

令和 4 年 6 月 9 日現在

機関番号：14301

研究種目：基盤研究(B) (一般)

研究期間：2019～2021

課題番号：19H02433

研究課題名(和文) 間接型強誘電体の学理構築と機能開拓

研究課題名(英文) Science and function exploration of improper ferroelectrics

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) 13,100,000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の酸素八面体回転を制御して、圧電体・強誘電体の開拓を目指した。SrLa₂Sc₂O₇における構造解析から、室温相は極性構造を有し、酸素八面体の回転と傾斜による二種類の構造歪みをもつことがわかった。強誘電ヒステリシス測定により分極反転が観察され、この化合物が新奇強誘電体であることが明らかになった。

この他にも、AgRTiO₄ (Rは希土類)が室温で酸素八面体回転による構造歪みをもち、圧電体となることがわかった。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、八面体回転と八面体変形が競合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な新規強誘電体・圧電体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Pb(Zr,Ti)O₃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, SrLa₂Sc₂O₇, crystallizes in a polar orthorhombic symmetry (space group A21am) at room temperature. 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, AgRTiO₄ (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 圧電体

1. 研究開始当初の背景

BaTiO₃ や PbTiO₃ 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 d⁰ 電子配置をもつイオン (Ti⁴⁺ や Nb⁵⁺) や 6s² 孤立電子対をもつカチオン (Pb²⁺ や Bi³⁺) 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、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 ABO₃ 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ーであり、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、「酸素八面体回転による結晶構造の反転対称性の破れ」に焦点を当て、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、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 SrLa₂Sc₂O₇ と (2) $n=1$ RP 相 AgRTiO₄ (R は希土類) の内容を以下に示す。

3. 研究の方法

$n=2$ RP 相 SrLa₂Sc₂O₇ は通常の高温固相反応法を用いて作製した。 $n=1$ RP 相 AgRTiO₄ 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 (SXR) 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 ($\lambda=1064$ 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]。

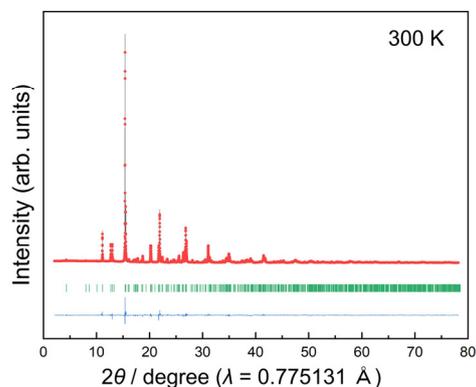


図 1: SrLa₂Sc₂O₇ の室温での SXR パターンと Rietveld 解析の結果

4. 研究成果

(1) SrLa₂Sc₂O₇

$n=2$ RP 相のハイブリッド間接型強誘電体 A₃B₂O₇ では、ペロブスカイト層の許容因子 t が小さくなると酸素八面体回転が誘起され、強誘電相が安定化される[7]。一方で、AR₂B₂O₇ のように価数の異なる二種類のカチオン (A²⁺ と R³⁺) が A サイトを占める $n=2$ の RP 相では、A カチオンがイオン半径差に起因して秩序化し、層間に局所電場が生じる。その結果、BO₆ 八面体自体の歪みが生じ、酸素八面体回転・傾斜が抑制されることが理論計算に基づき示されている[8]。

本研究では、AR₂B₂O₇ において強誘電性発現の可能性を調べるため、SrLa₂Sc₂O₇ 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

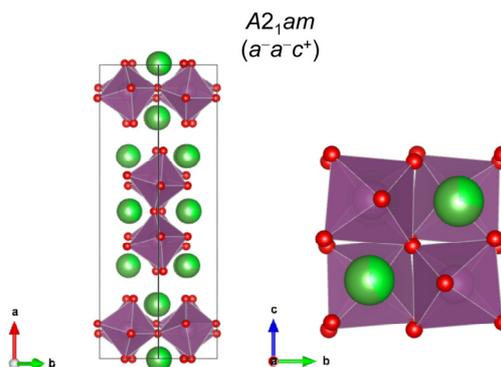


図 2: SrLa₂Sc₂O₇ の強誘電相 ($A2_1am$) の結晶構造

称構造 (空間群 $Fm\bar{3}m$) 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]。

$\text{SrLa}_2\text{Sc}_2\text{O}_7$ に対する室温での SXR D パターン (図 1) と NPD パターンの指数付けと消滅則から、空間群は既報の $Fm\bar{3}m$ 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、 $\text{SrLa}_2\text{Sc}_2\text{O}_7$ 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 2 に示す。 $A2_1am$ 構造は 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、 $\text{SrLa}_2\text{Sc}_2\text{O}_7$ はハイブリッド間接型強誘電体の候補である。

温度可変 SHG 測定の結果より、 $\text{SrLa}_2\text{Sc}_2\text{O}_7$ 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 (図 3) 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 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) AgRTiO_4 (R は希土類)

2014 年、研究代表者らは、 $n=1$ RP 相 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 LiRTiO_4 [11]、 HRTiO_4 [12]、 KRTiO_4 [13] が同じ機構で圧電体となることを明らかにした。

今回の研究では、 $n=1$ RP 相 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]。本研究では、 AgRTiO_4 の結晶構造を再調査し、構造-物性関係を調べた。 AgRTiO_4 ($R = \text{La, Sm, Eu, Y}$) に対する室温 SXR D 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、 $R = \text{Sm, Eu, Y}$ 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。 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、 $R = \text{Sm, Eu}$ では中性子の吸収が大きいため、NPD による構造解析が困難であった。 $R = \text{Y}$ 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。

AgRTiO_4 の安定相の結晶構造をさらに詳細に調べるため、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 AgRTiO_4 ($R = \text{Sm-Ho}$) 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 (図 4)。また、計

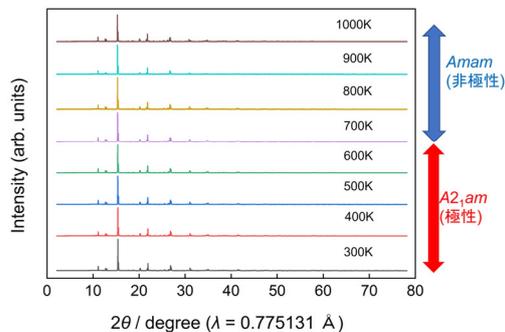


図 3: $\text{SrLa}_2\text{Sc}_2\text{O}_7$ の SXR D パターンの温度依存性。

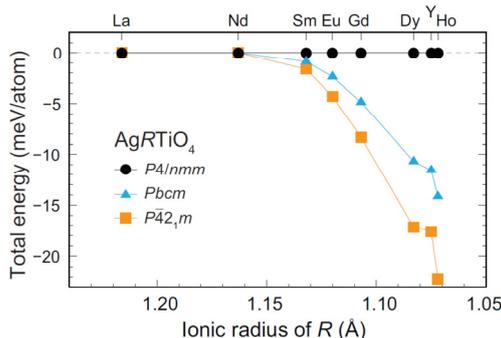


図 4: AgRTiO_4 に対する $P4/nmm$ 、 $Pbcm$ 、 $P\bar{4}2_1m$ 構造の全エネルギーの希土類イオン半径依存性

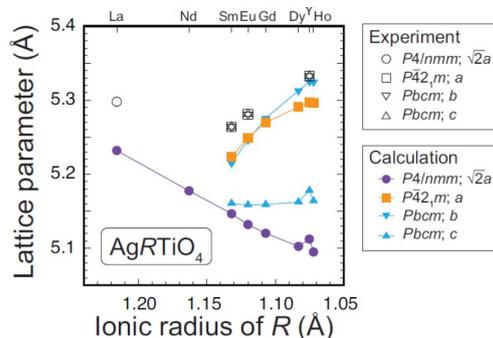


図 5: 実験と計算により得られた AgRTiO_4 に対する $P4/nmm$ 、 $P\bar{4}2_1m$ 、 $Pbcm$ 構造の短軸格子定数の希土類イオン半径依存性

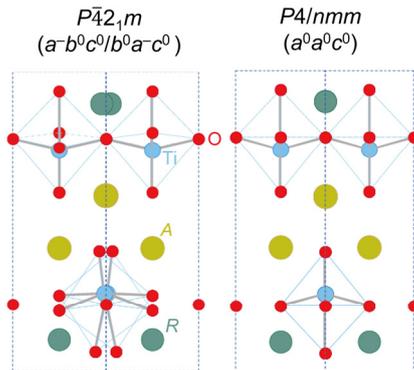


図 6: AgRTiO_4 の圧電相 ($P\bar{4}2_1m$) と原型相 ($P4/nmm$) の結晶構造

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ところ、前者の構造は、 R のイオン半径の増加に伴って a 軸長と b 軸長の減少を示し、実験結果をよく再現した (図 5)。以上の実験と計算の結果から、 AgRTiO_4 ($R = \text{Sm}, \text{Eu}, \text{Y}$) 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 ($A = \text{H}, \text{Li}, \text{Na}, \text{K}$) 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 参照)。

詳細な構造解析から、図 5 で示された Ag 系の圧電相 ($R = \text{Sm-Ho}$) 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。加えて、 Ag 系の圧電相 (空間群 $P\bar{4}2_1m$) では a 軸と b 軸に沿って負の熱膨張が観察された [図 7(a)]。 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(b)]。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、 a 軸と b 軸方向の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。

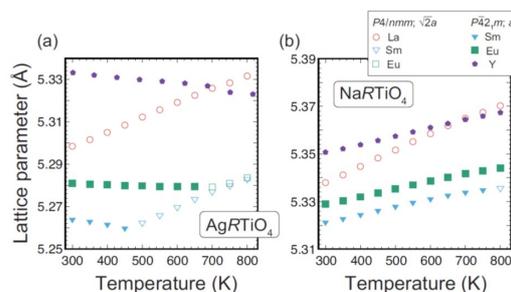


図 7: (a) AgRTiO_4 ($R = \text{La}, \text{Sm}, \text{Eu}, \text{Y}$) と (b) NaRTiO_4 ($R = \text{La}, \text{Sm}, \text{Eu}, \text{Y}$) における a 軸長 ($= b$ 軸長) の温度依存性

<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] I. Kim. *et al.*, *Mater Res. Bull.* **10** 1193 (1992).
- [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.
- [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8件（うち査読付論文 7件/うち国際共著 2件/うちオープンアクセス 0件）

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/acssami.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 Akihito, Kobayashi Yoji, Takatsu Hiroshi, Kageyama Hiroshi	4. 巻 143
2. 論文標題 Dehydration of Electrochemically Protonated Oxide: SrCoO ₂ 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 PbBi ₃ O ₄ X ₃ (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 Shimizu Masahiro, Murota Teppei, Urata Shingo, Takato Yoichi, Hamada Yuya, Koike Akio, Shimotsuma Yasuhiko, Fujita Koji, Miura Kiyotaka	4. 巻 155
2. 論文標題 Structural Origin of Thermal Shrinkage in Soda-Lime Silicate Glass Below the Glass Transition Temperature: A Theoretical Investigation by Microsecond Timescale Molecular Dynamics Simulations	5. 発行年 2021年
3. 雑誌名 The Journal of Chemical Physics	6. 最初と最後の頁 044501 ~ 044501
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1063/5.0056464	査読の有無 無
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 CuNbO3 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

1. 著者名 Akamatsu Hirofumi, Fujita Koji, Kuge Toshihiro, Gupta Arnab Sen, Rondinelli James M., Tanaka Isao, Tanaka Katsuhisa, Gopalan Venkatraman	4. 巻 3
2. 論文標題 A-site cation size effect on oxygen octahedral rotations in acentric Ruddlesden-Popper alkali rare-earth titanates	5. 発行年 2019年
3. 雑誌名 Physical Review Materials	6. 最初と最後の頁 065001/1 ~ 5
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1103/PhysRevMaterials.3.065001	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 Kawachiya Yuki, Murai Shunsuke, Saito Motoharu, Fujita Koji, Tanaka Katsuhisa	4. 巻 36
2. 論文標題 Photoluminescence decay rate of an emitter layer on an Al nanocylinder array: effect of layer thickness	5. 発行年 2019年
3. 雑誌名 Journal of the Optical Society of America B	6. 最初と最後の頁 E1 ~ E1
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1364/JOSAB.36.0000E1	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20件（うち招待講演 5件 / うち国際学会 4件）

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LiNbO ₃ 型酸化物の高圧合成と輸送特性
3. 学会等名 第61回高圧討論会
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 EuZrO ₃ 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 EuZrO ₃ 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

1. 発表者名 藤田 晃司
2. 発表標題 実験と計算を組み合わせたアプローチによる層状ペロブスカイト強誘電体・圧電体の設計
3. 学会等名 第36回強誘電体応用会議 (FMA) (招待講演)
4. 発表年 2019年

1. 発表者名 藤田 晃司
2. 発表標題 層状ペロブスカイト酸化物における酸素八面体回転エンジニアリング：新規強誘電体・圧電体の開拓
3. 学会等名 第4回固体化学フォーラム研究会 (招待講演)
4. 発表年 2019年

1. 発表者名 藤田 晃司
2. 発表標題 ペロブスカイト関連層状酸化物における酸素八面体回転エンジニアリング - 新規強誘電体・圧電体の開拓 -
3. 学会等名 半導体エレクトロニクス部門委員会およびナノ材料部門委員会合同研究会 (招待講演)
4. 発表年 2019年

1. 発表者名 藤田 晃司
2. 発表標題 層状ペロブスカイト酸化物における酸素八面体回転エンジニアリング：新奇強誘電体・圧電体の開拓
3. 学会等名 強誘電体関連物質の機能発現に関する構造科学の新展開（招待講演）
4. 発表年 2019年

1. 発表者名 Masayuki Fukuda, Ikuya Yamada, Hidenobu Murata, Hajime Hojo, Katsuhisa Tanaka, and Koji Fujita
2. 発表標題 Reversible Phase Transition and Irreversible Topochemical Reaction in a Perovskite-Type CuNbO_3
3. 学会等名 The 11th International Conference on the Science and Technology for Advanced Ceramics (STAC-11) (国際学会)
4. 発表年 2019年

1. 発表者名 Suguru Yoshida, Hirofumi Akamatsu, Ryosuke Tsuji, Olivier Hernandez, Haricharan Padmanabhan, Alexandra S. Gibbs, Ko Mibu, Shunsuke Murai, Venkatraman Gopalan, Katsuhisa Tanaka, and Koji Fujita
2. 発表標題 Development of Hybrid Improper Ferroelectric Layered Perovskites
3. 学会等名 The 13th Pacific Rim Conference of Ceramic Societies (PACRIM13) (国際学会)
4. 発表年 2019年

1. 発表者名 Shogo Takase, Jinsuke Miyake, Suguru Yoshida, Katsuhisa Tanaka, and Koji Fujita
2. 発表標題 Structural Phase Transitions in A-site Deficient Perovskite Oxides
3. 学会等名 The 13th Pacific Rim Conference of Ceramic Societies (PACRIM13) (国際学会)
4. 発表年 2019年

1. 発表者名 高瀬 祥吾、三宅 仁介、吉田 傑、田中 勝久、藤田 晃司
2. 発表標題 Aサイト欠陥ペロブスカイト型極性酸化物の構造相転移
3. 学会等名 日本セラミックス協会2020年年会
4. 発表年 2020年

1. 発表者名 大塚 達貴、田中 勝久、藤田 晃司
2. 発表標題 層状ペロブスカイト酸化物Sr ₃ Zr ₂ O ₇ のBカチオン置換による構造相転移
3. 学会等名 日本セラミックス協会2020年年会
4. 発表年 2020年

1. 発表者名 松井 大起、村井 俊介、田中 勝久、藤田 晃司
2. 発表標題 Eu ²⁺ 含有ペロブスカイト型酸化物薄膜の合成
3. 学会等名 日本セラミックス協会2020年年会
4. 発表年 2020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 日本セラミックス協会2020年年会
4. 発表年 2020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
http://www1.kuic.kyoto-u.ac.jp

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	村井 俊介 (MURAI Shunsuke) (20378805)	京都大学・工学研究科・助教 (14301)	

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	Northwestern University		