



Новая химия?

В этом году в очередной раз Нобелевскую премию по химии получил биохимик. Мы решили обратиться к нашим авторам-химикам с двумя вопросами:

- 1) Означает ли это, что химия как наука пришла к своему логическому концу? И вообще, что происходит с химией?
- 2) Назовите химические исследования, которые, с вашей точки зрения, были бы достойны Нобелевской премии.

Р.Хофман,
лауреат
Нобелевской
премии
по химии 1981 года



Лет десять назад Роальд Хофман читал лекцию в Высшем химическом колледже РАН, и наш собеседник, профессор Г.В.Лисичкин, задал ему вопрос, какие направления в химии он считает наиболее важными на тот момент. Не задумываясь, нобелевский лауреат назвал три направления:

- 1) Исследования поверхности. Действительно, не только в химии, но и в биологии границы раздела фаз очень важны — это ключевой момент, когда речь идет о катализаторах, сорбентах, коллоидах, имплантатах, сенсорах и т. д.
- 2) Физические методы исследования.
- 3) Создание искусственных биомо-

лекул. Р.Хофман высказал совершенно нетривиальную мысль: у него нет уверенности, что эволюция в природе шла оптимальным путем и что синтетическим путем нельзя получить более совершенные структуры. Например, ферменты с более высокой активностью.

Сегодня, десять лет спустя, Роальд Хофман так ответил на наши вопросы. Нобелевскую премию дает Шведская академия наук, и решение принимает весьма ограниченное число людей. У них собственное представление о том, что такое химия, которое вовсе не представляет собой результат консенсуса мирового сообщества химиков. Я лично с их мнением не согласен. Например, они решили, что молекулярная биология и биохимия — это часть химии. Поскольку такое решение принято (и пока Шведская академия наук не изменит его), половина, а то и больше Нобелевских пре-

мий по химии уходит и будет «уходить» в биохимию. Впрочем, они достанутся действительно прекрасным работам в этой области, которыми я искренне восхищаюсь.

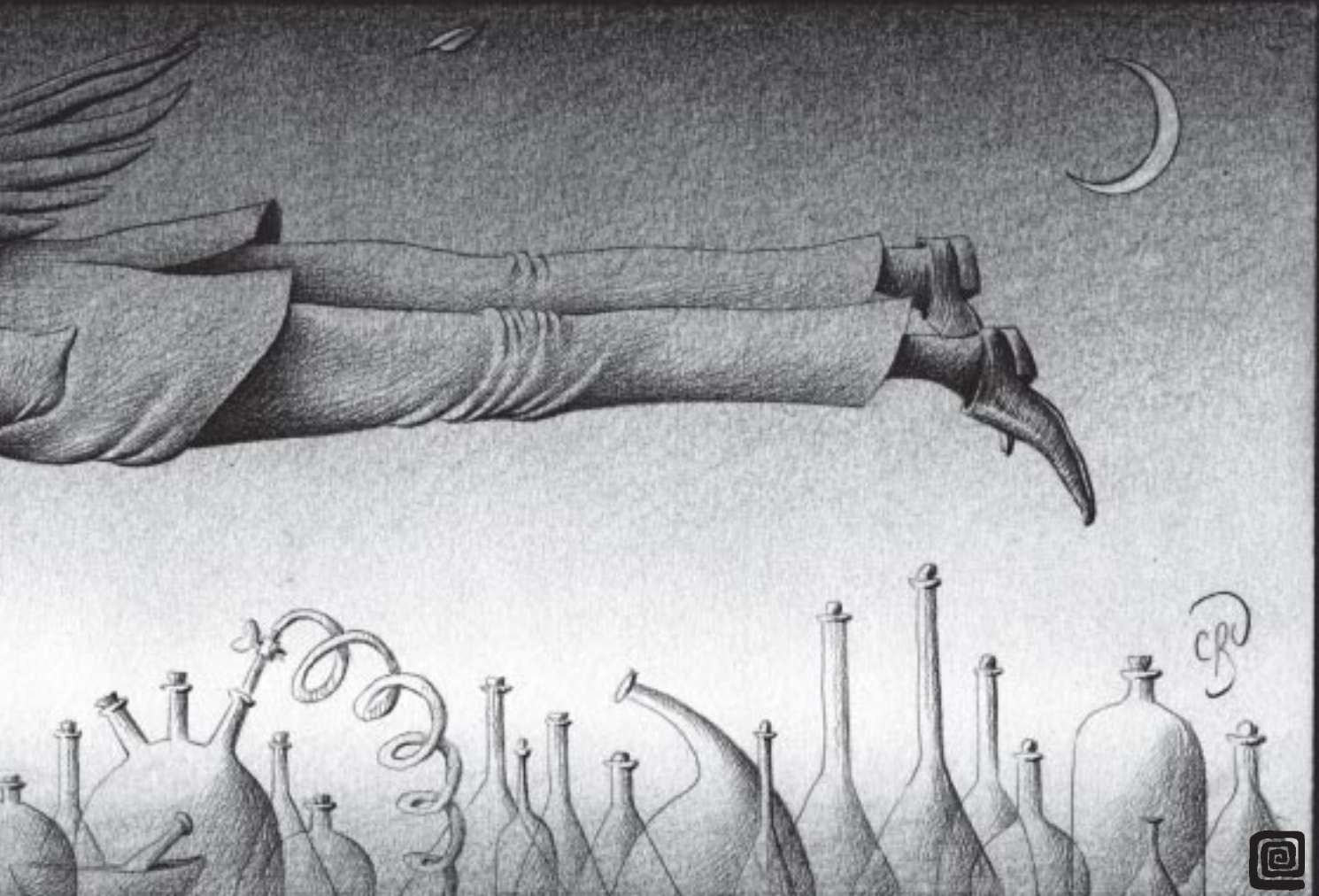
Что касается областей, которые, по моему мнению, достойны Нобелевской премии (фамилии назову только в одном случае), это:

- 1) бионеорганическая химия;
- 2) «зеленая» химия;
- 3) синтетическая неорганическая химия (исследования Ф.А.Коттона, Н.Бартлетта, Ф.Хауторна);
- 4) открытие каталитических антител.



Г.В.Лисичкин,
профессор,
доктор химических наук,
главный редактор
«Российского химического журнала»

Действительно, за последние 50 лет Нобелевские премии по химии 18 раз получали не «чистые» химики, а биохимики и молекулярные биологи. На мой взгляд, это связано с тремя



РАЗМЫШЛЕНИЯ

обстоятельствами. Первое: молекулярная биология – все-таки в значительной мере химия, поэтому принципиальных возражений против присуждения премий биохимикам быть не может, тем более что речь идет о выдающихся научных результатах. Второе: от молекулярной биологии ожидают быстрого решения проблем медицины. Вследствие этого она хорошо финансируется и быстро развивается, ее достижения впечатляют. Третье: все ныне здравствующие лауреаты Нобелевских премий имеют право номинировать кандидатов на эту премию. Понятно, что если среди выдвигающих большинство биохимиков, то и номинировать они будут, скорее всего, своих коллег. Это естественно, они знают предмет, знают людей, поэтому могут сделать выбор более обоснованно.

Конечно, и речи не может быть о том, что химия себя исчерпала. С течением времени количество нерешенных проблем в химии не убывает, а возрастает.

Синтетические методы, как в органической, так и в неорганической химии, достигли высокого совершенства. Химики научились синтезировать весьма сложные соединения, в

том числе природные, координационные, металлоорганические, супрамолекулярные. Свойства синтезированных веществ – их примерно 15 миллионов – систематически изучаются и заносятся в справочники. Но сегодня мы переживаем этап развития химии, когда основной становится обратная задача: каким строением должно обладать вещество, чтобы оно имело нужный набор свойств? Создание химических веществ и материалов с заданными свойствами или с определенной биологической активностью – одна из важнейших целей современной химической науки.

В связи с запросами практики, прежде всего фармакологии, возникло и бурно развивается новое направление – комбинаторная химия. Автоматизированные системы за очень короткое время получают огромное количество соединений (библиотеку) и даже испытывают их активность. Комбинаторная химия работает не только в фармакологии – на наших глазах научные подходы к подбору традиционных гетерогенных катализаторов заменяются чисто эмпирическими, поскольку комбинаторные роботы за считанные дни

синтезируют и устанавливают каталитическую активность нескольких тысяч каталитических композиций. Но это не фундаментальное решение задачи, хотя и очень технологичное, ведь комбинаторная химия лишь ускоряет достижение результата, это только высокоэффективный перебор вариантов. А хотелось бы заранее уметь предсказать структуру и строение веществ, которые надо синтезировать для обеспечения заданных свойств.

Сегодня широко применяют методы исследования количественной связи между структурой веществ и их свойствами или биологической активностью (QSPR/QSAR – Quantitative Structure-Property/Activity Relationships). Бесспорный лидер этого направления в России – академик Н.С.Зефирова. Такие методы основаны на описании структуры химического соединения с помощью набора числовых характеристик – дескрипторов и на построении корреляций между свойствами (активностью) и значениями дескрипторов. Однако речь здесь идет лишь о корреляциях, а не о функциональных связях. Кроме того, бурно развивается еще одно направление создания новых веществ

с конкретной биологической активностью — это моделирование молекулы биомишени и подбор органических молекул, связывающихся с ней оптимальным образом.

Большое будущее ждет компьютерную химию. Уже существуют компьютерные программы и методы, которые позволяют многое просчитать заранее и связать структуры с активностью. Однако необходимы фундаментальные физико-химические теории и закономерности, которые бы связывали свойства со структурой. Задача эта действительно актуальная, поскольку установление закономерности «структура—свойства» важно для любой области химии: неорганики, функциональных материалов, фармацевтической и медицинской химии и т. д. Этой проблемой будут заниматься еще не одно десятилетие, и, я думаю, здесь можно ждать Нобелевских премий.

Есть области химии, которые требуют радикальных решений. Например, проблемы экологии. Ясно, что создать промышленную цивилизацию, не загрязняющую окружающую среду, нельзя, а значит, необходимы научно-технологические решения, способствующие минимизации загрязнения.

Еще одна очень важная задача — это управление скоростями и селективностями химических реакций с помощью физических воздействий: электромагнитных полей, плазмы, радиации, звука и т. п. В этой области разработано очень много, и все же в большинстве случаев решения находят эмпирически. Особый интерес представляет одновременное использование разных воздействий, например СВЧ и ультразвука — таких комбинаций можно придумать много. Но теорий, которые предсказывали бы результат такого комбинированного воздействия — а оно может быть синергическим, — пока нет.

Традиционно актуальное направление — аналитическая химия. Оно было актуально всегда, но сегодня на первый план вышла сенсорика. Человечество вообще вступает в эпоху сенсоризации — мы уже всю пользуемся карточками и электромагнитными сенсорами «свой-чужой». Создание групповых и селективных химических и биосенсоров для всех значимых соединений отчасти завершит некий этап развития аналитики. Очевидно, что такой контроль (химический и биохимический) необходим везде, а значит, и для разработок в этой области будут благоприятные условия.

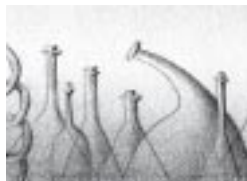
Больших результатов в химии можно ждать от развития физических методов исследования. Всегда появление нового физического метода обеспечивает прорыв в химии. Конечно, может получиться так, что премию за это получат физики, но для химии каждый метод открывает колоссальные перспективы.

И все-таки, по большому счету, открытия непредсказуемы. Не существует формализованных методов, которые позволяют угадать заранее хотя бы область, в которой будет сделано открытие. Этим и интересна наука.

С моей точки зрения, есть несколько российских химиков, уровень научных достижений которых вполне позволяет претендовать на Нобелевскую премию. Упомяну двоих:

— академик Владимир Исаакович Минкин — за его исследования в области синтеза бистабильных молекул. Эти молекулы могут существовать в двух устойчивых состояниях, между которыми возможны обратимые переходы под действием внешнего фактора (например, света). Подобные соединения — основа будущей молекулярной электроники;

— академик Юрий Александрович Золотов — по совокупности работ «за вклад в развитие аналитической химии».



В.В. Лунин,

академик,
декан химического факультета
МГУ им. М.В.Ломоносова

Очередная Нобелевская премия по химии только подтверждает тот факт, что химия становится центром естествознания. Еще в прошлом веке она стала его фундаментальной частью, а сегодня ее роль неизмеримо возросла. Просто пришло время отказаться от узкого взгляда на нашу науку, поскольку она интегрировалась в смежные области — такие, как науки о жизни. Биоорганическая химия, молекулярная биология — это неотъемлемые части химии, которые сегодня становятся более заметными. Присуждение Нобелевской премии по химии за исследование в области биоорганической химии никак не говорит о конце химии как науки. Наоборот, это лишь подтверждает, что химия развивается и выходит на новый уровень.

В России много блестящих химиков, чьи достижения могли бы быть

отмечены Нобелевской премией:

1) Академик Ю.Н.Молин (Новосибирск), Р.З.Сагдеев (Новосибирск) и академик А.Л.Бучаченко (Москва), которые внесли решающий вклад в становление и развитие спиновой химии.

2) Академик Е.Д.Свердлов (Москва), химик по образованию, убежденно и мировоззрению. Он работает в междисциплинарной области — молекулярной генетике, но это та же химия, если говорить о предметах и методах исследования.

3) Академик В.А.Кабанов, который внес выдающийся вклад в создание медицинских полимеров. Очень жаль, что Виктора Александровича уже нет с нами — об этой утрате скорбит все мировое сообщество химиков. Конференции в его память недавно прошли в Американском и Японском химических обществах.



Ю.А.Золотов,

академик, зав. кафедрой аналитической химии МГУ, председатель научного совета РАН по аналитической химии, главный редактор «Журнала аналитической химии»

Границы между химией и смежными науками никогда не были четкими, и это нормально. Напомню, что природа вообще не знает придуманного нами деления на дисциплины. Нобелевские премии по химии получали и физики — Э.Резерфорд, Ф.У.Астон, П.И.Дебай, Э.М.Макмиллан и др. Молекулярная биология — в значительной степени химия, и химики должны гордиться тем, что их наука все шире «простирает руки». Нам надо говорить не об исчерпании химии, а о ее растущей способности решать проблемы других наук.

Нобелевские премии неоднократно присуждали за методы исследования и методы химического анализа. Например, за элементный микроанализ органических веществ, полярографию, варианты хроматографии, радиоиммунологический метод, способы ионизации в масс-спектрометрии и др. Думаю, что премии заслужили и некоторые другие аналитические методы, например атомно-абсорбционная спектрометрия (эти работы не раз представляли на рассмотрение Нобелевскому комитету) или проточно-инжекционный анализ.

Ю.А.Устынюк,

профессор,
доктор химических наук,
зав. лабораторией ЯМР
химического факультета МГУ



Нобелевские премии по химии все чаще присуждают биохимикам и молекулярным биологам не случайно. За этим стоит вполне определенная объективная причина. Химия сейчас переживает очень интересный этап — этап смены парадигмы. В 1956 году Роберт Вудворд писал: «Органический синтез таит в себе вызов и волнение. Он полон приключений. Это большое искусство». Мы восхищались его блестящими многостадийными синтезами стрихнина (1954), резерпина (1958), витамина B₁₂ (1973), которые получили достойную оценку, когда Вудворду присудили Нобелевскую премию по химии в 1965 году. А сегодня химия достигла такого уровня развития, что подобные синтезы способен провести химик средней руки, а настоящий мастер может синтезировать молекулу практически любой сложности. Такие задачи переходят в ранг чисто технических проблем. Однако на этом уровне для химиков открылись новые перспективы.

В истории химической науки начался новый период, который, по всей видимости, можно назвать периодом супрамолекулярной химии. Родоначальник этого направления, Жан Мари Лен, лауреат Нобелевской премии по химии 1987 года, определил его как химию высокоселективных нековалентных взаимодействий (таких, как водородные и координационные связи, гидрофобное взаимодействие) между молекулами. Объекты супрамолекулярной химии — сложные надмолекулярные ансамбли. Их способность к самоорганизации, саморегуляции и репликации приближает их к биологическим системам. Действительно, большинство биологически важных соединений — это сложные супрамолекулярные комплексы. Типичный пример — двойная спираль ДНК, которая удерживается водородными связями. Каждая такая связь вносит небольшой вклад (около 5 ккал/моль), но, когда взаимодействуют сотни пар оснований и на каждую приходится две или три связи, в результате возникает прочная структура.

Не менее важную роль играют и координационные связи, которые

образуют ионы металлов с биомолекулами, — на них держатся все металлоферменты. Соответственно возникает проблема молекулярного распознавания на химическом уровне, а это одна из главных проблем современной биологии и медицины. По существу, химия супрамолекулярных систем — не что иное, как биология. Решение биологических задач стало делом квалифицированного химика, который в этом деле преуспеет заведомо больше, чем биолог. Все больше химиков берется за эти задачи. Так что Нобелевский комитет просто стал более широко понимать химию. Сегодня она создает новый методический арсенал для молекулярной биологии, энзимологии, медицины, точно так же, как в свое время для нее такой арсенал создала физика.

Это не означает, что у химии не осталось внутренних задач, — они есть. Разработка новых, все более совершенных методов построения молекул — это вечная задача. И здесь достигнуты блестящие успехи, которые вполне заслуживают Нобелевской премии. Мне кажется, что к числу таких в первую очередь можно отнести разработку новых, исключительно эффективных методов создания связей углерод—углерод и углерод—гетероатом на основе реакций кросс-сочетания. Это каталитические реакции Хека, Соногашира, Сузуки, Стилле, протекающие в присутствии соединений палладия. Они открыли перед химиками совершенно новые пути к построению сложных молекул и сильно потеснили классические методы. Металлоорганический катализ все шире используют в синтетической и промышленной практике.

Многие достижения в этой области уже отмечены Нобелевским комитетом. В 1963 году премию получили Карл Циглер и Джулио Натта, которые создали основы современных методов синтеза полимеров (катализаторы Циглера—Натта). В 2005 году Нобелевская премия была присуждена Иву Шовену, Роберту Граббсу и Ричарду Шроку за развитие метода

метатезиса в органическом синтезе. Уильям Ноуэлс, Риори Нойори и Барри Шарплесс получили Нобелевскую премию в 2001 году за исследования энантиоселективных каталитических реакций гидрирования. По своей значимости реакции кросс-сочетания, как мне кажется, не уступают уже отмеченным блестящим работам.

Я думаю, что в ближайшем будущем новых успехов можно ожидать и от химиков-теоретиков. Раньше химик-теоретик шел позади химика-экспериментатора. Анализируя экспериментальные результаты, он выработывал на их основе теоретические концепции, которые обеспечивали новый уровень понимания. Яркий пример успешного сотрудничества великолепного экспериментатора и замечательного теоретика — создание правил сохранения орбитальной симметрии Вудворда — Хофмана. Роальд Хофман был удостоен Нобелевской премии по химии в 1981 году.

Последние четверть века методы квантовой химии развивались исключительно быстро, и успехи в этой области были отмечены Нобелевской премией в 1998 году (Вальтер Кон и Джон Попл). Созданные в последние годы исключительно эффективные алгоритмы для суперкомпьютерных кластеров позволяют еще до синтеза в режиме параллельных вычислений рассчитывать структуру и свойства очень сложных молекул и супрамолекулярных комплексов. Это дает возможность применять теоретическое моделирование на начальных этапах химического исследования и уже на основе полученных результатов отбирать наиболее перспективные структуры и реакции для экспериментального изучения. Тем самым фантастически сокращается время, которое тратит химик-синтетик. Здесь открывается широкое поле для открытий, и каждое из них может оказаться эпохальным.

Материал подготовила
В.В.Благутина



РАЗМЫШЛЕНИЯ