

BÀN VỀ NGHIÊN CỨU CƠ BẢN TRONG HÓA HỌC

GS Hồ Sĩ Thoảng

Hội đồng Chính sách KH&CN quốc gia

Đề xuất các hướng nghiên cứu cơ bản cho bất kỳ lĩnh vực khoa học nào đều là việc làm hết sức khó khăn, không tránh khỏi rủi ro vì mang nặng tính dự báo. Tuy nhiên, đây lại là yêu cầu quan trọng đặt ra đối với các cơ quan quản lý, đặc biệt trong điều kiện kinh tế còn eo hẹp như Việt Nam. Cùng chia sẻ mối quan tâm này trong lĩnh vực hóa học, tác giả đã phân tích những đặc trưng riêng gắn với hoàn cảnh cụ thể của Việt Nam, từ đó đề xuất các hướng nghiên cứu cần ưu tiên.

Dù vẫn còn có những ý kiến khác nhau, nhưng có lẽ không cần phải thảo luận thêm nữa về sự cần thiết của nghiên cứu cơ bản. Các quốc gia có nền công nghiệp phát triển đều có một nền khoa học cơ bản ở trình độ cao. Ở Việt Nam, một thời gian khá dài, chúng ta cứ tranh luận với nhau về việc nên ưu tiên nghiên cứu cơ bản hay nghiên cứu ứng dụng, cơ bản thì cơ bản nói chung hay cơ bản định hướng ứng dụng...? Nhưng rồi cuối cùng cũng nhận ra, chẳng nên tiếp tục tranh luận nữa mà phải bắt tay vào việc. Những năm gần đây, nghiên cứu cơ bản đã không còn là đối tượng tranh cãi nữa, mà Nhà nước, cụ thể là Bộ Khoa học và Công nghệ, đã rất thành công trong chủ trương khuyến khích nghiên cứu cơ bản thông qua Quỹ Phát triển khoa học và công nghệ quốc gia (NAFOSTED), làm cho bộ mặt khoa học và công nghệ nước nhà trở nên khởi sắc rõ rệt. Hóa học Việt Nam cũng đã có những đóng góp đáng kể trong lĩnh vực này.

Nghiên cứu cơ bản trong hóa học

Trong các lĩnh vực khoa học cơ bản, hóa học có một đặc trưng khác với các lĩnh vực khác (toán học, vật lý, sinh học), đó là hóa học và công nghiệp hóa chất (kể cả luyện kim, lọc - hóa dầu, công nghiệp dược...) gần như là đã song song tồn tại hàng trăm năm, trong khi tuổi của các ngành công nghiệp liên quan đến vật lý và sinh học

(công nghiệp điện tử, công nghiệp sinh học...) chỉ mới đến con số hàng chục. Vì vậy, có thể nói, hóa học gắn bó với công nghiệp hóa chất hết sức chặt chẽ. Phần lớn nghiên cứu cơ bản hóa học đều có khả năng tiến tới triển khai trong công nghiệp, chỉ khác nhau ở quy mô mà thôi. Ví dụ, nghiên cứu chuyển hóa khí SO_2 thành acid sulfuric dẫn đến ngành sản xuất công nghiệp quy mô đồ sộ sản xuất acid này, còn nghiên cứu chuyển hóa acid salicylic thành aspirin thì chỉ dẫn đến quy trình sản xuất thuốc ở quy mô khá nhỏ. Với đặc thù đó, yêu cầu “định hướng” (đến ứng dụng) trong nghiên cứu cơ bản của hóa học ít khắt khe hơn trong các lĩnh vực khoa học khác, cho dù Nhà nước muốn ưu tiên những nghiên cứu cơ bản định hướng.

Mặc dầu vậy, chức năng của nghiên cứu cơ bản là khám phá những điều chưa biết, có khi còn mông lung, chỉ xuất phát từ một ý tưởng có thể được gọi là hoang đường. Những ý tưởng như vậy trong hóa học có lẽ ít hơn trong vật lý, nhưng không phải không có. Cách đây vài chục năm có ai tin rằng, rồi sẽ có những vật liệu rắn có bề mặt riêng đến cả chục ngàn mét vuông (m^2/g), thế mà các vật liệu như vậy đã xuất hiện và đang thu hút hàng trăm phòng thí nghiệm trên thế giới lao vào khảo cứu và chế tạo. Chưa có gì chắc chắn về tương lai huy hoàng (được kỳ vọng) của loại vật liệu này, nhưng đã có nhiều người cho rằng những vật liệu này (MOFs và ZIFs) đã mở ra một

cuộc cách mạng mới trong lĩnh vực hấp phụ và xúc tác - là lĩnh vực có tầm quan trọng hết sức to lớn đối với nền công nghiệp hóa chất thế giới. Cũng có những hướng nghiên cứu một thời được giới hóa học cả thế giới quan tâm và lao vào nghiên cứu, sau đó gần như bị lãng quên. Rồi đột nhiên, vài chục năm sau nữa, lại trở nên hấp dẫn các nhà khoa học. Ví dụ, lĩnh vực hóa học C_1 (C_1 -chemistry) - chuyển hóa khí methane thành hydrocarbon để thay thế nguồn hydrocarbon từ dầu mỏ, một thời rất được quan tâm, sau đó có lẽ do dầu mỏ chưa cạn kiệt nhanh như dự báo, các phòng thí nghiệm không còn quan tâm mấy đến hướng nghiên cứu này nữa. Gần đây, do hiệu ứng nhà kính phát triển quá nhanh, vai trò của hóa học C_1 lại được coi trọng, nhưng với kỳ vọng lớn hơn là vừa để giải quyết vấn đề giảm thiểu phát thải CO_2 , vừa chuyển hóa CO_2 thành nhiên liệu và hóa phẩm.

Một số đề xuất

Có thể thấy, đề xuất các hướng nghiên cứu cơ bản cho bất kỳ lĩnh vực khoa học nào, kể cả cho hóa học, là việc làm hết sức khó khăn, không tránh khỏi rủi ro và do đó, mang nặng tính dự báo. Mỗi nhà hóa học đều chỉ có thể xuất phát từ một góc nhìn của riêng mình để nhận thức về triển vọng, hướng đi của các lĩnh vực hóa học, trên cơ sở đó đề xuất những bài toán cụ thể cần giải quyết. Theo thời gian, và với sự tiến bộ của các lĩnh vực khoa học

lân cận, các hướng nghiên cứu hóa học được coi là ưu tiên có thể được tiếp tục quan tâm mà cũng có thể phải được điều chỉnh, thậm chí tạm dừng lại. Theo thiện ý của người viết bài này, trong tương lai hình dung được một số hướng sau đây nên xem xét đưa lên hàng ưu tiên trong nghiên cứu hóa học hiện nay.

Trước hết, những nghiên cứu về hóa lý thuyết, cụ thể là hóa học tính toán, nên được khuyến khích. Với khả năng gần như phát triển không giới hạn của máy tính, nhiều bài toán hóa học phức tạp về mối quan hệ giữa cấu trúc và tính chất của các hợp chất, nhiều bài toán công nghệ cũng như thiết kế các quá trình công nghệ có cơ hội được giải, mà không cần mất nhiều công sức thực nghiệm. Trong những năm gần đây, hóa học tính toán đã có đóng góp lớn cho sự phát triển nhanh chóng các ngành công nghiệp liên quan đến hóa học, nhưng chắc chắn dư địa cho những đóng góp tương tự vẫn còn rất lớn và thành quả của sự hợp tác giữa lý thuyết và thực nghiệm hóa học vẫn còn ở phía trước. Nhưng hóa học tính toán không hoàn toàn độc lập với các lĩnh vực hóa học khác, nó chỉ có thể thành công nếu gắn kết được với các nghiên cứu thực nghiệm trong hầu hết các lĩnh vực hóa học. Đây là vấn đề rất đáng lưu ý hiện nay để hóa lý thuyết phục vụ tốt hơn cho hóa thực nghiệm, điều mà hiện nay có lẽ chúng ta đang thiếu.

Trong hóa học thực nghiệm thì có lẽ lĩnh vực tổng hợp hữu cơ tinh vi sẽ tiếp tục có sức hút mạnh mẽ các nhà hóa học thế giới, Việt Nam không nên là ngoại lệ. Đây là lĩnh vực nghiên cứu rất rộng, nhưng mục tiêu chung là nhằm tạo ra các hợp chất có những tính năng mới hoặc có tính năng tốt hơn so với các hợp chất tương tự thế hệ trước. Ưu tiên hàng đầu có lẽ là các hợp chất có hoạt tính sinh học được sử dụng trong rất nhiều lĩnh vực của đời sống, trước hết là trong công nghiệp dược. Có thể nói vẫn về là, cần nâng tầm của ngành hóa hợp chất thiên nhiên lên những bậc thang cao hơn. Có nhiều nhà hóa học tầm cỡ thế giới cho rằng, thiên nhiên

hết sức ưu ái cho các nhà hóa học Việt Nam, ban cho họ cả một kho tàng nguyên liệu ban đầu vô cùng giàu có và đa dạng để có thể nghiên cứu chế biến và tổng hợp nên vô số các hợp chất quý giá mà không dễ dàng làm được bằng con đường tổng hợp nhân tạo. Ngành hóa hợp chất thiên nhiên của ta đã có những thành công rất đáng trân trọng, nhưng so với tiềm năng và yêu cầu của đất nước thì còn quá nhiều việc phải làm.

Nhưng đi từ thiên nhiên chỉ là một con đường. Không phụ thuộc vào các nguồn hợp chất thiên nhiên, tổng hợp hữu cơ thuần túy cũng cần được khuyến khích đẩy mạnh, mà các chất có hoạt tính sinh học vẫn là ưu tiên hàng đầu. Tiềm năng sử dụng các vật liệu có kích thước nanomet, kể cả các phức kim loại quý hiếm, làm chất xúc tác, nhất là xúc tác bất đối xứng, cho các phản ứng tổng hợp hữu cơ đặc hiệu còn rất lớn, có thể coi là kho tàng chưa được khai phá. Ở Việt Nam, một số nghiên cứu theo hướng này đã được triển khai và thu được những kết quả ấn tượng. Thực ra thì hóa học nano đang mở ra rất nhiều hướng nghiên cứu hấp dẫn, trong đó mục tiêu sử dụng vật liệu nano để hỗ trợ trị bệnh, kể cả các bệnh hiểm nghèo, cũng đã được một số nhà hóa học Việt Nam khởi sự và đạt được những thành tựu đáng kể.

Hóa học bảo vệ môi trường (hóa môi trường) có rất nhiều vấn đề cần nghiên cứu một cách bài bản để có được những giải pháp hữu hiệu bảo vệ môi trường sống đang ngày càng bị ô nhiễm nặng nề. Nhu cầu phát triển các phương pháp hóa học cũng như các phương pháp quang hóa đòi hỏi nhiều công trình nghiên cứu cơ bản mới có thể phát triển được các hệ thống công nghệ xử lý môi trường hiện đại và tối ưu, không những chỉ cần để phục vụ cho việc thiết kế và xây dựng các công nghệ “made in Vietnam”, mà vẫn cần thiết cả trong trường hợp phải nhận chuyển giao công nghệ mới từ nước ngoài, rồi thích nghi và cải tiến.

Gần đây, vấn đề hoạt hóa phân tử carbon dioxide CO_2 đã trở nên rất hấp dẫn các nhà hóa học, hoặc chuyển thành methanol CH_3OH hoặc chuyển thành methane CH_4 . Nhu cầu chuyển CO_2 trở lại thành các hóa chất có ích (nhiên liệu, hóa phẩm) hoặc ít ra là vô hại đã trở nên bức bách từ khi chất khí tưởng như vô hại này (vì nó không phải là khí độc) gây tai họa cho loài người bởi hiệu ứng nhà kính dẫn đến hiện tượng nóng lên toàn cầu, trong khi các giải pháp “cắt dầu” dưới đáy biển hay trong lòng đất, sau khi trải qua nhiều thử nghiệm, đã tỏ ra rất khó khả thi. Theo Giáo sư G Olah, nhà hóa học nhận giải Nobel năm 1987, và một số tác giả khác, việc bầu khí quyển trái đất tiến tới trạng thái cân bằng carbon (dioxide) là hoàn toàn hiện thực chỉ đơn giản là thông qua quá trình hydro hóa CO_2 thành methanol (gọi là “nền kinh tế methanol”). Đây là hướng đi rất lý thú và đang được nhiều phòng thí nghiệm hàng đầu thế giới nghiên cứu. Một số chất xúc tác, đặc biệt là xúc tác nano và xúc tác phức các kim loại quý đã được chứng minh là có hoạt độ rất cao trong chuyển hóa này. Trong chu trình đi từ CO_2 đến hydrocarbon (qua trung gian là methanol) có rất nhiều “công đoạn” đòi hỏi những công trình nghiên cứu hết sức cơ bản, kể cả “công đoạn” chế biến sinh khối, và đặc biệt là để sản xuất hydro. Hydro cần được sản xuất với giá thành ngày càng rẻ hơn, kể cả đi từ nước cũng như nguyên liệu khoáng nhưng quy trình được cải tiến để không phát thải CO_2 (mà chỉ sinh ra C).

Cuối cùng, các quá trình công nghiệp truyền thống (lọc - hóa dầu, công nghiệp tổng hợp hữu cơ cơ bản...) cũng cần có những nghiên cứu cơ bản để hoàn thiện hơn nữa, hạ giá thành sản phẩm và góp phần bảo vệ môi trường. Những nghiên cứu như vậy cần huy động sự tài trợ của các doanh nghiệp, nhưng không vì thế mà Nhà nước không quan tâm khuyến khích và hỗ trợ.