

## RS-立体異性体群と四つ組 RS-立体異性体の数え上げ

○ 藤田 眞作

湘南情報数理化学研究所

[はじめに] 筆者は、立体異性を議論するために、RS-立体異性体群を定義し、その図形的表現として、ステレオイソグラムを提案している [1, 2]。点群に基づく数え上げ法である単位減縮巡回指標 (USCI) 法 [3] およびプロリガンド法 [4] を拡張すれば、RS-立体異性体群に基づく数え上げをおこなうことができる [5, 6]。今回は、この拡張について、正四面体骨格を例にとり、その概要を述べる。

[ステレオイソグラムと四つ組 RS-立体異性体] ステレオイソグラムには、タイプ I-V の 5 種類がある。そのうちのタイプ I とタイプ V を図 1 に示す。

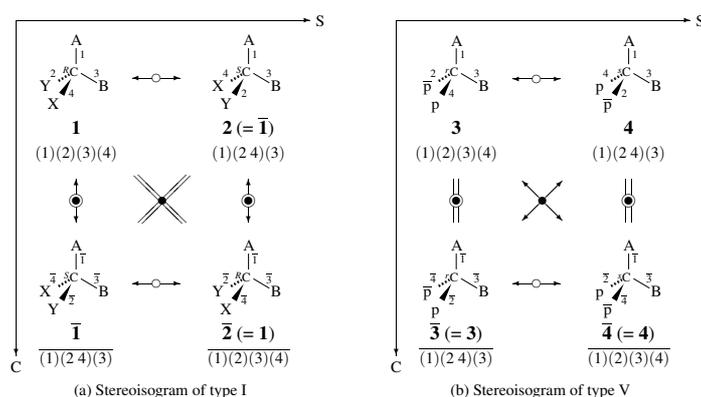


図 1: Stereoisograms of type I and type V.

点群 ( $T_d$ ) の観点からは、図 1(a) では、エナンチオマー対  $1\bar{1}$  ( $= 2\bar{2}$ : 縮重) を同値類と考え、1 個として勘定する。一方、図 1(b) では、アキラルな 3 および 4 をそれぞれ同値類とみて、全体で 2 個として勘定する。

RS-立体異性体群 ( $T_{d\bar{\sigma}I}$ ) の観点からは、図 1(a) では、タイプ I のステレオグラムとして、四つ組 RS-立体異性体 ( $1\bar{1}/2\bar{2}$ : 一對のエナンチオマーに縮重) を同値類として、1 個と勘定する。一方、図 1(b) では、アキラルな  $3/4$  を縮重した四つ組 RS-立体異性体として同値類とみなし、1 個と勘定する。

[拡張スフェリシティーおよび拡張 USCI] RS-立体異性体群  $T_{d\bar{\sigma}I}$  を  $T_d$  をもとに構成する。点群の部分群のキラル・アキラルを拡張して、RS-立体異性体群の場合にも、鏡映操作を含む部分群をアキラルとし、含まない部分群をキラルと定義する。この定義により、RS-立体異性体群の剰余類表現にスフェリシティーの概念 [3] をもちこむことができる。このようにしてえた拡張スフェリシティーでも、スフェリシティー指標を与えることができ [5, 6]、それぞれ、ホモスフェリック軌道に  $a_d$ 、エナンチオスフェリック軌道に  $c_d$ 、ヘミスフェリック軌道に  $b_d$  を対応させる ( $d$  は、軌道の大きさ)。

拡張スフェリシティーおよび拡張したスフェリシティー指標により、点群における USCI 法 [3] を拡張して、RS-立体異性体群が作用する場合に応用することができる。表 1 は、RS-立体異性体群  $T_{d\bar{\sigma}I}$  の  $T_{d\bar{\sigma}I}/C_{3v\bar{\sigma}I}$  軌道を減縮した結果を示したものである。減縮した部分群には、スフェリシティー指標の積 (キラリティー適応単位減縮巡回指標 USCI-CF) が対応する。たとえば、表 1 の第 2 行は、部分群  $C_2$  への減縮:

$$T_{d\bar{\sigma}I}/C_{3v\bar{\sigma}I} \downarrow C_2 = 2C_2/C_1 \quad (1)$$

をあらわし、拡張した USCI-CF として  $b_2^2$  を対応させることができる。ただし、式 1 の右辺にあらわれる剰余類表現  $C_2/C_1$  は、「大域対称性  $C_2$  と局所対称性  $C_1$  がともにキラルであることから、ヘミスフェリックである」と決定でき、スフェリシティー指標として  $b_2$  を与えることができる ( $d = |C_2|/|C_1| = 2/1 = 2$ )。[拡張 PCI-CF] 表 1 に示した USCI-CF から出発して、別にもとめた RS-立体異性体群  $T_{d\bar{\sigma}I}$  のマーク表の逆行列を使うと、拡張した部分巡回指標 PCI-CF をもとめることができる。

表 1: Subduction of  $\mathbf{T}_{d\tilde{\sigma}\tilde{\Gamma}}(\mathbf{C}_{3v\tilde{\sigma}\tilde{\Gamma}})$ 

Subgroup ( $\downarrow \mathbf{G}_j$ )	Subduction ( $\mathbf{T}_{d\tilde{\sigma}\tilde{\Gamma}}(\mathbf{C}_{3v\tilde{\sigma}\tilde{\Gamma}}) \downarrow \mathbf{G}_j$ )	USCI-CF	USCI	TEM						
				$\tilde{N}_j$	$\tilde{N}_j^{(I)}$	$\tilde{N}_j^{(II)}$	$\tilde{N}_j^{(III)}$	$\tilde{N}_j^{(IV)}$	$\tilde{N}_j^{(V)}$	
1	$\mathbf{C}_1$	$4\mathbf{C}_1(\mathbf{C}_1)$	$b_1^4$	$s_1^4$	1/48	0	0	1/48	0	0
2	$\mathbf{C}_2$	$2\mathbf{C}_2(\mathbf{C}_1)$	$b_2^2$	$s_2^2$	1/16	0	0	1/16	0	0
3	$\mathbf{C}_{\tilde{\sigma}}$	$\mathbf{C}_{\tilde{\sigma}}(\mathbf{C}_1) + 2\mathbf{C}_{\tilde{\sigma}}(\mathbf{C}_{\tilde{\sigma}})$	$b_1^2 b_2$	$s_1^2 s_2$	1/8	0	1/4	-1/8	0	0
4	$\mathbf{C}_{\tilde{\sigma}}$	$2\mathbf{C}_{\tilde{\sigma}}(\mathbf{C}_1)$	$c_2^2$	$s_2^2$	1/16	1/8	0	-1/16	0	0
5	$\mathbf{C}_s$	$\mathbf{C}_s(\mathbf{C}_1) + 2\mathbf{C}_s(\mathbf{C}_s)$	$a_1^2 c_2$	$s_1^2 s_2$	1/8	0	0	-1/8	0	1/4
6	$\mathbf{C}_{\tilde{\Gamma}}$	$4\mathbf{C}_{\tilde{\Gamma}}(\mathbf{C}_{\tilde{\Gamma}})$	$a_1^4$	$a_1^4$	1/48	1/24	0	-1/48	0	0
7	$\mathbf{C}_3$	$\mathbf{C}_3(\mathbf{C}_1) + \mathbf{C}_3(\mathbf{C}_3)$	$b_1 b_3$	$s_1 s_3$	1/6	0	0	1/6	0	0
8	$\mathbf{S}_4$	$\mathbf{S}_4(\mathbf{C}_1)$	$b_4$	$s_4$	1/8	0	1/4	-1/8	0	0
9	$\mathbf{S}_4$	$\mathbf{S}_4(\mathbf{C}_1)$	$c_4$	$s_4$	1/8	0	0	-1/8	0	1/4
10	$\mathbf{D}_2$	$\mathbf{D}_2(\mathbf{C}_1)$	$b_4$	$s_4$	0	0	0	0	0	0
11	$\mathbf{C}_{2\tilde{\sigma}}$	$\mathbf{C}_{2\tilde{\sigma}}(\mathbf{C}_{\tilde{\sigma}}) + \mathbf{C}_{2\tilde{\sigma}}(\mathbf{C}'_{\tilde{\sigma}})$	$b_2^2$	$s_2^2$	0	0	0	0	0	0
12	$\mathbf{C}_{2\tilde{\sigma}}$	$\mathbf{C}_{2\tilde{\sigma}}(\mathbf{C}_1)$	$c_4$	$s_4$	0	0	0	0	0	0
13	$\mathbf{C}_{2v}$	$\mathbf{C}_{2v}(\mathbf{C}_s) + \mathbf{C}_{2v}(\mathbf{C}'_s)$	$a_2^2$	$s_2^2$	0	0	0	0	0	0
14	$\mathbf{C}_{3\tilde{\sigma}\tilde{\sigma}}$	$\mathbf{C}_{3\tilde{\sigma}\tilde{\sigma}}(\mathbf{C}_{\tilde{\sigma}}) + \mathbf{C}_{3\tilde{\sigma}\tilde{\sigma}}(\mathbf{C}_s)$	$a_2 c_2$	$s_2^2$	0	-1/4	-1/4	1/4	1/2	-1/4
15	$\mathbf{C}_{2\tilde{\Gamma}}$	$2\mathbf{C}_{2\tilde{\Gamma}}(\mathbf{C}_{\tilde{\Gamma}})$	$a_2^2$	$s_2^2$	0	0	0	0	0	0
16	$\mathbf{C}_{s\tilde{\sigma}\tilde{\Gamma}}$	$\mathbf{C}_{s\tilde{\sigma}\tilde{\Gamma}}(\mathbf{C}_{\tilde{\Gamma}}) + 2\mathbf{C}_{s\tilde{\sigma}\tilde{\Gamma}}(\mathbf{C}_{s\tilde{\sigma}\tilde{\Gamma}})$	$a_1^2 a_2$	$s_1^2 s_2$	0	-1/4	-1/4	1/4	1/2	-1/4
17	$\mathbf{C}_{3\tilde{\sigma}}$	$\mathbf{C}_{3\tilde{\sigma}}(\mathbf{C}_{\tilde{\sigma}}) + \mathbf{C}_{3\tilde{\sigma}}(\mathbf{C}_{3\tilde{\sigma}})$	$b_1 b_3$	$s_1 s_3$	0	0	0	0	0	0
18	$\mathbf{C}_{3v}$	$\mathbf{C}_{3v}(\mathbf{C}_s) + \mathbf{C}_{3v}(\mathbf{C}_{3v})$	$a_1 a_3$	$s_1 s_3$	0	0	0	0	0	0
19	$\mathbf{C}_{3\tilde{\Gamma}}$	$\mathbf{C}_{3\tilde{\Gamma}}(\mathbf{C}_{\tilde{\Gamma}}) + \mathbf{C}_{3\tilde{\Gamma}}(\mathbf{C}_{3\tilde{\Gamma}})$	$a_1 a_3$	$s_1 s_3$	1/6	1/3	0	-1/6	0	0
20	$\mathbf{D}_{2\tilde{\sigma}}$	$\mathbf{D}_{2\tilde{\sigma}}(\mathbf{C}_{\tilde{\sigma}})$	$b_4$	$s_4$	0	0	0	0	0	0
21	$\mathbf{S}_{4\tilde{\sigma}}$	$\mathbf{S}_{4\tilde{\sigma}}(\mathbf{C}_s)$	$a_4$	$s_4$	0	-1/4	-1/4	1/4	1/2	-1/4
22	$\mathbf{S}_{4\tilde{\Gamma}}$	$\mathbf{S}_{4\tilde{\Gamma}}(\mathbf{C}_{\tilde{\Gamma}})$	$a_4$	$s_4$	0	-1/4	-1/4	1/4	1/2	-1/4
23	$\mathbf{D}_{2d}$	$\mathbf{D}_{2d}(\mathbf{C}_s)$	$a_4$	$s_4$	0	0	0	0	0	0
24	$\mathbf{S}_{4\tilde{\sigma}\tilde{\sigma}}$	$\mathbf{S}_{4\tilde{\sigma}\tilde{\sigma}}(\mathbf{C}_{\tilde{\sigma}})$	$c_4$	$s_4$	0	-1/4	-1/4	1/4	1/2	-1/4
25	$\mathbf{D}_{2\tilde{\Gamma}}$	$\mathbf{D}_{2\tilde{\Gamma}}(\mathbf{C}_{\tilde{\Gamma}})$	$a_4$	$s_4$	0	0	0	0	0	0
26	$\mathbf{C}_{2s\tilde{\sigma}\tilde{\Gamma}}$	$\mathbf{C}_{2s\tilde{\sigma}\tilde{\Gamma}}(\mathbf{C}_{s\tilde{\sigma}\tilde{\Gamma}}) + \mathbf{C}_{2s\tilde{\sigma}\tilde{\Gamma}}(\mathbf{C}'_{s\tilde{\sigma}\tilde{\Gamma}})$	$a_2^2$	$s_2^2$	0	1/4	1/4	-1/4	-1/2	1/4
27	$\mathbf{T}$	$\mathbf{T}(\mathbf{C}_3)$	$b_4$	$s_4$	0	0	0	0	0	0
28	$\mathbf{C}_{3s\tilde{\sigma}\tilde{\Gamma}}$	$\mathbf{C}_{3s\tilde{\sigma}\tilde{\Gamma}}(\mathbf{C}_{s\tilde{\sigma}\tilde{\Gamma}}) + \mathbf{C}_{3s\tilde{\sigma}\tilde{\Gamma}}(\mathbf{C}_{3s\tilde{\sigma}\tilde{\Gamma}})$	$a_1 a_3$	$s_1 s_3$	0	0	0	0	0	0
29	$\mathbf{D}_{2d\tilde{\sigma}\tilde{\Gamma}}$	$\mathbf{D}_{2d\tilde{\sigma}\tilde{\Gamma}}(\mathbf{C}_{s\tilde{\sigma}\tilde{\Gamma}})$	$a_4$	$s_4$	0	1/2	1/2	-1/2	-1	1/2
30	$\mathbf{T}_{\tilde{\sigma}}$	$\mathbf{T}_{\tilde{\sigma}}(\mathbf{C}_{3\tilde{\sigma}})$	$b_4$	$s_4$	0	0	0	0	0	0
31	$\mathbf{T}_{\tilde{\Gamma}}$	$\mathbf{T}_{\tilde{\Gamma}}(\mathbf{C}_{3\tilde{\Gamma}})$	$a_4$	$s_4$	0	0	0	0	0	0
32	$\mathbf{T}_d$	$\mathbf{T}_d(\mathbf{C}_{3v})$	$a_4$	$s_4$	0	0	0	0	0	0
33	$\mathbf{T}_{d\tilde{\sigma}\tilde{\Gamma}}$	$\mathbf{T}_{d\tilde{\sigma}\tilde{\Gamma}}(\mathbf{C}_{3s\tilde{\sigma}\tilde{\Gamma}})$	$a_4$	$s_4$	0	0	0	0	0	0

$$\text{PCI-CF}(\mathbf{C}_1) \stackrel{\text{I}}{\equiv} \frac{1}{48} b_1^4 - \frac{1}{48} a_1^4 - \frac{1}{8} b_1^2 b_2 + \frac{1}{4} a_1^2 a_2 - \frac{1}{8} a_1^2 c_2 + \frac{1}{6} b_1 b_3 - \frac{1}{6} a_1 a_3 + \frac{1}{16} b_2^2 - \frac{1}{4} a_2^2 + \frac{1}{4} a_2 c_2 - \frac{1}{16} c_2^2 + \frac{1}{8} c_4 - \frac{1}{8} b_4 \quad (2)$$

$$\text{PCI-CF}(\mathbf{C}_{\tilde{\sigma}}) \stackrel{\text{II}}{\equiv} \frac{3}{4} b_1^2 b_2 - \frac{1}{4} a_1^2 a_2 - \frac{1}{2} b_1 b_3 + \frac{1}{2} a_1 a_3 - \frac{1}{4} b_2^2 + \frac{1}{2} a_2^2 - \frac{1}{4} a_2 c_2 + \frac{1}{2} b_4 - \frac{1}{2} a_4 \quad (3)$$

$$\text{PCI-CF}(\mathbf{C}_{\tilde{\sigma}}) \stackrel{\text{I}}{\equiv} \frac{4}{8} a_2^2 - \frac{1}{4} a_2 c_2 + \frac{1}{8} c_2^2 - \frac{1}{4} c_4 + \frac{1}{4} a_4 \quad (4)$$

$$\text{PCI-CF}(\mathbf{C}_s) \stackrel{\text{V}}{\equiv} \frac{5}{4} a_1^2 c_2 - \frac{1}{4} a_1^2 a_2 + \frac{1}{4} a_2^2 - \frac{1}{4} a_2 c_2 \quad (5)$$

$$\text{PCI-CF}(\mathbf{C}_{\tilde{\Gamma}}) \stackrel{\text{I}}{\equiv} \frac{6}{24} a_1^4 - \frac{1}{4} a_1^2 a_2 + \frac{1}{3} a_1 a_3 + \frac{1}{8} a_2^2 - \frac{1}{4} a_4 \quad (6)$$

$$\text{PCI-CF}(\mathbf{C}_{2\tilde{\sigma}}) \stackrel{\text{II}}{\equiv} \frac{11}{4} b_2^2 - \frac{1}{4} a_2^2 - \frac{1}{4} b_4 - \frac{1}{4} c_4 + \frac{1}{2} a_4 \quad (7)$$

$$\text{PCI-CF}(\mathbf{C}_{s\tilde{\sigma}\tilde{\sigma}}) \stackrel{\text{IV}}{\equiv} \frac{14}{2} a_2 c_2 - \frac{1}{2} a_2^2 \quad (8)$$

$$\text{PCI-CF}(\mathbf{C}_{s\tilde{\sigma}\tilde{\Gamma}}) \stackrel{\text{IV}}{\equiv} \frac{16}{2} a_1^2 a_2 - a_1 a_3 - \frac{1}{2} a_2^2 + a_4 \quad (9)$$

$$\text{PCI-CF}(\mathbf{C}_{3\tilde{\sigma}}) \stackrel{\text{II}}{\equiv} \frac{17}{2} b_1 b_3 - \frac{1}{2} a_1 a_3 - \frac{1}{2} b_4 + \frac{1}{2} a_4 \quad (10)$$

$$\text{PCI-CF}(\mathbf{S}_{4\tilde{\sigma}\tilde{\sigma}}) \stackrel{\text{IV}}{\equiv} \frac{24}{2} c_4 - \frac{1}{2} a_4 \quad (11)$$

$$\text{PCI-CF}(\mathbf{C}_{2v\tilde{\sigma}\tilde{\Gamma}}) \stackrel{\text{IV}}{\equiv} \frac{26}{2} a_2^2 - \frac{1}{2} a_4 \quad (12)$$

$$\text{PCI-CF}(\mathbf{C}_{3v}\tilde{\sigma}\hat{l}) \stackrel{28}{\equiv} \frac{1}{\text{IV}} a_1 a_3 - a_4 \quad (13)$$

$$\text{PCI-CF}(\mathbf{T}_{\tilde{\sigma}}) \stackrel{30}{\equiv} \frac{1}{\text{II}} b_4 - \frac{1}{2} a_4 \quad (14)$$

$$\text{PCI-CF}(\mathbf{T}_{d\tilde{\sigma}\hat{l}}) \stackrel{33}{\equiv} \frac{1}{\text{IV}} a_4 \quad (15)$$

ただし，部分群  $\mathbf{C}_2, \mathbf{C}_3, \mathbf{S}_4, \mathbf{S}_4, \mathbf{D}_2, \mathbf{C}_{2\tilde{\sigma}}, \mathbf{C}_{2v}, \mathbf{C}_{2\hat{l}}, \mathbf{C}_{3v}, \mathbf{C}_{3\hat{l}}, \mathbf{D}_{2\tilde{\sigma}}, \mathbf{S}_{4\tilde{\sigma}}, \mathbf{S}_{4\hat{l}}, \mathbf{D}_{2d}, \mathbf{D}_{2\hat{l}}, \mathbf{T}, \mathbf{D}_{2d\tilde{\sigma}\hat{l}}, \mathbf{T}_{\hat{l}}, \mathbf{T}_d$  については，いずれも 0 となるので省略した．

[拡張 PCI-CF による数え上げ] 正四面体の 4 個の頂点に置換するプロリガンドとして，プロリガンド倉庫：

$$\mathbf{X} = \{A, B, X, Y; p, q, r, s; \bar{p}, \bar{q}, \bar{r}, \bar{s}\}, \quad (16)$$

から 4 個を選ぶ．ただし，A, B, X, Y は，アキラルなプロリガンドをあらわし， $p/\bar{p}, q/\bar{q}, r/\bar{r}, s/\bar{s}$  の対は，分離した状態でエナンチオメリックな対をあらわすとす．文献 [3] の Theorem 19.6 (or Theorem 9.7) を用いると，次のリガンド在庫式をうる：

$$a_d = A^d + B^d + X^d + Y^d \quad (17)$$

$$c_d = A^d + B^d + X^d + Y^d + 2p^{d/2}\bar{p}^{d/2} + 2q^{d/2}\bar{q}^{d/2} + 2r^{d/2}\bar{r}^{d/2} + 2s^{d/2}\bar{s}^{d/2} \quad (18)$$

$$b_d = A^d + B^d + X^d + Y^d + p^d + q^d + r^d + s^d + \bar{p}^d + \bar{q}^d + \bar{r}^d + \bar{s}^d. \quad (19)$$

これらを上記の PCI-CF に代入して，展開すると次の母関数をうる．

$$\begin{aligned} f_{\mathbf{C}_1} \frac{1}{\text{III}} & \left\{ \frac{1}{2}(\text{ABXp} + \text{ABX}\bar{p}) + \dots \right\} + \left\{ \frac{1}{2}(\text{ABpq} + \text{AB}\bar{p}\bar{q}) + \dots \right\} \\ & + \left\{ \frac{1}{2}(\text{Ap}\bar{p}q + \text{Ap}\bar{p}\bar{q}) + \dots \right\} + \left\{ \frac{1}{2}(\text{Apqr} + \text{Ap}\bar{q}\bar{r}) + \dots \right\} \\ & + \left\{ \frac{1}{2}(\text{pqrs} + \bar{p}\bar{q}\bar{r}\bar{s}) + \dots \right\} + \left\{ \frac{1}{2}(\text{p}\bar{p}\bar{q}r + \text{p}\bar{p}\bar{q}\bar{r}) + \dots \right\} \end{aligned} \quad (20)$$

$$\begin{aligned} f_{\mathbf{C}_{\tilde{\sigma}}} \frac{3}{\text{II}} & \left\{ \frac{1}{2}(\text{A}^2\text{Bp} + \text{A}^2\text{B}\bar{p}) + \dots \right\} + \left\{ \frac{1}{2}(\text{ABp}^2 + \text{AB}\bar{p}^2) + \dots \right\} \\ & + \left\{ \frac{1}{2}(\text{A}^2\text{pq} + \text{A}^2\text{p}\bar{q}) + \dots \right\} + \left\{ \frac{1}{2}(\text{Ap}^2\bar{p} + \text{Ap}\bar{p}^2) + \dots \right\} \\ & + \left\{ \frac{1}{2}(\text{Ap}^2q + \text{Ap}^2\bar{q}) + \dots \right\} + \left\{ \frac{1}{2}(\text{p}^2\bar{p}q + \text{p}\bar{p}^2\bar{q}) + \dots \right\} \\ & + \left\{ \frac{1}{2}(\text{p}^2q\bar{q} + \text{p}^2q\bar{q}) + \dots \right\} + \left\{ \frac{1}{2}(\text{p}^2qr + \text{p}^2q\bar{r}) + \dots \right\} \end{aligned} \quad (21)$$

$$f_{\mathbf{C}_{\tilde{\sigma}}} \frac{4}{\text{I}} \left\{ \text{p}\bar{p}q\bar{q} + \text{p}\bar{p}\bar{r}\bar{r} + \dots \right\} \quad (22)$$

$$f_{\mathbf{C}_s} \frac{5}{\text{V}} \left\{ \text{ABp}\bar{p} + \text{ABq}\bar{q} + \dots \right\} \quad (23)$$

$$f_{\mathbf{C}_{\hat{l}}} \frac{6}{\text{I}} \text{ABXY} \quad (24)$$

$$f_{\mathbf{C}_{2\tilde{\sigma}}} \frac{11}{\text{II}} \left\{ \frac{1}{2}(\text{A}^2\text{p}^2 + \text{A}^2\bar{p}^2) + \dots \right\} + \left\{ \frac{1}{2}(\text{p}^2\text{q}^2 + \text{p}^2\bar{q}^2) + \dots \right\} \quad (25)$$

(中略)

$$f_{\mathbf{T}_{\tilde{\sigma}}} \frac{30}{\text{II}} \left\{ \frac{1}{2}(\text{p}^4 + \bar{p}^4) + \dots \right\} \quad (26)$$

$$f_{\mathbf{T}_{d\tilde{\sigma}\hat{l}}} \frac{33}{\text{IV}} \left\{ \text{A}^4 + \text{B}^4 + \text{X}^4 + \text{Y}^4 \right\} \quad (27)$$

それぞれの部分群の母関数について， $A^a B^b X^x Y^y p^p \bar{p}^{\bar{p}} q^q \bar{q}^{\bar{q}} r^r \bar{r}^{\bar{r}} s^s \bar{s}^{\bar{s}}$  であらわされる項の係数が該当する RS-立体異性体の個数をしめす．表 1 の右部分に示したタイプ数え上げ行列 (TEM) をもちいると，タイプ I-V に類別した数え上げもおこなうことができる．

[数え上げの結果の図示] これらを図示すると，図 2 のようになる．ただし，同種の置換様式になるプロ分子は，まとめて代表的なものを示した．それぞれのプロ分子について，RS-立体異性体群の部分群，点群の部分群，およびタイプを付した．

	RS-astereogenic	RS-stereogenic		
		 <b>5</b> ( $[\theta]_{10}$ ) $C_{\hat{r}}, C_1, I$		
		 <b>6</b> ( $[\theta]_{28}$ ) $C_{\bar{\sigma}}, C_1, I$		
chiral	 <b>7</b> ( $[\theta]_{20}$ ) $T_{\bar{\sigma}}, T, II$	 <b>8</b> ( $[\theta]_3$ ) $C_{3\bar{\sigma}}, C_3, II$	 <b>9</b> ( $[\theta]_{15}$ ) $C_{3\bar{\sigma}}, C_3, II$	
	 <b>10</b> ( $[\theta]_{22}$ ) $C_{3\bar{\sigma}}, C_3, II$	 <b>11</b> ( $[\theta]_{21}$ ) $C_{3\bar{\sigma}}, C_3, II$	 <b>12</b> ( $[\theta]_5$ ) $C_{2\bar{\sigma}}, C_2, II$	
	 <b>13</b> ( $[\theta]_{25}$ ) $C_{2\bar{\sigma}}, C_2, II$	 <b>14</b> ( $[\theta]_7$ ) $C_{\bar{\sigma}}, C_1, II$	 <b>15</b> ( $[\theta]_9$ ) $C_{\bar{\sigma}}, C_1, II$	
	 <b>16</b> ( $[\theta]_{12}$ ) $C_{\bar{\sigma}}, C_1, II$	 <b>17</b> ( $[\theta]_{16}$ ) $C_{\bar{\sigma}}, C_1, II$	 <b>18</b> ( $[\theta]_{17}$ ) $C_{\bar{\sigma}}, C_1, II$	
	 <b>19</b> ( $[\theta]_{24}$ ) $C_{\bar{\sigma}}, C_1, II$	 <b>20</b> ( $[\theta]_{26}$ ) $C_{\bar{\sigma}}, C_1, II$	 <b>21</b> ( $[\theta]_{27}$ ) $C_{\bar{\sigma}}, C_1, II$	
			 <b>22</b> ( $[\theta]_{11}$ ) $C_1, C_1, III$	
			 <b>23</b> ( $[\theta]_{14}$ ) $C_1, C_1, III$	
			 <b>24</b> ( $[\theta]_{18}$ ) $C_1, C_1, III$	
			 <b>25</b> ( $[\theta]_{19}$ ) $C_1, C_1, III$	
			 <b>26</b> ( $[\theta]_{29}$ ) $C_1, C_1, III$	
			 <b>27</b> ( $[\theta]_{30}$ ) $C_1, C_1, III$	
	achiral	 <b>28</b> ( $[\theta]_1$ ) $T_{d\bar{\sigma}\hat{r}}, T_d, IV$	 <b>29</b> ( $[\theta]_2$ ) $C_{3v\bar{\sigma}\hat{r}}, C_{3v}, IV$	 <b>30</b> ( $[\theta]_4$ ) $C_{2v\bar{\sigma}\hat{r}}, C_{2v}, IV$
		 <b>31</b> ( $[\theta]_{23}$ ) $S_{4\bar{\sigma}\hat{r}}, S_4, IV$	 <b>32</b> ( $[\theta]_6$ ) $C_{s\bar{\sigma}\hat{r}}, C_s, IV$	 <b>33</b> ( $[\theta]_8$ ) $C_{s\bar{\sigma}\hat{r}}, C_s, IV$
				 <b>34</b> ( $[\theta]_{13}$ ) $C_s, C_s, V$

図 2: 正四面体プロ分子の四つ組 RS-立体異性体 (タイプ I-V) .

[おわりに — 立体化学の標準的な体系の誤り] 立体化学の標準的な体系では、「Cahn-Ingold-Prelog (CIP) 命名法の *R/S* 立体記述子がキラリティーを記述していること」、「*pro-R/pro-S* 記述子がプロキラリティーを記述していること」を前提にしている。しかし、これらの前提が誤りであることを、ステレオイソグラムを考察することにより明らかにしている [1, 2]。今回の数え上げ結果により、さらに詳しい議論が可能になったことを報告する。

## 参考文献

- [1] S. Fujita, *J. Org. Chem.*, **69**, 3158–3165 (2004).
- [2] S. Fujita, *Tetrahedron*, **60**, 11629–11638 (2004).
- [3] S. Fujita, “Symmetry and Combinatorial Enumeration in Chemistry,” Springer-Verlag, Berlin-Heidelberg (1991).
- [4] S. Fujita, “Combinatorial Enumeration of Graphs, Three-Dimensional Structures, and Chemical Compounds,” University of Kragujevac, Faculty of Science, Kragujevac (2013).
- [5] S. Fujita, *J. Math. Chem.*, **52**, 508–542 (2014), <http://dx.doi.org/doi:10.1007/s10910-013-0276-y>.
- [6] S. Fujita, *J. Math. Chem.*, **52**, 543–574 (2014), <http://dx.doi.org/doi:10.1007/s10910-013-0277-x>.