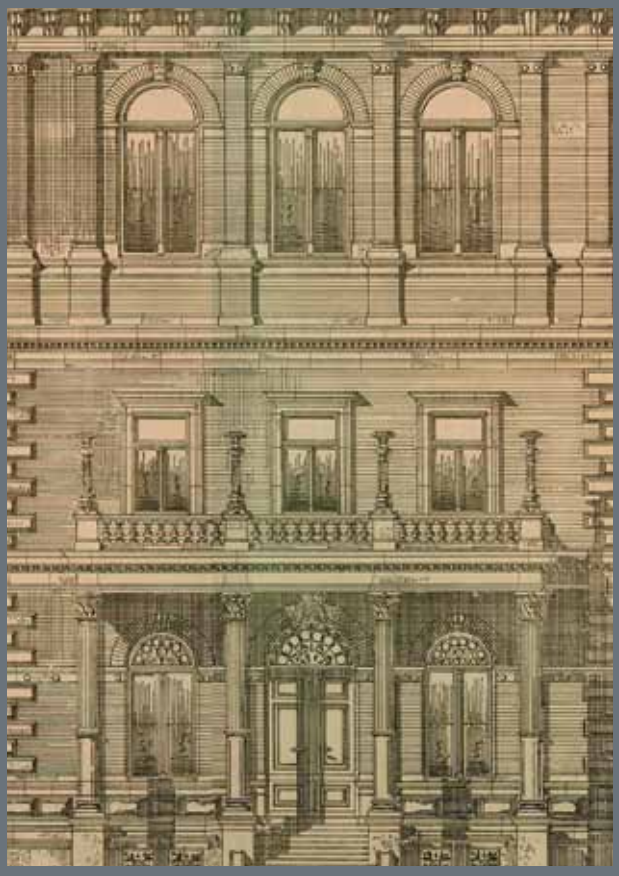
Hrvatska akademija znanosti i umjetnosti

NENAD TRINAJSTIĆ
1936. – 2021.



HRVATSKA AKADEMIJA ZNANOSTI I UMJETNOSTI
SPOMENICA PREMINULIM AKADEMICIMA SVEZAK 258

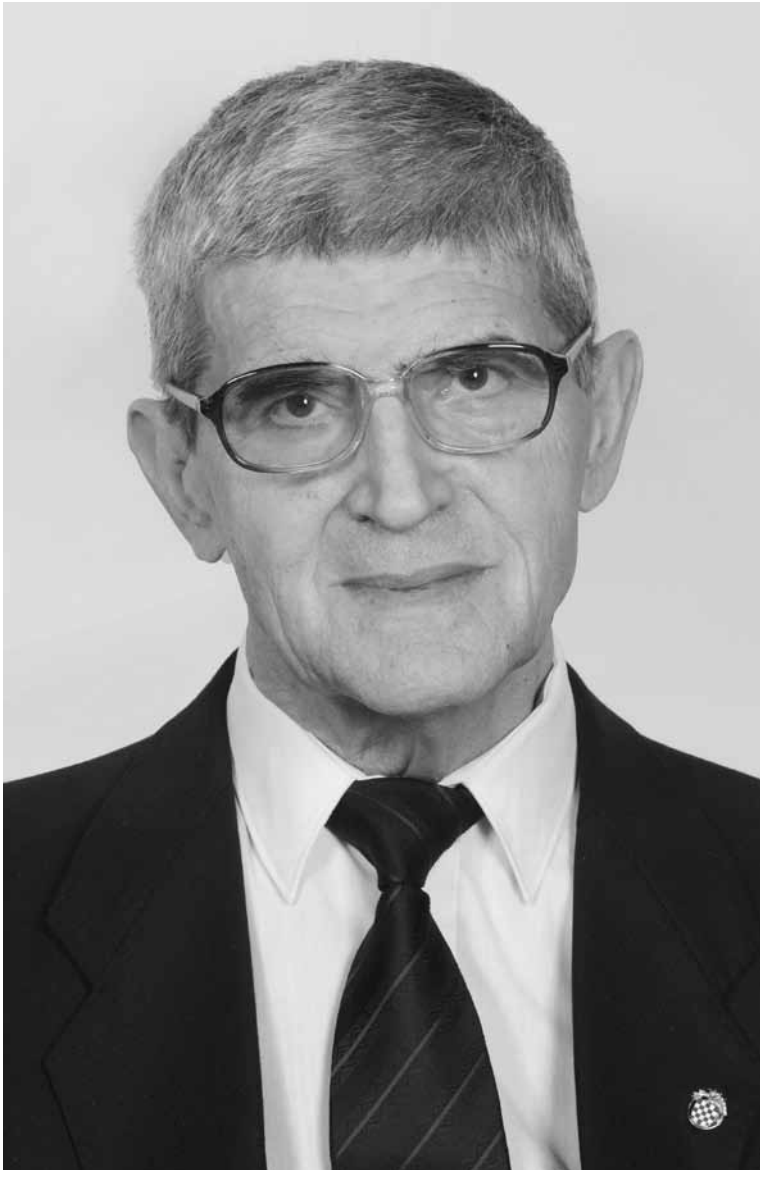
HRVATSKA AKADEMIJA ZNANOSTI I UMJETNOSTI
SPOMENICA PREMINULIM AKADEMICIMA SVEZAK 258
ISBN 978-953-347-527-1 ISSN 1330-0865 (Tisak)
ISSN 2670-9988 (Online)
10.21857/y26kec35g9

Uredio
Akademik MLADEN ŽINIĆ

RAZRED ZA MATEMATIČKE, FIZIČKE I KEMIJSKE ZNANOSTI



NENAD TRINAJSTIĆ
1936. – 2021.



N. Trinajstić

SADRŽAJ

Akademik Goran Pichler
Nenad Trinajstić 9

Dr. sc. Nađa Došlić
Nenad Trinajstić i procvat teorijske kemije u Hrvatskoj 11

Dr. sc. Bono Lučić
Život u znanosti akademika Nenada Trinajstića – moje sjećanje na Trinu kao ustrajna podupiratelja mladih istraživača 17

PRILOG
Bibliografija akademika Nenada Trinajstića
Popis izradio dr. sc. Bono Lučić 45

RAZRED ZA MATEMATIČKE, FIZIČKE I KEMIJSKE ZNANOST

Priređuje u povodu prve obljetnice smrti

AKADEMIKA NENADA TRINAJSTIĆA

KOMEMORATIVNI SASTANAK

u utorak, 20. rujna 2022., u 13 sati
u Palači Hrvatske akademije znanosti i umjetnosti,
Trg Nikole Šubića Zrinskog 11, Zagreb

Sastanak će otvoriti

akademik GORAN PICHLER, tajnik Razreda

O životu i djelu preminulog akademika govorit će
dr. sc. NAĐA DOŠLIĆ, znanstvena savjetnica
Voditeljica Grupe za teorijsku kemiju
Zavod za fizičku kemiju, Institut *Ruđer Bošković*

dr. sc. BONO LUČIĆ, viši znanstveni suradnik
Centar za NMR, Institut *Ruđer Bošković*

Akademik GORAN PICHLER

NENAD TRINAJSTIĆ

Akademik Nenad Trinajstić je prije svega bio izuzetno susretljiv u svakom pogledu.

Susretao sam ga svakodnevno na Institutu *Ruđer Bošković* jer su tamo radili mnogi moji prijatelji (Slobodan Danko Bosanac, pokojni Ante Graovac...).

Nije samo radio u uskom području kemije nego je znao zahvatiti i susjedne oblasti znanosti.

Njegovao je sport.

Najviše se istaknuo u kemijskoj teoriji grafova.

Njegova knjiga *Život u znanosti* najbolje opisuje njegov cijeli život.

Bio je tajnik drugog razreda od 1. 1. 2011. do 31. 12. 2014.

Redoviti je član u razdoblju od 18. 6. 1992. do 27. 8. 2021.

Rođen je Zagrebu gdje je 1960. diplomirao na Tehnološkom fakultetu.

Nakon diplome radio je u Plivinu istraživačkom institutu, a 1962. godine prešao je na Institut *Ruđer Bošković* gdje je ostao do umirovljenja 2001. godine.

Zaslužni znanstvenik Instituta *Ruđer Bošković* postao je 2005. godine. Od 1992. godine bio je redoviti član HAZU.

Nenad Trinajstić jedan je od najcitiranijih hrvatskih kemičara (a objavio je preko 550 znanstvenih radova, više stotina preglednih i stručnih članaka te 12 knjiga).

Bavio se razvojem i primjenom kvantno-kemijskih, kompjutorskih i matematičkih metoda u kemiji te osobama i događajima iz hrvatske kemije.

Autor je prve knjige o kemijskoj teoriji grafova *Chemical Graph Theory* (CRC Press, Boca Raton, 1983., drugo izdanje 1992.). Citiranost te monografije je vrlo velika, preko 2200 citata.

Dvije su mu knjige u tisku: *Hrvatska kemija u XX. stoljeću – Ljudi i događaji* (Školska knjiga i HAZU) i *Život u znanosti* (HAZU).

Dr. sc. NAĐA DOŠLIĆ

Institut Ruđer Bošković, Zavod za fizičku kemiju,
Grupa za teorijsku kemiju, Bijenička c. 54, Zagreb

NENAD TRINAJSTIĆ I PROCVAT TEORIJSKE KEMIJE U HRVATSKOJ

Nenad Trinajstić nije bio samo fantastičan znanstvenik sa značajnim postignućima u dvama različitim područjima kemije – u teoriji elektronske strukture molekula i u kemijskoj teoriji grafova – nego i svestran intelektualac s izrazitim interesom za umjetnost, literaturu i povijest, posebno za osobe i događaje iz hrvatske kemije. Bio je čovjek s mnoštvom ideja i izvanrednim intelektualnim sposobnostima za kemiju i matematiku. Svojim sposobnostima i nevjerojatnom radnom etikom značajno je doprinio našem razumijevanju veze između strukture i svojstava molekula.

O životu i djelu Nenada Trinajstića je mnogo toga napisano. Sâm Trina, koji je nedvojbeno volio i znao lijepo pisati, u svojim autobiografskim notama objavljenima u *Croatici* 2016. godine opisuje svoje obiteljsko podrijetlo, školske dane i okolnosti koje su ga dovele na studij kemije.

Poznato je da se nakon kratka i relativno burna iskustva u Plivi – nedavno sam dobila sadnice bergenije od ljudi koji još nisu mogli zaboraviti Trinine dane u laboratoriju – zaposlio na IRB-u 1962. godine, u Laboratoriju za fizikalnu organsku kemiju. Međutim, ubrzo je prešao na fizičku kemiju gdje je počeo raditi s teoretičarem Milanom Randićem, koji se nakon doktorata na Cambridgeu vratio u Hrvatsku. S Randićem je Trinajstić radio na problemu stabilnosti metiliranih ciklopropana. U toj su analizi koristili Coulson-Moffittovu teoriju maksimalnog prekrivanja molekulskih orbitala. Ta teorija objašnjava raspodjelu elektronske gustoće u cikličkim molekulama, odnosno pojačani s-orbitalni karakter sp2 hibridiziranih orbitala. Nakon povratka iz vojske 1964. godine je na Randiće-

vu preporuku otišao na preddoktorsko usavršavanje kod Johna Murrella. Idemo to staviti u širi kontekst. John Murrell je bio mladi profesor kemije koji je bio nedavno doktorirao kod Christophera Longuet-Higginsa, čovjeka koji je dao fundamentalne doprinose razvoju kvantne kemije – uveo je koncept permutacijske inverzije identičnih atoma, objasnio elektronske spinske rezonancije, Jahn-Tellerov efekt. Trinajstić je upoznao Longuet-Higginsa i s njim godinama bio u prijateljskim odnosima.

S Johnom Murellom je proveo gotovo dvije godine (1964. – 1966.). Prvo je radio na Sveučilištu Sheffield, a onda na Sveučilištu Sussex. Nenad Trinajstić se ubrzo pokazao kao talentiran, brz i domišljat student koji je za nepune dvije godine u Engleskoj publicirao naizgled nevjerojatnih sedam radova iz područja elektronske strukture molekula. Međutim, poznavajući njegovu nevjerojatnu radnu etiku i energiju, taj broj ne čudi. Ti su radovi bili okosnica Trinajstićeva doktorata koji je pod naslovom *Elektronska struktura nekih višeatomnih molekula* 1967. godine obranio u Zagrebu. To je prvi doktorat iz područja kvantne kemije u Hrvatskoj.

U Engleskoj je upoznao i sprijateljio se s Harryjem Krotom, koji je u to doba radio doktorat iz spektroskopije na Sussexu i koji je dvadesetak godina poslije otkrio fulerene i za to dobio Nobelovu nagradu. Upoznao je i Stuarta Cartera i mnoge druge znanstvenike koji su u narednim desetljećima činili jezgru međunarodnih kontakata Grupe za teorijsku kemiju (GTK).

Po povratku u Zagreb 1967. Nenad Trinajstić pomaže i u organizaciji prve škole kvantne kemije u tadašnjoj Jugoslaviji. To je bio velik događaj za teorijsku kemiju. Na toj konferenciji Danko Bosanac, koji je upravo bio diplomirao fiziku, upoznaje Johna Murrella i odlazi na doktorat na Sveučilište Sussex, a Nenad Trinajstić upoznaje Michaela Dewara i odlazi na postdoktorsko usavršavanje u SAD, Sveučilište Texas, Austin. Kako je prošlo mnogo godina, važno je naglasiti da je Michael Dewar bio vodeći kvantni kemičar u SAD i već je tada radio na razvoju semiempirijskih molekulsko-orbitalnih metoda (MINDO). Riječ je o postupcima u kojima se pojednostavnjuje sekularna jednadžba u Hartree-Fockovu postupku.

Jedno- i dvočestični integrali se parametriziraju, a tro- i četveročestični integrali se zanemaruju. Nenad Trinajstić je s Michaelom Dewarom objavio 16 radova koji su bili u temelju poznate Dewarove AM1 metode. Na Sveučilištu Texas upoznao je i Douglasa J. Kleina koji će postati njegov dugogodišnji suradnik i prijatelj.

U ranim 70-ima 20. st. situacija je u teorijskoj kemiji bila znatno drukčija nego danas. Teorijska kemija, odnosno teorija elektronske strukture molekula još nije mogla isporučiti rezultate koji bi se mogli usporediti s eksperimentom, odnosno koji bi drugim kemičarima bili interesantni. Zbog toga teorijski kemičari nisu bilo dobro prihvaćeni u svojim sredinama, što je generiralo frustraciju i stvaralo teške ljude. Nenad Trinajstić nije bio među njima.

Godine 1970. vratio se na IRB i nastavio iznimno uspješnu karijeru, 1972. godine postao je viši znanstveni suradnik, a 1977. znanstveni savjetnik. Ubrzo je postao i naslovni profesor na Kemijskom odjelu PMF-a. Pod njegovim je vodstvom doktoriralo 20 studenata, među prvima Milorad Milun i Ivan Gutman. S Gutmanom i Milunom je objavio mnogo fantastičnih radova u kojima je po prvi puta povezao Huckelovu molekularno-orbitalnu teoriju s graf-teorijskim konceptima. Posebno su u čuvenom radu iz 1972. u *Chem. Phys. Lett.* Gutman i Trinajstić pokazali kako se Huckelova energija može računati pomoću parametara pripadajućih molekulskih grafova. Ti su koncepti bili potpuno novi, a Trinajstić je bio u poziciji u kojoj je konačno mogao isporučiti vrijedne rezultate. Trinini doprinosi kemijskoj teoriji grafova bili su fundamentalni i originalni. Bio je mislilac i lider u svojim radovima.

Često se među teorijskim kemičarima ne samo u Hrvatskoj postavljalo pitanje zašto je Trinajstić napustio kvantnu kemiju, a tako mu je dobro išlo. Moguće je da je bio predvidio razvoj kvantne kemije – mukotrpan, u velikoj mjeri tehnički posao na razvoju kompleksnih kompjuterskih programa, koji mu se nije sviđao i zbog kojeg je promijenio područje rada. Moguće je i da je mislio kako više nema što reći u kvantnoj kemiji i odlučio se za promjenu područja istraživanja.

Kako bilo, njegov rad u kemijskoj teoriji grafova rezultirao je impozantnim scientometrijskim pokazateljima. O tim bojevima je mnogo pisano i još više govoreno. Dovoljno je reći da se na IRB-u s dosta manjim brojem radova od Trinajstićeva h-indeksa postaje znanstveni savjetnik u trajnom zvanju. O kemijskoj teoriji grafova, koju je Nenad Trinajstić utemeljio i koja ga je fascinirala do kraja života, više u prilogu Bone Lučića. Vezano uz karijeru Nenada Trinajstića, rekla bih još da je 1992. izabran za redovitog člana HAZU i da je bio iznimno ponosan na članstvo u Akademiji.

Na kraju bih Vam željela reći nešto o Trini onako kako sam ga vidjela „odrastajući" u teorijskoj kemiji i kako mislim da ga je vidjela generacija koju je Darko Babić nedavno nazvao *GTK release 2.0.* Moj prvi susret s Trinom na IRB 1987. ostavio me bez riječi. Kao stipendist IRB obilazila sam laboratorije u ZFK. Procedura za stipendiste bila je jasna – odlazak u laboratorij, razgovor o mogućem poslu i mnogo preprinta koje treba pročitati prije idućeg razgovora. Planirani razgovor s prof. Trinajstićem se dugo odgađao. S njegove strane jer je dosta izbivao s IRB, a s moje strane jer sam, bez obzira na to što mi se njegova knjiga *Simetrija molekula* jako sviđala, već bila odlučila da želim raditi na fotoelektronskoj spektroskopiji, tj. simulirati spektre i snimiti pokoji čim se instrument osposobi i ja dođem na red. Od prof. Trinajstića sam se vratila bez ijednog preprinta u stanju koje je potaknulo moga tadašnjeg mentora Branka Ruščića da, ne dižući pogled s papira, izjavi kako je prof. Trinajstić osebujna ličnost. Naime, pokazalo se da je Trinajstiću slovenska okupacija pulske željezničke postaje važnija od razgovora o poslu, a ja o toj okupaciji nisam imala izraženo mišljenje.

Drugi je susret bio još traumatičniji. Sviđale su mi se simulacije interne dinamike molekula, ali odlaskom B. Ruščića u SAD to više nije bila opcija. Učinilo mi se da su sudarni procesi koje je proučavao Danko Bosanac u GTK dobar nastavak posla. Nakon razgovora s Dankom obratila sam se Trinajstiću i rekla da bih se zaposlila u Grupi za teorijsku kemiju. Uhhh! Ispalo je da je Nenad Trinajstić bio iznimno protivan ideji zapošljavanja žena u Grupi za teorijsku kemiju jer po njegovim riječima prethodna isku-

stva nisu bila dobra. Relativno mi je neuvijeno rekao da teorijska kemija nije za žene. Situacija je bila bezizgledna. Međutim, ubrzo se pokazalo da je Nenad Trinajstić razuman i demokratičan čovjek te da cijeni mišljenje kolega. Uvažio je argumente Tomislava Cvitaša i 1988. godine sam se zaposlila u Grupi za teorijsku kemiju. Trina je bio moj šef od 1988 do 2001. godine. Nije nikad više spomenuo da žene nisu za teoriju, a vodio je grupu tako da je bilo jako lako zaboraviti da ju on vodi.

S vremenom se pokazalo da je Trina izvanredan čovjek. Pokazalo se da jako dobro poznaje povijesna zbivanja i društvene okolnosti u Istri. Svoje rano djetinjstvo, odnosno ratne godine proveo je kod none i nonića u Voloskom. Često je pričao o tome kako voli boraviti ondje. Tamo je bio i njegov brat, koji je bio učitelj i o kojem je uvijek pričao s mnogo divljenja. Naime, Trini metodika nije bila jača strana, a za pojam program kolegija mislim da nije bio čuo.

Da se vratim na Istru, znao je mnogo o njezinoj povijesti, posebno bližoj, o Ćićima, o Crkvi, o odnosu Hrvata i Talijana, o podijeljenim vjerskim i nacionalnim osjećajima. Razmimoilaženja u mišljenju ga nisu smetala, dapače uživao je u argumentiranoj raspravi.

Bio je uvijek voljan pomoći. Znao je kako izgleda kad djeca imaju temperaturu, kako pomoći tridesetogodišnjem mužu komu se posao u računskom centru više ne sviđa i koji se želi vratiti u matematiku, znao je kako poboljšati projekt za postdoktorsku stipendiju i kako poticati samostalnost i odgovornost.

Nenad Trinajstić je bio bibliofil s više od 10 000 pročitanih knjiga. Bilo je gotovo nemoguće pročitati knjigu prije Trine ili naći knjigu koju on još nije bio pročitao. Bilo je nemoguće otići na konferenciju, a da Vas netko ne zapita za Trinu. Trina je bio idol za sve studente GTK generacije 2.0, za mnogobrojne kolege i prijatelje s kojima je volio raspravljati i razgovarati.

Bio je i najviši znanstvenik u zlatno doba teorijske kemije u Hrvatskoj. Metar i devedeset. Trina, koji nije nikad usvojio sinkronizaciju pokreta potrebnu za vožnju automobilom i ne znam kako je preživio u Texasu, u

vlaku je bio optužen da je veliki Hrvat. Čitao je biografiju Alojzija Stepinca. Odmah je priznao – ustao se i rekao da je „velik“ metar i devedeset.

Trina je zaista bio velik Hrvat koji je svoje domoljublje dokazivao originalnošću, svakodnevnim požrtvovnim radom i istinskim multikulturalizmom. Sad kad Trine više nema među nama, svjesni smo toga koga smo izgubili, koliko nam je značio i koliko je dobrog napravio za kemiju i našu zemlju. Trinino veliko postignuće su i standardi koje je postavio u teorijskoj kemiji i zbog kojih i danas kolege rado navraćaju u GTK. Zato smo zahvalni i žalimo za Trinom.

Dr. sc. BONO LUČIĆ
Institut Ruđer Bošković, Centar za NMR, Bijenička c. 54, Zagreb

ŽIVOT U ZNANOSTI AKADEMIKA NENADA TRINAJSTIĆA – MOJE SJEĆANJE NA TRINU KAO USTRAJNA PODUPIRATELJA MLADIH ISTRAŽIVAČA

Nenad Trinajstić (Zagreb, 26. 10. 1936. – 27. 8. 2021.)

ŽIVOTOPIS

Nenad Trinajstić rođen je 26. listopada 1936. u Zagrebu, Hrvatska. Roditelji su mu bili Regina (rođ. Pavić, 1916., Zagreb – 1992., Zagreb) i Cvjetko Trinajstić (1913., Volosko, Hrvatska – 1998., Richmond, Australija). Njegovi djed i baka po majci došli su u Zagreb iz sjeverne Dalmacije, a njegovi djed i baka po ocu cijeli su život živjeli u Voloskom, malom mjestu između Rijeke i Opatije (Hrvatska). Po eseju N. Trinajstića (A Life in Science, *Internet Electron. J. Mol. Des 2*, 413–434 (2003)), prezime Trinajstić vezano je uz nadimak Trinajstić (13-ić) – pretka rođenog kao trinaesto dijete, a kasnije je postalo prezime potomaka toga djeteta.

Rane dane za vrijeme Drugoga svjetskog rata (1941. – 1945.) s bratom Ivanom (rođen 1938. u Zagrebu) provodi kod očevih djeda i bake u Voloskom. Sedmogodišnju osnovnu školu (1951.) i petogodišnju gimnaziju (1956.) završio je u Zagrebu. Privlačila ga je filozofija, ali se na majčin nagovor i intervenciju upisao na studij kemije na Kemijsko-tehnološkom odjelu Tehničkog fakulteta Sveučilišta u Zagrebu. Naime, majka je za vrijeme njegova boravka s društvom u Alpama dokumente za upis umjesto

na Filozofski fakultet predala na Kemijsko-tehnološki odjel Tehničkog fakulteta. Po povratku ga je uvjeravala (i uvjerila) da mu je to bolji i sigurniji odabir za životni poziv.

Nenad Trinajstić je 1960. godine sklopio brak s Juditom, rođ. Juričev, rođenom u Zagrebu (1938.), koju je upoznao u IX. gimnaziji. Imali su dvoje djece: Reginu (1960.) i Deana (1965.); oboje rođeni u Zagrebu.

Diplomirao je na Tehnološkom fakultetu (1960.), doktorirao na Prirodoslovno-matematičkom fakultetu (1967.) Sveučilišta u Zagrebu, a usavršavao se na britanskim sveučilištima u Sheffieldu i Brightonu (1964. – 1966.) te na sjevernoameričkom Sveučilištu Texas u Austinu (1968. – 1970.). Nakon rada u Plivi (1960. – -1962.) radni vijek nastavlja na Institutu *Ruđer Bošković* (IRB) u Zagrebu gdje je umirovljen 2001. u zvanju znanstvenog savjetnika u trajnom zvanju. U zvanje zaslužni znanstvenik Instituta *Ruđer Bošković* izabran je 2005. godine. Kao gostujući profesor predavao je na sveučilištima u SAD, Engleskoj, Njemačkoj, Italiji, Rusiji, Bugarskoj, Rumunjskoj, Mađarskoj, Japanu, Hong Kongu i Kanadi.

Za redovitog člana HAZU u Razredu za matematičke, fizičke i kemijske znanosti izabran je 1992. Bio je član Predsjedništva HAZU 2004. – 2010. i 2015. – 2018. i tajnik razreda 2011. – 2014. godine. Istraživačke aktivnosti nastavio je i nakon umirovljenja.

Njegov je opus izniman – promatrano u hrvatskoj kemijskoj znanosti, ali i u hrvatskoj znanosti općenito. Objavio je preko 550 znanstvenih radova u međunarodnim časopisima, više stotina osvrta, preglednih i stručnih članaka te 12 knjiga, a njegovi radovi i knjige često su citirani u svjetskoj literaturi. Akademik Nenad Trinajstić ostavio je trajan trag u kemijskoj znanosti svojim postignućima u teorijskoj kemiji, koja su prepoznata u svijetu osobito po radovima koji ga svrstavaju u red utemeljitelja kemijske teorije grafova kao novoga istraživačkog područja između kemije i matematike.

Većina njegovih radova i knjiga objavljena je na engleskom jeziku u područjima kvantne, matematičke i računalne kemije. Objavio je i nekoli-

ko knjiga o osobama i događajima iz hrvatske kemije u kojima je prikupio i izložio dragocjene informacije o povijesti toga znanstvenog polja iz kojeg su potekla i dva naša nobelovca – Lavoslav Ružička i Vladimir Prelog. Akademik Trinajstić objavio je i više desetaka radova iz povijesti znanosti, kao i autobiografsko djelo *Život u znanosti – Uspomene iz nepovrata* (HAZU, 2016.) s dragocjenim podatcima o hrvatskoj kemijskoj znanosti.

Bio je dugogodišnji član mnogih inozemnih znanstvenih te domaćih znanstvenih i kulturnih institucija poput Međunarodne akademije za matematičku kemiju, Hrvatskog kemijskog društva, Hrvatskog biofizičkog društva, Družbe „Braće Hrvatskoga Zmaja", Hrvatskog centra P. E. N. i Matice hrvatske.

Imao je iznimno velik broj suradnika i kolega iz zemlje i inozemstva s kojima je u suautorstvu objavljivao znanstvene i stručne radove i knjige. Zbog svega navedenog, njegovi bivši (a osobito mlađi) kolege trajno su mu zahvalni.

1. ŠKOLOVANJE I KRATAK PREGLED ZNANSTVENOG RADA AKADEMIKA NENADA TRINAJSTIĆA

1.1. Školovanje i usavršavanja

Godine 1959. započeo je svoj prvi znanstveni rad – istraživanje polarografije za diplomski rad pod mentorstvom profesora Ivana Filipovića (Sv. Ivan Zelina, 1911. – Zagreb, 1998.). Diplomski rad pod naslovom *Utjecaj pH na poluvalni potencijal bizmuta u otopinama natrijeva acetata i octene kiseline* završio je 1960. Iako je njegovo istraživanje za diplomski rad bilo u osnovi eksperimentalno istraživanje, profesor Filipović je Trinajstića naučio osnovama teorijske kemije – Schrödingerovoj jednadžbi, teoriji Paulingove rezonancije i teoriji HMO (engl. *Hückel Molecular Orbital theory*), što će biti polazište njegovih kasnijih istraživanja kada je prešao u područje teorijske kemije.

Nakon diplome 1960. zaposlio se u istraživačkom odjelu Plive (Zagreb). Godine 1962. zaposlio se u Laboratoriju za fizikalnu organsku kemiju na Institutu *Ruđer Bošković*, čiji je voditelj bio Dionis Emerik Sunko, i započeo magistarski studij organske kemije i biokemije. No, nakon godinu dana prešao je na magistarski studij fizikalne kemije, a tada je u stankama za kavu u laboratoriju mnogo razgovarao o kvantno-kemijskim problemima s profesorom Milanom Randićem da bi se naposljetku odlučio istraživanje za magistarski rad provoditi pod Randićevim mentorstvom.

Završio je istraživanje i napisao magistarski rad do ljeta 1963., a usmeni dio (obrana rada) odgođena je do ljeta 1966. nakon što je završio obvezni vojni rok (u Banjoj Luci) i nakon dvogodišnjeg boravka u Engleskoj u grupi profesora Johna N. Murrela FRS na Sveučilištu Sheffield i kasnije na Sveučilištu Sussex. Naslov njegova magistarskog rada koji je obranio na Sveučilištu u Zagrebu 1966. godine bio je *Metoda maksimalnog preklapanja i njezina primjena za proračun hibrida nekih metil-supstituiranih ciklopropana*. Tada se pridružio Grupi za teorijsku kemiju Zavoda za fizikalnu kemiju Instituta *Ruđer Bošković* u Zagrebu, koju je ranije utemeljio Milan Randić, dopisni član HAZU.

Ubrzo nakon toga završio je i istraživanje za doktorat te prijavio i obranio tezu temeljenu na istraživanju provedenom pod nadzorom profesora Murrella. Trinajstić je svoju disertaciju na Prirodoslovno-matematičkom fakultetu Sveučilišta u Zagrebu obranio u siječnju 1967. godine. Doktorski rad nosio je naslov *Elektronska struktura nekih poliatomnih molekula*. I magistarska i doktorska radnja Nenada Trinajstića bile su prve obranjene radnje u području teorijske kemije u Hrvatskoj.

Kao postdoktorand Zaklade Roberta A. Welcha pridružio se grupi profesora Michaela J. S. Dewara FRS (1918. – 1997.) na Sveučilištu Texas (Austin) i tamo ostao dvije godine (1968. – 1970.). Izradio je i obranio radove s M. J. S. Dewarom provodeći SCF MO i MINDO proračune raznih velikih molekulskih sustava. Ova istraživanja Nenada Trinajstića i ona koja su proveli drugi Dewarovi postdoktorandi bila su preteča AM1 (engl. *Austin Model One*) metode – rada koji uvodi metodu AM1 (*J. Am.*

Chem. Soc. 107, 3902–3909 (1985)), koji je do sada citiran preko 17 000 puta u bazi *Google Scholar*.

1.2. Područja znanstvenog interesa

Njegovi znanstveni interesi bili su u područjima kvantne kemije, matematičke kemije, računalne kemije, povijesti kemije i posebice povijesti hrvatske kemije. Jedan dio radova vezan uz modeliranje strukture i svojstava proteina ubraja se i u biofiziku. Trideset najcitiranijih radova čiji je koautor prof. Trinajstić dano je u Tablici 1., a oni su ukupno citirani 8700 puta.

Njegov rad u kvantnoj kemiji može se grupirati u dvije glavne istraživačke teme. Prva je razvoj poluempirijske teorije molekulske orbitale (MO) primjenjive na velike (heterocikličke) molekule, većinom izveden u suradnji s A. Hinchliffeom, J. N. Murrellom i M. J. S. Dewarom (radovi 17, 23 i 25 u Tablici 1.). Drugu istraživačku temu čine istraživanja u okviru modela valentnih veza, koji je razvio Milan Randić i nazvao model konjugiranih krugova. Ove studije su uspostavile kvantno-mehaničku osnovu modela konjugiranih krugova, njegovu parametrizaciju i primjenu na različite klase konjugiranih molekula i fulerena (uglavnom u suradnji s M. Randićem, D. J. Kleinom i S. Nikolić).

Tablica 1. Trideset najcitiranijih radova Nenada Trinajstića po bazi *Web of Science* (12/2021.).

Br.	Rad	Citati
1	I. Gutman, N. Trinajstić: „Graph Theory and Molecular Orbitals. III. Total π-Electron Energy of Alternant Hydrocarbons". CHEM. PHYS. LETT. 17, 535–538 (1972).	1632
2	I. Gutman, B. Ruščić, N. Trinajstić, C. F. Wilcox, Jr.: „Graph Theory and Molecular Orbitals. XII. Acyclic Polyenes". J. CHEM. PHYS. 62, 3399–3405 (1975).	744

3	I. Gutman, M. Milun, N. Trinajstić: „Graph Theory and Molecular Orbitals. XIX. Non-Parametric Resonance Energies of Arbitrary Conjugated Systems". J. AMER. CHEM. SOC. 99, 1692–1704 (1977).	614
4	S. Nikolić, G. Kovačević, A. Miličević, N. Trinajstić: „The Zagreb Indices 30 Years After". CROAT. CHEM. ACTA 76, 113–124 (2003).	591
5	D. Bonchev, N. Trinajstić, „Information Theory, Distance Matrix, and Molecular Branching". J. CHEM. PHYS. 67, 4517–4533 (1977).	544
6	D. Amić, D. Davidović-Amić, D. Bešlo, N. Trinajstić: „Structure-Radical Scavenging Activity Relationship of Flavonoids". CROAT. CHEM. ACTA 76, 55–61 (2003).	417
7	D. Plavšić, S. Nikolić, N. Trinajstić, Z. Mihalić: „On the Harary Index for the Characterization of Chemical Graphs". J. MATH. CHEM. 12, 235–250 (1993).	356
8	B. Zhou, N. Trinajstić: „On a Novel Connectivity Index". J. MATH. CHEM. 46, 1252–1270 (2009).	305
9	B. Zhou, N. Trinajstić: „On General Sum-Connectivity Index". J. MATH. CHEM. 47, 210–218 (2010).	300
10	Z. Mihalić, N. Trinajstić: n „A Graph-Theoretical Approach to Structure-Property Relationships". J. CHEM. EDUCATION 69, 701–712 (1992).	282
11	D. Amić, D. Davidović-Amić, D. Bešlo, V. Rastija, B. Lučić, N. Trinajstić: „SAR and QSAR of the Antioxidant Activity of Flavonoids". CURR. MED. CHEM. 14, 827–845 (2007).	277
12	A. Graovac, I. Gutman, N. Trinajstić, T. Živković: „Graph Theory and Molecular Orbitals. Application of Sachs Theorem". TEORET. CHIM. ACTA 26 , 67–78 (1972).	259
13	S. Nikolić, N. Trinajstić, Z. Mihalić: „The Wiener Index: Development and Applications". CROAT. CHEM. ACTA 68, 105–129 (1995).	233

14	A. Sabljić, N. Trinajstić: „Quantitative Structure-Activity Relationships: The Role of Topological Indices“. ACTA PHARM. JUGOSL. 31, 189–214 (1981).	206
15	D. Amić, D. Bešlo, B. Lučić, S. Nikolić, N. Trinajstić: „The Vertex-Connectivity Index Revisited“. J. CHEM. INF. COMPUT. SCI. 38, 819–822 (1998).	197
16	Z. Mihalić, S. Nikolić, N. Trinajstić: „Comparative Study of Molecular Descriptors Derived from the Distance Matrix“. J. CHEM. INF. COMPUT. SCI. 32, 28–37 (1992).	175
17	M. J. S. Dewar, N. Trinajstić: „Ground States of Conjugated Molecules. XX. SCF MO Treatment of Compounds Containing Bivalent Sulphur“. J. AMER. CHEM. SOC. 92, 1453–1459 (1970).	173
18	Z. Mihalić, D. Veljan, D. Amić, S. Nikolić, D. Plavšić, N. Trinajstić: „The Distance Matrix in Chemistry“. J. MATH. CHEM. 11, 223–258 (1992).	152
19	B. Lučić, N. Trinajstić: „Multivariate Regression Outperforms Several Robust Architectures of Neural Networks in QSAR Modeling“. J. Chem. Inf. Comput. Sci. 39, 121–132 (1999).	150
20	D. Bonchev, O. V. Mekenyan, N. Trinajstić: „Isomer discrimination by topological information approach“. J. Comput. Chem. 2, 127–148 (1981).	149
21	A. Miličević, S. Nikolić, N. Trinajstić: „On reformulated Zagreb indices“. Mol. Divers. 8, 393–399 (2004).	148
22	D. Babić, D. J. Klein, I. Lukovits, S. Nikolić, N. Trinajstić: „Resistance-distance matrix: A computational algorithm and its application“. Int. J. Quantum Chem. 90, 166–176 (2002).	122
23	M. J. S. Dewar, J. A. Hashmall, N. Trinajstić: „Ground states of conjugated molecules. XXII. Polarographic reduction potentials of hydrocarbons“. J. Am. Chem. Soc. 92, 5555–5559 (1970).	122

24	I. Lukovits, S. Nikolić, N. Trinajstić: „Resistance distance in regular graphs“. Int. J. Quant. Chem. 71, 217–225 (1999).	120
25	M. J. S. Dewar, N. Trinajstić: „Semiempirical SCF–MO treatment of excited states of aromatic compounds“. J. Chem. Soc. A. 0, 1220–1237 (1971).	119
26	D. J. Klein, Z. Mihalić, D. Plavšić, N. Trinajstić: „Molecular topological index: a relation with the Wiener index“. J. Chem. Inf. Comput. Sci. 32, 304–305 (1992).	113
27	B. Lučić, N. Trinajstić, S. Sild, M. Karelson, A. R. Katritzky: „A New Efficient Approach for Variable Selection Based on Multiregression: Prediction of Gas Chromatographic Retention Times and Response Factors“. J. Chem. Inf. Comput. Sci. 39, 610–621 (1999).	111
28	D. Bonchev, O. Mekenyan, N. Trinajstić: „Topological characterization of cyclic structures“. Int. J. Quantum Chem. 17, 845–893 (1980).	102
29	D. Cvetković, I. Gutman, N. Trinajstić: „Graph theory and molecular orbitals. VII. The role of resonance structures“. J. Chem. Phys. 61, 2700–2706 (1974).	96
30	A. T. Balaban, J. Brunvoll, J. Cioslowski, B. N. Cyvin, S. J. Cyvin, I. Gutman, H. Wenchen, H. Wenjie, J. V. Knop, M. Kovačević, W. R. Müller, K. Szymanski, R. Tošić, N. Trinajstić: „Enumeration of Benzenoid and Coronoid Hydrocarbons“. Zeitschrift Naturforsch. A. 42, 863–870 (1987).	95

Istraživačke aktivnosti u području matematičke kemije bile su na razvoju i primjeni teorije grafova i molekulskih deskriptora (koncepata kemijske teorije grafova) u kemiji, dizajnu lijekova ili znanosti o okolišu. Ove studije rađene su s doktorandima (npr. I. Gutman, M. Milun, M. Barysz, S. Nikolić, A. Jurić, D. Amić) i kolegama (npr. D. Cvetković, M. Randić, D. J. Klein, T. Živković, D. Babić, R. B. Mallion, D. Bonchev, A. Graovac, D. Plavšić, I. Lukovits, S. C. Basak, Z. Mihalić, B. Lučić, D. Vukičević, A. Miličević). Među njegovim radovima u Tablici 1. zanimljiva je referen-

cija 1 u kojoj je razvijen par prilično jednostavnih topoloških indeksa, a koji se u literaturi nazivaju Zagrebačkim indeksima. Prvi Zagrebački indeks M_1 definiran je kao zbroj svih kvadrata stupnjeva vrhova (tj. valencija atoma) grafa koji predstavlja molekulu, a drugi Zagrebački indeks M_2 računa se kao zbroj umnožaka stupnjeva vrhova koji tvore svaku od bridova grafa (tj. svaku od kemijskih veza). Dakle, u prvome Zagrebačkom indeksu zbroj ide po svim atomima, a u drugom po svim vezama grafa koji predstavlja kemijsku strukturu molekule. Zagrebački indeksi prvo su korišteni kao indeksi grananja (ref. 2 u Tablici 1.), a kasnije kao topološki indeksi u kvantitativnim studijama odnosa svojstvo/aktivnost strukture (npr. ref. 4 u Tablici 1.). Važno je napomenuti da se u svijetu poznati i široko primjenjivani indeksi povezanosti ili Randićevi indeksi uvedeni od Trinajstićeva učitelja Milana Randića 1975. godine mogu promatrati kao analogoni Zagrebačkim indeksima. Razlika je u tome da su doprinosi pojedinih atoma u prvom indeksu povezanosti obrnuto proporcionalni kvadratnom korijenu valencije atoma (stupnju čvora grafa), a doprinosi se zbrajaju po svim atomima. Kod drugog indeksa povezanosti su doprinosi veza (bridova grafa koji predstavlja kemijsku strukturu molekule) obrnuto proporcionalni kvadratnom korijenu umnoška valencija atoma (čvorova) koji tvore kemijsku vezu i zbrajaju se doprinosi svih veza u molekuli (bridova grafa).

Ti su indeksi uključeni i u brojne računalne programe koji služe za izračun molekularnih deskriptora pod nazivom prvi i drugi Zagrebački indeks, a koriste se u modeliranju svojstava molekula, npr. u istraživanjima lijekova ili u zaštiti zdravlja ljudi i okoliša od kemijskih onečišćivala.

Osim toga, značajni su, prepoznati i citirani u literaturi Trinajstićevi rezultati u uvođenju i drugih topoloških indeksa kao molekulskih deskriptora (ref. 7, 8, 9 i 15 u Tablici 1.), koji su se primjenjivali u QSAR/QSPR modeliranju (ref. 10, 14, 16, 21 i 26 u Tablici 1.).

Druga skupina najzanimljivijih rezultata profesora Trinajstića i njegovih kolega (doktoranda Ivana Gutmana i Milorada Miluna) u graf-teorijskoj analizi Hückelove teorije molekularnih orbitala (HMO) je formulacija energije topološke rezonancije (TRE) kao mjere aromatičnosti ko-

njugiranih sustava (ref. 3 u Tablici 1.). Tom je rezultatu prethodila studija Graovca, Gutmana, Trinajstića i Živkovića (referenca 12), koja se smatra početkom kemijske teorije grafova. Rezultat iz ref. 3 kasnije je uspješno proširen (ref. 29) i na konjugirane ione, radikale, ion-radikale i premoštene anulene (npr. referenca 2 u Tablici 1.).

Treća skupina Trinajstićevih istraživačkih aktivnosti pripada području računalne kemije i odnosi se na razvoj protokola za izvođenje QSPR/QSAR (npr. ref. 4, 6, 10, 11, 13–15, 19 i 27 u Tablici 1.), objavljene u suautorstvu s kolegama i doktorandima (npr. S. Nikolić, A. Jurić, A. Sabljić, D. Amić, D. Bešlo, M. Randić, D. Plavšić, I. Lukovits, S. C. Basak, Z. Mihalić, B. Lučić, A. Miličević). Također, izdvajam i razvoj računalnih programa za izvođenje izbora najboljih podskupova deskriptora u QSAR/QSPR modele (npr. ref. 19 i 27 u Tablici 1.), objavljene u suautorstvu s doktorandom B. Lučićem i drugim suradnicima. Neki radovi iz ovoga područja istraživanja realizirani su i objavljeni u suradnji s uglednim profesorom svjetskoga glasa Alanom Royem Katritzkym sa Sveučilišta Florida, SAD. Razvoj nekoliko učinkovitih algoritama za karakterizaciju, generiranje i kombinatorno prebrajanje različitih klasa molekula proveo je u suradnji s profesorom Janom von Knopom i njegovom grupom (Wolfgang R. Müller, Klaus Szymanski) sa Sveučilišta u Düsseldorfu, Njemačka (npr. ref. 30 u Tablici 1.). Rezultati te suradnje sažeti su u dvjema monografijama *Computer Generation of Certain Classes of Molecules* (SKTH, Zagreb, 1985.) i *Computational Chemical Graph Theory* (Horwood, New York, 1991.). Osim toga, radio je na korištenju informacijsko-teorijskih koncepata za razlikovanje izomera i primjeni informacijsko-teorijskih indeksā u kemiji poput studije vezane uz grananje molekulskih struktura (ref. 5, 20 i 28 u Tablici 1.) s D. Bonchevom i O. Mekenyanom iz Bugarske. Zanimljivo je napomenuti da je O. Mekenyan početkom 80-tih 20. st. bio na postdoktorskom usavršavanju na Institutu *Ruđer Bošković* u Zagrebu surađujući s Nenadom Trinajstićem. On je dugogodišnji voditelj Laboratorija za matematičku kemiju u Burgasu, Bugarska, koji razvija i unapređuje QSAR Toolbox, program za predviđanje ekotoksičnosti kemikalija i za procjenu njihova utjecaja na okoliš. Razvoj programa QSAR Toolbox dugo godina financijski podupiru OECD, Europska

kemijska agencija i Europska komisija putem direktive REACH (engl. *Registration, Evaluation, Authorisation and Restriction of Chemicals*). Profesor Mekenyan voditelj je toga razvoja koji predstavlja primjenu modeliranja na kojem je radio Nenad Trinajstić u zaštiti okoliša, zdravlja ljudi i životinja. U znanstvenom fokusu Nenada Trinajstića bilo je i istraživanje kriterija za izračun molekulske kompleksnosti (u suradnji sa S. Nikolićem, Ivom Tolić te G. Rückerom i C. Rückerom iz Njemačke).

Trinajstićev rad na istraživanju povijesti kemije, a osobito povijesti hrvatske kemije odnosio se na proučavanje i pregled događaja i osoba važnih za hrvatsku kemiju, ali i na povijest kvantne teorije te na rane razvoje kemijske teorije grafova (s Milanom Randićem). Priredio je u suradnji s dr. sc. Snježanom Paušek-Baždar monografiju *Hrvatska kemija u 20. stoljeću* (Školska knjiga, Zagreb, 2014.). Ranije je priredio monografiju o značajnim hrvatskim kemičarima naslova *100 hrvatskih kemičara* (Školska knjiga, Zagreb, 2002.), a pisao je i o djelu nobelovca Roalda Hoffmanna te preveo neke njegove pjesme na hrvatski. Također je opisao i dopisivanja koja je vodio s nobelovcem Vladimirom Prelogom.

1.3. Citiranost istraživačkih rezultata

Profesor Trinajstić objavio je preko 550 znanstvenih radova u časopisima, 49 znanstveno-stručnih radova u zbornicima i poglavlja u knjigama, 15 knjiga, 173 stručna i pregledno-stručna rada te više desetaka uvodnika, nekrologa i osvrta. Po citatnoj bazi podataka (tj. citatnom servisu indeksiranja) *Web of Science* (WoS) u vlasništvu Clarivate Analyticsa, 621 rada koje izlistava WoS kao i drugi njegovi radovi i knjige koje izlistava baza WoS, citirani su više od 22 000 (dvadeset dvije tisuće) puta, a njegov Hirschov faktor iznosi 63. Među tim citatima ističe se njegova knjiga *Chemical Graph Theory* (oba izdanja: 1983. i 1992.) citirana preko 3200 puta.

U danas sve prihvaćenijoj i sve češće korištenoj bazi *Google Scolar* svi registrirani znanstveni i stručni radovi akademika Nenada Trinajstića citirani su više od 31 000 puta (preko 7700 puta od 2018.). Njegov H-indeks u toj bazi je 74, a i 10-indeks 377.

1.4. Uredničke i recenzentske aktivnosti

Akademik Trinajstić bio je član uredništva brojnih međunarodnih znanstvenih časopisa, kao i urednik knjiga i zbornika radova. Uređivao je inozemne i domaće međunarodne znanstvene časopise poput *Journal of Mathematical Chemistry* kao suurednik (1990. – 1993.) i *Croatica Chemica Acta* (1994. – -2005.). Također je bio i urednik časopisa *Prirodoslovlje* (2001. – 2008.; od 2009. kao počasni urednik) koji objavljuje Matica hrvatska. Bio je član uređivačkih odbora 14 časopisa kao što su *Croat. Chem. Acta* (1967. – 1994.), *J. Mol. Struct. (Teochem)* (1985. – 1994.), *J. Math. Chem*. (1986. – 1990., 1994. – 2005.), *Comput. Chem.* (1989. – 2002.), ali i drugih časopisa koji nisu uključeni u baze poput *Web of Science*.

Nekolicina časopisa posvetila mu je posebne brojeve kao *Internet Electronic Journal of Molecular Design* (2003./2004.), *Journal of Chemical Information and Computer Sciences* (2007.) i *International Journal of Chemical Modelling* (2014.), koji sam suuredio. Časopis *Croatica Chemica Acta* posvetio mu je posebne brojeve u dvama navratima: 2004. i 2016. godine (vodio sam uređivanje potonjeg) u prigodi njegovih 65. i 80. godina života.

Uređivao je i posebna izdanja nekoliko međunarodnih znanstvenih časopisa. Obavljao je dugo godina recenzentske aktivnosti za više od stotinu međunarodnih znanstvenih časopisa.

1.5. Znanstveno-nastavna napredovanja

Godine 1967. Trinajstić postaje znanstveni suradnik, 1971. viši znanstveni suradnik, a znanstveni savjetnik 1977. – sve u Grupi za teorijsku kemiju, čiji je bio i dugogodišnji voditelj. Bio je i predstojnik Zavoda za fizikalnu kemiju od 1997. do obveznog umirovljenja krajem 2001. godine. U status profesora emeritusa 2005. izabran je na Institutu *Ruđer Bošković*.

Na Prirodoslovno-matematičkom fakultetu je Nenad Trinajstić biran u zvanje docenta (1970.), izvanrednog (1973.) i redovitog profesora

(1977.) te profesora emeritusa (1999. –2001.). Kao pomoć studentima napisao je udžbenik *Molekularne orbitale u kemiji* (Školska knjiga, Zagreb, 1974.), a s Leom Klasincem i Zvonimirom B. Maksićem udžbenik *Simetrija molekula* (Školska knjiga, Zagreb, 1979.).

1.6. Mentoriranje diplomskih, magistarskih i doktorskih radova studenata

Pod njegovim nadzorom studenti su izradili i obranili 16 diplomskih, devet znanstvenih magistarskih radova i 18 doktorskih radova/disertacija. Istraživačke teme diplomskih radova, kao i istraživački interesi profesora Nenada Trinajstića uglavnom su bili iz različitih disciplina teorijske kemije, no neki od njih bili su vezani i uz računalne znanosti, računalnu biofiziku, farmaceutske znanosti i teorijsku biologiju.

Među radovima izrađenim pod njegovim mentorstvom magistarski rad (*Teorija grafova i molekularne orbitale*, Sveučilište u Zagrebu, 1973.) i doktorska disertacija (*Istraživanje topoloških svojstava konjugiranih ugljikovodika*, Sveučilište u Zagrebu, 1973.) Ivana Gutmana prve su ocjenske radnje iz matematičke kemije u Hrvatskoj. Nadalje, dr. sc. Borka Džonova-Jerman-Blažič (*Računalno podržana rješenja nekih nenumeričkih problema u kemiji*, Sveučilište u Zagrebu, 1981.) obranila je prvu disertaciju iz računalne kemije u Hrvatskoj, a doktorska disertacija dr. sc. Ive Marije Tolić (*Stanice kao tensegrične strukture. Polja sila i citoskeletna napetost izmjereni u pojedinačnim glatkim mišićnim stanicama*, Sveučilište u Zagrebu, 2002.) prva je disertacija obranjena u Hrvatskoj koja se dijelom svrstava u teorijsku biologiju (pored eksperimentalnoga dijela, koji je sastavni dio te disertacije). Također, akademik Trinajstić vodio je i pet postdoktorandā.

2. SURADNJE SA ZNANSTVENICIMA IZ MANJIH SREDINA U HRVATSKOJ

Akademik Trinajstić surađivao je s velikim brojem hrvatskih znanstvenika koji su bili zaposleni na institucijama izvan Zagreba pomažući im održati postojeće i uspostaviti nove kontakte, kao i (neformalne i projektne) suradnje s uglednim znanstvenicima u svijetu. Imajući priliku povremeno raditi i u međunarodnom okruženju, oni su razvijali karijeru i podizali razinu znanstvenog istraživanja i nastavničkog rada u sredinama izvan Zagreba. U tim sam suradnjama i osobno sudjelovao kao npr. s Davorom Juretićem iz Splita i s kemičarima Albinom Jurićem iz Križevaca te Draganom Amićem i Dragom Bešlom iz Osijeka. Tako je npr. objavljen rad u suautorstvu s D. Amićem i njegovom grupom (ref. 6 iz Tablice 1.) u kojem su postavili jednostavne i jako citirane QSAR modele, koji povezuje strukturne karakteristike flavonoida (polifenola) s njihovom biološkom antioksidativnom aktivnošću. Model je pokazao da su za dobru antioksidativnu aktivnost flavonoida najvažniji broj OH skupina na aromatskom prstenu i njihov međusobni položaj (veću aktivnost pokazuju polifenoli koji imaju kateholne OH skupine). Taj je rad četvrti najcitiranijih od svih radova objavljenih u časopisu *Croatica Chemica Acta*. Također je vrlo citiran i pregledni rad broj 11 u Tablici 1. u kojem je dan pregled i kritički osvrt na modeliranje odnosa između strukture i antioksidativne aktivnosti flavonoidnih spojeva.

S obzirom na širok spektar znanstvenih tema za koje se zanimao i kojima se bavio, surađivao je i s hrvatskim biofizičarima potičući razvoj te znanstvene zajednice u Hrvatskoj. Tako je kod njega diplomirao hrvatski biofizičar Bojan Benko, koji je radeći na Imunološkom zavodu u Zagrebu više godina predavao biofiziku na studiju fizike na Prirodoslovno-matematičkom fakultetu Sveučilišta u Zagrebu. Surađivao je s poznatim hrvatskim biofizičarom Jankom Herakom, mentorirao je i surađivao s Ivom Tolić (biologinjom i biofizičarkom) iz Zagreba te s biofizičarima Davorom Juretićem iz Splita i Damirom Zucićem iz Osijeka u modeliranju strukture proteina, u čemu sam i osobno sudjelovao.

3. TRINA KAO USTRAJAN PODUPIRATELJ MLADIH ISTRAŽIVAČA U ZNANOSTI

U razdoblju od 30 godina moga rada s akademikom Nenadom Trinajstićem (oslovljavali smo ga „profesor“ ili jednostavnije „Trina“) imao sam mnogo prilika svjedočiti, ali i sudjelovati u njegovim susretima i razgovorima s novim kolegama. Naime, dijelio je vlastiti radni prostor (sobu osrednje veličine) s nama dvoje kolega, ali u njoj se uvijek nalazilo mjesta za ponekoga novog mladog suradnika – privremeno ili koliko god bude potrebno. Bili su to mladi ljudi pomalo nespretni i zbunjeni dijelom stoga što su bili opterećeni informacijama dobivenim od starijih kolega o opsegu i veličini njegova znanstvenoga opusa, kao i informacijama o nadaleko poznatom znanstveniku, voditelju projekta i programa, grupe ili zavoda na Institutu *Ruđer Bošković*. Bez iznimke su pokazivali izraženo zanimanje i snažnu želju da daju vlastiti originalni doprinos znanosti u području teorijske kemije koje se, u pravilu, ispripletalo s biologijom, fizikom, matematikom i računarstvom. Uvodni strah mladih kolega razbijao bi profesor svojim prvim rečenicama, često popraćenim anegdotama i šaljivim zgodama iz njegova bogata životnog i istraživačkog opusa. Snažno nastojanje profesora Trinajstića da pomogne mladim suradnicima oduvijek me je duboko fasciniralo, kao i moje najbliže kolege. Ta bi pomoć bila ili u dobivanju istraživačkih doktorskih stipendija ili, ako one u određenom razdoblju nisu bile dostupne, u definiranju istraživačkih tema i vođenju izrade doktorske disertacije ili neformalnom istraživačkom suradnjom i potporom. Njegov entuzijazam za rad i pomoć mladim ljudima koji ulaze u znanost bio je nepokolebljiv čitavo vrijeme koje sam proveo s akademikom Trinajstićem.

Ubrzo mi se nametnulo i pitanje: je li akademik Trinajstić bio takav u svom ophođenju sa studentima i mladim suradnicima i ranije u svojoj karijeri? To sam malo istražio propitujući kolege koji su ranije radili s profesorom – ili su radili s drugim kolegama, ali u istoj instituciji u neposrednoj blizini. Ustanovio sam da su svi oni neovisno došli do gotovo identična mišljenja. Posljednji primjer bili su mi dojmovi dr. sc. Borisa Sinkovića (diplomand akademika Trinajstića iz 1979. s radnjom naslova *Aromatič-*

nost konjugiranih molekula u pobuđenome stanju i dr. sc. Predrag-Petera Ilicha (njegov doktorand iz 1979. s naslovom disertacije *Neklasična aromatičnost*), koji su ostvarili zapažene znanstvene karijere u SAD. Obojicu nisam nikada osobno susreo/upoznao. Prenijeli su mi gotovo identične dojmove mojima o svome radu i vremenu provedenom s profesorom Trinajstićem i o presudnu utjecaju koji je rad s njim imao na njihove buduće znanstvene karijere.

Moje iskustvo, koje dijele i mnogi moji kolege koji su kao mladi surađivali s profesorom Trinajstićem, jest da je svatko tko je pokucao na vrata njegove radne sobe i iskazao interes za istraživanje, čak i kada je donosio nerazrađene i nekonkretne ideje o tom istraživanju, naišao na entuzijastična profesora Trinajstića koji bi dao ključni savjet, poticaj i pomoć mladom kolegi u razvijanju jasnijeg i bolje definiranog plana istraživanja. Često je bio slučaj da predložena istraživačka ideja mlađeg kolege nije bila usko povezana s kemijom, pa čak i da su neki njegovi studenti koje je mentorirao u izradi doktorskih disertacija imali vrlo različito obrazovanje od njegova. Takav su primjer dr. sc. Iva Tolić (diplomirala biologiju, a doktorirala 2002. s tezom naslova *Stanice kao tensegrične strukture. Polja sila i citoskeletna napetost izmjereni u pojedinačnim glatkim mišićnim stanicama*) ili ja koji sam diplomirao elektrotehniku (mikroelektroniku) i magistrirao iz područja fizike (molekularne biofizike) 1995. (a doktorirao 1997. s tezom naslova *Odnosi strukture, svojstava i aktivnosti molekula: uporaba uređeno ortogonaliziranih deskriptora*). No profesor Trinajstić bi svojom sposobnošću da vidi dalje od naizgled očiglednih ograničenja pomogao mladom kolegi preokrenuti njegov početni (možda velik) nedostatak u prednost te osmisliti i definirati nov obećavajući plan/smjer istraživanja. Držao je do preporuka koje bi za nekoga mladog kolegu dobio od drugih uglednih znanstvenika i rado bi ih se kasnije prisjećao i prepričavao u opuštenim razgovorima. Također, nije mi poznato da je ikada propustio/odbio napisati preporuku za nekoga svog mlađeg suradnika kada je za to bio upitan/zamoljen.

Dodatna istaknuta osobina profesora Nenada Trinajstića njegovo je vođenje i mentorstvo u znanstveno-istraživačkom radu: bio je vidno zainteresiran za napredak u radu, oduševljen novim istraživačkim idejama

mladih kolega i nije im propuštao odati priznanje za postignute rezultate. Takav svakodnevni istraživački i obrazovni pristup bio je poticajan i dragocjen za mlade ljude, jednako kao i njegovi napori u stvaranju boljih mogućnosti za njihov istraživački rad i samoostvarenje. Takvi poticaji i pomoć u razvoju mladih znanstvenika izuzetno su mudra edukativna djelatnost jer, kakva god će biti naša budućnost (promatrano općenito i znanstveno), stvarat će ju i ocrtavati oni koji su danas mladi. Stoga ako pomognemo današnjim mladim ljudima da postanu hrabri, dobri i optimistični, velika je vjerojatnost da ćemo iz sadašnjeg vremena moći gledati s optimizmom u budućnost. Odnosom spram mladih čovjek pokazuje svoj odnos spram budućnosti zajednice, čega je profesor Trinajstić bio u potpunosti svjestan.

Posljednjih smo godina svjedoci velikih i stalnih napora čelnika Europske unije i Republike Hrvatske u stvaranju i pružanju mogućnosti zapošljavanja mladih ljudi. Profesor Trinajstić je svojim obrazovnim i znanstveno-istraživačkim doprinosom te cjelokupnom karijerom djelovao u tom duhu desetljećima ranije odgojivši i usmjerivši u znanstveno-istraživački i nastavni rad brojne vrsne, svjetski poznate znanstvenike.

4. ADMINISTRATIVNE I VODITELJSKE DUŽNOSTI NA INSTITUTU (VOĐENJE ZAVODA I RAD NA PROJEKTIMA)

U posljednjih 30 godina života i znanstvenoga rada akademika Trinajstića svjedočio sam njegovu opiranju bilo kakvim dužnostima koje nisu čisti znanstveni rad. Međutim, pred kraj karijere morao se prihvatiti vođenja znanstvenog programa Zavoda za fizičku kemiju (što je činio do umirovljenja 2001.) kao njegov najistaknutiji član, što je iziskivalo dodatni napor, uza zdravstvene poteškoće koje su došle uz dvije ozbiljnije operacije koje je u tom periodu morao obaviti (operacija leđa i srčanih zalisaka). U to vrijeme vodio je i znanstveni projekt „Razvoj i primjena modela u kemiji“ (1996. – 2022.) na kojem su suradnici bili kolege iz Grupe za teorijsku kemiju na Institutu „Ruđer Bošković“ (D. Babić, H. Bilinski, A. Graovac, B. Lučić, S. Nikolić i znanstveni novaci I. M. Tolić, S. Frančiško-

vić-Bilinski i I. Vlah), a i kolege s drugih institucija: D. Amić (Osijek), D. Juretić (Split), A. Jurić (Križevci), M. Medić-Šarić (Zagreb).

To je vrijeme uvođenja računala i internetskih tehnologija u administrativni rad i u pisanju i vođenju projekata, uvođenje komunikacije putem elektroničke pošte, kao i objavljivanja i recenziranja znanstvenih radova putem elektroničke pošte i interneta. U usvajanju tih tehnologija u svome svakodnevnom radu oslanjao se na mlađe kolege, u čemu sam sudjelovao cijelo to vrijeme, kao i na pomoć stručnih službi (npr. tajnice A. Baruškin). U vođenju Zavoda za fizičku kemiju u danima i mjesecima njegove sprijećenosti kvalitetno, predano i nesebično ga je zamjenjivala dr. sc. Biserka Kojić-Prodić (kasnije izabrana za zaslužnu znanstvenicu Instituta Ruđer Bošković) tako da su uz posredovanje nas mlađih kolega u pronalaženju i pripremi potrebnih podataka na zajedničkim računalima (koja smo duže vremena dijelili) sve obveze vođenja znanstvenog programa Zavoda za fizičku kemiju, kao i sva izvješća, sastavljana kvalitetno i predavana na vrijeme. Znanstveni program zavoda koji je vodio prednjačio je po produktivnosti i kvaliteti rezultata u hrvatskim okvirima. Kasnije će, nakon umirovljenja, voditi ili biti suradnik-istraživač i produktivno raditi na projektima „Razvoj i primjena modela u kemiji i bioinformatici“ te „Razvoj metoda za modeliranje svojstava bioaktivnih molekula i proteina“.

S obzirom na to da se bavio teorijskim radom, velika većina njegovih rezultata plod su ideja proizišlih iz neformalnih suradnji s brojnim kolegama i studentima. Pri pisanju projekata se više puta znao čuditi proračunatosti i detaljnom planu rada koji se zahtijevao i koji se morao napraviti za dugo naredno razdoblje. Govorio bi: „Kako ja mogu znati koja će mi odlična ideja pasti na pamet za godinu, dvije ili tri?“ U tim se situacijama oslanjao na mlađe suradnike, pa sam tako zajedno s njim radio u osmišljavanju istraživačkih ideja, sastavljanju istraživačkog tima i prijavama dvaju zadnjih znanstvenih projekata, uključivanju zadnjega znanstvenog projekta u znanstveni program, u administrativnom i financijskom vođenju te u pisanju različitih periodičnih i završnih izvješća. Posljednji provedeni projekt na kojemu sam radio s akademikom Trinajstićem i ostalim kolegama rezultirao je s više desetaka izvrsnih i visoko citiranih znanstvenih

radova i bio jedan od najbolje rangiranih znanstvenih projekata u znanstvenom polju kemije u Hrvatskoj.

Pred kraj njegova rada na Instututu *Ruđer Bošković* 1998. – 2001. godine na moj prijedlog i inicijativu uspostavili smo suradnju s Alanom Royem Katritzkym sa Sveučilišta Florida, SAD, vodećim heterocikličkim kemičarom koji se bavio i modeliranjem, redovitim članom Britanske akademije znanosti (*The Royal Society*) sa sjedištem u Londonu i jednim od najpoznatijih kemičara toga doba. On je poznavao radove zagrebačkih teorijskih kemičara, osobito Trinajstićeve, a u program koji je razvijen u njegovu laboratoriju naziva Codessa Pro uključio je i spomenute Zagrebačke indekse. Profesor Katritzky objavio je do kraja života (2014. godine) preko 2200 znanstvenih radova i tada bio jedan od najcitiranijih znanstvenika na svijetu. Kao plod te suradnje objavili smo kvalitetne znanstvene radove i razmijenili posjete. Tako je profesor Katritzky posjetio Institut *Ruđer Bošković* i Zavod za fizičku kemiju u zadnjoj godini Trinina vođenja te održao iznimno posjećeno i inspirativno predavanje. Bio je to vjerojatno jedan od najpoznatijih znanstvenika koji je posjetio Institut, a osobito Zavod za fizičku kemiju, od njegova utemeljenja.

U 2001. godini sastavio sam prijedlog projekta transfera znanja stečenog zajedničkim radom i istraživanjima u izradi moje doktorske disertacije te smo ga predložili hrvatskoj farmacutskoj tvrtki Pliva d. d. Projekt je prihvaćen, financiran i uspješno proveden od 2001. do 2004. godine i donio je za to doba otežana financiranja znanosti u poratnim godinama značajan prihod Institutu iz suradnje s gospodarstvom. Taj je projekt imao dodatnu (pa i simboličku) vrijednost da je ugovoren u drugoj polovici posljednje godine njegova zaposlenja na Institutu, i to s tvrtkom Pliva d. d. u kojoj je Trinajstić započeo karijeru kao mladi kemijski inženjer 1960. godine. Ujedno je to bila potvrda koristi od modeliranja i primjenjivosti rezultata modeliranja (kojim se Trinajstić bavio cijeli njegov znanstveni radni vijek) u hrvatskom gospodarstvu.

5. TRININA OMILJENA TEZA: KEMIJA KAO SREDIŠNJA PRIRODOSLOVNA ZNANOST

Način na koji je profesor Trinajstić, po obrazovanju inženjer kemije i doktor kemijskih znanosti, promatrao i obavljao vlastiti znanstveni rad te brojna postignuća koja su iz tog rada proizišla u obliku projekata, znanstvenih radova, knjiga, diplomskih, magistarskih ili doktorskih radnji, bio je temelj za nastanak i učvršćenje njegova uvjerenja/teze – da je kemija središnja prirodoslovna znanost iz koje se najlakše ostvaruju suradnje s drugim znanstvenim granama. Često sam imao prilike slušati rasprave i sudjelovati u njima još kao mladi znanstvenik i doktorand 90-tih godina 20. st. u Grupi za teorijsku kemiju u Zavodu za fizičku kemiju Instituta *Ruđer Bošković*. O tome je profesor Trinajstić često raspravljao i s drugim starijim znanstvenicima i kolegama iz drugih prirodoslovnih područja poput fizike i biologije, i uvijek je čvrsto branio i promovirao tu tezu.

Zbog središnjeg položaja kemije, kemijska su istraživanja prirodna poveznica različitih prirodoslovnih disciplina. Osim toga, svi procesi u ljudskom organizmu i oni koji se odvijaju u ljudskome mozgu u procesu nastanka novih znanstvenih ideja kemijske su prirode – tj. mogu se u osnovi razložiti i opisati kemijskim i biokemijskim konceptima i reakcijama.

Zanimljivo je pripomenuti da je prije 10 godina Američko kemijsko društvo pokrenulo nov znanstveni časopis naslova *ACS Central Science*. U uvodu su dali sljedeće objašnjenje: „Kemija je ključna za sve znanosti, a ACS Publications to dokazuje svojim novim, recenziranim, interdisciplinarnim časopisom – *ACS Central Science*. Ovaj jedinstveni mjesečni časopis sadržavat će interdisciplinarne istraživačke članke od iznimne važnosti u kemiji i područjima povezanim s kemijom, jačajući odlučujuću ulogu kemije kao 'središnje znanosti'".

6. TRININ DOPRINOS PROMOCIJI HRVATSKE I HRVATSKE ZNANOSTI U SVIJETU

Stalna nastojanja u promociji Hrvatske Trina je pokazao na osobit način i u prigodi priređivanja drugog izdanja knjige *Kemijska teorija grafova* (engl. *Chemical Graph Theory*), koju je na engleskom jeziku objavio ugledni američki izdavač CRC Press u godini međunarodnoga priznanja Hrvatske (1992.) kada je na poleđini na koricama izabrao otisnuti hrvatsku zastavu. To je jedinstven primjer u međunarodnome stručnom izdavaštvu, a ta knjiga citirana je više od 3200 puta u *Google znalcu*.

Svoj najcitiraniji znanstveni rad o prvom i drugom Zagrebačkom indeksu, koji se računa na temelju strukture molekule prikazane u obliku grafa, objavio je 1972. s tadašnjim doktorandom Ivanom Gutmanom. Zagrebačke indekse, koji karakteriziraju osnovna topološka svojstva molekula, nazvao je po rodnome gradu u kojemu su autori i proveli istraživanje. Taj je rad stalna inspiracija matematičkim kemičarima i citiran je više od 2400 puta u bazi *Google znalac* (i preko 1640 puta u bazi *Web of Science*), čime se u svijetu prenosi informacija o Zagrebu. Zagrebački su indeksi uključeni i u brojne računalne programe koji služe za izračun molekularnih deskriptora, a koriste se u modeliranju svojstva molekula, npr. u istraživanju lijekova ili u zaštiti okoliša.

Svjetski poznata postignuća grupe koju je akademik Trinajstić godinama predvodio bila su temelj za pokretanje međunarodnih znanstvenih skupova Math/Chem/Comp 1986. godine. Ti se skupovi bave istraživačkim temama između matematike, kemije i računalnih znanosti, svake se godine održavaju u Dubrovniku, a akademik Trinajstić bio je suorganizator i redovit sudionik tih skupova. Do 2022. godine održana su 33 znanstvena skupa Math/Chem/Comp koji promoviraju Hrvatsku i Dubrovnik.

7. RAD U STRUKOVNIM I KULTURNIM UDRUGAMA I NJEGOVANJE ZAVIČAJNIH VEZA

Bio je dugogodišnji član mnogih inozemnih znanstvenih te domaćih znanstvenih i kulturnih institucija i udruženja, kojima je značajno doprinio svojim radom. Kao aktivni i uvaženi član Hrvatskog kemijskog društva uspješno je obavljao dužnost glavnog i odgovornog urednika međunarodnoga znanstvenog časopisa *Croatica Chemica Acta*, tada ponajboljega hrvatskog znanstvenog časopisa.

Zanimljivo je istaknuti da je Nenad Trinajstić bio voditelj Znanstvenoga organizacijskog odbora 13. Skupa hrvatskih kemičara 1993. godine u Zagrebu. S obzirom na redni broj skupa (13.), sasvim je bilo jasno da je voditeljstvo organizacije u znanstvenom smislu trebalo biti ponuđeno Nenadu Trinajstiću, što je on bez razmišljanja prihvatio. Tada je uputio poziv za plenarno predavanje profesoru Robertu Huberu s Tehničkog sveučilišta iz Münchena, dobitniku Nobelove nagrade 1988. godine (koju je ravnopravno dijelio s Hartmutom Michelom i Johannom Deisenhoferom) za njihov rad iz 1983. godine u kojem su odredili trodimenzionalnu strukturu prvoga membranskog proteina fotosintetskog reakcijskog centra – proteina na kojemu počiva fotosinteza, fundamentalni proces za nastanak i održavanje života. Profesor Robert Huber spremno se odazvao tom pozivu u toj teškoj ratnoj godini i održao iznimno posjećeno plenarno predavanje te tako dao podršku i vjetar u leđa hrvatskim kemičarima i biokemičarima, ali i znanstvenoj zajednici općenito, da izdrže i prebrode teške ratne dane. Zanimljivo je pripomenuti da je nobelovac Huber prihvatio Trinajstićev poziv unatoč činjenici što je u Zagreb morao putovati vlakom iz Münchena (koji je tih godina bio dosta sporiji nego danas). Naime, nije bilo putničkih letova za Zagreb u tim ratnim godinama.

U Matici hrvatskoj aktivan je nakon obnove njezina rada 1990. kao odbornik te u osnivanju i radu Odjela prirodoslovlja u organiziranju znanstvenih skupova Hrvatski prirodoslovci, koji se održavaju od 1992. Istaknuo se i kao popularizator znanosti u Matičinu časopisu *Prirodoslovlje* kao urednik (2001. – 2008.) i kao počasni urednik nakon 2009.

Ponosio se svojim podrijetlom i bio je vezan uz Volosko, rodno mjesto Trinajstića, ali i brojnih poznatih hrvatskih ljudi i znanstvenika poput Andrije Mohorovičića. To je dijelom realizirao i članstvom u Družbi „Braće Hrvatskog Zmaja" gdje je kao član Družbe bio aktivan od 1991. u Prirodoslovnoj sekciji kao *Zmaj primorski*.

Iskazivao je zahvalnost svojim učiteljima i iskreno se veselio uspjesima svoje obitelji, hrvatskih znanstvenika, kao i uspjesima hrvatskih sportaša i ljudi općenito.

8. NAGRADE I PRIZNANJA ZA RAD

Za znanstveni rad nagrađen je Nagradom Grada Zagreba (1972), domaćim i inozemnim nagradama, ali i državnim nagradama za znanstveni rad (1982.) i za životno djelo (2004.).

Nekolicina časopisa posvetila mu je posebne brojeve, a časopis *Croatica Chemica Acta* to je učinio u dvama navratima: 2004. i 2016. godine, koji sam imao čast znanstveno uređivati zajedno s njegovim doktorandom iz mladih dana Predragom Ilićem (SAD) te profesorima Hrvojem Vančikom (Zagreb) i Jerzyjem Cioslovskim (Poljska).

Također je primio i druge nagrade poput nagrade Hrvatskog kemijskog društva („Božo Težak").

9. JAVLJANJE SURADNIKA NA VIJEST O SMRTI AKADEMIKA NENADA TRINAJSTIĆA

Na vijest o smrti javili su mi se kao jednom od dugogodišnjih suradnika akademika Trinajstića njegovi kolege, suradnici i prijatelji iz zemlje i inozemstva. Biranim riječima ocrtali su veliku važnost koju je suradnja s Trinom odredila ili usmjerila njihove karijere. Među njima su i njegovi diplomandi i doktorandi koji su akademsku karijeru izgradili u SAD (Zlatko Bačić, Boris Sinković, Predrag Ilić) ili u Hrvatskoj (Dragan Amić iz Osijeka, jedan od najcitiranijih znanstvenika iz Osijeka), kao i mlađi kolege s kojima je surađivao

(Rudolf Kiralj iz Bjelovara) ili Mario Lovrić (Graz/Zagreb), koji je kod njega kao posljednji student položio ispit na Doktorskom studiju kemije na Prirodoslovno-matematičkom fakultetu Sveučilišta u Zagrebu.

Javili su se i kolege i prijatelji poput profesorice Zrinke Kovarik u ime Hrvatskoga prirodoslovnog društva, profesora (biofizičara) Davora Juretića iz Splita, Dušanke Janežič i Tomaža Pisanskog iz Slovenije, Jerryja R. Diasa, Subhasha C. Basaka i Alexandra T. Balabana iz SAD, Kunala Roya iz Indije te Rogera Malliona iz Engleske. Također su se e-pismima javili i profesor Kinkar Chandra Das iz Južne Koreje i Bo Zhou iz Kine, s kojima je objavio poveći broj radova u zadnjim godinama. Radovi s profesorom Zhouom iz 2009. i 2010. o indeksu povezanosti koji se temelji na zbroju doprinosa atoma i poopćenom obliku tog indeksa (navedeni pod rednim brojevima 8 i 9 u Tablici 1.) zajedno su citirani u literaturi više od 600 puta prema citatnoj bazi *Web of Science*.

Također su se javili i oni koji su poznavali njegov opus kao profesor Bakhtiyor Rasulev (NDSU, Fargo, SAD), koji ga poznaje kao jednog od vodećih znanstvenika u matematičkoj kemiji i kemijskoj teoriji grafova, i profesor Christoph Steinbeck sa Sveučilišta u Jeni, Njemačka (ujedno i prorektor sveučilišta na kojemu je kao profesor radio i znameniti filozof Georg Wilhelm Friedrich Hegel). Prof. Steinbeck potvrdio je da je kodiranje topoloških indeksa u svome poznatom i u modeliranju često korištenom i citiranom računalnom programu otvorenog kôda CDK realizirao slijedeći njegovu knjigu *Chemical Graph Theory* iz 1992. godine. Među brojnim topološkim indeksima u programu CDK uključeni su i prvi i drugi Zagrebački indeks.

10. ZAKLJUČNE MISLI

Profesor Trinajstić bio je vrhunski intelektualac, čija je zbirka pročitanih knjiga (od kojih je nekolicinu čitao i po više puta) prelazila 10 tisuća naslova.

Kolege i prijatelji zvali su ga jednostavno i od milja Trina. Bio je iznimno pristupačan i jednostavan učitelj, kolega i prijatelj, uvijek otvoren za nove istraživačke ideje ne ustručavajući se pritom prijeći granice kemije – u matematiku, fiziku ili biologiju.

Posljednjih 30 godina njegova života neprekidno smo surađivali u znanosti, izmjenjivali ideje i razgovarali o raznim temama. Bio je ugodna, pozitivna, optimistična osoba, inspirativan edukator i istraživač, stalno spreman pomoći i davati dragocjene savjete – a osobito mlađim suradnicima potičući ih na definiranje i realizaciju novih istraživačkih ideja.

U pritiscima koje trpe i kojima su izloženi mladi ljudi koji rade u znanosti u vrijeme dok privatno podižu obitelji – svoje mlađe suradnike promatrao je cjelovito kao osobe iz obitelji i s vlastitim obiteljima. Veselio se njihovu znanstvenom uspjehu. Zbog svega navedenoga njegovi bivši mlađi kolege i ja trajno smo mu zahvalni. Njegov savjet rado smo slijedili, a njegova preporuka vrijedila je i otvarala vrata na domaćim i uglednim svjetskim sveučilištima i institutima.

Njegov znanstveni rad i opus može se opisati upravo onako kako je on sâm naslovio u svojoj knjizi – tj. kao *Život u znanosti*. Profesor Trinajstić bio je nepopravljiv idealist, platonist. Pa bih na to nadometnuo – živio je: „Život u znanosti i znanstvenim idejama – s predanošću i sa srcem", protkan brojnim ugodnim i plodnim znanstvenim suradnjama s brojnim kolegama kojima je, kako su mi sami posvjedočili, suradnja s njim usmjerila i odredila znanstvenu ili stručnu karijeru i život.

Sve je to akademiku Trinajstiću bilo moguće postići uz njegovu vjernu životnu pratiteljicu – suprugu Juditu i njihovu obitelj – čijim se uspjesima radovao i kojima se ponosio.

***

Iskazujem bliskost s poštovanom obitelji akademika Trinajstića, sa svim suradnicima-kolegama i prijateljima u Razredu za matematičke, fizičke i kemijske znanosti HAZU i ostalim uvaženim kolegama akademicima HAZU u povodu godišnjice Trinine smrti.

Velika hvala, poštovani profesore Trinajstiću – dragi Trina, na stalnoj pomoći i savjetima tijekom proteklih 30 godina naše suradnje i zajedničkih dionica života provednih u znanosti i znanstvenim istraživanjima.

Hvala Ti na svemu, dragi Trina!

BIBLIOGRAFIJA AKADEMIKA NENADA TRINAJSTIĆA

Popis izradio dr. sc. Bono Lučić

ZNANSTVENI RADOVI

1. N. Trinajstić and M. Randić: „Maximum Overlap Hybridisation in Methyl Substituted Cyclopropanes". J. CHEM SOC., 5621–5624 (1965).
2. N. Trinajstić: „Molecular Orbital Calculations for [18]Annulene Trioxide". CROAT. CHEM. ACTA 37, 307–311 (1965).
3. A. Hinchliffe, J. N. Murrell and N. Trinajstić: „Calculation on the Energy Levels of Alterant Hydrocarbon Anions". TRANS. FARADAY SOC. 62, 1362–1369 (1966).
4. J. N. Murrell, J. G. Stamper and N. Trinajstić: „Localized Orbitals of Water". J. CHEM. SOC. A, 1624–1627 (1966).
5. N. Trinajstić: „Molecular Orbital Calculations for Tetracene Monopositive Ion". CROAT. CHEM. ACTA 38, 283–286 (1966).
6. N. Trinajstić: „Equivalent Orbitals of NH, NH2 and NH3". CROAT. CHEM. ACTA 38, 287–291 (1966).
7. S. Carter, J. N. Murrell, E. J. Rosch, N. Trinajstić and P. A. H. Wyatt: „The Kinetics of Unsymmetrical Quinone-Hydroquinone Redox Reactions". J. CHEM. SOC. B, 477–484 (1967).
8. M. Randić and N. Trinajstić: „Semiempirical Calculation of Bond Lengths in Cyclopentadienyl Ligands". J. CHEM. PHYS. 46, 1469–1474 (1967).
9. J. G. Stamper and N. Trinajstić: „Localized Orbitals for Some Simple Molecules". J. CHEM. SOC. A, 782–784 (1967).
10. K. Blažević and N. Trinajstić: „A Discussion of the Absorption Spectra of Substituted 4-Pyridones and Their 4-Thio Analogues". CROAT. CHEM. ACTA 39, 25–28 (1967).
11. N. Trinajstić and A. Hinchliffe: „Molecular Orbital Calculations for the Three Isomeric Thiophthenes". CROAT. CHEM. ACTA 39, 119–124 (1967).
12. N. Stojanac and N. Trinajstić: „Elektronenspektren einiger Thioamide und Ihrer S- und N-Derivate". MONAT. CHEM. 98, 2263–2271 (1967).

13. N. Trinajstić: „Heterocyclische Sauerstoff- und Schwefelanaloge des [18]Annulens“. MONAT. CHEM. 98, 2077–2081 (1967).
14. N. Trinajstić: „Equivalent Orbitals for C2H2, C2H4, and C2H6“. Z. PHYS. CHEM. (Leipzig) 236, 369–371 (1967).
15. N. Trinajstić and Z. Majerski: „Reactivity of Thiophthenes: A Theoretical Study“. Z. NATURFORSCH. 22a, 1475–1476 (1967).
16. N. Trinajstić and A. Hinchliffe: „Molecular Orbital Calculations for the Benzothiophenes and Naphthothiophenes“. Z. PHYS. CHEM. (Frankfurt) 59, 271–281 (1968).
17. L. Klasinc, Z. Majerski and N. Trinajstić: „Reactivity Indices for Benzotropones“. Z. NATURFORSCH. 23a, 192–194 (1968).
18. N. Trinajstić: „Calculation of Carbon-Sulphur Bond Lenghts“. TETRAHEDRON LETT., 1529–1532 (1968).
19. J. N. Herak and N. Trinajstić: „Free Valence Indices of Carbon in Heterocyclic Compounds“. THEORET. CHIM. ACTA 9, 333–335 (1968).
20. L. Klasinc, Z. Majerski and N. Trinajstić: „Molecular Orbital Calculations for Some Furotropones“. Z. PHYS. CHEM. (Leipzig) 239, 262–267 (1968).
21. A. Hinchliffe and N. Trinajstić: „Calculation of Proton Coupling Constants for Dibenzothiophene Radical Anion“. THEORET. CHIM. ACTA 10, 458–460 (1968).
22. N. Trinajstić and A. Hinchliffe: „Molecular Orbital Calculation for Some Bithiophenes and Bifurans“. CROAT. CHEM. ACTA 40, 163–169 (1968).
23. A. Hinchliffe and N. Trinajstić: „Electronic Properties of Conjugated Ions“. THEORET. CHIM. ACTA 11, 271–273 (1968).
24. A. Kornhauser, J. N. Herak and N. Trinajstić: „Mechanism of Photosensitized Dimerization of Pyrimidines“. CHEM. COMM., 1108–1109 (1968).
25. T. Živković and N. Trinajstić: „Novel Expression for Electronic Density Distribution Calculations“. CHEM. PHYS. LETT. 2, 369–370 (1968).

26. E. Gey, Z. B. Maksić and N. Trinajstić: „Localized Molecular Orbitals in Simple Polyatomic Molecules". J. MOL. STRUCT. 3, 21–26 (1969).
27. T. Živković and N. Trinajstić: „Calculation of the Bond Lengths in Sulphur-Containing Heterocyclic Systems". CAN. J. CHEM. 47, 697–699 (1969).
28. N. Trinajstić and R. J. Wratten: „A Semiempirical Investigation of Annulenes". J. MOL. STRUCT. 3, 395–402 (1969).
29. N. Trinajstić: „Reactivity of Maleic Anhydride With Polycyclic Hydrocarbons with 'Open' Ends". CROAT. CHEM. ACTA 41, 47–48 (1969).
30. M. J. S. Dewar and N. Trinajstić: „Theoretical Study of Cyclazines". J. CHEM. SOC. A, 1754–1755 (1969).
31. M. J. S. Dewar and N. Trinajstić: „Aromaticity in Polycyclic Annulenes". TETRAHEDRON LETT., 2129–2132 (1969).
32. M. J. S. Dewar and N. Trinajstić: „Ground States of Conjugated Molecules. XIV. Redox Potentials of Quinones". TETRAHEDRON 25, 4529–4534 (1969).
33. M. J. S. Dewar, A. J. Harget and N. Trinajstić: „Ground States of Conjugated Molecules. XV. Bond Localization and Resonance Energies in Compounds Containing Nitrogen or Oxygen". J. AMER. CHEM. SOC. 91, 6321–6325 (1969).
34. M. J. S. Dewar and N. Trinajstić: „A SCF MO Treatment of Some Tropone Derivatives". CROAT. CHEM. ACTA 42, 1–12 (1970).
35. M. J. S. Dewar and N. Trinajstić: „Ground States of Conjugated Molecules. XX. SCF MO Treatment of Compounds Containing Bivalent Sulphur". J. AMER. CHEM. SOC. 92, 1453–1459 (1970).
36. M. J. S. Dewar and N. Trinajstić: „Quantum Chemical Data. I. SCF Molecular Orbitals for Benzenoid Hydrocarbons". COLL. CZECH. CHEM. COMM. 35, 3137–3189 (1970).
37. M. J. S. Dewar and N. Trinajstić: „Quantum Chemical Data. II. SCF Molecular Orbitals for Non-Benzenoid Hydrocarbons". COLL. CZECH. CHEM. COMM. 35, 3484–3518 (1970).

38. M. J. S. Dewar and N. Trinajstić: „Ground States of Conjugated Molecules. XVIII. Azepines and Oxepines“. TETRAHEDRON 26, 4269–4276 (1970).
39. M. J. S. Dewar and N. Trinajstić: „Resonance Energies of Some Compounds Containing Nitrogen or Oxygen“. THEORET. CHIM. ACTA 17, 235–238 (1970).
40. M. J. S. Dewar, A. J. Harget, N. Trinajstić and S. D. Worley: „Ground States of Conjugated Molecules. XXI. Benzofurans and Benzopyrroles“. TETRAHEDRON 26, 4505–4516 (1970).
41. Z. Majerski and N. Trinajstić: „Tautomerism of Phenols – Theoretical Study“. BULL. CHEM. SOC. JAPAN 43, 2648–2649 (1970).
42. M. J. S. Dewar and N. Trinajstić: „Triplet States of Aromatic Hydrocarbons“. CHEM. COMM., 646–647 (1970).
43. N. Bodor and N. Trinajstić: „Valence-Shell MO Calculations for Formamide and Related Compounds“. REV. ROUM. CHIM. 15, 1807–1811 (1970).
44. M. J. S. Dewar, J. A. Hashmall and N. Trinajstić: „Ground States of Conjugated Molecules. XXII. Polarographic Reduction Potentials of Hydrocarbons“. J. AMER. CHEM. SOC. 92, 5555–5559 (1970).
45. M. J. S. Dewar and N. Trinajstić: „Semiempirical SCF MO Treatment of Excited States of Aromatic Compounds“. J. CHEM. SOC. A, 1220–1237 (1971).
46. M. J. S. Dewar, D. H. Lo, D. B. Patterson, N. Trinajstić and G. E. Peterson: „MINDO/2 Calculations of Nuclear Quadrupole Coupling Constants of Chlorobenzenes“. J. CHEM. SOC. CHEM. COMM., 238–239 (1971).
47. M. J. S. Dewar, M. C. Kohn and N. Trinajstić: „Cyclobutadiene and Diphenylcyclobutadiene“. J. AMER. CHEM. SOC. 93, 3437–3440 (1971).
48. N. Trinajstić: „An SCF MO Treatment of Tropone Radical Anion“. BULL. CHEM. SOC. JAPAN 44, 3208–3209 (1971).

49. N. Trinajstić: „π-Electron Systems“. J. MOL. STRUCT. 8, 236–239 (1971).
50. N. Bodor, M. Farkas and N. Trinajstić: „SCF MO Calculations for 1,3-Thiazole and 2-Phenyl-1,3-Thiazole and Rotational Barriers in 2-Phenyl-1,3-Thiazole and Its Protonated Form“. CROAT. CHEM. ACTA 43, 107–111 (1971).
51. N. Bodor, E. Pop and N. Trinajstić: „Valence-Shell and π-Electron SCF MO Calculations for the Isomerism of the 21-Benzylidene-20-Oxo-Pregnane Derivatives“. REV. ROUM. CHIM. 16, 1427–1433 (1971).
52. N. Bodor, I. Schwartz and N. Trinajstić: „SCF MO Study of the Tautomerism of Anilino-Thiazole and Related Compounds“. Z. NATURFORSCH. 26b, 400–402 (1971).
53. N. Trinajstić: „The Spin Density Distribution in the Benzyl Radical“. CHEM. PHYS. LETT. 10, 172–173 (1971).
54. L. Klasinc and N. Trinajstić: „Theoretical Study of Isocondensed Thienopyrroles“. TETRAHEDRON 27, 4045–4052 (1971).
55. N. Trinajstić: „Molecular Orbital Calculations of Aromatic Stabilization of Polycyclic Conjugated Molecules“. RECORD CHEM. PROGRESS 32, 85–97 (1971).
56. Z. Majerski and N. Trinajstić: „Tetra-cycloalkanes. I.“ CROAT. CHEM. ACTA 43, 199–203 (1971).
57. N. Zambelli and N. Trinajstić: „Theoretical Study of Furotropones“. Z. NATURFORSCH. 26b, 1007–1010 (1971).
58. N. Trinajstić: „The Spin Density Distribution in the Hydrocarbon Radical Ions“. SPECTROSCOPY LETT. 4, 85–89 (1971).
59. M. Milun, Ž. Sobotka and N. Trinajstić: „Hückel Molecular Orbital Calculations of Index of Aromatic Stabilization of Polycyclic Conjugated Molecules“. J. ORG. CHEM. 37, 139–141 (1972).
60. I. Gutman, M. Milun and N. Trinajstić: „Hückel Molecular Orbital Calculations of Aromatic Stabilization of Annulenes“. CROAT. CHEM. ACTA. 44, 207–213 (1972).

61. V. Galasso and N. Trinajstić: „Conformational Analysis and Electronic Structure of Phenylthiazoles and Teir Protonated Forms". TETRAHEDRON 28, 2799–2804 (1972).
62. L. Klasinc, E. Pop, N. Trinajstić and J. V. Knop: „Theoretical Studies of Positional Isomers Obtained by Annelation of Benzene and 5-Membered Ring Heterocyclics Containing Nitrogen, Oxygen, or Sulphur". TETRAHEDRON 28, 3465–3474 (1972).
63. A. Graovac, I. Gutman, N. Trinajstić and T. Živković: „Graph Theory and Molecular Orbitals. Application of Sachs Theorem". THEORET. CHIM. ACTA 26, 67–78 (1972).
64. I. Gutman, N. Trinajstić and T. Živković: „Comments on the PMO Method". CHEM. PHYS. LETT. 14, 342–345 (1972).
65. V. Galasso and N. Trinajstić: „A Quantum-Mechanical Study on the Stereochemistry of the Isomeric Bipyrroles, Bifurans, Bithiophenes, Thienylfurans, Biselenophenes". TETRAHEDRON 28, 4419–4429 (1972).
66. D. Cvetković, I. Gutman and N. Trinajstić: „Graph Theory and Molecular Orbitals. II". CROAT. CHEM. ACTA 44, 365–374 (1972).
67. I. Gutman, N. Trinajstić and T. Živković: „Theoretical Studies on Radialenes and Related Molecules". CROAT. CHEM. ACTA 44, 501–505 (1972).
68. D. Cvetković, I. Gutman and N. Trinajstić: „Kekulé Structures and Topology". CHEM. PHYS. LETT. 16, 614–616 (1972).
69. I. Gutman and N. Trinajstić: „Graph Theory and Molecular Orbitals. III. Total π-Electron Energy of Alternant Hydrocarbons". CHEM. PHYS. LETT. 17, 535–538 (1972).
70. I. Gutman, M. Milun and N. Trinajstić: „Comments on the Paper: 'Properties of the Latent Roots of a Matrix, Estimation of π-Electron Energies' by B. J. McClelland". J. CHEM. PHYS. 59, 2772–2774 (1973).
71. L. Klasinc, E. Pop and N. Trinajstić: „Theoretical Study of Isomeric Thienylfurans". REV. ROUM. CHIM. 18, 89–98 (1973).

72. A. Graovac, I. Gutman, M. Randić and N. Trinajstić: „Kekulé Index for Valence Bond Structures of Conjugated Polycyclic Systems". J. AMER. CHEM. SOC. 95, 6267–6273 (1973).
73. E. Pop, L. Klasinc and N. Trinajstić: „Theoretical Studies of Some Furocoumarin Isomers". REV. ROUM. CHIM. 18, 1249–1257 (1973).
74. I. Gutman and N. Trinajstić: „Graph Theory and Molecular Orbitals". TOPICS CURR. CHEM. 42, 49–93 (1973).
75. I. Gutman and N. Trinajstić: „Graph Theory and Molecular Orbitals. IV. Further Application of Sachs Formula". CROAT. CHEM. ACTA 45, 423–429 (1973).
76. V. Galasso, M. Milun and N. Trinajstić: „Thienopyrroles. Theoretical Studies on the Preferred Conformation and Electronic Structure". Z. NATURFORSCH. 28b, 464–467 (1973).
77. M. Milun and N. Trinajstić: „Cyclobutadiene, Benzocyclobutadiene, and Biphenylene". Z. NATURFORSCH. 28b, 478–482 (1973).
78. I. Gutman and N. Trinajstić: „Graph Theory and Molecular Orbitals. V. The Loop Rule". CHEM. PHYS. LETT. 20, 257–260 (1973).
79. I. Gutman, N. Trinajstić and T. Živković: „Graph Theory Molecular Orbitals. VI. A Discussion of Non-Alternant Hydrocarbons". TETRAHEDRON 29, 3449–3454 (1973).
80. M. Milun and N. Trinajstić: „Theoretical Studies on the Electronic Spectra of Isomeric Bifurans, Bipyrroles, Bithiophenes, Thienylfurans, Thienylpyrroles, and Furylpyrroles". SPECTROSCOPY LETT. 6, 329–346 (1973).
81. V. Galasso and N. Trinajstić: „Application of the INDO-MO Method to the Calculation of Hyperfine Coupling Constants of Sulphur-Containing Radicals. I. Thiophen Radicals". J. CHIM. PHYS. 70, 1489–1492 (1973).
82. I. Gutman and N. Trinajstić: „A Graph-Theoretical Classification of Conjugated Hydrocarbons". NATURWISS. 60, 475 (1973).

83. J. V. Knop, N. Trinajstić, I. Gutman and L. Klasinc: „A Graph-Theoretical Study of Positional Isomers“. NATURWISS. 60, 475–476 (1973).
84. I. Gutman and N. Trinajstić: „Graph Theory and Molecular Orbitals. VIII. Kekulé Structures and Permutations“. CROAT. CHEM. ACTA 45, 539–545 (1973).
85. I. Gutman, M. Milun and N. Trinajstić: „On the Dewar Definition of Resonance Energy“. CHEM. PHYS. LETT. 23, 284–286 (1973).
86. D. Cvetković, I. Gutman and N. Trinajstić: „Graph Theory and Molecular Orbitals. VII. The Role of Resonance Structures“. J. CHEM. PHYS. 61, 2700–2706 (1974).
87. D. Cvetković, I. Gutman and N. Trinajstić: „Graph Theory and Molecular Orbitals. IX. On the Stability of Cata-Condensed Hydrocarbons“. THEORET. CHIM. ACTA 34, 129–136 (1974).
88. I. Gutman, J. V. Knop and N. Trinajstić: „A Graph-Theoretical Analysis of the HOMO-LUMO Separation in Conjugated Hydrocarbons“. Z. NATURFORSCH. 29b, 80–82 (1974).
89. J. Koller, A. Ažman and N. Trinajstić: „Some Ab Initio Calculations on Indole, Isoindole, Benzofuran and Isobenzofuran“. Z. NATURFORSCH. 29a, 624–632 (1974).
90. J. V. Knop, N. Trinajstić and T. Živković: „A Graphical Study of Positional Isomers Containing Bivalent Sulphur“. COLL. CZECH. CHEM. COMM. 39, 2431–2448 (1974).
91. R. B. Mallion, A. J. Schwenk and N. Trinajstić: „A Graphical Study of Heteroconjugated Molecules“. CROAT. CHEM. ACTA 46, 171–182 (1974).
92. R. B. Mallion, N. Trinajstić and A. J. Schwenk: „Graph Theory in Chemistry. Generalization of Sachs' Formula“. Z. NATURFORSCH. 29a, 1481–1484 (1974).
93. I. Gutman and N. Trinajstić: „Violation of the Dewar-Longuet-Higgins Conjecture“. Z. NATURFORSCH. 29a, 1238 (1974).

94. D. Cvetković, I. Gutman and N. Trinajstić: „Conjugated Molecules Having Integral Spectra“. CHEM. PHYS. LETT. 29, 65–68 (1974).
95. I. Gutman and N. Trinajstić: „Graph Theory and Molecular Orbitals. XIII. On the Stability of Annelated Tropylium Cations“. CROAT. CHEM. ACTA 46, 243–248 (1974).
96. I. Gutman, N. Trinajstić and C. F. Wilcox, Jr.: „Graph Theory and Molecular Orbitals. X. The Number of Kekulé Structures and the Thermodynamc Stability of Conjugated Systems“. TETRAHEDRON 31, 143–146 (1975).
97. C. F. Wilcox, Jr., I. Gutman and N. Trinajstić: „Graph Theory and Molecular Orbital. XI. Aromatic Substitution“. TETRAHEDRON 31, 147–152 (1975).
98. I. Gutman, B. Ruščić, N. Trinajstić and C. F. Wilcox, Jr.: „Graph Theory and Molecular Orbitals. XII. Acyclic Polyenes“. J. CHEM. PHYS. 62, 3399–3405 (1975).
99. I. Gutman and N. Trinajstić: „On the Parity of Kekulé Structures“. CROAT. CHEM. ACTA 47, 35–39 (1975).
100. D. Cvetković, I. Gutman and N. Trinajstić: „Graphical Studies on the Relations Between the Structure and Reactivity of Conjugated Systems: The Role of Non-Bonding Molecular Orbitals“. J. MOL. STRUCT. 28, 289–303 (1975).
101. T. Živković, N. Trinajstić and M. Randić: „On Conjugated Molecules With Identical Topological Spectra“. MOL. PHYS. 30, 517–533 (1975).
102. A. Graovac and N. Trinajstić: „Möbius Molecules and Graphs“. CROAT. CHEM. ACTA 47, 95–104 (1975).
103. A. Graovac, I. Gutman and N. Trinajstić: „On the Coulson Integral Formula for Total π-Electron Energy“. CHEM. PHYS. LETT. 35, 555–557 (1975).
104. N. Trinajstić and I. Gutman: „Some Aspects of Graph Spectral Theory of Conjugated Molecules“. MATH. CHEM. (Mülheim/Ruhr) 1, 71–82 (1975).

105. A. Graovac and N. Trinajstić: „Graphs in Chemistry“. MATH. CHEM. (Mülheim/Ruhr) 1, 159–170 (1975).

106. I. Gutman, M. Milun and N. Trinajstić: „Topological Definition of Resonance Energy“. MATH. CHEM. (Mülheim/Ruhr) 1, 171–175 (1975).

107. J. V. Knop, N. Trinajstić and T. Živković: „Graphical Study of Positional Isomers“. MATH. CHEM. (Mülheim/Ruhr) 1, 177–181 (1975).

108. I. Gutman and N. Trinajstić: „Graph Spectral Theory of Conjugated Molecules“. CROAT. CHEM. ACTA 47, 507–533 (1975).

109. A. Graovac, O. E. Polansky, N. Trinajstić and N. Tyutyulkov: „Graph Theory in Chemistry. II. Graph-Theoretical Description of Heteroconjugated Molecules“. Z. NATURFORSCH. 30a, 1696–1699 (1975).

110. A. Graovac and N. Trinajstić: „Graphical Description of Möbius Molecules“. J. MOL. STRUCT. 30, 416–420 (1976).

111. A. Graovac, I. Gutman and N. Trinajstić: „A Linear Relationship Between Total π-Electron Energy and the Characteristic Polynomial“. CHEM. PHYS. LETT. 37, 471–474 (1976).

112. J. V. Knop, A. Sabljić and N. Trinajstić: „Topological Studies of Fused Tricyclic and Tetracyclic Molecules Having Planar Conjugated Perimeter“. REV. ROUM. CHIM. 21, 749–755 (1976).

113. M. Randić, N. Trinajstić and T. Živković: „Molecular Graphs Having Identical Spectra“. J. CHEM. SOC. FARADAY TRANS. II, 244–256 (1976).

114. I. Gutman and N. Trinajstić: „Graph Theory and Molecular Orbitals. XIV. On Topological Definition of Resonance Energy“. ACTA CHIM. ACAD. SCI. HUNGARICAE 91, 203–209 (1976).

115. I. Gutman and N. Trinajstić: „Graph Theory and Molecular Orbitals. XV. The Hückel Rule“. J. CHEM. PHYS. 64, 4921–4925 (1976).

116. I. Gutman and N. Trinajstić: „Graph Theory and Molecular Orbitals. XVI. On p-Electron Charge Distribution“. CROAT. CHEM. ACTA 48, 19–24 (1976).

117. I. Gutman and N. Trinajstić: „Graph Theory and Molecular Orbitals. XVII. On the Self-Polarizability of the Atom“. J. CHEM. PHYS. 65, 3796–3797 (1976).

118. I. Gutman, M. Milun and N. Trinajstić: „Graph Theory and Molecular Orbitals. XVIII. On Topological Resonance Energy“. CROAT. CHEM. ACTA 48, 87–95 (1976).

119. A. Sabljić, N. Trinajstić, J. V. Knop, J. Koller and A. Ažman: „Ab Initio Study of Methyl Substituted Allyl Cations“. J. MOL. STRUCT. 33, 145–150 (1976).

120. J. V. Knop, M. Milun and N. Trinajstić: „On Aromatic Stability of Oxygen-, Imino-, and Sulphur-Bridged [18]Annulenes“. J. HETEROCYCL. CHEM. 13, 505–508 (1976).

121. I. Gutman and N. Trinajstić: „On the Extension of the Hückel Rule to Polycyclic Non-Alternant Conjugated Hydrocarbons“. CAN. J. CHEM. 54, 1789–1794 (1976).

122. I. Gutman and N. Trinajstić: „Simple Topological Formula for Dewar Resonance Energies of Benzenoid Molecules“. CROAT. CHEM. ACTA 48, 297–299 (1976).

123. A. Graovac, I. Gutman, M. Randić and N. Trinajstić: „On Structural Features Characterizing Conductivity in Polymeric Conjugated Hydrocarbons“. COLLOID POLYMER SCI. 255, 480–487 (1977).

124. I. Gutman, M. Milun and N. Trinajstić: „Graph Theory and Molecular Orbitals. XIX. Non-Parametric Resonance Energies of Arbitrary Conjugated Systems“. J. AMER. CHEM. SOC. 99, 1692–1704 (1977).

125. T. Živković, N. Trinajstić and M. Randić: „On Topological Spectar of Composite Molecular Systems“. CROAT. CHEM. ACTA 49, 89–100 (1977).

126. I. Gutman and N. Trinajstić: „Applications of the Cauchy Inequalities in Simple Molecular Orbital Theory“. J. CHEM. SOC. FARADAY TRANS. II, 435–437 (1977).

127. I. Gutman and N. Trinajstić: „Factors Contributing to the Stability of Conjugated Heterocycles Containing a Single Heteroatom". CHEM. PHYS. LETT. 46, 591–593 (1977).
128. N. Trinajstić: „New Developments in Hückel Theory". INT. J. QUANTUM CHEM. S 11, 469–477 (1977).
129. D. Bonchev and N. Trinajstić: „Information Theory, Distance Matrix, and Molecular Branching". J. CHEM. PHYS. 67, 4517–4533 (1977).
130. M. Milun and N. Trinajstić: „Resonance Energy as a Criterion for Reactivities of Conjugated Hydrocarbons". CROAT. CHEM. ACTA 49, 101–105 (1977).
131. M. Milun and N. Trinajstić: „On Aromatic Stability of Positional Isomers Consisting of Bicyclic Systems Composed Entirely of Five-Membered Heterocycles". CROAT. CHEM. ACTA 49, 107–113 (1977).
132. I. Gutman, M. Milun and N. Trinajstić: „Topological Resonance Energies of Annulenes". CROAT. CHEM ACTA 49, 441–452 (1977).
133. N. Trinajstić: „Computing the Characteristic Polynomial of a Conjugated System Using the Sachs Theorem". CROAT. CHEM. ACTA 49, 593–633 (1977).
134. A. Graovac, I. Gutman and N. Trinajstić: „Graph-Theoretical Study of Conjugated Hydrocarbons. Total π-Electron Energies and Their Differences". INT. J. QUANTUM CHEM. 12 (Suppl 1), 153–155 (1977).
135. J. V. Knop, N. Trinajstić, M. Milun and S. Pejaković: „Conformational Analysis and Electronic Structure of Thienylpyridines". REV. ROUM. CHIM. 23, 103–110 (1978).
136. I. Gutman, M. Randić and N. Trinajstić: „Kekulé Structures and Topology. III. On Inseparability of Kekulé Structures". REV. ROUM. CHIM. 23, 383–395 (1978).

137. A. Graovac, I. Gutman, M. Randić and N. Trinajstić: „Kekulé Index for Valence Bond Structures of Conjugated Systems Containing Cyclobutadiene“. COLL. CZECH. CHEM. COMM. 43, 1375–1392 (1978).

138. A. Sabljić and N. Trinajstić: „Theoretical Study of Azacyclazines“. J. MOL. STRUCT. 49, 415–420 (1978).

139. A. Sabljić and N. Trinajstić: „Theoretical Study of Triafulvene, Fulvene, Heptafulvene, and Their O- and N-Heteroanalogs“. CROAT. CHEM. ACTA 51, 249–257 (1978).

140. I. Gutman, S. Bosanac and N. Trinajstić: „Graph Theory and Molecular Orbitals. XX. Local and Long Range Contributions to Bond Order“. CROAT. CHEM. ACTA 51, 293–298 (1978).

141. D. Bonchev and N. Trinajstić: „On Topological Characterization of Molecular Branching“. NT. J. QUANTUM CHEM. S 12, 293–303 (1978).

142. P. Ilić, B. Jerman-Blažič-Džonova, B. Mohar and N. Trinajstić: „On Normalization of Topological Resonance Energy“. CROAT. CHEM. ACTA 52, 35–42 (1979).

143. D. Bonchev, Ov. Mekenyan, G. Protić and N. Trinajstić: „Application of Topological Indices to Gas Chromatographic Data: Calculation of the Retention Indices of Isomeric Alkylbenzenes“. J. CHROMATOGR. 176, 149–156 (1979).

144. M. Hannoun, N. Blažević, D. Kolbach, A. Sabljić, N. Trinajstić, A. Sega, A. Lisini, F. Kajfež and V. Šunjić: „Friedel-Crafts Acylation of 3-Carboxymethylbenzo[b]thiophenes : LIS-NMR and HMO Study of Regioselectivity“. J. HETEROCYCL. CHEM. 16, 1029–1034 (1979).

145. D. Bonchev, J. V. Knop and N. Trinajstić: „Mathematical Models of Branching“. MATH. CHEM. (Mülheim/Ruhr) 6, 21–47 (1979).

146. Ov. Mekenyan, D. Bonchev and N. Trinajstić: „Topological Rules for Spirocompounds“. MATH. CHEM. (Mülheim/Ruhr) 6, 93–115 (1979).

147. L. Klasinc, B. Ruščić, A. Sabljić and N. Trinajstić: „Application of Photoelectron Spectroscopy to Biologically Active Molecules and Their Constituent Parts. VI. Opiate Narcotics". J. AMER. CHEM. SOC. 101, 7477–7482 (1979).

148. L. J. Schaad, B. A. Hess, Jr., J. B. Nation, N. Trinajstić and I. Gutman: „On the Reference Structure for the Resonance Energy of Aromatic Hydrocarbons". CROAT. CHEM. ACTA 52, 233–248 (1979).

149. D. Bonchev, Ov. Mekenyan, J. V. Knop and N. Trinajstić: „On Characterization of Monocyclic Structures". CROAT. CHEM. ACTA 52, 361–367 (1979).

150. D. Bonchev, G. Lickomannov and N. Trinajstić: „Information Theory Analysis of the Nodal Properties of π-Molecular Orbitals". ACTA CHIM. ACAD. SCI. HUNGARICAE 102, 321–332 (1979).

151. B. M. Gimarc and N. Trinajstić: „Aromatic Inorganic Rings". PURE APPL. CHEM. 52, 1443–1458 (1980).

152. P. Ilić and N. Trinajstić: „Topological Resonance Energy Approach to Homoaromaticity". PURE APPL. CHEM. 52, 1495–1508 (1980).

153. P. Ilić and N. Trinajstić: „Topological Resonance Energies of Conjugated Ions, Radicals and Ion-Radicals". J. ORG. CHEM. 45, 1738–1748 (1980).

154. P. Ilić, B. Sinković and N. Trinajstić: „Topological Resonance Energies of Conjugated Structures". ISRAEL J. CHEM. 20, 258–269 (1980).

155. D. Bonchev, Ov. Mekenyan and N. Trinajstić: „Topological Characterization of Cyclic Structures". INT. J. QUANTUM CHEM. 17, 845–893 (1980).

156. K. Tabaković, I. Tabaković, M. Trkovnik, A. Jurić and N. Trinajstić: „Studies on Novel Heterocyclic Ring Systems. Reaction of 4-Hydroxylcoumarin with o-Aminobenzaldehyde and 2-Mercaptoaniline". J. HETEROCYCL. CHEM. 17, 801–803 (1980).

157. Ž. Jeričević, A. Sabljić and N. Trinajstić: „Spin Labels in Membranes: A Simple MO Study of Some Methyl Substituted Polyene Radicals". INT. J. BIOL. MACROMOL 2, 266–267 (1980).
158. A. Graovac, N. Trinajstić and M. Randić: „Graph-Theoretical Search for Benzenoid Polymers with Zero Energy Gap". CROAT. CHEM. ACTA 53, 571–579 (1980).
159. P. Ilić, A. Jurić and N. Trinajstić: „On Topological Resonance Energy of Coumarin and Its Derivatives". CROAT. CHEM. ACTA 53, 587–590 (1980).
160. P. Ilić and N. Trinajstić: „On the Topological Resonance Energy of Porphins and Related Structures". CROAT. CHEM. ACTA 53, 591–599 (1980).
161. O. Mekenyan, D. Bonchev and N. Trinajstić: „Chemical Graph Theory: Modeling of Thermodynamic Properties of Molecules". INT. J. QUANTUM CHEM. 18, 369–380 (1980).
162. J. V. Knop and N. Trinajstić: „Chemical Graph Theory. II. On the Graph Theoretical Polynomials of Conjugated Structures". INT. J. QUANTUM CHEM.; QUANTUM CHEM. SYMP. 14, 503–520 (1980).
163. L. Klasinc, N. Trinajstić and J. V. Knop: „Application of Photoelectron Spectroscopy to Biologically Active Molecules and Their Constituent Parts. VIII. Thalidomide". INT. J. QUANTUM CHEM.; QUANTUM BIOL. SYMP. 7, 403–409 (1980).
164. S. S. D'Amato, B. M. Gimarc and N. Trinajstić: „Isospectral and Subspectral Molecules". CROAT. CHEM. ACTA 54, 1–52 (1981).
165. A. Graovac, D. Kasum and N. Trinajstić: „On Acyclic Polynomials of [N]-Heteroannulenes". CROAT. CHEM. ACTA 54, 91–95 (1981).
166. V. Galasso, L. Klasinc, A. Sabljić, N. Trinajstić, G. C. Pappalardo and W. Steglich: „Conformation and Photoelectron Spectra of 2-(2-Furyl)pyrrole and 2-(2-Thienyl)pyrrole". J. CHEM. SOC. PERKIN TRANS. II, 127–131 (1981).

167. D. Bonchev, Ov. Mekenyan and N. Trinajstić: „Isomer Discrimination by Topological Information Approach". J. COMPUT. CHEM. 2, 127–148 (1981).

168. J. V. Knop, W. R. Müller, Ž. Jeričević and N. Trinajstić: „Computer Enumeration and Generation of Trees and Rooted Trees". J. CHEM. INF. COMPUT. SCI. 21, 91–99 (1981).

169. O. Mekenyan, D. Bonchev and N. Trinajstić: „Algebraic Characterization of Bridged Polycyclic Compounds". INT. J. QUANTUM CHEM. 19, 929–955 (1981).

170. A. Sabljić, N. Trinajstić and D. Maysinger: „Molecular Connectivity and Biological Activity in a Series of Isatin Derivatives". ACTA PHARM. JUGOSL. 31, 71–76 (1981).

171. Ov. Mekenyan, D. Bonchev and N. Trinajstić: „A Topological Characterization of Cyclic Structures with Acyclic Branches". MATH. CHEM. (Mülheim/Ruhr) 11, 145–168 (1981).

172. A. Sabljić and N. Trinajstić: „Aromatic Stability of Bridged Annulenes". J. ORG. CHEM. 46, 3457–3461 (1981).

173. M. Randić, B. Ruščić and N. Trinajstić: „Herndon's Structure Resonance Theory. On the Valence Structure Count for Conjugated Radical Cations". CROAT. CHEM. ACTA 54, 295–308 (1981).

174. T. Živković, N. Trinajstić and M. Randić: „On Additivity of Heats of Atomization of Benzenoid Hydrocarbons". CROAT. CHEM. ACTA 54, 309–320 (1981).

175. D. Kasum, N. Trinajstić and I. Gutman: „Chemical Graph Theory. III. On the Permanental Polynomial". CROAT. CHEM. ACTA 54, 321–328 (1981).

176. A. Sabljić and N. Trinajstić: „Quantitative Structure-Activity Relationships: The Role of Topological Indices". ACTA PHARM. JUGOSL. 31, 189–214 (1981).

177. B. Mohar and N. Trinajstić: „On Computation of the Topological Resonance Energy". J. COMPUT. CHEM. 3, 28–36 (1982).

178. B. M. Gimarc and N. Trinajstić: „Inorganic Aromatic Rings: The π-Electronic Structure of B6S16". INORG. CHEM. 21, 21–25 (1982).
179. P. Ilić, B. Mohar, J. V. Knop, A. Jurić and N. Trinajstić: „The Topology and the Aromaticity of Coumarins". J. HETEROCYCL. CHEM. 19, 625–631 (1982).
180. B. Džonova-Jerman-Blažič and N. Trinajstić: „Computer-Aided Enumeration and Generation of the Kekulé Structures in Conjugated Hydrocarbons". COMPUT. CHEM. 6, 121–132 (1982).
181. B. Džonova-Jerman-Blažič and N. Trinajstić: „Applications of Reduced Graph Model to the Enumeration of Kekulé structures and Conjugated Circuits of Benzenoid Hydrocarbons". CROAT. CHEM. ACTA 55, 347–369 (1982).
182. D. Bonchev and N. Trinajstić: „Chemical Information Theory: Structural Aspects". INT. J. QUANTUM CHEM.; QUANTUM CHEM. SYMP. 16, 463–480 (1982).
183. M. Randić and N. Trinajstić: „On Isomeric Variations in Decanes". MATH. CHEM. (Mülheim/Ruhr) 13, 271–290 (1982).
184. Ž. Trgovčević, D. Petranović, E. Salaj-Šmic, M. Petranović, N. Trinajstić and Ž. Jeričević: „DNA Replication Past Pyrimidine Dimers in the Absence of Repair". MUTATION RES. – DNA REPAIR REPORTS 112, 17–22 (1983).
185. N. Trinajstić, Ž. Jeričević, J. V. Knop, W. R. Müller and K. Szymanski: „Computer Generation of Isomeric Structures". PURE APPL. CHEM. 55, 379–390 (1983).
186. J. V. Knop, K. Szymanski, Ž. Jeričević and N. Trinajstić: „Computer Generation and Identification of Carcinogenic Bay Regions in Benzenoid Hydrocarbons". INT. J. QUANTUM CHEM. 23, 713–722 (1983).
187. L. Klasinc, B. Ruščić, A. Sabljić and N. Trinajstić: „Application of Photoelectron Spectroscopy to Biologically Active Molecules and Their Constituent Parts. IX. 1,4-Benzodiazepin-2-ones". INT. J. QUANTUM CHEM. 23, 1667–1676 (1983).

188. J. V. Knop, K. Szymanski, Ž. Jeričević and N. Trinajstić: „Computer Enumeration and Generation of Benzenoid Hydrocarbons and Identification of Bay Regions". J. COMPUT. CHEM. 4, 23–32 (1983).

189. J. Seibert and N. Trinajstić: „Chemical Graph Theory. IV. On the Cyclic Polynomial". INT. J. QUANTUM CHEM. 23, 1829–1841 (1983).

190. J. Debicki-Pospišil, T. Lovrić, N. Trinajstić, and A. Sabljić: „Anthocyanin Degradation in the Presence of Furfural and 5-Hydroxymethylfurfural". J. FOOD SCIENCE 48, 411–416 (1983).

191. P. Ilić and N. Trinajstić: „Structural Normalization of Topological Resonance Energy". CROAT. CHEM. ACTA 56, 203–213 (1983).

192. A. Jurić and N. Trinajstić: „Topological Resonance Energies of Thiocoumarins". CROAT. CHEM. ACTA 56, 215–219 (1983).

193. O. Mekenyan, D. Bonchev and N. Trinajstić: „Structural Complexity and Molecular Properties of Cyclic Systems with Acyclic Branches". CROAT. CHEM. ACTA 56, 237–261 (1983).

194. J. V. Knop, W. R. Müller, K. Szymanski, M. Randić and N. Trinajstić: „Note on Acyclic Structures and their Self-returning Walks". CROAT. CHEM. ACTA 56, 405–409 (1983).

195. J. V. Knop, D. Plavšić, M. Randić and N. Trinajstić: „Chemical Graph Theory. V. On the Classification of Topological Biradicals". CROAT. CHEM. ACTA 56, 411–441 (1983).

196. J. V. Knop, K. Szymanski, G. Jashari, and N. Trinajstić: „The Connection Between the Adjacency Matrix and the Boundary Code of Benzenoid Hydrocarbons". CROAT. CHEM. ACTA 56, 443–450 (1983).

197. P. Krivka and N. Trinajstić: „On the Distance Polynomial of a Graph". APPL. MATH. 28, 357–363 (1983).

198. A. H. Stollenwerk, B. Kanellakopulos, H. Vogler, A. Jurić and N. Trinajstić: „Magnetic Susceptibilities and Resonance Energies of Annelated [14]- and [18]annulenes". J. MOL. STRUCT. 102, 377–389 (1983).

199. K. Tabaković, I. Tabaković, M. Trkovnik and N. Trinajstić: „Chemistry of Coumarins. Nucleophilic Substitutions of 4-Chloro-3-nitrocoumarin with Hard and Soft Nucleophiles“. LIEBIGS ANN. CHEM. 1983, 1901–1909.

200. M. Barysz, N. Trinajstić and J. V. Knop: „On the Similarity of Chemical Structures“. INT. J. QUANTUM CHEM.: QUANTUM CHEM. SYMP. 17, 441–451 (1983).

201. J. V. Knop, K. Szymanski and N. Trinajstić: „Computers of Tomorrow“. INT. J. QUANTUM CHEM.: QUANTUM CHEM. SYMP. 17, 629–642 (1983).

202. A. Jurić, A. Sabljić and N. Trinajstić: „Aromaticity in Bridged Heteroannulenes“. J. HETEROCYCL. CHEM. 21, 273–282 (1984).

203. M. Randić and N. Trinajstić: „Conjugation and Aromaticity of Corannulenes“. J. AMER. CHEM. SOC. 106, 4428–4434 (1984).

204. S. El-Basil, P. Krivka and N. Trinajstić: „Application of the Dualist Model. Generation of Kekulé Structures and Resonant Sextets of Benzenoid Hydrocarbons“. CROAT. CHEM. ACTA 57, 339–353 (1984).

205. S. El-Basil and N. Trinajstić: „Application of the Reduced Graph Model to the Sextet Polynomial“. J. MOL. STRUCT. (THEOCHEM) 110, 1–14 (1984).

206. J. V. Knop, K. Szymanski and N. Trinajstić: „A Note on Trees with Polyhexagonal Supervertices“. MATH. CHEM. (Mülheim/Ruhr) 16, 103–118 (1984).

207. J. V. Knop, K. Szymanski, Ž. Jeričević and N. Trinajstić: „On the Total Number of Polyhexes“. MATH. CHEM. (Mülheim/Ruhr) 16, 119–134 (1984).

208. A. Velenik, T. Živković and N. Trinajstić: „On Bond Orders and Bond Energies in Conjugated Systems“. REV. ROUM. CHIM. 29, 737–740 (1984).

209. S. El-Basil, G. Jashari, J. V. Knop and N. Trinajstić: „Note on the Application of the Reduced Graph Model in Conjunction with

Search Trees to the Enumeration of Kekulé Structures". MONAT. CHEM. 115, 1299–1312 (1984).

210. Ž. Jeričević, N. Trinajstić, D. Petranović and Ž. Trgovčević: „Mathematical Modelling of DNA Replication in UV-Irradiated Bacteria". STUDIA BIOPHYSICA 102, 97–106 (1984).
211. J. V. Knop, K. Szymanski, L. Klasinc and N. Trinajstić: „Computer Enumeration of Substituted Polyhexes". COMPUT. CHEM. 8, 107–115 (1984).
212. J. V. Knop, K. Szymanski, N. Trinajstić and P. Krivka: „Computer Generation of All 1-factors for a Class of Graphs With All Vertices of Degree Two or Three". COMPUT. MATH. APPL. 10, 369–382 (1984).
213. D. J. Klein and N. Trinajstić: „Hückel Rules and Electron Correlation". J. AMER. CHEM. SOC. 106, 8050–8056 (1984).
214. J. V. Knop, K. Szymanski and N. Trinajstić: „Price-performance Relationship of Microcomputers and Main Frames for Calculations in Theoretical Chemistry". INT. J. QUANTUM CHEM.: QUANTUM CHEM. SYMP. 18, 639–645 (1984).
215. M. Barysz and N. Trinajstić: „A Novel Approach to the Characterization of Chemical Structures". INT. J. QUANTUM CHEM.: QUANTUM CHEM. SYMP. 18, 661–673 (1984).
216. M. Grzonka, J. V. Knop, L. Klasinc and N. Trinajstić: „Theoretical Studies on Small Ring Heteropropellanes. Oxapropellanes". CROAT. CHEM. ACTA 57, 1629–1632 (1984).
217. P. Křivka and N. Trinajstić: „Parity of Kekulé Structures Revisited". COLL. CZECH. CHEM. COMM. 50, 291–299 (1985).
218. M. Randić, N. Trinajstić, J. V. Knop and Ž. Jeričević: „Aromatic Stability of Heterocyclic Conjugated Systems". J. AMER. CHEM. SOC. 107, 849–859 (1985).
219. B. M. Gimarc, A. Jurić and N. Trinajstić: „Sulphur-Nitrogen Rings: Relative Stabilities and Structures". INORG. CHIM. ACTA 102, 105–112 (1985).

220. N. Adler, D. Babić and N. Trinajstić: „On the Calculation of the HPLC Parameters for Polycyclic Aromatic Hydrocarbons". FRESENIUS Z. ANAL. CHEM. 322, 426–429 (1985).
221. S. El-Basil, P. Křivka and N.Trinajstić: „Fibonacci Graphs Possessing Identical Matching Polynomials". J. MATH. PHYS. 26, 2396–2398 (1985).
222. I. Tabaković, K. Tabaković, R. Grujić, N. Trinajstić and Z. Meić: „Chemistry of Coumarins – Synthesis of Some 3,4-substituted Coumarins Using the HSAB Principle". HETEROCYCLES 23, 2539–2542 (1985).
223. K. Szymanski, W. R. Müller, J. V. Knop and N. Trinajstić: „On Randić's Molecular Identification Numbers". J. CHEM. INF. COMPUT. SCI. 25, 413–415 (1985).
224. M. Barysz, J. V. Knop, S. Pejaković and N. Trinajstić: „Characterization of Branching". POLISH J. CHEM. 59, 405–432 (1985).
225. B. Pavlović and N. Trinajstić: „On Symmetry and Asymmetry in Literature". COMPUT. MATH. APPLS. 12B, 197–227 (1986).
226. P. Ilić, B. Sinković and N. Trinajstić: „Molecular Topology in Excited States". J. MOL. STRUCT. (THEOCHEM) 136, 155–164 (1986).
227. B. Ruščić, P. Křivka and N. Trinajstić: „On the Generalized Approach to the Structure Count". THEORET. CHIM. ACTA 69, 107–117 (1986).
228. M. Barysz, D. Plavšić and N. Trinajstić: „A Note on Topological Indices". MATH. CHEM. (Mülheim/Ruhr) 19, 89–116 (1986).
229. M. Barysz, S. Nikolić and N. Trinajstić: „A Note on the Characteristic Polynomial". MATH. CHEM. (Mülheim/Ruhr) 19, 117–126 (1986).
230. O. Mekenyan, D. Peitchev, D. Bonchev, N. Trinajstić and I. Bangov: „Modelling the Interaction of Small Organic Molecules with Biomacromolecules. I. Interaction of Substituted Pyridines with Anti-3-azopyridine Antibody". DRUG RES. 36, 176–183 (1986).

231. O. Mekenyan, D. Bonchev, N. Trinajstić and D. Peitchev: „Modelling the Interaction of Small Organic Molecules with Biomacromolecules. II. A Generalized Concept for Biological Interactions". DRUG RES. 36, 421–424 (1986).
232. O. Mekenyan, D. Peitchev, D. Bonchev, N. Trinajstić and J. Dimitrova: „Modelling the Interaction of Small Organic Molecules with Biomacromolecules. III. Interaction of Benzoates with Anti-p-(p'-azophenylazo)-benzoate Antibody". DRUG RES. 36, 629–634 (1986).
233. P. Křivka, Ž. Jeričevič and N. Trinajstić: „On the computation of the Characteristic Polynomial of a Chemical Graph". INT. J. QUANTUM CHEM.: QUANTUM CHEM. SYMP. 19, 129–147 (1986).
234. M. Randić, B. M. Gimarc and N. Trinajstić: „On the Aromatic Stabilities of Polyacenes and Helicenes". CROAT. CHEM. ACTA 59, 345–358 (1986).
235. J. V. Knop, K. Szymanski, H. W. Kroto and N. Trinajstić: „Chemical Graph Theory. VII. Enumeration and Generation of the Non-ionic/Radical Members of Cyanopolyyne Family". CROAT. CHEM. ACTA 59, 359–367 (1986).
236. A. Jurić, N. Trinajstić and G. Jashari: „Aromatic Stability of Bridged Polyenes". CROAT. CHEM. ACTA 59, 717–633 (1986).
237. P. Křivka, S. Nikolić and N. Trinajstić: „Applications of the Reduced Graph Model. Enumeration of Kekulé Structures for Certain Classes of Large Benzenoid Hydrocarbons". CROAT. CHEM. ACTA 59, 659–668 (1986).
238. K. Szymanski. W. R. Müller, J. V. Knop and N. Trinajstić: „Molecular ID Numbers". CROAT. CHEM. ACTA 59, 719–724 (1986).
239. J. V. Knop, W. R. Müller, K. Szymanski and N. Trinajstić: „On the Enumeration of 2-factors of Polyhexes". J. COMPUT. CHEM. 7, 547–564 (1986).
240. N. Trinajstić, M. Randić and D. J. Klein: „On the Quantitative Structure-Activity Relationships in Drug Research". ACTA PHARM. JUGOSL. 36, 267–279 (1986).

241. J. V. Knop, W. R. Müller, K. Szymanski, N. Trinajstić, A. Kleiner and M. Randić: „On Irreducible Endospectral Graphs". J. MATH. PHYS. 27, 2601–2612 (1986).
242. M. Randić and N. Trinajstić: „On the Relative Stabilities of Conjugated Heterocycles Containing Divalent Sulfur". SULFUR REPORTS 6, 379–430 (1986).
243. J. V. Knop, W. R. Müller, K. Szymanski and N. Trinajstić: „A Note on the Number of Circulenes". MATH. CHEM. (Mülheim/Ruhr) 20, 197–208 (1986).
244. K. Szymanski, W. R. Müller, J. V. Knop and N. Trinajstić: „On the Identification Numbers for Chemical Structures". INT. J. QUANTUM CHEM.: QUANTUM CHEM. SYMP. 20, 173–183 (1986).
245. N. Trinajstić, D. J. Klein and M. Randić: „On Some Solved and Unsolved Problems of Chemical Graph Theory". INT. J. QUANTUM CHEM.: QUANTUM CHEM. SYMP. 20, 699–742 (1986).
246. J. August, H. W. Kroto, and N. Trinajstić: „Interstellar Polyynes and Related Species". ASTROPHYS. SPACE SCI. 128, 411–419 (1986).
247. W. R. Müller, K. Szymanski, J. V. Knop and N. Trinajstić: „An Algorithm for Construction of the Molecular Distance Matrix". J. COMPUT. CHEM. 8, 170–173 (1987).
248. O. Mekenyan, D. Bonchev, A. Sabljić and N. Trinajstić: „Application of Topological Indices to QSAR. The Use of the Balaban Index and the Electropy Index for Correlations with Toxicity of Ethers on Mice". ACTA PHARM. JUGOSL. 37, 75–86 (1987).
249. M. Randić, S. Nikolić and N. Trinajstić: „On the Benzenoid Character of Polycyclic Conjugated Hydrocarbons". GAZZ. CHIM. ITAL. 117, 69–73 (1987).
250. M. Randić, H. Hosoya, N. Ohkami and N. Trinajstić: „The Generalized Wheland Polynomial". J. MATH. CHEM. 1, 97–122 (1987).

251. S. Carter, N. Trinajstić and S. Nikolić: „A Note on the Use of ID Numbers in QSAR Studies". ACTA PHARM. JUGOSL. 37, 37–42 (1987).

252. T. P. Živković and N. Trinajstić: „On the Number of Kekulé Structures of Unbranched Cata-condensed Benzenoid Chains". CHEM. PHYS. LETT. 136, 141–144 (1987).

253. J. V. Knop, K. Szymanski, W. R. Müller, H. W. Kroto and N. Trinajstić: „Computer Enumeration and Generation of Physical Trees". J. COMPUT. CHEM. 8, 549–554 (1987).

254. M. Randić, V. Solomon, S. C. Grossman, D. J. Klein and N. Trinajstić: „Resonance Energies of Large Conjugated Hydrocarbons by a Statistical Method". INT. J. QUANTUM CHEM. 32, 35–59 (1987).

255. S. Nikolić, A. Jurić and N. Trinajstić: „On the Aromatic Stability of Azulenofurans, Azulenopyrroles and Azulenothiophenes". HETEROCYCLES 26, 2025–2036 (1987).

256. A. T. Balaban, J. Brunvoll, J. Cioslowski, B. N. Cyvin, S. J. Cyvin, I. Gutman, W. C. He, W. J. He, J. V. Knop, M. Kovačević, W. R. Müller, K. Szymanski, R. Tošić and N. Trinajstić: „Enumeration of Benzenoid and Coronoid Hydrocarbons". Z. NATURFORSCH. 42a, 863–870 (1987).

257. Ž. Saničanin, A. Jurić, I. Tabaković and N. Trinajstić: „Synthesis and Electrochemical Study of Benzothiazine and Phenothiazine Derivatives". J. ORG. CHEM. 52, 4053–4057 (1987).

258. D. J. Klein, T. Živković and N. Trinajstić: „Resonance in Random p-Electron Polymers". J. MATH. CHEM. 1, 309–334 (1987).

259. M. Randić and N. Trinajstić: „Critical Test for Resonance Energies". J. AMER. CHEM. SOC. 109, 6923–6926 (1987).

260. B. Bogdanov, S. Nikolić, A. Sabljić, N. Trinajstić and S. Carter: „On the Use of the Weighted Identification Numbers in the QSAR Study of the Toxicity of Aliphatic Ethers". INT. J. QUANTUM CHEM.: QUANTUM BIOL. SYMP. 14, 325–330 (1987).

261. M. Randić, S. Nikolić and N. Trinajstić: „On the Aromatic Stability of a Conjugated C60 Cluster". CROAT. CHEM. ACTA 60, 595–604 (1987).
262. M. Randić and N. Trinajstić: „Composition as a Method for Data Reduction: Application to Carbon-13 NMR Chemical Shifts". THEORET. CHIM. ACTA 73, 233–246 (1988).
263. H. Vogler and N. Trinajstić: „Phenanth- and Anth-Fused Benzannelated Annulenes: A Graph-Theoretical Study". J. MOL. STRUCT. (THEOCHEM) 164, 325–334 (1988).
264. P. Křivka, R. B. Mallion and N. Trinajstić: „Chemical Graph Theory. Part VII. The Use of Ulam Subgraphs in Obtaining Characteristic Polynomials". J. MOL. STRUCT. (THEOCHEM) 164, 363–377 (1988).
265. S. Carter, N. Trinajstić and S. Nikolić: „On the Use of ID Numbers in Drug Research: A QSAR of Neuroleptic Pharmacophores". MED. SCI. RES. 16, 185–186 (1988).
266. H. Vogler and N. Trinajstić: „The Conjugated Circuits Model: On the Geometries of Annelated[N]annulenes". THEORET. CHIM. ACTA 73, 437–448 (1988).
267. M. Randić, S. Nikolić and N. Trinajstić: „Compact Molecular Codes for Polycyclic Systems". J. MOL. STRUCT. (THEOCHEM) 165, 213–228 (1988).
268. M. Randić, D. Plavšić and N. Trinajstić: „Characterization of Local Benzenoid Features in Polycyclic Conjugated Hydrocarbons". GAZZ. CHIM. ITAL. 118, 441–446 (1988).
269. M. Randić, Ž. Jeričević, A. Sabljić and N. Trinajstić: „On the Molecular Connectivity and π-Electronic Energy in Polycyclic Hydrocarbons". ACTA PHYS. POLON. 74, 317–330 (1988).
270. N. Trinajstić: „The Characteristic Polynomial of a Chemical Graph". J. MATH. CHEM. 2, 197–215 (1988).
271. M. Randić, S. Nikolić and N. Trinajstić: „Aromaticity in Heterocyclic Molecules Containing Divalent Sulfur". COLL. CZECH. CHEM. COMM. 53, 2023–2054 (1988).

272. D. J. Klein, T. G. Schmalz, S. El-Basil, M. Randić and N. Trinajstić: „Kekulé Count and Algebraic Structure Count for Unbranched Alternant Cata-Fusenes". J. MOL. STRUCT. (THEOCHEM) 179, 99–107 (1988).

273. M. Randić, B. M. Gimarc, S. Nikolić and N. Trinajstić: „On the Aromatic Stabilities of Thiophene Analogues of Helicenes". J. MOL. STRUCT. (THEOCHEM) 181, 111–140 (1988).

274. M. Randić, A. Sabljić, S. Nikolić and N. Trinajstić: „A Rational Selection of Graph-Theoretical Indices in the QSAR". INT. J. QUANTUM CHEM.: QUANTUM BIOL. SYMP. 15, 267–285 (1988).

275. M. Randić, L. L. Henderson, R. Stout and N. Trinajstić: „Conjugation and Aromaticity of Macrocyclic Systems". INT. J. QUANTUM CHEM.: QUANTUM CHEM. SYMP. 22, 127–141 (1988).

276. M. Randić, S. Nikolić and N. Trinajstić: „Enumeration of Kekulé Structures for Helicenic Systems". CROAT. CHEM. ACTA 61, 821–831 (1988).

277. M. Randić, B. M. Gimarc, S. Nikolić and N. Trinajstić: „On the Aromatic Stability of Helicenic Systems". GAZZ. CHIM. ITAL. 119, 1–11 (1989).

278. M. Randić, D. Plavšić and N. Trinajstić: „Conjugated Circuits in Excited Valence Structures". J. MOL. STRUCT. (THEOCHEM) 183, 29–43 (1989).

279. M. Randić, M. Barysz, J. Nowakowski, S. Nikolić and N. Trinajstić: „Isospectral Graphs Revisited". J. MOL. STRUCT. (THEOCHEM) 185, 95–121 (1989).

280. M. Randić, D. Plavšić and N. Trinajstić: „Aromaticity in Polycyclic Conjugated Hydrocarbon Dianions". J. MOL. STRUCT. (THEOCHEM) 185, 249–274 (1989).

281. S. Nikolić, M. Randić, D. J. Klein, D. Plavšić and N. Trinajstić: „The Conjugated-Circuit Model: Application to Benzenoid Hydrocarbons". J. MOL. STRUCT. (THEOCHEM) 198, 223–237 (1989).

282. W. R. Müller, K. Szymanski, J. V. Knop, S. Nikolić and N. Trinajstić: „On Counting Polyhex Hydrocarbons“. CROAT. CHEM. ACTA 62, 481–483 (1989).

283. N. Trinajstić, D. Plavšić and D. J. Klein: „The Conjugated-Circuit Model Revisited“. CROAT. CHEM. ACTA 62, 709–716 (1989).

284. D. Plavšić, N. Trinajstić, M. Randić and C. Venier: „The Conjugated-Circuit Model: Application to Benzenoid Hydrocarbon Radicals“. CROAT. CHEM. ACTA 62, 717–738 (1989).

285. D. J. Klein and N. Trinajstić: „Foundations of Conjugated-Circuits Models“. PURE APPL. CHEM. 61, 2107–2115 (1989).

286. B. Bogdanov, S. Nikolić and N. Trinajstić: „On the Three-dimensional Wiener Number“. J. MATH. CHEM. 3, 299–309 (1989).

287. S. Carter, S. Nikolić and N. Trinajstić: „A Novel Algorithm for QSAR“. INT. J. QUANTUM CHEM.: QUANTUM BIOL. SYMP. 16, 323–330 (1989).

288. D. Amić, A. Jurić and N. Trinajstić: „Topological Resonance Energies of Some Forms of the Flavylium Chromophoric System“. CROAT. CHEM. ACTA 63, 19–26 (1990).

289. J. V. Knop, W. R. Müller, K. Szymanski and N. Trinajstić: „A Note on the Classification and Enumeration of Coronoid Hydrocarbons“. J. MOL. STRUCT. (THEOCHEM) 205, 361–365 (1990).

290. W. R. Müller, K. Szymanski, J. V. Knop, S. Nikolić and N. Trinajstić: „On the Enumeration and Generation of Polyhex Hydrocarbons“. J. COMPUT. CHEM. 11, 223–235 (1990).

291. D. J. Klein and N. Trinajstić: „Pascal Recurrence Algorithm for Kekulé-Structure Counts of Benzenoid and Coronoid Hydrocarbons“. J. MOL. STRUCT. (THEOCHEM) 206, 135–142 (1990).

292. N. Trinajstić: „On the Classification of Polyhex Hydrocarbons“. J. MATH. CHEM. 5, 171–176 (1990).

293. J. Brunvoll, B. N. Cyvin, S. J. Cyvin, J. V. Knop, W. R. Müller, K. Szymanski and N. Trinajstić: „Enumeration and Classification of

Coronoid Hydrocarbons: Note to a Note". J. MOL. STRUCT. (THEOCHEM) 207, 131–139 (1990).

294. S. Nikolić and N. Trinajstić: „Compact Molecular Codes for Annulenes, Aza-annulenes, Annulenoannulenes, Aza-annulenoannulenes, Cyclazines and Aza-cyclazines". CROAT. CHEM. ACTA 63, 155–169 (1990).
295. M. Randić, D. Plavšić and N. Trinajstić: „On the Difference in Bond Orders Between HMO and PPP Methods". INT. J. QUANTUM CHEM. 37, 437–448 (1990).
296. J. V. Knop, W. R. Müller, K. Szymanski and N. Trinajstić: „Use of Small Computers for Large Computations: Enumeration of Polyhex Hydrocarbons". J. CHEM. INF. COMPUT. SCI. 30, 159–160 (1990).
297. W. R. Müller, K. Szymanski, J. V. Knop and N. Trinajstić: „Molecular Topological Index". J. CHEM. INF. COMPUT. SCI. 30, 160–163 (1990).
298. M. Randić, B. Jerman-Blažič and N. Trinajstić: „Development of 3-Dimensional Molecular Descriptors". COMPUT. CHEM. 14, 237–246 (1990).
299. S. Nikolić, N. Trinajstić, J. V. Knop, W. R. Müller and K. Szymanski: „On the Concept of the Weighted Spanning Tree of Dualist". J. MATH. CHEM. 4, 357–375 (1990).
300. B. Bogdanov, S. Nikolić and N. Trinajstić: „On the Three-Dimensional Wiener Number. A Comment". J. MATH. CHEM. 5, 305–306 (1990).
301. D. Amić and N. Trinajstić: „On the Lack of Reactivity of Buckminsterfullerene. A Theoretical Study". J. CHEM. SOC. PERKIN TRANS. II, 1595–1598 (1990).
302. S. Nikolić, N. Trinajstić and D. J. Klein: „The Conjugated-Circuit Model". COMPUT. CHEM. 14, 313–322 (1990).
303. D. J. Klein and N. Trinajstić: „Valence Bond Theory and Chemical Structure". J. CHEM. EDUC. 67, 633–637 (1990).

304. S. Nikolić and N. Trinajstić: „A Theoretical Study of Fully Arenoid Systems". GAZZ. CHIM. ACTA 120, 685–689 (1990).
305. D. Plavšić, S. Nikolić and N. Trinajstić: „The Conjugated-Circuits Model: On the Selection of the Parameters". CROAT. CHEM. ACTA 63, 683–692 (1990).
306. J. V. Knop, W. R. Müller, K. Szymanski and N. Trinajstić: „Enumeration of Planar Polyhex Hydrocarbons". REPORTS IN MOLECULAR THEORY 1, 95–98 (1990).
307. N. Trinajstić: „The Role of Graph Theory in Chemistry". REPORTS IN MOLECULAR THEORY 1, 185–213 (1990).
308. N. Trinajstić, S. Nikolić and S. Carter: „Mathematical Modelling of Structure-Activity Relationships". PERIOD. BIOL. 92, 431–432 (1990).
309. N. Trinajstić, T. G. Schmalz, T. P. Živković, S. Nikolić, G. E. Hite, D. J. Klein and W. A. Seitz: „[N]phenylenes: A Theoretical Study". NEW J. CHEM. 15, 27–31 (1991).
310. N. Bošnjak, Z. Mihalić and N. Trinajstić: „Application of Topographic Indices to Chromatographic Data: Calculation of the Retention Indices of Alkanes". J. CHROMATOGR. 540, 430–440 (1991).
311. J. V. Knop, W. R. Müller, K. Szymanski and N. Trinajstić: „On the Determinant of the Adjacency-Plus-Distance Matrix as the Topological Index for Characterizing Alkanes". J. CHEM. INF. COMPUT. SCI. 31, 83–84 (1991).
312. B. Jerman-Blažič, S. Nikolić and N. Trinajstić: „The Reduced Graph Model Revisited". J. MOL. STRUCT. (THEOCHEM) 227, 79–86 (1991).
313. S. Nikolić, N. Trinajstić, Z. Mihalić and S. Carter: „On the Geometric-Distance Matrix and the Corresponding Structural Invariants of Molecular Systems". CHEM. PHYS. LETT. 179, 21–28 (1991).
314. N. Trinajstić, S. Nikolić and D. J. Klein: „Quantum-Mechanical and Computational Aspects of the Conjugated-Circuit Model". J. MOL. STRUCT. (THEOCHEM) 229, 63–89 (1991).

315. D. Amić and N. Trinajstić: „A Theoretical Study of Flavylium Salts". J. CHEM. SOC. PERKIN TRANS. II, 891–895 (1991).
316. D. Amić and N. Trinajstić: „Activation Hardness as an Index for Predicting the Orientation of Nucleophilic Aromatic Substitution: Application to Flavylium Salts". BULL. CHEM. SOC. BELG. (European Section) 100, 527–532 (1991).
317. S. Nikolić, N. Trinajstić, J. V. Knop, W. R. Müller and K. Szymanski: „On the Classification and Enumeration of Planar Polyhex Hydrocarbons". J. MOL. STRUCT. (THEOCHEM) 231, 219–225 (1991).
318. Z. Mihalić and N. Trinajstić: „The Algebraic Modelling of Chemical Structures: On the Development of Three-Dimensional Molecular Descriptors". J. MOL. STRUCT. (THEOCHEM) 232, 65–78 (1991).
319. D. Plavšić, S. Nikolić and N. Trinajstić: „The Conjugated-Circuit Model: The Optimum Parameters for Benzenoid Hydrocarbons". J. MATH. CHEM. 8, 113–120 (1991).
320. M. Randić, D. Plavšić and N. Trinajstić: „On the Relative Stability of Nonbenzenoid Alternant Hydrocarbons". POLYCYCLIC AROMATIC COMPOUNDS 2, 183–194 (1991).
321. M. Randić, D. Plavšić and N. Trinajstić: „Maximum Valence Structures in Nonbenzenoid Polycyclic Hydrocarbons". STRUCT. CHEM. 2, 543–554 (1991).
322. M. Ivanušević, S. Nikolić and N. Trinajstić: „A QSAR Study of Antidotal Activity of H-Oximes". REV. ROUM. CHIM. 36, 389–398 (1991).
323. Z. Mihalić, S. Nikolić and N. Trinajstić: „Comparative Study of Molecular Descriptors Derived from the Distance Matrix". J. CHEM. INF. COMPUT. SCI. 32, 28–37 (1992).
324. N. Trinajstić: „On the Classification of Polyhexes". J. MATH. CHEM. 9, 373–380 (1992).

325. S. Nikolić, D. Plavšić and N. Trinajstić: „On the Z-counting Polynomial for Edge-Weighted Graphs". J. MATH. CHEM. 9, 381–387 (1992).

326. D. J. Klein, Z. Mihalić, D. Plavšić and N. Trinajstić: „Molecular Topological Index: A Relation with the Wiener Index". J. CHEM. INF. COMPUT. SCI. 32, 304–305 (1992).

327. D. Plavšić, N. Trinajstić and D. J. Klein: „Clar Structures in Fractal Benzenoids". CROAT. CHEM. ACTA 65, 279–284 (1992).

328. A. Jurić, M. Gagro, S. Nikolić and N. Trinajstić: „Molecular Topological Index: An Application in the QSAR Study of Toxicity of Alcohols". J. MATH. CHEM. 11, 179–186 (1992).

329. Z. Mihalić, D. Veljan, D. Amić, S. Nikolić, D. Plavšić and N. Trinajstić: „The Distance Matrix in Chemistry". J. MATH. CHEM. 11, 223–258 (1992).

330. D. Amić, N. Trinajstić and D. Davidović-Amić: „Experimental and Theoretical Study of the Styrylbenzopyrilium Chromophore". J. CHEM. SOC. PERKIN TRANS. II, 1933–1938 (1992).

331. Z. Mihalić and N. Trinajstić: „A Graph-Theoretical Approach to Structure-Property Relationships". J. CHEM. EDUC. 69, 701–712 (1992).

332. D. Horvat, A. Graovac, D. Plavšić, N. Trinajstić and M. Strunje: „On the Intercorrelation of Topological Indices in Benzenoid Hydrocarbons". INT. J. QUANTUM CHEM.: QUANTUM CHEM. SYMP. 26, 401–408 (1992).

333. D. Plavšić, S. Nikolić and N. Trinajstić: „The Conjugated-Circuit Model: Application to Non-alternant Hydrocarbons and a Comparison With Some Other Theoretical Models of Aromaticity". J. MOL. STRUCT. (THEOCHEM) 277, 213–237 (1992).

334. D. Babić and N. Trinajstić: „Resonance Energy of Conjugated Hydrocarbons Derived by Cluster Expansion". CROAT. CHEM. ACTA 65, 881–892 (1992).

335. B. Mohar, D. Babić and N. Trinajstić: „A Novel Definition of the Wiener Index for Trees". J. CHEM. INF. COMPUT. SCI. 33, 153–154 (1993).
336. D. Juretić, B. Lee, N. Trinajstić and R. W. Williams: „Conformational Preference Functions for Predicting Helices in Membrane Proteins". BIOPOLYMERS 33, 255–273 (1993).
337. W. R. Müller, K. Szymanski, J. V. Knop, Z. Mihalić and N. Trinajstić: „The Walk ID Number Revisited". J. CHEM. INF. COMPUT. SCI. 33, 231–233 (1993).
338. D. Plavšić, S. Nikolić, N. Trinajstić and Z. Mihalić: „On the Harary Index for the Characterization of Chemical Graphs". J. MATH. CHEM. 12, 235–250 (1993).
339. S. Nikolić, N. Trinajstić and Z. Mihalić: „Molecular Topological Index: An Extension to Heterosystems". J. MATH. CHEM. 12, 251–264 (1993).
340. D. Plavšić, D. Babić, S. Nikolić and N. Trinajstić: „A Comparative Study of Several Simple Aromaticity Models for Benzenoid Hydrocarbons". GAZZ. CHIM. ITAL. 123, 243–249 (1993).
341. D. Juretić, N. Trinajstić and B. Lučić: „Protein Secondary Structure Conformations and Associated Hydrophobic Scales". J. MATH. CHEM. 14, 35–45 (1993).
342. D. Babić, A. Graovac and N. Trinajstić: „On the HOMO-LUMO Separation in Fullerenes". CROAT. CHEM. ACTA 66, 35–47 (1993).
343. D. Juretić, B. Lučić and N. Trinajstić: „Predicting Membrane Protein Secondary Structure: Preference Functions Method for Finding Optimal Conformational Parameters". CROAT. CHEM. ACTA 66, 201–208 (1993).
344. N. Trinajstić: „The Magic of the Number Five". CROAT. CHEM. ACTA 66, 227–254 (1993).
345. W. R. Müller, K. Szymanski, J. V. Knop and N. Trinajstić: „On the Number of Square-Cell Configurations". THEORET. CHIM. ACTA 86, 269–278 (1993).

346. M. Randić and N. Trinajstić: „Viewpoint 4 – Comparative Structure-Property Studies: The Connectivity Basis“. J. MOL. STRUCT. (THEOCHEM) 284, 209–221 (1993).
347. J. V. Knop, W. R. Müller, K. Szymanski, S. Nikolić and N. Trinajstić: „On the Concept of Fully-Arenoid Hydrocarbons“. MATH. CHEM. (Mülheim/Ruhr) 29, 81–106 (1993).
348. D. Babić and N. Trinajstić: „Pyracylene Rearrangement Classes of Fullerene Isomers“. COMPUT. CHEM. 17, 271–275 (1993).
349. M. Randić, N. Trinajstić, L. L. Henderson and R. P. Stout: „A Note on the Enumeration of Kekulé Structures in a Class of Coronoids“. J. MOL. STRUCT. (THEOCHEM) 285, 121–128 (1993).
350. D. Plavšić, S. Nikolić, N. Trinajstić and D. J. Klein: „Relation between the Wiener Index and the Schultz Index for Several Classes of Chemical Graphs“. CROAT. CHEM. ACTA 66, 345–353 (1993).
351. D. Amić, D. Davidović-Amić and N. Trinajstić: „Application of Topological Indices to Chromatographic Data : Calculation of the Retention Indices of Anthocyanins“. J. CHROMATOGR. A 653, 115–121 (1993).
352. M. Randić and N. Trinajstić: „In Search for Graph Invariants of Chemical Interest“. J. MOL. STRUCT. (THEOCHEM) 300, 551–572 (1993).
353. M. Randić, Z. Mihalić, S. Nikolić and N. Trinajstić: „Graph-Theoretical Correlations – Artfacts or Facts“. CROAT. CHEM. ACTA 66, 411–434 (1993).
354. D. Babić and N. Trinajstić: „On the K(4n + 2) Rule for Fullerenes“. J. MOL. STRUCT. (THEOCHEM) 303, 283–286 (1994).
355. N. Trinajstić, D. Babić, S. Nikolić, D. Plavšić, D. Amić and Z. Mihalić: „The Laplacian Matrix in Chemistry“. J. CHEM. INF. COMPUT. SCI. 34, 368–376 (1994).
356. M. Randić, Z. Mihalić, S. Nikolić and N. Trinajstić: „Graphical Bond Orders: Novel Structural Descriptors“. J. CHEM. INF. COMPUT. SCI. 34, 403–409 (1994).

357. Z. Mihalić and N. Trinajstić: „On the Number of Spanning Trees in Fullerenes". FULLERENE SCIENCE & TECHNOLOGY 2, 89–95 (1994).
358. M. Randić and N. Trinajstić: „Isomeric Variations in Alkanes: Boiling Points of Nonanes". NEW J. CHEM. 18, 179–189 (1994). INT. J. QUANTUM CHEM. 50, 369–384 (1994).
359. D. J. Klein, M. Randić, D. Babić and N. Trinajstić: „On Conjugated-Circuit Polynomials". INT. J. QUANTUM CHEM. 50, 369–384 (1994).
360. D. Amić, D. Davidović-Amić and N. Trinajstić: „Theoretical Study of the 5,6-Benzoflavylium Chromophore". GAZZ. CHIM. ITAL. 124, 53–56 (1994).
361. W. R. Müller, K. Szymanski, J. V. Knop and N. Trinajstić: „Bit-tuple Notation for Trees". J. CHEM. INF. COMPUT. SCI. 34, 960–961 (1994).
362. Z. Mihalić, D. Babić and N. Trinajstić: „Benzenoid Graphs with Equal Maximum Eigenvalues". J. MATH. CHEM. 15, 407 (1994).
363. M. Randić and N. Trinajstić: „Notes on Some Less Known Early Contributions to Chemical Graph Theory". CROAT. CHEM. ACTA 67, 1–35 (1994).
364. D. Babić, N. Trinajstić and D. J. Klein: „A Note on a Variant of the Leapfrog Transformation of Chemical Graphs". CROAT. CHEM. ACTA 67, 37–44 (1994).
365. D. Davidović-Amić, D. Amić and N. Trinajstić: „4-Carboxyflavylium Salts: Stable Red Dyes?". CROAT. CHEM. ACTA 67, 163–170 (1994).
366. M. Randić, D. J. Klein, H. Zhu, N. Trinajstić and T. Živković: „Aromatic Properties of Fully-Benzenoid Hydrocarbons". FIZIKA A 3, 61–75 (1994).
367. D. Babić and N. Trinajstić: „On Assembling Fullerenes from Identical Fragments". FULLERENE SCIENCE & TECHNOLOGY 2, 343–356 (1994).

368. D. Babić and N. Trinajstić: „Kekulene and Antikekulene". J. MOL. STRUCT. (THEOCHEM) 314, 321–327 (1994).

369. N. Trinajstić, Z. Mihalić and F. E. Harris: „A Note on the Number of Spanning Trees in Buckminsterfullerene". INT. J. QUANTUM CHEM.: QUANTUM CHEM. SYMP. 28, 525–528 (1994).

370. S. Nikolić, M. Medić-Šarić, S. Rendić and N. Trinajstić: „Toxic Effects and a Structure-Property Study of Organic Explosives, Propellants and Related Compounds". DRUG METABOLISM REV. 26, 717–738 (1994).

371. N. Trinajstić, S. Nikolić and Z. Mihalić: „On the Complexity of Platonic Solids". BULLETIN OF THE CHEMISTS TECHNOLOGISTS OF MACEDONIA 13, 61–68 (1994).

372. M. Randić, D. J. Klein, H.-Y. Zhu, N. Trinajstić and T. Živković: „Comparative Study of Large Molecules. Highly Accurate Calculation of a Limit for Infinite Systems from Data on Finite Systems". THEORET. CHIM. ACTA 90, 1–26 (1995).

373. D. Amić, D. Davidović-Amić and N. Trinajstić: „Calculation of Retention Times of Anthocyanins with Orthogonalized Topological Indices". J. CHEM. INF. COMPUT. SCI. 35, 136–139 (1995).

374. W. R. Müller, K. Szymanski, J. V. Knop and N. Trinajstić: „A Comparison between the Matula Numbers and Bit-tuple Notation for Rooted Trees". J. CHEM. INF. COMPUT. SCI. 35, 211–213 (1995).

375. T. Živković, M. Randić, D. J. Klein, H.-Y. Zhu and N. Trinajstić: „Analytical Approach to Very Large Benzenoid Polymers". J. COMPUT. CHEM. 16, 517–526 (1995).

376. D. Amić and N. Trinajstić: „On the Detour Matrix". CROAT. CHEM. ACTA 68, 53–62 (1995).

377. N. Trinajstić, W. R. Müller, K. Szymanski and J. V. Knop: „On the Complexity of Square-Cell Configurations". CROAT. CHEM. ACTA 68, 91–98 (1995).

378. S. Nikolić, N. Trinajstić and Z. Mihalić: „The Wiener Index: Development and Applications". CROAT. CHEM. ACTA 68, 105–129 (1995).

379. N. Trinajstić, M. Randić, D. J. Klein, D. Babić and Z. Mihalić: „On Mathematical Properties of Buckminsterfullerene". CROAT. CHEM. ACTA 68, 241–267 (1995).

380. D. Babić and N. Trinajstić: „Stability of Fullerenes with Four-Membered Rings". CHEM. PHYS. LETT. 237, 239–245 (1995).

381. H. Vančik, D. Babić and N. Trinajstić: „C60 – An Abiotic Terpenoid?". FULLERENE SCIENCE & TECHNOLOGY 3, 305–312 (1995).

382. M. Randić, S. Nikolić and N. Trinajstić: „Compact Codes: On Nomenclature of Acyclic Chemical Compounds". J. CHEM. INF. COMPUT. SCI. 35, 357–365 (1995).

383. B. Lučić, S. Nikolić, N. Trinajstić and D. Juretić: „The Structure-Property Models Can Be Improved Using the Orthogonalized Descriptors". J. CHEM. INF. COMPUT. SCI. 35, 532–538 (1995).

384. D. Babić and N. Trinajstić: „Resonance Energies of Fullerenes with 4-Membered Rings". INT. J. QUANTUM CHEM. 55, 309–314 (1995).

385. W. R. Müller, K. Szymanski, J. V. Knop and N. Trinajstić: „A Remark on the Naming of Cata-Condensed Benzenoids with Base 5 Numbers". J. CHEM. INF. COMPUT. SCI. 35, 759–760 (1995).

386. B. Lučić, S. Nikolić, N. Trinajstić, A. Jurić and Z. Mihalić: „A Structure-Property Study of the Solubility of Aliphatic Alcohols in Water". CROAT. CHEM. ACTA 68, 417–434 (1995).

387. B. Lučić, S. Nikolić, N. Trinajstić, D. Juretić and A. Jurić: „A Novel QSPR Approach to Physicochemical Properties of the α-Amino Acids". CROAT. CHEM. ACTA 68, 435–450 (1995).

388. N. Trinajstić: „On Theoretical Research in Biology". PERIOD. BIOL. 97, 177–182 (1995).

389. N. Trinajstić: „Ethics in Genetics. A Comment". PERIOD. BIOL. 97, 249–250 (1995).

390. D. Juretić, B. Lučić and N. Trinajstić: „Secondary Structure Prediction Quality for Naturally Occurring Amino Acids in Soluble Proteins". J. MOL. STRUCT. (THEOCHEM) 338, 43–50 (1995).

391. D. J. Klein, A. Graovac, Z. Mihalić and N. Trinajstić: „Excitation Spectra for Degenerate Rearrangements". J. MOL. STRUCT. (THEOCHEM) 341, 157–164 (1995).

392. D. Amić, D. Davidović-Amić, A. Jurić, B. Lučić and N. Trinajstić: „Structure-Activity Correlation of Flavone Derivatives for Inhibition of cAMP Phosphodiesterase". J. CHEM. INF. COMPUT. SCI. 35, 1034–1038 (1995).

393. M. Šoškić, D. Plavšić and N. Trinajstić: „2-Difluoromethylthio-4,6-bis(monoalkylamino)-1,3,5-triazines as Inhibitors of Hill Reaction:A QSAR Study with Orthogonalized Descriptors". J. CHEM. INF. COMPUT. SCI. 36, 146–150 (1996).

394. D. Babić and N. Trinajstić: „On the Assembling of Fullerenes from Cyclocarbons". J. MOL. STRUCT. 376, 507–511 (1996).

395. D. Babić and N. Trinajstić: „Symmetric Decomposition of Buckminsterfullerene". COMM. MATH. COMPUT. CHEM. 33, 17–24 (1996).

396. D. Babić and N. Trinajstić: „Möbius Inversion on a Poset of a Graph and Its Acyclic Subgraphs". DISCRETE APPL. MATH. 67, 5–11 (1996).

397. M. Šoškić, D. Plavšić and N. Trinajstić: „Link between Orthogonal and Standard Multiple Linear Regression Models". J. CHEM. INF. COMPUT. SCI. 36, 829–832 (1996).

398. B. Kiralj, B. Kojić-Prodić, M. Žinić, S. Alihodžić and N. Trinajstić: „Bond Length-Bond Order Relations and Calculated Geometries for Some Benzenoid Aromatics, Including Phenanthridine. Structures of 5,6-Dimethylphenanthridinium Triflate,[N-(6-Phenanthridinylmethyl)-aza-18-crown-6-κ5 O,O',O",O"',O""]

(picrate-κ2 O,O')potassium, and [N,N'-Bis(6-phenanthridinyl-κN-methyl)-7,16-diaza-18-crown-6-κ4 O,O',O",O"']sodium Iodide Dichloromethane Solvate". ACTA CRYST. B 52, 823–837 (1996).

399. S. Nikolić, N. Trinajstić, A. Jurić, Z. Mihalić and G. Krilov: „Complexity of Some Interesting (Chemical) Graphs". CROAT. CHEM. ACTA 69, 883–897 (1996).
400. N. Trinajstić: „On the Nature of Theoretical Research". CROAT. CHEM. ACTA 69, 1013–1022 (1996).
401. D. Plavšić, M. Šoškić, I. Landeka and N. Trinajstić: „On the Relation between the P'/P Index and the Wiener Number". J. CHEM. INF. COMPUT. SCI. 36, 1123–1126 (1996).
402. N. Trinajstić, S. Nikolić, B. Lučić and D. Amić: „On QSAR Modeling". ACTA PHARM. 45, 24–263 (1996).
403. S. Nikolić, N. Trinajstić, A. Jurić and Z. Mihalić: „The Detour Matrix and the Detour Index of Weighted Graphs". CROAT. CHEM. ACTA 69, 1577–1591 (1996).
404. M. V. Diudea, O. Ivanciuc, S. Nikolić and N. Trinajstić: „Matrices of Reciprocal Distance, Polynomials and Derived Numbers". MATCH – COMM. MATH. COMPUT. CHEM. 35, 41–64 (1997).
405. D. J. Klein, M. Randić, D. Babić, B. Lučić, S. Nikolić and N. Trinajstić: „Hierarchical Orthogonalization of Descriptors". INT. J. QUANTUM CHEM. 63, 215–222 (1997).
406. D. Amić, D. Davidović-Amić, D. Bešlo, B. Lučić and N. Trinajstić: „The Use of the Ordered Orthogonalized Multivariate Linear Regression in a Structure-Activity Study of Coumarin and Flavonoid Derivatives as Inhibitors of Aldose Reductase". J. CHEM. INF. COMPUT. SCI. 37, 581–586 (1997).
407. M. Šoškić, D. Plavšić and N. Trinajstić: „Inhibition of the Hill Reaction by 2-Methylthio-4,6-bis(monoalkylamino)-1,3,5-triazines. A QSAR Study". J. MOL. STRUCT. (THEOCHEM) 394, 57–65 (1997).

408. N. Trinajstić, S. Nikolić, D. Babić and Z. Mihalić: „The Vertex- and Edge-Connectivity Indices of Platonic and Archimedean Molecules". BULLETIN OF THE CHEMISTS AND TECHNOLOGISTS OF MACEDONIA 16, 43–51 (1997).

409. N. Trinajstić, S. Nikolić, B. Lučić. D. Amić and Z. Mihalić: „The Detour Matrix in Chemistry". J: CHEM. INF. COMPUT. SCI. 37, 631–638 (1997).

410. S. Nikolić and N. Trinajstić: „On the Concept of a Chemical Model". CROAT. CHEM. ACTA 70, 777–786 (1997).

411. A. Jurić, S. Nikolić and N. Trinajstić: „Topological Resonance Energies of Thienopyrimidines". CROAT. CHEM. ACTA 70, 841–846 (1997).

412. B. Jurišić, M. Flögel, S. Nikolić and N. Trinajstić: „Kinetic and Thermodynamic Characterisation of Nα-Acetyl Microperoxidase-8 Interaction with Hydrogen Peroxide and Acetyl Hydroperoxide". ACTA PHARM. 47, 149–158 (1997).

413. I. M. Tolić and N. Trinajstić: „What Is Life? Is It Just a Physico-Chemical Process of High Complexity?". PERIOD. BIOL. 99, 295–302 (1997).

414. D. Amić, D. Davidović-Amić, D. Bešlo, B. Lučić and N. Trinajstić: „A Simple QSAR Model for Trypsin Aminopeptidase Inhibitory Flavonoids". CROAT. CHEM. ACTA 70, 905–911 (1997).

415. N. Trinajstić, S. Nikolić and Z. Mihalić: „On Computing the Molecular Detour Matrix". INT. J. QUANTUM CHEM. 65, 415–419 (1997).

416. M. Randić, W. R. Müller, J. V. Knop and N. Trinajstić: „The Characteristic Polynomial as a Structure Discriminator". J. CHEM. INF. COMPUT. SCI. 37, 1072–1077 (1997).

417. M. Vedrina, S. Marković, M. Medić-Šarić and N. Trinajstić: „TAM: A Program for the Calculation of Topological Indices in QSPR and QSAR Studies". COMPUT. CHEM. 21, 355–361 (1997).

418. B. Lučić and N. Trinajstić: „New Developments in QSPR/QSAR Modeling Based on Topological Indices“. SAR QSAR ENVIRON. RES. 7, 45–62 (1997).

419. S. Nikolić, N. Trinajstić and I. Baučić: „Comparison between the Vertex- and Edge-Connectivity Indices for Benzenoid Hydrocarbons“. J. CHEM. INF. COMPUT. SCI. 38, 42–46 (1998).

420. B. Kiralj, B. Kojić-Prodić, S. Nikolić and N. Trinajstić: „Bond Lengths and Bond Orders in Benzenoids: A Comparison of the Valence Bond and Molecular Orbital Treatments“. J. MOL. STRUCT. – THEOCHEM 427, 25–37 (1998).

421. D. Juretić, D. Zucić, B. Lučić and N. Trinajstić: „Preference Functions for Prediction of Membrane-buried Helices in Integral Membrane Proteins“. COMPUT. CHEM. 22, 279–294 (1998).

422. M. Randić, S. El-Basil, S. Nikolić and N. Trinajstić: „Clar Polynomials of Large Benzenoid Systems“. J. CHEM. INF. COMPUT. SCI. 38, 563–574 (1998).

423. D. Amić, D. Davidović-Amić, D. Bešlo, B. Lučić and N. Trinajstić: „QSAR of Flavylium Salts as Inhibitors of Xanthine Oxidase“. J. CHEM. INF. COMPUT. SCI. 38, 815–818 (1998).

424. D. Amić, D. Bešlo, B. Lučić, S. Nikolić and N. Trinajstić: „The Vertex-Connectivity Index Revisited“. J. CHEM. INF. COMPUT. SCI. 38, 819–822 (1998).

425. M. V. Diudea, G. Katona, I. Lukovits and N. Trinajstić: „Detour and Cluj-Detour Indices“. CROAT. CHEM. ACTA 71, 459–471 (1998).

426. D. Plavšić, N. Trinajstić, D. Amić and M. Šoškić: „Comparison between the Structure-Boiling Point Relationships with Different Descriptors for Condensed Benzenoids“. NEW J. CHEM. 22, 1075–1078 (1998).

427. I. M. Tolić and N. Trinajstić: „The Number Five in Biology“. PERIOD. BIOL. 100, 259–265 (1998).

428. S. Nikolić and N. Trinajstić: „Modeling the Aqueous Solubility of Aliphatic Alcohols“. SAR QSAR ENVIRON. RES. 9, 117–126 (1998).

429. I. M. Tolić and N. Trinajstić: „Origin of Life: Earth or Outer Space?“. PERIOD. BIOL. 100, 405–410 (1998).

430. B. Lučić and N. Trinajstić: „Multivariate Regression Outperforms Several Robust Architectures of Neural Networks in QSAR Modeling“. J. CHEM. INF. COMPUT. SCI. 39, 121–132 (1999).

431. I. Lukovits, S. Nikolić and N. Trinajstić: „Resistance Distance in Regular Graphs“. INT. J. QUANTUM CHEM. 71, 217–225 (1999).

432. B. Lučić, N. Trinajstić, S. Sild, M. Karelson and A. R. Katritzky: „A New Efficient Approach for Variable Selection Based on Multiregression: Prediction of Gas Chromatographic Retention Times and Response Factors“. J. CHEM. INF. COMPUT. SCI. 39, 610–621 (1999).

433. S. Nikolić, N. Trinajstić and S. Ivaniš: „The Connectivity Indices of Regular Graphs“. CROAT. CHEM. ACTA 72, 875–883 (1999).

434. S. Nikolić, I. M. Tolić and N. Trinajstić: „On the Complexity of Molecular Graphs“. MATCH – COMM. MATH. COMPUT. CHEM. 40, 187–201 (1999).

435. D. Amić, D. Davidović-Amić, D. Bešlo, B. Lučić and N. Trinajstić: „Prediction of pK Values, Half-Lives and Electronic Spectra of Flavylium Salts from Molecular Structure“. J. CHEM. INF. COMPUT. SCI. 39, 967–973 (1999).

436. S. C. Basak, B. D. Gute, B. Lučić, S. Nikolić and N. Trinajstić: „A Comparative QSAR Study of Benzamidines Complement- Inhibitory Activity and Benzene Derivatives Acute Toxicity“. COMPUT. CHEM. 24, 181–191 (2000).

437. A. R. Katritzky, K. Chen, Y. Wang, M. Karelson, B. Lučić, N. Trinajstić, T. Suzuki and G. Schüürmann: „Prediction of Liquid Viscosity for Organic Compounds by a Quantitative Structure-Property Relationship“. J. PHYS. ORG. CHEM. 13, 80–86 (2000).

438. B. Lučić, D. Amić and N. Trinajstić: „Nonlinear Multivariate Regression Outperforms Several Concisely Designed Neural Networks on Three QSPR Data Sets". J. CHEM. INF. COMPUT. SCI. 40, 403–413 (2000).

439. D. Amić, D. Davidović-Amić, D. Bešlo and N. Trinajstić: „Vitisin-Type Pigments: Possible novel Food Colors". CROAT. CHEM. ACTA 73, 511–516 (2000).

440. S. Nikolić, N. Trinajstić and I. M. Tolić: „Complexity of Molecules". J. CHEM. INF. COMPUT. SCI. 40, 920–926 (2000).

441. S. C. Basak, S. Nikolić, N. Trinajstić, D. Amić and D. Bešlo: „QSPR Modeling: Graph Connectivity Indices versus Line Graph Connectivity Indices". J. CHEM. INF. COMPUT. SCI. 40, 927–933 (2000).

442. S. Nikolić, I. M. Tolić, N. Trinajstić and I. Baučić: „On the Zagreb Indices as Complexity Indices". CROAT. CHEM. ACTA 73, 909–921 (2000).

443. I. Lukovits, S. Nikolić and N. Trinajstić: „Note on the Resistance Distances in the Dodecahedron". CROAT. CHEM. ACTA 73, 957–967 (2000).

444. S. Nikolić, N. Trinajstić and M. Randić: „Wiener Index Revisited". CHEM. PHYS. LETT. 333, 319–321 (2001).

445. V. Paar, N. Pavin, A. Rubčić, J. Rubčić and N. Trinajstić: „Scale-Invariant Power Law and Fractality for Molecular Weights". CHEM. PHYS. LETT. 336, 129–134 (2001).

446. D. Amić, B. Lučić, S. Nikolić and N. Trinajstić: „Predicting Inhibition of Microsomal p-Hydroxylation of Aniline by Aliphatic Alcohols: A QSAR Approach Based on Weighted Path Numbers". CROAT. CHEM. ACTA 74, 237–250 (2001).

447. D. Babić and N. Trinajstić: „Planar Rearrangements of Fullerenes". J. MOL. GRAPHICS MODELLING 19, 210–215 (2001).

448. B. Lučić, I. Lukovits, S. Nikolić and N. Trinajstić: „Distance-Related Indexes in the Quantitative Structure-Property Relationship Modeling". J. CHEM. INF. COMPUT. SCI. 41, 527–535 (2001).

449. N. Trinajstić, S. Nikolić, S. C. Basak and I. Lukovits: „Distance Indices and Their Hyper-Counterparts: Intercorrelation and Use in the Structure-Property Modeling". SAR QSAR ENVIRON. RES. 12, 31–54 (2001).

450. D. Bonchev and N. Trinajstić: „Overall Molecular Descriptors. 3. Overall Zagreb Indices". SAR QSAR ENVIRON. RES. 12, 213–236 (2001).

451. S. Nikolić, D. Plavšić and N. Trinajstić: „On the Balaban-Like Topological Indices". MATCH – COMMUN. MATH. COMPUT. CHEM. 44 (2001) 361–386.

452. D. Amić, S. C. Basak, B. Lučić, S. Nikolić and N. Trinajstić: „Structure-Water Solubility Modeling of Aliphatic Alcohols Using the Weighted Path Numbers". SAR QSAR ENVIRON. RES. 13 (2002) 281–295.

453. I. Lukovits, S. Nikolić and N. Trinajstić: „On Relationship Between Vertex-Degrees, Path-Numbers and Graph Valence-Shells in Trees". CHEM. PHYS. LETT. 354 (2002) 417–422.

454. B. Lučić, I. Bašic, D. Nadramija, A. Miličević, N. Trinajstić, T. Suzuki, R. Petrukhin, M. Karelson and A. R. Katritzky: „Correlation of Liquid Viscosity with Molecular Structure Using Different Variable Selection Methods". ARKIVOC 2002 (IV), 45–49. http://www.arkat-usa.org/.

455. D. Babić, D. J. Klein, I. Lukovits, S. Nikolić and N. Trinajstić: „Resistance-Distance Matrix: A Computional Algorithm and Its Application". INT. J. QUANTUM CHEM. 90 (2002) 166–176.

456. I. Lukovits, A. Miličević, S. Nikolić and N. Trinajstić: „On Walk Counts and Complexity of General Graphs". INTERNET ELECTRONIC J. MOL. DESIGN 1 (2002) 388–400. http://www.biochempress.com/.

457. B. Lučić, A. Miličević, S. Nikolić and N. Trinajstić: „Harary Index – Twelve Years Later". CROAT. CHEM. ACTA 75 (2002) 847–868.

458. R. B. Mallion and N. Trinajstić: „Reciprocal Spanning-Tree Density: A New Index Characterising the Intricacy of (Poly)cyclic Mo-

lecular-Graph". MATCH – COMMUN. MATH. COMPUT. CHEM. 48 (2003) 97–116.

459. I. Lukovits, A. Graovac, E. Kálmán, G. Kaptay, P. Nagy, S. Nikolić, J. Sytchev and N. Trinajstić: „Nanotubes: Number of Kekulé Structures and Aromaticity". J. CHEM. INF. COMPUT. SCI. 43 (2003) 609–614.
460. A. Miličević, S. Nikolić, D. Plavšić and N. Trinajstić: „On the Hosoya Z-Index of General Graphs" . INTERNET ELECTRONIC J. MOL. DESIGN 2 (2003) 160–178. http://www.biochempress.com.
461. D. Amić, D. Davidović-Amić, D. Bešlo and N. Trinajstić: „Structure-Radical Scavenging Activity Relationship of Flavonoids". CROAT. CHEM. ACTA 76 (2003) 55–61.
462. S. Nikolić, G. Kovačević, A. Miličević and N. Trinajstić: „The Zagreb Indices 30 Years After". CROAT. CHEM. ACTA 76 (2003) 113–124.
463. D. Vukičević and N. Trinajstić: „Modified Zagreb Index M2 – Comparison with the Randić Connectivity Index for Benzenoid Systems". CROAT. CHEM. ACTA 76 (2003) 183–187.
464. B. Lučić, A. Miličević, S. Nikolić and N. Trinajstić: „On Variable Wiener Index". INDIAN J. CHEM. 42A (2003) 1279–1282.
465. B. Lučić, N. Trinajstić, I. Bašic and D. Nadramija: „Toward Generating Simpler QSAR Models: Nonlinear Multivariate Regression versus Several Neural Network Ensembles and Some Related Methods". J. CHEM. INF. COMPUT. SCI. 43 (2003) 1094–1102.
466. I. Lukovits and N. Trinajstić: „Atomic Walk Counts of Negative Order". J. CHEM. INF. COMPUT. SCI. 43 (2003) 1110–1114.
467. T. Piližota, B. Lučić and N. Trinajstić: „Use of Variable Selection in Modeling the Secondary Structural Content of Proteins from Their Composition of Amino Acid Residues". J. CHEM. INF. COMPUT. SCI. 44 (2004) 113–121.
468. A. Miličević, S. Nikolić and N. Trinajstić: „Coding and Ordering Kekulé Structures". J. CHEM. INF. COMPUT. SCI. 44 (2004) 415–421.

469. L. Pogliani, M. Randić and N. Trinajstić: „What Can Be Said About the Number 13 Beyond the Fact That It Is a Prim Number?“. CROAT. CHEM. ACTA 77 (2004) 447–456.

470. A. Miličević, S. Nikolić and N. Trinajstić: „On Reformulated Zagreb Indices“. MOLECULAR DIVERSITY 8 (2004) 393–399.

471. D. J. Klein, J. L. Palacios, M. Randić and N. Trinajstić: „Random Walks and Chemical Graph Theory“. J. CHEM. INF. COMPUT. SCI. 44 (2004) 1521–1525.

472. D. Vukičević and N. Trinajstić: „Wiener Indices of Benzenoid Graphs“. BULLETIN OF THE CHEMISTS AND TECHNOLOGISTS OF MACEDONIA 23 (2004) 113–129.

473. S. Nikolić, A. Miličević, N. Trinajstić and A. Jurić: „On the Use of the Variable Zagreb vM2 Index in QSPR: Boiling Points of Benzenoid Hydrocarbons“. MOLECULES 9 (2004) 1208–1221.

474. D. Vukičević and N. Trinajstić: „On the Discriminatory Power of the Zagreb Indices for Molecular Graphs“. MATCH COMMUN. MATH. COMPUT. CHEM. 53 (2005) 111–138.

475. D. Vukičević, S. Nikolić and N. Trinajstić: „On the Schultz Index of Thorn Graphs“. INTERNET ELECTRONIC J. MOL. DESIGN 4 (2005) 501–514. http://www.biochempress.com.

476. D. Vukičević, A. Miličević, S. Nikolić, J. Sedlar and N. Trinajstić: „Paths and Walks in Acyclic Structures: Plerographs versus Kenographs“. ARKIVOC 2005 (X), 33–44. a href=”http://www.arkat-usa.org”>http://www.arkat-usa.org.

477. D. Vukičević and N. Trinajstić: „Comparison of the Hosoya Z-Index for Simple and General Graphs of the Same Size“. CROAT. CHEM. ACTA 78 (2005) 223–239.

478. S. Nikolić, A. Miličević and N. Trinajstić: „On Graphical Matrices“. CROAT. CHEM. ACTA 78 (2005) 241–250.

479. B. Hollas, I. Gutman and N. Trinajstić: „On Reducing Correlations between Topological Indices“. CROAT. CHEM. ACTA 78 (2005) 489–492.

480. D. Juretić, B. Lučić and N. Trinajstić: „Why Focusing on Bioinformatics?". PERIOD. BIOL. 107 (2005) 379–383.

481. I. Lukovits, A. Miličević, N. Trinajstić and D. Vukičević: „Kekulé-Structure Counts in Damaged Benzenoid Parallelograms". INTERNET ELECTRONIC J. MOL. DESIGN 5 (2006) 144–149. http://www.biochempress.com.

482. S. M. Rajtmajer, A. Miličević, N. Trinajstić, M. Randić and D. Vukičević: „On the Complexity of Archimedean Solids". J. MATH. CHEM. 39 (2006) 119–132.

483. D. Vukičević, D. Veljan and N. Trinajstić: „Thorny Graphs. I. Valence Connectivities". MATCH – COMMUN. MATH. COMPUT. CHEM. 55 (2006) 73–82.

484. S. Nikolić, A. Miličević and N. Trinajstić: „QSPR Study of Polarographic Half-Wave Reduction Potentials of Benzenoid Hydrocarbons". CROAT. CHEM. ACTA 79 (2006) 155–159.

485. D. Janežič, B. Lučić, S. Nikolić, A. Miličević and N. Trinajstić: „Boiling Points of Alcohols – A Comparative Study". INTERNET ELECTRONIC J. MOL. DESIGN 5 (2006) 192–200. http://www.biochempress.com.

486. A. Miličević S. Nikolić and N. Trinajstić: „Toxicity of Aliphatic Ethers: A Comparative Study". MOLECULAR DIVERSITY 10 (2006) 95–99.

487. I. Gutman, S. Radenković, N. Trinajstić and A. Vodopivec: „On the Relation between π-Electron Energy and Topological Resonance Energy". Z. NATURFORSCH. 61a (2006) 345–348.

488. D. Vukičević, I. Lukovits and N. Trinajstić: „Counting Kekulé Structures of Benzenoid Parallelograms Containing One Additional Benzene Ring". CROAT. CHEM. ACTA 79 (2006) 509–512.

489. D. Amić, D. Davidović-Amić, D. Bešlo, V. Rastija, B. Lučić and N. Trinajstić: „SAR and QSAR of the Antioxidant Activity of Flavonoids". CURRENT MEDICINAL CHEMISTRY 14 (2007) 827–845.

490. D. Janežič, B. Lučić, A. Miličević, S. Nikolić, N. Trinajstić and D. Vukičević: „Hosoya Matrices as the Numerical Realization of Graphical Matrices and Derived Structural Descriptors". CROAT. CHEM. ACTA 80 (2007) 271–276.

491. D. Vukičević, B. Zhou and N. Trinajstić: „Altered Wiener Indies of Thorn Trees". CROAT. CHEM. ACTA 80 (2007) 283–285.

492. D. Vukičević and N. Trinajstić: „On the Anti-forcing Number of Benzenoids". J. MATH. CHEM. 42 (2007) 575–583.

493. B. Zhou and N. Trinajstić: „On the Largest Eigenvalue of the Distance Matrix of a Connected Graph". CHEM. PHYS. LETT. 447 (2007) 384–387.

494. B. Zhou and N. Trinajstić: „Further Results on the Largest Eigenvalue of the Distance Matrix and Some Distance-Based Matrices of Connected (Molecular) Graphs". INTERNET ELECTRONIC J. MOL. DESIGN 6 (2007) 375–384. http://www.biochempress.com.

495. D. Janežič, A. Miličević, S. Nikolić, N. Trinajstić and D. Vukičević: „Zagreb Indices: Extension to Weighted Graphs Representing Molecules Containing Heteroatoms". CROAT. CHEM. ACTA 80 (2007) 541–545.

496. N. Trinajstić and D. Vukičević: „Mathematical Studies of Kekulé Structures". STRUCT. CHEM. 18 (2007) 807–812.

497. B. Zhou and N. Trinajstić: „Maximum Eigenvalues of the Reciprocal Distance Matrix and the Reverse Wiener Number". INT. J. QUANTUM CHEM. 108 (2008) 858–864.

498. D. Vukičević and N. Trinajstić: „On the Anti-Kekulé Number and Anti Forcing Number of Cata-Condensed Benzenoids". J. MATH. CHEM. 43 (2008) 719–726.

499. D. Vukičević, S. M. Rajtmajer and N. Trinajstić: „Trees with Maximal Second Zagreb Index and Prescribed Number of Vertices of the Given Degree". MATCH COMMUN. MATH. COMPUT. CHEM. 60 (2008) 65–70.

500. B. Zhou and N. Trinajstić: „A note on Kirchhoff Index". CHEM. PHYS. LETT. 455 (2008) 120–123.

501. B. Zhou and N. Trinajstić: „Bounds on the Balaban Index". CROAT. CHEM. ACTA 81 (2008) 319–323.

502. F. Wei, B. Zhou and N. Trinajstić: „Minimal Spectrum-Sums of Bipartite Graphs with Exactly Two Vertex-Disjoint Cycles". CROAT. CHEM. ACTA 81 (2008) 363–367.

503. B. Zhou and N. Trinajstić: „On Reciprocal Molecular Topological Index". J. MATH. CHEM. 44 (2008) 235–243.

504. B. Zhou, X. Cai and N. Trinajstić: „On Harary Index". J. MATH. CHEM. 44 (2008) 611–618.

505. B. Zhou, Z. Du and N. Trinajstić: „Harary Index of Landscape Graphs". INT. J. CHEM. MODEL. 1 (2008) 35–44.

506. B. Lučić, S. Nikolić and N. Trinajstić: „Distance-Related Molecular Descriptors". INTERNET ELECTRONIC J. MOL. DESIGN 7 (2008) 195–206. http://www.biochempress.com.

507. D. Vukičević, S. Nikolić and N. Trinajstić: „On the Path-Zagreb Matrix". J. MATH. CHEM. 45 (2009) 538–543.

508. D. Amić, B. Lučić, G. Kovačević and N. Trinajstić: „Bond Dissociation Enthalpies Calculated by the PM3 Method Confirm Activity Cliffs in Radical Scavenging of Flavonoids". MOL. DIVERSITY 13 (2009) 27–36; erratum 13 (2009) 37.

509. B. Zhou and N. Trinajstić: „On Resistance-Distance and Kirchhoff Index". J. MATH. CHEM. 46 (2009) 283–289.

510. B. Zhou, X. Cai and N. Trinajstić: „On Reciprocal Complementary Wiener Index". DISCR. APPL. MATH. 157 (2009) 1628–1633.

511. B. Lučić, N. Trinajstić and B. Zhou: „Comparison between the Sum-connectivity and Product-connectivity Indices for Benzenoid Hydrocarbons". CHEM. PHYS. LETT. 475 (2009) 146–148.

512. Z. Du, B. Zhou and N. Trinajstić: „On Randić Indices of Chemical Trees and Chemical Unicyclic Graphs". MATCH COMMUN. MATH. COMPUT. CHEM. 62 (2009) 131–142.

513. B. Zhou and N. Trinajstić: „The Kirchhoff Index and the Matching Number". INT. J. QUANTUM CHEM. 109 (2009) 2978–2981.
514. B. Zhou and N. Trinajstić: „On Reciprocal and Reverse Balaban Indices". CROAT. CHEM. ACTA 82 (2009) 537–541.
515. B. Zhou and N. Trinajstić: „On Extended Connectivity Indices". J. MATH. CHEM. 46 (2009) 1172–1180.
516. B. Zhou and N. Trinajstić: „On a Novel Connectivity Index". J. MATH. CHEM. 46 (2009) 1252–1270.
517. K. C. Das, B. Zhou and N. Trinajstić: „Bounds on Harary Index". J. MATH. CHEM. 46 (2009) 1369–1376.
518. N. Trinajstić and B. Zhou: „Estrada Index of Bipartite Graphs". INT. J. CHEM. MODEL. 1 (2009) 387–394.
519. B. Zhou, Y. Yang and N. Trinajstić: „On Reciprocal Reverse Wiener Index". J. MATH. CHEM. 47 (2010) 201–209.
520. B. Zhou and N. Trinajstić: „On General Sum-Connectivity Index". J. MATH. CHEM. 47 (2010) 210–218.
521. B. Zhou and N. Trinajstić: „On Reverse Degree Distance". J. MATH. CHEM. 47 (2010) 268–275.
522. Y. Yuan, B. Zhou and N. Trinajstić: „On Geometric-Arithmetic Index". J. MATH. CHEM. 47 (2010) 833–841.
523. Z. Du, B. Zhou and N. Trinajstić: „Minimum Sum-Connectivity Indices of Trees and Unicyclic Graphs of a Given Matching Number". J. MATH. CHEM. 47 (2010) 842–855.
524. B. Zhou and N. Trinajstić: „Mathematical Properties of Molecular Descriptors Based on Distances". CROAT. CHEM. ACTA 83 (2010) 227–242.
525. K. C. Das and N. Trinajstić: „Comprison Between First Geometric-Arithmetic Index and Atom-Bond Connectivity Index". CHEM. PHYS. LETT. 497 (2010) 149–151.
526. R. Xing, B. Zhou and N. Trinajstić: „Sum-Connectivity Index of Molecular Trees". J. MATH. CHEM. 48 (2010) 583–591.

527. B. Zhou and N. Trinajstić: „Minimun General Sum-Connectivity Index of Unicyclic Graphs". J. MATH. CHEM. 48 (2010) 697–703.
528. B. Zhou and N. Trinajstić: „Some Properties of the Reformulated Zagreb Indices". J. MATH. CHEM. 48 (2010) 714–719.
529. B. Zhou and N. Trinajstić: „On Sum-Connectivity Matrix and Sum-Connectivity Energy of (Molecular) Graphs". ACTA CHIM. SLOVEN. 57 (2010) 518–523.
530. D. Vukičević, N. Trinajstić, S. Nikolić, B. Lučić and B. Zhou: „Master Connectivity Index and Master Connectivity Polynomial". CURR. COMPUT. AIDED DRUG DES, 6 (2010) 235–239.
531. D. Vukičević and N. Trinajstić: „Bond-Additive Modeling. 3. Comparison between the Product-connectivity Index and Sum-connectivity Index". CROAT. CHEM. ACTA 83 (2010) 349–351.
532. Z. Du, B. Zhou and N. Trinajstić: „On the general sum-connectivity indeks of trees". APPL. MATH. LETT. 24 (2011) 402–405
533. K. Xu and N. Trinajstić: „Hyper-Wiener and Haray Indices of Graphs with Cut Edges". UTILITAS MATHEMATICA 84 (2011) 153–163.
534. S. Wang, B. Zhou and N. Trinajstić: „On the sum-connectivity index". FILOMAT 25 (2011) 29–42.
535. S. Feretić and N. Trinajstić: „The Area Generating Function for Simple-2-column Polyominoes with Hexagonal Cells". INT. J. CHEM. MODEL. 3 (2011) 115–129.
536. W. Luo, B. Zhou, N. Trinajstić and Y. Du: „Reverse Wiener Indices of Graphs with Exactly Two Cycles". UTILITAS MATHEMATICA, 88 (2012) 189–202.
537. K. Ch. Das and N. Trinajstić: „Relationship between the eccentric connectivity index and Zagreb indices". COMPUT. MATH. APPL. 62 (2011) 1758–1764.
538. B. Zhou and N. Trinajstić: „On Altered Wiener Indices of Trees and Chemical Trees". INT. J. CHEM. MODEL. 3 (2011) 437–447.

539. Z. Du, B. Zhou and N. Trinajstić: „On Geometric-Arithmetic Index of (Molecular) Trees, Unicyclic Graphs and Bicyclic Graphs". MATCH COMMUN. MATH. COMPUT. CHEM. 66 (2011) 681–697.

540. R. Xing, B. Zhou and N. Trinajstić: „On the Zagreb eccentricity indices". CROAT. CHEM. ACTA 84 (2011) 493–497.

541. H. Dong, B. Zhou and N. Trinajstić: „A novel version of the edge-Szeged index". CROAT. CHEM. ACTA 84 (2011) 543–545.

542. K. C. Das and N. Trinajstić: „Comparison Between Geometric-arithmetic Indices", CROAT. CHEM. ACTA. 85 (2012) 353–357.

543. W. Luo, B. Zhou, N. Trinajstić, Z. Du: „Reverse Wiener Indices of Graphs of Exactly Two Cycles". UTILITAS MATHEMATICA 88 (2012), 189–202.

544. Z. Du, B. Zhou and N. Trinajstić: „Extremal Properties of the Zagreb Eccentricity Indices". CROAT. CHEM. ACTA 85 (2012) 359–362.

545. B. Zhou and N. Trinajstić: „Relations Between the Product- and Sum-connectivity Indices". CROAT. CHEM. ACTA 85 (2012) 363–365.

546. B. Lučić, I. Sović, J. Batista, K. Skala, D. Plavšić, D. Vikić-Topić, D. Bešlo, S. Nikolić and N. Trinajstić: „The Sum-Connectivity Index - An Additive Variant of the Randić Connectivity Index". CURR. COMPUT. AIDED DRUG DES. 9 (2013) 184–194.

547. B. Lučić, I. Sović, D. Bešlo, D. Plavšić, D. Vikić-Topić and N. Trinajstić: „On the Novel Balaban-like and Balaban-Detour-like Molecular Descriptors". INT. J. CHEM. MODEL. 5 (2013) 277–294.

548. K. Ch. Das, H. Jeon and N. Trinajstić: „Comparison between the Wiener index and the Zagreb indices and the eccentric connectivity index for trees". DISCRETE APPL. MATH. 171 (2014) 35–41.

549. A. Ali and N. Trinajstić: „A Novel/Old Modification of the First Zagreb Index", MOL. INF. 37 (2018) 1800008.

550. Z. Du, A. Ali and N. Trinajstić: „Alkanes with the First Three Maximal/Minimal Modified First Zagreb Connection Indices". MOL. INF. 38 (2019) 1800116.

551. K. Xu, F. Gao, K. C. Das and N. Trinajstić: „A formula with its applications on the difference of Zagreb indices of graphs". J. MATH. CHEM. 57 (2019) 1618–1626.

Rad objavljen u preprint arhivi

1. Z. Du, B. Zhou, N. Trinajstic, „Sum-connectivity indices of trees and unicyclic graphs of fixed maximum degree", (2012). https://doi.org/10.48550/ARXIV.1210.5043.

KNJIGE

Autor

1. N. Trinajstić: „Molekularne orbitale u kemiji" (Molecular Orbitals in Chemistry). Školska knjiga, Zagreb, 1974., 120 str.
2. A. Graovac, I. Gutman, and N. Trinajstić: „Topological Approach to the Chemistry of Conjugated Molecules". Springer-Verlag, Berlin, 1977., 123 str.
3. L. Klasinc, Z. B. Maksić i N. Trinajstić: „Simetrija molekula" (Symmetry of Molecules). Školska knjiga, Zagreb, 1979., 131 str.
4. N. Trinajstić: „Chemical Graph Theory", Volume I. Chemical Rubber Company (CRC) Press, Boca Raton, Florida, 1983., 147 str.
5. N. Trinajstić: „Chemical Graph Theory", Volume II. Chemical Rubber Company (CRC) Press, Boca Raton, Florida, 1983., 166 str.
6. N. Trinajstić: „Orbitalet moleculare në kimi" (revised translation into Albanian language of 'Molecular Orbitals in Chemistry'). Sveučilište, Prishtinë, 1984., 120 str.
7. J. V. Knop, W. R. Müller, K. Szymanski and N. Trinajstić: „Computer Generation of Certain Classes of Molecules". SKTH / Kemija u industriji, Zagreb, 1985., 253 str.

8. N. Trinajstić, S. Nikolić, J. V. Knop, W. R. Müller and K. Szymanski: „Computational Chemical Graph Theory: Characterization, Enumeration and Generation of Chemical Structures by Computer Methods". Simon & Schuster/Horwood, Chichester, 1991., 356 str.
9. N. Trinajstić: „Chemical Graph Theory", second revised edition. CRC Press, Boca Raton, Florida, 1992., 322 str.
10. N. Trinajstić: „Ogledi o znanosti i znanstvenicima" (Essays on Science and Scientists). Matica hrvatska, Zagreb, 1998., 188 str.
11. N. Trinajstić: „100 hrvatskih kemičara" (100 Croatian Chemists). Školska knjiga, Zagreb, 2002.
12. D. Janežič, A. Miličević, S. Nikolić and N. Trinajstić: „Graph-Theoretical Matrices in Chemistry". University of Kragujevac, Kragujevac, 2007.
13. D. Janežič, A. Miličević, S. Nikolić and N. Trinajstić: „Graph-Theoretical Matrices in Chemistry" (1st ed.). CRC Press, Boca Raton, 2015. (enlarged and corrected edition).
14. S. Paušek-Baždar, N. Trinajstić: „Hrvatska kemija u 20. stoljeću. Ljudi i događaji". Hrvatska akademija znanosti i umjetnosti i Školska knjiga, Zagreb, 2014., 312 str.
15. N. Trinajstić: „Život u znanosti – Uspomene iz nepovrata", Hrvatska akademija znanosti i umjetnosti, Zagreb, 2016., 332 str.

Urednik

1. N. Trinajstić (Editor): „Mathematics and Computational Concepts in Chemistry". Horwood/Wiley, New York, 1986., str. 365.
2. D. J. Klein and N. Trinajstić (Editors): „Valence Bond Theory and Chemical Structure". Elsevier, New York, 1990., str. 629.

Stručni radovi

1. I. Gutman i N. Trinajstić: „Primjena teorije grafova u kemiji. I. Elementi teorije grafova". KEM. IND. (Zagreb) 22, 75–79 (1973).

2. I. Gutman i N. Trinajstić: „Primjena teorije grafova u kemiji. II. Veza između teorije molekularnih orbitala i teorije grafova“. KEM. IND. (Zagreb) 22, 237–240 (1973).
3. I. Gutman i N. Trinajstić: „Primjena teorije grafova u kemiji. III. Alternantni ugljikovodici i njihova svojstva“. KEM. IND. (Zagreb) 23, 329–333 (1974).
4. I. Gutman i N. Trinajstić: „Primjena teorije grafova u kemiji. IV. Predviđanje stabilnosti velikih policikličkih konjugiranih molekula“. KEM. IND. (Zagreb) 23, 381–386 (1974).
5. I. Gutman i N. Trinajstić: „Primjena teorije grafova u kemiji. V. Pravilo modula 4“. KEM. IND. (Zagreb) 23, 641–645 (1974).
6. I. Gutman and N. Trinajstić: „The Modulo 4 Rule“. SCIENTIA YUG. 1, 1–2 (1974).
7. I. Gutman i N. Trinajstić: „Primjena teorije grafova u kemiji. VI. Predviđanje termodinamičkih svojstava alkana“. KEM. IND. (Zagreb) 24, 25–29 (1975).
8. J. V. Knop, I. Gutman i N. Trinajstić: „Primjena teorije grafova u kemiji. VII. Prikazivanje kemijskih struktura u dokumentaciji“. KEM. IND. (Zagreb) 24, 505–510 (1975).
9. N. Trinajstić: „Od prirodoslovca do kemičara, od kemičara do prirodoslovca“, *Simpozij prirodne znanosti i njihovo značenje u suvremenom društvu*. Hrvatsko prirodoslovno društvo, Zagreb 1975., str. 49–50.
10. N. Trinajstić i T. Živković: „A gráfemélet az elméleti kémiában“. KÉMIAI KÖZLEMÉNYEK (Budapesti) 44, 460–466 (1975).
11. A. Graovac, I. Gutman i N. Trinajstić: „Primjena teorije grafova u kemiji. VIII. Möbiusove strukture“. KEM. IND. (Zagreb) 25, 229–233 (1976).
12. N. Trinajstić: „Elektronska struktura benzena“. PRIRODA 65, 39–41 (1976).
13. N. Trinajstić: „Prognoziranje kemijske reaktivnosti“. KEM. IND. (Zagreb) 25, 339–343 (1976).

14. N. Trinajstić: „Profesor Vladimir Prelog, sudobitnik Nobelove nagrade za kemiju 1975“. KEM. IND. (Zagreb) 25, 295–298 (1976).
15. N. Trinajstić: „Some Graph-Theoretical Results of the Zagreb Group in 1975“. MATCH COMMUN. MATH. COMPUT. CHEM. (Mülheim/Ruhr) 2, 3–15 (1976).
16. M. Milun i N. Trinajstić: „Teorija aromatičnosti“. KEM. IND. (Zagreb) 25, 559–570 1976).
17. N. Trinajstić i R. Trinajstić: „Prirodni spojevi. O strukturnim svojstvima porfirina“. PRIRODA 65, 132–133 (1976).
18. H. Bilinski, M. Marković i N. Trinajstić: „Živa u okolišu. I.“. KEM. IND. (Zagreb) 25, 521–527 (1976).
19. B. Džonova-Jerman-Blažič, N. Trinajstić i B. Mohar: „Računalniško generiranje acikličnega polinoma molekularnih grafov“. INFORMATICA 77, 6233 1–4 (1977).
20. M. Protić i N. Trinajstić: „Prirodni spojevi. II. Alkaloidi“. PRIRODA 65, 268–270 (1976).
21. Z. Bačić, N. Trinajstić i V. Žganec: „O metadonu i opijatskim analgeticima“. KEM. IND. (Zagreb) 26, 639–645 (1977).
22. K. Horvatić i N. Trinajstić: „Matematička kemija. Primjena teorije skupova u kemiji“. KEM. IND. (Zagreb) 27, 127–135 (1978).
23. N. Trinajstić: „Na granici između bioorganske kemije i biokemije“. KEM. IND. (Zagreb) 27, 160–162 (1978).
24. E. Rachin, M. Milun and N. Trinajstić: „PCILO Conformational Analysis of Phenylimidazoles“. IZVESTIJA PO HIMIJA (Sofija) 11, 313–318 (1978).
25. H. Bilinski i N. Trinajstić: „Živa u okolišu. II. O metil-živi“. KEM. IND. (Zagreb) 28, 59–65 (1979).
26. A. Sabljić, N. Trinajstić i J. V. Knop: „O molekularno-orbitalnoj teoriji u kvantnoj biokemiji i kvantnoj farmakologiji“. KEM. IND. (Zagreb) 28, 113–122 (1979).
27. A. Sabljić i N. Trinajstić: „Odnos strukture i biološke aktivnosti“. KEM. IND. (Zagreb) 28, 467–477 (1979).

28. N. Trinajstić, G. Protić, V. Švob i Deur-Šiftar: „Izračunavanje indeksa zadržavanja u plinskoj kromatografiji pomoću strukturnih faktora. Alkil-benzeni“. KEM. IND. (Zagreb) 28, 527–537 (1979).
29. H. Bilinski, N. Trinajstić i M. Zelić: „Živa u okolišu. III. O akumulaciji žive i metil-žive u organizmima“. KEM. IND. (Zagreb) 29, 53–58 (1980).
30. B. Džonova-Jerman-Blažič i N. Trinajstić: „Topološki modeli za predstavitev rezonančnih oblik molekulskih struktur“. Zbornik radova *BIOMEDICINSKA KIBERNETIKA*, Skopje, 1980., str. 136–149.
31. P. Ilić i N. Trinajstić: „Neklasična aromatičnost. Aromatičnost konjugiranih iona“. KEM. IND. (Zagreb) 29, 417–423 (1980).
32. B. Džonova-Jerman-Blažič i N. Trinajstić: „Kemijski informacijski sistemi. II. Algoritmi za obravnavo in obdelavo kemijsko-strukturnih informacij“. INFORMATICA 80, 47–54 (1980).
33. N. Trinajstić: „Kemija“. TEHNIČKA ENCIKLOPEDIJA, Leksikografski zavod, Zagreb, 1980., Vol. 7, str. 1–33.
34. W. Müller, N. Trinajstić, and J. V. Knop: „GEPORT – Generation, Enumeration, and Plotting of Rooted Trees“. QCPE BULL. 1, 15 (1981).
35. N. Trinajstić: „Noviji rezultati Zagrebačke grupe u kemijskoj teoriji crteža, 1977-1981“. KEM. IND. (Zagreb) 30, 387–397 (1981).
36. N. Trinajstić: „Nobelove nagrade za kemiju godine 1981. Teorijska kemija“. PRIRODA 70, 101–102 (1981).
37. B. Ruščić i N. Trinajstić: „Molekula“. TEHNIČKA ENCIKLOPEDIJA, Leksikografski zavod, Zagreb, 1982., Vol. 8, 627–643.
38. G. Q. Jashari dhe N. Trinajstić: „Teorija e Grafave dhe Energjia Rezonante Topologjike e Molekuleve Benzenoide“. BULL. CHEM. TECHN. KOSOVO 2, 193–198 (1982).
39. N. Trinajstić: „O prirodi kemijske strukture“. KEM. IND. (Zagreb) 33, 311–320 (1984).

40. N. Trinajstić: „Povratak povjerenja u teoriju valentnih struktura“. KEM. IND. (Zagreb) 33, 499–514 (1984).
41. J. V. Knop, K. Szymanski, N. Trinajstić: „Future Developments in Computer Architecture“. INFORMATICA 1, 48–56 (1984).
42. J. V. Knop, K. Szymanski, G. Jashari and N. Trinajstić: „Computer-Assisted Generation of Aza-Benzenoids“. BULL. CHEM. TECHN. KOSOVO 3, 7–18 (1984).
43. D. Kasum i N. Trinajstić: „Matematička kemija. II. O Polyinom teoremu“. 34, 245–251 (1985).
44. G. Jashari, A Veseli, A. Graovac, dhe N. Trinajstić: „Shqyrtimi i spektreve të largësisë së disa llojeve të grafeve molekularë (On the Distance Spectra of Some Classes of Molecular Graphs)“. BULL. CHEM. TECHN. KOSOVO 4, 177–242 (1985).
45. K. Humski, V. Imper i N. Trinajstić: „O stereizometriji i kiralnosti“. KEM. IND. (Zagreb) 35, 151–160 (1986).
46. D. J. Klein and N. Trinajstić: „On the Chemical Structure-Biological Activity Relationships“ in: The First Yugoslav Symposium on Molecular Sciences *Modelling of Structure and Properties of Molecules and Materials*. Zagreb, 1986., pp. 113–120.
47. N. Trinajstić: „Znanstveni rad Vladimira Preloga“. PRIRODA 75, 7–8 (1986).
48. N. Trinajstić i T. Tóth: „Interakcija korisnika i sekundarnih izvora informacija prikazana na primjeru Chemical Abstract Sevice-a“. KEM. IND. (Zagreb) 35, 527–550 (1986).
49. A. Sabljić and N. Trinajstić: „Quantitative Structure-Activity Relationships (QSAR) in Drug Research“. ACTA PHARM. JUGOSL. 36, 79–80 (1986).
50. S. Nikolić and N. Trinajstić: „Ugljikova molekula: poput nogometne lopte“. PRIRODA 75, 115–117 (1986/87).
51. N. Trinajstić, J. V. Knop, W. R. Müller and K. Szymanski: „Chemical Graph Theory. VIII. On the 2-factors of Polyhexes“. KEM. IND. (Zagreb) 35, 671–674 (1986).

52. S. Nikolić i N. Trinajstić: „O kavezastoj ugljikovoj molekuli C60". KEM. IND. (Zagreb) 36, 107–111 (1987).
53. A. Jurić, D. Kitan, M. Kuleš, M. Trkovnik i N. Trinajstić: „O aromatičnosti kumarina i nekih njegovih derivata i o odnosu između p-elektronskog naboja i protonskog pomaka u njihovim NMR spektrima". KEM. IND. (Zagreb) 36, 233–238 (1987).
54. N. Trinajstić: „Graphs as General Models" in: *Research, Science and Technology*. Edited by V. Muljević and G. Macesich. Center for Yugoslav-American Studies, Tallahassee, Florida, 1987., pp. 168–185.
55. N. Trinajstić: „Informacija i vrijednost informacije". POLITIČKA MISAO 24, 12–15 (1987).
56. N. Trinajstić, S. Nikolić i D. Horvat: „O prirodi kemijske strukture". PRIRODA 76, 51–53 (1987/88).
57. N. Trinajstić, S. Nikolić i D. Horvat: „Matematički modeli strukture molekula". KEM. IND. (Zagreb) 36, 493–502 (1987).
58. N. Trinajstić: „Teorija na grafite i molekulnite orbitali" u: *Teorija na grafite i priloženieto i v himijata*, uredili N. Tyutyulkov i D. Bonchev. Nauka i iskustvo, Sofija 1987., treće poglavlje, str. 86–120.
59. S. Nikolić i N. Trinajstić: „O velikim kavezastim molekulama". ACTA CHIM. KOSOVICA 7, 75–92 (1987).
60. N. Trinajstić: „How I Met Michael Dewar" in: *Michael J. S. Dewar – A Group Memoir*, Edited by Nathan L. Bauld. Austin, 1988., 135–138.
61. A. Sabljić and N. Trinajstić: „A Formula for Rating Scientists". PERIOD. BIOL. 90, 397–399 (1988).
62. N. Trinajstić: „O prirodi kemijske strukture". SCI. YUGOSL. 14, 119–124 (1988).
63. N. Trinajstić, S. Nikolić, and S. Carter: „QSAR: Theory and Application". KEM. IND. (Zagreb) 38, 469–484 (1989).
64. N. Trinajstić: „'If you want to be leader, think!'". J. MOL. STRUCT. (THEOCHEM) 200, 219–224 (1989).

65. D. J. Klein and N. Trinajstić: „An Introduction". Valence Bond Theory and Chemical Structure. Edited by D. J. Klein and N. Trinajstić. Elsevier, Amsterdam, 1990., pp. 1–10
66. D. Amić i N. Trinajstić: „O reaktivnosti i stabilnosti flavilijevog kromofornog sustava". KEM. IND. (Zagreb) 41, 345–359 (1992).
67. N. Trinajstić: „Božo Težak (1907-1980)". HRVATSKI ZNANSTVENI ZBORNIK 2, 27–49 (1993).
68. N. Trinajstić: „Uvodno slovo". SPOMENICA o devedesetoj obljetnici postojanja Agrikulturnog-kemijskog zavoda u Križevcima. Poljoprivredni institut i Ogranak Matice hrvatske, Križevci, 1993., str. 1–3.
69. N. Trinajstić: „Zdenko Majerski (1937-1988) – rani odlazak tihog čovjeka". RADOVI Leksikografskog zavoda „Miroslav Krleža" 3, 115–121 (1993).
70. N. Trinajstić: „On the Evaluation of the Quality of Scientific Research". ENCYCLOPAEDIA MODERNA 14, 256–261 (1993).
71. N. Trinajstić: „Experimental and Theoretical Research in the Natural Sciences". ENCYCLOPAEDIA MODERNA 14, 359–360 (1993).
72. N. Trinajstić: „Hoffmann, Roald (1937-) – Primijenjena teorijska kemija" u: *VELIKANI NAŠE EPOHE*. Uredio Ratko Vince. Hrvatski radio, Zagreb, 1994., 317–322.
73. M. Pavlović, A. Alebić-Juretić, L. Klasinc, N. Trinajstić, R. Turk i N. Kezele: „Čovjek, okoliš i ozon". ARHIV ZA HIGIJENU RADA I TOKSIKOLOGIJU 45, 275–284 (1994).
74. N. Trinajstić: „Kemija – moćna znanost budućnosti". HRVATSKI ZNANSTVENI ZBORNIK 3, 65–73 (1994).
75. N. Trinajstić: „My Twenty Years of Cooperation with American Scientists in Theoretical Chemistry". USA – Croatia Scientific Cooperation 1963 – 1993. Edited by V. Paar. Školska knjiga, Zagreb, 1995., pp. 317–322.

76. N. Trinajstić: „Mladen Deželić – zaboravljeni hrvatski kemičar". POLIMERI 16, 167–170 (1995).
77. N. Trinajstić: „O filozofiji prirodnih znanosti". POLIMERI 16, 275–279 (1995).
78. N. Trinajstić: „Kemija – moćna znanost budućnosti". KEM. IND. (Zagreb) 44, 519–524 (1995).
79. N. Trinajstić: „Mladen Deželić – zaboravljeni hrvatski kemičar". PRIRODA 86, 28–31 (1996).
80. N. Trinajstić i Đ. Težak: „Život i djelo Mladena Deželića – zmaja Klokočkog IV." u: *Znameniti prirodoslovci članovi Družbe 'Braća Hrvatskog Zmaja'*. Urednik Alojz Getliher. Družba „Braća Hrvatskog Zmaja" i Školska knjiga, Zagreb, 1996., str. 14–27.
81. N. Trinajstić: „Institut Rugjer Bošković i Prirodoslovno-matematički fakultet". POLIMERI 17, 98–100 (1996).
82. N. Trinajstić: „Hrvatski velikani znanosti" – predgovor u: *Katalozi izložbe 'Znanost u Hrvata: prirodoslovlje i njegova primjena'*. Urednica Greta Pifat-Mrzljak. Muzejsko-galerijski centar, Zagreb, 1996., str. 366–368 (prvi dio) i 16–18 (drugi dio).
83. B. Lučić, N. Trinajstić i D. Juretić: „Od sekvencije do konformacije proteina. I.". POLIMERI 17, 119–128 (1996).
84. N. Trinajstić: „Prelogov znanstveni rad". RUGJER 1 (#2), 5–6 (1996).
85. N. Trinajstić: „Uoči sedamdesete obljetnice časopisa 'Croatica Chemica Acta'". RUGJER 1 (#4), 16–19 (1996).
86. N. Trinajstić: „Ljepota se ipak nagrađuje – Nobelova nagrada za kemiju 1996.". POLIMERI 17, 269–270 (1996).
87. S. Paušek-Baždar i N. Trinajstić: „Kratki pregled hrvatske kemije u XX. stoljeću". RUGJER 2 (#6), 3–10 (1997).
88. S. Nikolić i N. Trinajstić: „Milutin Cihlar Nehajev kao kemičar". RUGJER 2 (#7), 11–12 (1997).
89. N. Trinajstić: „The 70th Anniversary of CROATICA CHEMICA ACTA 1927-1997". CROAT. CHEM. ACTA 70, I–IV (1997).

90. N. Trinajstić: „Prirodne znanosti i opće dobro". PRIRODA 87 (#838), 3 (1997).
91. N. Trinajstić, N. Brničević, M. Herceg i S. Nikolić: „Suvremena anorganska, strukturna i teorijska kemija u Hrvatskoj" u: *Zbornik radova Simpozija o fundamentalnim istraživanjima*, urednik: Dubravko Tadić. HAZU, Zagreb, 1997., str. 124–134.
92. I. Piljac, N. Trinajstić i H. Vančik: „Ugljik". TEHNIČKA ENCIKLOPEDIJA, Leksikografski zavod, Zagreb, 1997., Vol. 13, 293–315.
93. N. Trinajstić i S. Nikolić: „Profesor Milan Randić – znanstvenik nemirnog duha" u: *ISTAKNUTI HRVATSKI ZNANSTVENICI U AMERICI*, urednici: J. Herak i S. Nikolić. Hrvatsko-američko društvo i Matica hrvatska, Zagreb, 1997., str. 1–21.
94. N. Trinajstić: „U spomen – znanstveni rad nobelovca Dr. Sc. Vladimira Preloga (23. 7. 1906. – 7. 1. 1998.)". PRIRODA 88 (#849-850), 6–7 (1998).
95. N. Trinajstić i S. Nikolić: „O broju pet u prirodi, kemiji i drugdje". POLIMERI 19, 97–98 (1998).
96. N. Trinajstić: „Mnogo vike o ničemu". POLIMERI 19, 99–100 (1998).
97. N. Trinajstić: „Kako vrednovati znanstveni rad i znanstvenike?" u: *VIDLJIVA I NEVIDLJIVA AKADEMIJA*, uredio: Darko Polšek. Institut društvenih znanosti „Ivo Pilar", Zagreb, 1998., str.101–110.
98. L. Pogliani, M. Randić and N. Trinajstić: „Is Zero Something Rather than Nothing". KEM. IND. (Zagreb) 47, 387–396 (1998).
99. N. Trinajstić: „Kemija u Hrvatskoj: osvrt na Ružičku i pogled unaprijed". POLIMERI 19, 216–217 (1998).
100. B. Lučić i N. Trinajstić: „Citiranosti hrvatskih kemičara od početka 1981. do lipnja 1997.". POLIMERI 19, 224 (1998).
101. N. Trinajstić: „Hrvatski časopis za kemiju Croatica Chemica Acta". SVEUČILIŠNI GLASNIK 44, 89–92 (1998).

102. L. Pogliani, M. Randić and N. Trinajstić: „Much Ado about Nothing – An Introductory Inquiry about Zero“. INT. J. MATH. EDUC. SCI. TECHNOL. 29, 729–744 (1998).
103. B. Lučić i N. Trinajstić: „Citiranosti hrvatskih kemičara od početka 1981. do lipnja 1997.“. KEM. IND. (Zagreb) 48, 33 (1999).
104. S. Nikolić i N. Trinajstić: „Sjećanje na Krešimira Humskoga (1939.-1997.) i Zdenka Majerskoga (1937.-1988.)“. KEM. IND. (Zagreb) 48, 81–84 (1999).
105. N. Trinajstić: „Božo Težak and Croatica Chemica Acta“. CROAT. CHEM. ACTA 72, A1–A4 (1999).
106. N. Trinajstić: „Dopisivanje s profesorom Vladimirom Prelogom“. KEM. IND. (Zagreb) 48, 151–157 (1999).
107. N. Trinajstić: „Felix Klein's Commemorative Plague in Düsseldorf“. MATH. INTELL. 21, 50 (1999).
108. N. Trinajstić: „Kemija – središnja prirodna znanost“. HRVATSKA REVIJA XLIX, 85–93 (1999).
109. N. Trinajstić: „Dopisivanje s profesorom Vladimirom Prelogom“. GAZOPHYLACIUM IV, 117–124 (1999).
110. S. Nikolić i N. Trinajstić: „Milutin Cihlar Nehajev – hrvatski književnik i kemičar“. HRVATSKA REVIJA XLIX, 582–590 (1999).
111. S. Nikolić i N. Trinajstić: „Milutin Cihlar Nehajev kao kemičar“. KEM. IND. (Zagreb) 49, 111–117 (2000).
112. S. Nikolić i N. Trinajstić: „O znanosti i znanstvenoj metodi“. KEM. IND. (Zagreb) 49, 265–273 (2000).
113. S. Nikolić i N. Trinajstić: „O vremenu i računanju vremena“. GAZOPHYLACIUM V, 82–86 (2000).
114. L. Pogliani, M. Randić and N. Trinajstić: „About One – An Inquiry About the Meaning and Uses of the Number One“. INT. J. MATH. EDUC. SCI. TECHNOL. 31, 811–824 (2000).
115. N. Trinajstić: „Quantum Theory in Chemistry – Early Developments“. KEM. IND. (Zagreb) 50, 421–425 (2001).

116. N. Trinajstić: „Quantum Chemistry in Croatia – Beginnings". KEM. IND. (Zagreb) 50, 427–429 (2001).
117. N. Trinajstić: „Smiljko Ašperger – Curriculum Vitae". CROAT. CHEM. ACTA 74, VII–X (2001).
118. S. Nikolić i N. Trinajstić: „Milutin Cihlar Nehajev – kemičar s doktoratom Sveučilišta u Beču i hrvatski književnik". GAZOPHYLACIUM VI, 33–42 (2001).
119. S. Nikolić and N. Trinajstić: „Milan Randić— Life and Work". CROAT. CHEM. ACTA 75, 319–327 (2002).
120. N. Trinajstić and I. Gutman: „Mathematical Chemistry". CROAT. CHEM. ACTA 75, 329–356 (2002).
121. D. Amić i N. Trinajstić: „Antioksidacijska aktivnost vina". GAZOPHYLACIUM VII (2002) 88–93.
122. N. Trinajstić: „Quantum Theory in Chemistry" in: *HUNDRED YEARS OF QUANTUM THEORY*. Edited by D. Tadić. Croatian Academy of Sciences and Arts, Zagreb, 2002., pp. 55–65.
123. N. Trinajstić: „O Ružičkinom imenu". KEM. IND. 52 (2003) 122.
124. N. Trinajstić: „A Life in Science". INTERNET ELECTRONIC J. MOL. DESIGN 2 (2003) 413–434. http://www.biochempress.com.
125. S. Nikolić and N. Trinajstić: „Complexity of Molecules" in: *PROCEEDINGS OF THE INTERNATIONAL CONFERENCE OF COMPUTATIONAL METHODS IN SCIENCES AND ENGINEERING 2003*. Edited by T. E. Simos. World Scientific, Singapore, 2003., pp. 454–456.
126. N. Trinajstić, S. Turina i J. Varljen: „Želimir Procházka (1921.-2003.) – hrvatski đak, češki znanstvenik". KEM. IND. 52 (2003) 527–529.
127. N. Trinajstić: „Zanimljivosti o broju 13". GAZOPHYLACIUM VIII (2003) 23–26.
128. N. Trinajstić: „Virtualni razgovor s Vladimirom Katovićem". GLASNIK AMACIZ-a 31 (2003) 17–18.

129. N. Trinajstić: „Kako se zvao Ružička“. PRIRODA 94 (2004) 19.
130. N. Trinajstić: „Krešimir Balenović (1914.-2003.) – životni put“ u: Krešimir Balenović (1914.-2003.), uredio N. Trinajstić, *Spomenica preminulim akademicima*, HAZU, Zagreb, 2004., svezak 120, str. 9–16.
131. N. Trinajstić: „Dr. Krešimir Balenović – sveučilišni profesor i akademik“. LIČKA REVIJA 5, 46–39 (2005).
132. N. Trinajstić: „More on Felix Klein in Düsseldorf“. MATH. INTELL. 27 (3) (2005) 4–5.
133. S Nikolić, A. Miličević and N. Trinajstić: „Graphical Matrices in Chemistry“. WSEAS TRANSACTIONS ON INFORMATION SCIENCE & APPLICATIONS 2 (issue 11), 1739–1742 (2005).
134. S. Nikolić i N. Trinajstić: „Leopold Ružička – prvi Hrvat dobitnik Nobelove nagrade“ u: *UGLEDNI HRVATSKI ZNANSTVENICI U SVIJETU*, urednik: Janko Herak. Hrvatsko-američko društvo i Hrvatska matica iseljenika, Zagreb, 2005. Hrvatski tekst – str. 110–118; engleski prijevod – str. 238–246.
135. N. Trinajstić: „Sjećanje na Akademika Miroslava Karšulina“ u: *SPOMENICI POSVEĆENOJ MIROSLAVU KARŠULINU (1904.-1984.)*, urednik: N. Trinajstić. HAZU, Zagreb, 2005., str. 7–12.
136. N. Trinajstić: „Mladen Deželić (1900.-1989.) – Zmaj Klokočki IV.: Znanstveni rad i sveučilišna karijera u Zagrebu“ u: *MLADEN DEŽELIĆ (3. I. 1900. – 28. XI. 1989.)*, urednik: Žarko Dadić. Družba „Braća Hrvatskoga Zmaja“, Zagreb, 2005., str. 11–23.
137. B. Pavlović i N. Trinajstić: „O simetriji i asimetriji u književnosti“ u: *LJEPOTA RIJEČI*, urednik: Josip Pandurić. Disput d.o.o., Zagreb. 2005., str. 97–149.
138. N. Trinajstić: „Vladimir Prelog (1906.-1998.)“. HRVATSKO SLOVO 11 (20. 12. 2005.) 15.
139. N. Trinajstić: „O nekim zanimljivim rezultatima postignutim u Hrvatskoj u području matematičke kemije“. KEM. IND. 55 (2006) 223–227.

140. S. Paušek-Baždar i N. Trinajstić: „Hrvatska kemija u 19. stoljeću". KEM. IND. 55 (2006) 333–339.

141. N. Trinajstić: „Sjećanje na godine studija 1956.-1960.". GLASNIK 37 (2006) 19–21.

142. N. Trinajstić: „Vladimir Prelog – treći Hrvat dobitnik Nobelove nagrade" u: *SPOMENICI POSVEĆENOJ VLADIMIRU PRELOGU (1906.-1998.)*, urednik: K. Ilakovac. HAZU, Zagreb, 2006., str. 11–23.

143. N. Trinajstić: „Leopold Ružička (1887.-1978.) – prvi Hrvat dobitnik Nobelove nagrade" u: *PERIVOJ HRVATSKIH VELIKANA – RONDEL UČENIKA GIMNAZIJE U OSIJEKU*, urednici: A. Tucak, A. Mutnjaković, G. Kralik. Družba „Braća Hrvatskoga Zmaja" – Zmajski stol u Osijeku, Osijek, 2007., 44–52.

144. N. Trinajstić: „Leopold Ružička (1887.-1976.) – the First Croat Nobel Prizewinner" in: *THE PUBLIC GARDEN OF CROATIAN GREAT MEN – THE ROUNDEL OF OSIJEK GRAMMAR SCHOOL STUDENTS*. Editors: A. Tucak, A. Mutnjaković, G. Kralik. The Brothers of the Croatin Dragon Society – Dragon Seat in Osijek, Osijek, 2007., 122–123.

145. N. Trinajstić: „Kako vrednovati znanstvenike?". KEM. IND. 56 (2007) 61–62.

146. N. Trinajstić: „Manje znani hrvatski kemičari. I. Božidar Rogina". KEM. IND. 56 (2007) 345–351.

147. N. Trinajstić: „Rani dani Instituta Rugjera Boškovića i Profesor Božo Težak" u: *PROFESOR BOŽO TEŽAK, LUČONOŠA ZNANOSTI*, urednica Gjurgjica Težak. Hrvatska sveučilišna naklada, Zagreb, 2007., 97–102.

148. N. Trinajstić i S. Paušek-Baždar: „Hrvatska kemija u XX. stoljeću. I. dio. Razdoblje od 1901. do 8. svibnja 1945.". KEM. IND. 56 (2007) 403–416.

149. N. Trinajstić: „Pogled na hrvatsku kemiju kroz skupove kemičara i kemijskih inženjera (1969.-2007.)". KEM. IND. 56 (2007) 501–509.

150. S. Nikolić i N. Trinajstić: „Milutin Cihlar Nehajev – hrvatski književnik i kemičar“. SENJSKI ZBORNIK 33 (2006/2007) 271–292.
151. N. Trinajstić: „Znanstveni skupovi Hrvatski prirodoslovci“. KEM. IND. 56 (2007) 610–611.
152. N. Trinajstić: „Leopold Ružička (1887.-1976.) – Vukovarac i prvi Hrvat dobitnik Nobelove nagrade“. VUKOVARSKI ZBORNIK 2 (2007) 155–168.
153. N. Trinajstić: „Hirschov indeks *h* nekih sadašnjih i bivših članica i članova Grupe za teorijsku kemiju Instituta 'Rugjer Bošković'“. KEM. IND. 57 (2008) 465–479.
154. N. Trinajstić, N. Raos, S. Paušek-Baždar i D. Škare: „Hrvatska kemija u XX. stoljeću. IV. Hrvatski kemijski časopisi“. KEM. IND. 57 (2008) 447–448.
155. B. Lučić, S. Nikolić, N. Trinajstić: „Távolságfüggő molekuláris deszkriptorok“. MAGYAR KEMIAI FOLYÓIRAT – ÖSSZEFOGLALÓ KÖZLEMÉNYEK (Budapesti) 114, 171–175 (2008).
156. N. Trinajstić: „O životnome putu i znanstvenome djelu Leopolda Ružičke, prvoga Hrvata dobitnika Nobelove nagrade“. GAZOPHYLACIUM XIII (svezak 3–4) (2008) 23–27.
157. B. Hanžek, I. Soljačić i N. Trinajstić: „Hrvatski kemičari. II. Karlo Weber“. KEM. IND. 58 (2009) 1–10.
158. N. Trinajstić, M. Kaštelan-Macan, S. Paušek-Baždar i H. Vančik: „Hrvatska kemija u XX. stoljeću. II. dio. Razdoblje od sloma Nezavisne Države Hrvatske 8. svibnja 1945. do uspostave Republike Hrvatske 25. lipnja 1991.“. KEM. IND. 58 (2009) 315–336.
159. N. Trinajstić: „Najcitiraniji radovi hrvatskih terijskih kemičara“. KEM. IND. 58 (2009) 343.
160. N. Trinajstić: „Iz života i znanstvenoga rada Leopolda Ružičke, prvoga Hrvata dobitnika Nobelove nagrade“. PRIRODOSLOVLJE 9 (2009) 3–24.
161. S. Paušek-Baždar i N. Trinajstić: „Hrvatska kemija u XIX. stoljeću“. HRVATSKA I EUROPA – KULTURA, ZNANOST I UMJET-

NOST, svezak IV: Moderna hrvatska kultura od Preporoda do Moderne (XIX. stoljeće). Urednici: Josip Bratulić, Josip Vončina i Antun Dubravko Jelčić. Školska knjiga, Zagreb, 2009., str. 715–720.

162. N. Trinajstić: „Ein Buch, das es wert ist, gelesen zu werden" aus „Betrachtung über Wissenschaft und Wissenschatler". Članak je stavljen na mrežnu stranicu profesora Helmuta Moritza u svibnju 2010. http://www.helmut-moritz.at. Prijevod Norberta Zsifkovitsa s hrvatskoga članka *Knjiga koju valja pročitati*, koji je preuzet iz knjige *Ogledi o znanosti i znanstvenicima*, Matica hrvatska, Zagreb, 1998., str. 160–176.
163. N. Trinajstić: „Ivan Gutman – kemičar i matematičar" u: *UGLEDNI HRVATSKI ZNANSTVENICI U SVIJETU – peti dio*, urednik: Janko Herak. Hrvatsko-američko društvo i Hrvatska matica iseljenika, Zagreb, 2010. Hrvatski tekst – str. 87–102, 4ngleski prijevod – str. 247–262.
164. N. Trinajstić: „Pedeseta obljetnica izlaženja časopisa Američkoga kemijskoga društva Journal of Chemical Information and Modeling". KEM. IND. 59 (2010) 402.
165. N. Trinajstić, S. Nikolić, A. Miličević, I. Gutman: „O Zagrebačkim indeksima". KEM. IND. 59 (2010) 577–589.
166. N. Trinajstić: „Zlatko Meić – dobitnik Godišnje državne nagrade za znanost 2006.". KEM. IND. 59 (2010) 599–605.
167. N. Trinajstić: „Božo Težak i Croatica Chemica Acta" u: *GODINA BOŽE TEŽAKA*, Zagreb, 2010., str. 28–30.
168. I. Soljačić, B. Hanžek, N. Trinajstić: „Karlo Weber (1902.-1978.) – istaknuti hrvatski kemičar, žrtva komunističke represije". GODIŠNJAK NJEMAČKE ZAJEDNICE 17 (2010) 163–176.
169. B. Lučić and N. Trinajstić: „Most Cited Papers in Croatica Chemica Acta". CROAT. CHEM. ACTA 83 (2010) CCCVII–CCCXII.
170. N. Trinajstić: „In memorian – Akademik Dionis Emerik Sunko (1922.-2010.)". PRIRODA 101 (1) (2011) 46–47.

171. N. Trinajstić: „Dionis Emerik Sunko (26. rujna 1922. – 16. srpnja 2010.)". AMAC UNIVERSITATIS ZAGREBIENSIS 12 (17) (2010) 15.
172. N. Trinajstić: „Dionis Emerik Sunko (1922.-2010.)". LJETOPIS HRVATSKE AKADEMIJE 114 (2011) 829–831.
173. N. Trinajstić, S. Paušek-Baždar, V. Flegar: „150 godina Hrvatske akademije znanosti i umjetnosti i 125 godina prisutnosti kemičara u Akademiji". KEM. IND.

Poglavlja objavljena u inozemnim i domaćim knjigama

1. R. B. Mallion, A. J. Schwenk and N. Trinajstić: „On the Characteristic Polynomial of a Rooted Graph" in: *RECENT ADVANCES IN GRAPH THEORY*. Proceedings of the Second Czechoslovak Symposium on Graph Theory. Editor M. Fiedler. Academia, Prague, 1975., 345–350.
2. N. Trinajstić: „Calculation of Spin Density Distribution in Planar Radicals" in: *MAGNETIC RESONANCE IN CHEMISTRY AND BIOLOGY*. Edited by J. N. Herak and K. J. Adamić. Dekker, New York, 1975., 97–125.
3. H. Güsten, L. Klasinc, J. V. Knop and N. Trinajstić: „Application of Photoelectron Spectrometry to Biologically Active Molecules and Their Constituent Parts. I. Indoles" in: *EXCITED STATES OF BIOLOGICAL MOLECULES*. Edited by J. B. Birks. Wiley, Chichester, Sussex, 1975., 45–49.
4. J. Koller, A. Ažman and N. Trinajstić: „Ab Initio Molecular Orbital Studies in Quantum Biology. Electronic Characteristics if Indole and Benzofuran" in: *QUANTITATIVE STRUCTURE-ACTIVITY RELATIONSHIPS*. Proceedings of the Conference on Chemical Structure-Biological Activity Relationships: Quantitative Approach. Edited by M. Tichy. Akademiai Kiado, Budapest, 1976., pp. 205–209.
5. N. Trinajstić: „Hückel Theory and Topology" in: *Semiempirical Methods of Electronic Structure Calculation. Part A: Techniques*. Edi-

ted by G. A. Segal. MODERN THEORETICAL CHEMISTRY, Vol. 7. Plenum, New York, 1977., pp. 1–27.

6. A. Graovac, M. Randić and N. Trinajstić: „Graph-Theoretical Approach to the Estimation of the Energy Gap of Polymeric Conjugated Hydrocarbons“ in: *Quasi One-Dimensional Conductors II.*, LECTURE NOTES IN PHYSICS, Vol. 96. Edited by S. Barišić, A. Bjeliš, J. R. Cooper and B. Leontić. Springer-Verlag, Berlin, 450–455 (1979).
7. B. Džonova-Jerman-Blažič, B. Mohar and N. Trinajstić: „Algorithms for Symbolic Computation in Chemistry: Computing the Acyclic Polynomial of Molecular Graph“ in: *APPLICATIONS OF INFORMATION AND CONTROL SYSTEMS*. Edited by D. G. Lainiotis and N. S. Tzannes. D. Reidel Publ. Co., Dordrecht, Holland, 395–402 (1980).
8. M. Randić, V. Katović and N. Trinajstić: „Symmetry Properties of Chemical Graphs. VII. Enantiomers of a Tetragonal-Pyramidal Rearrangement“ in: *SYMMETRIES AND PROPERTIES OF NONRIGID MOLECULES: A COMPREHENSIVE SURVEY*. Edited by J. Maruani and J. Serre. Elsevier, Amsterdam, 1983., pp. 399–408.
9. M. Barysz, G. Jashari, R. S. Lall, V. K. Srivastava and N. Trinajstić: „On the Distance Matrix of Molecules Containing Heteroatoms“ in: *CHEMICAL APPLICATIONS OF TOPOLOGY AND GRAPH THEORY*. Edited by R. B. King. Elsevier, Amsterdam 1983., pp. 222–230.
10. N. Trinajstić and P. Krivka: „On The Reduced Graph Model“ in: *MATHEMATICS AND COMPUTATIONAL CONCEPTS IN CHEMISTRY*. Edited by N. Trinajstić. Horwood, Chichester, 1986., pp. 328–345.
11. N. Bošnjak, N. Adler, M. Perić and N. Trinajstić: „On the Structural Origin of Chromatographic Retention Data: Alkanes and Cycloalkanes“ in: *MODELLING OF STRUCTURE AND PROPERTIES OF MOLECULES*. Edited by Z. B. Maksić, Horwood, Chichester, 1987., pp. 103–122.

12. M. Randić, S. Nikolić and N. Trinajstić: „The Conjugated Circuits Model: On the Selection of the Parameters for Computing the Resonance Energies“ in: *GRAPH THEORY AND TOPOLOGY IN CHEMISTRY*. Edited by R. B. King and D. H. Rouvray. Elsevier, Amsterdam, 1987., pp. 429–447.
13. N. Trinajstić: „Of Models and Graphs“ in: *MATH/CHEM/COMP 1987*. Edited by R. C. Lacher. Elsevier, Amsterdam, 1988., pp. 83–100.
14. M. Randić and N. Trinajstić: „On Conjugated Chains“ in: *MATH/CHEM/COMP 1987*. Edited by R. C. Lacher. Elsevier, Amsterdam, 1988., pp. 109–123.
15. K. Kovačević D. Plavšić, N. Trinajstić and D. Horvat: „On the Intercorrelation of Topological Indices“ in: *MATH/CHEM/COMP 1988*. Edited by A. Graovac. Elsevier, Amsterdam, 1989., pp. 213–224.
16. N. Adler, L. Kovačić-Beck and N. Trinajstić: „On the Correlation Between Graph-theoretical Indices and Physical Properties of Hydrocarbons. Prediction of Densities of n-Alkane Mixtures“ in: *MATH/CHEM/COMP 1988*. Edited by A. Graovac. Elsevier, Amsterdam, 1989., pp. 225–234.
17. S. Carter, S. Nikolić and N. Trinajstić: „A QSAR Study of the Anti-tumouric Activity of Phenyltriazines“ in: *MATH/CHEM/COMP 1988*. Edited by A. Graovac. Elsevier, Amsterdam, 1989., pp. 255–264.
18. N. Trinajstić: „On the Scientific Method“ in: *MATH/CHEM/COMP 1988*. Edited by A. Graovac. Elsevier, Amsterdam, 1989., pp. 557–568.
19. J. V. Knop, W. R. Müller, K. Szymanski, S. Nikolić and N. Trinajstić: „Computer-Oriented Molecular Codes“ in: *COMPUTATIONAL CHEMICAL GRAPH THEORY*. Edited by D. H. Rouvray. Nova Science Publishers, New York, 1990., pp. 9–32.
20. N. Trinajstić: „Graph Theory and Molecular Orbitals“ in: *CHEMICAL GRAPH THEORY: INTRODUCTION AND FUNDA-*

MENTALS. Edited by D. Bonchev and D. H. Rouvray. Abacus Press – Gordon & Breach, New York, 1991., 235–279.

21. N. Trinajstić: „Fivefold Symmetry in the Literature“ in: *FIVEFOLD SYMMETRY*. Edited by I. Hargittai. World Scientific, Singapore, 1992., 395–405.
22. N. Trinajstić, D. Babić, S. Nikolić and Z. Mihalić: „Symmetry of Molecules“ in: *CHEMICAL GROUP THEORY: INTRODUCTION AND FUNDAMENTALS*. Edited by D. Bonchev and D. H. Rouvray. Gordon & Breach, Amsterdam, 1994., 133–158.
23. N. Trinajstić, Z. Mihalić and A. Graovac: „The Interplay Between Graph Theory and Molecular Orbital Theory“ in: *GRAPH-THEORETICAL APPROACHES TO CHEMICAL REACTIVITY*. Edited by D. Bonchev and O. Mekenyan. Kluwer Academic Publishers, Dordrecht, 1994., 37–72.
24. S. Rendić, M. Medić-Šarić, S. Nikolić and N. Trinajstić: „Organic Explosives as Dangerous Environmental Xenobiotics – QSAR Study“ in: *ENVIRONMENTAL XENOBIOTICS*. Edited by Mervyn Richardson Taylor & Francis, London, 1996., pp. 289–312.
25. N. Trinajstić: „Mathematics and Chemistry – the Unlikely Partners“ in: *CONCEPTS IN CHEMISTRY – A CONTEMPORARY CHALLENGE*. Edited by D. H. Rouvray. Wiley, New York, 1997., pp. 17–39.
26. B. Lučić, N. Trinajstić and D. Juretić: „Recognition of Membrane Protein Structure from Amino Acid Sequence“ in: *FROM CHEMICAL TOPOLOGY TO THREE-DIMENSIONAL GEOMETRY*. Edited by A. T. Balaban. Plenum Press, New York, 1997., pp. 117–158.
27. D. Juretić, B. Lučić, D. Zucić and N. Trinajstić: „Protein Transmembrane Structure: Recognition and Prediction by Using Hydrophobicity Scales through Preference Functions“ in: *THEORETICAL ORGANIC CHEMISTRY*. Edited by C. Párkányi. Elsevier, Amsterdam, 1998., pp. 405–445.

28. S. Nikolić, N. Trinajstić and Z. Mihalić: „The Detour Matrix and the Detour Index“ in: *TOPOLOGICAL INDICES AND RELATED DESCRIPTORS IN QSAR AND QSPR*. Edited by J. Devillers and A. T. Balaban. Gordon and Breach Science Publishers, The Netherlands, 1999., 279–306.
29. S. Nikolić, N. Trinajstić, S. I. Turk: „On the additive version of the connectivity index“ in: *Rhodes*, Greece, 2012: pp. 342–350. https://doi.org/10.1063/1.4771727.
30. S. Nikolić, N. Trinajstić, D. Amić, D. Bešlo and S. C. Basak: „Modeling Solubility of Aliphatic Alcohols in Water. Graph Connectivity Indices versus Line Graph Connectivity Indices“ in: *QSPR/QSAR STUDIES BY MOLECULAR DESCRIPTORS*. Edited by M. V. Diudea. Nova Science Publishers, Huntington, 2001., pp. 63–81.
31. D. J. Klein, D. Babić and N. Trinajstić: „Enumeration in Chemistry“ in: *CHEMICAL MODELLING: APPLICATIONS AND THEORY*. Edited by A. Hinchliffe. The Royal Society of Chemistry, London, 2002., Vol. 2, pp. 56–95.
32. S. Nikolić, N. Trinajstić, I. M. Tolić, G. Rücker and C. Rücker: „On Molecular Complexity Indices“ in: *COMPLEXITY – INTRODUCTION AND FUNDAMENTALS*. Edited by D. Bonchev and D. H. Rouvray. Taylor & Francis, London, 2003., pp. 29–89.
33. D. Babić, D. J. Klein, J. von Knop and N. Trinajstić: „Combinatorial Enumeration in Chemistry“ in: *CHEMICAL MODELLING: APPLICATIONS AND THEORY*. Edited by A. Hinchliffe. The Royal Society of Chemistry, London, 2004., Vol. 3, pp. 126–170.
34. A. Miličević and N. Trinajstić: „Combinatorial Enumeration in Chemistry“ in: *CHEMICAL MODELLING: APPLICATIONS AND THEORY*. Edited by A. Hinchliffe. The Royal Society of Chemistry, London, 2006., Vol. 4, pp. 405–469.
35. N. Trinajstić: „Božidar Rogina (1901.-1967.) – pionir prehrambene kemije u Hrvatskoj“ u: *RADOVI ZAVODA ZA ZNANSTVENO-ISTRAŽIVAČKI I UMJETNIČKI RAD U BJELOVARU*. Glavni i

odgovorni urednik: Slobodan Kaštela. Zagreb – Bjelovar, 2007., str. 191–204.

36. N. Trinajstić: „Vlasta Bonačić-Koutecký: putovanje od Splita i Zagreba do Berlina preko Baltimorea i New Yorka“ u: *UGLEDNI HRVATSKI ZNANSTVENICI U SVIJETU*, IV. dio, urednik: Janko Herak. Hrvatsko-američko društvo, Hrvatska matica iseljenika i Farmaceutsko-biokemijski fakultet, Zagreb, 2008. Hrvatski tekst – str. 9–16, engleski prijevod – str. 87–95.
37. B. Lučić, D. Amić and N. Trinajstić: „Antioxidant QSAR Methodology as Exemplified on Polyphenols“ in: *SPRINGER PROTOCOLS – METHODS IN MOLECULAR BIOLOGY*, Vol. 477: ADVANCED PROTOCOLS IN OXIDATIVE STRESS I. Edited by D. Armstrong. Humana Press, New York, 2008., Chapter 16, pp. 207–218.
38. N. Trinajstić: „Životni put Akademika Vinka Škarića“ u: *SPOMENICI PREMINULIM AKADEMICIMA – VINKO ŠKARIĆ 1923.-2006*., urednik: K. Ilakovac. HAZU, Zagreb, 2008., str. 9–12.
39. S. Nikolić, N. Trinajstić and B. Zhou: „On the Eigenvalues of the Ordinary and Reciprocal Resistance-Distance Matrices“ in: *COMPUTATIONAL METHODS IN SCIENCE AND ENGINEERING*. Edited by G. Maroulis and T. E. Simos. American Institute of Physics, Melville, New York, 2009., Vol. 1, pp. 205–214.
40. D. Janežič, A. Miličević, S. Nikolić and N. Trinajstić: „Topological Complexity of Molecules“ in: *ENCYCLOPEDIA OF COMPLEXITY AND SYSTEMS SCIENCE*. Editor: Robert Meyers. Section: COMPLEXITY IN COMPUTATIONAL CHEMISTRY. Section editor: Danail Bonchev. Springer, New York, 2009., Vol. 10, pp. 9210–9224.
41. S. Paušek-Baždar i N. Trinajstić: „Prirodoslovni rad Ivana Leopolda Payera“ u: *800 GODINA SLOBODNOGA KRALJEVSKOGA GRADA VARAŽDINA: 1209.-2009*. Glavni urednici Miroslav Šicel i Slobodan Kaštela. HAZU, Grad Varaždin i Vraždinska županija, 2009., str. 831–838.

42. N. Trinajstić: „On Models and Modeling in Chemistry“ u: *MATHEMATICAL METHODS AND MODELLING FOR STUDENTS OF CHEMISTRY AND BIOLOGY*. Editors: Ante Graovac, Ivan Gutman and Damir Vukičević. University of Dubrovnik, University of Split, Rugjer Bošković Institute and Hum naklada d.o.o., Zagreb, 2009., pp. 1–11.
43. N. Trinajstić: „Božo Težak i Croatica Chemica Acta“ u: *GODINA BOŽE TEŽAKA 2007*. Zagreb, 2010., str. 28–30.
44. B. Lučić, S. Nikolić, N. Trinajstić, B. Zhou, S. Ivaniš Turk: „Sum-Connectivity Index“ in: *Novel Molecular Structure Descriptors – Theory and Applications*, I. Gutman, B. Furtula (Eds.), University of Kragujevac, Kragujevac, Serbia, 2010., pp. 101–136.
45. B. Lučić, S. Nikolić and N. Trinajstić: „Zagreb Indices“ in: Putz, M. V. (Ed.) *Chemical Information and Computational Challenges in the 21st Century – A Celebration of 2011 International Year of Chemistry*. New York, Nova Science Publishers, Inc., 2011., pp. 261–275.
46. B. Lučić, A. Miličević, S. Nikolić and N. Trinajstić: „Coding and Ordering Benzenoids and Their Kekulé Structures“ in: Putz, M. V. (Ed.): *Carbon Bonding and Structures – Advances in Physics and Chemistry*. Dordrecht, Heidelberg, London, New York: Springer, 2011., pp. 205–225
47. B. Lučić, I. Sović, D. Plavšić and N. Trinajstić: „Harary Matrices: Definitions, Properties and Applications“ in: Gutman, I. and Furtula, B. (Eds.): *Distance in Molecular Graphs – Applications*. Kragujevac, University of Kragujevac and Faculty of Science Kragujevac, 2012., pp. 3–26.
48. B. Lučić, I. Sović and N. Trinajstić: „The four connectivity matrices, their indices, polynomials and spectra“ in Basak, S. C., Restrepo, G., Villaveces, J. L. (Eds.): *Advances in mathematical chemistry and applications*. Sharjah, UAE: Bentham Science Publishers, 2015., pp. 76–91.
49. V. Bojović, B. Lučić, D. Bešlo, K. Skala and N. Trinajstić: „Calculation of topological molecular descriptors based on degrees of ver-

tices", in: *2019 42nd International Convention on Information and Communication Technology, Electronics and Microelectronics (MIPRO)*, IEEE, Opatija, Croatia, 2019., pp. 266–269. https://doi.org/10.23919/MIPRO.2019.8757128.

Uvodnici, prikazi knjiga, nekrolozi i drugi članci

1. N. Trinajstić: Book Review – Drago Grdenić: „Povijest kemije (The History of Chemistry)". CROAT. CHEM. ACTA 75 (2002) A33–A37.
2. N. Trinajstić: „Nova knjiga Drage Grdenića: Povijest kemije". POLIMERI 23 (2002) 26–27.
3. N. Trinajstić: „Prikaz knjige – Janko Herak (urednik): Istaknuti hrvatski znanstvenici u svijetu. – I. dio". KEM IND. 51 (2002) 299.
4. N. Trinajstić: „Prvi broj časopisa *Prirodoslovlje*". KEM IND. 51 (2002) 300.
5. N. Trinajstić: „Book Review — Drago Grdenić: *Povijest kemije*". AMBIX 50 (2003) 123–124.
6. N. Trinajstić, S. Turina i J. Varljen: „Nekrolog — Želimir Procházka (Dubrovnik, 1921., – Prag, 2003.)". GLASNIK AMACIZ-a 31 (2003) 24–25.
7. N. Trinajstić: „Obituary — Krešimir Balenović (1914-2003)". ACTA PHARM. 53 (2003) 239–240.
8. N. Trinajstić: „Obituary — Krešimir Balenović (1914-2003)". CROAT. CHEM. ACTA 76 (2003) A3–A4.
9. N. Trinajstić: „Nekrolog — Krešimir Balenović (1914.-2003.)". FARMACEUTSKI GLASNIK 59 (2003) 129–130.
10. N. Trinajstić, S. Turina and J. Varljen: „Obituary – Želimir Procházka (1921.-2003.)". CROAT. CHEM. ACTA 76 (2003) A33–A35.
11. N. Trinajstić: „Nekrolog — Krešimir Balenović (1914.-2003.)". LJETOPIS HRVATSKE AKADEMIJE 107 (2004) 417–420.
12. N. Trinajstić: „Prikaz knjige – Janko Herak (urednik): *Istaknuti hrvatski znanstvenici u svijetu*. – II. dio". KEM IND. 53 (2004) 35.

13. N. Trinajstić: „Book Review – Smiljko Ašperger: *Chemical Kinetics and Inorganic Reactions Mechanisms*“. CROAT. CHEM. ACTA 77 (2004) A9.
14. N. Trinajstić: „Book Review – *Chemistry and Mathematics: Two Scientific Languages of the 21st Century*“. CROAT. CHEM. ACTA 77 (2004) A11.
15. N. Trinajstić: „Proslov: Novi broj časopisa *Prirodoslovlje* s novim Uredništvom“. PRIRODOSLOVLJE 5 (2005) 1.
16. N. Trinajstić: „Obituary – Marko Branica (1931-2004)“. CROAT. CHEM. ACTA 78 (2005) A1–A2.
17. N. Trinajstić: „Book Review – M. Kaštelan-Macan: *Vizionari kemijsko-tehnološkoga studija* (*Visionaries of Chemical Technological Studies*)“. CROAT. CHEM. ACTA 78 (2005) A13–A14.
18. M. Herceg-Rajačić and N. Trinajstić: „Obituary – Boris Matković (1927-2005)“. CROAT. CHEM. ACTA 78 (2005) A27–A28.
19. N. Trinajstić: „Obituary – Dragutin Fleš (1921-2005)“. CROAT. CHEM. ACTA 78 (2005) A29–A30.
20. N. Trinajstić: „Obituary – Zdravko Pusko Ježić (1931-2005)“. CROAT. CHEM. ACTA 78 (2005) A31–A32.
21. N. Trinajstić: „Obituary – Vinko Škarić (1923-2006)“. CROAT. CHEM. ACTA 79 (2006) A3–A4.
22. N. Trinajstić: „Book Review – X. Li, I. Gutman: *Mathematical Aspects of Randić-type Molecular Structure Descriptors*“. CROAT. CHEM. ACTA 79 (2006) A31–A32.
23. N. Trinajstić: „Book Reviews – M. Mintas, S. Raić-Malić, N. Raos: *Načela dizajniranja lijekova* i M. Mintas, S. Raić-Malić, N. Raos: *Lijekovi u prostoru – farmakofori i receptori*“. CROAT. CHEM. ACTA 80 (2007) A1.
24. N. Trinajstić: „Book Review – L. Pogliani: *Numbers Zero, One, two and Three in Science and Humanities*“. CROAT. CHEM. ACTA 80 (2007) A25–A26.

25. N. Trinajstić: „Obituary – István Lukovits (1945-2007)“. CROAT. CHEM. ACTA 80 (2007) A27.
26. N. Trinajstić: „Prikaz knjige – *Vladimir Prelog i hrvatska kemija*. Zbornik radova“. Urednik: D. Škare. HKDI / Kema u industriji, Zagreb, 2007., VI + 90 stranica. KEM. IND. 56 (2007) 468–469.
27. N. Trinajstić: „Hrvatski prirodoslovci 16“. PRIRODOSLOVLJE 7 (2007) 1–2.
28. N. Trinajstić: „Book Review – *Vladimir Prelog i hrvatska kemija* (*Vladimir Prelog and Croatian Chemistry*)“. CROAT. CHEM. ACTA 80 (2007) A33–A34.
29. N. Trinajstić: „Book Review – Shinsaku Fujita: *Diagrammatical Approach to Molecular Symmetry and Enumeration of Stereoiosomers*“. CROAT. CHEM. ACTA 81 (2008) A27–A28.
30. N. Trinajstić: „Proslov – Hrvatski prirodoslovci 17“. PRIRODOSLOVLJE 8 (2008) 1.
31. N. Trinajstić: „Book Review – B. Pignataro (Editor): *Tomorrow's Chemistry Today*“. CROAT. CHEM. ACTA 81 (2008) A33–A34.
32. N. Trinajstić: „Book Review – Đ. Težak (Editor): *Professor Božo Težak, the Torchbearer of Science*“. CROAT. CHEM. ACTA 81 (2008) A35–A36.
33. N. Trinajstić: „Prikaz knjige – D. Amić: *Organska kemija za studente agronomske struke*“. KEM. IND. 58 (2009) 417–418.
34. N. Trinajstić: „Pozdravni govor u ime predsjednika HAZU na proslavi devedesete obljetnice Kemijsko-inženjerskoga studija“. KEM. IND. 58 (2009) 608–609.
35. N. Trinajstić: „Vladimir Prelog's Heritage (Živa baština Vladimira Preloga)“. CROAT. CHEM. ACTA 82 (2009) CXXXIII–CXXXIV.
36. N. Trinajstić: „Festival znanosti u Sinju“. PRIRODA 100 (2010) 18–19.

37. N. Trinajstić: „Prikaz knjige M. Mintas, S. Raić-Malić: *Medicinska kemija*“. CROAT. CHEM. ACTA 83 (2010) CCVII.
38. N. Trinajstić: „Book Review – M. Dumić, K. Kovačević: *Ogledi o Vladimiru Prelogu*“. ACTA PHARM. 60 (2010) 369–372.
39. N. Trinajstić: „Prikaz knjige – M. Dumić, K. Kovačević: *Ogledi o Vladimiru Prelogu*“. FARMACEUTSKI GLASNIK 66 (2010) 513–516.
40. N. Trinajstić: „Prikaz knjige – M. Dumić, K. Kovačević: *Ogledi o Vladimiru Prelogu*“. KEM. IND. 59 (2010) 512–514.
41. N. Trinajstić: „In Memoriam – Dionis Emerik Sunko (26. rujna 1922. – 16. srpnja 2010.)“. AMAC UNIVERSITATIS ZAGREBIENSIS 12 (2010) 15.
42. N. Trinajstić: „Bez premca među hrvatskim tiskovinama“. MERIDIJANI 150 (2010) 18.
43. N. Trinajstić: „Book Review – M. Dumić, K. Kovačević: *Ogledi o Vladimiru Prelogu – Homage to Vladimir Prelog*“. CROAT. CHEM. ACTA 83 (2010) CCCCIX–CCCCXII.
44. N. Trinajstić: „Prikaz knjige – O. Carević, D. Vikić-Topić: *Znanost, humanost i ekologija*“. FARMACEUTSKI GLASNIK 66 (2010) 703–704.
45. N. Trinajstić: „Book Review – V. Šunjić, M. J. Parnham: *Signposts to Chiral Drugs-Organic Synthesis in Action* (Springer, Basel AG, 2011.)“. CROAT. CHEM. ACTA 75 (2002) A33–A37.
46. N. Trinajstić: „Book Review – Ivan Gutman: *Selected Theorems in Chemical Graph Theory*“. CROAT. CHEM. ACTA 89 (2016) 555–557.

SPOMENICA PREMINULIM AKADEMICIMA

NENAD TRINAJSTIĆ
1936. – 2021.

Nakladnik
Hrvatska akademija znanosti i umjetnosti
Trg Nikole Šubića Zrinskog 11, 10000 Zagreb

Za nakladnika
Akademik Dario Vretenar, glavni tajnik

Lektorica
Livija Reškovac

Grafička urednica
Sonja Batušić

Naklada
100 primjeraka

Tisak
Stega tisak d.o.o.

Zagreb, tiskano u listopadu 2023.

ISBN 978-953-347-527-1