

Таблица 1. Изомеры замещения полиэдров, содержащих шесть мест возможного замещения (по вершинам)

№	Семейство	Число изомеров													
		Октаэдр		ПШ		ТП		ТА		ТБ		ПП		ДТ	
		O _h	O	D _{6h}	D ₆	D _{3h}	D ₃	D _{3d}	D ₃	D _{4h}	D ₄	C _{3v}	C ₃	C _{2v}	C ₂
1	h ⁶	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1
2	h ⁵ x	1	1	1	1	1	1	1	1	2	2	2	2	3	3
3	h ⁴ x ₂	2	2	3	3	3	4	3	4	4	4	3	3	7	9
4	h ⁴ xy	2	2	3	3	3	5	3	5	5	5	4	6	11	15
5	h ³ x ³	2	2	3	3	3	4	3	4	4	4	4	4	8	10
6	h ³ x ² y	3	3	6	6	6	10	6	10	8	9	8	12	20	30
7	h ³ xyz	4	5	10	10	10	20	10	20	12	15	12	24	36	60
8	h ² x ² y ²	5	6	11	11	11	18	11	18	12	15	12	18	30	48
9	h ² x ² yz	6	8	16	16	16	30	16	30	17	24	20	36	52	90
10	h ² xyzuz	9	15	30	30	30	60	30	60	27	45	36	72	96	180
11	hxyzuv	15	30	60	60	60	120	60	120	45	90	72	144	180	360

Примечание: ПШ - правильный шестиугольник, ТП - тригональная призма, ТА - тригональная антипризма, ТБ - тетрагональная бипирамида, ПП - пентагональная пирамида, ДТ - двухшапочный тетраэдр.

Если в качестве группы симметрии исходного полиэдра взять группу вращений (подгруппу его точечной группы), то циклов ой индекс и производящая функция будут включать в себя зеркальные изображения. Так могут быть выявлены хиральные изомеры.

Таблица 2. Распределение X-, XY-,... замещенных бензола по семействам

Вид зам. бензола	Число представителей											
	Всего	В семействах										
		I	II	III	IV	V	VI	VII	VIII	IX	X	XI
X	13	2	2	6	0	3	0	0	0	0	0	0
XY	92	3	6	18	9	9	36	0	11	0	0	0
XYZ	430	4	12	36	36	18	144	40	44	96	0	0
XYZU	1505	5	20	60	90	30	360	200	110	480	150	0
XYZUV	4291	6	30	90	180	45	720	600	220	1440	900	60
XYZUVW	10528	7	42	126	315	63	1260	1440	385	3360	36150	420

Зная числа изомеров в семействах, несложно определить число представителей X-, XY-, ... замещенных полиэдра в этих семействах, значит, и, общее число представителей (табл. 2). Мы имеем 13 представителей X-замещенных бензола, 92 представите ля

XУ-замещенных бензола и т.д. (см. табл. 2). Можно также найти число замещенных бензола, распределенных по симметрии [3; 4; 6].

Литература

1. Cayley A. On the mathematical theory of isomers // Phi los.Mag. 1874. V. 47. P. 444-446.
2. Харари Ф., Пальмер Э. Перечисление графов. Пер. с а нгл. М.: Мир, 1977. 324 с.
3. Папулов Ю.Г., Розенфельд В.Р., Кеменова Т.Г. Молекулярные графы: учеб. пособие. - Тверь: ТвГУ, 1990. 88 с.
4. Папулов Ю.Г., Виноградова М.Г. Математика и химия: монография. Тверь: ТвГУ. 2007. 200 с.
5. Папулов Ю.Г., Папулова Д.Р. Строение молекул и физические свойства: монография. - Тверь: ТвГУ, 2010. 280 с.
6. Виноградова М.Г., Папулов Ю.Г. Теоретико-графовые методы в химии: учеб. пособие. - Тверь: ТвГУ, 2013. 88 с.