

Алгебра и гармония в химических приложениях

Говоря о математизации науки, чаще всего имеют в виду лишь сугубо прагматическое использование вычислительных методов, забывая меткое высказывание А. А. Любищева о математике как не столько служанке, сколько царице всех наук. Именно уровень математизации выводит ту или иную науку в категорию точных — если подразумевать под этим не использование точных количественных оценок, а высокий уровень абстрагирования, свободу оперирования понятиями, относящимися к категориям нечисленной математики.

Среди методов такой "качественной математики", нашедших эффективное применение в химии, главная роль принадлежит множествам, группам, алгебрам, топологическим конструкциям и, в первую очередь, графам — наиболее общему методу изображения химических структур.

Возьмем, например, четыре точки, произвольно располо-

женные на плоскости или в пространстве, и соединим их между собой тремя черточками. Как бы ни были расположены эти точки (называемые вершинами) и каким бы образом ни соединили их между собой черточками (называемыми ребрами), мы получим лишь две возможные структуры-графа, различающиеся между собой взаимным расположением связей: один граф, похожий на буквы «П» или «И», и другой граф, похожий на буквы «Т», «Э» или «У». Если же вместо четырех абстрактных точек взять четыре атома углерода, а вместо черточек — химические связи между ними, то два указанных графа будут соответствовать двум возможным изомерам бутана — нормального и изо-строения.

Чем вызван все нарастающий интерес химиков к теории графов, этому причудливому, но весьма простому языку точек и черточек?

Граф обладает тем замечательным свойством, что он остается неизменным при любых деформациях структуры, не сопровождающихся разрывом связей между ее элементами. Структуру графа можно исказить, полностью лишив ее симметрии в обычном понимании; тем не менее, у графа останется симметрия в топологическом смысле, определяемая одинаковостью, взаимозаменяемостью концевых вершин.

Учитывая эту скрытую симметрию, можно, например, предсказать число различных изомерных аминов, получаемых на основе структур бутана и изобутана заменой атомов углерода на атомы азота; графы позволяют использовать простые физические соображения и для понимания закономерностей типа «структура — свойство».

Другая, несколько неожиданная идея — выражать с помощью чисел структурные качества графов (например, степень их разветвленности). Интуитивно мы чувствуем, что изобутан более разветвлен, чем нормальный бутан; количественно это можно выразить, скажем, тем, что в молекуле изобутана трижды повторяется структурный фрагмент пропана, а в нормальном бутане — лишь дважды. Это структурное число (называемое топологическим индексом Винера) удивительно хорошо коррелирует с такими характеристиками предельных углеводородов, как температура кипения или теплота сгорания. Последнее время появилась своеобразная мода на изобретение различных топологических индексов, их уже набралось более двадцати; манящая простота делает этот пифагорейский метод все более популярным*.

* См. «Химию и жизнь», 1988, № 7, с. 22.

Использование теории графов в химии не ограничивается лишь структурной молекул. Еще в 30-е годы А. А. Баландин, один из предшественников современной математической химии, провозгласил принцип изоморфного замещения, согласно которому один и тот же граф несет единую информацию о свойствах самых разнородных структурированных объектов; важно лишь четко определить, какие именно элементы выбираются в качестве вершин и какие именно отношения между ними будут выражаться ребрами. Так, помимо атомов и связей в качестве вершин и ребер можно выбрать фазы и компоненты, изомеры и реакции, макромолекулы и взаимодействия между ними. Можно подметить глубокое топологическое родство между правилом фаз Гиббса, стехиометрическим правилом Хориути и рациональной классификацией органических соединений по степени их насыщенности. С помощью графов успешно описываются взаимодействия между элементарными частицами, срастание кристаллов, деление клеток... В этом смысле теория графов служит наглядным, практически универсальным языком междисциплинарного общения.

Развитие каждой научной идеи традиционно проходит ступени: статья — обзор — монография — учебник. Соцветье идей, именуемое математической химией, уже миновало стадию обзоров, хотя еще и не достигло статуса учебной дисциплины. Ввиду разнообразия направлений, основной формой публикаций в этой области сейчас служат сборники; несколько таких сборников увидели свет в 1987-1988 гг.

Первый сборник под ре-

дакцией Р. Кинга — «Химические приложения топологии и теории графов» (М.: Мир, 1987) — содержит перевод докладов международного симпозиума с участием химиков и математиков разных стран: книга дает полноценное представление о пестрой палитре подходов, возникших на стыке теории графов и химии. В ней затронут весьма широкий круг вопросов — начиная от алгебраической структуры квантовой химии и стереохимии, магических правил электронного счета и кончая структурой полимеров и теорией растворов. Химиков-органиков, без сомнения, привлечет новая стратегия синтеза молекулярных узлов типа трилистника, экспериментальная реализация идеи молекулярного листа Мебиуса. Особый интерес вызовут обзорные статьи по использованию уже упоминавшихся выше топологических индексов для оценки и предсказания самых разнообразных свойств, вплоть до биологической активности молекул.

Перевод этой книги полезен еще и тем, что затронутые в ней вопросы; возможно, позволят снять ряд дискуссионных проблем в области методологии химической науки. Так, неприятие некоторыми химиками в 50-е годы математической символики резонансных формул сменилось в 70-е годы отрицанием отдельными физиками самой концепции химической структуры. В рамках математической химии такого рода противоречия могут быть устранены, например, с помощью комбинаторно-топологического описания как классических, так и квантово-химических систем.

Хотя работы советских ученых в этом сборнике не представлены, отродно отметить повышенный интерес

к проблемам математической химии в отечественной науке. Примером может служить первое рабочее совещание «Молекулярные графы в химических исследованиях» (Одесса, 1987), собравшее около ста специалистов со всей страны. По сравнению с зарубежными исследованиями, отечественные работы отличаются более выраженный прикладной характер, направленность на решение задач компьютерного синтеза, создания разнообразных банков данных. Несмотря на высокий уровень докладов, совещание отметило недопустимое отставание в деле подготовки специалистов по математической химии. Лишь в Московском и Новосибирском университетах эпизодически читаются курсы по отдельным ее вопросам. Вместе с тем, пора серьезно поставить вопрос — какую математику должны изучать студенты-химики? Ведь даже в университетских математических программах химических факультетов такие разделы, как теория групп, комбинаторные методы, теория графов, топология практически не представлены; в свою очередь, университетские математики и вовсе не изучают химию. Кроме проблемы обучения остро стоит вопрос о научных коммуникациях: необходим общесоюзный журнал по математической химии, выходящий хотя бы раз в год. За рубежом уже много лет издается журнал «MATCH» («Mathematical Chemistry»), а наши публикации разбросаны по сборникам и самым разнообразным периодическим изданиям.

До недавнего времени познакомиться с математической химией советский читатель мог лишь по книге В. И. Соколова «Введение в теоретическую стереохимию» (М.:

Наука, 1979) и брошюре И. С. Дмитриева «Молекулы без химических связей» (Л.: Химия, 1977). Частично восполняя этот пробел, сибирское отделение издательства «Наука» выпустило в прошлом году книгу «Применение теории графов в химии» (под редакцией Н. С. Зефирова и С. И. Кучанова). Книга состоит из трех разделов, причем первый посвящен использованию теории графов в структурной химии; во второй части рассмотрены графы-реакции; в третьей показано, как с помощью графов можно облегчить решение многих традиционных задач химической физики полимеров. Конечно, эта книга — еще не учебник (значительная часть обсуждаемых идей представляет собой оригинальные результаты авторов); тем не менее, первую часть сборника вполне можно рекомендовать для первоначального ознакомления с предметом.

Еще один сборник — труды семинара химического факультета МГУ «Принципы симметрии и системности в химии» (под редакцией Н. Ф. Степанова) увидел свет в 1987 году. Главная тема сборника — теоретико-групповые, теоретико-графовые и теоретико-системные методы в химии. Нетрадиционен круг обсуждаемых вопросов, еще менее стандартны ответы на них. Читатель узнает, например, о причинах трехмерности пространства, о возможном механизме возникновения диссимметрии в живой природе, о принципах конструирования периодической системы молекул, о плоскостях симметрии химических реакций, об описании молекулярных форм без использования геометрических параметров и о многом другом. К сожалению, найти книгу можно только в науч-

ных библиотеках, поскольку в широкую продажу она не поступала.

Коль скоро речь зашла о принципах симметрии и системности в науке, нельзя не упомянуть еще об одной необычной книге — «Система. Симметрия. Гармония» (М.: Мысль, 1988). Эта книга посвящена одному из вариантов так называемой общей теории систем (ОТС), предложенному и развиваемому Ю. А. Урманцевым и нашедшему на сегодняшний день наибольшее число сторонников среди ученых самых разных специальностей — как естественных, так и гуманитарных. Исходные принципы ОТС Урманцева составляют понятия системы и хаоса, полиморфизма и изоморфизма, симметрии и асимметрии, а также гармонии и дисгармонии.

Думается, что теория Урманцева должна вызвать самое пристальное внимание химиков уже хотя бы потому, что в ней традиционно химические понятия состава, изомерии, диссимметрии возведены в ранг общесистемных. В книге можно встретить поразительные симметричные аналоги — например, между изомерами листьев и молекулярных структур*. Конечно, при чтении книги местами необходим определенный уровень профессиональной непривязанности — скажем, когда речь заходит о химико-музыкальных параллелях или обосновании зеркально-симметричной системы элементов. Тем не менее, книгу пронизывает центральная идея — найти универсальный язык, выражающий единство мироздания, сродни которому разве что касталийский язык «игры в бисер» Германа Гессе.

Говоря о математических конструкциях современной химии, нельзя обойти вниманием и замечательную книгу А. Ф. Бочкова и В. А. Смита «Органический синтез» (М.: Наука, 1987). Хотя ее авторы — «чистые» химики, ряд обсуждаемых в книге идей весьма близок затронутым выше проблемам. Не останавливаясь на блестящей форме изложения и глубине содержания этой книги, после прочтения которой просто хочется заняться органическим синтезом, подчеркнем лишь два момента. Во-первых, рассматривая органическую химию сквозь призму ее вклада в мировую науку и культуру, авторы проводят отчетливую параллель между химией и математикой как универсальными науками, черпающими объекты и проблемы своих исследований внутри самих себя. Иными словами, к традиционному статусу математики как царицы и служанки химии, можно добавить и своеобразную ипостась ее сестры. Во-вторых, убеждая читателя в том, что органический синтез — точная наука, авторы апеллируют к точности и строгости как самой структурной химии, так и к совершенству логики химических идей.

Если так говорят экспериментаторы, то можно ли сомневаться, что час математической химии действительно пробил?

*Кандидат химических наук
Е. БАБАЕВ*

* См. «Химию и жизнь», 1989, № 2.