

PARADIGME NOI ÎN CERCETAREA CHIMICĂ

acad. Ionel HAIDUC
președintele Academiei Române

NEW PARADIGMS IN CHEMISTRY RESEARCH

In contemporary chemistry are using both "classical" - "molecular chemistry", "solid state chemistry, and new notions ("Paradigms") like: "supramolecular chemistry" (introduced by Jean-Marie Lehn, Nobel Laureate in Chemistry, 1987), resulting from the combination of large numbers of indefinitely components; "proteomics" (inserted by Marc Wilkins, 1994), considered the next step in genomics study of biological systems, "metalomica" (introduced by Szpunar, 2005), which seeks to study metalloproteins or metal-containing biomolecules; "green chemistry" - that encourages the design, development and implementation of chemical products and processes that would minimize or eliminate the use and / or generation of toxic, hazardous to humans or the environment (pollutants).

The contemporary chemistry permanently changes its face, a new fields and paradigms appear, it more and more address to understanding the chemistry of the normal vital and pathological processes and offers an special and attractive research field for those who is dedicated to it.

Anul 2011 a fost declarat de Organizația Națiunilor Unite, la inițiativa IUPAC (International Union of Pure and Applied Chemistry) susținută de UNESCO, drept Anul Internațional al Chimiei. Acesta este un bun prilej de a arunca o privire asupra imaginii de ansamblu a chimiei ca știință la începutul secolului 21 și asupra tendințelor actuale și de perspectivă.

Titlul articolului de față sugerează că în ultimul timp chimia nu s-a dezvoltat doar printr-un proces evolutiv, ci s-a produs o adevărată revoluție, din care au rezultat concepte și paradigme noi.

În chimia „clasică” putem distinge două categorii de substanțe din punct de vedere structural: combinații formate din molecule distincte (marea majoritate a celor organice dar și numeroase anorganice) și combinații solide în care toți atomii sau ionii sunt uniți într-o structură compactă, fără a putea distinge molecule independente. Avem în primul caz o „chimie moleculară”, iar în al doilea caz o „chimie non-moleculară”, o chimie a stării solide („solid state chemistry”). Structurile non-moleculare se pot forma prin interacțiuni puternice: legături covalente (de exemplu diamantul, siliciul elementar, metalele etc.), legături ionice (de exemplu clorura de sodiu, de fapt toate „sărurile” ionice) sau prin legături covalente polare (oxizi, sulfuri, halogenuri, nitruri non-moleculare).

În primul caz moleculele își păstrează

individualitatea iar starea solidă se realizează prin interacțiuni mai slabe, forțe intermoleculare care se desfac ușor. Forțele intermoleculare sunt slabe, dar suficient de puternice pentru a asocia moleculele în structuri organizate. Preocuparea pentru modul în care se leagă, se organizează și se mențin în structuri solide moleculele a dat naștere CHIMIEI SUPRAMOLECULARE. Aceasta este o direcție nouă în chimie, studiul interacțiunilor dintre molecule, al structurilor formate prin legături necovalente. Nașterea acestui domeniu se datorează lui Jean-Marie Lehn (laureat al Premiului Nobel pentru Chimie, 1987), care scria în 1977: „Așa cum există o chimie moleculară bazată pe legături covalente, există un domeniu al chimiei supramoleculare, chimia ansamblurilor de molecule și a legăturilor intermoleculare”.¹ Potrivit lui Jean-Marie Lehn, „chimia supramoleculară se ocupă cu entități organizate de complexitate mai ridicată care rezultă din asocierea a două sau mai multe specii chimice menținute împreună prin forțe intermoleculare”. Pe baza acestei definiții se poate deduce că în chimia supramoleculară se lucrează cu două tipuri de obiecte: „supermolecule” – adică specii discrete, bine definite, oligomoleculare, care rezultă din asocierea intermoleculară a unui număr mic de componente, și ansambluri sau sisteme supramoleculare, care rezultă din asocierea unui număr mare, nedefinit de componente.

Formarea structurilor supramoleculare are loc spontan prin auto-asamblare (self-assembly) și auto-organizare (self-organization), în care așa-numita recunoaștere moleculară („molecular recognition”) joacă un rol determinant. Interacțiunile dintre molecule pot fi legături coordinative (donor-acceptor), legături secundare („soft-soft interactions”), legături de hidrogen, legături pi etc.²

În alt context, Jean-Marie Lehn afirma că noul domeniu reprezintă o „chimie coordinativă generalizată”.³ Din această generalizare a rezultat un limbaj nou, cu termeni care descriu componentele structurilor supramoleculare: coronand, criptand, carcerand, podand, ciclofan – care extind noțiunea clasică de ligand, sau catenan, rotaxan, pseudorotaxan, helicat – care descriu tipuri specifice de structuri supramoleculare.⁴ Sunt termeni noi, neobișnuiți pentru cei ce activează în

¹ (a) J.M. Lehn, Pure Appl. Chem. 1978, 50, 871; (b) J.M. Lehn, Angew. Chem., Int. Ed. Engl. 1988, 27, 89; J.M. Lehn, Supramolecular Chemistry. Concepts and Perspectives. VCH Weinheim, 1995.

² (a) I. Haiduc, Supramolecular Organometallic Chemistry, Wiley-VCH, Weinheim, 1999; (b) I. Haiduc, in Encyclopedia of Organometallic Chemistry, Taylor and Francis, London, 2007, vol. 1:1, pag.1-8.

³ J.M. Lehn, in A.F. Williams, C. Floriani, A.E. Mehrbach, (Editors) Perspectives in Coordination Chemistry, Verlag Helvetica Chimica Acta, Basel and VCH, Weinheim, 1992, pag. 447.

⁴ K. Ariga, J.P. Hill, M.V. Lee, A. Vinu, R. Charvet, S. Acharya, Sci. Technol. Advances Materials, 2008, 9, 014109.

chimia clasică, dar care sunt frecvent întâlniți în noua chimie supramoleculară, care a cunoscut o dezvoltare explozivă în ultimul timp, reflectată în numeroase cărți și monografii și într-o enciclopedie de chimie supramoleculară.

O altă dezvoltare recentă în chimie, reflectată în apariția unor paradigme noi, cuprinde domenii interdisciplinare, descrise prin sufixul -omica. Sufixul -omica a apărut într-un neologism din limba engleză (-omics) într-un termen care descrie un domeniu al biologiei moleculare, genomica („genomics”), adaptat pe scară largă și fără rezerve. A fost în curând urmat de termenul proteomica („proteomics”) și mai recent metalomica („metallomics”), care au intrat în uzul curent, în domenii care leagă chimia de biologia moleculară. Sufixul -om indică obiectul de studiu al unui domeniu: genom, proteom (în engleză genome, proteome).

Proteomica este studiul proteinelor, în particular al structurilor și funcțiilor lor. Termenul „**proteome**” (combinat din „**protein**” și „**genome**”) a fost introdus de un doctorand, Marc Wilkins, în 1994, iar proteomics, prin analogie cu genomics, în 1997. Proteomica este considerată treapta următoare genomicii în studiul sistemelor biologice și este mai complicată decât genomica. Editura Elsevier publică Journal of Proteomics, editura Wiley-VCH revista Proteomics, iar American Chemical Society publică Journal of Proteome Research. Mai apar The Open Proteomics Journal, o revistă electronică cu acces liber (gratuit), Molecular and Cellular Proteomics, Journal of Proteomics and Bioinformatics, Human Genomic and Proteomics (de asemenea cu acces liber), ceea ce dovedește o activitate intensă în domeniu.



Iurie Platon. *Cucutenianca*, anii 1990, șamotă

Termenul „**metalom**” (engl. „metallome”) a fost introdus de R.J.P. Williams prin analogie cu „proteome” pentru a descrie distribuția ionilor metalelor în compartimentele celulei vii.⁵ Termenul **metalomica** („metallomics”) descrie studiul metalomului. Mai nou (Szpunar, 2005)⁶ definește metalomica drept studiul tuturor speciilor metalice și metaloidice din celule și țesuturi, iar Hiroki Haraguchi definește „metalomii” („metallomes”) ca metalloproteine sau orice biomoleculă care conține metale, iar metalomica („metallomics”) drept studiul acestor biomoleculă.⁷ Uneori se exagerează și s-a încercat o generalizare prin introducerea termenului de elementomica („elementomics”) și se sugerează și termeni ca „lipidomics” sau „glycomics”.⁸

Noul domeniu a dobândit recunoaștere iar importanța care i se acordă este reflectată în apariția revistei METALLOMICS, publicată de Royal Society of Chemistry, începând cu anul 2009, și în organizarea unor conferințe internaționale consacrate acestei discipline.

Limbajul chimic s-a îmbogățit în ultima vreme cu un termen întâlnit din ce în ce mai frecvent: „**Chimia verde**” („green chemistry”).⁹ Această paradigmă nouă descrie o nouă filosofie în chimie și ingineria chimică, chimia sustenabilă, care încurajează proiectarea, elaborarea și implementarea unor produse și procese chimice care reduc la minim sau elimină folosirea și/sau generarea de substanțe toxice, periculoase pentru om sau mediu (substanțe poluante).¹⁰ Se aplică tuturor ramurilor chimiei. „Chimia verde” diferă de chimia mediului („environmental chemistry”) care este chimia mediului natural și a poluanților chimici în natură. Este important că această „chimie verde” încearcă să reducă sau să prevină poluarea la sursă, nu să rezolve situația după poluare. Și acest nou domeniu se bucură de o atenție deosebită, iar apariția unei reviste specializate GREEN CHEMISTRY, publicată de Royal Society of Chemistry începând cu anul 1999, confirmă actualitatea noii filosofii în practica și cercetarea chimică. Există deja o foarte bogată literatură referitoare la chimia verde.

Concluzia care se desprinde din această prezentare este simplă: chimia contemporană își schimbă fața în permanență, apar domenii și paradigme noi, se adresează tot mai mult spre înțelegerea chimică a proceselor vitale normale și patologice și oferă un câmp de cercetare deosebit de atractiv pentru cei care i se dedică.

⁵ R.J.P. Williams, Coord. Chem. Rev. 2001, 216-217, 583.

⁶ (a) J. Szpunar, The Analyst 2005, 130, 442 (b) S. Monicou, J. Szpunar, R. Lobinski, Chem. Soc. Revs. 2009, 38, 1119.

⁷ H. Haraguchi, J. Analyt. Atomic Spectrometry 2004, 19, 5.

⁸ Y.F. Li, C. Chen, Y. Qu, Y. Gao, B. Li, Y. Zhao, Z. Chai, Pure Appl. Chem. 2008, 20, 2577.

⁹ P. Anastas, J. Warner, Green Chemistry: Theory and Practice, Oxford University Press, New York, 1998.

¹⁰ U.S. Environmental Agency, <http://www.epa.gov>