

令和 5 年 6 月 8 日現在

機関番号：14301

研究種目：挑戦的研究（開拓）

研究期間：2020～2022

課題番号：20K20546

研究課題名（和文）層状化合物が拓く強誘電体材料科学の新展開

研究課題名（英文）Science and innovation of improper ferroelectricity in layered perovskites

研究代表者

藤田 晃司 (FUJITA, Koji)

京都大学・工学研究科・教授

研究者番号：50314240

交付決定額（研究期間全体）：（直接経費） 19,900,000円

研究成果の概要（和文）：本研究では、層状ペロブスカイト酸化物における結晶学軸周りの酸素八面体回転・傾斜を制御して、新規圧電体および強誘電体を開拓した。たとえば、 $\text{La}_2\text{SrSc}_2\text{O}_7$ では、二種類のAカチオンの無秩序配列が酸素八面体回転を誘起し、極性構造の形成をもたらすことを見出した。加えて、この化合物が強誘電体であることを初めて実証した。この他にも、 $\text{AgRTiO}_4$ （Rは希土類）が酸素八面体回転により圧電体となることが明らかになった。また、a軸とb軸に沿って負の熱膨張が生じることを見出した。二軸の負の熱膨張の原因として、Ag-O-Tiの共有結合を通じて酸素八面体が極度に変形する機構を提案した。

研究成果の学術的意義や社会的意義

膨大なペロブスカイト化合物の中で強誘電体・圧電体は5%に満たず、応用分野も限定的であった。酸素八面体回転に基づく強誘電体・圧電体の物質設計では、元素選択の自由度が大きいため、この方向での物質探索により高機能性を有する新規材料が登場する可能性は大いにある。また、現在は鉛を含むペロブスカイト強誘電体 $\text{Pb}(\text{Zr},\text{Ti})\text{O}_3$ が圧電素子として広範に利用されているが、環境保全の観点からこれを代替する無鉛圧電材料の開発が強く求められている。新しい機構に基づく新材料の開発はそのような産業界の要望にも応えることができる。

研究成果の概要（英文）： Piezoelectricity and improper ferroelectricity in layered perovskites, which utilize ubiquitous rotation/tilting distortions to break inversion symmetry, offer an attractive route to the discovery of new functional materials because their activity derives from geometric rather than electronic origins. In this study, we demonstrate that a layered perovskite oxide,  $\text{La}_2\text{SrSc}_2\text{O}_7$ , crystallizes in a polar orthorhombic symmetry (space group  $A21am$ ) at room temperature, due to the random arrangement of two different A cations. The switchable polarization indicative of ferroelectricity can be revealed in a plot of polarization versus electric field.

In addition, we show that layered perovskite oxides,  $\text{AgRTiO}_4$  (R: rare earth), adopt an acentric tetragonal structure at room temperature. Interestingly, these compounds exhibit biaxial negative thermal expansion. We ascribe the observed phenomenon to the interplay between the structural distortions that alter the octahedral connectivity and shape.

研究分野：無機材料科学

キーワード：強誘電体

### 1. 研究開始当初の背景

BaTiO<sub>3</sub> や PbTiO<sub>3</sub> 等のペロブスカイト型酸化物のように、電気分極そのものが常誘電-強誘電相転移の秩序変数となっている強誘電体は、直接型強誘電体に分類される。このタイプの強誘電体の設計指針として、二次 Jahn-Teller 歪みをもたらす d<sup>0</sup> 電子配置をもつイオン (Ti<sup>4+</sup> や Nb<sup>5+</sup>) や 6s<sup>2</sup> 孤立電子対をもつカチオン (Pb<sup>2+</sup> や Bi<sup>3+</sup>) を含む化合物を選択することが提案されており、これらの条件を満たす化合物の中で多くの強誘電体・圧電体が見出されている。しかし、利用可能な元素が制限されるため、膨大なペロブスカイト化合物の中で圧電体・強誘電体は非常に少なく、応用分野も限定的であった。

一方で、ペロブスカイト型および関連構造をもつ酸化物において、結晶学的軸周りの酸素八面体の回転・傾斜は最もありふれた構造歪みであるが、単純ペロブスカイト型酸化物 ABO<sub>3</sub> ではこれらの構造歪みにより結晶構造の反転対称性が破れることはない。しかし近年、Ruddlesden-Popper (RP) 相や Dion-Jacobson (DJ) 相のようなペロブスカイト関連層状酸化物において、酸素八面体の回転や傾斜によって結晶構造の反転対称性が破れ、圧電性や強誘電性が発現することが理論と実験の両面から示されている[1,2]。特に、酸素八面体の回転と傾斜に基づく二種類の構造歪みにより副次的にカチオンの極性変位が生じ強誘電性が発現する場合、強誘電相転移を駆動する主秩序変数は非極性構造歪み (酸素八面体の回転と傾斜) に関するパラメータであり、電気分極は従秩序変数となる。このような強誘電体はハイブリッド間接型強誘電体と呼ばれ[1]、最近研究が盛んに行われている。

### 2. 研究の目的

本研究では、新しいタイプの圧電体や強誘電体の学理構築を念頭に、新規層状ペロブスカイト酸化物圧電体・強誘電体を探索した。具体的には、RP 型層状ペロブスカイト酸化物 (組成式 A<sub>n+1</sub>B<sub>n</sub>O<sub>3n+1</sub>) を対象に、回折実験、分光実験ならびに第一原理計算を組み合わせて、新奇強誘電体・圧電体の開拓と構造-特性相関の調査を行った。主な研究成果として、(1) n = 2 RP 相 La<sub>2</sub>SrSc<sub>2</sub>O<sub>7</sub> と (2) n = 1 RP 相 AgRTiO<sub>4</sub> (R は希土類) の内容を以下に示す。

### 3. 研究の方法

n = 2 RP 相 La<sub>2</sub>SrSc<sub>2</sub>O<sub>7</sub> は通常の高温固相反応法を用いて作製した。n = 1 RP 相 AgRTiO<sub>4</sub> は高温固相反応法と低温イオン交換法を組み合わせ合成した[3]。得られた試料に対して放射光 X 線回折 (SXRD) と粉末中性子回折 (NPD) 測定を行った。回折データに対して Rietveld 解析を行い、結晶構造を精密化した。結晶構造の描画には VESTA を用いた [4]。結晶構造の反転対称性の破れを観察するため、光源として Nd:YAG ピコ秒パルスレーザー (λ = 1064 nm) を用いて、光第二高調波発生 (SHG) を測定した。極性化合物については、外部電場 (E) に対する室温での分極 (P) の応答を観察した。加えて、第一原理密度汎関数理論 (DFT) 計算により動力学的安定性の評価と安定構造探索を行った[5,6]。

### 4. 研究成果

#### (1) La<sub>2</sub>SrSc<sub>2</sub>O<sub>7</sub>

n = 2 RP 相のハイブリッド間接型強誘電体 A<sub>3</sub>B<sub>2</sub>O<sub>7</sub> (A: アルカリ土類金属、B: Ti, Zr, Sn, Mn などの金属元素) では、ペロブスカイト層の各原子のイオン半径 (r<sub>A</sub>, r<sub>B</sub>, r<sub>O</sub>) から計算される許容因子  $t = (r_A + r_O) / \sqrt{2}(r_B + r_O)$  が 0.89 より小さくなると、酸素八面体回転と傾斜が誘起され、強誘電相が安定化される[7]。一方で、n = 2 RP 型 Ln<sub>2</sub>AM<sub>2</sub>O<sub>7</sub> (Ln: ランタノイド、M: 遷移金属や典型元素) では、小さい許容因子をもつ場合でも強誘電性が発現する例はほとんど知られていない。その理由として、二種類の A カチオン (Ln<sup>3+</sup> と A<sup>2+</sup>) が価数とイオン半径差により秩序化する結果、ペロブスカイト層と岩塩層の界面で電気双極子が生じ、酸素八面体自体が歪むことで酸素八面体回転が抑制される機構が提案されている[8]。

本研究では、Ln<sub>2</sub>AB<sub>2</sub>O<sub>7</sub> において強誘電性発現の可能性を調べるため、La<sub>2</sub>SrSc<sub>2</sub>O<sub>7</sub> の結晶構造を調べた。既報ではこの化合物は室温で中心対称構造 (空間群 Fmmm) をもつと報告されていたが[9]、最近の構造解析では極性構造の可能性が示唆されている[10]。

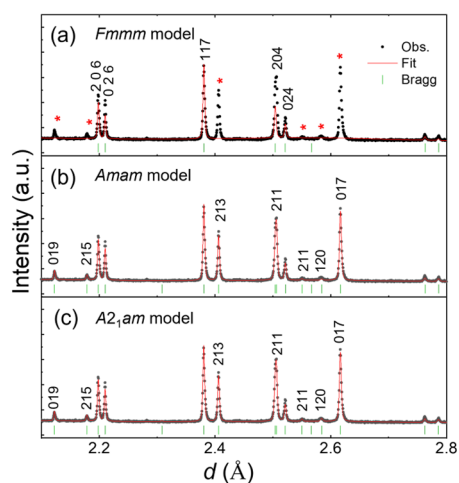


図 1: 室温での La<sub>2</sub>SrSc<sub>2</sub>O<sub>7</sub> の NPD パターンと Rietveld 解析の結果: (a) Fmmm モデル、(b) Amam モデル、(c) A<sub>2,am</sub> モデル

$\text{La}_2\text{SrSc}_2\text{O}_7$  に対する室温での NPD パターン (図 1) と SXR D パターンの指数付けと消滅則から、空間群は文献 9 の  $Fm\bar{3}m$  とは異なり、直方晶系の  $A2_1am$  (非中心対称、極性) か  $Amam$  (中心対称、非極性) のどちらかに絞られた。室温で SHG が観測されたことから、結晶構造は  $A2_1am$  に属することがわかった。室温での  $P-E$  ヒステリシスの観察から (図 2)、 $\text{La}_2\text{SrSc}_2\text{O}_7$  が強誘電体であることの明確な証拠も得られた。

構造精密化により得られた強誘電相の結晶構造を図 3 に示す。 $A2_1am$  構造は  $\text{ScO}_6$  八面体の回転と傾斜に基づく二種類の構造歪み (Glazer 表記で  $a^-a^+c^+$ ) を有しており、 $\text{La}_2\text{SrSc}_2\text{O}_7$  はハイブリッド間接型強誘電体の候補である。ペロブスカイト (Pv) 層と岩塩 (Rs) 層にはともに  $\text{La}^{3+}$  と  $\text{Sr}^{2+}$  が存在しており (Pv 層  $\text{Sr}/\text{La}=48/52$ 、Rs 層  $\text{Sr}/\text{La}=26/74$ )、二種類の A カチオンが無秩序配列する傾向が高いことがわかった (無秩序度は約 78%)。この A カチオンの無秩序配列により酸素八面体回転が起こり、極性・強誘電構造が安定化したと考えられる。A カチオンの無秩序配列による極性構造の安定化は、第一原理計算結果からも支持された。

温度可変 SHG 測定の結果より、 $\text{La}_2\text{SrSc}_2\text{O}_7$  の強誘電-常誘電相転移が  $T_C \sim 600$  K で起こることが確認された。高温 SXR D データの消滅則から、常誘電相の空間群は  $Amam$  と決定された。 $Amam$  構造は  $\text{ScO}_6$  八面体回転による一種の構造歪み (Glazer 表記で  $a^-a^-c^0$ ) のみを伴っている。 $T_C$  において格子体積は連続的に変化し、強誘電相転移は二次相転移的な振る舞いを示した。これは、強誘電相の空間群  $A2_1am$  が常誘電相の  $Amam$  の部分群に属することと一致する。

## (2) $\text{AgRTiO}_4$ ( $R$ は希土類)

2014 年、研究代表者らは、 $n=1$  RP 相  $\text{NaRTiO}_4$  において酸素八面体回転によって結晶構造の反転対称性が破れ圧電性が現れることを発見した [2]。この報告の後、 $n=1$  RP 相  $\text{LiRTiO}_4$  [11]、 $\text{HRTiO}_4$  [12]、 $\text{KRTiO}_4$  [13] が同じ機構で圧電体となることを明らかにした。本研究では、 $n=1$  RP 相  $\text{AgRTiO}_4$  に注目した。既報では、 $R$  のイオン半径が小さくなると、直方晶系の  $Pbcm$  構造が安定化すると報告されている [3]。今回、 $\text{AgRTiO}_4$  の結晶構造を再調査し、構造-物性関係を調べた。

まず、 $\text{AgRTiO}_4$  の安定相の結晶構造を調べるため、DFT 計算による安定構造探索を行った。周期表で Sm 以降の希土類元素を含む  $\text{AgRTiO}_4$  ( $R = \text{Sm}-\text{Ho}, \text{Y}$ ) においては、酸素八面体回転を伴った直方晶構造 ( $Pbcm$ ) や正方晶構造 ( $P\bar{4}2_1m$ ) の方が原型相の正方晶構造 ( $P4/nmm$ ) に比べてエネルギーが低くなり、最安定構造は圧電性の  $P\bar{4}2_1m$  構造であった。

次に、室温において  $\text{AgRTiO}_4$  ( $R = \text{La}, \text{Sm}, \text{Eu}, \text{Y}$ ) の SXR D を測定した。回折パターンの指数付けと消滅則から、 $R = \text{La}$  の空間群は正方晶系  $P4/nmm$  (中心対称、非極性) であり、 $R = \text{Sm}, \text{Eu}, \text{Y}$  に対する空間群は正方晶系  $P\bar{4}2_1m$  (非中心対称、非極性) か直方晶系  $Pbcm$  (中心対称、非極性) のどちらかに絞られた。 $\text{AgRTiO}_4$  の一連の系においてレーザー照射による試料損傷のため、中心対称性の有無を SHG 測定により判別できなかった。加えて、 $R = \text{Sm}, \text{Eu}$  では中性子の吸収が大き

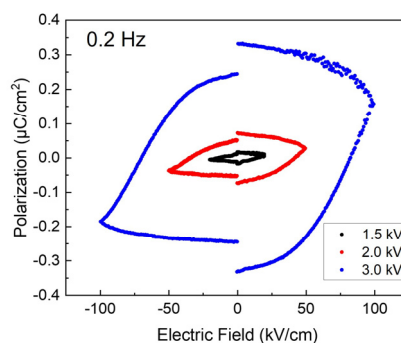


図 2:  $\text{La}_2\text{SrSc}_2\text{O}_7$  の室温での  $P-E$  ヒステリシス曲線

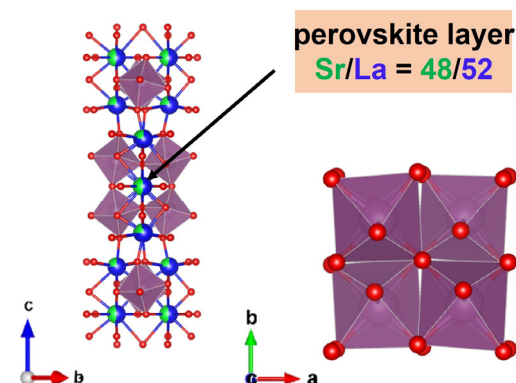


図 3:  $\text{La}_2\text{SrSc}_2\text{O}_7$  の強誘電相 ( $A2_1am$ ) の結晶構造: 左図と右図は短軸 ( $a$  軸) 方向と長軸 ( $c$  軸) から見た図

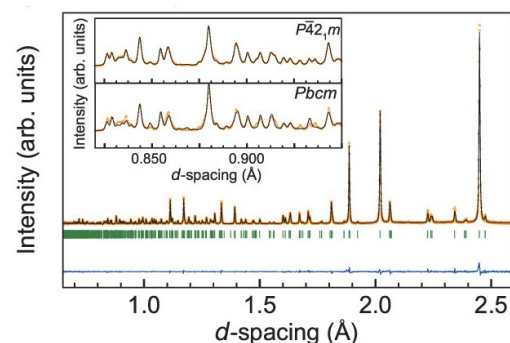


図 4: 室温での  $\text{AgYTiO}_4$  の NPD パターンと Rietveld 解析の結果: 挿入図は  $P\bar{4}2_1m$  モデルと  $Pbcm$  モデルの結果

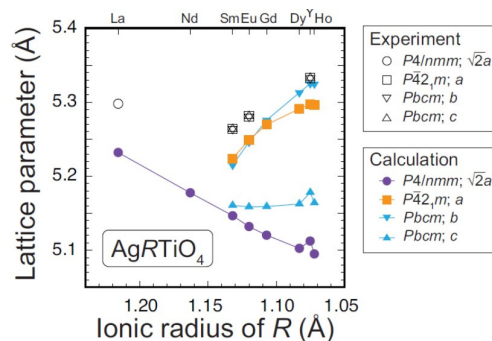


図 5: 実験と計算により得られた  $\text{AgRTiO}_4$  に対する  $P4/nmm$ 、 $P\bar{4}2_1m$ 、 $Pbcm$  構造の短軸格子定数の希土類イオン半径依存性



いため、NPD による構造解析が困難であった。 $R = Y$  においては、NPD データに対して構造精密化を行ったところ、 $P\bar{4}2_1m$  構造モデルの方が  $Pbcm$  構造モデルよりも実測データをよく再現した (図 4)。

$AgRTiO_4$  ( $R = Sm-Ho, Y$ ) の結晶構造を推定するため、計算で得られた  $P\bar{4}2_1m$  構造と  $Pbcm$  構造の格子定数の  $R$  イオン半径依存性を比較した (図 5)。 $P\bar{4}2_1m$  構造は、 $R$  のイオン半径の増加に伴って  $a (= b)$  軸長の減少を示し、実験結果をよく再現した。一方で、 $Pbcm$  構造の場合、 $R$  の種類に関わらず、計算された構造では  $a$  軸長と  $b$  軸長に大きな差が見られた。この結果は、実験で得られた構造の  $a$  軸長と  $b$  軸長の差が非常に小さいことと異なる。以上の実験と計算の結果から、 $AgRTiO_4$  ( $R = Sm, Eu, Y$ ) の空間群は、既報の  $Pbcm$  と異なり、 $P\bar{4}2_1m$  であると結論付けた。

$Ag$  系の圧電相は  $ARTiO_4$  ( $A = H, Li, Na, K$ ) の圧電相と同じ空間群をもち [2,11-13]、結晶構造は Glazer 表記で  $a^-b^0c^0/b^0a^-c^0$  の酸素八面体回転によって特徴付けられる [図 6(a)]。詳細な構造解析から、図 5 で示された  $Ag$  系の圧電相 ( $R = Sm-Ho$ ) の格子定数  $a (= b)$  の  $R$  イオン半径依存性は、 $TiO_6$  八面体の回転と変形の競合により生じることが明らかになった。具体的には、 $R$  のイオン半径が大きくなるにつれて  $TiO_6$  八面体回転が抑えられると同時に八面体変形が大きくなり、 $c$  軸方向には引っ張られるが、 $a$  軸と  $b$  軸方向には圧縮が生じる [図 6(b)]。さらに、温度上昇に伴って、 $Ag$  系の圧電相 (空間群  $P\bar{4}2_1m$ ) は  $a$  軸と  $b$  軸に沿って負の熱膨張を示した (図 7 左)。 $Ag$  系でも高対称非圧電相 (空間群  $P4/nmm$ ) のときは二軸の負の熱膨張は観察されない。また、 $Na$  系では  $P\bar{4}2_1m$  構造と  $P4/nmm$  構造のどちらも負の熱膨張を示さない (図 7 右)。つまり、負の熱膨張は  $Ag$  系圧電体に特有の現象である。電子状態の計算結果から、負の熱膨張の原因として、 $Ag-O-Ti$  の共有結合を通じて  $TiO_6$  八面体が極度に変形するという機構を提案した。

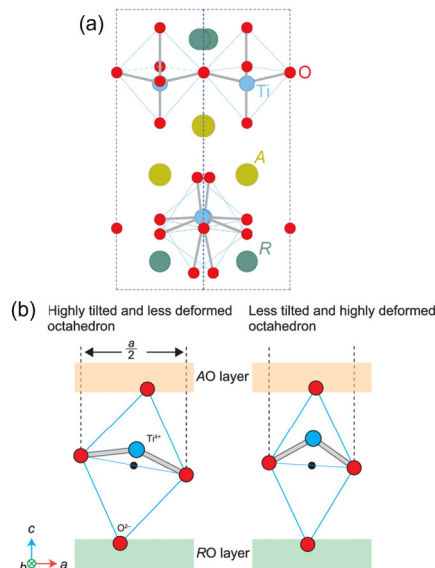


図 6: (a)  $AgRTiO_4$  の圧電相 ( $P\bar{4}2_1m$ ) の結晶構造 (b) 酸素八面体回転と酸素八面体変形の競合の様子

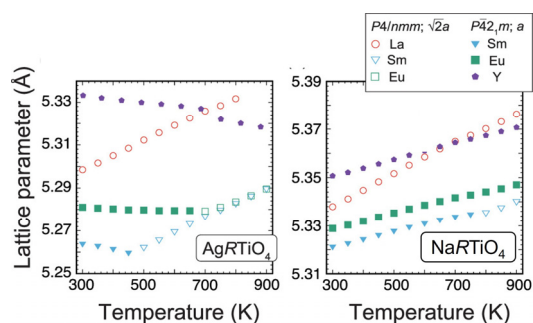


図 7: (左図)  $AgRTiO_4$  ( $R = La, Sm, Eu, Y$ ) と (右図)  $NaRTiO_4$  ( $R = La, Sm, Eu, Y$ ) における  $a$  軸長 ( $= b$  軸長) の温度依存性

#### <引用文献>

- [1] N. A. Benedek and C. J. Fennie, *Phys. Rev. Lett.* **106**, 107204 (2011).
- [2] H. Akamatsu *et al.*, *Phys. Rev. Lett.* **112**, 187602 (2014).
- [3] K. Toda *et al.*, *Solid State Ionics* **81**, 267 (1995).
- [4] K. Momma and F. Izumi, *J. Appl. Crystallogr.* **44**, 1272 (2011).
- [5] G. Kresse and J. Furthmüller, *Phys. Rev. B*, **54**, 11169 (1996); G. Kresse and D. Joubert, *ibid* **59**, 1758 (1999).
- [6] A. Togo and I. Tanaka, *Scr. Mater.* **108**, 1 (2015).
- [7] S. Yoshida *et al.*, *J. Am. Chem. Soc.*, **140** 15690 (2018).
- [8] Y. Zhang *et al.*, *Phys. Rev. Lett.*, **125** 157601 (2020).
- [9] Y. A. Titov *et al.*, *Dopov. Nats. Akad. Ukr.* **3**, 155 (2009).
- [10] A. R. Sharits (2016). [Doctoral dissertation, Ohio State University]. OhioLINK Electronic Theses and Dissertations Center. [http://rave.ohiolink.edu/etdc/view?acc\\_num=osu1480524956906735](http://rave.ohiolink.edu/etdc/view?acc_num=osu1480524956906735).
- [11] A. Sen Gupta *et al.*, *Adv. Electron. Mater.* **2**, 1500196 (2016).
- [12] A. Sen Gupta *et al.*, *Chem. Mater.* **29**, 656 (2017).
- [13] H. Akamatsu *et al.*, *Phys. Rev. Mater.*, **3**, 065001 (2019).

## 5. 主な発表論文等

〔雑誌論文〕 計10件（うち査読付論文 10件 / うち国際共著 4件 / うちオープンアクセス 0件）

1. 著者名 Fukasawa Ikuya, Maruyama Yuki, Yoshida Suguru, Fujita Koji, Takahashi Hidehiro, Ohgaki Masataka, Nagao Masanori, Watauchi Satoshi, Gopalan Venkatraman, Tanaka Katsuhisa, Tanaka Isao	4. 巻 615
2. 論文標題 Growth and phase transition of Sr3Zr2O7 single crystals	5. 発行年 2023年
3. 雑誌名 Journal of Crystal Growth	6. 最初と最後の頁 127241 ~ 127241
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1016/j.jcrysgro.2023.127241	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 Yoshida Suguru, Akamatsu Hirofumi, Gibbs Alexandra S., Kawaguchi Shogo, Gopalan Venkatraman, Tanaka Katsuhisa, Fujita Koji	4. 巻 34
2. 論文標題 Interplay between Oxygen Octahedral Rotation and Deformation in the Acentric ARTiO4 Series toward Negative Thermal Expansion	5. 発行年 2022年
3. 雑誌名 Chemistry of Materials	6. 最初と最後の頁 6492 ~ 6504
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1021/acs.chemmater.2c01245	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 Matsuo Yumi, Matsukawa Yuko, Kitakado Masahiro, Hasegawa George, Yoshida Suguru, Kubonaka Ryoto, Yoshida Yuya, Kawasaki Tatsushi, Kobayashi Eiichi, Moriyoshi Chikako, Ohno Saneyuki, Fujita Koji, Hayashi Katsuro, Akamatsu Hirofumi	4. 巻 61
2. 論文標題 Topochemical Synthesis of LiCoF3 with a High-Temperature LiNbO3-Type Structure	5. 発行年 2022年
3. 雑誌名 Inorganic Chemistry	6. 最初と最後の頁 11746 ~ 11756
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1021/acs.inorgchem.2c01439	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 Kato Daichi, Tomita Osamu, Nelson Ryky, Kirsanova Maria A., Dronskowski Richard, Suzuki Hajime, Zhong Chengchao, Tassel Cedric, Ishida Kohdai, Matsuzaki Yosuke, Brown Craig M., Fujita Koji, Fujii Kotaro, Yashima Masatomo, Kobayashi Yoji, Saeki Akinori, Oikawa Itaru, Takamura Hitoshi, Abe Ryu, Kageyama Hiroshi, 他2名	4. 巻 32
2. 論文標題 Bi12O17Cl12 with a Sextuple Bi-O Layer Composed of Rock Salt and Fluorite Units and its Structural Conversion through Fluorination to Enhance Photocatalytic Activity	5. 発行年 2022年
3. 雑誌名 Advanced Functional Materials	6. 最初と最後の頁 2204112 ~ 2204112
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1002/adfm.202204112	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 Fukuda Masayuki, Yamada Ikuya, Hojo Hajime, Takahashi Chihiro, Yoshida Yuya, Tanaka Katsuhisa, Azuma Masaki, Fujita Koji	4. 巻 9
2. 論文標題 Topochemical Synthesis of Perovskite-type CuNb2O6 with Colossal Dielectric Constant	5. 発行年 2021年
3. 雑誌名 Journal of Materials Chemistry C	6. 最初と最後の頁 13981 ~ 13990
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1039/D1TC01711J	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 Fujita Kyoko, Asakura Hiroyuki, Hosokawa Saburo, Teramura Kentaro, Kobayashi Masaki, Fujita Koji, Tanaka Tsunehiro	4. 巻 13
2. 論文標題 Oxygen Release and Storage Property of Fe-Al Spinel Compounds: A Three-Way Catalytic Reaction over a Supported Rh Catalyst	5. 発行年 2021年
3. 雑誌名 ACS Applied Materials & Interfaces	6. 最初と最後の頁 24615 ~ 24623
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1021/acsami.1c01486	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 Li Hao-Bo, Kobayashi Shunsuke, Zhong Chengchao, Namba Morito, Cao Yu, Kato Daichi, Kotani Yoshinori, Lin Qianmei, Wu Maokun, Wang Wei-Hua, Kobayashi Masaki, Fujita Koji, Tassel Cedric, Terashima Takahito, Kuwabara Akihide, Kobayashi Yoji, Takatsu Hiroshi, Kageyama Hiroshi	4. 巻 143
2. 論文標題 Dehydration of Electrochemically Protonated Oxide: SrCoO2 with Square Spin Tubes	5. 発行年 2021年
3. 雑誌名 Journal of the American Chemical Society	6. 最初と最後の頁 17517 ~ 17525
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1021/jacs.1c07043	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 Suzuki Hajime, Higashi Masanobu, Tomita Osamu, Ishii Yusuke, Yamamoto Takafumi, Kato Daichi, Kotani Tetsu, Ozaki Daichi, Nozawa Shunsuke, Nakashima Kouichi, Fujita Koji, Saeki Akinori, Kageyama Hiroshi, Abe Ryu	4. 巻 33
2. 論文標題 PbBi3O4X3 (X = Cl, Br) with Single/Double Halogen Layers as a Photocatalyst for Visible-Light-Driven Water Splitting: Impact of a Halogen Layer on the Band Structure and Stability	5. 発行年 2021年
3. 雑誌名 Chemistry of Materials	6. 最初と最後の頁 9580 ~ 9587
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1021/acs.chemmater.1c02876	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 Fukuda Masayuki, Yamada Ikuya, Murata Hidenobu, Hojo Hajime, Hernandez Olivier J., Ritter Clemens, Tanaka Katsuhisa, Fujita Koji	4. 巻 32
2. 論文標題 Perovskite-Type CuNbO <sub>3</sub> Exhibiting Unusual Noncollinear Ferrielectric to Collinear Ferroelectric Dipole Order Transition	5. 発行年 2020年
3. 雑誌名 Chemistry of Materials	6. 最初と最後の頁 5016 ~ 5027
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1021/acs.chemmater.0c00444	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13件 (うち招待講演 1件 / うち国際学会 1件)

1. 発表者名 川崎 龍志, Zhang Yang, Yi Wei, 藤田 晃司, 赤松 寛文, 鳥居 周輝
2. 発表標題 ルドルスデン - ポッパ型スカンジウム酸化物における強誘電性
3. 学会等名 日本セラミックス協会2023年年会
4. 発表年 2023年

1. 発表者名 Li Sihui, 鬼頭 拓也, 小西 伸弥, 藤田 晃司, 田中 勝久
2. 発表標題 EuZrO <sub>3</sub> 系固溶体の結晶構造と磁氣的性質
3. 学会等名 日本物理学会 2023年春季大会
4. 発表年 2023年

1. 発表者名 加藤 大地, 富田 修, 鈴木 肇, 鐘 承超, Tassel Cedric, 石田 耕大, 松崎 洋介, 藤田 晃司, 阿部 竜, 陰山 洋, Nelson Ryky, Dronskowski Richard, Kirsanova A. Maria, Abakumov M. Artem, Brown M. Craig, 藤井 孝太郎, 八島 正知, 佐伯 昭紀, 及川 格, 高村 仁, 小林 洋治, Gorelik E. Tatiana
2. 発表標題 光触媒Bi <sub>12</sub> O <sub>17</sub> Cl <sub>2</sub> の結晶構造とトポケミカルフッ素化による構造変化
3. 学会等名 日本化学会 第103春季年会
4. 発表年 2023年

1. 発表者名 岡田 舜也, 山田 幾也, Yi Wei, 藤田 晃司
2. 発表標題 層状ペロブスカイト型構造を持つ極性酸化物の高圧合成と構造解析
3. 学会等名 第16回日本セラミックス協会関西支部学術講演会
4. 発表年 2022年

1. 発表者名 藤田晃司
2. 発表標題 酸素八面体回転エンジニアリングによる層状ペロブスカイト酸化物強誘電体の創製
3. 学会等名 日本セラミックス協会第34回秋季シンポジウム (招待講演)
4. 発表年 2021年

1. 発表者名 益田菜優太, Yi Wei, 藤田 晃司, 山田 幾也
2. 発表標題 新規ペロブスカイト型モリブデン酸化物の高圧合成
3. 学会等名 日本セラミックス協会関西支部学術講演会
4. 発表年 2021年

1. 発表者名 高橋千宙, Yi Wei, 藤田 晃司, 山田 幾也
2. 発表標題 Cu+を含むペロブスカイト酸化物の高圧合成と構造解析
3. 学会等名 日本セラミックス協会関西支部学術講演会
4. 発表年 2021年



1. 発表者名 Hiroyuki Asakura, Kyoko Fujita, Saburo Hosokawa, Kentaro Teramura, Koji Fujita, Tsunehiro Tanaka
2. 発表標題 Oxygen Storage Property of Fe-Al Spinel Compounds: Three-Way Catalytic Reaction over Supported Rh Catalyst
3. 学会等名 MRM2021 Materials Research Meeting (国際学会)
4. 発表年 2021年

1. 発表者名 小林真己, 藤田晃司
2. 発表標題 酸素欠損ペロブスカイト層状化合物のエピタキシャル成長と強誘電性
3. 学会等名 第37回強誘電体会議
4. 発表年 2020年

1. 発表者名 細野舜, 林数馬, 山田幾也, 藤田晃司
2. 発表標題 新規LiNbO3型酸化物の高压合成と輸送特性
3. 学会等名 第61回高压討論会
4. 発表年 2020年

1. 発表者名 鬼頭拓也, 村井俊介, 藤田晃司, 田中勝久
2. 発表標題 EuZrO3系固溶体の結晶構造と磁氣的性質
3. 学会等名 令和2年度 日本材料学会ナノ材料部門委員会 第1回研究会
4. 発表年 2020年

1. 発表者名 鬼頭拓也, 村井俊介, 藤田晃司, 田中勝久
2. 発表標題 EuZrO3系固溶体の結晶構造と磁氣的性質
3. 学会等名 日本セラミックス協会 2021年年会
4. 発表年 2021年

1. 発表者名 矢野健司, 高瀬祥吾, 藤田晃司, 板坂浩樹, 西正之
2. 発表標題 チタニアの光触媒効果を利用したAFM探針上への銀析出とチップ増強ラマン分光への応用
3. 学会等名 日本セラミックス協会 2021年年会
4. 発表年 2021年

〔図書〕 計0件

〔産業財産権〕

〔その他〕

京都大学大学院工学研究科 材料化学専攻 機能材料設計学講座 藤田研究室 <a href="http://www1.kuic.kyoto-u.ac.jp">http://www1.kuic.kyoto-u.ac.jp</a>
--

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			
フランス	Univ Rennes	Institut Laue-Langevin		
米国	Pennsylvania State University			
英国	Rutherford Appleton Laboratory			