

有機化合物の異性体と数学

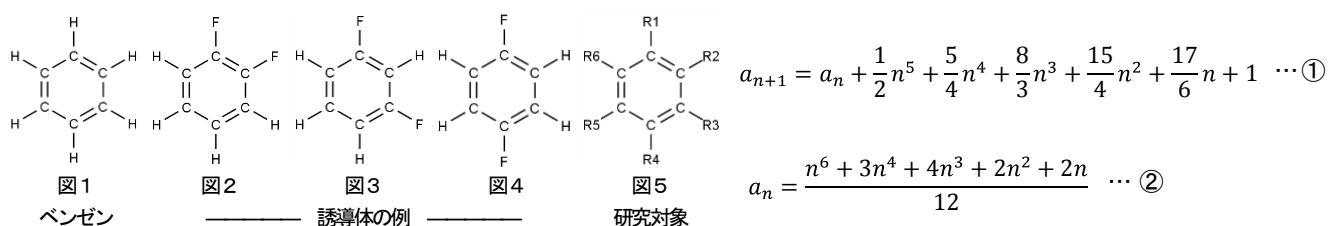
静岡県立沼津東高等学校
2年 西垣啓佑

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、この研究では考えた。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 (昨年度の成果)

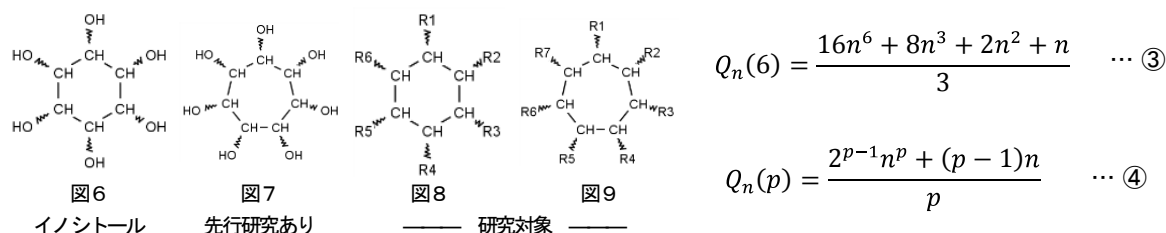
どんな分子でも異性体の個数が求められる万能の数式は存在しない。この研究では、まずベンゼン C_6H_6 のように単純な分子を調べることにした。ベンゼン (図 1) の水素原子 H をフッ素原子 F に変えた誘導体 (図 2 ~ 4 など) を書き出し数え上げると 13 種類あった。水素原子 H を n 種類の置換基に変えた誘導体 (図 5) の個数を a_n とすると漸化式①が導かれた。これを初項 $a_1=1$ の条件で解くと一般項②が得られた。 $n=2$ を代入すると $a_2=13$ となり数え上げの結果と一致した。



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、この研究で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 (昨年度の成果)

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 $Q_n(6)$ と、炭素数が素数 p に変わった場合の誘導体 (図 9 など) の個数 $Q_n(p)$ を求めた。



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 $Q_n(6)$ を n の式で表した。同様の方法で $Q_n(3)$, $Q_n(4)$, $Q_n(5)$ や $Q_n(7)$, $Q_n(8)$ 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 $Q_n(m)$ は、昨年度の段階で求められていなかった。変数が複数あるため簡単ではない。ここまでの内容について原稿をまとめて、山崎自然科学教育振興会の山崎賞で受賞を果たした。

4 イノシトール誘導体の式 (今年度の成果)

循環する最小単位に着目して、次の式を導出した。

炭素数が m で、置換基数が n のとき、イノシトール型誘導体の個数を $Q_n(m)$ と置くと、次の等式が成り立つ。

m が奇数のとき

$$Q_n(m) = \frac{1}{m} \sum_{d|m} \varphi\left(\frac{m}{d}\right) 2^{d-1} n^d$$

m が偶数のとき

$$Q_n(m) = \frac{1}{m} \sum_{d|m} \varphi\left(\frac{m}{d}\right) 2^{d-1} n^d + 2^{\frac{m}{2}-2} n^{\frac{m}{2}}$$

ただし、 φ はオイラーのトーシェント関数である。

5 考察

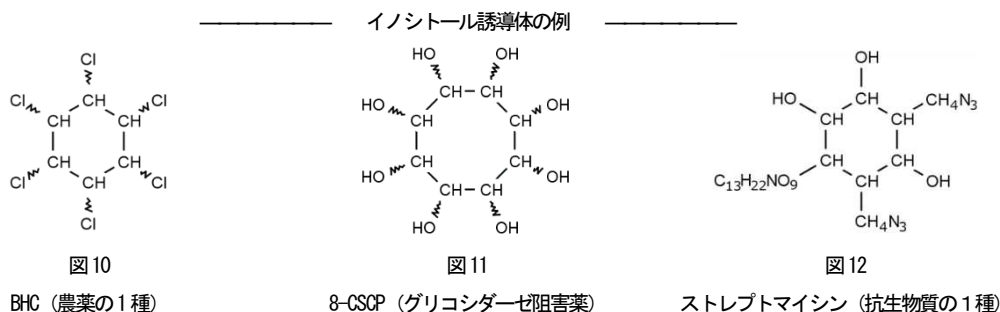
この研究の意義は、次の3点にあると考えられる。

(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 $Q_1(m)$ を求めている。この研究では、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 $Q_n(m)$ を導き出した。

(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-CSCP 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。



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たものを発展させたものです。指導して下さった吉田亮祐教諭に感謝します。