

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

2021 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

本研究では、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掲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。2021年度は以下の成果を得た。

組織形成・電流輸送過程のモデリング高度化に向けて、深層学習ノイズフィルタリングを活用することで、走査透過電子顕微鏡(STEM)画像の収録時間を従来の1/100程度にまで短縮し、三次元電子線トモグラフィー観察のためのSTEM連続傾斜像データを世界最速の5秒で収録する手法を開発した。また、シリアルセクションングによって得られる膨大な数の材料組織画像の解析に適用する、ニューラルネットワークベースのセマンティックセグメンテーションによる相予測モデルを構築することで、輸送電流特性に直接影響を与える内部組織構成要素の客観的抽出とその定量化を進めた。粒界制御では、Ba122系において結晶間の方位差が臨界傾角よりも小さな亜粒界ネットワーク構造をナノメートルスケールで緻密に導入する粒界エンジニアリングにより、鉄系高温超伝導体として世界最高の超伝導電流を得ることに成功した。これらの手法、知見に基づく組織制御や機械学習に基づくプロセス設計により、Ba122系多結晶バルク材料の輸送電流特性を大幅に向上した。さらに、バイズ最適化によるプロセスインフォーマティクスを実験的研究を進める研究者がより活用しやすくする方策のひとつとして、特殊な計算環境を個別に設定することなく、プロセス条件、バイズ最適化計算、計算結果の可視化までを一貫して実行できるGUIアプリケーションを開発し、インターネットにおいて一般公開した。

§ 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 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. Hasegawa, Y. Shimada, and A. Yamamoto: "Enhanced critical current density in K-doped Ba122 polycrystalline bulk superconductors via fast densification," *iScience*, vol. 25, 103992 1-11 (2022).
- 2) K. Iida, D. Qin, C. Tarantini, T. Hatano, H. Saito, C. Wang, Z. Guo, H. Gao, H. Saito, S. Hata, M. Naito, and A. Yamamoto: "Approaching the ultimate superconducting properties of

- (Ba,K)Fe₂As₂ by naturally formed low-angle grain boundary networks,” *npg Asia Materials*, vol. 13, 68 1–9 (2021).
- 3) A. Ishii, R. Kamijyo, A. Yamanaka, and A. Yamamoto: “BOXVIA: Bayesian optimization executable and visualizable application,” *SoftwareX*, vol. 18, 101019 1–8 (2022).
 - 4) Z. Guo, H. Gao, K. Kondo, T. Hatano, K. Iida, J. Hänisch, H. Ikuta, S. Hata: “Nanoscale Texture and Microstructure in a NdFeAs(O,F)/IBAD-MgO Superconducting Thin Film With Superior Critical Current Properties”, *ACS Appl. Electron. Mater.* 3, 3158–3166 (2021).
 - 5) S. Tokuta, and A. Yamamoto: “Thermal response of the iron-based Ba122 superconductor to in situ and ex situ processes,” *Superconductor Science & Technology*, vol. 34, 034004 1–7 (2021).
 - 6) M. Ainslie, and A. Yamamoto: “Thickness Dependence of Trapped Magnetic Fields in Bulk MgB₂ Superconductors,” *IEEE Transactions on Applied Superconductivity*, vol. 32, 6800504 1–4 (2022).
 - 7) A. Ishii, A. Yamanaka, E. Miyoshi, Y. Okada, and A. Yamamoto: “Estimation of solid-state sintering and material parameters using phase-field modeling and ensemble four-dimensional variational method,” *Modelling and Simulation in Materials Science and Engineering*, vol. 29, 065012 1–27 (2021).
 - 8) A. Ishii, A. Yamanaka, E. Miyoshi, and A. Yamamoto: “Efficient estimation of material parameters using DMC-BO: Application to phase field simulation of solid state sintering,” *Materials Today Communications*, vol. 30, 103089 1–13 (2022).