

ЦКП ИОХ РАН: исследования экспертного уровня для науки и технологий



Центр коллективного пользования Института органической химии РАН (ЦКП ИОХ РАН) создан на базе одного из ведущих научно-исследовательских институтов Российской академии наук, который носит имя выдающегося ученого-химика Н. Д. Зелинского. В стенах этого научного учреждения со славной историей проводятся научные исследования в области органической и биоорганической химии, а также катализа.

ЦКП ИОХ РАН как структурная единица института ориентирован на выполнение и поддержку работ, связанных с приоритетными направлениями развития науки Российской Федерации.

Центр коллективного пользования Института органической химии РАН был создан в 2005 году и является подразделением, которое объединяет уникальные дорогостоящие аналитические приборы и установки для проведения междисциплинарных исследований, с одной стороны, и многолетний опыт экспертов-практиков, специализирующихся в области аналитической химии. О деятельности и задачах, поставленных перед сотрудниками центра, рассказывает старший научный сотрудник ЦКП к. х. н. Дмитренко Андрей Сергеевич.

Андрей Сергеевич, расскажите, пожалуйста, о роли ЦКП в структуре ИОХ РАН.

Надо начать с того, что в целом ЦКП выделился как структура в соответствии с требованиями времени. Изначально мы работали как рядовое подразделение в составе ИОХ РАН. Деятельность ЦКП была почти полностью нацелена на поддержку и реализацию научных тенденций и идей, которыми жил институт.

Создание Центра коллективного пользования в виде отдельной структурной единицы совпало с приобретением дорогостоящего оборудования и было обусловлено заинтересованностью нашего института в расширении спектра совместных с другими организациями исследований. Новая линейка уникальных аналитических приборов позволила нашим ученым подняться на следующий уровень в аналитике, а оформление ЦКП в отдельную структуру помогло решить организационные задачи для помощи нашим партнерам, у которых такие лабораторные возможности отсутствовали.

В этой связи надо сказать о сотрудничестве нашего центра с фондом РФФИ в рамках Президентской программы по предоставлению грантов для работ, осуществляемых с помощью, в том числе, центров коллективного пользования. Работа в рамках Программы позволила грамотно скоординировать деятельность центра, направленную во внешний мир, выстроить взаимоотношения специалистов центра со сторонними заказчиками. В результате, наши партнеры представляют свои проекты не нам, а на конкурс в РФФИ, сопровождая их подробным объяснением, по какой причине им требуется использование именно нашего центра, с указанием необходимого для анализа оборудования. На сегодняшний день у нас уже успешно выполнено несколько таких проектов.

Вы говорите о дорогостоящем оборудовании – каким образом наполнялся приборный ряд вашего центра?

Был период, который сопровождался определенными трудностями, связанными с приобретением оборудования. Например, по направлению ЯМР были поставки оборудования в 2004–2012 годах, а затем – затишье.

В последние годы ситуация в этом направлении кардинально улучшилась. В частности, по программе обновления приборного парка мы получили современные лабораторные установки и уникальное оборудование – их использование расширяет возможности наших исследований, делает работы более емкими и интересными как для заказчиков, так и для нас.

А теперь несколько слов о ЦКП. На чем основана деятельность центра и сколько человек задействовано в его работе?

Мы выполняем различные исследования органических и неорганических веществ. Соединения, которые поступают в ЦКП, как правило, надо охарактеризовать, установить их структуру, найти молекулярную формулу. Если дело касается химических реакций, то здесь есть ряд методик, которые позволяют понять процессы и условия протекания реакции, охарактеризовать образующиеся соединения. Чтобы правильно провести исследования, эффективно построить синтез, необходимо не только современное аналитическое оборудование, но и специалисты, обладающие экспертным опытом, глубоко погруженные в тематику. В ЦКП подобралась хорошая команда таких ученых.

Наше подразделение небольшое – шесть штатных единиц: руководитель, специалисты по ЯМР, электронной микроскопии и рентгеноструктурному анализу. Также к работе по проектам мы привлекаем сотрудников Отдела структурных исследований института, молодых ученых и успешно работаем как по внутренним научным программам, так и с заказами сторонних организаций.

Какие работы вы проводите в рамках ЦКП в данный момент?

Центр проводит работы по разным направлениям. Например, у нас есть новый проект, который мы реализуем совместно с Всероссийским институтом генетических ресурсов растений (ВИР) имени Н. И. Вавилова. Коллеги из ВИР предоставляют нам образцы овса из своей огромной коллекции, а мы изучаем метаболические профили: определяем, какого вещества больше или меньше в зависимости от урожая, сезона, освещенности. В области метабомики много научных работ посвящено рису и пшенице, а овес, несмотря на то, что это традиционная для нашей страны культура, изучен сравнительно мало.

Очень интересные исследования проводятся по определению структуры и модификации растительных полисахаридов. Руководит исследованиями по данной тематике Александр Степанович Шашков, специалист мирового уровня в области ЯМР, автор фундаментальных работ по структурному анализу углеводов. А. С. Шашков – один из самых цитируемых специалистов в этой области – у него более тысячи научных работ.

Как крупный специалист в ЯМР-спектроскопии, как бы вы охарактеризовали современное состояние этого направления? Будет ли

происходить какие-то кардинальные изменения в этой области аналитической химии или, став рутинным методом, она перестала самостоятельно развиваться?

Конечно, базовый принцип, реализованный в спектрометрах со сверхпроводящим магнитом и в Фурье-спектроскопии, остается неизменным более 50 лет, и о кардинальных изменениях здесь говорить не приходится.

Однако сейчас много работ в этой области, в том числе новаторских, пионерских. Например, в твердотельном ЯМР все время происходит поиск новых решений – развиваются методы сверхскоростного вращения при работе с белками.

Постоянно совершенствуется обработка сигналов ЯМР-экспериментов, разрабатываются расчетные методы, автоматизация отнесения сигналов, в том числе, с помощью искусственного интеллекта.

Вы сказали, что оборудование используется для внутренних задач института, а также у вас есть партнерские отношения с другими организациями. Наблюдается ли рост числа обращений сторонних заказчиков в последнее время?

Да, действительно, круг партнеров, кому интересно наше оборудование и уровень предоставляемых услуг, расширяется. Для того чтобы взаимодействие со сторонними заказчиками было удобным и понятным, мы разместили всю необходимую информацию на сайте ИОХ РАН, в разделе «Центр коллективного пользования». Это действительно упрощает процесс, потому что вступать в переговоры с академической организацией без какой-то конкретики человеку из другой сферы, скажем прямо, сложно. Во-первых, надо знать, к кому обратиться, какие исследования доступны, и представлять конечную стоимость работ. Звонков поступает много, и конечно, мы не готовы удовлетворить все запросы, поскольку не все заявки представляют научный или практический интерес. Тем не менее, количество партнеров и заказчиков ЦКП растет.

Вы можете назвать области, запросы в которых участились после перелома в экономической и социальной жизни страны? Кому ваш центр стал наиболее интересен в части диагностических исследований?

Есть фармпредприятия, которые обращаются к нам для выполнения определенных работ, необходимых для осуществления производственных процессов. Но я бы не связывал повышенный спрос с последними

событиями в стране, если только опосредованно – они послужили толчком для поиска и разработки технологий, в том числе наукоемких, внутри страны. С развитием производственных мощностей, а также с внедрением новых фармстандартов, фармстатей и требований, фармацевтические предприятия обращаются туда, где им могут помочь, в том числе, в ЦКП ИОХ РАН.

Но чаще все-таки мы имеем дело с нашими коллегами из других академических организаций и вузов.

А как бы вы сформулировали причину того, что такой поворот в сторону российской науки произошел сейчас и что мешало этому случиться раньше?

Основная причина разворота в сторону российской науки – необходимость обеспечения национального суверенитета. Ни для кого не секрет, что в какой-то период времени мы пробовали отказаться от собственных разработок, от собственных исследований в пользу готовых технологий, купленного за рубежом оборудования. Был нанесен серьезный ущерб приборостроению и научной отрасли в целом. Тогда были заданы такие векторы, при которых наука оказалась практически ненужной. Огромное количество отраслевых институтов было закрыто, а если они и оставались на плаву, то перенесли колоссальные кадровые потери. Высокоинтеллектуальные механизированные производства закрывались, оборудование распродавалось, уничтожались важнейшие наработки.

Это привело к тому, что связь между академической и отраслевой наукой и производством была во многом нарушена. Сегодня мы сталкиваемся с тем, что к нам обращаются представители промышленных предприятий, подчас из совсем далеких от наших задач областей, но которые априори не могут существовать без научного сопровождения, и просят нас помочь в проведении исследований. На вопрос, а как же вы обходитесь без собственных штатных химиков, они толькожимают плечами со словами: «У нас был отраслевой институт, но его давно нет, и заниматься нашими проблемами некому».

Вы считаете, что воссоединение науки и промышленности – это панацея в сложившейся экономической ситуации?

Да, во многих областях эта связь прервалась, и все силы надо направить на восстановление правильных процессов. На ум приходит атомная промышленность, где все этапы производства изделий – от разработки до серийного выпуска, – требующие постоянной научной

поддержки, сохранились. И посмотрите, как у них все работает, эффективно функционирует.

Мне кажется, что скоро наступит тот момент, когда начнет восстанавливаться вот эта правильная последовательная система связи науки и производства.

Что вы имеете в виду, можете объяснить подробнее?

Должны появиться такие, приближенные к отраслевой практике, структуры, которые будут «перетаскивать», внедрять фундаментальные научные результаты в область реального производства и адаптировать их уже конкретно к технологическим процессам.

Ведь многие ученые не знают, как применить свои открытия в практике. Не все, даже очень уважаемые, специалисты могут пройти путь от открытия до серийного выпуска, учитывая нюансы внедрения, масштабирования, контроля качества. Необходимы структуры, которые станут звеньями этой цепи. Важно, чтобы и РАН, и отдельные институты снова стали частью общего процесса.

Вы считаете, что отечественная наука должна обеспечить российскую промышленность необходимой приборной базой?

Это очень сложная задача. Производство серьезного научного оборудования – по сути, производство мелкосерийное, но требующее значительных затрат при разработке. В этой области нам сложно составить конкуренцию на мировом рынке, а создавать приборную базу только для нашей страны гораздо менее рентабельно. Тем не менее, у нас успешно используется ряд приборов российского производства: ГЖХ-хроматографы, ГЖХ-МС-спектрометры, ИК-спектрометр, 3D-принтеры и др. Не так давно у нас на Ученом совете выступал известный ученый в области масс-спектрометрии Е. Н. Николаев с предложением поддержать серийный выпуск масс-спектрометра сверхвысокого разрешения, разработанного его группой. И возможности, и специалисты, и новые идеи у нас в стране есть, но для успешного развития научного приборостроения в настоящее время нужна серьезная государственная поддержка.

На ваш взгляд, создание ЦКП стало подспорьем в выстраивании «правильной» цепочки в отношениях «наука – производство»?

Я думаю, да. Мы к этому стремимся. То, оборудование, которое уже есть в нашем центре, которое приобретается, используется для решения реальных научных задач, результаты которых важны государству. К нам

обращаются люди с практическими запросами, которые мы по мере сил стараемся выполнять.

Вся приборная линейка, представленная в ЦКП ИОХ РАН, позволяет проводить сложные пионерские исследования, которые развивают науку в целом и обеспечивают налаживание связи с производством.

Чем оправдано создание ЦКП при научных институтах, почему нельзя предоставить в открытом доступе центры коллективного пользования, как говорится, «для всех»?

Теоретически создание таких площадок возможно. Но дело не только в том, что будет закуплено уникальное оборудование. Дело в том, кто будет работать на этом оборудовании. Если это будут единичные проекты, выполняемые людьми, не погруженными в проблемы, будет сложно добиться желаемого результата. На нашем оборудовании трудятся специалисты-практики, которые ежедневно работают, используя существующие методики, разбираются в тонкостях аналитического анализа, безусловно, знающие и любящие свое дело.

Оборудование, которое было приобретено для ЦКП, способно окупить расходы на его покупку за счет внешних заказов?

Вопрос окупаемости – это вопрос, скорее, из тех тяжелых времен, о которых мы уже говорили. Тогда, приобретая дорогостоящее оборудование, надо было направлять все свои силы и действия на то, чтобы окупить расходы и приумножить доходы. Сейчас, когда государство нацелено на восстановление отечественного производства, а соответственно, и научного потенциала, оборудование должно быть не средством получения сиюминутной прибыли, а прежде всего инструментом для достижения ценностей более высокого порядка – научных открытий, перспективных разработок.

И наш ЦКП движется именно в этом русле – сопровождает исследования нашего института и других научных организаций, поскольку это и есть тот самый вклад, который именно мы можем внести в большое и важное дело по укреплению суверенитета страны.

Какие планы на будущее вы уже видите в перспективе?

Институт на постоянной долгосрочной основе работает над обновлением и развитием приборного парка, потому что есть идеи, есть научные замыслы, интересные задачи, которые требуют высокоточного оборудования.



Масс-спектрометр ионно-циклотронного резонанса Solarix XR

источником ионизации при атмосферном давлении и источником MALDI, и подходит для анализа органических соединений практически всех диапазонов полярности и летучести. Полный набор методов фрагментации (диссоциация, индуцированная столкновениями (CID), диссоциация с переносом электрона и протона (ETD и PTD), электронная ионизация в ячейке циклотронного резонанса (ECD)) позволяет получать максимум доступной для масс-спектрометрических методов структурной информации.

Новейшие алгоритмы сбора данных, в том числе разработанные в ИОХ методы анализа масс-спектров с помощью искусственного интеллекта, позволяют Solarix XR поддерживать непревзойденные разрешения при больших для приборов ионно-циклотронного резонанса скоростях сбора данных, что делает возможным получение масс-спектров сверхвысокого разрешения при сочетании с ВЭЖХ- и ГХ-разделением.

Масс-спектрометры Bruker Maxis с жидкостным хроматографом Agilent 1200 и Bruker MicroTOF II, год выпуска – 2009, предназначены для анализа и исследования веществ и смесей веществ методом масс-спектрометрии высокого разрешения с использованием ионизации электрораспылением или

Во время продолжительной экскурсии по лабораторным помещениям мы познакомились с оборудованием, которым пользуются специалисты ЦКП ИОХ РАН в своей работе.

Новейший масс-спектрометр (производство 2019 года) ионно-циклотронного резонанса Solarix XR на основе сверхпроводящего магнита 15Т – уникальный прибор исследовательского класса, с максимальным разрешением более 20 млн, что минимум в 40 раз превышает показатели приборов других типов. Возможность анализа тонкой изотопной структуры (FIS) масс-спектра позволяет проводить точное определение молекулярной формулы и идентификацию соединений. Чувствительность метода дает возможность регистрировать масс-спектры соединений с концентрацией до 10^{-18} М. Сверхвысокое разрешение и погрешность определения массы менее 600-миллиардных долей делает Solarix XR исключительно эффективным в решении ряда актуальных научных задач, в том числе исследований каталитических процессов в сложных смесях без разделения, определения группового компонентного состава нефтей и продуктов переработки, метаболомного профилирования, исследований метаболизма новых фармпрепаратов.

Прибор оснащен полным спектром источников ионизации (для сочетания с ВЭЖХ, ГХ, ТСХ и капиллярным электрофорезом), в том числе комбинированным



Жидкостный хроматограф Agilent 1200



Масс-спектрометр Bruker MicroTOF II



ЯМР-спектрометр Bruker Avance II 600 с рабочей частотой 600 МГц

химической ионизации при атмосферном давлении, благодаря которой доступны регистрация масс-спектров при атмосферном давлении в диапазоне масс от m/z 50 до 1000 000 с разрешением до 30 000, тандемная масс-спектрометрия (диссоциация, активируемая соударениями), а также ВЭЖХ-МС-анализ.

Для решения широкого спектра структурных задач в ИОХ РАН эксплуатируется семь ЯМР-спектрометров. **Bruker Avance II 600** – ЯМР-спектрометр с рабочей частотой 600 МГц – оборудован современным датчиком типа Smartprobe с повышенной чувствительностью (до 10^{-6} М) и возможностью регистрации спектров на ядрах 1H , ^{13}C , ^{31}P , ^{19}F , ^{29}Si , ^{15}N , ^{195}Pt и др., что позволяет устанавливать строение и состав исследуемых молекулярных соединений.

В ЯМР-спектрометре **Bruker Avance II 400 WB** реализована возможность проводить исследования спектроскопии ЯМР твердого тела, ЯМР-томографии и диффузионные эксперименты.

ЯМР-спектрометры **Bruker Fourier 300HD** и **Avance 300NEO** используются для регистрации рутинных ЯМР-спектров сотрудниками ИОХ в режиме открытого доступа. Обучение для работы на этом оборудовании прошло более ста человек.

Монокристалльный дифрактометр **Rigaku Synergy-S**, 2021 года выпуска, предназначен для исследования строения низкомолекулярных органических, металлоорганических веществ и белков в кристалле. При использовании дифрактометров, как монокристалльного, так и порошкового, можно не только подтвердить



ЯМР-спектрометр Bruker 400WB



ЯМР-спектрометр Bruker Fourier 300HD



ЯМР-спектрометр Bruker Avance 300NEO



Электронный микроскоп Hitachi HT7700



Электронный микроскоп Hitachi SU-8000

информацию о структуре, но и определить ее с разрешающей способностью: 0.35 \AA .

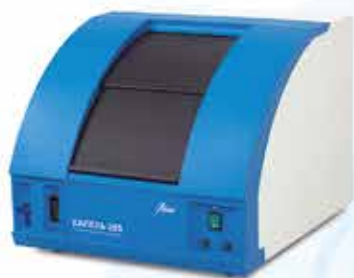
Два сканирующих электронных микроскопа **Hitachi SU-8000** и **Regulus 8230** имеют разрешение 1,5 и 0,9 нм соответственно, что позволяет визуализировать поверхность образцов в наномасштабе. Оба микроскопа оборудованы ЭДС-детекторами для определения элементного состава исследуемых образцов и построения карт распределения элементов. Один из микроскопов оснащен детектором регистрации рассеянных электронов для исследования образцов в темном поле, что позволяет добиться высокого контраста по атомному номеру элементов. Просвечивающий электронный микроскоп **Hitachi HT7700** имеет разрешение 0,144 нм, благодаря чему можно визуализировать межплоскостные расстояния в кристаллических образцах тяжелых элементов, а встроенная функция быстрого Фурье-преобразования такого изображения создает образ, аналогичный дифракции электронами на микро- и нанокристаллах. Разработанный комплексный подход для анализа образцов различного состава и свойств дает возможность получать информацию о составе и структуре аналита.

Инфракрасный спектрометр «**ИнфралЮМ ФТ-08**» произведен в России ГК «ЛЮМЭКС» и предназначен для проведения научных исследований и рутинных измерений в средней инфракрасной области спектра. В комплекте со стандартной приставкой на пропускание в приборе имеется приставка нарушенного полного внутреннего отражения (НПВО) с алмазным кристаллом, позволяющая



ИК-спектрометр «ИнфралЮМ ФТ-08» и приставка нарушенного полного внутреннего отражения (НПВО) с алмазным кристаллом

Аналитические приборы ГК «Люмэкс» для научных исследований



Системы капиллярного
электрофореза
«Капель-205»
Госреестр СИ РФ № 66406-17



Инфракрасные фурье-спектрометры
«Инфралюм ФТ-08»
Госреестр СИ РФ № 17728-09



Жидкостные хроматографы
«Люмахром-М»
Госреестр СИ РФ № 88183-23



Атомно-абсорбционные спектрометры
«МГА-1000»
Госреестр СИ РФ № 58356-14



Анализаторы ртути лабораторные
«РА-915Лаб»
Госреестр СИ РФ № 81851-21

Приглашаем на стенд ГК «Люмэкс» на выставке «Аналитика Экспо 2024»,
Крокус Экспо, павильон 3, зал 14, стенд D5043

Главный офис «Люмэкс», Санкт-Петербург
+7 (812) 335-03-36
lumex@lumex.ru

Офис в Москве
+7 (495) 981-54-49
centrum@lumex.ru



ускорить регистрацию ИК-спектров. В качественном определении исследуемых образцов помогает библиотека, включающая более 40 тыс. спектров.

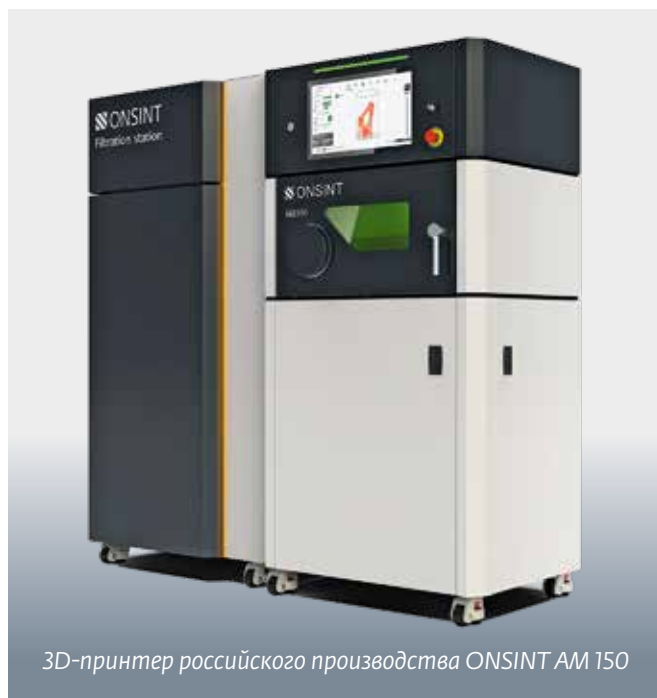
Углерод, водород, азот, сера и кислород – содержание этих элементов в образце с высокой точностью определяют на установке **LECO TrueSpec Micro**. Разогрев в печи этого прибора доходит до 1100 градусов. Образующиеся при сгорании образца оксиды углерода, водорода, азота и серы регистрируются отдельными детекторами. Весь процесс проходит в автоматическом режиме.

В Центре используется несколько 3D-принтеров. С помощью этих установок создаются химические реакторы под конкретный процесс, различное лабораторное оборудование. 3D-принтер российского производства **ONSINT AM 150** был установлен не так давно. Этот комплекс предназначен для изготовления высокоточных изделий сложной геометрической формы с повышенными и стабильными механическими свойствами из металлических порошковых материалов методом селективного лазерного сплавления (SLM) – путем сплавления металлического порошка мощным лучом лазера. Комплекс позволяет как печатать изделия, так и фильтровать порошок для следующей порции сплавления, внутри одной системы. Принтер имеет возможность работы с реактивными материалами, компактный дизайн и простое интуитивное управление. Область построения – 150 мм в диаметре и 220 мм в высоту, высота слоя – регулируемая от 15 до 90 мкм.

По принципу аддитивных технологий происходит синтез изделия слой за слоем. В работе используются



Автоматическая установка LECO TrueSpec Micro для определения элементов углерода, азота, серы и кислорода



3D-принтер российского производства ONSINT AM 150

нержавеющая сталь, сплавы титана, жаропрочные никелевые сплавы. Также принтер может печатать из алюминиевых, кобальт-хромовых и медных порошковых материалов.

Использование металлов в 3D-печати предоставляет больше возможностей для химии. Металл термостойкий, в отличие от пластика; химически стойкий; выдерживает воздействие агрессивной химической среды; его можно использовать в качестве катализатора в химических реакциях; он лучше удерживает размер при работе с маленькими объектами, например при получении микрореакторов, изготовление которых было недоступно при применении пластика из-за его малой стойкости к теплу и химическим воздействиям.

В настоящее время ЦКП ИОХ РАН располагает высококвалифицированными специалистами и уникальным дорогостоящим научным оборудованием, которое объединено в одном высокопроизводительном аналитическом комплексе. Данный приборный комплекс, оборудованный приборами для передовых исследований методами ЯМР-спектроскопии, масс-спектрометрии, электронной микроскопии и рентгеноструктурного анализа, не имеет аналогов в России и позволяет решать широкий спектр сложнейших научных и прикладных задач в области нанотехнологий, органической и элементоорганической химии, биохимии, химии полимеров и материаловедения, исследования каталитических процессов и гибридных органических систем.

С.А.С. Дмитриенкоком беседовала О.А. Лаврентьева



 **Onsint SM200**

Объем печати:
200×200×200 мм
Производительность: 0,8 л/ч
CO₂-лазер: 30 Вт



 **Onsint SM300**

Объем печати:
300×300×400 мм
Производительность: 2,2 л/ч
CO₂-лазер: 60 Вт



 **Onsint SM400**

Объем печати:
400×400×500 мм
Производительность: 4 л/ч
CO₂-лазер: 100 Вт



 **Onsint AM150**

Объем печати:
d150×220 мм
Производительность: до 10 см³/ч
Волоконный Yb лазер: 500Вт



 **Onsint AM350**

Объем печати: 350×350×400 мм
Производительность: до 100 см³/ч
Волоконный Yb лазер: 1 лазер мощностью
500Вт или 1000Вт;
2 лазера мощностью по 500Вт или 1000Вт
каждый