match no. 26 pp. 137-154 1991

MULTILINEARE AUFZÄHLPOLYNOME FÜR ANZAHLEN VON LINEARFAKTOREN IN KATAKONDENSIERTEN HEXAGONALEN SYSTEMEN

Peter John
Sektion Mathematik, Rechentechnik
und ökonomische Kybernetik
Technische Hochschule Ilmenau
O - 6300 Ilmenau

(received: May 1990)

ABSTRACT

Let H be a finite 2-connected plane graph whose finite regions are bounded by regular hexagons no three of which have a point in common. A simple model is developed which allows to determine new multilinear enumeration polynomials for Kekulé structures of H.

1. EINFÜHRUNG

Definitionen:

Eine hexagonale Zelle (kurz: Zelle) ist ein endliches Gebiet, welches durch ein regelmäßiges Sechseck der Seitenlänge 1 berandet wird.

Ein hexagonales System (HS) ist ein endlicher 2-fach zusammenhängender ebener Graph, dessen endliche Gebiete Zellen sind.

Der inner duale Graph von einem endlichen 2-fach zusammenhängenden ebenen Graphen G ist der duale Graph von G ohne den Knotenpunkt, der mit dem unendlichen Gebiet von G korrespondiert (FIG. 1).

Ein katakondensiertes hexagonales System (CHS) ist ein HS in welchem kein Knotenpunkt zu mehr als zwei Zellen gehört; ein CHS kann auch definiert werden als ein HS, dessen inner dualer Graph ein Baum ist (FIG. 1).

Ein unverzweigtes katakondensiertes hexagonales System (UCHS) ist ein CHS, dessen inner dualer Graph ein Weg ist.

Ein erweitertes katakondensiertes hexagonales System (ECHS) ist ein 2-fach zusammenhängender Graph, der in eine mehrblättrige Fläche mit Windungspunkten - die außerhalb des Graphen liegen - eingebettet ist, dessen endliche Gebiete Zellen sind und in dem kein Knotenpunkt mehr als zwei Zellen angehört.
Ein Linearfaktor (LF) eines Graphen G ist eine Menge paarweise disjunkter Kanten, die alle Knotenpunkte von G überdecken (FIG. 1).

Chemischer Hintergrund

Die Strukturformel eines benzenoiden Kohlenwasserstoffes (BK-s) besteht aus einem hexagonalen System H, welches durch die Kohlenstoffatome aufgespannt wird, und aus hängenden Kanten, so daß jedes Kohlenstoffatom, welches zu einer Zelle von H gehört, mit genau einem Wasserstoffatom verbunden ist (siehe FIG. 1).
Wir wollen H als Skelett von BK bezeichnen. Nach dem Kekulé-Modell repräsentieren die Kanten von H Einfach- bzw. Doppelbindungen und zwar so, daß die Wertigkeit jedes Kohlenstoffatoms vier ist. Diejenigen Kanten, welche Doppelbindungen repräsentieren, bilden einen LF von H. Es ist bekannt, daß die Doppelbindungen im Kekulé-Modell nicht bzw. nicht vollständig fixiert sind. Es ist eine bekannte Tatsache, daß insbesondere physikochemische Eigenschaften (z. B. Stabilität) eines gegebenen BK-s von der Gesamtheit aller LFen seines Skelettes H abhängen (/1/ - /4/). Deshalb ist das Studium der LFen in HSen nicht nur Gegenstand der Mathematik und Ästhetik sondern hat unmittelbar chemische Bedeutung.

Bezeichnungen

Es seien G ein Graph und L ein LF von G. Die Kanten von G, die zu L bzw. nicht zu L gehören, denken wir uns, wie üblich, rot bzw. blau gefärbt.

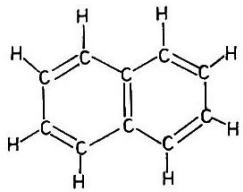
Die Anzahl der LFen von G werde mit $m = m(G)$ bezeichnet. Die Anzahl der LFen von G, die eine gegebene Kante e enthalten bzw. nicht enthalten, sei $r(e;G)$ bzw. $b(e;G)$: es ist also für jede Kante e von G

(1) $$r(e;G) + b(e;G) = m(G) \ .$$

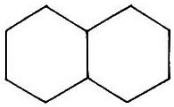
Werden alle LFen von G als gleichwahrscheinlich vorausgesetzt, so gibt die Zahl

(2) $$p(e;G) = \frac{r(e;G)}{m(G)}$$

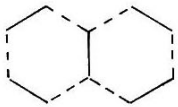
die Wahrscheinlichkeit an, Kante e in einem LF von G zu finden. Wenn G = H das Skelett eines BKs ist, so wird p(e;H) <u>Pauling'sche Bindungsordnung</u> genannt /5/; sie ist gleich dem durchschnittlichen Doppelbindungscharakter zwischen denjenigen zwei Kohlenstoffatomen, die durch e verbunden sind.



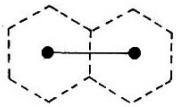
Kekulé – Struktur K von N



das Skelett H von N



Linearfaktor L von H, der mit K korrespondiert



der inner duale Graph von N

Naphthalen (N)

FIGUR 1

Literatur

1952 publizierten M.GORDON und W.H.T. DAVISON /6/ den ersten einfachen und einfach handhabbaren Algorithmus zur Berechnung von m(H), falls H ein CHS ist. Dieser Arbeit folgten insbesondere in den 70er und 80er Jahren viele Veröffentlichungen zur Anzahlbestimmung von LFen gegebener HSe, die in Büchern von N. TRINAJSTIĆ /7/ (1983), S.J. CYVIN und I. GUTMAN /8/ (1988), I. GUTMAN und S.J. CYVIN (Edts.) /9/ (1989) zusammengefaßt sind.

Für CHSe gaben A.T. BALABAN und Mitarbeiter /10/ - /12/ erstmals explizite Formeln zur Berechnung von m an, die multilineare Aufzählpolynome von LFen darstellen. Für ein UCHS gaben kürzlich R. TOŠIĆ und O. BODROŽA /13/ explizite Formeln für m in Abhängigkeit von der Zellenanzahl an.

In dieser Arbeit sollen neue multilineare Aufzählpolynome für CHSe vorgestellt werden. (Im Falle eines ECHSs kann analog verfahren werden.) Zu deren Berechnung wird ein bekannter Algorithmus /14/ modifiziert.

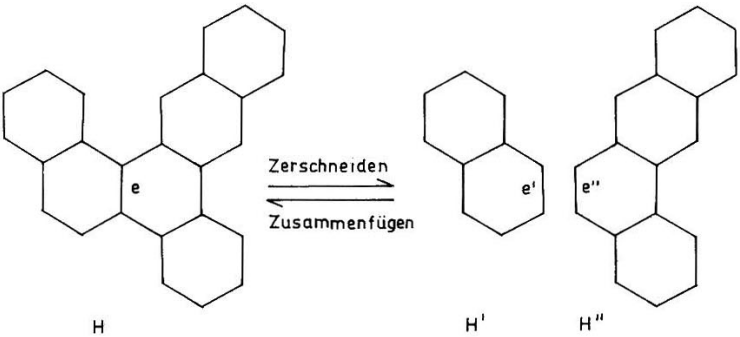
2. VORBEMERKUNGEN

Hier wollen wir wesentliche, zum besseren Verständnis beitragende Aussagen formulieren. Die Beweise findet der interessierte Leser in /14/.

Zerschneiden und Zusammenfügen

Eine Kante eines HSs werde als Innenkante bezeichnet, falls sie zwei Zellen angehört, ansonsten nennen wir sie Randkante.

Es seien H ein CHS und e eine Innenkante von H. Zerschneiden von H entlang e führe zu einem Paar kleinerer CHSe, sagen wir H', H", deren Vereinigung H und deren Durchschnitt e mit ihren Endknotenpunkten ist. Die Randkanten e' und e" von H' bzw. H" korrespondieren mit e von H (s. FIG. 2).



FIGUR 2

Zusammenfügen ist die inverse Operation vom Zerschneiden. Es seien H', H" CHSe mit den Randkanten e' bzw. e", wie in FIG. 2 zu sehen. Durch das <u>Zusammenfügen von H' und H" entlang der Kanten e', e"</u> entstehe ein größeres CHS, nennen wir es H, in dem die Kanten e' und e" miteinander identifiziert werden, wie in FIG. 2 dargestellt.

<u>Beobachtung 1 /14/:</u>

Jedes CHS hat einen LF. □

<u>Beobachtung 2 /14/:</u>

Es sei H ein CHS mit wenigstens zwei Zellen, L ein LF von H, die Kanten von L rot und alle nicht zu L gehörenden Kanten von H blau gefärbt. Kante e sei Innenkante und $\bar{e}$, $\bar{\bar{e}}$ seien zu e adjazente Randkanten, die zur Zelle C gehören. Dann sind beide Kanten $\bar{e}$, $\bar{\bar{e}}$ entweder blau oder rot gefärbt (FIG. 3). □

Alle LFen von H können aus Linearfaktoren von H' und H" (FIG. 2) auf folgende Weise gefunden werden: Wenn nicht beide Kanten e', e" blau sind, so füge H' und H" entlang e', e" zusammen, färbe e rot, falls e', e" rot sind, ansonsten färbe e blau, während die Farben aller übrigen Kanten beibehalten werden.

Offensichtlich gelten

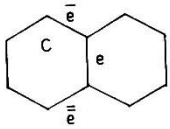
(3) $r(e;H) = r(e';H')\cdot r(e";H")$

(4) $b(e;H) = r(e';H')\cdot b(e";H") + b(e';H')\cdot r(e";H")$

und mit Gleichung (1)

(5) $$\begin{aligned} m(H) &= m(H')\cdot r(e";H") + r(e';H')\cdot b(e";H") \\ &= r(e';H')\cdot m(H") + b(e';H')\cdot r(e";H") \\ &= m(H')\cdot m(H") - b(e';H')\cdot b(e";H") \end{aligned}$$

(siehe FIG. 2).



FIGUR 3

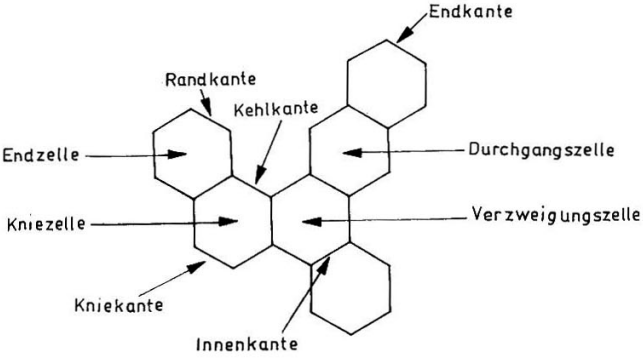
3. DER DACHGRAPH

Es sei H ein CHS mit wenigstens zwei Zellen. $\underline{C}_i$ (i = 1,2,3) bezeichne diejenige Teilmenge von Zellen von H, die auf ihrem Rand genau i Innenkanten von H haben. $\underline{C}_{21}$ sei diejenige Teilmenge von $\underline{C}_2$, welche alle diejenigen Zellen von $\underline{C}_2$ enthält, in denen die beiden Innenkanten parallel zueinander ("gegenüber") liegen und es sei $\underline{C}_{22} = \underline{C}_2 - \underline{C}_{21}$. Offensichtlich ist $\underline{C}_1 \cup \underline{C}_{21} \cup \underline{C}_{22} \cup \underline{C}_3$ die Menge aller Zellen von H und es ist $\underline{C}_1 \neq \emptyset$. Wir bezeichnen $C \in \underline{C}_1$ als <u>Endzelle</u>, $C \in \underline{C}_{21}$ als <u>Durchgangszelle</u>, $C \in \underline{C}_{22}$ als <u>Kniezelle</u> und $C \in \underline{C}_3$ als <u>Verzweigungszelle</u> von H (FIG. 4).

Eine <u>Endkante</u> von H ist eine auf dem Rand einer Endzelle befindliche und der dazugehörigen Innenkante gegenüberliegende Kante (FIG. 4).

Eine <u>Kehlkante</u> von H ist Randkante und zu genau zwei Innenkanten von H adjazent (FIG. 4).

Eine <u>Kniekante</u> von H ist eine Kante, welche auf dem Rand einer Kniezelle angetroffen wird und die der zu dieser Zelle gehörenden Kehlkante gegenüber liegt (FIG. 4).



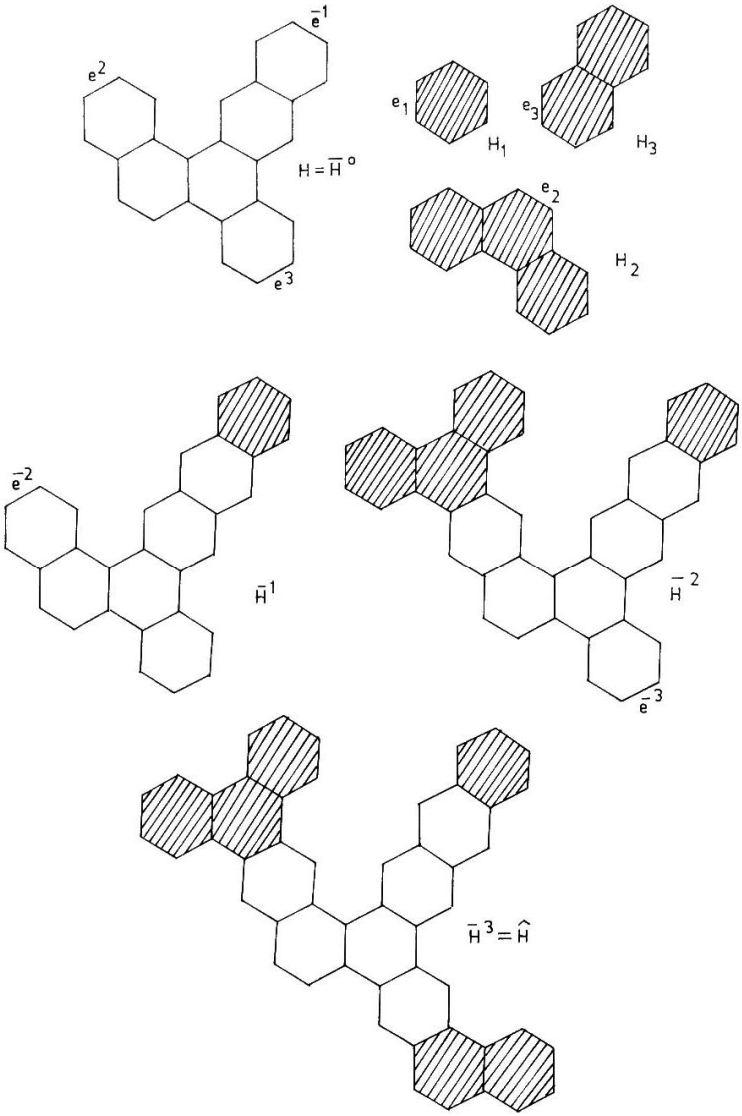
FIGUR 4

H habe $p = p(H)$ Endzellen ($p = 2,3,\ldots$). Einem positiven Umlauf des Randes von H folgend, seien die Endkanten fortlaufend mit $e^1, e^2, \ldots, e^p$ und die dazugehörenden Endzellen mit $C^1, C^2, \ldots$ $\ldots, C^p$ bezeichnet. Weiter seien p nicht notwendig verschiedene CHSe $H_1, H_2, \ldots, H_p$ gegeben. Kante e_j von H_j, $j = 1,2,\ldots,p$, inzidiere mit Knotenpunkten der Valenz 2. Durch geeignetes Zusammenfügen von H mit $H_1, H_2, \ldots, H_p$ werden wir ein größeres CHS bzw. ECHS - nennen wir es den <u>Dachgraphen</u> $\hat{H}$ - nach folgender Vorschrift konstruieren:

(i) Setze $H =: \bar{H}^o$ und $H_j =: \bar{\bar{H}}_j$. Dabei gehen e^1 (von H) in $\bar{e}^1$ (von $\bar{H}^o$) und e_j (von H_j) in $\bar{\bar{e}}_j$ (von $\bar{\bar{H}}_j$) über ($j = 1,2,\ldots,p$).

(ii) Graph $\bar{H}^j$ erhalten wir aus den beiden Graphen $\bar{H}^{j-1}$ und $\bar{\bar{H}}_j$, indem wir sie entlang der Kante $\bar{e}^j$ (von $\bar{H}^{j-1}$) und $\bar{\bar{e}}_j$ (von $\bar{\bar{H}}_j$) gemäß FIG. 2 zusammenfügen.

(iii) Falls $j < p$ ist, so gehe die in H mit e^{j+1} bezeichnete Endkante in eine Endkante $\bar{e}^{j+1}$ von $\bar{H}^j$ über. Ist $j = p$, so erhalten wir $\bar{H}^p =: \hat{H}$.


$\bar{e}^1$
e^2
$H = \bar{H}^o$
e^3
e_1
H_1
e_3
H_3
e_2
H_2
$\bar{e}^2$
$\bar{H}^1$
$\bar{H}^2$
$\bar{e}^3$
$\bar{H}^3 = \hat{H}$

FIGUR 5

In FIG. 5 wird das Vorgehen verdeutlicht.

Sicher ist der Dachgraph $\hat{H} = G(H;H_j,e_j;\ j = 1,2,\ldots,p)$ ein ECHS. Es sei bemerkt, daß alle Aussagen über CHSe auch für $\hat{H}$ zutreffen.
Offensichtlich ist die Anzahl $\hat{m}(H) := m(\hat{H})$ der Linearfaktoren von $\hat{H}$ eine Funktion von H, $H_1,H_2,\ldots,H_p$ und der Kanten $e_1,e_2,\ldots,e_p$:

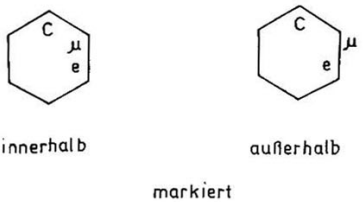
(6) $\hat{m}(H) = m(H;H_j,e_j;\ j = 1,2,\ldots,p)$.

Mit $r_j := r(e_j,H_j) = r(\bar{\bar{e}}_j,\bar{\bar{H}}_j)$ und $b_j := b(e_j,H_j) = b(\bar{\bar{e}}_j,\bar{\bar{H}}_j)$ gilt:

(7) $\hat{m}(H) = m(H;r_j,b_j;\ j = 1,2,\ldots,p)$.

4. DER ALGORITHMUS

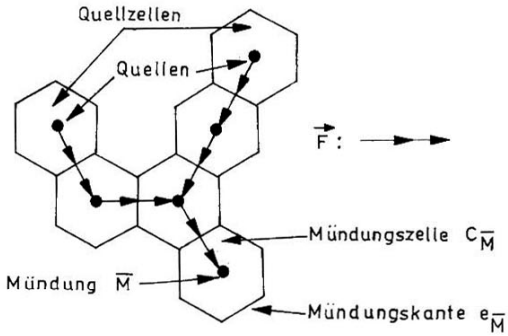
Es seien H ein CHS, C eine Zelle von H und e eine Innenkante, die auf dem Rand von C liege. Wir wollen sagen: "e ist innerhalb (außerhalb) mit μ markiert", wenn die Marke μ auf der Seite von e zu finden ist, die zur Zelle C gehört (nicht gehört) (FIG. 6).



FIGUR 6

Um $\hat{m}(H)$ zu berechnen, ist neben den (unabhängigen) Größen r_j, b_j $(j = 1,2,\ldots,p)$ ausschließlich H von Interesse. Deshalb können wir uns bei der Beschreibung des Algorithmus auf H beschränken.

Es sei F der inner duale Graph von H; wähle einen Endknotenpunkt M von F und orientiere alle Kanten von F zu M hin: F geht dadurch in einen Fluß $\vec{F}$ mit Quellen und der Mündung $\overline{M}$ über. Die Endzellen von H, welche mit den Quellen und der Mündung von $\vec{F}$ korrespondieren, seien die Quellzellen bzw. die Mündungszelle $C_{\overline{M}}$ und die jeweiligen Endkanten seien als Quellkante bzw. die Mündungskante $e_{\overline{M}}$ bezeichnet (FIG. 7).



FIGUR 7

Bei den Quellen beginnend und dem Fluß folgend, rekonstruieren wir H aus seinen Zellen durch Zusammenfügen und berechnen schrittweise die Werte $\bar{r}(e;H)$, $\bar{b}(e;H)$ für alle Innenkanten und die Mündungskante $e_{\overline{M}}$, welche mit den $\bar{r}$- und $\bar{b}$-Werten der "aktuellen" Mündungskante identisch sind. Damit finden wir $\bar{r}(e_{\overline{M}},H)$, $\bar{b}(e_{\overline{M}},H)$. Ist $e_{\overline{M}} = e^j$, $j = 1,2,\ldots,p$, von H, so erhalten wir schließlich mit den Gleichungen (3), (4)

(8) $\hat{r}(e^j;H) := r(e^j;\hat{H}) = \bar{r}(e_{\overline{M}};H) \cdot r_j$

(9) $\hat{b}(e^j;H) := b(e^j;\hat{H}) = \bar{b}(e_{\overline{M}};H) \cdot r_j + \bar{r}(e_{\overline{M}};H) \cdot b_j$

und mit Gleichung (1)

(10) $\hat{m}(H) = \hat{r}(e^j;H) + \hat{b}(e^j;H)$

$= \bar{r}(e_{\overline{M}};H) \cdot r_j + \bar{b}(e_{\overline{M}};H) \cdot r_j + \bar{r}(e_{\overline{M}};H) \cdot b_j$.

Algorithmus $\hat{A}$:

($\hat{A}$.1) Für Endzelle C^j von H ($j = 1,2,\ldots,p$) markiere

a) Endkante e^j außerhalb mit
$(\bar{r}(e^j;H),\bar{b}(e^j;H)) = (r_j,b_j)$ und

b) Innenkante e_1^j innerhalb mit
$(\bar{r}(e_1^j;H),\bar{b}(e_1^j,H)) = (r_j;r_j + b_j)$.

($\hat{A}$.2) Wenn es in H eine Zelle $C \in \underline{C}_2$ mit den Innenkanten e',e" gibt, wobei e' außerhalb und e" nicht innerhalb markiert ist, so markiere e" innerhalb mit

$$(\bar{r}(e";H),\bar{b}(e";H)) = \begin{cases} (\bar{r}(e';H);\bar{r}(e';H) + \bar{b}(e';H)) & \text{wenn } C\in\underline{C}_{21} \\ (\bar{r}(e';H)+\bar{b}(e';H);\bar{r}(e';H)) & \text{wenn } C\in\underline{C}_{22} \end{cases}.$$

($\hat{A}$.3) Wenn es in H eine Zelle $C\in\underline{C}_3$ mit den Innenkanten e*,e**, e*** gibt und e*,e** außerhalb und e*** nicht innerhalb markiert ist, so markiere e*** innerhalb mit

$$(\bar{r}(e^{***};H);\bar{b}(e^{***},H)) =$$
$$(\left[\bar{r}(e^*;H) + \bar{b}(e^*;H)\right]\cdot\left[\bar{r}(e^{**};H) + \bar{b}(e^{**};H)\right];$$
$$\bar{r}(e^*;H)\cdot\bar{r}(e^{**},H)).$$

($\hat{A}$.4) Wenn C^k ($k = 1,2,\ldots,p$) Endzelle von H ist, e^k und e_1^k die dazugehörende End- bzw. Innenkante und e_1^k außerhalb jedoch e^k nicht innerhalb markiert sind, so markiere e^k innerhalb mit

$$(\bar{r}(e^k;H);\bar{b}(e^k,H)) = (\bar{r}(e_1^k,H);\bar{r}(e_1^k,H) + \bar{b}(e_1^k,H)).$$

Die Prozedur bricht im Falle der Berechnung von $\hat{m}(H)$ ab, falls eine Endkante an beiden Seiten markiert ist (siehe die Gleichungen (8) - (10).

An dieser Stelle ist es angebracht, für eine Kante e von H eine der Gleichung (2) entsprechende Pauling'sche Bindungsordnungsfunktion

$$(11) \qquad \hat{p}(e;H) := p(e,\hat{H}) = \frac{r(e,\hat{H})}{m(\hat{H})} = \frac{\hat{r}(e,H)}{\hat{m}(H)}$$

zu definieren. Um die erforderlichen $\hat{r}(e;H)$-Polynome für jede

Kante e von H zu finden, ist die Prozedur erst dann zu beenden, falls alle Innenkanten an beiden Seiten markiert sind. Kante e sei auf der einen Seite mit $(\bar{r}^1(e,H);\bar{b}^1(e,H))$ und auf der anderen Seite mit $(\bar{r}^2(e;H);\bar{b}^2(e;H))$ markiert, dann ist (mit (3))

$$(12) \qquad \hat{r}(e;H) = \bar{r}^1(e;H)\cdot\bar{r}^2(e;H).$$

Es sei e^j, $j = 1,2,\ldots,p$, Endkante von H und e_o^j eine zu e^j adjazente Kante von H, dann setzen wir

$$(13) \qquad \hat{r}(e_o^j;H) := r(e_o^j;\hat{H}) = \bar{b}(e^j;H)\cdot r_j$$

$$(14) \qquad \hat{b}(e_o^j;H) := b(e_o^j;\hat{H}) = \bar{r}(e^j;H)\cdot(r_j+b_j).$$

Für jeden Knotenpunkt v, der mit keiner Endkante von H inzidiert, ist

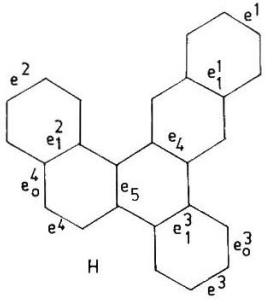
$$(15) \qquad \sum_{e\cdot v} \hat{r}(e;H) = \hat{m}(H),$$

wobei sich die Summation über alle mit v inzidierenden Kanten e von H erstreckt. Damit können (man beachte auch Bemerkung 2) alle übrigen $\hat{r}$-Werte von H gefunden und somit $\hat{p}(e;H)$ für jede Kante e ermittelt werden.
Als Beispiel sei das in FIG. 8.1 dargestellte CHS H mit den gegebenen Kantenbezeichnungen gewählt. Da $p(H) = 3$ ist, gibt es insgesamt drei Flüsse (FIG. 8.2). Da durch die Polynome für $\bar{r}$, $\bar{b}$ (Zwischenergebnisse) relativ viel Platz beansprucht wird, ist in der mittleren Spalte von FIG. 8.3 eine gesonderte Darstellung der drei Flüsse von H gewählt. In der linken Spalte finden wir die Aufzählpolynome für $\bar{r}^1(e;H)$, $\bar{b}^1(e;H)$ und in der rechten Spalte die Aufzählpolynome für $\bar{r}^2(e;H)$, $\bar{b}^2(e;H)$. Für Endkante e^3 von H erhalten wir (Gleichungen (8), (9))

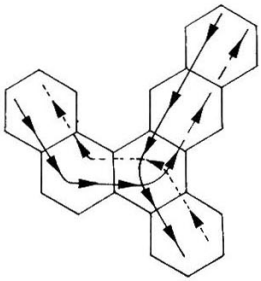
$$(16) \qquad \hat{r}(e^3;H) = (9r_1r_2 + 3r_1b_2 + 3b_1r_2 + b_1b_2)\cdot r_3$$

und

$$(17) \qquad \hat{b}(e^3;H) = (11r_1r_2 + 4r_1b_2 + 3b_1r_2 + b_1b_2)\cdot r_3 + (9r_1r_2 + 3r_1b_2 + 3b_1r_2 + b_1b_2)\cdot b_3,$$



8.1



8.2

$\bar{r}^1(e,H)$ $\bar{b}^1(e,H)$	Flüsse und zu markierende Kanten von H	$\bar{r}^2(e,H)$ $\bar{b}^2(e,H)$
r_1 b_1	e^1	$6r_2r_3+3r_2b_3+2b_2r_3+b_2b_3$ $14r_2r_3+6r_2b_3+5b_2r_3+2b_2b_3$
r_1 r_1+b_1	e_1^1	$6r_2r_3+3r_2b_3+2b_2r_3+b_2b_3$ $8r_2r_3+3r_2b_3+3b_2r_3+b_2b_3$
r_1 $2r_1+b_1$	e^4	$6r_2r_3+3r_2b_3+2b_2r_3+b_2b_3$ $2r_2r_3 + b_2r_3$
r_2 b_2	e^2	$7r_1r_3+3r_1b_3+2b_1r_3+b_1b_3$ $13r_1r_3+6r_1b_3+4b_1r_3+2b_1b_3$
r_2 r_2+b_2	e_1^2	$7r_1r_3+3r_1b_3+2b_1r_3+b_1b_3$ $6r_1r_3+3r_1b_3+2b_1r_3+b_1b_3$
$2r_2+b_2$ r_2	e_5	$6r_1r_3+3r_1b_3+2b_1r_3+b_1b_3$ r_1r_3
$9r_1r_2+3r_1b_2+3b_1r_2+b_1b_2$ $2r_1r_2+r_1b_2$	e_1^3	r_3 r_3+b_3
$9r_1r_2+3r_1b_2+3b_1r_2+b_1b_2$ $11r_1r_2+4r_1b_2+3b_1r_2+b_1b_2$	e^3	r_3 b_3

8.3

FIGUR 8

woraus mit Gleichung (10)

$$(18) \quad \hat{m}(H) = (20r_1r_2 + 7r_1b_2 + 6b_1r_2 + 2b_1b_2) \cdot r_3 + (9r_1r_2 + 3r_1b_2 + 3b_1r_2 + b_1b_2) \cdot b_3$$

folgt.

Durch Einsetzen von (16) und (18) in (11) erhalten wir die Pauling'sche Bindungsordnungsfunktion $\hat{p}(e^3;H)$ für Endkante e^3 von H in Abhängigkeit von r_j und b_j $(j = 1,2,3)$.

Für die Kante e_o^3 (FIG. 8.1) ergibt sich mit Gleichung (13)

$$\hat{r}(e_o^3;H) = (11r_1r_2 + 4r_1b_2 + 3b_1r_2 + b_1b_2) \cdot r_3 \; .$$

Unter Beachtung von Beobachtung 2 und der Gleichungen (12), (15) lassen sich die $\hat{r}(e;H)$-Aufzählpolynome für alle übrigen Kanten von H leicht finden, womit auch die $\hat{p}(e;H)$-Funktionen (Gleichung (11)) gegeben sind.

5. ABSCHLIESSENDE BEMERKUNGEN

5.1 Algorithmus $\hat{A}$ kann so abgeändert werden, daß auch eine Zelle $C \in \underline{C}_2 \cup \underline{C}_3$ als Mündungszelle geeignet ist.

5.2 Es seien $P = \{1,2,\ldots,p\}$ und P' eine Teilmenge von P, die auch leer sein kann. Der Term $m(\bigcup_{j\in P'} e^j;H)$ gebe die Anzahl derjenigen LFen von H an, die (neben anderen Kanten) alle Kanten e^j, $j \in P'$, enthalten. Damit kann $\hat{m}(H)$ folgendermaßen explizit formuliert werden:

$$(19) \quad \hat{m}(H) = \sum_{P'\subseteq P} \left\{ m(\bigcup_{j\in P'} e^j;H) \cdot \prod_{k\in P-P'} r_k \cdot \prod_{j\in P'} b_j \right\},$$

wobei

a) die Summation über alle Teilmengen P' von P erfolgt und

b) $m(\bigcup_{j\in\emptyset} e^j;H) = m(H)$ und $\prod_{k\in\emptyset} r_k = \prod_{j\in\emptyset} b_j = 1$ zu setzen sind.

5.3 Der Schreibaufwand kann reduziert werden, falls wir r_j und

b_j durch die Startwerte $r_j := r_j/r_j = 1$ bzw. $b_j := b_j/r_j = x_j$, $j = 1,2,\ldots,p$, ersetzen. Nach Anwendung von Algorithmus $\hat{A}$ erhalten wir das <u>reduzierte Aufzählpolynom</u> $\hat{m}_{red}(H)$ $(= m_{red}(\hat{H}))$ von H und es ist

$$(20) \qquad \hat{m}(H) = \hat{m}_{red}(H) \cdot \prod_{j=1}^{p} r_j \ .$$

Für jede Kante e von H können in analoger Weise reduzierte Aufzählpolynome $\hat{f}_{red}(e;H)$, $f \in \{r,b\}$, angegeben werden, wobei

$$(21) \qquad \hat{f}(e;H) = \hat{f}_{red}(e;H) \cdot \prod_{j=1}^{p} r_j$$

ist.

Somit gilt für die Pauling'sche Bindungsordnungsfunktion $\hat{p}(e;H)$ (Gleichung (11)) für Kante e von H:

$$(22) \qquad \hat{p}(e;H) = \frac{\hat{r}_{red}(e;H)}{\hat{m}_{red}(H)} \ .$$

Für das in FIG. 8.1 gegebene HS H erhalten wir:

$$(23) \qquad \hat{m}_{red}(H) = 20 + 6x_1 + 7x_2 + 9x_3 + 2x_1x_2 + 3x_1x_3 + 3x_2x_3 + x_1x_2x_3$$

und z. B. für Endkante e^3:

$$\hat{r}_{red}(e^3;H) = 9 + 3x_1 + 3x_2 + x_1x_2 .$$

5.4 Hat das CHS H q Kniezellen, $q = 1,2,\ldots$, so sind diese auch in $\hat{H}$ als Kniezellen vorhanden. An deren Kniekanten können weitere CHSe angefügt werden, so daß ein größeres ECHS bzw. CHS - nennen wir es $\hat{H}'$ - entsteht. Wir umfahren den Rand von H, bei Endkante e^1 beginnend, bezeichnen die angetroffenen Kniekanten fortlaufend mit $e^{p+1}, e^{p+2}, \ldots, e^{p+q}$, die dazu gehörenden Kniezellen mit $C^{p+1}, C^{p+2}, \ldots, C^{p+q}$ und markieren Kante e^{p+i}, $i = 1,2,\ldots,q$, außerhalb mit $(r_{p+i};b_{p+i})$ bzw. mit $(1;x_{p+i})$.

Auf H können wir wieder Algorithmus $\hat{A}$ anwenden, wobei jede Kniezelle als Verzweigungszelle zu betrachten ist. Das führt zu dem multilinearen Aufzählpolynom $\hat{m}'(H) = m(\hat{H}')$ bzw. zu $\hat{m}'_{red}(H) = m_{red}(\hat{H}')$ von H.
Für das in FIG. 8.1 gegebene HS H ist

$$(24) \quad \hat{m}'_{red}(H) = \hat{m}_{red}(H) + \varepsilon\cdot(14 + 4x_1 + 7x_2 + 6x_3 + 2x_1x_2 + 2x_1x_3 + 3x_2x_3 + x_1x_2x_3)\cdot x_4,$$
$$\varepsilon = +1,$$

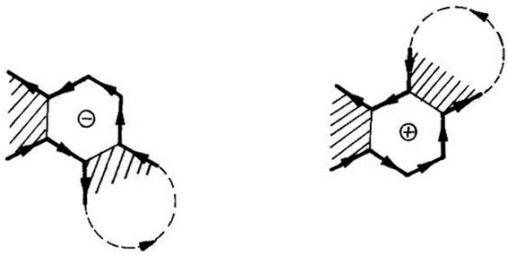
wobei $\hat{m}_{red}(H)$ der Gleichung (23) zu entnehmen ist.

Für jeden Knotenpunkt v von H, der mit keiner End- bzw. Kniekante von H inzidiert, ist (in Analogie zu Gleichung (15))

$$(25) \quad \sum_{e\cdot v} \hat{r}'(e;H) = \hat{m}'(H),$$

wobei die Summation über alle mit v inzidenten Kanten e von H erfolgt.

5.5 In H können zwei Typen von Kniezellen existieren (FIG. 9).



FIGUR 9

Dazu umfahren wir H im positiven Sinne, wobei wir z. B. bei Endkante e^1 beginnen.
Die Zelle $C'' \in \underline{C}_{22}$ von H habe die Kehlkante e''_1 und die Kniekante e". Wird bei diesem Umlauf von H Kante e" vor e''_1 angetroffen, so ist C" eine ⊕-Kniezelle, und wir markieren e" außerhalb mit (r";b") bzw. (1;x"). Im anderen Falle wollen wir von einer ⊖-Kniezelle sprechen, wobei e" außerhalb mit (r";-b") bzw. (1;-x") markiert werde.
Für das in FIG. 8.1 dargestellte System H wird $e'' = e^4$ außerhalb z. B. mit $(1;-x_4)$ markiert. Nach Anwendung von Algorithmus $\hat{A}$ finden wir das multilineare Aufzählpolynom $\hat{m}''_{red}(H) = m_{red}(\hat{H}'')$ (siehe Gleichung (24), $\varepsilon = -1$).

Es sei angemerkt, daß aus $\hat{m}''_{red}(H)$ bzw. $\hat{m}''(H)$ von H und aus Gleichungen (5) entsprechenden Gleichungen in Verbindung mit Algorithmus $\hat{A}$ das CHS H schrittweise rekonstruiert werden kann.

LITERATUR

/1/ Biermann, D. und W. Schmidt: Israel J. Chem. 20(1980), 312-318.

/2/ Clar, E.: Polycyclic Hydrocarbons, Vols. I, II, Acad. Press, London, 1964.

/3/ Clar, E.: Chimia 18(1964), 375-386.

/4/ Clar, E.: The Aromatic Sextet. J. Wiley et Sons, London - New York - Sydney - Toronto, 1972.

/5/ Pauling, L., L.O. Brockway und J.Y. Beach: J. Amer. Chem. Soc. 57(1935), 2705-2709.

/6/ Gordon, M. und W.H.T. Davison: J. Chem. Phys. 20(1952), 428-435.

/7/ Trinajstić, N.: Chemical Graph Theory, Vols. I, II, CRC Press, Boca Raton, Florida, 1983.

/8/ Cyvin, S.J. und I. Gutman: Kekulé Structures in Benzenoid Hydrocarbons. Lecture Notes in Chemistry, No.46, Springer-Verlag, Berlin - Heidelberg - New York - London - Paris - Tokyo, 1988.

/9/ Gutman, I. und S.J. Cyvin (Eds.): Advances in the Theory of Benzenoid Hydrocarbons; Topics in Current Chemistry, Springer-Verlag, Berlin 1990.

/10/ Balaban, A.T. und I. Tomescu: Match 14(1983), 155-182.

/11/ Balaban, A.T. und I. Tomescu: Croat. Chem. Acta 57(1984), 391-404.

/12/ Balaban, A.T., C. Artemi und I. Tomescu: Match 22(1987), 77-100.

/13/ Tošić, R. und O. Bodroža: Match 24(1989), 311-316.

/14/ John, P. und H. Sachs; In: Graphs, Hypergraphs and Applications (H. Sachs, Ed.). Proceedings of the Conference on Graph Theory, held in Eyba, October 1984, Teubner-Texte zur Mathematik, Bd. 73, BSB B.G. Teubner Verlagsgesellschaft, Leipzig, 1985, 80-91.