match no. 18 pp. 217-248 1985

Research Notes on the Topological Effect on MO (TEMO) 3*

EINIGE NEUE BEZIEHUNGEN ZWISCHEN DEN MIT BESTIMMTEN GRAPHEN ASSOZIIERTEN CHARAKTERISTISCHEN POLYNOMEN

(New Relations between the Characteristic Polynomials Associated with Certain Graphs)

Oskar E. Polansky

Max-Planck-Institut für Strahlenchemie, Stiftstr. 34-36,
D-4330 Mülheim a.d. Ruhr, F.R.G.

(Received: September 1984)

(Abstract):

Some new relations between the polynomials of certain partial graphs of a given simple graph are presented in eqs. (11), (12), (17), and (22)-(25). Three methods useful for the derivation of such relations are described: (i) partition of a composed graph by the removal of bridges, (ii) expansion of the polynomial of a vertex-weighted graph, and (iii) partial differentiation; the last method is the most effective one. It is shown, that all these relations orginate from the Jacobi theorem concerning the minors of a symmetric determinant.

---

* Teil 2: siehe [1].

1. Einleitung

Seit langer Zeit ist die Verknüpfung der charakteristischen Polynome, welche mit dem schlichten Graphen G und seinen durch Entfernung der Knoten k und l erzeugten Partialgraphen, $G^k = (G-k)$, $G^l = (G-l)$, $G^{kl} = (G-k-l)$, assoziiert sind, bekannt [2]:

$$G^kG^l - GG^{kl} = G^2_{kl} \;; \qquad (1)$$

darin sind die charakteristischen Polynome mit denselben Symbolen dargestellt wie die ihnen entsprechenden Graphen:

$$G = \Phi(G,x),\; G^k = \Phi(G^k,x),\; \text{etc.}; \qquad (2a)$$

ferner ist mit G^2_{kl} das Quadrat der Summe der charakteristischen Polynome notiert, welche denjenigen Graphen entsprechen, die aus G durch Entfernung eines die Knoten k und l verbindenden Weges, $P_{kl} \in G$, erzeugt werden:

$$G^2_{kl} = \{ \sum_{\{P_{kl}\}} \Phi(G-P_{kl},x)\}^2 \;. \qquad (2b)$$

Hierbei ist zu beachten, daß zuerst die Summe über alle Wege P_{kl} und dann erst die Bildung des Quadrates ausgeführt wird. Gl. (1) folgt aus dem Jacobi Theorem für die Minoren einer symmetrischen Determinante [2]; da die charakteristischen Polynome von Graphen unter anderem auch durch deren Säkulardeterminante definiert sind, kann die Jacobi-Gleichung unmittelbar auf charakteristische

Polynome übertragen werden [3].

Verknüpfungen von Polynomen, welche der linken Seite (LS) von (1) ähnlich sind, treten bei der Untersuchung des topologischen Effektes an Molekülorbitalen (TEMO) [4] häufig auf [1]; während aus der Differenz zweier Funktionen, welche die LS (1) darstellt, kein Schluß gezogen werden kann, ob diese im gesamten Bereich der Variablen $x \varepsilon (-\infty, +\infty)$ positiv oder negativ ist oder aber bei bestimmten Werten der Variablen das Zeichen ändert, macht die rechte Seite (RS) von (1) klar, daß stets

$$(G^kG^l - GG^{kl}) \geq 0$$

gilt, wie immer auch G und $k,l \varepsilon G$, sowie x gewählt werden. Durch diese Aussagekraft sind Beziehungen wie (1) von besonderer Bedeutung für TEMO-Untersuchungen.

Bei der Bearbeitung einer bestimmten Fragestellung [1] traten neben LS (1) auch noch Verknüpfungen auf wie z.B.:

$$(G^kG^{lm} + G^lG^{mk} - G^mG^{kl} - GG^{klm}) = ? , \tag{3}$$

$$(G^kG_{lm} - GG^k_{lm}) = ? \tag{4}$$

$$\begin{aligned}(G^kG^{lmn} &+ G^lG^{mnk} - G^mG^{nkl} - G^nG^{klm} \\ &- G^{kl}G^{mn} + G^{km}G^{ln} + G^{kn}G^{lm} - GG^{klmn}) = ?\end{aligned} \tag{5}$$

u.a.m. (siehe auch (37)-(39) in [1]), für welche allem Anschein nach die entsprechenden RS nicht bekannt sind. Es wurde daher versucht, diese Ausdrücke direkt zu gewinnen, was aber nur im Falle von (3) und (4) gelang. Bei der Beschäftigung mit diesen Aufgaben wurden drei verschiedene Versionen einer Methode entdeckt, welche eine systematische Bearbeitung derartiger Fragestellungen ermöglichen. Die bei diesen Untersuchungen erzielten Ergebnisse werden hier berichtet. Im folgenden Abschnitt 2 wird die RS (3) direkt hergeleitet. In den Abschnitten 3 bis 5 werden die verschiedenen Versionen der erwähnten Methode vorgestellt und zur Herleitung von (3) und (5) aus (1) benutzt. Da die RS (4) nicht auf diesem Wege gewonnen werden kann, wird sie direkt hergeleitet (Abschnitt 6). In Abschnitt 7 sind die Ergebnisse kurz zusammengefaßt und diskutiert.

2. Herleitung eines Ausdruckes für (3)

Wendet man (1) auf den Graphen G^m an, so erhält man

$$G^{km}G^{lm} - G^m G^{klm} = (G^m_{kl})^2 \quad . \tag{6}$$

Vergleicht man (3) mit (1) und (6) so stellt man fest, daß jeder Term von (3) aus zwei Faktoren besteht, von denen der eine in (1), der andere in (6) vorkommt; es muß daher (3) in irgendeiner Form in dem Produkt von (1) und (6) enthalten sein.

Tatsächlich erhält man

$$\begin{aligned} G^2_{kl}(G^m_{kl})^2 &= (G^k G^{lm})(G^l G^{km}) + (GG^{klm})(G^m G^{kl}) - \\ &- [G^k G^m][G^l G^{klm}] - [GG^{km}][G^{kl}G^{lm}] \quad , \end{aligned} \tag{7}$$

worin die beiden ersten Terme nur aus den in (3) vorkommenden bilinearen Formen gebildet werden (die runden und eckigen Klammern in der RS (7) sollen nur bestimmte bilineare Formen verdeutlichen). Die beiden ersten Terme von (7) erhält man aber neben anderen auch aus dem (formalen) Ansatz

$$\begin{aligned} &(G^k G^{lm} - GG^{klm})(G^l G^{km} - G^m G^{kl}) = \\ &= (G^k G^{lm})(G^l G^{km}) + (GG^{klm})(G^m G^{kl}) - \\ &[G^k G^m][G^{kl}G^{lm}] - [GG^{km}][G^l G^{klm}] \quad . \end{aligned} \tag{8}$$

Die Vereinigung von (7) und (8) führt nach einigen Umformungen und der Anwendung von (1) zu

$$
\begin{aligned}
&(G^k G^{lm} - GG^{klm})(G^l G^{km} - G^m G^{kl}) = \\
&= G^2_{kl}(G^m_{kl})^2 - G^2_{km}(G^l_{km})^2 = \\
&= (G_{kl}G^m_{kl} + G_{km}G^l_{km})(G_{kl}G^m_{kl} - G_{km}G^l_{km}) \;.
\end{aligned}
\tag{9}
$$

Die in (9) dargestellte Beziehung kann ganz allgemein wie folgt geschrieben werden

$$A(x)B(x) = A'(x)B'(x) \tag{10a}$$

Offensichtlich sind

$$
\begin{aligned}
A'(x) &= A(x)\cdot f(x) \\
B'(x) &= B(x)/f(x)
\end{aligned}
\tag{10b}
$$

zwei Funktionen, die dieser Beziehung genügen; $f(x)$ stellt darin eine noch zu bestimmende Funktion dar.

Die Anwendung von (10) auf (9) schließt zwei Aufgaben ein: 1. muß festgestellt werden, welcher Faktor der LS (9) mit welchem Faktor der RS (9) gemäß (10b) in Beziehung zu setzen ist, damit eine möglichst einfache Form für $f(x)$ erzielt wird und 2. muß $f(x)$ selbst bestimmt werden.

Die erste Aufgabe ist einfach zu lösen: Angenommen, die Knoten $k, l, m \in G$ seien aufeinander automorph abbildbar. Dann aber gilt u.a.

$$G^l = G^m \;, \qquad G^{kl} = G^{km} \;,$$

$$G_{kl} = G_{km}\ , \qquad G^m_{kl} = G^l_{km}\ .$$

Unter diesen Bedingungen wird auf beiden Seiten von (9) der zweite Faktor Null. Es kann daher angesetzt werden

$$\begin{aligned} G^k G^{lm} - GG^{klm} &= (G_{kl}G^m_{kl} + G_{km}G^l_{km})\cdot f(x) \\ G^l G^{km} - G^m G^{kl} &= (G_{kl}G^m_{kl} - G_{km}G^l_{km})/f(x)\ . \end{aligned} \tag{10c}$$

Die zweite Aufgabe ist nicht ganz so einfach. Es läßt sich zwar zeigen, daß in (10b) f(x) = 1 sein muß, der Beweis ist aber lang und umständlich; er geht davon aus, daß die LS (10c) und die Klammerausdrücke der RS (10c) reelle Polynome mit ganzzahligen Koeffizienten darstellen und daher auch f(x) ein derartiges Polynom oder ein Quotient solcher Polynome sein muß. Aus der Abschätzung der Grade der involvierten Polynome - und dies ist der lange und umständliche Teil der Beweisführung - folgt dann für das Polynom f(x) der Grad Null, also f(x) = 1. Auf die Wiedergabe des Beweises kann hier verzichtet werden, da sich f(x) = 1 im Abschnitt 3 auf unabhängigem Wege ergeben wird.

Mit f(x) = 1 folgt aus (10c) unmittelbar:

$$\begin{aligned} G^k G^{lm} - GG^{klm} &= G_{kl}G^m_{kl} + G_{mk}G^l_{mk} \\ G^l G^{mk} - G^m G^{kl} &= G_{kl}G^m_{kl} - G_{mk}G^l_{mk}\ . \end{aligned} \tag{11}$$

Durch Addition der beiden Zeilen von (11) erhält man

$$G^k G^{lm} + G^l G^{mk} - G^m G^{kl} - GG^{klm} = 2G_{kl}G^m_{kl}\ . \tag{12}$$

Der Vergleich der LS (12) mit (3) zeigt, daß (12) die gesuchte Beziehung darstellt.

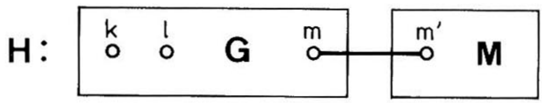
Die Knoten k, l, und m sind in Bezug auf (12) in zwei Äquivalenzklassen einzuteilen, nämlich {k,l} und {m}. (12) ist invariant in Bezug auf eine Vertauschung von k und l, während eine Vertauschung von k und m oder von l und m aus (12) andere Beziehungen erzeugt. Im Gegensatz hierzu ist in (11) die erste Zeile symmetrisch, die zweite Zeile antisymmetrisch in Bezug auf die Vertauschung von l und m.

Die Herleitung von (12) setzt die Kenntnis der Jacobi-Gleichung voraus: Der Ansatz (7) für die Herleitung wird durch die Multiplikation zweier Jacobi-Gleichungen, nämlich (1) und (6) gewonnen.

3. Eine Methode zur Erzeugung von Relationen (1. Version: Zerlegung eines Graphen mit mehreren Brücken)

Den Versuchen, die RS (5) in ähnlicher Weise wie (12) herzuleiten, blieb der Erfolg versagt, wobei der Grund hierfür vorerst nicht erkennbar war. Dieser Umstand zwang nach einer Methode zu suchen, welche die direkte Herleitung solcher Ausdrücke ersetzen könnte.

Einen wichtigen Denkanstoß lieferte hierbei die RS (12): Ein Term wie $G_{kl}G^m_{kl}$ muß auftreten, wenn ein Quadrat wie $(\alpha G_{kl} + \beta G^m_{kl})^2$ entwickelt wird. Der Klammerausdruck sollte sich aber für H_{kl} ergeben, wenn H den Graphen G als Partialgraph enthält der durch eine mit dem Knoten m ε G incidenten Brücke mit dem Rest von H verbunden ist. Der dieser Vorstellung entsprechende Graph H ist nachstehend schematisch dargestellt:



Die zwei von m verschiedenen Knoten k, l ε G $\subset$ H sind frei wählbar.

Die Jacobi Gleichung (1) lautet für H in Bezug auf die Knoten k und l wie folgt:

$$H^kH^l - HH^{kl} = H^2_{kl} \ . \qquad (13)$$

Die darin vorkommenden, von H abgeleiteten Größen sollen nun in Terms von G und M ausgedrückt wrden; das wird durch die Entfernung der Kante {m,m´} aus den entsprechenden Partialgraphen erreicht. Daran sind die Knoten k und l nicht beteiligt und man erhält für alle Größen der LS (13)

$$H^* = G^*M - G^{*m}M^{m'} \quad , \tag{14a}$$

darin stehen H^* und G^* für $H^* \in \{H, H^k, H^l, H^{kl}\}$ bzw. $G^* \in \{G, G^k, G^l, G^{kl}\}$.

Im Falle von H_{kl} muß daran erinnert werden, daß gemäß (2b) H_{kl} eine Summe von Polynomen darstellt; eine Entwicklung wie in (14a) kann aber nur für die einzelnen Polynome ausgeführt werden. Mit H_j, j=1,2,3,..., seien die Partialgraphen bezeichnet, welche aus H entstehen, wenn der die Knoten k und l verbindende Weg $P_j \in \{P_{kl}\}$ von H entfernt wird; die den einzelnen H_j´s assoziierten Polynome sind die Susmmanden von H_{kl}.

Da {mm´} eine Brückenkante ist, kann sie nur zu Wegen gehören, welcher von einem Knoten von G zu einem von M führt, nicht aber zu einem Weg welcher zwei Knoten von G, wie z.B. k und l, verbindet. Daraus folgt, daß alle in H existierenden Wege P_{kl} in G lokalisiert sind, d.h. bei der Bildung von H_j werden nur Knoten entfernt, welche zu G gehören. Wenn der Knoten $m \in G$ nicht zum Weg P_j gehört, $m \notin P_j$, läßt sich H_j wie folgt beschreiben: H_j besteht aus zwei Partialgraphen, G_j und M, welche durch die Brücke {mm´}, $m \in G_j$, $m' \in M$, verbunden sind. In diesem Falle erhält man die zu (14a) analoge Beziehung

$$H_j = G_j M - G_j^m M^{m'} \tag{14b}$$

(der Graph G_j entsteht aus G durch Entfernung des Weges P_j). Falls aber der Knoten m zum Weg $P_{j'}$ gehört, $m \in P_{j'}$, dann wird er (sowie die mit ihm inzidente Brückenkante {mm'}) zusammen mit $P_{j'}$ aus H entfernt; der resultierende Partialgraph $H_{j'}$ besteht dann aus mindestens zwei Komponenten, $G_{j'}$ und M, und das Polynom ist durch $H_{j'} = G_{j'}M$ gegeben. Obgleich dies (14b) zu verletzen scheint, ist dem nicht so: Enthält nämlich $G_{j'}$ nicht mehr den Knoten m, so kann der Graph $G_{j'}^m$ nicht gebildet werden, er ist nicht-existent. Nun ist aber definitionsgemäß das Polynom eines nicht-existenten Graphen identisch Null. Man sieht also, (14b) gibt auch in diesem Fall die Verhältnisse richtig wieder und darf daher für alle Partialgraphen H_j benutzt werden, gleichgültig ob $m \notin P_j$ oder $m \in P_j$. Die Summierung über alle j=1,2,3,... ergibt (in der mit (2b) erklärten Notierung) somit

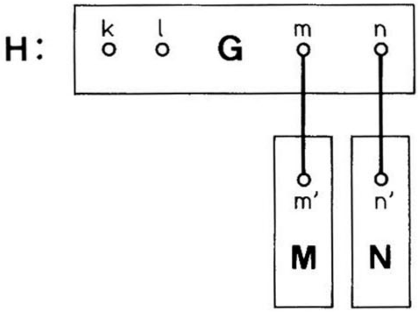
$$H_{kl} = G_{kl}M - G_{kl}^m M^{m'} \quad . \tag{14c}$$

Setzt man (14a) und (14c) in (13) ein, rechnet die angezeigten Multiplikationen aus, bringt dann alle Terme auf eine Seite der Gleichung und ordnet sie nach fallenden Potenzen von M, so erhält man schließlich:

$$[G^k G^l - G G^{kl} - G_{kl}^2] M^2 -$$
$$- [G^k G^{lm} + G^l G^{mk} - G^m G^{kl} - G G^{klm} - 2 G_{kl} G_{kl}^m] M M^{m'} +$$
$$+ [G^{km} G^{lm} - G^m G^{klm} - G_{kl}^{m\,2}] (M^{m'})^2 = 0 \qquad (15)$$

Diese Gleichung muß für alle denkbaren Partialgraphen M bestehen. Dies ist nur dann möglich, wenn die von M unabhängigen Koeffizienten alle gleich Null sind. In (15) sind daher drei solche Relationen eingebettet: wie durch Vergleich leicht festgestellt werden kann, sind die Koeffizienten von M^2 und $(M^{m'})^2$ mit (1) und (6) äquivalent, während der Koeffizient von $MM^{m'}$ die gesuchte Relation (12) liefert.

Mit diesem Beispiel sind die der vorgeschlagenen Methode zugrunde liegenden Gedanken illustriert, sowie die im Zusammenhang mit (10c) getroffene Feststellung, $f(x) = 1$, in unabhängiger Weise überprüft. Gleichzeitig zeigt dieses Beispiel, wie ein Graph H konstruiert werden müßte, um eine Relation für (5) oder ein noch komplizierteres Gebilde herzuleiten. Offensichtlich müßen alle in dem Ausdruck vorkommenden Knoten in G lokalisiert sein, im Falle von (5) ist also $k, l, m, n \in G$. Zwei dieser Knoten, und zwar diese, welche in (13) vorkommen (k und l), bedürfen keiner Markierung, während die übrigen als Endpunkte von Brücken angesehen werden; dem entsprechend muß H im Fall von (5) die Brücken {mm´} und {nn´} enthalten. Die zweiten Endknoten der Brücken müßen in unterschiedlichen Partialgraphen M,N,..., liegen. Um eine (5) entsprechende Relation zu erhalten, muß also H die folgende (schematische) Form haben:



Für die Größen der LS (13) erhält man hier:

$$H^{*} = G^{*}MN - G^{*m}M^{m'}N - G^{*n}MN^{n'} + G^{*mn}M^{m'}N^{n'} \quad , \tag{16a}$$

während sich für H_{kl} ergibt:

$$H_{kl} = G_{kl}MN - G^{m}_{kl}M^{m'}N - G^{n}_{kl}MN^{n'} + G^{mn}_{kl}M^{m'}N^{n} \quad . \tag{16b}$$

Setzt man diese Ausdrücke in (13) ein und verfährt wie oben beschrieben, so erhält man aus dem Koeffizienten von $MM^{m'}NN^{n'}$ wie folgt:

$$\begin{aligned} & G^{k}G^{lmn} + G^{l}G^{mnk} - G^{m}G^{nkl} - G^{n}G^{klm} - \\ & - G^{kl}G^{mn} + G^{km}G^{ln} + G^{kn}G^{lm} - GG^{klmn} = \\ & \qquad = 2(G^{m}_{kl}G^{n}_{kl} + G_{kl}G^{mn}_{kl}) \quad ; \end{aligned} \tag{17}$$

offensichtlich sind die LS (5) und LS (17) identisch und somit ist (17) die gesuchte Relation.

Die Zahl der Knoten, welche in einer Relation auftreten können ist im Prinzip nach oben offen; eine natürliche Grenze ist aber durch die Zahl der Terms der LS und RS einer solchen Relation gesetzt, wenn diese in ähnlicher Weise wie (1), (12) und (17) angeschrieben wird. Wählt man neben den "unmarkierten" Knoten k und l noch N weitere Knoten m,n,..., $N \geq 1$ so hat man insgesamt (N + 2) Knoten. Jeder Term der LS muß alle diese Knoten aber auch nur diese ohne Wiederholung als hochgestellte Indices enthalten. Die einzelnen Terme unterscheiden sich lediglich durch die Aufteilung der Indices auf die beiden Faktoren eines Terms; da es 2^{N+1} solche unterschiedliche Aufteilungen gibt, ist dies zugleich die Zahl der Terme der LS einer solchen Relation. In den Termen der RS treten k und l stets als tiefgestellte Indices auf; es sind also nur N hochgestellte Indices unterschiedlich auf die zwei Faktoren eines Terms zu verteilen, woraus für die RS eine Termzahl von 2^{N-1} resultiert. Die Zahl der Terme steigt also exponentiell mit der Zahl der Knoten, welche in die gesuchte Relation involviert sind.

Die Methode muß nicht iterativ eingesetzt werden; z.B. erhält man bei der Herleitung von (17) zugleich auch (12) und zwar aus dem Koeffizienten von $MM^{m'}N^2$. Sie kann aber auch iterativ angewandt werden: Nimmt man z.B. an, daß alle in (12) vorkommenden Partialgraphen G^* den Knoten n und einen mit diesem Knoten über die Brücke {nn'} verbundenen Partialgraphen N enthalten, so gilt $G^* = G^*N - G^{*n}N^{n'}$ für alle in (12) vorkommende Faktoren ($G^* = G^*$-N); setzt man dies ein und ordnet man nach Potenzen von N, so liefert der Koeffizient von $NN^{n'}$ die Beziehung (17).

Die iterative Anwendung der Methode zeigt eine hierarchische Ordnung der Relationen auf: die auf einer bestimmten Stufe stehende Relation folgt aus der über ihr stehenden, indem ein weiterer Knotenindex über die beiden Faktoren der Terme verteilt wird. Zur Illustration diene der Zusammenhang von (1) und (12):

$$G^kG^l \quad - \quad GG^{kl} \quad = \quad G_{kl}G_{kl} \qquad (1)$$

$$G^{km}G^l + G^kG^{lm} - G^mG^{kl} - GG^{klm} = G^m_{kl}G_{kl} + G_{kl}G^m_{kl} \qquad (12)$$

In gleicher Weise entsteht (17) aus (12), usw. Auf der obersten Stufe steht die Jacobi-Gleichung (1); dies entspricht dem Umstand, daß sie auch hier (in Form von (13)) für die Erzeugung der anderen Relationen benutzt wird.

Zum Schluße dieses Abschnittes sei noch ein mit (10a,b) ähnliches System angegeben, in welchem $f(x) \neq 1$. Wendet man (1) auf einen Graphen an in welchem k und l äquivalente Knoten sind, so daß $G^k = G^l$ gilt, erhält man aus (1) die zu (10c) analoge Form

$$GG^{kl} = (G^k + G_{kl})(G^k - G_{kl}) \; ; \qquad (10a')$$

$$G = (G^k + G_{kl})f(x) \qquad G^{kl} = (G^k - G_{kl})/f(x) \; . \qquad (10b')$$

Stellt G einen aus 6 Knoten bestehenden Ring dar in dem k und l benachbart sind, so erhält man $f(x) = (x^2-1)(x-2)/(x^2-x-1)$; der Zähler von f(x) enthält diejenigen Eigenwerte von G welche keine

Wurzeln von $(G^k + G_{kl})$ sind, während der Nenner von $f(x)$ diejenigen Wurzeln von $(G^k + G_{kl})$ enthält, welche keine Eigenwerte von G sind.

4. Zweite Version der Methode: Knotengewichtete Graphen

Wie bereits oben bemerkt, dienen die Partialgraphen, M,N,... der "Markierung" der Knoten $m,n,\ldots \varepsilon G$ und der Ordnung der einzelnen Glieder, wie es z.B. (15) zeigt. Dieses Ziel wird auch in ausreichender Weise erreicht, wenn dem zu markierenden Knoten unterschiedliche Knotengewichte, $h_m, h_n, \ldots$ zugeordnet werden.

Es sei G ein schlichter Graph (mit nicht gewichteten Knoten). Es entstehe H aus G dadurch, daß bestimmten Knoten von $G, m,n,\ldots \varepsilon G$, unterschiedliche Knotengewichte, $h_m, h_n, \ldots$, zugeordnet werden. Die Säkulardeterminanten von $\boldsymbol{H}$ und $\boldsymbol{G}$ unterscheiden sich dann nur in den diesen Knoten entsprechenden Diagonalelementen, u.zw. gilt

$$(\boldsymbol{H})_{mm} - (\boldsymbol{G})_{mm} = h_m, \quad (\boldsymbol{H})_{nn} - (\boldsymbol{G})_{nn} = h_n , \quad \ldots \quad .$$

Es sei angemerkt, daß die charakteristischen Polynome G und H durch Entwicklung der entsprechenden Säkulardeterminanten $\boldsymbol{G}$ und $\boldsymbol{H}$ gewonnen werden.

Wendet man das Additionstheorem erschöpfend auf $\boldsymbol{H}$ an, so erhält man:

$$\boldsymbol{H} = \boldsymbol{G} + h_m \boldsymbol{G}_{m,m} + h_n \boldsymbol{G}_{n,n} + \ldots + h_m h_n \boldsymbol{G}_{mn,mn} + \ldots \quad .$$

Darin stellen $\boldsymbol{G}_{m,m}$, $\boldsymbol{G}_{mn,mn}$, usw., diejenigen Haupt-Minoren von $\boldsymbol{G}$ dar, welche aus $\boldsymbol{G}$ durch Streichen der Zeile m und der Kolonne m bzw. der Zeilen m und n und der Kolonnen m und n, usw. gewonnen werden. Im Falle, daß nur den beiden Knoten m und n Gewichte zugeordnet sind, hat man also

$$\boldsymbol{H} = \boldsymbol{G} + h_m\boldsymbol{G}_{m,m} + h_n\boldsymbol{G}_{n,n} + h_m h_n\boldsymbol{G}_{mn,mn} \;.$$

Dieser Ausdruck kann sofort in Polynome umgeschrieben werden:

$$H = G + h_m G^m + h_m G^n + h_m h_n G^{mm} \;. \tag{14d}$$

Ähnliche Beziehungen erhält man für H^k, H^l, H^{kl} und H_{kl}, wenn man berücksichtigt, daß diese Polynome den Unterdeterminanten $\boldsymbol{H}_{k,k}$, $\boldsymbol{H}_{l,l}$, $\boldsymbol{H}_{kl,kl}$ und $\boldsymbol{H}_{k,l} = \boldsymbol{H}_{l,k}$ entsprechen. Trägt man alle diese Ausdrücke in (13) ein, erhält man wieder eine Reihe von Gliedern, welche nunmehr nach fallenden Potenzen von $h_m, h_n, \ldots,$ zu ordnen sind. Das weitere Verfahren deckt sich mit dem im vorhergehenen Abschnitt beschriebenen.

Der bei Anwendung dieser Version erforderliche Arbeitsaufwand ist nur geringfügig geringer als bei der vorher beschriebenen.

5. Dritte Version: Partielle Differentiation

Am Ende des Abschnitts 3 wurde auf die hierarchische Ordnung hingewiesen, welcher die Relationen (1), (12), (17) usw. unterliegen; sie entsteht in natürlicher Weise dadurch, daß sukkzessive immer ein weiterer neuer Knoten in die Relation involviert wird, und erinnert so an die hierarchische Ordnung, welcher partielle Differentialquotienten, z.B. $\partial F/\partial X_1$, $\partial^2 F/\partial X_1 \partial X_2$, usw., unterliegen. Diese Ähnlichkeit kommt nicht von ungefähr, entsprechen doch die in den verschiedenen Relationen auftretenden Polynome, $G^k, G^{kl}, \ldots, G_{kl}, \ldots,$ usw. bestimmten Minoren der Säkulardeterminante des Graphen G, welche als partielle Differentialquotienten der Säkulardeterminante aufgefaßt werden können: Wenn $\Delta = (a_{rs})$ eine Determinante darstellt, deren allgemeines Element mit a_{rs} bezeichnet ist, so gilt bekanntlich

$$\frac{\partial \Delta}{\partial a_{rr}} = \Delta_{r,r} \quad \text{und} \quad \frac{\partial \Delta}{\partial a_{st}} = \Delta_{s,t} \quad ,$$

worin $\Delta_{r,r}$ und $\Delta_{s,t}$ diejenigen Minoren von Δ darstellen, welche durch Streichen der Zeile r und Kolonne r, bzw. Zeile s und Kolonne t aus Δ erhalten werden. Wird für Δ die Säkulardeterminante eines Graphen Q gewählt, so ergibt die Entwicklung von Δ das charakteristische Polynom Q, die von $\Delta_{r,r}$ und $\Delta_{s,t}$ die Polynome Q^r bzw. Q_{st}, usw. (die Bedeutung von $\Delta_{rs,tu}$ wurde in [1] im Zusammenhang mit Gl. (16a,b) diskutiert). Von den partiellen Differentialquotienten der Säkulardeterminante wurde bei der Entwicklung der Hückeltheorie wesentlicher Gebrauch gemacht [5].

Um von den angedeuteten Möglichkeiten hier handlichen Gebrauch machen zu können, definieren wir für den Graphen G in analogie zu seiner Säkulardeterminante

$$\mathbf{G} = \det[x\mathbf{I}_n - \mathbf{A}(G)] \tag{18}$$

worin $\mathbf{A}(G)$ die Adjazenzmatrix des Graphen G, $\mathbf{I}_n$ die Einheitsmatrix der Ordnung n (mit n sei die Zahl der Knoten von G bezeichnet) und x eine reelle kontinuierliche Variable darstellen, die nachstehende Determinante

$$\tilde{\mathbf{G}} = \det[\mathbf{X} - \mathbf{A}(G)] \tag{19}$$

worin $\mathbf{X}$ eine Diagonalmatrix darstellt, in welcher das dem Knoten u entsprechende Element vorerst mit x_u bezeichnet sei; x_u wird als eine reelle kontinuierliche Variable angesehen welche dem Knoten u assoziiert ist (weiter unten, wenn die peinliche Unterscheidung zwischen der einem Knoten zugeordneten Variablen und dem Knoten selbst nicht mehr unbedingt notwendig ist, werden zugunsten einer schreibmaschinengerechten Notierung beide mit demselben Symbol bezeichnet). Offensichtlich stellt die Säkulardeterminante (18) einen Grenzwert für die Determinante (19) dar, welcher erreicht wird, wenn alle unterscheidbaren Variablen x_u in die allgemeine Variable x übergehen.

Die Entwicklung der Determinante (19) ergebe das Polynom G. Es ist leicht einzusehen, daß G in Bezug auf eine der Variablen, z.B. x_u, eine lineare Funktion darstellt:

$$\tilde{G} = A_u \cdot x_u + B_u \ .$$

Vergleicht man diesen Ausdruck mit der Entwicklung der Determinante (19) nach den Elementen der Zeile (Kolonne) u, so läßt sich A_u leicht als der dem Diagonalelement x_u adjungierte Hauptminor von (19) erkennen, während B_u die Summe der Produkte der übrigen Elemente der Zeile (Kolonne) u mit den ihnen adjungierten Minoren darstellt; dieser Vergleich verdeutlicht auch, daß A_u und B_u keine Funktionen von x_u sind. Es gilt also $A_u = \tilde{G}^u$, so daß die Funktion $\tilde{G}$ auch wie folgt geschrieben werden darf:

$$\tilde{G} = x_u\tilde{G}^u + B_u \ . \tag{20}$$

Aus (20) folgt unmittelbar

$$\begin{aligned} \partial\tilde{G}/\partial x_u &= \tilde{G}^u \ , \\ \partial^2\tilde{G}/\partial x_u^2 &= 0 \ . \end{aligned} \tag{21}$$

Die zweite Zeile von (21) korrespondiert damit, daß ein Knoten nur einmal aus einem Graphen G entfernt werden kann; der Graph G^{uu} kann daher nicht existieren und das mit ihm korrespondierende Polynom verschwindet identisch zu Null.

In Zusammenhang mit (21) könnte sich die Frage stellen, ob $\tilde{G}$ überhaupt differenzierbar sei; diese und ähnliche Fragen lassen sich leicht beantworten, wenn man für die den einzelnen Knoten zugeordneten Variablen ansetzt: $x_u = x + \varepsilon^u$, worin ε eine beliebig kleine Zahl sei. Die Individualität der einzelnen Variablen wird durch die unterschiedlichen Potenzen von ε gewahrt; der Übergang von $\tilde{G}$ nach G wird mit $\varepsilon \to 0$ kontinuierlich vollzogen. Infolge von $\partial x_u/\partial x = 1$ ist der vorgeschlagene Ansatz außerdem sehr bequem.

Für das, was nun folgt, sei vereinbart:

(1) die den Knoten zugeordneten Variablen seien mit demselben Symbol wie der betreffende Knoten bezeichnet;

(2) die peinliche Unterscheidung von $\tilde{G}$ und G werde fallen gelassen, d.h. $\partial G/\partial u$ werde wie folgt verstanden: Die Funktion $\tilde{G}$ werde nach der dem Knoten u zugeordneten Variablen partiell differenziert und alsbald der Übergang von $\tilde{G}$ nach G vollzogen.

Mit dieser Vereinbarung ist (21) wie folgt zu schreiben:

$$\partial G/\partial u = G^u \ ; \qquad \partial^2 G/\partial u^2 = 0 \ . \tag{21'}$$

Will man die Relation (12) aus (1) herleiten, hat man auf beide Seiten von (1) den Operator $\partial/\partial m$ einwirken zu lassen.
In der Tat erhält man mit

$$\frac{\partial}{\partial m}(G^k G^l - GG^{kl}) = G^k G^{lm} + G^l G^{mk} - G^m G^{kl} - GG^{klm}$$

und

$$\frac{\partial}{\partial m} G_{kl}^2 = 2G_{kl} G_{kl}^m$$

die beiden Seiten von (12) mühelos. Auf gleichartige Weise läßt sich (17) aus (12) und aus (17) eine weitere Relation, usw., gewinnen.

Die hier beschriebene Version der partiellen Differentiation besticht durch Eleganz und Mühelosigkeit; im Gegensatz zu den beiden anderen Versionen, welche die gleichzeitige Herleitung mehrerer Relationen gestatten, kann sie aber nur schrittweise angewandt werden. Wie auch die anderen Versionen setzt sie die Existenz einer Grundbeziehung, hier die Jacobi-Gleichung (1), für ihre Anwendung voraus.

Definiert man mit V_u den folgenden Operator

$$V_u = G^2 \frac{\partial}{\partial u} \frac{1}{G} ,$$

so läßt sich die LS (1) aus 1 gewinnen, es ist nämlich

$$V_l V_k \; 1 = G^k G^l - G G^{kl} \quad ;$$

die RS (1) läßt sich aber durch derartige Operatoren nicht erzeugen. Der Grund hierfür liegt darin, daß G_{kl} demjenigen Minor der Säkulardeterminante (18) entspricht, welcher dem Element $(\boldsymbol{G})_{kl}$ bzw. $(\boldsymbol{G})_{lk}$ adjungiert ist, diesen Elementen hier aber keine Variablen zugeordnet sind [5], so daß G_{kl} nicht durch partielle Differentiation gebildet werden kann.

6. Eine andere Relation

Bisher wurde (4) nicht behandelt. Quadriert man die LS(4), so erhält man nach Anwendung von (1) und (12) und einigen Umformungen

$$[G^kG_{lm} - GG^k_{lm}]^2 = G^2_{kl}G^2_{mk},$$

woraus die gesuchte Relation folgt:

$$G^kG_{lm} - GG^k_{lm} = G_{kl}G_{mk}. \tag{22}$$

Die partielle Differentiation von (22) ergibt die anderen in [1] zitierten Relationen, nämlich

$$G^{kl}G_{lm} - G^lG^k_{lm} = G_{kl}G^l_{mk}, \tag{23}$$

$$G^{kn}G_{lm} + G^kG^n_{lm} - G^nG^k_{lm} - GG^{kn}_{lm} = G_{kl}G^n_{mk} + G^n_{kl}G_{mk}, \tag{24}$$

$$G^{kln}G_{lm} + G^{kl}G^n_{lm} - G^{ln}G^k_{lm} - G^lG^{kn}_{lm} = G_{kl}G^{ln}_{mk} + G^n_{kl}G^l_{mk}. \tag{25}$$

Selbstverständlich kann (25) entweder durch die Einwirkung von $\partial/\partial n$ auf (23) oder durch die von $\partial/\partial l$ auf (24) erhalten werden.

In der gleichen Weise wie (22) läßt sich auch (23) direkt herleiten. Dies trifft aber für (24) nicht zu: Das Quadrat der LS(24) enthält u.a. den Term $-2[G^kG^nG^k_{lm}G^n_{lm}+GG^{kn}G_{lm}G^{kn}_{lm}]$ für welchen keine geeignete Umformung zur Verfügung steht.

Die direkte Herleitung ist nicht der einzige Zugang zu (22). Aus dem Jacobi-Theorem

$$\Delta_{r,t}\Delta_{s,u} - \Delta_{r,u}\Delta_{s,t} = \Delta\Delta_{rs,tu} \tag{26}$$

folgt (22) mit $r = t = k$, $l = s$, $m = u$ unmittelbar, wenn man berücksichtigt, daß $\Delta, \Delta_{k,k}$, $\Delta_{l,m}$, $\Delta_{kl,km}$, $\Delta_{k,l}$ und $\Delta_{k,m}$ der Reihe nach den folgenden Polynomen bzw. Summen von Polynomen entsprechen: G, G^k, G_{lm}, G^k_{lm}, G_{kl} und G_{mk}.

Die Einwirkung von $\partial/\partial k$ auf (22) bringt beide Seiten zum Verschwinden. Die Einwirkung von $\partial^2/\partial m \partial l$ auf (22) erzeugt

$$G^{klm}G_{lm} - G^{lm}G^k_{lm} = G^m_{kl}G^l_{mk}. \tag{27}$$

Mit (22), (23) und (27) und den aus ihnen durch zyklische Permutation der Knoten-Indices erzeugbaren Gleichungen sind alle Relationen dieses Typs für drei ausgezeichnete Knoten k, l und m angegeben. Im Falle von vier ausgezeichneten Knoten, k, l, m und n, sind (24) und (25) noch durch eine Gleichung zu ergänzen, welche durch die Einwirkung von $\partial/\partial m$ auf (25) erhalten werden kann.

Abschließend sei angemerkt, daß die LS(22) durch Einwirkung des im vorigen Abschnitts erwähnten Operators V_k auf $-G_{lm}$ erzeugt werden kann.

$$V_k(-G_{lm}) = G^kG_{lm} - GG^k_{lm}. \tag{28}$$

Für die Erzeugung der RS(22) steht aus den im vorhergehenden Abschnitt diskutierten Gründen kein Operator zur Verfügung.

7. Zusammenfassung und Diskussion

In den Gln. (11), (12), (15), (17), (22)-(25) und (27) sind bisher nicht bekannte Relationen zwischen den charakteristischen Polynomen verschiedener Partialgraphen des schlichten Graphen G (bzw. bestimmten Summen davon) angegeben. Einige dieser Relationen sind direkt herleitbar, andere nur mit Hilfe der beschriebenen Methoden zu erhalten. Die zuletzt beschriebene Methode der partiellen Differentiation ist die wirkungsvollste, sowohl in Hinsicht auf die Ableitung neuer Relationen aus bekannten als auch in Bezug auf die Zusammenhänge zwischen den Polynomen und den mit ihnen korrespondierenden Unterdeterminanten und Partialgraphen.

Alle Relationen, die in dieser Mitteilung angeben sind, lassen sich entweder aus (1) oder aus (22) herleiten. Diese beiden Gleichungen sind aber nichts anderes als Notierungen des Jacobi-Theorems (26) in Termen von Polynomen; so folgt (1) aus (26) mit $r = t = k$ und $s = u = l$, während $r = t = k$, $s = l$, $u = m$ die Relation (22) ergibt. In Anbetracht dieses Umstandes sind die o.a. Relationen zwar als neu, aber nicht als neuartig zu bezeichnen. Von den aus (26) folgenden Beziehungen wurde bisher nur (1) in Termen von Polynomen angegeben [3]. Der Vollständigkeit halber sei hier auch (26) für vier unterschiedliche Knoten, r, s, t und u, in Termen von Polynomen notiert

$$G_{rt}G_{su} - G_{ru}G_{st} = GG_{rt,su} - GG_{ru,st}; \qquad (29)$$

darin ist die an anderer Stelle [1] erörterte Korrespondenz von

$\Delta_{rs,tu}$ mit $[G_{rt,su} - G_{ru,st}]$ berücksichtigt.

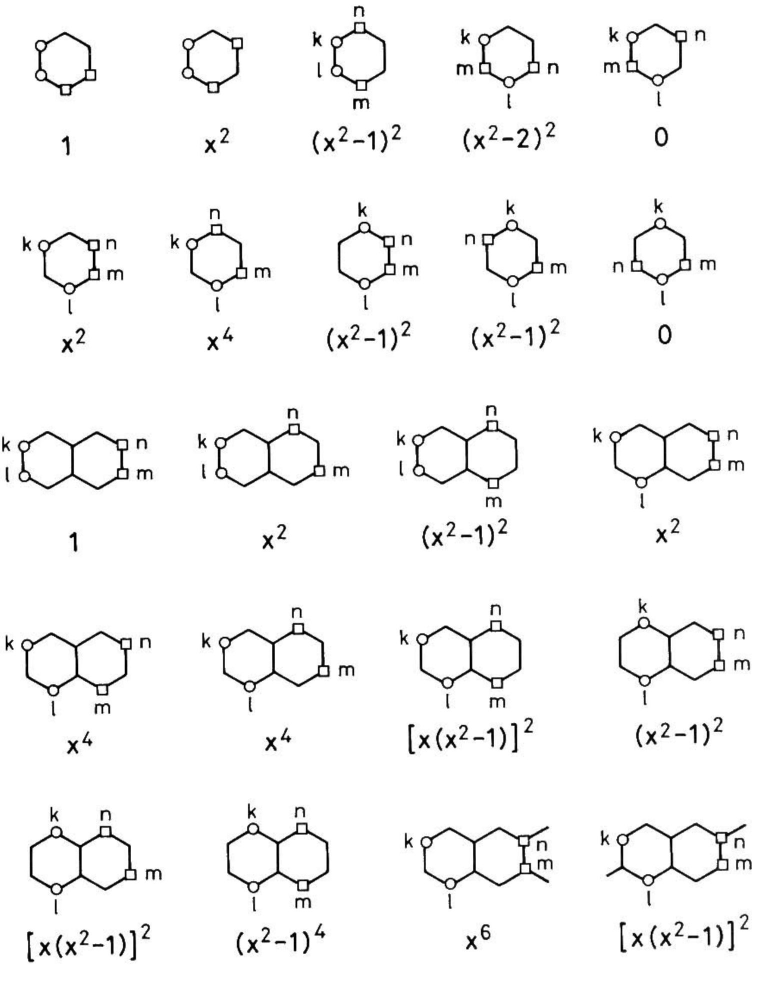
Die RS von (17), (24) und (25) sind Summen von je zwei bilinearen Termen; alle Versuche, diese Beziehungen in zwei unabhängige Relationen aufzuspalten, erwiesen sich als erfolglos, was nicht überrascht, wenn man bedenkt, daß beide Seiten dieser Gleichungen partielle Differentialquotienten darstellen. Nichtsdestoweniger haben diese Versuche im Falle von (17) ein merkwürdiges Resultat gezeitigt, das kurz berichtet sei. Wie leicht geprüft werden kann, ist (17) invariant gegenüber der Vertauschung von k mit l und/oder der Vertauschung von m mit n; ferner lassen sich die bilinearen Terme von (17) in zwei Klassen ordnen: zur einen gehören solche Terme, in denen m und n als Indices ein und desselben Faktors auftreten, und zur anderen solche, in denen m ein Index des einen und n ein Index des anderen Faktors sind. Definiert man eine Funktion, g(x) jeweils durch die Terme einer dieser Klassen, so erhält man

$$g(x) = \tag{30}$$

$$= -G^{m}G^{nkl} - G^{n}G^{klm} + G^{km}G^{lu} + G^{kn}G^{lm} - 2G^{m}_{kl}G^{n}_{kl} =$$

$$= -G^{k}G^{lmn} - G^{l}G^{mnk} + G^{kl}G^{mn} + GG^{klmn} + 2G_{kl}G^{mn}_{kl}.$$

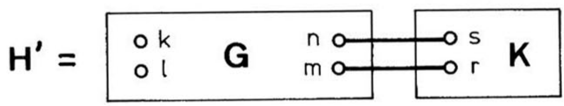
Die beiden letzten Zeilen von (30) wären unabhängige Beziehungen, wenn stets g(x) = 0 wäre; dem ist aber nicht so. Die Funktion g(x) zeigt eine merkwürdige Abhängigkeit von der Einbettung der Knotenpaare k, l und m, n in den Graphen G (siehe Figur 1). Es fällt auf, daß g(x) stets ein Quadrat ist; in vielen Fällen, aber nicht



Figur 1: Strukturabhängigkeit der durch (30) definierten Funktion g(x). Die Knoten k und l sind durch offene Kreise (o), die Knoten m und n durch Quadrate (□) gekennzeichnet; da g(x) invariant gegenüber einer Vertauschung von k mit l und/oder von m mit n ist, sind die Knoten nicht weiter spezifiziert.

in allen, wird g(x) durch $\{\Phi(G-P_{kn}-P_{lm})\}^2$ wiedergegeben. Die Strukturabhängigkeit von g(x) ist nicht geklärt; in gewissem Sinne erinnert sie an den in [1] erwähnten "Structure kernel".

Die im Abschnitt 3 beschriebene Methode besteht darin, die beiden Seiten der Jacobi-Gleichung (13) für einen Graphen H zu entwickeln, welcher den Graphen G als Partialgraphen enthält, und durch Vergleich der Koeffizienten gleicher Potenzen von M, $M^{m'}$, N, $N^{n'}$, usw. Beziehungen zwischen den Polynomen bestimmter Partialgraphen von G aufzufinden. Eine für diese Vorgangsweise notwendige Voraussetzung ist die Unabhängigkeit der Größen M, $M^{m'}$, N, $N^{n'}$, usw. voneinander; sie ist dadurch gegeben, daß die Partialgraphen M, N ..ε H beliebig sein können und nur durch je eine Brückenkante mit G verbunden sind. Die unabdingbare Forderung, die Entwicklung von H nur in unabhängigen Größen durchzuführen, verbietet, in ähnlicher Weise den nachstehenden Graphen H′ zu behandeln:



Die Entwicklung von H′ würde zu einer Reihe in den Potenzen von K, K^r, K^s, K^{rs}, K_{rs} führen, die aber infolge der Jacobi-Gleichung für K, nämlich

$$K^rK^s - KK^{rs} - K_{rs}^2 = 0$$

nicht voneinander unabhängig sind. Interessanterweise findet sich in der Entwicklung von H´ die in (30) definierte Funktion g(x) in den Koeffizienten von K^rK^s und KK^{rs} wieder:

$$\text{coeff.}K^rK^s = -G^mG^{nkl} - G^nG^{klm} + G^{km}G^{ln} + G^{kn}G^{lm} - 2G^m_{kl}G^n_{kl} = g(x)$$

$$\text{coeff.}KK^{rs} = G^kG^{lmn} + G^lG^{mnk} - G^{kl}G^{mn} - GG^{klmn} - 2G_{kl}G^{mn}_{kl} = -g(x).$$

Die Form des Koeffizienten von K^2_{rs} in der Entwicklung von H´ läßt seine Identifizierung mit g(x) nicht zu; in einigen Beispielen wurde aber die Übereinstimmung seines expliciten Ausdruckes in x mit der durch (30) für diese Beispiele definierten Funktion g(x) festgestellt.

8. Danksagung

Den Damen R. Wolf, T. Kammann, U. Heiligenstadt und I. Schneider sei auch hier für die Unterstützung bei der Vorbereitung des Manuskripts aufrichtig gedankt.

9. Literatur und Anmerkungen

[1] O.E. Polansky, Match, dieses Heft, vorstehende Arbeit.

[2] C.A. Coulson, H.C. Longuet-Higgins, Proc. Roy. Soc. A191, 39 (1947).

[3] I. Gutman, Z. Naturforsch. 36a, 1112 (1981).

[4] O.E. Polansky, J. Mol. Struct. 113, 281 (1984).

[5] Bei der Entwicklung der Hückeltheorie [2] sind den Diagonalelementen die Variablen α_r, den übrigen Elementen die Variablen β_{rs} zugeordnet.