

PRIKAZI KNJIGA

BOOK REVIEWS

Prikaz znanstvenog časopisa: *Journal of Computational Chemistry*

Izdavač: Wiley-Interscience Publ., (605 Third Ave., New York, N. Y., 10016)

Urednik: N. L. Allinger (Univ. of Georgia, Athens, GA 30602)

Izlazi: Tromjesečno; Predplata: \$ 50,00 + poštarina

Neprestani rast već udomaćenih znanstvenih časopisa, također i neprestani dolazak novih časopisa stvorili su nezdravu atmosferu prigovaranja pa, čak i pokušaja onemogućavanja novih znanstvenih časopisa, kao da su razlog pojavi i bujanju postojećih časopisa nezdrave ambicije pojedinaca, a ne postupan rast i razvoj znanosti i znanstvene aktivnosti. Da zaista dolazi vrijeme kad opća područja bilo kemije, fizike, biologije ili matematike (disciplinâ koje su se razvile bujanjem i rastom tzv. »naravne filozofije«), postaju preopširna pokazuju i naslovi znanstvenih časopisa. Unutar teorijske kemije danas ima već nekoliko jasno definiranih disciplina: kvantna kemija, statistička mehanika, teorija grupâ, teorija crteža (grafovâ), numeričke metode, nenumeričke metode, itd. Novi časopis *Journal of Computational Chemistry* usmjeren je k računskoj kemiji koja uključuje razne vidove organske, anorganske, fizičke i biokemije. Časopis će primati i radove iz eksperimentalne ili teorijske kemije ako oni sadržavaju neki vid računske naravi koji je od općeg interesa. Treba razlikovati, ipak, radove koji sadržavaju numeričke rezultate (dobivene, naravno, računskim metodama, ali već dobro poznatim pristupima) od radova u kojima se razrađuju računski pristupi i primjenjuju možda već i poznate metode, ali na novima, netrivialnim primjerima koji zahtijevaju modifikacije ili se pak prikazuju potpuno novi vidovi računske kemije. Ovi potonji prikladni su za novi časopis. Prvi broj potvrđuje nakane izdavača i urednika; objavljeni radovi pripadaju raznim područjima računske kemije: prvi rad npr. razmatra osnovne topološke modele kemijskih sustava, među ostalim radovima nalazimo opis optimizacije računanja ^{13}C kemijskih pomaka, razmatranje ciklobutanskih derivata empirijskim pristupom molekularne mehanike, problem savijanja bjelančevina — problem čiji kombinatorni značaj onemogućuje ispitivanja svih mogućih alternativa, itd. U uredničkom odboru okupljeni su stručnjaci s raznih područja kemije kao npr. Bartell (raspršenje i strukturna kemija); Clementi (složeni računi kompjuterima); Csizmadia (Kvantna kemija), Kaufman (biološki važne molekule); Pople (ne-empirijski računi elektronske strukture molekula); Pullman (kvantna biologija, dotično ono što taj naslov implicira); Scheraga (strukture bjelančevina); Streitwieser i Wiberg fizičko-organska kemija). Naravno, nije moguće da sva područja računske kemije budu zastupljena, — uočljiv je nedostatak predstavnika kojega od područja tzv. nenumeričke matematike (u kemiji), discipline koja npr. uključuje probleme optimalnosti algoritama, probleme teorije crteža i mnoge probleme teorije grupa. Kao što je poznato, kombinatorni značaj mnogih od tih problema očituje se u numeričkim rješavanjima i može znatno ubrzati postojeće pristupe. Sami pak problemi tzv. nenumeričke matematike i te kako zahtijevaju korištenje kompjuterom i razradu računskih problema — pridjev »ne-numerički« više se odnosi na činjenicu da se tu razmatraju manipulacije objektima (algebarskim, topološkim, geometrijskim, koji se naravno reprezentiraju brojkama, pa se manipulacije svode na operacije s brojkama najčešće nizovima, matricama i sl.). Dakle, ti problemi pripadaju u područje koje časopis pokriva. U stvari već u slijedećim brojevima časopisa pojavit će se nekoliko radova kemijske primjene teorije crteža, pa bude li se taj početni profil časopisa održao, moći će se postaviti i pitanje reprezentacije nenumeričke matematike u uređivačkom odboru. To je naravno važno za nas koji radimo u području kemijske primjene teorije crteža, budući da neki časopisi smatraju da teorija crteža i njezina primjena ne pristaju u okvire njihova profila. Pojava ovog časopisa bit će nesumnjivo pozdravljena od mnogih koji rade u interdisciplinarnim područjima, jer kako je u Uvodu na str. 1 prvog broja časopisa rečeno, to je časopis kemije (organske, anorganske, fizičke i biokemije),

kemije koja počiva na računskim pristupima, bez razlike radi li se o računskim pristupima uporabom infinitezimalnog računa, računa vjerojatnosti, računa teorije grupa ili pak računa teorije crteža — te zanemarene discipline koja počiva na vrlo isprepletenim relacijama kombinatorike i topologije. Časopis, nema sumnje, bit će uskoro neophodan svim knjižnicama kemijskih zavoda, sveučilišta i instituta. Ne zato što je kompjuterska kemija važnija od eksperimentalne ili teorijske kemije, u stvari bez eksperimentalne kemije nema kemije, već stoga što su kompjuterski pristupi i simulacije s ekonomskog stajališta vrlo prihvatljivi jer manje investicije u računске probleme mogu dovesti do golemih ušteda, ili barem do smanjenja gubitaka zbog raznih problematičnih pokušaja.

M. RANDIĆ

Molekule bez kemijskih veza (na ruskom),

I. S. Dmitriev,

Lenjingrad, Himija 1980.

str. 158, cijena 20 koppejaka.

U ovoj maloj knjižici govori se o primjeni teorije crteža (grafova) u kemiji. Djelo ima 7 poglavlja, zaključak i preporučenu literaturu. Autor diskutira o teoriji molekularnih orbitala i dosta detaljno o Hückelovu modelu (prvo poglavlje), o elementima kemijske teorije grafova (drugo poglavlje), o teoremu parova i njegovim posljedicama (treće poglavlje), o topologiji poliena, ciklopoliena i teoriji aromatičnosti (četvrto poglavlje), o molekulama bez kemijskih veza (peto poglavlje), o topologiji anorganskih molekula (šesto poglavlje) te o povijesti kemijske teorije grafova (sedmo poglavlje).

Iako je knjižici naslov *Molekule bez kemijskih veza* o njima se diskutira jedino u petom poglavlju, a ostalo predstavlja vrlo lijepi uvod u kemijsku teoriju grafova. Tipične molekule bez kemijskih veza jesu katenani, a autor diskutira o njihovoj topologiji, pripravi i svojstvima na svega sedam stranica teksta.

Literatura koju je autor preporučio za dodatno čitanje vrlo je štura. Unatoč tomu, navedeno je vrlo mnogo rezultata koji su postignuti u Zagrebačkoj grupi na Institutu »Ruđer Bošković«, ali nažalost gotovo nikada nije naveden izvornik.

N. TRINAJSTIĆ

Steric Fit in Quantitative Structure — Activity Relations, Lecture Notes in Chemistry

A. T. Balaban, A. Chiriac, I. Motoc, and Z. Simon,

Berlin, No. 15, Springer-Verlag, 1980.

str. 178.

Grupa rumunjskih znanstvenika: Alexandru T. Balaban (Odjel za organsku kemiju, Politehnički institut, Bukurešt), Adrian Chiriac (Odjel prirodnih znanosti, Sveučilište u Temišvaru), Ion Motoc (Središte za istraživanja u kemiji, Temišvar) i Zeno Simon (Odjel za biofiziku, Medicinski institut, Temišvar) autori su petnaeste knjižice u seriji *Lecture Notes in Chemistry*, koju izdaje Springer-Verlag.

Autori u njoj diskutiraju o steričkim i drugim strukturnim parametrima, koji ulaze u relacije strukture i (biološke) aktivnosti molekula. Također se vrlo detaljno raspravlja i o topološkim indeksima, koji reflektiraju kolektivna svojstva molekula. Prikazane su različite korelacije i dana je usporedba steričkih parametara i topoloških indeksa. Autori navode i pogodne statističke metode (npr. metoda Monte Carlo) za optimiziranje relacija odnosno strukture i aktivnosti, a govore i o metrici u biokemiji. Knjižici je priložen i kompjuterski program za one čitatelje, koji žele provesti samostalno teorijske račune. Djelo je popraćeno s 286 literaturnih referenci u kojima nalazimo i desetak citiranih radova naših autora (M. Randić, B. Ruščić, T. Živković, itd.).

Knjižicu bi trebali pročitati svi istraživači, koji rade u području medicinske kemije i koje zanima iznalaženje novih bioloških aktivnih molekula. Naime, relacije odnosa strukture i aktivnosti (QSAR u anglosaksonskoj stručnoj literaturi) vrlo su pogodne za suzivanje kruga molekula za biološko ispitivanje. Tako da npr. od nekoliko tisuća potencijalnih kandidata, možda treba ispitati svega desetak molekula. QSAR-metoda zato omogućava usmjereno istraživanje u području medicinske kemije i kao takova se danas i rabi. Ovdje opisana metoda omogućava i studij stereozomera, što klasične QSAR-relacije prije nisu mogle.

N. TRINAJSTIĆ

Recent Advances in the Quantum Theory of Polymers,

Edited by J.-M. Andre, J.-L. Bredas, J. Delhalle, J. Ladik, G. Leroy, and C. Moser,

Lecture Notes in Physics No. 113, Berlin, Springer-Verlag 1980.
str. 306.

Svezak broj 113 serije *Lecture Notes in Physics* sadržava radove s međunarodnog sastanka o kvantnoj teoriji polimera održanom u Namuru (Belgija) od 11. do 14. veljače 1979. g.

Cilj toga znanstvenog skupa bio je sažeti stvarno znanje o kvantnoj teoriji polimera i prikazati napredak u računanju i predviđanju svojstava polimera. Urednicima je pri sastavljanju izvještaja uspjelo ono što je rijetkost kod bilo kojeg znanstvenog sastanka: svi predavači predali su rukopise, tako da ova knjižica sadrži kompletne materijale sastanka u Namuru.

Sastanak se sastojao od 4 glavne teme (i 23 predavanja), pa je knjiga podijeljena na četiri dijela, koji obuhvaćaju eksperimentalni dio (tri članka), teorijski pristupi uređenim sustavima (16 članaka), teorijski pristupi neuređenim sustavima (tri članka) i sadašnje stanje i perspektive kvantno-mehaničkog izučavanja polimera (1 članak). Pokazalo se da se danas može elektronska struktura polimera rutinski proučavati semi-empirijskima i neempirijskim SCF-MO-metodama.

Iz Jugoslavije su na sastanku u Namuru bila dva referata: jedan od ljubljanske grupe, koju je vodio profesor Andrej Ažman (*Ab Initio Techniques for Ground State Calculation on Polymers*, M. Kertesz, J. Koller i A. Ažman, str. 56—79) i drugi od beogradske grupe (*Group Theory in Band Structure Calculations of Polymers*, I. B. Božović, M. Vujičić, F. Herbut i M. Damjanović, str. 80—91). Šteta što zagrebačka grupa (A. Graovac i suradnici) nije bila prisutna, jer bismo tada imali uvid gotovo u sve što se u kvantnoj teoriji polimera radi u nas.

N. TRINAJSTIĆ

Die Chemische Industrie und ihre Helfer

Herausgeber Selka, Industrieschau-Verlagsgesellschaft mbH 1980, Darmstadt,

Priručnik je po koncepciji isti kao i ranijih godina (vidi *Croat. Chem. Acta* 49 (1977) No. 4; 50 (1979) No. 4). On sadržava reklame i ponude proizvođača, konjuktorni pregled, stručni pregled i novitete, popis snabdjevača i proizvoda kemijske industrije, nabavni vodič za industriju i trgovinu, s alfabetskim pregledom proizvoda, te pregled i popis poduzeća s podacima o njihovoj strukturi i drugim informacijama. Namijenjen je stručnjacima iz nabavnih službi i proizvodnje u kemijskoj industriji.

I. BUTULA

New Developments in the Reaction Mechanisms of Organometallic Compounds,

I. P. Beletskaya,

(u *Chemistry Reviews*, Vol. 1., izdavač M. E. Vol'pin, pp. 119—204. Soviet Scientific Reviews, OPA Amsterdam B. V.

Četvrti prilog u ovoj monografiji potječe iz ugledne škole profesora O. A. Reutova, na Moskovskom državnom sveučilištu.

Budući da u organometalnim spojevima ugljik vezan neposredno na metal posjeduje više ili manje izražena svojstva karbaniona, to su elektrofilne supstitucije primarne reakcije takovih spojeva. U prvom dijelu članka autorica iznosi najnovije potvrde u prilog tzv. mehanizma ionskog para $[S_{E2}(RM^*)]$ kao najčešćeg eksperimentalno potvrđenog i jasno odjeljenog mehanizma od, gotovo hipotetskih, graničnih S_{E2} i S_{E1} slučajeva. Brojni primjeri kinetičkih istraživanja potječu gotovo isključivo s područja organoživinih i organokositrovih spojeva, a ilustrirani su preglednim tablicama i dijagramima ovisnosti reakcijske konstante o značajnoj promjenljivici (otapalo, temperatura, struktura organskog liganda itd.).

Drugo poglavlje opisuje redoks-reakcije organometalnih spojeva s kritičkim osvrtom na pretjeranu upotrebu tzv. SET (single electron transfer) koncepta u tumačenju svih kinetičkih rezultata gdje je CIDNP (Chemically Induced Dynamic Nuclear Polarization) eksperiment pokazao nazočnost radikala. Autorica pokazuje da se tu

gotovo redovito radi o reakcijama sa dva mehanizma, npr. elektrofilnom supstitucijom i redukcijom-oksidacijom, ili više njih, koji teku istovremeno.

Treće poglavlje možda je od najšireg interesa, a svakako je najbogatije korisnim podacima za svakog organskog kemičara aktivnog na području fizikalne ili sintetske organske kemije. Ono govori o reaktivnosti nekih klasičnih karbaniona, tj. indenil ($pK_a = 20.2$), 1-supst. fluorenil ($22 > pK_a > 11$, ovisno o supstituentu). Kvantitativni kinetički podaci o utjecaju otapala (gdje je pokazano da ne postoji ovisnost između konstante elektrofilne supstitucije i dielektričke konstante ili dipolnog momenta otapala), o utjecaju suprotnog kationa (gdje, ovisno o otapalu, porast radiusa — tj. mekoće — kationa vodi ili ubrzanju ili usporenju reakcije), te o utjecaju strukture supstrata ili elektrofila, na impresivan način pokazuju kako su opasne površne generalizacije na području reakcija organometalnih spojeva. One inače tako dobro služe u planiranju optimalnih reakcijskih uvjeta za transformacije »običnih« organskih molekula!

Članak donosi 70 citata, od kojih 41 potječe iz škole kojoj pripada autorica, 20 citata se odnose na radove prije 1970. god. a glavnina na radove iz perioda 1974—1978. god.

V. SUNJIĆ

Topics in Current Chemistry, Organic Chemistry, 88

Berlin-Heidelberg-New York, Springer-Verlag, 1980.

N. T. Anh, *Regio- and Stereo-Selectivities in Some Nucleophilic Reactions* (str. 145—162).

Ovaj prikaz donosi zapravo najnovije primjere uspješne primjene principa kontrole graničnim orbitalama (FMO) i principa tvrdih i mekih baza (HSAB) na tumačenje regio- i stereoselektivnosti organskih reakcija. To što te reakcije formalno spadaju u skupinu nukleofilnih procesa (S_N2 supstitucije na tetraedarskom ugljiku, 1,2- i 1,4-adicije, adicije na ketonsku karbonilnu skupinu) od sporednog je značenja. Bitno je međutim da je autoru izvanredno uspjelo pokazati da poznavanje elektronskih parametara, simetrije i relativnih energija graničnih orbitala, te koncentracije naboja na reagirajućem centru (tvrdoća, odn. mekoća), omogućuje predviđanja stereokemijskih ishoda organskih reakcija koje prema klasičnim mehanističkim nazorima nemaju zajedničkih svojstava, a uz to nisu niti usklađene (concerted). Ovaj kratki pregled možda je miljokaz u razvoju tumačenja stereoselektivnosti organskih reakcija elektronskim (orbitalnim) karakteristikama supstrata i reagensa, za razliku od klasičnih teorija na osnovi neveznih interakcija u konformacijski najpovoljnijemu prijelaznom stanju; sjetimo se npr. Prelogova, Cramova i Felkinova pravila o pristupu reagensa na karbonilnu skupinu u keto-esterima, esterima i ketonima. Citirani eksperimentalni radovi koji čine osnovu teorijskim razmatranjima, potječu uglavnom iz francuskih škola (R. Corriu, H. Felkin, J. Jacques, te iz autorove skupine), a svi bitni doprinosi vodećih teoretičara tom području (L. Salem, E. Ruch, R. G. Pearson, K. Fukui) primjerno su zastupljeni.

Iako su kvantno-kemijski termini u ovom prikazu jasno definirani a matematički aparat sveden na najmanju moguću mjeru, čitatelja zainteresiranog za detaljnije upoznavanje uputio bih na knjigu prof. Anha, koju je u njemačkom prevodu izdao Verlag Chemie (1972), *Die Woodward-Hoffman Regeln und ihre Anwendung*. Možda je za našu sredinu zanimljivo napomenuti da je za tu knjigu ovaj ugledni kvantno-teorijski kemičar dobio poticaj od francuske farmaceutske industrije nakon niza predavanja koja je održao o toj temi za njezine istraživače, sintetske organske kemičare! Naravno, i u nas upravo oni mogu imati najviše koristi od ovoga sažetog i informativnog prikaza.

V. SUNJIĆ