

固体化学のフロンティア：複合アニオン化合物の合成と機能

Frontier in solid state chemistry: synthesis of mixed anion compounds and their functionalities

産総研¹ ○荻野 拓¹

AIST¹

E-mail: h-ogino@aist.go.jp

複合アニオン化合物とは単一化合物中に複数のアニオンを含む物質群で、最近になってその特異性・有用性から物質科学のフロンティアとして注目を集めている[1]。本講演では、我々が行っている一連の複合アニオン化合物の合成とその機能について報告する。

複合アニオン化合物は様々な構造・組成のものが存在するが、我々が主に物質開発を行っているのが図1のような結晶構造を有する一連の化合物である。このような多元系で複雑な物質には、必然的に多くの固体化学的な制約が存在する[2]。また最近では、固体化学的な知見だけでなく、計算科学の発達により相生成について様々な理論予測が可能となってきた。複合アニオン化合物は元素の組み合わせが膨大である他、様々な構造の自由度が存在することから、より精密な計算手法と組み合わせることで、非常に多くの新物質の開発が期待できる。図1の層状複合アニオン化合物は、酸化物層・副アニオン層の組成・構造が異なる100種類以上の物質が知られている。多くの場合電子構造には副アニオン層の影響が強く、この層が持つ機能を発現することが可能である。例えば酸化物層とFeAs層が積層した化合物は鉄系超伝導体の一種であり、多くの組み合わせで超伝導が発現する。一方で、大きく物性が異なる層が積層した自然超格子構造を有することから、積層によって初めて発現する物性も多い。層間に大きなバンドギャップ差を有する $\text{Sr}_3\text{Sc}_2\text{Cu}_2\text{S}_2\text{O}_5$ では、層間の閉じ込め効果に由来する励起子発光が観測される[3]。発光特性を積層構造によっても制御できることもこの系の特徴である。複合アニオン化合物の合成には、従来の無機化合物とは異なる様々な要素を考慮する必要がある一方、大きな設計の自由度が存在し、物質数だけでなく、積層構造や配位構造を活かした様々な機能性材料の開発と物性制御が可能である。より精密な物質設計や新たな合成手法の開拓により、今後も様々な機能性材料の物質開発が期待できる。

[1] H. Kageyama *et al.*, *Nature Communications*, **9** (2018) 1

[2] 荻野拓, 日本結晶学会誌 **60** (2018) 246.

[3] 荻野拓, 日本セラミックス協会誌, **52** (2017) 808.

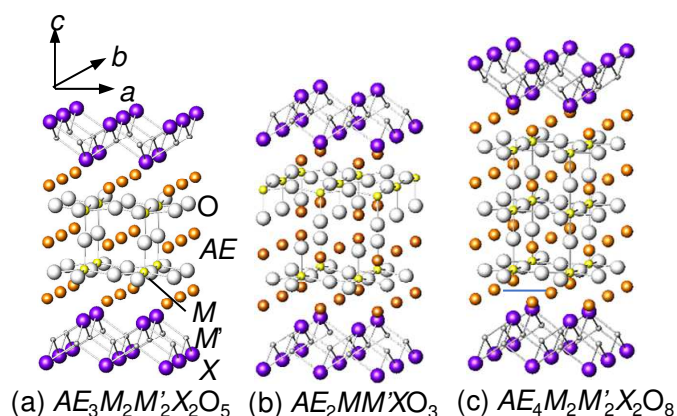


図1 複合アニオンペロブスカイトの結晶構造例

AE: アルカリ土類金属, M, M': 遷移金属

X: 副アニオン (S, Se, As, ...)