

先端国際共同研究推進事業

2024 年度採択

「Top のための ASPIRE」

マテリアル分野

2024 年度

年次報告書（公開版）

研究課題名次世代複合アニオン科学：反応・構造制御と新機能

日本側研究代表者 陰山 洋 京都大学 教授

相手側研究代表者

- ・ Andrew Goodwin, Professor, University of Oxford
- ・ Micheal Hayward, Professor, University of Oxford,
- ・ Laurent Cario, Research Director, Nantes University,
- ・ Wenhao Sun, Dow Corning Assistant Professor, University of Michigan

研究期間 2024 年 12 月 1 日～2030 年 3 月 31 日

1. 研究成果の概要

① 研究構想にかかる成果

<実施したこと>

本プロジェクトの研究構想に基づき、次世代複合アニオン物質の創製と機能探索、構造制御、反応制御の三本柱を中心に、実験と理論の緊密な連携による多面的な研究活動を推進した。次世代複合アニオン物質の探索においては、陰山グループが得意とする多種多様な合成手法（例えば高圧合成やメカノケミカル合成）を活用し、新規物質群の開拓に向けた検討を開始した。早くも未報告物質の合成に成功しており、得られた試料を含むいくつかの複合アニオン物質に関して、拠点ハブである京都大学の他参画グループと協力して、各専門性を活かした機能性評価を実施している。国内連携の成果として 2 本の論文（代表的な業績を参照）が出版されている。また、大学院生 1 名をオックスフォード大学に派遣し、海外グループが得意とする特殊合成技術の習得を目指すとともに、新物質探索を共同で実施した。

複合アニオン物質の構造面に関しては、高度な解析に耐えうる高精度回折データを取得するための予備実験を実施し、結晶構造評価を開始した。得られた結果に基づいて、Goodwin グループと連携して新規複合アニオン物質の高次構造解析を進めている。また、複合アニオン物質に適した電子顕微鏡観察条件の最適化を済ませ、新規物質の局所構造解析も本格化させた。大型施設利用に向けた準備も進めており、ビームタイムの申請を完了した。

理論的反応制御に関しては、ミシガン大学 Sun グループを中心に、第一原理に基づく複合アニオン物質の計算手法を整備し、速度論的な効果を取り込んだ反応モデリング基盤の構築を進めた。さらに、これまで実験研究に従事してきた陰山グループの大学院生を海外の理論グループ（ミシガン大学およびアーヘン工科大学）に長期派遣することで、実験化が理論解析を習得する環境を確立するとともに、理論と実験の密接な連携体制を整えた。

<得られた成果>

これらの取り組みにより、申請時に掲げた研究構想に沿った、複合アニオン材料科学における基盤整備と初期成果の獲得を達成した。既に新規複合アニオン物質の合成に成功したことは大きな成果であり、例えば京都大学・阿部グループと共同で複合アニオン物質の光触媒機能の評価を実施し、機能設計に向けた基礎データを取得している。また、構造解析の精密解析を目的とした多角的測定体制の基盤整備が進み、複合アニオン物質に固有な高次構造の解明に向けた準備が整った。理論面でも、熱力学安定性解析、反応経路予測、化学結合状態の可視化など、複合アニオン系に不可欠な理論解析手法の確立が進み、実験と理論の往還的連携を支える枠組みが形成されつつある。これらは、今後の材料機能探索、反応および構造理解に向けた強力な基盤となる。以上により、本プロジェクトは初年度から、探索・解析・理論の三位一体体制を力強く立ち上げ、次年度以降の本格的な物質設計・機能開拓に向けた確かな足場を築いた。

② 国際ネットワーク構築・拡大／国際頭脳循環の促進に資する若手研究者の人材育成に関する成果

<実施したこと>

国際共同研究体制の確立に向け、2025 年 1 月にフランス・リールにて本 ASPIRE プロジェクトのキックオフミーティングとなる複合アニオン化合物に関する国際シンポジウムを開催し、ミシガン大学 Sun グループ、オックスフォード大学 Goodwin グループを新たに加えた 6 か国間の広範なネットワークを正式に始動させた。本シンポジウムには相手方の研究グループを含む総勢 110 名が参加し、日本側からは 29 名（うち若手 24 名）を派遣して、セッション講演やポスター発表、国際交流の機会を創出した。京都大学の陰山・田部がフランス各地でレクチャーツアーを行い、また若手研究者の吉田・Zhu・鈴木もヨーロッパ各地で若手レクチャーツアーを実施する

など、若手研究者間の国際交流と人材育成を積極的に推進した。加えて、京都大学の陰山グループから博士および修士課程の学生計 3 名を、海外研究機関に 1～1.5 ヶ月派遣し、理論・実験融合型人材の育成ならびに海外グループが持つ特殊合成技術との融合を図った。これらの活動の成果はレポートとして各若手研究者・学生がまとめ、今後のさらなる若手派遣・受け入れ促進に向けて陰山研究室ウェブサイト上で公開している。現在は本 ASPIRE プロジェクト専用ウェブサイトの立ち上げ準備も進行中である。

また、2025 年 12 月に島根県で開催予定の固体化学に関する国際会議「2nd International Symposium on Solid State Chemistry: ISSSC-2025」についても、相手側研究代表者 4 名の invited speaker としての参加が確約され、ウェブサイト (<http://www.ehcc.kyoto-u.ac.jp/ISSSC2025/>) が公開されるとともに、一般参加登録も開始された。

<得られた成果>

多くの若手研究者が参加したキックオフミーティングおよび若手レクチャーツアーを通じて、日本側若手研究者と欧州側若手研究者間の研究交流が活発化し、これまで陰山が中心に築いてきた国際ネットワークを発展的に継承し、若年層への浸透を実現した。特に、現地での講演・議論を通じて日本側若手研究者の研究内容が直接共有された結果、欧米側の若手研究者から京都大学への滞在希望が寄せられるなど、双方向型の頭脳循環が自然発生的に促進される成果も得られた。また、派遣した 3 名の大学院生は、それぞれ異なる専門分野・研究文化の中で研究活動を経験し、複合的な視点を養う成果を挙げた。こうした研究者間の交流を契機に、現時点で 4 本の相手側海外研究チームとの国際共著論文が進行中である。R. Higuchi *et al.* はボルドー大の Tassel と Vignolle がそれぞれ構造解析と理論的考察で貢献しており、Vignolle との共同研究は陰山のレクチャーツアーを機に始まったものである。また、S. Kawanishi *et al.* と K. Murayama *et al.* はそれぞれ大学院生の海外研究機関派遣（オックスフォード大学ならびにアーヘン工科大学）で得られた成果に基づいている。初年度から具体的な共同研究成果が形成され、単なるネットワーク拡大にとどまらず、実質的な学術アウトプットへと直結する体制が早期に機能し始めた。

2. 研究実施体制

研究テーマ	中心となる研究者氏名	所属機関・部署・役職名
研究テーマ1 次世代複合 アニオン化合 物の創製	陰山 洋 Michael Hayward Laurent Cario	京都大学・大学院工学研究科・教授 University of Oxford・Department of Chemistry・Professor Nantes University・Research Director
研究テーマ2 高次構造解 析と制御	Andrew Goodwin	University of Oxford・Department of Chemistry・Professor
研究テーマ3 情報理論によ る反応機構・ ダイナミクス の発展的理解 とハイスルッ プ合成	Wenhao Sun	University of Michigan・College of Engineering・Dow Corning Assistant Professor

3. 代表的な業績（原著論文、プレスリリース、表彰など）

<原著論文>

- [1] D. Zhang, K. Yamamoto, Z. Cao, Y. Wang, Z. Zhong, H. Kiuchi, T. Watanabe, T. Matsunaga, K. Nakanishi, H. Miki, H. Iba, Y. Harada, K. Amezawa, K. Maeda, H. Kageyama, Y. Uchimoto., “Cathode Design Based on Nitrogen Redox and Linear Coordination of Cu Center for All-Solid-State Fluoride-Ion Batteries”, *J. Am. Chem. Soc.* 147(7), 5649–5657(2025). （国内連携成果）
- [2] Y. Yamamoto, K. Kume, S. Miyazaki, A. Shinozaki, A. Shinozaki, P. Song, S. S. Hasan, K. Hongo, R. Maezono, H. Ubukata, H. Kageyama, M. Higuchi, Y. Masubuchi. “Hand Milling Induced Phase Transition for Marcasite-type Carbodiimide”, *J. Am. Chem. Soc.* 147(13), 11390–11398(2025). （国内連携成果）