

osvrti

Kristalografija, interdisciplinarna znanost 21. stoljeća: XX. kongres međunarodne kristalografske unije

Firenca 23. – 31. 8. 2005.

B. Kojić-Prodić

Institut Ruđer Bošković, pp 180, 10002, Zagreb

Svjetski kongres kristalografa, koji se redovito održava svake treće godine od završetka Drugog svjetskog rata, jasno pokazuje aktualna usmjerenja i rezultate izrazito interdisciplinarne, tek nepuno stoljeće "stare" znanosti. To obilježje došlo je do izražaja i na ovogodišnjem skupu u Firenci, koji je izborom programa i predavača privukao više od 2200 znanstvenika iz cijelog svijeta. Estetskom doživljaju tog skupa pridonijela je bogata renesansna baština toskanske prijestolnice. Održano je 36 plenarnih (keynote) predavanja uključujući kao predavače nobelovce *R. Hoffmanna* i *H. Krotoa*. Usporednih 98 mikrosimpozija pratila su predavanja i poster. Bila su očita dva naglašena usmjerenja u istraživanju: proteinska struktura i funkcija i biološki aktivne male molekule (npr. nastajanje i struktura amiloidnih proteina, vezano uz Alzheimerovu bolest) te strukture i svojstva novih materijala (npr. dizajn Li-baterija, mikrostruktura materijala, nukleacija i rast zrna, ponašanje materijala pri visokim i niskim temperaturama i visokim tlakovima). Kongres je pokazao snažan razvoj novih eksperimentalnih tehnika i usavršavanje postojećih, što se ponajprije odnosi na primjenu sinkrotrona – izvora većeg intenziteta (8 GeV) u difrakcijskim mjerenjima i mikroizvorima promjera 1 mm – 1 μ m (za rad s malim uzorcima) – kao i na renesansu neutronske difrakcije i primjenu krioelektronske mikroskopije u raspoznavanju slike makromolekula. Primjena difrakcijskih metoda u identifikaciji spojeva i različitih materijala nije novina, ali količine koje se mogu detektirati zapanjujuće su male (nekoliko μ g), što se već uvelike primjenjuje u forenzici, medicinskoj dijagnostici, znanosti o okolišu, arheologiji i nizu drugih područja. Uz moderne difrakcijske uređaje, opremljene podesnim kolimirajućim sustavima, osjetljivim detektorima te pratećim kriouređajima za hlađenje uzoraka i detektora, neprestance se pomiču granice mogućeg, pridonoseći točnosti, brzini i kvaliteti mjerenja. Razvoj pratećeg softvera i računala, uključujući diskusije o "grid computingu", također su bili predmetom rada navedenog skupa.

Želja da se znanost i njezini dometi približe što većem broju ljudi zacijelo pridonosi boljem razumijevanju uloge znanosti u svakodnevnom životu i razumnoj primjeni njezinih tekovina bez štetnih posljedica za ljudsko zdravlje, uz očuvanje prirode i kulturno nasljeđe. Tijekom kongresa održana je i plenarna sjednica predstavnika svih država članica, čiji je zadatak utvrditi smjernice rada Svjetske unije kristalografa i svih njezinih sekcija, izabrati predsjednika i dopredsjednika te članove odbora s mandatom od tri godine. Upravo to tijelo donijelo je odluku o osnivanju sekcije posvećene ulozi kristalografije u očuvanju i razumijevanju kulturne baštine. Tako je na skupu objavljeno rješenje zagonetke plavog pigmenta koji su upotrebljavali Maje, zahvaljujući korištenju sinkrotronskog zračenja i računskih postupaka: rompski i monoklinski polimorfi minerala paligorskita i organske boje indiga koja se veže na površinski sloj minerala. Koliko ozbiljnosti traži taj posao pokazuje primjer Nizozemske, u kojoj na očuvanju baštine rade konzervatori koji imaju diplomu kemije, fizike ili biologije, a potom Visoke škole za konzervatore.

Cilj ovog prikaza je predočiti čitateljima kako jedna relativno nova disciplina zadire u mnoga područja znanosti, čije tekovine susrećemo primijenjene u životu svakog od nas. Moto nobelovca Krotoa pokazuje da znanstvenici jasno vide ulogu znanosti i vjerujemo da većina živi i radi u skladu s njegovom izrekom: "Zna-

nost je u službi očuvanja ljudskog zdravlja i prirode, nastojanja da se živi u skladu s njom te obrazovanja novih generacija i širenja spoznaja". Njegovo predavanje "Novi pogledi na mehanizme fulerena i nastajanja nanocjevčica" skreće pozornost na važne materijale 21. stoljeća, a ujedno predstavlja izuzetan komunikacijski domet zbog primjene suvremenih audiovizualnih efekata, što je slušateljstvo održalo u punoj pažnji i oduševljenju. Autor velikog broja BBC-jevih popularnih znanstvenih serija i organizator popularnih radnih grupa za mlade od Engleske do Meksika i Malezije nobelovac Kroto postavio je predavačima standard koji je teško dostići. U skladu s nastojanjima znanstvenika da se što više mladih uključi u rad znanstvenih skupova, organizatori 20. kongresa međunarodne kristalografske unije, posebice predsjednici znanstvenog kao i organizacijskog odbora prof. dr. *Carlo Mealli* i prof. dr. *Paola Paoli*, ishodili su 450 stipendija za mlade znanstvenike koje su im omogućile da prisustvuju skupu. Jamačno je to bio skup s najvećim brojem mladih istraživača koji je posljednjih godina održan u svijetu.

Predavanje nobelovca *R. Hoffmanna*, "Pogled teoretičara na kristalografiju", pokazalo je usku povezanost teorijskog i eksperimentalnog pristupa kemijskoj vezi i interakcijama molekula i tu je teško nešto dodati osim poželjeti da znanstvenici primjenjuju taj logičan pristup.

Dodjela Ewaldove nagrade za životna postignuća u kristalografiji, uz predavanje dobitnika, bio je središnji događaj svečanosti otvorenja skupa. To priznanje pripalo je ove godine istaknutom kristalografu prof. dr. P. Coppensu (rođenom 1930.) za rad "Vremenski razlučena fotokristalografija kratkoživičnih pobuđenih stanja molekula". To je novo područje u kojem se kombinira kristalografija s apsorpcijskom i emisijskom spektroskopijom i kvantno-kemijskim računima koji pokazuju elektronsku prirodu pobude. Unatoč zreloj životnoj dobi laureata, svi koji poznaju prof. Coppensa znaju da, uz superioran intelekt i radni elan, ima izuzetnu vještinu eksperimentiranja, koja traži stalno usavršavanje uređaja. Stigao je na svečanost izravno iz laboratorija. To područje otvara nove mogućnosti u razumijevanju mehanizama kemijskih reakcija prepoznavanjem prijelaznih, kratkoživičnih stanja i praćenje ireverzibilnih kemijskih reakcija u kristalu. Eksperimentalno veoma zahtjevno područje razvijat će se upravo zahvaljujući upotrebi i usavršavanju lasera i detektora. Tijekom posljednjeg desetljeća kemijska kristalografija ne djeluje primarno kao analitička metoda, već je okrenuta praćenju sinteze. Taj pristup dolazi do izražaja u kristalnom inženjerstvu, koje je povezano i sa supramolekularnom kemijom. Zadatak je prepoznati supramolekularni sinton i motiv ponavljanja, kao i cjelovitu strukturu ansambla. Dakle, planiranje i kontrola sinteza određivanjem struktura polaznih supstancija, međuprodukata i konačnih produkata u središtu je kemijske kristalografije i okrenuta je k razumijevanju mehanizama kemijskih reakcija.

U želji da odaberemo zanimljive i znanstveno relevantne primjere, teško je izbjeći subjektivno viđenje; kriterij pri izboru je znanstvena kompetentnost i aktualnost tema. U toj kategoriji treba izdvojiti predavanja "Difrakcija na jednoj čestici" doajena kristalografije dr. D. Sayrea (rođenog 1924.), koji je doktorirao u Oxfordu kod nobelovke D. Crowfoot-Hodgkin. Bio je dugogodišnji znanstveni savjetnik IBM-a, a sada radi na Odjelu za fiziku i astronomiju Sveučilišta u Stony Brooku. Nagli razvoj metoda za zapis slike elektronskim putem našao je primjenu u znanosti, tehnici i medicini, što potvrđuje i taj rad. U spomenutom izlaganju radi se o tome da se na razini atomskog razlučivanja "vide" makromolekule i njihovi ansamblu upotrebom femtosekundnog pulsirajućeg rendgenskog izvora; dakle, riječ je o rendgenskoj difrakcijskoj mikroskopiji. Novoj metodi komplementarna je krioelektronska mikroskopija, koja se primjenjuje, među inim, za određivanje faza strukturnih faktora makromolekularnih ansambla (npr. ribosoma i virusa). Dr. A. Zewail (CALTECH) govorio je o ultrabrznoj elektronskoj kristalografiji, koja prati nastajanje i nestajanje molekula u vremenu od pikosekunda do femtosekunda. Istraživači koji se bave proučavanjem kako materijala tako i makromolekula odmah mogu prepoznati važnost takve metode. Dr. M. Tanaka (IMRAM, Sveučilište Tohoku, Sendai, Japan) govorio je o proučavanju nanostrukture primjenom konvergentnog snopa u elektronskoj difrakciji. Tom tehnikom lako se mogu prepoznati razni oblici defekata kristalne rešetke, što je popraćeno primjerima na poluvodičkim materijalima. Veoma zanimljiv primjer primjene novih mikrodifrakcijskih tehnika predočila je dr. A. Cedola iz Ancone praćenjem procesa mineralizacije u oštećenim dijelovima kostiju koje se obnavljaju umjetnim putem.

L. N. Johnson, sa Sveučilišta u Oxfordu, izvijestila je o inhibitorima kinaza i prepoznavanju supstrata. Nema sumnje da je to istraživanje od izuzetne važnosti jer pronalaženjem učinkovitih inhibitora za tu porodicu enzima omogućuje se terapija pri liječenju raka, dijabetesa i artritisa. Neki od pronađenih inhibitora su u kliničkom ispitivanju.

Kako sustavnim modeliranjem interakcije supstrata, odnosno inhibitora s određenim proteazama (molekularno prepoznavanje), možemo pripremiti učinkovite lijekove, pokazao je prof. G. Klebe, čije predavanje nije bilo zanimljivo samo onima koji se bave dizajnom lijekova nego i svima onima koji u svom istraživanju prate interakciju molekula. U njegovom izlaganju bilo je očito koliko je važno imati na raspolaganju baze podataka koje su nužne u modeliranju. U okviru Međunarodne kristalografske unije stvoreno je

šest temeljnih baza podataka, koje se stalno nadopunjuju novim kristalnim strukturama i izrađuje se prikladan softver koji omogućuje što jednostavnije pretraživanje podataka i njihovu obradu. Tako ove godine Cambridge Structural Database obilježava 40. godišnjicu postojanja i rada.



Struktura glavne proteaze SARS-a koja je temelj za otkrivanje lijeka (<http://www.anl.gov>)

Istraživanja vezana uz djelovanje virusa SARS-korona, predstavljena predavanjima J. Josepha i Z. Raa, pokazala su na molekularnoj razini u okviru strukturne i funkcionalne proteomike mehanizme djelovanja čije poznavanje dopušta dizajniranje lijekova.

Posebne pohvale ne samo za važnost izloženog istraživanja nego i za izuzetan znanstveni domet dobio je prof. dr. D. Eisenberg (UCLA), koji se bavi amiloidima i prionima, te općenito proteinima povezanim s patološkim promjenama. Poznavanje uzroka i procesa koji vode nastajanju netopivih vlaknastih struktura, a prate neurodegenerativna oboljenja kao što su Alzheimerova i Parkinsonova bolest, predstavlja ključ za njihovo liječenje. Eisenberg je otkrio kako kod prirodnih proteina dolazi do promjene smatanja (foldinga) u ono karakteristično za amiloide, pri čemu se grupiraju dvostruke β -ploče okomito na nit vlakna. Uz primjenu sinkrotronskog zračenja njegova skupina odredila je strukturu s razlučivanjem od 1,3 Å difrakcijom na niti promjera 1,5 μ m i duljine 50 μ m. Budući da svi razumijemo važnost takvih istraživanja, nužno je objasniti kako su ona organizirana. U istraživanje je uključeno nekoliko grupa različitih struka: Medicinski institut Howard Hughes, UCLA-DOE, Institut za genomiku i proteomiku, UCLA, Centar za kristalografske studije, Kemijski odjel Sveučilišta u Kopenhagenu i ESRF (Synchrotron facility), Grenoble. U timu prof. Eisenberga izmjenjuje se od dvadeset do trideset istraživača. Na svim svjetskim skupovima pozvani predavači uvijek predstavljaju rezultate, u pravilu 3 – 7 timova iz različitih dijelova svijeta. U nas nika-ko da zaživi takva organizacija znanosti i interdisciplinarni pristup. Ponekad se deklarativno pristupa takvoj shemi, ali u nas je to gotovo nemoguće postići. Svi se striktno pridržavaju područja: kemija, fizika, biologija i nema govora o "miješanju".

Ljudska mašta i kreativnost nisu omeđene vremenom, ali sigurno jesu "logistikom". "High-throughput pipe line, high-throughput proteomics, high-throughput crystallography, high-throughput crystallisation, pa high-throughput screening" i tko zna gdje bi bio kraj tom nabranjanju, ali danas tehnologija neprestano pomiče te granice. Svakako treba informirati o japanskom projektu RIKEN Structural Genomics/Proteomics Initiative, pokrenutom 2001. u Sinkrotronskom centru Spring-8 čiji je cilj od 2002. do 2006. odrediti strukture 3000 biološki i medicinski značajnih proteina.

Učinjeno je sve potrebno da bi se takav projekt realizirao. Primjenjuje se sinteza proteina izvan stanica iz cDNA i početnica uz dvostupanjski PCR i CFPS i u 12 sati "rađa" se željeni protein. Na djelu je robotika u svakom koraku. Strukture se određuju difrakcijom sinkrotronskog zračenja i spektrometrima NMR visokog razlučivanja, kojih, ne biste pogodili, ima 40! Da je to sve zbilja, a ne planovi ili znanstvena fantastika, govore rezultati. U razdoblju 2002. – 2004. strukturno je karakterizirano 2000 proteina! Nakon što ste ovo pročitali, nemojte se predati te izgubiti volju i elan: i mi "mali" nešto možemo, barem otići u Spring-8 na mjerenja ili poslati svoj uzorak DHL-poštom (ili kojom drugom). Uostalom, uredno mi stižu obrasci za aplikaciju, a i to je nešto.

Nisam pesimist, a zašto bih i bila, jer od toga nema koristi. Iz naše zemlje u radu ovog renomiranog skupa sudjelovalo je sedam istraživača Prirodoslovno-matematičkog fakulteta i Instituta Ruđer Bošković s posterima i predavanjem. Iskoristili smo vrijeme provedeno na skupu najbolje što smo mogli, jer na nove takve prilike treba pričekati tri godine.

Literatura:

Acta Crystallogr. **A61** (2005) dostupno na Crystallography Journals Online: <http://journals.iucr.org>

prikazi knjiga

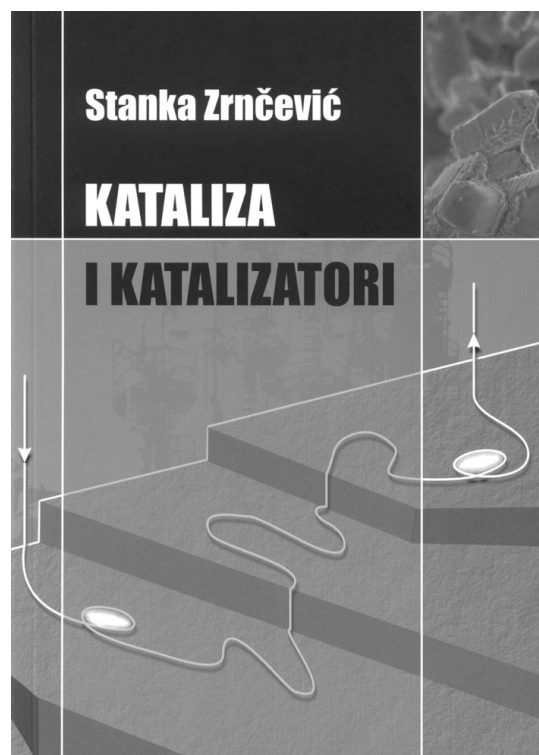
Stanka Zrnčević

Kataliza i katalizatori

Izdavač: HINUS, Zagreb; format: 17 × 24, meki uvez, 223 stranice; knjiga se može nabaviti u skriptarnici Fakulteta kemijskog inženjerstva i tehnologije, cijena 60 kn.

Djelo **Kataliza i katalizatori** je udžbenik, priručnik i izvor osnovnih podataka o sadašnjem stanju katalize i katalizatora. Pojavljuje se nakon niza godina kao logičan nastavak u promicanju ovog područja u Hrvatskoj koje dijelom zahvaća prirodne i dijelom tehničke znanosti. U djelu je objedinjen suvremeni pogled na prirodu katalitičkih reakcija, vezano uz integralni pristup s fizičkim procesima prijenosa koji određuju u velikoj mjeri primjenljivost čvrstih katalizatora u praksi. Od pojave prvog udžbenika i djela o katalizi prof. I. Brihte koje je tiskano 1952. pa djela prof. Pavice Fuderer iz 1967., ova knjiga predstavlja logičan slijed u kontinuiranom promicanju katalize kao znanstvene discipline od strane nastavnika Fakulteta kemijskog inženjerstva i tehnologije u Zagrebu. U knjizi je vrlo uravnoteženo dan moderni pristup ka cjelokupnom sagledavanju katalitičkih reakcija, dajući naglasak kako na fundamentalne procese na molekularnoj razini tako i na njihovo povezivanje s primjenskim značajkama (aktivnost, selektivnost, procesi prijenosa u čvrstim katalizatorima) sve do njihove uporabe u katalitičkom reaktoru.

Kao udžbenik, knjiga je nezaobilazna kao polazna literatura za studente Fakulteta kemijskog inženjerstva i tehnologije kao i drugih srodnih fakulteta pri praćenju odgovarajućih kolegija u kojima se razmatra kataliza i katalitički procesi. U knjizi je vrlo dobro raspoređen odnos između znanstvenog, fundamentalnog pristupa pri razjašnjavanju mehanizama i kinetike katalitičkih kemijskih reakcija s jedne strane te razmatranja svih čimbenika koji su utjecajni pri primjeni katalizatora u praksi. Upravo taj spoj ukazuje na primjenu kemijsko-inženjerske metodologije, što čini to djelo značajnim u našoj, inače oskudnoj stručnoj literaturi u području kemijskog inženjerstva. Knjiga će stoga biti i vrlo dobar priručnik i vodič mladim inženjerima koji rade u različitim granama kemijske industrije, poglavito u naftno-prerađivačkoj i naftno-petrokemijskoj industriji, različitim industrijama u kojima se provode organske sinteze kao i svima onima koji se žele ukratko i meritorno



upoznati s današnjim spoznajama i dostignućima u području katalize i primjene katalizatora.

Knjiga je koncipirana kroz četrnaest poglavlja koja se mogu više manje shvatiti kao zasebne cjeline i koje su razvrstane s obzirom na logičan slijed izlaganja od osnovnih pojmova sve do uporabnih svojstava katalizatora. U uvodnom dijelu ukratko se daje pregled povijesti katalize uz osnovnu podjelu na homogenu i heterogenu katalizu te bitne značajke katalizatora. U poglavlju "Kemija i kataliza" objašnjava se opća teorija katalitičkih reakcija prema prihvaćenim teorijama. Treće poglavlje pod naslovom "Homogena kataliza" u cjelini je posvećeno tumačenju mehanizama i reakcijskom