



# Догнать и обогнать **Природу**

21–26 ноября  
2016 г. в Москве про-  
шел Первый российский  
кристаллографический кон-  
гресс «От конвергенции наук к при-  
родоподобным технологиям», организа-  
торами которого выступили Национальный  
комитет кристаллографов России, Национальный ис-  
следовательский центр «Курчатовский институт» и Фе-  
деральный научно-исследовательский центр  
«Кристаллография и фотоника» РАН. Пред-  
седателем конгресса стал президент  
НИЦ «Курчатовский институт»  
член-корреспондент РАН  
**М.В. Ковальчук.**



пленарными докладами выступили ученые, ведущие специалисты в своих областях: от классической кристаллографии до природных нанокompозитов, биоорганических кристаллов, структурного дизайна материалов и нейросетевого искусственного интеллекта.

Доклад М.В. Ковальчука «Кристаллография — методология междисциплинарной науки XXI века» открыл научную программу форума. На конгрессе прозвучало несколько сотен докладов в секциях «Современная кристаллография», «Методы и техника структурных исследований», «Кристаллография в биологии и медицине», «Образовательные аспекты современной кристаллографии», на восьми микросимпозиумах и круглых столах. Впервые работала секция, посвященная кристаллографии и когнитивным исследованиям: роль кристаллографии в понимании устройства мозга и сознания возрастает, и в этом направлении открываются большие перспективы. Еще одно актуальное направление освещалось на секции «Кристаллографические методы в гуманитарных науках». Ученые говорили об исследовании предметов искусства, археологических артефактов с помощью новейших материаловедческих методов.

Большой интерес ученых вызвал микросимпозиум «Новые источники синхротронного излучения и нейтронов». Желающих принять участие в нем было так много, что программу пришлось продлить еще на один день.

В течение недели с раннего утра до позднего вечера работали секции и микросимпозиумы, шло бурное обсуждение докладов. Залы, где проходили заседания, были переполнены, организаторам порой приходилось искать дополнительные стулья, чтобы рассадить всех желающих.

О том, что важного и нового принес нынешний конгресс, мы беседовали с его участниками.



Выступление М.В. Ковальчука на открытии Первого российского кристаллографического конгресса

**Михаил Валентинович Ковальчук**, председатель конгресса, президент Национального исследовательского центра «Курчатовский институт»:

— Конгресс стал для нас знаковым событием. Его смысл намного глубже, чем сбор кристаллографического сообщества. Меня поразили живой интерес и энтузиазм, с которыми наши ученые откликнулись на это начинание. На конгресс зарегистрировались более 2 тыс. человек. Для сравнения: в Советском Союзе в Национальном комитете кристаллографов состояло меньшее количество ученых. Что радует больше всего, почти 900 участников — люди моложе 35 лет. Это наглядное свидетельство того, что российская наука, пережив вместе со страной сложный период кластеризации, не просто выжила, а заявляет о себе во весь голос.

Мы специально не приглашали иностранных участников. Рабочий язык конгресса — русский. География городов-участников — от Калининграда до Владивостока, а самые многочисленные делегации приехали из Москвы, Ростова-на-Дону и Новосибирска. Но это ни в коей мере не означает, что мы хотим закрыться от мира. Примерно 20% докладов на конгрессе выполнены с иностранным участием. Здесь присутствуют представители Международного союза кристаллографов, а также ряда европейских научных центров.

Вообще кристаллография как наука занимает особое положение. За 100 лет она прошла сложный и интересный путь — от описательной минералогии через химию, химический анализ, новую линию роста кристаллов к физике в виде рентгеноструктурного анализа, физического материаловедения, а затем и к биологии, белковой кристаллографии. В этом ее методология

развития — от подражания природе к искусственному конструированию объектов, не имеющих аналогов в природе.

А родилась кристаллография как наука из геологии, минералогии. Наш соотечественник Евграф Степанович Федоров 100 лет назад ввел 230 пространственных групп симметрий, которые описывали все многообразие форм кристаллов. Так кристаллография стала частью математики. Затем ученые начали изучать, из чего кристаллы состоят, их состав, свойства. И кристаллография стала частью химии. Потом, с открытием рентгеновских лучей, кристаллография стала еще и частью физики: рентгеновское излучение позволило увидеть распо-

ложение атомов, сложное, трехмерное строение всех окружающих нас материалов. Собственно, отсчет развития современной кристаллографии начинается с открытия рентгеновской дифракции. Появились новые дисциплины — рентгеновская кристаллография, кристаллофизика, рентгеновская физика и оптика. В середине XX в. благодаря этой же рентгеновской дифракции кристаллография фактически породила молекулярную биологию, переведя ее из статуса описательной науки на уровень математически и физически обоснованного научного знания.

Можно выделить три крупных этапа развития кристаллографии. Первый был связан с копированием природных структур и процессов, что стало основой промышленных технологий искусственного роста кристаллов. Уже в первые годы работы Института кристаллографии им. А.В. Шубникова была заложена идеология научного развития «рост — структура — свойства». Второй этап включал в себя развитие методов структурного анализа, изучение структуры кристаллов этими



На выставке Первого российского кристаллографического конгресса

методами и переход к изучению биоорганических кристаллов. Следующий этап, который мы переживаем в настоящее время, — это качественный переход: от кристаллов к неструктурированным средам и живым системам, от макрообъектов к микро- и нанообъектам, от трехмерных к двумерным и одномерным структурам, от дифракции к недифракционным методам, таким как малоугловое рассеяние, полное внешнее отражение и др.

Сегодня более 70% всех мировых исследований приходится на живые объекты. Нанобиотехнологии уже стали, по сути, новой технологической культурой, где на атомарном уровне стираются грани между живым и неживым, между органическим природным миром и неорганикой. Созданные на их основе новые материалы и системы уже используются в медицине, энергетике, экологии, на транспорте и т.д. Дело ближайшего будущего — воспроизводство систем и процессов живой природы в виде синтетической клетки, массового создания искусственных тканей и органов, аддитивных технологий, использующих природный принцип формирования объектов, выращивая их, создавая «под заказ». Следующим шагом может стать создание искусственного интеллекта на основе когнитивных, информационных технологий и на материальной базе «нано-био».

То есть дальнейшее развитие науки возможно только путем междисциплинарности, конвергенции наук и технологий, ведь сама природа конвергентна по своей сути. Такой междисциплинарный симбиоз нанотехнологических подходов с достижениями молекулярной биологии, биоинженерии, геной инженерии, информационных технологий, когнитивных и социогуманитарных наук становится базой для развития конвергентных, природоподобных технологий. Кристаллография по своей сути конвергентна, она гораздо больше, чем просто сумма своих частей. Поэтому она будет играть весьма важную роль в создании и развитии природоподобных технологий.

**Андрей Александрович Фурсенко**, помощник президента Российской Федерации:

— Конгресс показал, что «плач Ярославны» по российской науке заканчивается. В стране наука была, есть и будет. Россия всегда была и остается страной, которая оказывает значительное влияние на научные процессы во всем мире. Так получилось, что конгресс совпал еще с одним важным

событием — заседанием совета по науке и образованию при президенте страны, на котором должна быть обсуждена Стратегия научно-технологического развития Российской Федерации до 2035 г. Стратегия не будет перечислением каких-то конкретных направлений, которыми мы занимаемся. Она нацелена на то, чтобы сформулировать принципы, подходы к науке, которых мы придерживаемся.

Наука может и должна отвечать на вопросы, которые стоят перед страной, перед всем человечеством. Ответы на них можно дать, только изменив наше понимание и экономики, и природы, и социальной сферы. Мы должны искать новые подходы и новые принципы. Кристаллография как научное направление в этом смысле очень хорошая модель, на которой люди с давних пор учились понимать строение природы. В результате эта нау-



Подготовка белкового кристалла к исследованию методом рентгеноструктурного анализа

ка структурировалась таким образом, что накрыла и вопросы, связанные с живой и неживой природой, с тем, как устанавливаются мосты между этими понятиями.

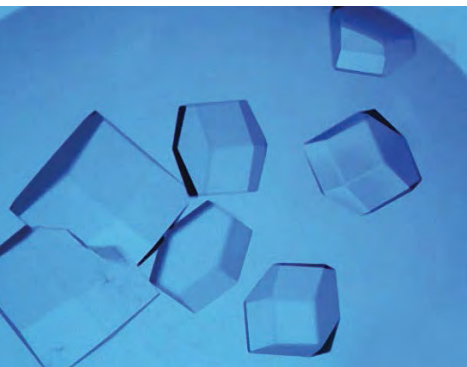
В программе конгресса прозвучали доклады, связанные не только с естественными науками, но и с гуманитарными исследованиями: ведь понимание материи дает нам пищу для понимания истории. Наука определяется личными взаимодействиями ученых. Когда мы говорим слово «конвергенция», то понимаем, что это не просто междисциплинарность конкретных направлений, а в том числе и контакты между людьми.

**Александр Дмитриевич Беглов**, представитель президента РФ в Центральном федеральном округе:

— Конгресс собрал более 160 научных организаций. Это очень много. Уникальность мероприятия в том, что оно объединило усилия лучших ученых умов, признанных авторитетов в науке и потенциал молодых ученых. Мы уже несколько

месяцев работаем над идеей, чтобы подобный форум собрал школьников. Есть очень много ребят, интересующихся этим направлением. Поэтому через год мы решили создать такой форум школьников, которые тоже будут изучать эту науку на конкретных научных базах. Таким образом появится вертикальная интеграция от школы к вузам, от вузов к национальному центру.

**Геннадий Григорьевич Онищенко**, заместитель председателя комитета по образованию и науке Государственной Думы Федерального Собрания РФ:



Кристаллы белка лизоцима, полученные при разных условиях

— Время летит очень быстро, и когда-нибудь в 2066 г. мы будем праздновать 50-летие первого конгресса кристаллографов России. Уверен, что все нынешние молодые участники в большинстве своем к тому времени станут светилами в этой области. Что мне нравится в конгрессе? Прежде всего, здоровый консерватизм, который соединил опыт, знания, огромный жизненный путь российской и советской науки и молодых людей, которые дерзко смотрят и думают: «Ну, что нового вы нам можете сказать?» А я вам должен сказать, что советская российская наука всегда могла и может сказать очень многое.

Я бы хотел еще обратить особое внимание на кумулятивную функцию, которую выполняет кристаллография в биологии, медицине, когнитивных исследованиях. Это те прорывные направления, которые во многом определяют развитие науки и экономики в нашей стране.

**Екатерина Борисовна Яцишина**, заместитель директора НИЦ «Курчатовский институт» и руководитель лаборатории естественно-научных методов в гуманитарных науках, кандидат философских наук:

— Современные технологии открывают новое перспективное исследовательское поле для целого ряда гуманитарных наук, и этот процесс идет по нарастающей.

Объектами исследования становятся прежде всего предметы живописи, скульптуры, ювелирные украшения, монеты. Кроме того, изучаются ископаемые органические и неорганические останки, письменные документы.

Сегодня мы можем различными методами углубленно исследовать строение, элементный и фазовый состав, степень сохранности разных артефактов. А это очень важно для определения методов реставрации, хранения музейных экспонатов. Помимо этого, столь детальная информация об исторических объектах проливает свет на источники сырья, технологии изготовления. То есть мы можем делать выводы о направлениях развития и распространения ремесел, формировании торговых и культурных связей.

Такие исследования объектов культурного наследия современными физическими методами идут во всем мире — в художественно-исторических музеях, исторических институтах и в естественно-научных центрах.

В НИЦ «Курчатовский институт» кроме дополняющих друг друга методик уникального для нашей страны «дуэта» специализированного источника синхротронного излучения «КИСИ-Курчатов» и источника нейтронов ИР-8 мы располагаем не имеющей аналогов инструментальной базой, в том числе для элементного, фазового, рентгенофлуоресцентного анализа, рентгеновской томографии и интроскопии, газовой хроматографии и масс-спектрометрии, электронной микроскопии, геномного анализа, магнитно-резонансной и компьютерной томографии, а также 3D-сканирования и т.д.

Все это позволило по инициативе М.В. Ковальчука начать развивать новое для Курчатовского института направление исследований и в 2015 г. создать лабораторию естественно-научных методов в гуманитарных науках. За последний год мы совместно с Институтом археологии РАН, Государственным историческим музеем, Музеем изобразительных искусств им. А.С. Пушкина исследовали разные артефакты — от наконечника копья из погребения майкопской культуры 3 тыс. до н.э. до средневековых натальных крестов из Суздальского Ополья, содержащего сферокарических сосудов и бронзовых скульптур эпохи Возрождения. Впереди новые интересные задачи.

**Сергей Николаевич Чвалун**, заместитель руководителя Курчатовского НБИКС-центра, доктор химических наук:

— Сообщения на конгрессе были посвящены нашим работам в области новых материалов биомедицинского назначения и в частности успехам,



Белковая структура на кремниевой подложке

которых мы достигли в создании изделий для ортопедии и хирургии. Были разработаны и изготовлены принципиально новые композиционные изделия для хирургии на основе биоразлагаемых полимеров с регулируемым сроком разложения, с регулируемыми механическими свойствами. В настоящее время проводятся длительные доклинические испытания *in vivo*. Эти материалы включают в себя биоразлагаемые полимеры и неорганические наполнители, не только способствующие повышению механических свойств изделий, но и обладающие заметным остеокондуктивным действием. Мы научились регулировать свойства в очень широком интервале и таким образом создавать изделия различного назначения с разнообразными функциями.



Станция рентгеновской кристаллографии и физического материаловедения «КИСИ-Курчатов» с модулем для исследования рентгеноакустических взаимодействий

Ведется интенсивная работа в области регенеративной медицины. Совместно с коллегами из Кубанского государственного медицинского университета нами была разработана биоискусственная диафрагма, которая замечательно работает на животных. Причем уже через два месяца отличить эту часть диафрагмы от настоящей невозможно, поскольку там интенсивно проходит процесс заселения собственными клетками.

Мы по-прежнему активно работаем в области трубчатых каркасов. Здесь получены уже не только трахея, но и желчные протоки, и мелкие сосуды. Существенный прорыв произошел и в области природоподобных нанокомпозитов на основе волокон структурных полисахаридов. Разработана рецептура их получения, показаны их уникальные свойства, применение которых означает создание новых легких многофункциональных материалов. Их структура продиктована самой природой, ее можно встретить как в растениях, так и у низших животных, например у моллюсков, а мы фактически пытаемся пройти тем же путем, но сделать это быстрее и с теми функциями, которые нам нужны.

**Элеонора Владимировна Штыкова**, ФНИЦ «Кристаллография и фотоника» РАН, доктор химических наук:

— Метод малоуглового рассеяния рентгеновского излучения и нейтронов (МУР) зародился еще в первой половине XX в. Он используется как инструмент изучения надатомной структуры различных веществ, природных и созданных человеком. С помощью МУР можно увидеть, как устроен материальный мир «изнутри». Такая структурная нанодиагностика, или диагностика на наноуровне, необходима не только для того, чтобы знать и понимать законы природы, но и чтобы научиться создавать новые материалы именно с такими свойствами, которые нам необходимы. На Первом российском кристаллографическом конгрессе малоугловому рассеянию посвятили два заседания и стендовую сессию, где были представлены результаты исследований двух важнейших областей нанодиагностики — строения биологических макромолекул в растворе и структуры современных нанокомпозитов.

При изучении структуры вещества очень важны источники излучения, поэтому появление современных синхротронов открыло новые перспективы для МУР. С помощью мощных синхротронных источников сейчас проводится анализ тонких структурных откликов отдельных макромолекул на изменения внешних условий, то есть исследуются различные быстротекущие процессы в веществе непосредственно в малоугловой камере. С другой стороны, уникальные свойства новейших источников синхротронных излучений (микронные и субмикронные размеры пучка, его когерентность,

возможность исследований в широком диапазоне длин волн) дают возможность проводить концептуально новые эксперименты. Можно ожидать, что дальнейшее развитие МУР послужит также мостом к проведению будущих экспериментов с использованием лазеров на свободных электронах. Именно поэтому на конгрессе обсуждались не только последние научные достижения в теории и практике малоуглового рассеяния, но и необходимое инструментальное обеспечение его использования на будущих синхротронах четвертого поколения.



В.А. Демин

**Вячеслав Александрович Демин**, руководитель Курчатовского комплекса НБИКС-технологий, кандидат физико-математических наук:

— В отличие от многих конференций и конгрессов, даже зарубежных, здесь царил атмосфера высокого творчества и интеллектуального праздника. На конгрессе были представлены доклады из разных областей знаний, объединенных кристаллографией, причем в новом понимании этого термина — не просто кристаллографии твердых тел с дальним порядком размещения атомов и молекул (кристаллов), но также частично и слабо упорядоченных систем, включая биологические ткани, нервную систему животных и т.д.

Я выступал с докладом, посвященным искусственному интеллекту, но поразил меня в этом сообществе интеллект естественный. Здесь присутствовали специалисты высочайшего уровня, общение с каждым из них способствовало рождению новых идей для развития моего собственного направления исследований.

**Ольга Анатольевна Алексеева**, и.о. заместителя директора ФНИЦ «Кристаллография и фотоника» РАН, кандидат физико-математических наук:

— На конгрессе я была сопредседателем заседания, посвященного исследованию структур неорганических материалов. Заявок на интересные

доклады было подано очень много, и программному комитету было непросто отобрать самые значимые. Большая часть выступлений традиционно посвящена взаимосвязям между структурой и свойствами кристаллов, определение которых позволяет создавать материалы с желаемыми свойствами. Были представлены довольно крупные обобщенные работы, для выполнения которых потребовался комплексный подход с привлечением хорошо развитых современных экспериментальных методов: электронной микроскопии, рентгеноструктурного анализа, нейтронной дифракции, ряда спектроскопических методик и, конечно, возможностей мегаустановок. Иногда исследуемые структуры настолько сложны, что приходится разрабатывать новые экспериментальные подходы. В то же время приятно отметить, что на конгрессе представлено большое количество ярких структурных работ.

Несколько докладов было посвящено материалам, содержащим редкоземельные элементы, которые в силу своей природы играют ключевую роль в формировании самых разных свойств — магнитных, электронных, проводящих. Важными и интересными были также работы, связанные с поиском новых катодных материалов, важных для развития альтернативной энергетики.

**Юлия Алексеевна Дьякова**, ученый секретарь ФНИЦ «Кристаллография и фотоника» РАН, кандидат физико-математических наук:

— В настоящее время одна из важных областей для человечества — развитие медицины и медицинских технологий, поиск новых лекарств, в том числе более эффективных антибиотиков, способных бороться с мутировавшими бактериями, а также противовирусных лекарств. Одна из ключевых проблем человечества — это и поиск противораковых препаратов.

Сейчас все вопросы, связанные с поиском новых лекарств, замыкаются на изучении структуры белка. Самым надежным для определения структуры макромолекул признан метод рентгеноструктурного анализа, когда мы выращиваем белковый кристалл, просвечиваем его рентгеновским излучением и решаем структуру. Но получить белковый кристалл, подобрать условия для его образования очень непросто. И от нас тут вообще ничего не зависит — речь идет о механическом переборе сотен тысяч условий, когда лишь в одном из них может выпасть кристалл. Этот этап непредсказуем и может затянуться на многие годы.

Кристалл не может возникнуть из ничего, из хаоса, который вдруг резко перешел к порядку. Мы предположили, что уже на самой ранней стадии кристаллизации могут образовываться некие упорядоченные комплексы молекул, служащие элементарными «кирпичиками» для роста будущего кристалла.



О.А. Алексеева

Наше предположение мы экспериментально проверили на примере образования кристалла модельного белка лизоцима. С помощью молекулярного моделирования и применения рентгеновского метода исследования неупорядоченных сред (малоуглового рассеяния) мы показали, что уже на самой ранней стадии кристаллизации в растворе образуются октамеры, причем мы наблюдаем их только в тех растворах, где потом возможно образование кристалла.

Знания о механизме начальной стадии кристаллизации позволят разработать методику быстрого поиска условий роста белковых кристаллов. На эту тему у нас совсем недавно были публикации в журналах «Кристаллография» и *Crystal Growth & Design* Американского химического общества. Эту работу мы подготовили под руководством М.В. Ковальчука. На нынешнем конгрессе этому также были посвящены несколько докладов.

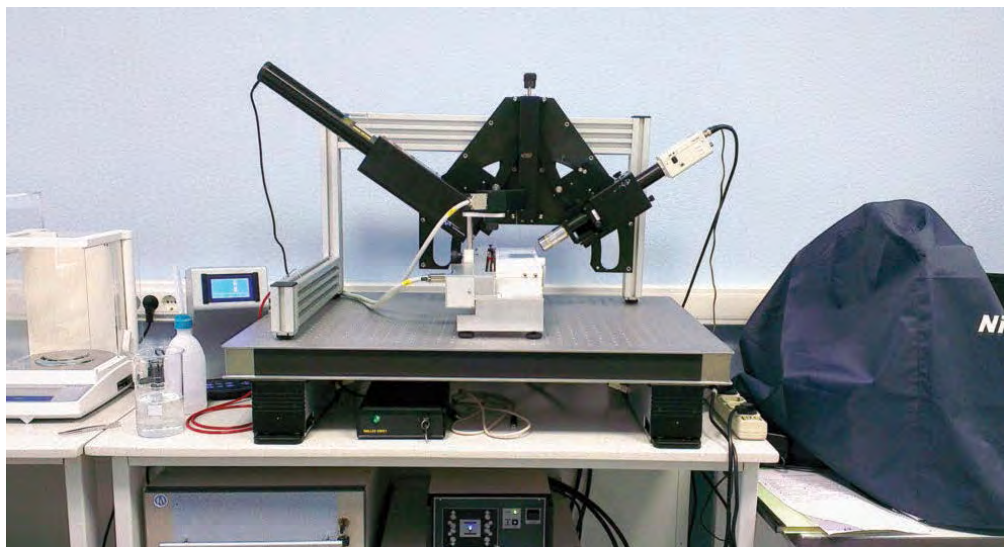
**Валерия Ролановна Самыгина**, ФНИЦ «Кристаллография и фотоника» РАН, НИЦ «Курчатовский институт», кандидат физико-математических наук:

— Мы занимаемся структурной биологией. В нашем отделе, возглавляемом М.В. Ковальчуком, собраны все исследования, связанные с синхротронным излучением. Структурная биология без него немислима. Ученым, исследующим строение белка, интересна его функция. Белки очень важны. Нельзя правильно лечить то или иное заболевание, если мы не поймем, какое нарушение работы

каких белков привело к патологии. Наш метод хорош тем, что мы напрямую видим, как устроен белок. Минус — мы видим застывшую картинку, ведь для основного структурного метода белок превращен в кристалл. Но есть подходы, позволяющие зафиксировать и в кристалле различные стадии работы белка.

Интересная тема — структура белок-белковых взаимодействий. Ведь в организме, как в социуме, где люди друг с другом взаимодействуют, белки зачастую не живут каждый сам по себе. Они часто находятся в тесном контакте. Скажем, при воспалении в организме начинает не усиленно воспроизводиться один белок, а образовываться целый белковый комплекс. Важно понять через структуру механизм этих белок-белковых взаимодействий. Именно такие комплексы выступают маркерами некоторых воспалительных реакций, что было обнаружено в клинической практике.

Один из белков, которым я занимаюсь, церулоплазмин, зарегистрирован в России как медицинский препарат. Он обладает антиоксидант-



Брюстеровский микроскоп, позволяющий проводить исследования латеральной упорядоченности ленгмюровских монослоев в процессе их формирования

ными свойствами, то есть нейтрализует опасные радикалы, он используется для премедикации онкологических больных перед химио- и лучевой терапией. И вот нами была получена структура такого же белка, но из плазмы крови крысы. Такой белок обладает гораздо большей антиоксидантной активностью, и структура объяснила причину этого явления. Мы уже сегодня готовы подсказать фармацевтам, каким образом надо изменить лекарственный человеческий церулоплазмин, чтобы он работал эффективнее. ■

**Беседовала Наталья Лескова**