

ний побутовий мотлох, у якому, власне, й розгортається людське існування. Картинки строкатого й неоднорідного життя, з одного боку, вибудовують структуру, а з другого – становлять «осердя» її оповідань. За великим рахунком, вона розповідає не людські історії – вона розповідає життя.

У своїх оцінках західні інтелектуали нерідко порівнюють Еліс Манро з Чеховим. Безперечно, таке зіставлення для неї є дуже почесним і, можливо, дещо компліментарним. Британська перекладачка Марія Карп в есеї «Дослідження імпульсів» висловлює думку про романний характер текстів Еліс Манро: «Вважається, що вона пише оповідання, хоча за ємністю це майже романи». Теза ця, гадаю, є метафорично перебільшеною. Тексти Еліс

Манро – це розгорнуті оповідання, що в ліпшому разі імітують романи. У них усе тримається на локальних вихідних ситуаціях і камерних внутрішніх колізіях, які навряд чи спроможні організувати ту щільність і «рентгенність» зображення життєвих процесів, що властиві романній фактурі. Також гадаю, що стильного письменника-оповідача зовсім не обов'язково номінувати на жанр, який за природою не є для нього органічним.

Те, що цьогорічного літературного Нобеля віддали Еліс Манро, є важливою подією в контексті українських «пронобелівських» перспектив. Нобелівський комітет у своїх рішеннях, безперечно, зважає на концепцію літературної геоконтинентальності й прагне урізноманітнювати, поповню-

вати колекцію країн, що відзначені цією премією. Тому свого художнього нобеліанта отримала й Канада, яка, за всієї беззастережної поваги до неї та її духовних набутків, навряд чи належить до світових літературних лідерів.

Отже, є надія, що наближається й нобелівський час України. І нашим поетам, прозаїкам та есеїстам потрібно одне: невтомно працювати й регулярно видавати нові книжки, як це робила канадка Еліс Манро, а також на більш-менш пристойному рівні перекладатися й чекати того жовтневого дня, коли геокультурний вибір Нобелівського комітету зупиниться на представникові чи представниці української літератури. Питання, власне, полягає в тому, скільки ще доведеться чекати.



## Складні біохімічні системи крізь призму квантової хімії

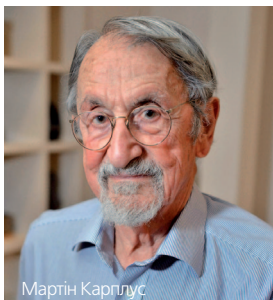


Микола КАРТЕЛЬ, академік Національної академії наук України, доктор хімічних наук, професор, директор Інституту хімії поверхні ім. О. О. Чуйка НАН України

Віктор ЛОБАНОВ, доктор хімічних наук, професор, завідувач відділу квантової хімії та хімічної фізики наносистем Інституту хімії поверхні ім. О. О. Чуйка НАН України



**Цьогоріч Нобелівську премію з хімії отримали Мартін Карплус (університет Страсбурга, м. Страсбург, Франція; Гарвардський університет, м. Кембридж, США; Кембриджський університет, м. Кембридж Велика Британія), Майкл Льовітт (Стенфордський університет, м. Пало-Альто, США) та Ар'є Воршел (університет Південної Кароліни, м. Клемсон, США, громадянство США, Ізраїль). Трьох професорів відзначено «за багаторічний цикл робіт, присвячених розвитку великомасштабних моделей складних хімічних систем», тобто за розроблення, по суті, фізичного методу отримання кількісних характеристик хімічних і біохімічних систем. Ці роботи продовжили характерну для сучасної науки тенденцію проникнення методів математики і теоретичної фізики в хімію та біологію.**



Мартін Карплус



Майкл Льовітт



Ар'є Воршел

**Мартін Карплус** (Martin Karplus) народився 1930 року у Відні (Австрія). 1950 року в Гарвардському університеті здобув ступінь бакалавра мистецтв, а 1953-го – ступінь доктора філософії в Каліфорнійському технологічному інституті (м. Пасадена, США), де він працював разом із Лайнусом Полінгом, лауреатом Нобелівської премії з хімії і Нобелівської премії миру. В Оксфорд-

ському університеті (Велика Британія) протягом 1953–1955 років проводив спільні дослідження з англійським математиком і хіміком-теоретиком Чарльзом Коулсоном – піонером квантово-хімічних розрахунків структури і властивостей молекул. Дослідження М. Карплуса зосереджені в таких розділах природознавства, як фізична хімія, хімічна кінетика, квантова хімія і,

насамперед, присвячені розробленню та чисельній реалізації класичної молекулярної динаміки для моделювання властивостей і перетворень біологічних макромолекул, для чого під його керівництвом була створена програма CHARMM, яка здобула всесвітнє визнання. Член міжнародної академії квантово-молекулярних наук.

**Майкл Льовітт** (Michael Levitt) народився 1947 року в Преторії (Південно-Африканська республіка). 1967 року здобув ступінь бакалавра наук в Королівському коледжі (м. Лондон, Велика Британія) за фахом «фізика», потім два роки стажувався в Інституті Вейцмана (м. Реховот, Ізраїль). 1971 року здобув ступінь доктора філософії в галузі обчислювальної біології, після чого знову продовжив стажування в Інституті Вейцмана (1972–1974 рр.). З 1974 по 1977 рік – науковий співробітник Лабораторії молекулярної біо-

логії в Кембриджському університеті, потім дворічна робота в Інституті біологічних досліджень ім. Дж. Солка (м. Сан-Дієго, США). З 1978-го по 1983-й – доцент, професор і завідувач відділу хімічної фізики Інституту Вейцмана. З 1987 року – професор, а потім завідувачий відділенням структурної біології медичної школи Стенфордського університету. Льовітт одним із перших застосував метод класичної молекулярної динаміки до молекул ДНК і білків, для чого створив перше програмне забезпечення, а також розробив методи прогнозу будови біологічних макромолекул, беручи участь у міжнародному експерименті CASP, присвяченому критичній оцінці технологій прогнозу структури білка.

**Ар'є Воршел** (Arieh Warshel) народився 1940 року в кібуці Сде Нахум (Ізраїль). У 1958–1962 роках служив в армії оборони Ізраїлю, демобілізувався у чині капітана. Ступінь бакалавра з хімії здобув 1966 року в Ізраїльському технологічному інституті (м. Хайфа), 1967 року – ступінь магістра, а 1969-го – докторський ступінь з хімічної фізики в Інституті Вейцмана. Протягом 1970–1972 років працював науковим співробітником в Гарвардському університеті, потім – в Інституті Вейцмана (1973–1977). Упродовж 1974–1976 років на запрошення Європейської організації молекулярної біології працював у лабораторії молекулярної біології Британської ради наукових досліджень у галузі медицини (Кембриджський університет). Надалі продовжив свою наукову діяльність у провідних наукових центрах США і Європи. З 2011 року – заслужений професор хімії і біохімії Університету Південної Кароліни. А. Воршела вважають засновником обчислювальної ензимології – розділу біохімії, що вивчає будову, механізм каталітичної дії і молекулярну структуру ферментів. Він також багато зробив для визначення динаміки білків під час протікання біохімічних процесів.

Ще 1929 року майбутній лауреат Нобелівської премії з фізики (1933) П. Дірак, перебуваючи під величезним враженням від успіхів квантової механіки в описі енергетичного спектру атома водню і природи ковалентного зв'язку в молекулі водню, сформулював оптимістичну програму досліджень властивостей речовини на атомно-молекулярному рівні. Зокрема, він писав: «Таким чином, фундаментальні фізичні закони, необхідні для побудови математичної теорії більшості фізичних і всіх хімічних явищ, нам добре відомі, а трудність полягає в тому, що рівняння, які виникають при точному записі цих законів, вельми складні і не залишають надії на можливість їх точного розв'язання. Отже, необхідно розвинути наближені методи розв'язання квантово-механічних задач, які дозволили б без надмірно трудомістких роз-

рахунків пояснити основні властивості складних комбінацій атомів».

Багато хто з хіміків, не кажучи вже про біологів, сучасників Дірака, вельми скептично поставився до тези тоді ще не дуже відомого молодого фізика. Їхній скептицизм ґрунтувався на усвідомленні того факту, що вже для системи, яка містить два електрони, квантова механіка не дає змоги отримати точне аналітичне рішення, а залучення чисельних методів, за відсутності у той час швидкодіючих електронних обчислювальних машин, завжди призводило до неодмінних погрішностей, оцінку яким неможливо було дати, не знаючи точного результату.

Для теоретичного опису еволюції складної хімічної системи, тобто хімічних реакцій, які відбуваються в ній, передовсім, потрібні відомості про її так звану поверхню потенціальної енергії (ППЕ), під якою розуміють певну функцію, що визначає залежність енергії від координат усіх атомів системи. Для найпростішого випадку хімічної реакції двох атомів, що взаємодіють по прямій, ППЕ можна уявити як ландшафт поверхні землі. Мінімальні значення ППЕ відповідають низинам на поверхні землі, а максимальні – підвищенням. На ППЕ є ділянки, яким на земному ландшафті відповідають ряди близько розташованих пагорбів. Хімічну реакцію можна описати як рух кульки нескінченно малого діаметра по ППЕ. Потрапляння кульки в западину відповідає утворенню молекули стійкої сполуки. Якщо ця западина розташована на вершині пагорба, то такий стан явищ відповідає формуванню нестійкої проміжної сполуки (інтермедіату). Під час переходу системи з одного стійкого стану в інший, кулька має піднятися улоговиною між двома пагорбами, подолати певний бар'єр і скотитися в іншу западину, яку ототожнюють з продуктами реакції.

Вирішальним за такого підходу до опису хімічної реакції є спосіб розрахунку ППЕ. Найбільш строгим і об'єктивним слід вважати квантово-механічний метод в неемпіричному варіанті (*ab initio*). Альтернативою неемпіричному варіанту вважається так званий напівемпіричний різновид, який дає можливість значно збільшити розмір систем, що піддаються обчислювальному експерименту.

Є ще простіший підхід, заснований на молекулярній механіці, яка використовує для розрахунку ППЕ емпірично виведену систему рівнянь, математична форма яких запозичена з класичної механіки. Ця система потенціальних функцій називається силовим полем. Метод використовує одне загальне припущення про можливість перенесення відповідних параметрів і силових сталих від однієї молекули до іншої. Інакше кажучи, ці числові значення згаданих параметрів, визначені на прикладі деяких простих молекул, використовуються потім як фіксовані величини для решти

молекул споріднених сполук. Неможливо точно довести, наскільки правильне це допущення. Завдання ППЕ дає змогу надалі, використовуючи другий закон Ньютона класичної фізики, розрахувати переміщення ядер в ході еволюції складної хімічної або біохімічної системи. Такий підхід і становить суть класичної молекулярної динаміки, що дає можливість з використанням оптимальних обчислювальних зусиль отримати досить адекватні моделі перетворення біохімічних молекул.

Метод класичної молекулярної динаміки, започаткований у теоретичній фізиці, набув поширення в хімії й, починаючи з 1970 року, в біохімії та біофізиці. Він відіграє важливу роль у визначенні структури білків та уточненні їхніх властивостей. Найбільш популярними пакетами програмного забезпечення для моделювання динаміки біологічних молекул є: *AMBER*, *CHARMM*, *GROMACS*, *GROMOS*, *LAMMPS*, *HOOMD-blue*, *NAMD* та *DL-POLY*.

Метод молекулярної класичної механіки використовується в тих випадках, коли довжина хвилі Де-Бройля атома набагато менша, ніж міжатомні відстані. Крім того, за низьких температур квантові ефекти стають домінуючими і для розгляду таких систем необхідно застосовувати методи квантової хімії.

Останнім часом досить широкого розвитку набув метод, що поєднує в собі точність квантово-механічного підходу і простоту молекулярної механіки, згідно з яким реакційний центр розглядається в межах квантової механіки, а решта – біомолекули і молекули водного середовища та їхньої взаємодії між собою – обробляються молекулярною механікою. Біля витоків такого підходу був один із лауреатів Нобелівської премії А. Воршел.

Варто зазначити, що названі лауреати отримали Нобелівську премію фактично за роз'яснення низки важливих експериментально встановлених фактів молекулярної біології, що дало змогу прогнозувати будову багатьох біологічно активних молекул за результатами числових дослідів, проведених методом класичної молекулярної динаміки. Зокрема, запропонована ними вторинна, третинна, четвертинна структура багатьох білкових молекул була блискуче підтверджена експериментально. Аналогічні дослідження проводяться в багатьох провідних лабораторіях світу під керівництвом таких вчених, як Аллен М. П. (*Allen M. P.*) (Велика Британія); Ченг Х.-П. (*Cheng H. -P.*), Вайнер С. Дж. (*Weiner S. J.*), Стілленджер Ф. Х. (*Stillinger F. H.*) (США); Гривцов А. Г., Журкін В. Б. (Росія); Ярмолюк С. М. (Україна); Іхара С. (*Ihara S.*) (Японія) та інших. Але Нобелівський комітет присудив премію з хімії саме М. Карплусу, М. Льовітту та А. Воршелу, зважаючи на їхні піонерські роботи.