

RECENZIJE

BOOK REVIEWS

International Series of Monographs on Analytical Chemistry, General Editors: R. Belcher and L. Gordon, Volume 6 *Atomic-Absorption Spectrophotometry*, by W. T. Elwell and J. A. F. Gidley, Pergamon Press LTD., Headington Hill Hall, Oxford, 1961, str. 102, 14×22 cm, cijena 30s (\$ 5.00).

U novije vrijeme (od 1955. godine) javljaju se prvi radovi iz analitičke primjene atomske apsorpcije svjetla. Atomsko-apsorpciona spektrofotometrija jedna je od novijih analitičkih metoda, koja se prema sve većem broju radova, rapidno razvija. Zbog toga se ubuduće može očekivati objavljivanje radova, koji će vjerojatno donijeti daljnja poboljšanja u dosadašnjim aparativnim rješenjima. Autori su imali poteškoća kod pisanja knjige, jer kod tako nove metode, teško je predvidjeti budući razvoj aparativne tehnike.

Materijal izložen u knjizi, osniva se na 66 objavljenih radova do prve polovine 1961. godine.

Najosnovnija teorija atomske apsorpcije izložena je ukratko (6 strana teksta), dok je opširnije prikazan eksperimentalni uređaj (16 stranica), komparacija s drugim analitičkim metodama određivanja tragova elemenata (također 16 stranica) i opis eksperimentalnog rada (u 8 stranica). U drugoj polovini knjige autori opisuju eksperimentalne detalje i uvjete rada kod određivanja tragova: cinka, olova, magnezija, mangana, željeza, kalcija, natrija, kalija, bakra i kadmija. Za daljnjih 15 elemenata daju samo letimični pregled valnih dužina apsorpcije i graničnu koncentraciju, kod koje se još primjećuje prisutnost elemenata.

Knjiga daje osnovnu orijentaciju u pogledu mogućnosti, kao i granice upotrebe atomske-apsorpcione spektrofotometrije za određivanje malih količina pojedinih elemenata (tragova) uz prisutnost velikih količina drugih supstancija. Najvažnija prednost ove metode, pred prije opisanim spektrofotometrijskim metodama, jest izbjegavanje utjecaja raznih drugih elemenata na spektar analiziranog elementa, što rezultira povećanjem tačnosti toga određivanja.

Ovako napisana knjiga namijenjena je, u prvom redu, specijaliziranim analitičarima, koji se bave određivanjem tragova elemenata.

M. BRANICA

Robert G. Breene: *The Shift and Shape of Spectral Lines*, Pergamon Press. 1961. XI+318, cijena £5 sh5.

Ova knjiga se ograničuje na relativno uže područje istraživanja širenja i pomaka spektralnih linija i prva je takva knjiga, pa je nesumnjivo važan doprinos naučnoj literaturi. Po obradi i izlaganju, materijal je dosta koncizan i pregledan, premda je prikazan na višem matematskom nivou. Stoga, iako interesantna spektroskopičarima, astrofizičarima, a također i općenito kao izvor informacija za studij zračenja, ova knjiga zahtijeva stanovito predznanje kvantne mehanike i odgovarajućega matematskog aparata. Međutim za mnoge fizičare i kemičare može biti zanimljivo da prolistaju prvih stotinu stranica, koje sadrže manje matematskih detalja, a obrađuju uz povijesni dio (početak i temelje ovim istraživanjima su dali Michelson i Rayleigh koncem prošloga stoljeća), uzroke proširenja spektralnih linija: Dopplerov efekt, i efekt ograničenja pravihlinih titraja naglim promjenama amplitude uslijed sudara tj. interakcija polja susjednih atoma. Da bi se dobio uvid u sadržaj ove knjige, navodimo nekoliko podnaslova: Primjena Fourierove analize na širenja linija, Ekvivalencija molekularnih sudara i prigušnih sila, Fazni pomak sudara i poluširina linije, Primjena principa Francka-Condona na širenje linija, Izračunavanje van der Waalsovih sila vezanih za širenje linija itd. Knjiga također uključuje opširnija izlaganja širenja linija kod Starkova efekta, rezonantno širenje i širenje rotaciono-vibracionih linija molekularnoga spektra. Svako poglavlje svršava s kratkim pregledom i sažetim izvodom materijala, što omogućuje brzo snalaženje u knjizi, koja sadrži preko 200 refe-

renca originalnih radova, desetak preglednih članaka i popis od 20 knjiga za daljnji studij. Među najviše citiranim autorima nalaze se: Margenau, Jablonski, Holstmark, Führtbauer i dr. Međutim upada u oči, da je većina radova relativno stara. Broj citiranih radova iz razdoblja 1925—1940 g. dva puta je veći od broja radova novijega datuma. To naravno ima dobrih i loših strana. Svakako daje iscrpniji pregled starije literature, koja je teže pristupačna, jer datira iz vremena, kada su postavljani teoretski temelji ovih problema. S druge strane, čitalac stoga ne može očekivati potpuna izlaganja novijih rezultata. Knjiga je lijepo opremljena.

M. RANDIĆ

R. Daudel, L. Lefebvre, and C. Moser: *Quantum Chemistry, Methods and Applications*. Interscience Publishers, Inc., New York 1959, XIII-572.

Postoji više knjiga iz kvantne kemije, koje obrađuju različite aspekte ove discipline, a najčešće iznose rezultate računa i diskusije bez dovoljno detalja, da početnik i nespecialist mogu dobiti uvid u same računске probleme, pa ih eventualno i ponoviti. Ovom je knjigom nadoknađen taj propust, pa se može najozbiljnije preporučiti svima, koji žele doznati kako se računaju valne funkcije za elektrone u molekulama i kakva je daljnja uloga valnih funkcija za opisivanje različitih fizikalnih i kemijskih svojstava sistema. Odmah treba istaknuti, da za čitanje ove knjige nije potrebno veće predznanje ni matematike ni kvantne teorije, jer su svi potrebni pojmovi dosta opširno objašnjeni. Knjiga je zapravo podijeljena u dva dijela, od kojih je prvi, (300 str.) uvodni pristupačniji širem krugu čitalaca. Materijal uglavnom obuhvaća diskusiju organskih struktura. Nakon predgovora o potrebi kvantno-mehaničkih metoda u kemiji slijedi uvod u osnove kvantne mehanike i opis nekih jednostavnijih teoretskih metoda (na pr. Hückelova aproksimacija). Na pedesetak stranica iznesena je teoretska rasprava o interatomskim udaljenostima (duljina i indeksi veza), valentnim kutovima (hibridizacija s-p orbitala) i energijama veza (rezonancija). Slijede specijalni problemi: UV apsorpcioni spektri i boje, dipolni moment, kemijska reaktivnost i kratki pregled primjene u biokemiji (kancerogene supstance). Time je iscrpljen materijal prvoga dijela knjige. Drugi dio knjige: Neempirijske i semi-empirijske metode (250 str.) sadrži metode, koje uključuju poznavanje složenih integrala, a njihovo je izračunavanje omogućeno tek primjenom elektronskih računskih strojeva. Kod ovih metoda se izbjegava, gdje god se može, unošenje eksperimentalnih veličina u teoretsku analizu, pa rezultati imaju nesumnjivo veću težinu. Razmatranja počinju s daljnjom razradom valne mehanike (varijacioni račun, račun smetnje, teorija grupa), zatim slijedi detaljni opis sistema s jednim elektronom (vodikov atom, H₂⁺ ion) i s dva elektrona (helijev atom, H₂ molekula). Problemi složenih molekula ilustrirani su na slučaju etilena i benzena, gdje su izložena izračunavanja molekularnih integrala (Goepert-Mayer i Sklarov potencijal), konfiguraciona interakcija, σ-π interakcija, varijacija nuklearnoga naboja Slaterovih funkcija, aproksimacija Pariser a i Parra itd. U posljednjem je poglavlju donesen pregled najnovijih rezultata, a u posebnom su dodatku opširnije iznesene *self-consistent-field* jednadžbe Roothaana za molekule.

Iz ovoga pregleda sadržaja može se dobiti uvid u opseg toga djela. Knjiga je lijepo i pregledno pisana, sadrži preko 600 referenci originalnih radova i gotovo nema tiskarskih pogrešaka, što je neobično važno u knjigama s matematskim slogom. Stoga cijena knjige od 4350 din. nije previsoka, pa je možemo preporučiti svim kemijskim laboratorijima kao veoma prikladnu investiciju.

M. RANDIĆ

James Miller, John M. Gerhauser, and F. A. Matsen, *Quantum Chemistry Integrals and Tables*, University of Texas Press, Austin 1959, str. 1200, cijena 4500 din.

Prvi uspjesi kvantne kemije vezani su za računске metode, koje približno određuju pojedine integrale eksperimentalnim vrijednostima. Tako na pr. za aromatske sisteme integral rezonancije $\beta = \int \Phi_i H \Phi_j d\tau$ obično je ocijenjen vrijednošću 20 kcal/mol. Dobiveni rezultati uspoređeni s drugim eksperimentalnim veličinama, daju tako uvid i opravdavaju pojedine teoretske modele. Ova metoda je npr. dala kvalitativni pregled svojstava sistema s delokaliziranim π-elektronima. Međutim mnoga svojstva atoma i molekula ne mogu se razmatrati, a da se ne pređe na stroža teoretska istraživanja vezana za izračunavanje vrlo kompleksnih višecentričnih inte-

grala. Većina ovakvih računa vezana je za Slaterove funkcije. Sistematsko izračunavanje različitih složenih integrala ovih funkcija započelo je 1949. na sveučilištu u Chicagu (Mulliken i sur. *J. Chem. Phys.* **17**, 1248) i drugdje (Kotani i sur. *Tables of Molecular Integrals*, Maruzen Co. Ltd., Tokyo, 1955.; Preuss, *Integraltafeln zur Quantenchemie*, Springer Verlag, Berlin, 1956.). Knjiga Millera, Gerhausera i Matsena je zasada najiscrpnija kolekcija integrala Slaterovih funkcija, koja uključuje pored izračunavanja jednostavnih integrala prekrivanja i integrale različitih operatora (r_{ia}^{-n} , r_{ij}^{-1} , V_i^2 , z_i itd.). Međutim, osnovne funkcije su ograničene na orbitale 1s, 2s i 2p, tako da ovo sužava primjenu. U prvom dijelu knjige, na svega tridesetak stranica, iznesene su opće formule za različite integrale izražene preko pomoćnih funkcija $A(m, a)$, $B(n, b)$, $G_t(n, b)$ i $W_t(m, n, a_1, a_2)$. Numeričke tabele uključuju veliki izbor argumenata, a štampane su direktno (photo-offset) sa originalnih podataka IBM 650 elektronskoga računskog stroja. Time su izbjegnute eventualne štamparske pogreške. Podaci su doneseni na 12 i 14 znamenaka, dakle i više nego je potrebno. Primjena ovih tabela omogućuje izračunavanje elektronskih energija za mnoge jednostavnije sisteme i time omogućuje teoretičarima, koji nisu u mogućnosti koristiti računске strojeve, da istražuju bar neke probleme iz molekularne kvantne mehanike.

M. RANDIĆ

A. V. Topchiev and B. A. Krentsel': *Polyolefines*, Pergamon Press 1962, str. XI+92 (prijevod s ruskog A. D. Norris).

U golemomu skupu plastičnih masa zanimljiva grupa poliolefina zauzima istaknuto mjesto zbog niza karakteristika, koje čine njihovu uporabnu vrijednost vrlo velikom. U skladu s time, ovo je područje u stručnoj literaturi obrađeno vrlo iscrpno. Međutim, knjiga *Polyolefines* se na poseban način pridružuje već postojećim djelima. Autori su nastojali dati vrlo jednostavan i sažet prikaz onoga, što je učinjeno na području kemije, tehnologije i primjene poliolefina. U relativno kratkom tekstu s 33 slike i 23 tabele pruža se zanimljiv prikaz, koji tek posredno upućuje na daljnje publikacije i knjige. Posredno zato, jer u knjizi ne nalazimo ni jednoga bibliografskog podatka, što je svakako nedostatak. Citiranje samo najznačajnijih izvora, iz kojih su autori crpili podatke, neznatno bi povećalo opseg knjige, a predstavljalo bi koristan putokaz čitaocima.

Knjiga je podijeljena u 8 poglavlja. Prvo razrađuje sirovinsku bazu, dobivanje i izolaciju ishodnih tvari za proizvodnju poliolefina. Daljnja četiri poglavlja opisuju proizvodnju i karakteristike polietilena dobivenog na razne načine, tj. visokotlačni, zatim polietilene dobivene procesom kod atmosferskoga i umjerenoga pritiska, i polietilen pripravljen primjenom radijacije nekoga radioaktivnog izvora. U 6. poglavlju iznosi se dobivanje, karakteristike i primjena kloriranih i sulfo-kloriranih polietilena. Sedmo poglavlje razrađuje aplikacije polietilena u industrijske i ostale svrhe. Zadnje, a ujedno i najopsežnije poglavlje pruža prikaz o relativno novom članu obitelji poliolefina — o polipropilenu. Na elementaran način opisuje se stereospecifična polimerizacija, osobine i primjena polipropilena.

Na kraju knjige prevodilac je uz privolu autora dodao kratki prikaz mehanizama polipolimerizacije etilena i propilena. Osim toga prevodilac je mjestimice korigirao, upotpunio, a u 5. poglavlju čak i promijenio redosljed originala. Na sve izmjene doslijedno upozoravaju »fusnote« s iznimkom naslova, koji je izvorno glasio: »*Poliolefini — novi sintetički materijali*«.

Po načinu kako je napisana, ova knjižica može pružiti širokom krugu čitalaca mnogo zanimljivosti o jednom aktuelnom području, koje prikazuje u vrlo sažetom i prihvatljivom obliku.

Z. JEŽIĆ