ОПЕРЕЖАЯ ВРЕМЯ

О Валентине Афанасьевиче Коптюге написано много. Это обусловлено масштабом личности и дел выдающегося ученого, организатора, государственного деятеля и Гражданина. Не все осознается сразу, понимание многих его идей и действий приходит и будет приходить со временем.

В. Маматюк, зав. лабораторией,
руководитель Химического сервисного центра
коллективного пользования СО РАН

С. Морозов, зав. лабораторией экологических исследований
и хроматографического анализа НИОХ СО РАН

М. Митасов, зам. директора,
руководитель Испытательного аналитического
центра НИОХ СО РАН

Нам хотелось осветить одну из сторон многогранной деятельности академика В. А. Коптюга, направленную на создание крупных широкопрофильных аналитических центров в Сибирском отделении — Центров коллективного пользования (ЦКП).

Не претендуя на полноту освещения этого направления деятельности Валентина Афанасьевича, мы бы хотели показать развитие работ, в которых каждый из авторов данной статьи в разное время принимал активное участие, на примере самого близкого, самого родного для Валентина Афанасьевича Института органической химии, с которым связана вся его творческая жизнь и все основные научные достижения.



Начало будущего аналитического центра НИОХ заложено В. А. Коптюгом при постоянной поддержке академика Н. Н. Ворожцова в первой половине 60-х годов, когда в его лаборатории изучения механизма органических реакций методом меченых атомов были созданы группы молекулярной спектроскопии (1961 г.), масс-спектрометрии и ядерного магнитного резонанса (1964 г.), и в 1965 г. начал работать первый спектрометр ЯМР.

Большая и целенаправленная работа по использованию физических методов в исследованиях органических соединений достаточно быстро дала результаты. Уже в 1967 году институтом на базе лаборатории Валентина Афанасьевича проводится Всесоюзная конференция по применению масс-спектрометрии в органической химии и выпускается атлас спектров ароматических и гетероциклических соединений (всего под редакцией В. А. Коптюга вышло 38 выпусков атласов, содержащих спектральные характеристики органических соединений).

Огромным событием в жизни института явилось приобретение двух новейших ЯМР-спектрометров фирмы «Вариан» (А56/60 и НА-100), на которых в ЛИМОР очень быстро развернулись исследования по изучению строения и свойств карбокатионов — промежуточных частиц, определяющих направление многих реакций в органической химии, положившие начало циклу работ по химии карбокатионов, удостоенному в 1990 г. Ленинской премии (В. Коптюг, В. Шубин, В. Штейнгарц, В. Бархаш).

Валентин Афанасьевич был одним из первых химиков-органиков, кто в полной мере оценил важность и значение физических методов исследования для изучения строения химических соединений, состава и свойств веществ и материалов на их основе и начал поиск организационных форм, обеспечивающих эффективное использование приборной базы для научных и прикладных работ.

Заметная веха в развитии будущего ЦКП — 1969 год, когда на базе централизованных специализированных групп физических методов исследования, успешно продемонстрировавших свои возможности, В. А. Коптюгом была проведена региональная школа по физическим методам исследования в органической химии, в которой приняли участие более 150 представителей различных предприятий и организаций Сибири. Для участников школы были подготовлены методические пособия по применению методов ИК-, УФ-, ЯМР-спектроскопии и масс-спектрометрии в органической химии, которые долгие годы использовались студентами НГУ, проходившими специализацию в области органической химии. А второе издание этих пособий служит студентам-органикам и в настоящее время.

Важнейшим этапом в создании Центра коллективного пользования стал 1970 год, когда из «внутреннего» ЦКП НИОХ, решающего задачи обеспечения научных исследований института спектральными методами, произошло его превращение во «внешний». Институт органической химии предложил обслуживание современными методами исследования организациям, сталкивающимся с решением структурных и аналитических задач. Информационное письмо, подготовленное В. А. Коптюгом, содержало не только предложения по обслуживанию, но и конкретные условия для регистрации ИК-, УФ-, КР-, ЯМР- и масс-спектров органических веществ. А также — по поиску спектральной информации в зарубежных каталогах и картотеках по различным разделам спектроскопии как вручную, так и с использованием новейшей поисковой системы, реализованной НИОХ совместно с ВЦ Сибирского отделения на ЭВМ БЭСМ-6 для опознания веществ по их спектральным характеристикам.

Для понимания масштаба работы, развернутой в централизованных группах физических методов исследования, по-прежнему входящих в лабораторию Валентина Афанасьевича, следует отметить, что в 1970 году было зарегистрировано более 10 тысяч ИК-спектров, трех тысяч УФ, тысячи ЯМР и сотни масс-спектров для внутренних и внешних пользователей. Успехи,

достигнутые в этой области, позволили ученому впервые в стране сформулировать проблемы комплексного использования физических методов исследования для повышения эффективности работы ученых-химиков, которые были изложены им в статье «Исследование по заказу», опубликованной в 1970 году в газете «Правда». Анализируя пути развития научных исследований, связанных с установлением состава и строения сложных органических соединений, обеспечение их научными приборами, он отмечает рост удельного веса стоимости измерительного оборудования в общих затратах на научные работы, сложность обеспечения работоспособности оборудования и высокого качества измерений, необходимость подготовки специалистов. Основываясь на опыте института, Валентин Афанасьевич приходит к выводу о целесообразности создания крупных многопрофильных инструментальных аналитических центров. Хотя в статье и не используется термин «центр коллективного пользования», речь идет именно о том, что мы сегодня понимаем под этим названием, и обсуждаются ключевые вопросы функционирования таких центров.

Широкое применение в исследовательской практике химиков спектроскопии молекул к началу 1980-х годов привело к накоплению огромных массивов спектральных данных. В опубликованных, но малодоступных коллекциях содержались сведения о десятках тысяч спектров различных соединений. В. А. Коптюг одним из первых осознал, что эффективное использование накопленной спектральной информации открывает новые возможности для увеличения производительности труда исследователей в самых разнообразных областях химии при решении наиболее массовых задач практики — установлении строения соединения. Он создает уникальную библиотеку спектральной информации и объединяет усилия химиков, математиков, программистов для формирования на основе информационного фонда машинных банков данных. Для осуществления этой работы по инициативе ученого Президиум Сибирского отделения организует в 1971 г. научно-информационный центр по молекулярной спектроскопии СО АН СССР (НИЦ МС) на базе кооперации подразделений НИОХ, ВЦ, ИАиЭМ и ГПНТБ СО РАН. В 1973 г. НИЦ МС приобретает статус общесоюзного центра.

В рамках НИЦ МС В. А. Коптюг ставит и успешно решает задачу построения компьютерной системы, связывающей инструментальные методы исследования и информационно-поисковые системы в единый комплекс.

Основные идеи принципов построения и функционирования этих комплексов и сегодня отвечают современному характеру и направлению развития методов автоматизации и анализа компьютерными средствами экспериментальных физико-химических данных.

В работах Валентина Афанасьевича в области создания компьютерных систем на основе баз данных типа «структура-свойство» поражает глубина научного предвидения и масштаб поставленных уже в самый начальный период задач. В тщательно продуманных в методологическом плане и, как всегда, понятных

для самого широкого круга специалистов работах еще в 1972-1974 гг. В. А. Коптюг формулирует проблему создания измерительного центра коллективного пользования, включающего современные научные приборы и машинные системы для решения аналитических задач в области фундаментальных исследований по химии, биологии и медицине, в области прикладных исследований, связанных с расшифровкой сложных композиций, включая криминалистику, в области экологии, охраны окружающей среды и здоровья населения, а также задач аналитического приборостроения.

Важнейший результат работ научно-информационного центра — дальнейшее развитие информационно-логических и экспертных систем на основе крупномасштабных баз данных. В 1987 г. научно-информационный центр становится головной организацией по приоритетному направлению «Химическая информатика» ГКНТ СССР. Работы Валентина Афанасьевича в этом направлении заложили основу для дальнейшего успешного развития перспективного направления — химической информатики и информационного обеспечения аналитических исследований.

В конце 80-х годов академик Коптюг, разрабатывая системный подход к решению экологических и природоохранных проблем, отмечает важность аналитических измерений и ставит вопрос об использовании аналитических центров, но уже для мониторинга и контроля объектов окружающей среды. Актуальным направлением для решения этих задач он считал создание в Сибирском отделении базовых аналитических лабораторий, оснащенных современным оборудованием, для обеспечения потребности Сибирского региона в проведении сложных экоаналитических и аналитических исследований с эффективностью и качеством, соответствующим международным стандартам.

Идея создания базовых аналитических лабораторий и их задачи сформулированы Валентином Афанасьевичем в 1990 г. в докладе на заседании Совета Министров СССР, отражены в постановлении Президиума Сибирского отделения и подробно изложены в статье, подготовленной сотрудниками ряда институтов СО РАН по просьбе Валентина Афанасьевича и при его участии.

Естественным развитием системы базовых лабораторий стала организация на их основе аккредитованных аналитических центров.

В НИОХ СО РАН при постоянной поддержке академика В. А. Коптюга в 1995 г. был организован Испытательный аналитический центр, который прошел в Госстандарте РФ аккредитацию на техническую компетентность и независимость. Центр специализируется на идентификации органических соединений и анализе следовых количеств токсичных веществ в объектах окружающей среды, пищевых продуктах, продовольственном сырье.

Понимая важность изучения и обобщения международного и отечественного опыта в области охраны окружающей среды и устойчивого развития, Валентин

Афанасьевич в конце 1989 г. принял решение об организации в Сибирском отделении специализированной библиотеки по химическим аспектам охраны окружающей среды при НИОХ СО РАН. Так в Сибири при активном участии ГПНТБ СО РАН родилась уникальная экологическая библиотека и было сформировано соответствующее направление работ в НИОХ — «Разработка научно-методологических и научно-организационных основ информационного обеспечения исследований по химическим аспектам охраны окружающей среды».

Одним из важнейших и основных результатов этой работы стало создание экоаналитического комплекса на базе Испытательного аналитического центра и справочного информационного фонда экологической библиотеки, что явилось основой для реализации идеи формирования единой региональной системы мониторинга окружающей природной среды и здоровья населения в Новосибирской области.

В сложных условиях реформ 90-х годов в Российской академии наук остро встал вопрос не только о развитии приборной базы научных исследований, но и о выживании науки в целом. Недостаток финансирования создавал реальную угрозу отставания в приборном оснащении и снижения уровня научных работ. В этих условиях В. А. Коптюг видел выход прежде всего в объединении приборного потенциала институтов СО РАН, централизации скудных бюджетных средств для приобретения уникальных научных приборов, определяющих передовой уровень исследований, участии в международных программах и сотрудничестве с ведущими зарубежными фирмами, производящими научные приборы. При Президиуме СО РАН была организована Приборная комиссия. Сегодня признанной формой эффективной работы научного оборудования стало его коллективное использование институтами.

Принципы коллективного использования научного оборудования получили дальнейшее развитие при организации грантовой системы поддержки научных проектов РФФИ. Сибирское отделение было подготовлено к созданию центров, поэтому сразу при объявлении конкурсов РФФИ в 1995 году было организовано 14 ЦКП в институтах с большой приборной и экспериментальной базой. Важное место в этой системе заняли аналитические центры, которые были организованы в ННЦ и региональных отделениях СО РАН в Иркутске и Красноярске. В Новосибирском научном центре они были, кроме того, объединены по направлениям наук — химии, биологии, геологии. Были созданы ЦКП по исследованию свойств веществ методами электронной микроскопии, лазерной физики, оптической спектроскопии, а также суперкомпьютерные и информационные центры.

Особое место среди центров коллективного пользования заняли центры на базе уникальных установок — центр синхротронного излучения, центр фотохимических исследований на основе лазера на свободных электронах.

В 1997 году вопросы поддержки приборной базы институтов, крупных установок национального масштаба, создания аналитических, информационных и вычислительных центров коллективного пользования были включены в систему мер, предложенных Сибирским отделением по стабилизации Российской науки, подготовленных академиками В. А. Коптюгом и Н. Л. Добрецовым.

Новый этап в развитии центров коллективного пользования научным оборудованием был начат в 2002 г., когда Президентом РФ были утверждены «Основы политики Российской Федерации в области развития науки и технологий на период до 2010 года и дальнейшую перспективу», в которых была поставлена задача создания сети ЦКП в России. Минпромнауки РФ в 2002 г. был сформирован научный совет по проблеме «Государственная поддержка центров коллективного пользования» и началась активная работа по созданию сети ЦКП. В эту работу активно включились и институты СО РАН, на базе которых функционировали ЦКП. Итоги двухлетнего периода работы сети ЦКП с обсуждением проблем, связанных с формированием, финансированием системы ЦКП в России были обсуждены на второй Всероссийской конференции «Центры коллективного пользования: состояние и перспективы развития», состоявшейся в июне 2004 г. в Санкт-Петербурге, в которой приняли участие многие представители ЦКП Сибирского отделения (ИФП, НИОХ, ИК, ИЯФ, ИХХТ).

Роль центров коллективного пользования для обеспечения развития научных исследований была осознана не только в РФФИ и в Академии наук, но также и в Министерстве высшего образования, в отраслевой науке, в органах государственного контроля. Это послужило основой принятия федеральной целевой научно-технической программы по созданию и развитию сети центров коллективного пользования в России.

Сибирское отделение участвует в этой программе как Ассоциация центров коллективного пользования. Среди центров СО РАН, получивших гранты федеральной программы, находится и Химический сервисный центр коллективного пользования, основу которого составляет Аналитический центр НИОХ.

Как всегда, системно подходя к решению сложных проблем, Валентин Афанасьевич на всех этапах формирования центров коллективного пользования и элементов их структуры уделял большое внимание подготовке кадров. В НГУ при его непосредственном участии были организованы спецкурсы и введены новые специальности по физическим методам в органической химии, химической информатике и экологии.

Сегодня сеть ЦКП СО РАН имеет мощную современную приборную базу, обеспечивает высокий уровень научных исследований по широкому спектру приоритетных направлений науки и техники, обладает метрологическим,

методическим и информационным обеспечением, развитой инфраструктурой и высокой квалификацией научного и эксплуатационного персонала.

Следует подчеркнуть, что академик Коптюг всегда и на всех уровнях придавал огромное значение кооперации специалистов различного профиля для реализации крупных научных проектов. Можно с уверенностью сказать, что все научные проекты, которые он реализовывал, будь то применение физических методов в химии или химическая информатика, или экология, были интеграционными и междисциплинарными. Сегодня это является принятой формой организации научных исследований в Сибирском отделении.

Таким образом, идеи, подходы и принципы, сформулированные Валентином Афанасьевичем, и найденные им эффективные решения нашли свое масштабное воплощение в деятельности Сибирского отделения и приобрели статус федеральных приоритетов государственной научно-технической политики России.