C. R. Chimie 5 (2002) 533–539

S1631074802014005/FLA

Algorithme de dénombrement des graphes chiraux et achiraux d'un cycloalcane monocyclique hétérosubstitué de formule brute $C_nH_{m_1}X_{m_2}Y_{m_3}$

Robert M. Nemba*, Alphonse Emadak

Laboratoire de chimie théorique, section de topologie moléculaire, université de Yaoundé-1, faculté des sciences, BP 812, Yaoundé, Cameroun

Reçu le 2 avril 2002 ; accepté le 19 juillet 2002

Abstract – A general pattern inventory is given for the enumeration of chiral and achiral graphs of any monocyclic cycloalkane with a multiple heterosubstitution of binary type X and Y and an empirical formula $C_nH_{m_1}X_{m_2}Y_{m_3}$, where $m_1 + m_2 + m_3 = 2\,n$. ***To cite this article: R.M. Nemba, A. Emadak, C. R. Chimie 5 (2002) 533–539*** © 2002 Académie des sciences / Éditions scientifiques et médicales Elsevier SAS

chiral graphs / achiral graphs / cycloalkanes / binary heterosubstitution

Résumé – On propose une méthode générale de détermination directe du nombre de graphes chiraux et achiraux d'un cycloalcane monocyclique ayant une hétérosubstitution multiple de nature binaire X,Y et une formule brute $C_nH_{m_1}X_{m_2}Y_{m_3}$, avec $m_1 + m_2 + m_3 = 2\,n$. ***Pour citer cet article : R.M. Nemba, A. Emadak, C. R. Chimie 5 (2002) 533–539*** © 2002 Académie des sciences / Éditions scientifiques et médicales Elsevier SAS

graphes chiraux / graphes achiraux / cycloalcanes / hétérosubstitution binaire

1. Introduction

Dans un cycloalcane monocyclique hétéropolysubstitué de formule brute $C_nH_{m_1}X_{m_2}Y_{m_3}$, le quadruplet de nombres entiers positifs (n, m_1, m_2, m_3) qui désignent respectivement la taille du cycle, les nombres d'atomes H et de substituants de nature distincte X et Y vérifient la condition :

$$m_1 + m_2 + m_3 = 2\,n \qquad (1)$$

Désignons par G, comme dans nos précédentes études [1–5], le stéréographe ou graphe tridimensionnel en symétrie D_{nh} du monocycloalcane parent C_nH_{2n}. Les positions des 2 n hydrogènes, qui sont des sites de substitution numérotés 1, 2,..., n et 1', 2',…, i',…, n' dans la Fig. 1 ci-dessous, sont permutées par les 4 n opérations de symétrie de D_{nh}.

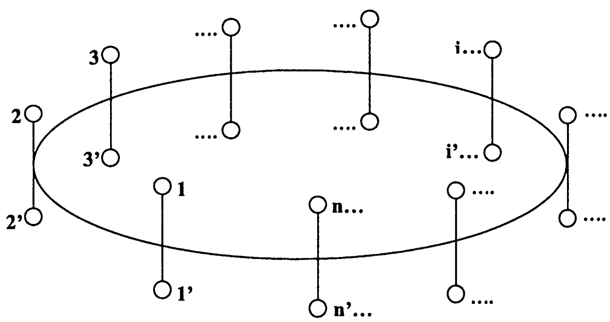

Fig. 1. Stéréographe G d'un cycloalcane monocyclique C_nH_{2n} en symétrie D_{nh}.

Les différents types de permutations des sites de substitution, engendrés par les classes d'opérations de symétrie de D_{nh} sont récapitulés dans le Tableau 1.

* *Correspondance et tirés à part.*
Adresse e-mail : rnemba@yahoo.fr (R.M. Nemba).

Tableau 1. Types de permutations engendrées par les opérations de symétrie de D_{nh}.

D_{nh}, n impair		D_{nh}, n pair	
Classes d'opérations de symétrie	Permutations engendrées	Classes d'opérations de symétrie	Permutations engendrées
$E = C_n^n$	$[1^{2n}]$	$E = C_n^n$	$[1^{2n}]$
C_n^r r et n premiers entre eux et $r \leq n-1$ $C_n^r = C_{kd}^{kj} = C_d^j$, $j \leq d-1$	$[n^2]$ $[d^{\frac{2n}{d}}]$	C_n^r, r et n premiers entre eux et $r \leq n-1$ $C_n^r = C_{kd}^{kj} = C_d^j$, $j \leq d-1$	$[n^2]$ $[d^{\frac{2n}{d}}]$
$S_n^{r'}$, r' et n premiers entre eux $S_n^{r'} = S_{kd}^{kj'} = S_d^{j'}$, d impair, $j' \leq 2d-1$	$[2n]$ $[(2d)^{\frac{n}{d}}]$	$S_n^{r'}$, r' et n premiers entre eux $S_n^{r'} = S_{kd}^{kj'} = S_d^{j'}$, d pair, $j' \leq d-1$ $S_n^{r'} = S_{kd}^{kj'} = S_d^{j'}$, d impair, $j' \leq 2d-1$	$[n^2]$ $[d^{\frac{2n}{d}}]$ $[(2d)^{\frac{n}{d}}]$
σ_h	$[2^n]$	σ_h, i, C_2	$[2^n]$, $[2^n]$, $[2^n]$
$n\,\sigma_v$	$n\,[1^2 2^{n-1}]$	$\frac{n}{2}\,\sigma_v$	$\frac{n}{2}\,[1^4\,2^{n-2}]$
nC'_2	$n\,[2^n]$	$\frac{n}{2}\,C'_2$, $\frac{n}{2}\,C''_2$, $\frac{n}{2}\,\sigma_d$	$\frac{n}{2}\,[2^n]$, $\frac{n}{2}\,[2^n]$, $\frac{n}{2}\,[2^n]$

L'ensemble P contenant les $4\,n$ permutations des sites de substitution de G sous l'action de D_{nh} est défini comme suit :

$$P = a_1[1^{2n}],\ (n+1)\ [2^n], \ldots, a_d[d^{\frac{2n}{d}}], \ldots, a_n[n^2],\ a_{2n}\ [2n],\ n[1^2\,2^{n-1}] \text{ si } n \text{ est impair} \quad (2)$$

$$P = a_1[1^{2n}],\ \frac{3}{2}\ (n+2)\ [2^n], \ldots, a_d[d^{\frac{2n}{d}}], \ldots, a_n[n^2],\ \frac{n}{2}\,[1^4\,2^{n-2}] \text{ si } n \text{ est pair} \quad (3)$$

Si on supprime dans P les permutations résultant des rotoréflexions et des plans de symétrie, on obtient l'ensemble P' des permutations engendrées par les $2\,n$ opérations de symétrie restantes, qui sont l'opération identité et les rotations propres ; ainsi :

$$P' = a'_1[1^{2n}],\ n[2^n], \ldots, a'_d[d^{\frac{2n}{d}}], \ldots, a'_n[n^2] \quad \text{si } n \text{ est impair} \quad (4)$$

$$P' = a'_1[1^{2n}],\ (n+1)\ [2^n], \ldots, a'_d[d^{\frac{2n}{d}}], \ldots, a'_n[n^2] \quad \text{si } n \text{ est pair} \quad (5)$$

Dans les expressions (2)–(5), chaque terme du type $[i^j]$ désigne j cycles de permutations de longueur i, tandis que les coefficients a_d et a'_d sont obtenus à partir des formules (6)–(10) ci-après :

$$a_d = \varphi(d)_{\mathrm{rp}} \quad (6)$$

$$a_d = \varphi(d)_{\mathrm{rp}} + \varphi(d)_{\mathrm{ri}} \quad \text{si } d \text{ (pair parfait)} \neq 2\,\mu\ (\mu \text{ impair}) \quad (7)$$

$$a_d = \varphi(d)_{\mathrm{rp}} + \varphi(d)_{\mathrm{ri}} + \varphi(\mu)_{\mathrm{ri}} \quad \text{si } d = 2\,\mu\ (\mu \text{ impair}) \quad (8)$$

$$a'_d = \varphi(d)_{\mathrm{rp}} \text{ si } d \text{ est pair ou impair} \quad (9)$$

$$\varphi(d)_{\mathrm{rp}} = \varphi(d)_{\mathrm{ri}} \quad (10)$$

Les termes $\varphi(d)_{\mathrm{rp}}$, $\varphi(d)_{\mathrm{ri}}$ et $\varphi(\mu)_{\mathrm{ri}}$ sont les fonctions « totient » d'Euler [6] pour les nombres entiers d et μ lorsque l'opération de permutation est équivalente à une rotation propre C_d^j (voir indice rp) ou à une rotation impropre $S_d^{j'}$ou $S_\mu^{j'}$ (voir indice ri).

2. Conditions mathématiques de formation d'une polyhétérosubstitution de degrés (m_1, m_2, m_3) sur le squelette de G

Les polyhétérosubstitutions distinctes résultent des combinaisons avec répétition de (m_1, m_2, m_3) éléments H, X et Y parmi $2\,n$ sites de substitutions de G, qui sont permutés par les opérations de symétrie de D_{nh}. Posons que le nombre de combinaisons avec répétition de (b, c, d) objets de type H, X et Y parmi a boîtes est déterminé à partir du coefficient multinomial $T(a\,;b,c,d) = \frac{a!}{b!\,c!\,d!}$.

On note ainsi que le nombre de combinaisons avec répétition de H, X et Y sur G par les d-cycles de permutations du type $[d^{\frac{2n}{d}}]$ est $T\left(\frac{2\,n}{d_c};\frac{m_1}{d_c},\frac{m_2}{d_c},\frac{m_3}{d_c}\right)$ si $d = d_c$ est le diviseur commun du quadruplet de nombres entiers non nuls ($2n$, m_1, m_2, m_3).

Le calcul du nombre de combinaisons avec répétition dans le cas des permutations de types $[1^2\,2^{n-1}]$ ou $[1^4\,2^{n-2}]$, qui sont le produit de deux cycles unitaires et de $n-1$ transpositions (2-cycles), lorsque n est impair, ou le produit de quatre cycles unitaires et de n–2 transpositions (2-cycles), lorsque n est pair, passe par la résolution des équations simultanées (11) et (12).

$$p_1 + p_2 + p_3 = \begin{cases} 2 \text{ si } n \text{ impair} \\ 4 \text{ si } n \text{ pair} \end{cases} \tag{11}$$

$$m'_1 + m'_2 + m'_3 = \begin{cases} n-1 \text{ si } n \text{ impair} \\ n-2 \text{ si } n \text{ pair} \end{cases} \tag{12}$$

qui donnent k solutions, qui sont les choix des triplets de nombres entiers positifs ou nuls (p_1, p_2, p_3) et (m'_1, m'_2, m'_3), dont les couples (p_i, m'_i) vérifient l'équation (13) :

$$m'_i = \frac{m_i - p_i}{2} \quad \text{où} \quad 1 \le i \le 3 \tag{13}$$

Ainsi, chaque solution (p_1, p_2, p_3) indique le choix du placement de deux ou quatre éléments de types H, X et Y sur deux ou quatre positions invariantes suivant la parité de n, tandis que (m'_1, m'_2, m'_3) sont les nombres de couples d'éléments H, X et Y à placer parmi ($n-1$) où ($n-2$) boîtes contenant chacune deux positions de substitutions.

Le nombre de type de placements des éléments de nature H, X ou Y sur deux et quatre positions invariantes pour (p_1, p_2, p_3) donné est $T(2; p_1, p_2, p_3)$ et $T(4; p_1, p_2, p_3)$ si n est impair ou pair, respectivement. De même, les nombres de combinaisons avec répétition de (m'_1, m'_2, m'_3) couples d'éléments de types H, X et Y parmi $n-1$ ou $n-2$ positions sont : $T(n-1\,; m'_1, m'_1, m'_1)$, si n est impair, et $T(n-2\,; m'_1, m'_1, m'_1)$, si n est pair.

Le nombre de polyhétérosubstitutions ou combinaisons avec répétition de degrés (m_1, m_2, m_3) en H, X et Y sur $2n$ sites de G obtenus à partir des permutations du type $[1^2\, 2^{n-1}]$ ou $[1^4\, 2^{n-2}]$, pour un couple de triplets (p_1, p_2, p_3) et (m'_1, m'_2, m'_3), est déterminé à partir du produit des coefficients multinomiaux :

$$T(2; p_1, p_2, p_3) \cdot T(n-1; m'_1, m'_2, m'_3) = \binom{2}{p_1, p_2, p_3}\binom{n-1}{m'_1, m'_2, m'_3} \text{ si } n \text{ est impair} \tag{14}$$

$$T(4; p_1, p_2, p_3) \cdot T(n-2\,; m'_1, m'_2, m'_3) = \binom{4}{p_1, p_2, p_3}\binom{n-2}{m'_1, m'_2, m'_3} \text{ si } n \text{ est pair} \tag{15}$$

Si les propositions ci-dessus sont vérifiées, en cherchant la différences $P' - P$ et $2\,P - P'$ des contributions moyennes des $4\,n$ permutations de P et $2\,n$ permutations de P', on obtient le couple de nombres entiers de graphes chiraux et $A_{ac}(n, m_1, m_2, m_3)$ de graphes achiraux du stéréographe G d'un cycloalcane monocyclique polyhétérosubstitué de la série $C_nH_{m_1}X_{m_2}Y_{m_3}$ à partir des formules de récurrence (16)–(19). On donne dans la suite quelques exemples d'applications.

Si n est impair :

$$A_c(n, m_1, m_2, m_3) = \frac{1}{4\,n}\left[\sum_{d_c \neq 2}(2a'_{d_c} - a_{d_c})\binom{\frac{2\,n}{d_c}}{\frac{m_1}{d_c}, \frac{m_2}{d_c}, \frac{m_3}{d_c}} + (n-1)\binom{n}{\frac{m_1}{2}, \frac{m_2}{2}, \frac{m_3}{2}}\right] - \frac{1}{4}\sum_k \binom{2}{p_1, p_2, p_3}\binom{n-1}{m'_1, m'_2, m'_3} \tag{16}$$

$$A_{ac}(n, m_1, m_2, m_3) = \frac{1}{2\,n}\left[\sum_{d_c \neq 2}(a_{d_c} - a'_{d_c})\binom{\frac{2\,n}{d_c}}{\frac{m_1}{d_c}, \frac{m_2}{d_c}, \frac{m_3}{d_c}} + \binom{n}{\frac{m_1}{2}, \frac{m_2}{2}, \frac{m_3}{2}}\right] + \frac{1}{2}\left[\sum_k \binom{2}{p_1, p_2, p_3}\binom{n-1}{m'_1, m'_2, m'_3}\right] \tag{17}$$

Si n est pair :

$$A_c(n, m_1, m_2, m_3) = \frac{1}{4\,n}\left[\sum_{d_c \neq 2}(2a'_{d_c} - a_{d_c})\binom{\frac{2\,n}{d_c}}{\frac{m_1}{d_c}, \frac{m_2}{d_c}, \frac{m_3}{d_c}} + \left(\frac{n}{2} - 1\right)\binom{n}{\frac{m_1}{2}, \frac{m_2}{2}, \frac{m_3}{2}}\right] - \frac{1}{8}\sum_k \binom{4}{p_1, p_2, p_3}\binom{n-2}{m'_1, m'_2, m'_3} \tag{18}$$

$$A_{ac}(n, m_1, m_2, m_3) = \frac{1}{2\,n}\left[\sum_{d_c \neq 2}(a_{d_c} - a'_{d_c})\binom{\frac{2\,n}{d_c}}{\frac{m_1}{d_c}, \frac{m_2}{d_c}, \frac{m_3}{d_c}} + \left(\frac{n}{2} + 2\right)\binom{n}{\frac{m_1}{2}, \frac{m_2}{2}, \frac{m_3}{2}}\right] + \frac{1}{4}\left[\sum_k \binom{4}{p_1, p_2, p_3}\binom{n-2}{m'_1, m'_2, m'_3}\right] \tag{19}$$

3. Applications

3.1. Exemple 1. Détermination du nombre de graphes chiraux et achiraux de C_3H_4XY

$n = 3$, $m_1 = 4$, $m_2 = m_3 = 1$; $P = \{[1^6], 4[2^3], 2[3^2], 2[6], 3[1^22^2]\}$, $P' = \{[1^6], 3[2^3], 2[3^2]\}$;

$D_c = D_6 \cap D_4 \cap D_1 = \{1\}$; $a_1 = a'_1 = 1$. Les solutions des équations de partition $p_1 + p_2 + p_3 = 2$ et $m'_1 + m'_2 + m'_3 = 2$ sont respectivement : $(p_1, p_2, p_3) = (0,1,1)$ et $(m'_1, m'_2, m'_3) = (2,0,0)$. À partir de ces données, on obtient :

$$A_c(3, 4, 1, 1) = \frac{1}{12}\binom{6}{4,1,1} - \frac{1}{4}\binom{2}{0,1,1}\binom{2}{2,0,0} = 2$$

$$\text{et } A_{ac}(3, 4, 1, 1) = \frac{1}{6}\left[3\binom{2}{0,1,1}\binom{2}{2,0,0}\right] = 1$$

3.2. Exemple 2. Détermination du nombre de graphes chiraux et achiraux de $C_3H_2X_2Y_2$

$n = 3$, $m_1 = m_2 = m_3 = 2$; $P = \{[1^6], 4[2^3], 2[3^2], 2[6], 3[1^2 2^2]\}$, $P' = \{[1^6], 3[2^3], 2[3^2]\}$; $D_c = D_6 \cap D_2 = \{1, 2\}$; $a_1 = a'_1 = 1$. Les solutions des équations de partitions $p_1 + p_2 + p_3 = 2$ et $m'_1 + m'_2 + m'_3 = 2$ sont respectivement :

$$(p_1, p_2, p_3) = \begin{pmatrix} 2 & 0 & 0 \\ 0 & 2 & 0 \\ 0 & 0 & 2 \end{pmatrix} \text{ et } (m'_1, m'_2, m'_3) = \begin{pmatrix} 0 & 1 & 1 \\ 1 & 0 & 1 \\ 1 & 1 & 0 \end{pmatrix}$$

À partir de ces données, on détermine :

$$A_c(3, 2, 2, 2) = \frac{1}{12}\left[\binom{6}{2,2,2} + 2\binom{3}{\frac{2}{2},\frac{2}{2},\frac{2}{2}}\right] - \frac{1}{4}\left[\binom{2}{2,0,0}\binom{2}{0,1,1} + \binom{2}{0,2,0}\binom{2}{1,0,1} + \binom{2}{0,0,2}\binom{2}{1,1,0}\right] = 7$$

et

$$A_{ac}(3, 2, 2, 2) = \frac{1}{6}\left[\binom{3}{\frac{2}{2},\frac{2}{2},\frac{2}{2}}\right] + \frac{1}{2}\left[\binom{2}{2,0,0}\binom{2}{0,1,1} + \binom{2}{0,2,0}\binom{2}{1,0,1} + \binom{2}{0,0,2}\binom{2}{1,1,0}\right] = 4$$

3.3. Exemple 3. Détermination du nombre de graphes chiraux et achiraux de C_4H_6XY

$n = 4$, $m_1 = 6$, $m_2 = m_3 = 1$; $P = \{[1^8], 9[2^4], 4[4^2], 2[1^4 2^4]\}$, $P' = \{[1^8], 5[2^4], 2[4^2],\}$; $D_c = D_4 \cap D_6 \cap D_1 = \{1\}$; $a_1 = a'_1 = 1$. Les solutions des équations de partitions $p_1 + p_2 + p_3 = 4$ et $m'_1 + m'_2 + m'_3 = 2$ sont respectivement : $(p_1, p_2, p_3) = (2,1,1)$ et $(m'_1, m'_2, m'_3) = (2,0,0)$. À partir de ces données, on obtient :

$$A_c(4, 6, 1, 1) = \frac{1}{16}\left[\binom{8}{6,1,1}\right] - \frac{1}{8}\left[\binom{4}{2,1,1}\binom{2}{2,0,0}\right] = 2$$

$$\text{et } A_{ac}(4, 6, 1, 1) = \frac{1}{4}\left[\binom{4}{2,1,1}\binom{2}{2,0,0}\right] = 3$$

3.4. Exemple 4. Détermination du nombre de graphes chiraux et achiraux de $C_4H_4X_2Y_2$

$n = 4$, $m_1 = 4$, $m_2 = m_3 = 2$; $P = \{[1^8], 9[2^4], 4[4^2], 2[1^4 2^4]\}$, $P' = \{[1^8], 5[2^4], 2[4^2],\}$; $D_c = D_4 \cap D_2 = \{1,2\}$; $a_1 = a'_1 = 1$. Les solutions des équations de partition $p_1 + p_2 + p_3 = 4$ et $m'_1 + m'_2 + m'_3 = 2$ sont respectivement les lignes des matrices :

$$(p_1, p_2, p_3) = \begin{pmatrix} 2 & 2 & 0 \\ 2 & 0 & 2 \\ 0 & 2 & 2 \\ 4 & 0 & 0 \end{pmatrix} \text{ et } (m'_1, m'_2, m'_3) = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 1 \\ 1 & 1 & 0 \\ 2 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 1 \end{pmatrix}$$

À partir de ces données, on obtient :

$$A_c(4, 4, 2, 2) = \frac{1}{16}\left[\binom{8}{4,2,2} + \binom{4}{2,1,1}\right] - \frac{1}{8}\left[\binom{4}{2,2,0}\binom{2}{1,0,1} + \binom{4}{2,0,2}\binom{2}{1,1,0} + \binom{4}{0,2,2}\binom{2}{2,0,0} + \binom{4}{4,0,0}\binom{2}{0,1,1}\right] = 23$$

$$A_{ac}(4, 4, 2, 2) = \frac{1}{2}\left[\binom{4}{2,1,1}\right] + \frac{1}{4}\left[\binom{4}{2,2,0}\binom{2}{1,0,1} + \binom{4}{2,0,2}\binom{2}{1,1,0} + \binom{4}{0,2,2}\binom{2}{2,0,0} + \binom{4}{4,0,0}\binom{2}{0,1,1}\right] = 14$$

4. Conclusion

Le Tableau 2 récapitule les résultats du calcul des séquences de nombres entiers $A_c(n, m_1, m_2, m_3)$ et $A_{ac}(n, m_1, m_2, m_3)$ pour les systèmes monocycliques polysubstitués $C_n H_{m_1} X_{m_2} Y_{m_3}$, où $n = 3$, 4, 5, 6 et 8, tandis que les nombres entiers (m_1, m_2, m_3) varient conformément à la condition fixée par l'équation (1). On vérifie facilement avec les cycloalcanes substitués de petite taille ($n = 3$ et 4) que les résultats de ce

Tableau 2. Nombres de squelettes chiraux et achiraux d'un cycloalcane polyhétérosubstitué de formule brute $C_nH_{m_1}X_{m_2}Y_{m_3}$, avec $n = 3, 4, 5, 6, 8$ et $m_1 + m_2 + m_3 = 2\,n$.

	n		3		4		5		6		8	
m_1	m_2	m_3	A_c	A_{ac}	A_c	A_{ac}	A_c	A_{ac}	A_c	A_{ac}	A_c	A_{ac}
4	1	1	2	1								
3	2	1	4	2								
2	2	2	7	4								
6	1	1			2	3						
5	2	1			8	5						
4	2	2			23	14						
4	3	1			14	7						
3	3	2			30	10						
8	1	1					4	1				
7	2	1					16	4				
6	3	1					40	4				
6	2	2					62	12				
5	4	1					60	6				
5	3	2					120	12				
4	4	2					156	18				
4	3	3					204	12				
10	1	1							4	3		
9	2	1							24	7		
8	3	1							76	13		
8	2	2							118	29		
7	4	1							156	18		
7	3	2							316	28		
6	5	1							220	22		
6	4	2							564	62		
6	3	3							749	44		
5	5	2							672	42		
5	4	3							1 128	54		
4	4	4							1 422	96		
14	1	1									6	3
13	2	1									48	9
12	3	1									333	48
12	2	2									218	19
11	4	1									666	33
11	3	2									1 338	54
10	5	1									1 476	51
10	4	2									3 723	156
10	3	3									4 954	102
9	6	1									2 470	65
9	5	2									7 440	135
9	4	3									12 430	165
8	7	1									3180	75
8	6	2									11 205	270
8	5	3									22 410	225
8	4	4									28 065	414
7	7	2									12 780	180
7	6	3									2 900	260
7	5	4									44 880	330
6	6	4									52 430	560
6	5	5									62 868	390

modèle sont identiques à ceux obtenus par dessin et inventaire des différents graphes. Cette concordance est montrée pour les cyclopropanes disubstitués par les graphes de la Fig. 2a. Dans le cas des cyclobutanes tétrasubstitués de la série $C_4H_4X_2Y_2$, les calculs prévoient $A_c(4, 4, 2, 2) = 23$ et $A_{ac}(4, 4, 2, 2) = 14$. Les graphes de la Fig. 2b confirment cette prévision et montrent 23 couples d'énantiomères et 14 formes achirales. En fixant par exemple $X = COOH$ et $Y = C_6H_5$, on dénombre les isomères de position et les stéréoisomères d'une famille de diacides organiques ayant la même formule brute $C_4H_4(COOH)_2(C_6H_5)_2$. Les composés les plus connus de cette série sont les acides truxuliques (avec deux groupements COOH en positions 1 et 3) et les acides truxiniques (avec deux groupements COOH en positions 1 et 2). Ces deux catégories de diacides existent à l'état naturel dans les feuilles de coca ou sont obtenues par photodimérisation topochimique des formes α et β de l'acide cinnamique [7]. L'importance de

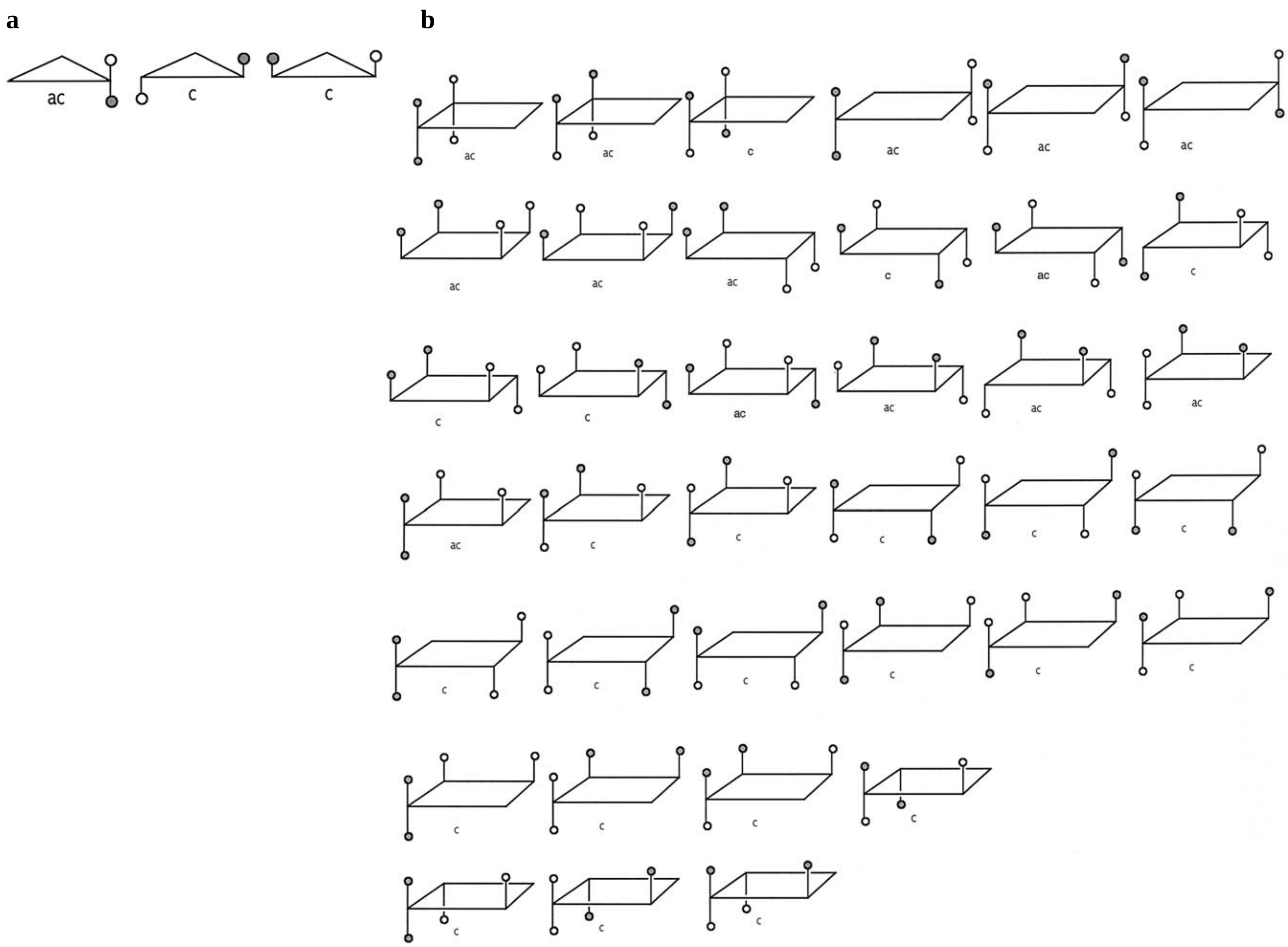

Fig. 2. **a.** Formes chirales (c) et achirale (ac) de C_3H_4XY avec X = ○ et Y = ●. **b.** Formes chirales (c) et achirale (ac) de $C_4H_4X_2Y_2$ avec X = ○ et Y = ●.

cette étude est de montrer qu'on peut éviter la méthode classique de Polyà [8–13] et obtenir, par une approche combinatoire directe, des formules de récurrence permettant d'inventorier les squelettes chiraux et achiraux des cycloalcanes monocycliques hétéropolysubstitués par un binaire (X,Y). En outre, le présent modèle peut être généralisé aux systèmes ayant une polyhétérosubstitution de nature multiple. Il est à noter qu'en effectuant les sommes suivantes : $A_c(n, m_1, m_2, m_3) + A_{ac}(n, m_1, m_2, m_3) = A_T(n, m_1, m_2, m_3)$ et $2\,A_c(n, m_1, m_2, m_3) + A_{ac}(n, m_1, m_2, m_3) = A_E(n, m_1, m_2, m_3)$ à partir des données du Tableau 2 et pour des valeurs fixées n, m_1, m_2 et m_3, on obtient $A_T(n, m_1, m_2, m_3)$ et $A_E(n, m_1, m_2, m_3)$, qui sont respectivement les résultats des dénombrements topologique et énantiomérique de la méthode de Polyà.

Références

[1] R.M. Nemba, F. Ngouhouo, Tetrahedron 50 (1994) 6663.

[2] R.M. Nemba, F. Ngouhouo, New J. Chem. 18 (1994) 1175.

[3] R.M. Nemba, M. Fah, J. Chem. Inf. Comput. Sci. 37 (4) (1997) 722.

[4] R.M. Nemba, A.T. Balaban, J. Chem. Inf. Comput. Sci. 38 (1998) 1145.

[5] R.M. Nemba, C. R. Acad. Sci. Paris, Ser. IIb 323 (1996) 773.

[6] A. Kaufman, Introduction à la combinatorique, Dunod, Paris, 1980, p. 84.

[7] E.L. Eliel, S.H. Wilen, L.N. Mander, Stereochemistry of organic compounds, Wiley Interscience, New York, 1994, p. 756.

[8] G. Polyà, Acta Math. 69 (1937) 145.

[9] G. Polyà, R.C. Read, Combinatorial Enumeration of Graphs, Groups and Chemical Compounds, Springer Verlag, New York, 1987, p. 58.

[10] (a) G. Polyà, R.E. Tarjan, D.R. Woods, Notes in introductory combinatorics, Birhauser, Boston, 1983, p. 55 ; (b) A.T. Balaban, Croat. Chem. Acta 51 (1978) 35.

[11] (a) F. Harary, E. Palmer, R.W. Robinson, R.C. Read, in : A.T. Balaban, Chemical Applications of Graph Theory, Academic Press, London, p. 11 ; (b) A.T. Balaban, J.W. Kennedy, L.V. Quintas, J. Chem. Educ. 65 (1988) 304; (c) R.W. Robinson, F. Harary, A.T. Balaban, Tetrahedron 32 (1976) 355.

[12] A. Tucker, Math. Mag. 47 (1974) 248.

[13] D.H. Rouvray, Chem. Soc. Rev. 3 (1974) 355.