

Recensiones

H. F. Hamerka: Advanced Quantum Chemistry. 278p. Inc. Reading (Massachusetts): Addison-Wesley Publishing Co. 1965.

Received November 27, 1967

The book is written for graduate students and for research workers engaged in the study of magnetic and optical properties of molecules. It does not cover the whole quantum chemistry as the title might suggest, but only a rather specialized field.

It is possible to recognize three parts in the development of the subject.

In the first part (Chapter 1 – 3) the electromagnetic and relativistic theories, the basic postulates of quantum theory and the quantum mechanical description of the spin are reviewed with a derivation of the total spin Hamiltonian. It is peculiar that no use is made of the Dirac equation in this or in the following parts of the book.

In the second part (Chapter 4 – 7) the variational principle and perturbation theory (also time dependent) are discussed rather more extensively than it is usually done and a quantum mechanical description of the radiation field and of emission and absorption of radiation is given.

The third part (Chapter 8 – 12) is mainly concerned with application of the theory to the study of NMR and ESR spectroscopy, to the calculation of molecular diamagnetic susceptibilities and shielding constants, and to the interpretation of rotational magnetism. It is to be noticed that the last three chapters, in which singlet-triplet transition, properties of triplet states, scattering or dispersion of radiation, resonance fluorescence, optical rotation, Raman effect are discussed, are largely based on original papers by the author. A rather detailed description of these phenomena is offered, at a research level.

I believe that this book will be of value not only to the specialist in the field but also to chemists with a sound knowledge of quantum mechanics.

MASSIMO SIMONETTA

Exercices de Chimie Quantique. A. JULG et O. JULG, VIII + 129. Paris: Dunod 1967.

Reçu le 8 Décembre 1967

Selon l'intention des auteurs ce travail constitue un complément à «Chimie Théorique» d'A. JULG. (Paris, Dunod 1964). «De même que la *Chimie Théorique* correspondait au cours professé à la Faculté des Sciences de Marseille, les *Exercices* correspondent aux problèmes faits en séance de travaux dirigés en vue de compléter le cours.» La grande partie des *Exercices* est pourtant indépendante du livre et peut être utilisée en soi. A part quelques éléments mathématiques l'ouvrage consiste en trois parties: des calculs relatifs à l'atome, des calculs par la simple méthode des orbitales moléculaires (LCAO), des calculs par des méthodes plus élaborées, champs autocohérent surtout.

Dans la première partie on trouve notamment six exemples différents de construction d'orbitales hybridées que l'étudiant trouvera très utile. La partie LCAO contient un grand choix d'exercices (23) portant sur des hydrocarbures conjugués, des molécules hétéroatomiques, substituées et des ions. Il faut notamment mentionner le traitement des petits cycles et des paracyclophanes (conjugaison «verticale»).

La partie des méthodes élaborées ne va pas très loin mais le lecteur appréciera sûrement les renseignements relatifs au calcul des intégrales et aux avantages des orbitales atomiques orthogonalisées.

Le livre ne fait pas d'appel à la théorie des groupes mais la symétrie est utilisée d'une manière intuitive.

Tel qu'il est ce livre est très utile aux étudiants avancés et aux jeunes chercheurs et pourrait les dispenser de bien des heures de tâtonnement. Complété par des considérations de symétrie plus complexes et par un effort dans la direction des méthodes plus élaborées, il pourrait rendre également grand service aux chercheurs plus avancés.

C. SANDORFY