

УДК 539.1

## **ЧУВСТВИТЕЛЬНОСТЬ МЕТОДА МАСС-СПЕКТРОМЕТРИИ ОТРИЦАТЕЛЬНЫХ ИОНОВ ПРИ ИДЕНТИФИКАЦИИ ТОКСИЧНЫХ ВЕЩЕСТВ<sup>1</sup>**

Терентьев А.Г.<sup>а,б</sup>, Легков М.А.<sup>в</sup>, Хатымов Р.В.<sup>г</sup>

<sup>а</sup>*Костромской государственной университет;*

*г. Кострома, ул. Дзержинского, 19; e-mail: tag2278@mail.ru.*

<sup>б</sup>*«27 Научный центр» МО РФ; г. Москва, Бригадирский пер., 13.*

<sup>в</sup>*12 Центральный научно-исследовательский институт МО РФ;*

*г.Сергиев-Посад-7, ул.Весенняя, 2Б.*

<sup>г</sup>*Институт физики молекул и кристаллов УНЦ РАН;*

*респ. Башкортостан, г.Уфа, пр-т Октября, 151.*

В настоящее время при идентификации токсичных веществ применяются самые разные аналитические методы. Важной характеристикой, определяющей востребованность аналитического метода, является его чувствительность.

Ранее авторами было показано, что метод масс-спектрометрии отрицательных ионов резонансного захвата электронов (МС ОИ) имеет ряд преимуществ перед методом масс-спектрометрии электронной ионизации положительных ионов (МС ПИ) при решении аналитических задач. Однако, в настоящее время существует мнение, что метод МС ОИ имеет низкую чувствительность, что не позволяет его применять при идентификации токсичных веществ.

В работе показано, что чувствительность метода МС ОИ превышает чувствительность метода МС ПИ при исследовании веществ, содержащих несколько электрофильных групп. Для доказательства этого утверждения авторами представлены результаты квантово-химических расчетов и экспериментальные данные по исследованию модельной группы веществ: толуола, изомеров нитротолуола, динитротолуола, тринитротолуола.

Полученные данные можно использовать для определения наиболее подходящего, по чувствительности, метода при исследовании токсичных соединений.

---

<sup>1</sup> Работа выполнена при финансовой поддержке гранта Российского научного фонда (проект № 15-13-10005).