

ОБРАБОТКА ДАННЫХ МАСС-СПЕКТРОМЕТРИИ ВТОРИЧНЫХ ИОНОВ: АНАЛИЗ ПРОБ АТМОСФЕРНОГО АЭРОЗОЛЯ ЗА 2020 ГОД

Киселев С.С.¹, Александров О.Е.¹, Коваленко М.А.¹, Купряжкин А.Я.¹, Маркелов Ю.И.², Поддубный В.А.², Щелканов А.А.², Гадельшин В.М.^{1,2,3}

¹) Уральский федеральный университет имени первого Президента России Б.Н. Ельцина, г. Екатеринбург, Россия

²) Институт промышленной экологии УрО РАН, г. Екатеринбург, Россия

³) Майнцкий университет имени Иоганна Гутенберга, г. Майнц, Германия

E-mail: avtofan96rus@gmail.com

DATA PROCESSING OF SECONDARY ION MASS SPECTROMETRY: ANALYSIS OF ATMOSPHERIC AEROSOL SAMPLES FROM 2020

Kiselyov S.S.¹, Aleksandrov O.E.¹, Kovalenko M.A.¹, Kupryazhkin A.Ya.¹, Markelov Y.I.², Poddubny V.A.², Shchelkanov A.A.², Gadelshin V.M.^{1,2,3}

¹) Ural Federal University, Yekaterinburg, Russia

²) Institute of Industrial Ecology UB RAS, Yekaterinburg, Russia

³) Johannes Gutenberg University Mainz, Germany

The results of secondary ion mass spectrometry of aerosol samples, collected in 2020 at the Institute of Industrial Ecology, are discussed. The data processing tool is introduced to identify mass peaks and corresponding chemical compounds.

Современное развитие мировой экономики, промышленности и сельского хозяйства неразрывно связано с экологической нагрузкой, которую они оказывают на окружающую среду. Особенно важно контролировать уровень загрязнения атмосферы, поскольку оно оказывает прямое влияние на качество жизни всех экосистем. Существенную опасность представляют высокие концентрации искусственных аэрозолей – твёрдых летучих микрочастиц, выбрасываемых в воздух как результат человеческой деятельности. Анализ химического состава и структуры аэрозольных микрочастиц позволяет не только получить информацию об уровне опасности для здоровья населения, но и идентифицировать источники загрязнений [1], помогает определить причины и последствия техногенных аварий [2].

В докладе представлены результаты обработки данных масс-спектрометрических исследований образцов атмосферного аэрозоля, собранных в 2020 году. Аэрозольные микрочастицы отбирались аспирационным методом на фильтры КФБЖ и АФА на территории Института промышленной экологии УрО РАН в городе Екатеринбург [3]. Без последующей пробоподготовки, чтобы избежать каких-либо изменений в химическом составе или структуре микрочастиц, образцы фильтров были напрямую исследованы на времяпролётном масс-спектрометре вторичных ионов на кафедре технической физики Уральского федерального университета.

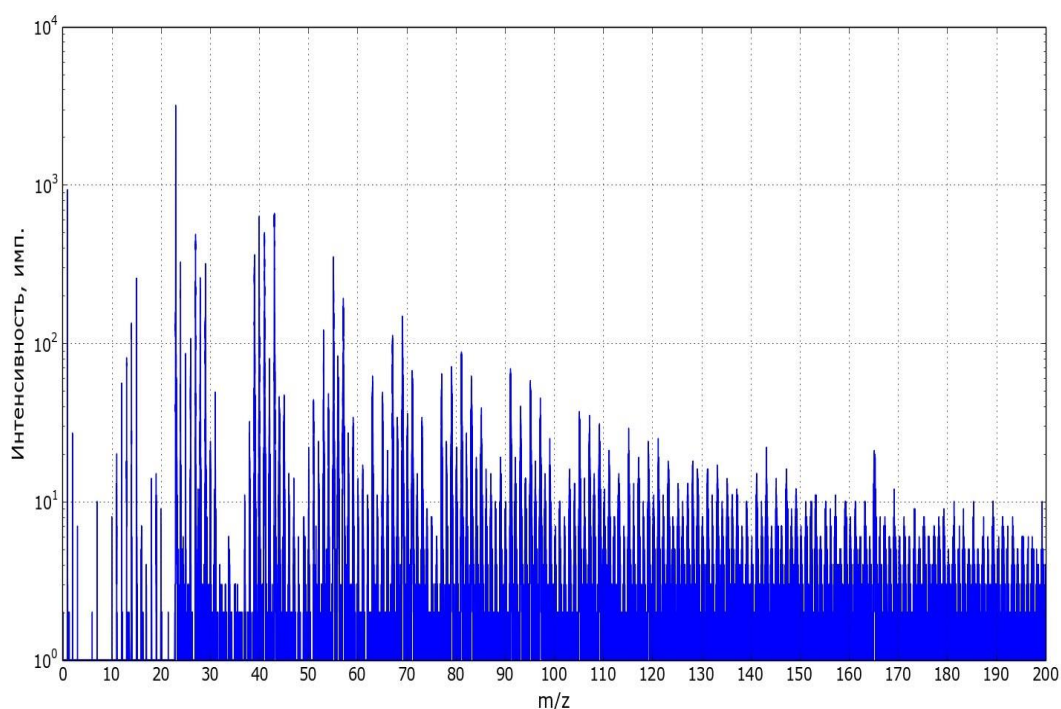


Рис. 1. Типичный масс-спектр вторичных ионов в логарифмическом масштабе, полученный в результате анализа пробы атмосферного аэрозоля, отобранной на фильтр летом 2020 г.

Ключевая роль в работе отводится расшифровке полученных масс-спектров: для качественного анализа химического состава необходимо найти соответствие между полученными пиками и предполагаемыми атомными или молекулярными ионами с тем же отношением массы к заряду. Для автоматизации обработки масс-спектров разрабатывается специальный программный комплекс, позволяющий выводить результаты анализа в требуемом оператором виде; предпринимаются шаги по созданию единой базы химических соединений и характерных им масс-спектров для упрощения идентификации пиков.

Исследование выполнено при финансовой поддержке РФФИ в рамках научного проекта № 19-05-50138.

1. D. Huang et al., *Analytica Chimica Acta*, 989, 1-14 (2017).
2. Н. Н. Вениаминов, *Перспективные материалы*, S14, 123-127 (2013).
3. А. А. Щелканов и др., *Физика. Технологии. Инновации: сборник статей VII Международной молодежной научной конференции*, 268-277 (2020).