マーク表の作成プログラムの開発

○藤田 眞作
京都工芸繊維大学工芸学部物質工学科 (〒606-8585 京都市左京区松ヶ崎御所海道町)

[はじめに]

演者は，立体異性体の数え上げ方法として，「スフェリシティ(sphericity)」を加味したUSCI (Unit-Subduced-Cycle-Index) 法を開発し，その展開を図っている [1]．USCI 法は，(1) 三次元の化学構造 (立体異性体) の数え上げに使えるほか，(2) 対称性を加味した数え上げもおこなえるという強力な方法であるが，マーク表やUSCI 表など群論の知識を必要とする．これらの表は，群の乗法表と部分群の情報から出発して計算することができるが，群の位数が大きくなるとコンピューター計算にたよらざるを得ない．本講演では，USCI 法の概要を説明し，それに必要なマーク表やUSCI 表をコンピューターで計算するためのプログラムの開発について述べる．

[マーク表作成手順]

マーク表は，古く Burnside の教科書 [2] に記載があるが，その後は長く忘れ去られていたものである．マーク表の作成手順は次の通りである．

1. 乗法表を作成する (初期データとして与える).
2. 各部分群 (初期データとして与える) について，剰余類分解をおこない，各剰余類に番号を付ける．たとえば，$\mathbf{C}_{3v}$ 点群の部分群 $\mathbf{C}_s$ については，次のようになる．

$$\mathbf{C}_{3v} = \underbrace{\mathbf{C}_s}_{1} + \underbrace{C_3\mathbf{C}_s}_{2} + \underbrace{C_3^2\mathbf{C}_s}_{3} \tag{1}$$

3. 剰余類表現 (coset representation) の算出．式 1 の各剰余類を要素とみなし，$\mathbf{C}_{3v}$ の各要素を掛けて，置換を求める．6 個の置換を集めて，剰余類表現 $\mathbf{C}_{3v}(/\mathbf{C}_s)$ とする:

$$\begin{array}{llllll} I \sim & \begin{pmatrix} 1 & 2 & 3 \\ 1 & 2 & 3 \end{pmatrix} & C_3 \sim & \begin{pmatrix} 1 & 2 & 3 \\ 2 & 3 & 1 \end{pmatrix} & C_3^2 \sim & \begin{pmatrix} 1 & 2 & 3 \\ 3 & 1 & 2 \end{pmatrix} \\ \sigma_{d(1)} \sim & \begin{pmatrix} 1 & 2 & 3 \\ 1 & 3 & 2 \end{pmatrix} & \sigma_{d(2)} \sim & \begin{pmatrix} 1 & 2 & 3 \\ 3 & 2 & 1 \end{pmatrix} & \sigma_{d(3)} \sim & \begin{pmatrix} 1 & 2 & 3 \\ 2 & 1 & 3 \end{pmatrix} \end{array} \tag{2}$$

4. 剰余類表現 $\mathbf{C}_{3v}(/\mathbf{C}_s)$ を，各部分群に固定 (stabilize) したときに何個の要素が固定されるかを計算する．たとえば，$\mathbf{C}_s = \{I, \sigma_{d(1)}\}$ に固定すると，式 2 のうち，I および $\sigma_{d(1)}$ が選ばれる．要素を見ると 1 のみが固定され，2 および 3 は動く．したがって，マーク (不動点の個数) は 1 となる．
5. 上記の操作を，すべての剰余類表現と部分群について調べ，マーク表にする．

$\mathbf{C}_{3v}$ のマーク表

	$\mathbf{C}_1$	$\mathbf{C}_s$	$\mathbf{C}_3$	$\mathbf{C}_{3v}$
$\mathbf{C}_{3v}(/\mathbf{C}_1)$	6	0	0	0
$\mathbf{C}_{3v}(/\mathbf{C}_s)$	3	1	0	0
$\mathbf{C}_{3v}(/\mathbf{C}_3)$	2	0	2	0
$\mathbf{C}_{3v}(/\mathbf{C}_{3v})$	1	1	1	1

[USCI 表作成手順]

マーク表は，単なる異性体 (あるいはグラフ) の数え上げに有効であるが，**立体異性体**の数え上げには，そのままでは使えない．これを可能にしたのが，演者の開発した USCI 法 [1] である．USCI 表およびスフェリシティを加味した USCI-CF (unit-subduced-cycle-index-with-chirality-fittingness) 表の作成手順は次の通りである．

1. 上記の剰余類表現 $\mathbf{C}_{3v}(/\mathbf{C}_s)$ (eq. 2) を計算するところまでは同じ．

2. 剰余類表現 $\mathbf{C}_{3v}(/\mathbf{C}_s)$ を，各部分群に固定 (stabilize) する．このとき，不動点の数を求めるのではなく，部分群のどの剰余類表現に減縮 (subduce) されるかを計算する．この操作は，代数的には，$\mathbf{C}_{3v}$ のマーク表と $\mathbf{C}_s$ のマーク表 (逆行列) の掛け算におきかえうる (この計算をプログラム化する)．たとえば，$\mathbf{C}_s = \{I, \sigma_{d(1)}\}$ に減縮する場合は，マーク表の $\mathbf{C}_{3v}(/\mathbf{C}_s)$ 列から $\mathbf{C}_s$ の部分を選んで，$\mathbf{C}_s$ のマーク表の逆行列を掛ける．

$$(3\ 1)\begin{pmatrix} 1/2 & 0 \\ -1/2 & 1 \end{pmatrix} = (1\ 1) \tag{3}$$

右辺の結果は，$\mathbf{C}_s(/\mathbf{C}_1)$ および $\mathbf{C}_s(/\mathbf{C}_s)$ の多重度をあらわす．すなわち，

$$\mathbf{C}_{3v}(/\mathbf{C}_s) \downarrow \mathbf{C}_s = \mathbf{C}_s(/\mathbf{C}_1) + \mathbf{C}_s(/\mathbf{C}_s) \tag{4}$$

3. 式 3 および式 4 の結果は，具体的には，次のような意味をもつ．式 2 から，$\mathbf{C}_s = \{I, \sigma_{d(1)}\}$ を取り出すと，二つの部分に分かれる．

$$\begin{array}{rcccccc} I \sim & \begin{pmatrix} 1 & 2 & 3 \\ 1 & 2 & 3 \end{pmatrix} & = & \begin{pmatrix} 1 \\ 1 \end{pmatrix} & + & \begin{pmatrix} 2 & 3 \\ 2 & 3 \end{pmatrix} \\ \sigma_{d(1)} \sim & \begin{pmatrix} 1 & 2 & 3 \\ 1 & 3 & 2 \end{pmatrix} & = & \underbrace{\begin{pmatrix} 1 \\ 1 \end{pmatrix}}_{\mathbf{C}_s(/\mathbf{C}_s)} & + & \underbrace{\begin{pmatrix} 2 & 3 \\ 3 & 2 \end{pmatrix}}_{\mathbf{C}_s(/\mathbf{C}_1)} \\ & \text{sphericity:} & & \text{homospheric} & & \text{enantiospheric} \\ & \text{USCI-CF :} & & a_1 & & c_2 \\ & \text{USCI :} & & s_1 & & s_2 \end{array} \tag{5}$$

これから，USCI-CF (a_1c_2) および USCI (s_1s_2) をうる．

4. 上記の手順を繰り返して，USCI-CF 表および USCI 表をうる．

$\mathbf{C}_{3v}$ の USCI-CF 表

	$\mathbf{C}_1$	$\mathbf{C}_s$	$\mathbf{C}_3$	$\mathbf{C}_{3v}$
$\mathbf{C}_{3v}(/\mathbf{C}_1)$	b_1^6	c_2^3	b_3^2	c_6
$\mathbf{C}_{3v}(/\mathbf{C}_s)$	b_1^3	a_1c_2	b_3	a_3
$\mathbf{C}_{3v}(/\mathbf{C}_3)$	b_1^2	c_2	b_1^2	c_2
$\mathbf{C}_{3v}(/\mathbf{C}_{3v})$	b_1	a_1	b_3	a_1

$\mathbf{C}_{3v}$ の USCI 表

	$\mathbf{C}_1$	$\mathbf{C}_s$	$\mathbf{C}_3$	$\mathbf{C}_{3v}$
$\mathbf{C}_{3v}(/\mathbf{C}_1)$	s_1^6	s_2^3	s_3^2	s_6
$\mathbf{C}_{3v}(/\mathbf{C}_s)$	s_1^3	s_1s_2	s_3	s_3
$\mathbf{C}_{3v}(/\mathbf{C}_3)$	s_1^2	s_2	s_1^2	s_2
$\mathbf{C}_{3v}(/\mathbf{C}_{3v})$	s_1	s_1	s_3	s_1

三つの表を比較すると，次の序列が得られる:

USCI-CF 表 —(Sphericity 消去)→ **USCI 表** —(s_1 の指数のみ残す)→ **マーク表**

[文献] (1) Fujita, S. (1991) *Symmetry and Combinatorial Enumeration in Chemistry* (Springer-Verlag, Berlin-Heidelberg). (2) Burnside, W (1911) *Theory of Groups of Finite Order*, 2nd Ed., (Cambridge University Press, Cambridge).