

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

2020 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

## § 1. 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、高温超伝導新材料に対する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」に乖離があり、これを予測・制御する指針が不明確であった。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特性の向上実現へと導くことを狙いとしている。2020年度は以下の成果を得た。

組織制御について、山本グループは、これまでに確立した高エネルギー混合法による K ドープ Ba122 系多結晶バルクの合成プロセスに対してベイズ最適化を適用し、高い輸送特性を得ることに成功した。この 3 次元構造を、機械学習による画像解析を適用した組織パラメータ定量化へと嶋田グループが展開しており、山中グループが開発した Local Penalization 法による効率的ベイズ最適化 web アプリも活用することで、機械学習に基づくプロセス設計の手法構築を進めている。また、波多グループによるその場観察データを、アンサンブル 4 次元変分法によりフェーズフィールド計算に同化することで粒界・組織形成過程を予測する手法を山中グループが、パーコレーションモデルにより異方性を織り込んだ輸送特性予測手法を山本グループが、それぞれ構築した。

粒界制御については、フッ化物基板を用いることで K ドープ Ba122 のエピタキシャル成長に初めて成功し、飯田グループと波多グループが人工単一粒界の実現、及び、輸送特性評価と粒界ナノ構造解析への展開を進めている。

## § 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 大学院工学研究院、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、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

【代表的な原著論文情報】

- [1] S. Tokuta, Y. Shimada, and A. Yamamoto: "Evolution of inter-granular microstructure and critical current properties of polycrystalline Co-doped BaFe<sub>2</sub>As<sub>2</sub> through high-energy milling," Superconductor Science & Technology 33, 094010 1-8 (2020).
- [2] S. Tokuta, and A. Yamamoto: "Thermal response of the iron-based Ba122 superconductor to in situ and ex situ processes," Superconductor Science & Technology 34, 034004 1-7 (2021).
- [3] T. Obara, and A. Yamamoto: "Quantitative analysis of meandering and dimensional crossover of conduction path in 3D disordered media by percolation modeling," Superconductor Science & Technology 33, 074004 1-7 (2020).
- [4] D. Qin, K. Iida, T. Hatano, H. Saito, Y. Ma, C. Wang, S. Hata, M. Naito, and A. Yamamoto: "Realization of epitaxial thin films of the superconducting K-doped BaFe<sub>2</sub>As<sub>2</sub>", Phys. Rev. Materials 5, 014801 (2021).
- [5] K. Kondo, S. Motoki, T. Hatano, T. Urata, K. Iida, and H. Ikuta, "NdFeAs(O,H) epitaxial thin films with high critical current density", Supercond. Sci. Technol. 33, 09LT01 (2020).
- [6] K. Iida, J. Hänisch, K. Kondo, M. Chen, T. Hatano, C. Wang, H. Saito, S. Hata, and H.

Ikuta, “High  $J_c$  and low anisotropy of hydrogen doped NdFeAsO superconducting thin film”,  
Sci. Rep. 11, 5636 (2021).