

MERIT インターンシップ（国内）報告書

新領域創成科学研究科 物質系専攻

MERIT8 期生

大瀧貴史

実施期間

2020 年 9 月 23 日 ~ 2020 年 10 月 30 日

受け入れ先

日本製鉄株式会社 技術開発本部 尼崎研究開発センター

テーマ

fcc 鉄の磁性と固溶元素の状態

研究内容

鉄は常温で bcc 構造の強磁性相が熱力学的に安定となるが、高温領域(911 - 1392°C)では fcc 構造の常磁性が安定となる。鉄に対する元素添加の DFT 計算は、bcc 鉄に対しては数多くの研究が報告されているが、fcc 鉄に対しては研究が少ない。その理由は、fcc 鉄においては各鉄原子サイトにおける磁気モーメントがランダムな方向を向いており、このランダムさを DFT 計算で取り扱うのが難しいからである。

近年、fcc 鉄の元素添加について、Special Quasirandom Structure (SQS) と Magnetic Sampling Method (MSM) を組み合わせることで、溶解エンタルピーの DFT 計算が報告された。しかし、報告されている計算手法は、計算コストが非常に大きいという問題がある。そこで、本研究では、fcc 鉄に対するバナジウム添加について、スーパーセルサイズを先行研究で用いられてきたサイズ(3×3×3, Fe₁₀₇V₁)から一回り小さなサイズ(2×2×2, Fe₃₁V₁)へと縮小した系の計算を行った。その際に SQS を吟味することで、3×3×3 スーパーセルでの計算結果を再現した。本研究で作成した SQS を

用いることで、計算結果の質をほとんど悪化させることなく計算時間を約 1/10 倍に短縮させることができた。

所感

鉄鋼はあまり馴染みのない分野であり、一から勉強した上で研究を行ったが、研究員の方々との頻繁な議論を通じて内容を深めることで想像以上の成果を収めることができた。自身の物理学の専門知識を大いに有効活用できたと感じている。企業での基礎研究の様子を肌で感じたことは、自身のキャリアについて考える上でとても貴重な経験となった。

謝辞

日本製鉄の皆様には、コロナ禍という例年と異なる困難の中でインターンシップを開催し受け入れていただいたことに深く感謝いたします。特に、澤田英明様と伊藤一真様からは、研究インターンシップのご指導をいただきました。厚く御礼申し上げます。また、事務的な手続きでお世話してくださった物性研 CCMS 事務局の有馬和美様に感謝いたします。本インターンシップをご快諾してくださった指導教員の岡本博教授と MERIT 副指導教員の石坂香子教授に御礼申し上げます。最後に、インターンシップ先企業とのマッチングを行っていただいた計算物質科学高度人材育成・産学マッチングプログラム(MP-CoMS)と、企業インターンシップという貴重な機会を提供していただいた MERIT プログラムに感謝いたします。