



# КВАДРУПОЛЬНЫЙ ВРЕМЯПРОЛЕТНЫЙ AGILENT 7200 ДЛЯ ГХ ИНДЕКС ЦИТИРУЕМОСТИ

The Measure of Confidence



Agilent Technologies

# КВАДРУПОЛЬНЫЙ ВРЕМЯПРОЛЕТНЫЙ AGILENT 7200 ДЛЯ ГХ

Этот индекс цитирования обеспечивает быстрый доступ к библиографической информации, которая может потребоваться для изучения новых данных, анализа тенденций и ознакомления с последними вариантами применения **квадрупольного времяпролетного Agilent 7200 для ГХ** специалистами-аналитиками во всем мире. Он удобно организован по отраслям и поможет быстро найти источники, наиболее соответствующие вашему случаю.



Квадрупольный времяпролетный Agilent 7200 для ГХ

## ЭКОЛОГИЯ

### **Tolerance and sequestration of macroalgal chemical defenses by an Antarctic amphipod: a 'cheater' among mutualists (Резистентность антарктического бокоплава к токсическим веществам, выделяемым морскими водорослями: «трюкач» среди симбионтов)**

Маргарет О. Амслер (Margaret O. Amsler), Чарльз Д. Амслер (Charles D. Amsler), Жаклин Л. фон Салм (Jacqueline L. von Salm), Крейг Ф. Аумак (Craig F. Aumack), Джеймс Б. Макклиток (James B. McClintock), Райан М. Янг (Ryan M. Young), Билл Дж. Бейкер (Bill J. Baker)  
*Marine Ecology Progress Series*, т. 490, стр. 79–90, 2013

Мелководные экосистемы вдоль западного побережья Антарктического полуострова включают заросли крупных водорослей, способных вырабатывать токсические вещества в защитных целях, и густые скопления связанных с ними разноногих ракообразных (бокоплавов), которые, как считается, сосуществуют в симбиозе. Бокоплавов приносят пользу химически защищенным макрофитам, потребляя эпифитные микроводоросли, и, в свою очередь, используют их в виде убежища от хищных рыб. В настоящем исследовании было документально доказано исключение из этой схемы. Бокоплав *Paradexamine fissicauda* способен употреблять в пищу два вида химически защищенных симпатрических красных водорослей, *Plocamium cartilagineum* и *Picconia plumosa*. В предыдущих исследованиях водоросль *Plocamium cartilagineum* была одним из самых сильных факторов сдерживания в экосистеме для нескольких потребителей; было найдено, что она не используется в пищу пятью другими видами бокоплавов, которые в то же время используют ее в качестве «хозяина» в природе. Бокоплав *Paradexamine fissicauda*, питавшийся исключительно *Plocamium cartilagineum* в течение 2 месяцев, имели гораздо меньшую вероятность быть съеденными рыбами, чем особи этого вида, питавшиеся красными водорослями, не вырабатывающими токсических веществ, или чем представители иных морфологически сходных симпатрических видов бокоплавов. В тканях бокоплавов *Paradexamine fissicauda*, питавшихся водорослью *Plocamium cartilagineum*, были обнаружены производимые ею галогенированные вторичные метаболиты, тогда как в тканях бокоплавов, питавшихся нетоксичной красной водорослью, эти вещества отсутствовали. Это означает, что *P. fissicauda* поглощает сильнодействующие токсические вещества, выделяемые водорослью *Plocamium cartilagineum*, для собственных нужд.

## ЭНЕРГЕТИКА, ХИМИЧЕСКАЯ ПРОМЫШЛЕННОСТЬ И МАТЕРИАЛЫ

### **Deoxygenation of decanoic acid and its main intermediates over unpromoted and promoted sulfided catalysts (Деоксигенация декановой кислоты и ее основных промежуточных продуктов в присутствии непромотированных и промотированных сульфидированных катализаторов)**

Соизик Бриллюет (Soizic Brillouet), Елена Балтаг (Elena Baltag), Сильветт Брунет (Sylvette Brunet), Фредерик Ричард (Frédéric Richard)  
*Applied Catalysis B: Environmental*, т. 148–149, 27 апреля 2014, стр. 201–211

Впервые изучено превращение декановой кислоты, используемой в качестве модельного кислородсодержащего соединения, в присутствии катализатора  $\text{Mo}/\text{Al}_2\text{O}_3$  при 340 °C и суммарном давлении 4 МПа (давление  $\text{H}_2$ —2,72 МПа) в реакторе с неподвижным слоем катализатора. Считается, что деоксигенация декановой кислоты протекает по двум основным механизмам: (i) механизму HDO, который приводит к образованию деценов и декана в качестве конечных углеводородов; кислород удаляется в виде воды; (ii) механизму DEC, включающему реакцию декарбонирования, которая протекает в основном с образованием изомеров нонена; кислород удаляется в виде воды и окиси углерода. Другие продукты, такие как оксигенаты (в основном деканаль и 1-деканол) и серосодержащие вещества (в основном 1-декантиол), образуются по механизму HDO как промежуточные соединения. Отмечалось существенное ингибирующее действие карбоновой кислоты на деоксигенацию деканала. Была составлена общая схема реакции деоксигенации декановой кислоты в присутствии сульфидированных катализаторов. Предложены механизмы реакции деоксигенации, рассматривающие вакансии серы как активные центры, с участием катионов в качестве общих промежуточных соединений для механизмов HDO и DEC. Измерено влияние кобальта и никеля на скорость деоксигенации декановой кислоты с использованием катализаторов  $\text{CoMo}/\text{Al}_2\text{O}_3$  и  $\text{NiMo}/\text{Al}_2\text{O}_3$ . Кобальт и никель значительно ускоряют механизм DEC, а на механизм HDO они оказывают ингибирующее влияние. Авторы предположили, что ускоряющее влияние на механизм DEC может быть результатом увеличения основности анионов серы, находящихся вблизи кобальта или никеля, содержащихся в промотированной сульфидированной фазе.

### **Identification of unknown organosulfur compounds with GC/QTOF-MS in the water-soluble portion from mildly oxidized Jincheng No. 15 anthracite (Идентификация неизвестных сероорганических соединений в водорастворимой фракции умеренно окисленного антрацита Jincheng 15 с помощью квадрупольного времяпролетного ГХ-МС)**

Ю-Гао Ванг (Yu-Gao Wang), Сян-Юн Вей (Xian-Yong Wei), Хон-Лей Ян (Hong-Lei Yan), Чжан-Ку Ли (Zhan-Ku Li), Шен-Кан Вон (Sheng-Kang Wang), Фан-Цзин Лю (Fang-Jing Liu), Пен Ли (Peng Li), Син Фан (Xing Fan), Чжи-Мин Зон (Zhi-Min Zong)  
*Fuel*, т. 135, 1 ноября 2014, стр. 188–190

Впервые был выполнен анализ продуктов умеренного окисления антрацита Jincheng 15 в водном растворе перекиси водорода с помощью квадрупольного времяпролетного ГХ-МС; проведены теоретические расчеты. Идентифицирован ряд гетероатомных компонентов путем сравнения их масс-спектров с данными библиотеки NIST11. Кроме того, формулы двух сероорганических соединений, для которых не было найдено совпадений в библиотеке масс-спектров, были выведены в соответствии с их тандемными масс-спектрами; образование их фрагментарных ионов убедительно объяснено путем расчета энергии на основе теории функционала плотности. В результате исследования было сделано предположение, что анализ с использованием квадрупольного времяпролетного ГХ-МС в сочетании с теоретическим расчетом окажется мощным инструментом для идентификации неизвестных соединений в сложных смесях углей и их производных.

### **Synthetic Phenolic Antioxidants in Middle Distillate Fuels Analyzed by Gas Chromatography with Triple Quadrupole and Quadrupole Time-of-Flight Mass Spectrometry (Анализ синтетических фенольных антиоксидантов в среднестиллятном топливе методом трехкврупольной и квадрупольно-временной ГХ-МС)**

Рени Л. Вебстер (Renée L. Webster), Пол М. Роусон (Paul M. Rawson), Дэвид Дж. Эванс (David J. Evans) и Филип Дж. Мариотт (Philip J. Marriott) *Energy Fuels*, 2014, 28 (2), стр. 1097–1102

Разработаны методы селективного определения и количественного анализа 10 синтетических фенольных антиоксидантов (CPA) в реактивном и дизельном топливе. Аналитическая методика не предусматривает пробоподготовки; используется прямой ввод разбавленного исходного топлива в колонку для газовой хроматографии. Для количественного анализа синтетических фенольных антиоксидантов в диапазоне концентраций 0,1–20 мг/л использовался метод газовой хроматографии с трехкврупольным и квадрупольным времяпролетным масс-спектрометрами. Точность определения варьировалась в диапазоне 3–9%. Показана достоверность и надежность методики и отсутствие необходимости оценки эффективности экстракции, поскольку экстракция не требуется. Как правило, это удобно для летучих соединений CPA, входящих в спецификацию реактивного и дизельного топлива. Методика пригодна для оценки CPA в свежих и находящихся в использовании среднестиллятных топливах, хранящихся на военных базах и танкерах или используемых на морских или авиационных платформах.

### **Formation of chlorobenzenes by oxidative thermal decomposition of 1,3-dichloropropene (Образование хлорбензолов в результате окислительного термического разложения 1,3-дихлорпропена)**

Нвакамма Ахубелем (Nwakamma Ahubelem), Калпит Шах (Kalpit Shah), Бехдад Мохтадери (Behdad Moghtaderi), Мохаммеднур Альтаравнех (Mohammednoor Altarawneh), Богдан З. Длугогорский (Bogdan Z. Dlugogorski), Алистер Дж. Пейдж (Alister J. Page) *Combustion and Flame*, т. 162, вып. 6, июнь 2015, стр. 2414–2421

Эксперименты по изучению горения и расчеты на основе теории функционала плотности были проведены с целью исследования образования хлорбензолов в результате окислительного термического разложения 1,3-дихлорпропена. В диапазоне от 800 до 1150 К наблюдалось образование ряда хлорбензолов от моно- до гексахлорбензола, причем степень хлорирования была пропорциональна температуре сгорания. В диапазоне от 950 до 1050 К более хлорированные родственные соединения хлорбензола (тетра-, пента- и гексахлорбензол) найдены только в следовых количествах. Расчеты на основе теории функционала плотности показывают, что циклизация хлорированных гексатриенов протекает через образование радикалов с незамкнутой оболочкой. Эти частицы представляют собой ключевые компоненты в механизме образования хлорированных полиароматических углеводородов. Результаты исследования должны обеспечить лучшее понимание процесса образования сажи в результате сжигания или пиролиза хлорированных алкенов с короткой углеродной цепью.

### **Enrichment and identification of cyclized hopanoids from Shengli lignite (Обогащение и идентификация циклированных гопаноидов из лигнита Шенли)**

Син-Шун Цун (Xing-Shun Cong), Чжи-Мин Цзун (Zhi-Min Zong), Мин Ли (Min Li), Ли Гао (Li Gao), Чжи-Хао Вэй (Zhe-Hao Wei), Ян Ли (Yan Li), Син Фан (Xing Fan), Инь Чжоу (Yin Zhou), Сянь Юн Вэй (Xian-Yong Wei) *Fuel Processing Technology*, т. 134, июнь 2015, стр. 399–403

Четырнадцать циклированных гопаноидов, выделенных из лигнита Шенли (Shengli lignite), в том числе гидробензогопаны, бензогопаны и перегруппированные бензогопаны, были обогащены с помощью фракционной экстракции и препаративной жидкостной хроматографии среднего давления. Структуры этих веществ были предварительно определены с помощью газовой хроматографии и масс-спектрометрии. Перегруппированные бензогопаны, которые не были зарегистрированы ранее, вероятно, образуются из соответствующих бензогопанов в результате реакции перегруппировки метильных групп.

### **Mechanism of low-molecular alkenes interaction with sulfur-containing spatially hindered phenols under conditions of thermal modification of polymer materials (Механизм взаимодействия низкомолекулярных алкенов с серосодержащими пространственно экранированными фенолами в условиях термической модификации полимерных материалов)**

А. П. Крысин (A. P. Krysin), Л. М. Покровский (L. M. Pokrovskii), А. А. Нефедов (A. A. Nefedov), И. К. Шундрин (I. K. Shundrina), Б. А. Селиванов (B. A. Selivanov)

*Журнал общей химии*, март 2015, т. 85, вып. 3, стр. 498–505

Изучены превращения полиолефинов в ходе высокотемпературной модификации под действием серосодержащих модификаторов с использованием гексена-1 и гексана в качестве модельных соединений. С помощью термогравиметрии и ГХ-МС установлен состав продуктов термолитического разложения бис[3-(3,5-ди-трет-бутил-4-гидроксифенил)пропил] дисульфида и бис[3-(3,5-ди-трет-бутил-4-гидроксифенил)пропил] сульфида при 200–270 °С. В статье обсуждается механизм модификации олефинов в присутствии сульфидов и дисульфидов, участвующих в образовании промежуточных бирадикальных соединений.

### **Poly (oxypropylene)-amidoamine modified bentonite as potential shale inhibitor in water-based drilling fluids (Применение бетонита модифицированного поли(оксипропилен)-амидоамином в качестве потенциального ингибитора глинистых сланцев в водных буровых растворах)**

Хань Чжун (Han Yi Zhong), Чженсун Цю (Zhengsong Qiu), Вэйянь Чжуан (Weian Huang), Дзе Цао (Jie Cao) *Applied Clay Science*, т. 67–68, октябрь 2012, стр. 36–43

Посредством конденсации низкомолекулярного полиоксипропилен диамина POP230 с дикарбоновыми кислотами синтезирован ряд поли(оксипропилен)-амидоаминовых соединений, являющихся потенциальными ингибиторами глинистых сланцев. Синтезированный полимер был охарактеризован с использованием ИК-Фурье-спектроскопии и масс-спектрального анализа (МС).

**Chemical analysis of bleach and hydroxide-based solutions after decontamination of the chemical warfare agent O-ethyl S-2-diisopropylaminoethyl methylphosphonothiolate (VX) (Химический анализ растворов на основе гипохлорита натрия и гидроксидов после нейтрализации отравляющего вещества О-этил-S-2-диизопропиламиноэтил метилфосфотиолата [VX])**

Ф. Б. Хопкинс (F. B. Hopkins), М. Р. Граветт (M. R. Gravett), А. Дж. Селф (A. J. Self), М. Вон (M. Wang), С. Хое-Чи (C. Hoo-Chee), Н. Ли Хои Сим (N. Lee Hoi Sim), Дж. Т. А. Джонс (J. T. A. Jones), С. М. Тимперлей (C. M. Timperley), Дж. Р. Ричес (J. R. Riches)  
*Analytical and Bioanalytical Chemistry*, август 2014, т. 406, вып. 21, стр. 5111–5119

В этой статье описано применение современных аналитических методов для анализа дезактивационных растворов после нейтрализации отравляющего вещества О-этил-S-2-диизопропиламиноэтил метилфосфотиолата (VX). В ней использовались следующие приборы компании Agilent: моноквадрупольный ГХ-МС, квадрупольный времяпролетный ГХ-МС, квадрупольный времяпролетный ВЭЖХ-МС.

## ЭКОЛОГИЧЕСКИЙ КОНТРОЛЬ

**Advanced Techniques in Gas Chromatography-Mass Spectrometry (GC-MS-MS and GC-TOF-MS) for Environmental Chemistry (Усовершенствованные методики в газовой хроматографии и масс-спектрометрии (ГХ-МС-МС и ГХ-ВП-МС) для экологической химии)**

Имма Феррер (Imma Ferrer), Е. Турман (E. Thurman)  
октябрь 2013, ELSEVIER, ISBN: 978-0-444-62623-3

ГХ-МС в экологической химии

**Analysis of Trace-Level Volatile Compounds in Fresh Turf Crop (*Lolium perenne L.*) by Gas Chromatography Quadrupole Time-of-Flight Mass Spectrometry (Анализ следовых количеств летучих веществ в свежих срезах дерна (*Lolium perenne L.*) методом ГХ с квадрупольно-времяпролетной масс-спектрометрией)**

Сайсай Хун (Saisai Hong), Вэньюй Кан (Wenyu Kang), ЮЭ Су (Yue Su), Иньлун Го (Yinlong Guo)  
*Chinese Journal of Chemistry*, т. 31, вып. 10, октябрь 2013, стр. 1329–1335

Традиционные исследования летучих соединений не позволяют идентифицировать следовые количества некоторых веществ с помощью ГХ-МС. При определении следовых количеств летучих соединений в свежих срезах дерна вида Плевел многолетний (*Lolium perenne L.*) были применены специфические методики на основе газовой хроматографии в сочетании с гибридной квадрупольно-времяпролетной масс-спектрометрией. Согласно опубликованным литературным данным, анализ целевых веществ проводился с использованием индексов удерживания, точных масс характеристических ионов и масс-спектров второй стадии (спектров  $MS_2$ ). В ряде экспериментов было показано, что низкая энергия электронного удара приводила к увеличению интенсивности сигнала для пиков молекулярных ионов с низкой интенсивностью. Увеличение интенсивности пика молекулярного иона с изначально низкой интенсивностью способствовало повышению точности качественного анализа. Всего было идентифицировано 60 летучих соединений; основными компонентами оказались бензенацетальдегид (14,8%), 2,5-диметил-пирозин (9,6%) и гексаналь (9,3%). Идентификация была выполнена с использованием поиска по масс-спектральным базам данных, индексу удерживания и точных масс характеристических ионов.

**Gas chromatography quadrupole time-of-flight mass spectrometry determination of benzotriazole ultraviolet stabilizers in sludge samples (Определение стабилизаторов ультрафиолетового излучения на основе бензотриазола в пробах осадков методом квадрупольно-времяпролетной ГХ-МС)**

Х. Касадо (J. Casado), И. Родригес (I. Rodriguez), И. Карпинтейро (I. Carpinteiro), М. Рамиль (M. Ramil), Р. Сена (R. Cela)  
*Journal of Chromatography A*, т. 1293, 7 июня 2013, стр. 126–132

В этом исследовании представлена упрощенная методика для селективного определения девяти бензотриазольных УФ-стабилизаторов в осадках городских очистных сооружений. Аналиты извлекались из проб с использованием методики твердофазной дисперсии матрицы с последующим анализом с помощью квадрупольно-времяпролетной ГХ-МС. Были получены хроматограммы, демонстрирующие высокую селективность разделения, с учетом интервала масс 0,005 Да с центром, соответствующим дочернему иону, для количественного определения каждого из соединений. Кроме того, наличие точных МС-МС-спектров со сканированием по дочерним ионам позволило идентифицировать пики, зарегистрированные в МС-МС-хроматограммах выделенных ионов. В результате простая процедура пробоподготовки, сочетающая в одной стадии экстракцию и очистку с использованием всего 10 мл этилацетата, обеспечивает подготовку сложных проб донных осадков. С применением разработанной методики удалось добиться пределов количественного определения (LOQ) аналитов от 2 до 10 нг г<sup>-1</sup> для осадка, высушенного сублимацией; степени извлечения составили от 70 до 111% с погрешностью 2–13%. Анализ проб осадка и аттестованных эталонных материалов подтвердил наличие остаточных количеств восьми из девяти бензотриазольных УФ-стабилизаторов. В отдельно взятых пробах при длинах волн УФ-326, УФ-328 и УФ-234 отображается наибольшая частота возникновения и отдельные концентрации свыше 100 нг г<sup>-1</sup>.

**Profiling of soil fatty acids using comprehensive two-dimensional gas chromatography with mass spectrometry detection (Определение почвенных жирных кислот с использованием комплексной двумерной газовой хроматографии с масс-спектрометрией)**

Энни Сей Цзен (Annie Xu Zeng), Сюнь-Тун Чин (Sung-Tong Chin), Антонио Патти (Antonio Patti), Филип Дж. Марриотт (Philip J. Marriott)  
*Journal of Chromatography A*, т. 1317, 22 ноября 2013, стр. 239–245

Методами ГХ-ГХ исследованы сложные эфиры жирных кислот почвенных бактерий. Применение различных наборов колонок показало, что наиболее подходящей является комбинация неполярной и полярной колонок. Лесные почвы содержали насыщенные, ненасыщенные, разветвленные, гидроксил- и кислородсодержащие метиловые эфиры жирных кислот (МЭЖК). Точный анализ масс с помощью квадрупольно-времяпролетной масс-спектрометрии в комбинации с двумерной ГХ-ГХ позволили идентифицировать все МЭЖК.

### Reliable screening of pesticide residues in maternal and umbilical cord sera by gas chromatography-quadrupole time of flight mass spectrometry (Достоверный скрининг остаточных количеств пестицидов в сыворотке материнской и пуповинной крови методом квадрупольно-времяпролетной ГХ-МС)

ЖоЦзин Фань (RuoJing Fan), Фан Чжан (Fang Zhang), ХаоЯн Ван (HaoYang Wang), Ли Чжан (Li Zhang), Цзин Чжан (Jing Zhang), Ин Чжан (Ying Zhang), ЧунТянь Ю (ChongTian Yu), ИньЛун Го (YinLong Guo)  
*Science China Chemistry*, май 2014, т. 57, вып. 5, стр. 669–677

Широкое использование пестицидов вызывает тяжелые побочные последствия для здоровья человека, особенно для беременных женщин и новорожденных. В этом исследовании была разработана методика скрининга для определения разнообразных пестицидов в сыворотке материнской и пуповинной крови. Все пестициды в сыворотке были получены с использованием твердофазной экстракции (ТФЭ) и проанализированы методом квадрупольно-времяпролетной ГХ-МС. Чтобы задать критерии качества была создана база данных для 50 пестицидов, включающая точные массы 3–5 специфических ионов с соответствующими соотношениями интенсивностей для каждого пестицида. Кроме того, для интерпретации данных для каждого предполагаемого пестицида использовалась инновационная система «точек идентификации» (IPs) на основе спектров МС<sub>1</sub> и МС<sub>2</sub>. Эта методика затем применялась к паре проб с сывороткой материнской и пуповинной крови. Всего в результате скрининга были обнаружены остаточные количества шести пестицидов. В заключение можно сделать вывод о том, что квадрупольно-времяпролетная ГХ-МС в сочетании с базой данных точных масс является одним из самых эффективных инструментов для систематического анализа пестицидов.

### Determination of benzotriazoles in water samples by concurrent derivatization-dispersive liquid-liquid microextraction followed by gas chromatography-mass spectrometry (Определение бензотриазолов в пробах воды с использованием одновременной дериватизации и дисперсионной жидкость-жидкостной микроэкстракции с последующим анализом методом ГХ-МС)

Дж. Касадо (J. Casado), Р. Нескателли (R. Nescatelli), И. Родригес (I. Rodriguez), М. Рамиль (M. Ramil), Ф. Марини (F. Marini), Р. Села (R. Cela)  
*Journal of Chromatography A*, т. 1336, 4 апреля 2014, стр. 1–9

Методика одновременного ацетилирования и дисперсионной жидкость-жидкостной микроэкстракции в сочетании с газовой хроматографией и масс-спектрометрией (ГХ-МС) предложена для чувствительного определения пяти полярных бензотриазольных соединений (1Н-бензотриазол, ВТгі; 4- и 5-метил-1Н-бензотриазол, 4-ТТгі и 5-ТТгі; 5,6-диметил-1Н-бензотриазол, ХТгі; 5-хлор-1Н-бензотриазол, 5-С1ВТгі) в пробах воды. При оптимальных условиях к пробам (10 мл) прибавляли 1 мл Na<sub>2</sub>HPO<sub>4</sub> (8% мас./об.) и смешивали затем с трехкомпонентной смесью для ацетилирования и микроэкстракции, содержащей 100 мкл уксусного ангидрида, 1,5 мл ацетонитрила и 60 мкл толуола. Таким образом, аналиты одновременно подвергались ацетилированию и переходили в капли диспергированного толуола. Предложенная методика позволила добиться пределов количественного определения (LOQ) от 0,007 до 0,080 нг мл<sup>-1</sup> и получить коэффициенты обогащения от 93 до 172, хорошую воспроизводимость со значениями относительного стандартного отклонения менее 10% и линейную зависимость с коэффициентами свыше 0,9991 для всех соединений в диапазоне между LOQ и 20 нг мл<sup>-1</sup>. Калибровка, выполненная с использованием образцов обогащенной сверхчистой воды, подвергнутых одновременному ацетилированию и дисперсионной жидкость-жидкостной микроэкстракции, оказалась пригодной для точного количественного анализа сложных водных матриц, например наземных или сточных вод, обеспечивая извлечение в диапазоне от 86 до 112%. Концентрации ВТгі, 4-ТТгі и 5-ТТгі были измерены в пробах из окружающей среды; концентрация ВТгі в неочищенных сточных водах доходила до 1,9 нг мл<sup>-1</sup>.

### Multidimensional gas chromatography in combination with accurate mass, tandem mass spectrometry, and element-specific detection for identification of sulfur compounds in tobacco smoke (Применение двумерной газовой хроматографии в сочетании с тандемной масс-спектрометрией высокого разрешения и обнаружением конкретных элементов для идентификации серосодержащих соединений в табачном дыме)

Нобуо Оchiaи (Nobuo Ochiai), Кадзухиса Мицуи (Kazuhisa Mitsui), Кикую Сасамотоо (Kikuo Sasamoto), Юта Йошимура (Yuta Yoshimura), Фрэнк Дэвид (Frank David), Пэт Сандра (Pat Sandra)  
*Journal of Chromatography A*, т. 1358, 5 сентября 2014, стр. 240–251

Разработана методика идентификации серосодержащих соединений в экстракте табачного дыма. Метод основан на вводе проб экстракта табачного дыма большого объема (10 л) с последующей одномерной (1D) или двумерной (2D) газовой хроматографией (ГХ) (с возможностью выбора) в комбинации с гибридным квадрупольным времяпролетным масс-спектрометром, с использованием электронной ионизации (EI) и химической ионизации в режиме положительных ионов (PCI) с параллельным хемилюминесцентным детектированием (ХЛД) серы. Для идентификации каждого отдельного серосодержащего соединения средние фракции 28 серосодержащих компонентов, полученные в 1D-ГХ, были последовательно проанализированы в 2D-ГХ в трех режимах МС-детектирования (SCD/EI-TOF-MS, SCD/PCI-TOF-MS и SCD/PCI-Q-TOF-MS). С помощью поиска в библиотеке масс-спектров, определения линейных индексов удерживания и молекулярной массы с использованием точных масс-спектров в режиме PCI, расчета по формулам с использованием точных масс-спектров в режиме EI и PCI и уточнения структуры с помощью активированной соударением диссоциации протонированной молекулы были идентифицированы тридцать серосодержащих соединений. Кроме того, были получены молекулярные формулы для 11 неизвестных серосодержащих соединений. Концентрации идентифицированных и неизвестных серосодержащих соединений находились в пределах 10–740 нг/мг общего количества твердых микрочастиц (СОС: 1,2–12%, n = 3).

## ПИЩЕВАЯ ПРОМЫШЛЕННОСТЬ

### Rapid simultaneous screening and identification of multiple pesticide residues in vegetables (Экспресс-методика одновременного скрининга и идентификации следовых количеств некоторых пестицидов в овощных культурах)

Фан Чжан (Fang Zhang), Чунтянь Ю (Chongtian Yu), Вэньвэнь Ван (Wenwen Wang), Жоцзинь Фань (Ruoqing Fan), Джисюй Чжан (Zhixu Zhang), Иньлун Го (Yinlong Guo)  
*т. 757, 13 декабря 2012, стр. 39–47*

С использованием новой базы данных и газовой хроматографии в сочетании с гибридной квадрупольно-времяпролетной масс-спектрометрией (ГХ-МС) разработана экспрессная методика одновременного скрининга и идентификации остаточных количеств некоторых пестицидов в овощных культурах. В общей сложности 187 пестицидов с различными химическими группировками были исследованы с помощью квадрупольно-времяпролетной ГХ-МС для создания базы данных. База данных содержит времена удерживания и точные массы ионов МС и МС-МС спектры для каждого пестицида.

### Fast comprehensive two-dimensional gas chromatography method for fatty acid methyl ester separation and quantification using dual ionic liquid columns (Комплексная экспресс-методика двумерной газовой хроматографии для разделения и количественного анализа метиловых эфиров жирных кислот с использованием двойных колонок с ионной жидкостью)

Ася Ночин (Asia Nocheen), Благой Митревски (Blagoj Mitrevski), Асгари Бано (Asghari Bano), Филип Дж. Мариотт (Philip J. Marriott)  
*Journal of Chromatography A, т. 1312, 18 октября 2013, стр. 118–123*

Сафлоровое масло содержит сложную смесь насыщенных и ненасыщенных жирных кислот С18, помимо других жирных кислот; разделение этих компонентов со схожими структурами с помощью обычной газовой хроматографии (ГХ) может вызывать трудности. Данное исследование направлено на улучшение степени разделения метиловых эфиров жирных кислот в сафлоровом масле и их количественный анализ с использованием комплексной двумерной газовой хроматографии (ГХ-ГХ). Разделение методом двумерной газовой хроматографии осуществляется посредством сочетания двух колонок содержащих ионные жидкости; в результате экспериментов была выбрана комбинация фаз SLB-IL111 и IL59, которая обеспечивает превосходное разделение стандартной смеси метиловых эфиров жирных кислот (МЭЖК), а также жирных кислот в сафлоровом и льняном маслах по сравнению с другими наборами протестированных колонок. За короткое время (16 мин) удалось добиться хорошего разделения МЭЖК сафлорового масла. Валидация определения МЭЖК была осуществлена благодаря воспроизводимости методики, линейности отклика до 500 мг л<sup>-1</sup> и пределами обнаружения от 1,9 до 5,2 мг л<sup>-1</sup> с коэффициентом разделения 20:1. Количественный анализ проводили с использованием двух уровней разбавления: в 200 раз для основных компонентов и в 20 раз для следовых количеств компонентов. Жирные кислоты С15:0 и С17:0 были обнаружены в сафлоровом масле впервые. Комплект колонок SLB-IL111/IL59 оказался новой и эффективной комбинацией для разделения и количественного анализа жирных кислот в маслах растительного и животного происхождения.

### Analysis of Volatile Compounds from *Siraitia grosvenorii* by Headspace Solid-Phase Microextraction and Gas Chromatography-Quadrupole Time-of-Flight Mass Spectrometry (Анализ летучих соединений из *Siraitia grosvenorii* (архат) методами парофазной твердофазной микроэкстракции и газовой хроматографии с квадрупольно-времяпролетной масс-спектрометрией)

И Ся (Yi Xia), Фан Чжан (Fang Zhang), Вэйюнь Ван (Weiyun Wang), Иньлун Го (Yinlong Guo)  
*Journal of Chromatographic Science, (2014) doi: 10.1093/chromsci/bmu012*

В настоящем исследовании был использован анализ равновесного пара методом твердофазной микроэкстракции (HS-SPME) в сочетании с газовой хроматографией с квадрупольно-времяпролетной масс-спектрометрией для выделения и идентификации летучих компонентов из *Siraitia grosvenorii* (архат), многолетней травянистой лианы, используемой в качестве натурального подсластителя и для медицинских целей. По сравнению с методом статического парофазного анализа и твердофазной микроэкстракцией различными волокнистыми покрытиями, в твердофазной микроэкстракции для извлечения целевых определяемых веществ, в том числе альдегидов, спиртов, кислот, сложных эфиров и других соединений, более предпочтительно использование волокна на основе дивинилбензола, карбоксена или полидиметилсилоксана. Для идентификации использовался многомерный подход к качественному анализу, включающий поиск по библиотеке, сравнение индекса удерживания, точное измерение массы, масс-спектр дочерних ионов (спектр МС<sup>2</sup>) и нормализацию площади. В результате удалось идентифицировать 46 соединений *S. grosvenorii*. Среди них *n*-гексадекановая кислота, 5-оксиметилфурфурол, 2,3-дигидро-3,5-дигидрокси-6-метил-4Н-пиран-4-он, (Z,Z)-9,12-октадекадиеновая кислота и (E,E)-2,4-нонадиенал были основными летучими компонентами. Результаты показали, что анализ равновесного пара методом твердофазной микроэкстракции в сочетании с газовой хроматографией и квадрупольно-времяпролетной масс-спектрометрией является эффективным инструментом извлечения полярных летучих соединений из *S. grosvenorii* и точным способом идентификации летучих соединений в сложной матрице.

### Assessment of dispersive liquid-liquid microextraction conditions for gas chromatography time-of-flight mass spectrometry identification of organic compounds in honey (Оценка условий дисперсионной жидкость-жидкостной микроэкстракции для идентификации органических соединений в меде методом газовой хроматографии с времяпролетной масс-спектрометрией)

М. Монируззаман (M. Moniruzzaman), И. Родригес (I. Rodríguez), Т. Родригес-Кабо (T. Rodríguez-Cabo), Р. Села (R. Cela), С.А. Сулайман (S.A. Sulaiman), С.Х. Гэн (S.H. Gan)  
*Journal of Chromatography A, т. 1368, 14 ноября 2014, стр. 26–36*

Оценено использование дисперсионной жидкость-жидкостной микроэкстракции для определения малых количеств органических соединений в образцах меда методом газовой хроматографии (ГХ). Пробы были предварительно обработаны с помощью жидкость-жидкостной экстракции ацетонитрилом в оптимальных условиях с последующим применением дисперсионной жидкость-жидкостной микроэкстракции тетрагидрометаном (CCl<sub>4</sub>, 0,075 мл). Полученная фаза была проанализирована методом газовой хроматографии с использованием времяпролетного масс-спектрометра высокого разрешения. Весь процесс пробоподготовки занимает приблизительно 10 мин с общим расходом органических растворителей менее

4 мл. Относительные стандартные отклонения составили менее 12%; в полученных экстрактах было определено более 70 органических соединений с линейным индексом удерживания в диапазоне от 990 до 2900. По сравнению с анализом равновесного пара методом твердофазной микроэкстракции были получены более интенсивные пики для большинства летучих и полуплетучих соединений, пригодных для экстракции обоими методами. Кроме того, в экстрактах, полученных методом дисперсионной жидкость-жидкостной микроэкстракции, могут быть идентифицированы соединения других видов, например высокополярные и водорастворимые бензолкарбоновые кислоты, длинноцепочечные жирные кислоты, сложные эфиры и флавоноиды, которые трудно сконцентрировать методом твердофазной микроэкстракции. Некоторые из соединений, идентифицированных в экстрактах, полученных методом дисперсионной жидкость-жидкостной микроэкстракции, были предложены для классификации образцов и/или в качестве маркеров меда из определенных географических районов.

#### Assessment of gas chromatography time-of-flight accurate mass spectrometry for identification of volatile and semi-volatile compounds in honey (Оценка газовой хроматографии в сочетании с высокоточной времяпролетной масс-спектрометрией для идентификации летучих и полуплетучих соединений в меде)

М. Монируззаман (M. Moniruzzaman), И. Родригес (I. Rodriguez), М. Рамиль (M. Ramil), Р. Села (R. Cela), С. А. Сулайман (S. A. Sulaiman), С. Х. Гэн (S. H. Gan)

*Talanta*, т. 129, 1 ноября 2014, стр. 505–515

Оценена эффективность комбинированной системы газовой хроматографии (ГХ) в сочетании с гибридной квадрупольно-времяпролетной масс-спектрометрией (МС) для определения летучих и полуплетучих соединений в образцах меда. Выполнена оценка возможностей точного определения масс с помощью указанной системы после твердофазной микроэкстракции проб для идентификации соединений. Точные МС-спектры с применением электронного удара (EI) в режиме сканирования позволили различить соединения с одинаковыми номинальными массами, но имеющими различные эмпирические формулы. Кроме того, использование интервала масс шириной 0,005 Да позволило получить высокоспецифичные хроматограммы для выбранных ионов и исключить помехи при расчете площади их пиков. Дополнительные сведения, полученные из спектров МС с применением режима химической ионизации с регистрацией положительных ионов и спектров МС-МС в режиме сканирования ионов-продуктов, позволяют подтвердить идентификацию новых соединений. Указанные возможности были проиллюстрированы примерами входящих в состав меда ароматических соединений, принадлежащих к различным классам химических веществ и содержащих в своих молекулах различные элементы. Приведены также примеры соединений, структуру которых описать не удалось. В итоге удалось идентифицировать 84 соединения из 89 в 19 пробах меда из трех различных географических регионов. Пригодность откликов, измеренных для выбранных ионов, соответствующих упомянутым выше веществам, для идентификации соединений была оценена посредством анализа главных компонентов.

#### Enantiomeric Separation in Comprehensive Two-dimensional Gas Chromatography with Accurate Mass Analysis (Разделение энантиомеров в комплексной двумерной газовой хроматографии с использованием точного анализа масс)

Сюнь-Тун Чин (Sung-Tong Chin), Яда Нолвачай (Yada Nolvachai), Филип Дж. Марриотт (Philip J. Marriott)

*Chirality in Australia*, т. 26, вып. 11, стр. 747–753, ноябрь 2014

Проведена оценка возможности определения хирального состава нескольких монотерпенов, а именно  $\alpha$ -пинена,  $\beta$ -пинена и лимонена, в кардамонном масле методом комплексной двумерной газовой хроматографии на хиральных неподвижных фазах в сочетании с квадрупольно-времяпролетной масс-спектрометрией с точным анализом масс. Энантиомеры стандартной смеси были полностью разделены с помощью прямого ГХ-анализа с использованием фазы  $\beta$ -циклодекстрина, модифицированного 2,3-ди-*O*-метил-6-*t*-бутилсилилилом, однако энантиомер (+)-(*R*)-лимонен в кардамоновом масле перекрывался с другими фоновыми соединениями, такими как цимол и цинеол. Компоненты (+)-(*R*)-лимонена, определенные на основе характеристических ионов при  $m/z$  136, 121 и 107 с использованием хиральной одномерной газовой хроматографии с квадрупольно-времяпролетной масс-спектрометрией, не были достоверно обнаружены в альтернативном режиме tandemной МС-МС в результате образования подобных исходных ионов и ионов-продуктов при интерференции или совместном элюировании цимолом и цинеолом. Колонки с фазами SUPELCOWAX, SLB-IL111, HP-88 и SLB-IL59 были использованы в двумерном хиральном ГХ-анализе для разделения во втором измерении ( $^2D$ ). Лучшее разрешение пиков тестируемых монотерпеновых энантиомеров и сигналов компонентов матрицы было получено на SLB-IL59. На основе данных площадей пиков были определены соотношения энантиомеров для  $\alpha$ -пинена,  $\beta$ -пинена и лимонена в пробе кардамонового масла, которые составили соответственно 1,325, 2,703 и 1,040.

#### Suspected-target pesticide screening using gas chromatography quadrupole time-of-flight mass spectrometry with high resolution deconvolution and retention index/mass spectrum library (Скрининг целевых пестицидов с использованием газовой хроматографии в сочетании с квадрупольно-времяпролетной масс-спектрометрией с использованием деконволюции с высоким разрешением и библиотеки масс-спектров и индексов удерживания)

Фан Чжан (Fang Zhang), Хаоян Ван (HaoYang Wang), Ли Чжан (Li Zhang), Цзин Чжан (Jing Zhang), Жоцзинь Фань (Ruoqing Fan), ЧунТянь Ю (ChongTian Yu), Вэньвэнь Ван (Wenwen Wang), ИньЛун Го (YinLong Guo)

*Talanta*, т. 128, 1 октября 2014, стр. 156–163

Разработана стратегия скрининга остаточных количеств предполагаемых целевых пестицидов в сложных матрицах с помощью газовой хроматографии в сочетании с гибридной квадрупольно-времяпролетной масс-спектрометрией. Рабочий процесс скрининга включает три ключевых шага: начальное обнаружение, предварительную идентификацию и окончательное подтверждение. Начальное обнаружение компонентов в матрице было выполнено с помощью деконволюции масс-спектров с высоким разрешением. Предварительная идентификация предполагаемых пестицидов произведена с помощью специальной библиотеки, которая содержит масс-спектры ионов-предшественников (спектры МС<sup>1</sup>) и индексы удерживания. Окончательное подтверждение было получено путем точного измерения масс характеристических ионов с соотношениями откликов из спектров МС<sup>1</sup> или характеристических дочерних ионов из масс-спектров МС<sup>2</sup>. Для оценки пригодности рабочего процесса в реальных пробах в качестве моделей были выбраны три матрицы: яблоко, шпинат, лук-шалот, каждая с добавками 165 тестовых пестицидов при нескольких значениях концентраций. Результаты исследований показали, что применение времяпролетной масс-спектрометрии с высоким разрешением позволило эффективно извлекать спектры из хроматограмм с высоким уровнем шума на основе узкого интервала масс (5 мДа) и идентифицировать предполагаемые целевые



соединения по совпадению полных масс-спектров после деконволюции и фильтрации линейных индексов удерживания. В среднем с помощью деконволюции и библиотеки масс-спектров и индексов удерживания можно идентифицировать более 74% пестицидов с концентрациями 50 нг/мл. Выше 80% пестицидов с концентрациями 5 нг/мл или ниже могут быть подтверждены в каждой матрице с использованием по крайней мере двух характеристических ионов с соответствующими соотношениями откликов из спектров МС1. Кроме того, использование спектров дочерних ионов может однозначно подтвердить идентификацию некоторых предполагаемых пестицидов в сложных матрицах. В заключение можно сделать вывод о том, что квадрупольно-времяпролетная ГХ-МС в сочетании с библиотекой масс-спектров и индексов удерживания является одним из самых эффективных инструментов для анализа остаточных количеств предполагаемых пестицидов в сложных матрицах.

### **Negative chemical ionization gas chromatography coupled to hybrid quadrupole time-of-flight mass spectrometry and automated accurate mass data processing for determination of pesticides in fruit and vegetables (Использование газовой хроматографии в сочетании с гибридной квадрупольно-времяпролетной масс-спектрометрией в режиме химической ионизации с регистрацией отрицательных ионов и автоматизированной обработкой данных точных масс для определения пестицидов в плодовоовощных культурах)**

Наталия Безил (Natalia Besil), Саманта Уклес (Samanta Uclés), Милагрос Мескуя (Milagros Mezcuía), Горацио Хейзен (Horacio Heinzen), Амадео Р. Фернандес-Альба (Amadeo R. Fernández-Alba)  
*Analytical and Bioanalytical Chemistry*, август 2015, т. 407, вып. 21, стр. 6327–6343

Исследовано применение газовой хроматографии в сочетании с гибридной квадрупольно-времяпролетной масс-спектрометрией с высоким разрешением в режиме химической ионизации с регистрацией отрицательных ионов, объединяющей сканирование полного диапазона с экспериментами МС-МС и использованием точного анализа масс, для автоматического определения следовых количеств пестицидов в плодовоовощных культурах. В исследовании были включены семьдесят соединений, причем использование 50% из них не одобрено законодательством ЕС. В общем случае 76% определяемых веществ могут быть идентифицированы при концентрациях 1 мкг кг<sup>-1</sup>. Эксперименты по извлечению проводились для трех концентраций (1, 5 и 10 мкг кг<sup>-1</sup>). Семьдесят семь процентов обнаруженных пестицидов на самом низком уровне концентраций позволили получить степень извлечения в пределах 70–120%, 94% могут быть количественно определены при концентрации 5 мкг кг<sup>-1</sup>, и 100% были обнаружены при концентрациях 10 мкг кг<sup>-1</sup>. Для всех соединений была получена хорошая воспроизводимость, выраженная в виде относительного стандартного отклонения (СОС < 20%). Основным недостатком этого метода является ограниченный динамический диапазон, наблюдаемый для некоторых аналитов, который можно устранить путем разбавления пробы или уменьшения объема вводимой пробы. Авторы самостоятельно разработали и использовали базу данных для автоматической точной обработки данных по массам. Точность измеренных масс образующихся ионов составила в основном менее 5 млн д. по крайней мере для одного иона, используемого для идентификации. Если с помощью одностадийной масс-спектрометрии в режиме химической ионизации с регистрацией отрицательных ионов был получен только один ион, в качестве критерия идентификации использовался характеристический дочерний ион из МС-МС-экспериментов. В общей сложности было проанализировано 30 реальных проб, и в 67% из них были обнаружены 12 различных пестицидов в диапазоне 1,0–1321,3 мкг кг<sup>-1</sup>.

### **Tracing the origin of Lambrusco sparkling wines by a metabolomics approach using a HS-SPME-GC-CI-QTOF-MS method (Отслеживание происхождения игристых вин Ламбруско метаболомическим методом с использованием анализа равновесного пара методом твердофазной экстракции и газовой хроматографии в сочетании с квадрупольно-времяпролетной масс-спектрометрией в режиме химической ионизации)**

Джордж Вейнгардт (Georg Weingart), Фулвио Маттиви (Fulvio Mattivi)  
*3rd MS Food Day 2013, устный доклад*

Разработка инструментов для защиты потребителей от мошенничества в пищевой промышленности в настоящее время является одной из самых актуальных задач. В рамках проекта Ager Enologia, 2009 г., было отобрано около 100 образцов игристого вина Ламбруско из четырех различных областей с регламентированным контролем качества продукции. Летучие фракции вин экстрагировали методом твердофазной микроэкстракции, после чего для измерения использовали новый квадрупольный времяпролетный ГХ-МС Agilent 7200 в режиме CI. После извлечения соединения посредством деконволюции масс-спектра с помощью ПО Mass Profiler Professional была рассчитана модель по методу наименьших квадратов (МНК), причем общая точность для правильной классификации проб составила 97%.

### **Analyses and profiling of extract and fractions of neglected weed *Mimosa pudica* Linn. traditionally used in Southeast Asia to treat diabetes (Анализ и определение профиля экстракта и фракций сорного растения *Mimosa pudica* Linn. (Мимоза стыдливая), традиционно используемого в Юго-Восточной Азии для лечения диабета)**

Т. С. Тунна (T. S. Tunna), И. С. М. Зайдул (I. S. M. Zaidul), К. У. Ахмед (Q. U. Ahmed), К. Гафур (K. Ghafoor), Ф. Ю. Аль-Джухайми (F. Y. Al-Juhaimi), М. С. Уддин (M. S. Uddin), М. Хазан (M. Hasan), С. Фердоус (S. Ferdous)  
*South African Journal of Botany*, т. 99, июль 2015, стр. 144–152

Были изучены противодиабетические свойства сорняка *Mimosa pudica* Linn. (Мимоза стыдливая) или *hispida* (щетинисто-волосистая), (семейство бобовые) с целью предложить альтернативное лекарственное средство, направленное против глобальной угрозы сахарного диабета. Целью данной работы являлось изучение *in vitro* ингибиторной активности против диабетических ферментов (например, α-амилазы и α-глюкозидазы). Для этого были проведены три анализа антиоксидантов с целью выявления противодиабетического потенциала экстракта *M. pudica* в метаноле (MeOH) и его субфракций (гексан, этилацетат, ацетон, и метанол). Впервые было выполнено всестороннее определение химического профиля этого растения с использованием квадрупольно-времяпролетной ГХ-МС для оценки возможных соединений, присутствующих в экстракте и субфракциях, которые могли бы быть связаны с противодиабетической активностью. Анализ с использованием дифенилпикрилгидразила показал наименьшее (7,18 ± 0,0005) и наибольшее (158,4 ± 0,0004) значения IC<sub>50</sub> для MeOH и MeOH<sub>1</sub> соответственно. Ацетон и метанол показали наибольшие значения общего содержания фенольных соединений (TPC; 60,07 ± 1,066) и флавоноидов (TFC; 16,97 ± 1,472) соответственно. Ингибирующая активность метанола, и этилацетата, оказалась в три и два раза выше, чем у стандартной акарбозы в дозе 1 мг/мл (соответственно 95,65 ± 0,911 и 51,87 ± 3,106). Гексан, не проявив ингибиторной активности по отношению к обоим ферментам. Результаты по α-глюкозидазе для экстракта и субфракций были найдены значимыми

( $p < 0,05$ ). Анализ методом квадрупольно-времяпролетной ГХ-МС позволил идентифицировать в качестве основных компонентов органические кислоты, хинолоны, хинон, фенольные соединения и додекаборан. Впервые сообщается о присутствии в образцах *M. pudica* додекаборана, обладающего высокой способностью к захвату свободных радикалов. Высокие значения ТРС и ТФС могут объяснять ингибирующее действие *M. pudica* на ферменты, которое может способствовать регуляции поглощения глюкозы и, следовательно, гомеостаза глюкозы. Полученные результаты свидетельствуют, что *M. pudica* может быть предложена в качестве превосходной альтернативы для будущих противодиабетических субстанций.

### Low-temperature headspace-trap gas chromatography with mass spectrometry for the determination of trace volatile compounds from the fruit of *Lycium barbarum* L (Низкотемпературная парофазная ГХ-МС с газоуловителем для определения следовых количеств летучих соединений из плодов *Lycium barbarum* L [Дерезы обыкновенной])

Фанцзяо Чэнь (Fangjiao Chen), Юэ Су (Yue Su), Фан Чжан (Fang Zhang), Иньлун Го (Yinlong Guo)  
*Journal of Separation Science*, т. 38, вып. 4, стр. 670–676, январь 2015

*Lycium barbarum* L. содержит значительное количество сахаридов, и высокая температура может привести к разложению сахаридов и образованию большого количества воды. Кроме того, концентрация летучих соединений в плодах *L. barbarum* L. весьма низка. Следовательно, обычный парофазный метод для исследования летучих соединений из плодов *L. barbarum* L. малопригоден. Поскольку парофазный газовый хроматограф с масс-спектрометром, снабженный ловушкой-газоуловителем, является отличным инструментом для анализа следовых количеств веществ, был разработан усовершенствованный метод, основанный на низкотемпературном (30 °C) обогащении и парофазной экстракции летучих соединений из плодов *L. barbarum* L. Паровая фаза пробы извлекается в течение 17 циклов при 30 °C. Каждый раз экстрагируемые соединения концентрируются в ловушке (Телпах ТА и Телпах GR, 1:1). На заключительном этапе все летучие соединения подавались в газовый хроматограф после термической десорбции. В общей сложности описанным выше способом были идентифицированы 57 соединений. Идентификация выполнялась посредством поиска масс-спектров, индексов удерживания и точного измерения масс.

### Analysis of pesticide residues in fruits and vegetables using gas chromatography–high resolution time-of-flight mass spectrometry (Анализ остаточных количеств пестицидов в плодовоовощных культурах с использованием газовой хроматографии в сочетании с времяпролетной масс-спектрометрией высокого разрешения)

Нозля Бельмонте Валлес (Noelia Belmonte Valles), Саманта Уклес (Samanta Uclés), Наталия Безил (Natalia Besil), Милагрос Мескуа (Milagros Mezcúa), Амадео Р. Фернандес-Альба (Amadeo R. Fernández-Alba)  
*Analytical Methods*, вып. 5, 2015

В этой работе описывается исследование операционных параметров и скоростной методики автоматического определения остаточных количеств пестицидов в плодовоовощных культурах с использованием газовой хроматографии в сочетании с высокоточной времяпролетной масс-спектрометрией со сбором точных данных масс во всем спектре в режиме электронной ионизации (EI) на основе использования собственной базы данных точных масс. База данных содержит 110 соединений, пригодных для анализа методом ГХ, с основными фрагментарными ионами, образующимися при ионизации электронами с энергией 70 эВ. Кроме того, она включает время удерживания каждого пестицида при постоянной скорости потока. Эта пользовательская база данных была связана с коммерческим программным обеспечением, с помощью которого из необработанных данных GC/TOF MS для каждой пробы извлекались все соединения, которые могли представлять интерес и которые затем сопоставлялись с базой данных для поиска целевых соединений в пробе. С использованием методики автоматического обнаружения целевых пестицидов в помидорах, апельсинах и зеленом луке были протестированы добавки этилацетатных экстрактов с концентрациями 10, 20, 50 и 100 мкг кг<sup>-1</sup>; при уровне 10 мкг кг<sup>-1</sup> в помидорах было обнаружено 100% пестицидов, в луке — 97,8% и в апельсине — 95,6%. Эти результаты были получены при скорости сбора данных 4 ГГц (12 000 FWHM) и допустимой ошибке в массе 5 млн д. Интервал времени удерживания для обнаружения и идентификации составлял ±0,2 мин. Для всех соединений во всех матрицах были получены адекватные линейные отклики в диапазоне 10–100 мкг кг<sup>-1</sup>, хотя в некоторых случаях наблюдались эффекты насыщения. Разработанный метод был применен к реальным пробам, и результаты качественного и количественного анализа были сопоставимы с полученными с использованием ГХ-МС-МС с тройным квадруполом.

### Two-Dimensional Retention Indices Improve Component Identification in Comprehensive Two-Dimensional Gas Chromatography of Saffron (Улучшение идентификации компонентов в комплексной двумерной газовой хроматографии компонентов шафрана благодаря использованию двумерных индексов удерживания)

Мин Цзян (Ming Jiang), Чадин Кулсин (Chadin Kulsing), Йада Нолвачай (Yada Nolvachai), Филип Дж. Марриотт (Philip J. Marriott)  
*Analytical Chemistry*, 2015, 87 (11), стр. 5753–5761

Для повышения точности анализа компонентов шафрана была применена комплексная двумерная газовая хроматография в сочетании с времяпролетной масс-спектрометрией с определением точных масс и использованием индексов удерживания в двумерном разделении. Процесс представляет собой идентификацию веществ в трех измерениях. Помимо специфичности времяпролетной МС с точным определением масс и индексами удерживания первого измерения (<sup>1</sup>/), описана простая методика, использующая прямые многократные вводы проб с пошаговым программированием температуры для построения непрерывных кривых для эталонного ряда алканов в двумерной ГХ. Это дает доступ к расчетным индексам удерживания второго измерения (<sup>2</sup>/). Надежность расчетного индекса <sup>2</sup>/ была оценена с использованием тестовой смеси Гроба и насыщенных алканов, что показало хорошую корреляцию между полученными ранее и значениями из литературы с коэффициентом корреляции R<sup>2</sup>, равным 0,9997. При этом, по существу, свойство удерживания пиков в двумерном пространстве газовой хроматографии сводится к индексу удерживания в каждом измерении, который должен быть ценным средством подтверждения идентификации. Преимущество данных <sup>2</sup>/ в дополнение к совпадению с библиотекой индексов <sup>1</sup>/ и масс-спектров было продемонстрировано путем постепенного сокращения числа возможных соединений, соответствующих пикам, наблюдаемым для шафрана. 114 аналитов были оценены в соответствии со значениями <sup>1</sup>/ и <sup>2</sup>/ в пределах ±20 единиц индексов эталонных значений, и по соответствию спектра МС получены статистика совпадения 750 (включая точность определения массы молекулярного иона <20 млн д.) и их возможные формулы. Описанная методика обеспечивает новые перспективы использования всех возможностей двумерного разделения (ГХ-ГХ) в сочетании с поиском совпадения в библиотеке МС при анализе сложных проб и усовершенствование идентификации компонентов.

## СУДЕБНО-МЕДИЦИНСКАЯ ТОКСИКОЛОГИЧЕСКАЯ ЭКСПЕРТИЗА

### Determination of $^{13}\text{C}/^{12}\text{C}$ ratios of endogenous urinary 5-amino-imidazole-4-carboxamide 1 $\beta$ -D-ribofuranoside (AICAR) (Определение соотношения $^{13}\text{C}/^{12}\text{C}$ эндогенного 5-амино-имидазол-4-карбоксамид 1 $\beta$ -D-рибофуранозид (AICAR) в моче)

Томас Пайпер (Thomas Piper), Андреас Томас (Andreas Thomas), Норберт Баум (Norbert Baume), Тимоти Соболевски (Timothy Sobolevsky), Мартиал Саджи (Martial Saugy), Григорий Родченков (Grigory Rodchenkov), Вильгельм Шанцер (Wilhelm Schänzer), Марио Тревис (Mario Thevis) *Rapid Communications in Mass Spectrometry*, т. 28, вып. 11, 15 июня 2014, стр. 1194–1202

AICAR (5-амино-имидазол-4-карбоксамид 1 $\beta$ -D-рибофуранозид) запрещен для применения в спорте согласно правилам, установленным Всемирным антидопинговым агентством. Лаборатории, проводящие допинг-контроль, определяют пробы, подозрительные в плане злоупотребления AICAR, путем измерения его концентрации в моче и сравнения наблюдаемого уровня с естественными концентрациями. Поскольку концентрации AICAR в моче у разных людей могут сильно отличаться, этот подход требует дополнительного метода, который способен однозначно доказать экзогенное происхождение AICAR. Поэтому была разработана и подтверждена методика определения соотношения изотопов углерода AICAR в моче.

### Measuring xenon in human plasma and blood by gas chromatography/mass spectrometry (Измерение концентрации ксенона в человеческой плазме и крови с помощью газовой хроматографии/масс-спектрометрии)

Марио Тревис (Mario Thevis)\*, Томас Пайпер (Thomas Piper), Ганс Гейер (Hans Geyer), Андреас Томас (Andreas Thomas), Максимилиан С. Шефер (Maximilian S. Schaefer), Петер Киенбаум (Peter Kienbaum), Вильгельм Шанцер (Wilhelm Schänzer) *Rapid Communication in Mass Spectrometry*, 15 июля 2014, 28(13), стр. 1501–1506

Из-за благоприятных фармакокинетических свойств и минимальных побочных действий ксенон хорошо зарекомендовал себя в современной анестезии. Недавние исследования показали дополнительное внутри- и послеоперационное нейро-, кардио- и нефропротективное действие этого инертного газа. Поскольку было обнаружено, что образование индуцированного гипоксией фактора 1 $\alpha$  (HIF-1 $\alpha$ ) и его последующее воздействие в виде эритропоэтина, а также ингибирование обратного захвата норадреналина играют ключевую роль в этом контексте, возник вопрос, подлежит ли использование ксенона допинг-контролю и профилактическим допинг-исследованиям. Целью настоящего исследования, следовательно, было оценить, возможно ли обнаружение применения ксенона в пробах допинг-контроля на оборудовании, которое обычно доступно в испытательных лабораториях спортивного допинг-контроля.

### New Synthetic Cannabinoid – Methyl 2-([1-(5-Fluoro-Pentyl)-3-Methyl-1H-Indol-3-Ylcarbonyl]-Amino)Butyrate—as a Designer Drug (Новый синтетический каннабиноид — метил 2-([1-(5-фтор-пентил)-3-метил-1H-индол-3-ил-карбонил]-амино)бутират — как «дизайнерский» наркотик)

В. А. Шевырин (V. A. Shevyrin), Ю. Ю. Моржерин (Yu. Yu. Morzherin), В. П. Мелкозеров (V. P. Melkozerov), А. С. Неверо (A. S. Nevero) *Chemistry of Heterocyclic Compounds*, июль 2014, т. 50, вып. 4, стр. 583–586

Синтетические каннабиноиды, изучаемые с целью получения новых фармацевтических препаратов [1, 2], в последние годы появились в модифицированной форме кустарных, или «дизайнерских» наркотиков, которые циркулируют нелегально во всем мире [3–11]. В виду того что до недавнего времени химические структуры и данные фармацевтических испытаний для распространяемых соединений публиковались в научной и патентной литературе, распространение соединений, которые не были описаны в литературе и были синтезированы по аналогии с известными наркотическими веществами, которые уже запрещены в ряде стран, стало правилом. Синтезируются не только соединения уже известных групп синтетических каннабиноидов, но появляются и новые группы [10, 11]. Этот факт свидетельствует о незаконном поведении основательной и систематической работы по синтезу новых типов каннабиноидов и их тестировании на населении планеты. По этой причине контроль над распространением синтетических наркотиков является важной международной проблемой, первым этапом в решении которой является выяснение химической структуры вновь появляющихся соединений.

### Synthetic cannabinoids as designer drugs: New representatives of indol-3-carboxylates series and indazole-3-carboxylates as novel group of cannabinoids. Identification and analytical data (Синтетические каннабиноиды как «дизайнерские» наркотики: новые представители ряда индол-3-карбоксилатов и индазол-3- карбоксилатов как новая группа каннабиноидов. Идентификация и аналитические данные)

Вадим Шевырин (Vadim Shevyrin), Владимир Мелкозеров (Vladimir Melkozerov), Александр Неверо (Alexander Nevero), Олег Ельцов (Oleg Eltsov), Александр Барановский (Alexander Baranovsky), Юрий Шафран (Yuri Shafran) *Forensic Science International*, ноябрь 2014, т. 244, стр. 263–275

С помощью газовой хроматографии и масс-спектрометрии (ГХ-МС), в том числе масс-спектрометрии с высоким разрешением, а также сверхвысокоэффективной жидкостной хроматографии в сочетании с тандемной масс-спектрометрией с высоким разрешением, ядерной магнитно-резонансной спектроскопии (ЯМР) и ИК-Фурье-спектроскопии определена структура новых синтетических каннабиноидов, представителей группы индол- и индазол-3-карбоксилатов, используемых в курительных смесях. Полученные аналитические данные делают возможным надежную идентификацию этих соединений в ходе анализа криминальных конфискатов.

**Identification and analytical characteristics of synthetic cannabinoids with an indazole-3-carboxamide structure bearing a *N*-1-methoxycarbonylalkyl group (Идентификация и аналитические характеристики синтетических каннабиноидов со структурой индазол-3-карбоксамид, содержащих *N*-1-метоксикарбонилалкильную группу)**

Вадим Шевырин (Vadim Shevyrin), Владимир Мелкозеров (Vladimir Melkozzerov), Александр Неверо (Alexander Nevero), Олег Ельцов (Oleg Eltsov), Юрий Шафран (Yuri Shafran), Юрий Моржерин (Yuri Morzherin), Альберт Т. Лабедев (Albert T. Labedev)  
*Analytical and Bioanalytical Chemistry*, август 2015, т. 407, вып. 21, стр. 6301–6315

Новые запрещенные психотропные вещества представляют собой серьезную угрозу для здоровья во всем мире. Подобные соединения обычно не проходят предварительные фармакологические испытания. В 2014 году мы идентифицировали пять новых синтетических каннабиноидов со структурой индазол-3-карбоксамид, содержащих *N*-1-метоксикарбонилалкильную группу. Соединения обладают очень высокой каннабисоподобной активностью, вызвавшей массовые тяжелые интоксикации и смерти. Соединения были идентифицированы с помощью газовой хроматографии и масс-спектрометрии (ГХ-МС), в том числе масс-спектрометрии высокого разрешения, а также сверхвысокоэффективной жидкостной хроматографии в сочетании с тандемной масс-спектрометрией с высоким разрешением<sup>2</sup> и <sup>1</sup>H и <sup>13</sup>C ядерной магнитно-резонансной спектроскопии (ЯМР). Были изучены особенности масс-спектральной фрагментации соединений после электронной ионизации (EI) и диссоциации, индуцируемой соударением (CID). Аналитические характеристики соединений позволят идентифицировать их в различных материалах, конфискованных у криминальных лиц.

**Analytical characterization of some synthetic cannabinoids, derivatives of indole-3-carboxylic acid (Аналитические характеристики некоторых синтетических каннабиноидов, являющихся производными индол-3-карбоновой кислоты)**

Вадим Шевырин (Vadim Shevyrin), Владимир Мелкозеров (Vladimir Melkozzerov), Александр Неверо (Alexander Nevero), Олег Ельцов (Oleg Eltsov), Юрий Шафран (Yuri Shafran)  
*Forensic Science International*, т. 232, вып. 1–3, 10 октября 2013, стр. 1–10

С помощью газовой хроматографии и масс-спектрометрии (ГХ-МС), в том числе масс-спектрометрии с высоким разрешением, а также сверхвысокоэффективной жидкостной хроматографии в сочетании с тандемной масс-спектрометрией с высоким разрешением, ядерной магнитно-резонансной спектроскопии (ЯМР) и ИК-Фурье-спектроскопии была установлена структура ряда новых синтетических каннабиноидов, производных индол-3-карбоновой кислоты. Разработаны методики обнаружения соединений в смесях с использованием хроматографического разделения и масс-спектроскопического определения. Аналитические данные, полученные в работе, сделают возможной надежную идентификацию синтетических каннабиноидов нового типа в процессе судебно-медицинской экспертизы.

**Expanding sports drug testing assays: Mass spectrometric characterization of the selective androgen receptor modulator drug candidates RAD140 and ACP-105 (Расширение анализов на допинг-контроль: масс-спектрометрическое определение характеристик потенциального селективного модулятора андрогенных рецепторов RAD140 и ACP-105)**

Марио Тревис (Mario Thevis), Томас Пайпер (Thomas Piper), Саймон Беук (Simon Beuck), Ганс Гейер (Hans Geys), Вильгельм Шанцер (Wilhelm Schänzer)  
*Rapid Communications in Mass Spectrometry*, т. 27, вып. 11, стр. 1173–1182

Аналитическая характеристика веществ, которые могут быть использованы не должным образом, имеет большое значение. В настоящем исследовании было изучено масс-спектрометрическое поведение потенциальных селективных модуляторов андрогенных рецепторов RAD140 (содержащего ядро 5-фенилоксидиазола) и ACP-105 (содержащего *N*-замещенный фармакофор тропанола) в режиме ESI-MS(/MS) и EI-MS(/MS). В соответствии с установленными протоколами был синтезирован эталонный материал, и выяснены механизмы диссоциации RAD140 и ACP-105 методом жидкостной хроматографии с квадрупольно-времяпролетной МС с ионизацией электрораспылением или применением ионной/орбитальной ловушки и газовой хроматографии в сочетании с квадрупольно-времяпролетной масс-спектрометрией высокого разрешения с применением электронной ионизации.

**Hydrogen isotope ratio mass spectrometry and high-resolution/high-accuracy mass spectrometry in metabolite identification studies: Detecting target compounds for sports drug testing (Масс-спектрометрия изотопных соотношений водорода и высокоточная масс-спектрометрия с высоким разрешением в исследованиях с идентификацией метаболитов: обнаружение целевых соединений для допинг-контроля)**

Марио Тревис (Mario Thevis), Томас Пайпер (Thomas Piper), Стивен Хорнинг (Stevan Horning), Дитер Жучелка (Dieter Juchelka), Вильгельм Шанцер (Wilhelm Schänzer)  
*Rapid Communications in Mass Spectrometry*, т. 27, вып. 17, стр. 1904–1912, 15 сентября 2013

Сочетание масс-спектрометрии изотопных соотношений с масс-спектрометрией высокого разрешения существенно упрощает и ускоряет идентификацию метаболитов меченых дейтерием соединений в моче. Этот принцип, особенно актуальный в допинг-контроле, применим и к другим областям исследования лекарственных препаратов, позволяя пропустить подготовку веществ с радиоактивной меткой и правила обращения с ними.

**3-Naphthoylindazoles and 2-naphthoylbenzimidazoles as novel chemical groups of synthetic cannabinoids: Chemical structure elucidation, analytical characteristics and identification of the first representatives in smoke mixtures (3-Нафтоилиндазолы и 2-нафтоилбензоимидазолы как новые химические группы синтетических каннабиноидов: уточнение химической структуры, аналитических характеристик и идентификация первых представителей в курительных смесях)**

Вадим Шевырин (Vadim Shevyrin), Владимир Мелкозеров (Vladimir Melkozorov), Александр Неверо (Alexander Nevero), Олег Ельцов (Oleg Eltsov), Юрий Шафран (Yuri Shafraan)  
*Forensic Science International*, т. 242, сентябрь 2014, стр. 72–80

С помощью газовой хроматографии и масс-спектрометрии (ГХ-МС), в том числе масс-спектрометрии с высоким разрешением, а также сверхвысокоэффективной жидкостной хроматографии в сочетании с тандемной масс-спектрометрией с высоким разрешением, ядерной магнитно-резонансной спектроскопии (ЯМР) и ИК-Фурье-спектроскопии была установлена структура ряда новых синтетических каннабиноидов, а именно: 1-(5-фторпентил)-1*H*-индазол-3-ил(нафтален-1-ил)метанон, нафтален-1-ил(1-пентил-1*H*-бензо[*d*]имидазол-2-ил)метанон и 1-(5-фторпентил)-1*H*-бензо[*d*]имидазол-2-ил(нафтален-1-ил)метанон. Полученные аналитические данные позволяют надежно идентифицировать эти соединения при анализе конфискованных запрещенных веществ, в том числе курительных смесей.

## ОБЩИЕ ВОПРОСЫ

**Mass Spectrometric Study of the Gas-Phase Difluorocarbene Expulsion of Polyfluorophenyl Cations via F-Atom Migration (Масс-спектрометрическое исследование выделения дифторкарбена в газовой фазе катионами полифторфенила посредством переноса атома фтора)**

Хао-Ян Ван (HaoYang Wang), Цзин Гао (Ying Gao), Фан Чжан (Fang Zhang), Чун-Тянь Ю (Chong-Tian Yu), Чу Сюй (Chu Xu), Инь-Лун Го (Yin-Long Guo)  
*Journal of the American Society for Mass Spectrometry*, декабрь 2013, т. 24, вып. 12, стр. 1919–1926

В настоящее время производится и применяется все большее количество фторсодержащих лекарственных препаратов, пестицидов, химических веществ и продуктов тонкого химического синтеза, особенно таких, которые содержат полифторированные ароматические фрагменты. Тем не менее количество сведений о масс-спектрометрическом поведении этих соединений в литературе остается ограниченным. В данной статье описывается непредвиденный, но при этом общий механизм диссоциации в газовой фазе полифторированных ароматических соединений в масс-спектрометрии: выделение дифторкарбена (потеря нейтральных частиц массой 50 Да). Результаты измерений точных масс, эксперименты с применением тандемной масс-спектрометрии и расчеты в соответствии теорией функционала плотности подтверждают внутримолекулярный механизм переноса атома F внутри кольца с отрывом CF<sub>2</sub>. На основании оценки данных масс-спектрометрии с применением электронной ионизации более чем для 40 полифторированных ароматических соединений из банка данных Национального института стандартов и технологий авторы предложили общую концепцию влияния групп заместителей на процесс диссоциации полифторированных ароматических соединений с образованием дифторкарбена в режиме масс-спектрометрии с электронной ионизацией. Эти исследования обогатили знания о специфической реакционной способности полифторированных ароматических соединений в газовой фазе и будут полезны при дальнейших аналитических исследованиях этих соединений методом масс-спектрометрии.

**Comprehensive two-dimensional gas chromatography-mass spectrometry: Recent evolution and current trends (Комплексная двумерная газовая хроматография в сочетании с масс-спектрометрией: последние достижения и современные тенденции)**

Петер К. Транчида (Peter Q. Tranchida), Флавио А. Франчина (Flavio A. Franchina), Паола Дуго (Paola Dugo), Луиджи Монделло (Luigi Mondello)  
*Mass Spectrometry Reviews*, 30 сентября 2014 doi: 10.1002/mas.21443

Предметом исследования данной работы является развитие и современные тенденции комплексной двумерной газовой хроматографии и масс-спектрометрии (ГХ-ГХ/МС) в сравнении с обзором, посвященным этому методу и опубликованным в начале 2008 года (Монделло (Mondello) и др., 2008 г.). Действительно, с тех пор был достигнут значительный прогресс в области масс-спектрометрии, значительно превышающий тот, что наблюдается в ГХ-ГХ. В частности, в настоящей статье рассматривается сочетание новых разновидностей масс-спектрометров [одноквадрупольных, трехквадрупольных, для измерения соотношения изотопов, времяпролетных с низким и высоким разрешением, гибридных (квадрупольно-времяпролетных)] с системами двумерной газовой хроматографии и определяется место комплексной двумерной газовой хроматографии в более широком контексте науки о разделении.

**Gas-phase fluorine migration reactions in the radical cations of pentafluorosulfanylbenzene (Aryl-SF<sub>5</sub>) and benzenesulfonyl fluoride (Aryl-SO<sub>2</sub>F) derivatives and in the 2,5-xyllylfluoroiodonium ion (Реакции с переносом фтора в газовой фазе радикал-катионов производных пентафторсульфанилбензола (Aryl-SF<sub>5</sub>) и бензолсульфонил фторида (Aryl-SO<sub>2</sub>F) и ионе 2,5-ксилилфторйодония)**

Ин гao (Ying Gao), Хао-Ян Ван (Hao-Yang Wang), Сян Чжан (Xiang Zhang), Цзя-шунь Чен (Jia-Shun Cheng), Фан Чжан (Fang Zhang), ИньЛун Го (YinLong Guo)  
*Journal of Mass Spectrometry*, июнь 2014, т. 49, вып. 6, стр. 481–489

Реакции Aryl-SF<sub>5</sub><sup>•+</sup> и Aryl-SO<sub>2</sub>F<sup>•+</sup> в газовой фазе были исследованы методом тандемной масс-спектрометрии с применением электронной ионизации. В подобных реакциях происходит перенос атома F от атома S в арильную группу с образованием дочернего иона Aryl-F<sup>•+</sup> с последующим выделением соответственно SF<sub>4</sub> или SO<sub>2</sub>. В частности, в процессе тандемной МС-МС при образовании катиона 4-пентафторсульфанилфенола, 4-SF<sub>5</sub>C<sub>6</sub>H<sub>4</sub><sup>•+</sup> (*m/z* 203) из 4-NO<sub>2</sub>C<sub>6</sub>H<sub>4</sub>SF<sub>5</sub><sup>•+</sup> за счет потери NO<sub>2</sub> может происходить несколько реакций переноса атома F к дочернему иону C<sub>6</sub>H<sub>4</sub>F<sub>3</sub><sup>•+</sup> (*m/z* 133) с выделением SF<sub>2</sub>. Были также изучены газофазные реакции 2,5-ксилилфторйодония (pXyl-I-F, *m/z* 251) с использованием тандемной масс-спектрометрии с применением ионизации распылением в электроспрее, при которых протекает аналогичный процесс переноса атома F от атома I в арильную группу с образованием катиона-радикала 2-фтор-*л*-ксилола (или его изомера 4-фтор-*м*-ксилола, *m/z* 124) путем восстановительного элиминирования атома йода. Все эти реакции переноса атома F в газовой фазе от гетероатома в арильную группу приводят к образованию ионов-продуктов, в которых арильная группа сочетается с атомом фтора с формированием новой связи C<sub>Aryl</sub>-F. Для выяснения механизмов этих реакций проводились расчеты в соответствии с теорией функционала плотности.

## Determination of Chlorophenoxy Acid Methyl Esters and Other Chlorinated Herbicides by GC High-resolution QTOF-MS and Soft Ionization (Определение метиловых эфиров хлорфеноксикислоты и других хлорированных гербицидов с использованием квадрупольно-времяпролетной масс-спектрометрии высокого разрешения и мягкой ионизации)

Виорика Лопес-Авила (Viorica Lopez-Avila), Патрик Роач (Patrick Roach), Рэндал Урдал (Randall Urdahl)  
*Analytical Chemistry Insights*, 2015, т. 10, стр. 1–9

Описано применение газовой хроматографии совместно с квадрупольно-времяпролетной масс-спектрометрией и мягкой ионизацией, созданной плазмой инертного газа, для определения различных метиловых эфиров хлорфеноксикислоты и нескольких хлорированных гербицидов. Этот источник ионизации, создаваемый плазмой, с возможностью задания длины волны в зависимости от природы газа (Xe, Kr, Ar, Ne или He) обеспечивает ионизацию соединений, которые могут быть проанализированы с помощью ГХ, с энергиями ионизации ниже 8,4, 10, 11,6, 16,5 или 22,4 эВ соответственно. К преимуществам мягкой ионизации относится возможность получить молекулярные ионы с большей интенсивностью, уменьшение фрагментации и снижение фонового шума по сравнению с электронной ионизацией. В представленном здесь исследовании для двух плазменных газов показано, что плазма криптона, которая мягче, чем плазма аргона, позволяет получить молекулярные ионы с относительной интенсивностью >60% для 11 из 16 исследуемых соединений. При использовании этой «настраиваемой» плазмы для ионизации аналитов существует возможность селективной ионизации и уменьшения фрагментации, что может способствовать увеличению чувствительности и уточнению структуры, особенно при использовании масс-спектрометрии высокого разрешения, которая позволяет получить точные массы с ошибкой в пределах нескольких частей на миллион (млн д.). Данные, полученные при использовании плазмы аргона для реально существующих матриц, например экстракта мяты, экстракта сливы и экстракта апельсиновой кожуры, с добавлением 16 тестируемых соединений, показывают, что тестируемые соединения могут быть обнаружены при концентрации экстракта 1–10 пг/мкл, а такие соединения, как ментон, лимонен, эвкалиптол, пинен, кариофиллен и другие изомеры C<sub>15</sub>H<sub>24</sub>, которые присутствуют в экстрактах мяты и апельсиновой кожуры на уровнях от млн д. до процентов, очевидно, не мешают определению метиловых эфиров хлорфеноксикислоты или хлорированных гербицидов, хотя влияние матрицы проявлялось и при добавлении тестируемых соединений на уровне 1–10 пг/мкл экстракта.

## МЕТАБОЛОМИКА И ПРОТЕОМИКА

### Identification of drug targets by chemogenomic and metabolomic profiling in yeast (Идентификация целевых лекарственных препаратов по определению химио-геномного и метаболомического профиля дрожжей)

М. Ву (M. Wu), М. Чжэн (M. Zheng), У. Чжан (W. Zhang), С. Суреш (S. Suresh), У. Шлехт (U. Schlecht), У. Л. Фитч (W. L. Fitch), С. Аронов (S. Aronov), С. Бауманн (S. Baumann), Р. Дэвис (R. Davis), Р. Сент-Онж (R. St. Onge), Д. Л. Дилл (D. L. Dill), Г. Пельтц (G. Peltz)  
*Pharmacogenet Genomics*, 22 декабря 2012, (12):877–86

**ЦЕЛЬ:** Для лучшего понимания биологического механизма заболеваний очень важна характеристика молекулярной мишени для подтвержденных клиническими испытаниями или новых лекарственных препаратов. Процедуру определения химио-геномного профиля в дрожжах выбрали для идентификации целевых лекарственных препаратов из-за ее простоты и доступности штаммов с отдельными делециями во всех генах. Измерение отклика, вызванного лекарственными препаратами в клеточных метаболитах, может дать важные сведения об их воздействии, поэтому был изучен эффект определения объединенного химио-генетического и метаболомического профиля дрожжей на диагностику лекарственных препаратов. **ОСНОВНЫЕ МЕТОДИКИ:** Для характеристики пяти лекарственных препаратов, действующих в двух биологически важных направлениях, были определены химио-геномные и метаболомические профили дрожжей. Была разработана новая методика расчетов, использующая выбранную метаболомическую сеть; с помощью этой методики были идентифицированы гены, которые могут отвечать за обнаруженные метаболомические различия. **РЕЗУЛЬТАТЫ И ВЫВОДЫ:** Сочетание метаболомического и химио-геномного профилирования наряду с данными анализа, выполненного с использованием новой методики расчетов, позволяет достоверно определить ферменты, на которые воздействуют пять исследованных лекарственных препаратов. Кроме того, эта новая методика расчетов будет способствовать идентификации генов, которые являются причиной метаболомических различий или мишеней лекарственных препаратов.

### Opiate-induced changes in brain adenosine levels and narcotic drug responses (Изменения уровней аденозина в мозге, индуцированные опиатами, и реакции на наркотические вещества)

М. Ву (M. Wu), М. Чжэн (M. Zheng), Р. Лобато (R. Lobato), Д. Бойсон (D. Boison), Дж. Д. Кларк (J.D. Clark), Г. Пельтц (G. Peltz)  
*Neuroscience*, 3 января 2013, 228: 235–42

Информация о метаболомических изменениях, которые обуславливают нейроповеденческие отклики, в том числе наркоманию, крайне ограничена. Вполне вероятно, что индуцированные опиатами метаболомические изменения мозга могут способствовать некоторым фармакодинамическим эффектам опиоидных препаратов. Для изучения этой проблемы с использованием полуперсонализированного метода был построен профиль метаболомических откликов мозга, индуцированных опиатами, у мышей в линиях C57BL/6 и 129Sv1, которые проявляют большую разницу в склонности к развитию наркотической зависимости. Увеличение доз морфина (10–40 мг/кг), вводимых в течение четырех дней, избирательно индуцировали двукратное снижение ( $p < 0,00005$ ) интенсивности сигнала аденозина в стволе головного мозга мышей C57BL/6, которые проявляли симптомы наркотической зависимости, но не снижали интенсивности сигнала аденозина у мышей линии 129Sv1, не проявляющих симптомов зависимости. На основании этого результата было исследовано влияние аденозина на зависимость среди генетически модифицированных мышей с изменениями интенсивности аденозина в головном мозге и в фармакологических экспериментах. Синдром отмены морфина значительно снижался ( $p < 0,0004$ ) у генетически модифицированных мышей с пониженным сигналом аденозина в стволе головного мозга и в результате воздействия на аденозиновый рецептор (1) [A(1)] антагонистом (2-хлор-N6-циклопентиладенозин, 0,5 мг/кг) или на рецептор A(2a) [A(2a)] антагонистом (SCH 58261, 1 мг/кг). Эти результаты свидетельствуют о важной роли гомеостаза аденозина в реакции на наркотические вещества. Изменения уровня аденозина в головном мозге, индуцированные опиатами, могут объяснить многие важные нейроповеденческие особенности, связанные с зависимостью от опиатов и их отменой.

### Geranylinalool Synthases in Solanaceae and Other Angiosperms Constitute an Ancient Branch of Diterpene Synthases Involved in the Synthesis of Defensive Compounds (Гераниоллиналол синтазы в пасленовых и других покрытосеменных составляют древнюю ветвь дитерпеновых синтаз, участвующих в синтезе защитных соединений)

Василики Фалара (Vasiliki Falara), Хуан М. Альба (Juan M. Alba), Мериджн Р. Кант (Merijn R. Kant), Роберт С. Шууринк (Robert C. Schuurink), Эран Пичерски (Eran Pichersky)  
*Plant Physiology*, сентябрь 2014, т. 166, вып. 1, стр. 428–441

Многие покрытосеменные растения, в том числе базальные двудольные и однодольные, в ответ на биологический вызов выделяют (*E,E*)-4,8,12-триметилдека-1,3,7,11-тетраен, являющийся производным гераниоллиналла. Обнаружение ранее гераниоллиналол синтазы (ГЛС) арабидопсиса (*Arabidopsis thaliana*), принадлежащей к семейству терпеновых синтаз (TPS) филогенетической ветви *e/f*, и двух ГЛС бобовых, относящихся к ветви TPS-g, не проясняло основного механизма синтеза гераниоллиналла в растениях. В этой работе был охарактеризован ген TPS-*e/f* томатов (*Solanum lycopersicum*), TPS46, кодирующий (*SIGLS*), и его гомолог (*NaGLS*) из растения Табак оттянутый (*Nicotiana attenuata*). Значение  $K_m$  *SIGLS* для геранилгеранил дифосфата составило 18,7 мкм с интенсивностью оборота 6,85 с<sup>-1</sup>. В листьях и цветах *N. attenuata*, который постоянно синтезирует 17-гликозиды гераниоллиналла, происходит постоянная экспрессия *NaGLS*, однако ген может быть индуцирован в листьях метилжасмонатом. В томатах *SIGLS* при нормальном росте не экспрессируется ни в одной части растения, но индуцируется в листьях при обработке аламетитином и метилжасмонатом. *SIGLS*, *NaGLS*, *AtGLS* и некоторые другие гераниоллиналол синтазы, охарактеризованные исключительно в лабораторных условиях, происходят из четырех разных семейств двудольных и составляют отдельную филогенетическую ветвь TPS-*e/f*, дивергенция которой от каурен синтаз, также в ветви TPS-*e/f*, происходит до расщепления растений на голосемянные и покрытосемянные. Ранняя дивергенция этой ветви и активности ГЛС генов в этой ветви в разных семействах двудольных позволяет предположить, что активность ГЛС, кодируемая этими генами, предшествует расщеплению на голосемянные и покрытосемянные. Тем не менее хотя последовательность TPS, относящаяся к этой родословной ГЛС, была недавно найдена в базальных двудольных, ни одна представительная последовательность еще не была найдена в однодольных или непокрытосемянных растениях.

### Mapping of the circulating metabolome reveals $\alpha$ -ketoglutarate as a predictor of morbid obesity-associated non-alcoholic fatty liver disease (Выявление $\alpha$ -кетоглутарата как прогностического показателя неалкогольного жирового заболевания печени, связанного с патологическим ожирением, путем картирования циркулирующего метаболома)

Э. Родригес-Галлеро (E. Rodríguez-Gallego), М. Гуирро (M. Guirro), М. Рьера-Боррул (M. Riera-Borrull), А. Хернандес-Агилера (A. Hernández-Aguilera), Р. Марине-Касадо (R. Mariné-Casadó), С. Фернандес-Арройо (S. Fernández-Arroyo), Р. Бельран-Дебон (R. Beltrán-Debón), Ф. Сабенч (F. Sabench), М. Хернандес (M. Hernández), Д. дель Кастилло (D. del Castillo), Дж.А. Мендес (J.A. Menendez), Дж. Кампс (J. Camps), Р. Рас (R. Ras), Л. Арола (L. Arola), Дж. Джовен (J. Joven)  
*International Journal of Obesity*, (28 марта 2014) | doi:10.1038/ijo.2014.53

Авторы рассматривают анализ плазмы крови пациентов с патологическим ожирением, перенесших бариатрическое хирургическое вмешательство, методом жидкостной и газовой хроматографии в сочетании с квадрупольно-времяпролетной масс-спектрометрией как средство для получения комплексного показателя уровней метаболитов, используя неспецифический метаболомический подход. На основании полученных результатов был разработан метод газовой хроматографии в сочетании с квадрупольно-времяпролетной масс-спектрометрией для точного количественного анализа  $\alpha$ -кетоглутарата в плазме крови для изучения возможности его применения в качестве нового биомаркера для обнаружения неалкогольного жирового заболевания печени.

### Mass Spectrometry Combinations for Structural Characterization of Sulfated-Steroid Metabolites (Комбинации масс-спектрометрических методов для характеристики структуры метаболитов сульфатированных стероидов)

Юэтянь Ян (Yuetian Yan), Дон Л. Ремпел (Don L. Rempel), Тимоти Е. Холи (Timothy E. Holy), Микаэль Л. Гросс (Michael L. Gross)  
*Journal of The American Society for Mass Spectrometry*, май 2014, т. 25, вып. 5, стр. 869–879

Характеристика конъюгатов стероидов, которые часто встречаются в виде метаболитов, связана с определенными трудностями. Один из вариантов применения — анализ мочи самки мыши, в которой конъюгаты стероидов являются важными лигандами для нейронов, распознающих феромоны. Ранее два анализа с наиболее интенсивным сигналом в моче мыши были охарактеризованы методами масс-спектрометрии (МС) и ЯМР как сульфатированные стероиды, однако существует намного больше соединений, структура которых пока не установлена. Учитывая, что их физические и химические свойства схожи, они, вероятно, имеют кольцевую структуру, характерную для сульфатированных стероидов. Поскольку эти соединения встречаются в моче мышей и в других образцах в следовых количествах, их трудно охарактеризовать методом ЯМР. Таким образом, масс-спектрометрические методы становятся основным подходом в определении их структуры. В этой работе показано, что комбинация инструментов масс-спектрометрии является эффективным средством определения структуры сульфатированных стероидов. С использованием аналогов 4-прегнена были протестированы следующие методы: масс-спектрометрия с высокой разрешающей способностью и мощностью для определения химических формул; масс-спектрометрия на основе водородно-дейтериевого обмена для определения количества активных обмениваемых атомов водорода (например, ОН-групп); масс-спектрометрия с использованием дериватизации гидрохлорида метоксиамины или ионизации в электроспрее с реактивной десорбцией с гидроксиламином для определения количества карбонильных групп; а также тандемная масс-спектрометрия (МС<sup>n</sup>), тандемная масс-спектрометрия с высоким разрешением и ГХ-МС для получения деталей структуры стероидного кольца. Исследование фрагментации позволило вывести три основных правила фрагментации для этого класса сульфатированных стероидов. Было показано, что подход с использованием комбинированных методов масс-спектрометрии эффективен для определения структуры стероидных метаболитов с важными выводами о персонализированной метаболомике в целом и для изучения социальных коммуникаций среди мышей в частности.

### **Dosimetry Determines the Initial OH Radical Concentration in Fast Photochemical Oxidation of Proteins (FPOP) (Определение начальной концентрации радикалов OH в быстром фотохимическом окислении белков методом дозиметрии)**

Бен Ниу (Ben Niu), Хао Чжан (Hao Zhang), Дэрил Гиблин (Daryl Giblin), Дон Л. Ремпел (Don L. Rempel), Микаэль Л. Гросс (Michael L. Gross)  
*Journal of The American Society for Mass Spectrometry*, май 2015, т. 26, вып. 5, стр. 843–846

При быстром фотохимическом окислении белков с использованием лазерного фотолиза перекиси водорода образуются радикалы OH, которые помечают аминокислотные боковые цепи белков в микросекундном интервале. Методика количественного определения гидроксильных радикалов после лазерного фотолиза имеет важное значение для быстрого фотохимического окисления белков, поскольку создает способ регулировать выход •OH, предлагает возможность настраиваемых модификаций, а также обеспечивает базу для кинетических измерений. Начальная концентрация радикалов OH должна быть измерена экспериментально. В этой статье описан подход с использованием ГХ-МС с разбавлением изотопов для количественного определения начальной концентрации •OH (в данном эксперименте было найдено ~0,95 мМ из 15 мМ H<sub>2</sub>O<sub>2</sub>) после лазерного фотолиза и исследования эффективности гашения для различных акцепторов •OH.

### **LC-MS-Based Metabolomics Study of Marine Bacterial Secondary Metabolite and Antibiotic Production in *Salinispora arenicola* (Исследование метаболомики выработки антибиотиков и вторичного метаболита бактерий в морских организмах *Salinispora arenicola* на основе ЖХ-МС)**

Утпал Бозе (Utpal Bose), Амита К. Невавитарана (Amitha K. Hewavitharana), И Кай Нг (Yi Kai Ng), Пауль Николас Шоу (Paul Nicholas Shaw), Джон А. Фюрст (John A. Fuerst), Марк П. Ходсон (Mark P. Hodson)  
*Marine Drugs*, 2015, т. 13, вып. 1, стр. 249–266

Вариации в скорости выработки вторичного метаболита с изменением содержания соли в среде культивирования, а также в различные периоды роста (время инкубации), были описаны с помощью метаболомического подхода на основе ВЭЖХ-МС. Метаболомика использовалась в качестве инструмента для изучения выработки рифамицинов (антибиотиков) и других вторичных метаболитов в облигатной разновидности морских актинобактерий *Salinispora arenicola*, выделенной из губок Большого Барьерного рифа, в растворах с двумя определенными концентрациями соли в течение трех различных инкубационных периодов. Результаты показали, что 14-дневный инкубационный период является оптимальным для максимального производства рифамицина В, тогда как максимальную концентрацию рифамицина S и W удалось получить только через 29 дней. Было показано, что существует связь «химического профиля» между числом дней инкубации и концентрации соли в среде культивирования; это соотношение позволяет достоверно определить критическую точку для выбора среды роста и времени получения продукта.

### **Identification of serum biomarkers associated with hepatitis B virus-related hepatocellular carcinoma and liver cirrhosis using mass-spectrometry-based metabolomics (Идентификация биомаркеров в сыворотке крови, связанных гепатоцеллюлярной карциномой и циррозом печени, вызванными вирусом гепатита, с помощью масс-спектрометрии на основе метаболомики)**

Юнхай Лю (Yonghai Lu), Чун Хуан (Chong Huang), Лян Гао (Liang Gao), Юн Цзянь Ху (Yong-Jiang Xu), Син Ен Ча (Sin Eng Chia), Шенсэн Чен (Shengsen Chen), Нинь Ди (Ning Li), Канькань Ю (Kangkang Yu), Цинся Лин (Qingxia Ling)  
*Metabolomics*, 16 мая 2015, стр. 1–13

Вирус гепатита В (HBV) является основным фактором риска смертности от цирроза печени и гепатоцеллюлярной карциномы (HCC). Учитывая долгосрочную цель улучшения ранней диагностики заболеваний, в настоящем исследовании была поставлена задача определить конкретные биомаркеры, связанные с развитием HCC и цирроза печени у пациентов с гепатитом HBV. С помощью ВЭЖХ-МС и ГХ-МС был построен профиль проб сыворотки крови 46 пациентов, инфицированных вирусом HBV с HCC и циррозом печени, и 24 здоровых лиц соответствующего возраста и пола. Было установлено, что у пациентов с HCC, связанной с вирусом HBV, концентрация жирных кислот и длинноцепочечных ацилкарнитинов была значительно повышена, тогда как уровень большинства углеводов, аминокислот, ацилкарнитинов с малой и средней цепью и глицерофосфолипидов был понижен по сравнению со здоровыми субъектами. Активизация жирных кислот и длинноцепочечных ацилкарнитинов в случае HCC положительно коррелирует с состоянием цирроза печени. Логистический регрессионный анализ показал, что пальмитоил карнитин вместе с аргинином является эффективным «комбинированным маркером» для диагностики гепатоцеллюлярной карциномы, связанной с HBV с чувствительностью 97,3% и специфичностью 100%. Линолевая кислота в сочетании с глюкозой были полезны для дифференцирования цирроза печени у больных HCC с чувствительностью 79,2% и специфичностью 75%. Эти результаты показывают, что метаболомика на основе масс-спектрометрии является перспективным инструментом, который может обеспечить углубленное понимание метаболизма опухоли и определить новые биомаркеры для выявления гепатокарциномы и цирроза печени от пациентов, инфицированных вирусом HBV.

### **Evaluation of comprehensive two-dimensional gas chromatography with accurate mass time-of-flight mass spectrometry for the metabolic profiling of plant–fungus interaction in *Aquilaria malaccensis* (Оценка использования комплексной двумерной газовой хроматографии в сочетании с времяпролетной масс-спектрометрией с точными массами для метаболомического профилирования взаимодействия растение–гриб в *Aquilaria malaccensis* [Агаровое дерево])**

Юн Фу Вон (Yong Foo Wong), Сун-Тон Чин (Sung-Tong Chin), Патрик Перимуттер (Patrick Perimutter), Филип Дж. Марриотт (Philip J. Marriott)  
*Journal of Chromatography A*, т. 1387, 27 марта 2015, стр. 104–115

Для изучения возможных облигатных взаимодействий между фитопатогенными грибами и *Aquilaria malaccensis*, которые приводят к образованию сложного массива вторичных метаболитов, была описана методика с использованием комплексной двумерной газовой хроматографии в сочетании с времяпролетной масс-спектрометрией с точным определением масс для неспецифического всестороннего метаболомического профилирования эфирных масел, выделенных из деревьев *A. malaccensis*, инфицированных естественным путем. В экспериментах была использована такая конфигурация полярной и неполярной колонок, которая обеспечивает оптимальное разделение компонентов по сравнению с другими наборами колонок. Четыре различных вида масел проявили совершенно разные метаболомические закономерности, что позволяет предположить развитие сигнальных отношений



между деревом-хозяином (появление различных фитоалексинов) и грибами (активация биотрансформации). Всего было обнаружено около 550 пиков (метаболитов), из которых предварительно идентифицировано 155 соединений, что составляет от 20,1 до 53,0% от общего количества ионов. Они представляют химические семейства монотерпеновых и сесквитерпеновых углеводородов, окисленных монотерпенов и сесквитерпенов (содержат кетоны, альдегиды, оксиды, спирты, лактоны, кетоспирты и диолы), нортерпеноидов, дитерпеноидов, гликолям с короткой цепью, карбоновых кислот и прочих. Большое количество обнаруженных метаболитов в сочетании с легкостью их определения в двумерном пространстве разделения подчеркивает важность комплексного аналитического подхода для фитохимического анализа растительных метаболомов. Кроме того, в статье обсуждаются возможности этой методики для классификации масел агарового дерева путем сравнения полученных метаболических профилей (распознавания шаблона для уникальных химических семейств метаболитов). Фитокомплекс масел агарового дерева означает выработку множества вторичных метаболитов сообществом растение-грибок в качестве химических сигналов экологического взаимодействия в природе. Насколько известно, это самая полная на сегодня информация об эфирных маслах *A. malaccensis*, которая дополняет имеющиеся данные для современных исследований опосредованной микробами биотрансформации терпенов и предлагает перспективы для раскрытия новых возможностей фитохимического и биотехнологического использования.

## ЛЕКАРСТВЕННЫЕ ПРЕПАРАТЫ

### Convenient syntheses of halo-dibenz[*b,f*]azepines and carbamazepine analogues via *N*-arylindoles (Удобный синтез гало-дибензо[*b,f*]азепинов и аналогов карбамазепина из *N*-арилиндолов)

Эмма-Клэр Эллиотт (Emma-Claire Elliott), Джеймс Л. Марр (James L. Marr), Б. Кевин Парк (B. Kevin Park), Пауль М. О'Нейл (Paul M. O'Neill), Эндру В. Сташульский (Andrew V. Stachulski)  
*Organic & Biomolecular Chemistry*, 2013, 11, 8426–8434

Гетероциклическая система дибензо[*b,f*]азепина и связанные молекулы с одинарной 10,11-связью являются важными шаблонами для достоверно описанных молекул лекарственных препаратов, в частности карбамазепина (противосудорожное средство), кломипрамина и имипрамина (антидепрессанты). В связи с метаболическими и иммунологическими исследованиями синтезирован ряд галогенированных аналогов карбамазепина в качестве зондов для структурного метаболизма и эффектов сверхчувствительности и опубликовано их метаболическое поведение. Хотя существует несколько путей синтеза указанных аналогов, была поставлена задача найти короткие и производительные методы получения этих целевых соединений. В докладе представлен эффективный метод двухступенчатого синтеза ряда дибензо[*b,f*]азепинов из соответствующих индолов путем *N*-арилирования с последующей кислотнo-катализируемой перегруппировкой с критическим анализом других подходов. Ранее было показано, что этот путь оказался эффективным для фторсодержащих аналогов; в настоящей работе авторы представили более широкий обзор по этому вопросу. Боковая 5-карбоксамидная цепь карбамазепина может быть добавлена различными способами, обеспечивая в целом удобный доступ к молекулам лекарственного средства.

### Identification of Human Semiochemicals Attractive to the Major Vectors of Onchocerciasis (Идентификация химических сигнальных веществ человека, привлекательных для основных переносчиков онхоцеркозов)

Райан М. Юнг (Ryan M. Young), Натан Д. Буркетт-Кадена (Nathan D. Burkett-Cadena), Томми В. Макгаха мл. (Tommy W. McGaha Jr.), Марио А. Родригес-Перез (Mario A. Rodriguez-Perez), Лаурент Д. Тое (Laurent D. Toé), Монсуру А. Аделеке (Monsuru A. Adeleke), Мусса Санфо (Moussa Sanfo), Траоре Сунгало (Traore Soungalo), Чарльз Р. Католи (Charles R. Katholi), Рэймонд Ноблет (Raymond Noblet), Генри Фадамиро (Henry Fadamiro), Хосе Л. Торрес-Эстрада (Jose L. Torres-Estrada), Марио С. Салинас-Кармона (Mario C. Salinas-Carmona), Билл Бейкер (Bill Baker), Томас Р. Уннаш (Thomas R. Unnasch), Эдди В. Капп (Eddie W. Cupp)  
*PLOS Neglected Tropical Diseases*, 8 января 2015, DOI: 10.1371/journal.pntd.0003450

Методы отлова с использованием в качестве приманки человека, которые в настоящее время являются стандартом сбора мошки, являющейся переносчиком *Onchocerca volvulus*, возбудителя онхоцеркоза, являются неэффективными и представляют определенные этические проблемы. Поскольку энтомологические методы являются основными методами, рекомендованными международным сообществом для проверки ликвидации онхоцеркоза, существует необходимость в разработке альтернативных методов сбора этих переносчиков. Последние исследования показали, что ловушки с использованием в качестве приманки CO<sub>2</sub> и загрязненной одежды довольно перспективны в плане замены людей для этой цели. Однако для широкого распространения этих ловушек необходимо разработать соответствующую формулу приманки. Для этого были определены летучие соединения, выделенные из человеческого пота, привлекающие мошку, основного переносчика онхоцеркоза в Африке и Америке, и использованы для оптимизации ловушек для сбора этих насекомых. Для выполнения этой задачи в данной работе описано использование электроантеннографии и поведенческих анализов для выявления соединений, выделяемых человеком, которые являются нейростимуляторами для этих переносчиков, и продемонстрировано, что эти соединения действительно привлекают переносчиков в полевых условиях с использованием ранее разработанных ловушек. Разработка приманки такого состава позволит широко применять эти ловушки в программах ликвидации онхоцеркоза в Африке и Америке.

## Литература Agilent:

Обратитесь к вашему торговому представителю для приобретения:

### ЭНЕРГЕТИКА, ХИМИЧЕСКАЯ ПРОМЫШЛЕННОСТЬ И МАТЕРИАЛЫ

Информация о техническом решении:

5991-5684EN [Speciation of Chlorinated Hydrocarbons in Reformate using the Agilent 7200 GC/Q-TOF](#)

Методическая информация:

5990-9477EN [Analysis of Biomarkers in Crude Oil using the Agilent 7200 GC/Q-TOF](#)

5991-3476EN [Metabolomics of Carbon-Fixing Mutants of Cyanobacteria by GC/Q-TOF](#)

### ЭКСПОСОМИКА

Технический обзор:

5991-3418EN [Using the Blood Exposome to Discover Causes of Disease](#)

### ПИЩЕВАЯ ПРОМЫШЛЕННОСТЬ

Методическая информация:

5991-0106EN [Olive Oil Characterization using Agilent GC/Q-TOF MS and Mass Profiler Professional Software](#)

5991-5254EN [GC/Q-TOF Workflow for Pesticide Residue Screening](#)

5991-5633EN [Screening for More Than 740 Pesticide Residues in Food Using an Agilent GC/Q-TOF and an Exact Mass Pesticide Library](#)

5991-5894EN [Screening for Hundreds of Pesticide Residues Using a GC/Q-TOF with an Exact Mass Pesticide Database in Food](#)

Краткий методический обзор:

5990-9076EN [Analysis of Medium Volatility Sulfur Compounds in Coffee using Agilent GC/Q-TOF](#)

Информационное письмо:

5991-5021EN [Pesticides PCDL flyer: Simplify Screening of Target and Non-Target Compounds](#)

Веб-семинар:

[Tandem high resolution mass spectrometry employing Agilent GC/Q-TOF 7200 for saffron \(Cocus Sativus\) authentication & fraud detection](#)

(Тандемная масс-спектрометрия высокого разрешения с использованием квадрупольно-времяпролетного Agilent 7200 для ГХ для аутентификации шафрана (Cocus Sativus) и выявления фальсификатов)

### СУДЕБНО-МЕДИЦИНСКАЯ ТОКСИКОЛОГИЧЕСКАЯ ЭКСПЕРТИЗА

Методическая информация:

5991-5939EN [Investigations on storage-induced changes of the red blood cell lipidome](#)

5991-4369EN [Characterization and Classification of Heroin from Illicit Drug Seizures using the Agilent 7200 GC/Q-TOF](#)

### ОБЩИЕ ВОПРОСЫ

Технические обзоры:

5990-9207EN [Time-of-Flight Mass Spectrometry](#)

5991-5885EN [Resolving Power and Mass Resolution](#)

Спецификация:

5991-1036EN [Agilent 7200B Series Q-TOF GC/MS System](#)

Брошюра:

5990-8194EN [Agilent 7200B Q-TOF for GC/MS](#)

### **МЕТАБОЛОМИКА И ПРОТЕОМИКА**

Методическая информация:

5991-0571EN [Metabolic Profiling of Yeast Sterols using the Agilent 7200 Series GC/Q-TOF System](#)

5991-2481EN [Metabolomics of Opiate-Induced Changes in Murine Brain by GC/Q-TOF](#)

5991-4663EN [Enhanced Metabolite Profiling from Bark of \*Alangium Salviifolium\* using LC/MS and GC/Q-TOF Techniques](#)

5991-6215EN [Integrated Transcriptomics and Metabolomics Study of Retinoblastoma Using Agilent Microarrays and LC/MS/GC/MS Platforms](#)

### **ЭКОЛОГИЧЕСКИЙ КОНТРОЛЬ**

Методическая информация:

5991-5899EN [Screening of Semivolatile Organic Compounds \(SVOCs\) on Aerosol Particles](#)

### **ЛЕКАРСТВЕННЫЕ ПРЕПАРАТЫ**

Методическая информация:

5991-6058EN [Quantification of Potential Genotoxic Impurities in Amlodipine Besylate](#)

## Дополнительная информация

Дополнительные сведения  
о квадрупольном времяпролетном  
Agilent 7200 для ГХ см. на веб-сайте  
**[www.agilent.com/chem/7200\\_GCQTOF](http://www.agilent.com/chem/7200_GCQTOF)**

Центры по работе с клиентами Agilent  
в вашей стране:  
**[www.agilent.com/chem/contactus](http://www.agilent.com/chem/contactus)**


Россия:  
**+7 (495) 664-73-00**  
**[agilentRU@agilent.com](mailto:agilentRU@agilent.com)**

Европа:  
**[info\\_agilent@agilent.com](mailto:info_agilent@agilent.com)**

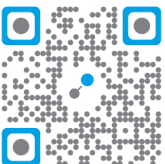
Азиатско-Тихоокеанский регион:  
**[inquiry\\_lsca@agilent.com](mailto:inquiry_lsca@agilent.com)**


Продукция Agilent предназначена только для  
исследовательских целей. Не для использования  
в диагностических процедурах. Информация, описания  
и технические характеристики в настоящем документе  
могут быть изменены без предупреждения.

© Agilent Technologies, Inc. 2015  
Напечатано в США 29 октября 2015  
5991-6419RU




**KAMPILAB**  
Agilent Technologies  
Authorized Distributor



  
<http://campilab.by>

ООО "КАМПИЛАБ"



**Agilent Technologies**