

第5号様式

学位申請者名	高田谷 吉智	学生番号	60149002	クラスタ名	ナノテクノロジー
論文題目	非調和下方歪み追跡法を用いた反応経路探索の効率化の検討および低次元炭素同素体と窒化ホウ素の結晶構造の限定探索				
論文審査及び最終試験の成績（表記は合格又は不合格とする。）	合格				

審査委員会

主査 田中 一郎

委員 橋本 正人

委員 山門 英雄

委員

[論文審査の結果の要旨]

超球面探索法を用いるとポテンシャルエネルギーの非調和下方歪みを追跡することによって分子や結晶の新規構造を網羅的に探索できる。しかし、原子数が増加すると膨大な計算時間が必要になる難点がある。そこで、本論文では、最安定構造とのエネルギー差が 300 kJ/mol 以下で、実用上重要と思われる構造を効率良く探索するために、どこまで探索オプションが限定できるかを BCONS 分子において検討した。さらに他の系にも応用し、理論計算で予測されている新規低次元炭素同素体の安定性、バンド構造、体積弾性率の検討を行った。また、非調和下方歪みの追跡が困難な窒化ホウ素結晶でも、一般化された超球面探索法における目的関数を工夫して結晶多形の探索が可能になる手法を開発した。これによって、今まで探索できなかった新たな結晶多形の発見にも成功した。これらの成果は、十分な新規性および有用性を有しており、博士論文に値するものである。

[最終試験の結果の要旨]

北3号館システム工学部 B101 教室において、令和元年 8月 23 日午後 2時 50分より公聴会を実施した。公聴会では、学位申請者からの 40 分の研究発表の後、約 30 分の質疑応答が行われた。質疑応答では、探索オプションの設定や、より重い原子を計算対象とした場合の手法の有効性などに関する質問があったが、その他のものを含めてすべての質疑に対して適切な回答がなされた。したがって、これらの結果を総合的に判断し、最終試験は合格と判定する。