

ХРОНИКА

ХИМИЯ ГЕТЕРОЦИКЛОВ И ИНТЕРНЕТ

(по итогам Второй электронной конференции
по химии гетероциклов, ЕСНЕТ-98)

В июле 1998 г. в мировой сети Интернета была проведена вторая электронная конференция по химии гетероциклов. Инициаторами ее проведения выступили химическое общество Великобритании и Международное общество по химии гетероциклов. Материалы конференции были размещены на сервере Imperial College в Лондоне, где на протяжении нескольких лет (во многом благодаря энтузиазму проф. Rzepa) ведется интенсивная пропаганда использования достижений Интернета в химии.

Электронные конференции еще не вполне привычны для химиков, а потому кратко отметим особенности этого сравнительно нового направления международных коммуникаций между учеными. Для участия в такой конференции (отправить доклад, просмотреть материалы и поучаствовать в дискуссиях) необходимо, разумеется, иметь компьютер, подключенный через WWW и FTP серверы к сети Интернета. В худшем случае, для пассивного участия в дискуссиях (без возможности видеть сами доклады) достаточно иметь адрес электронной почты. Достоинствами электронных конференций являются широчайшие возможности использования компьютерных средств (высококачественной цветной графики, видео, анимации, звука) для адекватной презентации научных материалов, что с очевидностью, труднодостижимо на обычных конференциях. Электронный фотоальбом участников в какой-то мере заменяет визуальный контакт. Разумеется, чтобы подготовить полноценный электронный доклад необходимо обладать минимальными навыками создания htm-страниц (стандарта электронных документов для WWW), а для переноса обычных изображений (например, фотографий) в электронный формат полезно располагать цветным сканнером.

Помимо указанных стандартных особенностей обсуждаемая конференция характеризуется новыми — чисто химическими — деталями. Во-первых, структурные формулы, приведенные в докладах, можно было в буквальном смысле оживить на экране (пошевелить, поворачивать, добиться эффекта трехмерности) обычным нажатием на кнопку мыши. Во-вторых, участникам была предоставлена уникальная возможность структурного поиска химической информации, разбросанной по всем докладам, например по интересующему структурному фрагменту гетероцикла. Обе возможности достигаются единым и простым способом: участнику требуется в дополнение к стандартной программе Netscape проинсталлировать бесплатно распространяемую программу Chemscape. После этого можно автоматически увидеть и оживить любой химический структурный файл, созданный в каком-либо популярном формате. Таковы, например, mol-файлы (создаваемые программой ISISDraw), pdb-файлы (генерируемые при рентгеноструктурном анализе), разнообразные форматы ввода-вывода структур для программ молекулярной механики и квантовой химии. Структурный поиск достигался простым условием: от участников конференции требовалось прислать структурные формулы обсуждаемых гетероциклов в каком-либо известном

химическом формате. После этого структурный запрос — формула, нарисованная химиком на своем персональном компьютере — пересылался по сети на сервер конференции, где и производился поиск. В качестве эксперимента химикам предлагалось попробовать свои силы и в представлении спектральной информации в (пока еще) специфических форматах.

География участников конференции охватывала в основном Западную и Восточную Европу и Австралию плюс несколько докладов из США. Несколько неожиданно — по числу как докладов, так и авторов — доминировала Россия (Москва, Новосибирск, Красноярск, Петербург, Екатеринбург), далее следовали Австрия и Австралия. Тематика представленных 130 докладов была разбита на пленарные и стендовые. В разделе пленарных докладов (keynotes) известные химики (в частности, Padwa, Katritzky, Livinghouse, Froehlich, Kanemasa) обсуждали фундаментальные аспекты химии гетероциклов. В центре внимания была проблематика использования хиральных реагентов и катализаторов в реакциях Дильса—Альдера и реакциях восстановления, асимметрическая индукция, каскадные процессы циклизации-циклоприсоединения, вопросы направленного синтеза алкалоидов и их аналогов, не прямое электрофильное замещение в шестичленных гетероциклах.

Стендовые доклады участников были подразделены на несколько секций. Секция синтеза гетероциклов и методологии гетероциклического синтеза были наиболее репрезентативными, хотя, пожалуй, наиболее стандартными по тематике. Помимо обсуждения примеров гетероциклизаций (включая разнообразные циклоприсоединения), приводящих, в основном, к ароматическим циклам, рециклизаций и примеров нуклеофильного замещения была широко представлена проблематика синтеза хиральных гетероциклов на основе различных субстратов (нитронов, терпенов) или разными методами (например, при использовании дрожжей). Встречались и неординарные подходы (например, твердофазный синтез гетероциклов с использованием шаровой мельницы или все более частое применение микроволновых печей для осуществления разнообразных синтезов).

Секция направленного синтеза биологически активных веществ отличалась широким разнообразием объектов и подходов. Наряду с работами по оптимизации известных схем синтеза (например, упрощенный синтез псilocина), синтезу аналогов нуклеозидов, поиску аналогов лекарственных веществ предметом исследования явились механизмы образования порфириногена, супрамолекулярные структуры, содержащие порфирин. В интересном докладе профессора Jordis (Австрия) обсуждалась простая процедура синтеза хирального полимера и его использование для разделения рацематов. Пожалуй, лучшим докладом (как по форме, так и по содержанию), получившим специальный приз оргкомитета, являлся направленный дизайн спиралевидного (и, очевидно, хирального) основания Трегера, содержащего акридиновый фрагмент, и изучение закономерностей его связывания с ДНК.

Тематика докладов на секции, посвященной механизмам реакций, была весьма разнородной. Серьезное исследование механизмов превращений 1,2,3-триазолов выполнено группой В. А. Бакулева (Екатеринбург). Химия и спектроскопия интересного подкласса антиароматических бензодитиазинов была рассмотрена новосибирской группой исследователей (это единственная работа, вызвавшая резонанс при последовавшем обсуждении докладов участниками конференции). Другие доклады затрагивали проблемы нелинейно-оптических свойств гетероциклов, сольватохромии, фотодеградации гетероциклических пестицидов.

Секция «Computational heterocyclic chemistry» в основном включала вопросы использования квантово-химических методов для расчета электронной структуры конкретных молекул (скорпионин — антиароматическая

структура, напоминающая фигуру скорпиона, дигидропиримидины, индазол) и различных процессов (циклоприсоединение винилкарбоната к фурану, гидролиз гетероциклических мочеви́н), причем в качестве расчетного метода отчетливо доминировал метод *ab initio*. Исследовательская группа Московского университета представила на этой секции обширный доклад (кстати, с рекордным числом примеров анимационной графики), посвященный другому аспекту использования компьютеров в химии гетероциклов — теоретическому прогнозированию и экспериментальному поиску нетривиальных рециклизаций.

Материалы конференции расположены на сервере <http://www.ch.ic.ac.uk/ectoc/echet98/> и останутся доступными до 2000 г.; копия материалов будет выпущена на отдельном компакт-диске. Резюмируя, хочется подчеркнуть, что как по количеству, так и по качеству докладов химии России и Восточной Европы оказались на уровне мировых стандартов, предъявляемых к участникам электронных конференций.

Е. В. Бабаев

Московский государственный университет
им. М. В. Ломоносова, Москва 119899
e-mail: babaev@org.chem.msu.su
<http://org.chem.msu.su/~babaev>