

令和 2 年 6 月 5 日現在

機関番号：12601

研究種目：基盤研究(A) (一般)

研究期間：2015～2019

課題番号：15H02024

研究課題名(和文) 格子歪とアニオンランダム配置の相乗効果による界面高イオン導電性の発現

研究課題名(英文) Interfacial ionic conduction enhanced by lattice distortion and randomly distributed anions

研究代表者

長谷川 哲也 (Hasegawa, Tetsuya)

東京大学・大学院理学系研究科(理学部)・教授

研究者番号：10189532

交付決定額(研究期間全体)：(直接経費) 32,900,000円

研究成果の概要(和文)：立方晶ZrO₂相中の酸化物イオンの導電性に対するカチオンドーピング、アニオンドーピング、酸素欠損量、エピタキシャル歪みの影響を第一原理MD計算により系統的に調べた。さらに、アニオン(窒素およびフッ素)ドーピングによる効果を検証した。その結果、酸素欠損、格子歪および異種アニオンを導入することで、酸素の拡散係数が大幅に増大することを見出した。続いて、La-O-F系に注目して計算を進め、F-の方がO²⁻よりも拡散係数は大きいことを示した。さらに、結晶系の影響についても調べ、層状の正方晶系では層間でのイオンの移動が制限され、F-がinterstitialcy機構によって拡散することを明らかにした。

研究成果の学術的意義や社会的意義

本研究により、界面を用いたイオン伝導という新規分野とその学理の基礎が確立されたという点で学術的な意義は大きい。また、材料開発の面では、界面を利用するという新しいアプローチが生まれ、探索対象が大幅に広がることができた。特に、将来的には、燃料電池の分野に及ぼすインパクトは大きい。単一の界面だけでは、輸送できるイオンの量が限られるが、積層化すれば輸送量も実用レベルまで到達しうると考えられる。さらに、本申請ではフッ化物イオンや酸化物イオンの伝導に焦点を絞ったが、本研究で確立させた学理は、リチウムイオンなどのカチオン伝導やヒドリドといった他のアニオン伝導にも適用できるため、波及効果は計り知れない。

研究成果の概要(英文)：Effects of cation dopants, anion (F⁻ and N³⁻) dopants, oxygen vacancy and epitaxial strain to the oxygen diffusion in cubic ZrO₂ were systematically investigated by means of first principles MD calculations. As a result, it was found that the oxygen diffusion coefficient was considerably enhanced by introducing oxygen vacancy, anion and lattice strain simultaneously. Similar calculations were also conducted for La-O-F. MD simulations revealed that F⁻ can migrate faster than O²⁻. Particularly, in tetragonal La-O-F, F⁻ was found to diffuse through an interstitialcy mechanism due to the layered crystal structure.

研究分野：固体化学

キーワード：界面イオン伝導 格子歪 アニオン欠損

様式 C-19、F-19-1、Z-19 (共通)

1. 研究開始当初の背景

燃料電池は、次世代を担う環境調和型エネルギーとして注目を集めている。酸素イオン導電体は固体電解質型燃料電池 (SOFC) に不可欠な材料であり、これまで様々な材料が提案されてきた。イットリア安定化ジルコニア ((ZrO₂)_{1-x}(Y₂O₃)_x; YSZ) は代表的な酸素イオン導電体であるが、さらなる高イオン導電性(実用ラインは 10⁻² S cm⁻¹)やより低温での動作 (YSZ では ~800 が必要) に対する要求は強い。

一方で、界面の利用したイオン導電についても注目が集まっている。その契機となったのが SrTiO₃ 上の YSZ 薄膜で観測された高酸素イオン導電である (J. Garcia *et al.*, *Science*, **321**, 676 (2008)). 我々は、その原因を探るため、第一原理計算による *ab initio* 分子動力学 (MD) 計算を行い、格子歪により高イオン導電性が生じることを確かめた。また、異方性に関しても、Li_{0.33}La_{0.56}TiO₃ 系エピタキシャル薄膜において、明瞭なイオン導電率の異方性を実験的に観測していた。

2. 研究の目的

本研究では、界面の利用という切り口から酸素イオン導電体の開発へとチャレンジする。界面を用いることで、次のような効果が期待できる。

- 1) 基板からエピタキシャル歪が加わり、酸素が移動するための空間が広がる。
- 2) 格子歪により結晶に異方性が生じ、面内方向に高いイオン導電性が発現する可能性がある。

本研究で、もう一つ注目するのが、アニオンの部分置換によるアニオン配列の乱れである。これは、上記 MD 計算の過程で発見した新現象であり、ジルコニア (ZrO₂) の酸素の一部を窒素やフッ素で置換すると、イオン導電率が向上することをすでに見出している。これは、アニオンのランダムネスが、酸素が秩序構造をとり安定化するのを抑制すると解釈できる。格子歪とアニオンのランダムネスが共存すると、イオン導電率はさらに向上する。この協奏効果の原因は今のところ不明であるが、格子歪、アニオン配列だけでなく、酸素空孔も重要な役割を果たしていると考えられる。まず、格子の空隙を酸素イオンが移動する剛体球モデルに立ち、拡散過程を丁寧に追跡することにより、原子配列やその熱運動の影響を考察する。次に、化学結合に立脚したエネルギー論を導入し、イオン伝導に関わる学理と実用的な酸素拡散モデルを構築する。

さらに、ジルコニアを含む蛍石構造物質やペロブスカイト型化合物を主な対象として計算科学による材料探索を進め、高酸素イオン導電体として有望な系を提案する。

また、本申請の後半では、他のアニオン種を含んだ酸化物薄膜の合成法を確立する。薄膜の合成法には実績のあるパルスレーザー蒸着 (PLD) 法を用い、酸素以外のアニオンとしては、酸素よりも共有結合性の強い窒素とイオン性の高いフッ素の 2 種類について検討する。それらの導入には、気相からの導入とトポタクティック反応の 2 つの手法を試みる。酸素欠損量やアニオン組成比は合成条件に大きく依存すると予想されるため、これらのパラメータの制御性に優れた合成法を確立することも、本研究の大きな目的の一つである。

3. 研究の方法

まず、対象とする物質をジルコニアに絞って、イオン導電性を見積もるための手法を確立する。続いて、イオン導電性が、i) 格子歪、ii) 酸素欠損量、iii) カチオン置換 (YSZ に対応) iv) アニオン置換 (窒素、フッ素) により、どのような影響を受けるかを個々に調べる。さらに、複数の事項を同時に取り扱い、協奏的な効果について検討する。

ここで重要となるのは、単なるイオン導電率の大小だけではなく、界面でのイオン導電メカニズムの理解と、それを支配する要因を結晶構造、化学結合的観点から抽出することである。構造的な要因としては、酸素イオンが通過するパスと、その熱揺らぎに注目する。

また、酸素イオンの秩序配列構造も重要な研究課題である。予備的な計算の結果、格子歪を印加した系では、酸素の秩序配列構造が生じやすいことがわかっており (図 5) その機構について、エネルギー系をもとに考察する。さらに、この秩序構造が、カチオンやアニオン置換により破壊される過程も動力学論的に観察し、両者の差異について、化学結合や格子エネルギーの立場から論じる。ただし、上記要因は、実験で観測は容易ではない。そこで、実験の指針となるよう、実測可能なパラメータを提案したい。

続いて、上述の計算を、組成により伝導イオン種が変化する La-O-F 系やペロブスカイト化合物へと適用する。結晶構造の違いや、構成金属元素の違いが、界面イオン伝導にどのような影響を及ぼすかを明らかにし、提案したモデルを修正・補強する。以上により、界面イオン伝導の学理を構築する。さらに、高酸素イオン導電体として有望な系を提案する。

計算には、基本的に現有のワークステーションを用いるが、MD シミュレーションは計算コストがかかるため、大型計算機を使用する。

アニオンを含んだ酸化物薄膜の合成には、以下の 2 種類の方法を試みる。

i) 気相からの窒素の導入

窒素ガスを ECR プラズマや rf プラズマにより活性化させ、アブレーションルーム中に導入する (窒素プラズマ支援 PLD 法)。

ii) トポタクティック法によるフッ素の導入

まず遷移金属酸化物薄膜を合成し、その後、ポリフッ化ビニリデン (PVDF) を用いたトポタクティック反応を施す。フッ素慮は反応温度により制御する。

4. 研究成果

4.1. ZrO₂における酸素副格子の形成と酸素イオン伝導に対する格子歪の効果

まず、基本となる母体の構造の決定、ならびに現実に即した時間スケールでイオン導電性を見積もるための手法の確立に主眼をおいた。その結果、母体として従来仮定されてきた立方晶 ZrO₂では不十分であり、ドーパントであるイットリウムの効果も考慮する必要があることが判明した。また、最安定構造の決定には密度汎関数摂動理論に基づくフォノン計算が不可欠であり、不安定な虚フォノンをすべて取り除くことに成功した。

高温における安定構造を計算した結果、エピタキシャル歪みによって新たな酸素副格子が形成されることがわかった(図1)。次に、この安定構造に基づき *ab initio* MD 計算を行い、酸素イオンの軌跡を観察した(図2)。なお、従来は、副格子を形成するまでの時間で酸素拡散を見積もっており、それでは拡散係数を正しく評価できない。モデルとして、3×3×2 倍セルに酸素欠損を1つ導入した系(Zr₇₂O₁₄₃)、YSZに対応する系(Zr₆₀Y₁₂O₁₃₈)及び、酸素欠損量を上記YSZと同一にした系(Zr₇₂O₁₃₈)を用意した。*ab*面内にはSrTiO₃基板からのエピタキシャル歪みに相当する格子変形を加えた。拡散係数は平均二乗変位量(MSD)から算出した。

計算の結果、Zr₆₀Y₁₂O₁₃₈及びZr₇₂O₁₃₈では、Zr₇₂O₁₄₃に比べ大きな酸素イオン拡散が得られた。酸素-カチオン距離の動径分布関数を調べたところ、エピタキシャル歪みがYSZにもたらす影響はZrO₂として単純にモデル化できるものではなく、酸素配置の構造変化、ドーパントや酸素欠損の濃度などの複合的な要因が関わっていることがわかった。本研究の結果、酸素が副格子を形成し、その構造がイオン導電性に大きな影響を及ぼすという新しい知見を得たが、これは大きな成果であると言える。

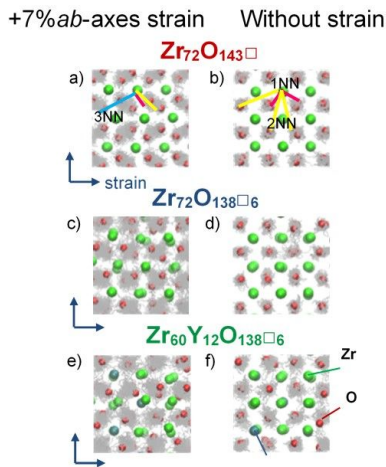


図1. 高温での安定構造

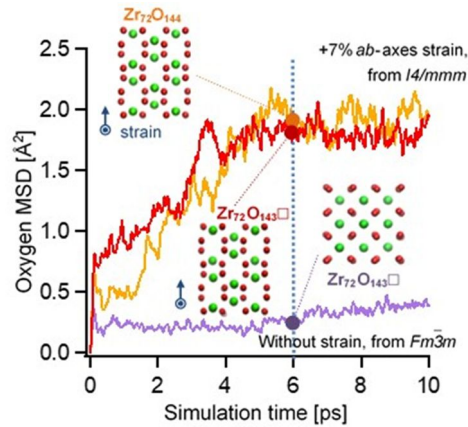


図2. 第一原理 MD シミュレーション

4.2. ZrO₂における酸素イオン伝導に対するアニオンドーブの効果

引っ張り歪だけでは拡散係数は増加せず、酸素欠損を同時に導入すると拡散係数は増大した。また、酸素欠損量が多い(3×3×2のセル中に6個の欠陥; [6Vo])場合にはアニオンの効果は顕著ではなかったが、[1Vo]や[3Vo]ではアニオンドーブにより拡散係数が増大した。

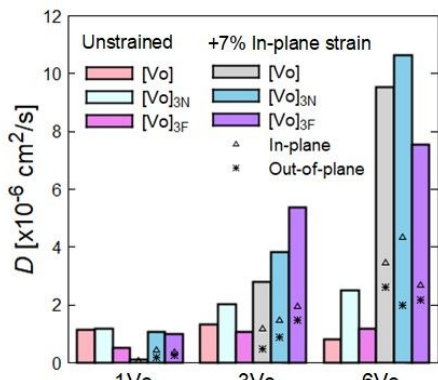


図3. 拡散係数の計算値

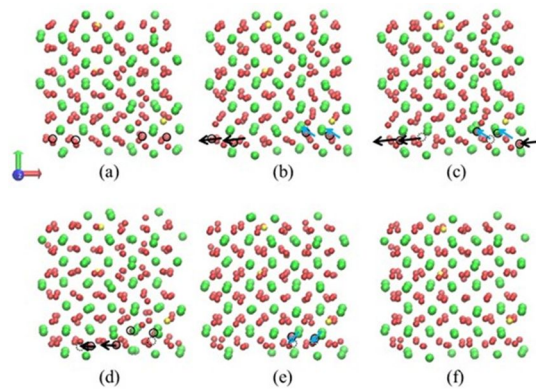


図4. MD シミュレーション中のスナップショット

拡散過程を詳細に観察したところ、いずれの系でも、酸素欠損を介して酸素イオンが拡散する

ことが判明した。一方、格子歪と酸素欠損、アニオンを導入した系で、格子間空隙を介した酸素イオンの拡散も観測された。すなわち、アニオン、格子歪、適度な量の酸素欠損を導入することで、酸素イオンの拡散係数が大幅に増大することを見出した(図3)。これは実用化にとって朗報である。このメカニズムによる拡散を増大できれば、拡散係数はさらに増大できるものと考えられる。

酸素副格子の振る舞いについても検討した。その結果、酸素欠損が導入されるとジグザグ型の副格子構造が出現し、これが反転する様子が観測された(図4)。アニオンを導入すると、ジグザグ構造の特性長が短くなり、反転の頻度が増大した。すなわち、アニオンはジグザグ型副格子を不安定化させると考えられる。上記反転と酸素の拡散は同期してくることから、酸素副格子の形成とその流動性がイオン拡散を支配する大きな要因であると結論した。

酸素イオンは主に格子欠陥を介して拡散していたが(欠陥機構)、一方で、酸素欠損と格子歪、アニオンを同時に導入した系で、格子間空隙を介した拡散も観測された。これは、ジルコニア系では初めて見出された機構である。結晶構造を工夫し、この格子間空隙を介した拡散の頻度を高めることができれば、拡散係数のさらなる増大が見込める。

4.3. LaOFでのイオン伝導

La-O-F系は、組成に応用でイオン拡散種が酸素物イオン/フッ素イオン間で変化することが知られており、その起源を明らかにすることを目的に第一原理 MD 計算を行った。まずは最も基本的な物質であるLaOFを対象とした。フレンケル対の生成エネルギーを計算したところ、フッ化物イオンの方が明確に小さな値を示し、従って、フッ化物イオンを含むフレンケル対が生成しやすいことがわかった。

続いて、第一原理 MD 計算を進めた。LaOFの構造としては、正方晶系と菱面体晶系の2つを仮定した。フッ化物イオンの方が酸化物イオンよりも拡散係数が大きいことを見出した。さらに、正方晶系と菱面体晶系とで拡散の様子を比較した。両者ではフッ化物イオンの動きに大きな違いがみられた(図5)。すなわち、層状の結晶構造を有する正方晶系では、層間でのイオンの移動が制限され、フッ化物イオンと空孔が出会う機会が少ない。その結果として、フッ化物イオンは interstitialcy 機構によって拡散した(図6)。一方、菱面体晶系では、フレンケル対はすぐに空孔に補足されてしまうため、ほとんど拡散は起きなかった。以上の結果を基に、エピタキシャル薄膜技術により La-O-La-F 超構造を作成できれば、フッ化物イオンの拡散がさらに促進され、高いイオン導電性を実現できることを提案した。

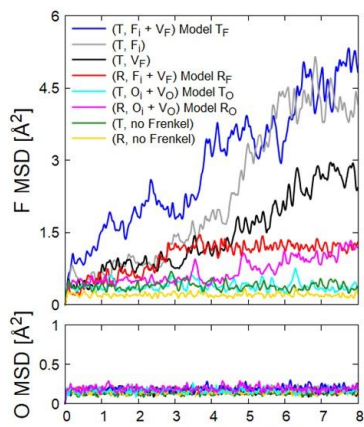


図5. LaOFのMDシミュレーション

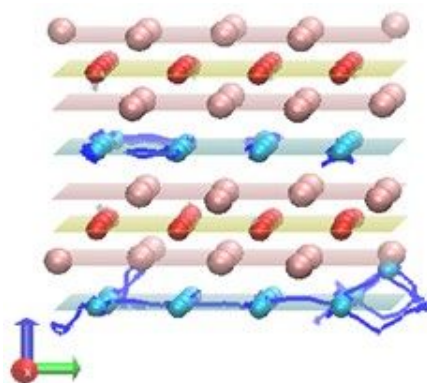


図6. 正方晶系でのフッ素拡散

4.4. ペロブスカイト系でのイオン拡散

燃料電池としての応用が期待されているアニオンドープ La_2NiO_4 および $\text{Li}_{3x}\text{La}_{2/3-x}\text{TiO}_3$ に対しても MD 計算を行った。 La_2NiO_4 系では酸素サイトが2種類あり、どのサイト通して拡散が起こるかを明らかにするとともに、アニオンによる効果を理論的に解明することを目標とした。その結果、アニオンの配置に関わらず、岩塩ブロックが酸素の拡散パスでありことがわかった。窒素は NiO_6 八面体の頂点位置を占める傾向にあり、その結果、窒素の拡散係数は酸素やフッ素に比べ小さかった。フッ素は最も大きな拡散係数を示し、これは岩塩ブロックを interstitialcy 機構でホッピングするためと解釈でき、拡散係数は大きな異方性を示した。また、酸素の拡散係数はアニオンドープにより向上した。この結果は、アニオンドープ系が高イオン導電体として有望であることを示唆する。

$\text{Li}_{3x}\text{La}_{2/3-x}\text{TiO}_3$ では、特に格子歪の効果に注目した。その結果、面内に引っ張り歪を加えるとリチウムの拡散定数が増大し、実験結果を定性的に再現した。一方、Laの分布が拡散定数に大

きな影響を及ぼすことが判明した。面内に異方的な歪（x 軸方向に圧縮、y 軸方向に引っ張り）を印加すると、La 量の多い領域と少ない領域が出現した。高 La 量の領域はリチウムの拡散を阻害するため、x 軸方向の拡散定数が最大となった。従って、La 分布の制御もイオン導電性の向上に重要である。

4.5. 酸フッ化物のトポタクティック合成

カチオンの秩序配列がイオン伝導に及ぼす影響を調べるため、カチオンの秩序配列した蛍石型 BaBiF₅ 薄膜の合成を試みた。通常気相合成法ではカチオンはランダムに分布してしまうため、トポタクティック手法を試みた。すなわち、まずペロブスカイト型 BaBiO₃ 薄膜を合成し、これに PVDF を反応させることでフッ化物へと変換した。BaBiF₅ と BaBiO₃ では結晶構造が異なるが、カチオン配列は同一であるため、元の BaBiO₃ 中のカチオン配列が保持されることを期待した。比較的低温の 300 °C で PVDF と反応させたところ、カチオンが秩序配列した BaBiF₅ 膜を得ることに成功した。一方、反応温度を 350 °C まで上昇させると、カチオンの移動が起こり、Ba と Bi がランダムに配置した膜が得られた。すなわち、反応温度によりカチオンの配列を制御することができた。

続いて、結晶構造によるイオン拡散の制御について実証するため、ペロブスカイト型 Ru 酸化物と Fe 酸化物との積層膜を作成し、トポタクティック反応によるフッ素導入を試みた。その結果、Fe 酸化物層のみフッ化物イオンが拡散し、Ru 酸化物層にはフッ素は侵入しないことを明らかにした。従って、朝貢し技術はイオン拡散の制御に有用な戦略であると言える。ここで、Ru 酸化物中にフッ化物イオンが拡散しなかったのは、Ru の価数に変動しにくいことによると考えられる。

5. 主な発表論文等

〔雑誌論文〕 計7件（うち査読付論文 7件/うち国際共著 0件/うちオープンアクセス 1件）

1. 著者名 Akira Chikamatsu, Keisuke Kawahara, Takaaki Shiina, Tomoya Onozuka, Tsukasa Katayama, and Tetsuya Hasegawa	4. 巻 3
2. 論文標題 Fabrication of Fluorite-Type Fluoride Ba _{0.5} Bi _{0.5} F _{2.5} Thin Films by Fluorination of Perovskite BaBiO ₃ Precursors with Poly(vinylidene fluoride)	5. 発行年 2018年
3. 雑誌名 ACS Omega	6. 最初と最後の頁 13141-13145
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1021/acsomega.8b02252	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスとしている (また、その予定である)	国際共著 -
1. 著者名 M. Oka, H. Kamisaka, T. Fukumura and T. Hasegawa	4. 巻 17
2. 論文標題 DFT-based ab initio MD Simulation of the Ionic Conduction in Doped ZrO ₂ Systems under Epitaxial Strain	5. 発行年 2015年
3. 雑誌名 Phys. Chem. Phys. Chem.	6. 最初と最後の頁 29057-29063
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1039/C5CP03238E	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難	国際共著 -
1. 著者名 M. Oka, H. Kamisaka, T. Fukumura and T. Hasegawa	4. 巻 154
2. 論文標題 Density functional theory-based ab initio molecular dynamics simulation of ionic conduction in N-/F-doped ZrO ₂ under epitaxial strain	5. 発行年 2018年
3. 雑誌名 Comp. Mater. Sci.	6. 最初と最後の頁 91-96
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1016/j.commat.2018.07.038	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難	国際共著 -
1. 著者名 Y. Kurauchi, T. Katayama, A. Chikamatsu and T. Hasegawa	4. 巻 123
2. 論文標題 Two-dimensional fluorine distribution in a heavily distorted perovskite nickel oxyfluoride revealed by first-principles calculation	5. 発行年 2019年
3. 雑誌名 J. Phys. Chem. C	6. 最初と最後の頁 31190-31195
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1021/acs.jpcc.9b09112	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難	国際共著 -

1. 著者名 M. Oka, H. Kamisaka, T. Fukumura and Tetsuya Hasegawa	4. 巻 167
2. 論文標題 Interstitialcy diffusion of fluoride ions in LaOF by DFT-based first-principles calculations	5. 発行年 2019年
3. 雑誌名 Comp. Mater. Sci.	6. 最初と最後の頁 92-99
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1016/j.commat.2019.05.028	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難	国際共著 -

1. 著者名 A. Chikamatsu, Y. Suzuki, T. Maruyama, T. Onozuka, T. Katayama, D. Ogawa and T. Hasegawa	4. 巻 55
2. 論文標題 Selective fluorination of perovskite iron oxide/ruthenium oxide heterostructures via a topotactic reaction	5. 発行年 2019年
3. 雑誌名 Chem. Commun.	6. 最初と最後の頁 2437-2440
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1039/C8CC09443H	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難	国際共著 -

1. 著者名 A. Chikamatsu, T. Maruyama, T. Katayama, Y. Su, Y. Tsujimoto, K. Yamaura, M. Kitamura, K. Horiba, H. Kumigashira and T. Hasegawa	4. 巻 4
2. 論文標題 Electronic properties of perovskite strontium chromium oxyfluoride epitaxial thin films fabricated via low-temperature topotactic reaction	5. 発行年 2020年
3. 雑誌名 Phys. Rev. Mater.	6. 最初と最後の頁 025004/1-6
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1103/PhysRevMaterials.4.025004	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難	国際共著 -

〔学会発表〕 計13件 (うち招待講演 7件 / うち国際学会 6件)

1. 発表者名 Akira Chikamatsu, Keisuke Kawahara, Takaaki Shiina, Tomoya Onozuka, Tsukasa Katayama, and Tetsuya Hasegawa
2. 発表標題 Fabrication of fluorite-type Ba _{0.5} Bi _{0.5} F _{2.5} thin films by fluorination of perovskite BaBiO ₃ with polyvinylidene fluoride
3. 学会等名 E-MRS 2018 Spring Meeting (国際学会)
4. 発表年 2018年

1. 発表者名 長谷川 哲也
2. 発表標題 複合アニオン化合物薄膜の合成と物性開拓
3. 学会等名 第65回応用物理学会春季学術講演会（招待講演）
4. 発表年 2018年

1. 発表者名 長谷川 哲也
2. 発表標題 複合アニオン化合物薄膜におけるアニオン配列制御とその評価
3. 学会等名 第11回物性科学領域横断研究会（招待講演）
4. 発表年 2017年

1. 発表者名 T. Hasegawa
2. 発表標題 Growth of Electronic Functional Oxynitride Thin Films by Pulsed Laser Deposition
3. 学会等名 10th International Symposium on Transparent Oxide and Related Materials for Electronics and Optics（招待講演）（国際学会）
4. 発表年 2017年

1. 発表者名 長谷川 哲也
2. 発表標題 複合アニオン化合物薄膜の合成と物性開拓
3. 学会等名 第65回応用物理学会春季学術講演会（招待講演）
4. 発表年 2018年

1. 発表者名 Mayuko Oka, Hideyuki Kamisaka, Tomoteru Fukumura and Tetsuya Hasegawa
2. 発表標題 DFT-based ab initio MD Simulation of the Ionic Conduction in N/F-Doped ZrO ₂ under Epitaxial Strain
3. 学会等名 International Conference on Solid State Devices and Materials (国際学会)
4. 発表年 2016年

1. 発表者名 M. Oka, H. Kamisaka, T. Fukumura and T. Hasegawa
2. 発表標題 First-principle Computational Approach to Ionic Conduction in Transition Metal Oxide: Effect of strain, defects, and dopants in ZrO ₂ system
3. 学会等名 E-MRS 2016 Fall Meeting (招待講演) (国際学会)
4. 発表年 2016年

1. 発表者名 M. Oka, H. KAMISAKA, T. Fukumura and T. Hasegawa
2. 発表標題 DFT-based ab initio MD Simulation of the Ionic Conduction in Doped ZrO ₂ Systems under Epitaxial Strain
3. 学会等名 EMN Fuel Cell Meeting 2016 (招待講演) (国際学会)
4. 発表年 2016年

1. 発表者名 岡 真悠子, 神坂英幸, 福村知昭, 長谷川哲也
2. 発表標題 LaO _F におけるイオン伝導機構の第一原理計算
3. 学会等名 第10回分子科学討論会2016神戸
4. 発表年 2016年

1. 発表者名 川原皐紀, 神坂英幸, 長谷川哲也
2. 発表標題 Li ₃ xLa ₂ /3 xTiO ₃ 中の Li イオン伝導に対する格子歪みの効果: 分子動力学シミュレーション
3. 学会等名 第64回応用物理学会春季学術講演会
4. 発表年 2017年

1. 発表者名 岡真悠子, 神坂英幸, 福村知昭, 長谷川哲也
2. 発表標題 エピタキシャル歪み下におけるZrO ₂ 系薄膜の構造変化とイオン伝導性に関する第一原理計算
3. 学会等名 第18回理論化学討論会
4. 発表年 2015年

1. 発表者名 長谷川哲也
2. 発表標題 複合アニオン化合物エピタキシャル薄膜の合成と物性開拓
3. 学会等名 日本セラミックス協会第28回秋季シンポジウム (招待講演)
4. 発表年 2015年

1. 発表者名 M. Oka, H. Kamisaka, T. Fukumura and T. Hasegawa
2. 発表標題 DFT-based Ab Initio MD Simulation of the Ionic Conduction in Doped ZrO ₂ Systems under Epitaxial Strain
3. 学会等名 MANA-RSC symposium: Materials for Energy Generation and Storage (国際学会)
4. 発表年 2015年

〔図書〕 計0件

〔産業財産権〕

〔その他〕

-

6. 研究組織

	氏名 (ローマ字氏名) (研究者番号)	所属研究機関・部局・職 (機関番号)	備考
--	---------------------------	-----------------------	----