結び目不変量を用いた鎖状錯体の比較

（久留米高専 材料システム工学科[1]，機械工学科[2]，
一般科目（理科系）3）
〇松尾陵[1]・野﨑悠斗[1]・蓑毛響介[2]・酒井道宏[3]

キーワード：結び目理論，ゲーリッツ不変量，配位化合物

１．緒言

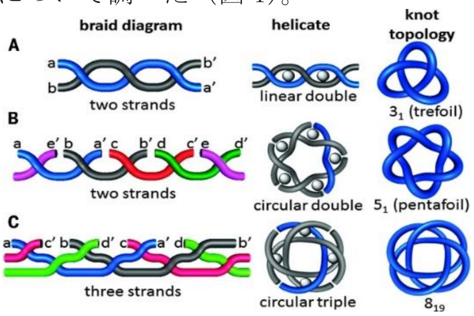
本稿では，ゼミ形式の４年次学科横断科目「リベラルアーツ特論」で実践しているSTEAM教育での工学分野(E)と数学(M)に着目し，鎖状錯体と結び目理論の関連性に関する調査結果を報告する。

２．鎖状錯体と結び目の関連性

鎖状錯体とは，鎖状に構成される金属イオンや金属原子が有機分子や無機イオンなどの配位子に取り囲まれた中性あるいはイオン性の化合物のことをいい，配位化合物のことである。今回は，人工的に編組し作成された材料に対して，ゲーリッツ不変量を用いて解析し，数学的に分類した。

３．分類した材料

今回は，$[Fe_42](PF_6)_7Cl$ をねじることによって編組することで作成した３種類の分子の結び目について調べた（図 1)。



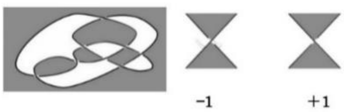
［図 1．分子と結び目］

４．結び目とゲーリッツ不変量

１本のロープを用意し，自由に絡め両端をつないだものを結び目と呼ぶ。結び目がほどけて１つの輪となるとき，自明であるという。結び目が自明か否かを調べる場合，ある変形で結び目の性質を保つ数量である結び目不変量を用いる。

〈定義（ゲーリッツ不変量)〉

以下のように図式の各領域を白黒交互に塗り分けたものを白黒彩色という。結び目の白黒彩色に対して，各黒領域 を $X_0, X_1, \cdots, X_m$ とし，各交点に下のように±1 をつけ，これをこの交点の符号と呼ぶ。このとき，異なる領域の間にある交点の符号の和を連結指数という。



［図 2. 白黒領域と符号］

結び目に対し，各成分が連結指数 で表される対称行列をゲーリッツ行列という。

(i, j)-成分：Xi と Xj の連結指数

(i, i)-成分：−(i 行の残りの成分の和)

整数行列に対して，次の変形を行う。

- ある行（列）を−1 倍する。
- 2 つの行（列）入れ替える。
- ある行(列)に他の行(列)の整数倍を加える。
- (0 0 1・・・0)の行（列）があれば，1 を含む行と列を削除する。

この変形での整数列をゲーリッツ不変量という。

５．計算結果

第３節で示した結び目 A, B のゲーリッツ不変量は以下の結果になり，異なることがわかった。

［表 1.　不変量の計算結果］

結び目	ゲーリッツ行列	不変量
A	$\begin{pmatrix} 3 & -3 \\ -3 & 3 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 2 & -1 & -1 \\ -1 & 2 & -1 \\ -1 & -1 & 2 \end{pmatrix}$	(3)
B	$\begin{pmatrix} 0 & -1 & 1 & 1 & -1 \\ -1 & 1 & -1 & 1 & 0 \\ 1 & -1 & -1 & 0 & 1 \\ 1 & 1 & 0 & -1 & -1 \\ -1 & 0 & 1 & -1 & 1 \end{pmatrix}$ $\begin{pmatrix} 0 & -1 & 1 & -1 & 1 \\ -1 & 1 & -1 & 0 & 1 \\ 1 & -1 & 1 & 1 & -1 \\ 1 & 1 & 0 & -1 & -1 \end{pmatrix}$	(5)

＜参考文献＞

・堀田有花他『結び目や絡み目をもつ分子ナノカーボン』第 26 回高専シンポジウム発表要旨

・JONATHANJ.DANON 他『Braiding a molecular knot with eight crossings』

お問い合わせ先
氏名：酒井道宏
E-mail：sakai@kurume-nct.ac.jp

結び目不変量を用いた鎖状錯体の比較

久留米高専　材料システム工学科[1]　機械工学科[2]　一般科目理科系[3]

〇松尾陵[1]　野﨑悠斗[1]　蓑毛響介[2]　酒井道宏[3]

1.緒言

鎖状錯体と呼ばれる配位化合物を人工的に編組し作成された材料に対し、ゲーリッツ不変量を用いて解析して数学的に分類した。

2.調査した結び目

今回調査した結び目は以下の通りである。

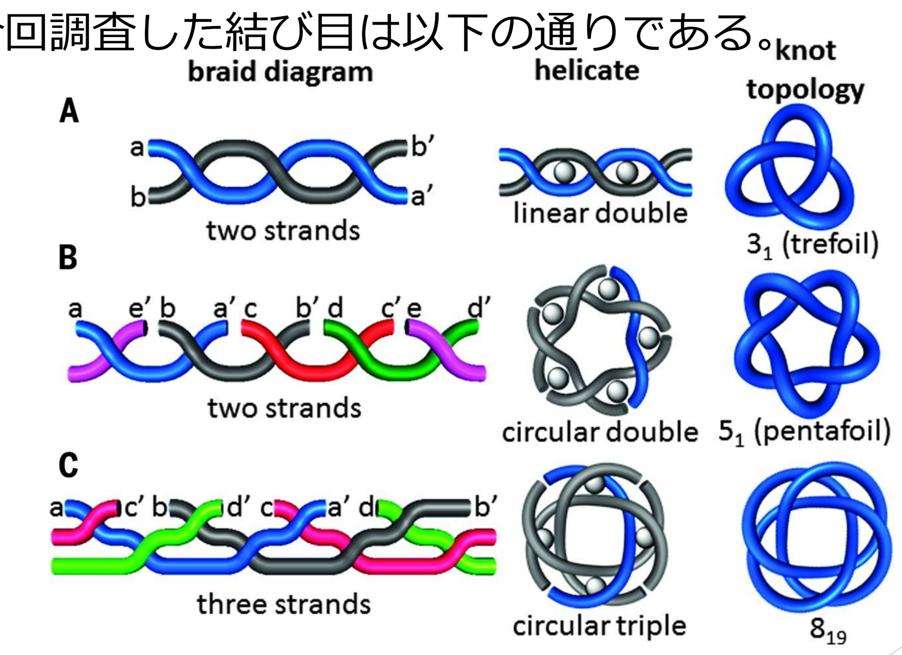


図 1

3.結び目とゲーリッツ不変量

1本のロープを用意し，自由に絡め両端をつないだものを結び目と呼ぶ。結び目がほどけて1つの輪となるとき，自明であるという。結び目が自明か否かを調べる場合，ある変形で結び目の性質を保つ数量である結び目不変量を用いる。

〈定義〉
　以下のように図式の各領域を白黒交互に塗り分けたものを白黒彩色という。結び目の白黒彩色に対して，各黒領域 を $X_0, X_1, \ldots, X_m$とし，各交点に下のように ± 1 をつけ，これをこの交点の符号と呼ぶ。このとき，異なる領域の間にある交点の符号の和を連結指数という。

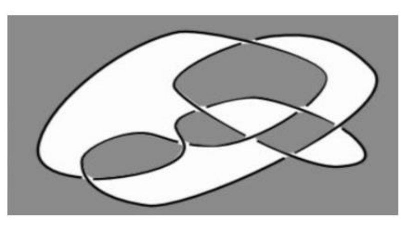


図2

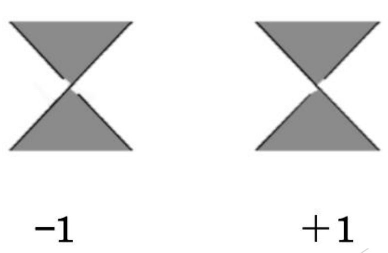
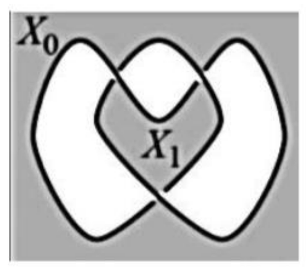


図3

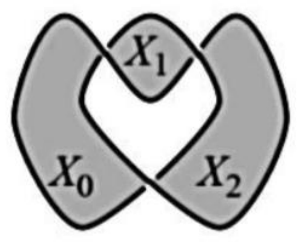
結び目に対し，各成分が連結指数で表される対称行列をゲーリッツ行列という。
(i, j)-成分:Xi と Xj の連結指数
(i, i)-成分:−(i 行の残りの成分の和)
整数行列に対して，次の変形を行う。
- ある行(列)を−1 倍する。
- 2 つの行(列)入れ替える。
- ある行(列)に他の行(列)の整数倍を加える。
- (0 0 1・・・0)の行(列)があれば，1 を含む行と列を削除する。

この変形での整数列をゲーリッツ不変量という。
性質
(1)自明な結び目のゲーリッツ不変量は１である。
(2)ゲーリッツ不変量の値が異なれば、結び目は異なる。

4.ゲーリッツ不変量の計算
結び目Aの計算

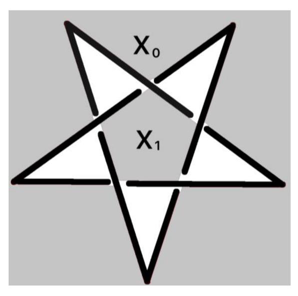


$$\begin{pmatrix} -3 & 3 \\ 3 & -3 \end{pmatrix} \to (3)$$

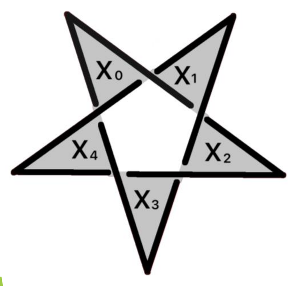


$$\begin{pmatrix} -2 & 1 & 1 \\ 1 & -2 & 1 \\ 1 & 1 & -2 \end{pmatrix} \to \begin{pmatrix} -2 & 1 \\ 1 & -2 \end{pmatrix} \to \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ -3 & -2 \end{pmatrix} \to (-3) \to (3)$$

結び目Bの計算

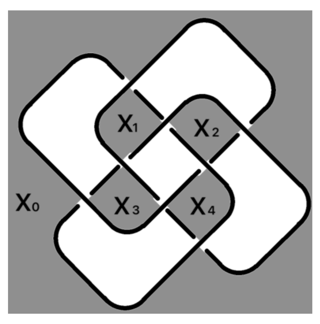


$$\begin{pmatrix} -1 & 1 \\ 1 & -1 \end{pmatrix} \to (1)$$

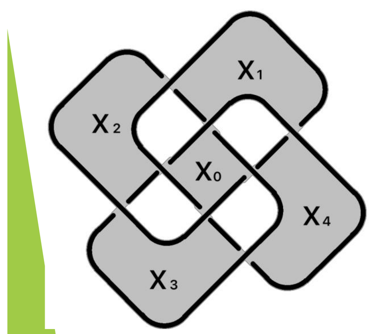


$$\begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 & 0 & -1 \\ 1 & 0 & -1 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & -2 & 1 \\ -1 & 0 & 0 & 1 & 0 \end{pmatrix} \to \begin{pmatrix} 0 & -1 & 0 & 0 \\ -1 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 1 & -2 & 1 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \end{pmatrix} \to \begin{pmatrix} -1 & 0 & 0 \\ 1 & -2 & 1 \\ 0 & 1 & 0 \end{pmatrix} \to \begin{pmatrix} -2 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \to \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \to (1)$$

結び目Cの計算



$$\begin{pmatrix} 0 & -1 & 1 & 1 & -1 \\ 1 & 1 & -1 & 1 & 0 \\ 1 & -1 & -1 & 0 & 1 \\ 1 & 1 & 0 & -1 & -1 \\ -1 & 0 & 1 & -1 & 1 \end{pmatrix} \to \begin{pmatrix} 1 & -1 & 1 & 0 \\ -1 & -1 & 0 & 1 \\ 1 & 0 & -1 & -1 \\ 0 & 1 & -1 & 1 \end{pmatrix} \to \begin{pmatrix} -2 & 1 & 1 \\ 1 & -2 & -1 \\ 1 & -1 & 1 \end{pmatrix} \to \begin{pmatrix} -3 & -1 \\ 1 & 2 \end{pmatrix} \to \begin{pmatrix} 0 & 5 \\ 1 & 2 \end{pmatrix} \to (5)$$



$$\begin{pmatrix} 0 & -1 & 1 & -1 & 1 \\ -1 & 1 & -1 & 0 & 1 \\ 1 & -1 & -1 & 1 & 0 \\ -1 & 0 & 1 & 1 & -1 \\ 1 & 1 & 0 & -1 & -1 \end{pmatrix} \to \begin{pmatrix} 1 & -1 & 0 & 1 \\ -1 & -1 & 1 & 0 \\ 0 & 1 & 1 & -1 \\ 1 & 0 & -1 & -1 \end{pmatrix} \to \begin{pmatrix} -2 & 1 & 1 \\ 1 & 1 & -1 \\ -1 & 0 & -1 \end{pmatrix} \to \begin{pmatrix} 3 & -1 \\ 1 & -2 \end{pmatrix} \to \begin{pmatrix} 0 & 5 \\ 1 & -2 \end{pmatrix} \to (5)$$

5.結言

今回、人工的に編組し作成された材料に対して、ゲーリッツ不変量を用いて解析し、数学的に分類した結果、上記のように分類することができた。

結び目A, B, Cのゲーリッツ不変量が全て異なることから、これらは異なる結び目であることが分かった。

結び目A, Cのゲーリッツ不変量が1でないことから、これらがほどけないことが分かった。

結び目Bのゲーリッツ不変量が1であることから、この方法ではほどけるかどうかが分からないため、今後は彩色数などの別の不変量を用いて計算したい。

参考文献

▶堀田有花他、結び目や絡み目をもつ分子ナノカーボン、 第26回高専シンポジウム予稿集EDU-7

▶Jonathan J.Danon 他, Braiding a molecular knot with eight crossings, Science vol. 355, no. 6321, pp. 159-162.