

## SCIENTIFIC CORRESPONDENCE OF PROFESSOR DRAGOŠ CVETKOVIĆ

Professor Dragoš Cvetković has saved and classified a part of his scientific correspondence. These archives are located in the Mathematical Institute of the Serbian Academy of Sciences and Arts, Belgrade, Kneza Mihaila, 36. A part of the correspondence has been scanned and organized within several files whose names indicate the content and the period of time.

Each archive file is commented by D. Cvetković. Comments include some autobiographic facts which help in understanding the meaning of documents in the file. More details on the biography of D. Cvetković can be found in the book

Cvetković D., *Graphs as inspiration, Autobiographical Notes and Other Texts on the Occasion of Four Decades of Scientific Work in Mathematics (Serbian)*, Ed. V. Kovačević-Vujčić, Akademska misao, Beograd, 2006.

General comments on this electronic collection are contained in a separate file.

### **File: CORRESPONDENCE WITH H. SACHS AND I. GUTMAN, 1973**

#### **Comments by D. Cvetković**

I defended my doctoral thesis *Graphs and Their Spectra* on May 27, 1971.

Professor Horst Sachs, Technische Hochschule Ilmenau, Ilmenau, German Democratic Republic, and I published together in 1980 (jointly with Michael Doob) the book

Cvetković D., Doob M., Sachs H., *Spectra of Graphs - Theory and Application*. Deutscher Verlag der Wissenschaften - Academic Press, Berlin - New York, 1980; second edition, 1982; Russian translation, Naukova dumka, Kiev, 1984; III revised and enlarged edition, Johann Ambrosius Barth Verlag, Heidelberg - Leipzig, 1995.

The correspondence presented in this file shows how we have made first steps in writing the book *Spectra of Graphs*.

Collaboration with Ivan Gutman was continued in 1973. In this year Ivan Gutman got doctoral degree in Chemistry (20.12.1973).

For previous period see the file CORRESPONDENCE WITH H. SACHS AND I. GUTMAN, 1970-1972.

# »RUĐER BOŠKOVIĆ« INSTITUTE

41001 Zagreb, Croatia, Yugoslavia

POB 1016  
PHONE: (041) 424-355  
TELEX: 21-383

Zagreb, 11.1.1973.

Dragi Dr. Cvetković.

Molim Vas da mi što brže odgovorite da li Vam odgovara 9. februar (petak) za odbranu mog magistarskog rada. Ako ne, molim Vas da mi (nam) predložite neke termine koji bi Vama odgovarali. Dolaze u obzir samo dani pole 5. II jer se tada Dr. Trinajstić vraća iz Italije.

Srdačno Vas pozdravlja

*Ivan Gutman*

»RUĐER BOŠKOVIĆ« INSTITUTE

41001 Zagreb, Croatia, Yugoslavia

POB 1016  
PHONE: (041) 424-355  
TELEX: 21-383

Zagreb 16. I 73.

Dragi Dr. Cvetković

Ante Graovac i ja boravićemo u Beogradu sledećeg ponedeljka (22.I), utorka i (možda) srede. Želeli bismo se tom prilikom sastat s Vama. Ja ću poneti sve one materijale koje mislim da bi Vam bili od interesa. Molim Vas stoga da javite kada i gde bi Vam odgovaralo da se nademo. (jedino ponedeljak pošto ne dolazi u obzir jer tada A.G. i ja imamo jedno saopštenje na kongresu za makromolekule = beskonačni grafovi!) Poruku za nas možete ostaviti na telefonu 766-775 (kod moje sestre).

Do skorog viđenja

Joan Gutman  
i Ante Graovac.



108 BERLIN, <sup>Joh. - Dietrichs-Str. 10</sup> TAUBENSTRASSE 10  
Postfach 1216

Herrn  
Prof. Dr. Sachs  
65 Ilkbad  
L. Kasselberg 12

Ihr Zeichen: Ihre Nachricht vom: Unser Zeichen/Hauptstuf: Tag:  
131/11/116 23.1.73

Betreff:

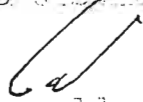
Ihre Publikationsverträge "Graphs and their spectra"

Sehr geehrter Herr Professor,

Wir möchten uns heute noch einmal sehr herzlich für Disposition und Anwesenheit Ihres Vizepräsidenten Dr. Cvethovic geplanten Publikationsvertrags bedanken, die Sie uns anlässlich Ihres letzten Besuches in unserm Verlag Ende November vergangenen Jahres übergaben. In der Zwischenzeit bestätigte die Frankfurter Geschäftsstelle von Academic Press den Eingang der von uns überreichten Unterlagen und teilte uns mit, daß die Materialien bereits an das Sekretariat in New York zur weiteren Begutachtung weitergeleitet worden sind.

Es ist daher anzunehmen, daß eine entsprechende Stellungnahme bis zur nächsten Frühjahrsmesse vorliegt, so daß dann bereits auf der Messe erste Absprachen getroffen werden können. Sobald wir Näheres erfahren, werden wir uns selbstverständlich unverzüglich mit Ihnen in Verbindung setzen.

Mit vorzüglicher Hochachtung  
und freundlichen Grüßen  
VEB DEUTSCHER VERLAG DER WISSENSCHAFTEN

  
Arnold  
Abteilungsleiter

  
Richter  
Direktionsleiter

Telefon: 2 29 00

Telegraphenanschrift: Devauwe Berlin - Konto: Berliner Stadtkontor der IHB, 108 Berlin, Behrenstraße 35-39, Konto-Nr. 6651-16-627

PSchA Berlin, Konto-Nr. 218 27

BN 90130937

Beograd 26.1.1973.

Lieber Herr Professor,

In diesem Brief schicke ich Ihnen die erste Version des Kapitels "Spectra of derived graphs" (37 Seiten) unseres Buches. Damit in Verbindung habe ich einen Vorschlag. Die geplanten Kapitel "Basic relations between spectral and structural properties of a graph" und "Spectra of derived graphs" sollen, meiner Meinung nach, seine Stellen umtauschen, so daß "Spectra of derived graphs" kommt als Kapitel 2. Dabei müßten die Sätze 2.30. - 2.33. aus meinem früheren Manuskript "Zusammenhang zwischen den Spektral- und Struktur-eigenschaften eines Graphen" in Kapitel <sup>1. Einfehren</sup> gehen. Das wäre eine natürlichere Reihenfolge der Darlegung des Materials.

Bald werde ich Ihnen die entsprechenden Teile von Kapiteln 7. und 8. ("More applications of the spectral method" und "Applications in chemistry and physics") schicken. Die schwerste Sache für mich ist Kapitel 6. ("Characterization of graphs by means of spectra") ich hoffe ~~nich~~ aber, <sup>dass</sup> während des Frühlings wird auch diese Sache fertig sein.

<sup>4</sup> Ich schlage <sup>7</sup> Ihnen vor, daß Sie das Manuskript "Zusammenhang zwischen den..." mit Ihrem Material (spectra of types 2) <sup>2</sup> auf der englischen Sprache ergänzen, und mit Ihren Bemerkungen auf mein Text mit zurück-

senden. Dann würde ich die zweite Version in der  
englischen Sprache schreiben. Dabei würde ich <sup>den</sup> Text  
mit neuem Material ergänzen. Ich meine aber,  
dass ~~die~~ Schreiben der zweiten Version <sup>einen</sup> ~~hat den~~ Sinn  
~~aber~~ <sup>aber</sup> nach ~~der~~ Beendigung des ersten Kapitels <sup>hat</sup>  
(Grunddefinitionen, Bezeichnungen u.s.w.!).

Mit freundlichen Grüßen

Ihr

Dragoš Vekarić

»RUĐER BOŠKOVIĆ« INSTITUTE

41001 Zagreb, Croatia, Yugoslavia

POB 1016  
PHONE: (041) 424-355  
TELEX: 21-383

Zagreb,  
29. 04. 1973.

Poštovani kolego Vethariću,  
Izlijem Vam dva novca stenkevice  
o kojima smo Vam ju i J. Gutman pi-  
čali. Ostali su njihove serije članka ne bi  
Vam bili toliko zanimljivi.

Ju i J. Gutman razmišljamo o stru-  
kturna koje se nam isporučili. Struktura se  
nam se čini da je zanimljive gube naj-  
zanimljivije operacije (razmišljamo se o o).

Prekajemo da će nam nekako perlok-  
vod o namu determinante det A (pe-  
operacije hehsovog teorije!).

Mnogo mnogo pozdrava od

Ante Guranca.

PROF. DR. HORST SACHS

63 ILMENAU  
AM WENZELSBERG 12  
TELEFON 3317

Ilmenau, 30. 1. 73

Lieber Herr Cvettkovic'!

Gestern bekam ich beiliegenden Brief  
vom DVW, und ich schicke ihn Ihnen  
zu Ihrer Information über den Stand  
der Dinge; bitte, schicken Sie ihn  
mir gelegentlich wieder zurück.



Wie geht es Ihnen? Ich habe gerade  
eine unangenehme Grippe, die in diesem  
Winter sehr stark verbreitet ist, überstanden  
und fühle mich wieder wohl - hoffentlich  
ist Ihre Familie davon verschont geblieben!  
Leider konnte ich hier über fibrosis  
cystica nichts wesentliches in Erfahrung  
bringen: Ich wünsche Ihrem Sohn recht  
baldige Genesung! - Ich werde jetzt  
gedrängt, sobald wie möglich ein Buch über  
Anwendungen der Graphentheorie zu  
schreiben!

Herzlich grüßt  
Ihr Horst Sachs

# TECHNISCHE HOCHSCHULE ILMENAU

Sektion Mathematik, Rechentechnik und Ökonomische Kybernetik

TH Ilmenau, 63 Ilmenau, Postschließfach 327

Ihre Zeichen

Ihre Nachricht vom

Bitte Abteilung mit angeben

Unsere Zeichen

63 Ilmenau, den

1. Febr. 1973

Sehr geehrter Herr Kollege!

Zu unserem Kolloquium wurden von sehr vielen Kollegen Vorträge angemeldet. Ich bitte Sie, den Termin für die Einsendung des Manuskriptes Ihres Vortrages (15. 4. 1973) unbedingt einzuhalten, da ich andernfalls nicht gewährleisten kann, daß Ihr Vortrag in das Vortragsprogramm aufgenommen wird.

Ich rechne sehr mit Ihrem Verständnis und bin

mit freundlichen Grüßen

Ihr

Horst Paulus

dzi 2346-E-V2-11-ScG10-71

Drahtwort:  
TH Ilmenau

Fernruf:

Ilmenau 591/541

Neue Fernruf-Nr. 740

Bank:

IHB Ilmenau 4761-22-127032

Postscheckkonto Erfurt 134 50

Fernschreiber

Teha Ilm 42 84 23

# »RUĐER BOŠKOVIĆ« INSTITUTE

41001 Zagreb, Croatia, Yugoslavia

POB 1016  
PHONE: (041) 424-355  
TELEX: 21-383

Zagreb, 5.2.1973.

Dragi Dr. Cvetković.

Kao što već znate, odbrana mog magistarskog rada biće u petak 9. februara u 12 sati u Institutu "Ruđer Bošković" (Bijenička cesta 54). Molim Vas da mi javite kada ćete doći, da li Vam je potreban prevoz do Instituta, da li treba obezbediti prenoćište i sl.

O grafovima- u Zagrebu.

Srdačno Vas pozdravlja

*Ivan Gutman*

# »RUĐER BOŠKOVIĆ« INSTITUTE

41001 Zagreb, Croatia, Yugoslavia

POB 1016  
PHONE: (041) 424-355  
TELEX: 21-383

Zagreb, 22.2.1973.

Dragi Dragoš.

Htio bih Te ukratko obavestiti o daljem razvoju primene grafova u kemiji.

1. U radu Heilbronnara (Helv.Chim.Acta 37 (1954) 913) po našem mišljenju urađeno je sve ono što je bilo od interesa ~~na~~ za nas. Štoviše, metoda Heilbronnara bitno prevazilazi ono što faktorizacija grafa može pružiti. Zbog toga smo (Živković, Graovac i ja) prestali razmatrati ovaj problem.

2. Na žalost, ne mogu saopštiti nikakav novi moment u vezi matrice  $A^{-1}$  niti o  $\eta$ . Tvoji rezultati o  $\eta$  su, naravno, vrlo zanimljivi. Interesira me i primena na nelinearne sisteme. Što se tiče pisanja članka, da li misliš na matematički ili kemijski časopis? S obzirom da ću imati dosta vremena u buduće ja bih razmišljao o jednom većem članku (za neki od vodećih svetskih časopisa) gde bi sa dovoljnom matematičkom strogosti izneli rezultate o  $p_+$ ,  $p_-$  i  $p_0 \equiv \eta$  i primene. Tu mislim kako na već sada postojeće tako i na one koje bi se u skoroj budućnosti našle (naročito za  $p_+$  i  $p_-$ ). Neki naši rezultati tiču se beskonačnih grafova.

Očekujem Tvoje mišljenje.

3. Pravi razlog da pismo šaljem baš sada jeste sljedeći. Naišli smo na ovaj problem: Na koliko se načina mogu izabrati čvorovi iz zadanog grafa (povezanog, neorijentiranog, bez petlji) da među njima ne bude susednih?

Kako si se bavio sličnim problemima (npr. Tvoja disertacija) možda ćeš nam moći pomoći. Molim Te stoga da hitno odgovoriš, da li je ovaj problem uopće rešen, a ako jeste molio bih Te da bilo navedeš referencu, bilo opišeš rešenje. Odgovor mi je zaista važan.

Knjigu od Philips-a šaljem u posebnoj koverti. Psychometrica je naručena i fotokopije ću poslati čim bude moguće. Primerak magistarskog rada sam već poslao.

Srdačan pozdrav

*Ivan*

# »RUĐER BOŠKOVIĆ« INSTITUTE

41001 Zagreb, Croatia, Yugoslavia

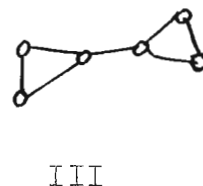
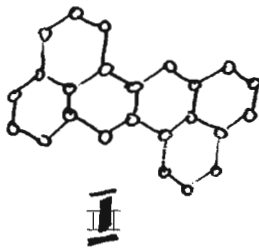
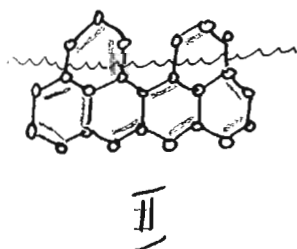
POB 1016  
PHONE: (041) 424-355  
TELEX: 21-383

Zagreb, 1.3.1973.

Dragi bragoš.

Hvala na pismu od 24.2. Metoda za broj nula je svakako vrlo zanimljiva. Dr. Trinajstić je također mišljenja da bi se moglo pokušati sa pisanjem jednog većeg članka o ovom problemu. Ja se nadam da ću uskoro moći poslati skicu onoga što bi pisali.

U vezi tvog pisma imam malu primedbu. Graf koji se pridružuje prstenovima u grafu ne određuje jednoznačno niti graf niti broj nula. Na primer



$\eta(I)=0$  jer je broj Kekuléovih grafova  $k > 0$ , dok je  $\eta(II)=2$ , što se može zaključiti po tvom pravilu za "kićanje" ili po teoremu 5.2.2. iz mog magistarskog rada. Obema grafovima odgovara graf prstenova III.

Sada o broju unutrašnje stabilnih skupova grafa. Hosoya je definirao broj  $Z$  (tzv. topološki indeks)

$$Z = \sum_{j=0}^m Z(j) \quad ; \quad Z(0)=1$$

gde je  $Z(j)$  broj mogućih izbora  $j$  nesusednih grana u grafu. (Prema tome je, kao što si pogodio,  $Z(m)$  = broj Kekuléovih struktura.)

Z se može primeniti na zasićene ugljikovodike (čiji grafovi mogu imati čvorove do stepena 4, a praktično svi su realno egzistirajuće molekule), i u vezi je sa brojnim fizičkim i termodinamičkim svojstvima tih molekula. Bilo bi od interesa da se sazna kako Z ovisi od strukture grafa.

Problem o kojem sam te pitao je nastao zbog toga što je

$Z$  = broj unutrašnje stabilnih skupova grafa grane.

Poznat mi je sledeći rezultat: Za stable je

$$\text{per} (x I + A) = \sum_{j=0}^N x^{N-2j} Z(j)$$

pa je  $Z = \text{per} (I + A)$ .  $\text{per}$  je permanent,  $A$  je matrica susedstva,  $I$  je jedinična matrica  $N$  je broj čvorova u grafu. Ovaj rezultat se može dobiti iz Sachsove formule. Na žalost, ne vidim(o) načina da se ovo generalizira za ostale grafove.

Šrdačni pozdravi

*Ivan*



108 BERLIN, JOHANNES-DIECKMANN-STRASSE 10  
Postfach 1216

Herrn

Dr. D. Cvetković

11 000 B e o g r a d

Lamartinova 44

Jugoslawien

Ihr Zeichen

Ihre Nachricht vom

Unser Zeichen/Hausruf

Tag

Ar/Bj

27.3.73

Bericht

Ihr Publikationsvorhaben mit Herrn Prof. Sachs " Graphes and their spectra "

Sehr geehrter Herr Dr. Cvetković !

Herr: Prof. Sachs, Ilmenau, war so freundlich uns Ihre Anschrift zu übermitteln. Wir möchten diese Gelegenheit benutzen, um Ihnen mitzuteilen, daß wir an Ihrem zusammen mit Herrn Prof. Sachs geplanten Publikationsvorhaben über Graphen und ihre Spektren in englischer Sprache sehr interessiert sind. Wir haben das Vorhaben inzwischen in unserem Verlagsgremium beraten und in unsere Editionspläne aufgenommen, so daß nun dem Vertragsabschluß nichts mehr im Wege steht. Als Termin für die Übergabe der Manuskripte an den Verlag nannte Herr Prof. Sachs Mitte 1974. Wir wären Ihnen sehr dankbar, wenn Sie uns mitteilen könnten, ob der von Herrn Prof. Sachs genannte Termin auch Ihren Vorstellungen entspricht und welchen Umfang in Manuskriptnormseiten (etwa 30 Zeilen à 65 Anschläge) der von Ihnen erarbeitete Teil voraussichtlich haben wird. Ferner wären wir Ihnen dankbar, wenn Sie uns darüber hinaus mitteilen könnten, wie viele Abbildungen Sie in Ihrem Teil vorgesehen haben, da diese Angabe ebenfalls Bestandteil des auszufertigenden Vertrages ist.

Da vom Verlag Academic Press kein Vertreter auf der Leipziger Messe war, können wir Ihnen zu unserem Bedauern noch nichts Näheres mitteilen. Sobald uns von AP eine Stellungnahme vorliegt, werden wir uns unverzüglich wieder mit Ihnen in Verbindung setzen.

Mit vorzüglicher Hochachtung  
und freundlichen Grüßen

VEB DEUTSCHER VERLAG DER WISSENSCHAFTEN

Dr. Walter  
Verlagsleiter

W. Arnold  
Abteilungsleiter

Telefon: 229 00

Telegraphenanschrift: Deutscher Verlag, Berlin Konto: Berliner Stadtkonto der IHB, 108 Berlin, Behrenstraße 35-39, Konto-Nr. 6651-16-627  
PSchA Berlin, Konto-Nr. 21827  
BN 90130937

Jlmanan, 27. 3. 73

Lieber Herr Cvetković !

Herzlichen Dank für Ihren Brief vom 13. 2. 73  
und die Übersendung der Arbeit von Rouvray  
"The Topological Matrix...", die ich Ende  
Februar erhielt! Ich habe sogleich an Herrn  
Wolfgang Arnold, Redakteur beim DVW,  
geschrieben, daß er Ihnen eine (wenigstens  
halb-offizielle) Bestätigung schicken solle,  
daß das geplante Buch in jedem Falle  
erscheinen wird - ich hoffe sehr, daß Sie  
inzwischen einen solchen Brief erhalten  
haben, denn er teilte mir mit, er werde  
das selbstverständlich erledigen. Er hat  
erst kürzlich die Redaktion Mathematik  
(wohl auch Physik) als Leiter übernommen  
und ist ein vielbeschäftigter Mann - falls  
Sie noch keine Bestätigung erhalten haben,  
so schreiben Sie mir bitte, damit ich noch  
einmal erinnern kann (ich nehme an,  
daß er mir einen Durchschlag schicken wird,  
und den habe ich noch nicht erhalten -  
ich werde in der nächsten Woche noch ein-  
mal bei ihm anfragen).



Lieber Herr Cveticovic, ich denke oft an Sie,  
weil ich ein so sehr schlechtes Gewissen habe:  
Sie haben schon viele Kapitel fertiggestellt, und  
ich habe kaum einen Beitrag geleistet - ja, ich  
finde nicht einmal Zeit, die Arbeiten, die Sie  
mir schicken, in Ruhe durchzuarbeiten!  
Immer, wenn ich gerade damit beginnen will,  
kommt ein anderer Auftrag - ein Gutachten,  
das dringend benötigt wird, ein Vortrag, oder  
etwas Ähnliches, alles Dinge, die ich nicht  
ablehnen kann - und dann bleibt das  
Spektrum wieder liegen. Deshalb verzweifeln Sie  
aber bitte nicht und haben Sie Geduld mit  
mir: Es wird das alles in Ordnung kommen.  
Der gegenwärtige Zustand ist nicht sehr be-  
friedigend, aber ich bin überzeugt davon, daß  
es besser werden wird.

Treffen wir uns Ende Juni in Ungarn?

(International Colloquium on Infinite and Finite  
Sets, Sponsored by the International Mathematical  
Union and the Bolyai-János Mathematical Society;  
Keszthely (Hung.), 25.6. - 1.7.1973). Es wäre  
eine gute Gelegenheit, uns anzusprechen.

Die Anschrift ist: L. BABAI, Secretary of the  
Organizing Committee, Bolyai János  
Matematikai Társulat 1368, Budapest,  
P. f. 240.

Herzlich grüßt Sie

Ihr  
Horst Sachs

11.4.1973

VEB Deutscher Verlag  
der Wissenschaften  
108 Berlin  
Johannes- Dieckmann Str. 10  
Postfach 1216

Dear Sirs,

Thank you very much for your kind letter of 27.3.1973.

I agree with the proposed date for the termination of the book "Graphs and their spectra" - the middle of 1974. Prof. Sachs has probably given you the data regarding the foreseen number of pages, number of figures for the entire book.

For the time being I foresee that the part of the book on which I am working will include some 150-250 pages (with about 30 lines per page and about 65 letters in a line). Probably, it will approximately be 200 pages. About 25 figures, of small dimensions will be inserted in that text.

Apart from that the Appendix would cover, according to the previous agreement, about 20 printed pages and it would contain tables, including figures which must be casted. Figures in the Appendix would take, probably about 10-30%.  
With kind regards,

Yours sincerely

Dragoš Cvetković

Lamartinova 44  
Beograd,  
Yugoslavia

11.4.1973

Prof. H.Sachs  
DDR 63 Ilmenau  
Am Wenrealsberg 12

Dear Professor Sachs

Thank you very much for your letter of 27.3.1973.

Almost simultaneously with your letter, another one, from DWV reached me, the copy of which together with the copy of my reply to them, are enclosed herewith.

I agree with you to have a meeting in Hungary in the month of June. If anything unforeseeable happens, I will let you know in due course. In that case I would invite you in Beograd for a few days. If you change your mind regarding the trip to Budapest, please inform me, too. I am certain that our meeting would be agreeable and useful.

With kind regards,

Yours sincerely

Dragoš Cvetković

Lamartinova 44  
Beograd  
Yugoslavia

# »RUĐER BOŠKOVIĆ« INSTITUTE

41001 Zagreb, Croatia, Yugoslavia

POB 1016  
PHONE: (041) 424-355  
TELEX: 21-383

Zagreb, 6.5.1973.

Dragi Dragoš.

Šaljem Ti kopiju našeg rada "Graph Theory and Molecular Orbitals. IV" koji će uskoro izići iz štampe, a također i rukopis o kome sam javio u prošlom pismu.

Rukopis sadrži kompletnu "matematiku" koju nameravamo prezentirati a sâm tekst će još biti naknadno dopisan. Reference će također biti dopisane. Uglavnom se pozivamo na rad u Theoret.Chim.Acta. Reference o "Coates-ovoj formuli", molim Te, dodaj.

U stvari, materijal ima dva dosta raznorodna dela. Prva i druga glava bave se sa  $A^{-1}$ . Rezultati su sadržani u formulama (13), (16) i (17). Kao što vidiš, predznak  $(A^{-1})_{pq}$  nismo u stanju odrediti (sem za klasu  $\mathcal{B}$ ). Možda bi Ti mogao još nešto dodati?

Glava 3 nastala je kao rezultat mojih skoro polugodišnjih nastojanja da dokažem formulu Heilbronner-a. Na kraju se ispostavilo da ona i nije bila sasvim tačna. Molim Te da, ako ti vreme to dozvoli, obratiš naročitu pažnju na taj dio. Klasu  $\mathcal{B}$  sam definirao kako sam najbolje mogao. Bilo bi zanimljivo pokušati definiciju i bez crtanja grafa na ravan. Napominjem da teoremi 2-5 nemaju nikakav iskaz koji bi zahtevao crtanje grafa naravan (tj. oni su čisto graf-teoretski).

Grafovi iz klase  $\mathcal{B}$  poseduju i niz drugih vrlo zanimljivih osobina, npr.

1.  $\det A = \text{per } A$

2. za njih važi Teorem 5.2.2. iz mog magistarskog rada Da li bi ova klasa, kao i pravilnosti koje u njoj postoje, bila od interesa u matematici? Da li bi se moglo razmišljati o pisanju jednog članka o toj problematici? Tu mislim na strožije i/ili korektnije dokaze teorema iz rukopisa, osobina 1. i 2.

itd.

Ostale primeđbe sam naznačio na marginama.

Počećemo pripremati englesku verziju rukopisa ali ćemo  
čekati na Tvoje komentare.

Srdačni pozdravi

*Ivan Gutman*

ДОПИСНИЦА-DOPISNICA  
ПОШТЕНСКА-КАРТИЧКА



DR.

DRAGOŠ CVETKOVIĆ

11000 BEOGRAD

ПОШТАНСКИ БРЕЗ-ПОСТАВЉАЊИЦА: КОДИНА ШТИЧКА

LAMARTINOVA 44

da ispodji svoje kulinarske  
spesobnosti.) Pozdrav:

Trava

Dragi Dragoš

Novac smo naručili i nadajmo se da će rada ne ići OK.

Danas sam dobio Troje pismo sa dokazom leme 1; jako me raduje ta se ova "topološka" teorema može tako jednostavno dokazati. Očekuje nas, svakako, i usmea diskusija jes li problem očitovanja grafa ~~u~~ u ravni, s moje tačke gledišta, dosta značajan.

Očekujem obavest o vašem dolasku u Zagreb (ili Samobor, da Magda može još jednom

# »RUDER BOŠKOVIĆ« INSTITUTE

41001 Zagreb, Croatia, Yugoslavia

POB 1016  
PHONE: (041) 424-355  
TELEX: 21-383

Zagreb, 18. 5. 1973.

Dragi Dragoš.

Hvala na pismu od 14. maja; na njega odgovaram odmah. Razgovarao sam sa Dr. Trinajstićem i on se slaže da profesoru Sachs-u obezbedi honorar za predavanje koje bi održao u Zagrebu. (300 din) Prema tome, sa naše strane će za profesora Sachs-a biti sve uređeno i mi ga željno očekujemo. Na žalost, praksa je ovoga Instituta da ne snosi putne troškove stranih gostiju, tako da je odgovor Dr. Trinajstića u vezi posete F. Harary-ja bio negativan. Naravno, mi bi njega i te kako rado videli u svojoj sredini.

U vreme kada bi se poseta profesora Sachs-a dogodila Dr. Trinajstić će biti u Nemačkoj a Ante Graovac u USA, tako da će naša grupa biti malo "okrnjena". Međutim, nesumnjivo će naši razgovori biti korisni. Ima izgleda da bih ja (čak uskoro) počeo rad na svojoj disertaciji koja bi u tom slučaju obrađivala srodne teme kao i magistarski rad.

Razlog da ti odgovaram u hitnom pismu je sljedeći: pokušao bih zatražiti od Instituta da i mene pošalje na Simpozijum. U molbi bih morao navesti odgovarajuće podatke: kada, gde, koliki su troškovi, kao i tačan naziv simpozijuma i organizatora. Molim te stoga da mi, ako je moguće, javiš ove podatke, kao i da li je još moguće prijaviti se. Očekujem tvoj odgovor.

Dr. Trinajstić me je obavestio da je sa isplatom honorara za učestvovanje u komisiji za odbranu magistarskog rada sve u redu a da Sveučilište ima običaj honorare isplatiti krajem školske godine, što bi značilo uskoro.

Na kraju da se i ja izvinem što se dugo nisam javljao. Stvar je u toliko žalosnija što sam na nekim problemima dosta radio (npr. matrica  $A^{-1}$ ) ali da nikakav ozbiljniji progres nije učinjen. Dva rada iz serije "Graph Theory and Molecular Orbitals" su u štampi i njihove kopije ću poslati za nekoliko dana.

Srdačni pozdravi:

*Ivan*

*Josipa Krása  
objekt 2*



Beograd 28.5.1973.

moje pozdravo

Lieber Herr Professor Sachs,

Endlich nach einer längeren Pause schreibe ich Ihnen wieder! Bitte, entschuldigen Sie mich dafür. Ich hatte viele Probleme (mit meiner Wohnung, an der Arbeitsstelle u.s.w.). In solcher Situation geht die Arbeit an dem Buch nicht ganz schnell.

Ich hoffe, daß es Ihnen und Ihrer Frau gut geht und ich freue mich sehr Sie (wahrscheinlich die beide) am Balaton-See zu sehen.

Ich möchte Ihnen einen Vorschlag machen. Ich entschuldige mich, weil ich Ihnen einen solchen Vorschlag etwas früher nicht machen konnte, aber vielleicht ist es noch nicht zu spät. Ich lade Sie und Ihre Frau ein, einige Tage vor dem Kolloquium in Ungarn nach Beograd zu kommen. Natürlich, Sie werden meine Gäste. Dann könnten wir zusammen nach Ungarn (wahrscheinlich mit einem Wagen) fahren. Nach Wunsch, können wir nach Ungarn via Zagreb fahren (damit würden Sie noch eine große jugoslawische Stadt sehen) und eine Treffung mit Chemikern aus Zagreb haben. Das würde ihnen ganz bestimmt eine große Freude machen.

# »RUĐER BOŠKOVIĆ« INSTITUTE

41001 Zagreb, Croatia, Yugoslavia

POB 1016  
PHONE: (041) 424-355  
TELEX: 21-383

Zagreb, 29.5.1973.

Dragi Dragoš.

Šaljem Ti kopiju "Graph Theory and Molecular Orbitals. III", koji se sada štampa u Chem.Phys.Letters. Na žalost, četvrti nastavak ove serije ne mogu poslati jer ne raspolažemo više niti jednim primerkom. Čim dobijemo prelom iz Croat.Chem.Acta ja ću ga iskopirati i poslati. Profesoru Sachsu smo, svojevremeno, poslali fotokopiju toga rada.

Inače, zatražio sam od Instituta da me pošalju u Mađarsku a istovremeno sam pisao i Babaiu. O tome ću Ti još pisati. Svakako, puno hvala na informacijama koje si mi poslao.

Dolazak profesora Sachsa je uređen. Molim Te kada bude moguće javi kada tačno dolazite, u koliko sati i pod kojim naslovom da oglasimo predavanje. Sve "domaćinske" dužnosti ću ja obaviti, samo mi napišite šta vas interesira.

Na kraju da "nagovestim" izvestan napredak u vezi sa  $A^{-1}$ . Uspelo mi je da izvedem formulu Heilbronnera (Helv.Chim.Acta 1962, kopiju toga rada sam Ti doneo):

$$(A^{-1})_{pq} = (-1)^{\frac{d(p,q)-1}{2}} \frac{K_{pq}}{K}$$

gde je  $d(p,q)$  rastojanje između čvorova  $p$  i  $q$ ,  $K$  broj Kekuléovih grafova grafa, a  $K_{pq}$  broj Kekuléovih grafova grafa koji je nastao odbacivanjem čvorova  $p$  i  $q$  i njima susednih grana. Izvod automatski daje neke relacije i za one grafove za koje formula Heilbronnera ne važi. Naime formula važi za bihromatske grafove koji ne sadrže 4m-člane prstenove (na način kako smo to diskutirali u Samoboru).

Dr.Trinajstić i ja smo se dogovorili da pokušamo napisati s Tobom noticu o ovome sa sledećom "strukturom":

- a) opis (bez dokaza) Coates-ovog algoritma za računanje  $A^{-1}$ ;
- b) izvođenje Heilbronnerove formule;
- c) poopštenja te formule za ostale bihromatske kao i nebihromatske grafove.

Prvu verziju rukopisa poslaću Ti (nadam se) još ove nedelje, a do toga Te

srdačno pozdravlja

*Ivan*

»RUĐER BOŠKOVIĆ« INSTITUTE

41001 Zagreb, Croatia, Yugoslavia

POB 1016  
PHONE: (041) 424-355  
TELEX: 21-383

Zagreb, 11. 6. 1973 .

Dragi Dragoš.

Uspjeli smo dokazati i Teorem 1, te ga odmah šaljem. Izmjene u rukopisu bi bile na strani 9 i 11 (kao što je naznačeno) dok stranu 10 treba odbaciti.

Očekujući Tvoj odgovor,

Srdačni pozdravi

*Ante Grunow*  
*Ivan Gutman*

13.6.1973

Prof. J.J.Seidel  
Technological University  
Eindhoven  
Department of Mathematics  
P.O.B. 513 Eindhoven  
The Netherlands

Dear Professor Seidel,

These days I had a very pleasant and interesting meeting with Professor M.Dobb who conveyed to me your regards, as well as your desire to have my papers. Please find them enclosed herewith, except my doctorate thesis which was earlier forwarded to you.

Thank you for the interest shown in my papers,

Yours sincerely

Dragoš Cvetković

H. Sachs,  
DDR 63 Jlimenan  
Am Neuzelsberg 12

Jlimenan, 13. 6. 73

Herrn

Dr. Oragoš Cvetković

Lamartinova 44

Beograd / Jugoslawia

Lieber Herr Cvetković!

Zunächst möchte ich mich herzlich bedanken für Ihren Brief vom 11. 4. 73 - ich habe ein wenig mit der Antwort gezögert, um Ihnen verbindliche Mitteilungen über ein mögliches Treffen anläßlich meines geplanten Aufenthaltes in Ungarn machen zu können. Leider wird das nun doch nicht zustande kommen, falls wir uns nicht anläßlich des Kongresses über Mengen Theorie in Keszthely sehen. Ich bin in diesem Jahr etwas vom Pech verfolgt: Mein Gesundheitszustand ist doch schlechter, als ich erwartet hatte, und so muß ich mich im Juli (3. 7. bis 31. 7. 73) einer Heilkur

(Herz und Kreislauf) in Bad Elster unterziehen. An der Tagung in Keszthely (25.6. bis 30.6.) werde ich teilnehmen, muß dann aber sofort zurückreisen. Mein Aufenthalt in Budapest ist nun auf die zweite Septemberhälfte verschoben. Vielleicht können wir dann zusammenkommen? Ob ich eine Reise nach Beograd unternehmen kann, ist leider sehr ungewiß.

Lieber Herr Cvitković, ich habe vor einigen Tagen mit Herrn Arnold vom VEB Deutscher Ver. d. Wiss. gesprochen: Er war gerade dabei, sich auf eine Reise nach Frankfurt vorzubereiten und wollte dort auch den Vertreter von Academic Press treffen; ich weiß noch nicht, was dabei herausgekommen ist, hoffe aber sehr, daß er uns bald informieren wird. - Wenn ich an Sie schreibe, habe ich immer ein schlechtes Gewissen, weil ich noch immer nicht zu einer zügigen Arbeit an dem Manuskript gekommen

bin, während Sie bereits so viel geleistet haben. Es kamen auch zu viele unerwartete und schnell zu erfüllende Pflichten dazwischen! Nun hoffe ich sehr, daß mir die Ärzte im Bord Elster die Arbeit im gewissen Umfang gestatten, denn dort werde ich die nötige Ruhe dazu finden. Hoffentlich verbieten es die Ärzte nicht! Dennoch: Wir werden es schaffen!

Lieber Herr Cvetković, ich hoffe sehr, daß es Ihnen und Ihren lieben Angehörigen gut geht, und wünsche vor allem Ihrem Sohn recht gute Besserung! Leider habe ich hier über „fibrosis cystica“ nichts Neues in Erfahrung bringen können. - Spätestens sehen wir uns ja im Oktober in Ilmenau!

Mit recht herzlichen Grüßen  
und besten Wünschen

Ihre  
Barbara und Horst Laubs

Zagreb, 13.6.1973.

Dragi Dragoš.

Hitno Ti odgovaram na pismo od 9.6.

Forinte Ti mogu nabaviti po ceni od 45 din za 100 Ft. Forinte bi mi Magdina mama poslala na post restante u Keszthely. Ti bi ih platio kada se vratimo u Jugoslaviju. (Na isti način ćemo nabaviti novac Magda i ja.) Molim Te, ako ovo odgovara, da najhitnije javiš kolika Ti je svota potrebna da bi mi to odmah mogli javiti u Mađarsku.

Magda će doći sa mnom.

Pošto Ti i tvoj kolega idete kolima, pod uslovom da imate dva mesta slobodna, imam jednu molbu. Želeli bismo vam se "priključiti". Imam dve varijante molbe:

i) Put preko Zagreba je tek neznatno duži, pa biste mogli ići preko Zagreba. U tom slučaju ne bi bilo dodatnih problema.

ii) Ako nećete ići kroz Zagreb, a ipak biste nas hteli povesti, mi bi vas sačekali na nekom pogodnom usputnom mestu. Tada vas molim da javite maršrutu.

Magda i ja bi, razume se, adekvatno učestvovali u pokrivanju putnih troškova.

Željeznička veza Zagreb-Keszthely je više nego žalosna: putuje se oko 12 sati sa 3 presedanja. Zato bi nam vaša usluga bila vrlo potrebna.

Molim Te da mi što prije odgovoriš o mogućnostima da idemo zajedno u Mađarsku. Međutim, o potrebnim forintama, molim, odgovori odmah.

Srdačni pozdravi

*Jvan*

P.S.

Žao mi (nam) je što prof. Sachs neće doći. Posetu sam otkazao.



Zagreb, 2.7.1973.

Dragi Dragoš.

Sretno sam se vratio, što se isto nadam da ću čuti i za vas. U subotu je moje saopštenje prošlo dobro. Mene je vrlo radovalo što je posle mog govora usledilo nekoliko pitanja (tako da mi se čini da je moj govor izazvao možda najveću diskusiju na celom Kolokviju).

I profesor Kurepa se zainteresirao, i malo smo razgovarali. Zamolio me je za komplet separata, što ću mu ja, naravno, poslati. Međutim u žurbi sam zaboravio da ga pitam za adresu, te sada molim da mi je Ti napišeš. Uostalom, uputio sam profesora Kurepu na Tebe ako ga bilo šta bude i dalje interesiralo.

U diskusiji nakon predavanja javio se József Pelikán koji mi je tada (i u kasnijim razgovorima) rekao da on i Lovász imaju (valjda u štampi) rad u kojem su dokazali da je maksimalni element spektra stabla maksimalan za zvezdu a minimalan za lanac, kao i da imaju način kako da poređaju ostale grafove "između" (mislím na stabla). Pelikán mi je obećao poslati jednu kopiju tog rada, a kada to dobijem, ako Te ovaj rezultat interesira, mogu ga kopirati i poslati.

Inače u subotu je bio nezaboravni banket, i stvarno je šteta što niste ostali. Profesor Sachs mi je ponudio da me pozove u Ilmenau, što na žalost za sada ne dolazi u obzir.

Danas sam sa Trinajstićem razgovarao o "sudbini"

našeg zajedničkog članka. On nije toliko pesimističan i  
to znači da se može očekivati prva engleska verzija u sko-  
roj budućnosti.

Srdačni pozdravi

*Ira*

# »RUĐER BOŠKOVIĆ« INSTITUTE

41001 Zagreb, Croatia, Yugoslavia

POB 1016  
PHONE: (041) 424-355  
TELEX: 21-383

Zagreb, 4. 7. 1973.

Dragi Dragoš.

Poslednjih nekoliko dana uspelo mi je da načinim izvestan napredak sa matricom  $A^{-1}$ . Šaljem Ti novu verziju poglavlja 3 (i poglavlje 4). Meni se čini da su sada svi dokazi OK. Teorem 6 (u novoj verziji) bazira se na činjenici da se svi kontraprimeri za (nekadašnji) teorem 5 sastoje u elementarnim putevima između dva čvora od kojih je jedan u a drugi izvan 4m-prstena. Kako ovaj teorem, na kraju krajeva i nije tako važan, dokaz je samo skiciran.

Prema tome, izgleda da formula Heilbronner-a važi samo u klasi  $\mathcal{C}$ . Napominjem da se uvek mogu naći dva čvora takva da formula Heilbronner-a ne važi ako graf sadrži 4m-prsten. Meni se čini vrlo važnim i rezultat da za susedne čvorove formula važi uvek (za susedne čvorove ~~4m~~ je upravo Pauling-ov red veze).

$\frac{K_{pq}}{K}$

Očekujemo Tvoje eventualne dalje primedbe. No pisanje rada ću odmah započeti. Biće to vrlo obiman materijal i ja ću insistirati da ga šaljemo u najbolji mogući časopis (predlog: Theoretica Chimica Acta). Zbog toga ne verujem da će biti gotov prije jeseni. Ja bih ponovio svoj predlog da matematički interesantne delove ovog rada publiciramo u nekom matematičkom časopisu.

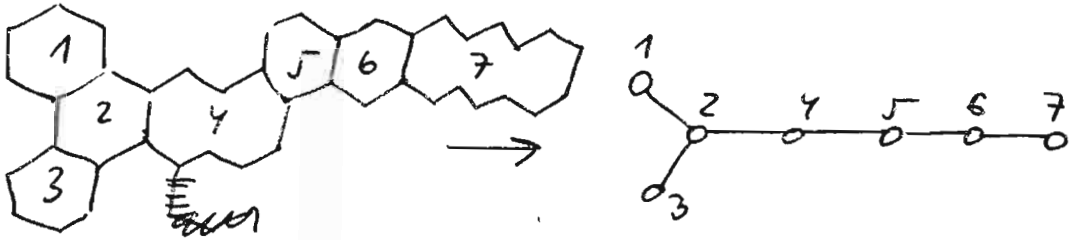
Srdačni pozdravi

Jovan

↓

P.S.

Mislino da će Ti konstitui ovo objašnjenje  
klase  $\mathcal{C}$ . Ako se svakoj unutrašnjoj oblasti  
pridruži ~~čvor~~ čvor i ako su susjedni čvorovi  
pridruženi susjednim oblastima, onda se grafovi  
iz  $\mathcal{C}$  pridružuju stabla



graf iz klase  $\mathcal{C}$

ovo se u kemiji zove "cata". kondenzacija

Zagreb, 15.8.1973.

Dragi Dragoš.

Javljam Ti se iz Zagreba. Stroj za kopiranje se pokvario pa ću Ti tražene kopije poslati sa izvesnim zakašnjenjem.

1. U međuvremenu nam se javio W.C.Herndon i poslao kopije nekih svojih radova, a među njima: A Remark on Permanents and Resonance Structures of Graphs (Lee, Herndon i Phan, poslano u Acta Mathematica) i A Numerical Method for Computing the Number of Resonance Structures for Certain Graphs (Phan, Herndon i Lealey). I ovaj drugi članak je pisan za matematičare a u njemu se tretiraju grafovi iz klase  $B_1$ . Čim budem mogao poslaću kopije.

2. Javio mi se Robin J.Wilson. Piše između ostalog da namerava doći iduće godine u Jugoslaviju i da bi se želio sresti i s Tobom.

3. Dovoljan uvjet da matrica  $M$ , dimenzija  $n \times n$  ima simetričan spektar je da postoji permutacija  $P$  takva da je

$$P M P^t = \begin{pmatrix} O_p & A \\ B & O_q \end{pmatrix}$$

gde  $O_p$  i  $O_q$  označavaju nula matrice  $p \times p$  i  $q \times q$  ( $p+q=n$ ).

Za nenegativne matrice to je ujedno i nužan uslov.

Za simetrične matrice sa  $n \leq 5$  to je također nužan uslov. Ova granica se možda može pomeriti.

4. Hteo bih ti saopštiti neke rezultate koje sam nedavno dobio o broju nula u spektru grafa ( $\eta$ ).

Neka  $v$  označava čvor a  $e$  granu grafa  $G$ ;  $G-v$  i  $G-e$  su podgrafovi grafa  $G$  dobiveni odbacivanjem čvora  $v$  odn. grane  $e$ . Za proizvoljni graf je

$$\eta(G-v) = \eta(G) + i \quad i=-1,0,+1$$

$$\eta(G-e) = \eta(G) + j \quad j=-2,-1,0,+1,+2$$

Za bikromatski graf je

$$\begin{aligned} \eta(G-v) &= \eta(G) + k & k &= -1, +1 \\ \eta(G-e) &= \eta(G) + l & l &= -2, 0, +2 \end{aligned}$$

Mogu se naći primeri za sve vrednosti brojeva  $i, j, k, l$ .

Specijalno, za bikromatske grafove važi:

$$\eta(G) = 0 \implies \eta(G-v) = 1.$$

5. Našao sam vrlo jednostavnu metodu za ~~na~~ određivanje onih transformacija na grafu koje ne menjaju  $\eta$ . Metoda skoro ne zahteva nikakvo računanje a slična je onome što je Živković objavio u Croat.Chem.Acta. Sve nama ranije poznate transformacije dokazuju se za čas bez teškoća i to za proizvoljne grafove. Također se može pokazati da je:

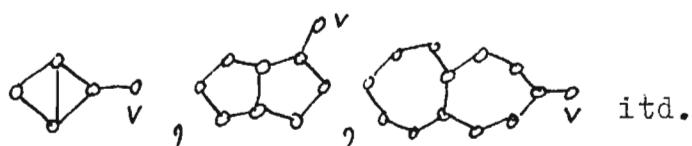
$$\eta( \text{G}_1 \text{---} \text{G}_2 ) = \eta( \text{G}_1 \text{---} \text{---} \text{G}_2 ) .$$

Mogu se naći takvi grafovi  $g$  koji se preko određenog čvora  $v$  mogu spojiti za proizvoljni čvor proizvoljnog grafa  $G$  i da pri tome  $\eta$  poraste za konstanti  $D=D(g)$ .  
~~Maxxi~~

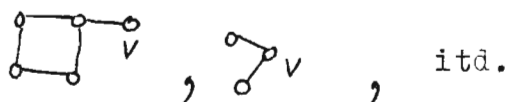
$$\eta( \text{G} \text{---} \underset{v}{\text{g}} ) = \eta( \text{G} ) + D(g).$$

Na primer:

$D=0$  za sve bikromatske grafove za koje je  $\eta=0$  (pri tome je  $v$  proizvoljno) kao i za



$D=1$  za



6. U Mađarskoj sam našao bolje granice za  $E$  nego što su ranije poznate (koristeći "rafiniranje" nejednakosti između aritmetičke i geometrijske sredine):

$$2T \leq 2N\mathcal{V} - E^2 \leq (N-2)T$$

$T = 2\mathcal{V} - N \sqrt{(\det A)^2}$ ;  $N$ =broj čvorova,  $\mathcal{V}$ =broj grana.

Druge nejednakosti za sada nisam uspeo iskoristiti.

Ako Ti se neke od ovih stvari čine upotrebljivim ili interesantnim molim Te piši. Također molim odgovor u vezi Wilsona.

Ima li šta novo sa grafovima iz klase  $B$  ?

Srdačni pozdravi

*Ivan*



108 BERLIN, JOHANNES-DIECKMANN-STRASSE 10  
Postfach 1216

Herrn  
Dr. D. Cvetković

11 000 Beograd

Lamartinova 44  
Jugoslawien

Ih. Zeichen

Ihre Nachricht vom

Unser Zeichen/Hausruf  
At/Bj

Tag  
21.8.1973

Betreff

Sehr geehrter Herr Dr. Cvetković !

Bitte entschuldigen Sie, daß wir erst jetzt auf Ihr freundliches Schreiben vom 11.4.73 zurückkommen, dessen Empfang wir dankend bestätigen. Wir hatten immer gehofft, Ihnen mit unserem Antwortschreiben bereits die Stellungnahme von Academic Press zu Disposition und Exposé Ihrer gemeinsam mit Herrn Prof. Sachs geplanten Monographie übermitteln zu können. Leider haben sich dabei seitens dieses Verlages - wie uns erst vor kurzem bekannt wurde - Verzögerungen ergeben. Sobald wir Näheres in Erfahrung gebracht haben, werden wir uns jedoch umgehend wieder mit Ihnen in Verbindung setzen.

Mit vorzüglicher Hochachtung  
und freundlichen Grüßen

VEB DEUTSCHER VERLAG DER WISSENSCHAFTEN

*W. Lamp*  
Dr. Walter  
Verlagsleiter

*A. Arnold*  
Arnold  
Abteilungsleiter

Telefon 22900



VEB DEUTSCHER VERLAG  
DER WISSENSCHAFTEN



Herrn

Dr. D. Cvetković

11 000 B e o g r a d

Lamartinova 44

Jugoslawien

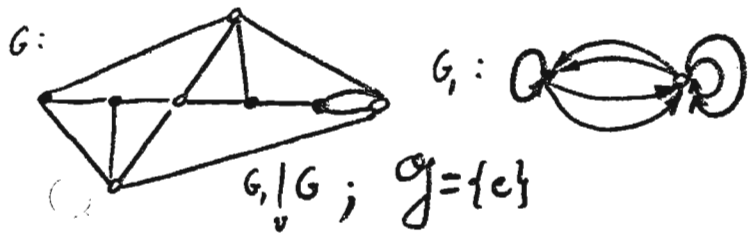
VEB Deutscher Verlag  
der Wissenschaften  
DDR - 108 Berlin  
Johannes-Dieckmann-Straße 10  
Postfach 1216

Thunau, 18. 8. 73.

Sehr geehrter Herr Cothare!

Ich danke Ihnen recht herzlich für Ihren Brief sowie für die Arbeiten von Kelman. Ich finde sie sehr interessant.

Hiermit sende ich Ihnen das Beispiel des Graphen  $G$  der keine Automorphiegruppe (eigentliche) enthält und trotzdem einen Teiler  $G_1$  besitzt:



Das Beispiel hat Petersdorff in seiner Dissertationsschrift angegeben.

Bis baldigen Wiedersehen in Thunau

- mit besten Grüßen

B. v. Neumann

Zagreb, 6.9.1973.

Dragi Dragoš.

Stroj za kopiranje je najzađ proradio, pa Ti šaljem traženu kopiju rada T.F.Yena. Kako su se pojavile i neka administrativna ograničenja korištenja stroja šaljem Ti originalni separat Lovászovog rada ; molim Te vratiti mi ga kada Ti bude odgovaralo (najbolje da ga doneseš sa sobom u Zagreb). Nadam se da ću početkom iduće nedelje moći da Ti pošaljem i kopiju svoje (ne definitivne) disertacije, kao i našeg zajedničkog rada.

Danas su Ti odobrene tri dnevnicе, u skladu s onim što si nam pisao. Očekujemo detalje u vezi Tvog dolaska. Trinajstić se vraća oko 14.9. iz SSSR i posle ovog datuma odgovara nam bilo koji termin do druge polovine ~~XXX~~ oktobra.

Srdačni pozdravi

Jovan

»RUĐER BOŠKOVIĆ« INSTITUTE

41001 Zagreb, Croatia, Yugoslavia

POB 1016  
PHONE: (041) 424-355  
TELEX: 21-383

465/207  
1-1  
3-6  
Zagreb, 9.9.1973.

Pragi Dragoš.

Šaljem Ti englesku verziju našeg rada. Namera nam je poslati ga u Journal of Chemical Physics, a to je svakako najbolji (i najstariji) časopis za kemijsku fiziku. Zbog toga će i recenzije biti vrlo stroge.

Molim Te da sve Tvoje primedbe (uključujući i uočene štamparske i pravopisne greške) napišeš što je moguće prije. Naročito Te molimo da presудиš da li smo upotrebili valjane izraze: area, border, interior, exterior itd; mi bi želeli da koristimo uobičajene termine iz Topologije.

Kao što se vidi, rad je pretrpio znatne promene u odnosu na hrvatskosrpsku verziju. U drugom delu, koji sadrži rezultate o benzenoidnim grafovima, promena ima mnogo manje. Ipak bih Te molio da obratiš pažnju na Teorem 4. Njegova formulacija je svakako nastala posle našeg razgovora u Beogradu; on u stvari sadrži (potencijalno) rešenje onog problema o kojem smo tamo razgovarali.

Istovremeno će Dr.Cvitaš također pročitati ovaj rad i načiniti (još jednu) jezičku korekciju.

Srdačni pozdravi

Jovan

Ilmenau, 11. 9. 73

Lieber Herr Cvetković!

Inzwischen ist nun mein Reise termin festgelegt worden: Ich werde am 17. 9 nach Budapest und am 25. 9. wieder zurück fliegen. Leider ist die Zeit sehr kurz, und ich habe noch kein Programm für meinen Aufenthalt in Ungarn, so daß es mir nicht sinnvoll erscheint, ein Treffen in Szeged zu verabreden: Ich weiß nicht, ob ich überhaupt dort hin fahren werde, und dann wäre die Zeit auch zu knapp, um sinnvolle Arbeit an dem Buch leisten zu können: Es wäre schade, wenn Sie die weite Reise unternehmen würden, um dann enttäuscht zurückzukehren. Deshalb seien Sie bitte nicht böse, wenn ich Ihnen vorschlage, daß wir unsere Zusammenkunft doch lieber bis zum Int. Wiss. Kolloquium im Oktober, hier in Ilmenau, verschieben. Ich freue mich sehr auf Ihren Besuch! Hier hat diese Tage das neue Studienjahr begonnen und natürlich wieder eine Menge Pflichten mit sich gebracht.

Ich hatte kürzlich mit Herrn Arnold vom Deutschen Verlag der Wissenschaften ein Gespräch:

F, der Vertreter von AP,

Er hat an der Buchmesse in Frankfurt am  
Main teilgenommen und dort auch mit dem  
Vertreter von Academic Press gesprochen; der war  
jedoch ganz neu im Amt, sein Vorgänger, der  
vorher mit mir und dem DVW verhandelte hatte  
(van der Plas oder ähnlich), ist wohl inzwischen  
entlassen worden. Er<sup>F</sup> wirpke also nichts, versprach  
mir, bald von New York aus von sich hören zu  
lassen. Herr Arnold meint aber, das Buch wird  
herausgebracht, ganz gleich, wie sich AP verhält,  
eventuell auch zusammen mit Springer - nun,  
vorerst müssen wir wohl noch warten.

Übrigens sagte mir de Bruijn in Keszthely (vielleicht  
war es auch Ernst Straus und nicht de Bruijn)  
am letzten Abend, als sie schon fort waren,  
dass Alan J. Hoffman (IBM, New York) beabsichtige,  
ein Buch über Graphenspektren zu schreiben -  
haben Sie etwas davon gehört? Einzelheiten habe  
ich allerdings nicht erfahren. Nun, wir werden ja  
sehen. Sollen Sie mit Hoffman im Briefwechsel?

Mit gleicher Post sende ich Ihnen einen Ausdruck  
einer Arbeit „G. J. Finch / H. Sachs: Über Beziehungen zwischen  
Struktur und Spektrum regulärer Graphen“.

Mit recht freundlichen Grüßen,  
auch an Ihre lieben Angehörigen,

Herr  
Herr Sachs

# »RUĐER BOŠKOVIĆ« INSTITUTE

41001 Zagreb, Croatia, Yugoslavia

POB 1016  
PHONE: (041) 424-355  
TELEX: 21-383

Zagreb, 17.9.1973.

Dragi Dragoš.

U posebnom pismu šaljem Ti fotokopije nekih radova od interesa kao i moje disertacije. Prosto neverovatan splet događaja odlagao je pravljenje ovih kopija sve do danas.

Ako stigneš da čitaš nešto od ovog rukopisa čini mi se da bi za Tebe bila interesantna naročito poglavlja 3 i 8.

Sada već s nestrpljenjem očekujemo Tvoj odgovor o zajedničkom radu kao i o tome kada bi došao.

S pozdravom

*U  
Ovan*

# »RUĐER BOŠKOVIĆ« INSTITUTE

41001 Zagreb, Croatia, Yugoslavia

POB 1016  
PHONE: (041) 424-355  
TELEX: 21-383

Zagreb, 4. listopada 1973.

Dragi Dragoš.

Šaljemo Ti novu verziju poglavlja 4 našeg rada. Paralelno rad ide na jezičku korekciju. Izmjene u ostalim poglavljima su neznatne.

Nova verzija poglavlja 4 se (strogo) pridržava našeg dogovora u Zagrebu, izuzev materijala iznetog na stranama 10 i 11. Naime, Teorem 4 (u staroj verziji) se ipak nije mogao zamijeniti Teoremom 4 i Korolarom 4.1.' (iz nove verzije). Zbog toga je (bez dokaza) dodan Teorem 4' čija posljedica su onda korolari 4.3 i 4.4 (vrlo potrebni u daljem izlaganju). Nadamo se da ćeš prihvatiti ovo rješenje.

Ukoliko ne bude ozbiljnijih primjedbi (ili bude jako ozbiljnih, koji zahtijevaju dogovor) molili bi Te da nam telefoniraš.

Zadovoljstvo nam je također obavijestiti Te da si jučer izabran za (drugog) člana komisije za ocjenu i odbranu disertacije jednog od nas.

Očekujući Tvoj skori odgovor, srdačno Te pozdravljaju

Nemad

Jovan



»RUĐER BOŠKOVIĆ« INSTITUTE

41001 Zagreb, Croatia, Yugoslavia

POB 1016  
PHONE: (041) 424-355  
TELEX: 21-383

Professor J.M. Stout  
Editor  
The Journal of Chemical  
Physics  
Department of Chemistry  
The University of Chicago  
Chicago  
Illinois 60637  
U.S.A.

October 19<sup>th</sup>, 1973.


Dear Sir,

Please, find enclosed the paper entitled: "Graph Theory and Molecular Orbitals. VII. The Role of Resonance Structures" by D. Cvetković, I. Gutman, and N. Trinajstić, which we would like to submit for publication in "The Journal of Chemical Physics"

We find the connection between the graph theory and molecular orbital theory a problem of general interest. Several groups are working on various aspects of this problem, but so far there was no attempt made to consider the relation between the MO and VB theories using a graph-theoretical approach. Therefore, we hope you will find our paper interesting enough for chemical community at large and thus suitable for publication in "The Journal of Chemical Physics".

Looking forward to hearing from you, I remain

Sincerely yours,

  
Dr. Nenad Trinajstić

# »RUĐER BOŠKOVIĆ« INSTITUTE

41001 Zagreb, Croatia, Yugoslavia

POB 1016  
PHONE: (041) 424-355  
TELEX: 21-383

Zagreb, 15.X 1973.

Dragi Dragoš.

Tročitao sam poglavlje iz tvoje knjige koje si nam ostavio u Zagrebu. Imao bih sledeće opaske.

1. strana 2, formula

Hamiltonijan ispravno glasi

$$\sum_{i=1}^n \frac{\hbar^2}{2m_i} \left( \frac{\partial^2}{\partial x_i^2} + \dots \right)$$

jer sve čestice ne moraju imati iste mase.

2. strana 2, preposlednji red

Preporučio bih da se reč "aromatic hydrocarbon" ne koristi. Pojam aromatičnosti je vrlo slabo definiran i čak postoji struja koja traži izbacivanje tog pojma iz kemije. Detaljnije o tome jednom prilikom usmeno.

3. strana 5, kraj prvog pasusa

Predlažem da se doda da ova diskusija nije potpuna i da se detalji mogu naći u nekoj knjizi. Za čitaoce-matematičare bih svakako predložio knjigu: R.McWeeny and F.T.Sutcliffe "Methods of Molecular Quantum ~~Chemistry~~ Mechanics" Academic Press, London 1969.

4. strana 5, početak drugog pasusa

isto kao 2. Bolje je: For conjugated hydrocarbons... To već i stoga što svi konjugirani ugljikovodici nisu aromatični (neki su na primer nestabilni).

5. strana 6;

Ako želiš, mogu dati bolje reference.

6. strana 6,

isto kao 2.

7. strana 6, 6. red od dole,

Nije jasno da li "not large" ili "large".

8. strana 9,

Verovatno treba da bude  $\eta(G) > 0$ .

9. strana 10, 4.red od gore

Nije mi jasno o kakvim se izuzecima radi. Za parno  $n$  i  $\lambda_1 \gg \lambda_2 \gg \dots \gg \lambda_n$  je uvek

$$E\pi = 2 \sum_{i=1}^{n/2} \lambda_i$$

Moguće je da ta greška dolazi iz materijala koji sam Ti poslao prošle godine. Tada još nisam "uvideo" ovu jednostavnu činjenicu.

10. strana 11, Theorem

Ukazao bih na bolje granice koje sam dobio (v.disertaciju i rad koji sam Ti poslao). Za bikromatske grafove te granice su ispravne.

11. strana 12, 5.red od gore

Verovatno treba da bude "are".

12. strana 14, 1.red od gore

Mislim da treba "a unit".

13. Ukazao bih da znamo za 5 tipova transformacija koje ne menjaju  $\eta(G)$ :

$$\eta(\text{---} \alpha) = \eta(\text{---} \circ \circ \circ \circ \alpha)$$

$$\eta \left( \begin{array}{c} \text{---} \\ \text{---} \end{array} \right) = \eta \left( \begin{array}{c} \text{---} \\ \text{---} \end{array} \circ \circ \right)$$

$$\eta(\text{---} \circ) = \eta(\text{---} \circ \textcircled{B}) \quad \textcircled{B} = \text{bikromatski graf sa } \eta(B)=0$$

$$\eta \left( \begin{array}{c} \text{---} \\ \text{---} \end{array} \right) = \eta \left( \begin{array}{c} \text{---} \\ \text{---} \end{array} \circ \circ \right)$$

$$\eta(\textcircled{1} \circ \textcircled{2}) = \eta(\textcircled{1} \circ \circ \circ \textcircled{2})$$

Ovo važi za sve grafove. Jedan elementaran dokaz posedujem. (v također moju disertaciju poglavlje 8.3., strana 106 u konačnoj verziji) Naravno, ne insistiram da se ovo stavi u poglavlje knjige.

Trinajstić je poglavlje također pročitao i nije imao primedbe. Nadam se da ćeš nam poslati i jednu konačniju verziju poglavlja. Za sve potrebne reference stojim Ti na raspolaganju.

Tvoje primedbe na naš zajednički rad, koji je u finalnoj formi, biće unete. Ovih dana ćemo rad poslati u časopis.

Kao što smo Ti već javili, nalaziš se u komisiji za ocenu i odbranu mog doktorata. Bilo bi potrebno da ocena rada bude gotova prvih dana novembra jer će oko 10.XI biti sednica na koju bih želio stići. Institut mi je odobrio dva dana boravka u Beogradu. Da li bi Tebi (i eventualno Simiću) odgovaralo da dođem 1.XI ?

Očekujući odgovor, srdačni pozdravi

*Jovan*

Zagreb 22. X 73.

Dragi Dragoš:

Šaljem Ti mišljenje o disertaciji koje je napisao Dr. Trinajstić. Molim Te da nam hitno odgovoriš da li imaš neke formalne primedbe na ovo mišljenje (i koje). Te primedbe ćemo uneti u konačnu verziju mišljenja koje će Trina potpisati u petak 26. X. 73. (jer u ponedjeljak putuje a vraća se tek u polovinom decembra). Posle toga će ostali članovi komisije biti zamoljeni da potpišu ovo mišljenje ili da daju svoje odvojeno.

Očekujem i Tvoj odgovor u vezi mog dolaska u Beograd.

Pozdrav

Jovan

# »RUĐER BOŠKOVIĆ« INSTITUTE

41001 Zagreb, Croatia, Yugoslavia

POB 1016  
PHONE: (041) 424-355  
TELEX: 21-383

Zagreb, 30.10.1973.

Dragi Dragoš.

Kako do danas nisam primio Tvoje pismo, odložiću svoj dolazak u Beograd. Šaljem Ti pet primeraka mišljenja koje je Dr. Trinajstić već potpisao, a druga dva člana komisije su također izrazili spremnost da ga potpišu. Molim Te da ga potpišeš i vratiš što je moguće ranije. Najkasnije bi mišljenje trebalo biti opet kod nas 6. novembra.

Ako ne želiš potpisati ovo mišljenje, molim Te da i u tom slučaju hitno vratiš priložene primerke. Molio bih Te da onda daš svoje odvojeno mišljenje (u pet primeraka), koje bi trebalo stići u Zagreb najkasnije 7 novembra. S obzirom da je sve to jedna formalnost, nadam se da do toga neće doći. Ako mišljenje ne bude gotovo na vreme odbrana se neće moći održati u decembru.

U koliko mišljenje bude na vreme predano, mogao bih braniti disertaciju u drugoj polovini decembra. Predložio bih petak 21. decembra u 12 sati, jer mi se čini da bi to Tebi odgovaralo.

Srdačni pozdravi

p.s.

u slučaju bilo kakve komplikacije molim Te da nas nazoveš telefonom.

»RUĐER BOŠKOVIĆ« INSTITUTE

41001 Zagreb, Croatia, Yugoslavia

POB 1016  
PHONE: (041) 424-355  
TELEX: 21-383

Zagreb 8. 11. 73.

Dragi Dragoš:

Hvala na brzom slanju mišljenja. Ono je stiglo na vreme i već je predano u rektorat.

Što se tiče mog dolaska u Beograd, očigledno ove nedelje više neću doći. Ako nemaš ništa protiv, došao bih iduće nedelje, pa bi se mogli sastati u sredu i četvrtak. Imamo vrlo mnogo za razgovarati. Nadam se takođe da ima nekog progressa sa grafovima klase B.

Ja ću Te, po svom dolasku u Beograd, nazvati telefonom. Ako ne dobijem od Tebe odgovor smatraću da Ti moj dolazak odgovara. Molim Te da obavestiš o ovome i Simića jer (ako se on bavi sa IB) voleo bih se s njim sastati.

Pozdrav

Jovan

»RUĐER BOŠKOVIĆ« INSTITUTE

41001 Zagreb, Croatia, Yugoslavia

POB 1016  
PHONE: (041) 424-355  
TELEX: 21-383

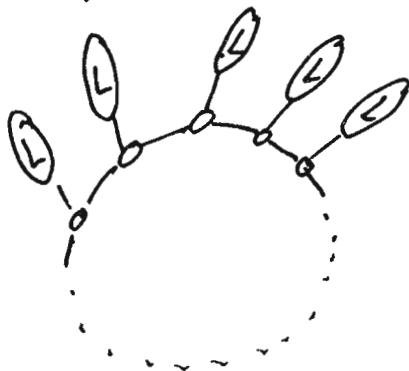
Zagreb 27. XI 1973.

Dragi Dragoš

Raspitao sam se za plaćanje Trojih putnih troškova. Fakultet će Ti troškove refundirati. Pored toga, da se ne bi ponovio slučaj kao kod magistriranja (kada si također trebao dobiti putne troškove), Dr. Cvitaš će na vreme "upozoriti" administraciju.

Odbrana rada je i zvanično odobrena i zakazacu 20. XII.

Šaljem Ti rad o radikalnim i srodnim molekulama, tj: o grafovima oblika



$L = \text{lanac dužine } n$   
( $n=0, 1, 2, \dots$ )

Imamo i neke nepublikovane rezultate kada je  $L$  proizvoljni graf.



Ne posedujem ni ti jednu kopiju rada "Graph Theory and Molecular Orbitals. VIII" (jedina nada je kod Trine) pa ću ti kopiju toga rada poslati tek kada Trinajstić dođe u Zagreb.

Analiziram Tvoje rezultate o aditivaciji broja Kekulé'ovih struktura i o faktORIZACIJI nesimetričnih grafova, ali o tome još nemam šta naročito javiti. Čekam (o) i Tvoje rezultate o aditivaciji  $\eta$ .

Pozdrav

Jvan

Još i ovo: daviš šaljem i naš rad u J.Chem. Phys. kojeg sam korigirao a dao sam nacrtati i sve cetera.

# »RUĐER BOŠKOVIĆ« INSTITUTE

41001 Zagreb, Croatia, Yugoslavia

POB 1016  
PHONE: (041) 424-355  
TELEX: 21-383

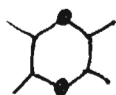
Zagreb, 3.12.1973.

Dragi Dragoš.

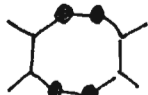
Hitam da Ti odgovorim povodom Tvog pisma o nulama u "lancu prstenova". To je sve nas (Živkovića, Trinajstića i mene) oduševilo. Tvoji rezultati su od najvećeg interesa upravo zato što "pokrivaju" nesimetrične molekule.

U vezi toga možemo Ti već sada saopštiti sledeće:

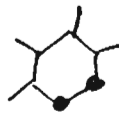
1. Postoje zaista samo četiri tipa prstenova (a,b,c,d):



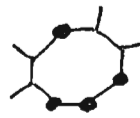
a



b



c



d

i oni su jednoznačno određeni sa veličinom prstena modulo 4 i parnošću broja čvorova između račvanja (a i d imaju neparan broj takvih čvorova, dok b i c paran; na slici su označeni sa ●). Posedujem relativno jednostavan dokaz da se svi ostali slučajevi svode na a-d.

2. U Tvom pismu našlo se nekoliko omaški. Preslikavanja a-d treba da glase

$$a: \alpha \rightarrow 1 + \alpha$$

$$b: \alpha \rightarrow 1 - \frac{1}{\alpha}$$

$$c: \alpha \rightarrow 1 + \frac{1}{\alpha}$$

$$d: \alpha \rightarrow 1 - \alpha$$

Pri tome, pored bezbrojnih drugih, važe i ove lepe jednakosti:

$$b^3 = 1 \quad d^2 = 1$$

$$ab^2a = b \quad ab^2c = cb^2a = d$$

$$cb^2c = b \quad ab^2d = db^2a = c$$

$$db^2d = b \quad cb^2d = db^2c = a$$

$$ada = d \quad adb = bda = c$$

$$bdb = d \quad adc = cda = b$$

$$cdc = d \quad bdc = cdb = a$$

Čini mi se da nije moguće izraziti  $c$  i  $d$  samo pomoću  $a$  i  $b$ . Nadamo se da ćeš Ti kao matematičar moći izvući još nešto iz upadljivo harmonične forme reslikavanja  $a-d$ , koji na izvjestan način čine zatvorenu celinu. To bi i za nas bilo zanimljivo.

Dr. Trinajstić je bio ovde oko 24 sata pa je s Živkovićem otputovao u Lenjingrad. Dogovorili smo se da bi pisali jedan veliki rad o nulama (za možda J.Amer.Chem.Soc.) namenjen organskim kemičarima (gde bi izložili sav raspoloživi materijal) s mnogo primera a bez preterane matematičke strogosti. Dok će ovaj "posao" trajati nekoliko meseci, želeli bismo također da ovaj krasni formalizam izložimo i u jednom kraćem članku (Chem.Phys.Letters) koji bi sadržavao potrebne matematičke detalje, ali također i niz relevantnih primena. (Tih, za nas važnih primena- specijalnih slučajeva već sada znamo desetak!) Na oba rada autori bi bili Ti, ja, Trina i (verovatno) Živković. Iako je to nešto drugačije od našeg prvog dogovora, nadamo se da ćeš se s ovim složiti. Molio bih Te da ako imaš bilo kakvih primedbi ili novih rezultata, da mi to javiš. Inače, 20.12. ćemo moći svi skupa razgovarati. Potle bi trebao da bude gotov prvi rukopis kraćeg rada i skica dužeg.

Primi srdačne pozdrave od Trine, Živkovića i mene.

*Ivan*

( \

p.s. šaljem Ti separat našeg rada br. 6 iz serije, koji je upravo danas stigao.

## Teorem

$$\lim_{x \rightarrow 0} \left( \frac{xI}{xI - A} \right)_{pq} = \frac{a_{N-1}(G/p)}{a_{N-1}(G)} \delta_{pq}$$

Voži za kromatski graf  $G$  sa  $\chi(G) = 1$

$$\chi(G) = 1$$

*Molimo Te da se odлучiš da li  
bi potpisao ovo mišljenje.*

Predmet: Izvještaj i ocjena doktorskog rada  
Mr. Ivana Gutmana: "ISTRAŽIVANJA  
TOPOLOŠKIH SVOJSTAVA KONJUGIRANIH  
UGLJIKOVODIKA"

Dekanatu Prirodoslovno Matematičkog fakulteta  
Sveučilišta u Zagrebu

Komisija izabrana na sjednici Vijeća nastavnika  
PMF-a od 18. listopada 1973. u sastavu Dr. Kenad Trinajstić,  
Dr. Dragoš Cvetković, Dr. Zvonimir Maksić i Profesor Mirko  
Mirnik podnosi ovaj

### I Z V J E Š T A J

Doktorski rad Mr. Ivana Gutmana (asistenta  
Instituta "Rugjer Bošković") pod naslovom: "ISTRAŽIVANJA  
TOPOLOŠKIH SVOJSTAVA KONJUGIRANIH UGLJIKOVODIKA" sadrži  
ukupno 121 stranicu, a podijeljen je na oznake, uvod,  
7 poglavlja, zaključak, popis literature (sa 112 lite-  
rature referenci), sažetke (na hrvatskom i engleskom  
jeziku) i životopis.

U oznakama dano je značenje pojedinih simbola  
koji se u tekstu koriste. U uvodu (prvo poglavlje) dane  
su osnovne definicije (molekularni graf, topologija, itd.),  
svrha rada, spomenuti su važniji doprinosi prije autorovih  
istraživanja i najavljen je opseg autorovih istraživanja.

Drugo poglavlje (Teorija grafova i molekularne orbitale) podijeljeno je na dva dijela. U prvom dijelu (Teorija grafova) dane su definicije pojmova iz teorije grafova koji su potrebni u poglavljima koja slijede. U drugom dijelu ovog poglavlja (Molekularne orbitale) nalazi se kratki prikaz veze između jednostavne (Hückelove) teorije molekularnih orbitala i teorije grafova.

Treće poglavlje (Ukupna  $\pi$ -elektronska energija) podijeljeno je na četiri dijela. U prvom dijelu se razmatra veza između matrice susjedstva, matrice gustoće i ukupne  $\pi$ -elektronske energije. U drugom dijelu ovog poglavlja daju se razne donje i gornje granice za energiju, od kojih su neke bolje od onih poznatih u literaturi. U trećem dijelu (Pravilo petlji) te četvrtom (Neki rezultati primjene pravila petlji) izložen je jedan rezultat koji omogućava da se sagleda ovisnost ukupne  $\pi$ -elektronske energije o strukturi molekule. Aproximativni izrazi za energiju dobiveni iz pravila petlji bolji su od onih poznatih u literaturi i sadrže ih kao posebne slučajeve.

U četvrtom poglavlju (Kekuléove strukture i topologija), a koje je podijeljeno na dva dijela (Kekuléovi grafovi i permutacije, te Veza između broja Kekuléovih struktura i matrice susjedstva) definiran je Kekuléov graf i nađena je veza koja postoji između Kekuléovih grafova i permutacija, kao i veza između broja Kekuléovih struktura i matrice susjedstva. Rezultat koji povezuje permanentu matrice susjedstva s brojem Kekuléovih struk-

tura nije ranije bio poznat u kemijskoj literaturi.

U petom poglavlju (Neka svojstva grafova benzenoidnih ugljikovodika) se diskutira posebna klasa grafova koja odgovara benzenoidnim ugljikovodicima i za tu klasu je dokazan niz originalnih rezultata (jedna lema i sedam teorema).

Šesto poglavlje (Inverzna matrica matrice susjedstva) sadrži primjenu rezultata dobivenih u predhodnom poglavlju. U njemu se diskutiraju neki aspekti povezanosti Hückelove molekularno-orbitalne teorije s VB teorijom, i to veza između Ruedenbergovog i Paulingovog reda veze (prvi dio šestog poglavlja) i veza Kekuléovih struktura s koeficijentima NBMO (treći dio). U drugom dijelu ovog poglavlja ukazano je na pogrešnost jedne formule koju je dao Heilbronner te je prikazano kako ona treba da glasi i za koje grafove važi.

U sedmom poglavlju (Raspodjela  $\pi$ -elektronske gustoće) diskutira se o raspodjeli elektronske gustoće kod nealternantnih ugljikovodika. U prvom dijelu se pomoću pravila petlji daje opći pristup problemu, a u drugom dijelu dana su tri originalna pravila za određivanje smjera i približne veličine dipolnog momenta nealternata.

U osmom, zadnjem poglavlju (Raspodjela energetskih nivoa) diskutirani su neki aspekti ovisnosti raspodjele energetskih nivoa o molekularnoj topologiji. Ono je podijeljeno na tri dijela. U prvom dijelu je pri-

kazan utjecaj zatvaranja prstena na HOMO-LUMO separaciju. Rezultat ovog dijela sažet je u dva originalna pravila.

Drugi i treći dio bave se klasifikacijom konjugiranih ugljikovodika pomoću brojeva  $N_+$ ,  $N_0$  i  $N_-$ . U drugom dijelu (Transformacije koje ne mijenjaju vrijednost  $N_+ - N_-$ ) dokazano je 5 teorema o održanju jedne funkcije brojeva  $N_+$ ,  $N_0$  i  $N_-$ , koji su u trećem dijelu poglavlja (Jedna moguća klasifikacija konjugiranih ugljikovodika) iskorišteni za određivanje osnovnih elektronskih svojstava te za klasifikaciju konjugiranih ugljikovodika.

U zaključku su sažeti rezultati rada po poglavljima. Literatura je dana vrlo iscrpno, s očitom željom autora da bude kompletna u vezi teme koju je doktorskim radom tretirao.

Na temelju iznesenog Komisija daje slijedeći

#### Z A K L J U Č A K

Mr. Ivan Gutman je u svom doktorskom radu razvio topološki pristup studiranju svojstava konjugiranih molekula i na taj se način uključio u pionirski rad istaknutih istraživača Coulsona, Heilbronnera, Ruedenberg, Hosoye, koji u ovoj nadolazećoj kompjuterskoj eri traže jednostavnije pristupe studiranju problema elektronske strukture i reaktivnosti u kemiji. Za odličnu je ilustra-



ciju gore rečenog autorov izraz za totalnu  $\pi$ -elektronsku energiju. Iz postojećih teorijskih računskih metoda može brojkom odrediti vrlo lagano (korištenjem kompjutera) veličinu te energije, ali ne može odrediti koji sve faktori doprinose energiji. Autor je radu prišao vrlo sustavno, što se vidi već i iz Oznaka. Članovi komisije još ne znaju niti jedan pokušaj sustavnog navođenja simbolike grafičke metodologije u kemiji (u fizici je to već podosta davno učinjeno, vidi npr. J.W.Essam and M.E.Fischer, Rev.Mod.Phys. 42 (1970) 272), iako je prirodno da se mnogi rezultati i formule u kemiji izraze crtežom. To je prirodnije nego korištenje numeričkih rezultata.

Dakle, već se na prvom koraku ogleda autorovo nastojanje da sredi dosadašnje znanje i onda na tako točno poznatim temeljima krene naprijed. To je on učinio vrlo uspješno i svako poglavlje sadrži mnoge originalne rezultate (vidi npr. pravilo petlji, vezu između MO i VB teorija u jednostavnoj formulaciji, strogu definiciju benzenoidnih ugljikovodika, niz teorema za nealternantne ugljikovodike, klasifikaciju konjugiranih ugljikovodika itd.). Ukupno je u radu dokazano 12 novih teorema i jedna lema i formulirano je 5 novih pravila.

Doktorski rad Ivana Gutmana obiluje nizom novih rezultata, od kojih su neki publicirani u renomiranim časopisima za kemijsku fiziku (vidi Literaturu) i na taj način prošli i stroge recenzije koje takvi časopisi danas zahtijevaju.

Doktorski rad Mr. Gutmana odlikuje se čistim jezikom i vrlo dobrom tehničkom opremom, iako su se potkrale manje griješke (na strani 2 simboli  $L_1$  i  $L_1^{(p)}$  nisu baš jasni, na strani 28 naslov poglavlja je nečitljiv, ima dosta riječi koje su loše otisnute itd.).

Na osnovu svega iznijetog smatramo da ovaj doktorski rad predstavlja originalni i značajni doprinos istraživanjima topoloških svojstava konjugiranih ugljikovodika te nam je zadovoljstvo predložiti Vijeću nastavnika PMF-a da ga prihvati i kandidatu odobri obranu.

U Zagrebu, dne 7 studenog 1973.

članovi komisije:

N. Trinajstić

Dr. Nenad Trinajstić

Dr. Dragoš Čvetković

Dr. Zvonimir Maksić

Profesor Mirko Mirnik

Predmet: Izvještaj i ocjena doktorskog rada  
Mr. Ivana Gutmana: "Istraživanja  
topoloških svojstava konjugiranih  
ugljikovodika"

Dekanatu PMF-a Sveučilišta u Zagrebu

Komisija izabrana na sjednici Vijeća nastavnika PMF-a  
od 18. listopada 1973. u sastavu Dr. Nenad Trinajstić, Dr. Dragoš  
Cvetković, Dr. Zvonko Maksić i Profesor Mirko Mirnik podnosi ovaj

### IZVJEŠTAJ

Doktorski rad Mr. Ivana Gutmana (asistenta Instituta  
"Rugjer Bošković") pod naslovom: "Istraživanja topoloških svoj-  
stava konjugiranih ugljikovodika" sadrži ukupno 121 stranicu,  
a podijeljen je na oznake, uvod, 7 poglavlja, zaključak, popis  
literature (sa 112 literaturnih referenci), sažetcima (na hrvat-  
skom i engleskom jeziku) i životopisom.

U oznakama dano je značenje pojedinih simbola koji  
se u tekstu koriste. U uvodu (prvo poglavlje) dane su osnovne  
definicije (molekularni graf, topologija, itd.), svrha rada, spo-  
menuti su važniji doprinosi prije autorovih istraživanja i na-  
javljen je opseg autorovih istraživanja. U drugom poglavlju  
(Teorija grafova i molekularne orbitale) dane su definicije poj-  
nova iz teorije grafova koji su potrebni u poglavljima koja  
slijede i ukratko prikazuje veze između jednostavne (Hückelove)  
teorije molekularnih orbitala i teorije grafova. U trećem pog-  
lavlju (Ukupna  $\pi$ -elektronska energija) se diskutira veza izme-  
đu matrice susjedstva, matrice gustoće i ukupne  $\pi$ -elektronske  
energije, donje i gornje granice energije, pravilo petlji i  
njegova primjena (aproksimativni izrazi za energiju). U čet-  
vrtom poglavlju (Kekuléove strukture i topologija) definiran  
je Kekuléov graf, veza Kekuléovih grafova i permutacija, kao i  
veza između broja Kekuléovih struktura i matrice susjedstva.  
U petom poglavlju (Neka svojstva grafova benzenoidnih ugljikovo-  
dika) se diskutira posebna klasa grafova, koja odgovara benze-  
noidnim ugljikovodicima i za tu klasu je dan niz originalnih  
teorema. U šestom poglavlju (Inverzna matrica matrice susjedstva)

diskutiraju se neki aspekti povezanosti Hückelove MO teorije s VB teorijom, kao npr. veza između Ruedenbergovog i Paulingovog reda veze, veza Kekuléovih struktura i koeficijenata NBMO orbitala, i td. U sedmom poglavlju (Raspodjela Pi-elektronske gustoće) se diskutira o raspodjeli Pi-elektronske gustoće kod nealternantnih ugljikovodika, a dana su i originalna pravila za određivanje smjera i približne veličine dipolnog momenta nealternanata. U osmom i zadnjem poglavlju (Raspodjela energetske nivoa) diskutira se ovisnost raspodjele energetske nivoa o molekularnoj topologiji, pa je prikazan utjecaj zatvaranja prstena na HOMO-LUMO separaciju a dana je također i klasifikacija konjugiranih ugljikovodika pomoću brojeva  $N_+$ ,  $N_0$  i  $N_-$ . U zaključku su sažet rezultati rada po poglavljima. Literatura je dana vrlo iscrpno s očitom željom autora da bude kompletna u vezi teme koju je doktorskim radom tretirao.

Na temelju iznesenog Komisija daje slijedeći

#### ZAKLJUČAK

Mr. Ivan Gutman je u svom doktorskom radu razvio topološki pristup studiranju svojstava konjugiranih molekula i na taj se način uključio u pionirski rad istaknutih istraživača Coulsona, Heilbronnera, Ruedenberga, Hosoye, koji u ovoj nadolazećoj kompjuterskoj eri traže jednostavnije pristupe studiranju problema <sup>elektronske</sup> strukture i reaktivnosti u kemiji. Za odličnu je ilustraciju gore rečenog autorov izraz za totalnu Pi-elektronsku energiju. Niz postojećih teorijskih <sup>metoda</sup> može brojkom odrediti vrlo laganom (korištenjem kompjutera) veličinu te energije, ali ne može odrediti koji sve faktori doprinose energiji. Autor je radu prišao vrlo sustavno, što se već vidi iz oznaka. Članovi komisije još ne znaju niti jedan pokušaj sustavnog navođenja simbolike grafičke metodologije u kemiji (u fizici je to već podosta davnino učinjeno, vidi npr. J.W.Essam and M.E.Fischer, Rev.Mod.Phys. 42 (1970) 272), iako je prirodno da se mnogi rezultati i formule u kemiji izraze crtežom. To je prirodnije nego korištenje numeričkih rezultata. Dakle, već se na prvom koraku ogleđa autorovo nastojanje da sredi dosadašnje znanje i onda da na tako točno poznatim temeljima krene naprijed. To je učinio vrlo uspješno i svako poglavlje sadrži mnoge originalne rezultate, vidi npr. pravilo petlji, vezu između broja Kekuléovih struktura i matrice susjedstva, strogu definiciju benzenoidnih ugljikovodika, niz teorema za nealternantne ugljikovodike, klasifikaciju konjugiranih ugljikovodika, itd.

Doktorski rad Ivana Gutmana tako obiluje nizom novih rezultata, od kojih su neki publicirani u renomiranim časopisima za kemijsku fiziku (vidi literaturu) i na taj način prošli i stroge recenzije koje takvi časopisi danas zahtijevaju.

Doktorski rad I. r. Gutmana odlikuje se čistim jezikom i vrlo dobom tehničkom opremom, iako si se potkrale manje griješke (na strani 2 simboli  $L_1$  i  $L_1^{(p)}$ ) nisu baš jasni, na strani 23 naslov poglavlja je nečitljiv, ima dosta riječi koje su loše otisnute itd.).

Na osnovu svega iznijetog smatramo da ovaj doktorski rad predstavlja originalni i značajni doprinos istraživanjima topoloških svojstava konjugiranih ugljikovodika te nam je zadovoljstvo predložiti Vijeću nastavnika PMF-a da ga prihvati i kandidatu odobri obranu.

U Zagrebu, dne 7. studenog 1973.

članovi komisije:

---

Dr. Venad Trinajstić

---

Dr. Dragoš Svetković

---

Dr. Zvonimir Maksić

---

Profesor Mirko Mirnik

»RUĐER BOŠKOVIĆ« INSTITUTE

41001 Zagreb, Croatia, Yugoslavia

POB 1016  
PHONE: (041) 424-355  
TELEX: 21-383

Zagreb, 13 XII 1973

Dragi Dragoš.

Želio bih Ti se još jednom javiti prije  
odbrane, koja će se održati u četvrtak 20. XII 1973.  
u 13<sup>00</sup>h u Institutu "Ruđer Bošković". U koliko  
nam se Ti više ne bi javljao smatraćemo da dolaziš  
u četvrtak u jutro.

Vreme od jutra do 13 h eventualno bi  
moglo da se iskoristi za razgovore.

Ako bi Ti nešto još trebalo u vezi dolaska  
u Zagreb molim Te da javiš.

Srdacima pozdravi

Ivan