

[別紙2]

審査の結果の要旨

論文提出者 KOTLIAROV YURI

本研究は、結晶構造データベース構築と活用の両面において重要な情報処理である「新たな知識の抽出」と「品質管理」の二つの過程に焦点をあて、位相幾何学的な手法の適用して新しい知識の発見とこれまで見逃して来た過誤の抽出を試みたものである。前者のデータの「新たな知識の抽出」に関しては、単純な質問要求によってデータベースからデータを検索するだけでなく構造と特性の相関に着目してデータ間の深い関係を注意深く調べ、材料開発の指針となる知識の発見を試みたものである。一方、後者の「品質管理」に関しては、位相幾何学的なアプローチにより幾何学的に切断されたトポロジーを持つような誤った結晶構造を抽出する方法を開発し、結晶データベースの品質を高めることを可能としている。

論文は8章から構成される。第1章は序論であり、材料設計、結晶構造データ取り扱いについての概要と、研究の動機となった酸化物高温超伝導材料を例に上記の研究目的を設定している。第2章は、低次元物質系の構造記述についての一般論と結晶構造の多様性とそれらの比較や分類の難しさについて論じ、結晶構造の記述に関連して、構造の本質に対する僅かな変換による影響を防ぐ新たなアプローチとして位相幾何学的な特徴の記述を考え、結晶構造と構造基本単位に焦点をあて2次元的な層の積み重ねとして表現される層順列を一般的な結晶学的情報に加えて解析する手法を提案している。特に、ペロブスカイト関連構造を持つ銅酸化物系においてその順列には規則性が隠されているが、化学的組成が既知であるとすれば層構造は層内の原子配置と単位格子における特定の結晶学的方向に沿った層の順列として記述され、そこで示された構造規則性と高温超伝導体の材料開発指針について論じている。

第3章～第5章では、無機結晶構造データベースを例題としたプログラム開発と実装、予備的な結晶構造解析結果について説明し、酸化物高温超伝導材料の材料設計への適用について論述している。開発したプログラムは、空間群の対称性についての取り扱いをするための標準ライブラリである SgInfo に上記の位相幾何学的な特徴を抽出するための機能を追加したもので、無機結晶構造データベースとしては市販の ICSD を選び、そのデータ解析を行っている。これまでの構造-特性相関に関する類似の研究では、主に要素分解した構造の結晶学的特徴と特性との相関を明らかにすることに注目していたが、この場合研究者が同族の系列元素を含んだ物質や固溶体、派生構造等の類似構造をもつ化合物を見つけよ

うとすると、単位格子の対称性に基づく標準的な原理は大して役に立たない。本研究では銅酸化物の層構造に関して低次元物質系の構造要素間の特徴に着目し、類似ではあるが異なる結晶構造を持つ化合物系の探索に対し、層順列の比較分類を行う先進的なデータマイニング手法を初めて実装した。本手法により膨大な結晶構造データから類似の物質を抽出することが極めて容易になることがわかり、また、層間の距離の解析からデータベース中に互いの層が非現実的なほどの大きなギャップを形成して離れている幾つかの誤りを発見した。このように、層を用いた方法は、結晶構造データベースの品質管理の遂行を簡単なものになっている。

第 6 章は、層関係の記述の一般化と品質管理への適用について述べている。上述の層記述は、層間距離が原子間距離より短く、原子間の実際の結合を反映していない構造中のギャップについては大雑把にしか吟味できないため、結晶構造をグラフ理論により記述し、データの品質管理をさらに改善することを試みた。つまり、全ての結晶構造を、頂点 (= 原子) とそれらを繋ぐ (稜) 線 (= 原子間の結合) とで表される位相幾何学的グラフにより表現することにより、空間的な原子配置や対称性の情報を失うが原子間の結合を数学的に表現できるため、どんな結晶構造に対してもその管理を行うことができる強力なツールを開発している。新たな手法における重要なステップは、グラフの構築の基準となる適切な距離の選択であり、この目的のため、最大切断距離 (MDD) をグラフの結合構造を導く距離の最小値として定義する。この研究における重要な作業は MDD の分布を調べることであるが、結晶構造データベースは構造解析プログラムと組み合わせることにより自己説明的にそうした基準を与えている。

第 7 章は以上の結果を基にした知識の構造化についての議論であり、第 8 章は位相幾何学的な記述による新たな手法の導入の効果として結論をまとめている。

以上のように本研究は、データベースの活用の要件となるデータ抽出と品質管理のための新しい方法を提示し、情報システムのライフサイクルを成立させるための基盤技術を開発した点で、人工物工学に寄与するところが少なくない。

よって本論文は博士 (工学) の学位請求論文として合格と認められる。