HOKKAIDO UNIVERSITY

Title	Theoretical Studies on Organic Molecular Crystal Phase Transition and Thin-Film Formation Processes via Automated Reaction Path Exploration for Periodic Systems
Author(s)	近藤, 翔哉
Description	この博士論文の全文は利用可能日以降に公開されます。
Degree Grantor	北海道大学
Degree Name	博士(理学)
Dissertation Number	甲第17019号
Issue Date	2026-06-30
DOI	https://doi.org/10.14943/doctoral.k17019
Doc URL	https://hdl.handle.net/2115/100072
Type	doctoral thesis
File Information	KONDOH_Shoya_review.pdf, 審査の要旨 https://creativecommons.org/licenses/by/4.0/

Hokkaido University Collection of Scholarly and Academic Papers : HUSCAP

学 位 論 文 審 査 の 要 旨

博士の専攻分野の名称　博士（理学）　氏名　近藤　翔哉

審査担当者	主査	教授	長谷川 淳也
	副査	教授	前田 理
	副査	教授	猪熊 泰英
	副査	准教授	小林 正人

学 位 論 文 題 名

Theoretical Studies on Organic Molecular Crystal Phase Transition and Thin-Film Formation Processes via Automated Reaction Path Exploration for Periodic Systems
（周期系反応経路自動探索法を用いた有機分子結晶相転移および薄膜形成過程に関する理論的研究）

本論文は、周期系に拡張した人工力誘起反応法に分子力場および機械学習力場を組み合わせることで、有機分子結晶の相転移と薄膜形成過程を理論的に解明したものである。従来困難であった他原子系の反応経路探索を可能にし、ベンゼン結晶では相転移ネットワークとエネルギーランドスケープを解析することで、分子配向変化や圧力による構造変化の支配的要因を明らかにした。さらに、イミダゾール結晶では深いエネルギー井戸構造を見出し、高い融点との関係を示した。また、原子層堆積法におけるトリメチルアルミニウムと水の表面反応を解析し、吸着過程や立体障害、水素結合ネットワークが反応選択性や律速に与える影響を解明した。これらの成果は、結晶構造相転移や二次原材料合成といった複雑な材料挙動の理解を深めるものであり、学位授与に値するものと認められる。