OUKA
The University of Osaka
Institutional Knowledge Archive

Title	Theoretical Study on Zero Modes in Nanographene with Vacancies Composed of Phenalenyl-Tessellation Molecules
Author(s)	森下, 直樹
Citation	大阪大学, 2022, 博士論文
Version Type	
URL	https://hdl.handle.net/11094/88107
rights	
Note	やむを得ない事由があると学位審査研究科が承認したため、全文に代えてその内容の要約を公開しています。全文のご利用をご希望の場合は、大阪大学の博士論文についてをご参照ください。

The University of Osaka Institutional Knowledge Archive : OUKA

https://ir.library.osaka-u.ac.jp/

The University of Osaka

様式３

論　文　内　容　の　要　旨

氏　名	（　森下　直樹　）
論文題名	Theoretical Study on Zero Modes in Nanographene with Vacancies Composed of Phenalenyl-Tessellation Molecules （フェナレニル充填型分子で構成される有孔ナノグラフェンにおけるゼロモードの理論的研究）

論文内容の要旨

「炭素の時代」と呼ばれる21世紀に人類が入手できる、原子の空間配置が精密制御された究極の炭素材料の例を提示することを目指して、ディラック電子系と共存し得る局在ゼロモードを持つ分子構造群を発見し、そして量子デバイスとしての応用可能性がある電子スピン系が現れるナノグラフェン分子を構成することを目的とした理論的研究を実施した。

本研究では、上記の目的を実現するものに、空孔中心六角アームチェアナノグラフェン(Vacancy-Centered Hexagonal Armchair Nanographene)と、その一般化であるフェナレニル充填型分子(Phenalenyl-Tessellation Molecule, PTM)、ならびにPTMの高分子構造であるPoly-PTMがあることを見出し、非結合性軌道に対するゼロサムルールおよび分子構造の幾何学的特徴をグラフ理論的に表現して、分子構造とゼロモードの発現形態の関係性および分子設計に必要なルールを定式化した。更に、密度汎関数法計算を用いて、ゼロモードが発生する分子の実現可能性を検証して、物質設計を実施した。

結果として、n個の空孔を内包するPTMにおいては、n個の空孔由来ゼロモードに加えて、他方の副格子に常に1個の$\sqrt{3}\times\sqrt{3}$型ゼロモードが分子全体に広がって存在することを厳密に示した。また、Poly-PTMでは、各PTM内の空孔由来ゼロモードの性質が保たれたまま、「スーパーゼロサムルール」に従って$\sqrt{3}\times\sqrt{3}$型ゼロモードに由来する広がったゼロモードが複数のPTMに跨って発現することを明らかにした。この知見を応用して、局在ゼロモードによる$S=1$反強磁性1次元ハイゼンベルグチェーンがナノグラフェンにより実現できることを見出した。

これにより、例えば量子計算への活用可能性を持つ炭素ベース量子デバイスを実現するナノグラフェン分子の構成例を、ゼロモードの振舞いを制御できるPTMに基礎を置いた物質設計の手法と共に示した。

様式7

論文審査の結果の要旨及び担当者

氏　　名　（　森下　直樹　）			
	（職）		氏　　名
論文審査担当者	主 査	教　授	石原　一
	副 査	教　授	寺田　博一
	副 査	教　授	田中　秀和
	副 査	教　授	草部　浩一　（兵庫県立大学大学院理学研究科）

論文審査の結果の要旨

グラフェンが与えるπ電子系には、有効ハミルトニアンがワイル型になることに基づくゼロモードが現れることが理解されてきたが、有限サイズの物質構造において定常固有解として系統的にゼロモードが現れる例をさらに発見することは、応用上の観点からも望まれていた。特に、交互炭化水素として分子に現れるゼロモードが系統的に複数現れる系が発見され、従来とは異なる設計思想で新たに基礎となる法則が見出されることで、量子デバイス等への応用を発展させる可能性があった。

論文提出者の森下は、この課題を、物質構造を特定した形で系統的に与える一群の分子構造を見出すことで解決している。特定の幾何学的な穴をもつフェナレニル充填型分子と、そのポリマー構造によって、望まれる局在型ゼロモードを分子中に配置することに成功している。ディラック電子としての広がりをもつゼロモードと共存させたり、それを除いたりする設計事例も明示した。これらの結論に対して、グラフ理論を適用してその数理的証明を与えており、学術的にも価値の高い結果を得ていると言える。

中性分子として設計事例を構成した場合には、ゼロモードに電子スピン自由度が残り、それらが磁気的有効交換相互作用することで、全体として磁性体が構成される。そこで、一群のナノグラフェンが、多体電子系としての局在磁性を伴って与えられることが例示された。従来、有機分子やクラスター中にフェリ磁性状態を与える物質設計を行う分子磁性の分野が成功している。その成果と比較しても、今回の設計が比較的広い反強磁性ハイゼンベルグスピン系を提供できること、その物質構造が量子縺れ状態の発現を保障していること、結果として物質科学の応用としての量子計算素子の設計を拓く物質設計を与えていることは、今後の炭素材料系の発展にも貢献するものと判断される。

よって、本論文を、博士（理学）の学位論文として価値のあるものと認める。