

## PRIKAZI KNJIGA

## BOOK REVIEWS

*Srpskohrvatsko-engleski rečnik — Hemija i srodne oblasti*

Slobodan Ribnikar

Srpsko hemijsko društvo, Beograd 1983.

str. 237

Rječnik dra S. Ribnikara djelo je za kakovim se potreba osjećala već dugo, dugo vremena, otkako je engleski jezik osvojio gospodujući položaj u uzajamnom općenju kemičara različitih naroda. Štoviše, nakon ranih djela (Šulek, npr.) u nas i nema dvo- ili višejezičnih prijevodnih rječnika za kemiju i srodne joj znanosti. Izlazak djela Slobodana Ribnikara stoga je za našu kemiju vrlo važan događaj.

Rječnik opseže (prema gruboj procjeni pisca ovog prikaza) oko 13 000 nautuknica, ubrojivši tu i uputnice. Izrađen je vrlo pomno, a izbor riječi i pojmova čini se da je posve primjeren opsegu. U nj su uključeni i izrazi koji pripadaju hrvatskoj terminologijskoj normi. Bez dvoumljenja se može reći da to djelo nema nikakvih krupnijih nedostataka: gotovo svi nedostaci što sam ih uočio jesu one neizbježive sitne omaške zbog kojih je valjda i sročena izreka: *Duae res sunt longe difficillimae — lexicon scribere et grammaticam*. Jedini spomena vrijedan prigovor tiče se postupka sa sinonimima: »U većini slučajeva sinonimi jesu jednako primjenljivi (npr. *val* → *talas*) ali negde strelica upućuje na oblik koji je, po mišljenju autora, ispravniji (npr. *benzol* → *benzen*).« (citirano iz predgovora).

Dr S. Ribnikar obavio je jedan, u biti, pionirski posao, ali tako dobro kao da je nastavljač već duge tradicije.

VL. SIMEON

*Structures versus Special Properties*

*Structure and Bonding, vol. 52,*

izd. Springer-Verlag, Berlin — Heidelberg — New York 1982.

52. svezak niza *Structure and Bonding* donosi četiri zanimljiva priloga:

R. G. Woolley napisao je pregled pod naslovom »Natural Optical Activity and the Molecular Hypothesis« u kojemu prikazuje molekulsku hipotezu kao osnovicu za kritičku raspravu o teoriji optičke aktivnosti: atomi i molekule promatraju se kao složene elementarne ekscitacije (ili kvazi-čestice) u makroskopskomu kvantno-mehaničkom sustavu zvanomu tvar, pa se spontano narušena prostorna inverzijska simetrija promatra u tom kontekstu, s posebnim osvrtom na reprezentaciju operatora prostorne inverzije. Na kraju se daje kritički prikaz niza mikroskopskih kvantnih teorija optičke aktivnosti.

L. Banci, A. Bencini, C. Benelli, D. Gatteschi i C. Zanchini napisali su prilog »Spectral-structural Correlations in High-Spin Cobalt(II) Complexes« u kojemu daju pregled spektralnih i magnetskih osobina visokospinskih kompleksa Co(II) i njihovih sveza s elektronskom strukturom i koordinacijskom geometrijom. Za interpretaciju podataka poslužili su se pristupom kutnog prekrivanja (Angular Overlap). Taj će članak biti vrlo koristan onomu tko se bude bavio proučavanjem kompleksa Co(II) ali i svima koji će Co(II) htjeti uporabiti kao spektroskopsku »oznaku« (probe).

A. Tressaud i J.-M. Dance autori su članka »Relationships Between Structure and Low-Dimensional Magnetism in Fluorides« u kojemu se osobito bave svezama među kristalografskim značajkama i dimenzionalnošću magnetskih interakcija u fluoridima.

Na kraju sveska nalazi se prilog »Structure and Bonding in Organic Derivatives of Antimony(V)« što su ga napisali V.K. Jain, R. Bohra i R.C. Mehrothra, prikazujući najvažnije strukturne aspekte kemije organoantimonovih spojeva koja je u proteklom desetljeću doživjela svoju »renesansu«. Ovaj svezak sadržava i autorsko kazalo za sveske 1...52.

VL. SIMEON

*Additives for Plastics (Polymers/Properties and Applications 5)*

J. Štêpek and H. Daoust

Springer Verlag, New York — Heidelberg — Berlin, 1983  
(XI + 243 str.)

Seriya *Polymers/Properties and Applications* (1977) nastavak je prethodne serije *Chemie, Physik und Technologie der Kunststoffe in Einzeldarstellungen* (1961—1970; 15 svezaka). Knjiga je peti svezak nove serije.

Autori u predgovoru napominju da je knjiga prvenstveno namijenjena studentima tehnologije plastičnih masa i kemije makromolekula te tehnolozima u industriji plastičnih materijala. Sadržaj knjige (dva dijela) obuhvaća 14 poglavlja u kojima je obrađeno 12 tipova dodataka, sistematiziranih s obzirom na njihov utjecaj na polimerni sistem. Dodaci su nadalje klasificirani prema odgovarajućim kriterijima te su iscrpno prikazana njihova svojstva, navedena komercijalna imena i praktične primjene. Cjelokupni tekst (uključivo i 54 slike) potkrijepljen je sa 650 literarnih citata koji se navode nakon pojedinih poglavlja.

U prvom dijelu (obuhvaća 7 poglavlja) obrađeni su dodaci koji modificiraju fizička svojstva polimera. Način na koji su sistematizirani i obrađeni najbolje ilustriraju naslovi pojedinih poglavlja: 1. plastifikatori; 2. maziva i odvajala otpresaka od kalupa; 3. polimeri kao modifikatori; 4. punila, ojačala i vezne tvari; 5. bojila (pigmenti i fluorescentne tvari); 6. pjenila (kemijska i fizička) i 7. antistatici. Uz prikaz plastifikatora također su dane osnove termodinamike polimernih sistema, topljivosti polimera, fazne separacije, geliranja i teorije slobodnog volumena. Te teorije kao i prikaz mješljivosti polimernih sistema, vrlo sažete i iznesene na izrazito jednostavan način, omogućuju razumijevanje specifičnih pojava u dvokomponentnom sistemu polimer-dodatak.

Drugi dio obuhvaća sredstva koja sprečavaju starenje i degradaciju polimera. Ukratko su prikazani utjecaji kemijski i fizički aktivnih medija, ionizirajućeg zračenja i mehaničke degradacije, te je razmatrana teškoća odnosno nemogućnost stabilizacije polimera u tim slučajevima. Nadalje, dodaci koji sprečavaju degradaciju plastičnih masa obrađeni su u pet poglavlja: toplinski stabilizatori; antioksidansi i tvari koje sprečavaju djelovanje metalnih iona; sredstva za zaštitu od degradacije UV-zračenjem; usporivači gorenja te biocidi za zaštitu od biološke degradacije. U tim poglavljima iznesene su i osnove pojedinih tipova degradacije polimera. Posljednje poglavlje u knjizi jest kratki pregled metoda kojima se dodaci ugrađuju u polimernu matricu. Na kraju se nalaze kratice upotrijebljenih simbola i predmetno kazalo.

Vrlo sistematičan pregled dodataka za polimerne materijale, popraćen elementarnim teorijskim osnovama pojedinih fenomena, čini ovu knjigu izuzetno korisnom za sve kojima je to prvi susret s navedenim područjem. Isto tako, iscrpan broj literarnih citata te sveobuhvatni prikaz svojstava (često uz navedene proizvođače i trgovačka imena) i primjene u konkretnim slučajevima od velike je vrijednosti i za svakog stručnjaka koji se bavi ovom problematikom.

MLADEN ANDREIS

*Fluorimetrie*

Maximilian Zander

Springer Verlag, Berlin — Heidelberg — New York 1981

127 stranica, 51 slika, 12 tablica (na njemačkom)

Ova knjiga, 17. svezak serije: Upute za kemijsko-laboratorijsku praksu, bavi se primjenom fluorescencije u analitičkoj kemiji. Fluorimetrija je posljednjih godina doživjela velik napredak, kako u pogledu instrumentacije tako i s obzirom na razvoj visoko osjetljivih selektivnih i brzih analitičkih metoda

za propulzivna područja kao što su biokemija i istraživanje okoliša. Knjiga se obraća praktičaru, no donosi i dovoljno teorijske podloge kao i vrijedne osvrtne na suvremenu literaturu tog područja. Poglavlja *Uloga fluorimetrije u instrumentalnoj analitici* (3 str.), *Teorijske osnove luminescencije organskih molekula* (40 str.), *Metodičke osnove fluorimetrije* (37 str.), *Specijalne fluorimetrijske tehnike* (22 str.) i *Primjene* (15 str.) dobro su odmjerena i puna korisnih informacija. Knjigu preporučam svakom suvremenom kemijskom laboratoriju.

L. KLASINC

*Structure and Bonding. Vol. 45*

G. Wendin

*Breakdown of the One-Electron Pictures in Photoelectron Spectra.*

Springer-Verlag, Heidelberg, New York, 1981.

69 slika, 3 tablice, 130 strana.

Autor G. Wendin (Göteborg i Brookhaven) daje u svom revijskom članku teoriju sloma jednoelektronskog prikaza fotoelektronskih spektara baziranu na konceptu fluktuacije i raspada praznog nivoa (»rupe«) što uključuje interakciju jedne takve rupe s konfiguracijama s primarno dvije rupe i jednim pobuđenim elektronom. Ovaj tzv. gigantski Coster-Kronig (g CK) proces, ustvari konfiguracijska interakcija, istraživan je i dokumentiran nizom primjera spektara mnogo elektronskih atoma (Cd do Gd), (Bi do Pu) i molekula (N<sub>2</sub>, N<sub>2</sub>O<sub>4</sub>, CS<sub>2</sub> i dr.) Knjiga sadrži 214 referenci.

L. KLASINC

*Structure and Bonding Vol. 43. Bonding Problems*

Springer-Verlag, Berlin, Heidelberg, New York, 1981

58 slika, 30 tablica, 220 stranica, cijena (platno) 98 DM.

Knjiga sadrži sljedećih pet doprinosa:

C. K. Jørgensen (Sveučilište u Ženevi): *Uvjeti totalne simetrije koji stabiliziraju molekule, atome, jezgre i hadrone* članak koji treba preporučiti svakom kemičaru kojeg zanima suvremena teorija materije (36 strana 125 referenci).

J. C. Green (Oxford): *Fotoelektronski spektri organometalnih spojeva d- i f-bloka u plinskoj fazi* u kojem autorica na 75 strana i uz 138 referenci daje impresivan pregled vlastitog i ostalog istraživanja elektronske strukture organometalnih spojeva pomoću fotoelektronske spektroskopije.

R. Engelman (Nuklearni centar Soreq, Izrael): *Vibracije u interakciji s nečistoćama* revija o efektima interakcije među elektronskim stanjima iona ili molekula nečistoće na vibracije domaćina (host). Na 40 strana, 170 referenci.

K. N. Raymond i W. L. Smith (Berkeley, USA): *Agensi za specifično izdvajanje aktinida i primjene na dekontaminaciju* obrađuje posebno problem plutonija (30 strana, 193 reference).

A. V. Xavier, J. J. G. Moura i I. Moura (Lisabon): *Nove strukture u željezo-sumpor proteinima* daje zbirnu informaciju o tim novim spojevima i tehnike za identificiranje njihova središta (20 strana, 92 reference).

L. KLASINC

*Structure and Bonding vol. 39. Electrons and Transitions*

Springer-Verlag, Berlin, Heidelberg, New York 1980

32 slike, 18 tablica, 120 stranica.

Ovaj svezak zapažene serije monografija iz područja intenzivnog prekrivanja teorijske i eksperimentalne kemije donosi tri međusobno po svom sadržaju prilično heterogena ali zato ne manje zanimljiva priloga.

Prvi od njih *Veza metal-ligand u 3d sendvič-kompleksima* D. W. Clacka i K. D. Warrena s University College u Cardiffu (Wales, V. Britanija) na četrdesetak stranica daje pregled uglavnom vlastitih istraživanja raznih serija t.zv. sendvič-kompleksa prvog reda prijelaznih metala s tro- do osmočlanim prstenima. Rabi se teorija molekulskih orbitala i ispituje također efekt simetrije miješanih sendvič-sistema i utjecaj heteroatoma.

Drugi je prilog *Model polarizacije liganda za spektre metalnih kompleksa: vjerojatnosti prijelaza za dinamičko sprezanje* od S. F. Masona s King's Collega u Londonu. U tom je pregledu uspoređen model kristalnog polja s modelom polarizacije liganada te je pokazano da prvi daje bolje slaganje za energije d-d i f-f prijelaza, a potonji za odgovarajuće vjerojatnosti prijelaza. Dani su primjeri primjene toga modela na oscilatorima jakosti lantanidnih i prijelazno-metalnih kompleksa, rotacijske jakosti kiralnih kompleksa i sl. (40 str, 82 reference)

U posljednjem članku *Studij interakcije sumpora s metalnim površinama i granicama faza s pomoću Auger-elektronske spektrometrije* od L. R. Balsenc sa Sveučilišta u Ženevi, pokazana je važnost Auger-spektroskopije za rješavanje teorijskih i praktičnih problema vezanih uz prisustvo sumpora na metalnim površinama. Važne su indutrijske primjene na području heterogene katalize, metalurgije (segregacija, površinska samo-difuzija i sl.) posebno obrađene i čine ovaj rad, uz 286 suvremenih referenci, posebno zanimljivim.

L. KLASINIC

Robert Scopes

*Protein Purification, Principles and Practice*Serija *Springer Advanced Texts in Chemistry*, Urednik: Ch. R. Cantor

Springer-Verlag, New York Inc. 1982

282 str.

Ova je knjiga plod autorova dvadesetgodišnjeg iskustva u istraživanjima koja su uključivala izolaciju i čišćenje enzima iz različitih izvora. Knjiga sadržava devet poglavlja: Laboratorij za čišćenje enzima, Priprava ekstrakata, Separacija taloženjem, Separacija adsorpcijom, Separacija u otopini, Održavanje enzimske aktivnosti, Optimizacija i praćenje opisanih postupaka, Mjerenje enzimske aktivnosti i Određivanje čistoće; Kristalizacija. Autor ne daje potanke upute za pojedine postupke, već samo kratki prikaz glavnih postupaka, s jednostavnim teorijskim objašnjenjem reakcija koje se zbivaju tijekom fracioniranja. U knjizi su opisane kako tradicionalne metode (na pr. izolovanje) tako i suvremeni postupci poput afinitetne kromatografije i sličnih metoda koji su katkad vrlo djelotvorni, ali ipak nisu rješenje za sve slučajeve.

Zahvaljujući autorovu dugogodišnjem iskustvu, knjiga ne daje samo pregled postojećih metoda i tehnika, već ističe i prednosti i mane pojedinih postupaka, kako bi istraživač mogao lakše odabrati postupak za svoj problem.

Na kraju knjige dana su dva Dodatka: prvi sadržava tablice za količinu precipitanata prilikom izolovanja proteina, a u drugom se daje kratak prikaz metoda za mjerenje koncentracije proteina. Knjiga sadržava 204 literaturne referencije s punim naslovima radova. Vrlo su dobro zastupljeni radovi izašli u 1981. i 1982. god., a na kraju knjige nalazi se i predmetno kazalo. Knjiga je namijenjena studentima i istraživačima, koji počinju raditi na izolaciji i čišćenju enzima.

VERA SIMEON

Atsushi Mizuike

*Enrichment Techniques for Inorganic Trace Analysis*

Springer-Verlag, Berlin, 1983

144 str., 41 slika, 49 tablica

Ovo je prema navodu izdavača devetnaesti naslov u seriji *Chemical Laboratory Practice*, koju uređuje grupa istaknutih znanstvenika. Nasuprot brojnim monografijama, udžbenicima i priručnicima koji se bave mjernim tehnikama relativno je malo knjiga koje se bave, za analitički postupak jednako važnim, tehnikama uzimanja uzorka, pripreme uzorka i obrade uzorka. Ova knjiga se bavi tehnikama separacije, dakle obradom uzorka, pa je već stoga treba pozdraviti. Autor knjige istaknuti je znanstvenik s brojnim radovima na širokom području tehnika separacije, a predmet knjige su tehnike separacije u funkciji obogaćivanja (pretkoncentriranja) pri analizi anorganskih tragova.

Uloga tehnika obogaćivanja u analizi tragova, opći aspekti tehnike obogaćivanja, te gubici analita i kontaminacija uzorka obuhvaćeni su u prva tri po-

glavlja knjige. Naredna poglavlja nose imena izabranih tehnika separacije značajnih za postupak obogaćivanja. Zastupljene su volatilizacija, ekstrakcija kapljevina-kapljevina, selektivno otapanje, taloženje, elektrokemijsko izlučivanje i otapanje, sorpcija, ionska izmjena i kapljevinska kromatografija, flotacija te zamrzavanje i zonsko taljenje. Posljednja dva poglavlja bave se obogaćivanjem uzoraka vode, odnosno uzoraka plina. Za žaljenje je da su ta dva poglavlja, koja su posebno zanimljiva sa stajališta zaštite okoline, obuhvatila jedva sedam stranica teksta.

Nedostatke koji proizlaze iz katkada suviše sažetog teksta nadoknađuje mnoštvo korisnih tablica. Knjiga sadržava 785 navoda literature, pri čemu je interesantno navesti da je tu preko 250 navoda japanskih autora. Knjiga može zadovoljiti širok krug stručnjaka koji su na ovaj ili onaj način u dodiru s postupcima analize, jer je pored sažetosti vrlo informativna.

DARKO MALJKOVIĆ

*Ausgewählte Methoden der Wasseruntersuchung, Band II,  
Biologische, Mikrobiologische und toxikologische Methoden*  
VEB Gustav Fischer Verlag Jena, 1982.

Ova knjiga sa 579 stranica, 61 slikom i 88 tablica u tekstu i 39 slika u Dodatku, drugo je prerađeno i prošireno izdanje. To je kolektivno djelo 67 autora. Knjiga je podijeljena u ova poglavlja: 1. Biološka istraživanja vode, 2. Toksikološka istraživanja vode i 3. Higijensko-mikrobiološka istraživanja vode. Ta su poglavlja razdijeljena u niz potpoglavlja koja na veoma precizan način opisuju metodologiju za određivanje indikatorskih organizama, analizu grupa vodenih organizama, određivanje bioaktivnosti i biomase, izvođenje laboratorijskih testova na toksičnost, bakteriološku analizu vode, virološku analizu vode i parazitološku analizu vode. Metode su opisane tako da se mogu direktno primijeniti, što je u laboratoriju pisca ovih redaka i učinjeno. Valja ipak konstatirati da se knjiga bavi klasičnim metodama istraživanja kvalitete voda i da donosi znanje akumulirano već znatno prije njezina prvog izdanja (1970—1975). U njoj nema ni spomena o novijim metodama koje koriste položaj vrste u prehrambenom lancu za izražavanje utjecaja stranih tvari na ekosistem (»infaunal trophic index«), mjerenje biomase i njezine aktivnosti novim biokemijskim parametrima, procjenu toksičnosti zapažanjem ranih, subletalnih biokemijskih promjena i slično. Ukratko, knjiga ne odražava znanje akumulirano u posljednjih petnaestak godina. Zamjerka je knjizi što to neuvrstavanje nije barem u uvodnom dijelu obrazloženo. Da je to učinjeno, čitalac bi bio orijentiran o području kojim se djelo bavi, bila bi mu skrenuta pažnja na manjkavosti, npr. testova na toksičnost i njihova kriterija—letaliteta, ali i praktična vrijednost i nezaoobilaznost tih testova usprkos njihovoj manjkavosti, i usprkos postojanju daleko relevantnijih toksikoloških metoda. Da je to učinjeno, ovom vrijednom i u svakom laboratoriju koji se bavi istraživanjem voda dobro došlom djelu ne bi bilo zamjerke.

B. KURELEC

*Chemical Graph Theory,*  
Nenad Trinajstić  
Vol. 1 and vol. 2  
CRC Press, Inc., Boca Raton, Florida

Kemijska teorija crteža ili grafova posljednjih desetak godina doživjela je velik razvitak, okupila je priličan broj znanstvenih radnika i počela privlačiti pažnju indiferentnih kemičara. Knjiga profesora Trinajstića namijenjena je širem krugu kemičara koji se žele informirati o specifičnostima te grane teorijske kemije. Knjiga sadržava velik broj izvornih citata i tako omogućuje brzo uključivanje zainteresiranih kemičara u to relativno novo područje koje će mnogi čitatelj naći vrlo zanimljivim, poučnim, a naravno i potrebnim. Knjiga je podijeljena u dva zasebna sveska: prvi dio donosi teorijsku podlogu, drugi dio primjenu na važnije kemijske probleme (iako ova podjela nije toliko značajna jer se pojedini problemi isprepliću). U početku na 20-tak stranica nalazimo osnovne pojmove matematičke teorije crteža: izomorfnost, osnove invarijante,

podjela crteža, podcrteži, Eulerovi i Hamiltonovi crteži itd. Na to se poglavlje nadovezuje opis kemijskih crteža, koji obuhvaćaju konstrukcije povezane s Hückelovom teorijom, s Kekuléovim strukturama i Möbiusovom inverzijom predznaka jednostavnih Hamiltoniana. Poglavlja 3 i 4 sadrže osnovne podatke i svojstva pridruženih matrica, uključujući karakteristični polinom i njegovu konstrukciju. Prva knjiga završava razmatranjem Hückelove metode, koja je u stvari ekvivalentna analizi strukturne matrice (matrice bliskosti). Čitatelj će ovdje naći niz novih podataka, koji su ostali nezapaženi kroz niz godina, kada je Hückelova metoda igrala odlučnu ulogu u razvoju kvantne kemije. Znatan dio tih zapažanja i analiza potječe od samog autora, koji već više od desetak godina intenzivno radi i surađuje na nizu problema kemijske teorije crteža. Karakteristika niza graf-teorijskih rezultata jest stanovita elegantnost, i čitatelj će naći nekoliko takovih elegantnih rezultata opisanih u posljednja dva poglavlja prve knjige. Npr. prebrojavanje neveznih, protuveznih i veznih orbitala. Tema posljednjeg poglavlja prve knjige jesu izospektralne molekule — molekule čija topološka matrica ima iste vlastite vrijednosti. Prošlo je preko 40 godina razvoja i uporabe Hückelove metode, a da kemičari nisu ni slutili da postoji mogućnost »dupliciranja« vlastitih vrijednosti za različite molekule. Dr. T. Živković (iz Zagreba) među prvima je uočio tu neobičajnost 1973. (iako su matematičari uočili postojanje izospektralnih crteža još 1957, a kemičari-dokumentalisti oko 1970, no ti raniji radovi nisu imali direktnu ulogu u teoriji kemijske veze ili u razmatranju molekulskih svojstava). Drugi dio knjige počinje opširnijom diskusijom o rezonancijskoj energiji. Elegantna sugestija Trinajstića i suradnika o acikličkoj hipotetskoj strukturi kao referentnoj strukturi za definiciju rezonancijske energije ilustrirana je na nekoliko primjera. U slijedećem poglavlju razmatraju se Kekuléove strukture kao baza za diskusiju o svojstvima konjugiranih ugljikovodika. Prikaz o neispravnosti pojma parnosti strukture (koji su 1950-tih godina uveli tada vodeći teorijski kemičari H. C. Longuet-Higgins i M. J. S. Dewar) vrlo je poučan: za sve tada poznate primjere definicija je davala smislovit rezultat. Ali, točnost matematičkih koncepcija ne može se *dokazati* nizanjem primjera, dovoljno je naći jedan jedini protuprimjer da se cijela hipoteza sruši. Takav primjer prvi su dali Gutman i Trinajstić, demonstrirajući tako nedostatak pretpostavke parnosti Kekuléovih struktura. U trećem poglavlju razmatraju se svojstva konjugiranih krugova — posebnih krugova u pojedinim Kekuléovim strukturama u kojim nalazimo naizmjenično jednostruke i dvostruke veze CC. Konjugirani krugovi opet su jedan primjer ranije nezapaženoga strukturnog elementa, koji igra fundamentalnu ulogu u karakterizaciji aromatičnosti. Slijedeće poglavlje razmatra problem odnosa strukture i svojstava te strukture i aktivnosti. Problem počinje s činjenicom da većina svojstva se može prikazati brojkom, ali struktura, naravno, nije skalar da bi se mogla sažeti jednim brojčanim podatkom. Tzv. topološkim indeksima (u stvari graf-teorijski indeksi) pokušava se riješiti ta dilema, sugerirajući recept kako strukturu reducirati u brojku a da se pri tom sačuva što više strukturnih značajki. U knjizi se razmatra niz topoloških indeksa, dajući čitatelju uvid u različito podrijetlo pojedinih indeksa. Knjiga završava kraćim poglavljem o prebrojavanju izomera, problemom kojim je u stvari kemijska teorija crteža i započela svoj doprinos kemiji nekih 110 godina ranije.

Ukupno oba dijela knjige sadrže oko 300 stranica. Knjiga je *odličan* izvor osnovnih tema kemijske teorije crteža, sadrži dovoljno informacija da zainteresirani čitatelj razmatra primjenu na vlastite probleme, ili čak postane samostalan znanstveni radnik u tom području teorijske kemije koje mnogo obećava. U knjizi su dobro uravnoteženi doprinosi autora (koji je ne samo zapaženi, već i jedan od vodećih teorijskih organskih kemičara teorije grafova) s prikazom rada drugih autora. Treba odmah reći da svoju najveću primjenu i razvoj kemijska teorija grafova nalazi u organskoj kemiji i da će mnogi anorganski kemičar biti razočaran nedostatkom materijala iz anorganske kemije. Prigovor, ipak, nije na mjestu: naprosto anorganski kemičari nisu do sada dali znatnijih priloga, izuzevši radove R. B. King-a i pojedinačne doprinose nekolicine drugih autora. Desetak poglavlja u kojima se razmatraju razni aspekti organske kemije nesumnjivo će privući pažnju organskih kemičara, a poželjno bi bilo da ih uoče i fizički kemičari. No, bez obzira na orijentaciju, knjiga se može uzeti kao vrijedan dokument koji uvodi čitatelja u *metode* teorije crteža. Kada jednom svlada gradivo ove knjige, svatko će biti dovoljno spreman da razmatra i rješava vlas-

tite probleme bilo organske, biokemije ili anorganske kemije. U stvari, očekivati je da će uskoro razvoj teorije crteža dovesti do primjena u biokemiji i biofizici, jer karakteristično je za teoriju crteža, koja predstavlja matematičku granu koja obrađuje kombinatorne i topološke aspekte problema, da daje dobre rezultate upravo za *kompleksne* probleme. Npr. oblik bjelančevina ili čak mnogo jednostavnijih t-RNA toliko je kompleksan da izlazi iz područja strogih metoda kvantne kemije.

Ima li knjiga nedostataka? Prvo — cijena je previsoka. Istina to je prva i jedina knjiga ove vrsti jednog autora (oko 1976. Balaban je uredio knjigu s nizom poglavlja, svako od drugog autora, knjiga koja je više skup revijskih članaka nego monografija kao ova knjiga Profesora Trinajstića). Knjiga je vrijedna novca, makar naravno mnogi će se morati služiti primjerkom iz sveučilišnih knjižnica. Što se tiče sadržaja — moglo bi se reći da bi se poglavlja o odnosima struktura-svojstva i poglavlje o prebrojavanjima mogla proširiti novim materijalom. Npr. nakon iscrpne diskusije o topološkim indeksima bilo bi poželjno nešto opširnije reći i o korištenju nizova (sljedova) za karakterizaciju struktura. Također, cijelo jedno poglavlje moglo bi se posvetiti problemu izomorfности kao i pitanju simetrije crteža, o kojima u knjizi ima malo ili gotovo ništa. Naravno negdje treba stati, a problem izomorfности i automorfности vode na kanonsko označavanje, što opet dovodi do primjene u kemijskoj dokumentaciji kao i primjeni kompjutera (recimo u sintezi), itd. To sve već bi bilo dosta gradiva za treću knjigu; tko zna, znajući energiju i produktivnost profesora Trinajstića možda je takva treća knjiga i već negdje na putu!

Sve u svemu: odlična knjiga koja će mnoge uputiti na važnije probleme u kemiji nego što su precizna izračunavanja geometrije malih molekula ili izračunavanje velikih molekula na problematičnu točnost.

MILAN RANDIĆ

*Industrial Developments, Advances in Polymer Science, Vol 51*

Urednici: Grupa znanstvenika

Springer-Verlag, Berlin, 1983.

U ovom svesku prikazana su četiri pregledna članka o polimernim materijalima i mehanizmu polimernih reakcija od interesa za industriju polimernih materijala.

G. Henrici-Olive i S. Olive (Monsanto, Textiles Company, Pensacola, Florida, SAD) opisuju u članku *Kemija nastajanja ugljičnih vlakana iz poliakrilonitrila* veliki broj prekursora na osnovi PAN-vlakana koji su u kontroliranim okolnostima karbonizirana u visokomodularna ugljična vlakna. Vlakna najboljih svojstava dobivena su karbonizacijom kopolimera AN/VBr.

V.A. Zakharov, G.D. Bukatov i Y.I. Yermakov (Institute of Catalysis, Novosibirsk, SSSR) u članku *O mehanizmu polimerizacije olefina uz Ziegler-Natta katalizatore* prikazali su nove podatke o aktivnim centrima Ziegler-Natta katalizatora i o mehanizmu propagacije i prijenosa lančane aktivnosti. Podaci o mehanizmu temelje se na određivanju aktivnih centara označavanjem radioaktivnim CO, na analizi mikrostrukture polimera s pomoću <sup>13</sup>C-NMR, na analizi reakcija polimerizacije uz visokoaktivne katalizatore na nosaču, i na kvantnokemijskim proračunima elektronske strukture aktivnih centara.

U. Zucchini i G. Cecchin (Montepolimeri, Ferrara, Italia) opisali su pod naslovom *Kontrola raspodjele molekulske mase poliolefina sintetiziranih uz Ziegler-Natta katalizatore* metode određivanja raspodjele molekulskih masa poliolefina. Naglašeno je da i pored velikog broja radova i patenata objavljenih u vezi s Ziegler-Natta katalizatorima, do sada nisu revijski prikazani radovi o raspodjeli molekulskih masa pri polimerizaciji olefina uz Ziegler-Natta katalizatore. Nakon kratkog uvoda o industrijskom značenju stereoregularne polimerizacije olefina, prikazan je mehanizam polimerizacije koji objašnjava široku raspodjelu molekulskih masa kod polimerizacije uz Ziegler-Natta katalizatore. U zaključku se dokazuje da široka raspodjela molekulskih masa nastaje više zbog mnoštva aktivnih centara, a manje je posljedica fizikalnih fenomena. Zbog toga je za kontrolu molekulskih masa potrebno bolje poznavati kinetiku polimerizacije i prirodu aktivnih centara, što će vjerojatno biti jedan od trendova razvojno-istraživačke djelatnosti u budućnosti.

F. A. Shuto v (Building Institute, Leningrad, USSR) u članku *Spužvasti polimeri — Celularna struktura i svojstva*, opisuje osnovne morfološke parametre spužvastih polimera, uključujući veličinu, oblik, broj ćelija, zatvorenost ćelija, celularnu strukturnu anizotropiju, raspodjelu veličine ćelija, površinu ćelija i sl. Uz opis metoda za određivanje navedenih svojstava, naveden je utjecaj pojedinih parametara na glavna svojstva celularnih polimernih materijala, posebno na prividnu gustoću, čvrstoću i toplinsku vodljivost. Celularna struktura spužvastih polimera opisana je kao specijalni slučaj statističkih faznih sistema.

Sva četiri rada odlikuju se jasnoćom i visokim znanstvenim nivoom, a poseban je značaj 51. sveska u tome što povezuju teoriju makromolekulskih znanosti s industrijskim razvojem. Kao i u ostalim revijskim pregledima ove serije, članci su dokumentirani velikim brojem literaturnih citata.

R. VUKOVIĆ

Michael Thor Pope

*Heteropoly and Isopoly Oxometalates*u seriji *Inorganic Chemistry Concepts, Vol. 8*

Springer-Verlag, Berlin, Heidelberg, New York, Tokyo, 1983

Gotovo svi elementi periodičnog sistema elemenata mogu biti heteroatomni u polioksianionu, ali je poznato samo pet prijelaznih elemenata: vanadij, niobij, tantal, molibden i volfram, koji tvore tvećinu takvih struktura. Od tih pet elemenata molibden(VI) i volfram(VI) dominiraju u kemiji polioksaoaniona. Koja su to svojstva atoma koja ih čine prikladnima za stvaranje diskretnih izopoli- i heteropolioksaoaniona? Dva zahtjeva čine se bitnima: veličina kationskog radiusa i sposobnost dobrog akceptora za kisikove  $p\pi$  elektrone. Združenost tih zahtjeva je, naravno, rijetkost, ali kao da je optimum te združenosti postignut u primjerima molibdena (VI) i volframa(VI). Kao preduvjet sklonosti polimerizaciji metalnih oksoaniona, u razmatranjima autora ove knjige, navodi se još jedan zahtjev, a to je povećanje koordinacijskog broja metalnog kationa sa 4 na 6. Većina polioksomolibdata(VI) i polioksovolframata(VI) sadrži oktaedarski koordinirani molibden(VI) ili volfram(VI) što, primjerice, nije nađeno u kemiji kroma(VI).

Uz uvodni, dijelom povijesni dio, knjiga sadrži pregled metoda istraživanja polioksaoaniona u otopinama. U 2. poglavlju razmatraju se preparativni i strukturni principi, te svojstva i primjena. Poglavlja 3 i 4 pregled su kemije izopoli- i heteropolioksaoaniona. Među izopolioksoanionima dominiraju: vanadati, niobati, tantalati, molibdati i volframati, a u kemiji heetropolioksaoaniona tetraedarske strukture uz navedene oksoanione najčešće su prisutni silicij, germanij, fosfor, arsen i bizmut, a u oktaedarskim strukturama prisutni su neki prijelazni elementi kao i elementi rijetkih zemalja. Osobita svojstva tih spojeva (upotreba kao liganada, te redoks-kemija) opisani su u poglavljima 5 i 6. Novije područje istraživanja polioksaoaniona u reakcijama s organskim i organometalnim skupinama opisano je u poglavlju 7. Posljednje poglavlje obuhvaća razmatranja granica i mogućnosti ovog područja kemije, te mehanizam nastajanja polioksaoaniona.

Uz prikladnu podjelu materijala, konciznost u iznošenju, iscrpan prikaz literature, knjiga sadrži vrijedan dodatak o nomenklaturi polioksaoaniona.

NEVENKA BRNIČEVIĆ

E. Breitmaier i G. Jung

*Organische Chemie II, Spezielle Verbindungsklassen, Naturstoffe, Synthese, Strukturaufklärungen*

Georg Thieme Verlag, Stuttgart-New York, 1983

XVI + 656 str., 191 slika, 86 tablica.

Iz sadržaja ovog sveska (1. Razjašnjenja strukture spektroskopskim metoda- ma 2. Fotoreakcije 3. Nebenzoidni aromati 4. Organometalni spojevi 5. Supstituirane karbonske kiseline 6. Heterocikli 7. Heteroaromati 8. Organske boje i pigmenti 9. Sintetski polimeri 10. Planiranje sinteze 11. Aminokiseline 12. Peptidi i proteini 13. Alkaloidi 14. Ugljikohidrati 15. Nukleozidi 16. Lipidi



17. Terpeni 18. Steroidi) i pregleda sadržaja prvog sveska koji je dan u nastavku (1. Kemijska veza u organskim molekulama 2. Sistematika i svojstva grupa spojeva 3. Alkani 4. Radikalna supstitucija 5. Alkeni 6. Eliminacija i adicija 7. Dieni i polieni 8. Alkini 9. Halogenalkani 10. Nukleofilna supstitucija na alifatskim spojevima 11. Cikloalkani 12. Stereokemija 13. Aromatičnost 14. Benzen i derivati 15. Elektrofila i nukleofilna supstitucija na aromatima 16. Kondenzirani aromati 17. Alkoholi i glikoli 18. Eteri 19. Karboksilne kiseline i njihovi derivati 20. Aldehidi i ketoni 21. Amini 22. Diazo-spojevi, arildiazonijeve soli, azo-spojevi i drugi spojevi sa dušikom 23. Fenoli i kinoni 24. Organosumporni spojevi 25. Derivati ugljične kiseline 26. Najvažniji tipovi reakcija u organskoj kemiji-sažetak 27. Simetrija orbitala i usklađene reakcije poliena (Woodward-Hoffmannova pravila)) vidljivo je da oba sveska čine cjelinu u kojoj se podjela u poglavlja i njihov redoslijed čine donekle proizvodnjima.

Gotovo sva poglavlja pisana su tako da težište leži na količini i aktualnosti informacija, što je rezultiralo izvanrednom konciznošću i velikim brojem podataka, često i onih koji su rezultat znanstvenih dostignuća u posljednjih 4—5 godina. Takav udžbenik se nešto teže čita u cjelini, a pitanje je da li je tolika količina podataka i didaktički primjerena studentima nižih semestara. Na kraju svakog poglavlja nalazi se izvrstan izbor iz najvažnije literature, podijeljen na citate priručnika koji pružaju širi uvid u obrađeni materijal, revijske radove, godišnje izvještaje i sl. Na kraju knjige je kazalo pojmova (35 str.). Treba istaknuti brojne i vrlo pregledne tablice po poglavljima, na pr. fizičko-kemijskih svojstava pojedinih skupina spojeva ili kemijskih transformacija funkcijskih skupina, te slikovite prikaze mehanizama enzimskih reakcija i složenih trodimenzijskih struktura u poglavljima o peptidima, proteinima, ugljikohidratima i alkaloidima. Poglavlje o planiranju sinteze upućuje u tzv. retrosintetski pristup (Corey, Wipke) i koristi se njegovom simbolikom. Poglavlje o heteroaromatskim spojevima pruža uvodna objašnjenja fizičko-kemijskih svojstava 5- i 6-članih prstenova na osnovi njihovih  $\pi$ -elektronskih svojstava ali u kasnijim tumačenjima njihove reaktivnosti taj pristup nije možda dovoljno naglašen. Poglavlja o fotoreakcijama, organometalnim spojevima, organskim bojama i pigmentima pružaju daleko više podataka od sličnih poglavlja u poznatim udžbenicima, dok je uvodno poglavlje o spektroskopiji na standardnoj razini. U završnim poglavljima posvećenima pojedinim klasama spojeva pozitivna je novost da se navode njihova tehnološki zanimljiva svojstva, te tehnološke sheme pripreve u industrijskom mjerilu — kemijskim ili fermentativnim putem.

Ukupno uzevši, autorima je uspjelo dati aktualan i pregledan udžbenik organske kemije koji će sigurno naći mjesto uz već općenito prihvaćena djela američkih autora (»Cram — Hammond«, »Morrison — Boyd«, »Heathcock — Straitwieser.«). Bez obzira na cijenu, koja recenzentu nije poznata, preporuka ovog udžbenika knjižnicama ili pojedincima u vremenu devizne nestašice bila bi skoro neumjesna!

V. ŠUNJIĆ

### *Chemical Graph Theory*

Nenad Trinajstić

Vols. 1 and 2, CRC

Press Inc., Boca Raton, Florida, 1983.

U kemijskoj literaturi je posljednjih godina zabilježen značajan porast radova posvećenih teoriji grafova. Dobar dio ove produkcije otpada na Gutmana i Trinajstića, inicijatora ove vrste istraživanja u nas, pa je potpuno na mjestu da (barem) jedan od njih napiše knjigu o toj problematici. Vremenski period od proteklih desetak godina dovoljan je također da se izvuku neki barem privremeni zaključci i ocjene. Zbog toga pojavu gornje knjige treba u principu pozdraviti. Materijal knjige je organiziran u dva toma. U prvom su dani elementi teorije grafova, definicija i svojstva topoloških matrica i karakterističnih polinoma grafa. Dosta prostora je posvećeno topološkim aspektima Hückelove teorije a diskutirana je i pojava izospektralnih grafova (i odgovarajućih izospektralnih molekula). U drugom dijelu iscrpno se raspravlja o topološkoj rezonantnoj energiji (TRE), modelu konjugiranih krugova, prebrojavanju Kekulé-ovih struktura, prebrojavanju izomera te o najrazličitijim topološkim

indeksima. Oba toma su vrlo lijepo opremljeni. Knjiga sadrži velik broj razrađenih primjera kojima autor slikovito ilustrira pojedine pristupe i formule. To bi svakako bila njena vrlo jaka strana kada bi se radilo o udžbeniku. Međutim prikazani materijal se oslanja na izuzetno velik broj referenci pa se stiče dojam da je autor želio obuhvatiti sve ili gotovo sve radove u području, što knjizi daje karakter monografije. Kako su mnogi radovi i doprinosi više registrirani nego kritički evaluirani (vidi kasnije) možda je najispravnije knjigu okarakterizirati kao zbir revijskih članaka. Teorija grafova temelji se na vrlo jednostavnoj slici molekule. Atomi su svi jednaki. Oni su ili vezani ili to nisu. Odatle slijedi da su njihove interakcije ili jednake ili potpuno zanemarene. Geometrija molekula je također zanemarena a zadržana je jedino topologija. Ako atome karakteriziramo nekim posebnim ad hoc težinskim faktorima, onda graf-teorijski pristup odgovara konstitucijskim formulama molekula, koje je u kemiju uveo Couper 1858. g. Očigledno je da ovakav odviše jednostavan model određuje domet same metode. Ona je vrlo korisna u prebrojavanju izomera, prebrojavanju Kekuléovih struktura planarnih molekula, u kemijskoj dokumentaciji i sl. što je u knjizi lijepo prikazano. No teorija grafova je odviše uska da opiše osnovne značajke kemijske veze, jer je ova potonja kvantni fenomen pa su za to potrebni kvantni modeli. Finije detalje preraspodjele elektronske gustoće u molekulama koji imaju odlučan utjecaj na njihova fizikalno-kemijska svojstva ne treba ni spominjati. Zbog toga moramo teoriju grafova primjenjivati u kemiji s velikom dozom opreza. Nažalost to često nije slučaj pa smo svjedoci mnogih Prokrustovih efekata, tj., nefizikalnih rezultata. Razočarava da knjiga N. Trinajstića ne doprinosi čvršćem uspostavljanju granica primjenljivosti teorije grafova.

Pisac ovog prikaza želio bi ukazati na slijedeće konkretne nedostatke. Ponaјprije, naslov je previše pretenciozan. Ne radi se o nekoj posebnoj kemijskoj teoriji grafova već o primjeni teorije grafova u kemiji. Analogija s teorijom grupa je poučna. Nitko ne govori o kemijskoj teoriji grupa već o primjeni ove teorije na molekule o čemu svjedoče naslovi barem pedesetak knjiga. Usput, teorija grupa tretira simetriju koja je daleko fundamentalnije svojstvo od topologije. Nadalje, zamašno poglavlje posvećeno je »ekvivalentnosti« Hückelove metode i teorije grafova, što je već nekoliko puta obrađivano (vidi npr. *Lecture Notes in Chemistry*, Vol. 4, Springer-Verlag, Berlin, 1977) s vrlo malim varijacijama. Međutim, u svim tim revijskim prikazima nije naglašeno da su grafovi i Hückelova metoda ekvivalentni samo ako je ova potonja dana u svom najjednostavnijem obliku. Hückelova  $\pi$ -elektronska teorija je mnogo fleksibilnija jer može uključiti prekrivanje atomskih orbitala, varijaciju rezonantnih integrala  $\beta$  s udaljenostima, intramolekularni prijenos naboja i njegov utjecaj na Coulombske integrale  $\alpha$  itd. Teorija grafova to ne može uzeti u obzir bez ogromnog broja empirijskih parametara, ali tada u metodu stavljamo ono što bismo od nje htjeli dobiti. Nadalje, ukupna  $\pi$ -elektronska energija se poistovjećuje sa zbrojem orbitalnih energija, što nije isto. Ustvari, zbroj orbitalnih energija je samo vrlo gruba aproksimacija ukupne energije a ove dvije veličine se razlikuju u sumi svih međuelektronskih interakcija. Vjerojatno zbog toga razne teorije rezonancije i nailaze na mnoge teškoće. Danas se o tome mnogo zna i postoje bolje aproksimativne formule za ukupnu energiju pa je neobično da se to ne komentira, ako se već ne koristi u samom radu. Nekritičnost autora najviše dolazi do izražaja kod topološke rezonantne energije (TRE) koja je poglavlje za sebe. Ova metoda se temelji na tzv. acikličkim polinomima za koje je dokazano da nemaju fizikalnu podlogu (E. Heilbronner, *Chem. Phys. Letters* 85 (1982) 377). Zbog toga ne iznenađuje da TRE metoda daje pogrešne rezultate pa je npr. ciklobutadien aromatičniji od benzena itd. Sve je to dokumentirano u literaturi (I. Gutman, *Chem. Phys. Letters* 66 (1979) 595, *Theoret. Chim. Acta* 56 (1980) 89; I. Gutman and B. Mohar, *Chem. Phys. Letters* 69 (1980) 375; W. C. Herndon, *J. Amer. Chem. Soc.* 104 (1982) 3541 uz već spomenuti Heilbronnerov članak) ali se u knjizi uopće ne spominje. Štoviše, i dalje se publiciraju članci o TRE pri čemu se ignorira njena proizvoljnost. Nadalje, nekritičan stav nailazimo i kod problema izospektralnih molekula. Neke vrlo različite molekule mogu imati iste topološke orbitalne energije pa su s gledišta teorije grafova (kao i Hückelove teorije u najjednostavnijoj formi) ekvivalentne. No u stvarnosti se njihova svojstva bitno razlikuju. Heilbronner je to vrlo uvjerljivo pokazao na jednom primjeru pomoću fotoelektronske spektroskopije (E.

Heilbronner and T.B. Jones, *J. Amer. Chem. Soc.* **100** (1978) 6506.) Proizlazi da su čak i ionizacijski potencijali izospektralnih molekula različiti. Ostala svojstva se moraju razlikovati već na temelju velikih razlika u geometriji. Ovaj primjer vrlo dobro ilustrira grubost i neelastičnost teorije grafova.

Jedan od najvećih nedostataka teorije grafova jest zanemarivanje geometrije molekula, koja u sebi imanentno sadrži važne informacije. Da bi se nekako ublažio taj nedostatak, teorija grafova je proizvela ogroman broj topoloških indeksa u kojima su navodno pohranjene strukturne karakteristike. Nažalost to nije slučaj jer nikakav broj ne može zamijeniti bogatstvo geometrijskih oblika molekula. Topološki indeksi su navedeni u knjizi bez ikakve selektivnosti. Također su nekritično dane njihove korelacije s raznim svojstvima. Slaganje s nekom eksperimentalnom veličinom pomoću empirijskih korelacija uopće nije dokaz valjanosti i ispravnosti modela. Klasičan primjer nalazimo u astronomiji. U vrijeme kad se pojavio Kopernikov heliocentrični sustav, Ptolomejev geometrični sustav je imao daleko bolje slaganje s astronomskim opažanjima, iako je u suštini potpuno pogrešan. Zbog toga i korelacije topoloških indeksa s eksperimentalnim podacima treba uzimati krajnje oprezno. One mogu biti naprosto ples numeričkih parametara jer iza njih ne stoji fizikalan model.

Na kraju, ako se netko želi baviti teorijom grafova, onda mogu knjigu N. Trinajstića preporučiti. Moram, međutim, upozoriti neupućenog kemičara da kod primjene teorije grafova u kemiji pažljivo plovi između mnogih Scila i Haribdi.

ZVONIMIR MAKSIĆ