

## 4. 有機化合物の異性体と数学

静岡県立沼津東高等学校

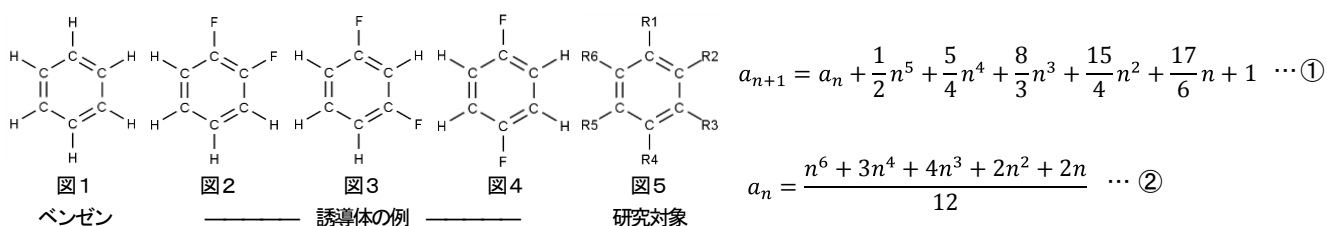
2年 伊東利将 岡田悠希 西垣啓佑 早川一成

### 1. 研究の動機

同じ種類の原子が集まっても、つながり方が違えば別の分子である。分子式が同じで構造式が異なる物質を異性体と呼ぶ。異性体の数え上げは高校の学習範囲であり、大学入試でも出題される。数式に数値を代入して異性体の個数を求める方法があれば知りたいと、私たちは考えた。そのような解法は問題集[1]の模範解答になかった。

### 2. ベンゼン誘導体の式

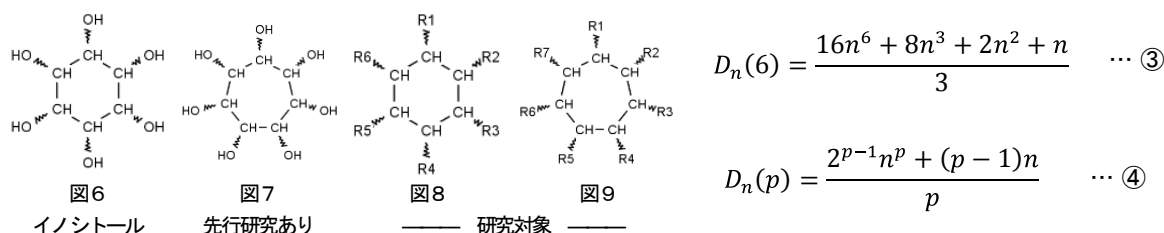
どんな分子でも異性体の個数が求められる万能の数式は存在しない。まず私たちはベンゼン  $C_6H_6$  のように単純な分子を調べることにした。ベンゼン (図1) の水素原子 H をフッ素原子 F に変えた誘導体 (図2~4 など) を書き出し数え上げると 13 種類あった。水素原子 H を  $n$  種類の置換基に変えた誘導体 (図5) の個数を  $a_n$  とすると漸化式①が導かれた。これを初項  $a_1=1$  の条件で解くと一般項②が得られた。 $n=2$  を代入すると  $a_2=13$  となり数え上げの結果と一致した。



数列の漸化式を使った方法で、メタン  $CH_4$ ・エチレン  $C_2H_4$ ・アセチレン  $C_2H_2$ ・シクロプロパン  $C_3H_6$ ・シクロヘキサン  $C_6H_{12}$ ・キュバン  $C_8H_8$  といった分子でも、誘導体の個数を数式にできた。これらは大学で学習する群論のバーンサイドの定理を使っても求められるが、私たちは高校で学習する数列の漸化式を用いても求められることを示した。

### 3. イノシトール誘導体の式

先行研究を探したところ、イノシトール  $C_6H_{12}O_6$  (図6) とその炭素数を変えたとき (図7など) の立体異性体の数を調べた論文[2]を見つけた。私たちはこの論文の内容を一般化し、イノシトールのヒドロキシ基を  $n$  種類の置換基に変えた誘導体 (図8) の個数  $D_n(6)$  と、炭素数が  $p$  に変わった場合の誘導体 (図9など) の個数  $D_n(p)$  を求めようとした。



今までと違って立体異性体を考えなければならない。漸化式やバーンサイドの定理はそのままでは使えない。私たちは、9通りの場合分けを実行し、式③のように  $D_n(6)$  を  $n$  の式で表した。同様の方法で  $D_n(3)$ ,  $D_n(4)$ ,  $D_n(5)$  や  $D_n(7)$ ,  $D_n(8)$  などを求めた。

さらに  $p$  が素数のとき成り立つ式④を導いた。素数  $p$  を一般の自然数  $m$  に拡張したときの式  $D_n(m)$  は、まだ求められていない。変数が複数あるため簡単ではない。

#### 4. 考察

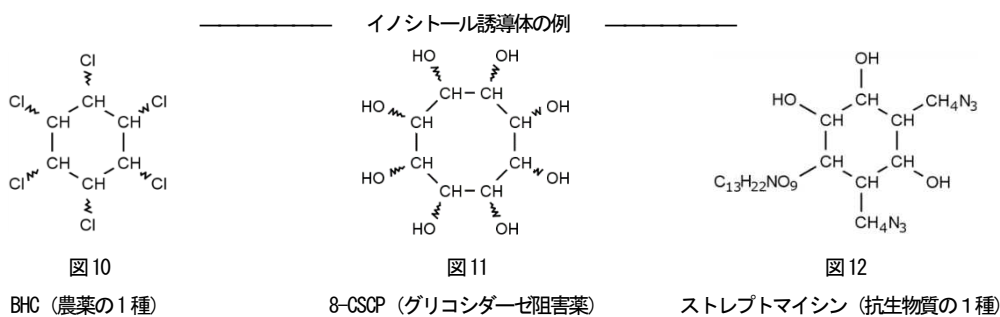
私たちの研究の意義は、次の3点にあると考えられる。

(1) 先行研究の学術論文にない新しい数式を導き出そうとした

先行研究[2]は置換基がヒドロキシ基 (-OH) であるイノシトール誘導体の個数  $D_1(m)$  を求めている。私たちは、ヒドロキシ基1種類に限らず多種多様な  $n$  種類の置換基を持つイノシトール誘導体の個数を求める式  $D_n(m)$  を目指して研究している。

(2) イノシトール誘導体の豊富さを数式で表現した

イノシトール (図6) はビタミンであり、BHC (図10) は農薬、8-CPCS はグリコシダーゼ阻害薬 (図11)、ストレプトマイシン (図12) は抗生物質である。これらと同様に、多種多様なイノシトール誘導体の中には、いまだ知られていない有用な化合物が存在する可能性がある。



(3) 美しい式を導出した

イノシトール誘導体の炭素数  $p$  が素数のとき、 $D_n(p)$  は項の数が2つであり単純な式④になる。

#### 5. 今後の展望

置換基数が  $n$  で、炭素数が  $p$  (素数) の場合、イノシトール誘導体の個数  $D_n(p)$  は、 $n$  と  $p$  の式で表すことができた。置換基数が  $n$  で、炭素数が  $m$  (自然数) の場合、イノシトール誘導体の個数  $D_n(m)$  は、まだ  $n$  と  $m$  の式で表せていない。今後の研究課題としたい。現段階では、循環する最小部分に着目し、回転・反転の可能性を考察していく必要があるだろうと予想している。

#### 6. 参考文献

[1] リードα化学 (数研出版) p.138-141, [2] "How to Calculate the Number of Stereoisomers of Inositol Homologs.", *Bull. Chem. Soc. Jpn.*, p.1260-1264, Arata Yajima (2014)

#### 7. 謝辞

この研究は沼津東高校理数科課題研究の中で行われました。沼津東高校の石川素久校長、高橋浩章理数科課長、私たちの班を担当した吉田亮祐教諭、およびお世話になった先生方に感謝します。