

CROATICA  
CHEMICA ACTA

Croat. Chem. Acta Vol. 56 No. 2

157—314 (1983)

Zagreb, 30. lipanj, 1983

## SADRŽAJ

Elektronski apsorpcijski i fluorescencijski spektri indolnih derivata. Kvantitativna obradba utjecaja supstituenata i teorijsko razmatranje ... <b>J. J. Aaron, A. Tine, C. Villiers, C. Párkányi i D. Bouin</b>	157—168
Proces desolvatacije elektrofila u reakcijama kombinacije nukleofil-elektrofil ... <b>J. Bertrán, J. Anguiano i A. Oliva</b>	169—174
Odnos strukture i aktivnosti u antiupalnim steroidima: Pristup prepoznavanjem obrasca ... <b>N. Bođor, A. J. Harget i E. Phillips</b>	175—183
SCF-proračuni kao sredstva za interpretaciju reakcijskih mehanizama — slučajevi otpuštanja CO <sub>2</sub> iz ioniziranog ClCH <sub>2</sub> —COOCH <sub>3</sub> i C <sub>2</sub> H <sub>4</sub> iz ioniziranog (CH <sub>3</sub> ) <sub>2</sub> N—COCH <sub>2</sub> X ... <b>G. Frenking i H. Schwarz</b>	185—190
Empirijska formula koja prikazuje međusobnu ovisnost duljine C—C veza ... <b>A. Furka</b>	191—197
Usporedba toplina stvaranja ugljikovodika ... <b>A. Furka</b>	199—201
Strukturalno normiranje topologijske rezonancijske energije ... <b>P. Ilić i N. Trinajstić</b>	203—213
Topologijske rezonancijske energije tiokumarina ... <b>A. Jurić i N. Trinajstić</b>	215—219
Upotreba mikrokompjutera kao pomagala u teorijskim računima ... <b>E. C. Kirby</b>	221—223
Vibronsko sprezanje u karbonilnim spojevima ... <b>G. Marconi i G. Orlandi</b>	225—235
Strukturalna sastavljenost i molekularna svojstva cikličkih sistema s acikličkim ograncima ... <b>Ov. Mekenyan, D. Bonchev i N. Trinajstić</b>	237—261
Fotoelektronski spektri nekih trans-2,2'-disupstituiranih stilbena ... <b>M. Mintas, K. Jakopčić i L. Klasinc</b>	263—267
Dianioni ciklofana s nezasićenim mostovima; ciklička konjugacija u sistemima s 22—38 π-elektrona na perimetru ... <b>U. Norinder, D. Tanner i O. Wennerström</b>	269—280
Fotoelektronska spektroskopija heterocikličkih spojeva. 1-(2-furil)-2-ari-leteni ... <b>I. Novak, L. Klasinc, G. Karminski-Zamola i K. Jakopčić</b>	281—287
Konformacijska analiza s aspekta lokalizacije i delokalizacije ... <b>P. R. Surján</b>	289—295
O postojanju biradikal-ionskih stanja donor-akceptor ciklofana. Jednostavna MO-teorijska studija ... <b>H. Vogler</b>	297—313

CROATICA  
CHEMICA ACTA

Croat. Chem. Acta Vol. 56 No. 2

157—314 (1983)

Zagreb, June 30, 1983

The contents of CCA may be reproduced citing the original form  
in any medium without prior permission

## CONTENTS

Electronic Absorption and Fluorescence Spectra of Indole Derivatives. Quantitative Treatment of the Substituent Effects and a Theoretical Study ... <b>J. J. Aaron, A. Tine, C. Villiers, C. Párkányi, and D. Bouin</b>	157—168
The Electrophile Desolvation Process in Nucleophile-Electrophile Combination Reactions . . . . . <b>J. Bertán, J. Anguiano, and A. Oliva</b>	169—174
Structure-Activity Relationships in the Antiinflammatory Steroids: A Pattern Recognition Approach . . . <b>N. Bodor, A. J. Harget, and E. Phillips</b>	175—183
SCF-Calculations as Tool to Interpret Reaction Pathes — The Cases of CO <sub>2</sub> Loss from Ionized ClCH <sub>2</sub> -COOCH <sub>3</sub> and C <sub>2</sub> H <sub>4</sub> Loss from Ionized (CH <sub>3</sub> ) <sub>2</sub> N-COCH <sub>2</sub> X . . . . . <b>G. Frenking and H. Schwarz</b>	185—190
An Empirical Formula Expressing the Mutual Dependence of C—C Bond Distances . . . <b>A. Furka</b>	191—197
Comparison of the Heats of Formation of Hydrocarbons . . . <b>A. Furka</b>	199—201
Structural Normalization of Topological Resonance Energy ... <b>P. Ilić and N. Trinajstić</b>	203—213
Topological Resonance Energies of Thiocoumarins ... <b>A. Jurić and N. Trinajstić</b>	215—219
The Use of a Micro-Computer as an Aid to Theoretical Calculations ... <b>E. C. Kirby</b>	221—223
Vibronic Coupling in Carbonyl Compounds ... <b>G. Marconi and G. Orlandi</b>	225—235
Structural Complexity and Molecular Properties of Cyclic Systems with Acyclic Branches . . . <b>Ov. Mekenyan, D. Bonchev, and N. Trinajstić</b>	237—261
Photoelectron Spectroscopy of Some trans-2,2'-Disubstituted Stilbenes ... <b>M. Mintas, K. Jakopčić, and L. Klasinc</b>	263—267
Dianions from Cyclophanes with Unsaturated Bridges; Cyclic Conjugation in 22—38 $\pi$ -Electron Perimeter Systems ... <b>U. Norinder, D. Tanner, and O. Wennerström</b>	269—280
Photoelectron Spectroscopy of Heterocycles. 1-(2-Furyl)-2-arylethenes ... <b>I. Novak, L. Klasinc, G. Karminski-Zamola, and K. Jakopčić</b>	281—287
Conformation Analysis in Light of Localization and Delocalization ... <b>P. R. Surján</b>	289—295
On the Existence of Biradical-Ionic States of Donor-Acceptor Cyclophanes. A Simple MO-Theoretical Study . . . . . <b>H. Vogler</b>	297—313