

CROATICA
CHEMICA ACTA

Croat. Chem. Acta 49 (1977) No. 4

Zagreb, Jugoslavija

26.04.1978.

SADRŽAJ

Opća i teorijska kemija

- Računanje karakterističnog polinoma konjugiranog sustava pomoću Sachsova teorema . . . **N. Trinajstić** 593—633
- Nove primjene Dewarova broja . . . **I. Gutman** 635—641
- Sustavni studij simetrijskih svojstava grafova. I. Petersonov graf . . . **M. Randić** 643—655
- Hibridizacija maksimalnog prekrivanja u molekulama PF₅ i SF₄ . . . **K. M. Sun, T. C. W. Mak i W. K. Li** 657—664
- Računi samousklađenog polja na molekuli HCl metodom razvoja valne funkcije na jednom centru. Dio II. Analiza gradijenta električkog polja izračunanog s pomoću valne funkcije jednog centra kod jezgre atoma klora **J. E. Grabenstetter i M. A. Whitehead** 665—675
- Primjena mnogo-čestične Rayleigh-Schrödingerove perturbacijske teorije na studij pobuđenja koja slijede fotoionizacijske procese u molekulama . . . **I. Hubač i V. Kvasnička** 677—684
- Patološko ponašanje računa potencijalnog polja uslijed nestabilnosti Hartree-Fockove metode zbog smanjene simetrije . . . **C. Trindie** 685—693
- Usporedba semiempirijskih i ab initio računa molekularnih svojstava. I. Dijamagnetska susceptibilnost i kvadrupolni momenti nekih molekula srednje veličine . . . **A. Graovac, Z. B. Maksić, K. Rupnik i A. Veseli** 695—707
- Ultraljubičasti i infracrveni spektri nekih *p*-nitrobenzil fenil etera . . . **A. M. G. Nassar, A. H. Hindawey, S. H. Etaiw, R. M. Issa i F. M. Issa** 709—712
- Vodljivost *S*-alkilisotiuronijevih jodida u metanolu pri 25 °C . . . **Amina M. Hafez, H. Sadek i N. H. el-Hammamy** 713—716
- Proučavanje elektronskih i magnetskih spektara kompleksa kroma, željeza i kobalta s 4-benzilamidotiosemikarbazidom i tiosemikarbazonom . . . **M. C. Jain i P. C. Jain** 717—726
- Masni spektri in kinetične energije ionov nekaterih fluoro-kloro substituiranih norbornanov in nortriciklanov . . . **B. Kralj, V. Kramer, M. Trkman in J. Marsel** 727—737
- Mössbauerovi spektri željezo(III) jodata i perjodata . . . **S. Musić, J. Šipalo-Žuljević, B. Šuveljak-Šipalo, I. Nagy-Czakó i A. Vértes** 739—742
- π -Participacija u solvolizi i sekundarni deuterijski izotopni efekti. Oktahidrodimetanaftalenski sustav . . . **R. Malojčić, S. Borčić i D. E. Sunko** 743—749
- Kronopotenciometrijsko istraživanje prethodeće kemijske reakcije drugog reda: Ti(IV) u tiocijanatnoj otopini . . . **M. Vuković i V. Pravdić** 751—756

Gornja granica brzine prijenosa protona ... A. I. Hassid, Tai-Ming Liang, R. Eliason i M. M. Kreevoy	757—765
Spektrofotometrijski studij kiselinsko-bazne ravnoteže u bezvodnim otapalima ... T. Jasinski, A. A. El-Harakany, A. A. Taha i H. Sadek	767—777

Kemijska sinteza

Deftaloilacija cefalosporina i penicilina koji sadržavaju ftalimid ... S. Kukolja, S. R. Lammert i A. I. Ellis	779—795
2-Acetamido-2-deoksi-D-manono-1,5-lakton: sinteza i studij inhibicije 2-acetamido-2-deoksi-β-D-glukozidaze ... M. Pokorny i N. Pravdić	797—807
Kemija 2,4-dioksotiazolidina.II. Amonoliza 2,4-dioksotiazolidina i njegovih derivata K. Popov-Pergal, M. Pergal i D. Jeremić	809—812
Ciklizacija dietil(ftalimidoacetil)malonata u 3-(ftalimidometil)pirazolin-5-one ... N. Bregant, I. Perina i M. Malnar	813—818
Hidroliza nekih organofosfornih jedinjenja. Deo I. Reakcije u alkalnom rastvoru ... D. Minić i D. Rakin	819—828
Sinteza i spektralna svojstva hidroksi i metoksi supstituiranih benzen-azofosfonata Lj. Tušek i V. Jagodić	829—835
Reakcije klorida 1-benzotriazolkarboksilne kiseline. I. Sinteza 2,6-bis(hidroksimetil)piridinkarbamata ... I. Butula, M. V. Proštenik i V. Vela	837—842
Reakcije klorida 1-benzotriazolkarboksilne kiseline.III. Piridoksinkarbamati i srodni spojevi ... M. V. Proštenik, V. Vela i I. Butula	843—849
Transesterifikacije u sintezi dinukleozidfosfata s dihidropirimidin-nukleozidima kao komponentama ... V. Škarić, M. Hohnjec i Đ. Škarić	851—856
Reakcije ferocena s kloridima dikarboksilnih kiselina ... M. Laćan, V. Rapić i A. Brbot-Šaranović	857—867

Analitička kemija

Mogućnosti proširenja detekcijskih funkcija analitičkog sistema na niske koncentracije C. Liteanu, I. Rică i E. Hopârtean	869—878
--	---------

Prilozi

Prikazi knjiga	A43—A50
Disertacije	B19—B20
Oglasi	C5—C9
Errata	C11
Sadržaj: Croatica Chemica Acta , Vol. 49	XIX—XXIII
Indeks	XXV—XXI

CROATICA
CHEMICA ACTA

Croat. Chem. Acta 49 (1977) No. 4

Zagreb, Yugoslavia

26.04.1978.

CONTENTS

General and Theoretical Chemistry

- Computing the Characteristic Polynomial of a Conjugated System Using the Sachs Theorem . . . **N. Trinajstić** 593—633
- New Applications of the Dewar Index **I. Gutman** 635—641
- A Systematic Study of Symmetry Properties of Graphs. I. Petersen Graph **M. Randić** 643—655
- Maximum Overlap Hybridization in PF₅ and SF₄ . . . **K. M. Sun, T. C. W. Mak, and W. K. Li** 657—664
- One-Centre-Expansion Self-Consistent-Field Calculations on HCl. Part 2. Analysis of the Electric Field Gradient, EFG, at the Cl Nucleus from OCE-SCF Wave Functions . . . **J. E. Grabenstetter and M. A. Whitehead** 665—675
- Application of Many-Body Rayleigh-Schrödinger Perturbation Theory to Excitations Accompanying Photoionization in Molecules **I. Hubač and V. Kvasnička** 677—684
- Pathology in Force-Field Computation Associated with Hartree-Fock Symmetry-Breaking Instability . . . **C. Trindie** 685—693
- Semiempirical versus ab Initio Calculations of Molecular Properties. I. Diamagnetic Susceptibilities and Quadrupole Moments in Some Medium Size Molecules . . . **A. Graovac, Z. B. Maksić, K. Rupnik, and A. Veseli** 695—707
- Ultraviolet and Infrared Spectra of Some *p*-Nitrobenzyl Phenyl Ethers . . . **A. M. G. Nassar, A. M. Hindawey, S. H. Etaiw, R. M. Issa, and F. M. Issa** 709—712
- Conductance of *S*-Alkylisothiuronium Iodides in Methanol at 25 °C . . . **Amina M. Hafez, H. Sadek, and N. H. el-Hammamy** 713—716
- Magneto-Spectral Studies on Some Trivalent Metal Complexes: Chromium, Iron and Cobalt Complexes Derived from 4-Benzyl-amidothiosemicarbazide and its Thiosemicarbazide . . . **M. C. Jain and P. C. Jain** 717—726
- The Mass and Ion Kinetic Energy Spectra of Fluoro-Chloro Substituted Norbornanes and Nortricyclanes . . . **B. Kralj, V. Kramer, M. Trkman, and J. Marsel** 727—737
- Mössbauer Spectra of Iron(III) Iodate and Periodate . . . **S. Musić, J. Šipalo-Žuljević, B. Šoveljak-Šipalo, I. Nagy-Czakó and A. Vértes** 739—742
- π -Participation in Solvolysis and Secondary Deuterium Isotope Effects. Octahydrodimethanonaphthalene System . . . **R. Malojčić, S. Borčić, and D. E. Sunko** 743—749

(Continued on inside back cover)

(Continued from outside back cover)

Chronopotentiometric Studies of a Preceding Chemical Reaction of Second Order: Ti(IV) in SCN ⁻ Solution ... M. Vuković and V. Pravdić	751—756
The Upper Limit on Rates of Proton Transfer ... A. I. Hassid, Tai-Ming Liang, R. Eliason, and M. M. Kreevoy	757—765
Spectrophotometric Study of Acid-Base Equilibria in Non-Aqueous Solvents ... T. Jasinski, A. A. El-Harakany, A. A. Taha, and H. Sadek	767—777

Chemical Synthesis

Dephthaloylation of Phthalimido-Containing Cephalosporins and Penicillins ... S. Kukulja, S. R. Lammert, and A. I. Ellis	779—795
2-Acetamido-2-deoxy-D-mannono-1,5-lactone: Synthesis and Inhibition of 2-Acetamido-2-deoxy-β-D-glucosidase ... M. Pokorny and N. Pravdić	797—807
Chemistry of 2,4-Dioxothiazolidine.II. Ammonolysis of 2,4-Dioxothiazolidine and its Derivatives ... K. Popov-Pergal, M. Pergal, and D. Jeremić	809—812
Cyclization of Diethyl (phthalimidoacetyl)malonate into 3-(Phthalimidomethyl)pyrazolin-5-ones ... N. Bregant, I. Perina, and M. Malnar	813—818
Hydrolysis of Some Organophosphorus Compounds. Part I. Reactions in Alkaline Solution ... D. Minić and D. Rakin	819—828
Synthesis and Spectral Properties of Hydroxy- and Methoxy-Substituted Benzeneazophosphonates ... Lj. Tušek and V. Jagodić	829—835
Reactions with 1-Benzotriazolecarboxylic Acid Chloride. I. Synthesis of the 2,6-bis(hydroxymethyl)pyridinedicarbamates ... I. Butula, M. V. Proštenik, and V. Vela	837—842
Reaktionen mit 1-Benzotriazolocarbonsäurechlorid.III. Pyridoxinkarbamate und verwandte Verbindungen ... M. V. Proštenik, V. Vela, and I. Butula	843—849
Transesterifications in the Synthesis of Dinucleoside Phosphates Containing Dihydropyrimidine Nucleoside Residues ... V. Škarić, M. Hohnjec, and Dj. Škarić	851—856
Ferrocene Compounds. VI. Reactions of Ferrocene with Dicarboxylic Acid Chlorides ... M. Lačan, V. Rapić, and A. Brbot-Šaranović	857—867

Analytical Chemistry

The Possibility of Extending the Detection Function of an Analytical System to Lower Concentrations ... C. Liteanu, I. Rică, and E. Hopârtean	869—878
---	---------

Appendix

Book Reviews (In Croatian)	A43—A50
Dissertations	B19—B20
Announcements	C5—C9
Errata	C11
Contents: Croatica Chemica Acta, Vol. 49	XIII—XVII
Index	XXV—XXXI

Naslovna stranica

S. Maričić

Cover design by