

戦略的創造研究推進事業 CREST
研究領域「元素戦略を基軸とする物質・材料の
革新的機能の創出」
研究課題「異常原子価および特異配位構造を
有する新物質の探索と新機能の探求」

研究終了報告書

研究期間 平成23年4月～平成28年3月

研究代表者：島川 祐一
(京都大学化学研究所、教授)

§ 1 研究実施の概要

(1) 実施概要

「異常原子価」と「特異配位構造」をキーワードとして、ありふれた 3d 遷移金属の酸化物を中心に新しい機能特性を示す物質の探索・合成を進め、幾つもの新物質を見出すことに成功した。新物質合成では、京都大学(1)グループが主として高压合成法とエピタキシャル薄膜原子層薄膜作製法を駆使し、京都大学(2)グループが低温トポタクティクな物質変換を得意としてきたが、本研究では、高压合成や薄膜作製と低温物質変換を組み合わせることで、異常原子価状態の遷移金属イオンを含む酸化物や、特異な酸素配位構造をもつ新物質の合成の成功に至った。

異常高原子価イオンを含んだ酸化物では、特に京都大学(1)グループを中心に、Fe を含んだ A サイト秩序型ペロブスカイト構造酸化物での電荷不均化とサイト間電荷移動という一見全く異なった電氣的・磁氣的な振る舞いが、「酸素ホールの局在化挙動の違い」として統一的に理解できることを明らかにした。この両物質、さらにはこれから派生した関連物質まで、SPRING-8 グループの放射光 X 線分光により磁気構造が明らかにされ、詳細な磁気相互作用は大阪大学グループの第一原理計算から解明された。一連の研究は、特異な手法を用いた物質合成と、その構造・物性評価、さらには理論計算が強く連携して、新物質での興味深い現象を解明したことで世界的にも注目される研究となった。また、スピントロニクス分野での応用が可能となる室温をはるかに超える高い磁気転移温度 (560 K) を有するハーフメタル、A-B サイト秩序型ペロブスカイト酸化物 $\text{CaCu}_3\text{Fe}_2\text{Re}_2\text{O}_{12}$ の発見にも繋がった。

配位構造制御では、京都大学(2)グループにより開発されてきた低温トポタクティクな反応を利用して、3d 遷移金属の特異な平面 4 配位構造を有する幾つかの新物質を得ることに成功したことに加え、人工超格子薄膜へ適用することで、酸素イオン拡散の経路の制御が可能であることを実証した。

本 CREST 研究において、当初の想定を超える進展を見せたのが、薄膜ヘテロ構造界面の評価技術と「界面エンジニアリング」による薄膜の機能特性制御である。京都大学(1)グループの電子顕微鏡観察技術を用いて酸素などの軽原子の原子レベルでの可視化構造評価技術を確立し、僅か数格子単位 (1~サブ nm 程度) 厚さでの酸素八面体の連結角度の変化に見られる結晶格子の歪みを検出できるようになった。さらに、薄膜作製グループでは、この数格子単位の厚さの異種界面を挿入することに成功し、この界面構造を変化させることによって薄膜全体の物性を制御できること実証した。

固体化学的なアプローチによる物質創製研究は、当初は出口としての応用特性が見えにくいことが多く、本研究での中間評価でも指摘を受けたが、それでも想定外の興味深い機能特性が幾つか見いだされた。京都大学(2)グループを中心として低温還元では、極めて高い空孔率をもった導電性 Ti 酸化物を得ることに成功し、電極材料などの実用展開の検討が始まった。また、層状チタン化合物 Ti_2PTe_2 が低温で配位選択的なインターカレーションを示すことを見出し、Cd などの有害金属助除去などへ応用できることを実証した。これは、固体のインターカレーションとしても特異な現象であり、大阪大学グループによる第一原理計算により、Ti のまわりの異方的な配位構造が本質的な役割を担っていることが明らかにされた。

本 CREST 研究の目標の一つが、「無機材料における物質デザイン」を実証することであった。京都大学(1)、(2)グループによる構造解析結果、および SPRING-8 グループによる電子構造解析結果を受けて、大阪大学グループの第一原理計算による理論的な原理解明により得られた一連のデータを基に、幾つかの新しい物質をデザインして合成することに成功している。代表的な例としては、カチオンの配列制御から構成イオン間の磁気相互作用をデザインして、高い磁気転移温度を有する新規 A-B サイト秩序型ペロブスカイト構造酸化物の発見に至ったものや、異常高原子価 Fe イオンの配列次元性をデザインして、トポタクティク物質変換により新規 2 次元層状物質を作り出したものが挙げられる。その他、大阪大学グループでは、新規なマルチフ

ェロイック物質を純粋に電子的な観点から提示できるまでに至った。また、これらとは別に、京都大学(1)グループでは、イオン半径(イオン結晶)という汎用的な概念に基づく結晶構造安定性予測プログラムを使った物質スクリーニングにも成功した。これは、古くから用いられてきたマテリアルズインフォマティクスを現代版にアレンジして物質デザインに成功した例といえるものである。

(2) 顕著な成果

＜優れた基礎研究としての成果＞

1. 異常高原子価 Fe イオンの挙動解明

概要：異常原子価状態の 3d 遷移金属イオンを含んだ A サイト秩序型ペロブスカイト構造酸化物の示す特異な特性を、放射光 X 線分光、磁気構造解析、および電子状態計算などから解明した。特に、異常高原子価 Fe^{4+} イオンの不安定性の解消により起こる「電荷不均化」と「電荷移動」という一見全く異なった電氣的・磁氣的な振る舞いが、「酸素ホールの局在化挙動の違い」として統一的に理解できることを明らかにした。この成果は論文で公表し、その結果を基に世界で幾つかのグループが追隨して発展的研究を展開している。

2. 薄膜ヘテロ構造界面の評価と界面エンジニアリングによる機能制御への展開

概要：超高分解能電子顕微鏡を用いて、酸素を含めた全構成原子の可視化を行い、酸化物薄膜ヘテロ構造界面での原子レベルの格子歪みの様子を明らかにすることに成功した。さらに、ヘテロ構造界面が新しい機能特性発現の場となることに注目し、界面数原子層を代えることで薄膜の機能特性を制御できる「界面エンジニアリング」を実証した。一連の結果は、酸化物ヘテロ界面での新しい機能特性の解明へ向けた評価技術を確認しただけではなく、今後の新規界面構造の設計と機能制御へと発展するものである。成果は論文で公表した他、関連記事が新聞などにも取り上げられた。

3. 新規遷移金属酸化物の構造予測と理論による機能解明、物質デザイン

概要：結晶構造安定性予測に基づく物質スクリーニングにより設計した平面 4 配位構造の Mn イオンを含んだ新規 A サイト秩序型酸化物を合成することに成功した。この中で、特に $\text{LaMn}_3\text{V}_4\text{O}_{12}$ は立方晶格子でありながらスピン構造は対象性が下がったノンコリニアな 60° 構造となることが中性子磁気構造解析から明らかにされ、この特異なスピン構造の起源は磁気相互作用の微視的理論計算から解明された。構造安定性予測に基づく物質設計、高圧法による物質合成、理論計算による特性解明、さらに第一原理計算による類似特性を示す物質デザインへの展開など、理論と実験の強い連携による成果である。

＜科学技術イノベーションに大きく寄与する成果＞

1. 薄膜酸化・還元解明と界面イオン伝導への展開

概要：Fe 酸化物の低温還元による特異な平面 4 配位構造に注目し、ブラウンミレライト構造 $\text{CaFeO}_{2.5}$ /ペロブスカイト構造 SrTiO_3 人工超格子薄膜での還元過程の解析から、 $\text{CaFeO}_{2.5}$ からの酸素脱離が 2 次元平面内に制御できることを実証した。一連の成果は、ありふれた Fe 酸化物を燃料電池などへ応用し、さらに課題である動作温度の低温化へ向けた材料開発の基礎データとなるものである。成果は論文で公表した他、関連記事が新聞などにも取り上げられた。

2. 高い磁気転移温度を有するハーフメタル新材料の発見

概要：特異な平面 4 配位構造を持つ新規 A-B サイト秩序型ペロブスカイト酸化物 $\text{CaCu}_3\text{Fe}_2\text{Re}_2\text{O}_{12}$ の合成に成功し、この材料が室温をはるかに超える高い磁気転移温度 (560 K) を有するフェリ磁性ハーフメタルであることを明らかにした。新物質では磁性と電気特性が強く相関しスピン偏極伝導電子が生じるが、特に室温以上の転移温度を有するハーフメタルはあまり知られて

ならず、今後の省電力、高効率なエレクトロニクス、スピントロニクスへの応用へと繋がる成果である。

3. 多孔性材料の導電化と電極材料への応用

概要：ソフトケミストリーによる低温物質変換は、遷移金属酸化物の骨格構造を保ったまま機能特性を制御できる新奇な手法である。 TiO_2 に Zr ゲッター還元反応を施すことにより、均一な孔径を有する多孔性モリス酸化物を得ることに成功した。さらに、様々な反応を施すことで、多孔性を維持したまま、高い導電性を付与した酸化物、窒化物、酸窒化物などへ変換できることも見出した。従来の多孔性酸化物モリスが全て絶縁体であったのに対し、開発した新物質は高い導電性を有しており、電極材料など、これまでにない新しい応用展開への途を拓くものである。この成果は論文発表に加えて、特許申請を行った。

§ 2 研究実施体制

(1) 研究チームの体制について

①「京都大学(1)」グループ

研究参加者

氏名	所属	役職	参加時期
島川 祐一	京都大学化学研究所	教授	H23.4～
倉田 博基	同上	教授	H23.4～
菅 大介	同上	准教授	H23.4～
齊藤 高志	同上	助教	H23.4～
治田 充貴	同上	助教	H25.4～
市川 能也	同上	特任助教	H23.4～
秋月 康秀	同上	研究補佐員	H26.1～H26.8
太田 玲衣	同上	研究補佐員	H23.4～H27.7
阿部 愛	同上	研究補佐員	H27.6～
村元 美穂	同上	研究補佐員	H25.7～
平泉 由梨	同上	技術補佐員	H24.4～
平井 慧	同上	学生 M、D	H23.4～H27.3
関 隼人	同上	学生 D	H25.4～
保坂 祥輝	同上	学生 M、D	H24.4～
黒崎 諒	同上	学生 M	H25.4～H27.3
佐藤 理子	同上	学生 M	H25.4～H27.3
真鍋 佳典	同上	学生 M	H25.4～H27.3
佐々木 貴大	同上	学生 M	H26.4～
馬場 枝里奈	同上	学生 M	H26.4～
甚目 洸志	同上	学生 M	H24.4～H26.9
郭 海川	同上	学生 D	H26.4～
藤吉 好史	同上	学生 D	H24.4～
山口 睦	同上	学生 M、D	H26.4～
陳 威廷	同上	博士研究員	H23.4～H25.9
張 守宝	同上	博士研究員	H23.9～H26.3
遠山 武範	同上	学生 M、D	H23.4～H25.3
松本 和也	同上	学生 M、D	H23.4～H25.3
清水 卓也	同上	学生 M	H24.4～H25.3

西 仁美	同上	学生 M	H24.4～H25.3
山田 まりな	同上	学生 M	H24.4～H25.3
麻生 亮太郎	同上	学生 M、D	H23.4～H26.3
齋藤 光	同上	学生 M	H23.4～H26.3
村上 永晃	同上	学生 M	H24.4～H26.3
尾崎 祐介	同上	学生 M	H27.4～
西村 幸恵	同上	学生 M	H27.4～
和田 環	同上	学生 M	H27.4～
熊 鵬	同上	学生 D	H27.4～
Fabio Denis Romero	同上	博士研究員 (JSPS)	H27.18～

研究項目

- ・ 高圧合成による新物質探索
- ・ エピタキシャル単結晶薄膜による物質作製
- ・ 結晶構造評価と機能特性の評価・解析
- ・ 高分解能電子顕微鏡による精密構造解析と原子レベル電子状態解析

②「京都大学(2)」グループ

研究参加者

氏名	所属	役職	参加時期
陰山 洋	京都大学・大学院工学研究科	教授	H23.4～
小林 洋治	同上	講師	H23.4～
山本 隆文	同上	助教	H23.4～
Cedric Tassel	京都大学・白眉プロジェクト	特任助教	H23.4～
細川 三郎	京都大学・大学院工学研究科	講師	H23.4～
宮崎 晃平	同上	助教	H23.4～
Hongcheng Lu	同上	博士研究員	H26.6～
Tang Ya	同上	学生 D	H27.4～
竹入 史隆	同上	学生 D	H27.4～
藤戸 大徳	同上	学生 D	H27.4～
内田 善規	同上	学生 M	H26.4～
久野 禎記	同上	学生 M	H26.4～
村上 泰斗	同上	学生 M	H26.4～
吉宗 航	同上	学生 M	H26.4～
Yu Wen	同上	学生 M	H27.4～
出雲 菜々	同上	学生 M	H27.4～
松本 勇輝	同上	学生 M	H27.4～
三木田 梨歩	同上	学生 M	H27.4～
渡部 大地	同上	学生 M	H27.4～
堀越 亮	同上	技術職員	H23.4～H26.3
矢島 健	同上	研究員 (科学研究)	H23.4～H24.3
甲斐 一也	同上	学生 D	H23.4～H24.3
北田 敦	同上	学生 D	H23.4～H24.3

Liis Seinberg	同上	学生 D	H23.4～H25.3
坂口辰徳	同上	学生 D	H23.4～H25.3
大倉 仁寿	同上	学生 M	H23.4～H25.3
川崎 翔太	同上	学生 M	H23.4～H25.3
光岡 新悟	同上	学生 M	H23.4～H25.3
浅井 啓	同上	学生 M	H25.4～H26.3
會津 康平	同上	学生 M	H25.4～H26.3
中野 晃佑	同上	学生 M	H24.4～H26.3
越湖 将貴	同上	学生 M	H24.4～H26.3
吉井 龍太	同上	学生 M	H24.4～H26.3
Aharen Tomoko	同上	博士研究員	H25.4～H26.3
Subodh Ganesanpotti	同上	海外特別研究員(JSPS)	H24.4～H25.9
野尻 聡子	同上	研究補助員	H26.3～H27.3

研究項目

- ・ 非溶液型ソフトケミストリーを核とした新物質探索
- ・ 新規反応性開拓とナノ材料開発
- ・ 電気化学特性評価

③「SPring-8」グループ

研究参加者

氏名	所属	役職	参加時期
木村 滋	(公財)高輝度光科学研究センター利用研究促進部門	副部門長 主席研究員	H23.4～
水牧 仁一朗	同上	副主幹研究員	H24.4～
藤井 将	同上	博士研究員	H25.4～

研究項目

- ・ 高分解能放射光X線回折技術を用いた局所ナノ構造解析
- ・ 時分割*in-situ*構造解析による機能解明
- ・ X線光電子分光・吸収発光分光スペクトル解析による電子状態解析

④「大阪大学」グループ

研究参加者

氏名	所属	役職	参加時期
小口 多美夫	大阪大学産業科学研究所	教授	H23.4～
山内 邦彦	同上	助教	H23.4～
榎田 浩義	同上	助教	H23.4～
小寺 満	同上	特任研究員	H23.4～H24.3
豊田 雅之	同上	特任研究員	H24.4～H27.11
小鷹 浩毅	同上	特任研究員	H27.10～
磯山 佳甫	大阪大学基礎工学研究科	学生 D	H24.4～H27.3
藤村 卓功	大阪大学理学研究科	学生 D	H27.4～
上田 卓弥	同上	学生 M	H23.4～H25.3

研究項目

- ・ 第一原理計算による電子状態解析
- ・ 新奇物性・新機能発現機構の解明
- ・ 物質デザインによる新機能物質の設計

(2)国内外の研究者や産業界等との連携によるネットワーク形成の状況について

国内外で、固体化学・固体物理分野の研究者との密な情報交換を図っている。特に本研究参画メンバーは、固体化学関連学術誌の **Board member** に就任したり、**Oxide Electronics** や **Pacificchem** など広く機能性酸化物材料をターゲットとする国際会議を主宰するなど活動を行ってきた。また、これらの場での情報を積極的にチームの研究へと還元してきた他、本研究の成果発表の場としても活用してきた。

本研究の物質評価では、物質同定や機能特性解明、電子状態解析の第一歩として結晶構造解析が必須である。実際、チーム内で放射光 X 線回折や電子顕微鏡観察により結晶構造を多角的に評価する体制を構築している。しかしながら、もう一つの量子ビームである中性子を用いた結晶構造評価はチーム内ではできない状況である。また、本研究で注目する3d遷移金属イオンの多くはスピンを有しており、磁気特性と磁気構造解析は機能特性解明の上ではきわめて重要になることが多い。さらに、酸化物材料の中で軽元素である酸素の精密な情報を得るためにも、中性子回折を用いた結晶・磁気構造解析は重要な評価ツールの一つである。この状況を補完するために、これまで **JST 戦略的国際科学技術協力推進事業:日英研究交流(2009-2011 年度)**などを活用して英国エジンバラ大学と共同で中性子回折実験を進めてきたが、本 **CREST** 研究でもこの国際共同研究を継続・発展させて有効活用している。実際、**CREST** 研究期間においても年 1-2 回の中性子ビームタイムを英国 **ISIS**、フランス **ILL** の中性子実験で確保することができており、中性子回折を中心とした国際共同研究ネットワークも発展的に構築してきている。

欧州統合教育プロジェクト(**Erasmus Mundus**)の大型実験施設(放射光実験施設・中性子実験施設)を使った材料評価研究に関する大学院生教育プログラム(**Master of Materials Science Exploiting Large Scale Facilities**)とも連携して、日本・欧州の双方での材料研究分野の共同研究と学生の交換留学を含めた教育プロジェクトに参画し、国際共同研究ネットワークを構築してきた。これまでに研究代表者である島川がリサーチフェローとして講師を務めたほか、毎年、欧州の学生(1-2 名)を3-6ヶ月間の長期滞在で受け入れている他、京都大学の博士課程の学生を約1ヶ月のサマープログラムへ派遣した。

研究後半の目標として「エネルギー応用」を重視したこともあり、**NEDO-RISING** などの電池プロジェクトや固体アイオニクス学会などとの積極的な交流をはかってきた。また、エネルギーデバイスの開発を目標とした **JST 戦略的国際科学技術協力推進事業:日本スペイン研究交流「エネルギーの高効率生産を目指した電気化学デバイス材料としての新規ペロブスカイト酸化物の開発」**にも参画し、交流を深めるとともにネットワーク形成を進めてきた。

§ 3 研究実施内容及び成果

3. 1 材料合成・物質制御、および電子顕微鏡観察（京都大学(1)： 島川グループ）

(1) 研究実施内容及び成果: 高圧合成による新物質探索

本 CREST 研究では平成 23 年度に 15 GPa まで発生可能な 2 段階プレス高圧合成装置を購入し、これを用いることで、広範な条件での新物質合成が可能となり、多くの新物質の発見に至った。特に、「異常原子価」と「特異配位構造」を有する A サイト秩序型ペロブスカイト構造酸化物(図 1-1)に注目して研究を進め、以下に記載する幾つかの重要な結果を得るに至った。

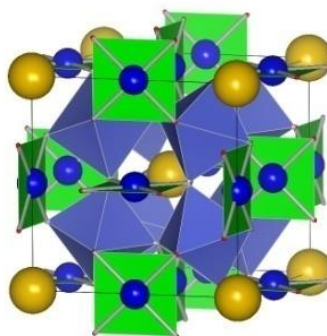


図 1-1 新規整備した高圧合成装置と合成した A サイト秩序型ペロブスカイト構造酸化物

特異な「電荷不均化」を示す $\text{CaCu}_3\text{Fe}_4\text{O}_{12}$ と「サイト間電荷移動」を示す $\text{LaCu}_3\text{Fe}_4\text{O}_{12}$ の固溶体を作製し、転移変化の詳細を検討した結果、一見全く異なった電氣的・磁氣的な振る舞いが、「酸素ホールの局在化挙動の違い」として統一的に理解できることが明らかとなった(図 1-2)。この酸素ホールの局在化挙動は、リガンドホールの電荷整列による電荷不均化とモット転移による電荷移動、と捉えることができ、これは固体物理の概念としても新規なものである。(2012 年 6 月に *Scientific Reports* に論文発表、関連記事が京都新聞、科学新聞などに掲載)。

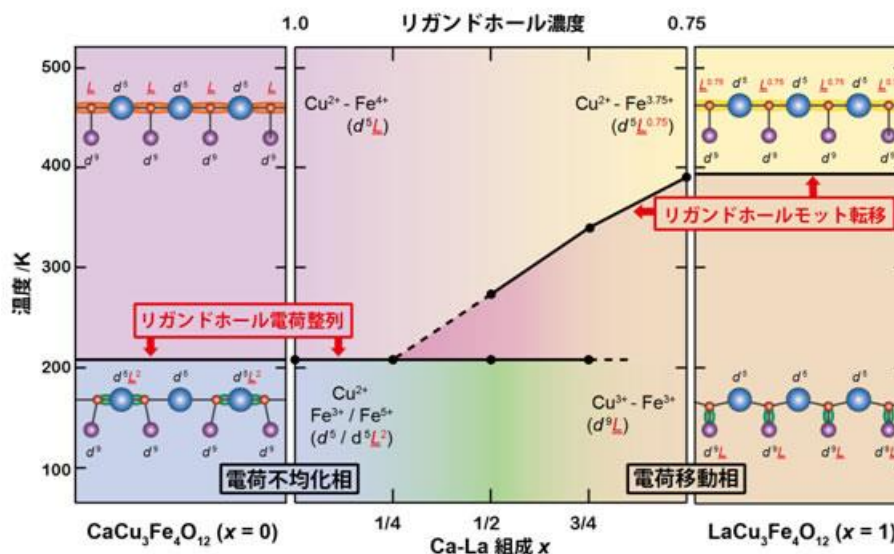


図 1-2 酸素ホールの局在化から見た異常高原子価 Fe イオンの振る舞い

高压合成による A サイト秩序型ペロブスカイト構造酸化物に関しては、多くの材料系で SPring-8 グループによる X 線磁気円二色性実験と大阪大学グループによる第一原理電子状態計算がなされ、磁気相互作用が系統的に明らかにされた。これらの結果を発展させ、カチオン秩序制御による磁気相互作用という物質デザインに基づき、新規な A-B サイト秩序型ペロブスカイト構造新物質 $\text{CaCu}_3\text{Fe}_2\text{Ta}_2\text{O}_{12}$ や $\text{CaCu}_3\text{Fe}_2\text{Nb}_2\text{O}_{12}$ の合成の成功に至った。A サイトが秩序化していない $\text{Ca}_2\text{FeTaO}_6$ や $\text{Ca}_2\text{FeNbO}_6$ では、B-B 反強磁性的相互作用のために幾何学的な磁気フラストレーションが起こるのに対して、新規 A-B サイト秩序型ペロブスカイト構造酸化物では、A'-B 相互作用によりフラストレーションが解消されてより高温で強磁性(フェリ磁性)を示すことを見出した。この結果は、さらに室温以上の高い磁気転移温度を有するハーフメタル新材料 $\text{CaCu}_3\text{Fe}_2\text{Re}_2\text{O}_{12}$ の発見へと繋がった。(2014 年 5 月に *Nature Communications* に論文発表、関連記事が京都新聞、日刊工業新聞、科学新聞などに掲載)。この新物質の電子状態はスピン偏極伝導電子を有するフェリ磁性のハーフメタルであり、スピン偏極した電子のトンネル磁気も確認した(図 1-3)。室温以上においてスピン偏極伝導電子を有する材料は、特にスピントロニクスへの応用展開として非常に重要なものである。

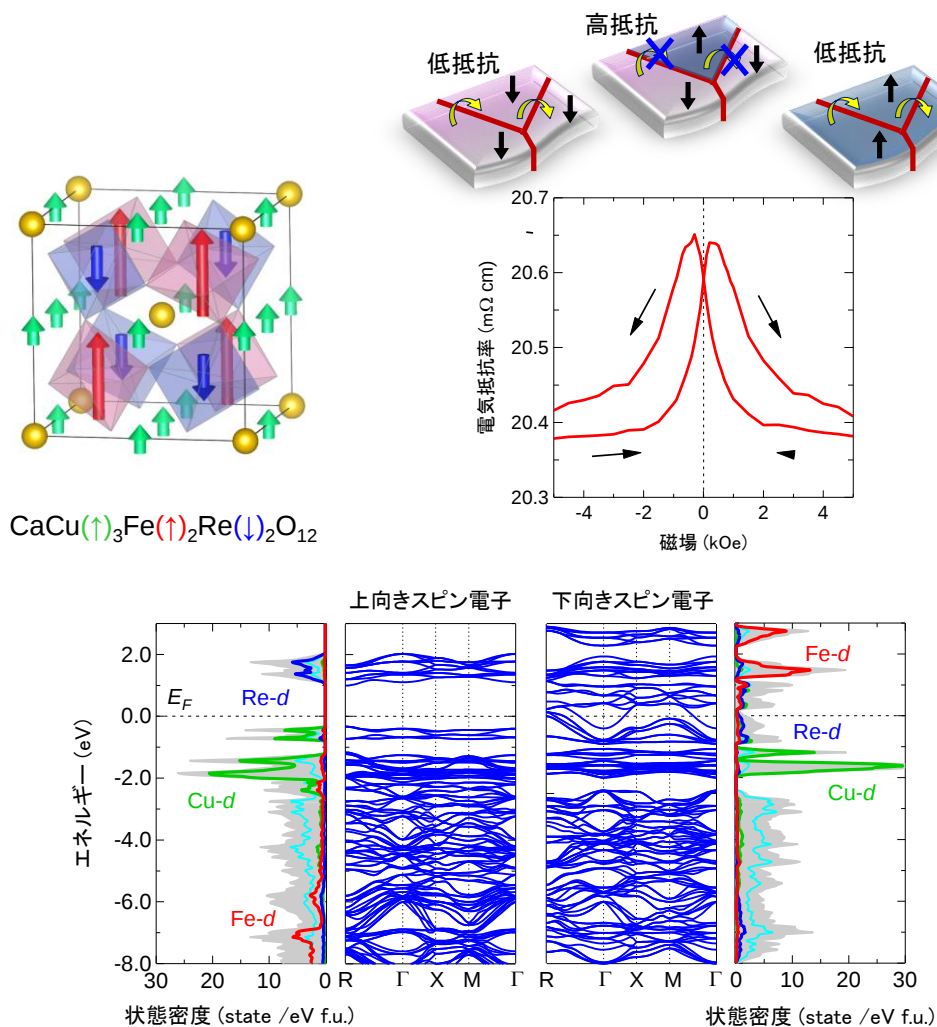


図 1-3 新物質 $\text{CaCu}_3\text{Fe}_2\text{Re}_2\text{O}_{12}$ の結晶・磁気構造(左上)と磁気抵抗効果(右上)、ハーフメタル電子状態(下)

A サイト秩序型ペロブスカイト構造酸化物では、A サイトに Mn を含んだ酸化物で、これまでに磁性と誘電性が相関したマルチフェロイクスなどが見いだされているが、その機能特性発現の起源として複雑な磁気構造が指摘されている。京都大学(1)グループで作製した $\text{YMn}_3\text{Al}_4\text{O}_{12}$ と $\text{LaMn}_3\text{V}_4\text{O}_{12}$ では、国際共同研究による中性子回折実験及び SPring-8 グループによる放射光分光による磁気円二色性実験から、この両者が全く異なる磁気構造をとることを見出した。特に $\text{LaMn}_3\text{V}_4\text{O}_{12}$ は立方晶のスピ格子でも対象性が下がった非常に珍しいノンコリニアな 60° スピン構造が発現している。これらの磁気構造の微視的かつ統一的な理解が第一原理電子状態計算を用いた大阪大学グループで進められ、異なるスピ構造の原因が Mn の価数の違いにあることを明らかにした(図 1-4)。一連の結果は実験グループと理論グループによる共著論文としてまとめられ、掲載された。

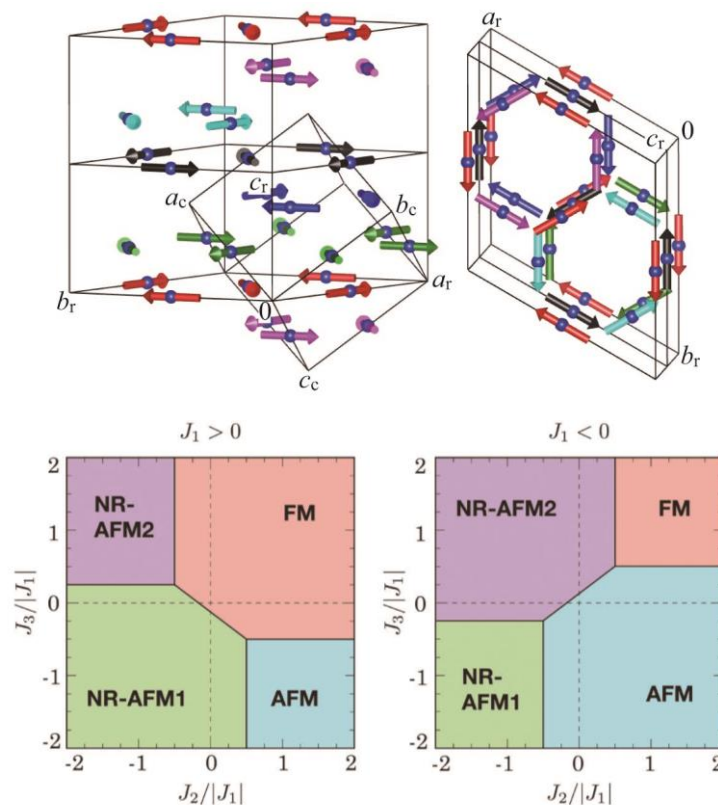


図 1-4 $\text{LaMn}_3\text{V}_4\text{O}_{12}$ の中性子回折により得られた磁気構造(上)と第一原理計算による安定磁気構造解析結果(下)

(2) 研究実施内容及び成果：薄膜材料による新しい機能発現への展開

低温トポタキティックな酸化・還元反応を 3d 遷移金属酸化物エピタキシャル薄膜に適用してきた。特に、人工超格子薄膜での還元では、層選択的な酸素脱離が起こり、酸素イオンの移動が 2 次元平面内に制御できる可能性を示した(図 1-5) (2011 年 6 月に *Scientific Reports* に論文発表、関連記事が京都新聞、日刊工業新聞、科学新聞などに掲載)。これは人工超格子の組み合わせによって、酸素イオン伝導の次元性を制御できる可能性を示唆するものである。

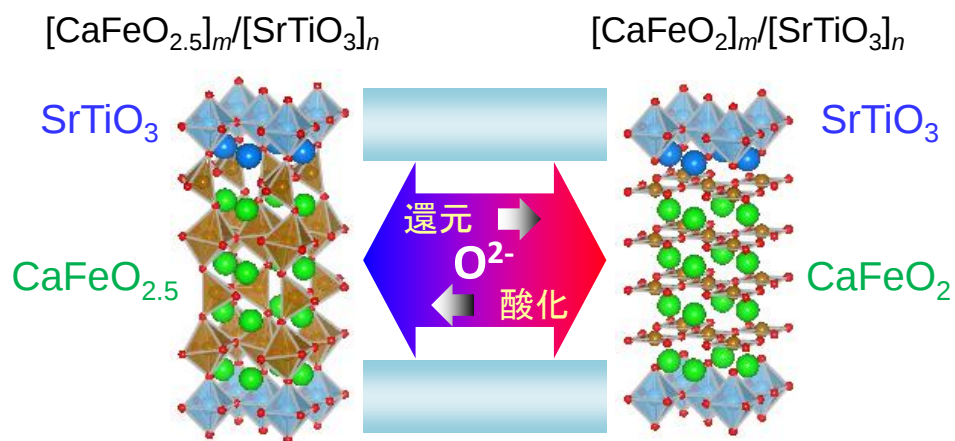


図 1-5 人工超格子薄膜での2次元酸素イオン脱離

一連の成果は、ありふれた Fe 酸化物を燃料電池などへ応用し、さらに社会的にも大きな課題である動作温度の低温化へ向けた材料開発の基礎データとなるものである。

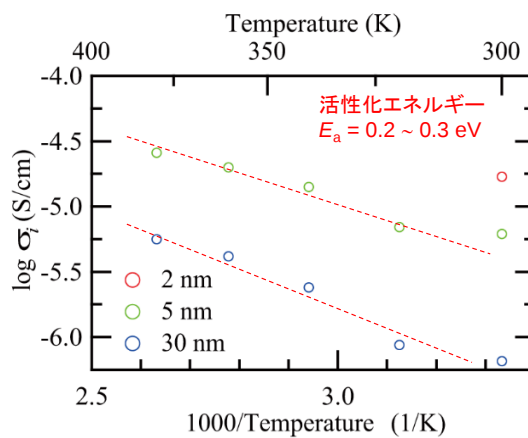


図 1-6 $\text{SrFeO}_{2.5}$ 薄膜の伝導特性

(3) 研究実施内容及び成果：薄膜ヘテロ構造界面での歪制御と高分解能電子顕微鏡観察による歪の直接観察

遷移金属酸化物薄膜をパルスレーザー蒸着法を用いて原子レベルで制御して作製し、特に基板からのエピタキシャル歪を利用することで、新たな機能特性を発現させることを目指して研究を進めてきた。同時に、作成した薄膜の精密な構造評価として、超高分解能電子顕微鏡を駆使してきた。環状暗視野(HAADF)法・明視野(ABF)法を併用することにより軽原子である酸素を含めた全原子の可視化に成功し、その精密な位置決定から、薄膜中の僅かな格子歪みを原子層厚単位で検出することに成功した(図 1-7)。

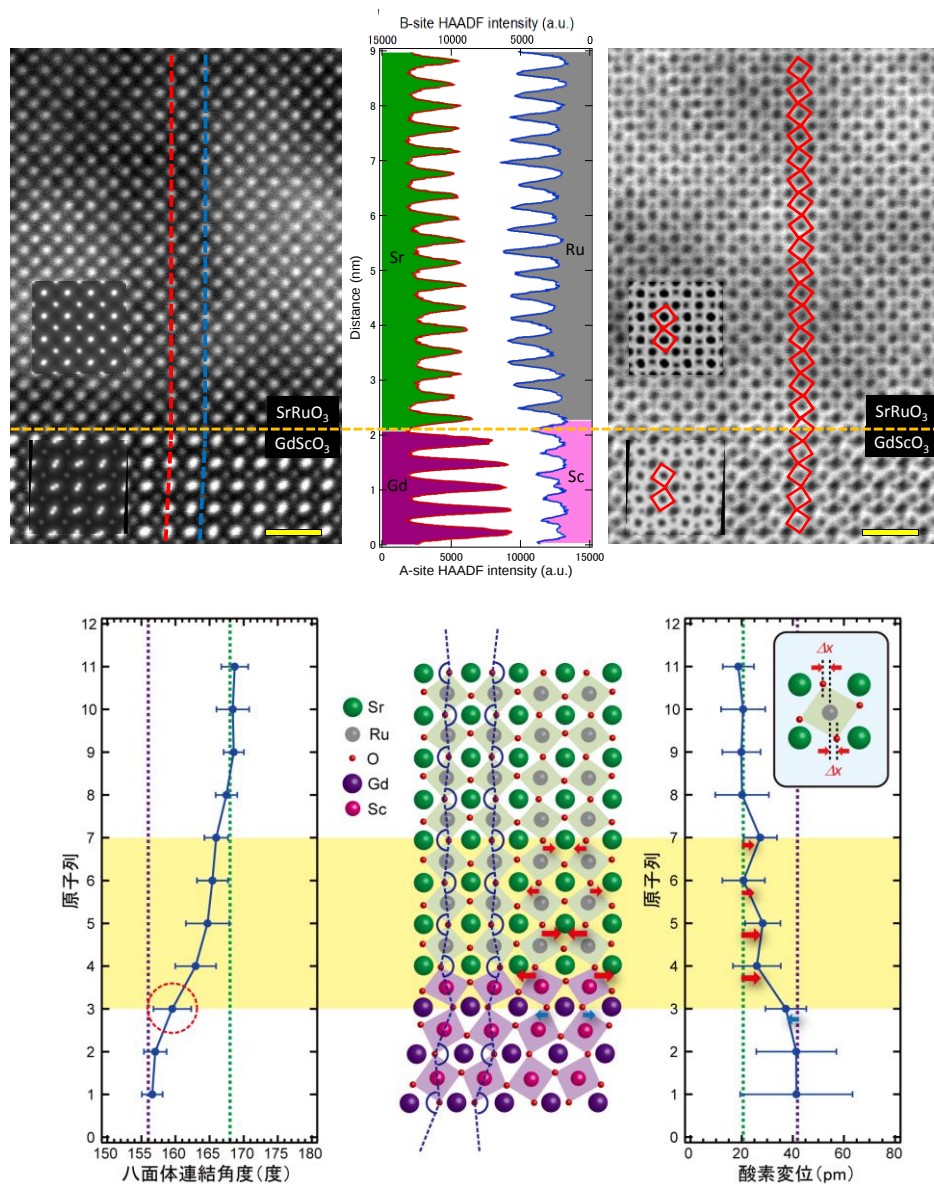


図 1-7 GdScO₃/SrRuO₃ヘテロ構造の超高分解能電子顕微鏡環状暗視野(HAADF)・明視野(ABF)像とそのスペクトル解析(上)と酸化物ヘテロ界面近傍における酸素八面体の連結変化

遷移金属酸化物薄膜での歪効果として、 SrRuO_3 において膜厚や基板からの歪みに応じて RuO_6 八面体の回転が大きく変化して、薄膜の磁気・輸送特性も大きく変化することを見出した。 $\text{GdScO}_3/\text{SrRuO}_3$ ヘテロ構造の界面を超高分解能電子顕微鏡を使った環状明視野 (ABF) 法により詳細に調べた結果、この界面では酸素原子の位置のみがわずかにずれて、酸素八面体の連結角度を変化させることで、僅か 4 格子単位 (約 1.6 nm) の厚さの界面領域で結晶格子の歪みの違いが吸収されている様子を明らかにすることに成功した (図 1-7) (2013 年 7 月に *Scientific Reports* に論文発表、関連記事が京都新聞、日刊工業新聞、科学新聞などに掲載)。この結果は、ヘテロ界面での新しい機能特性の解明へ向けた評価技術を確認したものである。

このように薄膜の構造・物性において、界面での原子レベルでの歪の重要性を明らかにした結果を受け、さらに界面付近の僅か数原子層の構造を制御することで、その上の薄膜全体の物性を任意にコントロールする「界面エンジニアリング」へと発展させた。ここでは、僅か 1~数ユニットセルの厚さの異種界面相を挟むだけで、基板からの八面体歪の傾斜伝搬を制御し、上部 SrRuO_3 薄膜のスピン-軌道相互作用の変化を通じて、磁気異方性を制御することに成功した (図 1-8) (2016 年 3 月に *Nature Materials* に論文発表、関連記事が京都新聞、科学新聞に掲載)。この結果は、新規界面構造の設計や格子歪みの制御をとした機能性酸化物薄膜の設計へと発展させる礎となるものである。

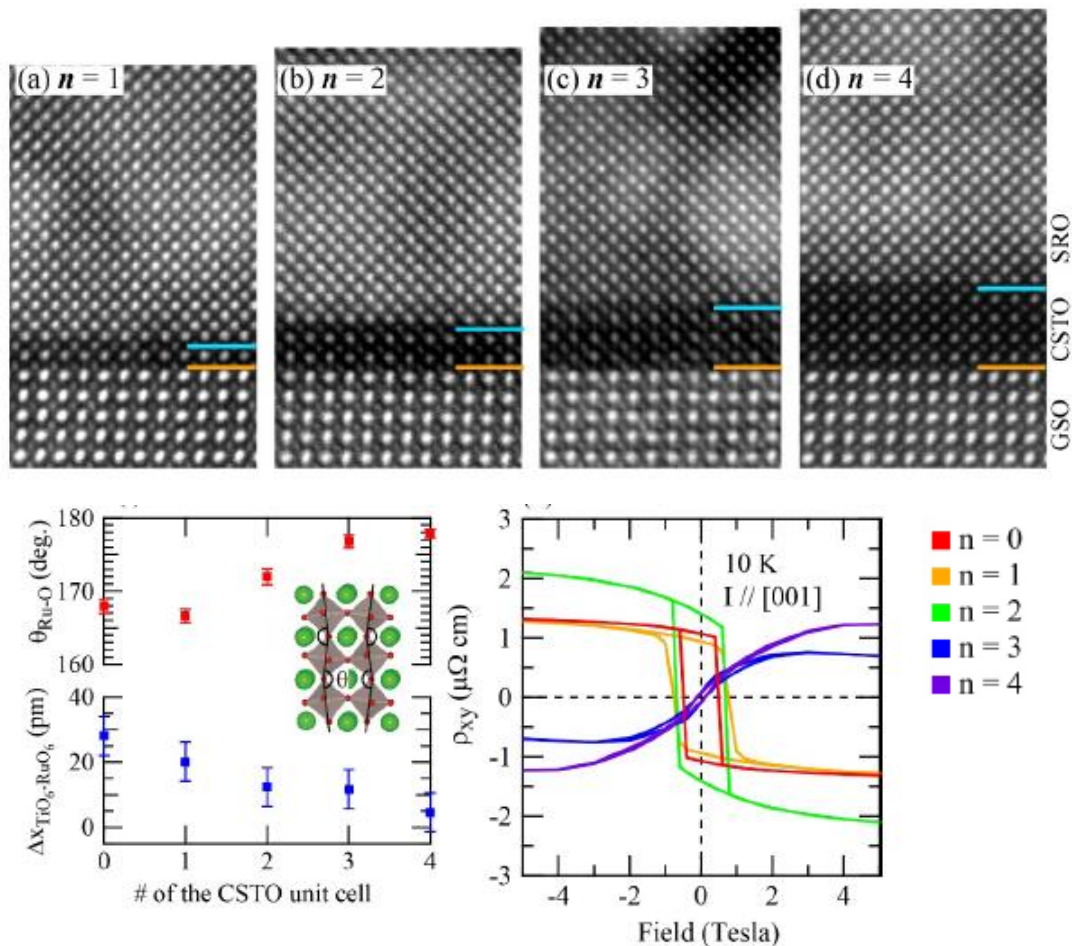


図 1-8 酸化物薄膜での界面エンジニアリングによる磁気異方性の制御

また、酸素欠損ペロブスカイト $\text{SrFeO}_{2.8}$ の物性が基板からのストレインにより大きく変化することも見出した。バルク材料 $\text{SrFeO}_{2.8}$ では電荷不均化による金属-絶縁体転移が低温 (70 K) で起こることは知られていたが、ヘテロ構造を作製し、薄膜にエピタキシャルストレインを印加することで、この転移温度が 550 K も上昇し、室温をはるかに超える 620 K で起こることを見出した。この酸素欠損ペロブスカイト酸化物での Fe の電荷不均化には、放射光メスバウアー分光を使い、ごく薄い薄膜での温度変化に伴う Fe のイオン価数変化を解明することに成功した。

(4) 研究実施内容及び成果：低次元配列物質のデザインと低温トポタクティック酸化による新規層状酸化物の合成

これまでに異常高原子価を含んだ Fe イオンを含んだ酸化物に注目し、電荷不均化やサイト間電荷移動などの興味深い特性を見出してきたが、知られている酸化物での異常高原子価 Fe イオンは 3 次元ネットワークを形成しており、特異な相転移は 3 次元で起こると考えられてきた。この仮説を検証するために、異常高原子価 Fe イオンが 2 次元配列した物質を作りたいと考えた。そこで、Fe と Mn が 2 次元層状に配列したブラウンミレライト構造 $\text{Ca}_2\text{Fe}^{3+}\text{Mn}^{3+}\text{O}_5$ に注目し、カチオンの移動反応が起こらない低温でトポタクティックに低温酸化することで、 Fe^{4+} が 2 次元に層状に配列した新規層状ペロブスカイト $\text{Ca}_2\text{Fe}^{4+}\text{Mn}^{4+}\text{O}_6$ を得ることに成功した (図 1-9)。これは、カチオンの次元配列制御を低温トポタクティック酸化反応を使うことでデザインして得た成果である (*Bull. Chem. Soc. Jpn.* に掲載された論文は Selected Paper に選出)。

異常高原子価 Fe^{4+} イオンは 2 次元に配列した場合でも、2 次元面内で Fe^{3+} と Fe^{5+} が市松模様に並んだ電荷不均化を起こすことが明らかになった。また、低温で Fe^{3+} 、 Fe^{5+} が 2 次元面内でフェリ磁性に Mn^{4+} は反強磁性にカップした珍しい磁気構造となっていることを明らかにした。

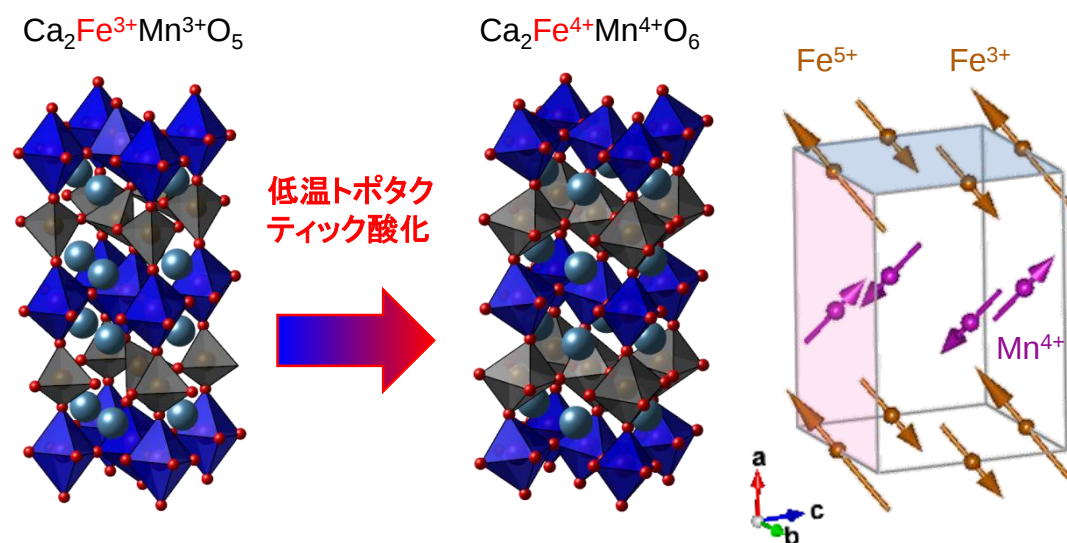


図 1-9 異常高原子価 Fe^{4+} の 2 次元配列した層状構造 $\text{Ca}_2\text{FeMnO}_6$ の結晶構造と磁気構造

(4) 研究実施内容及び成果：構造安定化予測に基づく新物質デザイン

多くの遷移金属酸化物は、基本的にはイオン結晶として捉えることができる。例えば、ペロブスカイト構造酸化物では、B サイトの遷移金属カチオンが 6 つの O^{2-} イオンで囲まれた八面体を作り、頂点を共有した八面体の作る酸素 12 配位の隙間に比較的サイズの大きな A サイトのカチオンが入った構造となっている。この構造の安定性を遷移金属イオンと酸素とのイオン結合距離から bond valence (結合価数) によって評価するのが、SPuDS: Structure Prediction Diagnostic Software である。この手法を新物質デザインへ適用し、合成実験におけるスクリーニングとして機能することを実証した。一連の A サイト秩序型ペロブスカイト構造新物質の探索の過程で、A サイトに Mn イオンが入った物質設計を行った結果が図 1-10 である。一般的に、Global Instability Index (*GII*) と呼ばれる指標が 0.1 以下となる物質では、イオン結晶としての構造が安定となり、合成が可能である。実際に、この結果に基づいて、高圧法を使い $YMn_3Al_4O_{12}$ の単相の試料を得ることに成功した。(ちなみに、*GII* が 0.3588 となる $LaMn_3Al_4O_{12}$ の合成を試みたところ、単相の試料を得ることはできなかった。)

この構造安定性の予測は、 $Ln^{3+}Mn^{2+}_3V^{3.75+}_4O_{12}$ 組成で見られるペロブスカイト構造の A サイト秩序—無秩序相転移とそれに伴う磁気特性の変化 (反強磁性—スピングラス) も説明できることも明らかにした。物質デザインによる新物質合成と機能特性の予測にまで適用できる興味深い手法である。

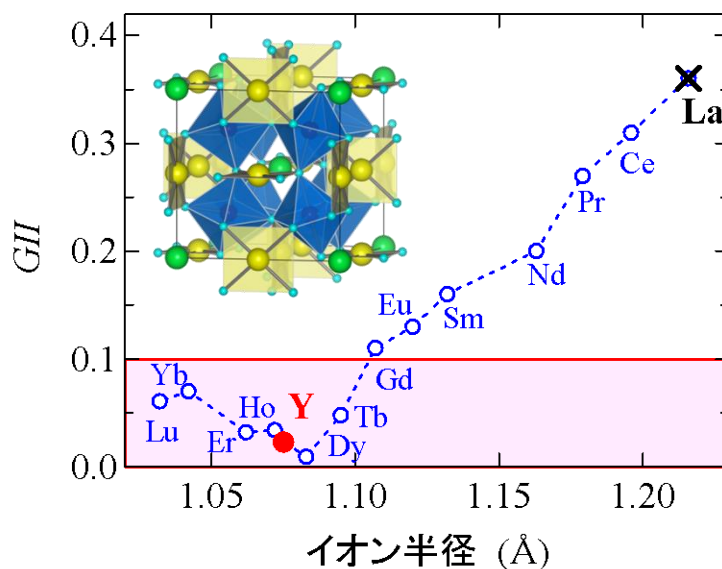


図 1-10 A サイト秩序型ペロブスカイト構造をとる新物質 $Ln^{3+}Mn^{2+}_3Al^{3+}_4O_{12}$ における構造安定性予測

3. 2 材料合成・物質制御（京都大学(2)：陰山グループ）

(1)研究実施内容及び成果：低温合成による新物質開拓

京都大学(2)グループでは低温合成法(ソフト合成)を駆使したトポケミカルな構造変換に着目して研究を進めてきた。特異な平面 4 配位をもつ無限層構造 SrFeO_2 の Sr の一部を希土類元素 (Ho, Sm, Nd) で置換すると、 FeO_2 層間の頂点位置に部分的に酸素イオンが入り構造が大きく変化することが、SPRING-8 グループの放射光 X 線回折データの PDF 解析などから明らかとなった。これは、Ni や Cu を含む従来の無限層構造の化合物には見られなかったものであり、平面 4 配位の Fe が極めて強い共有結合性を持ちながら、柔軟性を兼ね備えていることを示している。また、 $\text{BaFeO}_{2.5}$ を前駆体とする低温還元反応によって、新しい平面 4 配位物質 BaFeO_2 を合成することにも成功した。これまでに FeO_4 平面 4 配位の酸化物は幾つか報告されているが、本物質ではこの配位が八面体などの他配位と共存する初の例である。さらに、この低温トポケミカルな反応を活用するにより、特異な平面 4 配位をもつ Sr_2FeO_3 などの幾つかの新物質の合成にも成功した(図 2-1)。無限層構造化合物 $(\text{Sr}, \text{Eu})\text{FeO}_2$ においては、圧力により Eu^{2+} から Fe^{2+} へと電荷移動が起こり、その結果、鉄の酸化物としては初めて +1 価が実現されることを示した。この電荷移動と磁気構造については、大阪大学グループによる電子状態計算からも理論的な説明がされた。

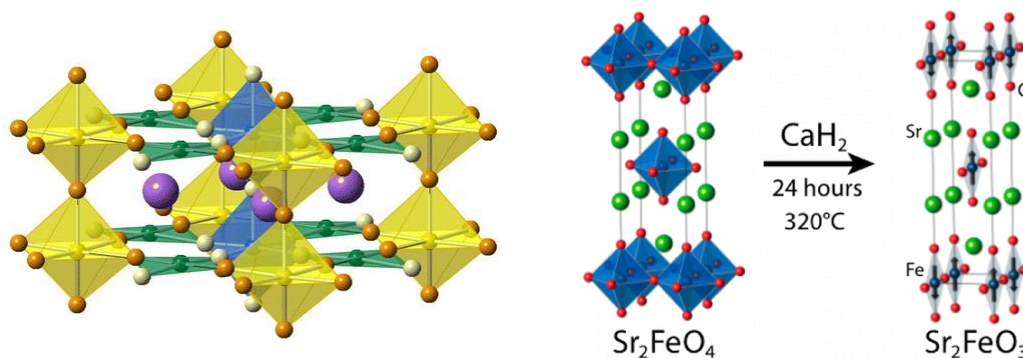


図 2-1 平面4配位ユニットを持つ新物質 BaFeO_2 (左)と Sr_2FeO_3 (の右) 結晶構造

さらに CaH_2 などを使った低温反応は、アニオン置換による新物質合成に繋がることを見出し、このようにして得られた新物質をエレクトロニクス、スピントロニクスへ応用展開する可能性を検討した。その中で、ペロブスカイト型の新物質 SrCrO_2H の合成に成功し、これまでに知られている3価のCrイオンとしては最も高い磁気転移温度を持つことを見出した(図 2-2)。この物質ではCr-O-Crの結合角が 180° になっており、アニオン置換によって構造許容(トレランス)因子を制御し、磁気的な超交換相互作用を最大にできることを実証したものである。また、コバルト含有層状ペロブスカイト型の酸水素化物 $\text{LaSrCoO}_3\text{H}_{0.7}$ 薄膜では、基板の方位(LaSrAlO_4 のおよび(100)、(001)面)によってアニオン配列の異なる正方晶、斜方晶の構造を安定化することに成功した(図 2-2)。基板によるストレイン効果によって複数のアニオン種の秩序制御を達成した例は殆どなく、本研究結果は今後のアニオン種の秩序制御による物性制御に新たな指針を与える結果であると考えている。薄膜試料 $\text{ATiO}_{3-x}\text{H}_x$ ($A = \text{Sr}, \text{Ba}$)においては、H量を変えながら電気抵抗測定を行い、それによってヒドリドによるキャリアドープや構造に与える影響を明らかにした。その結果、カチオン置換(例えば、Nb)で観測されていた局所的な歪みさえも再現できることを明らかにした。これは、H置換が物性制御に極めて有効な手段であることを初めて示したものである。

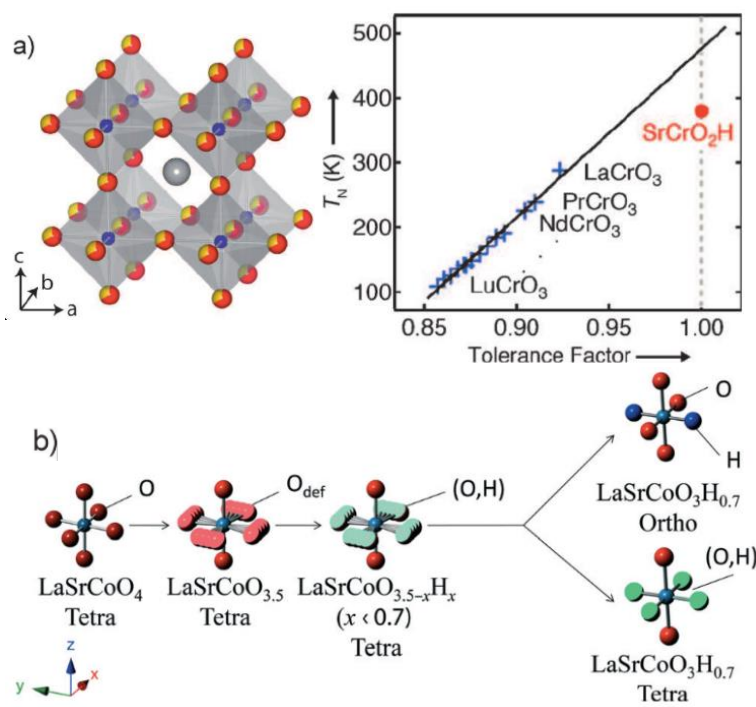


図 2-2 (a) SrCrO₂H の結晶構造、および磁気転移温度の比較 (b) LaSrCoO₃H_{0.7} における、H⁻の配位制御

(2) 研究実施内容及び成果：新規機能性酸化物の合成

低温還元により得られる多孔性モノリス酸化物が新しい機能材料になると注目してきた。孔特性を精密に制御したマクロ多孔性酸化物モノリス体としてはシリカやアルミナ、チタニアなどのが知られているが、これらは全て絶縁体であり、電極材料などとして導電性酸化物モノリス体の開発が望まれている。相分離法により得られたTiO₂のマクロ多孔性モノリス体に対して、金属Zrを酸素ゲッターとした還元反応を行い、一連の酸素欠損型チタン酸化物Ti_nO_{2n-1} ($n = 2, 3, 4, 6$)のマクロ多孔性モノリス体をそれぞれ単相で作製することに成功した(図 2-3)。Ti₄O₇のSEM像からは、還元処理後もTiO₂前駆体と同様のマクロ孔形態が維持されていることが確認された。さらに、得られた一連の還元体は従来材料の約半分のバルク密度(1.8 gcm⁻³)で約3倍の空孔率(60%)をもちながらも、従来材料と同等の低い室温バルク抵抗率($2 \times 10^{-2} \Omega\text{cm}$)を有することがわかった。

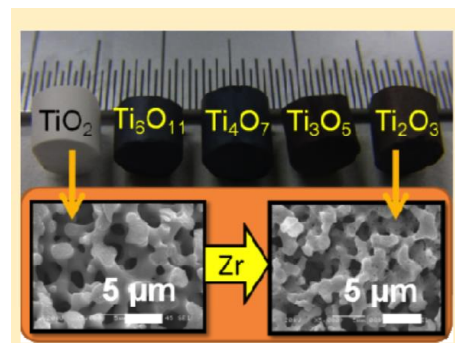


図 2-3 多孔質Ti_nO_{2n-1} モノリスの作製

さらに、導電性の向上を目指し、多孔性酸化チタン(TiO₂)モノリスをアンモニア気流中で焼成することにより窒化チタン(TiN)多孔体の作製を行った。得られた窒化チタン多孔体は、酸化チタンモノリス由来のマクロ孔に加え、結晶粒子間隙由来のメソ孔を有しており、さらに 300 S cm⁻¹ を超えるバルク導電性を示した。これらは、階層的多孔構造と優れた電子伝導性を生かしてバインダーフリーの電極材料としてリチウム-硫黄電池などへの応用が可能である。また、窒化チタンモノリスのキャパシタ電極としての応用実験も行い、その結果、1 M KOH 水溶液中において 100 mV s⁻¹ という大きな走査速度においても 10 F cm⁻¹ を超える大きな静電容量も得られた。このTiNモノリス多孔体は、結晶性に優れ、機械的安定性と電子伝導性にも優れている。バ

インダーフリーのモノリス型キャパシタ電極として応用し(図 2-4)、アルカリ性の電解液には優れた耐久性を見出した。電解液中のイオン種と TiN の擬似容量との関係は $K^+ < Na^+ < Li^+$ と、通常の物質と異なる傾向を発見し、その起源を明らかにした。また、酸窒化物モノリス多孔体について焼成雰囲気と温度などの合成条件と、得られた材料の結晶性、ミクロ孔、メソ孔特性や電気伝導性の相関を明らかにした。

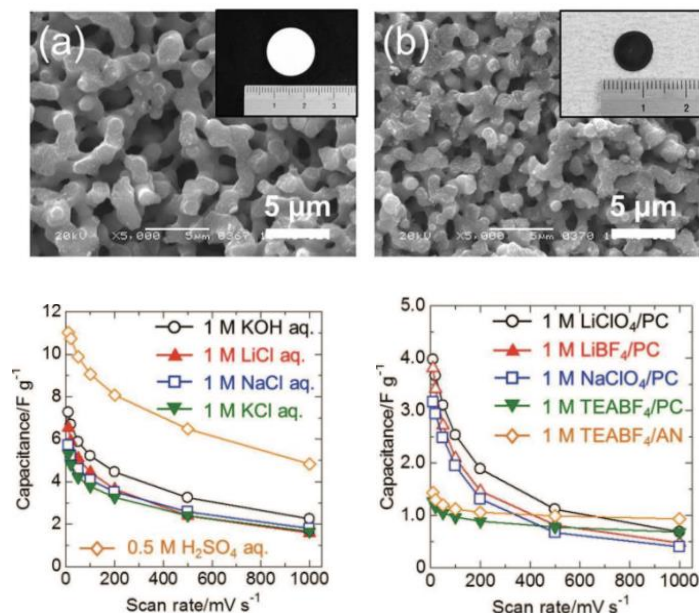


図 2-4 (a) TiO_2 前駆体モノリス、(b) TiN モノリス、(c) 水溶液、および有機溶媒での TiN モノリスのキャパシタ容量

(3) 研究実施内容及び成果：新規機能の探索

層状チタン化合物 Ti_2PTe_2 の低温での反応を調べている仮定で、インターカレーションにより Cd や Zn などの遷移金属が特異的に挿入されることを明らかにし、新規な環境材料として展開できる可能性を見出した。通常の層状化合物ではさまざまなイオンや分子の挿入が可能であるが、この材料では Te と四面体配位を取りうる遷移金属のみが挿入される、つまり、配位選択性がある。特に、図 2-5 に示すように Cd が約 $80^\circ C$ 程度の低温でも選択的に挿入されるという結果は、固体のインターカレーションの常識を覆すものであり、リサイクリングや有毒元素除去に関する新しい方法論を与える可能性がある。これは、 Ti のまわりの異方的な配位環境が、選択的インターカレーションに本質的な役割を担っていることを示す結果であることが、大阪大学グループによる第一原理計算によって明らかにされた。同様のインターカレーションは、同構造をもつ Zr_2PTe_2 についても起こることを検証し、 Cd や Zn などの挿入により菱面体格子から三方晶格子へとスタッキング様式が変化する。しかし、 Ti 系と Zr 系では、吸収温度や速度に顕著な差がみられりことも明らかにした。

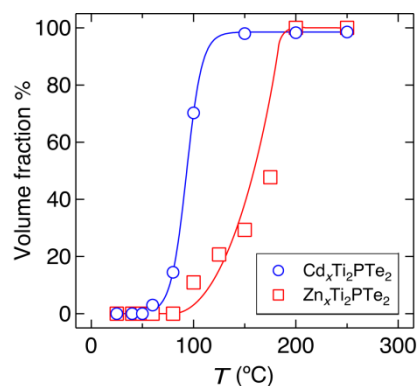


図 2-5 低温における、 Ti_2PTe_2 に対する Cd 、 Zn のインターカレーション反応

(4) 研究実施内容及び成果：合成手法と物質探索の新展開

新しい機能性物質開発の可能性を広げるために、合成手法の展開もはかってきた。その中で、ソルボサーマル法を使った合成により、新規有機—無機ハイブリット鉄化合物 $\text{FeF}_3(4,4'\text{-bipyridine})$ を得た。この物質は鉄が $S=5/2$ のスピンを持つことが分かっており、その一次元の構造から、理想的な $S=5/2$ 鎖物質になっていると考えられる。実際、約 160K で低次元磁性体に特有のブロードなピークが見られ、比熱測定の結果、2 K まで磁気秩序の様子が見られない(図 2-6)。このような低次元性の化合物系では、スピン量子数が小さい ($S = 1/2, 1$) 物質の報告例はこれまでに数多くあり、理論的な考察と共に精力的に研究が進められてきたものの、本物質のような磁気モーメントが大きい鉄での理想的な一次元物質は初めてのものである。

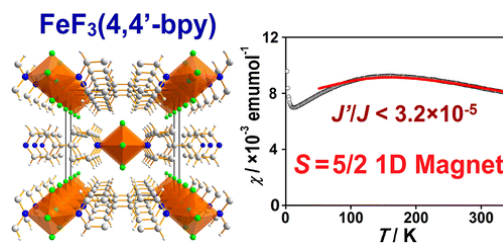


図 2-6 $\text{FeF}_3(4,4'\text{-bipy})$ の構造と磁性

3. 3 放射光による構造評価と電子状態解析 (SPring-8: 木村グループ)

(1)研究実施内容及び成果: 放射光分光測定による電子状態解析

SPring-8 グループは、京都大学(1)、
(2) グループにより合成された新物質の
構造を評価するとともに、特異な機能特
性を解明するため、電子状態を明らかに
する研究を実施した。

電子状態解析では、京都大学(1)グル
ープで高压合成された A サイト秩序型
ペロブスカイト構造酸化物、京都大学(2)
グループでの低温トポタクティク反応に
より得られた平面4配位物質の原子価状
態と磁気状態に関する数多くの測定を
行なってきた結果、酸化物中での 3d 遷
移金属イオンの異常な原子価状態や
様々な配位状態の標準スペクトルを確
立するに至った(図3-1)。これらは、今後
の多くの物性研究の基準となるものであ
る。

また、A サイト秩序型ペロブスカイト構
造酸化物の評価に関しては、京都大学
(1)グループで作製された試料の分光ス
ペクトル、及び磁気円二色性を測定し、さらに大阪大学グループと共同で電子状態計算も行い、
構成イオン間に働く様々な磁気相互作用の起源の解明に成功した。電荷不均化を示す
 $\text{CaCu}_3\text{Fe}_4\text{O}_{12}$ では、転移温度以下での Fe および Cu の L-吸収端において X 線吸収(XAS)およ
び X 線磁気円二色性(XMCD)測定を行った。図 3-2 に Fe-L、Cu-L 吸収端の XAS と XMCD ス
ペクトルをそれぞれ示す。Fe と Cu の各 L 端における XMCD の符号が逆であることから、Fe と
Cu の磁気モーメントが反強磁性的に結合し、フェリ磁性体となっていることがわかる。磁気光学
総和則を適用することで、Fe-3d 電子の軌道磁気モーメントが有限に残ること、電荷不均化して
いる Fe^{3+} と Fe^{5+} が強磁性的に結合していることを示した。また、電荷不均化を起こしている Fe^{5+}
イオンを非磁性の 5 価イオンに置換した $\text{CaCu}_3\text{Fe}_2\text{Sb}_2\text{O}_{12}$ でも、同様の Fe と Cu の磁気モーメン

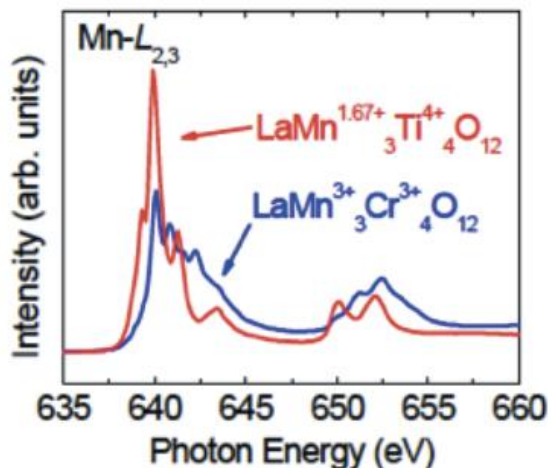


図 3-1 異なる原子価状態における放射光X線
におけるMn-L吸収端スペクトル。

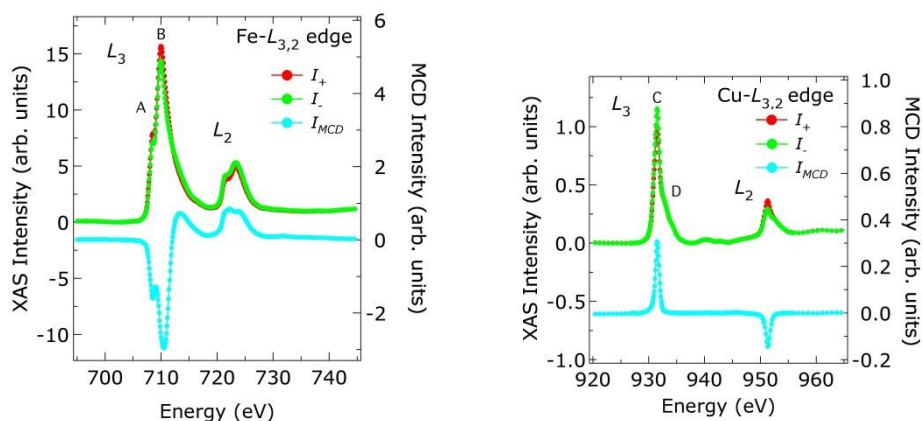


図 3-2 $\text{CaCu}_3\text{Fe}_4\text{O}_{12}$ のFe-L、およびCu-L吸収端でのXAS・XMCDスペクトル

トが反強磁性的に結合したフェリ磁性体となっていることを確認したが、高い磁気転移温度を有するハーフメタル $\text{CaCu}_3\text{Fe}_2\text{Re}_2\text{O}_{12}$ では、その磁気構造が大きく異なることを明らかにした。 Re の XAS、及び XMCD の測定から、 Re の磁気モーメントが Fe や Cu の磁気モーメントと反強磁性的に結合し、その結果として Fe と Cu の磁気モーメントが強磁性的に結合していることを見出した(図 3-3)。これは、この物質の特徴である高い磁気転移温度と大きな磁化の値の起源を解明した決定的な実験であり、ハーフメタル新物質解明の重要な情報を与えたことになる。また、一連の磁気構造解析の結果は、カチオンの配列制御による磁気構造制御に繋がるものである。

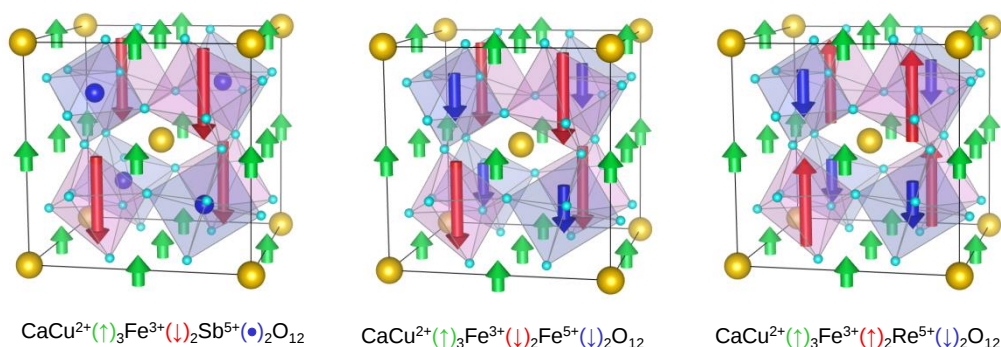


図 3-3 Aサイトペロブスカイト構造酸化物での磁気相互制御

さらに、分光測定の実験結果は、一連の物質の基礎物性を理解するうえで重要なものとなった。 Cu-L_3 吸収端($E=932\text{eV}$ 付近)のスペクトルの形状は、一連の A サイト秩序型ペロブスカイト構造の電気伝導性と強く相関しており、単純な Cu^{2+} ではなく、この系の遍歴性の起源となっている可能性を指摘した(図 3-4)。また、磁気相互作用に関しては、大阪大学グループと共同で電子状態計算を行い、定量的な解釈に成功した。 $\text{CaCu}_3\text{Fe}_2\text{Sb}_2\text{O}_{12}$ では、 Cu-Cu 間磁氣的交換相互作用 $J = 4.93\text{meV}$ 、 Fe-Fe 間は $J = -2.40\text{meV}$ 、 Cu-Fe 間では比較的強い反強磁性的交換相互作用 $J = -9.81\text{meV}$ がはたらいっている結果、XMCD 実験で観測された A'サイトの Cu と B サイトの Fe スピンが反平行となったフェリ磁性が安定であるという結果を得た。これらの磁氣的相互作用から平均場近似で見積もった磁気転移温度は $T_C = 191\text{ K}$ であり、実験値 $T_C = 170\text{ K}$ と

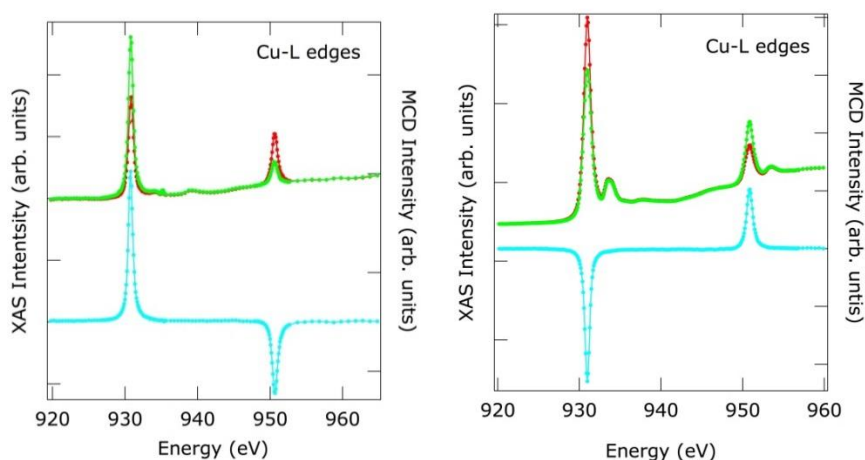


図 3-4 $\text{CaCu}_3\text{Fe}_2\text{Sb}_2\text{O}_{12}$ (左)と $\text{CaCu}_3\text{Fe}_2\text{Re}_2\text{O}_{12}$ (右)の Cu-L 吸収端でのXAS・XMCDスペクトル

も良く一致する結果である。さらに、電子状態密度とスピン密度分布を詳しく解析した結果、Cu-Fe 間の反強磁性的交換相互作用は $\text{Cu}(dx^2-y^2)\text{-O}(px)\text{-Fe}(t_{2g})$ 混成による超交換相互作用が主要な要因であることも解明した。このような A'-B サイト間の磁氣的交換相互作用に関する知見は、京都大学(1)、(2)グループの物質合成へフィードバックし、磁気相互作用を制御した物質デザインによる新物質合成にも大きく貢献した。

(2) 研究実施内容及び成果:放射光X線回折技術を用いた局所ナノ構造解析・時分割*in-situ*構造解析

開発された機能性酸化物材料のデバイスへの応用に展開する際に必須となる、局所ナノ構造解析やその場観察技術など、放射光 X 線回折技術を用いた新しい評価手法を開発してきた。

構造評価では、サブミクロンの局所構造の解析技術が完成した(図 3-5)。これにより、京都大学(1)グループで作製された SrRuO_3 ナノワイヤーの局所逆格子空間での回折測定を行い、ナノワイヤー化の配向方向を決定することができた(図 3-6)。これらは、今後のナノスケールのデバイス評価によって極めて重要である。特に、磁気抵抗材料やマルチフェロイクスをメモリやセンサなどのナノサイズのデバイスへ加工する場合の評価において威力を発揮するはずである。また、ゲート付高速 CCD を導入し、時分割測定の整備を完了した。これは、特に京都大学(1)グループが新たに注目している酸素イオン伝導の直接観察への適用の可能性の検討を進めているところである。このような新評価手法は、将来の低温動作燃料電池などでのデバイスの直接動作観察にも適応できるため、今後その有用性を含め更なる手法開発を継続していく予定である。

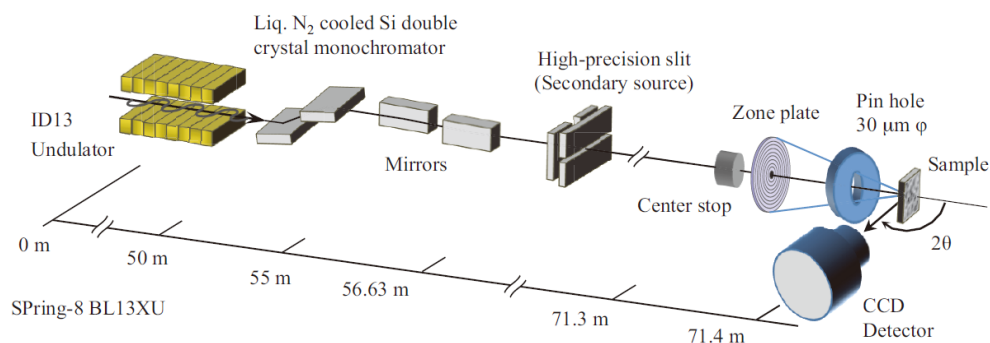


図 3-5 局所構造解析用マイクロX線回折装置

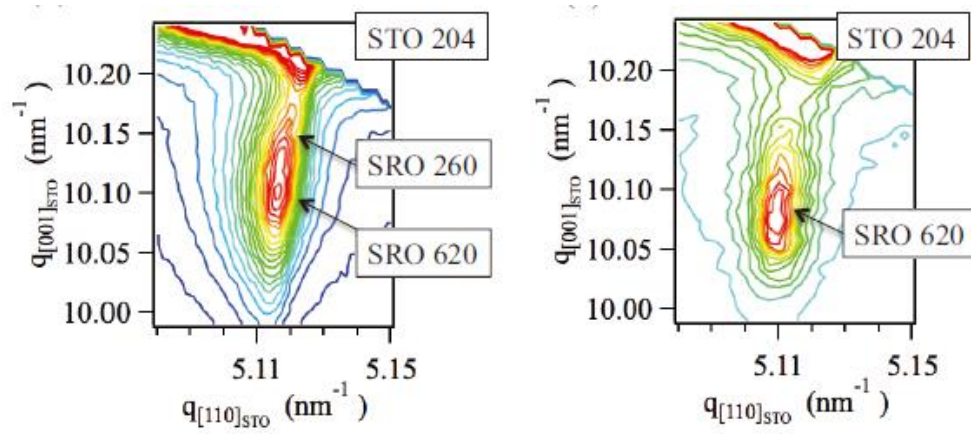


図 3-6 SrRuO₃ナノワイヤーの局所逆格子マップ。
 左は0.2 × 0.2 mm²のビームで、右は250 × 190 nm²のビームで測定。左ではツイン構造に起因する260回折と620回折が観測されているが、右では620回折のみが観測された。

3. 4 第一原理計算による電子状態解析・機能発現の解明と物質設計（大阪大学：小ログループ）

(1)研究実施内容及び成果：

大阪大学グループは、京都大学(1)、(2)グループおよび SPring-8 グループにより実験が進められている物質系を中心に第一原理電子状態計算手法による電子状態と物性機構の解明を進めた。

京都大学(1)グループにより合成された A サイト秩序型ペロフスカイト酸化物は、 $\text{CaCu}_3\text{Fe}_4\text{O}_{12}$ における電荷不均化や $\text{LaCu}_3\text{Fe}_4\text{O}_{12}$ におけるサイト間電荷移動などの特徴的な電子状態変化を示す。これらの相転移現象に関して、電子状態計算からの機構解明に迫った。 $\text{CaCu}_3\text{Fe}_4\text{O}_{12}$ の $\text{Fe}^{4+} \rightarrow \text{Fe}^{3+} + \text{Fe}^{5+}$ 電荷不均化では、Fe-3d 軌道と O-2p 軌道間の混成が強く Fe^{3+} や Fe^{5+} イオンでは純粋な d^5 や d^3 電子配置ではなく、Fe イオン周りとしては価数にあまり違いのない、Fe-O 結合距離に依存して軌道混成の微妙な違いがそのスピン磁気モーメントの違いを生じさせていることが明らかとなった。一方、 $\text{CaCu}_3\text{Fe}_4\text{O}_{12}$ の二価の Ca イオンが三価の La イオンに置き換わった $\text{LaCu}_3\text{Fe}_4\text{O}_{12}$ では、Cu イオンが三価となることで Fe^{3+} イオンが安定化し、電荷不均化が起こらずに高温もしくは高圧条件で $\text{Cu}^{3+} \rightarrow \text{Cu}^{2+}$ と変化し、金属状態へ相転移を起こす。第一原理計算による全エネルギーの解析から、 Cu^{3+} を伴う絶縁相と Cu^{2+} を伴う金属相の弾性率の違いからその圧力転移が説明できることを示し(図 4-1)、高温相は基底状態である絶縁相の単なる常磁性状態ではなく、高圧相、すなわち Cu^{2+} の存在により現れた常磁性状態であると推察した。

珍しい A サイト磁性を示す $\text{CaCu}_3\text{Ti}_4\text{O}_{12}$ および、その類縁物質である $\text{CaCu}_3\text{Ge}_4\text{O}_{12}$ や $\text{CaCu}_3\text{Sn}_4\text{O}_{12}$ において、A' サイト副格子における磁氣的交換結合を求め、その微視的起源をクラスター模型を用いて解析した。その結果、A' サイトを Cu^{2+} イオンが占める場合に、第一および第二近接 Cu 間に強磁性的な超交換相互作用 (J_1 , J_2) が働き、そのために $\text{CaCu}_3\text{Ge}_4\text{O}_{12}$ や $\text{CaCu}_3\text{Sn}_4\text{O}_{12}$ において強磁性的な基底状態が安定となることを明らかにした。さらに、B サイトに d 電子の t_{2g} 軌道が非占有となる Ti^{4+} を含む場合に第三近接 Cu 間に反強磁性的な長距離超交換相互作用 (J_3) が働き、これが J_1 を凌駕するため、G 型反強磁性状態が安定となることを解明した(図 4-2)。

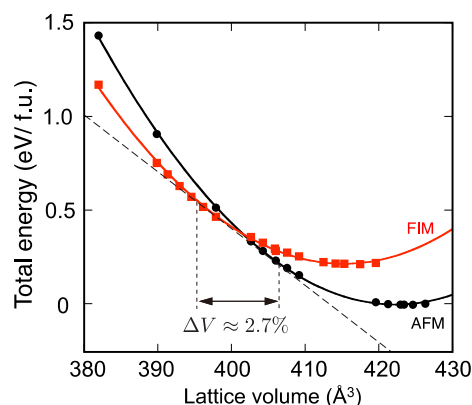


図 4-1 $\text{LaCu}_3\text{Fe}_4\text{O}_{12}$ の絶縁相(黒線、低温で反強磁性秩序を示す)と金属相(赤線、低温でフェリ磁性秩序を示す)の相対安定性の圧力依存性。

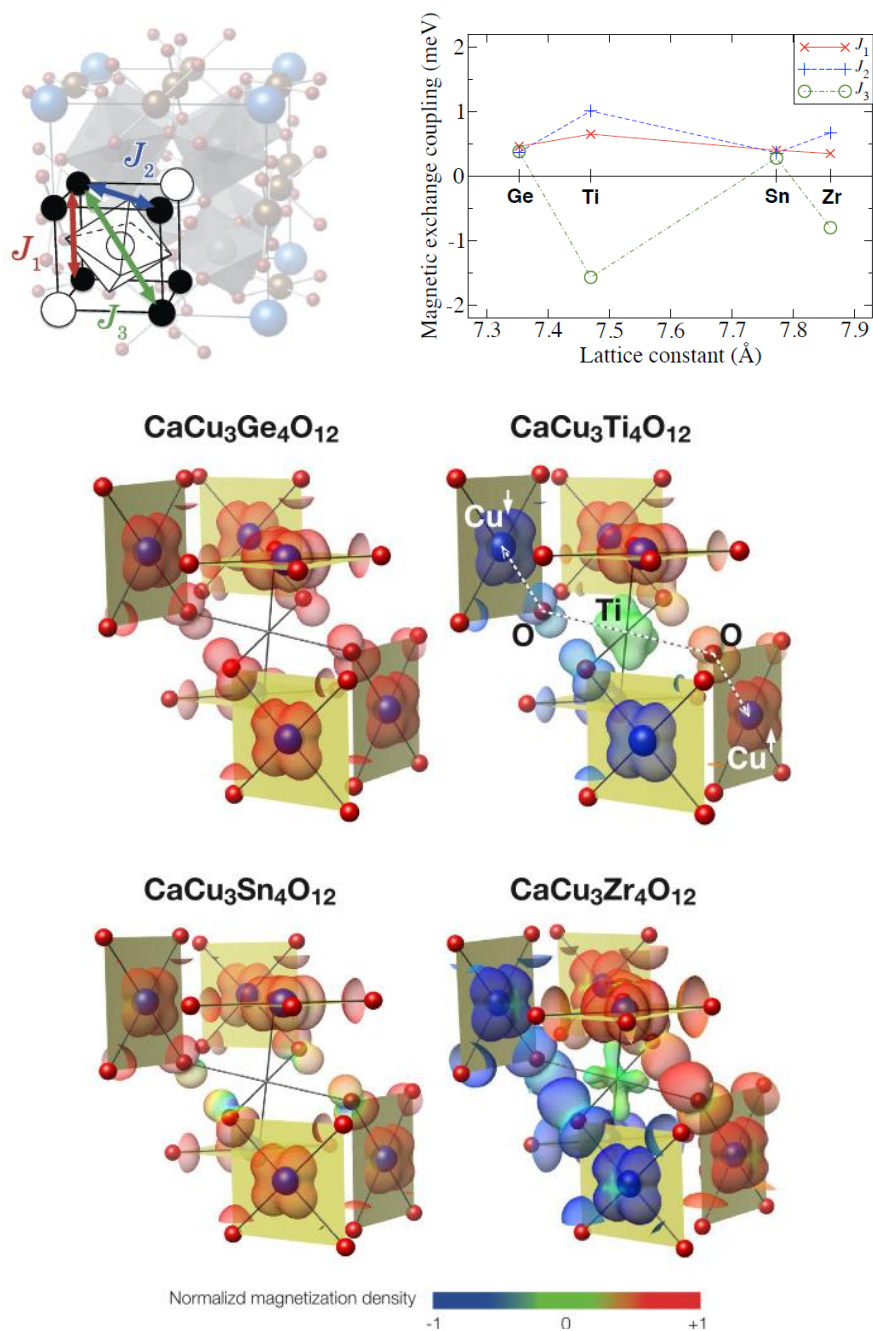


図 4-2 $\text{CaCu}_3\text{B}_4\text{O}_{12}$ でのA' サイトでの磁気相互作用(上)部分電荷密度分布。
 $\text{CaCu}_3\text{Ti}_4\text{O}_{12}$ と $\text{CaCu}_3\text{Zr}_4\text{O}_{12}$ では、第三隣接Cuのスピ間に反強磁性的相互作用が働く。

さらに、実験では報告されていない、 $\text{CaCu}_3\text{Zr}_4\text{O}_{12}$ についての物性予測を行い、Z さらに、A サイト秩序型ペロフスカイト酸化物における磁気構造の微視的かつ統一的理解を目標として、A'サイトに Mn イオンを含む物質での磁気構造に関して、第一原理電子状態計算を用いた研究を行った。G 型反強磁性体の $\text{YMn}_3\text{Al}_4\text{O}_{12}$ や $\text{LaMn}_3\text{Cr}_4\text{O}_{12}$ では、隣接する Mn^{3+} イオン間に超交換相互作用において、電子状態計算の結果から強束縛近似における電子軌道間の電子の飛び移り積分を見積もり、主体的に寄与する電子軌道を調べた結果、図 4-3 に示すような軌道の組み合わせで反強磁性的な超交換相互作用がはたらくことが明らかになった。一方、B サ

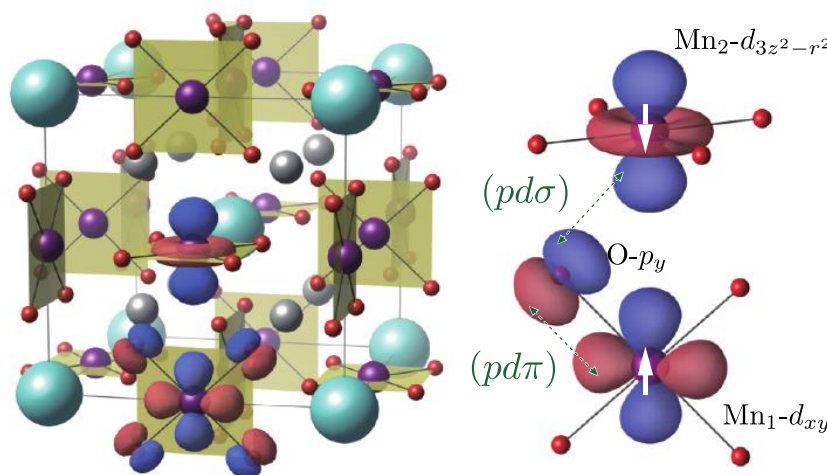


図 4-3 $\text{YMn}_3\text{Al}_4\text{O}_{12}$ の隣接 Mn イオンのスピン間に働く超交換相互作用に寄与する電子軌道の模式図。

イトに V を含んだ $\text{LaMn}_3\text{V}_4\text{O}_{12}$ では A' サイトの Mn が 2 価となり、長距離の相互作用が複合的にはたらいってノンコリニアな磁気構造が現れることが判明した。A' サイトに Cu を含んだ物質系での結果と比較することにより、A' サイトの電子数が変わることによって交換相互作用に寄与する軌道が変化し、結果として交換相互作用の符号が強磁性的から反強磁性的に入れ替わることを明らかにした。

京都大学(2)グループにより合成・物性測定が進められている Sr_2CuO_3 は擬一次元反強磁性絶縁体であり、高压下で空間群 $Immm$ から $Ammm$ に構造相転移を起こす。第一原理計算から高压下での構造の安定性を議論し、実験を定量的に説明する転移圧および Sr イオン周りのイオン結合性とその相転移を引き起こしていることを明らかにした。

(2) 研究実施内容及び成果：機能特性予測

遷移金属酸化物では、誘電特性と磁気特性の相関したマルチフェロ物質が新しい機能性材料として注目を集めている。そこで、マルチフェロ物質系に関して電気磁気効果の電子論的機構の研究を進めてきた。コバルト酸化物 $\text{Ba}_2\text{CoGe}_2\text{O}_7$ の電子状態計算を行い、スピン軌道相互作用および異方的 pd 混成に起因する電気磁気効果の微視的機構を明らかにした(、図 4-4)。また、ランダウ理論による対称性の議論を行い、結晶の反転対称性が破れており磁気秩序のある場合にのみ極性をもつ場合には、このような電気磁気効果が生じることを解明した。さらに、この物質の遷移金属サイトを V や Ni で置換すると、 t_{2g} 軌道準位が部分的に占有され、酸素四面体の極性をもつヤーン・テラー歪みが生じる。強束縛模型を用いてこの現象を詳細に調べたところ、四面体の 4 つのイオン変位モードが互いに相関して強誘電歪みを生じていることが明らかになった。しかし

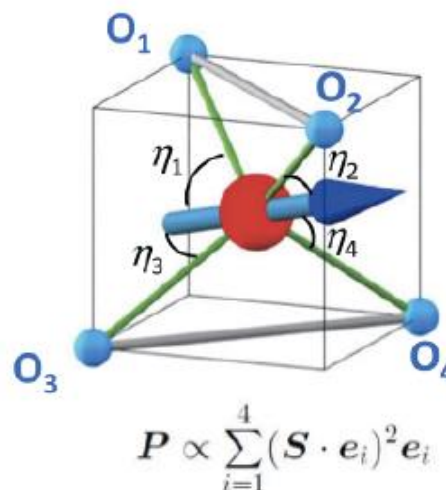


図 4-4 マルチフェロイック物質での電気磁気相互作用

ながら、ヤーン・テラー歪みに起因する分極はサイト間で打ち消してしまい、全体として反強誘電性を示す。この問題を打開するため、VとNiイオンを市松模様に並べ、磁性・誘電性ともにフェリ的に結合した「マルチフェリ状態」を示す $\text{Ba}_4\text{VNiGe}_4\text{O}_{14}$ 超構造をデザインした。なお、 $\text{Ba}_2\text{CoGe}_2\text{O}_7$ と同様の性質を示す物質を探索したところ、低温で電荷・軌道秩序を示すマグネタイト Fe_3O_4 が、同じ機構によって電気磁気効果を示すことが分かった。また、電荷秩序と磁気構造の組み合わせによって自発分極を示す物質として、ペロブスカイト酸化物 $\text{SmBaMn}_2\text{O}_6$ が数 $\mu\text{C}/\text{cm}^2$ という大きな分極を示す事を理論予測した。さらに、無限層構造をもつ CaFeO_2 が $\text{Ba}_2\text{CoGe}_2\text{O}_7$ よりも強い交差相関を示すことを電子状態計算および群論的手法を用いて予測した。同じ結晶構造をもつ MgFeO_2 ではより大きな電気磁気効果が得られることも予測されている。

マルチフェロ物質の代表例としては TbMnO_3 がよく知られているが、ここではMnのスパイラルな磁気秩序に起因して電気分極が発現する。この物質に圧力を加えるとE型反強磁性に相転移することが実験的に発見され、圧力下での第一原理計算による全エネルギーの議論から圧力誘起磁気相転移機構が解明された。

(3) 研究実施内容及び成果：実験データとの対応

第一原理電子状態計算から、特に放射光による分光測定結果との具体的な対応づけも大きな精度良くできるように進展した。

X線吸収スペクトルにおける電気双極子遷移と電気四極子遷移の交差項の発現に関する理論を展開し、極性物質に対してその交差項の存在を示し、第一原理計算により強誘電体 BaTiO_3 のK吸収端近傍で観測され得ることを明らかにした。また、近年、磁性を有しない系において、大きなスピン軌道相互作用と反転対称性の破れに起因してスピン分裂したバンドが現れるいわゆるRashba効果に注目が集まっているが、Bi表面やSi表面でのAu鎖構造におけるRashba効果を第一原理計算から調べ、スピン分解角度分解光電子分光により得られたバンド構造を良く説明する結果を得た。

§ 4 成果発表等

(1)原著論文発表 (国内(和文)誌 1 件、国際(欧文)誌 113 件)

1. K. Matumoto, M. Haruta, M. Kawai, A. Sakaiguchi, N. Ichikawa, H. Kurata, and Y. Shimakawa, “Selective reduction of layers at low temperature in artificial superlattice thin films”, *Sci. Rep.*, **1**, 27 (2011). (DOI: 10.1038/srep00027)
2. D. Kan and Y. Shimakawa, “Strain effect on structural transition in SrRuO₃ epitaxial thin films”, *Crystal Growth & Design*, **11**, 5483 (2011). (DOI: 10.1021/cg201070n)
3. M. Mizumaki, W. T. Chen, T. Saito, I. Yamada, J. P. Attfield, and Y. Shimakawa, “Direct observation of the ferrimagnetic coupling of A-site Cu and B-site Fe spins in charge-disproportionated CaCu₃Fe₄O₁₂”, *Phys. Rev. B* **84**, 094418 (2011). (DOI: 10.1103/PhysRevB.84.094418)
4. M. Haruta, H. Kurata, K. Matsumoto, S. Inoue, Y. Shimakawa, and S. Isoda, “Local electronic structure analysis for brownmillerite Ca(Sr)FeO_{2.5} using site-resolved ELNES”, *J. Appl. Phys.*, **110**, 033708 (2011). (DOI:10.1063/1.3610526)
5. K. Yamauchi, P. Barone, and S. Picozzi, “Theoretical investigation of magnetoelectric effects in Ba₂CoGe₂O₇”, *Phys. Rev. B* **84**, 165137 (2011). (DOI:10.1103/PhysRevB.84.165137)
6. M. Haruta and H. Kurata “Direct observation of crystal defects in an organic molecular crystals of copper hexachlorophthalocyanine by STEM-EELS”, *Sci. Rep.*, **2**, 252 (2012). (DOI:10.1038/srep00252)
7. C. Tassel and H. Kageyama, “Square planar coordinate iron oxides”, *Chem. Soc. Rev.*, **41**, 2025 (2012). (DOI:10.1039/c1cs1518a)
8. A. Kitada, Y. Tsujimoto, T. Yamamoto, Y. Kobayashi, Y. Narumi, K. Kindo, A. A. Aczel, G. M. Luke, Y. J. Uemura, Y. Kiuchi, Y. Ueda, K. Yoshimura, Y. Ajiro, and H. Kageyama, “Quadruple-layered perovskite (CuCl)Ca₂NaNb₄O₁₃”, *J. Solid State Chem.* **185**, 10 (2012). (DOI:10.1016/j.jssc.2011.10.038)
9. K. Yamauchi and S. Picozzi, “Orbital degrees of freedom as origin of magnetoelectric coupling in magnetite”, *Phys. Rev. B* **85**, 085131 (2012). (DOI:10.1103/PhysRevB.85.085131)
10. T. Saito, R. Yamada, and Y. Shimakawa, “Magnetic interactions in A-site ordered perovskites LnCu₃(Ge_{3/4}Ga_{1/4})₄O₁₂ (Ln = La, Dy)”, *Inorg. Chem.*, **51**, 5095 (2012). (DOI: 10.1021/ic202582z)
11. N. Ichikawa, M. Iwanowska, M. Kawai, C. Calers, W. Paulus, and Y. Shimakawa, “Reduction and oxidation of SrCoO_{2.5} thin films at low temperatures”, *Dalton Trans.*, **41**, 10507 (2012). (DOI: 10.1039/c2dt30317e)
12. D. Kan and Y. Shimakawa, “Geometric-shape-dependent structural transition behavior in (110) SrRuO₃ epitaxial thin films”, *J. Appl. Phys.*, **111**, 093532 (2012). (DOI: 10.1063/1.4716029)
13. Y. W. Long, T. Kawakami, W. T. Chen, T. Saito, T. Watanuki, Y. Nakakura, Q. Q. Liu, C. Q. Jin, and Y. Shimakawa, “Pressure Effect on Intersite Charge Transfer in A-site-Ordered Double-Perovskite-Structure Oxide”, *Chem. Mater.*, **24**, 2234 (2012). (DOI: 10.1021/cm301267e)

14. W. T. Chen, T. Saito, N. Hayashi, M. Takano, and Y. Shimakawa, "Ligand-hole localization in oxides with unusual valence Fe", *Sci. Rep.*, **2**, 449 (2012). (DOI: 10.1002/anie.201202644)
15. K. Oka, T. Koyama, T. Ozaaki, S. Mori, Y. Shimakawa, and M. Azuma, "Polarization rotation in the monoclinic perovskite $\text{BiCo}_{1-x}\text{Fe}_x\text{O}_3$ ", *Angew. Chem. Int. Ed.*, **51**, 7977 (2012). (DOI: 10.1038/srep00449)
16. Y. Shimakawa, W. -T. Chen, and T. Saito, "New A-site ordered perovskite-structure oxides with intriguing functional properties", *Proceeding of the 2012 Powder Metallurgy World Congress*, 16F-T14-14 (2012).
17. T. Tohyama, T. Saito, and Y. Shimakawa, "Material Design, Synthesis and Magnetic Properties of Novel A-Site-Ordered Perovskites $\text{AMn}_3\text{Al}_4\text{O}_{12}$ ", *Proceeding of the 2012 Powder Metallurgy World Congress*, 16F-T14-15 (2012).
18. K. Hirai, D. Kan, N. Ichikawa, and Y. Shimakawa, "Epitaxial Growth of Brownmillerite-structure $\text{Sr}_{1-x}\text{La}_x\text{FeO}_{2.5}$ Thin Films", *Proceeding of the 2012 Powder Metallurgy World Congress*, 16F-T14-18 (2012).
19. A. Kitada, G. Hasegawa, Y. Kobayashi, K. Kanamori, K. Nakanishi, and H. Kageyama, "Selective Preparation of Conducting Macroporous Monoliths of Reduced Titanium Oxides TiO_{2n-1} ($n = 2, 3, 4, 6$)", *J. Am. Chem. Soc.*, **134**, 10894 (2012). (DOI: 10.1039/ja302083n)
20. T. Yamamoto, Y. Kobayashi, N. Hayashi, C. Tassel, T. Saito, S. Yamanaka, M. Takano, K. Ohoyama, Y. Shimakawa, K. Yoshimura, and H. Kageyama, " $(\text{Sr}_{1-x}\text{Ba}_x)\text{FeO}_2$ ($0.4 \leq x \leq 1$): a New Oxygen-Deficient Perovskite Structure", *J. Am. Chem. Soc.*, **134**, 11444 (2012). (DOI: 10.1021/ja3007403)
21. L. Seinberg, S. Yamamoto, G. Ruwan, Y. Kobayashi, S. Isoda, M. Takano, and H. Kageyama, "Low Temperature Solventless Synthesis and Characterization of Ni and Fe Magnetic Nanoparticles", *Chem. Commun.*, **48**, 8237 (2012). (DOI: 10.1039/C2CC33830K)
22. C. Tassela and H. Kageyama, "Square planar coordinate iron oxides", *Chem. Soc. Rev.*, **41**, 2025 (2012). (DOI: 10.1039/C1CS15218A)
23. M. Mizumaki, T. Saito, T. Uozumi, and Y. Shimakawa, "X-ray spectroscopic studies of A-site ordered perovskite $\text{LaMn}_3\text{B}_4\text{O}_{12}$ ($\text{B}=\text{V}, \text{Cr}$)", *e-J. Surf. Sci. Nanotech.*, **10**, 575-577 (2012). (DOI: 10.1380/ejssnt.2012.575)
24. M. Kodera and T. Oguchi, "First-principles calculations for pressure-induced structural transition of Sr_2CuO_3 ", *J. Phys. Soc. Jpn.*, **81**, 094701 (2012). (DOI: 10.1143/JPSJ.81.094701)
25. K. Takubo, T. Kanzaki, Y. Yamasaki, H. Nakao, Y. Murakami, T. Oguchi, and T. Katsufuji, "Orbital states of V trimers in $\text{BaV}_{10}\text{O}_{15}$ detected by resonant x-ray scattering", *Phys. Rev. B* **86**, 085141 (2012). (DOI: 10.1103/PhysRevB.86.085141)
26. T. Tohyama, M. S. Senn, T. Saito, W. -T. Chen, C. C Tang, J. P. Attfield, and Y. Shimakawa, "Valence change of A'-site Mn by A-site doping in $\text{La}_{1-x}\text{Na}_x\text{Mn}_3\text{Ti}_4\text{O}_{12}$ ", *Chem. Mater.*, **25**, 178 (2013). (DOI: 10.1021/cm303182u)
27. D. Kan, R. Aso, H. Kurata, and Y. Shimakawa, "Thickness-dependent structure-property relationships in strained (110) SrRuO_3 thin films", *Adv. Func. Mater.*, **23**, 112 (2013). (DOI: 10.1002/adfm.201202644)

10.1002/adfm.201202402)

28. S. Zhang, T. Saito, M. Mizumaki, W. -T. Chen, T. Tohyama, and Y. Shimakawa, “Site-Selective Doping Effect in $\text{AMn}_3\text{V}_4\text{O}_{12}$ ($\text{A} = \text{Na}^+$, Ca^{2+} , and La^{3+})”, *J. Am. Chem. Soc.*, **135**, 6056 (2013). (DOI: 10.1021/ja308851f)
29. R. Aso, D. Kan, Y. Shimakawa, and H. Kurata, “Atomic level observation of octahedral distortions at the perovskite oxide heterointerface”, *Sci. Rep.*, **3**, 2214 (2013). (DOI: 10.1038/srep02214)
30. D. Kan, R. Aso, H. Kurata, and Y. Shimakawa, “Epitaxial strain effect in tetragonal SrRuO_3 thin films”, *J. Appl. Phys.*, **113**, 173912 (2013). (DOI: 10.1063/1.4803869)
31. W. -T. Chen, M. Mizumaki, T. Saito, and Y. Shimakawa, “Frustration relieved ferrimagnetism in novel A- and B-site-ordered quadruple perovskite”, *Dalton Trans.*, **42**, 10116 (2013). (DOI: 10.1039/c3dt50489a)
32. K. Matsumoto, D. Kan, N. Ichikawa, S. Hosokawa, H. Kageyama, and Y. Shimakawa, “Oxygen Incorporation into Infinite-Layer Structure AFeO_2 ($\text{A} = \text{Sr}, \text{Ca}$)”, *Chem. Lett.*, **42**, 732 (2013). (DOI: 10.1246/cl.130208)
33. H. Wadati, K. Kato, Y. Wakisaka, T. Sudayama, D. G. Hawthorn, T. Z. Regier, N. Onishi, M. Azuma, Y. Shimakawa, T. Mizokawa, A. Tanaka, and G. A. Sawatzky, “Impact of Mn-O-O-Mn superexchange pathways in a honeycomb lattice Mn oxide with small charge-transfer energy”, *Solid State Comm.*, **162**, 18 (2013). (DOI: 10.1016/j.ssc.2013.02.021)
34. K. Hirai, D. Kan, R. Aso, H. Kurata, and Y. Shimakawa, “Anisotropic in-plane lattice strain relaxation in brownmillerite $\text{SrFeO}_{2.5}$ epitaxial thin films”, *J. Appl. Phys.*, **114**, 053514 (2013). (DOI: 10.1063/1.4817505)
35. A. Kitada, G. Hasegawa, Y. Kobayashi, K. Miyazaki, T. Abe, K. Kanamori, K. Nakanishi, and H. Kageyama, “Hierarchically Porous Monoliths of Oxygen-deficient Anatase TiO_{2-x} with Electric Conductivity”, *RSC Adv*, **3**, 7205 (2013). (DOI: 10.1039/C3RA40545A)
36. C. Tassel, L. Seinberg, N. Hayashi, S. Ganesanpotti, Y. Ajiro, Y. Kobayashi, and H. Kageyama, “ Sr_2FeO_3 with Stacked Infinite Chains of FeO_4 Square Planes”, *Inorg. Chem.*, **52**, 6906 (2013). (DOI: DOI: 10.1021/ic400444u)
37. M. Mizumaki, T. Saito, T. Uozumi, and Y. Shimakawa, “Electronic structure of Cu in ferromagnetic $\text{CaCu}_3\text{Sn}_4\text{O}_{12}$ ”, *J. of Phy.: Conference Series* **428**, 012030 (2013). (DOI: 10.1088/1742-6596/428/1/012030)
38. K. Yamauchi, “Theoretical Prediction of Multiferroicity in $\text{SmBaMn}_2\text{O}_6$ ”, *J. Phys. Soc. Jpn.*, **82**, 043702/1-4, 2013 (DOI:10.7566/JPSJ.82.043702)
39. M. Toyoda, K. Yamauchi, and T. Oguchi, “Ab initio study of magnetic coupling in $\text{CaCu}_3\text{B}_4\text{O}_{12}$ ($\text{B} = \text{Ti}, \text{Ge}, \text{Zr}, \text{and Sn}$) ”, *Phys. Rev. B* **87**, 224430 (2013). (DOI: 10.1103/PhysRevB.87.224430)
40. K. Yamauchi and S. Picozzi, “Mechanism of Ferroelectricity in Half-Doped Manganites with Pseudocubic and Bilayer Structure”, *J. Phys. Soc. Jpn.* **82**, 113703 (2013). (DOI:10.7566/JPSJ.82.113703)
41. M. Toyoda, K. Yamauchi, and T. Oguchi, “Ab initio study on magnetic coupling in

- A-site-ordered perovskite $\text{CaCu}_3\text{B}_4\text{O}_{12}$ (B = Ti, Ge, Zr, and Sn)", *Phys. Rev. B* **87**, 224430 (2013). (DOI:10.1103/PhysRevB.87.224430)
42. J. M. Ok, Y. J. Jo, K. Kim, T. Shishidou, E. S. Choi, H.-J. Noh, T. Oguchi, B. I. Min, and J. S. Kim, "Quantum Oscillations of the Metallic Triangular-Lattice Antiferromagnet PdCrO_2 ", *Phys. Rev. Lett.* **111**, 176405 (2013). (DOI:10.1103/PhysRevLett.111.176405)
 43. J. A. Sobota, K. Kim, H. Takatsu, M. Hashimoto, S.-K. Mo, Z. Hussain, T. Oguchi, T. Shishidou, Y. Maeno, B. I. Min, and Z.-X. Shen, "Electronic Structure of the Metallic Antiferromagnet PdCrO_2 Measured by Angle-Resolved Photoemission Spectroscopy", *Phys. Rev. B* **88**, 125109 (2013). (DOI:10.1103/PhysRevB.88.125109)
 44. S. S. Subramanian, K. Yamauchi, T. Ozaki, T. Oguchi, and B. Natesan, "Influence of lone pair doping on the multiferroic property of orthorhombic HoMnO_3 : ab initio prediction", *J. Phys.: Condensed Matter* **25**, 385901 (2013). (DOI:10.1088/0953-8984/25/38/385901)
 45. T. Ueda, M. Koder, K. Yamauchi, and T. Oguchi, "First-Principles Calculation of X-ray Absorption Spectra for the A-site Ordered Perovskite $\text{CaCu}_3\text{Fe}_4\text{O}_{12}$ ", *J. Phys. Soc. Jpn.* **82**, 094718 (2013). (DOI:10.7566/JPSJ.82.094718)
 46. H. Takatsu, J. J. Ishikawa, S. Yonezawa, H. Yoshino, T. Shishidou, T. Oguchi, K. Murata, and Y. Maeno, "Extremely Large Magnetoresistance in the Nonmagnetic Metal PdCoO_2 ", *Phys. Rev. Lett.*, **111**, 056601 (2013). (DOI:10.1103/PhysRevLett.111.056601)
 47. K. Hotta, K. Nakamura, T. Akiyama, T. Ito, T. Oguchi, and A. J. Freeman, "Atomic-Layer Alignment Tuning for Giant Perpendicular Magnetocrystalline Anisotropy of 3d Transition-Metal Thin Films", *Phys. Rev. Lett.*, **110**, 267206 (2013). (DOI:10.1103/PhysRevLett.110.267206)
 48. N. Yasuda, Y. Fukuyama, S. Kimura*, K. Ito, Y. Tanaka, H. Osawa, T. Matsunaga, R. Kojima, K. Hisada, A. Tsuchino, M. Birukawa, N. Yamada, K. Sekiguchi, K. Fujiie, O. Kawakubo, and M. Takata, "System of laser pump and synchrotron radiation probe microdiffraction to investigate optical recording process", *Review of Scientific Instruments*, **84**, 063902 (2013). (DOI: 10.1063/1.4807858)
 49. M. Mizumaki, T. Saito, T. Uozumi, and Y. Shimakawa, "Electronic structure of Cu in ferromagnetic $\text{CaCu}_3\text{Sn}_4\text{O}_{12}$ ", *J. of Phys.: Conference Series*, **428**, 012030 (2013). (DOI: 10.1088/1742-6596/428/1/012030)
 50. C. Tassel, L. Seinberg, N. Hayashi, S. Ganesanpotti, Y. Ajiro, Y. Kobayashi, and H. Kageyama, " Sr_2FeO_3 with Stacked Infinite Chains of FeO_4 Square Planes", *Inorg. Chem.* **52**, 6906 (2013). (DOI: 10.1021/ic400444u)
 51. G. Hasegawa, T. Sato, K. Kanamori, K. Nakano, T. Yajima, Y. Kobayashi, H. Kageyama, T. Abe, and K. Nakanishi, "Hierarchically Porous Monoliths Based on N-doped Reduced Titanium Oxides and Their Electric and Electrochemical Properties", *J. Chem. Mater.* **25**, 3504 (2013). (DOI: 10.1021/cm401933a)
 52. Y. Kobayashi, Z. Li, K. Hirai, C. Tassel, F. Loyer, N. Ichikawa, N. Abe, T. Yamamoto, Y. Shimakawa, K. Yoshimura, M. Takano, and H. Kageyama, "Gas phase contributions to topochemical hydride reduction reactions", *J. Solid State Chem.*, **207**, 190 (2013). (DOI:

10.1016/j.jssc.2013.09.006)

53. D. Kan and Y. Shimakawa, “Transient behavior in Pt/Nb-doped SrTiO₃ Schottky junctions”, *Appl. Phys. Lett.*, **103**, 142910 (2013). (DOI: 10.1063/1.4824169)
54. R. Aso, D. Kan, Y. Shimakawa, and H. Kurata, “Atomic level observation of octahedral distortions at the perovskite oxide heterointerface”, *Sci. Rep.*, **3**, 2214 (2013). (DOI: 10.1038/srep02214)
55. K. Hirai, D. Kan, R. Aso, H. Kurata, and Y. Shimakawa, “Anisotropic in-plane lattice strain relaxation in brownmillerite SrFeO_{2.5} epitaxial thin films”, *J. Appl. Phys.*, **114**, 053514 (2013). (DOI: 10.1063/1.4817505)
56. M. Mizumaki, K. Yoshii, N. Hayashi, T. Saito, Y. Shimakawa, and M. Takano, “Magnetocaloric effect of field-induced ferromagnet BaFeO₃”, *J. Appl. Phys.*, **114**, 073901 (2013). (DOI: 10.1063/1.4818316)
57. S. Zhang, T. Saito, M. Mizumaki, W. -T. Chen, T. Tohyama, and Y. Shimakawa, “Site-Selective Doping Effect in AMn₃V₄O₁₂ (A = Na⁺, Ca²⁺, and La³⁺)”, *J. Am. Chem. Soc.*, **135**, 6056 (2013) (DOI: 10.1021/ja308851f)
58. A. Kitada, G. Hasegawa, Y. Kobayashi, K. Miyazaki, T. Abe, K. Kanamori, K. Nakanishi, and H. Kageyama, “Hierarchically Porous Monoliths of Oxygen-deficient Anatase TiO_{2-x} with Electric Conductivity”, *RSC Adv*, **3**, 7205 (2013). (DOI: 10.1039/C3RA40545A)
59. D. Kan, R. Aso, H. Kurata, and Y. Shimakawa, “Epitaxial strain effect in tetragonal SrRuO₃ thin films”, *J. Appl. Phys.*, **113**, 173912, 2013. (DOI: 10.1063/1.4803869)
60. W. -T. Chen, M. Mizumaki, T. Saito, and Y. Shimakawa, “Frustration relieved ferrimagnetism in novel A- and B-site-ordered quadruple perovskite”, *Dalton Transactions*, **42**, 10116 (2013). (DOI: 10.1039/c3dt50489a)
61. K. Matsumoto, D. Kan, N. Ichikawa, S. Hosokawa, H. Kageyama, and Y. Shimakawa, “Oxygen Incorporation into Infinite-Layer Structure AFeO₂ (A = Sr, Ca)”, *Chem. Lett.*, **42**, 732 (2013). (DOI: 10.1246/cl.130208)
62. R. Aso, D. Kan, Y. Shimakawa, and H. Kurata, “Control of structural distortions in transition-metal oxide films through interfacial coupling of octahedral tilts”, *Adv. Func. Mater.*, **24**, 5177 (2014). (DOI: 10.1002/adfm.201303521)
63. D. Kan, T. Shimizu, Y. Yamada, R. Aso, H. Kurata, Y. Kanemitsu, and Y. Shimakawa, “Band-to-band photoluminescence as a probe of electron carriers in Nb-doped SrTiO₃ epitaxial thin films”, *Appl. Phys. Exp.*, **7**, 015503 (2014). (DOI: 10.7567/APEX.7.015503)
64. Y. Shimakawa, S. Zhang, T. Saito, M. W. Lufaso, and P. M. Woodward, “Order-disorder transition involving the A-Site cations in Ln³⁺Mn₃V₄O₁₂ perovskites”, *Inorg. Chem.*, **53**, 594 (2014). (DOI: 10.1021/ic402740k)
65. T. Saito, R. Yamada, C. Ritter, M. Senn, J.P. Attfield, and Y. Shimakawa, “Control of L-type ferrimagnetism by the Ce/vacancy ordering in the A-site-ordered perovskite Ce_{1/2}Cu₃Ti₄O₁₂”, *Inorg. Chem.*, **53**, 1578 (2014). (DOI: 10.1021/ic402616r)
66. K. Yamauchi and P. Barone, “Electronic ferroelectricity induced by charge and orbital orderings”, *J. Phys.: Condens. Matter.* **26**, 103201 (2014).

(DOI:10.1088/0953-8984/26/10/103201)

67. C. Tassel, Y. Goto, Y. Kuno, J. Hester, M. Green, Y. Kobayashi, and H. Kageyama, “Direct Synthesis of Chromium Perovskite Oxyhydride with a High Magnetic Transition Temperature”, *Angew. Chem. Int. Ed.*, **53**, 10377 (2014). (DOI: 10.1002/anie.201405453)
68. G. Bouilly, T. Yajima, T. Terashima, Y. Kususe, K. Fujita, C. Tassel, T. Yamamoto, K. Tanaka, Y. Kobayashi, and H. Kageyama, “Substrate Induced Anion Rearrangement in Epitaxial Thin Film of $\text{LaSrCoO}_{4-x}\text{H}_x$ ”, *CrystEngComm*, **16**, 9669 (2014). (DOI: 10.1039/C4CE01268B)
69. L. Seinberg, S. Yamamoto, Y. Kobayashi, M. Takano, and H. Kageyama, “ CaH_2 -assisted Low Temperature Synthesis of Metallic Magnetic Nanoparticles-loaded Multiwall Carbon Nanotubes”, *Chem. Commun.*, **50**, 6866 (2014). (DOI: 10.1039/C4CC01592D)
70. H. Fujii, M. Toyoda, H. Momida, M. Mizumaki, S. Kimura, and T. Oguchi, “Ab initio study of electronic, magnetic, and spectroscopic properties in A- and B-site-ordered perovskite $\text{CaCu}_3\text{Fe}_2\text{Sb}_2\text{O}_{12}$ ”, *Phys. Rev. B* **90**, 014430 (2014). (DOI: 10.1103/PhysRevB.90.014430)
71. S. Yanagisawa, K. Yamauchi, T. Inaoka, T. Oguchi, I. Hamada, “Origin of the band dispersion in a metal phthalocyanine crystal”, *Phys. Rev. B* **90**, 245141 (2014). (DOI: 10.1103/PhysRevB.90.245141)
72. K. Yamauchi, T. Oguchi, S. Picozzi, “Ab-initio Prediction of Magnetoelectricity in Infinite-Layer CaFeO_2 and MgFeO_2 ”, *J. Phys. Soc. Jpn.* **83**, 094712 (2014). (DOI: 10.7566/JPSJ.83.094712)
73. T. Aoyama, K. Yamauchi, A. Iyama, S. Picozzi, K. Shimizu, T. Kimura, “Giant spin-driven ferroelectric polarization in TbMnO_3 under high pressure”, *Nature Commun.* **5**, 4927 (2014). (DOI: 10.1038/ncomms5927)
74. M. Shahjahan, M. Toyoda, and T. Oguchi, “Ferromagnetic Half Metallicity in Doped Chalcopyrite Semiconductors $\text{Cu}(\text{Al}_{1-x}\text{A}_x)\text{Se}_2$ ($\text{A}=\text{3d}$ Transition-Metal Atoms)”, *J. Phys. Soc. Jpn.* **83**, 094702 (2014). (DOI: 10.7566/JPSJ.83.094702)
75. T. Oguchi, “Quasi-One-Dimensional Nature of the Rashba States of Au Wires on Si(557) Surface”, *J. Electron Spectrosc. Relat. Phenom.* **197**, (2014). (DOI: 10.1016/j.elspec.2014.09.004)
76. T. Saito, M. Toyoda, C. Ritter, S. Zhang, T. Oguchi, J. P. Attfield, and Y. Shimakawa, “Symmetry-breaking 60°-spin order in the A-site-ordered perovskite $\text{LaMn}_3\text{V}_4\text{O}_{12}$ ”, *Phys. Rev. B*, **90**, 214405 (2014). (DOI: 10.1103/PhysRevB.90.214405)
77. R. Aso, D. Kan, Y. Shimakawa, and H. Kurata, “Strong dependence of oxygen octahedral distortions in SrRuO_3 films on types of substrate-induced epitaxial strain”, *Cryst. Growth & Des. (Communication)*, **14**, 2128 (2014). (DOI: 10.1021/cg501340e)
78. R. Aso, D. Kan, Y. Shimakawa, and H. Kurata, “Control of structural distortions in transition-metal oxide films through oxygen displacement at the heterointerface”, *Adv. Func. Mater.*, **24**, 5177 (2014). (DOI: 10.1002/adfm.201303521)
79. M. S. Senn, W-T Chen, T. Saito, S. Garcia-Martin, J. P. Attfield, and Y. Shimakawa, “B-cation order control of magnetism in the 1322 perovskite $\text{CaCu}_3\text{Fe}_2\text{Nb}_2\text{O}_{12}$ ”, *Chem. Mater.*, **26**, 4832

(2014). (DOI: 10.1021/cm502064b)

80. N. Murakami, D. Kan, N. Ichikawa, and Y. Shimakawa, “Low-temperature reduction of brownmillerite $\text{CaFeO}_{2.5}$ in $\text{LaAlO}_3/\text{CaFeO}_{2.5}$ heterostructures made on SrTiO_3 ”, *Dalton Trans.*, **43**, 14596 (2014). (DOI: 10.1039/c4dt01616e)
81. W-T Chen, M. Mizumaki, H. Seki, M. S. Senn, T. Saito, D. Kan, J. P. Attfield, and Y. Shimakawa, “A half-metallic A- and B-site-ordered quadruple perovskite oxide $\text{CaCu}_3\text{Fe}_2\text{Re}_2\text{O}_{12}$ with large magnetization and a high transition temperature”, *Nature Comm.*, **5**, 3909 (2014). (DOI: 10.1038/ncomms4909)
82. S. Zhang, T. Saito, M. Mizumaki, and Y. Shimakawa, “Temperature-induced intersite charge transfer involving Cr ions in A-site-ordered perovskites $\text{ACu}_3\text{Cr}_4\text{O}_{12}$ (A = La and Y)”, *Chemistry -A Eur. J.*, **20**, 9510 (2014). (DOI: 10.1002/chem.201403692)
83. D. Kan, R. Aso, H. Kurata, and Y. Shimakawa, “Unit-cell thick BaTiO_3 blocks octahedral tilt propagation across oxide heterointerface”, *J. Appl. Phys.*, **115**, 184304 (2014). (DOI: 10.1063/1.4875839)
84. R. Aso, D. Kan, Y. Shimakawa, and H. Kurata, “Octahedral tilt propagation controlled by A-site cation size at perovskite oxide heterointerfaces”, *Cryst. Growth & Des.*, **14**, 2128 (2014). (DOI: 10.1021/cg500285m)
85. H. Seki, R. Yamada, T. Saito, B.J. Kennedy, and Y. Shimakawa, “High-concentration Na doping of SrRuO_3 and CaRuO_3 ”, *Inorg. Chem.*, **53**, 4579 (2014). (DOI: 10.1021/ic500265t)
86. G. Hasegawa, T. Sato, K. Kanamori, C.-J. Sun, Y. Ren, Y. Kobayashi, H. Kageyama, T. Abe, and K. Nakanishi, “Effects of Calcination Condition on Porous Reduced Titanium Oxides and Oxynitrides via Pre ceramic Polymer Route”, *Inorg. Chem.*, **54**, 2802 (2014). (DOI: 10.1021/ic502972v)
87. A. Takayama, T. Sato, S. Souma, T. Oguchi, and T. Takahashi, “One-dimensional edge states with giant spin splitting in a bismuth thin film”, *Phys. Rev. Lett.* **114**, 066402 (2015). (DOI: 10.1103/PhysRevLett.114.066402)
88. K. Isoyama, M. Toyoda, K. Yamauchi, and T. Oguchi, “Ab Initio Study on Pressure-Induced Phase Transition in $\text{LaCu}_3\text{Fe}_4\text{O}_{12}$ ”, *J. Phys. Soc. Jpn.*, **84**, 034709/1-5 (2015). (DOI: 10.7566/JPSJ.84.034709)
89. G. Hasegawa, A. Kitada, S. Kawasaki, K. Kanamori, K. Nakanishi, Y. Kobayashi, H. Kageyama, and T. Abe, “Impact of Electrolyte on Pseudocapacitance and Stability of Porous Titanium Nitride (TiN) Monolithic Electrode”, *J. Electrochem. Soc.*, **162**, A77 (2015). (DOI: 10.1149/2.0491501jes)
90. K. Hirai, D. Kan, N. Ichikawa, K. Mibu, Y. Yoda, M. Andreeva, and Y. Shimakawa, “Strain-induced significant increase in metal-insulator transition temperature in oxygen-deficient Fe oxide epitaxial thin films”, *Sci. Rep.*, **5**, 7894 (2015). (DOI: 10.1038/srep07894)
91. M. Toyoda, T. Saito, K. Yamauchi, Y. Shimakawa, T. Oguchi, “Superexchange interaction in the A-site ordered perovskite $\text{YMn}_3\text{Al}_4\text{O}_{12}$ ”, *Phys. Rev. B* **92**, 014420 (2015). (DOI: 10.1103/PhysRevB.92.014420)

10.1103/PhysRevB.92.014420)

92. P. Barone, K. Yamauchi, S. Picozzi, “Jahn-Teller distortions as a novel source of multiferroicity”, *Phys. Rev. B* **92**, 014116 (2015). (DOI: 10.1103/PhysRevB.92.014116)
93. E. Baba, D. Kan, Y. Yamada, M. Haruta, H. Kurata, Y. Kanemitsu, and Y. Shimakawa, “Optical and transport properties of transparent conducting La-doped SrSnO₃ thin films”, *J. Phys. D: Applied Physics* **48**, 455106 (2015). DOI: 10.1088/0022-3727/48/45/455106
94. X. Wang, Y.-S. Chai, L. Zhou, H. Cao, C.-d Cruz, J.-Y. Yang, J.-H. Dai, Y.-Y. Yin, Z. Yuan, R.-Z. Yu, M. Azuma, Y. Shimakawa, H.-M. Zhang, S. Dong, Y. Sun, C.-Q. Jin, and Y.-W. Long, “Observation of magnetoelectric multiferroicity in a cubic perovskite system: LaMn₃Cr₄O₁₂”, *Phys. Rev. Lett.*, **115**, 087601 (2015). (DOI: 10.1103/PhysRevLett.115.087601)
95. Y. Hosaka, N. Ichikawa, T. Saito, P. Manuel, D. Khalyavin, J. Paul Attfield, and Y. Shimakawa, “Two-dimensional charge disproportionation of the unusual high-valence state Fe⁴⁺ in a layered double perovskite”, *J. Am. Chem. Soc.*, **137**, 7468 (2015). (DOI: 10.1021/jacs.5b03712)
96. D. Kan, T. Shimizu, and Y. Shimakawa, “Influence of cation off-stoichiometry on transport properties of metal/Nb-SrTiO₃ junctions”, *J. Appl. Phys.*, **117**, 205305 (2015). (DOI: 10.1063/1.4921802)
97. S. Corallini, M. Ceretti, G. Silly, A. Piovano, S. Singh, J. Stern, C. Ritter, J. Ren, H. Eckert, K. Conder, W.-T. Chen, F.-C. Chou, N. Ichikawa, Y. Shimakawa, and W. Paulus, “1D oxygen diffusion mechanism in Sr₂ScGaO₅ electrolyte explored by neutron and synchrotron diffraction, ¹⁷O-NMR and DFT calculations”, *J. Phys. Chem. C* **119**, 11447 (2015). (DOI: 10.1021/acs.jpcc.5b02173)
98. Y. Hosaka, N. Ichikawa, T. Saito, M. Haruta, K. Kimoto, H. Kurata, and Y. Shimakawa, “Ca₂FeMnO₆: a layered double perovskite with unusually high valence Fe⁴⁺ in a layered arrangement”, *Bull. Chem. Soc. Jpn.*, **88**, 657 (2015). (DOI: 10.1246/bcsj.20140404)
99. G. Bouilly, T. Yajima, T. Terashima, W. Yoshimune, K. Nakano, C. Tassel, Y. Kususe, K. Fujita, K. Tanaka, T. Yamamoto, Y. Kobayashi, and H. Kageyama, “Electrical Properties of Epitaxial Thin Films of Oxyhydrides ATiO_{3-x}H_x (A = Ba and Sr)”, *Chem Mater.*, **27**, 6167 (2015). (DOI: 10.1021/acs.chemmater.5b02374)
100. H. Lu, T. Yamamoto, W. Yoshimune, N. Hayashi, Y. Kobayashi, Y. Ajiro, and H. Kageyama, “A Nearly Ideal One-dimensional S = 5/2 Antiferromagnet FeF₃(4,4'-bpy) (4,4'-bpy = 4,4'-bipyridyl) with Strong Intrachain Interactions”, *J. Am. Chem. Soc.* **137**, 9804 (2015). (DOI: 10.1021/jacs.5b06120)
101. G. Hasegawa, T. Deguchi, K. Kanamori, Y. Kobayashi, H. Kageyama, T. Abe, and K. Nakanishi, “High-level Doping of Nitrogen, Phosphorus and Sulfur into Activated Carbon Monoliths and Their Electrochemical Capacitances”, *Chem. Mater.* **54**, 2802 (2015). (DOI: 10.1021/acs.chemmater.5b01349)
102. M. Mizumaki, H. Fujii, K. Yoshii, N. Hayashi, T. Saito, Y. Shimakawa and M. Takano, “Electronic structure of BaFeO₃ studied by X-ray spectroscopy”, *Physica Status Solidi (c)* **12**, 818, (2015). (DOI: 10.1002/pssc.201400252)

103. H. Saijo, K. Yamauchi, K. Shirai, T. Oguchi, “Impact of Ferroelectric Distortion on Thermopower in BaTiO_3 ”, *J. Phys. Soc. Jpn.* **84**, 054701 (2015). (DOI: 10.7566/JPSJ.84.054701)
104. R. Takahashi, I. Ohkubo, K. Yamauchi, M. Kitamura, Y. Sakurai, M. Oshima, T. Oguchi, Y. Cho, M. Lippmaa, “A-site driven ferroelectricity in strained ferromagnetic $\text{La}_2\text{NiMnO}_6$ thin film”, *Phys. Rev. B* **91**, 134107 (2015). (DOI: 10.1103/PhysRevB.91.134107)
105. T. Oguchi, “Quasi-One-Dimensional Nature of the Rashba States of Au Wires on Si(557) Surface”, *J. Electron Spectrosc. Relat. Phenom.* **201**, 18 (2015). (DOI: 10.1016/j.elspec.2014.09.004)
106. K. Yamauchi, P. Barone, T. Shishidou, T. Oguchi, S. Picozzi, “Coupling Ferroelectricity with Spin-Valley Physics in Oxide-Based Heterostructures”, *Phys. Rev. Lett.* **115**, 037602 (2015). (DOI: 10.1103/PhysRevLett.115.037602)
107. J. Park, B. G. Kim, S. Mori, T. Oguchi, “Tetrahedral tilting and ferroelectricity in Bi_2AO_5 (A=Si, Ge) from first principles calculations”, *J. Solid State Chem.* **235**, 68 (2016). (DOI:10.1016/j.jssc.2015.12.011)
108. A. Kitada, Y. Tsujimoto, M. Nishi, A. Matsuo, K. Kindo, Y. Ueda, Y. Ajiro, and H. Kageyama, “Magnetic and Structural Studies on Two-Dimensional Antiferromagnets $(\text{MCl})\text{LaNb}_2\text{O}_7$ (M = Mn, Co, Cr)”, *J. Phys. Soc. Jpn.* **85**, 034005/1-6(2016).. (DOI:http://dx.doi.org/10.7566/JPSJ.85.034005)
109. H. Seki, Y. Hosaka, T. Saito, M. Mizumaki, and Y. Shimakawa, “Ferromagnetism induced by substitution of the iron(IV) ion by an unusual high-valence nickel(IV) ion in antiferromagnetic SrFeO_3 ”, *Angew. Chem. Int. Ed.*, **55**, 1360-1363 (2016). (DOI: 10.1002/anie.201509195)
110. D. Kan, Y. Orikasa, K. Nitta, H. Tanida, R. Kurosaki, T. Nishimura, T. Sasaki, H. Guo, Y. Ozaki, Y. Uchimoto, and Y. Shimakawa, “Overpotential-induced introduction of oxygen vacancy in $\text{La}_{0.67}\text{Sr}_{0.33}\text{MnO}_3$ surface and its impact on oxygen reduction reaction catalytic activity in alkaline solution”, *Journal of Physical Chemistry C*, in press (2016). DOI:
111. 真鍋 佳典、市川 能也、齊藤 高志、菅 大介、島川 祐一、「A サイト層状ペロブスカイト構造酸化物 $\text{GdBa}(\text{Fe}_{0.5}\text{Mn}_{0.5})_2\text{O}_x$ (x = 5, 6) の結晶構造と B サイト陽イオン価数」、*紛体および粉末冶金*, **63-1**, 33-37 (2016).
112. Y. Heo, D. Kan, Y. Shimakawa, and J. Seidel, “Resistive switching properties of epitaxial BaTiO_{3-d} thin films tuned by after-growth oxygen cooling pressure”, *Physical Chemistry Chemical Physics*, **18**, 197-204 (2016). (DOI: 10.1039/C5CP05333A)
113. T. Kawakami, Y. Sekiya, A. Miura, K. Kobayashi, K. Tokumichi, I. Yamada, M. Mizumaki, N. Kawamura, Y. Shimakawa, Y. Ohishi, N. Hirao, N. Ishimatsu, N. Hayashi, M. Takano, “Two-step suppression of charge disproportionation in $\text{CaCu}_3\text{Fe}_4\text{O}_{12}$ under high pressure”, *J. Phys. Soc. Jpn.* **85**, 034716 (2016). (DOI: 10.7566/JPSJ.85.034716)
114. D. Kan, R. Aso, R. Sato, M. Haruta, H. Kurata, and Y. Shimakawa, “Tuning magnetic anisotropy by interfacially engineering the oxygen coordination environment in a transition metal oxide”, *Nature Materials* **15**, AOL (2016). (DOI: 10.1038/NMAT4580)

(2)その他の著作物(総説、書籍など)

1. 島川 祐一 (依頼解説執筆)、「ペロブスカイト構造鉄酸化物とその人工格子薄膜における低温での酸素拡散」、セラミックデータブック 2011/12, **39**, 62 (2011).
2. 島川 祐一 (依頼解説執筆)、「負の熱膨張を示す新しい A サイト秩序型ペロブスカイト構造酸化物」、セラミックス, **46**, 927 (2011).
3. 島川 祐一 (依頼解説執筆)、「酸化物人工格子薄膜における層選択的還元と酸素イオン拡散挙動」、燃料電池, **11**, 72 (2011).
4. セドリック・タッセル、陰山 洋、松下 能孝 (依頼解説執筆)、「Anomalous local structure of infinite-layer iron oxides uncovered by synchrotron radiation: 放射光でみえてきた無限層鉄酸化物の特異なローカル構造」(日本語版), *Nanotech Japan Bulletin*, **4**, 33 (2011).
5. 木村 滋 (依頼解説執筆)、「キラキラ光る DVD にどうやってデータを記録するの? 放射光が解き明かす驚異のナノの世界」、講談社ブルーバックス B-1737 第 3 章, 125 (2011).
6. S. Kimura, Y. Tanaka, S. Kohara, and M. Takata (Invited Article), “Time resolved investigation of fast phase-change phenomena in rewritable optical recording media”, *Materials Science and Technology*, edited by Prof. S. Hutagalung, ISBN: 978-953-51-0193-2, Chapter 11, pp. 259-274 (2012).
7. 小口 多美夫 (依頼解説執筆)、「密度汎関数法の発展—マテリアルデザインへの応用」(赤井久純/白井光雲編)、シュプリンガー・ジャパン、第 III 部応用編第 5 章、pp. 275-292 (2011).
8. 北田 敦、長谷川 丈二、陰山 洋 (依頼解説執筆)、「伝導性を有するチタン酸化物モノリス」、機能材料, **32**, 44 (2011).
9. 陳 威廷、島川 祐一 (インタビュー記事)、「鉄酸化物の特性変化メカニズムを解明」、化学, **67**, 67 (2012).
10. 治田 充貴、磯田 正二、倉田 博基 (依頼解説執筆)、「サイト分解 STEM-EELS 法による局所電子構造解析」、顕微鏡, **47**, 51 (2012).
11. 倉田 博基 (依頼解説執筆)、「電子顕微鏡」、金属錯体の機器分析(下), 14 章, 大塩 寛紀編(三共出版), (2012).
12. Y. Shimakawa and T. Saito (Invited Feature Article: 年間最優秀論文(Best of pss)に選出), “A-site magnetism in A-site-ordered perovskite-structure oxides”, *Phys. Status Solidi B* **249**, 423 (2012). (DOI: 10.1002/pssb.201147477)
13. Y. Tsujimoto and H. Kageyama (Invited Article), “Ion-Exchange Reaction for Two-Dimensional Quantum Antiferromagnetism”, *Ion Exchange Technologies*, Edited by A. Kilislioglu, *InTech*, Chapter 2, 9 (2012). (DOI: 10.5772/52111)
14. 山本 隆文、小林 洋治、陰山 洋 (依頼解説執筆)、「溶液に頼らない低温合成:新しい金属酸化物の開拓」、機能材料, **33**, 53 (2013).
15. 木村 滋、坂田 修身 (依頼解説執筆)、「(放射光を用いた)X線反射率法」、薄膜の評価技術ハンドブック (テクノシステム), 第 4 章第 3 節第 1 項, 150 (2013).
16. 坂田 修身、木村 滋 (依頼解説執筆)、「薄膜回折:電場印加下その場測定を紹介」、薄膜の評価技術ハンドブック (テクノシステム), 第 4 章第 3 節第 2 項, 153 (2013).

17. 島川 祐一(依頼解説執筆)、「高圧合成によって拓かれる新しい「機能性酸化物材料」の開発」、*MATERIAL STAGE*, **13**, 9 (2013).
18. 島川 祐一、齊藤 高志、水牧 仁一郎(依頼解説執筆)、「新規機能性酸化物材料の構造物性評価：放射光を使った A サイト秩序型ペロブスカイト構造酸化物の研究から」、*放射光*, **26**, 64 (2013).
19. Y. Shimakawa (Invited review article for The CSJ Award for Creative Work), “Reduction and Oxidation of Transition-Metal Oxide Thin Films: Solid State Chemistry with Epitaxially Grown Thin Films”, *Bull. Chem. Soc. Jpn.*, **86**, 299 (2013). (DOI: 10.1246/bcsj.20120277)
20. Y. Shimakawa and M. Mizumaki (Invited topical review article), “Multiple magnetic interactions in A-site-ordered perovskite-structure oxides”, *J. Phys. Cond. Matter*, **26**, 473203 (2014). DOI: 10.1088/0953-8984/26/47/473203
21. 島川 祐一(依頼解説執筆)「高い磁気転移温度を持つハーフメタル酸化物新材料」、*フライングケミカル*, **43-12**, 5 (2014).
22. Y. Shimakawa (Invited topical review article), “Crystal and magnetic structures of $\text{CaCu}_3\text{Fe}_4\text{O}_{12}$ and $\text{LaCu}_3\text{Fe}_4\text{O}_{12}$: Distinct charge transitions of unusual high valence Fe”, *J. Phys. D: Appl. Phys. Special issue on “100 Years of Crystallography”*, **48**, 504006/1-13 (2015). (DOI: 10.1088/0022-3727/48/50/504006)
23. D. Kan, R. Aso, H. Kurata, and Y. Shimakawa (Invited Research Update Article), “Interface-engineered oxygen octahedral tilts in perovskite oxide heterostructures”, *APL Mater.*, **3**, 062302 (2015). DOI: 10.1063/1.4918965
24. D. Kan, R. Aso, H. Kurata, and Y. Shimakawa (Invited Perspective Article), “Phase control of a perovskite transition-metal oxide through oxygen displacement at heterointerface”, *Dalton Trans*, **44**, 10594 (2015). DOI: 10.1039/C4DT03749A
25. 齊藤 高志、島川 祐一 (紛体粉末冶金協会「研究進歩賞」受賞記念講演論文)「高圧合成を中心とした新規機能性酸化物材料の合成」、*紛体および粉末冶金*, **62-6**, 289 (2015).
26. 菅 大介、島川 祐一(依頼解説執筆)、「薄膜固体ナノ化学による新機能の発現 ―遷移金属酸化物薄膜ヘテロ構造中の酸素に注目して」、*「化学」*, **70-11**, 68-69 (2015).
27. 島川 祐一 (依頼解説執筆)、「新しい機能性遷移金属酸化物の物質設計 ―最も古いマテリアルズインフォマティクスを現代版にアレンジ」、*化学*, **71-1**, 39-44 (2016).
28. 島川 祐一(依頼解説執筆)、「高い磁気転移温度をもつハーフメタル遷移金属酸化物：カチオン秩序配列による磁気構造制御」、*応用物理*, **85-3**, 212-217 (2016).

(3)国際学会発表及び主要な国内学会発表

① 招待講演 (国内会議 43 件、国際会議 81 件)

1. 陰山 洋 (招待講演)、「ソフト化学による酸化物の構造・機能制御」、*日本セラミックス協会関西支部第六回学術講演会、イーグレ姫路(姫路)*、2011 年 7 月 29 日
2. 水牧 仁一郎 (招待講演)、「放射光利用による新規材料開発」、*第 59 回マテリアルズテーラリング研究会、(軽井沢)*、2011 年 7 月 29 日
3. 陰山 洋 (招待講演)、「酸素の通り道：ペロブスカイトを舞台とした低温反応」、*計算物質科*

学研究センター第1回シンポジウム～『京』と大型実験施設の連携に向けて～、東京大学物性研究所(柏)、2011年9月13日

4. 水牧 仁一朗 (招待講演)、「A サイト秩序型ペロブスカイトの軟 X 線分光」、PF 研究会「軟 X 線分光・散乱測定を用いた物性研究の現状と展望」、高エネルギー加速器研究機構(つくば)、2011年9月14日
5. 山内 邦彦 (招待講演)、「第一原理計算によるマルチフェロイック物質の研究」、日本物理学会秋季大会、富山大学(富山)、2011年9月21日
6. 陰山 洋 (招待講演)、「低温化学による酸化物の組成、構造、物性制御」、北海道大学 G-COE シンポジウム、北海道大学(北海道)、2011年11月18日
7. 島川 祐一 (招待講演)、「A サイト秩序型酸化物 $AA_3B_4O_{12}$ の電荷不均化・電荷移動・電気伝導」、高温電子伝導材料の探索研究会、産総研(愛知)、2011年12月23日
8. 菅 大介 (受賞招待講演)、「 $SrRuO_3$ エピタキシャル薄膜の構造相転移:薄膜ナノ構造におけるストレイン効果」、応用物理学会 春季大会、早稲田大学(東京)、2012年3月15日
9. 小口 多美夫 (招待講演)、「二色性で見る対称性と秩序(領域5シンポジウム)」、日本物理学会第67回年次大会、関西学院大学(西宮)、2012年3月25日
10. 島川 祐一 (受賞招待講演)、「新規機能性酸化物の創製と構造・物性評価に関する研究」、日本化学会 第92 春季年会、慶応大学(日吉)、2012年3月26日
11. 木村 滋 (招待講演)、「SPring-8 での極微小結晶による単結晶構造解析」、日本化学会第92 春季年会 特別企画講演「化学者のための放射光ことはじめ」、慶應大学(日吉)、2012年3月28日
12. 陰山 洋 (招待講演)、「3d 遷移金属酸化物をベースとした低温反応 - ハイブリッドから酸水素化物まで -」、日本化学会新領域研究グループ「低次元無機-有機複合系の光化学」、化学会館、2012年5月11日
13. 陰山 洋 (招待講演)、「酸化物配位化学:低温合成」、第 73 回応用物理学会学術講演会 特別シンポジウム「ここまでの酸化物材料科学:創造と成功の本質」、松山大学、2012年9月12日
14. 菅 大介 (招待講演)、「希土類を置換した $BiFeO_3$ におけるモルフォトロピック相境界近傍での構造・機能特性相関」、日本セラミックス協会 第 25 回秋季シンポジウム、名古屋市、2012年9月21日
15. 山本 隆文 (招待講演)、「平面四配位鉄酸化物の構造と磁性」、日本中性子科学会第12回年会、Future Neutron Star 講演、京都大学、2012年12月11日
16. 島川 祐一 (招待講演)、「新規 3d 遷移金属酸化物の合成」、日本セラミックス協会 第 51 回セラミックス基礎科学討論会、仙台市、2013年1月9日
17. 木村 滋 (招待講演)、「Mg 合金中長周期積層構造相の放射光構造解析」、第 26 回日本放射光学会年会・放射光科学合同シンポジウム 企画講演1「新しい軽量Mg 合金研究の放射光による展開-構造・特性・機能」、名古屋大学、2013年1月12日
18. 陰山 洋 (招待講演)、「酸化物の配位コントロール」、分子研研究会「無機化学の現状と未来:若い世代が切り開く新しいサイエンス」、分子研、2013年1月18日

19. 木村 滋 (招待講演)、「放射光で見る Mg 基 LPSO 構造」、日本物理学会 第 68 回年次大会 領域 10 シンポジウム「Mg 基長周期積層構造 (LPSO) における面欠陥と溶質原子の相互作用」、広島大学、2013 年 3 月 26 日
20. 小林 洋治 (招待講演)、「固体材料合成および評価技術の新展開」、酸水素化物と混合アニオン材料の化学、ワークショップ、二本松市、2013 年 9 月 2 日
21. 麻生 亮太郎、菅 大介、島川祐一、倉田 博基、「走査型透過電子顕微鏡による SrRuO₃ 薄膜中の八面体構造の歪み解析」(講演奨励賞受賞講演)、第 74 回応用物理学会秋季学術講演会、同志社大学、2013 年 9 月 18 日
22. 山内 邦彦 (招待講演)、「第一原理計算を用いたマルチフェロイック物質の材料設計」、物性研スパコン共同利用・CMSI 合同研究会(第4回 CMSI 研究会)、千葉市、2013 年 12 月 10-13 日.
23. 陰山 洋 (招待講演)、「酸化物化学への挑戦」、界面ナノ科学研究会 新世代研究所、東京、2013 年 12 月 25 日
24. 陰山 洋 (招待講演)、「配位化学に基づく新物質開発」、第 94 回日本化学会春季年会、中長期企画 “元素戦略: 物質開発に基づく材料科学のジャンプアップ”、名古屋大学、2014 年 3 月 28 日
25. 木村 滋 (招待講演)、「放射光マイクロ回折による薄膜・界面・ナノ構造評価」、日本物理学会 第 68 回年次大会 領域 10 シンポジウム「局所構造と物性 その評価と応用」、東海大学、2014 年 3 月 29 日
26. 齊藤 高志、島川 祐一 (「第 38 回 研究進歩賞」受賞記念講演)、「高圧合成を中心とした新規機能性酸化物材料の合成」、粉体粉末冶金協会 26 年度春季大会、早稲田、2014 年 6 月 5 日
27. 陰山 洋 (依頼講演)、「不思議な“さび”」、第 83 回病態生化学セミナー、島根大学医学部、2014 年 9 月 18 日
28. 水牧 仁一朗 (招待講演)、「負の熱膨張を示す遷移金属酸化物の電子状態-X 線分光から」、日本物理学会・秋季大会 領域領域 3, 8, 10 合同シンポジウム「負熱膨張の新展開-相変態に伴う巨大応答と新物質-」、徳島大学、2014 年 9 月 25 日
29. 陰山 洋 (招待講演)、「新物質開発の魅力」、出雲高等学校一年生向け、京都大学、2014 年 10 月 7 日
30. 島川 祐一 (招待講演)、「秩序構造ペロブスカイト酸化物における磁気相互作用」、物性研究所計算物質科学研究センター第 4 回シンポジウム、柏市、2014 年 11 月 12 日
31. 山内 邦彦 (招待講演)、「電荷秩序が誘起する強誘電酸化物の電子状態計算」、電荷とスピンの織りなす時空間マルチスケール揺らぎ研究会、岡山大学、2014 年 12 月 20 日
32. 菅 大介 (招待講演)、「酸素原子変位の界面エンジニアリングを用いた酸化物相制御」、第 5 回 統合物質シンポジウム「物質創製研究の新しい展望」、名古屋市、2014 年 12 月 20 日
33. 陰山 洋 (招待講演)、「混合アニオン系の合成・構造・機能物性」、第 53 回セラミックス協会基礎科学討論会、京都、2015 年 1 月 8 日
34. 陰山 洋 (招待講演)、「トレンス因子による物性制御: ペロブスカイトを超えて」、第 14 回

CROSSroads「スピン系とフラストレーション」、茨城県東海村、2015 年 2 月 3 日

35. 小口 多美夫 (招待講演)、「第一原理計算手法の現状と展望 — はじめに」、日本物理学会第 70 回年次大会シンポジウム、早稲田、2015 年 3 月 21 日
36. 島川 祐一 (招待講演)、「遷移金属酸化物の結晶構造・磁気構造解析：中性子回折による機能性酸化物材料研究」、日本化学会 第 95 春季年会 (特別企画講演)、船橋市、2015 年 3 月 29 日
37. 陰山 洋 (招待講演)、「アニオン化学と機能開拓」、環境・エネルギー(グリーン)分野俯瞰とスコープ抽出のための検討会、科学技術振興機構、東京、2015 年 7 月 8 日
38. 陰山 洋 (招待講演)、「効率的ソルボサーマル法によるフッ化物磁性体の探索」、第 101 回研究会日本学術振興会フッ素化学第 155 委員会、京都、2015 年 8 月 6 日
39. 倉田 博基 (招待講演)、「高エネルギー分解能 EELS が拓く材料の化学状態分析の可能性」、日本物理学会 2015 年秋季大会、吹田市、2015 年 9 月 1 日
40. 島川 祐一 (招待講演)、「高い磁気転移温度を持つハーフメタル新材料の合成：カチオン秩序による磁気構造制御」、SPRING-8 シンポジウム 2015、福岡市、2015 年 9 月 14 日
41. 齊藤 高志 (依頼講演)、「A サイト秩序型ペロブスカイト酸化物 $AA'_3B_4O_{12}$ の高压合成とその物性」、日本セラミックス協会 第 28 回秋季シンポジウム、富山市、2015 年 9 月 16 日
42. 陰山 洋 (依頼講演)、「混合アニオン酸化物の化学と物理」、量子物質研究の最前線、東大物性研、2015 年 12 月 9 日
43. 菅 大介 (招待講演)、「酸化物ヘテロ構造中の酸素配位環境の制御と機能探求」、粉体粉末冶金協会 秋季大会、京都市、2015 年 12 月 12 日

〈国際〉

1. H. Kageyama (Invited), “Reactivity and Physical Properties of Transition-metal Perovskite Oxides”, *17th International Symposium on the Reactivity of Solids (ISRS17)*, Bordeaux, France, Jun. 28, 2011.
2. Y. Shimakawa (Invited), “New perovskite-structure oxides containing Fe with unusually oxidation states and unusual oxygen coordinations”, *10th International Conference on Materials Chemistry (MC10)*, Manchester, UK, Jul. 6, 2011.
3. Y. Shimakawa (Invited), “New perovskite-structure oxides containing Fe with unusually oxidation states and unusual oxygen coordinations”, *Chemistry and Physics of Functional Materials*, Santa Barbara, USA, Jul. 26, 2011.
4. Y. Shimakawa (Invited), “A-site ordered perovskite-structure oxides with functional properties”, *XXII Congress and General Assembly International Union of Crystallography*, Madrid, Spain, Aug. 28, 2011.
5. Y. Shimakawa (Invited), “Synthesis of new transition-metal oxide materials”, *The 1st Annual World Congress of Nano-S&T*, Dalian, China, Oct. 23, 2011.
6. K. Yamauchi (Invited), “Novel mechanisms for multiferroicity and magnetoelectric effects in transition metal oxides”, *The 14th Asian Workshop on First-Principles Electronic Structure*

Calculations, Tokyo, Japan, Oct. 30, 2011.

7. Y. Shimakawa (**Invited**), “Charge transfer and charge disproportionation of unusually high-oxidation states of Fe in oxides”, *UK-Japan Meeting 2012 in Tokyo*, Tokyo, Japan, Jan. 9, 2012.
8. Y. Shimakawa (**Invited**), “Overview of research activity at ICR, Kyoto University”, *Japan-UK-Taiwan meeting “Synthesis and Properties of New Functional Materials”*, Kyoto, Japan, Jan. 12, 2012.
9. D. Kan (**Invited**), “Strain effect on structural transition of (110) SrRuO₃ epitaxial thin films”, *Japan-UK-Taiwan meeting “Synthesis and Properties of New Functional Materials”*, Kyoto, Japan, Jan. 12, 2012.
10. T. Saito (**Invited**), “A-site-ordered perovskite ACu₃B₄O₁₂”, *Japan-UK-Taiwan meeting “Synthesis and Properties of New Functional Materials”*, Kyoto, Japan, Jan. 12, 2012.
11. K. Yamauchi (**Invited**), “Ab-initio Theoretical Studies on Charge-Order Induced Ferroelectricity and Magnetoelectric Effects”, *Electronic Ferroelectricity – ELF2012*, Vietri Sur Mare, Italy, Mar. 23, 2012.
12. K. Yamauchi (**invited**), “Charge-order-induced multiferroicity in transition-metal oxides”, *ISSP-CMSI international workshop/symposium on Material Simulation in Petaflops era (MASP2012)*, Tokyo, Japan, Jul. 2, 2012.
13. D. Kan (**invited**), “Structure-Property Correlations in Rare-earth Substituted BiFeO₃ Epitaxial Thin Films at Morphotropic Phase Boundary”, *21st International Symposium on Applications of Ferroelectrics*, Aveiro, Portugal, Jul. 12, 2012.
14. D. Kan (**invited**), “Thickness dependent structure-property relationships in coherently-grown (110) SrRuO₃ thin films”, *International conference on Emerging Advanced Nanomaterials*, Brisbane, Australia, Jul. 23, 2012.
15. T. Saito and Y. Shimakawa (**invited**), “Synthesis of A-site-ordered perovskites under high pressures”, *The 6th Asian Conference on High Pressure Research (ACHPR 6) & International Forum on High Pressure Sciences (IFHPS)*, Beijing, China, Aug. 10, 2012.
16. Y. Shimakawa (**invited**), “Solid-state chemistry of transition-metal oxide thin films”, *XXI International Materials Research Congress*, Cancun, Mexico, Aug. 15, 2012.
17. T. Oguchi (**invited**), “A-site Ordered Perovskite Oxides: A Playground for Novel Electronic Phases”, *4th APCTP-IACS Joint Conference on Physics of Novel and Emerging Materials*, Pohang, Korea, Oct. 29, 2012.
18. K. Yamauchi (**invited**), “Electronic state calculation in electronic ferroelectricity”, *CMRC Workshop “Novel dielectric property in correlated electron system - Electron and Structure-“*, Tsukuba, Japan, Nov. 19, 2012.
19. S. Kimura and Y. Imai (**invited**), “Synchrotron X-ray Microdiffraction as a Tool for Characterization of Local Strain Field”, *The 6th International Symposium on Advanced Science and Technology of Silicon Materials*, Kona, Hawaii, USA, Nov. 20, 2012.
20. D. Kan (**invited**), “Thickness-dependent structure-property correlations in coherently-grown

- (110) SrRuO₃ thin films”, *Energy Materials Nanotechnology (EMN) Fall meeting*, Las Vegas, USA, Dec. 1, 2012.
21. D. Kan (**invited**), “Thickness-dependent structure-property correlations in coherently-grown (110) SrRuO₃ thin films”, *The 2012 Collaborative Conference on Crystal Growth (3CG)*, Orlando, USA, Dec. 13, 2012.
 22. H. Kageyama (**invited**), “Anionic Control of Function in Metal Oxides”, *1st Bristol-Kyoto Symposium*, University of Bristol, UK, Jan. 11, 2013.
 23. J. P. Attfield, Y. Shimakawa, and Ru-Shi Liu (**invited**), “High Pressure Materials for Energy Technologies”, *EPENET Hsinchu & Kyoto Showcase and Workshop*, Hsinchu, Taiwan & Kyoto, Japan, Mar. 1-6, 2013.
 24. Y. Shimakawa (**invited**), “Research Activity at ICR, Kyoto University on High Pressure Materials for Energy Technologies”, *EPENET Hsinchu & Kyoto Showcase and Workshop*, Hsinchu, Taiwan & Kyoto, Japan, Mar. 1-6, 2013.
 25. D. Kan (**invited**), “Control of octahedral distortions in perovskite oxides by epitaxial strain”, *EPENET Kyoto Showcase and Workshop*, Kyoto, Japan, Mar. 5, 2013.
 26. N. Ichikawa (**invited**), “Topotactic control of oxygen concentrations at low temperatures in perovskite oxide thin films”, *EPENET Kyoto Showcase and Workshop*, Kyoto, Japan, Mar. 5, 2013.
 27. T. Saito (**invited**), “Exploration of Functional Materials Using High Pressures”, *EPENET Kyoto Showcase and Workshop*, Kyoto, Japan, Mar. 5, 2013.
 28. Y. Shimakawa (**invited**), “Novel A-site-ordered perovskite-structure oxides synthesized by high-pressure technique”, *Study of Matter at Extreme Conditions (SMEC 2013)*, Miami, USA, Mar. 25, 2013.
 29. D. Kan and Y. Shimakawa (**invited**), “Substrate-induced oxygen octahedral tilts in perovskite oxide thin films”, *International Conference Superstripes 2013 Quantum in Complex Matter*, Ischia, Italy, May. 31, 2013.
 30. K. Yamauchi (**invited**), “Theoretical prediction of novel magnetoelectric materials”, *Joint Workshop of Interactive Materials Science Cadet Program (IMSC)*, Osaka University, and S-1 JSPS Core-to-Core Program (A) Advanced Research Networks, Hyogo, June 16-19, 2013.
 31. M. Toyoda, K. Yamauchi, and T. Oguchi (**invited**), “Magnetic coupling in A-site-ordered perovskite oxides”, *International Workshop of Computational Nano-Materials Design on Green Energy*, Hyogo (Japan), June 16-19, 2013.
 32. T. Saito and Y. Shimakawa (**invited**), “A-site-ordered perovskites: High-pressure synthesis and structural and physical property measurements under high pressure”, *ESS Science Symposium on Neutron Scattering at Extreme Conditions*, Edinburgh, UK, Jul. 5, 2013.
 33. Y. Shimakawa (**invited**), “Crystal and magnetic structures of novel A-site-ordered perovskites”, *International Conference on Neutron Scattering (ICNS 2013)*, Edinburgh, UK, Jul. 9, 2013.
 34. D. Kan, (**invited**) “Control of a perovskite oxide through oxygen octahedral connectivity”, *EMN East*, Beijing, China, Sep. 8 (2013).

35. H. Kageyama (**invited**), "Titanium Compounds with Mixed Anion Coordination", *246th ACS National Meeting, "Synthesis of Solid State Materials: Beyond "Heat-and-Beat"*, Indianapolis, USA, September 11, 2013
36. H. Kageyama (**invited**), "Topochemical Reactions in Condensed Phases toward Functional Properties", *UK-Japan Workshop on Organic-Inorganic Framework*, Kyoto, Japan, October 10, 2013
37. Y. Zhang (**invited**), "Interlayer Switching of Reduction for Polymorphism Control of Oxygen Order and Disorder", *The 2013 Energy Materials Nanotechnology (EMN) Open Access Week*, Chengdu, China, October 23, 2013
38. H. Kageyama (**invited**), "Unusual Coordination Chemistry in Iron Oxides", *The 2013 Energy Materials Nanotechnology (EMN) Open Access Week*, Chengdu, China, October 23, 2013
39. T. Oguchi (**invited**), "Novel Electronic States in Perovskite Oxides", *5th IACS-APCTP International Conference on Novel Oxide Materials and Low Dimensional Systems*, Indian Institute of Science, Bangalore (India), December 9-11, 2013.
40. Y. Shimakawa (**invited**), "Synthesis of new functional oxide materials", *NTU-KU Symposium 2013*, Taipei, Taiwan, Dec. 19, 2013
41. D. Kan (**invited**), "Control of structural distortions in transition-metal oxide films through interfacial octahedral connectivity", *Solid State Chemistry Potpourri in Kyoto*, Kyoto, Japan, Mar. 11, 2014
42. Y. Shimakawa (**invited**), "New perovskite-structure oxides: High-pressure synthesis and epitaxial thin film growth", *2014 Bordeaux-Kyoto Symposium*, Bordeaux, France, May. 6, 2014
43. H. Kageyama (**invited**), "Low Temperature Reactions of Functional Solids", *E-MRS, Solution and Properties of Functional Oxide Thin Films and Nanostructures*, Lille, France, May 29, 2014
44. H. Kageyama (**invited**), "Coordination-Selective Transition Metal Intercalation in a Layered Telluride", *18th International Symposium on the Reactivity of Solids*, Saint Petersburg, Russia, Jun. 12, 2014
45. H. Kageyama (**invited**), "Coordination Selective Intercalation of Transition Metals in a Layered Material", *5th International Symposium on Structure-Property Relationships in Solid State Materials*, Qingdao, China, Jun. 23, 2014
46. T. Saito (**invited**), "Exploration of novel functional materials under high pressure", *Workshop on Novel Functional Oxides*, Kyoto, Japan, Jul. 8, 2014
47. D. Kan (**invited**), "Phase control of a transition metal oxide through interfacial engineering of oxygen displacement", *Workshop on Novel Functional Oxides*, Kyoto, Japan, Jul. 9, 2014
48. N. Ichikawa (**invited**), "Low-temperature oxidation and reduction in transition metal oxide thin films", *Workshop on Novel Functional Oxides*, Kyoto, Japan, Jul. 9, 2014
49. H. Kageyama (**invited**), "Rare-earth Substitutional Study on Square Planar Coordinate Iron Oxide SrFeO_2 ", *13th Bilateral German-Japanese Symposium "Interplay of Spin- and Orbital Degrees of Freedom in Strongly Correlated Electron Systems"*, Ringberg Castle, Germany, Jul.

14, 2014

50. N. Ichikawa (**invited**), “Reduction and oxidation of 3d transition metal oxide thin films at low temperatures”, *Oxide Thin Films for Advanced Energy and Information Applications: Materials Chemistry of Thin Film Oxides*, Chicago, USA, Jul. 15, 2014
51. Y. Shimakawa (**invited**), “Multiple magnetic interactions in ordered perovskite-structure oxides”, *23rd Congress and General Assembly International Union of Crystallography*, Montreal, Canada, Aug. 10, 2014
52. Y. Shimakawa and J. P. Attfield (**invited**), “Structural, electronic and magnetic ordering: from fundamental physics to functionality”, *23rd Congress and General Assembly International Union of Crystallography*, Montreal, Canada, Aug. 11, 2014
53. Y. Shimakawa (**invited**), “A-site magnetism on cubic spin sublattice of ordered perovskites”, *Advances in oxide materials: Preparation, properties, performance*, Santa Barbara, USA, Aug. 28, 2014
54. D. Kan (**invited**), “Phase control of a transition metal oxide through interfacial engineering of oxygen displacement”, *21st International Workshop on Oxide Electronics (WOE)*, Lake George, USA, Sep. 30, 2014
55. Y. Shimakawa (**invited**), “Intriguing physical properties of new ordered perovskite-structure oxides synthesized under high pressure”, *Pressure and Strain Effects in Correlated Electron Materials (PSECEM14)*, Dresden, Germany, Oct. 6, 2014
56. H. Kageyama (**invited**), “New Material Synthesis for Battery Application”, *The 3rd International Symposium on New Generation Batteries*, Kyoto University, Nov. 22, 2014
57. Y. Shimakawa (**invited**), “Magnetic interactions in cubic spin sublattices of ordered perovskites”, *The 18th SANKEN International Symposium & The 13th SANKEN Nanotechnology Symposium*, Osaka, Japan, Dec. 10, 2014
58. M. Toyoda, K. Yamauchi, and T. Oguchi (**invited**), “A-site magnetic ordering in quadruple perovskite oxides”, *The 18th SANKEN International Symposium & the 13th SANKEN Nanotechnology Symposium*, Osaka, Japan, Dec. 11, 2014
59. T. Saito and Y. Shimakawa (**invited**), “High Pressure Synthesis of A-Site-Ordered Perovskites”, *The 7th Asian Conference on High Pressure Research (ACHPR-7)*, Bangkok, Thailand, Jan. 16, 2015
60. D. Kan (**invited**), “Phase control of a transition metal oxide through interface engineering of oxygen displacement”, *Electronic Materials and Applications 2015 (Amer. Ceram. Soc.)*, Orlando, USA, Jan. 22, 2015
61. H. Kageyama (**invited**), “Transition Metal Oxynitrides”, *A UK-Japan meeting on Transforming Framework Materials Chemistry*, The Royal Society at Chicheley Hall, UK, Mar. 3, 2015
62. Y. Shimakawa (**invited**), “Novel magnetic materials in ordered perovskite-structure oxides”, *The EMN Phuket Meeting*, Phuket, Thailand, May 4, 2015
63. Hiroshi Kageyama (**invited**) (Kyoto University), Transition Metal Oxynitrides and Oxyhydrides, E-MRS, Advances and Enhanced Functionalities of Anion-controlled New

Inorganic Materials, Lille, France May. 12, 2015

64. H. Kageyama (**invited**), “New Trend in Solid State Chemistry”, *4th Super-PIRE REIMEI -26th REIMEI Workshop on Frontiers of Condensed Matter Physics*, TRIUMF, Vancouver, Canada, May. 18, 2015
65. H. Kageyama (**invited**), “Anion-Controlled Functionalities in Perovskite-based Materials”, *The 2nd Kyoto - Bordeaux Symposium 2015*, Kyoto University, Japan, May. 22, 2015
66. H. Kageyama (**invited**), “Mixed Anion Compounds with Functional Properties”, *NanoMat2015, 11th Japan-France Workshop on Nanomaterials and 2nd WPI-Workshop on Materials Science*, University of Rennes 1, France, May. 28, 2015
67. Y. Shimakawa (**invited**), “Ligand hole localization in perovskite-structure oxides with unusual high valence Fe”, *French-Indo Symposium on Correlated Oxide Materials (FISCOM 2015)*, Montpellier, France, July 15, 2015
68. Y. Shimakawa (**invited keynote lecture**), “New ordered perovskite-structure oxides synthesized by high-pressure technique”, *AIRAPT-25th & EHPRG-53rd*, Madrid, Spain, Aug. 31, 2015
69. Y. Shimakawa (**invited**), “Novel functional oxides with ordered perovskite structures synthesized by high-pressure technique”, *E-MRS Fall meeting*, Warsaw, Poland, Sep. 18, 2015
70. D. Kan (**invited**), “Tuning functional properties by interfacially engineering oxygen coordination environment in transition-metal oxides”, *CEMS Topical Meeting on Oxide Interfaces 2015*, Wako, Japan, Nov. 6, 2015
71. D. Kan (**invited**), “Interface engineering of oxygen coordination environment: a new route for exploring functionality of transition metal oxides”, *International Symposium of Interactive Material Science Cadet Program (iSIMSC-2)*, Osaka, Japan, Nov. 18, 2015
72. H. Kageyama (**invited**), “Anion-controlled Functions in Perovskite Based Compounds”, *International Conference on Magnetic Materials & Applications (ICMAGMA-2015)*, Chennai, India, Dec 4, 2015
73. T. Oguchi (**invited**), “Magnetoelectricity in CaFeO_2 and MgFeO_2 ”, *The 1st Pusan-Osaka Meeting on Advanced Matter Physics*, Pusan National University, Pusan, Korea, Oct. 16-17, 2015
74. M. Toyoda (**invited**), “Magnetic exchange interaction in quadruple perovskites”, *The 1st Pusan-Osaka Meeting on Advanced Matter Physics*, Pusan National University, Pusan, Korea, Oct. 16-17, 2015
75. H. Kageyama (**invited**), “Topochemical Reactions of Perovskite-based Transition-metal Oxyfluorides”, *Pacificchem 2015*, Hawaii, USA, Dec 20, 2015
76. Y. Shimakawa (**invited**), “Control of properties by cation order in transition-metal oxides”, *The 5th International Conference on MEXT Project of Integrated Research on Chemical Synthesis “Chemical Science for Future Societies”*, Nagoya, Japan, Jan. 19, 2016
77. T. Oguchi (**invited**), “Magnetic exchange interaction in A-site ordered perovskite oxides”, *Workshop on Frontier Materials Research*, Sungkyunkwan University, Suwon, Korea, Jan.

28-29, 2016

78. N. Ichikawa (**invited**), “Oxide-ion conduction in polymorphic Sr-Sc-Ga-O compounds”, *International workshop on recent progress in solid state chemistry*, Kyoto, Japan, Mar. 9, 2016
79. S. Saito (**invited**), “Antiferromagnetic metal $\text{LaCu}_3\text{Cr}_4\text{O}_{12}$ synthesized at high pressure”, *International workshop on recent progress in solid state chemistry*, Kyoto, Japan, Mar. 9, 2016
80. D. Kan (**invited**), “Tuning functional properties by interfacially engineering oxygen coordination environ in a transition-metal oxide”, *International workshop on recent progress in solid state chemistry*, Kyoto, Japan, Mar. 9, 2016
81. Y. Shimakawa (**highlighted invited lecture**), “Unusual A-site magnetism in cation ordered transition-metal oxides studied comprehensively by experiments and theoretical calculations”, *ICCMSE 2016 Computational Chemistry (CC) Symposium*, Athens, Greece, Mar. 18, 2016

② 口頭発表 (国内会議 118 件、国際会議 44 件)

1. 市川 能也、島川 祐一、「Rutile 型 TiO_2 薄膜の CaH_2 による還元」、応用物理学会学術講演会、山形大学(山形)、2011 年 8 月 31 日
2. 菅 大介、島川 祐一、「 SrRuO_3 エピタキシャル薄膜の構造相転移:薄膜ナノ構造におけるストレーン効果」、応用物理学会学術講演会、山形大学(山形)、2011 年 8 月 31 日
3. 平井 慧、市川 能也、松本 和也、菅 大介、島川 祐一、「 $\text{Sr}_{1-x}\text{La}_x\text{FeO}_{2.5}$ エピタキシャル薄膜の作製」、応用物理学会学術講演会、山形大学(山形)、2011 年 9 月 1 日
4. Cédric Tassel, Liis Seinberg, Naoaki Hayashi, and Hiroshi Kageyama, “Low Temperature Synthesis of Sr_2FeO_3 with Square Planar Coordination”, 日本セラミックス協会秋季シンポジウム、北海道大学(北海道)、2011 年 9 月 7 日
5. 山本 隆文、陰山 洋、小林 洋治、川上 隆輝、岡田 卓、八木 健彦、亀掛川 卓美、「 A_2MO_3 における圧力誘起構造相転移」、日本セラミックス協会秋季シンポジウム、北海道大学(北海道)、2011 年 9 月 7 日
6. 矢島 健、竹入 史隆、辻本 将彦、細川 三郎、高野 幹夫、小林 洋治、陰山 洋、「平面四配位、高価数をとる Pd 酸弗化物の合成およびその物性」、日本セラミックス協会秋季シンポジウム、北海道大学(北海道)、2011 年 9 月 7 日
7. 関 隼人、山田 隆太、齊藤 高志、Brendan Kennedy、島川 祐一、「 $(\text{Sr},\text{Na})\text{RuO}_3$ の高压合成と物性」、日本物理学会秋季大会、富山大学(富山)、2011 年 9 月 21 日
8. 小寺 満、獅子堂 達也、水牧 仁一朗、小口 多美夫、「 SrFeO_2 の X 線吸収スペクトルの研究」、日本物理学会秋季大会、富山大学(富山)、2011 年 9 月 22 日
9. 辻本 吉廣、網代 芳民、陰山 洋、S. M. Yusuf, A. K. Bera, C. Ritter, J. P. Attfield、「 $1/3$ 磁化プラトーを示す正方格子量子磁性体 $(\text{CuCl})\text{Sr}_2\text{Nb}_3\text{O}_{10}$ の磁気構造」、日本物理学会秋季大会、富山大学(富山)、2011 年 9 月 22 日
10. 齊藤 高志、島川 祐一、「A サイト秩序型ペロブスカイト $\text{CaCu}_3\text{B}_4\text{O}_{12}$ への Cu サイト置換効果」、日本物理学会秋季大会、富山大学(富山)、2011 年 9 月 23 日
11. 陳 威廷、齊藤 高志、島川 祐一、「Synthesis and magnetic behaviors of A-and-B-sites

- ordered double perovskites $\text{CaCu}_3\text{Fe}_2\text{B}_2\text{O}_{12}$ ($\text{B} = \text{Nb}, \text{Sb}$)」、日本物理学会秋季大会、富山大学(富山)、2011 年 9 月 23 日
12. 水牧 仁一朗、齊藤 高志、山田 隆太、魚住 孝幸、島川 祐一、「硬 X 線光電子分光でみた $\text{CaCu}_3\text{Cr}_4\text{O}_{12}$ の電子構造」、日本物理学会秋季大会、富山大学(富山)、2011 年 9 月 24 日
 13. 清水 卓也、菅 大介、島川 祐一、「Nb ドープ SrTiO_3 エピタキシャル薄膜の電気特性における蒸着速度依存性」、第 59 回 応用物理学関係連合講演会、早稲田大学(東京)、2012 年 3 月 15 日
 14. 西 仁実、菅 大介、島川 祐一、「 $\text{La}_{1/3}\text{Sr}_{2/3}\text{FeO}_3$ における電荷不均化転移の薄膜成長方位依存性」、第 59 回 応用物理学関係連合講演会、早稲田大学(東京)、2012 年 3 月 17 日
 15. 上田 卓弥、小寺 満、山内 邦彦、小口 多美夫、「A サイト秩序型ペロブスカイト $\text{CaCu}_3\text{Fe}_4\text{O}_{12}$ における X 線吸収スペクトルの第一原理計算」、日本物理学会第 67 回年次大会、関西学院大学(西宮)、2012 年 3 月 24 日
 16. 齊藤 高志、Clemens Ritter、張 守宝、陳 威廷、遠山 武範、島川 祐一、「A サイト秩序型ペロブスカイト $\text{LaMn}_3\text{V}_4\text{O}_{12}$ の磁気構造解析」、日本物理学会第 67 回年次大会、関西学院大学(西宮)、2012 年 3 月 26 日
 17. 張 守宝、陳 威廷、遠山 武範、齊藤 高志、島川 祐一、「Structural, magnetic and transport properties of high-pressure synthesized $\text{AMn}_3\text{V}_4\text{O}_{12}$ ($\text{A} = \text{La}$ and Bi)」、日本物理学会第 67 回年次大会、関西学院大学(西宮)、2012 年 3 月 26 日
 18. 陳 威廷、齊藤 高志、島川 祐一、「Magnetic and transport properties of A- and B-sites ordered double perovskites $\text{CaCu}_3\text{Fe}_2\text{B}_2\text{O}_{12}$ ($\text{B} = \text{Ta}, \text{Re}$)」、日本物理学会第 67 回年次大会、関西学院大学(西宮)、2012 年 3 月 26 日
 19. 山田 まりな、遠山 武範、陳 威廷、市川 能也、齊藤 高志、島川 祐一、「酸素欠損ペロブスカイト(Sr,Ca) $_2\text{FeGaO}_5$ の結晶構造と磁気特性」、日本化学会 第 92 春季年会、慶応大学(日吉)、2012 年 3 月 26 日
 20. 山田 まりな、遠山 武範、陳 威廷、市川 能也、齊藤 高志、島川 祐一、「酸素欠損ペロブスカイト(Sr,Ca) $_2\text{FeGaO}_5$ の結晶構造と磁気特性」、粉体粉末冶金協会 24 年度春季大会、京都市、2012 年 5 月 24 日
 21. 西 仁実、菅 大介、島川 祐一、「 $\text{La}_{1/3}\text{Sr}_{2/3}\text{FeO}_3$ における電荷不均化転移の薄膜成長方位依存性」、粉体粉末冶金協会 24 年度春季大会、京都市、2012 年 5 月 24 日
 22. 平井 慧、菅 大介、市川 能也、島川 祐一、「 SrFeO_x ($x \sim 2.8$)薄膜の金属-絶縁体転移」、第 73 回 応用物理学学術講演会、松山市、2012 年 9 月 12 日
 23. 清水 卓也、菅 大介、島川 祐一、「Pt と Nb ドープ SrTiO_3 薄膜からなるショットキー接合の電流-電圧特性」、第 73 回 応用物理学学術講演会、松山市、2012 年 9 月 12 日
 24. 市川 能也、島川 祐一、「無限層構造 LaNiO_2 薄膜への A サイト置換ドーピング」、第 73 回 応用物理学学術講演会、松山市、2012 年 9 月 12 日
 25. 菅 大介、麻生 亮太郎、倉田 博基、島川 祐一、「格子整合した SrRuO_3 における薄膜構造の膜厚依存性」、第 73 回 応用物理学学術講演会、松山市、2012 年 9 月 12 日
 26. 水牧 仁一朗、齊藤 高志、魚住 孝幸、島川 祐一、「軟 X 線発光分光でみた A サイト規則化

- ペロブスカイト $\text{LaMn}_3\text{B}(\text{B}=\text{V}, \text{Cr})_4\text{O}_{12}$ の電子構造」、日本物理学会、横浜国立大、2012 年 9 月 18 日
27. 張 守宝、齊藤 高志、陳 威廷、遠山 武範、水牧 仁一朗、島川 祐一、「Structural, magnetic, and transport properties of high-pressure synthesized $\text{AMn}_3\text{V}_4\text{O}_{12}$ (A= Na, Ca, and La)」、日本物理学会 秋季年会、横浜市、2012 年 9 月 19 日
 28. 遠山 武範、齊藤 高志、Mark Senn、陳 威廷、Chiu Tang、J. Paul Attfield、島川 祐一、「共鳴 X 線回折による A サイト秩序型ペロブスカイト酸化物 $\text{La}_{1-x}\text{Na}_x\text{Mn}_3\text{Ti}_4\text{O}_{12}$ の構造解析」、日本物理学会 秋季年会、横浜市、2012 年 9 月 19 日
 29. 陳威 廷、齊藤 高志、水牧 仁一朗、島川 祐一、「Magnetic structures of A- and B-sites ordered double perovskites $\text{CaCu}_3\text{Fe}_2\text{B}_2\text{O}_{12}$ 」、日本物理学会 秋季年会、横浜市、2012 年 9 月 20 日
 30. 齊藤 高志、齊藤 高志、山田 隆太、Clemens Ritter、Mark Senn、Alex Sinclair、J. Paul Attfield、島川 祐一、「A サイト秩序型ペロブスカイト $\text{Ce}_x\text{Cu}_3\text{Ti}_4\text{O}_{12}$ における磁性と A サイト Ce 欠損秩序」、日本物理学会 秋季年会、横浜市、2012 年 9 月 20 日
 31. 山本 隆文、小林 洋治、林 直顕、セドリクタツセル、齊藤 高志、島川 祐一、山中 昭司、大山 研司、吉村 一良、高野 幹夫、陰山 洋、「 $(\text{Sr}_{1-x}\text{Ba}_x)\text{FeO}_2$ ($0.4 \leq x \leq 1$): 新規酸素欠損型ペロブスカイト構造」、日本セラミックス協会第25回秋季シンポジウム、名古屋大学、2012 年 9 月 20 日
 32. 石井 穰、川上 隆輝、山本 隆文、小林 洋治、陰山 洋、「高圧下における $\text{Sr}_{0.7}\text{Eu}_{0.3}\text{FeO}_2$ のメスバウアー分光」、日本物理学会 2012 年秋季大会、横浜国立大学、2012 年 9 月 20 日
 33. 清水 卓也(若手優秀講演論文賞 受賞)、菅 大介、島川 祐一、「PtとNb-SrTiO₃薄膜からなるショットキー接合の電流-電圧特性」、粉体粉末冶金協会 秋季大会、草津市、2012 年 11 月 21 日
 34. 越湖 将貴、矢島 健、小林 洋治、陰山 洋、「層状チタン化合物へのインターカレーション反応」、第38回固体イオニクス討論会、京都テルサ、2012 年 12 月 4 日
 35. Guillaume Bouilly, Cedric Tassel, Yoji Kobayashi, Hiroshi Kageyama, 「An Unusually Reduced Cobalt Oxide」、第38回固体イオニクス討論会、京都テルサ、2012 年 12 月 4 日
 36. 齊藤 高志、張 守宝、C. Ritter、J. P. Attfield、島川 祐一、「A サイト秩序型ペロブスカイト $\text{LaMn}_3\text{V}_4\text{O}_{12}$ の 120°スピン構造」、日本中性子科学会第12回年会、京都市、2012 年 12 月 12 日
 37. 山本 隆文、小林 洋治、陰山 洋、「 BaFeO_2 の合成、構造、物性」、第51回セラミックス基礎科学討論会、仙台国際センター、2013 年 1 月 9 日
 38. 浅井 啓、山本 隆文、小林 洋治、陰山 洋、「層状物質の圧力誘起アモルファス化」、第 51 回セラミックス基礎科学討論会、仙台国際センター、2013 年 1 月 9 日
 39. 水牧 仁一朗、齊藤 高志、池永 英司、魚住 孝幸、島川 祐一、「A サイト規則化ペロブスカイト $\text{ACu}_3\text{V}_4\text{O}_{12}$ (A=Na,Ca,Y)の電子状態」、日本放射光学会、名古屋大、2013 年 1 月 12 日
 40. 山田 まりな、齊藤 高志、市川 能也、島川 祐一、「異常高原子価イオンを含む酸素欠損ペロブスカイト $\text{Ca}_2\text{FeGaO}_x$ の合成」、日本化学会 春季年会、草津市、2013 年 3 月 22 日

41. 保坂 祥輝、市川 能也、齊藤 高志、島川 祐一、「異常高原子価イオンを含んだ層状ダブルペロブスカイト $\text{Ca}_2\text{FeMnO}_6$ の合成」、日本化学会 春季年会, 草津市, 2013 年 3 月 22 日
42. 平井 慧、麻生 亮太郎、菅 大介、市川 能也、倉田 博基、島川 祐一、「ブラウンミレライト $\text{SrFeO}_{2.5}$ エピタキシャル薄膜の異方的な格子緩和」、応用物理学会春季学術講演会, 厚木市, 2013 年 3 月 28 日
43. 菅 大介、麻生 亮太郎、倉田 博基、島川 祐一、「ストレイン効果によって安定化された正方晶 SrRuO_3 薄膜の構造-特性相関」、応用物理学会春季学術講演会, 厚木市, 2013 年 3 月 28 日
44. 齊藤 高志、遠山 武範、Thomas Hansen、陳 威廷、島川 祐一、「A サイト秩序型ペロブスカイト $\text{YMn}_3\text{Al}_4\text{O}_{12}$ の磁気構造」、日本物理学会第 68 回年次大会, 東広島市, 2013 年 3 月 28 日
45. 村上 永晃、菅 大介、市川 能也、島川 祐一、「 LaAlO_3 キャップ層を用いた $\text{CaFeO}_{2.5}$ 還元過程における酸素イオン拡散経路の制御」、応用物理学会春季学術講演会, 厚木市, 2013 年 3 月 29 日
46. 市川 能也、島川 祐一、「ブラウンミレライト酸化物薄膜の合成と構造評価」、応用物理学会春季学術講演会, 厚木市, 2013 年 3 月 29 日
47. 麻生 亮太郎、菅 大介、島川祐一、倉田 博基、「ペロブスカイト酸化物ヘテロ界面における八面体構造の歪み解析」、日本顕微鏡学会第 69 回学術講演会、茨木市、2013 年 5 月 20 日
48. 保坂 祥輝、市川 能也、齊藤 高志、島川 祐一、「異常高原子価イオンを含んだ層状ダブルペロブスカイト $\text{Ca}_2\text{FeMnO}_6$ の合成」、粉体粉末冶金協会 25 年度春季大会, 早稲田、2013 年 5 月 28 日
49. 村上 永晃 (若手優秀講演論文賞 受賞)、菅 大介、市川 能也、島川 祐一、「 $\text{LaAlO}_3/\text{CaFeO}_{2.5}/\text{SrTiO}_3$ ヘテロ構造における CaH_2 低温還元反応中の酸素イオン拡散」、粉体粉末冶金協会 25 年度春季大会、早稲田、2013 年 5 月 28 日
50. 保坂 祥輝、市川 能也、齊藤 高志、島川 祐一、「異常高原子価イオンを含んだ層状ダブルペロブスカイト $\text{Ca}_2\text{FeMnO}_6$ の合成」、粉体粉末冶金協会 25 年度春季大会、早稲田、2013 年 5 月 28 日
51. 齊藤 高志、遠山 武範、張 守宝、島川 祐一、「A サイト秩序型ペロブスカイト酸化物 $\text{AMn}_3\text{B}_4\text{O}_{12}$ の高圧合成と構造、物性」、日本セラミックス協会 第 26 回秋季シンポジウム、長野市、2013 年 9 月 4 日
52. 保坂 祥輝、市川 能也、齊藤 高志、島川 祐一、「異常高原子価イオンを含んだ層状ダブルペロブスカイト $\text{Ca}_2\text{FeMnO}_6$ の合成」、日本セラミックス協会 第 26 回秋季シンポジウム、長野市、2013 年 9 月 4 日
53. Subodh Ganesanpotti, Céderic Tassel, Naoaki Hayashi, Hiroshi Kageyama、「High pressure synthesis, crystal structure and properties of novel Ca_2BRuO_6 (B = Fe, Co) ceramics」、日本セラミックス協会 第 26 回秋季シンポジウム、信州大学、2013 年 9 月 4 日
54. 市川 能也、保坂 祥輝、齊藤 高志、島川 祐一、「低温酸化による層状ダブルペロブスカイト酸化物の合成」、応用物理学会秋季学術講演会, 京田辺市、2013 年 9 月 16 日
55. 菅 大介、麻生 亮太郎、倉田 博基、島川 祐一、「酸素八面体の連結性を利用したペロブ

スカイト酸化物の相制御」、応用物理学会秋季学術講演会、京田辺市、2013年9月16日

56. 平井 慧、麻生 亮太郎、菅 大介、市川 能也、倉田 博基、島川 祐一、「 $\text{SrFeO}_{2.5}/\text{DyScO}_3$ ヘテロ接合界面における特異な構造」、応用物理学会秋季学術講演会、京田辺市、2013年9月18日
57. 齊藤 高志、張 守宝、A. Arevalo Lopez、W. Kockelmann、J. P. Attfield、島川 祐一、「A サイト秩序型ペロブスカイト $\text{CaMn}_3\text{V}_4\text{O}_{12}$ の磁気構造」、日本物理学会秋季大会、徳島市、2013年9月29日
58. 齊藤 高志、張 守宝、島川 祐一、「A サイト秩序型ペロブスカイト $\text{AMn}_3\text{V}_4\text{O}_{12}$ ($\text{A} = \text{La}, \text{Ca}, \text{Na}$)における Mn/V の価数制御と物性」、粉体粉末冶金協会 秋季大会、名古屋市、2013年11月28日
59. 山本 隆文、川上 隆輝、水牧 仁一朗、吉井 龍太、岡田 卓、八木 健彦、小林 洋、高野 幹夫、陰山 洋、「平面四配位鉄酸化物における圧力誘起電荷移動転移」、第52回セラミックス協会基礎科学討論会、名古屋、2014年1月10日
60. 越湖 将貴、矢島 健、Yaoqing Zhang、小口 多美夫、小林 洋治、折笠 有基、山本 隆文、内本 喜晴、Mark A. Green、陰山 洋、「層状テルライド Ti_2PTe_2 への配位選択的な遷移金属の低温挿入反応」、第52回セラミックス協会基礎科学討論会、名古屋、2014年1月10日
61. 平井 慧、菅 大介、市川 能也、壬生 攻、依田 芳卓、島川 祐一、「 $\text{SrFeO}_{2.80}$ 薄膜の高温での電荷不均化による金属-絶縁体転移」、第61回応用物理学会春季学術講演会、相模原市、2014年3月18日
62. 村上 永晃、菅 大介、市川 能也、島川 祐一、「 $\text{LaAlO}_3/\text{CaFeO}_{2.5}/\text{SrTiO}_3$ ヘテロ構造中の酸化還元過程における酸素イオン拡散」、第61回応用物理学会春季学術講演会、相模原市、2014年3月18日
63. 市川 能也、島川 祐一、「 $\text{Ca}_2\text{FeGaO}_5$ ブラウンミレライト薄膜の低温酸化」、第61回応用物理学会春季学術講演会、相模原市、2014年3月18日
64. 佐藤 理子、菅 大介、麻生 亮太郎、倉田 博基、島川 祐一、「酸素八面体傾斜の伝搬を利用したペロブスカイト酸化物の相制御」、第61回応用物理学会春季学術講演会、相模原市、2014年3月18日
65. 菅 大介、麻生 亮太郎、倉田 博基、島川 祐一、「圧縮及び引張ストレイン下における酸素八面体傾斜」、第61回応用物理学会春季学術講演会、相模原市、2014年3月18日
66. 麻生 亮太郎、菅 大介、島川 祐一、倉田 博基、「ペロブスカイト酸化物ヘテロ界面における A サイトカチオンサイズで制御された八面体傾斜の伝搬」、第61回応用物理学会春季学術講演会、相模原市、2014年3月18日
67. 真鍋 佳典、市川 能也、齊藤 高志、水牧 仁一朗、島川 祐一、「層状構造 GdBaFeMnO_5 及び GdBaFeMnO_6 の合成」、日本セラミックス協会 2014 年 年会、横浜市、2014年3月18日
68. 島川 祐一、遠山 武範、張 守宝、齊藤高志、M. W. Lufaso、P. M. Woodward、「ペロブスカイト構造酸化物の結晶構造予測: A サイト秩序型ペロブスカイト $\text{LnMn}_3\text{V}_4\text{O}_{12}$ での秩序—無秩序転移」、日本セラミックス協会 2014 年 年会、横浜市、2014年3月19日
69. 関 隼人、齊藤 高志、B. Kennedy、島川 祐一、「Na ドープ ARuO_3 ($\text{A} = \text{Sr}, \text{Ca}$)ペロブスカイ

トの高圧合成と物性変化」、日本化学会 春季年会、名古屋市、2014 年 3 月 27 日

70. 島川 祐一、陳 威廷、水牧 仁一朗、関 隼人、齋藤 高志、菅 大介、「完全スピン偏極伝導電子を有するハーフメタル $\text{CaCu}_3\text{Fe}_2\text{Re}_2\text{O}_{12}$ 」、日本化学会 春季年会、名古屋市、2014 年 3 月 27 日
71. 保坂 祥輝、市川 能也、齋藤 高志、水牧 仁一朗、島川 祐一、「 $\text{CaFe}_{1-x}\text{Mn}_x\text{O}_3$ における異常高原子価鉄イオン Fe^{4+} の電荷不均化」、日本化学会 春季年会、名古屋市、2014 年 3 月 27 日
72. 齋藤 高志、張 守宝、水牧 仁一朗、島川 祐一、「A サイト秩序型ペロブスカイト $\text{BiCu}_3\text{Cr}_4\text{O}_{12}$ における Cu-Cr サイト間電荷移動」、日本物理学会第 69 回年次大会、平塚市、2014 年 3 月 28 日
73. 藤井 将、豊田 雅之、靱田 浩義、水牧 仁一朗、木村 滋、小口 多美夫、「第一原理計算による AB サイト秩序型ペロブスカイト酸化物 $\text{CaCu}_3\text{Fe}_2\text{Sb}_2\text{O}_{12}$ の磁性の研究」、日本物理学会第 69 回年次大会、東海大学(湘南キャンパス)、2014 年 3 月 28 日
74. 黒崎 諒、菅 大介、大山 純、折笠 有基、内本 喜晴、島川 祐一、「ペロブスカイト Mn 酸化物エピタキシャル薄膜触媒を用いた酸素還元反応の活性評価」、電気化学会第 81 回大会、吹田市、2014 年 3 月 31 日
75. 黒崎 諒、菅 大介、大山 純、折笠 有基、内本 喜晴、島川 祐一 (若手優秀講演論文賞受賞)、「ペロブスカイト Mn 酸化物エピタキシャル薄膜触媒を用いた酸素還元反応の活性評価」、粉体粉末冶金協会 26 年度春季大会、早稲田、2014 年 6 月 5 日
76. 野崎 保将、矢島 健、吉宗 航、後藤 能宏、Cedric Tassel、山本 隆文、小林 洋治、陰山 洋、「新規層状ニクタイト水素化物の合成」、日本セラミックス協会 第 27 回秋季シンポジウム、鹿児島大学、2014 年 9 月 8 日
77. 山本 隆文、陰山 洋、「平面四配位鉄酸化物におけるカチオン置換効果」、日本セラミックス協会 第 27 回秋季シンポジウム、鹿児島大学、2014 年 9 月 8 日
78. 吉宗 航、Cédric Tassel、Guillaume Bouilly、寺嶋 孝仁、山本 隆文、小林 洋治、陰山 洋、「トポケミカル酸化反応による新規ペロブスカイト薄膜の合成」、日本セラミックス協会、第 27 回秋季シンポジウム、鹿児島大学、2014 年 9 月 8 日
79. 保坂 祥輝、市川 能也、齋藤 高志、水牧 仁一朗、治田 充貴、倉田 博基、P. Manuel、D. Khalyavin、J. P. Attfield、島川 祐一、「異常高原子価イオンを含んだ層状ダブルペロブスカイト $\text{Ca}_2\text{FeMnO}_6$ の結晶構造及び磁気構造」、日本セラミックス協会 第 27 回秋季シンポジウム、鹿児島市、2014 年 9 月 8 日
80. 秋月 康秀、齋藤 高志、水牧 仁一朗、島川 祐一、「新規ペロブスカイト酸化物 $\text{LaAgFe}_2\text{O}_6$ の合成、構造、物性」、日本セラミックス協会 第 27 回秋季シンポジウム、鹿児島市、2014 年 9 月 11 日
81. 真鍋 佳典、市川 能也、齋藤 高志、水牧 仁一朗、島川 祐一、「 GdBaMMnO_{5+d} ($\text{M} = \text{Fe}, \text{Co}$) の構造と物性評価」、日本セラミックス協会 第 27 回秋季シンポジウム、鹿児島市、2014 年 9 月 11 日
82. 関 隼人、齋藤 高志、島川 祐一、「ペロブスカイト構造 $\text{SrFe}_{0.5}\text{Ni}_{0.5}\text{O}_3$ の高圧合成と物性評価」、日本セラミックス協会 第 27 回秋季シンポジウム、鹿児島市、2014 年 9 月 11 日

83. 佐藤 理子、菅 大介、麻生 亮太郎、倉田 博基、島川 祐一、「酸化物ヘテロ構造中の酸素八面体傾斜の伝搬」、*応用物理学会秋季学術講演会*, 札幌市, 2014 年 9 月 19 日
84. 黒崎 諒、菅 大介、大山 純、折笠 有基、内本 喜晴、島川 祐一、「ペロブスカイト Mn 酸化物エピタキシャル薄膜触媒を用いた酸素還元反応の活性評価」、*応用物理学会秋季学術講演会*, 札幌市, 2014 年 9 月 19 日
85. 菅 大介、島川 祐一、「Pt/Nb-SrTiO₃ ショットキー接合における過渡的な振舞い」、*応用物理学会秋季学術講演会*, 札幌市, 2014 年 9 月 20 日
86. 佐藤 理子、菅 大介、麻生 亮太郎、倉田 博基、島川 祐一、「酸素八面体傾斜の伝搬を利用したペロブスカイト酸化物の相制御」、*粉体粉末冶金協会 秋季大会*, 豊中市, 2014 年 10 月 31 日
87. 真鍋 佳典、市川 能也、齊藤 高志、水牧 仁一朗、島川 祐一、「LaBaFeMnO_{5+δ} の構造と物性評価」、*粉体粉末冶金協会 秋季大会*, 豊中市, 2014 年 10 月 31 日
88. 平井 慧、菅 大介、市川 能也、麻生 亮太郎、倉田 博基、島川 祐一、「酸化物ヘテロ界面における室温近傍での酸素イオン伝導」、*応用物理学会 春季学術講演会*, 平塚, 2015 年 3 月 12 日
89. 馬場 枝里奈、菅 大介、島川 祐一、「Sr_{1-x}La_xSnO₃ 透明導電薄膜の作製」、*応用物理学会 春季学術講演会*, 平塚, 2015 年 3 月 12 日
90. 齊藤 高志、張 守宝、水牧 仁一朗、島川 祐一、「A サイト秩序型ペロブスカイト ACu₃Cr₄O₁₂ (A = La, Bi) の高圧合成と相転移」、*日本セラミックス協会 年会*, 岡山, 2015 年 3 月 19 日
91. 郭 海川、保坂 祥輝、関 隼人、齊藤高志、島川 祐一、「異常高原子価 Fe イオンを含んだ新規層状ペロブスカイト構造酸化物 LaCa₂Fe₃O₉」、*日本セラミックス協会 年会*, 岡山, 2015 年 3 月 19 日
92. 藤井 将、水牧 仁一朗、豊田 雅之、小口 多美夫、木村 滋、「AB サイト秩序型ペロブスカイト CaCu₃Fe₂Re₂O₁₂ の磁性の研究」、*日本物理学会*, 早稲田大学, 2015 年 3 月 21 日
93. 水牧 仁一朗、齊藤 高志、播木 敦、魚住 孝幸、張 守宝、島川 祐一、「X 線光電子分光による LaCu₃Cr₄O₁₂ における温度誘起サイト間電荷移動の直接観測」、*日本物理学会*, 早稲田大学, 2015 年 3 月 24 日
94. 齊藤 高志、張 守宝、水牧 仁一朗、P. Manuel、J. P. Attfield、島川 祐一、「A サイト秩序型ペロブスカイト ACu₃Cr₄O₁₂ (A = La, Bi) の磁気構造」、*日本物理学会 第 70 回年次大会*, 早稲田, 2015 年 3 月 24 日
95. 関 隼人、齊藤 高志、島川 祐一、「ペロブスカイト SrFe_{1-x}Ni_xO₃ の結晶構造と物性」、*日本化学学会 第 95 春季年会*, 船橋市, 2015 年 3 月 26 日
96. 保坂 祥輝、市川 能也、齊藤 高志、P. Manuel、D. Khalyavin、J. P. Attfield、島川 祐一、「新規ペロブスカイト層状物質の磁気構造と二次元電荷不均化」、*日本化学学会 第 95 春季年会*, 船橋市, 2015 年 3 月 26 日
97. 治田 充貴、保坂 祥輝、市川 能也、齊藤 高志、島川 祐一、倉田 博基、「STEM-EELS による原子分解能定量評価」、*日本顕微鏡学会 第 71 回学術講演会*, 京都市, 2015 年 5 月 14 日

98. 郭 海川、保坂 祥輝、関 隼人、齊藤 高志、市川 能也、島川 祐一、「新規層状ペロブスカイト構造酸化物 $\text{LaCa}_2\text{Fe}_3\text{O}_9$ の合成と物性」、*粉体粉末冶金協会 27 年度春季大会*, 早稲田, 2015 年 5 月 27 日
99. 関 隼人、齊藤 高志、島川 祐一、「高圧法により合成した新奇ペロブスカイト $\text{SrFe}_{1-x}\text{Ni}_x\text{O}_3$ 」、*粉体粉末冶金協会 27 年度春季大会*, 早稲田, 2015 年 5 月 27 日
100. 菅 大介、折笠 有基、新田 清文、谷田 肇、佐々木 貴大、郭 海川、尾崎 祐介、内本 喜晴、島川 祐一、「 $\text{La}_{0.67}\text{Sr}_{0.33}\text{MnO}_3$ エピタキシャル薄膜をモデル電極とした酸素還元反応触媒活性の評価」、*第 76 回 応用物理学会秋季学術講演会*, 名古屋市, 2015 年 9 月 14 日
101. 保坂 祥輝、市川 能也、齊藤 高志、島川 祐一、「 $\text{CaFe}_{1-x}\text{M}_x\text{O}_3$ ($\text{M} = \text{Mn}, \text{Ti}$) における異常高原子価イオン Fe^{4+} の電荷不均化」、*日本セラミックス協会 第 28 回秋季シンポジウム*, 富山市, 2015 年 9 月 16 日
102. 郭 海川、保坂 祥輝、関 隼人、齊藤 高志、市川 能也、島川 祐一、「ペロブスカイト構造酸化物 $\text{LaCa}_2\text{Fe}_3\text{O}_9$ における A サイト秩序/無秩序配列の構造と磁気特性への影響」、*日本セラミックス協会 第 28 回秋季シンポジウム*, 富山市, 2015 年 9 月 16 日
103. 熊 鵬、関 隼人、郭 海川、保坂 祥輝、齊藤 高志、島川 祐一、「異常高原子価 Fe^{5+} イオンを含んだダブルペロブスカイト酸化物の合成とその物性」、*日本セラミックス協会 第 28 回秋季シンポジウム*, 富山市, 2015 年 9 月 16 日
104. 水牧 仁一朗、藤井 将、河村 直己、富岡 泰秀、「ダブルペロブスカイト酸化物 $\text{Ca}_2\text{TMReO}_6$ ($\text{TM} = \text{Cr-Ni}$) の Re の電子状態の TM イオン依存性」、*日本物理学会、関西大学*, 2015 年 9 月 19 日
105. 藤井 将、水牧 仁一朗、木村 滋、豊田 雅之、小口 多美夫、「第一原理計算による AB サイト秩序型ペロブスカイト $\text{CaCu}_3\text{Fe}_2\text{Re}_2\text{O}_{12}$ の Re-L 端 XMCD スペクトルの解析」、*日本物理学会、関西大学*, 2015 年 9 月 19 日
106. 馬場 枝里奈、菅 大介、山田 泰裕、治田 充貴、倉田 博基、金光 義彦、島川 祐一、「高い移動度をもつ透明導電性酸化物(Sr, La) SnO_3 の作製」、*粉体粉末冶金協会 秋季大会*, 京都市, 2015 年 11 月 12 日
107. 熊 鵬、市川 能也、齊藤 高志、菅 大介、保坂 祥輝、島川 祐一、「新規酸化物 $\text{Ba}_2\text{LaGaO}_5$ の合成と結晶構造」、*日本セラミックス協会 年会*, 早稲田, 2016 年 3 月 15 日
108. 市川 能也、島川 祐一、Serena Corallini, Monica Cretti, Werner Paulus、「Sc と Ga を含むペロブスカイト構造酸化物の酸素イオン伝導性」、*日本セラミックス協会 年会*, 早稲田, 2016 年 3 月 15 日
109. 保坂 祥輝、市川 能也、齊藤 高志、島川 祐一、「異常高原子価 $\text{Fe}^{3.5+}$ を含んだ $\text{Ca}_{0.5}\text{Bi}_{0.5}\text{FeO}_3$ の逐次相転移」、*日本セラミックス協会 年会*, 早稲田, 2016 年 3 月 15 日
110. 西村 幸恵、菅 大介、島川 祐一、「端面制御した $\text{La}_{0.67}\text{Sr}_{0.33}\text{MnO}_3$ エピタキシャル薄膜を用いた酸素還元反応触媒活性評価」、*応用物理学会 春季学術講演会*, 大岡山, 2016 年 3 月 19 日
111. 菅 大介、若林 裕助、田尻 寛男、島川 祐一、「放射光 X 線回折を利用した酸化物へテロ構造中の酸素八面体傾斜の評価」、*応用物理学会 春季学術講演会*, 大岡山, 2016 年 3 月 20 日

112. 平野 裕理、山内 邦彦、小鷹 浩毅、小口 多美夫、「グラフェンにおける電子状態トポロジーへの積層構造の影響」、*日本物理学会*、東北学院大学、2016 年 3 月 19 日
113. 山本隆文、松本勇輝、竹入史隆、林直顕、陰山洋、「新規層状オキシカルコゲナイド化合物の合成と磁性」、*日本物理学会 第 71 回年次大会*、東北学院大学、2016 年 3 月 21 日
114. 村上泰斗、山本隆文、Cédric Tassel、高津浩、小林洋治、網代芳民、陰山洋、「新規層状アンチモン化合物の合成と磁気物性」、*日本物理学会 第 71 回年次大会*、東北学院大学、2016 年 3 月 21 日
115. 齊藤 高志、J. P. Attfield、島川 祐一、「A サイト秩序型ペロブスカイト $\text{LaCu}_3\text{Cr}_4\text{O}_{12}$ の反強磁性金属状態」、*日本物理学会 第 71 回年次大会*、仙台、2016 年 3 月 22 日
116. 松本勇輝、山本隆文、竹入史隆、林 直顕、陰山 洋、松本勇輝、山本隆文、竹入史隆、林 直顕、陰山 洋、*日本化学会第 96 春季年会*、同志社大学、2015 年 3 月 25 日
117. 郭 海川、保坂 祥輝、関 隼人、齊藤 高志、市川 能也、島川 祐一、「A サイト層状秩序/無秩序構造酸化物 $\text{LaCa}_2\text{Fe}_3\text{O}_9$ (1): 合成と電荷不均化転移」、*日本化学会 第 96 春季年会*、京田辺市、2015 年 3 月 25 日
118. 保坂 祥輝、郭 海川、齊藤 高志、市川 能也、Pascal Manuel、Dmitry Khalyavin、Angel Arevalo Lopez、J. Paul Attfield、島川 祐一、「A サイト層状秩序/無秩序構造酸化物 $\text{LaCa}_2\text{Fe}_3\text{O}_9$ (2): 磁気構造解析」、*日本化学会 第 96 春季年会*、京田辺市、2015 年 3 月 25 日

〈国際〉

1. K. Matsumoto, “Artificial superlattice thin films of FeO_2 infinite-layer structures”, *Japan-UK-Taiwan meeting “Synthesis and Properties of New Functional Materials”*, Kyoto, Japan, Jan. 12, 2012.
2. N. Ichikawa, “Low temperature reduction of nickel oxides in perovskite-related structures”, *Japan-UK-Taiwan meeting “Synthesis and Properties of New Functional Materials”*, Kyoto, Japan, Jan. 12, 2012.
3. T. Tohyama, “Cation stoichiometry of A-site ordered perovskites $\text{La}_{1-x}\text{Na}_x\text{Mn}_3\text{Ti}_4\text{O}_{12}$ ”, *Japan-UK-Taiwan meeting “Synthesis and Properties of New Functional Materials”*, Kyoto, Japan, Jan. 12, 2012.
4. S. Zhang, “Structural, magnetic and transport properties of high-pressure synthesized $\text{AMn}_3\text{V}_4\text{O}_{12}$ (A= Na, Ca and La)”, *Japan-UK-Taiwan meeting “Synthesis and Properties of New Functional Materials”*, Kyoto, Japan, Jan. 12, 2012.
5. W. T. Chen, “Synthesis and magnetic behaviors of new A- and B-site ordered double perovskites $\text{CaCu}_3\text{Fe}_2\text{B}_2\text{O}_{12}$ ”, *Japan-UK-Taiwan meeting “Synthesis and Properties of New Functional Materials”*, Kyoto, Japan, Jan. 12, 2012.
6. M. Koder and T. Oguchi, First-principles calculations for pressure-induced transition of Sr_2CuO_3 , *APS March Meeting 2012*, Boston , USA, February 29, 2012.
7. T. Ueda, M. Koder, K. Yamauchi, and T. Oguchi, “First-principles calculation of the A-site ordered perovskite $\text{CaCu}_3\text{Fe}_4\text{O}_{12}$ ”, *International Conference of Magnetism (ICM2012)*, Busan,

Korea, Jul. 8, 2012.

8. K. Yamauchi and S. Picozzi, “First-Principles Calculation of Multiferroic Bilayer Manganite”, *International Conference of Magnetism (ICM2012)/Strongly Correlated Electron Systems (SCES2012)*, Busan, Korea, Jul. 8, 2012.
9. M. Mizumaki, T. Saito, T. Uozumi, and Y. Shimakawa, “X-ray spectroscopic studies of A-site ordered perovskite $\text{LaMn}_3\text{B}_4\text{O}_{12}$ (B=V, Cr)”, *XAFS theory and nano-particles*, Chiba, Japan, Jul. 18, 2012.
10. W. -T. Chen, T. Saito, M. Mizumaki, and Y. Shimakawa (**selected poster presentation**), “Structural and physical properties of A- and B-sites ordered double perovskites $\text{CaCu}_3\text{Fe}_2\text{B}_2\text{O}_{12}$ ”, *Gordon Research Conferences on Solid State Chemistry*, New London, NH, USA, Jul. 22, 2012.
11. W. -T. Chen, T. Saito, M. Mizumaki, and Y. Shimakawa, “High-Pressure Synthesis of Novel A- and B-site Ordered Double Perovskite $\text{CaCu}_3\text{Fe}_2\text{M}_2\text{O}_{12}$ (M = Nb, Ta, Sb and Re)”, *IUCr Commission on High Pressure 2012 Meeting "Advances in Crystallography at High Pressures"*, Mito, Japan, Sep. 25, 2012.
12. Y. Shimakawa, W. -T. Chen, and T. Saito, “New A-site ordered perovskite-structure oxides with intriguing functional properties”, *Powder Metallurgy World Congress (PM2012)*, Yokohama, Japan, Oct. 16, 2012.
13. T. Tohyama, T. Saito, and Y. Shimakawa, “Material Design, Synthesis and Magnetic Properties of Novel A-Site-Ordered Perovskites $\text{AMn}_3\text{Al}_4\text{O}_{12}$ ”, *Powder Metallurgy World Congress (PM2012)*, Yokohama, Japan, Oct. 16, 2012.
14. K. Hirai, D. Kan, N. Ichikawa, and Y. Shimakawa, “Epitaxial Growth of Brownmillerite-structure $\text{Sr}_{1-x}\text{La}_x\text{FeO}_{2.5}$ Thin Films”, *Powder Metallurgy World Congress (PM2012)*, Yokohama, Japan, Oct. 16, 2012.
15. G. Hasegawa, T. Sato, K. Kanamori, Y. Kobayashi, H. Kageyama, K. Nakanishi, and T. Abe, “Pre-ceramic Polymer Route to Macroporous Monoliths Based on N-Doped Reduced Titanium Oxides”, *Hybrid Materials 2013*, Sorrento, Italy, Mar. 7, 2013.
16. M. Toyoda, K. Yamauchi, and T. Oguchi, “Ab initio study on magnetic coupling in A-site-ordered perovskite $\text{CaCu}_3\text{B}_4\text{O}_{12}$ (B=Ti, Ge, Zr, and Sn)”, *APS March Meeting*, Baltimore, USA, Mar. 18, 2013.
17. R. Aso, D. Kan, Y. Shimakawa, and H. Kurata, “A-site Cation-dependent Accommodation of Octahedral Tilt in ATiO_3 Films”, *The First East-Asia Microscopy Conference (EAMC-1)*, Chongqing, China, Oct. 15 (2013).
18. Y. Shimakawa, W. -T. Chen, T. Saito, and M. Mizumaki, “Multiple magnetic interactions in novel A-and-B-site-ordered quadruple perovskite-structure oxides”, *MRS (Materials Research Society) Fall meeting*, Boston, USA, Dec. 5, 2013.
19. M. Toyoda, K. Yamauchi, and T. Oguchi, “Noncollinear magnetic order in quadruple perovskite $\text{LaMn}_3\text{V}_4\text{O}_{12}$ ”, *APS March Meeting 2014*, Denver, USA, Mar. 6, 2014.
20. D. Kan, R. Aso, H. Kurata, and Y. Shimakawa, “Phase Control of a Transition-Metal Oxide

- through Oxygen Octahedral Connectivity”, *2014 MRS Spring Meeting*, San Francisco, USA, Apr. 24, 2014.
21. K. Hirai, D. Kan, N. Ichikawa, K. Mibu, Y. Yoda, and Y. Shimakawa, “Metal-Insulator Transition in $\text{SrFeO}_{2.875}$ Epitaxial Thin Films”, *2014 MRS Spring Meeting*, San Francisco, USA, Apr. 25, 2014.
 22. H. Kageyama, “New Materials (Summary Talk)”, *OIST International Workshop on Novel Quantum Materials and Phases*, Okinawa, Japan, May 17, 2014.
 23. Y. Hosaka, “Double perovskite $\text{Ca}_2\text{FeMnO}_6$ with two-dimensional layered arrangement of Fe^{4+} ”, *Workshop on Novel Functional Oxides*, Kyoto, Japan, Jul. 8, 2014.
 24. H. Seki, “High pressure synthesis of $\text{SrFe}_{1-x}\text{Ni}_x\text{O}_y$ ”, *Workshop on Novel Functional Oxides*, Kyoto, Japan, Jul. 8, 2014.
 25. Y. Akizuki, “High-pressure synthesis of novel perovskite oxides containig A-site transition metals”, *Workshop on Novel Functional Oxides*, Kyoto, Japan, Jul. 8, 2014.
 26. K. Hirai, “Metal-insulator transition in $\text{SrFeO}_{2.8}$ epitaxial thin film”, *Workshop on Novel Functional Oxides*, Kyoto, Japan, Jul. 9, 2014.
 27. M. Toyoda, K. Yamauchi, T. Oguchi, “A-site magnetic ordering in quadruple perovskite oxides”, *APS March Meeting 2015*, San Antonio, Texas, US, Mar. 2–6, 2015.
 28. K. Yamauchi, P. Barone, S. Picozzi, “Rashba splitting and spin-valley coupling in ferroelectric oxides”, *Psi-k 2015 conference*, San Sebastian, Spain, Sep. 6-10, 2015.
 29. T. Yamamoto, T. Kawakami, M. Mizumaki, T. Okada, and H. Kageyama, “Intersite Charge Transfer Transition in a Square Planar Coordinated Iron Oxide”, *The 9th International Conference on the Science and Technology for Advanced Ceramics (STAC-9)*, Tsukuba, Japan, Oct 19, 2015
 30. H. Lu, N. Hayashi, H. Kageyama, “A Nearly-Ideal One-Dimensional $S = 5/2$ Antiferromagnet $\text{FeF}_3(4,4'\text{-bipyrdyl})$ ”, *The 9th International Conference on the Science and Technology for Advanced Ceramics (STAC-9)*, Tsukuba, Japan, Oct 20, 2015
 31. T. Yamamoto, T. Kawakami, M. Mizumaki, T. Okada, and H. Kageyama, “Intersite Charge Transfer Transition in a Square Planar Coordinated Iron Oxide”, *The 9th International Conference on the Science and Technology for Advanced Ceramics (STAC-9)*, Tsukuba, Japan, Oct 19, 2015
 32. H. Seki, T. Saito, and Y. Shimakawa, “High pressure synthesis of $\text{SrFe}_{1-x}\text{Ni}_x\text{O}_3$ ”, *3rd International Conference of Powder Metallurgy in Asia (APMA2015)*, Kyoto, Japan, Nov. 9, 2015
 33. Y. Hosaka, N. Ichikawa, T. Saito, P. Manuel, D. Khalyavin, J.P. Attfield, and Y. Shimakawa, “A layered double perovskite $\text{Ca}_2\text{FeMnO}_6$ with unusually high valence Fe^{4+} ”, *3rd International Conference of Powder Metallurgy in Asia (APMA2015)*, Kyoto, Japan, Nov. 9, 2015
 34. H. Guo, Y. Hosaka, H. Seki, T. Saito, N. Ichikawa, and Y. Shimakawa, “A new layered perovskite oxide with unusually high valence iron, $\text{LaCa}_2\text{Fe}_3\text{O}_9$ ”, *3rd International Conference of Powder Metallurgy in Asia (APMA2015)*, Kyoto, Japan, Nov. 9, 2015

35. T. Murakami, H. Kageyama, T. Yamamoto, “Magnetic and Thermoelectric Properties New Antimonide with CaAl_2Si_2 -type Structure”, *Pacificchem 2015*, Hawaii, USA, Dec 18, 2015
36. N. Ichikawa, S. Corallini, M. Ceretti, W. Paulus, and Y. Shimakawa, “Oxide-ion conduction in brownmillerite and perovskite $\text{Sr}_2\text{ScGaO}_5$ ”, *Pacificchem 2015*, Honolulu, USA, Dec. 18, 2015
37. T. Saito, S. Zhang, M. Toyoda, T. Oguchi, C. Ritter, J. P. Attfield, and Y. Shimakawa, “A-site magnetism in the Mn-spin sublattice of A-site ordered perovskites $\text{AMn}_3\text{B}_4\text{O}_{12}$ ”, *Pacificchem 2015*, Honolulu, USA, Dec. 19, 2015
38. T. Yamamoto, T. Kawakami, T. Yajima, T. Okada, H. Kageyama, “Collapse Transition in Early Transition Metal Pnictide”, *Pacificchem 2015*, Hawaii, USA, Dec 19, 2015
39. H. Lu, H. Kageyama, “Novel Low-dimensional Magnets Prepared by Hydro(solvo)thermal Method”, *Pacificchem 2015*, Hawaii, USA, Dec 19, 2015
40. C. Tassel, Y. Goto, Y. Kuno, Y. Kobayashi, H. Kageyama, “High Pressure Synthesis, Structure, and Magnetic Properties of Novel Perovskite Oxyhydrides” *Pacificchem 2015*, Hawaii, USA, Dec 20, 2015
41. P. Xiong, “Geometrical spin frustration of unusual high valence Fe^{5+} in the double perovskite $\text{La}_2\text{LiFeO}_6$ ”, *International workshop on recent progress in solid state chemistry*, Kyoto, Japan, Mar. 9, 2016
42. Y. Hosaka, “Double perovskite $\text{Ca}_2\text{FeMnO}_6$ with two-dimensional layered arrangement of Fe^{4+} ”, *International workshop on recent progress in solid state chemistry*, Kyoto, Japan, Mar. 9, 2016
43. G. Haichuan, “New perovskite-type oxides $\text{LaCa}_2\text{Fe}_3\text{O}_9$ with A-site layered order/disorder structures”, *International workshop on recent progress in solid state chemistry*, Kyoto, Japan, Mar. 9, 2016
44. D. Kan, R. Aso, R. Sato, M. Haruta, H. Kurata, and Y. Shimakawa, “Tuning magnetic anisotropy by interfacially engineering the oxygen coordination environment in a transition-metal oxide”, *2016 MRS Spring Meeting*, Phoenix, USA, Mar. 31 (2016).

③ ポスター発表 (国内会議 17 件、国際会議 25 件)

1. 竹入 史隆、矢島 健、辻本 将彦、小林 洋治、高野 幹夫、陰山 洋、「フッ化物イオンを挿入した Pt 酸化物の構造および物性」、日本セラミックス協会秋季シンポジウム、北海道大学、北海道、2011 年 9 月 7 日
2. 北田 敦、辻本 吉廣、松尾 晶、王 俊峰、金道 浩一、吉村 一良、小林 洋治、網代 芳民、陰山 洋、「二次元量子磁性体(MCl) LaNb_2O_7 (M = Co, Cr)の磁化過程」、日本物理学会秋季大会、富山大学、富山、2011 年 9 月 21 日
3. 松本 和也、平井 慧、市川 能也、菅 大介、島川 祐一、「無限層構造 AFeO_2 (A = Sr, Ca) への酸素取り込みによる酸化過程」、日本セラミックス協会 第 25 回秋季シンポジウム、名古屋市、2012 年 9 月 19 日
4. 豊田 雅之、山内 邦彦、小口 多美夫、「A サイト秩序型ペロブスカイト $\text{YMn}_3\text{B}_4\text{O}_{12}$ (B = Al, Sc)の磁性についての第一原理計算」、日本物理学会、横浜国立大学、2012 年 9 月 21 日

5. 山本 隆文,「平面四配位鉄酸化物の構造と物性」, 日本学術会議シンポジウム「物性物理学・一般物理学の未来を語る」, 日本学術講義堂, 2013 年 1 月 15 日
6. 磯山 佳甫, 豊田 雅之, 山内 邦彦, 小口 多美夫,「第一原理計算による $\text{LaCu}_3\text{Fe}_4\text{O}_{12}$ の電子状態」, 日本物理学会, 広島大学, 2013 年 3 月 29 日
7. 豊田雅之, 山内邦彦, 小口多美夫,「A サイト秩序型ペロブスカイト $\text{CaCu}_3\text{B}_4\text{O}_{12}$ (B = Ge, Ti, Sn, Zr)の磁氣的相互作用」, 日本物理学会, 広島大学, 2013 年 3 月 29 日
8. 麻生 亮太郎, 荻本 真央, 平井 慧, 菅 大介, 根本 隆, 島川 祐一, 倉田 博基,「走査型透過電子顕微鏡による遷移金属酸化物薄膜の格子歪み解析」, 日本顕微鏡学会第 69 回学術講演会, ホテル阪急エキスポパーク, 2013 年 5 月 20 日
9. 山口 淳太, 川上 隆輝, 山本 隆文, 小林 洋治, 陰山 洋,「平面四配位構造をとる $\text{Sr}_{0.7}\text{Eu}_{0.3}\text{FeO}_2$ の圧力誘起のサイト間電荷移動」, 日本物理学会 2013 年秋季大会, 徳島大学, 2013 年 9 月 25 日
10. 麻生 亮太郎,「 ATiO_3 薄膜における TiO_6 八面体傾斜の A サイトカチオン依存性」, 日本顕微鏡学会・関西支部若手の会, KKR ホテルびわこ, 2013 年 12 月 7 日
11. 磯山佳甫, 豊田雅之, 山内邦彦, 小口多美夫,「第一原理計算による $\text{LaCu}_3\text{Fe}_4\text{O}_{12}$ の電子状態」, 日本物理学会, 東海大学, 2014 年 3 月 28 日
12. 水牧 仁一朗,「硬 X 線光電子分光でみた A サイト規則化ペロブスカイト酸化物 $\text{CaCu}_3\text{B}_4\text{O}_{12}$ (B = Ti~Co)の電子状態」, 日本物理学会, 中部大学, 2014 年 9 月 9 日
13. 保坂 祥輝, 市川 能也, 齊藤 高志, P. Manuel, D. Khalyavin, 治田 充貴, 倉田 博基, J. P. Attfield, 島川 祐一 (優秀ポスター賞 受賞),「2 次元に配列した異常高原子価 Fe^{4+} を含む新奇層状ペロブスカイト」, 第 4 回 CSJ 化学フェスタ 2014, 東京都, 2014 年 10 月 15 日
14. 後藤 能宏, Cedric Tassel, 久野 禎記, 小林 洋治, 山本 隆文, 陰山 洋 (優秀ポスター賞 受賞)「高い TN をもつ新規酸水素化物 SrCrO_2H : アニオンによる物性制御」, 第 4 回 CSJ 化学フェスタ 2014, 東京都, 2014 年 10 月 16 日
15. 関 隼人, 齊藤 高志, 島川 祐一 (優秀ポスター賞 受賞),「ペロブスカイト $\text{SrFe}_{1-x}\text{Ni}_x\text{O}_3$ のイオン価数状態と磁気特性」, 第 4 回 CSJ 化学フェスタ 2014, 東京都, 2014 年 10 月 16 日
16. 郭 海川, 保坂 祥輝, 関 隼人, 齊藤 高志, 市川 能也, 島川 祐一,「異常高原子価 Fe イオンを含んだ新規 A サイト層状ペロブスカイト構造酸化物 $\text{LaCa}_2\text{Fe}_3\text{O}_9$ の合成とその特異な電荷不均化転移」, 第 5 回 CSJ 化学フェスタ 2015, 東京都, 2015 年 10 月 13 日
17. 馬場 枝里奈, 菅 大介, 島川 祐一,「 $\text{Sr}_{1-x}\text{La}_x\text{SnO}_3$ 透明導電薄膜の作製と TCO 性能評価」, 第 5 回 CSJ 化学フェスタ 2015, 東京都, 2015 年 10 月 15 日

〈国際〉

1. H. Kageyama,“(CuBr) $\text{Sr}_2\text{Nb}_3\text{O}_{10}$ with a 1/3 magnetization plateau”, *MEXT/CIFAR Program on Frustrated Magnetic and Other Systems*, Vancouver, Canada, May 2, 2011.
2. D. Kan, “Structural transition of epitaxial (110) SrRuO_3 thin films grown on SrTiO_3 substrates”, *18th International Workshop on Oxide Electronics*, Napa Valley, California, USA, Sep. 27, 2011.

3. K. Yamauchi, "Theoretical studies on non-linear magnetoelectric effects induced by single-site spin-orbit coupling", *SPINTECH6*, Matsue, Japan, Aug. 1, 2011.
4. T. Saito, "A-site-ordered perovskite $\text{ACu}_3\text{B}_4\text{O}_{12}$ ", *UK-Japan Meeting 2012 in Tokyo*, Tokyo, Japan, Jan. 10, 2012.
5. W. T. Chen, "High-pressure synthesis and magnetic properties of new A- and B-site ordered double perovskites $\text{Cu}_3\text{Fe}_2\text{B}_2\text{O}_{12}$ ", *UK-Japan Meeting 2012 in Tokyo*, Tokyo, Japan, Jan. 10, 2012.
6. T. Yamamoto, C. Tassel, Y. Kobayashi, T. Kawakami, T. Okada, T. Yagi, H. Yoshida, T. Kamatani, Y. Watanabe, T. Kikegawa, M. Takano, K. Yoshimura, H. Kageyama, "Pressure-induced structural, magnetic and transport transitions in the two-legged ladder $\text{Sr}_3\text{Fe}_2\text{O}_5$ ", *American Physical Society (APS) March Meeting*, Boston, USA, Feb. 27, 2012.
7. K. Yamauchi and S. Picozzi (**Poster Award**), "Electronic structure and magnetoelectric effect in magnetite", *Psi-k Research Conference on Computational Oxide Spintronics*, Cheshire, UK, May 7, 2012.
8. C. Tassel and H. Kageyama, "Negative Thermal Expansion of $(\text{Sr,Ca})\text{FeO}_2$ with FeO_4 Square Planes", *4th International Symposium on Structure-Property Relationships in Solid State Materials (SPSSM-2012)*, Bordeaux, France, Jun. 26, 2012.
9. Y. Shimakawa, W. -T. Chen, T. Saito, N. Hayashi, and M. Takano, "Charge disproportionation and charge transfer in A-site-ordered perovskite-structure oxides with unusually high-valence Fe", *Gordon Research Conferences on Solid State Chemistry*, New London, NH, USA, Jul. 22, 2012.
10. M. Mizumaki, T. Saito, T. Uozumi, and Y. Shimakawa, "Electronic structure of Cu in ferromagnetic $\text{CaCu}_3\text{Sn}_4\text{O}_{12}$ ", *XXIst International Symposium on the Jahn-Teller Effect (JT2012)*, Tsuluba, Japan, Aug. 26, 2012.
11. R. Aso, D. Kan, Y. Shimakawa, and H. Kurata (**Poster Competition 1st PRIZE**), "Quantitative strain analysis of BaTiO_3 epitaxial thin films using Cs-TEM and STEM-EELS", *15th European Microscopy Congress (EMC2012)*, Manchester, UK, Sep. 16, 2012.
12. Y. Shimakawa, "A-site-ordered perovskite-structure oxides with intriguing properties", *Goodenough 90th Birthday Symposium "Transition-metal Oxides: Fundamental Chemistry and Physics to Designing Materials for Energy Storage"*, Austin, TX, USA, Oct. 26, 2012.
13. G. Bouilly, C. Tassel, Y. Kobayashi, and H. Kageyama, "An Unusually Reduced Cobalt Oxide", *JAEA Synchrotron Radiation Research Symposium, "Magnetism in Quantum Beam Science"*, SPring-8, Hyogo, Japan, Mar. 12, 2013.
14. M. Mizumaki, T. Saito, T. Uozumi, and Y. Shimakawa, "V-3d electronic states for $\text{CaA}_3\text{V}_4\text{O}_{12}$ ($\text{A} = \text{Mn}, \text{Cu}$) using XAS and XPS", *The International conference on Strongly Correlated Electrons Systems*, The Univ. of Tokyo, Aug. 7, 2013.
15. S. B. Zhang, T. Saito, M. Mizumaki, W. -T. Chen, T. Tohyama, and Y. Shimakawa, "Site-selective doping effect in $\text{AMn}_3\text{V}_4\text{O}_{12}$ ($\text{A} = \text{Na}^+, \text{Ca}^{2+}$, and La^{3+})", *The 3rd International Conference on MEXT Project of Integrated Research on Chemical Synthesis: Synergy of Theory*

and Molecular Transformation, Fukuoka, Japan, Jan. 10, 2014.

16. T. Yamamoto, “Pressure-induced Charge Transfer Transition in a Square Planar Iron Oxide”, *OIST International Workshop on Novel Quantum Materials and Phases*, Okinawa, Japan, May 15, 2014.
17. K. Hirai, D. Kan, N. Ichikawa, K. Mibu, Y. Yoda, and Y. Shimakawa, “Metal-insulator transition in $\text{SrFeO}_{2.8}$ epitaxial thin films”, *The 4th International Conference on MEXT Project of Integrated Research on Chemical Synthesis*, Kyoto, Japan, Jul. 11, 2014.
18. H. Seki, R. Yamada, T. Saito, B. J. Kennedy, and Y. Shimakawa, “High-concentration Na doping of SrRuO_3 and CaRuO_3 ”, *The 4th International Conference on MEXT Project of Integrated Research on Chemical Synthesis*, Kyoto, Japan, Jul. 11, 2014.
19. Y. Hosaka, N. Ichikawa, T. Saito, M. Mizumaki, P. Manuel, D. Khalyavin, J. P. Attfield, and Y. Shimakawa, “Double perovskite $\text{Ca}_2\text{FeMnO}_6$ with layered alignment of unusually high valent cation Fe^{4+} ”, *The 4th International Conference on MEXT Project of Integrated Research on Chemical Synthesis*, Kyoto, Japan, Jul. 11, 2014.
20. K. Yamauchi, P. Barone, T. Shishidou, T. Oguchi, S. Picozzi, “Theoretical prediction of spin-valley coupling in 5d transition-metal oxides”, *20th International conference on magnetism (ICM)*, Barcelona, Spain, July 5-10, 2015.
21. M. Toyoda, K. Yamauchi, T. Oguchi, “Magnetic Exchange Interaction between A'-site transition-metal ions in A-site-ordered Perovskites”, *The 20th International Conference on Magnetism (ICM)*, Barcelona, Spain, July 5-10, 2015.
22. M. Toyoda, K. Yamauchi, T. Oguchi, “3d-5d exchange interaction in quadruple perovskites $\text{AMn}_3\text{B}_4\text{O}_{12}$ ”, *Psi-k 2015 conference*, San Sebastian, Spain, Sep. 6-10, 2015.
23. M. Haruta, Y. Hosaka, N. Ichikawa, T. Saito, Y. Shimakawa, and H. Kurata, “Local electronic structure Analysis for brownmillerite $\text{CaFeMnO}_{2.5}$ ”, *The 2nd East-Asia Microscopy Conference*, Himeji, Japan, Nov. 25, 2015.
24. P. Xiong, H. Seki, H. Guo, Y. Hosaka, T. Saito, and Y. Shimakawa, “A double-perovskite structure oxide with unusual high valence Fe^{5+} ”, *The 5th International Conference on MEXT Project of Integrated Research on Chemical Synthesis “Chemical Science for Future Societies”*, Nagoya, Japan, Jan. 19, 2016.
25. N. Ichikawa, S. Corallini, W. Paulus, and Y. Shimakawa, “Oxide-ion conduction in polymorphic Sr-Sc-Ga-O compounds”, *Institute for Chemical Research International Symposium 2016 (ICRIS'16)*, Kyoto, Japan, Mar. 7, 2016.

(4)知財出願

①国内出願 (1 件)

1. 「マクロ多孔性チタン化合物モノリスとその製造方法」、陰山 洋 中西 和樹 小林 洋治 北田 敦 長谷川 丈二、京都大学、2013 年 2 月 17 日出願、2012-032411

②海外出願 (1 件)

1. 「マクロ多孔性チタン化合物モノリスとその製造方法」、陰山 洋 中西 和樹 小林 洋治 北田 敦 長谷川 丈二、独立行政法人科学技術振興機構、2013 年 2 月 18 日、13748592.6、米国・EP

③その他の知的財産権

(5)受賞・報道等

①受賞

1. 菅 大介、応用物理学会 第 31 回(2011 年秋季)応用物学会講演奨励賞:「 SrRuO_3 エピタキシャル薄膜の構造相転移:薄膜ナノ構造におけるストレイン効果」、2012 年 3 月 15 日
2. * 島川 祐一、日本化学会 第 29 回学術賞:「新規機能性酸化物の創製と構造・物性評価に関する研究」、2012 年 3 月 26 日
3. Y. Shimakawa and T. Saito, “**Best of pss 2013**”: “A-site magnetism in A-site-ordered perovskite-structure oxides”, *Physica Status Solidi B*, 249, 423-434, 2012
4. 清水 卓也、菅 大介、島川 祐一、若手優秀講演論文賞 受賞:「Pt と Nb- SrTiO_3 薄膜からなるショットキー接合の電流-電圧特性」、粉体粉末冶金協会 秋季大会, 2012 年 11 月 21 日
5. R. Aso, D. Kan, Y. Shimakawa, and H. Kurata, **Poster Competition 1st PRIZE**: “Quantitative strain analysis of BaTiO_3 epitaxial thin films using Cs-TEM and STEM-EELS”, *15th European Microscopy Congress (EMC2012)*, Manchester, UK, Sep. 16, 2012
6. 森吉 千佳子、平本 尚三、大久保 寿紀、大沢 仁志、杉本 邦久、木村 滋、高田 昌樹、北中 佑樹、野口 祐二、宮山 勝、第 34 回応用物理学会論文賞(応用物理学会優秀論文賞): 2012 年 9 月 11 日
7. Yamauchi and S. Picozzi, **Poster Award**: K “Electronic structure and magnetoelectric effect in magnetite”, *Psi-k Research Conference on Computational Oxide Spintronics*, Cheshire, UK, May 7, 2012
8. 陰山 洋、平成24年度大阪スマートエネルギービジネスシーズコンペ 基礎技術部門 最優秀賞:「ヒドリドを利用した次世代エネルギー材料に向けての基板技術開発」、2013 年 2 月 27 日
9. 麻生 亮太郎、菅 大介、島川 祐一、倉田 博基、応用物理学会 講演奨励賞受賞:「 SrRuO_3 エピタキシャル薄膜の走査型透過電子顕微鏡による局所構造・歪み解析」、第 60 回応用物理学会春季学術講演会、2013 年 3 月 28 日
10. 村上 永晃、菅 大介、市川 能也、島川 祐一、若手優秀講演論文賞 受賞:「 $\text{LaAlO}_3/\text{CaFeO}_{2.5}/\text{SrTiO}_3$ ヘテロ構造における CaH_2 低温還元反応中の酸素イオン拡散」、粉体粉末冶金協会 25 年度春季大会, 2013 年 5 月 28 日
11. 陰山 洋、19th International Conference on Solid State Ionics 最優秀ポスター賞; 2013 年 6 月

12. 正直 花奈子、花田 貴、崔 正焄、島田 貴章、今井 康彦、木村 滋、谷川 智之、片山 竜二、松岡 隆志、**第 74 回応用物理学会秋季学術講演会 Poster Award**:2013 年 9 月
13. * 陰山 洋、**第 10 回日本学術振興会賞**、2014 年 2 月
14. 齊藤 高志、島川 祐一、**粉体粉末冶金協会 第 38 回研究進歩賞**:「高圧合成を中心とした新規機能性酸化物材料の合成」、2014 年 6 月 3 日
15. 黒崎 諒、**粉体粉末冶金協会 26 年度春季大会若手優秀講演論文賞**:「ペロブスカイト Mn 酸化物エピタキシャル薄膜触媒を用いた酸素還元反応の活性評価」、2014 年 6 月
16. 保坂 祥輝、**第 4 回 CSJ 化学フェスタ 2014 優秀ポスター賞**:「2 次元に配列した異常高原子価 Fe^{4+} を含む新奇層状ペロブスカイト」、2014 年 10 月
17. 関 隼人、**第 4 回 CSJ 化学フェスタ 2014 優秀ポスター賞**:「ペロブスカイト $\text{SrFe}_{1-x}\text{Ni}_x\text{O}_3$ のイオン価数状態と磁気特性」、2014 年 10 月
18. 後藤 能宏、**第 4 回 CSJ 化学フェスタ 2014 優秀ポスター賞**:「高い TN をもつ新規酸水素化物 SrCrO_2H : アニオンによる物性制御」、2014 年 10 月
19. Y. Hosaka, N. Ichikawa, T. Saito, M. Haruta, K. Kimoto, H. Kurata, and Y. Shimakawa, “ $\text{Ca}_2\text{FeMnO}_6$: a layered double perovskite with unusually high valence Fe^{4+} in a layered arrangement”, *Bull. Chem. Soc. Jpn.*, **88**, 657-661 (2015). “Selected Paper”
20. 関 隼人、齊藤 高志、島川 祐一、**日本化学会 第 95 春季年会 学生講演賞**:「ペロブスカイト $\text{SrFe}_{1-x}\text{Ni}_x\text{O}_3$ の結晶構造と物性」、2015 年 4 月
21. T. Kawakami, Y. Sekiya, A. Miura, K. Kobayashi, K. Tokumichi, I. Yamada, M. Mizumaki, N. Kawamura, Y. Shimakawa, Y. Ohishi, N. Hirao, N. Ishimatsu, N. Hayashi, M. Takano, “Two-step suppression of charge disproportionation in $\text{CaCu}_3\text{Fe}_4\text{O}_{12}$ under high pressure”, *J. Phys. Soc. Jpn.*, **85**, 034716 (2016). “Editor’s Choice”

②マスコミ(新聞・TV等)報道

- (1) 「人工超格子での酸素イオン拡散の制御に成功 — 固体燃料電池や酸素貯蔵材料の開発へ向けた新展開 —」**2011 年 6 月 30 日**、京都大学プレスリリース
 1. 京都新聞 (7 月 1 日、29 面)「燃料電池の発電を高効率に: 酸素イオン制御材料: 京大グループ開発」
 2. 日刊工業新聞 (7 月 1 日、21 面)「酸素イオンの移動 300 °C 以下で制御: 人工超格子使い成功: 固体酸化物燃料電池の用途拡大: 京大」
 3. 科学新聞 (7 月 15 日、4 面)「京大化研: 人工超格子で酸素イオン拡散を制御: 固体燃料電池などへの応用期待」
- (2) 「異常原子価鉄イオンが示す機能特性原理の解明 — スイッチ、センサーなどに使える多機能新材料開発へ向けた新知見 —」**2012 年 6 月 8 日**、京都大学、JST プレスリリース
 1. 京都新聞 (6 月 12 日、31 面)「鉄酸化物変化のメカニズム解明: 京大教授ら: 新材料開発に期待」
 2. 科学新聞 (6 月 29 日、4 面)「異常原子価鉄イオンの機能特性原理を解明: 京大化研の研究グループが成功」
- (3) 「酸化物ヘテロ界面での格子歪みの直接観察に成功」**2013 年 7 月 12 日**、京都大学、JST

プレスリリース

1. 京都新聞（7月17日、23面）「特殊な結晶構造の金属酸化物： 接合部 原子レベルで観察： 京大グループ」
2. 日刊工業新聞（7月1日、21面）「「ヘテロ界面」 ひずみ吸収： 京大が構造解明： 新たな素子開発に道」
3. 科学新聞（8月9日、1面）「酸化物ヘテロ界面で格子歪みを直接観察： 京大化研の研究グループ成功」
- (4) 「高い磁気転移温度を持つハーフメタル新材料の合成に成功 ―超高密度磁気メモリーなどスピントロニクスデバイスへ応用可能な新材料―」 2014年5月19日、京都大学、SPRING-8、JST プレスリリース
 1. 日刊工業新聞（5月23日、19面）「高い磁気転移温度・電子スピナー方向： 「ハーフメタル」 合成」 京大など」
 2. 科学新聞（6月13日、6面）「高い磁気転移温度のハーフメタル新材料」 日英グループが合成成功」
 3. 京都新聞（6月28日、9面）「300℃でも巨大磁気抵抗効果」金属酸化物開発、高密度 HD に応用期待」
- (5) 「界面構造を変えるだけで金属酸化物の機能特性を制御 ―酸素配位環境を利用した新機能探求へのアプローチ―」 2016年3月2日、京都大学、JST プレスリリース
 1. 京都新聞（3月8日、29面）「材料変えず物性変える」 京大、磁気メモリー応用」
 2. 科学新聞（3月18日、4面）「界面構造を変えるだけで金属酸化物の機能特性を制御」 京大

③その他

1. *Phys. Status Solidi B*, Vol. 249, Number 3 (2012) に表紙絵が掲載
Y. Shimakawa and T. Saito, “A-site magnetism in A-site-ordered perovskite-structure oxides”
2. *Dalton Transactions*, vol. 41, Number 35 (2012) に表紙絵が掲載
N. Ichikawa, M. Iwanowska, M. Kawai, C. Calers, W. Paulus, and Y. Shimakawa, “Reduction and oxidation of SrCoO_{2.5} thin films at low temperatures”
3. *Chemistry of Materials*, Vol. 25, Number 10 (2013) に表紙絵が掲載
T. Tohyama, M. S. Senn, T. Saito, W. -T. Chen, C. C. Tang, J. P. Attfield, and Y. Shimakawa, “Valence change of A'-site Mn by A-site doping in La_{1-x}Na_xMn₃Ti₄O₁₂”
4. *Dalton Transactions*, vol. 42, Number 28 (2013) に表紙絵が掲載
W. -T. Chen, M. Mizumaki, T. Saito, and Y. Shimakawa, “Frustration relieved ferrimagnetism in novel A- and B-site-ordered quadruple perovskite”
5. *Advanced Functional Materials*, Vol. 24, Number 33 (2014) に中表紙絵が掲載
R. Aso, D. Kan, Y. Shimakawa, and H. Kurata, “Control of structural distortions in transition-metal oxide films through oxygen displacement at the heterointerface”



(6)成果展開事例

①実用化に向けての展開

- ・ JST-京都大学「新技術説明会」(2013年5月17日)において、本研究で得られたAサイト秩序型ペロブスカイト構造酸化物に関しての技術を紹介。

②社会還元的な展開活動

- ・ 本研究成果は各グループのホームページで公開し、一般に情報提供している。
京都大学、島川研究室: <http://www.scl.kyoto-u.ac.jp/~shimakgr/index.html>
京都大学、陰山研究室: <http://www.ehcc.kyoto-u.ac.jp/eh10/index.php>
Spring-8: <http://www.spring8.or.jp/ja/>
大阪大学、小口研究室: http://www.cmp.sanken.osaka-u.ac.jp/index_jp.html
- ・ プレスリリースの内容は京都大学、および京都大学化学研究所のホームページで公開し、一般に情報提供している。
京都大学: <http://www.kyoto-u.ac.jp/ja>
京都大学化学研究所: http://www.kuicr.kyoto-u.ac.jp/index_J.html
- ・ 「国民との科学・技術対話」企画「京都大学アカデミックデイ 2015」(2015年10月4日開催)に参加

§ 5 研究期間中の活動

5. 1 主なワークショップ、シンポジウム、アウトリーチ等の活動

年月日	名称	場所	参加人数	概要
2011年 8月1-5日	京都府立洛北高校 (SSH)夏季実習	京都大学・化学研 究所	5人	
2011年 11月1日	京都府立洛北高校 (SSH)講義	洛北高校	30人	
2011年 12月2-3日	磁性分光研究会	京都大学・宇治	50人	
2012年 1月12-13日	日本-英国-台湾 ワークショップ	京都大学・宇治	30人	
2012年 2月21日	京都大学宇治 キャンパス産学交流会	京都大学・宇治	50人	
2012年 2月23日	京都府立洛北高校生 (SSH)実習報告会	洛北高校	100人	
2012年 7月30 -8月3日	京都府立洛北高校生 (SSH)夏季実習	京都大学・ 化学研究所	5人	
2012年 10月31日	FM 京都ラジオ出演			「SUNNYSIDE BALCONY」に出演

2013 年 1 月 7 日	物性分光研究会	京都大学・宇治	30 人	
2013 年 2 月 21 日	京都府立洛北高校生 (SSH)実習報告会	洛北高校	100 人	
2013 年 2 月 27 日	京都大学宇治 キャンパス産学交流会	京都大学・宇治	50 人	
2013 年 3 月 5-6 日	日本-英国-台湾 EPENET ワークショップ	京都大学・宇治	50 人	
2013 年 4 月 25 日	京都府立洛北高校 (SSH)講義	洛北高校	30 人	
2013 年 5 月 17 日	JST 新技術説明会	JST 東京別館ホール		特許技術説明
2013 年 7 月 17 日	α -station エフエム京都 ラジオ出演	京都		アウトリーチ
2013 年 7 月 29 日 -8 月 2 日	京都府立洛北高校 (SSH)実習	洛北高校	5 人	アウトリーチ
2013 年 9 月 21-22 日	CREST 全体会議	千葉		研究進捗報告会
2013 年 10 月 18 日	島根県立出雲高校 講義	京都大学・桂	320 人	アウトリーチ
2013 年 10 月 22 日	大阪桐蔭中学校	大阪	300 人	アウトリーチ
2013 年 11 月 29 日	CREST 公開シンポジウム	東京		研究進捗報告会 アウトリーチ
2014 年 4 月 24 日	京都府立洛北高校 (SSH)講義	洛北高校	30 人	アウトリーチ
2014 年 5 月 19 日	M. Hayward 教授 (Oxford)セミナー	京都大学・宇治	15 人	セミナー
2014 年 5 月 21 日	プレスリリース	京都大学・ 吉田(本部)	10 人	アウトリーチ
2014 年 7 月 8-9 日	<i>Workshop on Novel Functional Oxides</i>	京都大学・宇治	25 人	ワークショップ 学術交流
2014 年 7 月 16-17 日	CREST 全体会議	千葉		研究進捗報告会
2014 年 7 月 28 日 -8 月 1 日	京都府立洛北高校 (SSH)実習	洛北高校	15 人	アウトリーチ
2014 年 9 月 18 日	第 83 回病態生化学セミ ナー	島根大学・医学部	50 人	アウトリーチ
2014 年 10 月 7 日	出雲高校 1 年生向け	京都大学・桂	300 人	アウトリーチ
2014 年 10 月 30 日	S. Kimber 博士(ILL)セミ ナー	京都大学・宇治	15 人	セミナー

2014 年 11 月 28 日	S. Garcia Martin 博士 (Complutense) セミナー	京都大学・宇治	15 人	セミナー
2014 年 12 月 25-26 日	小口研・中井研合同理論 ミーティング	兵庫県	30 人	研究進捗報告会 討論会
2015 年 2 月 7-8 日	物性分光研究会	京都大学・宇治	35 人	研究会
2015 年 3 月 24 日	元素戦略公開シンポジウ ム	東京		研究進捗報告会 アウトリーチ
2015 年 4 月 27 日	「ペロブスカイト」研究会	京都	15 名	研究・技術交流会
2015 年 5 月 14 日	京都府立洛北高校 (SSH) 講義	洛北高校	30 人	アウトリーチ
2015 年 5 月 21 日	プレスリリース	京都大学・ 吉田(本部)	10 人	アウトリーチ
2015 年 7 月 9 日	S. Garcia Martin 博士 (Complutense) セミナー	京都大学・宇治	15 人	セミナー
2015 年 7 月 27 -31 日	京都府立洛北高校 (SSH) 実習	洛北高校	15 人	アウトリーチ
2015 年 8 月 22-23 日	CREST 全体会議	信州		研究進捗報告会
2015 年 9 月 13-14 日	SPRING-8 シンポジウム	九州		アウトリーチ
2015 年 10 月 4 日	京都大学アカデミック デイ 2015	京都		アウトリーチ
2015 年 10 月 7 日(予定)	出雲高校 1 年生向け研 修	シェラトン都ホテ ル大阪	320 人	アウトリーチ
2015 年 10 月 22-23 日	島川-長谷川-高田 T、 CREST 合同研究会	兵庫	40 人	研究進捗報告会 討論会

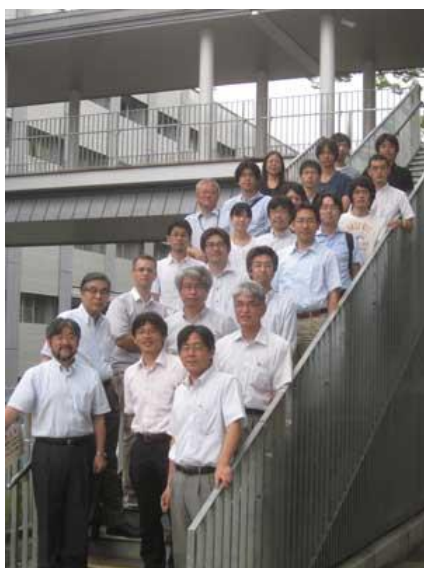
§ 6 最後に

本 CREST 研究では、京都大学(1) (2)グループによる「材料合成・物質制御」、京都大学(1)グループによる高分解能電子顕微鏡観察と SPring-8 グループの放射光 X 線評価による「構造評価・電子状態解析」、大阪大学グループの「第一原理電子状態計算」による相互連携が当初の想定以上に効果的に機能して、その結果として、幾つもの新物質の発見、興味深い機能特性の発見に至ったことは非常に大きい成果であった。(インパクトファクターという指標をどのようにとらえるかという議論があることは理解したうえで、)多くの研究成果がインパクトの高いジャーナルに掲載され、さらに本研究での成果に関して、ほぼ毎年プレス発表を行い、実際に成果が新聞に取り上げられて各方面から様々な反響があったことは、重要で高いレベルの研究を遂行してきた結果であると思っている。

CREST という半トップダウン的な研究形態とその評価内容に、研究当初はやや戸惑いを感じたが、中間評価とそれを受けてのチーム内ミーティングでの議論により、研究後半の方向性の再確認と目標の再構築を行い、新たなフェーズとして研究を展開できたことも貴重な経験であった。

本 CREST 研究を通して、各グループでは、実験・評価装置の整備が進んだことは非常にありがたかった。また、SPring-8 での成果公開優先利用枠などを申請でき、優先的に実験ビームタイムを確保できた点も研究を進展させるのに役立った。また、海外との共同研究も CREST の支援で多く行い、特に学生を含めた若い研究者に多くの経験を積ませることができた。

CREST 研究期間において、JST、および参加機関の事務をはじめ多くの方に多大なお世話になりました。ここに感謝の意を表します。



京都大学化学研究所(京都、宇治キャンパス)でのチーム内ミーティングでの写真。