

実験と理論・計算・データ科学を融合した材料開発の革新
2018年度採択研究代表者

2022年度
年次報告書

山本 明保

東京農工大学 大学院工学研究院
准教授

超伝導インフォマティクスに基づく多結晶型超伝導材料・磁石の開発

主たる共同研究者:

飯田 和昌 (日本大学 生産工学部 教授)

嶋田 雄介 (東北大学 金属材料研究所 助教)

波多 聡 (九州大学 大学院総合理工学研究院 教授)

山中 晃徳 (東京農工大学 大学院工学研究院 教授)

研究成果の概要

本研究は、実験材料科学と計算・データ科学等の協奏による、多結晶材料の組織制御と機能開拓の新しいスタイルを、高温超伝導新材料からの磁石基礎開発を例として提示することを目指している。輸送電流特性は超伝導材料の磁石性能を決定するパラメータの一つであるが、物質本来の「物性」と材料の「特性」の間に乖離があり、これらを予測・制御する指針を得るための方法が不明確であった。そこで、個々の結晶粒内と、粒界、これらの集合組織にフォーカスをあて、データ科学に基づくプロセス設計、粒界・組織形成と電流輸送過程のシミュレーション等の計算材料科学的手法、並びに電子顕微鏡法に基づくナノ構造解析とマルチスケール組織解析のバックアップのもと、粒界制御と多結晶組織制御によって輸送電流特性の向上実現へと導くことを狙いとしている。

本年度は以下の成果が得られた。粒界制御では、母相 BaFe₂As₂(Ba122)を中間層として用いることで、酸化物基板上にも結晶性に優れたカリウムドーパ Ba122 (K:Ba122)のエピタキシャル成長を実現した。走査歳差運動照射電子回折法によるナノ方位解析を実施したところ、薄膜内部に無数の小傾角粒界が存在する結果を得た。これらが磁束ピン止め点となり鉄系超伝導体で最高の磁場中臨界電流特性を達成した。また酸化物双晶基板上に成長した K:Ba122 人工単一粒界を実現することに成功した。一方、組織制御では、ニューラルネットワーク深層学習を多結晶 Ba122 バルクの3次元構造再構築に展開し、新たなマクロスケール組織パラメータの提案に成功したほか、輸送特性予測手法に適用することで産業界との連携を開始した。また、新規組織パラメータを制御し、データ駆動型プロセス設計も活用することで、多結晶バルクとして記録的に高い磁場中臨界電流特性を得た。さらに、組織形成・電流輸送過程のモデリング高度化に向けて、実験データのデータ同化に着手するとともに、透過電子顕微鏡に輸送可能な加熱その場観察用の TEM 試料ホルダーを開発し、ナノ粒子が焼結する過程を3次元で捉える4次元観察手法を実証した。

【代表的な原著論文情報】

- 1) Shinnosuke Tokuta, Yuta Hasegawa, Yusuke Shimada, Akiyasu Yamamoto, “Enhanced critical current density in K-doped Ba122 polycrystalline bulk superconductors via fast densification”, *iScience* **25** [4], 103992 (2022).
- 2) Yusuke Shimada, Shinnosuke Tokuta, Akinori Yamanaka, Akiyasu Yamamoto, Toyohiko J. Konno, “Three-dimensional microstructure and critical current properties of ultrafine grain Ba(Fe,Co)₂As₂ bulk superconductors”, *Journal of Alloys and Compounds* **923**, 166358 (2022).
- 3) Dongyi Qin, Kazumasa Iida, Zimeng Guo, Chao Wang, Hikaru Saito, Satoshi Hata, Michio Naito and Akiyasu Yamamoto, “K-doped Ba122 epitaxial thin film on MgO substrate by buffer engineering”, *Supercond. Sci. Technol. Letter* **35**, 09LT01 (2022).
- 4) Shiro Ihara, Mizumo Yoshinaga, Hiroya Miyazaki, Kota Wada, Satoshi Hata, Hikaru Saito and Mitsuhiro Murayama, “In-situ electron tomography for thermally activated solid reaction of anaerobic nanoparticles”, *Nanoscale* **23**, 10133-10140 (2023).