

CROATICA  
CHEMICA ACTA

Croat. Chem. Acta Vol. 59 No. 3 513—772 A7—A25 C5—C6 (1986)

Zagreb, 25. srpanj 1986

## SADRŽAJ

Energije veza hidrida i fluorida dušika i fosfora ... <b>J. Berkowitz, S. T. Gibson, J. P. Greene, O. M. Nešković i B. Ruščić</b>	513—526
Jednočestične i dvočestične raspodjele na granici faza tekuće-plinovito ... <b>B. Borštnik, D. Pumpernik i D. Janežič</b>	527—532
Dokaz formula za molekularne orbitale i energijske razine Möbiusovih anulena zasnovan na teoriji specijalnih cikličkih matrica ... <b>A. C. Day, R. B. Mallion i M. J. Rigby</b>	533—538
Simulirana ab initio molekularno-orbitalna (SAMO) metoda ... <b>B. J. Duke i B. O'Leary</b>	539—546
Prednosti modalnog označavanja za jedinstveno identificiranje atoma u kemijskoj nomenklaturi ... <b>A. L. Goodson i N. Lozac'h</b>	547—563
Poziv na permutacijsku reprezentaciju grupa ... <b>W. Hässelbarth</b>	565—582
Kako konstruirati nekekuleovske poliheksagonalne grafove? ... <b>H. Hosoya</b>	583—590
O nekim daljnim klasama izomera koji pokazuju topološki efekt na molekularne orbitale ... <b>J. Hoxha, A. Graovac i O. E. Polansky</b>	591—598
Kinetička i termodinamička svojstva fotosintetičkog sistema ... <b>D. Juretić i F. Sokolić</b>	599—615
Aromatska stabilnost premoštenih poliena ... <b>A. Jurić, N. Trinajstić i G. Jashari</b>	617—633
Faktorizacija kemijskih grafova i njihovih polinoma: Postupak dijeljenja polinoma ... <b>E. C. Kirby</b>	635—641
Optički prijelazi u visoko pobuđenim stanjima: RF LOG spektar XeI ... <b>L. Klasine, D. Kumar, P. L. Clancy i S. P. McGlynn</b>	643—652
Jednostavni model reakcija slobodnih radikala ... <b>M. Klessinger i U. Höweler</b>	653—658
Primjena modela reduciranih crteža. Prebrojavanje Kekuléovih struktura za neke klase velikih benzenoidnih ugljikovodika ... <b>P. Krivka, S. Nikolić i N. Trinajstić</b>	659—668
Konfiguracijski popis, topolojska hiralnost i nove kombinatorijske invarijante ... <b>K. C. Millett</b>	669—684
O prirodi intermetalnih veza u PtSn <sub>M</sub> ... <b>K. Schubert</b>	685—694
Efektivni potencijali interakcije para molekula SO <sub>2</sub> ... <b>F. Sokolić i Y. Guissani</b>	695—710
Teorem sparivanja i teorija svih valentnih elektrona. Aproximativna LCOAO teorija za analiziranje UV i MCD spektara konjugiranih organskih spojeva. 1. ... <b>J. Spanget-Larsen</b>	711—717
Molekularni ID brojevi ... <b>K. Szymanski, W. R. Müller, J. V. Knop i N. Trinajstić</b>	719—724
Möbiusovi $\pi$ -sustavi: Veza između malih cikličkih i velikih lineranih $\pi$ -sustava ... <b>O. Wennerström i U. Norinder</b>	725—729

Prebrojavanje Kekuléovih struktura u jednodimenzionalnim polimerima ... <b>D. Babić</b> i <b>A. Graovac</b>	731—744
Molekularna geometrija i elektronska struktura heptalentropna i heptalendiona ... <b>G. Buemi</b> i <b>F. Zuccarello</b>	745—756
MNDO studij tautomerizacije 3-aciltetramske kiseline ... <b>M. Eckert-Maksić</b> i <b>Lj. Maksimović</b>	757—767
Formalni dokaz da jednočestična particijska funkcija translacije idealnih plinova ovisi o obliku »posude« ... <b>Z. Slanina</b>	769—772
	<i>Prilog</i>
Hrvatsko kemijsko društvo. Izvanredna i redovita godišnja skupština	A7—A25
Obavijest	C5

Redakcija zaključena 24. ožujka 1986.

Godišnja pretplata za časopis CROATICA CHEMICA ACTA iznosi 2500 d (ili US \$ 30), za članove 500 d (ili US \$ 7,5), a za studente-članove 200 d. Za izdavača odgovara odgovorni urednik. Glavni i odgovorni urednik Dr. Vladimir Simeon, Zagreb, Marulićev trg 19/II (Pošt. pret. 163). Uprava: 41001 Zagreb, Marulićev trg 19/II. (Pošt. pret. 163). Ziro račun Hrvatsko kemijsko društvo, Zagreb broj 30102-678-4153

Tisak: SOUR »Vjesnik« — OOUR TM

CROATICA  
CHEMICA ACTA

Croat. Chem. Acta Vol. 59 No. 3

513—772 A7—A25 C5—C6 (1986)

Zagreb, July 25, 1986

## CONTENTS

Bond Energies of Nitrogen and Phosphorous Hydrides and Fluorides ... <b>J. Berkowitz, S. T. Gibson, J. P. Greene, O. M. Nešković and B. Ruščić</b>	513—526
One Particle and Two Particle Distributions in the Liquid-Vapour Inter- face ... <b>B. Borštnik, D. Pumpernik and D. Janežič</b>	527—532
Proof of the Formulae for the Molecular Orbitals and Energy Levels of Möbius Annulenes, Based on the Theory of Skew-Circulant Ma- trices ... <b>A. C. Day, R. B. Mallion and M. J. Rigby</b>	533—538
The Simulated ab Initio Molecular Orbital (SAMO) Method. A Study of the Linear Metallic Hydrogen Chain ... <b>B. J. Duke and B. O'Leary</b>	539—546
Advantages of Nodal Numbering for Uniquely Identifying Atoms in Chemical Nomenclature ... <b>A. L. Goodson and N. Lozac'h</b>	547—563
An Invitation to Permutation Representations of Groups ... <b>W. Hässelbarth</b>	565—582
How to Design Non-Kekulé Polyhex Graphs? ... <b>H. Hosoya</b>	583—590
On Some Further Classes of Isomers Which Exhibit Topological Effect on Molecular Orbitals ... <b>J. Hoxha, A. Graovac and O. E. Polansky</b>	591—598
Membrane Potential as a Coupling Agent for Photophosphorylation by Bacteriorhodopsin and ATP-ase Containing Artificial Membrane ... <b>D. Juretić and F. Sokolić</b>	599—615
Aromatic Stabilities of Bridged Polyenes ... <b>A. Jurić, N. Trinajstić and G. Jashari</b>	617—633
The Factorisation of Chemical Graphs and Their Polynomials: A Poly- nomial Division Approach ... <b>E. C. Kirby</b>	635—641
Optical Transitions in Highly Excited States: RF LOG Spectrum of XeI ... <b>L. Klasinc, D. Kumar, P. L. Clancy, and S. P. McGlynn</b>	643—652
A Simple Model for Free-Radical Reactions ... <b>M. Klessinger and U. Höweler</b>	653—658
Applications of the Reduced Graph Model. Enumeration of Kekulé Stru- ctures for Certain Classes of Large Benzenoid Hydrocarbons ... <b>P. Křivka, S. Nikolić and N. Trinajstić</b>	659—668
Configuration Census, Topological Chirality and the New Combinatorial Invariants ... <b>K. C. Millett</b>	669—684
On the Bindings in the Mixture PtSn <sub>M</sub> ... <b>K. Schubert</b>	685—694
Effective Intermolecular Pair Potentials for Sulphur Dioxide ... <b>F. Sokolić and Y. Guissani</b>	695—710
The Alternant Hydrocarbon Pairing Theorem and All-Valence Electrons Theory. An Approximate LCOAO Theory for the Electronic Ab- sorption and MCD Spectra of Conjugated Organic Compounds. 1. ... <b>J. Spanget-Larsen</b>	711—717
Molecular ID Numbers ... <b>K. Szymanski, W. R. Müller, J. V. Knop, and N. Trinajstić</b>	719—724

Möbius $\pi$ -Systems; Links Between Small Cyclic and Large Linear $\pi$ -Systems	. . . <b>O. Wennerström and U. Norinder</b>	725—729
Enumeration of Kekulé Structures in One-dimensional Polymers	. . . <b>D. Babić and A. Graovac</b>	731—744
Molecular Geometry and Electronic Structure of Heptalentropones and Heptalendiones	. . . <b>G. Buemi and F. Zuccarello</b>	745—756
MNDO Study of Tautomerism in 3-Acetyltetramic Acid	. . . <b>M. Eckert-Maksić and Lj. Maksimović</b>	757—767
A Formal Proof of Vessel-Shape Dependency of the Ideal-Gas One- -Particle Partition Function of Translation	. . . <b>Z. Slanina</b>	769—772
		<i>Appendix</i>
Minutes of the Meeting of the Croatian Chemical Society (in Croatian) Announcement		A7—A25 C5