

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

2018 年度
実績報告書

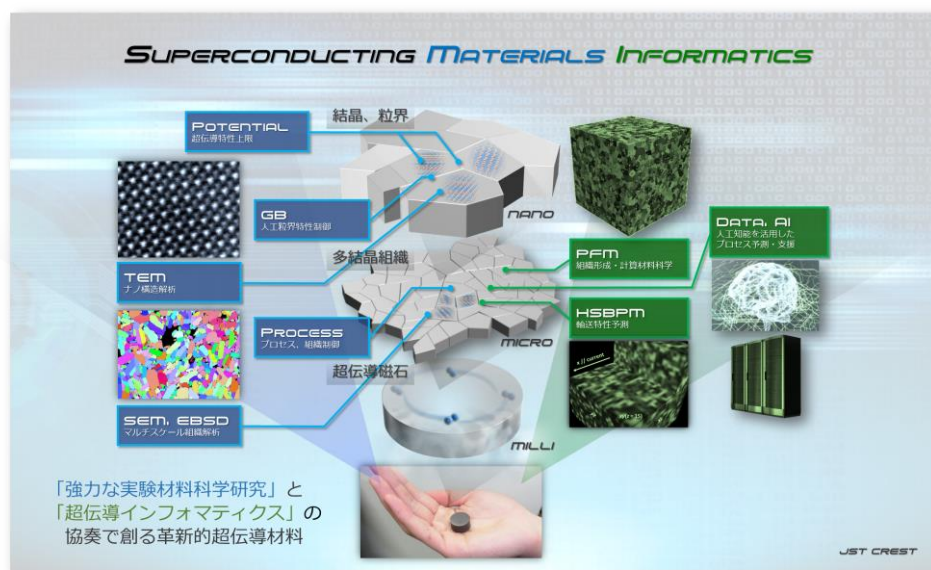
山本 明保

東京農工大学大学院グローバルイノベーション研究院
特任准教授

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

§ 1. 研究成果の概要

本研究では、高温超伝導新材料に対する磁石基礎開発を例として、実験材料科学と計算・データ科学等の協奏による、複雑系多結晶の組織制御と機能材料開発の新しいスタイルを掲示することを目標としている(下図参照)。超伝導材料において、輸送特性は電流性能や磁石特性を決定する応用上重要な特性の一つであるが、物質本来の有する「物性」と材料として現れる「特性」との間に大きな乖離があることが課題となっている。すなわち、無数のマイクロな結晶粒から構成され不純物や欠陥も内包する多結晶材料では、伝導性に数桁幅がある粒界(結晶粒間の界面)を介して、複雑な組織上に電流輸送経路が形成されるため、マクロな輸送特性を予測・制御する普遍的指針が不明確であった。本研究では、多結晶材料の内部をマイクロな 3 次元電気回路とみなして数理モデル化し、計算・データ科学と実験材料科学との両面から、個々の結晶粒内と、粒界、そしてこれらの集合組織(微細組織)の制御にフォーカスをあてる。粒界・組織の形成予測シミュレーション手法、系全体の電流輸送シミュレーション手法(計算)、データ科学によるプロセス設計手法(データ)、電子顕微鏡法による粒内、粒界と組織のマルチスケール直接観察(解析)のバックアップのもと、粒界制御と組織制御によって電流輸送特性の向上実現へと導くことを狙いとしました。



2018 年度は、①多結晶組織制御、②人工粒界における特性解明と制御、③多結晶組織形成と輸送特性予測の各研究項目に対して、各グループにおける基盤技術の開発とグループ間の連携をスタートさせた。山本グループと嶋田グループでは、高エネルギー混合法による Ba122 系多結晶バルクの合成とマルチスケール組織解析手法の開発を進めた。従来よりも混合エネルギーが高い試料において、結晶粒径の変化と構造欠陥の導入が進むことを見出すとともに、本系で初の高磁場輸送特性の向上に成功した。飯田グループと波多グループでは、単結晶基板上に高品質薄膜を成膜し、原子レベル界面・欠陥構造観察を行った。山中グループでは、多結晶組織の形成過程を予測するために、フェーズフィールド法に基づく数値計算方法の基礎技術の開発を行った。山本グループでは、異方性を有する結晶から構成され、組織欠陥を含む多結晶材料における輸送機構のモデル化を進めており、シミュレーション結果と、理論、実験値との比較検討を開始した。

§ 2. 研究実施体制

(1)「山本」グループ

- ① 研究代表者:山本 明保 (東京農工大学グローバルイノベーション研究院 特任准教授)
- ② 研究項目
 - ・多結晶組織設計、バルク合成と磁石開発
 - ・輸送特性予測手法の開発
 - ・データ蓄積およびデータベース基盤の構築

(2)「飯田」グループ

- ① 主たる共同研究者:飯田 和昌 (名古屋大学大学院工学研究科 准教授)
- ② 研究項目
 - ・人工粒界における特性制御手法の開発
 - ・超伝導特性上限チューニング手法の開発

(3)「波多」グループ

- ① 主たる共同研究者:波多 聡 (九州大学大学院総合理工学研究院 教授)
- ② 研究項目
 - ・ナノ構造解析による超伝導特性発現及び超伝導体生成・組織形成の機構提案

(4)「山中」グループ

- ① 主たる共同研究者:山中 晃徳 (東京農工大学大学院工学研究院 准教授)
- ② 研究項目
 - ・計算材料科学とデータ科学に基づくプロセス条件最適化・組織形成過程予測手法の開発

(5)「嶋田」グループ

- ① 主たる共同研究者:嶋田 雄介 (東北大学金属材料研究所 助教)
- ② 研究項目
 - ・マルチスケール組織解析
 - ・内部組織定量化手法の開発