

Принято
на заседании ученого
совета ТИБОХ ДВО РАН
протокол № 10
от «27» декабрь 2023 г.

УТВЕРЖДАЮ
Директор ТИБОХ ДВО РАН
д.х.н. Дмитренко П.С.



**Программа развития
Центра коллективного пользования научным оборудованием
«Дальневосточный центр структурных молекулярных исследований
(ЯМР- и масс-спектрометрии)»
на 2024 – 2028 гг.**

Концепция развития ЦКП на 2024– 2028 годы

Деятельность Центра коллективного пользования научным оборудованием «Дальневосточный центр структурных молекулярных исследований (ЯМР- и масс-спектрометрии)» (ЦСМИ) Тихоокеанского института биоорганической химии им. Г.Б. Елякова ДВО РАН призвана содействовать решению задач, выполняемых в рамках приоритетных направлений развития образования, науки, технологий и техники Российской Федерации, и в соответствии с Концепцией долгосрочного прогноза научно-технологического развития Российской Федерации на период до 2030 года. Основная цель концепции - формирование системы взглядов на основные проблемы, стоящие перед Российской Федерацией и ее научными центрами, и выбор приоритетных направлений развития центра коллективного пользования.

Деятельность ЦКП направлена на реализацию Приоритетного направления развития науки, технологий и техники в Российской Федерации «Науки о жизни». Актуальной задачей ЦКП является повышение уровня проведения научных исследований молекулярного строения и свойств широкого круга химических соединений природного и синтетического происхождения на основе современных методов ядерного магнитного резонанса, масс-спектрометрии и хроматографии. Особое внимание должно быть уделено приборному обеспечению проведения междисциплинарных исследований, определяемых интеграцией научных дисциплин и возникновением новых проблемно-ориентированных поисковых фундаментальных задач на стыке наук.

ЦКП сформирован на базе Лаборатории физико-химических методов исследований ТИБОХ и является той современной организационной формой, которая должна обеспечить комплексные исследования свойств веществ и материалов, чтобы получить новые научные знания в области химии и биологии природных соединений и их синтетических аналогов. ЦКП использует следующие методы исследования биомолекул: спектроскопию ядерного магнитного резонанса на ядрах ^1H , ^{13}C , ^{15}N , ^{31}P ; 2D ЯМР-спектроскопию; различные варианты масс-спектрометрии, включая определения молекулярной массы методом ионизации электронами, ионизации электрораспылением, матрично активированной лазерной десорбции/ионизации, масс-спектрометрию высокого разрешения, тандемную масс-спектрометрию; методы изучения состава смесей низкомолекулярных неполярных метаболитов с помощью газожидкостной и газовой хроматографии-масс-спектрометрии; методы измерения концентраций метаболитов в тканях с помощью радиоизотопной метки; методы определения состава сложных смесей

слабополярных и полярных метаболитов методом высокоэффективной жидкостной хроматографии-масс-спектрометрии; методы разделения смесей природных и синтетических соединений с помощью высокоэффективной жидкостной хроматографии с различными детекторами; методы получения ИК спектров низко- и высокомолекулярных соединений в растворах органических растворителей, в виде твердых образцов и в пленках; методы получения спектров УФ и КД низкомолекулярных и высокомолекулярных соединений в растворах органических растворителей и в водных растворах; метод количественной оценки элементов вторичной структуры (альфа-спираль, бета-структура, неупорядоченная структура) для водных растворов белков; метод установления абсолютной конфигурации низкомолекулярных соединений с привлечением квантово-химических расчетов спектров КД программным комплексом Gaussian 16; метод отнесения полос поглощения низкомолекулярных соединений в их ИК-спектрах в растворах органических растворителей с привлечением квантово-химических расчетов программным комплексом Gaussian W03.

Комплекс научного оборудования ЦКП должен позволить реализовать научно-методическое и приборное обеспечение научно-исследовательских работ по изучению биологически активных природных веществ и их синтетических аналогов, проводить исследования их состава, структуры и основных физико-химических свойств современными методами ЯМР, ИК, УФ и КД спектроскопии и масс-спектрометрии, а также методами радиоизотопного анализа. Имеющееся и приобретаемое оборудование должно обеспечивать стандартные физико-химические методы для исследования структур индивидуальных соединений, а также позволить развивать новые направления исследований биологических систем, такие как протеомика и метаболомика. Кроме того, оборудование ЦКП должно обеспечить проведение экологического мониторинга морских акваторий и наземных территорий Дальневосточного федерального округа, что важно для улучшения качества жизни и здоровья населения.

Таким образом, наличие перечисленных выше методов исследования и современного научного оборудования, а также квалифицированных научных и научно-технических кадров в ЦКП делает возможным не только проведение комплексных междисциплинарных исследований в ТИБОХ ДВО РАН, но и предоставление оборудования и разработанных и приобретенных методик в коллективное пользование широкого круга организаций-пользователей. При решении указанных научных проблем в рамках ЦКП будет реализована комплексность и междисциплинарность исследований, обеспечена высокая загрузка научного оборудования, осуществлена экономия средств, идущих на закупку уникального высокоточного научного спецоборудования. Хорошо

известно, что фундаментальные исследования в области структурного анализа природных биомолекул и их синтетических аналогов тесно связаны с прорывными аспектами прикладного значения (создание лекарств и других биопрепаратов, продуктов функционального питания, медицинских диагностикумов, средств защиты от различных инфекционных и химических угроз и т.п.).

В качестве важнейшей составляющей деятельности ЦКП нужно рассматривать научно-методическое обеспечение подготовки и переподготовки специалистов, повышения квалификации научно-педагогических кадров, подготовки научных кадров - кандидатов и докторов наук, предоставление возможности молодым специалистам и студентам работать и обучаться на современной приборной базе. Потребность Дальневосточного региона и всей страны в получении высококвалифицированных научных кадров в области исследований наук о жизни, разработка бакалаврских, магистерских программ и программ специалитета для студентов Дальневосточного Федерального Университета и других ВУЗов Дальневосточного региона определяет, и будет определять, в качестве важнейшей составляющей деятельности ЦКП привлечение его к образовательным услугам, включая работу специальных практикумов на базе современного оборудования ЦКП, разработку учебных пособий, написание учебников и т.д.

Наличие современного уникального научно-исследовательского оборудования в ЦКП должно позволить ученым дальневосточного региона активно участвовать в федеральных проектах, реализовать научно-методическое и приборное обеспечение научно-исследовательских работ Институтов Дальневосточного отделения Российской Академии наук на современном экспериментальном уровне, решать фундаментальные и прикладные задачи при совместных исследованиях со странами Азиатско-Тихоокеанского региона (Вьетнам, Китай, и др.).

Таким образом, концепция развития ЦКП должна обеспечить сочетание фундаментальных, поисковых исследований и научно-прикладной деятельности, совместное проведение приоритетных фундаментальных и поисковых научно-исследовательских и научно-производственных работ с заинтересованными организациями, предоставление лабораторного оборудования и площадей для подготовки и развития кадрового потенциала.

Основные направления развития

Основными направлениями развития ЦКП являются структурные молекулярные исследования биомолекул и их синтетических аналогов. В этой области будет

осуществлено совершенствование научно-методического обеспечения исследовательских работ, дальнейшее развитие приборной базы ЦКП, повышение квалификации персонала, участие в образовательных программах, поддержка учебного процесса Дальневосточного Федерального Университета и других ВУЗов региона.

Мероприятия по развитию материально-технической базы ЦКП ЦСМИ ТИБОХ

Для дальнейшего развития исследований в режиме коллективного пользования необходимо:

1. Заменить в спектрометре ЯМР-700 высокого разрешения аналитическую систему Bruker AVANCE III на Bruker AVANCE NEO, что позволит повысить чувствительность спектрометра для исследования структур минорных природных соединений, выделенных из морских и наземных микро- и макроорганизмов;
2. Приобрести программу ACDlab для моделирования спектров ЯМР с модулями для ядер ^1H , ^{13}C , ^{15}N , ^{31}P и базами данных для перечисленных ядер;
3. Заменить в спектрометре ЯМР Bruker DPX-300 аналитическую систему AVANCE 300 на Bruker AVANCE NEO
4. Приобрести ВЖХ-МС/МС масс-спектрометр Sciex 3500 QQQ с функцией прямого ввода для задач установления, структуры и идентификации низкомолекулярных метаболитов, целевой и медицинской метаболомики, экологического мониторинга природных экосистем и др.;
5. Приобрести масс-спектрометр сверхвысокого разрешения Orbitrap Fusion Tribrid MS (Thermo Scientific) для фундаментальных и прикладных задач метаболомики и протеомики;
6. Приобрести разделительную и выделительную технику нового поколения (сверхскоростные жидкостные хроматографы высокого давления, системы наноэлектрофореза, совмещаемые с масс-спектрометрами и др.), необходимую для развития протеомных и метаболомных исследований;
7. Организовать профилактический ремонт дорогостоящих запасных частей к масс-спектрометрам (турбомолекулярные и форвакуумные насосы, лазеры, компрессоры и др.) с закупкой этих запасных частей.

Руководитель ЦКП

д.х.н.



Дмитренко П.С.