

«Тихая революция в химии»

Стефан Дж. Липпард

Предлагаем читателям выдержки из статьи известного американского химика-каталистика Стефена Дж. Липпарда из Массачусетского технологического института, которая, без сомнения, должна привлечь внимание химиков, интересующихся наиболее значимыми проблемами нашей отрасли знания. (Перепечатка из «Каталитического бюллетеня», апрель 2001 г., перевод Н.С. Крыловой, научное редактирование В.Л. Кузнецова, Институт катализа СО РАН.)

Университеты ищут источники пополнения своих денежных фондов по всей стране. Наиболее успешным университетам удается убедить бывших студентов и других потенциальных спонсоров, что их деньги пойдут на благое дело — на новое оборудование, программы, оплату профессорам, преподавательские гранты и даже на спортивные тренажеры. Когда Массачусетский технологический институт (МТИ) начал кампанию по привлечению полутора миллиардов долларов, Президент МТИ Чарльз М. Вест обратился к руководителям факультетов Института с просьбой привести доводы в пользу своих дисциплин. Стефен Дж. Липпард, профессор химии по гранту Артура Амоса Нойеса и заведующий кафедрой химии МТИ, подготовил «список пожеланий», включающий перспективные задачи фундаментальной химии. Липпард отмечает, что этот «список пожеланий» не носит исчерпывающего характера, в него можно было бы включить и другие достойные задачи. Однако, по его словам, достижение уже одной или нескольких целей из «списка пожеланий» позволит химикам внести заметный вклад в улучшение условий жизни человека.

Химия — это наука, которая исследует природу материи и воздействует на нее на молекулярном уровне. Химики изучают окружающий мир, но, подобно художникам, они также создают новые молекулы с необычными свойствами. Поскольку с помощью самых мощных микроскопов пока нельзя увидеть молекулы в движении, химики должны применять непрямые методы для выявления перемещений, происходящих в ходе химических реакций. При взаимодействии молекул, которое приводит к образованию агрегатов, в том числе и твердых тел, выделяются вещества, передающие свойства таких агрегатов функционально полезным материалам. Поскольку человеческое воображение не имеет границ, химия как наука никогда не сможет получить окончательного завершения.

В начале XXI века в химии происходит «тихая революция». Тихая — в том смысле, что в научной среде она не полностью осознается, революционность же состоит в том, что старые парадигмы уступают место новым принципам. В качестве моле-

кулярных кинематографистов и креативных художников химии сегодня предвидят новый набор «великих задач», осуществление которых радикально изменит вклад химии в общее развитие науки. Цель данного сообщения — представить в виде «списка пожеланий» некоторые из этих воодушевляющих задач.

- Мы хотим создать химические объекты, состоящие из многих идентичных компонентов, собранных таким образом, чтобы служить рецепторами для данных связующих единиц или лигандов.
- Мы хотим создать самовоспроизводящиеся молекулы и самокорректирующиеся химические реакции. К последней категории относятся каталитические реакции, где устраняются и исправляются ошибки, внесенные в продукт.
- Мы хотим понять природу известных или желаемых новых химических превращений, достаточно хороших для того, чтобы мы могли создавать катализатор для реакции рациональным образом.
- Мы хотим изучить химию на интерфейсах и управлять стереохимией гетерогенных катализаторов, используемых в виде массивных образцов.
- Мы хотим освоить надмолекулярные конструкции, препятствующие слипанию химически неустойчивых образований, например, возникающих на каталитически активных центрах на стадиях выделения продукта.
- Мы хотим использовать параллельный автоматизированный синтез или комбинаторные реакции проб и ошибок для совершенствования химического превращения по примеру эволюционного отбора.
- Мы хотим контролировать направление и ориентацию молекулы при ее подходе к другой молекуле, с которой она реагирует.

- Мы хотим понять внутренние движения молекул так, чтобы при соответствующей координации можно было использовать импульс электромагнитной энергии для точного разрыва отдельной связи в молекуле.
- Мы хотим понять структуру и динамику межмолекулярных взаимодействий, чтобы иметь возможность предсказывать и контролировать свойства молекулярных образований.
- Мы хотим разработать реагенты и реакционные пути для активации химических связей, ранее считавшихся инертными.
- Мы хотим найти средства для превращения широко распространенных в природе веществ в химически полезные низкомолекулярные строительные блоки, и наоборот.
- Мы хотим разработать искусство проведения химических реакций без растворителей.
- Мы хотим создать реагенты, которые химически изменяют часть молекулы, не требуя при этом построения, а затем снятия защиты других реакционных центров этой молекулы, которые не должны измениться.
- Мы хотим создать химические продукты и процессы, не требующие применения или производства опасных веществ и использующие возобновляемые ресурсы.
- Мы хотим понять и использовать свойства соединений промежуточного размера (от 1 до 100 нм) между молекулярным и твердым состоянием.
- Мы хотим изучить химию отдельных изолированных молекул и сравнить их свойства со свойствами ансамбля таких молекул, а также с их свойствами в различных растворителях.
- Мы хотим создать молекулы, самоорганизующиеся в надмолекулярные структуры, включая твердые тела, свойства которых отличаются от свойств молекулярного образования.
- Мы хотим научиться выращивать кристаллические твердые тела, состоящие из молекул любого состава, и внедрять в эти кристаллы "гостей" (другие молекулы или атомы) для улучшения их физических и химических свойств.
- Мы хотим найти вещества необычного состава, содержащие химические элементы и основные частицы в не встречавшихся ранее сочетаниях.
- Мы хотим освоить химию изолированных видов, чтобы, внося химическое вещество или воздействуя магнитным либо электрическим полем, можно было произвольно высвобождать гостя, содержащегося в соответствующем хозяине в газовом, растворенном или твердом состоянии.
- Мы хотим понять и применить на практике химию, энергетику и спектроскопию полиатомных радикалов.
- Мы хотим разработать новые теоретические подходы, чтобы понять химическое связывание и реакции, а также проверить эти теории в реальных химических системах.

Мы не пытались наметить потенциальные приложения вышеизложенного к таким областям как химическая технология, наука о материи, нейрология, физика, биология, экология, информационная технология или биотехнология, которые традиционно подпитываются достижениями фундаментальной химии. Мы уверены, что наши коллеги, работающие в этих областях, смогут сами установить необходимые связи.