

10
ЛЕТ
ЖУРНАЛУ

17 МОБИЛЬНЫЕ
СПЕКТРАЛЬНЫЕ
АНАЛИЗАТОРЫ

22 СТРУКТУРА ВИДОВ
ДЕЯТЕЛЬНОСТИ
ЭКОНОМИКИ

45 ВВЕРХ ПО
ТОВАРНОЙ
ЛЕСТНИЦЕ

50 СИЛЬНЫМ
ПОКОРЯЕТСЯ
МЕТАЛЛ

НАУКА И ИННОВАЦИИ

научно-практический журнал



№ 3(121)_2013



**СПЕКТРОСКОПИЯ —
СПОСОБ
ПОЗНАНИЯ
МАТЕРИИ**

ISSN 1818-9857
9771818985001

НАУКА И ИННОВАЦИИ

научно-практический журнал

№3(121)_2013

Зарегистрирован в Министерстве информации Республики Беларусь, свидетельство о регистрации 388 от 18.05.2009

Учредитель:
Национальная академия наук Беларуси

Издатель:
РУП «Издательский дом
«Белорусская наука»

Главный редактор:
Жанна Комарова

Редакционный совет:

А.М. Русецкий – председатель совета
П.А. Витязь – зам. председателя
С.В. Абламейко
И.В. Войтов
И.Д. Волотовский
М.С. Высоцкий
В.Г. Гусаков
С.А. Жданок
О.А. Ивашкевич
Ж.В. Комарова
Н.П. Крутько
В.А. Кульчицкий
М.И. Михадюк
Р.В. Михайлова
А.Г. Мрочек
М.В. Мясникович
П.Г. Никитенко
Г.Б. Свидерский
С.П. Ткачев
Б.М. Хрусталеv
И.П. Шейко
А.П. Шкадаревич

Ведущие рубрик:
Спектроскопия –
Жанна Комарова
Инновации – Павел Дик
Синергия знаний – Ирина Емельянович
В мире науки – Ирина Атрошко

Компьютерный дизайн:
Алексей Петров

Отдел маркетинга и рекламы:
Елена Верниковская

Адрес редакции:
220072, г. Минск,
ул. Академическая, 1-129.
Тел.: (017) 284-14-46
e-mail: nii2003@mail.ru,
http://innosfera.org

Подписные индексы:
007532 (ведомственная). 00753 (индивидуальная) Формат 60x84 1/8. Бумага офсетная. Печать офсетная. Усл. печ. л. 8,37.
Тираж 810 экз.
Цена договорная. Подписано в печать 04.03.2013. Отпечатано в типографии РУП «Минсктиппроект»: 220123, Минск, ул. В. Хоружей, 13, тел. 288-60-88. Лицензия ЛП №02330/0494102 от 11.03.2009. Заказ №559

© «Наука и инновации»

При перепечатке и цитировании ссылка на журнал обязательна. За содержание рекламных объявлений редакция ответственности не несет. Мнение редакции не всегда совпадает с мнением авторов статей. Рукописи не рецензируются и не возвращаются.

- 4 Вячеслав Щербин
10 лет вместе с «Наукой и инновациями»



Тема номера

Спектроскопия – способ познания материи

- Наталья Хрипач,
Александр Барановский
- 6 **Применение спектроскопии в органической химии**
- Борис Джагаров,
Сергей Лепешкевич,
Александр Сташевский
- 10 **Лазерная спектроскопия процессов с участием молекулярного кислорода**
- Мустафо Асимов
- 12 **Лазерно-оптическая технология оксигенации биоткани**
- Павел Храмов
- 14 **Оптическая диагностика конвективного тепло- и массообмена в газовой динамике**

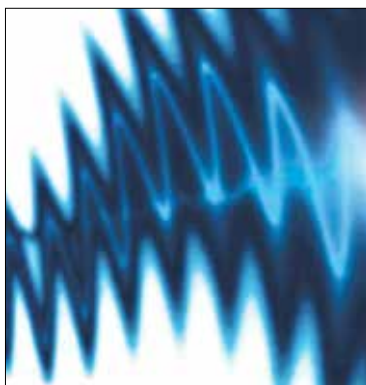
- Михаил Бельков, Сергей Райков
- 17 **Мобильные лазерные спектральные анализаторы**
- Ольгерд Кузнецик
- 18 **Спектроскопия в астрономии**
- Ольга Киевлякис
- 21 **Взгляд во Вселенную**

Инновации

- Ирина Михайлова-Станюта
- 22 **Структура видов деятельности экономики Беларуси и прогноз ее динамики**
- Александр Коршунов,
Валерий Гончаров,
- 25 **О некоторых аспектах повышения эффективности Национальной инновационной системы**
- Елена Салихова
- 29 **Системный подход к стимулированию развития национальной высокотехнологичной сферы**

Синергия знаний

- Анна Поболь, Алексей Поболь
- 32 **Управление ИС в научно-технических организациях**
- Юрий Нечепуренко
- 38 **Стратегии коммерциализации интеллектуальных ресурсов**
- Людмила Пшебельская
- 42 **Экономическая оценка инновационных проектов**
- Ирина Емельянович
- 45 **Вверх по товарной лестнице**



В мире науки

Жанна Комарова

50 Сильным покоряется металл

Игорь Рожанский, Иосиф Цыбовский, Анна Богачёва, Светлана Котова, Татьяна Забавская, Наталья Шахнюк, Анатолий Клесов

55 Белорусы: этногенез и связь с другими славянскими народами с позиции ДНК-генеалогии



Александр Прокопович, Эльдар Надиров, Дмитрий Прокопович

63 Экспертная система для диагностики анемий

Татьяна Самаль, Татьяна Маскаленко

66 Лечение обструктивных форм острого бронхита у детей раннего возраста

Ирина Атрошко

71 Лучшие диссертации года

Contents

Natalya Khripach, Alexander Baranovskiy

6 Use of spectroscopy in organic chemistry

The article covers an application of spectroscopic methods in organic chemistry. Special attention is paid to nuclear magnetic resonance spectroscopy and mass spectrometry.

Boris Dzhagarov, Sergei Lepeshkevich, Alexander Stasheuski

10 Laser spectroscopy of processes with molecular oxygen participation

The paper tells about one of the most important particles on Earth – molecular oxygen, its forms and its reactions with hemoglobin and myoglobin. The developments can be applied in medicine.

Mustafo Asimov

12 Laser and optical technology of tissue oxygenation

The article deals with the technology allowing to supply oxygen to tissues. The findings can be applied in injury and burn therapy, diabetes and bed sores therapy and others.

Pavel Khramtsov

14 Optical diagnostics of convective heat and mass exchange in gas dynamics

The article topic is optical research of processes of heat and substance transfer. Optical diagnostics allows not only to get high-quality visual image of processes but also to measure their qualitative characteristics with pinpoint accuracy and high resolution.

Mikhail Belkov, Sergei Raykov

17 Mobile laser spectral analyzer

The authors of the article describe mobile lasers that they have created and the experience of examining the chemical composition of materials.

Olgerd Kuznechik

18 Spectroscopy in astronomy

The author of the paper describes research unseen clouds, a cloudless night sky and airflows. The works have been carried out with the use of spectroscopy.

Olga Kiyeliakis

21 Look into the Universe

The paper describes the fundamental principles of spectroscopic methods of space research.

Irina Mihailova-Stanyuta

22 Structure of Belarusian economy activities and forecast of its dynamics

The article analyzes the activity structure of economy of the Republic of Belarus.

Alexander Korshunov, Valeiy Goncharov

25 About some aspects of efficiency improvement of National innovative system

The article runs about peculiarities of the national innovative system of the Republic of Belarus and the ways of its efficiency improvement.

Elena Salikhova

29 System approach to stimulation of the development of the national highly technological sphere

The article touches upon the problems connected with the development of the advanced technologies and production of highly technological goods on their basis. The measures on making this process more dynamic are suggested.

Anna Pobol, Igor Pobol

32 Intellectual property management in scientific and technical organizations

The paper presents the results of an expert inquiry of scientific and technical enterprises in Belarus concerning their intellectual property management practice, complemented by the sample patent data analysis of such enterprises.

Yurij Nechepurenko

38 Strategies of intellectual resources commercialization

The article shows practical aspects of the way different strategies of intellectual property management are implemented in scientific organization at the example of an exact one – Physics and Chemistry Research Institute of Belarusian State University.

Lyudmila Pshhebelskaya

42 Legal regulations in the sphere of innovative activity

The analysis of innovation projects specifics and normative documents in the Republic of Belarus, which determine the process of their economic assessment, shows that the most significant features of the project – the uncertainty of the conditions of implementation and the associated risks are ignored.

Irina Emelyanovich

45 Up the market steps

The paper presents the discussion at a round table about how a research organization should work to sell the results of its research and its developments and what marketing tools should be used to achieve these goals.

Zhanna Komarova

50 Metal is subdued by the strong

Within the conversation with the member of Academy of Sciences Vladimir Klubovich, incentives to spark creativity and interest to engineering among youngsters, based on the example of his personal scientific and life experience, are explored.

Igor Roghanskiy, Iosif Tsyibovskiy, Anna Bogachova, Svetlana Kotova, Tatyana Zabavskaya, Natalia Shahnyuk, Anatoliy Klyosov

55 Belarusians: ethnogeny and connection with other Slavonic peoples from DNA genealogy perspective

The article offers the analysis of a large amount of ethnic Belarusians samples (more than a thousand haplotypes), which allowed the authors to make interesting generalizations about the ethnogeny of Belarusian people and its connections with other Slavs in DNY genealogy perspective.

Alexander Prokopovich, Eldar Nadyirov, Dmitriy Prokopovich

63 Expert system for anemia diagnostics

When making haemogram, researchers offer patients with anemia risks to use expert system, based on the estimation of probable connection of clinical blood test results with pathological state.

Tatyana Samal, Tatyana Maskalenko

66 Curing children of tender age with obstructive bronchitis

The article became the analysis results of diagnostics and treatment children of tender age with acute obstructive bronchitis.

Irina Atroshko

71 Best thesis works of the year

Summaries of thesis research works which became awardees of the Supreme accreditation committee are offered to readers' attention.

Спектроскопия –

Способ

познания

Материи

Историю развития спектроскопии, от первых опытов по разложению света с помощью призмы и до наших дней, воедино собрать довольно сложно. Однако доподлинно известно, что свои истоки она берет в середине XIX в., когда физик Густав Роберт Кирхгоф и химик Роберт Вильгельм Бунзен заложили основы спектрального анализа, нашедшего свое приложение в практике химических исследований. С его помощью в 1860 г. был открыт цезий, а в 1861 г. – рубидий. Кирхгоф также доказал применимость данного метода для определения химического состава небесных светил, объяснил природу темных полос в спектре Солнца (фраунгоферовы линии). В результате ученым был сформулирован основной закон

теплого излучения, в котором он впервые ввел понятие абсолютно черного тела.

Научные исследования в области спектроскопии в Беларуси начались с создания в 1953 г. в БГУ им. В.И. Ленина двух оптических кафедр: физической оптики и спектрального анализа. Их возглавили воспитанники ленинградской оптической школы А.Н. Севченко и Б.И. Степанов. Одновременно в АН БССР был создан сектор физики и математики, преобразованный в 1955 г. в Институт физики и математики, а после отделения математики в самостоятельный институт в 1959 г. – в Институт физики. До этого периода в республике функционировали лишь четыре небольшие заводские лаборатории, которые использовали в своей работе общепринятые методы эмиссионного спектрального анализа.

С первых дней существования профильных учреждений направления научных исследований в Беларуси определились достаточно четко: молекулярная и атомная спектроскопия, люминесценция, спектроскопия

плазмы, физическая оптика, фотохимия.

За прошедшие 60 лет в спектроскопии возникли совершенно новые научные школы: лазерная и нелинейная спектроскопия, космическая спектроскопия, спектроскопия наноструктур и т.д.

Методами спектроскопии сегодня исследуют уровни энергии и структуру атомов, молекул и образованных из них макроскопических систем, изучают квантовые переходы между уровнями энергии, взаимодействия атомов и молекул, а также макроскопические характеристики объектов – температуру, плотность, скорость макроскопического движения и т.д.

Белорусские ученые активно участвуют в развитии сложившихся и формировании новых направлений современной спектроскопии и оптики.

В данном номере журнала представлены наиболее значимые наработки отечественных ученых в области спектроскопии, заслуживающие особого внимания в силу своей практической применимости. ■

Применение спектроскопии в органической химии

Спектроскопические методы исследования занимают ведущие позиции в химии, биологии, фармацевтике, других областях. Их используют, чтобы определить состав сложных композиций, состояние живых организмов, контролировать качество продукции, изучить строение веществ и т.д. Применение спектроскопических методов основано на взаимодействии молекул вещества с электромагнитным излучением, в результате чего происходит поглощение, испускание или рассеяние части энергии, что регистрируется в виде соответствующего спектра.

В органической химии чаще всего применяют спектроскопию инфракрасного (ИК), ультрафиолетового (УФ) и видимого диапазона, ядерного магнитного резонанса (ЯМР) и масс-спектрометрию.

ИК-спектроскопия использует диапазон длин волн электромагнитного спектра, отвечающий колебательным и вращательным уровням энергии молекул. При исследовании органических соединений обычно используют поглощение ИК-излучения в области $\lambda=2-50$ мкм, что соответствует волновым числам $\nu=5000-200$ см⁻¹. С помощью ИК-спектроскопии можно быстро и надежно идентифицировать разнообразные функциональные группы (карбонильную, гидроксильную, карбоксильную, амидную, amino-, циано- и др.), а также различные неопределенные фрагменты (двойные и тройные углерод-углеродные связи, ароматические или гетероароматические системы). ИК-спектроскопия широко применяется для идентификации и подтверждения качества фарма-

цевтических субстанций, действующих веществ пестицидов и т.д. при условии, что спектры эталонов были записаны ранее и доступны для сравнения.

В УФ-спектроскопии используется более коротковолновая область (400–700 нм) электромагнитного излучения, обладающего большей энергией, которая вызывает электронные переходы в молекуле. В УФ-спектрах наблюдают функциональные группы или системы, которые получили название хромофоров. Обычно они имеют π -электроны или свободные электронные пары гетероатомов, переход которых с основного на возбужденный энергетический уровень соответствует УФ-диапазону. Хромофоры входят в состав белков и нуклеиновых кислот, поэтому УФ-спектроскопия широко применяется в биохимических исследованиях.

В основе метода ЯМР лежит взаимодействие магнитных моментов атомов с внешним магнитным полем. Под его влиянием происходит ориентация спиновых моментов ядра и возникает диф-



Наталья Хрипач,
заместитель
директора
по научной работе
Института
биоорганической
химии
НАН Беларуси,
кандидат
химических наук

ференцировка энергетических уровней, поскольку магнитная энергия ядра может принимать лишь дискретные значения. С помощью высокочастотного генератора можно вызвать переходы между энергетическими уровнями. При этом ядро будет поглощать (резонировать) только в узком диапазоне длин волн, соответствующем разнице энергий основного и возбужденного состояний.

Метод начали применять в химии в начале 1950-х гг., практически сразу вслед за открытием явления ядерного магнитного резонанса. Поскольку атом водорода – неперенный компонент органических соединений, а его наиболее распространенный изотоп ¹H обладает ядерным магнитным моментом, долгое время развивалась в основном спектроскопия ЯМР на протонах атомов водорода. Открытие фурье-спектроскопии позволило на 2–3 порядка повысить чувствительность ЯМР-спектрометров за счет накопления сигналов, а появление новых магнитов на основе сверхпроводящих материалов многократно увеличило разрешающую способность аппаратов.

Широкое использование метода ЯМР в химии связано с тем, что на резонансные частоты поглощения ядра влияет его непосредственное окружение, поэтому по виду и положению сигналов в спектре можно узнать взаимное расположение атомов. Основные характеристики, получаемые из протонного ЯМР-спектра, – химический сдвиг сигнала атома, который зависит от электроотри-



Александр Барановский,
заведующий
лабораторией
физико-химических
методов
исследования
Института
биоорганической
химии НАН
Беларуси, кандидат
химических наук

цательности соседних атомов в молекуле, и тонкая структура сигнала (мультиплетность), которая определяется наличием соседних атомов водорода. В зависимости от пространственного расположения последних энергия их взаимного влияния, проявляющегося в спектре в виде константы спин-спинового взаимодействия, принимает различные значения, благодаря чему можно выяснить структуру молекул. Поскольку интенсивность сигнала в спектре ЯМР прямо зависит от концентрации исследуемого вещества, метод может быть использован для количественного анализа без применения стандарта.

В настоящее время спектроскопия ЯМР – основной способ изучения кинетики и динамики молекул в растворах, установления строения молекул и состава биологических жидкостей, растворов или смесей. Размер изучаемых молекул может варьироваться от небольших молекул органических соединений до природных биомолекул с массой в десятки килодальтонов. С помощью ЯМР-спектроскопии изучают содержание метаболитов в физиологических жидкостях человека в норме и патологии, а также определяют метаболический профиль в процессе лечения пациентов и даже во время проведения операции. В медицине используют магнитно-резонансную томографию (МРТ), основанную на резонансном поглощении атомами водорода молекул воды, которая содержится в органах и тканях организма. В фармацевтике ЯМР-спектроскопия помогает не только выяснять структуру соединений при разработке новых фармацевтических субстанций, но и контролировать качество субстанций и готовых лекарственных форм. С помощью метода ЯМР также выявляют фальшивки среди фармацевтических препаратов. Разработаны специальные устройства для контроля качества пищевых продуктов по принципу «отпечатков пальцев», когда эксперименталь-

ный спектр исследуемого объекта автоматически сравнивается с хранящимся в памяти устройства эталоном.

Спектроскопия ЯМР позволяет получить прямую информацию о строении изучаемого предмета, и ее применение на практике ограничивается только высокой стоимостью приборов и их частей, например электромагнитов. При их эксплуатации необходимо постоянное охлаждение жидкими азотом и гелием, что весьма затратно и требует наличия определенной инфраструктуры.

В Институте биоорганической химии (ИБОХ) установлен современный мультиядерный фурие-ЯМР-спектрометр высокого разрешения AVANCE-500 с рабочей частотой 500 МГц производства Bruker-Biospin (рис. 1). Конфигурация прибора позволяет проводить одномерные и двумерные эксперименты в растворах в широком диапазоне температур (-150 – 150 °С) путем детектирования большинства ядер периодической системы.

Использование ЯМР-спектрометра позволяет решать основные научные задачи, возникающие в процессе синтеза новых органических соединений: определять состав реакционных смесей, оценивать кинетику процесса, устанавливать конфигурацию и конформационное поведение сложных органических молекул в растворах. Внедрение в практику исследования современных методов двумерной спектроскопии ЯМР (HSQC, TOCSY, NOESY и др.) позволило вывести на новый качественный уровень и значительно расширить доказательную базу при установлении структуры сложных органических соединений.

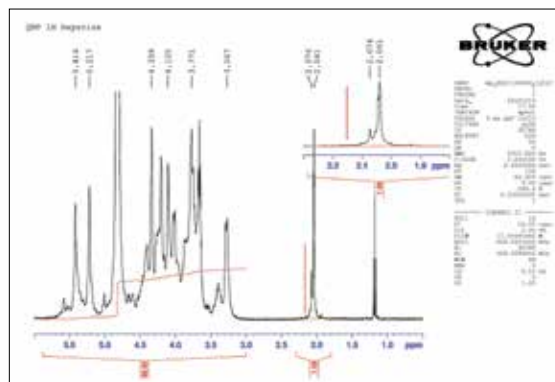
Для ядер ^1H и ^{13}C проводятся гомо- и гетероядерные двумерные эксперименты.

Гомоядерные эксперименты:
 ■ COSY (homonuclear correlation spectroscopy) отражает скалярное взаимодействие между протонами (обычно до трех связей);

■ TOCSY (total correlation spectroscopy) выявляет изоли-



Рис. 1.
ЯМР-спектрометр



рованные спиновые системы и отражает взаимодействие ядер внутри системы;

■ NOESY (nuclear Overhauser effect spectroscopy) показывает диполь-дипольные взаимодействия, определяет пространственную сближенность протонов. Полезен для установления стереохимии молекул.

Гетероядерные эксперименты:

■ HSQC (heteronuclear single-quantum correlation spectroscopy) позволяет выявить углерод-протонные взаимодействия через одну связь и соотнести сигналы атомов углерода в спектре ^{13}C с сигналами протонов, присоединенными к данному атому углерода (рис. 3);

Рис. 2.
 ^1H ЯМР-спектр гепарина

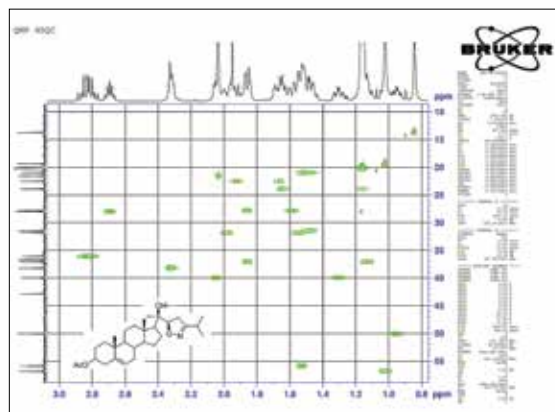


Рис. 3.
Двумерный HSQC корреляционный спектр стероида



Рис. 4.
Хроматомасс-
спектрометр

■ HMBC (heteronuclear multiple-bond correlation spectroscopy) позволяет установить протон-углеродную корреляцию более чем через одну связь. Используется для определения порядка соединения атомов в молекуле; метод эффективен для установления положения сигналов четвертичных атомов углерода. HMBC можно применить также для записи двумерных корреляционных спектров протон-азот с естественным содержанием ^{15}N в молекуле. Это дает возможность исследовать на спектрометре AVANCE-500 низкомолекулярные азотсодержащие соединения.

AVANCE-500 весьма эффективен для установления или подтверждения химического строения и пространственной структуры низкомолекулярных органических соединений; изучения структуры неорганических и металлоорганических соединений (ЯМР-спектроскопия на ядрах ^{29}Si , ^{119}Sn , ^{113}Cd , ^{77}Se , ^{195}Pt , ^{103}Rh и др.); исследования структуры полимеров в растворах; количественного и качественного анализа лекарственных препаратов, средств защиты растений, стимуляторов роста, препаратов для ветеринарии; проведения качественного и количественного анализа биологических жидкостей на содержание глюкозы, липидов и других метаболитов.

Один из простых примеров применения ЯМР-спектроскопии для контроля качества лекарственного средства представлен на примере гепарина, закупаемо-

го в качестве фармацевтической субстанции для производства готовой лекарственной формы. Методика была введена в качестве обязательной для фармпредприятий в связи с выявлением серьезных побочных эффектов при применении препаратов гепарина, содержащих гиперсульфатированный хондроитин сульфат, анализ на содержание которого является затруднительным и ранее не проводился. На рис. 2 представлен протонный спектр чистого гепарина (имеет один сигнал в области 2.04 м.д.). В случае содержания примеси хондроитин сульфата в спектре появляется дополнительный пик при 2.16 м.д. (отмечено на рисунке красной вертикальной линией).

На рис. 3 представлен двумерный HSQC спектр молекулы стероида. В верхней части рисунка изображен ЯМР-спектр ^1H , а в левой части – спектр ^{13}C . Пятна на плоскости, так называемые кросс-пики, указывают на связь атома углерода, сигнал которого находится на одной горизонтальной линии с кросс-пиком, с атомом водорода, чей сигнал расположен на одной вертикальной линии с кросс-пиком. Имея набор одномерных и двумерных спектров, специалист без труда установит строение неизвестного соединения.

Другой важный метод исследования веществ – масс-спектрометрия. В отличие от оптических методов спектроскопии, которые детектируют поглощение или испускание энергии молекулами или атомами, в данном случае регистрируются ионы. Масс-спектрометрия основана на измерении отношения массы к числу элементарных положительных или отрицательных зарядов ионов (m/z), полученных из молекул анализируемого вещества. Это отношение выражается в атомных единицах массы, или дальтонах. Ионы, образовавшиеся в ионном источнике, ускоряются и перед попаданием в детектор разделяются с помощью масс-анализатора.

Сочетание масс-спектрометрии с другими методами позво-

ляет получать больше информации об объекте исследования. Оказались весьма эффективными и широко распространены в качестве аналитических приборов хроматомасс-спектрометры, в которых различные типы газовых, жидкостных или ионных хроматографов обеспечивают предварительное разделение компонентов пробы, а масс-спектрометр осуществляет индикацию разделенных веществ и измерение их содержания.

В качестве масс-селективного детектора используют разные анализаторы: магнитный, электростатический, квадрупольный, времяпролетный, ионную ловушку, циклотронно-резонансный. Чтобы ионизировать компоненты образца, применяются электронный удар, химическая ионизация, электроспрей, фотоионизация, лазерная десорбция, химическая ионизация при атмосферном давлении, полевая десорбция.

В ИБОХ используются хроматомасс-спектрометры: газовый хроматограф Agilent 6890N с масс-селективным детектором Agilent 5975 Inert, жидкостные хроматографы Agilent 1200 с одиночным и тройным квадрупольными анализаторами Agilent 6120 и 6410, а также масс-спектрометр с индуктивно связанной плазмой Agilent 7500сх. (рис. 4–5). В каждом из них масс-селективным детектором является квадрупольный анализатор. Под действием постоянного и переменного электрических полей ионы с определенной массой испытывают стабильные колебания и могут пройти через квадрупольный фильтр только при определенных значениях постоянного и переменного напряжений на электродах.

Высокоэффективную жидкостную хроматографию в сочетании с масс-детектором можно использовать для анализа термолабильных и малолетучих веществ, растворимых в полярных растворителях, таких как ацетонитрил, вода, метанол. Предварительное разделение на колонке позволяет анализировать