



HOKKAIDO UNIVERSITY

Title	Exploration of novel two dimensional materials by using first principle calculation and materials informatics approach [an abstract of dissertation and a summary of dissertation review]
Author(s)	宮里, 一旗
Degree Grantor	北海道大学
Degree Name	博士(工学)
Dissertation Number	甲第13635号
Issue Date	2019-03-25
Doc URL	https://hdl.handle.net/2115/74069
Rights(URL)	https://creativecommons.org/licenses/by-nc-sa/4.0/
Type	doctoral thesis
File Information	Itsuki_Miyazato_review.pdf, 審査の要旨



学位論文審査の要旨

博士の専攻分野の名称 博士 (工学) 氏名 宮里 一旗

審査担当者 主 査 教 授 郷原 一壽

副 査 教 授 折原 宏

副 査 高橋 啓介 (国立研究開発法人物質・材料研究機構)

学位論文題名

Exploration of novel two dimensional materials by using first principle calculation and materials
informatics approach

(マテリアルズ・インフォマティクスと第一原理計算を用いた新規二次元材料の探索)

近年、データ科学を援用して材料開発を行うマテリアルズ・インフォマティクスに対して基礎と応用の両面から大きな期待が寄せられている。これまでの材料開発では、プロトタイプ材料の合成などに時間と費用がかかること、研究者それぞれの知識や経験、もしくはインスピレーションに開発速度が左右されるなどの問題があった。最近では、コンピュータ性能の向上に加え、新たなシミュレーション技術も開発されてきている。その恩恵により実験工程の一部がシミュレーションに代替できるようになり、以前より材料開発のスピードが早くなった。特に第一原理計算は、新規材料予測において革命的影響を及ぼすシミュレーション手法を与えた。例えば、触媒材料の反応経路の推定、電子材料におけるバンド構造、構造材料における体積弾性率など、多くの物理的・化学的な情報を得ることができる。そのため、二次元材料、ナノ粒子、ナノクラスターなどのナノスケールの材料において、様々な新規材料の予測に使われている。そして、第一原理計算により予測された材料は実際に合成され、実用化に至ったものもある。しかし、シミュレーションを用いた材料開発にも欠点があり、取り扱う系によっては十分な精度が得られないなどの問題がある。また、シミュレーションにも、モデル設計の段階で、人間の経験や勘が必要であるため、最終結果に対して個々の研究者の依存性が大きいという観点では、根本的な枠組みは従来の手法の延長線上にあるといえる。

これまでの枠組みを突破する方法として考えられているのがマテリアルズ・インフォマティクスといわれる分野・手法である。マテリアルズ・インフォマティクスでは大量のデータからコンピュータによって統計的傾向を推定することで新規材料の予測を行う。そのため、これまでに全くない材料候補を予測できる可能性がある。

以上を背景に、本研究では、第一原理計算とマテリアルズ・インフォマティクスを用いて、新規二次元材料の探索を行った。

第一章では、マテリアルズ・インフォマティクスこれまでの歴史、現在、産業界や学界で行われている取り組み、そして将来の方向について説明した。

第二章では、本研究の研究対象である二次元材料について、その代表的な材料の特異な物理特性と期待される応用例を説明した。

第三章では、第一原理計算について、元となる密度汎関数理論を説明した。

第四章では、本研究で利用した計算コード“GPAW”について、その特徴と本研究を進めるうえでの利点、環境構築についての説明を行った。

第五章では、第一原理計算を用いた新規二次元材料の予測について、本研究で得られた結果について説明した。h-BN、h-BP が 15 族の元素を共通して持っていることに着目し、同構造の窒素 (N)、リン (P) の部分を他の 15 族元素 (As, Sb, Bi) に置換した材料を考案し、その評価を第一原理計算で行った。その結果、考案したこれら 3 つの単層二次元材料はエネルギー的に安定であり、バンドギャップ値から半導体への応用が期待できることが明らかになった。さらに多層構造の場合についても評価を行い、B-Sb と B-Bi の材料においては他のものとは異なり、化学吸着によるジグザグ構造を取り、電子状態も単層とは異なることを明らかにした。

第六章では、機械学習について、マテリアルズ・インフォマティクスへの適用という視点から概要をまとめた。さらにこの研究で用いた単純ベイズ分類器のアルゴリズムの原理を説明した。

第七章では、実際の機械学習の実装について述べ、Scikit-learn という Python 言語の機械学習モジュールの導入法などを説明した。

第八章では、第一原理計算の材料データに対して機械学習を適用し、そこから新規の二次元磁性材料を予測した研究成果を説明した。216 の二次元磁性材料の理論データベースを「教師あり学習」の手法を用いて、磁気モーメントを目的変数として機械学習を行い、その逆問題を解くことで高磁性の 254 の新規二次元材料の候補を得た。この 254 の候補を、さらに第一原理計算で評価を行い、結果的に高磁性かつエネルギー的に安定な MnPd_2 、 FeS 、 CrSe 、 CrS 、 MnTe 、 MnSe 、 MnS が新規の二次元磁性材料であることを明らかにした。

第九章では、本研究によって得られた結果から、マテリアルズ・インフォマティクスの新たな展望について述べ、本研究全体の総括を行った。

これを要するに、著者は第一原理計算とマテリアルズ・インフォマティクスを用いて、新規な 2 次元物質を探索し新たな知見を得た。このことは、材料開発に対して理論計算と情報科学を融合した学問を開拓することに貢献するとともに、応用物理学の発展に寄与するところ大なるものがある。

よって著者は、北海道大学博士 (工学) の学位を授与される資格あるものと認める。