

PRIKAZI KNJIGA

BOOK REVIEWS

N. L. Biggs, E. K. Lloyd, and R. J. Wilson: *Graph Theory 1736—1936*, Calderon Press, Oxford 1976, 239 str.

Smatra se da je teorija grafova kao samostalno organizirana disciplina matematike nastala 1936. godine objavljivanjem knjige Dénesa Königa: *Theorie der endlichen und unendlichen Graphen*. Međutim, stvarna povijest teorije grafova započela je točno dvije stotine godina ranije, istraživanjima Leonharda Eulera o tzv. problemu Königsberških mostova.

Tri engleska matematičara, Norman Biggs (Royal Holloway College, London), Keith Lloyd (University of Southampton) i Robin Wilson (Open University, Oxford) skupili su najvažnije radove (ukupno 37 članka) iz te dvjestogodišnje »prehistorije«. Knjiga sadržava samo najvažnije ulomke tih radova s detaljnim, kako matematičkim tako i povijesno-biografskim komentarima. Tako se sada, po prvi puta, mogu na istom mjestu i na istom jeziku (engleskom) naći ona istraživanja Eulera, Hamiltona, Cayleya, Pólye, Veblena, Kuratowskog, Petersena, Königa i drugih, koja su zacrtala sve najvažnije pravce razvoja moderne teorije grafova.

Knjiga je podijeljena na deset poglavlja (1. *Putevi*, 2. *Krugovi*, 3. *Stabla*, 4. *Kemijski grafovi*, 5. *Eulerova formula za poliedre*, 6. *Problem četiri boje — rana povijest*, 7. *Bojenje mapa na površinama*, 8. *Ideje iz algebre i topologije*, 9. *Problem četiri boje — do 1936*, 10. *Faktorizacija grafa*) i na tri dodatka (1. *Teorija grafova od 1936.*, 2. *Biografski podaci*, 3. *Bibliografija 1736—1936*). Za kemičare je osobito zanimljivo četvrto poglavlje, te ćemo se u ovom prikazu na njega i ograničiti.

Kao što je poznato, strukturne formule organske kemije u znatnoj se mjeri podudaraju s pojmom grafa u matematici. Tako i povijest »kemijskih grafova« započinje otkrićem strukturnih formula i općenito kemijske strukture. U knjizi nalazimo niz zanimljivih podataka o tome (na primjer da je neke vrsti strukturne formule upotrebljavao još Higgins 1789. godine). Prikazani su doprinosi Kekuléa, Franklanda, Crum Browna i drugih. Taj dio teksta ilustriran je ulomkom *Grafička notacija* iz udžbenika kemije E. Franklanda iz 1866. godine. Naročiti stimulans razvoju teorije grafova dao je problem prebrojavanja izomera. Budući da je teorija stabala već opisana u prethodnom poglavlju, ovdje se bez većeg uvoda odmah prelazi na Cyleyevе radove o enumeraciji i na njegov čuveni članak *O matematičkoj teoriji izomera* iz godine 1874.

Slijedeći odjeljak posvećen je radovima (točnije razmišljanjima) velikog engleskog i američkog matematičara J. J. Sylvestera o vezi između kemije i algebre. Priložen je Sylvesterov članak iz časopisa *Nature: Kemija i algebra* iz 1877/8. godine. Današnjem čitaocu je jasno da su Sylvesterova istraživanja bila potpun promašaj s gledišta kemije, pa taj odjeljak treba shvatiti ponajviše kao povijesni kuriozitet.

U teoriji prebrojavanja grafova revoluciju su predstavljali radovi Györgya Pólye počev od 1935. godine, iako je ekvivalentne rezultate izneo još 1927. godine Redfield (ali je to ostalo nezapaženo). Ostatak poglavlja izlaže Pólyin u teoriju i naveden je njegov članak *Opći kombinatorni problem u svezi s grupama permutacija i računanje broja izomera organskih spojeva* (1935). Poglavlje završava s listom od 29 referenci.

Knjiga je prava riznica za one koje zanimaju počeci teorije grafova. Poglavlje o kemijskim grafovima jedinstvena je zbirka dokumenata o ranoj povijesti teorijske kemije.

I. GUTMAN

M. Hoffmann, H. Kromer und R. Kuhn: *Polymeranalytik I. Makromolekulare Strukturen, Physikalische Methoden, Anwendungskriterien*, George Thieme Verlag, Stuttgart 1977, 438 stranica, 103 slike.

Knjiga je opremljena kao fleksibilno džepno izdanje u okviru serije Thieme *Taschenlehrbuch der organischen Chemie*. Pod analitikom polimera, kako je to obu-

hvaćeno u ovoj knjizi, podrazumijeva se određivanje molekulske i nadmolekulske strukture, dakle osnovnih strukturnih značajki o kojima ovise specifična svojstva polimera. U svom pristupu problemu analitike ili karakterizacije polimera, autori opravdano pretpostavljaju da je za razumijevanje analitičkih metoda i za njihovu uspješnu primjenu rješavanju praktičkih problema povezanih sa sintezom ili primjenom, neophodno potrebno dobro poznavanje elemenata strukture. Stoga je dobar dio knjige posvećen ovom problemu. Knjiga je prema tome podijeljena u dva dijela.

U prvom dijelu na 140 stranica obuhvaćene su razne metode i mehanizmi polimerizacije, a zatim su dosta opsežno obrađene osnovne strukturne karakteristike polimera. Nakon toga dana je podjela visokomolekulskih materijala prema mehaničkim svojstvima i kemijskoj strukturi.

Drugi dio sadržava opis fizikalnih metoda analitike polimera. U šest poglavlja opisane su metode koje pokrivaju kompletan sistem određivanja molekularne strukture. To su:

- razne metode frakcioniranja,
- određivanje kemijske i steričke lančane strukture,
- određivanje molekulske strukture i molekulske distribucije,
- određivanje konformacije, dugolančane razgranatosti, asocijacija i pokretljivosti polimernih molekula,
- karakterizacije kemijske i steričke heterogenosti i
- karakterizacija umreženih struktura.

Opis metoda je sažet ali dovoljan za potpuno razumijevanje. Opis sadržava kratke teorijske osnove, bitne elemente eksperimentalnog postupka, obradu podataka, ilustraciju mogućnosti primjene te mogući izvor pogrešaka pri izvođenju mjerenja.

Knjiga je prvenstveno namijenjena stručnjacima specijaliziranim za karakterizaciju polimera. Međutim, knjiga u kondenziranom obliku sadržava mnogo informacija koje omogućuju lahko međusobno povezivanje problema pri sintezi, karakterizaciji i primjeni polimera, pa se može preporučiti kao vrlo koristan priručnik svakom polimernom kemičaru.

U ovom svesku objavljen je sadržaj drugog i trećeg sveska koji su u pripremi a obrađivat će karakterizaciju nadmolekulske strukture, karakterizaciju disperznih sistema, te planiranje analitičkih postupaka za rješavanje specijalnih problema.

F. FLAJSŠMAN

R. P. Hanzlik: *Inorganic Aspects of Biological and Organic Chemistry*, Academic Press, New York—San Francisco—London 1976, XVIII + 402 str.

Na području bio-anorganske kemije (ili, kako mnogi kažu, — anorganske biokemije) pojavilo se posljednjih 3—4 godine nekoliko knjiga, npr. monumentalno djelo *Inorganic Biochemistry* (ur. G. L. Eichhorn). Sada se pojavila knjiga s toga područja koja ima izrazitu didaktičku namjenu, a pored bio-anorganske kemije obuhvaća još jedno interdisciplinsko područje — organometalnu kemiju. Pisac knjige, Robert P. Hanzlik (Department of Medicinal Chemistry, School of Pharmacy, University of Kansas) želio je dati razmjerno kratak, sintetički prikaz teorijskih zasadâ bio-anorganske i organometalne kemije i reviju dostignuća i dominantnih smjerova razvitka tih područja. Knjiga se razvila na osnovi tečaja *Interdisciplinski aspekti anorganske kemije* za postdiplomske studente.

Prvih šest poglavlja posvećeno je izlaganju teorijskog aparata: relevantnih činjenica anorganske i organske kemije, osnova učenja o gradnji atoma i molekula te o kemijskoj vezi u kompleksnim spojevima itd. Sedmo je poglavlje posvećeno redoks-procesima i njihovoj biokemijskoj ulozi; tu se govori o raznim redoks-aktivnim koordinacijskim spojevima kao npr. hemoproteinima, rubredoksinima, ferredoksinima i sl., o oksidativnom fosforiliranju, itd. Osmo se poglavlje bavi problemima sinteze uz korištenje kelatnih spojeva. Deveto i deseto poglavlje ponovno obrađuju biokemijske probleme: katalizu metalnim ionima, metalne komplekse i metaloenzime te koordinacijsku biokemiju kisika i dušika. Posljednja dva poglavlja posvećena su organometalnoj kemiji — strukturi, naravi veze i reakcijskim mehanizmima organometalnih spojeva te — posebno iscrpno — reakcijama liganda u toj klasi kompleksnih spojeva.

VL. SIMEON

Die Chemische Industrie und ihre Helfer-Neueausgabe 1977/78. Herausgeber Selka, Industrieschau-Verlagsgesellschaft mbH, Darmstadt.

Novo izdanje priručnika namijenjenog kemijskoj industriji i trgovini svrstano je već tradicionalno po poglavljima: *Reklame i ponude proizvođača, Konjunktorni pregled, Stručni pregled i noviteti, Snabdjevači kemijske industrije s popisom proizvoda, Nabavni vodič za industriju i trgovinu s alfabetskim pregledom proizvoda i Pregled i popis poduzeća s podacima o njihovoj strukturi i drugim informacijama.*

Kemijskoj industriji i trgovačkim poduzećima ovaj dobro uređeni priručnik vrijedno je pomagalo pri traženju informacija, posebice pri nabavci sirovina i kemijskih proizvoda s područja SR Njemačke i Zapadnog Berlina.

I. BUTULA

Dragoš Cvetković i Mirko Milić: *Teorija grafova i njene primene*, Naučna knjiga, Beograd 1977, 270 str.

Ovo je drugo izdanje udžbenika Cvetkovića i Milića, namijenjenog prvenstveno studentima Elektrotehničkog fakulteta. Ono se sastoji iz tri dijela i znatno je obimnije od prvog izdanja. Prvo poglavlje pod naslovom *Uvod u teoriju grafova* napisao je D. Cvetković u suradnji sa S. Simićem. Drugo poglavlje, *Teorija grafova u analizi električnih mreža* napisao je M. Milić. Treći dio knjige sadrži niz kratkih i međusobno nepovezanih priloga, čiji su autori A. A. Zykov, H. Sachs, F. Turčinhodžić, P. Zumbulović, i D. Cvetković.

Knjiga pretstavlja jedinstveno u nas djelo, u kojemu su izloženi praktično svi aspekti teorije grafova. Primjenama je poklonjena posebna pažnja, pa tako nalazimo primjere primjene grafova u regulaciji prometa, vojsci, ekonomiji, šahu i dr. O upotrebi teorije grafova u analizi električnih mreža govori čitav drugi dio knjige (90 str.).

Značenje ove knjige za kemičare je dvojako. Prvo, u posljednjih desetak godina naglo raste primjena teorije grafova u kemiji. (Čitaoci ovog časopisa mogu se u to lako uvjeriti.) Zato razmjerno velik broj kemičara želi danas upoznati i savladati ovu matematičku disciplinu. Naši kemičari više za tu svrhu ne moraju koristiti inozemnu literaturu.

Drugo, u matematičkim monografijama o teoriji grafova (a koje su u posljednje vrijeme postale veoma brojne), po pravilu se odnosu između kemije i teorije grafova posvećuje samo marginalna pažnja. Utoliko je zanimljivije da se u poglavljima koje je napisao Cvetković opširno analizira taj odnos, osobito činjenica da su stanoviti pojmovi u kemiji i teoriji grafova izomorfni. Čini nam se da je s te, kemijske, točke gledišta ova knjiga jedinstvena u svijetu.

Tako se, pored dobro poznate konstatacije da su strukturne formule organske kemije multigrafovi (str. 9 i 30), ukazuje i na istovjetnost Kekuléovih struktura i l-faktora (str. 64), spektralne teorije grafova i HMO teorije (str. 110–112) i dr. Primijetimo da se u svezi s primjenom spektara grafova citira čak 11 radova zagrebačkih teorijskih kemičara.

Knjiga sadržava opsežan popis monografske literature kao i kratak rječnik najvažnijih termina na engleskom, njemačkom, francuskom i ruskom jeziku.

Iako je knjiga namijenjena sasvim drugom profilu stručnjaka, za nju će biti zainteresirani i mnogi kemičari.

I. GUTMAN

Izdavači: L. Pál, G. Grüner, A. Jánossy, and J. Sólyom, *Organic Conductors and Semiconductors*.

Fizika organskih vodiča doživjela je nagao procvat u posljednjih pet godina. Motivacija za tako značajan znanstveni napor jesu neobična fizička svojstva lančastih vodiča. Posebno, anomalna vodljivost nekih od tih materijala izazvala je nadu da bi se mogli naći materijali sa svojstvima supravodljivosti u području temperatura oko 100 K.

Anomalna svojstva vodljivosti u vezi su sa strukturnim faznim prijelazom u sistemima, što vodi na problem vezani elektron-fonon. Međutim unutar iste porodice materijala nailazi se na vrlo različita ponašanja, poluvodička ili čak praktično nevodljiva, praćena pojačanim magnetskim efektima. To ukazuje i na važnost coulombskog međudjelovanja elektrona. Problem postaje još složeniji zbog jednodimenzionalnosti

osnovne jedinice organskih vodiča i poluvodiča građenih od lanaca. Taj skup okolnosti tvori jedan od najinteresantnijih problema u fizici čvrstog stanja.

Konferencija *Organski vodiči i poluvodiči*, Siófok, Madžarska 1976, odnosno njezin zbornik, predstavlja vrlo potpun pregled eksperimentalnog i teorijskog rada u tom području do 1976 god. Čitav je sadržaj tematski podijeljen u osam velikih skupina:

U prvoj skupini, *Jednodimenzionalni modeli* dan je pregled teorijskih rezultata za striktno jednodimenzionalne model-sisteme. Tu, između ostaloga, nailazimo na »tour de force«, rješenja nekih jednodimenzionalnih modela, uspostavljanje korespondencija između nisko-dimenzionalnih modela i primjenu aproksimativnog postupka renormalizacijske grupe.

U drugoj skupini *Kvazi-jednodimenzionalni modeli* težište je na efektima (slabog) međudjelovanja lanaca koji tvore kristal. Iako moguće slabo, to međudjelovanje osigurava fazni prijelaz na konačnoj temperaturi, te je stoga od kvalitativne važnosti. Problem je matematički kompliciraniji od čisto jednodimenzionalnog te se stoga, osim u jednostavnom Ginzburg-Landauovu slučaju, upotrebljavaju aproksimativne metode rješavanja, uglavnom metode renormalizacijske grupe.

U trećoj skupini radova *Efekt nečistoća i nereda u jednoj dimenziji* posebna pažnja je posvećena lokalizacijskim efektima nečistoća i nereda na elektrone, koji mogu biti dramatični u jednoj dimenziji. Pod neredom se uglavnom podrazumijeva dinamički nered rešetke, tj. njezine vibracije. Zanimljivo je da se radovi vodećih sovjetskih teoretičara odnose baš na ovaj smjer istraživanja.

Četvrta skupina *Fazni prijelazi u TTF-TCNQ i sličnim spojevima* odnosi se uglavnom na objašnjavanje kaskada strukturnih faznih prijelaza u tetrathiofulvalen-tetracijanokvinodimetanu (TTF-TCNQ). Jedinствена strukturna svojstva tog materijala objašnjavaju se unutar Ginzburg-Landau teorija, sa ili bez uključenja jednodimenzionalnih efekata.

Eksperimentalni rezultati na TTF-TCNQ i iz njega izvedenim spojevima iz pete skupine, daje vrlo kompletan pregled izuzetnog eksperimentalnog napora u svijetu, na tom području. Tu se nalaze izvještaji o strukturnim, transportnim, optičkim, magnetskim i termodinamičkim svojstvima TTF-TCNQ, dobivenim najrazličitijim eksperimentalnim metodama (neutronska raspršenja, X-zrake, nuklearna magnetska rezonancija, reflektivnost, visoki pritisci, vodljivost, itd.)

U šestoj skupini, *Soli s prijenosom naboja različite od TTF-TCNQ i sličnih* nalaze se uglavnom kemijski radovi na sintezi i osnovnim svojstvima drugih lančastih vodiča. Cilj je ovih radova izdvojiti iz neizmjernog bogatstva organskih spojeva lančaste strukture, one, koji imaju interesatna svojstva vodljivosti. U Zborniku su sadržani prvi rezultati, koji su u posljednjih godinu dana, doveli do vrlo zanimljivih razvoja, posebno na porodici tetrathiacena (TTT).

Sedma skupina *Polisumporni nitrid* opisuje prvi vodljivi polimer (SN)_x, koji je pored toga i supravodljiv. (SN)_x nema bitno jednodimenzionalno ponašanje, no napominjemo da je bromiranjem (SN)_x, poslije konferencije, nađena klasa materijala s vrlo istaknutim i zanimljivim jednodimenzionalnim svojstvima.

U posljednjoj glavi *Metalni kompleksi i organski poluvodiči* dan je pregled nekih radova na već tradicionalnim lančastim vodičima, gdje lance tvore atomi prijelaznih metala. Ti se sistemi ističu relativnom jednostavnošću kristalne rešetke, te zbog jednostavnijih svojstava, služe i kao prvi kamen kušnje postojećim teorijama. Dio te glave posvećen je i organskim poluvodičima. Taj dio Zbornika međutim ne daje cjelovit prikaz aktivnosti u oba navedena područja.

U zaključku, konferencija, odnosno njezin Zbornik daju vrijedan doprinos sistematizaciji znanja i organizaciji nanstvenog napora, te se već sada mogu prepoznati odgovarajuće pozitivne posljedice.

Za novodošlicu u to područje Zbornik predstavlja najnoviji i najkompletniji skup rezultata i ideja u području organskih vodiča, koji se u ovom trenutku može naći.

S. BARIŠIĆ

Houben - Weyl: *Methoden der organischen Chemie*. Četvrto potpuno novo priredeno izdanje. Svez 7, dio 3a.

Chinone I. Izdavač: Georg Thieme Verlag, Stuttgart 1977, 832 str., 122 tablice.

Ovaj svezak tog vrlo opširnog priručnika opisuje *p*-kinone benzena i naftalena.

Nakon uvoda i općih svojstava kinona, opisuje se na 620 stranica dobivanje svih mogućih gore navedenih kinona. Na daljnjih 80 stranica govori se o najrazličitijim reakcijama kinona te konačno na 10 stranica prikazana je mogućnost njihove identifikacije. U ovom priručniku nalazimo niz uobičajenih i trgovačkih imena, niz podataka, patenata, metoda pripreme kao i primjene. Opisuju se samo neka postrojenja i uređaji koji služe u industrijske svrhe. Nakon bibliografije i indeksa autora nalazimo indeks sadržaja na 62 stranice, koji je zbog pojedinih kompliciranih spojeva razdijeljen na skupine na bazi osnovnih spojeva označujući ove prema Beilsteinovu sustavu. Tako na primjer imide dikarboksilnih kiselina nalazimo kao takove, a samo rijetko kao posebne heterocikličke sisteme. Međutim, sve cikličke i spirocikličke spojeve prate strukturne formule. Radi preglednosti spojevi su poredani redom od najmanjih prema većim prstenima i od manje kompliciranih prema kompliciranijim. Tako ćemo u indeksu npr. cikloheksil-ciklopropan naći samo kod ciklopropana. U indeksu masnim slovima odštampane stranice označuju da se na tom mjestu nalazi propis za priprevu dotičnog spoja. Ovo djelo bit će od velike koristi onima koji se ovim područjem bave, ali radi velike količine podataka manje je pregledno.

D. KOLBAH

H. H a k e n: *Synergetics*, Springer-Verlag, Berlin—Heidelberg—New York, 1977, 322 str.

Podnaslov knjige, u doslovnom prijevodu: *Neravnotežni fazni prijelazi i samo-organizacija u fizici, kemiji i biologiji*, ujedno je i približna definicija riječi sinergika, koju je autor uveo da opiše tu disciplinu. Zapravo, ovo je druga knjiga s tim naslovom. Prva knjiga (H. H a k e n, urednik, *Synergetics*, B. G. Teubner, Stuttgart, 1973) donosi tekstove referata na istoimenom simpoziju održanom 1972. g.

Zahvaljujući radovima mnogih autora, među kojima H. H a k e n zauzima značajno mjesto, u posljednje vrijeme studira se u fizici i kemiji sve više primjera gdje se dobro organizirane vremenske, prostorne ili prostorno-vremenske strukture spontano formiraju iz kaotičnog stanja. Kao i u živim sistemima, takova organizacija može se održati samo na račun toka energije (katkad i materije) kroz sistem. Spontana formacija, ili samo-organizacija, uređenih struktura u najrazličitijim situacijama slijedi uvijek iste osnovne principe. Odgovarajući zakoni najlakše se mogu razumjeti iz analogije s teorijom faznih prijelaza u ravnotežnim sistemima, koja je u fizici odnedavno potpuno izgrađena. Zadatak nove discipline sinergike jest da uz upotrebu analogije dinamičkih sistema sa statističkom fizikom nađe nove zakone koji opisuju ponašanje sistema sa spontanom organizacijom.

Knjiga je organizirana u dva dijela. Prvi dio donosi poznate principe matematičke statistike, teorije informacija, opise stohastičkih procesa (poglavlje *Slučaj*) i dinamičkog razvoja sistema (poglavlje *Nužnost*). Materijal je izložen u novom svjetlu i na vrlo zanimljiv način. Na pr. poglavlje o nužnosti donosi i vrlo lijep prikaz teorije katastrofâ R. Thom-a. Slijedeće poglavlje kombinira izložene pojmove te uvada Langevin-ove i Fokker-Planck-ove jednadžbe te analogiju s faznim prijelazima. Osnovna tema sinergike sadržana je u idućem poglavlju o osnovnim principima samo-organizacije.

Drugi dio knjige donosi primjere iz fizike, kemije, biokemije i biologije. Opisani su na pr. samo-organizacija, razvoj nestabilnosti i fazni prijelaz kod lasera (područje u kome je autor dao pionirski doprinos), kemijske reakcije u kojima se javljaju prostorne i/ili vremenske oscilacije ili razni problemi dinamike populacije u biologiji.

Knjiga je namijenjena studentima fizike, kemije i biologije. Ona donosi izvanredno zanimljiv i stimulativan pristup, mnogo primjera, problema i referenci, te razvija interdisciplinarni način razmišljanja. Autor je nastojao da nivo izlaganja bude takav da tekst može pratiti svatko tko je prošao osnovni kurs iz matematike. To je uglavnom i postignuto, ma da će u nekim dijelovima (posebno onima označenim zvjezdicom) uživati samo teorijski fizičari. Knjiga može odlično poslužiti kao nadopunjujući tekst uz kurseve statističke mehanike ili biofizike, te u većem broju postdiplomskih kurseva iz različitih disciplina. Pri našem sistemu obrazovanja koje se sve više sužava na jednu disciplinu, studiranje interdisciplinarnih fenomena ponekad će predstavljati napor. No, estetski užitak i kreativniji pristup problemima bit će nagrada studentima koji se odluče da prođu kroz ovaj materijal.

S. MARČELJA

T. Várkonyi: *Zagađivanje zraka (A levegőszennyeződés)*, Müszaki Könyvkiadó, Budapest 1977, 139 str., cijena 28 Ft.

Promjena kemijskog sastava Zemljine atmosfere uslijed čovjekove tehnološke djelatnosti, tzv. zagađivanje zraka, postaje u naše vrijeme problem svih zemalja svijeta. Nas može zanimati što u cilju upoznavanja i savladavanja ovog problema preduzimaju naši sjeverni susjedi.

Knjiga, čiji je glavni autor i ujedno urednik T. Várkonyi, obuhvaća sve najvažnije aspekte zagađivanja zraka. U prvom poglavlju izložena su osnovna fizikalna i kemijska svojstva »čistog« zrak. Posebna je pažnja posvećena takozvanim plinovima u tragovima (H_2O , O_3 , CO_2 , CO , N_2O , NO_2 , NH_3 , SO_2 i H_2S) i atmosferskom aerosolu, koji igraju osnovnu ulogu i kao zagađivači zraka.

Sljedeća dva poglavlja opisuju najvažnije tvari koje zagađuju zrak, njihove izvore i njihovu raspodjelu, te osnovne ekobiološke, medicinske i gospodarstvene posljedice zagađenosti zraka. Navedeni su primjeri raspodjele pojedinih zagađivača (naročito SO_2), i to kako za teritorij Evrope tako i za teritorij Mađarske. Razmotren je i niz primjera za dnevnu, tjednu i godišnju fluktuaciju zagađenosti. Iz razumljivih razloga opširno je diskutirano o situaciji u nizu mađarskih gradova i oblasti. Posljedice zagađenosti zraka razmotrene su samo u kratkim crtama, i to posebno oštećenja životinja, biljaka i ljudskog zdravlja, tehnološke štete (korozija) i ekonomske štete.

Četvrto poglavlje daje sažeti prikaz meteoroloških faktora koji utječu na rasprostranjenje i općenito na dinamiku zagađivača.

Sljedeće poglavlje, koje je najopširnije, opisuje uređaje za detekciju i mjerenje zagađenosti zraka. Ovi uređaji opisani su do u pojedinosti, tako da ovaj dio knjige podsjeća na praktikum.

Završno, šesto poglavlje govori o mehanizmima za zaštitu od zagađivanja zraka. Tu se ne misli toliko na same tehničke uređaje za odstranjivanje zagađivača (iako su i oni razmotreni u najkraćem obliku), koliko na kontrolu, praćenje i mjerenje emisije zagađivača, te na razne administrativno-pravne, ekonomske i druge mjere »ne-tehnološke prirode« u cilju suzbijanja zagađenosti ljudskog okoliša. Istaknut je značaj sredstava javnog informiranja i općenito javnog mjenja za uspješno ostvarivanje zakonima predviđenih akcija zaštite okoliša.

Velikim brojem tablica autori su uspjeli izložiti znatan činjenički materijal na relativno malom prostoru. Izvjestan broj netočnih tvrdnji (na primjer da metan ima neugodan miris (str. 19), da je ugljični monoksid teži od zraka (str. 28) i sl.) ne bi smio biti prisutan u tekstu.

Knjiga je namijenjena specijalistima koji se bave zaštitom okoliša i proučavanjem zagađenosti atmosfere, ali će pojedini njezini dijelovi biti korisni i zanimljivi i kemičarima drugih struka.

I. GUTMAN

Structure and Bonding, Urednici: J. D. Dunitz (Zürich), P. Hemmerich (Konstanz), J. A. Ibers (Evanston), C. K. Jørgensen (Geneve), J. B. Neilands (Berkeley), D. Reinen (Marburg), R. J. P. Williams (Oxford), Springer-Verlag, Berlin—Heidelberg—New York 1977, Volume 32, stranica 166.

Trideset i drugi svezak serije *Structure and Bonding* donosi četiri članka, kojima je zajedničko to što donose prikaze nekih novih kemijskih učinaka kao posljedica naročite elektronske strukture velikih molekula. Tako u prvom članku (na 56 stranica) Heinrich Vahrenkamp (Kemijski laboratorij Sveučilišta u Freiburgu) donosi prikaz novijih rezultata (u posljednjih pet godina) u kemiji grozdastih spojeva prijelaznih metala (Fe, Ru, Os, Co, Rh, Ni, Pt, itd.) s organskim ligandima (cikloheptatrieni, cokolooktetetraeni, olefini, ciklopenten, ciklopentadien, benzen, itd.). Kemija tih spojeva vrlo je razvijena ali, kao što sam autor naglašava, još nema sustavnosti u toj vrsti kemijskog istraživanja; stoga je autorov članak pokušaj u tom smjeru. Članak je popraćen s 408 literaturnih referenci.

U drugom članku J. A. Wilson (Bellovi laboratoriji, Murray Hill) diskutira na 35 stranica o elektronskim prijelazima kod lantanidnih spojeva (CeP , $NdBr_2$, TbN , $TmTe$, YbH_2) i o uvjetima koji dovode do fluktuacije između elektronskih konfiguracija. Članak je popraćen s 55 literaturnih referenci. U trećem članku (na 54 stranice) John N. Murrell (Škola molekularnih znanosti Sveučilišta Sussex kod Brightona), učitelj većem broju zagrebačkih teorijskih kemičara, daje prikaz kon-

strukcije ploha potencijalne energije višeatomskih molekula. Autor najprije detaljno diskutira o definiciji plohe potencijalne energije, a zatim pokazuje kako se mogu izračunavati te plohe i koje se računске metode unutar MO-teorije mogu upotrebljavati (HF, MC SCF). Članak je popraćen sa 141 literaturnom referencom. U četvrtomu, posljednjem članku (na 20 stranica) J. A. Duffy (Kemijски odjel Sveučilišta u Aberdeenu) diskutira o polioksidnim sustavima (metalni oksidi, fosfati, borati, silikati) i njihovoj »optičkoj« elektronegativnosti. Naime, prema Jørgensenu (C. K. Jørgensen, *Oxidation Numbers and Oxidation States*, Chapter 7, Springer-Verlag, Berlin—Heidelberg—New York 1969) energija apsorpcijske vrpce za oktaedarski kompleks prijelaznog metala koja odgovara prijelazu od $(\pi + \sigma) t_{1u}$ u $(d) t_{2g}$ ili $(d) e_g$ može se dobiti iz razlike elektronegativnosti između liganada i središnjeg atoma. To znači da elektronegativnost liganada i središnjih atoma utječe na optička svojstva spojeva prijelaznih metala. Članak je popraćen s 33 literaturne reference.

Niti jedan od autora ne referira neko domaće ime, što znači da ni u ovom smjeru suvremenog temeljnog istraživanja u kemiji mi nismo prisutni.

N. TRINAJSTIĆ

I. G. Csizmadia *Theory and Practice of MO Calculations on Organic Molecules*, Elsevier, Amsterdam—Oxford—New York 1976, 378 strana.

Iako knjiga nosi pomalo zvučan naslov *Teorija i praksa molekulsko-orbitalnih proračuna organskih molekula*, njene ambicije su nešto skromnije. »Doći će vrijeme kada će... svaki organski kemičar vršiti i teorijska i eksperimentalna istraživanja istog fenomena« kaže pisac i svojom knjigom upravo najavljuje to vrijeme. Naime, to je svojevrsan praktikum kompjuterske kvantne kemije i njezini osnovni cilj jest da osposobi kemičara ne-teoretičara da realizira u praksi vlastite molekulsko-orbitalne proračune.

Knjiga je podijeljena na četiri dijela i dodatak.

Prvi dio sačinjava matematički i fizički uvod. Elementi linearne algebre (vektori, matrice, problem vlastitih vrijednosti) izloženi su na neortodoksan način, s puno primjera, objašnjenja i ilustracija, a s malo teorema i apstraktnih izvođenja. Elementi kvantne fizike izloženi su na najkraći mogući način; već od samog početka isključiva je orijentacija na one detalje koji čine osnovu kvantne kemije.

Drugi dio knjige je *Teorija zatvorene elektronske ljuske*. U prvom njegovom poglavlju izložena je Hartree-Fock-Roothaanova metoda i Mullikenova populacijska analiza. Kompletni matematički formalizam tih metoda dan je u dodatku na kraju knjige. Umjesto toga nalazimo u ovom poglavlju niz primjera i praktičnih uputa i, što je inače rijetkost u knjigama ovakve vrste, algoritamsku shemu iterativne SCF-metode. Drugo poglavlje *Semiempirijske molekulsko-orbitalne teorije* pored općih razmatranja opisuje samo ove metode: Hückelovu, proširenu Hückelovu, PPP i CNDO. Sve je to izloženo prilično koncizno, na svega trideset stranica. Slijedi kratko poglavlje o pobuđenim i ioniziranim stanjima. Četvrto poglavlje bavi se detaljnom analizom hibridnih i lokaliziranih orbitala.

Poglavlje o *Granicama molekulsko-orbitalne teorije* trebalo bi govoriti o konfiguracijskoj interakciji. Međutim, nakon što je na nizu numeričkih primjera uvjerljivo pokazao kako Hartree-Fockove orbitale često oupće ne zadovoljavaju u kemiji, pisac konstatira da se »konfiguracijska interakcija ne može izvoditi rutinski i da se obično izvodi samo u ograničenom opsegu« — i vraća se na MO-metode.

Završno poglavlje ovoga dijela *Primjene MO-teorije na probleme sa zatvorenom ljuskom* je najduže i obrađuje ove kemijske primjene: određivanje termodinamičkih i kinetičkih parametara, geometrije i stereokemije, izračunavanje reakcijskih intermedijara i mehanizama reakcija i dr.

Treći dio knjige bavi se teorijom otvorene ljuske. U prvom poglavlju izlažu se ograničena i neograničena Hartree-Fockova teorija a u drugom njihove primjene i ograničenja. Čitav taj materijal izložen je vrlo koncizno, na svega 35 strana, što je svakako odraz autorovih subjektivnih afiniteta. To što je metoda konfiguracijske interakcije zaobiđena, na ovom mjestu je još veći nedostatak.

Četvrti dio *Praktični aspekti MO-računanja* vjerojatno je najoriginalniji, i za čitaoca najkorisniji. U prvom poglavlju *Baze za molekulsko-orbitalna računanja* dan je niz praktičnih podataka i uputa u svezi s izborom baznih orbitala. Tabela s parametrima za najvažnije tipove orbitala (Slaterove, STO-3G, STO-4G i dr.). Slijedi

poglavlje *Informacije o izabranim kompjuterskim programima*, gdje su prije svega opisani programi iz zbirke *Quantum Chemistry Program Exchange*. Završno poglavlje predstavlja niz dodatnih savjeta za početnike, u svezi s izborom problema, teorijskog pristupa, programa, baze i sl.

Odsutnost popisa literaturnih referenci nikako ne spada u dobre strane ove knjige. Istini za volju, međutim, u tekstu su na mnogim mjestima citirani literaturni izvori.

Knjiga će odlično poslužiti eksperimentalnim kemičarima, koji, htjeli — ne htjeli, moraju polako ovladavati tehnikama teorijske kemije.

I. GUTMAN