

兰州大学

毕 业 论 文

(本 科 生)

论文题目 (中文) (4, 6)-富勒烯分子图中的低阶匹配计数

论文题目 (外文) Number of Lower-Order Matchings in (4,6)-
Fullerene Graphs

学 生 姓 名 魏志峰

导师姓名、职称 张和平 教授

学生所属学院 萃英学院

专 业 数学萃英班

年 级 2011

兰州大学教务处

诚信责任书

本人郑重声明：本人所呈交的毕业论文（设计），是在导师的指导下独立进行研究所取得的成果。毕业论文（设计）中凡引用他人已经发表或未发表的成果、数据、观点等，均已明确注明出处。除文中已经注明引用的内容外，不包含任何其他个人或集体已经发表或在网上发表的论文。

本声明的法律责任由本人承担。

论文作者签名：_____

日 期：_____

关于毕业论文（设计）使用授权的声明

关于毕业论文（设计）使用授权的声明

本人在导师指导下所完成的论文及相关的职务作品，知识产权归属兰州大学。本人完全了解兰州大学有关保存、使用毕业论文的规定，同意学校保存或向国家有关部门或机构送交论文的纸质版和电子版，允许论文被查阅和借阅；本人授权兰州大学可以将本毕业论文的全部或部分内 容编入有关数据库进行检索，可以采用任何复制手段保存和汇编本毕业论文。本人离校后发表、使用毕业论文或与该论文直接相关的学术论文或成果时，第一署名单位仍然为兰州大学。

本毕业论文研究内容：

☒ 可以公开

☐ 不易公开，已在学位办公室办理保密申请，解密后适用本授权书。

（请在以上选项内选择其中一项打“√”）

论文作者签名：_____

导师签名：_____

日 期：_____

日 期：_____

(4, 6)-富勒烯分子图中的低阶匹配计数

中文摘要

我们将对 (4, 6)-富勒烯分子图中不高于六阶的匹配进行计数。基于新的递归计数方法, 我们建立了计算公式, 该公式用分子图的结构指标显式表达了匹配数。作为计数的准备, 我们对 (4, 6)-富勒烯分子图做了结构分类。同时我们得到了 (4, 6)-富勒烯分子图的一些有趣的结构性质, 尤其是几个由局部形态推知分子整体结构的结果。我们的工作纠正了已发表的论文中存在的错误。

关键词: 氮硼富勒烯, (4, 6)-富勒烯, 结构性质, 6-匹配, 计数

NUMBER OF LOWER ORDER MATCHINGS IN (4,6)-FULLERENE GRAPHS

Abstract

We count the number of matchings of order no more than six in (4, 6)-fullerene graphs. With a new recurrence method, closed formula for the number of matchings is obtained, based on the number of hexagon faces and some other structural indices. As preparation, we give a structural classification of (4, 6)-fullerene graphs and several induction results in (4,6)-fullerene graphs from local to global structure. We have corrected some mistakes in some published papers.

Key words: boron-nitrogen fullerene, (4,6)-fullerene, structure, 6-matching, enumeration

目 录

中文摘要	I
英文摘要	II
引言	1
第一章 准备工作	2
第二章 (4, 6)-富勒烯分子图的结构分类	4
2.1 (4, 6)-富勒烯分子图中六长圈的结构	4
2.2 (4, 6)-富勒烯分子图局部决定整体结构的定理	9
2.2 (4, 6)-富勒烯分子图结构分类定理	12
第三章 (4, 6)-富勒烯分子图中的低阶匹配计数	13
3.1 (4, 6)-富勒烯分子图中计数问题的已有结果	13
3.2 (4, 6)-富勒烯分子图中 4-匹配的计数	14
3.3 (4, 6)-富勒烯分子图中 5-匹配的计数	16
3.4 (4, 6)-富勒烯分子图中 6-匹配的计数：递推关系式	17
3.5 (4, 6)-富勒烯分子图中 6-匹配的计数，进一步处理	18
3.6 小结：(4, 6)-富勒烯分子图中低阶匹配计数结果	21
结论	23
参考文献	24
附录	25
致谢	29
论文（设计）成绩	30

引言

(4, 6)-富勒烯分子图的研究源自化学, 是氮硼富勒烯的数学模型。从数学上来说, (4, 6)-富勒烯是三正则的可平面图, 其面均为四边形或六边形。 k -匹配是 k 条两两无公共端点的边的集合。我们的目标是计算(4,6)-富勒烯分子图中低阶匹配(阶数不高于 6)的个数。

事实上, 图中的匹配个数具有理论和应用上的重要性。在一些图类中, 其匹配多项式(匹配数的生成函数)与图的其他性质密切相关。例如参考文献 [5, 9] 指出了图的匹配多项式和特征多项式的关系。在 1971 年, Hosoya 发现了分子图中各阶匹配个数之和与分子的沸点等性质之间的联系。

匹配计数方面的工作目前已经取得一些结果(参看参考文献 [2, 12, 13])。Behmaram [3] 最近计算了(4,6)-富勒烯分子图中不高于四阶的匹配的个数。Y. Li 等 [11] 计算了 5-匹配的个数。例如, [11] 的方法是, 先计数(4, 6)-富勒烯分子图中 5 条边形成的子图中不是 5-匹配的个数。Behmaram [3] 的方法与上述方法相同。虽然这种方法理论上可行并且他们的操作过程非常精细, 他们的论文中还是出现了一些疏忽。

在 Behmaram 的论文 [3] 中, 作者等同了 (4, 6)-富勒烯图的六边形面和图中的六长圈, 因而导致了错误结果。同时, 在 [3] 中计算 4-匹配个数的部分, 作者应用基本计数原理出现了错误, 因而对 4-匹配计数的结果是错的。对于 Y. Li 的论文 [11], 由于引用了论文 [3] 的一个错误结果, 其对 5-匹配的计数结果也是错误的。此外, 论文 [11] 计数其所谓的子图 n 时也出现了错误。

Vesalian 的论文 [12, 13] 分别对满足围长不小于 5 和 6 的图类计数了 5-匹配和 6-匹配的个数。但(4,6)-富勒烯分子图的围长为 4, 因而他的结果不适用。

这篇论文组织如下。在第一章, 我们将列出已有的一些结果作为准备。在第二章我们将给出一个(4,6)-富勒烯分子图的结构分类定理。分类定理基于(4,6)-富勒烯分子图中的几个由局部性质确定整体结构的结果, 他们又以六长圈的结构定理为基础。在第三章我们将应用递归方法对(4,6)-富勒烯分子图中不高于六阶的匹配进行计数并给出一组计算公式。

第一章 准备工作

这一章中我们将做一些准备工作，给出一些术语、记号以及引理。

令 G 为一图(我们考虑的图均为有限图)，我们将 G 的顶点集和边集分别记为 $V(G)$ 和 $E(G)$ 。将图 G 的顶点数和边数分别记为 $n(G)$ 和 $m(G)$ 。记图 G 的最小度(最大度)为 $\delta(G)$ ($\Delta(G)$)。将 G 的连通度和边连通度分别记为 $\kappa(G)$ 和 $\lambda(G)$ 。

引理 1.1 令 G 为一(4,6)-富勒烯分子图， s 和 h 分别为其中的四边形面和六边形面的个数。那么，

(1) [3]

$$s = 6$$

$$n = 2h + 8$$

$$m = 3h + 12;$$

若

(2) 若 $h \geq 1$ ，则 $h \geq 2$ ；

(3) G 的任意两个面不会有超过一条公共边；

(4) [6, 8] G 为二部图，因此不包含奇长圈；

(5) [8]

$$\kappa(G) = \lambda(G) = 3。$$

证明：第三条论断是图的三连通性的直接推论。于是只有第二条论断是需要证明

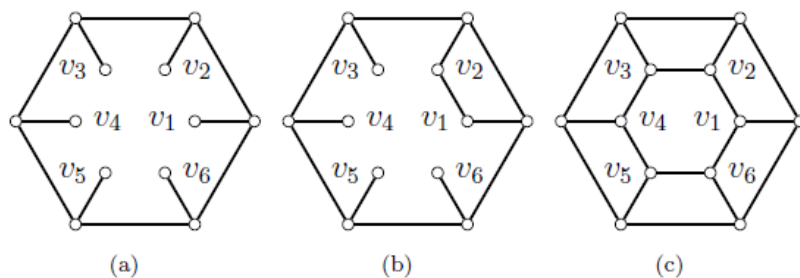


图 1.1 引理 1.1 证明的图

的。

第二条论断断言了，若一个(4,6)-富勒烯分子图含有六边形面，那么其六边形面的个数至少是 2。我们采用反证法。假设存在一个(4,6)-富勒烯分子图只含有一个六边形面(如图 1.1 的(a)所示)。由于 G 为平面图且为三正则的，于是(如图 1.1 的(b)所示)，

$$v_1 v_2 \in E(G)$$

同理可得，

$$v_2 v_3, v_3 v_4, v_4 v_5, v_5 v_6, v_6 v_1 \in E(G)$$

如图 1.1 的(c)所示。

而由于 G 是三正则的，于是 G 与图 1.1(c)中的图同构，因此 G 有至少两个六边形面，这是一个矛盾。命题得证。

引理 1.2 [1] 令 G 为一 k -连通图， C 为 G 中的一个 k 长圈， v 为 G 的一个顶点且满足 $v \in V(G) \setminus V(C)$ 。那么，存在 k 条连接 v 和 C 的内部不交的路，并且这 k 条路只交于点 v 。

第二章 (4, 6)-富勒烯分子图的结构分类

2.1 (4, 6)-富勒烯分子图中六长圈的结构

引理 2.1 [8] 令 G 为一(4,6)-富勒烯分子图, C 为其中的一个四长圈, 则 C 必为一个四边形面。

我们现在开始探讨(4,6)-富勒烯分子图中六长圈的结构。在一个(4,6)-富勒烯分子图中, 六长圈并不一定是一个六边形面。首先我们对(4,6)-富勒烯分子图中的六长圈做分类:

引理 2.2 令 G 为一(4,6)-富勒烯分子图, C 为其中的一个六长圈, 我们称

- (1) C 是第一类的, 若 C 内部所围的面全为六边形面, 或若 C 外部所围的面全为六边形面。
- (2) C 是第二类的, 若 C 内部所围的面全为四边形面, 或若 C 外部所围的面全为四边形面。我们称 C 是内部第二类的, 若 C 内部所围的面全为四边形面; 称 C 是外部第二类的, 若 C 外部所围的面全为四边形面。

- (3) C 是第三类的, 若 C 不属于上述两类中的任何一类。

注记 2.3: 由定义 2.2, 若某六长圈 C 既是内部第二类的又是外部第二类的, 那么立即可知 G 为立方体图。相似地, 我们可以给出内部第一类和外部第一类的说法。然而根据引理 1.1, 任何(4,6)-富勒烯分子图中的六长圈 C 不可能既是内部第一类的又是外部第一类的。

命题 2.4 令 G 为一(4,6)-富勒烯分子图, C 为其中的一个六长圈。则若 C 为第一类的, 当且仅当 C 必为一个六边形面。

为证明命题 2.4, 我们需要下面的

引理 2.5 [6] 令 G 为一平面图, 其每个面均为 p 边形, 则

$$m = \frac{p}{p-2}(n-2).$$

命题 2.4 的证明: 设 C 为 G 中的一个第一类的六长圈且不为六边形面, 记为 $C = v_1v_2 \dots v_6$ 。

若六长圈 C 的内部没有顶点, 则其内部必有某条边, 比如边 $e = v_1v_4$ 。由引理 2.1, C 内部的只有两个四边形面, 于是 C 的外部共有四个四边形面, 与 C 是第一类的相矛盾。

因此, C 的内部至少有一个顶点。我们考虑由 C 上的顶点和它内部的顶点导出的 G 的子图 \tilde{G} 。由引理 1.2 可知, \tilde{G} 中除 C 上的某三个顶点度数为 2 以

外所有顶点的度数均为 3，因此

$$2m(\tilde{G}) = 3n(\tilde{G}) - 3。$$

但由引理 2.5 可知，

$$2m(\tilde{G}) = 3n(\tilde{G}) - 6。$$

这是一个矛盾。于是就证明了命题 2.4。

注记 2.6: 由命题 2.4，(4,6)-富勒烯分子图中的六长圈 C 不可能既是第一类的又是第二类的。否则，我们假设有某个六长圈 C 既是外部第一类的又是内部第二类的。根据命题 2.4， C 为一个无界的六边形面。因此由 C 为内部第二类的可知， G 中仅有一个六边形面，这不可能。换言之，由定义 2.2，我们给出了一个(4,6)-富勒烯分子图中六长圈集合的分划。

命题 2.7 令 G 为一(4,6)-富勒烯分子图， C 为其中的一个六长圈，若 C 为第二类的，则 C 必为图 2.1 所示两种子图的边界。

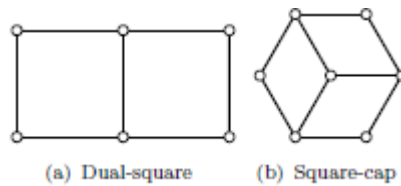


图 2.1

证明：我们假设 G 中的一个六长圈 C 是内部第二类的，记 $C = v_1v_2\dots v_6$ 。记 C 内部的四边形面的个数为 s 。于是成立下面的

$$2 \leq s \leq 6。$$

考虑由 C 上的顶点和它内部的顶点导出的 G 的子图 \tilde{G} ，记 x 为 \tilde{G} 中二度顶点的个数（他们事实上在六长圈 C 上）。

由命题 2.4 可知， C 不是一个面。

若 C 的内部只有边，唯一可能的情形是， C 的内部只有一条边且连接 C 上的两个顶点，例如顶点 v_1 和 v_4 。由引理 2.1 可知，命题成立。

因此接下来我们假设， C 的内部有顶点。同时我们假设 C 的外部有顶点。（否则若 C 的外部只有边那么，那么重复上一段推理可知 C 既是外部第二类的又是内部第二类的， G 为一个立方体图，命题成立。）由引理 1.8 可知， $x=3$ 。对图 \tilde{G} 应用欧拉公式可知

$$3n - 3 = 4s + 6。$$

由于 n 为整数，于是 $s=3$ 或 $s=6$ 。但 $s=6$ 是不可能的，因为由命题 2.4，

这将推出 C 是图 G 中的唯一一个六边形面(注意到若 $s=6$ 则 C 是外部第一类的!)。这与引理 2.7 相矛盾。因此

$$s=3.$$

由于三个四边形面形成一个有六边形边界的子图只有图 2.1 的(b)一种可能, 因此就证明了命题。

注记 2.8: 对于命题 2.7 中提到的两类图, 我们分别称他们为“四边形偶”(图 2.1 的(a))和“四边形帽”(图 2.1 的(b))。我们有时也称这两类图的六长圈边界为“四边形偶”和“四边形帽”, 这并不会引起混淆。

我们现在考虑(4,6)-富勒烯分子图中第三类的六长圈。

令 C 为(4,6)-富勒烯分子图 G 中一个第三类的六长圈。由于 C 既不是六边形面又不是一个四边形偶, 其内部必然有 G 的顶点。事实上, 若 C 的内部没有边, 那么 C 是一个六边形面, 这不可能。若 C 的内部只有边, 那么由命题 2.7, C 是一个四边形偶, 矛盾。我们考虑由 C 上的顶点和它内部的顶点导出的 G 的子图 \tilde{G} , 记 x 为 \tilde{G} 中二度顶点的个数(他们事实上在六长圈 C 上)。分别用 \tilde{h} 和 \tilde{s} 来记 C 内部的六边形面和四边形面的个数。由引理 1.2 可知,

$$\begin{aligned} 2m(\tilde{G}) &= 4\tilde{s} + 6(\tilde{h} + 1) \\ 2m(\tilde{G}) &= 3n(\tilde{G}) - x \\ f(\tilde{G}) &= \tilde{h} + \tilde{s} + 1 \\ n(\tilde{G}) &= 2 + m(\tilde{G}) - f(\tilde{G}) \end{aligned}$$

对 \tilde{G} 应用欧拉定理和欧拉公式可得

$$x=3$$

于是由上面的方程组可解得, $\tilde{s}=3$ 。类似地, C 的外部的四边形的个数也是 3。我们将上面的讨论总结成:

引理 2.9 令 G 为一(4,6)-富勒烯分子图, C 为其中的一个六长圈, 若 C 为第三类的, 则

- (1) C 的内部和外部区域中四边形面的个数均为 3.
- (2) 有 G 的顶点在 C 的内部区域, 也有顶点在 C 的外部区域。

下面的命题 2.10 阐明了第三类六长圈的结构。

命题 2.10 令 G 为一(4,6)-富勒烯分子图, C 为其中的一个六长圈, 若 C 为第三类的, 则 C 必为一个带有数个(至少一个)六边形层的四边形帽的边界, 如图 2.2 所示。

将命题 2.4, 命题 2.7 和命题 2.10 总结起来得到,

定理 2.11 令 G 为一(4,6)-富勒烯分子图, C 为其中的一个六长圈, 则 C 或

者是一个六边形面，或者是一个四边形偶，或者是一个带有 $n \geq 0$ 个六边形层的四边形帽的边界。

命题 2.10 的证明：我们考虑由 C 上的顶点和它内部的顶点导出的 G 的子图 \tilde{G} 。由引理 2.9 可知， \tilde{G} 中仅有三个在 C 上的顶点为二度点，记为 v_1 , v_3 和 v_5 。除此以外所有顶点的度数均为 3。

首先我们来证明 v_1 , v_3 和 v_5 在 C 上的位置如图 2.3(e) 所示。这只要证明它们的排列方式不是 2.3(a) 或 2.3(b) 即可。若 v_1 , v_3 和 v_5 的排列如图 2.3(a)，那么只

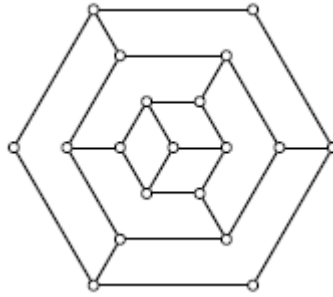


图 2.2 带两个六边层的四边形帽

要删除边 v_1v_2 和 v_5v_6 即可破坏图 G 的连通性，这与图 G 的 3-边连通性质矛盾。

现在转向 v_1 , v_3 和 v_5 的第二种排列方式(图 2.3(b))。由于 G 是三正则的可平面图，于是 $v_6v_6, v_6v_1, v_1v_3, v_3v_2, v_2v_2'$ 在一个六边形面上。换句话说， $v_2v_6' \in E(G)$ (如图 2.3(c))。这样我们就得到了 C 内部区域的一个六边形面。注意到六长圈 $v_4v_5v_2v_2'v_6v_6'$ 和 C 有相似的结构，重复上面的推理可知 $v_4v_2'' \in E(G)$ (如图 2.3(d))。于是我们得到了有一个落在 C 的内部区域的六边形面。这样一直递推下去，我们可以得到 C 的内部区域有无限多个六边形面，这不可能。

于是由上面的讨论可知， v_1 , v_3 和 v_5 三个顶点在 C 上的排列方式比如图 2.3(e)。

我们断言 $v_2' \neq v_6'$ 。否则，若 $v_2' = v_6'$ ，那么 $v_2' = v_4' = v_6'$ ，从而 C 成为一个四边形帽，与 C 是第三类的相矛盾。事实上，若 $v_2' = v_6' \neq v_4'$ ，对 v_4' 和六长圈 $v_2v_2'v_6v_5v_4v_3$ 应用引理 1.2 即可导致矛盾。由对称性可知 v_2' , v_4' 和 v_6' 是三个不同的顶点。同时， $v_2'v_4', v_2'v_6', v_4'v_6' \notin E(G)$ ，否则将产生一个五长圈而与 G 的二部

性质矛盾。

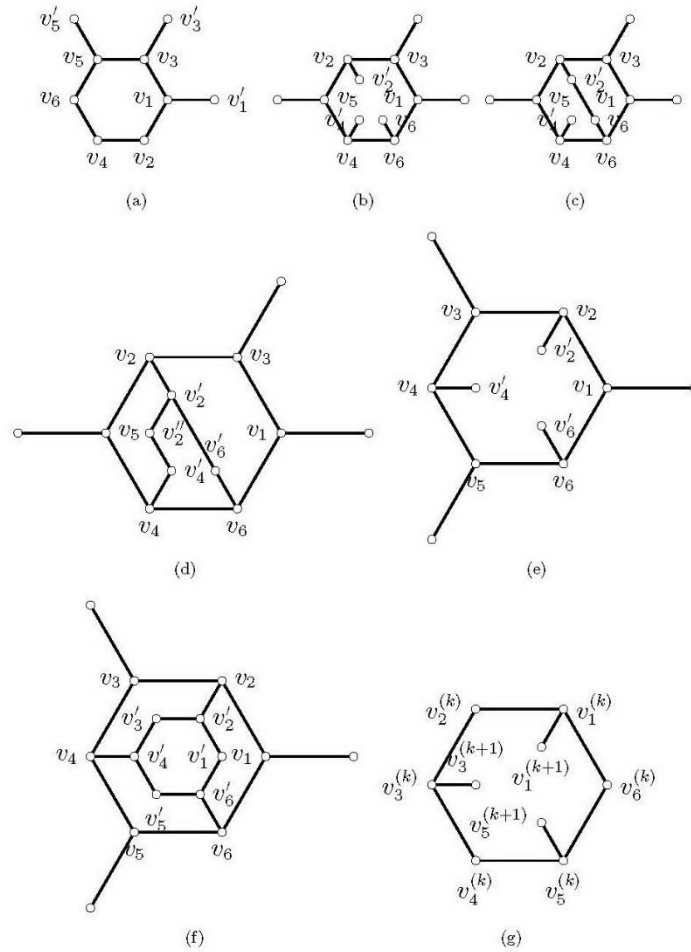


图 2.3

由于 G 是三正则的, 因此 $v_6v_6', v_6v_1, v_1v_2, v_2v_2'$ 在一个六边形面上。我们记和 v_6' 及 v_2' 均相邻的顶点为 v_1' 。

同理可知, v_4v_4', v_4v_3, v_3v_2 和 v_2v_2' 在同一个六边形面上。于是有顶点 v_3' 同时和顶点 v_4' v_2' 相邻且 $v_1' \neq v_3'$ 。否则若 $v_1'v_4' \in E(G)$, 那么六长圈 $v_2v_3v_4v_4'v_1'v_2'$ 的内部没有顶点 (若有顶点应用引理 1.2 即可得到矛盾)。同时六长圈 $v_2v_3v_4v_4'v_1'v_2'$ 也不是一个面 (若它是一个六边形面, 那么面 $v_2v_3v_4v_4'v_1'v_2'$ 和面 $v_1v_2v_2'v_1'v_6v_6'$ 将有两条公共边)。于是在 $v_2v_3v_4v_4'v_1'v_2'$ 的内部只有边。而唯一可能的边是 $v_2'v_4'$ 。但若 $v_2'v_4' \in E(G)$, 则 $v_1'v_2'v_4'v_1'$, 矛盾。于是 $v_1'v_4' \notin E(G)$ 。

类似可得

$$v_4'v_5', v_5'v_6' \in E(G).$$

我们得到, 六长圈 $C' = v_1'v_2'v_3'v_4'v_5'v_6'$ 及其邻点如图 2.3(f)所示。若 C' 的内部恰有 3 个六边形面, 那么 C' 应为一个四边形帽, 命题成立。否则若 C' 的内部有多于 3

个三个六边形面，那么重复上一段推理，我们将得到一个六长圈 C^m 。重复上面的过程有限多次，我们将得到一个六长圈 $C^{(k)}$ ， C 是 $C^{(k)}$ 附带 k 个六边形层，且 $C^{(k)}$ 内部只有三个四边形面和少于三个六边形面。

不失一般性，我们假设 v_1^k, v_3^k, v_5^k 有落在 $C^{(k)}$ 内部的邻点 $v_1^{k+1}, v_3^{k+1}, v_5^{k+1}$ （如图 2.3(g)）。我们断言

$$v_1^{k+1} = v_3^{k+1} = v_5^{k+1}.$$

否则，若 $v_1^{k+1}, v_3^{k+1}, v_5^{k+1}$ 是三个不同的顶点，用上面的手法我们可以在 $C^{(k)}$ 的内部得到三个六边形面，与假设相矛盾。若 $v_1^{k+1} = v_3^{k+1} \neq v_5^{k+1}$ ，那么我们得到四边形面 $v_1^k v_2^k v_3^k v_3^{k+1} v_1^{k+1}$ 和六长圈 $v_1^k v_3^k v_3^{k+1} v_3^k v_4^k v_5^k v_6^k v_1^k$ 。显然 v_5^{k+1} 在 $v_1^k v_3^k v_3^{k+1} v_3^k v_4^k v_5^k v_6^k v_1^k$ 的内部。对顶点 v_5^{k+1} 和六长圈 $v_1^k v_3^k v_3^{k+1} v_3^k v_4^k v_5^k v_6^k v_1^k$ 应用引理 1.2，我们将得到一个矛盾。因此由对称性可得， $v_1^{k+1} = v_3^{k+1} = v_5^{k+1}$ 。

于是命题 2.10 成立。

2.2 (4,6)-富勒烯分子图局部决定整体结构的定理

由命题 2.10 的证明，我们可以得到下面的推论

推论 2.12 令 G 为一(4,6)-富勒烯分子图

- (1) 若 C 为其中的一个六长圈且 C 和它的邻点如图 2.3(e)所示，那么 G 为管状结构。
- (2) 若 G 中有一个四边形帽，则另外三个四边形也形成四边形帽且 G 为管状结构。

注记 2.13: 根据 X.Jiang[8]，管状的(4,6)-富勒烯分子图是由两端的两个四帽和连接两个四边形帽的 n ($n \geq 0$) 个六边形层构成的。

命题 2.10 和推论 2.12 的意义在于，我们可以通过(4,6)-富勒烯分子图一个局部的形态推知其整体结构。另一种情形是下面的

推论 2.14 令 G 为一(4,6)-富勒烯分子图。若 G 有如图 2.4(a)所示的子图，即

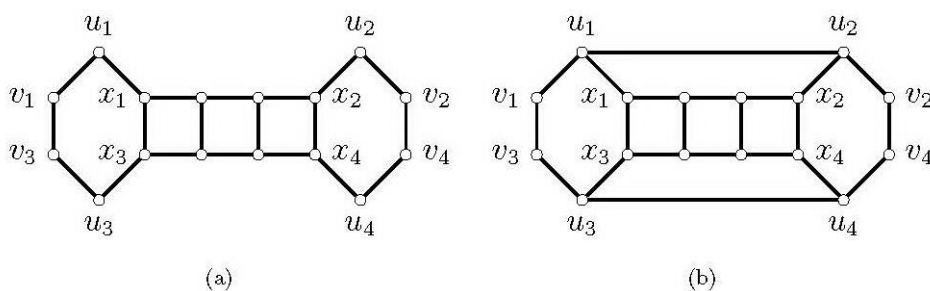


图 2.4

G 恰有 3 个连成一系列的四边形面, 那么其另外 3 个四边形面也连成一系列。

证明: 由于 G 是三正则的, 于是 $u_1u_2, u_3u_4 \in E(G)$ 如图 2.4 所示。

若 $v_1v_4 \in E(G)$ 将产生一个五长圈, 于是 $v_1v_4 \notin E(G)$ 。

若 $v_1v_2 \in E(G)$ (如图 2.5(a)), 那么有六长圈 $v_1v_2v_4u_4u_3v_1$ 。显然 $v_1v_2v_4u_4u_3v_1$ 比不为面且不为带有四边形帽或带有数个六边形层的四边形帽 (命题 2.10 和推论 2.12)。于是由定理 2.11, $v_1v_2v_4u_4u_3v_1$ 是一个四边形偶, 因此 $v_3v_4 \in E(G)$ 。注意到 G 是三正则图, 因此 G 与图 2.5(b) 中的图同构。

于是我们假设 $v_1v_2 \notin E(G)$, 由对称性可知 $v_3v_4 \notin E(G)$ 。

从而, 如图 2.6(a) 所示, 有一个顶点 w_1 与 v_1 相邻。由于边 v_2w_1 和 v_2v_3 将导致一个五长圈, 因而

$$v_2w_1, v_2v_3 \notin E(G).$$

所以有一个顶点 w_2 与 v_2 相邻。由于 G 是三正则的, 于是 $w_1v_1, v_1u_1, u_1u_2, u_2v_2$

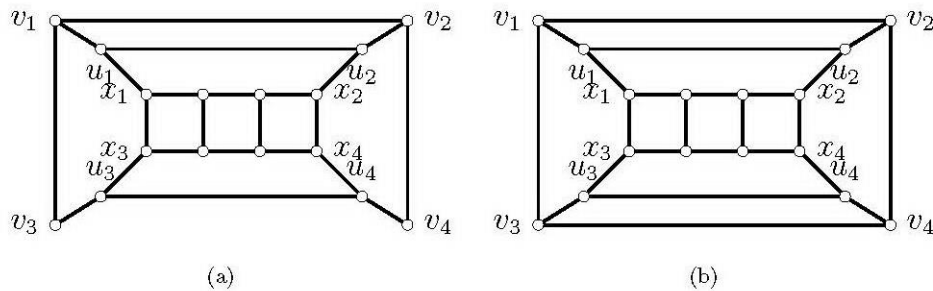


图 2.5

和 v_2w_2 在一个六边形面上。换言之, $w_1w_2 \in E(G)$ 。

对于 v_3 , 有 $v_3w_1, v_3w_2 \notin E(G)$ 。事实上, 若 $v_3w_1 \in E(G)$, 那么有三长圈 $v_3w_1v_1v_3$, 这不可能。若 $v_3w_2 \in E(G)$, 六长圈 $v_3u_3u_4v_4v_2w_2v_3$ 既不是第二类的又不是第三类的 (根据定理 2.11 和推论 2.12), 于是它是一个六边形面。但这将导致面 $v_3u_3u_4v_4v_2w_2v_3$ 和 $x_2x_4u_4v_4v_2u_2x_2$ 有两条公共边。所以有一个顶点 w_3 和 v_3 相邻。

同理可知, 有顶点 w_4 与 v_4 相邻。于是立即有 $w_3w_4 \in E(G)$ 。 G 的一个局部如图 2.6(b) 所示。

若 $w_1w_3 \in E(G)$, 则 $w_2w_4 \in E(G)$ 。事实上 w_1w_3 将产生 显然不是六边形面的六长圈 $w_1w_3w_4v_4v_2w_2w_1$ 且不是有 $n(n \geq 0)$ 六边形层的四边形帽。根据定理 2.11, $w_1w_3w_4v_4v_2w_2w_1$ 为一个四边形偶且 $w_3w_4 \in E(G)$ 。在这种情况下, 命题成立

否则若 $w_1w_3 \notin E(G)$, 由对称性 $w_2w_4 \notin E(G)$ 。重复上面一段推理可知 $w_1w_4 \notin E(G)$ 。于是有顶点 y_1 与 w_1 相邻。类似可知, 有顶点 y_3 和 w_3 相邻。进而, $y_1y_3 \in E(G)$ 。

如法炮制，我们有顶点 y_2 和 y_4 满足

$$y_2w_2, y_4w_4, y_2y_4 \in E(G).$$

现在 G 的一个局部如图 2.6(c)所示。

注意到八长圈 $w_1y_1y_3w_3w_4y_4y_2w_2w_1$ 和八长圈 $u_1v_1v_3u_3u_4v_4v_2u_2u_1$ 有相似的结构，递推可知命题成立。

注记 2.15: 我们对命题 2.14 的证明实际上是构造性的。因此若一个(4,6)-富勒烯分子图有如图 2.4(a)的一个局部，那么我们可以推知其整体结构。我们(4,6)-

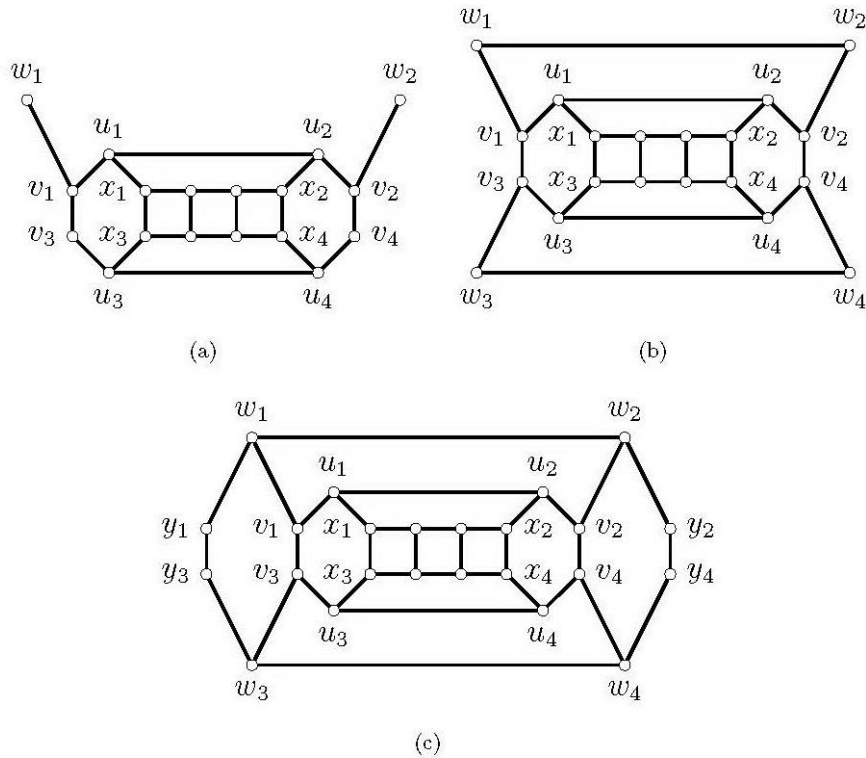


图 2.6

富勒烯分子图的这种结构为灯笼结构

与命题 2.14 相似，有下面的

命题 2.16 令 G 为一(4,6)-富勒烯分子图。若 G 有如图 2.7 所示的子图，即 G 有 4 个连成一列的四边形面，那么 G 或者是立方体图，或者是六棱柱图。

证明：证明的方法与命题 2.14 类似，我们将证明细节放在附录中。

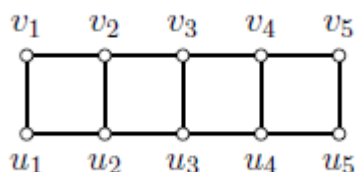


图 2.7

2.3 (4, 6)-富勒烯分子图结构分类定理

将推论 2.12、命题 2.14 以及命题 2.16 总结起来，我们给出：

命题 2.16((4,6)-富勒烯分子图结构分类定理) 令 G 为一(4,6)-富勒烯分子图，则 G 必属于下面的某一类且只属于其中一类：

- (1) 立方体图；
- (2) 六棱柱图；
- (3) 有至少一个六边形层的管状(4,6)-富勒烯分子图；
- (4) 灯笼结构的(4,6)-富勒烯分子图；
- (5) 不属于上述四种类型，我们称之为分散结构的(4,6)-富勒烯分子图。

证明：若 $h(G)=0$ ，那么 G 是一个立方体图，因此在下面的推导中我们假设 $h(G) \geq 2$ 。

若 G 有 4 个成一列的四边形面，由于 $h(G) \geq 2$ ，从而由命题 2.16 可知 G 为一个六棱柱图。

若 G 恰有 3 个连成一列的四边形面，那么由命题 2.14 可知， G 为管状分子。

若 G 不属于上述几种情形，那么我们没有局部决定整体结构的结果。然而，我们可以得到在这种情况下，没有超过两个四边形面“结合”在一起。换言之，若 C 为 G 中的六长圈，则 C 或者是六边形面，或者是四边形偶。这就是我们称这种结构为分散结构的原因，因为四边形面是“分散”的。

第三章 (4, 6)-富勒烯分子图中的低阶匹配计数

在这一章中，我们将对不高于 6 阶的匹配进行计数。

3.1 (4, 6)-富勒烯分子图中计数问题的已有结果

首先，我们标记下面计数过程中将出现的一些子图，如图 3.1 所示。对于 G

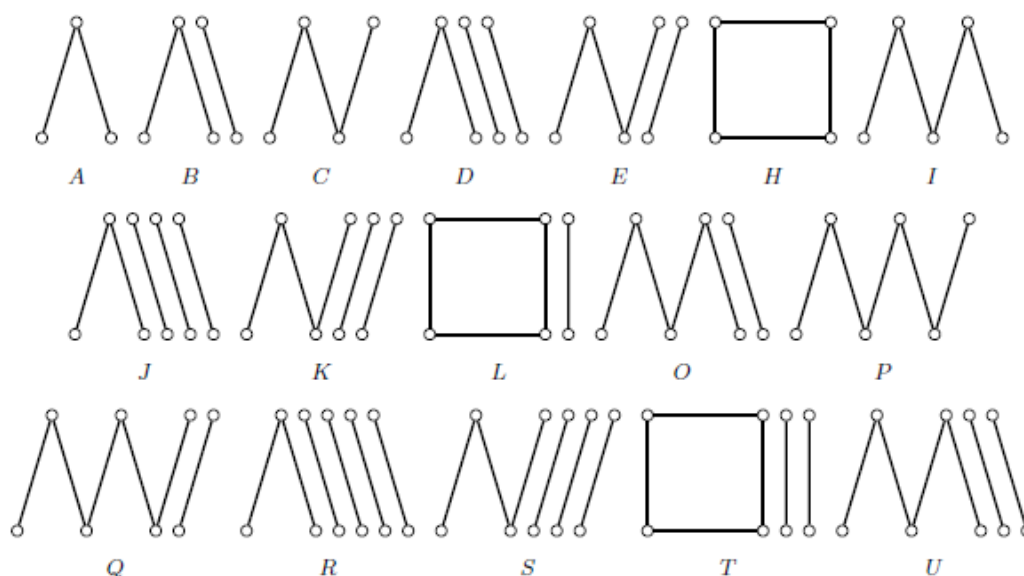


图 3.1

的某个子图，如子图 A，我们记 G 的同构于 A 的子图的个数为 $N(A)$ 。

引理 3.1 令 G 为一 (4,6)-富勒烯分子图，其中六边形面的个数为 h ，我们有下面的计数结果：

- (1) $[3] N(A) = 3n$;
- (2) $[3] N(C) = 4m$;
- (3) $[3] N(I) = 8m - 24$;
- (4) $[11] N(O) = 72h^2 + 240h + 120$;
- (5) $[11] N(L) = 18h + 24$;
- (6) $N(H) = 6$;
- (7) $N(P) = 48h + 120$;
- (8) $N(T) = 27h^2 + 27h + 12$ 。

证明：我们只需要计算 $N(P)$ 和 $N(T)$ 。其计数过程是初等的，我们将其放在附录中。

引理 3.2[3,11] 令 G 为一(4,6)-富勒烯分子图，其中六边形面的个数为 h ，那么

$$\begin{aligned} M(G,1) &= m = 3h + 12 \\ M(G,2) &= \frac{9}{2}h^2 + \frac{57}{2}h^2 + 42 \\ M(G,3) &= \frac{9}{2}h^3 + \frac{63}{2}h^2 + 65h + 44 . \end{aligned}$$

3.2 (4,6)-富勒烯分子图中 4-匹配的计数

命题 3.3 令 G 为一(4,6)-富勒烯分子图，其中六边形面的个数为 h ，那么

$$M(G,4) = \frac{27}{8}h^4 + \frac{81}{4}h^3 + \frac{273}{8}h^2 + \frac{117}{4}h + 9 .$$

证明：我们将证明下面的三个方程：

$$M(G,3) \times (m-3) = 4 \times M(F,4) + 2 \times N(D) + N(E) \quad (3.3a)$$

$$M(G,3) \times 6 \times 2 = 2 \times N(D) + 2 \times N(E) \quad (3.3b)$$

$$M(G,2) \times 2 \times 4 = N(E) + 4 \times N(H) + 2 \times N(I) \quad (3.3c)$$

首先，我们证明(3.3a)。我们考虑下面的过程，

1. 选取一个 3-匹配；
2. 从剩余的边中向选取的 3-匹配添加一条边。

应用基本计数原理可知，进行上述过程的方法的个数是

$$M(G,3) \times \binom{m-3}{1} .$$

另一方面，进行上面的过程后可能形成的 G 的子图有 4-匹配、子图 D 或者子图 E 。每个 4-匹配可以被 4 个这样的过程生成，这是由于给定一个 4-匹配，有 4 种方式确定步骤 1 中选取的 3-匹配。类似地，每个子图 D 可以被两个这样的过程所生成，而每个子图 E 只能被 1 个这样的过程生成。于是，执行上述过程的办法的数目为

$$4 \times M(G,4) + 2 \times N(D) + 2 \times N(E)$$

这就证明了(3.3a)。

下面再来证明式子(3.3b)。

我们设置下面的过程：

1. 选取一个 3-匹配;
2. 选取 3-匹配中的一个顶点 v ;
3. 选取与 v 相邻而又不在已选取的 3-匹配中的 G 的一条边。

由基本计数原理可知, 执行上述步骤的方法数为:

$$M(G, 3) \times \binom{6}{1} \times \binom{2}{1}$$

另一方面, 执行上述步骤后, 得到的 G 的子图的可能情形为子图 D 或子图 E 。每个子图 D 能够被两个这样的步骤生成, 这是由于有两种方式确定步骤 1 中选取的 3-匹配。每个子图 E 也能够被两个这样的步骤产生, 这是由于在步骤 2 中有两种方式确定所选取的顶点 v 。从而执行上述步骤的办法的总数为:

$$2 \times N(D) + 2 \times N(E)$$

这样我们就证明了(3.3b)。

最后证明(3.3c)。

设定下面的过程,

1. 选取一个 2-匹配;
2. 选取步骤 1 中所选取的 2-匹配的一条边;
3. 对于步骤 2 中选取的边的两个顶点, 分别选取一条不在所选 2-匹配中的与顶点相邻的边。

根据基本技术原理可知, 进行上述步骤的个数为

$$M(G, 2) \times \binom{2}{1} \binom{2}{1} \binom{2}{1}$$

而执行上面的步骤后, 可得到的 G 的子图有子图 E 、子图 H 或子图 I 。每个子图 H 能够通过 4 种上面的步骤生成, 这是由于对于每个子图 H , 有两种办法确定步骤 1 中的 2-匹配, 选定 2-匹配后又有两种办法确定步骤 2-中选取的匹配边。每个子图 I 能够被两个上面的过程生成, 因为我们有两种办法确定步骤 1 中选定的 2-匹配。然而每个子图 E 只能被一个上述步骤生成。从而, 执行上述步骤的办法个数为

$$N(E) + 4 \times N(H) + 2 \times N(I)$$

于是根据前面证明的 3 个方程和引理 3.1, 我们便证明了命题 3.3。

注记 3.4: 这里我们应用的计数方法即是引言中提到的递归方法。在证明过程中, 我们证明了 3 个方程, 通过这 3 个方程我们将 4-匹配的计数问题转化为子图 E 的计数问题, 这样就降低了问题的难度。这就是我们称之为“递归”的原因。

3.3 (4, 6)-富勒烯分子图中 5-匹配的计数

命题 3.5 令 G 为一(4,6)-富勒烯分子图, 其中六边形面的个数为 h , 那么

$$M(G, 5) = \frac{81}{40}h^5 + \frac{27}{4}h^4 - \frac{9}{8}h^3 + \frac{39}{4}h^2 - \frac{27}{5}h.$$

证明: 与命题 3.3 的证明类似, 我们证明下面的三个方程,

$$M(G, 4) \times (m-4) = 5 \times M(F, 5) + 2 \times N(J) + N(K)$$

$$M(G, 4) \times 8 \times 2 = 2 \times N(J) + 2 \times N(K)$$

$$M(G, 3) \times 3 \times 4 = 4 \times N(L) + 2 \times N(O) + N(P) + N(K) \quad (3.5)$$

前面两个方程的证明和(3.3a)、(3.3b)的证明是类似的, 因此我们只证明上面的第三个等式。

我们设置下面的过程,

1. 选定一个 3-匹配;
2. 选取步骤 1 中选定的 3-匹配中的一条边;
3. 对于步骤 2 中选取的边的两个顶点, 分别选取一条不在所选 3-匹配中的与顶点相邻的边。

根据基本计数原理可知, 执行上述步骤的办法个数为

$$M(G, 3) \times \binom{3}{1} \times \binom{2}{1} \binom{2}{1}.$$

而另一方面, 执行上述手续后, 得到的 G 的子图可能为子图 K 、子图 L 、子图 O 或子图 P 。每个子图 L 能够被四种上述手续产生, 这是由于给定一个子图 L 有 2 种办法确定步骤 1 中选取的 3-匹配, 确定 3-匹配后又有 2 种办法确定步骤 2 中选定的匹配边。每个子图 O 可被两个上面的过程产生, 这是因为给定一个子图 O 有两种办法确定步骤 1 中选取的 3-匹配。然而对于一个子图 K , 它只能被一种上面的过程生成。子图 P 亦然。因此执行上述过程的办法的个数为

$$4 \times N(L) + 2 \times N(O) + N(P) + N(K).$$

这就证明了第三个方程(3.5)。

于是由上面的三个方程和引理 3.1 可知命题成立。

推论 3.6 由方程(3.5)和引理 3.1 可知,

$$N(K) = 54h^3 + 234h^2 + 180h + 72.$$

3.4 (4, 6)-富勒烯分子图中 6-匹配的计数：递推关系式

命题 3.7 令 G 为一 (4,6)-富勒烯分子图，其中六边形面的个数为 h ，那么

$$M(G, 6) = \frac{81}{80}h^6 - \frac{81}{80}h^5 - \frac{99}{16}h^4 + \frac{405}{16}h^3 - \frac{2833}{40}h^2 - \frac{123}{10}h - 16 + \frac{N(Q)}{6}.$$

证明：只要证明下面的四个方程，

$$M(G, 5) \times (m-5) = 6 \times M(G, 6) + 2 \times N(R) + N(S)$$

$$M(G, 5) \times 10 \times 2 = 2 \times N(R) + 2 \times N(S)$$

$$M(G, 4) \times 4 \times 4 = N(S) + 4 \times N(T) + 2 \times N(U) + N(Q)$$

$$2 \times N(U) + 2 \times N(Q) = 4 \times [N(K) - 4 \times N(T)] + 2 \times 4 \times N(T) \quad (3.6)$$

由于四个方程中的前三个形式与命题 3.5 中的三个方程是相似的，应用相同的方法可以获得证明，因此我们只给出第四个方程，方程(3.6)的证明。

我们设定下面的步骤，

1. 选取一个子图 K ；
2. K 包含唯一一条长度为 3 的路，选取这条路的一个端点 v ；
3. 对于步骤 2 中选定的端点 v ，选取 v 的一条邻边，这条邻边需满足前面所说的三长路只有 v 一个公共顶点。

于是，根据基本计数原理可知，执行上述手续的方法数为

$$(N(K) - N(T)) \times \binom{4}{1} \times \binom{2}{1} \binom{2}{1} + N(T) \times \binom{4}{1} \times \binom{2}{1} \binom{1}{1},$$

这里的两个加项是考虑了步骤 2 中所说的三长路是否落在一个四边形面上的情况。

而执行上面的步骤之后，得到的 G 的子图为子图 U 或子图 Q 。对于给定的一个 G 的子图 U ，我们有两种办法确定步骤 1 中选定的子图 K ，子图 Q 亦然。因此，执行上面手续的办法个数为，

$$2 \times N(U) + 2 \times N(Q).$$

这就证明了式子(3.6)。

因此，由这四个式子、引理 3.1 以及推论 3.6，我们得到了命题中所说的递推关系。

注记 3.8: 由命题 3.7，要计算 $M(G, 6)$ ，只要计算 $N(Q)$ 即可。

3.5 (4, 6)-富勒烯分子图中 6-匹配的计数, 进一步处理

引理 3.9 令 G 为一管状结构的(4,6)-富勒烯分子图, 其中六边形面的个数为 h , 六边形层的个数为 $t \geq 1$, 那么

$$N(Q) = 144h^2 + 320h + 42.$$

证明: 为了计算 $N(Q)$, 我们首先选取一个子图 P (五长路), 然后选取一条与已选取的子图 P 不相交的边。然而, 注意到首先选取的 P 的不同情形下, 第二步中边的可选个数是不同的。因此

1. 若选取的 P 落在一个六长圈内, 考虑到六长圈的几种不同结构, 这种情形下生成的子图 Q 的个数为,
2. 若选取的子图 P 的一个三长的部分落在一个四长圈中, 那么可能五长路的中间三条边落在一个四长圈上 (当然要排除掉上面考虑过的五长路落在一个四边形偶的一部分情形), 或者某一段的三条边落在四长圈上 (如图 3.2 所示)。这两种情形下生成的 Q 个数分别为

$$6 \times 2 \times \binom{m-12}{1}$$

和

$$\binom{6}{1} \times 8 \times \binom{m-12}{1}$$

注意还有一种情况是一个五长路被“嵌入”到一个四边形偶内 (如图 3.3)。这种情况下生成 Q 的个数为

$$6 \times 2 \times \binom{m-11}{1}.$$

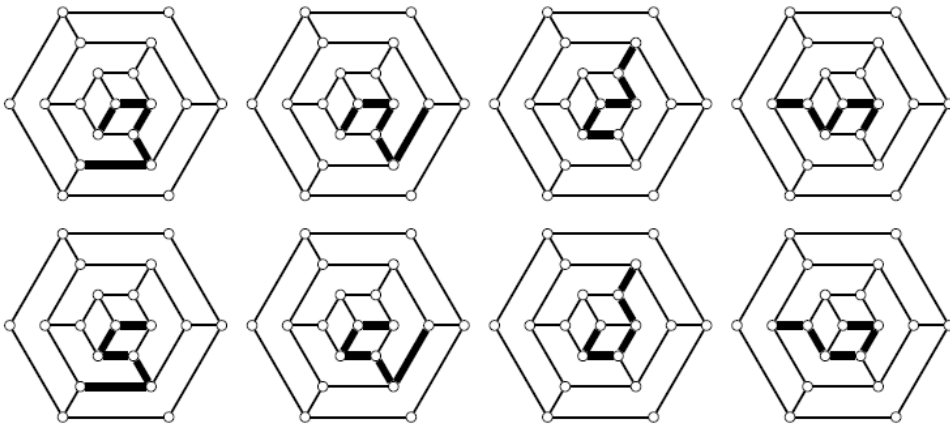


图 3.2

3. 在考虑不在上述两种情形之内的其他情况, 个数为

$$[N(P) - h \binom{6}{1} - (t+1) \binom{6}{1} - 6 \times \binom{6}{1} - 6 \times 2 - \binom{6}{1} \times 8 - 6 \times 2] \times \binom{m-13}{1}.$$

因此子图 Q 的个数为三个情形中的各项之和, 再注意到 $h=3t$, 我们便证明了这个引理。

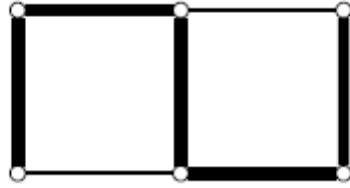


图 3.3

引理 3.10 令 G 为一灯笼结构的(4,6)-富勒烯分子图 (不为退化的立方体图情形), 其中六边形面的个数为 h , 那么

$$N(Q) = 144h^2 + 318h + 24.$$

证明: 为了计算 $N(Q)$, 我们先选一条五长路, 然后选取一条与已选取的五长路不相交的边。然而, 注意到首先选取的五长路的不同情形下, 第二步中边的可选

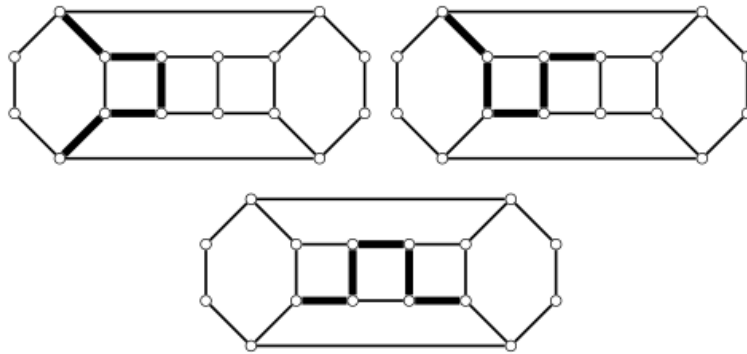


图 3.4

个数是不同的。因此

1. 若选取的五长路落在一个六长圈内, 考虑到六长圈的几种不同结构, 这种情形下生成的子图 Q 的个数为,

$$h \times \binom{6}{1} \times \binom{m-12}{1} + 4 \times \binom{6}{1} \times \binom{m-11}{1}$$

2. 再考虑五长路的一个三长的部分落在四长圈的情形, 若选取的五长路的中间三条边落在一个四长圈上 (如图 3.4 所示), 那么所产生的 Q 的个数

为

$$16 \times \binom{m-12}{1}$$

再考虑如图 3.3 的情形, 这样的 Q 的个数为

$$8 \times \binom{m-11}{1}$$

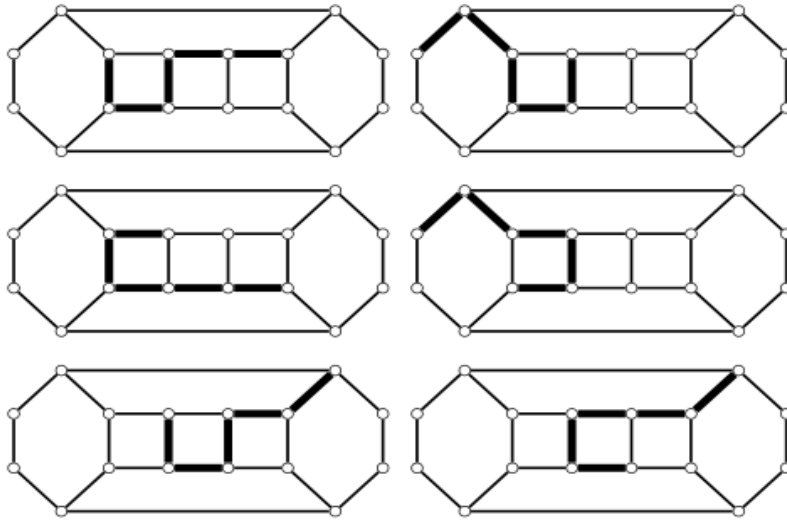


图 3.5

在所选取的五长路只有一端的三条边落在某个四长圈上的情形 (当然要排除上面计算过的几种情形), 所产生的 Q 的个数为

$$64 \times \binom{m-12}{1}$$

这里的 64 是逐个计数所得到的这样类型的子图 P 的个数 (图 3.5)。

3. 最后考虑不在上述情形的五长圈,

$$[N(P) - h \times \binom{6}{1} - 4 \times \binom{6}{1} - 8 - 64] \binom{m-13}{1}.$$

将上面的几项求和, 便得到了 $N(Q)$ 。

引理 3.11 令 G 为一分散结构的 (4,6)-富勒烯分子图, 其中六边形面的个数为 h , 四边形偶的个数为 y , 那么

$$N(Q) = 144h^2 + 318h + 6y.$$

证明: 为计算 Q 的个数, 我们首先选取一条五长路, 然后添加一条和已选取的五长路不相交的边。

1. 首先若所选的五长路落在某个六长圈中，这种情况所产生的 Q 的个数

$$h \times \binom{6}{1} \times \binom{m-12}{1} + y \times 6 \times \binom{m-11}{1}$$

2. 再考虑所选的五长路有一部分落在一个四长圈中的情形，这时生成的 Q 的个数为

$$(6 \times 4 - 2y) \times \binom{m-12}{1} + 2y \times \binom{m-11}{1} + (96 - 8y) \binom{m-12}{1}.$$

这里我们只解释最后一项的意义，前两项的解释与引理 3.9 和引理 3.10 相似。事实上，这里的第三项考虑的是只有某一段（而非两段）的三长子路落在一个四长圈中的情形，这样的五长路的个数为

$$(6 - 2y) \times \binom{4}{1} \times \binom{2}{1} \times \binom{2}{1} + 2y \times 11 = 96 - 8y.$$

这里 $(6 - 2y)$ 是不在某个四边形偶中的四边形的个数。对于这样的—个四边形，删掉一条边得到一条三长路，选取三长路的一个端点并向外延伸可得一个符合上面要求的五长路。对于项 $2y \times [4 + 2 \times 3 + 2] = 2y \times 11$ ， $2y$ 是在四边形偶中的四边形的个数，对于每个这样的四边形，如图 3.6 有 11 中方法生成一个符合上面要求的五长路。

3. 再考虑不属于上面两种情形的其他情形，这样生成的 Q 的个数为

$$[N(P) - h \times \binom{6}{1} - 6y - (24 - 2y) - 2y - (96 - 8y)] \binom{m-13}{1}$$

将这三项相加，就得到了 Q 的计数结果。

3.6 小结：(4, 6)-富勒烯分子图中低阶匹配计数结果

定理 3.12 令 G 为一 (4,6)-富勒烯分子图，其中六边形面的个数为 h ，那么

$$M(G, 1) = 3h + 12;$$

$$M(G, 2) = \frac{9}{2}h^2 + \frac{57}{2}h + 42;$$

$$M(G, 3) = \frac{9}{2}h^3 + \frac{63}{2}h^2 + 65h + 44;$$

$$M(G, 4) = \frac{27}{8}h^4 + \frac{81}{4}h^3 + \frac{273}{8}h^2 + \frac{117}{4}h + 9;$$

$$M(G, 5) = \frac{81}{40}h^5 + \frac{27}{4}h^4 - \frac{9}{8}h^3 + \frac{39}{4}h^2 - \frac{27}{5}h.$$

6-匹配的计数要考虑到不同结构

a) 若 G 为立方体图, 则

$$M(G,6)=0;$$

b) 若 G 为六棱柱图, 则

$$M(G,6)=20;$$

c) 若 G 为管状结构, 至少有一个六边形, 则

$$M(G,6)=\frac{81}{80}h^6-\frac{81}{80}h^5-\frac{99}{16}h^4+\frac{405}{16}h^3-\frac{1873}{40}h^2+\frac{1231}{30}h-9;$$

d) 若 G 为灯笼结构 (不退化为立方体图), 则

$$M(G,6)=\frac{81}{80}h^6-\frac{81}{80}h^5-\frac{99}{16}h^4+\frac{405}{16}h^3-\frac{1873}{40}h^2+\frac{407}{10}h-12;$$

e) 若 G 为分散结构且有 y 个四边形偶, 则

$$M(G,6)=\frac{81}{80}h^6-\frac{81}{80}h^5-\frac{99}{16}h^4+\frac{405}{16}h^3-\frac{1873}{40}h^2+\frac{407}{10}h-16+y.$$

证明: 这实际上是前面结果的一个总结。

对于立方体图, 显然 6-匹配个数为零。

对于六棱柱图, 我们应用枚举法借助计算机[10]得到了其中 6-匹配的个数(见附录)。

结 论

作为主要结果，我们给出了(4,6)-富勒烯分子图中阶数不高于 6 的匹配的计算公式（定理 3.12）和(4,6)-富勒烯分子图类的一个结构分类定理（定理 2.16）。由于(4,6)-富勒烯分子图结构上的复杂性，对更高阶匹配的计数有实质上的困难。我们的方法（包括结构分类的方法和计数方法）完全可以推广到相似的图类，如(3,6)-富勒烯分子图和(5,6)-富勒烯分子图。

参考文献

- [1] R. Balakrishnan and K. Ranganathan, A Textbook of Graph Theory, 1 ed., Springer, 1999.
- [2] A. Behmaram, On the number of 4-matchings in graphs, MATCH Comm Math Comp Chem 62 (2009), 381–388.
- [3] A. Behmaram, H. Yousefi-Azari, and A. R. Ashrafi, On the number of paths, independent set, and matchings of low order in (4,6)-fullerenes, MATCH Comm Math Comp Chem 69 (2013), 25–32.
- [4] T. Došlić, Cyclical edge-connectivity of fullerene graphs and (k,6)-cages, J Math Chem 33 (2003), 103–111.
- [5] I. Gutman, The matching polynomial, MATCH Comm Math Comp Chem 6 (1979), 75–91.
- [6] F. Harary, Graph theory, 1 ed., Addison-Wesley, Addison-Wesley, 1969.
- [7] H. Hosoya, Topological index. a newly proposed quantity characterizing the topological nature of structural isomers of saturated hydrocarbons, Bulletin of the chemical society of Japan 44 (1971), 2332–2339.
- [8] X. Jiang and H. Zhang, On forcing matching number of boron-nitrogen fullerene graphs, Disc Appl Math 159 (2011), 1581–1593.
- [9] D. Kalabjan and B. Mohar, The number of matchings of low order in hexagonal systems, Disc Math 186 (1999), 167–175.
- [10] D. E. Knuth, The art of computer programming, 3 ed., vol. 1: Fundamental Algorithms, Addison-Wesley, 1997.
- [11] Y. Li, J. Du, and J. Tu., On the number of 5-matchings in boron-nitrogen fullerene graphs, 2015.
- [12] R. Vesalian and F. Asgari, Number of 5-matchings in graphs, MATCH Comm Math Comp Chem 69 (2013), 33–46.
- [13] R. Vesalian, R. Namazi, and F. Asgari, Number of 6-matchings in graphs, MATCH Comm Math Comp Chem 73 (2015), 239–265.

附录

首先我们给出计算六棱柱图中 6-匹配个数的函数，代码语言为标准 C++（符合 C++ 14 标准）。

```
int hexagonal_prisms()
{
    int counter = 0;
    /*******Set the adjacency matrix of the graph
    /*****Initializing adjacency matrix of the graph
    int ** mar = new int*[18];
    for (int i = 0; i < 18; i++)
    {
        mar[i] = new int[4];
    }
    /*****End initializing
    /*****Begin setting matrix
    mar[0][0] = 5; mar[0][1] = 6; mar[0][2] = 1; mar[0][3] = 7;
    mar[1][0] = 0; mar[1][1] = 7; mar[1][2] = 2; mar[1][3] = 8;
    mar[2][0] = 1; mar[2][1] = 8; mar[2][2] = 3; mar[2][3] = 9;
    mar[3][0] = 2; mar[3][1] = 9; mar[3][2] = 4; mar[3][3] = 10;
    mar[4][0] = 3; mar[4][1] = 10; mar[4][2] = 5; mar[4][3] = 11;
    mar[5][0] = 4; mar[5][1] = 11; mar[5][2] = 0; mar[5][3] = 6;
    mar[6][0] = 0; mar[6][1] = 5; mar[6][2] = 12; mar[6][3] = 13;
    mar[7][0] = 0; mar[7][1] = 1; mar[7][2] = 13; mar[7][3] = 14;
    mar[8][0] = 1; mar[8][1] = 2; mar[8][2] = 14; mar[8][3] = 15;
    mar[9][0] = 2; mar[9][1] = 3; mar[9][2] = 15; mar[9][3] = 16;
    mar[10][0] = 3; mar[10][1] = 4; mar[10][2] = 16; mar[10][3] = 17;
    mar[11][0] = 4; mar[11][1] = 5; mar[11][2] = 17; mar[11][3] = 12;
    mar[12][0] = 11; mar[12][1] = 17; mar[12][2] = 6; mar[12][3] = 13;
    mar[13][0] = 6; mar[13][1] = 12; mar[13][2] = 7; mar[13][3] = 14;
    mar[14][0] = 7; mar[14][1] = 13; mar[14][2] = 8; mar[14][3] = 15;
    mar[15][0] = 8; mar[15][1] = 14; mar[15][2] = 9; mar[15][3] = 16;
    mar[16][0] = 9; mar[16][1] = 15; mar[16][2] = 10; mar[16][3] = 17;
    mar[17][0] = 16; mar[17][1] = 10; mar[17][2] = 11; mar[17][3] = 12;
    /*****End setting matrix
    /*******End of the setting section
    int flag = 0, aim=6;
    int *c;
    c = new int[aim + 2];
    for (int i = 0; i < aim; i++)
    {
```

```
        c[i] = i;
    }
    c[aim] = 18;
    c[aim + 1] = 0;
    int j = 0;
    int ergod, k, l;
    do
    {
        flag = 0;
        for (ergod = 0; ergod < aim; ergod++)
        {
            for (k = 0; k < 4; k++)//ergodic index
            {
                for (l = 0; l < aim; l++)
                {
                    if (mar[c[ergod]][k] == c[l])
                    {
                        flag = flag + 1;
                    }
                }
            }
        }
        if (flag == 0)
        {
            counter++;
        }
        j = 0;
        while ((c[j] + 1) == c[j + 1])
        {
            c[j] = j;
            j++;
        }
        if (j <= (aim - 1))
        {
            c[j] = c[j] + 1;
        }
    } while (j <= (aim - 1));
    return counter;
    delete[]c;
    for (int i = 0; i < 18; i++)
    {
        delete[]mar[i];
```

```

}
delete[]mar;
}

```

下面给出在论文正文中省略的两段证明。

命题 2.16 令 G 为一 (4, 6)-富勒烯分子图。若 G 有如图附 1(a) 所示的子图, 即 G 有 4 个连成一列的四边形面, 那么 G 或者是立方体图, 或者是六棱柱图。

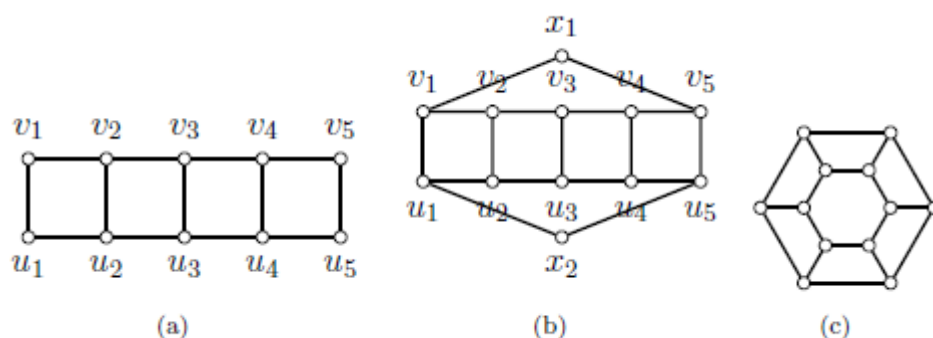


图 附 1

证明: 我们假设 G 不是立方体图, 那么 $v_1 \neq v_5$ $u_1 \neq u_5$ 。

首先我们断言 $v_1 u_5 \notin E(G)$ 。否则, 应该有 $u_1 v_5 \in E(G)$ 。从而, 对 G 有

$$\begin{aligned} n &= 8 \\ m &= 15 \end{aligned}$$

由欧拉公式可知,

$$f = 9.$$

于是 $h = 9 - s = 3$, 进而

$$m = \frac{6h + 4s}{2} = 21,$$

这是一个矛盾, 从而 $v_1 u_5 \notin E(G)$ 。

于是有顶点 x_1 与顶点 v_1 相邻, 由于 G 是三正则图, $v_5 x_1 \in E(G)$ 且六长圈 $x_1 v_1 v_2 v_3 v_4 v_5 x_1$ 是一个六边形面。类似地, 有顶点 x_2 和顶点 u_1 相邻, 如图附 1(b) 所示。

于是我们有六长圈 $x_1v_1u_1x_2u_5v_5x_1$ 。显然此六长圈不为六边形面。又由推论 2.12 知图 G 中没有四边形帽，从而六长圈 $x_1v_1u_1x_2u_5v_5x_1$ 必为四边形偶。于是 $x_1x_2 \in E(G)$ 。这就证明了命题（图附 1(c)）。

引理 3.1 为一 (4,6)-富勒烯分子图，其六边形面的个数为 h 。 N and T 为图 3.1 中所标记的 G 的子图，那么有下面的计数结果。

$$\begin{aligned} N(P) &= 48h + 120; \\ N(T) &= 27h^2 + 27h + 12. \end{aligned}$$

证明：首先我们计算 $N(P)$ 。我们首先选取一个三长路，然后从两个端点向外延伸以得到一条五长路。

注意到选取的三长路可能落在某个四边形面上，于是

$$\begin{aligned} N(P) &= (N(C) - 6 \times \binom{4}{1}) \binom{2}{1} \binom{2}{1} + 6 \times \binom{4}{1} \\ &= 48h + 120 \end{aligned}$$

现在我们转向 $N(T)$ 。我们可以先选择一个四边形面，然后添加两条与已选择的四边形面不相交边。注意这样的过程之后得到的可能是子图 T 或者图附 2 中的图。我们记图附 2 中图的个数为 \tilde{N} ，那么

$$\begin{aligned} \tilde{N} &= 6 \times \binom{n-8}{1} \times \binom{3}{2} + 6 \times \binom{4}{1} \\ &= 36h + 24 \end{aligned}$$

于是

$$\begin{aligned} N(T) &= 6 \times \binom{m-8}{2} - \tilde{N} \\ &= 27h^2 + 27h + 12 \end{aligned}$$

引理证明完毕。

致 谢

我首先对导师张和平教授致以深深的感谢，感谢他不断的鼓励和指导。他在这篇学位论文写作的各个阶段指引我，没有他贯彻始终而有启发性的教导，本文不可能以现状面世。

对数学与统计学院和萃英学院的各位老师表示深深的谢意，正是因为各位老师的帮助，我发现了数学世界的美妙，也更好的理解了萃英学院“我有世界，世界有我”的院训。

本课题作为萃英学生创新基金立项支持的科研训练项目获得了萃英学院支持，我感谢兰州大学萃英学生创新基金在课题研究过程中给予的经费资助。

感谢在兰州大学求学过程中帮助过我的朋友们，你们的倾听和帮助让我克服了诸多困难。

感谢我的家人，焉得谖草，言树之背，养育之恩，无以回报。

论文（设计）成绩

导师评语

建议成绩 _____ 指导教师（签字） _____

答辩小组意见

答辩委员会负责人（签字） _____

成绩 _____ 学院（盖章） _____

年 月 日