

POVZETEK

Diplomsko delo vsebuje definicije, leme in izreke, ki so potrebni za dokaz pravilnosti postopka iskanja Clarovega števila in Clarove strukture benzenoidnih in posplošenih benzenoidnih sistemov, ki sta ga ponudila Abeledo in Atkinson. Za dokaz pravilnosti predlaganega postopka smo uporabili lastnosti unimodularnih in totalno unimodularnih matrik in linearno programiranje. Zaradi slednjega je časovna zahtevnost postopka polinomska, kar pomeni da so v praksi rešljivi tudi veliki sistemi. V delo je vključeno tudi veliko primerov in slik. Prav tako je priložen tudi program za izračun Clarovega števila in Clarove strukture.

Math. Subj. Class. (2000): 05 C 50, 05 C 70, 90 C 05, 92 E 10

Ključne besede: graf, benzenoidni sistem, posplošeni benzenoidni sistem, unimodularnost, totalna unimodularnost, linearno programiranje, Clarovo število, Clarova struktura, resonančna množica.

Keywords: graph, benzenoid system, generalized benzenoid system, unimodularity, total unimodularity, linear programming, Clar number, Clar structure, resonant set

Literatura

- [AA98] Hernan Abeledo, Gary Atkinson, *Polyhedral Combinatorics of Benzenoid Problems.*, IPCO 1998, str. **202-212**
- [HZ94] P. Hansen in M. Zheng, *The Clar Number of a benzenoid hydrocarbon and linear programming*, Journal of Mathematical Chemistry 15, str. **93-107** (1994)
- [VD68] A.F. Veinott in G.B. Dantzig, *Integral Extreme Points*, SIAM Review 10 No. 3, str. **371-372** (1968)
- [T78] K. Truemper, *Algebraic Characterizations of Unimodular Matrices*, SIAM Journal of Applied Mathematics, 35 No. 2, str. **328-332** (1978)
- [S86] A. Schrijver, *Theory of Integer and Linear Programming*, John Wiley & Sons, New York, 1986
- [H72] F. Harary, *Graph Theory*, Addison-Wesley, 1972
- [A76] H. Aihara, *On the Number of Aromatic Sextets in a Benzenoid Hydrocarbon*, Bulletin of the Chemical Society of Japan, **49** (1976) str. **1429-1430**.
- [C72] E. Clar, *The Aromatic Sextet Theory*, John Wiley & Sons, London, 1972
- [HH84] W. C. Herndon in H. Hosoya, *Tetrahedron.*, **40** (1984)
- [CZ58] E. Clar, M. Zander, Journal of Chemical Society, 1958, 1861
- [DL65] M. J. S. Dewar, C. de Llano, J. Am. Chem. Soc., **87** (1965), **685**
- [DL69] M. J. S. Dewar, C. de Llano, J. Am. Chem. Soc., **91** (1969), **789**
- [HZ92] P. Hansen in M. Zheng, *Upper Bounds for the Clar Number of Benzenoid Hydrocarbons*, Journal of the Chemical Society, Faraday Transactions, **88** (1992) str. **1621-1625**.