

Недостающее звено — или контуры нового?

В этом году лаборатория физической химии конденсированных сред Института неорганической химии им. А.В. Николаева СО РАН отметила юбилей, который в жизни любого коллектива признается первым по-настоящему серьезным — десятилетие.

Рождение новой лаборатории — событие знаковое, говорящее прежде всего о том, что в ней появилась настоятельная необходимость. При этом обязательно в одной точке должны сойтись важные составляющие, гарантирующие успех дела. Все 10 лет лабораторию возглавляет доктор физико-математических наук Светлана Геннадьевна Козлова. Как характеризуют её коллеги, «первоклассный физико-химик, владеющий как теоретическими методами компьютерной квантовой химии, так и экспериментальными методами спектроскопии магнитного резонанса».

Собственно, к обязанностям завлаба она приступила ровно через год после того, как защитила докторскую диссертацию по теме «Корреляционные и обменные взаимодействия в оксидах и фторидах тяжелых элементов: ЯМР и квантово-химические расчеты». Работа была посвящена решению некоторых фундаментальных проблем, относящихся к области квантовой и физической химии соединений «тяжелых» металлов — платины, золота, свинца и т.д.

Закончила С.Г. Козлова НГУ в 1980 году и сразу стала сотрудницей ИНХа, обозначив место будущей работы, как водится, ещё в университете. Как отмечает сама Светлана Геннадьевна, ей нескладно повезло, что начала она свою «производственную деятельность» в лаборатории доктора физико-математических наук Святослава Петровича Габуды, ставшего её наставником («образец истинного ученого!»). Направление исследований — радиоспектроскопия и анализ физической природы химических взаимодействий в неорганических веществах.

Образование, которое дают на физфаке, настроило меня на то, что надо искать специфические эффекты в разного рода объектах, — говорит Светлана Геннадьевна. — Ориентировалась я на фториды, повезло, что есть в Сибирском отделении такой институт — Неорганической химии, где синтезируют новые соединения, материалы с необычными свойствами. Чтобы характеризовать образцы, и используются физические методы.

— Скор ли увенчался успехом поиск эффектов?

— В Институте неорганической химии с легкой руки моего наставника я стала заниматься методом ЯМР. В 1988-м защитила по нему диссертацию. Метод стал главным инструментом в моих исследованиях. В конце 1980-х нам удалось выйти на некоторые новые эффекты, связанные с химическими сдвигами и анизотропией магнитного экранирования ядер в соединениях тяжелых элементов — свинца, висмута, платины и т.д. Удалось кое-что объяснить, в том числе такую специфику как релятивистские эффекты.

— На этот предмет были какие-то сомнения?

— Сначала, с легкой руки Поля Дирака (создателя релятивистской квантовой механики) считалось, что релятивистские эффекты важны прежде всего для внутренних электронных оболочек тяжелых атомов, а для внешних оболочек, ответственных за химическую связь, они как будто не очень существенны... Но спустя 50 лет выяснилось, что экстремальные свойства золота, ртути, серебра, платины и других металлов обусловлены именно релятивизмом! Позже в наших работах удалось доказать, что влияние релятивистских эффектов хорошо прослеживается также в важнейших свойствах соединений тяжелых металлов... Моя докторская диссертация и была направлена на систематическое исследование и выявление таких вот неочевидных эффектов, которые непосредственно связаны с проявлением релятивизма.

— Проблема эта среди коллег обсуждается?

— Она заслуживает внимания. Это новое, практически важное, но вместе с тем достаточно трудное направление исследований, поэтому работ здесь не так много даже в мировом масштабе. Каждый результат может стать классикой. Это ещё и просто интересно.

Вот возьмем гексафторид платины PtF₆. Свойства его также во многом экстремальны — это мощнейший окислитель, применяемый в «продвинутых» ядерных технологиях. Вместе с тем, по классике, эта молекула должна быть искажённой и спиново-парамагнитной — из-за влияния орбитального «вырожде-

ния» (или эффекта Яна-Теллера). В реальности молекула имеет форму правильного октаэдра, не искажена, и никаких следов спин-орбитального вырождения «не работает» из-за влияния релятивистского эффекта спин-орбитального взаимодействия. Резюме: если бы не было релятивистских эффектов, свойства подобных веществ были бы резко отличны от того, что наблюдается в действительности. Данная тема послужила основой не только ряда журнальных публикаций, но и одной из наших монографий, опубликованных в США.

Это продукт коллективного труда, плюс использования комплекса физических методов исследования — ЯМР, магнетохимии, калориметрии, компьютерной квантовой химии в разных вариантах. Работа преимущественно фундаментальная, ориентированная на выяснение фундаментальных физико-химических характеристик неорганических веществ, более глубокого понимания их природы.

— Светлана Геннадьевна, необходимость создания лаборатории физической химии конденсированных сред была продиктована какими-то обстоятельствами?

— Прежде всего требованиями времени. Все мы знаем, что было десятилетие, когда наука переживала очень трудные времена, теряла специалистов, целые коллективы — закрывались лаборатории, научные сотрудники стремились устроить свою судьбу за пределами страны и прочее. Многие ещё и сейчас приходится восстанавливать, упущенное внимание уделено созданию новых материалов, синтезу соединений, такое подразделение, конечно, нужно. На базе того, что осталось, что возникло заново, фактически организовали лабораторию физической химии конденсированных сред. Она состоит из пяти групп: ЯМР и рентгено-электронной спектроскопии, прецизионной и сканирующей калориметрии, магнетохимии и, конечно, квантовой химии.

— Коллектив у вас большой?

— Нас двадцать человек. Каждый обладает набором необходимых качеств — в такой лаборатории ведь не просто работать. С одной стороны, надо быть отличным специалистом в своей области, с другой — понимать, чем занимаются другие. Есть у нас и физики, и химики. Учим друг друга и учимся. Достигли состояния, когда и физики и химики говорят на одном языке и прекрасно дополняют друг друга. Лаборатория обеспечивает потребности сотрудников ИНХ и других организаций в проведении компьютерного моделирования электронного строения, зонной структуры и спектральных свойств неорганических веществ с использованием суперкомпьютера и новейших программных комплексов.

— Возрастные пропорции соблюдены?

— Не хватает среднего звена. В трудный период, как я уже упоминала, многие уехали за границу. Образовался разрыв поколений: совсем молодые люди и возрастные, с большим опытом, уникальными знаниями и своими интересами. Здесь трудно найти точки соприкосновения, прежде новые сотрудники появлялись каждые пять-семь лет. Выпало важное звено. Иной раз разница бывает особо заметной. Одно хорошо — сближает работа. Хотя проблема остается.

— Круг тем, которым привержены исследователи, расширяется, меняется?

— Фронт работ института расширяется, конечно, и соответственно требуется качественное обновление и тематики работ, и «инструментария». Скажем, когда в ИНХ пришел Владимир Петрович Федин, ныне директор и член-корреспондент РАН, появилось новое для нас направление, связанное с химией так называемых хиральных соединений, характеризующихся зеркальной изомерией. Свойства хиральности (или «ручности») обусловлены внутренней асимметрией молекул, строение которых отдаленно напоминает «правый» и «левый» винты. Упаковка подобных «ротосимметричных» молекул хиральных веществ отличается огромным разнообразием, превосходящим разнообразие структурных типов атомных упаковок (для которых возможно наличие «всего лишь» 32 точечных и 230 Фёдоровских пространственных групп симметрии), и даже упаковок «магнитных»

атомов, для которых установлено наличие 90 точечных и 1421 Шубниковских групп. Для упаковок «ротосимметричных» веществ в последнее время в США было установлено существование ни много ни мало 624 точечных и 17 807 пространственных рото-групп симметрии. Такое количество вариантов структуры может быть одним из источников огромного разнообразия биологических веществ, построенных, между прочим, именно из хиральных молекул.

— Она так важна, эта проблема?

— Безусловно. В течение последних двух десятилетий в мировой литературе было много попыток сконструировать «одномолекулярные» и «одноэлектронные» транзисторы и «квантовые» компьютеры, к сожалению, пока безуспешных. Может быть, всё дело как раз в хиральности, которую пока не принимают во внимание, но которая прекрасно работает в муравьиной головке, и не только...

— То есть, получается как бы проблематика на стыке с биохимией?

— Не совсем. Биохимия имеет дело со свойствами уже «готовых» хиральных молекул — белков, нуклеиновых кислот, сахаров, и это их свойство как бы дано от бога. Но физическая же химия ещё интересуется взаимодействиями, которые приводят к нарушению рото-симметрии и к механизму отбора упорядоченных гомохиральных веществ, в том числе таких, как биологические. В лаборатории В.П. Федина был сконструирован высокопористый координационный полимер (МОФ — металлоорганический сорбент), включающий ротосимметричные молекулы (диазабициклоктана, сокращенно дабко). Принципиально важный результат был получен на основании исследования магнитной спиновой релаксации. Оказалось, что вблизи абсолютного нуля температур имеет место спонтанная хиральная поляризация молекул дабко! Это с большой вероятностью подтверждает связь хиральной поляризации с симметричными свойствами физического вакуума, в котором «действуют» электроны и ядра молекул дабко. Собственно, эта картина и предполагалась в некоторых теоретических моделях, но ранее она не находила экспериментального подтверждения.

В практическом плане этот результат может означать, что становятся более реалистичными контуры очередного этапа развития нанотехнологий, который может быть



связан, как отмечено в нашей публикации в журнале Американского химического общества, с переходом к новой и пока ещё гипотетической «хиратронике».

— Много ли ездите к коллегам в другие страны?

— Молодёжь — часто, и я их в этом всячески поддерживаю — «молодым везде у нас дорога!». Сама же я — скорее редко, по одному разу в год. Отказалась от заманчивого предложения многолетнего контракта. Недавно побывала на хорошей конференции в Валенсии (Испания), выступала с устным докладом.

— Что беспокоит вас как завлаба?

— Очень трудная задача: требуется омолодить коллектив. Молодёжь нужна, она наше будущее, её надо учить. Но как можно отказаться от возрастных, но креативных сотрудников? У меня на этот счёт своё мнение. Считаю, надо следовать главным принципам организации науки. В науке нет возраста, национальности, приоритета специальности, преимуществ по половому признаку. В любом случае главенствует результат. При нарушении принципов научный процесс не организовать. И когда я вижу нарушения, психологически это очень тяжело. Что бы здесь такое придумать, очень разумное, доброе, вечное...

Помнится, когда Светлана Геннадьевна защитила докторскую диссертацию, я беседовала с ней, она сказала: «В физической химии, как и во всей физической науке, всё упирается в везение — удастся ли найти то самое «недостающее звено», с помощью которого хаотическая мозаика экспериментальных результатов и наблюдений вдруг приобретет какой-то очевидный смысл и логику».

Недостающее звено ей, как видно, часто найти удаётся. Вывод — везение как некий эффект присутствует в научной работе завлаба, д.ф.-м.н. Светланы Геннадьевны Козловой.

Л. Юдина, «НВС»

Учащиеся СУНЦ НГУ получили стипендии Сибирского отделения РАН

Двадцатого ноября 2012 г. учащиеся СУНЦ НГУ получили пять стипендий Фонда им. М.А. Лаврентьева и 17 стипендий, учреждённых Институтом ядерной физики им. Г.И. Будкера СО РАН. Вручение состоялось на торжественном посвящении в ФМШата. Как отметил заместитель директора по науке ИЯФ СО РАН академик Геннадий Николаевич Кулипанов, институт устанавливает стипендии только второй год, они присуждаются учащимся по результатам экзаменов и собеседований. Фонд им. М.А. Лаврентьева также отмечает тех, кто имеет выдающиеся достижения в учёбе.

Заместитель председателя СО РАН академик Василий Михайлович Фомин высказал мысль, что успехи будут всегда оценены.

— Результаты вашего труда всегда будут отмечать, смотреть, чего вы достигли. И несколько человек, которые вышли сюда, уже отличаются от вас: они будут получать стипендию Сибирского отделения РАН. Пусть она небольшая, но это будет хорошим подспорьем к тому, что вам выделяет государство.

Ю. Позднякова, ЦОС СО РАН
Фото автора

