

ЛАБОРАТОРИЯ ЯДЕРНОГО МАГНИТНОГО РЕЗОНАНСА

Как все начиналось

В далеком 1966 году Ю.Л. Фролов (тогда кандидат наук, позже профессор, зам директора ИрИХ) обратился к руководству физфака Иркутского госуниверситета с просьбой рекомендовать двух студентов с тем, чтобы они после выполнения дипломной работы были распределены в ИрИОХ. Этими студентами оказались Т.И. Процук (Вакульская) и В.К. Воронов. Вскоре Ю.Л. Фролов договорился с Новосибирским институтом химической кинетики и горения Сибирского отделения АН СССР о том, что на период преддипломной практики и на время выполнения дипломной работы студенты из Иркутска будут направляться в Новосибирск. Так был установлен творческий контакт между двумя институтами. В этом основная заслуга принадлежала Юлию Леонидовичу Фролову, который прекрасно понимал важность методов магнитного резонанса и квантовой химии для изучения молекулярного строения.

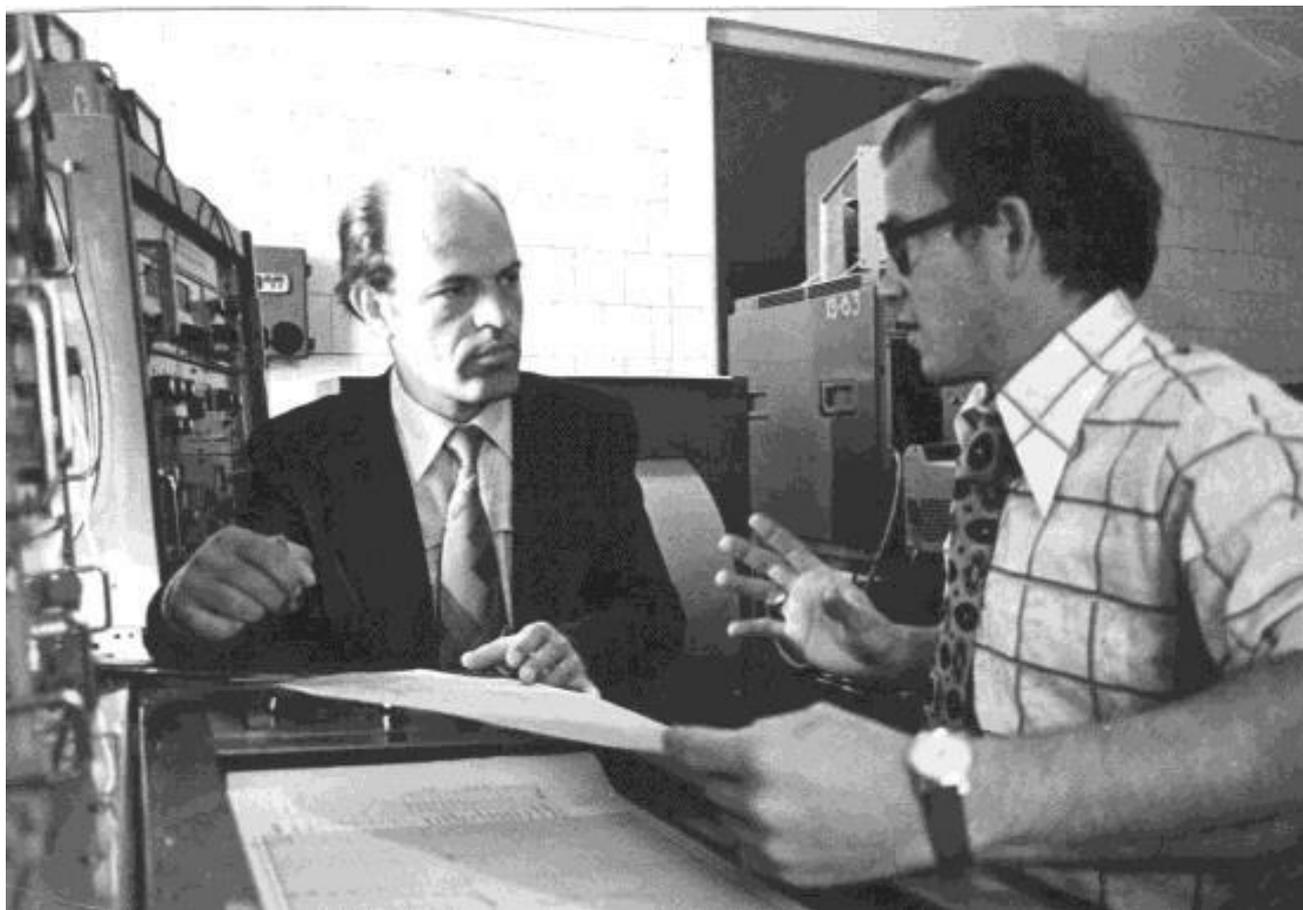
Лаборатория магнитного резонанса в ИрИОХ создавалась в тесном сотрудничестве со школой академика Молина. Параллельно руководством ИрИОХа велась работа по приобретению собственного спектрометра ЯМР высокого разрешения. Был приобретен спектрометр BS 487B фирмы "Tesla" высокого разрешения с резонансной частотой по протонам 80 МГц. Основные заботы по приобретению и освоению спектрометра лежали на плечах Ю.Л. Фролова.

Таким образом, уже в конце 60-х годов ЯМР достаточно прочно вошел в практику работы ИрИОХа, а институт уже располагал высококласным спектрометром, который успешно использовался для детектирования спектров. Параллельно для института снимались и расшифровывались спектры ЯМР синтезированных соединений в Москве на спектрометрах самого высокого (по тем временам) мирового уровня. Здесь институту помогал аспирант ИГУ Г.А. Калабин.



Ларин Михаил Федорович и Штеренберг Борис Захарович. Спектрометр ЯМР «Тесла», 80 МГц.

При тесном взаимодействии с лабораторией органического синтеза ИриОХа Геннадий Александрович основал крупную признанную на мировом уровне школу ЯМР спектроскопии, из которой вышел ряд докторов и кандидатов наук. Только в 1968-1970 годах в научные центральные периодические издания было направлено несколько десятков статей работников ИриОХа, в которых разбирались спектры ЯМР самого высокого уровня, с использованием новейших методик.



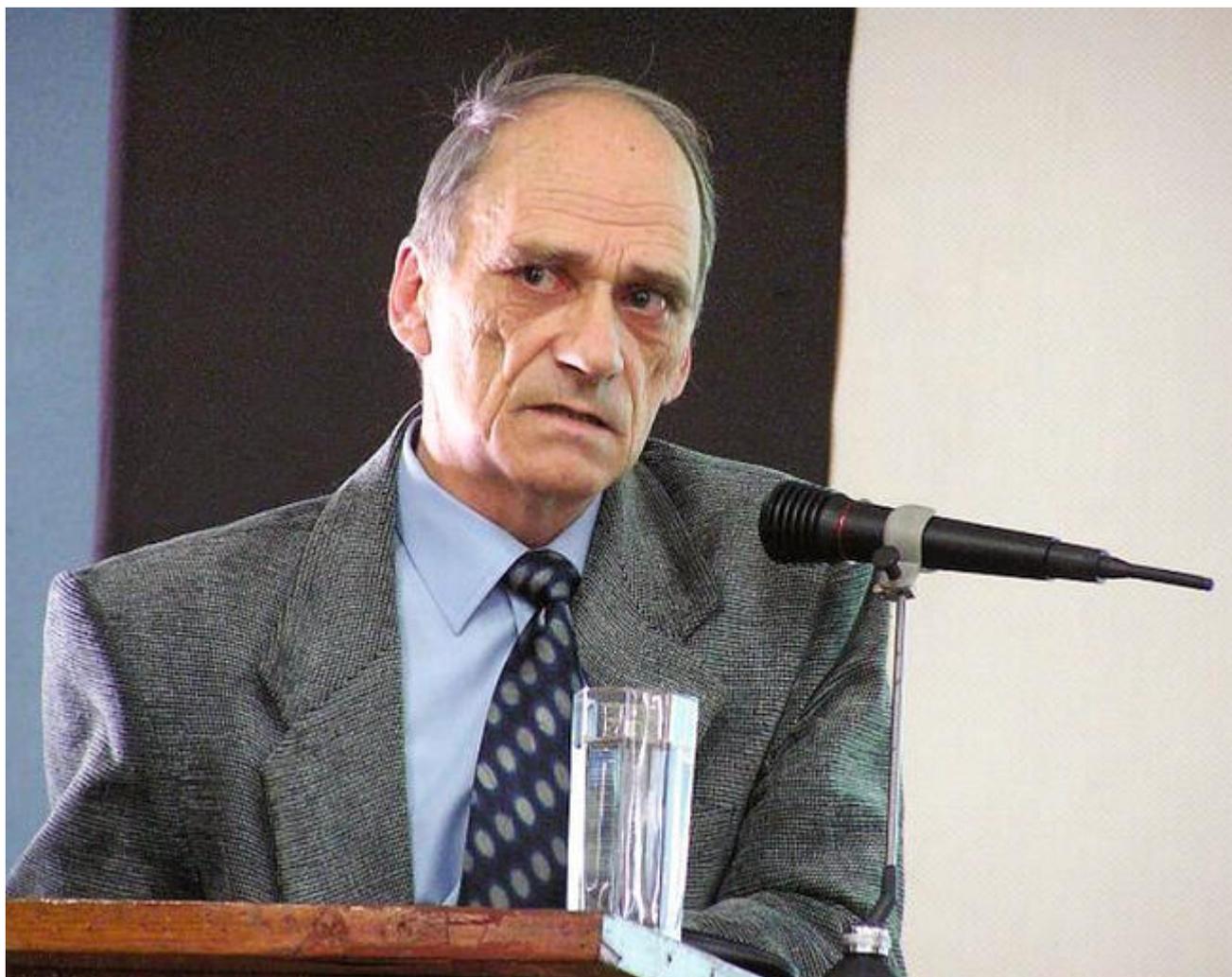
Харольд Янке (ГДР) и Ларин Михаил Федорович за работой на «Тесле»

В 60-х годах, до приобретения спектрометра ЯМР фирмы Tesla, в институте был освоен отечественный спектрометр ЯМР из опытной партии Сумского завода. В институте работал также ЭПР-анализатор, изготовленный в Ангарске. Ответственным за эксплуатацию спектрометра ЯМР был Валентин Григорьевич Сахаровский. На кафедре физики Иркутского политехнического института (ИПИ) сформировались как профессионалы д.х.н, профессор А.В. Афонин и к.х.н. А.В. Ващенко, которые впоследствии перешли на работу в ИриОХ. Это сотрудничество усилилось после того, как в 1997 году в ИПИ была организована учебно-исследовательская лаборатория ядерного магнитного резонанса и при активной поддержке академика РАН Р.З. Сагдеева был приобретен спектрометр ЯМР фирмы "Bruker" с резонансной частотой по протонам 250 МГц.

Советский период

В тяжелые 90-е годы лаборатория ЯМР вошла на волне исследований строения и механизмов реакций элементоорганических и гетероатомных соединений методами ЯМР, ЭПР и ЯКР спектроскопии. Они привели, в частности, к обнаружению целого ряда новых реакций и перегруппировок кремний-, германий- и оловоорганических

соединений, к широкому внедрению в мировую исследовательскую и аналитическую практику мультаядерной спектроскопии ЯМР. Наибольшее признание в России и за рубежом получил обширный цикл выполненных в лаборатории пионерских экспериментальных и теоретических работ по изучению соединений пента- и гексакоординированного кремния под руководством доктора химических наук, профессора В. А. Пестуновича – основателя и первого руководителя лаборатории ЯМР.



Пестунович Вадим Александрович – первый заведующий лабораторией, д.х.н., профессор, Лауреат Государственной премии, работал в институте с 25.01.1971 по 04.07.2004 г.

Годы жизни: 6.01.1942 – 4.07.2004 гг.

В этот период лаборатория провела в Иркутске три Международные конференции с приглашением иностранных ученых (G. Engelhardt, H. Jancke, M. Witanovski, L. Stefaniak, Э. Лиепиньш, Янке, E. Lippmaa, R. Radeaglia) "Спектроскопия ЯМР тяжелых ядер", сыгравшие большую роль в становлении лаборатории и укреплении ее международного уровня (М.Ф. Ларин, С.Н. Тандура).



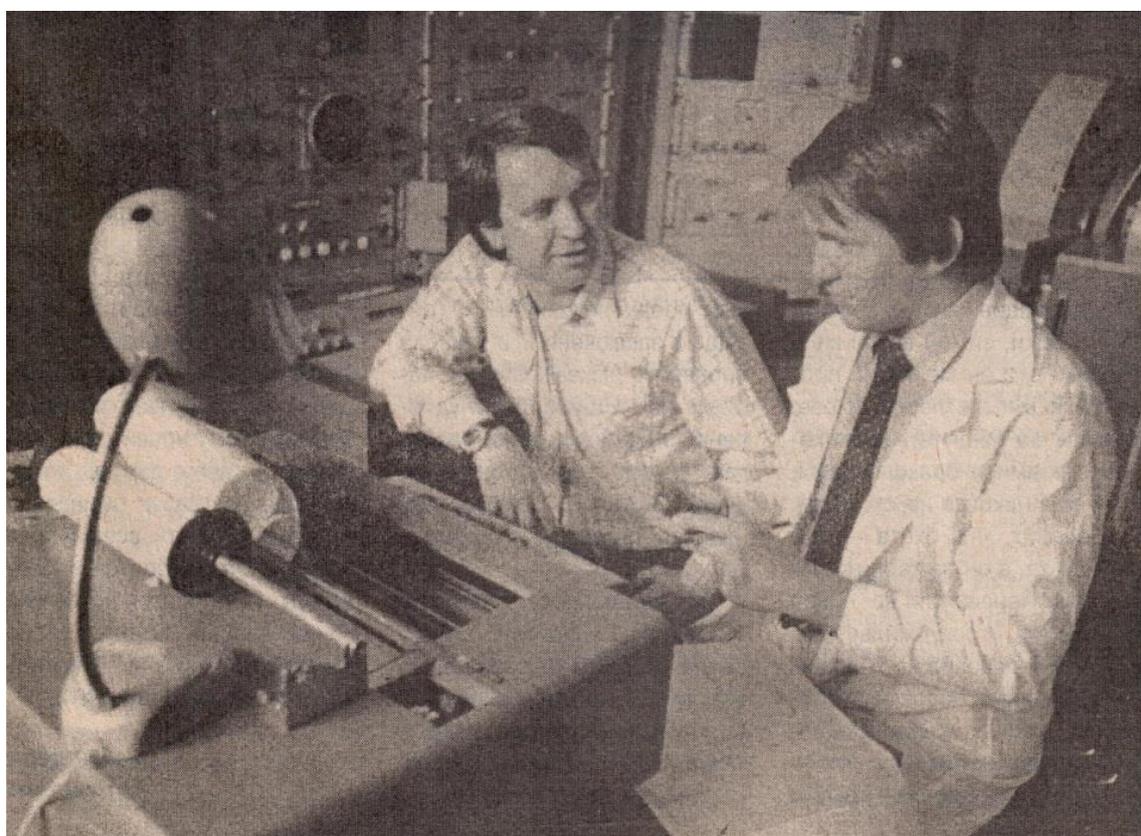
Людмила и Михаил Ларины на Первомайской демонстрации

В эти же годы в лаборатории активно разрабатываются новые методики, основанные на использовании спектроскопии ЯМР ^{15}N для структурных исследований органических молекул, таутомерных превращений и реакционной способности азотсодержащих гетероциклических соединений (М.Ф. Ларин, Л.И. Ларина). Активно развиваются работы по использованию метода ЯКР в структурных исследованиях (Г.В. Долгушин). Выполняются работы по ЭПР-мониторингу органических реакций, протекающих с переносом электрона (Т.И. Вакульская). Сотрудники лаборатории защищают ряд докторских диссертаций (В.К. Воронов, В.П. Фешин, М.В. Сигалов, И.Д. Калихман, С.Н. Тандура, В.К. Турчанинов, В.Ф. Сидоркин, Л.И. Ларина, Т.И. Вакульская), публикуют монографии в престижных изданиях, выступают на международных симпозиумах.

В 1984 году под руководством В.А. Пестуновича в один день защищаются сразу три кандидатские диссертации (Албанов, Петухов, Штеренберг) – случай, достойный книги рекордов Гиннеса.



Турчанинов В., Владимиров, Албанов А., Сидоркин В., Сигалов М., Ларина Л., Вакульская Т., Калихман И., Балахчи Г.



Штеренберг Борис Захарович и Долгушин Геннадий Васильевич за спектрометром ЯКР ИС-3, 1985 год.



Михаил Ларин, Борис Штеренберг и японец-наладчик спектрометра ЯМР "Jeol", 90 МГц, 1985 год.



Романенко Людмила Самсоновна, к.х.н., спектроскопист ЯКР, 1985 год.



Тамара Вакульская, Наталья Лазарева и Людмила Ларина

В 1999 г. в лаборатории появляется первый сверхпроводящий спектрометр ЯМР нового поколения "DPX-400", что позволило поднять проводимые структурные исследования на принципиально новый уровень. Лаборатория постепенно становится одним из отечественных и мировых центров спектроскопии ЯМР.



Александр Албанов и Людмила Ларина снимают первые спектры на новом Bruker DPX-400



Сергей Зинченко и Михаил Веснин после запуска спектрометра Bruker DPX-400

Начало XXI века отмечено трагическим событием в истории лаборатории. На самом подъеме научной активности лаборатории 4 июля 2004 г. неожиданно оборвалась жизнь выдающегося ученого, талантливого организатора науки, лауреата Государственной премии, заведующего лабораторией структурной химии со дня ее основания профессора Вадима Александровича Пестуновича. Это было тяжелой, невозполнимой утратой и для лаборатории, и для института, и для мировой науки. Тем не менее лаборатория продолжает работать с прежним энтузиазмом и отдачей, но нет уже ее идейного вдохновителя и наставника.



Доленко Георгий Николаевич, Сидоркин Валерий Федорович, Пестунович Вадим Александрович, Кейко Владимир Владимирович, Афонин Андрей Валерьевич, Владимиров Виталий Владимирович, Штеренберг Борис Захарович, Ларин Михаил Федорович, Елин Виталий Петрович, Шагун Владимир Александрович, Балахчи Георгий Константинович, Догаев Олег Борисович и Сигалов Марк Владимирович

Страницы новой истории

В этот сложный для лаборатории период ее заведующим становится профессор, доктор химических наук Леонид Борисович Кривдин. По возможности им сохраняются сформировавшиеся научные традиции, но одновременно с этим развиваются и новые для лаборатории направления. Активно разрабатываются ЯМР–ориентированные квантово-химические расчеты высокого уровня и формируются новые подходы в стереохимических исследованиях на основе химических сдвигов и констант спин–спинового взаимодействия. Совместно с группами профессора Ш. Зауэра (Университет Копенгагена), профессора Р. Контрераса (Университет Буенос–Айреса) и профессора М. Барфилда (Университет Аризоны) в лаборатории разрабатываются и апробируются неэмпирические методы расчета констант магнитного экранирования (химических сдвигов) и констант спин–спинового взаимодействия на основе подхода поляризационного пропагатора и теории функционала электронной плотности. Полученные результаты по теоретическому изучению механизмов и путей передачи спин–спинового взаимодействия в органических молекулах быстро приобретают широкую известность и начинают активно цитироваться в мировой литературе.



Кривдин Леонид Борисович – заведующий лабораторий в 2004-2021, д.х.н., профессор. Работает в институте с 01.09.2004 г.

В начале 2000-х годов в лабораторию приходят молодые аспиранты с большим запасом энтузиазма и желанием работать в науке, которые под руководством Л.Б. Кривдина начинают активно развивать область высокоточных ЯМР-ориентированных расчетов и успешно защищают кандидатские и докторские диссертации. Это сотрудники лаборатории Ю.Ю. Русаков, И.Л. Русакова, С.С. Хуцишвили, К.А. Чернышев, С.В. Федоров, Д.О. Самульцев, В.А. Семенов и сотрудники базовой кафедры химии Ангарского государственного технического университета Г.Н. Глушко, Е.А. Чиркина, Т.А. Кузнецова, В.А. Данилова, Н.А. Щербина, Н.В. Истомина. Всего за эти годы под руководством Л.Б. Кривдина было защищено 12 диссертаций.



Юрий Русаков и Кирилл Чернышев настраивают расчетный кластер



Сергей Федоров осваивает новый Bruker AVANCE-400



Албанов Александр Иванович, к.х.н., с.н.с., за работой на Bruker AVANCE-400, 2015 год



Ларина Людмила Ивановна, д.х.н., в.н.с. Расчетный кластер в 2010 г.

Лаборатория по сути переживает свое второе рождение, связанное с омоложением коллектива, обновлением приборного парка (включая запуск в 2004 г. второго сверхпроводящего ЯМР–спектрометра AVANCE-400) и развитием новых подходов в стереохимических исследованиях и квантово-химических расчетах высокого уровня. Международным признанием научных заслуг лаборатории в области ЯМР спектроскопии является избрание в 2007 г. ее заведующего профессора Л.Б. Кривдина редактором журнала *Magnetic Resonance in Chemistry*, основного международного периодического издания в области спектроскопии ЯМР и ее использованию в химии.

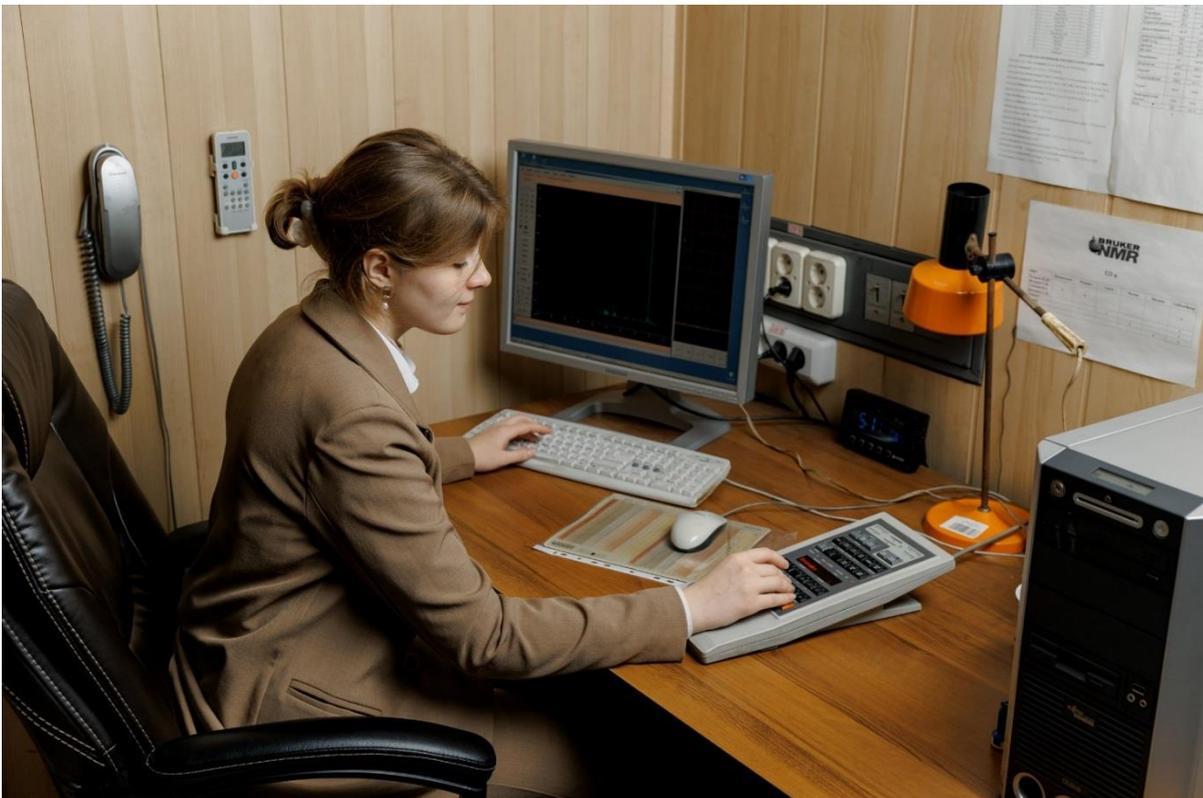
Последние годы отмечены заметным усилением теоретических работ в области ЯМР-ориентированных расчетов высокого уровня (Л.Б. Кривдин, Ю.Ю. Русаков, И.Л. Русакова, С.В. Федоров, Д.О. Самульцев, В.А. Семенов). В 2012 г. в полном расцвете сил и творческой активности из жизни трагически ушел молодой талантливый ученый Кирилл Андреевич Чернышев, совсем немного не дойдя до защиты докторской диссертации. Вечная ему память!

Особое развитие получают теория и практика полного четырехкомпонентного релятивистского расчета химических сдвигов и констант спин-спинового взаимодействия с участием "тяжелых" ядер (Ю.Ю. Русаков, И.Л. Русакова), что составило прорыв в этой области на международном уровне и способствовало получению престижного гранта Российского научного фонда (2014-2016 гг.).

Традиционно выполняются сложнейшие стереоэлектронные исследования синтезируемых в институте органических и элементоорганических соединений при использовании современных возможностей мультядерной многоимпульсной спектроскопии ЯМР (Л.И. Ларина, А.И. Албанов, И.А. Ушаков, С.В. Зинченко), включая хорошо отлаженные и апробированные в лаборатории методы спектроскопии ЯМР на ядрах ^{13}C (И.А. Ушаков, С.В. Зинченко), ^{15}N (Л.И. Ларина) и ^{29}Si (А.И. Албанов). Развиваются методы высокоточного расчета химических сдвигов ЯМР ^{29}Si и ^{31}P методами функционала электронной плотности (С.В. Федоров). Быстро подрастает молодежь (Д.О. Самульцев, В.А. Семенов), наращивая публикации в области расчетных методов ЯМР ^{15}N и ^{13}C . Развиваются работы по квантово-химическому изучению механизмов органических реакций (Е.А. Чиркина). Также, с начала 2020-х гг. лаборатория (Русаков Ю.Ю. и Русакова И.Л.) успешно занимается исследованиями и разработкой методов создания эффективных квантово-химических базисных наборов.



Леонид Кривдин, Людмила Ларина, Игорь Ушаков и Александр Албанов



Юлия Никурашина за спектрометром Bruker Avance-400

В ходе реструктуризации института в 2016 году группа ЭПР переходит в состав лаборатории структурных исследований (ранее - лаборатории физической химии), а лаборатория структурной химии становится лабораторией ядерного магнитного резонанса. В 2020-е коллектив лаборатории пополняется молодыми кадрами – активно вливаются в рабочий процесс выпускник ИрНИТУ Уханев Степан и магистрант ИГУ Никурашина Юлия. С 1 января 2021 г. новым заведующим лабораторией становится ее воспитанник к.х.н. Семенов Валентин Александрович.

Но это уже новейшая история, написать которую предстоит нашему дружному коллективу. В путь!



Юбилей профессора Кривдина – 2015 год:

В первом ряду: Борис Чечет, Владимир Смирнов, Людмила Ларина, Борис Ульянов, Ирина Русакова, Елена Таусон, Маргарита Альперт, Тамара Вакульская.

Во втором ряду: Владимир Таусон, Людмила Таусон, Нина Сосновская, Леонид Кривдин, Ольга Казарова.

В третьем ряду: Игорь Розенцвейг, Елена Чиркина, Наталья Щербина, Юрий Русаков, Ольга Космачева, Александр Албанов, Максим Кривов.

В четвертом ряду: Сергей Федоров, Игорь Ушаков, Дмитрий Самульцев, Валентин Семенов, Спартак Хуцишвили, Николай Корчевин, Владимир Медведев.



Лаборатория ЯМР в 2023 году:

Слева направо: Леонид Кривдин, Сергей Федоров, Дмитрий Григорьев, Людмила Ларина, Александр Албанов, Валентин Семенов, Юрий Русаков, Сергей Зинченко, Степан Уханев, Ирина Русакова, Юлия Никурашина.