

多面体絡み目の構成と特徴づけ

菊屋 美月 (お茶の水女子大学)

イントロ

(研究の目的)

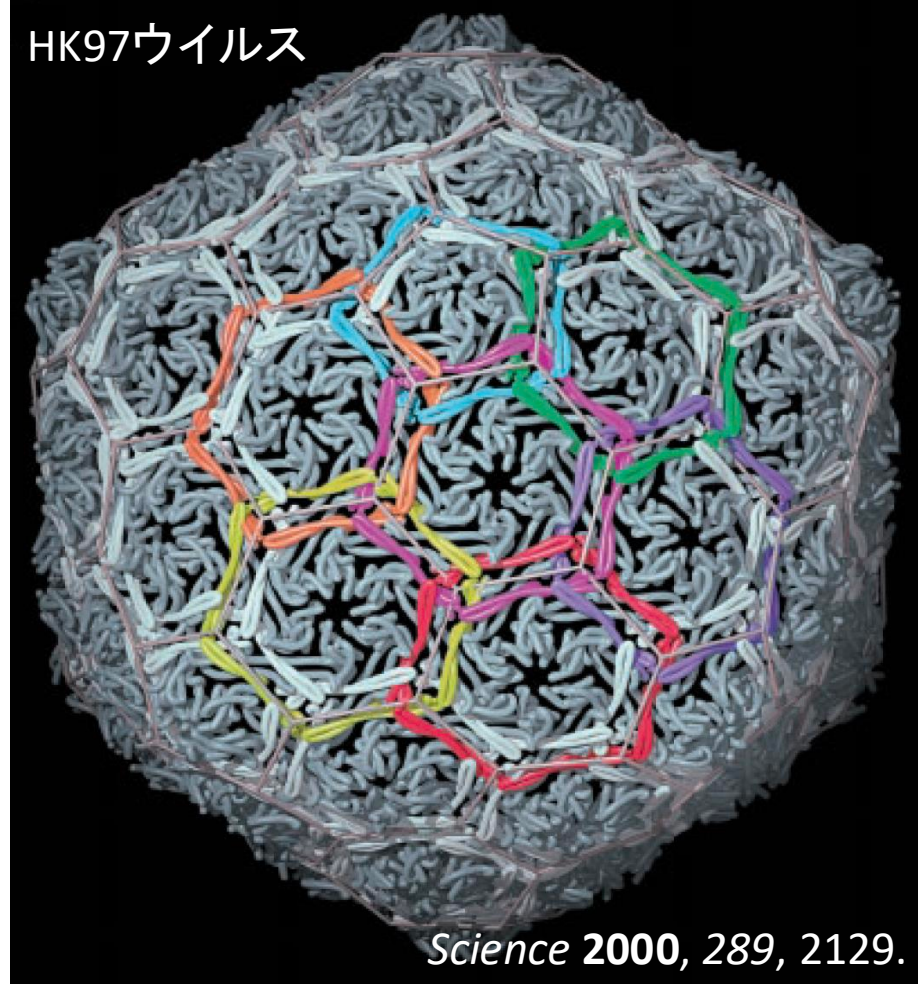
八面体の3重coveringとして捉えることのできる**超分子**が発見された。このトポロジ-を理解するために、新たに**3重covering**を導入し、その多面体絡み目の構成と特徴づけを行う。

(研究の重要性)

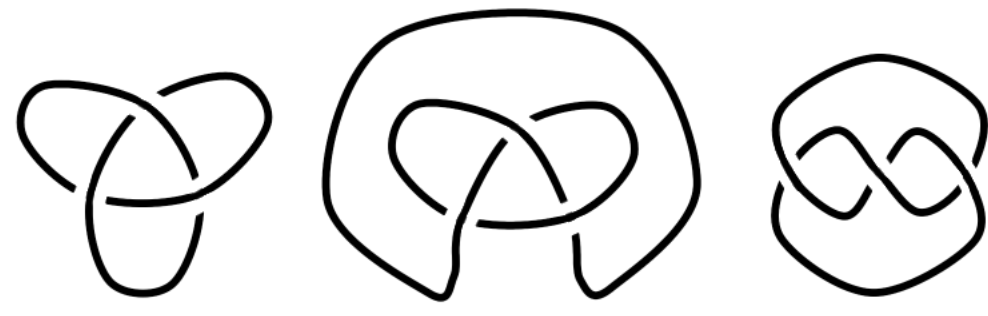
自然界には**交点数420**の絡まった構造をもつ**ウイルス**が存在する。それに近いカプセル構造を合成したい。(ドラッグデリバリーシステム)

(結び目理論とは)

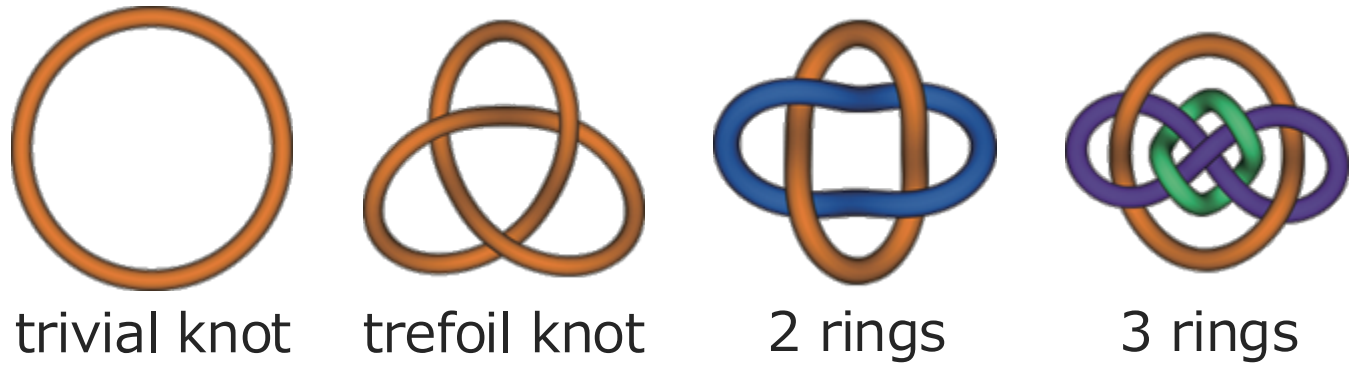
トポロジーの一分野で、閉じたひもの結び目を対象に、そのひもの形がどのように異なるか、あるいは同じであるかを数学的に解析する学問である。



Science 2000, 289, 2129.



これらは同じ結び目である。



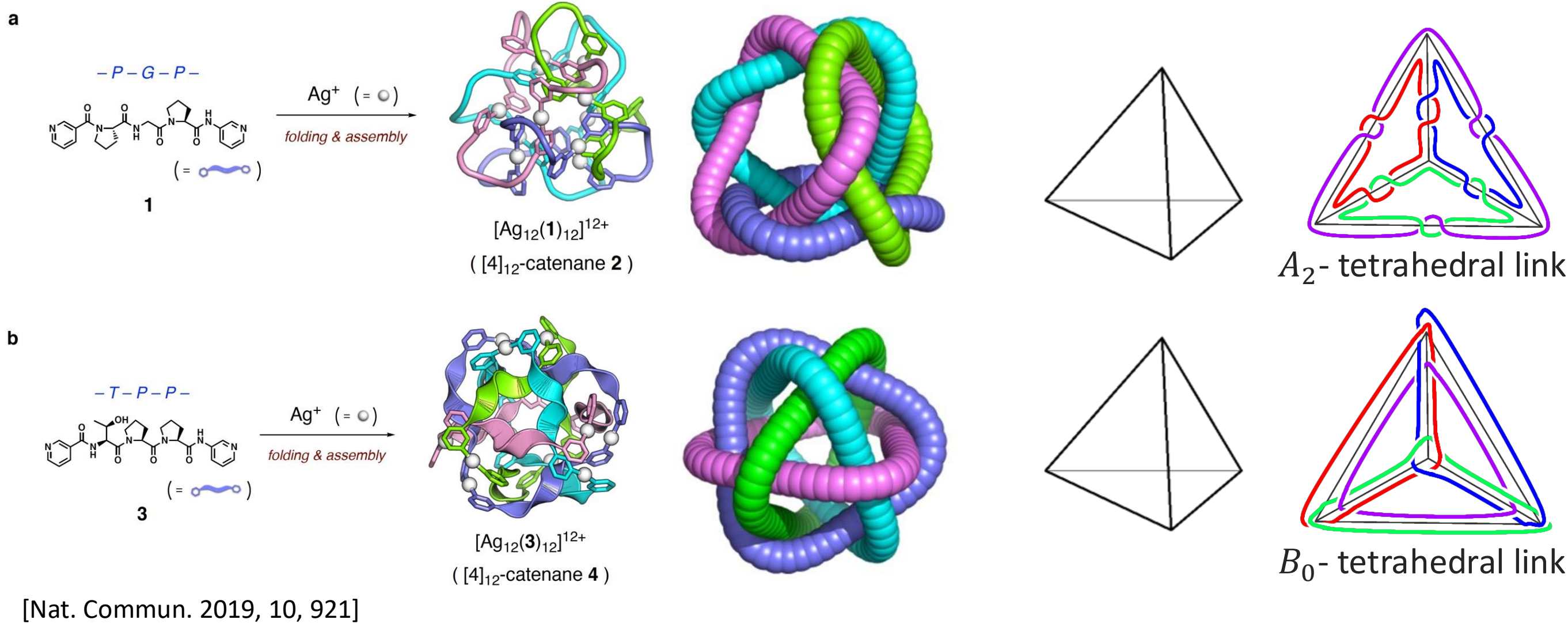
trivial knot trefoil knot 2 rings 3 rings

(結び目と絡み目)

3次元空間における絡み合った輪を**結び目(knot)**といい、複数の輪が絡み合った構造を**絡み目(link)**という。

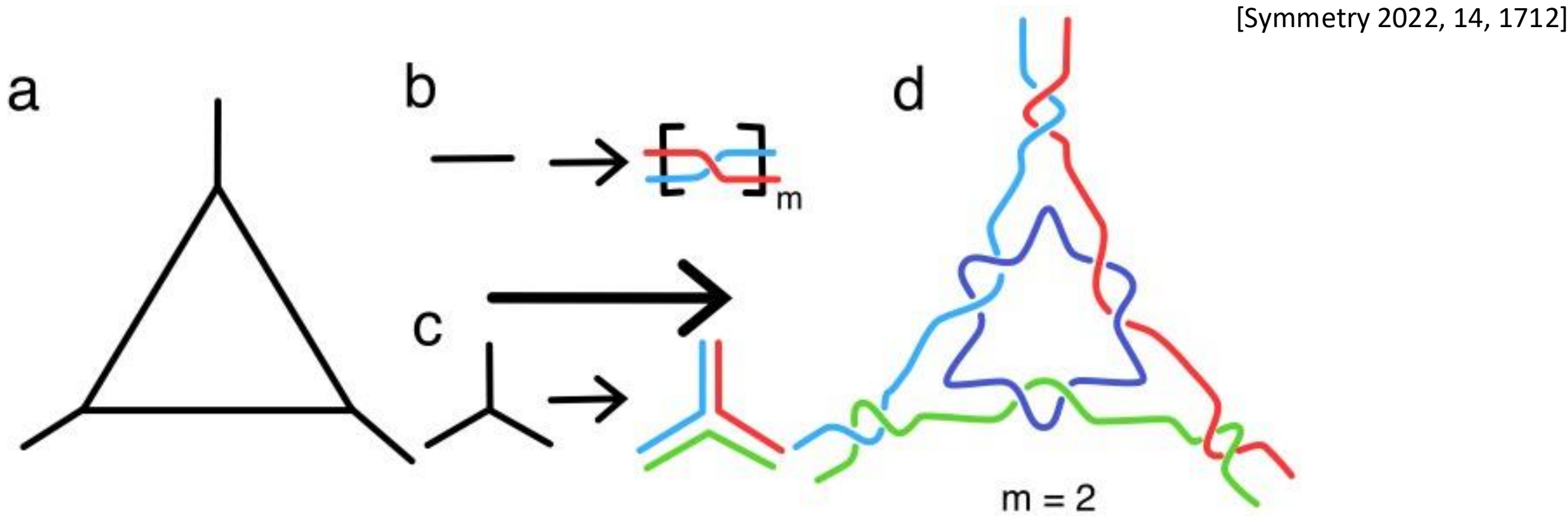
(研究の背景)

超分子の中には、絡み合った構造を示すものがあることが知られている。本研究ではそのトポロジーの特徴を理解し、分類する。



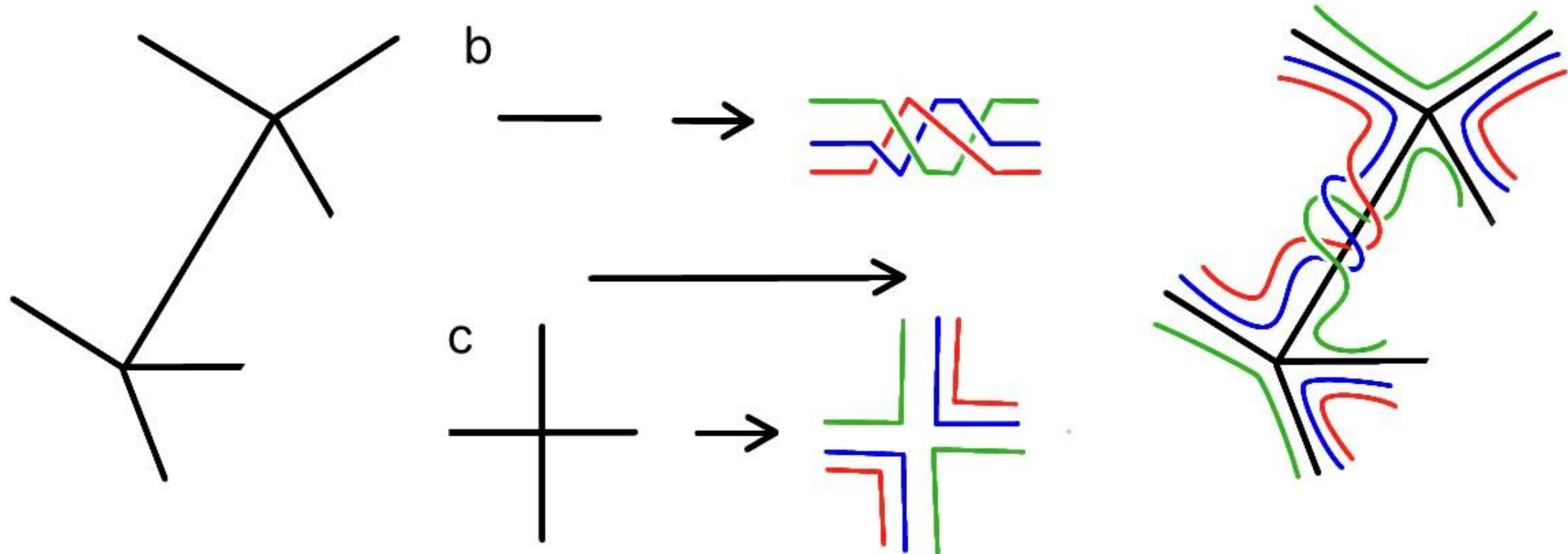
準備

定義 (2-fold A_m polyhedral linkの構成方法)



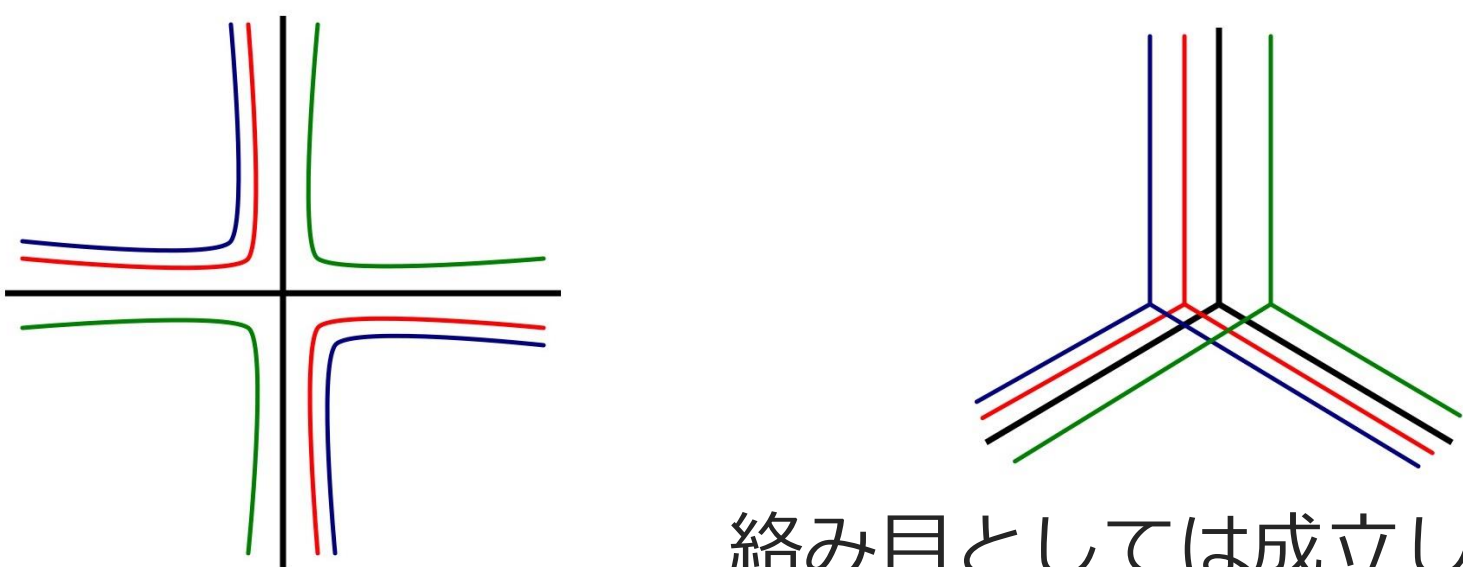
[Symmetry 2022, 14, 1712]

定義 (3-fold A_2 polyhedral linkの構成方法)



命題 (3-fold A_m polyhedral linkの存在条件)

Pの3-fold A_m polyhedral linkが存在するならば、頂点の次数は偶数である。



絡み目としては成立しない例

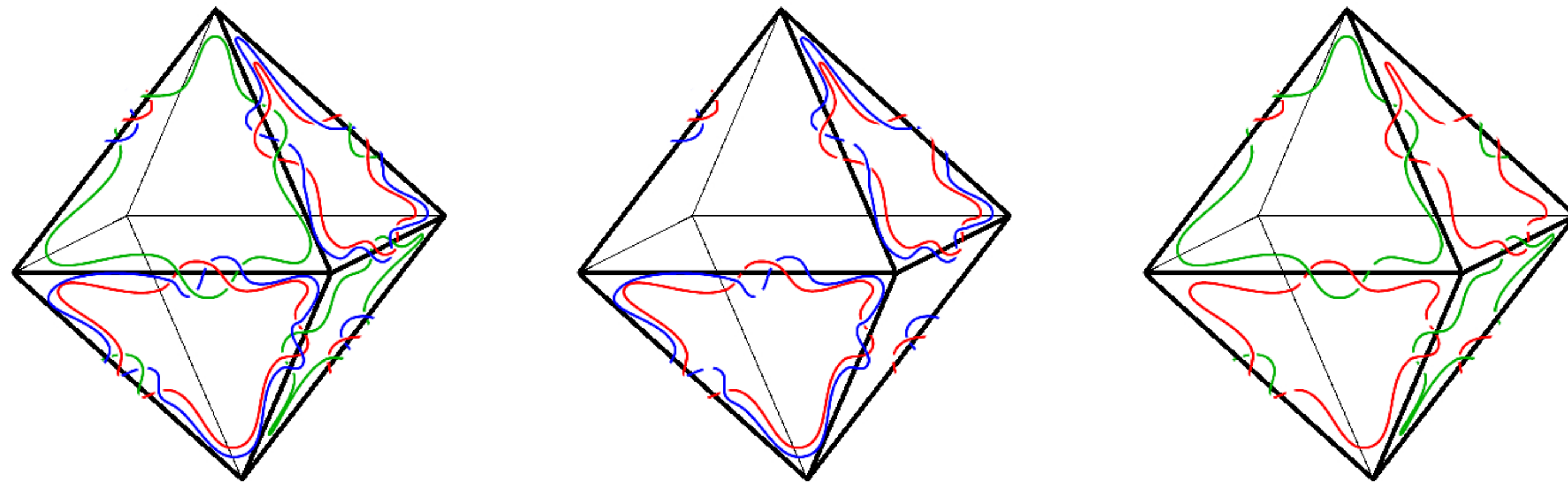
参考文献

- Tomohisa Sawada, Ami Saito, Kenki Tamiya, Koya Shimokawa, Yutaro Hisada, and Makoto Fujita, Metal-peptide rings form highly entangled topologically inequivalent frameworks with the same ring- and crossing-numbers, Nat. Commun. 2019 10, 921.
- Guang Hu,Xin-Dong Zhai, Dan Lu, Wen-Yuan Qiu, Hu G.; Zhai X.-D.; Lu D.; Qiu, W.-Y. The architecture of Platonic polyhedral links, J. Math. Chem. 2009, 46, 592-603.
- Daishi Fujita, Yoshihiro Ueda, Sota Sato, Nobuhiro mizuno, Takashi Kumasaka makoto Fujita, Self-assembly of tetravalent Goldberg polyhedra from 144 small components, Nature 2016 540, 563-566.

結果

定理 (正多面体の3重covering)

正多面体において、3-fold A_2 polyhedral linkが存在するのは**正八面体に限る**。また、このとき交点数は**72**、成分数は**12**である。
八面体は八面体的対称性 O_h をもつが、3-fold A_2 octahedral linkは四面体的対称性Tをもつ。



与えられた構造を理解することができた。今後合成され得る超分子の構造を検討する。

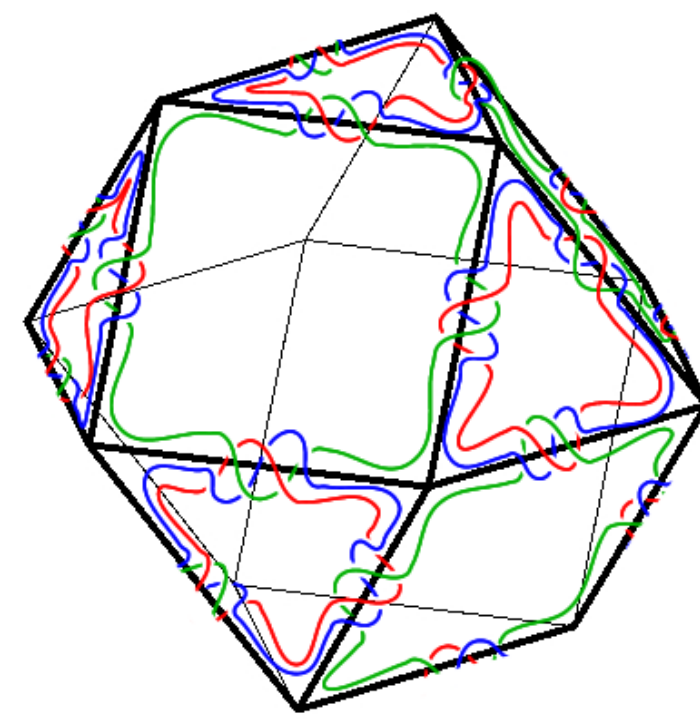
定理 (半正多面体の3重covering)

半正多面体において、3-fold A_2 polyhedral linkが存在するのは**立方八面体**(cuboctahedron)、**斜方立方八面体**(rhombicuboctahedron)、**二十・十二面体**(icosidodecahedron)、**斜方二十・十二面体**(rhombicosidodecahedron)に限る。

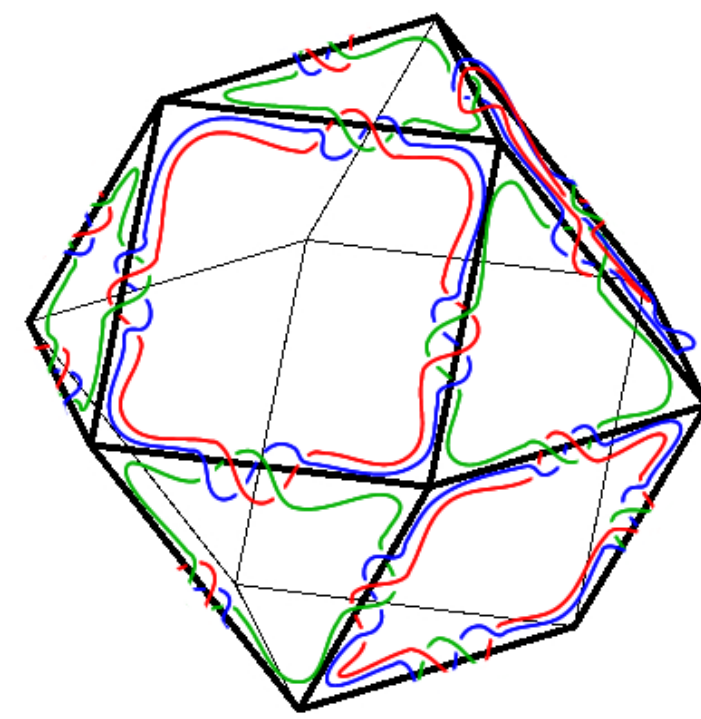
多面体	頂点形状	v	e	f	交点数	成分数
八面体	[3,3,3,3]	6	12	$\triangle \times 8$	72	12
立方八面体	[3,4,3,4]	12	24	$\triangle \times 8 + \square \times 6$	144	20 / 22
斜方立方八面体	[3,4,4,4]	24	48	$\triangle \times 8 + \square \times 18$	288	38 / 40
二十・十二面体	[3,5,3,5]	30	60	$\triangle \times 20 + \textcircled{5} \times 12$	360	44 / 52
斜方二十・十二面体	[3,4,5,4]	60	120	$\triangle \times 20 + \square \times 30 + \textcircled{5} \times 12$	720	92 / 94

定理 (3-fold A_2 cuboctahedral link)

立方八面体は3重coveringが存在する。また、3-fold A_2 cuboctahedral linkは**2種類**存在すし、交点数はどちらも**144**、成分数は**20**と**22**である。



交点数：144
成分数：22



交点数：144
成分数：20

定義 (次数4のゴールドバーク多面体 [D.Fujita.et al, Nature 2016])

正三角形あるいは四辺形が、正八面体と同じ対称性を見せながら各頂点まわりに4枚ずつ集まる"多面体"を**tetra-Goldberg Polyhedron**という。

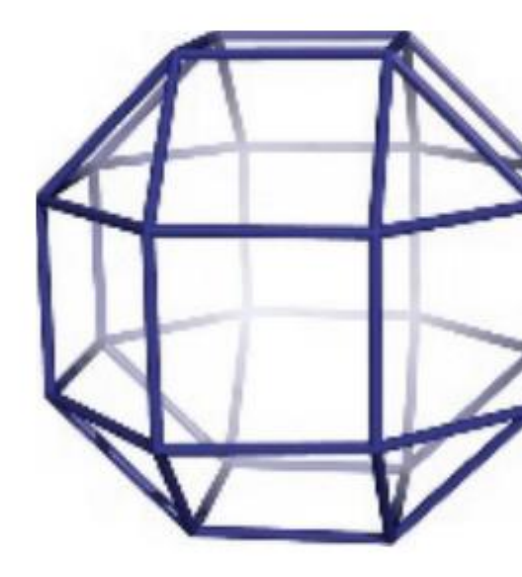
[Nature 2016, 540, 563]



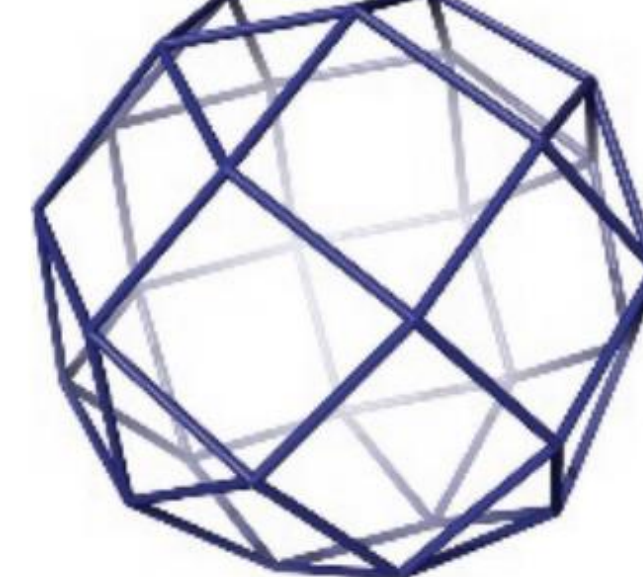
Octahedron



Cuboctahedron



Rhombicuboctahedron



tet-GP(2,1)

tet-GP(1,0)

tet-GP(1,1)

tet-GP(2,0)

交点数:

72

144

288

360

定理 (ゴールドバーク多面体の3重covering)

tet-GP(h,k)において、3-fold A_2 polyhedral linkが存在する。 $Q=h^2+k^2$ とすると、このときの交点数は**72Q**、成分数は、

(1)Qが偶数のとき**9Q+4**または**9Q+2**

(2)Qが奇数のとき**9Q+3**

となる。

今回得た結果をもとに、超分子合成の共同研究者に新しい構造として提案する。

今後の展望

- 多面体頂点の位置にあるパーツの構造を分析する
- 3重coveringの他の構成について検討し、分類する
- 4重coveringや5重coveringについても分類する
- これらを新たな超分子の構造として提案する
- すでに発見されている平面や3次元ネットワークにおける3重coveringを分類する