

povijest kemije i kemijskog inženjerstva

Ureduju: H. Vančik i M. Hraste

O nekim zanimljivim rezultatima postignutim u Hrvatskoj u području kemijske teorije grafova*

KUI – 12/2006.
Prispjelo 30. svibnja 2005.
Prihvaćeno 4. siječnja 2006.

Nenad Trinajstić

Institut Rugjer Bošković i Hrvatska akademija znanosti i umjetnosti,
Zagreb (E-mail: trina@irb.hr)

Prikazani su ukratko najzanimljiviji rezultati postignuti u području kemijske teorije grafova u Grupi za teorijsku kemiju Instituta "Rugjera Boškovića" posljednjih trideset i pet godina. U članku se govori o Sachsovome teoremu za konstrukciju karakterističnoga polinoma molekule, o uvođenju topološke rezonancijske energije kao mjere aromatičnosti konjugiranih molekula, o analizi izospektralnih molekula, o razvijanju algoritama za generiranje i prebrojavanje Kekuléovih struktura, o razvoju i primjeni molekularnih deskriptora, o analizi modela konjugiranih krugova i njegovoj primjeni na fulerene, o analizi različitih graf-teorijskih matrica, o razvoju računalne metode CROMRsel za modeliranje svojstava molekula pomoću molekularnih deskriptora, o razvoju i primjeni algoritama za prebrojavanje različitih klasa molekula te o studiranju kompleksnosti molekula i kemijskih reakcija. Navedeni su brojni suradnici i gosti Grupe za teorijsku kemiju, koji su radili na problemima kemijske teorije grafova.

Ključne riječi: *Aromatičnost, fulereni, izospektralne molekule, kemijska teorija grafova, kombinatno prebrojavanje, kompleksnost, molekularni deskriptori*

Početak moderne kemijske teorije grafova u Hrvatskoj može se smatrati članak *Graph Theory and Molecular Orbitals. Application of Sachs Theorem*, četvorice članova Grupe za teorijsku kemiju Instituta "Rugjera Boškovića": Ante Graovca, Ivana Gutmana, Nenada Trinajstića i Tomislava Živkovića, koji je tiskan u časopisu *Theoretica Chimica Acta* 26 (1972) 342. Članak je stigao u časopis 1. travnja 1972. U tom je članku pokazano kako se može karakteristični polinom konstruirati na temelju strukturnih karakteristika molekule, koja je u tu svrhu prikazana kao graf, a postupak se temeljio na teoremu prilagođenom za kemijsku uporabu, koji je objavio 1962. njemački matematičar Horst Sachs.¹ O značenju toga članka kaže Roger B. Mallion "...paper that changed everything and gave a verve and momentum to the subject unlike any other..." (...članak koji je promijenio sve i unio polet i zamah u područje kao niti jedan prije...).² Međutim, dosta prije Sachsa, Coulson je prvi uočio vezu između koeficijentata karakterističnoga polinoma i podgrafova.³

Nakon prvoga članka nastavljena je analiza različitih graf-teorijskih aspekata jednostavne teorije molekularnih orbitala poznate u literaturi kao Hückelova teorija. Najvažniji rezultat objavljen je 1977., kada je predložena topološka rezonancijska energija (TRE indeks) kao mjera aromatičnosti neke konjugirane molekule i kada je uveden polinom sparivanja.⁴ Poticaj za gore navedeni članak bila su dva ranija članka, objavljenja 1972., u kojima je dana jedna jednostavna mjera aromatičke stabilnosti izvedena pomoću Hückelove teorije.^{5,6} Ta se dva članka još uvijek citiraju i analiziraju, vidi npr. nedavni članak Schaada i Hessa u *Chemical Reviews*,⁷ u kojem autori razmatraju u posebnom odjeljku Milun, Sobotka and Trinajstić Two-Bond Reference. Članak o indeksu TRE imao znatan utjecaj na razvoj moderne teorije aromatičnosti, a u mnogim knjigama o aromatičnosti posvećeno mu je nekoliko stranica, vidi npr. V. I. Minkin, M. N. Glukhovtsev, B. Y. Simkin, *Aromaticity and Antiaromaticity*, Wiley, New York, 1994). Danas se indeks TRE rabi bez citiranja izvornoga rada u kome je predložen.

Među mnogim zanimljivim rezultatima koji su postignuti ovdje ćemo navesti rezultat da među svim mogućim konjugiranim molekulama postoji samo 6 molekula koje imaju

* Prilog s Prvoga kongresa hrvatskih znanstvenika iz domovine i inozemstva (Zagreb–Vukovar, 15.–29. studenoga 2004.)

cjelobrojni graf-teorijski spektar⁸ i rezultat o izospektralnim konjugiranim molekulama.⁹ Taj je rezultat zanimljiv zato jer je u doba dominacije Hückelove teorije molekularnih orbitala bio nepoznat. Izospektralne molekule su molekule koje su različito građene, ali koje imaju identične graf-teorijske spektre.^{10,11} U matematičkoj teoriji grafova takvi se grafovi nazivaju kospektralni grafovi.¹² Rječnikom Hückelove teorije izospektralnost znači da postoje konjugirane molekule, koje imaju identične Hückelove molekularne orbitale. Par takvih molekula je 1,4-divinilbenzen i 2-fenilbutadien, a prvi ih je uočio Tomislav Živković. Nakon dovršavanja matematičke analize Hückelove teorije i graf-teorijske analize konjugiranih molekula sve što je napravljeno sažeto je u knjizi A. Graovac, I. Gutman, N. Trinajstić, *Topological Approach to Chemistry of Conjugated Molecules*, Springer-Verlag, Berlin, 1977.

Nakon 1977. Milun se posvetio spektroskopiji, vakuumske fizici i nanostrukturama, Gutman je napustio Zagreb, smjestio se u Kragujevcu (SiCG) i nastavio je vrlo kvalitetno raditi u području matematičke kemije, a Živković je nastavio raditi u području kvantne računalne kemije. Graovac i Trinajstić nastavili su raditi u području kemijske teorije grafova, s time da se Graovac kasnije usredotočio na kombinatorne probleme vezane za nanostrukture.

Budući da je kemijska teorija grafova dio matematičke kemije, Gutman i Trinajstić su pred par godina pokušali definirati to područje teorijske kemije, nakon što su analizirali postojeće definicije, na sljedeći način:¹³ *Mathematical chemistry is part of theoretical chemistry which is concerned with applications of mathematical methods to the chemical problems* (matematička kemija je dio teorijske kemije koji se bavi primjenama matematičkih metoda na kemijske probleme). I drugi su se autori pozabavili razvitkom matematike u kemiji i također su pokušali definirati matematičku kemiju.^{14,15}

Nakon vrlo plodnoga razdoblja 1972.–1977. u područje kemijske teorije grafova ulazi brojni mlađi suradnici, od kojih neki nakon doktorata, a neki i nakon diplomskoga rada napuštaju Hrvatsku: Predrag Ilić (došao iz BiH-a raditi na doktoratu, otišao u SAD), Borka Džonova-Jerman-Blažič (došla iz Slovenije raditi na doktoratu i tamo se vratila), Biljana Panzova (došla iz Makedonije raditi magistarski rad i tamo se vratila), Boris Sinković (nakon diplomskoga rada otišao u SAD), Željko Jeričević (nakon doktorata otišao u SAD, sprema se vratiti na Sveučilište u Rijeci), Aleksandar Sabljčić, Albin Jurić, Branko Ruščić (nakon doktorata otišao u SAD), Emil Pop (došao iz Rumunjske raditi na doktoratu i tamo se vratio, danas je u SAD-u), Sonja Nikolić, Kemo Sinanović (došao iz BiH-a raditi magistarski rad i tamo se vratio), Nada Bošnjak, Alemka Božić, Gani Jashari (došao iz Kosova raditi doktorat i tamo se vratio), Bogdan Bogdanov (došao iz Makedonije raditi na doktoratu i tamo se vratio), Dejan Plavšić, Dragan Amić (Osijek), Zlatko Mihalić, Bono Lučić, Emil Ivanov Račin (došao iz Bugarske raditi na doktoratu i tamo se vratio), Maria Barysz (došla iz Poljske raditi na doktoratu i tamo se vratila), Dražen Horvat, Iva Maria Tolić-Norrellyke (dijelom izradila doktorat na Institutu "Rugjeru Boškoviću", a dijelom na Harvardu, sada je u Njemačkoj), Ante Miličević (izradio diplomski rad na Institutu "Rugjeru Boškoviću, sada je u Institutu za medicinska istraživanja i medicinu rada), Damir Vukičević (Split), Sarah Rajtmajer (kao studentica došla na ljetnu praksu s Department of Mathe-

matics, Columbia University, New York, sada radi doktorat na Odsjeku za matematiku, Prirodoslovno-matematičkoga fakulteta u Zagrebu). Također se uspostavlja suradnja sa znanstvenicima iz svijeta: Danail Bonchev (Bugarska, SAD), Roger B. Mallion (Engleska), Jan von Knop (Njemačka), Pavel Křivka (Češka, bio na poslijedoktorskoj specijalizaciji u Zagrebu), Sherif El-Basil (Egipat), Milan Randić (SAD, utemeljio Grupnu za teorijsku kemiju), Maria Barysz (Poljska), Benjamin M. Gimarc (SAD), Dragoš Cvetković (SiCG), Douglas J. Klein (SAD), Harold W. Kroto (Engleska), Charles F. Wilcox, Jr. (SAD), Marjan Vračko (Slovenija), Bojan Mohar (Slovenija), Subhash C. Basak (SAD), Stuart Carter (Engleska), István Lukovits (Mađarska), Haruo Hosoya (Japan), Alan R. Katritzky (SAD), Dušanka Janežič (Slovenija), Lionello Pogliani (Italija), Janez Žerovnik (Slovenija), Mircea V. Diudea (Rumunjska), Károly Héberger (Mađarska), Christoph Rücker (Njemačka), Edward C. Kirby (Škotska), A. T. Balaban (Rumunjska, SAD), Tomaž Pisanski (Slovenija).

Problemi na kojima se radi su analiza modela konjugiranih krugova, prebrojavanje i generiranje Kekuléovih struktura, razvoj i primjena molekularnih deskriptora, razvoj primjena graf-teorijskih matrica od kemijskoga interesa, modeliranje QSPR i QSAR, kompjutorsko generiranje i prebrojavanje različitih klasa molekula, razmatranje kompleksnosti molekula. Uporedo s tim opsežnim istraživanjima, Trinajstić piše prvu i za sada jedinu monografiju o kemijskim primjenama teorije grafova, koju naslovljava *Chemical Graph Theory*, koja izlazi iz tiska 1983. u dva sveska¹⁶, čije je drugo izdanje izašlo 1992. u jednom svesku¹⁷, a treće je u pripremi. Naziv *kemijska teorija grafova* danas je općenito prihvaćen za područje primjena teorije grafova u kemiji, a knjiga se citira preko 1700 puta.

Milan Randić je 1976. predložio model konjugiranih krugova za studiranje aromatičnosti konjugiranih sustava^{18,19}, koji se pokazao osobito pogodan u primjeni na fulerene i srodne sustave. Konjugirani krugovi čine strukturu particiju Kekuléovih struktura, koji su se pokazali osebujnim za ocjenu aromatičnosti pojedine konjugirane strukture. Pokazano je da model konjugiranih krugova posjeduje strogu kvantno-mehanički temelj i da ga je moguće izvesti iz Pauling-Whealandovoga modela, a da pripadni Hamiltonijan može strogo definirati u prostoru ortogonalnih Kekuléovih struktura.²⁰ Problem, koji se tu javlja je generiranje i prebrojavanje Kekuléovih struktura iz kojih se izvode konjugirani krugovi. Jedan način rješenja toga problema je pomoću metode temeljene na Pascalovom rekurzivnome algoritmu²¹, a u slučaju konjugiranih polimera i sličnih molekula pomoću metode transfer-matrice.²² S problemom prebrojavanja Kekuléovih struktura velikih benzenoidnih molekula pozabavio se u novije doba zagrebački matematičar Tomislav Došlić. On je razmatrao tzv. benzenoidne paralelograme i trokutaste benzenoide²³. Kekuléove strukture su temeljne valentne strukture u teoriji valentnih struktura^{24,25}, pa su studirana njihova svojstva^{26,27}, a tu se ističu suradnički doprinosi splitskoga matematičara Damira Vukičevića.^{28–30}

U Zagrebu (a vrlo često u suradnji s kolegama iz svijeta) je razvijeno nekoliko molekularnih deskriptora, kao što su Zagrebački indeksi^{31,32} i poopćeni Zagrebački indeksi³³, Haryjev indeks³⁴ i modificirani Haryjev indeks³⁵, detour-indeks³⁶, varijabilni Wienerov indeks³⁷ i poopćeni Wienerov indeks.³⁸ Uporedo s razvijanjem i uporabom molekularnih deskriptora, razmatrane su graf-teorijske matrice iz kojih se

većina molekularnih deskriptora izvodi. Tako su predložene Hararyjeva matrica³⁴, Baryszina matrica udaljenosti^{39,40}, različite matrice za utežene grafove^{41,42}, a studirana su svojstva detour matrice^{36,43}, Laplaceove matrice⁴⁴, različitih matrica udaljenosti^{45,46}, matrice incidencije⁴⁷, Markovljeva matrica⁴⁸, Schultzove matrice⁴⁹ i grafičkih matrica.^{50–53} Sve što je urađeno u vezi s graf-teorijskim matricama u kemijskoj teoriji grafova sabrano je u preglednom članku *Graph-Theoretical Matrices in Chemistry*.⁵⁴

Razvijena je također i strategija modeliranja svojstava molekula pomoću molekularnih deskriptora⁵⁵, koja je rezultirala između ostaloga i računalnim postupkom nazvanim CROMRsel.^{56–58} Sudeći prema odjecima u literaturi našu strategiju primjenjuje dosta istraživača, a monografije u kojima raspravlja o molekularnim deskriptorima i modeliranju QSPR/QSAR spominju radove Zagrebačke grupe (vidi lit.^{40,59,60}). U literaturi se naziva *Zagrebačka grupa* onaj dio Grupe za teorijsku kemiju Instituta "Rugjera Boškovića" koji se bavi kemijskom teorijom grafova.

Uočivši u literaturi početni razvoj i uporabu virtualnih kombinatorskih knjižnica kemijskih spojeva u pripravi spojeva ciljanih svojstava, započelo je razvijanje algoritama za potpuno generiranje i prebrojavanje različitih klasa molekula u suradnji s profesorom *Janom von Knopom* i njegovom grupom sa Sveučilišta u Düsseldorfu i u jednom dijelu s profesorom *Sir Haroldom W. Krotom* sa Sveučilišta u Brightonu. Pionirski radovi u tom području bili su kodiranje, generiranje i prebrojavanje acikličkih spojeva pomoću uređene *N*-torke i uporaba obrnutoga leksikografskoga reda⁶¹ te kodiranje pomoću koda DAST (*dualist angle-restricted spanning tree*), generiranje i prebrojavanje benzenoidnih ugljikovodika.⁶² Osim pojma *kemijskih stabala*, uveden je u pojam *fizikalnih stabala*, koja za razliku od kemijskih stabala zadržavaju informaciju o svojem nastanku.⁶³ Na temelju koncepcije o fizikalnim stablima predložen je jednostavan mehanizam po kojem se formiraju acikličke molekule u međuzvezdanom prostoru.⁶⁴ Kasnije je pokazano da su Morganova stabla⁶⁵ podvrsta fizikalnih stabala.⁶⁶ Sve što je učinjeno u Zagrebu u području generiranja i prebrojavanja sabrano je u knjizi *Computational Chemical Graph Theory*⁶⁷ i u tri pregledna članka^{68–70} napisana po pozivu za seriju *Chemical Modelling*, koju izdaje *Royal Society of Chemistry* u Londonu.

Studiranje kompleksnosti molekula i traganje za strukturnim čimbenicima koji utječu na složenost molekularnih sustava i kemijskih reakcija pokazalo je da kompleksnost molekula raste s veličinom molekule, s grananjem molekule, prstenovima i s prostornim rasporedom, a pada s porastom simetrije. Sve što je učinjeno u tom području sabrano je u preglednom članku, napisanom po pozivu.⁷¹ Studirana je i kompleksnost Platonskih⁷² i Arhimedskih krutina⁷³, jer su sve Platonske krutine realizirane u kemiji, a od Arhimedskih krutina za sada jedino krnji ikozaedar, koji služi kao model za strukturu buckminsterfullerena, kuglaste molekule, koja se sastoji od 60 ugljikovih atoma.⁷⁴ Govoreći o buckminsterfullerenu, vrijedi napomenuti da su nedavno *Vukičević*, *Kroto* i *Randić*⁷⁵ objavili atlas Kekuléovih valentnih struktura buckminsterfullerena. Buckminsterfulleren ima 12 500 Kekuléovih struktura⁷⁶, a ovi su autori ustanovili da su samo 158 Kekuléovih struktura nezavisne, koje mogu svrstati u šest skupina s obzirom na stupnjeve slobode: 1 *df*(10), 2 *df*(9), 33 *df*(8), 47 *df*(7), 39 *df*(6) i 36 *df*(5). Pojam stupanj slobode Kekuléove strukture (na engleskome jeziku

degree of freedom, otuda kratica *df*) uveli su *Randić* i *Klein*⁷⁷, a stupanj slobode Kekuléove strukture definiran je kao najmanji broj dvostrukih veza koji jednoznačno definira Kekuléovu strukturu. Tako npr. 47 *df*(8) znači da ima 47 nezavisnih Kekuléovih struktura buckminsterfullerena, koje su jednoznačno definirane sa 7 dvostrukih veza. *Babić* i *Trinajstić* prije više od 10 godina analizirali Kekuléove strukture buckminsterfullerena pomoću teorije grupa ustanovivši da buckminsterfulleren ima 158 nezavisnih Kekuléovih struktura.⁶³

Članovi Grupe za teorijsku kemiju (*Babić*, *Graovac*, *Nikolić*, *Trinajstić*, *Živković*) sudjelovali su u utemeljenju i organiziranju međunarodnih skupova poznatih pod nazivom MATH/CHEM/COMP, koji su započeli 1986. i do sada ih je u neprekinutom nizu održano 20, svi u Dubrovniku, osim dvaju (održanih u Rovinju) u godinama Domovinskoga rata, kada je Dubrovnik bio izložen zločinačkome granatiranju. Na tim skupovima sudjeluju matematičari koji se bave diskretnom matematikom, specijalisti za računalne znanosti, kemičari, koji se bave matematičkom kemijom, kemijskom teorijom grafova i računalnom kemijom, kao i mnogobrojni sudionici iz drugih područja kao što su bioinformatika, biofizika, medicinska kemija, farmaceutska kemija, itd. Naročita vrijednost tih skupova je u tome što na njima sudjeluje veliki broj studenata i mladih znanstvenika iz domovine i svijeta. Ti skupovi su kroz godine postali vrlo utjecajni za istraživanja u području u kojem se isprepliću diskretna matematika, kemijska teorija grafova i računalna kemija. Tome u prilog svjedoči broj sudionika – na početku je skupovima sudjelovalo dvadesetak sudionika, ali valja naglasiti polovica je bila iz inozemstva dok u novije vrijeme, a osobito nakon 2000., broj sudionika višestruko nadmašuje početni broj.

ZAHVALA

Zahvaljujem se recenzentima na vrijednim primjedbama.

Literatura

0. A. Graovac, I. Gutman, N. Trinajstić, T. Živković, *Theor. Chim. Acta* **26** (1972) 342.
1. H. Sachs, *Publ. Math. Debrecen* **9** (1962) 270.
2. R. B. Mallion, *MATCH – Commun. Math. Comput. Chem.* **53** (2005) 15.
3. C. A. Coulson, *Proc. Cambridge Phil. Soc.* **46** (1949) 202.
4. I. Gutman, M. Milun, N. Trinajstić, *J. Am. Chem. Soc.* **99** (1977) 1692.
5. M. Milun, Ž. Sobotka, N. Trinajstić, *J. Org. Chem.* **37** (1972) 139.
6. I. Gutman, M. Milun, N. Trinajstić, *Croat. Chem. Acta* **44** (1972) 207.
7. L. J. Schaad, B. A. Hess, *Chem. Rev.* **101** (2001) 1465.
8. D. Cvetković, I. Gutman, N. Trinajstić, *Chem. Phys. Lett.* **29** (1974) 65.
9. T. Živković, Report at the Quantum Chemistry School, Repino, prosinca 1973.
10. T. Živković, N. Trinajstić, M. Randić, *Mol. Phys.* **30** (1975) 517.
11. M. Randić, T. Živković, N. Trinajstić, *J. Chem. Soc. Faraday Trans. II* (1976) 244.
12. F. Harary, *Graph Theory*, Addison-Wesley, Reading, MA, 1971, drugo izdanje, str. 158.

13. N. Trinajstić, I. Gutman, *Croat. Chem. Acta* **75** (2002) 329.
14. R. B. King, *Foundations of Chemistry* **2** (2000) 221.
15. A. T. Balaban, *Reflections About Mathematical Chemistry, Foundations of Chemistry*, u tisku.
16. N. Trinajstić, *Chemical Graph Theory*, CRC Press, Boca Raton, FL, 1983.
17. N. Trinajstić, *Chemical Graph Theory*, 2nd revised ed., CRC Press, Boca Raton, FL, 1992.
18. M. Randić, *Chem. Phys. Lett.* **38** (1976) 68.
19. M. Randić, *Chem. Rev.* **103** (2003) 3449.
20. D. J. Klein, N. Trinajstić, *Pure Appl. Chem.* **61** (1989) 2107.
21. D. J. Klein, N. Trinajstić, *J. Mol. Structure (Theochem)* **206** (1990) 135.
22. D. J. Klein, T. P. Živković, N. Trinajstić, *J. Math. Chem.* **1** (1987) 309.
23. T. Došlić, *Croat. Chem. Acta* **78** (2005) 251.
24. S. J. Cyvin, I. Gutman, *Kekulé Structures in Benzenoid Hydrocarbons*, Springer-Verlag, Berlin, 1988.
25. D. J. Klein, N. Trinajstić (urednici), *Valence Bond Theory and Chemical Structure*, Elsevier, New York, 1990.
26. M. Randić, D. Plavšić, N. Trinajstić, *Gazz. Chim. Ital.* **118** (1988) 441.
27. A. Miličević, S. Nikolić, N. Trinajstić, *J. Chem. Inf. Comput. Sci.* **44** (2004) 415.
28. I. Gutman, D. Vukičević, A. Graovac, M. Randić, *J. Chem. Inf. Comput. Sci.* **44** (2004) 296.
29. D. Vukičević, M. Randić, A. T. Balaban, *J. Math. Chem.* **36** (2004) 271.
30. D. Vukičević, D. J. Klein, *J. Math. Chem.* **37** (2005) 163.
31. I. Gutman, B. Ruščić, N. Trinajstić, C. F. Wilcox, Jr., *J. Chem. Phys.* **62** (1975) 3399.
32. S. Nikolić, G. Kovačević, A. Miličević, N. Trinajstić, *Croat. Chem. Acta* **76** (2003) 113.
33. D. Bonchev, N. Trinajstić, *Overall Molecular Descriptors. 3. Overall Zagreb Indices, SAR QSAR Environ. Res.* **12** (2001) 213.
34. D. Plavšić, S. Nikolić, N. Trinajstić, Z. Mihalić, *J. Math. Chem.* **12** (1993) 235.
35. B. Lučić, A. Miličević, S. Nikolić, N. Trinajstić, *Croat. Chem. Acta* **75** (2002) 847.
36. D. Amić, N. Trinajstić, *Croat. Chem. Acta* **68** (1995) 53.
37. B. Lučić, A. Miličević, S. Nikolić, N. Trinajstić, *Indian J. Chem.* **42A** (2003) 1279.
38. S. Nikolić, N. Trinajstić, M. Randić, *Chem. Phys. Lett.* **333** (2001) 319.
39. M. Barysz, G. Jashari, R. S. Lall, V. K. Srivastava, N. Trinajstić, *On the Distance Matrix of Molecules Containing Heteroatoms, u Chemical Applications of Topology and Graph Theory*, izdao R. B. King, Elsevier, Amsterdam, 1983, pp. 222.
40. R. Todeschini, V. Consonni, *Handbook of Molecular Descriptors*, Wiley-VCH, Weinheim, 2000, pp. 283.
41. S. Nikolić, N. Trinajstić, A. Jurić, Z. Mihalić, *Croat. Chem. Acta* **69** (1996) 1577.
42. A. Miličević, S. Nikolić, D. Plavšić, N. Trinajstić, *Internet Electronic J. Mol. Design* **2** (2003) 160. (www.biochempress.com)
43. N. Trinajstić, S. Nikolić, B. Lučić, D. Amić, Z. Mihalić, *J. Chem. Inf. Comput. Sci.* **37** (1997) 631.
44. N. Trinajstić, D. Babić, S. Nikolić, D. Plavšić, D. Amić, Z. Mihalić, *J. Chem. Inf. Comput. Sci.* **34** (1994) 368.
45. Z. Mihalić, D. Veljan, D. Amić, S. Nikolić, D. Plavšić, N. Trinajstić, *J. Math. Chem.* **11** (1992) 223.
46. D. Babić, D. J. Klein, I. Lukovits, S. Nikolić, N. Trinajstić, *Int. J. Quantum Chem.* **90** (2002) 166.
47. D. J. Klein, A. Miličević, N. Trinajstić, *On Incidence and Dissimilarity Matrices*, rukopis u pripremi.
48. D. J. Klein, J. Palacios, M. Randić, N. Trinajstić, *J. Chem. Inf. Comput. Sci.* **44** (2004) 1521.
49. W. R. Müller, K. Szymanski, J. von Knop, N. Trinajstić, *J. Chem. Inf. Comput. Sci.* **30** (1990) 160.
50. M. Randić, D. Plavšić, M. Razinger, *MATCH Commun. Math. Comput. Chem.* **35** (1997) 243.
51. M. Randić, N. Basak, D. Plavšić, *Novel Graphical Matrix and Distance-Based Molecular Descriptors*, *Croat. Chem. Acta* **77** (2004) 251.
52. S. Nikolić, A. Miličević, N. Trinajstić, *Graphical Matrices as Sources of Double Invariants for Use in QSPR, Lecture Series on Computer and Computational Sciences* **1** (2004) 1.
53. S. Nikolić, A. Miličević, N. Trinajstić, *Graphical Matrices in Chemistry*, *Croat. Chem. Acta* **78** (2005) 241.
54. A. Miličević, S. Nikolić, N. Trinajstić, D. Janežič, *Graph-Theoretical Matrices in Chemistry*, *Adv. Quantum Chem.*, in press.
55. Z. Mihalić, N. Trinajstić, *J. Chem. Educ.* **69** (1992) 701.
56. B. Lučić, N. Trinajstić, *J. Chem. Inf. Comput. Sci.* **39** (1999) 121.
57. B. Lučić, D. Amić, N. Trinajstić, *J. Chem. Inf. Comput. Sci.* **40** (2000) 403.
58. B. Lučić, N. Trinajstić, I. Bašić, D. Nadramija, *J. Chem. Inf. Comput. Sci.* **43** (2003) 1094.
59. A. T. Balaban (urednik), *From Topology to Three-Dimensional Geometry*, Plenum Press, New York, 1997.
60. J. Devillers, A. T. Balaban (urednici), *Topological Indices and Related Descriptors in QSAR and QSPR*, Gordon & Breach, Amsterdam, 1999.
61. J. von Knop, W. R. Müller, Ž. Jeričević, N. Trinajstić, *Computer Enumeration and Generation of Trees and Rooted Trees*, *J. Chem. Inf. Comput. Sci.* **21** (1981) 91.
62. W. R. Müller, K. Szymanski, J. von Knop, S. Nikolić, N. Trinajstić, *J. Comput. Chem.* **11** (1990) 223.
63. J. von Knop, K. Szymanski, W. R. Müller, H. W. Kroto, N. Trinajstić, *J. Comput. Chem.* **8** (1987) 549.
64. J. August, H. W. Kroto, N. Trinajstić, *Astrophys. Space Sci.* **128** (1986) 411.
65. I. Lukovits, *Isomer Syntactic*: *J. Chem. Inf. Comput. Sci.* **39** (1999) 563.
66. I. Lukovits, I. Gutman, *Croat. Chem. Acta* **75** (2002) 563.
67. N. Trinajstić, S. Nikolić, J. von Knop, W. R. Müller, K. Szymanski, *Computational Chemical Graph Theory*, Simon & Schuster/Horwood, Chichester, 1991.
68. D. J. Klein, D. Babić, N. Trinajstić, *Enumeration in Chemistry, u: Chemical Modelling – Applications and Theory*, Vol 2, urednik: A. Hinchliffe, The Royal Society of Chemistry, London, 2002, pp. 56.
69. D. Babić, D. J. Klein, J. von Knop, N. Trinajstić, *Combinatorial Enumeration in Chemistry, u: Chemical Modelling – Applications and Theory*, Vol 3, urednik: A. Hinchliffe, The Royal Society of Chemistry, London, 2004, 126.
70. A. Miličević, N. Trinajstić, *Combinatorial Enumeration in Chemistry, u: Chemical Modelling – Applications and Theory*, Vol. 4, urednik: A. Hinchliffe, The Royal Society of Chemistry, London, 2006, str. 408–472.
71. S. Nikolić, N. Trinajstić, I. M. Tolić, G. Rücker, C. Rücker, *On Molecular Complexity Indices, u: Complexity Introduction and Fundamentals*, urednici D. Bonchev, D. H. Rouvray, Taylor & Francis, London, 2002, pp. 23.

72. N. Trinajstić, S. Nikolić, Z. Mihalić, On the Complexity of Platonic Solids, *Bull. Chem. Technol. Macedonia* **13** (1994) 61.
73. S. M. Rajtmajer, A. Miličević, N. Trinajstić, M. Randić, D. Vukičević, On the Complexity of Archimedean Solids, *J. Math. Chem.* **30** (2006) 119–132.
74. H. W. Kroto, J. R. Heath, S. C. O'Brien, R. F. Curl, R. E. Smalley, *Nature* **318** (1985) 162.
75. D. Vukičević, H. W. Kroto, M. Randić, *Croat. Chem. Acta* **78** (2005) 223.
76. D. J. Klein, T. G. Schmalz, G. E. Hite and W. A. Seitz, *J. Am. Chem. Soc.* **108** (1986) 1301.
77. M. Randić, D. J. Klein, Kekulé Valence Structures Revisited. Innate Degrees of Freedom of Pi-Electron Couplings, in: *Mathematics and Computational Concepts in Chemistry*, urednik: N. Trinajstić, Horwood/Wiley, New York, 1986, pp. 274.
78. D. Babić, N. Trinajstić, *Assembling Fullerene Sci. Technol.* **2** (1994) 343.

SUMMARY

On Some Interesting Results Achieved in Chemical Graph Theory in Croatia

N. Trinajstić

Some interesting results achieved in chemical graph theory in Theoretical Chemistry Group at the Rugjer Bošković Institute are briefly reviewed. In the article are discussed the use of the Sachs theorem for the construction of the characteristic polynomial of molecules, the topological resonance energy as a measure of aromaticity, isospectral molecules, the development of algorithms for the generation and enumeration of Kekulé structures, the analysis of the conjugated-circuit model and its application to fullerenes, the analysis of various graph-theoretical matrices, the development of the computational method CROMRsel for modeling molecular properties by means of descriptors, the development and application of algorithms for the enumeration of various classes of molecules and the studies of the complexity of molecules and chemical reactions. Numerous co-workers and visitors that did research in chemical graph theory in Theoretical Chemistry Group are listed.

The Rugjer Bošković Institute and the Croatian Academy of Sciences and Arts, Zagreb, Croatia
E-mail: trina@irb.hr

Received May 30, 2005
Accepted January 4, 2006