

ХРОМАТО-МАСС-СПЕКТРОМЕТРИЯ ПРИ ПОСТРОЕНИИ СТРУКТУРЫ МОЛЕКУЛ

Буряк А.К.

*Институт физической химии и электрохимии им. А.Н. Фрумкина Российской Академии
Наук, 119071, Москва, Ленинский проспект 31/4,
akburyak@mail.ru*

Традиционно хромато-масс-спектрометрия рассматривается как аналитический метод, позволяющий проводить качественное обнаружение и количественное определение органических молекул с известной структурой.

Вместе с тем современные хромато-масс-спектрометры дают возможность получать обширный набор структурной информации, позволяющей определять и структуру анализируемых молекул.

В первую очередь это относится к приборам, оснащенным двумерными хроматографами и tandemными масс-спектрометрами сверхвысокого и высокого разрешения. В сочетании с использованием селективных сорбентов, молекулярно-статистических и квантово-химических расчетов хромато-масс-спектрометрия позволяет получать надежную структурную информацию [1-3].

В докладе рассмотрены методические подходы к получению структурной информации и примеры структур новых соединений, полученных хромато-масс-спектрометрическим методом [4].

Литература

1. Гриневич О.И., Буряк А.К. Теоретическое исследование адсорбции некоторых азолов на поверхности графена. Журнал физической химии, 2024 г., том 98, № 1, с. 153-158 DOI 10.31857/s0044453724010193
2. Khrisanfov M.D., Matyushin D.D., Samokhin A.S., Buryak A.K. EI2FP: Efficient Prediction of Molecular Fingerprints from Electron Ionization Mass Spectra. MASS SPECTROMETRY LETTERS, 2024 том 15, № 4, с. 178-185 DOI 10.5478/MSL.2024.15.4.178
3. Machine Learning for Group-Targeted Elution Order Prediction: Substituted Flavones as a Case Study, Rozanov Ivan, Stavrianidi Andrey, Buryak Aleksey, в журнале Journal of Chemical Information and Modeling, издательство American Chemical Society (United States), 2025, том 65, № 23, с. 12786-12798 DOI 10.1021/acs.jcim.5c02096
4. Пат. RU 2 705 932(13) C1, МПК G01N 30/86. Способ идентификации наркотических и психоактивных веществ в сложных биологических матрицах организма человека. Савчук С.А., Новиков А.П., Буряк А.К., Шабаршин Н.Ю. Опубликовано: 12.11.2019 Бюл. № 32.

УДК 543.544.14

САМАРСКАЯ НАУЧНО-ПЕДАГОГИЧЕСКАЯ ШКОЛА ХРОМАТОГРАФИИ

Л.А. Онучак, С.В. Курбатова, А.В. Буланова, А.Л. Лобачев, Р.В. Шафигулин,
И.А. Платонов

*Самарский национальный исследовательский университет
имени академика С.П. Королева*

В докладе приведены сведения о самарской научно-педагогической школе хроматографии, ее основателях, о развитии и научно-педагогическом потенциале. Самарская хроматографическая школа – коллектив ученых Самарского университета, СвНИИП, СамГТУ, осуществляющий поиск новых хроматографических закономерностей, разработку новых методов и подходов к хроматографическим исследованиям, номенклатуре, результаты которых публикуются в мировых научных журналах и