

Резюме проекта, выполняемого

в рамках ФЦП

«Исследования и разработки по приоритетным направлениям развития научно-технологического комплекса России на 2014 – 2020 годы»

по этапу № 4

Номер Соглашения о предоставлении субсидии: 14.579.21.0016

Тема: «Разработка нового высокочувствительного метода масс-спектрометрического определения химических соединений, основанного на лазерной десорбции-ионизации путем переноса электрона»

Приоритетное направление: Науки о жизни (НЖ)

Критическая технология: Биомедицинские и ветеринарные технологии

Период выполнения: 05.06.2014 - 31.12.2016

Плановое финансирование проекта: 88.50 млн. руб.

Бюджетные средства 43.50 млн. руб.,

Внебюджетные средства 45.00 млн. руб.

Получатель: Общество с ограниченной ответственностью «Энергомаштехника»

Индустриальный партнер: Закрытое акционерное общество "Научно-технический центр физического приборостроения"

Ключевые слова: Лазерная масс-спектрометрия, ионизация с переносом электрона, определение металлов и комплексных соединений металлов.

1. Цель проекта

Проект направлен на решение проблемы разработки новых аналитических методов высокочувствительного количественного определения органических и биоорганических соединений.

Целями проекта являются:

- а) разработка новых принципов и методических подходов к определению химических соединений путем лазерно-индуцированной ионизации соединений на поверхности полупроводникового материала, десорбции и детектировании ионов масс-анализатором;
- б) создание экспериментального образца прибора, реализующего новые принципы и подходы и разработка методик высокочувствительного масс-спектрометрического определения металлов и комплексных соединений металлов в жидких образцах сложного состава.

2. Основные результаты проекта

На первом этапе:

Выполнен аналитический обзор научных и информационных источников, посвященных использованию методов лазерной десорбции-ионизации для масс-спектрометрического анализа химических соединений. Отдельное внимание уделено проблемам масс-спектрометрического определения комплексных соединений металлов.

Осуществлен выбор и обоснование направлений исследований, в том числе разработаны возможные варианты решений исследовательских задач.

Получено 42 координационных соединения серебра, золота, палладия, рения, меди, ртути для дальнейших исследований методом LETDI. В качестве лигандов использовались как известные в спектроскопии селективные органические реагенты, так и новые, вновь синтезированные соединения.

Проведены квантово-химические расчеты энергии десорбции ионов соединений, являющихся структурными аналогами биологически активных соединений и биолгандов. В расчетах использовали кластеры, моделирующие металлы, их оксиды и полупроводники. Оценены величины энергии десорбции и выбраны материалы для дальнейших экспериментальных исследований.

Проведены патентные исследования в соответствии с ГОСТ 15.011-96.

На втором этапе:

Проведены численные расчеты зависимости температуры поверхности эмиттера ионов от времени и от параметров лазерного излучения.

Разработаны методики формирования активных поверхностей полупроводниковых материалов – эмиттеров ионов.

Проведен расчет конфигурации лазерного источника ионов.

На третьем этапе:

Проведены исследования влияния параметров лазерного излучения (длины волны и интенсивности) на эффективность ионизации и десорбции ионов и найдены оптимальные параметры излучения.

Проведены исследования ионизационных свойств поверхностей эмиттеров ионов для лазерной десорбции-ионизации химических соединений путем переноса электрона. Выбраны эмиттеры ионов, обладающие лучшими аналитическими параметрами.

Проведены комплексные масс-спектрометрические исследования с модельными гетероциклическими, полиароматическими и координационными химическими соединениями. Получены масс-спектры, изучены механизмы фрагментации ионов.

Показано, что метод LETDI обеспечивает возможность проведения анализа неполярных соединений с низкой величиной основности с пределом обнаружения 1 пг и ниже, что существенно лучше, чем при использовании современных серийных масс-спектрометров с ионизацией MALDI или «электроспрей».

Разработана эскизная конструкторская документация на макет прибора для определения химических соединений методом LETDI.

На четвертом этапе:

Изготовлен макет прибора для определения химических соединений методом LETDI по эскизной конструкторской документации ВГРА.412149.002.

Разработаны программа и методики исследовательских испытаний макета прибора с целью проверки соответствия технических характеристик макета прибора требованиям ТЗ.

Проведены испытания макета прибора, подтвердившие заданные в ТЗ технические характеристики прибора.

Проведены исследования аналитических характеристик метода LETDI при определении металлов в пищевых продуктах.

На основе проведенных патентных исследований, аналитического обзора научных и информационных источников, комплексных масс-спектрометрических исследований показано, что развиваемый в проекте метод позволяет решать принципиально новый класс задач, недоступный известным ранее масс-спектрометрическим методам.

Полученные результаты полностью соответствуют требованиям технического задания.

Полученные результаты служат основой разработки нового высокочувствительного метода масс-спектрометрического определения химических соединений, аналитические параметры которого соответствуют мировому уровню.

3. Охраноспособные результаты интеллектуальной деятельности (РИД), полученные в рамках прикладного научного исследования и экспериментальной разработки

На втором этапе выполнения работы поданы заявки РФ:

№2015120408 от 29.05.2015 г., изобретение "Способ масс-спектрометрического определения химических соединений";

№2015120409 от 29.05.2015 г., полезная модель "Установка для масс-спектрометрического определения химических соединений".

На четвертом этапе подана заявка на регистрацию программного обеспечения "Chromo-LETDI" от 22.06.2016 г.

4. Назначение и область применения результатов проекта

Результаты проведенной НИР могут быть использованы для развития современных диагностических методов в медицине, для разработки новых эффективных солнечных элементов на основе комплексных соединений металлов, для развития методов экологического контроля, для создания новых методов сверхчувствительного определения металлов в различных образцах.

Из всего многообразия практических приложений разрабатываемого метода можно выделить лишь несколько:

совершенствование диагностических процедур и разработка новых лекарственных препаратов на основе комплексных соединений переходных металлов для лечения онкологических заболеваний;

высокочувствительное определение токсичных металлов и комплексных соединений металлов в объектах окружающей среды, изучение реакций комплексообразования ионов металлов представляет большой интерес для развития теории и практики функциональных материалов, биокаталитических и сенсорных технологий.

Создание новых масс-спектрометрических приборов и новых, более совершенных, методов химического анализа всегда стимулирует развитие приложений, имеющих социальный и народно-хозяйственный эффект.

Потенциальными потребителями ожидаемых результатов проекта являются научно-исследовательские, клинические медицинские, экологические и другие учреждения в нашей стране и зарубежных странах, использующие масс-спектрометрический анализ органических соединений в своей повседневной деятельности или в создании новых образцов продукции.

5. Эффекты от внедрения результатов проекта

К некоторым значимым социально-экономическим эффектам можно отнести следующие:

- благотворное влияние на снижение уровня такого социально значимого заболевания, как онкология, приведет к снижению бюджетных ассигнований на лечение и повышению качества жизни;

- эффективный экологический мониторинг природных объектов служит основой снижения заболеваемости и смертности;

- развитие систем контроля пищевых продуктов, в частности, определение вредных химических соединений в напитках, продуктах питания и кормах животных, позволит улучшить потребительские свойства существующей продукции.

6. Формы и объемы коммерциализации результатов проекта

Применение метода будет востребовано и в других областях, помимо медицины, для проведения химического анализа веществ. Зарегистрированные в установленном порядке технические решения по проекту в виде патентов могут быть использованы сторонними разработчиками и производителями приборов. Коммерциализация будет осуществляться за счет продажи лицензий на использование патентов.

Оценка рынка планируется на последнем этапе выполнения ПНИ.

7. Наличие соисполнителей

Соисполнитель ООО "Атомикс". Привлекался в 2014, 2015 и 2016 гг.

Общество с ограниченной ответственностью
«Энергомаштехника»

_____ генеральный директор

(должность)

_____ *(подпись)*

Егоров А.Б.

_____ *(фамилия, имя, отчество)*

Руководитель работ по проекту

_____ руководитель работ

(должность)

_____ *(подпись)*

Гречников А.А.

_____ *(фамилия, имя, отчество)*

М.П.