

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

2019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提示することを目標としている。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た。

2019 年度はグループ間での連携を本格的にスタートさせ、以下の成果が得られた。

①多結晶組織制御：山本グループでは、2018 年度に確立した高エネルギー混合法による 122 系 (BaFe_2As_2 , 以下 Ba122 とする)多結晶バルクの合成手法を、高い臨界温度と低い電磁的異方性を持ち、高磁場応用に有望な K ドープ Ba122 系に適用し、試作を行った。前年度に予察的に検討した Co ドープ系と比較すると、K ドープ系では化学的反応性や揮発性に富むカリウム組成の制御が、組織制御と並び、プロセス検討の上で重要な課題である。山中グループと協働で、ベイズ推定を取り入れたプロセス条件の最適化を進めており、前年度と比較して 2 倍以上高い電流輸送特性を持つ試料が得られつつある。また、嶋田グループにおいて各種先端顕微鏡法を用いた Ba122 超伝導体のマルチスケール組織解析をすすめており、プロセスデータ科学に用いる組織データベース構築に向けた組織定量化手法の検討にも着手した。

②人工粒界における特性解明と制御：結晶粒界のキャリア量制御に向けた知見を得るため、予察的に NdFeAsO 系においてオーバードープ状態の単結晶薄膜を作製したところ、不可逆磁場が向上することを見出したほか、粒内臨界電流密度を対破壊電流密度（理論上の電流限界値）の約 13%程度までに高めることに成功した（飯田グループ）。また、K ドープ Ba122 のエピタキシャル薄膜を作製することを試みた。人工単一粒界については、波多グループにより粒界近傍の Plan view 観察が可能になりつつあり、今後粒界近傍の詳細な解析を行う予定である。

③多結晶組織形成と輸送特性予測：山中グループでは、3 次元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固相焼結中の組織形成予測モデルの開発を進めている。超伝導材料の定量的な組織予測に向けて、粒界異方性を新たに導入した PF モデルを開発したほか、計算量の多い多数の結晶粒を含む系での予測を実現するため、計算高速化手法の検討も行った。山本グループでは、前年度に検討した組織欠陥を含む多結晶材料における輸送機構モデルを活用することで、輸送電流特性を予測するシミュレーションに着手した。また、実材料で予測される結果に対する比較対象とするため、コンピュータ上で発生させたランダム系に対して同様のシミュレーションを行い、局所輸送電流量や組織欠陥が及ぼす影響を統計的に解析した。

【代表的な原著論文】

1. Shinnosuke Tokuta, and Akiyasu Yamamoto, “Enhanced upper critical field in Co-doped Ba122 superconductors by lattice defect tuning” APL Materials, vol. 7, 111107 1-6 (2019).
2. Kazumasa Iida, Taito Omura, Takuya Matsumoto, Takafumi Hatano and Hiroshi Ikuta, “Grain boundary characteristics of oxypnictide NdFeAs(O,F) superconductors”, Superconductor Science & Technology, vol. 32, 074003 1-7 (2019).
3. Yusuke Shimada, Akiyasu Yamamoto, Yujiro Hayashi, Kohji Kishio, Jun-ichi Shimoyama, Satoshi Hata, and Toyohiko J. Konno, “Formation of defects and their influence on inter- and intra-granular current in sintered polycrystalline 122 phase Fe-based superconductors,” Superconductor Science & Technology, vol. 32, 084003 1-9 (2019).

§ 2. 研究実施体制

(1) 山本グループ

- ① 研究代表者: 山本 明保 (東京農工大学大学院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