Г. Эйринг, Дж. Уолтер, Дж. Кимбалл, Квантовая химия, перевод Л. И. Казарновской, под ред. М. И. Генкина. Гос. изд-во иностр. литературы, 1948.

Дж. Уэланд, Теория резонанса и её применение в органической химии, перевод М. Е. Дяткиной, под ред. Я. К. Сыркина, Гос. изд-во иностр. литературы, 1948.

Более двадцати лет прошло с того времени, как впервые было дано квантовомеханическое истолкование природы химической связи. За эти годы множество работ было посвящено квантовой химии; начав с изучения простейшей молекулы водорода, учёные в настоящее время вычисляют значения энергетических термов в сложнейших многоатомных молекулах и применяют квантовохимические методы к решению самых разнообразных проблем. Квантовая химия заняла видное место в науке, и материал, ею охваченный, настолько обширен, что сейчас можно уже подводить некоторые итоги. После периода горячего увлечения новыми методами, которые, как казалось, могут дать исчерпывающее физическое объяснение химическим свойствам вещества, наступил период критического рассмотрения основ квантовой химии, время поисков новых путей в теории молекул, так как ограниченность методов квантовой химии сейчас уже очевидна. В то же время актуальность теории строения и свойств молекул увеличивается с каждым днём. Поэтому надо считать положительным фактом выход в свет двух новых переводных монографий по квантовой химии, которые наряду с книгами советских учёных, посвящённых той же области (Я. Сыркин и М. Дяткина, Химическая связь и строение молекул; В. Кондратьев, Структура атомов и молекул и др.), заполняют существенный пробел в научной литературе.

Книга Эйринга, Уолтера и Кимбалла написана физиками-теоретиками и представляет математическое изложение не только квантовой химии, т. е. квантовой механики молекул, но и тех разделов общей классической и квантовой физики, с которыми необходимо ознакомиться для того, чтобы понять принципы квантовой химии. Собственно квантовой химии посвящена лишь вторая половина книги (восемь глав из восемнадцати). Такое построение монографии (старая квантовая механика, принципы классической механики, основы квантовой механики и её математические методы, строение атома и лишь затем квантовая химия) определило чрезвычайную сжатость и, мы сказали бы, конспективность изложения При этом авторы понимают под словами «квантовая химия» не только теорию химической связи в простых и сложных молекулах, но и теорию любых физических свойств молекул — молекулярную спектроскопию, статистическую механику, квантовомеханическую теорию скоростей реакций, теорию электрических, магнитных и оптических явлений (теория оптической активности) и т. д Все эти вопросы изложены в книге, и на долю самой теории химической связи остаются две главы — одна десятая книги. С точки зрения теоретической физики, удельный вес теории химической связи в общей системе квантовой механики действительно не столь уж высок, и все сюда относящиеся вопросы, имеющие

принципиальное физическое значение, в самом деле изложены авторами в указанных двух главах *)

Специфичностью распределения материала в значительной степени определяются достоинства и недостатки рецензируемой книги. Книга эта не удовлетворит читателя-химика, интересующегося квантовой теорией в применении к конкретным веществам и процессам. Кроме того, книга слишком трудна для химика; авторы явно имели в виду, что читателям её будет физик-теоретик, обладающий солидной математической подготовкой. Но такой читатель, в сущности, не нуждается в конспективном изложении принципов классической механики и элементарных задач квантовой теории.

С другой стороны, для физика, изучающего строения молекул, было бы весьма ценным подробное изложение именно теории молекул. В этом смысле книга Эйринга, Уолтера и Кимбалла обманывает ожидания.

Главным достоинством книги является её высокий научный уровень и то, что в ней нашли своё отражение разнообразные проблемы химической физики сегодняшнего дня. Здесь особенно интересна глава XVI, посвящённая квантовомеханической теории скоростей реакций Авторы дают детальную теорию метода активированного комплекса (переходного состояния), принадлежащую самому Эйрингу. Ценным является изложечие квантовой теории оптической активности, в разработке которой Эйринг также принимал видное участие. Краткое, но достаточно ясное изложение теории групп (гл. X и приложение VII) также будет весьма полезным для читателя. В то же время главы, в которых излагаются общие основы квантовой механики (гл. I—IX), не содержат чего-либо нового, а вопросам молекулярной спектроскопии и статистической механики уделено слишком мало места. Об этих важных вопросах читатель книги получит лишь предварительное и поверхностное представление

Как раз две небольшие главы, касающиеся химической связи (гл. XII — Ковалентная связь и гл XIII — Резонанс и строение сложных молекул), содержат интересные указания и оценки, обычно отсутствующие в литературе. Важно и безусловно правильно указание, что термин «обменная энергия» имеет более математический, чем физический смысл (стр. 288), сделанное в связи с изложением работы Джеймса и Кулиджа. Существенна оценка теории направленных валентностей (стр. 296): «это рассмотрение надо оценивать, как квантово-механическое описание образования ковалентной связи, базирующееся в значительной мере на предварительном знании экспериментальных фактов» Однако авторы не затрудняют себя исследованием принципиальных основ квантовой химии и не дают характеристики точности и надёжности излагаемых ими методов. Поэтому у читателя создаётся ложное впечатление равноценности основных положений квантовой механики и её применения к теории сложных молекул, которое не случайно вызывает в последнее время столько споров.

В целом «Квантовая химия» Эйринга, Уолтера и Кимбалла представляет собой конспективный обзор теории ряда актуальных вопросов Этот обзор составлен на высоком научном уровне, но без нужной критики и не отличается глубиной мысли Книга будет полезна читателю хотя бы по причине отсутствия более подробных монографий.

Книга Дж. Уэланда «Теория резонанса» носит совершенно иной характер Это — книга, написанная для химиков-органиков, книга нематематическая и в этом смысле даже более доступная читателю, чем известная монография Я. К. Сыркина и М Г. Дяткиной.

Автор излагает теорию электронного резонанса без её обоснования, в виде неких формальных правил (параграф 1.4 — Условия резонанса), считая, что такое обоснование может быть дано лишь в математической форме, недо-

---

*) Ср. Л Ландау и Е Лифшиц, Квантовая механика, ч I, Гостехиздат, 1948.

ступной читателю-химику. Уэланд утверждает, что «эти правила, как и сами существование резонанса, являются лишь следствиями основных уравнений квантовой механики» (стр. 19). В какой мере эти следствия обязательны? Ответ на этот вопрос автор даёт на стр. 49, в абзаце, который ввиду его важности мы приводим полностью:

«Из предыдущего видно, что идея резонанса является умозрительной концепцией в бо́льшей степени, чем другие физические теории. Она не отражает какого-либо внутреннего свойства самой молекулы, а является математическим способом, изобретённым физиком или химиком для собственного удобства. Действительно, если бы квантовомеханические проблемы можно было решать точно, или если бы были использованы другие приближённые методы, идея резонанса не возникла бы. Более того, если в уравнении использовать другой набор φ (структурных функций. *М. В.*), то молекула, волновая функция которой приближается к функции ψ, будет описана иначе, как резонирующая между совершенно другим рядом структур. Однако мы увидим в следующих главах, что эти обстоятельства никоим образом не уменьшают практической пользы этой концепции, но они заставляют нас всегда иметь в виду, что резонанс имеет смысл только в связи с частным способом приближения к истинному положению, и нужно постоянно следить за тем, чтобы не приписывать различным резонансным структурам физический смысл, которого они не имеют».

Мы видим, что Уэланд пытается разобраться в сущности теории резонанса и констатирует известное неблагополучие в её методологических основах. Однако приведённые цитаты свидетельствуют о полной путанице понятий и дезориентируют читателя. Либо резонанс есть необходимое следствие квантовой теории, и тогда эта концепция не может считаться просто «удобным приёмом», либо это только «удобный приём», и тогда мы, применяя теорию резонанса, должны стать на махистскую точку зрения. В действительности резонанс не есть ни то, ни другое — как нам представляется, теория резонанса имеет смысл преходящей химической рабочей гипотезы, до известной степени применяющей данные квантовой теории. Размеры рецензии не позволяют нам остановиться на этом вопросе подробнее

Уэланд с большой изобретательностью и остроумием рассматривает аналогию электронного резонанса с механическим резонансом двух маятников Эти занимательные страницы книги (стр. 34—45) посвящены доказательству наличия такой аналогии и, следовательно, обоснованию термина «резонанс» в применении к химическим проблемам. Всё же аналогия эта носит формальный и неубедительный характер, и, с нашей точки зрения, термин «резонанс» скорее запутывает, чем разъясняет существо дела.

Дальнейшее изложение посвящено конкретным химическим и физическим проблемам (природа валентности, энергия резонанса, резонанс и статические эффекты, дипольные моменты, молекулярные спектры, химическое равновесие и химические реакции). В книге приведён богатый и разнообразный материал, ценные табличные данные (таблица межатомных расстояний в органических молекулах, стр. 410—424). К сожалению, автор сразу же забывает о тех предостережениях, которые высказывались им в вышеприведённой цитате Поэтому многочисленные качественные выводы, сделанные по поводу конкретных химических вопросов, не всегда звучат достаточно убедительно. а физические рассуждения о молекулярных спектрах и дипольных моментах носят поверхностный характер. В предисловии редакции Дж. Уэланд аттестуется как химик и одновременно физик-теоретик. Если справедливо первое, то второе звучит неправдоподобно: книга Уэланда, посвящённая строению и свойствам молекул как физической проблеме, лишена подлинного физического содержания. Это особенно ярко проявляется в главе о молекулярных спектрах (гл. VI, стр. 207—236), в которой весьма сложная и неразрешённая проблема строения электронных спектров многоатомных молекул излагается как доступная решению при помощи качественных псевдонаглядных методов

теории резонанса. Автор, правда, оговаривает, что совпадение расчётов Склаpe и Ферстера с наблюдаемыми длинами волн сомнительно (стр. 232), но не объясняет причин этого и не даёт продуманной оценки применения теории резонанса в спектроскопии.

Таким образом, книга Уэланда может представить ценность только как сводка материала и качественное изложение теории резонанса. Анализ принципиальных основ теории, данной в книге, является путаным и методологически порочным. Между тем, потребность в таком анализе весьма велика. На это указывает и редакция книги, отмечая, что «в настоящее время теория резонанса подвергается научной критике советских учёных с разных точек зрения». Очевидно, что появление книги Уэланда на русском языке оправдано уже тем, что она даёт некоторый материал для такой критики. Актуальной задачей советских физиков, химиков и философов естествознания является установление единой материалистической точки зрения на современные теории строения молекул, критика методологически и, следовательно, научно ошибочных взглядов ряда зарубежных учёных и в том числе Уэланда. Такой путь скорее всего приведёт к цели — к построению подлинно научной теории в химии.

Советский читатель будет с нетерпением ожидать появления советских монографий, посвящённых вопросам строения молекул, квантовой химии и теории электронного резонанса, удовлетворяющих тем высоким требованиям, которые мы должны предъявить к их научному и методологическому содержанию. Мы видим, что рецензируемые книги этим требованиям не удовлетворяют.

Характерно, что авторы обеих книг полностью игнорируют советские научные работы в области квантовой химии и строения молекул. Между тем, эти работы существенны и в количественном и в качественном отношении. Укажем на многочисленные работы проф. Я. К. Сыркина и его школы по теории резонанса, работы ленинградских физиков по молекулярной спектроскопии, работы школ акад. С. И. Вавилова, акад. А. Н. Теренина, акад. А. Е. Порай-Кошица и многие другие. Незнание этих работ авторами рецензируемых книг говорит не в их пользу.

Переводы обеих книг выполнены очень хорошо. Внешность книг прекрасная. Хотелось бы, чтобы не только переводные, но и советские книги издавались бы на том высоком уровне, который свойственен всем изданиям ИЛ.

М. Волькенштейн