

平面稠环芳烃的产生和计数*

何文辰

何文杰

(河北化工学院)

(河北省科学院)

摘 要

本文提出了一个用计算机产生所有平面稠环芳烃的方法,并给出了直到9个六元环为止的所有多六图的计数结果。*

一、引 言

本文是我们在非数值计算领域工作^[1]的继续。文中所研究的稠环芳烃去氢骨架图是平面蜂窝图的局部,亦称多六图。

我们的讨论将仅限于平面多六图的计数,就是说不考虑任何形式的螺省(因为它们有着非平面的结构)。

请注意这里使用的“平面”一词不顾及由于分子的内部相互作用造成的扭曲。

多六图的产生和计数问题是有名的六角动物细胞生长问题^[2-4],尽管不少作者对此进行过研究^[2-20],但迄今为止仍属未解决的问题。有的文献^[8,13]中,多六图的计数把非平面的螺省包括了进去;有的文献^[11]中又把7环的晕苯当作6环的环省,因而稠环芳烃的计数是混乱的。

本文中,我们提出一个方法,可以产生包括晕稠(corona-fused)在内的所有平面稠环芳烃,而且还给出了到9环为止的全部平面稠环芳烃的分类和计数结果。

二、稠环芳烃分子的特征图,特征图的 H_e 矩阵以及稠环芳烃分子(即多六图)的命名:

所谓稠环芳烃分子的特征图(即约化偶图) $G(V, E)$ ^[21,23]是这样一個图,其顶点集 V 为该稠环芳烃的所有苯环的中心点组成,而其边集 E 是由那些连接所有相邻苯环中心点的线段组成^[14,21-23]图1给出了一个例子,图中多六图带有垂直边,其对

* 本文曾发表于英国出版的四面体杂志

Tetrahedron vol. 42 No. 19. 5291—5299 (1986)

** 最近我们用VAX II小型机已经得到了到12环为止的多六图分类计数。

应的特征图带有横边。特征图中的顶点序号是从上到下从左到右扫描得到的。

所谓 $G(V, E)$ 的 He 矩阵是一个 $N \times N$ 矩阵 (a_{ij}) ，这里 N 是特征图 $G(V, E)$ 的顶点数目，而 $V_i (i = 1, 2, \dots, N)$ 代表的是 $G(V, E)$ 的第 i 个顶点。

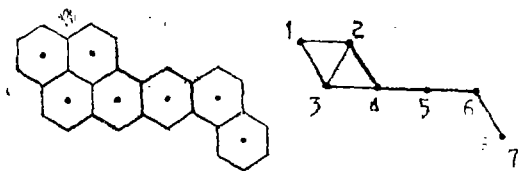


图1 多六图和它的特征图

$$a_{ij} = \begin{cases} 0 & (\text{若 } i=j, \text{ 或 } V_i \text{ 与 } V_j \text{ 不相邻}) \\ 1 & (\text{若 } V_i \text{ 与 } V_j \text{ 相邻, 且 } \overline{ij} \text{ 边与水平正向成角为 } k\pi) \\ 2 & (\text{若 } V_i \text{ 与 } V_j \text{ 相邻, 且 } \overline{ij} \text{ 与水平正向成角为 } k\pi + \pi/3) \\ 3 & (\text{若 } V_i \text{ 与 } V_j \text{ 相邻, 且 } \overline{ij} \text{ 与水平正向成角为 } k\pi + 2\pi/3) \end{cases}$$

(注：这里水平正向规定为从左到右)

图1的特征图所对应的He矩阵是：

$$(a_{ij}) = \begin{pmatrix} 0 & 1 & 3 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 1 & 0 & 2 & 3 & 0 & 0 & 0 \\ 3 & 2 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 3 & 1 & 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & 0 & 3 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 3 & 0 \end{pmatrix}$$

根据图1 (或者根据它的He矩阵)，我们可以写下这个多六图的一个命名序列^[1] (或者就叫做名字吧) 为

$$2; 4/6, 7; 5; 2, 4; 1, 3$$

这个命名序列被符号“/”分为两节。第一节中的数代表的是从上到下 (除了最底下一层以外) 各层的顶点数目，第二节中的数字排列代表的是当我们把特征图逆时针旋转 60° 后每一横排 (即两个分号之间) 的顶点的原来序数的序号排列。

用旋转和反射变换的办法^[1]，我们可以得到该多六图的12个He矩阵和12个命名序列相应于12不同的方位，从这12个命名序列中的那些第一节中具有最少层次的中间挑选字典序极小者作为标准命名 (连同标点符号一起比较，采用ASCII码认定分号“;”大于逗号“,”)。至于细节请参阅文献^[1]。

三、多六图的计算机产生:

从 N 个顶点的特征图(简称 N -图)产生 $(N+1)$ -图的步骤如下

第一步: 从一个一定取向的特征图的一个顶点 V_i ($i = 1, 2, \dots, N$) 向右延伸一个步长, 产生一个新的顶点 V_{i+1} , (如果这个新产生的点与原来 N -图中的任一顶点重合, 就是说对于原来的 N -图来说 $a_{i, i+1} = 1$, 则这个新产生的点应被取消), 并将原来 N -图中的顶点 $i+1, i+2, \dots, N$ 各序号分别改为 $i+2, i+3, \dots, N+1$ 。

第二步: 求出这个新产生的 $(N+1)$ -图的一个命名。若在原来的 N -图中, V_i 属于第一节第 m 层和第二节第 p 层, 则在新产生的 $(N+1)$ -图中 V_{i+1} 应属于第一节第 m 层(从而使这一层的顶点总数从 A_m 变成 A_m+1)和第二节第 $(p-1)$ 层。因为在第二节每一层中的数字都是递增排列的, 因而我们可以很容易地把数字 $i+1$ 插入到第 $p-1$ 层的适当位置, 如果 $p=1$, 那么 V_{i+1} 将位于第二节中原来第一层的前面一层, 因而它就成了第二节的新的第一层了。

第三步: 求出这个新产生的 $(N+1)$ -图的He矩阵 (\bar{a}_{ij}) 这个矩阵应是 $(N+1) \times (N+1)$ 矩阵, 其元素如下:

$$1) \bar{a}_{ij} = \begin{cases} a_{ki} & (k \leq j \leq i) \\ a_{k-1, i-1} & (i+2 \leq k \leq j) \\ a_{k, i-1} & (k+2 \leq i+2 \leq j) \end{cases}$$

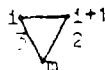
式中 a_{ki} 和 \bar{a}_{ki} 分别是原来的 N -图和新产生的

$(N+1)$ -图的矩阵元。

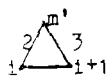
$$2) \bar{a}_{i, i+1} = 1$$

$$1 \longrightarrow 1+1$$

$$3) \bar{a}_{i+1, m} = 2 \quad (\text{若 } \bar{a}_{im} = 3 \text{ 且 } m > i+1)$$



$$4) \bar{a}_{m', i+1} = 3 \quad (\text{若 } \bar{a}_{m' i} = 2 \text{ 且 } m' < i)$$



$$5) \bar{a}_{i+1, i+2} = 1 \quad (\text{若 } V_{i+2} \text{ 与 } V_{i+1} \text{ 属于第一节的同一层, 而在第二节中 } V_{i+2} \text{ 比 } V_{i+1} \text{ 高一层})$$

$$1+1 \longrightarrow 1+2$$

$$6) \bar{a}_{i, i+1} = 2 \quad (\text{若 } V_j \text{ (} j < i+1 \text{) 在第一, 二节中均比 } V_{i+1} \text{ 高一层})$$



$$7) \bar{a}_{i+1, i} = 3 \quad (\text{若 } V_j \text{ (} j > i+1 \text{) 在第一节中比 } V_{i+1} \text{ 低一层, 而在第二节中与 } V_{i+1} \text{ 同层})$$

$$8) \bar{a}_{k, i+1} = \bar{a}_{i+1, j} = 0 \quad (k \leq i+1 \leq j) \quad (\text{对于其它情形})$$



$$9) \bar{a}_{rs} = \bar{a}_{sr} \quad (r > s)$$

第四步: 按文献^[1]中的方法求出这个新产生的 $(N+1)$ -图的标准命名。

第五步: 对于一个一定取向的 N -图的每一个顶点 V_i ($i = 1, 2, \dots, N$), 进行以

上的步骤一至四, 如果新产生的 $(N+1)$ -图与先前产生过的 $(N+1)$ -图一致则这个新图应予以取消。

第六步: 按文献^[1]中的方法对所产生的图进行分类计数。

第七步: 对于此 N -图的另 5 个旋转方向进行步骤一至六。

第八步: 对于每一个其它的 N -图进行步骤一至七。这样, 我们就可以得到全部的 $(N+1)$ -图以及它们的标准命名序列。

不过在产生 $(N+1)$ -图时, 要避免在一步产生中产生出多于一个的顶点, 例如, 在图2a中, 在 V_{i+1} 产生的同时, 中心点也产生了出来, 而在图2f中, 一步产生, 竟有 1 个新的顶点同时产生出来。为了避免这种情形引起的计数错误, 我们采用了以下办法。

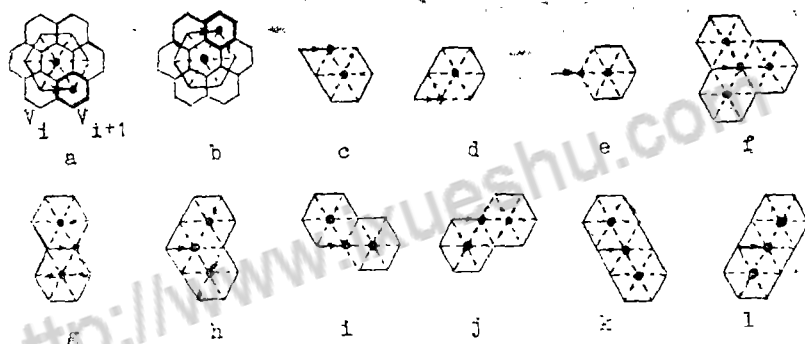


图2 一次产生出多于一个顶点的情形

首先, 我们限制产生仅在 $\bar{a}_{i+1, i} = 0$ ($f > i+1$) 的情形下进行, 换句话说对于 $\bar{a}_{i+1, i} \neq 0$ ($f > i+1$) 的“产生”将予以排除。这个限制条件之所以合理是因为它不会减少多六图的计数, 但却可以大大减少非数值计算工作。

有了这个限制条件, 我们只需要进一步排除图2a的情形 (2b~2c各种情形已为上面那个限制条件所排除) 就够了。换句话说, 对于图3所示的待生长图 (特征图的一个片断) 从 V_i 去产生新顶点 V_{i+1} 必须排除。利用 He 矩阵元 a_{ij} , 我们可以很容易地知道象图3这样的片断是否存在, 这样我们就避免了一个“产生”步骤, 产生出多于一个顶点的情况。

多六图的产生、命名^[1], 分类和计数可以很容易地进行, 因为其算法属多项式算法 (P算法)。即使对相当大的 N (多六图的六边形数目) 这个算法仍然有效, 只要计算机的存储量足够大, 速度足够快, 就可以一直进行下去。从 N -图到 $(N+1)$ -图的产生程序的框图如下:



图3 “产生”的排除

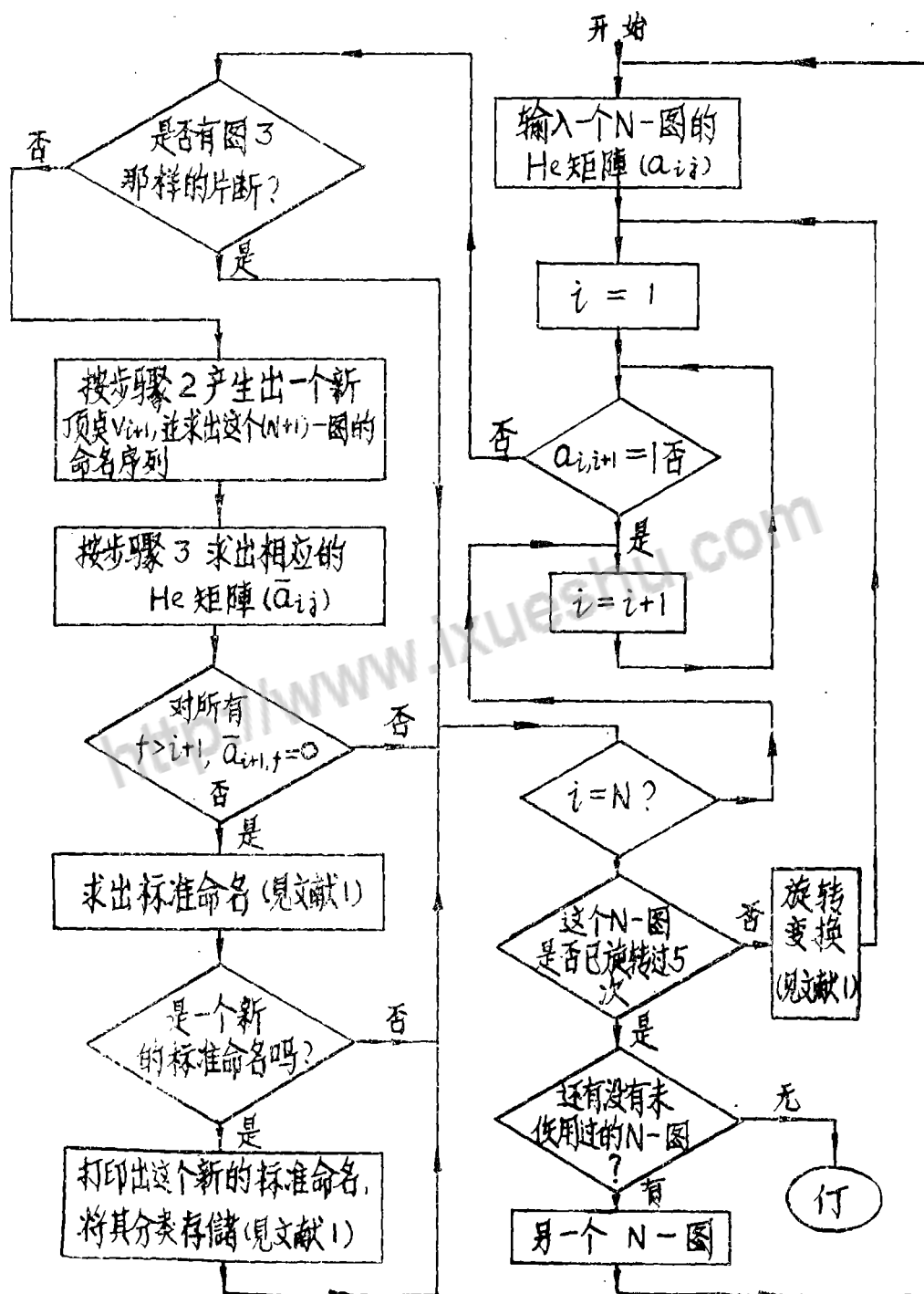


图4 “产生”程序的框图

四、平面多六图的计数:

仅用一台微机,我们就得到了到9个苯环为止的平面稠环芳烃系统的命名分类和计数。其结果如表1所示(因命名序列太多故无法在此抄录),至于稠环芳烃的计算机分类方法,包括将其分成具有开库勒结构的和不具有开库勒结构的方法可参阅文献^[1]。

表1中, k 是一个稠环芳烃分子具有的开库勒结构的数目, B 是无分支链稠, C 是有分支链稠, D 代表周稠或环周稠, E 代表晕稠而 F 代表 D 和 E 的衍稠。

表1 稠环芳烃的产生和分类

$k \neq 0$							$k = 0$			
N	B	C	D	F	E	总数	D	F	总数	总数
1	1	0	0	0	0	1	0	0	0	1
2	1	0	0	0	0	1	0	0	0	1
3	2	0	0	0	0	2	1	0	1	3
4	4	1	1	0	0	6	0	1	1	7
5	10	2	1	2	0	15	1	6	7	22
6	24	12	3	12	0	51	3	27	30	81
7	67	51	6	66	0	190	9	132	141	331
8	182	229	22	331	1	765	27	644	671	1436
9	520	969	60	1676	1	3226	119	3165	3284	6510

我们的结果与文献^[5,6,8-11,13,17,20]中的数据不同。

(1) 我们的结果包括进了晕稠或环稠的情形,然而 DZG (Düsseldorf—zagreb 德、南小组) 的结果中却不包括,因此从 $N = 1$ 到 7, 我们的数据和他们的是一样的,但是对于 $N \geq 8$, 就出现了不同(见表2)。DZG 的边界码方法遗漏的图(特征图)如图5所示。

表2 DZG 数和我们的数据的不同

N	DZG 数	我们的数据
8	1435	1436
9	6505	6510

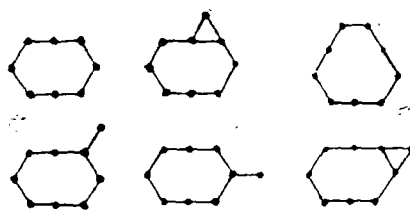


图5 表2的图解说明

(2) Balaban-Harary 数^[8,13]不包括周稠和晕稠, 却包括螺省, 仅就链稠而言, $N \geq 6$ 时, Balaban-Harary 数就和我们的不一样了(见表 3), Balaban-Harary 数比我们多出来的部分正好是螺省的数目(见图 6)。

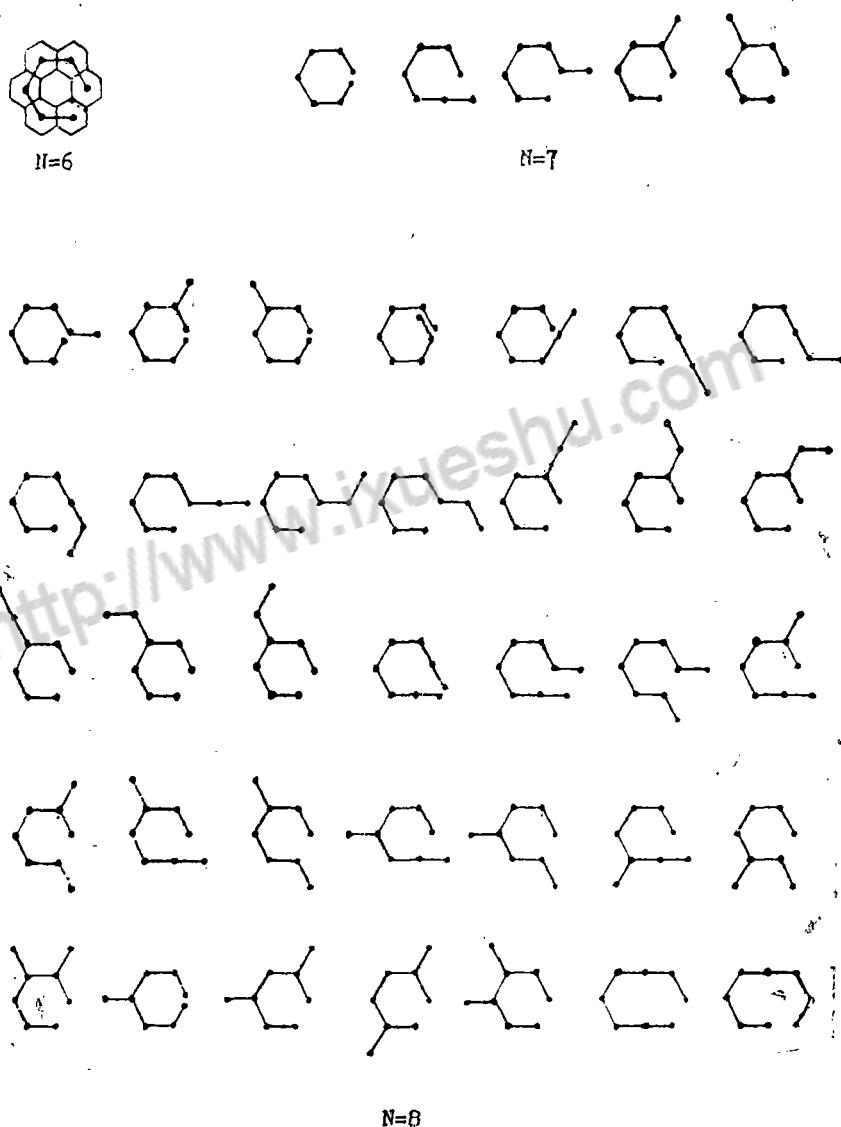


图 6 螺省

表3 链稠数

N	Balaban-Harary 数	我们的数 B+C
1	1	1
2	1	1
3	2	2
4	5	5
5	12	12
6	37	36
7	123	118
8	446	411
9	1689	1489

表4 Lunnon数和我们的数据的差别

N	Lunnon 数	我们的数
1	0	0
2	0	0
3	0	0
4	0	0
5	0	0
6	1	0
7	2	0
8	13	1
9	67	5

(3) Lunnon数^[11]包括了平面单环稠,但他把7环的晕稠片断当成了6环的环稠片断。他的结果和我们结果的差别如表4和图7所示。

(4) Dias数^[6]也与我们的结果不同,他的链稠系统包括了链稠螺省在内因而和Balaban-Harary数是一样的(见表3),但对非链稠系统而言,在Dias的工作^[6]中,只考虑了闭壳层结构即开库勒数 $k \neq 0$ 的非自由基结构,实际上他连非自由基结构也遗漏了一些。

五、讨论:

1. 以类似于本文的方法,我们可以进行三角形或正方形组成的稠接系统的产生和计数。

2. 如果在前述步骤3中,除了情况2)~4)以外第 $(i+1)$ 排和第 $(i+1)$ 列的元素 $\overline{a_{k,i+1}} = \overline{a_{i+1,j}}, j=0$ ($k \leq i+1 \leq j$),则我们可以得到链稠和周稠(包括螺省)的计数是和Balaban-Harary数一样的。

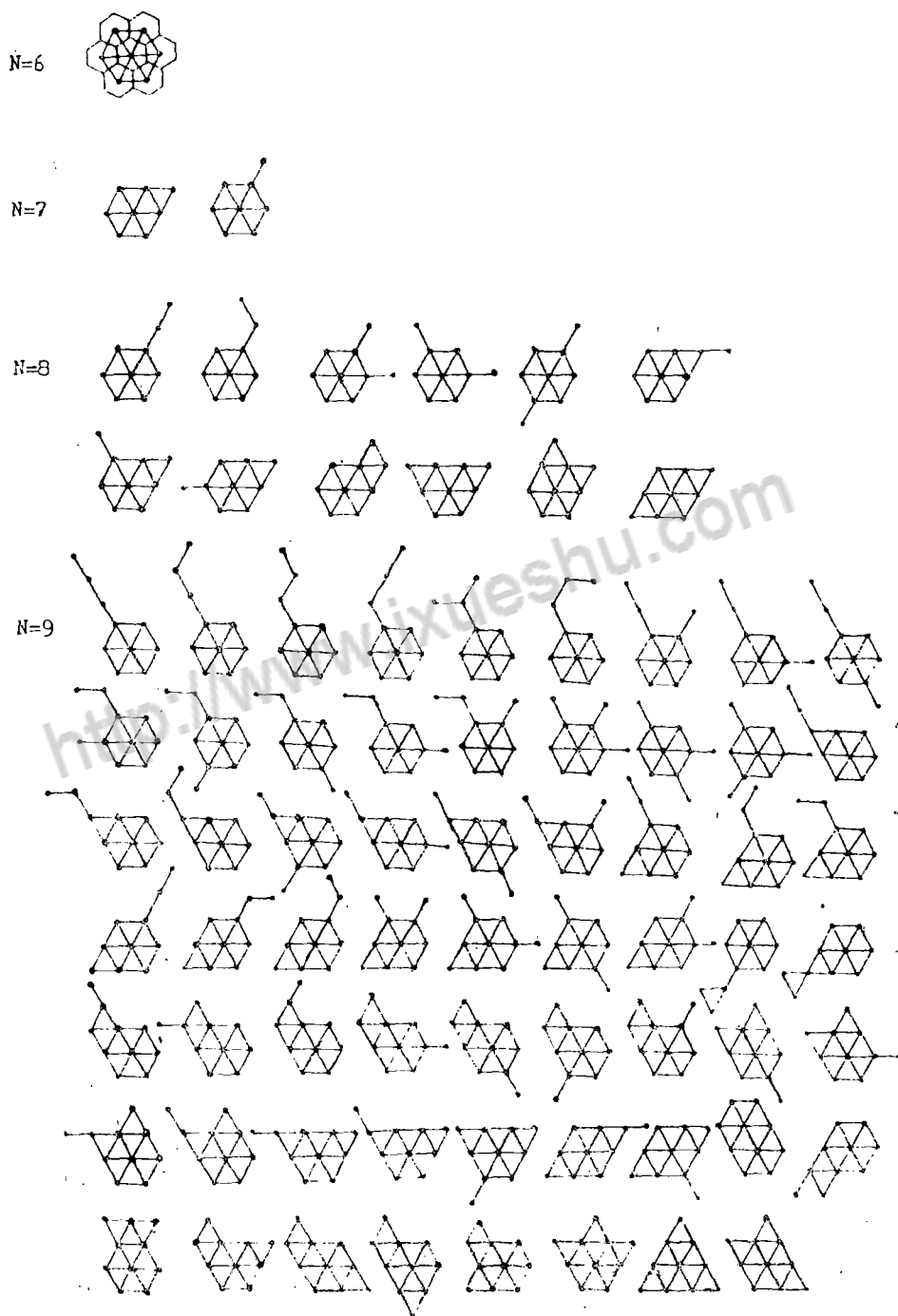


图 7 表 4 的说明

参考文献

1. Wenchen He and Wenjie He: *Theoret. Chim. Acta* 68, 301-313 (1985)
2. Harary, F.: "Graph Theory", Addison-Wesley, Reading MA 1972.
3. Harary, F. and Palmer, E.M.: *Graphical Enumeration*, New York: Academic 1973.
4. Harary, F. In: "Graph Theory and Theoretical Physics", Edited by Harary, F., Academic, New York, 1967, p. 1.
5. Knop, J. V.; Muller, W. R.; Szymanski, K. and Trinajstić, N.: *Computer Generation of Certain Classes of Molecules*, SKTH/Kemija u industriji, Zagreb-1985.
6. Dias, J. R.: *J. Chem. Inf. Comput. Sci.* 22, 15 (1982)
7. Balaban, A. T.: *Tetrahedron* 27, 6115 (1971)
8. Harary, F. and Read, R. C.: *proc. Edinburgh Math. Soc. Sec. II*, 17, 1 (1970)
9. Klarner, D. A.: *Fibonacci Quart.* 3, 9 (1965)
10. Klarner, D. A.: *Can. J. Math.* 19, 851 (1967)
11. Lunnnon, W.F. in: "Graph Theory and Computing", Edited by Read, R. C., Academic, New York, 1972, p. 87.
12. Balaban, A.T. (ed) *Chemical Applications of Graph Theory*, London: Academic press, 1976, p. 63.
13. Balaban, A. T. and Harary, F.: *Tetrahedron* 24, 2505-2516 (1968)
14. Balaban, A. T.: *Tetrahedron* 25, 2949-2958 (1969)
15. Balaban, A. T.: *Math. Chem.* 2, 51 (1976)
16. Dias, J. R.: *Math. Chem.* 14, 83 (1983)
17. Knop, J. V.; Szymanski, K.; Jeričević, Ž. and Trinajstić, N.: *Math. Chem.* 16, 119 (1984)
8. Knop, J. V.; Szymanski, K.; Jeričević, Ž. and Trinajstić, N.: *J. Comput. Chem.* 4, 23 (1983)
19. Trinajstić, N.; Jeričević, Ž.; Knop, J. V.; Müller, W. R. and Szymanski, K.: *Pure Appl. Chem.* 55, 379 (1982)
20. Živković, T.: *Theoret. Chim. Acta* 61, 363 (1982)
21. Polansky, O. E. and Rouvray, D. H.: *Math. Chem.* 2, 147 (1976)
22. Polansky, O. E. and Rouvray, D. H.: *Math. Chem.* 2, 63 (1976)
23. Balaban, A. T.: *Pure Appl. Chem.* 54, 1075 (1982).



论文写作，论文降重，
论文格式排版，论文发表，
专业硕博团队，十年论文服务经验



SCI期刊发表，论文润色，
英文翻译，提供全流程发表支持
全程美籍资深编辑顾问贴心服务

免费论文查重：<http://free.paperyy.com>

3亿免费文献下载：<http://www.ixueshu.com>

超值论文自动降重：http://www.paperyy.com/reduce_repetition

PPT免费模版下载：<http://ppt.ixueshu.com>

阅读此文的还阅读了：

- [1. 4种稠环芳烃荧光光谱的量子化学研究](#)
- [2. 行严格长为偶数的平面分拆的计数](#)
- [3. HE矩阵和稠环芳烃\(PAH\)的一种命名法](#)
- [4. 土法炼焦污染区内多环芳烃大气排放,环境分布及影响](#)
- [5. 溴代稠环芳烃的氧化溴化法合成](#)
- [6. 煤合成原油中的多甲基苯和稠环芳烃](#)
- [7. 激光溅射合成全氯代稠环芳烃](#)
- [8. 重质稠环芳烃的固体核磁共振光谱研究](#)
- [9. 面近正则外平面地图的色计数函数](#)
- [10. 稠合多环芳烃结构一览及有关其结构预测计数的注解](#)
- [11. 稠环芳烃的致癌性](#)
- [12. 苯稠环芳烃的环电流与芳香性](#)
- [13. 双奇异平面地图的计数](#)
- [14. 环境空气中稠环芳烃的分析](#)
- [15. 苯稠环芳烃环电流的计算](#)
- [16. 稠环芳烃Kekule结构式的书写](#)

- [17. AN2000稠环芳烃高效外加剂的研制](#)
- [18. 平面稠环芳烃的产生和计数](#)
- [19. 新型仿细胞色素P—450单加氧酶模型:环\(4\)芳烃—金属卟啉](#)
- [20. 稠环芳烃的致癌性](#)
- [21. \$m \times n\$ 平面格图圈计数的一些结果](#)
- [22. 平面格图中定长圈的计数](#)
- [23. 带根单行平面地图的计数](#)
- [24. 稠环芳烃甲基衍生物甲基立体增活的CNDO研究](#)
- [25. 热解温度对烟草稠环芳烃产生量的影响](#)
- [26. 用时间分辨荧光技术分析稠环芳烃](#)
- [27. 稠环芳烃的管理](#)
- [28. 稠环芳烃Kekule结构式的书写](#)
- [29. 多环芳烃结构与命名及对称性分类——正规苯型稠环芳烃](#)
- [30. 行严格长为偶数的平面分拆的计数](#)
- [31. 烹饪过程中多环芳烃的产生及控制](#)
- [32. 从3,4-苯并芘谈稠环芳烃的癌化学](#)
- [33. 平面上 \$\(5/2\) \times n\$ 和 \$\(4/2\) \times n\$ 矩形格图圈的计数](#)
- [34. 稠环芳烃和多环芳烃成因模拟](#)
- [35. 稠环芳烃直接加氢的分子模拟研究](#)
- [36. 平面上 \$4 \times n\$ 矩形格图中圈的计数](#)
- [37. GaPO₄-LTA单晶中稠环芳烃类物质\(PAHs\)的制备与表征](#)
- [38. 生物工程用稠环芳烃衍生物](#)
- [39. 一般平面地图依点和面数的计数\(I\)](#)
- [40. 激光作用于稠环芳烃及其衍生物产生碳原子簇的负离子质谱研究](#)
- [41. 几种稠环芳烃EL材料的量子化学研究](#)
- [42. 多环芳烃的结构预测计数和一揽子分子轨道计算](#)
- [43. 复印机的危害有多大?](#)
- [44. 任意稠合多环芳烃 \$\pi\$ -键总能近似计算的通式](#)
- [45. 关于非整数次Sobolev空间的几个定理](#)
- [46. 氯仿至全氯代稠环芳烃的液相电弧合成](#)
- [47. PAH\(多环芳烃\)的危害及产生的途径](#)
- [48. Pluronic F68胶束水溶液对稠环芳烃的增溶](#)
- [49. 激光作用于稠环芳烃及其衍生物产生碳原子簇的负...](#)
- [50. 苯稠环芳烃环电流的计算](#)