

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, 1970 - 1972

Comments by D. Cvetković

In 1969 I was a teaching assistant for mathematics at the Faculty of Electrical Engineering, University of Belgrade. By some chance I came across at problems concerning graph eigenvalues and started publishing some papers.

At the end of 1969 I got in touch with Professor Horst Sachs, Technische Hochschule Ilmenau, Ilmenau, German Democratic Republic. Professor Sachs has already published some important papers on graph spectra and has friendly responded to my letter to him. In 1980 we published together (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 Professor Sachs has helped me to obtain my doctoral degree and how we have started the work on the book *Spectra of Graphs*.

I defended my doctoral thesis *Graphs and Their Spectra* on May 27, 1971. At that time I got in touch with Ivan Gutman who had just graduated Chemistry at the University of Belgrade. His fortunate great creative act at that time was to recognize that the theory of graph spectra has applications in Chemistry (in the Hückel theory of non-saturated hydrocarbons). We started a fruitful collaboration in publishing some papers. The chemical community has widely accepted Gutman's ideas in using graph spectra to chemical problems. Several thousands of papers have been published in later decades along these lines which has led to the creation of what is nowadays called Chemical Graph Theory.

This file contains several letters which Gutman has sent me from Zagreb, Croatia, where he immediately after graduation got a position at the scientific institute "Rudjer Bošković".

Sehr geehrter Herr Professor Sachs ,

Ich beehre mich, Ihnen meine zwei Abhandlungen, die die Graphen.-
spectren interpretieren, zu senden. Ich bitte Sie hofflichst um Ihre Meinung
ob diese Abhandlungen publiziert werden konnen.

Ich bin Assistent für Mathematik an der Elektrotechnischen Fa-
kultät in Beograd / Cheff der mathematischen Katheder ist Prof. Dr D.S. Mi-
trinović / . Bei uns in Beograd besteht die Moglichkeit, dass diese Abhand-
(ungen gedruckt werden.

In vorhinein bedanke ich mich für Ihre Liebenswürdigkeit und
hochachtungsvoll bleibe

5.12.1969.

PROF. Dr. HORST SACHS
DDR 63 Ilmenau

Am WENSELSBERG 12

10th February 70

Dear Professor,

I wish to thank you most heartily for your kindness
in reading my papers and giving your opinion.

I take this opportunity to send you, herewith enclosed,
the reprints of my papers which are up to now published.

With kind regards,

Yours sincerely

D. Cvetković

Dragoš Cvetković

Prof. Dr. Horst Sachs
63 Ilmenau
Am Wenzelsberg 12
Deutsche Demokratische Republic

21st September 1970

Dear Professor Sachs,

Professor Mitrinović has shown to me your letter regarding my papers. I wish to thank you most warmly on your nice words about me and my papers. I am also appreciating the ideas given relevant to graph spectres which will be useful to me in my further work.

Two new papers of mine are recently out of print, and I am pleased to enclose them herewith.

In agreement with Professor Mitrinović I take the liberty to address you the following request: For me it would be certainly very beneficial (having in view my work on Dissertation and eventual later writing of a monograph on graph spectres) to meet you personally. Knowing your business and your health state, I take the liberty to ask you whether in the coming months you could spare some time for me during my short stay in Ilmenau. Stay expenses of mine will be covered either by our Faculty or by some other establishment. During my visit I will use the German language.

Wishing you an improvement in your health, I remain,

Sincerely Yours

Dragoš Cvetković

Dragoš Cvetković

Prof. Dr. Horst Sachs

DDR 63 ILMENAU

Am Wenzelsberg 12

Deutsche Demokratische Republik

5th January 1971

Dear Sir,

Relying on your accord, in principle, with my visit to you, which was conveyed to me by your colleague who had stayed here, I applied for a scholarship for the studies abroad. The Council for Scientific Work of the Republic of Serbia has assigned to me the requested scholarship for a studious travelling abroad from 4 -6 weeks. Naturally, for an efficient use of the scholarship I need an official invitation from you.

I have finished my Doctorate Thesis and one of these days I shall submit it to the Faculty. As the Dissertation is written in Serbo-Croatian I am not sending it to you. Once it is defended it will be published in English and then supplied to you.

I am enclosing herewith reprints of my papers published meanwhile.

I take this opportunity to send you my best wishes for a Happy New Year.

Yours Sincerely

Dragoš Cvetković

Beograd, 18.3.1971.

Lieber Herr Professor Sochs,

Ich habe Ihren Brief von 4.3. vor einigen Tagen bekommen ~~mit~~ ^{mit} Vielen Dank für Ihre Gratulation^{ation}! Doch das ist ein bisschen früh, weil die Promotion ist, als ich schon Ihnen in meinem früheren Brief gemeldet habe, ~~am~~ Anfang~~am~~ Mai plant. Die Verspätung ist vorgekommen, weil zwei Mitglieder der Promotionskommission ^{mussten} plötzlich ins Ausland ~~beamtlich~~ ^{ab} reisen ~~konnten~~. ~~mussten~~ Ich bedanke mich sehr auch für Ihre Bemühungen ~~in Verbindung mit meinem Ansuchen~~ ^{Getzt} werde ich auf Ihre Fragen antworten.

1) Name: CVETKOVIĆ

2) Vorname: DRAGOŠ

3) Geburtsdatum: 6.3.1941.

4) Geburtsort: SREM.MITROVICA (JUGOSLAWIEN)

5) Wohnanschrift: ~~11000~~ 11000 BEOGRAD, LAMARTINOVA 44
(ich besitze kein Telefon)

6) Arbeitsstelle: ASISTENT DER MATHEMATISCHEN KATHEDER AN DER ELEKTROTECHNISCHEN FAKULTÄT IN BEOGRAD

7) Art der Beschäftigung, Tätigkeit, Titel: DIPL.-ING.

8. Wissenschaftszweig, Fachrichtung: MATHEMATIK,
GRAPHENTHEORIE.

9. Sprachen: ICH KANN DEUTSCH SPRECHEN; ~~ICH~~
~~DIE~~ FACHLITERATUR ~~AUF~~ DER RUSSISCHEN, ENGLISCHEN UND
FRANZÖSISCHEN SPRACHE KANN ICH LEBEN.

10. Nr. des Personalausweises: 224140 (SUP BEOGRAD)
aber ich glaube daß dieses Ausweis gilt nicht für Ausland.

11. Nr. des Reisepasses: Ich besitze jetzt keinen Rei-
pass, aber in einigen Tage, ich glaube, ich werde
~~ihn~~ ~~ich~~ haben und ^{dann} gleich Ihnen die Nummer mitteilen.

12. Ich besitze kein Kooftfahrzeug.

13. Ungefähr 25 Tage.

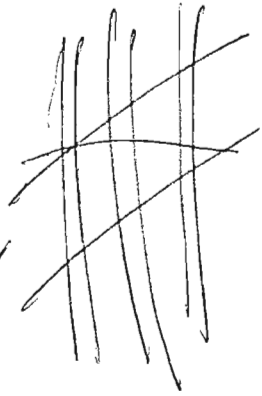
Dauer des Aufenthalts

14. Ich glaube das alle Formalitäten nicht,
früher des Endes April beenden werden können.
Da ich ~~ich~~ ^{habe} Anfang ~~ich~~ Mai die ~~Pro~~ Verteidigung der
Thesis ^{habe} ~~ich~~ schloß ^{ich} als Termin für Einreise ~~ich~~ Ende
Mai ~~vor~~. Ich weiß nicht ob das zu spät ist, d.h. wann
~~beginnt~~ bei Ihnen der Sommerurlaub beginnt, Auch
ich weiß nicht ob das Ihnen ~~stimmt~~ ^{entspricht}, da Sie noch
nicht ganz gesund sind und ein Sonnenarium aufsuchen
sollen. Deshalb (ich lasse) Ihnen, wenn das Ende Mai,

~~stimm~~ als Termin meiner Einreise nicht ~~stimm~~^{erfüllt},
ganz nach Ihrer Wunsch ein späteres Termin
(vielleicht im Herbst) festzustellen.
~~sofort~~

Mit freundlichen Grüßen

D. Belković



Beograd 3.6.1971.

Lieber ^{Herr} Professor Sachs,

Endlich kann ich Ihnen melden daß ich vor
einigen Tagen meine Dissertation verteidigt habe.
Ich benutze diese Gelegenheit um Ihnen mein schön-
sten Dank für alles, was Sie über diese Dissertation
getan haben, noch einmal ~~zu~~ auszudrücken.

^{Zu} ~~bei~~ Ihnen in September komme. Dann habe ich genug
Zeit mich gut zu bereiten um ^{den} ~~den~~ Besuch möglichst
viel ^{zu} auszunützen.

In ~~der~~ Zwischenzeit ~~sche~~ sende ich Ihnen
drei ^{meine} neue Schriften; ich hoffe, ~~da~~ sie ^{werden} ~~sein~~ interes-
sant für Sie. Zwei von ihnen werden bei uns
publiziert ^{sein} ~~werden~~, und „Inequales obtained...“
habe ich nach Ungarn (Acta Mathematica) geschickt;
ich weiß noch nicht ob sie dort publiziert ^{wird} ~~werden~~.

Ich übersetze jetzt meine Dissertation in die englische
Sprache und sie wird bald publiziert, ~~wird~~. Ich
wäre glücklich wenn Sie könnten meine Dissertation,
~~die ich Ihnen bald senden werde~~ ^{obwohl} im Manuscript ablesen, ~~aber~~ ^{aber} ich weiß daß Sie jetzt auf
Urlaub bzw. Erholung sind, Andererseits Prof. Mitinović

... iad ...

versichert, wahrscheinlich aus technischen Gründen, daß ich möglichst rasch die Manuscript bereite.

Empfangen Sie, Herr Professor, viele herrliche Grüsse.

Ihr sehr ergebener

Ich werde wahrscheinlich Ihnen das Manuscript ^{doch} senden, aber ~~ich~~, bitte, ~~Sie~~ wenn Sie keine Zeit ^{haben}, gehen Sie nicht in Einzelheiten; ich werde zufrieden mit einem Allgemeinen Urteil. Dissertation bearbeitet Ideen die Ihnen aus meinen früheren Arbeiten bekannt sind.

Technische Hochschule Ilmenau

Sektion Mathematik, Rechen Technik und
"Ökonomische Kybernetik"

Der Direktor

Herrn

Professor D. S. Mitinovic

University of Belgrade

Faculty of Electrical Engineering

Bulevar revolucije 73

Beograd, Yugoslavia

Ilmenau 23.3.1970

Sehr geehrter Herr Kollege Mitinovic!

Für Ihren Brief vom 4.2.1970, bedauere ich mich sehr und bitte Sie zugleich um Entschuldigung, dass ich infolge vieler Pflichten erst heute Zeit finde, Ihnen zu antworten.

Natürlich bin ich einverstanden und empfinde es als eine große Ehre für mich, wenn Sie die Arbeit von Herrn Lethovic mit dem Zusatz "Presented by Prof. H. Sachs" versehen.

Sehr geehrter Herr Kollege, ich freue mich, über Herrn Lethovic mit Ihnen Verbindung gefunden zu haben und bin

mit freundlichen Grüßen
Hochachtungsvoll

Ilmenau, 17. 2. 71

Herrn

Drago's Cvetković

Lamartinova 44

Beograd, Yugoslavia

Lieber Herr Cvetković!

Für Ihren Brief vom 5. Januar und für die über-
sandten Sonderdrucke danke ich Ihnen sehr!

Sicher werden Sie mit Ungeduld eine Antwort von
mir erwarten, und ich bitte Sie sehr um Verständ-
nis dafür, daß ich Ihnen erst heute schreiben kann:

Unmittelbar nachdem mir Herr Dr. Bräuning über
seine Zusammenkunft mit Ihnen in Belgrad be-
richtet hatte, mußte ich mich in ein Krankenhaus
begeben, wo ich bis Ende des vergangenen Jahres
lag (Herz), und auch heute bin ich noch nicht
im Dienst. Inzwischen fühle ich mich aber
wieder wohler und hoffe, in der nächsten

Woche die erforderlichen Schritte unternehmen zu können, um die offizielle Einladung für Sie zu erwirken. Da der Dienstweg immer eine gewisse Zeit in Anspruch nimmt, muß ich Sie leider noch um etwas Geduld bitten. Ich freue mich jedenfalls sehr auf Ihren Besuch hier und wünsche Ihnen für die Verteidigung Ihrer Dissertationschrift (Thesis) viel Erfolg!

Ich weiß nicht, ob offiziell ein Arbeitsplan für Sie oder für uns erforderlich ist; Hauptpunkte eines solchen Planes sollten sein: Teilnahme am Seminar über Graphentheorie, Ihr Vortrag im Rahmen dieses Seminars, eventuell ein Kolloquiumsvortrag von Ihnen, ferner Gedankenaustausch mit allen Kollegen Graphentheoretikern. Falls Sie andere Punkte für wichtig halten, so teilen Sie mir diese bitte bald mit.

Mit gleicher Post schreibe ich an Herrn Prof. Mitinovic

Mit besten Grüßen!

Ihr
Horst Sachs

4. März 1971

Lieber Herr Dr. Cvetković!

Kann man zur Promotion schon gratulieren?
Falls ja, so möchte ich das bitte recht herzlich
tun!

Ich habe inzwischen für Ihre Einreise hier
die erforderlichen Schritte eingeleitet, benötige
aber noch Ihre Personalien. Deshalb bitte ich Sie,
mir diese möglichst bald mitzuteilen. Und
zwar geht es um folgende Fragen:

- 1) Name
- 2) Vorname
- 3) Geburtsdatum
- 4) Geburtsort
- 5) Wohnanschrift (Adresse, Telefon-Nummer)
- 6) Arbeitsstelle
- 7) Art der Beschäftigung,
Tätigkeit, Titel

- 8) Wissenschaftszweig, Fachrichtung
- 9) Sprachen (ist Verständigung
in deutsch [oder russisch?
oder englisch?]
möglich?)
- 10) Nr. des Personal ausweises (falls Sie
so etwas haben)
- 11) Nr. des Reisepasses
- 12) Nr. des Kraftfahrzeugs (falls Sie mit
eigenem Auto kommen).
- 13) Dauer des Aufenthalts
- 14) Bevorzugte oder mögliche Termine für
Ihre Einreise.

Zu Punkt 14 muß ich noch bemerken, daß
ich im Frühjahr oder Sommer für etwa
4 Wochen ein Sanatorium aufsuchen will,
jedoch steht der Termin hierfür noch

nicht fest - bitte, lassen Sie sich selbst
genügend Spielraum!

Ich freue mich auf Ihre persön-
liche Bekanntschaft

und bin mit freundlichen Grüßen

Ihr

Horst Lehn

P.S. Gleichzeitig bitte ich um Ihre
Vorschläge zur Ergänzung Ihres
Arbeitsplanes (oweit mich betreffend).
Bitte informieren Sie auch Herrn Prof. (Mitrinovic) und übermitteln ihm beste
Grüße von mir.

H. L.

Ilmenau, 3.5.71

Lieber Herr Grotkowitz!

Vielen Dank für Ihre beiden Briefe mit den Angaben zur Person. Ich habe inzwischen die notwendigen Schritte eingeleitet und hoffe, daß ich Ihnen bald eine Einladung offiziell übersenden kann. Ich bedauere, daß das alles so viel Zeit beansprucht, aber leider kann ich den Vorgang von mir aus nicht beschleunigen. Nun zum Termin Ihres Aufenthaltes hier: Daß er noch in diesem Monat zustande kommt (also im Mai, wie Sie vorsehen), ist wohl nicht mehr zu erwarten. Im Juni soll ich

nach einer Kur umgezogen und anschließend,
im Juli, habe ich dann Urlaub. Im August
sind hier Hochschulferien - ich habe deshalb
für Ihren Aufenthalt den September
vorgeschlagen: Hoffentlich sind Sie nicht zu
sehr enttäuscht. Aber das ist noch eine
akzeptable Jahreszeit, und wir können
dann alles in Ruhe vorbereiten.

Ich wünsche sehr, dass es nun keine
Komplikationen mehr gibt!

Für die Verteidigung Ihrer Dissertations-
schrift wünsche ich Ihnen viel Erfolg
und eine recht gute Note!

Mit freundlichen Grüßen

Ihr

Horst Sachs

Ilmenau, 17. Sept. 1971

Lieber Herr Dr. Cveticovic!

- Inzwischen hat der September begonnen, und ich habe von unserer zuständigen Stelle noch immer keine Nachricht erhalten, wann Sie hier eintreffen werden. Heute ermunterte ich mich bei der Abteilung für internationale Beziehungen der Hochschule (die für die Bearbeitung meines bzw. Ihres Antrages seitens der Hochschule zuständig ist), erfuhr aber, daß auch dort noch kein Termin bekannt ist. Ich würde Sie auch gern als meinem persönlichen Gast einladen, aber meine Anfrage (bereits vor Monaten) ergab, daß Studienreisen mit Stipendium in jedem
-

Falls auf dem Dienstweg abzuwickeln sind, so
daß ich die Angelegenheit von mir aus nicht mehr
beschleunigen kann. Ich möchte Sie aber bitten,
doch Ihrerseits einmal bei der zuständigen Stelle

Ihres Ministeriums nachzufragen, was Sie von mir
aus noch unternehmen können. Vielleicht ist es
^(sofern das zweckmäßig)
erforderlich, daß Sie sich Zweckes Erteilung eines
Visums auch noch direkt an das Belgrader
Konsulat der Deutschen Dem. Republik wenden ???

Ich würde mich sehr freuen, wenn ich Sie recht
bald bei uns begrüßen könnte!

Mit recht freundlichen Grüßen
auch an Herrn Professor Mitinović,

Ihr

Herst Sachs

Ilmenau, 8.9.71

Herrn
Dr. D. Cvetkovic
11000 Beograd
Lamartinova 44

Lieber Herr Dr. Cvetkovic!

Sicher haben Sie inzwischen den Brief, den ich Ihnen vor ein paar Tagen schickte, erhalten. Leider ist durch ein bedauerliches Missverständnis eine Verzögerung Ihrer Reise hierher eingetreten, aber inzwischen, so hoffe ich, konnte ich die Situation klären: Ich hoffe sehr, in der Lage zu sein, Ihnen am Anfang der nächsten Woche das erforderliche Vorvisum zuzusenden, auf Grund dessen Sie dann in die Deutsche Demokratische Republik einreisen können. Auf jeden Fall werde ich Sie am Anfang der nächsten Woche über den Stand der Dinge informieren. Es tut mir

sehr leid, daß ich versäumte, Ihr Visum rechtzeitig zu beantragen (ich wußte nicht, daß ich unabhängig von der Genehmigung Ihres Aufenthaltes an unserer Hochschule auch noch die Einreisegenehmigung beantragen mußte, und das hätte schon vor Monaten geschehen können) - bitte seien Sie mir deshalb nicht böse.

Ich habe veranlaßt, daß der Direktor der Sektion, der ich angehöre, Herr Professor Vogel, Ihnen heute ein offizielles Einladungsschreiben übermittelt: Ich bitte Sie, dieses Schreiben bei sich zu ~~haben~~^{tragen}, so daß Sie es beim Grenzübertritt erforderlichenfalls vorweisen können.

Ich hoffe sehr, daß es nun keine weiteren Komplikationen gibt! Ich freue mich darauf, Sie kennen-
zulernen, und bin

mit freundlichen Grüßen

Ihr

Herr Leubs

Ilmenau, 20. 12. 71

Lieber Herr Cretzovic!

Vor mir liegen eine Karte und zwei Briefe von Ihnen, für die ich mich noch nicht bedankt habe: Das möchte ich hiermit nachholen! Bitte entschuldigen Sie, daß ich noch nicht eher schrieb, als 1.) heißt mich zum Jahresende die Arbeit (das ist bei Ihnen sehr ökonomisch), und 2.) wollte ich Ihnen zum dem Empfang der Bücher, die Sie an mich abgesprochen haben, bestätigen, doch leider habe ich bis heute noch keine Buchsendung erhalten. Für die viele Mühe, die Sie sich deshalb gemacht haben, und für die vielen Bücher, die Sie für mich gekauft oder bestellt haben, möchte ich Ihnen ganz besonders herzlich danken! Bitte schreiben Sie mir, was ich Ihnen dafür schicken kann. Wenn die Bücher bis auch noch nicht angekommen sind, so zweifle ich doch nicht daran, daß Sie in dem

nächsten Tagen eintreffen werden. Bitte benutzen Sie bei Buchsendungen immer die Dienstadresse:
Technische Hochschule Jena, Sektion Mathematik,
Rechenchnik und Ökonomische Kybernetik, Herr ...
Aber geben Sie nicht zu viel Geld für mich aus! —

Lieber Herr Cvetkovic, ich kann mir gut vorstellen, daß in Belgrad viele Pflichten auf Sie gewartet haben: Werden Sie „Algebra und Logik“ für Ingenieure oder für Mathematiker lesen? Das wird in jedem Fall viel Arbeit, aber hoffentlich auch viel Freude machen.

Die Übersetzung meines Artikels „Gedanken zur Entwicklung der Theorie der endlichen Graphen“ genehmige ich natürlich sehr gern, und auch die Redaktion der „Mitteilungen der Mathematischen Gesellschaft der DDR“ hat mir entgegen keine Einwände

Und nun zur geplanten Monographie über
Graphenspektren: Ich freue mich sehr, daß Sie -
trotz Ihrer großen Belastung - mit soviel Eifer
gleich an die Arbeit gegangen sind! Ich selbst
habe inzwischen ein Gespräch mit dem "Deutschen
Verlag der Wissenschaften, Berlin" geführt mit dem
Ergebnis, daß dieser Verlag im Prinzip gerne bereit
ist, eine solche Monographie herauszubringen,
wie könnten etwa in den Plan 1973/74 auf-
genommen werden. Wenn die Einzelheiten
können zu gegebener Zeit noch präzisiert
werden.

Auch die von Ihnen vorgeschlagene Gliederung
ragt mir zu - ich glaube, die "block designs"
sollten wir unbedingt berücksichtigen, aber leider
habe ich davon kaum eine Ahnung. Schön wäre
es, wenn wir das Kapitel über Anwendungen recht
stark und zugkräftig machen ~~sollten~~ könnten.
Ich glaube, auf ein allzu starres Schema sollten wir

mus noch nicht festlegen, sondern die Gliederung vorerst
 als Arbeitsgrundlage betrachten - die besten Gedanken
 kommen immer erst bei der inhaltlichen Erarbeitung
 selbst. Nur in einem Punkt habe ich große Bedenken:
 Ich glaube nicht, daß ich das Tempo, das Sie bereits
 zum Start ausschlagen (und ich freue mich darüber!),
 durchhalten kann: Gegenwärtig korrigiere ich die
 Bögen zum Teil II meines Brückleins und habe bereits
 für das kommende Jahr eine Reihe von Forschungs- und
 Publikationsverpflichtungen (neben der Lehre), so daß
 ich für den ersten Entwurf lieber das ganze Jahr 1972
 vorsehen möchte (womit ich betroffen bin, bitte lassen Sie
 sich nicht bremsen!). Wir könnten dann auch die
 block-designs hier in einem Seminar behandeln. Die
 Zeit drängt ja noch nicht so sehr, da die Dinge im
 Fluss sind und täglich Neues hinzukommt, so daß
 in einem Jahr manche Kapitel vielleicht in besserer,
 abgerundeter Form dargestellt werden können. Das soll
 Sie jedoch nicht hindern, Material zusammenzufragen
 und diejenigen Kapitel, die bereits fest geformten Inhalt
 haben, zu konzipieren. Ich glaube, daß ich vielleicht
 im April oder im nächsten Jahres voll "erustigen" kann.
 Bitte, senden Sie mir immer den neuesten Stand des
 Projektes mit! Und noch einmal: Vielen Dank!

Recht herzliche Grüße
 neuzeit
 2hr
 Hrm
 Paul

že u intervalu [-3,+3].

Isključivo kao podrška i
očehaj odgovor Ivan Gostinica
SOMBOR, STEPANOVICA 7

ДОПИСНИЦА-DOFISNICA
ПОШТЕНСКА КАРТИЧКА

DR

DRAGOŠ CVETKOVIĆ

11000 BEOGRAD

LAMARTINOVA 44



Dragi dr. Cretkoviću

Knjiga "DICTIONARY OF TI-ELECTROCALCULATIONS" od Coulson-a i Streitveiser-a nalazi se godinama u antikvarnici Srpske književne zadruge u ulici Maršala Tita. Knjiga se nalazi među ostalim stručnim knjigama; tako ćete je prepoznati: braon je boje a visoka barem 30 cm. Najbolje da je potražite sami, jer se može desiti da prodavac kaže jednostavno da je nema, da ne bi morao sam da je traži.

Na strani X te knjige nalazi se tabela (koz dolara) koja predstavlja na jezik grafova gledi: karakteristične vrednosti matrice inverznog le-

Šombor, 30.V 1971 g.

Poštovani Dr. Cvetkoviću,

Volim da vam javim, da je naš tim dokaz teoreme o broju nula u spektru bihromatskog grafa sačinio jednu ograšku.

Što se tiče teoreme o sinetričnosti spektra bihromatskog grafa tu su hemičari prilično preduhitrili matematičare. Članak Coulson-a i Rushbrooke-a publikovan je još pre rata u časopisu Proceedings of the Cambridge Philosophical Society (Proc. Camb. Phil. Soc. 36, 193, 1940.), koji se, koliko je meni poznato, ne može nabaviti u Beogradu. Kasnije objavljeni članak (C.A. Coulson, H.C. Longuet-Higgins, Proc. Roy. Soc., 192, 16, 1947.) može da se nađe u biblioteci Hemijskog instituta.

U knjizi koju sam vam poslao nalazi se također dokaz ove teoreme (str. 78-80), a šaljem vam i svoj dokaz. U koliko ste još uvek zainteresovani za Lückel-ovu metodu predlažem vam da obratite pažnju na § 11, § 13 (zaključno sa str. 68) i § 14.

Konačno, želeo bih vam skrenuti pažnju na dva članka J.A. Bočvar-a i I.V. Stenkevič-a (Žurnal strukturnoj himii 10, 680, 1969. i 12, 142, 1971.) koji u suštini izučavaju spektralne osobine nekih klasa grafova.

Srdačno vas pozdravlja:

Ivan Gutman

P.S.

Ovu pošiljku sam prvobitno poslao na adresu:
Drago Cvjetković, Beograd, Lamartinova 4,
ali se pošiljka vratila jer je adresa pogrešna.

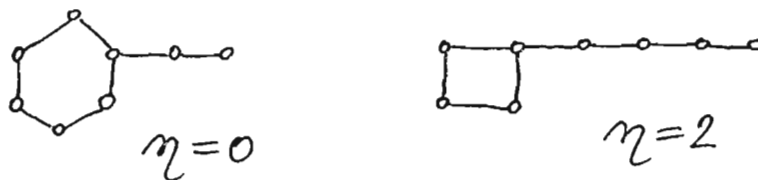
2. 6. 1971.

Sombor, 11.VII 1971.

Dragi Dr. Cvetkoviću,

do sada sam sakupio nekoliko pravila o broju nula u spektru bihromatskih grafova pa sam odlučio da Vam se javim.

Pre svega, broj nula u spektru nije jednoznačno određen brojevima p i q , čak ni stepenima pojedinih čvorova; na primer:



Pravila koja ću sada da navedem mogu se dokazati elementarnim razmatranjima u vezi submatrice A . Broj nula u spektru grafa G označiću sa $\eta(G)$.

1. Ako je G_1 podgraf grafa G , onda:

$$\eta(G) - \eta(G_1) \leq \delta_{\check{c}}$$

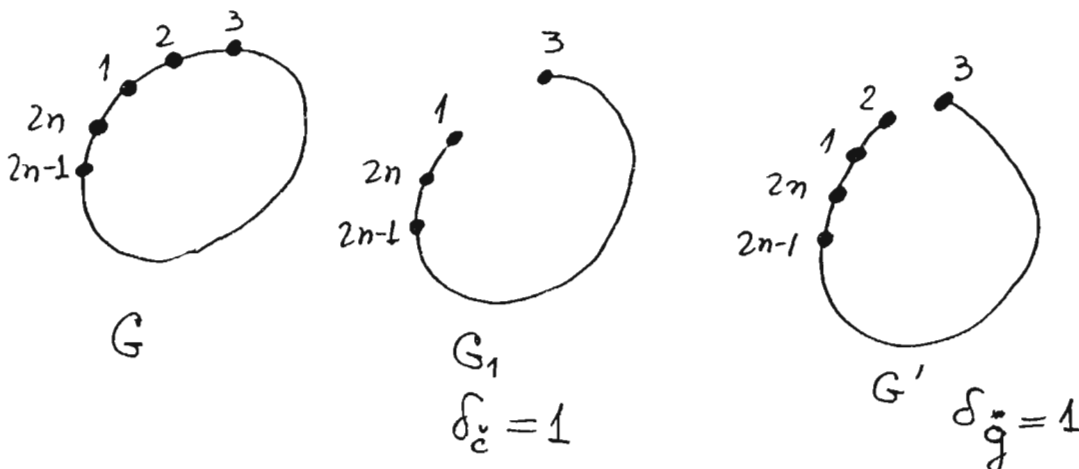
gde je $\delta_{\check{c}}$ broj čvorova koji "fale" u G_1 .

2. Ako je G' delimični graf grafa G , onda:

$$|\eta(G) - \eta(G')| \leq 2\delta_g$$

gde je δ_g broj grana koje "fale" u G' .

Na primer, za konturu G sa $2n$ čvorova je:



Znajući da je $\eta(G_1) = 1$, $\eta(G') = 0$ (videti pravilo 4.) koristeći pravilo 1. imamo:

$$\eta(G) \leq \delta_{\check{c}} + \eta(G_1) = 2.$$

Koristeći pravilo 2. imamo:

$$|\eta(G) - \eta(G')| = |\eta(G)| = \eta(G) \leq 2\delta_g = 2.$$

Prema tome, za proizvoljnu konturu je $\eta \leq 2$.

3. Ako graf G sadrži čvor stepena jedan i ako se podgraf G_1 dobija eliminacijom toga i njemu susednog čvora, onda:

$$\eta(G) = \eta(G_1).$$

Ovo pravilo može ponekad da bitno skрати određivanje broja nula. Na primer:

$$\eta(\text{cycle}_8) = \eta(\text{cycle}_8 - \text{vertex}) = \eta(\text{cycle}_4) = \eta(\text{cycle}_2) = \eta(\text{two isolated vertices}) = 2$$

Pomoću ovog pravila potpuno je određen broj nula u spektru drveta.

4. Spektar drveta ne sadrži nulu ako i samo ako je za svaki čvor vezano tačno jedno podrđvo sa neparnim brojem čvorova.

5. Za lanac[⊗] L_n sa n čvorova važi:

$$(L_n) = \begin{cases} 0 & \text{ako je } n \text{ parno} \\ 1 & \text{ako je } n \text{ neparno} \end{cases}$$

6. Nužan (ne i dovoljan) uslov da bihromatski graf nema nulu u svom spektru je da postoji njegov delimični graf čiji su svi čvorovi stepena jedan. (Ovo pravilo je zanimljivo jer prevedeno na jezik organske hemije glasi:....da je moguće napisati Kekulé-ov-

⊗ tako nazivam drvo u kojem nema čvorova stepena većeg od dva.

sku strukturnu formulu.)

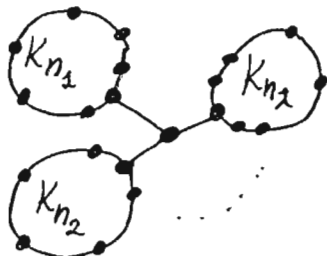
7. Ako je $\eta(G_1) = 0$ i ako se graf G dobija proizvoljnim spajanjem pomoću jedne grane grafova G_1 i G_2 tada:

$$\eta(G) = \eta(G_2).$$

8. Ako je K_n kontura sa $2n$ čvorova, tada:

$$\eta(K_n) = \begin{cases} 0 & \text{ako je } n \text{ neparno} \\ 2 & \text{ako je } n \text{ parno} \end{cases}$$

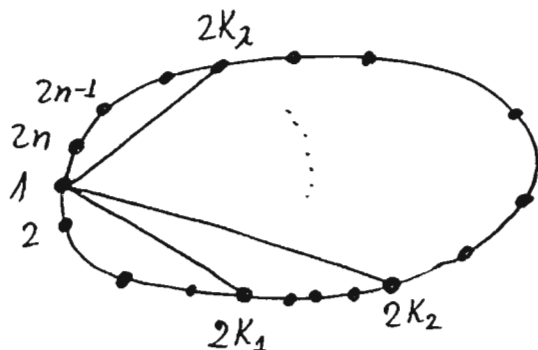
Primer: Pomoću pravila 7. i 8. lako je pokazati da je za



$\eta = 1$ ako su svi $n_i, i=1,2,\dots,\lambda$, neparni brojevi. Ako je samo jedan n_i paran tada je na osnovu pravila 7., 8. i 3. takodje $\eta = 1$. Ako su samo dva n_i parna tada je na osnovu pravila 10. $\eta = 3$. Ako ima $\lambda' > 2$ parnih n_i tada se na osnovu pravila 1. zna da je

$$\eta \leq 1 + 2\lambda'.$$

9. Za graf G (λ -puta premošćena kontura)



$$\eta(G) = \begin{cases} 0 & \text{ako } \sum_{i=1}^{\lambda} \text{par}(k_i) \neq h \\ 2 & \text{ako } \sum_{i=1}^{\lambda} \text{par}(k_i) = h \end{cases}$$

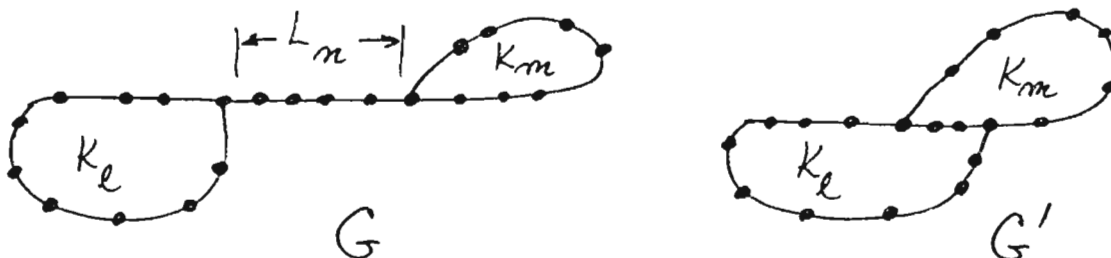
gde je

$$\text{par}(k) = \begin{cases} +1 & \text{ako je } k \text{ parno} \\ -1 & \text{ako je } k \text{ neparno} \end{cases}$$

$$h = \begin{cases} 2 & \text{ako je } n \text{ neparno} \\ 0 & \text{ako je } n \text{ parno} \end{cases}$$

Specijalno za $\lambda = 1$ je $\eta(G) = 0$.

10. Neka graf G ima kao podgrafove konture K_ℓ i K_m (sa 2ℓ i $2m$ čvorova) i lanac L_n (sa $n \geq 0$ čvorova). Za $n < 0$ imamo graf G' .



Za paran broj čvorova (tj. za parno n):

$$\eta(G') = 0 \quad \eta(G) = \begin{cases} 0 & \text{ako su } \ell \text{ i } m \text{ neparni} \\ 2 & \text{u ostalim slučajevima} \end{cases}$$

Za neparan broj čvorova (tj. za neparno n):

$$\eta(G') = \eta(G) = \begin{cases} 1 & \text{ako su } \ell \text{ i } m \text{ neparni} \\ 3 & \text{u ostalim slučajevima} \end{cases}$$

Ovde svakako treba ubrojiti i pravilo koje ste Vi našli za grafove čiji su svi čvorovi jedne boje stepena dva (iz čega takođe sledi pravilo 8.), kao i:

- $\eta \geq |p - q|$.
- $\eta \leq p + q - 2$, kao i pravilo o bikompletnom grafu.
- Ako je $p = q$ i broj grana g leži u intervalu $p^2 + 1 - p \leq g \leq p^2$, tada:

$$2g + 2p - 2p^2 - 2 \leq \eta \leq 2p - 2.$$

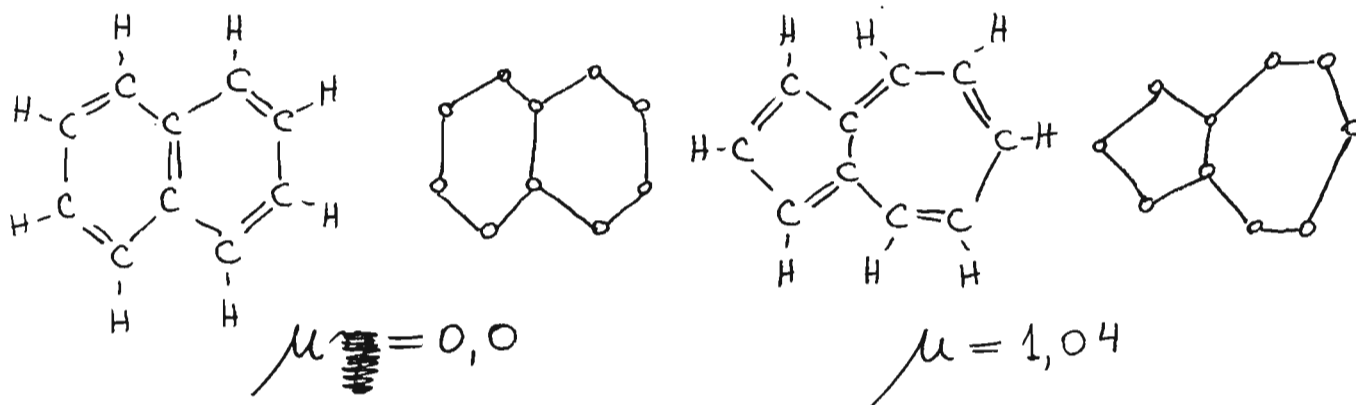
Ovaj skup pravila svakako nije potpun. Naročito nedostaju pravila za proizvoljno premošćene konture i za premošćene konture gde "most" nije grana nego lanac.

Ako Vam se čini da su ova pravila od neke koristi i da bi vredelo nastaviti u tom pravcu Vaše primedbe biće mi dragocene. Dokaze pojedinih pravila po potrebi staviću Vam na raspolaganje.

Što se tiče rada koji želite da objavite zajedno sa mnom, Vi ćete svakako, kao matematičar, jedini da odlučujete o tome šta i kako treba da bude publikovano. Nije mi jasno u kojoj meri bi taj rad dodirivao područje hemije (kvantne hemije), ali ako to bude slučaj ja sam vrlo rad da kao hemičar doprinesem najviše koliko mogu.

Dve najuočljivije veze između osobina molekula i grafova bile bi⁸:

I. Ugljovodonik koji se može pretstaviti bihromatskim grafom nema dipolni moment (μ). Na primer postoje dva jedinjenja $C_{10}H_8$: "bihromatski" naftalin i "ne-bihromatski" azulen.



II. "Bihromatski" ugljovodonik čiji odgovarajući graf sadrži nulu u svom spektru je nestabilan. Specijalno za konture (u hemiji: anulene) važi tzv. Hückel-ovo pravilo, koje je ekvivalentno pravilu 8.

Nadam se da ću od Vas dobiti detaljniji odgovor.

Ja se takodje prvenstveno odmaram preko leta a matematikom se bavim iz rasonode.

Tokom jeseni svakako ću navraćati u Beograd i tada ću Vas obavezno potražiti.

Najsrdačnije Vas pozdravlja:

8 dopustio sam sebi
bitna uprščavanja

Ivan Gutman

Zagreb, 24.9.1971.

Dragi Dr. Cvetkoviću.

Odmah da se izvinim što ste morali tako dugo da čekate na moj odgovor. Objašnjenje je malo neobično: već skoro mesec dana očekujem da ću ići u Beograd ali se taj odlazak odlaže iz nedelje u nedelju.

Ja sada radim u Grupi za Kvantnu kemiju u Zagrebu i ovde postoji krug ljudi koji su zainteresirani za mogućnost primene grafova u hemiji, specijalno za problematiku o kojoj se mi dopisujemo.

U vezi publiciranja naših rezultata ja bih insistirao da to bude naš zajednički rad. Čini mi se da bi moglo da ima sledeći raspored:

1. Kratak uvod o spektru bihromatskog grafa i istorijat teoreme o simetričnosti spektra (kao i primene u kvantnoj hemiji).

2. Korektan dokaz teoreme o vezi ranga matrice i broja nula u spektru.

3. Neke posledice ove teoreme, tj. neka od pravila koja sam napisao u svom drugom pismu.

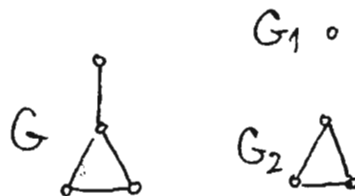
U vezi ovih pravila imao bih još sledeće primedbe:

a) Pravilo 4 je ipak korektno. Ovo je između ostalog jednostavna posledica teoreme koju ste mi saopštili u Vašem poslednjem pismu.

b) Pravilo 3 i 7 ne važe za nebihromatske grafove, n. pr.:



nevaženje pravila 3
 $\eta(G) = 0$ $\eta(G_1) = 1$
 $\eta(G) \neq \eta(G_1)$

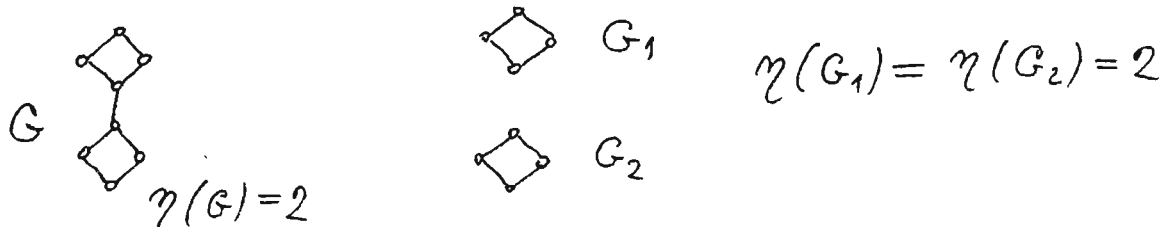


nevaženje pravila 7
 $\eta(G) = 0$ $\eta(G_1) = 1$ $\eta(G_2) = 0$
 $\eta(G) \neq \eta(G_1)$

c) Pravilo 7 ne može se uopštiti da glasi:

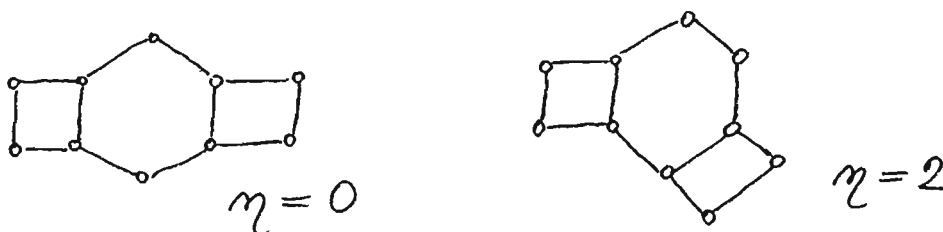
ako $\eta(G_1)$ i $\eta(G_2) \neq 0$. Na primer:

$$\eta(G) = \eta(G_1) + \eta(G_2)$$



Slažem se sa Vama da nisu sva pravila od većeg značaja, tako da bismo publicirali samo ona najzanimljivija (moj predlog: br. 3, 6, 7, 8, 9, 10). Podvlačim da ~~se~~ se pomoću tih pravila može odrediti η za sve bihromatske grafove sa 0, 1 i 2 konture.

Zadatak nalaženja broja η čini se da zalazi u najtananije topološke osobine grafova i da možda to i nije bez interesa za dublja matematička proučavanja. Radi ilustracije:



C.F. Wilcox, Tetrahedron Letters No. 7, 795 (1968)

Sve ono što sam Vam poslao su moji originalni radovi. Ništa od toga (izuzev Hückel-ovog pravila, tj. pravila br. 8, kao što sam i onomad napisao) nije "prevod" nekog pravila iz hemije. Za sve njih imam dokaz.

Postoje određene primene u kvantnoj hemiji nekih od pravila koje sam našao, i imamo nameru da to publiciramo u nekom časopisu za hemičare. U toj publikaciji mi ne bismo želeli da dajemo stroge dokaze tih pravila, već bi se pozivali na Vaš i moj članak. Zbog toga Vas molim da što pre pređemo na konkretno ostvarivanje našeg članka.

Ako prihvatite moj predlog onda bi Vi mogli da napišete uvod a ja bih dodao (vrlo kratko) istorijat i primenu u

kvantnoj hemiji.

Dokaz teoreme o rangu A-matrice već postoji, a Vi biste trebali da mu date konačni oblik. Posledice ove teoreme ("pravila") bih prvo napisao ja a Vi biste ^{im} dali konačni oblik.

Ovo je naravno samo predlog. Sa zadovoljstvom ću prihvatiti Vaše primedbe.

I dalje ostaje otvorena mogućnost mog dolaska u Beograd, kada ćemo se svakako sastati. U očekivanju Vašeg skorog odgovora primite najsrdačnije pozdrave.

Ivan Gutman

Adresa:

Ivan Gutman

Grupa za ~~Kvantnu~~ Teorijsku kemiju

Institut "Ruđer Bošković"

41000 Zagreb, Bijenička c. 54.

Zagreb 27. 9.

Dragi dr Cvetkoviću.

Kada sam počeo da pregledam literaturne podatke o kvantno-kemijskim osobinama alternantnih ugljovodnika (tj. "bichromatskih grafova") našao sam na teoremu o vezi ranga matrice susjedstva i broja nula u spektru grafa. Dokaz je malteno identičan sa mojim, a dao ga je H. C. Longuet-Higgins godine 1950 (Journal of Chemical Physics 18, 256). Na istom mestu nalazi se dokaz "mog" pravila br. 6.

U članku C. A. Coulson-a i H. C. Longuet-Higgins-a (Proc. Roy. Soc. A 192, 16 (1948)) nalazi se izvanredan dokaz o simetričnosti spektra bichromatskog grafa (koji sadrži p čvorova jedne i q čvorova druge vrste i koji je na pogodan način numerisan). Karakteristični polinom je:

$$\Delta(\lambda) = \begin{vmatrix} -\lambda \mathbf{I} & \mathbf{A} \\ \mathbf{A}' & -\lambda \mathbf{J} \end{vmatrix} \quad \text{gde su } \mathbf{I} \text{ i } \mathbf{J} \text{ jedinične matrice reda } p \text{ i } q. \text{ Tada}$$

$$\Delta(\lambda) = (-1)^p \begin{vmatrix} \lambda \mathbf{I} & -\mathbf{A} \\ \mathbf{A}' & -\lambda \mathbf{J} \end{vmatrix} = (-1)^{p+q} \begin{vmatrix} \lambda \mathbf{I} & \mathbf{A} \\ \mathbf{A}' & \lambda \mathbf{J} \end{vmatrix} = (-1)^{p+q} \Delta(-\lambda)$$

Obratite pažnju da se u dokazu ne ulazi u strukturu submatrice A , dakle teorema važi i za multigrafove kao i za orijentirane grafove.

Želim Vas da iznesete Vaše mišljenje o daljoj "sudbini" članka koji pripremamo.

Srdasno Vas pozdravlja

Juan Gutierrez

Institut "Ruđer Bošković"
Bijenicka c. 54, Zagreb
(grupa za Teorijsku kemiju)

21. 10. 1971.

Dragi Dr Cvetkoviću.

Iz Vašeg pisma iz Nemačke ne vidi se da li ste primili moje drugo (ekspres) pismo.

Dakle, Longuet-Higgins je dokazao našu teoremu 3 ali je nije nigde iskoristio jer ga nije zanimala višestrukost broja nula već samo da li spektar uopšte sadrži nulu (to je dovoljan uslov da molekul bude nestabilan).

Kasnije su M.S.J. Dewar i Longuet-Higgins (Proc. Roy. Soc. A214,482,(1952)) dokazali jednu teoremu koja će Vas verovatno zanimati:

Posmatramo bihromatski graf G sa po n čvorova iz klase X i Y . Spektar grafa čine brojevi $\lambda_1, \lambda_2, \dots, \lambda_n, \lambda_{n+1}, \dots, \lambda_{2n}$. Numerirajmo čvorove iz X (proizvoljno) sa $1, 2, \dots, n$ a čvorove iz Y sa $1', 2', \dots, n'$. Neka je K regularan delimični graf grafa G stepena 1. (Predlažem naziv "Kekulé-ov graf" jer K odgovara tzv. "Kekulé-ovoj formuli" u organskoj hemiji.) Tada je u K sa čvorovima $1', 2', \dots, n'$ vezana neka permutacija čvorova $1, 2, \dots, n$. Definišimo:

$$P = \begin{cases} +1 & \text{ako je permutacija parna} \\ -1 & \text{ako je permutacija neparna} \end{cases}$$

Primeri:

permutacija	1 2 3	2 3 1
P	+1	+1
permutacija	K_1 2 1	K_2 1 2
P	-1	+1

Neka za graf G postoje različiti Kekulé-ovi grafovi:

K_1, K_2, \dots, K_h i samo ovi. Tada je:

$$\prod_{i=1}^{2n} \lambda_i = - \left(\sum_{j=1}^h \mathcal{P}_j \right)^2$$

ili, uzevši u obzir simetričnost spektra:

$$\lambda_i + \lambda_{2n-i+1} = 0$$

dobiva se:

$$\prod_{i=1}^{2n} \lambda_i = \left| \sum_{j=1}^h \mathcal{P}_j \right|^2$$

Nije teško zaključiti sledeće:

1. Ako ne postoji niti jedan Kekulé-ov graf tada je: $\sum \mathcal{P}_j = 0 \Rightarrow \eta(G) > 0$ a to je teorema 5.

2. Ako je graf dobiven proizvoljnom kompozicijom kontura sa 6, 10, ... čvorova, tada je:

$$\prod \lambda_i = h$$

jer su sve permutacije istog znaka, i tada je $h > 0$ (tj. postojanje makar jednog Kekulé-ovog grafa) dovoljan uslov za $\eta(G) = 0$. ~~xyxyxy~~

Ovo drugo očito nije dovoljno strogo formulirano jer može da se dogodi da graf "komponiran" od kontura sa 6, 10, ... čvorova sadrži i konture sa 8, 12, ... čvorova:



Možda ćete Vi imati neki prilog u vezi ovog problema. Inače, nadam se da ću svoj deo posla na član-ku završiti do početka novembra.

Srdačno Vas pozdravlja:

Grupa za Teorijsku Kemiju
Institut "Rudjer Bošković"
Zagreb, Bijenička c. 54.

Jovan Gutman

Neka bihromatski graf ima p čvorova jedne boje (sa indeksima $1, \dots, p$) i q čvorova druge boje (sa indeksima $p+1, \dots, p+q$). Neka je $p \leq q$. Neka je graf povezan.

Tada matrica susjedstva ima oblik:

$$S = \left(\begin{array}{c|c} 0 & A \\ \hline A' & 0 \end{array} \right) \begin{array}{l} \} p \\ \} q \end{array}$$

gde su submatrice A (tipa $p \times q$) i A' (tipa $q \times p$) uzajamno transponovane; njihovi elementi su 0 i 1, pa ću pisati:

$$S = \left(\begin{array}{c|c} 0 & 0,1 \\ \hline 0,1 & 0 \end{array} \right)$$

Teorema I. Spektar bihromatskog grafa je simetričan.

Karakteristični polinom je:

$$K(\lambda) = \left| \begin{array}{c|c} -\lambda & 0 \\ \hline 0 & -\lambda \end{array} \right| \begin{array}{l} 0,1 \\ 0,1 \end{array} \begin{array}{l} \\ \\ 0 \\ 0 \end{array} \begin{array}{l} \\ \\ \\ -\lambda \end{array}$$

pa se može napisati

$$\lambda^p K(\lambda) = \left| \begin{array}{c|c} -\lambda^2 & 0 \\ \hline 0 & -\lambda^2 \end{array} \right| \begin{array}{l} 0, \lambda \\ 0, \lambda \end{array} \begin{array}{l} \\ \\ 0 \\ 0 \end{array} \begin{array}{l} 1 \\ p \\ p+1 \\ p+q \end{array}$$

Svakoj vrsti od 1 do p dodaju se neke, pogodno odabrane, vrste od

gde je

$$X = \begin{pmatrix} X_1 \\ \vdots \\ X_2 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} X_1 \\ \vdots \\ X_p \\ \vdots \\ X_{p+1} \\ \vdots \\ X_{q-p} \end{pmatrix}$$

može da se razbije na dve:

$$A' X_1 = \lambda X_2$$

$$A X_2 = \lambda X_1$$

Za $\lambda = 0$ će biti

$$A' X_1 = 0 \quad (*)$$

$$A X_2 = 0 \quad (**)$$

Neka je rang $A = R$. Onda je i rang $A' = R$. Tada u skladu sa stavom II. jednačina (*) ima $p-R$, a jednačina (**) $q-R$ linearno nezavisnih rešenja, dakle postoji $(p-R) + (q-R)$ linearno nezavisnih karakterističnih vektora matrice S za $\lambda = 0$, iz čega prema stavu I. sledi da u spektru matrice S ima baš

$$\eta = p + q - 2R$$

nula. \square

Proširenje teoreme I i II na nepovezane grafove

Neka su $G_i, i=1, \dots, n$, bihromatski grafovi sa p_i čvorova jedne boje i q_i čvorova druge boje. Neka su njihove matrice susjedstva S_i . Nepovezan graf G je unija

$$G = \bigcup_{i=1}^m G_i$$

i pogodnom numeracijom čvorova imaće njegova matrica susjedstva oblik:

$$S = \begin{pmatrix} S_1 & 0 & \dots & 0 \\ 0 & S_2 & \dots & 0 \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ 0 & 0 & \dots & S_n \end{pmatrix}; \quad S_i = \begin{pmatrix} 0 & A_i \\ A_i' & 0 \end{pmatrix}$$

\square Moja omaška bila je u tome što sam smatrao da je $R = \min\{p, q\} = q$ iz čega sledi moja ranija tvrdnja: $\eta = q - p$.

Vidi se da je:

$$K(\lambda) = \prod_{i=1}^n K_i(\lambda)$$

pa teorema I važi i za nepovezane grafove. Broj nula u spektru grafa G_i je η_i :

$$\eta_i \geq |p_i - q_i|$$

i tada je

$$\eta \geq \sum_{i=1}^n |p_i - q_i|$$

Tačan broj nula je:

$$\eta = \sum_{i=1}^n (p_i + q_i - 2R_i)$$

gde je $R_i = \text{rang } A_i$.

Zagreb, 1.11.1971.

Dragi Dr Cvetkoviću.

Šaljem Vam svoj deo članka. Strane A i B dolaze na stranu 3 Vašeg teksta, strana C dolazi na stranu 5, strane D i E dolaze na 9, strane F,G,H,I i J čine dokaz teoreme 8 i 9, koje bih ja radije stavio iza teoreme 3 kao njene posledice. Oba dokaza su ispala vrlo glomazna. Nadam se da će Vam uspeti da ih bitno skratite.

U svakom slučaju Vi slobodno prepravite bilo koji deo mog teksta, tim pre što je nemam nikakve primedbe na Vaš deo.

Jeđina moja primedba je da se imena autora u naslovu ređaju abecednim redom, dakle: Cvetković, Gutman.

Na kraju članka mogli bismo da damo mali rečnik "sinonima". Ja sam na strani K napisao svoju verziju. To bi matematičarima olakšalo čitanje publikacija namenjenih hemičarima. Coulson-ov članak od pre rata je: C.A.Coulson, G.S. Rushbrooke "Note on the Method of Molecular Orbitals" Proc. Camb. Phil.Soc. 36,193 (1940).

Predlažem da sada napravite definitivnu verziju i date da se prevede na engleski bez da me više konzultirate. Crteže ću napraviti ja. Vi mi pošaljite njihov definitivni spisak.

Šrdačno Vas pozdravlja.

Ivan Gutman

Institut "Ruđer Bošković"

Grupa za Teorijsku Kemiju

Bijenička c. 54, Zagreb

Dragi dr Cvetković

Zagreb 5. 11. 71.

Šahem Vam rukopis.

Što se tiče saopštenja bojim se da neću moći da dođem, ali li ga svakako održite. I dalje ostaje moje obećanje da kada (ako) dođem u Beograd da ću Vas ne-
kako posetiti:

Grupa u kojoj radim je dosta zainteresirana za Hückel-ovu metodu, naravno mnogo toga se ne može "prevesti" na jezik Teorije grafova. Specijalno mene (i dalje) zanima topološka pozadina Hückel-ove teorije. U vezi toga imamo neke manje rezultate, ali oni ne bi bili interesantni za Vas. Ovih dana dajem jedan članak u štampa; kada budu gotovi reprinti i ako Vas to zanima poslaću Vam jedan. U svakom slučaju istraživanja o vezi topologije i spektara grafova se ovde nastavljaju, a saradnja sa Vama će nam uvek biti dragocena.

Coulson je u podmaklim godinama, ali je živ. On, kao i mnogi drugi vodeći kvantni hemičari više se bavi ~~računima~~ tačnijim računima nego što je HMO-metoda (Hückel Molecular Orbital). U poslednje vreme najviše (po mojoj oceni) iz HMO-metode je dao Edgar Heilbronner. Već sam Vam ranije skrenuo pažnju na njegove rezultate o mreži na torusu (očigledno nešto istražuje u vezi topologije!). Proste godine su izašle tri njegove knjige: "Das HMO-Modell und seine Anwendung" Grundlagen und Handhabung (prva knjiga) Übungsbeispiele mit Lösungen (druga knjiga) Tabellen berechneter, und experimenteller Größen (tre-

Po svom naslovu (ali ne i po sadržaju, koji nema
veze sa teorijom grafova) zanimljiv je i njegov članak:
"Hückel Molecular Orbitals of Möbius-type Conformations of
Annulenes" Tetrahedron Lett. 1964 (1923)

Adresa Heilbronner-a je

Laboratorium für organische Chemie der Eidg. Techni-
schen Hochschule, Zürich.

Ukoliko ste da vam ~~od~~ odgovori to će me jako zanimati.

Na kraju, želeo bih vam obratiti pažnju na dve ~~debele~~
knjige:

A. Streitwieser, J.I. Brauman, C.A. Coulson, "~~Two~~ Sup-
plement Tables of Molecular Orbital Calculations"
I i II, Pergamon Press 1965

koje sadrže 1222 stranice + celokupnu raniju knjigu
Streitwieser-a i Coulson-a o spektrima grafova. Izraču-
nati su spektri oko 2000 grafova.

Izdavaču Vas pozdravlja
Ivan Gutman

41000 ZGB

INSTITUT "RUĐER BOŠKOVIĆ"

BIJENIČKA C. 54

GRUPA ZA TEORIJSKU KEMIJU

Zagreb 6. 12. 1971.

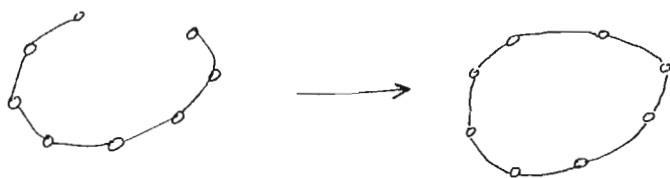
Dragi dr Cvetkoviću

Pre svega, hvala na knjizi. Već sam počeo da je čitam.

Što se tiče Vašeg dolaska u Zagreb, biće nam drago ako nas posetite. Razmena mišljenja biće nam dragocena. Nadamo se da ćemo tom prilikom naići na neke probleme koji su podjednako zanimljivi kako u Teoriji grafova tako i u kvantnoj kemiji.

Ako nameravate da dođete u decembru biće najbolje da dođete posle 15., jer se onda vraća sa odnosa Tomislav Živković koji sada radi na problemima karakterističnih polinoma nekih klasa grafova i njihovih spektara, ali prije 25., jer ću onda ja da odputujem iz Zagreba. Posle Nove godine će opet cela grupa biti na okupu. Pored Živkovića za sličnu problematiku zainteresovan je i dr Nenad Trinajstić, koji sada i rukovodi grupom.

Osnovni problem koji nas trenutno preokupira jeste zavisnost zbira svih elemenata spektra grafa sa istim predznakom (recimo svih pozitivnih elemenata u spektru) i topoloških svojstava grafa. (Naime ovaj zbir je direktno vezan sa ukupnom energijom molekula). Tako smo proučavali kako se menja taj zbir u "reakciji" tipa:



Šaljemo Vam kopiju jednog članka koji je vrlo važan za nas. Svakako bi ga trebalo citirati u našem radu.

Pozdravlja Vas
Joan Gutman

PS

- 1° Broj našeg telefona je : 38541 lokal 358
- 2° Ako dođete do "Ruđer Boškovića" javite se u porti i recite da tražite Trinajstića. Možete nas i nazvati sa porte. (358)

Zagreb, 13. 1. 1972.

Dragi Dr Cvetkoviću.

Javljam Vam se sa tolikim zakašnjenjem jer sam vrlo zauzet mnogobrojnim obavezama.

Rad Petersdorfa i Sachsa još uvek proučavamo, ali naši prvi rezultati nisu ohrabrujući. Naime, čak i kada smo na jednostavan način izračunali neke korene karakterističnog polinoma, time nismo ništa uprostiti nalaženje ostalih korena (tj. dijagonalizaciju matrice susedstva).

Naišli smo, međutim, na jedan problem gde bi Vi možda mogli lako da nam pomognete. Treba nam barem jedan PING sa sledećim osobinama:

- a) maksimalni stepen čvora je 3
- b) oba grafa poseduju regularni podgraf stepena 1.
- c) broj čvorova što je moguće manji, ali nekakva minimizacija broja čvorova nije potrebna.

U nama dostupnoj literaturi nije bilo takvih PING-ova. Ukoliko Vi znate za neke takve PING-ove, molim Vas da nam to što pre javite.

Dr Trinajstić je trenutno u Trstu, a vraća se za desetak dana. Tek tada ću moći da Vam napravim fotokopiju članka koji ste tražili.

Srdačno Vas pozdravlja

Jovan Gutman

Zagreb, 24. veljače 1972.

Dragi Dr Cvetkoviću.

Skoro pre mesec dana poslali smo Vam fotokopiju članka koji ste tražili a takođe i jedno opširno pismo o nekim našim novim rezultatima. Pošto nam se do sada niste javili počinjemo da razmišljamo o mogućnosti da se naše pismo zagubilo. S druge strane, imali bi da Vam javimo i rezultate postignute u međuvremenu (npr. završili smo članak o primeni Teorije grafova u Hückelovoj teoriji). Ne-ki naši rezultati, kao što smo i u predhodnom pismu javili svakako bi bili od interesa u Teoriji grafova, što bi omogućilo našu dalju suradnju.

Očekujemo Vaš skori odgovor, makar samo o prijemu naše ranije pošiljke.

Primate srdačne pozdrave

Joan Gutman
Aute Groenke
Tom Ziti

»RUĐER BOŠKOVIĆ« INSTITUTE

41001 Zagreb, Croatia, Yugoslavia

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

Zagreb, 8. 3. 1972. -

Dragi Dr. Čvetkoviću

Pre svega, čestitam Vam na izboru za predavača.

Što se tiče našeg rada, stvari stoje ovako. Prošle nedelje naša grupa je poslala rad "Graph Theory and Molecular Orbitals. The Connection Between Graph Theory and the HMO Theory." u časopis Theoretica chimica Acta (Berlin). Autori su A. Graovac, I. Gutman, N. Trinajstić i T. Živković. Nama su u Zagrebu ostale samo dve kopije tog rada, pa ćete svakako razumeti zašto Vam ne mogu poslati jedan primerak. U koliko u ovom trenutku ipak želite da pročitate naš rad, ja bih Vam poslao jednu od kopija ~~xxxx~~ s tim da nam ga vratite za desetak dana.

Tomislav Živković je obećao da će svoje rezultate dati u pismenoj formi najkasnije do 20. 3. Mi bi predložili da Vi tada taj rukopis pročitate i u slučaju da se on pokaže interesantnim za Teoriju grafova to bude osnova za jednu zajedničku publikaciju u nekom matematičkom časopisu. Istovremeno, zbog određenih kemijskih implikacija, mi imamo nameru da ove rezultate saopštimo i u nekom časopisu za kemičare. Molio bih Vas da odgovorite u vezi ovog našeg predloga.

Na kraju bih Vam želeo skrenuti pažnju na dve publikacije, za koje mi se čini da nisu bez interesa za Teoriju grafova.

Edgar Heilbronner je dao rekurentne formule za karakteristični polinom velike ~~ka~~ klase grafova. Rad se zove "Das Komposition-Prinzip: Eine anschauliche Methode zur elektronen-theoretischen Behandlung nicht oder niedrig symmetrischer Molekeln in Rahmen der MO-Theorie" Helv. chim. Acta 36, 170 (1953). Neka bude pomenuto da je T. Živković došao nedavno do istih rezultata ne znajući za ovaj rad.

Zbir polovine korena karakterističnog polinoma je, kao što smo Vam u Zagrebu istakli, ~~ima~~ od većeg značaja u Teorijskoj kemiji. B.J. McClelland u J. Chem. Phys. 54, 640 (1971) dao je neke aproksimativne formule za ovu veličinu. To je i prvi ozbiljniji rad iz tog područja. Naša grupa je, međutim, stala na stanovište da formule (tj. nejednakosti) McClellanda ne zadovoljavaju (iako su matematički korektne). Nedavno smo poslali komentar na ovaj rad u J. Chem. Phys. Pored toga mi i dalje pokušavamo doći do "prave" aproksimativne formule za ovu veličinu, naročito Milorad Milun.

Srdačno Vas pozdravljaju

Ivan Gutman
Tijel Živković

Zagreb 28. 3. 1972.

Dragi Dr Cvetkoviću

Šaljem Vam naš rad o Teoriji grafova.
Svrha Vaša primedba o nijemu liće nam dragocena.
Rad smo poslali u "Theoretica Chimica Acta" (Berlin)
ali još nije dobijen odgovor.

Tomislav Žirhović je završio svoj rad ali ga
(još) nije otkucao na mašini. Čim bude gotov on
će Vam ga poslati.

Srdacni pozdravi

Joan Gutman

Prof. Dr Horst Sachs

DDR 63 Flumenau

Am Wenzelsberg 12
Deutsche Demokratische Republik

Oslaušnjaci se na Vašu načelnu saglasnost sa mojom posebnom Vama, koji je usmeno peneo Vaš kolega koji je borovio kod nas, ja sam konkurisao za dobijanje stipendije za borovak u inostranstvu. Savet za naučni rad republike Srbije mi je odobrio troženu stipendiju ^{za studijsko putovanje u trajanju od 4-6 nedelja.} Naravno, za efektivno korišćenje stipendije potrebno je da dobijem zvaničnu poziv od Vas. ~~Ja predložim da to~~

Ja sam završio doktorsku disertaciju i ovih dana ću je predati fakultetu. Disertacija je napisana na srpsko-hrvatskom jeziku te ~~je~~ Vam je stoga i ne šaljem. Pošto bude odobrena objaviće se na engleskom jeziku te ću Vam je tada poslati.

Šaljem Vam separate rodova koji su u međuvremenu obavljeni.

Želim Vam dobru Noću i zdravlje

Dragi Bošković!

»RUĐER BOŠKOVIĆ« INSTITUTE

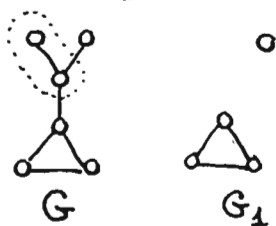
41001 Zagreb, Croatia, Yugoslavia

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

Zagreb, 13. 4. 1972.

Dragi Dr Cvetkoviću

Javljam Vam se sa još jednim pismom, a u vezi sa radom T. Živkovića. Taj rad sam dobio na čitanje tek juće, iako me je Živković, kao i ostale članove grupe, obavestio o svojim osnovnim zaključcima nešto ranije. Moj je dojam da su neki njegovi zaključci srećna poopštenja nekih naših teorema, iako postoji izvesno preklapanje između naših i njegovih rezultata. Činjenica je da Živković nije bio pročitao naš rad. Za mene je od naročitog interesa bila teorema 3b, koja je u stvari ekvivalentna posledici br. 1 naše teoreme 7, ali proširena i na nebihromatske grafove. Ja sam Vam u svom pismu od 24. 9. 1971. poslao kontraprimer za ovaj slučaj:



$$\left. \begin{array}{l} \eta(G) = 0 \\ \eta(G_1) = 1 \end{array} \right\} \Rightarrow \eta(G) \neq \eta(G_1)$$

Nakon toga više nismo pokušavali da proširimo naše iskaze i na nebihromatske grafove. Danas sam proverio taj "kontraprimer", i on nije, na žalost, tačan. Naime, graf G sadrži jednu nulu u spektru.

Srdačni pozdravi:

Ivan Gutman

Dragi Dr. Cvetković,

Izgleda da su teoremi 3a i 3b u radu koji vam prilažemo analogni teoremima koje ste izveli Vi i Gutman. Razlika je s jedne strane u tome što se vi ograničavate na alternantne grafove, dok su s druge strane vaši teoremi općenitiji jer dozvoljavaju spajanje proizvoljnih komponenata. Vjerojatno je moguća neka sinteza tih teorema koja bi obuhvatila oba slučaja. Nadam se da ćemo o tome moći detaljnije diskutirati kad dodjete u Zagreb.

Tomislav Žitković

»RUĐER BOŠKOVIĆ« INSTITUTE

41001 Zagreb, Croatia, Yugoslavia

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

Zagreb, 13.4.1972.

Dragi Dr Cvetkoviću.

Pre sveg^a, hvala Vam što ste pročitali naš rad. Vašu glavnu primedbu smo prihvatili i ona će ući u tekst rada. (U stvari, u prvobitnom rukopisu postojala je slična rečenica, ali je omaškom ispala tokom jedne od mnogobrojnih izmena). Na žalost iz čisto tehničkih razloga više ne možemo menjati nomenklaturu, jer smo rad već poslali u štampu. Naime, u međuvremenu smo dobili recenziju; uz neke manje bitne primedbe recenzija je bila pozitivna. Reprinte ću Vam svakako poslati. Takođe bih želeo poslati reprint profesoru Sachs-u, pa Vas molim za njegovu adresu.

Dr Trinajstić je saopštio ovaj rad na Simpozijumu za Teorijsku kemiju u Ženevi pre desetak dana i rad je naišao na veće zanimanje prisutnih.

Želeo bih sada da Vas u ime Dr Trinajstića zamolim i upitam da li biste mogli da u Zagrebu održite jedno predavanje o Teoriji grafova u Teorijskoj sekciji Hrvatskog kemijskog društva. Datum bi odredili Vi, s tim da bi to bilo negde u drugoj polovici maja ili junu. U koliko je to s Vaše strane moguće

HKD će Vam poslati i zvanični poziv. (Troškove Vašeg boravka u Zagrebu, jasno, snosi HKD.)

Vaš boravak u Zagrebu iskoristili bi i za iscrpniji razgovor unutar naše grupe u Institutu "Ruđer Bošković". Kao što ste mogli primetiti, interes za Teoriju grafova je vidno porastao od Vaše zadnje posete.

U prilogu Vam šaljem Živkovićev rad o broju nula u spektru grafa. Molio bih da sve eventualne primedbe ili sugestije u vezi tog rada šaljete na njegovu adresu (Tomislav Živković, Grupa za Teorijsku kemiju, ...)

Ne pišete već duže vreme o našem zajedničkom radu. Znači li to da se on nalazi u štampi?

Srdačno Vas pozdravlja:

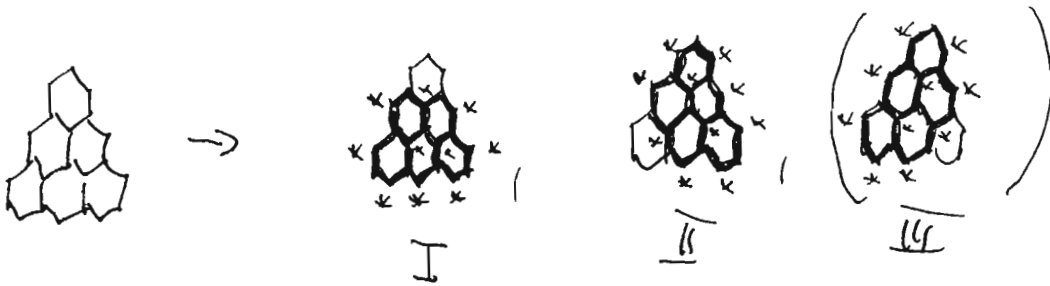
Frau Gutman

Zagreb, 13. IV. 1972.

Dragi Dr. Crnković,

Šoljem kao kopiju vaše s NB 170-s. (grijeh $x=0$ u konformistično-polino-u)

Prinjer (H) na Fig. 6. nije korekton. Triangulan de facto ima svoj NB 170-s, međutim one x mogu obiliti prinjerom teorije 2a (a ne 2b) ne slijedeći volu:



Struktura III je linearna kombinacija struktura

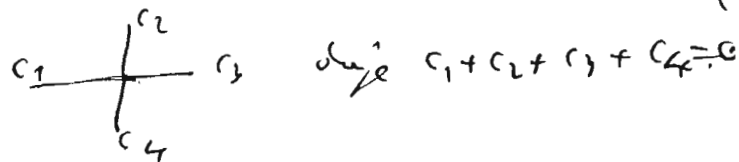
I i II oslabila slijedi da postoji barem solji

NB 170-s

čakvo razotrozi u svo roba u odnosi - φ obitule, i. e. stepen čvoru je najviše 3. Međutim

u to pogledu ne obitule oprečije.

ostoji i solji pravilo da nema net četvrti
one biti ulu. e. g.



i to te suru čvor.

Teoreti ovakve izvedeni ostoji u vrijnosti i
to pratore koje pojedini čvorove visje roba od 3.

To se kaže vidi da se objavljuje u ovom izdanju
izvestaje.

Mali ko do i ova kopija vodu
je to i je jeli vodu? Je i si
ostao.

Vjeda u izvješću mali tlo i vodu.

To je Zichovci

Dragi dr Cvetkoviću.

Javljam Vam se sa podosta zakašnjenja, ali mislim da imam da Vam saopštim dosta novih stvari.

Pre svega, izgleda da se tek sada počelo ozbiljno raditi na Teoriji grafova u našoj grupi, ali, kao što ćete videti, radi se punom parom.

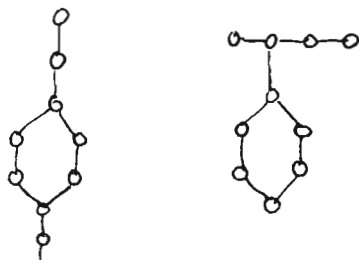
1. Što se tiče grupe automorfizama, u literaturi postoji rad: U.Wild, J.Keller, H.H.Güfithard "Symmetry Properties of the Hückel Matrix", Theoret. chim. Acta 14, 383 (1969) u kojem je praktično urađeno sve što je interesantno za kemičare.

2. Grupa simetrije je uvek podgrupa grupe automorfizama. Dokaz je jednostavan: svaka operacija simetrije je permutacija koja ne kida veze u grafu (u to se možete uveriti i razmatranjem svake operacije simetrije ponaosob: refleksije, rotacije, inverzije).

3. Grupa automorfizama je najveća podgrupa grupe permutacija koja komutira sa (Hückel-ovim) hamiltonijanom.

4. Tomislav Živković je našao jednostavan algoritam za određivanje broja nula u spektru za onu klasu grafova koja nas interesira (maksimalni stepeni čvorova 3), ali se algoritam sigurno može proširiti i na ostale grafove. O ovom postupku ćemo Vas naknadno detaljno obavestiti.

5. Našli smo, skoro slučajno, jedan PING, upravo onakav kakav nam treba:



i to u "Dictionary of π -Electron Calculations", koji i Vi imate. Moguće je da je to do sada nepoznati PING.

6. Koristeći formulu Sachs-a mi smo dokazali sve do sada poznate i za kemičare interesantne osobine spektara (simetričnost, broj nula,...) a dobili smo i neke do sada nepoznate relacije. U vezi toga pripremamo jednu publikaciju (za J. Chem. Phys.) i prvu upotrebljivu varijantu rukopisa ćemo Vam svakako poslati.

7. U vezi toga mislim da su naročito interesantne dve teoreme koje je dokazao Ante Graovac.

Zadan je bihromatski graf sa N čvorova. Neka je skup svih grafova sa N čvorova koji dolaze u obzir u Sachs-ovoj formuli za a_N toga grafa:

$$S = \{s_1, s_2, \dots, s_M\}$$

Svi oni grafovi iz S koji ne sadrže konture (dakle odgovaraju Kekulé-ovim strukturama) neka čine skup:

$$G = \{g_1, g_2, \dots, g_K\}$$

Definirajmo operaciju \oplus koju izvodimo nad dva grafa sa istim čvorovima. Skup grana u $g_A \oplus g_B$ je unija skupa grana u g_A i u g_B . Tada je:

A.

$$\{g_A \oplus g_B \mid g_A, g_B \in G\} = S$$

B.

Ako je c broj kontura u grafu $q = g_A \oplus g_B$, tada tačno 2^c različitih parova g_A, g_B daju isti graf q. (Za $A \neq B$ računamo i g_A, g_B i g_B, g_A)

Ove dve teoreme ilustriraću na primeru grafa:

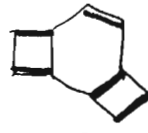




S_1



S_2



S_3



S_4



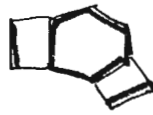
S_5



S_6



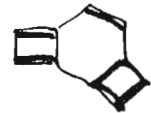
S_7



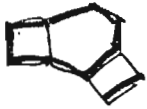
S_8



S_9



S_{10}



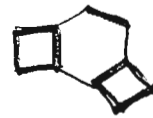
S_{11}



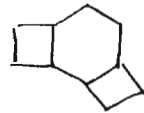
S_{12}



S_{13}



S_{14}



$$S = \{S_1, \dots, S_{14}\}$$

$$G = \{S_1, \dots, S_5\}$$

\oplus	S_1	S_2	S_3	S_4	S_5
S_1	S_1	S_9	S_6	S_{14}	S_8
S_2	S_9	S_2	S_{14}	S_7	S_{12}
S_3	S_6	S_{14}	S_3	S_{10}	S_{11}
S_4	S_{14}	S_7	S_{10}	S_4	S_{13}
S_5	S_8	S_{12}	S_{11}	S_{13}	S_5

Vidi se da se svi elementi S javljaju u tablici (teorema A), i to s_1, \dots, s_5 po 2^0 puta, s_6, \dots, s_{13} po 2^1 puta a s_{14} 2^2 puta.

Srdačan pozdrav:

Iraue Gutman
Tomislav Žitković

24.4.72

Dragoř Cvetković

Mr. J.J. Seidel
Department of Mathematics
Technological University
P.O.Box 513
Insulindelaan, Eindhoven
Netherlands

Dear Sir,

Please find enclosed herewith a copy of my dissertation "Graphs and their spectra" which I took the liberty to send you since it is in relation to your papers.

With kind regards,

Yours Sincerely

Dragoř Cvetković

PO BOX 513 - EINDHOVEN
THE NETHERLANDS

Dr. Dragoš Cvetković
Lamartinova 44
11000 BEOGRAD
Yugoslavia

EINDHOVEN,

May 3rd, 1972.

Dear Dr. Cvetković,

Thank you very much for sending me a copy of your thesis, which provides a nice survey of an important subject in graph theory. In order to keep your excellent bibliography up to date I send you some recent papers.

[31] contains lots of cospectral non-isomorphic graphs. This can be done for any order of Steiner triple systems or Latin squares. Theorem 3.2 and the Algol programs provide algorithms for deciding upon non-equivalence. Section 6 yields graphs with a rich automorphism group.

[32] is to be published in the R.C. Bose anniversary volume, and contains a challenging problem on the existence of a graph on 99 vertices.

Section 3 of [33] may be interpreted in terms of directed graphs.

Theorem 5.1 of [34] is due to J.H. Smith, Calgary conference p. 403-406.

Sincerely Yours,



(Prof.dr. J.J. Seidel)

»RUĐER BOŠKOVIĆ« INSTITUTE

41001 Zagreb, Croatia, Yugoslavia

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

Dr. Dragoš Cvetković
Lamartinova 44
Beograd

8. svibnja 1972.

Poštovani kolega Cvetković,

Tomislav Živković mi je rekao da ste u svom pismu spomenuli da Vam najviše odgovara da dodjete do nas jedan petak pri kraju ovog mjeseca. Nama bi najviše odgovaralo da dodjete 26. svibnja, a predavanje bi oglašili za 13⁰⁰ sati na Institutu "Rugjer Bošković".

Međutim, postoji jedna neprilika, a to je nezgodna financijska situacija HKD-a. Stoga mi bi Vam platili 300 ND za predavanje. To vjerovatno ne će pokriti sve Vaše troškove ovdje. Radi toga Vas molim da mi javite, da li možete doći pri ovim dosta nepovoljnim financijskim uvjetima, a ako ste voljni doći molim Vas da mi pošaljete naslov predavanja.

S poštovanjem,


Nenad Trinajstić

INSTITUTE "RUĐER BOŠKOVIĆ"

BIJENIČKA 54. ZAGREB, YUGOSLAVIA

LETTERS: P. O. B. 171

TELEGRAMS: INSTRUBO, ZAGREB

ZAGREB, 8, V. 1972.

Drogi kolego Svetković,

Hvala vam — za Vašu pismu od 4. 5.
Šta se tiče Vašeg dolaska u Zagreb, — on
bi najviše odgovarao početkom 26. 5. O tome
vam obavještio kolegu Tringislića, i
on će vam detaljnije pisati.

Kod s kojom — u skladu s
poslom u kemijske časopis (Theor. Chem.
Acta), tako da je u tom smislu vrlo
vratu u vezi, jer za kemijske ispa-
v nije potrebna suvlasna matemati-
tike točnat. Onu Vašu ideju sam
pregledao (pismo koje ste poslali kolezi
Gutmanu), i ona je vrlo interesantna
i produktivna za otvaranje četvrtaka.
Bilo bi zgodno kada bi postojela
jednaka efikasna metoda i ta

stranici petroleuma i istovremeno proste-
nane. Navode, koja daje volu i ta
te slucajeve, etatna proizvodnja iz
granice istovremeno pripisati volu i ta
neretko vijekoviti sta donosi komple-
cine postupke. Kjerovno i sa ova
detaljnije razgovorati kod sudete
ovaj.

Sudeno za podrobnije

Trizler Zuhari

Zagreb: 15. svibnja 1972.

Poštovani kolega Cvelković,

Hvala Vam na pismu od 12. svibnja. Ja sam već oglasio Vaše predavanje i očekujemo Vas dakle 26. svibnja ujutro.

Gutman i ja smo također napisali jedan gotovo predni članak o vezi teorije grafova i metode molekularnih orbitala, koji zapravo nadopunjuje naš Vaš članak što je u tisku u "Theoret. Chim. Acta". U ovaj rad smo uključili i Vas kao ko-autora radi Vaše pomoći od prije, a također očekujemo da napravite neke nadopune na manu skriptu, koji Vam prilažem pismu.

Ovaj smo rad namijenili poslati u naš domaći časopis: "Croatica Chemica Acta", da na taj

načinu predstavljanju ovoj sredini
dio našeg znanstvenog rada.
od vas se nadamo, da će
nadopuniti one dijelove, koje smo
ostavili prazne i koji zahtijevaju
teoriju koju mi ne znamo. Također
se nadamo da će korigirati
i terminologiju, jer je moguće
da koristimo navedene 17 teorije gra-
fova na engleskom jeziku, koje nije
u uporabi. Osim toga slobodni
ste učiniti sve promjene i dopu-
ne, koje vam se čine potrebne.

Nadamo se, da kada stupnete
u kontakt ćemo moći razgovarati
detaljno o ovom manuskriptu.

Hvala na čestitci.

Pozdravi

Nenad Trinajstić

TECHNOLOGICAL UNIVERSITY EINDHOVEN - Department of Mathematics

PO BOX 513 - EINDHOVEN
THE NETHERLANDS

Dr. D.M. Cvetkovic,
Lamartinova 44,
11000 Beograd,
Yugoslavia.

JJS/1a

EINDHOVEN,
25 May 1972.

Dear Dr. Cvetkovic,

Further to my earlier letter I suggest you, if possible, to send a copy of your monograph on Graphs and their Spectra to the following persons:

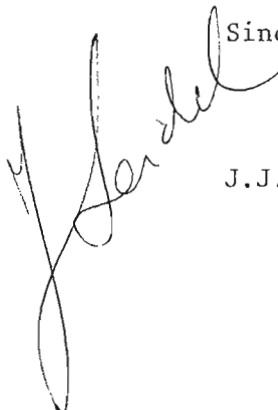
Professor Donald Higman, Dept. Mathematics, University of Michigan,
Ann Arbor (Mich.), U.S.A.

Dr. Jean Doyen, Dept. Mathematics, Université Libre, Glaverbel,
166 Chausseé de la Hulpe, Bruxelles 17, Belgique.

Dr. J.M. Goethals, M.B.L.E. Research Laboratory, 2 Rue van Becelaire,
Bruxelles 17, Belgique.

They all showed interest when going through your monograph.

Sincerely yours,



J.J. Seidel.

Dr. J.M. Goethals,
M.B.L.E. Research Laboratory
2 Rue van Becelaire
Bruxelles 17
Belgique

Dear Sir,

On the suggestion of Professor J.J.Seidel
I take the liberty to send you enclosed herewith a copy
of my Dissertation entitled "Graphs and their Spectra",
hoping you will find it of interest.

With kind regards,

Yours Sincerely

Dragoš Cvetković

Home address:
Lamartinova 44
11000 Beograd
Yugoslavia

J.J. Seidel
Technological University
Eindhoven
PO Box 513
The Netherlands

Dear Professor Seidel,

Thank you very much for your two letters and for your papers. I would like to have your papers relevant to graph spectra and I would kindly ask you whenever it is possible to forward them to me.

A copy of my thesis I sent today to the addresses you gave me in your letter.

With kind regards

Yours Sincerely

Dragoš Cvetković

Home address:
Lamartinova 44
Beograd,
Yugoslavia

»RUDER BOŠKOVIĆ« INSTITUTE

41001 Zagreb, Croatia, Yugoslavia

Zagreb, 9. 6. 1972.

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

Dragi Dr Cvetkoviću

Saljemo Vam kopiju našeg zajedničkog rada koji smo danas predali u uredništvo časopisa "Croatica Chimica Acta". Rad će sada ići na recenziju. Kopija, koju šaljemo, je jedina koja nam je ostala; molimo Vas stoga da nam ga poslije nekog vremena vratite, jer čak i ako recenzije budu pozitivne, izvjesne izmjene ćemo skoro sigurno morati napraviti. Vaše priloge smo uneli bez iole značajnijih izmjena.

Razmatrali smo tablice koje sadrže sve jednostruke korijene Hückel-ove sekularne jednadžbe i smatramo da je postupak vrlo zanimljiv i možda bi mogli ovo iskoristiti u kemiji. Da li bi mogli opisati Vaš postupak detaljnije (možda bi nam mogli poslati reprint), a mi ćemo onda napisati jedno manje preliminarno saopćenje za neki kemijski časopis. To bi bilo potrebno što prije uraditi jer u svijetu postoje i druge grupe koje se bave vrlo sličnim problemima.

Ovo zadnje ilustrira i rad koji se sasvim nedavno pojavio u Theoretica Chimica Acta 25, 215 (1972) od H. Hosoyo-a: Graphical Enumeration of the Coefficients of the Secular Polynomials of the Hückel Molecular Orbitals

Vrlo bi nas interesiralo Vaše mišljenje o ovom radu.

Na kraju se interesiramo i o napretku Vaših aproksimativnih formula za totalnu Pi-elektronsku energiju. S tim u vezi naišli smo na jedan zanimljiv formalizam Coulson-a, čije detalje Vam šaljemo odvojeno.

Primite srdačne pozdrave:

Nenad Trinajstić
Ivan Gutman

»RUDER BOŠKOVIĆ« INSTITUTE

41001 Zagreb, Croatia, Yugoslavia

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

Zagreb, 13. srpnja.

Dragi Dr. Cvetković,

Hvala Vam na pismima od 29. lipnja i 6. srpnja.

Šaljemo Vam manuskript rada: "Kekulé Structures and Topology" koji namjeravamo poslati u časopis: "Chemical Physics Letters". Zato Vas molimo, da ako imate ikakve primjedbe na manuskript, da nam ih javite najkasnije do 21. srpnja. Ako do tada ništa ne stigne, mi ćemo uzeti kao da ste Vi njime zadovoljni i proslijediti ćemo manuskript u časopis.

Nadamo se i dalje aktivnoj suradnji.

Pozdravlja Vas

Nenad Trinajstić

P.S. Naš raniji rad "Molecular Orbitals and Graph Theory", koji smo predali u CCA je dobio povoljne ocjene inostranih recenzentata, pa se sada nalazi u štampi.

Zagreb, 21. 6. 1972.

Dragi Dr. Cvetković.

Šaljemo Vam jedan rukopis koji je nastao kao rezultat Vašeg posjeta Zagrebu prije mjesec dana. Naša je namjera da ovo u suradnji s Vama publiciramo u Chemical Physics Letters. Naravno, u tom radu bit će data i jedna opširnija diskusija o kemijski relevantnim posljedicama ove ^Yformule.

Za sada bi Vas molili da kritički pregledate ovaj dio rada i date primjedbe kao i da dopišete reference iz matematičke literature (Holl-ov rad). U kemijskoj literaturi, koliko je nama poznato, postoje samo dva rada iz ove oblasti:

M.Gordon and W.H.T.Davison, J.Chem.Phys. 20,428 (1952)

Teh Fu Yen, Theoret.Chim. Acta 20,399 (1971).

U Zagrebu je prošlog tjedna boravio Aleksandar Balaban (Bukurešt) koji je objavio dvadesetak radova iz primjene teorije grafova u kemiji. Dali smo mu jedan primjerak Vaše doktorske teze na engleskom, koja ga je osobito interesirala. Sada bi Vas molili da nam, ako je moguće, pošaljete jedan primjerak.

Na kraju Vas molimo da što prije odgovorite na ovo pismo, kako bi rad dovršili i poslali još prije godišnjeg odmora, dakle u sedmom mjesecu.

Srdačno Vas pozdravljaju:

Joan Gutman
N. Trinajstić

Zagreb, 22.6.1972.

Dragi Dr. Cvetković.

Šaljemo Vam poopćenje Hall-ove formule, koja va-
ži za sve grafove.

Srdačno Vas pozdravljaju:

Nenad Trinajstić
Ivan Gutman

Broj Kekulé-ovih grafova nebikromatskih grafova

Neka graf G ima N čvorova.

Kekulé-ovim strukturama odgovaraju neke permutacione matrice

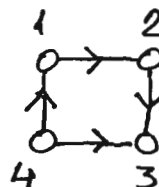
R_j ($N \times N$) koje su simetrične, tj. $R_j = R_j^T$. No pored ovih

postoje i permutacione matrice koje nisu simetrične. Njima ~~odgovaraju~~

odgovaraju grafovi sa usmjerenim konturama, npr.

$$R = \begin{bmatrix} 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \\ 1 & 0 & 0 & 0 \end{bmatrix}$$

odgovara grafu



Promatrajmo prvo jedan bikromatski graf. Sve one permutaci-

je R_j za koje važi

$$A \wedge R_j = R_j \quad (1)$$

predstavljaju ili Kekulé-ove grafove ili grafove sa usmjere-

nim parnim konturama. Njihov broj je (kao što je ranije do-

kazano) tačno K^2 . Primjetimo takođe da važi jednakost

$$\text{per } A = \sum_{j=1}^{N!} \text{per}(A \wedge R_j) = \sum_{s \in S_N} 2^{r(s)} \quad (2)$$

gdje s znači Sachs-ov graf sa $r(s)$ kontura, a ~~SM~~ S_N skup svih Sachs-ovih grafova sa N čvorova^{*}. To je zbog toga što svaka kontura u s može imati dvije orijentacije.

Vratimo se sada nebikromatskim grafovima. Permutacije koje zadovoljavaju (1) predstavljaju ili Kekulé-ove grafove ili usmjerene konture (bilo parne bilo neparne). Jednadžba (2) i dalje važi a možemo je napisati kao

^{*}Za detalje vidjeti naš rad u Theoret. Chim. Acta.

$$\text{per } A = \sum_{s \in S_N^{\bullet}} 2^{\#r(s)} + \sum_{s \in S_N^{\bullet\bullet}} 2^{r(s)} \quad (3)$$

gdje S_N^{\bullet} i $S_N^{\bullet\bullet}$ označavaju skup Sachs-ovih grafova sa parnim konturama (uključujući i one bez kontura, tzv. Kekulé-ove grafove) i sa neparnim konturama. No maločas smo vidjeli (kod bikromatskog grafa) da je

$$\sum_{s \in S_N^{\bullet}} 2^{r(s)} = K^2 \quad (4)$$

Tako konačno dobivamo

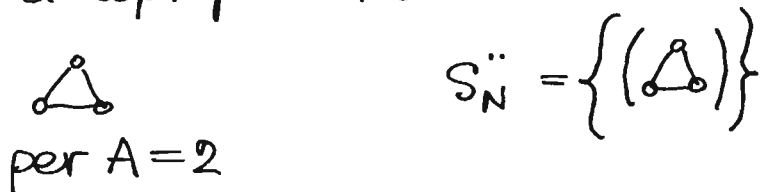
$$\text{per } A = K^2 + \sum_{s \in S_N^{\bullet\bullet}} 2^{r(s)} \quad (5)$$

tj.

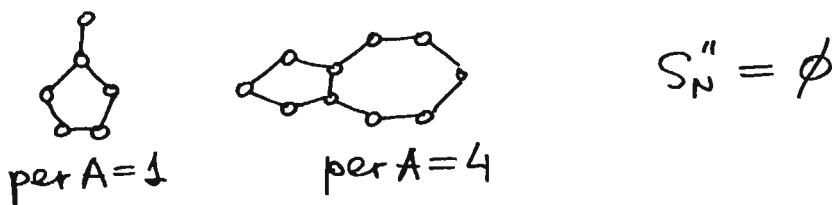
$$K = \sqrt{\text{per } A - \sum_{s \in S_N^{\bullet\bullet}} 2^{r(s)}} \quad (5a)$$

Za grafove interesantne u kemiji formula (5) odn. (5a) je lako upotrebljiva jer se bez teškoća može naći $S_N^{\bullet\bullet}$. To se vidi na primjerima:

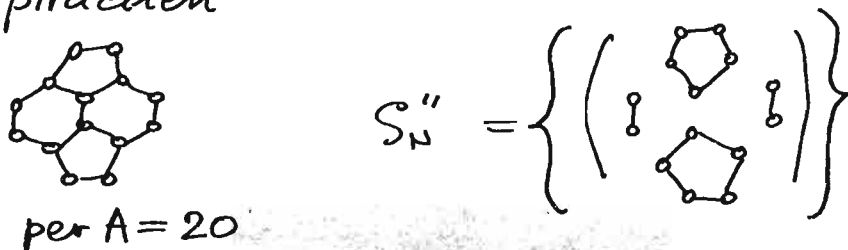
1° ciklopropenil radikal



2° fulven i azulen



3° piracilen



Veza matrice susjedstva sa brojem Kekulé-ovih grafova u bikromatskim grafovima

Neka je A matrica susjedstva bikromatskog grafa G sa m čvorova jedne i n čvorova druge boje. Neka je K broj Kekulé-ovih grafova grafa G . Tada važi sljedeći teorem:

$$K = \begin{cases} 0 & \text{za } m \neq n \\ \sqrt{\text{per } A} & \text{za } m = n \end{cases}$$

Dokaz

Čvorove grafa G ćemo numerirati tako da su čvorovi $1, 2, \dots, m$ povezani sa čvorovima $m+1, m+2, \dots, m+n$. U tom slučaju matrica susjedstva poprima oblik:

$$A = \begin{bmatrix} 0 & B \\ B^T & 0 \end{bmatrix} \quad (1)$$

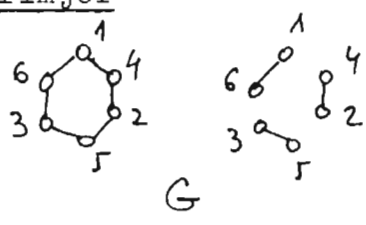
gdje je B^T transponirana matrica B .

Promatrajmo sada neki Kekulé-ov graf grafa G , tj. izbacimo sve grane koje graf G posjeduje sem onih koje dolaze kao dvostruke veze u datoj Kekulé-ovoj strukturnoj formuli. To je isto kao da zamjenjujemo neke jedinice u B (i u B^T !) sa nulama. Matrica P koja zaostaje izbacivanjem nekih jedinica iz matrice B ima u svakom stupcu i i u svakoj koloni točno jednu jedinicu. Prema tome, matrica P je permutaciona matrica. Matrica P je kvadratna, pa je

$$m = n \quad (2)$$

nužan uvjet postojanja Kekulé-ovih ~~struk~~ grafova.

Primjer



$$A = \begin{pmatrix} 000 & 101 \\ 000 & 110 \\ 000 & 011 \\ 110 & 000 \\ 011 & 000 \\ 101 & 000 \end{pmatrix}$$

$$B = \begin{bmatrix} 101 \\ 110 \\ 011 \end{bmatrix}$$

$$P = \begin{bmatrix} 001 \\ 100 \\ 010 \end{bmatrix}$$

Permutacionih matrica ima točno $m!$ i neka su to $P_1, P_2, \dots, \dots, P_{m!}$. Primjetimo da je

$$\left. \begin{aligned} |\det P_j| &= 1 \\ \text{per } P_j &= 1 \end{aligned} \right\} \text{ za sve } j \quad (3)$$

i da je samo jedan produkt u razvoju determinante odn. permanenta jednak jedinici (ostali produkti su nule). Primjetimo takođe da ako izbacimo makar jednu jedinicu iz matrice P_j biće njema determinanta kao i njen permanent nužno jednaki nuli.

Kako su elementi matrice A, B i P_j jedinice ili nule, definiraćemo sljedeću operaciju \wedge na skupu $\{0,1\}$:

$$\begin{aligned} 0 \wedge 0 &= 0 \wedge 1 = 1 \wedge 0 = 0 \\ 1 \wedge 1 &= 1 \end{aligned} \quad (4)$$

Neka je za $A = \|a_{ij}\|$, $B = \|b_{ij}\|$, $C = \|c_{ij}\|$

$$A \wedge B = C \text{ ako } a_{ij} \wedge b_{ij} = c_{ij} .$$

Promatrajmo matrice $B \wedge P_j$ $j=1,2,\dots,m!$. Očigledno je $B \wedge P_j = P_j$ samo ako postoji Kekulé-ov graf koji odgovara permutaciji P_j . U svim ostalim slučajevima, u skladu sa definicijom operacije \wedge , matrica $B \wedge P_j$ sadrži makar jednu jedinicu manje od matrice P_j . Prema tome je

$$\text{per}(B \wedge P_j) = \begin{cases} 0 & \text{ako } P_j \text{ ne odgovara Kekulé-ovoj strukturi} \\ 1 & \text{ako } P_j \text{ odgovara Kekulé-ovoj strukturi} \end{cases} \quad (5)$$

Zbog toga je

$$\sum_{j=1}^{m!} \text{per}(B \wedge P_j) = K \quad (6)$$

S druge strane $\text{per}(B \wedge P_j)$ je upravo jedan od članova u razvoju permanenta matrice B , tj.

$$\text{per } B = \sum_{j=1}^{m!} \text{per}(B \wedge P_j) \quad (7)$$

Iz istih razloga važi jednakost:

$$\det B = \sum_{j=1}^{m!} \det(B \wedge P_j) \quad (7a)$$

Iz jedn. (6) i (7) sljedi da je

$$\text{per } B = K. \quad \emptyset \quad (8)$$

Iz jedn. (1) je očigledno da je

$$\text{per } A = \text{per } B \text{ per } B^T = (\text{per } B)^2 \quad (9)$$

pa konačno imamo

$$\text{per } A = K^2 \quad (10)$$

Ovim je teorem dokazan.

29.6.72

D.Cvetković

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

Dear Professor Seidel,

Thank you very much for the despatched papers.

Recently, at the session of International Mathematical Summer Center in Italy I got acquainted with Dr. Jean Dogen. Mr. Dogen delivered a very interesting lecture on Steiner triple systems.

With kind regards,

Yours Sincerely

D.Cvetković

»RUĐER BOŠKOVIĆ« INSTITUTE

41001 Zagreb, Croatia, Yugoslavia

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

Zagreb, 22. 7. 1972.

Dragi Dr. Cvetković,

Hvala Vam na pismu od 20. srpnja, koji smo, na žalost, primili tek danas, dok je rukopis "Kekulé Structures and Topology" bio poslan dan ranije. Vaše primjedbe ćemo pokušati naknadno uneti u tekst.

Što se tiče "metode poligona" za konstruiranje karakterističnog polinoma, ona ni nama nije poznata. Poslaćemo Vam fotokopije nama dostupnih članaka. Inače, mi smo pisali profesoru Hosoyi i on nam je odgovorio i poslao svoje reprints.

Zadnji desetak dana proučavali smo orbite (članke Petersdorfa i Sachsa te Vaš i Krausov). Nismo mogli pronaći praktičnu upotrebljivost orbita za naše (kemijske) probleme. Naime, poznavanje samo nekih korijenova karakterističnog polinoma ne bi dalo nikakve informacije kemičarima. Isto važi i za poznavanje skupa S_{r_1, \dots, r_t} tim prije što se ne znamo odlučiti koji $\lambda \in S$

jeste u spektru grafa koji se proučava (bez razvijanja determinante ili sličnog postupka). Pored toga, u radu Wilda, Kellera i Güntharda eksplicitno su definirane orbite (str. 387 i 391 te dijagrami 5 i 8) kao i grupa automorfizama grafa. Dobili smo sljedeći rezultat:

Neka molekula posjeduje grupu simetrije S . Neka ista molekula shvaćena kao graf posjeduje grupu automorfizama A . Za faktoriziranje karakterističnog polinoma odlučna je uvijek grupa A .

Ako je $A \subseteq S$ tada se računanje izvodi sa nekom homomorfom slikom grupe S (nekim ireducibilnim reprezentacijama) koja je izomorfna sa grupom automorfizama A .

Ako je $S \supseteq A$ tada je naša tvrdnja sama po sebi jasna.

Kako nam je sada zbog godišnjih odmora nemoguće fotokopirati tražene članke, njih ćemo Vam poslati u devetom mjesecu.

Srdačno Vas pozdravljaju:

*Anita Grozanić,
Zvonimir Anušić*

N. Trinajstić

»RUĐER BOŠKOVIĆ« INSTITUTE

41001 Zagreb, Croatia, Yugoslavia

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

Zagreb, 6.9.1972.

Dragi Dr Cvetković,

Javljam Vam se posle letnje pauze. Nadam se da ste se dobro odmorili.

Prvo da Vas obradujem: rad o broju Kekulé-ovih struktura je prihvaćen u Chemical Physics Letters. Urednik nas je čak zamolio da pošaljemo i druge slične rezultate ako ih imamo.

Rad "Graph Theory and Molecular Orbitals II" nalazi se u fazi štampanja. Ovih dana sam izvršio prvu korekciju. Živkovićev rad o nulama u spektru biće štampan u istom broju Croatica chimica Acta. Nadam se da ste dobili separate od "GT and MO's I". Jedan primerak sam poslao i profesoru Sachs-u. Zanima me takođe ~~X~~ da li je već izašao naš rad u Matematičkom vesniku.

Otkako je raspust prošao intenzivno proučavam literaturu o Hückel-ovoj teoriji. Naišao sam na mnoge zanimljive rezultate. Navešću Vam samo rezultat Hall-a (G.G.Hall, Proc.Roy. Soc. A229, ~~25~~ 251 (1955)).

Neka matrica susedstva bihromatskog grafa sa n čvorova jedne i druge boje bude

$$A = \begin{pmatrix} 0 & B \\ B^t & 0 \end{pmatrix}$$

i neka su njeni vlastiti vektori $C_i = (c_{i1}, c_{i2}, \dots, c_{i2n})$, sa vlastitim vrednostima x_i i neka je $x_i x_j$ za $i \neq j$. Definirajmo matricu P:

$$P_{st} = 2 \sum_{i=1}^n c_{is} c_{it} \quad .$$

(Matrica P je od prvorazrednog značaja u hemiji, tzv. "bond order" matrica, v. tablice Coulson-a i Streitwieser-a str. XI.)

Tada je P oblika:

$$P = \begin{pmatrix} I & R \\ R^t & I \end{pmatrix} \quad (I \text{ je jedinična matrica reda } n), \text{ a matrica } \mathbf{R}$$

zadovoljava, između ostalog, jednačine:

$$R^t R = I$$

$$R B^t = B R^t$$

$$R^t B = B^t R \quad \text{i}$$

$$R B^t = (B B^t)^{1/2} \quad \text{i} \quad B^t R = (B^t B)^{1/2} .$$

Ova poslednja dva rezultata su značajna u hemiji jer je

$$E_{\text{H}} \stackrel{\text{def}}{=} 2 \sum_{i=1}^n x_i = 2 \operatorname{tr}(B^t B)^{1/2} = 2 \operatorname{tr}(B B^t)^{1/2}$$

tr = trag matrice. Postoje više poopštenja Hall-ovog teorema.

Ja nisam zaboravio da ste u julu tražili neke fotokopije. Na žalost, to pismo je (verovatno) kod Dr Trinajstića koji je trenutno u Rumuniji. Kada se on vrati ja ću ga potsetiti na fotokopije. Za svaki slučaj, možda bi bilo dobro da i meni napišete koji članci Vas interesuju.

Srdačno Vas pozdravlja

Ivan Gutman

Zagreb, 8.9.1972.

Dragi Dr Cvetković.

Pregledao sam naš rad i nemam nikakve primedbe. S obzirom da ste mi pisali hitno, pretpostavljam da je potrebno hitno i odgovoriti. Inače, svakako ste primili moje opširno pismo od pre neki dan.

Ja nemam žiro račun pošto obično nemam prihode ovačke vrste. Zato bih Vas zamolio da celi iznos honorara primite Vi pa da mi poštom pošaljete moj dio. Ako to ne bude moguće, molim Vas da mi to javite pa ću već naći neku soluciju.

Srdačno Vas pozdravlja:

Ivan Gutman

Zagreb 15. 9. 72.

Dragi Dr. Cvethović.

Otvorio sam žiro račun. Njegov broj je 663-620-1-71500-3037. Prema tome sada je, što se toga tiče sve u redu.

S obzirom da ste zauzeti ovih dana neće Vas opterećivati jednim novim ^{dugačkim} pismom. Međutim, ipak Vam ovom prigodom javljam da sam došao do vrlo zanimljivih rezultata u vezi ovisnosti veličine E_{Π}

$$E_{\Pi} = 2 \sum_{i=1}^{N/2} x_i \quad (\text{v. ranije pismo})$$

o raznim karakterističnim parametrima grafa (broj čvorova, broj grana, broj četvorougona i sl.) Rezultati važe isključivo za bichromatske grafove za koje je

$$E_{\Pi} = \sum_{i=1}^N |x_i|.$$

Ako Vas ova problematika zanima, vrlo rado ću saopštiti i detalje. Primite srdačne pozdrave

Juan Gutman

»RUĐER BOŠKOVIĆ« INSTITUTE

41001 Zagreb, Croatia, Yugoslavia

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

Dr. Dragoš Cvetković
Lamartinova 44
11000 Beograd

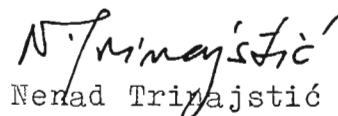
21. rujna 1972.

Dragi kolega Cvetković,

Evo poslije nekog vremena da Vam se opet javim. Mi smo i dalje aktivni na primjeni teorije grafova u kemiji. Upravo smo završili, pa pismu prilažemo treći rad iz serije: "Graph Theory and Molecular Orbitals", u kojemu pokazujemo ovisnost pi-elektronske energije konjugiranih molekule o molekularnoj topologiji. Nas bi interesiralo Vaše mišljenje i mogući kriticizam ovog rada.

Nemojte nam zamjeriti na ovolikom bombardiranju pismima iz Zagreba, ali ste nas upravo Vi stimulirali da smo počeli intenzivno raditi na ovoj problematici.

S poštovanjem,


Nenad Trinajstić

P. S.

Ovo je gumba verzija rada.

»RUĐER BOŠKOVIĆ« INSTITUTE

41001 Zagreb, Croatia, Yugoslavia

POB 1.016
PHONE: (041) 424-355
TELEX: 21-383

Zagreb, 3.10.1972.

Dragi Dr. Cvetković.

Iako već duže vreme ne odgovarate, pomišljam da se možda moje pismo zagubilo. Zato ću Vam ponoviti broj svog žiro računa

663-620-1-71500-3037 .

U međuvremenu, otkako ste primili kopiju našeg rada, uspeo mi je naći teorem opštijeg karaktera o funkciji E , tj.

$$a) N = 2n$$

$$b) N = 2n+1$$

$$E = 2 \sum_{i=1}^n x_i$$

$$E = 2 \sum_{i=1}^n x_i + x_{n+1}$$

ako je $x_i \geq x_j$ za $i < j$ a N broj čvorova grafa. Izrazi koje sam dobio glase:

$$E = k_0 \operatorname{tr} A^0 + k_2 \operatorname{tr} A^2 + k_4 \operatorname{tr} A^4 + \dots \quad (1)$$

$$E = k_0 L_0 + k_2 L_2 + k_4 L_4 + \dots \quad (2)$$

gde je A matrica susedstva grafa, tr znači trag matrice a L_n je broj kružnih puteva (petlji) dužine n u grafu ($L_0=N$). Koeficijenti k bi se dobili u razvoju $|x|$ u McLaurin-ov red. Kako ovaj red ne konvergira, k -ovi se moraju odrediti aproksimirajući $|x|$ konačnim polinomom. Najbolji polinom će, verovatno, biti Čebišav-ljev druge vrste.

Nužni i dovoljni uslovi za važenje jednakosti (1) i (2) jeste

$$a) \text{ za } N = 2n$$

$$x_1 \geq x_2 \geq \dots \geq x_n \geq 0 \geq x_{n+1} \geq \dots \geq x_{2n} ;$$

$$b) \text{ za } N = 2n + 1$$

$$x_1 \geq x_2 \geq \dots \geq x_n \geq x_{n+1} = 0 \geq x_{n+2} \geq \dots \geq x_{2n+1}$$

što , između ostalog, važi za sve bihromatske grafove.

Sada se skupilo dosta materijala oko funkcije E. Tu mislim na

a) Hall-ove i Ruedenbergove rezultate (o čemu sam Vam prije pisao),

b) McClelland-ove nejednakosti

$$N \leq E \leq \sqrt{2N} \gamma \quad (\gamma = \text{broj grana})$$

i Vaša poopštenja istih,

c) moje "pravilo o petljama", koje se mora svakako još poboljšati i

d) pregled (verovatno) celokupne literature o E.

Zbog toga sam sklon da Vam predložim da pokušamo napisati za neki matematički časopis jedan rad o funkciji E ako smatrate da bi ona bila od interesa za matematičare. Taj rad bi već i zato bio koristan da skrene pažnju matematičara na neke u suštini nerešene probleme u hemiji. Naime, i druge funkcije tipa E, gde se sumiranje vrši samo preko tzv. "okupiranih orbitala" su relativno važne u hemiji (npr. red veze, π -elektronski naboj i sl., v. uvod u tablice Coulson-a i Streitwieser-a).

Izvinjavam se što je ovo pismo, i pored moje najbolje volje poprimilo ovako bujne dimenzije. Srdačno Vas pozdravlja

Ivan Gutman

»RUĐER BOŠKOVIĆ« INSTITUTE

41001 Zagreb, Croatia, Yugoslavia

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

Zagreb, 22.10.1972.

Dragi Dr. Cvetković.

Hvala Vam na pismu od 15.10.72. Sa zadovoljstvom ću pokušati napisati nešto o primeni spektara grafova u hemiji, tim prije što je taj materijal sada već sreden. Naime, u najskorije vreme pisaću svoj magistarski rad čiji naslov je "Teorija grafova i molekularne orbitale" a bazi- raće se na člancima "Graph Theory and Molecular Orbitals" I-IV. (Br. III je prihvaćen u Chemical Physics Letters a br. IV, gde su navedena pravila o petljama i upotrebljeni Čebiševljevi polinomi prva vrste, poslali smo u International Journal of Quantum Chemistry koji daje vrlo stroge re- cenzije; autori su I.G., N.Trinajstić i T.Živković.) Tako- der, za Fortschritte der Chemischen Forschung (Springer Verlag) napisali smo Dr.Trinajstić i ja pregledni članak sa istim naslovom; o ovome će Vas N.T. verovatno uskoro detaljno obavestiti.

Kako ću od 22. do 24. januara boraviti u Beogradu mogli bi te dane iskoristiti da razjasnimo even- tualne nejasnoće oko rukopisa kao i da Vas konsultiram u vezi nekih problema sa vlastitim vektorima matrice sused- stva, *koji me sada interesiraju.*

Ako ne iskrsne ništa nepredvideno, ja bih svoju verziju rukopisa napisao čim završim pisanje magistar-

skog rada a najverovatnije u drugoj polovini 11. meseca.

Do kraja ove godine rukopis ću svakao završiti.

Srdačno Vas pozdravlja:

Ivan Gutman

Ilmenau, 19. 1. 72

Lieber Herr Cvetkovic'!

Erst heute erreichte mich Ihre umfangreiche
Bücherseendung, und ich möchte Ihnen hiermit
recht herzlichen Dank sagen! Der Grund
ist wohl, daß die Verpackung verloren ging
und es deshalb recht lange dauerte, bis man
mich als Empfänger ermitteln konnte, aber
heute wurden mir die Bücher und Sonderdrucke
(unverpackt) vom Rektor übergeben. Ein
Büchlein und einen Sonderdruck habe ich
an Herrn Hubschurenther, einen anderen
Sonderdruck an Herrn Dr. Finck weiterge-
geben, die sich beide ebenfalls recht

kurzlich dafür bedanken. Insgesamt wurden
mir 10 Bücher bzw. Sonderdrucke übergeben,
und ich hoffe sehr, daß nichts verlorengegangen
ist:

Welsh, Comb. Math. and its Appl. (Oxford-Conf.)

Cvetković / Milić Teorija grafova

(2 Exemplare, eines für Herrn
Hubschurenther)

Matematička Biblioteka 25

" " 32

Dirac / Stojaković: Problem četiri boje.

Cvetković: The spectral method ...

(insgesamt 4 Exemplare, eines
für Herrn Hubschurenther und eines
für Herrn Dr. Finck)

Noch einmal: Vielen Dank!

Lieber Herr Cvetkovic, bitte schicken Sie ^{Bücher} ~~Brief~~
und Sonderdrucke etc an die Dienst adresse:
TH Ilmenau, Sektion Mathematik, Rechn. Technik
und ~~Kybernetik~~ Ökonomische Kybernetik, 63 Ilmenau;
bei Briefen ist es gleich, die können Sie auch
an die Privatadresse schicken (Bücher für
Dienststellen werden vom Zoll schneller abge- ()
fertigt).

So viel für heute: Sobald ich Zeit finde,
schreibe ich mehr; mit diesem Brief
wollte ich nur so schnell wie möglich
den Empfang der Bücher bestätigen!

Wir hoffen, daß es Ihnen gut
geht! Mit vielen Grüßen von
allen Kollegen

Ihr
Herst Sachs

Ilmenau, 4. 3. 72

Lieber Herr Cvetković!

Endlich finde ich Zeit, Ihnen den schon seit langem
fälligen Brief zu schreiben. Ich hoffe, daß es
Ihnen gut geht und Sie den Winter gut überstanden
haben. Hier gab es kaum Schnee, und jetzt ist
schon beinahe Frühlingswetter. Ich war ein wenig
an der Grippe erkrankt, aber inzwischen bin ich
wieder gesund.

Ihre Arbeit "The algebraic multiplicity of the number
zero in the spectrum of a bipartite graph" habe ich
mit großer Interesse gelesen - es war völlig neu
für mich, daß Graphenspektren in der Chemie

so eine große Rolle spielen, und dass Chemiker einige Resultate schon vor den Mathematikern besaßen! Ich glaube, es ist sehr wichtig, dass Sie das herausgefunden haben: Dadurch erhält unsere "Spektraltheorie" eine starke Stütze durch die Naturwissenschaften!

Ich habe in den vergangenen Monaten kaum Zeit gefunden, mich mit Eigenwerten zu beschäftigen, doch hoffe ich, jetzt, nachdem die Korrektur von Teil II meines Büchleins beendet ist, mich wieder dem Polynom eines Graphen zuwenden zu können.

Ich kann auch etwas sehr Erfreuliches berichten:

Ein sehr tüchtiger Student, der in diesem Jahr das Studium beenden wird, wird bei mir als

"Forschungsstudent" arbeiten, und zwar wird er eine Dissertationsschrift auf dem Gebiet der

Graphenspektren auffertigen. Als erste Etappe hierfür soll er noch in diesem Jahr eine systematische Zusammenstellung und kritische Sichtung der Literatur über "block designs" und die Rolle des Spektrums für die zugehörigen Graphen (Arbeiten von Seidel, Shrikhande, ... vornehmen - hoffentlich wird das nicht zu umfangreich. Seine Ausarbeitungen können dann gleichzeitig als Grundlage für das Kapitel "block designs" unserer geplanten Monographie dienen, und ich hoffe, daß auch andere Teile des Buches von seinen künftigen Untersuchungen profitieren werden.

Wenn es Ihre Zeit erlaubt, so würde ich mich freuen, wenn Sie mir einmal wieder schreiben und über Ihre Fortschritte bei den Untersuchungen berichten würden.

Alles Gute für Sie und Ihre lieben Angehörigen!

Ihr
Hans Sachs

Ilmenau, 16. 4. 1972

Lieber Herr Cvetkovic!

- Für Ihren Brief vom 22. 3. 72 und für die beiden Bücher
und die Sonderdrucke, die inzwischen auch ganz
unbeschädigt hier angekommen sind, möchte ich Ihnen
(.) ganz herzlich danken! Sie haben mir damit eine
große Freude gemacht und mir sehr bei der Vervoll-
ständigung meiner Graphik-Bibliothek geholfen! Noch
einmal Recht vielen Dank, und bitte zögern Sie
nicht, mir zu schreiben, wenn ich Ihnen mit Büchern
oder in anderer Weise irgendwie behilflich sein kann! -
Wir freuen uns, daß es Ihnen und Ihrer Frau gut geht -
mit der Zeit geht es uns genau so wie Ihnen: Man hat
davon nie genug. So muß ich gleich zu Beginn des
(.) Briefes schreiben, daß ich durch vielerlei Verpflichtungen
(Ausarbeiten neuer Vorlesungen u. s. w.) gegenwärtig
ganz besonders an Zeitnot zu leiden habe und in
den letzten Wochen gar nicht zu neuen Untersuchungen
an den eigenen Forschungsgegenständen gekommen

bin. Außerdem muß ich in nächster Zeit 6 (sechs!) Annotationschriften aus unterschiedlichen Gebieten begutachten und Rezensionen über Bücher schreiben - Sie können sich nicht vorstellen, wie wenig Möglichkeiten da zu eigener Forschungsstätigkeit übrig bleiben. Muss mehr freuen ich mich, daß Sie und Herr Kraus das Problem von Herrn Petersdorf und mir aufgegriffen und mir weiterreichende Resultate erzielt haben - Computer können also auch für theoretische Untersuchungen von Nutzen sein! Man ist also auch die Frage $\pm\sqrt{3}$ geklärt - es wäre allerdings schön, wenn man noch die Schlingen beseitigen könnte. Ich habe auch eine kleine Arbeit vorbereitet, mit der sich jetzt Herr Finck beschäftigt und die endgültige Redaktion vornimmt - das kostet ja immer am meisten Zeit! Ich hoffe aber sehr, daß mein neuer Mitarbeiter (Forschungsstudent), Herr Runge, bald aktiv werden kann - noch arbeitet er sich ein und beschäftigt sich mit "block designs".

Besonders interessiert mich für mich Ihre Bemerkungen über die Verwendung der Spektren

in der Chemie, und Sie haben natürlich Recht, daß wir gründlich arbeiten und sorgfältig zitieren müssen. Es ist wirklich notwendig, eine gut durchdachte Monographie über diesen Gegenstand zu schreiben - nicht zu spät, sonst wird die Frage von anderen aufgegriffen, aber auch nicht übereilt, da viele Dinge ja noch so sehr im Fluss sind - wenn ich doch nur etwas mehr Zeit für diese Dinge ~~hätte~~ hätte! Im Herbst wird ein polnischer Mathematiker eine Aspirantur bei mir aufnehmen, vielleicht findet er auch Interesse an Graphenspektren. - Wenn Sie mir die eine oder andere Arbeit aus der Chemie, die typisch ist für unsere Fragestellung (z. B. über die von Ihnen erwähnte Faktorisierung von $\lambda I - A$), zugänglich machen könnten, so wäre ich Ihnen sehr dankbar.

Über die Frage der geometrischen Realisierung von Symmetrien kann ich Ihnen so auf Anhieb nichts sagen - ich werde darüber nachdenken.

Für den Sommer habe ich noch keine besonderen Pläne. Ende August ist die Haupttagung der Mathematischen Gesellschaft der DDR in Dresden, Anfang September soll eine Graphiktagung in Odessa (bei Jukov) sein, aber vermutlich nur für die Sowjetunion. Von Ihrem Angebot, Sie in Belgrad zu besuchen, werde ich gern Gebrauch machen, doch ist es mir zur Zeit leider ganz unmöglich, genau zu disponieren; Wenn Sie deshalb bitte nicht böse! Ich wünsche Ihnen einen angenehmen Aufenthalt in Italien - Bose und Bruck habe ich in 1969 in Ungarn bzw. 1968 in Komosia kennen gelernt, da lohnt es sich schon, an der "Sommer Schule" teilzunehmen. Bitte, schreiben Sie mir, wenn Sie etwas Interessantes haben - auch wenn ich nicht so flüchtig korrespondiere, so freue ich mich doch ganz besonders, wenn Sie Fortschritte machen können.

Mit vielem Dank für Alles
und besten Grüßen an Ihre liebe Frau, Prof.
Mitrinović und Herrn Kraus

Ihr Host Seiber

PROF. DR. HORST SACHS

63 ILMENAU
AM WENZELSBERG 12
TELEFON 3317

Ilmenau, 26.6.72

Lieber Herr Cvetkovic!

Zunächst einmal möchte ich Ihnen recht herzlich danken für die Übersendung Ihrer Dissertationsschrift! Das Paket mit mehreren Exemplaren ist hier gut und unversehrt angekommen, und ich freue mich für Sie, daß Ihre Arbeit nun der wissenschaftlichen Welt in auch äußerlich so ansprechender Form vorliegt! Auch für Ihren Brief vom 16.72 und

den mitgeschickten Manuskript recht vielen Dank! Leider bin ich gerade jetzt so stark mit Arbeit besetzt (Vorlesungen, Prüfungen, Dissertationen, Sitzungen, ...), daß ich bis Mitte Juli nicht mehr etwas Neues in Angriff nehmen kann. Ich schreibe jetzt - zusammen mit Dr. Fritze - eine kleine Arbeit: Struktur und Spektrum. Bitte, seien Sie nicht böse über die kurze Nachricht. Sobald ich Zeit finde, erhalten Sie einen Brief - Vielen Dank für Ihre Bemühungen wegen der Bücher. Das Buch von PERCUS habe ich gerade diesen Tage zum Rezensieren bekommen! 176 und zu hat der Mensch doch etwas "Glücke"! - Sehr interessant ist, was Sie über die Chemie schreiben. M. GORDON aus (Chester (England), Chemie-Professor, schreibt mir auch über gewisse Annäherungen der Gruppen (ohne Spektrum) in der Chemie - ich habe ihm empfohlen, sich mit Ihnen in Verbindung zu setzen. - Bitte, machen Sie (warte, wie Sie begreifen haben. Ich schreibe bald!

Recht herzlich grüßt Sie Ihr Horst Sachs

Ilmenau, 20. 8. 72

Lieber Herr Cvětković!

Endlich finde ich Zeit, mich für Ihren Brief vom 21 Juli und vor allem für das Buch von Sabra S Anderson, das ich inzwischen auch erhalten habe, recht herzlich zu bedanken! Das Buch von Anderson habe ich schon gelesen: Ich staune immer wieder, daß die Autoren der vielen Bücher, die gegenwärtig erscheinen sind, der Graphentheorie immer wieder neue Aspekte abgewinnen können. Ich erhielt auch (vom Verlag zugesandt) eine Einführung in die Graphentheorie von Robin J. Wilson (das ist der Sohn des englischen Ex-Labour-Premierministers), die sich sehr gut lesen läßt und im letzten Kapitel sogar eine Einführung in die Theorie der Matrizen enthält: Natürlich, das ganze Buch hat ausgesprochen einführenden Charakter - aber ich glaube, es ist schwerer, eine gute Einführung zu schreiben, als

(oft)

eine Monographie über einen speziellen Fragenkreis.
Das Buch heißt: Introduction to Graph Theory

£ 1.50 by Robin J. Wilson, Oliver & Boyd, Edinburgh 1972

Lieber Herr Cvetković, immer wenn ich an Sie
schreibe, habe ich ein äußerst schlechtes Gewissen:
Nun ist schon fast ein Jahr vergangen, seit Sie
hier waren, und ich habe inzwischen schon so viel
Material von Ihnen erhalten, das ich noch nicht
einmal durcharbeiten konnte und damit weit
hinter unserem Plan zurückliege - ich kann Sie
nur um Verständnis bitten und versichern, daß die
Theorie des Spektrums der nächste Programmpunkt
für meine Arbeit bleibt! Inzwischen habe ich
lediglich (zusammen mit Dr. Frucht) eine kleine
Arbeit über „Struktur und Spektrum“ für die
„Mathematischen Nachrichten“ vorbereitet - ich
werde Ihnen einen Durchschlag des Manuskripts
schicken, sobald es fertig ist. Ihre vorlesungsfreie
Zeit (August - eigentlich Urlaub) war ausgefüllt
mit so vielen kleineren Pflichten des Nachholens

und Vorbereiten, das wiederum keine Zeit übrig
bleibt. In der letzten Augustwoche findet die
Haupttagung der ökoth. Gesellschaft der DDR in
Dresden statt, und Sie können sich sehr vorstellen,
wie viel Mühe die Vorbereitung einer so großen
Tagung (ich bin Vorsitzender) macht - unmittel-
bar anschließend möchte ich an einer Tagung
über Graphen in Odessa teilnehmen, zu der
mich Jakob eingeladen hat (All-Union-Kongress?),
und wenn ich zurückkomme, läuft das neue
Studienjahr bereits auf vollen Touren! Auch
hatte ich im Juli einen Autounfall, dessen Über-
windung mich einige ~~Enge~~ Energie gekostet hat,
zum Glück gab es keine ernsthaften Verletzungen.
Bitte, denken Sie während der Tagung an mich und
wünschen Sie mir, daß alles gut abläuft.

Lieber Herr Coetkovic, Sie erwähnen das Buch
von Moon "Counting labelled trees" - ich würde
mich sehr freuen, wenn ich ein Exemplar bekom-
men könnte. Vielleicht allerdings wird mir Moon

Ilmenau, 24. 9. 72

Lieber Herr Cvetkovic,

Recht vielen Dank für Ihren Brief vom 22. 8., den ich leider erst jetzt beantworten kann, weil ich erst vor einigen Tagen aus Odessa zurückkehrte - nicht haben Sie meine Karte von dort inzwischen erhalten. Die Tagung der sowjetischen Graphentheoretiker in Odessa wurde von Jakob geleitet; außer mir nahmen nur noch drei Ausländer daran teil: Walther aus Ilmenau sowie J. Bosák und eine Dame aus Bratislava. Es wurde über einige schöne neue Ergebnisse berichtet (z. B.: Jeder planare Graph mit nicht mehr als 44 Knotenpunkten ist vierfärbbar), das Spektrum fand jedoch, soweit ich folgen konnte, keine Erwähnung. Es gibt in der Sowjet-Union eine Reihe tüch-

tiefer junger Graphentheoretiker, der nicht
bald von sich reden machen werden.

Nun zum Inhalt Ihres Briefes: Ich gratu-
liere Ihnen, daß Ihre Dissertation die Auf-
merksamkeit eines so bekannten Mannes
wie Richard BELLMAN auf sich gezogen hat.
Es wäre wirklich nicht schlecht, eine Mono-
graphie bei Academic Press zu publizieren,
da die Bücher dieses ^{angesehenen} Verlages in der ganzen
Welt verbreitet werden! Ich habe mich inzwi-
schen erkundigt, welchen Bedingungen ich
unterworfen bin, und folgendes erfahren:
Wenn ich in einem ausländischen Verlag
publizieren will, so benötige ich hierfür eine
besondere Genehmigung, und diese wird
nur dann erteilt, wenn kein Verlag der
DDR bereit ist, die Publikation zu über-
nehmen. Das trifft nun nicht zu: Sowohl
der Deutsche Verlag der Wissenschaften, Berlin"

als auch der „B. G. Teubner - Verlag, Leipzig“
haben bereits erklärt, daß sie ein Manuskript
über Graphenspektren gern annehmen werden.
Die Vertreterin des Teubner-Verlages, Frau Ziegler,
mit der ich über diese Angelegenheit sprach,
erklärte aber folgendes: Ihr Verlag [und
ebenso der „Deutsche Verlag der Wissenschaften“]
sind sehr an Gemeinschaftsproduktionen
mit „Academic Press“ interessiert - auch in
englischer Sprache - wobei die gesamte Herstellung
möglichst bei uns liegen soll (aus Devisengründen,
während der überwiegende Teil der Auflage
natürlich durch AP in englisch sprechenden
Ländern vertrieben wird. Das ist eine Verfahrens-
weise, die auch für AP ökonomische Vorteile bietet
und niemanden diskriminiert. Bei meinem
nächsten Aufenthalt in Berlin werde ich auch
mit Dr. Boll vom DVW hier über sprechen.
Vielleicht können Sie an Bellman schreiben,
daß sein Angebot durchaus auf vorbereitetem

Boden trifft, das es aber - über mich - bereits gewisse Absprachen mit dem „Deutschen V. d. W.“ gegeben hat, an die wir uns gebunden fühlen, und das wir ihn bitten, sich über die Möglichkeiten einer Co-Produktion zu äußern, denn das wäre die uns angenehmste Variante. Sobald ich mit DVW gesprochen habe, gebe ich Ihnen Nachricht.

Inzwischen hat hier das neue Studienjahr mit vielen Aufgaben begonnen. Ich habe aber auch eine günstige Nachricht für Sie: Seit dem 1. Sept. 72 arbeitet bei mir ein junger polnischer Aspirant, Piotr Weyman, und ich hoffe sehr, das mit seiner Hilfe (und der Hilfe von Herrn Runge) das Projekt der Monographie von meiner Seite nun doch etwas zügiger bearbeitet werden kann.

Lieber Herr Cvetković, ich hoffe sehr, das es Ihnen und Ihren Angehörigen gut geht, und bin mit besten Wünschen und freundlichen Grüßen - auch von meiner Frau -

Ihr
Horst Leuchs.

Rostock, 26.10.72

Lieber Herr Cvetković!

Für Ihren Brief vom 9.10.72 und die Kopie Ihrer Korrespondenz mit Richard Bellman danke ich Ihnen herzlich! Mit großem Bedauern habe ich erfahren, daß Ihr Sohn krank ist. Natürlich werde ich jede Gelegenheit nutzen, um etwas über Fibrosis cystica zu erfahren, aber leider konnte man mir bis jetzt nichts darüber mitteilen. Verbindungen zu berühmten Ärzten habe ich leider nicht, doch sicher werden mir einige Bekannte helfen können. Ich bin gegenwärtig in Rostock zu einer Tagung (in kleinem Kreise) über „Diskrete Mathematik“ und werde die Gelegenheit nutzen, mit den Kollegen darüber zu sprechen. Hoffentlich kann ich Ihnen helfen!

Ich habe hier einen Überblicksvortrag über Spektren gehalten und bin auf erstaunlich großes Interesse gestossen. Die meisten der Teilnehmer sind allerdings keine Gruppentheoretiker, sondern Systemtheoretiker, Automatentheoretiker und Algebriker, und sie kennen den Begriff des Spektrums nicht. Besonders die Automatentheoretiker glauben, hier

Anwendungsmöglichkeiten zu sehen, etwa zur Charakterisierung der Komplexität eines Graphen - und Ihnen Überlegungen oder Untersuchungen, die hierzu etwas zu tun haben, bekannt? Besonders interessiert die Frage, ob eine Ausdehnung der Resultate auf diskrete (lokal finite) unendliche Graphen möglich sei: Hierzu müßte man die (unendliche) Adjazenzmatrix als linearen Operator im Hilbert-Raum auf fassen und dann dessen Spektrum untersuchen. Ich weiß nicht, ob das geht, und habe das Gefühl, daß bei unendlichen Graphen wesentlich andere Umstände einwirken, doch habe ich mir systematisch darüber nachgedacht, vielleicht sind Ihnen oh-artige Gedanken bekannt? Ich würde mich gern damit beschäftigen, doch - die Zeit fehlt mir so sehr! Noch in diesem Jahr drücken mich eine ganze Reihe von Terminen.

Nun zu unserem geplanten Buch: Sie haben an Billman ganz in meinem Sinne geschrieben; natürlich habe ich noch keine Antwort von ihm. Bitte, setzen Sie die Arbeit an dem Manuskript fort - ich habe selbst nur ein so schlechtes Gewissen, daß ich noch

gewirkt dazu geleistet habe, und fühle mich sehr
in Ihrer Schuld. Nun, ich sage Ihnen schon voraus,
es wird wohl länger dauern - dennoch habe ich große
Hoffnungen, daß es bald heraus kommen wird. Gegen-
wärtig schreibe ich - zusammen mit Dr. Frick - eine
Arbeit über die Struktur regulärer Graphen (insbeson-
dere die Überdeckung mit gewissen Arten von Bäumen,
wobei das Spektrum eine wesentliche Rolle spielt (das
ist die Verallgemeinerung dessen, ^{worüber} ich vor einem
Jahr in Jülich ausarbeitete). Hoffentlich können sich
Herr Rung und Herr Weymann für unsere Theorie be-
geistern.

Ende vergangener Woche war ich in Berlin und habe
mit Herrn Arnold (Redakteur beim Deutschen Verlag der
Wissenschaften) gesprochen; Chefredakteur Dr. Boll, den
ich auch persönlich gut kenne, war leider verreist.
Herr Arnold sieht gute Chancen für den Abschluß
eines Vertrages zwischen DVW und AP; so hat sich AP
bei der letzten Buchmesse in Frankfurt am Main an
Koproduktionen mit Verlagen der DDR sehr interessiert
gezeigt. Der nächste Schritt von meiner Seite wird nun

PS: Bitte prüfen Sie Prof. Ushakov's: freier Willkür von mir. Ich habe keine
Bereit erhaltenen Text hoffe sehr, dass er nicht zwischen Euch die Arbeit von Ihnen
erhalten wird, die in irgendeiner Weise zu einem anderen Zweck zu sein.

dann bestehen, dem DVW ein Angebot mit ausführlicher
breit. Exposé zu unterbreiten, das werde ich
in der nächsten Woche erledigen; ich kann mich
daher ja weitgehend auf Ihre Vorstellungen stützen.
Sie erhalten hiervon eine Durchschrift. Binnen 8 Wochen
wird der Verlag die Entscheidungen von seiner Seite treffen
und sich gegebenenfalls selbst an AP wenden. Ich hoffe,
das es gelingen wird. Sollte allerdings ein Vertrag zwischen
DVW und AP nicht zustande kommen, so möchte ich,
wie Herr Grotkowski, Ihren Interessen nicht im Wege stehen:
Ich würde es voll kommen verstehen, wenn Sie dann allein
auf das Angebot von Bellmann eingehen würden. Ich
könnte dann zwar nicht als Co-Autor fungieren, würde
aber dem sehr gern mit Ihnen zusammenarbeiten und Sie
durch meinen Rat unterstützen. Zunächst aber sollten wir
versuchen, die andere Möglichkeit zu realisieren.

Für Ihre Einladung, Sie in Beograd zu treffen, recht herz-
lichen Dank! Auch ich glaube, dass wir uns, wenn die Arbeit
am Manuskript einen gewissen Stand erreicht hat, unbedingt
persönlich aussprechen sollten. Aber noch kann ich nicht
disponieren, vor Mitte nächsten Jahres wird die Zusamen-
kunft auch noch nicht zweckmäßig sein. In jedem Falle
bleibt die Möglichkeit, Sie hierher einzuladen, das kann ja
kurzfristig realisiert werden (besonders wenn Sie einen Vertrag
mit DVW haben) Herzlichst grüßt Ihr Herr Sachs

Ilmenau, 11.11.72

Lieber Herr Cvetković !

Ich danke Ihnen sehr für Ihren Brief vom
23.10. mit dem ins Detail gehenden Gliederungs-
vorschlag ! Ich werde hoffentlich bald so weit
sein, daß ich auch mit voller Kraft an dem
Buch arbeiten kann. Bis Ende des Jahres
sind allerdings noch zu machen : Ein Kapitel
über Graphentheorie für einen Festband zum
25. Jahrestag der Republik - zwei Original-
arbeiten fertig stellen - 1 Promotionsgutachten
und ca. 8 weitere Gutachten unterschiedlicher
Art - also, ich muß fleißig sein ! Die Graphen-
theorie ist jetzt recht populär geworden .

In der Anlage schicke ich einen Vortrag, den ich
außerdem einer Tagung über „diskrete Math.“
in Rostock gehalten habe - vielleicht läßt
sich der eine oder andere Gedanke daraus
verwenden. Über das in Abschnitt 9 behandelte
Problem der Überdeckung schreibe ich gerade
zusammen mit Dr. Finck eine Arbeit.
Wenn Sie weitere Gedanken dazu haben
(Kritik, Ergänzungen, ...) - bitte, schreiben Sie
mir bei Gelegenheit.

Gestern rief mich der Vertreter von AP im
Namen Bellmans von Frankfurt am Main
an und bekräftigte sein Interesse
am Zustandekommen des Buches (seinem
Namen habe ich nicht verstanden, aber es
war nicht Terrence Toohy) : Er sagte,

es werde kaum Schwierigkeiten geben, um das Buch in Co-Produktion mit VEB ~~DVW~~ DVW heraus zu bringen, es gäbe da schon Präzedenzfälle, und AP werde sich unverzüglich mit DVW ~~DVW~~ in Verbindung setzen. Ich muß nun das Exposé in englisch schreiben.

Lieber Herr Cvetković, diesen Brief gebe ich Herrn Dr. Schönfeld mit, den Sie während Ihres Aufenthaltes hier kennen lernten und der übermorgen nach Niš und BEOGRAD fährt (oder fliegt).

In Eile grüßt Sie herzlich

PS: Prof. Mypabae
aus Moskau sprach mir,
sich dort wegen Fibrosis
cystica zu erkundigen.
Ihnen sehr alles Gute!

Ihr
Horst Sachs

Zagreb 13. 11. 72.

Dragi Dr. Cvetković

Izvinjavam se što podaci koje sam Vam poslao o svom žiro računu nisu bili zadovoljavajući.

Dakle žiro račun

663-620-1-71500-3037 glavi na

ime Ivana Gutuana, Sombor, Stepanovića 7

(jer je to još uvek moje mesto stalnog boravka).

Nadam se da će sada moći da se izvrši uplata.

Naš rad "Kekulé Structures and Topology" izišao je iz štampe (Chemical Physics Letters 16 (1972) 614-616); nadam se da će i separati stići uskoro, pa ćemo Vam odgovarajući broj poslati.

Sada sam jako zauzet oho izrade magistrarskog rada, pa ću Vam se javiti kasnije neko opcionije.

Srdacno Vas pozdravljam

Ivan Gutuan

Zagreb: 27. studeni 1972.

Dragi Kolega Cvetković,

Hvala Vam na pismu od 24. studenog 1972. lijepo od Vas što ćete doći u Zagreb i tako ćemo moći razgovarati o zajedničkim problemima. Ivan će Vas na vrijeme obavijestiti o datumu ispita.

Molbi bi Vas za jednu uslugu. Ovdje u Zagrebu nemam broj 2 časopisa "ZHURNAL STRUKTURNOI KHMII". Vidio sam da ga posreduje knjižarnica Srpske Akademije Nauka, knez Mihajlova 35. Da li bi bilo tako ljubazni da nam upriličite shvedede članke (ako je to mogući):

Zhurn. Strukl. Khim. 2, 241 (1961)
i 452

Srdacni pozdravi,

Nenad Trinajstić

»RUĐER BOŠKOVIĆ« INSTITUTE

41001 Zagreb, Croatia, Yugoslavia

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

Dr. D. Cvetković
Lamartinova 44
11000 Beograd

21. studeni 1972.

Ivan Gutman je upravo dovršio svoj magistarski rad ("Teorija grafova i molekularne orbitale") čiju kopiju prilažem pismu. Rad je predao Sveučilištu u Zagrebu, a ja sam predložio ispitnu komisiju i Vas u nju. Ostala dva člana komisije bi bili Dr. Zvonimir B. Maksić (koji se upravo vratio iz U.S.A. i koji ekspert za teorijsku kemiju) i ja.

Sveučilište ima običaj da vanjskom ispitivaču ne nadoknadi putne troškove, ali daje pristojan honorar člana komisije (koliki to ne znam). Možda bi Vam Vaš fakultet mogao nadoknaditi putne troškove?

Sveučilište u Zagrebu će Vam poslati službenu obavijest o danu održavanja ispita. Mene bi pak zanimalo da mi javiti da li ste voljni doći u Zagreb. Tom prilikom bi mogli malo diskutirati o nekim novim našim projektima itd.

Naš zajednički rad s Ivanom: "Graph Theory and Molecular Orbitals. II." je upravo izašao u časopisu: "Croatica Chemica Acta" 44, 365-374 (1972). Ivan Vam je javio da nam je također i članak "Kekulé Structures and Topology" izašao u časopisu "Chemical Physics Letters" 16, 614-616 (1972). To je usput rečeno internacionalni časopis za kemijsku fiziku. Naša je suradnja do sada bila plodonosna pa nema razloga za prekidanje. Stoga se nadam da ćete doći u Zagreb s novim interesantnim teoremima iz teorije grafova, koji će se moći upotrebiti u kemiji.

Srdačni pozdravi,

N. Trinajstić
Nenad Trinajstić

Horst Sachs

Ilmenau, 27. 11. 72

Lieber Herr Cvetković!

Ganz in Eile: Zunächst herzlichen Dank für Ihren Brief vom 6. November. Anbei sende ich Ihnen das Exposé; die Gliederung entspricht Ihrem Vorschlag, ich habe sie nur ein wenig erweitert, ich hoffe, Sie werden einverstanden sein. Insbesondere habe ich dem "Teiler" ein extra Kapitel eingeräumt, da er mir mehr und mehr als wichtiges Hilfsmittel erscheint (vielleicht auch für die Chemie: Man könnte damit Moleküle gleicher lokaler, aber verschiedener globaler Struktur beschreiben). Inzwischen haben Sie sicher mein Rostocker Manuskript erhalten, daß Ihnen Herr Dr. Schönefeld überbrachte: Hierin schreibe ich an einer Stelle, daß ich den Begriff des Teilers nicht in der Literatur gefunden habe, aber ich entsinne mich, daß Sie in einem Ihrer Briefe schrieben, daß dieser Begriff von den Chemikern schon lange (in implizierter Form) benutzt wird; könnten Sie mir wohl genauere Literaturangaben dazu machen, vielleicht auch (ganz kurz) schreiben, um was es sich handelt, damit ich meine Formulierungen ganz korrekt wählen kann?

Inzwischen hat Herr van der Paas von AP nun auch beim DVW nachgesucht, so daß ich eigentlich kaum noch Schwierigkeiten für das Erscheinen des Buches in der gewünschten Art sehe. Nun beginnt die Arbeit!

Ich habe, wie immer, wenig Zeit. Indem ich Ihre Familie und Sie herzlich grüße, bleibe ich

Ihr

Horst Sachs

Jlmenau, 3.12.72

Lieber Herr Cvetković!

Ganz in Eile möchte ich Ihnen folgendes mitteilen: In der vergangenen Woche war ich in Berlin beim DVW, wo ich das Exposé abgab und noch einmal durchsprach. Nun möchte der Verlag über einige Einzelheiten etwas genauere Angaben haben, und so haben wir vorläufig folgendes vereinbart (wenn Sie andere Auffassungen haben, so schreiben Sie bitte gleich, dann kann ich das sofort ändern lassen):

Umfang: (200 ± 50) Seiten vom Format Ihrer Dissertation

Abbildungen: ungefähr 60 (oder weniger), einschließlich auftretender Flussdiagramme u. ähnliches (alles, was klistriert werden muß); Bezeichnung der Abbildungen mit ~~„Abb.“~~ ~~(nicht~~ „Fig.“ ~~oder~~ ~~„Bild“)~~

Manuskript-Abgabe: II. Quartal 1974
(also etwa April/Mai 1974)

Abgabe eines Muster-Kapitels, das auf der Buchmesse 1973 ausgestellt werden kann:

Sommer 1973

(Appendix)
Für Tabellen und Programme sind etwa
20 Seiten (maximal) vorgesehen (entspricht das
Ihren Vorstellungen?).

In welcher Form sollen die Maschinen-
programme gebracht werden? Nur als
Flussdiagramme (wenn ja, wie viele), oder
als textlich vorbereitete Programme?

Wie ungefähr würde das aussehen?

(Man möchte wissen, ob wir klischeefähig
Bilder vorlegen, ob Handsatz erforderlich ist,
oder ob Maschinensatz genügt).

Welche Programmiersprache soll benutzt
werden, ALGOL, FORTRAN, PL 1...? Es müßte
eine Sprache sein, die sowohl bei uns wie
auch in den USA gebräuchlich ist. (Vollständig
FORTRAN IV?)

Welche Form sollen die Tabellen haben?

Ich halte das Ganze für den jetzigen Zeit-
punkt noch gar nicht für sehr wichtig,
aber sicher dient es der Zusammenarbeit mit
dem Verlag, wenn wir jetzt schon einige
Angaben machen können.

Für heute: Herzliche Grüße!

Ihr Horst Sachs

»RUĐER BOŠKOVIĆ« INSTITUTE

41001 Zagreb, Croatia, Yugoslavia

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

Zagreb, 19. prosinca 1972.

Cijenjeni kolega Cvetković,

Šaljem Vam mišljenje o magistarskom radu Ivana Gutmana.

Molim Vas da nam hitno vratite potpisano (dodajte na poseban papir, ako želite nešto, a mislite da nam je promaklo), jer bi sjednica Vijeća voditelja trebala biti krajem mjeseca.

S poštovanjem,


Nenad Trinajstić

P.S.

O ostalom u sljedećem pismu ili usmeno kad dođete u Zgb.

»RUĐER BOŠKOVIĆ« INSTITUTE

41001 Zagreb, Croatia, Yugoslavia

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

Zagreb, 25.12.1972.

Dragi Dr. Cvetković.

Šaljem Vam prvi dio svog rukopisa o funkciji E (i njoj srodnim funkcijama) matrice susedstva. Do zakašnjenja je došlo jer sam imao čitav splet porodičnih neprilika. U vezi rukopisa hteo bih istaći sledeće:

1. Ovo je jedini primerak rukopisa pa molim da ga čuvate.

2. To je samo skica koja može poslužiti da se napravi detaljan plan pravog rukopisa. Matematičke izvode sam dao vrlo detaljno da bi rukopis bio što je moguće lakše čitljiv. Jasno mi je da će pravi tekst biti bitno kraći i da će trivijalni delovi otpasti.

3. Crna tinta označava tekst rukopisa a plava moje komentare, koji bi olakšali uklapanje u integralni tekst. Smatrao sam da je čitalac predhodno upoznat sa materijalom iz našeg rada u Mat.Vesniku^x.

4. Izvođenja sam modificirao da bi bila kraća i elegantnija nego u originalnim radovima.

5. Rezultati McClelland-a (J.Chem.Phys. 54 (1971) 640-643) o granicama unutar kojih leži E nisu ušli u ovaj rukopis prvenstveno zbog toga što Vi imate neke opštije rezultate o istoj problematici.

6. Drugi dio rukopisa trebalo je govoriti o vezi funkcije E (i dr.) i strukture grafa. Tu sam naišao na neke teškoće i zato bih prije sačekao Vaš odgovor na ovo pismo i mišljenje o već napisanom tekstu. U najkraćim crtama radi se o sledećem:

O funkciji E publicirali su

a) G.G.Hall, Proc.Roy.Soc. (London) A229 (1955) 251-259,

b) N.F.Stepanov, V.M.Tatevskij, Ž.Strukt.Him. 2(1961) 204;

2 (1961) 452-455, A 4409

^xVeć mi je neugodno da o tome pišem, ali honorar za taj rad još nije stigao na moj žiro račun

c) I. Gutman, N. Trinajstić, Chem. Phys. Lett. u štampi,

d) I. G., N. T., T. Živković, još nije prihvaćeno u štampu.

Svi oni su u stvari razvijali $|A|$ u red potencija (pri čemu se javljaju poznati problemi sa konvergencijom) koristeći da je $E = 2\text{Tr}|A|$. Zatim su $\text{Tr}A^n$ dovodili u vezu sa strukturom grafa.

a) Hall ne opisuje svoju metodu, a daje izraze:

$$E^{(1)} = 2N + \frac{\nu}{2}$$

$$E^{(2)} = \frac{7}{8}N + \frac{5}{4}\nu - \frac{1}{8} \sum_{r \in X} (\sigma_r'^2 + \sigma_r'')$$

gde je N broj čvorova, ν broj grana, σ_r' i σ_r'' broj prvih i drugih suseda čvora r a $\sum_{r \in X}$ znači sumiranje po svim čvorovima jedne boje. $E^{(n)}$ je n -ta aproksimacija za energiju E .

b) Stepanov i Tatevskij su opisali svoju metodu u Ž. Strukt. Him. 2, 204. Zato bih Vas molio da taj rad pregledate (i po mogućnosti mi pošaljete kopiju). Vi ste nam poslali njihov drugi rad ibid. 2, 452 gde su koristili razvoj $|A|$ u red Čebiševljevih polinoma i zatim odredili ovisnost E o 17 vrsta grana (tj. o njihovom broju).

c) Kopiju našeg rada imate. Mi smo iskoristili vezu između $\text{Tr}A^n$ i koeficijenata karakterističnog polinoma (Newton-ove relacije); koeficijente smo računali po teoremu Sachs-a.

Ovde bih istakao da je C. A. Coulson (Proc. Roy. Soc. 46 (1949) 202-205) našao vezu a_1 - a_6 i strukture grafa, ali njegova metoda nailazi na velike teškoće za dalje koeficijente.

d) Uočili smo vezu

$\text{Tr}A^n =$ broj kružnih puteva dužine n u grafu (petlji)

i tako je nastalo naše pravilo petlji. Bitno je da petlje dužine $4m+2$ imaju pozitivnu a one dužine $4m$ negativnu kontribuciju u E . Korišten je razvoj u Čebiševljeve polinome.

Tek nedavno sam "otkrio" da su rezultati dobiveni u c) i d) dobrim delom sadržani u a) i b).

Nadam se da ćemo uskoro moći razgovarati u Beogradu krajem januara i prilikom odbrane magistarskog rada u Zagrebu. U međuvremenu ću čekati Vaš odgovor.

Želeo bih da Vam ovom prilikom izrazim najtoplije želje za sreću i uspeh u novoj godini kao i za našu dalju uspešnu saradnju.

Sa srdačnim pozdravima

Ivan Gutman