

## 海外での研究発表を経験して

大学院工学研究科

物理工学系プログラム応用物理分野

吾妻 真光

名古屋工業大学 尾形研究室(計算物性研究室)博士前期課程2年の吾妻 真光です。この度、計測会から海外発表支援金をいただきました。2023年の5月29日から5日間に渡って開催された European Materials Research Society (E-MRS) 2023 Spring Meeting に参加した経験を報告します。

学会の開催地はフランスのストラスブールで、ドイツとの国境上を流れるライン川の西側に位置する、昔ながらの建築様式のヨーロッパらしい建物が多数ある街です。私は海外渡航すら初めてでしたので、さらに英語で研究発表を行なうとなると、不安がなかなか頭を離れませんでした。それでも列車を降りて現地につき、宿泊先に向かって歩いた時には、ストラスブールの美しい街並みが心を踊らせてくれました。

今学会では、口頭発表(表題: Ferroelectric  $90^\circ$  domain wall migration and free energy in  $\text{BaTiO}_3$  via molecular dynamics simulations)とポスター発表(表題: Tuning physical properties of ferroelectric  $\text{BaTiO}_3$  by lateral compression: A molecular dynamics simulation study)の2件の発表を行いました。

(注) 発表内容の要約を文末に補足説明として記しました。

私の研究分野は原子スケールでのコンピュータシミュレーションで、特に強誘電体材料を対象として研究を行っています。今まで経験した日本国内での学会発表では、実験を主とする研究者の参加が多かった印象です。(参加した学会によるところも大きいと思います)一方、今回の学会ではシミュレーションによる強誘電体研究の発表も多く、先行論文の著者として見覚えのある名前も発表者にありました。この意味では、国内での学会よりも、研究内容が近いことで周囲の参加者が身内に感じられました。発表を無事終えて、質疑応答でも一通り回答できたものの、もっと英語力があればより深く議論できたであろうことが惜しく、英語力の向上が今後の課題です。

E-MRSは、2023年で40周年記念だったようです。学会期間中の昼食にはコース料理が提供され、最終日の夜には会場前の広場で酒や食事が振る舞われました。毎度現地の料理が楽しめたことに加えて、参加者同士でコミュニケーションがとれる機会も多く、初の学会参加と周年記念が重なったのは幸運だったと感じます。ここまで恵まれた学会参加は稀かもしれませんが、博士後期課程進学後も海外での研究発表や留学を積極的に行いたいと思います。

最後に、改めて、計測会から海外発表給付金をいただきましたことに深く感謝申し上げます。また、日頃よりご指導をいただいている尾形 修司教授をはじめ、私の研究活動に関わってくださった全ての方々に感謝いたします。いただいた給付金を有効活用し、これからも研究活動に励みます。



学会会場前での集合写真。右から3番目が筆者

\*表情が分かりにくいので、顔写真を付けました。



学会での昼食の様子(パノラマ写真)

#### ●発表内容に関する補足説明

強誘電体は、自発分極(電氣的な偏り)を持ち、外部から電場を印加することで自発分極の方向を反転させられる物質であり、コンデンサーや強誘電体メモリ(FerAM)などに用いられる。現在は強誘電体材料として有害な鉛を含むものが性能の高さから広く使われているが、環境への配慮から、鉛を含まない強誘電体材料による代替が望まれている。今学会では、鉛を含まない強誘電体材料として代表的なチタン酸バリウム( $\text{BaTiO}_3$ )に関する2つの研究成果を発表した。

##### (1) 口頭発表

Ferroelectric  $90^\circ$  domain wall migration and free energy in  $\text{BaTiO}_3$  via molecular dynamics simulations

強誘電体チタン酸バリウムにおける  $90^\circ$  ドメイン壁の移動と自由エネルギーの分子動力学シミュレーション計算

本研究では、ドメイン壁(自発分極の向きが変化する界面)の外部電場下での移動過程を原子スケールのシミュレーションによって解析した。さらに、ドメイン壁の存在度に直結する自由エネルギーを求めた。ドメイン壁の種類(分極方向の違い)によって移動速度や自由エネルギーに倍以上の差があることを見出した。

## (2) ポスター発表

Tuning physical properties of ferroelectric BaTiO<sub>3</sub> by lateral compression: A molecular dynamics simulation study

二軸歪みによる強誘電体 BaTiO<sub>3</sub> の特性チューニングの分子動力学シミュレーション解析  
チタン酸バリウム の特性を向上させるための手法として、材料に2方向の歪みを与えることの効果を原子スケールで解析した。2方向の歪みを適切に印加することで、材料が強誘電体としての性質を維持できる温度上限を 300°C以上に向上させられることを見出した。また、歪み下での原子の変位パターンを解析し、歪みによって特性が変化するメカニズムを明らかにした。