

Приложение

к Методическим рекомендациям по формированию, согласованию, утверждению и отмене программ развития научных организаций, созданных в форме федеральных государственных бюджетных и автономных учреждений, подведомственных Министерству науки и высшего образования Российской Федерации

ПРОГРАММА РАЗВИТИЯ ИОХ РАН на 2019 - 2023 гг.

РАЗДЕЛ 1. ОБЩАЯ ИНФОРМАЦИЯ

Информация о научной организации	
1	
1.1.	Полное наименование ФЕДЕРАЛЬНОЕ ГОСУДАРСТВЕННОЕ БЮДЖЕТНОЕ УЧРЕЖДЕНИЕ НАУКИ ИНСТИТУТ ОРГАНИЧЕСКОЙ ХИМИИ им. Н.Д. ЗЕЛИНСКОГО РОССИЙСКОЙ АКАДЕМИИ НАУК
1.2.	Сокращенное наименование ИОХ РАН
1.3.	Фактический (почтовый) адрес 119991, Москва, Ленинский пр., д.47
2.	Существующие научно-организационные особенности организации
2.1.	Профиль организации «1. Генераторы знаний»
2.2.	Категория организации 1
2.3.	Основные научные направления деятельности 06. Органическая и координационная химия

РАЗДЕЛ 2. ЦЕЛЬ И ЗАДАЧИ ПРОГРАММЫ РАЗВИТИЯ

2.1. Цель Программы развития

Целью Программы развития ИОХ им. Н.Д. Зелинского РАН является создание научного центра мирового уровня, координирующего развитие в Российской Федерации фундаментальных и прикладных исследований в области органических и гибридных молекулярных систем для развития прорывных технологий в интересах национальной безопасности и устойчивого развития.

2.2. Задачи Программы развития

Программа развития ИОХ РАН включает в себя следующие комплексные задачи:

1. **Формирование фундаментальных научных исследований на мировом уровне.** Сложившаяся практика преодоления отставания путем простой корректировки с существующими на сегодня мировыми трендами неэффективна в высокотехнологичных областях с высоким уровнем конкурентности научных исследований. Поэтому целью Программы развития ИОХ РАН является открытие новых, прорывных направлений, в которых изначально будет зафиксирован приоритет российской науки на мировой арене, а полученное преимущество будет ключевым фактором опережающего развития практических приложений и новых технологий.

2. **Создание организации полного цикла: от полученных фундаментальных результатов до научных основ прорывных технологий нового поколения для критически важных отраслей российской экономики.** Интеграция научных исследований и центров развития промышленных технологий является важнейшей задачей Программы развития. Фундаментальные исследования будут целенаправленно развиваться до уровня научных основ новых технологий с целью дальнейшей практической реализации и коммерциализации.

3. **Развитие научно-образовательного кластера.** В настоящее время ИОХ РАН занимает ведущее положение в области интеграции науки и образования. На базе организации сформирована не имеющая аналогов система непрерывного химического образования, дальнейшее развитие которой обеспечит кадровый потенциал для инновационного и научного обеспечения Программы развития.

4. **Развитие научно-исследовательской инфраструктуры.** В последние годы ИОХ РАН систематически и целенаправленно модернизировал научно-исследовательскую инфраструктуру. В настоящее время она отвечает уровню самых

лучших мировых центров. Благодаря интеграции передовых физико-химических аналитических методов в единый приборный комплекс сформирована единственная в стране уникальная научно-исследовательская инфраструктура для изучения органических и гибридных молекулярных систем. Модернизация и дальнейшее развитие приборного комплекса ИОХ РАН предоставит ключевые возможности для получения новых знаний и разработки прорывных технологий в интересах национальной безопасности и проектов устойчивого развития научно-образовательных организаций по всей стране.

5. Формирование статуса организации-лидера в международном научно-технологическом пространстве. Интеграция в международную научно-исследовательскую деятельность является важнейшей частью Программы развития ИОХ РАН с целью постоянного повышения уровня научных исследований, развития передовой инновационной деятельности, поддержки наукоемких отраслей промышленности, выполнения научно-образовательной программы и повышения престижа российской науки на мировой арене.

6. Популяризация полученных в ходе реализации Программы знаний и химии вообще в обществе. Формирование имиджа химической науки как основы экологически безопасных, безотходных, ресурсо- и энергосберегающих технологий обеспечивающих высокое качество жизни. Преодоление хемофобии в обществе и других негативных тенденций, связанных с нехваткой или некорректной информацией о новейших химических технологиях.

7. Создание на базе ИОХ РАН кластера высокорейтинговых химических журналов. В настоящий момент ИОХ РАН является со-учредителем 7 ведущих российских химических журналов – «Успехи химии» («Russian Chemical Reviews»), «Mendeleev Communications», «Известия Академии наук. Серия химическая» («Russian Chemical Bulletin»), «Журнал органической химии» («Russian Journal of Organic Chemistry»), «Кинетика и катализ» («Kinetics and Catalysis»), «Химия твердого топлива» («Solid Fuel Chemistry»), «Химия и технология органических веществ». Из них «Успехи химии» - самый высокоимпакт-факторный российский научный журнал.

8. Координация фундаментальных и прикладных исследований в области органических и гибридных молекулярных систем для прорывных технологий в интересах национальной безопасности и устойчивого развития. Решение задач, указанных в пунктах 1-7 создаст необходимые условия для обеспечения эффективной координации Институтом фундаментальных и прикладных исследований в области органических и гибридных молекулярных систем в Российской Федерации.

РАЗДЕЛ 3. НАУЧНО-ИССЛЕДОВАТЕЛЬСКАЯ ПРОГРАММА

«Молекулярные органические и гибридные системы для создания прорывных технологий в интересах национальной безопасности и устойчивого развития»

3.1. Ключевые слова

Органический и элементоорганический синтез, катализ, механизмы и интермедиаты химических реакций, органические и гибридные материалы, фармацевтические субстанции, лекарственные препараты, углеводные вакцины, иммуноферментные диагностикумы, биологически активные соединения, высокоэнергетические соединения и материалы, химические технологии, гликотехнологии, молекулярные устройства, ЯМР-спектроскопия, масс-спектрометрия, электронная микроскопия, нанотехнологии.

3.2. Аннотация научно-исследовательской программы

Мировым трендом развития химии сегодня становится дизайн и исследование молекулярных систем различной сложности, обладающих полезными практическими свойствами. Эти системы уже находят применение в ключевых областях экономики, таких как фармацевтика, нефтехимическая промышленность, медицина, энергетика, оборонная промышленность и многие другие области, составляющие основу национальной безопасности страны. Подавляющее большинство окружающих нас веществ относятся к органическим соединениям, и именно они составляют основу всего живого на Земле. Однако до недавнего времени систематические комплексные междисциплинарные исследования в области прежде всего органических и гибридных молекулярных систем в России практически не проводились. Поэтому целью данной Программы является направленный дизайн и исследование новых органических и гибридных молекулярных систем для развития прорывных технологий в интересах национальной безопасности и устойчивого развития. Для достижения поставленной цели будут предложены оригинальные высокоселективные методы синтеза и технологии получения молекулярных систем, отличающиеся низким энерго- и ресурсопотреблением и минимальной экологической нагрузкой. Это, в свою очередь, потребует получения фундаментальных знаний о природе, движущих силах, механизмах и интермедиатах химических реакций, контроль химических реакций на уровне отдельных молекул и молекулярных систем различной сложности.

3.3. Цель и задачи научно-исследовательской программы

Стратегические цели и задачи научных исследований Программы развития ИОХ РАН направлены на ликвидацию зависимости от импортных технологий и продуктов, создание комплексных импортозамещающих подходов, формирование конкурентных преимуществ российской экономики, обеспечение национальной безопасности и достижение устойчивого развития в будущем в сферах научного и промышленного применения органических веществ и материалов. Практическая реализация проводимых исследований ориентирована на получение стратегических органических материалов, повышение качества жизни российских граждан, обеспечение роста химической промышленности, продовольственной и технологической безопасности, гарантированное снабжение населения высококачественными отечественными лекарственными препаратами, гарантии энергетической безопасности и развитие энергосберегающих технологий без нанесения урона окружающей среде.

Ключевыми направлениями Программы развития ИОХ РАН являются:

- получение фундаментальных знаний о природе, движущих силах, механизмах и интермедиятах химических реакций, контроль химических реакций на уровне отдельных молекул и молекулярных систем различной сложности;
- развитие методологии тонкого органического синтеза фармацевтических субстанций, лекарственных препаратов, биологически активных соединений, продуктов агрохимии, средств защиты растений, химического обеспечения пищевой промышленности;
- создание оригинальных разработок в области высокоэнергетических веществ и материалов, востребованных в продуктах специального назначения;
- разработка экологически чистых каталитических технологий нового поколения в области топливно-энергетического комплекса, конверсии природной биомассы в ценные органические полупродукты и соединения-платформы;
- создание на базе полученных фундаментальных знаний новых органических веществ, молекулярных систем и гибридных материалов, разработка высокоэффективных процессов, технологий и устройств в приоритетных областях развития российской экономики;
- развитие методологии структурного анализа природных олиго- и полисахаридов, а также стереонаправленного синтеза углеводных производных и гликоконъюгатов на их

основе, включая гликотерапевтики, конъюгированные вакцины и компоненты диагностикумов;

- формирование на мировом уровне материально-технической базы исследований и разработок, создание научно-исследовательской инфраструктуры для комплексного обеспечения инновационного развития проектов получения и трансформации органических веществ и гибридных материалов.

Программа развития ИОХ РАН формируется в соответствии со Стратегией научно-технологического развития Российской Федерации (Указ Президента Российской Федерации от 01.12.2016 г. № 642), Программой фундаментальных научных исследований государственных академий наук до 2020 года, Планом фундаментальных научных исследований на 2020-2030 годы, Стратегией национальной безопасности Российской Федерации (утв. Указом Президента РФ от 31 декабря 2015 года № 683), базовыми критическими технологиями Российской Федерации в рамках государственной программы Российской Федерации «Развитие науки и технологий» на период до 2020 года (распоряжение Правительства РФ от 20.12.2012 г. № 2433-р), Стратегией инновационного развития Российской Федерации на период до 2020 года (утв. распоряжением Правительства РФ от 8 декабря 2011 г. № 2227-р) и дальнейшими перспективами в соответствии с национальными интересами.

Реализация Программы развития ИОХ РАН предполагает решение следующих основных задач:

1) Разработка новых подходов тонкого органического синтеза – получение функционализированных молекул с атомарной точностью.

Тонкий органический синтез является наиболее востребованной областью современной химии для повышения качества жизни человека, сохранения здоровья, создания новых поколений лекарственных препаратов, в том числе для профилактики и лечения социально значимых заболеваний. Большинство существующих в настоящее время промышленных процессов связано с получением и переработкой органических веществ. Именно органические молекулы составляют и будут составлять важнейшую основу как топливно-энергетического комплекса (переработка углеводов), так и ближайшие приоритеты развития химической промышленности.

Проведенные ранее в ИОХ РАН исследования выявили интереснейшую тенденцию в развитии органической химии – реализацию реакций с «атомарной точностью» – передовой край синтеза и трансформации органических молекул. Развитие

данного направления даст новый импульс для формирования научных программ и, в дальнейшем, для развития фундаментальной науки в стране.

Данное направление исследований нацелено на решение общей проблемы, которая стоит перед синтетическими методами, – необходимость введения функциональной группы и даже более сложного по строению заместителя в органическую молекулу с беспрецедентным уровнем контроля над направлением химической реакции. Анализ перспектив развития методологии современного селективного органического синтеза позволяет сказать о появлении нового направления – синтеза органических молекул, биологически активных соединений и фармацевтических блоков с абсолютной регио- и стереоселективностью. С учетом перспектив развития на ближайшие годы, смысл методического совершенствования подходов органического синтеза можно определить термином «атомарная точность» (atomic precision) в проведении химических реакций.

2) Органические системы в биомедицине и науках о жизни.

Исследования в области биоорганической химии и междисциплинарных исследований по синтезу и изучению механизма биологической активности природных соединений и их избирательно модифицированных производных в последние годы стало одним из важнейших направлений работ ИОХ РАН. Они включали, прежде всего, работы по структурным, химическим и биологическим исследованиям природных углеводов (растительных и бактериальных полисахаридов, олигосахаридов, разнообразных полифункциональных гликозидов), стероидов, олигопептидов и других полиенов.

Среди указанных направлений наиболее широкие перспективы для создания лекарств, вакцин и диагностикумов, требуемых для обнаружения и лечения инфекционных поражений, рака, воспаления, нейродегенеративных и других заболеваний дают междисциплинарные Гликомные исследования, которые, вслед за Геномными и Протеомными исследованиями, сформировали вектор современного развития наук о живых системах (приставка «глико» обозначает принадлежность к углеводам). Исследования мозга и многие инновационные медицинские технологии, в особенности клеточные, геномные и постгеномные, имеют своей задачей повлиять на процессы, которые определяют углеводные молекулы в клетках-мишенях. Цель – увеличить продолжительность и качество человеческой жизни с помощью современных достижений науки и технологий, что полностью отвечает одному из приоритетов, сформулированных в Майских указах Президента РФ В.В. Путина.

В предстоящие годы биоорганические исследования в ИОХ РАН будут развиваться, обеспечивая преемственность с предыдущими работами, а также их динамичное развитие с учетом существующих мировых тенденций в синтезе и изучении 3D-структур сложных биомолекулярных систем, в том числе в направлениях создания молекулярных инструментов для изучения процессов межклеточных взаимодействий и их регуляторов, в особенности инновационных лекарств, вакцин и диагностических систем. Важным направлением в исследовании синтеза и свойств биомолекулярных систем, объём которых будет расширяться в работах ИОХ РАН, будут исследования в интересах сельского хозяйства и ветеринарии.

Запланированные работы будут обеспечиваться новыми методами тонкого органического синтеза и катализа, а также структурными исследованиями, которые будут развиваться в рамках других направлений исследований ИОХ РАН. Кроме этого, важные направления работ будут связаны с ориентированными исследованиями новых методов превращения природных низко- и высокомолекулярных соединений, а также возобновляемого природного сырья в продукты химико-технологического передела с высокой добавленной стоимостью.

3) Создание промышленных каталитических технологий – достижения баланса эффективности, экологической совместимости и устойчивого развития.

Потребности современного общества в принципиально ином уровне и скорости создания наукоемких химических производств привели к существенной трансформации концепции катализа в последнее десятилетие. Принципиальное значение имеет изначальный дизайн безотходных и нетоксичных химических превращений на основе природного сырья и использование экологически-безопасных методов его химической модификации (sustainable chemistry) в сочетании с высокой эффективностью синтетических методов (e-factor) и их низкой себестоимостью (cost-efficiency). С точки зрения построения химического процесса молекулярное превращение должно приводить к образованию только желаемого продукта (полная селективность), демонстрировать повышенную производительность (высокоактивные катализаторы и реагенты), функционировать продолжительное время (стабильные катализаторы) и иметь возможность регенерации реагентов и катализаторов для повторного использования. Такие беспрецедентные потребности в направлении создания «идеальных» каталитических процессов привели к формированию целого ряда новых методов органического синтеза. Существенный импульс в этих исследованиях дало понимание механизмов реакций на молекулярном уровне за счет применения современных физико-

химических методов исследования и оборудования научной инфраструктуры нового поколения.

Помимо работ, направленных на систематическое развитие методологии каталитического органического синтеза, в данной области стремительно появляются новые подходы, которые дают начало целым областям современной химии (реакции под действием микроволнового излучения, ультразвуковая обработка, микрореакторные технологии, процессы в ионных жидкостях и гелях, реакции в сверхкритических средах и целый ряд других направлений).

Особое место среди перспективных подходов повышения эффективности процессов органического синтеза занимает реализация каталитических маршрутов на основе наночастиц и комплексов металлов для осуществления необходимых химических превращений. Использование каталитических реакций обеспечивает замену химических реагентов, приводящих к образованию вредных отходов, на экологически чистые окислители (H_2O_2 , O_2) и восстановители (H_2). Кроме того, катализ может обеспечить проведение реакции более коротким и эффективным путем (например, за счет прямого синтеза без использования защитных групп) с высоким уровнем селективности по целевым продуктам. Последнее приводит к выполнению таких принципов «зеленой химии», как атомная и энергетическая эффективность химического процесса.

Развитие современных каталитических технологий является принципиально важной частью Программы развития ИОХ РАН, полностью отвечает вызовам химической науки 21-го века и составит основу для большинства современных синтетических процессов. В проводимых исследованиях будут развиваться два ключевых направления - гомогенный катализ комплексами металлов или безметалльными катализаторами (получение фармацевтических субстанций, лекарственных препаратов и другие сферы приложения тонкого органического синтеза) и гетерогенный катализ наночастицами металлов (переработка углеводородов, крупнотоннажный синтез и большинство промышленных процессов).

4) Исследование сложных молекулярных систем и механизмов химических реакций с помощью комплекса современных физико-химических методов.

Целью данного направления исследований является разработка комплексных экспериментальных и теоретических подходов к исследованию природы, движущих сил, механизмов и интермедиатов химических реакций, контролю химических реакций на уровне отдельных молекул и молекулярных систем различной сложности в гомогенных и гетерогенных условиях. Важнейшей задачей при этом является установление структуры

получаемых соединений и изучение строения молекулярных и надмолекулярных систем на основе комбинации мощных современных инструментов физико-химического анализа: спектроскопии ЯМР на различных ядрах в жидкой и твердой фазах, масс-спектрометрии высокого и сверхвысокого разрешения, электронной микроскопии и рентгеноструктурного анализа. Несмотря на активное применение в последнее десятилетие каждого из этих методов в органической и биорганической химии, химии полимеров, катализе и материаловедении, каждый из данных методов в отдельности имеет как ряд своих преимуществ, так и недостатков. В результате часто не удается получить достоверной картины изучаемого процесса или системы. Использование совокупности всех трех комплиментарных методов позволит впервые провести комплексное изучение химических реакций на молекулярном уровне в режиме реального времени. Последнее особенно важно, поскольку будет получена ценная информация о механизмах химических процессов, выявлены ключевые интермедиаты химических превращений и установлены факторы, влияющие на направление реакций. Это позволит разработать новые высокоселективные методы получения соединений с заданными свойствами и создать подходы к управлению динамическими молекулярными системами. Исследования по данному направлению будут проводиться, в том числе, на примере изучения реакций гомогенного и гетерогенного катализа, а также синтеза широкого ряда природных соединений и образуемых ими молекулярных систем, находящихся широкое применение в медицине и биологии. Разработанные подходы комплексного анализа молекулярных систем позволят поднять на новый уровень работы в области органической химии, катализа и биохимии.

В результате выполнения данных исследований будет разработан уникальный комплексный подход к изучению строения отдельных молекул, их ассоциатов и молекулярных систем различной сложности в жидком и твердом состоянии при помощи совместного использования методов спектроскопии ЯМР, масс-спектрометрии и электронной микроскопии. Это позволит впервые подробно исследовать каталитические химические реакции на поверхности нанокатализаторов и в объеме, исследовать динамические процессы, протекающие в биорганических и гибридных молекулярных системах, взаимодействие биолигандов с рецепторами в реальном времени. На основании полученных новых научных данных можно будет оптимизировать исходные структуры катализаторов с целью повышения их активности и селективности, а для биологически активных соединений – оценить эффективность их взаимодействия с рецепторами и модифицировать архитектуру молекул для наиболее селективного связывания. Для удовлетворения потребностей синтетической и каталитической химии, а также

максимально эффективного совмещения разных аналитических методов между собой будут оптимизированы существующие и разработаны новые методики пробоподготовки и анализа объектов исследований, что, несомненно, приведет к появлению инноваций в смежных областях исследований. В ИОХ РАН накоплен колоссальный опыт по структурным исследованиям разнообразных органических металлоорганических и биоорганических объектов и накоплена уникальная база данных спектральной информации, что гарантирует успешность выполнения запланированного исследования и достижение поставленных целей.

5) Исследования в интересах обороны и безопасности.

Исключительно важным направлением работ Института на ближайшее время являются актуальные исследования в интересах обороны и безопасности страны. Эти работы будут базироваться на разработке новых методологических подходов к синтезу азот-кислородных органических систем, а также высоконапряженных и высокоплотных углеводов как основы для получения потенциальных компонентов высокоэнергетических материалов и соединений двойного назначения. Нетривиальность задачи объясняется тем, что такие системы должны сочетать трудносовместимые на первый взгляд свойства: высокую энергетику, безопасность в обращении, экологичность технологий получения и продуктов их сгорания, доступность сырья и др.

В частности, планируется разработать новые взрывобезопасные и экологичные методы синтеза нитросоединений в среде диоксида углерода и низших фторуглеводородов в жидком и сверхкритическом состоянии. Будут созданы оригинальные способы получения высокоэнергетических материалов, прежде всего нитраминов, в микро- и ультрадисперсной форме и их флегматизации ультратонкими полимерными пленками с использованием суб- и сверхкритических флюидов. Будут разработаны новые стратегии синтеза аннелированных и неаннелированных тетразиндиоксидов и других новых полиазот-кислородных гетероциклов с рекордными энергетическими показателями, а также получены полинитросоединения гексаазаизовюрцитанового ряда, высокоэнтальпийные системы на основе фуросана и пиразола, имеющие сбалансированный элементный состав. Практическая реализация запланированных результатов может позволить существенно модернизировать существующую в настоящее время компонентную базу вооружений, повысить поражающую способность и улучшить эксплуатационные свойства изделий.

Некоторые из полученных азот-кислородных систем будут изучены в качестве потенциальных доноров оксида азота – важнейшего регулятора клеточного метаболизма,

широко используемого для лечения сердечно-сосудистых заболеваний. Здесь можно ожидать создания новых медицинских препаратов, которые будут превосходить по активности и широте терапевтического эффекта применяемые в клинической практике нитраты и не проявят, в отличие от последних, вредных побочных эффектов.

Высокая вероятность получения запланированных результатов определяется тем, что работы будут проводиться научным коллективом, принадлежащим к крупнейшей в России научной школе по химии нитросоединений и конденсированных азот-кислородных систем (руководитель академик В.А. Тартаковский), исследования которой в значительной степени укрепили оборонный потенциал нашей страны. Программой предусмотрено использование громадного научного потенциала этой школы для создания новых технологий двойного назначения для получения необходимых стране высокоэнергетических материалов и оригинальных отечественных лекарственных препаратов для лечения социально значимых заболеваний.

б) Развитие селективных и экологически безопасных методов синтеза органических соединений, в том числе высокомолекулярных, и создание на их основе материалов (включая наноматериалы) с ценными свойствами для различных отраслей техники, биологии, медицины, сельского хозяйства.

Целью исследования является разработка или существенное совершенствование методов получения органических соединений, представляющих практический интерес в качестве биологически активных веществ – потенциальных лекарственных препаратов; создание фундаментальных основ и реализация экологически чистых технологий («зеленая химия») на основе электрохимических и фотохимических процессов; разработка и совершенствование способов синтеза веществ для цифровых технологий, фотоники, фотовольтаики и микроэлектроники (устройства оптической памяти, нанолитография, элементы солнечных батарей, полевые транзисторы). Это в конечном итоге позволит создавать новые уникальные материалы с повышенными эксплуатационными характеристиками, обеспечивающими их применение в современной технике и гарантирующими надежный задел на будущее.

В рамках Программы будет расширен фронт исследований, направленный на создание биологически активных соединений – практических предшественников лекарственных препаратов. Предполагается интенсифицировать разработку регио- и энантиоселективных методов синтеза подобных веществ, выделение оптически чистых форм из рацематов, создание уникальных катализаторов, изучение влияния их структуры на энантиомерную чистоту продуктов каталитических реакций. На основе концепции

каскадных, домино- и мультикомпонентных реакций планируется получение неизвестных ранее функционализированных гетероциклов с самыми разнообразными типами активностей, а также биоразлагаемых полимеров. В фокусе внимания будет разработка принципиально новых алгоритмов создания высокоактивных рециклизуемых органокатализаторов для асимметрического синтеза, путем введения в их состав структурных вспомогательных фрагментов различной симметрии с ионными группами для последующего формирования энантиоселективных связей углерод – углерод и углерод – гетероатом. Существенное внимание при этом будет уделено развитию расчетных методов в органической химии с использованием данных квантово-химических расчетов в процессах с новыми гибридными катализаторами, а также в практически важных каскадных и домино-реакциях, что позволит реализовать минимальное число стадий при получении аналогов природных соединений и наиболее активных энантиомеров лекарств.

Опираясь на результаты предшествующих исследований, планируется осуществить направленный синтез продуктов, обладающих противоопухолевой, противогрибковой, противотуберкулезной, противоспидовой, антипаразитарной и другими видами активности, антиконвульсантов, антикоагулянтов, потенциальных доноров окиси азота, противовирусных препаратов, средств лечения болезни Альцгеймера и проч. Продолжатся работы, связанные с повышением урожайности растений, получением средств борьбы с сельскохозяйственными вредителями.

Традиционно, в центре внимания будут находиться проблемы создания экологически чистых и селективных способов синтеза разнообразных продуктов методами электрохимии, фотохимии, а также с использованием процессов на иммобилизованных органокатализаторах и т.п. На базе принципов «зеленой химии» и высокоэффективных, селективных каталитических систем планируется развить физико-химические основы рационального природопользования и охраны окружающей среды, реализовать новые ресурсо- и энергосберегающие химико-технологические процессы. Составной частью этого направления явится поиск альтернативных реакционных сред, таких как вода и суб- или сверх-критические флюиды (диоксид углерода, фторсодержащие углеводороды и др.) с целью повышения уровня стереоселективности и эффективности каталитических процессов. Изучение процессов адсорбции гербицидов, лекарственных препаратов и тяжелых металлов на гранулированных активированных углях с заданными свойствами позволит выработать рекомендации для создания экологически чистых процессов.

Продолжится работа, направленная на создание и совершенствование методов синтеза веществ для цифровых технологий, фотоники и микроэлектроники (устройства оптической памяти, нанолитография, элементы солнечных батарей, полевые транзисторы), в рамках которой будет развит эффективный препаративный метод синтеза конденсированных поли(гетеро)ароматических соединений для применения в многослойных оптических дисках, а также разработаны подходы к получению новых билдинг-блоков с расширенной возможностью делокализации электронов для создания солнечных элементов с повышенной фотовольтаической эффективностью. Важно подчеркнуть междисциплинарный характер данного направления: поликонденсированные продукты также могут найти применение в качестве биологически активных соединений, а их флуоресцирующие аналоги – как метки в медицинской практике.

Одним из важнейших направлений современной техники является необходимость повышения эксплуатационных характеристик изделий, что может быть достигнуто в значительной мере совершенствованием способов функционализации входящих в их состав соединений. В сущности, этот подход затронет практически все работы Института, в частности, будут получены уникальные перфторированные полимеры, работающие в широком интервале температур, и кроме того, являющиеся материалом для создания высокоэффективных газоразделительных и ион-селективных проводящих мембран для топливных элементов.

Органическая электрохимия составляет фундамент современных исследований в крайне актуальной области редокс-активных органических и элементоорганических компонентов для устройств хранения и преобразования энергии. Кроме того, она является одним из ключевых «зеленых» методов для получения новых веществ и материалов. Разработка и тестирование полностью органических батарей на основе редокс-активных органических и элементоорганических электродных материалов, полевых транзисторов, электрохромных соединений, солнечных ячеек, сенсibilизированных органическими красителями является сегодня мировым трендом. Редокс-активные органические материалы все чаще используются в тонком органическом синтезе и в качестве медиаторов для солнечных батарей. Все возрастающее внимание привлекают разнообразные органические и элементоорганические молекулярные, олигомерные и полимерные материалы, способные к редокс-контролируемому (с участием электрического тока) механическому отклику и управлению. Редокс-инициируемые внутримолекулярные движения, запускаемые процессами димеризации, паймеризации и активации функциональных

фрагментов дендримеров, детально изучаются с целью создания новых типов молекулярных переключателей, молекулярных челноков, сенсоров и механически активных узлов манипуляторов. Ведутся интенсивные исследования по эффективности электронного трансфера спейсерами, соединяющими фрагменты, находящиеся в разном химически неэквивалентном электронном состоянии. Органический электросинтез представляет собой уникальный инструмент для получения химических соединений с полезными свойствами: биологически активных веществ, важных полупродуктов органического синтеза и полимерных материалов. Электросинтез относится к ключевым методам «Зеленой химии», поскольку электрический ток заменяет в нем материальные окислители и восстановители.

7) Развитие методов регио- и стереонаправленного синтеза, структурного и конформационного анализа природных соединений и их аналогов с целью создания новых лекарственных веществ и материалов для использования в фундаментальных исследованиях живых систем.

Целью исследования является разработка новых или существенное усовершенствование методов получения, структурного и конформационного анализа природных соединений и синтетических биологически активных веществ, представляющих интерес для медицины и биохимических исследований. Значительное внимание будет уделено:

- направленному синтезу, структурному, конформационному и спектральному анализу природных олиго- и полисахаридов и их производных, а также соответствующих гликоконъюгатов; изучению взаимосвязи строения и генетики биосинтеза антигенных полисахаридов важных в медицинском отношении бактерий и плесневых грибов;

- синтезу, изучению реакционной способности и свойств стероидных структур и родственных соединений с целью создания новых типов стероидов с модифицированным стероидным скелетом, разработке методов их получения и подробного изучения их биологических свойств.

- разработке методов синтеза природных низкомолекулярных биорегуляторов, их структурных и функциональных аналогов, в том числе, продуктов направленной модификации стероидных, полиенов, полифенольных и других природных соединений и метаболитов с целью получения на этой основе новых биологически активных агентов.

Развитие эффективных методов хемо-, регио- и стереонаправленного синтеза, структурного, спектрального и конформационного анализа производных углеводов,

гликомиметиков и разнообразных гликоконъюгатов, олигосахаридных лигандов и их химических конъюгатов с белковым носителем — целевых объектов настоящей научно-исследовательской работы — продиктовано необходимостью создания новых подходов к синтезу вакцин против инфекционных и онкологических заболеваний, диагностических препаратов и лекарственных соединений и является актуальной проблемой современной химии природных соединений. Планируется разработка новых методов, соответствующих требованиям современной медицины. Установление строения бактериальных углеводов и гликоконъюгатов, таких как антигенные липополисахариды и их O-специфические полисахаридные цепи, расположенные на наружной мембране клеточной стенки, выяснение корреляции между их структурой и свойствами позволяют понять механизмы их биосинтеза, биологические функции и роль в патогенезе инфекционных заболеваний.

Ингибиторы деления клеток (цитостатики), то есть вещества, обладающие антипролиферативным действием, широко применяются в химиотерапии онкологических заболеваний. Однако химиотерапевтические средства обладают нежелательными побочными эффектами. В связи с этим планируется разработка новых высокоэффективных противоопухолевых лекарственных средств с низкой системной токсичностью и широким «терапевтическим окном». Создание новых типов прогестагенных стероидов с модифицированным стероидным скелетом, разработка методов их получения и подробное изучение их биологических свойств, выбор наиболее перспективных соединений для использования в медицине является актуальной проблемой. Рациональное использование накопленного в лабораториях опыта позволит увеличить эффективность поиска новых мощных и селективных физиологически активных препаратов. Продвижение в этом направлении возможно лишь на основе синтеза и фундаментальных исследований взаимосвязи структуры и биологического действия стероидных, полиеновых и других типов природных соединений, а также их аналогов и точно модифицированных производных.

Разработка методов синтеза низкомолекулярных аналогов природных кофакторов ферментативных реакций для их использования в качестве инструментов механизмов биохимических реакций. Поиск новых реагентов и катализаторов для направленной трансформации органических соединений с целью повышения эффективности синтезов низкомолекулярных биорегуляторов ацетогениновой природы. Синтез диарилзамещённых бензимидазопиразолопиридонов — селективных ингибиторов раковых клеток лейкемии Molt-4. Оптимизация структуры фенилпиразинофуразана —

эффективного ингибитора бактерий и грибов. Оптимизация технологии синтеза лигандов для отечественных радиофармацевтических препаратов.

Разработка новых стратегий синтеза биологически значимых олигосахаридов, включая методы стереонаправленного создания гликопиранозидных и гликофуранозидных связей. Разработка методов введения функциональных групп в различные новые природные и синтетические олигосахариды. Разработка методов синтеза новых неогликоконъюгатов биологически активных соединений на основе функционализированных природных и синтетических олигосахаридов. Характеристика бактериальных гликозилтрансфераз с применением аналогов синтетических субстратов-акцепторов этих ферментов. Исследование биологически активных полисахаридов пробиотических молочнокислых бактерий для получения продуктов функционального питания. Исследование биосинтеза O-антигенных полисахаридов энтеробактерий с применением синтетических феноксиундецилдифосфатдисахаридов. Выяснение генетической основы структурной вариабельности O-антигенных полисахаридов и путей формирования внутривидового разнообразия клонов холерного вибриона (*Vibrio cholerae*). Выделение и изучение строения и свойств сульфатированных полисахаридов иглокожих и сульфатированных галактанов красных водорослей. Дизайн и разработка методов получения новых потенциальных лекарственных средств - перспективных стероидов ряда прегнана и эстрана с потенциальной прогестагенной, цитотоксической и нейропротекторной активностями. Разработка методов получения производных авермектина В1, а также новых гибридных молекул, состоящих из производных авермектина В1 и синтетических веществ, обладающих биологической активностью. Дизайн и разработка методов получения новых стероидов ряда прегнана, андростана и эстрана, содержащих гетероциклические фрагменты, в качестве потенциальных противоопухолевых лекарственных средств. Разработка методов синтеза секостероидов, содержащих гетероциклические фрагменты. Разработка новых подходов создания фторсодержащих стероидных соединений. Выделение и изучение методами ЯМР спектроскопии и масс спектрометрии строения гликополимеров клеточных стенок грамм-положительных фитопатогенных бактерий порядка Actinomycetales. Развитие методов стереонаправленного альфа- и бета-гликозилирования фуранозидными гликозил-донорами и блочной сборки олигосахаридных цепей и их приложение в синтезе олигосахаридных цепей бактериальных и грибковых антигенных полисахаридов. Исследование методами ЯМР спектроскопии целевых соединений, получаемых в процессе развития метода стереонаправленного альфа- и бета-гликозилирования фуранозидными гликозил-донорами и блочной сборки олигосахаридных цепей,

структурный и конформационный анализ синтезированных олигосахаридных цепей бактериальных и грибковых антигенных полисахаридов.

8) Разработка вычислительных методов и сетевой инфокоммуникационной системы для моделирования химических процессов и объектов, прогнозирования структуры и свойств новых веществ и материалов и обработки химической информации.

Целью исследования является создание новых эффективных методов, алгоритмов и аппаратно-программных средств для моделирования химических процессов и объектов и их использование для прогнозирования структуры новых веществ и материалов, а также разработки методов их получения.

Для современного подхода к решению сложных задач вычислительной химии характерно использование широкого спектра математических методов и инфокоммуникационных технологий, обеспечивающих решение разнообразных вычислительных задач, сбор, обработку и хранение данных, а также доступ исследователей к информационным ресурсам. В соответствии с описанными выше тенденциями, в планируемой научно-исследовательской работе можно выделить три основных уровня. Учитывая широкий диапазон требований к аппаратному и программному обеспечению (как системному, так и прикладному) со стороны задач вычислительной химии на первом уровне представляется актуальным исследование характеристик производительности аппаратных компонент вычислительных кластеров на базе многоядерных процессоров и отдельных серверов. Результаты этих исследований создают базу для решения актуальной задачи второго, более высокого уровня, - собственно создания информационных, вычислительных и телекоммуникационных ресурсов, доступных в среде Интернет. Третьим уровнем планируемой работы являются собственно исследования химических объектов с использованием созданных методов, программных продуктов и информационных ресурсов.

В ходе работ будут решены следующие основные задачи:

- Разработка и программная реализация новых высокопроизводительных неэмпирических методов квантовой химии для кардинального ускорения расчетов больших (свыше тысячи атомов) биомолекулярных систем, в том числе и массовых расчетов докинг-комплексов;
- Разработка математических методов описания динамики фотохимических реакций в молекулярных комплексах и наночастицах;
- Реализация территориально-распределенных GRID-систем на базе новых международных стандартов для задач вычислительной химии;

- Анализ эффективности применения новейших базовых аппаратных и программных средств вычислительной техники для задач вычислительной химии с целью совершенствования архитектуры специализированных компьютерных систем для химии;
- Разработка новых методов 3D-QSAR в прогнозировании биологической и других видов активности;
- Математическое моделирование адсорбции, химического и электрокаталитического синтеза и деградации биологически активных соединений;
- Разработка теоретических основ создания высокоэффективных методов тонкого разделения компонентов многокомпонентных смесей органических веществ на неподвижном слое сорбента.

3.4. Уровень научных исследований по теме научно-исследовательской программы в мире и Российской Федерации.

Исследования, проводимые в ИОХ РАН, всегда определяли уровень развития синтетических методов в стране и оказывали существенное влияние на мировые тренды в данной области. ИОХ – один из крупнейших научных центров в области органической, физической органической, биоорганической химии и органического катализа – был учрежден Постановлением Президиума АН СССР от 23 февраля 1934 г. и создан путем объединения представителей ведущих научных школ Москвы и Ленинграда. Костяк Института составили научные коллективы академиков А.Е. Фаворского, Н.Д. Зелинского и его учеников, академиков В.Н. Ипатьева и А.Е. Чичибабина. В Институт влились также лаборатории академиков Н.Я. Демьянова, Павла П. Шорыгина и почетных академиков М.А.Ильинского и Н.М. Кижнера. Таким образом, с самого начала в ИОХе был представлен цвет российской органической химии и катализа.

Успешная деятельность Института содействовала возникновению новых научных направлений и коллективов. В 1954 г. на базе ряда лабораторий ИОХ были созданы Институт элементоорганических соединений и Институт физики высоких давлений, а в 1959 г. – Институт химии природных соединений АН СССР (ныне Институт биоорганической химии). При непосредственном участии ученых ИОХа созданы Иркутский институт органической химии СО АН (ныне Иркутский институт химии), Институт биоорганической химии АН Белоруссии, Институт органической химии АН Киргизии, Институты химии АН Таджикистана и АН Туркменистана.

Ведущие ученые ИОХ являются представителями России в международных научных организациях, членами отечественных и зарубежных академий и научных обществ, научных советов РАН, работают в редакциях отечественных и международных

журналов. Из стен Института вышли многие тысячи научных статей, опубликованных в лучших отечественных, зарубежных и международных журналах, а также множество докладов, около 160 монографий и сборников трудов, более десятка учебников и методических руководств (некоторые из них выдержали несколько изданий, переведены на иностранные языки). Сотрудники ИОХ являются авторами сотен изобретений. Только за последние 5 лет сотрудниками Института опубликовано более 1800 статей и обзоров в высокорейтинговых отечественных и зарубежных научных журналах.

На всех этапах своей истории ИОХ стремится сочетать проведение фундаментальных научных исследований с решением важнейших для нашей страны прикладных задач. Начиная с 90-х годов, ИОХ РАН проводит научные исследования по актуальным и приоритетным направлениям, включая работы в рамках государственных научно-технических программ, Федеральной целевой научно-технической программы «Исследования и разработки по приоритетным направлениям науки и техники», Федеральной целевой программы «Интеграция науки и высшего образования России» и других Федеральных целевых программ, программ фундаментальных исследований и целевых программ Российской академии наук, программ фундаментальных исследований ОХНМ РАН, Программы развития науки и технологий г. Москвы, ведомственных целевых программ и других программ. В Институте активно ведутся работы по договорам и контрактам с отечественными и зарубежными компаниями. Ученые Института участвуют в выполнении совместных научных проектов с учеными западноевропейских стран, Азии, США и других стран, в исследованиях в рамках научных программ Европейского Союза, программ различных фондов и организаций. Научные проекты многих сотрудников Института успешно проходят конкурсный отбор в рамках Программы государственной поддержки исследований ведущих научных школ Российской Федерации и молодых ученых – кандидатов и докторов наук, конкурсов Российского научного фонда, Российского фонда фундаментальных исследований, зарубежных научных фондов, программ и организаций. В 2014 г. ИОХ РАН стал победителем конкурса на получение грантов по приоритетному направлению деятельности «Реализация комплексных научных программ, предусматривающих развитие научных организаций и образовательных организаций высшего образования в целях укрепления кадрового потенциала науки, проведения научных исследований и разработок мирового уровня, создания наукоемкой продукции»: грант РНФ № 14-50-00126 «Органические и гибридные молекулярные системы для критических технологий в интересах национальной безопасности и устойчивого развития» был продлен на 2017-

2018 гг. В 2019 г. ИОХ РАН стал одной из 18 организаций победителей конкурса РФ «Проведение исследований на базе существующей инфраструктуры мирового уровня».

Более 30 сотрудников ИОХ РАН являются лауреатами Ленинской, Государственных премий СССР и РФ, премии Совмина СССР, правительства РФ, именных премий РАН, Демидовской премии, международных премий; 9 ученых отмечены почетным званием «Заслуженный деятель науки РФ». За 85-летнюю историю института более 50 его сотрудников были избраны членами АН СССР и Российской академии наук.

Таким образом, исследовательские работы ИОХ РАН в существенной степени сформировали текущий уровень научных исследований по рассматриваемой теме научно-исследовательской программы в стране и являются общепризнанными в мире.

3.5. Основные ожидаемые результаты по итогам реализации научно-исследовательской программы и возможность их практического использования (публикации, патенты, новые технологии)

Ключевой особенностью реализации научно-исследовательской программы ИОХ РАН является сбалансированное сочетание:

1. фундаментальных научных исследований, направленных на генерацию новых знаний, создание опережающих научных направлений для обеспечения приоритета страны на мировой арене и публикацию статей в журналах с высоким импакт-фактором (Q1) и в журналах топового уровня;
2. практических разработок, направленных на развитие инновационных областей экономики, создание новых и совершенствование существующих промышленных технологий, разработку прорывных технологий в интересах национальной безопасности и устойчивого развития и обеспечение импортозамещения в ведущих областях приложений органических и гибридных молекулярных систем, включая защиту интеллектуальной собственности и патентование приоритетных практически-значимых результатов;
3. научно-образовательных программ, направленных на формирование уникальных кадров высшей квалификации, ориентированных как на фундаментальные научные исследования, так и на технологические и промышленные работы в ключевых секторах национальной экономики;

4. инфраструктурного проекта мирового уровня, призванного обеспечить устойчивую работу российских ученых на передовом крае научно-технического прогресса и независимость в реализации проектов национальной важности.

Важнейшие результаты по итогам реализации научно-исследовательской программы будут сосредоточены в следующих направлениях:

- Фундаментальные исследования в области химии органических и гибридных молекулярных систем приведут к созданию нового научного направления – синтеза органических молекул, биологически активных соединений и фармацевтических блоков с абсолютной регио- и стереоселективностью. Таким образом, будет решена важнейшая задача тонкого органического синтеза и достигнута «атомарная точность» в проведении химических реакций, включая процессы функционализации сложных молекул. Практическое применение результатов исследований решит важнейшую проблему получения и переработки органических веществ и создания на этой основе новых материалов, обладающих уникальными свойствами, для важнейших отраслей экономики, в том числе связанных с ОПК.
- Систематические исследования синтетических биологически активных соединений позволит инициировать разработку новых лекарств для лечения онкологических, инфекционных и других заболеваний. Развитие методологии структурного анализа природных олиго- и полисахаридов, а также стереонаправленного синтеза углеводных производных и гликоконъюгатов на их основе, приведёт к созданию новых гликотерапевтиков, конъюгированных вакцин 3-его поколения, а также к разработке оригинальных иммуноферментных диагностикумов для обнаружения маркерных полисахаридов и соответствующих иммуноглобулинов, в том числе с использованием нанотехнологичных гибридных молекулярных систем и сканеров-роботов. Разработанные синтетические методы послужат основой для создания инновационных технологий получения энантимерно чистых лекарств для лечения социально значимых заболеваний.
- На базе комплексного аналитического подхода, основанного на инфраструктуре мирового уровня в области спектроскопии ЯМР, масс-спектрометрии, электронной микроскопии, рентгеновских методов исследования и других физико-химических методов, будет создан краеугольный центр структурных исследований для реализации высокоимпактных научных проектов в стране. Сформированная в ИОХ РАН инфраструктура впервые позволит проводить исследования сложнейших

химических, биологических и каталитических процессов одновременно на наноразмерном и молекулярном уровнях.

3.6. Потребители (заказчики) результатов исследований научно-исследовательской программы (обязательно при наличии проектов, включающих проведение поисковых и прикладных научных исследований)

Заказчиками и партнерами ИОХ РАН являются федеральные министерства и ведомства: Министерство науки и высшего образования, Роскосмос, Министерство обороны, ФСБ, Минпромторг, Минтранс, Минсельхоз, Минприроды; а также:

- предприятия оборонно-промышленного комплекса (ИОХ РАН входит реестр предприятий оборонно-промышленного комплекса Минпромторга);

- крупные химические, нефтегазовые, энергетические, промышленные и транспортные корпорации;

- государственные и частные медицинские учреждения, а также научно-исследовательские учреждения, занимающиеся химическими, биомедицинскими исследованиями, созданием средств диагностики и реконструктивной медицины;

- государственные и частные научно-исследовательские учреждения и компании, занимающиеся разработкой и производством инновационных фармацевтических препаратов и готовых лекарственных форм, а также вакцин.

Партнерами ИОХ РАН являются институты Российской академии наук, университеты и учебные заведения, НИИ, зарубежные компании и научно-образовательные организации.

РАЗДЕЛ 4. РАЗВИТИЕ КАДРОВОГО ПОТЕНЦИАЛА ОРГАНИЗАЦИИ

Программой развития предусмотрены следующие основные направления развития кадрового потенциала Института.

1. Укрепление связей с Высшими учебными заведениями химического профиля Москвы и регионов. Создание на базе Института совместных кафедр с ВУЗами для организации лабораторного практикума и привлечения студентов к научно-исследовательской работе в лабораториях Института.

2. Повышение численности (до 100 человек) и улучшение качественного состава аспирантуры Института, главным образом за счет выпускников ВУЗов, имеющих опыт научно-исследовательской работы в Институте и научный задел для своевременного выполнения диссертационного исследования на мировом уровне.

3. Регулярное проведение конкурсов на замещение вакантных должностей научных работников в связи с повышением квалификации, окончанием срока срочного трудового договора и др. Стимулирование участия в этих конкурсах научной молодежи.

4. Регулярное проведение конкурсов на лучшую научно-исследовательскую работу и научных конференций с участием молодых ученых Института, для выявления кадрового резерва перспективных молодых научных сотрудников.

5. Поддержка новых научных направлений (точек роста) путем проведения соответствующих структурных изменений в Институте, включая создание новых научных подразделений, возглавляемых молодыми учеными.

6. Проведение стажировок аспирантов и молодых ученых-преподавателей ВУЗов и научных сотрудников отраслевых ведомств и предприятий в лабораториях Института с целью поиска потенциальных кандидатов для пополнения кадрового состава Института с одной стороны, и повышения уровня исследований в области химии в РФ, с другой стороны.

7. Подготовка высококвалифицированных научных кадров на основе созданной в Институте системы непрерывного химического образования. Обучение теоретическим основам химии и привлечение к научной работе учащихся специализированных химических школ под руководством ведущих ученых, молодых сотрудников и аспирантов Института.

8. Популяризация химии среди учеников школ и студентов ВУЗов для их вовлечения в научно-исследовательскую работу в ИОХ РАН.

9. Проведение циклов лекций ведущих российских и зарубежных ученых по актуальным направлениям современной химической науки для повышения научного уровня аспирантов и молодых ученых Института.

РАЗДЕЛ 5. РАЗВИТИЕ НАУЧНО-ИССЛЕДОВАТЕЛЬСКОЙ ИНФРАСТРУКТУРЫ ОРГАНИЗАЦИИ

5.1. Краткий анализ соответствия имеющейся научно-исследовательской инфраструктуры организации научно-исследовательской программе.

Научно-исследовательская инфраструктура ИОХ РАН была существенно усовершенствована в последние годы и, в целом, отвечает уровню научного центра мирового класса. Интеграция передовых физико-химических аналитических методов в единый приборный комплекс – Центр коллективного пользования ИОХ РАН, сформировала единственную в стране уникальную научно-исследовательскую инфраструктуру для изучения молекулярных органических и гибридных систем.

Общая балансовая стоимость научного оборудования составляет 996 миллионов рублей, из них балансовая стоимость научного оборудования в возрасте до 5 лет - 377 миллионов рублей.

5.2. Основные направления и механизмы развития научно-исследовательской инфраструктуры организации (включая центры коллективного пользования и уникальные научные установки)

Модернизация и развитие приборного комплекса ИОХ РАН предоставит ключевые возможности для разработки прорывных технологий, требуемых для решения приоритетных задач Стратегии научно-технологического развития РФ и национальной безопасности, а также для устойчивого развития научно-образовательных организаций по всей стране. В частности, запланировано приобретение современного приборного комплекса в составе:

- Масс-спектрометра ион-циклотронного резонанса с преобразованием Фурье (МС ИЦР ПФ) ультравысокого разрешения, (типа Solarix 2XR производства компании Bruker Daltonik GmbH) стоимость 330000 тыс. руб. (контракт на поставку согласован, запуск прибора планируется в середине 2019 года),
- Электронного микроскопа последнего поколения (типа High-end Electron Microscope Hitachi HD-2700 With Cs corrector, NEG- Cold-FE gun and High Resolution lens model: 0.136nm (DF-STEM)/0.105nm) стоимостью 350000 тыс. руб. и Фурье ЯМР спектрометра 700 МГц с криогенным датчиком стоимость 350000 тыс. руб.
- Импульсного ЭПР спектрометра E580 компании Bruker.

Цель приобретения такого оборудования: обеспечение доступа к передовым технологиям масс-спектрометрии ионно-циклотронного резонанса, ЯМР и электронной микроскопии для выполнения научно-исследовательских работ, образовательной деятельности, промышленных разработок и развития передовых инновационных технологий. Появление такого приборного комплекса придаёт качественно новый импульс исследованиям в следующих областях: катализ и органический синтез, новые материалы и способы конструирования, включая новые органические и гибридные молекулярные системы; биомедицина; биоиндустрия; биоресурсы и продовольственная безопасность; рациональное природопользование и экологическая безопасность; аналитическая и биоорганическая химия, наноматериалы; глубокая переработка углеводородного сырья.

Ожидаемые результаты:

Первый в России уникальный приборный комплекс даст возможность перейти на качественно новый уровень в фундаментальных и прикладных исследованиях в интересах инновационного развития и национальной безопасности РФ.

Оснащение Института прибором FT/ICR-MS, современным высокопольным ЯМР спектрометром и ЭПР-спектрометром, а также электронным микроскопом последнего поколения позволит обеспечить своевременные и качественные результаты научных исследований и прикладных испытаний в приоритетных направлениях, таких как катализ и органический синтез, новые материалы и способы конструирования; биомедицина, биоиндустрия; биоресурсы и продовольственная безопасность; рациональное природопользование и экологическая безопасность; аналитическая и биоорганическая химия, наноматериалы; глубокая переработка углеводородного сырья.

РАЗДЕЛ 6. РАЗВИТИЕ СИСТЕМЫ НАУЧНОЙ КОММУНИКАЦИИ И ПОПУЛЯРИЗАЦИИ РЕЗУЛЬТАТОВ ИССЛЕДОВАНИЙ

В рамках Программы развития ИОХ РАН будет осуществляться информирование научного сообщества о научных достижениях, результатах научных исследований Института органической химии им. Н.Д. Зелинского РАН и их потенциальной научной и социально-экономической значимости для Российской Федерации, планируется разрабатывать и внедрять новые механизмы демонстрации и популяризации достижений науки.

Предусматриваются:

1. Организация и проведение международных и всероссийских научных и научно-популярных мероприятий (конференций, конгрессов, симпозиумов, круглых столов, совещаний);
2. Выпуск научных и научно-популярных изданий и книг;
3. Создание музейных и выставочных экспозиций;
4. Создание и обеспечение функционирования профильных интернет-ресурсов научного и научно-популярного характера, в том числе с привлечением Совета молодых ученых ИОХ РАН;
5. Создание и поддержка документальных фильмов с научной и научно-популярной направленностью.

Целью данного направления работы является обеспечение междисциплинарного обмена научными знаниями в области органической, физической, биоорганической химии и катализа, привлечение молодежи в науку, формирование позитивного имиджа

российской науки и информирование потенциальных инвесторов о результатах исследований.

Ожидаемые результаты данного направления Программы развития:

1. Создание и развитие междисциплинарных проектов с научно-исследовательскими организациями России и мира;
2. Укрепление сотрудничества с профильными высшими учебными заведениями Российской Федерации;
3. Развитие научной коммуникации и научно-популярной журналистики, освящающей работы ИОХ РАН;
4. Использование эффективных инструментов популяризации результатов и достижений научно-исследовательской деятельности – высокорейтинговых средств массовой информации научно-технической направленности, а также других инструментов распространения научной информации о результатах исследований и разработок среди потенциальных потребителей результатов научно-исследовательских и опытно-конструкторских (опытно-технологических) работ ИОХ РАН;
5. Широкое информирование потенциальных пользователей о возможностях и условиях использования созданной инфраструктуры исследований и разработок ИОХ РАН.

Результаты реализации данного направления Программы развития будут востребованы как научным сообществом, так и органами государственного управления, образовательными организациями и представителями бизнеса.

РАЗДЕЛ 7. СОВЕРШЕНСТВОВАНИЕ СИСТЕМЫ УПРАВЛЕНИЯ ОРГАНИЗАЦИИ

Для оптимизации управления административным персоналом и научными структурными подразделениями **планируется модифицировать систему учета бухгалтерской, кадровой и научно-технической информации.**

Важным элементом системы научно-организационного управления является создание эффективного управления базой данных публикаций сотрудников Института. Это позволит оперативно анализировать работу научных структурных подразделений и рассчитывать наукометрические показатели, необходимые для составления отчетной документации, а также для подготовки материалов в электронную информационную систему государственного задания. Существенным аспектом такой базы данных является возможность введения и обмена данных через локальную сеть Института или сеть Интернет.

Планируется усовершенствовать имеющуюся систему электронного документооборота, что позволит систематизировать весь массив входящих и исходящих документов. Создание электронных каталогов существенно упростит обращение к архивным материалам, а доступ к каталогам по локальной сети Института сделает эффективным работу, как ученого секретариата, так и административно-управленческого аппарата. Наличие единого реестра корреспонденции позволит отслеживать подготовку требуемых материалов соответствующими структурными подразделениями Института. Кроме того, данная система существенно упростит подготовку документов, включающих одновременно научно-технические показатели, данные планового и бухгалтерского учета и информацию о кадровом составе лабораторий.

Планируется усовершенствовать ведение регистрационного учета внутренних документов, связанных с приобретением товаров и услуг за счет средств федерального бюджета и внебюджетных источников, как для реализации научно-исследовательской работы, так и для нужд административно-управленческого персонала. Это позволит улучшить учет проводимых закупок, и своевременное внесение изменений в план финансово хозяйственной деятельности Института.

Проведение структурных реорганизаций научных подразделений включает: создание новых лабораторий и научных групп, отвечающих новым научным направлениям; ликвидацию и объединение неэффективных лабораторий и коллективов; оптимизацию структуры административных подразделений, в том числе бухгалтерии, планово-экономического отдела, отдела снабжения, отдела контрактной службы и прочих.

Интеграция управления деятельностью, направленной на подготовку научных кадров. Планируется совершенствование взаимодействия между Отделом аспирантуры, Советом молодых ученых ИОХ РАН и образовательными структурами среднего и высшего образования, которые созданы при Институте или курируются Институтотом. Важным элементом управления данной деятельностью будет оптимизация системы финансовой поддержки молодых ученых, задействованных в выполнении научно-исследовательской работы.

РАЗДЕЛ 8. СВЕДЕНИЯ О РОЛИ НАУЧНОЙ ОРГАНИЗАЦИИ В ВЫПОЛНЕНИИ МЕРОПРИЯТИЙ И ДОСТИЖЕНИИ РЕЗУЛЬТАТОВ И ЗНАЧЕНИЙ ЦЕЛЕВЫХ ПОКАЗАТЕЛЕЙ НАЦИОНАЛЬНОГО ПРОЕКТА «НАУКА» И ВХОДЯЩИХ В ЕГО СОСТАВ ФЕДЕРАЛЬНЫХ ПРОЕКТОВ

ИОХ РАН примет непосредственное участие в реализации задач национального проекта «Наука» и входящих в его состав федеральных проектов. Институт ведет активные работы по формированию научного центра мирового уровня «Органические и гибридные молекулярные системы для развития прорывных технологий в интересах национальной безопасности и устойчивого развития». На базе этого Центра в Институте планируется координация и развитие в Российской Федерации мультидисциплинарных фундаментальных и прикладных исследований в области органических и гибридных молекулярных систем.

Научно-исследовательская инфраструктура ИОХ РАН была существенно модернизирована в последние годы и отвечает уровню научного центра мирового класса. Интеграция передовых физико-химических аналитических методов в единый приборный комплекс – Центр коллективного пользования ИОХ РАН, сформировала единственную в стране уникальную научно-исследовательскую инфраструктуру для изучения молекулярных органических и гибридных систем. Общая балансовая стоимость научного оборудования составляет на конец 2018 г. 996 586,4 тыс. рублей.

ИОХ обладает возможностью осуществления научно-технологической деятельности полного цикла, начиная от теоретического дизайна катализаторов, веществ и материалов с заданными свойствами, до разработки методов их получения, и далее до практического синтеза новых материалов, с их последующей аналитической характеристикой и установлением их физико-химических свойств. В конечном итоге, запланировано практическое создание и оптимизация прототипов устройств на основе органических и гибридных молекулярных систем.

ИОХ обладает не только не имеющей аналогов приборной базой, широчайшими научно-технологическими возможностями, но и многолетним опытом, позволяющим проведение стажировок молодых ученых, преподавателей Вузов и научных сотрудников отраслевых ведомств и предприятий, в том числе ведущих зарубежных организаций. В Институте действует программа лекционных курсов, проведения семинаров и практических занятий для аспирантов и студентов. Институт регулярно проводит научные мероприятия на высоком международном уровне.

В результате участия ИОХ в Федеральном проекте «Развитие передовой инфраструктуры для проведения исследований и разработок в Российской Федерации» (задача «Обновление не менее 50% приборной базы ведущих научных организаций, выполняющих научные исследования и разработки») планируется увеличение количества статей, индексируемых в международных базах данных. Так к 2021 году количество статей по международной базе Web of Science составит не менее 408 и по базе Scopus не

менее 404. В 2021 году запланирован рост финансирования до 1 027 352,66 тыс. руб. в год, из них не менее 35% — объем внебюджетных средств. В ходе реализации задач национального проекта «Наука» численность исследователей в возрасте до 39 лет составит не менее 37% и к 2021 г. запланирован рост доли исследований, проводимых под руководством молодых ученых в возрасте до 39 лет до 10,3%.

РАЗДЕЛ 9. ФИНАНСОВОЕ ОБЕСПЕЧЕНИЕ ПРОГРАММЫ РАЗВИТИЯ

№	Показатель	Единица измерения	Отчетный период 2018 год	Значение				
				2019 год	2020 год	2021 год	2022 год	2023 год
1.	Общий объем финансового обеспечения Программы развития ¹	тыс. руб.	1 250 965,3	914 265,5	1 008 762,36	1 027 352,66	1 038 700,0	1 039 750,0
	Из них:							
1.1.	субсидии на финансовое обеспечение выполнения государственного задания из федерального бюджета	тыс. руб.	511 778,0	663 614,5	665 159,5	660 052,6	670 000,0	670 000,0
1.2.	субсидии на финансовое обеспечение выполнения государственного задания из бюджета Федерального фонда обязательного медицинского страхования	тыс. руб.	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0
1.3.	субсидии, предоставляемые в соответствии с абзацем вторым пункта 1 статьи 78.1 Бюджетного кодекса Российской Федерации	тыс. руб.	359 669,0	6 329,2	6 500,0	6 600,0	6 700,0	6 750,0
1.4.	субсидии на осуществление капитальных вложений	тыс. руб.	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0
1.5.	средства обязательного медицинского страхования	тыс. руб.	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0

¹ Указывается в соответствии с планом финансово-хозяйственной деятельности организации

1.6.	поступления от оказания услуг (выполнения работ) на платной основе и от иной приносящей доход деятельности	тыс. руб.	379 518,3	244 321,8	337 102,86	360 700,06	362 000,0	363 000,0
1.6.1.	В том числе, гранты	тыс. руб.	311 727,6	183 500,0	114 627,1	114 627,1	120 000,0	125 000,0
1.7.	Общая балансовая стоимость выбывших единиц научного оборудования	тыс. руб.	30054,90	10000,0	12000,0	13000,0	14000,0	15000,0
1.8.	Объем расходов на эксплуатацию обновляемого научного оборудования	тыс. руб.	1 634,0	2 500,0	9 200,0	10 500,0	11 800,0	13 100,0
1.9.	Полная учетная стоимость приборной базы, планируемая к приобретению за счет средств гранта в форме субсидии, в том числе в целях развития ЦКП	тыс. руб.	—	76 969,39	76 969,39	76 969,39	76 969,39	76 969,39
1.10.	Полная учетная стоимость приборной базы на 1 января 2018 года	тыс. руб.	940608,9					
1.11.	Процент обновления приборной базы организации за счет средств гранта в форме субсидии,	%		8,18	8,18	8,18	8,18	8,18



/М.П. Егоров/

Директор ИОХ РАН, академик
30 августа 2019 года