2O07　　やせた六角動物のケクレ構造はいも虫グラフの Z で数える

○　細矢治夫[1]，　Ivan Gutman[2]

[1]お茶の水女子大学, 広島大学,　[2]クラグエバッツ大学

１．はじめに

縮合多環芳香族炭化水素 (PCAH) の炭素原子骨格のグラフは、グラフ理論では polyhex、または六角動物 (hexagonal animal) とも呼ばれる。 polyhexはカタ縮合のcatahex（やせた六角動物）とペリ縮合のperihexに分けられる。polyhexのケクレ構造式（数学では完全マッチング、 perfect matching）の数え上げの問題は数理化学の大きなターゲットであり、特にcatahexのケクレ数の数え上げに関しては多くの興味あるアルゴリズムが提出されている。[1-5]。その中で、筆者はセクステット多項式[1]（後述)、Gutman[2] と El-Basil[5]はいも虫グラフ (caterpillar tree)を使った理論を展開している。いも虫グラフ (caterpillar tree) というのは、図１に示すように、n個の点をn–1 本の線で一列に結んだ経路グラフ P_n の各点に、x本の線が１点から放射状に出ている星グラフ$K_{1,x}$ の組 (x_1, x_2,…, x_n) を埋込んでできた木グラフ $C_n(x_1, x_2,\cdots, x_n)$ である。

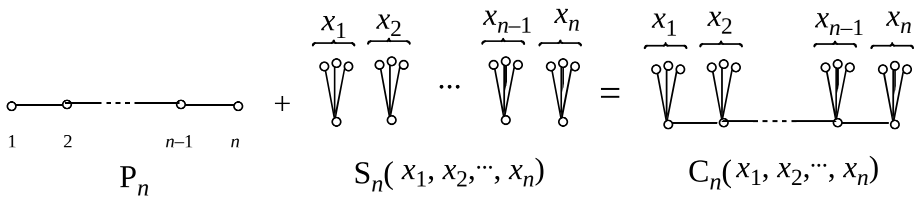


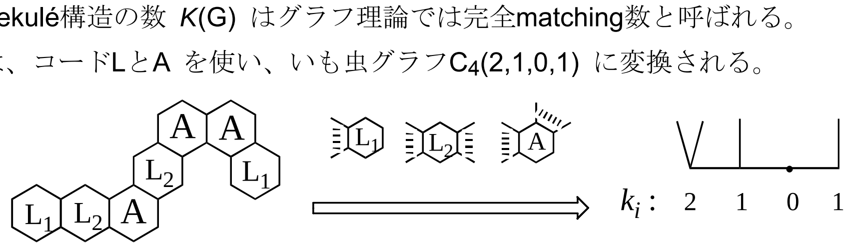
図１　　経路グラフ、星グラフ、いも虫グラフ

一方、筆者はグラフを特性化するためにトポロジカルインデックスZ（以下Z-indexと呼ぶ）を提出し、数理化学の種々の問題の解析に応用してきた[6-8]。 今回、「やせた六角動物のケクレ数は、それに対応するいも虫グラフのZ-indexに他ならない」ということ、またこのZが、Eulerが連分数を計算するために提出した連分多項式 (continuant) に他ならないということも見出された。更に、catahexのケクレ数をめぐる様々な興味ある数学的問題についても紹介する。

２．トポロジカルインデックス Z とセクステット多項式

グラフ（graph）Gは点と辺の集合である。Gの中でk本の互いに隣り合わない辺を選ぶ組合わせの数を非隣接数（non-adjacent　number、またはk-matching 数）と定義しp(G,k)と表す。p(G,k) の総和をZ indexと定義する。[6] 2n個の点からなるGの全ての点をn本の辺で埋めたパタンを完全matching と呼ぶ。PCAH (G)のKekulé構造の数 K(G) はグラフ理論では完全matching数と呼ばれる。

図２のcatahexは、コードLとA を使い、いも虫グラフC_4(2,1,0,1) に変換される。

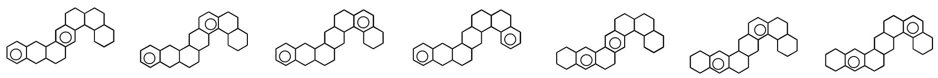


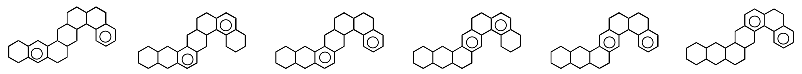
$$\mathrm{L\,L\,A\,L\,A\,A\,L = L^2\,A\,L^1\,A\,L^0\,A\,L^1} \Longrightarrow C_4(2, 1, 0, 1)$$

図２

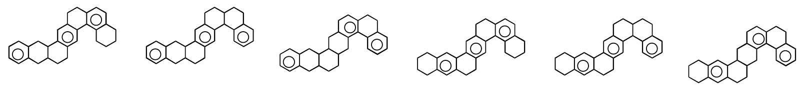
次にセクステット多項式を説明する。[1] やせたPCAH、すなわちcatahexグラフG中で*k*個の互いに共鳴し合うaromatic sextetを選ぶ組合わせの数をr(G,*k*)と表すと、その総和がケクレ数Z(G)に等しくなることを既に著者らは証明している。具体的に図２のcatahexについてその例を示す。

r(G,0) = 1 (def)　　　r(G,1) = 7 = # of hexagons





r(G,2) = 13

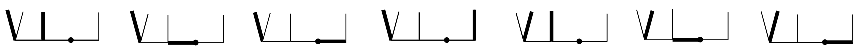


r(G,3) = 6

K = 1 + 7 + 13 + 6 = 27

これは、図２で得られたいも虫グラフC_4(2,1,0,1) のZ indexの導出と完全に対応する。

p(G,0) = 1 (def)　　　p(G,1) = 7 = # of edges



p(G,2) = 13

p(G,3) = 6

Z = 1 + 7 + 13 + 6 = 27

つまり、「やせた六角動物のケクレ数は対応するいも虫グラフの Z に等しい」ことが示される。

３．連分多項式と行列式

上に示したことの大筋は既に知られていたが、今回この問題がEulerの提出した連分多項式（continuant）を使うことによって、連分数や３重対角行列式と密接な関係にあることが判明した。ちなみに、C_4(2,1,0,1) のいも虫の全ての足の数に１を加えた (3,2,1,2) からできる連分数から次のようにZが得られる。

$$3+\cfrac{1}{2+\cfrac{1}{1+\cfrac{1}{2}}}=\frac{27}{8}$$

次式も楽しい。

$$\begin{vmatrix} 3 & 1 & 0 & 0 \\ -1 & 2 & 1 & 0 \\ 0 & -1 & 1 & 1 \\ 0 & 0 & -1 & 2 \end{vmatrix} = 3\begin{vmatrix} 2 & 1 & 0 \\ -1 & 1 & 1 \\ 0 & -1 & 2 \end{vmatrix} + \begin{vmatrix} 1 & 1 \\ -1 & 2 \end{vmatrix} = 3\times 8+3=27$$

参考文献

1) H. Hosoya, T. Yamaguchi, *Tetrahedron Lett.*, (1975) 4659.　2) I. Gutman, *Theor. Chim. Acta*, **45** (1977) 309.

3) S. J. Cyvin, I. Gutman, *Kekulé Structures in Benzenoid Hydrocarbons*, Springer, Berl. 1988.

4) I. Gutman, S. J. Cyvin, *Introduction to the Theory of Benzenoid Hydrocarbons*, Springer, Berl. 1989.

5) S. El-Basil, *Topics Curr. Chem.*, **153** (1990) 273.　6) H. Hosoya, *Bull. Chem. Soc. Jpn.*, **44** (1971) 2332.

7) H. Hosoya, *Bull. Chem. Soc. Jpn.*, **76** (2003) 2233.

8) H. Hosoya, *Croat. Chem. Acta*, **80** (2007) 239.