

XI съезд Всероссийского масс-спектрометрического общества

Новые тенденции и перспективы

Р.С. Борисов¹, И.Д. Васильева², А.Т. Лебедев²

УДК 543.07:543.423

С 30 октября по 3 ноября 2023 года в Институте физической химии и электрохимии им. А. Н. Фрумкина и Институте нефтехимического синтеза им. А. В. Топчиева прошел XI съезд Всероссийского масс-спектрометрического общества и юбилейная X Всероссийская конференция с международным участием «Масс-спектрометрия и ее прикладные проблемы». Зарегистрировано более 200 делегатов и участников, представляющих около 500 членов Всероссийского масс-спектрометрического общества. В конференции принимали участие и зарубежные коллеги из Казахстана, Беларуси и Китая. Партнеры мероприятия – ООО «МС-Аналитика», ООО «Альгимед», ООО «Энерголаб», ООО «Элемент», ООО «Аксельфарм», ООО НКЦ «Лабтест», ООО «Аквахром», НПК «Промтегра» и НИЯУ МИФИ. В ходе конференции представители этих организаций экспонировали оборудование, а также выступили с пленарными и секционными докладами.

В первый день съезда состоялось общее собрание членов ВМСО. Рассмотрены организационные вопросы: одобрена работа руководящих органов ВМСО под руководством президента общества А. Т. Лебедева за 2021–2023 годы. Проведены выборы Президента и Совета ВМСО. Президентом ВМСО на второй срок вновь избран А. Т. Лебедев, а в состав Совета введены новые члены – известный специалист в области газовой хроматографии – масс-спектрометрии проф. СПбГУ И. Г. Зенкевич, активно работающая в области биоинформатики К. В. Вяткина (Сеченовский Университет), разработчик масс-спектрометрического оборудования А. Р. Губаль (ООО «Люмэкс»), специализирующийся в области плантомики сотрудник МГУ им. М. В. Ломоносова А. Н. Ставрианиди.

Прошедшие с предыдущего съезда два года стали тяжелыми для ВМСО. Наше общество потеряло своих основателей, ученых мирового уровня, лауреатов золотой медали ВМСО: создателя метода ионизации электрораспылением, лауреата медали Томсона Л. Н. Галль, главного редактора журнала «Масс-спектрометрия» В. Г. Заикина, разработчика метода фотоионизации при атмосферном давлении И. А. Ревельского. Участники съезда заслушали доклады о жизни и творчестве наших ушедших коллег и почтили их память.

¹ ИНХС им. А.В. Топчиева РАН.² МГУ им. М.В. Ломоносова.

По окончании организационной части съезда была открыта X Всероссийская конференция с международным участием «Масс-спектрометрия и ее прикладные проблемы», на которой были заслушаны 10 пленарных лекций, 70 секционных устных и 71 стендовый доклад. Работа велась в пяти секциях: органическая масс-спектрометрия; масс-спектрометрия в медицине и биологии; изотопная, неорганическая и элементная масс-спектрометрия; аналитическая масс-спектрометрия; приборостроение.

Пленарные доклады

Научную программу съезда открыл доклад академика В. П. Ананикова (ИОХ РАН), посвященный применению масс-спектрометрии и машинного обучения в нанотехнологиях и катализе. Масс-спектрометрический мониторинг реакций – одно из активно развивающихся направлений науки. Использование этого подхода приводит к генерации гигантского количества данных, обработка которых требовала бы от человека неизмеримых затрат времени. Развиваемые под руководством В. П. Ананикова методы машинного обучения и обработки данных дают возможность существенно ускорить этот процесс и обеспечить химиков-катализиков информацией о механизме реакций.

Крайне важный для отечественного приборостроения доклад был представлен А. А. Сысоевым от группы

авторов из НИЯУ МИФИ. Темой доклада стали результаты разработки отечественного масс-спектрометра с тройным квадрупольным масс-анализатором. Главным достоинством проектируемого прибора станет его серийное производство в нашей стране, что позволит частично решить острую проблему обеспечения науки и промышленности масс-спектрометрическим оборудованием.

В программу пленарной сессии следующего дня конференции были включены два научных доклада. В. Е. Франкевич, представляющий группу авторов из ФГБУ «НМИЦ АГП им. В. И. Кулакова» Минздрава РФ, рассказал о роли масс-спектрометрии в акушерстве, гинекологии и перинатологии. Масштабная программа неонатального скрининга, запущенная в России, дала очень высокие результаты по ранней диагностике заболеваний новорожденных. Однако в докладе было продемонстрировано, что масс-спектрометрия позволяет решать разнообразные проблемы и в области репродуктивного здоровья.

Во второй день на пленарной сессии высокий интерес слушателей вызвал доклад от компании «Альгимед Техно» о возможностях микробиологической идентификации на базе отечественных масс-спектрометров. Докладчик, главный специалист по продукту Фролов Илья, представил результаты сравнения МАЛДИ-ВПМС АЛМАСС Био 200 производства «Альгимед Техно» с масс-спектрометрами производства Bruker GmbH – UltrafleXtreme и Microflex. Сравнение проводилось с участием лаборатории индикации и ультраструктурного анализа микроорганизмов НИИ эпидемиологии и микробиологии им. Н. Ф. Гамалеи. Полученные результаты сравнения демонстрируют возможность серийного производства отечественного оборудования, не уступающего западным аналогам, а по некоторым параметрам и превосходящего их. Создание базы данных для идентификации микроорганизмов методом МАЛДИ-ВПМС компанией «Альгимед Техно» в сотрудничестве с российскими микробиологическими коллекциями стало ключевым моментом доклада.

Второе сообщение представила И. В. Перминова (МГУ им. М. В. Ломоносова), ведущий специалист по исследованию гуминовых систем в нашей стране. Изучение таких сложных систем на молекулярном уровне возможно только с помощью масс-спектрометрии ультравысокого разрешения. Разработанные под руководством автора доклада подходы к обработке результатов использования такого метода анализа позволяют проводить хемотипирование молекулярного пространства гуминовых систем. Интересной иллюстрацией применения хемотипирования стало сравнение состава органических соединений в воде рек Сибири.



Д. Х. Н. А. Т. Лебедев

Пленарная сессия третьего дня заседаний началась с сообщения Э. Д. Вирюса, сделанного от имени группы авторов из ФНЦ ВНИИФК и НИИОПП. Докладчик подробно рассмотрел современные тенденции в детектировании биомаркерных соединений в организме человека с помощью хромато-масс-спектрометрии. Проведенный сравнительный анализ используемых подходов в количественном определении целевых соединений позволил слушателям оценить их достоинства и недостатки.

Продолжением пленарной сессии стал доклад Б. Л. Мильмана и И. К. Журкович (НКЦ им. С. Н. Голикова), посвященный проблематике идентификации соединений. Резкое увеличение роли нецелевого анализа, развитие омиксных направлений в науке привело, на взгляд авторов, к смене парадигмы в целях и содержании химико-аналитических исследований. Особую роль в этом играют различные методы машинной обработки получаемых данных.

Программа последнего дня работы конференции продолжала тематику биоаналитической масс-спектрометрии. В докладе представителя Россельхознадзора А. В. Третьякова основное внимание было уделено применению масс-спектрометрии для контроля качества пищевой продукции. В нашей стране Россельхознадзор является одним из пионеров широкомасштабного применения хромато-масс-спектрометрии в рутинном анализе и сохраняет лидерские позиции в разработке новых стандартизованных методов анализа. Докладчик отметил,



Чл.-корр., д. х. н. РАН А. К. Буряк

что все возрастающее значение приобретают нецелевые подходы.

Использованию масс-спектрометрии в эндокринологии было посвящено сообщение В. А. Иоутси и М. В. Овчарова (НМИЦ эндокринологии). Авторы продемонстрировали превосходство масс-спектрометрических подходов над традиционными иммунохимическими методами. Вместе с тем отмечено, что круг анализаторов, для детектирования которых масс-спектрометрия еще не применялась, по-прежнему широк, и необходимо продолжать работы в этом направлении.

Важную проблему соблюдения этических правил научного сообщества затронул в своем докладе А. О. Чижов (ИОХ РАН). Побочным эффектом применения мер по стимулированию публикационной активности стал рост числа таких негативных явлений, как плагиат и фальсификация данных. В представленном докладе были рассмотрены проявления такого неэтичного поведения в статьях по масс-спектрометрии и выявлены некоторые специфические предикторы фальсификации.

Заключительный пленарный доклад А. К. Буряка (ИФХЭ РАН) был посвящен применению лазерной десорбции/ионизации для исследования химии поверхности конструкционных материалов. Использование этого подхода для изучения ракетных двигателей, поверхностей космических станций, бетона и грунтов ракетных полигонов позволяет решать широкий круг задач.

Секция «Органическая масс-спектрометрия»

В программе секции были представлены 8 устных и 12 стеновых докладов. Сообщения в этой секции обычно отличаются разнообразием тем и включают как доклады традиционного направления, связанного с детектированием и изучением строения органических соединений, так и новые области применения масс-спектрометрии.

В последние годы все большее внимание в нашей стране уделяется развитию способов синтеза соединений непосредственно в источнике ионов. Наиболее интересные доклады в этой области, представленные Д. О. Кулешовым и И. А. Громовым от имени группы авторов, были посвящены изучению возможности создания мультиапплиярной электрораспылительной системы для масштабирования микрокаельного химического синтеза. Такой подход обладает большим потенциалом в разработке эффективных способов получения органических соединений. В двух докладах авторы показали, что разработанная система обеспечивает распыление до 10 мл жидкости в минуту и обладает удобным коллектором продуктов синтеза.

При изучении механизмов органических реакций возникают сложности, связанные с реакциями, которые протекают при электрораспылении. Сравнение результатов применения масс-спектрометрии ИЭР и МАЛДИ, проведенное авторами из ИНХС РАН, показало, что МАЛДИ в некоторых случаях обеспечивает более релевантные результаты. Как уже отмечалось, масс-спектрометрический мониторинг реакций производит большие объемы данных. Для их обработки и интерпретации предложено применять различные машинные методы. Результаты разработок были представлены в виде стеновых сообщений из ИОХ РАН.

Новый подход в изучении органических реакций был описан в сообщении М. Ю. Лопатина и группы авторов из МГУ им. М. В. Ломоносова и Института катализа им. Г. К. Борескова СО РАН. Для изучения подвижности кислорода в образцах различных перспективных катализаторов паровой конверсии этанола был применен изотопный обмен кислорода. Использование масс-спектрометрического детектирования позволило определить степень замещения атомов ^{18}O на ^{16}O . Полученные результаты позволили выявить наиболее эффективные катализитические системы.

Несмотря на активное применение «мягких» масс-спектрометрических методов, ионизация электронами в сочетании с газовой хроматографией остается популярной для изучения органических соединений. В докладе И. Г. Зенкевича и Е. В. Елисеенкова (СПбГУ) продемонстрирована возможность повышения вероятности правильной идентификации соединений за

rosmould & 3D-TECH

rosmould.ru

Международная выставка
пресс-форм и штампов,
оборудования
и технологий для
производства изделий

18–20 июня 2024

МВЦ «Крокус Экспо», Москва

3D-TECH

Специализированная
экспозиция аддитивных
технологий и 3D-печати



Промокод для получения
бесплатного билета

RM24-SUHRJ

счет использования аддитивных схем расчета индексов удерживания.

Секция «Масс-спектрометрия в медицине и биологии»

В ходе секционных сессий была представлена серия из 23 устных и 20 постерных докладов. В этом году секция стала наиболее популярной среди других научных направлений конференции, что отражает современные тенденции в развитии масс-спектрометрии.

Наибольшее количество доложенных работ было посвящено изучению метаболома живых организмов. Цикл работ в этой области был представлен сотрудниками Сколковского института науки и технологий А. А. Вишневской, А. И. Левашовой и С. В. Осипенко, которые использовали изотопный обмен и изотопные метки для изучения метаболизма человека и растений. Особый интерес вызвал доклад последнего из перечисленных авторов, посвященный изучению метаболических превращений лекарственных средств в микросомах печени. Проведение процесса в присутствии кислорода ^{18}O позволило идентифицировать ранее не описанные метabolиты различных препаратов.

Интересные сообщения о детектировании маркеров сепсиса были представлены от имени группы авторов А. К. Паутовой и Н. А. Бурнаковой. Работы представляют собой развитие ранее сделанных исследований: за счет включения ВЭЖХ-МС/МС в круг используемых методов анализа удалось увеличить число определяемых маркеров, а также применить ГХ-МС для обнаружения маркеров в спинномозговой жидкости.

Значительная часть сообщений на секции была связана с протеомными исследованиями. А. Т. Лебедев (Университет МГУ-ППИ) рассказал о результатах применения комбинации методов активации ионов EThcD для *de novo* секвенирования природных пептидов амфибий методом сверху-вниз. Показано, что использование такого подхода дает возможность определить полный сиквенс пептидов без привлечения других методов МС/МС. В еще одном докладе этой научной группы, представленном И. Д. Васильевой, аналогичный метод анализа дал возможность провести межпопуляционные сравнения пептидов ранидных лягушек.

Преимущества ультракороткой протеомики, позволяющие проводить анализ в режиме минутных градиентов разделения смесей протеолитических пептидов, были обсуждены в докладе М. В. Горшкова с соавторами из ИЭПХФ РАН и МГУ. Развиваемый авторами способ анализа позволяет не только проводить экспрессный качественный анализ смесей пептидов, но и определять их количественно. Примером такого подхода стал количественный анализ для изучения взаимодействия онкопрепаратов с раковыми клеточными линиями.

Секция «Применение масс-спектрометрии для аналитических целей (экология, допинг-контроль, контроль продукции и процессов и т. д.)»

В программу секции вошли 16 устных и 22 постерных доклада. Представленные сообщения демонстрируют разнообразие применяемых в аналитических целях масс-спектрометрических способов анализа. Однако наибольшее число докладов было связано с использованием методов машинного обучения. Развитие этих подходов находится на острие современной науки, поэтому активная работа в этом направлении в нашей стране выглядит многообещающе.

Интересные результаты такого рода исследования были представлены в работе А. Ю. Шолоховой и Д. Д. Матюшина (ИФХЭ РАН). В этом случае машинное обучение было привлечено для интерпретации результатов изучения структуры продуктов трансформации несимметричного диметилгидразина. Эта проблематика давно привлекает внимание химиков-аналитиков в нашей стране, поскольку случаи разлива этого токсичного ракетного топлива происходят, к сожалению, регулярно. Высокая реакционная способность гептила при его попадании в окружающую среду или долговременном хранении приводит к формированию большого числа различных соединений, идентификация которых представляет собой достаточно сложную задачу. Применение алгоритмов машинного обучения позволило существенно расширить круг соединений с установленным строением.

Работы по использованию машинного обучения для идентификации малых молекул, в частности фосфорсодержащих отравляющих веществ, были представлены сотрудниками Сколковского института науки и технологий. В сообщении С. В. Осипенко с соавторами, были представлены результаты предсказания времен удерживания для соединений в условиях жидкостной хроматографии. Авторы отмечают, что погрешность в таком предсказании сопоставима с внутрилабораторной прецизионностью измерений времен удерживания.

Использование масс-спектрометрических баз данных и индексов удерживания анализов – одна из основ идентификации малых молекул. Однако качество представленных в библиотеках данных оценить достаточно сложно, ответственность за внесение тех или иных значений лежит исключительно на компаниях, выпускающих такие продукты. В работах А. С. Самохина и М. Д. Хрисанфова, представляющих МГУ им. М. В. Ломоносова и ИФХЭ РАН, продемонстрирована возможность автоматического выявления масс-спектров низкого качества и ошибочных индексов удерживания.

Семейство времяпролётных масс-спектрометров «Люмас»



«Люмас ИТР-301»

Базовая модель времяпролётного
масс-спектрометра «Люмас ИТР-301»
сертификат об утверждении типа средств
измерений № 88916-23 от 24.04.2023

- Элементный анализ
- Изотопный анализ технологических
объектов
- Диапазон масс от 1 до 2000 а.е.м.
- Ионизация в тлеющем разряде
- Малый расход разрядного газа
- Высокая чувствительность

Специализированная система Lumas SOLID
предназначена для прямого анализа
твёрдофазных образцов.

- Производство сверхчистых материалов
- Материаловедение
- Полупроводниковая промышленность
- Геология
- Атомная промышленность
- Аэрокосмическая промышленность

Специализированная система Lumas GAS
предназначена для прямого анализа газов.

- Производство инертных газов
- Биомедицинские исследования
- Полупроводниковая промышленность
- Атомная промышленность
- Аэрокосмическая промышленность
- Мониторинг технологических процессов



Темой нескольких устных и постерных докладов стало применение масс-спектрометрии для детектирования различных органических соединений в воде. Так в сообщении М. Ю. Вождаевой и группы авторов из ГУП РБ «Уфаводоканал» и УГНТУ, продемонстрировано, что применение хромато-масс-спектрометрии позволяет обнаруживать и количественно определять в питьевой воде большой набор побочных продуктов хлорирования. Результаты экспериментов с широко применяемыми в быту соединениями, представленные в докладах Е. А. Детенчук и А. С. Сурмилло (МГУ им. М. В. Ломоносова) в соавторстве с коллегами из САФУ им. М. В. Ломоносова, показали, что в условиях очистки воды галогенированием могут образовываться потенциально опасные соединения.

Еще один важный источник загрязнения водоемов – фармацевтические препараты и их метаболиты, попадающие туда со сточными водами. В стендовом сообщении С. А. Сыпалова (САФУ им. М. В. Ломоносова) показано, что использование ВЭЖХ-ИСП-МС позволяет детектировать амброксол и бромгексин в воде и почвенных отложениях с низкими пределами обнаружения.

Секция «Изотопная, неорганическая и элементная масс-спектрометрия»

На заседаниях секции были представлены восемь устных и три постерных доклада. Интересные результаты применения масс-спектрометрии с импульсным тлеющим разрядом были описаны в серии устных и постерных сообщений сотрудников ООО «Люмэкс», СПбГУ и ИАП РАН. Показано, что вновь разработанный масс-спектрометр «ЛЮМАС ИТР-301» позволяет решать широкий круг задач твердотельного и газового анализа: элементный анализ сплавов и порошковых геологических проб, изотопный анализ, определение гелия вдейтерии, анализ ЛОС и неорганических газов в воздухе.

Н. Р. Галль от имени группы авторов из ИАП РАН и ФТИ им. А. Ф. Иоффе представил многообещающие результаты применения метода ЭРИАД, иначе называемого ионизацией электрораспылением, для изотопных измерений. Создателям метода удалось показать, что изменение напряжения между соплом и скиммером позволяет перейти от молекулярного анализа к анализу элементному. Таким образом, один и тот же источник ионов может быть использован для определения молекулярной массы анализа и особенностей его строения за счет дополнительной активации ионов, а в режиме определения элементного состава возможно установление количества входящих в молекулу атомов гетероэлементов. Такой подход является более дешевым вариантом масс-спектрометрии высокого разрешения.

Секция «Приборостроение»

В программе секции было заявлено 15 устных и 14 постерных докладов. В этом году доклады приборостроителей вызвали особенный интерес, поскольку многие из разработок получили шанс практического воплощения в серийных приборах. В частности, сообщения Д. Д. Одинцова и С. С. Потешина, представляющих НИЯУ МИФИ и научно-производственную биотехнологическую компанию «Альгимед Техно», были посвящены многооборотным времяпролетным масс-анализаторам на основе секторных электростатических полей, которые станут основой для создаваемого ими перспективного прибора. В целом, многоотражательные времяпролетные масс-анализаторы обеспечивают сравнительно высокое разрешение и наибольшую скорость регистрации масс-спектров среди всех существующих типов. Недостатком таких устройств является высокая степень потерь ионов и сложности с увеличением количества ионов в пакете, более высокий уровень шумов. Использование многооборотных времяпролетных масс-анализаторов может частично решить эту проблему.

Еще одним перспективным типом масс-анализаторов являются магнитные статические устройства. Именно такие масс-анализаторы стояли на первых масс-спектрометрах, но сегодня они практически не используются. Тем не менее, в докладе Н. Р. Галль и коллег (ИАП РАН и ФТИ им. А. Ф. Иоффе РАН) показано, что возможности магнитных анализаторов еще далеко не исчерпаны. Проведение дальнейших исследований может вернуть магнитные масс-анализаторы в современные приборы.

Конкурсы молодых ученых

В ходе конференции была вручена премия им. А. А. Макарова – создателя революционного масс-анализатора Orbitrap. Лауреатами премии могут стать молодые ученые, работающие в области научного приборостроения. В этом году награду получил сотрудник ФТИ им. А. Ф. Иоффе РАН И. А. Громов за разработку масс-спектрометра для анализа водородно-гелиевых смесей. Создание таких приборов необходимо для развития атомной промышленности.

Среди докладов, представленных на конференции молодыми учеными, было проведено два конкурса. В первом из них, который традиционно проводится самим Обществом, могут участвовать как устные, так и постерные доклады. Главным призом, который в этом году получил Г. В. Лапшов за свою работу в области ионной подвижности, является грант на поездку для участия в любой конференции по выбору лауреата. Вторые места в конкурсе заняли С. В. Осипенко



Молодые ученые – участники конференции

и И. С. Воронов, а третий – Д. О. Кулешов, Е. М. Казакова и А. С. Сурмилло.

Впервые на конференции была вручена еще одна премия молодым ученым от Фонда развития химической физики. Лауреатами этой премии могли стать студенты и аспиранты, представившие устные доклады. Первое место в конкурсе заняла Д. Д. Емекеева, чья работа связана с применением масс-спектрометрии для изучения патогенеза болезни Альцгеймера.

Поощрительные призы получили А. С. Сурмилло, М. Д. Хрисафанов и С. В. Осипенко.

По материалам конференции составлен сборник тезисов докладов.

Фото: Ольга Макарова / ИФХЭ РАН

Авторы / Authors

Борисов Роман Сергеевич, к. х. н., ведущий научный сотрудник Института нефтехимического синтеза им. А. В. Топчиеva РАН, Москва. Область научных интересов: масс-спектрометрия органических соединений.

Borisov Roman Sergeevich, Ph.D., leading researcher at the Institute of Petrochemical Synthesis named after A. V. Topchiev RAS, Moscow. Research interests: mass spectrometry of organic compounds. borisov@ips.ac.ru.

ORCID 0000-0002-8203-7055

Васильева Ирина Дмитриевна, к. х. н., младший научный сотрудник МГУ имени М. В. Ломоносова, Москва. Область научных интересов: масс-спектрометрия белков и пептидов. Vasilyeva Irina Dmitrievna, Ph.D., junior researcher at Moscow State University named after M. V. Lomonosov, Moscow. Research interests: mass spectrometry of proteins and peptides.

ORCID 0000-0001-5819-0941

Лебедев Альберт Тарасович, д. х. н., профессор МГУ им. М. В. Ломоносова.

Lebedev Albert Tarasovich, Doctor of Chemical Sciences, Professor of Moscow State University named after M. V. Lomonosov. Research interests: mass spectrometry of proteins and peptides.

ORCID 0000-0002-6459-9484

АЛМАСС Био

Настольный МАЛДИ-ВПМС

Предназначен для быстрой и точной видовой идентификации микроорганизмов

В БАЗЕ + 2700 ВИДОВ

Бактерии, включая микробактерии

Грибы, включая плесневые и дрожжи

Пополнение базы ведется в коллaborации с научными и клиническими центрами

НАБОР РЕАГЕНТОВ ДЛЯ КАЛИБРОВКИ МАСС-СПЕКТРОМЕТРА «АЛМАСС БИО»



УНИВЕРСАЛЬНО

Подходит для исследований в медицине, ветеринарии и сфере пищевой безопасности.

НАДЕЖНО

Набор рибосомальных белков уникален для каждого микроорганизма.

ТОЧНО

Точность идентификации более 99%

Выпускается в 2-х модификациях:

АЛМАСС Био 60 – ориентирован на рутинное применение в лабораториях.

АЛМАСС Био 200 – подходит для крупных научных организаций и лабораторий.

Реагенты «АЛМАСС Био Стандарт», «АЛМАСС Био Растворитель», «АЛМАСС Био Матрица» могут применяться по отдельности.

Для калибровки МАЛДИ-ВПМС систем других производителей может потребоваться проведение ручной адаптации калибровочного масс-листа. Система сочетает в себе лучшие разработки в области МАЛДИ масс-спектрометрической идентификации микроорганизмов.



Характеристики «АЛМАСС Био»

