

PRIKAZI KNJIGA — BOOK REVIEWS

Houben-Weyl

Methoden der organischen Chemie

Band E 20/ Teil 1 und 2

MAKROMOLEKULARE STOFFE

Editors: Herbert Bartl and Jürggen Falbe

325 Tables, 144 Figures

Georg Thieme Verlag, Stuttgart, New York, 1987

Volume E 20, Parts 1 and 2, of Houben-Weyl's *Methods of the Organic Chemistry* is entitled *Macromolecular Compounds*. The same subject was already reviewed in vol. XIV (Parts 1 and 2), about 25 years ago. The present volume offers a contemporary view on the chemistry of polymers. Part 1 of vol. E 20 (656 pp) describes the synthetic methods used in polymer chemistry, such as those of polyadditions, polycondensations or polymerisations of monomers having multiple C,C or C,X (X = heteroatom) bonds. Chemical transformations of polymers and multiple polymerisations are also found in the survey of synthetic methods. Polymerisation reactions are divided according to the initiators and the reaction media (polymerisations in homogeneous and heterogeneous media, emulsions, suspensions, etc.).

Part 2 (p 657—1793) classifies the polymers as those having only C-atoms in the main chain (alkenes, alkynes, arynes) and those containing C- and hetero-atoms (polyethers, -anhydrides, -esters, -sulphides, -sulphones, -amines, -amides, -urethanes, -ureas etc.). For each class of polymers precise descriptions are given of the synthetic procedures and apparatus.

MLADEN ŽINIĆ

Houben-Weyl

Methoden der organischen Chemie

Vierte völlig neu gestaltete Auflage

Band 13 Teil 9a

Metallorganische Verbindungen

Mn Re Fe Ru Os Pt

Herausgegeben von Adolph Segnitz

74 Tabellen

Georg Thieme Verlag Stuttgart-New York, 1986

Vol. 13, Part 9a, of Houben-Weyl's *Methods of the Organic Chemistry* describes the chemistry of the organo-manganese, -rhenium, -iron, -ruthenium, -osmium and -platinum compounds containing at least one metal-carbon σ -bond. Organometallic compounds are classified according to the increase of the transition metal oxidation state; within the same oxidation state the organometallic compounds are divided into the following groups: alkyl-, ylidy-, (1-alkenyl), (1-alkynyl), metallolo-, aryl-, acyl-, alkoxy-carbonyl-, and aminocarbonyl-compounds. The chemistry of Mn, Re, Fe, Ru and Os organometallic compounds is reviewed by the Editor, A. Segnitz,

while that of Pt by K. von Werner. The basic concept of the Houben-Weyl's »Methods«, characterized by the presence of the representative synthetic procedures, is included in this volume, too. The emphasis is on the preparations and rearrangements of the organometallic compounds and their uses in the synthetic organic chemistry. Organomanganese and organoiron compounds are important in the C—C bond forming reactions (alkylations, arylations). Some of the organoiron compounds may be used as analogues of the Grignard reagents, while the others are important in the carbon monoxide insertion reactions leading to the ketones, aldehydes, lactones, esters, carboxylic acids and carboxylic acid chlorides. 2-Alkenyl or 2-alkynyl-manganese, -iron and -ruthenium compounds react with electrophilic reagents giving saturated or unsaturated five-membered ring systems. Some of the organomanganese, -iron and platinum compounds are catalysts for hydrogenations under homogeneous reaction conditions, isomerisations and polymerisations of alkenes and alkyne. This volume (874 pp) also contains the relevant Bibliography and the Author and Subject Indexes.

MLADEN ŽINIĆ

*Houben-Weyl**Methoden der organischen Chemie**Erweiterungs- und Folgebände zur vierten Auflage.*

Herausgegeben von K. H. Büchel, J. Falbe, H. Hagemann, M. Hanack, D. Klamann, R. Kreher, H. Kropf und M. Regitz

*Band E 18/ Teil 1 und 2**Organo- π -metall-Verbindungen als Hilfsmittel in der organischen Chemie*

Editor: Jürgen Falbe, 156 Tables, 23 Figures

Georg Thieme Verlag Stuttgart-New York, 1986

Vol. E 18 of Houben-Weyl's *Methods of the Organic Chemistry* presents the chemistry of the organometallic π -complexes. This volume is a supplement to the preceding ones: XII/1, XII/2a, b, XIII/3a, b, c, XIII/4, 5, 6, 7, 8, 9 and V/2a dealing with the corresponding reactions of σ -complexes. The content is organized in three main parts: the synthesis of the organometallic π -complexes (Chapter I) and the stoichiometric (Chapter II) and catalytic (Chapter III) reactions of such complexes. Part I (p 1—748) of Vol. E 18. contains Chapters I, II and IIIa (hydrogenations, hydrometallations, dimetallations) and Part II (p 750—1333) contains the remaining part of Chapter III and ends with the Bibliography (Chapter IV) and the Author and Subject Indexes.

In Chapter I by P. L. Pauson numerous synthetic methods for the preparation of different types of the organometallic π -complexes are arranged according to the number of C-atoms of the organic π -ligand system. The Chapter also contains many of the representative procedures for the preparation of important types of these complexes. Chapter II (written also by P. L. Pauson) describes the stoichiometric reactions of the organometallic π -complexes, such as substitutions and addition reactions which alter the organic ligand. The major part of Vol. E 18 reviews the reactions of great importance for the organic syntheses which use the organometallic π -complexes as catalysts (Chapter III). This Chapter is the result of the common effort of 15 chemists from Germany, Hungary, Sweden and Great Britain. Especially interesting topics included in Chapter III are: hydrogenations using the polymer-bound organometallic π -complexes, asymmetric hydrogenations under homogeneous catalysis conditions, hydroalkylations and hydroacylations, carbene additions and insertions, oxidations and reductions catalyzed by the organometallic π -complexes.

MLADEN ŽINIĆ

Houben-Weyl

METHODEN DER ORGANISCHEN CHEMIE, Band XVI/Teil 1, 689 pp. Register der Arbeitsvorschriften von Stoffklassen (alphabetisch) und Einzelverbindungen (CH...-Register) der Bände I—XV sowie E 1—5 und E 11.

Georg Thieme Verlag, Stuttgart-New York, 1986

METHODEN DER ORGANISCHEN CHEMIE, Band XVI/Teil 2a, 805 pp. Register der Stoffklassen (allgemein, offenkettige) der Bände I—XV sowie E 1—5 und E 11.

Georg Thieme Verlag, Stuttgart-New York, 1987

METHODEN DER ORGANISCHEN CHEMIE, Band XVI/Teil 2b, 1198 pp. Register der Stoffklassen (cyclische, Spiro- und Bi-Verbindungen; Steroide); Namensreaktionen der Bände I—XV sowie E 1—5 und E 11.

Georg Thieme Verlag, Stuttgart-New York, 1987

Index Volume XVI/1 lists all the experimental procedures for the preparation of the classes of substances and of individual compounds published in the 4th Edition, as well as those in Volumes 1 to 5 and 11 of supplementary E-series of Houben-Weyl. This part of Vol. XVI, with two sections (classes of substances, pp 1—25, and CH-index of individual compounds, pp 26—689) includes all classes or individual compounds which can be found in the mentioned Houben-Weyl Volumes if sufficient experimental details are given that they may be synthesized without further reference to the literature. A total of 70,000 individual compounds with about 80,000 synthetic procedures have been indexed in this Volume. This represents about 7% of the individual compounds mentioned in the Volumes of Houben-Weyl.

The second part (Vol. XVI/2) contains and index of the classes of substances treated in the mentioned Volumes of Houben-Weyl but the substance classes therein are more finely subdivided. As a consequence of the very large number of classes of compounds described in the Houben-Weyl Volumes mentioned, Volume XVI/2 is divided into two parts: open-chain compounds (Vol. XVI/2a, pp 805) and cyclic compounds (Vol. XVI/2b, pp 1198). At the end of this part an index of the named reactions has been added (Namensreaktionen, pp 1178—1198).

Both parts, Vol. XVI/1 and Vol. XVI/2 are going to be enormously helpful to all organic chemists and others interested in the practice of organic synthesis and the use of Houben-Weyl Methoden der Organischen Chemie as a source of quick information.

K. JAKOPČIĆ

V. Gold, K. L. Loening, A. D. McNaught and P. Sehmi

Compendium of Chemical Terminology

Blackwell, Oxford 1987, viii + 456 pp.

The main goal of this 'compendium' was to list the official definitions of the terms used in all branches of chemistry and physical chemistry. 'Official' should be understood as: issued by an IUPAC body and published in an IUPAC document. The project of the book was initiated by the late Victor Gold, member of the IUPAC Interdivisional Committee for Nomenclature and Symbols, and was continued and completed by the other three co-authors. The book contains the material published up to the end of 1985 by five IUPAC divisions (Physical, Inorganic, Organic, Macromolecular, Analytical Chemistry — no material was included from the Applied Chemistry and Clinical Chemistry divisions). The compilation can be judged as thorough and reliable — the authors should be complimented on their excellent job. However, a faint trace of dissatisfaction is left after the perusal of the book: the authors restricted the scope of the book, seemingly without a single exception, to the officially approved material, even at the cost of furnishing incomplete information. For example, the terms 'enthalpy', 'entropy', 'enzyme' seem to have never been formally defined in any IUPAC document and, consequently, are not entered.

However, many terms derived from them happened to have been defined and are entered in the 'Compendium': e.g. 'enthalpy of activation', 'enthalpy of wetting', 'entropy of activation', 'enzyme catalysis', etc. Inclusion of definitions of the terms of basic importance, provided they are clearly marked as 'non-official', would undoubtedly enhance the usefulness of the 'Compendium' and point to the omissions in the body of defined notions and physical quantities. It is hoped that this will be done in the future editions.

VL. SIMEON

SURFACTANTS IN SOLUTION, Vol. 4, 5, 6

K. L. Mittal and P. Bothorel, Eds.

Plenum Press, New York and London, 1986.

Volumeni 4, 5, 6 zbornici su petoga internacionalnog simpozija *Surfactants in Solution* održanoga u Bordeaux-u, Francuska 9—13. srpnja 1986. Taj je simpozij nastavak serije simpozija započetih u Albany, N. Y. 1976. (zbornik: *Micellization, Solubilization and Microemulsions*; Vol. 1 and 2, K. L. Mittal, Ed., Plenum Press, N. Y., 1977). Druga dva simpozija održana u Knoxville-u, TN., 1978, i u Potsdamu, N. Y., 1980, zabilježena su u publikacijama dvaju zbornika radova, i to: *Solution Chemistry of Surfactants*, Vol. 1 and 2, K. L. Mittal, Ed., Plenum Press, N. Y. 1979, i *Solution Behavior of Surfactants: Theoretical and Applied Aspects*, Vol. 1 and 2, K. L. Mittal and E. J. Fendler, Eds., Plenum Press, N. Y. 1982. Četvrti simpozij održan u Lundu, Švedska, nosi naslov sadašnje serije, a publikacije radova sabrane su u zborniku: *Surfactants in Solution*, Vol. 1, 2 and 3, K. L. Mittal and B. Lindman, Eds., Plenum Press, N. Y. 1984.

Ovaj zbornik u tri volumena (4, 5 i 6) sadrži 137 radova mnogih autora iz velikog broja zemalja iz cijelog svijeta, a radovi su razvrstani prema područjima u osam dijelova, pokrivajući ova područja: agregacija surfaktanata; struktura, dinamika i karakterizacija micela; fazni dijagrami i ponašanje faza surfaktanata u otopini; ponašanje inverznih micela; micelarna kataliza i reakcije u micelama; biološki amfilili, dvosloji, vezikule i liposomi; adsorpcija surfaktanata i ponašanje monoslojeva; formiranje i karakterizacija mikroemulzija te reakcije u mikroemulzijama; adsorpcija i kvašenje; teorije površinske napetosti; kromatografija pjena; rešetke i emulzije; mineralna flotacija.

Ova edicija ima u sva tri volumena 1747 stranica, a zajedno s prijašnje četiri edicije te serije (spomenute u uvodnom dijelu) više od 7000 stranica, i zato predstavlja vrlo dobar prikaz sadašnjeg stanja istraživanja na tom području, kao i izvor novih istraživačkih ideja.

U prikazu radova ove edicije mogu se izdvojiti područja u pojedinim volumenima. Lakom snalaženju u ovoj ediciji doprinosi činjenica, da u svakom volumenu nalazimo sadržaj ostalih dvaju volumena, biografske podatke o autorima i abecedno kazalo pojmova.

D. TEŽAK

Metal Complexes with Tetrapyrrole Ligands I

Editor: J. W. Büchler

Structure and Bonding, Vol. 64

Springer Verlag, Berlin (1987) 275 stranica, 73 slika i 58 tablica.

J. W. Büchler, je kao gost urednik u posebnom svesku serije *Struktura i vezivanje* posvećenom metaloporfirinima uspio dobrim izborom istaknutih istraživača dati pregled stupnja znanja na ovom području. Metalni kompleksi tetrapirrolnih liganda predstavljaju, kao što je poznato, raširenu klasu koordinacijskih spojeva koja uključuje biološki značajne derivate hema, klorofila i vitamina B₁₂. Knjiga je podijeljena u četiri poglavlja: 1) *Novija dostignuća u stereokemiji metalnih tetrapirola* (W. R. Scheidt, Y. J. Lee); 2) *Infracrveni i ramanski spektri metaloporfirina* (T. Kitagava, Y. Ozaki); 3) *Sinteza i struktura biomimetskih porfirina* (B.

Morgan, D. Dolphin) i 4) *Sinteza, elektrokemija i strukturna svojstva porfirina s jednostrukim vezama metal-ugljik i vezama metal-metal* (R. Guillard, C. Lecomte, K. M. Kadish). Prva dva poglavlja o stereokemiji i vibracijskim spektrima koja su uskoj vezi s naslovom serije, pokazuju kako su fine interakcije između metala i tetrapirolnih liganada i kako brojnim dostupni podaci omogućuju dobar uvid u intra- i intermolekularno vezivanje u metal-tetrapirolnim sustavima. To će zacijelo potaknuti daljnja istraživanja o odnosu strukture i djelovanja u biokemiji tetrapirolnih sustava. Druga dva poglavlja odnose se na noviji razvoj u sintetskoj kemiji tetrapirolnih kompleksa. Nadovezujući se na prve radove T. G. Traylora, J. P. Collmana i J. E. Baldwin koji opisuju porfirine s modifikacijama na obodu, zamišljenim tako da posjeduju svojstva makromolekularnih hem-proteina, daroviti organski kemičari stvorili su mnoštvo različitih supstituiranih porfirina. Stoga je pregledni rad o biomimetskim porfirinima koristan za svakoga tko radi na tom području. Članak o jednostrukim vezama metal-ugljik i vezama metal-metal pokazuje kako građevni blokovi poznati iz organometalne kemije mogu u kombinaciji s metaloporfirinskim sustavima tvoriti fascinirajuće klase molekula. Pored prikaza opće strategije u sintezi organometalnih porfirinskih kompleksa, u ovom preglednom članku opisana su elektrokemijska i strukturna svojstva metaloporfirina s gledišta organometalne kemije. Knjiga je popraćena autorskim indeksom svezaka 1—64 i poslužit će kao dragocjeni izvor informacija istraživačima na tom području.

MLADEN MINTAS

OCCURRENCE, PROPERTIES AND UTILIZATION OF NATURAL ZEOLITES

Urednici: D. Kallo i H. S. Sherry

Izdavač: Akademiai Kiado, Budapest 1988. g.

Str. XII + 857

To je zbornik radova 2. međunarodne konferencije o nalazištu, svojstvima i upotrebi prirodnih zeolita, održane od 12. do 16. kolovoza 1985. u Budimpešti, Mađarska.

Zbornik sadrži 66 pozvanih i prihvaćenih radova u 10 poglavlja: *Geologija i mineralogija* (10), *Sinteza i stabilnost* (6), *Kristalokemija i fizička svojstva* (10), *Opća primjena* (3), *Ionska zamjena* (5), *Pročišćavanje voda* (7), *Adsorpcija* (4), *Kataliza* (6), *Primjena u agrikulturi* (7) i *Različito* (8).

Iako su prirodni zeoliti i njihova osnovna svojstva poznati već više od dva stoljeća, industrijski su se počeli upotrebljavati prije manje od 30 godina. Ubrzan razvoj kemije i tehnologije sintetskih zeolita i njihove komercijalne primjene kao adsorbensa, katalizatora, molekulskih sita i ionskih izmjenjivača, u posljednje tri dekade, ukazao je na mogućnost korištenja bogatih nalazišta prirodnih zeolita u iste ili slične svrhe. Iako zbog relativne nečistoće, strukturne imperfekcije i relativnog »siromaštva« strukturnih varijeteta, prirodni zeoliti ne mogu u potpunosti zamijeniti sintetske, velika nalazišta, relativno jeftina eksploatacija i mogućnost kemijskih modifikacija čine ih veoma interesantnim supstituentima njihovim sintetskim analogima. Osim standardnih načina upotrebe kao selektivnih kationskih izmjenjivača, sredstva za uklanjanje amonijevih iona iz gradskih i industrijskih otpadnih voda i u agrikulturi, prezentirani radovi upućuju na mogućnost korištenja prirodnih zeolita u građevinskoj industriji (dodaci cementima), za sušenje i pročišćavanje plinova (uklanjanje sumpornih i dušikovih spojeva), za obogaćenje zraka kisikom, u industriji papira, gume i plastike (punila), kao katalizatora u kemijskoj i petrokemijskoj industriji, za solidifikaciju i odlaganje radioaktivnog otpada, u solarnoj energetici i dr.

Budući da i u našoj zemlji postoje znatna nalazišta prirodnih zeolita (o kojima su na konferenciji izvijestili N. Krošl-Kuščer i P. Kovič iz Geološkog zavoda u Ljubljani i J. Obradović iz Fakulteta za rudarstvo i geologiju Univerziteta u Beogradu), ova opsežna knjiga može biti za stručnjake iz raznih grana kemijske industrije i šire, veoma interesantno štivo u kojem mogu naći vrlo jednostavna i u mnogim slučajevima jeftina rješenja za mnoge probleme i ideje za nove poslove.

B. SUBOTIC

Studies in Physical and Theoretical Chemistry 51

GRAPH THEORY AND TOPOLOGY IN CHEMISTRY

A Collection of Papers Presented at an *International Conference held at the University of Georgia*, Athens, Georgia, U.S.A., 16—20 March 1987

Edited by R. B. King and D. H. Rouvray

Elsevier, Amsterdam 1987

Teorija crteža ili grafova u kemiji i dalje vidljivo napreduje, usprkos indiferečnosti, pa čak i otvorenom »neprijateljstvu« jednog dijela kemičara. Takvo je stanje znak stanovite krize u teorijskoj kemiji. »Unfortunately... piše J. D. Hirschfelder u svom članku *My Adventure in Theoretical Chemistry* (*Ann. Rev. Phys. Chem.* 34 (1983) 1—29, str. 2) ... now there are too few theoretical chemists with sufficient vision to take the giant step of exploring completely new techniques. Instead, scientists in the 1980s get immersed in a maze of computational details that they lose sight of the simple, elegant theories«. Slično, E. Bright Wilson u poznatoj knjizi: *An Introduction to Scientific Research*, piše: »The most rewarding work is usually to explore a hitherto untouched field. There are not easy to find today. However, every once in a while some new theory or new experimental method or apparatus makes it possible to enter a new domain. Sometimes it is obvious to all that this opportunity has arisen, but in other cases recognition of the opportunity requires more imagination«. (podvukao M. R.)

Nema sumnje da je kemijska teorija crteža ili grafova jedan od tih »slučajeva« kada prepoznavanje prigodnosti zahtijeva imaginaciju. »Odgovor« na takvo stanje jesu posebne konferencije s naglaskom na matematičku kemiju (Saskatoon, 1986), kemijsku teoriju grafova (Athens 1985, 1987; Galveston 1989), matematičke metode kemije i organske kemije posebno (Dubrovnik 1983, 1985), matematičke, kemijske i kompjuterske pristupe (Dubrovnik 1986, 1987), itd. Knjiga *Graph theory and topology in chemistry* daje pregled radova prikazanih na jednoj od posljednjih konferencija te discipline koja je »enfant terrible« teorijske kemije.

Knjiga je zbirka pozvanih radova sudionika konferencije i donosi rezultate ukupno 60 suradnika, od kojih se čak 10 može povezati sa Sveučilištem u Zagrebu. Poimence (abecednim redom): N. Adler, D. Babić, A. Graovac, V. Katović, K. Kovačević, L. Kovačić-Beck, S. Nikolić, M. Randić, N. Trinajstić i T. P. Živković. To bez sumnje ukazuje na »Zagrebačku grupu« kao jednu od vodećih grupa u toj disciplini. Isto tako nema sumnje da ta dominacija »Zagrepečana«, neće dugo potrajati, jer interes za ovu disciplinu u svijetu snažno raste. Na konferenciji u Athens, Georgia bilo je sudionika iz desetak zemalja. Knjiga, predstavlja »izlog« kemijskih tema koje kombinatoričke i topološke metode obrađuju. Radovi su skupljeni u pet podgrupa: (A) *Teorija uzlova i topologija (kemijskih) reakcija*; (B) *Molekularna »složenost« (kompleksnost), sličnost i topologijski pokazatelji*; (C) »Grozдови« i čvrsto stanje; (D) *Vlastite vrijednosti, konjugirani sustavi i rezonantnost*; i (E) »Kodovi« (zaporke), prebrojavanja i redukcija podataka.

U ovom prikazu ne možemo se osvrnuti na pojedine radove. Prvo, spomenut ćemo teme »zagrebačke« grupe: *Korelacija među fizičkim svojstvima i topologijskim indeksima n-alkana* (Adler i Kovačić-Beck); *Svojstva pravoreda (simetrije) kemijskih crteža: Prestrojavanje osno-deformiranih oktaedara* (Randić, Klein, Katović, Oakland, Seitz i Balaban), *Svojstva osnovnog stanja konjugiranih sustava u jednostavnoj metodi rezonantne teorije orbitala veza* (Živković); *Model konjugiranih krugova: O izboru parametara za izračunavanje rezonancijskih energija* (Randić, Nikolić i Trinajstić); *Jednostavno ocjenjivanje ukupne referentne energije π -elektrona* (Graovac, Babić i Kovačević). To, naravno ne daje potpunu sliku aktivnosti »zagrebačke« grupe, niti po tematici, a niti su svi suradnici imali priliku prisustvovati konferenciji. Npr., ne vidimo doprinose u području »kodova«, enumeracija, itd.« gdje je doprinos zagrebačke grupe zapažen, a također na ovoj konferenciji nisu bili zastupani u većoj mjeri ni radovi s područja relacija struktura-svojstva-aktivnost, gdje također zagrebačka grupa daje vidljive doprinose (usporedi revijski članak Sabljica i Trinajstića u *Acta Pharm. Jugosl.* 31 (1981) 189).

Od drugih radova spomenut ćemo samo neke. Članak *Makromolekule i kemijske dinamike* (Summers) uvodnog je tipa i prikazuje ulogu i mogućnosti teorije uzlova u analizi velikih (bioloških) molekula. Teorija uzlova također je predmet radova o stereokemiji i kiralnosti složenih struktura (Walba, Simon, Flappan, Jonish i Millett) u kojima se među ostalim, govori o Jones-ovim polinomima, novim važnim invarijantama uzlova, koje su nedavno »uvedene« u matematičke analize, a da se zapravo još potpuno ne zna njihova »fizička« interpretacija (ako je i imaju). Radi se o polinomima u dvije varijable, za razliku od Alexanderovih polinoma (jedne varijable) koji su posljednjih 40-tak godina dominirali u teoriji uzlova kao osnovni pokazatelj izomorfnosti uzlova. Da su uzlovi od interesa u kemiji, potvrđuju slike »zauzlatih« struktura DNA, kao i prisutnost posebnih enzima koji »odmotavaju« uzlove (»rezanjem«, poput Aleksandra Velikog, pa ponovnim spajanjem oduzlane »niti« DNA). Bonchev i Polansky (*O topologijskoj kompleksnosti kemijskih sustava*) dodiruju interesantnu temu i predlažu postupnu analizu kompleksnosti molekula. Rad, izgleda, više upućuje na postojanje problema nego na njegovo rješenje. Pristup autora praćen je nizom proizvoljnih odluka o relativnoj »važnosti« različitih strukturalnih čimbenika, koje nisu (a vjerojatno ne mogu biti) opravdane pa je teško zamisliti da takav pristup neće doživjeti znatnih promjena. U istoj »grupaciji« radova Nicholson, Tsai, Johnson i Naim razmatraju jedan od fundamentalnih problema teorije grafova u radu *Tvrđnja (teorem) o izomorfnosti podcrteža molekularnih grafova*. Poznato je da problem izomorfnosti podcrteža (ali ne i problem izomorfnosti crteža) pripada razredu tzv. »NP-potpunih« (»NP-complete«) problema. To znači da je problem, gledan s točke kompleksnosti računanja (koja se mjeri brojem potrebnih računskih operacija), ekvivalentan problemima za koje je već utvrđeno da su postojeći algoritmi eksponencijalnog, tj. ne polinomnog ili kratko NP, karaktera. Burdett u članku *Topologija i struktura molekula u čvrstom stanju* daje prilično opširan pregled mnogih rezultata organske i anorganske kemije koji se temelje na idejama o simetriji orbitala izloženih u radovima Fukuija, Hoffmanna, Hückela, Walsha i Woodwarda. U prikazu je naglašen topologijski aspekt koji pokazuje kako prividno nepovezani kemijski problemi imaju zajedničku bazu. Shen i Sinanoglu daju zanimljiv pregled »grafičkog« pristupa analizi važnih organskih radikala, posrednika (intermedijara) različitih kemijskih reakcija. Njihov rad dobro ilustrira kako neke grafičke »manipulacije« molekularnim crtežima daju uvid u narav kemijske promjene (transformacije). Klein i suradnici opisuju tzv. »prijenosnu« (»transfer«) matricnu metodu koja omogućuje analizu svojstva periodičnih struktura (npr. benzenoidnih polimera). »Neizbježna« tema mnogih sastanaka teorijskih »grafičara« jesu, naravno, benzenoidne strukture, prebrojavanje Kekulé-ovih struktura i slično. Na ovom sastanku, među ostalim, nalazimo doprinose toj temi, braće He (autori, matematičar i kemičar, iz Narodne Republike Kine). Ti su autori postali »žrtve« neopravdanog nepoznavanja kineskih normi od strane urednika knjige, koji su pobrkali imena i prezimena autora i »prekrstili« ih u »ne-braču« H. Wenjie i H. Wenshen. Wenjie He i Wenshen He iznose neka opća svojstva prebrojavanja Kekuléovih valentnih struktura i prebrojavanja staza među specijalno kvalificiranim vrhovima (atomima). Taj rad, iako sadrži stroge matematičke dokaze, praktičnog je značaja, iako su zapravo osnovni rezultati bili već ranije razmatrani u jednom radu Krivke i Trinajstića, koji autorima iz Kine vjerojatno nije poznat. Konačno, rad Diasa (*Brzo izračunavanje vlastitih vrijednosti malih heterocikla koristeći ideju funkcionalnih grupa*) ilustrira interesantno korištenje nultnih (nodalnih) svojstava grafova (molekularnih orbitala tipa Hückela) za izračunavanje vlastitih vrijednosti pridruženih matrica bliskosti. Usput, »adjacency« je bolje prevoditi na hrvatski kao »bliskost« umjesto »susjednost«, jer potonji izraz ima svoje posebno značenje u topologiji. »Susjedni« i »bliski« imaju različita značenja: »susjedni« implicira nepostojanje objekta (iste vrste) između elemenata u pitanju, dok »bliski« dopušta blize objekte iste vrste.

Toliki broj autora očigledno donosi neujednačenost, kako razine izlaganja, tako i »važnosti«, »težine« i originalnosti problema ili rješenja. S izuzetkom primjene u QSAR (quantitative structure-activity relationships) koja na ovom sastanku nije bila zastupana, radovi prikazani na sastanku u Athens, Georgia, prilično su reprezentativni, kako po temi tako i po omjeru »teorijskih« i »primijenjenih« radova. Nedostatak radova o QSAR i nije ozbiljniji manjak sastanka, s obzirom na redovne

(dvogodišnje) QSAR-sastanke u Evropi i Sjedinjenim Državama Amerike, gdje među kemometričkim, statističkim i matematičkim pristupima metode razvijene u kemijskoj teoriji crteža sve više i više postaju zapažene.

Bilo bi pretjerano tvrditi da od 41 prikazanog rada svi predstavljaju značajne doprinose kemijskoj teoriji crteža, kemijskoj topologiji i kemiji uopće. Na konferencijama autori često prikazuju nezavršene radove, ponavljaju ranije rezultate ili pak daju opširnije revije svojih vlastitih ranijih radova. Svega toga naći će pažljivi čitatelj u ovoj knjizi. Nije isključeno da će se s vremenom pokazati neki nedostaci ovog ili onog prikaza danog u knjizi. Knjiga sadrži dovoljno raznovrsnog materijala koji može poslužiti svakom za analizu.

M. RANDIĆ

Kozo Sone and Yutaka Fukuda

Inorganic Thermochromism

Inorganic Chemistry Concept, Vol. 10

Ed. C. K. Jørgensen *et al.* Springer-Verlag, Berlin 1987

71 slika, 16 tablica, 134 stranice

Riječ termokromizam upotrebljava se za promjenu boje sustava uslijed promjene temperature. Nakon uvoda u prvom poglavlju autori opisuju u drugom poglavlju termokromne pojave kod kompleksa kobalta u dvovalentnom stanju u otopini. Treće poglavlje je posvećeno kelatima nikla(II) u otopini, a četvrto kelatima bakra(II). Različiti aspekti kromotropnih pojava u otopinama različitih kompleksa željeza i vanadija nalaze se obrađeni u petom poglavlju. Posljednje, šesto poglavlje odnosi se na termokromizam u čvrstom stanju u spojevima prijelaznih metala.

Glavni cilj autora bio je da na temelju proučavanja termokromizma proniknu u elektronsku strukturu anorganskih spojeva kao i u promjene te strukture pri faznim prijelazima, u kemijskim ravnotežama i tijekom reakcija. Prema izjavi samih autora taj je cilj postignut samo djelomično.

Usprkos spomenutim ograničenjima knjiga se može preporučiti anorganskim kemičarima, osobito onima koji se bave kompleksnim spojevima opisanim u ovoj knjizi.

M. PRIBANIĆ