

· 快 讯 ·

# 硼氮富勒烯的 Clar 多项式和 Sextet 多项式

张福基, 鄢仁政

(厦门大学数学科学学院, 福建 厦门 361005)

**摘要:** Clar 结构因其在比较分子稳定性中的作用而广受关注. Shiu W C 等人计算了  $C_{60}$  的 Clar 结构的数量并给出其 Clar 多项式和 sextet 多项式, 而对于硼氮富勒烯, 相应的问题尚未解决. 本文考查了 Seifert G 等人确定的最稳定的 3 种硼氮富勒烯的结构特征, 通过组合原理得到  $B_{12}N_{12}$ ,  $B_{16}N_{16}$  的 Clar 多项式和 Sextet 多项式, 并给出了详细证明. 此外还给出用于一般硼氮富勒烯的计算程序, 并作为例子给出  $B_{28}N_{28}$  的 Clar 多项式和 Sextet 多项式. 本文的结果解决了一般的硼氮富勒烯分子 Clar 多项式和 Sextet 多项式的计算工作.

**关键词:** 硼氮富勒烯; Clar 多项式; Sextet 多项式; 图论

**中图分类号:** O 157.5

**文献标识码:** A

**文章编号:** 0438 0479(2005)02 0149 02

## 1 背景

文献[1]给出了  $C_{60}$  的 Clar 多项式和 Sextet 多项式, 对于硼氮富勒烯, 相应的问题尚未解决. 本文研究一般硼氮富勒烯 Clar 多项式和 Sextet 多项式的计算方法, 作为例子计算了由文献[2]所确定的 3 个最稳定的硼氮富勒烯,  $B_{12}N_{12}$ ,  $B_{16}N_{16}$  和  $B_{28}N_{28}$  (如图 1~3 所示)的 Clar 多项式和 Sextet 多项式.

Clar 结构的概念是由 Clar E<sup>[3]</sup> 提出的, 其目的是用以比较分子的共振稳定性, 它是指在图上的六边形画圈且满足以下规律:

(i) 不允许在两个相邻的六边形中都画圈;

(ii) 如果  $G$  去掉这些六边形后有完美匹配, 这些六边形可画圈;

(iii) Clar 结构是指在(i), (ii)的限制下包含最多个圈的画法.

Herndon 和 Hosoya<sup>[4]</sup> 为了更准确的计算共振能量(RE), 对 Clar 结构的定义做了扩展, 将条件(iii)改成条件(iv): 在(i), (ii)的限制下画圈, 在圈的集合包含意义下, 圈数达极大则成为一个 Clar 结构. 本文说的 Clar 结构就是指这个定义, 而 Clar 的原始定义称为 proper Clar 结构.

为计算 Clar 结构的数量而定义的 Clar 多项式例见文献[5]:

$$\xi(G; x) = \sum_{i=0}^m \rho(G, i) x^i \quad (1)$$

其中  $\rho(G, i)$  是  $G$  中含  $i$  个圈的 Clar 结构的数量,  $m$  是  $G$  的 proper Clar 结构所含的圈数.

Sextet pattern 是 Clar 结构定义的另一扩展. 在一个图中两个六边形称为互相独立, 如果这两个六边形没有公共的边. 平面图  $G$  上的一个由多个独立六边形组成的集合  $S$  称为 Sextet pattern 如果  $G \setminus S$  至少含一个完美匹配( $G \setminus S$  是  $G$  中去掉  $S$  中所有六边形的顶点及关联的边后得到). 自然, 极大 Sextet pattern 与 Clar 结构一一对应.

对应 Clar 多项式的用于计算 Sextet pattern 数量的叫 Sextet 多项式, 这是 Hosoya 和 Yamaguchi<sup>[6]</sup> 给出的:

$$B_G(x) = \sum_{i=0}^m \sigma(G, i) x^i \quad (2)$$

其中  $\sigma(G, i)$  表示  $G$  中含  $i$  个独立六边形的 Sextet pattern 的数量,  $m$  表示  $G$  的所有 Sextet pattern 中含六边形个数的最大值.

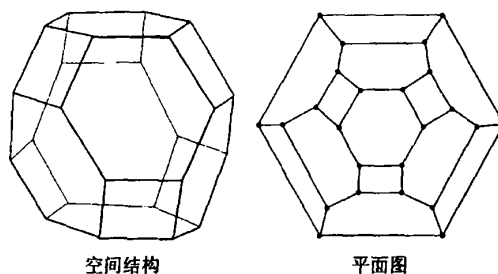


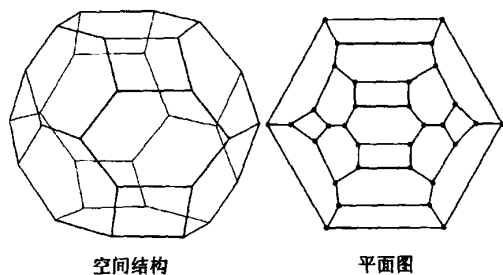
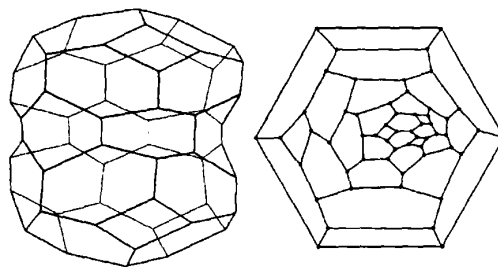
图 1  $B_{12}N_{12}$

Fig. 1  $B_{12}N_{12}$

收稿日期: 2004 12 13

基金项目: 国家自然科学基金(10371102)资助

作者简介: 张福基(1936-), 男, 教授, 博士生导师.

图 2  $B_{16}N_{16}$ Fig. 2  $B_{16}N_{16}$ 图 3  $B_{28}N_{28}$ Fig. 3  $B_{28}N_{28}$ 

## 2 主要结果

定理 1  $B_{12}N_{12}$  的 Clar 多项式和 Sextet 多项式分别为:

$$\xi(B_{12}N_{12}; x) = 2x^4 + 4x^2 \quad (3)$$

$$B_{B_{12}N_{12}}(x) = 2x^4 + 8x^3 + 16x^2 + 8x + 1 \quad (4)$$

定理 2  $B_{16}N_{16}$  的 Clar 多项式和 Sextet 多项式分别为:

$$\xi(B_{16}N_{16}; x) = 9x^4 \quad (5)$$

$$B_{B_{16}N_{16}}(x) = 9x^4 + 36x^3 + 42x^2 + 12x + 1 \quad (6)$$

对于更大的硼氮富勒烯, 直接讨论这两个多项式比较困难, 我们利用计算机编程解决. 将该程序用于  $B_{12}N_{12}$  和  $B_{16}N_{16}$  得到与定理 1、定理 2 相同的结果, 用于  $B_{28}N_{28}$  则得到下面结论:

定理 3  $B_{28}N_{28}$  的 Clar 多项式和 Sextet 多项式分别为:

$$\xi(B_{28}N_{28}; x) = 3x^8 + 48x^7 + 156x^6 + 96x^5 + 9x^4 \quad (7)$$

$$B_{B_{28}N_{28}}(x) = 3x^8 + 72x^7 + 522x^6 + 1434x^5 + 1719x^4 + 894x^3 + 216x^2 + 24x + 1 \quad (8)$$

## 参考文献:

- [1] Shiu W C, Lam P C B, Zhang Heping. Clar and sextet polynomials of buckminsterfullerene [J]. J. Mol. Struct. (Theochem), 2003, 622: 239 - 248.
- [2] Seifert G, Fowler P W, Mitchell D, et al. Boron nitrogen analogues of the fullerenes; electronic and structural properties [J]. Chem. Phys. Lett., 1997, 268: 352 - 358.
- [3] Clar E, The Aromatic Sextet [M]. New York: Wiley, 1972.
- [4] Herndon W C, Hosoya H. Parameterized valence bond calculations for benzenoid hydrocarbons using Clar structures [J]. Tetrahedron, 1984, 40: 3 987 - 3 995.
- [5] El Basil S. Clar sextet theory of buckminsterfullerene ( $C_{60}$ ) [J]. J. Mol. Struct. (Theochem), 2000, 531: 9 - 21.
- [6] Hosoya H, Yamaguchi T. Sextet polynomial; a new enumeration and proof technique for the resonance theory applied to aromatic hydrocarbons [J]. Tetrahedron Lett., 1975, 38: 4 659 - 4 662.

# Clar and Sextet Polynomials of Boron nitrogen Fullerenes

ZHANG Fujia, YAN Renzheng

(School of Mathematical Sciences, Xiamen University, Xiamen 361005, China)

**Abstract:** Shiu W C et al. computed the count of Clar structures of  $C_{60}$  and the associated Clar polynomial and sextet polynomial. For boron nitrogen fullerenes the corresponding problem has not been solved. This paper considers three BN fullerenes which were anomalously stable. By combinatorial techniques the Clar polynomial and the sextet polynomial of  $B_{12}N_{12}$  and  $B_{16}N_{16}$  are given. Detailed proof is also provided. Furthermore, a program for general cases is designed. As an illustration, the Clar polynomial and the sextet polynomial of  $B_{28}N_{28}$  is given.

**Key words:** boron nitrogen fullerene; Clar polynomial; Sextet polynomial; graph theory