

### НОВЫЕ ДОСТИЖЕНИЯ В МАСС-СПЕКТРОМЕТРИИ

Масс-спектрометрия наряду с другими спектральными методами предназначена для анализа и установления строения органических соединений. Широкое применение метода связано с такими замечательными особенностями, как исключительно высокая чувствительность (требуется минимальные количества вещества), информативность, экспрессность (1–2 мин для индивидуальных соединений), возможность анализа смесей при использовании в комбинации с газовой и жидкостной хроматографией, а также в комбинации с компьютером для автоматической интерпретации спектров по специальным программам [1].

Получение спектра в масс-спектрометрии основано на ионизации органической молекулы с образованием *молекулярного иона* и его дальнейшем разрушении с последующей регистрацией массы образующихся ионов. Обычно ионизация осуществляется под действием электронного удара, хотя используются и другие методы. Для этого в условиях глубокого вакуума (остаточное давление около  $10^{-6}$  мм рт. ст., или  $10^{-3}$  Па) вещество переводят в газобразное состояние и подвергают бомбардировке потоком электронов – *электронному удару* (электронной ионизации). При этом молекула теряет электрон, превращаясь в положительный молекулярный ион-радикал, или захватывает электрон с образованием отрицательного ион-радикала. Для органических веществ более широко применяется масс-спектрометрия положительных ионов.

Распад молекулярного иона (фрагментация) идет с разрывом наименее прочных связей в молекуле соединения и с образованием наиболее стабилизированных осколочных частиц. В масс-спектрометре заряженные частицы под действием определенным образом направленных электрического и магнитного полей фокусируются в пучки, распределяются в зависимости от отношения массы  $m$  к заряду  $z$  ( $m/z$ ) и регистрируются детектором. После усиления сигналы записываются в виде масс-спектра. Последний представляет собой последовательность пиков (сигналов) различной интенсивности, расположенных в зависимости от величины  $m/z$ , то есть каждый пик соответствует ионам с данным значением  $m/z$ ; причем для однозарядных ионов  $z = 1$ , величина  $m/z$  совпадает с массой этого иона. По  $m/z$  молекулярного иона устанавливают молекулярную массу и брутто-формулу исследуемого вещества, а анализ образующихся осколочных ионов дает информацию о его строении.

К ограничениям метода относятся: сложность получения спектров для малолетучих веществ, в частности с большой молекулярной массой; в ряде случаев трудности с идентификацией пика молекулярного иона. Обычные масс-спектрометры могут работать с белками и полимерами массой до 1 МДа, и только некоторые модифицированные устройства – с молекулами, масса которых достигает 10 МДа [2].

Очередной задачей для масс-спектрометрии стало измерение массы частиц в диапазоне от Мега- до ГигаДальтон. Хотя этот диапазон является оптимальным для наномеханических резонаторов, при использовании наномеханического масс-спектрометра часто происходит непоправимая потеря образца наряду с продолжительным временем анализа и неточностью измерений [2]. В 2018 г. было опубликовано сообщение о том, что впервые была точно определена масса в 105 МДа большого ДНК-вируса с использованием системы, сочетающей распыление аналитов из раствора, их перемещение и фокусировку без применения электромагнитных полей, измерение массы индивидуальных частиц с помощью 20 наномеханических резонаторов, причем количество образца составило менее 1 пикомоля.

#### ЛИТЕРАТУРА

1. Щербина, А.Э. Органическая химия. Идентификация и системный структурный анализ органических соединений : учебн. пособие для студентов химико-технологических специальностей / Щербина А.Э., Антоневиц И.П., Толкач О.Я. / Мн. : БГТУ, 2005. – 256 с.
2. Dominguez-Medina, S. Neutral mass spectrometry of virus capsids above 100 megadaltons with nanomechanical resonators / S. Dominguez-Medina [et al.] // Science – 2018. – Vol. 362, Issue 6417. – P. 918–922.