**Использование метода Нелдера-Мида для оптимизации операционных параметров ионного источника масс-спектрометра в системе ГХ-МС**

***Белоносова В.А., Данилов Д.А.***

*Студент, 3 курс бакалавриата*

*Уральский федеральный университет имени первого Президента России им. Б. Н. Ельцина, физико-технологический институт, Екатеринбург, Россия*

*E-mail: bielonosova@gmail.com*

ГХ-МС — это практически единственный метод качественного и количественного анализа сложных многокомпонентных систем, состоящих из веществ, способных к существованию в газообразном состоянии. Газовый хроматограф позволяет выделять индивидуальные компоненты из их смесей, а масс-спектрометр проводить качественный и количественный анализ. В качественном анализе особо зарекомендовал себя ионный источник электронного удара, позволяющий регистрировать масс-спектры веществ. Такие системы могут работать в двух режимах: измерения масс-спектра электронного удара в широком диапазоне масс (качественный анализ) и регистрации ионного тока избранного иона (количественный анализ).

Данная работа посвящена оптимизации операционных параметров ионного источника масс-спектрометра с целью получения наилучшего отношения сигнал-шум в режиме измерения избранных ионов. Такими ионами были выбраны осколки с отношением m/z равным 206 и 219. Данная область масс-спектра близка к одному из биомаркеров, применяемого при идентификации типа нефтесодержащих систем. Массовое число 219 соответствует одному из осколков перфтортрибутиламина, калибровочного газа. А 206 – использовано для наблюдения за изменением фонового сигнала. Операционными параметрами были выбраны: напряжения на 1 и 2 линзах ионной оптики, отражающего электрода и тока анода. Измерения проводили на ГХ-МС Clarus 600 (Perkin Elmer).

В ходе эксперимента проводилась съемка хроматограмм калибровочного газа (перфтортрибутиламин) в потоке газа носителя (гелия) 1 мл в минуту. На первом этапе были построены однофакторные зависимости параметров ионного источника с определенным шагом: напряжения на 1 и 2 линзах, тока анода от 0 до 200 В с шагом 40, напряжение на отражающем электроде от 0 до 10 В с шагом 2. Далее был применён метод многофакторной оптимизации Нелдера-Мида, где полученное значение ионного тока являлось значением функции, а параметры ионного источника координатами точек, образующих симплекс.

В ходе сравнения результатов многофакторной оптимизации методом Нелдера-Мида с алгоритмом, рекомендуемым производителями ГХ-МС (однофакторный) было выявлено многократное улучшение показателей. Полученная оптимизация в дальнейшем будет использована при проведении количественного анализа нефтесодержащих систем.