



研究領域名 複合アニオン化合物の創製と新機能

京都大学・大学院工学研究科・教授 かげやま ひろし
陰山 洋

研究課題番号：16H06438 研究者番号：40302640

【本領域の目的】

資源が乏しい日本にとって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。21 世紀に入って、複数のアニオンが同一化合物に含まれる「複合アニオン化合物」が、新しいタイプの無機材料として注目を集めはじめている。酸化物や窒化物など既存の無機材料と比べ、複合アニオン化合物では特異な配位構造や結晶構造が得られるため、根源的に異なる革新的機能が現れる可能性がある。一方で複合アニオンに立脚した合成アプローチは、まだ始まったばかりであり、21 世紀の新物質開発の大きな潮流になると考えている。このような背景を受けて、本研究領域では、複合アニオン化合物の基礎学理を構築し、当該分野での世界に対する日本の優位性を確立すると共に、将来の産業応用につながりうる新規複合アニオン化合物材料の開発を行う。

【本領域の内容】

本領域では、物質系や応用分野によって無機材料科学が細分化、縦割り化されている学問およびコミュニティの現状を複合アニオンというキーワードのもと刷新し、学会の枠を越えた研究チームからなる分野を横断した共同研究体制を構築することで、異分野の研究者たちが有機的に連携し、新規複合アニオン化合物の創製と新機能の創出を目指す。具体的には、「合成」、「解析」、「機能」という物質開発の基本サイクルの各パーツとなるグループに属する研究者たちが、一体となって物質開発に臨むことによって、単一アニオン化合物に比べ複雑で困難な問題に立ち向かい、複合アニオン化合物のメリットを生かした革新的機能を創出する。また、本領域の用意する様々なプログラムを通じて積極的に若手を育成し、

複数分野にて専門性を有し、グローバルな人材を育成していく。

研究項目 A01 では、新規複合アニオン化合物の探索と「合成」を担い、多重合成法やアニオンの精密制御法の開発、結晶構造制御指針の確立、計算手法による物質設計に発展させる。A02 では、回折法・放射光分光などによる複合解析により複合アニオン化合物固有の「解析」に関わる問題の解決、第一原理計算を用いた裏付けを行い、物性理解を深化させる。A03 では、創エネルギー・省エネルギーを指向した複合アニオン化合物の化学・物理「機能」創出に展開し、機能と結晶・電子構造の相関を系統化し、その知見を複合アニオン化合物合成に還元する。

【期待される成果と意義】

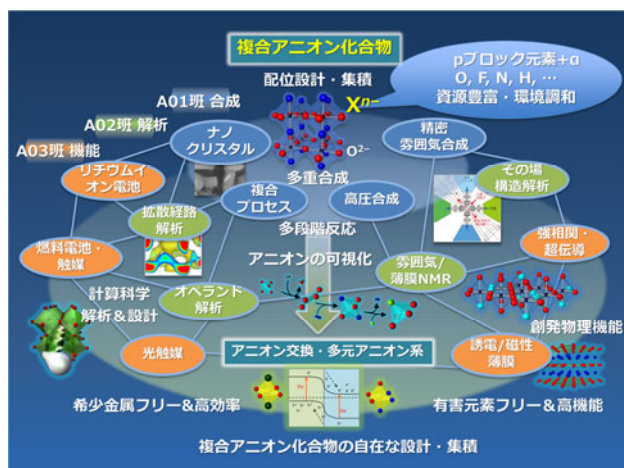
本領域では、「複合アニオン化合物」という新しいタイプの物質を扱うのが特色であり、従来型の物質では全く想像もつかない、アニオンならではの新しい機能性が創発されることが期待できる。加えて、アニオンとしては酸素以外にも水素・塩素・リン・炭素といったクラーク数上位の元素も数多いことから、我が国のアキレス腱であるエネルギー問題を解決する産業応用に繋がる次世代の材料が次々と産まれることが予想できる。これまで、物質や応用で仕切られていた研究者や研究分野の壁を複合アニオン化合物のキーワードの下に統合し、人材の越境と若手の育成を行いつつ、新物質機能の開拓とその基礎学理の探求とを両輪とする研究を推進することで、我が国の物質研究の基盤的な学術水準を向上させる。その結果として、多彩な現象をもたらすことが解明され、世界をリードする物質機能の開発力が強化される。

【キーワード】

複合アニオン化合物、汎用元素、結晶化学、結晶工学、分析手法、放射光、理論計算、電子構造、局所構造、化学結合、燃料電池、触媒、二次電池、光触媒、(光)電気化学、誘電体、蛍光体、磁性体、熱電変換材料、超伝導体

【研究期間と研究経費】

平成 28 年度－32 年度
1,022,800 千円





Title of Project : Synthesis of Mixed Anion Compounds toward Novel Functionalities

Hiroshi Kageyama
(Kyoto University, Graduate School of Engineering, Professor)

Research Project Number : 16H06438 Researcher Number : 40302640

【Purpose of the Research Project】

Given the scarcity of resources for our nation, keeping a technological advantage is vital for preserving our industry's competitiveness as a whole. We believe the development of new materials is necessary for this. Recently, mixed anion compounds consisting of multiple anions within a single compound have gathered attention. The use of multiple anions enables unusual coordination modes and crystal structures, giving them a huge potential for new properties when compared to existing oxides or nitrides. While mixed anion compounds will occupy a central stage in materials development, the field is still quite new. In this project we will establish the scientific foundations of mixed anion chemistry, establish Japan's pre-eminent position in the field, and contribute to industry by providing new mixed anion materials.

【Content of the Research Project】

The scientific community in materials science is divided into many narrow disciplines. This project will unite the community and field using mixed anion systems as a rallying point. We envision a multidisciplinary team working together to develop new mixed anion compounds and explore their functions. Our team will be divided into subgroups addressing the synthesis, analysis, and functional properties of mixed anion compounds, based on these key components of the materials discovery cycle. These subgroups will work together to solve problems difficult to address with conventional non-mixed anion systems. Our multidisciplinary approach will also be invaluable in training new scientists for the next generation.

The synthesis subgroup (A01) will focus on the discovery of new mixed anion compounds based on various synthesis techniques. The group's efforts will involve complex reactions,

establishing the principles controlling crystal structure, and use computational techniques for material design. The analysis group (A02) will use various diffraction and spectroscopy techniques to solve various characterization issues inherent to mixed anion systems. Combining these results with insight obtained from *ab initio* calculations will enhance our understanding of the materials' physical properties. The functions subgroup (A03) will channel these materials to provide solutions for various energy-related applications. The subgroup will make various connections between function and crystal/electronic structure, providing feedback to the further synthesis of new mixed anion compounds.

【Expected Research Achievements and Scientific Significance】

Mixed anion materials differ greatly from conventional materials, making radically new functions and applications possible. Additionally mixed anion systems focus on the effects of elements such as hydrogen, chlorine, phosphorus, carbon, etc. (in anionic form). As these elements are quite ubiquitous, our approach to materials development is relatively unimpeded by conventional problems of resource scarcity and distribution.

Until now, individuals separated by various fields and applications have led materials development. In this project, young scientists will be trained without such conventional barriers between fields. While training the next generation of scientists, we will contribute to raising the overall level of our nation's academic and technological prowess.

【Key Words】

Mixed anion compounds, ubiquitous elements, crystal chemistry, crystal engineering, analytical techniques, synchrotron radiation, theoretical calculations, electronic structure, local structure, chemical bonding, fuel cells, catalysis, rechargeable batteries, photocatalysis, photoelectrochemistry, dielectrics, fluorescent materials, magnetic materials, thermoelectrics, superconductors.

【Term of Project】 FY2016-2020

【Budget Allocation】 1,022,800 Thousand Yen

