

令和 2 年 6 月 2 日現在

機関番号：14301

研究種目：挑戦的研究(萌芽)

研究期間：2018～2019

課題番号：18K18806

研究課題名(和文)欠陥固有ナノひずみ集中場による力学的ナノ強誘電体の創出

研究課題名(英文)Development of Mechanical Nano-ferroelectrics induced by nanoscale strain field of lattice defects

研究代表者

北村 隆行(Kitamura, Takayuki)

京都大学・工学研究科・教授

研究者番号：20169882

交付決定額(研究期間全体)：(直接経費) 4,900,000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、原子・格子スケールの微小強誘電体を力学的につくり出すことを目的とし、代表的な格子欠陥である転位とナノ強誘電体に対してその場観察力学試験と量子力学に基づく第一原理解析を行った。転位芯部では自発的な固有ひずみ場が形成されており、この固有ひずみ場によって数結晶格子サイズの強誘電性が発現することを明らかにした。すなわち、転位芯自体が原子・格子スケールの強誘電材料となることを示した。さらに、ナノ強誘電体に対する力学試験・解析を実施し、ひずみと強誘電性の運動効果(マルチフィジックス特性)を明らかにした。

研究成果の学術的意義や社会的意義

本研究は、臨界寸法以下の強誘電性は存在し難いという前例を覆し、格子欠陥が有する固有のひずみ場によって力学的に原子スケールの強誘電体をつくり出す点や、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-強誘電性間の異種物理特性が作用する新しい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、ひずみシリコンなどの応用例のように電子デバイスへの利用が始まっていることから、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)：To overcome the critical nano-dimensions where ferroelectricity disappears and to mechanically design ultra-small ferroelectrics with atomic and lattice scales, we have performed in-situ mechanical tests and first-principles analysis based on quantum mechanics for dislocation cores in SrTiO<sub>3</sub>. We find that a spontaneous intrinsic strain field is formed at the dislocation core, and this strain field induced the ferroelectricity with a few crystal lattice sizes. Therefore, the dislocation core itself can be regarded as a atomic (or lattice)-scale ferroelectric material. In addition, mechanical testing and analyses for nano-ferroelectrics have been carried out and then we clarify the coupling effect between strain and ferroelectricity (multiphysics properties).

研究分野：ナノ材料力学

キーワード：格子欠陥 ナノひずみ場 強誘電性 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)材料は、ナノ・バイオ MEMS や高密度記録デバイス、燃料電池など次世代科学技術の基幹を成すが、それらの実用化には精密に形状制御された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確保が重要な課題である。研究代表者らのグループでは、ナノ材料中の強誘電性を原子/電子レベルから解明する研究に従事しており、その過程で、ナノスケールの強誘電材料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り、臨界ナノ寸法を境に強誘電性が消失することを明らかにした。すなわち、臨界ナノ寸法以下の強誘電体は物理的に存在し難いとされている。

さて、一般的には、材料中には転位や微小き裂などの多数の欠陥が含まれており、こうした欠陥は材料特性・機能を劣化させることが知られる。一方で、研究代表者らのグループでは、非強誘電材料中の欠陥部に、本来有り得ないはずの強誘電性が現れることを示唆するに至っている。例えば、転位では、その芯部近傍に強誘電性が発現することが理論的に予想され、転位芯自身が原子数個程度の寸法の強誘電体となりうる。すなわち、物理的な臨界寸法を超えた、原子スケールの強誘電体を格子欠陥によって創出できる可能性に気付いた。さらに、欠陥によって誘起される強誘電性は、マクロ材で見られる単純な直線状の性質と異なることも予備的な理論解析から予想されている。こうした特異な強誘電特性は欠陥が自発的に形成するひずみ場に沿って生じていることから、欠陥固有のナノひずみ集中場によって発現している可能性が示唆されるが、その詳細な発現機構や特性の詳細は全く解明されていない。

以上から、欠陥固有のひずみ集中場によって発現する新奇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、従来よく知られる物理的な臨界寸法を超えた、さらに微小なナノ強誘電体を創出できる可能性があること、さらに、ひずみ集中場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、積極的に工学利用することで、新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、研究代表者らのグループが有するナノ材料に関する独自の実験技術ならびに量子解析手法を発展・併用することで、欠陥構造とその固有ひずみ集中場に依存して発現する、物理的な臨界寸法を超えた格子スケールの新奇強誘電特性を原子/電子レベルから明らかにすること、さらに、ナノレベルでのひずみと強誘電特性の連動効果(マルチフィジックス特性)とその原理・法則を究明することで、新機能を力学的に制御し、自在に引き出す力学設計基盤を示すことを目的とする。

### 3. 研究の方法

本研究では、研究代表者らのグループが有する欠陥固有のナノひずみ集中場に関する実験観察技術ならびに大規模な原子・電子レベル解析法を併用・発展させることで、上記目的を達成する。北村(代表者)と澄川(分担者)が試料作製・実験観察・評価を行う。また、北村と嶋田(分担者)が大規模量子解析装置開発と同解析実施を行う。北村が全体を統括し、得られた実験・解析結果について全員で検討する。具体的な研究方法は以下のとおりである。

- ・欠陥をナノレベルで制御して導入・配列した試料を作製し、集束イオンビーム加工によって透過観察が可能な薄片化ナノ試験片を作製する。
- ・上記ナノ試験片に対して高分解能透過型電子顕微鏡を用いた観察試験を行い、欠陥部での原子構造と周囲のナノレベルひずみ集中場を詳細観察・評価する。
- ・大規模量子解析手法と装置の構築を行い、上記(2)で実験的に得られた欠陥構造・ひずみ集中場を再現する大規模原子モデルに対して量子力学解析を実施する。
- ・実験・解析によって得られた欠陥部近傍の原子構造・電子状態から、同部に現れる特異な格子スケール強誘電特性を評価・解明する。さらに、特異な強誘電性が発現した領域の電子状態を解析し、ひずみとの連動性を明らかにすることで、その発現メカニズムとひずみ-強誘電性連動効果(マルチフィジックス)を解明する。

### 4. 研究成果

転位や微小き裂は周囲に特異性を有する固有のひずみ集中場を形成するため、本研究ではこれらの欠陥を主たる研究対象とした。特定の結晶方位に回転操作した二枚の単結晶板を重ね合わせた後、一定の圧力をかけて高温拡散接合を行うことで刃状転位が周期的に配列した構造を作製することに成功し、これによって同欠陥を対象材である SrTiO<sub>3</sub> に導入したナノ試験片を作製した。作製した試料から、現有の集束イオンビーム(FIB)加工装置を用いて欠陥を有する領域を切り出すことで、ナノサイズの試験片を作製した。作製したナノ試験片に対し、現有の高分解能透過型電子顕微鏡(High-resolution transmission electron microscope: HRTEM)を用いて欠陥とその近傍の原子位置を精密に透過観察することで、原子構造と同部での特性評価を行った。さらに、得られた透過像に対して幾何学的位相解析(Geometric Phase Analysis: GPA)を実施することで、欠陥近傍のひずみ集中場を評価することに成功した。

上記で得られた欠陥の原子構造ならびにひずみ場に関する実験結果を基に、原子構造モデルを作成し、量子力学解析を実施した。欠陥と周囲のひずみ場を再現するためには、大規模な量子力学解析を実施する必要があり、本研究ではまずそのための解析手法・装置の構築を行った。この大規模解析用装置・技術を用いて欠陥部近傍の原子構造・電子状態を評価した。解析によって得られた転位芯構造は実験で得られた転位芯の原子像とよく一致しており、これは本第一原理解析によって実際のSrTiO<sub>3</sub>中の転位構造が良く再現できたことを示している。以上のように信頼性の確認ができた本第一原理解析結果を基に、転位芯部に現れる強誘電特性を解析した。図1は、SrTiO<sub>3</sub>中の刃状転位芯に対する第一原理解析結果であり、図(a)は刃状転位芯周囲に発現する強誘電分極ベクトル(赤矢印)分布、図(b)は刃状転位芯近傍のひずみ分布を示す。SrTiO<sub>3</sub>は常誘電体であり自発分極を持ち得ないが、刃状転位芯近傍では赤矢印で示す強誘電分極が発現している。さらに、その発現領域はわずかに結晶格子数個程度の微小領域に留まっていることから、転位芯自体が原子(結晶格子)スケールの微小強誘電材料となっていることが明らかになった。さらに、この強誘電分極の発現領域は、刃状転位によって自発的に形成されるひずみ分布(図(b))とよく対応していることから、この原子(結晶格子)スケール強誘電性が転位の固有ひずみ場によってもたらされたことが示唆された。すなわち、格子欠陥固有の力学場が、臨界サイズを超えた、超微小機能性の発現を担うことを示した。

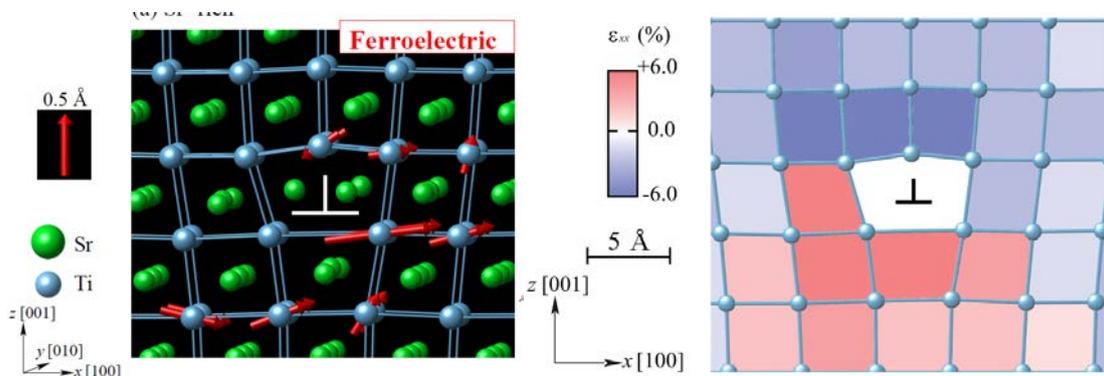


図1. SrTiO<sub>3</sub>中の刃状転位芯に対する第一原理解析結果。(a)刃状転位芯周囲に発現する強誘電分極ベクトル(赤矢印)分布。(b)刃状転位芯近傍のひずみ分布。

本研究ではさらに、上記によって示唆された負荷ひずみと強誘電性の連動性(マルチフィジックス特性)をより詳細に解明するため、制御された負荷下における強誘電分極の力学挙動に焦点を当て、実験的・解析的検討を行った。まず、微小強誘電材料試験片に制御された負荷を行い、かつ、その分極挙動をその場観察するための新たな実験手法を考案した。図2(a)はその模式図を示す。図中中央の薄片化した観察領域の両側に厚く剛性の高い部位を残し、透過型電子顕微鏡内でこの試験体に上部から負荷圧子で鉛直下向きに押し込みを行い開口変位を与えることで、観察領域上端部に引張りひずみを負荷することができる。図(b)は実際の試験片のTEM観察像であり、設計どおりの形状に試験体を作製することに成功した。さらに、薄片化した観察部上端では、ナノ強誘電体の特徴であるナノレベルの縞状(ストライプ型)ドメイン構造が明瞭に観察できた。

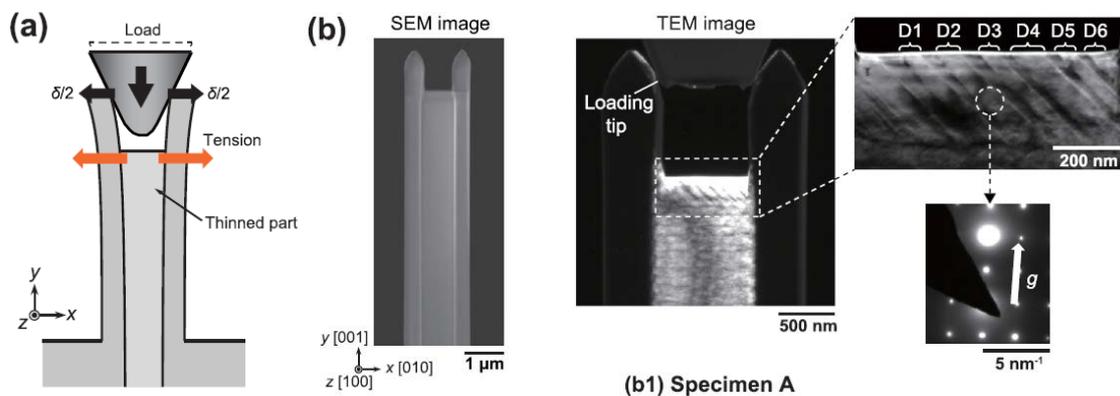


図2。(a)ナノ強誘電体のマルチフィジックス力学実験のための試験設計模式図。(b)収束イオンビーム加工によって作製したナノ強誘電体試験片とその薄片化した観察領域上端のドメイン構造の透過型電子顕微鏡像。

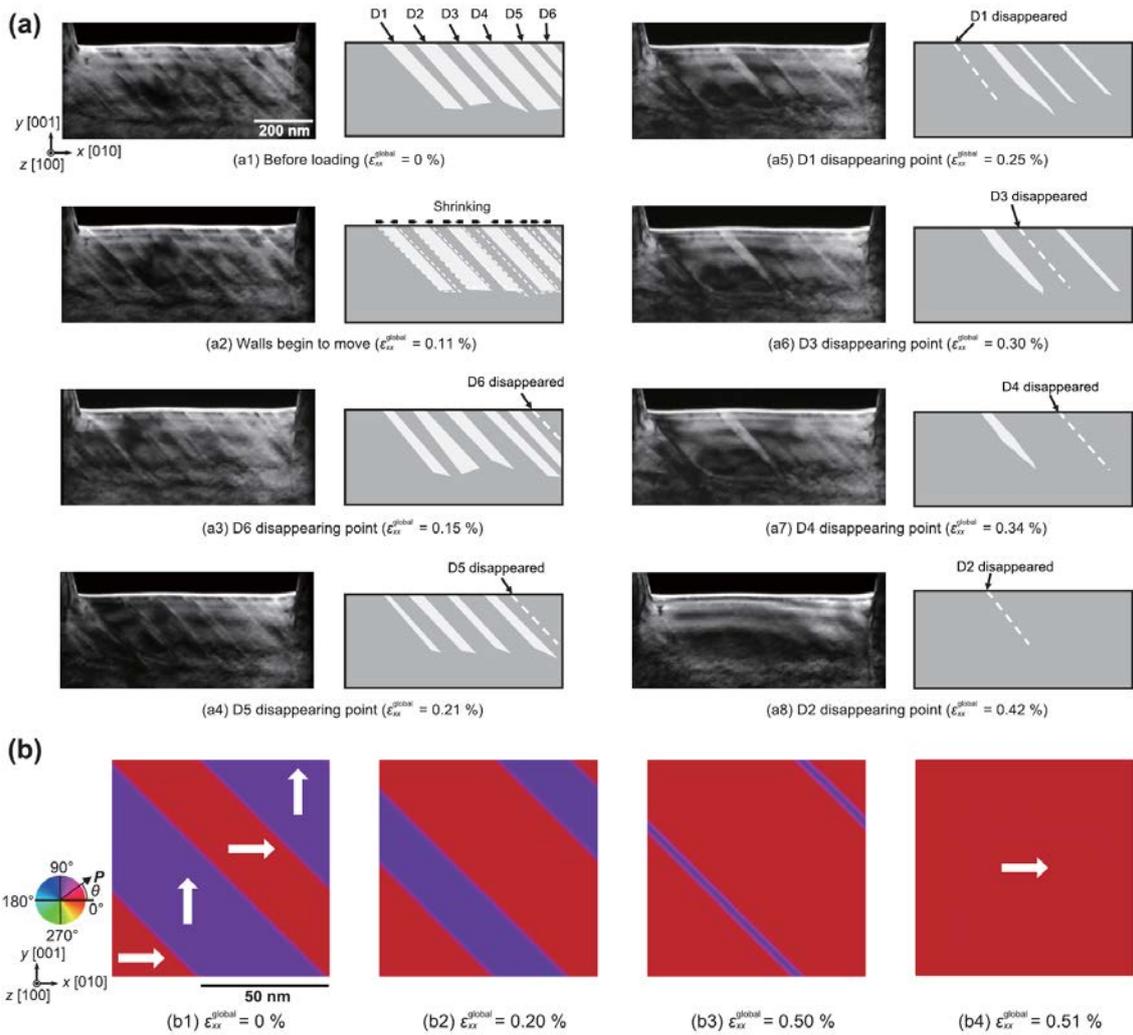


図 3. (a) 透過型電子顕微鏡内その場観察実験結果. (b) Phase-field 解析による理論解析結果.

図 3 (a) は、透過型電子顕微鏡内その場観察実験結果を示す。ナノレベルの強誘電ドメインの境界であるドメイン壁が、ある臨界負荷を超えた段階で移動し始め、ドメイン壁の移動・合体をともなってナノドメインが消失する様子が観察できた。これは、同強誘電体の材料物性をよく再現する連続体モデルを用いた Phase-field 解析結果 (図 3 (b)) とよく一致していることから、ナノ強誘電体の微視的力学応答を実験的にとらえることに成功した。さらに、このナノ強誘電ドメインの力学応答の素過程となるドメイン壁の移動について、力学的な検討を行った。その結果、ドメイン壁に負荷される分解せん断応力がある臨界値に達すると、ドメイン壁が不安定的に移動することが明らかになった。これは、別途行ったドメイン壁に対するせん断負荷第一原理解析結果とよく一致しており、ナノレベルの強誘電ドメインの力学応答 (マルチフィジクス特性) に関する基礎的知見を得ることができた。

上記の成果は、既に国際論文誌 (“In situ TEM observation of nanodomain mechanics in barium titanate under external loads”, Takashi Sumigawa, Ken Hikasa, Akihiro Kusunose, Hiroaki Unno, Kairi Masuda, Takahiro Shimada, and Takayuki Kitamura, *Physical Review Materials*, Vol. 4, Issue 5, Article number 054415 (8 pp) (2020)) に掲載されており、同誌の「Editors’ Suggestion」に選ばれるなど、国際的に高い評価を受けている。

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 0件）

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 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 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 <sub>3</sub> 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 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) 10.1103/PhysRevApplied.11.054001	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 Yabin Yan, Kai Huang, Takashi Sumigawa, Takayuki Kitamura	4. 巻 193
2. 論文標題 Fracture criterion of mixed-mode crack propagation along the interface in nanoscale components	5. 発行年 2018年
3. 雑誌名 Engineering Fracture Mechanics	6. 最初と最後の頁 137-150
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1016/j.engfracmech.2018.02.014	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 Li-cheng Guo, Kai Huang, Takashi Sumigawa, Yabin Yan, Takayuki Kitamura	4. 巻 196
2. 論文標題 Unstable cracking behavior in nanoscale single crystal silicon: Initiation, unstable propagation and arrest	5. 発行年 2018年
3. 雑誌名 Engineering Fracture Mechanics	6. 最初と最後の頁 113-122
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1016/j.engfracmech.2018.04.014	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 Molly Bazilchuk, Takashi Sumigawa, Takayuki Kitamura, Zhiliang Zhang, Helge Kristiansen and Jianying He	4. 巻 -
2. 論文標題 Deformation and fracture of micron-sized metal-coated polymer spheres: an in-situ study	5. 発行年 2018年
3. 雑誌名 Advanced Engineering Materials	6. 最初と最後の頁 1800049-1-6
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1002/adem.201800049	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, Kim Byungwoon, Yuki Mizuno, Takuma Morimura, and Takayuki Kitamura	4. 巻 153
2. 論文標題 In situ observation on formation process of nanoscale cracking during tension-compression fatigue of single crystal copper micron-scale specimen	5. 発行年 2018年
3. 雑誌名 Acta Materialia	6. 最初と最後の頁 270-278
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1016/j.actamat.2018.04.061	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 Pasquale Gallo, Takashi Sumigawa, Takayuki Kitamura, Filippo Berto	4. 巻 95
2. 論文標題 Static assessment of nanoscale notched silicon beams using the averaged strain energy density method	5. 発行年 2018年
3. 雑誌名 Theoretical and Applied Fracture Mechanics	6. 最初と最後の頁 261-269
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1016/j.tafmec.2018.03.007	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 Takayuki Kitamura, Takashi Sumigawa, Takahiro Shimada	4. 巻 187
2. 論文標題 Challenge toward nanometer scale fracture mechanics	5. 発行年 2018年
3. 雑誌名 Engineering Fracture Mechanics	6. 最初と最後の頁 33-44
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1016/j.engfracmech.2017.10.009	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 <sub>3</sub>	5. 発行年 2019年
3. 雑誌名 npj Computational Materials	6. 最初と最後の頁 23
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 Pasquale Gallo, Yohei Hagiwara, Takahiro Shimada, and Takayuki Kitamura	4. 巻 103
2. 論文標題 Strain energy density approach for brittle fracture from nano to macroscale and breakdown of continuum theory	5. 発行年 2019年
3. 雑誌名 Theoretical and Applied Fracture Mechanics	6. 最初と最後の頁 102300
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1016/j.tafmec.2019.102300	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 Ajit K. Katiyar, Ashwini Ann Davidson, Houk Jang, Yun Hwangbo, Byeori Han, Seonwoo Lee, Yohei Hagiwara, Takahiro Shimada, Hiroyuki Hirakata, Takayuki Kitamura and Jong-Hyun Ahn	4. 巻 11
2. 論文標題 Ultrasoft silicon nanomembranes: Thickness-dependent effective elastic modulus	5. 発行年 2019年
3. 雑誌名 Nanoscale	6. 最初と最後の頁 15184-15194
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1039/c9nr03995c	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 <sub>3</sub> : 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

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 uunder 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 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

〔学会発表〕 計7件 (うち招待講演 2件 / うち国際学会 7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 <sub>3</sub>
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 Takashi Sumigawa
2. 発表標題 Formation of Slip Bands in Nano-polycrystalline Copper sandwiched between Brittle Materials
3. 学会等名 European conference on fracture (国際学会)
4. 発表年 2018年

1. 発表者名 Takashi Sumigawa
2. 発表標題 Fatigue of single-crystal gold micro-specimen by resonant vibration
3. 学会等名 1st International Conference on Theoretical, Applied, Experimental Mechanics (国際学会)
4. 発表年 2018年

1. 発表者名 Takayuki Kitamura
2. 発表標題 Challenge toward Fracture Mechanics in Atomic Scale
3. 学会等名 European conference on fracture (招待講演) (国際学会)
4. 発表年 2018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
研究 分担者	澄川 貴志  (Sumigawa Takashi)  (80403989)	京都大学・工学研究科・准教授   (14301)	
研究 分担者	嶋田 隆広  (Shimada Takahiro)  (20534259)	京都大学・工学研究科・准教授   (14301)	