

2P04 スパイラルアルゴリズムから得られる数列からシュレーゲル

ダイアグラムを作る方法

○成田進* 久我稔* 川田大介* 野村泰志* 渋谷泰一* 森川鐵朗**

(*信大繊維、上越教育大自然系**)

[序] Fowler ら[1]によって提唱されたスパイラルアルゴリズムを用いると任意のフラレーンは、12個の5角形の位置を示す数列によって表される。このアルゴリズムから得られる数列を元にしてシュレーゲルダイアグラムを描くことを目的とした。シュレーゲルダイアグラムは立体分子中の原子どうしの結合を平面上に表す方法の一つであり、立体分子模型では見づらい裏側の結合も容易に見ることができるようになる。共役分子系の2重結合の位置の確認やポーリングボンドオーダーの表示などに広く利用されている。

[方法] まずシュレーゲルダイアグラムをいくつかの同心円(以降これをリングと呼ぶ)からなる平面図形と見なし(見なせないフラレーンも存在する?)、中心に据える1番目の5角形の辺をリング1とし、外部に向かい順に2、3と呼ぶ。また内側のリングと外側のリングを結ぶ線を縦糸と呼び、 $k-1$ 番目のリングと k 番目のリングの間を第 k 層と呼ぶ。そうするとシュレーゲルダイアグラムを描くために(1)全部でいくつのリングが出来るのか、(2)各リング上にはいくつの点(炭素原子)があるのか、(3)それぞれのリング間の縦糸の本数は何本か、(4)リング間で何番目と何番目の点(炭素原子)が繋がっているのか、の4種類のデータが必要であることがわかる。これらのデータをスパイラルアルゴリズムの数列から次のようにして求めることができる。

1) k 番目のリング上の点のうち、 $k+1$ 番目のリング(外側)と縦糸で繋がっているものの点の合計を ns_k 、それ以外の $k-1$ 番目のリング(内側)と縦糸で繋がっている点の合計を nd_k とする。 k 番目のリング上の点の合計は nd_k と ns_k の和となる。スパイラルアルゴリズムから $ns_1=5$ 、 $nd_1=0$ であるのは明らかである。 ns_k と nd_{k+1} はどちらも $k+1$ 層の縦糸の本数と同じであるから $nd_{k+1}=ns_k$ が成り立つ。また $k+1$ 層にある図形の数(六角形と五角形)はリング間を結ぶ縦糸の数と等しいので $nd_{k+1}(=ns_k)$ となる。

2) $k+1$ 層内にある5角形および6角形の数(それぞれ $npen_{k+1}$ 、 $nhex_{k+1}$)とおくと、 $k+1$ 層上の点の合計は六角形の個数、5角形の個数に6、5をそれぞれ掛け、そこから二重に数えている縦糸の分を引けばよいので

$$(ns_{k+1} + nd_{k+1}) + (ns_k + nd_k) = 6 \times nhex_{k+1} + 5 \times npen_{k+1} - ns_k - nd_{k+1} \quad (1) \text{ が成り立つ。1)から}$$

$$npen_{k+1} + nhex_{k+1} = nd_{k+1} (= ns_k) \quad (2) \text{ となるから、結局}$$

$$ns_{k+1} = 2 \times ns_k - nd_k - npen_{k+1} \quad (3) \text{ を得る。}$$

ここで第1層から k 層目までの多角形(六角形と五角形)の数を m 個とすると1)より $k+1$ 層には $m+1 \sim m+ns_k$ 番目の多角形があるので、スパイラルアルゴリズムから得られる数列と照らし合わせると $npen_{k+1}$ と $nhex_{k+1}$ がわかる。これを漸化式(3)に代入すると ns_k 、 nd_k の値から ns_{k+1} を決定できる。 $npen_{k+1}$ と $nhex_{k+1}$ が既に得られているので(2)から nd_{k+1} を求めることができ、これと ns_{k+1} を加えることにより $k+1$ 番目のリング上の点の総数を求めることができる。また、1)より $ns_1=5$ 、 $nd_1=0$ であるから、漸化式(3)より全ての k に対し ns_k が求まり、全てのリング上の点の個数、リング間の縦糸の本数が分かる。リングの個数は、点の合計が炭素数と同じになったときのリングを最後のものとして決定される。縦糸が何番目の点と繋がっているか説明は、紙面の都合上、発表当日に明らかにしたい。またこの方法で描くことのできたフラレーン、描くのに工夫を要したフラレーンの例も発表当日に明らかにしたい。

参考文献 [1] P. W. Fowler and D. E. Manolopoulos, "AN ATLAS OF FULLERENES",
CLARENDON PRESS / OXFORD (1995).