

CROATICA
CHEMICA ACTA

Croat. Chem. Acta Vol. 56 No. 3

315—552 (1983)

Zagreb, 1. listopad, 1983

SADRŽAJ

Primjena kemijske nomenklature zasnovane na grafovima u teorijskoj i preparativnoj kemiji . . . A. L. Goodson	315—324
Aciklički i karakteristični polinom regularnih konjugiranih polimera i njegovih derivata . . . A. Graovac, O. E. Polansky i N. N. Tyutyulkov	325—356
Novi topološki indeksi za alternantne policikličke aromatske ugljikovodike . . . K.-D. Gundermann, C. Lohberger i M. Zander	357—363
Topološka svojstva benzenoidnih sustava. XXI. Teoremi, hipoteze, neriješeni problemi . . . I. Gutman	365—374
Varijacijski pristup dijabatskim stanjima J. Hendeković	375—382
Termodinamička i kinetička ograničenja u procesu pohranjivanja slobodne energije kod fotosintetskih sistema D. Juretić	383—387
Perturbacijske samousklađene orbitale za sisteme s otvorenom ljuskom. Primjena za ksililene P. Karafiloglou	389—395
Metoda molekularnih fragmenata III. Induktivni i mezomerni efekti . . . M. Klessinger	397—403
Bilješka o acikličkim strukturama i njihovim samovraćajućim šetnjama . . . J. V. Knop, W. M. Müller, K. Szymanski, M. Randić i N. Trinajstić	405—409
Kemijska teorija crteža. V. O klasifikaciji topologijskih biradikala . . . J. V. Knop, D. Plavšić, M. Randić i N. Trinajstić	411—441
Odnos između matrice susjedstva i rubnog koda benzenoidnih ugljikovodika . . . J. V. Knop, K. Szymanski, G. Jashari i N. Trinajstić	443—450
Topološka svojstva i model Pariser-Parr-Pople tipa za male Li klastere . . . J. Koutecký, D. Plavšić i D. Döhnert	451—459
Opis nekih molekularnih svojstava pomoću točkastih naboja . . . Z. Maksić i K. Rupnik	461—476
Analiitička ilustracija značaja molekularne topologije u Aufbau procesu . . . R. B. Mallion	477—490
Topološke lokalizirane molekularne orbitale Hückelovih i Möbiusovih anulena . . . A. Moyano i J. C. Paniagua	491—497
O vezi lokaliziranih molekularnih orbitala s Kekuléovim indeksom . . . J. C. Paniagua i A. Moyano	499—507
Acetilen, viniliden i vinil kation u osnovnom i pobuđenim stanjima . . . G. Winkelhofer, R. Janoschek, F. Fratev i P. v. R. Schleyer	509—524
Molekulsko-orbitalna rezonancijska teorija: jednostavan model i poopćeno Hückelovo pravilo . . . T. P. Živković	525—551

CROATICA
CHEMICA ACTA

Croat. Chem. Acta Vol. 56 No. 3

315—552 (1983)

Zagreb, October 1, 1983

CONTENTS

Application of Graph-Based Chemical Nomenclature to Theoretical and Preparative Chemistry . . . A. L. Goodson	315—324
Acyclic and Characteristic Polynomial of Regular Conjugated Polymers and Their Derivatives . . . A. Graovac, O. E. Polansky, and N. N. Tyutyulkov	325—356
New Topological Indices for Alternant Polycyclic Aromatic Hydrocarbons . . . K.-D. Gundermann, C. Lohberger, and M. Zander	357—363
Topological Properties of Benzenoid Systems. XXI. Theorems, Conjectures, Unsolved Problems . . . I. Gutman	365—374
Variational Approach to Diabatic States J. Hendeković	375—382
The Thermodynamic and Kinetic Limits on the Process of Free Energy Storage by Photosynthetic Systems D. Juretić	383—387
Perturbational Self-Consistent Orbitals for Open-Shell Systems. An Application to Xylylenes P. Karafiloglou	389—395
The Fragments-in-Molecules Method III. Inductive and Mesomeric Effects M. Klessinger	397—403
Note on Acyclic Structures and their Self-Returning Walks J. V. Knop, W. R. Müller, K. Szymanski, M. Randić, and N. Trinajstić	405—409
Chemical Graph Theory. V. On the Classification of Topological Biradicals J. V. Knop, D. Plavšić, M. Randić, and N. Trinajstić	411—441
The Connection Between the Adjacency Matrix and the Boundary Code of Benzenoid Hydrocarbons J. V. Knop, K. Szymanski, G. Jashari, and N. Trinajstić	443—450
Topological Properties on Small Li Clusters and the Pariser-Parr-Pople-Type Model J. Koutecký, D. Plavšić, and D. Döhnert	451—459
Point-charge Description of some Molecular Properties Z. B. Maksić and K. Rupnik	461—476
An Analytical Illustration of the Relevance of Molecular Topology to the Aufbau Process R. B. Mallion	477—490
Topological Localized Molecular Orbitals of Hückel and Möbius Annulenes A. Moyano and J. C. Paniagua	491—497
On the Relationship Between Localized Molecular Orbitals and Kekulé Structures J. C. Paniagua and A. Moyano	499—507
Acetylene, Vinylidene, and the Vinyl Cation in Ground and Excited States G. Winkelhofer, R. Janoschek, F. Fratev, and P. v. R. Schleyer	509—524
Molecular Orbital Resonance Theory: A Simple Model and the Generalised Hückel Rule T. P. Živković	525—551