

## PRIKAZI KNJIGA

## BOOK REVIEWS

*Pattern Recognition in Chemistry, Lecture Notes in Chemistry,*

Kurt Varmuza

Berlin No. 21, Springer-Verlag, 1980.

str. 217.

Tri su grupe metoda koje se upotrebljavaju za kompjutorsku interpretaciju kemijskih podataka. To su (a) heuristične metode (koje nastoje složiti kompjutorske programe da pristupaju problemu onako kako bi to i kemičar uradio), (b) metode dohvaćanja informacija (koje se upotrebljavaju za traženje podataka u knjižnicama podataka) i (c) metode temeljene na prepoznavanju letova (koje su naročito upotrebljive za klasificiranje objekata u zasebne razrede na temelju nekih svojstava). U metodama prepoznavanja pletopa sklop karakterističnih značajki (npr. spektar) nekog objekta (molekule) uzima se kao apstraktni uzorak koji sadrži informaciju o nekom svojstvu objekta koje nije »izravno« mjerljivo (npr. biološka aktivnost). »Čiste« metode prepoznavanja pletova nastoje iznaći vezu između apstraktnog oblika i svojstva objekta bez uplitanja kemijskog znanja i kemijske intuicije.

Knjižica Kurta Varmuze (Institut za opću kemiju Sveučilišta u Beču) *Pattern Recognition in Chemistry* bavi se upravo metodama prepoznavanja pletova. Sastoji se od 20 poglavlja, koja su klasificirana u dva dijela. Prvi dio sadrži 11 poglavlja i donosi uvod u metode prepoznavanja pletova i potanki opis različitih tehnika koje su danas u uporabi. Drugi se dio sastoji od 9 poglavlja i donosi prikaz primjene metoda prepoznavanja pletova u kemiji. One su se udomaćile u spektralnoj analizi, kromatografiji, elektrokemiji, tehnologiji, farmakologiji, kliničkoj kemiji, arheološkoj kemiji, kemiji okoliša, prehrambenoj kemiji, itd.

Djelo je popraćeno s 468 literaturnih referencija od 1928. do 1980. Najcitiraniji autori izvornih doprinosa su P. C. Jurs (43 ref.), T. L. Isenhour (39 ref.) i B. R. Kowalski (37 ref.). Autor navodi i časopise koji najčešće donose radove iz tog područja od interesa za kemičare: *Analytical Chemistry, Journal of American Chemical Society, Journal of Chemical Documentation and Computer Science, Journal of Medicinal Chemistry, Journal of Chromatographic Science, Applied Spectroscopy* i još nekoliko vrlo specijaliziranih časopisa.

U Jugoslaviji se metodom prepoznavanja pletova aktivno bavi grupa oko D. Hadžija i J. Zupana (koji su ušli u ovu knjižnicu s tri citata) u Ljubljani, dok u Zagrebu na Institutu »Ruđer Bošković« neki članovi Grupe za teorijsku kemiju surađuju s A. J. Hargetom (Odjel računskog stroja Sveučilišta Aston u Birminghamu) na metodi prepoznavanja oblika zasnovanog na grozdastoj aproksimaciji.

N. TRINAJSTIĆ

*Electronic States of Molecules and Atom Clusters, Lecture Notes in Chemistry,*

Giuseppe Del Re, Gaston Berthier, and Josiane Serre,

Berlin, No. 13, Springer Verlag,

str. 177.

U trinaestoj knjižici serije *Lecture Notes in Chemistry* autori Giuseppe Del Re (Katedra za teorijsku kemiju Sveučilišta u Napulju), Gaston Berthier (Institut za biologiju Sveučilišta u Parizu) i Josiane Serre (Laboratorij za kemiju Više opće škole za djevojke »Montrouge«) daju temelje i perspektive semiempirijskih molekularno-orbitalnih metoda. Naime, u posljednjem desetljeću svjedoci smo konfrontacije upotrebljivača semiempirijskih i »točnih« (ab initio) molekularno-orbitalnih metoda. Međutim, ta je konfrontacija više emotivna nego racionalna, jer i jedne i druge metode mogu pomoći u razumijevanju eksperimentalnih činjenica.

Budući da su i semiempirijske i ab initio molekularno-orbitalne metode aproksimativne metode, jedini kriterij njihove uspješnosti jest koliko one mogu pomoći u predviđanju svojstava i reaktivnosti molekula. Zato valja upozoriti organske kemičare, molekularne biologe, i druge upotrebljivače teorije molekularnih orbitala na opasnosti nekritičke upotrebe »boljih« metoda, jer one to ne moraju uvijek biti za neki specifični problem. Jedino se može govoriti o hijerarhiji metoda s obzirom na sadržaj informacija i širinu spektra primjenljivosti. To su i temeljne postavke knjižice Del Rea, Berthiera i Serreove.

*Electronic States of Molecules and Atom Clusters* sastoji se od 5 poglavlja. U prvom i drugom se poglavlju raspravlja o temeljnim pojmovima i matematičkom formalizmu teorije molekularnih orbitala. Treće poglavlje obuhvaća klasičnu Hückelovu teoriju i trodimenzijsku Hückelovu teoriju poznatu pod imenom proširena Hückelova teorija. U četvrtom poglavlju su prikazane PPP (Pariser-Parr-Popleova) SCF MO, CNDO (potpuno zanemarivanje diferencijalnog prekrivanja) SCF MO i različite NDO metode (INDO, MINDO, NNDO), kao i PCILO metoda, koju zaobilazi SCF razinu upotrebom sheme perturbacijske interakcije konfiguracija. U tom poglavlju autori diskutiraju i o dometu svih navedenih metoda. U petom posljednjem poglavlju autori diskutiraju o nekim temeljnim pitanjima, kao npr. o problemu neortogonalnosti, o izboru parametara, o sigma-pi separaciji, o  $X_{\alpha}$  metodi, itd. U tom se poglavlju diskutira i o primjeni molekularno-orbitalnih metoda u fizici čvrstog stanja.

Knjižica je popraćena s 396 referencija, koje su klasificirane po razdobljima: 1930—1949 (22 ref., dominira po doprinosu C. A. Coulson), 1950—1959 (37 ref., interesantno da se ne navode radovi R. Pariser and R. G. Parr, *J. Chem. Phys.* **21** (1953) 446 i *J. Chem. Phys.* **21** (1953) 767, koji su temeljni za teoriju poznatu kao PPP metoda), 1960—1964 (40 ref., dominiraju reference G. Del Re), 1965—1967 (78 ref. dominira J. A. Pople), 1968—1970 (36 ref.), 1971—1973 (55 ref.), 1974—1976 (63 ref.) i 1977—1980 (65 ref.).

Zanimljivo je da se u ovom popisu uočljivo ne navode radovi M. J. S. Dewara, koji je posljednja dva desetljeća vodeći znanstvenik u području razvijanja semiempirijskih metoda. Tako je sveukupni broj navedenih Dewarovih radova svega 4.

Od naših autora navodi se krug oko pokojnog Andreja Ažmana (1 ref.) i Zagrebačka grupa teorije crteža (1 ref.).

N. TRINAJSTIĆ

### *Die Chemische Industrie und ihre Helfer,*

Herausgeber Selka, Industrieschau-Verlagsgesellschaft mbH, Darmstadt, 1981.

Ovaj priručnik za 1980/81. namijenjen je stručnjacima iz proizvodnje i nabavnih službi u kemijskoj industriji. Po koncepciji je isti kao i ranijih godina i sadrži: reklame i ponude proizvođača, konjunktorni pregled, stručni pregled i novitete, popis snabdjevača i proizvoda za kemijsku industriju i trgovinu s alfabetskim pregledom proizvoda, popis poduzeća (s podacima o njihovoj strukturi) i druge informacije.

I. BUTULA

### *Bioactive Organo-Silicon Compounds, Topics in Current Chemistry (Fortschritte der Chemischen Forschung)*

Editor Dr. Fridrich L. Boschke,

Berlin-Heidelberg-New York Vol. 84, Springer Verlag, 1979,

str. 146.

Svezak broj 84 serije *Topics in Current Chemistry* donosi dva članka iz područja organske kemije i farmakologije spojeva silicija. Prvi članak (75 stranica) o pripravi i svojstvima biološki aktivnih organosilicijevih spojeva napisali su Reinhold Tacke i Ulrich Wannagat (s Instituta za anorgansku kemiju Sveučilišta u Braunschweigu). Nakon uvoda, u tri poglavlja ovog članka, opširno su prikazane mogućnosti pripreme i svojstva biološki aktivnih silicijevih spojeva, strukturnim analoga poznatih biološki aktivnih spojeva ugljika. Također su prodiskutirane sličnosti i razlike u fizičko-kemijskim svojstvima i biološkoj aktivnosti analogā. Posebno poglavlje posvećeno je biološki aktivnim spojevima silicija čiji organski (ugljikovi) analozi još nisu poznati ili ne pokazuju nikakvu biološku aktivnost. U posljednjem

poglavlju toga članka dan je pregled toksičnosti i biološke aktivnosti dosad pripremljenih organosilicijevih spojeva. Članak je popraćen s 132 literaturne referencije, zaključno s prvom polovicom 1978. g.

Michail G. Voronkov (s Instituta za organsku kemiju, Sovjetske akademije znanosti u Irkutsku) autor je drugog članka (50 stranica) o biološkoj aktivnosti silatrana. Silatrani predstavljaju novu klasu biološki aktivnih spojeva sa širokim spektrom djelovanja. U članku su prodiskutirani karakteristični rezultati biološke aktivnosti silatrana te mogućnost njihove primjene. Veliki broj silatrana našao je korisnu primjenu u kemoterapiji, poljoprivredi i industrijskoj mikrobiologiji. Članak je popraćen s 99 literaturnih referencija, zaključno s prvom polovicom 1978. g.

Knjiga sadržava vrijedan materijal, jedna je od rijetkih s područja organske kemije silicija i sigurno može koristiti svakome tko se zanima za kemiju i farmakologiju biološki aktivnih spojeva.

Na kraju sveska nalazi se autorski indeks za sveske od broja 26 do 84.

A. SABLJIĆ

*Basic Analytical Chemistry,*

L. Pataki and E. Zapp

Budapest, Akademiai Kiado, 1980, str. XIII + 463

Knjigâ i udžbenikâ analitičke kemije (na stranim jezicima) ima priličan broj. Međutim, ovu knjigu kojoj su autori profesori analitičke kemije s univerziteta u Budimpešti, treba ne samo zapaziti nego i istaknuti kao znatan i svojevrsan potuhvat koji zahtijeva veliko znanje i iskustvo. To je prava mala enciklopedija po svojoj sveobuhvatnosti, a istovremeno prvorazredni udžbenik po koncepciji, rigoroznosti i logičkoj dosljednosti. Knjiga pokriva sve aspekte analitičke kemije s vrlo dobro izbalansiranim sadržajima iz klasične i instrumentalne, kvalitativne i kvantitativne analize. Autor predgovora, istaknuti analitički kemičar i iskusan nastavnik sveučilišta u Birminghamu, prof. R. Belcher izražava se o knjizi najpohvalnije i među ostalim kaže: »Knjiga ove vrsti mnogo kasni, a vjerojatno ju nitko nije ni pokušao napisati, misleći da bi mogla zahtijevati tri ili četiri volumena. Autori su pokrili sve sadržaje, klasične i instrumentalne, ali uz takovu ekonomiju riječi, da je sav materijal sažet u jedan volumen«.

Iako je tekst zgsnut, vrlo je jasan i pregledan, nadopunjen brojnim crtežima, grafovima i tablicama. Primjeri za ilustraciju veoma su dobro odabrani.

Knjiga je podijeljena u šest poglavlja. Sadržaj pojedinih poglavlja i njihova širina najbolje su vidljivi iz naslova i udjela u knjizi: 1. Kemijske ravnoteže u otopini (18%), 2. Kvalitativna kemijska analiza (20%), 3. Kvantitativna kemijska analiza (29%), 4. Instrumentalne metode analize (20%), 5. Separacijske metode (6%), 6. Analiza organskih spojeva (elementarni sastav i funkcijske skupine) (6%). U dodatku knjiga sadrži tablice s ravnotežnim konstantama i standardnim redoks-potencijalima, podatke za pripremu otopina nekih reagenasa, zatim bibliografske podatke i indeks pojmova.

U prvom poglavlju autori daju solidnu i suvremenu teorijsku podlogu kemijskih metoda. Generaliziraju donorno-akceptorski princip interakcije i dosljedno ga slijede u izlaganju svih tipova kemijskih procesa u kvalitativnoj i kvantitativnoj kemijskoj analizi (poglavlja 2 i 3).

U četvrtom poglavlju primjerno je dan pregled preko gotovo svih instrumentalnih metoda analize (elektrokemijske, optičke i spektroskopske, metode temeljene na magnetskim fenomenima, termičke i radiometrijske metode). Iako je opis pojedinih metoda vrlo kratak, ipak sadrži najbitnije podatke o temeljnim načelima, o tehnikama rada i mjerenja, te o analitičkim mogućnostima i ograničenjima. Na taj se način može dobiti dobar osnovni uvid u pojedine metode prije njihova potanijeg proučavanja u naprednijim ili specijaliziranim kolegijima, odnosno u toku njihove primjene.

Knjiga u cjelini odražava jedinstvenost analitičke kemije i nadopunjujuću ulogu različitih metoda i informacija koje one pružaju. Logičnom dosljednošću u opisivanju istih procesa korištenih u različite svrhe autori nastoje razviti određeni kemijski način mišljenja u analitičkoj kemiji i naglasiti općeniti pristup analitičkim problemima, utemeljen na solidnom poznavanju kemijskih i fizičkih načela na kojima se

analitičke metode zasnivaju. Zbog mnoštva različitih metoda i sve većih zahtjeva u rješavanju vrlo složenih analitičkih problema takav pristup vjerojatno najbolje odgovara današnjem stanju i potrebama analitičke kemije.

Vjerujemo, da će se knjiga svidjeti i biti od koristi svima onima, čiji je rad neposredno ili posredno vezan uz probleme analitičke kemije. Posebno ju preporučujemo nastavnicima i studentima kemije. S pomoću ove knjige nastavnici će vjerojatno lakše riješiti svoje dileme, što i kako predavati u skučenom vremenu predviđenom za osnovne kolegije analitičke kemije u nastavnim programima. Studenti mogu dobiti ovom knjigom jedan udžbenik, umjesto više njih međusobno neusklađenih ili nesuvremenih. Steta je samo što će strani jezik predstavljati zapreku da se naši studenti mogu bez poteškoća služiti ovom vrijednom knjigom. Stoga bi vrijedilo razmisliti o mogućnostima njezina prevođenja na naš jezik, to više što nema domaćih udžbenika koji bi adekvatno pokrivali to područje.

M. ŠIROKI