分子がつくる構造のトポロジー

下川航也 *（お茶の水女子大学）

概要

本稿では，分子がつくる構造を，結び目理論と 3 次元多様体論の観点から考察する．一つは，ブロック共重合体のミクロ相分離等に現れる bicontinuous / tricontinuous / polycontinuous pattern であり，これは 3 次元トーラス $T^3 = \mathbb{R}^3/\mathbb{Z}^3$ のハンドル体分解として定式化される [7, 15]．もう一つは，金属ペプチド環の自己集合体に現れるカテナン構造であり，これは多面体絡み目の構成と分類の問題として定式化される [17, 24].

1 序

環状分子のトポロジー構造は絡み目として記述される．多環状高分子の構造 [20]，DNA 絡み目のトポロジーを用いた DNA 組み換え酵素の働き [19, 21]，自己集合体で得られる絡まり構造 [17, 18, 6] 等が議論されてきた．また，相分離構造が 3 重周期的に空間を満たすとき，その構造は周期ネットワーク，あるいは T^3 の分解として記述される [15]．本稿では，自己集合体で得られる構造を多面体絡み目へ，相分離構造を T^3 のハンドル体分解へ翻訳し，考察を行う．

第 2 章では，polycontinuous pattern をハンドル体分解として定式化し，一意性および安定同値定理を述べる [7, 15]．第 3 章では，多面体絡み目の構成と，交代絡み目の分類理論に基づくその分類 [24] を述べ，多面体絡み目の多重被覆への一般化 [9] を述べる．

2 polycontinuous pattern と T^3 のハンドル体分解

周期的な相分離構造を，3 次元トーラス T^3 の分解と見ることにより考察する．

2.1 3 次元ネットと polycontinuous pattern

定義 2.1. $\mathbb{R}^3$ に埋め込まれたグラフ G が，格子 $\Lambda \cong \mathbb{Z}^3$ の平行移動作用で不変であるとき，G を **3 次元ネット**という．商空間 $T^3 = \mathbb{R}^3/\Lambda$ において，G は T^3 内の空間グラフを定める．3 次元ネット G の正則近傍を**ラビリンス**と呼ぶ.

定義 2.2. 3 重周期曲面が $\mathbb{R}^3$ を二つの 3 重周期的ラビリンスに分割するとき，その分割を

* 〒112-8610 東京都文京区大塚 2-1-1 お茶の水女子大学基幹研究院自然科学系

bicontinuous pattern という．同様に，3 重周期分岐曲面が三つのラビリンスに分割するとき **tricontinuous pattern**，3 重周期的な 2 次元多面体が n 個のラビリンスに分割するとき **polycontinuous pattern** という（図 1）．

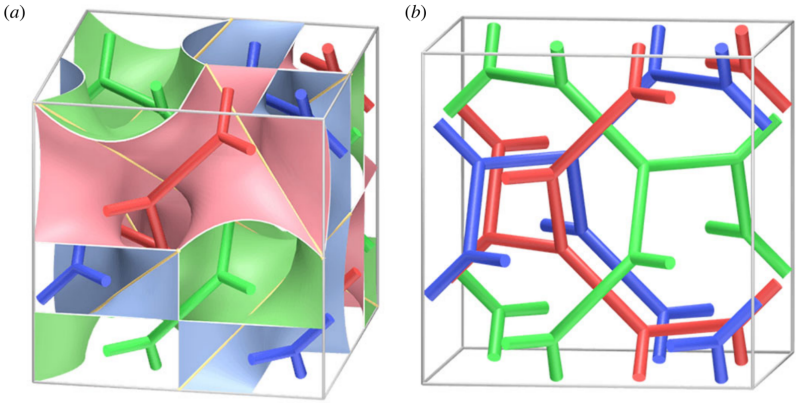


図 1　tricontinuous pattern と対応する 3 成分ネット（[15] より）．

二成分ネットと bicontinuous pattern は，ネットの骨格化に由来する IX–XI move を法として互いを一意に定める [7]．三成分の場合は次が成り立つ．

定理 2.3 (Ishihara–Koda–Ozawa–Shimokawa [7])**.** 三成分からなる 3 次元ネットは，IH–HI 変形と同位変形を除いて tricontinuous pattern を一意に定める．逆に，tricontinuous pattern は，IX–XI 変形と同位変形を除いて三成分 3 次元ネットを一意に定める．

この対応により，今回扱う相分離構造の分類は T^3 内の空間グラフおよび分解の分類に帰着する．

2.2　Heegaard 分解とハンドル体分解

定義 2.4. M を閉向き付け可能 3 次元多様体とする．ハンドル体 H_1, H_2 と閉曲面 S が

$$M = H_1 \cup_S H_2, \qquad H_1 \cap H_2 = \partial H_1 \cap \partial H_2 = S$$

を満たすとき，$M = H_1 \cup_S H_2$ を **Heegaard 分解**という．

定理 2.5 (Frohman–Hass [2], Boileau–Otal [1])**.** 各 $g \geq 3$ に対して，T^3 の種数 g の Heegaard 分解は同相を除いて一意的である．

系 2.6. 単純 3 重周期的 bicontinuous pattern は，[15] の意味の同値を除き一意的である．

bicontinuous pattern は，トポロジーの範疇では区別されず，幾何的量などの考察が有効になる．三つ以上の領域の定式化のため，Heegaard 分解を一般化したハンドル体分解を導入する [15]．

定義 2.7. 2 次元多面体 P の各点の近傍が図 2 のいずれかのモデル（円板，三重点，頂点）に同相

であるとき，P を**単純多面体**という．

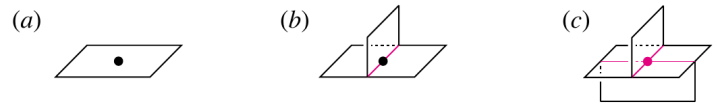


図 2　単純多面体の局所モデル（[15] より）．(a) 非特異点，(b) 三重点，(c) 頂点．

定義 2.8 ([15])**.** M を閉連結向き付け可能 3 次元多様体，$P \subset M$ を連結コンパクトな 2 次元多面体とし，

$$M \setminus P = \bigsqcup_{i=1}^{n} \mathrm{int}(H_i)$$

かつ各 H_i が種数 g_i のハンドル体であるとき，$(H_1, \ldots, H_n; P)$ を型 $(g_1, \ldots, g_n)$ の**ハンドル体分解**といい，P をその **partition** と呼ぶ．P の特異グラフを B とするとき，$M \setminus B$ 内の単純閉曲線で P のセクターと横断的に 1 点で交わるものが存在しないとき **proper**，P が単純多面体であるとき **simple** という．

$n = 2$ のとき単純 proper ハンドル体分解は Heegaard 分解に他ならない．$n = 3$ で各 $H_i \cap H_j$ が連結なものは Koenig [10] の意味での trisection である．相分離構造では非連結な交わりが自然に現れるため，この広い意味の分解が必要となる．

T^3 のハンドル体分解については次が成り立つ．

定理 2.9 ([15])**.** T^3 の単純 proper な型 $(1, 1, 1)$ ハンドル体分解は，T^3 の自己同相を除いて六角ハニカム分解（図 3）に限る．したがって，型 $(1, 1, 1)$ の tricontinuous pattern は同位を除いて一意的である．

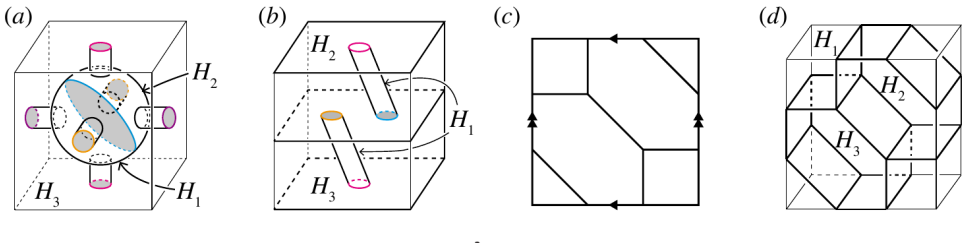


図 3　(a) T^3 の型 $(0, 0, 3)$ ハンドル体分解．(b) 型 $(0, 2, 2)$ ハンドル体分解．(c) T^2 の三つの六角形への分割．(d) T^3 の六角ハニカム分解（[15] より）．

例 2.10 ([15])**.** 型 $(2, 2, 2)$ では一意性は成り立たない．六角ハニカム分解に三回の type-1 安定化を施すことにより，図 4 の二つの型 $(2, 2, 2)$ ハンドル体分解が得られる．図 4(b) の分解では各

$F_{ij} = H_i \cap H_j$ は 2 穴トーラスと円板の非交和であり，(d) の分解では F_{23} は 1 穴トーラスとアニュラスの非交和，各 F_{1j} は 3 穴球面である．よって両者は異なる分解である．

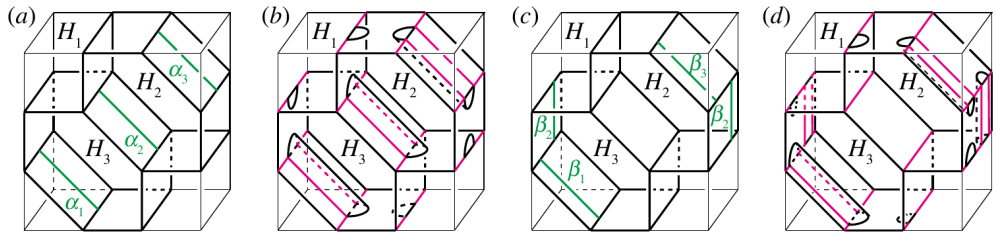


図 4　T^3 の互いに異なる型 $(2,2,2)$ ハンドル体分解（(b) と (d)）([15] より)．

2.3　安定同値

ハンドル体分解に対し，図 5 の type-0, type-1, type-2 安定化が定義される．また，partition の頂点数を変える局所変形として 0-2, 2-0, 2-3, 3-2 move が定義される [15].

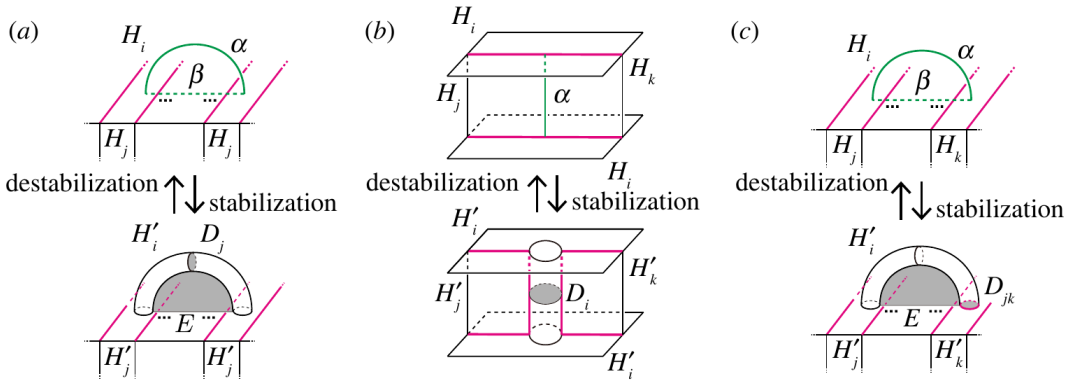


図 5　安定化と非安定化．(a) type-0，(b) type-1，(c) type-2（[15] より)．

次は Reidemeister–Singer の定理のハンドル体分解への拡張である．trisection の場合は Koenig [10] による．

定理 2.11 (Sakata–Mishina–Ogawa–Ishihara–Koda–Ozawa–Shimokawa [15])**.** 閉向き付け可能 3 次元多様体 M の任意の二つの simple proper ハンドル体分解は，0-2, 2-0, 2-3 move と type-0, type-1 安定化を有限回施すと同値となる．

系 2.12 ([15])**.** 二つの単純な彩色付き net-like pattern は，0-2, 2-0, 2-3 move と type-0, type-1 安定化の有限列で移り合う．

この定理により，異なる polycontinuous pattern が安定化を通じて比較可能になる．例えば，3

成分の srs ネット（gyroid 型ネット）から定まる 3srs パターンについて次が成り立つ．

定理 2.13 ([15])**.** 3srs パターン（図 6）や 3etc（図 7）は六角ハニカムパターンから有限回の安定化によって得られる．

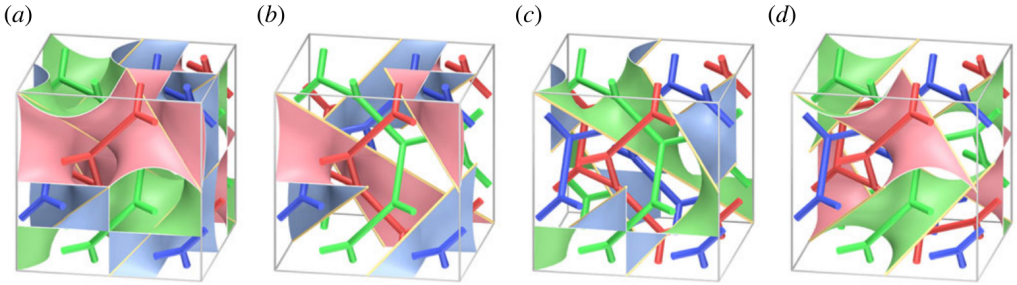


図 6　(a) 3srs ネットに対応する tricontinuous pattern．(b)–(d) ちょうど二つのラビリンスに接する境界付き曲面（[15] より）．

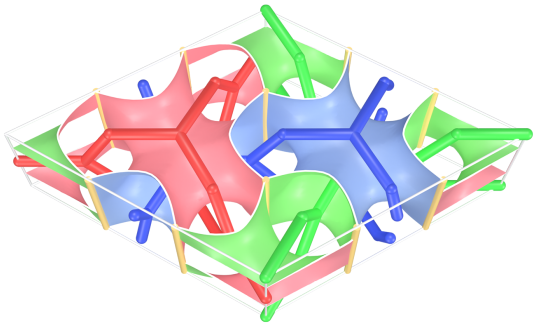


図 7　3etc．3srs とは格子が異なる．

3　多面体絡み目

3.1　金属ペプチド環の自己集合体

金属イオンとペプチド配位子の自己集合により，複雑なトポロジーをもつカテナン構造が合成されている [17, 18, 6]．文献 [17] では，ピリジン置換トリペプチドと銀イオン Ag^{+} から 4 成分 12 交点のペプチドカテナンが得られた．ペプチド配列を変えることにより二つの異なるトポロジーが実現される．PGP 配列（P: L-プロリン，G: グリシン）は type-A 四面体絡み目を，TPP 配列（T: L-スレオニン）は type-B 四面体絡み目を与える．両者は成分数と交点数が等しいが異なるトポロジーをもつ．また，文献 [18] では 6 成分 24 交点の type-A 立方体絡み目型カプセルが，文献 [6] では 60 交点の織り込みネットワークをもつ $M_{60}L_{60}$ キャプシドが報告されている．

3.2　多面体絡み目の構成

多面体絡み目は，多面体の辺と頂点を一定の局所規則で絡み目図式に置き換えて得られる絡み目である [14, 5, 11]．本稿では S^2 と同相な多面体のみを扱う．

定義 3.1 ([24, 14, 5, 11])**.** 多面体 P に対し，図 8 のように得られる交代絡み目を，それぞれ **type-A**（branched curve and n-twisted double line），**type-B**（cross curve and double line），**type-C**（single line，各頂点の次数は 4）**多面体絡み目**という．この構成が定める交代図式を**標準交代図式**と呼ぶ．

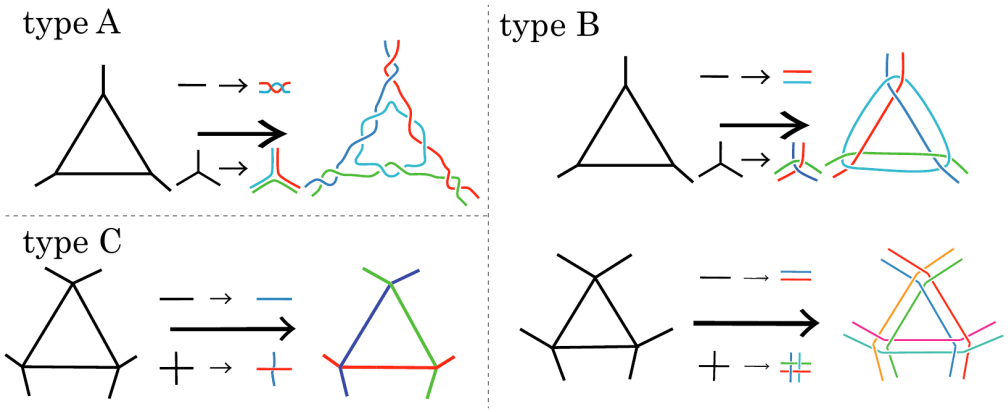


図 8　多面体からの多面体絡み目の構成（[24] より）．黒が多面体の一部，色付きが得られる絡み目の一部を表す．

ここで交点数の最小性は次の定理から従う．

定理 3.2 (Kauffman [8], Murasugi [13], Thistlethwaite [22])**.** 既約交代図式は最小交点図式である．

系 3.3. 交代多面体絡み目の標準交代図式は最小交点図式である．

正多面体から得られる多面体絡み目の成分数と交点数を表 1 に示す．同じ数値データをもつ組が複数現れることが分かる．実際，次の組は互いに同値であることが知られている．

命題 3.4 (Lu–Hu–Qiu–Qiu [11])**.** 次の各組の多面体絡み目は互いに同値である：(1) type-B 四面体絡み目と type-C 立方八面体絡み目；(2) type-B 立方体絡み目，type-B 八面体絡み目，type-C 斜方立方八面体絡み目；(3) type-B 十二面体絡み目，type-B 二十面体絡み目，type-C 斜方二十・十二面体絡み目．

[6] で得られた構造は空間グラフであるが，成分絡み目として type-A 正十二面体絡み目を含み，

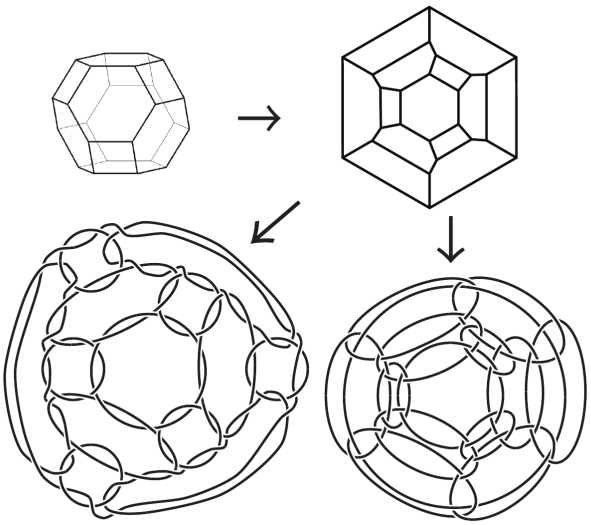


図 9　切頂八面体から得られる type-A（左）と type-B（右）の多面体絡み目の交代図式．いずれも 14 成分 72 交点をもつ（[24] より）．

表 1　正多面体から得られる多面体絡み目の（成分数, 交点数） [24].

多面体	d	v	e	f	type A	type B	type C
正四面体	3	4	6	4	$(4, 12)$	$(4, 12)$	–
立方体	3	8	12	6	$(6, 24)$	$(6, 24)$	–
正八面体	4	6	12	8	$(8, 24)$	$(6, 24)$	$(3, 6)$
正十二面体	3	20	30	12	$(12, 60)$	$(12, 60)$	–
正二十面体	5	12	30	20	$(20, 60)$	$(12, 60)$	–

交点数が 60 であることがわかる．

3.3　フライプ剛性による分類

成分数と交点数が一致する多面体絡み目の区別には，交代絡み目の分類定理を用いる．**フライプ**とは，図式の一部のタングルを水平軸のまわりに 180 度回転させる図式の変形である．得られる図式が元と異なるとき，フライプは非自明であるという．

定理 3.5 (Menasco–Thistlethwaite [12])**.** 同じ素な交代絡み目を表す二つの既約交代図式は，S^2 の同位と有限回のフライプによって移り合う．

非自明なフライプを許さない交代図式は **rigid** であるという．rigid な図式をもつ交代絡み目どうしは，図式を比較するだけで区別できる．非自明なフライプが存在するならば，図式の双対グラフには nested 4-cycle が存在する [4]．したがって，双対グラフが nested 4-cycle を含まなけれ

ば，その交代図式は rigid である．P を多面体とするとき，type-A 多面体絡み目の標準交代図式の双対グラフは，P の重心細分から P の 1-skeleton 上の辺を削除して得られる．type-B 多面体絡み目の標準交代図式の双対グラフは，P の重心細分から，P の頂点と面の中心を結ぶ辺を削除して得られる．このことから次の命題を得る．

命題 3.6 ([24])**.** type-A および type-B 多面体絡み目の標準交代図式は rigid である．

定理 3.7 (Wakayama–Shimokawa [24])**.** P を多面体とする．P の type-A と type-B の交代多面体絡み目は，同じ交点数をもつが異なる絡み目である．さらに P の頂点が全て 3 価なら，両者は同じ成分数と交点数をもつが異なる絡み目である．

これは，PGP 配列と TPP 配列から得られる二つのペプチドカテナン [17] のトポロジーが異なることを示している．

定理 3.8 ([24])**.** 次の各組の多面体絡み目は，同じ成分数と交点数をもつが互いに異なる：(1) type-A 立方体絡み目と type-B 八面体絡み目；(2) type-A 十二面体絡み目と type-B 二十面体絡み目；(3) type-A 切頂八面体絡み目と type-A 切頂立方体絡み目；(4) type-A 切頂八面体絡み目と type-B 切頂立方体絡み目；(5) type-A 切頂立方体絡み目と type-B 切頂八面体絡み目；(6) type-A 切頂二十面体絡み目と type-B 切頂十二面体絡み目；(7) type-A 切頂十二面体絡み目と type-B 切頂二十面体絡み目．

3.4 多重被覆多面体絡み目

100 を超える交点数をもつ自己集合体の合成は、現在重要な課題の一つとなっている．その候補となる絡み目の系統的な構成として，菊屋 [9] は多面体絡み目を辺の被覆度により整理し，3 重被覆多面体絡み目を考察した．この議論は，[16, 23] による多面体の多重被覆の議論に基づくものである．本節ではその結果を述べる．

定義 3.9 ([16, 23, 9])**.** $P = (V, E)$ を多面体グラフ，$N(P)$ をその正則近傍，$p \in \mathbb{N}$ とする．絡み目 L が P の p **重被覆**であるとは，埋め込み $f\colon L \hookrightarrow N(P)$ であって，$N(P)$ の P への変位レトラクト r に対し $r \circ f(L) = P$ となり，かつ各辺 e の内点 x に対し $|(r \circ f)^{-1}(x)| = p$ となるものが存在することをいう．

$p = p_1 + p_2$ $(p_1 \geq p_2 > 0)$ と分割し，辺の片側を p_1 本，他方を p_2 本の紐が通り，辺に沿ってひねりを加える構成を type-A の p 重被覆という．第 3 章の type-A 多面体絡み目は，2 重被覆 A_2 に対応する（添字は辺上の半ひねりの回数を表す）．

命題 3.10. P を各頂点の次数が d の多面体とする．d が偶数なら，任意の p_1, p_2 に対して P の p 重被覆絡み目が存在する．d が奇数なら，P の p 重被覆絡み目が存在するのは $p_1 = p_2$ のときに限る．とくに $p = 3$ のとき，3 重被覆絡み目が存在するのは d が偶数のときに限る．

3.5　3 重被覆多面体絡み目

$p = 3$，$(p_1, p_2) = (2, 1)$ の場合を考える．辺の片側に 2 本の紐 X_1, X_2，他方に 1 本の紐 Y_1 を配置し，辺上に m 回の半ひねりを加えることにより，**3 重被覆 A_m 多面体絡み目**が定義される（図 10）．以下 $m = 2$ とする．

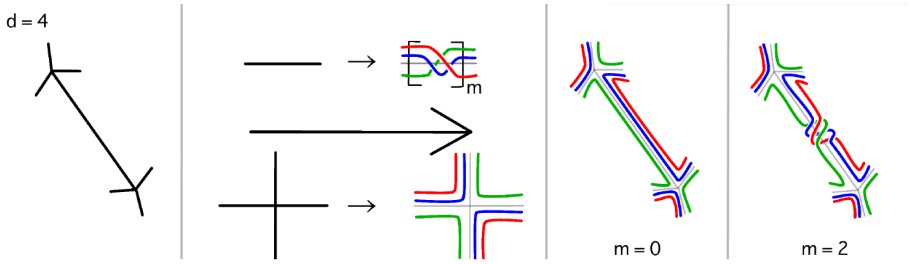


図 10　3 重被覆 A_m 多面体絡み目の構成（[9] より）．

系 3.11 ([9])**.** 正多面体のうち 3 重被覆絡み目を許すのは正八面体のみである．半正多面体のうち 3 重被覆絡み目を許すのは，立方八面体，斜方立方八面体，二十・十二面体，斜方二十・十二面体の四つである．

定理 3.12 ([9])**.** 3 重被覆 A_2 正八面体絡み目 L の成分数は 12，交点数は 72 である（図 11）．L の対称性は向きを保つ四面体群 T となる．

最近，東京科学大学澤田研究室で得られた構造は，正八面体の 3 重被覆絡み目と考えることができ，その交点数は 72 となる．

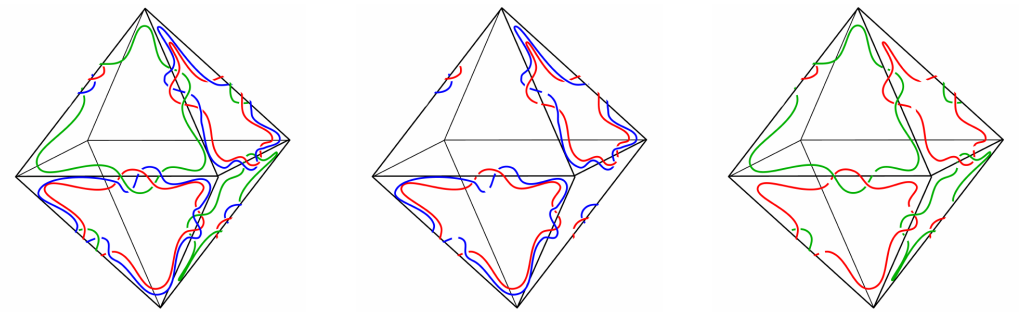


図 11　3 重被覆 A_2 正八面体絡み目 L（左）と，その部分絡み目 $L_1 \cup L_2$（中央），$L_2 \cup L_3$（右）([9] より)．

交点数の下からの評価は，$X_1 \cup X_2$ がなすトーラス絡み目 $T(2, 6)$ と，2 重被覆 A_2 絡み目として現れる部分絡み目 $L_i \cup L_3$ の交点数の和により得られ，標準図式の交点数と一致する．同様の方

法により，3 重被覆を許す半正多面体，反角柱，および 4 価 Goldberg 多面体 [3] に対して次が示される．

定理 3.13 (菊屋 [9])**.** 3 重被覆 A_2 多面体絡み目の成分数と交点数は表 2 の通りである．立方八面体，斜方立方八面体，二十・十二面体，斜方二十・十二面体については，面の被覆の仕方に応じて 2 種類の絡み目が存在する．また，4 価 Goldberg 多面体 tet-$GP(h,k)$（$Q = h^2 + k^2$）については，Q が偶数のとき 2 種類，奇数のとき 1 種類の絡み目が存在する．

表 2　3 重被覆 A_2 多面体絡み目の交点数 $c(L)$ と成分数 $\mu(L)$ [9].

多面体	頂点形状	v	$c(L)$	$\mu(L)$
正八面体	$[3,3,3,3]$	6	72	12
立方八面体	$[3,4,3,4]$	12	144	20 または 22
斜方立方八面体	$[3,4,4,4]$	24	288	38 または 40
二十・十二面体	$[3,5,3,5]$	30	360	44 または 52
斜方二十・十二面体	$[3,4,5,4]$	60	720	92 または 94
n 角反角柱（$n \geq 4$）	$[n,3,3,3]$	$2n$	$24n$	$3n+3$
tet-$GP(h,k)$（Q：偶数）	–	$6Q$	$72Q$	$9Q+2$ または $9Q+4$
tet-$GP(h,k)$（Q：奇数）	–	$6Q$	$72Q$	$9Q+3$

$M_{60}L_{60}$ キャプシド [6] に含まれる十二面体絡み目の交点数は 60 である．表 2 の絡み目は，これを大きく超える交点数をもつ自己集合体のトポロジーの候補を与える．

謝辞

今回，講演の機会を頂きました世話人の山本稔先生，逆井卓也先生，鳥居猛先生に御礼申し上げます．共同研究に携わって頂きました研究者の方々に感謝致します．この研究は JST CREST JPMJCR25Q3 の支援を受けたものです．東北大学の阪田直樹さんとお茶の水女子大学の菊屋美月さんに図を提供して頂きました．謹んで御礼申し上げます．

参考文献

[1] M. Boileau and J.-P. Otal, Sur les scindements de Heegaard du tore T^3, J. Differential Geom. **32** (1990), 209–233.

[2] C. Frohman and J. Hass, Unstable minimal surfaces and Heegaard splittings, Invent. Math. **95** (1989), 529–540.

[3] D. Fujita, Y. Ueda, S. Sato, N. Mizuno, T. Kumasaka and M. Fujita, Self-assembly of tetravalent Goldberg polyhedra from 144 small components, Nature **540** (2016), 563–566.

[4] H. Howards, J. Li, X. Liu and A. Paulec, An infinite family of knots whose hexagonal mosaic number is only realized in non-reduced projections, arXiv:1912.03697v2, 2026.

[5] G. Hu, X.-D. Zhai, D. Lu and W.-Y. Qiu, The architecture of Platonic polyhedral links, J. Math. Chem. **46** (2009), 592–603.
[6] Y. Inomata, S. Oguma, N. Sagara, A. Nishijima, Y. Saburomaru, S. Yoshida, T. Kajitani, K. Shimokawa, S. Sato, M. Yoshizawa, M. Fujita and T. Sawada, An $M_{60}L_{60}$ metal-peptide capsid with a 60-crossing woven network, Chem **11** (2025), 102555.
[7] K. Ishihara, Y. Koda, M. Ozawa and K. Shimokawa, Neighborhood equivalence for multibranched surfaces in 3-manifolds, Topology Appl. **257** (2019), 11–21.
[8] L. H. Kauffman, State models and the Jones polynomial, Topology **26** (1987), 395–407.
[9] 菊屋美月, 多面体絡み目の構成と特徴づけ, お茶の水女子大学修士論文（令和 7 年度）, 2026.
[10] D. Koenig, Trisections of 3-manifolds, arXiv:1805.11276.
[11] D. Lu, G. Hu, Y.-Y. Qiu and W.-Y. Qiu, Topological transformation of dual polyhedral links, MATCH Commun. Math. Comput. Chem. **63** (2010), 67–78.
[12] W. Menasco and M. Thistlethwaite, The classification of alternating links, Ann. of Math. (2) **138** (1993), 113–171.
[13] K. Murasugi, Jones polynomials and classical conjectures in knot theory, Topology **26** (1987), 187–194.
[14] W.-Y. Qiu, X.-D. Zhai and Y.-Y. Qiu, Architecture of Platonic and Archimedean polyhedral links, Sci. China Ser. B: Chem. **51** (2008), 13–18.
[15] N. Sakata, R. Mishina, M. Ogawa, K. Ishihara, Y. Koda, M. Ozawa and K. Shimokawa, Handlebody decompositions of three-manifolds and polycontinuous patterns, Proc. R. Soc. A **478** (2022), 20220073.
[16] 佐藤衡, 多面体空間グラフによる多面体の n 重 covering, 埼玉大学修士論文（令和 5 年度）, 2024.
[17] T. Sawada, A. Saito, K. Tamiya, K. Shimokawa, Y. Hisada and M. Fujita, Metal-peptide rings form highly entangled topologically inequivalent frameworks with the same ring- and crossing-numbers, Nat. Commun. **10** (2019), 921.
[18] T. Sawada, Y. Inomata, K. Shimokawa and M. Fujita, A metal-peptide capsule by multiple ring threading, Nat. Commun. **10** (2019), 5687.
[19] K. Shimokawa, K. Ishihara, I. Grainge, D.J. Sherratt, and M. Vazquez, FtsK-dependent XerCD-*dif* recombination unlinks replication catenanes in a stepwise manner, Proc. Natl. Acad. Sci. USA **110** (2013), 20906-20911.
[20] K. Shimokawa, K. Ishihara, and Y. Tezuka, “Topology of polymers”, SpringerBriefs in the Mathematics of Materials vol.4 (2019).
[21] R. Stolz, M. Yoshida, R. Brasher, M. Flanner, K. Ishihara, D.J. Sherratt, K. Shimokawa, and M. Vazquez, Pathways of DNA unlinking: a story of stepwise simplification, Scientific Reports **7**, 12420 (2017).
[22] M. B. Thistlethwaite, A spanning tree expansion of the Jones polynomial, Topology **26** (1987), 297–309.
[23] 山田寛之, グラフの被覆を保つ変形と被覆の性質, 埼玉大学修士論文（令和 5 年度）, 2024.
[24] N. Wakayama and K. Shimokawa, On the classification of polyhedral links, Symmetry **14** (2022), 1712.