



ISSN 0028-1263

НАУКА И ЖИЗНЬ

II ● Наши представления
2013 о природе верны, и это
стоит «Нобеля» ● Счи-
тать, что отправлять деньги в
космос означает выбрасывать
их, — неправильно ● Неужели
человеческие органы можно и вы-
ращивать, и собирать, как конст-
руктор? ● «Гонка вооружений»
подхлестывает прогресс ● Дети
любят львов или боятся?



Нобелевские премии 2013 года

А. ПОНЯТОВ, канд. физ.-мат. наук — Последний камень в основании Стандартной модели (Нобелевская премия по физике)	2
Ю. СМЕРНОВА — Секреты внутриклеточной логистики (Нобелевская премия по физиологии и медицине)	4
В. ЕРЁМИН, докт. физ.-мат. наук — Компьютерный облик химии (Нобелевская премия по химии)	7
В. ПТУШЕНКО, канд. физ.-мат. наук — Частицы квантово-ньютоновской мозаики	8
Кунсткамера	10, 68

Вести из институтов,
лабораторий, экспедиций

Т. ЗИМИНА — Лазер измеряет сахар у диабетиков (11); Сколько науки в космическом эксперименте? (22); Азовское море — генератор топлива (24). М. ПЕТРОВ — Титановые импланты с «узором» (23).	
И. АНДРЕЕВ, канд. ист. наук — Взлёты и падения династии Романовых	12
Е. КОНСТАНТИНОВ — Куда растут ветки?	26
О чём пишут научно-популярные журналы мира	31
Н. ЛЕСКОВА — Академик Николай Кардашёв: «Люди должны уметь мечтать»	34
С. ТРАНКОВСКИЙ — Зачем нужен радиотелескоп на орбите	36
Бюро научно-технической информации	40, 55
А. ЧУГУНОВ, канд. физ.-мат. наук, А. ВАСИЛЕВСКИЙ, канд. хим. наук — Эволюционная «гонка вооружений»: нейротоксины против ионных каналов	42
Подписка на журнал «Наука и жизнь»	49
Е. КОНСТАНТИНОВ — Связанные одной цепью	51
Новые книги	55
З. КОРОТКОВА — «Сен-Жерменское предместье»	56
Бюро иностранной научно-технической информации	58
В. МИРОНОВ — Биопечать вместо донорских органов	62
В. ГУЛЯЕВ, докт. ист. наук — Скифы. Что мы знаем о них	70

«УМА ПАЛАТА»

Познавательно-развивающий
раздел для школьников

Н. ГОРЬКАВЫЙ — Сказка об учёном Архимеде, который стоил целой армии (81). Ю. ФРОЛОВ — Синий... как рак (89). С. ТРАНКОВСКИЙ — Капля и камень (90).

Памяти Игоря Константиновича

Лаговского	92
И. ЛАГОВСКИЙ — Благородных упражнений изустные преданья... (отрывок из новой книги)	93
Т. ИЛЬИНА, канд. биол. наук — «Бабочки» садов Нептуна	106
В. МАКСИМОВ — Из истории фамилий ...	110
Внимание: фотоконкурс «Отражения»	112
Т. ПАНОВА, докт. ист. наук — Безликое русское Средневековье... ..	114
Фотоблокнот	119
Математические досуги	120
А. ШЕЛУДЧЕНКО — «Штрих и слово»	122
Н. КУЗЬМИН — Полярные ночи (рассказ) ...	124
Наука и жизнь в начале XX века	127
Ю. РЯЗАНЦЕВ — Царь зверей попал в рейтинги	128
Е. ГИК, мастер спорта по шахматам — Компьютеры и гроссмейстеры	130
Ответы и решения	134
Маленькие хитрости	135
Кроссворд с фрагментами	136
Ю. ФРОЛОВ — «Есть за границей контора Кука...»	138
М. КОСТЫРЯ, канд. искусствоведения — «Зашифрованные» портреты	139

НА ОБЛОЖКЕ:

1-я стр. — Симпатична или страшна? Львица на охоте. Ботсвана, дельта реки Окаванго, май 2008 года. Фото Н. Домриной. (См. статью на стр.128.)

Внизу: Франсуа Энглер и Питер Хиггс — обладатели Нобелевской премии по физике 2013 года. Фото: АФР. (См. статью на стр. 2.)

2-я стр. — «В Плотниковом переулке». Картина народного художника РСФСР Е. И. Куманькова, создавшего живописную летопись Москвы. (См. статью на стр. 56.)

3-я стр. — Что можно разглядеть на «Аллегорическом семейном портрете» Яна де Брая и на полотнах других голландских живописцев? Ответы в статье на стр. 139.

4-я стр. — «Отражения». Новый фотоконкурс «Науки и жизни» анонсируют фотографии Л. Синицыной. (См. стр. 112.)

В этом номере 144 страницы.



НАУКА И ЖИЗНЬ®

№ 11

НОЯБРЬ

Журнал основан в 1890 году.
Издание возобновлено в октябре 1934 года.

2013

ЕЖЕМЕСЯЧНЫЙ НАУЧНО-ПОПУЛЯРНЫЙ ЖУРНАЛ



Фото: AFP.

ПОСЛЕДНИЙ КАМЕНЬ В ОСНОВАНИИ СТАНДАРТНОЙ МОДЕЛИ

Захватывающая эпопея с поиском и открытием бозона Хиггса завершилась логичным финалом. Нобелевская премия по физике 2013 года присуждена бельгийцу Франсуа Энглеру и англичанину Питеру Хиггсу «за теоретическое открытие механизма, который способствует нашему пониманию происхождения массы субатомных частиц и который недавно был подтверждён открытием предсказанной фундаментальной частицы, экспериментами ATLAS и CMS на Большом адронном коллайдере в ЦЕРНе».

В последние десятилетия бозон Хиггса, гипотеза о существовании которого была выдвинута в 1964 году, стал «культовой» элементарной частицей, предметом широкого обсуждения не только в профессиональной среде, но и среди людей, далёких от физики. В немалой степени всеобщему интересу способствовал запуск Большого адронного коллайдера, одной из главных задач которого и был поиск неуловимой частицы.

Бозон Хиггса крайне необходим современной физике. Это не просто ещё одна элементарная частица: её обнаружение позволило закрыть последнюю дыру в экспериментальном обосновании электрослабой теории (Нобелевская премия 1979 года), являющейся частью Стандартной модели — теории устройства нашего мира на микроуровне. Все

остальные её положения уже прошли экспериментальную проверку. В частности, предсказанные в 1967 году переносчики слабого взаимодействия W- и Z-бозоны обнаружены ещё в 1983 году (Нобелевская премия 1984 года). Если было бы доказано, что бозон Хиггса не существует, то потребовался бы пересмотр Стандартной модели.

Открытие бозона Хиггса в 2012 году подтвердило не только важный сам по себе механизм формирования массы частиц, но и принципиальную обоснованность наших представлений о природе. Именно это и оценено Нобелевской премией.

Основополагающую роль в Стандартной модели играет понятие симметрии, означающее, что при определённом преобразовании параметров системы не происходит изменения её законов. Например, одинаковость законов физики в разные моменты времени — это временная симметрия, а в разных точках пространства — пространственная симметрия, или симметрия относительно преобразований координат. Математически это проявляется в том, что описывающие частицы уравнения не меняют свой вид (инвариантны) при преобразованиях. Помимо наглядной пространственно-временной симметрии были обнаружены и более сложные неочевидные симметрии для «цветовых», фазовых и других преобразований. В этом случае говорят о преобразованиях во внутреннем пространстве.

Очень важный момент — соответствие каждому виду симметрии своего закона сохранения. Так, временной симметрии соответствует закон сохранения энергии, а внутренняя симметрия электродинамики

● ЛЮДИ НАУКИ

Франсуа Энглер и Питер Хиггс на пресс-конференции в ЦЕРНе по случаю открытия бозона Хиггса. 4 июля 2012 года.

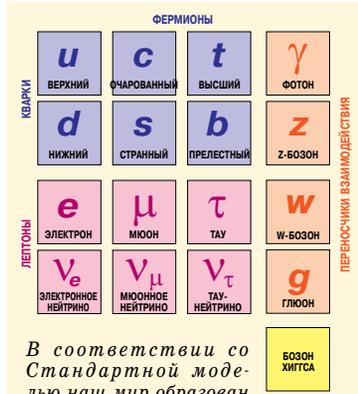
приводит к закону сохранения заряда. И наоборот, наличие закона сохранения означает наличие соответствующей симметрии. Наличие симметрий уравнений для частиц не только приводит к различным законам сохранения, но и определяет свойства взаимодействий, разрешённые моды распада частиц, времена их жизни и так далее. Именно это позволяет строго обосновать симметрии экспериментально.

С другой стороны, наличие симметрий служит запретом на свойства частиц, которые нарушают симметрию. Вот здесь и возникает одна из принципиальных проблем Стандартной модели: её экспериментально обоснованные симметрии запрещают существование масс у кварков, лептонов и частиц — переносчиков взаимодействий. Однако эксперимент однозначно показывает наличие масс у этих частиц, за исключением фотона и глюона.

Для решения проблем, связанных с симметриями, Ёитиро Намбу в 1960 году предложил так называемый механизм спонтанного нарушения симметрии (Нобелевская премия 2008 года), известный до этого в статистической физике, например, в теориях сверхтекучести и сверхпроводимости. Суть его в том, что взаимодействия, определяющие динамику физической системы (описывающие её дифференциальные уравнения), обладают одной, ненарушенной, симметрией, а основное состояние системы — иной симметрией. Другими словами, нарушение касается только начальных условий. Классический пример спонтанного нарушения симметрии — магнит, имеющий выделенное направление магнитного поля, в то время как уравнения Максвелла, описывающие электромагнитное поле, изотропны.

Термин «спонтанное», то есть самопроизвольное, здесь означает, что система сама выбирает несимметричное состояние в силу его энергетической выгоды.

В 1964 году Франсуа Энглер (совместно с умершим в 2011 году Робертом Браутом) и независимо от них Питер Хиггс предложили механизм приобретения массы бозонами в результате спонтанного нарушения симме-



В соответствии со Стандартной моделью наш мир образован небольшим количеством фундаментальных (не имеющих внутренней структуры) частиц, к которым относят кварки, лептоны и частицы — переносчики взаимодействий (электромагнитное — фотон, сильное — глюон, слабое — Z- и W-бозоны).

трии. О нём также говорят как о нарушении электро-слабой симметрии.

Суть механизма в том, что всё пространство однородно заполнено особым полем, минимальная средняя энергия (конденсат) которого отлична от нуля и постоянна во времени и пространстве. В это поле, словно в вязкую среду, погружены все остальные частицы Стандартной модели. Но главным является особенность взаимодействия поля с движущейся частицей — оно не влияет на равномерное движение, но мешает ускорению тем больше, чем сильнее взаимодействие. Это означает, что частицы, взаимодей-

ствующие с полем (кварки, лептоны, W- и Z-бозоны), приобретают массу, пропорциональную силе взаимодействия с ним. Не взаимодействующие с этим полем фотон и глюон остаются безмассовыми.

Спонтанное нарушение симметрии заключается в том, что уравнения движения частиц симметричны, а начальное значение — ненулевая средняя величина поля — нарушает симметрию. В квантовой теории каждому полю соответствуют квантовые флуктуации, проявляющие себя как частицы. Частица данного поля и получила название «бозон Хиггса». Она тоже обладает массой, поскольку взаимодействует с собственным полем. Новое поле не должно выделять никакого направления в пространстве. Поля с таким свойством называют скалярными, и им соответствуют частицы с нулевым спином.

Несмотря на то что первая опубликованная работа принадлежит Р. Брауту и Ф. Энглеру, механизм и бозон часто связывают с именем только П. Хиггса, который первым увидел, что теория предсказывает существование новой частицы с нулевым спином.

Кандидат физико-математических наук Алексей ПОНЯТОВ.

«Наука и жизнь» о бозоне Хиггса:

- Ройзен И. **Бозон Хиггса необходим!** — 1996, № 1.
- Лозовская Е. **Лоб в лоб на скорости света.** — 2008, № 8.
- Ройзен И. **Нобелевская асимметрия.** — 2008, № 12.
- Матвеев В. **Элементарные частицы. От электрона до бозона Хиггса.** — 2010, № 8.
- Рубаков В. **Долгожданное открытие: бозон Хиггса.** — 2012, № 10.
- Понятов А. **Хиггс открыт. Что дальше?** — 2013, № 10.

НОБЕЛЕВСКАЯ ПРЕМИЯ ПО ФИЗИОЛОГИИ И МЕДИЦИНЕ 2013 ГОДА



Фото: H. Goren. © HHMI

Рэнди Шекман. Родился в 1948 году в городе Сент-Пол, штат Миннесота, США. Закончив бакалавриат по молекулярной биологии в Калифорнийском университете Лос-Анджелеса, поступил в Стэнфордский университет на отделение биохимии, где попал в лабораторию Артура Корнберга. В настоящее время работает в Калифорнийском университете Беркли (США).



Фото: © Yale University

Джеймс Ротман. Родился в 1950 году в городе Хэйверхилл, штат Массачусетс, США. Путь в клеточную биологию начал с изучения физики в Йельском университете. В Гарвардском университете получил степень доктора в области биохимии. Работал в Стэнфорде, Принстоне и других научных центрах. В настоящее время профессор Йельского университета.



Фото: © S. Fisch

Томас Зюдоф. Родился в 1955 году в Гёттингене, Германия. В 1982 году закончил медицинский факультет Гёттингенского университета. Работал в Институте биофизической химии им. Макса Планка в Гёттингене. С 1983 года работает в США. В 2013 году стал членом консультативного совета Института биоорганической химии РАН (Москва).

СЕКРЕТЫ ВНУТРИКЛЕТОЧНОЙ ЛОГИСТИКИ

Лауреатами Нобелевской премии по физиологии и медицине 2013 года стали американские учёные Рэнди Шекман, Джеймс Ротман и Томас Зюдоф за исследования механизма регуляции везикулярного транспорта в клетках.

Устройство живой клетки без преувеличения — одна из величайших загадок природы. Благодаря работам, отмеченным в этом году Нобелевским комитетом, стало понятно, каким образом происходит обмен веществ внутри клетки и между отдельными клетками.

Одноклеточный эукариотический (имеющий ядро) организм не в пример сложнее одноклеточного прокариота — организма без ядра. Одно из отличий состоит в том, что пространство эукариотической клетки разделено на компартменты — отделы, выполняющие свои функции и отделённые от соседей и цитоплазмы внутриклеточными мембранами. Благодаря такому разделению внутри каждого компартмента может происходить синтез определённых молекул.

Чтобы синтезированная молекула могла попасть по назначению, она упаковывается в везикулу — крошечный пузырёк, образованный мембраной, в которую встроены белки, выполняющие функции «почтового адреса». Благодаря такой упаковке содержимое везикулы доставляется по назначению и точно в срок.

Механизм внутриклеточной почты работает на удивление слаженно. В человеческом и любом другом живом организме постоянно происходит множество различных процессов. Пока вы читаете эту статью, сердце перекачивает кровь, эритроциты переносят кислород к различным органам, глазные мышцы регулируют движение глаз по строчкам, опорно-двигательный аппарат обеспечивает поддержание положения тела

в удобной позе, — словом, организм живёт. И всё это происходит как бы само собой благодаря тому, что в клетках работают отлаженные за миллионы лет механизмы.

У нынешней Нобелевской премии есть солидная нобелевская история и преемственность.

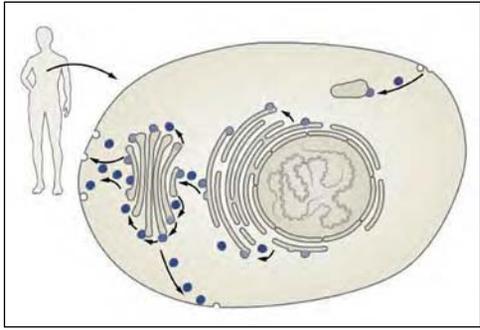
В 1974 году премия по физиологии и медицине была вручена «за открытия, касающиеся структурной и функциональной организации клетки» Джорджу Паладе, Кристиану де Дюву и Альберу Клоду. Именно Клод впервые исследовал клетку при помощи электронного микроскопа, и впоследствии благодаря электронной микроскопии было обнаружено, что транспорт молекул в клетке и между клетками происходит внутри мембранных пузырьков — везикул. Но каким образом клетке удаётся поддерживать такую сложную логистическую систему, ещё никто не понимал.

Тогда же, в 70-е годы прошлого века, только начинал свои исследования под руководством нобелевского лауреата 1959 года Артура Корнберга будущий нобелевский лауреат Рэнди Шекман. Его первоначальный интерес был направлен на изучение мембран млекопитающих. Но в то время ещё не было технологий, которые бы позволили изучать везикулярный транспорт в культурах клеток млекопитающих, и потому Шекман обратился к модельному организму — дрожжам (*Saccharomyces cerevisiae*). В общей сложности было обнаружено почти 50 генов, регулирующих образование везикул, их перенос, прикрепление к наружной мембране клетки и другие процессы.

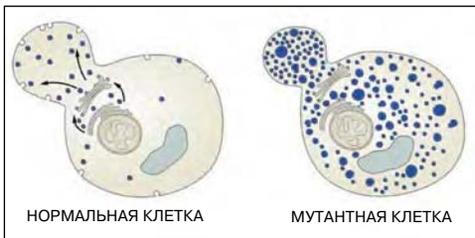
Гены, получившие названия *sec1*, *sec2*, *sec3* и т.д., удалось выявить у мутантных дрожжей, чья внутриклеточная транспортная система была нарушена и напоминала плохо работающий общественный транспорт: где-то все стоят в пробке, а где-то автобуса можно ждать часами.

Анализируя накапливающийся внутри клеток-мутантов секрет, Шекман разделил кодируемые открытыми им генами белки на три группы. Одни отвечали за транспорт внутри эндоплазматического ретикулума, другие — в аппарате Гольджи, третьи работали на экспорт — выносили содержимое везикул за пределы клетки.

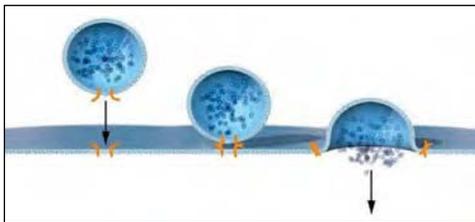
Джеймс Ротман двигался навстречу Шекману. Он начал исследовать белки, необходимые для успешного слияния мембраны везикулы и наружной мембраны. Ротман обнаружил, что точная доставка содержимого везикул возможна благодаря особому белковому комплексу (SNAP Receptor), состоящему из трёх компонентов: VAMP/синаптобревин находится на поверхности



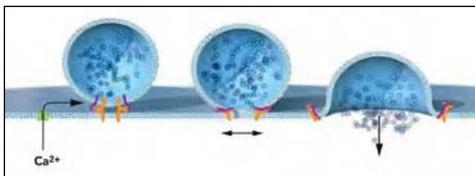
У клеток организма сложная структура. Органеллы, или компартменты, выполняют различные функции, в том числе производят необходимые для жизни молекулы. Эти молекулы упаковываются в пузырьки — везикулы и доставляются в нужное место внутри клетки или за её пределы.



Везикулярный транспорт регулируется специальными белками. Если синтез этих белков нарушен, например в клетках мутантных дрожжей, возникает внутриклеточный транспортный хаос.



Слияние везикулы с мембраной происходит благодаря специфическому белковому комплексу.



Передача сигналов между нервными клетками с помощью везикул управляется ионами кальция.

везикулы, а SNAP-25 и синтаксин работают в составе плазматической мембраны.

Оказалось, что некоторые гены, которые Шекман определил как ответственные за транспортную регуляцию у дрожжей, работают и у млекопитающих. Итогом стала первая совместная работа двух будущих нобелевских лауреатов о том, что ген *sec17* дрожжей кодирует функциональный эквивалент белка млекопитающих SNAP (так что всё-таки Шекман добился своего и выяснил, как везикулярный транспорт работает в клетках млекопитающих, пусть и через дрожжи). Впоследствии оказалось, что это универсальный эволюционный механизм и для грибов, и для животных, и для растений. В результате Ротману удалось сформулировать гипотезу, которая объясняет, почему везикулы сливаются с клеточными мембранами именно там, где нужно. Согласно этой гипотезе, слияние регулируют две группы рецепторов, находящиеся на мембране и везикулах: синтаксины и синаптобrevины.

Область интересов профессора Стэнфордского университета Томаса Зюдофа — взаимоотношение нервных клеток. Благодаря работам Шекмана и Ротмана стало понятно, как происходит передача сигнальных молекул и какие гены отвечают за процесс. Но каким образом доставка осуществляется точно в срок? Оказалось, что всё дело в ионах кальция: именно кальций служит сигналом, по которому белок везикулы связывается с мембраной того места, куда нужно доставить ценный груз. Зюдоф выяснил, что ключевую роль в слиянии везикулы с мембраной играют белки комплексин и синаптоагмин. Зюдоф работал на мышах, нокаутных по гену комплексина, у которых этот белок не синтезировался. Оказалось, что дефицит комплексина приводит к снижению активности всех синапсов. Канал, по которому содержимое везикулы проходит сквозь мембрану, открыт только тогда, когда ионы кальция связываются с белком на поверхности везикулы. Зюдоф работал с нервными клетками, и сначала его открытие касалось механизма передачи сигналов от одного нейрона к другому. Впоследствии оказалось, что это работает и для всех остальных клеток тоже.

Благодаря работе Шекмана, Ротмана и Зюдофа прояснилась природа неврологических заболеваний, диабета и иммунологических нарушений, ибо все они связаны с недостатком или переизбытком тех или иных веществ, которые либо не вырабатываются, либо не доходят до места назначения. К примеру, работа иммунной системы основана на том, что цитокины и

эффektorные молекулы вовремя доставляются к месту иммунного ответа.

Оказалось, что мутации в некоторых генах, отвечающих за везикулярный транспорт, приводят к тяжёлым заболеваниям. Так, мутации в гене *Munc18-1* вызывают некоторые виды эпилепсии. Ботулотоксин — сильнейший яд, вырабатываемый бактерией *Clostridium botulinum*, расщепляет синаптобrevин и синтаксин, что вызывает блокировку выброса нейромедиатора ацетилхолина и в итоге приводит к параличу и смерти.

Неужели можно сказать, что мы досконально разобрались в хотя бы крохотной части того сложнейшего механизма, который реализуется в жизни одной-единственной клетки? Разумеется, нет. И другие учёные, и сами новоиспечённые нобелевские лауреаты продолжают работу в этой области. Шекман ищет рецепторы, позволяющие осуществлять везикулярный транспорт между эндоплазматическим ретикуломом и аппаратом Гольджи. Зюдоф исследует роль синаптических белков в адаптивных изменениях мозга и их роль в возникновении шизофрении. Ротман изучает биофизику экзоцитоза — выделения содержимого везикул во внешнюю среду.

«Шекман, Ротман и Зюдоф, безусловно, получили Нобелевскую премию заслуженно, — отмечает декан биолого-почвенного факультета Санкт-Петербургского государственного университета, доктор биологических наук Алла Давидовна Харазова. — Эта работа важна не только для фундаментальной науки, она имеет огромное прикладное значение. Везикулярным транспортом пользуются многие бактерии, протисты и другие патогены для проникновения в клетку. В ходе эволюции они выработали различные ухищрения, чтобы оставаться незамеченными клеткой-хозяином как можно дольше. Выяснив, как эти организмы манипулируют мембранными белками и другими ключевыми молекулами, мы сможем существенно продвинуться в лечении таких заболеваний, как туберкулёз, сальмонеллёз, туляремия. Мы на кафедре цитологии и гистологии давно следим за этой темой и уже в 1992 году включили в учебник «Основы общей цитологии» описание экспериментов Ротмана. Тогда это был настоящий прорыв. Но и сейчас, спустя годы и несмотря на самые современные методы исследований, наука ещё очень далека от понимания всего того, что кроется в живой клетке».

Юлия СМЕРНОВА.

Иллюстрации: Nobelprize.org.

НОБЕЛЕВСКАЯ ПРЕМИЯ ПО ХИМИИ 2013 ГОДА

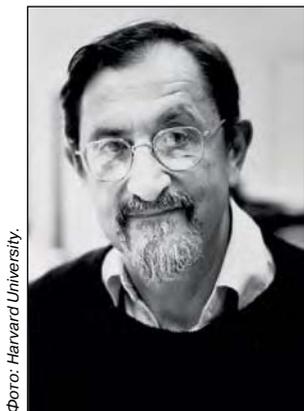


Фото: Harvard University.

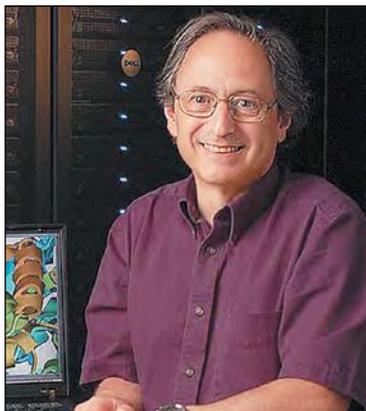


Фото: © Reuters.



Фото: Wikipedia Commons.

Нобелевские лауреаты по химии 2013 года (слева направо): Мартин Карплус (Martin Karplus, Страсбургский и Гарвардский университеты, Франция — США), Майкл Левитт (Michael Levitt, Стэнфордский университет, США) и Арье Варшелъ (Arieh Warshel, университет Южной Калифорнии, США).

КОМПЬЮТЕРНЫЙ ОБЛИК ХИМИИ

В ожидании Нобелевских премий 2013 года особое внимание было приковано к премии по химии, ведь среди номинантов — американский учёный российского происхождения Валерий Фокин, разработавший новые методы синтеза в органической химии. Шансы Фокина с учётом индексов цитирования оценивались весьма высоко, но премия досталась трём химикам-теоретикам — профессорам американских университетов Мартину Карплусу, Майклу Левитту и Арье Варшелю.

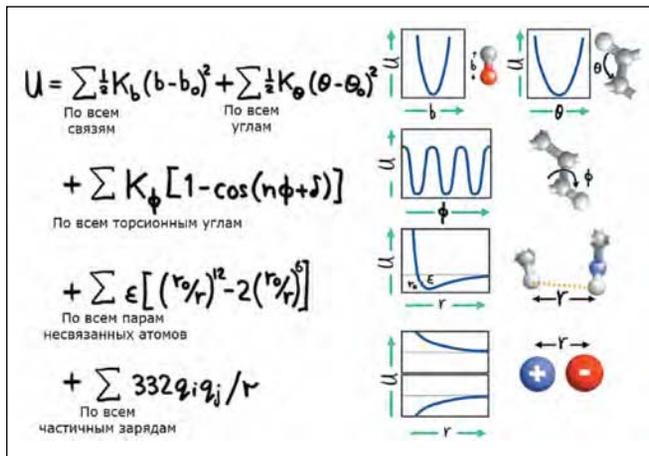
Точная формулировка Нобелевского комитета такова: премия 2013 года по химии присуждена «за создание многоуровневых моделей сложных химических систем». Фраза очень расплывчатая, попробуем в ней разобраться.

Что такое сложные химические системы? Это в первую очередь биологически активные молекулы — белки и нуклеиновые кислоты. Только сложные молекулярные системы могут выполнять те многочисленные функции, которые возложены на них Природой. Напомним, что ни одна химическая реакция в живом организме не идёт без участия биологических катализаторов — ферментов, представляющих собой белковые молекулы. Типичный белок содержит несколько тысяч связанных между собой атомов, в каждом из которых есть ещё несколько электронов, — всё это, вместе взятое, составляет очень «сложную химическую систему».

Как описать такую систему теоретически? Для этого берут имеющиеся экс-

периментальные данные и строят модель системы, которая соответствует этим данным. Если модель хорошая, то она содержит только небольшое число допущений, имеющих ясный физический смысл, но при этом охватывает все самые существенные свойства рассматриваемой системы. Именно такие модели сложных молекул и удалось создать Карплусу, Левитту и Варшелю в середине 1970-х годов, а использованные ими физические принципы и написанные компьютерные программы легли в основу многих современных методов компьютерного моделирования биохимических систем. Сейчас эти методы прочно вошли в арсенал химиков-теоретиков — ими владеют даже студенты старших курсов и аспиранты.

Химия изучает вещества и реакции между ними. Вещества описываются структурой, а реакции происходят при движении атомов от одной частицы к другой, поэтому важнейшие задачи химии — определение структуры молекул и динамики химиче-



Потенциальная энергия молекулярной системы и её зависимость от координат и углов. Первые три слагаемых характеризуют взаимодействие ковалентно связанных атомов, следующее за ними — ван-дер-ваальсово притяжение несвязанных атомов, последнее — кулоновское взаимодействие заряженных групп атомов. (Из статьи: Levitt M. The birth of computational structural biology // Nature Structural Biology, 2001, v. 8, № 5, p. 392.)

ских реакций. Для этого используются две основные физические теории — классическая механика и квантовая механика. Классическая механика позволяет рассчитывать траектории движения частиц — например атомов, зная силы взаимодействия между

ними. Классические уравнения движения решаются с помощью численных методов достаточно легко даже в случае большого числа атомов — для этого нужно только правильно учесть все взаимодействия атомов в молекуле, а их немало. Если силы известны, то можно рассчитать такое расположение атомов, при котором энергия минимальна, и тем самым определить устойчивую структуру молекулы, например конформацию белка (то есть конкретное расположение групп атомов

относительно друг друга). Такая процедура используется в широко распространённом в теоретической химии методе *молекулярной динамики*.

Левитт и Варшель в 1975 году первыми успешно применили молекулярную динамику для определения конформации белка. Они предложили достаточно простую модель белка, в которой учитывались только вращения каждого аминокислотного остатка относительно соседних с ним, а движения отдельных атомов внутри аминокислотных остатков усреднялись по времени. Мы видим здесь два уровня описания (вспомним «многоуровневые модели» в названии пре-

ЧАСТИЦЫ

КВАНТОВО-НЬУТОНОВСКОЙ МОЗАИКИ

*If I have seen further
it is by standing on the
shoulders of giants.*

Isaac Newton, 1676

Интересно вспомнить общую картину, важной частью которой стали работы нынешних лауреатов Нобелевской премии по химии Мартина Карплуса, Майкла Левитта и Арье Варшеля.

Первой молекулой, описанной методами квантовой механики в 1927 году Вальтером Гайтлером и Фрицем Лондоном, была молекула водорода, точнее, её ион H_2^+ . К 1940—1950-м

годам уже были рассчитаны энергетические уровни небольших молекул. В 1954 году Нобелевская премия по химии «за исследование природы химической связи и его применение к объяснению строения сложных молекул» была присуждена Лайнусу Полингу (кстати, один из нынешних лауреатов, Мартин Карплус, был аспирантом Полинга в начале 1950-х годов), в 1981 году — «за разработку теории протекания химических реакций» Роалду Хофману и Кэниши Фукуи. В 1998 году Нобелевской премии

по химии были удостоены Вальтер Кон и Джон Попл «за развитие методов квантовой химии».

К настоящему времени методами квантовой химии рассчитываются системы, содержащие многие десятки атомов. Для сравнения скажем, что молекула АТФ, «энергетическая валюта» клетки, содержит около пятидесяти атомов; входящий в состав гемоглобина гем — около восьми десятков атомов; небольшой белок — тысячи, а крупные белковые комплексы — десятки тысяч атомов.

Применение методов квантовой механики, разумеется, начиналось с изучения *структуры* молекул. Первая же модель *химиче-*

мии): один — детальный, другой — усреднённый. Этот пример также показывает, как наука близка к искусству: великий скульптор Микеланджело говорил, что он берёт кусок мрамора и просто отсекает всё лишнее. Так же и учёный берёт изучаемую систему и выделяет в ней самое главное. Только, в отличие от скульптора, остальное он не отбрасывает, а усредняет.

Однако химия — это не только структуры, но и химические реакции. Превращения веществ всегда сопровождаются изменением электронного строения молекул, поэтому для теоретического описания химических реакций надо учитывать движение электронов. Но электрон не подчиняется законам классической механики, здесь требуется квантовая механика, а её уравнения в применении к химическим системам оказываются очень сложными даже для численного решения, причём сложность резко возрастает с увеличением числа атомов. Современные методы квантовой химии позволяют неплохо рассчитывать молекулы, состоящие из десятков атомов, но в белках атомов в десятки и сотни раз больше.

Квантовая механика даёт детальное описание, но она очень трудная, классическая механика намного проще, однако испытывает сложности в описании химических реакций. Что же делать? Ответ сейчас кажется вполне естественным: взять лучшее от обеих теорий. Оказалось, что в химии

такое возможно. И первыми это поняли и осуществили лауреаты премии 2013 года. Они учли, что в самом акте химической реакции участвует лишь небольшая группа атомов — например активный центр в белках, а остальные атомы создают для этой группы усреднённое силовое поле. Таким образом, вся молекулярная система разбивается на две части: активная часть описывается по возможности точно, квантово-механически, с учётом влияния окружения, а само окружение — упрощённо, с помощью классической механики. Эту идею использовали для анализа электронного строения органических молекул Карплус и Варшель, а к реакциям в биологических системах её первыми применили Варшель и Левитт в знаменитой статье 1976 года «Диэлектрическая, электростатическая и пространственная стабилизация карбониевого иона в реакции в лизоциме».

Лизоцим — водорастворимый белок, который разрушает клеточные стенки бактерий путём гидролиза некоторых органических молекул. Для этого молекула (её называют субстратом) должна попасть внутрь белка, в его активный центр, где и происходит реакция. Варшель и Левитт разбили весь комплекс «белок — субстрат» на две части: в квантово-механическую часть они включили 15 атомов (C, N, H, O) из активного центра и субстрата, а движение всех остальных атомов описали классически, с помощью

ских реакций в среде была построена в рамках *макроскопического* подхода. В 1956 году канадский химик Рудольф Маркус предложил и в последующие годы развил макроскопическую теорию реакций с переносом заряда*. Эта теория, обладая физической ясностью и широкой сферой применения, сыграла значительную роль в развитии физической химии (в 1992 году Р. Маркус был удостоен за неё Нобелевской премии по химии). Практически одновременно начиная с 1959 года более общую теорию, учитывающую как классиче-

скую составляющую отклика среды, так и её квантовые свойства, развивал Р. Р. Догондзе в сотрудничестве в разное время с Ю. А. Чизмаджевым, А. М. Кузнецовым и В. Г. Левичем в Институте электрохимии АН СССР (ныне — Институт физической химии и электрохимии им. А. Н. Фрумкина). В какой-то мере определение «многоуровневая модель» можно применить к теории Догондзе с той разницей, что разделение химической системы на классическую (макроскопическую) и квантовую подсистемы он провёл не по принципу «далеко—близко» от реакционного центра, а очень изящно, на основании фактического квантового или

классического поведения этих подсистем (возможность «туннелирования» и т.п.).

В представлении Нобелевского комитета упоминаются также другие исследователи, внёсшие, наряду с нынешними лауреатами, свой вклад в развитие современного сегодня направления в исследованиях химических реакций: Дж. Гао, Ф. Маццарас, К. Морокума, У. Г. Синг, П. Кольман, Х. М. Сенн, В. Тиель.

**Кандидат физико-математических наук
Василий ПТУШЕНКО,
Московский государственный университет
им. М. В. Ломоносова.**

* Подробнее об этом см. «Наука и жизнь» № 6, 2012 г.

функции взаимодействия, изображённой на рисунке*. Более того, они добавили и третий уровень, включив в уравнения молекулы растворителя — воды. Тем самым были учтены все виды энергии, которые влияют на протекание химической реакции. Несмотря на многоуровневость модели и все возможные упрощения, уравнения движения — классические и квантовые — всё равно оставались достаточно сложными, однако компьютерные мощности того времени уже позволяли их решить с помощью численных методов. В результате была получена подробная картина движения атомов в ходе разрыва химической связи в субстрате, происходящего внутри активного центра. Так впервые с помощью компьютера люди смогли заглянуть в самое «сердце» химической реакции, происходящей в живых организмах.

Именно в этой статье впервые был применён термин «гибридный квантово-классический метод». В последующие годы бурное развитие компьютерных возможностей привело к созданию гораздо более совершенных расчётных методик (для их описания используют аббревиатуру QM/MM — quantum mechanics/molecular

mechanics). Был накоплен огромный объём расчётной информации, основанной на более точных экспериментальных данных, однако физические идеи остались теми же самыми, и заслуга в этом «отцов-основателей» гибридных методов: Мартина Карплуса, Майкла Левитта и Арье Варшеля.

Несмотря на гигантские возможности, которые предоставляют компьютеры химикам-теоретикам, фактически превратив многих из них в программистов, научных проблем в области молекулярного моделирования остаётся ещё много. Главная из них — отсутствие общего рецепта разбиения молекулярной системы на квантовую и классическую части. До сих пор это вопрос творческий, который для каждой конкретной биохимической системы решается по-разному. Главные требования к современным молекулярным моделям остаются теми же, что и десятки лет назад: адекватный учёт «физики процесса» и хорошее согласие с экспериментальными данными.

Конечно, компьютеры изменили характер теоретической химии, однако не убили её творческой составляющей, а лишь расширили её возможности, включив в них живые системы.

* Заметим справедливости ради, что при решении уравнений квантовой механики использованы численные методы, ранее разработанные Карплусом.

**Доктор физико-математических наук
Вадим ЕРЁМИН,
химический факультет МГУ
им. М. В. Ломоносова.**



ОПАСНАЯ НАУКА

Дэвид Гудстейн, американский физик, преподающий в Калтехе, обычно начинает курс лекций по статистической механике такими словами:

— Людвиг Больцман, потративший много сил на изучение статистической механики, покончил с собой в 1906 году. Такая же судьба постигла в 1933 году Пауля Эренфеста, продолжившего его труды. Теперь настал наш черёд заняться статистической механикой. Наверное, будет разумно подойти к этому предмету с некоторой осторожностью.

ДАРВИН-БИЗНЕСМЕН

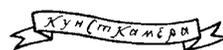
Отвечая на вопросы психологической анкеты, распространявшейся среди английских учёных с целью выяснить помогающие их работе черты личности, Чарлз Дарвин написал: «Особых талантов не имею, разве что талант к бизнесу, что доказывается аккуратным ведением всех счетов моего бюджета, регулярными ответами на все поступающие письма и умением очень удачно вложить деньги».

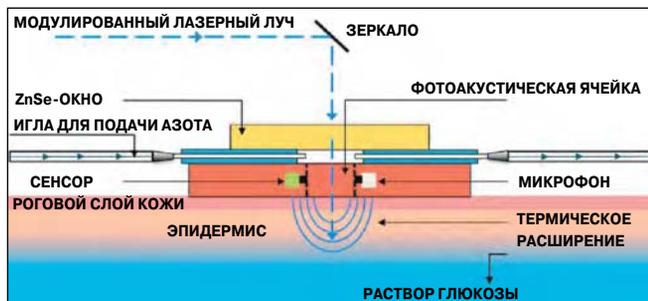
ПОДРУЧНОЕ СРЕДСТВО

Выдающийся американский генетик Сьюэл Райт (1889—1988), читая студентам лекции, делал много записей на доске, так что за время лекции ему приходилось три-четыре раза стирать мате-

матические уравнения и генетические схемы, чтобы освободить место для новых.

Однажды он принёс для демонстрации студентам морскую свинку редкой, генетически обусловленной расцветки. Свинка никак не желала спокойно сидеть на столе, и, чтобы утихомирить грызуна, лектор зажал его под мышкой, а другой рукой быстро писал что-то на доске. Когда доска кончилась, Райт, перепутав свинку с тряпкой, принялся стирать ею надписи с доски. Животное отчаянно запищало, лектор от неожиданности выпустил его, свинка заметалась по аудитории, и лекцию на этом пришлось завершить.





ЛАЗЕР ИЗМЕРЯЕТ САХАР У ДИАБЕТИКОВ

Швейцарские физики предложили определять содержание глюкозы у больных диабетом с помощью лазера. Главное преимущество нового метода контроля — его неинвазивность, то есть пациентам не надо несколько раз в день колоть палец с тем, чтобы получить каплю крови на анализ. Как сообщили авторы исследования на 9-й Международной конференции по диодной лазерной спектроскопии (TDLs-2013), состоявшейся в Физическом институте им. П. Н. Лебедева РАН, пациентов, нуждающихся в постоянном мониторинге содержания глюкозы в крови, в мире насчитывается примерно 366 млн человек.

Метод основан на лазерной спектроскопии. В своих экспериментах сотрудники Института квантовой электроники, лазерной спектроскопии и сенсоров (г. Цюрих, Швейцария) использовали квантовый каскадный лазер (ККЛ). С помощью ККЛ можно изучать содержание в тканях человека сложных химических соединений, к каковым относится и глюкоза. ККЛ представляют собой полупроводниковые лазеры, излучающие в инфракрасной области. Их основное отличие от обычных полупроводниковых лазеров — в механизме возникновения излучения. Если излучение электромагнитных волн в обычных полупроводниковых лазерах возникает при рекомбинации электронно-дырочных пар, то в ККЛ излучение генерируется при переходе электронов меж-

ду тонкими слоями различных материалов (гетероструктур), так что один электрон рождает несколько квантов. Длину волны излучения в таких лазерах можно регулировать, изменяя толщины слоев. Отметим, что эти мощные лазеры невелики, — их характерные размеры составляют 3 мм, что открывает широкие возможности для использования в медицине.

То или иное вещество по-разному поглощает излучение разной длины волны и имеет свой, присущий только ему характерный спектр поглощения, по которому можно это вещество идентифицировать. Так и у глюкозы есть свой спектр поглощения и длина волны, на которой это поглощение максимально. Метод, предложенный исследователями из Цюриха, использует эффект возникновения акустических волн в испытуемой среде под действием оптического излучения (фото-термоакустический эффект). Заключается он в нагреве объема среды при поглощении ею ИК-излучения определенной длины волны. Этот нагрев влечёт за собой изменение плотности среды (или механических напряжений в среде). Если мощность падающего излучения меняется (модулируется), происходят временные изменения плотности, что возбуждает в среде акустические волны. Построив калибровочную кривую акустического ответа исследуемого материала на лазерное излучение, можно определить концентрацию интересующего вещества, в данном случае — глюкозы.

Фотоакустическая ячейка для измерения уровня сахара в образцах кожи, контактирующих с водным раствором глюкозы. На схеме показано термическое расширение нагреваемого объема биологического образца при поглощении лазерного излучения.

Свои эксперименты швейцарские физики проводили в средней ИК-области спектра: именно на этих длинах волн возможно определение содержания глюкозы во внутритканевых жидкостях кожи. Излучение квантового каскадного лазера (длины волн 9 и 13 мкм) направляли в фотоакустическую ячейку объемом 78 мм³. Ячейка снабжена микрофоном для детектирования возникающего фотоакустического сигнала и сенсором для измерения относительной влажности и температуры кожи испытуемого. Дело в том, что часто кожа имеет слишком высокую влажность, вода же сама по себе поглощает излучение в средней ИК-области, меняя спектр поглощения испытуемой среды. Поэтому для снижения влажности кожи и исключения паразитного поглощения экспериментальная ячейка постоянно продувалась азотом. В модельном эксперименте кусочек кожи находился в контакте с водным раствором глюкозы с концентрацией от 0,1 до 10 г/дл, которая диффундировала в испытуемый образец. На данный момент исследователям удалось достигнуть чувствительности метода в 100 мг/дл, что отвечает физиологическому изменению концентрации глюкозы в крови (30—500 мг/дл), но для определения уровня сахара этого недостаточно: она должна быть примерно в 10 раз выше, над чем экспериментаторам ещё придётся поработать. Пока же в планах исследователей — испытание фотоакустического метода определения глюкозы в межтканевой жидкости кожи здоровых добровольцев после так называемого теста на толерантность к глюкозе и одновременное определение у них содержания глюкозы в крови традиционным методом для сравнения получаемых данных.

Татьяна ЗИМИНА.

● ВЕСТИ ИЗ ИНСТИТУТОВ

ВЗЛЁТЫ И ПАДЕНИЯ

Кандидат исторических наук Игорь АНДРЕЕВ, профессор МГПУ.

Три века династии Романовых — немалая часть истории России, фактически завершившая её дореволюционный этап. По воле Его Величества Случая, Рока, Промысла или законного права наследования — каждый выбирает нужное в зависимости от своих убеждений и пристрастий — носители этой фамилии триста лет стояли во главе страны. И едва ли не столько же лет современники и потомки прикидывали (да и сейчас прикидывают): во благо или во зло России правил либо номинально сидел на её престоле тот или иной монарх из этой династии?

В середине XIX века, когда «железный» Николай I скоропостижно скончался, либерально-стелющаяся дворянская интеллигенция впала в настоящую «арифметическую» эйфорию. «Знатоки» прошлого утверждали, что на российском престоле издавна чередовались «хорошие» и «плохие», «удачные» и «неудачные» государи. К примеру, Елизавета — «хорошая», Пётр III — «неудачный», Екатерина Великая — «удачная», Павел I — «плохой»... По такому раскладу после «плохого» Николая I должен следовать «хороший» Александр II, от которого в либеральном лагере ждали реформ и в самом деле дождались... Однако сия логика для оценки исторической роли Романовых едва ли годится. Николай II, согласно этим выкладкам, попадает в разряд «удачливых». Так что рассуждения подобного рода неуместны: далее — трагедия... Итак, оценка Романовых методом «чередования» обречена на провал.

Оказавшись в центре отечественной истории, Романовы сполна уплатили за свою «звёздную» популярность, став объектом научных изысканий и обывательских оценок. При этом оценки монархов в короткие сроки могли кардинально меняться, подчиняясь непостоянной логике массового исторического сознания, мало озабоченного поиском исторической правды. Да и оценки Романовых историками сильно разнились и разнятся — в зависимости от взглядов и нравственных установок их авторов.

Среди царственных особ едва ли можно найти фигуру, отношение к которой не колебалось бы от восторженного «рго» до резкого «сонго». Кажется, только Екатерину I, государственная значимость которой ничтожна, никогда не возносили на пьедестал да обходили прискорбным молчанием Ивана Антоновича — несчастного младенца, лишённого сначала трона и семьи, а затем и жизни.

А вот такие правители, как Фёдор Алексеевич, Анна Иоанновна, Елизавета Петровна и даже Пётр III, в некоторых исследованиях неожиданно выступают как выдающиеся государственные деятели, много обещавшие, но по каким-то причинам либо совсем, либо не до конца проявившие себя. Что же касается таких масштабных фигур, как Пётр I, Екатерина II

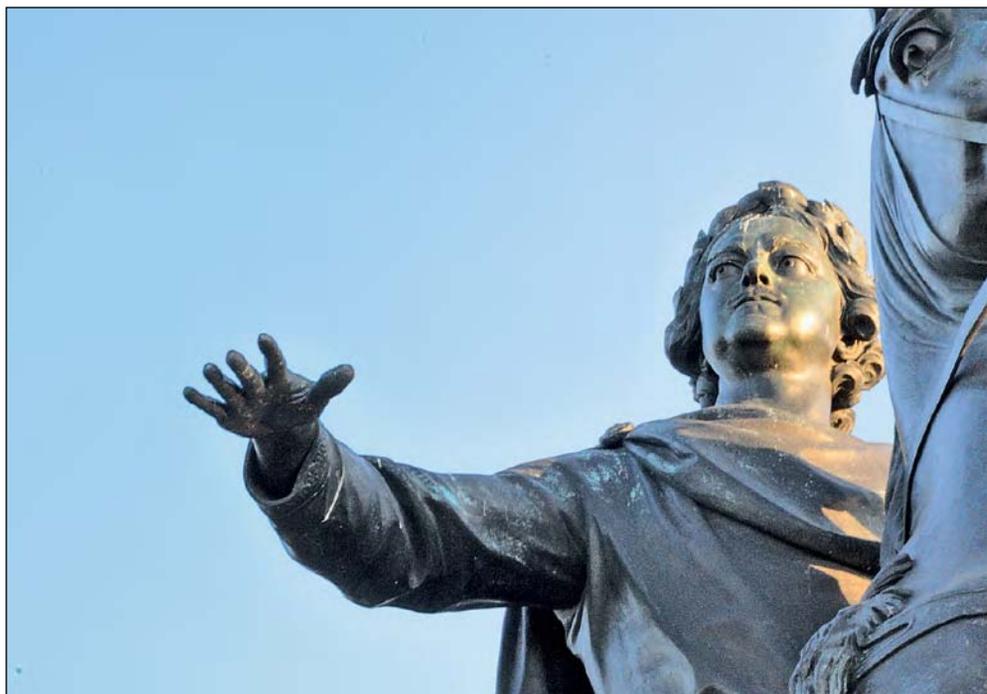
или Александр II, то разнообразие оценок (вкуче с эмоционально возбуждёнными всплесками) поистине впечатляет. И в таком бесконечном движении маятника нет ничего необычайного и необъяснимого. Прошлое уже не изменится. Но изменяется наше отношение к нему.

Из этого вовсе не следует, что надо отказаться от попыток понять и оценить династию в целом. В конце концов перепуганный и растерянный пятнадцатилетний Михаил Фёдорович Романов и его матушка старица Марфа, справедливо упрекавшая русских людей в том, что они «измалодушествовались» (то есть постоянно изменяли присяге), сами избрали в феврале 1613 года свой царственный жребий. И какими бы разными ни были семнадцать правителей династии, это вовсе не отменяет вопроса о месте династии в истории страны и её вкладе в эту историю. Понятие «династия» объединяет и связывает как её основателей, так и их наследников. И такая связь не одна лишь история, а нечто большее — это страна, в которой они правили и которая менялась в результате принятых ими решений.

На историю династии — о ней журнал «Наука и жизнь» рассказывал в течение нынешнего года — авторы статей смотрели как на чередование ответов на вызовы времени, встававшие перед Россией (см. №№ 3 — 9). Они, эти вызовы, различны по масштабу, характеру, остроте... Вызовы расширения территории, освоения пространства — задачи чрезвычайно важные для становления России. Отстаивание независимости и обре-

● ОТЕЧЕСТВО

Страницы истории



тение достойного международного статуса. Преодоление отсталости, внутреннего хаоса и т.д. Задача правящей династии — найти во всех случаях адекватные ответы. И Романовы здесь накопили богатый опыт. В его широком «списке» нашлось место и для сформировавшихся *династических традиций преодоления вызовов*. Главные среди них — доминирующий стиль мышления, способы и приёмы, нравственные доминанты, включающие пределы допустимого...

Династические традиции, довлея над Романовыми, помогали либо, напротив, мешали им найти удачные решения. В конечном счёте они влияли на результаты найденных ответов на вызовы времени. А из результатов и их «стоимости» складываются представления о вкладе династии Романовых в историю страны.

ДИНАСТИЧЕСКИЙ СТИЛЬ

Повседневной формой для большинства Романовых стал военный мундир. Даже императрицы в ответственные моменты облачались в «мундилообразное платье», подчёркивая тем значимость происходящего и свои претензии на новый статус. Преображенский мундир Екатерины II в день переворота, дополненный голубой лентой

Пётр I. Один из ракурсов знаменитого «Медного всадника» работы Этьена Мориса Фальконе (1716—1791). Памятник установлен в 1782 году на Сенатской площади Санкт-Петербурга.

Андрея Первозванного вместо красной ленты ордена Святой Екатерины, явственно сигнализировал о смене персон на троне. (Голубую ленту, о которой в впопыхах забыли, сняла с одного из сановников княгиня Дашкова, Екатерина Малая, очень гордившаяся своей сопричастностью к перевороту.)

Военный мундир — вот подлинная «кожа Романовых» и одновременно символ того, в чём более всего они сильны. По крайней мере, так они сами считали.

Но следует заметить: подавляющее большинство династий в истории страдают «милитаристским синдромом». Прежде всего, потому, что ещё со времён Древнего Рима именно военное дело считалось достойным триумфатора-императора-правителя. Да и в перечне главных задач и достоинств монарха защита собственной территории, а при случае и завоевание чужой стояли на первом ме-

● РАЗДУМЬЯ УЧЁНОГО



Николай I. Памятник работы Петра Карловича Клодта (1805—1867), созданный по проекту Огюста Монферрана (1786—1858). Установлен памятник (на фото: один из ракурсов) в 1859 году на Исаакиевской площади в Санкт-Петербурге.

сте. Словом, война — истинно царское дело, а в мирное время оно сменяется подготовкой к войне — учениями и парадами.

В российском варианте приверженность монархов к военному делу усугублялась рядом обстоятельств. С одной стороны, необходимостью защиты открытых территорий, с другой — стремлением к территориальным приобретениям. Говорю об этом вовсе не для того, чтобы подчеркнуть экспансионистский характер романовской России. Новая династия лишь откликнулась на «вызовы», отражавшие особенности исторического развития страны: с её местоположением на двух континентах; с экстенсивным характером народного хозяйства; с дворянством и крестьянством, равно мечтающими об обретении «подрайской земли»; наконец, с национальным менталитетом, когда «много» и есть «хорошо», а «мало» всегда «плохо».

При Романовых Московское царство стало Российской империей — в то время

наиболее эффективной конструкцией государственного устройства. Империя же (в силу устройства) милитаризирует жизнь подданных, особенно элиты. И действительно, в организации обороны или достижения статуса первоклассной военной державы Романовы сделали очень много. Если кто-то и осмеливался попробовать на прочность Российскую империю, то очень скоро оставлял эту затею — слишком дорого она обходилась.

Увлечённость военным делом вошла в кровь и плоть династии. Сюда направлялись силы, энергия, талантливость. В массовом представлении начало этой увлечённости связано с именем Петра Великого и его «потешными» войсками. На самом деле всё началось раньше. Уже Алексей Михайлович живо интересовался военными достижениями и знаниями. Правда, в отличие от сына, он не попадал под обстрелы и не ходил в атаку. За осадой Смоленска и Риги наблюдал издали, так что «к ядрам и пулям близко не ходил», соответственно и они к нему «не ходили» (перифраз письма Петра к сестре, царевне Наталье Алексеевне, которая упрашивала брата не рисковать; царь в ответ балагурил — сам под пули не лез, но был там, где пули «ко мне ходят»). Это не мешало Тишайшему причислять себя к знатокам военного дела и наставлять воевод в вопросах стратегии и тактики.

Лёгкое военное «недомогание» отца у Петра переросло в настоящую «армейско-флотскую лихорадку», и она (за редким исключением) больше не покидала Романовых. «Болезнь» стала наследственной, с тяжелейшими приступами парадомании и шагистики. Тем не менее забота об армии и поддержание её престижа оказались одним из приоритетов династии.

Однако в том, как Романовы пытались обеспечивать безопасность империи и разрешать международные противоречия (так, как это понимали в Москве, а затем в Петербурге), не всё однозначно. Хватало и ошибок, и недопонимания, и откровенной глупости. Сильная сторона династии оборачивалась слабостями. Склонность к военному решению проблем воспринималась как универсальное средство если не для всех, то для большинства вопросов. Военное мышление могло возобладать там, где оно вовсе не должно было иметь место.

Грубый окрик, испепеляющий взгляд, указующий жест представлялись верным средством «убеждения» в общении с подданными. И таких подданных лучше всего облачить в форму. Романовы сами оделись в мундиры и элиту одели, превратив ми-