

А. М. СМОЛЕГОВСКИЙ

РОЛЬ ИССЛЕДОВАНИЙ У. Л. БРЭГГА В ИСТОРИИ КРИСТАЛЛОХИМИИ

Сегодня кристаллохимия — одна из ведущих наук, определяющих научно-технический прогресс. История ее поучительна для понимания проблем возникновения пограничных дисциплин, взаимосвязи метода и теории, фундаментального и прикладного направлений в науке, взаимодействия наук и особенностей их эволюции в современных условиях. Развитие кристаллохимии представляет интерес и с точки зрения «человеческого фактора». Поистине уникальную роль в зарождении, становлении, развитии и формировании современного «облика» кристаллохимии сыграли исследования английского физика, лауреата Нобелевской премии (1915) У. Л. Брэгга. И дело тут не только в конкретных результатах (а они грандиозны), но и в стиле его работы, в умении выбрать и по достоинству оценить перспективные направления.

Попытаемся проследить становление кристаллохимии сквозь призму историко-научного анализа работ У. Л. Брэгга.

У. Л. Брэгг и возникновение структурной кристаллохимии

Возникновение кристаллохимии как науки, изучающей взаимосвязь между кристаллической структурой¹ соединений, их химическим составом и комплексом химических, физических и биологических свойств, обязано, прежде всего, созданию принципиально нового метода исследования вещества — рентгеноструктурного анализа (РСА). Решающий вклад здесь принадлежит У. Л. Брэггу, который вывел «основное (для начальной фазы развития РСА) уравнение»² РСА: $n\lambda = 2d \sin \theta$, где n — целое число, d — межплоскостное расстояние, θ — угол между первичным пучком и отражающей плоскостью [2].

Вывод Брэгга базировался на идее, согласно которой дифракцию рентгеновских лучей можно адекватно представить как их отражение от атомных плоскостей в кристаллической решетке.

Но, как видно из определения, о кристаллохимии можно вести речь только тогда, когда, во-первых, определены химический состав и структура кристалла, во-вторых, изучены его свойства и, в-третьих, предприняты попытки объяснения их на основе структурных представлений. Последнее напрямую связано с наличием массива структурных данных по большой группе соединений и специфического языка, т. е. принятой исследователями единой формы передачи кристаллохимической информации. Сказанное объясняет, почему нельзя говорить о возникновении структурной кристаллохимии непосредственно вслед за созданием метода рентгеноструктурного анализа. Необходим переходный период.

Посмотрим, какова была роль У. Л. Брэгга на этой стадии развития кристаллохимии. Прежде всего коснемся вопроса о накоплении структурной информации. В 1915 г. увидела свет написанная совместно с отцом (У. Г. Брэггом) книга У. Л. Брэгга «Рентгеновские лучи и строение кристаллов» [4],

в которой сообщались результаты изучения 33 кристаллических веществ. Конечно, по сегодняшней мерке не все исследования можно рассматривать как полный рентгеноструктурный анализ соединений (т. е. определение кристаллической и точечной симметрий, параметров решетки, числа формульных единиц, координат атомов в ячейке). Но в ту пору важность полученных данных представлялась исключительной.

В книге подробно, с изображением проекций и моделей описаны структуры каменной соли, алмаза, меди, пирита, флюорита, сфалерита, кальцита, магнетита и др., которые позднее были выделены как структурные типы. На этой начальной стадии исследований были выявлены разнообразные мотивы, характерные для определенных кристаллографических сингоний. Так, было установлено, что атомы меди, кристаллизующейся в кубической сингонии, образует гранецентрированную решетку.

Иначе расположены атомы углерода в кристалле алмаза, принадлежащего к той же кристаллографической системе. Атомы кобальтина (CoAsS), также кристаллизующегося в кубической сингонии, образуют мотив, сходный с пиритом. В другом кубическом кристалле — NaClO_3 атомы натрия и хлора располагаются аналогично размещению тех же атомов в поваренной соли. Примечательна ремарка Брэгга к структуре кубического кристалла NH_4Cl : «Положение атомов водорода сомнительно» [5, с. 482]. Она долго будет повторяться в последующих работах других авторов, ибо метод рентгеноструктурного анализа не позволял в ту пору локализовать атомы водорода из-за слабого рассеяния ими рентгеновских лучей.

Современный исследователь, знакомясь с первыми публикациями Брэгга, содержащими описание расшифрованных им структур, не увидит в них данных о координатах атомов, параметрах элементарных ячеек, точечной симметрии. Более того, автор подчас путает сингонии с классами, не всегда в состоянии указать точную кристаллическую симметрию. И это неудивительно, ведь У. Л. Брэгг — физик, ранее не имевший дело с кристаллографией. Возможно, если бы пионерами структурных исследований были Е. С. Федоров, Г. В. Вульф или П. Грот, начальная стадия развития кристаллохимии была бы иной.

К счастью, Брэгг не скрывал своей неосведомленности и предпринял усилия, чтобы от нее избавиться. Когда же ему была необходима срочная консультация, то он обращался за помощью к крупнейшим кристаллографам. Так, ему оказал существенную поддержку при расшифровке структуры пирита Е. С. Федоров. Впрочем, эта работа принесла последнему неожиданную радость. Так называемая асимметричная пространственная группа симметрии, теоретический вывод которой Федоров сопроводил комментарием о невозможности ее существования в реальных кристаллах, была обнаружена именно в кристалле пирита.

Если заглянуть в публикации по кристаллохимии ³ 1913—1919 гг., то можно увидеть ту же картину — их авторы в основном физики. «Физикам станет отныне ясно, — писал в 1915 г. Г. В. Вульф, — что кристаллография как учение о геометрических законах, управляющих кристаллической формой, не может быть отделена от кристаллофизики как физики твердого тела» (цит. по русск. изд. [4, с. 9—10]).

Между тем для возникновения структурной кристаллохимии необходимо было, прежде всего, соотнести экспериментальные данные с классическими представлениями химии. Ни в статьях Брэгга за 1913—1919 гг., ни в монографии [4] такой попытки найти нельзя. Физик Брэгг был так увлечен определением реального расположения атомов в кристалле, что обобщения химического характера его не интересовали. Однако иначе оценили результаты структурных исследований Г. В. Вульф и Е. С. Федоров. Так, уже в статье, опубликованной в 1914 г., Федоров особо выделил то обстоятельство, что элементами кристаллической структуры оказались не молекулы целиком, а атомы [8]. В «Предисловии к русскому переводу» монографии [4] Вульф отмечал: «Одним из самых пора-

зительных результатов нужно считать то, что полученные Брэггами структуры даже таких химически сложных веществ, как, например, исландский шпат, углекислая известь (CaCO_3), состоят из атомов, расположенных в пространстве так, что их не представляется возможным соединить в молекулы» [с. 3]. И более того, «выходит, что кристалл построен не из молекул, а из атомов, и понятие о химической молекуле как о некоем индивидууме для кристалла теряет свою силу (выделено мной.— А. С.)» [там же]. Выделенная фраза — фундаментальный химический вывод.

О том, что именно так он был воспринят самим Вульфом, свидетельствуют его последующие слова о неожиданности этого результата для большинства кристаллографов, особенно французских. Последние рассматривали в качестве структурных элементов кристалла даже на молекулы, а их группы («*particules cristallines*»):). В качестве альтернативного Вульф указывает на подход кристаллографов английской школы, в частности, В. Барлоу. Но почему-то ничего не говорит о П. Гроде, хотя немецкий кристаллограф задолго до работ У. Л. Брэгга предсказывал возможность нахождения атомов в узлах кристаллической решетки. Конечно, упоминание о Барлоу не случайно, поскольку он первый «заподозрил» атомы как возможные структурные единицы кристаллов.

В этой связи необходимо сделать уточнение о первой структуре, расшифрованной с помощью рентгеноструктурного анализа. Обычно ошибочно называют структуру хлорида натрия. В действительности же она была только подтверждена, так как правильную модель ее предложил еще в конце XIX в. В. Барлоу. Первой структурой, определенной без использования предварительной модели, оказался кристалл алмаза. Это плод совместного исследования отца (У. Г. Брэгга) и сына (У. Л. Брэгга), выполненного в 1913 г. [9].

Итак, принципиальный вывод об отсутствии молекул в структурах большинства неорганических кристаллов был сделан У. Л. Брэггом уже на начальном этапе рентгеноструктурного анализа соединений. Но этот вывод не сразу стал достоянием химиков. Очень важно, что в эти же годы были осмыслены обнаруженные в результате рентгеноструктурного анализа ряда соединений факты неодинакового удаления лигандов от центрального атома. Иными словами, пришлось пересмотреть вернеровское представление о координации, координационном числе в преломлении к кристаллическим структурам. Статьи, посвященные этой проблеме, опубликовали в 1915—1916 гг. П. Пфейффер и П. Ниггли (Швейцария) [10, 11]. Собственно говоря, это были исследования, положившие начало направлению, активно развиваемому в настоящее время и именуемому «неорганической стереохимией»⁴.

Вклад У. Л. Брэгга в становление структурной неорганической кристаллохимии

Таким образом, возникновение структурной кристаллохимии теснейшим образом связано с расшифровкой У. Л. Брэггом в 1913—1919 гг. относительно простых химических структур. Обобщения кристаллохимического характера — плод коллективных усилий многих исследователей.

Продолжая определять структуры все более сложных объектов, Брэгг предпринял попытку кристаллохимического осмысления полученных результатов. В опубликованной в 1920 г. статье [13] он впервые изложил итоги определения межатомных расстояний в соединениях с одинаковой формулой. Эта работа имела принципиальное значение в истории кристаллохимии. «Датой возникновения кристаллохимии как науки можно считать 1920 год», — писал Р. К. Эванс [14, с. 12], имея в виду статью Брэгга [13].

Познакомимся с ней поближе. Как резюме статьи можно рассматривать помещенную в ней таблицу, где приведены межатомные расстояния в щелочных галогенидах $A-X$ (A — электроположительный, X — электроотрицательный

элементы). Анализ таблицы указывает на существование определенных закономерностей. Так, кроме CsCl, CsBr и CsI, все галогениды щелочных металлов имеют структуру типа NaCl, характеризуясь последовательным увеличением размеров решетки в направлении фториды → иодиды и литиевые → цезиевые соли. При этом имеет место близость величин изменения межатомных расстояний у двух солей с одним и тем же катионом и независимость этих параметров от природы катионов. Например, для LiCl и LiF, NaCl и NaF, KCl и KF, RbCl и RbF величина изменения межатомных расстояний соответственно равна: 0,56; 0,50; 0,48; 0,45. А для LiF и NaF, NaF и KF — 0,30 и 0,35.

Обнаружение данных закономерностей привело к возрождению (но на принципиально новом уровне) представлений о кристаллической структуре как об упаковке «сферических» атомов с характерными для них размерами (радиусами). Модели некоторых соединений, как уже упоминалось, были разработаны В. Барлоу в XIX в. Сама же идея о плотной упаковке шарообразных частиц в кристаллах встречается уже в работах ученых XVI—XVIII вв. (Д. Кардано, И. Кеплер, М. В. Ломоносов, Р. Ж. Гаюи и др.).

Таким образом, именно У. Л. Брэггу кристаллохимия обязана тем, что такое несколько абстрактное физическое представление, как радиус атома, служащее прежде всего для описания самого атома, стало одним из фундаментальных ее понятий.

Хотя в дальнейшем Брэгг уделял мало внимания разработке систем **атомных, ионных, металлических, ковалентных, орбитальных** радиусов⁵, которые сыграли важнейшую роль в развитии теоретической кристаллохимии, трудно переоценить его пионерскую работу в этом направлении.

В начале 1920-х годов были предприняты попытки установить ряд структур относительно сложных органических соединений. Главные из них сделаны в лаборатории У. Г. Брэгга. Впрочем, иногда говорят о том, что первое определение кристаллической структуры (алмаза) было одновременно и первым исследованием в области органической кристаллохимии.

Адекватным отражением развития мировой кристаллохимии в первой половине 1920-х годов являются систематические публикации за этот период (см. [7]), включающие помимо структурной информации достижения в области теории кристаллической решетки и методики рентгеноструктурного анализа. И если вклад Брэгга, связанный с расшифровкой новых структур и развитием методики их исследования, был наибольшим, то в отношении теории кристаллической решетки этого сказать нельзя, хотя он, разумеется, свободно ориентировался в этой проблеме.

Из наиболее значительных событий первой половины 1920-х годов необходимо отметить появление центра мировых структурных исследований металлов и сплавов в Стокгольме, возглавляемого А. Вестгреном и Г. Фрагменом. Понимая, что нельзя объять необъятное, но и не желая отставать в этой области, а также в технике порошковых рентгенографических методов, которой в совершенстве владели в Стокгольме, Брэгг направляет туда на стажировку своего первого аспиранта А. Дж. Бредли. Вернувшись через год в Англию, Бредли становится одним из ведущих мировых специалистов по кристаллохимии металлов и сплавов и создает свою школу в этой области.

Новый этап в развитии мировой кристаллохимии вновь оказался связанным с исследованиями У. Л. Брэгга и его школы (вторая половина 1920-х годов). Речь идет о цикле блестящих работ по структуре силикатов — сложных кремнекислородных минералов, слагающих земную кору. Обнаруженное в структуре силикатов разнообразие архитектурных построек (узоров) существенно расширило представления о структурных мотивах в неорганических соединениях. Результаты этих исследований позволили Брэггу сформулировать кристаллохимические закономерности для общего класса силикатов и их многочисленных структурных аналогов, построенных на основе тетраэдров $[\text{SiO}_4]$, $[\text{AlO}_4]$ и др.

В 1930 г. ученики У. Л. Брэгга Дж. Вест и И. Нарай-Сабо, впервые расшиф-

ровавшие структуры дигидроортофосфата калия ($\text{K}_2\text{H}_2\text{P}_2\text{O}_7$) и апатита ($\text{Ca}_{10}(\text{PO}_4)_6\text{F}_2$), указали на специфическую роль тетраэдров $[\text{PO}_4]$ в образовании структуры фосфатов. Таким образом, именно благодаря исследованиям брэгговской школы в кристаллохимию вошло фундаментальное представление о существовании «тетраэдрических структурных единиц» — $[\text{SiO}_4]$, $[\text{PO}_4]$, $[\text{SO}_4]$, $[\text{ClO}_4]$ и др. Оно позволило не только рассмотреть многочисленные и на первый взгляд несхожие структуры с позиции общих кристаллохимических закономерностей, но и развить в дальнейшем «кристаллохимию структур с тетраэдрическими анионами».

Итак, развитие кристаллохимии в 1913—1930 гг. в значительной степени определялось достижениями У. Л. Брэгга и его школы. Они создали кристаллохимию силикатов, включая концепцию плотнейшей упаковки, сильно облегчавшую определение структуры соединений методом проб и ошибок.

Вместе с тем кристаллохимии тех лет было присуще и характерное для периода У. Л. Брэгга недостаточное внимание к проблеме химической связи в кристаллах.

В 1930-х годах объем мировых структурных исследований значительно возрос, о чем можно судить по публикациям в «Strukturbericht» (В. 1—7). Но в идеологии столь же заметных изменений не произошло, и новые данные органично вписывались в существующую кристаллохимическую концепцию (концепцию Брэгга).

Однако отсутствие попыток ревизовать собственно структурные взгляды не означало, что в этот период кристаллохимическая идеология не обогатилась новыми положениями в области теории химической связи. Напротив, именно в 1930-е годы теоретическая кристаллохимия испытала мощное воздействие со стороны квантовой механики. Разумеется, это влияние было персонифицированным, и такой «персоной» оказался американский физикохимик Л. Полинг.

Речь идет о серии статей Полинга, опубликованных в 1928—1933 гг. [15—22]. Семь из них, появившиеся в 1931—1933 гг. под общей рубрикой «Природа химической связи», послужили основой одноименной монографии, увидевшей свет в 1939 г. [23].

Не будет преувеличением сказать, что флагманом кристаллохимии 1920—1930-х годов являлась школа Брэгга. Большинство кристаллохимиков в других странах Европы (физиков и минералогов по образованию) были приверженцами ее традиций. Под традициями здесь понимается тенденция к последовательному определению структур возрастающей сложности, оставляющая в тени химическую близость объектов и ориентирующаяся не на синтетические продукты, а на минералы. Так, даже Л. Полинг (в начале 1920-х годов аспирант) начал свою «кристаллохимическую» карьеру с попытки расшифровать структуру соединения Ca_2HgV_4 , содержащую в элементарной ячейке 192 атома, только потому, что его руководитель Дикинсон систематически изучал кубические кристаллы (т. е. подбирал объекты исследования по кристаллографическому, а не химическому признаку [24, с. 3]).

Исследования У. Л. Брэгга по кристаллохимии металлов и сплавов

Итак, к началу 1930-х годов У. Л. Брэгг с сотрудниками завершил исследование силикатов. Новым объектом изучения стали сплавы. Но здесь он выступал уже более как теоретик, нежели как экспериментатор. Отчасти это было связано с «распадом» проблемной группы («брэгговского кружка», по М. В. Белову). Проблема, объединявшая исследователей из разных стран (И. Ито — Япония, В. Х. Захариасен — Норвегия, И. Нарай-Сабо — Венгрия, Б. Уоррен, Л. Полинг — США и др.), была решена, и они, выросшие за короткий срок в крупных ученых, возглавили собственные коллективы, разъехавшись по всему свету.

Первым исследованием У. Л. Брэгга по структуре металлов и сплавов было

определение строения кристаллической меди в 1914 г. [25]. В 1920-е годы он интересовался изучением металлов и сплавов в Стокгольмском структурном центре, главным образом с точки зрения освоения порошковой рентгенографии, уровень развития которой в Швеции был в те годы чрезвычайно высок. С этим, как отмечалось, была связана и командировка А. Дж. Бредли.

В 1933—1954 гг. Брэгг опубликовал 34 работы, посвященные различным теоретическим аспектам физики и кристаллохимии металлов и сплавов. Эта сторона его деятельности мало изучена и совершенно не оценена. Быть может, это связано с тем, что она не вызвала того резонанса, какой породили блестящие исследования по силикатам. Но есть и иная причина. Наибольший интерес (хотя и не удовлетворенный результатами РСА) ученых вызывали первые и последующие шаги в направлении исследования структуры белков. Эти фундаментальные работы, конечно, оттеснили на второй план такие «прикладные» проблемы, как структура металлов и сплавов.

Поскольку объем статьи не позволяет подробно рассмотреть хотя бы основные исследования У. Л. Брэгга по физике и кристаллохимии металлов и сплавов, выделим лишь некоторые их аспекты. В статьях [26—28] Брэгг дает структурную характеристику сплавов, анализ их равновесных состояний, статистическую и термодинамическую теории перехода типа «порядок — беспорядок» и сравнительную оценку разных методов его (перехода) изучения. В работах [29, 30] описана созданная им и признанная ныне классической (см. [31]) «пузырьковая модель кристаллической структуры», сделавшая возможным наблюдение поведения границ доменов при пластической деформации кристаллов.

Роль У. Л. Брэгга в создании английской школы кристаллохимии белка

Важнейшей ветвью современных кристаллохимических исследований является кристаллохимия биоструктур, на развитие которой во всех технически передовых странах «брошены» значительные силы и средства. Однако предвидеть такую ситуацию в конце 1930-х годов и даже во второй половине 1940-х было практически невозможно. Действительно, хотя ученик У. Г. Брэгга Т. Астбюри получил первые рентгенограммы фибриллярных белков (кератин шерсти, волос, 1926 г.) и ДНК (1938 г.), а другой его ученик Дж. Д. Бернал (совместно с Д. Кроуфут) доказал возможность рентгенографического изучения увлажненных кристаллов глобулярных белков (пепсин, 1934 г.), проблема определения структуры белков казалась тогда неразрешимой. Не говоря уже о трудности получения рентгенограмм, сложность их расшифровки намного превосходила возможности существующих методик.

Вот почему своим активным интересом к вопросам строения белков в послевоенные годы У. Л. Брэгг буквально «ошеломил членов „группы металлов“» [30, с. 119].

Но интерес Брэгга не был случайным, точнее, он возродился вновь. Еще в 1938 г. он обратил внимание на пионерскую работу М. Перуца, избравшего в 1937 г. в качестве диссертационной темы определение структуры гемоглобина. После вынужденного из-за интернирования в 1940—1943 гг. отхода от исследований Перуц вновь занялся ими и в январе 1946 г. по инициативе Брэгга был введен в состав группы Дж. Кендрию в Кавендишской лаборатории.

В первой публикации Брэгга, связанной с изучением белков и появившейся в 1939 г. [33], рассматривался вопрос, как непосредственно из функции Патерсона определить структуру инсулина. В другой статье того же года [34] Брэгг описал разработанную им схему «рентгеновского микроскопа», которая позволила Перуцу заметно продвинуться в своей работе по изучению структуры гемоглобина лошади. В 1942 г. Брэгг усовершенствовал конструкцию рентгеновского микроскопа [35].

В апреле 1943 г. он прочел несколько лекций в научных центрах Швеции об итогах первых исследований строения белков.

Понимая важность интенсивного развития структурных исследований белков, Брэгг с присущей ему настойчивостью добивался субсидирования их со стороны Медицинского исследовательского комитета. Трудность заключалась в том, что в послевоенное время лишь немногие разделяли его оптимизм. Впоследствии, вспоминая эти годы, Брэгг писал: «История рентгеноструктурного анализа глобулярных белков есть история романтическая» [36, с. 5]. Но, видимо, он сумел заразить своей верой членов Медицинского исследовательского комитета. Его председатель сэр Э. Мелленби известил Брэгга о положительном решении вопроса. В частности, он писал: «Скорее к моему удивлению, Ваш проект установления в Кавендишской лаборатории исследовательской единицы по молекулярной структуре биологических систем принят 17 октября (1947 г.— А. С.)» [32, с. 119].

Все последующие годы вплоть до перехода в 1954 г. в Королевский институт в Лондоне Брэгг активно поддерживал исследования по структуре белков, проводившиеся в Кавендишской лаборатории. А с 1954 по 1966 г., будучи директором Королевского института, он способствовал установлению тесных контактов между руководимой им лабораторией Дэви — Фарадея (Королевский институт) и лабораторией молекулярной биологии Медицинского исследовательского комитета в Кембридже.

Обращает на себя внимание шепетильность Брэгга в отношении своих публикаций. Несмотря на многолетнее совместное обсуждение (с 1938 г.) рентгенограмм гемоглобина и миоглобина с М. Перуцем и Дж. Кендрю, он до 1950 г. не выступал соавтором работавших под его началом коллег. В 1949 г. Брэгг опубликовал статью «Молекулы-гиганты» [37].

С 1950 по 1954 г. появилось 9 статей Брэгга, написанных совместно с М. Перуцем, Е. Хавелсом и Дж. Кендрю [38—46].

Хотя в 1962 г. Кендрю и Перуц получили Нобелевскую премию за эти исследования⁶, в их сотрудничестве с Брэггом были и грустные моменты. Наиболее мучительный — неудача в конкуренции с Полингом. Последний на основании стереохимических представлений предположил, что аминокислоты из полипептидной цепи стремятся к образованию спиральных конфигураций, причем спираль (он назвал ее α -спиралью) является главным элементом в структуре белка. Правильность этой идеи экспериментально подтвердил Перуц.

Мысль о принципе спирального построения белков как об их наиболее характерной особенности была высказана в 1941—1943 гг. Г. С. Тейлором и М. Л. Хаггинсом [47—49] в США. Эта идея была воспринята и группой Полинга, и группой Брэгга. Но успех пришел именно к Полингу благодаря тому, что он с точностью до десятых долей ангстрема определил длины связей и углы в полипептидной цепи, предположил планарность пептидной связи и, главное, отказался от признания «условия целочисленности винтовых осей» Хаггинса. Брэгг, Перуц и Кендрю, напротив, приняли этот оказавшийся ошибочным постулат и потерпели поражение в своих исследованиях.

«Было особенно обидно задать правильный вопрос и обеспечить Полинга правильным ответом», — заметил по этому поводу Д. Филлипс [32 с. 120].

Своеобразным «утешением» для Брэгга явилось поражение Полинга в конкуренции с сотрудниками Кавендишской лаборатории Дж. Уотсоном и Ф. Х. К. Криком, которым вместе с Р. Франклином и М. Уилкинсом удалось первыми расшифровать структуру ДНК (1953). «Своеобразие» в том, что Брэгг не принимал (как это имело место при изучении белков) непосредственного участия в обсуждении проблемы ДНК и поначалу даже недооценил ее (см. [50]), но затем, осознав важность исследований Уотсона и Крика, оказал им всемерную поддержку.

И таким образом, к этому эпохальному открытию причастен, хотя и косвенно, руководитель Кавендишской лаборатории сэр Лоуренс Брэгг.

Взгляды У. Л. Брэгга на организацию научных исследований и качества лидера научного коллектива

Развитие кристаллохимии, как любой науки, реализуется в форме эволюции ее когнитивной и институциональной структур. Сказанное о кристаллохимических исследованиях У. Л. Брэгга дает представление о динамике взглядов в кристаллохимии, о системе ее положений, сложившейся к началу 1970-х годов.

Хотя организация работ в руководимых У. Л. Брэггом лабораториях Манчестерского университета, Национальной физической лаборатории, Кавендишской лаборатории и в лаборатории Дэви — Фарадея Королевского института не может служить моделью развития организационных форм мировых кристаллохимических исследований, она во многом поучительна и для сегодняшнего дня, как и взгляды Брэгга на качества, которыми должен обладать лидер научного коллектива.

Визиты Брэгга в Швецию, Канаду, СССР и другие страны содействовали возникновению кристаллохимических центров (например, становление советской кристаллохимической школы в определенной мере связано с посещениями нашей страны У. Л. Брэггом и Дж. Д. Берналом). Значительна роль его учеников и стажеров в развитии кристаллохимических исследований в разных странах (в частности, в Норвегии, Венгрии, Японии).

Исключительно важными являются усилия Брэгга по созданию Международного союза кристаллографов (1948 г.), его периодического органа «Acta crystallographica» и организации конгрессов.

Ряд публикаций Брэгга затрагивает проблему организации научных исследований [51—58]. В частности, в статье [58, с. 83] он пишет: «Руководитель группы... распространяет свое влияние на большое число учеников, однако может потерять прямой контакт с природой ... Мне кажется поэтому, что наибольшее число умов, с которыми руководитель может находиться в прямом контакте, составляет пять. Если „школа“ больше, то каждый из последних, в свою очередь, может иметь под началом пятерых, что в общей сложности составляет двадцать пять. Нередки школы, насчитывающие 125 человек, но я никогда не слышал о руководителе, имеющем 625 учеников».

В этой же статье Брэгг высказывается о качествах, необходимых, по его мнению, для руководителя научной школы. Прежде всего, считает Брэгг, лидеру «совершенно необходимо быть энтузиастом» и оптимистом: «Энтузиазм и оптимизм — жизненно важные факторы в поддержании духа⁷ исследовательской группы» [там же].

Далее Брэгг выделяет «непредубежденность, готовность отбросить прежние идеи и начать все сызнова в совершенно новом направлении» [58, с. 83]. Весьма любопытно, что он не считает главным качеством руководителя одаренность.

Среди условий, тормозящих прогресс исследований, Брэгг главным называет «записную книжку (руководителя.— А. С.), сплошь заполненную перечнем текущих обязанностей» [там же], т. е. иначе говоря, чрезмерное администрирование.

В этой статье Брэгг предложил типологию ученых-физиков, разделив их на четыре категории: **мыслителей** — тех, «кто находит новый взгляд на явление» (Ньютон, Бор и др.); **открывателей** — обнаруживших неизвестное ранее явление, «но редко идущих к новым достижениям» (Рентген, Эрстед и др.); **охотников** — «чующих истину» (Фарадей, Резерфорд и др.); **конструкторов** — создателей аппаратуры, открывающей путь для совершенно нового направления научного исследования (Ч. Т. Р. Вильсон, Э. О. Лоуренс и др.) [58, с. 81, 82].

Список литературы

1. *Goldschmidt V. M.* Kristallchemie // Handwörterbuch der Naturwissenschaften. 2. Auflage. B. 5. Iena, 1934. S. 1128—1154.
2. *Bragg W. L.* The diffraction of short electromagnetic waves by a crystal // Proc. Cambridge Philos. Soc. 1912. V. 17, P. 43—57; Nature. 1912. V. 90. P. 402.
3. *Wulff G.* Über Kristallröntgenogramme // Phys. Z. 1913. Jg. 14. № 6. S. 217—220.
4. *Bragg W. H., Bragg W. L.* X-rays and crystal structure. L., 1915; русск. пер.: *Брэгг У. Г., Брэгг У. Л.* Рентгеновские лучи и строение кристаллов. М., 1916.
5. *Bragg W. L.* The analysis of crystals by the x-ray spectrometer // Proc. Roy. Soc. 1914. V. A89. P. 468—489.
6. *Wyckoff R. W. G.* The structure of crystals. N. Y. 1924.
7. Strukturbericht. 1931. B. 1.
8. *Fedorov E. S.* Die erste experimentale Feststellung eines asymmetrischen regelmäßigen Punktsystems // Z. Kristallogr. 1914. B. 54. H 2. S. 163—165.
9. *Bragg W. H., Bragg W. L.* The structure of the diamond // Proc. Roy. Soc. London. 1913. V. A89. P. 277—291; Nature. 1913. V. 91. P. 557.
10. *Pfeiffer P.* Die Kristalle als Molekülverbindungen // Z. anorg. und allgem. Chem. 1915. B. 92. H. 4. S. 376—380.
11. *Niggli P.* Struktur der Kristalle // Ibid. 1916. B. 94. H. 2. S. 207—216.
12. *Кунепр Д.* Неорганическая стереохимия. М., 1985.
13. *Bragg W. L.* The arrangement of atoms in crystals // Philos. Mag. 1920. (6). V. 40. P. 169—189.
14. *Эванс Р. К.* Введение в кристаллохимию. М.; Л., 1948.
15. *Pauling L.* // Proc. Nat. Acad. Sci. 1928. V. 14. P. 259.
16. *Pauling L.* The nature of the chemical bond. Application of results obtained from the quantum mechanics and from a theory of paramagnetic susceptibility to the structure of molecules // J. Amer. Chem. Soc. 1931. V. 53. P. 1367—1400.
17. *Pauling L.* The nature of the chemical bond. II. The one-electron bond and the three-electron bond // Ibid. P. 3225—3237.
18. *Pauling L.* The nature of the chemical bond. III. The transition from one extreme bond type to another // Ibid. 1932. V. 54. P. 988—1003.
19. *Pauling L.* The nature of the chemical bond. IV. The energy of single bonds and the relative electronegativity of atoms // Ibid. P. 3570—3582.
20. *Pauling L., Wheland G. W.* The nature of the chemical bond. V. The quantum-mechanical calculation of the resonance energy of benzene and naphthalene and the hydrocarbon free radicals // J. Chem. Phys. 1933. V. 1. P. 362—374.
21. *Pauling L., Sherman J.* The nature of the chemical bond. VI. The calculation from thermochemical data of the energy of resonance of molecules among several electronic structures // Ibid. 1933. V. 1. P. 606—617.
22. *Pauling L., Sherman J.* The nature of the chemical bond. VII. The calculation of resonance energy in conjugated systems // Ibid. P. 679—686.
23. *Pauling L.* The nature of the chemical bond and the structure of molecules and crystals; an introduction to modern structural chemistry. Ithaca; N. Y., 1939.
24. *Pauling L.* Historical perspective // Structure and bonding in crystals. V. 1. N. Y.; L.; Toronto; Sydney; San Francisco, 1981. P. 1—11.
25. *Bragg W. L.* The crystalline structure of copper // Philos. Mag. (6). 1914. V. 27. P. 355—360.
26. *Bragg W. L., Williams E. J.* The effect of thermal agitation on atomic arrangements in alloys // Proc. Roy. Soc. London, 1934. V. A145. P. 699—730.
27. *Bragg W. L., Williams E. J.* The effect of thermal agitation on atomic arrangement in alloys — II // Ibid. 1935. V. A151. P. 540—566.
28. *Bragg W. L.* Atomic arrangement in metals and alloys // J. Inst. Met. 1935. V. 56. P. 275—299.
29. *Bragg W. L.* A model illustrating intercrystalline boundaries and plastic flow in metals // J. Sci. Instrum. 1942. V. 19. P. 148—150.
30. *Bragg W. L., Nye J. F.* A dynamical model of a crystal structure // Proc. Roy. Soc. London, 1947. V. A190. P. 474—481.
31. *Фейнман Р., Лейтон Р., Сэндс М.* Фейнмановские лекции по физике. Т. 2. М., 1966. С. 274—287.
32. *Phillips D.* William Lawrence Bragg // Biogr. Mem. Fel. Roy. Soc. 1979. V. 25. P. 75—143.
33. *Bragg W. L.* Patterson diagrams in crystal analysis // Nature. 1939. V. 143. P. 73—74.
34. *Bragg W. L.* A new type of «X-ray microscope» // Ibid., P. 678.
35. *Bragg W. L.* The X-ray microscope // Ibid., 1942. V. 149. P. 470—471.
36. *Bragg W. L.* X-ray analysis of biological molecules // Aspects of protein structure L.; N. Y., 1963. P. 1—9.
37. *Bragg W. L.* Giant molecules // Proc. Roy. Inst. Gtr. Brit. 1949. V. 34. P. 395—405; русск. пер.: *Брэгг У. Л.* Молекулы-гиганты // УФН. 1950. Т. 40. Вып. 1. С. 108—119.
38. *Bragg W. L., Kendrew J. C., Perutz M. F.* Polypeptide chain configurations in crystalline proteins // Proc. Roy. Soc. London. 1950. V. A203. P. 321—357.
39. *Bragg W. L., Howells E. R., Perutz M. F.* Arrangement of polypeptide chains in horse methaemoglobin // Acta crystallogr. 1952. V. 5. P. 136—141.
40. *Bragg W. L., Perutz M. F.* The external form of the haemoglobin molecule. I. // Ibid. P. 277—283.
41. *Bragg W. L., Perutz M. F.* The external form of the haemoglobin molecule. II. // Ibid., P. 323—328.

42. Bragg W. L., Perutz M. F. The structure of haemoglobin // Proc. Roy. Soc. London, 1952. V. A213. P. 425—435.
43. Bragg W. L., Howells E. R. X-ray diffraction by imidazole methaemoglobin // Acta crystallogr. 1954. V. 7. P. 409—411.
44. Bragg W. L., Howells E. R., Perutz M. F. The structure of haemoglobin. II. // Proc. Roy. Soc. London. 1954. V. A222. P. 33—44.
45. Bragg W. L., Perutz M. F. The structure of haemoglobin. IV. Fourier projections of the 010 plane // Ibid. V. A225. P. 315—329.
46. Bragg W. L., Perutz M. F. I. A Fourier projection of haemoglobin on the 010 plane II. Sign determination by the isomorphous replacement method // Acta crystallogr. 1954. V. 7. P. 653—654.
47. Taylor H. S. Large molecules through atomic spectacles // Proc. Amer. Chem. Soc. 1941. V. 85. P. 1.
48. Haggins M. L. The structure of fibrous proteins // Chem. Rev. 1943. V. 32. P. 195.
49. Huggins M. L. X-ray studies of the structure of biochemical interest // Annual. Rev. Biochem. 1942. V. 11. P. 27—50.
50. Уотсон Дж. Двойная спираль. Воспоминания об открытии структуры ДНК. М., 1969.
51. Bragg W. L. Current researches in the Cavendish laboratory. L., 1948.
52. Bragg W. L. Organisation and work of the Cavendish laboratory // Nature. 1948. V. 161. P. 627—628.
53. Bragg W. L. The Cavendish laboratory // J. Inst. Met. 1948. V. 75. P. 107—114.
54. Bragg W. L. Crystallographic research in Cavendish laboratory // Proc. Roy. Inst. Gr. Brit. 1951. V. 35. P. 103—113.
55. Bragg W. L. The Cavendish laboratory of Cambridge university // Nucleo. 1952. V. 7. P. 447—449.
56. Bragg W. L. Budgets of the scientific departments of university of Cambridge // Nature. 1953. V. 171. P. 642—643.
57. Bragg W. L. A centre of fundamental research // Physics. to-day. 1953. V. 6. P. 18—19.
58. Bragg W. L. What makes a scientist // Proc. Roy. Inst. Gr. Brit. 1969. V. 42. P. 397—410; русск. пер.: Брэгг Л. Что создает ученого // Наука и жизнь. 1970. № 9. С. 80—84.
59. Bragg W. L. The spirit of science // Proc. Roy. Soc. Edinburg. 1967. V. A67. P. 303—308.

ПРИМЕЧАНИЯ

¹ Под структурой в данном случае понимается пространственное расположение атомов с фиксированными значениями межатомных расстояний и валентных углов. Таким образом, речь идет о зарождении не кристаллохимии вообще, а о структурной кристаллохимии. Это означает признание существования «дорентгеноструктурного» периода в развитии кристаллохимии, на что впервые указал В. М. Гольдшмидт [1].

² Аналогичное уравнение независимо от У. Л. Брэгга и иным путем (из анализа уравнений М. Лауэ) вывел русский кристаллофизик Г. В. Вульф [3].

³ Их список приведен в [6] и [7].

⁴ Недавно первая монография по этой проблеме была переведена на русский язык [12].

⁵ Вклад в решение этой проблемы внесли в 1926—1976 гг. В. М. Гольдшмидт, Л. Полинг, В. Х. Захариасен, Л. Аренс, Дж. Слейтер, Дж. Уэйбер, Т. Кромер, Р. Шеннон и Ч. Прюит.

⁶ Т. е. за установление пространственной структуры молекулы миоглобина методом РСА.

⁷ Брэгг очень большое значение придавал тому, что он называл «духом науки». Не случайно одна из его статей так и озаглавлена — «Дух науки» [59].

К. В. СКУФЫН (ВОРОНЕЖ), Л. В. БЕЛОУСОВ

ПОИСКИ БИОЛОГИЧЕСКОГО СИНТЕЗА В РАБОТАХ К. К. СЕНТ-ИЛЕРА

Из плеяды биологов, работавших в России в конце XIX и в первых десятилетиях XX в., скромное, если не сказать незаметное, место в нашей исторической памяти занимает автор свыше 100 работ по различным вопросам зоологии и гистологии (хотя и объединенных общей теоретической концепцией) профессор Юрьевского, а позднее Воронежского университета Константин Карлович Сент-Илер (1866—1941). Ряд обстоятельств его жизни не способствовал столь широкой его известности среди современников, на какую он, бесспорно, мог бы

Авторы выражают благодарность Ю. Пюттсепп (Тарту) за предоставленные материалы о деятельности К. К. Сент-Илера в дерптский период.

© К. В. Скуфын, Л. В. Белоусов.