

豊橋技術科学大学長 殿

平成 8年 2月 23日

審査委員長 阿部英次



論文審査及び最終試験の結果報告書

このことについて、下記の結果を得ましたので報告いたします。

記

学位申請者	吉田満帆	学籍番号	第 903738 号
申請学位	博士(工学)	専攻名	材料システム工学
論文題目	Application of a Formalized Net Diagram Method to the Studies of Structure, Stability and Electronic States of Fullerenes (展開図法の応用によるフラーレンの構造、安定性および電子状態の研究)		
公開審査会の日	平成 8年 2月 9日		
論文審査の期間	平成 8年 1月24日～平成 8年 2月23日	論文審査の結果	合格
最終試験の日	平成 8年 2月 9日	最終試験の結果	合格

論文内容の要旨

本論文は炭素の新しい同素体として最近大きな注目を集めているフラーレンの構造と性質の関係を、独特の展開図法、グラフ理論、立体幾何学および計算化学の手法を駆使して新しい角度から論じたものである。大きく二部に別れ、前半では展開図法に基づくフラーレン幾何異性体の自動発生アルゴリズムを創出し、可能な全異性体を発生、構造最適化した。更に、構造と安定性に関する新しい指標として「phason line概念」を提案して、これをC₆₀からC₁₂₀に至るフラーレンに適用し、安定構造を総て予測する事が出来た。特に注目すべき結果として、フラーレンの安定性は構造の対称性とは関係なく、phason lineの形、長さ、特に複数のphason lineの交点の数(ノード)が決定的に重要であることを指摘した。

一方、後半では分子力学計算による多層フラーレンの安定性の説明、7角形を含み負の曲率面を有するフラーレン変態の典型としてのドーナツ型フラーレンのトポロジカル芳香族性を論じた。また5員環を多数含み歪みの大きなキャップ部分へのC₂挿入によるナノチューブ成長およびフラーレン成長時に分子表面で頻繁に起こると考えられているピラシレン転移に対して、展開図法を適用して総ての可能な生成物の数え上げに基づいた議論を行った。後半部分で特に興味深い結果は、正負の曲率曲面が規則正しい模様を描きつつ混ざり合って無限大に広がった炭素の多形を考案した事であろう。

審査結果の要旨

科学の重要な発見の多くが偶然に達成されたように、グラファイトの新変態フラーレンもまた偶然に発見された(1985年)。しかし、これまでと違うのは偶々計算機科学が実用に耐える程度に成熟した時期に発見されたと言う点である。その結果として、シミュレーションを含む理論が実験と平行して刺激しあいながら進むという展開を示しているが、本学位論文に記されている研究もこの傾向を反映している。ここで用いている理論的手法は、数値計算を多用するマイクロシミュレーション以外にグラフ理論、固体物性論、理論有機化学などである。

最も独創的な部分はユニークな展開図法の開発とその数え上げ情報の応用である。この展開図法の展開は全く独力で行われた。後で解ったことであるが、ほぼ同時にCasperによって独立して行われていた良く似た展開図法が遂に一般化されないで終わったのに対して、本研究においてはデカルトの法則を利用してキャップ構造のグラフ的特性を抽出し、キャップ自動発生アルゴリズムを考案した。これは現在最高速の異性体発生プログラムとして結実している。本学位論文には、このほかにもphason line、無限大三次元スポンジ状フラーレン、トポロジカル超芳香族性などオリジナルなアイデアとその展開が豊富に盛り込まれている。以上により本論文は博士(工学)の学位論文に相当するものと判定した。

審査委員

阿部英次



梶原建樹



大澤映二



永島英夫



印

印

(注) 論文審査の結果及び最終試験の結果は「合格」又は「不合格」の評語で記入すること。