

Рентгеноструктурному анализу — 100 лет

В клубе «МИНИМАКС» Дома учёных СО РАН 16 мая прошёл семинар, посвящённый открытию немецким физиком Максом фон Лауэ закона дифракции рентгеновских лучей на кристаллах. Доклад 33-летнего Макса фон Лауэ на заседании немецкого физического общества 8 июня 1912 года — день рождения мощнейшего метода изучения строения вещества на атомном уровне.



О значении этого открытия для науки и об истории возникновения на основе рентгеноструктурного анализа (РСА) кристаллов и шла речь на семинаре. Об истории метода РСА рассказал д.ф.-м.н. С.В. Борисов (ИНХ СО РАН). Это событие в науке сравнимо с изобретением микроскопа или телескопа. Химики, физики, минералоги, а ныне всё активнее и биологи получают возможность «видеть» реальное расположение атомов в своих объектах и подтверждать (или не подтверждать) гипотезы и теоретические заключения.

Современный рентгеноструктурный анализ прошел длинный путь развития. К решению его проблем на разных этапах подключались физики, химики, математики, программисты — получено около 30 Нобелевских премий. Сейчас это образцово организованный раздел науки, объединяемый Международным союзом кристаллографов. Он издает специализированные журналы, проводит регулярные Международные конференции, тестирует приборное и программное обеспечение, курирует базы данных по структурам и т.д.

В Советском Союзе рентгеноструктурный анализ заинтересовались прежде всего минералоги и металловеды. По поручению академика А.Е. Ферсмана молодой талантливый выпускник Петроградского технологического института Н.В. Белов стал переводить работы зарубежных кристаллографов-рентгеноструктурщиков и увлекся этой наукой. В 1944 г. он возглавил лабораторию структуры кристаллов в Институте кристаллографии АН СССР, в 1953 г. стал академиком и до своей смерти в 1982 году был главой советских кристаллографов, обладая заслуженным авторитетом у минералогов, химиков, физиков, материаловедов. С его деятельным участием были созданы научные коллективы во многих городах России и в республиках Союза. По оценкам в 1960—1970 гг. в СССР расшифровывалось около 10 % от общего числа определяемых кристаллических структур.

При организации Сибирского отделения АН СССР соратник Н.В. Белова, один из основателей Института неорганической химии СО АН Г.Б. Бокий запланировал Теоретический отдел института как комплекс лабораторий по выращиванию кристаллов, определению их спектральных характеристик и, конечно, расшифровке их структур. Коллектив рентгеноструктурной лаборатории составили выпускники Московского и Горьковского университетов, где преподавали Белов и Бокий. Тогда это была единственная лаборатория в Сибирском отделении, а ныне рентгеноструктурные исследования ведутся во всех химических институтах, получающих новые соединения и материалы, — НИОХ, ИК, НГУ, ИХТИМС, МНТЦ. Лаборатории оснаще-

ны современными приборами и комплексами программ для структурных расчётов. Представители рентгеноструктурных лабораторий этих институтов рассказали о своих достижениях по исследованию структур как монокристаллов, так и порошков.

О дифракции на ультрадисперсных и наноструктурированных системах доложил заведующий лабораторией Института катализа д.ф.-м.н. С.В. Цыбуля, об успехах метода РСА в органической химии — д.ф.-м.н. Ю.В. Гатиллов (от молекул простых — к сложным) и д.х.н. И.Ю. Багрянская (о практически первом систематическом исследовании закономерностей упаковок органических молекул и об организации некоторых классов органических соединений) — из НИОХ.

Возможность широко использовать дифракцию рентгеновских лучей в кристаллах для установления их строения появилась в СО АН СССР только в 1975 году. Благодаря усилиям В.А. Коптюга в НИОХ был закуплен первый в Академгородке автоматический дифрактометр SyntexP21, который использовался также и сотрудниками ИНХ. В результате одним из первых в НИОХ была изучена структура карбокатионов, например, таких как 1-фенил-1,2,3,4,5,6-гексаметиленбензолониевый, 1,1,2-триметил-2-аценафтенильный. Были проведены также первые рентгеноструктурные исследования эпителиониевых ионов, нитрозиониевых комплексов с дуролом и 1,10-фенантролином. Этот метод интенсивно применяется для установления строения различных органических соединений, включая широко используемые нитроксилированные радикалы, гетероциклические и природные соединения. Современный дифрактометр с двумерным детектором позволил провести температурное исследование внутрирегулярного таутомерного равновесия в кристалле и установить его динамический характер. Уделяется внимание взаимосвязи между строением кристалла и его физическими свойствами, например, найдена корреляция энергии плавления кристалла с длиной звена цепочки в молекулярных комплексах арилен-1,3-диаминов и 18-краун-6.

О методике и результатах позиционных рентгенодифракционных исследований поликристаллических материалов на синхротронном излучении сделал доклад к.ф.-м.н. А.Н. Шмаков (ИК). И, наконец, оживление внес к.г.-м.н. В.В. Бакакин (ИНХ), рассказав о дифракции и «магическом кристалле» поэзии.

В преамбуле было подчеркнuto, что Макс фон Лауэ, глубокий знаток в области оптики, в своём открытии связал две гипотезы из двух различных областей науки: гипотезу о волновой природе рентгеновских лучей и гипотезу о пространственных решётках кристаллов. Следствия открытия были потрясающе плодотворными и разнообразными. Появление новых знаний находило своё отражение и в поэзии, в основном, конечно, на терминологическом уровне. Например, в оптической и кристалло-решёточной терминологии — с любопытным контрастом у «лириков» и «физиков».

Вот стихотворение Игоря Иртенёва «Дифракция» (в одноимённом сборнике 1997 г.):

*«Как увидишь над пашнею радугой —
Атмосферы родимой явление,
Так подумаешь: мать твою за ногу!
И застынешь в немом изумлении.
Очарован внезапною прелестью,
Ёлки, думаешь, где ж это, братцы, я?
И стоишь так с отвисшею челюстью,
Но потом понимаешь: ДИФРАКЦИЯ».*

И рифмованная реакция (в Рунете) на этот «гуманитарный ляп»:

*Есть ещё в моём милом отечестве
Незнакомые с физикой особи,
Тень бросают на всё человечество,
Вразуми и прости ты их, Господи!
Как завидят над речкою радугой
(Тоже мне, небывалая акция!)
Ну давай обниматься от радости:
«Гляньте братцы, да это ж ДИФРАКЦИЯ!»*

*И кричат, недоумки убогие,
Свято веря в дурацкую версию.
Мы-то знаем: по правилам логики,
Примитивная это ДИСПЕРСИЯ!*

Самый интересный и творчески содержательный пример с кристалло-решёточной метафорикой — стихотворение Аллы Михалевич, доктора биологических наук и лауреата премии имени Н. Заболоцкого — «Простая решётка кристалла», из книги «Фотосинтез», СПб, 2007 (разрядка наша):

*Простая решётка кристалла,
Простая решётка стиха —
И всё как алмаз заиграет,
Как перья в хвосте петуха.
А сколько в пространстве решётки
вмещается атомов-слов!
Все грани прозрачны и чётки
От правильных жёстких углов. <...>
Но в каждой такой разработке
Есть самый ответственный миг:
И в правильной жёсткой решётке
Возможен неправильный сдвиг.
В кристаллах живых карбонатов
Немного неправильный скол,
На этой границе когда-то
И весь фотосинтез пошёл.
Зато в образцах кремнезёма
Совсем идеальный кристалл, —
И жизнь потекла по-другому —
Процесс развиваться не стал.*

Ещё пример — лирические строчки у земляка Владимира Берязева, ныне главного редактора журнала «Сибирские огни». Верб (1984):

*...Нежности не исчерпать.
Таёт решётка кристалла.
Веточка, Вера, верба...
Милая, что с нами стало?»*

Далее — применение кристаллографических понятий в стиховедении (Л. Портер «Симметрия — владычица стихов», А. Квятковский «Ритмология»). И поразительный пример проникновения в поэтическую практику даже сугубо специальных терминов, связанных с именем Лауэ как «виновника» нынешнего заседания. Вот цитата из рецензии на книгу поэта Дмитрия Плахова («Литературная газета», № 17, 25 апреля 2012 г.):

«Просто sneдает желание разложить тексты по классам Лауэ. Ты берёшь стихотворение Плахова, ты читаешь его, а в нём — нестерпимое для любой жизни совершенство, когда слова уложены, как узлы решётки, между которыми не просунуть и электрона.» Автор рецензии — поэт, физик по образованию и биофизик по профессии Амиран Григоров.

Зная, что среди слушателей было несколько старожилов Академгородка, которые получили кристаллографическое образование у академика Николая Васильевича Белова, патриарха для сотен советских специалистов, докладчик осмелился ностальгически привести несколько тематически оправданных строчек из своего опуса (1971 г.):

*Как-то раз, когда пора настала,
Нам Н.В. Белов давал урок,
Рассказал он сказку про кристаллы
И в Кристаллографию завлёл.
В страну прекрасную, в страну несчастную,
Где так красив симметрии закон,
Где элементами — его агентами —
Любой ион в решётку заключён.*

Все тексты были богато снабжены портретными и предметными иллюстрациями.

**С.В. Борисов, д.ф.-м.н.,
В.В. Бакакин, к.г.-м.н.,
Н.В. Подберезская, д.х.н.**

Конкурс

Федеральное государственное бюджетное учреждение науки Новосибирский институт органической химии им. Н.Н. Ворожцова Сибирского отделения Российской академии наук объявляет конкурс на замещение вакантных должностей: ведущего научного сотрудника, д.б.н. по специальности 14.03.06 «фармакология, клиническая фармакология» — 1 вакансия в лабораторию фармакологических исследований (ЛФИ). На условиях срочного трудового договора: старшего научного сотрудника, к.х.н. по специальности 02.00.03 «органическая химия» — 1 вакансия в лабораторию изучения нуклеофильных и ион-радикальных реакций (ЛИНИРР); научного сотрудника, к.х.н. по специальности 02.00.03 «органическая химия» — 1 вакансия в лабораторию изучения нуклеофильных и ион-радикальных реакций (ЛИНИРР). Дата проведения конкурса — 14.08.2012 г. в НИОХ СО РАН. Требования к кандидатам — в соответствии с квалификационными характеристиками, утвержденными постановлением Президиума РАН от 25.03.2008 г. № 196. Срок подачи документов — не позднее 2-х месяцев со дня публикации объявления. Заявления и документы направлять в конкурсную комиссию по адресу: 630090, г. Новосибирск, пр. Ак. Лаврентьева, 9. Объявление о конкурсе и перечень необходимых документов размещены на сайтах института (<http://www.nioch.nsc.ru>) и Президиума СО РАН (<http://www.sbras.nsc.ru>). Справки по тел.: 330-68-55 (отдел кадров).

Федеральное государственное бюджетное учреждение науки Институт физики полупроводников им. А.В. Ржанова Сибирского отделения Российской академии наук объявляет конкурс на замещение вакантной должности научного сотрудника по специальности 05.13.15 «вычислительные машины, комплексы и компьютерные сети» на условиях срочного трудового договора по соглашению сторон. Требования к кандидатам: опыт работы в области распределенных вычислительных систем, децентрализованных алгоритмов управления ресурсами GRID-систем и построения пространственно-распределенных мультикластерных вычислительных систем. Квалификационные характеристики — в соответствии с постановлением Президиума РАН № 196 от 25.03.2008 г. Документы подавать по адресу: 630090, г. Новосибирск, пр. Ак. Лаврентьева, д. 13. Дата проведения конкурса: по истечении 2-х месяцев со дня выхода объявления. Объявление о конкурсе и перечень необходимых документов размещены на сайтах РАН и института (www.isp.nsc.ru). Справки по тел.: 333-24-72 (отдел кадров), 333-24-88 (ученый секретарь).

Федеральное государственное бюджетное учреждение науки Института химической кинетики и горения СО РАН объявляет приём в аспирантуру (очное отделение) на 2012—2015 учебные года по специальности: 01.04.17 «химическая физика, горение и взрыв, физика экстремальных состояний вещества», 02.00.04 «физическая химия», 03.01.02 «биофизика». Документы принимаются до 1 сентября 2012 г. по адресу: 630090, г. Новосибирск, ул. Институтская, 3, к. 330. Поступающие в аспирантуру должны будут сдать следующие экзамены: философия, иностранный язык, специальная дисциплина (химическая физика или биофизика). Срок проведения вступительных экзаменов: с 10 июня по 30 сентября 2012 г. Подробную информацию и перечень необходимых документов можно узнать по тел: (8-383) 330-23-83 (с 10.00 до 13.00) или на сайте института (www.kinetics.nsc.ru).

Федеральное государственное бюджетное учреждение науки Конструкторско-технологический институт вычислительной техники СО РАН объявляет приём в 2012 году в аспирантуру (очное и заочное отделения) по специальности: 05.13.06 «автоматизация и управление технологическими процессами и производствами». Перечень предоставляемых документов размещен на сайте института (www.kti.nsc.ru). Прием документов со 2 июля по 10 сентября, вступительные экзамены с 17 сентября по 17 октября. Поступающие в аспирантуру сдают следующие экзамены: специальную дисциплину (автоматизация технологических процессов и производств), философию, иностранный язык. Справки по тел.: 330-92-42.