

Аналитическая спектроскопия объединяет

По результатам 4-й Всероссийской конференции по аналитической спектроскопии

М. Н. Филиппов, д. ф.-м.н.¹, В. Б. Барановская, д. х. н.^{1,2}

С 24 по 29 сентября 2024 года в Краснодарском крае на берегу Черного моря прошла 4-я Всероссийская конференция по аналитической спектроскопии. В статье описываются тематические направления конференции, содержание выступлений ведущих специалистов, прослеживаются тенденции развития современных методов аналитической спектроскопии, обсуждаются польза и перспективы междисциплинарного сотрудничества ученых и др. В статье отмечено, что в рамках конференции состоялась 47-я Годичная сессия Научного совета РАН по аналитической химии. Подведены научные итоги 2022 года, состоялась традиционное вручение премий НСАХ РАН по аналитической химии за 2022 год.

Ключевые слова: ИК- и КР-спектрометрия, спектрометрия с индуктивно связанной плазмой, хемотрика, молекулярная масс-спектрометрия, атомно-абсорбционная и атомно-эмиссионная спектрометрия, рентгеновская спектрометрия

Научным советом по аналитической химии заложена и поддерживается с энтузиазмом традиция проведения профильных конференций в конце сентября на побережье Черного моря. Благодаря усилиям Кубанского государственного университета, кафедры аналитической химии, возглавляемой д. х. н. З. А. Темердашевым, из года в год с установленной очередностью проводятся конференции и симпозиумы по аналитической спектроскопии, аналитической хроматографии и капиллярному электрофорезу (4-я состоялась в 2020 году), разделению и концентрированию в аналитической химии и радиохимии (4-я состоялась в 2021 году). В центре этого цикла Съезд аналитиков России (2022 год), который проводится один раз в четыре года. Нынешний, 2023 год, ознаменовался проведением, в рамках деятельности комиссии по спектрометрическим



¹ ИОНХ им. Н. С. Курнакова РАН.

² baranovskaya@list.ru.

методам анализа ИСАХ РАН, 4-й конференции по аналитической спектроскопии с 24 по 29 сентября. Несмотря на то, что транспортная логистика в Краснодарский край сейчас сложная, в конференции приняли участие больше 250 человек из 10 регионов России. Ведущие университеты, институты РАН, отраслевые институты, промышленные предприятия и представители фирм-поставщиков аналитического оборудования и расходных материалов поддержали своим участием данное мероприятие.

Программа конференции включала в себя пять пленарных заседаний и одиннадцать тематических секций, на которых было сделано 53 устных доклада. Тематику конференции составили методы спектроскопии в биоаналитике, методы ИК- и КР-спектроскопии, спектроскопия с индуктивно связанной плазмой, хемометрика, молекулярная масс-спектрометрия, методы атомно-абсорбционной и атомно-эмиссионной спектроскопии, рентгеновская спектроскопия, анализ реальных объектов и варианты развития методов аналитической спектроскопии. Кроме устных выступлений, на конференции состоялись три стендовые сессии, на которых были представлены 186 докладов.



После открытия конференции сопредседателем Организационного комитета д. ф. - м. н. М. А. Большовым, с приветственным словом выступил Почетный председатель, академик РАН Ю. А. Золотов.

Он отметил, что конференция привлекла внимание большого числа специалистов, в том числе членов Научного совета

по аналитической химии, не занимающихся непосредственно спектроскопическими методами анализа. Конференция получилась представительной и авторитетной. Ю. А. Золотов обратил внимание, что на сегодняшний день спектроскопия охватывает практически все методы, опирающиеся на электромагнитные спектры от гамма-лучей до радиоволн, от гамма-спектроскопии до спектроскопии ЯМР и ЭПР. Но, например, масс-спектрометрия, которая не опирается на электромагнитный спектр, по решаемым аналитическим задачам, особенно в части элементного анализа, очень близка к другим спектроскопическим методам, особенно в варианте масс-спектрометрии с индуктивно связанной плазмой, и зачастую рассматривается

в группе спектроскопических методов. Поэтому конференция включила в круг обсуждаемых тем и молекулярную масс-спектрометрию. Академик Ю. А. Золотов отметил, что новые ветви «древца спектроскопии» продолжают развиваться. Так, лазеры не только коренным образом изменили возможности ряда спектроскопических методов, например, спектроскопию комбинационного рассеяния, но и дали возможность создавать новые аналитические методы. Появилась термическая спектроскопия с использованием лазеров, лазерно-индукционная спектроскопия и другие методы. И в той же спектроскопии комбинационного рассеяния в конце прошлого века возник вариант рассеяния, усиленного поверхностью, который мы сегодня называем гигантским комбинационным рассеянием. Инфракрасная спектроскопия в ближней инфракрасной области позволила определять разные макрокомпоненты. Завоевывает позиции рентгенофлуоресцентная спектроскопия с полным внешним отражением. Завершая свой доклад, академик Ю. А. Золотов отметил, что «поля» спектроскопических методов возделываются химиками, физиками, представителями других наук, что повелось со времен совместных работ химика Бунзена и физика Кирхгофа. В области рентгеновского анализа – ведущие ученые, в основном доктора технических наук, среди специалистов в атомно-эмиссионной спектроскопии мы видим множество докторов физико-математических наук, а те, кто занимается спектроскопией, как правило, химики. Прочный союз или продуктивное взаимодействие как раз, подчеркнул Ю. А. Золотов, и демонстрирует наша регулярная конференция по аналитической спектроскопии.



Доклад В. К. Карандашева из ИПТМ РАН и А. Ю. Лейкина (ООО «Группа Ай-Эм-Си»), который открыл научную программу конференции, был посвящен современному аппаратурному оформлению масс-спектрометрии с индуктивно связанной плазмой (МС-ИСП). В докладе было обсуждено состояние и перспективы развития, аналитические

возможности и основные проблемы – матричные и спектральные влияния, ограничения, связанные с подготовкой образцов к анализу. Приведен краткий обзор литературы за последние три года, проанализирована публикационная активность зарубежных

и российских авторов в области МС-ИСП за этот период. Представлена информация о производителях и моделях спектрометров, доступных в России в настоящее время, проведен краткий анализ характеристик и конструктивных особенностей приборов [1].



В докладе Б. Б. Дзантиева из Института биохимии им. А. Н. Баха, ФИЦ Биотехнологии РАН рассмотрены различные группы спектрометрических биоаналитических систем с использованием наночастиц, принципы их функционирования и задачи новых разработок [2]. Представлены результаты изучения рамановской спектроскопии для

высококочувствительного спектрометрического выявления различных соединений. Рассмотрены результаты апробации разработанных биоаналитических систем при контроле проб природной и питьевой воды, сельскохозяйственной продукции, продуктов питания, а также в медицинской диагностике.



М. А. Большов из Института спектроскопии РАН сделал доклад об аналитических и диагностических возможностях перестраиваемых диодных лазеров, представлены примеры применения метода абсорбционной спектроскопии с диодными лазерами [3].

Свой пленарный доклад А. А. Камнев из ИБФРМ РАН посвятил рассмотрению некоторых наиболее значимых особенностей методологии и пробоподготовки бактериальных клеток (в составе различных образцов бактериальных культур, включая биопленки – одну из главных форм существования бактерий), а также интерпретации экспериментально получаемых спектроскопических данных для неразрушающего (*in situ* и *in vivo*) анализа методом инфракрасной фурье-спектроскопии (ИКФС) [4].

В докладе И. В. Кубраковой из ГЕОХИ РАН рассмотрены способы получения и виды магнитных наночастиц (МНЧ), перспективных для биомедицинских исследований [5]. Обозначена связь строения и свойств частиц с областями их применения в медицинской диагностике и биоанализе. Особое



внимание уделено МНЧ, содержащим благородные металлы в качестве биомаркеров или действующего вещества. Рассмотрены биомедицинские задачи, реализуемые с помощью МНЧ, и аналитические пути решения этих задач. Обобщены данные о применении прямых и комбинированных атомно-спектральных

методов (ETAAS, ICPMS, HRICPMS, spICPMS, scICPMS) в биомедицинских исследованиях. Рассмотрены экспериментальные подходы к изучению поведения и превращений МНЧ *in vitro* и *in vivo*. Подчеркнута ключевая роль пробоподготовки в экспериментальном моделировании поведения МНЧ в биологических средах. Показаны особенности подготовки при определении растворенных и наноразмерных форм в биообъектах методами атомной спектроскопии. Оценены перспективы комплексных исследований поведения МНЧ в сложных биологических системах.

Особенный доклад был представлен А. А. Пупышевым из УрФУ, посвященный обзору книг по различным направлениям атомного спектрального анализа: атомно-абсорбционной и атомно-флуоресцентной спектроскопии, атомно-эмиссионной спектроскопии с пламенем, дугой, искрой, индуктивно связанной плазмой, тлеющим разрядом и микроволновой плазмой, масс-спектрометрии с индуктивно связанной плазмой, спектрометрии лазерной искры, таблицам и атласам атомных и ионных спектральных линий, а также молекулярных полос, приборному оснащению, спектроскопии и др. (рассмотрено более 5000 книг, временной интервал от 1870 года до нашего времени) [6]. Все книги обзора, отметил автор, реально присутствуют в Интернете и имеют прямой доступ.

В докладе С. Н. Штыкова из СГУ, посвященном наноспектроскопии, ее особенностям и областям применения, было отмечено, что это новое направление объединяет методы спектроскопии, позволяющие исследовать или характеризовать объекты с нанометровым пространственным разрешением [7]. Эти методы дают возможность преодолеть ограничения дифракционного барьера и исследовать фундаментальные явления в неорганических и биологических нанобъектах, наноматериалах, метаматериалах, межфазных поверхностях и тонких пленках, помогая решать проблемы в биомедицине,

гетерогенном катализе, нанотехнологиях, преобразовании и хранении энергии, коррозии, химических и биохимических датчиках и сенсорах.

В докладе А. З. Темердашева из КубГУ рассмотрены аспекты применения современных методов хромато-масс-спектрометрии в целях проведения биоаналитических исследований, включая способы подготовки проб к анализу, а также различные подходы к детектированию аналитов [8]. Особое внимание уделено нецелевому скринингу с использованием масс-спектрометрии высокого разрешения. Показано, что вариативность концентраций аналитов нередко требует адаптации схем пробоподготовки, что автоматически влечет за собой переход от поиска «неизвестного в неизвестном» к поиску «частично известного в частично известном» с учетом физико-химических свойств аналитов. Показаны возможности и ограничения, связанные с инструментальными особенностями современного аналитического оборудования, отмечены перспективы дальнейшего развития направления как целевого, так и нецелевого скрининга.

В этот раз на конференции был широко и разнообразно представлен рентгеноспектральный анализ. В пленарном докладе А. Г. Ревенко и Г. В. Пашковой из Института земной коры СО РАН (г. Иркутск) основное внимание уделено работам в области рентгенофлуоресцентного анализа (РФА) за последнее десятилетие [9]. Рассмотрено аппаратное развитие этого метода, дан краткий анализ методических публикаций в области геологии, биологии, археологии, металлургии. Рассмотрены направления, возникшие в последние годы. Это переоценка значений фундаментальных параметров, применение РФА для изучения наноматериалов и в космохимии. На устной сессии следует отметить обзорный доклад Г. В. Пашковой и А. Г. Ревенко, посвященный РФА с полным внешним отражением (РФА-ПВО) [10]. Весьма интересная работа была доложена на устной сессии от имени коллектива авторов – С. Л. Дудик, Б. Д. Калинин, А. А. Речинский, С. К. Савельев, Ю. И. Сергеев, представляющих разные организации Санкт-Петербурга (ООО «Прецизионные технологии», ООО «Веберкомеханикс», БГТУ «ВОЕНМЕХ» им. Д. Ф. Устинова, НПО «Спектрон»), – посвященная моделированию процессов в РФА [11]. Представлен комплекс программ, позволяющий по заданному составу выбирать условия проведения анализа, рассчитывать теоретические интенсивности, теоретические коэффициенты влияния и другие, в том числе ожидаемые метрологические характеристики. Представленный пакет программ позволяет фактически полностью воспроизвести в модельном варианте всю

процедуру РФА. Тематически эту проблему развивает стендовый доклад тех же авторов, посвященный априорной оценке характеристик РФА [12]. Следует отметить устный доклад В. М. Чубарова и А. Л. Финкельштейна, Институт геохимии им. А. П. Виноградова СО РАН и Иркутский госуниверситет, посвященный определению методом РФА форм нахождения платины в катализаторах [13]. Возвращаясь к стендовой сессии, следует обратить внимание на два доклада, представленных Б. Д. Калининым из Санкт-Петербурга и посвященных многообразию информативных сигналов, возникающих в РФА, использование которых значительно расширяет возможности метода [14, 15]. На конференции были представлены многочисленные доклады по применению РФА в анализе конкретных объектов. В целом, рентгеноспектральный анализ был представлен на конференции достаточно широко, во многих докладах нашли отражения самые современные тенденции развития метода.

Интересные работы, тематически связанные с РФА, представлены в секции «Хемотроника». Это доклад В. В. Панчука, Ю. Ю. Петрова и Д. О. Кирсанова из Санкт-Петербургского госуниверситета, который посвящен определению элементов в облученном ядерном топливе на основе хемотронической обработки спектров рентгеновской флуоресценции, индуцированной собственной активностью образцов [16]. Весьма интересен доклад обзорного характера В. В. Панчука, В. Г. Семенова и Д. О. Кирсанова по применению хемотронических методов в РФА [17].

Стендовые сессии сопровождали активные дискуссии опытных ученых и молодых коллег, рождались новые коллаборации, обсуждались совместные статьи.

Научно насыщенные, ключевые секционные доклады сделали Р. Х. Хамизов, В. П. Колотов, В. Б. Барановская, Н. А. Бурмистрова и другие авторитетные ученые.

Конференцию поддержали ряд организаций, производителей и поставщиков аналитического оборудования и расходных материалов. К ним относятся компании: ООО «НКЦ „ЛАБТЕСТ“»; ООО «ВМК-Оптоэлектроника»; ООО «Альгимед»; ООО «НПО «СПЕКТРОН»; BioinnLabs; ООО «Экротхим»; ООО «Мелитэк»; ООО «Энерголаб»; ООО «Химмед»; ООО «Сибирские Аналитические Системы»; ООО «Группа Ай-Эм-Си»; АО «ТВЭЛ».

В рамках конференции прошла 47-я Годичная сессия Научного совета РАН по аналитической химии. Научные итоги 2022 года подвела Т. Ю. Русанова из Саратовского национального исследовательского



государственного университета им. Н. Г. Чернышевского. Состоялось традиционное вручение премий НСАХ РАН по аналитической химии за 2022 год. Лауреатом премии «За существенный вклад в развитие аналитической химии» стал ведущий отечественный специалист в области электрохимических сенсорных систем, заведующий кафедрой аналитической химии Казанского (Приволжского) ФУ, д. х. н., профессор Г. А. Евтюгин. Молодежные премии получили к. х. н. А. С. Почивалов из СПбГУ за работу, посвященную микроэкстракционному выделению в фармацевтическом анализе антибактериальных и нестероидных противовоспалительных лекарственных средств и к. х. н. А. А. Фурлетов из МГУ им. М. В. Ломоносова за работу «Треугольные нанопластины серебра как аналитический реагент в спектрофотометрии и спектроскопии диффузного отражения».

На сессии НСАХ были намечены планы по научно-организационной деятельности совета на будущий 2024 год, куда вошли следующие мероприятия:

- 26 февраля – 1 марта 2024 года 14th Winter Symposium on Chemometrics (WSC), Tsaghkadzor (Armenia);
- 16–18 апреля 2024 года: Москва, Крокус-Экспо: 22-я Международная выставка «Аналитика-Экспо-2024»;
- Май – июнь 2024 года, Екатеринбург: 11-я Всероссийская конференция по электрохимическим методам анализа «ЭМА-2024»;
- 1–6 октября 2024 года, Сочи «Сириус»: 20-й Менделеевский съезд, Секция «Аналитическая химия».

Подводя итоги конференции, стоит отметить, что турбулентность внешних общемировых условий не мешает российским ученым придерживаться лидирующих научных трендов и актуальных направлений: нано- и биоаналитика, междисциплинарные исследования, развитие и совершенствование инструментальных приемов применительно

к перспективным веществам и материалам. Лаборатории оснащаются передовым оборудованием, молодые ученые активно вливаются в слаженные научные коллективы, публикации по-прежнему украшают журналы высокого рейтинга.

Редакция журнала и авторы очерка благодарят организационный комитет конференции за предоставленные фотоматериалы. В статье использована информация, приведенная в опубликованных Материалах 4-й Всероссийской конференции по аналитической спектроскопии с международным участием.

Литература

Ниже приведены заголовки обсуждаемых в статье докладов, которые опубликованы в материалах 4-й Всероссийской конференции по аналитической спектроскопии с международным участием (Краснодар, 24–30 сентября 2023 года).

1. Карандашев В. К., Лейкин А. Ю. Современное состояние метода масс-спектрометрии с индуктивно связанной плазмой. С. 17.
2. Дзантиев Б. Б. Спектрометрические биоаналитические системы с использованием наночастиц. С. 15.
3. Большов М. А. Аналитика и диагностика с перестраиваемыми диодными лазерами. С. 14.
4. Камнев А. А. Возможности и особенности неразрушающего анализа бактериальных клеток и биопленок методом ИК-фурье-спектроскопии. С. 50.
5. Кубракова И. В. Атомно-спектральные методы как инструмент исследования свойств и поведения наноразмерных магнитных материалов в биологических системах. С. 18.
6. Пупышев А. А. Книжки по атомному спектральному анализу. С. 19.
7. Штыков С. Н. Наноспектроскопия и наноаналитика – возможности, ограничения и перспективы. С. 22.
8. Темердашев А. З., Азарян А. А., Гашимова Э. М. Методы масс-спектрометрии в биоаналитических исследованиях. С. 21.
9. Ревенко А. Г., Пашкова Г. В. Рентгенофлуоресцентный анализ: современное состояние и перспективы развития. С. 155.
10. Пашкова Г. В., Ревенко А. Г. Современное состояние метода рентгенофлуоресцентного анализа с полным внешним отражением. С. 149.
11. Дудик С. Л., Калинин Б. Д., Речинский А. А., Савельев С. К., Сергеев Ю. И. Моделирование процессов в рентгенофлуоресцентном анализе. С. 117.
12. Дудик С. Л., Калинин Б. Д., Речинский А. А., Савельев С. К., Сергеев Ю. И. Априорная оценка возможности рентгенофлуоресцентного анализа продукта до проведения экспериментальных работ. С. 118.
13. Чубаров В. М., Финкельштейн А. Л. Определение форм вхождения платины в катализаторах на основе оксида алюминия методом рентгенофлуоресцентного анализа. С. 175.
14. Калинин Б. Д. Аналитические сигналы в рентгенофлуоресцентном анализе. С. 128.
15. Калинин Б. Д. Флуоресценция, рассеянное излучение и форма линии – аналитические сигналы для количественного, вещественного анализов и идентификации материала в рентгенофлуоресцентном анализе. С. 129.
16. Панчук В. В., Петров Ю. Ю., Кирсанов И. О. Определение элементов в облученном ядерном топливе на основе хемометрической обработки спектров рентгеновской флуоресценции, индуцированной собственной активностью образцов. С. 147.
17. Панчук В. В., Семенов В. Г., Кирсанов Д. О. Хемометрические методы в рентгенофлуоресцентном анализе. С. 148.

Хроматография (ВЭЖХ)

ДИАМ
инструментальная лаборатория

Система LC5090, Full



- «Рабочая лошадка» для рутинного анализа
- Максимальное давление насоса – 42 МПа
- Исполнение насоса: изократический, градиентный (бинарный и четырехканальный)
- Правильность ввода пробы (СКО) – 0,5%
- Перекрестное загрязнение – 0,01%

Система EClassical 3200, Elite



- Гибкая исследовательская система с хорошим выбором детекторов
- Максимальное давление насоса – 63 МПа
- Исполнение насоса: изократический, градиентный (бинарный и четырехканальный)
- Правильность ввода пробы (СКО) – 0,2%
- Перекрестное загрязнение – 0,005%

Хромато-масс-спектрометрия

Система ВЭЖХ-МС TQ-5100



- Мощнейший аналитический исследовательский инструмент для широкого круга задач
- Масс-анализатор: тройной квадруполь
- Диапазон масс: 19–2800 а.е.м.
- Режимы работы: полное сканирование, ион-селективный, мониторинг множественных реакций (MRM), синхронный и др.
- Скорость сканирования: 20 000 а.е.м./сек

Система ГХ-МС GCMS 1000



- Универсальный чувствительный прибор для анализа и исследований методом ГХ
- Масс-анализатор: одинарный квадруполь
- Диапазон масс: 1,5–1250 а.е.м.
- Режимы работы: полное сканирование, ион-селективный, синхронный
- Скорость сканирования: 12 500 а.е.м./сек

Диаэм, Москва ■ ул. Магаданская, д. 7, к. 3 ■ тел./факс: 8 (800) 234-0508 ■ sales@dia-m.ru

ДИАМ
инструментальная лаборатория

С.-Петербург
spb@dia-m.ru

Новосибирск
nsk@dia-m.ru

Воронеж
vrn@dia-m.ru

Йошкар-Ола
nba@dia-m.ru

Красноярск
krsk@dia-m.ru

Казань
kazan@dia-m.ru

Ростов-на-Дону
rnd@dia-m.ru

Екатеринбург
ekb@dia-m.ru

Кемерово
kemerovo@dia-m.ru

Нижний Новгород
nnovgorod@dia-m.ru

мобильное приложение



www.dia-m.ru