

· 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  $E^{[3]}$  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]:

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

其中  $(G, i)$  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  $G-S$  至少含一个完美匹配 ( $G-S$  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:

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

其中  $(G, i)$  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.

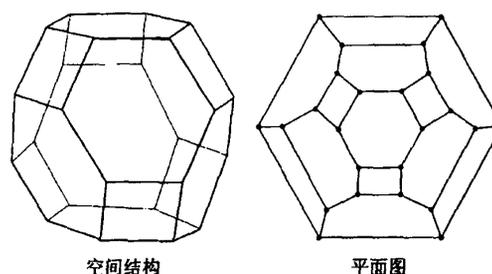


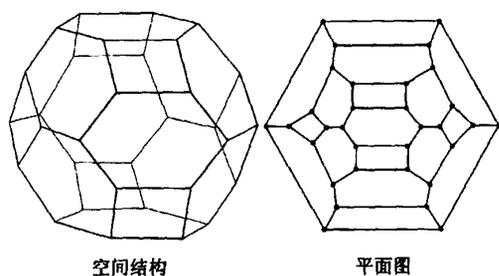
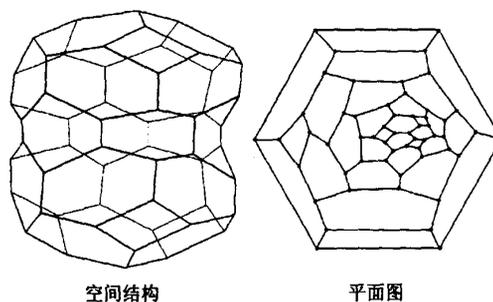
图 1  $B_{12}N_{12}$

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<sub>16</sub>N<sub>16</sub>Fig. 2 B<sub>16</sub>N<sub>16</sub>图 3 B<sub>28</sub>N<sub>28</sub>Fig. 3 B<sub>28</sub>N<sub>28</sub>

## 2 主要结果

**定理 1** B<sub>12</sub>N<sub>12</sub> 的 Clar 多项式和 Sextet 多项式分别为:

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

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

**定理 2** B<sub>16</sub>N<sub>16</sub> 的 Clar 多项式和 Sextet 多项式分别为:

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

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

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<sub>12</sub>N<sub>12</sub> 和 B<sub>16</sub>N<sub>16</sub> 得到与定理 1、定理 2 相同的结果,用于 B<sub>28</sub>N<sub>28</sub> 则得到下面结论:

**定理 3** B<sub>28</sub>N<sub>28</sub> 的 Clar 多项式和 Sextet 多项式分别为:

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

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

## 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<sub>60</sub>) [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 Fu-ji, YAN Ren-zheng

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

**Abstract:** Shiu W C et al. computed the count of Clar structures of C<sub>60</sub> 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<sub>12</sub>N<sub>12</sub> and B<sub>16</sub>N<sub>16</sub> 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<sub>28</sub>N<sub>28</sub> is given.

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