

УДК 539.1

**ЧУВСТВИТЕЛЬНОСТЬ МЕТОДА МАСС-СПЕКТРОМЕТРИИ
ОТРИЦАТЕЛЬНЫХ ИОНОВ ПРИ ИДЕНТИФИКАЦИИ
ТОКСИЧНЫХ ВЕЩЕСТВ¹**

Терентьев А.Г.^{а,б}, Легков М.А.^в, Хатымов Р.В.^г

^аКостромской государственной университет;

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

^б«27 Научный центр» МО РФ; г. Москва, Бригадирский пер., 13.

^в 12 Центральный научно-исследовательский институт МО РФ;

г.Сергиев-Посад-7, ул.Весенняя, 2Б.

^гИнститут 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.

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