

## Совет Д 002.59.01 по аналитической химии как генератор идей и защиты междисциплинарных исследований

Диссертационный докторский Совет Д 002.59.01, базирующийся в ГЕОХИ, уникален. Это единственный совет, которому дано право присуждать ученые степени по физико-математическим и техническим наукам авторам работ, посвященных развитию аналитической химии. Конечно, эта возможность обусловлена самой логикой и историей развития такой сложной области знания, как аналитическая химия. С одной стороны, аналитическая химия это фундаментальная наука, развитие которой требует привлечения всего объема общих и частных химических знаний. С другой стороны, это производственная деятельность, требующая быстрых и точных результатов ради поддержания самых разнообразных отраслей индустрии. И эта, вторая сторона практически никогда не обходилась без физических приборов и методов.

Следует заметить, что сейчас наступил переломный момент в истории взаимодействия аналитической химии с физикой. До сих пор аналитическая химия самостоятельно заимствовала физические методы и приборы, практически в самый момент их рождения. Более того, именно химия вместе с инженерами самостоятельно обеспечивала этим приборам драматическое развитие. Например, масс-спектрограф Астона родился ради различения масс изотопов, работал в диапазоне 1- 98 атомных единиц массы, умещался на лабораторном столе. Химики довели прибор до умения разбираться в осколках органических молекул с массами до  $10^6$  АЕМ, да еще с очень высоким разрешением. Такой прибор еще недавно занимал половину лаборатории. Но возникла производственная необходимость, и прибор сократился до размера большой радиолампы.

Можно привести пример из области взаимоотношений между теоретической физикой и химией. В физике возникло почти полное понимание, как устроен атом и молекула. Но строгие аналитические методы уперлись в модель молекулярного иона водорода. И стоп. И стоят там до сих пор. Химии это неинтересно. Она обращается к лучшим физикам-теоретикам, которые вырабатывают приближенные методы численных расчетов, и, тем самым, создает квантовую химию. А инженеры-программисты создают такие мощные инструменты, как ChemOffice и Гауссиан. Это сложное хозяйство, строго говоря, не наука, а искусство приближенно предсказывать характеристики сложных молекул. Да какие характеристики! Как раз те, которые важны для самой химии. Следовательно, и для аналитической химии, где никакие знания не бывают лишними. А теоретическая физика только вчера нашла обоснование, на основе первых принципов, некоторых расчетных приемов, найденных ранее в квантовой химии (Б.К. Новосадов. Методы математической физики молекулярных систем. М. URSS, 2009.).

Перелом в этой истории обусловлен двумя внутренними пружинами.

1. По объективным и физическим по природе причинам аналитическая химия стала с большим трудом снижать пределы обнаружения и определения элементов в природных и техногенных объектах. Возможности инженерных решений здесь практически исчерпаны. А на повестке дня стоит производственная задача определения органических соединений, что значительно сложнее элементного анализа вещества.

2. Новые приборные методы анализа вещества появляются один за другим. Но они основаны на столь изощренных физических идеях и столь сложны технически, что пока работают только в руках авторов-физиков. У химиков вдруг не стало нужной подготовки, чтобы тут же усвоить и развить в нужную сторону эти методы. То же самое наблюдается и в теоретической физике молекул, где появляются новые расчетные схемы, полностью проясняющие молекулярные процессы. Но их нельзя свернуть в программы типа Гпуссиана, где достаточно нажать одну кнопку и через сутки работы компьютера получить ответ про сложную молекулу. Требуется участие специалиста в расчетах, а специалистом готов быть только сам физик высокой квалификации.

Вот такие серьезные пружины сжались, затормозили движение, и пока никак не могут разжаться, чтобы толкнуть дело вперед.

А двигаться дальше надо. В каких направлениях – ясно. Лет 10 назад здесь, в ГЕОХИ, академик Ю.А. Золотов подробно рассказал об актуальных задачах аналитической химии в 21-м веке. Вопрос – как двигаться с заметной скоростью, на чем ехать? Каким тараном проломить стенку, выросшую на пути?

Надо вспомнить, что в новейшей истории науки все серьезные прорывы обеспечивались удачными междисциплинарными исследованиями. Это нашло отражение в названиях передовых областей знания. Биофизика, биохимия, геохимия, космохимия. Такие названия всем известны. Однако, обратим внимание на стихийное, незапланированное возникновение этих важнейших областей знания.

Грегор Мендель экспериментировал с цветным горошком в тиши монастырского аптекарского огорода. Биохимики выделили из клеток ДНК. Л. Полинг придумывал структуру тройной спирали ДНК и ожидал присуждения ему за это третьей Нобелевской премии. Но премия досталась физикам-рентгеноструктурщикам, нащупавшим структуру двойной спирали. А биофизики установили механизм считывания генетического кода с этой главной молекулы всего живого. Исторический хаос какой-то.

Я считаю, что пришло время сознательно планировать и организовывать междисциплинарные исследования ради ускоренного достижения целей, выдвигаемых самой жизнью. Также я считаю, что мне повезло быть членом Совета, который способен стать генератором таких идей и коллективным организатором таких исследований в области аналитической химии. И я вижу следующую картину.

Половина членов Совета Д 002.59.01 – химики. Половина – физики или специалисты, полностью владеющие физическим способом мышления, независимо от дипломов и ученых степеней (В.П. Колотов, Р.Х. Хамизов, А.М. Долгоносков). Некоторые из членов Совета уже обладают опытом ведения междисциплинарных исследований.

Л.А. Грибов совместно с мистером Арсеназо, С.Б. Савиным, вел работы по прояснению физического смысла номенклатуры химических связей. Они сумели выяснить, что даже между такими различными типами связей, как ковалентная и ионная, нет никакой физической пропасти. Различия лишь количественные. На этой основе аспирант С. Сударушкин впоследствии выполнил структурно-химическое исследование для председателя Совета академика Б.Ф. Мясоедова, для возглавляемой им радиохимии.

Когда перед институтом стояла задача резко снизить предел обнаружения некоторых элементов, Н.В. Чекалин применил изощренные физические идеи многократного возбуждения конкретных атомов несколькими лазерами, построил уникальную аппаратуру и получил нужный результат.

А.М. Долгоносوف продвинулся в планировании хроматографического анализа, создав теорию элементарного акта сорбции на основе собственной разработки соответствующей квантовой модели.

Р.Х. Хамизов получает уникальные химические результаты, опираясь на профессиональные методы термодинамики.

Б.К. Новосадов не только создал физическую теорию молекулярных состояний, но и принимал непосредственное участие в работах по электронографии сложных органических молекул.

Л.А. Грибов и В.И. Баранов создают последовательную квантовую теорию химических превращений. Что может быть важнее для аналитической химии, чем понимание элементарных событий в химических реакциях? А ведь настоящее глубокое понимание любых природных процессов может быть только физическим!

Мне, физику, повезло участвовать в междисциплинарном исследовании, которое возглавляет геохимик академик Э.М. Галимов. А само исследование посвящено выявлению конкретных химических и физических механизмов самопроизвольного возникновения органического вещества, способного передавать генетическую информацию в будущее.

Итак, Совет вполне компетентен и способен сам планировать, инициировать такие междисциплинарные, физико-химические исследования, которые дали бы мощный импульс развитию новых методов современной аналитической химии. А не ждать, пока эти исследования случатся сами собой, и останется только поставить их авторам диагноз – диссертабельно, недиссертабельно.

Совершенно ясно, как это можно делать. Именно в ГЕОХИ, в его отделе аналитической химии, где для этого созданы также уникальные возможности.

Пусть Совет порекомендует двум руководителям (химику и физику) двух аспирантов провести совместное исследование с целью достижения либо возможности определять новые органические вещества в заданных условиях, либо нового понимания механизмов реакций, участвующих в аналитическом процессе. Будут ли эти два руководителя сильно сопротивляться такой рекомендации, если от этого зависит в будущем благосклонность Совета к их подзащитным? Думаю, не будут. Но будут вынуждены консультироваться друг с другом при постановке конкретных задач этим аспирантам. И затем в ходе выполнения работ. Тут неважно, насколько хорошо руководители понимают друг друга (не секрет, что с этим всегда связаны затруднения). Важно, что им будет видно, продвигаются ли обе части работы в нужном направлении. Что же касается дележа совместных публикаций при защите, то здесь всё уже определено протоколом. Химик ответит на традиционный вопрос – а каков Ваш личный вклад в эти работы? Мой вклад чисто химический. Физик ответит на традиционный вопрос – а каков Ваш личный вклад в эти работы? Мой вклад чисто физический. И никаких формальных проблем не возникнет. Но в результате будет сокращено время выполнения такого запланированного исследования по

сравнению со временем спонтанного появления подобных результатов в независимых коллективах.

Пока такого рода деятельности в Совете не наблюдается. Возможно, это связано с традиционной организацией работы Совета. Во время защиты обсуждать такие вопросы по протоколу не полагается. В процессе предзащит на семинар собираются не все члены Совета. И задача предзащиты другая – диссертационно или нет. Поэтому я воспользовался новыми возможностями сайта Интранет ГЕОХИ, чтобы поставить этот вопрос для возможного его обсуждения в блоге.

Обращаю внимание коллег на другую сторону этой проблемы. Результаты междисциплинарных исследований, особенно удачные, на первых порах вызывают раздражение в научной среде. Чего ты вылез с результатами, которые выходят из ряда вон? Когда мы тут глубоко разбираемся с массой привычных однородных результатов, стоящих в одном ряду!

Я такую реакцию испытал на собственной шкуре, когда по приглашению коллег из института С. Д. Варфоломеева докладывал у них на семинаре о том, как можно воспользоваться техникой клеточных автоматов для моделирования предложенного Э.М. Галимовым сценария самопроизвольного возникновения генетического кода в мире полипептидов и полинуклеотидов. Я хотел говорить про технику, полезную и для использования в этом институте. А меня завалили раздраженными вопросами типа «А почему вы с Галимовым не обращаете внимание на работы, посвященные миру РНК, миру липидов, где добрые люди давно стараются найти механизмы возникновения генетического кода?» Да потому, что Галимов увидел в своем воображении именно такой мир, который эффективно создал генетический код! С тех пор я опасаясь рассказывать кому-либо о моделировании в технике клеточных автоматов.

Мы должны считаться с тем, что в экспертном совете ВАК междисциплинарные аспирантские исследования, выполненные синхронно и защищенные на одном и том же материале, могут вызывать подобное раздражение. Что чревато.

Однако мы опять-таки находимся в уникальном положении. Представители нашего Совета входят и в экспертные советы ВАК. Следовательно, там они имеют возможность вести направленную пропаганду идей необходимости и эффективности для науки и практики именно запланированных междисциплинарных исследований. И это может принести Совету дополнительный авторитет.

В заключение я хочу обратить внимание коллег на имеющую пока место неразвитость культуры междисциплинарных исследований. Такая культура просто отсутствует в связи и асинхронностью таких исследований в прошлом. Эта культура должна складываться заново именно в заранее планируемых и синхронно выполняемых междисциплинарных исследованиях.

Я много размышлял на эту тему. Результаты этих размышлений я публикую на сайте «Культура междисциплинарных исследований». Этот сайт, с благосклонного дозволения В.П. Колотова, присоединен к [intranet.geokhi.ru](http://intranet.geokhi.ru). Он открыт для обсуждения заинтересованным лицам. Прошу присылать свои мнения по адресу:

d\_vasily@mail.ru

Ваши мнения будут опубликованы здесь. Либо воспользуйтесь блогом Института.

Член Совета Д 002.59.01

В.А. Дементьев