2018 年臺灣國際科學展覽會
優勝作品專輯

作品編號　030010

參展科別　化學

作品名稱　取代基替換之異構物數量計算

得獎獎項　大會獎：四等獎

就讀學校　新北市立中和高級中學

指導教師　王晞安、劉宗憲

作者姓名　曹立暉、陳彥廷、李艾軒

關鍵詞　Burnside's Lemma、異構物

作者簡介

我是曹立暉，平常喜歡運動，喜歡做一些跟科學有關的事情，喜歡研究勝過寫考題。因為這些我才踏入科學展覽這個領域，在數學、物理、化學之間比較喜愛的是化學，但接觸後才發現自己有那麼多的不足，做這個主題要有很多化學先備知識，更要有數學的先備知識，有這些在進行討論的過程中才會更流暢。

我是陳彥廷，為了彌補國中科展的遺憾，高一時就和夥伴們踏上高中化學科展的旅途。在討論各種主題後，我們決定研究化學異構物的計算，這是一個獨特的主題，在查閱過許多論文後，運用著數學的觀念以及化學的知識，一步一步把研究做出來，雖然過程中遇到許多阻礙，但經由許多貴人的協助才得以解決，在高中生涯留下美好的回憶。

我是李艾軒。因為高一時懵懵懂懂的考進了化學專題班，啟發了對科學方面的求知慾，在因緣際會下形成了這個組合做研究，誤打誤撞的進到 2018 台灣國際科展。平時的興趣愛好廣泛多元，愛好拉小提琴，目前擔任本校資訊研究社社長。

摘要

本研究以數學上的 Burnside’s Lemma 思維，利用排列組合結合化學領域中的群論概念，應用在計算取代基可被替換的化學結構，所具有的異構物數量。

研究中討論了環狀共振(例如苯環)、環烷、直烷、醇、醚、醛、酮、羧酸、酯、胺、醯胺等分子結構，推導出任意取代基種類與數量不同時，所對應的化學異構物數量公式與計算方法。

整理出公式與計算方法後，將 C_nH_x 中 x 個 H 的位置改成給定的取代基種類與數量時，然後系統化異構物數量的處理流程。最後再針對典型分子的化學點群，給出其對稱的數學排列群樣貌，作為各式計算的背景資料。

Abstract

The number of chemical isomers in which the substituents could be replaced can be calculated by utilizing the mathematical Burnside's Lemma concept and group theory. We deduced the general equations and calculation methods for the number of chemical isomers of aromatic ring (such as benzene), straight-chain alkane, cycloalkane, alcohol, ether, aldehydes, ketones, carboxylic acids, esters, amines and amides with arbitrary substituents. After deducing the equations and calculation methods, we replace H of C_nH_x with given substituents and make the calculation process for the number of chemical isomers systematically. In addition, we obtain the symmetrical mathematical arrangement for the typical molecular point groups and make them as references for calculating the number of isomers.

壹、前言

在化學分子結構中，論及有多種取代基的異構物時，則多半經由窮舉法畫出所有異構物，顯然此法在碳數較多時並不實際，而且容易遺漏。如何有效排列計算異構物總數量而不遺漏，至今仍有許多問題待解決。

我們在臺灣國際科學展覽會資料庫、全國中小學科學展覽會資料庫中，從未發現有作品探討點群與異構物計數，而國外的期刊資料，關於取代基替換的計數文獻較少(例如Brian Alspach and S.Aronoff, 1977，必須分奇數或偶數個碳的環烷)，關於碳氫化合物的分支情形與計數較多，但研究方向與們我有所不同(蕭文強，C_nH_{2n+2}的生成函數推導)。

而Frank Albert Cotton在Chemical Applications of Group Theory一書中大量探討化學點群，也加入了矩陣的表徵來描述分子對稱。但一般而言，這些分子的取代基都已經被接上(可能種類相同或相異)(如下圖1)，因此其對稱點群的元素數量，必然比所有取代基都尚未被接上(或是看成全部接上了相同的取代基(如下圖2,3)，例如苯環上的6個氫)的點群數量少。

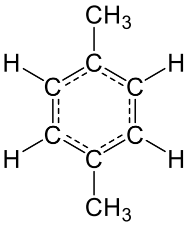


圖 1

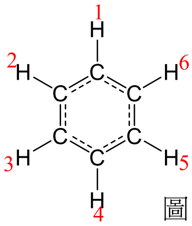


圖 2

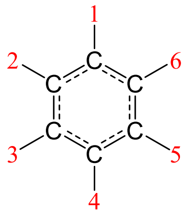


圖 3

對本研究而言，若在給定的結構下要計算任意接上取代基後的異構物數量，則需要的點群是所有取代基都尚未被接上(或全部接上了相同的取代基)者(如圖2,3)，例如Dihedral group。這促使了我們想要利用數學思維處理，除了將取代基的位置以編號取代，還將化學上的點群轉為數學上的cycle表徵，從而可以透過數學定理，把空間中較難以想像的排列問題，轉為好處理的直線排列問題，並得到了本研究的一些結論。

貳、研究目的

一、給出任意碳數的環狀共振結構，在不同取代基種類與取代基數量下，異構物的種類數。
二、給出任意碳數的環烷結構，在不同取代基種類與取代基數量下，異構物的種類數。
三、給出任意碳數的直烷結構，在不同取代基種類與取代基數量下，異構物的種類數。
四、給出任意碳數的醇、醚、醛、酮、羧酸、酯、胺、醯胺結構，在不同取代基種類與取代基數量下，異構物的種類計算法。
五、代入固定的碳數及取代基數量，討論四個碳及五個碳時：三碳環不超過 2 個，用分類的方法，計算在不同取代基種類與取代基數量下異構物的種類數。
六、針對典型分子的化學點群，給出其對稱的數學排列群樣式，作為各式計算的背景資料。

參、研究設備及器材

紙、筆、Microsoft Office Word、MathType、ChemDraw。

肆、名詞解釋

以下我們對化學結構中的幾個變數做定義，以便後續使用：

一、碳數(n)

結構中的的碳原子數量。

二、異構物的種類數(k)

給定取代基種類數量及每種取代基的數量後，可求得的異構物種類數。

三、取代基的種類數(i)

取代基(含原本未取代前的氫原子)的種類數。

四、每種取代基的數量($a_1 \sim a_i$)

第$1\sim i$種取代基的數量分別以$a_1 \sim a_i$表示。

五、取代基為奇數個的種類數(b)

以b表示$a_1 \sim a_i$中有多少個奇數，可知$b=\sum_{j=1}^{i}\left(a_j-2\left\lfloor\frac{a_j}{2}\right\rfloor\right)$。

六、每種取代基的數量之最大公因數(m)

定義m為$a_1 \sim a_i$的最大公因數，表為$m=(a_1,a_2,\ldots,a_i)$。

七、cycle 長度(d)

旋轉或翻轉動作中，任一個元素g內所具有的共同 cycle 長度。

伍、研究結果

○、代數化的思考

我們嘗試以代數的觀點來探討這個問題：如圖 4，例如某 Y 具有四個取代基，且為一平面結構，將四個取代基的位置編上 1,2,3,4 號。如果我們有i種取代基的選擇，而這個 Y 先不要被旋轉或翻轉的話，就有i^4種不同結果，以「i^4種取代基**配置**」稱呼，收集起來成為一個**配置集合**X。

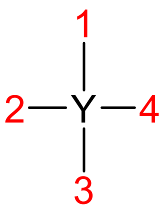


圖 4：Y 的四個取代基位置給予編號 1,2,3,4

那麼對這個 Y 就會有 8 種動作可以做：
(實際上這個動作所形成的群即為 Dihedral Group，簡記為D_4或Dih_4)

排列方法	旋轉動作	排列方法	翻轉動作
$e=(1)(2)(3)(4)$	轉0°	$(1\ 2)(3\ 4)$	對稱軸過$1,2$間和$3,4$間的翻轉
$(1\ 2\ 3\ 4)$	轉90°	$(1\ 4)(2\ 3)$	對稱軸過$1,4$間和$2,3$間的翻轉
$(1\ 3)(2\ 4)$	轉180°	$(1)(3)(2\ 4)$	對稱軸過$1,3$的翻轉
$(1\ 4\ 3\ 2)$	轉270°	$(2)(4)(1\ 3)$	對稱軸過$2,4$的翻轉
共 4 種動作		共 4 種動作	
合計共 8 種動作			

有些配置經過不同的動作作用後，會回到相同的配置。對於不同的化學分子，例如一些平面或立體的結構，我們可以利用它的結構，找出它有哪些旋轉或翻轉的對稱面(分子對稱性，即化學群論常見問題)，然後再把這些促使它們能對稱的動作收集起來成為一個群G。

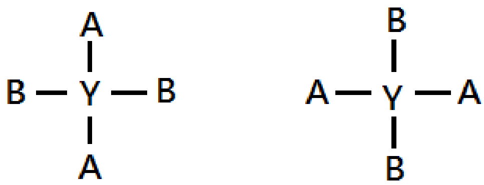


圖 5：Y 的兩種不同配置，
把其中一個旋轉 90 度後就會得到另一個，
故其實是相同的異構物(等價類)

我們只要再討論那些經過**動作群**G的作用後，會形成相同的配置可分成幾類(稱為**等價類**)，就可以知道異構物有多少種(比如 2 個 A 與 2 個 B 的異構物的取代基配置共有 2 種)。
群論中的 Burnside's Lemma 可以在異構物(等價類)的數量計算上起到作用：
設$A=\{1,2,3,\ldots n\}$，S_n表A集合上所有排列方法形成的**排列群**。

> Burnside's Lemma(**引自數學上抽象代數領域的一個計數引理**) (William Burside, 1897)
>
> 設G為作用在有限集合X的有限動作群，若集合$X_g=\{x\,|\,gx=x, x\in X\}$表示某個排列元素$g$作用在$X$上會保持不變的元素所形成的集合，則$k=\frac{1}{|G|}\sum_{g\in G}|X_g|$，其中$k$表示集合$X$可分割出$k$個不同的等價類數量。

X_g **在分子結構中，可以看成「針對某種對稱動作** g **後，仍然會是相同配置」的那些配置所形成的集合**；而這裡的等價類數量 k 即為異構物的種類數。也就是說，只要計算出 G 中每個 g 所對應的 $|X_g|$，就能利用 Burnside's Lemma 來計算異構物有多少種。

接下來我們就可以針對一些常見又具有對稱性的分子結構(環狀共振、環烷、直烷、五個碳以下所有的有機結構)，先描述該結構排列群 S 的子群 G，再利用 Burnside's Lemma，就可以對任意碳數(n)，以及任意給定取代基的種類(i)與數量($a_1 \sim a_i$)，建立可供放入參數的一般化公式。

一、環狀共振結構在不同取代基種類與取代基數量下，異構物的種類數

環狀共振結構的化學通式是 C_nH_n， $n \geq 3$，典範例即是苯環(如圖 6)。

化學理論一般認為在這些體系中的電子，可以自由在由原子組成的環形結構上運動(軌域)，環狀結構含有單鍵和雙鍵相間，軌域的結果是環鍵的鍵級趨於均化，給予體系穩定作用，碳與碳之間的鍵長也會相等。根據這個理論，**可以將這個結構視為在同一平面上，是環狀並且具有對稱性的**。

當結構不為共平面時，可用平面結的結構去計算，異構物數量會相同。

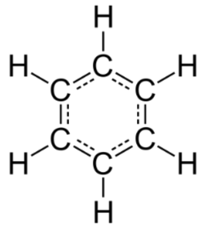


圖 6：苯的結構可視為在同一平面上，是環狀並且具有對稱性的

(一) 環狀偶數碳共振結構

環狀共振結構不限碳數為 6 時才會產生，而且在每個碳的位置上都恰有一個取代基 (數字大，較容易看出公式形式)，描述環狀共振結構的動作群 G (Dihedral Group D_6)。

1 環狀偶數/奇數碳共振結構的動作群

G 中的旋轉動作	G 中的翻轉動作
$e = g_1 = (1)(2)(3)(4)(5)(6)$	$g_7 = (1)(4)(2\ 5)(3\ 6)$
$g_2 = (1\ 2\ 4\ 5\ 6)$	$g_8 = (2)(5)(1\ 4)(3\ 6)$
$g_3 = (1\ 3\ 5)(2\ 4\ 6)$	$g_9 = (3)(6)(1\ 4)(2\ 5)$
$g_4 = (1\ 4)(2\ 5)(3\ 6)$	$g_{10} = (1\ 6)(2\ 5)(3\ 4)$
$g_5 = (1\ 5\ 3)(2\ 6\ 4)$	$g_{11} = (1\ 2)(3\ 6)(4\ 5)$
$g_6 = (1\ 6\ 5\ 4\ 3\ 2)$	$g_{12} = (2\ 3)(1\ 4)(6\ 5)$
共 12 種動作	

可得知當一圈有 n 個碳時，旋轉有 n 種動作：

轉 $\frac{k}{n} \times 360^\circ$， $k = 0 \sim n-1$；

翻轉也有 n 種動作：

奇數時：對稱軸過k的翻轉， $k = 1 \sim n$ 共有 n 個

偶數時：對稱軸過 k 及 $k+\frac{n}{2}$ 的翻轉， $k = 1 \sim \frac{n}{2}-1$

以及對稱軸過 k 與 $k+1$ 間和 $k+\frac{n}{2}$ 與 $k+1+\frac{n}{2}$ 間的翻轉，合計共有 n 個軸

因此不論 n 為奇數或偶數， $|G| = n + n = 2n$ 。

有了 $|G| = 2n$ 之後，再將旋轉動作與翻轉動作分開考慮：

續以 $n=6$ 為例，任何旋轉動作 g 必可被拆成互斥的 cycle 或僅有一個 cycle， $n=6$ 時，可以拆成 3 個 2-cycle 的有 <u>2</u> 種排列、可以拆成 2 個 3-cycle 的有可以拆成 6 個 1-cycle 的有 <u>1</u> 種排列。不同長度的 cycle 排列方法數有規則可循。考慮 cycle 的產生方式：6-cycle 是因為旋轉的格數與 6 互質(每次可轉 1,5 格，恰對應 g_2, g_6，所以會把將每個位置「跳」完後，才回到出發點。

若設某個旋轉動作 g **的 cycle 長度為** d **，則顯然有** $d \mid n$ 。

$n=6$ 時，考慮 6 以下，與 6 互質的正整數有幾個即可，以 $\phi(d)$ 表示(尤拉函數：正整數 d 的標準分解式 $d = p_1^{k_1} p_2^{k_2} \cdots p_r^{k_r}$ ，則不大於 d 且與 d 互質的正整數有 $\phi(d) = d \cdot \prod_{i=1}^{r}(1-\frac{1}{p_i})$ 個)。

6-cycle 的 g_2 與 g_6，旋轉格數分別為 1 格與 5 格。考慮 $\phi(6) = 6(1-\frac{1}{2})(1-\frac{1}{3}) = 2$ ，不大於 6 且與 6 互質的正整數是 1,5；因為 $n=6$，所以 g_2 與 g_6 會有 2 個 6-cycle，故旋轉格數即為 1×2 與 5×2 。意即 $\phi(6)$ 同樣是 6-cycle 的動作個數。其餘 6 的因數 3、2、1 以此類推，分別考慮 $\phi(3)$ 、 $\phi(2)$ 、 $\phi(1)$ 即可。

翻轉動作會將兩個兩個一組的位置互換，所以必定可以寫成一群 2-cycle 的乘積。但是位置數 n 為偶數時，翻轉的對稱軸可能不通過任何位置，或同時通過相對面的兩個位置； n 為奇數時，對稱軸一定會恰通過某一個位置。故這兩種情形的 g ：

① n 為偶數時：對稱軸過對面的兩個位置的 g 可拆成 2 個 1-cycle 與 $\frac{n-2}{2}$ 個 2-cycle

、對稱軸不過任何位置的 g 可拆成 $\frac{n}{2}$ 個 2-cycle；

② n 為奇數時：所有 g 的對稱軸必定過某一個位置，均可拆成 1 個 1-cycle 與 $\frac{n-1}{2}$ 個 2-cycle。

2.環狀偶數碳共振結構的異構物數量公式

對一個環狀有 n 個碳，$n \geq 3$ 的共振結構來說，取代基的位置數量為 n。設這 n 個位置共有 i 種相異的取代基，並且每種取代基的數量分別為 $a_1 \sim a_i$，則有 $n=\sum_{j=1}^{i} a_j$。

在 $k=\frac{1}{|G|}\sum_{g\in G}|X_g|$ 中，已有 $|G|=2n$，再對不同的 g 分別考慮其 $|X_g|$：

旋轉動作中，給定 cycle 長度為 d 的動作 g，由於取代基的數量為 $a_1 \sim a_i$，在填入 cycle 進行直線同物排列時，要讓同一個 cycle 裡都填入同一種的取代基，即 d 必須整除所有的 $a_1 \sim a_i$。設 $(a_1,a_2,...,a_i)=m$，則必須要有 $d\,|\,(a_1,a_2,...,a_i)=m$ 才能開始排列。因此對所有旋轉動作 g 而言，它們直線同物排列的方法數共為 $\displaystyle\sum_{\substack{n=a_1+a_2+...+a_i \\ a_1,...,a_i\in N \\ d|(a_1,...,a_i)=m}} \frac{\phi(d)\times\left(\frac{n}{d}\right)!}{\prod_{j=1}^{i}\left(\frac{a_j}{d}\right)!}$。

接著假設在 i 種相異的取代基裡，有 b 種取代基的數量是奇數的個數，故 $b=\sum_{j=1}^{i}\left(a_j-2\left\lfloor\frac{a_j}{2}\right\rfloor\right)$。這可以使我們在建立公式時有一個判斷式，以確保某些數量情境下，採取計算不同的項。**本研究的中括號皆指高斯符號**。

判斷式一：$\left\lfloor\frac{2^0}{2^b}\right\rfloor$ 表 $a_1 \sim a_i$ 中有 0 個奇數時要納入計算，1 個以上奇數時不納入計算

判斷式二：$\left\lfloor\frac{3b}{2^b+2}\right\rfloor$ 表 $a_1 \sim a_i$ 中有 2 個奇數時要納入計算，0,1 或 3 個以上奇數時不納入計算

翻轉動作承前述，$\frac{n}{2}$ 種 g 可拆成 2 個 1-cycle 與 $\frac{n-2}{2}$ 個 2-cycle、$\frac{n}{2}$ 種 g 可拆成 $\frac{n}{2}$ 個 2-cycle，故 $a_1 \sim a_i$ 中有多少個是奇數(b)會影響能否進行 cycle 的直線同物排列，利用 $b=\sum_{j=1}^{i}\left(a_j-2\left\lfloor\frac{a_j}{2}\right\rfloor\right)$，若 $a_1 \sim a_i$ 全為偶數($b=0$)，則不過任何位置的 $\frac{n}{2}$ 種 g 有 $\frac{\frac{n}{2}\times\left(\frac{n}{2}\right)!}{\prod_{j=1}^{i}\left\lfloor\frac{a_j}{2}\right\rfloor!}$ 種方法、而有過位置的 $\frac{n}{2}$ 種 +-

$\frac{n}{2}\times\left(\frac{n-2}{2}\right)!\times\sum_{k=1}^{i}\frac{1}{\left\lfloor\frac{a_k-2}{2}\right\rfloor!\times\prod_{\substack{j=1\sim k-1 \\ k+1\sim i}}\left\lfloor\frac{a_j}{2}\right\rfloor!}$ 種方法。

若 $a_1 \sim a_i$ 中恰有 2 個奇數($b=2$)，則 2 個數量為奇數的取代，只能各挑一個放入 $\frac{n}{2}$ 種 2 個 1-cycle 與 $\frac{n-2}{2}$ 個 2-cycle 的翻轉動作 g，故有 $\frac{\frac{n}{2}\times 2!\times\left(\frac{n-2}{2}\right)!}{\prod_{j=1}^{i}\left\lfloor\frac{a_j}{2}\right\rfloor!}$ 種方法。

這兩種情形不會同時發生，可以使用判斷式來整合。

綜合以上，可以得到環狀偶數碳共振結構的異構物數量 k 公式為：

$$k=\frac{1}{|G|}\sum_{g\in G}|X_g|=\frac{1}{2n}\left(\left(\sum_{\substack{n=a_1+a_2+\ldots+a_i\\ a_1,\ldots,a_i\in N\\ d|(a_1,\ldots,a_i)=m}}\frac{\phi(d)\times\left(\frac{n}{d}\right)!}{\prod_{j=1}^{i}\left(\frac{a_j}{d}\right)!}\right)+\left[\frac{2^0}{2^b}\right]\times\left(\frac{\frac{n}{2}\times\left(\frac{n}{2}\right)!}{\prod_{j=1}^{i}\left[\frac{a_j}{2}\right]!}+\frac{n}{2}\times\left(\frac{n-2}{2}\right)!\times\sum_{k=1}^{i}\frac{1}{\left[\frac{a_k-2}{2}\right]!\times\prod_{\substack{j=1\sim k-1\\ k+1\sim i}}\left[\frac{a_j}{2}\right]!}\right)\right.$$

$$\left.+\left[\frac{3b}{2^b+2}\right]\times\frac{\frac{n}{2}\times 2!\times\left(\frac{n-2}{2}\right)!}{\prod_{j=1}^{i}\left[\frac{a_j}{2}\right]!}\right)\quad，n\geq 4$$

3.環狀偶數碳共振結構的異構物數量舉例

以 $n=12$ 、 $i=4$ 、 $a_1=2$ 、 $a_2=2$ 、 $a_3=4$ 、 $a_4=4$ 為例(比如 $C_{12}H_2F_2Cl_4Br_4$)，異構物數量為

$$k=\frac{1}{24}\left(\frac{1\times\left(\frac{12}{1}\right)!}{\left(\frac{2}{1}\right)!\left(\frac{2}{1}\right)!\left(\frac{4}{1}\right)!\left(\frac{4}{1}\right)!}+\frac{1\times\left(\frac{12}{2}\right)!}{\left(\frac{2}{2}\right)!\left(\frac{2}{2}\right)!\left(\frac{4}{2}\right)!\left(\frac{4}{2}\right)!}+\frac{\frac{12}{2}\times\left(\frac{12}{2}\right)!}{\left(\frac{2}{2}\right)!\left(\frac{2}{2}\right)!\left(\frac{4}{2}\right)!\left(\frac{4}{2}\right)!}\right.$$

$$\left.+\left(\frac{12}{2}\right)\times\left(\frac{12-2}{2}\right)!\times\left(\frac{1}{1!2!2!}+\frac{1}{1!2!2!}+\frac{1}{1!1!2!}+\frac{1}{1!1!2!}\right)\right)=8760(\text{種})$$

(二)環狀奇數碳共振結構

1 環狀奇數碳共振結構的動作群如前述(奇偶相同)

2.環狀奇數碳共振結構的異構物數量公式

建立公式的步驟與偶數時類似，旋轉的部份相同，翻轉的部份因為是 1 個 1-cycle 與 $\frac{n-1}{2}$ 個 2-cycle，所以 $a_1\sim a_i$ 必須恰有 1 個是奇數，除此之外都沒有翻轉的方法。

我們以 $\left[\frac{1}{b}\right]$ **當作判斷式(不必擔心分母為 0，因為總和為奇數，所以 b 不可能為 0)**，當恰有 1 個取代基數量是奇數時，該取代基就必須填入 1-cycle，故翻轉的方法數為 $\frac{n\times\left(\frac{n-1}{2}\right)!}{\prod_{j=1}^{i}\left[\frac{a_j}{2}\right]!}$ 。

類似地我們可以得到環狀奇數碳共振結構的異構物數量 k 公式為：

$$k=\frac{1}{|G|}\sum_{g\in G}|X_g|=\frac{1}{2n}\left(\left(\sum_{\substack{n=a_1+a_2+\ldots+a_i\\ a_1,\ldots,a_i\in N\\ d|(a_1,\ldots,a_i)=m}}\frac{\phi(d)\times\left(\frac{n}{d}\right)!}{\prod_{j=1}^{i}\left(\frac{a_j}{d}\right)!}\right)+\left[\frac{1}{b}\right]\times\left(\frac{n\times\left(\frac{n-1}{2}\right)!}{\prod_{j=1}^{i}\left[\frac{a_j}{2}\right]!}\right)\right)\quad，n\geq 3$$

3.環狀奇數碳共振結構的異構物數量舉例

以 $n=15$ 、 $i=3$ 、 $a_1=3$ 、 $a_2=6$ 、 $a_3=6$ 為例(比如 $C_{15}H_3F_6Cl_6$)，異構物數量為

$$k=\frac{1}{30}\left(\left(\frac{1\times\left(\frac{15}{1}\right)!}{\left(\frac{3}{1}\right)!\left(\frac{6}{1}\right)!\left(\frac{6}{1}\right)!}+\frac{2\times\left(\frac{15}{3}\right)!}{\left(\frac{3}{3}\right)!\left(\frac{6}{3}\right)!\left(\frac{6}{3}\right)!}\right)+\frac{15\times\left(\frac{15-1}{2}\right)!}{\left[\frac{3}{2}\right]!\left[\frac{6}{2}\right]!\left[\frac{6}{2}\right]!}\right)=14086(\text{種})$$

二、環烷結構在不同取代基種類與取代基數量下，異構物的種類數

環烷是環狀對稱的結構，化學通式是 C_nH_{2n} ， $n\geq 3$ 。以最簡單的環烷為例，環丙烷的化學式為 C_3H_6 ，其結構如圖 7，(粗色線代表鍵結方向朝上，虛線代表鍵結方向朝下的立體結構)。

環烷結構中的碳雖然在同一平面上，但會向平面以外延伸出兩個鍵，其支鍵又可接上不同的取代基，因此異構物數量的計算會變得較為複雜，不能同前述的其他結構直接對整個結構作旋轉和翻轉。

以環己烷($n=6$)為例，可先把整個結構中取代基的位置，看成上下兩層平行的平面，再分別討論。先將第一層與第二層取代基的位置標上編號，如圖 8。

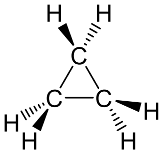


圖 7：環丙烷

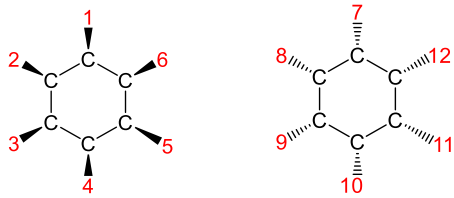


圖8：環己烷的第一層取代基(1~6)與第二層取代質(7~12)的位置編號

(一)環烷

首先先將整個圖形沿著兩個平行面旋轉，由於是圖形一起動作，因此不同層不互相影響，與前述的環狀共振結構旋轉為相同概念，但要分兩層來寫，把第一層中的每個編號加上 n 就可以得到第二層。

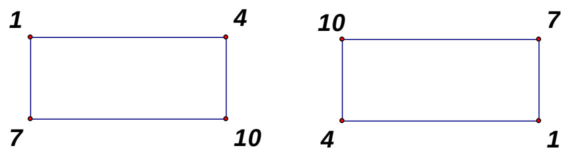
翻轉時，我們先以「過連接 1、7 號取代基的碳及 4、10 號取代基的碳，這兩個碳所在的直線，並與每個碳所在的平面垂直」的平面為對稱面翻轉的動作，可表示為 6 個 2-cycle 的 $g_7=(1\ \ 7)(4\ \ 10)(2\ \ 12)(6\ \ 8)(3\ \ 11)(5\ \ 9)$ ，以通過 1、7、2、8 號四個取代基所在平面的中垂面為對稱面翻轉的動作可表示為 6 個 2-cycle 的 $g_{10}=(1\ \ 8)(2\ \ 7)(6\ \ 9)(3\ \ 12)(4\ \ 11)(5\ \ 10)$ ，以此類推便可得 $n=6$ 為例的動作群 G 。

1.環烷結構的動作群

G 中的旋轉動作	G 中的翻轉動作
$e=g_1=(1)(2)(3)(4)(5)(6)(7)(8)(9)(10)(11)(12)$	$g_7=(1\ \ 7)(4\ \ 10)(2\ \ 12)(6\ \ 8)(3\ \ 11)(5\ \ 9)$
$g_2=(1\ \ 2\ \ 3\ \ 4\ \ 5\ \ 6)(7\ \ 8\ \ 9\ \ 10\ \ 11\ \ 12)$	$g_8=(2\ \ 8)(5\ \ 11)(3\ \ 7)(1\ \ 9)(4\ \ 12)(6\ \ 10)$
$g_3=(1\ \ 3\ \ 5)(2\ \ 4\ \ 6)(7\ \ 9\ \ 11)(8\ \ 10\ \ 12)$	$g_9=(3\ \ 9)(6\ \ 12)(4\ \ 8)(2\ \ 10)(5\ \ 7)(1\ \ 11)$
$g_4=(1\ \ 4)(2\ \ 5)(3\ \ 6)(7\ \ 10)(8\ \ 11)(9\ \ 12)$	$g_{10}=(1\ \ 8)(2\ \ 7)(6\ \ 9)(3\ \ 12)(4\ \ 11)(5\ \ 10)$
$g_5=(1\ \ 5\ \ 3)(2\ \ 6\ \ 4)(7\ \ 11\ \ 9)(8\ \ 12\ \ 10)$	$g_{11}=(2\ \ 9)(3\ \ 8)(4\ \ 7)(1\ \ 10)(6\ \ 11)(5\ \ 12)$
$g_6=(1\ \ 6\ \ 5\ \ 4\ \ 3\ \ 2)(7\ \ 12\ \ 11\ \ 10\ \ 9\ \ 8)$	$g_{12}=(3\ \ 10)(4\ \ 9)(5\ \ 8)(2\ \ 11)(1\ \ 12)(6\ \ 7)$
共 12 種動作	

當一圈有 n 個碳時，旋轉有 n 種動作：轉 $\frac{k}{n}\times 360^\circ$ ， $k=0\sim n-1$ ；

翻轉也有 n 種動作：



$$\begin{cases}\text{奇數時：對稱面過}k\text{ 與}k+n\text{ 的翻轉，}k=1\sim n\text{ 共有}n\text{ 個}\\ \text{偶數時：對稱面 }k\text{ 與 }k+n\text{ 及 }k+\frac{n}{2}\text{ 與 }k+\frac{n}{2}+n\text{ 的翻轉，}k=1\sim\frac{n}{2}-1\\ \qquad\text{以及對稱面過 }k\text{ 與 }k+1\text{ 間和 }k+\frac{n}{2}\text{ 與 }k+1+\frac{n}{2}\text{ 間的翻轉，合計共有 }n\text{ 個}\end{cases}$$

$|G|=n+n=2n$ 與共振結構時相同。

旋轉的動作與共振結構類似， $n=6$ 時，可以拆成 2 個 6-cycle 的有 2 種排列、可以拆成 4 個 3-cycle 的有 2 種排列、可以拆成 6 個 2-cycle 的有 1 種排列、可以拆成 12 個 1-cycle 的有 1 種排列，同樣可得到 cycle 長度為 d 的旋轉動作有 $\phi(d)$ 種，並且若某個旋轉動作 g 的 cycle 長度為 d ，則需滿足 $d\,|\,n$ 。

但翻轉的動作 cycle 型態不同，無論對稱面有沒有過任何位置，都可以拆成 n 個 2-cycle。以圖 18 為例，因為不同兩層的取代基位置總是會兩兩一組對換，可以看出它是在一個對稱面上的 4 個取代基形成的長方形旋轉 180° 。而且顯然**不論碳數是奇數或偶數都相同，故在環烷中，公式的建立可以統一，不必分奇偶。**

2.環烷結構的異構物數量公式

對環 n 烷來說，取代基的位置數量為 $2n$。設這 $2n$ 個位置共有 i 種相異的取代基，並且每種取代基的數量分別為 $a_1 \sim a_i$，則有 $2n=\sum_{j=1}^{i} a_j$。

在 $k=\frac{1}{|G|}\sum_{g\in G}|X_g|$ 中，已有 $|G|=2n$，再對不同的 g 分別考慮其 $|X_g|$：

與共振結構相同，旋轉動作中給定 cycle 長度為 d 的動作 g，由於取代基的數量為 $a_1 \sim a_i$，在填入 cycle 進行直線同物排列時，要讓同一個 cycle 裡都填入同一種的取代基，即 d 必須整除所有的 $a_1 \sim a_i$。設 $(a_1,a_2,...,a_i)=m$，則必須要有 $d\,|\,(a_1,a_2,...,a_i)=m$ 才能開始排列。因此對所有旋轉動作 g 而言，它們直線同物排列的方法數共為 $\sum_{\substack{2n=a_1+a_2+...+a_i \\ a_1,...,a_i\in N \\ d|(a_1,...,a_i)=m}} \frac{\phi(d)\times\left(\frac{2n}{d}\right)!}{\prod_{j=1}^{i}\left(\frac{a_j}{d}\right)!}$。

翻轉動作中，不論對稱面是否有通過碳，n 種 g 皆可以拆成 n 個 2-cycle。$a_1 \sim a_i$ 中有多少個是奇數(b)會影響能否進行 cycle 的直線同物排列(實際上一個也不能有)，利用 $b=\sum_{j=1}^{i}\left(a_j-2\left[\frac{a_j}{2}\right]\right)$ 作為判斷式：

若 $a_1 \sim a_i$ 全為偶數($b=0$)，在直線排列中 cycle 長度皆為 2，故可以先表示為 $\left(\frac{2n}{2}\right)!$，而因為有 $\frac{n}{2}$ 條對稱軸，所以共有 $\frac{n}{2}\cdot\left(\frac{2n}{2}\right)!$ 種，同物排列時則要除以 $\left[\frac{a_j}{2}\right]!$，由此，我們可以列出翻轉的 cycle 直線排列數共有 $\frac{n\cdot\left(\frac{2n}{2}\right)!}{\prod_{j=1}^{i}\left[\frac{a_j}{2}\right]!}$。當 $a_1 \sim a_i$ 中有某個是奇數，就完全沒有此項。

綜合以上，可以得到環烷結構的異構物數量 k 公式為：

$$k=\frac{1}{|G|}\sum_{g\in G}|X_g|=\frac{1}{2n}\left\{\left(\sum_{\substack{2n=a_1+...+a_j \\ a_1\sim a_i\in N \\ d|(a_1\sim a_i)=m \\ d|n}} \frac{\phi(d)\cdot\left(\frac{2n}{d}\right)!}{\prod_{j=1}^{i}\left(\frac{a_j}{d}\right)!}\right)+\left[\frac{2^0}{2^b}\right]\times\frac{n\times n!}{\prod_{j=1}^{i}\left[\frac{a_j}{2}\right]!}\right\}, \quad n\geq 3$$

(Brian Alspach and S.Aronoff 於 1977 年有類似的結論，但碳數分奇偶個別處理。)

3.環烷結構的異構物數量舉例

我們分別舉以 n 為偶數與奇數的兩種例子說明：

(1) $n=6$、$i=4$、$a_1=2$、$a_2=2$、$a_3=4$、$a_4=4$ 為例(比如 $C_6H_2F_2Cl_4Br_4$)，異構物數量為

$$k=\frac{1}{12}\left(\frac{1\times\left(\frac{12}{1}\right)!}{\left(\frac{2}{1}\right)!\left(\frac{2}{1}\right)!\left(\frac{4}{1}\right)!\left(\frac{4}{1}\right)!}+\frac{1\times\left(\frac{12}{2}\right)!}{\left(\frac{2}{2}\right)!\left(\frac{2}{2}\right)!\left(\frac{4}{2}\right)!\left(\frac{4}{2}\right)!}+\frac{6\times\left(\frac{12}{2}\right)!}{\left(\frac{2}{2}\right)!\left(\frac{2}{2}\right)!\left(\frac{4}{2}\right)!\left(\frac{4}{2}\right)!}\right)=17430(\text{種})$$

(翻轉皆為 2-cycle，每種取代基數量均為偶數，可以有翻轉的 $|X_g|$ 項)

(2) $n=3$、$i=2$、$a_1=3$、$a_2=3$ 為例(比如三氯環丙烷，$C_3H_3Cl_3$)，異構物數量為

$$k=\frac{1}{6}\left(\frac{1\times\left(\frac{6}{1}\right)!}{\left(\frac{3}{1}\right)!\left(\frac{3}{1}\right)!}+\frac{2\times\left(\frac{6}{3}\right)!}{\left(\frac{3}{3}\right)!\left(\frac{3}{3}\right)!}\right)=4(\text{種})$$

(翻轉皆為 2-cycle，每種取代基數量均為奇數，故沒有有翻轉的 $|X_g|$。

三、直烷結構在不同取代基種類與取代基數量下，異構物的種類數

我們在掛上取代基做異構物的計算時，皆是以掛完後不影響最長的碳鏈為原則。

(一)直烷

1.甲烷的異構物數量

如圖 9，甲烷分子的結構為正四面體，依其旋轉及翻轉情形，
可以很快看出異構物數量：

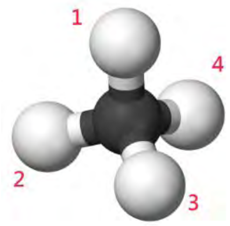


圖 9：甲烷

1. 1 種取代基時，四同：1 種異構物
2. 2 種取代基時，三同一異：1 種異構物
   二同二同：1 種異構物
3. 3 種取代基時，二同一異一異：1 種異構物(限定某種取代基為 2 個)
4. 4 種取代基時，四異：2 種異構物 (以某個取代基視角來看，其餘三個有順逆時針不同)。

在四個取代基位置標上編號，列出正四面體的 12 種旋轉或翻轉動作：

$e=(1)(2)(3)(4)$、$(1\ 2\ 3)(4)$、$(1\ 3\ 2)(4)$、$(1\ 2\ 4)(3)$、$(1\ 3\ 4)(2)$、$(1\ 4\ 3)(2)$、$(1\ 4\ 2)(3)$、$(1)(2\ 3\ 4)$、$(1)(2\ 4\ 3)$、$(1\ 3)(2\ 4)$、$(1\ 2)(3\ 4)$、$(1\ 4)(2\ 3)$

使用 Burnside's Lemma : $k(\text{異構物數量})=\dfrac{1}{|G|}\sum_{g\in G}|X_g|$，也會得到相同的結果：

1 種取代基時，四同：$k=\dfrac{1}{12}(1+1+1+1+1+1+1+1+1+1+1+1)=1(\text{種})$

2 種取代基時，三同一異：$k=\dfrac{1}{12}\left(\dfrac{4!}{3!}+1+1+1+1+1+1+0+0+0+1+1\right)=1(\text{種})$

二同二同：$k=\dfrac{1}{12}\left(\dfrac{4!}{2!2!}+0+0+0+0+0+0+2!+2!+2!+0+0\right)=1(\text{種})$

3 種取代基時，二同一異一異：$k=\dfrac{1}{12}\left(\dfrac{4!}{2!1!1!}+1+1+1+1+1+1+0+0+0+1+1\right)=1(\text{種})$

4 種取代基時，四異：$k=\dfrac{1}{12}(4!+0+0+0+0+0+0+0+0+0+0+0)=2(\text{種})$

2.兩個碳以上的直烷的動作群

以丁烷為例，當我們畫在平面上時如圖 10。

實際上丁烷的立體結構如圖 11，對每個碳來說，周遭的 4 個鍵結會形成一個四面體的樣子。

兩側尾端的碳，都接上 3 個可旋轉的取代基，因此在標號時，我們將其合編為 1 號與 4 號，計算異構物數量時再分情形討論，攤為平面簡記時如下。

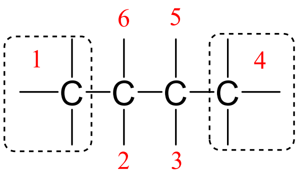


圖 10

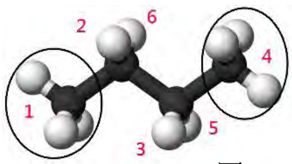


圖 11

排列方法	對應動作
$e=g_1=(\underline{\ 1\ })(2)(3)(\underline{\ 4\ })(5)(6)$	不動
$g_2=(\underline{\ 1\ }\ \ \underline{\ 4\ })(2\ 3)(5\ 6)$	以第 2,3 個碳的中點為中心，將丁烷沿著四個碳所在的平面旋轉$180°$
共 2 種動作	

我們可以依其結構的對稱性，找出丁烷的動作群G，其中G會包含 2 種動作(如上表)：

$(\underline{\ 1\ })$與$(\underline{\ 4\ })$分別代表在這個位置上要一次填入 3 個取代基，其餘皆為 1 個取代基。

3.兩個碳以上的直烷的異構物處理手法

無論碳數為多少，兩側可旋轉的位置我們都優先處理。對在$(\underline{\ 1\ })$與$(\underline{\ 4\ })$分別填入的 3 個取代基考慮異同，可以整理出 9 種情形如下方表格。分別對這 9 種情形，利用 Burnside's Lemma：

$k=\dfrac{1}{|G|}\sum_{g\in G}|X_g|$ 計算。**以下的k_j為包含某一種情形中各種填法的總和。**

因為不管碳數n是多少，這個結構的動作都只有 2 種，所以$|G|$恆為 2。

接著對兩種 g 分別考慮其 $|X_g|$。注意 $e=g_1=(\underline{\ 1\ })(2)(3)(\underline{\ 4\ })(5)(6)$，若要使某一種取代基配置經過 g_1 作用後仍是相同的配置，則**要讓同一個 cycle 裡填入相同的取代基**(但兩側是各一次填入 3 個，分 9 種情形考慮)，且如果遇到某側填入 3 個相異的取代基時，就要進行環狀排列(看起來是順逆時針的不同)，乘上 $(3-1)!=2$ 倍，若兩側都是 3 個相異的取代基時就要再乘上 $2\times2=4$ 倍。

序號	分類名稱	在 $(\underline{\ 1\ })$ 與 $(\underline{\ 4\ })$ 中的情形
(1)	三同 / 三同 same	各填入 3 個相同的取代基，而且兩側取代基為同一種
(2)	三同 / 三同 different	各填入 3 個相同的取代基，但兩側取代基不為同一種
(3)	三同 / 二同一異	有一個填入 3 個相同的取代基、 另一個填入 2 同 1 異的取代基
(4)	三同 / 三異 (考慮環狀排列再乘 2 倍)	有一個填入 3 個相同的取代基、 另一個填入 3 個相異的取代基
(5)	二同一異 / 二同一異 same	各填入 2 同 1 異的取代基，而且兩側取代基組成相同 (如皆為 2 個 H、1 個 Cl)
(6)	二同一異 / 二同一異 different	各填入 2 同 1 異的取代基，但兩側取代基組成不同 (如一側為 2 個 H、1 個 Cl；另一側為 2 個 H、1 個 F)
(7)	二同一異 / 三異 (考慮環狀排列再乘 2 倍)	有一個填入 2 同 1 異的取代基、 另一個填入 3 個相異的取代基
(8)	三異 / 三異 same (考慮環狀排列再乘 4 倍)	各填入 3 個相異的取代基，而且兩側取代基組成相同 (如皆為 1 個 H、1 個 Cl、1 個 F)
(9)	三異 / 三異 different (考慮環狀排列再乘 4 倍)	各填入 3 個相異的取代基，但兩側取代基組成不同 (如一側為 1 個 H、1 個 Cl、1 個 F； 另一側為 1 個 H、1 個 Cl、1 個 Br)

最後再把這個情境看成「**有數種相異物，填入 cycle 中之後對 cycle 進行直線同物排列，得到多少種直線同物排列的方法，$|X_g|$ 即為多少**」。

總結來說可以分為兩個階段：

第一階段：用組合找出上述 9 種情形中，不同取代基的填入方法有哪些。

第二階段：用 Burnside's Lemma 算 9 種情形的異構物數量 $k_1\sim k_9$，則總異構物數量為

$$k_1+k_2+k_3+2k_4+k_5+k_6+2k_7+4k_8+4k_9$$

這樣的處理手法不論碳數多寡恆為 9 種，在碳數較多時則能顯現出通用性與方便性。

4.具有兩種取代基的直烷之異構物數量

以 $C_4H_7Cl_3$ 為例：$e=g_1=(\underline{\ 1\ })(2)(3)(\underline{\ 4\ })(5)(6)$

$g_2=(\underline{\ 1\ }\ \ \underline{\ 4\ })(2\ 3)(5\ 6)$

我們也一併畫出異構物作為對照。

(1)三同 / 三同 same

$(\underline{\ 1\ })$ 與 $(\underline{\ 4\ })$ 中必須填入同一種 3 個相同的取代基，故只有填入 6 個 H 一種選擇。對 $g_1=(\underline{\ 1\ })(2)(3)(\underline{\ 4\ })(5)(6)$ 來說，將剩下的 $1H3Cl$ 填入其他 (2)(3)(5)(6) 的 4 個位置中，相當於 3 同 1 異的物品作直線排列，方法數即為 $\frac{4!}{3!}$；對 $g_2=(\underline{\ 1\ }\ \ \underline{\ 4\ })(2\ 3)(5\ 6)$ 來說，因為 $(2\ 3)(5\ 6)$ 必須兩種取代基的剩餘個數均為 2，故 3 同 1 異無法填入作直線排列，方法數為 0。最後利用 $|G|$ 為 2，代入 $k=\frac{1}{|G|}\sum_{g\in G}|X_g|$ 中，可以列出 $k_1=\frac{1}{2}\times\left(\frac{4!}{3!}+0\right)=2$ 種。

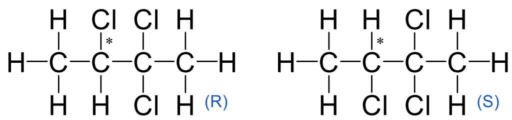


圖 12：三同 / 三同 same 的兩種異構物

(2)三同 / 三同 different

$(\underline{\ 1\ })$ 與 $(\underline{\ 4\ })$ 中要分別填入不同的 $3H$ 及 $3Cl$。對 $g_1=(\underline{\ 1\ })(2)(3)(\underline{\ 4\ })(5)(6)$ 來說，2 種取代基作直線排列後方法數為 $2!$。剩下的 $4H$ 則只有 1 種排列方法；對 $g_2=(\underline{\ 1\ }\ \ \underline{\ 4\ })(2\ 3)(5\ 6)$ 來說，因為 $(\underline{\ 1\ })$ 與 $(\underline{\ 4\ })$ 中是不同的東西，所以無法填入 $(\underline{\ 1\ }\ \ \underline{\ 4\ })$ 中作直線排列，方法數為 0 種。同上代入 Burnside's

Lemma 後，可以列出$k_2=\frac{1}{2}\times(2+0)=1$種。

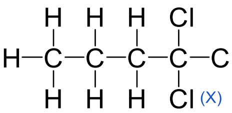


圖 13：三同 / 三同 different 的一種異構物

(3)三同 / 二同一異

依兩側填入的情形不同，可以分成兩種來討論：

<1> (_1_) 與 (_6_) 中分別填入 $3H$ 及 $2H1Cl$，剩下 $2H2Cl$

對 g_1 來說，$3H$ 及 $2H1Cl$ 直線排列後方法數為 $2!$，將剩下的 $2H2Cl$ 作同物排列寫成 $\frac{4!}{2!2!}$；

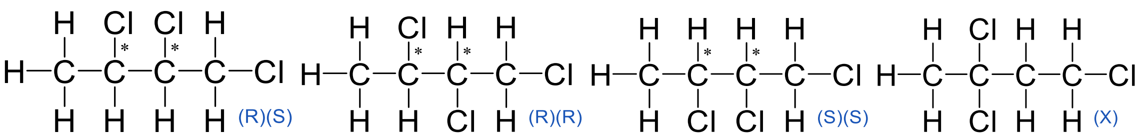
對 g_2 來說，(_1_) 與 (_4_) 中是不同的，無法填入 (_1_ _4_) 作直線排列，方法數為 0 種。

<2> (_1_) 與 (_6_) 中分別填入 $3H$ 及 $2Cl1H$，剩下 $3H1Cl$

對 g_1 來說，$3H$ 及 $2Cl1H$ 直線排列後方法數為 $2!$，將剩下的 $3H1Cl$ 作同物排列寫成 $\frac{4!}{3!}$；

對 g_2 來說，理由同<1>，方法數為 0 種。

綜合以上兩點，我們可以列出 $k_3=\frac{1}{2}\left(2\times\frac{4!}{2!2!}+0\right)+\frac{1}{2}\left(2\times\frac{4!}{3!}+0\right)=10$ 種。



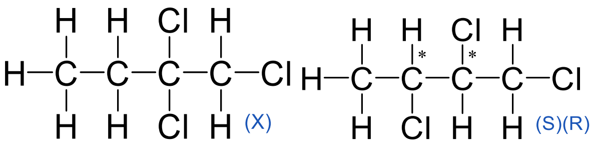


圖 14：三同 / 二同一異 < 1 >的 6 種異構物

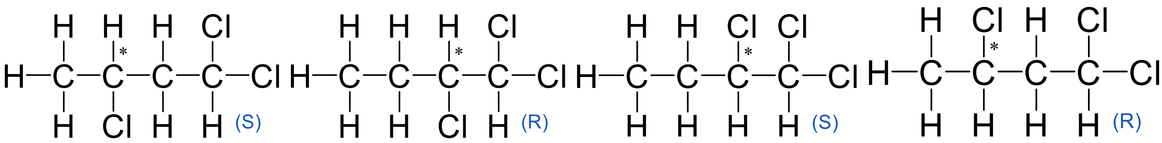


圖 15：三同 / 二同一異 < 2 >的 4 種異構物

(4)三同 / 三異

因為只有兩種取代基，故 $k_4=0$ 種。

(5)二同一異 / 二同一異 same

(_1_) 與 (_6_) 中必須分別填入相同數量與種類的取代基，因此只有填入 $2H1Cl$ 這一種可能。對 g_1 來說方法數為 0 種；對 g_2 來說，將剩下的 $3H1Cl$ 作直線排列，方法數為 $\frac{4!}{3!}$ 種。故可以列出

$k_5=\frac{1}{2}\left(0+\frac{4!}{3!}\right)=2$ 種。

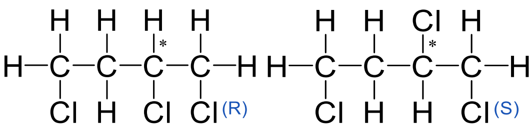


圖 16：二同一異 / 二同一異 same 的 2 種異構物

(6)二同一異 / 二同一異 different

(_1_) 與 (_6_) 中只能分別填入 $2H1Cl$ 及 $1H2Cl$，兩者直線排列的方法數為 $2!$，剩下的 $4H$ 只有 1 種排列，故可以列出 $k_5=\frac{1}{2}(2+0)=1$ 種。

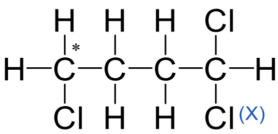


圖 17：二同一異 / 二同一異 different 的 1 種異構物

(7)二同一異 / 三異

(8)三異 / 三異 same

(9)三異 / 三異 different

因為只有兩種取代基，故第(7)(8)(9)種情形中，$k_7=k_8=k_9=0$種。

由上述(1)~(9)種情形，利用 Burnside's Lemma，可知$C_4H_7Cl_3$的總異構物數量為

$k_1+k_2+k_3+2k_4+k_5+k_6+2k_7+4k_8+4k_9=2+1+10+0+2+1+0+0+0=16$種。

5.具有三種取代基的直烷之異構物數量

具有三種或三種以上取代基的直烷，除了填入方法類似以外，還必須注意兩側的取代基，在三同或二同一異時，沒有環狀排列的問題；但若為三相異物，就必須加考慮環狀排列會有 2 種不同情形。如圖 18，在丙烷的一側分別放上相異的 H 、 Cl 、 F ，兩種放法會得到不同的異構物。

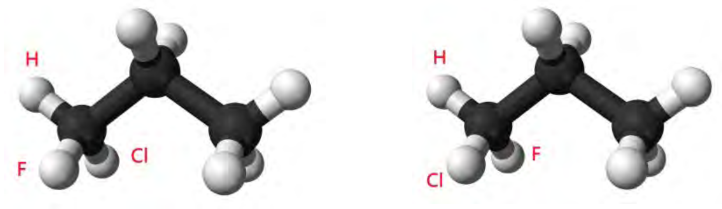
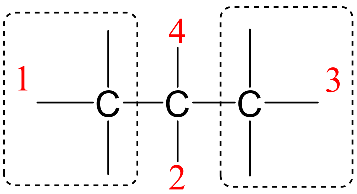


圖 18：三異時會有兩種不同異構物

以$C_3H_4Cl_2F_2$為例，依丙烷結構的對稱性，找出丙烷的動作群G ，其中G會包含 2 種動作：

$(\underline{\ 1\ })$與$(\underline{\ 3\ })$分別代表在這個位置上要一次填入 3 個取代基，其餘皆為 1 個取代基。

圖 19：丙烷取代基編號的平面簡記



排列方法	對應動作
$e=g_1=(\underline{\ 1\ })(2)(\underline{\ 3\ })(4)$	不動
$g_2=(\underline{\ 1\ }\ \ \underline{\ 3\ })(2\ 4)$	以第 2 個碳的中點為中心，垂直三個碳所在的平面左右旋轉180°
共 2 種動作	

將(1)~(9)種情形的討論簡化為表格，往後計算各種情境下的異構物，都可以套用此表快速列出：

$C_3H_4Cl_2F_2$ 的異構物計算表

$C_3H_4Cl_2F_2$ 的總異構物數量為 $k_1+k_2+k_3+2k_4+k_5+k_6+2k_7+4k_8+4k_9=0+0+6+4+2+9+8+4+0=33$ 種。

序號 j	分類名稱	在_1_與_3_中填入的取代基	剩餘取代基	第 j 種情形中 k_j 的值	兩側環狀排列
(1)	三同 / 三同 same	不可行	不可行	$k_1=0$	$1\times k_1=0$
(2)	三同 / 三同 different	不可行	不可行	$k_2=0$	$1\times k_2=0$
(3)	三同 / 二同一異	$3H$ / $2Cl1H$ $3H$ / $2Cl1F$ $3H$ / $2F1H$ $3H$ / $2F1Cl$	$2F$ $1H1F$ $2Cl$ $1H1Cl$	$k_3=\frac{1}{2}(2+0)+\frac{1}{2}(2\times2+0)$ $+\frac{1}{2}(2+0)+\frac{1}{2}(2\times2+0)=6$	$1\times k_3=6$
(4)	三同 / 三異 (考慮環狀排列再乘 2 倍)	$3H$ / $1H1Cl1F$	$1Cl1F$	$k_4=\frac{1}{2}(2\times2+0)=2$	$2\times k_4=4$
(5)	二同一異 / 二同一異 same	$2H1Cl$ / $2H1Cl$ $2H1F$ / $2H1F$	$2F$ $2Cl$	$k_5=\frac{1}{2}(1+1)+\frac{1}{2}(1+1)=2$	$1\times k_5=2$
(6)	二同一異 / 二同一異 different	$2H1Cl$ / $2H1F$ $2H1F$ / $2Cl1F$ $2H1Cl$ / $2F1Cl$ $2Cl1H$ / $2F1H$ $2H1Cl$ / $2F1H$ $2H1F$ / $2Cl1H$	$1Cl1F$ $2H$ $2H$ $2H$ $1H1Cl$ $1H1F$	$k_6=\frac{1}{2}(2\times2)+\frac{1}{2}(2+0)+\frac{1}{2}(2+0)$ $+\frac{1}{2}(2+0)+\frac{1}{2}(2\times2)+\frac{1}{2}(2\times2)=9$	$1\times k_6=9$
(7)	二同一異 / 三異 (考慮環狀排列再乘 2 倍)	$2H1Cl$ / $1H1Cl1F$ $2H1F$ / $1H1Cl1F$	$1H1F$ $1H1Cl$	$k_7=\frac{1}{2}(2\times2)+\frac{1}{2}(2\times2)=4$	$2\times k_7=8$
(8)	三異 / 三異 same (考慮環狀排列再乘 4 倍)	$1H1Cl1F$ / $1H1Cl1F$	$2H$	$k_8=\frac{1}{2}(1+1)=1$	$4\times k_8=4$
(9)	三異 / 三異 different (考慮環狀排列再乘 4 倍)	不可行	不可行	$k_9=0$	$4\times k_9=0$

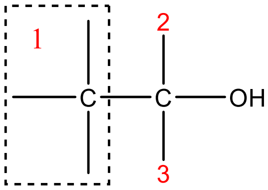
四、給出任意碳數的醇、醚、醛、酮、羧酸、酯、胺、醯胺結構，在不同取代基種類與取代基數量下，異構物的種類計算法。

除了考慮碳氫化合物在不同取代基的異構物數量以外，我們也討論其他特殊官能基(醇、醚、醛、酮、羧酸、酯、胺、醯胺)的結構，並逐一舉例說明該結構要考慮的地方。以下的計算方法皆以研究結果三之中的計算表處理。

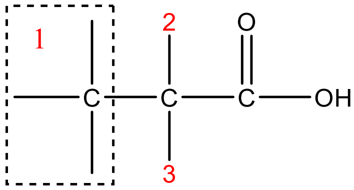
(一) 醇、羧酸、醛

醇、羧酸、醛三種結構都是一個碳接上一個官能基，所以異構物數量的計算方法類似，將它們編為同一類。以 $C_2H_3Cl_2OH$ ，$C_2H_3Cl_2COOH$ ，$C_2H_3Cl_2HO$ 為例，我們利用計算表並代入 Burnside's Lemma 中計算就可以求出以上三種結構的異構物數量。

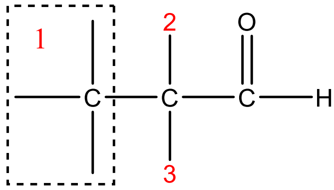
$C_2H_3Cl_2OH$



$C_2H_3Cl_2COOH$



$C_2H_3Cl_2HO$



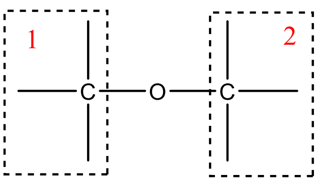
分類名稱	在（1）中的情形	剩餘取代基	異構物數量
三同	$3H$	$2Cl$	$k_1=1$
二同一異	$2H1Cl$	$1H1Cl$	$k_2=2$
	$2Cl1H$	$2H$	$k_3=1$
三異	×	×	×

$C_2H_3Cl_2OH$ 、$C_2H_3Cl_2COOH$ 、$C_2H_3Cl_2HO$ 的異構物數量總共有 $k_1+k_2+k_3=4$ 個。

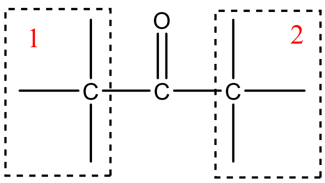
(二) 醚、酮

醚、酮兩種結構都是一個碳接上兩個官能基，如圖，所以異構物數量的計算方法類似，將它們編為同一類。以 C_2H_4ClFO 、C_3H_4ClFO 為例，我們利用表並代入 Burnside's Lemma 中計算就可以求出以上兩種結構的異構物數量。

C_2H_4ClFO



C_3H_4ClFO



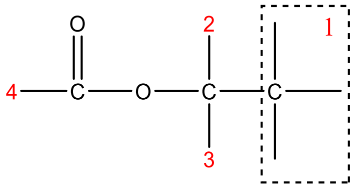
分類名稱	在（1）與（4）中的情形	異構物數量
三同 / 三同 same	×	×
三同 / 三同 different	×	×
三同 / 二同一異	×	×
三同 / 三異 (考慮環狀排列再乘 2 倍)	$3H/1H1Cl1F$	$k_1=2$
二同一異 / 二同一異 same	×	×
二同一異 / 二同一異 different	$2H1Cl/2H1F$	$k_2=1$
二同一異 / 三異 (考慮環狀排列再乘 2 倍)	×	×
三異 / 三異 same (考慮環狀排列再乘 4 倍)	×	×
三異 / 三異 different (考慮環狀排列再乘 4 倍)	×	×

C_2H_4ClFO 、C_3H_4ClFO 的異構物數量總共有 $k_1+k_2=3$ 個

(三) 酯

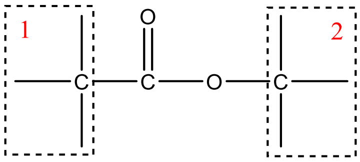
以 $C_3H_4ClFO_2$ 為例，我們先找出各種可能結構，再利用計算表並代入 Burnside's Lemma 中計算。

$C_3H_4ClFO_2$



分類名稱	在（1）中的情形	剩餘取代基	異構物數量
三同	$3H$	$1H1Cl1F$	$k_1 = 3! = 6$
二同一異	$2H1Cl$	$2H1F$	$k_2 = 3$
	$2H1F$	$2H1Cl$	$k_3 = 3$
三異	$1H1Cl1F$	$3H$	$k_4 = 2$

$C_3H_4ClFO_2$

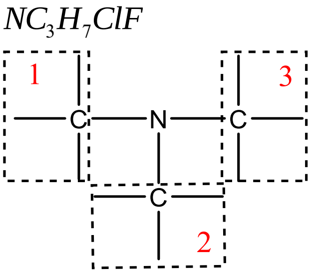


分類名稱	在（1）與（4）中的情形	異構物數量
三同 / 三同 same	×	×
三同 / 三同 different	×	×
三同 / 二同一異	×	×
三同 / 三異 (考慮環狀排列再乘 2 倍)	$3H / 1H1Cl1F$ $1H1Cl1F / 3H$	$k_5 = 4$
二同一異 / 二同一異 same	×	×
二同一異 / 二同一異 different	$2H1Cl / 2H1F$ $2H1F / 2H1Cl$	$k_6 = 2$
二同一異 / 三異 (考慮環狀排列再乘 2 倍)	×	×
三異 / 三異 same (考慮環狀排列再乘 4 倍)	×	×
三異 / 三異 different (考慮環狀排列再乘 4 倍)	×	×

$C_3H_4ClFO_2$ 的異構物數量總共有 $k_1 + k_2 + k_3 + k_4 + k_5 + k_6 = 20$ 個

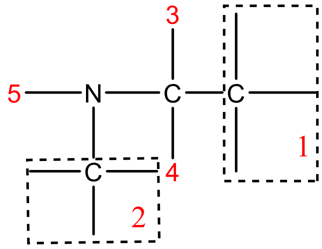
(四) 胺

以 NC_3H_7ClF 為例，我們先找出各種可能結構，再利用計算表並代入 Burnside's Lemma 中計算。



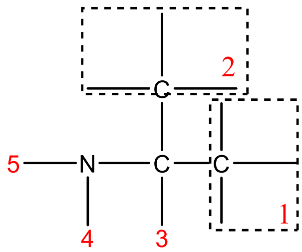
分類名稱	在(1)/(2)/(3)中填入的取代基	異構物數量
三同/三同/三同 3same	×	×
三同/三同/三同 2same	×	×
三同/三同/三同 3different	×	×
三同/三同/二同一異 2same	×	×
三同/三同/二同一異 2different	×	×
三同/二同一異/二同一異 2same	×	×
三同/二同一異/二同一異 2different	$3H/2H1F/2H1Cl$	$k=2$
三同/三同/三異 2same	$3H/3H/1H1Cl1F$	$k=1$
三同/三同/三異 2different	×	×
三同/三異/三異 2same	×	×
三同/三異/三異 2different	×	×
二同一異/二同一異/二同一異 3same	×	×
二同一異/二同一異/二同一異 2same	×	×
二同一異/二同一異/二同一異 3different	×	×
二同一異/二同一異/三異 2same	×	×
二同一異/二同一異/三異 2different	×	×
二同一異/三異/三異 2same	×	×
二同一異/三異/三異 2different	×	×
三異/三異/三異 3same	×	×
三異/三異/三異 2same	×	×
三異/三異/三異 3different	×	×

NC_3H_7ClF



分類名稱	在(1)/(2)中填入的取代基	剩餘取代基	異構物數量
三同/三同 same	$3H/3H$	$1H1Cl1F$	$k=3!=6$
三同/三同 different	×	×	×
三同/二同一異	$3H/2H1Cl$ $3H/2H1F$	$2H1F$ $2H1Cl$	$k=3+3=3$
三同/三異(考慮環狀排列再乘 2 倍)	$3H/1H1Cl1F$	$3H$	$k=1\times2=2$
二同一異/二同一異 same	×	×	×
二同一異/二同一異 different	×	×	×
二同一異 / 三異 (考慮環狀排列再乘 2 倍)	×	×	×
三異 / 三異 same (考慮環狀排列再乘 4 倍)	×	×	×
三異 / 三異 different (考慮環狀排列再乘 4 倍)	×	×	×

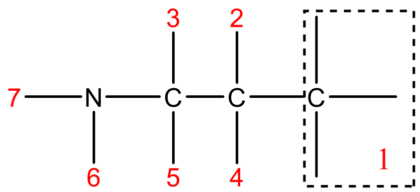
NC_3H_7ClF



分類名稱	在(1)/(2)/(4)(5)中填入的取代基	剩餘取代基	異構物數量
三同/三同/二同 same	×	×	×
三同/三同/二異 same	$3H/3H/1H1F$ $3H/3H/1H1Cl$ $3H/3H/1F1Cl$	$1Cl$ $1F$ $1H$	$k=1+1+1=3$
三同/三同/二同 different	×	×	×
三同/三同/二異 different	×	×	×
三同/二同一異/二同	$3H/2H1Cl/2H$ $3H/2H1F/2H$	$1F$ $1Cl$	$k=2\times2=4$
三同/二同一異/二異	$3H/2H1Cl/1H1F$ $3H/2H1F/1H1Cl$	$1H$ $1H$	$k=2\times2=4$
三同/三異/二同(考慮環狀排列再乘 2 倍)	×	×	×
三同/三異/二異(考慮環狀排列再乘 2 倍)	×	×	×
二同一異/二同一異/二同 same	×	×	×

二同一異/二同一異/二異 same	×	×	×
二同一異/二同一異/二同 different	$2H1Cl/2H1F/2H$	$1H$	$k=2\times2=4$
二同一異/二同一異/二異 different	×	×	×
二同一異 / 三異/二同 (考慮環狀排列再乘 2 倍)	×	×	×
二同一異 / 三異/二異 (考慮環狀排列再乘 2 倍)	×	×	×
三異 / 三異/二同 same (考慮環狀排列再乘 4 倍)	×	×	×
三異 / 三異/二異 same (考慮環狀排列再乘 4 倍)	×	×	×
三異 / 三異/二同 different (考慮環狀排列再乘 4 倍)	×	×	×
三異 / 三異/二異 different (考慮環狀排列再乘 4 倍)	×	×	×

NC_3H_7ClF



分類名稱	在(1)/(6)(7)中所填入的取代基	剩餘取代基	異構物數量
三同/二同	$3H/2H$	$2H1Cl1F$	$k=\frac{4!}{2!}=12$
三同/二異	$3H/1H1Cl$ $3H/1H1F$ $3H/1Cl1F$	$3H1F$ $3H1Cl$ $4H$	$k=\frac{4!}{3!}+\frac{4!}{3!}+\frac{4!}{4!}=9$
二同一異/二同	$2H1Cl/2H$ $2H1F/2H$	$3H1F$ $3H1Cl$	$k=\frac{4!}{3!}+\frac{4!}{3!}=8$
二同一異/二異	$2H1Cl/1H1F$ $2H1F/1H1Cl$	$4H$ $4H$	$k=1+1=2$
三異/二同	$1H1Cl1F/2H$	$4H$	$k=1\times2=2$
三異/二異	×	×	×

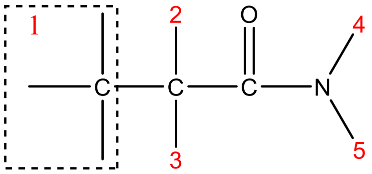
NC_3H_7ClF 的異構物數量總共有

$k_1+k_2+k_3+k_4+k_5+k_6+k_7+k_8+k_9+k_{10}+k_{11}+k_{12}+k_{13}+k_{14}=62$個

(五) 醯胺

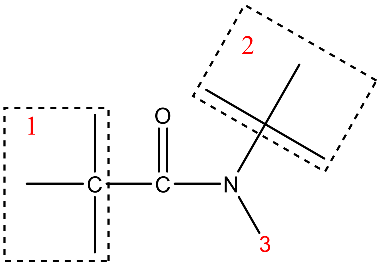
以 $CNOC_2H_5ClF$ 為例，先找出各種可能結構，再利用計算表並代入 Burnside's Lemma 中計算。

$CNOC_2H_5ClF$



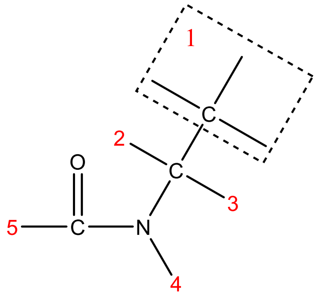
分類名稱	在(1)與4 、5中填入的取代基	剩餘取代基	異構物數量
三同/二同	$3H/2H$	$1Cl1F$	$k=2$
三同/二異	$3H/1H1Cl$ $3H/1H1F$ $3H/1F1Cl$	$1H1F$ $1H1Cl$ $2H$	$k=2+2+1$
二同一異/二同	$2H1Cl/2H$ $2H1F/2H$	$1H1F$ $1H1Cl$	$k=2+2$
二同一異/二異	$2H1Cl/1H1F$ $2H1F/1H1Cl$	$2H$ $2H$	$k=1+1$
三異/二同 (考慮環狀排列再乘 2 倍)	$1H1Cl1F/2H$	$2H$	$k=1\times2=2$

$CNOC_2H_5ClF$



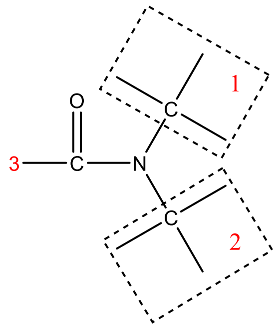
分類名稱	在(1)與(2)中填入的取代基	剩餘取代基	異構物數量
三同/三同	×	×	×
三同/二同一異	$3H/2H1Cl$ $3H/2H1F$	$1F$ $1Cl$	$k=1+1$
三同/三異 (考慮環狀排列再乘 2 倍)	$3H/1H1Cl1F$	$1H$	$k=1\times2$
二同一異/二同一異	$2H1Cl/2H1F$ $2H1F/2H1Cl$	$1H$ $1H$	$k=1+1$

$CNOC_2H_5ClF$



分類名稱	在 (1) 中填入的取代基	剩餘取代基	異構物數量
三同	$3H$	$2H1Cl1F$	$k=\frac{4!}{2!}=12$
二同一異	$2H1Cl$ $2H1F$	$3H1F$ $3H1Cl$	$k=\frac{4!}{3!}+\frac{4!}{3!}=8$
三異 (考慮環狀排列再乘 2 倍)	$1H1Cl1F$	$4H$	$k=1\times2=2$

$CNOC_2H_5ClF$



分類名稱	在（1）與（4）中的情形	剩餘取代基	異構物數量
三同 / 三同 same	×		×
三同 / 三同 different	×		×
三同 / 二同一異	$3H/2H1Cl$ $3H/2H1F$	$1F$ $1Cl$	$k=1+1=2$
三同 / 三異 (考慮環狀排列再乘 2 倍)	$3H/1H1Cl1F$	$1H$	$k=2$
二同一異 / 二同一異 same	×		×
二同一異 / 二同一異 different	$2H1Cl/2H1F$	$1H$	$k=1$
二同一異 / 三異 (考慮環狀排列再乘 2 倍)	×		×
三異 / 三異 same (考慮環狀排列再乘 4 倍)	×		×
三異 / 三異 different (考慮環狀排列再乘 4 倍)	×		×

$CNOC_2H_5ClF$ 的異構物數量總共 $k_1+k_2+k_3+k_4+k_5+k_6+k_7+k_8+k_9+k_{10}+k_{11}+k_{12}+k_{13}+k_{14}=48$ 個

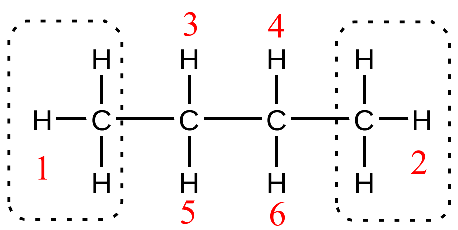
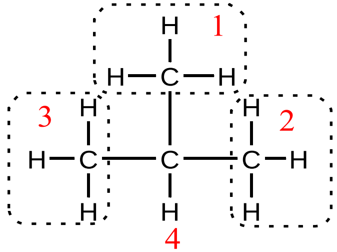
五、代入固定的碳數及取代基數量，討論四個碳及五個碳時：三碳環不超過 2 個，用分類的方法，計算在不同取代基種類與取代基數量下異構物的種類數。

給定碳數，討論可能存在的結構，並用分類的方法討論有幾種異構物。三個碳以下前述已做過。

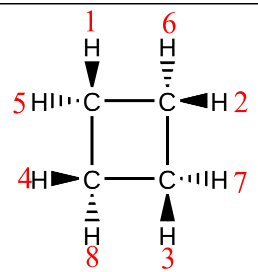
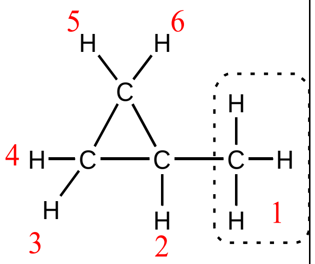
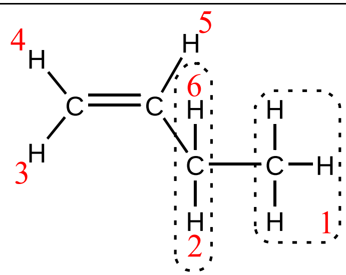
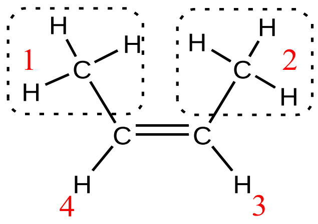
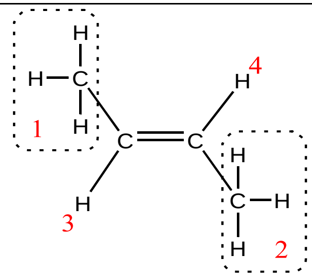
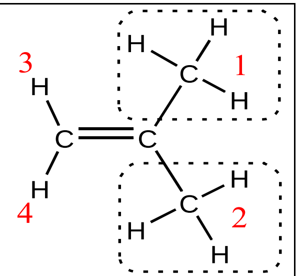
(一) 四個碳

我們整理出來，四個碳有以下這些結構，以 O 表示該結構可能存在，以 X 表示該結構可能不存在或不穩定。

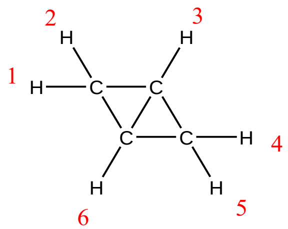
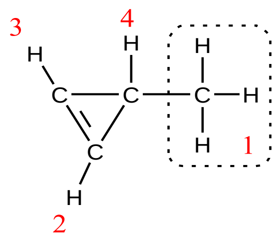
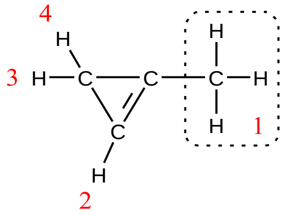
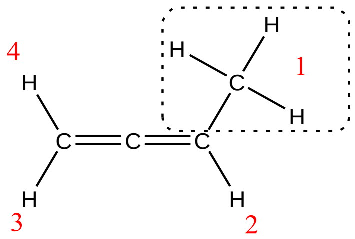
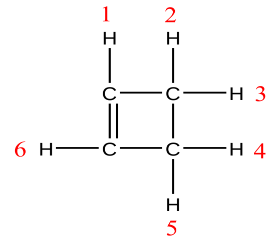
C_4H_{10} 有以下這些結構：

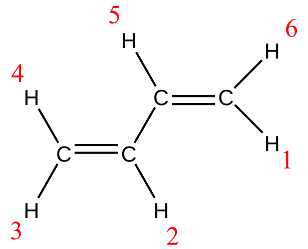
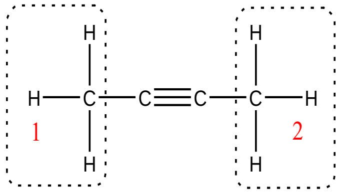
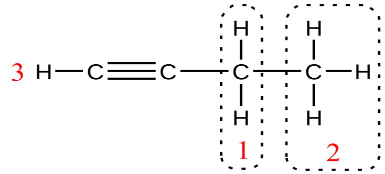
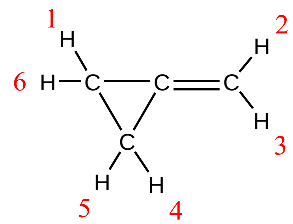
	
O	O

C_4H_8 有以下這些結構：

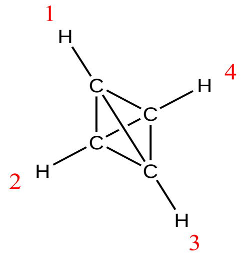
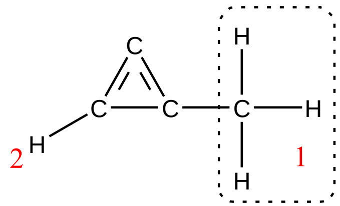
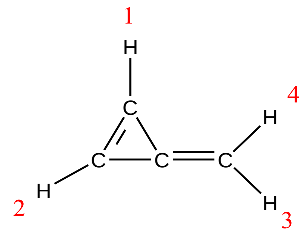
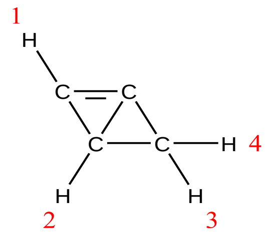
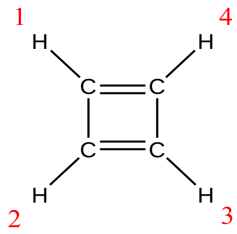
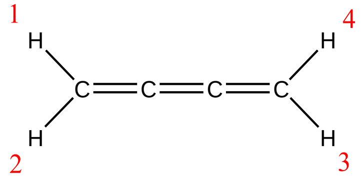
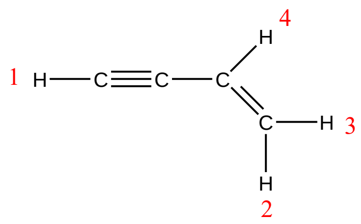
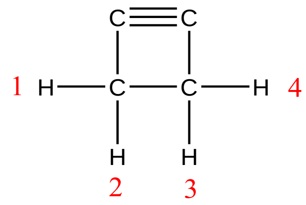
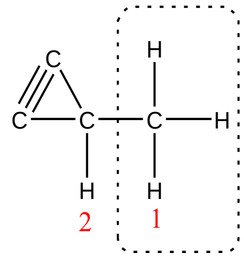
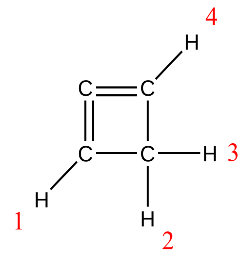
 C_4H_8 結構①	 C_4H_8 結構②	 C_4H_8 結構③	 C_4H_8 結構④	 C_4H_8 結構⑤	 C_4H_8 結構⑥
O	O	O	O	O	O

C_4H_6 有以下這些結構：

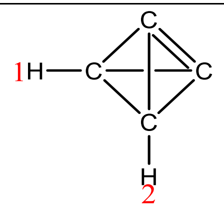
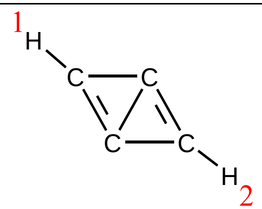
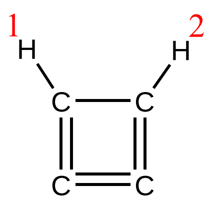
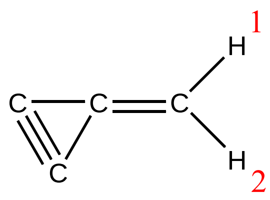
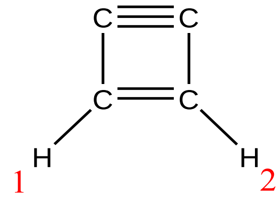
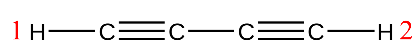
				
X	X	X	O	X

			
O	O	O	X

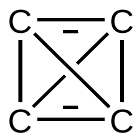
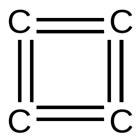
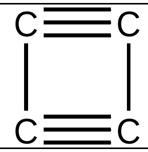
C_4H_4有以下這些結構：

				
X	X	X	X	X
				
O	O	X	X	X

C_4H_2有以下這些結構：

					
X	X	X	X	X	O

C_4H_0 有以下這些結構：

		
X	X	X

我們依照給定的碳數及取代基數量($a_1 \sim a_i$)代入C_nH_p，將 p 個 H 的位置改成給定的取代基，並用以下流程計算該異構物數量。

流程：

(a) 對於給定的碳數，畫出所有可能的結構(期間可能需要環、共振、烯、炔) 及所需的取代基數。

(b) 若尾端有三個取代基在同一碳上的結構則先將取代基填入，並討論異同與光學異構物問題。

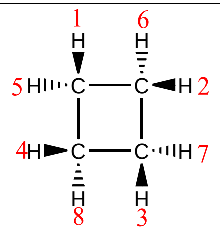
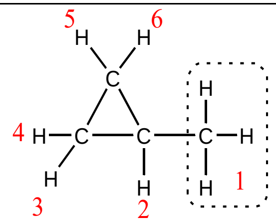
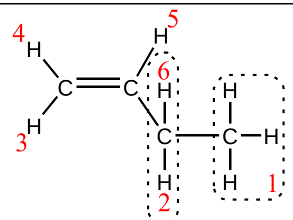
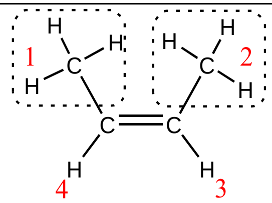
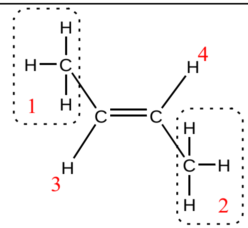
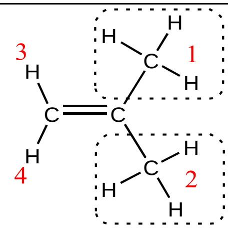
(c) 將所有取代基的位置編號(三個取代基在同一碳上的只給一個號碼)。

(d) 找出該結構的可行動作（翻轉、旋轉），再用 cycle 紀錄動作種類及動作總數量。

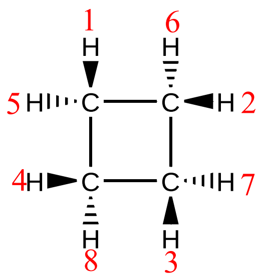
(e) 代入公式$k = \frac{1}{|G|}\sum_{g \in G}|X_g|$得到該種結構的異構物數量。

(f) 把$k_1 + k_2 + \ldots + k_n$即可得到該異構物總數。

以四個碳八個取代基做說明，以 $C_4H_4F_2Cl_2$ 為例，未掛上取代基前的 C_4H_8 有以下六種情況：

 C_4H_8 結構①	 C_4H_8 結構②	 C_4H_8 結構③	 C_4H_8 結構④	 C_4H_8 結構⑤	 C_4H_8 結構⑥
O	O	O	O	O	O

四個碳八個取代基結構①：$C_4H_4F_2Cl_2$ 為環烷結構，故可用上述環烷結構的異構物數量 k 公式：



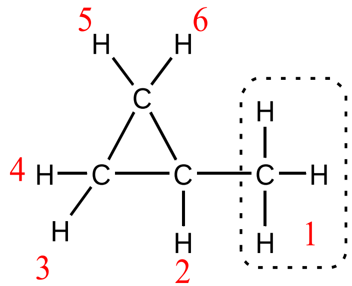
$$:\ k=\frac{1}{|G|}\sum_{g\in G}\left|X_g\right|=\frac{1}{2n}\left\{\left(\sum_{\substack{2n=a_1+\ldots+a_j\\ a_1\sim a_i\in N\\ d|(a_1\sim a_i)=m\\ d|n}}\frac{\phi(d)\cdot\left(\frac{2n}{d}\right)!}{\prod_{j=1}^{i}\left(\frac{a_j}{d}\right)!}\right)+\left[\frac{2^0}{2^b}\right]\times\frac{n\times n!}{\prod_{j=1}^{i}\left[\frac{a_j}{2}\right]!}\right\}$$

$n=4$、$i=4$、$a_1=2$、$a_2=2$、$a_3=4$，異構物數量為 $k=\frac{1}{8}\left(\frac{1\times\left(\frac{8}{1}\right)!}{\left(\frac{2}{1}\right)!\left(\frac{2}{1}\right)!\left(\frac{4}{1}\right)!}+\frac{1\times\left(\frac{8}{2}\right)!}{\left(\frac{2}{2}\right)!\left(\frac{2}{2}\right)!\left(\frac{4}{2}\right)!}+\frac{4\times(4)!}{\left(\frac{2}{2}\right)!\left(\frac{2}{2}\right)!\left(\frac{4}{2}\right)!}\right)=60$(種)

(翻轉皆為 2-cycle，每種取代基數量均為偶數，可以有翻轉的 $\left|X_g\right|$ 項)

四個碳八個取代基結構結構②：$C_4H_4Cl_2F_2$ 的異構物計算表

$G=\{g_1\}$ 其中 $g_1=(\_1\_)(2)(3)(4)(5)(6)$



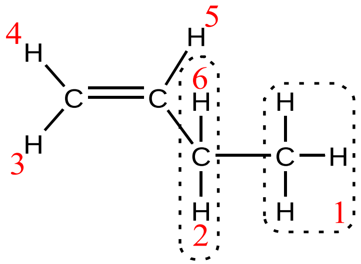
序號 j	分類名稱	在 _1_ 中填入的取代基	剩餘取代基	第 j 種情形中 k_j 的值	兩側環狀排列
(1)	三同	$3H$	$2H2Cl1F$	$k_1=\frac{5!}{2!2!}=30$	$1\times k_1=30$
(2)	二同一異	$2H1F$ $2Cl1F$ $1H2Cl$ $2F1Cl$ $1H2F$	$2H2Cl1F$ $4H1F$ $3H2F$ $4H1Cl$ $3H2Cl$	$k_2=\frac{5!}{2!2!}+\frac{5!}{2!2!}+\frac{5!}{4!}+\frac{5!}{3!2!}+\frac{5!}{4!}+\frac{5!}{3!2!}=90$	$1\times k_2=90$
(3)	三異	$1H1Cl1F$	$3HCl1F$	$k_3=2\times\frac{5!}{3!}=40$	$2\times k_3=40$

故四個碳八個取代基結構② $C_4H_4Cl_2F_2$ 的總異構物數量為 $k_1+k_2+2k_3=30+90+40=160$(種)。

四個碳八個取代基結構③：

$C_4H_4Cl_2F_2$ 的異構物計算表

$G=\{g_1\}$ 其中 $g_1=(\underline{\ 1\ })(\underline{\ 2\ })(3)(4)(5)$



故四個碳八個取代基結構③

$C_4H_4Cl_2F_2$ 的總異構物數量為

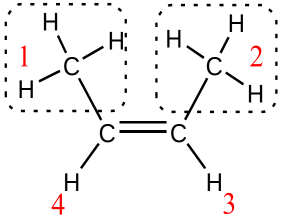
$k_1+2k_2+k_3+2k_4+2k_5+4k_6$

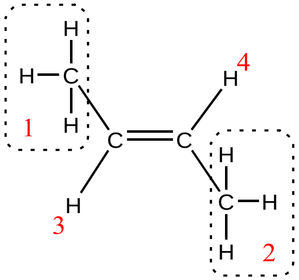
$=6+24+26+64+12+28=160$(種)

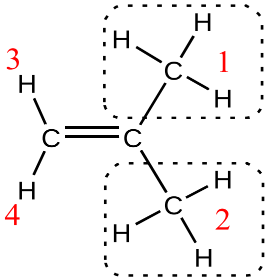
序號 j	分類名稱	在 _1_ 與 _2_ 中填入的取代基	剩餘取代基	第 j 種情形中 k_j 的值	兩側環狀排列
(1)	三同 / 二同	$3H$ / $2Cl$ $3H$ / $2F$	$1H2F$ $1H2Cl$	$k_1=\left(\frac{3!}{2!}\right)+\left(\frac{3!}{2!}\right)=6$	$1\times k_1=6$
(2)	三同 / 二異 (考慮環狀排列再乘 2 倍)	$3H$ / $1H1Cl$ $3H$ / $1H1F$ $3H$ / $1Cl1F$	$1Cl2F$ $2Cl1F$ $1H1Cl1F$	$k_4=\left(\frac{3!}{2!}\right)+\left(\frac{3!}{2!}\right)+(3!)=12$	$2\times k_2=24$
(3)	二同一異 / 二同	$2H1Cl$ / $2H$ $2H1Cl$ / $2F$ $2H1F$ / $2H$ $2H1F$ / $2Cl$ $2Cl1H$ / $2H$ $2Cl1H$ / $2F$ $2Cl1F$ / $2H$ $2F1H$ / $2H$ $2F1H$ / $2Cl$ $2F1Cl$ / $2H$	$1Cl2F$ $2H1Cl$ $2Cl1F$ $2H1F$ $1H2F$ $3H$ $2H1F$ $1H2Cl$ $3H$ $2H1Cl$	$k_5=\left(\frac{3!}{2!}\right)+\left(\frac{3!}{2!}\right)+\left(\frac{3!}{2!}\right)$ $+\left(\frac{3!}{2!}\right)+\left(\frac{3!}{2!}\right)+\left(\frac{3!}{3!}\right)$ $+\left(\frac{3!}{2!}\right)+\left(\frac{3!}{2!}\right)+\left(\frac{3!}{3!}\right)+\left(\frac{3!}{2!}\right)=26$	$1\times k_3=26$
(4)	二同一異 / 二異 (考慮環狀排列再乘 2 倍)	$2H1Cl$ / $1H1Cl$ $2H1Cl$ / $1H1F$ $2H1Cl$ / $1Cl1F$ $2H1F$ / $1H1Cl$ $2H1F$ / $1H1F$ $2H1F$ / $1Cl1F$ $2Cl1H$ / $1H1F$ $2Cl1F$ / $1H1F$ $2F1H$ / $1H1Cl$ $2F1Cl$ / $1H1Cl$	$1H2F$ $1H1Cl1F$ $2H1F$ $1H1Cl1F$ $1H2Cl$ $2H1Cl$ $2H1F$ $3H$ $2H1Cl$ $3H$	$k_7=\left(\frac{3!}{2!}\right)+(3!)+\left(\frac{3!}{2!}\right)$ $+(3!)+\left(\frac{3!}{2!}\right)+\left(\frac{3!}{2!}\right)$ $+\left(\frac{3!}{2!}\right)+\left(\frac{3!}{3!}\right)+\left(\frac{3!}{2!}\right)+\left(\frac{3!}{3!}\right)=32$	$2\times k_4=64$
(5)	三異 / 二同 (考慮環狀排列再乘 2 倍)	$1H1Cl1F$ / $2H$	$1H1Cl1F$	$k_8=(3!)=6$	$2\times k_5=12$
(6)	三異 / 二異 (考慮環狀排列再乘 4 倍)	$1H1Cl1F$ / $1H1Cl$ $1H1Cl1F$ / $1H1F$ $1H1Cl1F$ / $1Cl1F$	$2H1F$ $2H1Cl$ $3H$	$k_9=\left(\frac{3!}{2!}\right)+\left(\frac{3!}{2!}\right)+\left(\frac{3!}{3!}\right)=7$	$4\times k_6=28$

四個碳八個取代基結構④⑤⑥ $C_4H_4Cl_2F_2$ 的異構物計算表 (結構③④⑤的 G，故計算表相同)

$G=\{g_1,g_2\}$ 其中 $g_1=(\_1\_)(\_2\_)(3)(4)(5)$ $g_2=(\_1\_\ \_2\_)(3\ 4)$







序號 j	分類名稱	在 _1_ 與 _2_ 中填入的取代基	剩餘取代基	第 j 種情形中 k_j 的值	兩側環狀排列
(1)	三同 / 三同 same	不可行	不可行	$k_1=0$	$1\times k_1=0$
(2)	三同 / 三同 different	不可行	不可行	$k_2=0$	$1\times k_2=0$
(3)	三同 / 二同一異	$3H$ / $2Cl1H$ $3H$ / $2Cl1F$ $3H$ / $2F1H$ $3H$ / $2F1Cl$	$2F$ $1H1F$ $2Cl$ $1H1Cl$	$k_3=\frac{1}{2}\left(2\times\frac{2!}{2!}\right)+\frac{1}{2}(2\times2!)+\frac{1}{2}\left(2\times\frac{2!}{2!}\right)+\frac{1}{2}(2\times2!)=6$	$1\times k_3=6$
(4)	三同 / 三異 (考慮環狀排列再乘 2 倍)	$3H$ / $1H1Cl1F$	$1Cl1F$	$k_4=\frac{1}{2}(2\times2!)=2$	$2\times k_4=4$
(5)	二同一異 / 二同一異 same	$2H1Cl$ / $2H1Cl$ $2H1F$ / $2H1F$	$2F$ $2Cl$	$k_5=\frac{1}{2}\left(\frac{2!}{2!}+1!\right)+\frac{1}{2}\left(\frac{2!}{2!}+1!\right)=2$	$1\times k_5=2$
(6)	二同一異 / 二同一異 different	$2H1Cl$ / $2H1F$ $2H1F$ / $2Cl1F$ $2H1Cl$ / $2F1Cl$ $2Cl1H$ / $2F1H$ $2H1Cl$ / $2F1H$ $2H1F$ / $2Cl1H$	$1Cl1F$ $2H$ $2H$ $2H$ $1H1Cl$ $1H1F$	$k_6=\frac{1}{2}(2\times2!)+\frac{1}{2}\left(2\times\frac{2!}{2!}\right)+\frac{1}{2}\left(2\times\frac{2!}{2!}\right)+\frac{1}{2}\left(2\times\frac{2!}{2!}\right)+\frac{1}{2}(2\times2!)+\frac{1}{2}(2\times2!)=9$	$1\times k_6=9$
(7)	二同一異 / 三異 (考慮環狀排列再乘 2 倍)	$2H1Cl$ / $1H1Cl1F$ $2H1F$ / $1H1Cl1F$	$1H1F$ $1H1Cl$	$k_7=\frac{1}{2}(2\times2!)+\frac{1}{2}(2\times2!)=4$	$2\times k_7=8$
(8)	三異 / 三異 same (考慮環狀排列再乘 4 倍)	$1H1Cl1F$ / $1H1Cl1F$	$2H$	$k_8=\frac{1}{2}\left(\frac{2!}{2!}+1!\right)=1$	$4\times k_8=4$
(9)	三異 / 三異 different (考慮環狀排列再乘 4 倍)	不可行	不可行	$k_9=0$	$4\times k_9=0$

故四個碳八個取代基結構④⑤⑥ $C_4H_4Cl_2F_2$ 的總異構物數量

$k_1+k_2+k_3+2k_4+k_5+k_6$
$+2k_7+4k_8+4k_9=0+0+6$
$+4+2+9+8+4+0=33$(種)

根據結構①~⑥的計算結果，

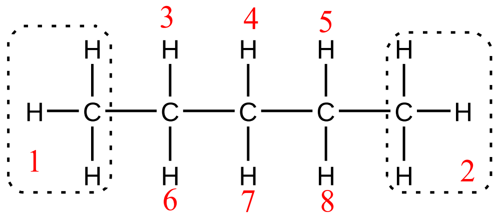
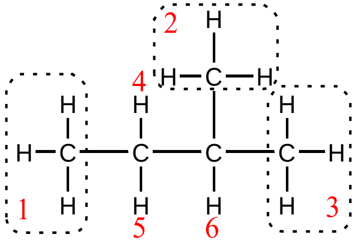
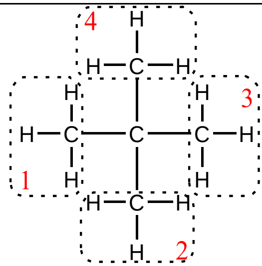
$C_4H_4Cl_2F_2$ 的異構物數量為

①+②+③+④+⑤+⑥ $=60+160+160+33+33+33=479$(種)

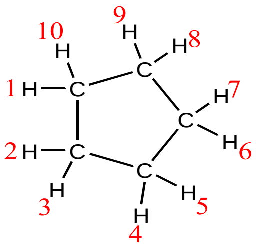
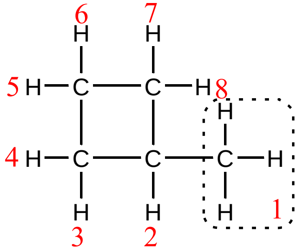
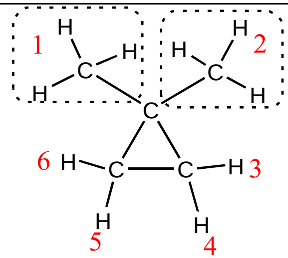
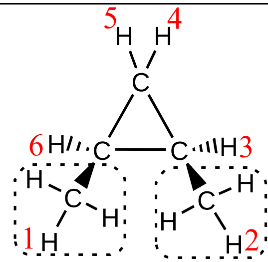
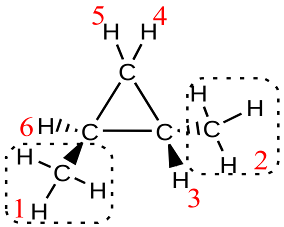
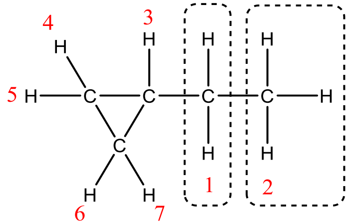
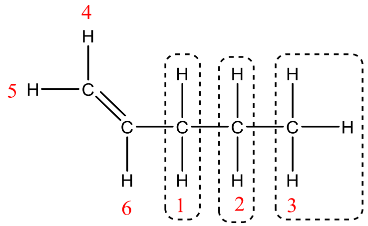
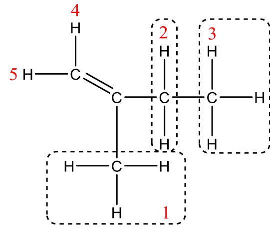
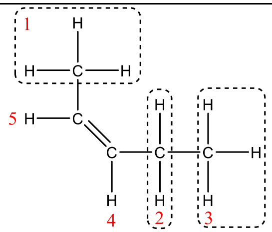
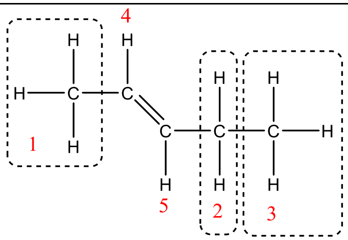
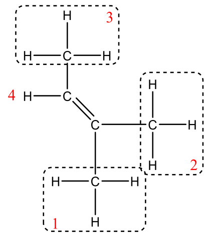
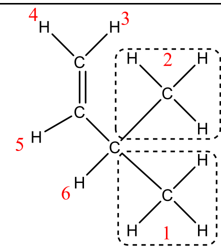
(二)五個碳

　　我們整理出來，五個碳有以下這些結構，以 O 表示該結構可能存在，以 X 表示該結構可能不存在：

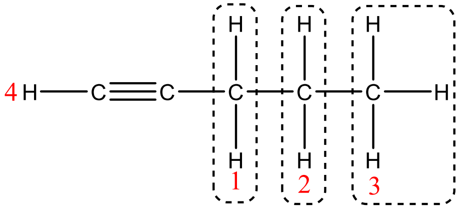
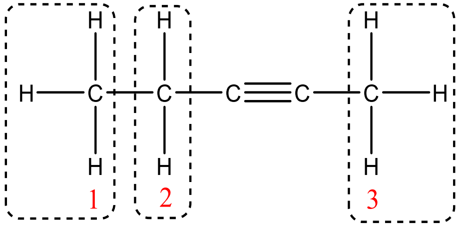
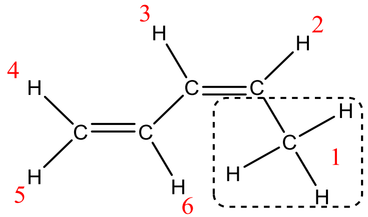
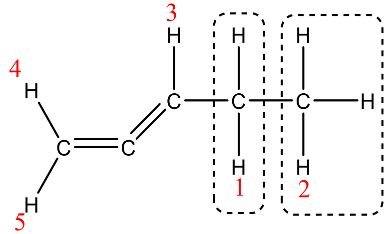
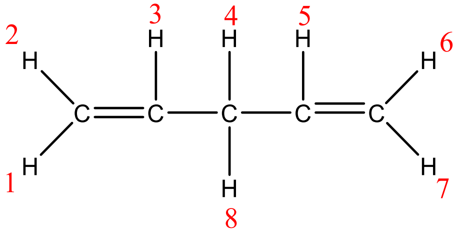
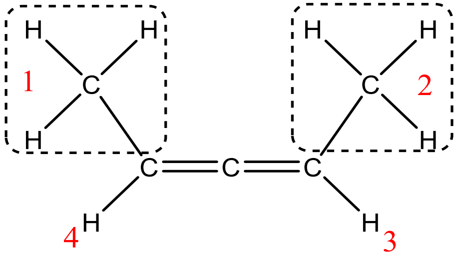
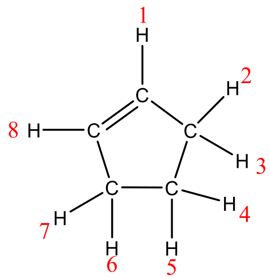
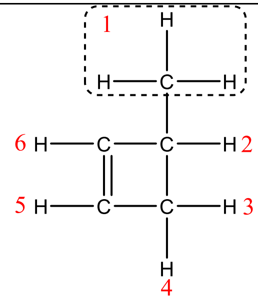
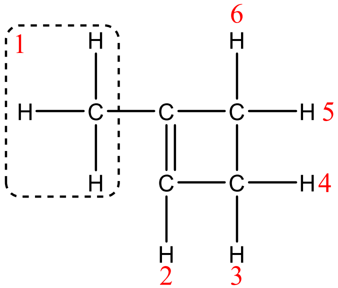
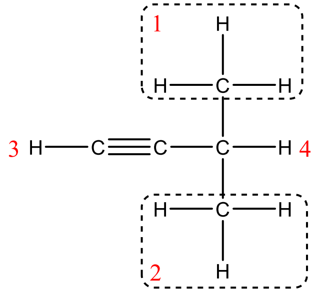
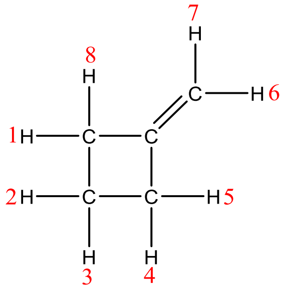
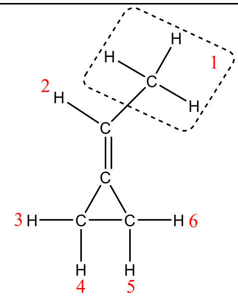
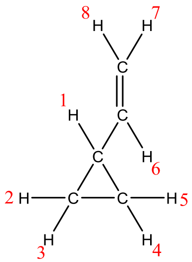
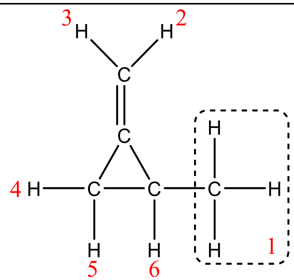
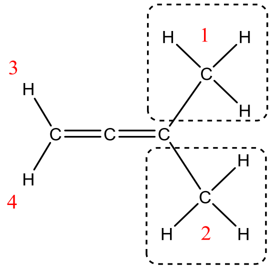
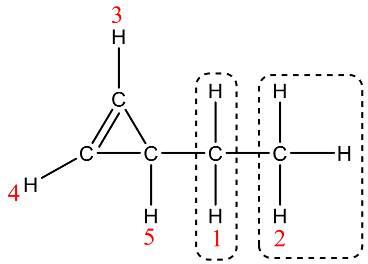
C_5H_{12} 有以下這些結構

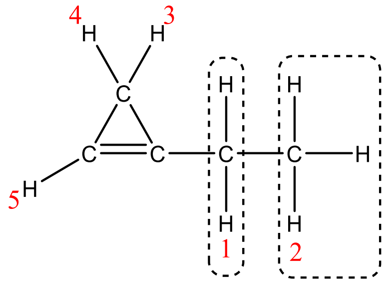
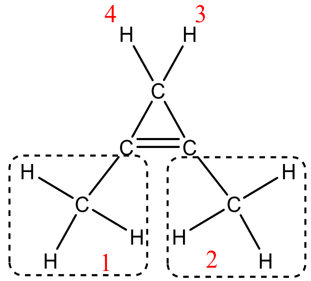
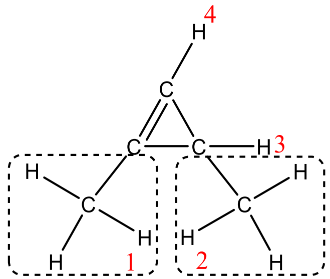
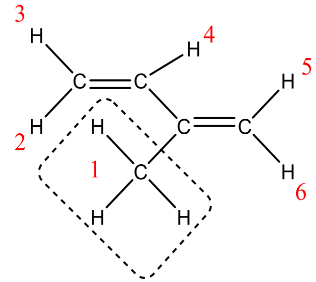
		
O	O	O

C_5H_{10} 有以下這些結構

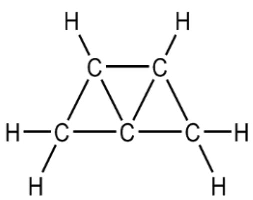
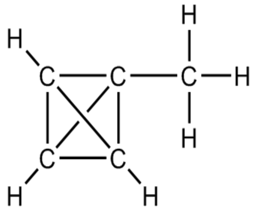
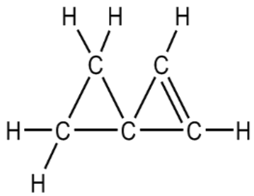
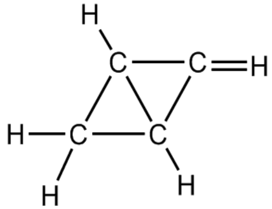
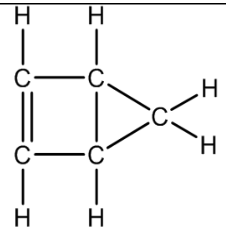
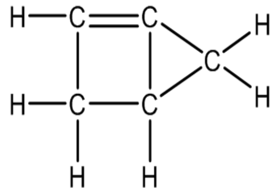
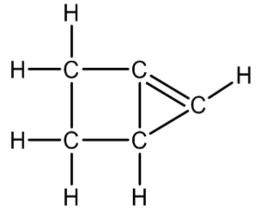
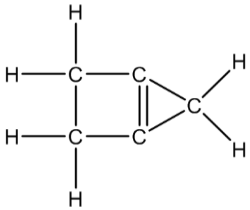
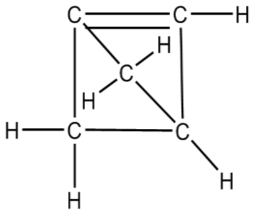
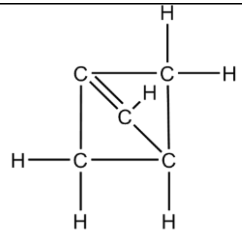
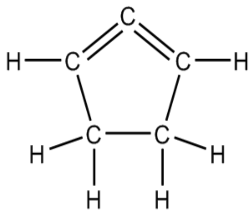
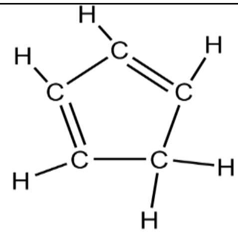
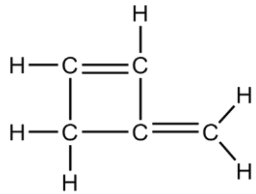
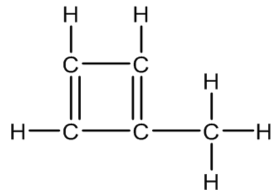
			
O	O	O	O
			
O	O	O	O
			
O	O	O	O

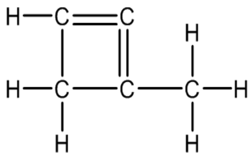
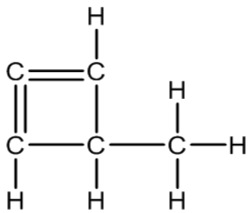
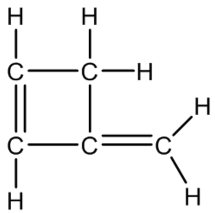
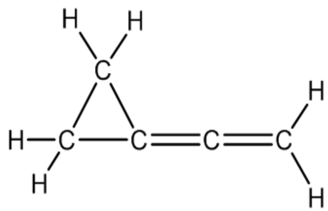
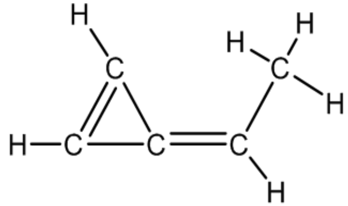
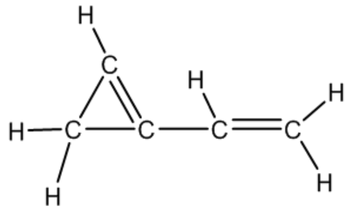
C_5H_8 有以下這些結構

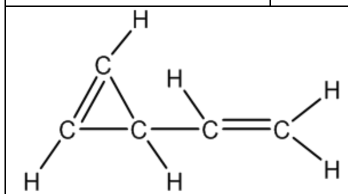
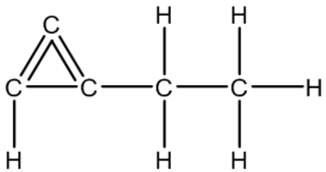
			
O	O	O	O
			
O	O	O	X
			
X	O	O	X
			
X	X	O	X

			
X	X	X	O

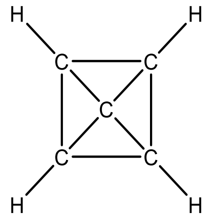
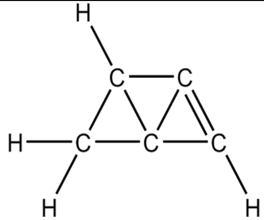
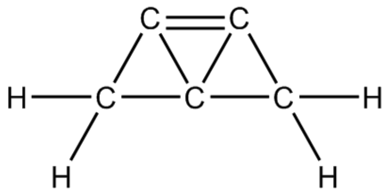
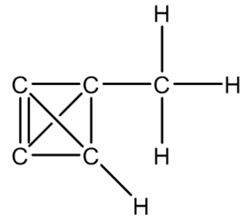
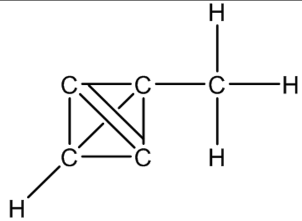
C_5H_6 有以下這些結構

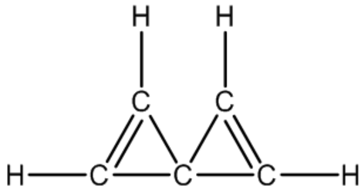
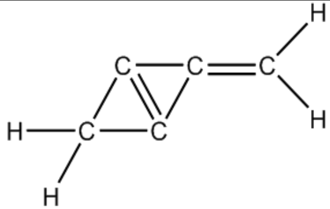
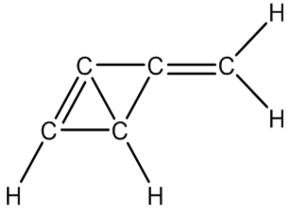
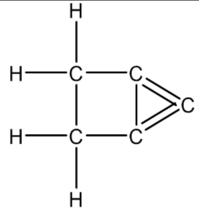
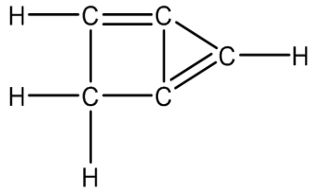
						
X	X	X	X	X	X	X
						
X	X	X	X	O	X	X

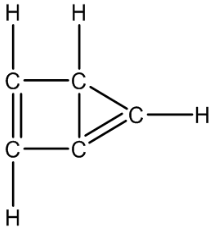
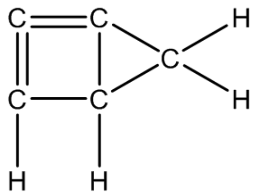
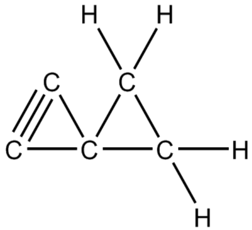
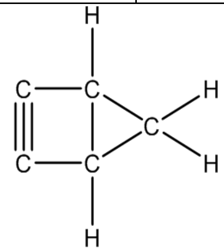
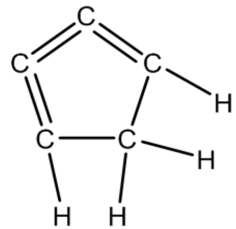
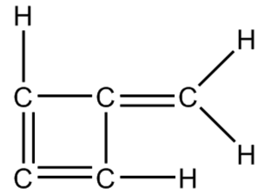
					
X	X	X	X	X	X

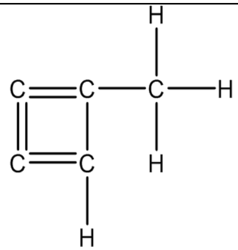
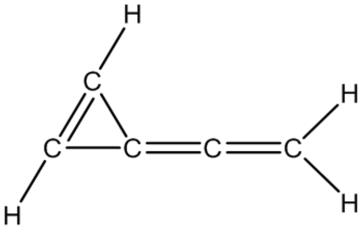
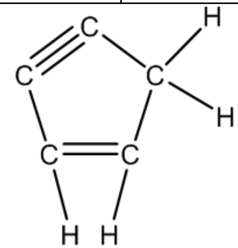
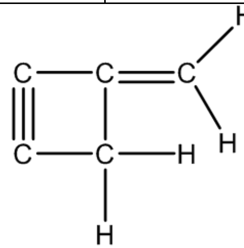
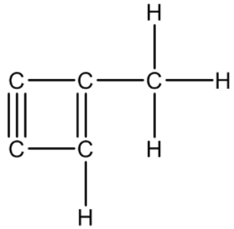
	
X	X

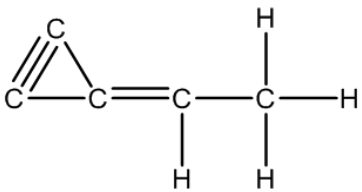
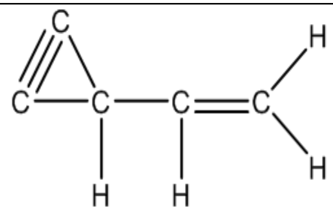
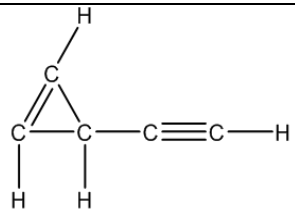
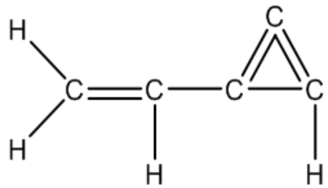
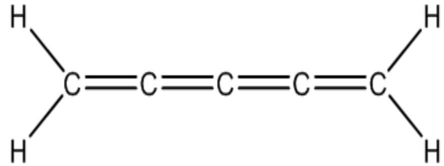
C_5H_4 有以下這些結構

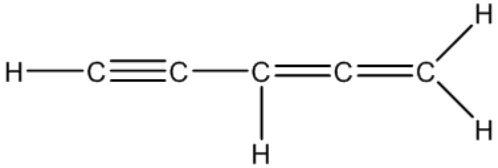
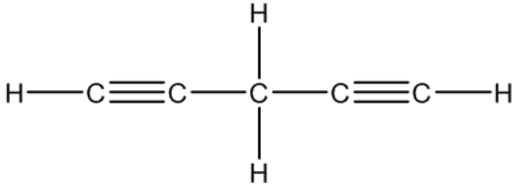
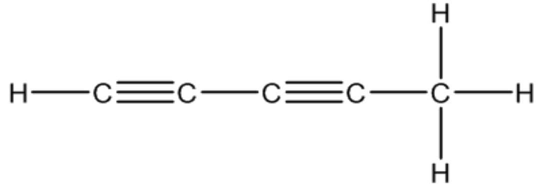
				
X	X	X	X	X

				
X	X	X	X	X

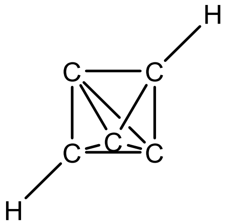
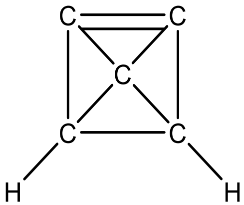
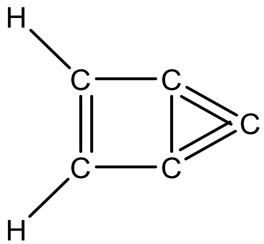
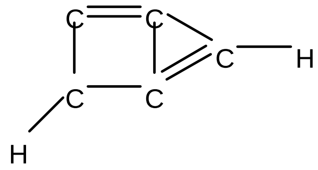
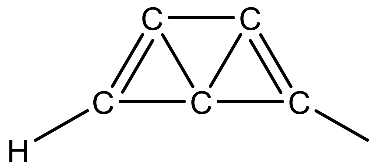
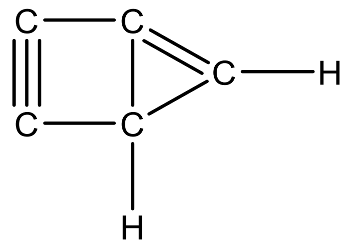
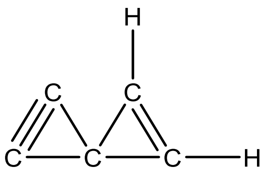
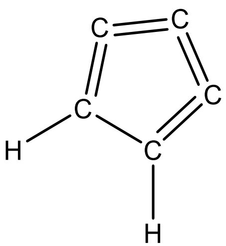
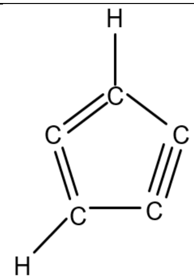
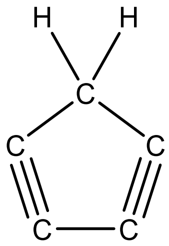
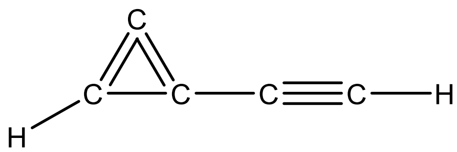
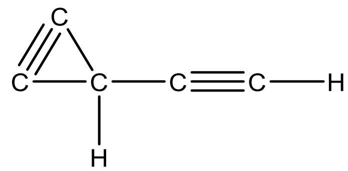
					
X	X	X	X	X	X

				
X	X	X	X	X

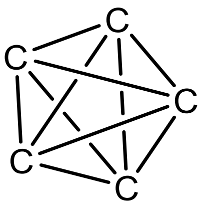
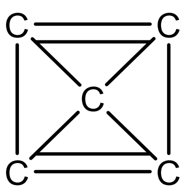
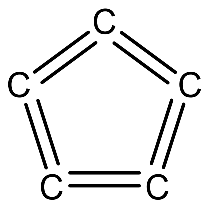
				
X	X	X	X	O

		
O	O	O

C_5H_2 有以下這些結構

					
X	X	X	X	X	X
					
X	X	X	X	X	X

C_5H_0 有以下這些結構

		
X	X	X

上述已經列出的取代基為 12、10、8 個的情形，關於取代基為 8、6、2、0 個的時候，我們可以仿照上述模式，求出異構物數量。

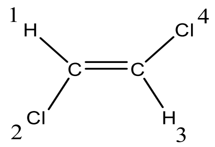
六、針對典型分子的化學點群，給出其對稱的數學排列群樣式，作為各式計算的背景資料。

針對 C_{2h}、C_{3v}、D_{2d}、D_{2h}、D_{3h}、D_{6h}、C_1、T_d，我們在說明書中均給出了範例，並給出其對稱元素的數量(即動作數$|G|$)，與排列群樣式，可作為各式計算的背景資料。

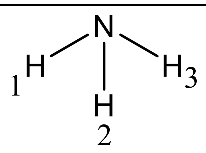
點群	對稱元素	範例
C_{2h}	C_2、E、i	$C_2H_2Cl_2$
C_{3v}	E、C_3、C_3、σ_v、σ_v、σ_v	NH_3
D_{2d}	E、C_2、$C_2^{'}$、$C_2^{'}$、σ_d、σ_d、σ_h、i	C_3H_4
D_{2h}	E、C_2、C_2、C_2、σ_v、σ_v、σ_v、σ_h、i	CH_4
D_{3h}	E、C_3、C_3、C_2、C_2、C_2	BF_3
D_{6h}	E、C_6、C_6、C_3、C_3、C_2、$C_2^{'}$、$C_2^{'}$、$C_2^{'}$、$C_2^{'}$、$C_2^{'}$、$C_2^{'}$、 σ_v、σ_v、σ_v、σ_d、σ_d、σ_d	C_6H_6
C_1	E	$CFClBrH$
T_d	E、C_3、C_3、C_3、C_3、C_3、C_3、C_3、C_3、C_2、C_2、C_2、 σ_d、σ_d、σ_d、σ_d、σ_d、σ_d	CH_4

以下的範例中，左邊的欄位代表可以利用 Burnside's Lemma 計算的動作數量，右邊的欄位則不能用來計算(鏡射不是剛性變換)。其中 E 代表不動，C 類代表旋轉，σ 類代表鏡射，i 代表中心點對稱。

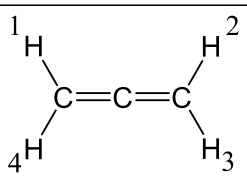
$C_{2h}:C_2H_2Cl_2:$　　可計算：C_2、E　　　　不可計算：σ_h、i

	$E=(1)(2)(3)(4)$ $C_2=(1\ 3)(2\ 4)$	$\sigma_h=(1)(2)(3)(4)$ $i=(1\ 3)(2\ 4)$

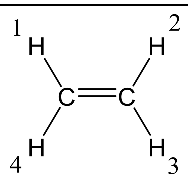
$C_{3v}:NH_3:$　　可計算：E、C_3、C_3　　　　不可計算：σ_v、σ_v、σ_v

	$E=(1)(2)(3)$ $C_3=(1\ 2\ 3)$ $C_3=(1\ 3\ 2)$	$\sigma_v=(1)(2\ 3)$ $\sigma_v=(2)(1\ 3)$ $\sigma_v=(3)(1\ 2)$

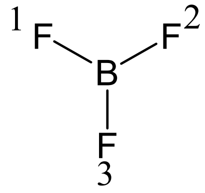
$D_{2d}:C_3H_4:$　　可計算：E、C_2、$C_2^{'}$、$C_2^{'}$　　　　不可計算：σ_d、σ_d、σ_k、i

	$E=(1)(2)(3)(4)$ $C_2=(1\ 3)(2\ 4)$ $C_2^{'}=(1\ 4)(2\ 3)$ $C_2^{'}=(1\ 2)(3\ 4)$	$\sigma_d=(1\ 4)(2\ 3)$ $\sigma_d=(1\ 2)(3\ 4)$ $\sigma_h=(1)(2)(3)(4)$ $i=(1\ 3)(2\ 4)$

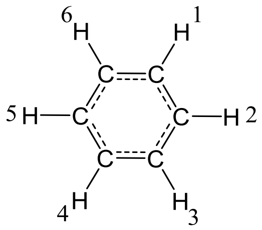
$D_{2h}:CH_4:$　　可計算：E、C_2、C_2、C_2　　　　不可計算：σ_v、σ_v、σ_v、σ_k、i

	$E=(1)(2)(3)(4)$ $C_2=(1\ 2)(3\ 4)$ $C_2=(1\ 3)(2\ 4)$ $C_2=(1\ 4)(2\ 3)$	$\sigma_v=(1\ 2)(3\ 4)$ $\sigma_v=(1\ 3)(2\ 4)$ $\sigma_v=(1\ 4)(2\ 3)$ $\sigma_h=(1)(2)(3)(4)$ $i=(1\ 4)(2\ 3)$

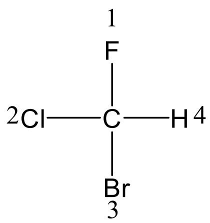
$D_{3h}:BF_3:$　　可計算：E、C_3、C_3、C_2、C_2、C_2　不可計算：σ_v、σ_v、σ_v

	$E=(1)(2)(3)$ $C_3=(1\ 2\ 3)$ $C_3=(1\ 3\ 2)$ $C_2=(1)(2\ 3)$ $C_2=(2)(1\ 3)$ $C_2=(3)(1\ 2)$	$\sigma_v=(1)(2\ 3)$ $\sigma_v=(2)(1\ 3)$ $\sigma_v=(3)(1\ 2)$

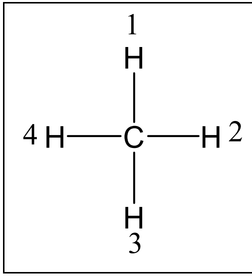
$D_{6h}:C_6H_6:$ 可計算：E、C_6、C_6、C_3、C_3、C_2、C_2、C_2、C_2、C_2'、C_2'、C_2'、C_2'、C_2'、C_2'、σ_v、σ_v、σ_v 不可計算：σ_d、σ_d、σ_d、σ_v、σ_v、σ_v、σ_k

	$E=(1)(2)(3)(4)(5)(6)$ $C_6=(1\ 2\ 3\ 4\ 5\ 6)$ $C_6=(1\ 6\ 5\ 4\ 3\ 2)$ $C_3=(1\ 3\ 5)(2\ 4\ 6)$ $C_3=(1\ 5\ 3)(2\ 6\ 4)$ $C_2=(1\ 4)(2\ 5)(3\ 6)$ $C_2'=(1\ 2)(3\ 6)(4\ 5)$ $C_2'=(2\ 3)(1\ 4)(5\ 6)$ $C_2'=(1\ 6)(2\ 5)(3\ 4)$ $C_2'=(1)(4)(2\ 6)(3\ 5)$ $C_2'=(2)(5)(1\ 3)(4\ 6)$ $C_2'=(3)(4)(1\ 5)(2\ 4)$	$\sigma_d=(1\ 2)(3\ 6)(4\ 5)$ $\sigma_d=(2\ 3)(1\ 4)(5\ 6)$ $\sigma_d=(1\ 6)(2\ 5)(3\ 4)$ $\sigma_v=(1)(4)(2\ 6)(3\ 5)$ $\sigma_v=(2)(5)(1\ 3)(4\ 6)$ $\sigma_v=(3)(6)(1\ 5)(2\ 4)$ $\sigma_h=(1)(2)(3)(4)(5)(6)$

$C_1:CFClBrH$ 可計算：E

	$E=(1)(2)(3)(4)$

$T_d:CH_4:$ 可計算：E、C_3、C_3、C_3、C_3、C_3、C_3、C_3、C_3、C_2、C_2、C_2 不可計算：σ_d、σ_d、σ_d、σ_d、σ_d、σ_d

	$E=(1)(2)(3)(4)$ $C_3=(3)(1\ 4\ 2)$ $C_3=(1)(2\ 3\ 4)$ $C_3=(4)(1\ 2\ 3)$ $C_3=(1)(2\ 4\ 3)$ $C_3=(4)(1\ 3\ 2)$ $C_3=(2)(1\ 3\ 4)$ $C_2=(1\ 2)(3\ 4)$ $C_3=(2)(1\ 4\ 3)$ $C_2=(1\ 3)(2\ 4)$ $C_3=(3)(1\ 2\ 4)$ $C_2=(1\ 3)(2\ 4)$	$\sigma_d=(1)(3)(2\ 4)$ $\sigma_d=(1)(2)(3\ 4)$ $\sigma_d=(1)(4)(2\ 3)$ $\sigma_d=(2)(4)(1\ 3)$ $\sigma_d=(2)(3)(1\ 4)$ $\sigma_d=(3)(4)(2\ 5)$

陸、研究結論

○、代數化的思考

Burnside's Lemma (群論)與異構物(化學問題)的連結：

Burnside's Lemma 中的角色	異構物
集合 X	i 的取代基數次方種異構物配置
X 中的元素 x	任一種異構物的取代基配置 x
S_n 的子群 G	不同分子結構所具有的對稱性
G 中的元素 g	任一種對稱所對應的變換方式 g
不動群集合 X_g	經過某種變換仍會是原來配置的那些取代基接法，所形成的集合。
等價類數量 k	k 種異構物

一、環狀共振結構在不同取代基種類與取代基數量下異構物的種類數

環狀共振結構的化學通式是 C_nH_n，$n \geq 3$，取代基的位置數量為 n，設 n 個位置共有 i 種相異的取代基，並且每種取代基的數量分別為 $a_1 \sim a_i$。

環狀偶數碳共振結構的異構物數量 k 公式為：

$$k=\frac{1}{2n}\left(\left(\sum_{\substack{n=a_1+a_2+\ldots+a_i\\ a_1,\ldots,a_i\in N\\ d\mid(a_1,\ldots,a_i)=m}}\frac{\phi(d)\times\left(\frac{n}{d}\right)!}{\prod_{j=1}^{i}\left(\frac{a_j}{d}\right)!}\right)+\left[\frac{2^0}{2^b}\right]\times\left(\frac{\frac{n}{2}\times\left(\frac{n}{2}\right)!}{\prod_{j=1}^{i}\left[\frac{a_j}{2}\right]!}+\frac{n}{2}\times\left(\frac{n-2}{2}\right)!\times\sum_{k=1}^{i}\frac{1}{\left[\frac{a_k-2}{2}\right]!\times\prod_{\substack{j=1\sim k-1\\ k+1\sim i}}\left[\frac{a_j}{2}\right]!}\right)\right.$$

$$\left.+\left[\frac{3b}{2^b+2}\right]\times\frac{\frac{n}{2}\times 2!\times\left(\frac{n-2}{2}\right)!}{\prod_{j=1}^{i}\left[\frac{a_j}{2}\right]!}\right)\text{，}n\geq 4$$

環狀奇數碳共振結構的異構物數量 k 公式為：

$$k=\frac{1}{2n}\left(\left(\sum_{\substack{n=a_1+a_2+\ldots+a_i\\ a_1,\ldots,a_i\in N\\ d\mid(a_1,\ldots,a_i)=m}}\frac{\phi(d)\times\left(\frac{n}{d}\right)!}{\prod_{j=1}^{i}\left(\frac{a_j}{d}\right)!}\right)+\left[\frac{1}{b}\right]\times\left(\frac{n\times\left(\frac{n-1}{2}\right)!}{\prod_{j=1}^{i}\left[\frac{a_j}{2}\right]!}\right)\right)\text{，}n\geq 3$$

二、環烷結構在不同取代基種類與取代基數量下異構物的種類數

環烷結構的化學通式是 C_nH_{2n}，$n \geq 3$，取代基的位置數量為 $2n$，設 $2n$ 個位置共有 i 種相異的取代基，並且每種取代基的數量分別為 $a_1 \sim a_i$。

環烷結構的異構物數量 k 公式為：$$k=\frac{1}{2n}\left\{\left(\sum_{\substack{2n=a_1+\ldots+a_j\\ a_1\sim a_i\in N\\ d\mid(a_1\sim a_i)=m\\ d\mid n}}\frac{\phi(d)\cdot\left(\frac{2n}{d}\right)!}{\prod_{j=1}^{i}\left(\frac{a_j}{d}\right)!}\right)+\left[\frac{2^0}{2^b}\right]\times\frac{n\times n!}{\prod_{j=1}^{i}\left[\frac{a_j}{2}\right]!}\right\}\text{，}n\geq 3$$

三、直烷結構在不同取代基種類與取代基數量下異構物的種類數

(一)兩個碳以上的直烷的異構物處理手法

序號	分類名稱	在兩側碳所連接的取代基情形
(1)	三同 / 三同 same	各填入 3 個相同的取代基，而且兩側取代基為同一種
(2)	三同 / 三同 different	各填入 3 個相同的取代基，但兩側取代基不為同一種
(3)	三同 / 二同一異	有一個填入 3 個相同的取代基、 另一個填入 2 同 1 異的取代基
(4)	三同 / 三異 (考慮環狀排列再乘 2 倍)	有一個填入 3 個相同的取代基、 另一個填入 3 個相異的取代基
(5)	二同一異 / 二同一異 same	各填入 2 同 1 異的取代基，而且兩側取代基組成相同 (如皆為 2 個 H、1 個 Cl)
(6)	二同一異 / 二同一異 different	各填入 2 同 1 異的取代基，但兩側取代基組成不同 (如一側為 2 個 H、1 個 Cl；另一側為 2 個 H、1 個 F)
(7)	二同一異 / 三異 (考慮環狀排列再乘 2 倍)	有一個填入 2 同 1 異的取代基、 另一個填入 3 個相異的取代基
(8)	三異 / 三異 same (考慮環狀排列再乘 4 倍)	各填入 3 個相異的取代基，而且兩側取代基組成相同 (如皆為 1 個 H、1 個 Cl、1 個 F)
(9)	三異 / 三異 different (考慮環狀排列再乘 4 倍)	各填入 3 個相異的取代基，但兩側取代基組成不同 (如一側為 1 個 H、1 個 Cl、1 個 F；另一側為 1 個 H、1 個 Cl、1 個 Br)

分為兩個階段

第一階段：用組合找出上述 9 種情形中，不同取代基的填入方法有哪些。

第二階段：用 Burnside's Lemma 算 9 種情形的異構物數量 $k_1 \sim k_9$ ，則總異構物數量為

$$k_1 + k_2 + k_3 + 2k_4 + k_5 + k_6 + 2k_7 + 4k_8 + 4k_9$$

這樣的處理手法不論碳數多寡恆為 9 種，在碳數不多時可以用來檢驗化學上用窮舉法畫出的情形是否有缺漏；在碳數較多時則能顯現出通用性與方便性。

(二) 建立各種情境下均適用的異構物計算表。

四、給出任意碳數的醇、醚、醛、酮、羧酸、酯、胺、醯胺結構，在不同取代基種類與取代基數量下，異構物的種類計算法。

我們利用類似研究目的三的計算表來計算任意碳數的醇、醚、醛、酮、羧酸、酯、胺、醯胺結構，大致上可分為三個階段：

第一階段：利用給定的分子式畫出所有可能的結構。

第二階段：因為醇、醚、醛、酮、羧酸、酯、胺、醯胺的端點結構可能不只一個，所以需先找出端點結構內討論填入取代基時所有可能的情形。

第三階段：用 Burnside's Lemma 算出各結構的異構物數量，加總起來得到該分子式的異構物總數。

五、代入固定的碳數及取代基數量，討論四個碳及五個碳時時：三碳環不超過 2 個，用分類的方法，計算在不同取代基種類與取代基數量下異構物的種類數

依照給定的碳數及取代基數量($a_1 \sim a_i$)代入 C_nH_p ，將 p 個 H 的位置改成給定的取代基，並以下流程計算該異構物數量。

(a) 對於給定的碳數，畫出所有可能的結構(期間可能需要環、共振、烯、炔) 及所需的取代基數。

(b) 若尾端有三個取代基在同一碳上的結構則先將取代基填入，並討論異同與光學異構物問題。

(c) 將所有取代基的位置編號(三個取代基在同一碳上的只給一個號碼)。

(d) 找出該結構的可行動作（翻轉、旋轉），再用 cycle 紀錄動作種類及動作總數量。

(e) 代入公式 $k = \frac{1}{|G|}\sum_{g \in G}|X_g|$ 得到該種結構的異構物數量。

(f) 把 $k_1 + k_2 + \cdots + k_n$ 即可得到該異構物總數。

六、針對典型分子的化學點群，給出其對稱的數學排列群樣式，作為各式計算的背景資料

針對 C_{2h}、C_{3v}、D_{2d}、D_{2h}、D_{3h}、D_{6h}、C_1、T_d，我們在說明書中均給出了範例，並給出其對稱元素的數量(即動作數$|G|$)，與排列群樣式，可作為各式計算的背景資料。

柒、參考文獻

1. John B. Fraleigh(2003)。A First Course in Abstract Algebra。7th Edition。
2. Alan Vincent 著。謝從卿譯(1985)。Molecular Symmetry and Group Theory。安和出版社。
3. Brian Alspach and S.Aronoff(1977)。Enumeration of Structural Isomers in Alicyclic Hydrocarbons and in Porphyrins。Canadian Journal of Chemistry。Volume 55 Number 15。
4. 蕭文強(1991)。波利亞計數定理。湖南教育出版社。
5. Frank Albert Cotton(1990)。Chemical Applications of Group Theory。3rd Edition。

捌、附錄

共振結構與環烷結構公式的 Python 程式碼

```
import fractions
import math
def gcd(a, b):
	while b:
		a, b = b, a%b
	return a
def gcds(A):
	c = A[0]
	for i in range(len(A)):
		c = gcd(c,A[i])
	return c

def divisor(n):
	A = []
	for i in range(n):
		if n % (i+1) ==0:
			A = A + [i+1]
	return A
def phi(n):
	amount = 0

	for k in range(1, n + 1):
		if fractions.gcd(n, k) == 1:
			amount += 1
	return amount
def odds(A):
	k = 0
	for i in range(len(A)):
		if A[i] % 2 != 0:
			k = k+1
	return k
def fact(n):
	k = 1
	for i in range(n):
		k = k * (i+1)
	return k
def factorial(n):
	k = 1
	for i in range(n):
		k = k * (i+1)
	return k
def product(A,d):
	k = 1
	for i in range(len(A)):
		k = k * fact(int(A[i]/d))
	return k
def sum(A):
	k = 0
	for i in range(len(A)):
		k = k + A[i]
	return k
def pro(A):
	k = 1
	for i in range(len(A)):
		k = k * fact(int(A[i]/2))
	return k

def isomersA(A):
	k = 0
	a = 0
	n = sum(A)
	b = 0;
	for i in range(len(A)):
		b = b + math.pow((    fact(int( (A[i]-2) /2) ) * (pro(A) /
fact(int(A[i]/2)))),-1)

	for x in divisor(gcds(A)):
		k = k + phi(x)*fact(int(n/x))/product(A,x)
	a = k;
	a = k + int(1/math.pow(2,odds(A))) *( ((n/2)
*fact(int(n/2)))/pro(A) + b*((n)/2)*fact(int((n-2)/2)))

	if(odds(A)==2):
		a = a + n*fact(int((n-2)/2)) / pro(A)
	a = a / (2*n)
	return int(a)

def isomersB(A):
	k = 0
	a = 0
	n = sum(A)
	for x in divisor(gcds(A)):
		k = k + phi(x)*fact(int(n/x))/product(A,x)
	a = (k+    int(1/odds(A)) *      ( n * fact(int((n-1)/2)))
/pro(A) ) / (2*n)
	return a

def isomersC(A):
	k = 0
	a = 0
	for x in divisor(gcd(gcds(A),int(sum(A)/2))):
		k = k + phi(x)*factorial(int(sum(A)/x))/product(A,x)
	a =
(k+int(1/2**odds(A))*(int(sum(A)/2)*factorial(int(sum(A)/2)))/
pro(A))/(sum(A))
	return int(a)

#print isomersA(A);
#print isomersB(A);
#print isomersC(A)
```

【評語】030010

在這個計劃中，學生們嘗試利用數學上的 Burnside's Lemma 思維結合化學領域中的群論概念，來解決有機化學結構上面對的異構物問題，是一個跳脫傳統化學思考模式的題目，值得予以鼓勵及認同。最主要的疑問點在於 (1)這項工具對於有機化學是否有用 以及 (2)這個方法和其他方法(例如：窮舉法)比較起來，是否能夠提供一個更簡單以及清晰的工具給化學家利用。對於學生的努力，值得肯定，但希望學生們能持續思考以上兩個問題，因為這是目前設計新穎研究時，我們都必須挑戰自己的課題。