

# Sjećanje na Antu Graovca

N. Trinajstić\*

Institut *Rugjer Bošković* i Hrvatska akademija znanosti i umjetnosti, Zagreb

Ante Graovac (Split, 1945. – Zagreb, 2012.) došao je sredinom 1970. u Grupu za teorijsku kemiju Odjela za fizičku kemiju Instituta *Rugjer Bošković*. Svoj diplomski rad *Proširenje metode jednoga centra* izradio je kod Milana Randića, a diplomirao 1970. na Odjelu za fiziku Prirodoslovno-matematičkoga fakulteta. Magistrirao je 1972. s radom *Računska i analitička istraživanja složenih molekularnih integrala* izrađen također pod voditeljstvom Randića na Poslijediplomskome studiju prirodnih znanosti Sveučilišta u Zagrebu, a doktorat će poslije izraditi kod profesora Franka E. Harrisa na Odjelu za fiziku Sveučilišta Utah u Salt Lake Cityju. Doktorirao je 1974. na PMF-u u Zagrebu s disertacijom naslovljenom *Fourierov transformat sume po rešetki u Hartree-Fockovom računu jednostavnih kristala*. Njegov je kratki životopis tiskan u *Kemiji u industriji* (*Kem. ind.* **58** (2009) 476–477) u povodu dobivanja *Godišnje nagrade za znanost* 2009. za razvoj i primjenu novih metoda matematičke kemije u potpuno novim područjima.

S člankom o primjeni Sachsova teorema započela je seriju članaka o odnosu jednostavne teorije molekularnih orbitala i teorije grafova u kojoj je objavljeno 20 članaka. Prvi članak u seriji je bio o Sachsovu teoremu: A. Graovac, I. Gutman, N. Trinajstić, T. Živković, *Graph Theory and Molecular Orbitals. Application of Sachs Theorem*, *Theoret. Chim. Acta* **26** (1972) 67–78.

Sve što je napravljeno u topologijskoj analizi konjugiranih spojeva sabrano je u knjizi A. Graovac, I. Gutman, N. Trinajstić, *Topological Approach to the Chemistry of Conjugated Molecules*, Springer-Verlag, Berlin, 1977., koja je dobro primljena sudeći po citiranosti (360 citata) i po tome što je rasprodana. Ta je knjiga izašla kao četvrta u seriji *Lecture Notes in Chemistry*, koju izdaje Springer. Springer je autore obavijestio u prosincu 2012. da će tu knjigu staviti na Web.

Organizirao sam u Dubrovniku u suradnji s Antom Graovcem tri međunarodna znanstvena skupa u okviru Međunarodne unije za čistu u primjenjenu kemiju (IUPAC, *International Union of Pure and Applied Chemistry*).

Prvi je skup bio *International Symposium on Aromaticity* (Dubrovnik, 3.–5. rujna 1979.). Ideju za taj skup je predložio 1976. profesor Gábor Náray-Szabó, a pokrovitelji Skupa uz IUPAC bili su Odjel za fizičku kemiju IRB-a, Hrvatsko kemijsko društvo, Društvo kemičara i inženjera Hrvatske i Unija kemijskih društava Jugoslavije. Mi smo taj skup dobili jer se tada već pokazalo da naš članak o topologijskoj rezonancijskoj energiji (TRE) kao kriteriju aromatičnosti predstavlja korak unaprijed u predviđanju aromatičke stabilnosti različitih klasa molekula bogatih  $\pi$ -elektronima, vidi I. Gutman, M. Milun, N. Trinajstić, *Graph Theory and Molecular Orbitals. XIX. Non-Parametric Resonance Energies of Arbitrary Con-*

*jugated Systems*, *J. Am. Chem. Soc.* **99** (1977) 1692–1704. Skupu su prisustvovali gotovo svi vodeći istraživači, koji su se bavili problemima vezanima na pripremu, stabilnost i aromatička svojstva konjugiranih spojeva.

Pozvana predavanja su tiskana u IUPAC-ovu časopisu *Pure and Applied Chemistry* (**52** (1980) 1399–1667), a članci temeljeni na kraćim usmenim izlaganjima i posterima tiskani su u časopisu *Croatica Chemica Acta* (**53** (1980) 525–685). Oba ova sveska uredili smo Ante Graovac i ja. Svezak časopisa *Croatica Chemica Acta* u

Theoret. chim. Acta (Berl.) 26, 67–78 (1972)  
© by Springer-Verlag 1972

## Graph Theory and Molecular Orbitals

### Application of Sachs Theorem

A. GRAOVAC, I. GUTMAN, N. TRINAJSTIĆ, and T. ŽIVKOVIĆ  
Institute "Rudjer Bošković", P.O.B. 1016, 41001 Zagreb, Croatia, Yugoslavia

Received March 1, 1972

The Sachs theorem [1] is discussed, and Kekulé and Sachs graphs are defined. The simple consequences of Sachs theorem which are of interest in chemistry are presented. Thus, it is shown that the pairing theorem, Hückel  $(4m+2)$  rule, and Longuet-Higgins and Dewar rule [2] can be obtained easily with the use of Sachs theorem. The dependence of the number of Kekulé structures on the molecular topology is also shown.

Das Theorem von Sachs [1] wird diskutiert und Kekulé- und Sachs-Graphen werden definiert. Die einfachen Folgerungen aus dem Theorem von Sachs, die in der Chemie von Interesse sind, werden abgeleitet. So wird gezeigt, daß die Paarregel von Coulson und Rushbrooke, die Hückelsche  $(4m+2)$ -Regel und die Regel von Longuet-Higgins und Dewar [2] leicht mit dem Sachsschen Theorem erhalten werden können. Die Abhängigkeit der Zahl der Kekulé-Strukturen von der molekularen Topologie wird ebenfalls gezeigt.

#### Introduction

In this work our intention is to investigate the applicability of the mathematical apparatus of Graph theory (GT) to the simple molecular orbital theory. Without insisting on rigid mathematical formalism (which can be found elsewhere [3–5]), we define a graph as an ordered pair

$$(\mathcal{N}, \mathcal{A}) \quad (1)$$

where  $\mathcal{N}$  is a set of some elements ("nodes") and  $\mathcal{A}$  is a relation defined on the set  $\mathcal{N}$ , which is symmetrical and antireflexive, i.e.:

$$(X, Y) \in \mathcal{A} \Rightarrow (Y, X) \in \mathcal{A}, \quad (2a)$$

$$(X, X) \notin \mathcal{A} \quad (2b)$$

So, two nodes can either belong to the relation  $\mathcal{A}$  (than we say that this nodes are adjacent), or not (then this nodes are not adjacent). A usual sketch representation of a graph is obtained when the nodes (elements of the set  $\mathcal{N}$ ) are drawn as small circles and if two nodes belong to the relation  $\mathcal{A}$  they are connected by a line (so called "edge"). The analogy between the nodes and edges of a graph and the atoms and bonds in a structural formula of a molecule is obvious.

Slika 1 – Prva stranica članka o Sachsovu teoremu: A. Graovac, I. Gutman, N. Trinajstić, T. Živković, *Graph Theory and Molecular Orbitals. Application of Sachs Theorem*, *Theoret. Chim. Acta* **26** (1972) 67–78. Neki autori smatraju da je naš članak o Sachsovu teoremu utjecao na eksplozivni razvoj kemijske teorije grafova pri kraju XX. stoljeća, vidi npr. R. B. Mallion, *An Autobiographical Account of Chemical Graph Theory in the Years Surrounding the Launch of MATCH: An Oxford Participant's Highly Personal and Parochial Reminiscence about the Period 1969–1976*, *MATCH Commun. Math. Comput. Chem.* **53** (2005) 15–52.

\* Akademik Nenad Trinajstić,  
e-pošta: trina@irb.hr



Slika 2 – Autori članka o primjeni Sachsova teorema 35 godina poslije, u lipnju 2007. u Dubrovniku. Redom s lijeva Ante Graovac (Split, 1945. – Zagreb, 2012.), Ivan Gutman (Sombor, 1947.), Nenad Trinajstić (Zagreb, 1936.) i Tomislav Živković (Zagreb, 1943.). Fotografiju je snimio Roger B. Mallion i njegovom dozvolom je upotrijebljena.

kojem su bili članci sa Skupa bio je posvećen Erichu Armandu Arthuru Josephu Hückelu (Charlottenburg, 1896. – Marburg, 1980.), kojega se može smatrati uz Heitlera i Hunda utemeljiteljem moderne kvantne kemije, ali kojega je mimoišla Nobelova nagrada zbog političkih razloga. Uvodni članak u taj svezak časopisa *Croatica Chemica Acta* bio je kratki članak *In memoriam – Erich Hückel* (1896. – 1980.) (*Croat. Chem. Acta* **53** (1980) XV–XVI), koji smo napisali Dionis Sunko i ja.

Pravila su takva da IUPAC-ove skupove jedna država može održavati tek svake treće godine. Zato smo sljedeći skup organizirali 1982. Bio je to znanstveni skup *International Symposium on Theoretical Organic Chemistry* (Dubrovnik, 30. kolovoza – 3. rujna 1982.). Taj je skup nama dodijeljen bez problema, jer smo tada već imali međunarodnu reputaciju istraživača koji rade vrlo inovativno u području teorijske organske kemije. Također smo tim skupom obilježili i 30. obljetnicu teorijske (organske) kemije u Hrvatskoj, jer se njezinim početkom može smatrati godina 1952. kada je Milan Randić u kasno proljeće te godine dovršio diplomski rad o elektonskoj strukturi benzena pod voditeljstvom Ivana Supeka.

Pokrovitelji Skupa bili su uz IUPAC, Odjel za fizičku kemiju IRB-a, Hrvatsko kemijsko društvo i Unija kemijskih društava Jugoslavije. Skupu su prisustvovali gotovo svi vodeći teorijski organski kemičari iz svijeta, a najistaknutiji sudionik bio je John Anthony Pople (Pittsburgh, Pennsylvania; koji će dobiti Nobelovu nagradu za kemiju 1998.).

Članci temeljeni na pozvanim predavanjima tiskani su u svesku časopisa *Pure and Applied Chemistry* (**55** (1983) 191–408), koji smo uredili Ante Graovac i ja. Članci temeljeni na kraćim predavanjima i posterima tiskani su u dva sveska časopisa *Croatica Chemica Acta* (**56** (1983) 157–551). Ta dva sveska smo uredili Ante Graovac, Darko Babić i ja.

Skup je protekao u kolegijalnoj atmosferi s razumnim raspravama o ulozi teorijske kemije u kemiji. IUPAC nam je čestitao na uspješnoj organizaciji Skupa.

Treći IUPAC-ov skup, koji smo organizirali opet u Dubrovniku od 2. do 5. rujna 1985. bio je naslovljen *International Symposium on Applications of Mathematical Concepts to Chemistry*. Zadnji dan Skupa bio je posvećen uspomeni na Profesora Andreja Ažmana (Celje, 1937. – Ljubljana, 1980.), koji je za života bio vodeći slovenski teorijski kemičar i s kojim smo vrlo uspješno surađivali.

Gotovo svi vodeći matematički kemičari toga vremena sudjelovali su na skupu. Uvodno je predavanje održao John N. Murrell FRS (Brighton) o matematičkome obrazovanju kemičara.

Sva pozvana predavanja su tiskana u knjizi N. Trinajstić, urednik, *Mathematics and Computational Concepts in Chemistry*, Ellis Horwood Ltd, Chichester, 1986. Uvodni članak je napisao Vladimir Prelog u kojem je između ostaloga napisao “...the progress of chemistry depends more than ever on applications of mathematics.” (...napredak kemije ovisi više nego ikad o primjenama matematike.). Prelog nije mogao doći u Dubrovnik, jer se oporavljao o loma noge, koji mu se dogodio na skijanju. Knjiga je bila posvećena istaknutim hrvatskim znanstvenicima Rugjeru Boškoviću, Andriji Mohorovičiću, Lavoslavu Ružički i Boži Težaku.

Osim pozvanih predavača, na Skupu je sudjelovao velik broj istaknutih teorijskih organskih kemičara iz svijeta. Njihova su izlaganja tiskana u specijalnome broju časopisa *Croatica Chemica Acta* (**59** (1986) 513–772), koji sam također uredio.

Na tome Skupu je pokrenuta i inicijativa da se osnuje *International Society of Mathematical Chemistry*, što će poslije i dogoditi.

Nakon tih aktivnosti Ante se posvetio organiziranju skupova koje je nazvao MATH/CHEM/COMP, koji se održavali u Dubrovniku od 1986. do 2011. Na njima su izlagali matematičari, koji se bave diskretnom matematikom, računalni stručnjaci, teorijski i matematički kemičari, i mnogi drugi.