

PRIKAZI KNJIGA

BOOK REVIEWS

A. Knop and L. A. Pilato

PHENOLIC RESINS Chemistry, Applications and Performance, Future Directions

Izdavač: Springer-Verlag

Berlin, Heidelberg, New York, Tokyo 1985.

Unutar serijske edicije pod nazivom *Polimeri/Svojstva i primjena* izdavač je tiskao 1979. godine monografiju *Chemistry and Application of Phenolic Resins* autora A. Knop i W. Scheib. Monografija je kroz petogodišnje razdoblje prihvaćena s izuzetnim interesom o čemu svjedoče dva prijevoda (ruski i japanski) te 52 literaturna citata (prema *SCI*). Proizlazi da svaki deseti članak iz tog područja navodi spomenutu knjigu kao referencu.

Knjiga o kojoj je ovdje riječ predstavlja nastavak gornje monografije s novim koautorom (L. A. Pilato) i suradnikom (V. Böhmer za Poglavlje 4). Od 19 poglavlja prvog izdanja, 9 poglavlja je zadržano u istom obujmu, 4 su smanjena, 3 povećana a 2 su potpuno nova: *Strukturno uniformni oligomeri* te *Visoka tehnologija i nove primjene* tako da je obujam novog izdanja povećan približno za petinu, a broj literaturnih navoda (965) veći je za preko 50% s obzirom na prvo izdanje. Zadržavši dakle koncept prethodnog izdanja, od sirovinske osnove preko kemijskih reakcija do produkata i njihove primjene, ovaj nadopunjeni i osuvremenjeni priručnik zajedno će biti od velike koristi za svakog kemičara koji se zanima ili bavi sintezom, proizvodnjom ili primjenom fenolnih smola.

Z. KATOVIĆ

Joanna Sadlej

Semiempirical Methods of Quantum Chemistry

Ellis Horwood Limited, Chichester, 1985.

In spite of the recent dramatic progress in numerical technology which enables accurate *ab initio* solutions of the Schrödinger equation for molecules with as many as 100 electrons, calculations on large or even intermediate sized systems are too laborious and/or economically prohibitive. Since this situation will not change in the foreseeable future, the semiempirical approach retains its relevance. As a matter of fact, the importance of good semiempirical methods can be hardly overestimated and development of reliable but efficient approximate schemes is highly desirable. In her book, J. Sadlej gives a nice overview of current semiempirical methods of CNDO, INDO and NDDO types. A brief account of PPP and EHT methods is presented, too. At the very beginning, a concise introduction to the foundations of quantum chemistry is provided. It is followed by a detailed description of semiempirical SCF-LCAO all-valence-electrons schemes for both closed and open shells. Various parametrizations are discussed at considerable length and (some) justification for the omnipresent zero-differential overlap approximations is given. The second part of the book is devoted to chemical applications of the presented semiempirical methods. They encompass calculations of one-electron properties (molecular multipole moments *etc.*), which serve as severe accuracy tests of the applied methods, estimates of molecular heats of formation, force constants, geometries and, last but not least, conformational analysis. Considerable attention is paid to the interpretation of molecular spectra (NMR, ESR, IR and Electron Absorption) and computation of the corresponding parameters. It should be stressed that these applications are very useful *per se*, because they yield (albeit approximate) estimates of molecular properties. Their comparison with experiment, on the other hand, indicates the scope and limitations of semiempirical

procedures. Finally, the last three chapters deal with chemical reactivity, hydrogen bonding and quantum biochemistry. They are, unfortunately, rather condensed but it is also fair to say that performance of various semiempirical methods in these fields is far from excellent and that a number of useful results is rather limited.

This survey of semiempirical results is impressive but at the same time incomplete. Very little is said about the EHT method which represents an important tool of the qualitative quantum chemistry. The same holds for the iterative extended Hückel (IEHT alias SCC-MO) method which yields the best values for one-electron properties at the semiempirical level of sophistication. Finally, the molecular spectroscopy chapter should include ESCA calculations. It is hoped that the next edition will be extended and updated in this respect.

To conclude, this book should find its place in every chemical library. It is strongly recommended to graduate students and to all chemists who would like to know something about semiempirical methods instead of using available programmes as a black box magic.

Z. B. MAKSIĆ

John G. Verkade

A Pictorial Approach to Molecular Bonding

Springer-Verlag, New York Berlin Heidelberg 1986, str. 291, 231 slika.

Kako na elementarnoj, »preddiplomskoj« razini konstruirati molekulske orbitale i odrediti intramolekulska vibracijska gibanja bez oslonca na teoriju grupa i druge složene matematičke metode kvantne kemije? Rješenje tog problema autor vidi u konceptu »generatorske orbitale« (generator orbital, GO), »lažne« orbitale koja se postavlja u središte molekule da bi poslužila kao simetrijski obrazac za konstrukciju molekulskih orbitala i amplituda normalnih vibracija. Taj model što ga je autor sa suradnicima (D. K. Hoffman i K. Ruedenberg) počeo razvijati početkom sedamdesetih godina vrlo je pogodan za slikovito prikazivanje i stoga lak za razumijevanje i primjenu.

Osim prikaza metode generatorske orbitale i temelja kvantne kemije (što čini knjigu pristupačnom i onome tko nije suviše blizak toj disciplini), osobitu vrijednost ovom djelu daje obilje primjera koji se protežu od najjednostavnijih anorganskih i organskih molekula (CO_2 , H_2O , $c\text{-C}_4\text{H}_4$) preko kompleksnih i organometalnih spojeva (CoF_6^{3-} , $\text{Mo}_6\text{Cl}_6^{4-}$, ferocen), pa do »egzotičnih« struktura poput XeF_2 , prizmana i kubana. Ukupno 35 iscrpno obrađenih primjera, uz obilje zadataka iza svakog poglavlja, omogućuje lako ovladavanje novom metodom, čak i uz oskudno poznavanje kvantne kemije. Nadamo se stoga da će ova knjiga dobro doći ne samo u nastavi, već i u rješavanju kvantno-kemijskih i spektroskopskih problema s kojima se kemičar tako često susreće u praksi.

N. RAOS

Sergej M. Ševčenko

Molekula v prostanstve

Izd. »Himija«, Lenjingrad 1986, str. 145.

Iako već sam naslov kazuje da je tema knjige stereokemija, »To, dakako, nije sva stereokemija... — kako piše autor u predgovoru — već samo jedan njezin dio — konformacijska analiza.« Tu suvremenu granu stereokemije autor nastoji na malom broju stranica što više približiti čitaocu kojemu konformacijska analiza nije najuža specijalnost.

Knjiga Sergeja M. Ševčenka spada u krug onih tako čestih knjiga na ruskom jeziku koje niti su posve popularne (tj. namijenjene nekemičarima), niti su posve stručne (tj. namijenjene uskim specijalistima). Odatle i vrlo živ i pristupačan način izlaganja, no unatoč »popularnom« pristupu knjizi ne manjka vrlo velik broj primjera, gotovo iz svih područja konformacijske analize. Polazeći od osnovnih definicija konformacije, opisa internih koordinata i jednostavnih primjera (ciklički

ugljikovodici i njihovi derivati), autor govori o konformacijskoj termodinamici i kinetici, molekulskoj mehanici, plohi potencijalne energije i intramolekulskim potencijalima. Od specijalnih područja osvrće se na utjecaj slobodnog elektronskog para na konformaciju, piše o anomernom efektu, a također govori i o konformacijama biomolekula (polisaharida i proteina). Posebnu vrijednost knjizi daje vrlo širok povijesni pristup što nesumnjivo govori o osnovnoj sklonosti autora prema povijesti kemije.

Neupućenom čitaocu ova će knjiga dati vrlo svestran i lak uvid u konformacijsku analizu, njezine osnovne probleme, metode i rezultate, no za studiczniji uvid u čitavo područje očito će biti nedostatna. Knjiga se stoga preporuča studentima, ali i svakom kemičaru koji želi — bez većeg napora — dobiti cjelovit uvid u tu fundamentalnu kemijsku disciplinu.

N. RAOS

A. Plonka

Time-Dependent Reactivity of Species in Condensed Media
Lecture Notes in Chemistry

Edited by G. Berthier, M. J. S. Dewar, H. Fischer, K. Fukui, G. G. Hal, H. Hartmann, H. H. Jaffè, J. Jortner, W. Kutzelnigg, K. Ruedenberg, J. Tomasi

Springer-Verlag, Berlin, 1986, Vol. 40, 151 stranica

A. Plonka (Institut za primijenjenu radijacijsku kemiju, Łódź, Poljska) napisao je 40. svezak niza *Lecture Notes in Chemistry* na način koji je zaista u skladu s namjerama izdavača: brzo, neformalno i na visokom nivou informirati široki krug kemičara o novim dostignućima u kemijskim znanostima i nastavi. Knjiga se čita na dušak. U kondenziranim medijima vrlo se često opaža da se reaktivnost kemijskih vrsta mijenja s vremenom, i pokušaji nalaženja fizikalne osnove ove pojave doveli su do postavljanja niza manje ili više postojanih teorija. A Plonke prikazao je reakcijsko-kinetički model koji rabi vremenski ovisnu konstantu brzine reakcije u određenom matematičkom obliku čija je univerzalnost fascinirajuća. Metoda je primijenjena na eksperimentalne rezultate iz bitno različitih područja istraživanja kinetike reakcija niza čestica (od elektrona do radikala makromolekula) u staklastim i polikristalnim krutinama, polimerima pa i micelama. Univerzalnost proizlazi iz postavke da model u osnovi reflektira raspodjelu aktivacijskih energija reakcija promatranih kemijskih vrsta u kondenziranom mediju. Mehanizam tih reakcija i podrijetlo raspodjele reaktivnosti nisu, naravno, jedinstveni za sve sisteme. Autor opisuje niz mehanizama koji su s uspjehom primijenjeni na pojedinim sistemima, npr. model tuneliranja elektrona smještenih u elektronskim klopama alkalnih stakala, ili utjecaj dinamike stvaranja i destrukcije micela na reaktivnost čestice koja je inkorporirana u miceli. Ipak, knjiga je pisana tako da upravo poziva na daljnja razmišljanja, jer jasno upućuje na niz otvorenih pitanja. Poticaj čitateljima da pokušaju primijeniti metodu na vlastite sisteme proizlazi i iz raznolikosti opisanih sistema, eksperimentalnih tehnika istraživanja i interpretacije rezultata.

Posebno poglavlje, iako dosta kratko, posvećeno je nekim teorijskim modelima iz područja fizike kondenziranih medija koji mogu pridonijeti boljem razumijevanju podrijetla distribucije reaktivnosti na molekulskom nivou. Matematičko rješavanje nekih funkcija prikazano je u dodatku. Literatura je citirana po poglavljima i mahom je iz posljednjih nekoliko godina, pa i to pridonosi atraktivnosti problematike. Pretpostavka je za lako razumijevanje knjige dosta dobro poznavanje fizikalne kemije. Napredniji studenti mogli bi, pak, naći u njoj poticaj za produbljivanje znanja iz mnogih područja kemije, pa i fizike.

M. BONIFAČIĆ

Industrial Applications of Radioisotopes

Edited by G. Földiák

Akadémiai Kiadó, Budapest, 1986.

564 stranice, dodaci, predmetno kazalo

Radioaktivni izotopi nailaze na vrlo raznoliku primjenu u industriji, od obilježivača do snažnih izvora ionizirajućeg zračenja. Radioaktivnost izotopa primjerena je problemima koji se nastoje rješavati, i varira u rasponu od 12 redova veličine. Područja znanstvenih istraživanja i praktične primjene radioizotopa na donjem, odnosno gornjem kraju toga raspona već su se u proteklih 30-ak godina dobro izdiferencirala kao radiokemija i radijacijska kemija, a odgovarajuće tehnike i tehnologije koje se na njima zasnivaju već su dobro uvriježene u industrijskoj praksi. Ova knjiga pokušava smjestiti tu vrlo široku i raznoliku problematiku unutar jednih korica, i to joj je ujedno i glavna zamjerka. Nije, naime, potpuno jasno kome se knjiga obraća. Čitaoci koji se mogu služiti engleskim jezikom već imaju odličan izbor djela koja monografski obrađuju pojedine teme kojima se bavi i ova knjiga. Studenti u autorovoj domovini vjerojatno već imaju ovaj materijal na materinskom jeziku, kao što i mi imamo svoje popularne *Radioaktivne izotope i zračenja* u redakciji I. Draganića već u tri izdanja.

Jezik je svakako jedan od problema u vezi s ovom knjigom, ne samo na razini korisnika nego i na razini autora, odnosno prevodilaca. Naime, neki su se pojmovi u struci toliko udomačili da su kao takvi postali opća svojina, pa strano zvuče kad se nađu prevedeni po drugi put na engleski jezik kao neka neuobičajena sintagma. Suradnja autora i prevodilaca svakako je mogla biti bolja.

Svako poglavlje popraćeno je popisom literature, koji predstavlja neku vrstu bibliografije područja, jer se u tekstu ne navode izvori. U tim bibliografijama uglavnom nema djela novijih od 1980. godine, što je svakako propust. Samo na područjima radijacijske kemije, dozimetrije i tehnologije pojavilo se otada više od desetak bibliografskih jedinica koje bi se morale spomenuti.

Djelo je prihvatljivo kao udžbenik, ali je teško zamisliti da bi moglo poslužiti industrijskim kadrovima koji traže rješenje nekoga specifičnog problema, kao što nastoji sugerirati izdavačev opis na poleđini.

DUŠAN RAŽEN