第 64 卷 第 6 期 厦门大学学报(自然科学版) Vol. 64 No. 6
2025 年 11 月 Journal of Xiamen University (Natural Science) Nov. 2025

doi:10.6043/j.issn.0438-0479.202411021

具有极值广义 Clar 覆盖多项式的六角链的刻画

严 丹[1],边 红[1*],赵菲菲[2]

(1.新疆师范大学数学科学学院,新疆 乌鲁木齐 830017;2.石河子大学理学院,新疆 石河子 832000)

摘要:[**目的**]给出具有最大、最小广义 Clar 覆盖多项式的极值六角链的刻画.[**方法**]首先,根据多项式的拟序,对两个广义 Clar 覆盖多项式如何比较进行说明.其次,固定六角链中六边形的个数,利用数学归纳法总结出六角链的极大线性链满足什么条件时其广义 Clar 覆盖多项式达到最大.最后,在此基础上,将极大线性链从不同位置上裂开,观察并证明其广义 Clar 覆盖多项式的变化情况.[**结果**]当每个极大线性链所包含的六边形个数相等时,其广义 Clar 覆盖多项式大于或等于任意六角链的广义 Clar 覆盖多项式.并且极大线性链从不同位置上裂开后得到的新六角链,其广义 Clar 覆盖多项式大于或等于没裂开之前的六角链的广义 Clar 覆盖多项式.此外,根据已有的递推公式,给出一个计算任意六角链的广义 Clar 覆盖多项式的修正算法.[**结论**]通过算法实例及证明可知:任意一个固定六边形个数的六角链,当每个极大线性链只包含 2 个六边形(即 ZigZag 六角链)时,其广义 Clar 覆盖多项式达到最大;反之,只包含一个极大线性六角链的六角链的广义 Clar 覆盖多项式最小.

关键词:六角链;Clar 覆盖多项式;广义 Clar 覆盖多项式

中图分类号:O 157.5 **文献标志码**:A **文章编号**:0438-0479(2025)06-1011-08

Characterization of a class of hexagonal chain with extremal generalized Clar covering polynomials

YAN Dan[1], BIAN Hong[1*], ZHAO Feifei[2]

(1. School of Mathematical Sciences, Xinjiang Normal University, Urumqi 830017, China;
2. School of Science, Shihezi University, Shihezi 832000, China)

Abstract: [**Objective**] The generalized Clar covering polynomial of hexagonal system contains many important issues in the Clar aromatic theory and the valence bond theory. These issues can be exemplified by the topological indicators, such as Kekulé number. Previous studies have shown that the generalized Clar covering polynomial can be used to accurately calculate the number of chemical activities including resonance energy. Resonant energy is often used to predict the aromatic stability of thick cyclic aromatic hydrocarbon conjugate systems. We give the characterization of hexagonal chains with the maximum and minimum generalized Clar covering polynomials, and present amendatory algorithm about computing the generalized Clar covering polynomial of arbitrary hexagonal chains. [**Methods**] First, the quasi-order of polynomial is used to explain the comparison of two Clar covering polynomials. Then we fix the number of hexagons of the hexagonal chain, and use mathematical induction to summarize what conditions the maximum linear chain of the hexagonal chain satisfies when its generalized Clar covering polynomial reaches its maximum. Finally, based on this finding, we split the maximal linear chain from different positions, observe and demonstrate the change of its generalized Clar covering polynomial. [**Results**] Induction results show that, when numbers of hexagons contained in each maximal linear chain

收稿日期:2024-11-28 **录用日期**:2025-03-26

基金项目:国家自然科学基金(12361072);2023 年新疆维吾尔自治区自然科学基金面上项目(2023D01A36)和青年项目(2023D01B48);国家自然科学基金数学天元基金(12426105);2022 年新疆师范大学创新教学团队项目

* **通信作者**:bh1218@163.com

引文格式:严丹,边红,赵菲菲.具有极值广义 Clar 覆盖多项式的六角链的刻画[J].厦门大学学报(自然科学版),2025,64(6):1011-1018.

Citation: YAN D, BIAN H, ZHAO F F. Characterization of a class of hexagonal chain with extremal generalized Clar covering polynomials[J]. J Xiamen Univ Nat Sci, 2025, 64(6): 1011-1018. (in Chinese)

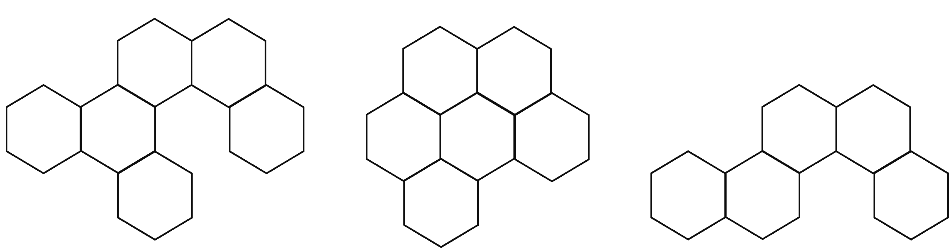
are unified, the generalized Clar covering polynomial is greater than or equal to the generalized Clar covering polynomial of any hexagonal chain. And, the new hexagonal chain obtained after splitting the maximal linear chain from different positions, its generalized Clar covering polynomial is greater than or equal to the generalized Clar covering polynomial of the hexagonal chain that is not split. For any hexagonal chain with a fixed number of hexagons, to get a hexagonal chain with larger generalized Clar covering polynomial, just fission each of its maximal linear hexagonal chains. After a series of fissions, a hexagonal chain containing only two or three hexagons is obtained. Finally, we discuss the number of maximal linear hexagonal chains containing three hexagons and obtain the final result. Meanwhile, we propose an amendatory algorithm for calculating the generalized Clar covering polynomial for any hexagonal chains according to the existing recursive formulas. According to the algorithm, we can obtain the generalized Clar covering polynomials for the hexagonal chain of hexagonal numbers $m=2;3;4;5;6$ and find that the generalized Clar covering polynomial reaches its minimum on a linear chain and reaches its maximum on the ZigZag hexagonal chain. [**Conclusions**] Through algorithm examples and proofs, we have found interesting behaviors of any hexagonal chain with a fixed number of hexagons. When each maximal linear chain contains only two hexagons (i. e. ZigZag hexagonal chain), its generalized Clar covering polynomial reaches its maximum. On the contrary, the generalized Clar covering polynomial of a hexagonal chain containing only one maximal linear hexagonal chain reaches its minimum.

Keywords: hexagonal chain; Clar covering polynomial; generalized Clar covering polynomial

在芳香族碳氢化合物的拓扑理论中，六角系统(图 1)表示一种芳香族碳氢化合物的碳原子骨架图，六边形的顶点代表碳原子，边代表碳原子之间的双键或单键. 从图论角度来看，六角系统是一个 2-连通的平面图，它的每一个内部面的边界都是一个边长为 1 的正六边形，六角系统的子图称为广义六角系统. 令 H 是一个六角系统，张福基和张和平在 1996 年首次提出了六角系统 H 的 Clar 覆盖多项式的概念[1]，给出了计算一个六角系统 H 的 Clar 覆盖多项式的基本递推公式. 因此 Clar 覆盖多项式也叫做 Zhang-Zhang 多项式. 文献[1-4]中给出了一系列关于 Clar 覆盖多项式的递推公式以及一些特殊六角链的 Clar 覆盖多项式的具体表达式，并指出 Clar 覆盖多项式能够更加精确、便捷地计算稠环芳香烃的共振能量等化学活性. 2016 年 Pleteršek 在文献[5]中引入了同时包含六边形和十边形的广义 Clar 覆盖多项式的概念. 2022 年 Furtula 等[6]基于广义 Clar 覆盖多项式的概念，研究了广义 Clar 覆盖多项式的一系列递推公式，并给出了计算任意六角链的广义 Clar 覆盖多项式的算法，同时揭示了广义 Clar 覆盖多项式能够更精确地估算、计算稠环芳香烃的共振能量等化学活性，从而被用于预测稠环芳香烃共轭体系的芳香族稳定性. 本文则是在已有的广义 Clar 覆盖多项式递推公式的基础上，利用多项式的拟序创新性地给出了具有极值广义 Clar 覆盖多项式的六角系统的刻画问题.

Gutman 等[7]对六角系统进行了分类. 在一个六角系统中，若没有 3 个六边形共用一个顶点，则称此六角系统为 cata-型六角系统(如图 1(a)所示)，反之则称为 peri-型六角系统(如图 1(b)所示). 对于 cata-型六角系统而言，若每个六边形至多与两个六边形相邻，则称为无分支的 cata-型六角系统，也叫六角链(如图 1(c)所示)；反之称为分支 cata-型六角系统(如图 1(a)所示).

在理论化学中，Kekulé 结构和 Kekulé 数是非常重要的概念. 2022 年 Radenković 等[8]用广义 Clar 覆盖多项式证明了分子振动能量与 Kekulé 和 Clar 结构有关. 令 G 是一个广义六角系统，化学中的一个 Kekulé 结构对应于图 G 的一个完美匹配，一个六角系统被称为 Kekuléan 当且仅当它具有 Kekulé 结构(即具有完美匹配)，用 $K(G)$ 表示图 G 的 Kekulé 结构



(a) cata-型六角系统　(b) peri-型六角系统　(c) 无分支的cata-型六角系统

图 1　3 种六角系统

Fig. 1　Three hexagonal system

数[9]，其他未定义的术语可参考文献[6].

用 C_n 表示 n 个顶点的圈，K_n 表示 n 个顶点的完全图. 广义六角系统 G 的一个生成子图被称为 G 的一个广义 Clar 覆盖，如果这个生成子图的每一个分支都是 C_6，C_{10} 或 K_2. 本文给出了具有最大、最小广义 Clar 覆盖多项式的极值六角链的刻画，并给出了计算任意六角链的广义 Clar 覆盖多项式的修正算法.

1　预备知识

Furtula 等在文献[6]中给出了六角系统的广义 Clar 覆盖多项式的一些基本性质和递推公式，并给出了一些特殊六角系统的广义 Clar 覆盖多项式的具体表达式.

定义 1[6]　令 G 是任意一个广义六角系统，则 G 的广义 Clar 覆盖多项式定义为

$$\mathrm{GZZ}(G,x,y)=\sum_{p\geqslant 0,q\geqslant 0}\mathrm{gz}(G,p,q)x^p y^q,$$

其中 $\mathrm{gz}(G,p,q)$ 代表图 G 中包含 p 个 C_6 和 q 个 C_{10} 的广义 Clar 覆盖的个数.

显然，$\mathrm{gz}(G,0,0)=K(G)$；且当 G 是空图时，$\mathrm{GZZ}(G,x,y)=1$；当 G 无 Kekulé 结构时，$\mathrm{GZZ}(G,x,y)=0$.

定理 1[6]　令 G 是任意一个广义六角系统，若 $e=ab$ 是 G 中位于边界的某一个六边形 S 的一条边（如图 2 所示），且与 S 相邻的六边形的个数为 $r(r\leqslant 5)$.

(i) 若 $r=0$，则

$$\mathrm{GZZ}(G)=x\mathrm{GZZ}(G-S)+\mathrm{GZZ}(G-a-b)+\mathrm{GZZ}(G-e).$$

(ii) 若 $r\neq 0$，令 $S_1,S_2,\cdots,S_r$ 为与 S 相邻的六边形. 则

$$\mathrm{GZZ}(G)=x\mathrm{GZZ}(G-S)+\mathrm{GZZ}(G-a-b)+y\sum_{i=1}^{r}\mathrm{GZZ}(G-S-S_i)+\mathrm{GZZ}(G-e).$$

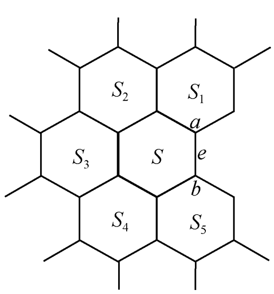


图 2　六边形 S 中的边 e 在广义六角系统 G 的边界上

Fig. 2　The edge e in the hexagon S is on the boundary of G

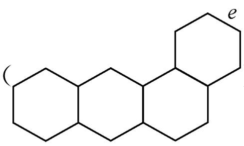
定理 2[6]　令 G 是一个广义六角系统，若 $e=ab$ 是 G 的一条边，但不属于 G 的任意一个 Kekulé 结构，则

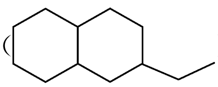
$$\mathrm{GZZ}(G)=\mathrm{GZZ}(G-e),$$

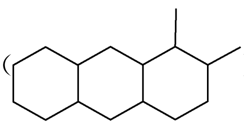
且若 $e=ab$ 属于 G 的所有 Kekulé 结构，则

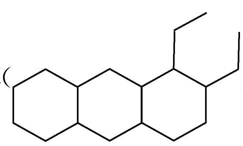
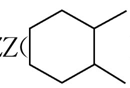
$$\mathrm{GZZ}(G)=\mathrm{GZZ}(G-a-b).$$

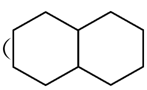
令 G 是一个如图 3 所示的广义六角系统. 根据定理 1 和定理 2，G 的广义 Clar 覆盖多项式为

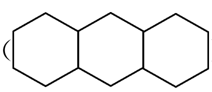
GZZ() =

xGZZ() +

GZZ() +

GZZ() + yGZZ() =

(x + 1)GZZ() +

GZZ() + y =

$$(x+1)(2x+y+3)+(3x+2y+4)+y=3x^2+xy+8x+3y+7.$$

令 G_1 和 G_2 是两个 Kekuléan 六角系统（或为 K_2），通过粘合两个 Kekuléan 六角系统 G_1 和 G_2 的外围边，而得到的具有公共外围边 $e=ab$ 的图，记作 $G_1\cdot G_2$（图 4）.

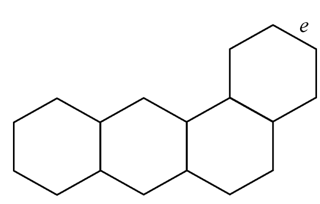


图 3　具有外围边 e 的广义六角系统 G

Fig. 3　Generalized hexagonal system G with peripheral edge e

定理 3[6]　令 G_1 和 G_2 是两个分别包含 S_1 和 S_2 的 Kekuléan 六角系统，则 $G_1\cdot G_2$ 的广义 Clar 覆盖多项式为

$$\mathrm{GZZ}(G_1\cdot G_2)=\mathrm{GZZ}(G_1)\mathrm{GZZ}(G'_2)+\mathrm{GZZ}(G'_1)\mathrm{GZZ}(G_2)+y\mathrm{GZZ}(G''_1)\mathrm{GZZ}(G''_2)-\mathrm{GZZ}(G'_1)\mathrm{GZZ}(G'_2),$$

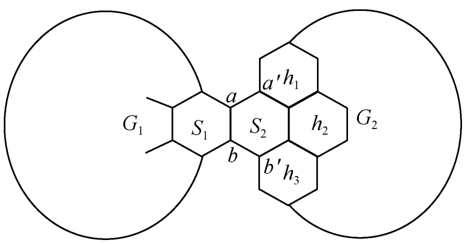


图 4 广义六角系统 $G_1 \cdot G_2$

Fig. 4 Generalized hexagonal system $G_1 \cdot G_2$

其中：$G'_i = G_i - a - b, G''_i = G_i - S_i (i = 1,2)$.

在不引起混淆的情况下，本文用 L_m 表示一个具有 m 个六边形的六角链，用 l_m 表示其广义 Clar 覆盖多项式. 显然，$l_m = mx + (m-1)y + m + 1$.

推论 1[6] 令 $G_1 \cdot L_m (m \geqslant 1)$ 是一个广义六角系统(图 5)，则

$$\mathrm{GZZ}(G_1 \cdot L_m) = \mathrm{GZZ}(G_1) + y\mathrm{GZZ}(G''_1) + (mx + (m-1)y + m)\mathrm{GZZ}(G'_1),$$

其中：$G'_1 = G_1 - a - b, G''_1 = G_1 - S$.

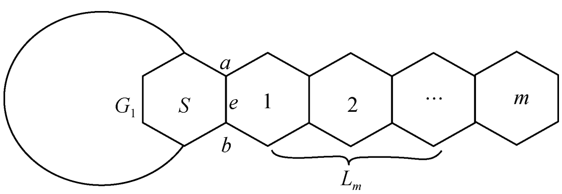


图 5 广义六角系统 $G_1 \cdot L_m$

Fig. 5 Generalized hexagonal system $G_1 \cdot L_m$

令 $f(x) = \sum_{k=1}^{n} a_k x^k, g(x) = \sum_{k=1}^{n} b_k x^k, (k = 0,1,\cdots, n)$ 是关于 x 的多项式，若 $f(x) \preceq g(x)$，当且仅当对任意的 $k, a_k \leqslant b_k$；同时，若存在 $k, a_k < b_k$，则 $f(x) \prec g(x)$.

下面给出一些计算六角链的广义 Clar 覆盖多项式的递推公式，令 $B(r_1, r_2, \cdots, r_n)$ 表示相关序列为 $(r_1, r_2, \cdots, r_n)$ 且包含 n 个极大线性六角链的六角链(图 6(a))，其广义 Clar 覆盖多项式记为 $\mathrm{ZB}(r_1, r_2, \cdots, r_n) = \mathrm{GZZ}(B(r_1, r_2, \cdots, r_n), x, y)$. $B(r_1, r_2, \cdots, r_n - 1)$ 表示从 $B(r_1, r_2, \cdots, r_n)$ 中去掉第 n 个极大线性链的末端六边形后得到的六角链(图 6(b))，并称其为辅六角链. 在不引发混淆的情况下，用最后一个极大线性链的序列符号表示此六角链和辅六角链，分别记作 $B(r_n)$ 和 $B(r_n - 1)$. 特别地，当 $r_1 = r_2 = \cdots = r_n$ 时，用 f_n 表示对应六角链 $B(r_n)$ 的广义 Clar 覆盖多项式，用 f'_n 表示对应辅六角链 $B(r_n - 1)$ 的广义 Clar 覆盖多项式.

Furtula 等在文献[6]中给出了关于 $\mathrm{ZB}(r_n)$ 和 $\mathrm{ZB}(r_n - 1)$ 的一些递推公式. 显然

当 $n = 1$ 时，$\mathrm{ZB}(r_1) = r_1 x + (r_1 - 1)y + r_1 + 1$.

当 $n = 2$ 时，$\mathrm{ZB}(r_1, r_2)$ 的广义 Clar 覆盖多项式为

$$\mathrm{ZB}(r_1, r_2) = (r_1 r_2 - r_1 - r_2 + 1)x^2 + (2r_1 r_2 - 3r_1 - 3r_2 + 4)xy + (r_1 r_2 - 2r_1 - 2r_2 + 4)y^2 + (2r_1 r_2 - r_1 - r_2 + 1)x + (2r_1 r_2 - 2r_1 - 2r_2 + 2)y + r_1 r_2 + 1. \tag{1}$$

当 $n \geqslant 3$ 时，$\mathrm{ZB}(r_n)$ 和 $\mathrm{ZB}(r_n - 1)$ 的广义 Clar 覆盖多项式为

$$\mathrm{ZB}(r_n) = \mathrm{ZB}(r_{n-1}) + y\mathrm{ZB}(r_{n-2} - 1) + ((r_n - 1)x + (r_n - 2)y + r_n - 1)\mathrm{ZB}(r_{n-1} - 1), \tag{2}$$

$$\mathrm{ZB}(r_n - 1) = \mathrm{ZB}(r_{n-1}) + y\mathrm{ZB}(r_{n-2} - 1) + [(r_n - 2)x + (r_n - 3)y + r_n - 2]\mathrm{ZB}(r_{n-1} - 1). \tag{3}$$

引理 1 令 $B(r_n)$ 是相关序列为 $(r_1, r_2, \cdots, r_n)$ 的六角链，$B(r_n - 1)$ 是对应的辅六角链. 则

$\mathrm{ZB}(r_n) \succeq \mathrm{ZB}(r_n - 1)$.

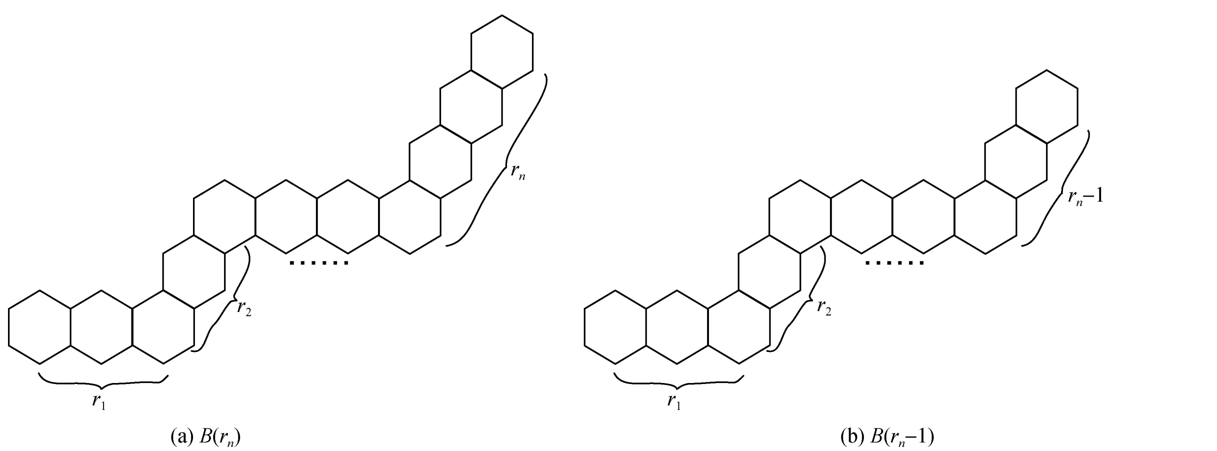


图 6 六角链 $B(r_n)$ 和辅六角链 $B(r_n - 1)$

Fig. 6 Hexagonal chain $B(r_n)$ and auxiliary hexagonal chain $B(r_n - 1)$

在文献[6]中,Furtula 根据式(2)和式(3)给出了计算任意给定相关序列的六角链的广义 Clar 覆盖多项式表达式的算法. 本文给出了一个计算任意六角链的广义 Clar 覆盖多项式的修正算法,在这个算法中只要输入 $B(r_n)$的每个极大线性链的六边形个数(即算法中第二行的 r),就能计算出其对应的广义 Clar 覆盖多项式;特别地,当 $n=1$ 时,需将第五行注释. 同时分别计算了 $m=3,4,5,6$ 时的六角链的广义 Clar 覆盖多项式的具体表达式(见附录(http://jxmu.xmu.edu.cn/upload/html/20250610)).

2　六角链的广义 Clar 覆盖多项式的最大、最小值

本节研究具有最大、最小广义 Clar 覆盖多项式的极值六角链的刻画. 以下考虑的六角链均为相关序列为 $(r_1,r_2,\cdots,r_n)$,且固定六边形个数为 m 的六角链.

定理 4　令 $B(r_n)$是一个六角链,则

$$f_n \geq \mathrm{ZB}(r_n),$$

其中 f_n 的相关序列为 $r_1=r_2=\cdots=r_n=p$,且 $np-(n-1)=m$.

证明　对 $B(r_n)$ 中的极大线性链 $r_i(i=1,2,\cdots,n)$ 的个数 n 进行归纳.

当 $n=1$ 时,结论显然成立.

当 $n=2$ 时,不妨假设 $B(r_1,r_2)$中的六边形个数为 q,即 $r_1+r_2=q$; 由式(1)得到 $B(r_1,r_2)$ 的广义 Clar 覆盖多项式为

$$\mathrm{ZB}(r_1,r_2)=(r_1r_2-q+1)x^2+(2r_1r_2-3q+4)xy+(r_1r_2-2q+4)y^2+(2r_1r_2-q+1)x+(2r_1r_2-2q+2)y+r_1r_2+1,$$

显然,当 $r_1=r_2$ 时 $\mathrm{ZB}(r_1,r_2)$ 最大,因此 f_2 是 $B(r_1,r_2)$的广义 Clar 覆盖多项式中最大的.

假设当 $n=k-1$ 时,定理结论是成立的,下面将证明当 $n=k$ 时,结论也是成立的.

令 $r_1=r_2=\cdots=r_{k-2}=p,r_{k-1}=t_1,r_k=t_2$ 和 $t_1+t_2=2p$. 根据假设知道广义 Clar 覆盖多项式 f_{k-2} 是 $\mathrm{ZB}(r_{k-2})$ 中最大的. 根据推论 1 可以得到关于 $B(r_k)$ 的广义 Clar 覆盖多项式

$$\mathrm{ZB}(r_k)=\mathrm{ZB}(r_{k-2})l_{r_k-1}+\mathrm{ZB}(r_{k-2}-1)\mathrm{ZB}(r_{k-1}-1,r_k)+y\mathrm{ZB}(r_{k-3}-1)l_{r_k-1}-\mathrm{ZB}(r_{k-2}-1)l_{r_k-1}=[\mathrm{ZB}(r_{k-2})-\mathrm{ZB}(r_{k-2}-1)]l_{r_k-1}+\mathrm{ZB}(r_{k-2}-1)\mathrm{ZB}(r_{k-1}-1,r_k)+y\mathrm{ZB}(r_{k-3}-1)l_{r_k-1}=(x+2y+1)\mathrm{ZB}(r_{k-3}-1)l_{r_k-1}+\mathrm{ZB}(r_{k-2}-1)\mathrm{ZB}(r_{k-1}-1,r_k).$$

先考虑 $\mathrm{ZB}(r_{k-1}-1,r_k)$,由假设知 $r_{k-1}=t_1,r_k=t_2$ 和 $t_1+t_2=2p$,则

$$\mathrm{ZB}(r_{k-1}-1,r_k)=[(t_1-1)t_2-(t_1-1)-t_2+1]x^2+[2(t_1-1)t_2-3(t_1-1)-3t_2+4]xy+[(t_1-1)t_2-2(t_1-1)-2t_2+4]y^2+[2(t_1-1)t_2-(t_1-1)-t_2+1]x+[2(t_1-1)t_2-2(t_1-1)-2t_2+2]y+(t_1-1)t_2+1=[-t_1^2+(2p+1)t_1-4p+2]x^2+[-2t_1^2+(4p+2)t_1-10p+7]xy+[-t_1^2+(2p+1)t_1-6p+6]y^2+[-2t_1^2+(4p+2)t_1-6p+2]x+[-2t_1^2+(4p+2)t_1-8p+4]y+[-t_1^2+(2p+1)t_1-2p+1].$$

显然每一项的系数都是关于 t_1 的二次函数,开口向下,有最大值,对称轴为 $t_1=p+\dfrac{1}{2}$,但 t_1 为整数,故 $r_{k-1}=r_k=p$ 时,$\mathrm{ZB}(r_{k-1}-1,r_k)$ 达到最大;继续考虑 $\mathrm{ZB}(r_k)$:

$$\mathrm{ZB}(r_k)=(x+2y+1)\mathrm{ZB}(r_{k-3}-1)l_{r_k-1}+\mathrm{ZB}(r_{k-2}-1)\mathrm{ZB}(r_{k-1}-1,r_k)=(x+2y+1)\mathrm{ZB}(r_{k-3}-1)l_{r_k-1}+[\mathrm{ZB}(r_{k-3})+y\mathrm{ZB}(r_{k-4}-1)+[(p-2)x+(p-3)y+p-2]\mathrm{ZB}(r_{k-3}-1)]\mathrm{ZB}(r_{k-1}-1,r_k)=(x+2y+1)\mathrm{ZB}(r_{k-3}-1)[(r_k-1)(x+1)+1+(r_k-2)y+\mathrm{ZB}(r_{k-1}-1,r_k)]+[(p-3)x+(p-5)y+p-3]\mathrm{ZB}(r_{k-3}-1)\mathrm{ZB}(r_{k-1}-1,r_k)+[\mathrm{ZB}(r_{k-3})+y\mathrm{ZB}(r_{k-4}-1)]\mathrm{ZB}(r_{k-1}-1,r_k).$$

由归纳假设,上式的第二、第三项以及 $\mathrm{ZB}(r_{k-3}-1)$ 已达到最大值. 故只需考虑

$$(r_k-1)(x+1)+1+(r_k-2)y+\mathrm{ZB}(r_{k-1}-1,r_k)=[-t_1^2+(2p+1)t_1-4p+2]x^2+[-2t_1^2+(4p+2)t_1-10p+7]xy+[-t_1^2+(2p+1)t_1-6p+6]y^2+[-2t_1^2+(4p+2)t_1-6p+2]x+[-2t_1^2+(4p+2)t_1-8p+4]y+[-t_1^2+(2p+1)t_1-2p+1]+(2p-t_1-1)(x+1)+1+(2p-t_1-2)y=[-t_1^2+(2p+1)t_1-4p+2]x^2+[-2t_1^2+(4p+2)t_1-10p+7]xy+[-t_1^2+(2p+1)t_1-6p+6]y^2+[-2t_1^2+(4p+1)t_1-4p+1]x+[-2t_1^2+(4p+1)t_1-6p+2]y+[-t_1^2-2pt_1+1].$$

类似可以证明,当 $r_{k-1}=r_k=p$ 时,$(r_k-1)(x+1)+1+(r_k-2)y+\mathrm{ZB}(r_{k-1}-1,r_k)$ 达到最大. 综上可知,定理结论成立.

定理 5　令 $B(r_n)$是相关序列为$(r_1,r_2,\cdots,r_n)$的

六角链.则

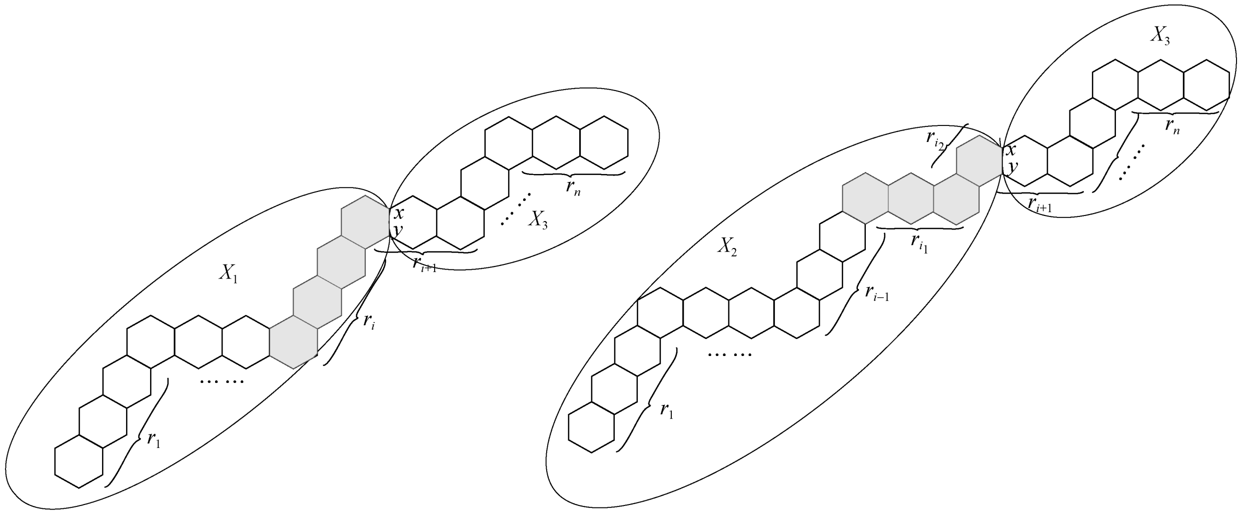
$$\mathrm{ZB}(r_1,\cdots,r_{i-1},r_{i_1},r_{i_2},r_{i+1},\cdots,r_n)\geq \mathrm{ZB}(r_n),$$

其中 $r_i=p$,$r_{i_1}+r_{i_2}=r_i+1$,$i=1,2,\cdots,n$.

证明 显然,有 $r_{i_1}+r_{i_2}-1=p$,$2\leqslant r_{i_1}<p$,$2\leqslant r_{i_2}<p$.将 X_1,X_2,X_3 去掉点 x,y 后的图形分别记作 X'_1,X'_2,X'_3,并将 X_1,X_2,X_3 去掉边 xy 所在的六边形后的图形分别记作 X''_1,X''_2,X''_3,根据定理 1 和定理 2 可以得到六角链 $B(r_n)$(图 7(a))和六角链 $B(r_1,\cdots,r_{i-1},r_{i_1},r_{i_2},r_{i+1},\cdots,r_n)$(图 7(b))的广义 Clar 覆盖多项式为

$$\begin{aligned}\mathrm{ZB}(r_n)=&\mathrm{ZB}(X_1)\cdot\mathrm{ZB}(X'_3)+\mathrm{ZB}(X'_1)\cdot\\&\mathrm{ZB}(X_3)+y\mathrm{ZB}(X''_1)\cdot\mathrm{ZB}(X''_3)-\\&\mathrm{ZB}(X'_1)\cdot\mathrm{ZB}(X'_3),\end{aligned}\tag{4}$$

$$\begin{aligned}\mathrm{ZB}(r_1,\cdots,r_{i-1},r_{i_1},r_{i_2},r_{i+1},\cdots,r_n)=&\mathrm{ZB}(X_2)\cdot\\&\mathrm{ZB}(X'_3)+\mathrm{ZB}(X'_2)\cdot\mathrm{ZB}(X_3)+y\mathrm{ZB}(X''_2)\cdot\\&\mathrm{ZB}(X''_3)-\mathrm{ZB}(X'_2)\cdot\mathrm{ZB}(X'_3).\end{aligned}\tag{5}$$



(a) 六角链$B(r_n)$ (b) 六角链$B(r_1,\cdots,r_{i-1},r_{i1},r_{i2},r_{i+1},\cdots,r_n)$

图 7 六角链 $B(r_n)$(a)和六角链 $B(r_1,\cdots,r_{i-1},r_{i_1},r_{i_2},r_{i+1},\cdots,r_n)$(b)

Fig. 7 Hexagonal chain $B(r_n)$ (a) and hexagonal chain $B(r_1,\cdots,r_{i-1},r_{i_1},r_{i_2},r_{i+1},\cdots,r_n)$ (b)

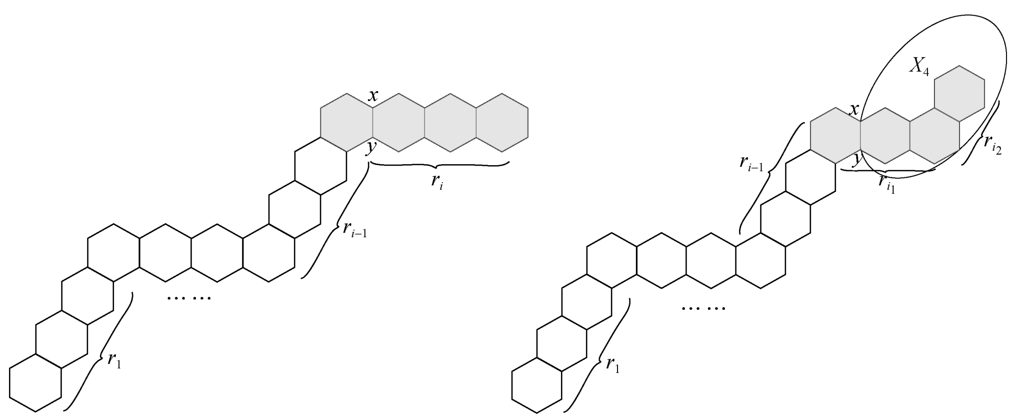
由式(4)和(5)可得

$$\begin{aligned}&\mathrm{ZB}(r_1,\cdots,r_{i-1},r_{i_1},r_{i_2},r_{i+1},\cdots,r_n)-\mathrm{ZB}(r_n)=\\&[\mathrm{ZB}(X_2)-\mathrm{ZB}(X_1)]\cdot\mathrm{ZB}(X'_3)+[\mathrm{ZB}(X'_2)-\\&\mathrm{ZB}(X'_1)]\cdot[\mathrm{ZB}(X_3)-\mathrm{ZB}(X'_3)]+\\&y[\mathrm{ZB}(X''_2)-\mathrm{ZB}(X''_1)]\cdot\mathrm{ZB}(X''_3).\end{aligned}$$

由引理 1 知 $\mathrm{ZB}(X_3)-\mathrm{ZB}(X'_3)\geq 0$,故只需考虑 $\mathrm{ZB}(X_2)-\mathrm{ZB}(X_1)$,$\mathrm{ZB}(X'_2)-\mathrm{ZB}(X'_1)$ 和 $\mathrm{ZB}(X''_2)-\mathrm{ZB}(X''_1)$ 的序关系即可,断言 $\mathrm{ZB}(X_2)\geq\mathrm{ZB}(X_1)$.

如图 8(a)和(b)所示,根据定理 3,可得

$$\mathrm{ZB}(X_1)=\mathrm{ZB}(r_{i-1})+\mathrm{ZB}(r_{i-1}-1)\cdot l_{r_i-1}+$$



(a) X_1: $r_1=r_2=\cdots=r_i=p$ (b) X_2: $r_1=\cdots=r_{i-1}=p$, $r_{i1}=t_1$, $r_{i2}=t_2$

图 8 六角链 $B(r_n)$中的 X_1(a)与六角链 $B(r_1,\cdots,r_{i-1},r_{i_1},r_{i_2},r_{i+1},\cdots,r_n)$中的 X_2(b)

Fig. 8 X_1 in hexagonal chain $B(r_n)$ (a) and X_2 in hexagonal chain $B(r_1,\cdots,r_{i-1},r_{i_1},r_{i_2},r_{i+1},\cdots,r_n)$ (b)

$$yZB(r_{i-2}-1)-ZB(r_{i-1}-1), \tag{6}$$

$$ZB(X_2)=ZB(r_{i-1})\cdot l_{r_2-1}+ZB(r_{r-1}-1)\cdot ZB(X_4)+yZB(r_{i-2}-1)\cdot l_{r_{i_2}-1}-ZB(r_{i-1}-1)\cdot l_{r_{i_2}-1}, \tag{7}$$

$$ZB(X_4)=l_{r_{i_2}-1}\cdot l_{r_{i_1}-2}-1+l_{r_{i_2}}+y. \tag{8}$$

因此,根据式(6)~(8)可得(图 9)

$$ZB(X_2)-ZB(X_1)=ZB(r_{i-1})(l_{r_{i2}-1}-1)+ZB(r_{i-1}-1)[ZB(X_4)-l_{r_i-1}]+yZB(r_{i-2}-1)\cdot(l_{r_{i_2}-1}-1)-ZB(r_{i-1}-1)\cdot(l_{r_{i_2}-1}-1)=(l_{r_{i_2}-1}-1)[ZB(r_{i-1})-ZB(r_{i-1}-1)]+yZB(r_{i-2}-1)\cdot(l_{r_{i_2}-1}-1)+ZB(r_{i-1}-1)[ZB(X_4)-l_{r_i-1}]=(x+2y+1)(l_{r_{i_2}-1}-1)ZB(r_{i-2}-1)+ZB(r_{i-1}-1)\cdot(ZB(X_4)-l_{r_i-1}).$$

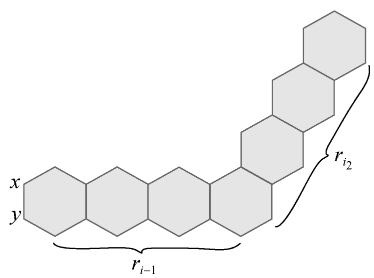


图 9 六角链 $B(r_1,\cdots,r_{i-1},r_{i_1},r_{i_2},r_{i+1},\cdots,r_n)$的 X_2 中的片段 X_4

Fig. 9 Fragment X_4 in X_2 of hexagonal chain $B(r_1,\cdots,r_{i-1},r_{i_1},r_{i_2},r_{i+1},\cdots,r_n)$

结果中第一项系数都大于等于 0,而 $ZB(r_{i-1}-1)\geq 0$,故只需考虑

$$ZB(X_4)-l_{r_i-1}=l_{r_{i_2}-1}\cdot l_{r_{i_1}-2}-1+l_{r_{i_2}}+y-l_{r_i-1}=[(r_{i_1}-2)(x+1)+(r_{i_1}-3)y]\cdot[(r_{i_2}-1)(x+1)+1+(r_{i_2}-2)y]-[((r_i-1)(x+1)+1+(r_i-2)y)]+[r_{i_2}(x+1)+1+(r_{i_2}-1)y]+y-1=(r_{i_1}-2)(r_{i_2}-1)(x+1)^2+(2r_{i_1}-5)(r_{i_2}-1)(x+1)y+(r_{i_1}-3)(r_{i_2}-2)y^2+(r_{i_2}-1)(x+1)+(r_{i_2}-2)y.$$

由此可知当 $r_{i_1}\geqslant 3$ 且 $r_{i_2}\geqslant 2$ 时,$ZB(X_4)-l_{r_i-1}$ 的系数都大于等于零. 而当 $r_{i_1}=2$ 时,由 $r_{i_1}+r_{i_2}=r_i+1$ 知 $r_{i_2}=r_i-1$;故当 $r_{i_1}=2$ 时,$ZB(X_4)-l_{r_i-1}=l_{r_{i_2}-1}+y-1\geq 0$. 因此 $r_{i_1}\geqslant 2,r_{i_2}\geqslant 2$ 时,$ZB(X_2)\geq ZB(X_1)$. $ZB(X'_2)\geq ZB(X'_1)$,$ZB(X''_2)\geq ZB(X''_1)$ 可以类似证明. 综上可知定理结论成立.

推论 2 令 $B(r_{n+k})$是相关序列为$(r_1,r_2,\cdots,r_{i-1},r_i,r_{i+1},\cdots,r_n,r_{n+1},\cdots,r_{n+k})$的六角链,则

$$ZB(r_1,\cdots,r_{i-1},r_{i_1},r_{i_2},r_{i+1},\cdots,r_{n+k})\geq ZB(r_{n+k}),$$

其中:$r_1=r_2=\cdots=r_i=p,r_{i_1}+r_{i_2}=r_i+1,r_{i+1}=r_{i+2}=\cdots=r_n=t,r_{n+1}=r_{n+2}=\cdots=r_{n+k}=r,p\geqslant 3,i=1,2,\cdots,n-1$.

推论 3 令 $B(r_n)$是相关序列为$(r_1,r_2,\cdots,r_{i-1},r_i,r_{i+1},\cdots,r_n)$的六角链,则

$$ZB(r_1,\cdots,r_{i-1},r_{i_1},r_{i_2},r_{i+1},\cdots,r_n)\geq ZB(r_n),$$

其中:$r_1=r_2=\cdots=r_i=p,r_{i_1}+r_{i_2}=r_i+1,r_{i+1}=r_{i+2}=\cdots=r_n=t,p\geqslant 3,i=1,2,\cdots,n-1$.

推论 4 令 $B(r_n)$是相关序列为$(r_1,r_2,\cdots,r_{i-1},r_i,r_{i+1},\cdots,r_n)$. 则

$$ZB(r_1,\cdots,r_{n-1},r_{n_1},r_{n_2})\geq f_n,$$

其中:$r_1=r_2=\cdots=r_n=p,r_{n_1}+r_{n_2}=r_n+1,p\geqslant 3$.

以下考虑的是相关序列为$(r_1,r_2,\cdots,r_n)$且包含 s 个六边形的六角链.

定理 6 令 $B(r_n)$是一个六角链. 则 $ZB(\overbrace{2,2,\cdots,2}^{s-1})\geq ZB(r_n)$.

证明 由定理 5 可知对于任意一个包含 s 个六边形的六角链,想要得到广义 Clar 覆盖多项式更大的六角链,只需对其每个极大线性六角链进行裂变,通过一系列裂变后,最终可以得到一个每个极大线性链中只包含两个或三个六边形的六角链. 即

$$s=3u+2v-(u+v-1)=2u+v+1,u\geqslant 0,v\geqslant 0,$$

其中 u 代表恰好包含 3 个六边形的极大线性六角链的个数,v 代表恰好包含 2 个六边形的极大线性六角链的个数. 显然这样的 u,v 一定是存在的. 当 u 为奇数时,$v=0,2,4,\cdots,s-1$;当 u 为偶数时,$v=1,3,5,\cdots,s-1$. 事实上,只需要考虑 $v=0$ 或 $v=1$ 的情形.

情形 1. 当 $v=0$ 时,则最终包含 s 个六边形的六角链的相关序列满足 $r_1=r_2=\cdots=r_u=3$. 根据推论 3 和推论 4 可知,对此六角链做一系列裂变,最终裂变成每个极大线性链只包含 2 个六边形的六角链,即 ZigZag 六角链 $ZB(\overbrace{2,2,\cdots,2}^{s-1})$.

情形 2. 当 $v=1$ 时,可以考虑以下两种子情形:

情形 2.1. 当 $r_1=r_2=\cdots=r_u=3,r_{u+1}=2$ 时,证明方法类似于情形 1.

情形 2.2. 当 $r_i=2,r_1=\cdots=r_{i-1}=r_{i+1}=\cdots=r_{u+1}$,$i=1,2,\cdots,u$ 时,根据推论 2 和推论 3 可知,对此六角链做一系列裂变,最终裂变成每个极大线性链只包含 2 个六边形的六角链,即 ZigZag 六角链 $ZB(\overbrace{2,2,\cdots,2}^{s-1})$.

综上所述,在所有六边形个数为 s 的六角链中,具

有最大广义 Clar 覆盖多项式的六角链是其每个极大线性链恰包含 2 个六边形的 Zigzag 六角链，即 ZB$(\overbrace{2,2,\cdots,2}^{s-1})$.

由上述分析可知，对于任意一个相关序列为$(r_1, r_2,\cdots,r_n)$的六角链，若对六角链中的任意一个极大线性六角链做一次裂变就会使其广义 Clar 覆盖多项式变大. 由此可知对于包含 s 个六边形的任意六角链，只包含一个极大线性六角链的六角链的广义 Clar 覆盖多项式是最小的. 因此，有如下结果：

定理 7 令 $B(r_n)$是包含 s 个六边形的六角链. 则 $l_s \leq \mathrm{ZB}(r_n)$.

参考文献：

[1] ZHANG H P, ZHANG F J. The Clar covering polynomial of hexagonal systems II. An application to resonance energy of condensed aromatic hydrocarbons[J]. Chinese Journal of Chemistry, 1996, 4: 321-325.

[2] ZHANG H P, ZHANG F J. The Clar covering polynomial of hexagonal systems I[J]. Discrete Applied Mathematics, 1996, 69(1/2): 147-167.

[3] LUCH A. The carcinogenic effects of polycyclic aromatic hydrocarbons[M]. Singapore: World Scientific, 2005.

[4] ZHANG H P, ZHANG F J. The Clar covering polynomial of hexagonal systems I[J]. Discrete Applied Mathematics, 1996, 69(1/2): 147-167.

[5] PLETERŠEK P Z. Equivalence of the gene-ralized Zhang-Zhang polynomial and the generalized cube polynomial [J]. Match, 2018, 80(1): 215-226.

[6] FURTULA B, RADENKOVIĆ S, REDŽEPOVIĆ I, et al. The generalized Zhang-Zhang polynomial of benzenoid systems-theory and applications[J]. Applied Mathematics and Computation, 2022, 418: 126822.

[7] GUTMAN I, CYVIN S J. Introduction to the theory of benzenoid hydrocarbons[M]. Berlin: Springer Science and Business Media, 1989.

[8] RADENKOVIĆ S, REDŽEPOVIĆ I, DORDEVIĆ S, et al. Relating vibrational energy with Kekulé- and Clar-structure-based parameters[J]. International Journal of Quantum Chemistry, 2022, 122(7): e26867.

[9] GUTMAN I, CYVIN S J. Kekulé structures in benzenoid hydrocarbons[M]. Berlin: Springer Science and Business Media, 2013.

(责任编辑：汪　军)