Химия-2018

Новые «горячие» области исследований

Б. Л. Мильман, д. х. н., Е. В. Островидова,
ФГБНУ «Институт экспериментальной медицины»,
И. К. Журкович, к. х. н.,
ФГБУН «Институт токсикологии ФМБА России»
bmilman@mail.ru

УДК 543; 001.811, ВАК 02.00.02
Статья поступила в редакцию 14.06.2019
Статья принята к публикации 05.08.2019

Эта публикация – четвертая из регулярной серии статей, посвященных мониторингу наиболее «горячих» областей развития химии и, в частности, аналитической химии. Мониторинг основан на применении современных наукометрических методов, а именно статистике цитирования и совместного цитирования научных публикаций. При этом делается акцент на выявление тематики научных работ переднего края – фронтов исследований. Применение такой методологии позволяет сделать вывод о том, что в 2018 году продолжились интенсивные исследования и разработки в области солнечной энергетики, нанотехнологии, химического катализа. Сохранилась отчетливая тенденция к росту степени биологизации и миниатюризации химического анализа.

Анализ научного цитирования – очень распространенный инструмент научной политики, применяемый главным образом для оценки персональных достижений и вклада в науку отдельных лабораторий, институтов и стран. Эта методология используется реже в тематическом анализе развития науки. Такого рода информация о передовых областях прежде всего необходима самим химикам для коррекции собственных исследований с целью соотнесения их с основными трендами развития научной сферы. Соответствующий взгляд на работы коллег также имеет значение.

КРАТКОЕ СОДЕРЖАНИЕ ПРЕДЫДУЩИХ «СЕРИЙ»

В первой статье [1] «сериала», опубликованной в 2013 году, рассмотрено использование научного цитирования для построения карт науки – связанных между собой наиболее бурно развивающихся областей исследований. Здесь наряду с частым цитированием во внимание принимается частое совместное цитирование (социтирование) высокоцитируемых публикаций. Появление двух и, главное, большего количества публикаций, связанных таким социтированием, означает существование новой (сравнительно новой) «горячей» области исследований. Ее предметный характер определяется темой как этих высокоцитируемых и высокосоцитируемых публикаций, так и новых статей, цитирующих те же работы. Общая методология была приспособлена нами для мониторинга развития аналитической химии в 2012 году. Эта процедура включала выборку 100 наиболее цитируемых работ из журналов по аналитической химии и их селекцию, исходящую из трех совместных

цитирований, минимально необходимых для выделения отдельного фронта исследований. Были сделаны выводы о преимущественном развитии биоаналитики (а); развитии миниатюрной аналитической техники (сенсоры, микрофлюидные устройства), стимулируемое потребностями внелабораторного анализа, прежде всего клинической диагностики (б); развитии метабомики и протеомики на основе применения хроматографии – масс-спектрометрии (в).

Во второй статье [2], относящейся к фронтам 2014 года, общие выводы о развитии аналитики остались в основном теми же. Сохранился, как и в прежние годы, акцент на биоаналитике. Большинство конкретных областей развития базировалось на применении масс-спектрометрии (протеомика, метабомика, анализ окружающей среды и продуктов питания) и разработке небольших аналитических приборов (сенсоры и аналитические чипы), появление которых в большой степени обусловлено прогрессом микрофлюидики и нанотехнологий.

Третья статья [3] рассматривала прогресс не только аналитической и биоаналитической химии, но и химии в целом и сопряженной с ней наукой о материалах. Анализ этих больших областей методами наукометрии проводит американская компания Clarivate Analytics в сотрудничестве с институтами Академии наук Китая [4, 5]. Здесь большие «горячие» области относились к применению наноматериалов и фотоэлементам (и батареям), а также отдельным направлениям органического синтеза. Развитие аналитики (уже наш анализ) в общих чертах повторило результаты предыдущих лет, хотя появились некоторые важные акценты, которые более подробно будут рассмотрены ниже.

ОБЩЕТЕМАТИЧЕСКИЙ НАУКОМЕТРИЧЕСКИЙ АНАЛИЗ В ОТНОШЕНИИ ХИМИИ И НАУКИ О МАТЕРИАЛАХ

Целевой анализ этой области, выделенный из мониторинга науки в целом и проведенный фирмой Clarivate Analytics и Академией наук Китая по прежней методологии [5], отражен в табл. 1. Если прибегать к самым общим формулировкам, то, казалось бы, многие направления развития (солнечные батареи, нанотехнологии, каталитические реакции) за два года не изменились. Так, остается устойчивым сравнительно новое направление – применение давно известного минерала перовскита (CaTiO_3) и его новых (синтетических) аналогов в солнечных батареях (№ 6, табл. 1) и родственные области (№ 5, табл. 1). «Старая добрая» органическая химия в виде новых каталитических реакций (№ 2 и 4) также не сходит «с арены».

Тем не менее в содержательном отношении тематика исследований 9 из 10 топ-фронтон стала за два года другой. Дадим краткие комментарии относительно трех «горячих» областей. Фронт № 9 примыкает к протеомике и обеспечивает новые возможности рентгеноструктурного анализа – в отношении нанообъектов, какими предстают плохо кристаллизующиеся белки, например мембранные белки. Фронты № 7 и 10 представляют собой новые аналоги очень распространенных тем исследований. Борофен (№ 7) – это аналог знаменитого графена, а новые экологически удобные нелетучие растворители (№ 10; смеси, включающие четвертичные аммониевые соли) – подобны ионным жидкостям.

АНАЛИТИКА И БИОАНАЛИТИКА. ГДЕ ВЫ, «ОМИКИ»?

Описанную в начале статьи методику мы применили в четвертый раз для выявления «горячих» областей развития аналитики в 2018 году. Мы составили список 100 (точнее 102) наиболее цитируемых статей в этой науке, используя перечень 20 ведущих (по суммарному количеству ссылок) аналитических журналов и число ссылок на отдельные статьи в них с 2013 по 2017 год [6]. Среди журналов – много самых известных общепублицистических изданий: *Analytical Chemistry*, *Trends in Analytical Chemistry*, *Analytica Chimica Acta* и др. Рассмотренные статьи сгруппированы по ссылкам на них в одних и тех же публикациях в 2018 году. Цитируемые статьи, получающие хотя бы три совместных ссылки, объединяются в кластеры. Их в 2018 году набралось 14 (табл. 2, рис. 1), приблизительно столько же, сколько в предыдущие годы [1–3]. Фронт исследований

в нашей модели – это такие кластеры высокоцитируемых работ и работы, цитирующие их в 2018 году. Эти фронты, объединенные между собой теми же связями социотирования, образуют карту аналитики 2018 года (рис. 1).

Анализ данных табл. 2 и сравнение с предшествующими результатами наукометрических исследований [1–3] приводит как к прежним, так и новым выводам. Во-первых, сохраняется тенденция к росту степени биологизации и миниатюризации химического анализа. Только «хеометрия» (№ 9), «наноматериалы как сорбенты» (№ 10) и «газовые сенсоры» (№ 6) в существенной степени минуют биоаналитику, хотя сенсоры для этого применения (загрязненный воздух, опасные производства, горнорудная промышленность и др.) могут иметь общую технологическую основу с биохимическими сенсорами.

Сравнительно новый вывод: те области биохимического анализа, которые основываются на применении больших приборов (масс-спектрометры и хроматографы), исчезают с карты развития аналитики или становятся меньше. Так, фронт «протеомика» (№ 3) уменьшился в 2,7 раза по сравнению с 2016 годом, если считать число высокоцитируемых публикаций, входящих в кластеры. «Метаболомика» присутствовала на картах аналитики в 2012 и 2014 годах, но ее уже не было в 2016 и 2018 годах. Соответственно, число цитирующих статей, в заголовках которых присутствуют слова «масс-спектрометрия» и «хроматография» (и производные термины) уменьшилось в 2018 году по сравнению с 2016 годом в 4,4–4,5 раза.

Обратная тенденция касается миниатюрных аналитических устройств – сенсоров, аналитических чипов, микрофлюидных устройств. Слова «сенсор» и «микрофлюидный»

Рис. 1. Карта аналитической химии 2018 года

в 2018 году, наоборот, упоминаются чаще (приблизительно в 2–2,5 раза). Соответствующие аналитические области охватывают несколько фронтов: сенсоры – № 1, 8, 11, 12, микрофлюидные устройства – № 2, 4, 5, 7.

«Углеродные квантовые точки» – особый вид биосенсоров – самый крупный фронт 2018 года (№ 1, табл. 2), более чем в два раза увеличивший свой размер по сравнению с ситуацией двухлетней давности. Разработка и применение новых наноматериалов – основной вклад в развитие био- и химической сенсорики (№ 1, 6, 8, 11, 12). Использование 3D-принтеров для изготовления микрофлюидных устройств – один из факторов развития этих областей (фронты № 2, 4, 5, 7). Необходимо отметить, что биологизация химического анализа привела к тому, что на карту аналитики попали некоторые смежные области, также отраженные в рассматриваемых журналах, но напрямую не связанные с биохимическим анализом («Органы на чипе», № 4; «Микрофлюидика клеток», № 5; «Экзосомы», № 13).

Фронты аналитики связаны с общехимическими направлениями развития в том, что касается роли нанотехнологий и протеомики (табл. 1).

ВОПРОСЫ И ОТВЕТЫ

Авторы статьи периодически делают сообщения, в которых используют рассмотренные материалы наукометрического изучения аналитики [1–3]. Эти данные вызывают не только интерес аудитории, но и закономерные вопросы. В этой статье мы хотели бы привести два общих вопроса вместе с достаточно развернутыми ответами.

Вопрос: «Мой коллега работает по существу в области аналитической химии, публикует хорошие статьи, но преимущественно в журналах, не относящихся напрямую к аналитике. Получается, что его вклад в развитие рассматриваемой области науки ваша методология не оценивает?»

Ответ: Применяемый нами наукометрический метод – для тематической, а не персональной оценки развития науки. Если

Таблица 1. Передний край развития химии и наук о материалах в 2018 году [5]

№	Фронт исследований	Цитируемые статьи	Число ссылок в 2012–2017 годах	Средний год цитируемой статьи	Комментарии
1	Литиевые металлические аноды, свободные от дендритов	34	2941	2015,9	Усовершенствование литиевых электродов для применения в наиболее перспективных перезаряжаемых элементах
2	Мета-селективная активация связи C-H	34	2599	2015,5	Селективные каталитические реакции арилирования
3	Фотоиндуцированная «живущая» радикальная полимеризация	34	3037	2015,3	Новые процессы полимеризации, в которых отсутствуют необратимые стадии обрыва цепи
4	Объединение реакции восстановления, иницируемой светом, и никелевого катализа	23	2350	2015,2	Удобные условия проведения новых реакций синтеза
5	Неорганические нанокристаллические оптоэлектронные материалы на основе перовскита	18	3951	2015,1	Новый класс материалов, применяемых, например, для фотоэмиссии
6	Солнечные батареи на основе перовскита	25	3361	2015,1	Новое применение давно известного минерала
7	Борофен	19	1831	2015,1	Недавно открытая форма бора – двумерный кристалл
8	Полимерные композиционные наноматериалы с высокой диэлектрической проницаемостью	16	1959	2015,0	Потенциальное применение в электронике (электротехнике) для создания конденсаторов с высокими характеристиками
9	Определение структуры белков с помощью рентгеновских лазеров на свободных электронах	19	2190	2014,6	Получение «мгновенных» изображений единичных молекул белков
10	Глубокие эвтектические растворители и их применение	18	2990	2014,2	Растворение малорастворимых в воде веществ и материалов, применение в «зеленой химии»

Таблица 2. Передний край развития аналитики в 2018 году

№	Фронт исследований	Цитируемые статьи	Число ссылок в 2013–2017 годах	Число ссылок в 2018 году	Средний год цитируемой статьи	Комментарии
1	Углеродные квантовые точки	12	2939	910	2013,7	Углеродные наноматериалы, характеризующиеся флуоресценцией. Применение в медицинской диагностике и др. [7]
2	Бумажная микрофлюидика	10	3554	951	2013,5	Миниатюрные аналитические устройства, в которых жидкость движется в порах бумаги. Применение – медицинская диагностика, тесты в экологии и анализе пищи [8]
3	Протеомика	7 2684	2684	961	2013,7	Разнообразные исследования, в том числе количественные определения и широкое покрытие протеомов
4	Органы на чипе	6	1535	591	2014,0	Модели человеческих органов. Миниатюрные полимерные устройства, содержащие микрофлюидные каналы. Их внутренние стенки покрыты клетками, взятыми из соответствующего органа. Применение – испытание новых лекарств [9]
5	Микрофлюидика клеток	6	1532	453	2013,8	Диагностические, аналитические и др. устройства для сортировки, разделения, фиксации клеток, культивирования бактерий и т. п. [10]
6	Газовые сенсоры	5	2089	793	2014,0	Изменение свойств, например электропроводности, оксидов металлов, углеродных наноматериалов и др. в среде различных газов [11]
7	3D-печать в микрофлюидике	5	1488	694	2015,0	Способ изготовления микрофлюидных устройств [12]
8, 11, 12	Био- и электрохимические сенсоры*	5 2 2	1224 458 450	421 75 54	2013,4 2013,0 2013,5	Внедрение новых наноматериалов, включая графен [13]. Основное применение – клиническая диагностика
9	Хеометрия и ее применение	3	1051	427	2013,7	Анализ основных компонентов и другие методы в обработке спектроскопических данных
10	Наноматериалы как сорбенты	3	580	152	2013,7	В том числе графен. Пробоподготовка в химическом анализе
13	Экзосомы	2	425	118	2013,0	Микроскопические внеклеточные пузырьки
14	Гибридная цепная реакция в определении нуклеиновых кислот	2	387	105	2013,5	Повышение чувствительности метода

* Случайное разделение этих кластеров, сходных по тематике.

та научная область, о которой говорится в вопросе, действительно относится к аналитике и развивается интенсивно, то в этом случае другие эксперты этого же профиля могут публиковать свои работы в аналитических журналах. Эти публикации могут набрать много ссылок и привести к «наблюдаемости» данной темы исследований. Может случиться так, что другие авторы родственной специальности также помещают потенциально высокоцитируемые статьи в журналах иного профиля. Тогда наш анализ не выявит соответствующий фронт, а его нужно искать на общих картах науки или в сводках из других наук. Другими словами, хорошие исследования не должны потеряться, но искать их потребуются по-другому.

Незаметными же могут оказаться исследования, не набравшие много ссылок. Но этот факт не обязательно свидетельствует о том, мы имеем дело со слабыми, вторичными или некорректными работами. «Незаметные» статьи могут быть чрезмерно оригинальными и трудными для понимания, сугубо прикладными, написанными не на английском языке или на плохом английском, помещенными в низкорейтинговые журналы и др. Окончательную оценку значимости публикаций всегда дают эксперты, специалисты; материалы же наукометрических работ, таких как наши – не «готовая продукция» окончательного предназначения, а, скорее, «обогащенное сырье», предполагающее различные варианты использования.

Вопрос: «Почему Вы говорите о химическом и биохимическом анализе, выделяя отдельно биохимический анализ? Химический анализ един. Никто не говорит, например, о химическом и геохимическом анализе».

Ответ: Проблема заключается в том, что биологические и медицинские объекты анализа – основные для аналитики в целом. Это следует из современных пропорций развития различных наук. По данным 2018 года на биологию, медицину и другие науки о жизни приходилось 38,6% всех научных публикаций, тогда как, например, на науки о земле (они подразумеваются в заданном вопросе о геохимическом анализе) – лишь 5,7% [14]. Анализ биообъектов выходит на первый план при изучении развития аналитики (см. выше). Таким образом, говоря о «химическом и биохимическом анализе», мы условно подчеркиваем главные объекты анализа. Если же придерживаться принципа единства аналитической химии, то рассматриваемую тенденцию можно сформулировать как увеличение доли анализа биологических и медицинских объектов.

Стремительная биологизация химического анализа ставит барьеры перед наукометрическим изучением «чисто» химической аналитики с использованием нашей методики. Как мы видели, доля масс-спектрометрии и хроматографии во фронтах исследований стремительно уменьшилась. В то же время нет ощущения (если опираться на запросы в информационной системе Web of Science [15]), что эти методы в химии используются реже. Возможно, применение масс-спектрометрии и хроматографии сейчас носит более прикладной и разрозненный характер.

ЛИТЕРАТУРА

1. Мильман Б., Журкович И. Аналитика и биоаналитика на картах науки // Аналитика. 2013. № 2. С. 34–41.
2. Мильман Б., Журкович И. Аналитика-2014: «горячие» области глобальных исследований // Аналитика. 2015. № 4. С. 56–62.
3. Мильман Б. Л., Журкович И. К. Новые рапорты с фронтов науки: наноматериалы, микрофлюидика, протеомика // Аналитика. 2017. № 5. С. 30–33.
4. Research fronts 2016. URL: <http://www.casid.cn/zkcg/zxcg/201706/P020170630548078477885.pdf>
5. 2018 Research Fronts. URL: https://clarivate.com.cn/wp-content/uploads/2018/10/Research-Fronts-2018_EN.pdf.
6. Google Scholar Metrics. URL: https://scholar.google.ru/citations?view_op=top_venues&hl=ru&vq=chm_analyticalchemistry.
7. Carbon quantum dots. URL: https://en.wikipedia.org/wiki/Carbon_quantum_dots.
8. Paper-based microfluidics. URL: https://en.wikipedia.org/wiki/Paper-based_microfluidics.
9. Что такое «орган на чипе»? URL: <https://evercare.ru/organ-on-chip>.
10. Кухтевич И. В., Евстапов А. А., Букатин А. С. Микрофлюидные устройства для исследования клеток (Обзор) // Научное приборостроение. 2013. Т. 23. № 4. С. 66–75.
11. Llobet E. Gas sensors using carbon nanomaterials: A review // Sensors and Actuators B: Chemical. 2013. Т. 179. С. 32–45.
12. Waheed S., Cabot J. M., Macdonald N. P., Lewis T., Guijt R. M., Paull B., Breadmore M. C. 3D printed microfluidic devices: enablers and barriers // Lab on a Chip. 2016. Т. 16. № 11. С. 1993–2013.
13. Zhu C., Yang G., Li H., Du D., Lin Y. Electrochemical sensors and biosensors based on nanomaterials and nanostructures // Analytical chemistry. 2014. Т. 87. № 1. С. 230–249.
14. Science and Engineering Indicators 2018. URL: <https://www.nsf.gov/statistics/2018/nsb20181/assets/nsb20181.pdf>.
15. Web of Science. URL: http://apps.webofknowledge.com/UA_GeneralSearch_input.do?SID=Elr1ILReb2FGa8Q9nzC&product=UA&search_mode=GeneralSearch.

REFERENCES

1. Milman B., Zhurkovich I. Analytics and bioanalytics on maps of science // Analytics. 2013. № 2. P. 34–41.
2. Milman B., Zhurkovich I. Analytics-2014: «hot» fields of global research // Analytics. 2015. № 4. P. 56–62.
3. Milman B. L., Zhurkovich I. K. New reports from the fronts of science: nanomaterials, microfluidics, proteomics // Analytics. 2017. № 5. P. 30–33.
4. Research fronts 2016. URL: <http://www.casid.cn/zkcg/zxcg/201706/P020170630548078477885.pdf>
5. 2018 Research Fronts. URL: https://clarivate.com.cn/wp-content/uploads/2018/10/Research-Fronts-2018_EN.pdf.
6. Google Scholar Metrics. URL: https://scholar.google.ru/citations?view_op=top_venues&hl=ru&vq=chm_analyticalchemistry.
7. Carbon quantum dots. URL: https://en.wikipedia.org/wiki/Carbon_quantum_dots.
8. Paper-based microfluidics. URL: https://en.wikipedia.org/wiki/Paper-based_microfluidics.
9. What is an organ on a chip? URL: <https://evercare.ru/organ-on-chip>.
10. Kukhtevich I. V., Evstapov A. A., Bukatin A. S. Microfluidic devices for cell studies: review // Nauchnoe Priborostroenie – Scientific Instrumentation. 2013. Т. 23. № 4. P. 66–75.
11. Llobet E. Gas sensors using carbon nanomaterials: A review // Sensors and Actuators B: Chemical. 2013. Т. 179. С. 32–45.
12. Waheed S., Cabot J. M., Macdonald N. P., Lewis T., Guijt R. M., Paull B., Breadmore M. C. 3D printed microfluidic devices: enablers and barriers // Lab on a Chip. 2016. Т. 16. № 11. С. 1993–2013.
13. Zhu C., Yang G., Li H., Du D., Lin Y. Electrochemical sensors and biosensors based on nanomaterials and nanostructures // Analytical chemistry. 2014. Т. 87. № 1. С. 230–249.
14. Science and Engineering Indicators 2018. URL: <https://www.nsf.gov/statistics/2018/nsb20181/assets/nsb20181.pdf>.
15. Web of Science. URL: http://apps.webofknowledge.com/UA_GeneralSearch_input.do?SID=Elr1ILReb2FGa8Q9nzC&product=UA&search_mode=GeneralSearch.

Международная выставка
оборудования, сырья и технологий
для фармацевтического производства

19–22.11.2019

Россия, Москва
МВЦ «Крокус Экспо»

**Получите
билет по
промокоду**

pha19N

pharmtech-expo.ru

Организатор
+7 (499) 750-08-28
pharmtech@ite-expo.ru

При поддержке