

機械学習を活用した P ドープ Ba122 バルク超伝導体の合成プロセス検討

Application of machine learning methods for the synthesis of P doped Ba122 bulks

東京農工大学, ^{○(B)}菊池 慎次郎, ^(M1)長谷川 友大, ^(D)徳田 進之介, ^(D)石井 秋光,

山中 晃徳, 山本 明保

Tokyo University of Agriculture and Technology, ^{○(B)}Shinjiro Kikuchi, ^(M1)Yuta Hasegawa,

^(D)Shinnosuke Tokuta, ^(D)Akimitsu Ishii, Akinori Yamanaka, Akiyasu Yamamoto

E-mail: s181637s@st.go.tuat.ac.jp

1. はじめに

近年、マテリアルズ・インフォマティクスを活用した材料研究開発が盛んに行われている。機械学習手法の一つであるベイズ最適化は、未知関数 $f(x)$ の最適値を効率的に探索する手法として知られる[1][2]。

鉄系超伝導体 BaFe_2As_2 (Ba122) は元素置換等により超伝導が発現し、As を P で置換した P ドープ Ba122 は単結晶において 31 K の臨界温度を示す[3]。一方で、多結晶においては合成時に Fe_2P 等の不純物が生成することがあり、超伝導相の高純度化が課題である。

本研究では、P ドープ Ba122 多結晶バルク試料の高純度化を目的として、ベイズ最適化を活用したプロセス設計を検討した。

2. 実験方法

Ar 雰囲気下で単体金属(Ba, Fe, As, P)を仕込組成 $\text{BaFe}_2(\text{As}_{0.67}\text{P}_{0.33})_2$ となるように秤量し、遊星型ボールミルを用いて粉砕・混合した。得られた粉末をペレット成型し、石英管に真空封入した後、200–1000°C, 48 h の条件で焼結した。試料の粉末 X 線回折パターンを測定し、リートベルト解析により、P ドープ Ba122 相の割合(相純度)と格子定数を評価した。未知関数 $f(x)$ を相純度、入力パラメータ x を焼結温度として、BOXVIA[4]によりベイズ最適化を行った。

3. 結果

12 試料を作製した時点での相純度と焼結温度の関係、および推測された平均関数と標準偏差を Fig.1(a)に示す。相純度は焼結温度の増加とともに向上し、750°C–860°C で高い値が得られたが、それ以上の高温域では減少した。Fig.1(b), (c)に焼結温度と格子定数の関係を示す。相純度の向上がみられた焼結温度域では格子定数が短縮しており、 Fe_2P の減少にともない P ドープ量が向上したことを示唆する。

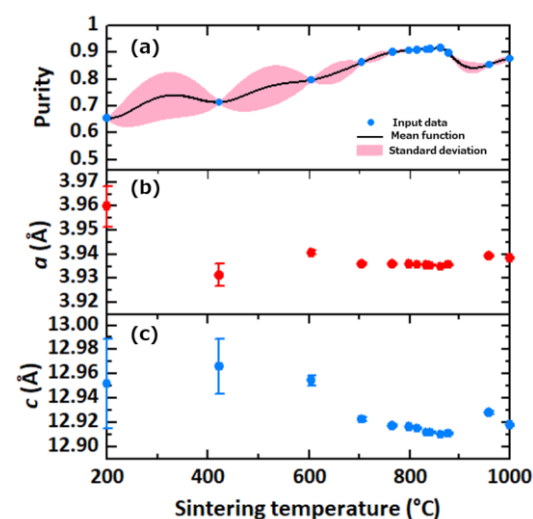


Fig.1 Sintering temperature dependence of phase purity and mean function with standard deviation (a), lattice constants a (b) and c (c).

- [1] D. Xue *et al.*: *Nat. Commun* **7**, 11241 (2016)
- [2] K.Osada *et al.*: *Mater. Today* **25**, 101538 (2020)
- [3] S. Kasahara *et al.*: *PRB* **81**, 184519 (2010)
- [4] A. Ishii *et al.*: *SoftwareX* submitted

[謝辞]

本研究は、JST CREST(JPMJCR18J3)の支援を受けたものである。