

RECENZIJJE

BOOK REVIEWS

H. Röpke und J. Riemann: *Analog-computer in Chemie und Biologie*, Springer Verlag, Berlin—Heidelberg—New York 1969. Pp. VII + 184. Cijena 91 NDin.

Ovu knjigu napisali su kemičari-kinetičari za kemičare, biokemičare i biologe sa svrhom da ih uvedu u područje primjene malo poznatih analognih računara. Dvojica autora su, sudeći po tekstu knjige, oduševljeni svojim poslom, te je djelo napisano sadržajno ujednačeno, odlično je dokumentirano podacima iz literature i tako predstavlja dobar priručnik.

Analogni elektronski računar je jednostavan, relativno jeftin stroj, iako ograničene tačnosti. Programiranje analognog računara je jednostavno, mnogo jednostavnije i shvatljivije od danas standardnog digitalnog računara treće generacije. Vjerojatno je i prednost analognog računara u tome da bude prihvatljiv kompromis tamo, gdje digitalnog računara nema, a obim i karakter posla ne opravdavaju veliko ulaganje sredstava.

Po riječima autora prednost je analognog računara u tome, što je testiranje kinetičkih modela kemijskih ili biokemijskih reakcija jednostavno i brzo. Kemičar je izobrazbom stekao sposobnost mišljenja u predodžbama (modelima). Autori polaze od opće poznate činjenice, da su jednostavni reakcioni mehanizmi prije iznimka nego pravilo. Katalitički procesi te encimatske reakcije su u pravilu kompleksni, ciklički ili sekvencijalni mehanizmi. Razumijevanje finog mehanizma neke kemijske ili biokemijske reakcije neophodno je ukoliko se teži kontroliranju te reakcije (a to je konačno i svrha istraživanja). Istraživanja finog mehanizma moguća su jedino logičkom kombinacijom modela i primjenom metode pokušavanja. Svaki kemičar ili biokemičar-kinetičar znađe da sumarni numerički podaci kinetičkih eksperimenata vrlo često dozvoljavaju više različitih rješenja. Metoda pokušavanja na osnovi logički opravdanih modela, predloženih jednostavnim shemama analognog računara, pruža odlične mogućnosti za istraživanja.

U uvodnom dijelu knjige autori prikazuju osnovne komponente analognih računara u dovoljno jasnom obliku, bez ulaženja u detalje elektronike. Pomoću svega 7 osnovnih elektroničkih elemenata prikazana je analogija s diferencijalnim jednažbama koje opisuju kemijske reakcije nultog, prvog i drugog reda. Programiranju analognih računara autori su posvetili slijedeće poglavlje (20 stranica). Sav ostali dio knjige zauzimaju primjeri. Prvo su, tablicom i pojedinačno, razrađeni opći primjeri iz kompleksne kemijske kinetike. 27 primjera uključuje kompleksna rješenja sa maksimalno 6 varijabli i 4 reakcijska stupnja. Nakon toga slijedi razrada 19 modela specijalnih, u literaturi opisanih, biokemijskih reakcija. 168 literaturnih, referenci (citiranih zajedno s naslovom) daje dovoljno materijala za daljnji studij.

Ova je knjiga dobar primjer kako se neka tema obrađuje upotrebljivo, kritički i bez gomilanja nepotrebnih detalja. Da li će se kemičar ili biokemičar u laboratoriju susresti s analognim računarom ili ne posebno je pitanje. Kao koncentrirana i vrijedna informacija ova je knjiga poželjna prnova za kemijsku biblioteku.

V. PRAVDIĆ

Michael J. S. Dewar: *The Molecular Orbital Theory of Organic Chemistry*, Mc Graw-Hill Book Co., New York 1969. strana: 484.

Zadnjih 20 godina je organska kemija doživila znatan preokret zahvaljujući razvoju molekularno-orbitalne (MO) teorije, razvoju digitalnih računskih strojeva (koji su omogućili rješavanje velikih molekula MO metodom) i primjeni računa smetnje na kemijske probleme (tzv. perturbaciona molekularno-orbitalna (PMO) metoda). Tako je teorijski studij organske kemije u okviru MO metoda (SCF MO ili PMO) znatno pridonio razumijevanju organskih reakcija i strukture organskih molekula. Da bi pak jezik i formalizam MO teorije bio poznat, organski kemičar danas mora

bar malo poznavati i teorijsku organsku kemiju. Nažalost osim jedne vrlo jednostavne knjige, limitirane po opsegu (K. Higasi, H. Baba, A. Rembaum, *Quantum Organic Chemistry*, Interscience Publ., New York 1965; o kojoj je također bilo govora na ovom mjestu) nije postojala niti jedna adekvatna knjiga. Sada nam Profesor Dewar (sa University of Texas, Chemistry Department, Austin, Texas, U.S.A.) donosi knjigu, koja bi trebala popuniti tu prazninu. On je i kvalificiran da napiše upravo takvu knjigu, jer osim što se bavi teorijskim istraživanjima, on pokriva široko područje eksperimentalnog rada (reakcijski mehanizmi, ionizacijski potencijali, spektri nuklearno-kvadrupolne rezonancije, sinteze novih heteroaromatskih sistema sa borom kao heteroatomom, sinteza organskih poluvodiča, itd.). Osim toga je i započeo svoj istraživački rad pred nekih 25 godina u Oxfordu na problemima sinteze prirodnih spojeva.

Sama pak knjiga, osim detaljnog prikaza SCF MO i PMO formalizma, donosi samo diskusiju o osnovnom stanju organskih molekula (toplina sagorijevanja molekule, dužine veze, dipolni moment, geometrija molekule u osnovnom i prelaznom stanju, ionizacijski potencijal, toplina reakcije, itd.). Za takav sadržaj svoje knjige autor ima dobre razloge. Prvo, to su i pitanja koja eksperimentalno orijentiranog organskog kemičara u najviše slučajeva i najviše zanimaju. Drugo, to područje je vrlo rijetko u formi knjige obuhvaćeno. Nekoliko poglavlja u spomenutoj knjizi Higasia, Babe i Rembauma i knjiga Streitwiesera (A. Streitwieser, Jr., *Molecular Orbital Theory for Organic Chemists*, Wiley, New York 1961), koja diskutira osnovno stanje organske molekule sa Hückelovom metodom, a koja nije naročito pogodna za kvantitativan studij. Također se nekoliko dobrih knjiga pojavilo, koje tretiraju pobuđena stanja organskih molekula (J. N. Murrell, *The Theory of the Electronic Spectra of Organic Molecules*, Methuen, London 1963. ili C. Sandorfy, *Electronic Spectra and Quantum Chemistry*, Prentice Hall, Englewood cliffs 1964.).

Knjiga ima 10 poglavlja. Poglavlja redom obuhvaćaju principe kvantne mehanike (22 str.), točna i aproksimativna rješenja Schrödingerove jednačbe (54 str.), semi-empirijske LCAO MO metode (31 str.), atomi i jednostavne molekule (45 str.), konjugirane i aromatske molekule (38 str.), PMO metoda (57 str.), sistemi sa nesparanim elektronom (30 str.), kemijska svojstva konjugiranih ugljikovodika (90 str.), konjugirani sistemi sa heteroatomima (72 str.) i MO metode sa svim valentnim elektronima (30 str.).

Vrijedno je spomena da je knjiga pisana vrlo jednostavno i pažljivom čitaocu gotovo da i ne treba prethodnog znanja iz kvantne mehanike. Svako je poglavlje popraćeno bitnim referencama i nizom problema, na kojima čitalac može testirati znanje stečeno u tek pročitano poglavlju.

Sve u svemu to je vrlo vrijedna knjiga, koja uvodi čitaoca na vrlo jednostavan i lagan način u područje teorijske organske kemije. Međutim, neki se ipak prigovori mogu uputiti na mnoge diagrame u knjizi (npr. korelacija reaktivnosti molekule sa njenim određenim teoretskim indeksima) su doneseni bez potrebnih podataka, tako se čak ne navode ni studirane molekule (osim grupnog imena), te stoga se treba ići direktno u originalne radove. Također problemima koji se nalaze na kraju svakog poglavlja nema rješenja priloženih u knjizi. Nažalost veliki broj udžbenika se piše tako i to onda umanjuje stimulativni efekt, nego da su rješenja priložena na kraju knjige (jer knjiga je namjenjena širokom spektru čitalaca), kao što je npr. lijepo učinjeno u knjizi Murrella i suradnika (J. N. Murrell, S. F. A. Kettle, and J. M. Tedder, *Valence Theory*, Wiley, London 1965).

N. TRINAJSTIĆ