・陰山、公募 岡、A02 公募 前園他)。新たな表面修飾法の開発により、長年、水素生成光触媒としてチャンピオン物質であった Rh ドープ SrTiO<sub>3</sub> を凌駕する光触媒能があることも明らかになった (前田、A01 公募 岡、A02 公募 山方)。

□励起発光波長制御: 複合アニオン化合物によるバンド制御を通じて、物質系に限定されない発光波長の制御指針を確立できた。Ce<sup>3+</sup> 添加部分窒化ガーネット、Eu<sup>3+</sup> 添加赤色酸窒化物蛍光体の開発に成功した。前者ではカチオン置換と部分窒化により、Ce<sup>3+</sup> の結晶場分裂を増大させて、黄色から橙色の発光を実現し (田部、A02 八島)、後者では部分窒化による電荷移動遷移励起帯の長波長化 (LED 励起可能な近紫外域へ) と複合アニオン配位による非対称性の増加に伴う電気双極子遷移確率の増強を実現した (田部)。さらに中性子回折測定結果から窒素配位の直接的証拠を得るとともに、Material studio、CASTEP を用いて部分窒化によるバンド構造変化を調査し、酸化物、酸窒化物の電子構造の変化を明らかにした (田部、A02 八島、A01 本郷)。これらの酸窒化物系蛍光体材料の開発に加えて、Ce<sup>3+</sup> 添加酸フッ化物 Sr<sub>3</sub>AlO<sub>4</sub>F 蛍光体が同型構造の酸化物 Sr<sub>2</sub>GdAlO<sub>5</sub> 蛍光体と比較して、高温まで温度消光しにくいことを見出した (田部)。さらには、松石が合成した新規酸水素化物 GdHO、Sr<sub>2</sub>LiSiO<sub>4</sub>H および Sr<sub>3-x</sub>A<sub>x</sub>AlO<sub>4</sub>H (A = Ca, Ba) では、ヒドライドイオン混合配位による高い電子雲膨張効果の結果、賦活された Tb<sup>3+</sup> や Eu<sup>2+</sup>、Ce<sup>3+</sup> の最低 5d 励起準位の低エネルギー化が起こることも発見した (田部、松石)。実際に Sr<sub>2</sub>LiSiO<sub>4</sub>H:Eu<sup>2+</sup> では同型の Sr<sub>2</sub>LiSiO<sub>4</sub>F:Eu<sup>2+</sup> に比べて、H<sup>-</sup> の存在により、励起帯・発光帯が長波長側にシフトすることが確認された。このように、アニオン共存

□新規電子伝導体薄膜の開発と熱電材料への応用: アモルファス ZnO<sub>x</sub>N<sub>y</sub> 薄膜が 200 cm<sup>2</sup> V<sup>-1</sup> s<sup>-1</sup> を超える高いモビリティを示すことを見出し、アモルファス電子伝導体における世界最高値を記録した (長谷川、A02 公募 関場、*Appl. Phys. Lett.* 2016)。さらに森との協働で同薄膜が低い熱伝導率をもつことを明らかとし、結果として高い熱電性能の新規系として報告した (長谷川・森、*Appl. Phys. Lett.* 2019)。異なる専門の機能物質研究者の融合により得られた典型的成果である。

■公募研究 A03: 小林・竹入、A01 陰山は Ba<sub>2</sub>H<sub>3</sub>X (X = Cl, Br, I) が 200 °C で 10<sup>-3</sup> S/cm を超える高い H<sup>-</sup> イオン伝導を示すことを発見した。これは、これまで報告されているヒドライドイオン伝導体の中でも最高の値である。そして、A02 桑原との連携により H<sup>-</sup> イオンのサイト選択的配位を理論計算から裏付け、H<sup>-</sup> 伝導に有利な結晶構造を明らかにした (*Sci. Adv.* 2021)。イオン伝導以外にも、黒澤が中心となって原発廃炉の迅速化を可能にする高線量環境の炉内線量計測法を開発するなど、社会的に大きなインパクトを与える成果が公募研究から生まれている (黒澤、*Appl. Phys. Express* 2020、プレスリリース、新聞報道)。

実用材料に匹敵する高性能電池材料



## 5. 主な発表論文等(受賞等を含む)(全て査読有, A01、A02、A03、公募)

### 領域全体の出版物

1. \*[H. Kageyama](#), [K. Hayashi](#), [K. Maeda](#), J. P. Attfield, Z. Hiroi, J. M. Rondinelli, K. R. Poeppelmeier, Expanding frontiers in materials chemistry and physics with multiple anions, *Nat. Commun.* 2018, 9, 772. 複合アニオンに関する世界初のレビュー
2. 陰山 洋、荻野 拓、長谷川 哲也編, 複合アニオン化合物の科学, 丸善出版, 2021. 計画研究代表・分担者、公募研究代表者 24 名で執筆した複合アニオンに関する世界初の教科書

### 国際的な賞

1. 前田 和彦 (A03 代表) : Clarivate Analytics 高被引用論文著者 2018/2019/2020.
2. 田部 勢津久 (A03 分担) : 米国セラミックス協会 Varshneya ガラス科学フロンティア賞 2018
3. 稲田 幹 (A02 分担) ECD : 米国セラミックス協会 Jubilee Global Diversity Award 2021

### 計画研究 A01

1. S. Gao, [K. Fujii](#), [M. Yashima](#), [A. Kuwabara](#), [Y. Uchimoto](#), \*[H. Kageyama](#) 他 9 名, Hydride-based antiperovskites with soft anionic sublattices as fast alkali ionic conductors, *Nature Comm.* 2021, 12, 201 プレスリリース、新聞報道
2. \*[Y. Iwasa](#), [Y. Tsujimoto](#), [M. Yashima](#), [H. Ogino](#), Synthesis, structure, and luminescence properties of layered oxychloride  $\text{Ba}_3\text{Y}_2\text{O}_5\text{Cl}_2$ , *J. Mater. Chem. C* 2020, 8, 17162-17168 Cover picture, hot papers
3. \*[Y. Asakura](#), [Y. Inaguma](#), K. Ueda, [Y. Masubuchi](#), \*[S. Yin](#), Synthesis of gallium oxynitride nanoparticles through hydrothermal reaction under a presence of acetylene black and their photocatalytic  $\text{NO}_x$  decomposition, *Nanoscale* 2018, 10, 1837-1844.
4. \*[Y. Masubuchi](#), M. Tadaki, S. Kikkawa, Synthesis of the perovskite  $\text{SrTaO}_2\text{N}$  using  $\text{C}_3\text{N}_4$  for both reduction and nitridation, *Chem. Lett.* 2018, 47, 31-33
5. D. Kato, [K. Hongo](#), [R. Maezono](#), \*[R. Abe](#), \*[H. Kageyama](#), 他 7 名, Valence band engineering of layered bismuth oxyhalides toward stable visible-light water splitting: Madelung site potential analysis, *J. Am. Chem. Soc.* 2017, 139, 18725-18731. Highlighted in JACS Spotlight
6. T. Yajima, [T. Yamamoto](#), [Y. Uchimoto](#), \*[H. Kageyama](#), 他 7 名, Selective and low temperature transition metal intercalation in layered tellurides, *Nat. Commun.* 2016, 7, 13809-1-8. プレスリリース、新聞報道、テレビ報道

### 計画研究 A02

1. [T. Yamamoto](#), [A. Chikamatsu](#), [S. Kitagawa](#), [M. Ochi](#), [F. Takeiri](#), [K. Fujii](#), [M. Yashima](#), [Y. Hirose](#), [D. Sekiba](#), [T. Mori](#), [K. Kimoto](#), [T. Hasegawa](#), \*[H. Kageyama](#), 他 16 名, Strain-induced creation and switching of anion vacancy layers in perovskite oxynitrides, *Nat. Commun.* 2020, 11, 5923.
2. [K. Fujii](#), [Y. Inaguma](#), \*[M. Yashima](#), 他 3 名, Cation- and anion-ordered rutile-type derivative  $\text{LiTeO}_3(\text{OH})$ , *Chem. Commun.*, 2020, 56, 10042-10045
3. [T. Yamamoto](#), \*J. E. McGrady, \*[H. Kageyama](#), \*M. A. Hayward, 他 6 名, The Role of  $\pi$ -blocking hydride ligands in a pressure-induced insulator to metal phase transition in  $\text{SrVO}_2\text{H}$ , *Nat. Commun.*, 2017, 8, 1217-1-7. プレスリリース、新聞報道
4. [T. Yamamoto](#), [K. Shitara](#), [A. Kuwabara](#), [M. Ochi](#), [K. Fujii](#), [M. Yashima](#), \*[H. Kageyama](#), 他 8 名, Selective hydride occupation in  $\text{BaVO}_{3-x}\text{H}_x$  ( $0.3 \leq x \leq 0.8$ ) with face- and corner-shared octahedra, *Chem. Mater.*, 2018, 30, 1566-1574.
5. Y. Goto, [Y. Noda](#), [Y. Uchimoto](#), \*[H. Kageyama](#), 他 7 名, Pressure-stabilized cubic perovskite oxyhydride  $\text{BaScO}_2\text{H}$ , *Inorg. Chem.* 2017, 56, 4840-4845.
6. M. Nakamura, [K. Fujii](#), [M. Yashima](#), [G. Hasegawa](#), [M. Inada](#), \*[K. Hayashi](#), \*[K. Maeda](#), 他 2 名, A Sn-based perovskite with a wide visible light absorption band assisted by hydride doping, *Chem. Mater.* 2021, 33, 3631-3638. プレスリリース、新聞報道
7. \*[G. Hasegawa](#), [M. Inada](#), [S. Matsuishi](#), \*[K. Hayashi](#), 他 9 名, Topotactic synthesis of mesoporous  $12\text{CaO} \cdot 7\text{Al}_2\text{O}_3$  (C12A7) mesocrystalline microcubes, *Chem. Mater.*, 2018, 30, 4498-4502.
8. S. Imaizumi, [T. Aoyama](#), [Y. Nambu](#), 他 7 名, Structural, electrical, magnetic, and optical properties of iron-based ladder compounds  $\text{BaFe}_2(\text{S}_{1-x}\text{Se}_x)_3$ , *Phys. Rev. B* 2020, 102, 035104-1-12.

### 発表論文計画研究 A03

1. T. Oshima, [K. Hongo](#), [R. Maezono](#), [M. Yashima](#), [K. Kimoto](#), [M. Kakihana](#), [H. Kageyama](#), \*[K. Maeda](#), 他 10 名, Two-dimensional perovskite oxynitride  $\text{K}_2\text{LaTa}_2\text{O}_6\text{N}$  with an  $\text{H}^+/\text{K}^+$  exchangeability in aqueous solution to form stable photocatalyst for visible-light  $\text{H}_2$  evolution, *Angew. Chem., Int. Ed.* 2020, 59, 9736-9743.
2. \*[Y. Hirose](#), [T. Mori](#), [T. Hasegawa](#), 他 3 名, Thermoelectric properties of amorphous  $\text{ZnO}_x\text{N}_y$  thin films at room temperature. *Appl. Phys. Lett.* 2019, 114, 193903.
3. \*[K. Asami](#), [K. Hongo](#), [R. Maezono](#), [M. Yashima](#), [S. Tanabe](#), 他 4 名, Crystal structure analysis and evidence of mixed anion coordination at  $\text{Ce}^{3+}$  site in  $\text{Y}_3\text{Al}_2(\text{Al},\text{Si})_3(\text{O},\text{N})_{12}$  oxynitride garnet phosphor, *J. Mater. Chem. C* 2019, 7, 1330-1336.
4. R. Kuriki, [K. Hongo](#), [R. Maezono](#), [H. Kageyama](#), \*[K. Oka](#), \*[K. Maeda](#), 他 3 名, A stable, narrow-gap oxyfluoride photocatalyst for visible-light hydrogen evolution and carbon dioxide reduction, *J. Am. Chem. Soc.* 2018, 140, 6648-6655. プレスリリース、新聞報道
5. S. Kodama, \*[S. Kurosawa](#), 他 17 名, Fiber-reading radiation monitoring system using an optical fiber and red-emitting scintillator for ultra-high dose condition, *Appl. Phys. Express* 2020, 13, 47002. プレスリリース、新聞報道
6. H. Ubukata, [F. Takeiri](#), [K. Shitara](#), [A. Kuwabara](#), [G. Kobayashi](#), \*[H. Kageyama](#), 他 4 名, Anion ordering enables fast  $\text{H}^+$  conduction at low temperatures, *Sci. Adv.* 2021, in press.

ホームページ等: 複合アニオン領域ウェブサイト <http://www.mixed-anion.jp>