

## スパイラルアルゴリズムからフラレン 3 次元座標を得る方法

○成田 進<sup>1</sup>、辻井秀和<sup>1</sup>、野村泰志<sup>1</sup>

<sup>1</sup>信州大学繊維学部応用化学課程(〒386-8567 上田市常田 3-15-1)

### <序>

スパイラルアルゴリズムを用いたフラレン異性体の数え上げの研究と求められた異性体の簡単な電子構造の研究は P. W. Fowler 達によってなされ、“AN ATLAS OF FULLERENES”<sup>1)</sup> という著書の形でまとめられている。そこには Fortran で書かれたスパイラルアルゴリズムプログラムとそれを用いて得られた出力結果 (ヒュッケル近似で求めた HOMO-LUMO エネルギーギャップ、分子の対称性、NMR パターン、異性体の Stone-Wales 変換関係など) や IPR フラレン異性体の図が掲載されている。これらの結果を用いるとフラレン異性体の系統的研究が可能になる。Fowler 達はヒュッケル近似の HOMO-LUMO エネルギーギャップやフラレン異性体の 3 次元構造図を発表しているので、何らかの方法を用いて、スパイラルアルゴリズムから得られた結果から隣接行列 (以下トポロジー行列と略す)、およびそれらに対応する 3 次元の座標を得る方法を持っていると思われる。しかしそれらの方法は必ずしも明らかにされていない。

我々は本研究で、スパイラルアルゴリズムから得られた結果からトポロジー行列を作成し、さらにそれらをもとにして 3 次元座標を得る方法を考案したので、その方法を発表したい。これらの最後のステップである 3 次元座標を得るにあたって WAVEFUNCTION 社の MacSpartan04 というソフトウェア<sup>2)</sup>を用いた。なお文献 1)でも述べられているが、全てのフラレン異性体がスパイラルアルゴリズムで表現できるとは限らないことに注意する必要がある。

### <方法>

スパイラルアルゴリズムを用いると最初の 5 角形を 1 番目と命名した全部で 12 個の 5 角形の出現順序が出力される。5 角形と 6 角形をたどって行く方法を螺旋形に取るので「スパイラル」という名前が付けられている (図 1 参照)。NON-IPR C<sub>50</sub> フラレンのスパイラルアルゴリズムを用いた出力結果の 1 例を下に示す。

6 C<sub>2</sub> 1 2 3 4 5 13 15 23 24 25 26 27 25 x 2

この例は NON-IPR C<sub>50</sub> フラレンの 6 番目の出力で対称性は C<sub>2</sub> に属し、NMR のパターンは 25 x 2であることを示している。真ん中の 1 から 27 までの一連の 12 個の数字は面を螺旋形にたどったときの 5 角形の表れる順番を示している。フラレンでは 5 角形の数は 12 個と決まっており、これら以外の数字の面は全て 6 角形に対応することに注意する。

フラレンの 3 次元座標を得るために以下の 2 つの step を実行する Fortran プログラムを作成し、これらから出力されたファイルをもとにして、<step3>で最終的な分子の 3 次元座標を求めた。

<step1> 5 角形の出現順序を表す一連の 12 個の数字からトポロジー行列を作成する (Fortran プログラム名 spiral2topol4.f)。

トポロジー行列を作成するときに max-mini-2valent-atom-connection-rule を用いた。フラレン骨

格を形成する炭素の原子価が3であるのは明らかである。我々はスパイアルゴリズムを用いると、「次の多角形面」が2価の炭素原子で最小番号を持つ原子と最大番号を持つ原子が必ず含まれていることに着目した。この2つの原子の結ぶ最短の「distance」を求め、「次の多角形の頂点数」からdistance+1を差し引いた頂点数を新たに加え、「次の多角形」のトポロジー行列を決定した。これらの作業を繰り返すことで最終的なトポロジー行列を求めることができた。スパイアルゴリズムを用いると「層の数（層構造数）」も自動的に求めることができた。

<step2> このトポロジー行列を利用して「sdf」形式のファイルを作成する（Fortranプログラム名 mkschlegel.f）。

<step1>で決定したトポロジー行列と「層構造数」から、「かなりいい加減に」暫定的な3次元座標を決定し、それらを用いて「sdf」形式のファイルを出力した。このとき、次の<step3>で立体的な構造を得るためには、いくつかの結合を切っておくことが必要であった。

<step3> この「sdf」形式のファイルをMacSpartan04ソフトウェアを使用して開き、分子力学法を用いてエネルギーを最適化し初期座標を決定し、その3次元座標を「xyz」形式のファイルとして出力した。

このようにして求めたシュレーゲル図を図1に示す。この図で黒の数字は面の頂点番号を、緑の数字は面の番号をしめす。<step1>で得られた「層構造数」は5であった。また<step3>で得られた最終的な3次元の分子図を図2に示す。

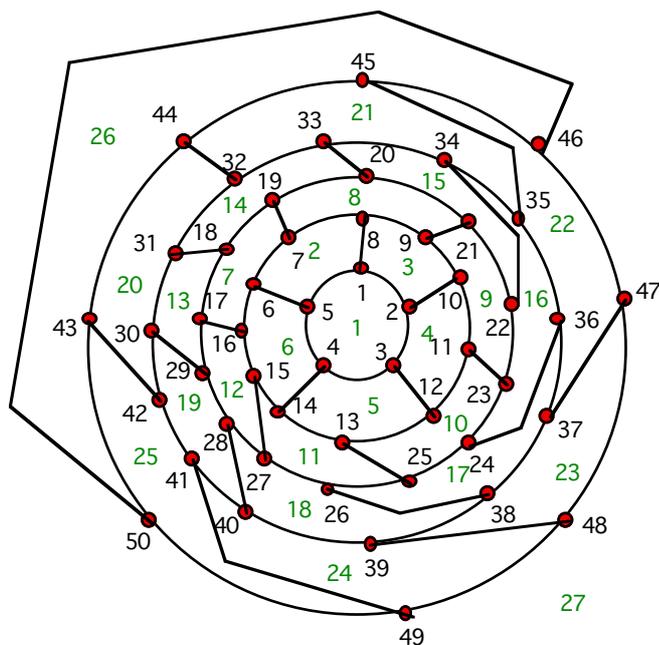


図1.  $C_{50-6-C_2}$  のシュレーゲルダイヤグラム

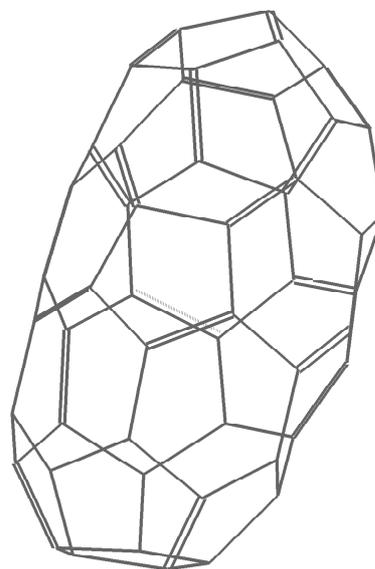


図2. 図1から決定された  $C_{50-6-C_2}$  の3次元分子図

#### 参考文献

- 1) P. W. Fowler and D. E. Manolopoulos, "AN ATLAS OF FULLERENES", Clarendon Press, Oxford, 1995
- 2) WAVEFUNCTION 社, MacSpartan04 ソフトウェア v.1.1