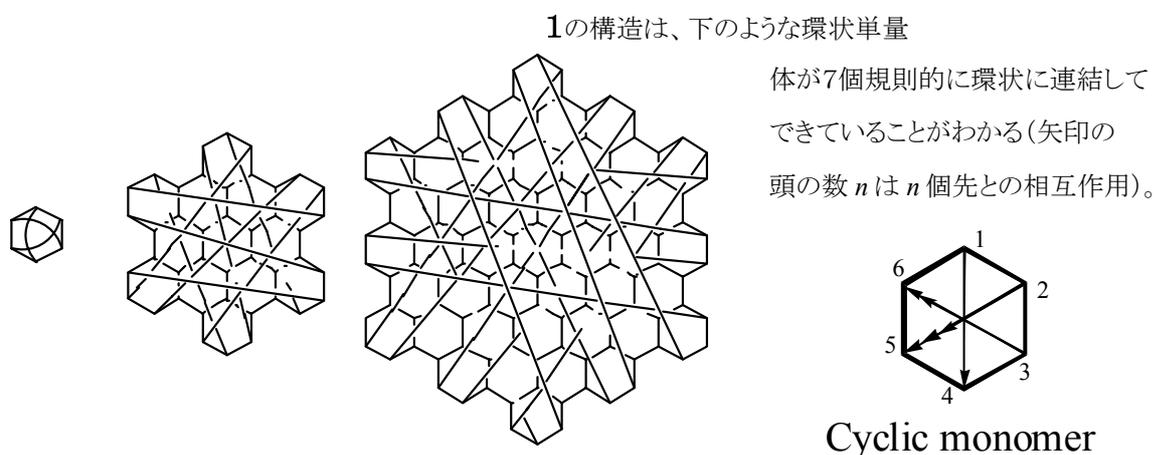


ヘキサベンゾコロネートーラスの高度の対称性

○ 細矢治夫、塚野葉子、岩田清香、中田恭子、長嶋雲兵
お茶大、青学大、産総研

ヘキサベンゾコロネートーラス**1**は、我々が10年ほど前に提出した仮想的な芳香族炭化水素の炭素原子のネットワークで、この D_{6h} の対称性を保ちながら6員環を環状に縮合させてだんだん大きなネットワークの系列 2_n も考えることができる。便宜上長く描いてある CC 結合も、他の CC 結合と同等であり、全ての 2_n は周辺構造をもたない炭素原子だけの不飽和共役系である。この 2_n の π 電子系が、極めて早くグラファイトの π 電子系に収束することは既に報告した。今回、特に**1**のもつ非常に高い対称性と、それに関連する種々の興味ある数学的な性質について報告する。

 2_1 $2_2 = 1$ 2_3 更に調べると、**1**はどの頂点も1度

ずつ通るハミルトンサイクルをもち、更にそれは 21 回回転対称

をもつ拡張ヒューウッドグラフになることがわかる。同様に、 2_3 は 19 個の環状単量体からなり、更に 57 回回転対称をもつ拡張ヒューウッドグラフであることがわかる。

これらの仮想的なネットワークの HMO も当然極めて細かく因数分解され、全て2次方程式の解として解析的に表すことができる。因みに**1**の軌道エネルギーは次式で与えられる。

$$x = \pm \sqrt{3 + 2 \cos \frac{2k\pi}{21} + 2 \cos \frac{8k\pi}{21} + 2 \cos \frac{10k\pi}{21}} \quad (k = 1, 2, \dots, 21)$$

この式の形は、当然のことながら、無限に大きいグラファイトの HMO の厳密解とよく似ている。

またこの系列のグラフ 2_3 はトーラス上にどの線も重ならずマッピングすることができる。即ち 2_3 は数学的にもトーラスであることが示される。

参考文献

- 1) H. Hosoya, Y. Ohkuma, Y. Tsukano, K. Nakada, *J. Chem. Inf. Comput. Sci.*, **35** (1995) 351.
- 2) H. Hosoya, Y. Tsukano, K. Nakada, S. Iwata, U. Nagashima, *Croat. Chem. Acta*, in press.