

УДК 543.51

О.С.Налобина (6 курс, каф. ФЭ), О.Ю.Цыбин, д.ф.-м.н., проф., А.В.Григорьев, асп.

КЛАССИФИКАЦИЯ ИОНОВ В МЕТОДЕ ЛАЗЕРНОЙ ДЕСОРБЦИИ ИОНИЗАЦИИ С ПОМОЩЬЮ МАТРИЦЫ

ABSTRACT: Mass-spectrometry is a method that widely spread in research of chemical compounds, for example, definition of molecule mass and molecular structure of substance, presence of admixtures, etc. For the correct understanding of spectra we need to know the mechanisms of ions formation. In this article two types of ions were found in MALDI mass-spectra are taken up.

Масс-спектрометрия является широко распространенным методом анализа макромолекулярных ионов. Она нашла свое применение в различных областях науки, таких как биохимия, клиническая химия, общая и органическая химия, фармацевтика, косметика, парфюмерия, пищевая промышленность, химический синтез, нефтехимия и нефтепереработка, контроль окружающей среды, медицина и токсикология, криминалистика и др. Но для правильной интерпретации масс-спектров необходимы знания о механизмах образования и типах ионов, которые могут быть представлены в масс-спектре.

Используемый нами метод лазерной десорбции ионизации с помощью матрицы (MALDI) является достаточно мягким и вызывает появление в спектре пиков только молекулярных и осколочных ионов. В качестве матриц чаще всего используют органические кислоты, такие как никотиновая, синапиновая, кофеиновая, янтарная, производная коричной кислоты и др. В моей работе в качестве матрицы используется α -циано-4-гидроксикоричная кислота.

Молекулярные ионы. Эти ионы возникают при действии на молекулы потока излучения с энергией, лишь немного превышающей ионизационный потенциал, их образование сопровождается удалением одного электрона по реакции $M+e \rightarrow M^+ + 2e$. Массы молекулярных ионов характеризуют молекулярный вес и эмпирическую формулу образца, поэтому молекулярные ионы имеют большое значение в аналитической работе. Молекулярные ионы являются наиболее тяжелыми из тех, которые могут образовываться при мономолекулярной реакции; они обычно свободны от наложения других ионов, и поэтому может быть проведено их точное измерение.

Осколочные ионы. С увеличением энергии излучения возрастает вероятность ионизации, и молекулярные ионы могут обладать избыточной энергией на электронных колебательных степенях свободы. Молекулярный ион, приобретающий избыточную энергию, переходит из своего основного состояния в состояние, соответствующее энергии диссоциации по одной из степеней свободы; при этом может образоваться осколочный ион. При дальнейшем увеличении падающей энергии возможности для протекания процессов диссоциации все более возрастают, что находит свое отражение в усложнении масс-спектра.

В ходе работы на времяпролетном масс-спектрометре MALDI мною были получены и исследованы спектры различных химических соединений (белки, пептиды,

нейротрансмиттеры), в которых встречаются два вида ионов – молекулярные и осколочные.