Ein einfacher Algorithmus zur Berechnung des charakteristischen Polynoms und der Eigenvektoren eines hexagonalen Bandes

Peter E. John
Technische Universität Ilmenau
Institut für Mathematik
Postfach 327
98684 Ilmenau

Abstract: We give an algorithm based on a general graph theoretical procedure for solving systems of linear equations (see [14]). The algorithm allows the eigenvalues and eigenspaces (eigenvectors) of any hexagonal tape to be simultaneously calculated.

1 Einleitung

1.1 Definitionen und Bezeichnungen

Es seien $G = (V, E)$ ein Graph mit der Knotenpunktmenge $V = V(G) = \{v_1, v_2, ..., v_n\}$ und der Kantenmenge $E = E(G)$, $A = A(G)$ seine 0 - 1 - Adjazenzmatrix und $I = I(G)$ eine $n \times n-$Einheitsmatrix. Das charakteristische Polynom

$$P_A(\lambda) = det(\lambda I - A) \tag{1}$$

wird als das **charakteristische Polynom** $P_G(\lambda)$ von G bezeichnet.
λ_0 heiße **Eigenwert** von G genau dann, wenn

$$P_G(\lambda_0) = 0 \tag{2}$$

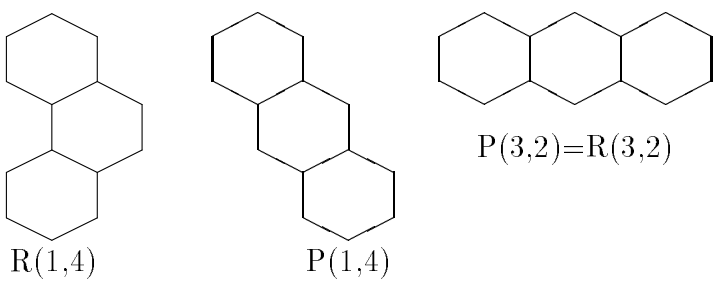
ist.
Ein Vektor $\underline{x}_0 = \underline{x}(\lambda_0)$ heiße ein **zu λ_0 gehörender Eigenvektor** von G, falls

$$(\lambda_0 \cdot I - A) \cdot \underline{x}_0 = \underline{0} \tag{3}$$

gilt, wobei $\underline{0} = \underline{0}(G)$ einen n-dimensionalen Nullvektor darstellt.
$\underline{x}_0$ heiße **normiert**, falls

$$| \underline{x}_0 | = 1. \tag{4}$$

Unter ε verstehen wir die euklidische Ebene, in welcher eine Richtung als "Vertikale" ausgezeichnet ist.



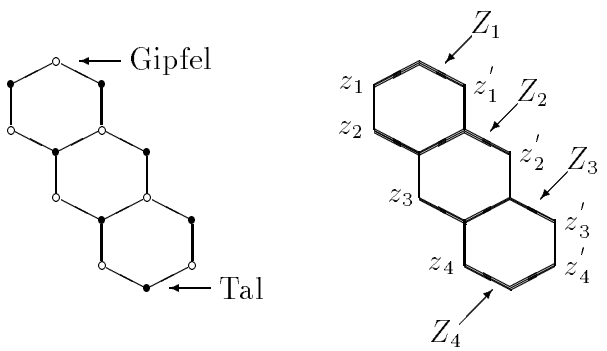


Abbildung 1

Eine **hexagonale Zelle** (kurz: **Zelle**) ist ein geschlossenes ebenes Gebiet, welches durch ein reguläres Sechseck der Seitenlänge eins berandet wird.
Ein **hexagonales System** (HS) ist ein zweifach zusammenhängender in ε eingebetteter Graph, dessen endliche Gebiete Zellen sind, wobei einige Kanten parallel zur gedachten Vertikale verlaufen (s. Abb. 1).
Es ist zweckmäßig, sich die Knotenpunkte eines HSs weiß und schwarz gefärbt zu denken, und zwar derart, daß jede Kante einen weißen mit einem schwarzen Knotenpunkt verbindet und daß der höchste Punkt jeder Zelle weiß ist (Abb. 1).
Ein **Gipfel** (**Tal**) eines HSs ist ein weißer (schwarzer) Knotenpunkt, dessen Nachbarn sämtlich tiefer (höher) liegen als er selbst (Abb. 1).
Graph G heiße **trivialer Graph**, falls $n = \mid V \mid = 1$ und $E = \emptyset$ sind.

1.2 Chemischer Bezug

Die Strukturformel eines benzenoiden Kohlenwasserstoffes (K) besteht aus einem hexagonalen System H, welches durch die Kohlenstoffatome aufgespannt wird, und aus hängenden Kanten, so daß jedes Kohlenstoffatom, welches genau einer Zelle (oder mehr als einer Zelle) angehört, mit genau einem Wasserstoffatom (oder mit keinem Wasserstoffatom) verbunden ist (Abb. 2); H werde als **Skelett** von K bezeichnet.

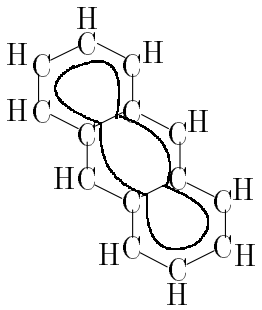


Abbildung 2

Nach dem Hückel-Modell [1, **?**] repräsentiert H das sogenannte $\sigma-$ Elektronenskelett von K, während außerdem jedes Kohlenstoffatom (von K) genau ein (energiereicheres, beweglicheres) $\pi-$Elektron zur Bindungsbildung in K beisteuert. Die Energien dieser $\pi-$Elektronen von K entsprechen den Eigenwerten und deren Verteilung über dem $\sigma-$ Skelett wird durch die Eigenvektoren von H beschrieben (siehe z. B. [3] - [6]).
Dieser Sachverhalt ist insbesondere für große Moleküle K von Interesse, wobei in dieser Arbeit neuartige Kohlenwasserstoffe - sogenannte Tubulene ([7] - [12]), die im Zusammenhang mit Fullerenen auftreten, den Hintergrund bilden.
An dieser Stelle wollen wir uns auf chemisch interessierende Strukturen beschränken, wobei die im folgenden Abschnitt beschriebenen hexagonalen Bänder lediglich einen kleinen Ausschnitt aus einer allgemeineren Klasse von (hexagonalen) Bändern repräsentieren.

2 Hexagonale Bänder

Es sei $\underline{H}$ die Menge aller HSe.
Zur Beschreibung der hier interessierenden Strukturen benötigen wir neben $\underline{H}$ eine weitere Graphenmenge.

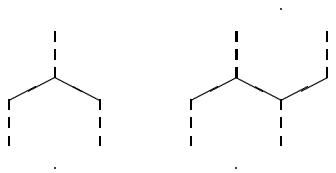


Abbildung 3

Unter einer **in ε (horizontal) liegenden Zick-Zack- Linie** wollen wir einen Weg Z verstehen, dessen Kanten folgendermaßen angeordnet sind: Jede Kante ist Seite eines gedachten Sechseckes und die Kantenmittelpunkte liegen auf einer gedachten Horizontalen (Abb. 3). Unter der **Länge** $l = l(Z)$ des Weges Z wollen wir die Anzahl seiner Kanten verstehen. Die Menge aller in ε horizontal angeordneten Zick-Zack-Linien sei $\underline{Z}$.
Das HS $H \in \underline{H}$ habe $g = g(H)$ Gipfel, $t = t(H)$ Täler, $h = h(H)$ Zellen und $q = q(H)$ horizontal angeordnete Zick-Zack-Linien $Z_i = Z(z_i, z_i')$, $i = 1, 2, ..., q$, mit den Endpunkten z_i, z_i' - wie in Abb. 1 zu sehen. Zur Konstruktion hexagonaler Bänder wählen wir aus $\underline{H}$ folgende HSe aus (siehe Abb.1):
$R = R(g = t, q)-$ ein rechteckähnliches HS und
$P = P(g = t, q)-$ ein parallelogrammähnliches HS, wobei $g \geq 1, q \geq 2$.
Offensichtlich ist $h(R) = h(P) = g \cdot (q - 1)$.
Die Gipfel (Täler) von R, P seien von links nach rechts mit $x_1, x_2, ..., x_g$ $(y_1, y_2, ..., y_{t=g})$ bezeichnet. Es sei $H = P$ (Falls $H = R$, so kann ganz analog verfahren werden).

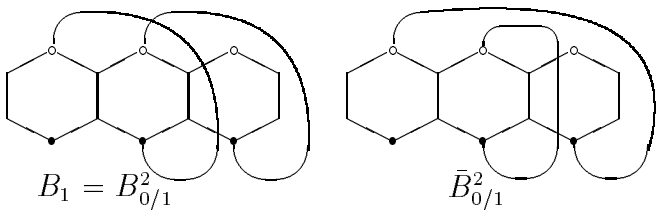


Abbildung 4

1. Fall (s. Abb. 4)
In H denken wir uns oberhalb bzw. unterhalb von ε insgesamt $r = 1, 2, ..., g = t$

Kanten
$e'_i = e'(x_{a+i}, y_{b+i})$
bzw.
$\overline{e}_i = \overline{e}(x_{a+i}, y_{b+1+r-i})$
mit $a, b = 0, 1, ..., g-r$ und $i = 1, 2, ..., r$ eingefügt. Auf diese Weise erhalten wir ein hexagonales Band $B^r_{a/b} = B^r_{a/b}(H)$ bzw. $\overline{B}^r_{a/b} = \overline{B}^r_{a/b}(H)$ mit $h(B^r_{a/b}) = h(\overline{B}^r_{a/b}) = g \cdot (q-1) + (r-1)$ (räumlich gesehenen) Sechsecken. Für $r = 1$ ist $B^1_{a/b} = \overline{B}^1_{a/b}$.

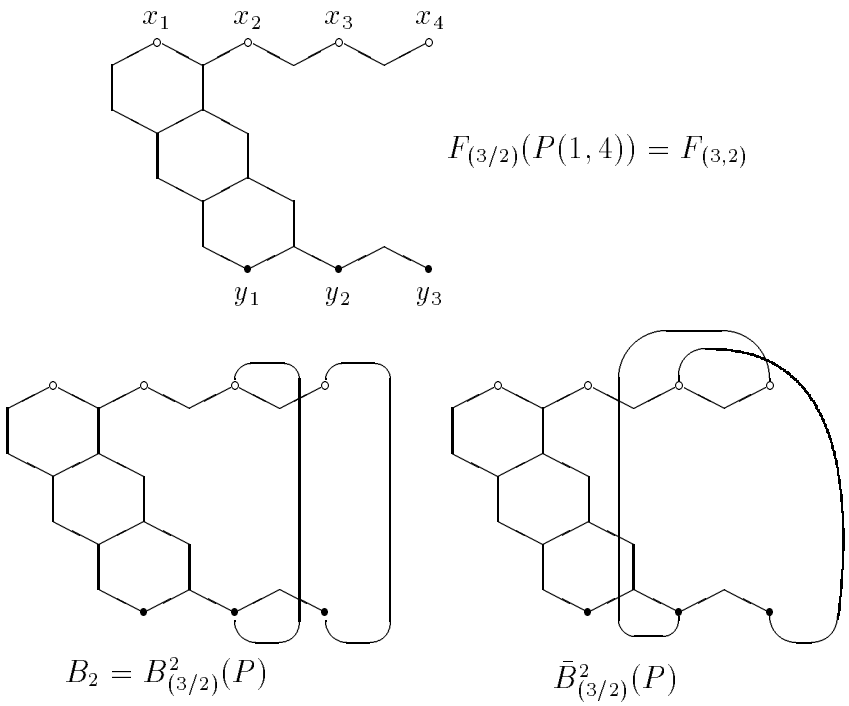


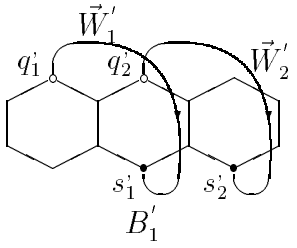
Abbildung 5

2. Fall (s. Abb. 5)
Es seien $Z^*_1 = Z(z^*_1, z^{*'}_1)$, $Z^*_q = Z(z^*_q, z^{*'}_q) \in \underline{Z}$ und $l^*_1 = l(z^*_1) = 2k_1 - 1$, $l^*_q = l(z^*_q) = 2k_q - 1$, $k_1, k_q = 1, 2, ...$ Wir denken uns (in ε) $Z^*_1(Z^*_q)$ an $Z_1(Z_q)$ so angefügt, daß z'_1 mit z^*_1 (z'_q mit z^*_q) identifiziert werden. Es sei angemerkt, daß hier neben der Wahl von $Z^*_i \in \underline{Z}$, $i = 1, 2, ..., q$, auch andere Identifizierungsmöglichkeiten bestehen. Die so entstandene Figur werde mit $F_{(k_1/k_q)} = F_{(k_1/k_q)}(H)$ bezeichnet, wobei folgende zusätzliche Gipfel (Täler) von $Z^*_1(Z^*_q)$ von Interesse sind: $x_{g+1}, x_{g+2}, ..., x_{g+k_1} = z^*_1$, $(y_{g+1}, y_{g+2}, ..., y_{g+k_q} = z^{*'}_q)$. In $F_{(k_1/k_q)}$ denken wir uns wieder (oberhalb bzw. unterhalb von ε) $r = 1, 2, ..., p+k, k = min\{k_1, k_q\}$, Kanten
$e'_i = e'(x_{p+k_1+1-i}, y_{p+k_q+1-i})$ bzw. $\overline{e}_i = \overline{e}(x_{p+k_1+1-i}, y_{p+k_q-r+i})$
für $i = 1, 2, ..., r$ eingefügt. So erhalten wir die hexagonalen Bänder
$B^r_{(k_1/k_q)} = B^r_{(k_1,k_q)}(H)$ bzw. $\overline{B}^r_{(k_1/k_q)} = \overline{B}^r_{(k_1,k_q)}(H)$.
Offensichtlich ist $B^1_{(k_1/k_q)} = \overline{B}^1_{(k_1/k_q)}$. Ein Band $B = B(H)$ $(\overline{B} = \overline{B}(H))$ wollen wir als **einfaches hexagonales Hückel- (Möbius-) Band** bezeichnen.

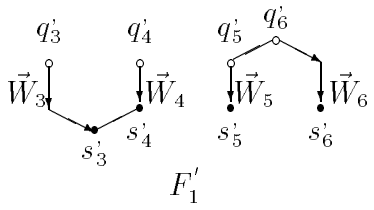
3 Algorithmus zur Polynom- und Eigenvektorberechnung

Wir werden uns auf hexagonale Hückelbänder beschränken, da im anderen Fall ganz analog verfahren werden kann.
Zunächst benötigen wir weitere Begriffe:
Unter einem (**gerichteten**) **Wegesystem** ((g) WS) eines Graphen G verstehen wir eine Menge paarweise disjunkter gerichteter Wege.
Ein (**gerichtetes**) **vollständiges Wegesystem** ((g) VWS) ist ein (g) WS, welches alle Knotenpunkte von G überdeckt.
Sei $\underline{W} = \{W_1, W_2, ..., W_p\}$ ein VWS von G. Weg $W_i = W(q_i, s_i)$ habe die Endknotenpunkte q_i, s_i. Es sei bemerkt, daß auch Wege der Länge 0 ($q_i = s_i$, triviale Wege) zugelassen sind. Werden die Kanten von W_i von q_i nach s_i orientiert, so erhalten wir einen gerichteten Weg $\overrightarrow{W}_i = \overrightarrow{W}(q_i, s_i)$, $\underline{W}$ geht in das gerichtete vollständige Wegesystem (gVWS) $\underline{\overrightarrow{W}} = \{\overrightarrow{W}_1, \overrightarrow{W}_2, ..., \overrightarrow{W}_p\}$ und G in einen teilweise kantengerichteten Graphen $\overrightarrow{G}$ über. Die Anfangs- (End-) Knotenpunkte von $\underline{\overrightarrow{W}}$ heißen **Quellen** (**Senken**) von $\overrightarrow{G}$.
Ein für unseren Algorithmus geeignetes gVWS kann folgendermaßen gefunden werden (s. Abb. 6).

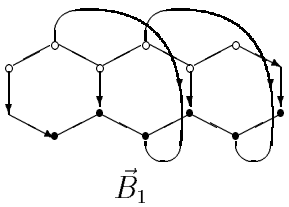
$B_1 = B^2_{0/1}(P(3,2))$



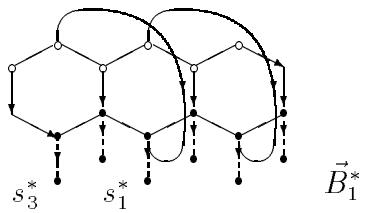
6.1



6.2



6.3



6.4

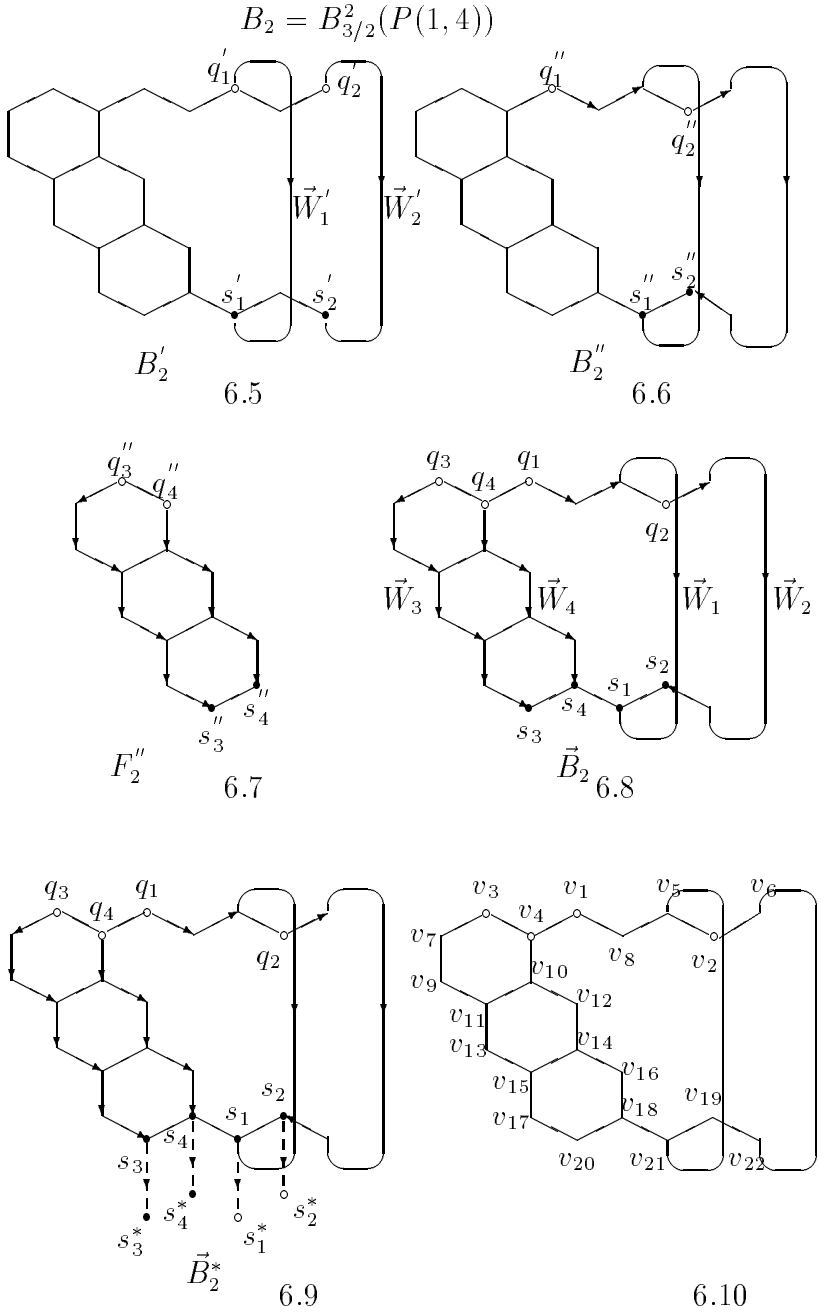


Abbildung 6

Es sei $B = B(H)$ ein Hückelband mit $V(B) = V(H)$, $E(B) = E(H) \cup E'$, $E' = \{e_1', e_2', ..., e_r'\}$. Zunächst ordnen wir $e_i' \in E'$ einen gerichteten Weg $\overrightarrow{W'}_i$ zu, wobei der weiße (schwarze) Endknotenpunkt von e_i' Quelle q_i' (Senke s_i') ist. Hierdurch wird B in ein Band B' mit dem gWS $\underline{\overrightarrow{W'}} = \underline{\overrightarrow{W}}(B')$ überführt (Abb. 6.1, 6.5). Gibt es in B' einen zu Z^* gehörenden Knotenpunkt v^*, dessen Valenz 2 und der Nachbarknotenpunkt einer Quelle (Senke) ist, wobei v^* selbst nicht Senke (Quelle)

ist, so kann einer der Wege von $\underline{\overrightarrow{W'}}$ so verlängert werden, daß v^* neue Quelle (Senke) ist usw.. Dadurch gehe $\underline{\overrightarrow{W'}}$ in $\underline{\overrightarrow{W''}}$ und somit B' in B'' über (Abb. 6.6). Es sei bemerkt, daß sich dadurch die Anzahl r der gerichteten Wege nicht ändert.

Werden in $B''(B')$ alle Knotenpunkte von $\underline{\overrightarrow{W''}}$ ($\underline{\overrightarrow{W'}}$) und alle mit diesen inzidierenden Kanten gelöscht, so erhalten wir eine Figur $F'' := B'' - \underline{\overrightarrow{W''}}$ ($F' := B' - \underline{\overrightarrow{W'}}$), die ganz in ε liegt (Abb. 6.2, 6.7). Hat $F \in \{F', F''\}$ einen (hängenden) Knotenpunkt v, welcher in $B''bzw.B'$ Nachbarknotenpunkt einer Quelle (Senke) ist, so wird v Quelle (Senke) des zu konstruierenden gVWS $\underline{\overrightarrow{W}}$. Hat F einen Knotenpunkt v, welcher in H Gipfel (Tal) ist, so wird v ebenfalls zur Quelle (Senke) von $\underline{\overrightarrow{W}}$. Wir bezeichnen die Quellen (Senken) in F von links nach rechts mit $q_{r+1}, q_{r+2}, ..., q_p$ ($s_{r+1}, s_{r+2}, ..., s_p$) (Abb. 6.2, 6.7). Nun existiert in F für jedes $i = r+1, r+2, ..., p$ ein gerichteter Weg $\overrightarrow{W}_i$ mit q_i als Quelle und s_i als Senke, welchen wir auch für $B''(B')$ nutzen. Ersetzen wir noch $\underline{\overrightarrow{W'}}$ bzw. $\underline{\overrightarrow{W''}}$ durch $\{\overrightarrow{W}_1, \overrightarrow{W}_2, ..., \overrightarrow{W}_r\}$, so haben wir unser gVWS $\underline{\overrightarrow{W}}$ gefunden, wobei $\overrightarrow{W}_i = \overrightarrow{W}(q_i, s_i) \in \underline{\overrightarrow{W}}$ die Quelle q_i mit der Senke s_i, $i = 1, 2, ..., p$, verbindet. Das so erhaltene Band werde mit $\overrightarrow{B}$ bezeichnet (Abb. 6.3, 6.8). Als nächstes verlängern wir in $\overrightarrow{B}$ jeden gerichteten Weg $\overrightarrow{W}_i$ durch Anfügen eines "virtuellen" Knotenpunktes s_i^* an s_i, wodurch ein gerichteter Weg $\overrightarrow{W}_i^*$ entstehe. Dabei wird $\overrightarrow{B}$ in eine Figur überführt, welche wir mit $\overrightarrow{B}^*$ bezeichnen wollen (Abb. 6.4, 6.9).

Es sei $v \in V(\overrightarrow{B}^*)$ ein Knotenpunkte von $\overrightarrow{B}^*$, welcher auf dem gerichteten Weg $\overrightarrow{W}^* \in \underline{\overrightarrow{W}}^*$ liege und der keine Quelle ist. Dann existiert in $\overrightarrow{B}^*$ für v ein eindeutig bestimmter " Vorgänger" v^+, wobei eine von v^+ nach v gerichtete Kante existiert. Es sei $N^+(v) := N(v^+) - \{v\}$ die Menge aller Nachbarknoten von v^+, die von v verschieden sind. Die Knotenpunkte von $\overrightarrow{B}^*$ seien für den zu beschreibenden Algorithmus wie folgt bezeichnet:
Für $i = 1, 2, ..., p$ seien $q_i = v_i$ und $s_i^* = v_i^*$:
Alle übrigen Knotenpunkte werden mit v_i, $i = p+1, p+2, ..., n$ bezeichnet, wobei die fortlaufende Indizierung von links nach rechts und von oben nach unten zu erfolgen hat.

Algorithmus:

Jedem Knotenpunkt v von $\overrightarrow{B}^*$ ordnen wir einen Vektor $\underline{d}(v, \lambda) = (d_1(v, \lambda), d_2(v, \lambda), ..., d_p(v, \lambda))$ mittels folgender Regeln zu.

(i) Ist $v = q_i$ (i-te Quelle):
$d(q_i, \lambda) = (\delta_{i1}, \delta_{i2}, ..., \delta_{ip})$,
wobei $\delta_{ij} = 0 (i \neq j),\ 1 (i = j),\ i, j = 1, 2, ..., p.$

(ii) Ist v keine Quelle:
$$\underline{d}(v,\lambda) = \lambda \cdot \underline{d}(v^+,\lambda) - \sum_{v' \in N^+(v)} \underline{d}(v',\lambda).$$

Mittels (i), (ii) ist es nun nicht schwer, jedem Knotenpunkt v von $\overrightarrow{B}^*$ einen Vektor $\underline{d}(v,\lambda)$ zuzuordnen. Wir bilden die $n \times p$-Matrix
$D(\overrightarrow{B},\lambda) = (\underline{d}^T(v_1,\lambda), \underline{d}^T(v_2,\lambda), ..., \underline{d}^T(v_n,\lambda))^T$
und die $p \times p$-Matrix
$D^*(\overrightarrow{B},\lambda) = (\underline{d}^T(v_1^*,\lambda), \underline{d}^T(v_2^*,\lambda), ..., \underline{d}^T(v_p^*,\lambda))^T$.

Es gelten
Satz 1:
$P_B(\lambda) = detD^*(\overrightarrow{B},\lambda)$

Satz 2: Es sei λ^0 Eigenwert von B und es sei $\underline{y}^o$ eine nichttriviale Lösung der Gleichung
$D^*(\overrightarrow{B},\lambda^o) \cdot \underline{y}^o = \underline{0}$,
wobei $\underline{0}$ ein p-dimensionaler Nullvektor ist, dann ist
$\underline{x}^o = D(\vec{B},\lambda^o) \cdot \underline{y}^o$
ein zu λ^o gehörender Eigenvektor von B und alle Eigenvektoren von B können auf diese Weise bestimmt werden.
Beide Sätze sind Modifikationen von Sätzen aus [13].

Beispiele:

(1) Für das in Abb. 5 dargestellte hexagonale Hückelband $B_2 = B^2_{(3,2)}$ (Abb. 6.5 ff) erhalten wir zunächst $D(\overrightarrow{B}_2,\lambda)$ und $D^*(\overrightarrow{B}_2,\lambda)$ (s.Tab. 1,2) und wegen Satz 1 das charakteristische Polynom

$$\begin{aligned} P_{B_2}(\lambda) = {} & \lambda^{22} - 26\lambda^{20} + 287\lambda^{18} - 1767\lambda^{16} \\ & +6710\lambda^{14} - 16413\lambda^{12} + 26195\lambda^{10} \\ & -26983\lambda^8 + 17292\lambda^6 - 6402\lambda^4 \\ & +1188\lambda^2 - 81. \end{aligned}$$

Die positiven Eigenwerte sind (auf 6 Dezimalen gerundet):

0,390685	1,487874
0,559334	1,592568
0,856046	2,079524
1,062755	2,257869
1,200624	2,491630
1,360182.	

$i \setminus j$	$d_j(v_i,\lambda)$			
	1	2	3	4
1	1	0	0	0
2	0	1	0	0
3	0	0	1	0
4	0	0	0	1
5	λ^2-1	0	0	$-\lambda$
6	$-\lambda^2+1$	λ	0	λ
7	0	0	λ	-1
8	λ	0	0	-1
9	0	0	λ^2-1	$-\lambda$
10	-1	0	-1	λ
11	0	0	$\lambda^3-2\lambda$	$-\lambda^2+1$
12	$-\lambda$	0	$-\lambda^3+\lambda$	$2\lambda^2-2$
13	1	0	$\lambda^4-3\lambda^2+2$	$-\lambda^3+\lambda$
14	$-\lambda^2+1$	0	$-\lambda^4+\lambda^2+1$	$2\lambda^3-3\lambda$
15	λ	0	$\lambda^5-4\lambda^3+4\lambda$	$-\lambda^4+2\lambda^2-1$
16	$-\lambda^3+\lambda$	0	$-2\lambda^5+6\lambda^3-4\lambda$	$3\lambda^4-7\lambda^2+3$
17	$2\lambda^2-2$	0	$\lambda^6-4\lambda^4+6\lambda^2-3$	$-\lambda^5+\lambda^3+\lambda$
18	$-\lambda^4+2\lambda^2-1$	0	$-2\lambda^6+7\lambda^4-5\lambda^2-1$	$3\lambda^5-9\lambda^3+6\lambda$
19	$-\lambda^4+2\lambda^2-1$	$\lambda^3-2\lambda$	0	$\lambda^3-\lambda$
20	$2\lambda^3-3\lambda$	0	$\lambda^7-5\lambda^5+10\lambda^3-7\lambda$	$-\lambda^6+2\lambda^4-\lambda^2+1$
21	$\lambda^3-2\lambda$	-1	0	$-\lambda^2+1$
22	$-\lambda^3+\lambda$	λ^2-1	0	λ^2

Tabelle 1

$i \setminus j$	$d_j(v_i^*,\lambda)$			
	1	2	3	4
1	$3\lambda^4-7\lambda^2+3$	$-\lambda^3+\lambda$	$2\lambda^6-7\lambda^4+5\lambda^2+1$	$-3\lambda^5+7\lambda^3-3\lambda$
2	$-\lambda^5+2\lambda^3$	$\lambda^4-3\lambda^2+2$	0	$\lambda^4-\lambda^2-1$
3	$3\lambda^4-7\lambda^2+3$	0	$\lambda^8-4\lambda^6+7\lambda^4-8\lambda^2+4$	$-\lambda^7+7\lambda^3-6\lambda$
4	$-\lambda^5+3\lambda$	1	$-3\lambda^7+14\lambda^5-21\lambda^3+10\lambda$	$4\lambda^6-14\lambda^4+15\lambda^2-5$

Tabelle 2

Für $\lambda_1 = 0,390685$ finden wir (wegen Satz 2)

$$D^*(\overrightarrow{B}_2,\lambda_1) = \begin{pmatrix} 2,001450 & 0,331053 & -0,781936 & 1,607204 \\ 0,110162 & 1,565394 & -1,129337 & 0 \\ 1,162952 & 1 & -3,022420 & 2,777834 \\ 2,001450 & 0 & -1,928074 & 2,928323 \end{pmatrix}$$

und

$$\underline{y}_1 = \begin{pmatrix} -0,553140 & 0,720392 & 0,944591 & 1 \end{pmatrix}^T .$$

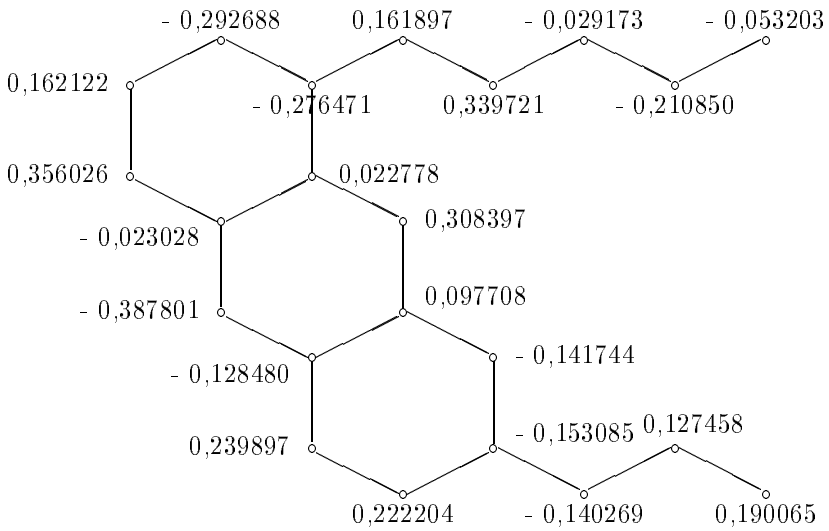
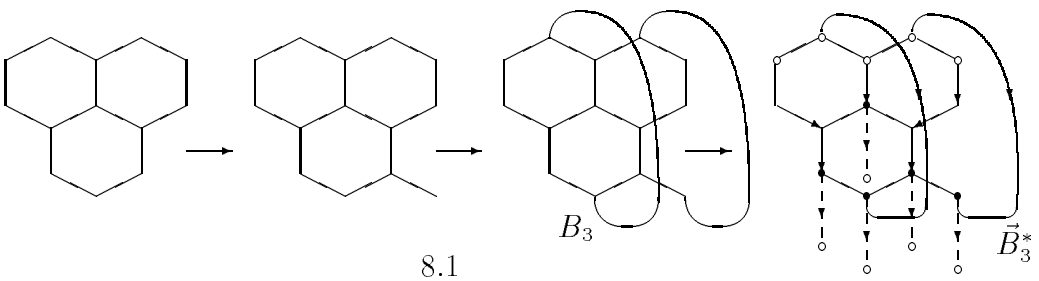


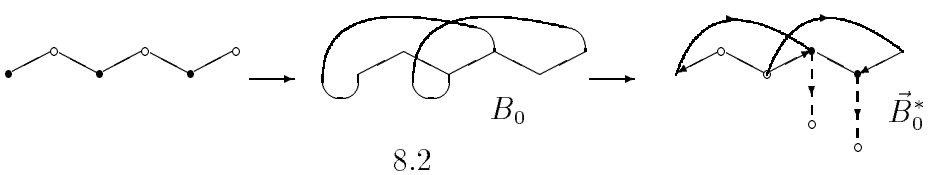
Abbildung 7

In Abb. 7 sind die Koordinaten des zu λ_1 gehörenden Eigenvektors $\underline{x}_1$ jeweils am Knotenpunkt angetragen.

(2) Für die Hückelbänder B_1 (Abb. 4), B_0 und B_3 (Abb. 8) seien Polynom und positive Eigenwerte (in Klammern mit Vielfachheit) genannt:



8.1



8.2

Abbildung 8

$P_{B_o}(\lambda) = \lambda^6 - 7\lambda^4 + 7\lambda^2 - 1$

$(\sqrt{2} - 1;\ 1;\ \sqrt{2} + 1)$

$P_{B_1}(\lambda) = \lambda^{14} - 18\lambda^{12} + 119\lambda^{10} - 380\lambda^8 + 665\lambda^6 - 626\lambda^4 + 313\lambda^2 - 64$

$(1(4);\ 1,363328;\ 2,124885;\ 2,761557)$

$P_{B_3}(\lambda) = \lambda^{14} - 18\lambda^{12} + 123\lambda^{10} - 420\lambda^8 + 779\lambda^6 - 787\lambda^4 + 403\lambda^2 - 81$

$(0,769998;\ 1(2);\ 1,503383;\ 1,525808;\ 1,895609;\ 2,688032)$

4 Abschließende Bemerkungen

4.1 Wir haben hier spezielle hexagonale Bänder beschrieben. Es kann von einem beliebigen $H \in \underline{H}$ ausgegangen werden und in geeigneter Weise ein hexagonales Band konstruiert werden (s. Abb. 8.1). Von theoretischem Interesse wäre noch der Fall, daß wir von einem $Z \in \underline{Z}(l(Z) \equiv 1,\ mod\ 2)$ ausgehen (s. Abb. 8.2).

4.2 Für die Anwendung des Algorithmus ist jeweils ein gVWS mit minimaler Wegeanzahl interessant. Die hier beschriebene Methode liefert nicht in jedem Falle ein solches. Für das in Abb. 9 dargestellte hexagonale Band B_4 finden wir nach obiger Methode ein gVWS mit 7 Wegen, wobei hier ein gVWS mit 4 Wegen ausreichend ist (siehe $\tilde{B}_4$).

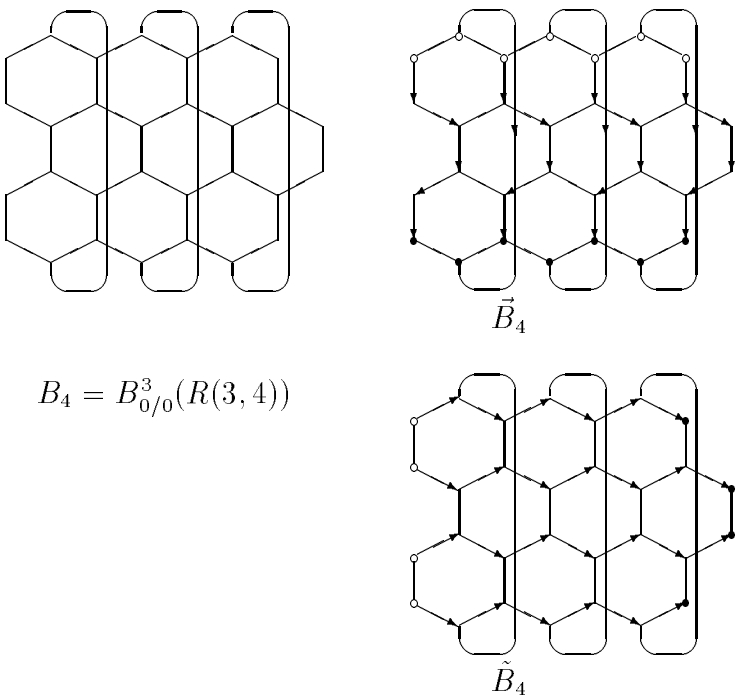


Abbildung 9

4.3 In einer früheren Arbeit [15] wurde der Begriff hexagonales Band wesentlich enger gesehen, was mit dieser Arbeit behoben werden soll.

4.4 Herr Dr. W. Rausch (TU Ilmenau) hat den oben beschriebenen Algorithmus in recht allgemeiner Form (zunächst in Turbo-Pascal) implementiert. Damit sind wir in der Lage, relativ schnell die hier interessierenden Größen (und auch gewisse Bindungsordnungen) zu bestimmen.

References

[1] Hückel, E.: Quantentheoretische Beiträge zum Benzolproblem. Z. Physik 70 (1931), 204-287, 72 (1931), 310-337, 76 (1932), 628-648, 83 (1933), 632-668.

[2] Hückel, E.: Grundzüge der Theorie ungesättigter und aromatischer Verbindungen, Verlag Chemie GmbH, Berlin, 1938.

[3] Coulson, C.A. und A. Streitwieser, Jr.: Dictionary of π-Electron Calculations, Pergamon Press, Oxford-London-Edinburgh-Paris-New York- Frankfurt, 1965.

[4] Coulson, C.A., B. O'Leary und R.B. Mallion: Hückel Theory for Organic Chemists, Acad. Press, London-New York-San Francisco, 1978.

[5] Cvetkovic, D.M., M. Doob und H. Sachs: Spectra of Graphs - Theory and Application, Academic Press, New York, 1980.

[6] Cvetkovic, D.M., M. Doob, I. Gutman und A. Torgasev: Recent Results in the Theory of Graph Spectra, North-Holland, Amsterdam (Annals of Discret Mathematics, No 36), 1988.

[7] Mintmire, J.W., B.I. Dunlap und C.T. White: Are Fullerene Tubules Metallic? Phys. Rev. Letts. 68 (1992), 631-634.

[8] Ebbesen, T.W. und P.M. Ajayan: Large-scale synthesis of carbon nanotubes, Nature, 358 (1992), 220-222.

[9] Hamada, N., Sh. Sawada und A. Oshiyama; New One-Dimensional Conductors: Graphitic Microtubules, Phys. Rev. Letts. 68 (1992), 1579-1581.

[10] Jijima, S.: Helical microtubules of graphitic carbon, nature, 354 (1992), 56-58.

[11] Ajayan, P.M. und S. Jijima: Capillarity - induced filling of carbon monotubes, Nature 361 (1993), 333-334.

[12] Klein, D.J., W.A. Seitz und T.G. Schmalz: Symmetry of Infinite Tubular Polymers: Application to Buckytubes, J. Phys. Chem. 97 (1993), 1231-1236.

[13] Fowler, P.W.: Cylindrical Fullerenes: the smallest nanotubes? J. Phys. Chem. Solid, 54 (1993), 1825-1833.

[14] Al-Khnaifes, Kh. und H. Sachs, In: Contemporary Methods in Graph Theory, R. Bodendiek (Ed.), B.I.-Wissenschaftsverlag Mannheim-Wien-Zürich, 1990, 47-71.

[15] John, P.E.: über Anzahlen von Linearfaktoren in hexagonalen Bändern, Match 28 (1992), 181-208.

Die Arbeit wurde seitens der DFG (Jo 231/1-3) gefördert.