

アルコールの異性体の数を式で表せるか

静岡県立沼津東高等学校
2年 高橋祐希 山崎稜

1 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別の物質を異性体と呼ぶ。分子からなる物質が多数知られる中で、ヒドロキシ基を持つ有機化合物をアルコールという。通常、すべての構造式を書き上げなければ異性体の数を求めることはできない。また、原子数の増加に伴い異性体の数も増加するため、数え上げは苦勞を伴う。

先行研究を探したところ、『組合せ論入門』（参考文献（1））でヒドロキシ基を1個もつ炭素数 n のアルコールの個数を係数比較（参考文献（2））で求める数式（数式 P ）があった。 R_n は炭素数 n のときのアルコールの異性体の個数、 x は母関数の媒介変数、 S は3要素の6個の可能な置換の群を表す。

$$\text{数式 } P: \sum_{n=0}^{\infty} R_n x^n = xS + 1$$

ただし、この方法では第一級・第二級・第三級アルコールがそれぞれ何種類あるか分からない。私たちは数式 P を一般化しようと考えたため、まず正しいか数え上げで検証した。

2 結果

（1）アルコール全体の個数の数え上げ

炭素数1～8を検証した。炭素数4の場合を次に示す。

数式で検証	数え上げで検証
$1 + R_1x + R_2x^2 + R_3x^3 + R_4x^4 =$ $1 + x + R_1x^2 + \left(R_2 + \frac{1}{2}R_1 + \frac{1}{2}R_1^2\right)x^3$ $+ \left(R_3 + \frac{3}{2}R_1R_2 + \frac{1}{3}R_1 + \frac{1}{6}R_1^3\right)x^4 + \dots$ 係数比較より $R_1 = 1, R_2 = 1, R_3 = 2, R_4 = 4$	

私たちの数え上げと先行研究の母関数を使った式から導出される値とを比較したところ、両者が一致した。

（2）第一級・第二級・第三級アルコールの個数

次に、アルコール類を第一級・第二級・第三級に分類して個数を表にまとめた（表）。すると、炭素数 $n-1$ のアルコール類の総数と炭素数 n の第一級アルコールの数の間には規則（式①）があると気づいた。これは「-OH」を「-CH₂OH」で読み換える操作によって説明できる。

また、試行錯誤を続けるうちに、第二級アルコールの数についても規則（式②）を見出した。第三級アルコールの数は、アルコール類の総数から第一級アルコールの数と第二級アルコールの数を引けば求められる（式③）。複雑ではあるが、第二級アルコールと同じような考え方で、第三級アルコールの数も、 R_n を用いて表すことができた。これにより数式 P を利用せずにアルコールの個数を

求めることができる。

化学式	アルコール (R_n)	第一級 (T_n)	第二級 (U_n)	第三級 (V_n)
CH ₃ OH	1	0	0	0
C ₂ H ₅ OH	1	1	0	0
C ₃ H ₇ OH	2	1	1	0
C ₄ H ₉ OH	4	2	1	1
C ₅ H ₁₁ OH	8	4	3	1
C ₆ H ₁₃ OH	17	8	6	3
C ₇ H ₁₅ OH	39	17	15	7
C ₈ H ₁₇ OH	89	39	33	17
C ₉ H ₁₉ OH	211	89	82	40
C ₁₀ H ₂₁ OH	507	211	194	102

数え上げによりまとめた表の数値と、数式による数値が一致し、私たちの導いた数式が确实だと検証できた。

3 考察と展望

私たちのアイディアの要点は「読み換える操作」であり、同様の手法はアルキンやエーテルなど他の有機化合物にも適用できた。私たちの研究は、アルコール類を含めた有機化合物の多様さを数式で表現するものである。高校数学の内容ではない母関数や対称群などを使わない点も、先行研究と異なる。

R_n はアルコール類の総数 T_n は第1級アルコールの数
 U_n は第2級アルコールの数 V_n は第3級アルコールの数

$$T_n = R_{n-1} \quad \cdots \textcircled{1}$$

$$U_n = \begin{cases} \sum_{k=1}^{\frac{n-2}{2}} R_k R_{n-k-1} & (n \text{ は偶数}) \\ \frac{R_{\frac{n-1}{2}} \left(R_{\frac{n-1}{2}} + 1 \right)}{2} + \sum_{k=1}^{\frac{n-3}{2}} R_k R_{n-k-1} & (n \text{ は奇数}) \end{cases} \quad \cdots \textcircled{2}$$

$$V_n = R_n - T_n - U_n \quad \cdots \textcircled{3}$$

図. 私たちの成果

私たちのもともとの目標はヒドロキシ基が複数のアルコール類で、異性体の個数を表す数式を導くことだった。今後はこの研究課題に挑みたい。

4 参考文献

- (1) G. ポリア・R. E. タージャン・D. R. ウッズ (1983) 『組合せ論入門』 近代科学社 P. 1-87
- (2) 数研出版株式会社編集部 (2011) 『高等学校数学科用 数学Ⅱ』 数研出版 P. 20-23