

Предисловие

Настоящий выпуск «Российского химического журнала» посвящен компьютерной химии – области теоретической химии, в которой для решения различных химических проблем применяются вычисления с использованием компьютеров. Ареал компьютерной химии исключительно широк. Он простирается от применения методов математической статистики для анализа разнообразных корреляционных задач, ориентированных, например, на предсказание биологической активности, для компьютерного дизайна лекарств и катализаторов химических реакций, расчетов динамических процессов и решения других задач с помощью молекулярного моделирования до расчетов электронного и пространственного строения молекул, их спектральных характеристик и механизмов реакций. Основой последнего направления является квантовая химия – раздел квантовой механики, прошедший с начала его становления в 30-е годы прошлого столетия гигантский путь развития. Представленные в настоящем выпуске статьи международного коллектива авторов посвящены именно этому направлению компьютерной химии.

Благодаря колоссальному прогрессу вычислительной техники квантовая химия стала в настоящее время мощным самостоятельным инструментом исследования химических объектов и явлений, а достигнутая точность неэмпирических квантовохимических расчетов послужила основанием для возникновения понятия «вычислительный эксперимент», который предшествует и дополняет лабораторное исследование или даже заменяет его, когда необходимо, например, детектировать короткоживущий интермедиат и оценить его физико-химические характеристики. Создание и распространение эффективных, «дружественных» для пользователя программных пакетов квантовохимических расчетов уже сделало вычислительный эксперимент рутинным инструментом исследований во многих химических лабораториях, применяемым не только для первоначального экспресс-анализа свойств вновь

синтезируемых соединений, но и для планирования возможных путей синтеза. Квантовохимические расчеты не только дают ценную количественную информацию об изучаемых структурах, их свойствах и трансформациях. Они служат также основой для выдвижения качественно новых концепций молекулярного строения и реакционной способности, создают новые структурные и механистические парадигмы, формируют новый язык и новое химическое мышление.

Прогресс и огромные достижения в компьютерной химии нашли отражение в издании специального международного журнала *Journal of Computational Chemistry*, ежегодных периодических сборников *Reviews in Computational Chemistry* (J. Wiley), а также в ряде тематических выпусков ведущих международных журналов, включая наиболее рейтинговый химический журнал *Chemical Reviews*. В то же время в отечественной научной литературе достижения компьютерной химии не были отражены на этом уровне, и настоящий специальный выпуск «Российского химического журнала» ставит целью постепенное заполнение этого пробела.

Современные квантовохимические методы расчета имеют четкую иерархию по точности получаемых результатов, по степени используемых приближений, скорости действия соответствующих программ и, следовательно, области применения. Современное состояние этих проблем отражено в обстоятельном вступительном обзоре Н.Ф. Степанова и Ю.В. Новаковской.

Если статья Н.Ф. Степанова и Ю.В. Новаковской вводит читателя в строгий мир точных формул и определений современной квантовой химии, то обзор Л.А. Грибова и И.В. Михайлова имеет некое философское звучание. Соглашаясь с П. Дираком в том, что настанет время, когда химики сотнями, если не тысячами, пойдут не в лаборатории, а к вычислительным машинам, авторы прогнозируют перспективы и ограничения виртуального мира, создаваемого компьютерной химией.

Применение методов квантовой и молекулярной механики к изучению интереснейших биологических проблем механизмов реакций ферментативного гидролиза нуклеозидтрифосфатов и процессов переноса протона в биохимически важных системах с участием молекул воды рассматривается в статье А.В. Немухина, Б.Л. Григоренко, М.С. Шадринной и в статье А.Н. Исаева. Возможности молекулярного моделирования для анализа биологически важных реакций продемонстрированы в статье Д. Вилленберга и Д. Тангилло (США), изучивших механизм ответственной стадии образования D-кольца таксола в процессе его биосинтеза, а также в работе А.Н. Исаева о роли водородных связей в процессах переноса протона в биохимически важных системах.

В обзоре Р.М. Миняева и В.И. Минкина рассмотрена история возникновения идей неклассического углеродного атома, послуживших отправной точкой систематического исследования органических и металлоорганических соединений с нестандартной валентностью и геометрией углеродных центров. Этот обзор дополняется статьей Т.Н. Грибановой с соавт., посвященной плоским молекулярным системам, содержащим гиперкоординированные атомы элементов второго периода. В статье Б.Б. Аверкиева и А.И. Болдырева (США) это направление теоретических исследований иллюстрировано новыми данными о строении и свойствах плоских циклических систем с 9- и 10-ти координированным центральным атомом бора.

Сложной проблемой теоретической квантовой химии является расчет свойств электронно-возбужденных состояний. Основные подходы к решению таких задач рассмотрены в обзоре И.В. Дорогана.

Анализ кислотных свойств и строения порфиринов и родственных им соединений дан в статье И. Алькорта, Ф. Бланко и Х. Эльгеро (Испания), а строение и необычные свойства эндоэдральных фуллеренов обсуждаются в работе А.Г. Старикова, О.А. Гапуренко, А.Л. Бучаченко, А.А. Левина и Н.Н. Бреславской. Проблеме фуллеренов посвящена также статья А.Ф. Шестакова.

Применение методов квантовой химии для изучения механизма каталитических реакций освещено в статье Ю.А. Устынюка и Ю.В. Бабина.

Обзорная статья А.А. Левина, С.П. Долина и Т.Ю. Михайловой посвящена одному из наиболее актуальных направлений современной квантовой химии, связанному с проблемами твердотельных сред, в частности, водородно-связанных материалов, проявляющих свойства сегнетоэлектриков и антисегнетоэлектриков.

Описательные и предсказательные возможности компьютерного моделирования практически важных задач, связанных с проблемами адсорбции на поверхности твердых тел, продемонстрированы в работе Р.А. Эварестова и А.В. Бандуры.

Можно быть уверенным в том, что выпуск специального номера журнала, посвященного компьютерной химии, будет способствовать дальнейшему повышению интереса российских ученых к этой бурно развивающейся области химической науки.

Академик ***В.И. Минкин***