

Что в имени твоём, масс-спектрометрия?

(К вопросу о терминах "масс-спектрометрия" и "масс-спектрометр")

Н.А.Понькин

Российский федеральный ядерный центр – Всероссийский научно-исследовательский институт экспериментальной физики. ФГУП "РФЯЦ-ВНИИЭФ"
пр. Мира 37, 607188 г. Саров, Нижегородская обл., Россия.
E-mail: staff@vniief.ru, ponkin@rol.ru.

В статье кратко представлены и обсуждены различные аспекты, характеризующие масс-спектрометрию с точки зрения фундаментальных основ, возможных подходов к классификации масс-спектрометров и их узлов, разнообразия получаемой с её помощью информации, сфер применения, а так же её внутренних проблем и противоречий. Сформулирован подход к определению термина МАСС-СПЕКТРОМЕТРИЯ, как науки, метода, методологии, инструментария, широкой сферы деятельности. Обозначены вопросы, формирующие общественное значение масс-спектрометрии, разнообразные факторы, влияющие на формирование её восприятия представителями различных общественных и государственных структур России.

Ключевые слова: инструментарий, ионизация, масс-спектрометр, масс-спектрометрия, масс-анализатор, метод, методология, наука, сфера деятельности

СОДЕРЖАНИЕ

1. Введение
 2. Что такое масс-спектрометрия?
 3. О превращении вещества в ионы
 4. О разделении ионов по массам
 5. О регистрации ионных токов
 6. Коротко о вакуумных условиях в масс-спектрометрах
 7. О классификации масс-спектрометров и их узлов
 8. Теоретические вопросы масс-спектрометрии
 9. Разнообразие получаемой масс-спектрометрической информации
 10. Сочетание масс-спектрометрии с другими методами
 11. Масс-спектрометрия и аналитические применения
 12. Масс-спектрометрия – один из ключевых методов познания природы
 13. Производственные и информационные ресурсы масс-спектрометрии
 14. Масс-спектрометрическое приборостроение
 15. Об организации масс-спектрометрической деятельности в России
 16. Масс-спектрометрия – наука, метод, методология, инструментарий, сфера деятельности
 17. Заключение
- Список литературы

"Вещи получают своё существование и свою природу посредством взаимозависимости и ничем не являются сами по себе".

(Один из постулатов даосизма).

1. ВВЕДЕНИЕ

Часто получается так, что когда занимаешься каким-либо делом, редко задумываешься об используемых определениях и терминах. Понятия и представления об объектах и явлениях, предметах и процессах кажутся органичными и естественными. Но рано или поздно возникает потребность рассмотреть определения более подробно, вникнуть в их суть,

разобраться во внутренних связях и противоречиях и оказывается, что вроде бы обычное понятие раскрывается по истине космически необозримым пространством. Для автора этой статьи такая трансформация произошла с термином "Масс-спектрометрия".

2. ЧТО ТАКОЕ МАСС-СПЕКТРОМЕТРИЯ?

Обычный вопрос, на который могут ответить многие, и даже не особенно задумываясь. Не стану приводить все варианты возможных определений, приведу лишь статьи из физической и горной энциклопедий и энциклопедических словарей^{1, 2, 3, 4, 5}. Авторам этих статей пришлось поработать над этими терминами, и этот труд немалого стоит.

"Масс-спектроскопия – метод исследования вещества по спектру масс атомов и молекул, входящих в его состав"¹.

"Масс-спектрометр – прибор, разделяющий с помощью электрических и магнитных полей пучки заряженных частиц (обычно ионов) с разным отношением массы частицы к её заряду"².

"Масс-спектроскопия (масс-спектрометрия, масс-спектрография, масс-спектральный анализ) – метод исследования вещества путем определения массы m (чаще, отношения массы к заряду m/e) и относительного количества ионов, образующихся (или имеющих) в веществе"³.

"Масс-спектрометр – прибор для разделения ионизованных частиц (атомов, молекул, кластерных образований) по их массам (точнее по отношению массы иона m к его заряду e) путем воздействия магнитных и электрических полей, а также для определения их масс и относительных содержаний, т.е. спектра масс"⁴.

"Масс-спектрометрия – метод определения химического, фазового состава и молекулярной структуры вещества, основанный на регистрации спектра масс ионов, образованных в результате ионизации атомов и (или) молекул пробы. ... По спектру масс (совокупность значений m/e и относительных содержаний соответствующих ионов) определяют относительное содержание элементов, изотопов определенного элемента, концентрацию и структуру химических соединений в пробе..."⁵.

Хороший развернутый ответ на подобный вопрос для непрофессионалов "**Что такое масс-спектрометрия и зачем она нужна?**" дал М.Токарев на сайте Thermo Electron Corporation в разделе "Популярно о масс-спектрометрии"⁶. Но и там дается определение масс-спектрометрии как физического метода измерения отношения массы заряженных частиц материи (ионов) к их заряду.

Таким образом, энциклопедические статьи, отражающие, как правило, общепринятое понятие о предмете и явлении, в основном определяют и объясняют масс-спектрометрию через такие термины как метод и прибор, который используют в этом методе.

Тем не менее, в Уставе Всероссийского масс-спектрометрического общества (ВМСО) записано, что "Основной целью Общества является содействие отечественной масс-спектрометрии как *современной фундаментальной и прикладной науке, ...*"⁷. А в некоторых публикациях встречаются определения масс-спектрометрии как физико-химической науки и даже как искусства. Это означает то, что на сегодняшний день в энциклопедических статьях отражены далеко не все стороны масс-спектрометрии. В этой статье сделана попытка раскрыть и объединить в систему те стороны масс-спектрометрии, которые пока не обсуждаются в энциклопедических статьях и на которые редко обращают внимание специалисты и потребители её услуг.

Из философии известно и общепринято положение о том, что суть объекта проявляется при взаимодействии его с другими предметами (см. эпиграф к статье). Поэтому, рассуждая о масс-спектрометрии, попытаемся рассмотреть её использование в исследовательской деятельности, применение в различных науках и технологиях, со стороны её методов, методологии, технических приемов, инструментария и фундаментальных основ.

Автор является приверженцем того, что будет более продуктивно для масс-спектрометристов, потребителей их услуг и для общества в целом, если масс-спектрометрию рассматривать не просто как физический метод исследования вещества или совокупность методов, а как одно из направлений науки — сферы человеческой деятельности, функция

которой — выработка и теоретическая систематизация объективных знаний о действительности; многосторонний и эффективный метод познания Мира (природы, окружающей среды, Вселенной), путем получения и накопления информации о происходящих природных и технологических процессах через трансформацию вещества в ионы, разделение их по массам и регистрацию их индивидуальных ионных токов.

Если абстрагироваться от конкретных задач, то масс-спектрометрию можно рассматривать и как самоорганизующуюся систему, преобразующую вещество и информацию в новую информацию о веществе, его составе, свойствах и происходящих с ним процессах. На рис.1 изображен пример схемы преобразования вещества и информации в процессе масс-спектрометрических исследований.

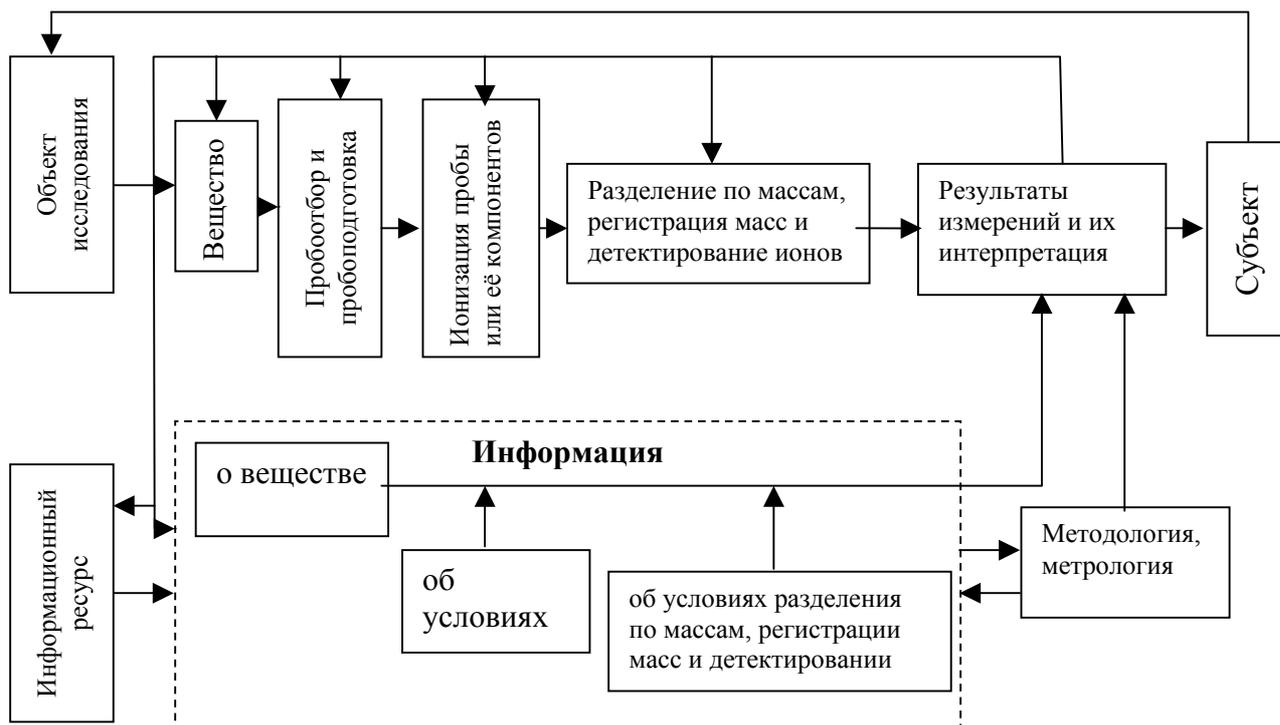


Рис. 1. Трансформация вещества и информации при масс-спектрометрических исследованиях.

3. О ПРЕВРАЩЕНИИ ВЕЩЕСТВА В ИОНЫ

Процесс преобразования вещества в ионы можно характеризовать следующими особенностями:

- Ионы имеются в плазме и могут быть сравнительно легко получены из газообразных и конденсированных веществ (жидкостей и твердых тел).
- Для получения ионов применяются: элементарные процессы (соударение различных частиц; воздействие радиации, электромагнитных квантов и электрических полей) и коллективные процессы (высокие температуры, лазерные импульсы, газовые разряды, распыление вещества).
- Ионы могут возникать при различных энергетических воздействиях частиц и излучений — от минимально возможных до высоких энергий (кэВ, МэВ, ГэВ). Минимальная энергия для появления положительных ионов — потенциал (энергия) ионизации, а отрицательные ионы могут возникать почти при нулевой энергии электронов.
- В зависимости от характера воздействия на вещество различают мягкую и жесткую ионизации. При мягкой ионизации, как правило, сохраняется структура молекул; получаются ионы с малой энергией, преимущественно однозарядные; при этом наблюдается простой

масс-спектр (в пределе – для соединения из моноизотопных элементов "одно соединение – один пик в масс-спектре").

- При жесткой ионизации может происходить самая разнообразная трансформация структуры молекул, и даже их полное разрушение; ионы распадаются на фрагменты (диссоциируют) и могут иметь большой энергетический разброс.
- В последующем трансформация и возникновение новых ионов происходят при ион-молекулярных реакциях первичных ионов с имеющимися в источнике газообразными веществами.

В результате всех этих процессов от одного соединения наблюдаются довольно сложные масс-спектры. В них могут разнообразными способами образовываться различные ионы: положительные и отрицательные; одно и многозарядные; атомарные, молекулярные и кластерные; первичные, диссоциированные, перезарядные ионы и ионы от ион-молекулярных реакций.

Кроме того, масс-спектры существенно усложняются из-за многоатомности и многоэлементности анализируемого соединения или вещества, многоизотопности входящих в него элементов и наличия в пробе нескольких соединений.

Всё это приводит не только к тому, что спектр одного соединения может быть представлен несколькими пиками на различных массовых числах (тем более для пробы из нескольких соединений), но и к появлению *мультиплетов* на различных массовых числах.

Дополнительно к этому можно отметить, что эффективность ионизации и регистрации ионов для разных элементов и соединений не одинаковы и зависят от их способов и условий. Это важные факторы, влияющие на результаты масс-спектрометрических исследований.

В качестве иллюстрации сказанного можно привести *характеристический* изотопный масс-спектр *отрицательных молекулярных* ионов фуллеренов C_{60}^- , состоящих из одного элемента - углерода природного изотопного состава (углерод имеет два стабильных изотопа ^{12}C и ^{13}C). Данный масс-спектр получен на секторном магнитном масс-спектрометре МИ 1201 при разрешении на полувысоте пика $R_{0.5} \sim 1200$, с использованием трехленточного источника ионов в режиме термоионизации⁸. Регистрация ионных токов осуществлялась с помощью вторичного электронного умножителя в режиме измерения аналогового сигнала с использованием автоматизированной системы на основе блока программной регистрации (БПР-1)⁹. Масс-спектр изображен на рис.2 в полулогарифмическом масштабе.

На этом масс-спектре наблюдаются две группы пиков, принадлежащих молекулярным ионам с разным количеством атомов углерода (C_{60} и C_{70}), с большой разницей их концентрации в пробе. Пики, принадлежащие каждой группе, относятся к молекулярным ионам фуллеренов, отличающиеся друг от друга количеством изотопов ^{13}C , которое обусловлено природной распространенностью изотопов углерода и может быть описано законом биномиального распределения. На масс-спектре видны сами пики и, кроме того, виден "шлейф" так называемых рассеянных ионов, распространяющийся более чем на 30 а.е.м. в обе стороны от массы интенсивных пиков. И это еще далеко не вся информация, которая может быть получена из представленного масс-спектра.

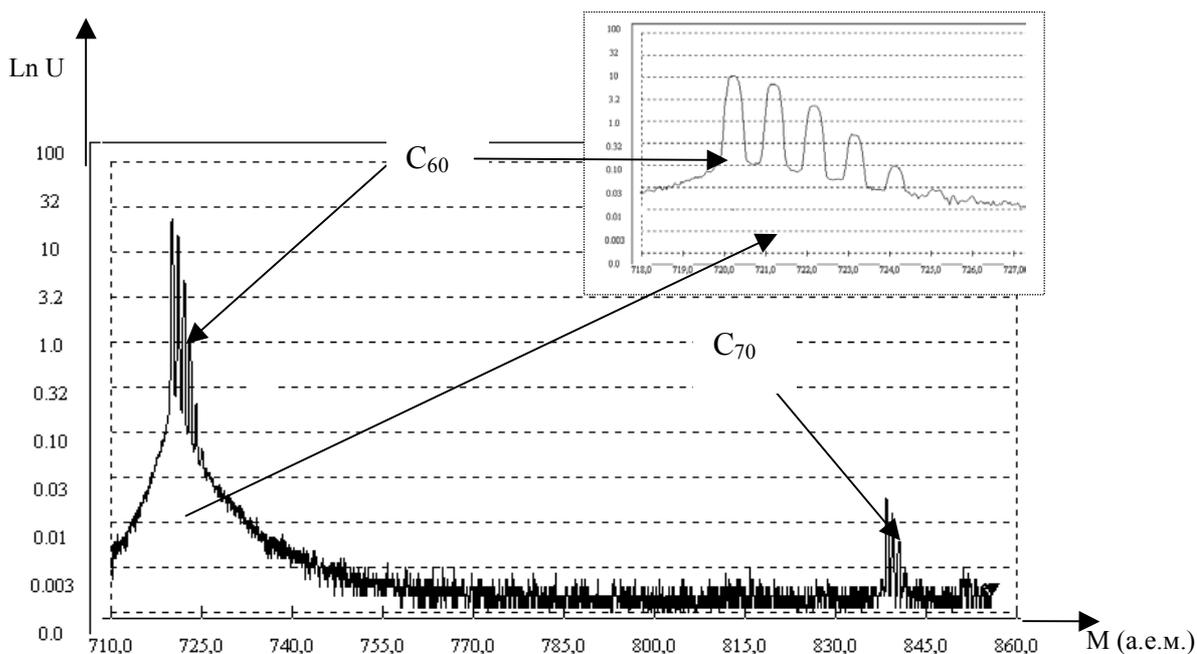


Рис. 2. Характеристические масс-спектры фуллеренов в полулогарифмическом масштабе

4. О РАЗДЕЛЕНИИ ИОНОВ ПО МАССАМ

Разделение по массе особенно явно проявляется при движении *сформированных* пучков ионов в *четко* ограниченных электрических и магнитных полях, которые имеются во многих масс-спектрометрах. Отметим, что разделение частиц по массам имеет гораздо более универсальный характер и наблюдается, хотя и с несколько меньшими эффектами, во многих природных и техногенных явлениях, что, в частности, находит применение в процессах идентификации источников происхождения веществ^{10, 16}.

Разделение ионов по массе (точнее, отношению массы к заряду) в различных электрических и магнитных полях имеют свои особенности:

- В стационарных поперечных магнитных полях частицы сортируются *по импульсам*, в стационарных поперечных электрических полях – по энергии, а в специально подобранных разделенных и совместных электрических и магнитных полях могут сортироваться *по массе* иона.
- Для разделения ионов по массам в секторных масс-спектрометрах с двойной фокусировкой применяются *самые разнообразные* комбинации магнитных и электрических полей. При этом могут варьироваться типы электрических и магнитных секторов, а также последовательность их расположения.
- Сортировка по массам происходит также в комбинации постоянных и переменных электрических квадрупольных полей (квадрупольные масс-спектрометры и ионные ловушки).
- Во времяпролетных масс-спектрометрах ионы сортируются *по скорости* при движении в свободном пространстве, что для частиц с одинаковой энергией ведет к сортировке по массе. В масс-спектрометрах того же вида при добавлении поперечных магнитных или электрических полей, использовании отражения ионов в продольных электрических полях может происходить сортировка ионов, имеющих некоторый разброс по энергии, прямо по их массам.

У различных типов масс-спектрометров сильно отличаются требования к формированию пучков ионов:

- квадрупольные масс-спектрометры и ионные ловушки не имеют жестких требований к входным пучкам ионов (по координатам, направлениям и энергии);

- ординарные времяпролетные масс-спектрометры с прямолинейной траекторией требуют формирования пучков ионов по времени (короткие импульсы) и энергии. В рефлектронах требования к допустимому разбросу по энергии ионов могут быть значительно ниже;
- секторные магнитные масс-спектрометры требуют жесткого формирования пучков ионов по координатам, направлениям и энергии.

В большинстве перечисленных типов масс-спектрометров используют ионы, имеющие энергию от нескольких эВ до десятков кэВ. Широко распространенные квадрупольные масс-спектрометры и ионные ловушки могут обеспечить хорошую сортировку ионов по массам для их пучков, практически не сформированных по энергиям, координатам и направлениям, причем для ионов малой энергии.

Имеет значение и длина пути ионов в масс-спектрометре, кратность воздействия анализирующих полей на ионы. Длинная траектория может приводить к увеличению возможности рассеяния ионов, требует увеличения габаритов и веса приборов. Колебательные или многократно повторяемые траектории позволяют заметно увеличить разрешающую способность масс-спектрометров. Особенно это заметно в квадрупольных масс-спектрометрах, в магнитно-резонансных масс-спектрометрах (с Фурье преобразованием и без него) и в ионных ловушках.

По общему характеру взаимодействия ионов с электрическими и магнитными полями в масс-спектрометрах можно отметить следующее:

- Обычно в секторных магнитных масс-спектрометрах используется однократное воздействие магнитных и электрических полей на пролетающие внутри сектора ионы (кроме секторов имеются ещё и плечи фокусировок).
- В квадрупольных масс-спектрометрах имеет место более длительное действие электрического поля на протяжении всего процесса сепарации по массам. В итоге получающегося поступательного и колебательного движения ионов через квадрупольный масс-анализатор проходят ионы только определенной массы.
- Для разделения ионов по массе, долговременного накопления и "хранения" ионов определенных масс могут использоваться разнообразные типы ионных ловушек (квадрупольные и с ион циклотронным резонансом).
- Своеобразным является получение и регистрация спектров масс в масс-спектрометрах с Фурье преобразующим ион циклотронным резонансом.
- В ординарных прямолинейных времяпролетных масс-спектрометрах на сформированные в источнике импульсные пучки ионов воздействие полей вообще отсутствует.
- Отражение ионов электрическим полем во времяпролетных масс-спектрометрах - рефлектронах существенно улучшают характеристики такого вида масс-спектрометров (в настоящее время занимающих *второе* место по распространенности и частоте применений!).

5. О РЕГИСТРАЦИИ ИОННЫХ ТОКОВ

Регистрация ионных токов определяется условиями ионизации и разделения ионов по массе, требованиями к точности и/или чувствительности измерений. В одних случаях требуется быстрая регистрация, в других одновременная для всех образовавшихся ионов, в-третьих, длительная и т.д. Поэтому для масс-спектрометров разработаны и применяются несколько способов измерения ионных токов: усилители постоянного тока (УПТ), АЦП сигнала электрометрического усилителя, счет ионов, почернение эмульсии фотопластинки. И устройства детектирования ионов: однолучевые приемники ионов, многолучевые приемники ионов, цилиндр Фарадея, вторичные электронные умножители, ионно-электронные преобразователи, микроканальные пластины, ионно-чувствительные пластинки (фотопластинки).

Необходимо понимать, что способы регистрации положительных и отрицательных ионов в некоторых случаях могут иметь свои особенности.

6. КОРОТКО О ВАКУУМНЫХ УСЛОВИЯХ В МАСС-СПЕКТРОМЕТРАХ

Практически все масс-спектрометры имеют вакуумированную среду в области разделения по массам и регистрации ионов. Качество вакуума определяют такие факторы, влияющие на измерительную информацию, как величина фона рассеянных ионов, величина фонового масс-спектра, память прибора к веществу из предыдущей пробы и т.п. Поэтому в масс-спектрометрах используют различные способы получения вакуума и динамические, и статические, и масляные и безмасляные, с азотными ловушками и без них. При этом применяют разные типы вакуумных насосов: сорбционные, криогенные, диффузионные (ртутные и паромасляные), турбомолекулярные, магнитоэлектрические.

Необходимо отметить, что на качество вакуума влияют и характеристики используемых материалов в конструкции вакуумной камеры и уплотняющих деталей, их технологическая обработка, схемы подсоединения вакуумных насосов, последовательность и режим подключения вакуумных агрегатов, технология введения пробы в область ионизации и т.п..

Все это и многое другое используется и учитывается при разработке, создании и использовании масс-спектрометров.

7. О КЛАССИФИКАЦИИ МАСС-СПЕКТРОМЕТРОВ И ИХ УЗЛОВ

Рабочий арсенал масс-спектрометрии чрезвычайно богат различными приборами, которые могут использоваться для решения широкого круга задач.

В таблице 1 перечислены основные узлы, применяемые в масс-спектрометрах, и сделана попытка классификации масс-спектрометров по агрегатному состоянию анализируемых веществ и по виду анализов. Конечно же, она, как и любая другая классификация, не может быть всеобъемлющей, но позволяет получить представление о назначении масс-спектрометрии, её методах и инструментарии.

Таблица 1. Классификация масс-спектрометров и их узлов.

№	Назначение масс-спектрометров. Их основные узлы и используемые методы	Классификация масс-спектрометров и их узлов	
1	2	3	
1	Исследование и анализ вещества:	по агрегатному состоянию веществ:	газов
			жидкостей
			твёрдых тел
			плазмы
		по виду анализов	изотопный анализ
			элементный анализ
			химический анализ
			определение структуры молекул
2	Масс анализаторы:	Статические	магнитные секторные
			секторные с двойной фокусировкой
			со скрещенными электрическими и магнитными полями
			времяпролетные
		Динамические	квадрупольные
			монопольные
			ионные ловушки
			радиочастотные
		магниторезонансные с Фурье преобразованием	
		ускорительные	

1	2	3
3	Источники ионов:	с электронным ударом с диссоциативным захватом электронов с поверхностной ионизацией с термоионизацией с индуктивно-связанной плазмой с тлеющим разрядом с искровым разрядом с дуговым разрядом с фотоионизацией с лазерной десорбцией и ионизацией с матрично - активированной лазерной десорбцией (МАЛДИ) с лазерной резонансной ионизацией с полевой ионизацией с коронным разрядом с вторичной ионной эмиссией с ионизацией нейтральными частицами с ионизацией при электрораспылении с химической ионизацией с ионизацией осколками спонтанного деления ^{252}Cf без ионизации (для плазмы) комбинированные
4	Устройства детектирования ионов:	однолучевые приемники ионов многолучевые приемники ионов вторичные электронные умножители ионно-электронные преобразователи микроканальные пластины ионно-чувствительные пластинки (фотопластинки)
5	Способ регистрации ионов:	АЦП сигнала электрометрического усилителя регистрация интегральных токов счет ионов почернение эмульсии фотопластинки
6	Методы ввода проб:	ввод газовой пробы ввод газовых проб и эталонов мембранный ввод газообразной пробы газовый хроматограф – масс-спектрометр жидкостный хроматограф – масс-спектрометр капиллярный электрофорез – масс-спектрометр ввод твердофазных проб – шлюзование ввод твердофазных проб – барабан испарение проб в источнике ионов из тигля испарение пробы лазером масс-спектрометр, встроенный в установку
7	Способы развертки по массам ионов:	ручная настройка на пик непрерывная развертка ступенчатая развертка вывод накопленных ионов (ионная ловушка) регистрация по времени пролета без развертки (на фотопластинке, многолучевые детекторы)

8. ТЕОРЕТИЧЕСКИЕ ВОПРОСЫ МАСС-СПЕКТРОМЕТРИИ

Как и в ряде естественных наук (например, в химии, где широко используется квантовая механика), роль и значение специфичной *собственной* теории масс-спектрометрии сравнительно невелики. Тем не менее, можно отметить следующие специализированные (специфические) для масс-спектрометрии теоретические вопросы:

- В результате длительной и кропотливой работы более или менее детально разработаны вопросы разделения и фокусировки ионов в статических электрических и магнитных полях различной конфигурации, в том числе и с учетом краевых и рассеянных полей.
- Предложено довольно много расчетно-обоснованных систем с электрическими и магнитными полями и без них (в частности времяпролетные приборы).

- С середины прошлого века ведется работа по анализу разделения ионов в квадрупольных полях (квадрупольные масс-фильтры, ионные ловушки) и при этом открываются новые черты и особенности этих процессов.
- Большое значение имеет моделирование работы масс-спектрометра *как единого целого* (источник ионов, масс-анализатор, детектор ионов) при вариации параметров масс-анализатора и пучков ионов.
- Масс-спектрометры требуют расчета и/или оценки допусков на основные геометрические и электрические параметры и не могут обойтись без системы юстировки. Обоснование этих моментов составляет важную часть теоретической работы.
- Несколько последних десятилетий большое внимание уделяется анализу работы различных тандемных масс-спектрометров, способов уменьшения фонов в масс-спектрах.
- На протяжении длительного времени делаются попытки построения моделей ионизации вещества в источниках с электронной бомбардировкой, поверхностной ионизацией, искровой и лазерной ионизацией, вторичной ионной эмиссией, ионизацией электрическим полем, а также уточняются различные аспекты ионизации в газовых разрядах.
- Теоретический анализ применялся также для анализа и совершенствования работы детекторов ионов с использованием вторичных процессов.
- Обработка результатов масс-спектрометрических измерений имеет немало специфичных черт и неразрывно связана с вычислительной техникой, математической статистикой и теорией ошибок.
- Практически любой масс-спектрометр (за исключением гелиевого течеискателя) предназначен для регистрации *нескольких* ионных пиков различных масс. Достижение возможно больших абсолютной и относительной чувствительности и возможно лучшей точности при регистрации масс-спектров также требует теоретической проработки.

Другие многочисленные теоретические вопросы, с которыми имеет дело масс-спектрометрия, относятся к сложным теоретическим представлениям ядерной, атомной, молекулярной физики, физики твердого тела и жидкостей, физики плазмы и элементарных процессов в ней, радиационных процессов. Вся эта информация "приспосабливается" к специфичным особенностям масс-спектрометрии. Основные теоретические представления, как правило, развивались в связи с общим познанием строения вещества и насущными требованиями практической масс-спектрометрии по развитию и объяснению результатов анализов. Успехи и прогресс масс-спектрометрии во многом обусловлены *единством и тесной связью* теоретических работ с опытно-конструкторскими разработками.

9. РАЗНООБРАЗИЕ ПОЛУЧАЕМОЙ МАСС-СПЕКТРОМЕТРИЧЕСКОЙ ИНФОРМАЦИИ

Физико-химические процессы, происходящие в масс-спектрометрах, довольно разнообразны. Масс-спектрометры могут использоваться для изучения взаимодействия ионов с веществом, находящимся как в обычном, так и в возбужденном состоянии. Через фиксацию появления ионов в этих процессах, определение их энергетических характеристик и периодов полураспада масс-спектрометр представляет наилучшее средство для изучения ион-молекулярных реакций, а также взаимодействия ионов с *возбужденными* атомами, молекулами и свободными радикалами. Частично эти вторичные процессы взаимодействия ионов используются для аналитических целей в широко распространенных источниках ионов с химической ионизацией и в современных тандемных масс-спектрометрах.

С помощью масс-спектрометрии, используя изменение содержания ионов различных масс (часто при *вариации* условий ионизации), может быть получена важная информация о структуре атомных ядер, атомов, молекул и более крупных образований:

- через массу, состав, характер диссоциации и содержание различных ионов масс-спектрометрия дает ряд ценных данных, как о химических, так и более слабых ван-дер-ваальсовых силах (все эти силы обусловлены электромагнитными взаимодействиями);
- через достаточно точное определение массы иона масс-спектрометрия позволяет судить об его элементном составе;

- через энергию, затраченную на создание определенных молекулярных ионов можно получить информацию об энергии связи внешних электронов;
- через распространенность различных диссоциированных ионов – информация о структуре молекул;
- через энергию осколочных ионов – информация о структуре орбиталей;
- через метастабильные ионы – информация о времени жизни возбужденных состояний;
- через точные массы и содержание изотопов - информация о свойствах атомных ядер.

В масс-спектрометрии отрицательных ионов кроме интенсивности и массы иона используют еще третью "координату" – величину энергии электронов, при ионизации вещества путем резонансного захвата электронов, что позволяет получать дополнительную информацию о структуре и других особенностях молекулы или её фрагментов.

Уместно отметить и то, что многие отрицательные ионы имеют ограниченное время жизни, что обусловлено процессом автоотщепления добавочного электрона. Это в свою очередь позволяет наблюдать масс-спектр нейтральных молекул, образовавшихся из разделенных ионов. А также измерять время жизни отрицательных ионов, характеризующее характер колебательного возбуждения молекулы или её фрагмента.¹¹

Нельзя не упомянуть зондовые методы масс-спектрометрии, позволяющие определять распределение элементов и изотопов в веществе (в частности, различных конструкционных материалах, полупроводниковых структурах, минералах, других геологических образцах и т.д.) по его поверхности и глубине с высоким пространственным разрешением.

Таким образом, масс-спектрометрические методы и оборудование используются при исследовании:

- вещества в ионизованном состоянии;
- атомных и молекулярных масс;
- изотопного состава и их вариаций;
- высокомолекулярных соединений;
- взаимодействия ионов с веществом;
- элементного и изотопного состава и структуры молекул и т.д.

10. СОЧЕТАНИЕ МАСС-СПЕКТРОМЕТРИИ С ДРУГИМИ МЕТОДАМИ

Большие принципиальные возможности масс-спектрометрии появляются при *сочетании её с другими методами*. Сочетание методов значительно расширяет возможности каждого из них, позволяя получать больше информации об объекте исследования:

- Оказалось полезным двукратное, трехкратное, четырехкратное и т.д. разделение по массам в *тандемных* масс-спектрометрах. В таком приборе имеет место "очищение" масс-спектра благодаря дискриминации различных помех (от рассеяния ионов на остаточных газах, на стенках камеры и различных эффектов столкновения и перезарядки).
- Весьма эффективными, как для хроматографии, так и для масс-спектрометрии, оказались хромато-масс-спектрометры - одни из наиболее распространенных современных аналитических приборов. В них различные типы газовых, жидкостных или ионных хроматографов (электрофореза) обеспечивают предварительное разделение вещества, а *индикацию* разделенных веществ и *измерение их содержаний* осуществляет масс-спектрометр. Поэтому масс-спектрометры в хромато-масс-спектрометрах большей частью имеют дело не со смесью соединений, а с индивидуальными соединениями, на короткое время поступающими в источник ионов.
- Очень полезной оказалась возможность практически *одновременного* (или *попеременного*) наблюдения массовых пиков с помощью масс-спектрометра и электромагнитного излучения - эмиссионным спектрометром. В таких "комплексных" приборах регистрируется электромагнитное излучение из масс-спектрометрических источников ионов с газовым разрядом (с индуктивно-связанной плазмой, тлеющим разрядом, искровым, дуговым, коронным).
- Весьма плодотворным, но далеко не в полной мере реализованным, оказалось совместное применение лазеров и масс-спектрометрии, которое может идти по двум - трем направлениям: применение лазеров в масс-спектрометрии, применение масс-спектрометрии

для диагностики и изучения работы лазеров, масс-спектрометрический контроль работы установок по лазерному разделению изотопов.

- Некоторые методы физико-химического анализа применяют одинаковые узлы или схожи по ряду моментов действия. Например, источники с индуктивно связанной плазмой используются и в масс-спектрометрии, и в оптической эмиссионной спектроскопии, а "электронный зонд", дающий локальное рентгеновское излучение элементов в рентгено-флуоресцентном анализе, идейно и частично конструктивно схож с "ионным зондом" вторичной ионной масс-спектрометрии.
- В современных аналитических средствах весьма высок уровень интеграции различных элементов, блоков, устройств (система подачи проб, различные стабилизаторы напряжений и токов, операционные усилители, средства вычислительной техники и программного обеспечения, стандартные образцы).

11. МАСС-СПЕКТРОМЕТРИЯ И АНАЛИТИЧЕСКИЕ ПРИМЕНЕНИЯ

Более распространенным и относительно простым является применение масс-спектрометрии в аналитических целях. Условия ионизации в этих случаях, как правило, либо остаются неизменными, либо контролируемым образом переключаются между несколькими значениями.

Масс-спектрометрия – как область аналитических измерений, требует довольно сложных приборов, основательного методического и метрологического обеспечения. Она объединяет и согласует длинную цепочку объектов, методов и процессов:

- объект исследования;
- подготовку эталонов, изотопных или элементных меток, поверочных смесей или образцов сравнения,
- метод отбора и подготовки проб;
- ионизацию вводимого вещества;
- разделение ионов по массам;
- их детектирование;
- обработку и представление полученной информации;
- её анализ и последующие выводы;

Работы по осуществлению этой цепочки требуют использования разнообразных систем и узлов масс-спектрометров.

Эти методы обладают хорошей наглядностью, большой универсальностью и информативностью, позволяют достигать высокой чувствительности, разрешающей способности и точности, что способствует их широкому распространению в различных отраслях науки и технологии:

- | | |
|--|--------------------------|
| • ядерная физика и ядерные технологии, | • геохимия и космохимия, |
| • химия и химические технологии, | • биология и биохимия, |
| • лазерные технологии, | • экология, |
| • полупроводниковые технологии, | • медицина, |
| • вакуумные технологии, | • фармакология, |
| • материаловедение, | • криминалистика и т.д. |

В этом контексте уместно привести цитату, взятую из сайта Thermo Electron Corporation⁶, в которой отражаются несколько другие сферы применения, которые, видимо, обусловлены профессиональной деятельностью и пристрастиями автора текста: "Трудно представить область человеческой деятельности, где не нашлось бы места масс-спектрометрии. Ограничимся просто перечислением: биохимия, клиническая химия, общая химия и органическая химия, фармацевтика, косметика, парфюмерия, пищевая промышленность, химический синтез, нефтехимия и нефтепереработка, контроль окружающей среды, производство полимеров и пластиков, медицина и токсикология, криминалистика, допинговый контроль, контроль наркотических средств, контроль алкогольных напитков, геохимия, геология, гидрология, петрография, минералогия, геохронология, археология, ядерная промышленность и энергетика, полупроводниковая промышленность, металлургия".

Таблица 2

ПРИМЕНЕНИЯ МАСС-СПЕКТРОМЕТРИИ			
Химический и структурный анализ	Изотопный анализ		Элементный анализ
Хромато-масс-спектрометры. ГХ и ЖХ системы.	Масс-спектрометры для анализа стабильных изотопов в газовой фазе	Термоионизационные масс-спектрометры	Масс-спектрометры с индуктивно-связанной плазмой
<u>Биохимия</u> <u>Протеомика</u> <u>Клиническая химия</u> <u>Косметика</u> <u>Допинги, наркотики</u> <u>Контроль окружающей среды</u> <u>Пищевые продукты</u> <u>Сельское хозяйство</u> <u>Криминалистика</u> <u>Органическая химия</u> <u>Парфюмерия и ароматизаторы</u> <u>Нефти</u> <u>Нефтехимия</u> <u>Фармацевтика</u> <u>Полимеры</u> <u>Токсикология</u>	<u>Сельское хозяйство</u> <u>Климатические исследования</u> <u>Клиническая химия</u> <u>Медицинская диагностика</u> <u>Пищевые продукты</u> <u>Ароматические вещества</u> <u>Алкогольные напитки</u> <u>Допинг контроль</u> <u>Геология</u> <u>Гидрология</u> <u>Петрография и минералогия</u> <u>Нефть</u> <u>Криминалистика</u>	<u>Геохронология</u> <u>Ядерная энергетика</u> <u>Контроль окружающей среды</u>	<u>Археология</u> <u>Косметика</u> <u>Экология</u> <u>Общая химия</u> <u>Металлургия</u> <u>Ядерная энергетика</u> <u>Геохимия</u> <u>Продукты питания</u> <u>Медицина и токсикология</u> <u>Фармацевтика</u> <u>Полупроводниковая промышленность</u> <u>Криминалистика</u> <u>Нефти и нефтепродукты</u>

В таблице 2, взятой из того же сайта, достаточно наглядно отражены разнообразие видов анализов (получаемой информации), инструментария и сфер применения масс-спектрометрии. Необходимо подчеркнуть, что данная таблица все же не исчерпывает список существующих типов масс-спектрометров и их применений (см. табл. 1).

Можно было бы дополнить её зондовыми масс-спектрометрическими методами анализа вещества, позволяющими получать информацию о пространственном распределении элементов и их изотопов в исследуемых образцах. Это достигается оснащением некоторых изотопных и элементных масс-спектрометров системой лазерной абляции или использовании специальных микрозондов - масс-спектрометров для регистрации вторичных ионов, получаемых в результате воздействия на исследуемый образец пучком ускоренных первичных ионов (ВИМС). Иногда для этих целей используют масс-спектрометры с искровыми источниками ионов.

12. МАСС-СПЕКТРОМЕТРИЯ – ОДИН ИЗ КЛЮЧЕВЫХ МЕТОДОВ ПОЗНАНИЯ ПРИРОДЫ

Причиной такого всеобъемлющего проникновения масс-спектрометрии в различные аспекты человеческой деятельности имеют многофакторный характер. Тем не менее, главным фактором, видимо, является то, что информация черпается непосредственно от элемента вещества (атома, молекулы, кластера), а в основе этого метода лежит *масса и заряд как одни из основных свойств вещества и фундаментальных понятий*. Именно масса позволяет различить один атом от другого, даже если это атомы одного элемента (изотопы).

Хотя одна из современных формулировок периодического закона Д.И.Менделеева звучит так: свойства элементов находятся в периодической зависимости от заряда их атомных ядер. Заряд ядра Z равен атомному (порядковому) номеру элемента в системе. Элементы, расположенные по возрастанию Z (H, He, Li, Be...), образуют 7 периодов. В 1-м — 2 элемента, во 2-м и 3-м — по 8, в 4-м и 5-м — по 18, в 6-м — 32. В 7-м периоде (на 1990) известны 23 элемента ...¹². Тем не менее, именно масса лежала и в основе периодической системы элементов Д.И.Менделеева, хотя бы потому, что понятие "заряд ядра" или "атомный номер" появились и вошли в обиход много позднее упомянутого закона.

Периодическая законность химических элементов¹³

"Сущность П. законности. Так как из всех свойств химических элементов атомный их вес наиболее доступен для численной точности определения и для полной убедительности, то исходом для нахождения законности химических элементов всего естественнее положить веса атомов, тем более, что в весе (по закону сохранения масс) мы имеем дело с неуничтожаемым и важнейшим свойством всякой материи. Закон есть всегда соответствие переменных, как в алгебре функциональная их зависимость. Следовательно, имея для элементов атомный вес как одну переменную, для отыскания закона элементов следует брать иные свойства элементов, как другую переменную величину, и искать функциональной зависимости. Взяв многие свойства элементов, напр. их кислотность и основность, их способность соединяться с водородом или кислородом, их атомность или состав их соответственных соединений, теплоту, выделяемую при образовании соответственных, напр. хлористых соединений, даже их физические свойства в виде простых или сложных тел сходного состава и т.п., можно подметить периодическую последовательность в зависимости от величины атомного веса. ...

Всю совокупность соотношений, замечаемых при подобных сличениях, можно формулировать в следующем положении: *химические и физические свойства соединений, образуемых элементами, находятся в периодической зависимости от величины атомного веса элементов*. Это и составляет сущность П. законности. Нельзя при этом не остановить внимания на том, что возрастание атомного веса состоит в увеличении массы, а при увеличении массы во всех обычных случаях идет все время последовательное изменение (напр. возрастает, при прочих равных обстоятельствах, притяжение, объем и т.п.) в определенную сторону, здесь же это замечается только до известного предела (напр. до перехода от одного периода к другому или до VIII группы в периоде и т.п.), после которого или совершается обратное изменение, или начинается повторение прежнего, как в пиле повторяются зубья и имеются высшие и низшие точки. Эта сторона дела придает П. законности общий своеобразный интерес новизны и заставляет думать, что замеченная законность может послужить к объяснению природы химических элементов, которые поныне составляют последнюю грань постижения химических превращений."¹³

С другой стороны вся окружающая человека среда и он сам состоит из вещества. Свойства веществ зависят от его состава и структуры, как на микро, так и на макро уровне.

Поэтому *объективно обусловлены* как потребность получения информации о веществе, так и развитие методов получения этой информации, основанные на измерении масс.

В своем обращении¹⁴ весной 2003 года инициатор создания Всероссийского масс-спектрометрического общества А.Т.Лебедев, отмечая, что со времени последней *Всесоюзной* масс-спектрометрической конференции 1986 года прошло 17 лет, писал: "Однако за это время в масс-спектрометрии произошла революция. Это касается и приборного оснащения, и методов ионизации образцов и регистрации масс-спектров, и областей применения метода. Большинство российских ученых: химиков, физиков, биологов, экологов, медиков и т.д., специально не изучающих масс-спектрометрическую литературу, не представляют всех современных возможностей метода. Сейчас масс-спектрометрия способна решать задачи практически любой естественной науки".

К этому можно добавить, что в ней, как у всякой зрелой науки, можно различить разделы теоретической, экспериментальной и прикладной масс-спектрометрии.

Но, несмотря на всё это, опыт автора дает основание утверждать, что во многих случаях *практической деятельности* масс-спектрометрия в России воспринимается только как обычный аналитический метод, предназначенный для выполнения рутинных измерений, обеспечивающих решение конкретных задач. При этом, как правило, не различают ни типы масс-спектрометров, ни методики измерений, ни их назначения. Обычно предполагается, что наличие прибора (масс-спектрометра) позволяет решить чуть ли не все проблемы. Практически не воспринимается значение и необходимость организации структурных подразделений, владеющих, применяющих, внедряющих и развивающих масс-спектрометрические методы, методологию и инструментарий.

Другой стороной отношения к масс-спектрометрии является боязнь и, возможно, недоверие к этому методу. А.В.Лебедев в предисловии к своей книге "Масс-спектрометрия в органической химии" отмечает, что постоянно сталкивается с ситуацией, когда даже опытные химики-органики пасуют перед масс-спектром, предпочитая извлечь необходимую информацию о структуре с помощью других, более знакомых им методов.

Подобное отношение к масс-спектрометрии обусловлено как объективными, так и субъективными факторами. Оно определяется общим уровнем научно-технической культуры и образования в государстве, количеством и доступностью информации, и многими другими причинами. В последующих разделах статьи сделана попытка прояснить влияние различных факторов на развитие и использование МАСС-СПЕКТРОМЕТРИИ в России.

13. ПРОИЗВОДСТВЕННЫЕ И ИНФОРМАЦИОННЫЕ РЕСУРСЫ МАСС-СПЕКТРОМЕТРИИ

За более чем вековую историю своего развития масс-спектрометрия, превратившись в широкую, разноплановую сферу деятельности, внедрилась в общемировую научный и производственный процесс. Есть все основания для того, чтобы говорить о формировании в промышленно развитых странах масс-спектрометрической инфраструктуры. В составе указанной инфраструктуры выделяются организации, занимающиеся разработкой, производством и распространением масс-спектрометрического оборудования, информационного, программного, методического и метрологического обеспечения, адаптацией его для решения задач конкретных потребителей. На сайте ВМСО¹⁵ приведен перечень из почти двух десятков крупных организаций, специализирующихся на производстве оборудования для масс-спектрометрии. К этому можно добавить что среди них имеются как национальные так и транс национальные организации.

Формируется инфраструктура исследовательских и аналитических лабораторий, специализирующихся на решении различных прикладных и фундаментальных задач. Иллюстрацией данного положения может служить список пользователей приборов марки Finnigan от Thermo Electron¹⁶ в России и странах СНГ.

Образовательные структуры держат в своем поле зрения это направление деятельности. Во многих ВУЗах читают учебные курсы, связанные с применением масс-спектрометрии.

Одним из важнейших факторов любой человеческой деятельности, тем более, научной, является не только получение, но хранение, распространение и обмен информацией.

Главнейшим носителем информации, заключенной в виде знаний, навыков, практического опыта являются *люди*: специалисты, практикующие в той или иной области масс-спектрометрии; рабочие группы, в совокупности располагающие знаниями и навыками для решения конкретных задач на конкретном оборудовании, конкретными методами; фирмы или предприятия, занимающиеся обеспечением различных сторон масс-спектрометрии, о которых упоминалось ранее.

Ну и, конечно же, невозможно развитие и распространение знаний без печатной и других видов издательской деятельности: журналы, книги, электронные издания, *Internet*. В настоящее время в мире существует немало изданий^{15, 16, 21}, специализирующихся по различным масс-спектрометрическим аспектам.

Масс-спектрометристы России имеют возможность обмениваться информацией на страницах различных российских печатных изданий. В таблице 4 представлен перечень наиболее значимых из них.

Таблица 3. Перечень основных российских журналов, отражающих вопросы масс-спектрометрии

№	Название журнала
1.	Приборы и техника эксперимента
2.	Измерительная техника
3.	Журнал аналитической химии
4.	Заводская лаборатория. Диагностика материалов (ранее "Заводская лаборатория")
5.	Журнал технической физики
6.	Вопросы атомной науки и техники (ВАНТ). Сер. Техническая физика и автоматизация. Сер. Радиационная техника.
7.	Геохимия
8.	Научные приборы (Научное приборостроение)
9.	МАСС-СПЕКТРОМЕТРИЯ

Журнал "МАСС-СПЕКТРОМЕТРИЯ" должен быть упомянут отдельной строкой, поскольку он еще только-только появился и естественно находится в начальной стадии своего становления и развития.

К информационным ресурсам можно отнести и нормативно-техническую документацию (инструкции, ГОСТы и ОСТы), регламентирующие прикладные аналитические аспекты масс-спектрометрии.

В этом же контексте нельзя не упомянуть и о регулярно проводимых конференциях по масс-спектрометрии, выставках аналитического оборудования, многие из которых не обходятся без масс-спектрометрических приборов и соответствующей литературы.

Таким образом, можно говорить о появлении и становлении информационной инфраструктуры, обеспечивающей потребности масс-спектрометрии. Хотя в России, в силу разных причин, связи между элементами этой структуры еще слабо развиты или отсутствуют, что не позволяет с определенностью говорить о ней как о системном факторе. Однако потенциал имеющегося информационного ресурса может оказаться достаточным для обеспечения становления, развития и распространения масс-спектрометрии в России.

14. МАСС-СПЕКТРОМЕТРИЧЕСКОЕ ПРИБОРОСТРОЕНИЕ

Потребности масс-спектрометрии обслуживает специальная отрасль аналитического приборостроения, занимающаяся проектированием, расчетным моделированием, макетированием, изготовлением, испытанием и внедрением масс-спектрометров и их отдельных узлов. Эта отрасль включает в себя такие наукоёмкие технологии, как:

- получение пучков ионов от самых разнообразных веществ и в различных условиях;
- проведение сложных ионно-оптических расчетов;
- использование и возможная разработка современной цифровой и аналоговой электроники (особенно высокоскоростной и высокоточной);
- применение техники и технологии высокого и сверхвысокого вакуума;
- использование современной автоматики и вычислительной техники;

- разработка технологий подготовки и ввода проб твердых, жидких и газообразных веществ в область ионизации и т.д.

У масс-спектрометрического приборостроения в России имеется своя богатая история, его проблемы во многом совпадают с проблемами других сторон масс-спектрометрии. На историческом рубеже перехода от СССР к СНГ деструктивные изменения в отрасли аналитического приборостроения в России преобладали над конструктивными. Об этом ярко и аргументировано изложено в недавней статье Л.Н.Галль¹⁷.

15. ОБ ОРГАНИЗАЦИИ МАСС-СПЕКТРОМЕТРИЧЕСКОЙ ДЕЯТЕЛЬНОСТИ В РОССИИ

К сожалению, в России условия для становления и существования инфраструктуры, обеспечивающей разнообразные потребности масс-спектрометрии, не являются благоприятными. После смены государственных устоев в конце прошлого века, произошел разрыв связей между существовавшими в СССР структурами, обеспечивающими потребности масс-спектрометрии и использующих её услуги. Часть организаций, оказались за рубежом России. В итоге произошли деградация и/или разрушение самих структур.

В новой системе отношений, которая создается в нашей стране, ещё нет достаточного количества потребителей масс-спектрометрических услуг, а у тех, которые имеются, отсутствует *платежеспособный* спрос, чтобы обеспечить необходимые инвестиции на поддержание, разработку и создание масс-спектрометрического оборудования, методического, метрологического, программного обеспечения, подготовку и воспроизводство кадров. Видимо еще не сформировались условия и должное понимание необходимости развития этих направлений деятельности.

Стоимость масс-спектрометрического оборудования и его эксплуатации, подготовки квалифицированных специалистов, информационного, программного и методического обеспечения относительно велика. Поэтому даже при наличии спроса не всякому потребителю они оказываются под силу.

Но поскольку потребности в масс-спектрометрических исследованиях и анализах существуют *объективно*, то неизбежно имеет место стремление к их удовлетворению. Одним из условий удовлетворения этих потребностей является объединение имеющихся интеллектуальных и материальных ресурсов для их совместного использования, налаживание разнообразных связей между масс-спектрометристами различных организаций. Это является одной из причин и одним из факторов, обусловивших возникновение ВМСО.

В современной России особое внимание обращается на инновационный путь развития производственной и научной сферы¹⁸. *Новые разработки техники, оборудования, материалов, технологии, организации производства предполагают знания состава, свойств вещества и процессов, происходящих с ним. Кроме того, военная, экономическая, энергетическая, технологическая, продовольственная, экологическая безопасность государства в современном мире, а также противодействие террористическим организациям и распространению наркотических веществ, не может быть обеспечена без применения эффективных методов анализа вещества различной природы.*

Учитывая эти факторы и потенциальные возможности масс-спектрометрии можно говорить о том, что государство *объективно должно быть заинтересовано* в создании условий, способствующих развитию в стране структур, владеющих, применяющих и распространяющих масс-спектрометрические методы исследования веществ. В какой-то мере в России эти условия начинают возникать, о чем может свидетельствовать и создание в 2001 году Центра изотопных исследований (ЦИИ) ВСЕГЕИ под эгидой Министерства Природных Ресурсов России¹⁹, и выпуск первого Российско-американского хромато-масс-спектрометра "Кристалл МС", в СКБ "Хроматэк", г. Йошкар-ола, республика Марий Эл, Россия²⁰.

Тем не менее, этот процесс находится в стадии зарождения, и масс-спектрометрия в России *в промышленных, научных и правительственных кругах ещё не имеет статуса жизненно необходимой сферы деятельности*. Как относительно самостоятельное направление деятельности, масс-спектрометрия не вошла в "Приоритетные направления

развития науки, технологий и техники Российской Федерации" и в "Перечень критических технологий Российской Федерации".

Большинству из действующих организаций приходится самим обеспечивать себя всем необходимым: разработкой и изготовлением оборудования, программного, методического, метрологического и информационного обеспечения, подготовкой кадров и т.д. Хотя такое положение обуславливает формирование специалистов высокой квалификации, оно же свидетельствует и о *неразвитости общественных отношений*, способствует расходованию большего количества ресурсов.

Необходимо заметить, что в тех организациях, которые не могут обеспечить весь спектр необходимой для масс-спектрометрии деятельности, результативность и эффективность работы на масс-спектрометрах низка, даже при наличии хороших современных приборов.

Такая особенность России, а именно отсутствие или недостаточный уровень организации соответствующих видов деятельности, привлекает внимание масс-спектрометрических структур технически развитых государств, и они упорно предлагают свою продукцию и услуги российским потребителям, несмотря на то, что платежеспособными из них в настоящее время являются очень немногие.

Интересным для анализа и иллюстрации данного положения является перечень потребителей масс-спектрометрического оборудования различного назначения фирмы Finnigan и Thermo Electron, в число которых входят более 60 российских организаций, относящихся к различным сферам деятельности научных, образовательных, производственных, экологических, криминалистических, медицинских, банковских и др.

Наряду с этим, как правило, наиболее способные и талантливые российские специалисты в области масс-спектрометрии сотрудничают или работают в тех же зарубежных фирмах.

16. МАСС-СПЕКТРОМЕТРИЯ – НАУКА, МЕТОД, МЕТОДОЛОГИЯ, ИНСТРУМЕНТАРИЙ, СФЕРА ДЕЯТЕЛЬНОСТИ.

В заключение сформулируем определение МАСС-СПЕКТРОМЕТРИИ, обобщающее обсуждаемую тему, с небольшими комментариями:

Масс-спектрометрия - представляет собой современную фундаментальную и прикладную физико-химическую **науку**. В её задачу входит получение и накопление знаний о составе веществ, их структуре, физико-химических свойствах, а также происходящих с ним процессах.

Именно эти знания позволили обеспечить и осуществить многие открытия и достижения 20-го века. Наиболее яркими, из которых, является обеспечение освоения ядерной энергии, развития микроэлектроники, к ним можно добавить достижения в химии, биологии, фармакологии, открытие стабильных изотопов, фуллеренов и многого другого, о чем могли бы сказать специалисты различных областей знаний.

Масс-спектрометрия - через образование ионов, их разделение по массам и детектирование, позволяет получать богатейшую информацию об окружающем мире. Масс-спектрометрия – естественный, многосторонний и эффективный **метод** (комплекс методов) определения состава вещества, исследования различных ядерных, атомных, плазменных, физико-химических, биологических, геологических и технологических процессов.

Она успешно дополняет, конкурирует и часто превосходит другие методы физико-химического анализа по широте и комплексности подхода, чувствительности и точности измерений.

Масс-спектрометрию можно характеризовать как **методологию**, своеобразное учение о структуре, логической организации, методах и средствах изучения вещества. В основе этого учения лежит ориентация на массу микрочастиц (ядер, атомов, молекул, кластеров и т.п.) как на главнейшую (основную) и стабильную характеристику вещества, и на вещество преимущественно в основном, а не в возбужденном состоянии.

Видимо благодаря этому масс-спектрометрия охватывает и объединяет практически все естественные науки и многие технологии.

Масс-спектрометрия за время её использования как универсального метода изучения вещества, согласуя свои возможности с различными объектами исследования, оснастилась богатым арсеналом **инструментального и технологического оборудования**, методического и метрологического обеспечения, современными средствами автоматизации.

В современной масс-спектрометрии имеются разнообразные устройства отбора проб, получения ионов, разделения их по массе, детектирования, а также получения, хранения, обработки и использования масс-спектрометрической информации.

Масс-спектрометрия – это широкое **поле деятельности**: научной, методической, технической, технологической. В эту деятельность вовлечено большое количество ученых, исследователей, инженеров, конструкторов, преподавателей и др. специалистов.

Во всем мире уже много лет существуют масс-спектрометрические общества, объединяющие специалистов в области масс-спектрометрии, потребителей её услуг и тех, кто интересуется ею как интересной и разноплановой сферой деятельности. Такая общественная организация появилась и в России. В октябре 2003г. прошел учредительный съезд Всероссийского масс-спектрометрического общества (ВМСО).

В определенной степени **Масс-спектрометрию** в России хорошо отражает и характеризует структура ВМСО, которая включает в себя 8 секций:

- | | |
|--------------------------------------|-------------------------------------|
| 1. Неорганическая масс-спектрометрия | 5. Изотопная масс-спектрометрия |
| 2. Органическая масс-спектрометрия | 6. Приборостроение |
| 3. Биомедицинская масс-спектрометрия | 7. Геохимия – элементный анализ |
| 4. Окружающая среда | 8. Аналитическая масс-спектрометрия |

Все это **МАСС-СПЕКТРОМЕТРИЯ** в широком смысле слова!

Другими словами, можно сказать, что в начале третьего тысячелетия есть все основания определять **масс-спектрометрию** как **широкую сферу деятельности**, обеспечивающую получение информации о составе вещества (изотопном, элементном, молекулярном), о молекулярной структуре вещества и структуре материалов, о физико-химических свойствах (масса, энергия ионизации, сродство к электрону, время жизни ионов, молекул и т.п.), о природных и технологических процессах.

В этой сфере деятельности имеются и фундаментальное, теоретическое, экспериментальное и прикладное направления. В свою очередь каждое из этих направлений подразделяются на решение более частных вопросов.

Это сфера деятельности, в которой разработаны: большой арсенал разнообразных методов, методология, инструментарий, обусловленные разнообразием исследуемых и используемых объектов и явлений.

Она оказывает огромное влияние на разные науки, технику и технологии, и даже социальную сферу (через социально-значимые виды деятельности: медицину, экологию, энергетику, криминалистику).

Сфера деятельности, которой в той или иной степени занимаются, которую изучают, используют и интересуются значительное количество людей.

17. ЗАКЛЮЧЕНИЕ.

Рамки небольшой статьи не позволяют подробно распространяться по каждому из перечисленных направлений и вопросов, связанных с масс-спектрометрией. Ведь только краткое упоминание всех аспектов масс-спектрометрии занимает значительное место. Да к тому же их многообразие, разносторонность и динамичное развитие не позволят ни одному автору обзреть их в полном объеме.

Появившись на рубеже 19-20 веков, **масс-спектрометрия** за вековой период своего развития **превратилась** из рядового метода исследования ионизированного вещества **в одно из направлений науки**.

Влияние общественного отношения к какому-либо виду человеческой деятельности, а тем более к науке имеет большое значение. Не вдаваясь в длинные рассуждения, уместно привести пример о положении в СССР в середине прошлого века таких наук как Генетика и

Кибернетика, обусловленном отношением к ним общества под воздействием идеологии и, возможно, других факторов. Можно только предполагать, какие успехи в этих науках могли быть достигнуты в Советском Союзе, если бы в официальных документах в отношении их не использовались бы такие термины как "буржуазная" и/или "лженаука". К счастью, масс-спектрометрия избежала этой участи, но все же некоторое её непонимание и игнорирование пока имеет место. Без сомнения, объективные потребности существования и развития человечества воздадут должное масс-спектрометрии и поставят её на заслуженное место в жизни нашего общества, но обратить внимание россиян на эту науку необходимо уже сейчас.

Ускоренное развитие масс-спектрометрии в России может быть обеспечено только с учетом комплексного системного государственного подхода, способствующего созданию развитой масс-спектрометрической инфраструктуры, обеспечивающей разнообразную деятельность. В том числе, с одной стороны: разработка, изготовление и распространение оборудования, программного, методического, метрологического и информационного обеспечения, подготовка кадров, и т.п. или привлечение и использование широких возможностей зарубежных или международных масс-спектрометрических структур. С другой стороны - использование аппаратного и методического обеспечения для решения широкого круга исследовательских и прикладных задач. При этом государство, *как одна из наиболее заинтересованных сторон*, должно способствовать привлечению инвестиций в эту сферу деятельности.

Должный уровень развития масс-спектрометрии позволит создать условия и подтолкнуть к развитию наукоемкие производства, разработку и создание новой техники, технологий, и т.д. Инновационный путь развития, которому привержена Россия в настоящий период, возможно, как никакой иной подходит для достижения данной цели и, в свою очередь, нуждается в ней - в развитой масс-спектрометрической инфраструктуре.

Ещё одним итогом этих рассуждений является вывод о том, что имеется насущная *объективная* потребность обратить внимание на **масс-спектрометрию** и **пересмотреть отношение к ней в России** со стороны широкой общественности, специалистов и руководителей науки, промышленности, государства, предпринимателей. Поскольку сегодняшнее общественное (в значительной степени *субъективное*) отношение к масс-спектрометрии в определенном смысле сдерживает её развитие и использование во многих сферах деятельности. Что, в свою очередь, ограничивает возможности естественных наук, промышленности, технологий, а в целом сдерживает динамику развития нашего общества. Кроме того, уровень развития масс-спектрометрии, в широком её понимании, во многом определяет уровень достижимой безопасности (военной, экономической, энергетической, технологической, продовольственной, экологической и т.д.) страны.

Таким образом, можно говорить о необходимости создания в России развитой масс-спектрометрической инфраструктуры. Методы и механизмы государственного регулирования и управления, которые необходимо применять для её создания, источники материальных, финансовых и других ресурсов, механизмы их перераспределения – прерогатива государственных органов и эти серьезные вопросы здесь не обсуждаются.

Что в имени твоём ...

БЛАГОДАРНОСТИ

Автор выражает глубокую признательность Б.К.Масленникову, способствовавшему изучению и осознанию многих из обсуждаемых аспектов масс-спектрометрии и по сути являющемуся соавтором статьи. Благодарит А.Ю.Рябчуна, Ю.И.Чубарова, В.Н.Вячина и К.Б.Жогову за продуктивное обсуждение многих поднимаемых вопросов, акцентирование внимания на некоторых особенностях обсуждаемых проблем, замечания к тексту статьи и моральную поддержку.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. А.В.Дубровин. "Масс-спектрокопия" // Физический энциклопедический словарь. Т.3, 1963 – с. 146-151.
2. А.В.Дубровин, Г.И.Косоуров. "Масс-спектрометр" // Физический энциклопедический словарь. Т.3, 1963 – с. 138-146.
3. В.Л.Тальрозе, Ю.С.Ходеев. "Масс-спектрокопия" // Физическая энциклопедия Т.3, 1992. – с. 57-59.
4. В.Л.Тальрозе. "Масс-спектрометр" // Физическая энциклопедия Т.3, 1992. – с. 53-57.
5. Г.И.Рамендик. "Масс-спектрометрия" // Горная энциклопедия. Т.3, 1987 – с. 266 – 267.
6. М.Токарев. "Что такое масс-спектрометрия и зачем она нужна?" // Материалы сайта Internet: www.textronica.com. (2004)
7. Устав общероссийской общественной организации «Всероссийское масс-спектрометрическое общество». Масс-спектрометрия 1(2). 93 -98 (2004)
8. Yu.I.Chubarov, N.A.Pon'kin, N.N.Tarasova, A.A.Kryzhanovskiy, and V.K.Maslennikov, "Fullerene mass-spectra obtained on a set-up of MI 1201B-type under the conditions of use for negative thermoionization" Fullerenes and Atomic Clusters. 6th Inter workshop IWFAС 2003, abstracts, p.316.
9. И.Б.Астахов, Ю.И.Чубаров, Н.П.Барабанов. "Блок программной регистрации БПР-1. Техническое описание. Инструкция пользователя." Саров, ВНИИЭФ, (2002)
10. Э.М.Галимов, В.С.Севастьянов, Е.В.Кульбачевская, А.А.Голявин. "Идентификация географического места происхождения наркотических веществ на основе изотопного анализа углерода и азота", Масс-спектрометрия 1(1), (2004)
11. В.И.Хвостенко, "Развитие масс-спектрометрии отрицательных ионов в Уфе. (Исследования резонансного захвата электронов молекулами)" Очерки истории масс-спектрометрии, БНЦ УрО АН СССР, Уфа, 69-97 (1988).
12. "Периодическая Система Элементов Менделеева" // Большая энциклопедия Кирилла и Мефодия (БЭКМ) (2002)
13. Д.И.Менделеев "Периодическая законность химических элементов" из "Энциклопедического словаря Брокгауза и Эфрона" (1890 –1907) // Периодическая Система Элементов Менделеева, Большая энциклопедия Кирилла и Мефодия (БЭКМ) (2002)
14. А.Т.Лебедев. "Обращение к масс-спектрометристам России" // сайт Internet www.vmsо.ru, (2003)
15. Материалы сайта Internet www.vmsо.ru. (2004)
16. Материалы сайта Internet www.textronika.com, (2004)
17. Л.Н.Галль "Масс-спектрометрия – дело государственное. Размышления о состоянии и путях возрождения отечественного масс-спектрометрического приборостроения" // Атомная стратегия, 2004, №4(9), с.5-6.
18. "Основы политики Российской Федерации в области науки и технологий на период до 2010 года и дальнейшую перспективу", утвержденные Президентом Российской Федерации от 30.03.2002 г. Пр-576.
19. http://www.vsegei.ru/news_all.html; <http://www.vsegei.ru/cir.html>, (2004)
20. <http://www.chromatec.ru>, (2004)
21. http://ionsource.com/links/ms_links.htm#History (2004)