

科学研究費助成事業 研究成果報告書

令和 5 年 6 月 4 日現在

機関番号：14301

研究種目：基盤研究(B) (一般)

研究期間：2020～2022

課題番号：20H02027

研究課題名(和文) 機能化格子欠陥による磁性強誘電原子構造体の創出と力学的機能設計

研究課題名(英文) Creation and Mechanical Design of Atomic-scale Multiferroics by Functionalized Defect Engineering

研究代表者

嶋田 隆広 (Shimada, Takahiro)

京都大学・工学研究科・教授

研究者番号：20534259

交付決定額(研究期間全体)：(直接経費) 13,900,000円

研究成果の概要(和文)：本研究では、原子空孔・転位などといった格子欠陥に着目し、量子力学に基づく第一原理計算を行うことで、格子欠陥部に母材にはない原子スケールのミクロな磁性・強誘電性が発現することを明らかにした。すなわち、臨界ナノ寸法以下の構造体では強誘電性等は存在し得ないという従来概念を覆し、格子欠陥によって原子スケールの磁性強誘電体を創り出せることを示した。また、格子欠陥の構造に依存して発現する機能が異なっており、構造機能相関の存在と構造設計可能性を示した。さらに、負荷ひずみに対する新奇特性の運動性(マルチフィジックス)を究明し、この格子欠陥機能を力学的に制御する指針を示した。

研究成果の学術的意義や社会的意義

本研究は、力学的な負荷ひずみと、従来は材料機能を劣化させる因子として忌避されてきた欠陥によって新奇な磁性強誘電体を創り出すことで、材料力学的観点に基づく全く新しい機能創成の可能性を開拓した点にその学術的意義がある。特に、臨界寸法以下の強誘電性は存在し得ないという従来概念を覆し、格子欠陥によって究極的に小さな原子寸法の磁性強誘電体の可能性を示した点にその特徴がある。また、負荷・電場・磁場の複合力場による複数の極性(磁気モーメント・分極)を利用した新規情報記録デバイスの超大容量化などの新しい技術を開拓するためのナノ機能要素を示した点に産業応用としての社会的意義がある。

研究成果の概要(英文)：In this study, we focused on lattice defects such as atomic vacancies and dislocations and performed first-principles calculations based on quantum mechanics, and revealed that atomic-scale microscopic magnetism and ferroelectricity, which do not exist in the host material, can be created in the lattice defects. In other words, we have shown that atomic-scale multiferroics can be created by engineering lattice defects, and overcome the conventional notion that ferroelectricity cannot exist below the critical nanoscale size. The structure-property relationship and the possibility of structural design were also demonstrated here. Furthermore, we have investigated the coupling of novel properties with applied strain (multiphysics), and have provided a guideline for controlling the lattice defect function in terms of mechanics.

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

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、研究代表者を含む世界の先進研究により、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・磁場を含む全ての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、既にナノ・バイオ機械システム(NEMS)や高密度情報媒体、エネルギー機器などの次世代ナノ・バイオ・情報・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。ところが、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、ナノスケールの構造体では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、臨界寸法を境にこれらの機能が消失することが報告されている。

さて、一般に、材料中に多数含まれる転位や空孔などの格子欠陥は、材料特性・機能を劣化させる。ところが、研究代表者は、非磁性・非強誘電材料中の格子欠陥に、本来有り得ないはずの磁性・強誘電性が現れることを発見した。例えば、転位では芯部に磁性・強誘電性が同時に発現しており、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。すなわち、格子欠陥によって、物理的な臨界寸法を超えた原子スケールの磁性強誘電体を創出できることに気付いた。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り、螺旋状や渦状などナノメートル程度の周期性を有することも同時に発見している。これらは、格子欠陥によって創出した磁性強誘電体が従来とは全く異なる発現機構と新奇な特性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、研究代表者は、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できる。本研究対象の格子欠陥誘起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新奇特性の力学的な制御・設計が実現できる可能性がある。

以上の研究過程から、本研究では、「格子欠陥が創り出す原子スケールの特異な磁性・強誘電特性の根源的発現機構は何であるのか?」を本研究の学術的問いとして掲げ、この発現メカニズムを解明することで臨界寸法を超えた超微小スケール磁性強誘電体を創出できること、さらに、この新奇機能を力学的に制御・設計するための力学-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

以上の研究背景・経緯から、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原子・電子レベルから解明し、臨界寸法を超えた超微小スケール磁性強誘電体を創出することを主目的とする。

3. 研究の方法

格子欠陥に発現する原子スケールの磁性強誘電性は、複数の物理特性が混在する磁性強誘電体の電子状態は非常に複雑であり(強相関係)、通常の第一原理計算(量子解析)ではその特性を全く評価できないばかりか、長周期の磁気・分極構造を評価するためには大規模な量子解析実施が不可欠となる。そこで、本研究では、新奇特性評価のための大規模・改良型量子解析手法の構築を行い、これを用いて、格子欠陥構造に依存する新奇磁気・強誘電特性の発現条件・特性を評価し、電子状態解析によりその発現機構を原子・電子レベルから解明する。さらに、これらの格子欠陥に対して力学負荷解析を実施し、発現する新奇特性と負荷ひずみの連動作用(マルチフィジックス原理)を解明する。量子解析で得られた成果を基に、格子欠陥-磁性-強誘電性が連動する新しいモデルを構築することで、この新奇機能を力学的に制御・設計する基盤技術の構築を目指す。

4. 研究成果

本研究では、原子空孔、転位、結晶粒界など様々な格子欠陥に対する大規模第一原理計算を系統に行い、各格子欠陥における強誘電性・磁性の発現とその特性について検討を行った。以下では、その代表として、転位に関する成果について示す。

図1(a)は、SrTiO₃中のらせん転位近傍における強誘電変位の大きさと転位芯からの距離の関係を示す。強誘電変位は、転位芯部において最も大きく、転位芯からの距離の増大にしたがい減少する。すなわち、らせん転位における分極は転位芯近傍の数格子の局所領域のみに発現してお

り、SrTiO₃ 中のらせん転位には原子スケールのらせん状分極が発現する。

図 1(b)は、同らせん転位芯部における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+0.03 と -0.03 $\mu_B/\text{\AA}^3$ の等値面を示す。SrTiO₃ 完全結晶は本来非磁性材料であるが、SrTiO₃ 中のらせん転位芯の 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とが明らかになった。転位線方向に隣接する Ti 原子に局在化した磁気モーメントは、交互に符号が異なっており、反強磁性秩序の磁気モーメントを示す。すなわち、らせん転位芯は、転位芯の Ti 原子のみに磁性が発現し、一次元の反強磁性秩序を発現する。

以上の強誘電性・磁性に関する解析により、SrTiO₃ のらせん転位は強誘電性と磁性が同時に現れるマルチフェロイック転位であることを明らかにした。さらに、両物性は転位芯近傍の原子スケール領域のみに発現し、その周囲では現れないことから、このマルチフェロイック転位は 1 次元原子スケールマルチフェロイクスとして振る舞うことを示した。

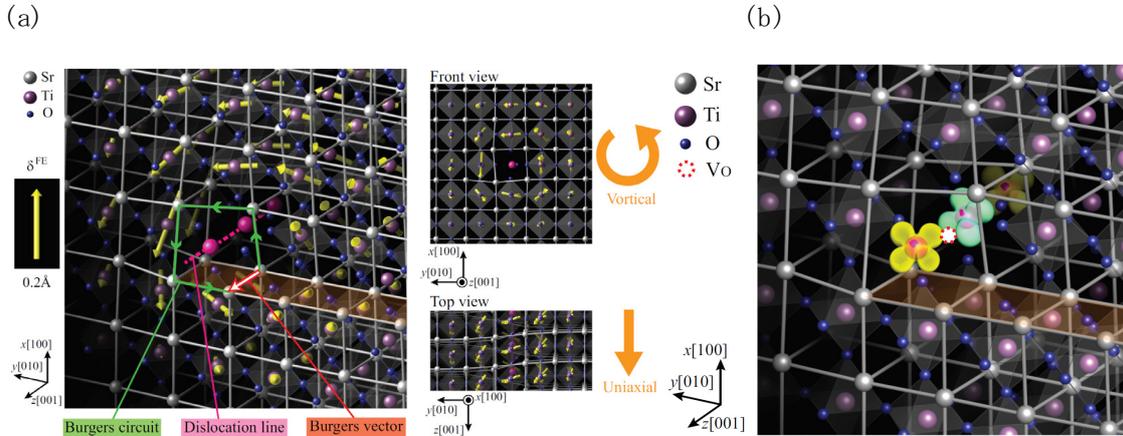


図 1. (a) SrTiO₃ 中のらせん転位芯近傍における強誘電変位の分布に関する第一原理計算結果。(b) SrTiO₃ 中のらせん転位芯近傍における磁気モーメントの分布に関する第一原理結果。

図 2(a)は、らせん転位芯まわりのせん断ひずみ分布と分極分布の関係を示す。らせん転位芯近傍のせん断ひずみは、中心部で大きく、転位芯からの距離に応じて減少する。このようなせん断ひずみ分布は、弾性論に基づき導出される理論解においても現れ、本解析結果はそれと良く一致する。したがって、導出されたひずみ分布はらせん転位固有のひずみ分布である。ここで、らせん転位まわりのひずみ分布と発現する分極の対応関係に着目すると、格子が有するせん断ひずみ成分の方向に分極が現れていることが明らかになった。したがって、らせん転位におけるらせん状分極構造は、らせん転位の有するひずみ場によって誘起される。

図 2(b)は、らせん転位芯のエネルギーバンド構造を示す。図中緑線は、Fermi エネルギーである。らせん転位ではバンドギャップ中にエネルギー準位が形成される。転位芯構造によって系に導入される余剰電子はバンドギャップ中に局在化し、このエネルギー準位を占有する。図 2(c)は、このエネルギー準位を占有する余剰電子の Up-spin と Down-spin の電子密度分布を示す。余剰電子はスピン分極し、Up-spin と Down-spin の電子はそれぞれ別の Ti 原子に局在化して 3d 軌道を占有する。すなわち、この電子のスピンの差が、らせん転位芯での磁気モーメント発現を担っており、転位芯が一次元反強磁性体となるメカニズムを明らかにした。

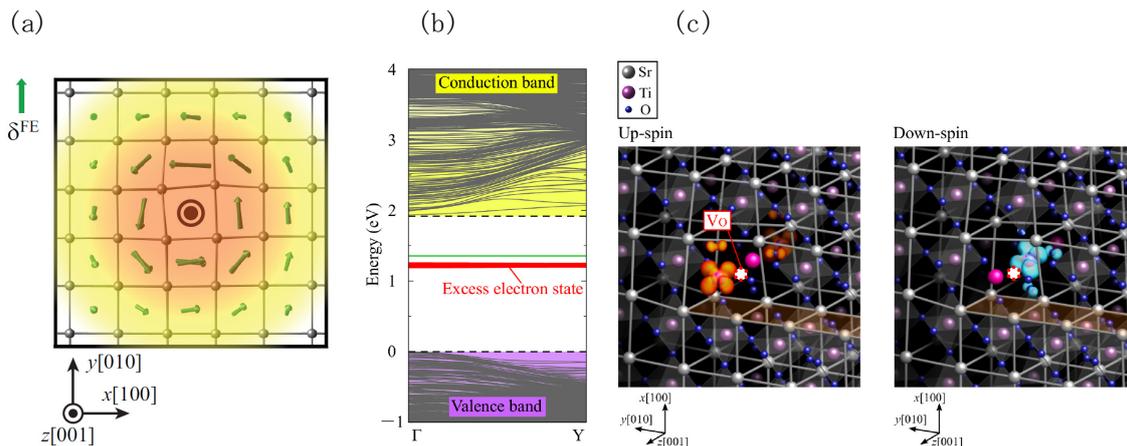


図 2. (a) らせん転位芯近傍のせん断ひずみ場と発現分極の関係。(b) らせん転位のエネルギーバンド図。(c) 欠陥固有の電子状態の Up/Down スピンの分布図。

次に、転位芯の固有の変形特性と発現物性との相関であるマルチフィジックス特性を明らかにするため、転位芯に対して引張負荷第一原理計算を行った。図3は、引っ張りひずみが0.0%、0.9%、2.0%、2.8%、3.3%、3.5%における転位芯近傍の原子構造の詳細を示す。図中の赤色の原子はTi原子間との結合が切断されたO原子を、黄緑色の原子は結合が切断されているTi、O原子近傍のSr原子を示す。図中(a-1)より、無負荷時において、転位芯直上(z軸正方向)の2列のTi-O原子間の結合が切断されている。ひずみ0.9%まで負荷が増大すると、この切断されている結合の直上に存在するTi-O原子間の結合が切断される(図中(a-2))。すなわち、切断されているTi-O原子列がz方向に2列から3列に増加し、構造変化が生じる。さらなる負荷の増大に伴い、同様にz方向に1列ずつTi-O結合の切断が起こり、転位近傍の構造が変形していく(図中(a-3) (a-5))。図3(b)は、各ひずみ点における電子密度分布を示す。図中の赤色原子は、Ti原子と結合していないO原子を示す。図中の黄色領域は、電子密度分布の等値面 $0.038 \text{ e}/\text{\AA}^{-3}$ を示す。図中(b-1)より、転位芯上部のO原子と隣接するTi原子との間の電子密度は高く、Ti-O原子間結合が存在している。一方、赤色で示すO原子と隣接する片方のTi原子との間では電子密度分布が低く、結合を形成していない。無負荷時で電子密度の高いTi-O原子間について、ひずみを0.9%まで増大させると電子密度が希薄になっており(図中(b-2))、赤色のO原子とTi原子の結合が切断される。以後の負荷ひずみの増大に伴う原子構造変化も電子密度の観点から結合切断であると判断でき、転位芯に負荷を加えると、結合切断を伴う微視的には非線形な構造変形が起こることを明らかにした。さらに、これらの変化は実験観察結果とよく一致しており、転位芯の微視的変形機構を初めて詳細に解明するに至った。

図3(c)は、負荷ひずみ0.0%、1.0%、2.0%、3.3%における転位芯のひずみ分布を示す。図中に、Volterraの転位モデルの重ね合わせと各負荷ひずみの和により得られる弾性解を同時に示す。負荷ひずみの増大に伴い、転位芯の圧縮側のひずみ場は線形に増加し、弾性解と一致する。すなわち、圧縮側のひずみ場はVolterraの転位モデルを用いて記述することができ、転位としての力学的特徴を保持している。一方、引張り側では負荷ひずみの増大によって弾性解よりも高いひずみを有し、弾性解からかい離する。これは、負荷に伴い同領域でのTi-O結合が切断されることで転位芯が構造変形を起こし、原子構造が無負荷時の転位のそれと異なることに起因する。したがって、引張り負荷下において、引張り側領域はすでに転位としての力学的特徴を消失しており、原子構造の変化に伴う固有の変形特性を示すことが明らかになった。さらに、強誘電性について評価した結果、この引張り側において大きな分極発現が見られ、転位芯部に巨大なマルチフィジックス効果が存在することが明らかになった。

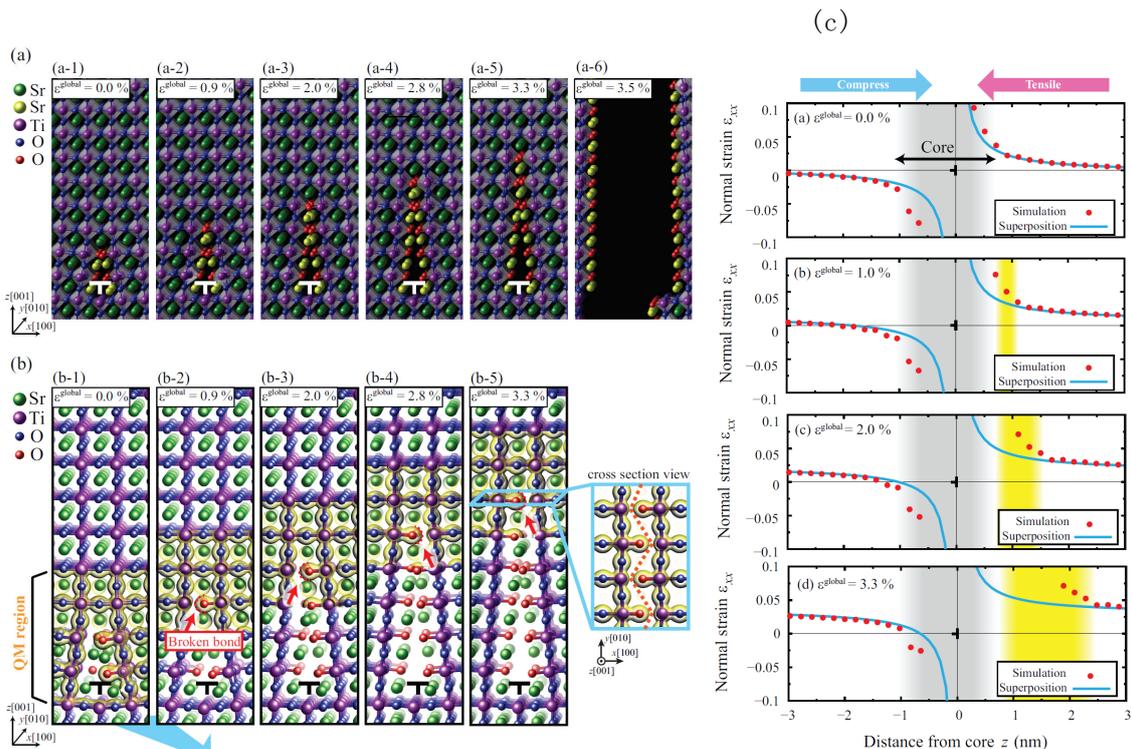


図3. (a) SrTiO₃ 転位芯に対する引張負荷第一原理計算結果. (b) SrTiO₃ 転位芯に対する引張負荷下における電子状態変化. (c) 転位芯近傍のひずみ場の解析. 青直線はボルテラの転位モデルに基づく弾性解、赤点は第一原理計算から評価したひずみ場を示している.

Landau 現象論に基づき、分極とひずみに関するマルチフィジックス特性を含んだ自由エネルギーモデルを構築し、自作のフェーズフィールド法プログラムに実装した。さらに、同フェーズフィールド法プログラムを用いて、転位芯近傍の強誘電性の再現を試みた。その結果、転位固有のひずみ場が形成される領域に分極の発現が見られた (図 4)。発現する分極の特徴は、第一原理計算によって得られた同結果とよく一致しており、本研究にて構築した自由エネルギーモデルが転位芯近傍の微視的な強誘電性発現をよく記述できることを明らかにした。本フェーズフィールド法モデルにより様々な欠陥における分極発現を解析でき、欠陥における機能化の体系的理解のための基盤となることが期待される。

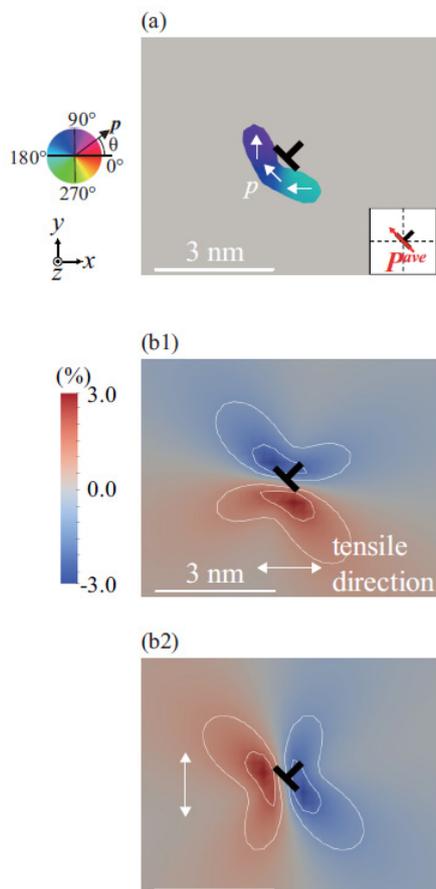


図 4. Landau 現象論に基づくフェーズフィールド法による転位芯近傍に発現する分極分布解析結果. (a) 転位芯近傍の分極分布. (b) 転位芯近傍のひずみ分布.

5. 主な発表論文等

〔雑誌論文〕 計35件（うち査読付論文 35件 / うち国際共著 27件 / うちオープンアクセス 0件）

1. 著者名 Hirakata Hiroyuki, Homma Shigekazu, Noda Hiroki, Sakaguchi Shumpei, Shimada Takahiro	4. 巻 133
2. 論文標題 Effects of excess electrons/holes on fracture toughness of single-crystal Si	5. 発行年 2023年
3. 雑誌名 Journal of Applied Physics	6. 最初と最後の頁 035101 ~ 035101
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1063/5.0123580	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 Hirakata Hiroyuki, Akiyoshi Masao, Masuda Ryoichi, Shimada Takahiro	4. 巻 277
2. 論文標題 High fracture toughness in van der Waals-layered MoTe ₂ : Disappearance of stress singularity	5. 発行年 2023年
3. 雑誌名 Engineering Fracture Mechanics	6. 最初と最後の頁 108974 ~ 108974
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1016/j.engfracmech.2022.108974	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 Akiyoshi Masao, Koike Shunya, Shimada Takahiro, Hirakata Hiroyuki	4. 巻 241
2. 論文標題 Bending deformation and self-restoration of submicron-sized graphite cantilevers	5. 発行年 2022年
3. 雑誌名 Acta Materialia	6. 最初と最後の頁 118381 ~ 118381
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1016/j.actamat.2022.118381	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 Jia Pengfei, Huang Kai, Yu Hongjun, Shimada Takahiro, Guo Licheng, Kitamura Takayuki	4. 巻 121
2. 論文標題 A novel atomic J-integral concept beyond conventional fracture mechanics	5. 発行年 2022年
3. 雑誌名 Theoretical and Applied Fracture Mechanics	6. 最初と最後の頁 103531 ~ 103531
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1016/j.tafmec.2022.103531	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 Wang Yu, Wang Jie, Kitamura Takayuki, Hirakata Hiroyuki, Shimada Takahiro	4. 巻 18
2. 論文標題 Exponential Temperature Effects on Skyrmion-Skyrmion Interaction	5. 発行年 2022年
3. 雑誌名 Physical Review Applied	6. 最初と最後の頁 014049 ~ 014049
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1103/physrevapplied.18.044024	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 Wang Yu, Wang Jie, Kitamura Takayuki, Hirakata Hiroyuki, Shimada Takahiro	4. 巻 106
2. 論文標題 Effective modeling of magnitude-fluctuated magnetization dynamics: Dynamic precursor effect in magnets	5. 発行年 2022年
3. 雑誌名 Physical Review B	6. 最初と最後の頁 094423 ~ 094423
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1103/physrevb.106.094423	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 Wang Yu, Kitamura Takayuki, Wang Jie, Hirakata Hiroyuki, Shimada Takahiro	4. 巻 18
2. 論文標題 Mechanical Acceleration and Control of the Thermal Motion of a Magnetic Skyrmion	5. 発行年 2022年
3. 雑誌名 Physical Review Applied	6. 最初と最後の頁 014049 ~ 014049
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1103/physrevapplied.18.014049	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 Lich Le, Hou Xu, Phan Manh-Huong, Quoc Bui Tinh, Wang Jie, Shimada Takahiro, Kitamura Takayuki, Dinh Van-Hai	4. 巻 54
2. 論文標題 Electrocaloric effect enhancement in compositionally graded ferroelectric thin films driven by a needle-to-vortex domain structure transition	5. 発行年 2021年
3. 雑誌名 Journal of Physics D: Applied Physics	6. 最初と最後の頁 255307 ~ 255307
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1088/1361-6463/abf0ed	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 Xiong Qi-Lin, Shimada Takahiro, Kitamura Takayuki, Li Zhenhuan	4. 巻 29
2. 論文標題 Shock response and defect evolution of copper single crystals at room and elevated temperatures	5. 発行年 2021年
3. 雑誌名 Modelling and Simulation in Materials Science and Engineering	6. 最初と最後の頁 045006 ~ 045006
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1088/1361-651x/abea68	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 Masuda Kairi, Shimada Takahiro, Kitamura Takayuki	4. 巻 104
2. 論文標題 Ferroelectric nanoscale logic gates by mixed dislocations in SrTiO ₃	5. 発行年 2021年
3. 雑誌名 Physical Review B	6. 最初と最後の頁 054104-054104
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1103/physrevb.104.054104	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 Hirakata Hiroyuki, Sano Kyohei, Shimada Takahiro	4. 巻 36
2. 論文標題 Reversible control of intrinsic shear strength of a ZnO single crystal through electron-beam-induced hole state	5. 発行年 2021年
3. 雑誌名 Journal of Materials Research	6. 最初と最後の頁 4438 ~ 4448
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1557/s43578-021-00399-9	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 Wang Yu, Shimada Takahiro, Wang Jie, Kitamura Takayuki, Hirakata Hiroyuki	4. 巻 221
2. 論文標題 The rectilinear motion of the individual asymmetrical skyrmion driven by temperature gradients	5. 発行年 2021年
3. 雑誌名 Acta Materialia	6. 最初と最後の頁 117383 ~ 117383
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1016/j.actamat.2021.117383	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 Zhu Yuquan, Xu Tao, Wei Qinghua, Mai Jiawei, Yang Hongxin, Zhang Huiran, Shimada Takahiro, Kitamura Takayuki, Zhang Tong-Yi	4. 巻 7
2. 論文標題 Linear-superelastic Ti-Nb nanocomposite alloys with ultralow modulus via high-throughput phase-field design and machine learning	5. 発行年 2021年
3. 雑誌名 npj Computational Materials	6. 最初と最後の頁 205-205
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1038/s41524-021-00674-7	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 Shimada Takahiro, Wang Yu, Hamaguchi Takayuki, Kasai Kohta, Masuda Kairi, Van Lich Le, Xu Tao, Wang Jie, Hirakata Hiroyuki	4. 巻 33
2. 論文標題 Emergence of non-trivial polar topologies hidden in singular stress field in SrTiO ₃ : topological strain-field engineering	5. 発行年 2021年
3. 雑誌名 Journal of Physics: Condensed Matter	6. 最初と最後の頁 505301 ~ 505301
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1088/1361-648x/ac28c1	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 Jia Pengfei, Huang Kai, Sumigawa Takashi, Shimada Takahiro, Guo Licheng, Kitamura Takayuki	4. 巻 234-235
2. 論文標題 A unified atomic energy release rate criterion for nonlinear brittle fracture in graphene nanoribbons	5. 発行年 2022年
3. 雑誌名 International Journal of Solids and Structures	6. 最初と最後の頁 111260 ~ 111260
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1016/j.ijsoistr.2021.111260	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 Xiong Qi-lin, Li Zhenhuan, Huang Xicheng, Shimada Takahiro, Kitamura Takayuki	4. 巻 45
2. 論文標題 Thermomechanical conversion in high-rate plastic deformation of nanotwinned polycrystalline copper	5. 発行年 2022年
3. 雑誌名 Journal of Thermal Stresses	6. 最初と最後の頁 65 ~ 80
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1080/01495739.2021.2000343	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 Lich Le Van, Bui Tinh Quoc, Shimada Takahiro, Kitamura Takayuki, Hong Hue Dang Thi, Nguyen Trong Giang, Dinh Van Hai	4. 巻 5
2. 論文標題 Abnormal Electromechanical Property of Nonlinearly Graded Lead Free Ferroelectric Thin Films	5. 発行年 2021年
3. 雑誌名 Advanced Theory and Simulations	6. 最初と最後の頁 2100370 ~ 2100370
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1002/adts.202100370	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 Xiong Qi-lin, Li Zhenhuan, Shimada Takahiro, Kitamura Takayuki	4. 巻 149
2. 論文標題 Atomistic investigation on the conversion of plastic work to heat in high-rate shear deformation	5. 発行年 2022年
3. 雑誌名 International Journal of Plasticity	6. 最初と最後の頁 103158 ~ 103158
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1016/j.ijplas.2021.103158	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 Sumigawa Takashi, Shimada Takahiro, Huang Kai, Mizuno Yuki, Hagiwara Yohei, Ozaki Naoki, Kitamura Takayuki	4. 巻 22
2. 論文標題 Ultrasml- ₃ Scale Brittle Fracture Initiated from a Dislocation in SrTiO ₃	5. 発行年 2022年
3. 雑誌名 Nano Letters	6. 最初と最後の頁 2077 ~ 2084
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1021/acs.nanolett.2c00005	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 Hirakata Hiroyuki, Fukuda Yasuyuki, Shimada Takahiro	4. 巻 55
2. 論文標題 Flexoelectric properties of multilayer two-dimensional material MoS ₂	5. 発行年 2021年
3. 雑誌名 Journal of Physics D: Applied Physics	6. 最初と最後の頁 125302 ~ 125302
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1088/1361-6463/ac4367	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 Le Van Lich, Xu Hou, Manh-Huong Phan, Tinh Quoc Bui, Jie Wang, Takahiro Shimada, Takayuki Kitamura, and Van-Hai Dinh	4. 巻 54
2. 論文標題 Electrocaloric effect enhancement in compositionally graded ferroelectric thin films driven by needle to vortex domain structure transition	5. 発行年 2021年
3. 雑誌名 Journal of Physics D: Applied Physics	6. 最初と最後の頁 255307
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1088/1361-6463/abf0ed	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, Takahiro Shimada, and Takayuki Kitamura	4. 巻 103
2. 論文標題 Dynamical topology in ferroelectric nanostructures by 1/2 [1-10] (110) dislocations in SrTiO ₃	5. 発行年 2021年
3. 雑誌名 Physical Review B	6. 最初と最後の頁 54114
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1103/PhysRevB.103.054114	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 Minh-Tien Le, Le Van Lich, Takahiro Shimada, Takayuki Kitamura, Trong-Giang Nguyen, and Van-Hai Dinh	4. 巻 118
2. 論文標題 Prediction of tunable magnetoelectric properties in compositionally graded ferroelectric/ferromagnetic laminated nanocomposites	5. 発行年 2021年
3. 雑誌名 Applied Physics Letters	6. 最初と最後の頁 52905
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1063/5.0041703	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, Kairi Masuda, Youhei Hagiwara, Naoki Ozaki, Tao Xu, Jie Wang, and Takayuki Kitamura	4. 巻 103
2. 論文標題 Ferroic dislocations in paraelectric SrTiO ₃	5. 発行年 2021年
3. 雑誌名 Physical Review B (Letter)	6. 最初と最後の頁 L060101
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1103/PhysRevB.103.L060101	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, Masataka Mori, Jie Wang, and Takayuki Kitamura	4. 巻 4
2. 論文標題 Defects engineering for non-trivial multiferroic orders in SrTiO ₃	5. 発行年 2020年
3. 雑誌名 Physical Review Materials	6. 最初と最後の頁 124405
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1103/PhysRevMaterials.4.124405	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, Takayuki Kitamura, Tinh Quoc Bui, and Van-Hai Dinh	4. 巻 22
2. 論文標題 Enhancement of electromechanical properties in (0-3) lead-free ferroelectric heterostructures with multiphase coexistence	5. 発行年 2020年
3. 雑誌名 Composites Communications	6. 最初と最後の頁 100540
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1016/j.coco.2020.100540	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 Kai Huang, Takashi Sumigawa, Takahiro Shimada, Shuuhei Tanaka, Youhei Hagiwara, Licheng Guo, and Takayuki Kitamura	4. 巻 206
2. 論文標題 An experimental study on atomic-level unified criterion for brittle fracture	5. 発行年 2020年
3. 雑誌名 International Journal of Solids and Structures	6. 最初と最後の頁 1-8
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1016/j.ijsoistr.2020.08.006	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, Jingtong Zhang, Yuquan Zhu, Jie Wang, Takahiro Shimada, Takayuki Kitamura, Tong-Yi Zhang	4. 巻 5
2. 論文標題 Two-dimensional polar metal of PbTe monolayer by electrostatic doping	5. 発行年 2020年
3. 雑誌名 Nanoscale Horizons	6. 最初と最後の頁 1400-1406
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1039/d0nh00188k	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, Kai Huang, Le Van Lich, Naoki Ozaki, Bongkyun Jang, and Takayuki Kitamura	4. 巻 12
2. 論文標題 Beyond conventional nonlinear fracture mechanics in graphene nanoribbons	5. 発行年 2020年
3. 雑誌名 Nanoscale	6. 最初と最後の頁 18363-18370
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1039/d0nr03836a	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 皆黒 幸一朗, 嶋田 隆広, 益田 快理, 北村 隆行	4. 巻 86
2. 論文標題 SnTeナノリボンの強誘電性臨界寸法とそのひずみエンジニアリング	5. 発行年 2020年
3. 雑誌名 日本機械学会論文集	6. 最初と最後の頁 19-00430
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1299/transjsme.19-00430	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 Yu Wang, Jiajun Sun, Takahiro Shimada, Hiroyuki Hirakata, Takayuki Kitamura, and Jie Wang	4. 巻 102
2. 論文標題 Ferroelectric control of magnetic skyrmions in multiferroic heterostructures	5. 発行年 2020年
3. 雑誌名 Physical Review B	6. 最初と最後の頁 14440
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1103/PhysRevB.102.014440	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 Qi-lin Xiong, Takahiro Shimada, Takayuki Kitamura, and Zhenhuan Li	4. 巻 131
2. 論文標題 Atomic investigation of effects of coating and confinement layer on laser shock peening	5. 発行年 2020年
3. 雑誌名 Optics and Laser Technology	6. 最初と最後の頁 106409
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1016/j.optlastec.2020.106409	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, Yuuki Ichiki, Gen Fujimoto, Tao Xu, Jie Wang, and Hiroyuki Hirakata	4. 巻 101
2. 論文標題 Ferrotoroidic polarons in antiferrodistortive SrTiO3	5. 発行年 2020年
3. 雑誌名 Physical Review B	6. 最初と最後の頁 214101
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1103/PhysRevB.101.214101	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, Koichiro Minaguro, Tao Xu, Jie Wang, and Takayuki Kitamura	4. 巻 10
2. 論文標題 Ab initio study of ferroelectric critical size of SnTe low-dimensional nanostructures	5. 発行年 2020年
3. 雑誌名 Nanomaterials	6. 最初と最後の頁 732
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.3390/nano10040732	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 Takashi Sumigawa, Ken Hikasa, Akihiro Kusunose, Hiroaki Unno, Kairi Masuda, Takahiro Shimada, and Takayuki Kitamura	4. 巻 4
2. 論文標題 In situ TEM observation of nanodomain mechanics in barium titanate under external loads	5. 発行年 2020年
3. 雑誌名 Physical Review Materials	6. 最初と最後の頁 54415
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1103/PhysRevMaterials.4.054415	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15件 (うち招待講演 1件 / うち国際学会 2件)

1. 発表者名 Yu Wang
2. 発表標題 Temperature Dependence of the Magnetic Skyrmion-Skyrmion Interaction: A Phase-Field Study
3. 学会等名 ICMR2022 (国際学会)
4. 発表年 2022年

1. 発表者名 Kohta Kasai
2. 発表標題 Phase-field Simulation of Mechanically Induced Polar Skyrmions in PbTiO ₃ Ultrathin Films
3. 学会等名 ICMR2022 (国際学会)
4. 発表年 2022年

1. 発表者名 笠井恒汰
2. 発表標題 強誘電体ナノ薄膜への押し込みによる分極スキルミオン組織形成に関するPhase-field解析
3. 学会等名 第35回計算力学講演会 (CMD2022)
4. 発表年 2022年

1. 発表者名 笠井恒汰
2. 発表標題 強誘電スキルミオンのナノメカニカルライティング
3. 学会等名 第2回マルチスケールマテリアルモデリングシンポジウム (第7回マルチスケール材料力学シンポジウム)
4. 発表年 2022年

1. 発表者名 阿部能將
2. 発表標題 鉄単結晶におけるひずみ誘起磁気相転移の電子的制御に関する第一原理解析
3. 学会等名 第2回マルチスケールマテリアルモデリングシンポジウム (第7回マルチスケール材料力学シンポジウム)
4. 発表年 2022年

1. 発表者名 嶋田 隆広
2. 発表標題 電子ドーピングによる結晶の弾性特性変化に関する第一原理解析
3. 学会等名 第35回計算力学講演会 (CMD2022)
4. 発表年 2022年

1. 発表者名 嶋田 隆広
2. 発表標題 材料強度の電子的制御とその量子論的力学機構
3. 学会等名 粉体粉末冶金協会2022年度春季大会 (第129回講演大会) (招待講演)
4. 発表年 2022年

1. 発表者名 藤田涼雅, 坂口竣平, 嶋田隆広, 平方寛之
2. 発表標題 電子応力概念の提案と第一原理電子応力解析法の開発
3. 学会等名 第6回マルチスケール材料力学シンポジウム
4. 発表年 2021年

1. 発表者名 笠井恒汰, 濱口高征, 嶋田隆広, 平方寛之
2. 発表標題 特異応力場による強誘電体内の高次トポロジカル秩序群の創出
3. 学会等名 第6回マルチスケール材料力学シンポジウム
4. 発表年 2021年

1. 発表者名 嶋田隆広, 市木佑樹, 平方寛之
2. 発表標題 SrTiO ₃ 表面の電子Polaronによる強誘電Skyrmionの創出とその力学的制御
3. 学会等名 M&M2021材料力学カンファレンス
4. 発表年 2021年

1. 発表者名 藤田涼雅, 坂口竣平, 嶋田隆広, 椎原良典, 平方寛之
2. 発表標題 第一原理電子応力解析法の開発と結晶材料への適用
3. 学会等名 M&M2021材料力学カンファレンス
4. 発表年 2021年

1. 発表者名 嶋田隆広, 坂口竣平, 藤田涼雅, 椎原良典, 平方寛之
2. 発表標題 第一原理電子軌道応力解析法の開発
3. 学会等名 第34回計算力学講演会
4. 発表年 2021年

1. 発表者名 笠井恒汰, 濱口高征, 嶋田隆広, 平方寛之
2. 発表標題 高次トポロジカルナノ強誘電体の創出: SrTiO ₃ 内き裂への負荷に関するPhase-field解析
3. 学会等名 材料シンポジウム
4. 発表年 2021年

1. 発表者名 Takahiro Shimada, Yuuki Ichiki, Tao Xu, Le Van Lich, Jie Wang, Hiroyuki Hirakata
2. 発表標題 Quantum Polar Skyrmions/Merons in Doped SrTiO3 Heterostructures: A Topological Polaron
3. 学会等名 2021 MRS Fall Meeting & Exhibits
4. 発表年 2021年

1. 発表者名 Yu Wang, Takahiro Shimada, Shizhe Wu, Yuelin Zhang, Jinxing Zhang, Jie Wang, Hiroyuki Hirakata
2. 発表標題 Phase-Field Simulations on Temperature-Related Behaviors of Skyrmions
3. 学会等名 2021 MRS Fall Meeting & Exhibits
4. 発表年 2021年

〔図書〕 計0件

〔産業財産権〕

〔その他〕

京都大学・材料物性学研究室 https://material.me.kyoto-u.ac.jp/ 京都大学・教育研究活動データベース https://kdb.iimc.kyoto-u.ac.jp/profile/ja.6bf4232c357d1db5.html
--

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

7. 科研費を使用して開催した国際研究集会

〔国際研究集会〕 計0件

8 . 本研究に関連して実施した国際共同研究の実施状況

共同研究相手国	相手方研究機関			
ベトナム	ハノイ工科大学			
中国	浙江大学	上海大学	ハルビン工科大学	他1機関
韓国	韓国機械研究院			