

# V ВСЕРОССИЙСКАЯ КОНФЕРЕНЦИЯ "МАСС-СПЕКТРОМЕТРИЯ И ЕЕ ПРИКЛАДНЫЕ ПРОБЛЕМЫ". ИТОГИ VI СЪЕЗДА ВМСО

А.Лебедев, д.х.н.,

Химический факультет МГУ им. М.В.Ломоносова

lebedev@org.chem.msu.ru

С 8 по 11 октября 2013 года прошел очередной VI съезд Всероссийского масс-спектрометрического общества (ВМСО), в рамках которого также была проведена V Всероссийская конференция с международным участием "Масс-спектрометрия и ее прикладные проблемы". В этом году съезд рубежный – ровно 10 лет назад на Учредительном съезде была создана Общероссийская общественная организация "Всероссийское масс-спектрометрическое общество". В новую Москву (город Московский) съехались 130 делегатов и участников, представляющих около 500 членов Всероссийского масс-спектрометрического общества (среди членов общества также ученые Украины, Казахстана, Узбекистана, Великобритании, Швеции, США, Израиля).

Генеральным спонсором проведения съезда и конференции выступило ЗАО "МС-Аналитика". В мероприятии активное участие приняли также такие российские и зарубежные компании, как Bruker, ЗАО "ЛЕКО Центр-М", компания "Элемент", московское представительство фирмы Waters, ООО "Шелтек", компании Intertech Corporation, "Неолаб", ABSciex. В ходе конференции представители этих организаций экспонировали свои стенды, а также выступили с устными докладами.

В первый день съезда состоялось общее собрание членов общества. Съезд рассмотрел организационные вопросы. Одобрена работа руководящих органов общества под руководством президента общества А.Т.Лебедева, принят отчет контрольно-ревизионной комиссии о финансовой деятельности общества в 2011-2013 годах. В своем выступлении А.Т.Лебедев отметил успехи российских масс-спектрометристов в мире. В частности, в 2012 году высшая награда Международного масс-спектрометрического общества – медаль Том-

сона – была присуждена Александру Алексеевичу Макарову, а новый времяпролетный прибор LECO Pegasus HRT, созданный по идеям и под руководством Анатолия Николаевича Веренчикова и Вячеслава Борисовича Артаева, получил золотую медаль на крупнейшем форуме производителей аналитического оборудования в мире – Pittcon 2012.

Делегаты съезда обсудили работу журнала "Масс-спектрометрия", издаваемого ВМСО; отмечено, что введение в редакционную коллегию авторитетных российских и зарубежных ученых позволило вывести журнал на новый уровень и претендовать на внесение его в списки международных систем цитирования, включая Web of Science и PubMed. Большинство статей журнала переводится на английский язык и публикуется в двух дополнительных номерах журнала Journal of Analytical Chemistry ("Журнал аналитической химии") в издательстве МАИК "Наука/Интерperiодика". Этот факт также способствует укреплению научного авторитета журнала и привлечению новых авторов.

В ходе дискуссии о дальнейших перспективах работы Общества выдвинуто предложение об активизации усилий в области привлечения к его работе молодых специалистов. Одним из способов реализации этого предложения стало введение новой ежегодной премии для молодых ученых – за лучшую публикацию в журнале "Масс-спектрометрия".

Проведены изменения в руководстве ВМСО, составе Совета и Президиума общества. Президентом избран сотрудник ИНХС РАН кандидат химических наук Борисов Роман Сергеевич.

В ходе съезда прошло традиционное вручение медали "За заслуги в развитии российской масс-спектрометрии", присуждаемой решением Общества. В этом году лауреатом этой награды стал Роман Александрович Зубарев (Каролинский университет, Швеция) в знак признания его достижений в области масс-спектрометрии биомолекул, создания масс-спектрометрического оборудования, разработки новых методов активации ионов.

По окончании организационной части было объявлено об открытии V Всероссийской конференции с международным участием "Масс-спектрометрия и ее прикладные проблемы", на которой заслушали семь пленарных лекций, 54 секционных устных и 60 стеновых докладов. Работа велась в семи секциях: приборостроение, применение масс-спектрометрии для аналитических целей, масс-спектрометрия в медицине и биологии, неорганическая и элементная масс-спектрометрия, изотопная масс-спектрометрия, органическая масс-спектрометрия.

Остановимся подробнее на сделанных докладах.

**Пленарная сессия.** Цикл пленарных лекций включал в себя доклады, посвященные истории и перспективам развития и применения масс-спектрометрии, а также сообщения о новейших достижениях мировых лидеров в области коммерческого приборостроения.

Большой интерес вызвал доклад Л.Н.Галль (ИАП РАН) о малоизвестных страницах истории создания и развития масс-спектрометрии в СССР. В нем дана оценка вклада, внесенного отечественными специалистами в общий прогресс масс-спектрометрии в мире. Не меньшее внимание уделили участники конференции докладу лауреата медали ВМСО-2013 Р.А.Зубарева о некоторых аспектах научного пути автора и перспективах дальнейшего развития его идей в области протеомики.

С докладом выступил М.И.Токарев, генеральный директор многолетнего партнера Общества ЗАО "МС-Аналитика", представляющего на рос-

сийском рынке масс-спектрометрическую продукцию Thermo Fischer Scientific. Он рассказал об основных характеристиках новой приборной линейки этой корпорации, уделив основное внимание новому уникальному прибору Fusion с масс-анализаторами трех типов. Сотрудница компании LECO Г.М.Шайлдуллина рассказала о возможностях современных времяпролетных масс-спектрометров высокого разрешения для анализа компонентов запаха. Сообщение представителей корпорации Bruker касалось недавно выведенной на рынок ВЭЖХ/МС-системы на основе тройного квадруполя EVOQ, а также других хромато-масс-спектрометрических систем. Для потенциальных пользователей этого прибора компания также организовала в ходе конференции мастер-класс. Компания "Элемент" представила системы автоматизированной пробоподготовки с использованием твердофазной экстракции Spark, ранее не поставлявшиеся в Россию. Новейшие масс-спектрометры на основе времяпролетных масс-анализаторов AxION 2 и AxION iQT и масс-спектрометры с индуктивно-связанной плазмой NexION производства PerkinElmer послужили темой докладов сотрудников "Шелтек". Представитель компании Waters сообщил о новейших разработках этой компании для масс-спектрометрического анализа. Сотрудник компании Intertech Corp рассказал о возможностях вновь разработанных масс-спектрометров с индуктивно-связанной плазмой Thermo Fischer Scientific, а представитель компании ABSciex описал достижения в области масс-спектрометрии ионной подвижности.

**Секция "Органическая масс-спектрометрия".** Основная часть докладов сессии традиционно связана с использованием масс-спектрометрии для изучения строения органических веществ. Существенное обновление парка масс-спектрометрического оборудования в России позволило использовать для решения таких задач все современные методы ионизации и разделения ионов. Вместе с тем значительная часть сообщений, сделанных в рамках секции, по-прежнему посвящены использованию для структурно-аналитических целей масс-спектрометрии с ионизацией электронами. Этот факт подчеркивает, что, несмотря на все более широкое применение новых масс-спектрометрических подходов, масс-спектрометрия с ионизацией электронами сохраняет свою актуальность.

Программа секции включала пять устных и 14 стеновых докладов. Интерес участников кон-

ференции вызвало сообщение Ю.И.Морозика (Военная академия войск РХБЗ и ИВ), посвященное изучению возможностей предсказания масс-спектров ионизации электронами путем наложения масс-спектров структурно родственных соединений. Такой подход закладывает основу для решения одной из основных проблем масс-спектрометрии с ионизацией электронами: теоретическое предсказание масс-спектра соединения. Необходимо также выделить доклады казанских ученых (ИОФХ КазНЦ РАН), чьи работы традиционно привлекают внимание специалистов. В частности, Д.В.Раков представил результаты сравнительного анализа данных, получаемых для одинаковых соединений с помощью масс-спектрометрии с различными методами ионизации. А в работе Р.З.Мусина описан интересный стереоизомерный эффект, наблюдаемый в масс-спектрах ионизации электронами дииминофосфонитов. Перспективность применения дериватизации анализов с целью повышения их эффективности ионизации в условиях масс-спектрометрии МАЛДИ нашла свое отражение в докладе Р.С.Борисова (ИНХС РАН), посвященном применению этого подхода для анализа неполярных соединений.

Среди многообразия стеновых докладов этой секции трудно выбрать лучшие. Тем не менее, хотелось бы отметить работы, связанные с многолетним изучением процессов фрагментации углеводородов нефти в условиях ионизации электронами, выполненные казахстанскими учеными (С.Ж.Жумагалиев и др., Атырауский институт нефти и газа МОН РК). Очень интересны результаты серии работ ученых ИИХ СО РАН (Л.В.Клыба и др.), применяющих ионизацию электронами и химическую ионизацию для установления строения синтетических органических

и комплексных соединений, а также работы представителей ИОХ РАН (А.О.Чижов, В.И.Каденцев, Д.Б.Еремин и др.), связанные с использованием масс-спектрометрии высокого разрешения в сочетании с активацией ионов соударением для установления строения сложных продуктов модификаций природных соединений.

**Секция "Применение масс-спектрометрии для аналитических целей".** Нестандартные идеи и плодотворные подходы к решению современных аналитических проблем – отличительная черта этой секции. Хотелось бы отметить, что практически ни одна область аналитической масс-спектрометрии не осталась без внимания секции. Большинство докладов было посвящено методическим и методологическим аспектам применения масс-спектрометрии в аналитической химии. На секции было представлено 13 устных и 13 стеновых докладов. Первый день работы секции открывался докладом Б.Л.Мильмана (НИИ экспериментальной медицины СЗО РАМН), который был посвящен масс-спектрометрическому определению микроцистинов – токсичных циклопептидов, которые выделяются цианобактериями (сине-зелеными водорослями) и попадают в водоемы при их цветении. В докладе представлена методика количественного определения этих суперэкотоксиантов в воде и биомассе с использованием высокоэффективной жидкостной хроматографии – масс-спектрометрии в сочетании с ионизацией электрораспылением и МАЛДИ. Метод ВЭЖХ/МС также успешно представлен А.Н.Ставрианиди (Химфак МГУ) – в его докладе был изложен подход группового определения физиологически активных компонентов растительного сырья.

Приятно отметить, что многообещающие исследования с использованием DART продол-



жаются группами М.В.Овчарова и Г.А.Калабина, представляющими ЦКП РУДН. Первая группа использует этот метод в сочетании с тонкослойной хроматографией (ТСХ), переводя аналиты в ионизированное состояние непосредственно с пластины для ТСХ. Таким образом, метод DART открывает "новые аналитические горизонты" для ТСХ, позволяя ей обнаружить вещества, не идентифицированные химическими и оптическими методами, а также открывая возможность селективного определения соединений, имеющих близкую хроматографическую подвижность. На примере фармацевтических препаратов М.В.Овчаров показал аналитические возможности такого сочетания. Г.А.Калабин подвел итог многолетних исследований применения метода DART в сотрудничестве с Е.С.Чернецовой: в результате этих исследований разработана методология DART для быстрого определения фармацевтических препаратов.

Использованию другого десорбционного метода ионизации - МАЛДИ - для анализа фармацевтических препаратов с пластин ТСХ посвящены работы Д.И.Жиляева и С.Эспарзы (ИНХС РАН). Сравнительный анализ возможностей метода DART и МАЛДИ в области установления жирнокислотного состава триглицеридов масел стал темой сообщения С.В.Горяинова (РУДН). С особым интересом участники конференции слушали доклад О.В.Зарубиной (Институт геохимии СО РАН), посвященный использованию дополнительных ячеек для устранения интерференций при определении микроэлементов в природных водах методом масс-спектрометрии с индуктивно-связанной плазмой.

Неизменно поражают своей оригинальностью доклады А.М.Зякуна (ИБФМ РАН). В этом году

Анатолий Маркович не изменил себе и изложил подход, позволяющий выявить комплексообразующую характеристику молекул, участвующих в образовании как моно-, так и гетеромолекулярных кластеров в зависимости от концентрации веществ в среде, а также с учетом структурных особенностей с применением масс-спектрометрии.

Около половины устных докладов на секции было посвящено газовой хроматографии/масс-спектрометрии. На устной секции представлено шесть докладов с использованием этого вечно актуального для аналитической масс-спектрометрии метода. Ярким подтверждением вышесказанного стал доклад О.А.Малошицкой (МГУПП), посвященный применению ГХ/МС в исследовании органических ксенобиотиков в продукции растительного происхождения. Новым трендом, как сейчас модно говорить, стало сочетание газовой хроматографии с времязпролетной масс-спектрометрией высокого разрешения, как, например, в работах сотрудников Химфака МГУ. В частности, Д.М.Мазур проиллюстрировал преимущества этого метода при анализе образцов снега, а О.В.Полякова продемонстрировала, как изящность и простота выполнения процедуры подготовки образцов к анализу в сочетании с газовой хроматографией/масс-спектрометрией высокого разрешения приводят к резкому сокращению продолжительности анализа. С ней заочно соревнуется сотрудник другой лаборатории Химфака МГУ - А.И.Ревельский. Он представил оригинальный способ селективного извлечения фенилкарбоновых кислот из сыворотки крови с применением сорбционного концентрирования на сверхсшитом полистироле с последующим ГХ/МС определением. Здесь уместно отметить, как ударно выступила масс-спектрометрическая школа лауреата золотой медали ВМСО 2011 года



И.А.Ревельского, представив на аналитической секции три устных доклада и включив в область своих интересов такие ключевые аспекты аналитической масс-спектрометрии, как пробоподготовку, получение и интерпретацию масс-спектральных данных. Яркий представитель этой школы, А.С.Самохин, рассказал о критериях выбора программного обеспечения при проведении поиска по базам данных масс-спектров электронной ионизации. В свою очередь руководитель школы, И.А.Ревельский, сделал доклад о современном состоянии метода химической ионизации и разработанном им методе фотохимической ионизации при атмосферном давлении в аналитической масс-спектрометрии. Метод ионизации, предложенный И.А. Ревельским, оказался настолько удачным, что позволяет детектировать несколько фемтограмм аналита с использованием сорокалетних квадрупольных масс-спектрометров. Приятно отметить, что старшее поколение масс-спектрометристов продолжает активно работать и предлагать новые и интересные аналитические подходы. Здесь уместно выделить Бродского Е.С. (ИПЭЭ РАН), который предложил интересный и эффективный подход к идентификации следовых количеств неизвестных хлорогранических веществ методом хромато-масс-спектрометрии высокого разрешения.

**Секция "Масс-спектрометрия в медицине и биологии".** В ходе работы секции авторами было сделано восемь устных докладов и представлено девять постеров. Важную часть докладов составили работы в одной из наиболее бурно развивающихся областей применения масс-спектрометрии – протеомике. Большая доля этих сообщений представила собой работы молодых представителей научной группы М.В.Горшкова (ИНЭП ХФ РАН), посвященные различным аспектам биоинформатики (Л.И.Левицкий и М.В.Иванов), а также использованию химической деградации пептидов для увеличения вероятности их масс-спектрометрической идентификации (А.А.Лобас). Важные результаты, показывающие путь к существенному увеличению достоверности идентификации пептидов путем предсказания их хроматографических параметров на базе специально разработанной модели, доложены непосредственно М.В.Горшковым.

Большое внимание участников конференции привлек доклад Т.Ю.Самгиной (Химфак МГУ), в котором описаны результаты секвени-

рования дисульфидсодержащих нетриптических пептидов с помощью различных методов активации ионов, показаны различия в полученной таким образом информации. Потенциал применения масс-спектрометрии для ранней диагностики и предсказания вероятности возникновения редкого заболевания – бокового амиотрофического склероза – раскрыт в докладе К.А.Артеменко (университет города Уппсала, Швеция). Крайне интересные аспекты дейтероводородного обмена в полипептидах и свободных аминокислотах показаны в работах А.К.Сурина и М.Ю.Сувориной (Институт белка РАН). Достаточно неожиданные и важные результаты достигнуты А.Ю.Елизаровым и соавторами (ЗАО "Научные приборы") при использовании масс-спектрометрии для мониторинга обезболивания в ходе хирургических операций: показано, что применение этого подхода позволяет оценить болевые ощущения, испытываемые пациентом.

Другие примеры использования масс-спектрометрии в клинической практике показаны в постерах, представленных А.Д.Абаймовым, Научный центр неврологии РАМН (использование масс-спектрометрии при лекарственном мониторинге), и А.Ю.Елизаровым (применение масс-спектрометра для поверки датчиков наркозного аппарата). В ходе постерной сессии показаны и другие интересные работы, посвященные, в частности, обнаружению глифосата и его метаболитов (К.С.Лауринаевичюс и др., ИБФМ РАН), определению маркеров нарушения липидного обмена (М.Н.Шаблинский и др., Биофак МГУ) и т.д.

**Секция "Приборостроение".** На секции представлено 15 устных и 16 стеновых докладов. В секции участвовали представители университетов, институтов РАН, масс-спектрометрических компаний. Наибольшее число докладов было представлено организациями Санкт-Петербурга (ИАП РАН, ФТИ им.А.Ф.Иоффе, СПбГПУ, ООО "Люмасс"), Рязани (РГУ им.С.А.Есенина, РГРТУ, ООО НПФ "Шибболет"), Москвы и Московской области (НИИУ МИФИ, Филиал ИНЭПХФ РАН им.В.Л.Тальзере, ООО "Линантек"). Особого внимания заслуживают работы по развитию принципа транспортировки ионов "архимедовыми" электрическими полями, представленные в устном докладе А.С.Бердникова. Представляет интерес теоретический подход к учету нелинейностей масс-спектра в анализаторах с Фурье-преобразованием, изложенный в докладе О.Ю.Цыбина. Весьма перспективна работа по

исследованию характеристик спектрометра ионной подвижности/времяпролетного масс-спектрометра с аксиально-симметричным анализатором, изложенная в устном докладе Д.М.Чернышева. Крайне интересен оригинальный метод формирования сверхзвуковой газовой струи, направляемой через источник электронной ионизации и радиочастотный квадруполь со смещением оси газовой струи относительно оси квадруполя, представленный в устном докладе В.В.Разникова. В докладе А.А.Сысоева подробно рассмотрен недавно созданный гибридный прибор на основе дрейфового спектрометра ионной подвижности и времяпролетного масс-спектрометра с секторным электростатическим полем. Результаты испытаний новой системы ввода для прецизионного измерения изотопных отношений в выдыхаемом воздухе представлены Е.С.Шешеней. Интересный подход к формированию ионного пакета в дрейфовом спектрометре ионной подвижности изложен в стендовом докладе, представленном Н.Н.Бисяриным. В сообщении А.С.Полякова изложены экспериментальные исследования ВЧ-квадруполя с параметрическим резонансным возбуждением колебаний ионов. Оригинальная система обработки

высокоскоростных потоков данных представлена в стендовом докладе А.В.Карпова.

**Секция "Неорганическая и элементная масс-спектрометрия".** Программа секции включила в себя шесть устных и пять стеновых докладов. Заметную часть докладов составили работы, в которых для установления состава анализов использована масс-спектрометрия тлеющего разряда. Например, в работе Г.Г.Сихарулидзе (ИПТМ РАН) этот метод применен для анализа геологических проб. Необходимо отметить, что практически не было представлено работ, посвященных применению другого хорошо зарекомендовавшего себя метода – масс-спектрометрии с индуктивно-связанной плазмой. Тем интереснее оказался постерный доклад С.С.Потешина (НИЯУ МИФИ), в котором этот масс-спектрометрический метод сочетался с набирающей популярность лазерной аблацией. Интересные результаты многолетней систематической работы в области применения масс-спектрометрии МАЛДИ/ПАЛДИ для изучения металлокомплексов кластерных ионов на различных поверхностях были представлены в докладах А.К.Буряка и И.С.Гончаровой (ИФХЭ РАН).

**Секция "Изотопная масс-спектрометрия".** Секция состояла из четырех устных и стенового

доклада. Необходимо отметить, что по сравнению с предыдущими конференциями, на прошедшей конференции 2013 года заметно снизилось число сообщений, в которых представлены результаты использования вариаций распространенностей стабильных изотопов, несмотря на то что в стране достаточно высококлассных масс-спектральных комплексов. Участники сессии предложили организовать работу по привлечению заинтересованных специалистов, которые используют методы изотопной масс-спектрометрии в экологических и биогеохимических исследованиях, путем проведения специализированных семинаров и школ, увеличения числа публикаций, посвященных этим вопросам, в журнале "Масс-спектрометрия".

Большой интерес вызвал доклад Н.Н.Аруева (ФТИ РАН), посвященный анализу изотопов гелия в конструкционных материалах токамака Глобус-М. На основе измерений количеств  $^3\text{He}$  и  $^4\text{He}$  обнаружено, что значительная часть  $^3\text{He}$ , содержащегося в материалах конструкций, является продуктами ядерного синтеза в дейтериевой плазме при температурах существенно ниже ожидаемых рабочих значений. Отмечено, что масс-спектрометр, используемый для измерений продукции  $^3\text{He}$ , является уникальным и крайне востребованным специалистами-ядерщиками прибором.

В докладах В.С.Файнберга (ЗАО "МС-Аналитика") и А.Ю.Колеснова (МГУПП) продемонстрированы возможности использования вариаций распространенностей стабильных изотопов углерода, азота, кислорода и водорода на уровне их природных концентраций при решении задач по выявлению генетических связей между анализируемыми образцами и их возможными природными источниками. Полученные авторами данные имеют практическое значение: позволяют установить принадлежность пищевых продуктов к определенным регионам выращивания и выявить фальсификаты, определить географические регионы и временные периоды проживания живых организмов, включая человека. Показано, что в последнем случае информация на основе изотопных данных может быть крайне важным показателем, а в ряде случаев – единственным источником информации о проживании человека. Так, в палеонтологических исследованиях изотопные данные являются основой для характеристики условий обитания живых существ. В представленном докладе В.С.Файнберга приведен пример, демонстрирующий успешное применение изотопной масс-спектрометрии в криминалистических расследованиях.

Доклад Л.Н.Галль (ИАП РАН) посвящен проблеме разработки изотопных масс-спектрометров, предназначенных для измерения крайне мало распространенных изотопов на уровне высоко распространенных изотопов соответствующих элементов. Эту задачу можно решить, используя статические масс-спектрометры с магнитным масс-анализатором, высоким разрешением и высокой стабильностью получаемого сигнала.

**Конкурс молодых ученых.** На традиционный конкурс молодых ученых было представлено семь устных докладов. Высокий уровень докладов, участвующих в конкурсе, существенно затруднил выбор конкурсной комиссии. Результатом жарких дебатов стало решение о присуждении одного диплома первой степени и двух дипломов второй степени.

Первую премию получил М.В.Овчаров за доклад "Анализ смеси фармацевтических субстанций с помощью масс-спектрометрии DART в сочетании с планарной хроматографией". Вторую премию получили А.С.Самохин за доклад "Какое программное обеспечение следует использовать при проведении поиска по базам данных масс-спектров электронной ионизации?" и Д.М.Чернышев за доклад "Исследование характеристик спектрометра ионной подвижности/времяпролетного масс-спектрометра с аксиально-симметричным анализатором". Лауреаты получили дипломы ВМСО и книги, изданные при содействии Общества. Лауреату первой премии, кроме того, за счет средств ВМСО будут оплачены расходы на участие в международной конференции по масс-спектрометрии.

\*\*\*

В заключение следует отметить, что представленных на конференции докладов было меньше, чем в предыдущие годы. Возможно, это связано с большим числом других конференций по схожей тематике, проводившихся в тот же период. Вместе с тем интерес к представленным докладам был очень высокий. На всех заседаниях присутствовало много слушателей, а вокруг стеновых докладов постоянно возникали дискуссии. Среди докладчиков было много молодых ученых, аспирантов, студентов, представляющих различные научные школы.

В фойе, благодаря оргкомитету, а также нашим коллегам из издательств "Бином" и "Техносфера", можно было приобрести книги по масс-спектрометрии и родственным областям, в том числе выпущенные совсем недавно.

