

学校编码: 10384

分类号\_\_\_\_\_密级\_\_\_\_\_

学 号: 200223046

UDC\_\_\_\_\_

厦 门 大 学  
硕 士 学 位 论 文

硼氮富勒烯和纳米管的 Clar  
多项式及 sextet 多项式

Clar and Sextet Polynomials of BN-Fullerenes  
and BN-Nanotubes

鄢 仁 政

指导教师姓名: 张 福 基 教授

专 业 名 称: 应 用 数 学

论文提交日期: 2005 年 4 月

论文答辩日期: 2005 年 5 月

学位授予日期: 2005 年 月

答辩委员会主席: \_\_\_\_\_

评 阅 人: \_\_\_\_\_

2005 年 4 月

## 摘 要

*Clar sextet* 理论因其在比较分子稳定性和计算共振能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。本文的研究对象包括由 Seifert G 等人确定的相对较稳定的 3 种硼氮富勒烯 ( $B_{12}N_{12}$ ,  $B_{16}N_{16}$  和  $B_{28}N_{28}$ ) 以及带帽的硼氮纳米管。本文主要结论如下:

1. 第二章利用六边形对偶图的性质研究了  $B_{12}N_{12}$  和  $B_{16}N_{16}$  的结构, 通过组合计数的方法给出了二者的 *Clar* 多项式和 *sextet* 多项式, 并给出了详细证明。

2. 对于大型的硼氮富勒烯分子, 由于其结构的复杂性, 本文认为直接计数 *Clar* 结构和 *sextet pattern* 结构是不可行的, 在没有可用的递推关系式之前, 本文给出用于计算 *Clar* 多项式和 *sextet* 多项式的算法和程序, 作为实例给出一个硼氮富勒烯 ( $B_{28}N_{28}$ ) 和一类硼氮纳米管 (带半- $B_{12}N_{12}$  帽的 Armchair 型硼氮纳米管) 的 *Clar* 多项式和 *sextet* 多项式。

**关键词:** 多面体硼氮富勒烯; *Clar* 多项式; *sextet* 多项式; 图论

## Abstract

Clar sextet theory is well known for its role in research of molecule stability and resonance energy. Shiu W C et al. gave 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. In this paper we consider three BN-fullerenes ( $B_{12}N_{12}$ ,  $B_{16}N_{16}$  and  $B_{28}N_{28}$ ) which were anomalously stable and capped boron-nitride nanotubes. The main results are as follows:

**1.** Properties of  $B_{12}N_{12}$  and  $B_{16}N_{16}$  are considered, as well as their hexagonal dual graphs. By Combinatorial Enumeration the Clar polynomials and the sextet polynomials of these two BN-fullerenes are given. Detailed proof is also provided.

**2.** For large BN-fullerenes, we suggest that it is unworkable to count Clar structures and sextet patterns using only pen and paper before we get a practical recursive formula because thousands of such structures may occur. We design the algorithm and the corresponding program for such cases. As an illustration, the Clar polynomials and the sextet polynomials of  $B_{28}N_{28}$  and hemi- $B_{12}N_{12}$  capped armchair boron-nitride nanotubes are given.

**Key words:** polyhedra boron-nitrogen fullerenes, Clar polynomial, sextet polynomial, graph theory

# 目录

中文摘要	I
英文摘要	II
第一章 引言	1
第二章 $B_{12}N_{12}$ 和 $B_{16}N_{16}$ 的结论	7
§ 2.1 $B_{12}N_{12}$ 的 <i>Clar</i> 多项式和 <i>sextet</i> 多项式 .....	7
§ 2.2 $B_{16}N_{16}$ 的 <i>Clar</i> 多项式和 <i>sextet</i> 多项式 .....	9
第三章 计算多项式的算法、程序和实例	14
§ 3.1 算法 .....	14
§ 3.2 程序和一类硼氮纳米管的实例 .....	16
参考文献	28
致谢	31

厦门大学博硕士学位论文

# 第一章 引言

有机物的稳定性研究一直是化学研究中的重要课题，其研究方法涉及到多个相关学科，特别是一些数学方法的引入，在简化计算、近似估计等方面起到很大作用，其中 *Kekulé* 结构在价键理论中的作用就是典型的例子。化学中的 *Kekulé* 结构的定义与图论中的完美匹配是一致的。自然的，图论中完美匹配的相关结果可以平移到 *Kekulé* 结构的研究中，例如苯类系统  $G$  的 *Kekulé* 结构的个数（简称 *Kekulé* 计数，记为  $K(G)$ ）等同于图的完美匹配计数。*Kekulé* 计数是衡量多环芳烃稳定性的重要指标，能够很好的估计分子的共振能量。

基于 *Kekulé* 结构的理论主要有三种，第一种就是 *Kekulé* 计数，第二种是共轭圈模型，第三种就是与本文工作密切相关的 *Clar sextet* 理论。共轭圈模型由 Randić [30-32] 创建，它实质上是一种关于圈的运算，可用于计算共振能。Gutman 和 Cyvin 的著作 [3] 对此作了系统的阐述。关于共轭圈的计算可参见 [37] 及其引用的参考文献。

苯类碳氢化合物 (Benzenoid Hydrocarbon) 在图形上可表示为由多个六边形 (仅考虑碳原子骨架) 通过公共边连接而成，通常也称为六角系统。Erich Clar 最早通过在六角系统上画圈的方法判断分子的稳定性，这个思想后来在 Clar 的著作 [1] 中以“*Clar* 结构”为名详细定义如下：

- (1). 不允许在两个相邻的六边形中都画圈；
- (2). 如果结构简式去掉这些六边形后有完美匹配，这些六边形可画圈，特别的，空图被认为具有完美匹配；
- (3). *Clar* 结构是指在 (1),(2) 的限制下包含最多个圈的画法。Fig 1 给出了一个 *Clar* 结构的例子。

一个六角系统  $G$  的 *Clar* 结构可以有多个，但每个 *Clar* 结构包含的圈数——独立六边形的个数——是相同的，这个圈数称为 *Clar number*。*Clar number* 具有特殊的化学意义：同分异构的两个芳香型化合物，*Clar number* 大者在化学和热力学上都表现得更稳定，且其在电子吸收频谱上处于具有相对较短波长的位置。这个规律是从大量实验数

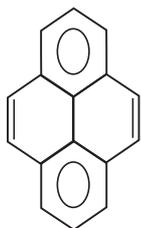


Fig. 1 pyrene的Clar结构

据总结而来，与之相关的一些例子可在 [3] 中找到。对于六角系统 *Clar number* 的计算，Hansen 和 Zheng[2] 利用线性规划建立模型并给出松弛条件，Abeledo 和 Atkinson[8] 证明了该模型必有整数解，并将此计算方法推广到二连通的平面偶图。

关于 Clar 结构定量分析的研究引出了与 *Clar* 结构相关的一些概念。*Clar* 结构的定义中如果只要求满足 (1) 和 (2)，则称为 *generalized Clar* 结构，也称为 *sextet pattern*。与 *Clar* 结构不同的是，每个 *sextet pattern* 包含的独立六边形的个数可以是不同的，为了体现这种区别，Hosoya 和 Yamaguchi [4] 对苯类系统  $G$  定义 *sextet* 多项式如下：

$$B_G(x) = \sum_{i=0}^m \sigma(G, i)x^i \quad (1.1)$$

其中  $m$  表示  $G$  的 *Clar number*， $\sigma(G, i)$  表示  $G$  中含  $i$  个独立六边形的 *sextet pattern* 的数量，特别的  $\sigma(G, 0)=1$ 。[4] 确定了在 Catafusene 时， $B_G(1) = K(G)$ ，之后 Zhang 和 Chen [22] 给出了二者相等的充要条件，完整刻划了二者的内在联系。

之后就有通过 *sextet* 多项式讨论化合物的共振能，但对部分大的苯类化合物，*sextet* 多项式给出的结果无法解释实际情况 [5,6]。Herndon 和 Hosoya[7] 通过扩展 *Clar* 结构的定义改进了这个结果，他们将 *Clar* 结构定义中条件 (3) 改为条件 (4)：在 (1),(2) 的限制下画圈，在圈的集合包含意义下圈数达极大时称为一个 *Clar* 结构，即无法在不破坏 (1),(2) 的前提下继续画圈。[7] 给出了此时计算共振能的具体方法，通过与 SCF 的结果比较，证实新结果用于预测化合物性质的效果良好。这个 *Clar* 结构的定义因而得到广泛的使用，为了不引起混淆，Clar 的原始定义通常被称为

*proper Clar* 结构，本文也采用这种习惯称法。

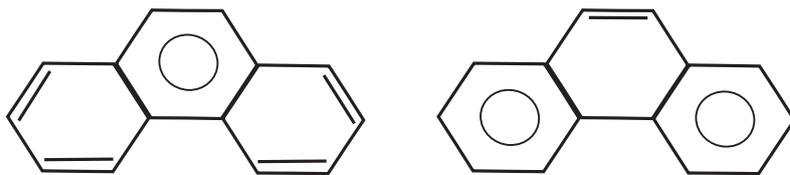


Fig. 2 phenanthrene的两种Clar结构

注意到此时一个苯类系统的两个 *Clar* 结构所含独立六边形的个数不必相同（见 Fig 2），很自然就有 *Clar* 多项式 [9] 的定义：

$$\xi(G; x) = \sum_i \rho(G, i) x^i \quad (1.2)$$

其中  $\rho(G, i)$  是  $G$  中含  $i$  个独立六边形的 *Clar* 结构的数量， $i$  则取遍所有可能的值，显然  $i$  的最大值为 *Clar number*。

随着富勒烯 (Fullerene) 及其衍生物 (如碳纳米管 Carbon nanotubes) 在光、电、磁等领域得到广泛的应用，相关的理论研究也受到很多学者的关注。巴克明斯特富勒烯 ( $C_{60}$ , Buckminsterfullerene) 是一个由 12 个五边形和 20 个六边形组成的球形 32 面体，它的外形酷似足球，六边形的每个碳原子均以双键与其他碳原子结合，形成类似苯环的结构。D.J.Klein 等人 [10] 利用化学方法对  $C_{60}$  的共振能做了研究，之后 El-Basil 以及 W.C.Shui 等人又先后给出  $C_{60}$  的 *Clar* 多项式和 *sextet* 多项式 [11]。

鉴于硼-氮 (B-N) 键和碳-碳 (C-C) 键的相似性，研究用相同数量的硼原子和氮原子合成富勒烯的硼氮类似物 (下称硼氮富勒烯, Boron-Nitrogen Fullerenes) 的理论工作引起化学界的极大兴趣 [12-19]，之后不断传出成功合成硼氮富勒烯和氮化硼纳米管 (Boron-Nitride Nanotubes) 的报告 [24,28,29]，[25] 概述了 2000 年之前的相关工作。氮化硼纳米管与碳纳米管相似，也是由六边形结构的原子层网状结构所卷成，末端为四边形或八边形的对称结构。实验证实，与碳纳米管相比，氮化硼纳米管的半导体特性独立于管的直径、空间的螺旋形状以及管的层数，这些特点使得氮化硼纳米管有很好的应用前景。

单壁氮化硼纳米管是一种管状结构的大型分子，其结构可以形象的分为中间层和半球形帽子。中间层是指由一定层数的六元环链叠成的两端

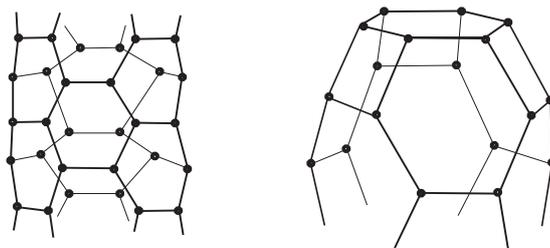


Fig. 3 中间层和帽子的立体图

开口的管状结构，其按相邻两层六元环的连接方式可分为 Zigzag 型 (锯齿型)，Armchair 型 (椅子型) 和 chiral 型 (手型) 三种 (见 Fig 4)。帽子是能与中间层末端相衔接使之封闭的结构。Fig 3 给出中间层和帽子的一个示例。

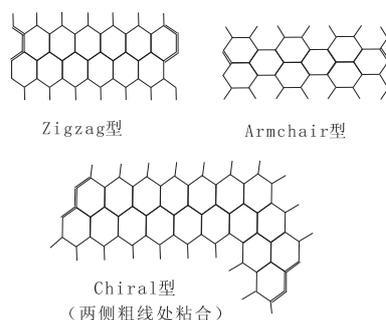
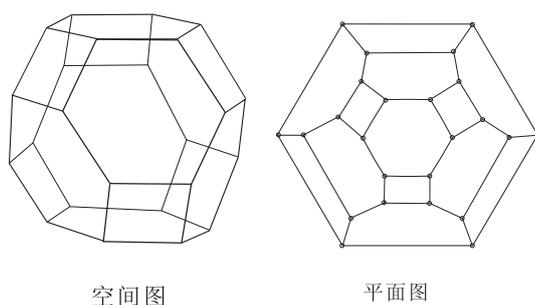
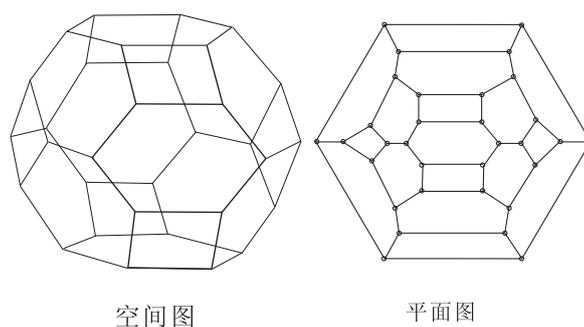
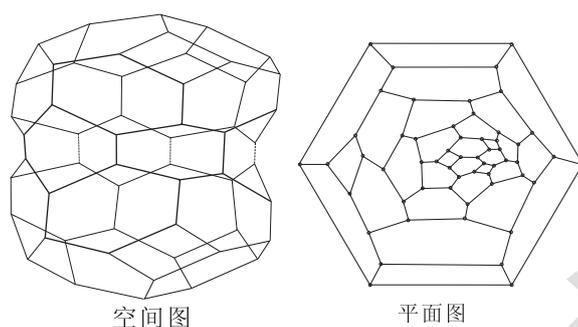


Fig. 4 中间层的三种结构

理论上，一个由  $(x-4)$  个六边形和 6 个四边形组成的氮化硼分子  $(BN)_x$ ，当  $x \geq 4$  且  $x \neq 5$  时均可构成氮化硼立体分子或氮化硼单壁纳米管 (BN-SWNT)，[19] 进一步指出当这 6 个四边形互相独立时化合物更具稳定性，注意到这与  $C_{60}$  中要求五边形互相独立的性质是一致的。这类硼氮富勒烯在结构上与六角系统的相似性促使学者尝试用六角系统的成熟理论来研究该类化合物的性质。[33] 给出了带半  $-B_{12}N_{12}$  帽的 Armchair 型单壁氮化硼纳米管的 *Kekulé* 计数的递推公式，并给出了 1 到 17 层的计算结果。[34] 给出了带半  $-B_{16}N_{16}$  帽的和带半  $-B_{36}N_{36}$  帽的 Zigzag 型单壁氮化硼纳米管的 *Kekulé* 计数的递推公式。[35, 36] 则利用转移矩阵及其特征根的性质对带帽的 Armchair 型和 Zigzag 型单壁氮化硼纳米管的 *Kekulé* 计数的作了一般性的研究，针对不同帽子组合形成的各种可能的

结构给出多种递推关系，并给出了大量的计算实例。[33-36] 的计算结果显示，氮化硼纳米管的 *Kekulé* 计数随层数的增加呈指数增长。

Fig. 5  $B_{12}N_{12}$ Fig. 6  $B_{16}N_{16}$ Fig. 7  $B_{28}N_{28}$ 

[18]通过基于 tight-binding scheme 的密度函数法 (DFTB)，指出当  $4 \leq x \leq 30$  时，特别稳定的团簇是  $B_{12}N_{12}$ ， $B_{16}N_{16}$  和  $B_{28}N_{28}$ ，这三种笼状化合物的结构如图所示。[26] 通过质谱分析法 (Mass Spectrometry) 的分析，证实了 [18] 中关于  $B_{28}N_{28}$  的稳定性计算是正确的。

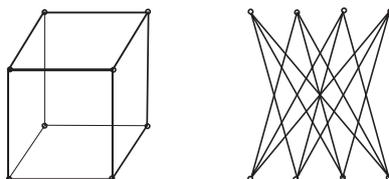
本文给出了  $B_{12}N_{12}$ ,  $B_{16}N_{16}$  和  $B_{28}N_{28}$  的 *Clar* 多项式和 *sextet* 多项式, 并且在第三章给出了用于计算硼氮富勒烯这两个多项式的算法和程序, 最后作为例子给出了一类氮化硼单壁纳米管的 *Clar* 多项式和 *sextet* 多项式。

本文的所有符号及运算除特别注明外, 均采用书 [20] 的表示法。

厦门大学博硕士学位论文

第二章  $B_{12}N_{12}$  和  $B_{16}N_{16}$  的结论§ 2.1  $B_{12}N_{12}$  的 *Clar* 多项式和 *sextet* 多项式

为计算简便，我们引入六边形对偶图的概念，这是由 W.C.Shu 等人 [11] 提出的，而其原始思想来自 Fowler[23]：以  $B_{12}N_{12}$  的六边形为顶点，两个顶点有一边相连当且仅当两个六边形有一条公共边，这样得到的图称为  $B_{12}N_{12}$  的六边形对偶图。从 Fig 8 可以看出  $B_{12}N_{12}$  的六边形对偶图实际上就是立方体（用 3-cube 表示）。

Fig. 8  $B_{12}N_{12}$  的六边形对偶图

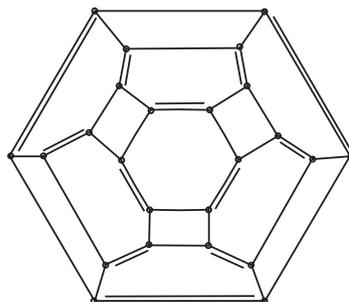
令  $M = \{e \mid e \in E(B_{12}N_{12}) \text{ 且 } e \text{ 是两个六边形的公共边}\}$ ，容易验证  $M$  是  $B_{12}N_{12}$  的完美匹配（见 Fig 9）。对  $B_{12}N_{12}$  中任意的独立六边形的集合  $S$ ，由于  $M$  在  $B_{12}N_{12} - S$  上的限制恰是  $B_{12}N_{12} - S$  的完美匹配，因此  $S$  是 *sextet pattern*。需要指出的是这个性质在一般情形下是不成立的。这样在  $B_{12}N_{12}$  的 *sextet pattern* 和立方体的独立集之间就有很自然的一一对应的关系，同样的对应关系也存在于  $B_{12}N_{12}$  的 *Clar* 结构和立方体的极大独立集之间。

下面引入两个多项式的概念，极大独立集多项式 [11] 定义如下：

$$I_m(G, x) = \sum_T x^{|T|} = \sum_k \beta(G, k) x^k$$

其中  $T$  取遍  $G$  的所有极大独立集， $\beta(G, k)$  表示  $G$  中含有  $k$  个顶点的极大独立集的数目。独立集多项式 [27] 定义如下：

$$I(G, x) = \sum_{k=0}^{\alpha} b(G, k) x^k$$

Fig. 9  $B_{12}N_{12}$  的一个Kekulé结构

其中  $\alpha$  是  $G$  的最大独立集的势,  $b(G, k)$  表示  $G$  中含有  $k$  个顶点的独立集的数目。

从上面的分析自然有下面的结论:

引理 1.

$$(a). \xi(B_{12}N_{12}; x) = I_m(3 - cube, x)$$

$$(b). B_{B_{12}N_{12}}(x) = I(3 - cube, x)$$

记立方体的两个分部是  $X$  和  $Y$ , 用  $T$  表示立方体的极大独立集, 下面分析  $T$  所有可能的情况:

Case 1.  $T = X$  或  $T = Y$ , 则  $|T| = 4$ ;

Case 2.  $T = \{x_i, y_i\}$ , 其中  $x_i \in X, y_i \in Y$  且  $y_i$  与  $x_i$  不相邻。因为立方体是 3 正则图, 对于  $X$  中任一个顶点, 在  $Y$  中恰有一个顶点与其不相邻。

由  $|X| = 4$  可知立方体中这样的极大独立集有 4 个。

因此我们得到:

$$I_m(3 - cube, x) = 2x^4 + 4x^2$$

用  $I$  表示立方体的独立集, 根据  $I$  包含的顶点数可分成如下四种情形:

Case 1.  $|I| = 4$ , 则  $I = X$  或  $I = Y$ ;

Case 2.  $|I| = 3$ , 则  $I$  中的 3 个顶点必属于同一分部, 否则至少有两个点相邻; 反之,  $X$  (或  $Y$ ) 中任 3 个顶点组成这样一个独立集。由  $2 \times C_4^3 = 8$  可知共有 8 个这样的独立集;

Case 3.  $|I| = 2$ , 若  $I$  的两个顶点分属不同分部则  $I$  是极大独立集, 从前

面讨论可知有 4 个；若  $I$  的两个顶点属于同一分部， $2 \times C_4^2 = 12$ ；因此一共有 16 个这样的独立集；

Case 4.  $|I| = 1$ ，显然恰有 8 个这样的独立集。

从以上分析可得：

$$I(3 - cube, x) = 2x^4 + 8x^3 + 16x^2 + 8x + 1$$

由引理 1 我们就得到下面的结论：

定理 1.

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

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

## § 2.2 $B_{16}N_{16}$ 的 *Clar* 多项式和 *sextet* 多项式

$B_{16}N_{16}$  是含 32 个顶点的 3-正则图，它有 18 个面，其中 12 个是六边形面，6 个是四边形面。作为一个不含割边的 3-正则偶图， $B_{16}N_{16}$  有完美匹配。在  $B_{16}N_{16}$  的一个平面嵌入 (见 Fig 10) 中，用  $h_i$  ( $i=1, 2, \dots, 12$ ) 表示六边形，在  $B_{16}N_{16}$  的六边形对偶图  $C_{12}$  (见 Fig 11) 中，用  $v_i$  表示对应  $h_i$  的顶点。

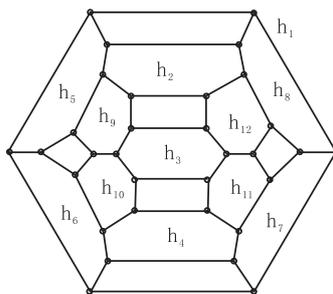


Fig. 10  $B_{16}N_{16}$  的一个平面嵌入

从  $B_{16}N_{16}$  的空间结构 (见 Fig 6) 我们可以注意到一个明显的事实：任意取定一个六边形的面，只需通过旋转就可以在保持  $B_{16}N_{16}$  外形不变的前提下将此六边形置于底面。即对任意两个六边形，都存在  $B_{16}N_{16}$  的自同构群  $Aut(B_{16}N_{16})$  中的某个元素，将一个六边形变换为另一个六边形，因此  $B_{16}N_{16}$  的 12 个六边形在  $Aut(B_{16}N_{16})$  的作用下是传递的。由六边形

对偶图的定义可知  $B_{16}N_{16}$  的六边形对偶图  $C_{12}$  是顶点传递图。

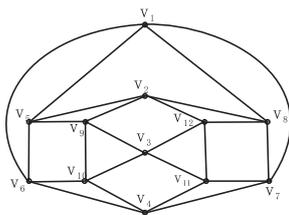


Fig. 11  $C_{12}$

引理 2:  $C_{12}$  的任意极大独立集  $I$  均满足  $3 \leq |I| \leq 4$

证明:  $C_{12}$  是四正则图, 任取  $C_{12}$  中不相邻的两个顶点构成集合  $T$ , 则  $|T \cup N(T)| \leq 2 + 2 \times 4 = 10 < 12 = V(C_{12})$ 。因此  $C_{12}$  中至少还有一点与  $T$  中的两个顶点均不相邻,  $|I| \geq 3$ ;  $C_{12}$  的 12 个顶点恰属于 4 个没有公共顶点的三角形:  $\Delta v_1 v_5 v_6$ ,  $\Delta v_3 v_9 v_{10}$ ,  $\Delta v_4 v_7 v_{11}$ ,  $\Delta v_2 v_8 v_{12}$ 。由于三角形三个顶点两两相邻, 因此  $I$  至多包含每个三角形中的一个顶点,  $|I| \leq 4$ , 命题成立。  $\square$

$I$  是  $C_{12}$  的独立集且  $|I| = 4$ , 则  $I$  是极大独立集, 记  $I$  对应到  $B_{16}N_{16}$  的六边形的集合为  $S$ , 则  $|S| = 4$  且  $S$  是极大独立六边形的集合。

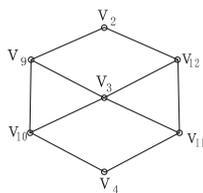


Fig. 12  $G_1$

引理 3:  $B_{16}N_{16}$  的任意极大独立六边形集  $S$  满足  $|S| = 4$ , 则  $B_{16}N_{16} - S$  有完美匹配

证明: 自同构群  $Aut(B_{16}N_{16})$  对  $B_{16}N_{16}$  上六边形的作用是传递的, 不失一般性, 可设  $h_1 \in S$ , 则与  $h_1$  相邻的四个六边形都不在  $S$  中。考查  $B_{16}N_{16} - h_1$  的六边形对偶图  $G_1$  (如 Fig 12 所示), 记  $S$  对应  $C_{12}$  中的  $I$ , 那么  $I$  在  $G_1$  上的限制恰是  $G_1$  的含 3 个顶点的独立集, 由图可知共有 3 种情况:  $\{v_2, v_3, v_4\}$ ,  $\{v_2, v_{10}, v_{11}\}$ ,  $\{v_4, v_9, v_{12}\}$ 。如果是第一种情况,  $B_{16}N_{16} - S$  的图形是两个正方形, 如果是二、三两种情况,  $B_{16}N_{16} - S$  的图形都是四条没有公共顶点的边, 因此都有完美匹配。命题成

立。 □

引理 4:  $C_{12}$  的任意含 2 个顶点的独立集  $I_0$ , 都存在含四个顶点的极大独立集  $I$ , 使得  $I_0 \subset I$

证明: 记  $I_0 = \{u, v\}$ , 由  $C_{12}$  的顶点传递性, 可取  $u = v_1$ , 因为  $v$  不能取  $u$  及其邻点, 所以  $v \in \{v_2, v_3, v_4, v_9, v_{10}, v_{11}, v_{12}\}$ , 不论  $v$  取哪个点, 此时的  $I_0$  必是引理 3 中某个  $I$  的子集, 命题成立。 □

引理 5: 若  $C_{12}$  的任意极大独立集  $I$  满足  $|I| = 3$ , 则对应的  $B_{16}N_{16} - S$  没有完美匹配

证明: 不妨设  $v_1 \in I$ , 则  $I$  在  $G_1$  上的限制恰是  $G_1$  中含两个顶点的极大独立集, 从 Fig 12 容易看出, 只有  $\{v_9, v_{11}\}$ ,  $\{v_{10}, v_{12}\}$  两种情况, 此时  $S = \{h_1, h_9, h_{11}\}$  或  $\{h_1, h_{10}, h_{12}\}$ , 对应的  $B_{16}N_{16} - S$  由两棵各含 7 个顶点的树组成, 因此没有完美匹配, 命题成立。 □

定理 2:  $B_{16}N_{16}$  中的非空的六边形集合  $S$  是  $B_{16}N_{16}$  的 *Clar* 结构当且仅当  $|S| = 4$

证明: 由引理 2 可知  $|S| \leq 4$ , 下面对  $|S|$  的所有不同取值分别讨论:

(1)  $|S| = 1$  或  $|S| = 2$ , 则由引理 4 可知, 存在  $S_0$ ,  $|S_0| = 4$ , 使得  $S \subset S_0$ , 从引理 3 可知  $B_{16}N_{16} - S_0$  有完美匹配, 此时  $S$  中还可以增加满足 *Clar* 结构定义的六边形, 所以  $S$  不是 *Clar* 结构;

(2)  $|S| = 3$  且  $S$  不是极大独立六边形集合时, 可作与 (1) 类似的讨论得出  $S$  不是 *Clar* 结构;

(3)  $|S| = 3$  且  $S$  是极大独立六边形集合时, 由引理 5,  $B_{16}N_{16} - S$  没有完美匹配, 所以  $S$  不是 *Clar* 结构;

(4)  $|S| = 4$  由引理 2 可知  $S$  是极大的, 依引理 3, 此时  $B_{16}N_{16} - S$  有完美匹配, 所以  $S$  是 *Clar* 结构。 □

引理 6: 若  $S$  是  $B_{16}N_{16}$  的含 3 个互相独立的六边形的集合, 则  $S$  是 *sextet pattern* 当且仅当  $S$  非极大

证明: 必要性: 用反证法, 若  $S$  是极大的, 则由引理 5,  $B_{16}N_{16} - S$  没有完美匹配, 因此  $S$  不是 *sextet pattern*, 矛盾。

Degree papers are in the "[Xiamen University Electronic Theses and Dissertations Database](#)". Full texts are available in the following ways:

1. If your library is a CALIS member libraries, please log on <http://etd.calis.edu.cn/> and submit requests online, or consult the interlibrary loan department in your library.
2. For users of non-CALIS member libraries, please mail to [etd@xmu.edu.cn](mailto:etd@xmu.edu.cn) for delivery details.

廈門大學博碩士論文