**Приложение 3**

**Основные направления современной химии и отечественные ученые-химики 21 века**

Химия оказалась в центре важных и сложных физических процессов. Без химии не может существовать и развиваться ни одна из областей современных естественных наук Химические реакции происходят не только в окружающем нас мире, но и в тканях, клетках, сосудах человеческого тела. Ученые ХХ века обнаружили, что именно химия помогает человеку различать запахи и цвета, позволяет быстро откликаться на едва уловимые перемены, происходящие в природе. Бурные химические процессы протекают внутри далеких звезд и в термоядерных реакторах, созданных учеными. Непрерывно идет химическое взаимодействие атомов и молекул в растениях и в недрах Земли, на поверхностях водных просторов и в толще горных хребтов. Поэтому для всестороннего изучения различных сложных явлений и процессов можно определить следующие направления химии в современном мире [9]:

- компьютерная химия, компьютерное моделирование молекул (молекулярный дизайн) и химических реакций;

- спиновая химия;

- синтез и исследование наноструктур, развитие и применение нанотехнологий;

- синтез полимерных полупроводников;

- химия чрезвычайно быстротекущих реакций (фемтохимия);

- синтез фуллеренов и нанотрубок;

- развитие химии одиночной молекулы;

- развитие электроники на молекулярном уровне;

- создание «молекулярных машин»;

- электровзрывная активация пульпы и растворов;

- создание и развитие «химической медицины», решение проблемы «химического бессмертия».

**Компьютерное моделирование молекул (молекулярный дизайн) и химических реакций**

Компьютерное моделирование химических реакций - это сформировавшаяся на стыке теоретической физики, прикладной вычислительной математики и химии область знаний, в которой создана количественная теория строения и основных свойств многоатомных молекул и реакций между ними. Пройдя довольно длительную историю развития, компьютерная химия дала возможность понять, как устроен микромир на молекулярном уровне. Она позволила с достаточно высокой степенью достоверности производить численный прогноз. На основании такого прогноза можно судить, во-первых, о самой возможности существования или иной молекулярной системы как устойчивой совокупности атомов. Во-вторых, об индивидуальных характеристиках таких систем (геометрическое строение, распределение заряда внутри молекулы и др.). В-третьих, о преимущественных направлениях тех или иных химических реакций. Создание мощного программного обеспечения наряду с самим развитием ЭВМ сделало такой прогноз практически доступным широкому кругу исследователей разных направлений.

Основные направления компьютерной химии:

- создание принципиально новых компьютерных программ поиска и отбор новых эффективных веществ;

- количественный анализ связи структура-активность для широкого спектра ФАВ.

Стало реальным говорить о так называемом инженерном уровне расчетов, когда достоверность прогноза достигает 80-90 процентов. При этом прогноз делается за столь короткий промежуток времени, что испытать массу вариантов можно быстрее, чем провести натурный эксперимент. Соответствующие методы получили столь большое распространение, что составили основу так называемого молекулярного дизайна, или моделирования молекул. Современный исследователь-химик уже не может ограничиться лишь традиционными химическими знаниями, навыками и экспериментами. Параллельно и даже с некоторым опережением должно проводиться моделирование химических систем. Сейчас уже можно смело говорить о двух равноправных сторонах одного и того же исследовательского процесса.

Компьютер реально становится таким же инструментом исследования, как и привычный химический или физико-химический эксперимент. И расчет, и эксперимент, следовательно, может проводить один и тот же человек.

Владение методами компьютерной химии становится, таким образом, необходимым требованием к любому современному специалисту-химику. Более того, современные компьютерные программы обладают высокой сервисностью, поэтому работать с ними может, в принципе, любой школьник-старшеклассник. Основным экспериментальным методом изучения электронных уровней молекулы служит спектроскопия. Например, с помощью ультрафиолетовой, оптической и фотоэлектронной спектроскопии определяют положение уровней энергии слабосвязанных электронов. Энергии наиболее глубоких электронов измеряют, применяя рентгеновскую фотоэлектронную спектроскопию. Исследование энергетического спектра молекул является сравнительно простой и точной процедурой.

В большинстве случаев изучение электронного строения молекул возможно только с использованием мощных современных компьютеров. Возможности современных вычислительных квантово-химических программ очень велики. Рекламный проспект одной из наиболее мощных программ Gaussian'98 приводит пример расчета фрагмента ДНК из 378 атомов, входе которого было установлено ее пространственное строение. Сегодня развитые программные пакеты позволяют даже неискушенному пользователю результаты с использованием современных прецизионных методов расчетов.

Конечным результатом любых расчетов должны быть ответы на вопросы, возникающие в ходе химических исследований. Методы компьютерной химии в ряде случаев позволяют рассчитать многие свойства молекул, что делает их особенно привлекательными в тех случаях, когда экспериментальное исследование затруднено (как в случае короткоживущих состояний) или просто невозможно. Если раньше искусством было само получение результата, то теперь этот процесс стал рутинным, а творческий момент сместился на создание моделей и осмысление их. Поэтому квантово-химические исследования подчас называют тоже "экспериментом", только проведенным на ЭВМ. Круг конкретных химических задач, решаемых методами квантовой химии, очень широк.

Полученные результаты далеко не всегда легко интерпретировать в терминах классической химии. Установление соответствия между экспериментально наблюдаемыми явлениями и данными квантово-химического расчета часто обогащает новыми идеями не только квантовую химию, но и саму химическую науку, создавая новые модели для описания химической связи, строения молекул и их взаимодействия.

**Спиновая химия**

Спиновая химия уникальна: она вводит в химию магнитные взаимодействия. Будучи пренебрежимо малыми по энергии, магнитные взаимодействия контролируют химическую реакционную способность и пишут новый, магнитный «сценарий» реакции.

Дизайн молекулярных магнетиков - одно из новых научных направлений современной химии, связанное с синтезом систем высокой размерности. Сегодня достижения современной химии таковы, что химики могут ставить перед собой сверхзадачу - синтезировать в мягких условиях готовое изделие, скажем, монокристалл, сразу, как цельный макрообъект, из исходных молекулярных компонентов. При этом становятся равноправно значимыми как внутримолекулярные, так и межмолекулярные взаимодействия и связи. Причем, и это особенно важно, они должны быть не какими-то случайными, а выполняющими определенную функциональную нагрузку. В результате из отдельных молекул должен получиться макрообъект с неким кооперативным свойством, которое присуще природе кристалла, т.е. природе макроансамбля, но никак не отдельно взятой молекуле.

Поскольку в итоге получается многоспиновая молекула (каждая молекула содержит неспаренный электрон (спиновую метку)) -- это можно отнести к спиновой химии. Особенно интересующие нас в данном случае макросвойства, такие как, скажем, магнетизм - свойства физического порядка. В этот момент соединяются в целое интересы химии и физики. Особенность таких соединений в том, что - это материалы будущего, новые компоненты элементной базы будущего, причем совсем не отдаленного. Молекулярные магнетики обладают разнообразным сочетанием физических характеристик, которое для классических магнитных материалов трудно было даже представить.

Сегодня мы научились получать кристаллы молекулярных магнетиков, которые по сравнению с классическими магнитными материалами необычайно легкие, поскольку их плотность в 5-7 раз меньше. При этом они могут быть оптически прозрачными в видимой и инфракрасной областях спектра. И еще одна из особенностей -- они, как правило, диэлектрики, т.е. не требуют каких-то специальных изоляционных покрытий при контакте с электропроводящими устройствами. Они совершенно не токсичны и устойчивы к коррозии. Молекулярные магнетики могут найти приложения в следующих областях: магнитная защита от низкочастотных полей, трансформаторы и генераторы, имеющие малый вес, научное приборостроение, криогенная техника, информационные технологии, медицина, энергетика.

**Нанохимия**

Для понятия нанотехнология, пожалуй, не существует исчерпывающего определения, но по аналогии с существующими ныне микротехнологиями следует, что нанотехнологии - это технологии, оперирующие величинами порядка нанометра. Поэтому переход от «микро» к «нано» - это качественный переход от манипуляции веществом к манипуляции отдельными атомами. Когда речь идет о развитии нанотехнологий, имеются в виду три направления: изготовление электронных схем (в том числе и объемных) с активными элементами, размерами сравнимыми с размерами молекул и атомов; разработка и изготовление наномашин; манипуляция отдельными атомами и молекулами и сборка из них макрообъектов. Разработки по этим направлениям ведутся уже давно. В 1981 году был создан туннельный микроскоп, позволяющий переносить отдельные атомы. Туннельный эффект - квантовое явление проникновения микрочастицы из одной классически доступной области движения в другую, отделённую от первой потенциальным барьером. Основой изобретенного микроскопа является очень острая игла, скользящая над исследуемой поверхностью с зазором менее одного нанометра. При этом электроны с острия иглы туннелируют через этот зазор в подложку.

Однако кроме исследования поверхности, создание нового типа микроскопов открыло принципиально новый путь формирования элементов нанометровых размеров. Были получены уникальные результаты по перемещению атомов, их удалению и осаждению в заданную точку, а также локальной стимуляции химических процессов. С тех пор технология была значительно усовершенствована. Сегодня эти достижения используются в повседневной жизни: производство любых лазерных дисков, а тем более производство DVD невозможно без использования нанотехнических методов контроля.

Нанохимия - это синтез нанодисперсных веществ и материалов, регулирование химических превращений тел нанометрового размера, предотвращение химической деградации наноструктур, способы лечения болезней с использованием нанокристаллов.

Направления исследований в нанохимии:

- разработка методов сборки крупных молекул из атомов с помощью наноманипуляторов;

- изучение внутримолекулярных перегруппировок атомов при механических, электрических и магнитных воздействиях. Синтез наноструктур в потоках сверхкритической жидкости; разработка способов направленной сборки с образованием фрактальных, каркасных, трубчатых и столбчатых наноструктур.

- разработка теории физико-химической эволюции ультрадисперсных веществ и наноструктур; создание способов предотвращения химической деградации наноструктур.

- получение новых нанокатализаторов для химической и нефтехимической промышленности; изучение механизма каталитических реакций на нанокристаллах.

- изучение механизмов нанокристаллизации в пористых средах в акустических полях; синтез наноструктур в биологических тканях; разработка способов лечения болезней путем формирования наноструктур в тканях с патологией.

- исследование явления самоорганизации в коллективах нанокристаллов; поиск новых способов пролонгирования стабилизации наноструктур химическими модификаторами.

Ожидаемым результатом будет функциональный ряд машин, обеспечивающий:

- методологию изучения внутримолекулярных перегруппировок при локальных воздействиях на молекулы.

- новые катализаторы для химической промышленности и лабораторной практики;

- оксидно-редкоземельные и ванадиевые нанокатализаторы с широким спектром действия.

- методологию предотвращения химической деградации технических наноструктур;

- методики прогноза химической деградации.

- нанолекарства для терапии и хирургии, препараты на основе гидроксиапатита для стоматологии;

- способ лечения онкологических заболеваний путем проведения внутриопухолевой нанокристаллизации и наложения акустического поля.

- методы создания наноструктур путем направленного агрегирования нанокристаллов;

- методики регулирования пространственной организации наноструктур.

- новые химические сенсоры с ультрадисперсной активной фазой; методы увеличения чувствительности сенсоров химическим модифицированием.

**Фемтохимия**

Фемтохимия исследует время движения реагирующих систем на потенциальной поверхности и вводит в химию экспериментальную химическую динамику как высшую, элитарную часть химической кинетики.

Освоение лазеров раздвинуло горизонты химии и обеспечило крупный прорыв в фемтохимия; это новая химия, детектирующая химические события в масштабе ультракоротких времён 10-15-10-14 с (1-10 фемтосекунд). Эти времена гораздо меньше периода колебаний атомов в молекулах (10-13-10-11 с). Благодаря такому соотношению времён фемтохимия «видит» саму химическую реакцию - как перемещаются во времени и в пространстве атомы, когда молекулы-реагенты преобразуются в молекулы продуктов.

В частности, фемтохимия занимается изучением переходного состояния химической реакции. Переходное состояние - это область межатомных расстояний, лежащая на пути от реагентов к продуктам, в которой система проходит через такие структуры, которые уже нельзя назвать реагентами, но ещё нельзя считать продуктами. Временная эволюция конфигурации атомов называется динамикой переходного состояния. Так как время пребывания молекулярной системы в переходном состоянии составляет всего порядка 100 фс, то до появления соответствующих инструментов исследователям приходилось восстанавливать его динамку, изучая кинетики реагентов и продуктов. Этих данных оказалось недостаточно для однозначного восстановления последовательности событий. Лишь с открытием в недавнем времени лазеров, изучающих ультракороткие импульсы длительностью 100 фс, появились новые экспериментальные возможности:

при длительности импульса ф = 10-14 с и скорости атома v = 105 см/с детектируются изменения расстояний в молекулярной системе на 0.1 Е, что позволяет с хорошей точностью проследить временную эволюцию конфигурации ядер;

Вследствие когерентности импульса возможно когерентное возбуждение нескольких колебательных или вращательных состояний молекулы с определёнными относительными фазами движения атомов. Такой тип возбуждённых состояний называется когерентным ядерным волновым пакетом. При энергии 1 мкДж импульса длительностью ф = 10-14 с, пиковая мощность равна P = 100 МВт, поэтому можно легко осуществлять многофотонные процессы поглощения, получая высоковозбужденные молекулярные системы. Под действием таких импульсов на вещество генерируются импульсы света в широком спектральном диапазоне (суперконтинуум), рентгеновского излучения и электронов.

Этот крупный прорыв в современной химии открыл прямые пути исследования механизмов химических реакций, а значит, пути управления реакциями. Успехи, достигнутые при использовании фемтосекундных импульсов, привели к открытию другой науки - фемтобиологии. Особенности фемтосекундных импульсов позволяют: обеспечивать высокое временное разрешение, образовывать когерентные колебательно-вращательные волновые пакеты, легко осуществлять многофотонные процессы поглощения, воздействовать на поверхность потенциальной энергии (ППЭ) и т.д.

Основные направления этих новых областей исследований - это исследования детальных микроскопических химических и биологических процессов и управление ими на фемтосекундной шкале времени.

**Синтез фуллеренов и нанотрубок**

Фуллерены и нанотрубки - это обширные классы интереснейших наноструктур. Например, среди фуллеренов, известно множество частиц и изомеров от малых (С20, С28) до гигантских (С240, С1840) с совершенно различными свойствами. Получены многооболочечные фуллерены (углеродные «луковицы»), состоящие из нескольких вложенных друг в друга структур.

Синтезированы фуллереновые полимеры, пленки, кристаллы (фуллериды), дозированные кристаллы (фуллериды) как с собственными структурами, так и повторяющие строение обычных кристаллов. Например, фуллерен С28 имеет ту же валентность, что и атом углерода, и образует устойчивый кристалл со структурой алмаза - гипералмаз. В последние годы обнаружено много молекул неорганических веществ (оксидов, дихалькогенидов металлов и прочих), по своей структуре подобных фуллеренам.

Из нанотрубок получают очень интересные материалы, например уникальной прочности нанобумагу: это плотные пленки из переплетенных, подобно растительным волокнам, жгутов нанотрубок. Недавно китайские специалисты научились прясть нанотрубки и получать таким образом углеродные нитки. Если вспомнить, что прочность нанотрубок в 50-100 раз больше, чем у стали, то становится понятно, что подобные изобретения человечеству весьма пригодятся. Найдены вполне реальные области применения нанотрубок -- например, в плоских дисплеях (фирма «Motorola»), которые превосходят плазменные и жидкокристаллические аналоги, и в нановесах, позволяющих взвесить объекты массой около 20 фемто-грамм (1 фг =10-15 г) - в частности, вирусы.

**Химия одиночной молекулы**

Сегодня ученые могут увидеть и распознать одну молекулу и даже манипулировать ей. Новое знание позволяет, например, увидеть поверхностные комплексы, катализирующие многие процессы. А главное, что можно уже не только увидеть, но и манипулировать молекулами, и моделировать из них разные наноструктуры.

Основное в химии одиночных молекул - аналитические методы. Сканирующий электронный микроскоп (СТМ) был создан в 1982 году, и тогда же во многих научных центрах начали активно развиваться методы, с помощью которых можно наблюдать за отдельными молекулами. Хотя теоретически все было подсчитано и предсказано, понадобилось почти 20 лет, чтобы получить первый колебательный спектр одной адсорбированной частицы.

2019 год провозглашен Генеральной ассамблеей ООН Международным годом периодической таблицы химических элементов. Это масштабное событие посвящено 150-летию открытия периодического закона химических элементов великим русским ученым Менделеевым. Проведение Международного года периодической таблицы химических элементов имеет особое значение для России, так как будет способствовать международному признанию заслуг русского ученого, а также укреплению престижа и популяризации отечественной науки.

В XXI веке в периодическую таблицу добавились четыре элемента. 3 из них были синтезированы в Институте ядерных исследований под руководством **Юрия Оганесяна**, одного из лидирующих специалистов в области экспериментальной физики. Оганесян – исследователь с мировым именем, продвинувший ядерную физику далеко вперёд. Он стал вторым учёным в мире, в честь которого при жизни назвали элемент таблицы Менделеева – Оганесон [10].

### Артем Оганов - российский химик-кристаллограф. В 1997 году с отличием закончил геологический факультет МГУ и уехал практиковаться за границу. Оганов долго работал в Британии, Швейцарии и США. Получив множество наград, учёный вернулся в Россию и продолжает работать. Оганов и его команда разработали вычислительный алгоритм, который может предсказать кристаллическую решётку любого химического соединения. Тем самым можно заранее узнать свойства материала, не получая его. Это значительно упрощает исследования, так как вместо слепых экспериментов учёные сразу получают нужные вещества. Программа USPEX помогла открыть новые лекарства, материалы на основе графена и даже вещества, способные существовать только при огромном давлении. Журнал Forbes включил Оганова в список 10 самых влиятельных учёных российского происхождения.

Международный союз теоретической и прикладной химии (IUPAC) и Международная сеть молодых химиков (IYCN) составили список 118 выдающихся молодых ученых. В рейтинг, оформленный в виде периодической таблицы Менделеева, попали пять российских ученых, сообщила пресс-служба Объединенного института ядерных исследований (ОИЯИ) [11].

"В рамках празднования Международного года Периодической таблицы химических элементов IUPAC и IYCN удостоили чести группу из 118 выдающихся молодых ученых войти в Периодическую таблицу молодых химиков. Представленная таблица демонстрирует многообразие карьерных путей молодых ученых, ведущих нас в следующее столетие, их творческие способности и преданность науке", - говорится в сообщении.

Так, на позиции 44-го химического элемента - профессор Российской академии наук и один из самых молодых ректоров России - глава РХТУ им. Д. И. Менделеева **Александр Мажуга.** Среди его научных интересов, в частности, биоорганическая химия, медицинская химия, нанохимия, развитие новых подходов к синтезу и исследованию биологически активных веществ.

На 90-й позиции - **Андрей Воротынцев** из Нижегородского технического университета им. Алексеева, который разрабатывает высокоэффективные каталитические системы. **Анна Романчук** из МГУ им. Ломоносова занимает место 101-го химического элемента. Она специализируется на радиохимии и изучает, в том числе распространение радионуклидов в окружающей среде.

Молодой ученый из Петербургского института ядерной физики им. Константинова национального исследовательского центра "Курчатовский институт" **Леонид Скрипников** оказался на 114-й позиции. На базе института в настоящее время идет строительство реактора ПИК - одного из мегасайенс-проектов, реализуемых в рамках нацпроекта "Наука". Следом за ним - **Галина Княжева** из ОИЯИ, которая ведет исследования в лаборатории ядерных реакций.