2O01

ペル方程式の化学の問題との関連

○ 細矢　治夫
お茶の水女子大学（〒112-8610 東京都区大塚 2-1-1）

［ペル方程式］

先ずペル方程式を紹介して、次にその解が化学のどのような問題とかかり合うかを議論する。

ここに出て来る数は全て正の整数とする。ただし、D は非平方数である。Pell 方程式 (1) とその拡張された方程式 (2)（これを Pellep-N と呼ぶ）は、２千年以上も前にギリシャやアラビアで知られていた。

$$x^2 - D\,y^2 = 1 \tag{1}$$

$$x^2 - D\,y^2 = \pm N \quad (\text{Pellep-}N) \tag{2}$$

N が平方数ならば、どんな D に対しても、(1) と (2)の解は無数に存在するが、それ以外の場合は特定の D についてしか解は存在しない。

ペル方程式の解のカオス的挙動は古来知られているが、それも含めて、ペル方程式の解の集合の数学的構造についての解析はまだ完全には行われていない。最近、著者はペル方程式の解の分類や、そのグラフ理論的な解析を行い、多くの興味ある結果を得たので、その一部をここに紹介する [1]。

例として、(1) の D=2, 3, 5 の最小解はそれぞれ、(x_1=3,y_1=2), (2, 1), (9, 4)である。D が小さい間はこれらの解もあまり大きくならないのに、次第に上下の変動が激しくなり、特に D が 61 では x_1 が 10 桁の数になる。このカオス的な挙動と解の分類については従来系統的な研究はされていなかった。

ところが、y_1 の $\log D$ に対する挙動をグラフにすると、一見何の規則性も見えなかったペル方程式の解がいくつかのクラスに分類できることが示唆される。例えば、次の多項式によって D=5,13,29 等の解が一つのクラスをつくることが示された。

X2　$\{8[m^3+(m+1)^3]^2+1\}^2 - [(2m+1)^2+4]\{4[m^3+(m+1)^3][m^2+(m+1)^2]\}^2 = 1$

m =	0	1	2	3	4	5
D	*5*	13	29	53	85	125
x	*9*	649	9801	66249	285769	930249
y	*4*	180	1820	9100	30996	83204

D=61 の解も X10–というクラスの最小のメンバーであることもわかった。このようにして、100 以下の D の解の分類を調べあげた。

［トポロジカルインデックス及び化学との関係］

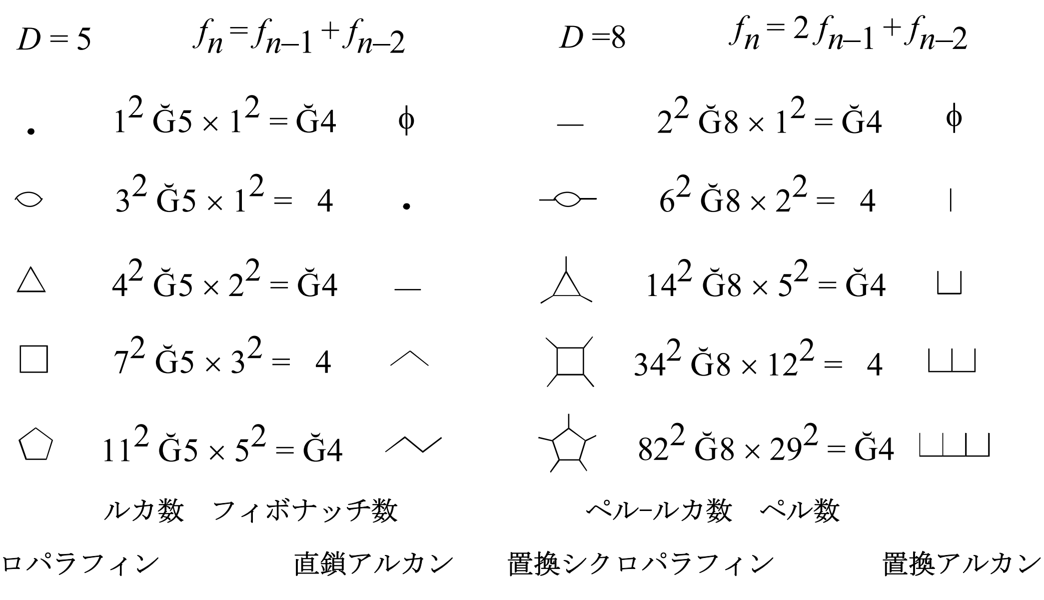
著者は、無向グラフ G についてトポロジカルインデックス Z_G という概念を提出し、グラフの代数

的な性質の議論の展開を長年行って来た [2-4]。グラフ G の中で互いに隣り合わない k 本の辺を選ぶ組合わせの数を非隣接数 $p(\mathrm{G},k)$とし、その総数をトポロジカルインデックス Z_G と定義する。トポロジカルインデックス Z_G は、飽和炭化水素の沸点のような熱力学的な諸性質と非常に良い相関関係を持つことが知られている。

一方、このトポロジカルインデックス Z_G は、不飽和共役炭化水素の π 電子エネルギーや結合次数のような電子的諸量とも良い相関関係をもち、グラフ理論的分子軌道法が展開されている[3]。

n 個の点を n–1 本の辺で順につなげた経路グラフ (path graph) S_n (直鎖アルカンの炭素原子骨格)の Z_G はフィボナッチ数（1, 2, 3, 5, 8, 13,⋯）、単環グラフ (Cycle graph) C_n（シクロパラフィンの炭素原子骨格）の Z_G はルカ数（1, 3, 4, 7, 11, 18,⋯）になる。経路グラフの各点から長さ１の枝を伸ばしてできる櫛 (Comb)グラフからはペル数（1, 2, 5, 12, 29, 70,⋯）が得られる。このように、トポロジカルインデックス Z_G を使うことによって、初等数学や整数論において、ペル方程式の解のみならず、ピタゴラス３角形、ヘロン３角形、パスカル３角形等のグラフ理論的な新しい解釈が無数に得られた。

さてここで、D=5 と 8 に対する Pellep-4 の解の組を下に示す。それらは、シクロパラフィン、直鎖のアルカン、及びその骨格の炭素原子に一つずつメチル基を置換した炭化水素のグラフの Z_G に他ならない。ペル方程式が化学の問題に関連することが指摘されたのは、これが初めてである。



引用文献

[1] H. Hosoya, お茶の水女子大学自然科学報告, 印刷中.

[2] H. Hosoya, *Bull. Chem. Soc. Jpn*., **44** (1971), 2332

[3] H. Hosoya, *Bull. Chem. Soc. Jpn*., **76** (2003), 2233

[4] 細矢治夫, 数学文化, **2** (2004), 80.