

ЗМІСТ

- 6 Симетрія парності в ряді проблем квантової та структурної хімії. **А.В. Лузанов**
- 38 Новий підхід у використанні топологічних дескрипторів. Ітерований реберний граф у проблемі фізико-хімічних властивостей насичених вуглеводнів. **А.Б. Захаров, В.В. Іванов**
- 46 Полярізаційне силове поле для молекулярно-динамічного моделювання наночастинок срібла. **М.М. Блажинська, О.В. Кириченко, О.М. Калугін**
- 59 Вольтамперометричне дослідження особливостей анодної обробки біомедичної нержавіючої сталі AISI 304 в ethaline: вплив температури та добавок води. **А.А. Кітик, Н.Г. Банник, О.В. Кун**
- 67 Синтез заміщених піроло[2,3-*d*]піримідинів та піридо[2,3-*d*]піримідинів в одnoreакторній конденсації 2-тіо-6-аміноурацилу, арилглюксалів і СН-кислот. **Н.М. Колос, Н.В. Чечина**

CONTENTS

- 6 Parity symmetry in a number of problems of quantum and structural chemistry. **A.V. Luzanov**
- 38 A new approach in topological descriptors usage. Iterated line graphs in the theoretical prediction of physico-chemical properties of saturated hydrocarbons. **A.B. Zakharov, V.V. Ivanov**
- 46 Polarizable force field for molecular dynamics simulations of silver nanoparticles. **M.M. Blazhynska, A.V. Kyrychenko, O.N. Kalugin**
- 59 Voltampermetric investigation of peculiarities of anodic processing of biomedical stainless steel AISI 304 in ethaline: temperature and additional water influence. **A.A. Kityk, N.G. Bannyk, O.V. Kun**
- 67 Synthesis of substituted pyrrolo[2,3-*d*]pyrimidines and pyrido[2,3-*d*]pyrimidines in the one-pot condensation of 2-thio-6-aminouracil, arylglyoxals and CH-acids. **N.N. Kolos, N.V. Chechina**

СОДЕРЖАНИЕ

- 6 Симметрия парности в ряде задач квантовой и структурной химии. ***А.В. Лузанов***
- 38 Новый подход в использовании топологических дескрипторов. Итерированный реберный граф в проблеме физико-химических свойств насыщенных углеводородов. ***А.Б. Захаров, В.В. Иванов***
- 46 Поляризационное силовое поле для молекулярно-динамического моделирования наночастиц серебра. ***М.М. Блажинская, А.В. Кириченко, О.Н. Калугин***
- 59 Вольтамперометрическое исследование особенностей анодной обработки биомедицинской нержавеющей стали AISI 304 в ethaline: влияние температуры и добавок воды. ***А.А. Китык, Н.Г. Банник, Е.В. Кун***
- 67 Синтез замещенных пирроло[2,3-*d*]пиримидинов и пиридо[2,3-*d*]пиримидинов в одnoreакторной конденсации 2-тио-6-аминоурацила, арилглиокселей и СН-кислот. ***Н.Н. Колос, Н.В. Чечина***