

**ВСЕРОССИЙСКАЯ НАУЧНАЯ КОНФЕРЕНЦИЯ ПО КВАНТОВОЙ
И МАТЕМАТИЧЕСКОЙ ХИМИИ (УФА, 2017)**

В ноябре 2017 г. в столице Республики Башкортостан г. Уфе была проведена Всероссийская научная конференция по квантовой и математической химии (Уфа, 13–17 ноября 2017 г.). В организации и проведении конференции приняли участие три крупнейшие научные и образовательные организации г. Уфы – Уфимский институт химии РАН (УФИХ РАН), Уфимский государственный нефтяной технический университет (УГНТУ) и Башкирский государственный университет (БашГУ). Сама конференция прошла в превосходно технически оборудованных залах заседаний УГНТУ и приняла гостей – лучших научных специалистов по тематике конференции из Москвы, Новосибирска, Казани, Екатеринбургa, Волгограда, Перми и других научных центров нашей страны.

Необходимость проведения научной конференции по математической и квантовой химии назрела давно. Во-первых, мы живем во время бурного развития информационных технологий, которые в значительной степени изменили окружающий мир, повлияли на все сферы деятельности человека, в том числе науку. Все больше в практику научных исследований входят подходы и методологии, основанные на использовании математических моделей процессов и систем и высокопроизводительных расчетах. Современная химия не только не является исключением, но и представляет пример масштабной «экспансии» математики в сферу своих интересов. Во-вторых, усложнение научного оборудования, методов химического анализа и исследования вещества ставит необходимость решения разнообразных математических задач, применения современных вычислительных технологий. Междисциплинарный характер научных работ только добавляет актуальности исследованиям с применением вычислительных приемов для решения научных и научно-практических задач в области строения вещества, катализа, химической технологии, материаловедения, биохимии, фармакологии и медицины.

Важнейшая составляющая любой серьезной научной конференции – это возможность прямого общения с представителями различных научных школ, обмен опытом и знаниями, укрепление научных контактов, взаимное обогащение новыми научными идеями, теориями и приемами исследований. В силу объективных причин научных мероприятий всероссийского масштаба в области квантовой химии в настоящий момент явно недостаточно. В значительной степени растеряла позиции Конференция по квантовой и вычислительной химии им. В.А. Фока (последняя, 14 сессия конференции прошла в 2014 г. в г. Самаре). Ежегодно проходит Симпозиум «Современная химическая физика» в г. Туапсе, однако исследования в области квантовой химии представлены там только в рамках небольшой сессии. В г. Иваново регулярно проводится Всероссийская молодежная школа-конференция «Квантово-химические расчеты: Структура и реакционная способность органических и неорганических молекул», однако, как видно из названия, ее целевой аудиторией являются только молодые ученые. Несколько лучше обстоят дела в области математического моделирования и высокопроизводительных вычислений. Тем не менее очевидно, что организация и проведение Всероссийской конференции по квантовой и математической химии в г. Уфе (2017 г.) было своевременно и необходимо для развития отечественной научной школы в этой области.

Решение о проведении конференции было одобрено и поддержано ведущими специалистами, учеными с мировым именем: академиком А.Л. Бучаченко, академиком В.И. Минкиным, а также академиком Н.С. Зефириным. К несчастью, Николай Серафимович не дожил до начала работы нашего форума. В ходе общения и в ряде научных докладов участники конференции высоко оценили научные заслуги и роль Н.С. Зефиринова в формировании научных представлений, определяющих современное состояние математи-

ческой и квантовой химии. Теплые слова о выдающемся ученом вошли в сборник материалов конференции [1].

В течение пяти рабочих дней конференции было прочитано 11 пленарных лекций о различных аспектах математической и квантовой химии, заслушано и обсуждено 36 устных докладов, проведена стендовая сессия. Авторами трудов, представленных на конференцию стали около 200 ученых. Очное участие в конференции приняло около 100 специалистов, с научными докладами выступили 56 человек.

Чтобы сформировать у читателя представление о научном уровне конференции, обсуждаемых направлениях развития квантовой и математической химии, проведен краткий анализ наиболее интересных докладов, вошедших в научную программу конференции. Так, пленарный доклад д.ф.м.н. Б.Н. Плахутина из Института катализа им. Г.К. Борескова СО РАН был посвящен авторской разработке новой формы метода Хартри – Фока, которая преодолевает известные недостатки ограниченного и неограниченного вариантов метода (RHF и UHF). Канонический метод Хартри – Фока (формулировка автора, мы предложили бы название – «метод Хартри – Фока – Плахутина, HFP») полностью соответствует постулатам квантовой механики и ее основополагающим теоремам (Купманса и Бриллюэна), снимает проблему «спинового загрязнения» при расчете открытых оболочек. На наш взгляд, выдающаяся работа Б.Н. Плахутина позволит вывести современную квантовую химию на качественно новый, более высокий уровень.

Вычислительным аспектам квантовой химии были посвящены пленарные доклады молодых уфимских докторов наук А.К. Фризен (УфИХ РАН) и Д.Ш. Сабирова (Институт нефтехимии и катализа РАН). В первом докладе изложена новая стройная теория радикально-координационной полимеризации, исчерпывающе объясняющая сложные экспериментальные закономерности полимеризационных процессов, проводимых в присутствии координационно-насыщенных комплексов металлов. Важно отметить, что ключевые положения этой теории были сформулированы по результатам квантово-химического моделирования с последующей экспериментальной верификаци-

ей. Работа д.х.н. А.К. Фризен – отличный пример того, что теоретические методы исследования занимают важное место в арсенале современной химии. В обзорном докладе д.х.н. Д.Ш. Сабирова изложены теоретические подходы к пониманию и прогнозированию свойств фуллеренов и их производных на основе исследования их способности к поляризуемости. Анализируются закономерности изменения поляризуемости для фуллеренов различного типа и степени функционализации, эндофуллеренов, олигомеров и ионных состояний фуллеренов. Предложены эмпирические зависимости, на основании которых возможно создание перспективных материалов для органических солнечных батарей с высокой эффективностью преобразования энергии.

По направлению конференции «Молекулярное моделирование высокомолекулярных и биологических систем» корпус пленарных докладчиков был представлен не менее достойно. Без преувеличения, классик научного направления по прогнозированию биологической активности лекарственных подобных соединений проф. В.В. Поройков (Институт биомедицинской химии им. В.Н. Ореховича РАН) подробно рассказал о созданной в его научной группе информационно-вычислительной платформе Way2Drug. Это бесплатный веб-ресурс, позволяющий любому исследователю во всем мире не только анализировать и отбирать наиболее перспективные соединения для синтеза и тестирования биологической активности, но и выявлять новые показания у известных лекарств. Блестящий доклад В.В. Поройкова вызвал интересную дискуссию при обсуждении доклада.

Впечатляющие результаты в дизайне новых нейротекторных соединений методами вычислительной химии доложены в пленарном докладе к.х.н. В.А. Палюлина (химический факультет МГУ им. М.В. Ломоносова). Фармакофорные модели и модели связи «структура–активность» для положительных аллостерических модуляторов позволили сформировать серию фильтров для виртуального скрининга и дизайна новых модуляторов на базе выявленных авторами новых скаффолдов. Современные возможности математической химии позволяют моделировать сложнейшие надмолекулярные образования, например, клеточные мембраны. Результаты таких иссле-

дований, представленные в пленарном докладе Р.Г. Ефремова (Институт биоорганической химии им. академиков М.М. Шемякина и Ю.А. Овчинникова РАН), важны не только для понимания специфических и регуляторных функций клеточных мембран, но и позволяют подойти к конструированию новых поколений нано-объектов, отличающихся высокой биологической активностью и уникальными свойствами.

В рамках секции «Математическое моделирование кинетики и механизмов реакций и сложных химико-технологических процессов» были представлены результаты детального моделирования процесса пиролиза этана с дополнительной активацией за счет лазерного излучения, докладчик – к.ф.-м.н. В.Н. Снытников (Институт катализа им. Г.К. Борескова СО РАН). Создана пространственно трехмерная модель турбулентности в потоке газа с химическими реакциями и лазерной активацией. Совокупность авторских результатов позволяет разработку эффективных процессов пиролиза этана, сочетающих высокую конверсию сырья и невысокие (600–700°C) температуры при атмосферном давлении. Другой актуальный технологический процесс, основанный на пиролизе и используемый для переработки углеродсодержащего сырья в составе промышленных и бытовых отходов, исследуется в работе д.ф.-м.н. В.И. Быкова (Институт биохимической физики им. Н.М. Эмануэля РАН). Интересной научной находкой автора является использование периодического изменения температуры как фактора интенсификации процесса. С помощью кинетического моделирования показано, что при осциллирующей температуре могут быть достигнуты большие степени превращения по сравнению со стационарным режимом. Этот результат согласуется с экспериментальными данными по флеш-пиролизу биомассы в установке в режиме «нагрев – охлаждение». Еще одним важным практическим выводом, полученным с помощью авторской кинетической модели, является доказательство существенной интенсификации процесса переработки углеродсодержащего сырья в нестационарном температурном режиме при наличии разветвленно-цепного процесса пиролиза.

В пленарном докладе д.х.н. А.В. Мышляцева (Омский государственный технический уни-

верситет) изложены положения метода трансфер-матрицы (МТМ) для определения концентрационных зависимостей констант скоростей физико-химических процессов на поверхности твердых тел, таких как адсорбция, десорбция, поверхностная диффузия, в рамках модели решеточного газа и теории переходного состояния. Так как МТМ дает точное значение большой статистической суммы для полубесконечной системы (бесконечной в одном направлении и конечной в остальных), то он является, по-видимому, наилучшим дополнением к методу Монте-Карло.

Доклад д.ф.-м.н. С.И. Спивака (БашГУ, Институт нефтехимии и катализа РАН) посвящен математическому анализу измерений при моделировании сложных реакций, основанному не на статистической модели эксперимента. Следуя идее лауреата Нобелевской премии академика Л.В. Канторовича, в качестве модели эксперимента предполагается информация о величине предельно допустимой погрешности. Поскольку не всегда эта величина известна (особенно при исследовании социально-экономических систем), целесообразным является рассмотрение предельно допустимых погрешностей аппроксимации как неизвестных величин. А определение параметров моделей необходимо осуществлять с учетом, во-первых, близости расчетных и экспериментальных данных; во-вторых, – минимально возможной области предельно допустимых погрешностей аппроксимации; в-третьих, – приемлемого уровня вариации оцениваемых параметров. На основании перечисленных принципов разработан метод определения точечных и интервальных оценок параметров модели, позволяющий идентифицировать модель с наилучшими качественными характеристиками, и, как следствие, эффективно решать задачи получения прогнозных оценок.

Проблемный обзорный доклад о современных вызовах математической и квантовой химии был представлен чл.-корр. РАН С.Д. Варфоломеевым (Институт биохимической физики им. Н.М. Эмануэля РАН, химический факультет МГУ им. М.В. Ломоносова) и посвящен исследованию молекулярных механизмов катализа ферментами. Методы молекулярной механики, молекулярной динамики, квантовой химии оказались в высшей степени плодотворными при расшифровке элементарных

процессов в каталитическом цикле белкового катализа. Общие подходы проанализированы на примерах исследования конкретных ферментных реакций, включая сериновые протеазы, ацетилхолин- и бутерилхолинэстеразы, N-ацетиласпартазу мозга человека. Некоторые возможные практические приложения суперкомпьютерных вычислений в молекулярной медицине и конструировании лекарств, озвученные автором доклада, например, конструирование лекарства, ориентированного на конкретного человека, сегодня звучат как научная фантастика. Однако прогресс квантовой и математической химии, развитие естественных наук в целом и наук о жизни и человеке в частности, не менее удивительны и внушают обоснованную надежду, что самые сложные научные задачи, стоящие перед нашим обществом, будут успешно решены.

Особый колорит работе конференции придало участие компании Schrödinger® – мирового лидера в области вычислительной химии, предоставляющей программные решения и услуги для исследований в области материаловедения и наук о жизни. Компания Schrödinger® является ведущим поставщиком новейших разработок в области молекулярного моделирования и корпоративного программного обеспечения, а также услуг, призванных ускорить и сделать более эффективным процесс поиска и создания новых соединений. Среди клиентов компании практически все основные мировые фармацевтические и биотехнологические компании, а также ведущие исследователи и ученые в области молекулярного моделирования и материаловедения. С целью ознакомления участников конференции с основными принципами рационального дизайна новых соединений и материалов представителями компании Schrödinger® были проведены два научно-практических семинара с использованием программных продуктов компании.

На семинаре по использованию методов биоинформатики для моделирования лекарственных соединений участникам конференции была предоставлена возможность познакомиться с одним из главных продуктов компании – пакета SMALL-MOLECULE DRUG DISCOVERY SUITE, позволяющего реализовать комплексный подход к разработке новых биологически активных соедине-

ний. В течение семинарского занятия ученые протестировали программное обеспечение в действии и получили полностью функциональную лицензию программы на определенный период. Благодаря превосходному техническому оснащению УГНТУ, второй семинар по молекулярно-динамическому моделированию для анализа и разработки новых материалов был проведен on-line с использованием интернет-моста между Кембриджем (Великобритания) и Уфой. Представитель компании Schrödinger® Якоб Гавартин рассказал о достоинствах сочетания комбинаторной и квантовой химии с автоматизированными вычислительными процедурами для рационального дизайна принципиально новых материалов. После краткого обзора еще одного программного продукта компании Schrödinger® MATERIAL SCIENCE участники семинара рассмотрели конкретные приложения, связанные с разными аспектами стабильности материалов, такие как химическая деградация, растворимость и термо-физические свойства.

Программа конференции включала в себя проведение конкурса молодых ученых, подготовивших ряд интересных устных и стендовых докладов. Оргкомитет конференции и жюри отметили дипломами первой степени работы Левицкой Алины (Казань) «Атомистическое моделирование нелинейно-оптических полимерных материалов на основе эпоксиаминных олигомеров с хромофорами в боковой цепи» и Плотниковой Анастасии (Волгоград) «Моделирование динамики сверхбыстрого нестационарного поглощения фенолята пириллия в ацетонитриле». Дипломами второй степени отмечены Малеев Александр (Нижний Новгород) за устный доклад «Оценка биологической активности функционализированных аналогов колхицина – потенциальных антимитотических агентов методом молекулярного докинга» и Котлованов Александр (Екатеринбург) за стендовый доклад «Компьютерное моделирование биологической активности оснований Шиффа в программе Schrödinger Maestro». Третье место разделили уфимские молодые ученые Диняхметова Диана «Начальные стадии радикальной полимеризации метилметакрилата, стирола и аллилхлорида в присутствии фуллерена C₆₀» и Еникеева Лениза «Математическое моделирование внутримолекулярных превращений орто-замещенных ароматиче-

ских нитрозооксидов». Как видно из названий докладов, спектр научных проблем, обсужденных на конференции, был разнообразен и широк.

Вторая половина одного из рабочих дней конференции была посвящена культурной программе. Мы считаем эту традиционную часть работы многих научных форумов необходимой, поскольку неформальный контакт ученых на таких мероприятиях становится проще. Кроме того, знакомство с культурными достижениями, историей региона, его традициями важно для расширения общего кругозора и, наконец, просто интересно. Участники конференции осмотрели достопримечательности Уфы, в том числе, конечно, конную скульптуру Салавата Юлаева. Любопытно, что наше посещение памятника пришлось как раз на 50-летие открытия этого символа Уфы и Башкортостана. Ученые нашей страны посетили Музей археологии и этнографии УНЦ РАН, осмотрели впечатляющую историческую коллекцию артефактов музея и, конечно, уникальную экспозицию «Золото сарматов». В завершение культурной программы участники конференции насладились творчеством выдающихся русских художников, произведения которых составляют золотой фонд Башкирского государственного художественного музея им. М.В. Нестерова. Поскольку время проведения конференции совпало со 100-летием Октябрьской революции, ставшей событием непреходящего значения для судеб России и всего мира, сотрудники музея подготовили исключительно интересную экспозицию, посвященную этому историческому событию и размещенную в нескольких больших залах музея. Эта экспозиция вызвала неподдельный интерес как старших коллег, так и молодых ученых. Мы не можем не отметить высокий профессионализм и исключительное радушие сотрудников обоих музеев, что, безусловно, усилило общее благоприятное впечатление от увиденного.

На закрытии конференции участники единодушно отметили хорошую организацию науч-

ного мероприятия, высокий научный уровень конференции. Особо следует отметить консолидированное пожелание научной общественности о необходимости проведения научной конференции по квантовой и математической химии на регулярной основе в масштабе Всероссийского или Международного научного форума. Также гости Уфы отметили, что научный потенциал нашего региона, разнообразие направлений научных исследований уфимских ученых в области квантовой и молекулярной химии делают город Уфу идеальным местом для проведения таких конференций. Будем надеяться, что при активной научной и финансовой поддержке Академии наук Республики Башкортостан, ведущих научных и образовательных организаций города Уфы, талантливых ученых нашего региона эти по-хорошему амбициозные планы смогут претвориться в жизнь.

Авторы от имени Оргкомитета конференции выражают искреннюю благодарность ректоратам Уфимского государственного нефтяного технического университета и Башкирского государственного университета, дирекции Уфимского института химии УФИЦ РАН за материальное обеспечение конференции и всестороннюю помощь. Мы признательны компании Schrödinger® за помощь в организации и проведении научных семинаров. Особая благодарность Заслуженному работнику культуры РБ Абдульмановой Зинфире Тимерхановне, декану общественного факультета творческого развития и культуры УГНТУ за бескорыстную помощь в организации культурной программы конференции.

Литература

1. Всероссийская научная конференция по квантовой и математической химии (Уфа, 13–17 ноября 2017 г.): сб. тез. докл. Уфа: Изд-во УГНТУ, 2017. 134 с.

*ХУРСАН Сергей Леонидович, д.х.н.
БОРИСЕВИЧ София Станиславовна, к.х.н.
СПИВАК Семен Израилевич, д.ф.-м.н.
КАНТОР Евгений Абрамович, д.х.н.*