

2008

## 球状多面体型共役π電子系の中でのC<sub>60</sub>の高度の安定性.

### トポロジカル・シンメトリーからの考察

細矢治夫

お茶の水女子大学 (名誉教授)

#### 1. はじめに

C<sub>60</sub> という組成の5・6多面体のフラーレンの中で、サッカーボール型のものが極めて安定であることは、様々な理論的考察から示されている。C<sub>60</sub> に限らずσ電子骨格の歪みを無視して共役π電子系の安定性の比較だけでも、かなり信頼性のある議論ができる。著者は、サッカーボール型のC<sub>60</sub>の安定性がHOMO, LUMO 近傍のMOの高い縮重度に大きな原因があることを主張して来た [1]。π電子系のネットワークのMOの縮重度はHMOによってほぼ正しく得られるので、C<sub>60</sub>以外の組成の様々な球状多面体型共役π電子系の縮重度を、著者が以前に提唱したトポロジカル・シンメトリーの手法 [1-3] を用いて調べた。定性的な議論ではあるが、表記の問題についての興味ある結果が得られたので報告する。

#### 2. トポロジカル・シンメトリー

角切り十二面体 (truncated dodecahedron) を例に選び、その60行60列のHMOの行列式がトポロジカル・シンメトリーを利用することによって効率よく因数分解されることを以下に示す。

図1のシュレーゲル図 (多面体のネットワークのトポロジーを、辺が交差しないように描いた図) には、11個の十角形が見えるが、これは正十二面体の12枚の五角形が角切りによって生じたもので、残りの1枚はこの図の外周の十角形となっている。

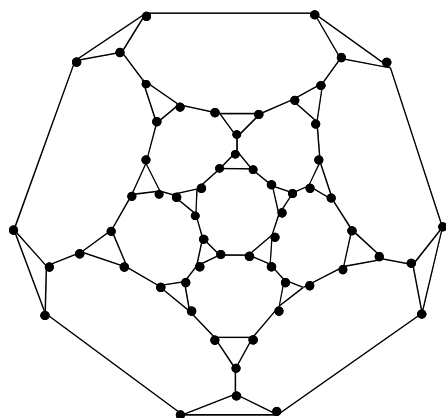


図 1

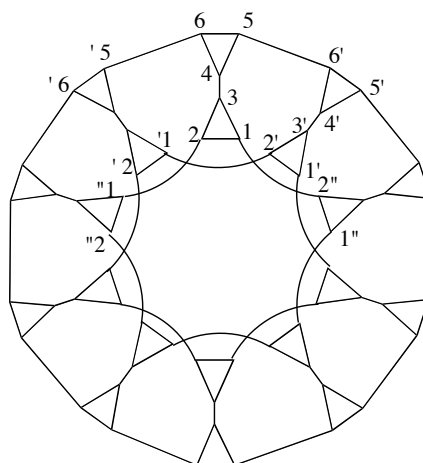


図 2

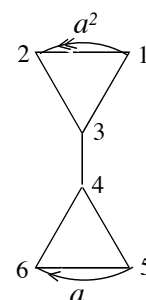


図 3

このダイアグラムの中心と外周の中間部分に、10枚の十角形をつなげる20角形が見える。その20角形を無理矢理一番外側に広げて、残りの辺や頂点をその内側に描き直すと図2が得られる。これは、辺

の交差があるので最早やシュレーゲル図ではなくなる。しかし、この多面体の隠れた十回回転対称の性質をきれいに見せてくれている。

即ち、この分子は、2個のシクロプロペンが二重結合をはさんで共役している6π電子系が10個環状に共役してできている。その際、各ユニットの5と6のC原子は20員環を、1と2の原子は2組の10員環を形づくっている。その共役のトポロジーを図3のように表すことができる。その結果60行60列の行列式は、下のような6行6列の行列10個に因数分解される。その時、 $a = \exp(k\pi i/5)$  ( $k=1\sim 10$ )で、 $a^*$ は $a$ の複素共役である。それを解いた結果が図4に示してある。

$$f(x) = \begin{vmatrix} -x & 1+a^2 & 1 & 0 & 0 & 0 \\ 1+a^{*2} & -x & 1 & 0 & 0 & 0 \\ 1 & 1 & -x & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & -x & 1 & 1 \\ 0 & 0 & 0 & 1 & -x & 1+a \\ 0 & 0 & 0 & 1 & 1+a^* & -x \end{vmatrix}$$

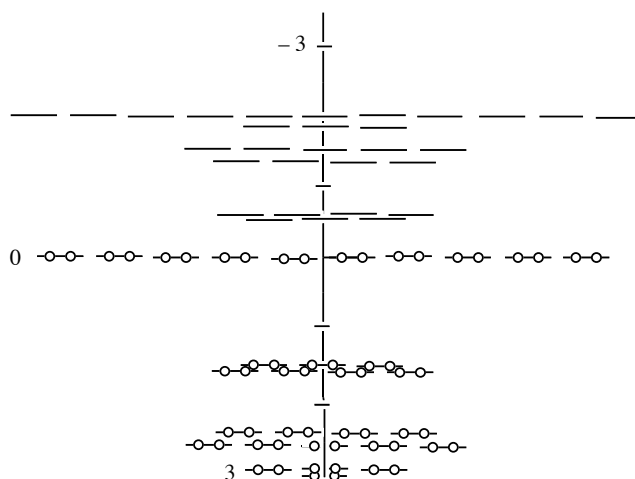


図 4

10重に縮重しているHOMOは閉殻をつくるが、それは全て不安定なNBMOなので、到底安定な基底状態は生まれないと予想される。このようなMO計算を多数の球状多面体について行った結果、サッカーボール型のC<sub>60</sub>以外には、安定なπ電子系は見出されなかった。具体例について講演で紹介する。

#### 参考文献

- [1] H. Hosoya and Y. Tsukano, Fullerenes Sci. Tech., 24 (1994) 381.
- [2] H. Hosoya, Y. Okuma, Y. Tsukano, and K. Nakada, J. Chem. Inf. Comput. Sci., 35 (1995) 351.
- [3] H. Hosoya, Y. Tsukano, K. Nakada, S. Iwata, and U. Nagashima, Croat. Chem. Acta, 77 (2004) 89/