A KNOT-THEORETICAL STUDY OF MOLECULAR CHIRALITY

RAMUD CHOCHAI

A THESIS SUBMITTED IN PARTIAL FULFILLMENT OF

THE REQUIREMENTS FOR THE DEGREE OF

DOCTOR OF PHILOSOPHY

(PHYSICAL CHEMISTRY)

IN

FACULTY OF GRADUATE STUDIES

MAHIDOL UNIVERSITY

1995

TH
R64K
1995

Copyright by Mahidol University

32765

ชื่อวิทยานิพนธ์ การศึกษาไครัลลิตีเชิงโมเลกุลโดยใช้ทฤษฎีปมเงื่อน
ผู้วิจัย ระมัด โชชัย
ปริญญา ปรัชญาดุษฎีบัณฑิต(เคมีเชิงฟิสิกส์)
คณะกรรมการควบคุมวิทยานิพนธ์
ปรีดีพร ลิ้มเจริญ, Ph. D.
อรพินท์ เผ่าวิบูล, Dr. rer. nat.
ประพิณ วิไลรัตน์, Ph. D.
วเรศ วีระสัย, Dr. rer. nat.
วันที่สำเร็จการศึกษา 21 เมษายน พ.ศ. 2538

บทคัดย่อ

มนุษย์มีความคุ้นเคยกับปมเงื่อน ห่วงคล้องและการถักไขว้มาแต่สมัยโบราณ แต่เมื่อพิจารณาในเชิงคณิตศาสตร์แล้วเรื่องดังกล่าวค่อนข้างจะยุ่งยาก นิยามของปมเงื่อนห่วงคล้องและการถักไขว้เกี่ยวข้องกับปัญหาการจัดวางและการฝังตัวของพหุลักษณ์ (หรือแมนิโฟลด์) ในปริภูมิเชิงนามธรรม การศึกษาสิ่งเหล่านี้อย่างถ่องแท้ต้องอาศัยความรู้พื้นฐานอย่างดีทางด้านเรขาคณิตโทโพโลยีและพีชคณิต ปัญหาสำคัญของการศึกษาทฤษฎีปมเงื่อน คือ การหาวิธีการสำหรับจำแนกปมเงื่อน 2 ปมว่า สมมูลกันหรือไม่ ในปัจจุบันทฤษฎีได้พัฒนาถึงขั้นที่พอจะสามารถให้วิธีการที่เหมาะสมเพื่อใช้แก้ปัญหาสำคัญนี้ได้ ทั้งนี้โดยการพิจารณาการเคลื่อนที่แบบไรเดอไมสเตอร์ และพหุนามปมเงื่อนต่าง ๆ นอกจากนั้นแล้วพหุนามบางชนิด อาทิ พหุนามของโจนส์ซึ่งมี 1 ตัวแปร พหุนามฮอมฟลีซึ่งมี 2 ตัวแปร สามารถใช้แสดงไครัลลิตีของปมเงื่อนได้ด้วย

วัตถุประสงค์สำคัญของวิทยานิพนธ์นี้คือ การศึกษาไครัลลิตีเชิงโมเลกุลซึ่งเป็นหัวข้อหลักของวิชาสเตริโอเคมีโดยใช้ทฤษฎีปมเงื่อน วิธีการศึกษาประกอบด้วยการหาวิธีการที่เหมาะสมทำการพันเชือกรอบแบบจำลองโมเลกุลเพื่อให้เกิดปมเงื่อนเชิงโมเลกุลขึ้น พบว่า แบบจำลองโมเลกุลที่มี 1 ศูนย์กลางไครัล จะให้ปมเงื่อนเชิงโมเลกุลที่เป็นรูปสามกลีบ ถ้าเป็นโมเลกุลที่มีมากกว่า 1 ศูนย์กลางไครัลเรียงกันไม่เป็นวง จะให้ปมเงื่อนประกอบของรูปสามกลีบรวมกัน ต่อไปทำการหาพหุนามไครัลลิตีของปมเงื่อนเชิงโมเลกุลที่ได้โดยใช้กฎผลคูณของพหุนามปมเงื่อนสำหรับปมเงื่อนประกอบ อย่างไรก็ตามพบว่า โมเลกุลที่ศูนย์กลางไครัลเรียงกันไม่เป็นวงจะให้ปมเงื่อนที่ซับซ้อนกว่า อีกทั้งยังเกิดห่วงคล้องและการถักไขว้ขึ้นมา ทำให้พหุนามที่ได้มีเลขยกกำลังที่ไม่เป็นจำนวนเต็ม

Copyright by Mahidol University

Thesis Title A Knot-Theoretical Study of Molecular Chirality

Name Ramud Chochai

Degree Doctor of Philosophy (Physical Chemistry)

Thesis Supervisory Committee

Preedeeporn Limcharoen, Ph.D.

Orapin Phaovibul, Dr. rer. nat.

Prapin Wilairat, Ph.D.

Waret Veerasai, Dr. rer. nat.

Date of Graduation 21 April B.E. 2538(1995)

ABSTRACT

Knots, links and braids have been known and used since ancient times. As mathematical objects, however, they are rather difficult to deal with. Their definitions involve some subtle problems of placement and embedding of manifolds in abstract spaces, and their proper treatment needs a good background knowledge of geometry, topology and algebra. Only recently has knot theory been sufficiently developed to give effective methods and reasonably easy procedures for determining whether two knots (or links, or braids) are equivalent or not. For this purpose, the **Reidemeister moves** and various types of **knot polynomials** have been introduced. Some knot polynomials, such as the **Jones polynomial** with one variable, and the **HOMFLY polynomial** with two variables, can also express the **chirality** of a knot.

Molecular chirality is an important aspect of stereochemistry. The main objective of this thesis is to study molecular chirality from the standpoint of knot theory. The abstract **molecular knot** is generated by tying a piece of string around the molecular model in an appropriate manner. It has the chirality corresponding to that of the molecular model. In this study, it has been found that the molecular knot for a molecule with one chiral center is a trefoil. Those for molecules with two or more chiral centers are composite knots. For molecules

Copyright by Mahidol University

with a noncyclic sequence of chiral centers, the composite knot, is a sum of trefoils. The product rules of knot polynomials for composite knots can thus be used to express the chirality polynomials of these molecular knots. Molecules with cyclic arrangement of chiral centers, however, give more complicated molecular knots, with links and braids, and the associated polynomials involve non-integral powers.

Copyright by Mahidol University