

## **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

защищаются в кандидатских и докторских диссертациях. Основателем самарской школы хроматографии является ученый с мировым именем – Вигдергауз Марк Соломонович, который в 1981 году по приглашению ректора Куйбышевского государственного университета В. В. Рябова возглавил кафедру общей и неорганической химии. Она была укомплектована молодыми выпускниками аспирантуры Московского, Казанского, Саратовского и Горьковского университетов. 9 июня 1982 года приказом министра высшего и среднего специального образования РСФСР было утверждено ее переименование в кафедру общей химии и хроматографии. На тот период и до сегодняшнего дня это единственная вузовская кафедра в стране, в названии которой присутствует термин "хроматография". Так как на кафедре работали преподаватели-химики различных направлений науки, то каждому из них М. С. Вигдергауз предложил индивидуальные пути сочетания его научной специализации с богатейшими возможностями хроматографии. В результате эффекта синергии появились интересные научные результаты на стыке хроматографии и физической химии, коллоидной химии, метрологии хроматографических измерений и информатики. Основными же направлениями научной деятельности кафедры общей химии и хроматографии в период 1981–1994 годов стали: теоретические основы ГХ и ее физико-химическое применение, разработка новых неподвижных фаз, в том числе жидкокристаллических и коллоидных, хроматография с неидеальными элюентами, барохроматография, сверхкритическая флюидная хроматография, аналитическая химия нефти, теория и практика качественного и количественного ГХ-анализа, автоматизация и метрологические аспекты ГХ-измерений, молекулярная ЖХ низкомолекулярных и высокомолекулярных соединений, моделирование фильтрации нефтевытесняющих реагентов и гелеобразующих составов на основе представлений ступенчатой хроматографии. На кафедре под его руководством была открыта аспирантура по направлению «Хроматография», защищены кандидатские и докторские диссертации.

В настоящее время она называется кафедрой физической химии и хроматографии, которой руководит к.х.н. доц. Р. В. Шафигулин. В разное время заведующими являлись к.х.н. доц. А. В. Буланова, д.х.н. проф. О. Г. Ларионов, д.х.н. проф. Л. А. Онучак. Исследования в области разработок хроматографических приборов и оборудования ведутся на кафедре химии Самарского университета под руководством заведующего кафедрой д.т.н., проф. И. А. Платонова. В рамках кафедры химии функционирует НОЦ «Хроматография», курсы повышения квалификации «Хроматография газовая и жидкостная. Хромато-масс-спектрометрия». На кафедрах ведутся исследования в области теории и практики газовой и жидкостной хроматографии, читаются лекции, проводятся семинарские и лабораторные занятия. Исследования в области хроматографии проводятся также в Средневолжском НИИ по нефтепереработке (г. Новокуйбышевск) под руководством к.х.н. Д. Е. Дискиной, д.т.н. И. И. Занозиной, а также в Самарском государственном техническом университете под руководством профессоров П. К. Ланге и С. Н. Яшкина. Выпускники Самарской педагогической школы по хроматографии востребованы и работают в различных научно-исследовательских и образовательных центрах России и зарубежья.