**Скрининг лекарственных соединений в моче методом масс-спектрометрии с ионизацией излучением лазерно-индуцированной плазмы при атмосферном давлении**

 ***Тимакова С.И., Симакина Я.И., Кравец К.Ю.***

*Аспирант 1-го года обучения*

*Институт геохимии и аналитической химии им. В.И. Вернадского РАН, Москва, Россия*

*E–mail:* *timackovasvet@yandex.ru*

APLPI (Atmospheric Pressure Laser Plasma Ionization) – метод ионизации органических соединений при атмосферном давлении [1]. Метод основан на использовании лазерно-индуцированной плазмы для создания высокой концентрации первичных ионов и возбужденных молекул, которые обеспечивают “мягкую” ионизацию определяемых соединений. Генерация плазмы осуществляется путем воздействия сфокусированного излучения импульсного Nd:YAG лазера (длина волны 1.06 мкм, длительность импульса 0.5 нс, энергия в импульсе 0.5 мДж) на поверхность металлической мишени, расположенной вблизи входного отверстия масс-спектрометра.

В докладе представлены результаты сравнения аналитических характеристик методов APLPI и ВЭЖХ-МС/МС при определении физиологически активных соединений и их метаболитов в моче. Приборная реализация APLPI основана на использовании масс-анализатора высокого разрешения “Orbitrap” в сочетании с термодесорбционным вводом пробы. В качестве ВЭЖХ-МС/МС использовали систему с тройным квадруполем и электрораспылительной ионизацией (Agilent 1260/6460) в режиме мониторинга выбранных ионов.

Объектами анализа являлись пробы мочи пациентов, проходящих лечение в больницах г. Москвы. Пробоподготовка заключалась в проведении жидкость-жидкостной экстракции по стандартной методике для ВЭЖХ. Полученные экстракты проанализированы обоими методами. Изучено десять соединений, принадлежащих к классам противоэпилептических, анальгезирующих, нейролептических, антигистаминных препаратов и антидепрессантов. В методе APLPI анализируемые жидкие пробы объемом 2 мкл помещали в кювету, которую нагревали индукционным способом до температуры 250-300оС. Десорбированные соединения подавались в зону ионизации в потоке азота.

Для каждого соединения найдены основные аналитические характеристики. Показано, что барбитураты более эффективно детектируются в режиме регистрации отрицательных ионов, а остальные исследованные соединения – в режиме регистрации положительных ионов. Сравнительные исследования показали, что методы APLPI и ВЭЖХ-МС/МС характеризуются близкими значениями чувствительности. Метод APLPI обладает существенно меньшей воспроизводимостью, однако позволяет одновременно детектировать большое количество лекарственных соединений при анализе одной пробы. При этом длительность анализа не превышает 1 минуты.

Изучена возможность проведения прямого анализа мочи без пробоподготовки методом APLPI, что недоступно для ВЭЖХ-МС/МС. Исследовано влияние матричных эффектов и определены аналитические параметры. На основе полученных данных рекомендовано использовать метод APLPI для скрининга лекарственных соединений, а ВЭЖХ-МС/МС – в качестве подтверждающего метода анализа.

**Литература**

1. Пенто А. В., Никифоров С. М., Симановский Я. О., Гречников А. А. и Алимпиев С. С. Лазерная абляция и ионизация излучением лазерной плазмы при атмосферном давлении в масс-спектрометрии органических соединений. // Квантовая электроника. – 2013. – Т. 43. – №. 1.– С. 55-59