1O09

対称性により類別したアルカンの数え上げ

○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**] Pólya によっておこなわれたアルカンの数え上げは，本質的にグラフ (化学的には，構造異性体) に関するもので，キラル・アキラルの区別，メソ体・擬不斉などの例外的な取り扱いなどの立体異性にかかわる項目を議論するには不十分である [1]．Robinson らは，Pólya の定理を修正して，キラル・アキラルの区別をおこなっているが，メソ体・擬不斉の取り扱いは完全とはいえない [2]．演者は最近，藤田のプロリガンド法 [3] を応用して，立体異性体としてのアルカンの数え上げをおこない，キラル・アキラルの区別，メソ体・擬不斉などの例外的な取り扱いにも成功した [4]．

演者は，上記とは別に，立体異性体の数え上げ方法として，「軌道のスフェリシティ(sphericity)」を加味した USCI (Unit-Subduced-Cycle-Index) 法を開発している [5]．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．この方法を用いれば，キラル・アキラルの区別よりもさらに詳しく，対称性 (点群) による類別が可能になる．

今回，USCI 法の四つの数え上げ法のうち，PCI (Partial-Cycle-Index) 法を適用して，アルカンの数え上げをおこなったので報告する．

[**方法**] アルキル基の再帰的な数え上げは，すでに報告した [6]．炭素数 10 までの結果を示せば，次の通りである．

$$a(x) = 1 + x + x^2 + 2x^3 + 3x^4 + 5x^5 + 8x^6 + 14x^7 + 23x^8 41x^9 + 69x^{10} + \cdots \tag{1}$$

$$c(x^2) = 1 + x^2 + x^4 + 2x^6 + 5x^8 + 11x^{10} + \cdots \tag{2}$$

$$b(x) = 1 + x + x^2 + 2x^3 + 5x^4 + 11x^5 + 28x^6 + 74x^7 + 199x^8 + 551x^9 + 1553x^{10} + \cdots. \tag{3}$$

ただし，x^k の係数は，炭素数 k の α_k (アキラルの個数), γ_k (二倍体の個数), β_k (アキラル・キラルの個数) をあらわす.

アルカンは，重心型と双重心型に分けて，それぞれの個数を求める．重心型のアルカンを求めるには，次に例示する PCI-CF (partial cycle index with chirality fittingness) を使う.

$$\text{PCI-CF}(\mathbf{C}_1, \$_d) = \frac{1}{24}b_1^4 - \frac{1}{8}b_2^2 - \frac{1}{4}a_1^2c_2 - \frac{1}{6}b_1b_3 + \frac{1}{12}b_4 + \frac{1}{4}a_2^2 + \frac{1}{2}a_1a_3 + \frac{1}{6}b_4 - \frac{1}{2}a_4 \tag{4}$$

$$\text{PCI-CF}(\mathbf{C}_2, \$_d) = \frac{1}{4}b_2^2 - \frac{1}{4}c_4 - \frac{1}{4}b_4 - \frac{1}{4}a_2^2 + \frac{1}{2}a_4 \tag{5}$$

$$\text{PCI-CF}(\mathbf{C}_s, \$_d) = \frac{1}{2}a_1^2c_2 - \frac{1}{2}a_2^2 - a_1a_3 + a_4 \tag{6}$$

$$\cdots \qquad \cdots$$

$$\text{PCI-CF}(\mathbf{T}_d, \$_d) = a_4, \tag{7}$$

これらは，四面体の点群 $\mathbf{T}_d$ の USCI 表から求めることができる．式 1–3 を式 4–7 に代入して重心型アルカンの決定条件を適用して展開すると，数え上げの母関数が得られる．ここでは示さないが，双重心型のアルカンについても，PCI-CF を求めたうえで，同様の手順に従い，数え上げの母関数を得る．

[**結果**] 上記の手順を Maple 言語でプログラムして，炭素数 100 までのアルカンの個数を求めた．実際に構造式を描いて検証した結果を発表する．

[**文献**] (1) Pólya, G. & Read, R. C. (1987) *Combinatorial Enumeration of Groups, Graphs, and Chemical Compounds* (Springer-Verlag, New York). (2) Robinson, R. W.; Harary, F.; Balaban, A. T. (1976) *Tetrahedron* **32**, 355–361. (3) Fujita, S. (2005) *Theor. Chem. Acc.* **113**, 73–79, 80–86; Fujita, S. (2006) *Theor. Chem. Acc.* **115**, 37–53. (4) Fujita, S. *Theor. Chem. Acc.*, 印刷中; Fujita, S *MATCH Commun. Math. Comput. Chem.*, 印刷中. (5) Fujita, S. (1991) *Symmetry and Combinatorial Enumeration in Chemistry* (Springer-Verlag, Berlin-Heidelberg). (6) Fujita, S *J. Comput. Chem. Jpn.*, 印刷中.