

令和 2 年 6 月 1 日現在

機関番号：14301

研究種目：基盤研究(B) (一般)

研究期間：2017～2019

課題番号：17H03145

研究課題名(和文) 格子欠陥が拓く原子スケール磁性強誘電体とその力学的機能制御

研究課題名(英文) Defect Engineering and Mechanical Control for Atomic-scale Multiferroics via Lattice Defects

研究代表者

嶋田 隆広 (Shimada, Takahiro)

京都大学・工学研究科・准教授

研究者番号：20534259

交付決定額(研究期間全体)：(直接経費) 13,700,000円

研究成果の概要(和文)：本研究では、機能が喪失する臨界ナノ寸法を克服し、微小な磁性強誘電体(マルチフェロイクス)を見出すことを目的とし、量子力学に基づく第一原理解析によって様々な格子欠陥部に発現する低次元かつ原子スケールの磁性・強誘電性を評価した。点欠陥である原子空孔やアンチサイト欠陥部、線欠陥である転位芯部では、欠陥部に局在化して発現する磁性と強誘電性が見られ、原子スケールのマルチフェロイクスを見出すことに成功した。また、それらの性質は、外部からの力学負荷によって制御できることを示した。さらに、こうした格子欠陥機能を記述する力学モデルを構築することで、複数の格子欠陥から成る複雑系の現象を解析することに成功した。

研究成果の学術的意義や社会的意義

本研究は、臨界寸法以下の磁性・強誘電性は存在し難いという点を覆し、格子欠陥によって原子スケールの磁性強誘電体を見出した点や、機能と力学的変形の相互作用であるマルチフィジックス原理を解明し、力学特性-磁性-強誘電性の3異種物理特性が作用する力学を提案する点に学術的意義がある。特に、マルチフィジックス特性は、ひずみ負荷によるシリコンのバンドギャップの変化を利用する「ひずみシリコン」など、電子デバイスへの応用が始まりつつあり、本研究成果によって、より高度なナノデバイス設計や全く新しい技術・製品開発に繋がると考えられる。

研究成果の概要(英文)：In this work, we aim to overcome the critical nano-dimensions where material functionality disappears and discover ultra-small magnetic ferroelectrics (multiferroics). We perform first-principles density-functional theory calculations to reveal the low-dimensional and atomic-scale ferroelectricity and magnetism appeared at lattice defects. The magnetic and ferroelectric properties localized to the defects are observed in the point defects, such as vacancies and anti-site defects, and in the line defects such as dislocation cores, and the single-atom scale multiferroics are successfully found. We also show that such lattice-defect properties can be controlled by external mechanical loading. Furthermore, by constructing a mechanics model to describe these lattice defect functions, we have succeeded in analyzing the phenomena of complex systems consisting of multiple lattice defects.

研究分野：計算材料力学

キーワード：格子欠陥 強誘電体 磁性 マルチフィジックス特性 第一原理解析

様式 C-19、F-19-1、Z-19 (共通)

1. 研究開始当初の背景

強誘電(圧電)性と磁性は互いに相反する発現機構を有することから、両特性を同時に示す材料は存在しないと考えられてきた。ところが、近年、それらを同時に示す新しい材料(磁性強誘電体; マルチフェロイクス)が発見され始めている。この磁性強誘電体は、電場・磁場を含む力場と緊密に作用する性質があることから世界中から注目を集め、ナノ・バイオ機械システム(NEMS)や高密度記録媒体、エネルギー機器などの次世代ナノ・生体・エネルギー科学技術の基幹材料となりつつある。一方、その実用化には、ナノサイズでの機能保持と、周囲部材との接合によるシビアな応力環境下での信頼性が重要な課題である。強誘電性や磁性は材料寸法に非常に敏感であることが知られており、特に、ナノスケールの構造体では自由表面が形成する反電場(強誘電性を減衰させる電場)や異材界面からの拘束が支配的となるため、臨界寸法(数十 nm)を境に機能が消失することが報告されている。すなわち、臨界ナノ寸法以下の微小な磁性強誘電体は実現し難いとされてきた。

研究代表者は、ナノスケールの強誘電体の原子・電子構造を量子力学的観点から解明する研究過程で、材料中の格子欠陥部に、本来有り得ないはずの磁性や強誘電性が現れることを発見した。例えば、転位では、その芯部に磁性・強誘電性が同時に発現し、転位芯自体が原子数個程度の寸法の磁性強誘電体となる。さらに、格子欠陥によって誘起される磁性強誘電性は、マクロ材で見られる単純な直線状の性質と異なる様相を示す。これらは、格子欠陥によるマルチフェロイックな特性が従来のそれとは全く異なる発現機構を有することを示唆している。ところが、その詳細な発現条件や特性、発現メカニズムはいまだ解明されていない。

他方で、申請者は、負荷によるひずみ(変形)に連動して、様々な材料機能(強誘電性/磁性/半導体性能等)が向上/劣化することを発見しており、力学・電子物性間の相互作用(マルチフィジックス特性)とその原理を電子・原子スケールから解明する研究に従事してきた。このマルチフィジックス特性を利用することで、材料の機能を力学的に制御し、従来以上に引き出すことが可能である。本研究対象の磁性強誘電体については、3 物性間(力学的変形-磁性-強誘電性)のさらに複雑かつ緊密なマルチフィジックス相互作用が予想され、この原理を解明・利用することで上述の格子欠陥機能の力学的な制御・設計が実現できる。

以上の研究過程から、格子欠陥によって発現する新奇磁性・強誘電特性とその発現メカニズムを明らかにすることで、原子スケールの磁性強誘電体を実現できること、力学的変形特性(ひずみ)と新奇特性間の相互作用原理(マルチフィジックス特性)を解明し、積極的に利用することで、この機能を力学的に制御・設計できること、に思い至った。

2. 研究の目的

本研究では、**Infini-band** を用いた高速通信を実装した並列計算システムを構築し、最新の量子解析手法・理論を用いることで、格子欠陥の低次元性や特異な原子構造・電子状態に依存して現れる磁性・強誘電特性とその発現機構を解明することを目的とする。さらに、負荷ひずみに対する格子欠陥機能の連動作用(マルチフィジックス原理)を究明することで、このマルチフェロイク特性を力学的に制御し、従来以上に引き出すための力学設計基盤となる法則性を明らかにする。

3. 研究の方法

高速通信機器 **Infini-band** を組み込んだ並列計算システムに、第一原理計算プログラムを実装・調整し、大規模な量子力学解析を行う。局在電子系・強相関電子系を正確に解析するため、DFT+U 法、Hartree-Fock/密度汎関数理論のハイブリッド法を用いた高度な第一原理量子力学シミュレーションを行う。

4. 研究成果

本研究では、非磁性・常誘電体である SrTiO₃ を母材とし、SrTiO₃ 中に存在する点欠陥、線欠陥、面欠陥などの種々の格子欠陥について体系的に研究を行った。以下では、主たる成果を取り上げて示す。

点欠陥の代表例として、A サイトを別種の原子 B が占めるアンチサイト欠陥がある。図 1 は、SrTiO₃ 中に Sr サイトを Ti 原子が置換した Ti アンチサイト欠陥における解析結果である。図 1 左は原子アンチサイト欠陥が存在するときの局所分極分布を示しており、図中黄色矢印が局所分極を示す。同図より、分極が Ti 原子アンチサイト欠陥を含む格子のみに発現し、その方向は Ti 原子アンチサイト欠陥の変位方向であることがわかる。これは、Ti 原子アンチサイト欠陥のみが完全結晶の原子位置から大きく変位し、欠陥以外の領域の原子は変位が小さいためと考えられる。ここで、分極が発現した領域は、Ti 原子アンチサイト欠陥を含む 1 単位格子程度の領域に限られる。これは、通常の強誘電体がその強誘電性を消失する臨界サイズ(3 ~ 5 nm)以下であるため、SrTiO₃ 中の Ti アンチサイト欠陥によって臨界サイズ以下の強誘電材料を実現できることを示している。また、図 1 右は、SrTiO₃ 中に Ti 原子アンチサイト欠陥が存在するときの磁気密度分布を示す。SrTiO₃ は磁性材料ではないため SrTiO₃ 母材には磁性は現れないが、SrTiO₃ 中に同欠陥が存在するときは磁性が現れ、またその磁性は同欠陥まわりの領域にのみ局在化する。以上より、アンチサイト欠陥は磁性と強誘電性を同時に示し、かつ、その機能が単原子・単格子サイズである微小マルチフェロイクスとして振る舞うことを示した。

このアンチサイト欠陥におけるマルチフェロイック特性の力学負荷依存性について検討した。図2は、(001)面内ひずみが負荷された際の分極・磁気モーメントの変化を示す。ひずみ負荷を行うことでアンチサイト欠陥の分極・磁気モーメント方向が応答する様子が見られ、特にその方向がひずみに依存して回転することが分かる。すなわち、アンチサイト欠陥によって誘起されたマルチフェロイック特性は、従来の強誘電体や磁性体と同様、力学負荷とのカップリング効果を示し、圧電性・磁歪を有することを明らかにした。さらに、引張、あるいは圧縮ひずみの別やそのひずみ量によって両特性の方向の指向性は異なるため、所望の負荷を与えることで同欠陥の特性の力学的に制御・設計できることを示した。

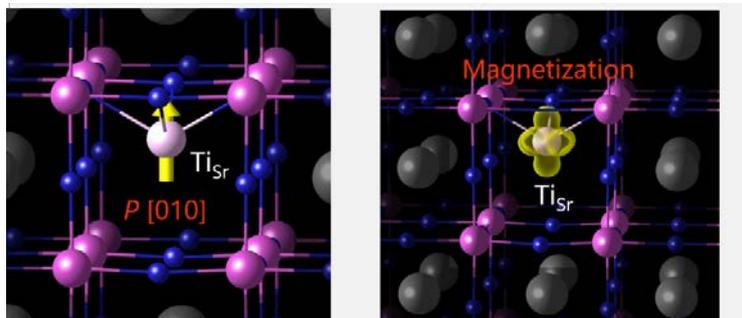


図1. Ti_{Sr} アンチサイト欠陥における強誘電分極分布 (左図) と磁気密度分布 (右図).



図2. (001)面内引張・圧縮ひずみ下におけるアンチサイト欠陥の磁性・強誘電性の力学応答.

次に、線欠陥の代表例である転位についての研究結果について示す。ここでも、非磁性・常誘電体である SrTiO_3 を母材とし、同材料中の刃状転位を対象とした結果を示す。図3左は、Sr原子が余剰となる転位芯構造を有する刃状転位芯 (Sr-rich 転位芯) 近傍の強誘電分極分布を示す。 SrTiO_3 完全結晶には分極が存在しないものの、Sr-rich 刃状転位芯周囲には強誘電分極が現れる。強誘電分極の大きさは転位芯部で最大となっており、転位芯から離れるにしたがって減少する。すなわち、Sr-rich 刃状転位芯では転位芯下部から右側にかけての数格子スケールの微小領域にのみ強誘電性が発現している。また、図3右は、Ti原子が余剰となる転位芯構造を有する刃状転位芯 (Ti-rich 転位芯) 近傍転位芯部の磁気モーメントの密度分布を示す。図中黄色と緑色の領域は、磁気密度の値がそれぞれ正、負の領域を示す。 SrTiO_3 完全結晶は本来非磁性材料であるが、Ti-rich 刃状転位では転位芯の2本のTi-O原子列のTi原子に磁気モーメントが局在化して発現する。これらの隣接するTi原子に局在化した磁気モーメントは、それぞれ符号が異なっていることから、Ti-rich 刃状転位芯部では転位線に沿って反強磁性 (Antiferromagnetic; AFM) 相の1次元的磁気構造が現れることが明らかになった。

こうした微小機能発現機能を検討するため、欠陥周囲に生じる力学場 (ひずみ場) の観点から検討を行った。図4は、Sr-rich 刃状転位芯まわりの垂直ひずみ分布を示す。図中桃色は引張ひずみ、水色は圧縮ひずみを示す。図より、転位芯上部では圧縮、下部では引張ひずみ状態が支配的となり、転位芯近傍にひずみが集中している様子が見られる。特に、大きな引張りひずみが存在する転位芯下部において、強誘電性が発現している。すなわち、離散的な構造をもち、材料内部の局所だけにひずみが集中する転位芯においても、ひずみ集中に起因して強誘電性が発現することが示唆される。一方で、磁性は、転位芯固有の原子構造による組成不整合により余剰電子が生じ、これが欠陥固有の電子状態 (欠陥準位) を形成するとともに、その軌道がスピン分極することで生じることが明らかになった。したがって、転位芯が有するマルチフェロイック特性は、転位芯が作り出す自発的な局所ひずみ場と原子組成の不整合によって発現することを示した。この機構に基づき、他材料においても強誘電性や磁性の発現を予測し、これらを工学利用することが可能となる。

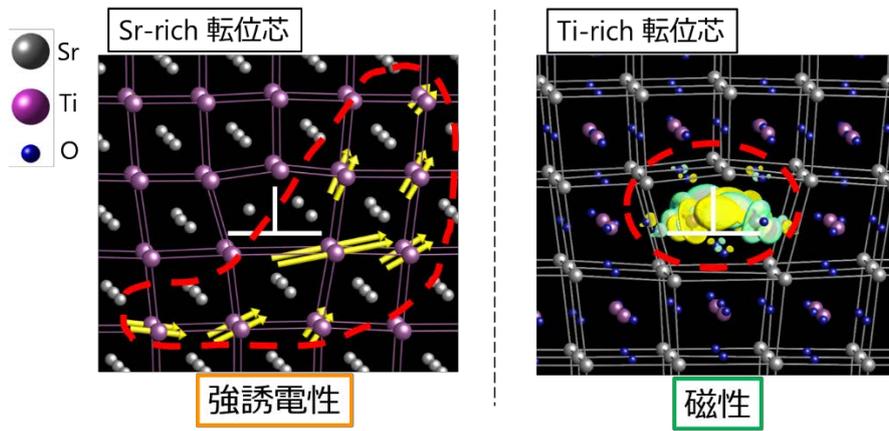


図 3. 刃状転位芯近傍における強誘電分極分布（左図）と磁気密度分布（右図）.

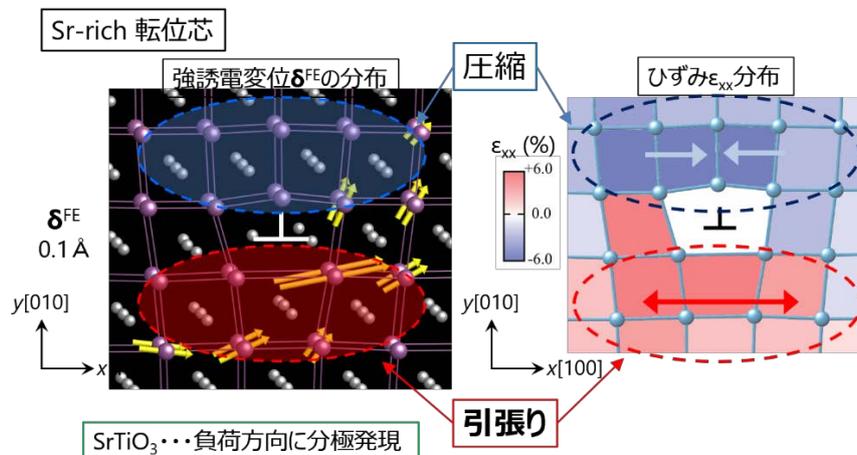


図 4. 刃状転位芯近傍における力学場（ひずみ場）の解析結果.

さらに、研究では、種々の格子欠陥についてのマルチフェロイック特性の発現とそのメカニズムを基に、本現象の力学モデルを構築した。分極や磁気モーメントと秩序変数として自由エネルギーを記述し、これを時間依存型 Landau-Ginzburg 方程式に基づいて Phase-field 法の枠組みの中で数値的に解くことで、連続体力学的モデルを構築した。図 5 に示すように、本力学モデルは第一原理解析結果をよく再現するとともに、転位列などのより複雑かつ大規模な格子欠陥システム中のマルチフェロイック特性を評価することにも成功している。これを用いることで格子欠陥工学 (Defect Engineering) に基づくより複雑な機能設計が可能となる。

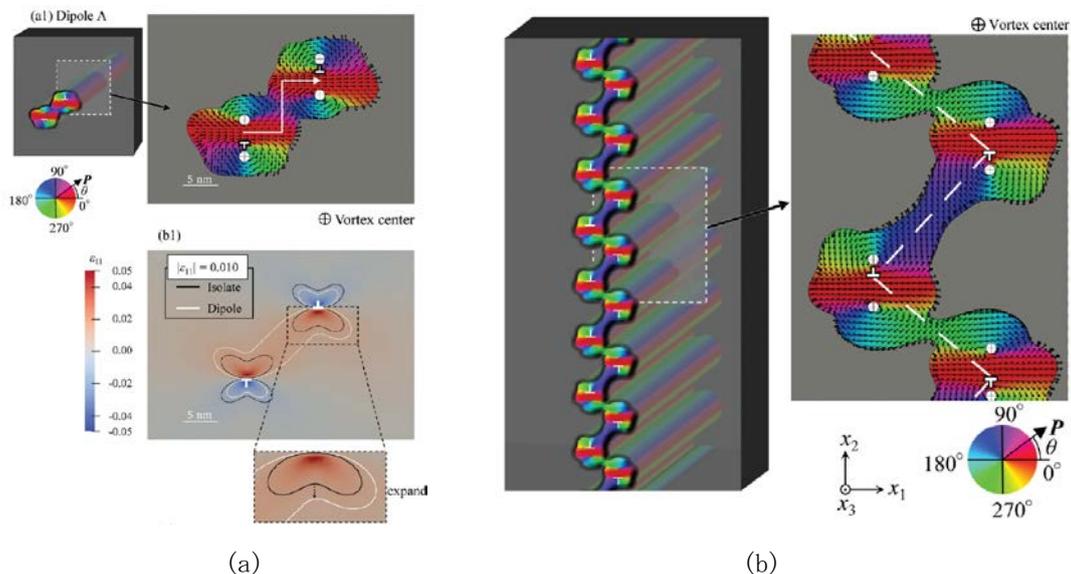


図 5. Phase-field 解析による転位列の強誘電性分布解析結果.

5. 主な発表論文等

〔雑誌論文〕 計21件（うち査読付論文 21件／うち国際共著 21件／うちオープンアクセス 1件）

1. 著者名 Le Van Lich, Tinh Quoc Bui, Takahiro Shimada, Takayuki Kitamura, Trong-Giang Nguyen, and Van-Hai Dinh	4. 巻 11
2. 論文標題 Deterministic switching of polarization vortices in compositionally graded ferroelectrics using a mechanical field	5. 発行年 2019年
3. 雑誌名 Physical Review Applied	6. 最初と最後の頁 54001
掲載論文のDOI（デジタルオブジェクト識別子） なし	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 該当する
1. 著者名 Tao Xu, Takahiro Shimada, Yasumitsu Araki, Masataka Mori, Gen Fujimoto, Jie Wang, Tong-Yi Zhang, and Takayuki Kitamura	4. 巻 5
2. 論文標題 Electron engineering of metallic multiferroic polarons in epitaxial BaTiO ₃	5. 発行年 2019年
3. 雑誌名 npj Computational Materials	6. 最初と最後の頁 23-1 - 23-7
掲載論文のDOI（デジタルオブジェクト識別子） 10.1038/s41524-019-0163-6	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 該当する
1. 著者名 Jie Wang, Yajun Zhang, Mohapatra Prakash Kumar Sahoo, Takahiro Shimada, Takayuki Kitamura, and Tong-Yi Zhang	4. 巻 8
2. 論文標題 Giant magnetoelectric effect at the graphone/ferroelectric interface	5. 発行年 2018年
3. 雑誌名 Scientific Reports	6. 最初と最後の頁 12448
掲載論文のDOI（デジタルオブジェクト識別子） 10.1038/s41598-018-30010-x	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 該当する
1. 著者名 Xiaoyuan Wang, Yabin Yan, Takahiro Shimada, Jie Wang, Takayuki Kitamura	4. 巻 123
2. 論文標題 Ferroelectric critical size and vortex domain structures of PbTiO ₃ nanodots: A density functional theory study	5. 発行年 2018年
3. 雑誌名 Journal of Applied Physics	6. 最初と最後の頁 114101
掲載論文のDOI（デジタルオブジェクト識別子） 10.1063/1.5013049	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 該当する

1. 著者名 Xu Hou, Huiyu Li, Takahiro Shimada, Takayuki Kitamura, Jie Wang	4. 巻 123
2. 論文標題 Effect of geometric configuration on the electrocaloric properties of nanoscale ferroelectric materials	5. 発行年 2018年
3. 雑誌名 Journal of Applied Physics	6. 最初と最後の頁 124103
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1063/1.5020584	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 該当する

1. 著者名 Le Van Lich, Takahiro Shimada, Jie Wang, Kairi Masuda, Tinh Quoc Bui, Van-Hai Dinh, Takayuki Kitamura	4. 巻 190
2. 論文標題 Continuum thermodynamics of unusual domain evolution-induced toughening effect in nanocracked strontium titanate	5. 発行年 2018年
3. 雑誌名 Engineering Fracture Mechanics	6. 最初と最後の頁 232-244
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1016/j.engfracmech.2017.12.030	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 該当する

1. 著者名 Tao Xu, Takahiro Shimada, Yoshitaka Uratani, Xiaoyuan Wang, Jie Wang, and Takayuki Kitamura	4. 巻 7
2. 論文標題 Multiferroic phases and transitions in ferroelectric lead titanate nanodots	5. 発行年 2017年
3. 雑誌名 Scientific Reports	6. 最初と最後の頁 45373
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1038/srep45373	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 該当する

1. 著者名 Takahiro Shimada, Tao Xu, Yasumitsu Araki, Jie Wang, and Takayuki Kitamura	4. 巻 17
2. 論文標題 Multiferroic dislocations in ferroelectric PbTiO ₃	5. 発行年 2017年
3. 雑誌名 Nano Letters	6. 最初と最後の頁 2674-2680
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1021/acs.nanolett.7b00505	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 該当する

1. 著者名 Tao Xu, Takahiro Shimada, Jie Wang, and Takayuki Kitamura	4. 巻 6
2. 論文標題 Antiferroelectric and antiferrodistortive phase transitions in Ruddlesden-Popper Pb ₂ TiO ₄ from first-principles	5. 発行年 2017年
3. 雑誌名 Coupled System Mechanics	6. 最初と最後の頁 29-40
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.12989/csm.2017.6.1.029	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 該当する

1. 著者名 Yinuo Shi, Hongjun Yu, Takahiro Shimada, Jie Wang, and Takayuki Kitamura	4. 巻 65
2. 論文標題 Phase field simulations on domain switching-induced toughening in ferromagnetic materials	5. 発行年 2017年
3. 雑誌名 European Journal of Mechanics - A/Solids	6. 最初と最後の頁 205-211
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1016/j.euromechsol.2017.04.007	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 該当する

1. 著者名 Takahiro Shimada, Tao Xu, Yasumitsu Araki, Jie Wang, and Takayuki Kitamura	4. 巻 3
2. 論文標題 Unusual metallic multiferroic transitions in electron-doped PbTiO ₃	5. 発行年 2017年
3. 雑誌名 Advanced Electronic Materials	6. 最初と最後の頁 1700134
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1002/aelm.201700134	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 該当する

1. 著者名 Yajun Zhang, Jie Wang, Mohapatra Prakash Kumar Sahoo, Takahiro Shimada, and Takayuki Kitamura	4. 巻 19
2. 論文標題 Strain-induced ferroelectricity and lattice coupling in BaSnO ₃ and SrSnO ₃	5. 発行年 2017年
3. 雑誌名 Physical Chemistry Chemical Physics	6. 最初と最後の頁 26047-26055
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1039/c7cp03952b	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 該当する

1. 著者名 Yajun Zhang, MPK Sahoo, Takahiro Shimada, Takayuki Kitamura, and Jie Wang	4. 巻 96
2. 論文標題 Strain-induced improper ferroelectricity in Ruddlesden-Popper perovskite halides	5. 発行年 2017年
3. 雑誌名 Physical Review B	6. 最初と最後の頁 144110
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1103/PhysRevB.96.144110	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 該当する

1. 著者名 Yajun Zhang, Takahiro Shimada, Takayuki Kitamura, and Jie Wang	4. 巻 8
2. 論文標題 Ferroelectricity in Ruddlesden-Popper chalcogenide perovskites for photovoltaic application: A role of tolerance factor	5. 発行年 2017年
3. 雑誌名 The Journal of Physical Chemistry Letters	6. 最初と最後の頁 5834-5839
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1021/acs.jpcllett.7b02591	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 該当する

1. 著者名 Xiaoyuan Wang, Yabin Yan, Takahiro Shimada, Jie Wang, Takayuki Kitamura	4. 巻 123
2. 論文標題 Ferroelectric critical size and vortex domain structures of PbTiO ₃ nanodots: A density functional theory study	5. 発行年 2018年
3. 雑誌名 Journal of Applied Physics	6. 最初と最後の頁 114101
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1063/1.5013049	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 該当する

1. 著者名 益田 快理, Le Van Lich, 嶋田 隆広, 北村 隆行	4. 巻 85
2. 論文標題 周期配列ナノ強誘電構造の力学的創出	5. 発行年 2019年
3. 雑誌名 日本機械学会論文集	6. 最初と最後の頁 19-00175
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1299/transjsme.19-00175	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 該当する

1. 著者名 Le Van Lich, Minh-Tien Le, Tinh Quoc Bui, Thanh-Tung Nguyen, Takahiro Shimada, Takayuki Kitamura, Trong-Giang Nguyen, and Van-Hai Dinh	4. 巻 179
2. 論文標題 Asymmetric flux-closure domains in compositionally graded nanoscale ferroelectrics and unusual switching of toroidal ordering by an irrotational electric field	5. 発行年 2019年
3. 雑誌名 Acta Materialia	6. 最初と最後の頁 215-223
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1016/j.actamat.2019.08.025	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 該当する

1. 著者名 Kairi Masuda, Le Van Lich, Takahiro Shimada, and Takayuki Kitamura	4. 巻 21
2. 論文標題 Topological ferroelectric nanostructures induced by mechanical strain in strontium titanate	5. 発行年 2019年
3. 雑誌名 Physical Chemistry Chemical Physics	6. 最初と最後の頁 22420-22428
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1039/c9cp03802g	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 該当する

1. 著者名 Kairi Masuda, Le Van Lich, Takahiro Shimada, and Takayuki Kitamura	4. 巻 21
2. 論文標題 Periodically-arrayed ferroelectric nanostructures induced by dislocation structures in strontium titanate	5. 発行年 2019年
3. 雑誌名 Physical Chemistry Chemical Physics	6. 最初と最後の頁 22756-22762
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1039/c9cp04147h	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 該当する

1. 著者名 Van-Hai Dinh, Le Van Lich, Tinh Quoc Bui, Le Van Tuan, Trong-Giang Nguyen, Takahiro Shimada, and Takayuki Kitamura	4. 巻 21
2. 論文標題 Intrinsic and extrinsic effects on the electrotoroidic switching in a ferroelectric notched nanodot by a homogeneous electric field	5. 発行年 2019年
3. 雑誌名 Physical Chemistry Chemical Physics	6. 最初と最後の頁 25011-25022
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1039/c9cp04676c	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 該当する

1. 著者名 Xiaoyuan Wang, Tao Xu, Fuzhen Xuan*, Chang Qing Chen, Takahiro Shimada, and Takayuki Kitamura	4. 巻 126
2. 論文標題 Effect of the oxygen vacancy on the ferroelectricity of 90° domain wall structure in PbTiO ₃ : A density functional theory study	5. 発行年 2019年
3. 雑誌名 Journal of Applied Physics	6. 最初と最後の頁 174107
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1063/1.5125306	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 該当する

〔学会発表〕 計11件 (うち招待講演 1件 / うち国際学会 8件)

1. 発表者名 Takahiro Shimada
2. 発表標題 QM/MM modeling of brittle fracture from a dislocation core in SrTiO ₃
3. 学会等名 15th Asia-Pacific Conference on Fracture and Strength (国際学会)
4. 発表年 2018年

1. 発表者名 Takahiro Shiraishi
2. 発表標題 Shear deformation induces localized chemical reaction of Ti/Si multilayered nanofilms
3. 学会等名 15th Asia-Pacific Conference on Fracture and Strength (国際学会)
4. 発表年 2018年

1. 発表者名 Kotaro Yamaguchi
2. 発表標題 Creep properties of submicrometer-sized single-crystal Al
3. 学会等名 15th Asia-Pacific Conference on Fracture and Strength (国際学会)
4. 発表年 2018年

1. 発表者名 Takahiro Shimada
2. 発表標題 Multiferroic polarons in doped perovskite oxides
3. 学会等名 2018 MRS Fall Meeting & Exhibit (国際学会)
4. 発表年 2018年

1. 発表者名 Takahiro Shimada
2. 発表標題 Defect-induced multiferroics with atomic dimensions in nonmagnetic ferroelectrics
3. 学会等名 2017 MRS Fall Meeting & Exhibit (国際学会)
4. 発表年 2017年

1. 発表者名 Takahiro Shimada
2. 発表標題 Ultimately small multiferroics designed by lattice defects in ferroelectrics
3. 学会等名 International Conference on Fracture (ICF14) (国際学会)
4. 発表年 2017年

1. 発表者名 嶋田隆広
2. 発表標題 強誘電体PbTiO ₃ 中の刃状転位芯による格子寸法マルチフェロイクス
3. 学会等名 第2回マルチスケール材料力学シンポジウム
4. 発表年 2017年

1. 発表者名 嶋田隆広
2. 発表標題 SrTiO ₃ 中の刃状転位を起点とする破壊に関するQM/MM解析
3. 学会等名 第22回計算工学講演会
4. 発表年 2017年

1. 発表者名 嶋田隆広
2. 発表標題 SrTiO ₃ 中の転位芯を起点とする破壊に関する QM/MM 解析
3. 学会等名 M&M2017材料力学カンファレンス
4. 発表年 2017年

1. 発表者名 Takahiro Shimada
2. 発表標題 Fracture criteria for nanoscale stress singularity in brittle materials
3. 学会等名 Materials Structures & Micromechanics of Fracture (MSMF9) (招待講演) (国際学会)
4. 発表年 2019年

1. 発表者名 Takahiro Shimada
2. 発表標題 Nontrivial Topological Polarization Field Self-Ordered in Nanoporous Ferroelectrics - A Phase-Field Modeling
3. 学会等名 2019 MRS Fall Meeting & Exhibit (国際学会)
4. 発表年 2019年

〔図書〕 計1件

1. 著者名 Yoshitaka Umeno, Takahiro Shimada, Yusuke Kinoshita, and Takayuki Kitamura	4. 発行年 2017年
2. 出版社 Springer Japan	5. 総ページ数 214
3. 書名 Multiphysics in Nanostructures	

〔産業財産権〕

〔その他〕

京都大学 研究教育活動データベース http://kyouindb.iimc.kyoto-u.ac.jp/j/gT3rQ
--

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
---------------------------	-----------------------	----