

Российская академия наук
Отделение химии и наук о материалах

Научный совет
по аналитической химии

Отчет за 2024 год

Москва 2025

Электронный отчет НСАХ РАН

<http://www.wssanalytchem.org/nsakh/SitePages/reports.aspx>

Бюро совета благодарит членов комиссий, отделений совета и организации, представившие материалы в отчет за 2024 г., а также председателей комиссий, принявших участие в обработке поступившего материала

Научный совет поздравляет

Председателя совета

Академика РАН Ю.А.Золотова

*с присуждением Международной премии в области
фундаментальных и прикладных исследований*

OGANESSON-2024

*За выдающиеся научные работы в области аналитической
химии, за огромный личный вклад в подготовку молодых ученых,
специалистов и кадров высшей квалификации*

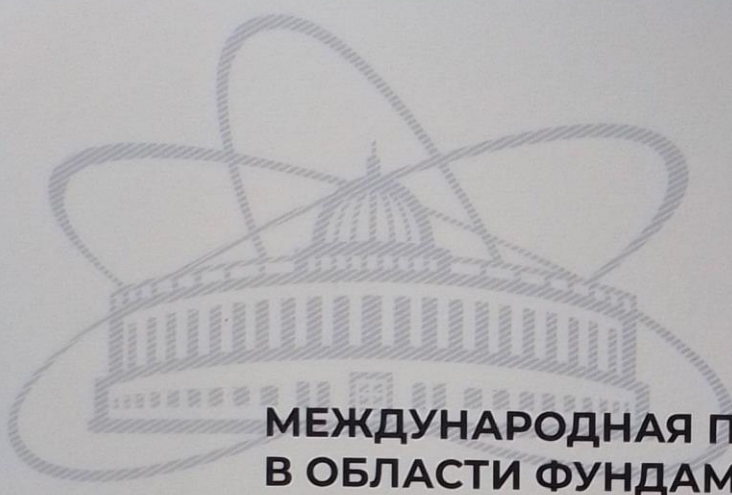
.....

Член-корр РАН В.П. Колотова,

награжденного знаком

«За заслуги в аналитическом контроле»

на заседании Ассоциации аналитических центров «[Аналитика](#)»



**МЕЖДУНАРОДНАЯ ПРЕМИЯ
В ОБЛАСТИ ФУНДАМЕНТАЛЬНЫХ
И ПРИКЛАДНЫХ ИССЛЕДОВАНИЙ
OGANESSON-2024**

За выдающиеся научные работы в области
аналитической химии, за огромный личный вклад
в подготовку молодых ученых, специалистов
и кадров высшей квалификации

присуждена

**Юрию Александровичу
ЗОЛотову**

Председатель
Комитета Премии,
Академик РАН
А. М. СЕРГЕЕВ

Директор
Объединенного института
ядерных исследований,
Академик РАН
Г. В. ТРУБНИКОВ

Дубна 2024

СОДЕРЖАНИЕ	
НАУЧНЫЕ ДОСТИЖЕНИЯ В 2024 г.....	
<i>МЕТОДЫ АНАЛИТИЧЕСКОЙ ХИМИИ</i>	
<u>Методы определения</u>	8
Спектроскопические методы	8
<i>Общие вопросы спектроскопических методов. Приборы</i>	8
<i>Рентгеновские методы</i>	10
<i>Атомно-эмиссионные методы</i>	17
<i>Атомно-абсорбционные методы</i>	27
<i>Спектрофотометрические методы</i>	29
<i>Методы колебательной спектроскопии</i>	31
<i>Другие спектроскопические методы</i>	36
Масс-спектрометрические и родственные им методы	40
Хроматографические и родственные им методы	61
<i>Общие вопросы хроматографии. Приборы</i>	62
<i>Газовая хроматография</i>	62
<i>Высокоэффективная жидкостная (в том числе ионная) хроматография</i>	63
<i>Хромато-масс-спектрометрия</i>	72
<i>Тонкослойная хроматография</i>	82
<i>Капиллярный электрофорез</i>	82
<i>Другие хроматографические методы</i>	90
Электрохимические методы	91
<i>Потенциометрия. Ионоселективные электроды</i>	92
<i>Вольтамперометрия</i>	93
<i>Кулонометрия</i>	99
<i>Электрохимические сенсоры</i>	99
Биохимические методы	110
Элементный анализ органических соединений	125
<u>Другие методы определения</u>	126
<u>Методы разделения и концентрирования</u>	127
Общие вопросы пробоподготовки	128
Сорбционные методы	131
Экстракционные методы	143
Другие методы разделения и концентрирования	150
<u>Методы обнаружения и идентификации</u>	160
<i>СПОСОБЫ ОСУЩЕСТВЛЕНИЯ АНАЛИЗА И ОБРАБОТКИ ДАННЫХ. ОБЩИЕ ПОДХОДЫ К АНАЛИЗУ</i>	
Анализ в потоке	162
Тест-методы и средства	166
Химические сенсоры и бионические системы на их основе	

(электронный нос, язык, глаз)	169
Наноаналитика	178
Микрочипы. Микрофлюидика	189
Локальный анализ	190
Хеометрика. Математизация химического анализа	190
Метрология и стандартизация анализа	197
<i>АНАЛИЗ РЕАЛЬНЫХ ОБЪЕКТОВ</i>	212
<i>ОБЩИЕ ВОПРОСЫ АНАЛИТИЧЕСКОЙ ХИМИИ</i>	
Терминология	221
История и методология аналитической химии.	221
Общие вопросы аналитического приборостроения	222
НАУЧНО-ОРГАНИЗАЦИОННАЯ ДЕЯТЕЛЬНОСТЬ СОВЕТА В 2024 г.	224
КНИГИ	253

МЕТОДЫ АНАЛИТИЧЕСКОЙ ХИМИИ

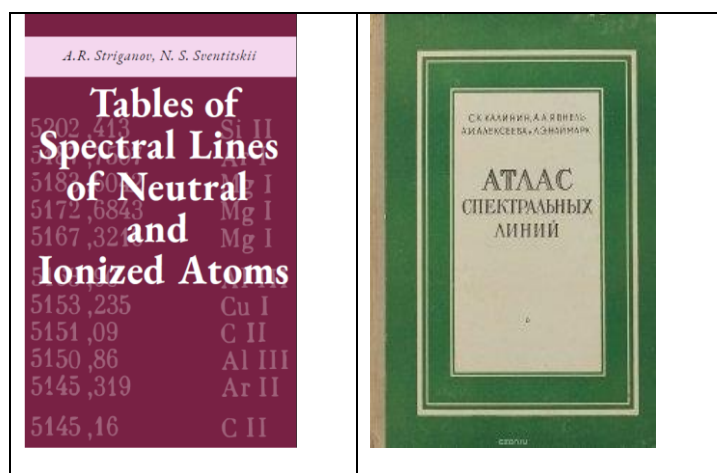
Методы определения

Спектроскопические методы

Общие вопросы спектроскопических методов. Приборы

1. Библиографический указатель атласов и таблиц атомных спектральных линий. Составлен иллюстрированный библиографический указатель таблиц спектральных линий и атласов спектров, применяемых в практических атомно-эмиссионных, атомно-абсорбционных и атомно-флуоресцентных анализах (333 издания). Временной диапазон изданий охватывает период от возникновения данных аналитических методов по настоящее время. В указателе представлены наиболее значимые для практической работы издания, опубликованные в различных странах. Для каждой публикации приведены полное библиографическое описание и краткая аннотация издания. Большинство книг и атласов в указателе сопровождаются иллюстрациями обложек или титульных листов, а также электронными адресами или идентификаторами, позволяющими легко и быстро найти издание в сети Интернет. Работа мирового уровня.

*Пупышев А.А., Васильева Н.Л. Таблицы спектральных линий и атласы спектров для атомно-эмиссионного, атомно-абсорбционного и атомно-флуоресцентного анализов. Библиографический указатель // Аналитика и контроль. 2024. Т. 28, № 2. С. 135-223.
<https://doi.org/10.15826/analitika.2024.28.2.007>*



Пупышев А.А., д.х.н., pupyshev@gmail.com (Уральский федеральный университет им. первого Президента России Б.Н. Ельцина, Кафедра физико-химических методов анализа, Екатеринбург.)

2. Разработан комплекс технических и методических приёмов определения состава одно- и двухкомпонентных систем *методом цифровой цветометрии в широком диапазоне концентраций*. Для фотокамеры смартфона и офисного планшетного фотосканера выбраны эффективные способы управления количеством света, попадающего в приёмник излучения, для проведения измерений в диапазоне линейности его передаточной функции. Сформулированы принципы (1) коррекции аналитического сигнала, основанной на избирательном извлечении данных из серии изображений, полученных при варьировании экспозиции, и (2) учёта взаимного влияния разных цветовых каналов светочувствительного датчика. Для анализа растворов в 96-луночном микропланшете созданы прототипы дешёвых универсальных измерительных боксов, при использовании которых вклад рассеянного излучения в аналитический сигнал не превышает уровня цифрового шума приёмника излучения. Разработанный в работе способ цветометрического определения окрашенных веществ в растворе в интервале содержаний более двух порядков с погрешностью менее 10-15% апробирован при анализе смесей красителей в модельных системах и газированных напитках. Правильность результатов определения подтверждена спектрофотометрическим методом.

Разработан прототип самодельного портативного анализатора на основе карманного дифракционного спектроскопа и бытовой компактной цифровой фотокамеры, пригодный для использования в качестве средства измерения в средних и высших образовательных учреждениях, а также малобюджетных организациях при проведении химического анализа (в том числе, внелабораторного) растворов малых объёмов фотометрическим и флуориметрическими методами. Конструкция анализатора позволяет минимизировать уровень рассеянного излучения и управлять экспозицией светочувствительного датчика для расширения рабочего диапазона его передаточной функции. Предложен простой и эффективный способ профилирования разработанного спектрального анализатора.

Предложен способ косвенного определения водородного показателя водных растворов малого объема (от единиц до сотен микролитров)

методом цифровой цветометрии с помощью бытовых оптических средств получения растровых изображений. Для нахождения рН не нужны постоянные цветовые шкалы или информация о концентрации кислотно-основного индикатора в растворе. Разработан прототип ручного рН-анализатора на базе смартфона для применения во внелабораторных условиях. Правильность результатов определения рН подтверждена методами ионометрии и спектрофотометрии.

Осколок К. В., к.х.н., k_oskolok@mail.ru; Моногарова О. В., к.х.н., o_monogarova@mail.ru; Гармай А. В., к.х.н., andrew-garmay@yandex.ru; (МГУ им. М.В. Ломоносова, Химический факультет, кафедра аналитической химии, лаборатория спектроскопических методов анализа).

Рентгеновские методы

1. Продолжена работа по разработке методики рентгенофлуоресцентного спектрального анализа цинк-алюминий-магниевого сплава и покрытий на его основе, нанесенных на стальной прокат, характеризующаяся высокими показателями прецизионности и экспрессности, и позволяющая одновременно определять концентрации всех нормируемых. Методика аттестована и применяется в лабораториях ПАО «Новолипецкий металлургический комбинат».

Лепилина М.Ю., Якубенко Е.В., Ермолаева Т.Н., Барановская В.Б. Разработка методики рентгенофлуоресцентного анализа цинк-алюминий-магниевого сплава//Заводская лаборатория. Диагностика материалов. 2024. Т. 90. № 2. С. 5-11).

Ермолаева Т.Н., д.х.н., профессор, etn@stu.lipetsk.ru; Якубенко Е.В., alyenka13@yandex.ru (Липецкий государственный технический университет, кафедра химии; ПАО «Новолипецкий металлургический комбинат»).

2. Разработана двухстадийная методика рентгенофлуоресцентного анализа высокоэнтропийных параниобатов РЗЭ состава $Y_{3-x}Yb_xNbO_7$ (где $x = 0 - 3$), используемых в качестве термобарьерных покрытий. На первом этапе с использованием метода фундаментальных параметров (МФП) проводили экспрессный полуколичественный анализ образцов керамики и промежуточных продуктов синтеза с установлением их предварительного состава. На втором этапе по построенным градуировочным зависимостям определяли количественный состав проб. Для построения градуировочных

зависимостей синтезировали серию образцов сравнения, содержащих 3,16 – 56,55 % Y, 8,78 – 71,0 % Yb и 12,83 – 19,70 % Nb. Выбраны аналитические линии элементов, свободные от спектральных наложений, и условия проведения РФА (ток и напряжение рентгеновской трубки, время экспозиции, способ учета фона вблизи аналитических линий). Относительное стандартное отклонение результатов определения Y, Yb и Nb в образцах керамики не превышало 0,66 %, относительная погрешность составляла не более 1,63 %. Разработанная методика позволяет определять основные компоненты в образцах керамики и может быть использована в целях аналитического контроля процесса синтеза параниобатов РЗЭ.

Рентгенофлуоресцентный анализ керамики на основе параниобатов состава $Y_{3-x}Yb_xNbO_7$ // Заводская лаборатория. Диагностика материалов. Т.90, № 5, С. 12-19. <https://doi.org/10.26896/1028-6861-2024-90-5-12-19>

Rapid and Precise Approaches for XRF Analysis of Rare Earth Niobates // Analytica. V. 5, № 3. С. 343-357. <https://doi.org/10.3390/analytica5030022>

Короткова Н.А., к.х.н., natalya.korotkova.95@mail.ru; Петрова К.В. gkv007@mail.ru, Барновская В.Б., д.х.н., baranovskaya@list.ru, Доронина М.С., к.т.н., ms.semenova@gmail.com (Институт общей и неорганической химии им. Н.С. Курнакова РАН, Центр коллективного пользования физическими методами исследования веществ и материалов, Москва).

3. Определение содержаний макро- и микроэлементов методом волнодисперсионной рентгенофлуоресцентной спектromетрии в объектах техногенных экосистем. Целью исследования явилась оценка аналитических возможностей вакуумного WDXRF-спектрометра S8 TIGER (Bruker AXS, Германия) для количественного определения содержаний Na, Mg, Al, P, S, K, Ca, Cr, Mn, Fe, Ni, Cu, Zn, Sr, Ba и Pb в иглах карликовой ели *Picea canadensis conica*, голубой колючей ели *Picea pungens glauca*, а также в техногенной почве г. Иркутск, на которой растут эти деревья. Были рассчитаны значения инструментального предела обнаружения аналитов и повторяемость результатов анализа. Значения относительного стандартного отклонения не превысили 15% для почв и растительных материалов. Правильность результатов подтверждена сравнением с данными, полученными по методикам рентгенофлуоресцентной спектromетрии с полным внешним отражением (РФС-ПВО – анализ суспензии) и прямой атомно-эмиссионной спектromетрии с дуговым разрядом (АЭС-ДР – анализ порошков). Точность данных РФС-ПВО и АЭС-ДР продемонстрирована анализом

сертифицированных стандартных образцов состава почв (ООКО151 – светло-каштановая почва, CGL 302 Н-2 – монгольская каштановая почва) и растительных материалов (ЛБ-1 – лист берёзы, ЭК-1 – элодея канадская), которые имеют метрологическую прослеживаемость.

Shtel'makh S.I., Zhilicheva A.N., Vasil'eva I.E. Determination of macro- and microelements concentrations by wavelength-dispersive X-ray fluorescence spectrometry in the objects of the technogenic ecosystem // X-Ray Spectrom. 2024;1–17. <https://doi.org/10.1002/xrs.3443>

Васильева И.Е., д.т.н., vasira@igc.irk.ru; Шабанова Е.В., д.ф.-м.н., shev@igc.irk.ru (Институт геохимии им. А.П. Виноградова СО РАН, группа атомно-эмиссионных методов анализа и стандартных образцов, Иркутск).

4. В рамках создания газочувствительных материалов на основе Ga_2O_3 с низкой рабочей температурой разработан подход к определению легирующей добавки Si методом РФА ПВО. Подход включает измельчение образцов с помощью планетарной мельницы и приготовление суспензий с последующим определением аналитов на сапфировых подложках методом абсолютных содержаний (Si) и методом внешнего стандарта. На основании результатов определения кремния найдены условия получения воспроизводимого сенсорного отклика синтезированных материалов.

Обосновано применение метода РФА ПВО для анализа новых биосовместимых материалов на основе гидроксиапатита. Получены результаты определения кальция, фосфора и церия в образцах биокерамики с применением в качестве внутренних стандартов меди и гадолиния.

Филатова Д.Г., к.х.н., gak1.analyt@gmail.com (МГУ им. М.В. Ломоносова, химический факультет, кафедра аналитической химии, лаборатория спектроскопических методов анализа).

5. Раскрыт потенциал рентгенофлуоресцентного метода при определении валентных форм железа с использованием отношения интенсивностей линий $\text{FeK}\beta_5$ и $\text{FeK}\beta_{1,3}$ с целью характеристики (и, в перспективе, разработки) стандартных образцов состава горных пород с содержанием общего железа более 0.5 масс. % как альтернатива классическому объемному методу на примере 40 образцов сравнения состава природных сред, проанализированных в рамках программы

профессионального тестирования лабораторий, специализирующихся на анализе геологических материалов (GeoPT). Сравнение полученных рентгенофлуоресцентным методом значений содержания двухвалентного железа (в пересчете на оксид FeO) с результатами анализа аттестованной методикой титриметрического анализа (НСАМ 50-X) показало, что оба метода обеспечивают сопоставимую точность: стандартное отклонение при определении содержания FeO в диапазоне до 10 масс. %. составило 0.3 масс. % для обоих методов по сравнению с опорными значениями. Применение рентгенофлуоресцентного метода актуально в условиях ограниченности разработанных аналитических подходов определения валентных форм железа, которые могут быть реализованы в виде простых рутинных методик.

Chubarov V. Novel application of the X-ray fluorescence method for the determination of FeO content for reference materials characterization // Talanta. 2025. V. 282. 126981. DOI: 10.1016/j.talanta.2024.126981.

Чубаров В.М., chubarov@igc.irk.ru (Институт геохимии им. А.П. Виноградова СО РАН, лаборатория рентгеновских методов анализа, Иркутск).

6. Элементный количественный анализ на мессбауэровском спектрометре. Мессбауэровская спектроскопия – широко распространенный метод определения химических состояний резонансных атомов в твердых телах. Как правило, информация, полученная с помощью мессбауэровской спектроскопии, дополняется данными об элементном составе. Для этого привлекаются дополнительные методы атомной спектроскопии, например, рентгенофлуоресцентный анализ (РФА). С другой стороны, измерительная схема мессбауэровского спектрометра схожа со схемой РФА спектрометра с энергетической дисперсией (ЭД-РФА), за исключением того, что для регистрации излучения в ЭД-РФА используются полупроводниковые детекторы, в то время как в мессбауэровских спектрометрах газовые или сцинтилляционные счетчики, которые обладают значительно худшим разрешением. В настоящей работе проблему недостаточного разрешения предлагается решать за счет привлечения хемометрических методов обработки данных. На примере определения содержания Ti, Cr, Mn, Ni, Nb и Mo в реальных образцах сталей показано, что предлагаемый подход позволяет получать количественную информацию об элементном составе на мессбауэровском

спектрометре, при этом для ряда элементов погрешность анализа сопоставима с погрешностью коммерческого ЭД-РФА спектрометра.

Spectrochimica Acta Part B: Atomic Spectroscopy, DOI: 10.1016/j.sab.2024.106878

Панчук В.В., д.ф.-м.н., vitpan@mail.ru; Семенов В.Г., (val_sem@mail.ru); Кирсанов Д.О., д.х.н., d.kirsanov@gmail.com (Санкт-Петербургский государственный университет, Институт химии, кафедра аналитической химии; Институт аналитического приборостроения РАН, Санкт-Петербург).

7. Предложен новый способ количественного РФА-ПВО анализа сложных образцов с сильными интерференционными эффектами. Способ основан на разложении спектра анализируемого образца на взвешенную сумму подспектров отдельных элементов. Далее веса подспектров пересчитываются в содержания определяемых элементов через коэффициент пропорциональности, рассчитанный с помощью одного стандартного образца. Предложенный подход был апробирован на определении содержаний Ti, Fe, Co, Ni, Cu, Zn, As, Ba, La, Ce и Pb в 9 образцах океанических полиметаллических конкреций и корок. Результаты определения содержания аналитов с помощью предложенного подхода сравнивались с результатами, полученными способами внутреннего стандарта и градуировочного графика. В работе показано, что предложенный подход, в котором используется всего один стандартный образец, дает либо сопоставимую, либо более высокую точность анализа по сравнению со способами градуировочного графика на трех стандартных образцах и внутреннего стандарта.

Spectrochimica Acta Part B: Atomic Spectroscopy, DOI: 10.1016/j.sab.2024.107070

Панчук В.В., д.ф.-м.н., vitpan@mail.ru; Пашкова Г.В., pashkova.gv@yandex.ru; Жиличева А.Н., alena.zhilicheva.13@mail.ru; Кирсанов Д.О., д.х.н. d.kirsanov@gmail.com (Санкт-Петербургский государственный университет, Институт химии, кафедра аналитической химии; Институт аналитического приборостроения РАН, Санкт-Петербург; Институт земной коры СО РАН, Иркутск).

8. Проведены исследования факторов, влияющих на правильность определения состава микронных включений минеральных палладиевых

фаз (майченерита (PdTeBi), фрудита (PdBi_2) и некоторых других) в сульфидных минеральных матрицах при рентгеноспектральном микроанализе. Измерения проводили на сканирующем электронном микроскопе (СЭМ) MIRA 3 LMH (TESCAN) и на электронно-зондовом микроанализаторе JXA-8200 (Jeol) с кристалл-дифракционными спектрометрами. Были выполнены оценки возможности уменьшения размера области локального анализа при уменьшении ускоряющего напряжения до 15 и 10 кВ, по сравнению с рекомендуемым производителями приборов 20 кВ. Выполнены оценки области генерации характеристического рентгеновского излучения L-серии Pd. Показано, что минеральные частицы палладиевых фаз можно считать «массивными», для которых применимы методы матричной коррекции, если их размеры составляют более 5 мкм при ускоряющем напряжении 20 кВ; 3 мкм при 15 кВ; 2.5 мкм при 10 кВ. Флуоресценция элементов Fe, Ni, Cu, содержащихся также в окружающей сульфидной матрице, препятствует идентификации принадлежности аналитического сигнала этих элементов частице или матрице. Сопоставление результатов определения на СЭМ MIRA 3 и на микроанализаторе JXA 8200 показало, что неопределенность содержаний составляет приблизительно 1.5 %, мас. при уровне содержания Pd более 20 %, в ассоциации с элементами Bi, Te, Sb. Оценки неопределенности практически не зависели от ускоряющего напряжения для СЭМ MIRA 3 (10, 15 или 20 кВ).

Николаев А. В., Финкельштейн А. Л., Белозерова О. Ю., Мехоношин А. С. Особенности определения состава палладиевых минеральных фаз микронных размеров методами электронно-зондового рентгеноспектрального микроанализа // Вестник ТГУ. Химия. 2024. (Принята к печати).

Николаев А.В., odinszova@Yandex.ru (Институт геохимии им. А.П. Виноградова СО РАН, лаборатория рентгеновских методов анализа, Иркутск).

9. Проведены исследования по выбору градуировочной модели при рентгенофлуоресцентном определении содержания Cr, Ni, Cu, Zn, As и Pb в растениях, собранных с территорий, загрязненных выбросами металлургической промышленности. Рутинные методики РФА растений, применяемые при изучении элементных составов растительности природных экосистем, не пригодны для образцов с широкими вариациями содержаний элементов (от следовых значений до нескольких процентов).

При этом, сертифицированные стандартные образцы (ССО) растений с подходящим химическим составом отсутствуют. Цель работы состояла в выборе градуировочной модели, применяя разные наборы градуировочных образцов: растительные и биологические ССО, синтетические образцы сравнения, созданные при смешивании ССО растений и ССО рыхлых отложений, и референтные материалы (РМ), представленные реальными образцами загрязненных растений, проанализированными другими аналитическими методами. Результаты РФА, полученные при использовании разных градуировок, сравнивали с данными атомно-абсорбционной спектроскопии и масс-спектрометрии с индуктивно связанной плазмой (ААС и МС-ИСП). Наилучшее согласие между сравниваемыми результатами было получено при использовании градуировочной модели, созданной с помощью РМ. Модель рекомендована при определении высоких содержаний Cr, Ni, Cu, Zn, As и Pb в загрязненных растениях. Результаты РФА растений, собранных в районе Ангарского металлургического завода, г. Свирск, были использованы при оценке состояния окружающей среды. Разработанные подходы РФА могут применяться при других эколого-геохимических исследованиях.

Chuparina E.V., Belogolova G.A., Baenguev B.A., Sokolnikova Ju.V., Zarubina O.V. Application of some calibration strategies in comparison to determine Cr, Ni, Cu, Zn, As, and Pb in contaminated plants by wavelength dispersive x-ray fluorescence // X-Ray Spectrom. 2024. Vol 1. <https://doi.org/10.1002/xrs.344010> (First published: 18.06.2024).

Чупарина Е.В., Ichup@igc.irk.ru (Институт геохимии им. А.П. Виноградова СО РАН, лаборатория рентгеновских методов анализа, Иркутск).

10. Изучены особенности определения цинка в пылевых выбросах газоочистки электрометаллургического производства, использующего для переработки металлолом. Методами рентгенофазового, энергодисперсионного рентгенофлуоресцентного анализа (ЭДРФА) и атомно-эмиссионной спектроскопии с индуктивно связанной плазмой (ИСП-АЭС) установили элементный и фазовый (оксид и феррит цинка, галит, сильвин и магнетит) составы пылевых выбросов газоочистки, с учетом которых разработали схему анализа. Разработанная методика энергодисперсионного рентгенофлуоресцентного определения цинка в

пылевых выбросах газоочистки предусматривает построение градуировочной зависимости с коррекцией матричных эффектов. Относительные отклонения при определении цинка при ЭДРФА с учетом матричной коррекции составили 2.1% и ИСП-АЭС 2.5%. Методику определения цинка апробировали на реальных образцах пылевых выбросов газоочистки.

Temerdashev, Z.A., Ryadno, E.G., Vasileva, L.V., Abakumov, A.G., Vasilev, A.M. Determination of Zinc in Gas Cleaning Dust Emissions from Electrometallurgical Production // Journal of Analytical Chemistry, 2024, 79(11), pp. 1545–1552.

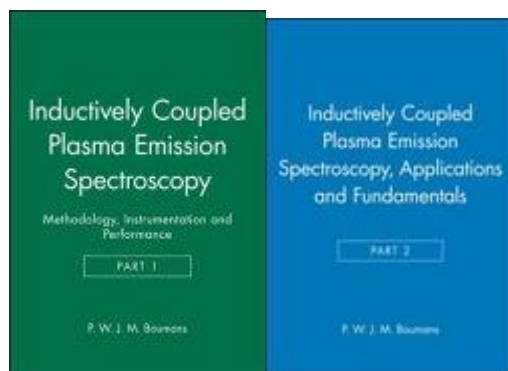
Темердашев З.А., temza@kubsu.ru (Кубанский государственный университет, кафедра аналитической химии, Краснодар).

Атомно-эмиссионные методы

1. Библиографический указатель печатных изданий по методу АЭС-ИСП.

Составлен иллюстрированный библиографический указатель печатных изданий (монографии, учебники, сборники статей, материалы симпозиумов и конференций, стандарты, научные отчеты, учебные пособия) по развитию и применению современного аналитического метода атомно-эмиссионной спектроскопии с индуктивно связанной плазмой (155 изданий). Временной диапазон указателя охватывает период от публикации первых печатных изданий, посвященных АЭС-ИСП, по настоящее время. В указателе представлены значимые для научной и практической работы аналитиков печатные издания, опубликованные в различных странах. Для каждого печатного издания приведены полное библиографическое описание и краткая аннотация. Большинство печатных изданий в указателе сопровождаются иллюстрациями обложек или титульных листов, а также электронными адресами или идентификаторами. Это позволяет легко и быстро найти издание в сети Интернет. Работа мирового уровня.

Пупышев А.А., Васильева Н.Л. Печатные издания по методу атомно-эмиссионной спектроскопии с индуктивно связанной плазмой. Библиографический указатель // Аналитика и контроль. 2024. Т. 28, № 3. С. 288-336. <https://doi.org/10.15826/analitika.2024.28.3.007>



2. Библиографический указатель статей по методу АЭС-ИСП.

Составлен иллюстрированный библиографический указатель наиболее значимых статей по созданию, развитию и применению современного аналитического метода атомно-эмиссионной спектроскопии с индуктивно связанной плазмой (103 статьи). Временной диапазон публикаций охватывает период от разработки первых мощных генераторов индуктивно связанной плазмы по настоящее время. В указателе приведены представляющие особый интерес для научной и практической работы публикации авторов различных стран. Каждую публикацию сопровождает ее полное библиографическое описание и краткая аннотация. Для большинства статей в указателе приведены электронные адреса или идентификаторы, позволяющими легко и быстро найти публикации в сети Интернет. Работа мирового уровня.

Пупышев А.А., Васильева Н.Л. Наиболее значимые статьи по методу атомно-эмиссионной спектроскопии с индуктивно связанной плазмой. Библиографический указатель // Аналитика и контроль. 2024. Т. 28, № 4 (В печати).



Пупышев А.А., д.х.н., pupyshev@gmail.com (Уральский федеральный университет им. первого Президента России Б.Н. Ельцина, кафедра физико-химических методов анализа, Екатеринбург).

3. Проведены исследования определения редкоземельных элементов (РЗЭ) непосредственно в фазе сорбционного концентрата методом атомно-эмиссионной спектроскопии с возбуждением спектра в дуге постоянного тока (ДАЭС). Для сорбционного извлечения и концентрирования РЗЭ из водных растворов и растворов проб гидроксиапатитов (ГА) и трикальцийфосфатов (ТКФ), легированных РЗЭ, предложен аминотиоэфирный сорбент 2-(1,3,5-дитиазинан-5-ил)уксусной кислоты (ДТУК). Установлено, что для полного извлечения РЗЭ из модельных солянокислых растворов необходимо добавление 10^{-7} г/л HF. С использованием модельных растворов выбраны условия сорбционного извлечения РЗЭ (кислотность растворов, масса сорбента, температура и время сорбции). Выбраны условия определения примесей РЗЭ методом ДАЭС — режим работы генератора и сила тока, время экспозиции, форма электродов и расстояние между ними, масса навески пробы. Для уменьшения влияния матрицы пробу разбавляли графитовым порошком (1:1 по массе), для улучшения атомизации РЗЭ в дуговом разряде в пробу вводили носитель — NaCl. Правильность результатов определения РЗЭ в образцах ГА и ТКФ по предложенной сорбционно-атомно-эмиссионной методике подтверждена сравнением с результатами референтного метода АЭС-ИСП. Оценены пределы определения РЗЭ ($5 \cdot 10^{-6}$ – $5 \cdot 10^{-5}$ % масс.), относительное стандартное отклонение не превышало 10 %.

Дуговое атомно-эмиссионное определение редкоземельных элементов после сорбционного извлечения из растворов, содержащих кальций и фосфор // Заводская лаборатория. Диагностика материалов. Т. 90, № 11. С. 5-16. <https://doi.org/10.26896/1028-6861-2024-90-11-5-16>

Архипенко А.А., к.х.н., alexandra622@mail.ru, Барановская В.Б., д.х.н., baranovskaya@list.ru, Иванов В.Н., Ксенофонтова Т.Д. kxenofontovat@bk.ru, Котцов С.Ю., Доронина М.С., к.т.н., ms.semenova@gmail.com (Институт общей и неорганической химии им. Н.С. Курнакова РАН, Центр коллективного пользования физическими методами исследования веществ и материалов, Москва).

4. Продолжены исследования по разработке методики определения неметаллических включений (НМВ) - оксисульфидов и сульфидов в конструкционной стали методом искровой атомно-эмиссионной

спектрометрии (ИАЭС) с применением спектрометра ARL iSpark 8860. Количественную оценку уровня НМВ на первом этапе осуществляли методом сканирующей электронной микроскопии (СЭМ с ЭДС) ASTM E2142. Затем, на втором этапе, для расчета массовых долей включений в пробе (с учетом результатов, полученных на первом этапе; коэффициентов пересчета элементов на компонент включения; значений концентраций элементов, входящих в состав включения) были предложены псевдо-формулы.

Пробенкова Э.А., Якубенко Е.В., Ермолаева Т.Н., Орехова Ю.Н. Совершенствование метода искрового атомно-эмиссионного спектрального определения оксисульфидов в конструкционной стали//Заводская лаборатория. Диагностика материалов. 2024. Т. 90. № 1. С. 5-16).

Поскольку вся сера присутствует в стали преимущественно в виде сульфидов, исследована возможность исключения из алгоритма и псевдо-формулы марганца, а также исключения серы, входящей в состав оксисульфидов. Подтверждена правильность и высокая прецизионность определения MnS по предложенному алгоритму и псевдо-формуле. Отсутствие систематической погрешности в результатах определения сульфидов подтверждено тестовой статистикой Стьюдента при анализе стандартного образца стали ИСО УГ124 (ЗАО «ИСО», Екатеринбург), предварительно проанализированного методом СЭМ с ЭДС. Показана согласованность результатов определения сульфидов в производственных образцах стали методом ИАЭС и СЭМ с ЭДС.

Разработан и аттестован комплект стандартных образцов состава электротехнической анизотропной стали с широким перечнем нормируемых элементов, предназначенный для построения градуировочных графиков и определения спектральными методами следующих элементов: В, С, N, Al, Alk.p., Si, P, S, Ca, Ti, V, Cr, Mn, Ni, Cu, Nb, Mo и Sn. Комплект стандартных образцов ЭС был выплавлен в модернизированной вакуумной индукционной печи («Leybold heraeus», Германия) с последующей обработкой ковкой для обеспечения гомогенизации образцов (ООО Научно-технический центр «Технологии Специальной Металлургии»). Подтверждены однородность и стабильность химического состава комплекта, установлены минимальные значения погрешности аттестованных значений нормируемых элементов. Рассчитаны значения коэффициентов детерминации, свидетельствующие о линейности градуировочных графиков в диапазонах концентраций

элементов (0,9817 - 0,9998 - для метода искровой атомно-эмиссионной спектрометрии с пределами обнаружения 0,1 - 170 ppm и 0,8141 - 0,9999 для метода рентгенофлуоресцентной спектрометрии с пределами обнаружения 0,8 - 18 ppm). Методами ИАЭС и РФА установлены градуировочные характеристики, подтверждена линейность градуировочных графиков в аттестованном диапазоне концентраций элементов.

С применением критерия Уилкоксона установлено, что разработанный и коммерческие комплекты СО (SPL SST-1A – SST-4A – Чехия) равноценны (расчетные значения градуировочных коэффициентов для элементов превышают критическое значение 68) и могут использоваться совместно для градуировки и последующего спектрального анализа нормируемых в ЭС элементов. Разработанный комплект применяется в лабораториях ПАО «Новолипецкий металлургический комбинат». Предложенный алгоритм разработки и аттестации комплекта стандартных образцов может быть рекомендован к применению в производственных лабораториях металлургических предприятий.

Носикова Е.В. Якубенко Е.В. Лепилина М. Ю., Михайлов А.М., Ермолаева Т.Н., Барановская В.Б. Разработка комплекта стандартных образцов для спектрального анализа анизотропной электротехнической стали// Заводская лаборатория. Диагностика материалов. (Проходит рецензирование).

Ермолаева Т.Н., д.х.н., etn@stu.lipetsk.ru; Якубенко Е.В., к.х.н., alyenka13@yandex.ru (Липецкий государственный технический университет, кафедра химии; ПАО «Новолипецкий металлургический комбинат».)

5. Применение метода ТИ-ЭТА-ААС для определения химических форм ртути в твердых пробах. Идентификация различных химических форм ртути в природных и техногенных объектах является актуальной задачей современной аналитической химии, при этом анализ твердых проб часто затруднен. Предложена методика с последовательным термическим испарением форм ртути и последующей регистрацией сигналов аналитов (хлорида, метилхлорида, сульфида и сульфата ртути) методом ААС-ЭТА. Изучена эффективность аккумуляции ртути растениями в среде произрастания в зависимости от химической формы элемента. Показано, что максимальные значения эффективности аккумуляции наблюдаются для монометилртути. Новизна проведенных

исследований состоит в том, что на текущий момент аналогов разработанной методики определения химических форм ртути в твердых образцах не существует.

Шуваева О.В., д.х.н., olga@niic.nsc.ru (Институт неорганической химии им. А.В. Николаева СО РАН, Новосибирск).

6. Аналитическое сопровождение роста кристаллов оксида гадолиния (III), допированного европием. Монокристаллы редкоземельных оксидов имеют большой потенциал применения в качестве материалов для лазеров и сцинтилляторов благодаря своим физико-химическим свойствам. Разработаны методики АЭС-ИСП анализа прекурсоров оксида гадолиния: борной кислоты и карбоната лития, а также методики определения примесного и основного состава выращенных кристаллов оксида гадолиния. Выполнена оценка матричного эффекта на сигналы аналитов при различной концентрации матричного элемента (B, Li, Gd). Показано, что для большинства элементов наблюдаются значимые матричные эффекты и анализ необходимо выполнять с присутствием элемента-основы в градуировочных растворах. Проведение АЭС-ИСП анализа методом добавок (для литиевой матрицы с применением германия в качестве внутреннего стандарта) позволяет определять более 50 элементов с пределами обнаружения на уровне от $n \cdot 10^{-7}$ до $n \cdot 10^{-3}$ % мас., что превосходит имеющиеся в литературе результаты. Установлены инструментальные параметры АЭС-ИСП анализа, позволяющие определять соотношения Eu/Gd с погрешностью, не превышающей 2%.

Медведев С.Н., к.х.н.; Полякова Е.В., (Институт неорганической химии им. А.В. Николаева СО РАН, Новосибирск).

7. Определение элементного состава пиролитического нитрида бора (керамика) методом атомно-эмиссионной спектроскопии. Нитрид бора представляет собой высокочистое термически и химически стойкое тугоплавкое соединение бора и азота с химической формулой BN. Исходя из этих особенностей BN-керамики и в отсутствии информации об элементном составе примесей, для анализа был использован метод атомно-эмиссионной спектроскопии с дуговым разрядом (АЭС-ДР). Преимущества: метод не требует переведения проб в раствор, позволяет из небольшой навески пробы определять содержание большого числа

примесей с пределами обнаружения менее 0.0001 % мас. Ограничением является необходимость градуировки по образцам сравнения близким по составу анализируемым пробам. Однако такие образцы отсутствуют, поэтому содержание микропримесей определяли способом стандартных добавок, в качестве которых использовали комплекты государственных стандартных образцов состава графитового коллектора микропримесей ГСО 4519-89÷45-23-89 – СОГ-21-1÷5, ГСО 7751-2000 – СОГ-24-2÷5 и ГСО 8487-2003 – СОГ-37-1÷5 с аттестованными массовыми долями до 37 элементов. Для каждой пробы готовили 15 смесей в соотношении пробы и добавки 1:1. Спектры, полученные по способу полного испарения 10 мг смеси из канала графитового электрода марки *осч*, регистрировали в выбранных операционных условиях с помощью комплекса для атомно-эмиссионного анализа (ДФС-458с, МАЭС, генератор "Везувий-2", программа АТОМ) и обрабатывали в программах АТОМ и MS Excel. В пробах VN–керамики (российские и зарубежные производители) интервалы содержаний найденных элементов составили (ppm): Si 0.8-2.1; Al 1.1-4.7; Ca 2.6-3.8; Mg 0.15-0.

Химическая пробоподготовка растительных материалов в системах микроволнового разложения туннельного типа для элементного анализа. Изучение мирового опыта показало, что до сих пор отсутствуют единые схемы химической пробоподготовки одновременно пригодные для всех типов растений без ограничения круга определяемых элементов. Образцы разнообразных растений были минерализованы в системе микроволнового разложения туннельного типа MultiVIEW (SPC SCIENCE, Канада) при вариациях аналитических навесок; состава и объемов реагентов; вариантов добавления реакционной смеси; режимов нагрева сосудов для одновременного определения широкого круга элементов методом АЭС-ИСП. Оценка полноты растворения была использована в качестве одного из критериев оптимальности условий пробоподготовки. Показано, что при трёхступенчатом режиме нагрева сосудов (скорость нагрева на первой ступени 2.76 °C/мин) навески (0.5 г) и реакционной смеси (HNO₃ 4 мл; H₂O₂ 1.5 мл; HCl 1 мл и HF 0.05 мл) возможно надёжное определение типичных для растений содержаний Si, Al, Mg, Ca, Fe, Na, K, Ba, Sr, Rb, P, B, Mn, Ti, Ni, V, Cu, Zn.

Практическое значение. Предложенная химическая пробоподготовка растительных материалов рекомендуется при экологическом мониторинге, аналитическом контроле продуктов питания и лекарственного сырья.

Шабанова Е.В., Зак А.А., Васильева И.Е. Химическая пробоподготовка растительных материалов в системах микроволнового разложения туннельного типа для элементного анализа // Журнал аналитической химии. 2024. 79(4): 332-351 DOI: 10.31857/S0044450224040035, EDN: vbilru (Shabanova E.V., Zak A.A. & Vasil'eva I.E. Chemical Sample Preparation of Plant Materials in Tunnel-Type Microwave Decomposition Systems for Elemental Analysis // Journal of Analytical Chemistry. 79(3), 287–302 (2024). (02.04.2024) DOI: 10.1134/S1061934824030134).

Васильева И.Е., д.т.н., vasira@igc.irk.ru; Шабанова Е.В., д.ф.-м.н., shev@igc.irk.ru (Институт геохимии им. А.П. Виноградова СО РАН, группа атомно-эмиссионных методов анализа и стандартных образцов, Иркутск).

8. АЭС-ИСП-ЭТИ и АЭС-ДДП-ЭТИ методики анализа водных растворов с предварительным сорбционным концентрированием аналитов на оксиде графена. Предложены ИСП-АЭС и ДДП-АЭС (атомно-эмиссионная спектрометрия с двухструйной дуговой плазмой) методики анализа водных растворов, сочетающие сорбционное концентрирование аналитов на оксиде графена и последующий анализ суспензий сорбентов при помощи электротермического испарения проб (ЭТИ). Указанный способ пробоподготовки существенно проще по сравнению с традиционными (исключена стадия десорбции аналитов) и обеспечивает значительное снижение пределов обнаружения аналитов за счет достижения более высоких коэффициентов концентрирования, а также возможность определения концентраций аналитов, десорбция которых затруднена. Методики АЭС-ИСП-ЭТИ и АЭС-ДДП-ЭТИ анализа с сорбционным концентрированием позволяют определять в водных растворах концентрации 13 элементов: Ag, Au, Ba, Be, Bi, Cd, Cr, Cu, In, Hg, Pb, Sn и Zn с пределами обнаружения в диапазоне от $n \cdot 10^{-11}$ до $n \cdot 10^{-7}$ % мас.

Медведев С.Н., к.х.н., Сапрыкин А.И., д.х.н., saprykin@niic.nsc.ru; (Институт неорганической химии им. А.В. Николаева СО РАН, Новосибирск).

9. Высокочистый теллур и его оксид (IV). Инструментальные методики и методика с концентрированием примесей.

Разработана методика обзорного анализа с использованием водных образцов сравнения, позволяющая одновременно определять до 41

примесей в теллуре Ag, Al, As, Au, B, Ba, Be, Bi, Ca, Cd, Co, Cr, Cu, Fe, Ga, Hf, Hg, In, K, Li, Mg, Mn, Mo, Na, Nb, Ni, P, Pb, Rb, Re, Sb, Se, Si, Sn, Sr, Ta, Ti, V, W, Zn, Zr с пределами обнаружения (ПО) от $n \times 10^{-5}$ до $n \times 10^{-3}$ % мас.

Оптимизация операционного параметра метода АЭС-ИСП – мощности индукционного разряда – позволяет достичь максимального отношения интенсивности сигналов аналитов к флуктуациям фона и в результате снизить ПО аналитов. Тщательный выбор аналитических линий для определяемых примесей, оптимальной концентрации основного компонента в растворе обеспечивают минимальные матричные влияния при концентрации теллура в растворе до 40 г/л. Усовершенствованная методика позволяет определять 61 аналит (Ag, Al, As, Au, B, Ba, Be, Bi, Ca, Cd, Ce, Co, Cr, Cu, Dy, Er, Eu, Fe, Ga, Gd, Hf, Hg, Ho, In, Ir, K, Li, La, Mg, Mn, Mo, Na, Nb, Nd, Ni, P, Pb, Pd, Pr, Pt, Rb, Re, Rh, Ru, Sb, Sc, Se, Si, Sm, Sn, Sr, Ta, Tb, Ti, Tm, V, Y, Yb, W, Zn, Zr) с ПО 1×10^{-7} – 4×10^{-4} мас. % и внутрилабораторной прецизионностью, не превышающей 25%. Методика позволяет охарактеризовать теллур чистотой 4N8, что удовлетворяет всем требованиям нормативного документа [ГОСТ 17614-2018. Теллур технический. Технические условия (с поправкой). М.: Изд. стандартов, 2018. 12 с.].

Применение при анализе теллура и его оксида адекватных образцов сравнения, т.е. таких, которые моделируют матрицу пробы, позволяет снизить $C_{\min}$ для примесей: As, Pb, Se и Sn в 1.2–20 раз по сравнению с усовершенствованной методикой, таким образом, возможно снижение нижней границы пределов обнаружения 10^{-5} мас. %.

Для дальнейшего снижения пределов обнаружения целесообразно применять предварительное концентрирование примесей. Традиционно для этих целей использую вакуумную отгонку. Исходя физико-химических свойств теллура и его оксида можно предположить, что возможно отделение основы пробы после химического превращения – хлорирования. Установлено, что в атмосфере хлора при температуре 150-300°C происходит образование легколетучего тетрахлорида теллура. При температуре 240 °C возможно отделение основы пробы более чем на 99 % мас.; масса остатков концентратов составляла в среднем не более 5 мг (в пересчете <1 % мас. от исходной навески). После реакционной отгонки теряются такие примеси как As, B, Bi, Fe, Ga, Hg, In, Mo, Re, Sb, Si, Sn, V, W (14). Количественно в концентрате микропримесей остаются: Ag, Al, Au, Ba, Be, Ca, Cd, Ce, Co, Cr, Cu, Dy, Er, Eu, Gd, Hf, Ho, Ir, K, La, Li, Lu,

Mg, Mn, Na, Nb, Nd, Ni, P, Pb, Pd, Pr, Pt, Rb, Rh, Ru, Sc, Sm, Sr, Ta, Tb, Ti, Tm, Y, Yb, Zn, Zr (47). Применение такого подхода позволяет снизить пределы обнаружения примесей до 10^{-8} мас. % для отдельных примесей, а внутрилабораторная прецизионность не превышает 30%.

Высокочистая сурьма и её оксид. Комплекс инструментальных методик. Разработана методика обзорного анализа с использованием водных образцов сравнения, позволяющая определять до 41 примесей в сурьме Ag, Al, As, Au, B, Ba, Be, Bi, Ca, Cd, Co, Cr, Cu, Fe, In, Ga, Hg, Hf, K, Li, Mg, Mn, Mo, Na, Nb, Ni, P, Pb, Rb, Re, S, Si, Se, Sn, Sr, Ta, Te, Ti, W, Zn Zr с ПО от $n \times 10^{-5}$ до $n \times 10^{-3}$ % мас.

Дальнейшая оптимизация параметров, а именно – выбор оптимальной концентрации матрицы и коррекция неспектрального влияния сурьмы внутренним стандартом Y, позволили расширить список определяемых элементов до 56 снизить и снизить пределы обнаружения до $n \times 10^{-7}$ до $n \times 10^{-4}$ мас. %.

Применение адекватных образцов сравнения при анализе сурьмы позволяет снизить пределы обнаружения по оптимизированной методикой для Ag, As, Au, Pb, Sb, Se, Sn и Te в 2-25 раз. Пределы обнаружения технологически важных примесей в сурьме: Ag, As, Au, Se и Te удовлетворяют требованиям ТУ к материалу Су0000 и Су0000П [ГОСТ 1089.11–82. Сурьма. Технические условия. М.: Изд-во стандартов, 2002. 9 с.].

Цыганкова А.Р., к.х.н., alphiya@yandex.ru; Гусельникова Т.Я. , Медведев Н.С., к.х.н., medvedev@niic.nsc.ru (Институт неорганической химии им. А.В. Николаева СО РАН, Аналитическая лаборатория, Новосибирск).

10. Изучено поведение химически активных фторсодержащих добавок AlF_3 , AgF и ZnF_2 на характер испарения труднолетучих элементов В, Ве, Сг, Fe, Hf, Мо, Si Ti V из кратера дуги постоянного тока при анализе оксида алюминия высокой чистоты в сопоставлении с термодинамическими данными. Показано, что наиболее эффективной добавкой из исследуемых соединений является фторид цинка. Использование этой добавки позволило снизить пределы определения труднолетучих элементов в оксиде алюминия на полтора-два порядка по сравнению с вариантом без добавок, а также улучшить воспроизводимость результатов определений.

Гражулене С.С., д.х.н., Grazhule@iptm.ru (Институт проблем технологии микроэлектроники и особо чистых материалов, лаборатория спектроскопических методов анализа; лаборатория ядерно-физических и масс-спектральных методов анализа РАН, Черноголовка).

11. Проведены исследования по аутентификации сухих белых вин сортов Шардоне, Рислинг и Мускат, выращенных в четырех регионах Краснодарского края, по географическому происхождению с использованием методов спектрометрического и хеометрического анализа. Выявлена разница в содержании Al, Ba, Ca и Rb в винах в зависимости от сорта, а Al, Ba, Rb, Fe, Li, Sr – в зависимости от региона произрастания винограда. Для отнесения вырабатываемых сортов вина к месту произрастания винограда использовали различные модели обработки данных. Анализ данных элементного анализа 153 образцов вин показал, что по точности идентификации вин среди методов машинного обучения предпочтительны автоматизированные нейронные сети (100 %), далее опорные векторные машины (98,69 %) и общий дискриминантный анализ (94,77 %). Примененные математические модели позволили с высокой точностью выявить кластерную структуру анализируемых сортов вин и их принадлежность к территории произрастания винограда. Концентрации Sr, Li и Fe в винах оказались доминирующими предикторами в построенных моделях определения географического происхождения вин. Сочетание данных ICP-спектрометрического анализа с возможностями статистического моделирования методов машинного обучения, ориентированных на данные большой размерности, позволило успешно решать маломерные задачи определения географического происхождения вин по их элементному составу и сорту.

Temerdashev, Z., Khalafyan, A., Abakumov, A., Bolshov, M., Akin'shina, V., Kaunova, A. Authentication of selected white wines by geographical origin using ICP spectrometric and chemometric analysis // Heliyon, 2024, 10(8), e29607.

Темердашев З.А., temza@kubsu.ru (Кубанский государственный университет, кафедра аналитической химии, Краснодар).

Атомно–абсорбционные методы

1. Изучены аналитические возможности метода атомно-абсорбционной спектрометрии с электротермической атомизацией и

источником непрерывного спектра применительно к определению европия и иттербия в гидроксипатитах и трикальцийфосфатах, включая выбор условий и режимов проведения анализа (температурно-временная программа, применение модификаторов, построение градуировочной зависимости и т.д.) для получения точных результатов. Установлено, что применение нитрита магния и ЭДТА в качестве модификаторов матрицы позволяет увеличить поглощение аналитов почти в 1,5 раза и на 10 – 30 % соответственно. Показана возможность одновременного определения Eu и Yb в диапазоне содержаний от 0,09 до 2 % масс. при относительном стандартном отклонении не более 6 % отн. Правильность определения европия и иттербия в образцах ГА и ТКФ, допированных каждым из этих или обоими РЗЭ, подтверждена методом варьирования навески и сравнением с результатами референтного метода АЭС-ИСП.

Определение редкоземельных элементов в синтетических фосфатах кальция методом электротермической атомно-абсорбционной спектроскопии с источником непрерывного спектра // Заводская лаборатория. Диагностика материалов. Т. 90, № 10. С. 15-23.
<https://doi.org/10.26896/1028-6861-2024-90-10-15-23>

Доронина М.С., к.т.н., ms.semenova@gmail.com, Шевченко А.С. ann91102@gmail.com, Ксенофонтова Т.Д., ksenofontovat@bk.ru, Барановская В.Б., д.х.н., baranovskaya@list.ru (Институт общей и неорганической химии им. Н.С. Курнакова РАН, Центр коллективного пользования физическими методами исследования веществ и материалов, Москва).

2. Предложен новый вариант фракционного испарения порошковых образцов в графитовом тигельном атомизаторе для прямого электротермического атомно-абсорбционного анализа. Зона испарения в тигле дополнена графитовым блоком (контейнером) с ячейками-каналами для разделения и размещения дозируемой массы порошкового образца. Таким образом, изменены условия термического разложения и селективного фракционного испарения органоминеральных образцов и уменьшены помехи в аналитической зоне. Пределы обнаружения элементов снижены, по крайней мере, в 2–5 раз по сравнению с использованием варианта анализа, в котором общая масса образца традиционно размещена на дне тигля. Относительное стандартное отклонение при определении элементов на кларковом уровне содержаний

обычно не превышает 0.20, что вполне удовлетворительно для целей геохимии и геологии.

Орешкин В.Н., Цизин Г.И., д.х.н., tsisin@analyt.chem.msu.ru; (МГУ им. М.В. Ломоносова, химический факультет, кафедра аналитической химии, лаборатория концентрирования).

3. Второй этап НИР «Новые аналитические формы при эколого-аналитическом мониторинге металлов-токсикантов» (№госрегистрации 124012400348-9).

Решена задача ускоренного электротермического атомно-абсорбционного определения фоновых содержаний кадмия в крупах, зерне с использованием палладийсодержащего силикагеля, вносимого в виде суспензии, и с применением техники карбонизации. Разработанная методика позволила сократить время анализа с 40 часов до 2-3 часов, сократить количество палладия, используемого для единичного определения, снизить стоимость элемент-определения. Термостабилизирующая способность модификатора Pd-SiO₂ выше, чем у одного из самых эффективных неорганических Pd/Mg модификаторов.

Проведены исследования и доказана эффективность палладийкомплексных модификаторов – комплексов Pd(II) с ксиленоловым оранжевым и хромазуолом S при прямом (без вскрытия) ЭТААС определении молибдена в соках и после предварительного озоления в меде, сахаре, конфитюре. Толерантность палладийкомплексных модификаторов к типовым депрессирующим матрицам NaCl и Na₂SO₄ в 1,5-2 раза выше, чем у Pd/Mg модификатора.

Сведения о публикациях: монография «Металлокомплексные химические модификаторы в электротермической атомно-абсорбционной спектроскопии. – 142 с. Монография будет опубликована в 2025 г.

Алемасова А.С., д.х.н., alemasovaa@gmail.com; Щепина Н.Д., shnatalina@mail.ru (Донецкий государственный университет, кафедра аналитической химии).

Спектрофотометрические методы

1. Спектрофотометрическим методом получены данные о спектральных характеристиках водного раствора полусинтетического антибиотика группы тетрациклинов - гидрохлорида миноциклина.

Выявлены оптимальные условия количественного анализа исследуемого антибиотика, получен полный спектр поглощения при 25⁰С, определена аналитическая длина волны, соответствующая 277 нм. Установлено, что положение основного максимума ($\lambda=277$ нм, pH=4.5) не сохраняется при изменении значений pH раствора. В областях значений $1 \leq \text{pH} \leq 3.5$ и $6 \leq \text{pH} \leq 10$ наблюдается смещение максимумов пиков в сторону коротких длин волн, что может быть связано с различным поглощением разных ионных форм препарата при снижении степени сопряжения двойных связей. При $\lambda=277$ нм представлен градуировочный график зависимости абсорбционности от концентрации гидрохлорида миноциклина в водных растворах в интервале 0.05-0.50 ммоль/дм³, рассчитан молярный коэффициент светопоглощения ε_{277} .

Крысанова Т.А., Тютина Н.А., Фомина А.А., Крысанов В.А., Давыдова Е.Г. Спектрофотометрическое определение гидрохлорида миноциклина в водном растворе // Вестник Воронежского государственного университета. Серия: Химия. Биология. Фармация. 2024. № 2. С. 14-19.

Крысанова Т.А., к.х.н., takrys@yandex.ru (Воронежский государственный университет, кафедра аналитической химии).

2. Исследовано влияние мицелл различных ПАВ на некоторые аналитические характеристики реакций диазотирования *n*-нитроанилина (I), *n*-аминобензойной кислоты (II), сульфаниловой кислоты (III) и азосочетания соответствующих солей диазония с дифениламином (ДФА). Установлено, что мицеллы ПАВ не оказывают влияния на стадию диазотирования. Азосочетание солей диазония (I – III) с ДФА приводит к образованию коллоидных растворов. Методом спектра мутности показано, что мицеллы анионных ПАВ (додецилсульфат натрия, ДДС) оказывают гомогенизирующее действие на состояние азокрасителей, делают их агрегативно устойчивыми, что позволяет применять исследуемые системы в фотометрическом анализе нитрит-иона на уровне долей ПДК. На примере синтезированных азосоединения 1-(4-ифениламин)-4-нитроазобензола (ДФНА) и его ионного ассоциата с ДДС показано, что при переходе от водной среды к мицеллярной, растворимость как ДФНА, так и его ассоциата увеличивается на 2 порядка. Мицеллярные среды на основе анионных ПАВ явились эффективными растворителями гидрофобных аналитических форм при проведении реакций диазотирования и азосочетания, диспергируя коллоидные частицы

азосоединений (100 – 400 нм) и приближая их к молекулярной степени дисперсности (10 нм и менее), что важно в фотометрии.

Доронин С.Ю., д.х.н. doroninsu@mail.ru; Соколова Т.А.; Саратовский национальный исследовательский государственный университет, кафедра аналитической химии и химической экологии).

Методы колебательной спектроскопии

1. Методом ИК-спектроскопии НПВО проведен структурно-групповой анализ антибиотиков: цефтриаксона натрия, цефазолина натрия, цефотаксима натрия, цефуроксима натрия, сульфаниламида, стрептомицина сульфата и неомидина сульфата и молекулярно-импринтированных полимеров (МИП) с отпечатками этих антибиотиков. Установлены характеристические частоты. Так, полосы в диапазонах 1730-1690 см⁻¹, 1790-1740 см⁻¹ и 1390-1360 см⁻¹ свидетельствуют о наличии имидных циклов. Проведен анализ и сравнение как МИП, так и неимпринтированных полимеров. Анализ ИК-спектров показал, что для МИП наблюдается увеличение интенсивности характеристических частот.

Зяблов А.Н., д.х.н., alex-n-z@yandex.ru; Воронежский государственный университет, кафедра аналитической химии).

2. Разработана универсальная методика определения структурно-родственных антибиотиков (пять представителей класса сульфаниламидов) в сложных объектах (моча и слюна человека) с использованием метода гигантского комбинационного рассеяния (ГКР) света. Процедура анализа включает только смешивание подкисленного анализируемого раствора с растворами катионного полиэлектролита (полидиаллилдиметиламмоний хлорид – ПДДА) и коллоидных наночастиц серебра. Подкисление приводит к генерации ГКР спектров с максимальным сходством спектральных профилей и интенсивностью. Добавление ПДДА улучшает селективность анализа за счет снижения фонового сигнала от биологических жидкостей, что позволяет упростить предварительную обработку образцов (для мочи – разбавление; для слюны – удаление муцина и разбавление). Разработанная методика позволяет проводить быстрое (≤ 10 мин), точное и воспроизводимое класс-специфическое определение сульфаниламидов в диапазонах концентраций, подходящих для неинвазивного терапевтического лекарственного мониторинга в моче

(40–600 мкМ) и слюне (10–30 мкМ). Таким образом показано, что изучение структурно-родственных аналитов методом ГКР является перспективным направлением для расширения возможностей ГКР как аналитического инструмента и улучшения понимания ГКР как явления.

Markina N.E., Goryacheva I.Yu., Markin A.V. SERS as a tool for determination of structurally related compounds: the case of sulfanilamide class antibiotics // Talanta, 2024, Vol. 277, P. 126433. <https://doi.org/10.1016/j.talanta.2024.126433>

Разработана методика ГКР определения трех аналитов (цефалоспориновые антибиотики (ЦСА), противоопухолевый препарат метотрексат (МТК) и креатинин (КРН)) в моче как матрице со сложным и изменяющимся составом. Выбор лекарств обоснован необходимостью контроля их концентраций в моче онкологических больных с сопутствующей бактериальной инфекцией, а контроль выведения КРН позволяет оценить функцию почек. В исследовании использовали три представителя ЦСА для достижения максимальной универсальности анализа. Проведена тщательная оптимизация этапов простых и быстрых этапов пробоподготовки для детектирования каждого аналита в моче, в том числе в образцах, содержащих избыток других целевых аналитов. Этапы пробоподготовки основаны на (1) способности ПДДА подавлять фоновый сигнал, (2) возможности усиления/ослабления ГКР сигнала путем корректировки значения pH, (3) осаждении ацетоном мешающих примесей. Таким образом показано, что селективность прямого ГКР анализа может быть улучшена путем управления процессами конкурентной адсорбции на поверхности ГКР подложки с использованием очень простых этапов пробоподготовки без применения сложных хроматографических методов.

Markina N.E., Markin A.V. Determination of multiple analytes in urine using label-free SERS coupled with simple sample pretreatments // Analytica Chimica Acta, 2024, Vol. 1332, P. 343383. <https://doi.org/10.1016/j.aca.2024.343383>

В 2024 году исполнилось 50 лет со дня открытия эффекта поверхностно-усиленного (гигантского) комбинационного рассеяния света (ГКР). Рассмотрению успехов применения ГКР в биомедицинском анализе посвящены две обзорные статьи, подготовленные коллективом авторов из Германии, Италии и России. Представители российской стороны (сотрудники Института химии Саратовского ГУ) написали разделы, посвященные различным форматам реализации ГКР анализа, а также

изучению возможностей ГКР в качестве инструмента для терапевтического лекарственного мониторинга, диагностики инфекционных заболеваний, анализа объектов окружающей среды и продуктов питания.

Cialla-May D., Bonifacio A., Bocklitz T., Markin A., Markina N., Fornasaro S., Dwivedi A., Dib T., Farnesi E., Liu C., Ghosh A., Popp J. Biomedical SERS – the current state and future trends // Chemical Society Reviews, 2024, Vol. 53, P. 8957-8979. <https://doi.org/10.1039/D4CS00090K>.

D. Cialla-May, Bonifacio A., Markin A., Markina N., Fornasaro S., Dwivedi A., Dib T., Farnesi E., Liu C., Ghosh A., Schmitt M., Popp J. Recent advances of surface enhanced Raman spectroscopy (SERS) in optical biosensing // TrAC Trends in Analytical Chemistry, 2024, Vol. 181, Part A, P. 117990. <https://doi.org/10.1016/j.trac.2024.117990>

Маркин А.В., к.х.н., av_markin@mail.ru; Саратовский национальный исследовательский государственный университет, Институт химии, кафедра общей и неорганической химии).

3. Разработана новая гибридная окислительная сенсорная платформа на основе фталоцианина и наночастиц серебра для определения раман-неактивных соединений методом гигантского комбинационного рассеяния (ГКР). Гибридный сенсорный элемент был получен путем самосборки цинка(II) 2,3,9,10,16,17,23,24-окта[(3',5'-дикарбокси)-фенокси] фталоциани-ната $ZnPc^*$ с монослоем оксида графена (ОГ) на твердой подложке. Атомно-силовая микроскопия, УФ-видимая и флуоресцентная спектроскопия подтверждают, что эта простая координационная структура в сочетании с молекулярной структурой $ZnPc^*$ предотвращает контактное гашение возбужденного светом триплетного состояния посредством ароматического стекирования с частицами ОГ. Флуоресцентное зондирование с использованием «Sensor Green» и терефталевой кислоты в качестве специфических индикаторов активных кислородных интермедиатов показывает, что гибридная нанопленка инициирует селективную генерацию синглетного кислорода под видимым светом. Прямое одноэлектронное окисление 3,3',5,5'-тетраметилбензидина (ТМВ) (0.1 мкМ) на гибридной поверхности в присутствии наночастиц серебра размером 100 нм в качестве плазмонных горячих точек под облучением светом 450-640 нм дает хорошо разрешенный резонансный спектр комбинационного рассеяния одноэлектронной окисленной формы ТМВ. Разработанная гибридная окислительная сенсорная платформа открывает

перспективы селективного обнаружения и определения широкого круга органических биологически активных соединений, различных токсикантов за счет их переводение в окисленную ГКР-активную форму.

Zvyagina A.I., Shiryayeva O.A., Afonyushkina E.Y., Kapitanova O.O., Averin A.A., Kormschikov I.D., Martynov A.G., Gorbunova Y.G., Veselova I.A., Kalinina M.A. Graphene oxide/zinc phthalocyanine selective singlet oxygen visible-light nanosensor for raman-inactive compounds // Small Methods. 2024. 2401420. DOI: 10.1002/smtd.202401420

Предложена технология синтеза высокостабильных ГКР-активных сенсорных платформ на основе наночастиц серебра методом ионно-лучевой модификации поверхности. Наночастицы были сформированы на тонкой серебряной пленке путем ее облучения низкоэнергетическими ионами. В сочетании с литографией эта технология позволяет создавать ансамбли наночастиц различных форм. Показано, что плазмонные свойства таких ГКР-сенсорных элементов сохраняются не менее 40 дней при хранении на воздухе без потери первоначальной активности, которая обеспечивается прежде всего монокристаллической структурой наночастиц серебра, полученных предложенным способом. Картирование ГКР-сенсорной платформы в присутствии красителя кристаллического фиолетового продемонстрировало высокие коэффициенты усиления и их воспроизводимость, которые сохранялись в три раза дольше, чем в случае применения поликристаллических серебряных наночастиц аналогичного размера, сформированных путем отжига.

Doroshina N.V., Streletskiy O.A., Zavidovskiy I.A. et al. Crystallinity as a factor of sers stability of silver nanoparticles formed by Ar⁺ irradiation // Heliyon. 2024. V. 10. № 6. e27538. DOI: 10.1016/j.heliyon.2024.e27538.

Веселова И.А., д.х.н., irina.veselova@mail.ru; Капитанова О.О., olesya.kapitanova@gmail.com (МГУ им. М.В. Ломоносова, химический факультет, кафедра аналитической химии, лаборатория биоаналитических методов и оптических сенсорных систем).

4. Предложены условия определения содержания мочевины и гуматов в водных удобрениях при их совместном присутствии методом ИК-НПВО-спектроскопии. Проведена идентификация спектров мочевины и гумата. Выбраны характеристические полосы мочевины и гумата для их количественного определения при совместном присутствии. Минимальная погрешность определения мочевины наблюдается при полосах 1628 и 1598 см⁻¹ (10-200 г/л), гумата — 1380 см⁻¹ (10-100 г/л). При расчёте содержания

гумата и мочевины в их смесях методом Фирордта погрешность определения каждого компонента составляет 3%. Предложенные условия определения проверены на модельных удобрениях и коммерческих гуматных удобрениях.

Проскурнин М.А., д.х.н., профессор РАН, proskurnin@gmail.com; Карпухина Е.А., karpukhina.evgeniya@gmail.com (МГУ им. М.В. Ломоносова, Химический факультет, кафедра аналитической химии, лаборатория спектроскопических методов анализа).

5. Оксид графена (ОГ) — уникальный двумерный материал на основе графена, состоящий из sp^2 кластеров, окруженных sp^3 атомами углерода, соединенных с кислородосодержащими группами. Он растворим в воде, что делает его основой создания нанофармпрепаратов. Однако такое применение ОГ невозможно без надежных методов и методик оценки полного состава ОГ и его контроля. Для этого перспективны инструментальные платформы на основе методов молекулярной и атомной спектроскопии для совокупной качественной и количественной оценки продуктов синтеза ОГ, полученных с помощью различных химических и электрохимических методов (доказательство получения оксида графена) и самих водных дисперсий ОГ. Для каждого метода, включаемого в такую платформу, требуется понимание химии поверхности, особенно распределения и природы кислотных центров имеет решающее значение для выявления химических свойств и реакционной способности ОГ, в частности, в свободнорадикальных процессах. Существует потребность в методиках количественной оценки распределения функциональных групп ОГ, аналогично классификации реакционных центров, например, цеолитов. Основные типы центров, неоднородных по своей силе, которые необходимо охарактеризовать в ОГ: (1) брэнстедовские кислотные центры, доноры H^+ , (2) льюисовские кислотные центры, чаще всего акцепторы электронных пар (ионы металлов, поверхностные дефекты структуры материала и др.) и (3) основные центры. Инструментом для исследования кислотных центров выбран метод ИК-НПВО спектроскопии с преобразованием Фурье. Исходные спектры ОГ часто представлены широкими неразрешенными полосами, что затрудняет как качественную, так и количественную оценку кислотных центров, поэтому для работы выбран метод молекулярных зондов. Получена количественная оценка реакционных центров методами ИК-НПВО и спектроскопии ЯМР с

вращением под магическим углом. Показано влияние предварительной очистки ОГ на количество кислотных центров.

Проскурнин М.А., д.х.н., профессор РАН, proskurnin@gmail.com; Михеев И.В., mikheev.ivan@gmail.com; Смирнова С.В., sv_v_smirnova@mail.ru (МГУ им. М.В. Ломоносова, Химический факультет, кафедра аналитической химии, лаборатория спектроскопических методов анализа, лаборатория концентрирования).

Другие спектроскопические методы

1. Электронные сигареты (ЭС) стали популярными во всем мире, а рынок в некоторых странах растет экспоненциально. Отсутствие стандартов на контроль данной продукции требует разработки аналитических методик для всестороннего контроля растущего разнообразия таких продуктов. Представлен подход, основанный на ядерном магнитном резонансе в слабом поле (НЧ-ЯМР) на частоте 80 МГц для одновременного определения следующих параметров: растворителей-носителей (растительный глицерин, пропиленгликоль и вода), никотина, а также содержания непротонированной формы никотина. Более того, стало возможным качественное и количественное определение четырнадцати слабых органических кислот, намеренно добавляемых для улучшения сенсорных характеристик электронных сигарет. В большинстве случаев эти параметры можно быстро и удобно определить без использования каких-либо манипуляций с образцом, таких как этапы разбавления, экстракции или дериватизации. Метод был применен к 37 образцам электронных сигарет. В частности, было обнаружено восемь различных органических кислот с содержанием до 56 мг/мл. Благодаря своей простоте метод может использоваться в рамках нормативного контроля, а также для изучения поведения никотина и других компонентов электронных сигарет при нагревании.

K. Adels, Y. Monakhova, Low-field NMR spectroscopic study of e-cigarettes: Is determination of only nicotine and organic carrier solvents possible? Microchem. J. (2024) V. 203, 110859, <https://doi.org/10.1016/j.microc.2024.110859>.

Гиалуроновая кислота (ГК) часто содержится в БАДах и нутрикосметике для лечения остеоартрита или увлажнения. Целью исследования была разработка и валидация альтернативного метода контроля качества ГК в БАДах с использованием низкочастотной (НЧ) и

высокочастотной (ВЧ) ЯМР спектроскопии. Кроме того, хондроитинсульфат (ХС), другой активный ингредиент БАДов, может быть одновременно количественно определен. Методы ¹H-ЯМР были успешно валидированы с точки зрения предела обнаружения (ПО) и предела количественного определения (ПКО), которые составили 0,1 мг/мл и 0,2 мг/мл (80 МГц), а также 0,2 мг/мл и 0,6 мг/мл (600 МГц). Коэффициенты извлечения оказались в интервале от 92 до 120% на обоих спектрометрах; точность, включая подготовку образцов, составила 4,2% и 8,0% для 600 МГц и 80 МГц соответственно. Количественные результаты, полученные с помощью НЧ и ВЧ ЯМР сопоставимы для 16 БАДов с различной матрицей. Измерения на НЧ ЯМР после предварительного кислотного гидролиза предлагают экономически эффективную и не требующую охлаждения альтернативу для анализа БАДов в отсутствии парамагнитных компонентов матрицы.

F.M. Lang, K.Adels, B.W.K. Diehl, M.Schulze, Y.Monakhova, (2024) NMR spectroscopy as an alternative analytical method for biopolymers without chromophore: example of hyaluronic acid in dietary supplements. Appl. Magn. Reson. (2024) 55 687-700, <https://doi.org/10.1007/s00723-024-01663-x>

Монахова Ю.Б., д.х.н., yul-monakhova@mail.ru; (Саратовский национальный исследовательский государственный университет, Институт химии, кафедра общей и неорганической химии).

2. Разработаны способы определения аммония и нитрата в почве методом цифровой цветометрии. Предложенная процедура включает (1) извлечение указанных ионов из почвы раствором хлорида калия, (2) проведение с их участием реакций образования, соответственно, индофенольного красителя (в присутствии фенола и гипохлорита натрия) и азокрасителя (продукта азосочетания 1-нафтиламина и сульфаниламида), (3) измерение характеристик цвета полученных растворов с помощью фотокамеры смартфона и офисного планшетного фотосканера. Чувствительность и точность разработанного способа сопоставимы со спектрофотометрическим (ГОСТ). Правильность результатов подтверждена при цветометрическом анализе стандартных образцов почв. Разработанный подход апробирован при определении аммония и нитрата в пробах почв Московской области.

Гармай А.В., andrew-garmay@yandex.ru; Моногарова О.В., o_monogarova@mail.ru; Осолок К.В., k_oskolok@mail.ru (МГУ им. М.В.

Ломоносова, Химический факультет, кафедра аналитической химии, лаборатория спектроскопических методов анализа).

3. Термолинзовая спектрометрия (ТЛС) использована в анализе дисперсий наночастиц полистирола в воде. Продемонстрированы возможности ТЛС в определении концентрации наночастиц в диапазоне концентраций 0.5–150 мг/л и оценке влияния размера частиц 65 и 80 нм на оптический сигнал. Результаты фототермического анализа высокодисперсных растворов полистирола выявили сложную динамику влияния концентрации нанофазы на температуропроводность. Вреязрешённые фототермические измерения демонстрируют наличие диффузии частиц, вызванной перегревом системы, динамика которой отличается от диффузии в дисперсных системах с металлическими наночастицами, что требует дальнейших исследований. Фототермические методы на примере термолинзовой спектрометрии позволяют расширить понимание протекающих в растворах с полимерной нанофазой процессов и выявить физико-химические изменения при концентрациях ниже 1 мг/л.

Проскурнин М.А., д.х.н., профессор РАН, proskurnin@gmail.com; Хабибуллин В.Р., vladhab1995@gmail.com (МГУ им. М.В. Ломоносова, Химический факультет, кафедра аналитической химии, лаборатория спектроскопических методов анализа).

4. На примере дофамина показана возможность люминесцентного определения катехоламинов, содержащих в своей структуре первичную аминогруппу, по реакции с флуорескамином. В результате взаимодействия образуется люминесцирующий продукт с максимумом возбуждения люминесценции при 395 нм и максимумом люминесценции при 485 нм, наибольшая интенсивность люминесценции наблюдается при проведении реакции при рН 8–8.5 в фосфатном буферном растворе через 5 мин после смешения реагентов, флуорескамин следует вводить последним. Оценены аналитические характеристики определения дофамина: предел обнаружения составляет 0.5 мкМ, диапазон определяемых содержаний – 1.5–100 мкМ.

Изучена возможность люминесцентного определения суммарного содержания сульфаниламидных препаратов по их реакции с флуорескамином. Показано, что возможно определение суммарного содержания сульфаниламида, сульфаметазина и сульфаметоксазола при их

совместном присутствии, присутствие сульфаметоксипиридазина приводит к заниженным результатам. Предложен подход к экстракционно-флуориметрическому определению сульфаниламида, сульфаметазина и сульфаметоксазола с использованием бытового цветорегистрирующего устройства – калибратора мониторов i1Pro2. Определение основано на предварительной дериватизации сульфаниламидов флуорескаминол и последующей экстракции люминесцирующего продукта в небольшой объем несмешивающегося с водой органического растворителя. Использование для измерений калибратора мониторов позволяет определение без отделения экстракта от водной фазы. Для этого в качестве разделителя фаз следует использовать черную полимерную мембрану с плотностью меньше плотности воды и больше плотности органической фазы: она самопроизвольно располагается на границе раздела фаз и служит своеобразным дном новой кюветы, в которой проводятся измерения. Применимость предложенного способа экстракционно-люминесцентного определения сульфаниламидов проверена при анализе лекарств.

Матяш М.В., masha13_1992@mail.ru; Апяри В.В., д.х.н., aryari@mail.ru (МГУ им. М.В. Ломоносова, химический факультет, кафедра аналитической химии, лаборатория концентрирования).

5. Продолжены работы по изучению аналитических возможностей иммобилизованных сорбционных микрозондов, которые представляют собой единичные гранулы сорбента, закрепленные на пластинке-держателе с помощью адгезивного слоя. В сочетании с цветометрией высокого разрешения, этот вариант позволяет проводить определение окрашенных аналитических форм путем регистрации сигнала единичных гранул или их малых массивов. Разработанный способ определения пищевых красителей с помощью микрозондов на основе оксида алюминия применен для определения пищевых красителей Понсо-4R в напитке и Зеленого прочного в капсулах таблеток. Установлено, что при регистрации сигнала на отдельных гранулах коэффициенты чувствительности градуировочной зависимости координат цвета от концентрации красителя в 3-5 раз выше по сравнению с плотным массивом микрозондов.

В плане развития данного направления изучено твердофазно-цветометрическое определение анионных форм окрашенных веществ с применением иммобилизованных сорбционных микрозондов на основе кремнезема, химически модифицированного группами четвертичного

аммониевого основания, и оксида алюминия. В качестве аналитов взяты пищевой краситель Желтый солнечный закат и билирубин. Оптимизированы условия определения данных веществ с помощью микрозондов на основе отдельных (дистанцированных) гранул сорбентов.

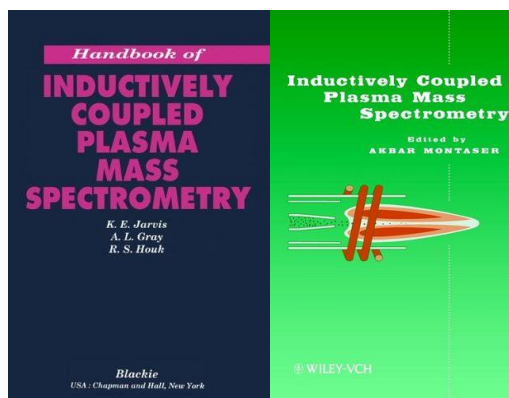
Тихомирова Т.И., д.х.н., Tikhomirova-tatyana@yandex.ru; Апяри В.В., д.х.н., aryari@mail.ru (МГУ им. М.В. Ломоносова, химический факультет, кафедра аналитической химии, лаборатория концентрирования).

Масс-спектрометрические и родственные методы

1. Библиографический указатель печатных и электронных изданий по методу МС-ИСП. Составлен иллюстрированный библиографический указатель печатных и электронных изданий (монографии, учебники, сборники статей, материалы симпозиумов и конференций, стандарты, учебные пособия) по созданию, развитию и применению мощного современного аналитического метода масс-спектрометрии с индуктивно связанной плазмой (139 изданий). Временной диапазон указателя охватывает период от публикации первых изданий, посвященных МС-ИСП, по настоящее время. В указателе представлены значимые для научной и практической работы аналитиков печатные и электронные издания, опубликованные в различных странах. Для каждого издания приведены полное библиографическое описание и краткая аннотация. Большинство изданий в указателе сопровождаются иллюстрациями обложек или титульных листов, а также электронными адресами или идентификаторами. Это позволяет легко и быстро найти издание в сети Интернет.

Работа мирового уровня.

Пунышев А.А. Печатные и электронные издания по методу масс-спектрометрии с индуктивно связанной плазмой (МС-ИСП). Библиографический указатель // Аналитика и контроль (принято в печать).



Пупышев А.А., д.х.н. pupyshev@gmail.com (Уральский федеральный университет им. первого Президента России Б.Н. Ельцина, Кафедра физико-химических методов анализа, Екатеринбург).

2. ¹Проведен обзор публикаций по методу масс-спектрометрии с различными источниками ионизации (индуктивно связанная плазма, вакуумный искровой разряд, тлеющий разряд, лазерный источник, источник вторичных ионов) и системами ввода образца (распыление растворов, лазерный пробоотбор, электротермическое испарение). Описаны преимущества и недостатки методов. В обзор вошли публикаций, содержащих методические решения и подходы для преодоления ограничений метода масс-спектрометрии с различными источниками ионизации применительно к анализу редкоземельных металлов и функциональных материалов на их основе. Обзор включает в себя российские и зарубежные публикации с 2014 по 2023 года.

Применение масс-спектральных методов для аналитического контроля функциональных материалов на основе редкоземельных металлов // Аналитика и контроль. Т. 28, № 3. С. 231-243.
<https://doi.org/10.15826/analitika.2024.28.3.001>

²Разработан метод масс-спектрального (МС-ИСП) с индуктивно связанной плазмой определения целевого элементного состава гадолиний-алюминиевых гранатов переменного состава $Gd_{3-x}Ce_xSc_yAl_{5-y}O_{12}$, где $x = 0,01-0,16$, $y = 0,25-1,75$. Это принципиально важно для получения оптической керамики с прогнозируемыми свойствами. Разработан способ автоклавного с микроволновым нагревом разложения исследуемых материалов, позволяющего с применением предложенной кислотной смеси и температурно-временной программы полностью перевести в раствор все компоненты пробы. Изучены и выбраны условия масс-спектрального анализа, а именно оценено влияние матричного состава, системы ввода

образца и столкновительной ячейки на пределы определения (ПО) примесных элементов (Mg, Si, Ti, V, Cr, Mn, Fe, Co, Ni, Cu, Y, La, Pr, Nd, Sm, Eu, Tb, Er, Ho, Tm, Yb, Lu). Предложенные условия масс-спектрального анализа обеспечивают ПО целевых аналитов в диапазоне от $1 \cdot 10^{-6}$ – $4,15 \cdot 10^{-3}$ масс. %. Правильность полученных результатов подтверждена методом введено-найденно и анализом образцов с известным химическим составом. Стандартное отклонение повторяемости (Sr) разработанной методики находится в диапазоне от 1 до 6 %. Разработанная методика анализа отличается чувствительностью, робастностью, многоэлементностью и имеет перспективы применения для других оптических и керамических материалов близкого состава.

Study of the Elemental Composition of Gadolinium–Aluminum Garnets — Obtaining Predictable Optical Properties // Solids. V. 5, № 4. С. 617-625. <https://doi.org/10.3390/solids5040041>

^{1,2}Короткова Н.А., к.х.н., natalya.korotkova.95@mail.ru, ^{1,2}Петрова К.В., к.х.н., gkv007@mail.ru, ^{1,2}Барановская В.Б., д.х.н., baranovskaya@list.ru, ^{1,2}Доронина М.С., к.т.н., ms.semenova@gmail.com; ²Архипенко А.А., alexandra622@mail.ru (Институт общей и неорганической химии им. Н.С. Курнакова РАН, Центр коллективного пользования физическими методами исследования веществ и материалов, Москва).

3. Масс-спектры природного органического вещества с высоким разрешением содержат большое число шумовых сигналов. Эти сигналы мешают правильной оценке молекулярного состава при нецелевом (нетаргетном) анализе, поскольку программное обеспечение находит эмпирические формулы и для таких пиков. Ранее предложенные методы фильтрации шума, использующие профиль распределения интенсивности пиков масс-спектра, опираются на гистограмму для вычисления порогового значения интенсивности. Однако профиль гистограммы может меняться в зависимости от настроек пользователя. Кроме того, эти алгоритмы не автоматизированы, поэтому обрабатываются вручную. Для преодоления указанных недостатков предложен новый алгоритм фильтрации шумов в масс-спектрах. Этот фильтр основан на моделях комбинации гауссовых кривых и методе машинного обучения для определения порогового значения интенсивности. Алгоритм полностью основан на самих данных и избавляет от необходимости работать с гистограммой. Он не имеет настраиваемых параметров и автоматически определяет уровень шума для каждого отдельного масс-спектра.

Работоспособность алгоритма проверена на масс-спектрах природного органического вещества, полученных путем усреднения различного числа микросканирований (переходных процессов), и результаты сравнены с другим шумовым фильтром, предложенным в литературе.

Волков Д.С., dmsvolkov@gmail.com; Проскурнин М.А., д.х.н., proskurnin@gmail.com (МГУ им. М.В. Ломоносова, химический факультет, кафедра аналитической химии, лаборатория спектроскопических методов анализа).

4. МС-ИСП и АЭС-ИСП методики анализа биологических жидкостей с предварительным сорбционным концентрированием аналитов на оксиде графена. Углеродные материалы на основе графена перспективны в качестве сорбентов за счет высокой удельной поверхности и сорбционной емкости. Изучены сорбционные свойства многослойного оксида графена по отношению к групповому концентрированию тяжелых металлов и других аналитов из растворов биологических жидкостей (моча, цельная кровь). Выбраны условия пробоподготовки (микроволновое разложение в смеси азотной кислоты и пероксида водорода). Разработаны методики анализа мочи и цельной крови методами масс-спектрометрии и атомно-эмиссионной спектрометрии с индуктивно связанной плазмой (МС-ИСП и АЭС-ИСП) с сорбционным концентрированием аналитов на оксиде графена. МС-ИСП и АЭС-ИСП методики позволяют определять концентрации более 20 аналитов с пределами обнаружения в диапазоне от $n \cdot 10^{-11}$ до $n \cdot 10^{-7}$ (анализ мочи) и от $n \cdot 10^{-9}$ до $n \cdot 10^{-7}$ (анализ крови). Показано, что использование оксида графена для сорбционного концентрирования позволяет снизить пределы обнаружения аналитов в 3-75 раз по сравнению с инструментальными МС-ИСП и АЭС-ИСП методиками.

Медведев Н.С., к.х.н., medvedev@niic.nsc.ru; Сапрыкин А.И., д.т.н., saprykin@niic.nsc.ru (Институт неорганической химии им. А.В. Николаева СО РАН, Аналитическая лаборатория, Новосибирск).

5. Методом масс-спектрометрии высокого разрешения с индуктивно связанной плазмой исследован примесный состав BCl_3 и получаемых из него восстановлением в водородной плазме аморфного бора и методом гидролиза – борной кислоте. Методом лазерной масс-спектрометрии исследован состав карбида бора, полученного в дуговом разряде.

Контролировалось содержание примесей более тридцати элементов. Полученная информация позволила прояснить источники поступления примесей в целевые продукты.

Потапов А.М., potapov@ihps-nnov.ru (Институт химии высокочистых веществ РАН, Нижний Новгород).

6. Разработан способ определения следовых количеств металлов в растворах, основанный на сочетании методов лазерной десорбции/ионизации, активируемой поверхностью, и капельной микроэкстракции. Способ включают экстракцию определяемых металлов в каплю раствора органического реагента с образованием комплексного соединения металла с реагентом, нанесение капли на специально подготовленный эмиттер ионов, лазерную десорбцию/ионизацию с переносом электрона и детектирование образующихся ионов в масс-спектрометре. В качестве определяемых элементов исследованы Cu , Mo , Ag , Pd , Pt и Au . Разработанный способ отличается высокой чувствительностью и селективностью анализа. Пределы обнаружения исследованных металлов составляют 0.2 – 10 пг/мл.

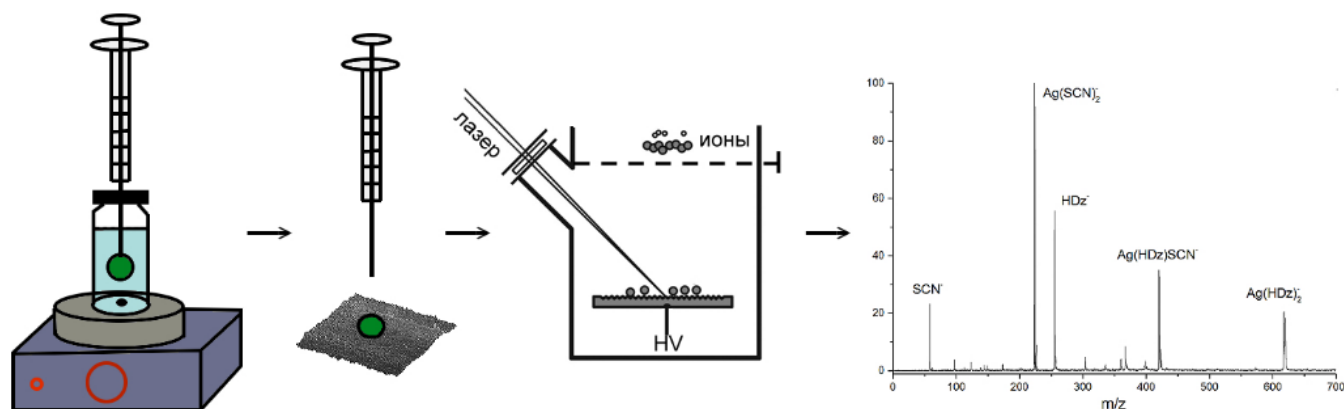


Рис. 1. Схема определения следовых количеств металлов

Borodkov A. S., Simakina Y. I., Grechnikov A. A. Surface-assisted laser desorption/ionization of metal complexes with dithizone // J. Anal. Chem. 2024. V. 79. № 11. P. 1574-1578.

Разработан способ экспресс-анализа и классификации образцов листового чая по запаху (составу выделяемых чаем органических

соединений), основанный на сочетании масс-спектрометрии с ионизацией, индуцированной лазерной плазмой при атмосферном давлении, и методов машинного обучения. Для классификации образцов использовали метод логистической регрессии в сочетании с рекурсивным устранением признаков с кросс-валидацией. Разработанный способ отличается высокой производительностью, не требует пробоподготовки и может быть востребован для решения задач быстрой оценки качества чая.

Тимакова С.И., Кравец К.Ю., Гречников А.А., Пенто А.В. Классификация чая по данным масс-спектрометрии с ионизацией, индуцированной лазерной плазмой при атмосферном давлении // Масс-спектрометрия. — 2024. — Т. 21, № 1. — С. 59—65.

Гречников А.А., д.х.н., grechnikov@geokhi.ru Институт геохимии и аналитической химии им. В.И. Вернадского РАН, лаборатория инструментальных методов и органических реагентов).

7. С использованием масс-спектрометрии MALDI впервые установлено строение олигомерных продуктов окисления гидрохинона пероксидом водорода в присутствии каталитических количеств FeSO_4 . Показано, что продукты реакции состоят из чередующихся и способных к взаимным превращениям полигидроксифениленовых и полигидрокси-п-бензохиноновых фрагментов, а их состав зависит от соотношения реагентов. Кроме того, решения задачи усложняется возможностью образования гидратных форм таких олигомеров. Продукты реакции характеризуются как восстановительными, так и окислительными свойствами, что определяет их уникальную биологическую активность.

Зенкевич И.Г., д.х.н., izenkevich@yandex.ru (Санкт-Петербургский государственный университет, Институт химии, Кафедра органической химии).

8. Разработаны методики прямого определения МПГ и других элементов в продуктах и полупродуктах медно-никелевого производства. Выбор изотопов определяемых элементов проводили с учетом матрицы образца и возможных интерференций. Прямое определение МПГ и других элементов в растворах после автоклавного кислотного разложения позволяет существенно сократить время анализа при хороших метрологических характеристиках. Правильность методики подтверждена с помощью анализа ГСО.

Разработаны методики масс-спектрометрического с индуктивно связанной плазмой (ИСП МС) определения примесных элементов (Na, Mg, Al, Si, K, Ca, Cr, Mn, Fe, Ni, Cu, Zn, As, Se, Pb, Sn, Sb, Co и др.) в сульфатах никеля и кобальта, решены вопросы, связанные с матричным влиянием и интерференциями при определении ряда элементов. Методика необходима для обеспечения работ, связанных с разработкой технологии получения чистых NiSO_4 и CoSO_4 .

Дрогобужская С.В., к.х.н., s.drogobuzhskaia@ksc.ru (Институт химии и технологии редких элементов и минерального сырья им. И.В. Тананаева, Апатиты).

9. Разработан способ спектрометрического анализа твердого материала (метод ЛА ИСП МС), который включает воздействие лазерного луча различных диаметров на стандартный образец материала с испарением анализируемого материала образца и образованием характерных кратеров, изображения которых фиксируют и замеряют их фактические площади. Испаренный материал направляют в спектрометр, где производят регистрацию полученного аналитического сигнала. Затем осуществляют построение градуировочной характеристики и производят расчет концентраций определяемого химического элемента в анализируемом образце твердого материала с учетом фактических площадей характерных кратеров. Технический результат заключается в повышении точности количественного спектрометрического анализа, расширении диапазона концентраций определяемых элементов и повышении достоверности результатов анализа. На способ получен патент № 2822410 от 11.01.2024.

Новиков А.И., м.н.с., a.novikov@ksc.ru; Дрогобужская С.В. к.х.н.; Широкая А.А., м.н.с. a.shirokaia@ksc.ru (Институт химии и технологии редких элементов и минерального сырья им. И.В. Тананаева, Апатиты).

10. Интеграция пико-фемтосекундной лазерной техники и электронной оптики в едином экспериментальном комплексе оказалась исключительно эффективной для наблюдения за поведением атомно-молекулярных структур на их естественных масштабах в пространственно-временном континууме. В режиме визуализации данная концепция привела к созданию 4D электронной микроскопии, а в режиме электронной дифракции появилась уникальная возможность снимать

атомно-молекулярные видеоролики. Высокая чувствительность метода в сочетании со сравнительно низким радиационным повреждением образца (в отличие от рентгеновского лазера на свободных электронах) позволила проводить исследования тонкопленочных перспективных материалов на компактных установках в стандартных лабораториях. В обзоре рассмотрено развитие этого научного направления от исследования наносекундной структурной динамики до фемтосекундной квантовой томографии на основе сверхбыстрой электронной дифракции.

С.А. Асеев, Б.Н. Миронов, Д.Г. Пойдашев, Е.А. Рябов, Дж. Ли, А.А. Ищенко. Структурная динамика тонкопленочных материалов: достижения, проблемы, перспективы. УФН 194(12),(2024)
<https://doi.org/10.3367/UFNr.2024.12.039828>

Ищенко А.А., д.х.н., aishchenko@yasenevo.ru (МИРЭА-Российский технологический университет, Институт тонких химических технологий имени М.В. Ломоносова, кафедра аналитической химии имени И.П. Алимарины; Институт спектроскопии РАН).

11. Многоэлементный анализ представительных образцов черных сланцев. В настоящее время большая часть добычи золота связана с его коренными месторождениями (черные сланцы и т.п.). Золото в них находится в трудно извлекаемой форме («упорное» золото), а его концентрация относительно невелика (примерно? 2 г/т). Для проведения контроля производственных процессов, решения задач геологоразведки и т.д., необходимы надежные методы аналитического контроля образцов такого рода. Известные сейчас методы анализа подобных образцов сложны и трудоемки. В ГЕОХИ РАН разработан новый способ анализа проб черных сланцев представительной массы (1000 мг и более) для определения золота и более 60 сопутствующих элементов, с использованием комплекса методов МС/АЭС-ИСП. Определение элементов проводится непосредственно из раствора после разложения проб черных сланцев. Для разложения проб предложена оригинальная методика кислотного вскрытия, основанная на твердофазном фторировании минералов матрицы (бифторид аммония) с последующим кислотным переводом пробы в раствор. Пробоподготовку проводят в один этап и она не имеет аналогов по эффективности. Полученный раствор устойчив в течение длительного времени. Для определения ультраследовых количеств элементов платиновой группы с целью

устранения спектральных интерференций проводят дополнительную очистку аналитов от мешающих компонентов с использованием селективного сорбента. Новый метод обеспечил расширение числа определяемых элементов и существенное снижение неопределенности результатов анализа. Метод апробирован на примере анализа стандартных образцов месторождения Сухой Лог Байкало-Витимской золоторудной провинции (СЛГ-1 и СЧС-1 и их обновленных аналогов СЛГ-1А и СЧС-1А). Уточнено содержание ряда элементов. На Рис.1 представлено сравнение результатов анализа и данных сертификата для образца СЛГ-1.

Методика, несомненно, будет востребована в золотодобывающей промышленности, геохимии и геологии.

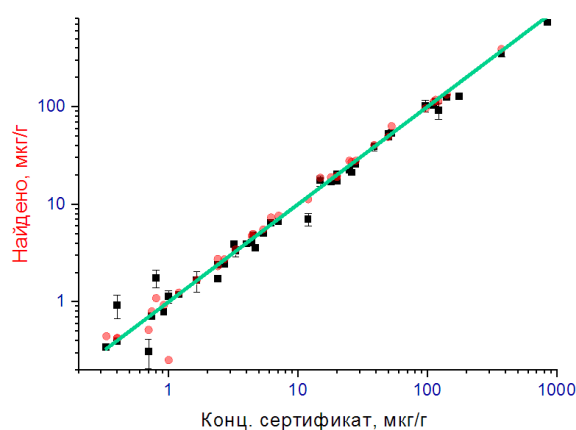


Рис. 2. Сопоставление результатов анализа и сертификата

В.П. Колотов, В.И. Казин, Е.А. Захарченко, И.Н. Громяк "Пробоподготовка образцов черных сланцев большой массы с использованием бифторида аммония для комплексного анализа методами МС/АЭС-ИСП" Ж. аналит. химии (принята к печати).

Колотов В.П., чл.-корр. РАН, Казин В.И., Захарченко Е.А. (Институт геохимии и аналитической химии им. В.И. Вернадского РАН).

12. Прогресс в решении многих принципиальных фундаментальных и прикладных вопросов в науках о Земле связан с развитием и внедрением в аналитическую практику новых инструментальных методов, в частности, МС-ИСП. При определении следов благородных металлов это единственный метод, обеспечивающий возможность получения данных о содержаниях всех элементов платиновой

группы (ЭПГ) и золота, а также сопутствующих микрокомпонентов, в геологических объектах различной природы.

В рамках работы рассмотрены возможности и ограничения наиболее распространенных способов подготовки геологических образцов к МС-ИСП определению ультраследовых содержаний ЭПГ и золота и выполнена экспериментальная оценка масс-спектральных влияний анионообразующих элементов (Zr, Hf, Ta) после ионообменного отделения матрицы. На примере стандартных образцов состава (СОС) пород (СЧС-1, СЛг-1, TDB-1, ОРУ-1, SBC-1) показана эффективность удаления мешающих компонентов путем их двухстадийного сорбционного отделения в сочетании с последующим МС-ИСП определением в режиме низкого и/или среднего разрешения с $\text{PrO } 0.01\text{--}0.5 \text{ нг г}^{-1}$.

Разработан комплекс методик исследования микроэлементного состава черных сланцев, включающий различные варианты подготовки проб к анализу для определения отдельных групп элементов, в том числе ЭПГ и золота, атомно-спектральными методами (АЭС-ИСП, МС-ИСП, ЭТААС). Получены данные по содержанию 54 элементов в стандартных образцах состава (СОС) черносланцевых пород СЛг-1А и СЧС-1А. Метрологически охарактеризованные данные позволят использовать эти СОС для детального изучения состава пород и руд, содержащих углеродистое вещество, как прямыми инструментальными методами (СЭМ-РСМА, САЭС), так и методами, использующих химическую пробоподготовку (ААС, АЭС-ИСП, МС-ИСП и др.). Актуальность задачи обусловлена отсутствием природных многоэлементных СОС, в которых одновременно аттестованы повышенные и следовые содержания золота, серебра, а также ЭПГ.

Тютюнник О.А., Набиуллина С.Н., Кубракова И.В., Аносова М.О. Интерференции некоторых полиатомных ионов при определении следов платиновых металлов и золота в геологических объектах методом масс-спектрометрии с индуктивно связанной плазмой // Масс-спектрометрия. – 2024. – Т.21, № 2. – С. 123-131.

Тютюнник О.А., Набиуллина С.Н., Кубракова И.В. Определение микроэлементного состава черносланцевых пород и руд. Стандартные образцы состава СЛг-1 и СЧС-1 // Геохимия. – 2023. – № 9 (68). – С. 982-992.

Кубракова И.В., kubrakova@geokhi.ru, Тютюнник О.А., Набиуллина С.Н. (Институт геохимии и аналитической химии им. В.И. Вернадского РАН, лаборатория геохимии и аналитической химии благородных металлов).

13. Рассмотрена возможность дериватизации с фталилглицилхлоридом широкого спектра аминокислот, оценены пределы их обнаружения и детектирования. Продemonстрировано сравнение с другими реагентами – дансилхлоридом и FMOC-Cl. Одним из ключевых аспектов исследований являлась оценка возможности имплементации предлагаемых методов в практику рутинных лабораторий. Показана возможность использования элюата после твердофазного концентрирования стероидных гормонов на гидрофобном сорбенте (C18) для анализа аминокислот, проведен сравнительный анализ, позволяющий показать, что после ТФЭ аминокислотный профиль не дискриминируется и данный элюат пригоден к дальнейшему применению.

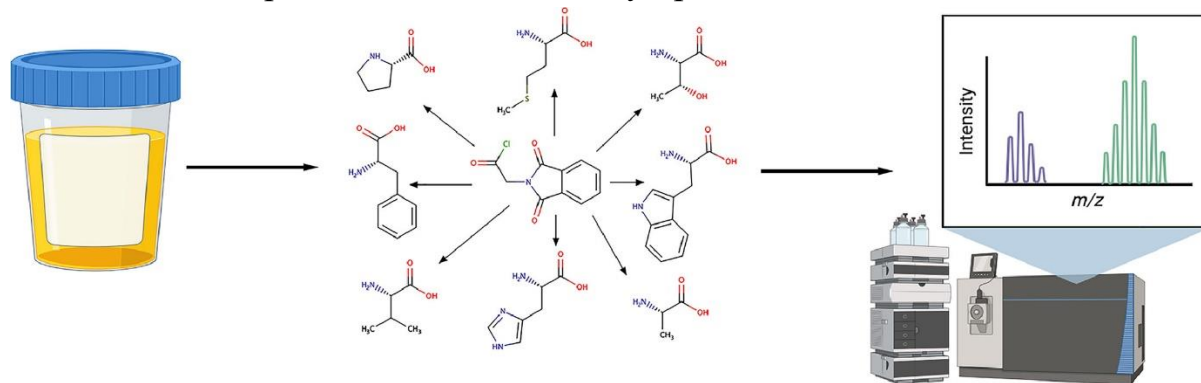


Рис. 3. Принципиальная схема применения предложенного подход

Temerdashev A., Nesterenko P.N., Atapattu S.N., Feng Y.-Q., Zorina M., Zhurkina K., Gashimova E., Steshin M.O., Dotsenko V.V. Phthalylglycyl chloride as a derivatization reagent for determination of urinary amino acids using ultra high-performance liquid chromatography coupled with high resolution mass spectrometry // *J. Chrom. Open.* – 2024. – V. 6. – 100162.

Проведены исследования, посвященные возможности применения цианацетгидразида в качестве дериватизирующего реагента для стероидных гормонов, а также для установления оптимальных условий дериватизации, предела обнаружения и детектирования, стабильности производных. Также проведено сравнение результатов с наблюдаемыми при использовании в качестве дериватизирующего реагента гидроксиламина. Установили, что новый реагент приводит к образованию двух типов производных – син- и анти- форм, которые в условиях хроматографического разделения способны частично или полностью разделяться. Проведено сравнение эффективности представленных реагентов с описанными ранее оксимами стероидов

Temerdashev A., Zorina M., Feng Y.-Q., Gashimova E., Dotsenko V.V., Ioutsy V., Atapattu S.N. Cyanoacetohydrazide as a Novel Derivatization Agent for the Determination of UHPLC-HRMS Steroids in Urine // Molecules. – 2024. – V. 29. – 2433.

Рассмотрена возможность использования подхода CIS-MS (coordination ion spray) с использованием катионов лития, калия и серебра. Отмечено, что наиболее интенсивные аддукты формируются при использовании в качестве допанта серебра, однако для этого требуются большие концентрации, приводящие к загрязнению ионной оптики и нарушению трансмиссии ионов. Однако несомненным преимуществом такого решения является возможность получения монозарядного иона с аддуктом металла, что, в ряде случаев, может значительно облегчить идентификацию соединений. Такой подход для соединений пептидной природы ранее не проводился.

Temerdashev A., Gashimova E., Azaryan A., Feng Y.-Q., Atapattu S.N. Coordination Ion Spray for Analysis of the Growth Hormones Releasing Peptides in Urine—An Application Study // Separations. – 2024. – V. 11. – 15.

В целях разработки подходов к ранней диагностике рака легких методом газовой хромато-масс-спектрометрии проанализированы пробы выдыхаемого воздуха 646 человек, в том числе 273 больных раком легких, 90 больных раком других локализаций, 150 больных неопухолевыми заболеваниями легких и 133 здоровых лиц контроля. Летучие органические соединения (ЛОС) концентрировали на трубках с сорбентом Tenax TA с последующей двухступенчатой термодесорбцией и анализом ГХ-МС. Показано, что используемые алгоритмы подготовки проб к анализу и их исследования не обладают достаточной чувствительностью, и, как следствие, не позволяют выявить значимые отличия при проведении нецелевого скрининга стероидов и липидов методами ГХ-МС и ВЭЖХ-МСВР и требуют дальнейшей оптимизации и доработки.

Gashimova E., Temerdashev A., Perunov D., Porkhanov V., Polyakov I. Diagnosis of Lung Cancer Through Exhaled Breath: A Comprehensive Study // Mol. Diag. Therapy. – 2024. – V. 28. – P. 847–860.

Темердашев А.З., TemerdashevAZ@gmail.com (Кубанский государственный университет, кафедра АХ).

14. Проведена характеристика метаболома пивоваренных сортов хмеля обыкновенного на основании результатов их профилирования методом ВЭЖХ-МСВР, совмещенного с анализом экспериментальных

данных посредством молекулярного нетворкинга. На подготовительном этапе работы были подобраны оптимальные условия подготовки и анализа образцов, а также параметры обработки экспериментальных данных. В ходе работы проводился анализ экстрактов образцов пивоваренного хмеля, сопряженный с накоплением спектров-фрагментации, индуцированной соударением для мажорных компонентов образцов. На основании полученного массива экспериментальных данных проводилось построение молекулярных сетей, связывающих близкие по структуре соединения. По результатам ручного анализа наблюдаемых паттернов фрагментации, сопоставления с базами данных, а также – литературными данными, проводилась идентификация компонентов, представленных в молекулярных сетях. По результатам построения молекулярных сетей было получено 5 характеристичных кластеров, образованных мажорными для хмеля классами соединений: гумилинонами, хальконами, альфа- и бета-кислотами, а также производными гулупиновой кислоты. В ходе детального анализа полученных кластеров было идентифицировано 113 соединений, включающих ранее не описанные гидрокигулупоны, дегидрогидроксигулупоны, а также различные вариации горьких кислот. По результатам анализа молекулярных сетей была сформирована база данных спектров фрагментации компонентов хмеля, включающая как масс-спектрометрические, так и хроматографические характеристики идентифицированных соединений. Информативность выявленного массива характеристик для хмеля соединений была апробирована в ходе анализа 84 образцов пивоваренного хмеля и проведения статистической обработки полученных данных, в том числе – с целью классификации анализируемых образцов, как на основании полного массива хроматомасс-спектрометрических данных, так и на основании сформированной панели соединений-маркеров.

Проведен широкий спектр исследований, связанный с изучением влияния радиационного облучения на пищевую продукцию. В частности проведены эксперименты с облучением суспензий белка бычьего сывороточного альбумина, рыбьего жира и крахмала. Для контроля происходящих при этом процессов разработан и апробирован в водных образцах альбумина способ идентификации и количественной оценки содержания активной формы БСА методом ВЭЖХ—МС/МС, который характеризуется высокой чувствительностью (0,1 мкг/мл БСА) и специфичностью при изучении влияния радиационного воздействия на структурные характеристики белка. С помощью разработанного метода

установлено, что при облучении рентгеновским излучением в дозах свыше 500Гр степень денатурации белка тем выше, чем выше доза облучения. В результате исследования модификаций альбумина после рентгеновского излучения установлено наличие окисленной формы аспарагиновой кислоты в положениях 182Asn, 341Asn, 409Asn и 428Asn аминокислотной последовательности альбумина при облучении в дозе 8кГр. Разработан и апробирован способ идентификации и количественной оценки содержания ряда полиненасыщенных жирных кислот с использованием метода ВЭЖХ-МС/МС, который характеризуется высокой чувствительностью (2 мкг/мл для олеиновой кислоты и 0,5мкг/мл для остальных кислот) и специфичностью при изучении влияния обработки на структурные характеристики кислот, присутствующих в рыбьем жире. В результате исследования влияния электронов на структурные характеристики жирных кислот в растворе рыбьего жира, облученного в диапазоне доз 0.25-8кГр, установлено экспоненциальное снижение содержания кислот в облученных суспензиях с увеличением дозы облучения от 0.5кГр и выше. При облучении в дозе 8кГр относительное содержание кислот составляет около 10-20% от показателей необлученных суспензий. Исследование содержания крахмала в концентрации 100 мг/мл в дистиллированной воде после облучения рентгеновским излучением и ускоренными электронами в диапазоне доз 0.1-10кГр показало снижение концентрации крахмала в суспензиях с увеличением дозы облучения. После облучения суспензии альбумина в концентрации 35 мг/мл в дистиллированной воде, суспензии крахмала в концентрации 110 мг/мл в дистиллированной воде и рыбьего жира в 100% концентрации рентгеновским излучением в диапазоне доз от 0.1кГр до 8кГр, установлены пять классов летучих соединений: альдегиды, кетоны, спирты, алканы и алкены. Получено, что наибольший радиационно-химический выход летучих соединений зафиксирован после облучения рыбьего жира, наименьший при облучении крахмала. Установлено, что с увеличением дозы облучения концентрация практически всех альдегидов, кетонов, алкенов и алканов увеличивалась с увеличением дозы облучения. Некоторые соединения были обнаружены при дозе, выше Дкрит. Также некоторые альдегиды и кетоны показали рост и затем спад концентрации с увеличением дозы облучения.

С помощью флуориметрического кинетического метода «отпечатков пальцев» установлена возможность дискриминировать образцы мяса курицы различных производителей, облученные в дозах 0.25, 1 и 5кГр и необлученные образцы как по дозам (если референсные и неизвестные

образцы получены от одного и того же производителя), так и по производителям (для необлученного образца или образцов, получивших одну и ту же дозу) с правильностью 100% с помощью нескольких реакций. Лучшей индикаторной реакцией оказалось окисление пентаметинового карбоцианина гипохлоритом, а лучшим методом машинного обучения – софтмакс-регрессия. Метод не выявил статистически значимого различия между клубнями картофеля сортов Гала и Фиолетовый, выращенными из клубней, обработанных ускоренными электронами и рентгеновским излучением в диапазоне доз от 5 до 30 Гр, и клубнями, полученными из необлученного семенного материала.

Анализ летучих соединений в клубнях нового урожая картофеля сортов Гала и Фиолетовый, выращенных из облученных и необлученных клубней, спустя 4 месяца после сбора урожая показал увеличение концентраций некоторых идентифицированных альдегидов с увеличением дозы предпосадочной обработки клубней, что может являться индикатором распада сахаров в связи с ускорением процессов прорастания клубней при хранении, выращенных из облученных клубней. Также увеличение альдегидов может быть индикатором окислительных процессов, протекающих в клубнях при хранении. Установлено различие содержания спирта изопропанола в облученных и необлученных клубнях, что может быть связано с различиями в протекании ферментативных процессов и процессов гниения, вызванных микроорганизмами. 4.3 Обработка данных концентраций летучих органических соединений образцов курицы, индейки, говядины, семги и картофеля с помощью метода главных компонент показала наилучшее различие облученных и необлученных образцов семги. Установлено, что различие облученных и необлученных образцов достигается, в основном, за счет увеличения концентрации альдегидов, являющихся продуктами окисления жиров.

Kozlova E., Bliznyuk U., Chernyaev A., Borshchegovskaya P., Braun A., Ipatova V., Zolotov S., Nikitchenko A., Chulikova N., Malyuga A. Optimization Function for Determining Optimal Dose Range for Beef and Seed Potato Irradiation // Foods. – 2024. – V. 13. – № 23. – P. 3729.

Brown A.V., Bliznyuk U.A., Borshchegovskaya P.Yu., Ipatova V.S., Khmelevsky O.Yu., Chernyaev A.P., Ananyeva I.A., Rodin I.A. // High-Performance Liquid Chromatography–Mass Spectrometry Study of the Effect of Accelerated Electrons on the Structure of Bovine Serum Albumin. Inorg Mater. – 2024.

Родин И.А., igorrodin@yandex.ru, Ихалайнен Ю.А., Фролова А.В., Апенкина А.В., Тимченко Ю.В., Браун А.В., Опруненко А.В., Ипатова В.С. Близнюк У.А., ⁵Борщеговская П.Ю. (МГУ им.М.В. Ломоносова, кафедра аналитической химии).

15. Комплексом масс-спектрометрических методов включая двумерную газовую хроматографию с масс-спектрометрическим детектированием, масс-спектрометрию ультравысокого разрешения с ионизацией электрораспылением и фотоионизацией при атмосферном давлении изучен состав серосодержащих соединений представительного набора нефтей Волго-Уральского нефтегазоносного бассейна. Показано, что основной вклад в эту группу веществ вносят бензотиофены, дибензотиофены и соединения неизвестного строения с DBE 7. Непараметрический корреляционный анализ с привлечением аппарата частных (парциальных) коэффициентов корреляции полученных данных позволяет сделать вывод о том, что формирование классов серосодержащих соединений протекало по механизмам, отличающимся как в пределах одной нефти, так и между образцами нефтей. Разница между величинами коэффициентов корреляции отдельных пар рядов серосодержащих соединений может служить классифицирующим признаком. При проведении такой классификации на основании непараметрического корреляционного анализа с привлечением аппарата частных (парциальных) коэффициентов корреляции выявлено четыре группы серосодержащих соединений.

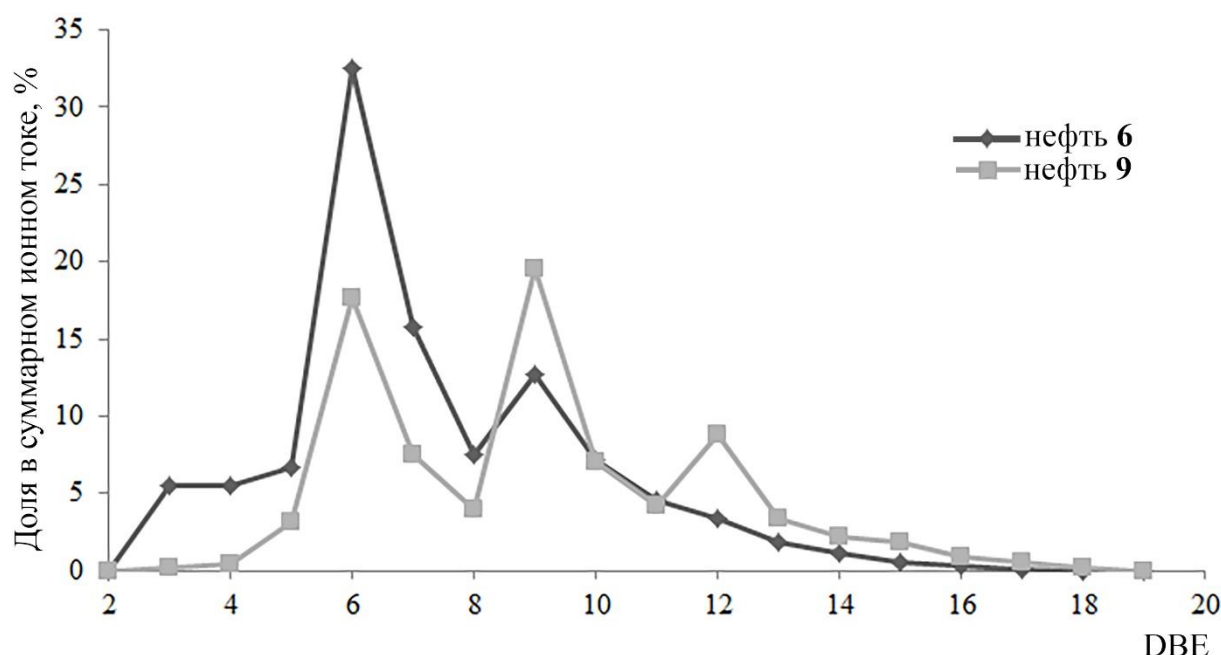


Рис. 4. Характер распределения доли различных классов серосодержащих соединений в суммарном ионном токе в зависимости от величины DBE в нефтях из доманиковского (6) и воробьевского горизонтов (9).

Smirnov M.B., Vanyukova N.A., Starkova Zh.E., Glyaznetsova Yu.S., Kanat'eva A.Yu., Borisov R.S. Composition of Sulfur-Containing Components of Crude Oils from the Volga–Ural Petroleum and Gas Province: a Study by Various Mass Spectrometric Methods // Pet. Chem. – 2024.

Борисов Р.С., borisov@ips.ac.ru, Канатьева А.Ю., Смирнов М.Б. (Институт нефтехимического синтеза РАН, Москва).

16. Проведен литературный обзор применения тандемной масс-спектрометрии в области биомедицинских исследований, включая эндокринологию, скрининг новорожденных, клиническую апробацию лекарственных средств, метаболомику и протеомику. Показано, что для решения большинства задач используется тандемный трехквadrupольный масс-спектрометр (ТТМС). Последние достижения в области технологий хроматомасс-спектрометрии и автоматизации управления прибором способствуют эффективному внедрению данного подхода в клиническую практику. Мы проанализировали тенденции применения тандемной масс-спектрометрии в биомедицине за последние два десятилетия, проведя сравнительный анализ использования ТТМС и приборов высокого разрешения, а также методов масс-спектрометрии и иммунологического анализа. Полученные результаты позволяют ожидать, что использование ТТМС и в дальнейшем будет доминировать над другими подходами.

Вместе с тем следует отметить, что решение большинства рутинных задач, возникающих в клинической практике, не требует использования наиболее современных дорогостоящих приборов, и для этих целей с успехом могут быть использованы более дешевые, а следовательно, более доступные для клинических лабораторий модели.

Tsakalof A., Sysoev A.A., Vyatkina K.V., Eganov A.A., Eroshchenko N.N., Kiryushin A.N., Adamov A.Yu., Danilova E.Yu., Nosyrev A.E. Current Role and Potential of Triple Quadrupole Mass Spectrometry in Biomedical Research and Clinical Applications // Molecules. – 2024. – V. 29. – № 23. – P. 5808.

Носырев А.Е., nosyrev_a_e@staff.sechenov.ru, Вяткина К.В. (Первый Московский государственный медицинский университет имени И. М. Сеченова), Сысоев А.А. (НИЯУ МИФИ).

17. Разработан оригинальный подход к скринингу и одновременному определению широкого спектра токсичных азотсодержащих продуктов трансформации (ПТ) ракетного топлива (несимметричный диметилгидразин, НДМГ) в суглинистых почвах, основанный на прямой термической десорбции (ТД) в сочетании с анализом методом газовой хроматографии – tandemной масс-спектрометрии (ГХ-МС/МС). Алюмосиликаты (глина), способны прочно связывать и удерживать азотсодержащие аналиты благодаря сочетанию полярных сорбционных и катионообменных свойств, что создает проблемы для их термодесорбционного извлечения и количественного определения. Для преодоления этой проблемы предложено применение модификаторов, конкурирующих с ПТ НДМГ за сорбционные центры и обеспечивающих их перевод в молекулярную форму. Среди испытанных добавок наилучшие характеристики продемонстрировала смесь хлорида и гидроксида калия, обеспечившая извлечение большинства ПТ НДМГ, превышающее 70% при оптимизированных условиях ТД (200°C, 30 мин). Онлайн-комбинация ТД с газовой хроматографией-тандемной масс-спектрометрией позволила разработать метод определения 15 аналитов в суглинистых почвах с пределами обнаружения в диапазоне 0,2–15 мкг/кг. Использование матрично-согласованной калибровки и дейтерированных внутренних стандартов обеспечило высокую точность (80–100%) и прецизионность (СКО <18%) анализа. Разработанный метод был валидирован и успешно испытан при анализе реальных образцов суглинистых почв, загрязненных ракетным топливом.

Popov M.S., Kosyakov D.S., Ul'yanovskii N.V. Analysis of nitrogen-containing rocket fuel transformation products in loamy soil by thermal desorption gas chromatography-tandem mass spectrometry // J. of Separation Science. – 2024. – V. 47. – № 16.

Предложен новый подход к изучению лигнанов методом безматричной поверхностно-активированной лазерной десорбции/ионизации (ПАЛДИ). Сочетание напыления углеродного нанопокрyтия на мишень с катионированием литием позволило получить высококачественные масс-спектры восьми лигнанов хвойной древесины с различными типами связей между ароматическими единицами. Впервые реализованы три типа масс-спектрометрической фрагментации таких аналитов (распад метастабильных ионов за пределами источника, активированная высоко- и низкоэнергетическими соударениями диссоциация). Независимо от метода tandemной масс-спектрометрии лигнаны продемонстрировали схожие паттерны фрагментации, включая разрыв связей между ароматическими единицами с образованием в основном литиированных ионов-продуктов. Диссоциация, вызванная низкоэнергетическими соударениями в квадрупольной ионной ловушке, обеспечила наиболее информативные tandemные масс-спектры и возможности для многостадийной фрагментации в структурных исследованиях. На этой основе разработан и успешно протестирован на реальных образцах экстрактов древесины подход к быстрому, высокопроизводительному и недорогому скринингу и предварительной идентификации лигнанов, включая изомерные соединения.

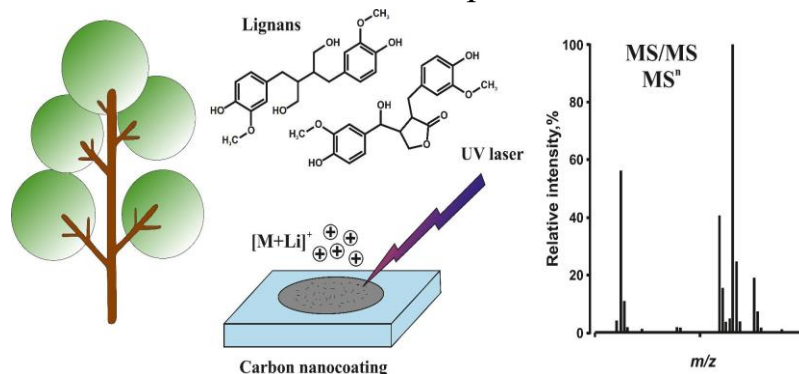


Рис. 5.-Концепция применения предложенного подхода.

Ul'yanovskii N.V., Anikeenko E.A., Chernobelskaya S.A., Onuchina A.A., Faleva A.V., Gorbova N.S., Kosyakov D.S. Surface assisted laser desorption/ionization mass spectrometry of lithium cationized lignans – A tool for rapid screening of plant extracts // Microchemical Journal. – 2024. – V. 201. – P. 110684.

Предложен подход к масс-спектрометрическому изучению структурных особенностей лигнинов, основанный на хемометрической обработке фотоионизационных масс-спектров высокого разрешения (Orbitrap) с использованием концепции дефектов массы Кендрика с повышенным разрешением (REKMD). На основе моделирования предложен набор приоритетных дробных базовых единиц Кендрика, обеспечивающих существенное расширение доступного диапазона дефектов массы для информативной визуализации масс-спектров биополимера. Разработанная стратегия анализа REKMD позволила получить наиболее полные данные по всем гомологическим рядам, характерным для лигнина, и обеспечила интерпретацию чрезвычайно сложных масс-спектров, в том числе tandemных, с получением структурной информации и надежным определением элементных составов олигомеров. С использованием разработанной методологии впервые выявлены минорные модификации лигнина в процессах биорефайнинга растительного сырья с применением ионных жидкостей.

Pikovskoi I.I., Kosyakov D.S., Belesov A.V. Resolution-enhanced Kendrick mass defect analysis for improved mass spectrometry characterization of lignin // International Journal of Biological Macromolecules. – 2024. – V. 273. – P. 133160.

С использованием комбинации методов высокоэффективной жидкостной и газовой хроматографии с масс-спектрометрией высокого разрешения изучены процессы деградации муколитиков амброксола и бромгексина в ходе дезинфекции сточной воды активным хлором. Показано, что на начальных стадиях протекают реакции циклизации, гидроксирования, хлорирования, электрофильного ипсо-замещения атомов брома хлором и окислительного N-деалкилирования. Наряду с известными метаболитами на основе элементного состава и tandemных масс-спектров предварительно идентифицирован ряд новых побочных продуктов дезинфекции (ППД). Глубокая деградация бромгексина и амброксола дает двадцать четыре идентифицированных летучих и полунлетучих соединения шести классов, среди которых тригалометаны составляют более 50%. Показано образование специфических ППД, представляющих собой бромсодержащие галоанилины. Семь представителей данного класса были обнаружены впервые. Идентифицирован еще один новый класс ППД, представленный галогенированными индазолами, образующимися путем деалкилирования

первичных продуктов превращения, содержащих в своей структуре пиразолиновый или тетрагидропириимидиновый цикл.

Sypalov S.A., Varsegov I.S., Ulyanovskii N.V., Lebedev A.T., Kosyakov D.S. Mucolytic Drugs Ambroxol and Bromhexine: Transformation under Aqueous Chlorination Conditions // IJMS. – 2024. – V. 25. – № 10. – P. 5214.

Предложена комбинированная аналитическая стратегия для нецелевого скрининга и идентификации полифенольных растительных метаболитов, основанная на сочетании методов двумерной спектроскопии ЯМР для предварительного поиска специфических структур с жидкостной хроматографией – тандемной масс-спектрометрией высокого разрешения (ВЭЖХ-МСВР), обеспечивающей молекулярный анализ и идентификацию обнаруженных метаболитов. Разработанный подход успешно использован для изучения биологически активных полифенолов компрессионной древесины лиственных пород деревьев, а также зеленых частей ягодных растений. Результаты анализа были подтверждены препаративным выделением индивидуальных соединений и их исследованием методами спектроскопии ЯМР.

Faleva A.V., Ulyanovskii N.V., Onuchina A.A., Kosyakov D.S. Polyphenolic Antioxidants in Bilberry Stems and Leaves: A Non-Targeted Analysis by Two-Dimensional NMR Spectroscopy and Liquid Chromatography–High-Resolution Mass Spectrometry // Antioxidants. – 2024. – V. 13. – № 11. – P. 1409.

Faleva A.V., Falev D.I., Onuchina A.A., Ulyanovskii N.V., Kosyakov D.S. Comprehensive identification of polyphenolic metabolites in aspen knotwood by combination of 2D NMR and HPLC-HRMS // Phytochemical Analysis. – 2024. – V. 36. – № 1. – P. 307–316.

С использованием усовершенствованной методологии, основанной на сочетании методов пиролитической ГХ-МС и инфракрасной микроскопии, установлено, что в донных отложениях дельты р. Северная Двина содержится до 350 мг/кг или 650 частиц/кг микропластика (сухой вес). Уникальные гидрологические условия района разветвления реки способствуют формированию очага микропластикового загрязнения, в котором концентрируется более >30 % поступающих частиц, в основном АБС-пластика размером менее 0,3 мм с развитой поверхностью. Полученные данные и высокая годовая изменчивость загрязнения свидетельствуют о том, что данный район выступает местом накопления, деградации и постепенного выброса микропластика в Белое и Баренцево моря, т.е. в Арктический регион.

Belesov A.V., Rezviy T.V., Pokryshkin S.A., Chukhchin D.G., Kozhevnikov A.Yu. New insights into the role of sediments in microplastic inputs from the

Northern Dvina River (Russia) to the White and Barents Seas // Marine Pollution Bulletin. – 2024. – V. 202. – P. 116310.

Косяков Д.С., d.kosyakov@narfu.ru, Ульяновский Н.В., Попов М.С., Пиковской И.И., Овчинников Д.В., Воронов И.С., Сыпалов С.А., Фалева А.В., Белесов А.В. (Северный (Арктический) федеральный университет, Центр коллективного пользования научным оборудованием «Арктика»)

Хроматографические и родственные им методы

Тенденции в развитии хроматографии в 20-е годы XXI века демонстрируют внедрение новых (чаще всего – наноструктурированных) материалов и интеграцию метода с современными информационными технологиями.

Важным направлением является синтез пористых микрочастиц и углеродных композитных наноматериалов для хроматографических колонок. Использование таких материалов позволяет значительно увеличить поверхность взаимодействия с аналитами, что способствует более быстрому и эффективному разделению. Наноразмерные материалы открывают новые возможности для создания специализированных сорбентов, адаптированных к конкретным задачам и типам анализируемых веществ. Или наоборот – предполагают множественные механизмы взаимодействия и, таким образом, одновременное разделение веществ разных классов, сильно различающихся по полярности, гидрофобности и т.п.

Еще одной значительной тенденцией является внедрение автоматизации и роботизации в хроматографические процессы. Автоматизированные системы управления и анализы данных позволяют сократить время на подготовку проб и повысить точность результатов. Внедрение методов анализа больших данных также позволяет извлекать более глубокие и скрытые зависимости из получаемых результатов, ведя к более эффективному принятию решений в научных и производственных процессах. Исследования касаются не только улучшения самих методов хроматографии, но и оптимизации программного обеспечения, необходимого для обработки и интерпретации данных. Расширение функций программных платформ, включая машинное обучение и искусственный интеллект, позволяет более эффективно обрабатывать огромные объемы данных. Это облегчает выявление закономерностей и аномалий в результатах анализов.

Продолжает развиваться интеграция хроматографии с другими аналитическими методами, такими как масс-спектрометрия и ядерная магнитная резонансная спектроскопия. Это сочетание предоставляет более полное понимание состава сложных смесей и улучшает идентификацию компонентов. Гибридные методы позволяют преодолевать ограничения, присущие каждой из технологий в отдельности.

Есть явный акцент и на экологическую безопасность. Ведутся исследования по созданию "зелёных" хроматографических методов, которые используют менее токсичные растворители или биоразлагаемые материалы, минимизируя негативное воздействие на окружающую среду.

О.А. Шпигун. А.В. Пирогов

Общие вопросы хроматографии. Приборы

Газовая хроматография

1. Предложен способ аппроксимации результатов газохроматографического анализа термически нестабильных соединений, заключающийся в аппроксимации зависимостей относительных площадей пиков таких соединений от температуры испарителя в интервале 150 – 300оС с использованием четырехпараметровой логистической регрессии (синонимы: сигмоидальная аппроксимация или аппроксимация Больцмана). Такая аппроксимация характеризуется наличием двух асимптот: низкотемпературная соответствует исходным количествам термически нестабильных аналитов, а высокотемпературная – их полной деструкции. Точность определения относительных площадей пиков, соответствующих исходным количествам лабильных аналитов (низкотемпературная асимптота) составляет не более 2 – 4% отн., что сравнимо с точностью гипотетических непосредственных определений. Показано, что температуры полуразложения проблемных компонентов и полуобразования продуктов их термической деструкции (точки перегиба сигмоидальной аппроксимации) одинаковы, что позволяет сопоставлять такие компоненты друг с другом в сложных смесях. Способ оригинален и не имеет аналогий.

Показано, что газохроматографические параметры удерживания (индексы удерживания) триметилсилильных производных аминокислот недопустимо указывать в химически неопределенной форме, например

ТМС-1, ТМС-2 и т.п. Их систематизация в результате сопоставления данных разных источников позволяет указать конкретное число триметилсилильных групп, обнаружить и устранить ряд ошибочных значений индексов, а в отдельных случаях детализировать структуры таких производных. Например, впервые выявлено, что существует два разных *трис*-ТМС-производных лизина с индексами удерживания 1708 $\pm$ 18 и 1847 $\pm$ 3.

Зенкевич И.Г. , д.х.н., профессор izenkevich@yandex.ru (Санкт-Петербургский государственный университет, Институт химии; кафедра органической химии).

2. Продолжены исследования по синтезу и изучению свойств новых сорбционных материалов на основе углерода. Изучена термодинамика адсорбции органических соединений различной геометрии и функциональной принадлежности на поверхности sp^2 -гибридных форм углерода. Новый углеродный материал, полученный из рисовой шелухи, предложен для сорбции летучих органических соединений. Актуальность работы обусловлена необходимостью утилизации большого количества шелухи, образующейся в результате переработки риса. Определен элементный состав и параметры пористой структуры твердых углеродных материалов, полученных при термической обработке шелухи риса.

Пирогов А.В., д.х.н., PirogovAV@my.msu.ru; Попов А.С., poroff-freeman@yandex.ru (МГУ им. М.В. Ломоносова, химический факультет, кафедра аналитической химии, лаборатория хроматографии).

Высокоэффективная жидкостная (в том числе ионная) хроматография

1. Цель работы заключается в изучении влияния добавок имидазолиевых ионных жидкостей на сорбцию ароматических кислот из водно-ацетонитрильных и водно-метанольных растворов на графитоподобном адсорбенте HYPERCARB™ методом ОФ ВЭЖХ. Показано, что планарные молекулы ароматических кислот более плотно контактируют с плоской поверхностью графитоподобного адсорбента Hypercarb™. Появление дополнительных заместителей в структуре кислот приводит к усилению удерживания за счет изменения в распределении электронной плотности в молекулах, к которой чувствительна поверхность

сорбента. Добавки имидазолиевых ионных жидкостей (ИЖ) в водно-органический элюент изменяют структурную организацию сетки водородных связей растворителя, изменяя гидрофобный эффект. Молекулы ИЖ могут как сами участвовать в процессе конкурентной сорбции с сорбатами на границе раздела фаз, так и могут образовывать с анализируемыми веществами ионные пары различной степени гидрофобности, которые и будут выталкиваться водно-органическим раствором на поверхность сорбента. Показано, что природа и структура добавляемой ИЖ существенно влияют на удерживание исследуемых ароматических кислот. При оценке влияния природы и структуры ИЖ на удерживание ароматических кислот важно учитывать вклады космотропного и хаотропного эффектов как катиона, так и аниона ИЖ. Добавление ИЖ с короткими углеводородными заместителями приводит к значительному снижению времени анализа при одновременном увеличении селективности разделения многокомпонентной смеси, а также приводит к значительному повышению эффективности. Добавка 0,1% трифторуксусной кислоты (ТФУ) переводит все анализируемые кислоты в молекулярную форму. Показано, что именно совместное использование ИЖ и ТФУ позволяет провести оптимальное разделение исследуемой смеси кислот.

Разницына В. М., Шафигулин Р. В., Виноградов К. Ю., Куркин В. А., Буланова А. В. Сорбция флавоноидов и ароматических кислот на сверхсшитом полистироле в системах с добавками имидазолиевых ионных жидкостей // Сорбционные и хроматографические процессы. 2024, 24(5), 682-694. <https://doi.org/10.17308/sorpchrom.2024.24/12508>.

Разницына, В. М., Шафигулин, Р. В., Барышникова В. С., Куркин В. А., Буланова, А. В. Влияние природы ионных жидкостей на удерживание ароматических кислот на HypercarbTM в условиях ОФ ВЭЖХ // XXII Менделеевский съезд по общей и прикладной химии. — 2024. — Т. 4. — С. 49.

Грант Российского научного фонда № 23-23-00397 «Ионные жидкости как эффективные модификаторы адсорбционных и хроматографических систем в исследовании кислородсодержащих биологически активных соединений».

Шафигулин Р.В., shafiro@mail.ru; Буланова А.В., д.х.н., av.bul@yandex.ru; Разницына В.М., v_raznitsyna@mail.ru (Самарский национальный исследовательский университет им. академика С.П. Королёва, кафедра физической химии и хроматографии).

2. Ранее было показано, что на графиках рекуррентных аппроксимаций зависимостей времен удерживания образующих гидраты аналитов от содержания органических компонентов элюентов в ОФ ВЭЖХ точки, соответствующие максимальному содержанию воды в элюенте, отклоняются вниз от линий регрессии. На примере 2,2'-бипиридила впервые установлено, что аномалии таких точек зависят от расхода элюента, и они могут быть локализованы как ниже, так и выше линий регрессии. Предложено объяснение наблюдаемых эффектов.

Зенкевич И.Г., izenkevich@yandex.ru; . Санкт-Петербургский государственный университет, Институт химии. Кафедра органической химии).

3. Гуминовые вещества представляют собой органические смеси большой сложности, что значительно усложняет их анализ любым методом. Фракционирование на более однородные смеси - практически единственный способ преодоления этих трудностей. Препаративная ВЭЖХ позволяет получить практически любые количества веществ, необходимых как для дальнейшего фракционирования, так и для исследований другими методами. Впервые для этих целей предложен изопропанол. Его преимущества показаны на примере фульвокислот природных вод. Изопропанол намного безопаснее обычно используемых растворителей и экстрагирует большинство неполярных соединений, которые не вымываются метанолом и ацетонитрилом. Выделенные фракции существенно различаются по своему молекулярному составу, что подтверждается масс-спектрометрией сверхвысокого разрешения и молекулярной спектроскопией. Ступенчатый градиентный ВЭЖХ-УФ-анализ каждой препаративной фракции демонстрирует возможности многомерной ВЭЖХ для фульвокислот. Изучены выделенные фракции на содержание широкого набора элементов, выявлены взаимосвязи между молекулярным и микроэлементным составами фракций. Полученные данные свидетельствуют о наличии в составе фульвокислот многочисленных и разнообразных металл-содержащих соединений; Таким образом, предложенный подход может быть использован для более глубокого изучения механизмов миграции элементов в окружающей среде.

Волков Д.С., dmsvolkov@gmail.com; Проскурнин М.А., д.х.н., профессор РАН, proskurnin@gmail.com (МГУ им. М.В. Ломоносова,

Химический факультет, кафедра аналитической химии. лаборатория спектроскопических методов анализа).

4. Разработан способ простого хроматографического одновременного определения известных антисептиков – хлоргексидина и триклозана – в дезинфицирующих жидкостях нового поколения. Получены зависимости времени удерживания хлоргексидина и триклозана от концентрации ацетонитрила в подвижной фазе (от 30 до 60%) и pH (в диапазоне 3–8 ед.) для сорбентов Luna-C18, Nucleosil CN, Диасфер-С4. Продемонстрировано идеальное разделение хлоргексидина, *n*-хлоранилина (наиболее токсичного продукта разложения хлоргексидина), дибутилфталата (как компонента косметического спирта), триклозана и ионола (бутилгидрокситолуола, ВНТ, Е321 – антиоксидантного агента) в течение 20 мин в режиме градиентного элюирования на колонке с отечественным сорбентом Диасфер-С4.

Пирогов А.В., Староверов С.М. Одновременное определение хлоргексидина, n-хлоранилина, триклозана, дибутилфталата и ионола в антибактериальной жидкости методом ВЭЖХ со спектрофотометрическим детектированием // Вестн. Моск. ун-та. Сер.2 Химия. 2024. Т.65. №1. С.57-66.

Пирогов А.В., д.х.н., Pirogov@analyt.chem.msu.ru (МГУ им. М.В. Ломоносова, Химический факультет, кафедра аналитической химии).

5. ¹Получен и исследован набор ковалентно-привитых неподвижных фаз на основе поли(стирол-дивинилбензола) с линейными полиэлектролитными слоями методом одностадийной эпоксиаминной полимеризации. Исследовано влияние условий синтеза, таких как температура, продолжительность синтеза и количество реагентов, на ионообменную емкость и селективность по отношению к неорганическим анионам и органическим кислотам с использованием гидроксидного элюента в режиме ионной хроматографии с подавлением. Полученные неподвижные фазы, упакованные в колонки длиной 10 см, позволяли разделять до 21 аниона за 45 мин, включая моно-, ди- и трехвалентные органические кислоты, а также неорганические анионы. Впервые показана возможность использования неподвижной фазы на основе ПС-ДВБ с привитым полиэлектролитом для разделения водорастворимых витаминов, сахаров, нуклеозидов и азотистых оснований в режиме гидрофильной

жидкостной хроматографии (ГИХ, HILIC) и алкилбензолов в режиме обращенно-фазовой ВЭЖХ. Полученные фазы показали более высокую эффективность по сравнению с ранее описанными многофункциональными сорбентами на основе той же матрицы.

Gorbovskaia A.V., Kvachenok I.K., Stavrianidi A.N., Chernobrovkina A.V., Uzhel A.S., Shpigun O.A. Polyelectrolyte-grafted mixed-mode stationary phases based on poly(styrene–divinylbenzene) // Microchem. J. 2024. V. 199. 110075. DOI: 10.1016/j.microc.2024.110075.

²Предложены два способа повышения степени гидрофилизации и экранирования матрицы сорбентов на основе сополимера стирола и дивинилбензола с привитым полиэтиленимином, кватернизованным глицидолом. Первый заключается в полимеризации глицидола в функциональном слое за счет варьирования pH реакционной среды, а второй — в модифицировании матрицы за счет окисления двойных связей на её поверхности для получения якорных эпоксигрупп. Продemonстрировано, что в первом случае оптимальным подходом является двукратное добавление глицидола до и после добавления щелочи, так как в этом случае первая добавка глицидола расходуется на кватернизацию полиамина, а вторая — на полимеризацию в ионообменных центрах. Новый метод модифицирования матрицы в совокупности с разработанным способом создания гидрофильных слоев позволил значительно снизить удерживание оксогалогенидов, галогенуксусных кислот и поляризуемых анионов в режиме ионной хроматографии с подавлением фоновой электропроводности и аминокислот в режиме гидрофильной хроматографии вплоть до изменения порядка элюирования. Полученные неподвижные фазы пригодны для одновременного определения стандартных неорганических анионов, оксогалогенидов и анионов галогенуксусных или алкилфосфоновых кислот в режиме ионной хроматографии, а также для разделения аминокислот, сахаров и витаминов в режиме гидрофильной хроматографии.

Горбовская А.В., Попкова Е.К., Ужель А.С., Шпигун О.А. Многофункциональные полимерные неподвижные фазы повышенной гидрофильности с привитым полиэтиленимином и полиглицидолом // Журн. аналит. химии. 2024. Т. 79. № 4. С. 373–386. DOI: 10.31857/s0044450224040063.

³Синтезирована серия многофункциональных неподвижных фаз с различной гидрофильностью полиэлектролита и плотностью прикрепления к поверхностям поли(стирол–дивинилбензола). Исследовано влияние

гидрофильности сорбентов и степени экранирования матрицы на хроматографические свойства полученных фаз в режимах ионной хроматографии (ИХ), гидрофильной жидкостной хроматографии (ГИХ) и обращенно-фазовой высокоэффективной жидкостной хроматографии (ВЭЖХ). Неподвижная фаза с более гидрофильным амином, а именно N-метилэтаноламином, в структуре полиэлектролита позволила одновременно разделять высокополяризуемые анионы и стандартные неорганические в режиме ИХ, различные полярные аналиты в режиме ГИХ, а также нитро- и хлорфенолы, а также алкилбензолы в режиме ВЭЖХ ОФ. Наиболее эффективным способом повышения гидрофильности и степени экранирования оказалось покрытие поверхности субстрата полиэтиленмином перед прикреплением полиэлектролита. Применение данного подхода привело к повышению разделяющей способности по отношению к нуклеозидам и азотистым основаниям по сравнению с ранее полученными многофункциональными неподвижными фазами на основе той же матрицы. Впервые изучен механизм удерживания фенолов на полимерных сорбентах с привитым полиэлектролитом.

Gorbovskaia A.V., Kvachenok I.K., Chikurova N.Yu., Chernobrovkina A.V., Uzhel A.S., Shpigun O.A. Influence of hydrophilicity and shielding degree on the chromatographic properties of polyelectrolyte-grafted mixed-mode stationary phases // Microchem. J. 2024. V. 207. 111802. DOI: 10.1016/j.microc.2024.111802.

⁴Получены новые многофункциональные неподвижные фазы с повышенной гидрофильностью, которые применены в режимах ионной и гидрофильной ВЭЖХ. Сорбенты получены последовательным ковалентным присоединением разветвленного полиэтиленмина и полиэлектролитов, синтезированных из диэпоксида и вторичного амина, на поверхности эпоксицированного полистирол-дивинилбензола. Для повышения степени экранирования полимерной матрицы в функциональном слое сорбента проведена дополнительная полимеризация глицидола при повышенном pH реакционной среды. Синтезированные фазы обладают повышенной гидрофильностью по сравнению с большинством сорбентов на основе сополимера стирола и дивинилбензола с ковалентно присоединенными слоями. Об этом в режиме ионной хроматографии свидетельствует уменьшение относительного удерживания поляризуемых анионов, слабогидратированных оксигалогенидов (вплоть до изменения порядка элюирования бромата) и галогенуксусных кислот. В режиме гидрофильной жидкостной хроматографии повышенная

гидрофильность фаз подтверждена ростом факторов удерживания полярных аналитов, а также изменением порядка элюирования аскорбиновой и никотиновой кислот по сравнению с фазами на основе полистирола–дивинилбензола, представленными в литературе. Отмечена низкая эффективность полученных неподвижных фаз в режиме ионной хроматографии, что связано с замедленным массопереносом в объемном полимерном функциональном слое. Отрицательное влияние полимерного слоя на эффективность в режиме гидрофильной жидкостной хроматографии выражено в меньшей степени из-за предположительно меньшей толщины задействованной в этом режиме части функционального слоя. Предложенный способ синтеза сорбентов обеспечивает повышение эффективности, селективности и разделяющей способности сорбентов в режиме гидрофильной жидкостной хроматографии по сравнению с фазами на основе сополимера стирола–дивинилбензола, описанными ранее в литературе. Полученные высокогидрофильные фазы позволяют разделять смесь 9 азотистых оснований и нуклеозидов за 18 мин, или 6 витаминов за 24 мин, или 8 сахаров за 11 мин. Таким образом, предложенный в работе метод гидрофилизации матриц перспективен для улучшения хроматографических характеристик фаз в режиме гидрофильной хроматографии и может быть использован для создания сорбентов с повышенной селективностью и эффективностью.

Gorbovskaia A.V., Timichev A.A., Chernobrovkina A.V., Uzhel A.S., Shpigun O. A. Novel highly hydrophilic resins with attached polymer layers for liquid chromatography // *J. Anal. Chem.* 2024. V. 79. № 9. P. 1269–1276. DOI: 10.1134/s106193482470062x.

^{1,2,3,4}Ужель А.С., к.х.н., anna_uzhel@mail.ru; ^{1,2,3,4}Горбовская А.В., ^{1,3}Чернобровкина А.В., к.х.н., (МГУ им. М.В. Ломоносова, Химический факультет, кафедра аналитической химии).

6. Актуальной задачей является создание хиральных неподвижных фаз. Представлен новый подход к синтезу полимерных наногибридных материалов с наночастицами золота (НЧЗ) и исследовано применение таких сорбентов в ВЭЖХ. НЧЗ позволяют легко функционализировать полимерную матрицу. В качестве селекторов выступают аминокислоты, в том числе с использованием спейсера для удаления от поверхности матрицы, макроциклические антибиотики.

Получены неподвижные фазы полистирол дивинилбензол-Ау-эремомицин и полистирол дивинилбензол-эремомицин. Эффективность по ацетону 1830 и 810 тт/м, соответственно.

Полученные материалы применяли для разделения смесей различной природы в ОФ, ПО и гидрофильном режимах хроматографии. Сорбенты проявили энантиоселективность к профенам, β -блокаторам, аминокислотам и их производным, что позволяет говорить об универсальности полученных хиральных неподвижных фаз.

Ананьева И.А., к.х.н., irishan@mail.ru; Просунцова Д.С., inhusoria6@yandex.ru (МГУ им. М.В. Ломоносова, Химический факультет, кафедра аналитической химии, лаборатория хроматографии).

7. Получен новый рекомбинантный RihC из *Limosilactobacillus reuteri* путем клонирования гена и экспрессии в клетках *E.coli*. Предложен новый подход к определению ферментативной активности нового RihC с использованием гидрофильной жидкостной хроматографии (ГИХ, HILIC). Для этой процедуры создана новая колонка, обеспечивающая определение урацила и уридина с высокой эффективностью и временами удерживания 0.9 и 1.7 мин соответственно. Определены кинетические параметры расщепления уридина RihC. Предложенный подход обеспечил значительную экспрессность измерения кинетики ферментативной реакции и позволил сократить время в 5 раз по сравнению с обращенно-фазовой ВЭЖХ.

Shaposhnikov L.A., Chikurova N.Yu., Chernobrovkina A.V., Tishkov V.I., Pometun A.A. Development of an approach to determining enzymatic activity of ribonucleoside hydrolase c using hydrophilic interaction liquid chromatography // J. Chromatogr. A. 2024. V. 1715. 464561. DOI: 10.1016/j.chroma.2023.464561.

Shaposhnikov L.A., Chikurova N.Yu., Atroshenko D.L., Savin S.S., Kleymenov S.Yu., Chernobrovkina A.V., Pometun E.V., Minyaev M.E., Matyuta I.O., Hushpulian D.M., Boyko K.M., Tishkov V.I., Pometun A.A. Structure–functional examination of novel ribonucleoside hydrolase c (RihC) from limosilactobacillus reuteri lr1 // Int. J. Molec. Sci. 2024. V. 25. № 1. P. 538. DOI: 10.3390/ijms25010538.

Получен сорбент для гидрофильной хроматографии (ГИХ) с гиперразветвленным функциональным слоем, содержащий цвиттер-ионные группы, который охарактеризован с использованием модельных веществ разнообразных кислотно-основных свойств. Для оценки вклада

ионного обмена в удерживание заряженных соединений при крайних рассматриваемых значениях pH проводили варьирование концентрации элюирующего иона. Установлено, что во всём диапазоне водного (w^w)pH подвижной фазы от 2.85 до 5.76 (водно-органический (w^s)pH 5.5-9.2) у сорбента преобладали анионообменные свойства, которые обеспечены влиянием четвертичных аминогрупп, сформированных в первом и втором функциональных слоях на поверхности матрицы. Это привело к низким факторам удерживания катиона тиамин, характеризующегося высокой гидрофильностью ($\log D = -4.20$), во всех рассматриваемых условиях. Однако факторы удерживания и вклад ионного обмена для органических анионов значительно снижались с ростом pH, что, по-видимому, вызвано увеличением степени диссоциации карбоксильных, остаточных силанольных и протонированных аминогрупп сорбента. При этом отмечено уменьшение удерживания нейтральных аналитов, что, вероятно, вызвано снижением толщины приповерхностного водного слоя неподвижной фазы, принимающего непосредственное участие в механизме распределения, и возможным изменением силы адсорбционных взаимодействий.

Для слабых кислот получены неожиданные зависимости удерживания при варьировании состава подвижной фазы. Для бензойной кислоты, практически недиссоциированной при (w^w)pH элюента, равном 2.85, установлен высокий вклад ионного обмена – вплоть до 80% при 1.25 mM концентрации элюирующего иона в подвижной фазе. В случае ксантина показан существенный рост факторов удерживания и вклада электростатических взаимодействий с увеличением pH элюента, что не согласовалось с величиной его (w^w) pKa 7.60. Отмеченные наблюдения свидетельствовали в пользу применения водно-органической шкалы pH при работе в гидрофильном режиме хроматографии и учёта влияния ионного обмена на удерживание аналитов даже при низкой степени их диссоциации. Таким образом, разработанный способ создания гиперразветвленного цвиттер-ионного функционального слоя на поверхности 3-аминопропилсиликагеля обеспечил получение неподвижной фазы с преобладающими анионообменными свойствами в рабочем диапазоне pH. Варьирование кислотности и концентрации буферного раствора подвижной фазы позволило подбирать условия эффективного и селективного разделения многокомпонентной смеси, содержащей вещества различной гидрофильности и заряда.

Максимов Г.С., Шемякина А.О., Ужель А.С., Чернобровкина А.В. Изучение хроматографических свойств разработанного гиперразветвленного цвиттер-ионного сорбента на основе силикагеля в режиме гидрофильной хроматографии // Сорбционные и хроматографические процессы. 2024. V. 24. № 3. С. 304–320. DOI: 10.17308/sorpchrom.2024.24/12234.

Изучено влияние pH подвижной фазы и концентрации противоионов в буферном растворе на удерживание в режиме гидрофильной жидкостной хроматографии (ГИХ, HILIC). Использовали аналиты с различными кислотно-основными свойствами и неподвижную фазу Diol на основе силикагеля. Обсуждали изменения удерживания и селективности разделения при ионизации аналитов и групп адсорбента. Показано, что фаза Diol ведет себя как катионообменник при pH 5.76 из-за ее остаточных диссоциированных силанольных групп, в то время как фаза практически не проявляла заряд при низком pH (2.85). Эффективность и коэффициенты симметрии для ионизированных соединений также зависели от изменений pH подвижной фазы и концентрации противоионов. Установлены условия разделения смеси аналитов с различными кислотно-основными свойствами.

Shemiakina A., Xie A., Maksimov G., Chernobrovkina A. Effect of mobile phase pH and counterion concentration on retention and selectivity for a diol column in hydrophilic interaction liquid chromatography // LC-GC North America, (International, s6). 2024. P. 8–18. DOI: 10.56530/lcgc.int.gk1189e7.

Чернобровкина А.В., к.х.н. chernobrovkina@analyt.chem.msu.ru (МГУ им. М.В. Ломоносова, Химический факультет, кафедра аналитической химии).

Хромато-масс-спектрометрия

1. Определен компонентный состав эфирного масла листьев трех видов редких цитрусовых из коллекции Федерального исследовательского центра «Субтропический научный центр Российской академии наук». Целью являлось исследование летучих органических веществ, входящих в состав эфирного масла, что позволит не только оптимизировать условия выращивания, но и проводить направленную селекцию. Эфирное масло выделено из листьев трех видов цитрусовых: *C. ichagensis* Sw., *C. maxima* ‘Sambokan’ (помпельмус), *C. maxima* ‘Гульрипшский’ (помпельмус) и гибрида *C. paradisi* Г-А-1 (грейпфрут). Изучаемые компоненты эфирного масла переводили из листьев цитрусовых растений в газовую фазу путем нагревания

измельченной навески при вибрационном перемешивании в замкнутом объеме в присутствии воды. Идентификацию и оценку относительного содержания химических соединений парогазовой фазы вели методом газовой хромато-масс-спектрометрии с помощью базы данных масс-спектров идентифицировано более двух десятков компонентов, в основном из классов моно-, бициклических терпенов и сесквитерпенов. Ведущим компонентом эфирного масла в листьях *C. maxima* 'Гульрипшский', *C. maxima* 'Sambokan' и *C. ichagensis* Sw. является γ -terpinene, в то время как в листьях *C. paradisi* главным компонентом был лимонен (limonene). Отмечена видовая специфика химического состава эфирного масла *C. maxima*, *C. paradisi* и *C. ichagensis* Sw. Полученные результаты будут использованы для определения видовой специфичности эфирных масел перспективных видов/форм различных цитрусовых и применены в дальнейшей селекционной работе по получению сортов/форм, с наибольшим содержанием эфирного масла.

Состав летучих веществ эфирного масла в листьях некоторых видов цитрусовых. Химия растительного сырья, 2024. № 4. С. XXX (в печати) DOI: 10.14258/jcprm.20240412859

Бехтерев В.Н., д.х.н., vic-bekhterev@yandex.ru; Белоус О.Г., oksana191962@mail.ru (ФИЦ «Субтропический научный центр РАН»).

2. Методом хромато-масс-спектрометрии исследован примесный состав образцов тетрахлорида кремния, полученных по разным технологиям: хлорированием диатомита и древесного угля, диспропорционированием трихлорсилана и хлорированием изотопно обогащенного кремния. Для разделения примесей изучена возможность применения капиллярной колонки DB-5MS 30 м × 0,32 мм × 0,25 мкм с метилсилоксаном в качестве неподвижной жидкой фазы. Показано, что при ее использовании большинство установленных веществ элюируется в виде отдельных хроматографических пиков, что упрощает их определение. Исключением являются примеси N₂, O₂, Ar, CO₂, SiF₄, CHF₂Cl, HCl и H₂S, которые определяли по характеристическим пикам в масс-спектре. Для идентификации примесей экспериментальные масс-спектры сравнивали со спектрами библиотеки NIST и литературными данными. Расширены сведения о примесном составе SiCl₄: идентифицировано 30 соединений — постоянные газы, алифатические и хлорсодержащие углеводороды, хлориды, серосодержащие вещества, кремнийорганические соединения, из них 19 обнаружены впервые. Получен и описан отсутствующий в литературных источниках масс-спектр C₂H₆Cl₄OSi₂.

Проведено сравнение примесного состава исследованных образцов и определены характерные для каждого из них примеси.

Впервые с использованием метода хромато-масс-спектрометрии исследован примесный состав диборана, синтезированного по реакции гидрирования хлорида бора. Для разделения примесей исследованы возможности применения капиллярных колонок GS-GasPro 60 м × 0,32 мм с силикагелем в качестве сорбента, GS-CarbonPLOT 25 м × 0,32 мм × 0,25 мкм с углеродным сорбентом и колонки DB-5MS 30 м × 0,32 мм × 0,25 мкм с метилсилоксаном. Идентификацию примесей проводили сравнением их масс-спектров с известными из литературных данных. В диборане идентифицированы примеси высших боранов $B_4 - B_{10}$, циклогексана, толуола. Впервые обнаружены бораны $B_6 - B_{10}$, циклогексан и толуол. Получен и описан отсутствующий в литературных источниках масс-спектр B_9H_{15} .

Методами хромато-масс-спектрометрии и атомно-эмиссионной спектроскопии с индуктивно-связанной плазмой исследован примесный состав особо чистого селена марки ОСЧ 17-3. Идентифицированы примеси 34 веществ. Среди них углеводороды, их галогенпроизводные, серо- и селенсодержащие вещества. Их концентрации составляют от 10^{-7} до 10^{-3} мас. %. Методом АЭС-ИСП проконтролировано содержание 46 примесей элементов. Установлено, что их концентрации не превышают $10^{-5} - 10^{-7}$ мас. %. Проведённые исследования позволили расширить и получить наиболее полную из имеющейся в настоящее время информацию о молекулярном и элементном примесном составе селена.

Созин А.Ю., д.х.н., Sozin@ihps-nnov.ru (Институт химии высокочистых веществ РАН, Нижний Новгород)ю

3. Методом хромато-масс-спектрометрии с использованием адсорбционных капиллярных колонок исследован примесные составы GeF_4 с естественным содержанием изотопов и изотопно обогащенным. Для идентификации и определения примесных веществ предложено их предварительное криогенное концентрирование. Расширены сведения о примесном составе тетрафторида германия различного изотопного состава. Установлено присутствие постоянных газов, предельных и непредельных углеводородов $C_3 - C_9$, фреонов, алкилфторсиланов, фторхлоргерманов, тетрафторида кремния, тетрахлорида германия. Всего идентифицировано

32 примесных вещества, 29 из которых обнаружены впервые.

Сорочкина Т.Г., Sorochkina@ihps-nnov.ru; (Институт химии высокочистых веществ РАН, Нижний Новгород).

4. На примере хромато-масс-спектрометрической идентификации продуктов свободно-радикального хлорирования индана показано, что основные сложности решения таких задач обусловлены большим числом потенциально возможных изомеров и конгенов, а также отсутствием для них как масс-спектрометрического, так и газохроматографического информационного обеспечения. Выявлен структурный фрагмент, который практически не представлен в соединениях, включенных в современные базы данных: атомы хлора в циклах в альфа-положениях к ароматическим системам. Отсутствие этой информации не может быть компенсировано никакими компьютерными алгоритмами с использованием искусственного интеллекта, глубокого машинного обучения, нейронных сетей и т.п. В таких условиях в качестве грубого приближения приходится использовать данные для соединений иной структуры. Однако даже в таких условиях возможна идентификация нескольких простейших хлорпроизводных

Зенкевич И.Г., д.х.н., izenkevich@yandex.ru; Санкт-Петербургский государственный университет, Институт химии. Кафедра органической химии).

5. Валидированы методики определения следовых содержаний приоритетных фталатов в поверхностных водах с фоновым уровнем загрязнения, включающие:

- методы жидко-жидкостной экстракции (ЖЖЭ) и газовой хроматографии с масс-спектрометрическим детектированием (ГХ-МС) в аналитическом окончании;
- концентрирование фталатов из воды на аналитической колонке жидкостного хроматографа с обращенно-фазовым сорбентом и разделение элюатов в режиме онлайн методом высокоэффективной жидкостной хроматографии (ВЭЖХ).

Методика ЖЖЭ-ГХ-МС апробирована в рамках мониторинга стойких органических загрязнителей в поверхностных водах оз. Байкал, оценены пределы определения фталатов (0.01 – 0.17 мкг/л, объем проб воды 1 л) и точность определения ($\pm \delta$ 12–38%) с учетом вклада лабораторного фона. Дана оценка статистически значимых средних

значений и диапазонов концентраций приоритетных фталатов в водах оз. Байкал: 0.02 (0.01–0.02), 0.07 (0.06–0.09), 0.55 (0.47–0.66) и 0.30 (0.26–0.34) мкг/л, для диметилфталата, диэтилфталата, ди-*n*-бутилфталата и ди(2-этилгексил)фталата (ДЭГФ).

Метод ВЭЖХ с УФ детектированием в режиме онлайн отличается отсутствием вклада лабораторного фона в результат измерения и оценен пределом определения равным 0.15 – 0.22 мкг/л (объем пробы 4 мл), точностью $\pm\delta$ в интервале от 10 до 20%. Метод апробирован в полевых условиях на портативном жидкостном хроматографе Милихром А-02. Оценены отношение стабильных изотопов углерода $^{13}\text{C}/^{12}\text{C}$ в составе фталатов при применении масс-спектрометрии высокого разрешения на стадии детектирования. Отношение $^{13}\text{C}/^{12}\text{C}$ в структуре ДЭГФ подтвердило поступление фталата из биогенных и абиогенных источников и его присутствие на уровне следов, как суммы фталатов различного генезиса.

Т.А. Григорьева, А.Г. Горшков. Валидация методики определения приоритетных фталатов методом ГХ-МС на следовом уровне концентраций в поверхностных водах с фоновым уровнем загрязнения. Заводская лаборатория. Диагностика материалов, 2024. – Т. 90. – № 7. – С. 17-26. DOI: 10.26896/1028-6861-2024-90-7-17-26.

T.A. Grigorieva, A.V. Kuzmin, A.G. Gorshkov. Validation of a High-Performance Liquid Chromatography Method for the Online Determination of Phthalates in Water at a Trace Level. Journal of Analytical Chemistry, 2024, Vol. 79, No. 10, pp. 1483–1490. DOI: 10.1134/S1061934824700874.

A. Gorshkov, T. Grigoryeva, Y. Bukin, A. Kuzmin. Case study of Diesters of o-Phthalic Acids in Surface Waters with Background Level of Pollution. Toxics 2023, 11, 869. <https://doi.org/10.3390/toxics11100869>.

Горшков А.Г., gorchkov_ag@mail.ru; Лимнологический институт СО РАН, Иркутск

6. Для извлечения легколетучих компонентов из масел наиболее перспективным методом экстракции ЛОС является дисперсионная жидкость-жидкостная экстракция (ОФ ДЖЖМЭ), благодаря минимальным затратам времени и растворителей. Методом ГХ-МС проведен качественный анализ образцов 6 видов пищевых коммерческих масел, в которых предварительно идентифицированы 83 компонента, относящихся к предельным и непредельным альдегидам, кетонам, спиртам, жирным кислотам и сложным эфирам. Для разных типов масел наблюдается схожее соотношение суммарных площадей пиков, относящихся к разным классам

компонентов. Выбраны условия ОФ ДЖЖМЭ для извлечения полярных и среднеполярных компонентов пищевых масел. Показано, что соотношение экстрагирующий растворитель – образец является самым значимым фактором, влияющим на извлечение компонентов из оливкового масла. Влияние соотношения растворителей при экстракции, времени обработки ультразвуком и времени центрифугирования оказалось статистически незначимым в исследованных диапазонах значений этих параметров.

На примере нескольких типов изомерных гетероциклических соединений из базы данных METLIN исследованы зависимости хроматографического удерживания в обращенно-фазовом режиме. Применены девять различных программных инструментов расчета дескрипторов в сочетании с различными способами выбора признаков (генетический алгоритм (GA), пошаговый Step-wise алгоритм, алгоритм Boruta) и методами машинного обучения (ML) (метод опорных векторов (SVM), множественная линейная регрессия (MLR), случайный лес (RF), градиентный бустинг (XGBoost)). Строгие внутренние и внешние метрики валидации использовались для выбора моделей с наилучшими предиктивными возможностями ($r_{test} > 0.73$, порядок элюирования $> 60\%$). Для разработанных моделей средние абсолютные ошибки находились в диапазоне от 60 до 110 с. Внешняя валидация, выполненная на опубликованных экспериментальных данных для структурно связанных фармацевтических соединений, подтвердила наилучшую точность моделирования MLR в сочетании с выбором признаков GA для набора общих физико-химических дескрипторов, в то время как ChemoPy/RF показала наилучшую точность при определении порядка выхода критических пар.

Obradović D., Stavrianidi A., Fedorova E., Bogojević A., Shpigun O., Buryak A., Lazović S. A comparative study of the predictive performance of different descriptor calculation tools: Molecular-based elution order modeling and interpretation of retention mechanism for isomeric compounds from METLIN database // J. Chromatogr. A. 2024. V. 1719. 464731. DOI: 10.1016/j.chroma.2024.464731.

Ставрианиди А.Н., д.х.н., Stavrianidi.andrey@gmail.com (МГУ им. М.В. Ломоносова, химический факультет, кафедра аналитической химии, лаборатория хроматографии).

7. Разработана методика разделения и определения антибиотиков различных классов на стандартных растворах с использованием ВЭЖХ-МС на базе тройного квадруполя Expec L-Chrom MS. Установлено, что почти все антибиотики полностью распадаются на продукты деградации при воздействии ускоренных электронов в дозе 3 кГр, за исключением хлорамфеникола, который обнаруживается на уровне 0.83 мг/л в растворе, облученном в дозе 7000 Гр. Содержание доксициклина в растворе, облученном в дозе 3000 Гр, оказалось меньше предела обнаружения, тогда как остальные антибиотики определялись на уровнях 0.32 мг/л для амоксицилина; 0.1 мг/л для ампицилина; 0.14 мг/л для бензилпенициллина; 3.36 мг/л для стрептомицина; 0.62 мг/л для тетрациклина. Разработана методика по поиску метаболитов антибиотиков с использованием масс-спектрометрии высокого разрешения на жидкостном хромато-масс-спектрометре Scientific Orbitrap Fusion Lumos, включающем орбитальную ионную ловушку. Наибольшее число метаболитов образовалось при распаде тетрациклина. Найденные продукты деградации антибиотиков и их точные массы.

Опруненко А.В., Браун А.В., Ипатова В.С., Близнюк У.А.; Родин И.А., д.х.н., igorrodin@yandex.ru (МГУ им. М.В. Ломоносова, химический факультет, кафедра аналитической химии, лаборатория масс-спектрометрии).

8. В настоящее время процессы сорбции/десорбции компонентов фармпрепаратов на микропластике (МП) изучены слабо. Эти исследования усложняются различной химической природой и размерами частиц МП, изменением их свойств со временем, а также внешними факторами (температура, pH и др.). Большинство работ ограничены изучением одного вида фармпрепарата и МП в модельных условиях и носят разрозненный и несистемный характер. Не существует унифицированного подхода к пробоподготовке реальных образцов, групповому извлечению компонентов фармпрепаратов и их последующему высокочувствительному определению в МП. Для разработки подобного подхода перспективным выглядит использование метода ВЭЖХ-МС, способного обеспечить высокую надежность одновременного группового определения целевых аналитов.

В рамках исследования выбраны условия, обеспечивающие одновременное определение антибиотиков в водных средах методом ВЭЖХ-МС, который

далее использовался для изучения процессов сорбции антибиотиков на микропластике. Объектами исследования были 26 веществ, принадлежащие к девяти различным классам антимикробных препаратов, а именно: бета-лактамы (пенициллины, цефалоспорины, карбопенемы), макролиды, нитроимидазолы, нитрофураны, сульфаниламиды, фторхинолоны, тетрациклины, линкозамиды и хлорамфеникол.

С помощью разработанного подхода изучены закономерности процессов сорбции отдельных классов антибиотиков на синтезированных наночастицах латекса из водных матриц при различных значениях pH среды и ионной силы. По полученным кинетическим кривым определено время установления сорбционного равновесия – 2 ч, а также максимальные значения адсорбции для различных классов препаратов. Наибольшими значениями сорбции характеризуются тетрациклины, фторхинолоны и линкомицин. При этом для всех рассмотренных классов антибиотиков наблюдается увеличение адсорбции в кислой среде. Это, вероятно, связано с тем, что наночастицы латекса имеют отрицательный заряд за счет имеющихся на поверхности кислотных групп. Для бета-лактамов сорбция также увеличивается при переходе от нейтрального к щелочному pH. С увеличением ионной силы значения сорбции уменьшались, что вероятно связано с конкурентной адсорбцией неорганических ионов.

Полученные результаты и изученные зависимости в дальнейшем будут использованы для разработки способов и подходов селективного извлечения адсорбированных антибиотиков с поверхности частиц микропластиков и их последующего определения в реальных объектах методом ВЭЖХ-МС.

Апенкина А.В.; Тимченко Ю.В., yury.tim@mail.ru; Родин И.А., д.х.н., igorrodin@yandex.ru (МГУ им. М.В. Ломоносова, химический факультет, кафедра аналитической химии, лаборатория масс-спектрометрии).

9. Злокачественные новообразования органов мочеполовой системы являются одними из самых распространенных онкопатологий, поражающих жизненно важные внутренние органы. Рак мочевого пузыря (РМП) характеризуется высокой онкоспецифической смертностью из-за схожих с другими заболеваниями мочевыделительной системы симптомов или их отсутствия на начальных этапах развития заболевания. Актуальна разработка новых методов диагностики данного заболевания. Получение

характеристических профилей биологических объектов, содержащих большое количество метаболитов с различными физико-химическими свойствами и широким диапазоном концентраций, представляет собой серьезную аналитическую задачу. Метод хромато-масс-спектрометрии, благодаря его высокой чувствительности, является ключевым подходом для осуществления метаболомных исследований, позволяя выявлять множество метаболитов из разных биохимических путей и на разных уровнях концентрации. Наиболее широкий метаболомный профиль для больных с РМП можно получить при ненаправленном профилировании мочи ввиду её нахождения в непосредственной близости от опухоли.

Предложена пробоподготовка, осуществлен подбор условий для ВЭЖХ-МС анализа, а также проведение метаболомного профилирования образцов мочи методом жидкостной хромато-масс-спектрометрии высокого разрешения для получения максимально возможного числа метаболитов. В качестве объектов анализа выступали образцы мочи больных РМП, а также здоровых пациентов и пациентов с заболеваниями мочевыводящих путей.

Полученные результаты могут быть использованы для обнаружения комплексных нарушений метаболизма, связанных с РМП, и в дальнейшем служить дополнением к текущим методам диагностики данного заболевания на разных стадиях.

Фролова А.В., frolova_a97@mail.ru; Родин И.А., д.х.н., igorrodin@yandex.ru (МГУ им. М.В. Ломоносова, химический факультет, кафедра аналитической химии, лаборатория масс-спектрометрии).

10. Разработана методика пробоподготовки и проведена оптимизация параметров метода твердофазной микроэкстракции для исследования профиля летучих соединений в твердых образцах пищевой продукции. Установлено, что использование ГХ-МС анализа в сочетании с твердофазной микроэкстракцией позволяет проводить определение летучих соединений на более низком уровне и идентифицировать большее число соединений по сравнению с ГХ-МС в сочетании с парофазным анализом.

Опруненко А.В., Болотник Т.А., Ипатова В.С., Близнюк У.А., Борщеговская П.Ю.; Родин И.А., д.х.н. igorrodin@yandex.ru ((МГУ им. М.В. Ломоносова, химический факультет, кафедра аналитической химии, лаборатория масс-спектрометрии).

11. Образцы мочи изучали с целью оценки ряда стероидомных показателей и оценки содержания летучих органических соединений в моче. Были изучены различные сорбенты для извлечения ЛОС, оптимизированы условия сорбционного концентрирования, показано, что наиболее показательным является изучение содержания диметилсульфида, диметил дисульфида диметил трисульфида, ацетона, 2-бутанона, 2-пентанона, бензола, пентанала, гексана, толуола и ацетонитрила. Образцы мочи 174 добровольцев были проанализированы с использованием оптимизированной процедуры. Результаты показали применимость предлагаемого подхода для образцов мочи как здоровых людей, так и онкологических больных. Обработка данных проводили построением и обучением нейросетей с использованием полученных данных, в результате чего были получены чувствительность, специфичность и точность модели на уровне 91%, 82% и 86% соответственно.

Gashimova E.M., Quantification of cancer biomarkers in urine using volatilomic approach / E.M. Gashimova, A.Z. Temerdashev, V.A. Porkhanov [et al.] // Heliyon. – 2024. – V. 10. – e39028.

Темердашев А.З., TemerdashevAZ@gmail.com (Кубанский государственный университет, кафедра аналитической химии).

12. Изучена возможность одновременного определения полихлорированных бифенилов и полиароматических углеводородов в природных водах методами дисперсионной жидкостно-жидкостной микроэкстракции и газовой хроматографии-масс-спектрометрии. Возможность использования дисперсионной жидкостно-жидкостной микроэкстракции (ДЖМЭ) для извлечения ПХБ и ПАУ с последующим их определением методом ГХ-МС оценивалась в присутствии обоих загрязнителей. Предложен метод ДЖМЭ с бинарным диспергирующим агентом, обеспечивающий одновременное извлечение аналитов с эффективностью от 80 до 97%. Предложенная процедура позволила определить методом ГХ-МС 16 ПАУ и 7 ПХБ в природных водах в широком диапазоне концентраций $2,0 \times 10^{-5}$ –0,04 мкг/мл со средней погрешностью 7–18% для ПАУ и 11–18% для ПХБ.

Temerdashev Z.A., Musorina T.N., Chervonnaya T.A. Simultaneous Determination of Polychlorinated Biphenyls and Polyaromatic Hydrocarbons in Natural Waters by Dispersive Liquid–Liquid Microextraction and Gas Chromatography–Mass Spectrometry // Journal of Analytical Chemistry, 2024, 79(10), pp. 1459–1465.

Темердашев З.А., temza@kubsu.ru (Кубанский государственный университет, кафедра аналитической химии).

13. Изучены различные способы извлечения ЭМК из ароматной воды ромашки аптечной (*Matricaria chamomilla* L.) для последующего ГХ-МС-определения. Рассмотрены методы дисперсионной жидкостной микроэкстракции, твердофазной и жидкость-жидкостной экстракции. После оптимизации условий DLLME и ТФЭ ЭМК из ароматной воды по сравнению с традиционной ЖЖЭ обеспечили лучшие степени извлечения в органическую фазу, что позволит повысить достоверность определения ее состава.

Т. К. Чубукина, Ю. А. Петренко, Н. В. Киселева. Возможности твердофазной экстракции и определения эфирно-масличных компонентов из гидролата ромашки аптечной (Matricaria chamomilla L.) // Вестник Дагестанского государственного университета. Серия1: Естественные науки. 2024. выпуск 3. с. 101-108.

Киселева Н.В., ab284b@mail.ru (Кубанский государственный университет, кафедра аналитической химии).

Тонкослойная хроматография

1. Произведено разделение кверцетина, (+)-катехина, рутина и нарингина с использованием мицеллярных подвижных фаз при варьировании природы и концентрации поверхностно-активных веществ, органического растворителя и электролита. Выбраны оптимальные хроматографические системы и условия их применения в тонкослойной хроматографии исследуемых флавоноидов.

Беланова Н.А., к.х.н., belanovana@mail.ru (Воронежский государственный университет, кафедра аналитической химии).

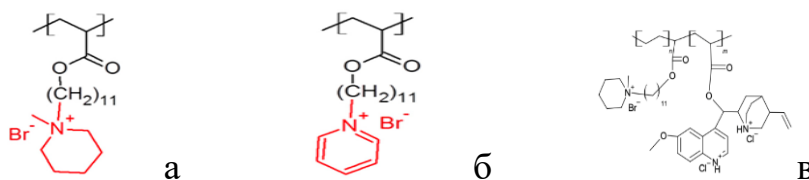
Капиллярный электрофорез

1. Предложены условия определения тетрациклина, окситетрациклина и хлортетрациклина при их совместном присутствии в растворе методом капиллярного зонного электрофореза, обеспечивающие пределы определения данных антибиотиков на уровне десятых долей мг/л. Исследована возможность повышения чувствительности

электрофоретического определения хлортетрациклина за счёт предварительного сорбционного концентрирования на катионите КУ-2. Установлены оптимальные параметры для сорбции в статическом и динамическом режимах. Показано, что пропускание водного раствора хлортетрациклина с $pH = 3$ со скоростью 1 мл/мин через патрон, содержащий 0,3 г КУ-2, и последующая десорбция 0,1 моль/л раствором NaOH позволяет достичь как минимум 4-кратного концентрирования аналита.

Лебедева Е.Л., к.х.н., ElenaLebedeva@urfu.ru; Петрова Ю.С., к.х.н., j.s.petrova@urfu.ru; Неудачина Л.К., к.х.н., Ludmila.Neudachina@urfu.ru (Уральский федеральный университет им. первого Президента России Б.Н. Ельцина, Кафедра аналитической химии и химии окружающей среды, Екатеринбург).

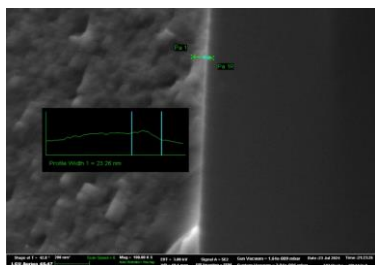
2. Продолжены исследования по выявлению аналитических характеристик новых мицеллярных полимеров поли-11-акрилоилоксиундецил-N-метилпиперидиний бромида (pAUMP-Br), поли-11-акрилоилоксиундецилпиридиний бромида (pAUPy-Br) как модификаторов внутренних стенок кварцевого капилляра при электрофоретическом разделении гидрофобных и гидрофильных аналитов (*стероидные гормоны, аминокислоты, биогенные амины*). С целью выявления возможностей хирального разделения синтезирован модификатор с хиральной меткой – ацилированным **хинином** – pAUMP-AQin. Проведенные электрофоретические эксперименты показали, что полимеры модифицируют стенки кварцевого капилляра, обращают электроосмотический поток (ЭОП), препятствуют сорбции основных аналитов, реализуют режимы капиллярной электрохроматографии и мицеллярной электрокинетической хроматографии и on-line концентрирования; в случае полимера с хромофорным фрагментом обеспечивают возможность косвенного детектирования; хиральный полимер pAUMP-AQin способствует разделению энантиомеров. Изучено влияние мицеллярных полимеров на эффективность и селективность разделения БАВ, реализацию режима косвенного детектирования при введении полимера с хромофорной терминальной группой в состав фонового электролита.



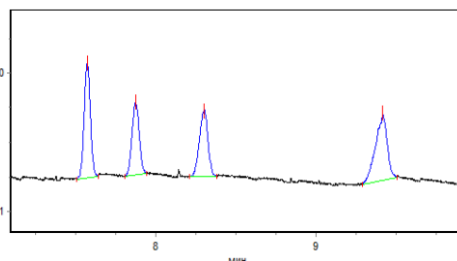
Структурные формулы мицеллярных полимеров pAUMP-Br (а), pAUPy-Br (б), pAUMP-AQin (в).

Для формирования динамического полимерного покрытия предварительно протравленные кварцевые капилляры в течение 1 ч промывали 0.01 М водными растворами соответствующих полимеров. В результате наблюдали генерацию анодного ЭОПа, что свидетельствовало о перезарядке поверхности внутренних стенок капилляра; условия: фоновый электролит (ФЭ): 10 mM фосфатный буферный раствор (pH=4.2); -20 кВ, 210 нм, 20 °С. Независимое подтверждение наличия сформированного покрытия получено методом СЭМ. На модифицированном капилляре достигнуто с хорошим разрешением разделение гидрофобных нейтральных аналитов - стероидных гормонов, которые при использовании непокрытых капилляров в режиме капиллярного зонного электрофореза мигрируют без разделения вместе с ЭОП

1.

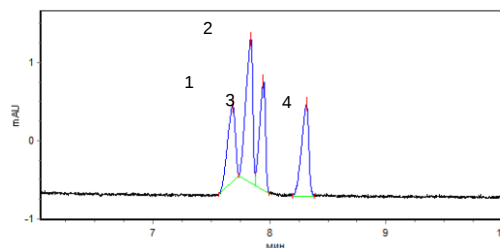
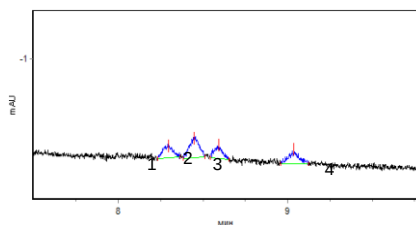


2.



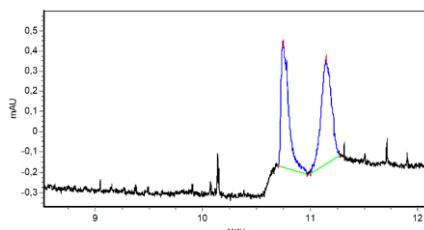
1. СЭМ-снимок внутренней поверхности капилляра, модифицированного pAUPy-Br (толщина покрытия 23 нм).
2. Электрофореграмма смеси стероидных гормонов (*кортизон, кортизол, кортикостерон, 11-дезоксикортикостерон*) на капилляре с покрытием pAUMP-Br -25 кВ; 242 нм, 20 °С.

Выполнена серия электрофоретических экспериментов на модифицированных мицеллярными полимерами капиллярах по онлайн концентрированию (*стэкинг с усилением поля*) на смесях катехоламинов (адреналин, норадреналин, дофамин, метанефрин). Аналиты сконцентрированы в 15-20 раз.



Электрофореграммы модельной смеси биогенных аминов, полученные при без концентрирования ((а), 2 с 30 мбар) и в условиях онлайн концентрирования ((б)Б 40 с 30 мбар) на капилляре с покрытием рAUMP-Br (ФЭ: 10 мМ ФБР, рН=4.23; -20 кВ; 210 нм, 20 °С); 1 – адреналин, 2 – норметанефрин, 3 – норадреналин, 4 – дофамин.

Энантиомерное разделение на примере триптофана с фактором энантиоселективности 1.5 выполнено. с применением двойной хиральной системы *сополимер с хиральной меткой* - β -ЦД (на стенках капилляра – хинин; в ФЭ – β -ЦД или 2-ГП- β -ЦД; β -ЦД в отсутствии хинина не обеспечивал разделение рацемата).



Разделение энантиомеров триптофана на капилляре с хиральным покрытием рAUMP-AQin (10 мМ ФБР, рН=4.25, с добавкой 9 мМ β -циклодекстрина, -20 кВ; 280 нм; 20 °С

Chromatographia <https://doi.org/10.1007/s10337-024-04376-2>
Polyelectrolytes in Capillary Electrophoresis.

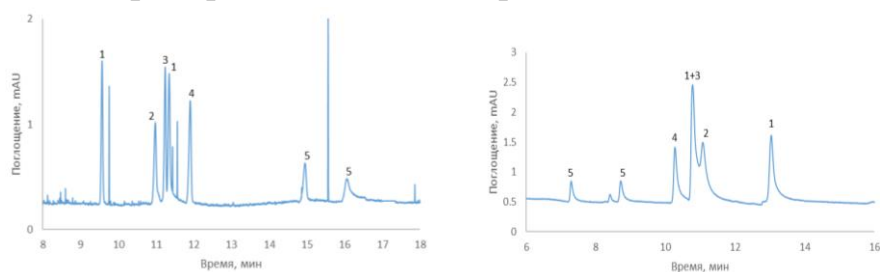
Карцова Л.А., д.х.н., kartsova @gmail.com; Адамова А.А. (Санкт-Петербургский государственный университет, кафедра органической химии).

3. Предложена методология формирования физически сорбированных моно- и полислойных покрытий на основе хитозана с использованием наночастиц золота. Сформированные покрытия апробированы при разделении кислотных и основных аналитов, нестероидных противовоспалительных средств (НПВС) и β -блокаторов. Установлены факторы, определяющие условия электрофоретического энантиомерного разделения при использовании наночастиц золота и хитозана в качестве хирального селектора. Хитозан, обладающий высокой

адгезией к стенкам кварцевого капилляра, использован в качестве перспективного типа катионных покрытий в капиллярном электрофорезе. Для оценки стабильности покрытия измеряли зависимость ЭОП от pH фонового электролита (ФЭ). Факт модификации подтвержден снимками СЭМ. Толщина покрытия - 45-70 нм. Покрытие оказалось стабильным: ЭОП не менялся при проведении более 50 анализов.

Для увеличения удельной поверхности подготовлено покрытие на основе наночастиц золота, модифицированных хитозаном. Уже при pH 7 генерировался анодный ЭОП.

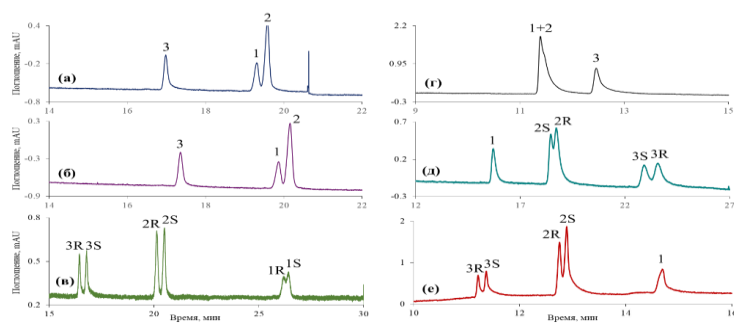
В системе «хитозан – GNP@CS» продемонстрировано с высокой эффективностью разделение дансилпроизводных аминокислот (триптофан, треонин, аланин, лизин, глутаминовая кислота). Эффективность и селективность разделения возросли по сравнению с немодифицированным капилляром.



Электрофореграммы смесей дансилпроизводных аминокислот.
Капель-105М; капилляр, модифицированный хитозаном. ФЭ: 10 мМ ФБР (pH 2)
GNP@CS, $\lambda = 230$ нм, -20 кВ.

- (а) – модифицированный капилляр;
(б) – немодифицированный капилляр, + 20 кВ. Аналиты: 1-триптофан, 2-глутаминовая кислота, 3-треонин, 4-аланин, 5-лизин.

Возможность энантиомерного разделения выявлена с применением двухфазной хиральной системы: хитозан на стенках капилляра, а в ФЭ – второй селектор (ГП- β -ЦД, β -ЦД или ванкомицин).



Электрофореграммы хирального разделения β -блокаторов на различных капиллярах

а-в – капилляр, модифицированный хитозаном, г, д – немодифицированный капилляр, е – капилляр с покрытием на основе ПДАДМАХ. Условия: Капель-105М; ФЭ: а, г) 25 мМ ФБР, рН 2; б) 25 мМ ФБР, рН 2, 0.01% (масс.) хитозана; в, д, е) 25 мМ ФБР рН 2, 5 мМ ГП-β-ЦД; ввод пробы: 5с*30 мбар; $\lambda = 230$ нм; U: ± 20 кВ. Аналиты: 1 – соталол, 2 – пропранолол, 3 – карведилол.

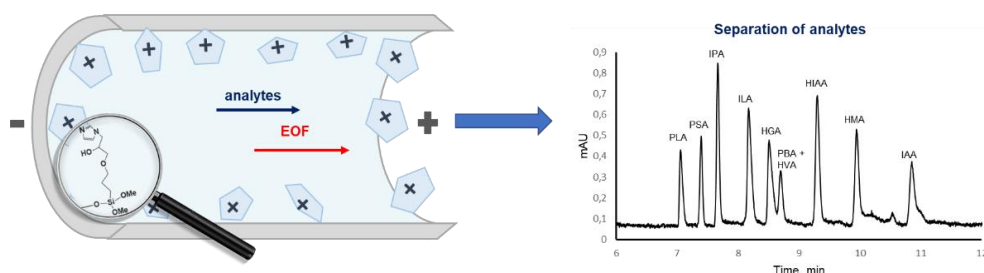
Результаты представлены в

Е. А. Колобова, Э. Р. Зиангирова, Е. В. Соловьева, Л. А. Карцова. Физически адсорбированные покрытия на основе хитозана для электрофоретического разделения биологически активных веществ // Журн. аналит. химии. 2025. Т. 1. (принята к печати).

Зиангирова Э.М., Карцова Л.А., Колобова Е.А., kartsova@gmail.com (Санкт-Петербургский государственный университет, кафедра органической химии).

4. Осуществлен синтез ковалентных покрытий на основе катиона имидазолия и выявлены его аналитические возможности при определении кислотных и основных БАВ: фенил- и индолкарбоновых кислот и катехоламинов.

Использование катионных модификаторов в электрофоретических системах способствует более избирательному разделению аналитов за счет различных взаимодействий (гидрофильных, гидрофобных, электростатических, π - π взаимодействий) с ними, предотвращает их адсорбцию на стенках кварцевого капилляра, генерирует стабильный анодный электроосмотический поток (ЭОП) и значительно сокращает время анализа. Одним из таких модификаторов является катионное ковалентное покрытие на основе катиона имидазолия, которое изучается в данной работе.



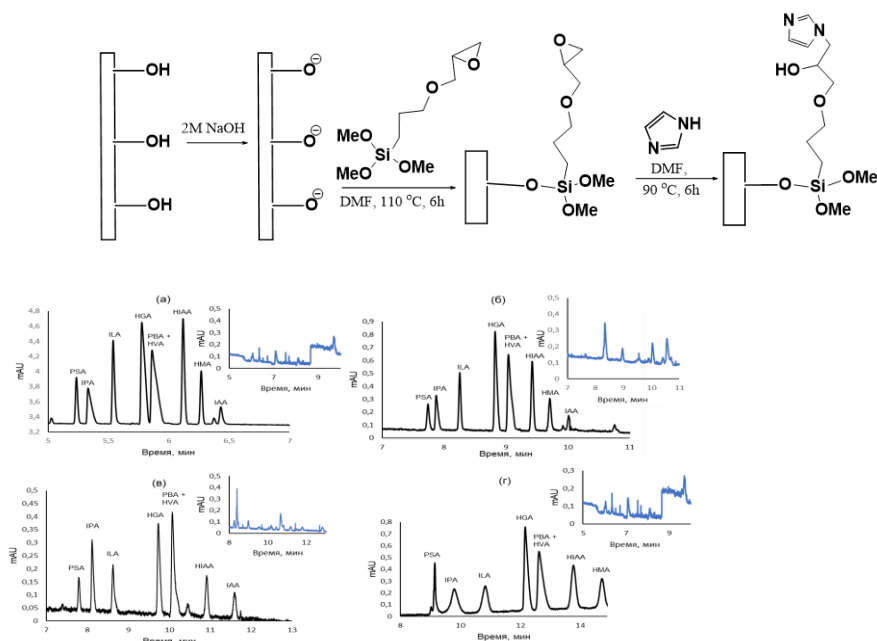
Электрофореграмма модельной смеси фенил- индол-карбоновых кислот на ковалентном покрытии на основе катиона имидазолия.

PLA – фенилмолочная кислота, PSA – фенил-янтарная кислота, IPA – индолпропионовая кислота, ILA – индолмолочная кислота, HGA – гомогентизиновая кислота, PBA – фенилбутановая кислота, HVA –

гомованилиновая кислота, HIAA – 5-гидроксиуксусная кислота, IPA – индолпропионовая кислота, IAA – индолакриловая кислота.

Результаты сопоставлены с электрофоретическим разделением аналитов на немодифицированном капилляре и динамическом покрытии на основе традиционно используемого катионного модификатора ЦТАБ, а также с приготовленными ковалентными покрытиями на основе алкилзамещенных имидазольевых катионов: бутил– и октилимидазолием. Выявлены возможности внутрикапиллярного концентрирования аналитов с применением синтезированного покрытия: *стэкинг с большим объемом вводимого образца, стэкинг с усилением поля и водной пробкой, стэкинг с усилением поля и мицеллярной пробкой, электростэкинг*. Электростэкинг позволил сконцентрировать аналиты в 106 - 512 раз и снизить ПО до 4 – 72 нг/мл.

Схема синтеза ковалентного покрытия



Он-лайн концентрирование смеси фенил- и индолкарбоновых кислот на ковалентном покрытии на основе катиона имидазолия:

стэкинг с большим объемом вводимого образца (а), стэкинг с усилением в поля и водной пробкой (б), электростэкинг (в), схема стэкинга с усилением поля и мицеллярной пробки (г), стэкинг с усилением поля и мицеллярной пробкой (д).

А.Ш. Ганиева, Л. А. Карцова. Разделение и концентрирование биологически активных соединений методом капиллярного электрофореза с использованием модификаторов на основе имидазольевого катиона. // Журн. аналит. химии. 2025. Т. 1. (в печати).

Ганиева А.Ш., Карцова Л.А., д.х.н., kartsova@gmail.com (Санкт-Петербургский государственный университет, кафедра органической химии).

5. Проведен цикл экспериментов по совместному определению анионов низкомолекулярных органических и неорганических кислот методом капиллярного зонного электрофореза с косвенным детектированием в биологических жидкостях

Низкомолекулярные органические и неорганические кислоты играют важную роль в регуляции кислотно-щелочного баланса и участвуют в различных биохимических процессах. Изменения их концентраций в биологических жидкостях служат диагностическими критериями ряда метаболических нарушений, включая воспалительные процессы и онкологические заболевания. Поиск подходов совместного определения этих биологически активных веществ (БАВ) весьма актуален. Большинство работ в этом направлении выполняются методами ГХ и ВЭЖХ с предварительным получением соответствующих производных. Альтернативным методом определения высокополярных и ионных БАВ является капиллярный электрофорез (КЭ), позволяющий разделять органические и неорганические кислоты в форме анионов с получением характеристических профилей аналитов при различных патологиях.

При поиске условий определения анионов решались две задачи: выбор способа детектирования (*прямого* - с УФ детектированием или *косвенного* - с введением в фоновый электролит(ФЭ) поглощающей добавки) и оптимизация селективности разделения аналитов. Изучены факторы влияющие на селективность разделения: состав фонового электролита (природа и концентрация поглощающей добавки и природа введенного модификатора - ЭДТА, ацетонитрила, метанола и пропанола-2) и направление ЭОПа. В случае объектов со сложной матрицей (образцы мочи) выявлены ограничения в селективности разделения анионов органических и неорганических кислот с применением традиционных подходов капиллярного зонного электрофореза (КЗЭ). Найдены условия совместного определения анионов низкомолекулярных органических (предельные, дикарбоновые и гидроксикарбоновые кислоты) и неорганических кислот (хлорид, бромид, фторид, фосфат, сульфат, нитрат, нитрит) методом КЗЭ с косвенным УФ-детектированием без обращения ЭОП. В качестве поглощающей добавки выбрана бензойная кислота. Предложена схема пробоподготовки образцов мочи в сочетании с *on-line*

концентрированием – *стэкингом* с большим объемом вводимой пробы. Степень концентрирования анионов – 77-112. В найденных условиях проведена оценка основных метрологических характеристик. Пределы обнаружения ~ 0.001 – 0.025 мкг/мл. Получены электрофоретические профили анионов органических и неорганических кислот в моче здоровых людей и больных с раком простаты с последующей хеометрической обработкой.

Лазаретова А.И., Бессонова Е.А., к.х.н., lena_pol@inbox Карцова Л.А., д.х.н., (Санкт_-Петербургский государственный университет, кафедра органической химии).

Другие хроматографические методы

1. Продолжены работы посвященные сорбции β-каротина кремнийсодержащими материалами. Показано, что наноструктурированные материалы типа МСМ-41 более эффективны для сорбционного извлечения каротиноида из гексановых растворов в динамических условиях по сравнению с силикагелем. Установлено, что для синтезированного аналога кремнийсодержащего материала (типа МСМ-41) ММС-1 число т.т. (N) превышают данные величины для силикагеля. Так при использовании в качестве сорбента ММС-1 N=135 и 610 (на начальном и конечном участке выходной кривой соответственно), а для силикагеля N=140 и 190.

Беланова Н.А., к.х.н., belanovana@mail.ru; Воронежский государственный университет, кафедра аналитической химии).

2. Проведен обзор литературных источников, опубликованных в России и за рубежом в основном за последние 10-15 лет, по использованию хроматографических методов в процессах разделения редкоземельных элементов. В настоящее время наибольшее применение получила жидкостная хроматография, поскольку она обладает преимуществами различных режимов разделения, надежности, быстрого разделения. Несмотря на то что хроматографические методы по производительности значительно уступают экстракции, они могут широко применяться, например, в процессах ультратонкой очистки препаратов, получения индивидуальных РЗЭ особой степени чистоты. Отмечается, что наиболее перспективными для разделения РЗЭ являются методы жидкость-

жидкостной хроматографии, в которых обе фазы находятся в свободном жидком состоянии и процессы разделения аналогичны нестационарным процессам экстракции. Реализация таких экстракционно-хроматографических процессов разделения металлов в промышленном масштабе возможна на основе применяемого в промышленности экстракционного оборудования - каскада экстракционных колонн или каскада смесительно-отстойных экстракторов.

Белова В.В., Костанян А.Е. Использование хроматографических методов в процессах разделения редкоземельных элементов // Хим. технология. 2024. Т. 25. № 11. С. 432-440. DOI: 10.31044/1684-5811-2024-25-11-432-440.

Белова В.В., д.х.н., belova@igic.ras.ru ; Костанян А.Е., д.х.н. (Институт общей и неорганической химии им. Н.С. Курнакова РАН, лаборатория аналитической химии и методов разделения и лаборатория основ технологии).

3. Совместно с университетом Чаньчжоу (Китай) начата разработка перспективных хиральных неподвижных фаз на основе гидрогелей металлоорганических структур (MOF), сформированных из центрального атома цинка и органических лигандов – производных хиральных аминокислот. Китайская сторона ответственна за синтез образцов, в то время как на базе Уфимского университета науки и технологий началось изучение возможностей применения данных MOFов для разделения энантиомеров. На сегодняшний день установлена принципиальная способность разработанных MOFов к проявлению энантиоселективности. Показано, что введение MOFa в гидрогель повышает энантиоселективность и адсорбционную активность. Максимальный коэффициент энантиоселективности достигает 1.2.

Гуськов В.Ю., д.х.н., guscov@mail.ru (Уфимский университет науки и технологий, кафедра аналитической химии).

Электрохимические методы

Основной мировой тренд современного развития электрохимических методов анализа – разработка «умных», надежных портативных миниатюрных устройств на основе новых материалов, технологий, в том числе с применением машинного обучения, для персонализированной

медицинской диагностики, мониторинга окружающей среды человека, фармацевтического анализа и т.д., позволяющие увеличивать чувствительность, селективность анализа, а также срок службы, обеспечивать высокую надежность по более низкой цене. Прогресс в области развития диагностики на месте открывает путь «от пробирки к смартфону».

А.Н. Козицина

Потенциометрия. Ионоселективные электроды

1. Проведен синтез медьсодержащих сложных оксидов на основе ниобатов составов $Ba_{4-x}Cu_xNb_2O_9$ (область гомогенности $0 \leq x < 0.1$) а также $Ba_{6-x}Cu_xNb_2O_{11}$ (область гомогенности $0 \leq x < 0.4$). Для однофазных образцов рассчитаны параметры элементарной ячейки. Сконструированы угольно-пастовые электроды (УПЭ) на основе полученных образцов, для которых изучены основные электрохимические характеристики. Область линейности электродной функции достигает 10^{-6} моль/дм³. Электроды демонстрируют катионную электродную функцию.

Выполнен синтез ниобатов лития, допированных цинком $Li_{1-x}Zn_xNbO_{3+0.5x}$, область гомогенности которых составила $0 \leq x \leq 0.3$. Образцы продемонстрировали удовлетворительную устойчивость в кислых средах. Сконструированные на основе синтетизированных ниобатов УПЭ показали неудовлетворительные результаты. По результатам исследования пленочных электродов, на основе полученных образцов ниобатов, можно сделать вывод об увеличении наклона электродной функции с повышением содержания цинка в составе. Для всех пленочных электродов установлен анионный характер электродной функции.

Штин С.А., к.х.н., sergey.shtin@urfu.ru (Уральский федеральный университет им. первого Президента России Б.Н. Ельцина, Кафедра аналитической химии и химии окружающей среды, Екатеринбург).

2. Разработаны модифицированные screen-printed потенциометрические сенсоры, чувствительные к цефалоспориновым антибиотикам – цефуросиму (Cefur), цефотаксиму (Ceftx), цефазолину (Cef). В качестве электродноактивных компонентов (ЭАК) использованы ассоциаты тетрадециламмония с комплексными соединениями «серебро (I) – цефуросим (цефотаксим)». Показана роль магнитных наночастиц Fe_3O_4 и хлорида цетилпиридиния (ЦПХ) в улучшении электроаналитических

свойств сенсоров в растворах исследуемых антибиотиков. Найдены оптимальные соотношения модификаторов в углеродсодержащих чернилах ($\text{Fe}_3\text{O}_4:\text{ЦПХ}=1:2,5$). Определены основные электроаналитические характеристики модифицированных сенсоров. Введение в углеродсодержащие чернила бинарной смеси магнитных наночастиц и хлорида цетилпиридиния приводит к улучшению электроаналитических свойств планарных сенсоров, чувствительных к цефуроксиму, цефотаксиму, цефазолину. При этом снижается предел обнаружения $1 \cdot 10^{-6}$ М ($1 \cdot 10^{-7}$ М), увеличиваются угловые коэффициенты (55 ± 3 мВ/рС) и интервалы линейности электродных функций ($1 \cdot 10^{-6}$ М – $1 \cdot 10^{-2}$ М), снижается время отклика – 26 - 30 с. Адсорбция ПАВ на границе раздела обеспечивает стабильность суспензии наночастиц и позволяет провести концентрирование молекул аналита.

Показана возможность отдельного определения цефалоспориновых антибиотиков в двух- и трехкомпонентных смесях проекционными методами многомерной обработки данных ПЛС-1 и ПЛС-2. Оценены среднеквадратичные ошибки градуировки и прогноза, на основании которых выбрано оптимальное количество латентных переменных для данных методов. Установлено, что все исследованные модели дают высокие значения коэффициентов корреляции и тангенсы угла наклона зависимостей «измерено-предсказано» близкие к единице, что позволяет рекомендовать эти методы для практического использования.

Кулапина Е.Г., д.х.н., kulapinaeg@mail.ru (Саратовский национальный исследовательский государственный университет, кафедра аналитической химии и химической экологии).

Вольтамперометрия

1. Изучена каталитическая активность смешанновалентных оксидов иридия, электроосажденных на поверхности стеклоуглеродного электрода в процессе окисления кофеина. При этом больший каталитический эффект получен на электроде, модифицированном композитом на основе пленки из нафтона и смешанновалентных оксидов иридия. На основе проведенных исследований разработан селективный вольтамперометрический способ определения кофеина. Линейная логарифмическая зависимость тока от концентрации кофеина наблюдается

в диапазоне от $1 \cdot 10^{-8}$ М до $5 \cdot 10^{-3}$ М. Разработанный способ использовали при определении кофеина в энергетических напитках.

Shaidarova, L.G. Voltammetric Determination of Caffeine in Energy Drinks Using an Electrode Modified with a Nafion Film and Mixed-Valence Iridium Oxides / L.G. Shaidarova, I.A. Chelnokova, D.A. Koryakovtseva, D.A. Kirilenko, and H.C. Budnikov // J. Anal Chem. - 2024. - Vol. 79, No. 6. - pp. 721–725. DOI: 10.1134/S1061934824700096.

Разработан способ изготовления стеклоуглеродного электрода с электроосажденными частицами палладия и молекулярно-импринтированным полимером из никотинамида для количественного определения дофамина в присутствии родственных по структуре соединений. Использование полимера со специфическими центрами распознавания, комплементарными молекуле-темплату, привело к увеличению чувствительности и селективности определения дофамина. Иммобилизация частиц палладия на поверхности электрода позволила увеличить селективность вольтамперометрического определения дофамина в присутствии адреналина и норадреналина. Разность потенциалов пиков окисления этих соединений составляет 200 мВ. Линейная билогарифмическая зависимость аналитического сигнала от концентрации дофамина наблюдается в интервале от $5.0 \cdot 10^{-9}$ М до $5.0 \cdot 10^{-3}$ М. Предложенный способ апробирован при анализе образцов урины.

Shaidarova, L.G. Selective Voltammetric Determination of Dopamine Using a Palladium Particle-Modified Electrode with Molecularly Imprinted Nicotinamide Polymer / L.G. Shaidarova, I.A. Chelnokova, D.Y. Khairullina, Y.A. Leksina, and H.C. Budnikov // J. Anal Chem. - 2024. - Vol. 79, No. 9. - pp. 1322–1328. DOI: 10.1134/S1061934824700680

Шайдарова Л.Г., д.х.н.. larisashaidarova@mail.ru (Казанский (Приволжский) федеральный университет, кафедра аналитической химии).

2. Исследованы процессы электрохимического превращения формальдегида на поверхности печатных углеродсодержащих электродов, модифицированных висмутом и сурьмой. Для контроля эффективности процессов модифицирования электродов «зелеными» металлами (на примере висмута и сурьмы) использовался нейтральный красный в качестве альтернативной обратимой окислительно-восстановительной системы. Показано, что НК в протонированной форме подвергается квазиобратимым одноэлектронным окислительно-восстановительным превращениям на ТУЭ и ТУЭ, модифицированных висмутом или сурьмой

в фосфатных буферных растворах ($\text{pH } 5,5 \pm 0,5$) в диапазоне потенциалов от $-0,3$ до $-0,8$ В, в котором висмут и сурьма не электроактивны. На основе проведенных исследований разработана новая вольтамперометрическая методика количественного определения формальдегида в лекарственном препарате и фармацевтическом сырье, сточных, талых, бутилированных водах на модифицированных висмутом печатных углеродсодержащих электродах. Разработка «зеленых» электродов и методик количественного определения на их основе позволит расширить возможности вольтамперометрического анализа ввиду достижения требуемых аналитических характеристик (широкая область катодных потенциалов, высокая электрокаталитическая активность, способность к адсорбции органических соединений и малая чувствительность к растворенному кислороду) без использования токсичных ртутьсодержащих электродов.

Neutral Red as a Redox Probe for Comparative Evaluation of Electrochemical Performance of Bismuth Modified Electrodes/Malakhova, N., Kifle, A. B., Ivoilova, A., Leonova, N. & Kozitsina, A.//Analytical Letters. 2025. 58, 1, pp. 61-78.

Козицина А.Н., д.х.н., a.n.kozitsina@urfu.ru; Кифле А.Б., Малахова Н.А. (Уральский федеральный университет им. первого Президента России Б.Н. Ельцина, Кафедра Аналитической химии Химико-технологического института, Научно-образовательный и инновационный центр химико-фармацевтических технологий, Екатеринбург).

3. Изучена возможность одновременного вольтамперометрического определения Cu(II) , Pb(II) и Cd(II) с применением водно-органических электролитов, содержащих диметилсульфоксид и хлорид($\text{KCl}+\text{LiCl}$)-ионы. Установлено, что в выбранных условиях Cu(II) , Pb(II) и Cd(II) восстанавливаются с образованием выраженных пиков, при этом наблюдается смещение их потенциалов в область более отрицательных значений с увеличением концентрации ДМСО, возрастание разности потенциалов пиков тока деполяризаторов (до 250 мВ) и максимальных катодных токов (до 1,6 раз). Показано, что электровосстановление в 5 М растворах ДМСО протекает квазиобратимо в случае Cu(II) , обратимо в случае Pb(II) , необратимо в случае Cd(II) . Установлены области линейных зависимостей $I_{\text{max}}=f(C_{\text{Me}})$, оценено влияние сопутствующих ионов. На основании проведенных исследований предложена новая методика одновременного вольтамперометрического определения Cu(II) , Pb(II) и

Cd(II) в многокомпонентных матрицах, отличающаяся высокой селективностью, точностью и простотой выполнения.

Трубачев А.В., Трубачева Л.В., к.х.н., trub_av@mail.ru (Удмуртский государственный университет, кафедра фундаментальной и прикладной химии, Ижевск).

4. Исследовано электрохимическое поведение супрамолекулярного электрохимического зонда на основе пиллар[5]арена, содержащего десять тетразольных фрагментов и электрохимически активного красителя Метиленового синего (МС) в соотношении 1:2. Электрохимический сигнал зонда пиллар[5]арен/МС, обеспечиваемый редокс-превращениями МС, менялся в присутствии некоторых ионов металлов (Zn^{2+} , Co^{2+}), которые не проявляли собственной окислительно-восстановительной активности в изучаемой области потенциала. Разработанный подход к модифицированию поверхности рабочего электрода найдет применение для определения других неэлектроактивных аналитов благодаря их влиянию на комплексообразование по типу «гость-хозяин», а также для создания биосенсоров на основе специфических взаимодействий ДНК-МС.

Makhmutova, L.I. A supramolecular electrochemical probe based on a tetrazole derivative pillar[5]arene/methylene blue system / L.I. Makhmutova, D.N. Shurpik, O.A. Mostovaya, N.R. Lachugina, A.V. Gerasimov, A. Guseinova, G.A. Evtugyn, I.I. Stoikov // Org. Biomol. Chem.- 2024.- V.22.- P. 4353-4363.
<https://doi.org/10.1039/D4OB00591K>

Евтюгин Г.А., д.х.н., gevtugyn@gmail.com; Гусейнова А., guseinova.adelya@yandex.ru (Казанский (Приволжский) федеральный университет, кафедра аналитической химии).

5. Предложен подход к комплексному исследованию соединений из ряда натриевых солей 3-нитро-4-Х-7R-тио-[1,2,4]триазоло[5,1-с][1,2,4]триазинов – оригинальных малых молекул, перспективных кандидатов в лекарственные средства инструментальными (электрохимические, спектроскопические) и цифровыми методами (квантово-химических, молекулярного докинга, молекулярной динамики). Показано, что диффузионный характер кинетики электродной реакции приводит к образованию большего количества интермедиатов радикальной природы, что, вероятно, является одной из причин, обуславливающей большую биофизическую активность соединений. Выделены два «соединения-лидера» – натриевая соль 3-нитро-4-оксо-7-этилтио-

[1,2,4]триазоло[5,1-с][1,2,4]триазинида дигидрата и натриевая соль 3-нитро-4-гидрокси-7-метилтио-4Н-[1,2,4]триазоло[5,1-с][1,2,4]триазинида моногидрата. Полученные данные удовлетворительно коррелируют с результатами проведенных биологических испытаний. Разработаны и апробированы методики их количественного вольтамперометрического определения.

Разработка подхода приблизит исследователей к пониманию связи между биологической активностью, физико-химическими свойствами вещества и структурой молекулы, что, в свою очередь, позволит химикам-синтетикам осуществлять направленный синтез соединений с ценными биологическими свойствами. Это приведет к сокращению временных и трудовых затрат, а также будет способствовать снижению экономических рисков при создании оригинальных лекарственных средств.

Козицина А.Н., д.х.н., a.n.kozitsina@urfu.ru; Можаровская П.Н. Дрокин Р.А. Иванова А.В., Цмокалюк А.Н., Балин И.Н., Русинов В.Л. (Уральский федеральный университет им. первого Президента России Б.Н. Ельцина, Кафедра Аналитической химии Химико-технологического института, Научно-образовательный и инновационный центр химико-фармацевтических технологий, Екатеринбург).

6. Исследовано электрохимическое поведение индия в присутствии 4-(2-пиридилазо)-резорцин (PAR) в качестве хелатирующего агента или в качестве агента предварительной концентрации. На основании проведенных исследований предложен новый подход определения индия с использованием адсорбционной инверсионной вольтамперометрии (AdSV). Измерения проводились с помощью квадратно-волновой вольтамперометрии с использованием комбинированной электродной системы, которая позволяет проводить предварительную концентрацию и инверсионную очистку без размыкания цепи. В качестве рабочего электрода использовался *ex situ* покрытый висмутовый пленочный электрод (BiFE). Была разработана программа потенциал-время для стадий цикла инверсии на основе различных факторов, которые влияют на величину сигнала инверсии. Градуировочная кривая была линейной в диапазоне концентраций от $2 \cdot 10^{-7}$ до $4 \cdot 10^{-6}$ М при рН 4,8, потенциале накопления -700 мВ и концентрации ПАВ $1 \cdot 10^{-4}$ М. Предел обнаружения по критерию 3σ при времени накопления 120 с составил $3,5 \cdot 10^{-9}$ М. Изучены некоторые помехи, вызванные ионами Tl(I), Zn(II), Cu(II), Pb(II), Co(II), Ni(II), Mn(II), Fe(III), Cr(III), и показано, что процедура замены

среды может эффективно устранить некоторые помехи. Показано, что метод может быть применен для определения индия в водопроводной воде и в образце стекла ИТО.

Martynov LY, Sadova MK, Sakharov KA, Yashtulov NA, Zaytsev NK. Determination of indium by adsorptive stripping voltammetry at the bismuth film electrode using combined electrode system facilitating medium exchange. Talanta. 2024 May 1;271:125680. doi: 10.1016/j.talanta.2024.125680. Epub 2024 Jan 16. PMID: 38277966.

Разработана методика определения неорганического йода в талломе ламинарии (*Laminariae thalli* L.), соответствующая нормам Государственной Фармакопеи Российской Федерации XV издания (ГФ РФ XV). Методика является валидной и пригодной для контроля качества фармацевтического сырья в условиях заводских лабораторий. По сравнению с титриметрической методикой, рекомендуемой ГФ РФ XV, предлагаемая методика более селективна, чувствительна и менее трудоемка. Работоспособность и метрологические характеристики методики были подтверждены валидацией согласно требованиям ГФ РФ XV. Методика может быть использована не только в научных исследованиях, но и в рутинном контроле качества лекарственного растительного сырья в контрольно-аналитических лабораториях, занимающихся фармацевтическим контролем качества.

Никулин А.В., Мартынов Л.Ю., Габаева Р.С., Лазов М.А. Разработка новой инверсионно-вольтамперометрической методики определения неорганического йода в слоевищах ламинарии (LAMINARIAE THALLI L.) для контроля качества сырья в условиях заводских лабораторий. Тонкие химические технологии 19(4) 372-383 (2024) DOI: 10.32362/2410-6593-2024-19-4-372-383.

Мартынов Л.Ю., martynov_leonid@mail.ru (МИРЭА-Российский технологический университет, Институт тонких химических технологий имени М.В. Ломоносова, кафедра аналитической химии имени И.П. Алимарина).

7. Разработана методика определения концентраций селена в питьевой воде, БАД и крови. Правильность предложенных методик подтверждена сопоставлением результатов анализа реальных проб с результатами АЭС-ИСП анализа.

Медведев С.Н., к.х.н., medvedev@niic.nsc.ru; (Институт неорганической химии им. А.В. Николаева СО РАН, Аналитическая лаборатория, Новосибирск).

Кулонометрия

1. Оценено влияние ультразвуковой обработки при получении водных извлечений из лекарственного растительного сырья (кора *Quercus robur* и *Frangula alnus*, соплодия *Alnus incana*, корневища *Potentilla erecta* и *Bergenia crassifolia*, корни и корневища *Sanguisorba officinalis*, трава *Leonurus*, цветки *Tilia × europaea* и *Matricaria chamomilla*, листья *Salvia officinalis* и *Urtica dioica*) на их обобщенные антиоксидантные показатели (интегральную антиоксидантную емкость и железовосстанавливающую способность) по данным гальваностатической кулонометрии. Показано, что наилучшие результаты достигаются при обработке в течение 30 мин. Дальнейшее увеличение времени является нецелесообразным с практической точки зрения. Самые высокие антиоксидантные показатели наблюдаются для извлечений, полученных из корней и корневищ. Значения железовосстанавливающей способности указывают на вклад фенольных соединений, который является значимым для исследуемых образцов. Установлены положительные корреляции антиоксидантных параметров с общепринятыми показателями, полученными фотометрически.

Зиятдинова Г.К., д.х.н., Ziyatdinovag@mail.ru (Казанский (Приволжский) федеральный университет, кафедра аналитической химии).

Электрохимические сенсоры

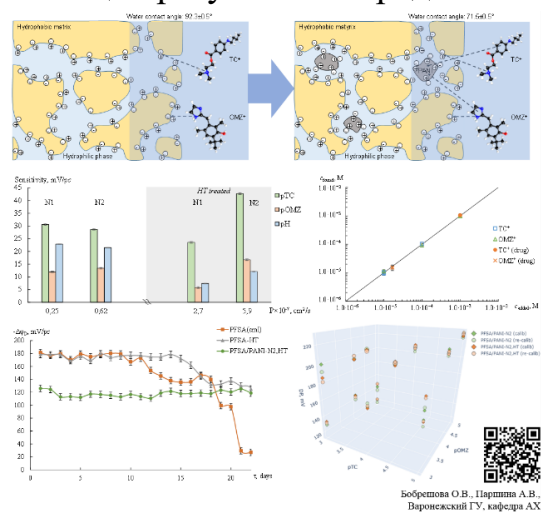
1. Возрастающий интерес в стоматологии к неинвазивной интраназальной анестезии с использованием тетракаина и оксиметазолина обуславливает необходимость их совместного определения в комбинированных препаратах и слюне человека. Потенциометрические мультисенсорные системы на основе фторполимерных сульфированных мембран, в том числе модифицированных наночастицами полианилина, были разработаны для решения данных задач. Изменение распределения чувствительности сенсоров к родственным анализам достигалось благодаря варьированию условий концентрационной поляризации ионов на границе мембраны с исследуемым раствором, за счёт изменения объема внутрипорового пространства, природы и доступности сорбционных центров, а также гидрофильности поверхности мембран, которые задавались условиями их синтеза, модификации и последующей гидротермальной обработки. Обратимость сорбции анализов при выбранных условиях регенерации обеспечивала долговременную

стабильную работу как самих сенсоров, так и установленных методом множественной линейной регрессии градуировочных уравнений. Введение в поры мембран допанта способствовало повышению их устойчивости к фаулингу. Погрешность совместного определения ионов тетракаина и оксиметазолина в растворах комбинированного препарата не превышала 7 и 11%, а в растворе искусственной слюны - 15 и 17%, полученных, соответственно, с помощью массива перекрестно чувствительных сенсоров на основе композиционных мембран. Погрешность анализа снижалась до 3-6% при анализе препарата и до 0.2-6% при анализе искусственной слюны, если в массив объединяли сенсоры на основе мембран с допантом и без за счет уменьшения корреляции между их откликами.

Результаты получены совместно с Лабораторией ионики функциональных материалов ИОНХ РАН (зав. лабораторией – д.х.н., академик РАН Ярославцев А.Б.).

Parshina A., Yelnikova A., Shimbareva V., Komogorova A., Yurova P., Stenina I., Bobreshova O., Yaroslavtsev A. Determination of Tetracaine and Oxymetazoline in Drugs and Saliva via Potentiometric Sensor Arrays Based on Fluoropolymer/Polyaniline composites // Journal of Chemometrics. 2024. V. 38, №10. e3583. DOI: 10.1002/cem.3583.

Графическая аннотация результатов представлена на рисунке ниже.



Бобрешова О.В., д.х.н., bobreshova@chem.vsu.ru ; Паршина А.В., д.х.н., parshina_ann@mail.ru (Воронежский государственный университет, кафедра аналитической химии).

2. Разработаны амперометрические сенсоры на основе молекулярно-импринтированного полимера (МИП) с отпечатками антибиотиков: цефтриаксона натрия, цефазолина натрия, цефотаксима натрия,

цефуроксима натрия, сульфаниламида, стрептомицина сульфата и неомицина сульфата. Экспериментально установлен диапазон определяемых концентраций $1.0 \cdot 10^{-1}$ – $1.0 \cdot 10^{-5}$ г/л. Пределы обнаружения антибиотиков составили $1.5 \cdot 10^{-6}$ и $8.5 \cdot 10^{-6}$ г/л. Правильность определения антибиотиков в модельных растворах проводили методом «введено-найденно». Величина относительного стандартного отклонения не превышала 8%. Методом добавок установлено, что состав матрицы антибиотиков не влияет на аналитический сигнал амперометрического сенсора. Разработан способ определения антибиотиков в молоке, сточных водах амперометрическими сенсорами на основе МИП-антибиотиков. В сточной воде и молоке в изучаемом диапазоне концентраций антибиотики не обнаружены.

Зяблов А.Н., д.х.н., alex-n-z@yandex.ru (Воронежский государственный университет, кафедра аналитической химии).

3. Разработан амперометрический сенсор, модифицированный полимером с молекулярным отпечатком (ПМО), для определения 3-(4-гидроксифенил)молочной кислоты (4-ГФМК) – одного из маркеров сепсиса. Установлена высокая селективность ПМО-сенсоров по отношению к целевым молекулам. Экспериментально установлен диапазон определяемых концентраций 4-ГФМК – 0.2–0.0002 мг/дм³.

Korovkina A. O. Determination of 3-(4-Hydroxyphenyl)lactic Acid by an Amperometric Sensor with Molecularly Imprinted Polymers / A. O. Korovkina, Vu Hoang Yen, N. V. Beloborodova, A. Yu. Vybornyi, A. N. Zyablov // Journal of Analytical Chemistry, 2024, Vol. 79, No. 11, pp. 1635–1639. DOI: <https://doi.org/10.1134/S1061934824701065>.

Разработаны пьезоэлектрические сенсоры на основе молекулярно-импринтированного полимера с отпечатком додецилсульфата натрия и показано, что полученные сенсоры чувствительны к определяемому веществу. Данные сенсоры апробировали при анализе паст (Lacalut aktiv, Aquaafresh, Новый Жемчуг, Лесной Бальзам). Диапазон определяемых концентраций составил 0.5–0.01 г/дм³.

Зяблов А.Н., д.х.н., alex-n-z@yandex.ru; (Воронежский государственный университет, кафедра аналитической химии); Дядищев М.Е., dyadisheff.mischa@yandex.ru (Елецкий государственный университет им. И.А. Бунина, кафедра биологических дисциплин и фармакологии).

4. Разработаны новые чувствительные и селективные вольтамперометрические сенсоры на основе стеклоуглеродных электродов, модифицированных смесями наночастиц оксидов металлов, диспергированных в воде или поверхностно-активных средах, для определения синтетических красителей (желтый «солнечный закат» FCF, синий блестящий FCF и хинолиновый желтый). Смеси наночастиц церия и диоксида олова, диспергированных в поверхностно-активных веществах (катионном гексадецилпиридиний бромиде или неионном Brij® 35), показали наилучший отклик на желтый «солнечный закат» FCF и хинолиновый желтый соответственно. Вольтамперометрический сенсор на основе смеси наночастиц диоксида церия и оксида железа(III), диспергированных в воде, позволяет определять синий блестящий FCF. Сенсоры охарактеризованы с помощью сканирующей электронной микроскопии, электрохимической импедансной спектроскопии и вольтамперометрии. Подтверждено значительное увеличение электроактивной площади поверхности и скорости переноса электрона. Для определения красителей использована дифференциально-импульсная вольтамперометрия в среде буферного раствора Бриттона-Робинсона при pH 2.0 для желтого «солнечного заката» FCF и при pH 5.0 для хинолинового желтого и синего блестящего FCF. Электрод, модифицированный 1 мг/мл смесью наночастиц CeO_2 и SnO_2 , диспергированных в 0.10 мМ гексадецилпиридиний бромиде, дает линейный отклик на желтый «солнечный закат» FCF в диапазоне концентраций 0.010–1.0 и 1.0–100 мкМ с пределом обнаружения 8.0 нМ. Сенсор на основе 1 мг/мл смеси наночастиц CeO_2 и SnO_2 , диспергированных в 0.50 мМ Brij® 35 позволяет определять хинолиновый желтый в диапазоне 0.50–7.5 и 7.5–25 мг/л с пределом обнаружения 0.13 мг/л. Электрод, модифицированный 0.75 мг/мл смесью наночастиц $\text{CeO}_2 \cdot \text{Fe}_2\text{O}_3$, обеспечивает возможность определения 0.25–2.5 и 2.5–250 мкМ синего блестящего FCF с пределом обнаружения 0.033 мкМ. Достигнутые аналитические характеристики улучшены по сравнению с описанными для других методов и достаточны для практического применения разработанных сенсоров, в частности, в анализе напитков. Доказана селективность сенсоров в присутствии неорганических ионов, углеводов, L-аскорбиновой кислоты, кофеина, а также ряда других синтетических красителей, характерных для реальных образцов. Результаты анализа реальных объектов хорошо согласуются с данными независимых методов.

Gimadutdinova L., Ziyatdinova G., Davletshin R. Voltammetric sensor based on the combination of tin and cerium dioxide nanoparticles with surfactants for quantification of Sunset Yellow FCF // Sensors. – 2024. – V. 24. – № 3. – Art. 930. – 17 p. <https://doi.org/10.3390/s24030930>.

Зиятдинова Г.К., д.х.н., Ziyatdinovag@mail.ru; Гимадутдинова Л.Т., liliya.gimadutdinova@gmail.com (Казанский (Приволжский) федеральный университет, кафедра аналитической химии).

5. Разработан высокочувствительный и селективный вольтамперометрический сенсор на основе нетканого углеволоконного материала, модифицированного фитосинтезированными наночастицами серебра и графеновыми нанопластинами, для определения пищевого синтетического красителя синий блестящий FCF (E133). Наночастицы серебра получены в результате простого, быстрого и экологически безопасного фитосинтеза с применением экстракта листьев облепихи без использования токсичных химических реагентов. Модифицирование углеволоконного электрода фитонаночастицами серебра и графеновыми нанопластинами способствовало увеличению активной площади поверхности электрода, возрастанию максимального тока окисления красителя E133 и снижению перенапряжения этого процесса относительно немодифицированного электрода. Выбраны условия формирования максимального аналитического сигнала красителя, включающие состав нанокompозитного модификатора (массовая доля наночастиц серебра и графеновых нанопластин составляет 4.4 % и 95.6 % соответственно) и кислотность фоновой электролита (фосфатный буферный раствор pH 5). Установлено, что процесс электроокисления красителя E133 на модифицированном углеволоконном электроде является необратимым, двухэлектронным, протекает без участия протонов и контролируется диффузией. Предложена схема электродного процесса, согласующаяся с литературными данными. Сенсор характеризуется низким пределом обнаружения (6.1 нМ), широким диапазоном определяемых концентраций (0.06 – 40 мкМ) и хорошей повторяемостью аналитического сигнала красителя $sr < 7 \%$. Показано, что изученные мешающие вещества не оказывают существенного влияния на аналитический сигнал красителя E133. Разработанный сенсор успешно применен для анализа напитков и карамели без предварительной пробоподготовки. Степень открытия красителя E133 в реальных образцах

составляет 97 – 103 %, что свидетельствует об отсутствии значимой систематической погрешности.

М.А. Бухаринова, Е.И. Хамзина, В.К. Тамошенко, А.В. Тарасов, Н.Ю. Стожко. Вольтамперометрическое определение синтетического пищевого красителя синий блестящий FCF // Аналитика и контроль. 2024. Т. 28, № 3. С. 251-258 DOI: 10.15826/analitika.2024.28.3.003.

Разработан высокочувствительный сенсор на основе углеволоконной бумаги, модифицированной шунгитом и формазанатом меди, для вольтамперометрического определения лидокаина. Синтезированный металлорганический комплекс, композит и модифицированный электрод были охарактеризованы методами инфракрасной спектроскопии, масс-спектрометрии высокого разрешения, элементного анализа, сканирующей электронной микроскопии, циклической и линейной вольтамперометрии. Двукратное увеличение пикового тока окисления лидокаина на модифицированном электроде по сравнению с немодифицированным связано с сенсibiliзирующим эффектом композитного модификатора, который обусловлен увеличением электроактивной площади и числа сайтов связывания лидокаина на электродной поверхности. Сенсор демонстрирует широкий динамический диапазон от 2 до 2120 мкМ с низким пределом обнаружения 0.18 мкМ лидокаина и высокой чувствительностью 0.7553 мкА/В·мкМ. Межэлектродная и внутриэлектродная повторяемость аналитического сигнала не превышают 3.5 %. Реакция сенсора стабильна в течение 3 недель. Разработанный сенсор апробирован для определения лидокаина в фармацевтических препаратах. Результаты анализа реальных образцов продемонстрировали высокие показатели воспроизводимости ($s_r \leq 5.5\%$) и правильности (ПП = 98–102 %).

M. A. Bukharinova, N. Yu. Stozhko, T. G. Fedorchenko, G. N. Lipunova, E. V. Shabrova, E. I. Khamzina and A. V. Tarasov A Voltammetric Sensor Based on Carbon Fiber Paper Modified with Shungite and Copper Formazanate for the Determination of Lidocaine // Journal of Analytical Chemistry, 2024, Vol. 79, No. 7, pp. 848–859. DOI: 10.1134/S1061934824700229.

Бухаринова М.А., mbukharinova@mail.ru; Стожко Н.Ю., д.х.н., snyu@usue.ru (Уральский государственный экономический университет, кафедра физики и химии, научно-инновационный центр сенсорных технологий).

6. Разработан вольтамперометрический сенсор на основе стеклоуглеродного электрода с послойным сочетанием карбоксилированных многостенных углеродных нанотрубок и электрополимеризованного пирогаллолового красного для определения эвгенола эфирных маслах. Найдены рабочие условия получения пленки поли(пирогаллолового красного) в потенциодинамическом режиме в нейтральной среде, обеспечивающие наилучший вольтамперометрический отклик эвгенола. Электрод охарактеризован с помощью сканирующей электронной микроскопии и комплекса электрохимических методов. Показана значимое улучшение вольтамперных характеристик эвгенола на полимер-модифицированном электроде. Рассчитаны параметры электроокисления эвгенола и показано, что реакция протекает с образованием *о*-хинона. В условиях дифференциально-импульсной вольтамперометрии на фоне буферного раствора Бриттона-Робинсона pH 2.0, диапазон определяемых содержаний эвгенола составляет 0.75-100 мкМ с пределом обнаружения 0.73 мкМ. Установлена высокая селективность определения эвгенола в присутствии неорганических ионов и типичных фенольных и терпеновых компонентов эфирных масел. Подход успешно апробирован на эвгенол-содержащих эфирных маслах и сопоставлен с независимым методом.

Kalmykova, A.D. A voltammetric sensor based on carboxylated carbon nanotubes and poly(pyrogallol red) for the determination of eugenol in essential oils / A.D. Kalmykova, G.K. Ziyatdinova // J. Anal. Chem. – 2024 – V. 79. – № 6. – P. 709-720. <https://doi.org/10.1134/S1061934824700084>.

Зиятдинова Г.К., д.х.н., Ziyatdinovag@mail.ru; Калмыкова А.Д., alena.kalmykova.pnb.2000@mail.ru; Казанский (Приволжский) федеральный университет, кафедра аналитической химии).

7. Разработаны электрохимические сенсоры и ДНК-сенсоры на основе печатных графитовых электродов, модифицированных фенотиазиновыми и акридиновыми красителями (тионин, профлавин), электрополимеризованными из глубоких эвтектических растворителей на основе лимонной и малоновой кислот, глюкозы и воды. Для сенсора на основе полипрофлавина оценены рабочие условия для внедрения ДНК тимуса телят и показана возможность обнаружения регистрации термического и окислительного повреждения ДНК для всех типов покрытий. Вольтамперометрический подход позволил различить нативную и химически окисленную ДНК, в то время как импедиметрический подход

позволил успешно распознавать нативную, термически денатурированную и химически окисленную ДНК по изменению сопротивления переноса заряда. Охарактеризовано влияние различных концентраций традиционных антиоксидантов и фармацевтических препаратов на окислительное повреждение ДНК. Для покрытий политионина с молекулярными отпечатками установлены рабочие концентрации темплата (эпинефрин). Образование молекулярных отпечатков подтверждено методами сканирующей электронной микроскопии и спектроскопии электрохимического импеданса. После удаления темплата сопротивление переноса заряда поверхностного слоя зависело от концентрации эпинефрина в диапазоне от 0.10 до 316 мкМ с пределом обнаружения 50 нМ. Подтверждена селективность сигнала сенсора в отношении серотонина и норэпинефрина, обычно присутствующих в биологических жидкостях. Сенсор прошел апробацию при определении эпинефрина в реальных образцах слюны и в растворах, имитирующих электролиты плазмы и белковую фракцию сыворотки. Незначительное влияние добавок и стабилизаторов, содержащихся в препаратах, устранялось разбавлением пробы. Разработанный импедиметрический сенсор показал хорошие возможности для дальнейшего применения в клинической диагностике, фармакокинетических исследованиях и контроле производства лекарственных средств.

Electrochemical DNA Sensor Based on Poly(proflavine) Deposited from Natural Deep Eutectic Solvents for DNA Damage Detection and Antioxidant Influence Assessment /A. Porfireva, A.Goida, V. Evtugyn, M. Mozgovaya, T. Krasnova, G.Evtugyn // Chemosensors.- 2024.-V. 12.- Article ID 215. <https://doi.org/10.3390/chemosensors12100215>.

Impedimetric sensor based on molecularly imprinted polythionine from deep eutectic solvent for epinephrine determination / A. Porfireva, A. Goida, V. Evtugyn, G. Evtugyn // Green Analytical Chemistry.-2024.- V.9.- Article ID 100113. <https://doi.org/10.1016/j.greeac.2024.100113>.

Порфирьева А.В.. porfireva-a@inbox.ru; Гойда А.И. a.goida@mail.ru; Казанский (Приволжский) федеральный университет, кафедра аналитической химии).

8. Создан лабораторный прототип портативного модульного электрохимического устройства МЭУ (рисунок 1) многоразового внелабораторного использования на основе рецепторов небиологической природы – синтезированных оригинальных производных азолазинов,

бипиридинов и разработанной концепции селективного биомолекулярного распознавания без использования биорецепторов для экспресс-диагностики инфекционных заболеваний и прогнозирования рисков возникновения их осложнений на основе данных о природе возбудителя (по содержанию гемагглютинина), уровня глюкозы, общего холестерина и антиоксидантой емкости биологических жидкостей пациента. Устройство позволяет с одной стороны быстро и достоверно определить вирусную природу инфекционного заболевания, а с другой – оценить риски возникновения осложнений на основании персонализированных данных об уровне важнейших клинических биомаркеров пациента.

МЭУ может быть использовано для экспресс-диагностики, что позволит сделать важный шаг на пути к персонализированной медицине посредством разработки и внедрения в клиническую практику устройств для использования медучреждениями, внелабораторного экспресс-анализа «у постели пациента», и в конечном итоге распространяться в аптечной сети для массового использования. Это приведет к существенному сокращению временных и финансовых затрат при диагностике и лечении социально-значимых заболеваний.

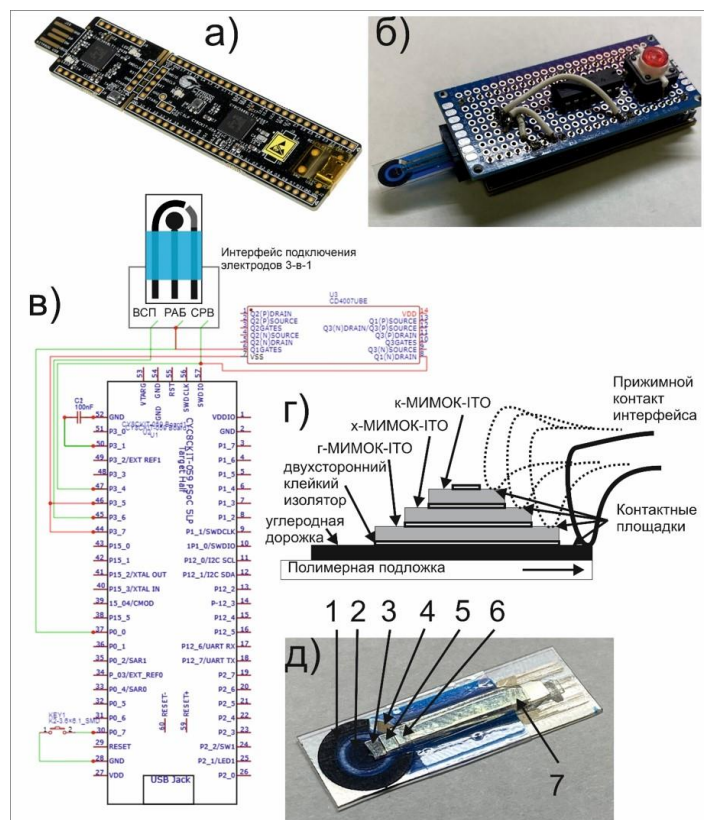


Рисунок 1 – а,б) PSoc 5LP Prototyping Kit; модульное электрохимическое устройство (МЭУ); в) Схема МЭУ для режима измерения ЦВА (зеленые линии соединений) и для режима ПТРЗ (красные линии соединений), активирующийся при нажатии кнопки. ВСП – вспомогательный электрод, РАБ – рабочий электрод, СРВ – электрод сравнения. г) Схема электрода 6-в-1 для определения ГГ, кортизола, глюкозы и холестерина, в разрезе. д) Фото электрода 6-в-1: 1 – Вспомогательный электрод для режима ЦВА, 2 – Рабочий электрод для режима ЦВА, 3 – г-МИМОК-ITO, 4 – Хлоридсеребряный электрод как электрод сравнения для режима ЦВА или как контрольный затвор для режима ПТРЗ, 5 - х-МИМОК-ITO, 6 - к-МИМОК-ITO, 7 – контактная часть электродов.

Sabitova, Y., Svalova, T., Medvedeva, M., Malysheva, N., Rusinov, V., Matern, A., Kozitsina, A./Rapid voltammetric determination of hemagglutinin in saliva using magnetic nanoparticles modified with triazolotriazine in a portable cell design//Chimica Techno Acta. 2025. 12, 1, 12106.

Svalova, T., Medvedeva, M., Mazur, A., Drokin, R., Butorin, I., Tsmokalyuk, A., Malysheva, N., Rusinov, V., Kozitsina, A./Voltammetric determination of hemagglutinin using triazolotriazine derivatives as agents for the biomolecule recognition//Electrochimica Acta. 2024, 481, 143954.

Козицина А.Н., д.х.н., a.n.kozitsina@urfu.ru; Свалова Т.С. Дрокин Р.А. Иванова А.В., Охохонин А.В., Сапожникова И.М., Штайц Я.К.,

Салимгареева Е.Р., Медведева М.В., Мухин Е.М. (Уральский федеральный университет им. первого Президента России Б.Н. Ельцина, Кафедра Аналитической химии Химико-технологического института, Научно-образовательный и инновационный центр химико-фармацевтических технологий, Екатеринбург).

9. Разработаны проточные ферментные биосенсорные системы на основе печатных углеродных электродов, модифицированных углеродной чернью, пиллар[3]арен[2]хиноном и ферроценом или углеродной чернью, ПАМАМ-каликс-дендримерами и электрополимеризованным хлоридом 3,7-бис(4-аминофениламино) фенотиазин-5-ия. Уриказу иммобилизовали путем карбодиимидного связывания на внутренних стенках проточной электрохимической ячейки, изготовленной методом 3D-печати из поли(молочной кислоты). Проточная система на основе углеродной черни, пиллар[3]арен[2]хинона и ферроцена использована для определения 1 нМ–0.1 мМ мочевой кислоты (предел обнаружения 0.3 нМ, 20 измерений в час). Внедрение ферроцена в состав поверхностного слоя привело к синергетическому увеличению тока восстановления H_2O_2 , измеренного переключением потока в хроноамперометрическом режиме. Разработанная система апробирована при определении мочевой кислоты в искусственной моче и растворе Рингера–Локка, показана возможность определения H_2O_2 в коммерческих дезинфицирующих средствах. Введение ПАМАМ-каликс-дендримеров в состав покрытия привело к пятикратному увеличению окислительно-восстановительных токов электроактивного полимера и к увеличению сигнала мочевой кислоты в 1.5 раза. Биосенсорная система на основе ПАМАМ-каликс-дендримеров использована для определения от 10 нМ до 20 мкМ мочевой кислоты с пределом обнаружения 4 нМ. Простота сборки проточной ячейки и низкая стоимость сменных частей делают перспективным будущее применение подобных биосенсорных систем в рутинных клинических анализах.

Stoikov, D. A Flow-Through Biosensor System Based on Pillar[3]Arene[2]Quinone and Ferrocene for Determination of Hydrogen Peroxide and Uric Acid / D. Stoikov, I. Shafigullina, D. Shurpik, I. Stoikov, G. Evtugyn // Chemosensors. - 2024. - V. 12. - Art. 98. <https://doi.org/10.3390/chemosensors12060098>.

Stoikov, D. Flow-Through Amperometric Biosensor System Based on Functionalized Aryl Derivative of Phenothiazine and PAMAM-Calix-Dendrimers for the Determination of Uric Acid / D. Stoikov, A. Ivanov, I.

Shafigullina, M. Gavrikova, P. Padnya, I. Shiabiev, I. Stoikov, G. Evtugyn // Biosensors. - 2024. - V. 14. - Art. 120. <https://doi.org/10.3390/bios14030120>.

Евтюгин Г.А., д.х.н., gevtugyn@gmail.com; Стойков Д.И., der.knight@yandex.ru (Казанский (Приволжский) федеральный университет, кафедра аналитической химии).

10. Представлен краткий обзор подходов к управлению концентрационной поляризацией в мембранных сенсорных системах с целью улучшения их метрологических характеристик и расширения областей применения. Рассмотрены примеры использования ионообменных мембран в вольтамперометрических сенсорах. Описаны неравновесные принципы функционирования потенциометрических сенсоров как в условиях нулевого тока (стационарная сорбция аналита в поверхностном модифицированном слое мембраны), так и при наложении внешнего тока или напряжения (гальваностатическая поляризация мембраны). Определены перспективы микро- и нанофлюидных датчиков с электрохимическим типом детектирования.

Apel P.Yu., Biesheuvel P.M., Bobreshova O.V., Borisov I.L., Vasil'eva V.I., Volkov V.V., Grushevenko E. A., Nikonenko V.V., Parshina A.V., Pismenskaya N.D., Ryzhkov I.I., Sharafan M.V., Yaroslavtsev A.B. Concentration polarization in membrane systems // Membranes and Membrane Technologies. 2024. V.6, №3. P. 133-161. DOI: 10.1134/S2517751624600390.

Бобрешова О.В., д.х.н., bobreshova@chem.vsu.ru ; Паршина А.В., д.х.н., parshina_ann@mail.ru (Воронежский государственный университет, кафедра аналитической химии).

Биохимические методы

1. Определение общего количества белка в растительных объектах является сложной задачей, поскольку классические методы неселективны по отношению к природе азота, а на результаты биохимических подходов влияют как сопутствующие соединения, так и сложный состав белковой матрицы. С помощью электрофоретического разделения трех коммерческих образцов белка подсолнечника установлено, что исследуемые объекты представляют собой смесь солерастворимых глобулинов и водорастворимых альбуминов с разной молекулярной массой. Содержание общего белка определяли по пяти

спектрофотометрическим методикам: прямой спектрофотометрии, с использованием бицинониновой кислоты, методами Бенедикта, Брэдфорда и Лоури. На основании сравнения полученных результатов сделан вывод, что наиболее подходящим для определения белка в этих растительных материалах является метод Дюма в сочетании с методом Лоури.

Vershinina Yu.S., Mitin I.V., Garmay A.V., Sugakov G.K., Veselova I.A. Simple and robust approach for determination of total protein content in plant samples. Foods, 2025, v. 14, N 3, article 358.

Подсолнечный шрот – богатый белками побочный продукт извлечения масла из семян подсолнечника. Однако его использование в пищевой промышленности весьма ограничено из-за высокого содержания фенольных соединений (1–4 мас. %), в частности, хлорогеновой кислоты. Продукты окисления этих соединений легко связываются с молекулами белков, придавая продукту темно-зеленый цвет и горьковатый привкус. Для контроля содержания хлорогеновой кислоты в растительном сырье на различных стадиях технологических процессов без специальной обработки и без предварительной подготовки образцов к анализу изучена возможность применения методов неразрушающей колебательной спектроскопии – Рамановской и Фурье-ИК. Предложена методика определения хлорогеновой кислоты с использованием ИК-спектроскопии с пределом ее обнаружения в подсолнечном шроте 0,75 мас.%. Результаты измерений подтверждены методами УФ-спектроскопии и ВЭЖХ. Показана принципиальная возможность контроля содержания хлорогеновой кислоты в белковых изолятах с пределом обнаружения 1 мас.% методом комбинационного рассеяния света.

Vershinina Yu.S., Reshetnikova E.V., Eremina O.E., Lv S., Kolesnik I.V., Kapitanova O., Veselova I.A. Raman and IR spectroscopy as a promising approach to rapid and non-destructive monitoring of chlorogenic acid in protein matrices. Frontiers in Chemistry, 2025, v. 13, article 1543663.

Веселова И.А., д.х.н., профессор, irina.veselova@mail.ru; Капитанова О.О., к.х.н., olesya.kapitanova@gmail.com (МГУ им. М.В. Ломоносова, Химический факультет, кафедра аналитической химии, лаборатория биоаналитических методов и оптических сенсорных систем).

2. На основе функционализированных азидо-группами нанозимов «искусственная пероксидаза» разработаны сенсоры для детекции олигонуклеотидных последовательностей. Для демонстрации

эффективности применения нанозимов в качестве электрокаталитических меток (в том числе безмедиаторных) протестирована система взаимодействия двух линейных ДНК-цепочек. Максимальный электрокаталитический отклик восстановления H_2O_2 достигается при использовании меченых цепочек, гибридизация которых с зондами на сенсоре локализует метку на расстоянии около 50 нуклеотидов от поверхности электрода. Показана возможность детекции меченых цепочек в диапазоне от 0.01 до 3 нМ. Рассчитанная константа диссоциации образующегося комплекса K_d составляет $(7.5 \pm 0.2) \times 10^{-10}$ М. Добавление в анализируемый раствор диффузионно-подвижного медиатора пирокатехина приводит к увеличению тока всего в 3–8 раз, что свидетельствует о высокой эффективности прямого (безмедиаторного) электрокатализа нанозимными метками. Селективность сенсоров продемонстрирована на примере дифференциации сигналов, обусловленных связыванием полностью комплементарных (Алкин-АААСАААСТАААТТААААТГАААТ) и частично некомплементарных (несоответствие 5 нуклеотидов в середине цепочки) олигонуклеотидов. На основе предложенного принципа регистрации безмедиаторного электрокаталитического тока нанозимными метками разработан ДНК/РНК-сенсор «сэндвич»-типа. Последовательная гибридизация олигонуклеотида HULC с зондами на электроде, а затем с мечеными цепочками позволяет детектировать этот маркер карциномы в концентрациях от 0.2 до 100 нМ. Методом «введено – найдено» показана возможность детекции HULC в сыворотке крови в наномолярных концентрациях.

Комкова М.А., к.х.н., komkovama@my.msu.ru (МГУ им. М.В. Ломоносова, химический факультет, кафедра аналитической химии; лаборатория электрохимических методов).

3. Выбраны условия ферментативного декарбоксилирования глутамата в присутствии неочищенного экстракта кабачка *Cucurbita pepo* (ЭК) в качестве источника глутаматдекарбоксилазы и последующего титриметрического определения. Диапазон определяемых содержаний глутамата составляет 3.9 – 30 мМ. Возможности разработанного подхода продемонстрированы на примере контроля качества приправ. Начаты разработки микрофлюидных систем двух видов – массивы микрозон и хеометры – на основе использования ЭК.

Моросанова Е.И., д.х.н., профессор, emorosanova@gmail.com (МГУ им. М.В. Ломоносова, Химический факультет, кафедра аналитической химии, лаборатория концентрирования).

4. Показана применимость регистрации поляризации флуоресценции (ПФ) для измерения активного лизоцима в белке куриного яйца. В зависимости от длины олигосахаридной цепи трейсера метод регистрирует как образование комплекса фермент-трейсер (из-за лектин-подобного, т. е. связывающего углеводы действия лизоцима), так и расщепление трейсера (из-за хитиназной активности лизоцима). Результаты измерения активности лизоцима в образцах куриных яиц, полученные с помощью ПФ, коррелировали с результатами традиционного метода турбидиметрии. Измерения на основе ПФ лишены недостатков турбидиметрии – не требуют использования бактериальных клеток, которые невозможно стандартизировать. Кроме того, регистрация ПФ характеризуется компактным оборудованием и экспрессностью. Новая методика измерения активности лизоцима применима для оценки сложного биоматериала, в том числе в целях контроля пищевых продуктов.

Mukhametova L.I., Zherdev D.O., Eremin S.A., Levashov P.A., Siebert H.-C., Tsvetkov Y.E., Yudina O.N., Krylov V.B., Nifantiev N.E. Application of the chitooligosaccharides and fluorescence polarization technique for the assay of active lysozyme in hen egg white. Biomolecules 2024, v. 14, N 12, article 1589.

Предложено использовать химически синтезированный субстрат для измерения в одном эксперименте как концентрации лизоцима, так и его ферментативной активности с помощью регистрации ПФ. Хитоолигосахариды с разной длиной цепи были флуоресцентно помечены и протестированы. В качестве основы для оптимального трейсера выбран пентасахарид. Дальнейшая оптимизация условий обеспечила точное (предел обнаружения 0,3 мкМ) и быстрое (<30 мин) определение человеческого лизоцима. Применение разработки для измерений в образцах слёз продемонстрировало хорошую корреляцию с референтным анализом. Достоинством синтетического флуоресцентно меченного трейсера, в отличие от природного пептидогликана, является высокая воспроизводимость получаемых результатов.

Mukhametova L.I., Zherdev D.O., Kuznetsov A.N., Yudina O.N., Tsvetkov Y.E., Eremin S.A., Krylov V.B., Nifantiev N.E. Fluorescence-polarization-based assaying of lysozyme with chitooligosaccharide tracers. Biomolecules, 2024, v. 14, N 2, article 170.

Разработана методика поляризационного флуоресцентного иммуноанализа (ПФИА) для определения антибиотика тилозина в мёде. Методика характеризуется пределом обнаружения тилозина 34.7 нг/мл и рабочим диапазоном определяемых концентраций 65.2-564.0 нг/мл. Показана высокая воспроизводимость измерений с помощью портативного детектора: относительное стандартное отклонение 1.5-2.5%. Методика апробирована на образцах меда; процент открытия варьировал от 98 до 103.8%. Продолжительность ПФИА без учета подготовки проб – 10 мин.

Еремин С.А., Мухаметова Л.И., Арутюнян Д.А., Терещенков А.Г., Сумбатян Н.В., Прийма А.Д., Нестеренко И.С., Берлина А.Н., Сотников Д.В. Разработка методики поляризационного флуоресцентного иммуноанализа для определения тилозина в мёде. Журнал аналитической химии, 2024, т. 79, № 2, с. 147-155.

Предложен метод синтеза конъюгатов ряда кетостероидов с 6-карбоксифлуоресцеином с использованием короткого бифункционального реагента аминооксипропиламина. Stereoизомеры, образующиеся при получении оксимов стероидов, были разделены с помощью препаративной тонкослойной хроматографии и протестированы в ПФИА. Изучены кинетические параметры связывания полученных флуоресцентных производных с моноклональными антителами к прогестерону. Разработан эффективный и универсальный подход к синтезу флуоресцентных конъюгатов для иммуноанализа с оптимальной длиной линкера, который улучшает их аналитические характеристики и упрощает их получение. Продемонстрирована перспективность полученных соединений для практического применения в клинической диагностике и при анализе объектов окружающей среды.

Прохоренко И.А., Глуценко Д.А., Гуляк Е.Л., Михура И.В., Коришун В.А., Мухаметова Л.И., Еремин С.А. Синтез стероидных трейсеров методом оксимного лигирования и их использование в поляризационном флуоресцентном иммуноанализе. Биоорганическая химия, 2024, том 50, № 1, с. 51–64.

Опубликован обзор, в котором проанализированы возможности методов ПФИА для обнаружения органических молекул в различных пищевых продуктах. Отмечено наличие портативных устройств для измерения сигнала поляризации флуоресценции. Разнообразие флуоресцентных меток и распознающих элементов (рецепторов, моноклональных и поликлональных антител и нанотел) позволяет с помощью ПФИА обеспечивать низкие пределы обнаружения. Развитие

различных форматов ПФИА делает их перспективными для контроля загрязнителей пищевых продуктов.

Mukhametova L.I., Eremin S.A. Fluorescence polarization assays for organic compounds in food safety. *Front. Biosci. (Elite Ed.)*, 2024, v. 16, N 1, article 4.

Еремин С.А., д.х.н., профессор, saeremin@gmail.com (МГУ им. М.В. Ломоносова, Химический факультет, кафедра химической энзимологии).

5. Биолюминесцентная тест-система на основе живых клеток, продуцирующих рекомбинантную термостабильную люциферазу светляков *L. mingrelica*, эффективна для изучения действия внешних стимулов на живые клетки. Данная тест-система использована для контроля изменений содержания АТФ и люциферазы внутри и вне клеток *E. coli* в присутствии гентамицина, что позволило оценивать изменение жизнеспособности клеток, эффективность действия антибиотика и прогнозировать образование персистеров. Метод перспективен для быстрого первичного высокопроизводительного скрининга антибактериальных агентов и лекарственных форм, оценки их эффективности и механизма действия.

Ломакина Г.Ю., Каминская С.С., Угарова Н.Н. Биолюминесцентная тест-система на основе рекомбинантной люциферазы светляка *L. mingrelica* для изучения эффективности действия гентамицина на живые клетки *E. coli*. *Биофизика*, 2024, т. 69, № 3, с. 565-573.

Угарова Н.Н., д.х.н., профессор, nugarova@gmail.com; Ломакина Г.Ю., к.х.н., lomakina0506@gmail.com (МГУ им. М.В. Ломоносова, Химический факультет, кафедра химической энзимологии, лаборатория физико-химических основ биоконверсии энергии).

6. Биолюминесцентные фотобактерии использованы как высокочувствительные и быстрые биоиндикаторы для скрининга и выбора ферментов, катализирующих детоксикацию микотоксинов, а также для оценки остаточной токсичности сред после взаимодействия микотоксинов с ферментами. На основании результатов молекулярного докинга, который проводился *in silico* для взаимодействия с 20 микотоксинами двух глюканаз - β -глюкозидазы и эндоглюканазы, отобраны ферменты для экспериментального изучения действия на 10 микотоксинов. С помощью светящихся клеток выявлено заметное некаталитическое снижение токсичности сред, содержащих дезоксиниваленол, для обеих глюканаз. β -

Глюкозидаза при pH 6,0 обеспечивала значительную детоксикацию сред, контаминированных афлатоксином B2.

Efremenko E., Lyagin I., Stepanov N., Senko O., Maslova O., Aslanli A., Ugarova N. Luminescent bacteria as bioindicators in screening and selection of enzymes detoxifying various mycotoxins. Sensors, 2024, v, 24, N 3, article 763.

Ефременко Е.Н., д.б.н., профессор, elena_efremenko@list.ru; Лягин И. Н., к.х.н., lyagin@mail.ru; Маслова О.В., к.х.н., olga-still@mail.ru; Степанов Н.А., к.т.н., na.stepanov@gmail.com; Сенько О.В., к.х.н., senkoov@gmail.com; Асланлы А.Г., к.х.н., ayselasanli@mail.ru; Угарова Н.Н., д.х.н., профессор, nugarova@gmail.com (МГУ им. М.В. Ломоносова, Химический факультет, кафедра химической энзимологии).

7. Разработан гетерогенный чувствительный метод анализа микроРНК-155, основанный на изотермической амплификации и каталитической сборке шпилек с высвобождением олигонуклеотида (СНАОР). Для высокочувствительного обнаружения продукта амплификации использовался конъюгат полипероксидазы со стрептавидином и усиленная хемилюминесцентная реакция. Предел обнаружения микроРНК-155 составил 0,4 пМ. Коэффициент вариации хемилюминесцентного сигнала в рабочем диапазоне – менее 12%. Кроме того, предлагаемый метод высоко специфичен. Показано, что эффективность СНАОР как метода амплификации аналогична эффективности традиционной каталитической сборки шпилек (СНА). В отличие от СНА, СНАОР, одним из продуктов которого является одноцепочечный олигонуклеотид, может использоваться в аналитических методах, основанных на каскадной амплификации, и перспективен для клинической диагностики.

Zinovkin R.A., Sakharov I.Yu. Challenges of using microRNAs as potential disease biomarkers. A review. Microchemical Journal, 2024, v. 206, article 111379.

Bodulev O.L., Zakharov M.D., Sakharov I.Yu. Chemiluminescent plate assay of microRNA-155 coupled with catalytic hairpin assembly with oligonucleotide release (СНАОР). Talanta, 2024, v. 270, article 125525.

Сахаров И.Ю., д.х.н., профессор, sakharovivan@gmail.com (МГУ им. М.В. Ломоносова, Химический факультет, кафедра химической энзимологии, НИЛ биосенсорики и моделирования ферментов).

8. Для эффективного контроля загрязнения окружающей среды техногенными соединениями, воздействующими на эндокринную систему, разработана иммунохроматографическая тест-система для одновременного выявления бисфенола А и диметилфталата – приоритетных контаминант, высвобождающихся из пластиковых изделий. В тест-системе используется сочетание золотых маркерных частиц разного цвета – красных сферических частиц и синих наночетов, что обеспечивает простую визуальную оценку результатов тестирования. Тест-система характеризуется пределами обнаружения бисфенола А и диметилфталата, равными 2,22 нг/мл и 0,67 нг/мл, соответственно, что удовлетворяет нормативным требованиям к обеспечению безопасности водных объектов. Применение системы для контроля проб речной воды показало высокую степень выявления целевых соединений – от 86,8% до 107,0%. Преимущества разработки по сравнению с используемыми в настоящее время средствами экологического мониторинга – простой экспрессный контроль, реализуемый непосредственно на месте отбора проб.

Komova N.S., Serebrennikova K.V., Berlina AN., Zherdev A.V., Dzantiev B.B. Dual lateral flow test for simple and rapid simultaneous immunodetection of bisphenol A and dimethyl phthalate, two priority plastic related environmental contaminants. Environmental Pollution, 2024, v. 363 (part 1), article 125171.

Разработана высокочувствительная иммунохроматографическая тест-система для обнаружения и оценки содержания гатифлоксацина – антибиотика, относящегося к классу фторхинолонов. При нерегламентированном использовании гатифлоксацина в ветеринарии он загрязняет мясо и другие пищевые продукты животного происхождения, вызывая токсические эффекты и способствуя распространению антибиотикорезистентных штаммов патогенов. Особенностью разработки явилось применение в качестве метки биметаллических наночастиц Au@Ag, являющихся эффективными пероксидазо-подобными катализаторами (нанозимами). Показано, что в присутствии пероксида водорода с поверхности наночастиц высвобождаются ионы серебра, вносящие существенный вклад в окислительную трансформацию хромогенного субстрата – 3,3',5,5'-тетраметилбензидина. Благодаря включению в методику иммунохроматографического тестирования этой усилительной стадии достигнут предел обнаружения гатифлоксацина, равный 0,8 пг/мл. Тест-система применена для характеристики проб мяса; степень выявления гатифлоксацина составила от 78,1 до 114,8%.

Полученные результаты подтверждают эффективность разработки для быстрого (продолжительность тестирования – 21 мин) и высокочувствительного мониторинга загрязнения пищевых продуктов.

Hendrickson O.D., Byzova N.A., Panferov V.G., Zvereva E.A., Xing S., Zherdev A.V., Liu J., Lei H., Dzantiev B.B. Ultrasensitive lateral flow immunoassay of fluoroquinolone antibiotic gatifloxacin using Au@Ag nanoparticles as signal-enhancing label. Biosensors, 2024, v. 14, N 12, article 598.

На примере микотоксина афлатоксина В1 (**АФВ1**) и специфически взаимодействующего с ним аптамера – олигонуклеотидного рецептора – изучены способы обеспечения высокочувствительного определения с использованием поляризационного флуоресцентного анализа. В рассмотренных аналитических системах реализуется конкурентное связывание с аптамером АФВ1, потенциально содержащегося в тестируемой пробе, и конъюгата АФВ1 с флуорофором – производным флуоресцеина. Предложены и охарактеризованы компоненты реакционной среды, которые повышают аффинность связывания АФВ1 с аптамером и снижают вращательную мобильность комплексов (аптамер – меченный флуорофором АФВ1), обеспечивая рост аналитического сигнала и снижение предела обнаружения. В качестве таких модуляторов сопоставлены восемь коротких олигонуклеотидов, комплементарных к различным участкам в структуре аптамера, а также полимеры, обратимо взаимодействующие с олигонуклеотидами, – поли-L-лизин и полиэтиленгликоль. Использование выбранного оптимального состава реакционной среды обеспечило снижение предела обнаружения АФВ1 в 12 раз – до 1 нг/мл. Продолжительность тестирования – 30 мин. Разработанная методика успешно апробирована для выявления АФВ1 в пробах миндаля.

Samokhvalov A.V., Mironova A.A., Eremin S.A., Zherdev A.V., Dzantiev B.B. Polycations as aptamer-binding modulators for sensitive fluorescence anisotropy assay of aflatoxin B1. Sensors, 2024, v. 24, N 10, article 3230.

Для высокочувствительного выявления инсектицида фипронила на основе сочетания иммунохроматографии и регистрации поверхностно-усиленного комбинационного рассеяния предложено использование биметаллических золото-серебряных наностержней со структурой ядро–оболочка–оболочка и включением между слоями оболочек репортерных молекул 5,5'-дитио-бис-(2-нитробензойной кислоты). Особенностью аналитической системы является иммобилизация на поверхности наностержней антивидовых антител, благодаря чему получаемый комплекс

пригоден для использования в сочетании со специфическими антителами против различных соединений. Разработанная система характеризуется чрезвычайно низким пределом обнаружения фипронила – 4,6 пг/мл. При тестировании растительных проб (огуречный и яблочный сок) степень выявления фипронила составила от 97,0% до 117,0%.

Serebrennikova K.V., Komova N.S., Barshevskaya L.V., Zherdev A.V., Dzantiev B.B. Highly sensitive SERS-based lateral flow immunoassay of fipronil using bimetallic Au@Ag@Ag nanorods. Microchimica Acta, 2024, v. 191, article 749.

Дзантиев Б.Б., д.х.н., профессор, dzantiev@inbi.ras.ru (ФИЦ Биотехнологии РАН, лаборатория иммунобиохимии).

9. Для количественной оценки метаболических превращений лекарственных препаратов, являющихся субстратами цитохромов Р450, разработана двухэлектродная система, позволяющая регистрировать как изменение концентрации субстрата за счет каталитических превращений, так и образование продукта электроферментативной реакции. Разработанная система может использоваться при решении задач фармакологии, связанных с определением каталитической активности функционально значимых изоформ цитохромов Р450. Дальнейшее развитие двухэлектродных систем для определения активности индивидуальных изоформ цитохрома Р450 является перспективным направлением биоэлектрохимии.

Kuzikov A.V., Masamrekh R.A., Filippova T.A., Tumilovich A.M., Strushkevich N.V., Gilep A.A., Khudoklinova Yu.Yu., Shumyantseva V.V. Bielectrode strategy for determination of CYP2E1 catalytic activity: electrodes with bactosomes and voltammetric determination of 6-hydroxychlorzoxazone. Biomedicines, 2024, v. 12, N 1, article 152.

Разработан электрохимический метод анализа фрагментации и деградации ДНК как маркера программируемой клеточной гибели (апоптоза). С увеличением числа фрагментов при повреждении ДНК зарегистрировано увеличение количества пиков электроокисления гетероциклических оснований ДНК и рост максимальных амплитуд токов электроокисления ДНК. Электроанализ позволяет вести мониторинг фрагментации и деградации ДНК с высокой чувствительностью – до 10 нг/мкл. На основе данной разработки реализован подход для регистрации каталитической активности нуклеаз и специфических рестриктаз.

Шумянцева В.В., Пронина В.В., Булко Т.В., Агафонова Л.Е. Электроанализ в фармакогеномных исследованиях: Механизмы взаимодействия лекарственных препаратов с ДНК. Успехи биологической химии, 2024, Т. 64, С. 431-448.

Agafonova L.E., Zhdanov D.D., Gladilina Y.A., Shisparenok A.N., Shumyantseva V.V. Electrochemical approach for the analysis of DNA degradation in native DNA and apoptotic cells. Heliyon, v. 10, N 3, article e25602.

Шумянцева В.В., д.б.н., профессор,
Viktoria.shumyantseva@ibmc.msk.ru (НИИ биомедицинской химии им. В.Н. Ореховича, лаборатория биоэлектрохимии).

10. Для определения трициклических антидепрессантов (имипрамина, амитриптилина) предложены амперометрические иммуносенсоры с использованием в качестве модификаторов поверхности электродов восстановленного оксида графена или углеродных нанотрубок в комбинации с гексарениевыми или гексамолибденовыми кластерными комплексами. Рассмотрены аналитические возможности кластерных комплексов с апикальными цианидными и гидроксильными лигандами, с апикальными лигандами на основе трифторуксусной кислоты в хитозане или циклическом хитозане, а также комбинаций силикатных наночастиц с гексамолибденовыми кластерными комплексами с теми же лигандами.

Для определения антибиотиков фторхинолонового ряда на примере ципрофлоксацина разработаны амперометрические иммуносенсоры на основе сочетания углеродных нанотрубок с гексамолибденовыми кластерными комплексами с апикальными лигандами на основе пивалиновой кислоты в хитозане и в циклическом хитозане, а также силикатными наночастицами на основе тех же компонентов. Изучение модификаторов поверхности электродов методами атомно-силовой микроскопии, спектроскопии электрохимического импеданса и различными вариантами вольтамперометрии позволило выбрать сочетания компонентов, обеспечивающие наилучшие аналитические характеристики иммуносенсоров. При изготовлении иммуносенсоров послойно наносили композитный материал при соотношении УНТ : кластер = 1:4 по объему. В качестве аналитического сигнала использовали электрохимическую активность кластерных комплексов Re и Mo при потенциалах 599 ± 20 , 624 ± 18 и 81 ± 5 , 127 ± 8 мВ, соответственно, в условиях дифференциально-импульсной вольтамперометрии. Закрепление модификатора на

поверхности электрода увеличивало ток в среднем на 33%. В присутствии определяемых веществ наблюдается уменьшение аналитического сигнала окисления кластерных комплексов Re и Mo.

Оценены возможности амперометрических иммуносенсоров для определения антибиотиков имипрамина, амитриптилина и ципрофлоксацина в фармацевтических препаратах и моче, поверхностных водах. Рабочий диапазон определяемых концентраций – 1 нМ – 0,1 мМ, предел обнаружения - (0,5-0,6) нМ. Погрешность определения не превышает 0.052-0.086. Сопоставление с данными ПФИА по t- и F-критериям показало, что результаты равнозначны и вклад систематической погрешности незначим.

Медянцева Э.П., д.х.н., профессор, emedyant@gmail.com, Брусницын Д.В., к.х.н., brussman@mail.ru (Казанский (Приволжский) федеральный университет, кафедра аналитической химии).

11. Разработаны амперометрические тирозиназные иммуносенсоры на основе печатных графитовых электродов, модифицированных восстановленным оксидом графена (ВОГ) и наноккомпозитом на основе ВОГ и наночастиц никеля (НЧ Ni) для определения колхицина. Установлено, что колхицин является активатором тирозиназы в диапазоне концентраций от 0,1 нМ до 1 мкМ с s_n 0,05 нМ, $R^2 = 0.9647$. Модификация поверхности электродов наноккомпозитами позволила улучшить аналитические характеристики биосенсоров: при рабочем диапазоне концентраций 0,05 нМ – 1 мкМ в случае модификации ВОГ s_n составила 1 фМ, $R^2 = 0.9701$. Для наноккомпозита ВОГ/НЧ Ni рабочий диапазон концентраций 0,01 нМ – 1 мкМ, s_n 3 фМ, $R^2 = 0.9995$. Разработанный иммуносенсор, модифицированный наноккомпозитом ВОГ/НЧ Ni, апробирован при количественном определении колхицина в образцах модельной и детской мочи.

Медянцева Э.П., д.х.н., профессор, emedyant@gmail.com, Бейлинсон Р.М., к.х.н., rvarlamo@mail.ru (Казанский (Приволжский) федеральный университет, кафедра аналитической химии).

12. ¹Импринтированные белки (ИБ) являются многообещающей альтернативой естественным системам распознавания. Один из важнейших этапов при получении ИБ – удаление молекул шаблона из его комплекса с белком. Бычий сывороточный альбумин (БСА) импринтировали в

присутствии 4-гидроксикумарина (4-ГК); очищали ИБ с помощью диализа, а для мониторинга очистки ИБ использовали флуоресцентную 3D-спектроскопию. Матрицы возбуждения–испускания исследовали с помощью нескольких хемометрических алгоритмов: метода главных компонент (PCA), параллельного факторного анализа (PARAFAC) и анализа независимых компонент (ICA). Показано, что PARAFAC и ICA более эффективны, чем PCA. PCA не разделяет сигналы флуоресценции отдельных компонентов раствора, а билинейный алгоритм ICA и трилинейный алгоритм PARAFAC позволяют разделить сигналы белка и шаблона, смешанные в сигналах флуоресценции ИБ, что позволяет оценить степень очистки ИБ.

Burmistrova N.A., Ilicheva P.M., Presnyakov K.Yu., Pidenko P.S., Rutledge D.N. 3D fluorescence spectroscopy combined with chemometrics as a tool for control of imprinted protein purification from template. Journal of Chemometrics, 2024, v. 38, N 12, article e3622.

²Методы молекулярного докинга и молекулярной динамики впервые применены для изучения ИБ на основе альбумина, специфичных к токсинам пищевого происхождения. Изучено изменение структуры белка и взаимодействия между белком и молекулами пищевых токсинов. На основе результатов теоретического расчета высказаны идеи о рациональном проектировании ИБ. Подход перспективен для исследования механизмов формирования ИБ, выявления их свойств и внедрения новых концепций создания ИБ, основанных на управлении условиями синтеза.

Ilicheva P.M., Fedotova E.S., Presnyakov K.Yu., Grinev V.S., Pidenko P.S., Burmistrova N.A. Theoretical design of imprinted albumin against foodborne toxins. Molecular Systems Design and Engineering, 2024, v. 9, N 5, p. 456-463.

³Проведены работы по получению сорбента, специфичного к зеараленону (ЗЕН), на основе наночастиц оксида кремния, модифицированных импринтированным БСА. Методами молекулярного моделирования обоснована возможность получения ИБ в присутствии фиктивного шаблона – 4-гидроксикумарина. Изучено влияние протонирования и условий очистки на сорбционную емкость ИБ. Предложен модифицированный подход к очистке ИБ, сокращающий объем элюента в 300 раз и время очистки в 48 раз. ИБ–БСА успешно применен для извлечения ЗЕН из модельных растворов (сорбционная емкость $1,70 \pm 0,15$ мг/г, импринтинг фактор 2,5) и искусственно

загрязненного экстракта пшеницы (сорбционная емкость $2,24 \pm 0,02$ мг/г), что подтверждено методом ВЭЖХ–УФ. Предложенный подход может быть использован для мониторинга микотоксинов в кормах для животных и пищевых продуктах.

Presnyakov K.Yu., Ilicheva P.M., Tsyupka D.V., Khudina E.A., Pozharov M.V., Pidenko P.S. Burmistrova N.A. Dummy-template imprinted bovine serum albumin for extraction of zearalenone. Microchimica Acta, 2024, v. 191, article 767.

^{1,2,3}Бурмистрова Н.А. д.х.н., профессор, naburmistrova@mail.ru;
³Пиденко П.С., к.х.н., pidenkops@gmail.com (Саратовский национальный исследовательский государственный университет им. Н.Г. Чернышевского, Институт химии, кафедра общей и неорганической химии).

13. Рассмотрено улучшение аналитических характеристик ферментных и микробных электрохимических биосенсоров и биотопливных элементов с использованием наноматериалов. Показано, что применение в рецепторном элементе сенсоров матричных графитовых электродов, модифицированных графеновыми чернилами, совместно с иммобилизованной в гель хитозана глюкозооксидазой значительно повышает амплитуду сигналов. Использование проводящего композита на основе терморасширенного графита и бактериальной целлюлозы для иммобилизации мембранных фракций клеток бактерий *Gluconobacter oxydans* позволяет двукратно снизить минимально определяемую концентрацию глюкозы и более чем вдвое улучшить воспроизводимость сигналов. С помощью биосенсоров показана высокая чувствительность иммобилизованных клеток бактерий *Rhodococcus* и *Pseudomonas* к метиловому спирту и фенолу. Биосенсоры позволяют оперативно и с минимальными материальными затратами проводить характеристику метаболических особенностей дрожжей-метилотрофов.

Решетилов А.Н., д.х.н., профессор, anatol@ibpm.pushchino.ru (Пущинский научный центр биологических исследований РАН, Институт биохимии и физиологии микроорганизмов им. Г.К. Скрыбина, лаборатория биосенсоров).

14. Продолжены исследования по применению полимеров с молекулярными отпечатками (ПМО) в распознающем слое пьезоэлектрических сенсоров для определения тетрациклина и сальбутамола. Слой ПМО формировали полимеризацией в эмульсии

Пикеринга, которую получали с применением стабилизирующих частиц диоксида кремния, синтезированных методом Штобера, и частиц магнетита, полученных методом соосаждения, а также частиц ядро–оболочка $\text{Fe}_3\text{O}_4@\text{SiO}_2$ (20–71 нм). Показано влияние размера частиц на стабильность эмульсий Пикеринга. Обоснован выбор соотношения шаблон : функциональный мономер (метакриловая кислота) : кросс-мономер (этиленгликольдиметакрилат) : инициатор полимеризации (азобисизобутиро-нитрил), обеспечивающего максимальное количество молекулярных отпечатков. Исследовано влияние различных модификаторов частиц на формирование молекулярных отпечатков. Показано, что ПМО, синтезированный с модифицированными додецилсульфатом натрия частицами SiO_2 (52 ± 4 нм), характеризуется наибольшей поверхностной плотностью молекулярных отпечатков на матрице – $0,0253$ мкмоль/см² для ПМО салбутамола и $0,0157$ мкмоль/см² для ПМО тетрациклина. Сенсоры апробированы для определения тетрациклина и салбутамола в жидких пробах.

Показана возможность применения УКТ в качестве меток в ПФИА. Для получения УКТ с различными функциональными группами на поверхности применяли амидирование, тиолирование и силанизацию. Исследовано влияние на свойства продуктов соотношений прекурсоров, концентраций реагентов, продолжительности и температуры синтеза. Установлено, что все УКТ флуоресцируют в синей области спектра ($\lambda_{\text{em}} = 450\text{--}460$ нм). Структурно-размерные характеристики УКТ установлены методом сканирующей зондовой микроскопии. УКТ, синтезированные амидированием, использовали для определения аминокликозидных антибиотиков методом ПФИА.

Ермолаева Т.Н., д.х.н., профессор, etn@stu.lipetsk.ru (Липецкий государственный технический университет, кафедра химии).

15. Опубликована коллективная монография «Полвека с химической энзимологией» приурочена к 50-летию кафедры химической энзимологии Химического факультета Московского государственного университета имени М.В. Ломоносова. Значительное место в монографии занимают главы, представляющие результаты создания специфических и высоко-чувствительных ферментативных методов анализа, иммуноферментного, биолюминесцентного, хемилюминесцентного и флуоресцентного методов. В монографии обсуждены как истоки формирования основных

направлений исследований, проводимых сотрудниками кафедры в области биоаналитической химии и биосенсорных систем, так и современный уровень развития работ и перспективы внедрения полученных результатов в медицинскую диагностику, контроль качества пищевых продуктов, в сельское хозяйство, различные биотехнологические процессы, решение экологических проблем.

Полвека с химической энзимологией. Монография (под ред. проф. Угаровой Н.Н., проф. Ефременко Е.Н.). М.: Научная библиотека, 2024. 364 с. ISBN 978-5-907823-50-1. DOI 10.36871/978-5-907823-50-1.

Егоров А.М., академик РАН, alex.m.egorov@gmail.com; Угарова Н.Н., д.х.н., профессор, nugarova@gmail.com; Еремин С.А., д.х.н., профессор, saeremin@gmail.com; Сахаров И.Ю., д.х.н., профессор, sakharovivan@gmail.com; Самсонова Ж.В., к.х.н., jvsamsonova@gmail.com (МГУ имени М.В. Ломоносова, химический факультет; кафедра химической энзимологии).

Элементный анализ органических соединений

1. Селенсодержащие органические соединения обладают рядом полезных свойств, благодаря которым находят применение в различных областях, например, в медицине и материаловедении. Разработана методика определения селена в синтетических полигетероатомных органических соединениях методом микроволновоплазменной атомно-эмиссионной спектromетрии. Установлены оптимальные условия пробоподготовки и атомно-эмиссионного определения селена. Для минерализации исследуемых веществ использовали сжигание в колбе, наполненной кислородом, с добавкой нитрата калия, который улучшает процесс горения и препятствует образованию сажи. В качестве поглотительного раствора использовали 0,1 М соляную кислоту. Установлено, что перед началом измерений на атомно-эмиссионном спектрометре необходимо, чтобы была полностью завершена продувка монохроматора, а также проведена оптимизация давления в распылителе. Кроме того, для оптимального измерения селена было увеличено количество репликатов и время забора пробы. С использованием разработанной методики выполнено определение селена в 11 синтетических органических соединениях с содержанием селена от 12 до 51 %, при этом абсолютная погрешность анализа не превышала 0,3%, что соответствует требованиям органического элементного анализа.

Тихова В.Д., к.х.н., tikhova@nioch.nsc.ru; Петракова С.Ю. (Новосибирский институт органической химии им. Н.Н. Ворожцова СО РАН, Центр спектральных исследований)

2. Некоторые виды лекарственного растительного сырья (ЛРС) могут быть природными концентраторами элементов и могут быть использованы как природные источники необходимых минеральных веществ. Изучен элементный состав травы клевера лугового и клевера среднего, собранных в двух округах Московской области. Определение микроэлементов проведено с помощью атомно-эмиссионного спектрометра с индуктивно связанной плазмой (АЭС-ИСП) Avio 200 фирмы Perkin Elmer, нормируемых тяжелых металлов с помощью атомно-абсорбционного спектрометра с электротермической атомизацией (ЭТААС) МГА-1000 фирмы Люмекс. Результаты. В изученных образцах было определено 10 микроэлементов: из них содержание Al, B, Ba, Fe, Mn, Sr, Zn находится в среднем на уровне 10^{-3} %, Ca, Mg, K, P, S на уровне 0,2-1,0%.

Никулин А.В., Радус Ф.В., Ефимова Ю.А., Ковалева Т.Ю., Потанина О.Г. Сравнительное исследование элементного состава клевера лугового (TRIFOLIUM PRATENSE L.) и клевера среднего (TRIFOLIUM MEDIUM L.). ФАРМАЦИЯ 73 18-23 (2024) DOI: 10.29296/25419218-2024-04-03.

Ефимова Ю.А., efimova@mirea.ru (МИРЭА-Российский технологический университет, Институт тонких химических технологий имени М.В. Ломоносова, кафедра аналитической химии имени И.П. Алимарины).

Другие методы определения

1. ^1H Гранулы синтезированного композитного материала "сшитый поливиниловый спирт – магнетит", импрегнированные раствором тетрабората натрия, применили в качестве чувствительного элемента для определения концентрации углеводов в растворах методом оптической микрометрии. Методом ИК-спектроскопии подтверждена химическая структура исследуемого полимера. Оценено содержание частиц Fe_3O_4 в гранулах поливинилового спирта (ПВС). При pH 8.6 наличие частиц магнетита в гранулах снижает предел обнаружения глюкозы и фруктозы до 7.9 ммоль/л. Сенсорные гранулы апробированы при определении методом оптической микрометрии суммарного содержания восстанавливающих углеводов в образцах натуральных сиропов (диабетическое питание) с

высоким содержанием фруктозы. Полученные результаты хорошо согласуются с данными, указанными производителями сиропов.

Щемелев И.С., Зиновьев Н.А., Иванов А.В., Ферапонтов Н.Б., Михеев И.В., Гагарин А.Н. Сенсорный гранулированный материал на основе импрегнированного композита "сшитый поливиниловый спирт – магнетит" для определения углеводов методом оптической микрометрии // Заводская лаборатория. Диагностика материалов. 2024. Т. 90. № 6. С. 5-14. DOI: <https://doi.org/10.26896/1028-6861-2024-90-6-5-14>.

Shchemelev I.S., Ivanov A.V., Ferapontov N.B. Composite "Crosslinked Polyvinyl Alcohol-Magnetite" as a Stimuli-Responsive Matrix for Optical Methods // Molecules. 2024. V. 29. № 12 P. 2794-2807. DOI: <https://doi.org/10.3390/molecules29122794>.

²Показано применение композитных пленок состава "сшитый поливиниловый спирт – магнетит" в качестве чувствительных элементов для определения состава водных растворов методом цифровой цветометрии. Продемонстрирован новый подход к получению композитных материалов "гидрофильный полимер – магнетит" путем осаждения частиц Fe₃O₄ в насыщенных парах аммиака. Полученные таким образом сенсорные пленки применили для анализа растворов электролитов и водно-спиртовых систем. Пленки подходят для определения объемной доли спирта в продукции с высоким его содержанием. Предел определения этанола составляет 63 об. %, изопропанола – 24 об. %. Разработанные композитные сенсорные материалы использовали в анализе жидких спиртосодержащих антисептиков для рук.

Shchemelev I.S., Zinov'ev T.V., Ivanov A.V., Ferapontov N.B. Digital Colorimetric Analysis of Aqueous and Aqueous–Organic Systems Using Polyvinyl Alcohol–Magnetite Hydrophilic Composite Films // J. Analyt. Chem. 2024. V. 79. № 9. P. 1204-1213. DOI: 10.1134/S1061934824700576.

^{1,2}Иванов А.В., д.х.н., sandro-i@yandex.ru; ^{1,2}Щемелев И.С., ¹Ферапонтов Н.Б., ¹Михеев И.В. (Институт общей и неорганической химии им. Н.С. Курнакова РАН, лаборатория аналитической химии и методов разделения; МГУ им. М.В. Ломоносова, химический факультет, кафедра аналитической химии).

Методы разделения и концентрирования

Общие тенденции развития методов разделения и концентрирования находят отражение в ежегодном отчете НСАХ.

Неуклонно растет доля публикаций по микроэкстракционным методам, которые постепенно становятся основными. По-видимому, их уже не стоит помещать в раздел «Другие методы разделения и концентрирования». Обращает на себя внимание возрастающее число сообщений, посвященных выделению микропластика, который превращается в глобального загрязнителя окружающей среды.

О.В. Родинков

Общие вопросы пробоподготовки

1. Обобщены обзорные статьи по жидкостной экстракции органических соединений из твердых образцов. Обсуждены различные способы ее осуществления: экстракция в аппарате Сокслета, ультразвуковая экстракция, экстракция в микроволновом поле, экстракция в суб- и сверхкритических условиях (жидкостная экстракция под давлением, экстракция субкритической водой, сверхкритическая флюидная экстракция), метод матричной твердофазной дисперсии и метод QuEChERS. На основании анализа обзорных работ систематизирована информация об особенностях пробоподготовки с помощью этих методов, рассмотрены экспериментальные параметры, влияющие на эффективность экстракции, приведены примеры использования этих методов для выделения органических соединений при анализе твердых объектов окружающей среды, пищевых продуктов и растений.

Дмитриенко С.Г., д.х.н., s.g.dmitrienko@yandex.ru (МГУ им. М.В. Ломоносова, химический факультет, кафедра аналитической химии, лаборатория концентрирования).

2. Разработан новый метод подготовки проб пресной воды для анализа микропластика. Используются надуксусная кислота и ее сочетание с реактивом Фентона. Использована также нетоксичная тяжелая жидкость на основе гетерополиоксо-вольфрамата натрия с плотностью 1,70 г/см³, которая позволяет извлекать полимеры с высокой плотностью. Новый подход сопоставлен с наиболее распространенным методом пробоподготовки (окисление (30% H₂O₂ + 0,05 М раствор Fe(II)), он показал более высокую эффективность извлечения частиц микропластика как в контрольных, так и в пресноводных образцах, отобранных из рек Обь и Бердь. Время, затрачиваемое на эту процедуру, составляет не более 3 ч.,

что в 6-12 раз меньше, чем для наиболее распространенных методов. Кроме того, такой подход позволяет получать образцы, пригодные для последующего анализа любым методом.

Сотникова Ю.С., sotnikova@nioch.nsc.ru; Карпова Е.В., karpovae@nioch.nsc.ru (Новосибирский институт органической химии им. Н.Н. Ворожцова СО РАН, Центр спектральных исследований).

3. Изучать накопление микропластика (МП) в организме и механизмы его влияния на здоровье человека можно с использованием лабораторных животных. Оценено накопление частиц МП в органах крыс. Разработан метод синтеза микрочастиц полиэтилентерефталата (ПЭТ) размером 2-5 мкм. С 1,5-месячного возраста животные получали МП в двух дозах. Крысам перорально с пищей вводили 10 и 100 мг/кг частиц ПЭТ. В качестве контроля использовали крыс, не получавших МП. Через два месяца животные были выведены из эксперимента для изучения содержания микропластика в их органах. На примере сердца проведено сравнение нескольких методов подготовки образцов. Разработан метод разложения органов с использованием надуксусной кислоты, перекиси водорода и сульфата железа (II), который оказался наиболее эффективным по сравнению с широко используемыми другими подходами. Определены также условия хроматографического анализа микрочастиц методом пиро-ГХ-МС. Установлено, что оценочное содержание ПЭТ в образце сердца крысы, употреблявшей 100 мг/кг частиц МП, составило 2 мкг/г, в то время как в образце сердца крысы, употреблявшей 10 мг/кг частиц МП, составило 0.2 мкг/г.

Сотникова Ю.С., sotnikova@nioch.nsc.ru; Осечкова А.Е., osechkova@nioch.nsc.ru; Нефедов А.А., nefyodov@nioch.nsc.ru (Новосибирский институт органической химии им. Н.Н. Ворожцова СО РАН, Центр спектральных исследований).

4. Разработан способ извлечения микропластика из донных осадков, являющихся одним из основных накопителей микропластика в окружающей среде. Донные осадки представляют собой в общем случае неорганическую матрицу, ее отделение является ключевой стадией пробоподготовки. Подобраны условия и оборудование для такого отделения методом разделения по плотности с использованием тяжелой жидкости на основе гетерополиоксвольфрамата натрия (1.70 г/см^3) и образцов донных осадков, представляющих собой песок и пластиковые

частицы размером 0.5 – 5.0 мм шести наиболее распространенных синтетических полимеров (ПЭ, ПП, ПВХ, ПЭТ, ПС, АБС). Было протестировано четыре способа разделения по плотности. Способ, основанный на двухстадийном разделении с использованием химического стакана со сливной трубкой на первой стадии и воронки с зажимом – на второй, оказался наиболее простым и эффективным (извлечение микропластика составило 100%). Способ был успешно применен для подготовки образцов донных осадков, отобранных на оз. Байкал. Установлено, что в образцах донных осадков сохраняется незначительное количество частиц неорганической природы (уголь и горные породы), имеющие плотность, сопоставимую с плотностью полимеров. Однако данное количество этих частиц не будет являться мешающим фактором для анализа микропластика методом пиролитической газовой хромато-масс-спектрометрии.

Сотникова Ю.С., sotnikova@nioch.nsc.ru; Кривошеина М.И. (Новосибирский институт органической химии им. Н.Н. Ворожцова СО РАН, Центр спектральных исследований)

5. Методологический пробел в изучении наночастиц окружающей среды в значительной степени обусловлен их малой долей (обычно не более 0.01%) в пепле, пыли или почве и, как следствие, сложностью выделения и анализа наночастиц. Разработана новая методика пробоподготовки образцов вулканического пепла (последовательное диспергирование в 0.1 М NaCl и 2 мМ Na₄P₂O₇) и последующего выделения наночастиц при помощи проточного фракционирования в поперечном силовом поле во вращающейся спиральной колонке с использованием 2 мМ Na₄P₂O₇ в качестве элюента. Методика позволяет на порядок увеличить массу выделяемых наночастиц и обеспечивает возможность определения элементов (таких, как Be, Cr, Co, Zn, Ag, Sb, Te, Ta, W, Tl, Bi), находившихся для наночастиц пеплов ряда вулканов ниже пределов обнаружения метода МС-ИСП при использовании при их выделении деионизированной воды в качестве элюента, а также не приводит к искажению результатов вследствие артефактов (в частности, образования в ходе пробоподготовки труднорастворимых фосфатов кальция). Данная методика может стать основой систематических исследований наночастиц пеплов широкого ряда вулканов различного типа.

Сорбционные методы

1. ¹Проанализированы и обобщены обзорные статьи по дисперсионной твердофазной экстракции (ДТФЭ) и магнитной твердофазной экстракции (МТФЭ), которые относятся к современным методам твердофазного сорбционного концентрирования. По сравнению с классической твердофазной экстракцией эти методы имеют ряд преимуществ, таких как снижение расхода сорбентов и растворителей, времени экстракции и стоимости анализа. Систематизирована информация о разных вариантах этих методов, различающихся осуществлением процесса концентрирования, природой используемых сорбентов, сочетанием с методами последующего определения сконцентрированных веществ; приведены примеры использования ДТФЭ и МТФЭ для выделения органических соединений при анализе объектов окружающей среды, пищевых продуктов и биологических жидкостей.

²Магнитный сверхсшитый полистирол использован в качестве сорбента в методе магнитной твердофазной экстракции с диспергированием сорбента углекислым газом. Для извлечения нитроимидазолов и их метаболитов из образцов меда перед их определением методом ВЭЖХ-МС/МС использовали шипучую таблетку, состоящую из магнитного сверхсшитого полистирола, гидрокарбоната натрия и лимонной кислоты. В предлагаемом способе диспергирование сорбента происходит без помощи дополнительных источников энергии (таких как ультразвук и перемешивающие устройства), а за счет интенсивного выделения углекислого газа при растворении таблетки. Магнитные свойства сорбента позволяют отделять его без использования центрифугирования или фильтрации. В результате процедура экстракции занимает менее 3 мин. Изучено влияние мольного соотношения гидрокарбоната натрия и лимонной кислоты, массы магнитного сорбента, массы таблетки и условий десорбции на извлечение аналитов. Также предложенный подход показал свою перспективность для выделения и концентрирования амфениколов (хлорамфеникола, флорфеникола и тиамфеникола) из меда и молока перед их определением методом ВЭЖХ-

МС/МС. Использовали шипучие таблетки, состоящие из гидрокарбоната натрия, лимонной кислоты и магнитного сверхсшитого полистирола в случае меда, гидрокарбоната натрия и магнитного сверхсшитого полистирола в случае молока. Пределы определения для разработанных методик составили 0.3–1 и 0.02–0.05 мкг/кг для меда и молока соответственно.

^{1,2}Дмитриенко С.Г., д.х.н.. s.g.dmitrienko@yandex.ru; ²Толмачева В.В., nikatolm@mail.ru; (МГУ им. М.В. Ломоносова, химический факультет, кафедра аналитической химии; лаборатория концентрирования).

2. Синтезированы сорбенты на основе кремнезема, химически модифицированного 2-аминофенилдисульфидными и тетрасульфидными группами ароматической структуры, обладающие высокой селективностью по отношению к палладию(II). Из растворов в диапазоне 2 М HCl – pH4 из всех платиновых металлов эти сорбенты количественно извлекают только палладий (II). Сорбционному концентрированию палладия (II) не мешают 10^6 -кратные количества щелочных, щелочноземельных и 10^4 -кратные количества цветных металлов и железа, 10^2 - 10^3 -кратные количества других платиновых металлов и серебра (I). В области количественной сорбции палладия (II) вместе с ним сорбируется только золото (III). В процессе сорбции палладия (II) поверхность сорбентов окрашивается в желто-оранжевый цвет. Интенсивность окраски возрастает пропорционально увеличению содержания палладия (II) на поверхности сорбентов, что использовано при разработке экспрессных и высокоселективных тест-методик его определения. Разработанные методики сорбционно-атомно-эмиссионного и тест-определения палладия использованы при анализе сульфидных медно-никелевых руд и продуктов их технологического передела. Правильность получаемых результатов подтверждена анализом стандартных образцов состава сульфидной руды и продуктов ее технологического передела.

Лосев В.Н., д.х.н., losevvn@gmail.com (ННИИЦ «Кристалл» Сибирского федерального университета).

3. Для концентрирования редкоземельных элементов (РЗЭ) предложены сорбенты на основе ячменной, рисовой шелухи, ячменных ростков (BS–1, BS–2, BS–3) и древесных сосновых опилок (BS–4), химически модифицированных фосфорнокислыми группами с их

различной концентрацией. Количественное (~99 %) извлечение РЗЭ достигается в диапазоне 0,5 М HCl – pH 5,5 для биосорбентов BS–3 и BS–4. Сорбент BS–2 количественно извлекает РЗЭ в диапазоне 0,5 М HCl – pH 3, а максимум извлечения РЗЭ сорбентом BS–1 находится при pH 4,0 – 5,0, но степень извлечения не превышает 80%. Время установления сорбционного равновесия при извлечении РЗЭ сорбентами BS–2, BS–3, BS–4 не превышает 10 мин, а сорбентом BS–1 – 15 мин. Сорбционная емкость сорбентов по РЗЭ пропорциональна количеству привитых групп и составляет 0,640 ммоль/г (94,2 мг/г) для сорбентов BS-3 и BS-4; 0,360 ммоль/г (56,5 мг/г) для BS-2 и 0,003 ммоль/г (0,471 мг/г) для BS-1. Разработаны методики сорбционно-атомно-спектрометрического определения РЗЭ, включающие их концентрирование в динамическом режиме, десорбцию 4 М HCl и определение в десорбирующих растворах методами атомно-эмиссионной и масс-спектрометрии с индуктивно связанной плазмой. Методики использованы при определении РЗЭ в лигнитах и золах от их сжигания.

Буйко О.В., bujko86@gmail.com (ННИИЦ «Кристалл» Сибирского федерального университета).

4. Изучена сорбция эритрозина, индигокармина и других красителей пленками полимеров с молекулярными отпечатками (ПМО) в статических условиях. Рассчитаны степени извлечения и импринтинг-фактор для полимеров с молекулярными отпечатками красителей, полученные высокие их величины указывают на избирательность ПМО к целевой молекуле темплата. Методами сканирующей силовой микроскопии и ИК-спектроскопии изучены структура и морфология поверхности пленок с молекулярными отпечатками эритрозина и индигокармина. Установлено, что в ПМО увеличивается шероховатость поверхности, при этом высота рельефа составляет 3-4 нм, удаление молекул темплата приводит к перераспределению в полимерах с молекулярными отпечатками пор по размеру.

Хальзова, С. А. Особенности полиимидных пленок с молекулярными отпечатками эритрозина и индигокармина / С. А. Хальзова, А. Н. Зяблов, А. Ю. Выборный // Коллоидный журнал. – 2024. – Т. 86, № 2. – С. 286-293. DOI: <https://doi.org/10.31857/S0023291224020138>.

Хальзова С.А. к.х.н. (МУП «Очистные сооружения» Борисоглебского городского округа Воронежской области); Зяблов А.Н.,

д.х.н., alex-n-z@yandex.ru (Воронежский государственный университет, кафедра аналитической химии).

5. Исследована кинетика сорбции кислорода из воды серебросодержащими нанокompозитами, синтезированными на основе макропористых ионообменников с разным размером пор (фиксированным 41 нм у ионообменника Lewatit K 2620 и варьирующимся в диапазоне от 10 до 100 нм для КУ-23). Установлено, что из-за монопористости ионообменника средний размер частиц серебра в нанокompозите Ag^0 -Lewatit K 2620 меньше, чем в КУ-23. Этот эффект способствует усилению поглощения кислорода и подтверждается результатами изучения скорости и степени поглощения кислорода нанокompозитами во всём исследованном диапазоне их ёмкости по металлу. Выявлено, что наличие различных типов пор у сорбента КУ-23 и лучшая диффузионная проницаемость обеспечивают более равномерное распределение серебра по объёму нанокompозитных зёрен и устойчивое состояние процесса сорбции. На основании результатов эксперимента синтезированные серебросодержащие нанокompозиты можно рекомендовать в качестве многофункциональных материалов с бактерицидным действием и каталитическим эффектом для различных областей промышленности.

Krysanov V., Gadebskaya M., Krysanova T., Kravchenko T., Kozaderov O. Effect of ion-exchanger monoporosity in the kinetics of oxygen sorption by silver-containing nanocomposites // Journal of Composites Science. 2024. V.8, № 7. P.249. DOI: [10.3390/jcs8070249](https://doi.org/10.3390/jcs8070249).

Крысанова Т.А., к.х.н., takrys@yandex.ru (Воронежский государственный университет, кафедра аналитической химии).

6. Исследована сорбция бора на анионообменных волокнах марки ФИБАН А-5 из одно- и двухкомпонентных (в присутствии минеральных ионов) растворов. Установлено, что используемый сорбент избирателен к извлечению соединений бора и может использоваться как альтернатива борселективным сорбентам с гидроксильными функциональными группами.

Исследованы высокоосновные анионообменные сорбенты в различных геометрических формах (волокна и гранулы) как сорбенты гидроксibenзолов. Установлено, что присутствие в матрице ионообменного материала стирол-дивинилбензола увеличивает количество

поглощенного фенольного соединения. Наличие в структуре бензола двух и более гидроксигрупп повышает сродство таких соединений к анионообменным сорбентам. Установлены равновесные характеристики процесса поглощения фенола, резорцина, пирогаллола и флороглюцина анионитами АВ-17-8 и ФИБАН А-1.

Проведено исследование активированного угля на основе кокосового сырья как сорбента некоторых органических соединений на примере фенола. Установлены емкости углей различной природы ВСК-400 и Norit GAC 1240W по кислотным и основным группам, оценено иодное число. Установлены равновесные характеристики сорбции фенола исследуемыми образцами углей при различных температурах. Проведен формальный анализ изотерм сорбции. Оценено влияние минеральных ионов на сорбцию фенола.

Воронюк И.В.. к.х.н., i.voronyuk@yandex.ru (Воронежский государственный университет, кафедра аналитической химии.

7. Цель исследования – получение бионеорганического сорбента, специфичного к зеараленону (ЗЕН), на основе наночастиц оксида кремния модифицированных импринтированным бычьим сывороточным альбумином (БСА).

Методами молекулярного моделирования обоснована возможность получения импринтированного белка (ИБ) в присутствии фиктивного шаблона (4–гидроксикумарин). Изучено влияние процесса протонирования и условий очистки на сорбционную емкость ИБ, предложен модифицированный подход к очистке ИБ, который позволил сократить объем элюента в 300 раз и время очистки в 48 раз. ИБ–БСА успешно применен для извлечения ЗЕН из модельных растворов (сорбционная емкость = $1,70 \pm 0,15$ мг/г, импринтинг фактор = 2,5) и искусственно загрязненного экстракта пшеницы (сорбционная емкость = $2,24 \pm 0,02$ мг/г), что подтверждено методом ВЭЖХ–УФ. Предложенный подход может быть использован для определения микотоксинов в кормах для животных и пищевых продуктах.

Presnyakov K.Yu., Ilicheva P.M., Tsyupka D.V., Khudina E.A., Pidenko P.S., Burmistrova N.A. Dummy-template imprinted bovine serum albumin for extraction of zearalenone. Microchimica Acta. (2024) 191, 767. <https://doi.org/10.1007/s00604-024-06790-7>.

Пиденко П.С. pidenkops@gmail.com (Саратовский национальный исследовательский государственный университет, Институт химии, кафедра общей и неорганической химии).

8. Установлены закономерности сорбции гистидина и триптофана материалами на основе сульфоэтилированных хитозана (СЭХ), полиэтиленimina (СЭПЭИ) и полиаминостирола (СЭПАС) в натриевой и медной формах. Изучено влияние степени сульфоэтилирования сорбентов, pH раствора, времени контакта фаз на сорбцию аминокислот как из индивидуальных растворов, так и при совместном присутствии. Установлено, что количественное извлечение указанных аминокислот в статическом режиме из аммиачно-ацетатного буферного раствора (pH 9–10) достигается при использовании СЭПАС в медной форме, при этом равновесие устанавливается в течение 30 минут контакта фаз. Предложены условия для сорбционного разделения указанных аминокислот в динамическом режиме с последующим определением методом лигандообменного капиллярного электрофореза.

Лебедева Е.Л., к.х.н., ElenaLebedeva@urfu.ru; Петрова Ю.С., к.х.н., j.s.petrova@urfu.ru; Неудачина Л.К., к.х.н., Ludmila.Neudachina@urfu.ru (Уральский федеральный университет им. первого Президента России Б.Н. Ельцина, кафедра аналитической химии и химии окружающей среды Екатеринбург).

9. Систематически исследовано влияние ряда факторов на сорбционное извлечение платины (IV) из растворов синтезированным по золь-гель технологии тиокарбамоилэтиламинопропилполисилоксаном (ТКЭАППС). Максимальное извлечение ионов благородного металла наблюдается в слабокислой среде, однако сорбция не является количественной. Изменение температуры в пределах 15 °С и изменение скорости перемешивания не оказывают заметного влияния на сорбируемость ионов платины(IV) ТКЭАППС, однако данные параметры влияют на характер процесса. Взаимодействие ионов сорбата с функциональными группами сорбента при pH 2 и pH 6,5 протекает по различным механизмам, в сильноокислых средах отмечается ступенчатость процесса, что может быть связано с особенностями протекания комплексообразования в твердой фазе, а также наложением поверхностной окислительно-восстановительной реакции.

Голуб А.Я., Alexey.golub@urfu.ru; Неудачина Л.К., к.х.н., Ludmila.Neudachina@urfu.ru (Уральский федеральный университет им. первого Президента России Б.Н. Ельцина, кафедра аналитической химии и химии окружающей среды. Екатеринбург).

10. Исследовано влияние условий модифицирования поли-3-(2-аминоэтиламино)пропилсилсесквиоксана тиоцианатом аммония. Установлена возможность варьирования сорбционных свойств материалов за счет образования на поверхности сорбента, в тех или иных условиях, дитиобиуретных и/или тиомочевинных групп. Установлено, что при использовании избытка тиоцианата аммония при модифицировании аминогрупп уменьшается доля дитиобиуретных групп с 90 % до 71-38 % в зависимости от среды реакции и соотношения реагентов. Синтезированные сорбенты проявляют сродство к серебру (I). Количественное и селективное извлечение достигается при pH 1-2. Установлена возможность повторного использования модифицированного полисилсесквиоксана в динамическом варианте сорбции. Впервые проведено изохронное исследование стабильности сорбционных свойств модифицированных полисилсесквиоксанов: сорбционные свойства сохраняются на протяжении 5 лет.

Мельник Е.А., ea-melnik@mail.ru; Петрова Ю.С., к.х.н., j.s.petrova@urfu.ru; Неудачина Л.К., к.х.н., Ludmila.Neudachina@urfu.ru (Уральский федеральный университет им. первого Президента России Б.Н. Ельцина, кафедра аналитической химии и химии окружающей среды. Екатеринбург).

11. Исследована сорбция ионов благородных металлов сорбентами на основе поливинилимидазола с различным строением сшивающего звена. Установлены закономерности влияния различных факторов на селективность сорбции ионов благородных металлов из растворов сложного состава. Исследуемые материалы позволяют отделять серебро (I), золото (III) и палладий (II) от ряда ионов неблагородных металлов при проведении сорбции из солянокислых растворов. Показана возможность сорбционно-спектроскопического определения палладия (II) в отработанных автомобильных катализаторах с использованием сорбента на основе сшитого поливинилимидазола.

Кузнецова К. Я., lorunova.97@mail.ru; Петрова Ю.С., к.х.н., j.s.petrova@urfu.ru; Неудачина Л.К., к.х.н., Ludmila.Neudachina@urfu.ru

(Уральский федеральный университет им. первого Президента России Б.Н. Ельцина, кафедра аналитической химии и химии окружающей среды. Екатеринбург).

12. Изучена морфология диоксида циркония, оксида алюминия и диоксида кремния, а также проведена статическая сорбция репеллентов N, N-диэтил-3-метилбензамида и этил-3-[ацетил(бутил)амино]пропионата на этих оксидах. Показано, что ZrO_2 , Al_2O_3 и SiO_2 фенил обладают высокой сорбционной активностью по отношению к репеллентам N, N-диэтил-3-метилбензамиду (239 мг/г для SiO_2 фенил) и этил-3-[ацетил(бутил)амино]пропионату (251 мг/г для ZrO_2). Примечательно, что, несмотря на наибольший объем пор и высокую удельную поверхность (по сравнению с другими исследованными оксидами), SiO_2-C_2 имеет существенно меньшую сорбционную емкость по отношению к другим оксидам, в частности к SiO_2 -фенил, что можно объяснить наличием в последнем фенильной группы, имеющей химическое сродство к молекулам репеллента. Полученные изотермы SiO_2-300 также подтверждают низкую сорбционную активность по отношению к N,N-диэтил-3-метилбензамиду. Сорбционное равновесие для обоих репеллентов в большинстве случаев описывается моделью мономолекулярной адсорбции Ленгмюра. Полученные результаты свидетельствуют о том, что исследованные диоксиды циркония, алюминия и кремния могут быть использованы в качестве компонентов-носителей репеллентов.

Zverev S.A., Vinogradova YA.V., Selivanova A.A., Solovov R.D., Sakharov K.A., Ischenko A.A., Andreev S.V. *Study of Sorption Properties of Zirconia, Alumina, and Silica in Relation to Repellents. COLLOID & POLYMER SCIENCE* **302**(8):1-10 (2024) DOI:10.1007/s00396-024-05260-z/

Андреев С.В., svandreev.niid@gmail.com (МИРЭА-Российский технологический университет, Институт тонких химических технологий имени М.В. Ломоносова, кафедра аналитической химии имени И.П. Алимарина; ФГБУ «НИИ дезинфектологии им. Ф.Ф. Эрисмана» Роспотребнадзора).

13. ¹Предложено матричное твердофазное диспергирование с применением магнитного сорбента на основе гуматов как эффективный способ концентрирования бисфенола А из образцов мышечной ткани и

печени рыб с дальнейшим определением аналита методом газовой хроматографии-масс-спектрометрии с предварительной дериватизацией уксусным ангидридом. В оптимальных условиях концентрирования (время перемешивания пробы 10 мин, масса сорбента 0,05 г) степень извлечения бисфенола А при однократной сорбции достигает 85%, степень десорбции (элюат - метанол, время 3 мин, объем 1 мл) превышает 99%, максимальное значение коэффициента концентрирования составляет 718. Предел определения бисфенола А в мышечной ткани составил 0,15 мкг/кг (в пересчете на сухой вес), в печени - 0,25 мкг/кг.

Губин А.С., Кушнир А.А., Суханов П.Т. Применение матричного твердофазного диспергирования в сочетании с газовой хроматографией-масс-спектрометрией для определения бисфенола А в пресноводных рыбах // Вестник Московского университета. Серия 2: Химия. 2024. Т. 65. № 5. С. 431-439.

²Предложена автоматизированная онлайн-система для динамического извлечения и концентрирования бисфенола А, октилфенола и нонилфенола из водных растворов. Система включает в себя три перистальтических насоса и колонку с магнитным сорбентом, который удерживается неодимовыми магнитами. Переключение потоков осуществляется при помощи шестиходового крана. В автоматизированном режиме также проводится регенерация сорбента и возвращение его в колонку для концентрирования. Наночастицы Fe₃O₄, функционализированные гуматами (Fe₃O₄@SiO₂-HA), использованы в качестве сорбентов. Распределенный по колонке сорбент удерживали двумя неодимовыми магнитами и пропускали через слой Fe₃O₄@SiO₂-HA раствор, содержащий фенолы. Изучено влияние взаимного расположения магнитов на распределение сорбента по сечению колонки. Установлено, что наиболее полно сечение колонки заполняется при использовании двух магнитов, отведенных на расстояние 0.2-0.3 мм от колонки. Максимальные коэффициенты концентрирования (2071-2100) после десорбции метанолом и упаривания получены при скоростях пропускания 0.5 см³·мин⁻¹.

Губин А.С., Суханов П.Т., Кушнир А.А., Евдокимов А.А., Болдырев Д.В. Управление магнитными сорбентами в системах динамического онлайн концентрирования для эффективного извлечения фенольных ксеноэстрогенов из водных растворов // Журнал прикладной химии. 2024. Т. 97. № 1. С. 52-62.

³Разработаны системы экстракционного и сорбционного концентрирования ароматических кислот, при которых достигается

соответственно 10 и 100-кратное концентрирование аналитов. В качестве десорбента выбран этиловый спирт, обеспечивающий степень десорбции 97-99%. Диапазон определяемых концентраций при сорбционно-флуориметрическом определении составляет 10-160 мкг/см³, предел обнаружения с учетом коэффициента концентрирования - 67,0 мкг/дм³. Относительная погрешность определения не превышает 12 %. Погрешность при определении обусловлена тушением флуоресценции и неполной сорбцией - десорбцией аналита. Диапазон определяемых концентраций сорбционно-фотометрического способа - 1-25 мкг/см³, предел определения - 7,0 мкг/дм³. Относительная погрешность определения не превышает 10 %. Способы сорбционно-фотометрического и сорбционно-флуориметрического определения салициловой кислоты легко выполнимы и могут быть применены для анализа лекарственных средств и в контроле сточных вод фармацевтических предприятий, пищевых продуктов. Погрешность определения не превышает 11, 13 и 8% соответственно при экстракционно-флуориметрическом, экстракционно-хроматографическом и экстракционно-фотометрическом определении. Расхождения между результатами, полученными при применении разных вариантов способов определения, и между дисперсиями (при сравнении экстракционных и сорбционных способов) незначимы.

Саввина А.Г., Кушнир А.А., Суханов П.Т. Определение ароматических кислот в различных матрицах с предварительным концентрированием полимерами на основе N-винилпирролидона // Инженерные технологии. 2024. № 1 (5). С. 64-72.

^{1,2,3}Суханов П.Т., д.х.н., pavel.suhanov@mail.ru; ^{1,2}Губин А.С., goubinne@mail.ru; ^{1,2,3}Кушнир А.А., kushnir_aleksei@mail.ru; ²Евдокимов А.А. aaevdokimov@ncfu.ru; ²Болдырев Д.В. d.bpltd@yandex.ru (Воронежский государственный университет инженерных технологий, кафедра физической и аналитической химии; кафедра промышленной экологии и техносферной безопасности; Северо-Кавказский федеральный университет. Ставрополь).

14. Перспективными материалами, применяемыми для сорбции поллютантов, являются акрилатные гидрогели – высоко гидратированные сетчатые структуры. Они способны эффективно поглощать воду, характеризуются высокой механической прочностью и химической стабильностью. Гидрогели на основе сополимеров акриламида с акрилатом калия/натрия (коммерческие образцы «Агрикола», Китай, «Счастливый

дачник», РФ) и графт-сополимеры хитозана, акриловой кислоты и акриламида применены для сорбции нитрит-ионов из водных растворов. Концентрацию нитрит-ионов устанавливали фотометрически по реакции с реактивом Грисса. Установлены условия сорбции нитрит-ионов: pH 4 (степень извлечения зависит от заряда поверхности сорбента и сорбата), время контакта фаз - 160 мин, при которых в зависимости от природы сорбента предельная сорбция составляет 19.21-14.9 мг/г. Зависимость скорости сорбции нитрит-ионов от времени контакта фаз аппроксимирована моделью псевдо-первого и псевдо-второго порядков. Модель псевдо-второго порядка наиболее адекватно ($r^2 = 0.981-0.993$) описывает кинетику сорбции, позволяет предположить, что процесс имеет хемосорбционный механизм (ионный обмен). Изотермы сорбции аппроксимировали моделями Ленгмюра, Фрейндлиха и Дубинина-Радushкевича и по классификации ИЮПАК принадлежат к первому типу. На основании анализа изотерм Ленгмюра ($r^2 = 0.978-0.995$) сделан вывод о распределении нитрит-ионов в системе водный раствор - гидрогель вследствие сорбции на независимых активных центрах сополимеров. Значения предельной сорбции нитрит-ионов может зависеть от особенностей строения объемного полимерного каркаса сорбентов, связанного со способом его получения и природой полярных групп.

Маслова Н.В., Кушнир А.А., Суханов П.Т., Сатуров А.С. Сорбция нитрит-ионов из водных растворов акрилатными гидрогелями // Сорбционные и хроматографические процессы. 2024. Т. 24. № 4. С. 470-480.

Суханов П.Т., д.х.н., pavel.suhanov@mail.ru; Маслова Н.В., maslovanatvl@mail.ru; Кушнир А.А., kushnir_aleksei@mail.ru (Воронежский ГУИТ (государственный университет инженерных технологий, кафедра физической и аналитической химии)).

15. Поиск перспективных материалов для извлечения органических загрязнителей из природных объектов и пищевых продуктов. Методы твердофазной экстракции весьма перспективны, так как позволяют модифицировать сорбенты для достижения необходимых характеристик извлечения отдельных классов загрязнителей. Использование сорбционных материалов типа кавитанды мало изучено для целей селективного извлечения полиароматических углеводородов (ПАУ) и полихлорированных бифенилов (ПХБ), что делает данное направление весьма привлекательным.

Дано теоретическое обоснование применения кавитандов, синтезированных на основе трифенилена, для извлечения ПАУ из воды. Используя литературные данные о взаимодействии молекул кавитанда с аналитами различной молекулярной массы и растворимости ПАУ, а также размера и структуры сорбента, было проведено моделирование процесса экстракции и получены теоретические расчеты для достижения максимальной эффективности экстракции аналитов. Согласно прогнозируемой модели, сорбент наиболее селективен к ПАУ с низкой и средней молекулярной массой, с меньшей селективностью к другим органическим загрязнителям, таким как ПХБ и пестициды. Ожидаемая эффективность экстракции для ПАУ с низкой и средней молекулярной массой составляет 75–90%, а для высокомолекулярных — до 80%. Однако улучшения экстракции можно достичь путем оптимизации таких параметров, как время уравнивания сорбента в образце и наличие физических обработок (нагревание, ультразвуковая обработка и т. д.).

В последнее время все большую популярность приобретает микроэкстракция с использованием молекулярно-импринтированных полимеров. Эта методика позволяет создавать полимеры со специфическими свойствами для селективного извлечения аналитов. С использованием трехуровневого дизайна эксперимента (дизайн Бокса-Бенкена) проводили моделирование извлечения аналитов исследуемым полимером на основе рассчитанных теоретических данных. При расчете теоретических параметров извлечения учитывались различные факторы, такие как растворимость аналита, коэффициент распределения октанол/вода, молекулярная масса, литературные и предварительные экспериментальные данные по извлечению аналитов в материале данного состава, а также матричные эффекты.

Таким образом, применение методов экспериментального дизайна с учетом литературных данных может быть интересным подходом для сокращения количества экспериментальных исследований, необходимых для оптимизации условий извлечения аналитов с использованием различных сорбентов из сложных матриц.

По результатам работы подготовлены и направлены тезисы на XXVIII Всероссийскую конференцию молодых учёных-химиков (с международным участием), г. Нижний Новгород; готовится материал к публикации.

Экстракционные методы

1. Разработана методика газохроматографического определения хлорорганических пестицидов в воде, основанная на предварительном выделении аналитов экстракционным вымораживанием. Областью применения разработки является санитарно-гигиенический контроль качества воды. Метод обеспечивает определение ХОП в объеме пробы 10 мл на уровне ниже установленных ПДК с относительной погрешностью, не превышающей 20 %. Пробоподготовка осуществляется в одну стадию при отрицательных температурах, что благоприятно для улучшения условий труда и техники безопасности, поскольку значительно уменьшается летучесть растворителей и компонентов исследуемого образца. Процедура проста, не предполагает дополнительных требований к квалификации оператора, обладает низкой стоимостью, расходом реактивов, материалов. Продолжительность этапа подготовки пробы не превышает 30 мин.

Бехтерев В.Н. Экспресс-определение хлорорганических пестицидов в воде методом экстракционного вымораживания в комбинации с газовой хроматографией. Гигиена и санитария. 2024. 103(5). С.489-495.

Бехтерев В.Н., д.х.н., vic-bekhterev@yandex.ru («Центр гигиены и эпидемиологии в Краснодарском крае», Сочинский филиал).

2. Создание упаковочных материалов, обеспечивающих высокое качество пищевых продуктов и их защиту от загрязняющих веществ и микробных патогенов, продлевающих срок годности продуктов питания и обладающих улучшенными механическими и барьерными свойствами, является важной и актуальной задачей. В качестве одного из подходов к решению этой задачи рассматривается введение в состав полимерных пленок различных добавок и наноразмерных наполнителей, обладающих антиоксидантными и антимикробными свойствами. Перспективными добавками являются экстракт корней солодки и наночастицы серебра, синтезированные с помощью экстракта солодки в этой работе. Способ экстрагирования влияет на антиоксидантные свойства экстракта и его редуцирующую способность при синтезе наночастиц. Цель настоящей

работы включала изучение влияния способа и продолжительности экстракции на антиоксидантные свойства экстрактов солодки и оценку антиоксидантной активности (АОА) наночастиц серебра, синтезированных с помощью экстрактов солодки. С использованием потенциометрического метода установлено, что экстрагирование путем мацерации способствует увеличению АОА экстрактов солодки уральской и солодки голой на 8 и 15 % соответственно по сравнению с ультразвуковой обработкой в течение 30 минут, однако проведение мацерации требует значительно больше времени. Появление полосы поглощения поверхностного плазмонного резонанса в области длин волн 420–430 нм на УФ-спектрах подтверждает образование наночастиц серебра, формирование которых в экстрактах солодки происходит в течение 20 суток при комнатной температуре. Установлено, что АОА серебряных наночастиц почти в 7–9 раз превышает АОА экстрактов солодки, используемых для синтеза. Отмечено, что при большей АОА растительного экстракта возможно получить золи серебра с более высокими антиоксидантными свойствами. Полученные результаты позволяют рекомендовать экстракты корня солодки и наночастицы серебра, синтезированные с их помощью, в качестве добавок в биополимерные упаковочные матрицы для улучшения их окислительной стабильности.

А.З. Джуманазарова, Н.Ю. Стожко, А.Д. Мураталиева, М.А. Бухаринова. Антиоксидантные свойства водных экстрактов солодки уральской (Glycyrrhiza uralensis), солодки голой (Glycyrrhiza glabra L.) и синтезированных на их основе наночастиц серебра // Индустрия питания. 2024. Т. 91. № 3. С. 69–78. DOI 10.29141/2500-1922-2024-9-3-7.

Стожко Н.Ю., д.х.н., sny@usue.ru (Уральский государственный экономический университет, кафедра физики и химии, научно-инновационный центр сенсорных технологий. Екатеринбург).

3. Исследованы экстракционные свойства новых терпенсодержащих лигандов различных типов – α -аминоксимов, α -пиненовых производных диаза-флуоренов, лигандов с фрагментами типа азакраунэфиров и D2-симметричных терпеновых производных ряда 1,12,14,25-тетраокса-2,5,8,11,15,18,21,24-октааза-циклогексакоза-2,10,15,23-тетраена. Показана их высокая селективность и эффективность по отношению к палладию и золоту.

Зубричева Д.В., dasha.Zubricheva@mail.ru (Новосибирский институт органической химии им. Н.Н. Ворожцова СО РАН, Центр спектральных исследований).

4. Оптимизация условий дисперсионной жидкость-жидкостной микроэкстракции для извлечения органических загрязнителей из природных объектов при последующем их ГХ-МС определении. В качестве определяемых веществ выбраны наиболее распространенные органические загрязнители: полициклические ароматические углеводороды (ПАУ) и полихлорированные бифенилы (ПХБ).

Разработаны новые оригинальные методики определения ПАУ и ПХБ с использованием дисперсионной жидкость-жидкостной микроэкстракцией (DLLME). Новый тип растворителей — природные глубокие эвтектические растворители — делают этот вид экстракции более экологичным и безопасным, а в качестве диспергирующих агентов обычно используют ацетон, метанол и ацетонитрил.

С использованием дизайна эксперимента разработана модель для извлечения аналитов и установлены некоторые особенности извлечения ПАУ: использование индивидуальных растворителей в качестве диспергирующих агентов показало высокую эффективность при извлечении определенных групп аналитов. Например, было обнаружено, что метанол лучше извлекает низкомолекулярные ПАУ (до 3 ароматических колец), в то время как ацетонитрил был более эффективен при извлечении высокомолекулярных ПАУ (более 4 ароматических колец). Одновременная экстракция всех аналитов с разной молекулярной массой была достигнута при использовании бинарной смеси растворителей (ацетонитрил + ацетон) в качестве диспергирующего агента. В качестве экстрагирующих растворителей использовались природные глубокие эвтектические растворители. Эффективность извлечения превысила 90% в оптимизированных условиях. Это предполагает новый подход к микроэкстракции с использованием смеси растворителей в качестве диспергирующего агента, а также модель для процедур экстракции, позволяющую прогнозировать поведение аналогичных аналитов, ПХБ, в предлагаемых системах.

Результаты работы представлены в диссертационном исследовании: Эколого – аналитический контроль загрязнения водных экосистем и почв полиароматическими углеводородами и

полихлорбифенилами, шифр совета 24.2.320.05 (Д 212.101.16). Дата защиты: 26.09.2024.

Подготовлены и направлены тезисы на XXVIII Всероссийскую конференцию молодых учёных-химиков (с международным участием), г. Нижний Новгород.

Аксенов А.В., д.х.н., alexaks05@rambler.ru; Червонная Т.А. arttat718@gmail.com (Северо-Кавказский федеральный университет, Ставрополь).

5. Возрастающий интерес к лекарственным растениям требует разработки эффективных и селективных методов извлечения из них биологически активных веществ (БАВ). В этом направлении крайне перспективны *умные материалы (smart materials)*. С их помощью удаётся существенно расширить возможности соответствующих аналитических методик. Такие *smart materials* как глубокие эвтектические растворители (ГЭР) и ионные жидкости (ИЖ) интересны в силу вариативности их составов и уникальности свойств, реализации различных механизмов и способов селективного извлечения БАВ.

Предложен микроэкстракционный подход с использованием рН-переключаемых систем на основе ГЭР, позволяющий концентрировать биологически активные аналиты до 9 раз. Экстрагент готовили растворением аликвоты ГЭР (20 мкл) в 500 мкл ацетонитрила с добавкой 20 мкл муравьиной кислоты. Полученный экстрагент добавляли к растительному сырью (1 : 20, масс. / об.) и проводили экстракцию с применением ультразвука. Сопоставление хроматографических профилей экстрактов до отделения принимающей фазы показало, что наличие ГЭР в экстрагенте повышает эффективность извлечения полярных (флавоноидов и их гликозидов) соединений на 20-30%. Отделение принимающей фазы вызывали добавлением к 350 мкл экстракта 30 мкл 4 М раствора NaOH: появление в системе сильного основания вызывало процесс образования принимающей фазы. Показана универсальность предлагаемого подхода путём его апробации на 4-х объектах природного происхождения: листья *Iris sibirica* L, зверобоя продырявленного (*H. perforatum* L.) и мандарина (*Citrus reticulata* L.), а также корни шлемника байкальского (*Scutellaria baicalensis* B.). Обнаружено, что наиболее подходящим является ГЭР состава *холин хлорид – мочевины* (1:2, моль/моль), демонстрируя большую экстракционную ёмкость и высокие коэффициенты концентрирования. Условия экстракции оптимизированы полнофакторным дизайном

эксперимента. Показана возможность сочетания разработанного подхода с ВЭЖХ-МС в режиме Full scan. Обнаружены соединения, характеристичные для каждого выбранного вида: в корнях шлемника байкальского удалось определить вогонозид, ороксиллин А и скуллкэпфлавон II, в листьях ириса сибирского – ирилон и ряд производных апигенина, в сырье зверобоя – гиперозид, хлорогеновую кислоту, а в сырье мандарина – гесперидин и ройфолин.

Ближайшие аналоги глубоких эвтектических растворителей – **ионные жидкости** – также представляют интерес в фитохимическом анализе благодаря уникальным свойствам, благоприятствующим селективности экстракции. Использование гидрофобных ИЖ позволяет концентрировать малополярные аналиты из водных растворов. Среди существующих подходов к микроэкстракции дисперсионная жидкостно-жидкостная микроэкстракция (ДЖЖМЭ) является наиболее эффективным и легко реализуемым подходом. Соли 1-гексил-3-метилимидазолия C_6MIm тетрафторборат - TFB, гексафторфосфат – HFP и бис(трифторметилсульфонил)имид – NTF2 использованы в качестве принимающих фаз при извлечении малополярных компонентов из водных экстрактов. В качестве модельных объектов выбраны ирис сибирский и шлемник байкальский в силу их богатого метаболического профиля. Выявлено, что $C_6MImNTF2$ наиболее полно извлекает аналиты и отделяется даже от сложных матриц, а диспергирование ультразвуком и высаливание негативно влияет на степени извлечения. Оптимизацию времени экстракции (60-120 с), объема экстракта (500-750 мкл) и диспергирующего растворителя (50-100 мкл) проводили методом центрально-композитного дизайна эксперимента. Сопоставление профилей БАВ, полученных при помощи ГЭР и ИЖ, выявляет интересную особенность: они взаимно дополняют друг друга.

Karpitskiy DA, Bessonova EA, Shishov AY, Kartsova LA. Handshake of deep eutectic solvent and ionic liquid: Two liquid-liquid microextraction procedures for plant analysis. Talanta. 2025; 282,126947. doi: 10.1016/j.talanta.2024.126947.

Karpitskiy D.A., Bessonova E.A., Shishov A.Yu, Kartsova L.A. Analytical capabilities of smart materials in combination with HPLC methods in the analysis of natural objects. XXII International Mendeleev Congress on General and Applied Chemistry, Sirius, Russia, October 7-12 2024. Book of abstracts. Vol. 4, P 33

Карпицкий Д.А., Бессонова Е.А., к.х.н., Карцова Л.А., д.х.н., kartsova@gmail.com (Санкт-Петербургский государственный университет, кафедра органической химии).

6. Предложены новые варианты off-line микроэкстракционного концентрирования биологически активных аналитов в условиях дисперсионной жидкостной микроэкстракции (ДЖЖМЭ), магнитной дисперсионной твердофазной экстракции (м-ТФМЭ) с применением в качестве экстрагентов ионных жидкостей, синтезированных наночастиц (НЧ) с различной природой покрытия поверхности. Предложена схема модификации поверхности НЧ на основе магнетита ионными жидкостями с применением математических методов оптимизации условий.

Выявлены аналитические возможности имидазолиевых ИЖ для экстракции и концентрирования стероидных гормонов, играющих ключевую роль в регуляции обменных процессов в организме человека и животных, из природных объектов ДЖЖМЭ и м-ТФМЭ для их последующего определения методом ВЭЖХ/УФ.

Аналиты - основные половые стероидные гормоны: эстрон (E1), эстрадиол (E2), эстриол (E3), тестостерон (T), прогестерон (Pr). Найдены условия их определения методом ОФ ВЭЖХ с диодно-матричным детектированием: колонка: силикагель с бифенильными функциональными группами (Kinetex™ Biphenyl, 5 μ m); элюент: ацетонитрил/вода, содержащая 0,1%-ный раствор муравьиной кислоты, градиентный режим элюирования. Пределы обнаружения (ПО) стероидов в водных растворах для E1, E2, E3 – 0,1 мкг/мл, для T и Pr – 0,05 мкг/мл, что недостаточно для их определения в природных объектах. Изучены возможности гидрофобных ИЖ на основе имидазола с различной природой аниона и длиной алкильных радикалов (1-бутил-3-метилимидазолия гексафторфосфат (C_4MImPF_6), 1-гексил-3-метилимидазолия бис(трифторметилсульфонил)имид ($C_6MImNTf_2$), 1-гексил-3-метилимидазолия тетрафторборат (C_6MImBF_4) и 1-метил-3-октилимидазолия тетрафторборат (C_8MImBF_4) в качестве экстрагентов в ДЖЖМЭ. Их плотность выше по сравнению с водой, что удовлетворяет требованиям ДЖЖМЭ.

Применение диспергирующего растворителя ограничивает возможности данного подхода из-за увеличения растворимости ИЖ в растворе пробы. Изучены варианты ДЖЖМЭ без диспергирующего растворителя: микроэкстракция с диспергированием экстрагента за счет

регулирования температуры (ДЖЖМЭ-Т), под воздействием УЗ (ДЖЖМЭ-УЗ) и вихревое диспергирование (В-ДЖЖМЭ). Во всех вариантах диспергирования ИЖ для лучшего отделения фазы экстрагента образец после экстракции охлаждали в морозильной камере (15 мин), центрифугировали и отбирали водную фазу для определения остаточной концентрации стероидных гормонов. Получены более высокие значения степеней извлечения аналитов (85 - 99%).

Vasilenko M., Bessonova E.A., Kartsova L.A. Microextraction pre-concentration of steroid hormones using ionic liquids. Mendeleev 2024, the XIII International Conference on Chemistry for Young Scientists. Saint-Petersburg (September 2–6, 2024). С. 386.

Арасланова А.Т., Василенко М., Бессонова Е.А., Карцова Л.А. Функционализированные материалы на основе ионных жидкостей и магнитных наночастиц для извлечения и концентрирования биологически активных веществ в условиях твердофазной микроэкстракции. XXII Менделеевский съезд по общей и прикладной химии, 7-12 октября, 2024, Федеральная территория «Сириус», Россия. Сборник тезисов докладов в 7 томах. Том 2. С. 361.

Бессонова Е.А., Арасланова А.Т., Москвичев Д.А., Карцова Л.А. Получение метаболических профилей биологически активных веществ в природных объектах методами хроматографии и капиллярного электрофореза с участием ионных жидкостей. XXII Менделеевский съезд по общей и прикладной химии, 7-12 октября, 2024, Федеральная территория «Сириус», Россия. Сборник тезисов докладов в 7 томах. Том 2. С. 328.

Бессонова Е.А., к.х.н., lena_pol@inbox.ru; Карцова Л.А., д.х.н. (Санкт-Петербургский государственный университет, Институт химии. кафедра органической химии).

7. Проведено разделение смеси аминокислот валина и изолейцина в картридже твердофазной экстракции, заполненном полимером с молекулярными отпечатками изолейцина. Концентрация аминокислот в исходной смеси составляла 0.05 моль/дм³ изолейцина и 0.1 моль/дм³ валина. Определение аминокислот в элюате проводили методом тонкослойной хроматографии. После пропускания смеси валина и изолейцина через картридж в первой порции элюата было обнаружено 0.015±0.010 моль/дм³ изолейцина и 0.092±0.010 моль/дм³ валина. Во второй порции элюата, собранной после последующего промывания патрона дистиллированной водой, обнаружено 0.043±0.010 моль/дм³

изолейцина. Таким образом, степень извлечения изолейцина составила 70%.

Степанищенко Е. С. Разделение смеси незаменимых аминокислот полимером с молекулярным отпечатком / Е. С. Степанищенко, А. С. Голопятова, А. Н. Зяблов, А. Ю. Выборный // Прикладные информационные аспекты медицины. – 2024. – Т. 27, № 2. – С. 84-88.

Зяблов А.Н., д.х.н., alex-n-z@yandex.ru (Воронежский государственный университет, кафедра аналитической химии).

8. Сделан обзор литературных данных, опубликованных в России и за рубежом за последние 10 лет, по извлечению редкоземельных элементов (РЗМ) бинарными смесями экстрагентов различных классов. Высокие значения коэффициентов разделения РЗМ в большинстве случаев достигаются за счет повышения селективности используемых экстрагентных смесей за счет формирования комплексов смешанного состава в органической фазе. В некоторых системах со смесями экстрагентов облегчаются процессы отчистки металлов от органической фазы.

Белова В.В., Холькин А.И. Использование смесей экстрагентов для извлечения и разделения редкоземельных элементов // Хим.технология. 2024. Т. 25 № 2. С. 52-59. DOI: 10.31044/1684-5811-2024-25-2-52-59.

Белова В.В., д.х.н., belova@igic.ras.ru; Холькин А.И., академик РАН (Институт общей и неорганической химии им. Н.С. Курнакова РАН, лаборатория аналитической химии и методов разделения и лаборатория основ технологии. Москва).

9. Разработан комплекс экстракционно-атомно-абсорбционных методик определения ртути, кадмия, висмута с аналитическим применением системы «вода-иодантипирин-пропиленкарбонат. Однократной экстракцией ионных форм Hg, Bi, Cd достигается количественное извлечение аналитов из кислых хлоридных растворов.

Петухов В.А., Рахматулин П.А., temerev@mail.ru (Алтайский государственный университет, Барнаул).

Другие методы разделения и концентрирования

1. Разработан «зеленый» способ выделения и концентрирования полярных гербицидов из пищевых продуктов растительного происхождения с применением супрамолекулярного растворителя на основе алкилполиглицозида. Способ включает извлечение аналитов из твердофазных проб в водную фазу, дериватизацию аналитов в среде изотропного раствора алкилполиглицозида (амфирил), и концентрирование производных в супрамолекулярный растворитель, образующийся при введении высшей карбоновой кислоты (агент коацервации). Схема процедуры микроэкстракции представлена на рисунке 1. В работе впервые показана возможность сочетания мицеллярной микроэкстракции в супрамолекулярный растворитель на основе алкилполиглицозида с ВЭЖХ-МС/МС.

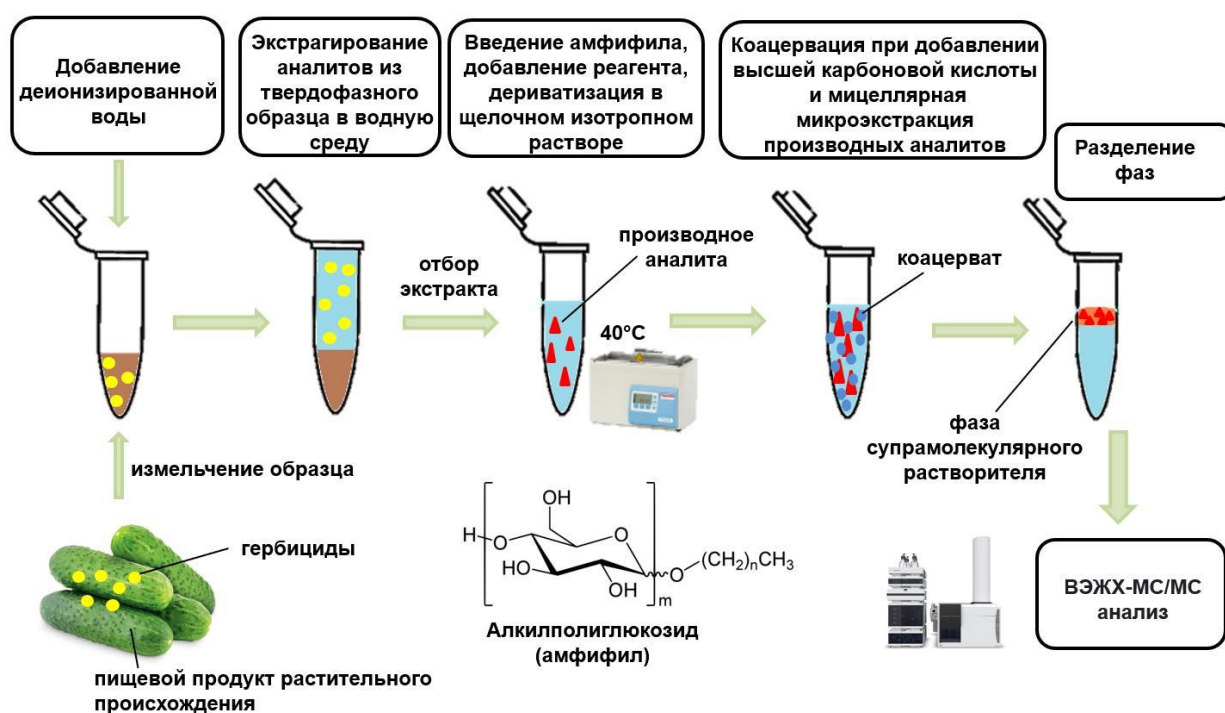


Рисунок 1. Схема микроэкстракции полярных гербицидов из проб пищевых продуктов растительного происхождения в супрамолекулярный растворитель (алкилполиглицозид в качестве амфирила, высшая карбоновая кислота в качестве агента коацервации).

Почивалов А.С., Булатов А.В., bulatov_andrey@mail.ru; Санкт-Петербургский государственный университет, кафедра аналитической химии, группа методов разделения и концентрирования.

2. Установлен феномен образования супрамолекулярного растворителя в водной фазе, содержащей алкилполиглицозид в качестве

амфифила и первичный спирт в качестве агента коацервации. Предложен механизм выделения фазы супрамолекулярного растворителя. Образование супрамолекулярного растворителя связано с солюбилизацией молекул спирта, которые встраиваются в структуру мицелл за счет гидрофобных взаимодействий, что приводит к увеличению мицелл и их агрегации, в результате чего выделяется отдельная несмешивающаяся с водой фаза. Новый супрамолекулярный растворитель нашел применение для эффективного выделения и концентрирования эфиров фталевой кислоты из проб пищевых продуктов для детского питания для их последующего определения методом ВЭЖХ-УФ. Схема процедуры микроэкстракции представлена на рисунке 2.



Рисунок 2. Схема микроэкстракции эфиров фталевой кислоты из проб пищевых продуктов в супрамолекулярный растворитель (алкилполиглюкозид в качестве амфифила, первичный спирт в качестве агента коацервации).

Talanta. V. 280. 2024. 126748. DOI: 10.1016/j.talanta.2024.126748

Шишов А.Ю., Булатов А.В., bulatov_andrey@mail.ru; Санкт-Петербургский государственный университет, кафедра аналитической химии, группа методов разделения и концентрирования.

3. Для повышения эффективности микроэкстракции в супрамолекулярные растворители на основе первичных аминов изучена возможность образования экстракционных систем в присутствии гидрофобных эвтектических растворителей (в качестве агентов коацервации). Установлено, что при введении в мицеллярные растворы первичных аминов гидрофобных эвтектических растворителей на основе терпеноидов и высших карбоновых кислот и спиртов наблюдается

образование супрамолекулярных растворителей с низким содержанием воды. Разработанный способ микроэкстракции был применен для выделения и концентрирования антибиотика фторхинолонового ряда (энрофлоксацина) из пищевых продуктов (молоко) для его последующего определения методом ВЭЖХ-ФЛ. Схема процедуры микроэкстракции представлена на рисунке

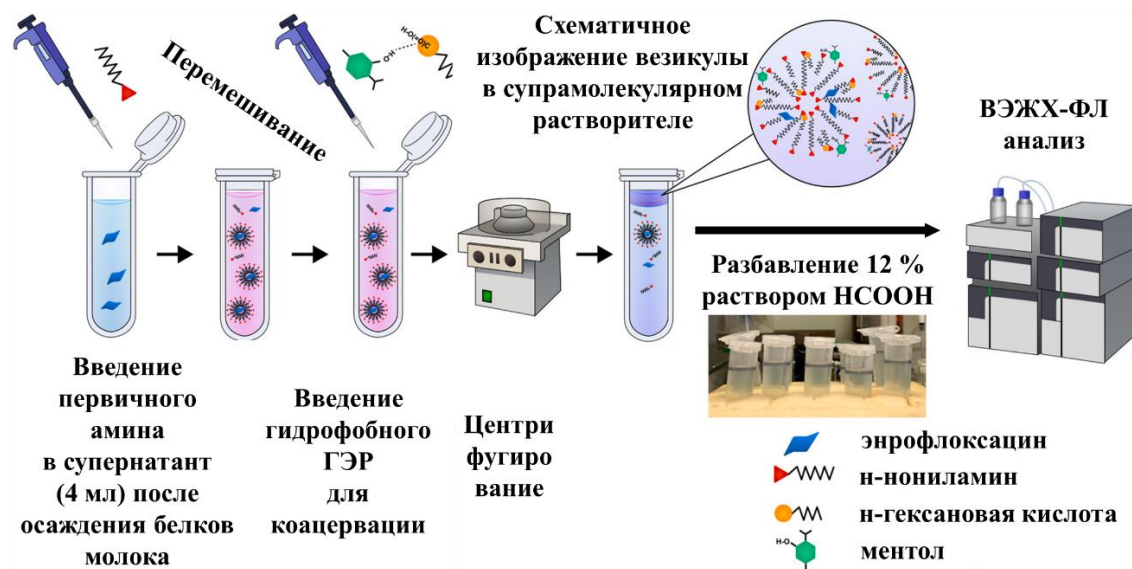


Рисунок. 3. Схема микроэкстракции энрофлоксацина в супрамолекулярный растворитель на основе первичного амина и гидрофобного эвтектического растворителя.

Talanta. V. 279. 2024. 126666. DOI: 10.1016/j.talanta.2024.126666

Курашов Я., Булатов А.В. bulatov_andrey@mail.ru; Санкт-Петербургский государственный университет, кафедра аналитической химии, группа методов разделения и концентрирования.

4. Разработан новый способ микроэкстракции, основанный на *in situ* образовании термочувствительного эвтектического растворителя в водной фазе. Термочувствительный эвтектический растворитель представляет собой смесь прекурсоров, способных изменять свою растворимость в воде в зависимости от температуры. Новый способ микроэкстракции нашел применение для выделения и концентрирования полициклических ароматических углеводородов и бисфенолов из пищевых продуктов (безалкогольные напитки). Разработанный способ микроэкстракции не требует центрифугирования и применения токсичных органических

растворителей. Впервые показана возможность концентрирования аналитов в термочувствительный эвтектический растворитель на основе лидокаина и карбоновых кислот из проб пищевых продуктов. Схема процедуры микроэкстракции представлена на рисунке 4.

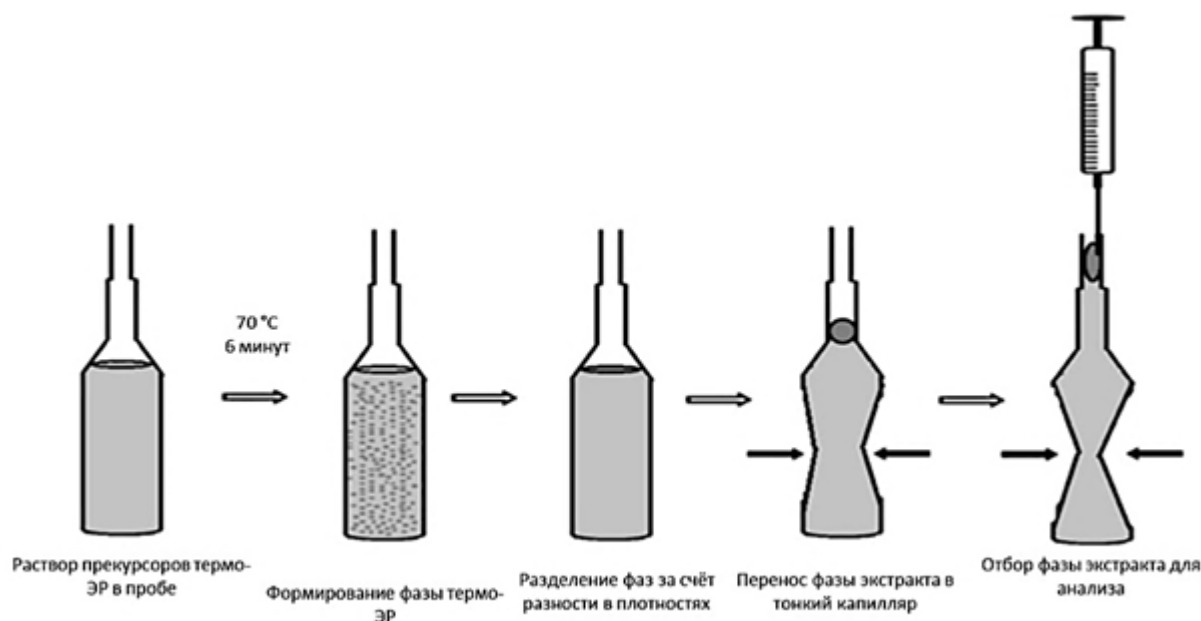


Рисунок 4. Схема микроэкстракции бисфенолов из пищевых продуктов в термочувствительный эвтектический растворитель (термо-ЭР).

Journal of Food Composition and Analysis. V. 135. 2024. 106569. DOI: 10.1016/j.jfca.2024.106569

Булатов А.В., bulatov_andrey@mail.ru; Санкт-Петербургский государственный университет, кафедра аналитической химии, группа методов разделения и концентрирова.

5. Предложен способ экстракционного выделения соединений серы из нефтяного сырья в миниканальном устройства с применением в качестве экстрагентов полярных органических растворителей и “зеленых” реагентов – глубоких эвтектических растворителей. Миниканалы ($d=0.2\text{-}3\text{мм}$) позволяют интенсифицировать процесс экстракции без применения физических полей: уменьшение размера канала способствует увеличению площади поверхности контакта фаз и уменьшению пути диффузии молекул. Эффективность экстракционного обессеривания нефтяного сырья зависит от конфигурации потока двух несмешивающихся фаз, ряда рабочих и конструкционных параметров миниреактора. Проведение

процесса обессеривания нефтепродукта в миниканале позволило сократить время контакта фаз с 20-60 минут до 20-50 секунд и выделить 36-75% серы из нефти и ее фракций за одну стадию экстракции. Предложенный подход может использоваться в качестве пробоподготовки, предшествующей инструментальному анализу выделенных соединений серы.

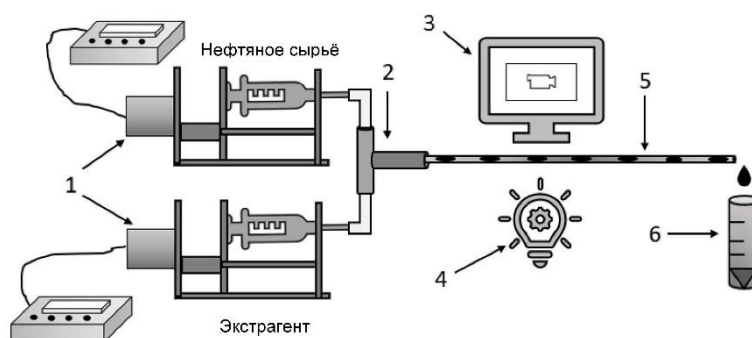


Схема экспериментальной установки: 1 - насос, 2 - Т-образный смеситель, 3 - цифровой микроскоп, 4- лампа подсветки, 5 - миниканал, 6 – емкость для сбора фаз

Катасонова О.Н., katasonova_ol@mail.ru; Институт геохимии и аналитической химии им. В.И. Вернадского РАН, лаборатория концентрирования. Москва).

6. Исследовано соосаждение хелатов металлов с 8-гидроксихинолином с полимерным индифферентным соосадителем поливинилбутиралем, позволяющее выполнять эффективное и избирательное концентрирование их из малых объемов в 15 мл и подготавливать удобные для РФА концентраты-излучатели с равномерным распределением тонкого слоя концентрата по поверхности фильтра. Процедура позволяет определять микро- и нанокolicества элементов в пробах морской воде. Экспериментальную диаграмму в координатах предел обнаружения - атомный номер элемента, в соответствии с законом Мозли в виде двух треков для К- и L-серий, можно использовать и для предсказательных оценок пределов обнаружения, других металлов, например всех РЗЭ, для которых рассмотренный способ концентрирования еще не отработывался. Предел обнаружения составляет $0.007(U) \dots 0.17(V)$ мкг/мл, коэффициент концентрирования $5 \cdot 10^4$ (при расчете для 1 мкг в 15 мл). В совокупности все результаты можно рассматривать как новый пример эффективного аналитического применения 8-гидроксихинолина для концентрирования и определения металлов в РФА.

Кузнецов В.В., д.х.н., kuzn@muctr.ru; Прокопенко Ю.Р., Агудин П.С.; Российский химико-технологический университет им. Д.И. Менделеева, Москва .

7. Органическое отравление (фаулинг) – серьезная проблема применения ионообменных мембран в электродиализе с целью разделения, извлечения и концентрирования реакционно способных органических веществ. Показано влияние функциональных групп ароматических аминокислот на стабильную работу анионообменных гетерогенных мембран и межмембранной ионопроводящей загрузки при удалении минеральных примесей из многокомпонентных растворов в электромембранной системе. Снижение массопереноса компонентов растворов, снижение эффективного числа переноса ионов гидроксила для анионообменных мембран, а также увеличение их сопротивления при длительном электродиализе связаны с явлением органического отравления. Для эффективного разделения ароматической аминокислоты и неорганической соли использован метод непрерывной электродеионизации с подобранным составом ионопроводящей загрузки.

Работа представлена на Всероссийской конференции с международным участием ФАГРАН-2024.

Елисеева Т.В., д.х.н., tatyanaeliseeva@yandex.ru; Харина А.Ю., к.х.н. (Воронежский государственный университет, кафедра аналитической химии).

8. ¹Изучена экстрагирующая способность блок-сополимера «Плуроник» по отношению к сорбиновой и бензойной кислотам. Установлены особенности межфазного распределения кислот: рассчитаны их коэффициенты распределения и степень извлечения (95-96%) в системах на основе блок-сополимера «Плуроник» и высаливателя сульфата аммония; установлены концентрации аналитов и экстрагента, соотношение объемов водной и органической фаз, при которых достигаются максимальные экстракционные характеристики. Определены параметры электрофоретического определения сорбиновой и бензойной кислот. Предложены схемы взаимодействия блок-сополимера с аналитами за счет водородных связей, учитывающие особенности строения «Плуроника» и извлекаемых веществ.

Известия вузов. Химия и хим. технология. 2024. Т. 67. Вып. 7. С. 41-47.

²Исследована экстракция аскорбиновой кислоты блок-сополимером «Плуроник»: максимальная экстракция достигается при соотношении объемов водно-солевой и органической фаз 10:4 и концентрации экстрагента 0,09 г/см³. Определение аскорбиновой кислоты после экстракции осуществлялось методом УФ-спектрофотометрии при 265 нм. Проведен анализ спектров люминесценции отдельных компонентов экстракционной системы и их смеси, который указал на снижение интенсивности свечения блок-сополимера «Плуроник» и аскорбиновой кислоты по сравнению со свечением чистого экстрагента. На основании результатов экстракции и данных люминесцентного анализа предложена схема межфазного взаимодействия в системе блок-сополимер – аскорбиновая кислота.

Бутлеровские сообщения. 2024. Т.79. №7. С.61-66.

³Предложен способ отдельного определения сорбиновой и бензойной кислот, включающий экстракцию их смеси раствором поли-*N*-винилформамида, электрофоретический анализ водной фазы и селективное определение каждого компонента смеси. На скорость образования двухфазной системы водорастворимый полимер-водно-солевой раствор аминокислоты влияют молекулярная масса и характеристическая вязкость экстрагента. Методика заключается в том, что водно-солевой раствор сорбиновой и бензойной кислот с концентрациями 0,045 г/см³ и 0,01 г/см³ соответственно экстрагируют раствором поли-*N*-винилформамида концентрации 0,3 г/см³, при соотношении объемов фаз 10:3. В органическую фазу переходит 98,2% сорбиновой и 97,3 % бензойной кислот.

Патент № 2811552. Оpubл. 15.01.2024. Бюлл. №2

⁴Изучено межфазное распределение метионина в экстракционных системах на основе азотсодержащих карбоцепных полимеров (поли-*N*-винилпирролидон, поли-*N*-винилкапролактан, поли-*N*-винилимидазол, поли-1-винил-1,2,4-триазол, полиакриламид и поли-*N*-винилформамид). Для всех полимеров рассчитана средневязкостная молекулярная масса и установлены размеры гидродинамических радиусов. Установлено влияние температуры на экстракцию, а также показана возможность осуществления бессолевой экстракции аминокислоты. На основе ИК-спектров образцов полимеров до и после их взаимодействия с метионином предложена схема образования комплексов.

Бутлеровские сообщения. 2024. Т.77. №2. С.88-94.

^{1,2,3,4}Мокшина Н.Я., д.х.н., moksнад@mail.ru; ¹²³⁴Пахомова О.А., ¹³⁴Полтева А.В.; ⁴Бакланов И.О., ²Иванчура П.В. (ВУНЦ ВВС «Военно-воздушная академия им. профессора Н.Е. Жуковского и Ю.А. Гагарина», кафедра физики и химии; Елецкий государственный университет им. И.А. Бунина, кафедра химико-биологических дисциплин и фармакологии).

9. Ионные жидкости (ИЖ) на основе катионов четвертичного аммония – диалкилсульфосукцинаты тетраалкиламмония – получены *in situ* при смешении в водном растворе солей – поставщиков катиона и аниона, составляющих ИЖ, и исследованы для экстракции из водных растворов ионов тяжелых металлов. Образование гидрофобной ИЖ происходит при эквимольном соотношении исходных солей и их суммарной концентрации не ниже $n \cdot 10^{-2}$ М. Результаты элементного анализа подтверждено образование смешанных солей – продукта неполного замещения бромида исходной соли тетраалкиламмония на диалкилсульфосукцинат $R_4N(An_x)(Br_{1-x})$. Ионы тяжелых металлов Cd(II), Co(II), Cu(II), Ni(II), Pb(II) и Zn(II) количественно экстрагируются в присутствии с 4-(2-пиридилазо)резорцина ($1 \cdot 10^{-3}$ М) в образующуюся *in situ* ИЖ на основе катиона тетрагексиламмония при pH 4.9 за 1 мин при соотношении объемов водной и органической фаз 40:1 и 20:1 преимущественно в форме однозарядных частично протонированных анионных комплексов. Показана возможность определения металлов методом атомно-эмиссионной спектроскопии с микроволновой плазмой после экстракции в ИЖ; пределы обнаружения составили от 2 до 25 мкг/л. Двухфазные водные системы (ДФВС), представляющие собой комбинацию органическая соль/неорганическая соль, на основе симметричных и несимметричных галогенидов тетраалкиламмония ($R'R'R''R'''NHal$), а также на основе катионного и анионного ПАВ получены и исследованы для экстракции РЗЭ. Установлены границы области фазового расслоения и оптимальные условия получения новых ДФВС для количественного извлечения и концентрирования РЗЭ (10–5000 мкг/л): суммарная концентрация компонентов ДФВС ($c_{R'R'R''R'''NHal} + NaX = 0.016–0.8$ М) и соотношение молярных концентраций компонентов $R'R'R''R'''NHal^+ : NaX$ (от 3:1 до 1:3), pH (5–8), соотношение объемов фаз, время контакта фаз (не более 10 мин). Продемонстрирована возможность определения РЗЭ методом масс-спектрометрии с индуктивно связанной плазмой после групповой экстракции растворами азотной кислоты. Отмечено снижение пределов обнаружения для ряда РЗЭ (Tb, Ho, Tm и Lu)

в 15–25 раз по сравнению с пределами обнаружения в 0.05 М азотной кислоте.

Смирнова С.В., sv_v_smirnova@mail.ru (МГУ им. М.В. Ломоносова, химический факультет, кафедра аналитической химии, лаборатория концентрирования).

10. Водные экосистемы являются основным резервуаром для микропластика, поступающего в окружающую среду. Оценка содержания микропластика в природных водах необходима при оценке степени загрязнения водных объектов и потенциальных рисков для обитателей водоемов. Как правило, содержание микропластика в природных водах невелико, поэтому разработка новых эффективных методов разделения частиц, позволяющих селективно выделять и концентрировать микропластик из природных вод, является актуальной задачей. Разработан новый метод выделения и концентрирования микропластика из природных вод во вращающейся спиральной колонке (ВСК) в режиме противоточной хроматографии с использованием двухфазных жидкостных систем «вода-масло». Определены параметры удерживания систем на основе растительных (касторового, тунгового, льняного, соевого, подсолнечного, кунжутного, рапсового, оливкового, терпентинного, лимонена) и синтетических (вазелинового и моторного) масел в ВСК и оценена возможность применения данных систем для выделения микропластика из проб воды. Изучено влияние скорости вращения ВСК и скорости потока подвижной фазы на удерживание масляной фазы в колонке. На примере микрочастиц полиэтилена различного размера (40–63, 63–100 и 100–250 мкм) показана высокая эффективность выделения микропластика (порядка 100%) в ВСК с использованием систем «вода-масло». Установлено, что эффективность выделения не зависит от солености проб воды, поэтому предложенный метод может быть использован для выделения микропластика как из пресных, так и морских вод. Разработанный метод выделения и концентрирования микропластика перспективен для очистки сточных вод от микропластика.

Ермолин М.С., к.х.н., ermolin@geokhi.ru (Институт геохимии и аналитической химии им. В.И. Вернадского) РАН, лаборатория геохимии наночастиц. Москва).

Методы обнаружения и идентификации

1. Представлен новый обзор основных методов, способов, процедур и информационных продуктов, применяемых в последние годы при идентификации химических соединений. Методология, используемая в целевом анализе, во многом осталась без изменения за последние 10-15 лет, хотя критерии идентификации подверглись некоторой модернизации. Резко расширился фронт исследований в нецелевом анализе. В этом случае основные проблемы заключаются в выявлении перспективных кандидатов на идентификацию. Успехи достигаются при широком применении современных хроматомасс-спектрометров высокого разрешения и прогрессу информатики. Последний включает разработку алгоритмов и программ обработки хроматографических и масс-спектрометрических данных, их сравнения со справочными характеристиками, прогнозирования масс-спектров и параметров удерживания и других величин, интерпретации данных. Химические базы данных позволяют оценить распространенность соединений/веществ и соответственно их перспективность как кандидатов на идентификацию.

Значение обзора, на взгляд авторов – новое освещение интенсивно развивающихся областей аналитики и информатики с единых методологических позиций. Предыдущие обзоры авторов на эту тему получили многие десятки ссылок.

Мильман Б.Л., Журкович И.К. Новое в методологии химической идентификации // Журнал аналитической химии. – 2024. – Т. 79, № 2. С. 119-137; Milman B.L., Zhurkovich I.K. New Trends in Chemical Identification Methodology // Journal of Analytical Chemistry. - 2024. - Vol. 79, № 2. - С. 119-133.

Мильман Б.Л., д.х.н., bormilman@yandex.ru (Научно-клинический центр токсикологии имени академика С.Н. Голикова ФМБА России, лаборатория токсикологической химии органических соединений. Санкт-Петербург).

2. Разработаны методики оценки оптического качества композитных керамик $\text{MgO-RE}_2\text{O}_3$ ($\text{RE} = \text{Y, Sc, Lu, Gd}$) с применением методов оптической 3D-микроскопии (3D OM) и лазерной 3D-ультрамикроскопии (3D ЛУМ). Реализация методов 3D OM и 3D ЛУМ в NIR (0.7-1.0 мкм) и SWIR (0.9-1.9 мкм) диапазонах длин волн позволила визуализировать процессы консолидации порошков и обнаружить микродефекты

пористости и состава в объёме непрозрачных в видимом диапазоне керамик $\text{MgO-RE}_2\text{O}_3$. Пределы обнаружения по размеру 3D ОМ и 3D ЛУМ в указанных диапазонах длин волн составляют $\sim \text{п} \cdot \text{мкм}$ и $\sim \text{п} \cdot 100 \text{ нм}$, соответственно. Интервал определяемых концентраций $10\text{-}10^9 \text{ см}^{-3}$, глубины сканирования образцов до $\sim 1\text{-}3 \text{ см}$. На основе полученных данных о размерах и концентрации микродефектов в образцах композитов $\text{MgO-RE}_2\text{O}_3$ проведены количественные оценки уровня и спектра вносимых микродефектами потерь на рассеяние.

Кеткова Л.А., Ketkova@ihps-nnov.ru (Институт химии высокочистых веществ РАН, Нижний Новгород).

3. Кинетический метод «отпечатков пальцев» (метод индикаторных реакций) применен для распознавания образцов близкого состава. В качестве новых индикаторных реакций изучили процессы образования-разрушения комплексов полиэлектролитов, меченных флуорофором и тушителем; реакции с участием ДНК, в том числе процессы ее расплетания – сплетания и разрушения гипохлоритом; реакции аминов с производными карбоцианинового красителя; фотохимическую реакцию, инициируемую оксидом кобальта (II, III), генерирующим активные формы кислорода, а также реакции окисления карбоцианиновых красителей. С помощью предложенных индикаторных систем проведено распознавание объектов близкого состава. Удастся распознать 11 образцов природных и водопроводных вод, отличить воды, содержащие и не содержащие водорастворимую фракцию моторных масел, причем содержание последней удастся обнаружить после 30-кратного разбавления. Кроме того, можно определить сорт моторного масла, загрязняющего воду, если образцы масел имеются у экспериментатора. Предлагаемые индикаторные реакции могут быть полезны в мониторинге качества воды в источниках водоснабжения. Предложен также способ определения степени свежести сырого мяса по его водному экстракту. Показана возможность оценки дозы, поглощенной продуктами питания, облученными электронами или рентгеновским излучением, с точностью до порядка (0, 100, 1000, 10000 Гр) с помощью предлагаемого подхода (на примере сырого мяса курицы и индейки).

Беклемишев М.К., д.х.н., beklem@inbox.ru (МГУ им. М.В. Ломоносова, химический факультет, кафедра аналитической химии, лаборатория биоаналитических методов и оптических сенсорных систем).

4. Представлен обзор литературы по идентификации и определению органических соединений, формирующих компонентный состав и потребительские свойства вин. Возможности, информативность и универсальность хроматографических методов в сочетании с математическим обеспечением значительно повысили степень автоматизации и надежность получения данных по идентификации и определению широкого спектра компонентов в вине. Обсуждаются условия определения высоких и низких концентраций органических соединений, отвечающих за качественные и региональные характеристики вин в компонентном составе. Для решения задач идентификации и определения компонентов, отвечающих за достоинства и недостатки винодельческой продукции, наибольшее распространение имеют различные методы газовой хроматографии и хромато-масс-спектрометрии, обеспечивающие надежное определение относительно летучих компонентов. Нелетучие компоненты вин определяются методом высокоэффективной жидкостной хроматографии с различными методами детектирования и методом высокоэффективного капиллярного электрофореза. Проанализированы основные подходы к установлению профиля и региональной принадлежности вин по компонентному составу, приведены примеры использования на практике.

Temerdashev, Z.A., Abakumov, A.G., Shelud'ko, O.N., Yakuba, Y.F., Tsyupko, T.G. Chromatographic Methods in the Identification and Determination of the Component Composition and Quality of Wines // Journal of Analytical Chemistry, 2024, 79(10), pp. 1364–1386.

Темердашев З.А., д.х.н., temza@kubsu.ru (Кубанский государственный университет, кафедра аналитической химии).

СПОСОБЫ ОСУЩЕСТВЛЕНИЯ АНАЛИЗА И ОБРАБОТКИ ДАННЫХ. ОБЩИЕ ПОДХОДЫ К АНАЛИЗУ

Анализ в потоке

1. Показана возможность использования амперометрического отклика модифицированных электродов в качестве аналитического

сигнала при определении антибиотиков в условиях проточно-инжекционного и порционно-инжекционного анализа.

Проточно-инжекционное амперометрическое определение цефалоспоринов (цефтриаксона, цефотаксима и цефоперазона) проводили на электродах, модифицированных бинарной системой из частиц золота и смешанновалентных оксидов рутения. Зависимость аналитического сигнала от концентрации рассматриваемых соединений в логарифмических координатах линейна в интервале от 5×10^{-7} до 5×10^{-3} М.

Композитный электрод с частицами золота, углеродными нанотрубками и ионной жидкостью на основе 1-бутил-3-метилимидазолия гексафторфосфата использовали для амперометрического детектирования сульфаниламидов (сульфаметазина, сульфацетамида и сульфатиазола) в порционно-инжекционных условиях. Зависимость аналитического сигнала от концентрации рассматриваемых соединений в логарифмических координатах линейна в интервале от 1×10^{-8} до 5×10^{-3} М для сульфаметазина и сульфацетамида и от 1×10^{-7} до 5×10^{-3} М для сульфатиазола. Предложенные способы определения сульфаниламидов и цефалоспоринов апробированы в анализе лекарственных средств.

Стеклоуглеродный электрод, модифицированный композитом из Au-Pd и восстановленного оксида графена (ГОВос) применяли для проточно-инжекционного амперометрического определения тетрациклина. Использование ГОВос как матрицы для включения бинарной системы Au-Pd привело к значительному росту тока, что связано с увеличением дисперсности металлического осадка и формированием частиц металлов нанометрового диапазона (средний диаметр частиц 50 нм). Предложенный способ демонстрирует высокую чувствительность (нижняя граница определяемых содержаний 5 нМ), экспрессность и производительность (60 проб в час). Разработанный способ определения тетрациклина апробирован при анализе образцов цветочного меда из разных районов Поволжья.

Shaidarova, L.G. Flow-Injection Amperometric Determination of Ceftriaxone, Cefotaxime, and Cefoperazone Using an Electrode Modified with a Binary System of Gold Particles and Mixed-Valent Ruthenium Oxides / L.G. Shaidarova, I.A. Chelnokova, M.A. Il'ina, and H.C. Budnikov // J. Anal Chem. - 2024. - Vol. 79, No. 8. - pp. 1159–1165. DOI: 10.1134/S1061934824700539.

Shaidarova, L.G. Batch-injection amperometric determination of sulfamethazine, sulfacetamide, and sulfathiazole on an electrode modified with a composite of gold nanoparticles, carbon nanotubes, and an ionic liquid / L.G. Shaidarova, I.A. Chelnokova, M.A. Il'ina, I.A. Gafiatova, H.C. Budnikov // J.

Шайдарова Л.Г. larisashaidarova@mail.ru; Казанский (Приволжский) федеральный университет, кафедра аналитической химии).

Тест-методы и тест-средства анализа

1. Для экспрессного внелабораторного определения аскорбиновой кислоты в сложных многокомпонентных матрицах - пищевых продуктах - без предварительной стадии пробоподготовки разработана тест-система, предполагающая проведение анализа с помощью тест-полосок и детектирование методом цифровой колориметрии. Для изготовления тест-полосок разработан новый способ нанесения и стабилизации хромогенного реагента с помощью природного терпеноида. При изготовлении тест-полосок используются дешевые и доступные реагенты. По сравнению с существующими аналогами разработанный способ не требует стадии пробоподготовки и использования дополнительного оборудования и реагентов, что позволяет проводить анализ во внелабораторных условиях. Схема анализа представлена на рисунке 5.

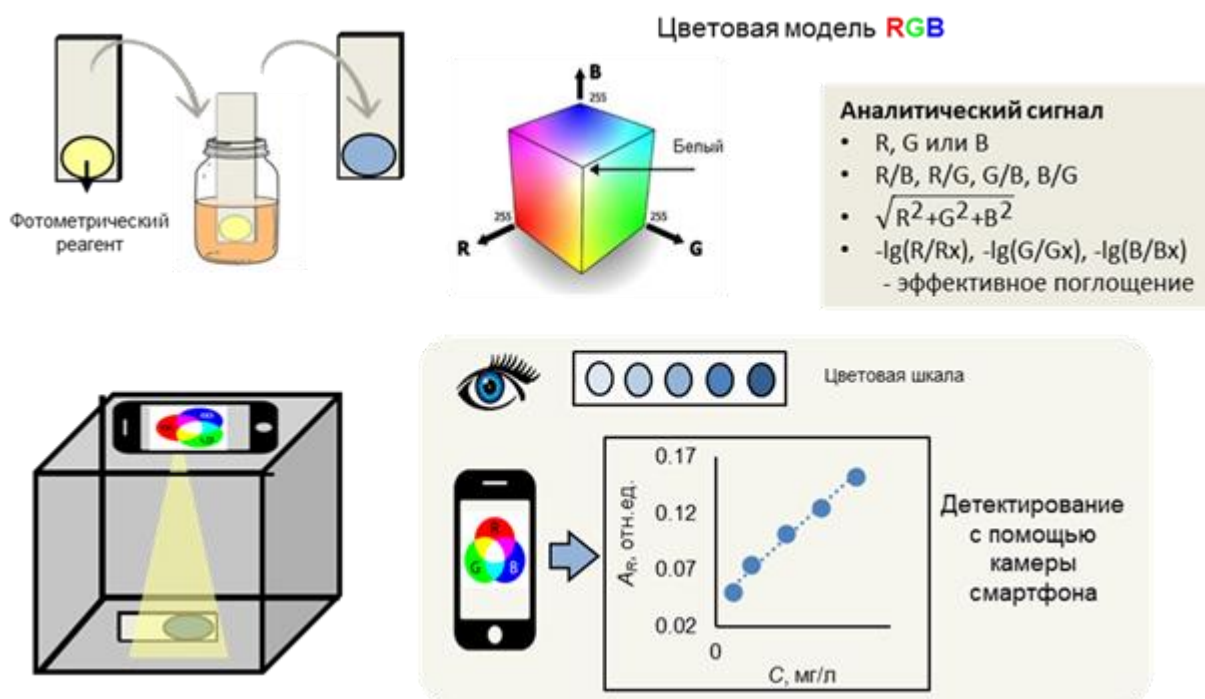


Рисунок. Схема определения аскорбиновой кислоты в пищевых продуктах с применением разработанной тест-системы.

Journal of Food Composition and Analysis. V. 137. 2025. 106920. DOI: 10.1016/j.jfca.2024.106920.

Тимофеева И.И., к.х.н.; Булатов А.В., д.х.н.. bulatov_andrey@mail.ru;
Санкт-Петербургский государственный университет, Институт химии,
кафедра аналитической химии, группа методов разделения и
концентрирования).

2. Рассмотрены результаты оценки адсорбционных и флуоресцентных свойств азолотриазиновых соединений и фаз на основе квантовых точек сульфида кадмия в парах летучих органических соединений (биомаркеров живых систем). Адсорбционные свойства фаз на основе органических красителей и инкапсулированных полупроводников по отношению к парам спиртов, кетонов, аминов, кислот, аммиака и альдегидов исследованы с помощью прямого высокочувствительного пьезоэлектрического микровзвешивания. Предложено оценивать согласованность методов прогнозирования изменений флуоресцентных свойств в тестовых системах для летучих органических соединений с помощью коэффициента конкордации Кендалла W . Наивысший уровень согласованности ($W = 0,89$) наблюдался между методами спектрофлуориметрии и прямого микровзвешивания паров при адсорбции на фазах, являющихся потенциальными наполнителями тестовых систем. Корреляция между результатами, полученными с помощью различных флуоресцентных методов (визуальные тест-системы и флуориметрия фаз на бумажных подложках), составляет 0,80, что подтверждает высокую степень согласованности оценок, полученных с их помощью, в отношении степени взаимодействия между анализируемыми веществами и органическими, комбинированными флуорохромами. Методы, тесно связанные по характеру аналитической реакции, не дают более точных результатов, чем метод прямого микровзвешивания в парах на микрофазах флуориметрических реагентов различной природы (квантовые точки сульфида кадмия/хитозан, органические азолотриазиновые соединения, смешанные фазы). Это, в свою очередь, позволяет выбирать более простые, доступные и быстрые методы и средства анализа в рутинных экспериментах.

ЖАХ DOI: [10.1134/S106193482405006X](https://doi.org/10.1134/S106193482405006X).

Кучменко Т. А., д.х.н., профессор РАН, tak1907@mail.ru; Вандышев Д.Ю., francy_2007@mail.ru; Ягов В.В., Умарханов Р.У., Леднева И.В. (Воронежский государственный университет инженерных технологий, кафедра физической и аналитической химии, Институт геохимии и аналитической химии им. В.И. Вернадского РАН, Москва; Воронежский государственный университет).

3. Обсуждаются результаты эксперимента по тестированию возможностей применения растворов 6-оксо-2-фенилимидазо[1,2-*b*]пиридо[4,3-*e*][1,2,4]триазин-7(6*H*)-ил)уксусной кислоты на планшетах и целлюлозных носителях для регистрации избыточного относительно биологически нормального содержания летучих органических соединений, которые сопровождают воспаления эндометрия. Флуоресцентные свойства красителя изучались с использованием гинекологической слизи коров, отобранной в разные периоды (до, после родов) и носовой слизи новорожденных телят. Отклик тест-систем сопоставлен с клинически установленными диагнозами коров и результатами микробиологических исследований. Проведена оценка ложно положительных и ложно отрицательных срабатываний тест-систем на основе 6-оксо-2-фенилимидазо[1,2-*b*]пиридо[4,3-*e*][1,2,4]триазин-7(6*H*)-ил)уксусной кислоты. Рассмотрена возможность применения данного флуорохромного реагента для экспрессной диагностики воспаления эндометрита у коров в режиме «на месте».

ЖАХ. DOI: [10.1134/S1061934824700588](https://doi.org/10.1134/S1061934824700588)

Кучменко Т. А., д.х.н., профессор РАН, tak1907@mail.ru; Вандышев Д.Ю., francy_2007@mail.ru; Скориков В. Н., skorikov.75@yandex.ru; Ягов В.В., Умарханов Р.У., Михалев В.И. (Воронежский государственный университет инженерных технологий, кафедра физической и аналитической химии; Институт геохимии и аналитической химии им. В.И. Вернадского РАН, Воронежский государственный университет; Всероссийский научно-исследовательский ветеринарный институт патологии, фармакологии и терапии).

4. Предложены мицеллярно-насыщенные фазы неионных ПАВ (их смеси с катионными ПАВ) в качестве тест-средств, позволяющих эффективно концентрировать аналитические формы фенола, резорцина, флороглюцина, тимола, 1-, 2-нафтолов ($R = 85 - 97\%$) и определять их (индивидуально и суммарно) на уровне десятых и сотых долей ПДК в

водных средах и лекарственных формах при концентрациях порядка $n \times 10^{-8}$ М методами колориметрии с применением цифровых технологий. Концентрирование указанных фенолов осуществляли в виде аналитических форм, образованных реакциями с 4-нитрофенилдиазонием, 4-аминоантипирином и реактивом Фолина-Чокальтеу в присутствии различных высаливателей, компонентов рН-индуцирования фаз (NaOH, Na₂CO₃) в изотермическом режиме (20-25°C). Для внелабораторного анализа разработан компаратор, позволяющий интегрально фиксировать превышение уровня ПДК фенолов «on-site» на уровне долей ПДК.

Доронин С.Ю., д.х.н., doroninsu@mail.ru, Цыгулева Э.И., musja2525@mail.ru (Саратовский национальный исследовательский государственный университет, кафедра аналитической химии и химической экологии).

5. Предложен *новый* подход для снижения предела обнаружения (более, чем на 2 порядка) *n*-аминобензойной кислоты и её лекарственных производных в реакциях конденсации с *n*-диметиламинобензальдегидом (ДМАБА), основанный на сочетании катализа анионными (эффект «мицеллярного катализа») и концентрирования неионными (эффект «мицеллярной микроэкстракции») ПАВ. Оптимизированы условия концентрирования и последующего тест-определения нанограммовых количеств *n*-аминобензойной кислоты, новокаина, новокаиамида, церукада мицеллярно-насыщенными фазами неионных и анионных ПАВ в варианте гомогенной жидкостной микроэкстракции аналитических форм – оснований Шиффа (ОШ), образованных реакциями аналитов с ДМАБА при температуре 20-25°C в присутствии различных высаливателей. Разработан компаратор для внелабораторного определения аналитов при концентрациях порядка $x \times 10^{-8}$ М в различных объектах. Мицеллярно-насыщенные фазы Тритона X-114 и додецилсульфата натрия предложены в качестве тест-средств, позволяющих эффективно концентрировать аналитические формы ОШ исследуемых аналитов (степени извлечения > 95 %).

Доронин С.Ю., д.х.н., doroninsu@mail.ru; Соколова Т.А. (Саратовский национальный исследовательский государственный университет, кафедра аналитической химии и химической экологии).

6. Предложены индикаторные бумаги с иммобилизованным парадиметиламинобензальдегидом для визуально-колориметрического и цветометрического определения антибактериальных соединений группы цефалоспоринов (цефалексина, цефуроксима, цефотаксима, цефтриаксона, цефазолина) с применением камеры смартфона. Оценено влияние условий и типа фоторегистрирующего устройства. Правильность разработанных экспресс-методик оценивали способом введено–найденно, методики характеризуются удовлетворительной воспроизводимостью результатов (S_r не превышает 19%). Выполнен анализ лекарственных препаратов – таблеток “Аксосеф” и капсул “Цефалексин”, найденные содержания цефалоспоринов согласуются с заявленными интервалами их содержаний в препаратах.

Тумская А.В., Косырева И.В. Экспресс-определение некоторых цефалоспоринов с помощью иммобилизованного парадиметиламинобензальдегида // Журнал аналитической химии, 2024, том 79, № 2, с. 1–8.

Разработаны способы экспресс-определения цефтазидима и цефепима с применением камеры смартфона на основе иммобилизованных на целлюлозную матрицу 4-гидрокси-3-метоксибензальдегида и 4-диметиламинобензальдегида. Получены цветовые шкалы для экспресс-определения антибиотиков в диапазоне концентраций 0.1-32 мг/мл. При визуально-колориметрическом определении β -лактамов установлены некоторые метрологические характеристики: интервал ненадежности (ИН) – 0.10-0.60 мг/мл, диапазон определяемых содержаний (ДОС) – 0.50-32 мг/мл, предел обнаружения (ПрО) – 0.50 мг/мл. Построены линейные зависимости интенсивностей цветовых параметров в моделях RGB, HSV и CMYK от I_{gc} антибиотика. Установлены наилучшие по чувствительности и коэффициенту регрессии градуировочных зависимостей параметры – B, S и Y. Получены профили лепестковых диаграмм и зависимости площадей лепестковых диаграмм от I_{gc} β -лактамов. Показано снижение значений предела обнаружения и нижних границ определяемых содержаний при цветометрическом определении цефтазидима и цефепима, по сравнению с визуально-колориметрическим определением β -лактамов (ДОС – 0.20-32 мг/мл, ПрО – 0.10 мг/мл). Оценено взаимодействие аминогрупп цефалоспоринов с ароматическими альдегидами в водных растворах с помощью спектрофотометрии, на поверхности твердой матрицы – спектроскопии диффузного отражения. Отмечено появление полос в интервале 410-480 нм как в спектрах поглощения, так и в спектрах

диффузного отражения при добавлении антибиотика в системы « β -лактамы – 4-диметиламинобензальдегид» и « β -лактамы – 4-гидрокси-3-метоксибензальдегид». Проведена оценка правильности экспресс-методик определения цефтазидима и цефепима способом «введено-найденно», S_r не превышает 0.09. Разработанные методики можно рекомендовать для оценки содержания β -лактамных антибиотиков при первичном скрининге.

Аникина А. И., Каратеева Е. Д., Косырева И. В. Визуально-колориметрическое и цветометрическое определение цефтазидима и цефепима с помощью иммобилизованных 4-гидрокси-3-метоксибензальдегида и 4-диметиламинобензальдегида // Бутлеровские сообщения, 2024. - Т. 78. - № 4. – С. 118-125.

Косырева И.В., i_kosyreva@mail.ru (Саратовский национальный исследовательский государственный университет, кафедра аналитической химии и химической экологии).

Химические сенсоры и бионические системы на их основе (электронный нос, язык, глаз)

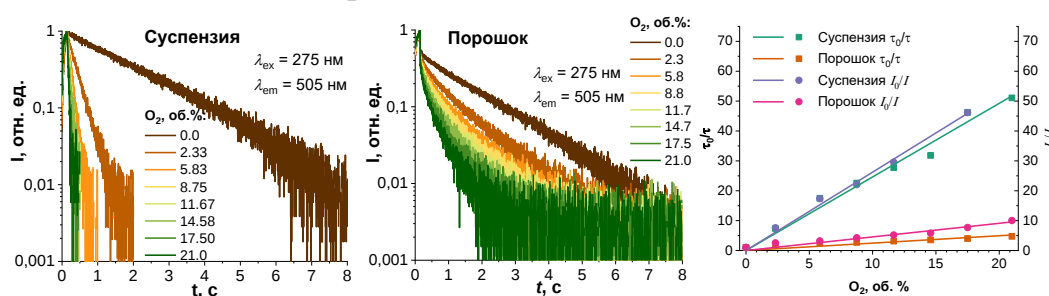
В отчетном году продолжали развиваться работы в области фундаментальных исследований, стали разнообразнее тематики, которые направлены на решение приоритетных практических задач (диагностика различных процессов, состояния человека и других живых систем, биопроб, пищевых продуктов, фармацевтических препаратов, газовых сред). Развиваются новые подходы в классическом сенсорном анализе и миниатюризации самих элементов и систем на их основе, изучении новых возможностей в анализе отдельных соединений в газовых и жидких средах, а также в области неопределенного анализа сложных смесей летучих соединений по их цифровым паттернам (системы искусственного обоняния).

Результаты работ реализованы в виде законченных НИОКР, хозяйственных договоров с предприятиями (Воронеж, ВГУИТ), развивающихся НИР по тематикам РНФ (Воронеж, ВГУИТ, ВГУ; Томск, НИТПУ), других фундаментальных и прикладных исследований (Москва, ГЕОХИ РАН им. А.И. Вернадского, МГУ им. М.В. Ломоносова; НИЦ «Курчатовский институт»; Черноголовка, ИПТМиОЧМ РАН, Ростов-на-Дону, ЮФУ; Липецк, ЛГТУ). Увеличилось число групп, представляющих свои результаты в этом направлении, среди них научные организации РАН (3) учебные заведения (6).

1. Разработка новых сенсоров на отдельные аналиты в газовых средах

1.1. В НИЦ «Курчатовский институт», Отделении Центра Фотохимии курчатовского комплекса кристаллографии и фотоники изучен процесс тушения долгоживущей флуоресценции тройных комплексов нафталин- β -циклодекстрин-циклогексан, локализованных в матрице двойных комплексов β -циклодекстрин-циклогексан, в водной суспензии кристаллогидратов и порошке, образующемся в результате высыхания кристаллогидратов. В суспензии кинетики флуоресценции моноэкспоненциальны, а тушение происходит динамически, бимолекулярная константа тушения составляет $k_q = 0.87 \times 10^5 \text{ с}^{-1} \text{ М}^{-1}$. В порошке кинетики флуоресценции не моноэкспоненциальны, что обусловлено различной структурой окружения молекул нафталина. Неоднородность окружения выражается в наличии распределения констант скорости безызлучательных процессов и уменьшении доступности молекул нафталина для взаимодействия с кислородом. Значения констант скорости бимолекулярного тушения в случае порошков в 5–10 раз меньше, чем соответствующие значения для суспензий, что указывает на замедление диффузии кислорода при разрушении кристаллогидратов. Исследуемые супрамолекулярные системы могут представлять интерес как потенциальные сенсорные материалы для создания датчиков кислорода.

Сопроводительные иллюстрации:



Ионов Д.С., Dmitriy.Ionov@gmail.com (НИЦ «Курчатовский институт», Отделение Центр Фотохимии курчатовского комплекса кристаллографии и фотоники, лаборатория multifunctional супрамолекулярных систем, Москва).

1.2. В Южном федеральном университете на кафедре аналитической химии получена и охарактеризована серия непредельных моно- и дикарбоксилатов цинка и свинца на основе итаконовой, фумаровой, коричной, транс, транс-муконовой, пропаргиловой и ацетилендикарбоновой кислот, а также их комплексов с полипиридиновыми лигандами (2,2'-дипиридил, 1,10-фенантролин, 4'-фенилтерпиридин). Термолизом металлосодержащих мономеров в присутствии тиомочевины получены нанокомпозиты, содержащие сульфиды цинка и свинца. Нанокомпозиты, содержащие сульфиды цинка и свинца, были использованы при разработке сенсоров сжиженного и природного газа. В целом сенсоры демонстрируют удовлетворительное время отклика от 23.5 до 7.4 с и малое время релаксации от 25.4 до 9.5 с. Наиболее существенное падение сопротивления происходит при концентрации природного газа на воздухе 5% с 936.7 до 25.1 МОм за 9.5 с. Отклонения в ходе эксперимента не превысили 2.9%. Длительная эксплуатация датчиков проводилась в условиях комнатной температуры, которая в исследуемый период изменялась от 22.6 до 39.3°C, и относительной влажности воздуха от 25.1 до 88.4%. Приборы продемонстрировали достаточно стабильную работу в течение не менее 55 суток.

Uflyand I.E., Zhinzhilo V.A., Kugabaeva G.D., Kydralieva K.K., Dzhardimalieva G.I. Synthesis of nickel-containing metal-polymer nanocomposites and their use as a humidity sensor. *Synthetic Metals*. 2024. 307, 117709. <https://doi.org/10.1016/j.synthmet.2024.117709>.

Uflyand I.E., Tkachev V.V., Zhinzhilo V.A., Droган E.G., Burlakova V.E., Dzhardimalieva G.I., Sokolov M.E. Complexes of copper(II), nickel(II), and cobalt(II) itaconates with chelating N-heterocycles: synthesis, structure, thermal properties, sorption activity, and their use in composites science. *J. Coord. Chem.* 2024. 77:15-16, 1700-1723. <https://doi.org/10.1080/00958972.2024.2386680>.

Uflyand I.E., Zhinzhilo V.A., Lifintseva T.V. Synthesis of copper-containing metal-polymer nanocomposites and their use as a humidity sensor, *ChemPhysMater* (2024), <https://doi.org/10.1016/j.chphma.2024.09.003>, 4.25, Q1.

Uflyand I.E., Baimuratova R.K., Korchagin D.V., Dzhardimalieva G.I., Chernyayev D.A., Zhinzhilo V.A. Preparation of ZnS-Based Nanocomposites by Thermolysis of Zinc-Containing Monomers in the Presence of Thiourea: Their Characterizations and LPG Sensing Applications. *J. Inorg. Organomet. Polym.* (2024). <https://doi.org/10.1007/s10904-024-03514-5>.

Уфлянд И.Е., д.х.н., ieuflyand@sfedu.ru; Жинжило В.А. i06993@yandex.ru (Южный федеральный университет, кафедра аналитической химии, Ростов-на-Дону).

2. Разработка новых сенсоров на отдельные аналиты в жидких средах

2.1. В результате совместной работы группы ученых из Липецкого государственного технического университета (руководитель Т.Н. Ермолаева) и Института проблем технологии микроэлектроники и особо чистых материалов РАН (руководитель Гражулене С.С., Grazhule@iptm.ru) выполнен комплекс исследований по формированию устойчивого рецепторного распознающего слоя пьезоэлектрических сенсоров на основе магнитных углеродных нанокompозитов под действием внешнего магнитного поля. **Полный текст см. раздел Химические сенсоры. Наноаналитика.**

Гражулене С.С., д.х.н.. Grazhule@iptm.ru (Институт проблем технологии микроэлектроники и особо чистых материалов РАН, лаборатория спектроскопических методов анализа, лаборатория ядерно-физических и масс-спектральных методов анализа. Черноголовка).

2.2. Научной группой под руководством д.х.н. Зяблова А.Н. в Воронежском государственном университете разработаны пьезоэлектрические сенсоры на основе полимеров с молекулярными отпечатками (ПМО) аспартама. Установлен диапазон определяемых концентраций $1.0-1.0 \cdot 10^{-3}$ г/л, предел обнаружения аспартама – $5 \cdot 10^{-4}$ г/л. Показано, что посторонние компоненты, обычно присутствующие в безалкогольных напитках, не мешают определению аспартама с использованием молекулярноимпринтированного (МИП) сенсора. Полученные результаты сравнили с данными референтного метода ВЭЖХ: результаты двух методов хорошо согласуются. Разработанный МИП-сенсор может быть использован для простого и экспрессного определения аспартама в безалкогольных напитках.

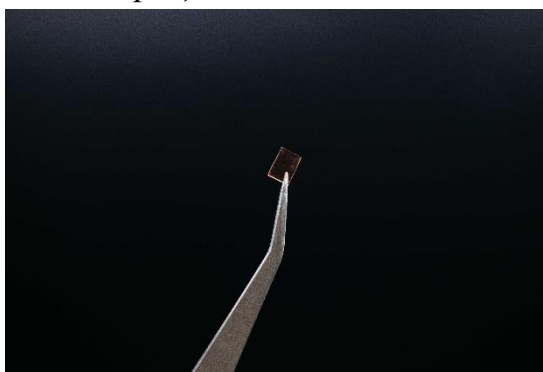
Применение пьезоэлектрических сенсоров для определения аспартама в жидких средах / А. Ю. Выборный, О. А. Шувалова, А. Н. Зяблов, КаоНьян Линь // Заводская лаборатория. Диагностика материалов. – 2024. – Т. 90, № 7. – С. 27-31. DOI: <https://doi.org/10.26896/1028-6861-2024-90-7-27-31>.

Зяблов А.Н., д.х.н.. alex-n-z@yandex.ru (Воронежский государственный университет, кафедра аналитической химии).

3. Разработки в направлении мультисистем

3.1 В Национальном исследовательском Томском государственном университете (кафедра аналитической химии) под руководством Гавриленко Н.А. разработаны способы определения веществ с использованием мультисигнальной системы (колориметрия, спектрофотометрия, визуальное определение) полиметакрилатной матрицы. Разработаны сенсоры для селективного определения катионов железа в поверхностных водах, пестицида карбофуран, pH среды, группового определения катионов тяжелых металлов, а также мультисигнальные чувствительные элементы на основе наночастиц серебра и золота. Двухсигнальный спектрофотометрический и колориметрический подход к определению можно использовать для обнаружения глюкозы, антиоксидантов и пероксидных соединений. Условия взаимодействия наночастиц золота и серебра с компонентами матрицы, глюкозой, пероксидом водорода и некоторыми другими веществами исследованы путем изучения влияния на аналитический сигнал таких факторов, как pH раствора, количество наночастиц в полимерной матрице, время контакта и концентрация аналита.

Сопроводительная иллюстрация:



Гавриленко Н. А.. д.х.н., gavrilenko@mail.tsu.ru (Национальный исследовательский Томский государственный университет, кафедра аналитической химии).

3.2. В рамках выполнения проекта РНФ «Колориметрическая мультисенсорная система с цифровой обработкой изображения» разработаны способы определения веществ с использованием цифровой колориметрической обработки изображения полиметакрилатных сенсоров

на основе наночастиц серебра и золота. Переход от селективного определения индивидуальных веществ к мультисенсорным платформам позволяет сократить время и повысить достоверность анализа за счет использования нелинейной нейронной сети для анализа колориметрической информации.

Предложен колориметрический способ количественного анализа глюкозы с помощью смартфона. Проведена оптимизация формы совмещения сенсоров в единой платформе без потери способности давать реакцию с определяемыми элементами, сопровождающуюся оптическим эффектом. Результатом испытания нескольких форм совмещения чувствительных элементов оптического химического сенсора в единую платформу стала рекомендация по использованию наночастиц серебра и золота в комбинации с нелинейной нейронной сетью по распознаванию целевого аналита и расчету его концентрации в пробе.

Сопроводительная иллюстрация:



Гавриленко М.А., д.х.н., dce@mail.ru (Национальный исследовательский Томский политехнический университет, отделение химической инженерии).

3.3. В рамках работ по гранту РФФИ для молодых ученых (<https://doi.org/10.3390/s24113634>; <https://doi.org/10.36107/spfp.2024.1.559>) в Воронежском государственном университете инженерных технологий (ВГУИТ) научной группой под руководством доц. Шуба А.А. проведено исследование по оценке возможности использования массива газовых химических сенсоров на основе пьезокварцевых микровесов с поликомпозиционными покрытиями для оценки микробиологических показателей качества молока и сравнения микрофлоры образцов молока. Исследована газовая фаза над пробами искусственного и сырого молока с

помощью газовых сенсоров, определены физико-химические и микробиологические показатели по ГОСТ (содержание жира, белка, сухих веществ, титруемую кислотность, КМАФАнМ, содержание дрожжей и плесени), для выделенных в молоке микроорганизмов проводилась видовая идентификация микроорганизмов с помощью биоинформатического анализа. Показано, что различия в сигнала сенсоров связаны с изменениям физико-химических и микробиологических показателей образцов молока. Предложена расчёт восьми дополнительных параметров сенсоров с поликомпозиционными покрытиями для оценки микросодержаний летучих соединений в газовой фазе. Установлены наиболее информативные выходные данные массива сенсоров для оценки микробиологических показателей, в том числе с применением проекционных методов обработки многомерных данных. Построены регрессионные модели, позволяющие прогнозировать количество микроорганизмов в пробах молока на основе данных информативных датчиков с погрешностью не более 17%. Предел определения КМАФАнМ в молоке составил 243 ± 174 КОЕ/см³. Предложены пути повышения точности и специфичности определения микроорганизмов в пробах молока.

Шуба А.А., к.х.н., an-mishina@yandex.ru; Умарханов Р.У.; Богданова Е.В., ek-v-b@yandex.ru; Анохина Е.П., katya_anoh@mail.ru (Воронежский государственный университет инженерных технологий, кафедра физической и аналитической химии).

3.4. На базе кафедры физической и аналитической химии ВГУИТ (Воронеж) объединенным коллективом исследователей из нескольких вузов и институтов РАН страны под руководством д.х.н., профессора РАН Кучменко подведены работы по оценке сорбционных свойств квантовых точек сульфида кадмия без модификации и модифицированных родамином 6Ж в парах легколетучих органических соединений – биомаркеров воспалительных процессов. Сорбционные свойства к парам спиртов, кетонов, аминов, органических кислот и воды изучены с применением высокочувствительного пьезокварцевого микровзвешивания. Показаны способы ранжирования данных, полученных в результате использования газового анализатора по типу «электронный нос» на основе пьезосенсоров с наноструктурированными модификаторами. Продемонстрирована возможность применения полученных тест-систем на биопробах –

гинекологической слизи крупного рогатого скота. Дополнительно оценивали состояние животного по гинекологической пробе введением люмофорного реагента. Полученные результаты тесно коррелируют с предварительным диагнозом специалистов. Оформлено и получено 2 патента на изобретения. Результаты опубликованы в Журнале аналитической химии.

Кучменко Т.А., д.х.н., профессор РАН, tak1907@mail.ru; Хмелевская Т.Н., tatiana_ilinova@mail.ru; Вандышев Д.Ю. francy_2007@mail.ru; Умарханов Р.У., rus_270487@mail.ru; Менжулина Д.А., darinochka_08@mail.ru; Скориков В.Н., Морозов А.В. (Воронежский государственный университет инженерных технологий, кафедра физической и аналитической химии; Институт геохимии и аналитической химии им. В. И. Вернадского РАН; ВГМУ им. Н.Н. Бурденко. кафедра клинической диагностики и репидемики детских болезней; Воронежский государственный университет).

4. Разработка приборов, тест-систем на основе сенсоров

4.1. Завершена НИОКР в рамках Гранта «СТАРТ-22»(научный руководитель проекта д.х.н., профессора РАН Кучменко Т.А., по разработке бисенсорного носимого трекера для анализа летучих соединений кожи на запястье в непрерывном режиме. Проведено исследование стабильности передачи сигналов по беспроводной сети от сенсоров в программное обеспечение. Осуществлено обучение сенсоров опытного образца бисенсорного трекера по основным летучим соединением – маркерам патологических состояний организма человека. Исследовано свыше 30 различных по природе летучих соединений, для которых рассчитаны кинетические параметры сорбции, необходимые для осуществления идентификации патологических маркеров состояний в летучем метаболоме человека. Установлена высокая надёжность аналитического сигнала, диагностических параметров сенсоров при выборе разного времени контроля от 5 до 30 мин., а также при замене сенсоров.. Установлен набор состояний организма человека, которые возможно диагностировать при помощи разрабатываемого бисенсорного трекера.

Сопроводительные иллюстрации:



Кучменко Т.А., д.х.н., профессор РАН, tak1907@mail.ru, Доровская Е.С. (Воронежский государственный университет инженерных технологий, кафедра физической и аналитической химии).

4.2. Реальный сектор экономики проявляет интерес к разработкам объективных систем по измерению запаха. Положительно оценена разработки прибора и методики типа «искусственное обоняние» на основе газовых пьезосенсоров для анализа в режиме «на месте» в цехах производства пенополиуретана (ВГУИТ, ООО «Сенсорика Новые Технологии», ООО «Эгида»). Особенностью исследования и предложенного решения является разработка эксклюзивного программного обеспечения для преобразования откликов массива сенсоров в балльную оценку и описательную характеристику запаха образцов ППУ в соответствие с органолептической оценкой запаха на производстве и потребителями.

Кучменко Т.А., д.х.н, профессор РАН, tak1907@mail.ru; Умарханов Р.У., rus_270487@mail.ru (Воронежский государственный университет инженерных технологий , ООО «Сенсорика-Новые технологии»).

4.3. В Московском государственном университете им. М.В. Ломоносова под руководством Моросановой Е.И. разработано трехмерное микрофлюидное устройство на основе бумаги (DμPAD) типа хеометра для линейно-колористического определения тиолов в биологических жидкостях и фармацевтических препаратах. Определение основано на ингибирующем действии аналитов – тиолов – на окисление пирокатехина в присутствии неочищенного экстракта шампиньона *Agaricusbisporus* (ЭШ).

Присутствие мочевой кислоты, билирубина, цистина, глицина, аланина, пролина и метионина не мешает определению. Для устранения мешающего влияния аскорбиновой кислоты до 350 мг/л предложено использование неочищенного экстракта огурца *Cucumissativus* (ЭО) в качестве источника аскорбатоксидазы.

Микрофлюидное устройство имеет трехмерную структуру и состоит из трех слоев: слой микрозоны, содержащей ЭШ, слой микрозоны, содержащей ЭО и слой хеометра, содержащего пирокатехин и 3-метил-2-бензотиазолинон гидразон, что позволяет проводить пробоподготовку (окисление аскорбиновой кислоты ЭО) и предотвращает взаимодействие ЭШ и пирокатехина до нанесения пробы.

Аналитическим сигналом является длина неокрашенного участка канала хеометра. Предложена методика определения тиолов с использованием разработанного микрофлюидного устройства: диапазон определяемых содержаний составляет $(1.1 - 10.0) \cdot 10^{-4}$ М, правильность 92.0–112.0 %, относительное стандартное отклонение 2.7–10.8 %.

Микрофлюидное устройство применено для определения общего содержания тиолов в искусственной моче и N-ацетилцистеина в фармацевтическом препарате. Полученные результаты хорошо согласуются с результатами спектрофотометрического определения с помощью реактива Элмана.

Моросанова Е.И., д.х.н., emorosanova@gmail.com (МГУ им. М.В. Ломоносова, химический факультет, кафедра аналитической химии. лаборатория концентрирования).

Наноаналитика

В 2023 году число отчетов в разделе «Наноаналитика» по сравнению с прошлым годом немного сократилось. Сравнение с отчетами за последние 3 года показало, что некоторые группы, постоянно работающие в данном направлении аналитической химии в СГУ, МГУ, ГЕОХИ РАН, СПбГУ, Казанском (Приволжском) ГУ, Воронежском ГУ, Липецком ГТУ свои результаты в данный раздел отчета не представили. Анализ отчетов показал, что часть результатов по наноаналитике направлена в разделы, посвященные методам или объектам анализа. В этом плане следует отметить работы группы Маркина А.В. (СГУ) по развитию и применению в анализе метода ГКР, позволившего авторам

снизить фоновый сигнал от биологических жидкостей и предложить быстрый способ определения сульфаниламидов в моче и слюне, а также цефалоспориновых антибиотиков, противоопухолевого препарата метотрексата и креатинина в моче. Достаточно интересен подход, предложенный в ЮФУ и основанный на применении термолиза металлосодержащих мономеров в присутствии тиомочевины для получения нанокомпозитов, содержащих сульфиды цинка и свинца.

С.Н. Штыков

1. Предложен подход к сочетанию концентрирования 13-ти пищевых и иных азокрасителей методом магнитной твердофазной экстракции (МТФЭ) на магнитных наночастицах (МНЧ) магнетита, модифицированных катионными полиэлектролитами хитозаном (ХТЗ) и полиэтиленимином (ПЭИ), а также молекулами катионного ПАВ бромид ацетилтриметиламмония (ЦТАБ), с их спектрофотометрическим определением в ряде пищевых объектов. Показано, что наночастицы магнетита, модифицированные ПЭИ и ХТЗ, являются перспективными сорбентами для концентрирования сульфосодержащих анионных моно- и бисазокрасителей методом МТФЭ. Выявлены закономерности сорбции и концентрирования азокрасителей на модифицированных МНЧ магнетита, рассмотрены модели сорбции и кинетика процесса. Показано значительное упрощение и ускорение процедуры отделения сорбента с аналитом от жидкой матрицы анализируемого раствора за счет использования постоянного магнита и явления суперпарамагнетизма наноразмерных МНЧ магнетита. В июне 2024 года защищена кандидатская диссертация Казимировой К.О. «Концентрирование и определение пищевых азокрасителей с применением наночастиц магнетита, модифицированных полиэлектролитами».

Исследован процесс сорбции 13-ти азокрасителей на модифицированных МНЧ магнетита. Проведено сравнение сорбции синтетических азокрасителей на $\text{Fe}_3\text{O}_4@\text{ХТЗ}$, $\text{Fe}_3\text{O}_4@\text{ПЭИ}$ и $\text{Fe}_3\text{O}_4@\text{ЦТАБ}$. На основании варьирования pH среды, времени контакта фаз, массы сорбента, концентрации и объема анализируемого раствора определены степени извлечения красителей в оптимальных условиях. Выявлено влияние на степень извлечения природы азокрасителя, природы заместителей и природы модификатора поверхности. Найдены условия десорбции красителей с поверхности сорбентов. Выяснено влияние pH

среды на значение ζ -потенциала Fe_3O_4 , $\text{Fe}_3\text{O}_4@\text{ХТЗ}$, $\text{Fe}_3\text{O}_4@\text{ПЭИ}$, $\text{Fe}_3\text{O}_4@\text{ПАК}$, $\text{Fe}_3\text{O}_4@\text{ЦТА}$ до ККМ, $\text{Fe}_3\text{O}_4@\text{ЦТА}$ при избытке ЦТАБ выше ККМ в растворе и $\text{Fe}_3\text{O}_4@\text{ДДС}$ (298К, $n=3$, $P=0.95$).

Установлены характер и природа сорбции: построены и проанализированы модели изотерм сорбции азокрасителей, которые в большинстве случаев соответствовали модели Ленгмюра и мономолекулярному характеру сорбции ($R^2=0.9999$). Рассмотрены кинетические модели сорбции и показано, что псевдо-второй порядок предпочтителен для описания сорбции красителей. В кислой и нейтральной области ответственными за сорбцию являются электростатические взаимодействия, а в щелочной значительную роль играют также водородная связь и гидрофобные взаимодействия. Оценена возможность регенерации до 95-99 % МНЧ, модифицированных ХТЗ, ПЭИ и ЦТАБ после сорбции азокрасителей. Рассчитаны сорбционная емкость, значения коэффициентов концентрирования, которые изменялись в интервале $(1.6 - 3.2) \cdot 10^3$ и коэффициентов распределения D в системе вода – МНЧ ($\lg D$ 4.6-5.5). С целью повышения эффективности концентрирования на примере пищевых азокрасителей изучена зависимость степени извлечения и коэффициента концентрирования от объема анализируемого раствора. Применение МНЧ позволяет концентрировать пищевые азокрасители в 75 раз.

Разработаны способы сорбционно-спектрофотометрического и сорбционно-хроматографического определения синтетических пищевых азокрасителей, основанные на использовании МНЧ, модифицированных ХТЗ, ПЭИ и ЦТАБ. Показано, что применение хемометрического подхода (PLS1) позволяет определять азокрасители в их смеси после десорбции с МНЧ без хроматографического разделения. Правильность определения подтверждена методом “введено-найдено” и сравнением с результатами, полученными методом ВЭЖХ. Показано, что применение концентрирования на модифицированных МНЧ позволяет обеспечить обнаружение отдельных пищевых азокрасителей в водных растворах на уровне 1.1-6.2 нг/мл. Разработанные методики апробированы на реальных объектах: в шипучих таблетках «Витамин С» (E122, E124 и E102); в сиропе «PROFESSIONAL SYRUPS» с ароматом Ваниль (E102 и E110), в капсулах ЛП «Арбидол» и в пастилках «Доктор МОМ» (E122), в спортивном напитке «Guarana Light» (E124) в безалкогольных напитка «Тархун» и «Mountain Dew» (E102). Относительная погрешность определения азокрасителей не превышает 10%.

Штыков С.Н., д.х.н., shtykovsn@mail.ru; Андреева К.О. (Саратовский национальный исследовательский государственный университет, кафедра аналитической химии и химической экологии).

2. Изучено влияние pH на спектры поглощения магнезона ХС (МХС) и люмогаллиона ИРЕА (ЛГ) в интервале pH 1.1 – 11 в универсальных буферных растворах и показано, что в интервале pH 1.1–4.5 при диссоциации сульфогруппы, имеющей изолированную π -систему, изменения в спектрах поглощения МХС и ЛГ отсутствуют. Сложная форма полосы с максимумом в интервале 490–500 нм и плечом при 420 нм может быть связана с одновременным существованием азо- и хинонгидразонной таутомерных форм МХС. Показано, что в интервале pH 7.0–9.6 в спектре появляется новая немного более интенсивная полоса с максимумом 580 нм, с четкой изобестической точкой в спектре при 530 нм, вследствие диссоциации ОН-группы бензольного кольца (образование формы HR^{2-}). Определена рК диссоциации ОН-группы, которая для формы HR^{2-} равна 7.16.

Сложная форма полосы ЛГ с максимумом в интервале 400–430 нм и плечом при 355–360 нм может быть связана с одновременным существованием азо- и хинонгидразонной таутомерных форм. Показано, что в интервале pH 5.0–6.1 в спектре появляется новая полоса с максимумом 438 – 440 нм, с четкой изобестической точкой в спектре при 405 нм, что связано с диссоциацией ОН-группы резорцинового кольца, находящейся в *n*-положении к азогруппе. В интервале pH 6.5 – 7.6 полоса максимум полосы H_2R^{2-} смещается до 445 нм и одновременно появляется плечо при 535–545 нм и в спектре отсутствует изобестическая точка, которая появляется в более щелочных средах (480 нм) при $\text{pH} \geq 8$. Определены рК диссоциации ОН-групп, которые для форм H_2R^{2-} и HR^{3-} равны 5.9 и 8.5, соответственно.

Установлен факт аномально большого сдвига ($\Delta\lambda$ 100 нм) в спектрах поглощения МХС при образовании ионных ассоциатов формы HR^{2-} с катионами цетилпиридиния (ЦП), цетилтриметиламмония (ЦТА) и цетилметилимидазолия (ЦМИ) с $\lambda = 680$ нм. Аномально большой сдвиг ($\Delta\lambda$ 90 нм) в спектрах поглощения ЛГ при образовании ионных ассоциатов формы HR^{3-} с катионами ЦП и ЦМИ с $\lambda = 600$ нм наблюдается в достаточно узком интервале pH. При образовании ассоциата ЛГ с ЦТА $\Delta\lambda$ 20 нм. Определены «кажущиеся» значения рК обоих реагентов, обусловленные образованием ионных ассоциатов. Изучено влияние

мицеллярных концентраций ЦП на спектры поглощения МХС и ЛГ и показано, что солюбилизация МХС в мицеллах практически не изменяет спектр ионного ассоциата и сильно влияет на спектр ЛГ. Предложен тест-метод определения ЦП и ЦТА в водном растворе на хроматографической бумаге по изменению цвета пятна МХС.

Штыков С.Н., д.х.н., shtykovsn@mail.ru Шалабай С.А., Тюнина Ю.А. (Саратовский национальный исследовательский государственный университет, кафедра аналитической химии и химической экологии).

3. Результаты всей работы в рамках гранта РНФ 23-23-00609 характеризуются как высоко перспективные для создания и применения сенсорных систем анализа летучих соединений (ЛОС), в том числе патогенных для характеристики состояния живых организмов. Это связано с несколькими факторами, в том числе:

- наличием простой и методики быстрого синтеза квантовых точек (КТ) с различными оболочками, которая позволяет получить стабильные по свойствам наночастицы, сорбционные свойства которых по отношению к ЛОС не меняются длительное время.
- Положительно оценено введение дополнительных реагентов в полимерную оболочку КТ и оптимальным является подход введения реагентов до синтеза КТ в стабилизатор. Реагенты меняют сорбционные свойства КТ, повышают селективность и изменяют визуальный отклик фаз на носителях разной природы и в растворе.
- Даже в отсутствие визуального фиксируемого отклика получаемые КТ перспективны для изменения эксплуатационных свойств газовых пьезосенсоров в системах «электронный нос» за счет повышения стабильности, времени жизни и селективности детектирования ЛОС в смеси.
- Фазы на основе КТ хорошо зарекомендовали себя при анализе реальных объектов: белковые и спиртосодержащие продукты; биопробы для оценки состояния репродуктивной системы коров.

Кучменко Т.А., д.х.н., профессор РАН, tak1907@mail.ru; Умарханов Р.У., rus_270487@mail.ru (Воронежский государственный университет инженерных технологий).

4. Изучена возможность определения глутатиона с использованием люминесцентных нанокластеров меди. Стратегия определения глутатиона

основана на селективном ингибировании тушения люминесценции нанокластеров меди в результате связывания тушителя с сульфгидрильной группой аналита. Молярную концентрацию глутатиона, связанного с тушителем, определяли по увеличению интенсивности полосы люминесценции нанокластеров меди при длине волны 420 нм. Установлено, что максимальная интенсивность люминесценции нанокластеров меди в присутствии тушителя и глутатиона достигается через 2.5 мин после смешивания всех реагентов в диапазоне pH 2–5. Предел обнаружения глутатиона в выбранных оптимальных условиях составляет 16 мкМ, диапазон определяемых содержаний составляет от 50 мкМ до 0.7 мМ. Относительное стандартное отклонение при определении 0.3 мМ глутатиона не превышает 0.04. Оценена селективность разработанного подхода по отношению к неорганическим ионам и различным биомолекулам.

Фурлетов А.А., к.х.н., aleksei_furletov@mail.ru; Апяри В.В., д.х.н., aryari@mail.ru (МГУ им. М.В. Ломоносова, химический факультет, кафедра аналитической химии, лаборатория концентрирования).

5. Систематизированы литературные данные по способам синтеза и применению кремниевых наночастиц в химическом анализе. Показано, что кремниевые наночастицы — перспективные наноразмерные материалы, которые за счет своей хорошей стабильности, низкой токсичности, оптических характеристик и других свойств нашли широкое применение в аналитической химии. Для синтеза кремниевых наночастиц применяются различные варианты физического, химического, биогенного синтеза. Варьируя условия, можно получать наночастицы с заданными геометрическими параметрами и оптическими свойствами. Благодаря низкой токсичности, высокой стабильности, возможности модифицирования, хорошим флуоресцентным и другим свойствам данные частицы можно рассматривать как перспективный материал для решения многих задач аналитической химии: обнаружения и определения ионов тяжелых металлов, радикалов, анионов и биологически активных соединений (глюкоза, гемоглобин, дофамин и др.).

Проведен синтез люминесцирующих кремниевых наноточек со средним диаметром 3.2 ± 1.9 нм, которые характеризуются возбуждением люминесценции при 360 нм, люминесценцией — при 445 нм. Изучено взаимодействие кремниевых наноточек с катехоламинами: дофамином,

норадреналином и адреналином. Показано, что в результате взаимодействия наноточек с дофамином происходит уменьшение интенсивности люминесценции, что можно использовать как аналитический сигнал для определения этого катехоламина. При взаимодействии наноточек с норадреналином и адреналином в спектре люминесценции появляется полоса при 500 нм и несколько уменьшается интенсивность люминесценции при 445 нм, как аналитический сигнал при определении этих катехоламинов следует использовать отношение интенсивности люминесценции при 500 нм к интенсивности люминесценции при 445 нм. Пределы обнаружения дофамина, норадреналина и адреналина составили 2, 0.06 и 0.14 мкМ, соответственно, диапазоны определяемых содержаний: 6 – 50 мкМ, 0.20 – 50 мкМ и 0.47 – 50 мкМ, определению не мешают многие гидрофильные и слабо заряженные вещества. Предложенный способ определения катехоламинов применим для анализа лекарственных препаратов.

Матяш М.В., masha13_1992@mail.ru; Апяри В.В., д.х.н., aryari@mail.ru (МГУ им. М.В. Ломоносова, химический факультет, кафедра аналитической химии, лаборатория концентрирования).

6. Получены золи серебра с использованием экстрактов из листьев растений с разной антиоксидантной активностью (АОА). Фитосинтезированные наночастицы серебра (фито-AgНЧ) охарактеризованы с помощью ИК-Фурье спектроскопии, просвечивающей электронной микроскопии, энергодисперсионной рентгеновской спектроскопии, методом дифракции электронов в выбранной области, УФ спектрофотометрии, электрохимической импедансной спектроскопии и циклической вольтамперометрии. Доказано участие –ОН и –NH₂ групп соединений растительных экстрактов в формировании фито-AgНЧ. Изучено влияние АОА экстрактов растений, возрастающей в ряду крыжовник – жимолость – земляника – облепиха, на размер фито-AgНЧ, их оптические и электрохимические свойства. Показано, что увеличение АОА растительного экстракта приводит к формированию более мелких и электрохимически активных фито-AgНЧ, которые обеспечивают снижение сопротивления переноса заряда. Наблюдается размерно-зависимое изменение величины и положения пика плазмонного резонанса наночастиц от величины АОА экстракта. Предложено рассматривать АОА растительного экстракта, как один из ключевых параметров

целенаправленного фитосинтеза и прогнозирования свойств фитонаночастиц.

N. Stozhko, A. Tarasov, V. Tamoshenko, M. Bukharinova, E. Khamzina and V. Kolotygina. Green Silver Nanoparticles: Plant-Extract-Mediated Synthesis, Optical and Electrochemical Properties // Physchem. 2024, 4, 402–419. <https://doi.org/10.3390/physchem4040028>

Стожко Н.Ю., д.х.н., sny@usue.ru (Уральский государственный экономический университет, кафедра физики и химии, научно-инновационный центр сенсорных технологий, Екатеринбург).

7. Изучено влияние сферических наночастиц серебра и мицелл поверхностно-активных веществ на интенсивность сенсibilизированной флуоресценции комплексов ионов европия с представителем группы производных тетрациклина - доксициклином, и разработан новый чувствительный и простой способ флуориметрического определения доксициклина в растворах. Нами показано, что в присутствии наночастиц серебра и ионов Eu^{3+} интенсивность флуоресценции аналитической системы, содержащей исследуемый антибиотик, возрастает в 125 раз. В присутствии неионогенного поверхностно-активного вещества Твин-80 сигнал сенсibilизированной флуоресценции хелата Eu^{3+} с доксициклином увеличивается более, чем в 19 раз. При совместном присутствии мицелл поверхностно-активного вещества Твин-80 и наночастиц серебра наблюдается дополнительное увеличение интенсивности флуоресценции хелата иона металла с производным тетрациклина в 27 раз. На основании проведенных исследований предложен способ флуориметрического определения доксициклина с использованием мицелл Твин-80, нанокластеров серебра и ионов Eu^{3+} в природной воде. Диапазон определяемых концентраций $1.0 \cdot 10^{-7} - 1.0 \cdot 10^{-5}$ М, предел обнаружения (ПрО) $6.0 \cdot 10^{-8}$ М (3 σ). Правильность определения контролировали методом «введено-найдено».

Данилина Т.Г., Сярдина А.В., Тимонова Е.Р., Неврюева Н.В., Смирнова Т.Д. Перенос энергии возбуждения в комплексах европия с доксициклином в присутствии мицелл поверхностно-активных веществ и наночастиц серебра // Известия Саратовского университета. Новая серия. Серия: Химия. Биология. Экология. 2024. Т.24. с. 364-373.

Смирнова Т.Д., д.х.н., smirnovatd@mail.ru (Саратовский национальный исследовательский государственный университет, кафедра аналитической химии и химической экологии).

8. Фотокатализаторы являются перспективными материалами для удаления органических красителей из окружающей среды. TiO_2 является одним из наиболее изученных фотокатализаторов; однако его применение в фотокаталитической промышленности еще не реализовано. Одним из подходов к повышению эффективности TiO_2 является осаждение на пористые инертные подложки. Представлен новый подход путем нанесения TiO_2 на поверхности пористых наноразмерных Al_2O_3 и ZrO_2 . Используя два метода мягкой химии — гликоль-цитратный путь для создания пористой и инертной подложки и пероксидный путь для осаждения слоя TiO_2 — разработана технология, которая позволяет варьировать концентрацию TiO_2 на инертной матрице. Разработанные композитные фотокатализаторы демонстрируют конкурентоспособную эффективность в разложении модельного красителя метиленового синего. Наиболее эффективным фотокатализатором оказался $\text{Al}_2\text{O}_3@\text{TiO}_2$ (0.26 мас.%) при 1200 °С. Этот материал разлагает примерно 98.2% метиленового синего за 5 ч, тогда как наноразмерный TiO_2 разлагает только 33.5% красителя при тех же условиях. На фотокаталитическую активность материала влияет концентрация TiO_2 в материале из-за разбавления раствора перекиси. Уменьшение концентрации TiO_2 усиливает фотокаталитическую активность композита. Таким образом, снижение концентрации метиленового синего было вызвано фотокатализом, а не сорбционным механизмом. Разложение метиленового синего во всех образцах согласуется с моделью псевдотортого порядка фотокатализа.

Istomina L.I., Sakharov K.A., Vikulina E.I., Yan YA., Solovov R.D., Zverev S.A., Goei R., Andreev S.V. A novel approach to making composite photocatalyst by peroxide sol–gel deposition of TiO_2 on Al_2O_3 and ZrO_2 nanosheets. Brazilian J. Chem. Eng. (2024) DOI: 10.1007/s43153-024-00461-z.

Соловов Р.Д., Roman_solovov@mail.ru (МИРЭА-Российский технологический университет, Институт тонких химических технологий имени М.В. Ломоносова, кафедра аналитической химии имени И.П. Алимарина, Москва).

9. Разработана универсальная методика определения структурно-родственных антибиотиков (пять представителей класса сульфаниламидов) в сложных объектах (моча и слюна человека) с использованием метода

гигантского комбинационного рассеяния (ГКР) света. Процедура анализа включает только смешивание подкисленного анализируемого раствора с растворами катионного полиэлектролита (полидиаллилдиметиламмоний хлорид – ПДДА) и коллоидных наночастиц серебра. Подкисление приводит к генерации ГКР спектров с максимальным сходством спектральных профилей и интенсивностью. **(Полный текст см. в разделе Спектроскопические методы).**

Markina N.E., Goryacheva I.Yu., Markin A.V. SERS as a tool for determination of structurally related compounds: the case of sulfanilamide class antibiotics // Talanta, 2024, Vol. 277, P. 126433. <https://doi.org/10.1016/j.talanta.2024.126433>.

Разработана методика ГКР определения трех аналитов (цефалоспориновые антибиотики (ЦСА), противоопухолевый препарат метотрексат (МТК) и креатинин (КРН)) в моче как матрице со сложным и изменяющимся составом. Выбор лекарств обоснован необходимостью контроля их концентраций в моче онкологических больных с сопутствующей бактериальной инфекцией, а контроль выведения КРН позволяет оценить функцию почек. В исследовании использовали три представителя ЦСА для достижения максимальной универсальности анализа. Проведена тщательная оптимизация этапов простых и быстрых этапов пробоподготовки для детектирования каждого аналита в моче, в том числе в образцах, содержащих избыток других целевых аналитов. Этапы пробоподготовки основаны на (1) способности ПДДА подавлять фоновый сигнал, (2) возможности усиления/ослабления ГКР сигнала путем корректировки значения pH, (3) осаждении ацетоном мешающих примесей. Таким образом показано, что селективность прямого ГКР анализа может быть улучшена путем управления процессами конкурентной адсорбции на поверхности ГКР подложки с использованием очень простых этапов пробоподготовки без применения сложных хроматографических методов.

Markina N.E., Markin A.V. Determination of multiple analytes in urine using label-free SERS coupled with simple sample pretreatments // Analytica Chimica Acta, 2024, Vol. 1332, P. 343383. <https://doi.org/10.1016/j.aca.2024.343383>.

Маркин А.В., av_markin@mail.ru (Саратовский ГУ, кафедра общей и неорганической химии)

10. Основы нанотехнологий: инновационные решения в анализе для биообъектов [Текст] : учеб. пособие / Т.А. Кучменко, Р.У. Умарханов; Воронеж. гос. ун-т инж. технол. – Москва :2024. 92 с. ISBN 978-5-89448-939-1

Учебное пособие разработано в соответствии с требованиями ФГОС ВО подготовки выпускников по специальностями 04.05.01 – «Фундаментальная и прикладная химия» и 06.05.01 – «Биоинженерия и биоинформатика». Предназначено для закрепления теоретических и практических знаний дисциплины «Основы нанотехнологий». В учебном пособии представлен материал по определению важнейших показателей качества биообъектов разной природы с применением инновационных аналитических решений и приборов искусственного обоняния («электронный нос») на пьезосенсорах. Приведены вопросы для самоподготовки, дано описание лабораторных работ. При поддержке МИП ООО «СНТ» (Россия, Воронеж).

Кучменко Т.А., д.х.н., профессор РАН, tak907@mail.ru; Умарханов Р.У. (Воронежский государственный университет инженерных технологий).

11. В результате совместной работы с Липецким государственным техническим университетом (Т.Н. Ермолаева) выполнен комплекс исследований по формированию устойчивого рецепторного распознающего слоя пьезоэлектрических сенсоров на основе магнитных углеродных нанокомпозитов под действием внешнего магнитного поля. Впервые создана методика формирования рецепторного слоя пьезоэлектрического сенсора, включающего кислотно-модифицированные магнитные углеродные наночастицы и наносферы полимеров с молекулярными отпечатками эритромицина и азитромицина, полученные методом "ядро-оболочка" для определения макролидных антибиотиков в жидких средах. Полученные результаты определения макролидов с помощью созданного пьезоэлектрического сенсора не уступают по чувствительности известным, но более трудоёмким и ресурсо-затратным способам анализа методом ВЭЖХ-УФ с предварительной твердофазной экстракцией и вольтамперометрического метода. При этом разработанные пьезоэлектрические сенсоры позволяют определять антибиотики в более широком диапазоне определяемых содержаний.

Гражулене С.С., Grezhule@iptm.ru (Институт проблем технологии микроэлектроники и особо чистых материалов РАН, лаборатория спектроскопических методов анализа; лаборатория ядерно-физических и масс-спектральных методов анализа, Черноголовка).

12. Сенсорные материалы на основе металлополимерных нанокомпозитов. Получена и охарактеризована серия непределных моно- и дикарбоксилатов цинка и свинца на основе итаконовой, фумаровой, коричной, транс,транс-муконовой, пропаргиловой и ацетилендикарбоновой кислот, а также их комплексов с полипиридиновыми лигандами (2,2'-дипиридил, 1,10-фенантролин, 4'-фенилтерпиридин). Термолизом металлосодержащих мономеров в присутствии тиомочевины получены нанокомпозиты, содержащие сульфиды цинка и свинца. Нанокомпозиты, содержащие сульфиды цинка и свинца, были использованы при разработке сенсоров сжиженного и природного газа. (Полный текст см. раздел «Химические сенсоры и бионические системы на их основе»).

Уфлянд И.Е., д.х.н., ieuflyand@sfedu.ru (Южный федеральный университет, кафедра аналитической химии, Ростов-на-Дону).

Микрочипы. Микрофлюидика

1. Развита концепция сборных микрофлюидных систем на основе бумаги, которая подразумевает конструирование микрофлюидных систем той или иной архитектуры из заранее приготовленных отдельных бумажных частей на адгезивной подложке. Изучена возможность определения кверцетина, дигидрокверцетина, морина и рутина методами спектроскопии диффузного отражения и цифровой цветометрии с использованием сборных микрофлюидных систем на основе бумаги. Показана возможность использования мини-спектрофотометра – калибратора мониторов для регистрации оптического аналитического сигнала, возникающего на зоне детектирования бумажных микрофлюидных систем.

Выбраны условия нанесения фотометрических реагентов на зоны детектирования микрофлюидных систем. В качестве реагентов для определения флавоноидов предложены щелочной раствор нитрата серебра(I), сферические наночастицы серебра в присутствии нитрата серебра(I) и треугольные нанопластинки серебра в присутствии нитрата

серебра(I). Показано, что наибольшей чувствительности определения флавоноидов удастся достичь при нанесении на зону детектирования микрофлюидных систем смеси щелочных растворов нитрата серебра(I) и треугольных нанопластинок серебра.

Оценены аналитические характеристики способов определения кверцетина, дигидрокверцетина, морина и рутина с использованием сборных микрофлюидных систем на основе бумаги. Пределы обнаружения флавоноидов в зависимости от природы вещества и способа регистрации аналитического сигнала составляют 0.1–0.2 мкг. Диапазоны определяемых содержаний флавоноидов составляют 0.5–6 мкг. Достаточный для анализа объем пробы не превышает 20 мкл.

Фурлетов А.А., к.х.н., aleksei_furletov@mail.ru; Апяри В.В., д.х.н., aryari@mail.ru (МГУ им. М.В. Ломоносова, химический факультет, кафедра аналитической химии, лаборатория концентрирования).

Локальный анализ

1. Методом сканирующей силовой микроскопии (ССМ) исследована морфология поверхности пленок молекулярно-импринтированных полимеров (МИП) с отпечатками антибиотиков: цефтриаксона натрия, цефазолина натрия, цефотаксима натрия, цефуроксима натрия, сульфаниламида, стрептомицина сульфата и неомицина сульфата на поверхности электродов сенсоров. Установлено, что в процессе синтеза МИП изменяется количество пор на поверхности полимерной пленки. Анализ ССМ-изображений показал отсутствие глобул и крупных агломератов на поверхности пленок, что свидетельствует о субмикронных размерах с низкой шероховатостью.

Фам Тхи Гам. Наноструктурный анализ поверхности полиимидных пленок / Фам Тхи Гам, А.Н. Зяблов, М.В. Гречкина // Химия, физика и механика материалов. 2024. Т. 42. № 3. С. 71-81.

Зяблов А.Н., д.х.н., alex-n-z@yandex.ru; Воронежский государственный университет, кафедра аналитической химии).

Хеометрика. Математизация химического анализа

Цифровизация и математизация химического анализа остаются существенными направлениями развития современной аналитической

химии. В 2024 году отечественные аналитики отметились рядом интересных работ, посвященных целому ряду фундаментальных проблем: автоматизации поиска ошибок в базах данных; теоретическим аспектам химического анализа, в частности, разработке метрики селективности в нецелевом качественном анализе; созданию новых вариантов параллельного факторного анализа с регуляризацией. При этом традиционно популярными остаются и прикладные работы, где готовые и хорошо зарекомендовавшие себя инструменты хемометрики используются для обработки сложных слабоселективных сигналов от аналитических приборов.

Д.О. Кирсанов

1. Процедура поиска ошибочных записей в базах данных по индексам удерживания. База данных индексов удерживания NIST является одним из наиболее широко используемых источников индексов удерживания. Как в нецелевом анализе, так и в исследованиях с применением машинного обучения фильтрация потенциальных ошибок отсутствует, или почти отсутствует. По нашим оценкам, около 80 % соединений из баз данных индексов удерживания NIST 17 и NIST 20 имеют только одно значение RI для стационарной фазы, что делает поиск ошибочных значений статистическими методами невозможным. Ручная проверка также нецелесообразна, поскольку база данных содержит более 300 000 записей. Предложена двухэтапная процедура поиска потенциально ошибочных индексов удерживания, основанная на машинном обучении. На первом этапе с помощью пяти прогностических моделей мы получаем прогнозируемые значения индекса удержания для всей базы данных. Второй - сравнение предсказанных значений с экспериментальными. Мы считаем индекс удержания ошибочным, если его точность (разница между предсказанным и экспериментальным значением) находится в нижних 5% для каждой из пяти моделей одновременно. Используя этот метод, мы смогли обнаружить 2093 ошибочные записи для стандартных и полустандартных неполярных стационарных фаз в базе данных индексов удерживания NIST 17, 566 из которых были исправлены или удалены разработчиками в NIST 20.

Это новый подход к поиску потенциально ошибочных записей в крупномасштабной базе данных, содержащей в основном уникальные записи, который может быть применен не только к индексам удержания.

Процедура может помочь отфильтровать и сообщить о неправильно обработанных данных, чтобы улучшить качество набора данных для приложений машинного обучения и экспериментального использования.

Analytica Chimica Acta, DOI: 10.1016/j.aca.2024.342375

Самохин А.С., к.х.н., научный сотрудник,
andrey.s.samokhin@gmail.com (Московский государственный университет имени М.В. Ломоносова, химический факультет, кафедра аналитической химии).

2. Концепция селективности в нецелевом качественном анализе.

Понятие селективности широко используется в аналитической химии как при количественном, так и при качественном анализе. Если в первом случае определение и использование селективности как-то регламентировано, то во втором случае, когда речь идет о нецелевом качественном анализе (классификации образцов), это понятие остается расплывчатым. В работе предложено новое определение селективности в нецелевом качественном анализе, а также способ ее численной оценки. Показано, как селективность может быть использована на практике для сравнения аналитических объектов, методик измерения и методов моделирования данных.

Analytica Chimica Acta, DOI: 10.1016/j.aca.2024.343352

Померанцев А.Л., д. ф.-м. н., г.н.с., alexey.pomerantsev@gmail.com,
(Федеральный исследовательский центр химической физики им. Н.Н. Семенова РАН, Москва).

3. Регуляризация параллельного факторного анализа (PARAFAC): новый подход к определению групп флуорофоров в спектрах флуоресценции природных вод.

Параллельный факторный анализ (PARAFAC) широко используется для обработки спектров возбуждения/эмиссии флуоресценции для отслеживания движения водных масс и изучения сезонных изменений в составе и содержании растворенного органического вещества. Этап выбора числа компонент является одним из самых сложных при использовании факторного анализа. Широко используемый метод анализа нагрузок при разбиении исходного множества на половины во многих случаях не позволяет определить лучшую модель из-за близости их статистических оценок. Поскольку использование регуляризации со штрафом на сумму модулей параметров

имеет тенденцию приводить к разреженным решениям, в которых часть коэффициентов равна нулю, применение данного подхода позволяет отобрать те переменные, которые несут полезную информацию. Предложена процедура выбора числа компонент при проведении параллельного факторного анализа спектров флуоресценции с использованием штрафов за определенные решения.

Journal of Applied Spectroscopy, DOI: 10.1007/s10812-024-01821-w

Лабутин Т. А., к.х.н., доцент, timurla@mail.ru (Московский государственный университет имени М.В. Ломоносова, химический факультет, кафедра аналитической химии).

4. Спектроскопия в БИК области и аквафотомика в исследованиях рака: пилотное исследование. В настоящее время большинство методов мониторинга лечения рака с помощью анализа биологических жидкостей основаны на высокоселективном обнаружении отдельных молекул или клеток. В данном исследовании мы рассматриваем анализ водной среды жидких образцов, то есть самой воды, с использованием аквафотоники и ближней инфракрасной спектроскопии (БИК) для сбора и обработки спектральных данных в рамках исследований рака. Вода, как молекулярная система, является богатым источником информации о текущем состоянии пациента, которая может быть извлечена из ближних инфракрасных спектров жидких образцов с помощью простых алгоритмов, основанных на многомерном анализе данных. Представленные результаты, полученные *ex vivo* в жидкостях организма, демонстрируют потенциал аквафотоники в исследованиях рака.

Суркова А.А., к.х.н., в.н.с. melenteva-anastasija@rambler.ru, (Международного научно-образовательного центра физики наноструктур, лаборатория "Гибридные наноструктуры для биомедицины", Университет ИТМО, Санкт-Петербург).

5. Предлагается новый способ многомерной обработки “Coloristic” для сопоставления набора различных данных, полученных по результатам пьезокварцевого микровзвешивания смеси ЛОС. Способ позволяет отразить особенности сорбции аналитов на одном покрытии. Подход универсален для любых систем на основе пьезосенсоров.

Кучменко Т.А., д.х.н., профессор РАН, tak1907@mail.ru (Воронежский государственный университет инженерных технологий,

кафедра физической и аналитической химии, Институт геохимии и аналитической химии им. В.И. Вернадского РАН).

6. Прогнозирование свойств ГЭР на основе подходов QSPR.

Глубокие эвтектические растворители (ГЭР) становятся все более популярными материалами в различных областях химии. Набор свойств конкретного ГЭР определяет диапазон его применимости для решения определенной задачи. Экспериментальный подбор этих свойств для удовлетворения потребностей различных приложений крайне трудо- и ресурсозатратен. В работе предложено использовать подход количественной взаимосвязи «структура-свойство» (QSPR) для моделирования свойств ГЭР. На примере холинхлорида и шести карбоновых кислот предпринята попытка построить регрессионные модели, связывающие молекулярные дескрипторы карбоновых кислот и свойства соответствующих растворителей. Установлены статистически значимые корреляции между дескрипторами кислот и плотностью, вязкостью и проводимостью ГЭР. Проанализировано влияние различных дескрипторов ГЭР на эти свойства. Проведена валидация полученных регрессионных моделей с использованием двойной петлевой кросс-валидации.

Colloids and Surfaces A: Physicochemical and Engineering Aspects, DOI: 10.1016/j.colsurfa.2024.133961

Обработка изображений спектров с помощью сверточных нейронных сетей. В последнее время для решения различных задач в аналитической химии широкое применение находят сверточные нейронные сети (CNN). Изначально этот тип сетей был предложен для обработки изображений, поскольку позволял сохранять информативные взаимосвязи между различными частями картины, поданной на вход. В аналитической химии, однако, такие сети применяют для обработки спектральных данных, представленных в традиционном для хемометрики виде числовых векторов. В данной работе на примере спектров БИК и Мессбауэровской спектроскопии мы изучили возможность анализа спектральных данных в виде двумерного изображения, а не одномерного вектора. Исследованы возможности 2D-CNN для численного прогнозирования параметров мессбауэровского спектра с использованием файлов изображений (.bmp) со спектрами. В качестве второго примера рассмотрена классификацию биологических тканей по их спектрам в

ближней инфракрасной области. В обоих случаях проведено сравнение производительности CNN для двух типов входных данных: спектров в виде изображений и в виде числовых векторов. Установлено, что в случае мессбауэровских спектров использование 2D-CNN обеспечивает более точное прогнозирование спектральных параметров, в то время как для БИК-спектров биологических тканей использование традиционного метода PLS-DA оказалось лучше для классификации по сравнению с подходом CNN.

Microchemical Journal, DOI: 10.1016/j.microc.2024.111329

Кирсанов Д.О., д.х.н., d.kirsanov@gmail.com (Санкт-Петербургский государственный университет, Институт химии, кафедра аналитической химии).

7. Определение глюкозамина и гиалуроновой кислоты в пищевых добавках. Был исследован потенциал спектрометрии в ближней инфракрасной области (БИК), инфракрасной спектрометрии с неполным внутренним отражением (ATR-IR) и потенциометрической мультисенсорной системы (MSS) для количественного определения глюкозамина и гиалуроновой кислоты в коммерческих образцах пищевых добавок. Все три метода в сочетании с хемометрической обработкой данных применимы для этой задачи. Анализ главных компонент (МГК) выявил сходство между тремя наборами данных. Были построены модели на основе проекции на латентные структуры (ПЛС) для количественного определения глюкозамина и гиалуроновой кислоты. Среднеквадратическая ошибка перекрестной проверки (RMSECV) для количественного определения глюкозамина варьировалась от 7,7 мас. % до 8,9 мас. %. Спектрометрия БИК продемонстрировала наилучшую точность для гиалуроновой кислоты (RMSECV = 9,9 мас.%), в то время как ATR-IR и MSS показали несколько худшие результаты со значениями RMSECV 12,1 и 11,3 мас.% соответственно. Результаты этого исследования показали, что NIR, ATR-IR и MSS демонстрируют меньшую точность по сравнению со сложными и высокоточными аналитическими методами. Однако их можно использовать для быстрой полуколичественной оценки глюкозамина и гиалуроновой кислоты в пищевых добавках в процессе рутинного контроля качества БАДов.

F.M. Lang K. Adels, A. Gaponova, V. Panchuk, D. Kirsanov, Y. Monakhova (2024) Fast spectroscopic and multisensor methods for analysis of

Монахова Ю.Б., д.х.н., yul-monakhova@mail.ru (Саратовский национальный исследовательский государственный университет, Институт химии, кафедра общей и неорганической химии).

8. Проекционные методы в исследовании импрегнированных белков. Импринтированные белки (ИБ) являются многообещающей альтернативой естественным системам распознавания. Одним из важнейших этапов при разработке ИБ является удаление молекул шаблона из его комплекса с белком. Бычий сывороточный альбумин (БСА) импринтировали в присутствии 4-гидроксикумарина (4-ГК); очистку ИП проводили с помощью диализа, а для мониторинга процесса очистки ИП использовали флуоресцентную 3D-спектроскопию. Матрицы возбуждения-испускания (ЕЕМ) исследованы с помощью нескольких хеометрических алгоритмов, включая метод главных компонент (РСА), параллельный факторный анализ (PARAFAC) и анализ независимых компонент (ICA). Показано, что методы PARAFAC и ICA более эффективны, чем РСА. РСА не разделяет сигналы флуоресценции отдельных компонентов раствора, а билинейный алгоритм ICA и трилинейный алгоритм PARAFAC позволяют разделить сигналы как белка, так и шаблона, смешанных вместе в сигналах флуоресценции ИБ, что позволяет провести оценку степени очистки ИБ.

Burmistrova N.A., Ilicheva P.M., Presnyakov K.Yu., Pidenko P.S., Rutledge D.N. 3D Fluorescence Spectroscopy Combined with Chemometrics as a Tool for Control of Imprinted Protein Purification from Template. Journal of Chemometrics Molecules (2024) e3622. <https://doi.org/10.1002/cem.3622>

Бурмистрова Н.А., д.х.н., naburmistrova@mail.ru (Саратовский национальный исследовательский государственный университет, Институт химии, кафедра общей и неорганической химии).

9. Идентификация антибиотиков. Показано использование ИК-спектроскопии в средней области в сочетании с хеометрическими алгоритмами для идентификации цефалоспориновых антибиотиков в виде порошков для инъекций. В качестве объектов исследования выбраны цефалоспорины III поколения: цефтриаксон, цефтазидим, цефотаксим, широко применяющиеся в фармацевтической практике. ИК-спектры препаратов регистрировали с использованием ИК-фурье-спектрометра с приставкой НПВО. Обработку результатов осуществляли методом

главных компонент (МГК), методом k -средних и агломеративной иерархической кластеризации (АНС). Показано, что с помощью данных алгоритмов можно провести идентификацию исследуемых цефалоспориновых антибиотиков различных производителей. В методе МГК точки, соответствующие образцам, находятся в отдельных квадрантах в зависимости от природы антибиотика. Методом k -средних получено разделение антибиотиков на классы, также видны различия и в самих классах в зависимости от производителя. Наиболее наглядное разделение цефалоспоринов наблюдается при представлении данных методом АНС в виде дендрограммы.

Шабунина А. Ю., Русанова Т. Ю. Идентификация цефалоспориновых антибиотиков с использованием ИК-спектроскопии и хемометрических алгоритмов // Известия Саратовского университета. Новая серия. Серия: Химия. Биология. Экология. 2024. Т. 24, вып. 3. С. 271–281.

Русанова Т.Ю., д.х.н., tatyanarys@yandex.ru; (Саратовский национальный исследовательский государственный университет, Институт химии, кафедра аналитической химии и химической экологии).

Метрология и стандартизация анализа

1. Усовершенствована Государственная первичная референтная методика измерений (ГПРМИ) массовой доли жира в пищевых продуктах и продовольственном сырье. В область применения ранее разработанной ГПРМИ (ФР.ПР1.31.2018.00001), основанной на методе Рэнделла, включены новые объекты: молоко и сливки питьевые, молоко и сливки сгущенные, филе рыбное, мясо рыбы, включая фарш, хлебобулочные изделия, мучные кондитерские изделия, макаронные изделия, какао-порошок, шоколад, мука из зерновых культур, орехов, паста ореховая, в т. ч. арахисовая. Выполнение измерений по ГПРМИ позволяет получать результаты измерений массовой доли жира в новых объектах в диапазоне от 0,1 % до 70 % включительно с расширенной неопределенностью (при $k=2$, $P=0,95$) от 0,015 % до 0,30 %, обеспечивая запас в сравнении со стандартизованными методиками измерений от 2 до 25 раз. Эквивалентность ГПРМИ аналогичным методикам измерений иностранных государств продемонстрирована в рамках пилотных сличений KOOMET 879/RU-a/23, 880/RU-a/23, а также путем анализа иностранных стандартных образцов ERM-BC381, muva-MP-

0223, muva-S-0820. Экспериментальное опробование процедуры применения ГПРМИ для оценки правильности результатов измерений, полученных с использованием других методик измерений, выполнено в рамках национальных межлабораторных сличительных испытаний (МСИ 241-ШОК-01/2024, МСИ 241-МП-05/2024). ГПРМИ предназначена для получения результатов измерений массовой доли жира в пищевых продуктах и продовольственном сырье с наивысшей в Российской Федерации точностью; выступает в качестве конечного звена в иерархии метрологической прослеживаемости; может быть использована для оценки правильности результатов измерений, полученных с использованием других методик (методов) измерений, а также определения характеристик стандартных образцов.

Совершенствование Государственной первичной референтной методики измерений массовой доли жира в пищевых продуктах и продовольственном сырье // Эталоны. Стандартные образцы. 2024. Т. 20, № 4. С. 57–75.

Сергеева А.С., sergeevaas@uniim.ru; Голынец О.С., Lab241@uniim.ru (УНИИМ-филиал ФГУП «ВНИИМ им.Д.И.Менделеева», лаборатория метрологии влагометрии и стандартных образцов, Екатеринбург).

2. Изготовлен и внесен в Федеральный информационный фонд стандартный образец состава раствора ионов тория ГСО 12728-2024, аттестованное значение 200 мг/кг, относительная погрешность (расширенная неопределенность) 1 %.

Внесен в Федеральный информационный фонд набор стандартных образцов состава оксида циркония ГСО 12780-2024/12784-2024 (СОЦ-22), предназначенный для метрологического обеспечения методов атомно-эмиссионного спектрального анализа циркония и сплавов на его основе.

Лисиенко Д.Г., к.х.н., d.g.lisienko@urfu.ru; Домбровская М.А., m.a.dombrovskaja@urfu.ru (Уральский федеральный университет им. первого Президента России Б.Н. Ельцина, кафедра физико-химических методов анализа, Екатеринбург).

3. Изучена стабильность вещества ГСО состава донного ила (БИЛ-1) и донных отложений (БИЛ-2) озера Байкал. Актуальность продления срока годности этих ГСО обусловлена их уникальной информативностью, отсутствием аналогов в РФ и мире, а также востребованностью при аналитическом контроле в сфере государственного

регулирования охраны окружающей среды. Получены новые экспериментальные данные о минеральном и гранулометрическом составах порошка каждого ГСО, соответственно с помощью рентгеновского дифрактометра D8 ADVANCE (Bruker, Германия) и лазерного дифракционного анализатора частиц HELOS/BR (Sympatec, Германия) для измерений в воздушной среде, подтвердившие стабильность вещества. По данным атомно-эмиссионной спектроскопии с дуговым разрядом (методика ФР.1.31.2008.05150) изучена однородность порошковых материалов для 33 элементов при анализе навесок разной массы. Установлены новые массы представительных проб для аттестованных и рекомендованных элементов в БИЛ-1 и БИЛ-2, сопоставимые с типичными аналитическими навесками современных одно- и многоэлементных методов (методик) химического анализа илов и донных отложений водоемов и водотоков. Расчет сроков годности в условиях естественного старения вещества СО выполнен согласно Р.50.2.031-2003 по результатам анализа, выполненным в лабораториях разных организаций с применением аналитических методов и методик, основанных на различных физических и химических принципах. *Практическое значение.* Продлены сроки годности использования по целевому назначению: ГСО 7126-94 (БИЛ-1) до 01.07.2044 г., ГСО 7176-95 (БИЛ-2) – до 28.02.2040 г. Изменения внесены в Федеральный государственный фонд средств измерений "Аршин":

<https://fgis.gost.ru/fundmetrology/registry/19>;

<https://fgis.gost.ru/fundmetrology/registry/19> .

Показана необходимость коррекции документа Р.50.2.031-2003, регламентирующего процедуры продления сроков годности и действия многоэлементных стандартных образцов утвержденных типов единичного изготовления.

Разработан новый стандартный образец вольфрамового концентрата для многоэлементных методик анализа. Разработан новый многоэлементный сертифицированный стандартный образец состава вольфрамового концентрата – ГСО 11541-2020 КВГ(Т) – концентрат вольфрамитогюбнеритовый (твердосплавный), в котором аналитическими методами с разными химическими и физическими основами определены содержания 62 элементов и компонентов. Аттестованы массовые доли 10 элементов (W, Al, Ca, S, Si, Ag, Cu, Mo, Pb, Sn) и рекомендованы массовые доли 11 элементов (F, Fe, Mn, Ti, As, Bi, Cd, Sc, V, Y, Zn).

Метрологические характеристики установлены с использованием результатов, полученных при межлабораторной аттестации в испытательных лабораториях 13 научных и производственных организаций России, Беларуси, Казахстана и Узбекистана с помощью одноэлементных (гравиметрия, спектрофотометрия, атомно-абсорбционная спектрометрия и др.) и многоэлементных методов (методик) химического анализа (атомно-эмиссионная спектрометрия с дуговым разрядом и индуктивно связанной плазмой – АЭС-ДР и АЭС-ИСП, масс-спектрометрия с индуктивно связанной плазмой – МС-ИСП, рентгенофлуоресцентная спектрометрия – РФС). Достоверность полученных данных подтверждена балансовыми моделями вещественного и элементного составов, сравнением с элементным составом вольфрамового концентрата SRM 277 (NIST, США).

ГСО 11541-2020 имеет более высокий информационный потенциал по сравнению со стандартными образцами других стран, представляет интерес для актуальных научных исследований при переходе к многоэлементным методикам анализа. Применение ГСО 11541-2020 способно обеспечить расширение возможностей многоэлементных методов анализа материалов с высоким содержанием вольфрама за счёт идентификации и учета полиатомных помех в методиках МС-ИСП, матричных влияний и спектральных наложений в методиках АЭС-ИСП, АЭС-ДР, РФС, а также совершенствование способов химической пробоподготовки (кислотное разложение в автоклавах и сплавление) перед измерением для одно- и многоэлементных методик.

Практическое значение. ГСО 11541-2020 – КВГ(Т) предназначен для разработки, аттестации и валидации высокопроизводительных многоэлементных методик АЭС-ИСП, АЭС-ДР, РФС, выполнения аналитического контроля химического состава руд и продуктов их переработки, сертификация готовой продукции в горнодобывающей, металлургической и химической промышленности, а также в научных исследованиях.

Васильева И. Е., Шабанова Е. В., Бухбиндер Г. Л. Новый стандартный образец вольфрамового концентрата для разработки многоэлементных методик анализа // Эталон. Стандартные образцы. 2024. Т. 20, № 2. С. 33–64. <https://doi.org/10.20915/2077-1177-2024-20-2-33-64>

Шабанова Е.В. . д.ф.-м.н., shev@igc.irk.ru; Васильева И.Е., д.т.н., vasira@igc.irk.ru (Институт геохимии им. А.П. Виноградова СО РАН, группа атомно-эмиссионных методов анализа и стандартных образцов).

4. Закончена разработка, аттестация и испытания сертифицированного стандартного образца нелегированной стали базовой марки 76 по ГОСТ Р51685. (ИСО УНЛ4/1) – ГСО 12498-2024 <https://fgis.gost.ru/fundmetrology/registry/19/items/1416528> . Данная марка стали применяется для изготовления железнодорожных рельсов общего назначения, нетермоупрочненных, обычной твердости.

Стандартный образец предназначен для аттестации, валидации и верификации методик измерений, контроля точности результатов измерений при определении химического состава сталей химическими и физико-химическими методами.

Стандартный образец может применяться:

- для поверки средств измерений при условии его соответствия обязательным требованиям, установленным в поверочных схемах и методиках аттестации эталонов единиц величин или методиках поверки средств измерений;
- для калибровки средств измерений при условии соответствия его метрологических и технических характеристик требованиям методик калибровки;
- для испытаний средств измерений и стандартных образцов в целях утверждения типа при условии соответствия его метрологических характеристик требованиям программ испытаний.

Применение стандартного образца планируется в металлургии, машиностроении, металлообработке, горнодобывающей промышленности.

Материал стандартного образца приготовлен из стали типа 76 в виде неокисленной стружки толщиной не более 0,4 мм (ГОСТ 7565, ГОСТ Р ИСО 14284). Материал расфасован по (100 – 300) г в банки, на которые наклеены этикетки. Банки упакованы в коробки с этикетками.

Аттестованные значения массовой доли элементов A и расширенная неопределенность аттестованных значений $U_{0,95}(A)$ в процентах

Элемент	A	$U_{0,95}(A)$
Углерод	0,736	0,004
Кремний	0,222	0,003

Марганец	0,852	0,005
Хром	0,023	0,001
Никель	0,055	0,001
Сера	0,0275	0,0005
Фосфор	0,0202	0,0004
Медь	0,036	0,001
Алюминий	0,0127	0,0005
Мышьяк	0,123	0,002
Азот	0,0041	0,0002

Примечание. Расширенная неопределенность аттестованного значения $U_{0,95}(A) = k \cdot u_c(A)$ получена для суммарной стандартной неопределенности аттестованного значения $u_c(A)$ и коэффициента охвата $k=2$, соответствующего уровню доверия 0,95, $A \pm U_{0,95}(A)$; соответствует границам абсолютной погрешности аттестованного значения $\pm \Delta$ для доверительной вероятности 0,95.

Степановских В.В., vstepanovskikh@gmail.com; Щукина М.Ю. Колпакова Е.К., Хузагалеева Р.К. (ЗАО «Институт стандартных образцов». Екатеринбург).

5. Закончена разработка, аттестация и испытания набора сертифицированных стандартных образцов сталей легированных (ИСО УГ147 – ИСО УГ151) – ГСО 12785-2024/ГСО 12789-2024 <https://fgis.gost.ru/fundmetrology/registry/19/items/1422113>.

Набор стандартных образцов приготовлен из легированных сталей различного состава и назначения, широко применяемых в промышленности: качественных конструкционных (38Х2МЮА, 38ХНЗМА), инструментальных (5ХНВ, ХВГ) и арматурной стали (20ХГ2Ц). Набор ИСО УГ147 – ИСО УГ151 позволяет контролировать 16 основных и примесных элементов в значительном числе распространенных сталей. *Аттестованные значения массовых долей элементов (%)* приведены в таблице 1.

Номер	Индекс СО	C	Si	Mn	Cr	Ni	S	P	W
-------	-----------	---	----	----	----	----	---	---	---

ГСО									
2785-2024	ИСО УГ147	0,296	0,55	0,380	2,06	0,142	0,0026	0,0087	–
2786-2024	ИСО УГ148	0,139	0,25	0,275	0,147	3,00	0,0031	0,0042	0,78
2787-2024	ИСО УГ149	0,59	0,248	0,659	0,659	1,58	0,0104	0,020	0,60
2788-2024	ИСО УГ150	0,177	0,57	1,63	1,03	0,180	0,0051	0,0063	–
2789-2024	ИСО УГ151	1,04	0,269	0,889	0,99	0,151	0,0038	0,0122	1,29

Таблица 1

Номер ГСО	Индекс СО	Mo	Ti	V	Cu	Al	Zr	As	N
2785-2024	ИСО УГ147	0,157	0,0054	0,062	0,321	0,69	–	–	0,017
2786-2024	ИСО УГ148	0,457	0,098	0,442	0,176	0,14	–	–	0,017
2787-2024	ИСО УГ149	0,048	–	0,0047	0,118	–	–	0,013	0,013
2788-2024	ИСО УГ150	0,0207	–	–	0,161	0,062	0,027	–	–
2789-2024	ИСО УГ151	0,014	–	0,0039	0,023	–	–	–	0,0081

Аттестованные значения массовой доли элементов прослеживаются к единице Международной системы единиц (SI) килограмм.

Стандартные образцы предназначены для аттестации, валидации и верификация методик измерений, контроль точности результатов измерений, установление и контроль стабильности градуировочных характеристик при определении состава сталей спектральными методами.

Степановских В.В.. vstepanovskikh@gmail.com; Третьякова М.В., spectral@icrm-ekb.ru; Колпакова Е.К., Хузагалеева Р.К. (ЗАО «Институт стандартных образцов». Екатеринбург.)

6. Закончены исследования по разработке, аттестации и испытаниям сертифицированного стандартного образца чугуна легированного типа ЧНХМД (ИСО ЧГ49), ГСО 12424-2024
<https://fgis.gost.ru/fundmetrology/registry/19/items/1414231>.

Чугун ЧНХМД имеет высокие механические свойства, сопротивление износу и коррозии в слабощелочных и газовых средах. Широко применяется для ответственных деталей двигателей внутреннего

сгорания. Стандартный образец предназначен для аттестации, валидации и верификации методик измерений, контроля точности результатов измерений, установления и контроля стабильности градуировочных характеристик при определении состава чугунов, легированных спектральными методами. В образце аттестован расширенный круг элементов, позволяющий анализировать и контролировать примеси цветных металлов в чугуне.

Аттестованные значения массовой доли элементов A и расширенная неопределенность аттестованных значений $U_{0,95}(A)$, %

Элемент	A	$U_{0,95}(A)$	Элемент	A	$U_{0,95}(A)$
Углерод	3,61	0,02	Ванадий	0,29	0,01
Кремний	2,43	0,01	Кобальт	0,060	0,001
Марганец	1,07	0,01	Медь	0,84	0,01
Хром	0,88	0,01	Алюминий	0,052	0,003
Никель	1,17	0,01	Бор	0,024	0,001
Сера	0,0051	0,0004	Магний	0,059	0,004
Фосфор	0,202	0,004	Олово	0,123	0,006
Молибден	0,77	0,01	Сурьма	0,109	0,007
Титан	0,051	0,002			

Расширенная неопределенность аттестованного значения $U_{0,95}(A) = k \cdot u_c(A)$ получена для суммарной стандартной неопределенности аттестованного значения $u_c(A)$ и коэффициента охвата $k = 2$, соответствующего уровню доверия 0,95, $A \pm U_{0,95}(A)$; соответствует границам абсолютной погрешности аттестованного значения $\pm \Delta$ для доверительной вероятности 0,95.

Степановских В.В., vstepanovskikh@gmail.com; Третьякова М.В., spectral@icrm-ekb.ru; Колпакова Е.К., Хузагалеева Р.К., Щукина М.Ю (ЗАО «Институт стандартных образцов». Екатеринбург).

7. Закончена разработка, аттестация и испытания сертифицированного стандартного образца сплава на никелевой основе типа ХН78 (ИСО НГ8) – ГСО 12793-2025.

Сплав ХН78 является одним из наиболее жаропрочных никелевых сплавов. Аустенитная структура сплава, обеспеченная технологией

выплавки в открытой электропечи с активным перемешиванием, обуславливает высокую прочность и достаточную пластичность. Широко применяется для изготовления ответственных деталей и труб, работающих при высоких температурах (до 1100°C) без потери механических свойств.

Стандартный образец предназначен для аттестации, валидации и верификации методик измерений, контроля точности результатов измерений, установления и контроля стабильности градуировочных характеристик при определении состава сплавов на никелевой основе спектральными методами.

Стандартный образец может применяться:

- для поверки средств измерений при условии его соответствия обязательным требованиям, установленным в поверочных схемах и методиках аттестации эталонов единиц величин или методиках поверки средств измерений;
- для калибровки средств измерений при условии соответствия его метрологических и технических характеристик требованиям методик калибровки;
- для испытаний средств измерений и стандартных образцов в целях утверждения типа при условии соответствия его метрологических характеристик требованиям программ испытаний.

Применение стандартного образца планируется в металлургии, машиностроении, металлообработке, горнодобывающей промышленности.

Материал стандартного образца приготовлен из сплава на никелевой основе типа ХН78Т (ГОСТ 5632-2014) в виде дисков диаметром (38-40) мм, высотой (25-30) мм.

Аттестованные значения массовой доли элементов A и расширенная неопределенность аттестованных значений $U_{0,95}(A)$: в процентах

Элемент	A	$U_{0,95}(A)$
Углерод	0,074	0,002
Кремний	0,204	0,006
Марганец	0,255	0,006
Хром	20,31	0,06
Сера	0,0019	0,0002

Фосфор	0,0015	0,0003
Титан	0,32	0,01
Медь	0,022	0,001
Алюминий	0,105	0,002
Железо	0,37	0,01

Примечание. Расширенная неопределенность аттестованного значения $U_{0,95}(A) = k \cdot u_c(A)$ получена для суммарной стандартной неопределенности аттестованного значения $u_c(A)$ и коэффициента охвата $k = 2$, соответствующего уровню доверия 0,95, $A \pm U_{0,95}(A)$; соответствует границам абсолютной погрешности аттестованного значения $\pm \Delta$ для доверительной вероятности 0,95.

Степановских В.В., vstepanovskikh@gmail.com; Третьякова М.В., spectral@icrm-ekb.ru; Щукина М.Ю., Колпакова Е.К., Хузагалеева Р.К. ((ЗАО «Институт стандартных образцов», Екатеринбург).

8. Закончена разработка, аттестация и испытания сертифицированного стандартного образца марганца металлического типа Mn95 по ГОСТ 6008 (ИСОФ5/1) – ГСО 12665-2024
<https://fgis.gost.ru/fundmetrology/registry/19/items/1419931>.

Марганец металлический (ГОСТ 6008-90) получен электротермическим способом, состоящим из трех этапов. Сначала выплавляют высокомарганцевистый бесфосфористый шлак. Из него получают высококремнистый силикомарганец. А из этого материала, в конечном итоге, получают марганец металлический, который используют в промышленности. Марганец широко применяется в чёрной металлургии для легирования, раскисления и десульфурации стали. Он уменьшает вредное влияние кислорода и серы, повышает твердость и прочность стали, ее режущие свойства, увеличивает прокаливаемость и износостойкость.

Стандартный образец предназначен для аттестации, валидации и верификации методик измерений, контроля точности результатов измерений при определении химического состава сталей химическими и физико-химическими методами.

Стандартный образец может применяться:

– для поверки средств измерений при условии его соответствия обязательным требованиям, установленным в поверочных схемах и

методиках аттестации эталонов единиц величин или методиках поверки средств измерений;

– для калибровки средств измерений при условии соответствия его метрологических и технических характеристик требованиям методик калибровки;

– для испытаний средств измерений и стандартных образцов в целях утверждения типа при условии соответствия его метрологических характеристик требованиям программ испытаний.

Применение стандартного образца планируется в металлургии, машиностроении, металлообработке, горнодобывающей промышленности.

Материал стандартного образца приготовлен из марганца металлического типа Мн95 (ГОСТ 6008-90) в виде порошка крупностью не более 0,125 мм и расфасован в банки с этикетками в соответствии с заявками потребителей по 100 г, 200 г.

Аттестованные значения массовой доли элементов A и расширенная неопределенность аттестованных значений $U_{0,95}(A)$: в процентах

Элемент	A	$U_{0,95}(A)$
Марганец	96,7	0,1
Кремний	0,50	0,01
Железо	2,46	0,02
Углерод	0,044	0,001
Сера	0,030	0,001
Фосфор	0,0038	0,0004
Медь	0,0080	0,0006

Примечание. Расширенная неопределенность аттестованного значения $U_{0,95}(A) = k \cdot u_c(A)$ получена для суммарной стандартной неопределенности аттестованного значения $u_c(A)$ и коэффициента охвата $k = 2$, соответствующего уровню доверия 0,95, $A \pm U_{0,95}(A)$; соответствует границам абсолютной погрешности аттестованного значения $\pm \Delta$ для доверительной вероятности 0,95.

Степановских В.В., vstepanovskikh@gmail.com; Щукина М.Ю., Колпакова Е.К., Хузагалеева Р.К. (ЗАО «Институт стандартных образцов». Екатеринбург).

9. Закончена разработка, аттестация и испытания сертифицированного стандартного образца феррованадия типа ФВд40У0,75 по ГОСТ 27130 (ИСОФ19/1) – ГСО 12758-2024
<https://fgis.gost.ru/fundmetrology/registry/19/items/1421817>

Феррованадий (ГОСТ 27130-94) – один из важнейших ферросплавов, предназначенный для легирования сталей, сплавов и чугунов. Ванадий связывает азот и снижает чувствительность стали к старению, повышает твердость, износостойкость и теплостойкость стали, что благоприятно влияет на стойкость режущего инструмента. Ванадий широко используют при производстве конструкционных, жаропрочных и инструментальных сталей. В последнее время все чаще применяется микролегирование ванадием конструкционных сталей, что значительно повышает их качество.

Материал феррованадия получен силикоалюмотермическим способом, заключающимся в восстановлении технической пятиокиси ванадия кремнием в дуговой электропечи.

Стандартный образец предназначен для аттестации, валидации и верификации методик измерений, контроля точности результатов измерений при определении химического состава сталей химическими и физико-химическими методами.

Стандартный образец может применяться:

- для поверки средств измерений при условии его соответствия обязательным требованиям, установленным в поверочных схемах и методиках аттестации эталонов единиц величин или методиках поверки средств измерений;
- для калибровки средств измерений при условии соответствия его метрологических и технических характеристик требованиям методик калибровки;
- для испытаний средств измерений и стандартных образцов в целях утверждения типа при условии соответствия его метрологических характеристик требованиям программ испытаний.

Применение стандартного образца планируется в металлургии, машиностроении, металлообработке, горнодобывающей промышленности.

Аттестованные значения массовой доли элементов A и расширенная неопределенность аттестованных значений $U_{0,95}(A)$: в процентах

Элемент	A	$U_{0,95}(A)$
---------	-----	---------------

Ванадий	47,6	0,1
Кремний	1,50	0,02
Марганец	2,90	0,02
Хром	0,28	0,01
Углерод	0,355	0,006
Сера	0,0092	0,0003
Фосфор	0,054	0,002
Медь	0,180	0,006
Мышьяк	0,0009	0,0001

Примечание. Расширенная неопределенность аттестованного значения $U_{0,95}(A) = k \cdot u_c(A)$ получена для суммарной стандартной неопределенности аттестованного значения $u_c(A)$ и коэффициента охвата $k = 2$, соответствующего уровню доверия 0,95, $A \pm U_{0,95}(A)$; соответствует границам абсолютной погрешности аттестованного значения $\pm \Delta$ для доверительной вероятности 0,95.

Степановских В.В.. vstepanovskikh@gmail.com; Щукина М.Ю., Колпакова Е.К., Хузагалеева Р.К. (ЗАО «Институт стандартных образцов», Екатеринбург).

10. Закончена разработка, аттестация и испытания сертифицированного стандартного образца ферросилиция азотированного типа ФСА 20 (ИСО Ф53) – ГСО 12759-2024. <https://fgis.gost.ru/fundmetrology/registry/19/items/1421819>.

Азотированный ферросилиций получен методом самораспространяющегося высокотемпературного синтеза (СВС). Ферросплав разработан и изготовлен по программе импортозамещения АО «Новотроицкий завод хромовых соединений». Применяется для получения легированных азотом высококачественных сталей широкого назначения.

Стандартный образец предназначен для аттестации, валидации и верификации методик измерений, контроля точности результатов измерений при определении химического состава сталей химическими и физико-химическими методами.

Стандартный образец может применяться для поверки средств измерений при условии его соответствия обязательным требованиям, установленным в поверочных схемах и методиках аттестации эталонов единиц величин или методиках поверки средств измерений; для калибровки средств измерений при условии соответствия его метрологических и технических характеристик требованиям методик калибровки; для испытаний средств измерений и стандартных образцов в целях утверждения типа при условии соответствия его метрологических характеристик требованиям программ испытаний. Применение стандартного образца планируется в металлургии.

Аттестованные значения массовой доли элементов A и расширенная неопределенность аттестованных значений $U_{0,95}(A)$: в процентах

Элемент	A	$U_{0,95}(A)$
Кремний	57,0	0,1
Железо	15,9	0,1
Углерод	0,068	0,002
Алюминий	1,00	0,02
Титан	0,297	0,007
Азот	23,0	0,2

Примечание. Расширенная неопределенность аттестованного значения $U_{0,95}(A) = k \cdot u_c(A)$ получена для суммарной стандартной неопределенности аттестованного значения $u_c(A)$ и коэффициента охвата $k = 2$, соответствующего уровню доверия 0,95, $A \pm U_{0,95}(A)$; соответствует границам абсолютной погрешности аттестованного значения $\pm \Delta$ для доверительной вероятности 0,95.

Степановских В.В., vstepanovskikh@gmail.com; Щукина М.Ю., Колпакова Е.К., Хузагалеева Р.К. (ЗАО «Институт стандартных образцов», Екатеринбург).

11. Закончена разработка, аттестация и испытания сертифицированного стандартного образца кокса литейного каменноугольного типа КЛ-3 (ИСО Р18/1) – ГСО 12794-2025

Кокс литейный (ГОСТ 3340-2023) является разновидностью топливного материала, получаемого из осадочных пород (углей) посредством их коксования. Литейный кокс применяют для плавки различных марок чугунов в вагранке. При этом он выполняет функцию

топлива и обеспечивает необходимым теплом, влияет на стабильность хода плавки и температуру выплавляемого чугуна. От классического доменного каменноугольного кокса отличается меньшим содержанием серы.

Стандартный образец предназначен для аттестации, валидации и верификации методик измерений, контроля точности результатов измерений при определении химического состава сталей химическими и физико-химическими методами.

Стандартный образец может применяться для поверки средств измерений при условии его соответствия обязательным требованиям, установленным в поверочных схемах и методиках аттестации эталонов единиц величин или методиках поверки средств измерений; для калибровки средств измерений при условии соответствия его метрологических и технических характеристик требованиям методик калибровки; для испытаний средств измерений и стандартных образцов в целях утверждения типа при условии соответствия его метрологических характеристик требованиям программ испытаний. Применение стандартного образца планируется в металлургии.

Аттестованные значения массовой доли элементов A и расширенная неопределенность аттестованных значений $U_{0,95}(A)$: в процентах

Элемент	A	$U_{0,95}(A)$
Сера	1,33	0,02
Фосфор	0,037	0,001
Оксид натрия	0,050	0,002
Оксид калия	0,123	0,005
Зольность	13,42	0,05

**При
меча
ние.**
Расш
ирен
ная
неоп

ределенность аттестованного значения $U_{0,95}(A) = k \cdot u_c(A)$ получена для суммарной стандартной неопределенности аттестованного значения $u_c(A)$ и коэффициента охвата $k = 2$, соответствующего уровню доверия 0,95, $A \pm U_{0,95}(A)$; соответствует границам абсолютной погрешности аттестованного значения $\pm \Delta$ для доверительной вероятности 0,95.

Степановских В.В., vstepanovskikh@gmail.com; Щукина М.Ю., Колпакова Е.К., Хузагалеева Р.К. (ЗАО «Институт стандартных образцов». Екатеринбург).

АНАЛИЗ РЕАЛЬНЫХ ОБЪЕКТОВ

1. Установлены условия определения целевых аналитов (Mg, Al, Si, Ca, Sc, Cr, Mn, Fe, Co, Ni, Cu, Zn, Ga, Se, Y, Cd, Sn, Te, La, Ce, Pr, Nd, Sm, Eu, Gd, Tb, Dy, Ho, Er, Tm, Yb, Lu, Pb) в наноразмерных *феррогранатах* состава $Y_{3-x}Ce_xFe_{5-y}Ga_yO_{12}$ методами рентгенофлуоресцентной спектromетрии (РФА), дуговой атомно-эмиссионной спектromетрии (ДАЭС) и масс-спектromетрии с индуктивно связанной плазмой (МС-ИСП). Предложены подходы к уменьшению и устранению основных спектральных и неспектральных помех в исследуемых методах. Разработан комплексный взаимодополняющий подход к аналитическому контролю гранатов состава $Y_{3-x}Ce_xFe_{5-y}Ga_yO_{12}$, что обеспечивает высокую точность и достоверность результатов, позволяет расширить номенклатуру целевых аналитов и границы определяемых содержаний.

Development of spectral methods for the analysis of nanocized ferrogarnets of the $Y_{3-x}Ce_xFe_{5-y}Ga_yO_{12}$ composition // Nanosystems: Phys. Chem. Math., 2024, 15 (6), 1–12.

Короткова Н.А., к.х.н., natalya.korotkova.95@mail.ru; Архипенко А.А. alexandra622@mail.ru; Смирнова М.Н., к.х.н., smirnovamn@igic.ras.ru; Барановская В.Б., д.х.н., baranovskaya@list.ru; Доронина М.С., к.т.н., ms.semenova@gmail.com; Кецко В.А., д.х.н., ketsko@igic.ras.ru; (Институт общей и неорганической химии им. Н.С. Курнакова РАН, Центр коллективного пользования физическими методами исследования веществ и материалов, Москва).

2. Показана возможность применения массива химических сенсоров для контроля формирования *аромата кондитерских масс* при коншировании. Оценена корреляция результатов сенсорометрического анализа и физико-химических показателей качества кондитерских масс. Установлено, что массив химических сенсоров позволяет оценить интенсивность и смещение состава аромата в процессе конширования – как важнейшей стадии производства, проводить экспресс-оценку стандартных показателей – кислотного числа лауринового заменителя какао масла по сигналу сенсора с полиэтиленгликоль адипинатом (степень корреляция Пирсона $R=0,94$), кислотность кондитерских масс разной природы по сигналам сенсоров на основе краун-эфира и Твин-40 ($R=0,90–0,92$). Наиболее ценен контроль уменьшения содержания нелетучих соединений – общего содержания сахаров и редуцирующих сахаров при коншировании по сигналам двух сенсоров ($R=0,90–0,93$).

Показана возможность внедрения анализатора газов “электронный нос” на основе сенсоров сорбционного типа в систему *контроля кондитерского производства* для определения физико-химических показателей и оцифровки самого нестабильного свойства – аромата, соблюдения и оптимизации рецептур, объективной и воспроизводимой оценки качества поступающего в переработку сырья и кондитерских изделий, а также воспроизводимости интегрального показателя (аромата) для разных партий готовых изделий.

ЖАХ DOI: [10.1134/S1061934824701089](https://doi.org/10.1134/S1061934824701089)

Кучменко Т.А.. д.х.н., профессор РАН, tak1907@mail.ru; Лисицкая Р.П., lisitskaya_raisa@mail.ru (Воронежский государственный университет инженерных технологий; Военно-воздушная академия им. проф. Н.Е. Жуковского и Ю.А. Гагарина).

3. С использованием «электронного носа» изучены сходства и различия *аромата продуктов ферментации натуральных молочных и аналоговых растительных продуктов типа йогурта*. Объектами исследования служили пробы натурального коровьего молока с массовой долей жира 3,2%, растительные напитки «Соевое молоко» (ООО «Соевый источник», г. Воронеж) и «Кокосовое молоко» (Индонезия), а также эти же пробы после ферментации закваской бактерий *Streptococcus salivarius ssp. thermophilus*, *Lactobacillus delbrueckii ssp. bulgaricus*, *Lactobacillus paracasei ssp. paracasei*, *Lactobacillus helveticus* (ГК «Союзснаб»). Установлено, что пробы кокосового молока наиболее близки по качественному и количественному составу аромата. Пробы коровьего молока различались по 11 из 18 показателей легколетучих компонентов в равновесной газовой фазе (61%), соевого молока - по 12 показателям (67%), кокосового молока - по 5 показателям (28%). Установлено, что наиболее существенно меняется органолептика аромата пробы на основе соевого молока. Показано, что ферментация соевого молока является эффективным технологическим приемом для нивелирования запаха натурального соевого молока.

Известия высших учебных заведений. Пищевая технология, DOI: [10.26297/0579-3009.2024.1.19](https://doi.org/10.26297/0579-3009.2024.1.19)

Глотова И.А., glotova-irina@yandex.ru; Кучменко Т.А., д.х.н., профессор РАН, tak1907@mail.ru; Умарханов Р.У., rus_270487@mail.ru; Галочкина Н.А., Ухина Е.Ю., Агутова С.И., Шахов С.В. (Воронежский

государственный аграрный университет имени императора Петра I, Воронежский государственный университет инженерных технологий).

4. Предложен способ прогнозирования *развития кариеса* по результатам анализа продуктов кислотного метаболизма микрофлоры зубного налета. Анализ биоматериала осуществляют с использованием прибора - портативного электронного носа «МАГ-8» со сменными газовыми пьезосенсорами ОАВ-типа с тремя различными сорбентами. При этом в качестве сорбентов пьезосенсоров наносят отдельно фазы карбоксилированных углеродных нанотрубок, азотнокислого цирконила и гидроксипатита. Способ, за счет экспресс-тестирования зубного налета для прогнозирования развития кариеса, позволяет своевременно начать профилактические и лечебные процедуры, снизить интенсивность разрушения зубов, а также травматичность и дискомфорт пациента во время обследования, сократить общее время исследования и объем нагрузки на врача без потери качества информации.

Патент RU 2826091 C1

Кучменко Т. А., д.х.н., профессор РАН, tak1907@mail.ru; Умарханов Р.У., к.х.н., rus_270487@mail.ru; Менжулина Д. А., darinotchka_08@mail.ru; Ипполитов Ю.А. (Воронежский государственный университет инженерных технологий, кафедра физической и аналитической химии, Воронежский государственный медицинский университет им. Н.Н. Бурденко, педиатрический факультет).

7. *Микропластик и нанопластик (МП и НП)* — серьезная экологическая проблема мирового масштаба. Сегодня пластиковые частицы настолько распространены, что выпадают с дождем и снегом на землю и даже присутствуют в пище и питьевой воде. В дальнейшем ситуация будет только ухудшаться. На химическом факультете МГУ ведутся работы по систематизации имеющейся литературы по основным типам источников, сравнению свойств МП и НП, установлению химического состава наиболее часто встречающихся в природе частиц. Определены основные виды пробоподготовки объектов для выделения МП и НП, представлены различные современные подходы к анализу такого рода частиц и соответствующие методы анализа (с их достоинствами и недостатками).

Пирогов А.В., д.х.н., PirogovAV@my.msu.ru; Проскурнин М.А., д.х.н., профессор РАН, Proskurnin@gmail.com (МГУ им. М.В. Ломоносова, химический факультет, кафедра аналитической химии, лаборатория хроматографии).

7. МС-ИСП, АЭС-ИСП и АЭС-ДДП методики многоэлементного анализа микропластиков. Известно, что накопление тяжелых металлов и других элементов в микропластиках усугубляет локальное загрязнение биосферы, гидросферы, почвы, атмосферы и приводит к увеличению биодоступности токсичных элементов и их соединений. Разработаны методики количественного многоэлементного анализа пластиков и микропластиков (полиэтилентерефталат, полипропилен и полистирол) методами МС-ИСП, АЭС-ИСП и АЭС-ДДП. Предложены способы пробоподготовки: растворение в смеси азотной и серой кислот для АЭС-ИСП и МС-ИСП анализа, измельчение и смешивание с графитовым порошком для ДДП-АЭС анализа, оптимизированы условия регистрации аналитических сигналов и оценены метрологические характеристики методик. АЭС-ИСП и МС-ИСП методики позволяют определять в микропластиках содержания более 50 элементов, в том числе тяжелых металлов, с пределами обнаружения от $n \cdot 10^{-7}$ до $n \cdot 10^{-3}$ % мас. АЭС-ДДП методика подходит для анализа образцов микропластиков с размером частиц менее 0,4 мм и позволяет определять в них содержания более 40 элементов, в том числе тяжелых металлов, с пределами обнаружения от $n \cdot 10^{-5}$ до $n \cdot 10^{-3}$ % мас.

Медведев Н.С., к.х.н., medvedev@niic.nsc.ru; Гусельникова Т.Я., guselnikova1988@inbox.ru (Институт неорганической химии им. А.В. Николаева СО РАН, Аналитическая лаборатория, Новосибирск).

8. Проведено комплексное исследование железосодержащих неорганических пигментов (охры) *археологического памятника «Палеолитическая стоянка Каменная Балка II»*. За счет применения комплекса аналитических методов (микрорентгенофлуоресцентный анализ, масс-спектрометрия с индуктивно связанной плазмой, нейтронно-активационный анализ, порошковая рентгеновская дифрактометрия) установлено, что можно выделить две отличающиеся по химическому составу группы охры – «оксидную» и «сульфатную», что свидетельствует

о двух различных источниках минеральных пигментов, используемых людьми в древности.

Статкус М.А., д.х.н., statkusma@my.msu.ru (МГУ им. М.В. Ломоносова, химический факультет, кафедра аналитической химии, лаборатория концентрирования).

9. Микробиологическая конверсия фармацевтических отходов. Поиск метаболитов с новыми полезными свойствами». В связи с глобальным фармацевтическим загрязнением водных объектов многих стран в настоящее время наблюдается нарастание интереса исследователей к поиску эффективных, в том числе микробиологических, способов переработки фармацевтических отходов для получения на их основе новых полезных продуктов. Результаты многолетних исследований показали, что продукт бактериальной деструкции парацетамолсодержащих фармацевтических отходов проявляет выраженные стимулирующие свойства в отношении лекарственных растений многих семейств: астровые, льняные, яснотковые, подорожниковые и др. В настоящее время проводятся комплексные исследования по влиянию данного биостимулятора на лекарственные растения семейства лилейные (ландыш майский) и крапивные (крапива двудомная).

Аналитическая часть проводимых исследований включает динамическое определение содержания биологически активных веществ: сердечных гликозидов в листьях ландыша майского, гидроксикоричных кислот, аскорбиновой кислоты, флавоноидов, дубильных веществ, хлорофилла, филлохинона в листьях крапивы двудомной с использованием различных методов анализа.

Несомненный интерес представляет математическое моделирование динамики изменения содержания биологически активных веществ в лекарственных растениях и прогноз их накопления под действием нового биостимулятора.

Последними исследованиями показано, что продукт биодеструкции парацетамола независимо от факторов внешней среды проявляет выраженную стимулирующую активность в отношении лекарственных растений сем. *Liliaceae* (ландыша майского) и сем. *Urticaceae* (крапива двудомная), обеспечивая достоверное увеличение морфометрических показателей, прирост биомассы сырья, количественных показателей анатомической структуры листьев и содержания в них биологически

активных веществ по сравнению со стимулятором роста «Циркон» и контролем (водой).

Полученные данные могут быть использованы в лекарственном растениеводстве при разработке агротехнических приемов выращивания сырья ландыша майского и крапивы двудомной, а также при формировании досье при регистрации продукта биодеструкции парацетамола как нового стимулятора роста растений.

Разработка лекарственных средств – традиции и перспективы. III Международ. науч.-практич. конф. (г. Томск, 18-20 сентября 2024 г.): сборник материалов – Томск: Изд-во СибГМУ, 2024. – С. 196 – 199.

Быков Е.В., Гапечкина Е.Д., Слабинская Е.В., Рубцов Д.Ф., Вихарева Е.В. Влияние нового биостимулятора на темпы прироста массы сырья лекарственных растений семейств астровые, лилейные и крапивные/ Всероссийская научно-практическая конференция с международным участием «Кромеровские чтения, 2024»: Сборник материалов (26 апреля 2024 года) / отв. ред. В.Г. Лужанин. – Пермь, ПГФА, 2024. – С. 167-172.

Принято в печать: (05.12.24): журнал «ХИМИЯ РАСТИТЕЛЬНОГО СЫРЬЯ». "Влияние нового биостимулятора на динамику изменения содержания биологически активных веществ в листьях крапивы двудомной".

Направлено в печать: (09.07.24): журнал «ХИМИЯ РАСТИТЕЛЬНОГО СЫРЬЯ». «Исследование влияния продукта биодеструкции парацетамола на вегетативное развитие и динамику накопления сердечных гликозидов в листьях ландыша майского».

Вихарева Е.В., д.фарм.н, vihareva@pfa.ru; Ившина И.Б., академик РАН, ivshina@iegm.ru ((Пермский федеральный исследовательский центр УрО РАН); Селянинов А.А., профессор, prof.selyaninov@yandex.ru (Пермский национальный исследовательский политехнический университет)

10. Для оценки антропогенного воздействия на экосистемы проведен специализированный мониторинг: исследованы биосубстраты и конкременты жителей Апатито-Кировского и Ловозерского районов области – волосы, желудочный сок, костная ткань и желчные конкременты методами ИСП МС (элементный анализ), ИКС, РСА и КРС (фазовый анализ), рассмотрены вопросы пробоподготовки для проведения фазового и элементного анализа. Проведено сравнение состава питьевых вод, используемых населением и элементного состава биосубстратов, показано превышение референтных значений некоторых элементов в

составе волос детей с. Ловозеро (В, Na, Ag, Al, P, V, Cr, As) и наличие РЗЭ как в их составе, так и в питьевых водах.

Разработанные спектрометрические методики послужат аналитической базой для решения проблем, связанных с необходимостью снижения последствий деятельности горно-перерабатывающих производств путем рационального использования минерального сырья и утилизации техногенных отходов.

Дрогобужская С.В., к.х.н., s.drogobuzhskaia@ksc.ru
(Институт химии и технологии редких элементов и минерального сырья им. И.В. Тананаева, Апатиты).

11. Целенаправленный скрининг 11 фенольных токсикантов (фенол, хлорфенолы, 2,4-дихлорфеноксиуксусная кислота, октилфенол, нонилфенол, бисфенол А) проведен в речной воде и донных отложениях (ДН) среднего течения реки Дон в границах Воронежской области. Для количественного химического анализа выбраны три точки отбора проб: в зоне воздействия сброса сточных вод очистных сооружений крупного города (Воронеж), в районном центре (город Лиски) и в районе с незначительным антропогенным воздействием. Концентрации фенольных соединений определяли с помощью газовой хроматографии -масс-спектрометрии (ГХ-МС), анализируемые вещества предварительно концентрировали на магнитном сорбенте, функционализированном аминированным сверхсшитым полистиролом. Отбор проб проводился четыре раза в год с учетом сезонных климатических колебаний и количества осадков. Максимальные концентрации установлены весной для 2,4-дихлорфеноксиуксусной кислоты (1022 нг/л) и 2,4-дихлорфенола (557 нг/л). В донных отложениях достигаются самые высокие концентрации алкилфенолов: 1,99 и 7,84 мкг/г для октилфенола и нонилфенола соответственно. Бисфенол А не обнаружен в обнаруживаемых количествах в воде, однако значительная концентрация этого соединения обнаружена в донных отложениях: 3,18 мкг / кг. Также определено, что донные отложения содержат 2,4,5-трихлорфенол, 2,4,6-трихлорфенол и пентахлорфенол. Максимальные концентрации фенольных загрязняющих веществ в речной воде обычно наблюдаются весной во время половодья и после обильных дождей. Концентрации фенола в донных отложениях менее подвержены сезонным колебаниям. Гидрофобность веществ и

повышение их устойчивости к разложению существенно влияют на их накопление в БС.

Gubin A.S., Sukhanov P.T., Kushnir A.A. TARGETED SCREENING OF PHENOLIC TOXICANTS IN WATERS AND BOTTOM SEDIMENTS OF THE MIDDLE REACHES OF THE DON RIVER // Chemistry for Sustainable Development. 2024. T. 32. № 3. С. 371-383.

Суханов П.Т., д.х.н., pavel.suhanov@mail.ru; Губин А.С., goubinne@mail.ru; Кушнир А.А., kushnir_aleksei@mail.ru (Воронежский государственный университет инженерных технологий, кафедра физической и аналитической химии, кафедра, кафедра промышленной экологии и техносферной безопасности).

12. Предложен способ определения гербицидов 2,4-дихлорфеноксиуксусной кислоты (2,4-Д) и ее метаболита – 2,4-дихлорфенола (2,4-ДХФ) в почвах. 2,4-Д и 2,4-ДХФ из почвы выделяли экстракцией раствором щелочи. Из экстракта аналиты извлекали с помощью сорбента на основе наночастиц магнетита и угля, полученного сжиганием рисовой шелухи, и десорбировали метанолом. В полученном концентрате 2,4-Д и 2,4-ДХФ переводили в метиловые эфиры и определяли их методом ГХ-МС. Пределы обнаружения 2,4-Д и 2,4-ДХФ составили соответственно 3,0 и 0,08 мкг/кг. В качестве реального объекта для анализа распределения гербицида «Балерина» (этилгексильный эфир 2,4-Д и его продуктов деградации) выбран выщелоченный чернозем (граница Ставропольского и Краснодарского краев). Через день после внесения препарата концентрация 2,4-Д в поверхностном слое почвы составила 119 мкг/кг. Существенное влияние на продвижение 2,4-Д по почвенному профилю оказывает выпадение осадков. Наибольшее снижение концентрации 2,4-Д установлено между 3 и 10 днями после внесения препарата. Через месяц после применения гербицида концентрации 2,4-Д составили 31, 18 и 11 мкг/кг на глубинах 10, 30 и 50 см соответственно. В поверхностном слое почвы 2,4-Д не обнаружен. 2,4-ДХФ в детектируемых количествах присутствовал на 16 день после применения гербицида, его деградация протекает значительно медленнее 2,4-Д. Через 1,5 месяца концентрация 2,4-ДХФ составила 0,53, 0,45 и 0,22 мкг/кг на глубинах 10, 30 и 50 см соответственно. В этот же срок 2,4-Д по всему почвенному профилю не обнаружен.

Сыпко К.С., Губин А.С., Суханов П.Т., Кушнир А.А., Пугачева И.Н.

Определение 2,4-дихлорфеноксиуксусной кислоты и ее метаболита в почвах методом газовой хроматографии-масс-спектрометрии после предварительного концентрирования с применением магнитного угля на основе рисовой шелухи //Аналитика и контроль. 2024.Т.28. № 1. С.38-45.

Сыпко К.С., kssypko@mail.ru; Суханов П.Т., д.х.н., pavel.suhanov@mail.ru; Губин А.С., goubinne@mail.ru; Кушнир А.А., kushnir_aleksei@mail.ru (Воронежский государственный университет инженерных технологий, кафедра физической и аналитической химии, кафедра промышленной экологии и техносферной безопасности; Невинномысский институт Северо-Кавказского федерального университета).

13. Изучены экстракты из ботвы картофеля (*Solanum tuberosum*) и томата (*Solanum lycopersicum*) с целью возможного использования в качестве биопрепаратов в органическом земледелии. Для продуктивного извлечения экстрактивных веществ из ботвы картофеля и томата была применена ультразвуковая обработка от 10 до 50 минут. Испытания на бактериостатическую активность показали, что экстракты из листьев картофеля избирательно действуют на *Pseudomonas* sp. (штамм 2), *Bacillus subtilis* штамм 26D и *Pseudomonas fluorescens* штамм В4050, что позволяет рекомендовать их для применения в качестве биопротекторов.

С использованием метода потенциометрии оценена антиоксидантная активность (АОА) в экстрактах из стеблей и листьев томата, которые были испытаны на прорастание семян и рост рассады томатов в сравнении с коммерческими биопрепаратами. Наибольший эффект показал экстракт из листьев томата, превосходящий действие коммерческих препаратов. Отмечено, что существует корреляция между рост-стимулирующим эффектом экстрактов из стеблей и листьев томата с их АОА. Высокая АОА и отсутствие ингибирующих или фитопатогенных свойств у экстракта из листьев томата позволяет рассматривать его как возможный ингредиент для создания нового биостимулятора.

A. Dzhumanazarova, N. Stozhko, D. Dzhorupbekova, N. Gutsalyuk, and M. Bukharinova. Biological preparations from crop waste for organic farming // *E3S Web of Conferences* 537, (2024)
<https://doi.org/10.1051/e3sconf/202453710010>.

Стожко Н.Ю., д.х.н., sny@usue.ru (Уральский государственный экономический университет, кафедра физики и химии, научно-инновационный центр сенсорных технологий. Екатеринбург.)

ОБЩИЕ ВОПРОСЫ АНАЛИТИЧЕСКОЙ ХИМИИ

Терминология

1. Проведено наукометрическое исследование лексики, относящейся к заголовкам 100 наиболее цитируемых публикаций по аналитической химии в 2019-23 гг. Определены наиболее распространенные термины и их взаимосвязанность. На основе этих данных очерчены наиболее актуальные для последнего времени области исследований. Они согласуются с современными тенденциями развития аналитики - миниатюризацией аналитической техники и приложением химического анализа к биомедицине и охране окружающей среды. Развитие сенсорной техники, применимой, в частности, в диагностике коронавирусных заболеваний, соответствует обеим тенденциям. Экологические аспекты аналитики проявляются в определении микропластика и становлении зеленой аналитической химии.

Результаты работы – оригинальная форма информационного обеспечения химиков-аналитиков. Применены сдвоенные наукометрические методы (анализ цитируемости и научной лексики) в современном компьютерном варианте.

Мильман Б.Л., Журкович И.К. Актуальные области исследований в аналитике. 2019-2023 гг. // Аналитика и контроль. - 2024. - Т. 28, № 3. - С. 244-250.

Мильман Б.Л., д.х.н., bormilman@yandex (Научно-клинический центр токсикологии имени академика С.Н. Голикова ФМБА России, лаборатория токсикологической химии органических соединений).

История и методология аналитической химии

1. Выполнено несколько работ по истории химии и, в частности, аналитической химии. Изучена история Менделеевских съездов по общей и прикладной химии, по материалам этой работы сделан пленарный доклад на XXII Менделеевском съезде (ФТ «Сириус») и подготовлена книга «Менделеевские съезды химиков: очерк истории», сданная в печать. Написан обзор того, что сделано в России в области истории химии, обзор опубликован. В 2024 г. издана также книга: Золотов Ю.А. «Научные труды. Обзор работ, библиография, избранные статьи» Организована

деятельность созданной в 2023 г. под руководством Ю.А. Золотова Комиссии РАН по истории химии.

Книги:

Золотов Ю.А. *Научные труды. Обзор работ, библиография, избранные статьи*. М.: Наука. 2024. 1075 с. ISBN 978-5-02-041088-6.

Золотов Ю.А. *Статьи, выступления, интервью 2023 года*. М.: Спутник+. 2024. 69 с. ISBN 978-5-9973-6802-9.

Статьи:

Золотов Ю.А. *Отечественные исследования по истории химии*//Вестн. Российской академии наук. 2024. Т. 94, № 10. С. 914-921. DOI 10.31857/S0869587324100063.

Золотов Ю.А., академик РАН, zolotov.32@mail.ru (МГУ им. М.В. Ломоносова, химический факультет. кафедра аналитической химии, лаборатория концентрирования).

Общие вопросы аналитического приборостроения

1. Разработаны программы для работы микроконтроллеров семейства Arduino предназначенные для управления измерительными устройствами амперометрических и пьезоэлектрических сенсорных систем, как в статическом так и динамическом режимах.

VoltAmPloter v.1.0 / А.Ю. Выборный, А.Н. Зяблов // RU 2024617324 Свидетельство о государственной регистрации программы для ЭВМ : заявитель и правообладатель ФГБОУ ВО ВГУ (RU). – № 2024615594 ; заявл. 19.03.2024; дата регистрации 01.04.2024. Бюл. №4.

ArduinoVoltAm v.1.0 / А.Ю. Выборный, А.Н. Зяблов // RU 2024617354 Свидетельство о государственной регистрации программы для ЭВМ : заявитель и правообладатель ФГБОУ ВО ВГУ (RU). – № 2024615595 ; заявл. 19.03.2024; дата регистрации 01.04.2024. Бюл. №4.

ArduinoFreqMetr v.2.0 / А.Ю. Выборный, А.Н. Зяблов // RU 2024663889 Свидетельство о государственной регистрации программы для ЭВМ : заявитель и правообладатель ФГБОУ ВО ВГУ (RU). – № 2024662829 ; заявл. 05.06.2024; дата регистрации 13.06.2024. Бюл. №6.

PumpControllerFIA-PC / А.Ю. Выборный, А.Н. Зяблов // RU 2024666369 Свидетельство о государственной регистрации программы для ЭВМ : Заявители и правообладатели : А.Ю. Выборный, А.Н. Зяблов. – № 2024665200 ; заявл. 02.07.2024; дата регистрации 12.07.2024. Бюл. №7.

PumpControllerFIA / А.Ю. Выборный, А.Н. Зяблов // RU 2024667090 Свидетельство о государственной регистрации программы для ЭВМ :

Заявители и правообладатели : А.Ю. Выборный, А.Н. Зяблов. – № 2024665179 ; заявл. 02.07.2024; дата регистрации 19.07.2024. Бюл. №7.

Зяблов А.Н.. д.х.н.. alex-n-z@yandex.ru (Воронежский государственный университет, кафедра аналитической химии).

НАУЧНО-ОРГАНИЗАЦИОННАЯ ДЕЯТЕЛЬНОСТЬ СОВЕТА В 2024 г.

Всероссийские мероприятия

- **26.02 – 01.03. 2024 г., Армения, Цахкадзор** : **14-й Зимний симпозиум по хеометрике**. От НСАХ РАН в организации симпозиума участвует Комиссия по хеометрике. (д.х.н. Кирсанов Д.О., к.х.н. Суркова А.А.). В работе симпозиума приняли участие 37 специалистов из 8 стран (Армения, Россия, Китай, Иран, Болгария, Венгрия, Франция, Италия).

- **16 - 18 апреля 2024 г., Москва, МВК «КрокусЭкспо»**: 22 Международная выставка лабораторного оборудования и химических реактивов **«AnalyticaExpo2024»**; Участие совета в организации научной программы выставки.

- **18 – 19 апреля 2024 г., Москва, ИФХЭ РАН**: Форум **«Хроматографические материалы и приборостроение»**. Организатор – Объединенная комиссия по хроматографии

- **12 – 17 мая 2024 г., Екатеринбург, парк-отель «Иволга»**: XI Всероссийская конференция по электрохимическим методам анализа (**«ЭМА-2024»**). *Организаторы*: Уральский федеральный университет имени первого Президента России Б.Н.Ельцина, Научный совет Российской академии наук по аналитической химии, Объединённый ученый совет по химическим наукам Уральского отделения РАН. Ответственные за мероприятие – д.х.н., профессор Козицина А.Н., д.х.н. Иванова А.В.

E-mail: Alisa-Kozitsina@yandex.ru; a.n.kozitsina@urfu.ru;
a.v.ivanova@urfu.ru

- **7 – 12 октября 2024 г., Сочи, Университет Сириус**: XXII Менделеевский съезд по общей и прикладной химии, в программу которого была включена секция **«Аналитическая химия: новые методы для химических исследований и анализа»**. Председатели секции – академик РАН Ю.А. Золотов, член-корр РАН В.П. Колотов. Менделеевский съезд в 2024 году был приурочен к 300-летию Российской академии наук, 190-летию со дня рождения Дмитрия Менделеева и 155-летию Российского химического общества имени Менделеева. Организаторы съезда - Российская академия наук, Министерство науки и высшего образования РФ, Фонд "Талант и успех", РХО им. Д. И.

Менделеева, ИФХЭ им. А. Н. Фрумкина РАН. В программу съезда был включен симпозиум «Современная хроматография и ее перспективы», организуемый Объединенной комиссией по хроматографии.

48-я Годичная сессия совета
(27 июня 2024 г., on-line формат)

27 июня 2024 г. в Москве состоялась 48-я годовичная сессия Научного совета РАН по аналитической химии в on-line формате. В повестке дня были вступительное слово председателя совета академика РАН Ю.А. Золотова¹, информация о молодежных премиях совета за 2023 г., доклад д.х.н. И.А. Родина (МГУ им. М.В. Ломоносова) о научных достижениях в области аналитической химии в 2023 г. (по материалам отчета совета), информация о научно-организационной деятельности совета в 2023- 2024 гг. и планах на 2025 г (ученый секретарь совета И.Н. Киселева), о XXII Менделеевском съезде и о «Журнале аналитической химии» (член-корр. РАН В.П. Колотов), дискуссия о состоянии кафедр аналитической химии в стране .

Во вступительном слове Ю.А. Золотов обрисовал ситуацию с исследовательскими работами в условиях санкций, кратко перечислил основные события в жизни российских аналитиков в 2023 и 2024 годах, поздравил лауреатов молодежной премии совета за 2023 г. Ими стали к.х.н., сотрудник Института земной коры СО РАН (Иркутск) А.С. Мальцев, награжденный за работу «Совершенствование способов пробоподготовки образцов, обработки данных и метрологической оценки методик рентгенофлуоресцентного анализа с полным внешним отражением», и к.х.н., сотрудник кафедры аналитической химии Химического факультета МГУ А.В. Горбовская, получившая премию за работы по созданию новых сорбентов для жидкостной хроматографии. Дипломы и премии будут вручены лауреатам на заседаниях ученых советов по месту работы.

Фото. Награждение к.х.н. А.С. Мальцева Дипломом лауреата молодежной премии НАСАХ РАН на ученом совете Института земной коры СО РАН (Иркутск)

¹Вступительное слово Ю.А. Золотова публикуется отдельно.



И.А. Родин рассказал о наиболее важных, с его точки зрения, научно-исследовательских работах в области спектроскопических, хроматографических, масс-спектрометрических, электрохимических методов, представляющих интерес не только с точки зрения развития методов, но и практически значимых. Так, в рамках программы «Развитие отечественного приборостроения гражданского назначения для научных исследований» в НИЯУ МИФИ создается первый российский серийный прибор ЖХ/МС/МС на основе тандемного трехквadrupольного масс-спектрометра с ионизацией электрораспылением, Разработка многочисленных ионоселективных электродов, химических сенсоров и их систем (электронного носа, электронного языка, электронного глаза) могут лечь в основу создания бионических систем. Ведутся работы в рамках Доктрины продовольственной безопасности РФ. В условиях санкций важное значение приобретают работы по созданию отечественных государственных и отраслевых стандартных образцов. И.А. Родин отметил, что во многих случаях направления ведущихся в стране исследовательских

работ в области аналитической химии совпадают с общемировыми тенденциями.

Научно-организационная работа совета, его комиссий и региональных отделений (сообщение И.Н. Киселевой) складывается из организаций конференций, молодежных школ, курсов повышения квалификации, семинаров. Были перечислены основные мероприятия 2023 – 2024 г., среди которых участие в научной программе международных выставок «АналитикаЭкспо», IV Всероссийская конференция по аналитической спектроскопии (Краснодар – Туапсе, сентябрь 2023 г.), 14 Зимняя школа по хемометрике (Армения, февраль 2024 г.); XI конференция по электрохимическим методам анализа ЭМА 2024 (Екатеринбург, май 2024 г.). На XXII Менделеевском съезде (Сочи, территория Сириус, 7 – 12 октября 2024 г.) будет работать секция «Аналитическая химия: новые методы для химических исследований и анализа»; поступило более 300 заявок на доклады. В 2025 г. планируется провести две конференции: XII Всероссийскую конференцию «Экоаналитика 2025» (Санкт-Петербург, 19 – 25 мая) и VII Всероссийскую конференцию по разделению и концентрированию в аналитической химии и радиохимии (Краснодар – Туапсе, 21 – 27 сентября).

В.П. Колотов представил общую информацию о XXII Менделеевском съезде: более 3000 участников, 9 секций, 13 симпозиумов. Материалы съезда будут изданы в электронном варианте. Программа секции «Аналитическая химия» будет опубликована на сайте совета.

«Журнал аналитической химии» имеет импакт-фактор 1.1, квартиль 3 по рейтингу Elsevier. В 2023 году подготовлены два спецвыпуска журнала: с материалами конференции по спектроскопическим методам и об аналитической химии в Уральском регионе. В 2024 г. подготовлен номер, посвященный В.Н. Майстренко, планируется организовать номер по теме «Хромато-масс-спектрометрия в анализе биологических, фармацевтических и родственных образцов» и номер, посвященный XXII Менделеевскому съезду. Прошла реорганизация системы издания академических журналов. С 2024 г. российская версия журналов издается издательством «Наука». Поскольку пока процесс не отлажен, к моменту сессии вышел только один номер «Журнала аналитической химии, хотя были сданы в издательство 8 номеров. Наладить периодичность издания журналов планируется в октябре-ноябре 2024 г. Английская версия

продолжает выпускаться издательством Pleiades Publishing в нормальном режиме.

Большая дискуссия развернулась по вопросу о состоянии кафедр аналитической химии. В своем выступлении ² проводивший дискуссию Ю. А. Золотов сформулировал цель, к которой надо стремиться аналитикам: много кафедр аналитической химии – хороших и разных. В дискуссии приняли участие В.И. Вершинин (Омский ГУ), Т.Н. Шеховцова (МГУ), В.А. Филичкина (МИСИС), М.А. Проскурнин (МГУ), С.С. Бабкина, С.Н. Штыков (Саратовский ГУ).

В.И. Вершинин рассказал о ситуации с кафедрами аналитической химии в вузах Сибири и Дальнего Востока: из 15 классических университетов на этой территории кафедры аналитической химии есть только в трех вузах; в четырех университетах кафедры объединены с химическими кафедрами другого профиля, причем их руководители – не аналитики, в восьми университетах кафедр нет. Причина – стремление к рентабельности, а не к качеству образования. По мнению Вячеслава Исааковича, в такой ситуации стоит задуматься о том, чтобы больше внимания уделять практическим аспектам.

Т.Н. Шеховцова рассказала о разработанной Министерством науки и высшего образования РФ и озвученной министром В.Н. Фальковым новой стратегии образования, которая еще будет обсуждаться. Один из мотивов ее подготовки – нехватка квалифицированных кадров во многих областях экономики. Предполагается установить три уровня образования – 4, 5 и 6 лет. Понятие бакалавр сохранится только для иностранных студентов. 4 года готовятся специалисты лишь некоторых отраслей, например информационных; 5 лет – базовый уровень (в области химии – химики-технологи); 6 лет – профессиональное фундаментальное образование (химик-исследователь). Сохраняется магистратура – для углубленной специализации. Аспирантура (3-4 года) – не этап обучения, не будут выдаваться дипломы, ее цель – защита диссертации. Будут введены единые программы по фундаментальным дисциплинам для всей страны (по требованию работодателей возможно обучение по разным программам). Увеличится объем часов на практические занятия, вводятся стажировки на предприятиях. Новая модель образования должна заработать с 1 сентября 2026 г., к 1 октября 2025 г. предполагается подготовить нормативную базу.

² Выступление Ю.А. Золотова печатается отдельно.

Вузы должны будут подключиться к работе над программами и установлению контактов с работодателями.

М.Н. Проскурнин рассказал, что на кафедре аналитической химии МГУ в последние два года учебные курсы усовершенствованы с увеличением их практической направленности. Переделана программа кандидатского минимума. В.А. Филичкина рассказала, как организован образовательный процесс на кафедре сертификации и аналитического контроля МИСИСа. Выпускники очень востребованы на предприятиях промышленности. Для обучения по направлениям «Стандартизация и метрология» и «Управление качеством» на кафедру приходят с предприятий целыми отделами.

В общей дискуссии по итогам сессии М.А. Проскурнин, положительно оценив проведение сессий в on-line формате, предложил еще один вариант –организацию сессий в виде двух или трехдневных мини-конференций с живым общением участников. Мнения участников сессии разделились.

В конце заседания принято решение утвердить отчет совета за 2023 г.

**Вступительное слово
председателя Научного совета РАН по аналитической химии
академика Ю.А.Золотова на годичной сессии совета
27 июня 2024 года**

Дорогие коллеги! В первый раз мы проводим сессию научного совета в дистанционном режиме. Можно надеяться, что невозможность живого общения членов совета будет частично компенсирована увеличением числа участников сессии. Время заседания выбрано с учетом часовых поясов.

В условиях санкций мы испытываем затруднения при пополнении и обслуживании приборного парка, участии в международных конференциях и проектах, отчасти при опубликовании работ. Тем не менее исследования в области аналитической химии не только успешно продолжаются, но и отмечены интересными и полезными результатами. Преподаватели аналитической химии, замученные почти непрерывными реформами высшего образования, делают свое дело. Инженерная прослойка нашего сообщества под лозунгом достижения технологического приоритета

разрабатывает новые средства анализа – приборы, разные аксессуары или способы обработки данных. А работники производственных аналитических лабораторий в еще большем объеме, чем прежде, выполняют анализы, обеспечивают контроль различных процессов и различных сред.

В 2023 году и в первой половине 2024 г. научный совет провел несколько конференций, работали Московский семинар по аналитической химии, новый Петербургский семинар, были организованы семинары на выставке «АналитикаЭкспо».

В этом году отмечается 300-летие Российской академии наук, этому событию посвящен ряд крупных мероприятий. Одно состоялось 8 февраля в Кремлевском дворце съездов с участием президента страны. Другое серьезное мероприятие – XXII Менделеевский съезд по общей и прикладной химии, где организованы секция аналитической химии, симпозиум по хроматографии, симпозиум по истории химии. К юбилею академии вышла книга «Аналитическая химия в Академии наук». В связи с юбилеем академии ряд членов нашего совета отмечены государственными наградами, благодарственными письмами президента Российской Федерации, наградами Академии наук.

Предыдущая сессия научного совета была проведена в сентябре 2023 г. В промежутке между сессиями несколько членов нашего совета, докторов наук, отметили юбилеи: Е.С. Бродскому исполнилось 85 лет, Н.Б. Зорову – 80, Б.Л. Мильману, В.Н. Сидельникову и С.Н. Штыкову – 75, С.А. Еремину и Н.К. Зайцеву – 70. Юбилеи отметили также С.Г. Дмитриенко, Т.Н. Ермолаева, Н.Я. Мокшина, Е.И. Савельева.

К сожалению, за этот же период совет понес утраты. 7 октября 2023 г. скончался специалист в области масс-спектрометрии сотрудник Института нефтехимического синтеза им. А.В.Топчиева РАН доктор химических наук Владимир Георгиевич Заикин. 21 октября ушла из жизни выдающийся ученый, замечательный, многосторонний по интересам человек, доктор физико-математических наук Лидия Николаевна Галль, работавшая в Институте аналитического приборостроения РАН; Лидия Николаевна внесла очень большой вклад в масс-спектрометрию. 12 ноября мы потеряли специалиста по электрохимическим методам анализа доктора химических наук Якова Иосифовича Турьяна, жившего в последние года в США. 24 ноября не стало профессора Воронежского государственного университета, специалиста по физической химии растворов и ионному обмену доктора химических наук Владимира Алексеевича Шапошника. 27

февраля 2024 г. скончалась Нина Александровна Колпакова, доктор химических наук, профессор Томского политехнического университета, многое сделавшая в развитии электрохимических методов анализа и аналитической химии платиновых металлов.

Проект программы нынешней сессии научного совета был заранее разослан членам совета. Есть небольшое изменение: премии молодым ученым предлагается вручить в другом месте, например на заседании Московского семинара по аналитической химии или на Менделеевском съезде.

О российских кафедрах аналитической химии

Ю.А. Золотов

Московский университет им М.В. Ломоносова

В нашей стране немало кафедр, которые на хорошем уровне проводят исследования в области аналитической химии, готовят высококвалифицированных специалистов-аналитиков, будучи выпускающими, а также успешно преподают общий курс аналитической химии. Примерами таких кафедр могут служить кафедры ряда классических университетов (Московского, Петербургского, Саратовского, Казанского, Самарского, Кубанского, Воронежского, Омского), Уральского федерального университета, единичных политехнических и технологических (Томского). В специализированных вузах, которых в стране большое число, таких кафедр немного. Можно назвать кафедры Воронежского университета инженерных технологий (в аспекте научной работы, а ранее - в аспекте подготовки кадров высшей квалификации), МИРЭА-МИТХТ (в аспекте подготовки учебников), МИСиС (в аспекте нацеленности на нужды отрасли). Число вузовских публикаций по аналитической химии сопоставимо с числом публикаций из научно-исследовательских институтов. Многие вузовские аналитики имеют широкую известность в научном мире.

Однако есть беспокоящие обстоятельства. Во многих классических и федеральных университетах кафедр аналитической химии нет или они себя не проявляют. В некоторых университетах кафедры были ликвидированы или слиты с другими кафедрами, причем в этом случае заведующим нередко становится специалист-неаналитик. Даже сильные кафедры иногда расширяли свое название, прибавляя к аналитической

химии, скажем, фармацевтическую химию, химическую экологию, сертификацию или еще что-нибудь. Считается, что это укрепляет позиции кафедры; в тактическом плане это, возможно, и справедливо, но косвенно это подрывает статус аналитической химии, науки самодостаточной.

Научная тематика некоторых, даже сильных, кафедр иногда смещается с сторону других наук – фармацевтики, медицины, геохимии и т.д. Это хорошо, когда решается крупная задача, когда от аналитиков требуются привлечение их интеллектуального потенциала; в этом случае демонстрируется важность, необходимость аналитической химии как науки, а не только возможность отшлифовать известную методику или помочь анализами.

С уходом тематики в другие сферы связан вопрос о заведующих кафедрами. Нередко даже в хороших университетах заведующими назначают неаналитиков. Конечно, это бывало и раньше: кафедрой аналитической химии Петербургского университета несколько десятилетий заведовал специалист по органической химии и химической кинетике коллега Д.И.Менделеева Н.А.Меншуткин, написавший известный учебник по аналитической химии. Целую серию учебников по аналитической химии подготовил в МИТХТ физико-химик А.А. Ищенко. И тем не менее очевидно: лучше, чтобы кафедру возглавлял аналитик.

Особое беспокойство вызывают специализированные вузы. Еще в 1930 гг. наш аналитик-классик Н.А.Тананаев, хорошо знавший и производственный аналитический контроль, ставил вопрос о том, чтобы промышленные вузы выпускали специалистов по аналитическому контролю для своих отраслей – инженеров-аналитиков. Начиная с 1970 годов в серии писем во властные структуры и в публикациях я ставил тот же вопрос. Но уже в более широком плане – речь шла вообще о специализированных вузах, в том числе фармацевтических, сельскохозяйственных, медицинских и других. Некоторые ведомства задачу подготовки аналитиков поняли сами. Бывший Минсредмаш создал и сейчас существующую выпускающую кафедру физико-химических методов анализа в Уральском политехническом институте. Попытки сделать выпускающие кафедры с переменным успехом делали и некоторые другие отраслевые вузы, но в целом проблема не решена и сейчас.

Но озабоченность, касающаяся специализированных вузов, не только и даже не столько в выпуске специалистов-аналитиков. Важнее то,

насколько эти нужды, особенности отрасли учитываются в преподавании аналитической химии, как научная тематика кафедр вписывается в нужды отрасли. Положение кафедры укрепляется, если в научной работе она взаимодействует со специальными кафедрами или развивает методы, широко используемые в отрасли и в преподавании делает акцент на методы и объекты, существенные для отрасли. Кафедра, скажем, металлургического вуза, научная тематика которой - хроматографический анализ биологически активных веществ, будет восприниматься в вузе чужой. Кафедра, преподающая аналитическую химию как в классическом университете, где в курсе всего понемногу, без акцентировки, сама делает себя посторонней.

Конечно, огромную роль играет личность лидера. Но надо быть Х.З. Брайниной, чтобы создать звучную школу в экономическом (экономическом!) вузе, или Я. И. Коренманом, чтобы зародить школу по экстракции на пустом месте, в пищевом институте. Но не все так могут, поэтому нужна общая методология.

Цель наша - много кафедр аналитической химии, хороших и разных.

Заседание бюро совета (13 февраля 2025 г.)

В 2024 г. закончился пятилетний период работы Научного совета РАН по аналитической химии (2019-2024 гг. Постановлением Отделения химии и наук о материалах РАН от 21 ноября 2024 г № 73 утвержден новый состав совета³. 13 февраля 2025 г. состоялось первое заседание бюро совета нового состава, из 24 членов бюро на заседании присутствовали 19 человек. Вел заседание председатель совета академик РАН Ю.А. Золотов. На обсуждение были вынесены следующие вопросы: направления и способы деятельности совета; структура совета; порядок работы совета; кадровые вопросы; ближайшие планы; разное.

Во вступительном слове Ю.А. Золотов довел до сведения присутствующих, что предложения, вынесенные на обсуждение бюро, подготовлены председателем совета и его заместителями д.х.н. А.В. Булатовым, член-корр. РАН В.П. Колотовым, д.х.н. М.А. Проскурниным и д.х.н. С.Н. Штыковым («малым бюро» совета).

Направления и способы деятельности совета включают следующее:

³ С составом совета можно ознакомиться на сайте www.rusanalytchem.org

- Содействие расширению масштабов и поднятию уровня отечественных исследований в области аналитической химии путем проведения сессий совета, научных конференций, съездов, семинаров, составления прогнозов (планов и отчетов работы совета и его членов).

- Содействие преподаванию аналитической химии, подготовке кадров высшей квалификации и переподготовке работающих специалистов.

- Содействие разработке и выпуску аналитических приборов, реактивов, стандартных образцов, компьютерных программ для целей аналитической химии.

- Ответы на вызовы экономики, обеспечения безопасности; содействие решению на современном уровне и в необходимых масштабах прикладных задач анализа и контроля в различных областях.

- Пропаганда и популяризация аналитической химии, в том числе путем проведения конкурсов.

- Издательская деятельность.

- Текущие дела. Переписка.

- Представительская деятельность.

В структуру совета включены

- *Комиссии по общим вопросам аналитической химии*: комиссия по преподаванию (д.х.н. М.А. Проскурнин)⁴, по информационной поддержке (член-корр. РАН В.П. Колотов), издательская комиссия (д.х.н. А.В. Булатов), по терминологии (член-корр. РАН В.П. Колотов), по хемометрике (д.х.н. Д.О. Кирсанов), по метрологии химического анализа (В.И. Дворкин);

- *Комиссии по методам аналитической химии*: комиссия по методам разделения и концентрирования (д.х.н. О.В. Родинков); Объединенная комиссия по хроматографии (Научного совета РАН по аналитической химии и Научного совета РАН по физической химии – член-корр. РАН О.А. Шпигун, член-корр. РАН А.К. Буряк, член-корр. РАН Р.Х. Хамизов), комиссия по спектрометрическим методам анализа (д.ф.-м.н. М.Н. Филиппов), по масс-спектрометрии (д.х.н. А.А. Гречников), по электрохимическим методам анализа (д.х.н. А.А. Карякин), по биохимическим методам анализа (д.х.н. Б.Б. Дзантиев);

- *Комиссии по видам анализа и способам его осуществления*: комиссия по химическим сенсорам и тест-методам (д.х.н. Т.А. Кучменко);

⁴ В скобках утвержденные председатели комиссий.

- *Комиссии по анализу важнейших объектов*: комиссия по анализу объектов окружающей среды.

Численность комиссий определяется их председателями. В составе комиссий могут быть и не члены Научного совета. Основными видами деятельности комиссий является проведение конференций, семинаров, рабочих совещаний, составление ежегодных отчетов.

Признано целесообразным сохранить Северо-Западное отделение (председатель д.х.н. А.А. Карцова), Северо-Кавказское отделение (д.х.н. З.А. Темердашев), Уральское отделение (д.х.н. А.Н. Козицына), Сибирское отделение (д.х.н. В.Н. Лосев).

Председатель жюри по присуждению премий Научного совета – д.ф.-м.н. М.Н. Филиппов.

Среди членов малого бюро обязанности распределены следующим образом: Ю.А. Золотов осуществляет общее руководство советом, за ним – представительские функции и пропаганда и популяризация аналитической химии. В.П. Колотов курирует конференции, отвечает за информационную поддержку совета, является главным редактором «Журнала аналитической химии». За М.А. Проскурным сфера образования, подготовка научной программы совета для выставки «АналитикаЭкспо». А.В. Булатов курирует создание в разных городах семинаров по аналитической химии и издательскую деятельность. С.Н. Штыков курирует региональные отделения и отвечает за международные связи. За И.Н. Киселевой годовой отчет совета и текущая работа.

Сессии совета можно проводить 1-2 раза в год (в обычном формате или в он-лайн варианте).

В планах крупных мероприятий совета на 2025 г. XIII Всероссийская конференция «Экоаналитика» (19 – 23 мая, Санкт-Петербург); VII Всероссийский симпозиум «Разделение и концентрирование в аналитической химии и радиохимии» (21 – 27 сентября, Краснодар); Симпозиум по ионной хроматографии (25 июня, Москва); Конференция по масс-спектрометрии (13 – 17 октября, Москва); 23-я Международная выставка лабораторного оборудования и химических реактивов (23 – 25 апреля, Москва); семинары по аналитической химии (Москва, Санкт-Петербург); годовичная сессия совета (27 июня, в он-лайн формате).

В план мероприятий 2026 г. включены 15th Winter Symposium on Chemometrics (конец февраля, Узбекистан); 24-я Международная выставка лабораторного оборудования и химических реактивов (апрель, Москва); V

Всероссийская конференция по аналитической спектроскопии» (20 – 26 сентября, Краснодар); XII Конференция «Аналитика Сибири и Дальнего Востока - 2026» (6 – 11 октября, Владивосток); семинары по аналитической химии (Москва, Санкт-Петербург); годовая сессия НСАХ РАН.

На осень 2027 г. намечено проведение V Съезда аналитиков России.

Бюро единогласно поддержало профессора, д.х.н. А.А. Ищенко (ФГБУ ВО «МИРЭА-Российский технологический университет») как кандидата на присвоение почетного звания «Заслуженный деятель науки РФ» с формулировкой «За большие заслуги в развитии фемтохимии, создании и развитии ряда новых методов исследования веществ и материалов, за создание учебников по аналитической химии.

22-я Международная выставка лабораторного оборудования и химических реактивов «AnalyticaExpo2024»

Выставка состоялась в МВЦ «КрокусЭкспо» с 16 по 18 апреля 2024 г. В деловой программе выставки было 2 семинара, организованных НСАХ РАН:

- Новые возможности и варианты высокоэффективной жидкостной хроматографии в химическом анализе и технологии (Ведущий - член-корр. РАН О.А. Шпигун)
- Новые импортозамещающие разработки отечественных производителей приборов для анализа нефтепродуктов (Ведущий – Е.А. Новиков).

XI Всероссийская конференция по электрохимическим методам анализа «ЭМА-2024»

XI Всероссийская конференция по электрохимическим методам анализа (ЭМА-2024) состоялась с 12 мая по 17 мая 2024 г. на базе парка-отеля «Иволга», рис.1 (г. Екатеринбург). Конференция проведена Уральским Федеральным университетом имени первого Президента России Б.Н. Ельцина (УрФУ). Организаторами конференции являлись Министерство науки и высшего образования России, Научный совет РАН по аналитической химии, Объединенный ученый совет по химическим наукам УрО РАН. Финансовую поддержку также оказали 8 предприятий, а именно: ООО «ФИЗЛАБПРИБОР», Российская научно-производственная

компания SmartStat, ООО «ТД Красная звезда», ООО "ХимМедПоволжье", ООО "Группа АЙ-ЭМСИ", ООО «АНК-сервис», ООО «Элемент» и АО «Алтайский Химпром им. Верещагина».

В конференции приняли участие 120 ученых из России, Узбекистана и Белоруссии, из которых 52 представляли Екатеринбург, 18 - Москву, 16 - Казань 7, 10 - Санкт-Петербург, 7 - Уфу, 7 - Томск, 2 – Кемерово, 2 – Тулу, 1 - Воронеж, 1 - Новосибирск, 2 – Ташкент (Узбекистан) и 1 – Минск (Белоруссия). В ходе конференции было сделано 13 пленарных докладов ведущими российскими учеными - руководителями научных групп и направлений. Было заслушано 6 ключевых и 50 устных докладов, разделенных на пять секций: «Состояние и перспективы развития электрохимических методов анализа; их место в системе аналитических методов», «Электрохимические и гибридные сенсоры», «Хеометрика в электрохимическом анализе», «Метрологическое обеспечение электрохимических методов», «Тенденции в электрохимическом приборостроении. Развитие отечественной приборной базы», «Электрохимический анализ и контроль реальных объектов (экоаналитика, биомедицина, фармацевтика и др.). Методы электроанализа в смежных науках». В двух постерных сессиях было представлено 49 постеров.

На открытии конференции участников поприветствовали председатель Научного совета РАН по аналитической химии академик Ю.А. Золотов (онлайн), Председатель Объединенного ученого совета по химическим наукам УрО РАН академик В.Н. Чарушин, чл-кор. РАН В.Л. Русинов, проректор по науке УрФУ д. ф.-м. наук А.В. Германенко, директор ХТИ УрФУ д.х.н. М.В. Вараксин, а также сопредседатель Оргкомитета конференции д.х.н. Г.А Евтюгин.

На сайте конференции «ЭМА-2024» <https://ema2024.urfu.ru/ru/> и НСАХ РАН www.rusanalytchem.org опубликованы тезисы и программа конференции в свободном доступе.

На закрытии конференции выступавшие отметили высокий уровень ее организации и проведения, непринужденную деловую атмосферу. Было высказано пожелание в будущем обратить большее внимание на проблемы и достижения Признано удачным и заслуживающим продолжения приглашение докладчиков по смежным направлениям наук для расширения возможностей междисциплинарных исследований и повышения уровня сотрудничества научных коллективов. Участники конференции выразили единодушное мнение об успехе проведения конференции, актуальности серии ЭМА и необходимости продления

практики проведения конференций по электрохимическим методам анализа в будущем.

Козицина А.Н.

XXII Менделеевский съезд по общей и прикладной химии

С 7 по 11 октября 2024 г. на Федеральной территории «Сириус», в конференц- и лекционных залах Университета «Сириус» состоялся грандиозный праздник российской химической науки - XXII Менделеевский съезд. На Форум съехались участники со всех уголков России – от Калининграда до Сахалина, крупнейшие специалисты химической отрасли, ученые-химики, инженеры, научная молодежь. В форуме приняли также участие иностранные ученые из около 40 стран. Было сделано 2 224 доклада – пленарных, ключевых, приглашённых, устных и постерных. В съезде участвовали 1420 молодых ученых и студентов.

Программа съезда включала, помимо пленарных заседаний, которые открывали каждый день, 9 секций и 14 симпозиумов, а также деловую программу с круглыми столами по актуальным темам взаимодействия науки и бизнеса, пленумом РХО им. Д.И. Менделеева и расширенным заседанием Научного совета химических обществ Международной ассоциации. Расписание заседаний было сделано так, что практически одновременно и параллельно проводились 23 специализированные конференции по всем актуальным направлениям развития химической науки, промышленности и образования. С программой съезда и тезисами докладов можно познакомиться на сайте <https://mendeleeevcongress.ru>.

В этом году празднуется 190-летие со дня рождения Дмитрия Ивановича Менделеева. Его портреты, его высказывания, его таблица – окружали участников съезда буквально на каждом шагу. Прекрасно были оформлены интерьеры здания Университета «Сириус», который стал местом проведения Съезда. Перед входом в университет парил воздушный шар с портретами Менделеева - от молодого (в годы, когда он создал знаменитую периодическую систему) до Менделеева - всемирно известного ученого. На здании университета над входом была установлена огромная таблица элементов Д.И. Менделеева. В холлах перед конференц-залами были установлены стенды с цитатами из трудов и высказываний Менделеева, например: «Промышленность – это средство народного

богатства, и наука, особенно химия, является ее движущей силой» («Промышленность и наука», 1880) или «Без мощного химического производства ни одно государство не может быть ни богатым, ни крепким» («Заветные мысли» 1905г.) Залы заседаний секций и симпозиумов были названы по фамилиям выдающихся ученых-химиков, представителей соответствующего направления исследований, например, зал Симпозиума по хроматографии был назван «Зал Цвета». Исключение составляли только залы для Открытия и Закрытия съезда – «Зал Менделеев» и зал пленарных заседаний промежуточных дней работы съезда – «Зал Атом». В одном из проходных холлов «Сириуса» был установлен информационный стенд с ключевыми докладчиками всех съездов от первого до двадцать первого.

Церемония открытия съезда предстала перед участниками в виде великолепного шоу со спецэффектами – участников с экранов приветствовал «оживленный» с помощью искусственного интеллекта Менделеев, оживали фотографии участников первых съездов – была представлена краткая история их проведения и те события в истории страны, на фоне которых они проводились. Видеоряд сопровождали музыкальные вставки в исполнении профессиональных артистов – джаз-бэндов, виолончелиста, эстрадных вокалистов.

С приветственным словом к участникам Съезда обратился президент РАН академик Г.Я. Красников. Было оглашено приветствие министра Минобрнауки В.Н. Фалькова

Открыл XXII Менделеевский съезд президент Русского химического общества им. Д.И. Менделеева академик РАН А.Ю. Цивадзе.

Первая половина каждого рабочего дня съезда отводилась на пленарные заседания, где участникам были представлены доклады ведущих российских ученых и ряда зарубежных, как, например, пленарный доклад лауреата Нобелевской премии по химии 2011 года «за открытие квазикристаллов» израильского химика Дана Шехтмана, М.В. Ковальчука (Природоподобие: новая эра развития человечества); В.П. Ананикова В.П. (Искусственный интеллект в химии); С.Н. Калмыкова (Химические аспекты создания ядерной энергетики нового поколения) В.И. Лысака (Создание новых материалов энергией взрыва); А.Ю. Цивадзе (Прорывные химические технологии переработки редкометаллического сырья); СМ. Алдошина (Критические технологии освоения минерально-сырьевой базы Российской Федерации: от прогноза и добычи руд к извлечению металлов и созданию высокотехнологичной продукции). С заключительным пленарным докладом завершающего дня XXII Менделеевского съезда

выступил академик РАН Ю.А. Золотов. В своем докладе «Менделеевские съезды: очерк истории» он рассказал, как зарождался форум, и напомнил о главной цели собрания — объединять химиков самых разных областей, направлять их и вдохновлять на новые научные свершения. «Менделеевские съезды на протяжении многих десятилетий были существенно важным событием для химиков нашей страны. Прежде всего, они были смотром достижений научной химии и влияли на направления научных работ, корректируя деяния участников съезда, направляя и вдохновляя их. Служили тем местом, где встречаются химики, работающие в разных областях — химики-исследователи и промышленные химики со смежниками, работающими в других областях науки». В заключение своего доклада академик Золотов Ю.А. осветил проблемы, над которыми следует подумать на будущее, например: «создать Положение о Менделеевских съездах (постоянный комитет, принципы выбора места и времени съезда и т.п.)»

Рыбакова Е.В. (Перепечатано с сокращениями из журнала «Аналитика». Т.14. № 6. 2024)

В программу XXII Менделеевского съезда были включены симпозиумы «Аналитическая химия: новые методы для химических исследований и анализа» (Руководители секции – академик Ю.А. Золотов, член-корр. РАН В.П. Колотов), «Симпозиум по хроматографии» (Руководители - член-корр. РАН А.К. Буряк, член-корр. РАН Р.Х. Хамизов, член-корр. РАН О.А. Шпигун).

На симпозиум «Аналитическая химия: новые методы для химических исследований и анализа» (8-11 октября) поступило около 300 тезисов, из которых была сформирована программа: 4 ключевых доклада, 16 приглашенных, 33 устных и более 150 стендовых. Тамтика докладов была очень широкой и интересной, много внимания было уделено химическим сенсорам, спектрометрическим методам, методам разделения и концентрирования, электрохимическим методам, наноаналитике. Очень широк был круг анализируемых объектов: объекты окружающей среды, пищевые продукты, металлы и сплавы, органические вещества и многое другое.

Симпозум по хроматографии, организованный на съезде Объединенной комиссией по хроматографии, прошел с 8 по 10 октября. На

нем было представлено 49 устных и 29 постерных докладов. Всего зарегистрированных участников симпозиума (очных и заочных) было около 100, однако доклады участников съезда по хроматографической тематике были в программах и других секций. В качестве ключевых и приглашенных докладчиков выступили ведущие специалисты в области хроматографии из ключевых научных школ по хроматографии со всей страны. Обсуждались новые сорбенты в хроматографии, новые подходы к разделению, тенденции в развитии хроматографического приборостроения, перспективы развития капиллярного электрофореза и многое другое.

Как отметил в своем докладе Ю.А. Золотов – «Менделеевские съезды — это ещё и праздничный фестиваль химиков» - и прошедший съезд был лучшим тому подтверждением.

Московский семинар по аналитической химии

(формат заседаний – очно-дистанционный)

16.01.2024г.

1. Проскурнин М.А. (д.х.н., профессор РАН. МГУ им. М.В. Ломоносова, Москва). *Методы анализа и мониторинга микро, субмикро- и нанопластика: современное состояние, проблемы и перспективы*

2. Багрянская Е.Г., Сотникова Ю.С., Половяненко (Новосибирский институт органической химии им. Н.Н. Ворожцова СО Д.Н. РАН). *Анализ микропластика методами ИК спектроскопии, пиролитической газовой хроматографии и другими методами*

3. Ермолин М.С. (к.х.н.. ГЕОХИ РАН). *Оценка содержания микропластика в природных водах и донных отложениях: пробоотбор и пробоподготовка*

24.09.2024г.

1. Третьяков А.В., Киш Л.К., Лебедев А.М., Гергель М.А., Козеичева Е.С. («Всероссийский государственный центр качества и стандартизации лекарственных средств для животных и кормов», ФГБУ «ВГНКИ») *Масс-спектрометрия как инструмент обеспечения пищевой безопасности: практические аспекты применения*

2. Лаврухина О.И., Амелин В.Г., Некрасов Д.Ю., Лебедев А.М., Макаров Д.А. (ФГБУ «ВГНКИ»). *Масс-спектрометрия как инструмент обеспечения пищевой безопасности: решение нетривиальных задач.*

24.11.2024г.

1. Борисов П.С. (к.х.н., ИРХС РАН). *Изучение состава серосодержащих соединений нефтей различными масс-спектрометрическими методами.*

2. Лабутин Т.А. (к.х.н., МГУ имени М. В. Ломоносова) *Анализ объектов окружающей среды методом лазерно-искровой эмиссионной спектроскопии.*

Санкт-Петербургский семинар по аналитической химии

(Северо-Западное отделение совета. Формат заседания – очно-дистанционный)

1. Санкт-Петербургский семинар по аналитической химии

2024 год отмечен многими знаковыми событиями: 300-летие Санкт-Петербургского университета, 300-летие Российской Академии Наук, 190-летие со Дня рождения Дмитрия Ивановича Менделеева.

19 февраля 2024 г. Заседание Петербургского семинара по аналитической химии «Победители конкурса исследовательских работ студентов и аспирантов Института химии СПбГУ», посвященное 300-летию Санкт-Петербургского университета.

1. Приветственное слово проректора по научной работе СПбГУ Микушева С.В.

2. Доклады студентов и аспирантов Института химии СПбГУ (время доклада - 15 мин):

- Керестень В.М. (аспирант 1-го года обучения) *Ионоселективные электроды с мембранами на основе ионофоров в режиме ненулевого тока*

- Кочеткова М.А. (магистрант 2-го курса) *Тест-системы для определения пищевых добавок в продуктах для детского питания.*

- Карпицкий Д.А. (аспирант 2-го года обучения) *Smart materials при анализе объектов природного происхождения со сложной матрицей.*

- Юськина Е.А. (магистрант 2-го курса) *Бесконтактный химический сенсор на основе высокочастотной катушки индуктивности.*

- Годунов П.А. (бакалавр 4-го курса) *Термочувствительные эвтектические растворители как экстрагенты нового поколения.*

18 марта 2024 г. Заседание Петербургского семинара по аналитической химии, посвященное женщинам-ученым Института химии СПбГУ – победителям Всероссийских конкурсов.

1. Пенькова А.В. (д.х.н., профессор) *Мембранные методы разделения.*

2. Осмоловская О.М. (к.х.н., доцент) *Неорганические наносорбенты твердофазной микроэкстракции: получение, важнейшие параметры и примеры использования.*

15 апреля 2024 г. Заседание Петербургского семинара по аналитической химии, посвященное 300-летию Российской Академии наук.

1. Москвин Л.Н. (д.х.н., проф.), Родинков О.В. (д.х.н., проф.) *Жидкостногазовая и жидкостно-газоадсорбционная хроматография и их практическое применение*

2. Почивалов А.С. (к.х.н., ассист., Институт химии СПбГУ) *Жидкостная экстракция в супрамолекулярные растворители: особенности проведения и применение в аналитической химии*

20 мая 2024 г.

1.Калмыков С.Н. (д.х.н., академик РАН, Вице-президент РАН) *Энергетика/экономика/экология ядерная.*

2.Кукушкин В.Ю. (д.х.н., академик РАН, Почетный проф. СПбГУ) *Сигма-дырочные взаимодействия в химии.*

17.06.2024 г. Заседание Петербургского семинара по аналитической химии, посвященное 190-летию со дня рождения Д.И.Менделеева.

1. Дмитриев И.С. (д.х.н., ст. н. сотр. СПб Филиала Института истории естествознания и техники РАН) *Несистемный Менделеев*

2. Карпов А.В. (д.ф.-м.н., учёный секретарь Лаборатории ядерных реакций ОИЯИ, Дубна) *Сверхтяжелые элементы*

21.10.2024 г.

1.Богданова П.Д. (компания «Петроаналитика», АНО ДПО «АНКОР-КОНСАЛТИНГ») *Стандартные образцы как основа для контроля качества результатов химического анализа.*

2.Бородин А.В. (компания «Инфраспек») *Инфракрасные Фурье-спектрометры серии ФСМ. Опыт, решения, разработки для анализа нефтепродуктов.*

8.11.2024г.

1. Михельсон К.Н. (д.х.н., проф. кафедры физической химии Института химии СПбГУ) *Ионоселективные электроды на основе ионофоров в токовых режимах, новые возможности применения.*

2. Бойченко Е.С. (к.т.н., с.н.с. Института химии СПбГУ; ИТМО) *Методы оптической спектроскопии в сочетании с хемометрической обработкой данных в онкологических исследованиях.*

16.12.2024г.

1. Зенкевич И.Г. (д.х.н., проф. кафедры органической химии Института химии СПбГУ) *Особенности газохроматографического анализа термически нестабильных соединений.*

2. Муравьев А.Г. (к.х.н., директор производственно-лабораторного комплекса Крисмас+). *О применении тест-методов химического анализа и средств на их основе в решении учебно-научных и производственных задач.*

Объединенная комиссия по хроматографии

01.03. – 30.09.2024 г., Москва, ИФХиЭ РАН – конкурс работ молодых ученых им. М.С Цвета

18 – 19.04.2024 г., Москва, ИФХЭ РАН: Форум «Хроматографические материалы и приборостроение»;

8 – 10.10.2024 г., Сочи, Сириус: Симпозиум по хроматографии в рамках XXII Менделеевского съезда;

05.12.2024 г., Самарский ГУ, ИФХиЭ: Семинар памяти М.С. Вигдергауза (оглайн формат), 22 докладчика

Северо-Западное отделение

Санкт-Петербургский семинар по аналитической химии, Санкт-Петербургский государственный университет: заседания 18 февраля, 18 марта, 15 апреля, 20 мая, 17 июня, 21 октября, 18 ноября, 16 декабря 2024 г., более 100 участников.

26.02 – 01.03.2024 г., г. Цахкадзор, Армения: **14th Winter Symposium on Chemometrics:** Организаторы - Российское хеометрическое общество, Комиссия по хеометрике совета, 37 участников из 8 стран (Армения, Россия, Китай, Иран, Болгария, Венгрия, Франция, Италия)

24.06. – 5.07. 2024 г. (весенний набор) и 9.12. – 20.12. 2024 г. (осенний набор), Санкт-Петербургский ГУ: Курсы повышения квалификации (дополнительная образовательная программа) «**Атомный оптический спектральный анализ**». Ответственные - Савинов Сергей Сергеевич (s.s.savinov@spbu.ru), Мягкова-Романова Марина Анатольевна (m.myagkova-romanova@spbu.ru). Количество слушателей – от 6 до 8.

.....

Институт аналитического приборостроения РАН (ИАП РАН)

- **организовал** III Ежегодную Всероссийскую Молодежную конференцию по методам и приборам для анализа биологических объектов «АналитБиоПрибор-2024» (14 – 15 ноября 2024 г., Санкт-Петербург, Санкт-Петербургский национальный исследовательский академический университет им. Ж.И. Алферова РАН). Партнеры конференции: Санкт-Петербургский национальный исследовательский Академический университет им. Ж.И. Алферова РАН; Компания «Синтол»; Российское химическое общество им. Д.И. Менделеева. Число участников – 150.

- принял участие в выставках:

1). **Военно-технический форум «Армия-2024»** (12 - 14 августа 2024г., Москва, КВЦ «Патриот»).

Представлено на стенде:

- Квадрупольный масс-спектрометр для анализа состава газовых смесей «Аромасс-2»
- Средства мониторинга функционального состояния военнослужащего с помощью носимой системы миниатюрных оптических датчиков.
- Комплект молекулярно-биологических тест-систем (КМТС).
- Аппаратно-программный комплекс массового параллельного секвенирования ДНК Нанофор СПС и «Генетический анализатор НАНОФОР®05» для расшифровки последовательности геномов патогенных микроорганизмов с целью их идентификации.

2). **Санкт-Петербургский международный Научно-образовательный Салон** (26 – 28 ноября 2024г., Санкт-Петербург, «Экспофорум»). Представлен доклад на мастер-классе «Точка контроля функционального состояния человека». Докладчик – Зайцева А.Ю.

.....

Институт химии и технологии редких элементов и минерального сырья им. И.В.Тананаева (ИХТРЭМС РАН):

- На дистанционных курсах «Документы СМК лаборатории в соответствии с ГОСТ ISO/IEC 17025-2019», "Внутренний аудитор лаборатории", "Менеджер по качеству лаборатории" прошли подготовку 35 сотрудников института.

- Ежегодно сотрудники ИХТРЭМС КНЦ РАН активно участвуют в проведении фестиваля «Наука+» с чтением лекций школьникам и студентам на тему «Современные методы анализа состава вещества»,

организацией экскурсий в лабораторию химических и оптических методов анализа, с проведением демонстрационных опытов школьникам и даже воспитанникам детских садов. Время проведения – начало ноября. Число участников в разные годы от 20 до 40 человек.



Приволжское отделение

22 апреля 2024 г., Самара, Самарский национальный исследовательский университет им. академика С.П. Королева, кафедра физической химии и хроматографии: Самарская областная студенческая научная конференция, подсекция **«Физическая, аналитическая химия и хроматография»**. Организаторы мероприятия - Правительство Самарской области, Совет ректоров ВУЗов Самарской области, Ответственные: заведующая кафедрой Онучак Людмила Артемовна, Число участников 20 человек.

Северо-Кавказское отделение

14-16 мая 2024 г., Донецк, Донецкий государственный университет: VIII Международная научная конференция **«Химические проблемы современности»**, работала Секция аналитической химии. Организаторы мероприятия: от НСАХ РАН зав. кафедрой аналитической химии д.х.н.,

проф. А.С. Алемасова; Число участников – 139. Секция аналитической химии – 15.

15 – 17 октября 2024 г., Донецк, Донецкий государственный университет: IX Международная научная конференция студентов, аспирантов и молодых ученых «Донецкие чтения 2024: образование, наука, инновации, культура и вызовы современности» Организаторы мероприятия: от НСАХ РАН зав. кафедрой аналитической химии д.х.н., проф. А.С. Алемасова; Число участников – 100.

Уральское отделение

12-17 мая 2024 г., Екатеринбург: XI Всероссийская конференция по электрохимическим методам анализа «ЭМА-2024»: (Комиссия по электрохимическим методам анализа, Уральский ФУ им. первого Президента России Б.Н. Ельцина (УрФУ), 130 участников.

2024 г., Екатеринбург: Выпуск 4 номеров журнала «Аналитика и контроль, Екатеринбург: Журнал выпускается на базе ФГАОУ ВО УрФУ, гл. редактор Д.Г. Лисиенко, E-mail: aik.red@gmail.com.

Июнь 2024 г., Екатеринбург, УрФУ, Физико-технологический институт, кафедра физико-химических методов анализа: Курсы повышения квалификации работников аналитических лабораторий «Методические основы атомно-эмиссионного спектрального анализа с применением анализатора МАЭС», куратор – к.х.н. Д.Г.Лисиенко, прошли курсов 9 сотрудников лабораторий предприятий РФ.

23-26 апреля 2024 г., Екатеринбург, УрФУ, кафедра аналитической химии и химии окружающей среды: XXXIV Российская молодёжная научная конференция с международным участием «Проблемы теоретической и экспериментальной химии», посвященная 190-летию со дня рождения Д.И. Менделеева. Работала секция «Аналитическая химия и химия окружающей среды. Число участников: 400. Сайт конференции: <https://conferenceusu.github.io/#info>

24 апреля 2024 г., Пермь: Всероссийская научно-практическая конференция с международным участием «Кромеровские чтения, 2024». Организатор: Пермская государственная фармацевтическая академия. Число участников секции «Аналитическая химия»: 23 чел.

24 мая 2024 года, Екатеринбург, УрГЭУ и РГППУ: VII Международная научно-практическая конференция молодых ученых, аспирантов, студентов и преподавателей «Экологическая безопасность в техносферном пространстве». Ответственный за мероприятие: д.х.н. Стожко Наталья Юрьевна, E-mail: sny@usue.ru

9 декабря 2024 г., Екатеринбург, УрГЭУ и РГППУ: XIII Межвузовская олимпиада по химии среди студентов нехимических специальностей и направлений подготовки. Ответственный за мероприятие: д.х.н. Стожко Наталья Юрьевна, E-mail: sny@usue.ru .Число участников 80 человек.

Сибирское отделение

16 – 17 декабря 2024 г., Новосибирск, Новосибирский институт органической химии СО РАН: Конференция «Стойкие органические загрязнители: проблемы обращения, инвентаризации и утилизации». Организаторы мероприятия - Багрянская Е.Г., Половяненко Д. Н., Морозов Д.А., Сотникова Ю. С. Число участников – **50 человек.**

Планы на 2025 – 2027 гг.

Всероссийские мероприятия

2025 г.

23-25 апреля 2025 г., Москва, МВЦ «КрокусЭкспо@ (пав. 3, зал 14): 23-я Международная выставка лабораторного оборудования и химических реактивов «AnalyticaExpo2025»; Участие совета в организации научной программы выставки; analitikaexpo.com

19 – 23 мая 2025 г., Санкт-Петербург: XIII Всероссийская конференция «Экоаналитика 2025» Организаторы: ОХНМ РАН, НСАХ РАН, ЭАА «Экоаналитика», Санкт-Петербургский государственный университет.:<https://events.spbu.ru/events/ecoanalytics>

21 – 27 сентября 2025 г., Краснодар: VII Всероссийский симпозиум «Разделение и концентрирование в аналитической химии и радиохимии» с международным участием. Организаторы: Министерство науки и высшего образования РФ, НСАХ РАН, ГЕОХИ РАН, МГУ им.

М.В. Ломоносова, Кубанский государственный университет.
<http://analytconf.ru>

30 октября 2025 г., Севастополь: Симпозиум по ионной хроматографии. Организаторы: Объединенная комиссия по хроматографии. Симпозиум пройдет в рамках III Всероссийской конференции «Физико-химические методы в междисциплинарных экологических исследованиях».

13 – 17 октября 2025 г., Москва, ИФХиЭ РАН: XI Всероссийская конференция с международным участием «Масс-спектрометрия и ее прикладные проблемы». ymso.ru

конец июня 2025 г., Москва: 49-я Годичная сессия НСАХ РАН (в on-line формате)

Будут работать Московский и Санкт-Петербургский семинары по аналитической химии

2026 г.

конец февраля 2026 г., Узбекистан: 15th Winter Symposium on Chemometrics. Организатор: Всероссийское хеометрическое общество; Комиссия по хеометрике совета. Ответственные: д.х.н. Кирсанов Д.О., +7 921 333 1246, d.kirsanov@gmail.com; к.х.н. Суркова А.А.

апрель 2026 г., Москва, МВЦ «КрокусЭкспо»: 24-я Международная выставка лабораторного оборудования и химических реактивов «АналитикаЭкспо 2026»

20 – 26 сентября 2026 г., Краснодар: V Всероссийская конференция по аналитической спектроскопии. Организатор: от НСАХ РАН Кубанский государственный университет <http://analytconf.ru>

6 – 11 октября 2026 г., Владивосток: XII Конференция «Аналитика Сибири и Дальнего Востока - 2026»

50-я Годичная сессия НСАХ РАН

Продолжат работу Московский и Санкт-Петербургский семинары по аналитической химии

2027 г.

осень 2027 г., V Съезда аналитиков России.

Работа комиссий и отделений совета в 2025 – 2026 гг.

Объединенная комиссия по хроматографии

Организация семинаров на базе ИФХЭ РАН, ГЕОХИ РАН, МГУ;
2025 и 2026 гг.: Проведение **конкурса работ молодых ученых**
им. М.С. Цвета;

25 – 26 июня 2025 г., Москва, ГЕОХИ РАН: Симпозиум по
ионной хроматографии (к 50-летию со дня открытия) www.geokhi.ru

апрель 2026 г., Москва: Форум отечественных производителей
хроматографического оборудования.

Северо-Западное отделение

19 – 23 мая 2025 г., Санкт-Петербург, СПбГУ: XIII Всероссийская
конференция «Экоаналитика 2025». Организаторы: ОХНМ РАН, НСАХ
РАН, ЭАА «Экоаналитика»,

Санкт-Петербургский семинар по аналитической химии (Санкт-
Петербург, Невский пр., д. 1, Менделеев холл): 17 февраля, 17 марта, 21
апреля, 16 июня, 20 октября, 17 ноября, 15 декабря 2025 г.

Институт аналитического приборостроения РАН

-13 – 14 ноября 2025 г., Санкт-Петербург: IV Всероссийская
Молодежная конференция конференция по методам и приборам
для анализа биологических объектов «АналитБиоПрибор-2025».
Ответственный: Букатин Антон Сергеевич, заместитель директора
ИАП РАН по научной работе, antbuk.fiztek@gmail.com. Предполагаемое
число участников – 150.

Северо-Кавказское отделение

21 – 27 сентября 2025 г., Краснодар: VII Всероссийский симпозиум
с«Разделение и концентрирование в аналитической химии и
радиохимии» с международным участием. Организаторы: Министерство

науки и высшего образования РФ, НСАХ РАН, ГЕОХИ РАН, МГУ им.
М.В. Ломоносова, Кубанский государственный университет
<http://analytconf.ru>

май 2025 г. Донецк, Донецкий государственный университет: IX
Международная научная конференция студентов, аспирантов и молодых
ученых «**Химические проблемы современности**», будет работать **секция**
аналитической химии. Организатор мероприятия - химический факультет
ФГБОУ ВО «Донецкий государственный университет», зав. кафедрой
аналитической химии д.х.н., проф. А.С. Алемасова, Тел.: +79493217740; E-
mail: alemasovaa@gmail.com

Уральское отделение

22 - 25 апреля 2025г., Екатеринбург, УрФУ: XXXV Российская
молодёжная научная конференция с международным участием «Проблемы
теоретической и экспериментальной химии», посвященная 165-летию со
дня рождения Н.С. Курнакова. Организаторы: Уральский федеральный
университет им. Первого Президента России Б.Н. Ельцина, Уральское
отделение РАН. Ответственный - Мазурин Максим Олегович, (343)389-
94-94; **E-mail:** ConferenceUSU@yandex.ru. Предполагается работа секции
«Аналитическая химия и химия окружающей среды».

Сайт конференции: <https://conferenceusu.github.io/#info>

В 2025 г. планируется выпуск 4 номеров журнала «Аналитика и
контроль», Главный редактор – член НСАХ Д.Г. Лисиенко (УрФУ,
Физико-технологический институт, E-mail: aik.red@gmail.com)

Июнь 2025 г., Екатеринбург. УрФУ: Курсы повышения
квалификации работников аналитических лабораторий «Методические
основы атомно-эмиссионного спектрального анализа с применением
анализатора МАЭС». Организаторы мероприятия: УрФУ, Физико-
технологический институт, кафедра физико-химических методов анализа,
Ответственный Д.Г.Лисиенко, E-mail: d.g.lisienko@urfu.ru.
Предполагаемое число участников – 10 сотрудников лабораторий
предприятий РФ.

Сибирское отделение

август-сентябрь 2025 г., Новосибирск, НИОХ СО РАН:
Конференция «Стойкие органические загрязнители: проблемы обращения, инвентаризации и утилизации». Организаторы мероприятия
Багрянская Е.Г., Половяненко Д.Н., Морозов Д.А., Сотникова Ю.С.
Ответственный - Морозов Денис Александрович, dmorozov@nioch.nsc.ru
Предполагаемое число участников – 50 – 100 человек.

КНИГИ

1. **Золотов Ю.А. Научные труды. Обзор работ, библиография, избранные статьи.** М.: Наука. 2024. 1075 с. ISBN 978-5-02-041088-6.
В книге представлены труды академика РАН Юрия Александровича Золотова – выдающегося ученого. Ведущего российского специалиста в области аналитической химии. Автором подготовлен обзор его научных работ с полной библиографией и текстами отобранных публикаций. Издание содержит публикации о жизни и трудах академика, сведения о его научно-организационной деятельности и о наградах.
2. **Золотов Ю.А. Статьи, выступления, интервью 2023 года. М.: Спутник+. 2024. 69 с. ISBN 978-5-9973-6802-9.**
Сборник небольших публикаций по общим вопросам науки, по аналитической химии. Приведены выступления автора при открытии научных конференций и семинаров по вопросам химии. Включены интервью и фрагменты записи встречи со студентами в День российской науки. Дан обзор других публикаций автора.
3. **Основы нанотехнологий: инновационные решения в анализе для биообъектов : учеб. пособие / Т.А. Кучменко, Р.У. Умарханов;** Воронеж. гос. ун-т инж. технол. – Москва :2024. – 92 с.ISBN 978-5-89448-939-1
Учебное пособие разработано в соответствии с требованиями ФГОС ВО подготовки выпускников по специальностям 04.05.01 – «Фундаментальная и прикладная химия» и 06.05.01 – «Биоинженерия и биоинформатика». Предназначено для закрепления теоретических и практических знаний дисциплины «Основы нанотехнологий». В учебном пособии представлен материал по определению важнейших показателей качества биообъектов разной природы с применением инновационных аналитических решений и приборов искусственного обоняния («электронный нос») на пьезосенсорах. Приведены вопросы для самоподготовки, дано описание лабораторных работ. При поддержке МИП ООО «СНТ» (Россия, Воронеж).
4. **От «электронного носа» к искусственному обонянию: экологический мониторинг по запаху: учеб. пособие / Т.А. Кучменко, Р.У. Умарханов;** Воронеж. гос. ун-т инж. технол., ООО «Сенсорика – Новые Технологии» – Москва, 2024. – 62 с.ISBN 978-5-89448-939-1
В учебном пособии представлены обзор существующих решений, новые разработки и перспективы развития интегральных аналитических систем «электронный нос» для решения задач экологического мониторинга различных объектов. Рекомендовано студентам, обучающимся по специальностям 04.05.01 – «Фундаментальная и прикладная химия»,

экологам, аспирантам и всем интересующимся сенсорными системами. Предназначено для закрепления теоретических и практических знаний дисциплин «Современные методы анализа», «Основы анализа особых объектов».

5. **Химические проблемы атомной энергетики и их решения. По идеям и под руководством проф. Л. Н. Москвина. Том 1. Химический контроль на ЯЭУ.** / В. С. Гурский, В. Н. Епимахов, А. А. Ефимов, В. Н. Епимахов, В. М. Красноперов, Г. Г. Леонтьев, И. С. Орленков, И. В. Мирошниченко, О. Ю. Пыхтеев, А. Л. Москвин, О. В. Родинков, В. Г. Семенов, Н. М. Якимова: под общ. ред. Л. Н. Москвина.— СПб.: Издательство ВВМ, 2024, 251 с.

В области химических проблем атомной энергетики рассмотрены современные методы химического и радиохимического анализа, предназначенные для осуществления контроля химических и радиационных параметров технологических сред ядерных энергетических установок и в полной мере адекватных требованиям атомной энергетики: электрохимические методы, ионная хроматография, проточные методы, Мессбауэровская спектроскопия, жидкостно-газовая хроматография, экспрессные методы радиохимического анализа и аксессуары, обеспечивающие его выполнение. Монография посвящена памяти Пыхтеева О.Ю.

6. **Химические проблемы атомной энергетики и их решения. По идеям и под руководством проф. Л. Н. Москвина. Том 2. Химико-технологические аспекты эксплуатации ЯЭУ.** / Б. А. Гусев, В. Н. Епимахов, А. А. Ефимов и др.; Под общ. ред. Л. Н. Москвина.— СПб.: Издательство ВВМ, 2024, 376 с.

Обобщены химико-технологические аспекты эксплуатации объектов атомной энергетики, включая решение проблем, связанных с процессами общей коррозии внутриконтурного оборудования, его предпусковых промывок и дезактивации, переработки и отверждения жидких радиоактивных отходов.

Монография посвящена памяти Пыхтеева О.Ю.

.