



HOKKAIDO UNIVERSITY

Title	Automated Discovery and Design Principles of Two-Dimensional Materials Using a High-Throughput First-Principles Framework
Author(s)	鈴木, 創
Degree Grantor	北海道大学
Degree Name	博士(総合化学)
Dissertation Number	甲第16857号
Issue Date	2026-03-25
DOI	https://doi.org/10.14943/doctoral.k16857
Doc URL	https://hdl.handle.net/2115/99702
Type	doctoral thesis
File Information	SUZUKI_Hajime_review.pdf, 審査の要旨 https://creativecommons.org/licenses/by/4.0/



学 位 論 文 審 査 の 要 旨

博士の専攻分野の名称 博士（総合化学） 氏名 鈴木 創

	主査	教授	前田 理
審査担当者	副査	教授	高橋 啓介
	副査	教授	武次 徹也
	副査	教授	島田 敏宏

学 位 論 文 題 名

Automated Discovery and Design Principles of Two-Dimensional Materials Using a
High-Throughput First-Principles Framework
(ハイスループット第一原理計算ワークフローによる二次元材料探索と設計指針の解明)

鈴木氏は独自のハイスループット第一原理計算手法を開発し 2 次元材料探索に適用した。本手法により 500 を超える 2 次元材料の探索に成功し 29 の強磁性体、10 の反強磁性体を発見した。特に新たに発見した 2 次元リン化金に着目し、これまで合成報告のなかったバルクの金のリン化に実験に成功した。さらにグラフェンにシアノ基を配置した構造をし発見し Na 電池の可能性を発見した。審査では独自に開発したハイスループット計算から実験まで結びつけ、物性まで明らかにしたことが評価され学位授与に値する審査結果となった。