

第4回マテリアルズ・インフォマティクス基礎研究会報告

併催 3rd Workshop on novel superconducting materials and biomimetic processes 2018

応用物理学会北海道支部・エンレイソウの会

テーマ: Novel superconducting materials and biomimetic processes

日時: 2018年9月2日(日) 13:00-18:30, 9月3日(月) 10:30-15:00

場所: 北海道大学電子科学研究所

*参加者: 32名

マテリアルズ・インフォマティクス(MI)は、現在、様々な先端分野の研究で活用されている。今回は、「実験科学, 理論科学, 計算科学につづく, 第4の科学」としてのMIの現代的な位置付け, Topotactic 反応(物質の格子構造が保たれたまま生じる, その物質内の一部の元素が移動する反応: (意識) 格子保持型イオン交換反応), 新規なエネルギー材料としてのペロブスカイト関連複合アニオン層状化合物(MALCs)の機能性に関する解説, 生体鋳型(Biotemplate)を用いた多様なナノ構造を示す酸化物超伝導体の作製方法, 及び複合アニオン化合物におけるMIを用いた新材料開発の5つのTopicsについて詳しい研究者5名をお招きし, 最新の研究成果について講演いただいた。2日間に渡り招待講演5件, 一般講演口頭6件, ポスター講演3件が行われ, 活発な議論がなされた。PG委員会による審査の結果, 佐々木悠馬, R. Msiska, K. Kaneyasu (敬称略) の3名が学生講演賞に選ばれた。佐々木悠馬氏には最優秀として「ニコニコテレビちゃんのクッション」(委員の私物)が副賞として贈呈された。招待講演の発表概要を以下にまとめる。

9月2日(日)

1. (チュートリアル, 招待) 知のコンピューティングが誘う発見科学

的場正憲^{1,2}, 茂木 強², 木村康則² (¹慶大, ²JST)

物質・材料開発における課題として演繹的な「原理駆動型」手法(理論科学×計算科学)とMIの併用が紹介された。この統合的アプローチ(講演にて知のコンピューティングの1つと定義された)は伝統的な科学的アプローチに比べ, 歴史が浅く, AI人材と同様に経験者の不足が指摘された。発見の科学哲学に関する歴史が概観された後に, 予測と発見を加速する知のコンピューティング的な発見科学の観点から, Data-Information-Knowledge-Wisdom (DIKW)モデルについて解説された。

2. (招待) Topotactic Reaction using Solid State Electrochemistry

M. Fujioka¹, C. Wu², N. Kubo¹, K. Sato¹, H. Kaiju¹, and J. Nishii¹
(¹Hokkaido Univ., ²Panzhuhua Univ.)

新たな物質・材料開発手法, すなわち合成方法の開発は, 材料科学の発展を促すものである。新たな合成方法としてプロトン駆動による物質へのイオン注入(Proton-driven ion

introduction: PDII)が紹介された. PDII を利用した Topostatic 反応の目的物質(Host material)と実施例として遷移金属カルコゲナイド TaS_2 への一価陽イオン注入, ナトリウムイオン伝導体 $\text{Na}_3\text{V}_2(\text{PO}_4)_3$ へのカリウム(K)イオン注入, 及び一次元導体 ZrTe_3 への銀(Ag)イオン注入について, その詳細が報告された.

他, 一般講演 7 件 (口頭 4 件, ポスター 3 件)

9 月 3 日(月)

3. (応用物理学会北海道支部講演会, 招待)

エネルギー材料としてのペロブスカイト型混合アニオン層状化合物(MALC)

神原陽一 (慶大)

MALC の発展の歴史の中での鉄系高温超伝導体の発見が紹介された. 鉄系超伝導体の内, ペロブスカイト型構造を分子構造として含む Perovskite-type MALC に着目し, その機能性として, 電気磁気状態相図, Powder-in-tube (PIT)型超伝導線材, 及び高機能酸素発生反応電気化学触媒の実現が紹介された.

4. (招待) A biotemplate-inspired approach to superconductor nanowire growth

S. R. Hall and J. Potticary (Univ. of Bristol)

金属酸化物ナノワイヤの作製には, バルク構造に対する加工や真空中のスパッタ現象等を用いたいわゆるトップダウン型の設計に基づく方法のみならず, 自己組織化を促すバイオテンプレートやナノるつぼにおける Vapor(気相)-Liquid(液相)-Solid(固相)反応によるボトムアップ型の設計に基づく方法がある. その例として, 生体鋳型を用いた $\text{YBa}_2\text{Cu}_3\text{O}_{7-\delta}$ (YBCO)マイクロワイヤ, ナノワイヤ, 及び $\text{Bi}_2\text{Sr}_2\text{CaCu}_2\text{O}_{8+x}$ (Bi-2212)ナノワイヤの特徴的なナノ構造が紹介された.

5. (招待) Low-temperature synthesis of nitrides/oxynitrides and emerging new functional materials by controlling electronic structure

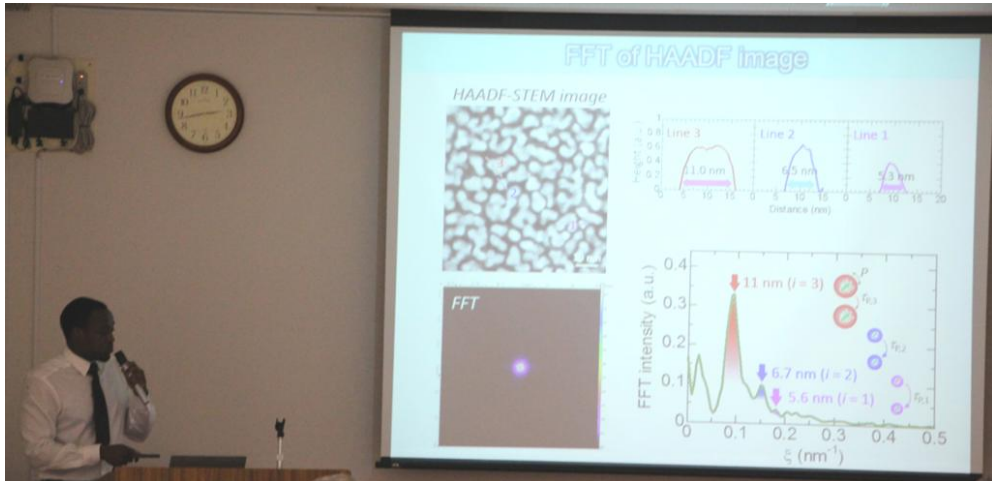
A. Miura, N. C. Rosero-Navarro, and K. Tadanaga (Hokkaido Univ.)

金属酸化物の部分的な窒化は, 一般にアンモニア, 又は窒素気体雰囲気下での高温熱処理のより行われている. このような窒化技術をより低温での反応や発熱反応を用いて, 実現する場合, 高温熱処理では実現の難しい電子機能の制御が可能となると期待される. そのような窒化された酸化物(複合アニオン化合物)の低温合成と機能性の例として, マンガン酸化物に対する窒化効果と, その酸素還元反応における機能性について紹介された.

他, 一般講演 2 件 (口頭 2 件)

文責: 神原陽一

2019 年 3 月 27 日



撮影日: 2018年9月3日(月)



撮影日: 2018年9月3日(月)



撮影日: 2018年9月2日(日)