

Аналитические методы в химии
и химической технологии

Analytical methods in chemistry
and chemical technology

УДК 535.33/34:547.77

<https://doi.org/10.32362/2410-6593-2024-19-5-462-478>

EDN YSOENJ



НАУЧНАЯ СТАТЬЯ

Анализ спектров ионной подвижности хлорацетофенона, трис(2-хлорэтил)амин и метилмеркаптана

Д.А. Александрова^{1,3,✉}, Т.Б. Меламед¹, Е.П. Баберкина¹, Е.С. Осина¹, Л.А. Лузенина¹,
А.А. Каплин¹, Р.В. Якушин¹, А.Е. Коваленко¹, Г.В. Цаплин¹, Ю.Б. Синькевич¹, А.А. Фенин¹,
Ю.Р. Шалтаева², В.В. Беляков², А.О. Шабля^{1,3}, А.Г. Сазонов³

¹ Российский химико-технологический университет им. Д.И. Менделеева, Москва, 125047 Россия

² Национальный исследовательский ядерный университет «МИФИ», Москва, 115230 Россия

³ Модус, Москва, 117638 Россия

✉ Автор для переписки, e-mail: dasha-25.2012@yandex.ru

Аннотация

Цели. Определить значения ионной подвижности хлорацетофенона, трис(2-хлорэтил)амин и метилмеркаптана; установить строение ионов, соответствующих характерным сигналам; определить предел обнаружения хлорацетофенона, метилмеркаптана и трис(2-хлорэтил)амин на ионно-дрейфовом детекторе «Кербер-Т» и автоматическом стационарном газосигнализаторе «Сегмент».

Методы. Метод спектрометрии ионной подвижности использован для определения значений ионной подвижности и детектирования аналитов. Энтальпии реакций образующихся ионов рассчитаны в программе ORCA 4.1.1 методом функционала плотности B3LYP с набором базисных функций 6-31G(d,p).

Результаты. Определены значения ионной подвижности хлорацетофенона, трис(2-хлорэтил)амин и метилмеркаптана. Разработана методика получения спектров ионной подвижности и их математической обработки. Изучены зависимости изменения спектров ионной подвижности от концентрации аналита. Предложены возможные механизмы формирования наблюдаемых спектров ионной подвижности в соответствии с особенностями ионизации хлорацетофенона, метилмеркаптана и трис(2-хлорэтил)амин. Рассчитаны энтальпии образования ионов. Показаны схемы ионизации соединений. Приведены обобщенные результаты экспериментальных исследований, особенности идентификации соединений с учетом структуры спектров, концентраций веществ и условий детектирования.

Выводы. Выявлены характеристические сигналы хлорацетофенона, трис(2-хлорэтил)амин и метилмеркаптана. Все исследованные вещества группы аварийно-химически опасных веществ могут быть детектированы спектрометром ионной подвижности при аналитически значимых концентрациях на уровне 10^{-2} мг/м³. Определены пределы обнаружения исследуемых веществ на газосигнализаторе «Сегмент». Предел обнаружения хлорацетофенона – 245 мг/м³, трис(2-хлорэтил)амин – 0.01 мг/м³ и метилмеркаптана – 0.8 мг/м³.

Ключевые слова

спектрометрия ионной подвижности, характеристический сигнал, ионизация, детектирование, хлорацетофенон, метилмеркаптан, трис(2-хлорэтил)амин

Поступила: 29.03.2023

Доработана: 03.04.2024

Принята в печать: 13.09.2024

Для цитирования

Александрова Д.А., Меламед Т.Б., Баберкина Е.П., Осина Е.С., Лузенина Л.А., Каплин А.А., Якушин Р.В., Коваленко А.Е., Цаплин Г.В., Синькевич Ю.Б., Фенин А.А., Шалтаева Ю.Р., Беляков В.В., Шабля А.О., Сазонов А.Г. Анализ спектров ионной подвижности хлорацетофенона, трис(2-хлорэтил)амин и метилмеркаптана. *Тонкие химические технологии*. 2024;19(5):462–478. <https://doi.org/10.32362/2410-6593-2024-19-5-462-478>

RESEARCH ARTICLE

Analysis of the ion mobility spectra of chloroacetophenone, tris(2-chloroethyl)amine, and methanethiol

Daria A. Aleksandrova^{1, 3, ✉}, Tatiana B. Melamed¹, Elena P. Baberkina¹, Ekaterina S. Osinova¹, Lidiya A. Luzenina¹, Artem A. Kaplin¹, Roman V. Yakushin¹, Aleksey E. Kovalenko¹, Grigory V. Tsaplin¹, Yuri B. Sinkevich¹, Anatoliy A. Fenin¹, Julia R. Shaltaeva², Vladimir V. Belyakov², Aleksey O. Shablya³, Andrey G. Sazonov³

¹Mendeleev University of Chemical Technology of Russia, Moscow, 125047 Russia

²National Research Nuclear University "MEPHI," Moscow, 115230 Russia

³Modus, Moscow, 117638 Russia

✉ Corresponding author, e-mail: dasha-25.2012@yandex.ru

Abstract

Objectives. To determine the ion mobilities of chloroacetophenone, tris(2-chloroethyl)amine, and methanethiol; the structure of ions corresponding to characteristic signals; the detection limits of chloroacetophenone, tris(2-chloroethyl)amine, and methanethiol with the Kerber-T ion drift detector and the Segment automatic stationary gas detector.

Methods. Ion mobility spectrometry was used in order to determine the ion mobilities and detect analytes. The enthalpies of reactions of ion formation were calculated using the ORCA 4.1.1 software by means of the B3LYP density functional method with the 6-31G(d,p) basis set.

Results. The ion mobilities of chloroacetophenone, tris(2-chloroethyl)amine, and methanethiol were determined. A method for recording ion mobility spectra and their mathematical processing was developed. The dependencies of the change in ion mobility spectra on the analyte concentration were also studied. Possible mechanisms were proposed for the formation of the ion mobility spectra observed, in accordance with the ionization features of chloroacetophenone, tris(2-chloroethyl)amine, and methanethiol. The enthalpies of ion formation were calculated. The ionization schemes of the compounds were shown. The generalized results of experimental studies were presented, as were the features of compound identification taking into account the structure of the spectra, the concentrations of substances, and the detection conditions.

Conclusions. Characteristic signals of chloroacetophenone, tris(2-chloroethyl)amine, and methanethiol were identified. All studied hazardous substances can be detected with an ion mobility spectrometer at concentrations at the ppm level. The following detection limits of the substances were determined with the Segment gas detector: chloroacetophenone, 245 mg/m³; tris(2-chloroethyl)amine, 0.01 mg/m³; and methanethiol, 0.8 mg/m³.

Keywords

ion mobility spectrometry, characteristic signal, ionization, detection, chloroacetophenone, methanethiol, tris(2-chloroethyl)amine

Submitted: 29.03.2023

Revised: 03.04.2024

Accepted: 13.09.2024

For citation

Aleksandrova D.A., Melamed T.B., Baberkina E.P., Osinova E.S., Luzenina L.A., Kaplin A.A., Yakushin R.V., Kovalenko A.E., Tsaplin G.V., Sinkevich Yu.B., Fenin A.A., Shaltaeva Ju.R., Belyakov V.V., Shablya A.O., Sazonov A.G. Analysis of the ion mobility spectra of chloroacetophenone, tris(2-chloroethyl)amine, and methanethiol. *Tonk. Khim. Tekhnol. = Fine Chem. Technol.* 2024;19(5): 462–478. <https://doi.org/10.32362/2410-6593-2024-19-5-462-478>

ВВЕДЕНИЕ

В настоящее время во всем мире приборы, работающие по принципу регистрации величины ионной подвижности, используют в основном для обнаружения боевых отравляющих веществ, наркотических средств и взрывчатых веществ [1, 2]. Кроме этого, детекторы, работающие по методу спектрометрии

ионной подвижности, успешно адаптированы для промышленных, технологических и экологических исследований, включая анализ качества пищевых продуктов и контроль состава воздуха [3–7].

Главным преимуществом приборов, работающих на принципе спектрометрии ионной подвижности, по сравнению с хроматографией и масс-спектрометрией является быстрота проведения анализа.

Средний интервал времени получения достоверного профиля спектра ионной подвижности исследуемого соединения составляет от 3 до 10 с. Ионно-дрейфовый детектор «Кербер-Т»¹ (ИДД «Кербер-Т») и газосигнализатор автоматический стационарный «Сегмент»² (ГАС «Сегмент») российского производителя ООО «Модус» портативны, работают при атмосферном давлении и не обладают громоздкими системами для создания вакуума.

В данной работе не ставилась задача исследования влияния мешающих факторов, в том числе наличия механических и иных видов примесей в анализируемом воздухе. Важным и практически реализуемым является оптимизация конструкции ГАС «Сегмент» для использования спектрометра ионной подвижности в широком диапазоне температур, в том числе в зимнее время при отрицательных температурах. Для удаления частиц пыли и грязи предусматривается дополнительная защита газового канала, предотвращающая задувание воздуха с фильтром грубой очистки на входном канале забора пробы.

В настоящее время ООО «Модус» успешно работает в направлении импортозамещения и разработки приборов экспресс-контроля опасных химических веществ для предотвращения применения аварийно-химически опасных веществ (АХОВ) при террористических действиях. Также в последнее время предъявляются повышенные требования к обеспечению безопасности на промышленных объектах для контроля состава воздуха рабочей зоны и в местах массового скопления людей, для чего необходимо детектирование более широкого круга соединений.

В литературе описано детектирование веществ ряда АХОВ, однако основное внимание исследователей приковано к фосфорорганическим соединениям, ипритам [8]. ООО «Модус» расширяет базу данных, в связи с чем и была проведена данная работа.

Все исследуемые объекты обладают высокотоксичными свойствами и относительно доступны. Метилмеркаптан широко применяется в органическом синтезе пестицидов и гербицидов, используется в качестве одорирующей добавки природного газа. Трис(2-хлорэтил)амин обладает кожно-нарывным действием и на сегодняшний день это единственный из азотистых ипритов, который сохранил свое значение в качестве боевого отравляющего вещества. Хлорацетофенон применяется в газовых баллончиках как «полицейский» газ. Подразделения Министерства внутренних дел

Российской Федерации (МВД РФ) имеют в распоряжении различные виды аэрозольных распылителей, содержащих хлорацетофенон. Изучение данных соединений необходимо для своевременного определения и устранения последствий распыления в воздух и смешивания с водой этих веществ.

ЭКСПЕРИМЕНТАЛЬНАЯ ЧАСТЬ

Исследования проводились на ИДД «Кербер-Т» и ГАС «Сегмент» производства ООО «Модус» (Россия). Определяющие параметры приборов приведены в табл. 1.

ИДД «Кербер-Т» уже получил широкое распространение на рынке досмотрового оборудования. ГАС «Сегмент» также интенсивно внедряется органами МВД, Федеральной службы охраны и Министерства обороны Российской Федерации для детектирования АХОВ, поэтому было необходимо провести на обоих приборах сравнительные исследования веществ, которые необходимы для расширения базы данных оборудования.

Спектры ионной подвижности получали при атмосферном давлении, в качестве дрейфового газа использовали окружающий воздух. Возможность регистрации результатов измерений предусмотрена программным обеспечением приборов. В результате получали текстовый файл, содержащий данные об обнаруженных целевых веществах и времени дрейфа, на основе которых создавалась ионограмма.

Для исследования использовали баллон метилмеркаптана со сжиженным газом (*Merck*, Германия). Газовый баллон с этилмеркаптаном, разбавленном в сухом воздухе, поставляло ООО «ГАЗ-АНАЛИТИК» (Россия). Сероводород получали при извлечении из морозильной камеры сульфида алюминия и его разложении до сероводорода при влажности от 20 до 55%. Трис(2-хлорэтил)амин был синтезирован для исследований, произведен контроль чистоты полученного реактива методом газовой хроматографии с масс-спектрометрическим детектированием, получено соединение с содержанием образца не менее 99%. Также для исследования были использованы хлорацетофенон, бромацетофенон и ацетофенон (*Sigma-Aldrich*, США) чистотой не менее 98%.

Пробы для приготовления растворов взвешивали на весах марки AND GR-120 производства A&D (Япония) с дискретностью 0.0001 г.

¹ Портативный ионно-дрейфовый детектор «Кербер-Т». URL: <http://www.analizator.ru/production/ims/kerber-t/>. Дата обращения 27.01.2023. / Kerber-T portable ion drift detector. URL: <http://www.analizator.ru/production/ims/kerber-t/>. Accessed January 27, 2023.

² Газосигнализатор автоматический стационарный «Сегмент». URL: <https://www.analizator.ru/production/ims/segment/>. Дата обращения 27.01.2023. / Segment automatic stationary gas detector. URL: <https://www.analizator.ru/production/ims/segment/>. Accessed January 27, 2023.

Таблица 1. Технические характеристики ИДД «Кербер-Т» и ГАС «Сегмент»

Table 1. Specifications of the Kerber-T ion drift detector (IDD) and Segment automatic stationary gas detector (ASGD)

Характеристика Characteristic	ИДД «Кербер-Т» Kerber-T IDD	ГАС «Сегмент» Segment ASGD
Диапазон детектирования малолетучих органических веществ по 2,4,6-тринитротолуолу (ТНТ), г Detection range of low-volatile organic substances for 2,4,6-trinitrotoluene (TNT), g	От $1.0 \cdot 10^{-11}$ до $2.0 \cdot 10^{-7}$ From $1.0 \cdot 10^{-11}$ to $2.0 \cdot 10^{-7}$	—
Предел обнаружения малолетучих органических веществ по ТНТ Detection limit of low-volatile organic substances for TNT – по твердым частицам, г – for solid particles, g – по парам, г/см ³ – for vapor, g/cm ³	Не более $1.0 \cdot 10^{-10}$ No more than $1.0 \cdot 10^{-10}$ Не более $5.0 \cdot 10^{-13}$ No more than $5.0 \cdot 10^{-13}$	—
Порог срабатывания для контролируемых веществ при нормальных климатических условиях, мг/м ³ Alarm threshold for controlled substances under normal climatic conditions, mg/m ³ – по зарину – for sarin – по зоману – for soman – по веществу типа VX – for VX-type substance – по хлору – for chlorine – по сероводороду – for hydrogen sulfide	—	$1.0 \cdot 10^{-2} \pm 30\%$ $1.0 \cdot 10^{-2} \pm 30\%$ $3.0 \cdot 10^{-3} \pm 30\%$ $1.0 \pm 30\%$ $10.0 \pm 30\%$
Способ ионизации Ionization method	Импульсный коронный разряд Pulsed corona discharge	Импульсный коронный разряд Pulsed corona discharge
Температура дрейфовой трубки, °C Drift tube temperature, °C	100	100
Время обнаружения и идентификации для всех обнаруживаемых веществ, с Time of detection and identification for all detectable substances, s	Не более 5 No more than 5	Не более 5 No more than 5
Вероятность ложного срабатывания, % Probability of false alarm, %	Не более 1 No more than 1	Не более 1 No more than 1
Время очистки детектора при загрязнении целевыми веществами в пределах диапазона детектирования, мин Detector cleaning time in the event of contamination with target substances within detection range, min	Не более 3 No more than 3	Не более 3 No more than 3

Для приготовления растворов и нанесения на пробоотборную салфетку 1–10 мкл растворов необходимых концентраций использовали дозатор марки Ленпипет Лайт (*Thermo Scientific*, Россия). В качестве пробоотборной салфетки использовали фольгу толщиной 11–15 мкм, предварительно отожженную в печи ИДД «Кербер-Т» при 180°C.

Расчеты энтальпий реакций проводили в программе ORCA 4.1.1 (*FacTs GmbH*, Германия) методом функционала плотности B3LYP³ с набором базисных функций 6-31G(d,p).

Специфика спектрометрии ионной подвижности

Метод спектрометрии ионной подвижности основан на ионизации молекул исследуемого вещества при атмосферном давлении. Сначала в разрядной камере образуются реактант-ионы, концентрация которых существенно превышает концентрацию определяемых веществ. При попадании в прибор целевых веществ реактант-ионы передают молекулам заряд по механизму химической ионизации при атмосферном давлении [9].

Образование ионов в области ионизации

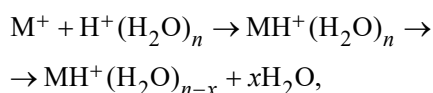
Образование реактант-ионов в отрицательной полярности при воздействии коронного разряда происходит в результате резонансного захвата электрона нейтральными молекулами, например, молекулами кислорода. Ион-молекулярные реакции с молекулами образца, приводящие к образованию продукт-ионов, могут протекать по следующей схеме:



где M — образец, $O_2^-(H_2O)_n$ — реактант-ион, $MO_2^-(H_2O)_{n-x}$ — продукт-ион, xH_2O — вода.

Этот продукт-ион может жить достаточно долго, чтобы сигнал его спектра проявился в спектре ионной подвижности, а может и претерпеть дальнейшие превращения, приводящие, например, к иону M^- .

Молекулы исследуемого вещества при столкновении с реактант-ионами в положительной полярности образуют кластерные ионы, которые превращаются в более стабильные кластерные гидратированные ионы, отщепляя молекулы воды:



где M — молекула исследуемого соединения, $H^+(H_2O)_n$ — реактант-ион, $MH^+(H_2O)_n$ — кластерный ион, $MH^+(H_2O)_{n-x}$ — ион исследуемого соединения.

Образовавшийся в этом процессе продукт-ион называют «протонированным мономером». Возможно образование протонированного димера $M_2H^+(H_2O)_n$ и других молекулярных ионов. Количество молекул воды в кластере варьируется от 1 до 3 в зависимости от природы соединения [10, 11].

Ионизированные молекулы различных веществ имеют разную скорость движения в дрейфовой камере в зависимости от их заряда, массы и эффективного сечения образовавшегося иона. Молекулярные ионы разных соединений отличаются временем прибытия τ_d к коллектору, что позволяет определить их природу. Это время пропорционально длине дрейфовой камеры L (см), обратно пропорционально градиенту электрического поля E и рассчитывается по формуле (1):

$$\tau_d = \frac{1}{K} \cdot \frac{L}{E}, \quad (1)$$

где K — коэффициент ионной подвижности, $cm^2/(V \cdot s)$.

Ионная подвижность зависит от температуры и колебаний давления. Для сравнения значений ионной подвижности, полученных в разных условиях, величины K приводят к нормальным условиям (2):

$$K_0 = \frac{KP}{760} \cdot \frac{273}{T}, \quad (2)$$

где T — температура (К) и P — давление (мм рт. ст.) в газовой атмосфере, в которой движутся ионы. K_0 называют приведенной подвижностью (или приведенным коэффициентом подвижности). В данной работе оперировали значениями приведенной ионной подвижности. Результаты представлены в виде ионограмм с вычитанием фонового спектра.

Методика работы

В процессе работы на ИДД «Кербер-Т» и ГАС «Сегмент» была разработана методика регистрации и определения характеристических значений ионной подвижности. Методика математической обработки спектров подробно описана в опубликованных ранее работах [12, 13].

Спектры ионной подвижности получали при атмосферном давлении, в качестве дрейфового газа использовали окружающий воздух.

³ B3LYP — 3-параметрический обменно-корреляционный функционал Бекке–Ли–Янга–Парра. / B3LYP is the Becke, 3-parameter, Lee–Yang–Parr exchange–correlation functional.

Трис(2-хлорэтил)амин исследовали в различных модификациях: чистое вещество, гидрохлорид и раствор гидрохлорида в воде.

Микрошприцом Agilent производства *Agilent Technologies* (США) отбирали 1, 2, 5, 8, 12 мкл насыщенного пара чистого трис(2-хлорэтил)амин в колбы объемом 25 мл.

Детектирование хлорацетофенона проводили путем отбора насыщенных паров и разбавления комнатным воздухом. Двухкомпонентным шприцом отбирали от 2 до 10 мл насыщенного пара хлорацетофенона в колбы объемом 35 мл. Концентрация насыщенного пара в газовой фазе рассчитывалась по уравнению Менделеева–Клапейрона:

$$pV = \frac{m}{M} \cdot RT,$$
 (3)

где p — давление насыщенного пара, V — объем, m — масса вещества, M — молекулярная масса, R — газовая постоянная, T — комнатная температура в К.

Рассчитанные по формуле (3) концентрации аналитов представлены в табл. 2.

Таблица 2. Концентрации трис(2-хлорэтил)амин в газовой фазе

Table 2. Concentrations of tris(2-chloroethyl)amine in the gas phase

№	Объем насыщенного пара, мкл Saturated vapor volume, μL	Объем колбы, мл Flask volume, mL	Концентрация, мг/м³ Concentration, mg/m³
1	1	25	0.005
2	2	25	0.01
3	5	25	0.025
4	8	25	0.04
5	12	25	0.06

Чувствительность для гидрохлорида меньше, чем для чистого вещества, поэтому гидрохлорид измеряли путем нагревания пробоотборной салфетки с веществом на ИДД «Кербер-Т».

Концентрацию аналита C рассчитывали по формуле (4):

$$C = \frac{C_{н.п.} \cdot V_{н.п.}}{V_k},$$
 (4)

где $C_{н.п.}$ — концентрация насыщенного пара, $V_{н.п.}$ — объем насыщенного пара, V_k — объем колбы.

Рассчитанные концентрации аналитов для ГАС «Сегмент» представлены в табл. 3.

Таблица 3. Концентрации хлорацетофенона, полученные на ГАС «Сегмент» в газовой фазе

Table 3. Chloroacetophenone concentrations measured with the Segment ASGD in the gas phase

№	Объем насыщенного пара, мкл Saturated vapor volume, μL	Объем колбы, мл Flask volume, mL	Концентрация, мг/м³ Concentration, mg/m³
1	4	35	485
2	5	35	600
3	6	35	725
4	8	35	970
5	10	35	1200

На ИДД «Кербер-Т» наблюдалась сорбция вещества при пассивном заборе пробы из колбы. Поэтому пробу вводили из шприца, под давлением вещество проходило через газовый канал, и определялся пик вещества. Концентрацию рассчитывали из предположения разбавления пробы входным потоком воздуха F объемом 500 мл/мин по формуле (5):

$$C = \frac{C_{н.п.} \cdot V_{н.п.}}{F \cdot t},$$
 (5)

где C — концентрация; $C_{н.п.}$ — концентрация вещества насыщенного пара; $V_{н.п.}$ — объем насыщенного пара; F — входной поток прибора; t — время ввода пробы.

Рассчитанные по формуле (5) концентрации аналитов для ИДД «Кербер-Т» представлены в табл. 4.

Таблица 4. Концентрации хлорацетофенона, полученные на ИДД «Кербер-Т» в газовой фазе

Table 4. Chloroacetophenone concentrations measured with the Kerber-T IDD in the gas phase

№	Объем насыщенного пара, мкл Saturated vapor volume, μL	Время ввода пробы, с Sample injection time, s	Концентрация, мг/м³ Concentration, mg/m³
1	3	5	300
2	4	5	400
3	5	5	500

Измерения метилмеркаптана проводили следующим образом. В колбу № 1 объемом 50 мл набрали насыщенные пары метилмеркаптана из газового баллона. Концентрацию насыщенных паров рассчитали

по уравнению Менделеева–Клапейрона. Отобрали 1 мл насыщенных паров в колбу № 2 объемом 500 мл; таким образом, разбавили насыщенные пары в 500 раз. Для получения конечных концентраций использовали пары из колбы № 2.

Далее микрошприцом Agilent отбирали 5 и 10 мкл насыщенного пара, инсулиновым шприцом отбирали 0.1, 0.25, 0.5, 1 мл насыщенного пара в колбы объемом 25 мл.

Рассчитанные концентрации аналитов по формуле (3) представлены в табл. 5.

Таблица 5. Концентрации метилмеркаптана в газовой фазе

Table 5. Methanethiol concentrations in the gas phase

№	Объем насыщенного пара колбы № 2, мкл Saturated vapor volume in flask 2, μL	Объем колбы, мл Flask volume, mL	Концентрация, $\text{мг}/\text{м}^3$ Concentration, mg/m^3
1	5	25	0.8
2	10	25	1.6
3	100	25	16
4	250	25	40
5	500	25	80
6	1000	25	160

Стеклянную колбу, содержащую воздушную смесь с определенной концентрацией аналита, помещали у пробоотборного канала спектрометра ионной подвижности на 5 с, в режиме анализа

газовой фазы прибор автоматически отбирал содержимое колбы.

Измерения проводили при изменении концентрации аналита от $0.01 \text{ мг}/\text{м}^3$ до концентрации, соответствующей давлению насыщенного пара аналита при температуре $20\text{--}25^\circ\text{C}$. В работе представлены спектры для оптимального диапазона концентраций детектирования.

РЕЗУЛЬТАТЫ И ИХ ОБСУЖДЕНИЕ

Исследование хлорацетофенона

Была получена серия спектров хлорацетофенона на ИДД «Кербер-Т» при различных концентрациях и проведена их математическая обработка с целью приблизительной оценки относительных количеств ионов (рис. 1). В отрицательной полярности наблюдается увеличение амплитуды одного основного пика $2.709 \text{ см}^2/(\text{В}\cdot\text{с})$ при увеличении концентрации образца. В положительной полярности при увеличении концентрации увеличиваются амплитуды всех наблюдаемых сигналов, хотя амплитуда сигнала с подвижностью 1.475 более стабильна, что может говорить о кластерном характере строения иона.

Серия спектров хлорацетофенона, полученных на ГАС «Сегмент», представлена на рис. 2.

По данным методикам и условиям измерения нижний порог обнаружения хлорацетофенона на ИДД «Кербер-Т» соответствует $300 \text{ мг}/\text{м}^3$, на ГАС «Сегмент» $245 \text{ мг}/\text{м}^3$. Перспективно использование нескольких пиков для идентификации в обеих полярностях одновременно: $1.708 \text{ см}^2/(\text{В}\cdot\text{с})$ и $1.475 \text{ см}^2/(\text{В}\cdot\text{с})$ с отклонением в 0.7% в положительной

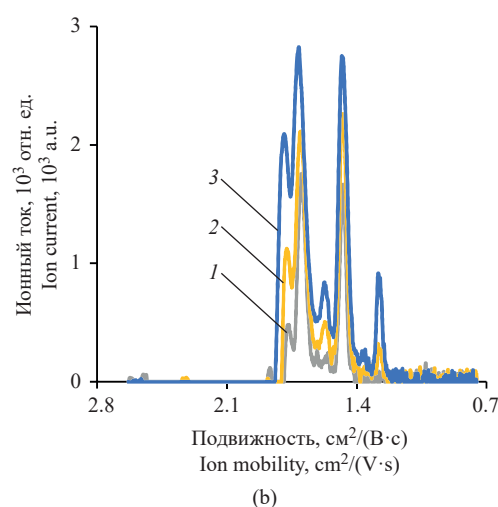
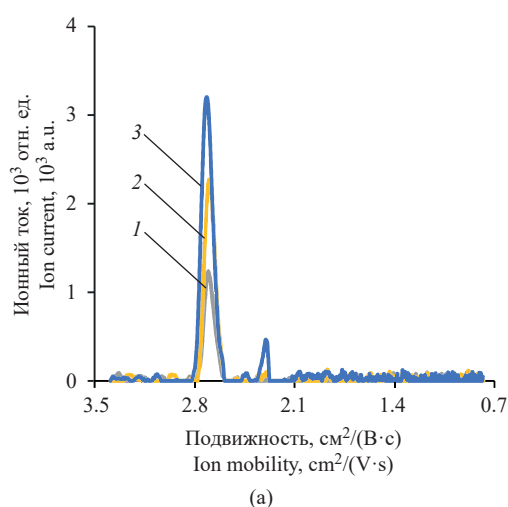


Рис. 1. Ионограммы хлорацетофенона, полученные на ИДД Кербер-Т:

(а) в отрицательной полярности, (б) в положительной полярности.

Концентрации: (1) $300 \text{ мг}/\text{м}^3$ (серая кривая), (2) $400 \text{ мг}/\text{м}^3$ (желтая кривая), (3) $500 \text{ мг}/\text{м}^3$ (синяя кривая)

Fig. 1. Ion mobility spectra of chloroacetophenone recorded with Kerber-T IDD in (a) negative and (b) positive polarity at concentrations of (1) $300 \text{ mg}/\text{m}^3$ (grey line), (2) $400 \text{ mg}/\text{m}^3$ (yellow line), and (3) $500 \text{ mg}/\text{m}^3$ (dark blue line)

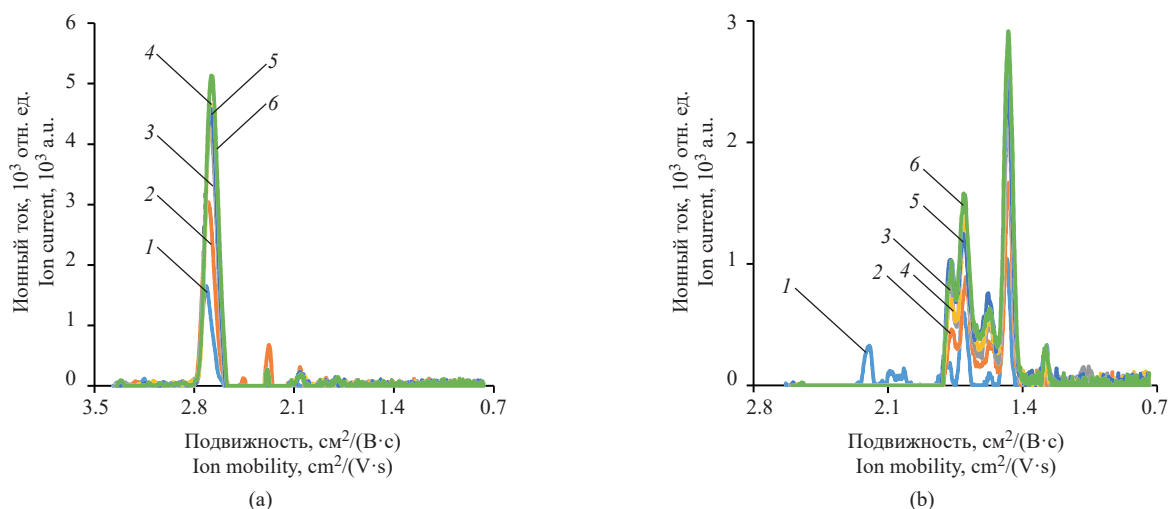


Рис. 2. Ионограммы хлорацетофенона, полученные на ГАС «Сегмент»:

(а) в отрицательной полярности, (б) в положительной полярности.

Концентрации: (1) 245 мг/м³ (голубая кривая), (2) 485 мг/м³ (оранжевая кривая), (3) 600 мг/м³ (серая кривая), (4) 725 мг/м³ (желтая кривая), (5) 970 мг/м³ (синяя кривая), (6) 1200 мг/м³ (зеленая кривая)

Fig. 2. Ion mobility spectra of chloroacetophenone recorded with the Segment ASGD in (a) negative and (b) positive polarity at concentrations of (1) 245 mg/m³ (blue line), (2) 485 mg/m³ (orange line), (3) 600 mg/m³ (gray line), (4) 725 mg/m³ (yellow line), (5) 970 mg/m³ (dark blue line), and (6) 1200 mg/m³ (green line)

полярности и $2.650 \text{ cm}^2/(\text{V}\cdot\text{s})$ с отклонением 2.5% в отрицательной полярности.

Было проведено сравнение спектров ионной подвижности хлорацетофенона, ацетофенона и бромацетофенона, полученных на ИДД «Кербер-Т», для установления строения ионов (рис. 3).

В отрицательной полярности наблюдается по одному пику для галогенсодержащих соединений, подвижности пиков хлорацетофенона и бромацетофенона соответствуют хлорид-иону ($2.650 \text{ cm}^2/(\text{V}\cdot\text{s})$)

и бромид-иону ($2.485 \text{ cm}^2/(\text{V}\cdot\text{s})$) соответственно. В положительной полярности для ацетофенона наблюдается 3 пика 1.706 , 1.578 и $1.300 \text{ cm}^2/(\text{V}\cdot\text{s})$, которые по подвижности соответствуют пикам хлор- и бромацетофенона, что говорит об одинаковом характере протонирования и, возможно, о том, что вещества ионизируются после отщепления галогенов. Однако для хлорацетофенона наблюдаются еще два пика 1.776 и $1.478 \text{ cm}^2/(\text{V}\cdot\text{s})$, которые вероятно относятся к протонированным хлорпроизводным

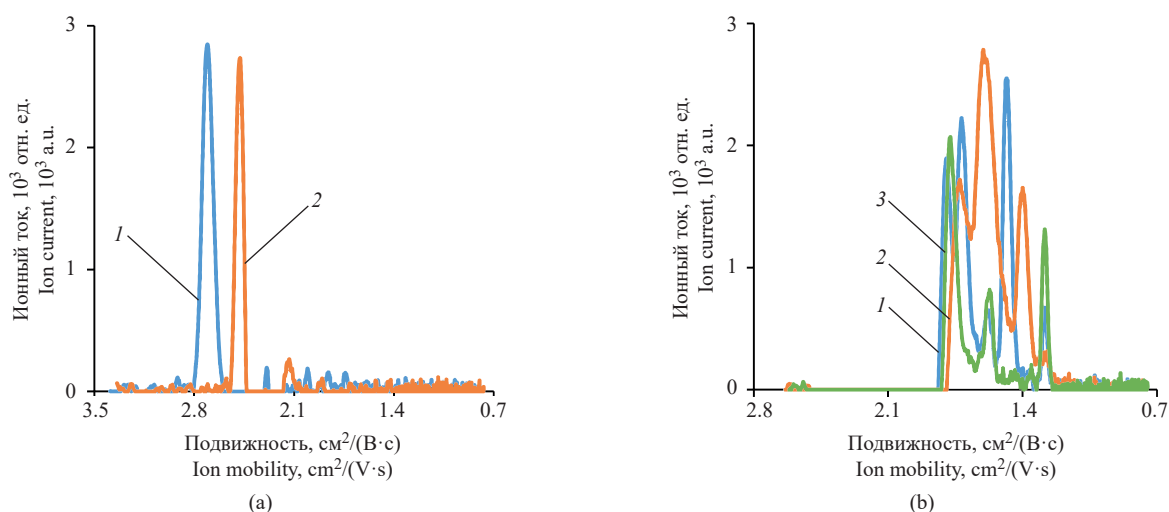


Рис. 3. Сравнительные ионограммы (1) хлорацетофенона (голубая кривая), (2) бромацетофенона (оранжевая кривая) и (3) ацетофенона (зеленая кривая) в отрицательной полярности (а) и в положительной полярности (б)

Fig. 3. Comparison of the ion mobility spectra of (1) chloroacetophenone (blue line), (2) bromoacetophenone (orange line), and (3) acetophenone (green line) in (a) negative and (b) positive polarity

ионам. Для бромацетофенона также наблюдается пик $1.397 \text{ см}^2/(\text{В} \cdot \text{с})$, который относится к протонированному бромпроизводному иону.

Были рассчитаны энтальпии реакций образующихся ионов в программе ORCA 4.1.1 методом функционала плотности B3LYP с набором базисных функций 6-31G(d,p) (табл. 6).

Наиболее энергетически выгодно образование мономерного иона с отщеплением молекулы воды. Однако образование иона с молекулой воды также возможно. Димер хлорацетофенона легко образуется. Тримеры имеют цепочечное строение, согласно расчетам они нестабильны и легко делятся на димер и мономер при столкновении с любой молекулой [12, 13]. Таким образом, наиболее вероятно присутствие сигналов мономерных и димерных ионов в спектре ионной подвижности.

Исследование трис(2-хлорэтил)амин

Спектры трис(2-хлорэтил)амин, полученные на ИДД «Кербер-Т», представлены на рис. 4.

В отрицательной полярности наблюдается нестабильность для сигналов хлорид-иона. В положительной полярности есть ярко выраженный характеристический сигнал с подвижностью $1.512 \text{ см}^2/(\text{В} \cdot \text{с})$, отнесенный к протонированию по атому азота. В результате проведенных измерений была определена оптимальная концентрация детектирования, равная 0.04 мг/м^3 .

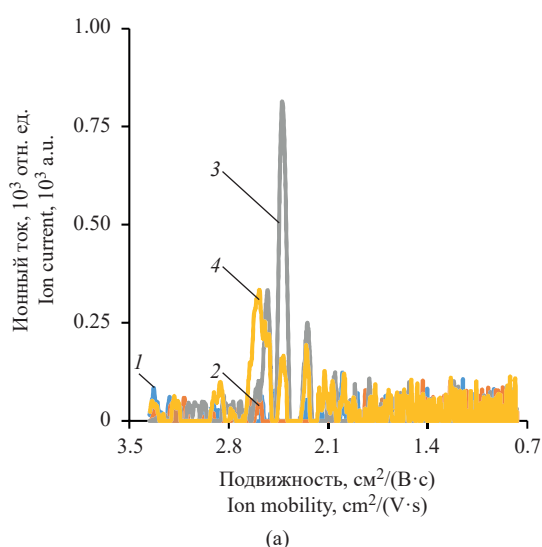


Таблица 6. Энтальпии образования ионов хлорацетофенона

Table 6. Enthalpies of formation of chloroacetophenone ions

Структура молекулярного иона Structure of molecular ion	Энтальпия образования, кДж/моль Enthalpy of formation, kJ/mol
	-148.9
	-85.2
	-88.3

Серия спектров образцов трис(2-хлорэтил)амин, полученных на ГАС «Сегмент», представлена на рис. 5.

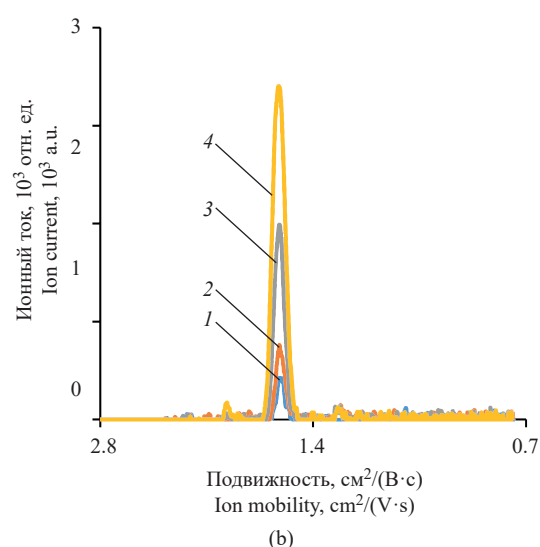


Рис. 4. Ионограммы трис(2-хлорэтил)амин, полученные на ИДД «Кербер-Т»:

(а) в отрицательной полярности, (б) в положительной полярности.

Концентрации: (1) 0.01 мг/м^3 (голубая кривая), (2) 0.025 мг/м^3 (оранжевая кривая), (3) 0.04 мг/м^3 (серая кривая), (4) 0.06 мг/м^3 (желтая кривая)

Fig. 4. Ion mobility spectra of tris(2-chloroethyl)amine recorded with Kerber-T IDD in (a) negative and (b) positive polarity at concentrations of (1) 0.01 мг/м^3 (blue line), (2) 0.025 мг/м^3 (orange line), (3) 0.04 мг/м^3 (gray line), and (4) 0.06 мг/м^3 (yellow line)

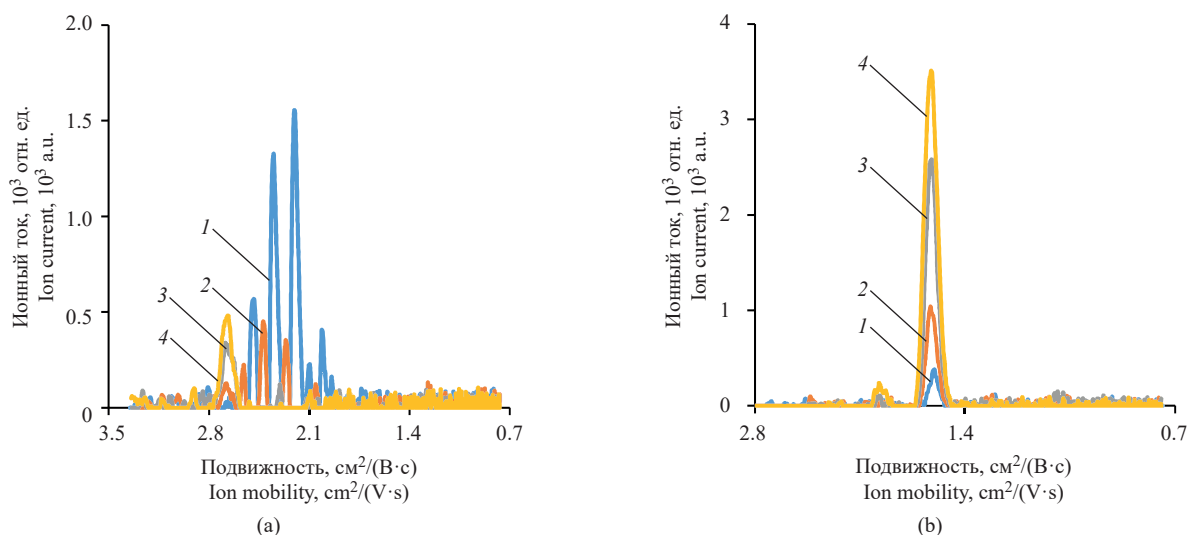


Рис. 5. Ионограммы трис(2-хлорэтил)амин, полученные на ГАС «Сегмент»:

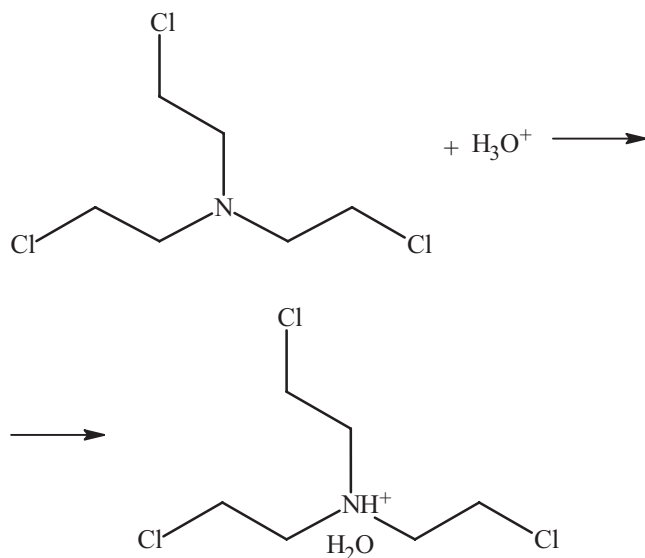
(а) в отрицательной полярности, (б) в положительной полярности.

Концентрации: (1) 0.01 мг/м³ (голубая кривая), (2) 0.025 мг/м³ (оранжевая кривая), (3) 0.04 мг/м³ (серая кривая), (4) 0.06 мг/м³ (желтая кривая)

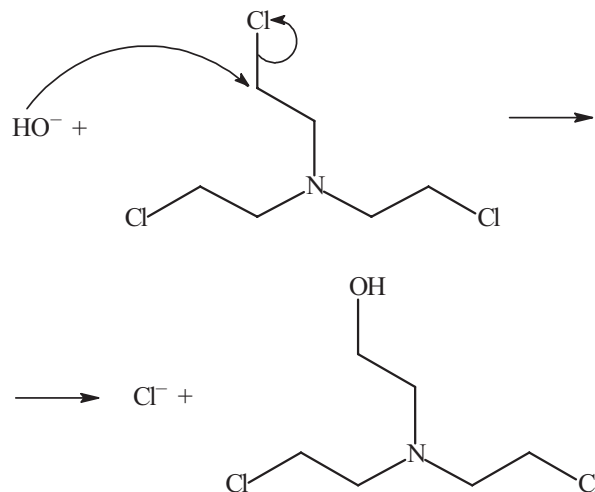
Fig. 5. Ion mobility spectra of tris(2-chloroethyl)amine recorded with the Segment ASGD in (a) negative and (b) positive polarity at concentrations of (1) 0.01 mg/m³ (blue line), (2) 0.025 mg/m³ (orange line), (3) 0.04 mg/m³ (gray line), and (4) 0.06 mg/m³ (yellow line)

В отрицательной полярности наблюдается рост сигнала с подвижностью 2.650 см²/(В·с) с увеличением концентрации, который относится к иону хлороводорода. Также присутствуют другие сигналы хлора и отклонение фоновых пиков, однако они нестабильны. В положительной полярности есть ярко выраженный характеристический сигнал с подвижностью 1.512 см²/(В·с), который соответствует сигналу трис(2-хлорэтил)амин, полученному на ИДД «Кербер-Т».

Ионизация в положительной полярности предполагается по атому азота со следующим механизмом:



Ионизация в отрицательной полярности происходит по атому хлора:



Возможно образование димеров и тримеров хлора, а также ассоциация с молекулами воды по атому водорода.

Трис(2-хлорэтил)амин можно использовать при растворении в воде его гидрохлорида и последующего ввода в системы водоснабжения. Поэтому были проведены исследования растворов гидрохлорида в воде на ИДД «Кербер-Т» (рис. 6): 1 мкл водного раствора наносили на пробоотборную салфетку, дожидались высыхания воды и устанавливали салфетку в прибор.

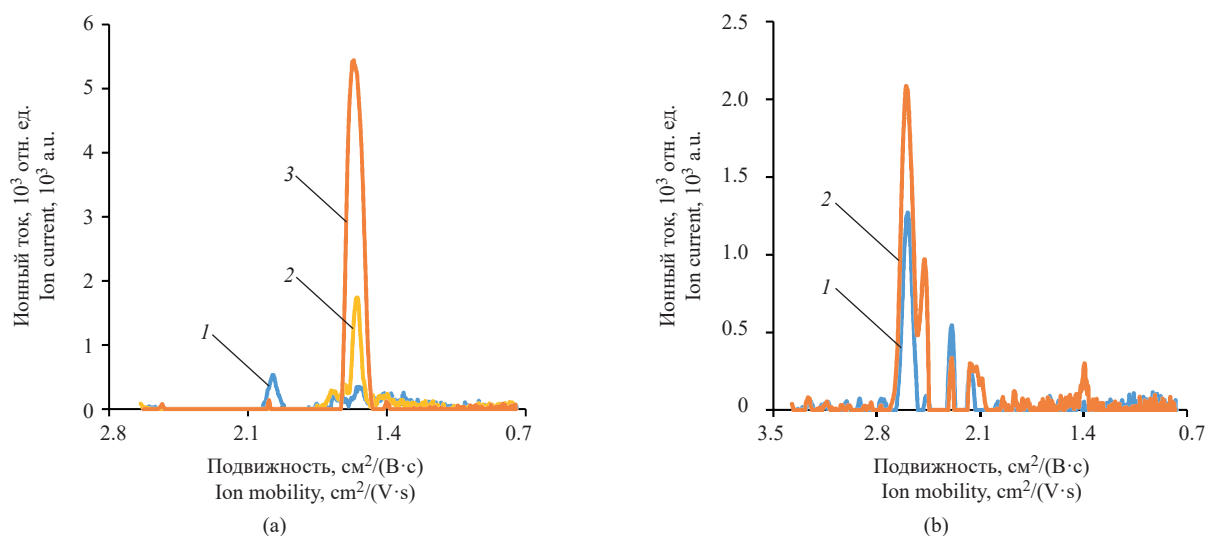


Рис. 6. Ионограммы трис(2-хлорэтил)амин, полученные на ИДД «Кербер-Т»: (а) в отрицательной полярности, (б) в положительной полярности. Массы: (1) 2 нг (голубая кривая), (2) 70 нг (желтая кривая), (3) 200 нг (оранжевая кривая)

Fig. 6. Ion mobility spectra of tris(2-chloroethyl)amine recorded with the Kerber-T IDD in (a) negative and (b) positive polarity at weights of (1) 2 ng (blue line), (2) 70 ng (yellow line), and (3) 200 ng (orange line)

Минимальный предел обнаружения на салфетке составляет 2 нг. При увеличении значений на порядок амплитуда пиков достигает своего максимального значения и далее не увеличивается. Минимальным пределом обнаружения с амплитудой 300 отн. ед. в парах над водным раствором является концентрация раствора 10^{-4} моль/л.

Ионная подвижность в положительной полярности для вещества, его гидрохлорида, паров над

водным раствором и измерениями с салфетки одинакова и составляет $1.512 \text{ cm}^2/(\text{V}\cdot\text{s})$.

Исследование метилмерктана

Серия спектров метилмерктана на ИДД «Кербер-Т» представлена на рис. 7. В отрицательной полярности наблюдается увеличение амплитуды двух основных пиков с подвижностями 2.175 и $2.075 \text{ cm}^2/(\text{V}\cdot\text{s})$ при

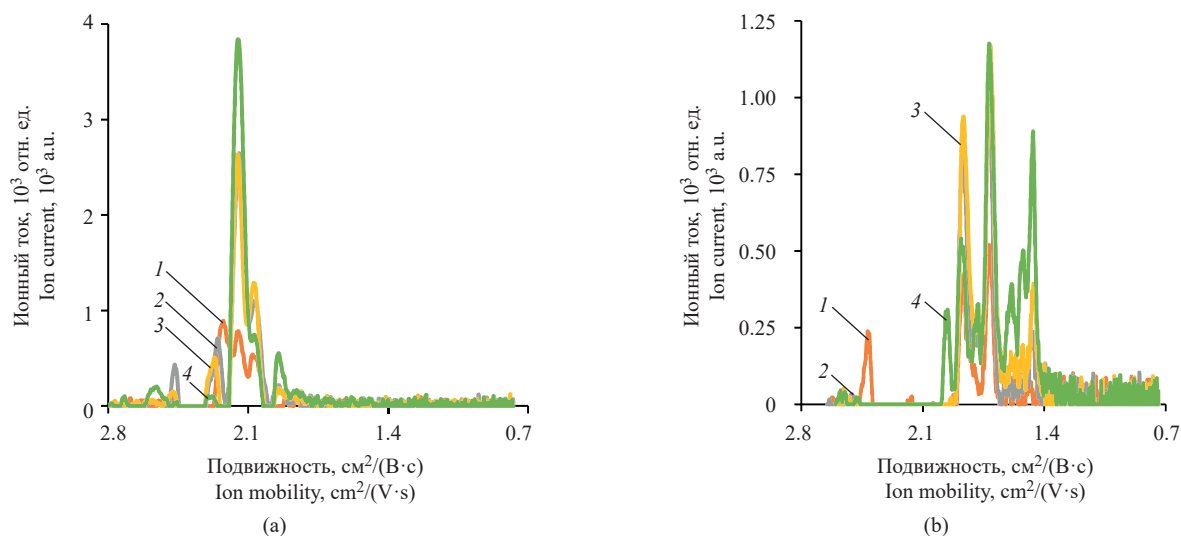


Рис. 7. Ионограммы метилмерктана, полученные на ИДД «Кербер-Т»: (а) в отрицательной полярности, (б) в положительной полярности. Концентрации: (1) 1.6 mg/m^3 (оранжевая кривая), (2) 16 mg/m^3 (серая кривая), (3) 40 mg/m^3 (желтая кривая), (4) 160 mg/m^3 (зеленая кривая)

Fig. 7. Ion mobility spectra of methanethiol recorded with Kerber-T IDD in (a) negative and (b) positive polarity at concentrations of (1) 1.6 mg/m^3 (orange line), (2) 16 mg/m^3 (gray line), (3) 40 mg/m^3 (yellow line), and (4) 160 mg/m^3 (green line)

увеличении концентрации образца. В положительной полярности до концентрации 40 мг/м^3 преобладает сигнал с подвижностью $1.869 \text{ см}^2/(\text{В} \cdot \text{с})$, при увеличении концентрации начинают преобладать сигналы с подвижностями 1.715 и $1.470 \text{ см}^2/(\text{В} \cdot \text{с})$.

Нижний порог обнаружения метилмеркаптана на ИДД «Кербер-Т» соответствует 1.6 мг/м^3 . Для сигнала с подвижностью $2.243 \text{ см}^2/(\text{В} \cdot \text{с})$ не хватает разрешения, он сливается с пиком $2.175 \text{ см}^2/(\text{В} \cdot \text{с})$ и образует один пик. Также наблюдается перетекание от третьего фоновых пика через $2.243 \text{ см}^2/(\text{В} \cdot \text{с})$ к пику $2.175 \text{ см}^2/(\text{В} \cdot \text{с})$. Сложная динамика спектра затрудняет определение метилмеркаптана только по отрицательной полярности. Представляется разумным использование нескольких пиков для идентификации в обеих полярностях одновременно.

Серия спектров метилмеркаптана, полученных на ГАС «Сегмент», представлена на рис. 8.

Измерения метилмеркаптана показали хорошую сходимость сигналов по подвижности и амплитуде пиков. Перспективно использование значения сигнала ионной подвижности $2.150 \text{ см}^2/(\text{В} \cdot \text{с})$ с отклонением в 0.7% в отрицательной полярности, а также сигналов с подвижностями 1.882 и $1.721 \text{ см}^2/(\text{В} \cdot \text{с})$ с отклонением 0.7% в положительной полярности. Сигналы с подвижностями $2.075 \text{ см}^2/(\text{В} \cdot \text{с})$ для отрицательной полярности и $1.470 \text{ см}^2/(\text{В} \cdot \text{с})$ в положительной полярности имеют небольшие амплитуды, поэтому их можно рассматривать как дополнительные аналитические пики.

Было проведено сравнение спектра ионной подвижности сероводорода, метилмеркаптана и этилмеркаптана для установления строения ионов (рис. 9).

В отрицательной полярности наблюдается отдельно стоящий пик с подвижностью $2.900 \text{ см}^2/(\text{В} \cdot \text{с})$ в области легких ионов, для него наиболее вероятно образование HS^- . Также есть 2 сходящихся пика метилмеркаптана и сероводорода с подвижностями 2.243 и $2.150 \text{ см}^2/(\text{В} \cdot \text{с})$ и отдельно стоящий пик этилмеркаптана с подвижностью $2.020 \text{ см}^2/(\text{В} \cdot \text{с})$. Сигнал с подвижностью $2.243 \text{ см}^2/(\text{В} \cdot \text{с})$ может быть обусловлен образованием частицы H-S-S^- при воздействии коронного разряда.

Поскольку в баллоне сухой воздух, а фон комнаты более влажный, то при подключении к прибору воздушной смеси из баллона этилмеркаптана образуется сигнал с подвижностью $2.030 \text{ см}^2/(\text{В} \cdot \text{с})$. Поэтому первый сигнал в положительной полярности в спектре этилмеркаптана не является характерным. На ионограмме метилмеркаптана и этилмеркаптана в положительной полярности определяется пик с подвижностью $1.882 \text{ см}^2/(\text{В} \cdot \text{с})$, соответствующий сигналу сероводорода. В положительной полярности наблюдается ряд пиков с примерно одинаковой периодичностью изменения ионной подвижности, что является основанием для соответствия пиков мономерному и димерному строению ионов метил- и этилмеркаптана.

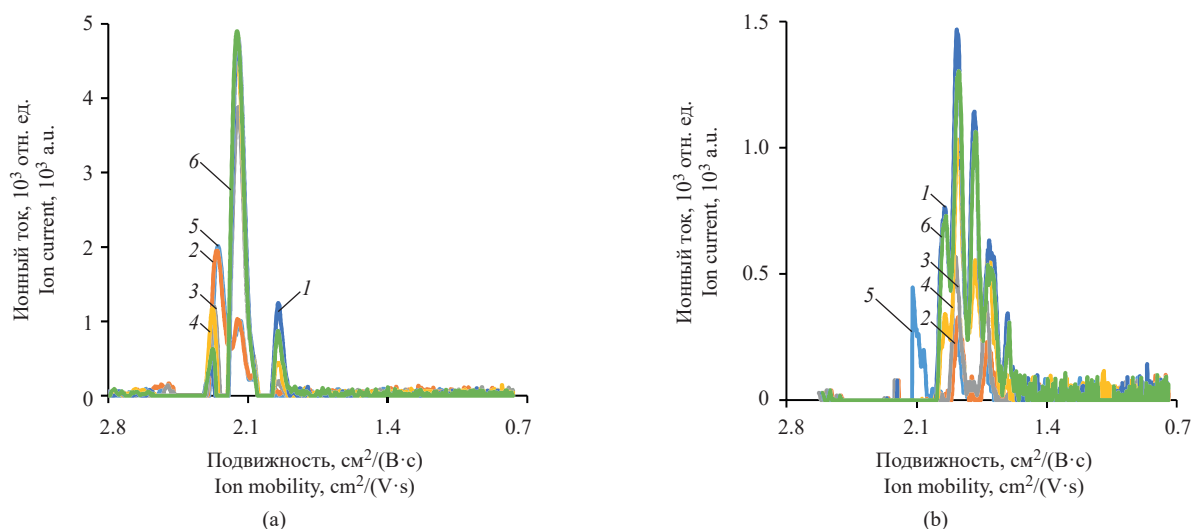


Рис. 8. Ионограммы метилмеркаптана, полученные на ГАС «Сегмент»:

(а) в отрицательной полярности, (б) в положительной полярности.

Концентрации: (1) 0.8 мг/м^3 (синяя кривая), (2) 1.6 мг/м^3 (оранжевая кривая), (3) 16 мг/м^3 (серая кривая), (4) 40 мг/м^3 (желтая кривая), (5) 80 мг/м^3 (голубая кривая), (6) 160 мг/м^3 (зеленая кривая)

Fig. 8. Ion mobility spectra of methanethiol recorded with the Segment ASGD in (a) negative and (b) positive polarity at concentrations of (1) 0.8 мг/м^3 (dark blue line), (2) 1.6 мг/м^3 (orange line), (3) 16 мг/м^3 (gray line), (4) 40 мг/м^3 (yellow line), (5) 80 мг/м^3 (blue line), and (6) 160 мг/м^3 (green line)

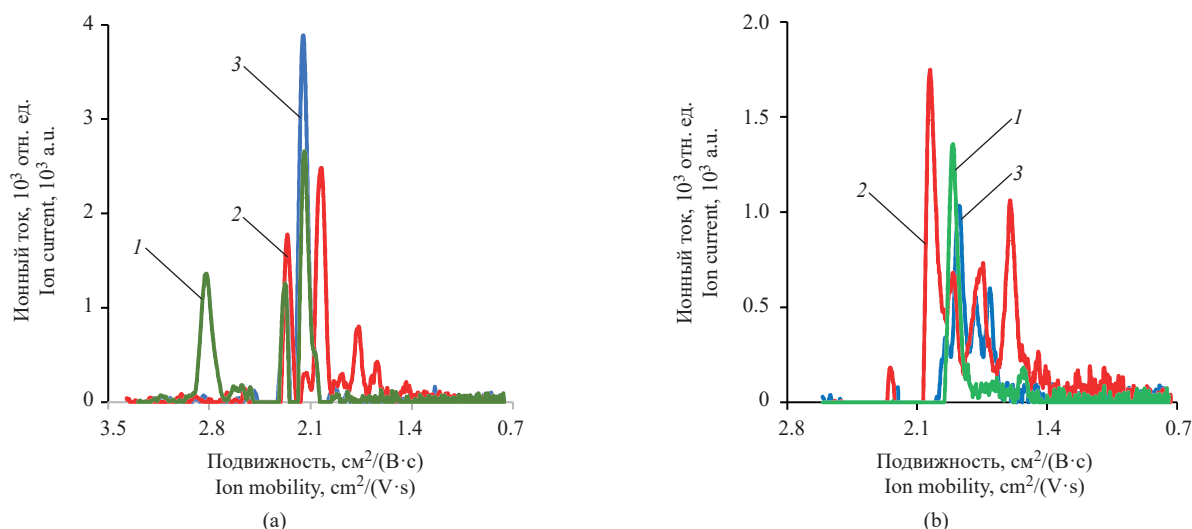


Рис. 9. Сравнительная ионограммы (1) сероводорода (зеленая кривая), (2) метилмеркаптана (красная кривая) и (3) этилмеркаптана (синяя кривая), полученные на ГАС «Сегмент» в отрицательной полярности (а) и в положительной полярности (б)

Fig. 9. Comparison of the ion mobility spectra of (1) hydrogen sulfide (green line), (2) ethanethiol (red line), and (3) methanethiol (dark blue line) recorded with the Segment ASGD in (a) negative and (b) positive polarity

ЗАКЛЮЧЕНИЕ

В результате проведенного исследования были получены спектры ионной подвижности при различных концентрациях паров хлорацетофенона, метилмеркаптана и трис(2-хлорэтил)амин в газовой фазе. Установлено, что значения ионной подвижности для всех исследованных соединений одинаковы как для ИДД «Кербер-Т», так и для ГАС «Сегмент», что позволяет равнозначно использовать приборы для контроля воздуха. Чувствительность ГАС «Сегмент» выше, поскольку предел обнаружения веществ ниже. Все исследованные вещества группы АХОВ могут быть детектированы спектрометрами ионной подвижности при аналитически значимых концентрациях на уровне 10^{-2} мг/м³. Даны рекомендации по использованию сигналов в базе данных веществ ИДД «Кербер-Т» и ГАС «Сегмент». Исследование спектров ионной подвижности и определение структуры ионов было проведено впервые.

Для хлорацетофенона могут быть использованы значения сигнала ионной подвижности $2.650 \text{ см}^2/(\text{В} \cdot \text{с})$ с отклонением в 2.5% в отрицательной полярности, а также сигналов с подвижностями 1.706 и $1.478 \text{ см}^2/(\text{В} \cdot \text{с})$ в положительной полярности с отклонением 0.7%.

Для трис(2-хлорэтил)амин оправдана установка значений ионной подвижности в положительной полярности $1.512 \text{ см}^2/(\text{В} \cdot \text{с})$ с интервалом допуска 0.7% и в отрицательной полярности $2.650 \text{ см}^2/(\text{В} \cdot \text{с})$ с расширенным интервалом допуска не менее 2.5%, т.к. сигнал в данной области спектра сильно зависит от внешних факторов: температуры, влажности и атмосферного давления.

Для метилмеркаптана наиболее характерными сигналами являются значения ионной подвижности $2.150 \text{ см}^2/(\text{В} \cdot \text{с})$ с отклонением в 0.7% в отрицательной полярности, а также сигналов с подвижностями 1.882 и $1.721 \text{ см}^2/(\text{В} \cdot \text{с})$ с отклонением 0.7% в положительной полярности.

Полученные сигналы для соединений позволяют установить детектирование по нескольким пикам одновременно, что может служить хорошим фильтром для ложноположительных срабатываний.

Работа может иметь практическое значение в предотвращении террористических актов, контроле воздуха рабочей зоны на производстве и иных угрозах жизни и здоровью людей. Внесение новых данных по значениям ионной подвижности вышеуказанных веществ в базу данных спектрометров ионной подвижности ИДД «Кербер-Т» и ГАС «Сегмент» способствует замещению импортных аналогов устройств контроля воздуха.

Благодарности

Работа выполнена в рамках программы развития «Приоритет-2030» Российского химико-технологического университета им. Д.И. Менделеева и за счет финансовой поддержки ООО «Модус».

Acknowledgments

The work was performed in the framework of the “Priority-2030” development program of the Mendeleev University of Chemical Technology of Russia and financially supported by Modus.

Вклад авторов

Д.А. Александрова — разработка методологии, проведение экспериментальных исследований, анализ литературных источников, написание и редактирование текста статьи.

Т.Б. Меламер — разработка методологии, проведение экспериментальных исследований, обработка экспериментальных данных, написание и редактирование текста статьи.

Е.П. Баберкина — разработка концепции научной работы, разработка методологии, написание и редактирование текста статьи.

Е.С. Осина — анализ литературных источников, разработка методологии.

Л.А. Лузенина — проведение экспериментальных исследований, анализ литературных источников.

А.А. Каплин — проведение экспериментальных исследований.

Р.В. Якушин — консультация по вопросам методологии и проведения исследования.

А.Е. Коваленко — консультация по вопросам практического применения результатов и проведения исследования.

Г.В. Цаплин — консультация по вопросам методологии, свойствам органических веществ, органическому синтезу.

Ю.Б. Синькевич — консультация по вопросам методологии, свойствам органических веществ, органическому синтезу.

А.А. Фенин — консультация по вопросам методологии и проведения исследования, расчет энтальпий реакций.

Ю.Р. Шалтаева — консультация по вопросам методологии и проведения исследования.

В.В. Беляков — консультация по вопросам методологии и проведения исследования.

А.О. Шабля — определение объектов исследования, обеспечение оборудованием и консультация по приборной базе.

А.Г. Сазонов — определение объектов исследования, обеспечение оборудованием и консультация по приборной базе.

Authors' contributions

D.A. Aleksandrova — methodology development, conducting experiments, analysis of literary sources, writing and editing the text of the article.

T.B. Melamed — methodology development, conducting experiments, processing experimental data, writing and editing the text of the article.

E.P. Baberkina — developing the scientific work concept, methodology development, writing and editing the text of the article.

E.S. Osinova — analysis of literary sources, methodology development.

L.A. Luzenina — conducting experiments, analysis of literary sources.

A.A. Kaplin — conducting experiments.

R.V. Yakushin — offering consultations on methodology and research.

A.E. Kovalenko — offering consultations on the results practical application and research.

G.V. Tsaplin — offering consultations on methodology, properties of organic substances, and organic synthesis.

Yu.B. Sinkevich — offering consultations on methodology, properties of organic substances, and organic synthesis.

A.A. Fenin — offering consultations on methodology and research, calculation of enthalpies of reactions.

Ju.R. Shaltaeva — offering consultations on methodology and research.

V.V. Belyakov — offering consultations on methodology and research.

A.O. Shablya — determination of research objects, provision of equipment, and consultation on the instrument base.

A.G. Sazonov — determination of research objects, provision of equipment, and consultation on the instrument base.

Авторы заявляют об отсутствии конфликта интересов.

The authors declare no conflicts of interest.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Mäkinen M.A., Anttalainen O.A., Sillanpää M.E. Ion mobility spectrometry and its applications in detection of chemical warfare agents. *Anal. Chem.* 2010;82(23):9594–9600. <https://doi.org/10.1021/ac100931n>
2. Yamaguchi S., Asada R., Kishi Sh., Sekioka R., Kitagawa N., Tokita K., Yamamoto S., Seto Y. Detection performance of a portable ion mobility spectrometer with ^{63}Ni radioactive ionization for chemical warfare agents. *Forensic Toxicol.* 2010;28(2):84–95. <https://doi.org/10.1007/s11419-010-0092-z>
3. Hernandez-Mesa M., Ropartz D., Garcia-Campana A.M., Rogniaux H., Dervilly-Pinel G., Le Bizec B. Ion mobility spectrometry in food analysis: Principles, current applications and future trends. *Molecules.* 2019;24(15):2706. <https://doi.org/10.3390/molecules24152706>
4. Jafari M.T., Khayamian T., Shaer V., Zarei N. Determination of veterinary drug residues in chicken meat using corona discharge ion mobility spectrometry. *Anal. Chim. Acta.* 2007;581(1):147–153. <https://doi.org/10.1016/j.aca.2006.08.005>
5. Hashemian Z., Mardihallaj A., Khayamian T. Analysis of biogenic amines using corona discharge ion mobility spectrometry. *Talanta.* 2010;81(3):1081–1087. <https://doi.org/10.1016/j.talanta.2010.02.001>

REFERENCES

1. Mäkinen M.A., Anttalainen O.A., Sillanpää M.E. Ion mobility spectrometry and its applications in detection of chemical warfare agents. *Anal. Chem.* 2010;82(23):9594–9600. <https://doi.org/10.1021/ac100931n>
2. Yamaguchi S., Asada R., Kishi Sh., Sekioka R., Kitagawa N., Tokita K., Yamamoto S., Seto Y. Detection performance of a portable ion mobility spectrometer with ^{63}Ni radioactive ionization for chemical warfare agents. *Forensic Toxicol.* 2010;28(2):84–95. <https://doi.org/10.1007/s11419-010-0092-z>
3. Hernandez-Mesa M., Ropartz D., Garcia-Campana A.M., Rogniaux H., Dervilly-Pinel G., Le Bizec B. Ion mobility spectrometry in food analysis: Principles, current applications and future trends. *Molecules.* 2019;24(15):2706. <https://doi.org/10.3390/molecules24152706>
4. Jafari M.T., Khayamian T., Shaer V., Zarei N. Determination of veterinary drug residues in chicken meat using corona discharge ion mobility spectrometry. *Anal. Chim. Acta.* 2007;581(1):147–153. <https://doi.org/10.1016/j.aca.2006.08.005>
5. Hashemian Z., Mardihallaj A., Khayamian T. Analysis of biogenic amines using corona discharge ion mobility spectrometry. *Talanta.* 2010;81(3):1081–1087. <https://doi.org/10.1016/j.talanta.2010.02.001>

6. Allers M., Schaefer Ch., Ahrens A., Schlottmann F., Hitzemann M., Kobelt T., Zimmermann S., Hetzer R. Detection of volatile toxic industrial chemicals with classical ion mobility spectrometry and high-kinetic energy ion mobility spectrometry. *Anal. Chem.* 2022;94(2):1211–1220. <https://doi.org/10.1021/acs.analchem.1c04397>
7. Смолин Ю.М., Кобцев Б.Н., Новоселов Н.П. Метод спектрометрии ионной подвижности для обнаружения химических загрязнений окружающей среды. *Вестник ТГТУ.* 2009;15(3):620–628.
8. Krylova N., Krylov E., Eiceman G.A., Stone J.A. Effect of moisture on the field dependency of mobility for gas-phase ions of organophosphorus compounds at atmospheric pressure with field asymmetric ion mobility spectrometry. *J. Phys. Chem. A.* 2003;107(19):3648–3654. <https://doi.org/10.1021/jp0221136>
9. Eiceman G.A., Kapras Z., Hill H.H. *Ion Mobility Spectrometry*. 3rd ed. Boca Raton: CRC Press; 2014. 444 p.
10. Borsdorf H., Eiceman G.A. Ion mobility spectrometry: Principles and applications. *Appl. Spectroscopy Rev.* 2006;41(4): 323–375. <https://doi.org/10.1080/05704920600663469>
11. Marquez-Sillero I., Aguilera-Herrador E., Cardenas S., Valcarcel M. Ion-mobility spectrometry for environmental analysis. *TrAC Trends in Analytical Chemistry.* 2011;30(5): 677–690. <https://doi.org/10.1016/j.trac.2010.12.007>
12. Александрова Д.А., Меламед Т.Б., Баберкина Е.П., Коваленко А.Е., Кузнецов Вл. Вит., Кузнецов Вит. Вл., Фенин А.А., Шалтаева Ю.Р., Беляков В.В. Спектрометрия ионной подвижности имидазола и возможности его определения. *Журн. аналит. химии.* 2021;76(11):989–996. <https://doi.org/10.31857/S0044450221110025>
13. Александрова Д.А., Меламед Т.Б., Баберкина Е.П., Фенин А.А., Осина Е.С., Коваленко А.Е., Якушин Р.В., Шалтаева Ю.Р., Беляков В.В., Зыкова Д.И. Спектрометрия ионной подвижности N-метилимидазола и возможности его определения. *Тонкие Химические Технологии.* 2021;16(6):512–525. <https://doi.org/10.32362/2410-6593-2021-16-6-512-525>
6. Allers M., Schaefer Ch., Ahrens A., Schlottmann F., Hitzemann M., Kobelt T., Zimmermann S., Hetzer R. Detection of volatile toxic industrial chemicals with classical ion mobility spectrometry and high-kinetic energy ion mobility spectrometry. *Anal. Chem.* 2022;94(2):1211–1220. <https://doi.org/10.1021/acs.analchem.1c04397>
7. Smolin Yu.M., Kobtsev B.N., Novoselov N.P. Ion mobility spectrometry technique for chemical environmental contamination detection. *Vestnik TSTU = Transactions TSTU.* 2009;15(3):620–628 (in Russ.).
8. Krylova N., Krylov E., Eiceman G.A., Stone J.A. Effect of moisture on the field dependency of mobility for gas-phase ions of organophosphorus compounds at atmospheric pressure with field asymmetric ion mobility spectrometry. *J. Phys. Chem. A.* 2003;107(19):3648–3654. <https://doi.org/10.1021/jp0221136>
9. Eiceman G.A., Kapras Z., Hill H.H. *Ion Mobility Spectrometry*. 3rd ed. Boca Raton: CRC Press; 2014. 444 p.
10. Borsdorf H., Eiceman G.A. Ion mobility spectrometry: Principles and applications. *Appl. Spectroscopy Rev.* 2006;41(4): 323–375. <https://doi.org/10.1080/05704920600663469>
11. Marquez-Sillero I., Aguilera-Herrador E., Cardenas S., Valcarcel M. Ion-mobility spectrometry for environmental analysis. *TrAC Trends in Analytical Chemistry.* 2011;30(5): 677–690. <https://doi.org/10.1016/j.trac.2010.12.007>
12. Aleksandrova D.A., Melamed T.B., Baberkina E.P. et al. Ion Mobility Spectrometry of Imidazole and Possibilities of Its Determination. *J. Anal. Chem.* 2021;76(11):1282–1289. <https://doi.org/10.1134/S1061934821110022> [Original Russian Text: Aleksandrova D.A., Melamed T.B., Baberkina E.P., Kovalenko A.E., Kuznetsov V.I. Vit., Kuznetsov V.I. Fenin A.A., Shaltaeva Yu.R., Belyakov V.V. Ion Mobility Spectrometry of Imidazole and Possibilities of Its Determination. *Zhurnal Analiticheskoi Khimii.* 2021;76(11):989–996 (in Russ.). <https://doi.org/10.31857/S0044450221110025>]
13. Aleksandrova D.A., Melamed T.B., Baberkina E.P., Fenin A.A., Osinova E.S., Kovalenko A.E., Yakushin R.V., Shaltaeva Yu.R., Belyakov V.V., Zykova D.I. Ion mobility spectrometry of N-methylimidazole and possibilities of its determination. *Tonk. Khim. Technol. = Fine Chem. Technol.* 2021;16(6):512–525. <https://doi.org/10.32362/2410-6593-2021-16-6-512-525>

Об авторах

Александрова Дарья Алексеевна, аспирант, кафедра экспертизы в допинг- и наркоконтроле, ФГБОУ ВО «Российский химико-технологический университет им. Д.И. Менделеева» (125047, Россия, Москва, Миусская площадь, д. 9); инженер-химик, ООО «Модус» (117638, Россия, Москва, Варшавское шоссе, д. 56, стр. 2). E-mail: dasha-25.2012@yandex.ru. Scopus Author ID 57208706352, SPIN-код РИНЦ 7704-8764, <https://orcid.org/0000-0001-8389-3964>

Меламед Татьяна Борисовна, магистрант, кафедра экспертизы в допинг- и наркоконтроле, ФГБОУ ВО «Российский химико-технологический университет им. Д.И. Менделеева» (125047, Россия, Москва, Миусская площадь, д. 9). E-mail: melamed.tanya@gmail.com. SPIN-код РИНЦ 8891-1910, <https://orcid.org/0000-0002-6457-2417>

Баберкина Елена Петровна, к.х.н., доцент, кафедра экспертизы в допинг- и наркоконтроле, ФГБОУ ВО «Российский химико-технологический университет им. Д.И. Менделеева» (125047, Россия, Москва, Миусская площадь, д. 9). E-mail: bettycka@mail.ru. Scopus Author ID 56636782900, SPIN-код РИНЦ 3168-3801, <https://orcid.org/0000-0002-9226-3478>

Осинова Екатерина Сергеевна, аспирант, кафедра экспертизы в допинг- и наркоконтроле, ФГБОУ ВО «Российский химико-технологический университет им. Д.И. Менделеева» (125047, Россия, Москва, Миусская площадь, д. 9). E-mail: osinova_kat@mail.ru. SPIN-код РИНЦ 9063-6384, <https://orcid.org/0000-0003-4088-6822>

Лузенина Лидия Андреевна, студент, ФГБОУ ВО «Российский химико-технологический университет им. Д.И. Менделеева» (125047, Россия, Москва, Миусская площадь, д. 9). E-mail: luzenina.l.a@muctr.ru. <https://orcid.org/0000-0002-0103-2771>

Каплин Артем Александрович, студент, ФГБОУ ВО «Российский химико-технологический университет им. Д.И. Менделеева» (125047, Россия, Москва, Миусская площадь, д. 9). E-mail: kaplin.artem@ya.ru. <https://orcid.org/0000-0003-1928-5651>

Якушин Роман Владимирович, к.т.н., доцент, кафедра органической химии, декан факультета химико-фармацевтических технологий и биомедицинских препаратов, ФГБОУ ВО «Российский химико-технологический университет им. Д.И. Менделеева» (125047, Россия, Москва, Миусская площадь, д. 9). E-mail: yakushin@muctr.ru. Scopus Author ID 56974245100, ResearcherID A-5116-2014, SPIN-код РИНЦ 7201-2016, <https://orcid.org/0000-0003-2923-5471>

Коваленко Алексей Евгеньевич, к.т.н., доцент, кафедра экспертизы в допинг- и наркоконтроле, ФГБОУ ВО «Российский химико-технологический университет им. Д.И. Менделеева» (125047, Россия, Москва, Миусская площадь, д. 9). E-mail: aekov@muctr.ru. Scopus Author ID 57208702823, SPIN-код РИНЦ 9105-5046, <https://orcid.org/0000-0002-8412-0311>

Цаплин Григорий Валерьевич, ассистент, кафедра химии и технологии органического синтеза, ФГБОУ ВО «Российский химико-технологический университет им. Д.И. Менделеева» (125047, Россия, Москва, Миусская площадь, д. 9). E-mail: tsaplingv@muctr.ru. Scopus Author ID 57202814506, SPIN-код РИНЦ 2276-9939, <https://orcid.org/0000-0001-9469-2682>

Синькевич Юрий Борисович, учебный мастер, кафедра химии и технологии органического синтеза, ФГБОУ ВО «Российский химико-технологический университет им. Д.И. Менделеева» (125047, Россия, Москва, Миусская площадь, д. 9). E-mail: sinkevich_y@mail.ru. Scopus Author ID 16029689600, <https://orcid.org/0000-0001-5987-7673>

Фенин Анатолий Александрович, старший преподаватель, кафедра химии высоких энергий и радиозологии, ФГБОУ ВО «Российский химико-технологический университет им. Д.И. Менделеева» (125047, Россия, Москва, Миусская площадь, д. 9). E-mail: fenin@muctr.ru. Scopus Author ID 16202751400, ResearcherID T-9318-2017, <https://orcid.org/0000-0002-5193-3607>

Шалтаева Юлия Ринатовна, старший преподаватель, отделение нанотехнологий в электронике, спинтронике и фотонике офиса образовательных программ (414), Институт нанотехнологий в электронике, спинтронике и фотонике, ФГАОУ ВО Национальный исследовательский ядерный университет «МИФИ» (115409, Россия, Москва, Каширское ш., д. 31). E-mail: YRShaltayeva@mephi.ru. Scopus Author ID 56018762000, SPIN-код РИНЦ 8644-7631, <https://orcid.org/0000-0002-9856-6031>

Беляков Владимир Васильевич, к.т.н., доцент, отделение нанотехнологий в электронике, спинтронике и фотонике офиса образовательных программ (414), Институт нанотехнологий в электронике, спинтронике и фотонике, ФГАОУ ВО Национальный исследовательский ядерный университет «МИФИ» (115409, Россия, Москва, Каширское ш., д. 31). E-mail: VVBelyakov@mephi.ru. Scopus Author ID 7103252626, SPIN-код РИНЦ 5436-8927, <https://orcid.org/0000-0002-0236-1243>

Шабля Алексей Олегович, заместитель генерального директора, ООО «Модус» (117638, Россия, Москва, Варшавское шоссе, д. 56, стр. 2). E-mail: a.shablya@analizator.ru. <https://orcid.org/0000-0002-4605-945X>

Сазонов Андрей Гаврилович, генеральный директор, ООО «Модус» (117638, Россия, Москва, Варшавское шоссе, д. 56, стр. 2). E-mail: kerber@analizator.ru. <https://orcid.org/0009-0008-1540-6739>

About the authors

Daria A. Aleksandrova, Postgraduate Student, Department of Expertise in Doping and Drug Control, Mendeleev University of Chemical Technology of Russia (9, Miusskaya pl., Moscow, 1125047, Russia); Chemical Engineer, Modus (56-2, Varshavskoe sh., Moscow, 117638, Russia). E-mail: dasha-25.2012@yandex.ru. Scopus Author ID 57208706352, RSCI SPIN-code 7704-8764, <https://orcid.org/0000-0001-8389-3964>

Tatiana B. Melamed, Master Student, Department of Expertise in Doping and Drug Control, Mendeleev University of Chemical Technology of Russia (9, Miusskaya pl., Moscow, 1125047, Russia). E-mail: melamed.tanya@gmail.com. RSCI SPIN-code 8891-1910, <https://orcid.org/0000-0002-6457-2417>

Elena P. Baberkina, Cand. Sci. (Chem.), Associate Professor, Department of Expertise in Doping and Drug Control, Mendeleev University of Chemical Technology of Russia (9, Miusskaya pl., Moscow, 1125047, Russia). E-mail: bettycka@mail.ru. Scopus Author ID 56636782900, RSCI SPIN-code 3168-3801, <https://orcid.org/0000-0002-9226-3478>

Ekaterina S. Osinova, Postgraduate Student, Department of Expertise in Doping and Drug Control, Mendeleev University of Chemical Technology of Russia (9, Miusskaya pl., Moscow, 1125047, Russia). E-mail: osinova_kat@mail.ru. RSCI SPIN-code 9063-6384, <https://orcid.org/0000-0003-4088-6822>

Lidiya A. Luzenina, Student, Mendeleev University of Chemical Technology of Russia (9, Miusskaya pl., Moscow, 1125047, Russia). E-mail: luzenina.l.a@muctr.ru. <https://orcid.org/0000-0002-0103-2771>

Artem A. Kaplin, Student, Mendeleev University of Chemical Technology of Russia (9, Miusskaya pl., Moscow, 1125047, Russia). E-mail: kaplin.artem@ya.ru. <https://orcid.org/0000-0003-1928-5651>

Roman V. Yakushin, Cand. Sci. (Eng.), Associate Professor, Department of Organic Chemistry, Dean of the Faculty of Chemical and Pharmaceutical Technologies and Biomedical Products, Mendeleev University of Chemical Technology of Russia (9, Miusskaya pl., Moscow, 1125047, Russia). E-mail: yakushin@muctr.ru. Scopus Author ID 56974245100, ResearcherID A-5116-2014, RSCI SPIN-code 7201-2016, <https://orcid.org/0000-0003-2923-5471>

Aleksey E. Kovalenko, Cand. Sci. (Eng.), Associate Professor, Department of Expertise in Doping and Drug Control, Mendeleev University of Chemical Technology of Russia (9, Miusskaya pl., Moscow, 1125047, Russia). E-mail: aekov@muctr.ru. Scopus Author ID 57208702823, RSCI SPIN-code 9105-5046, <https://orcid.org/0000-0002-8412-0311>

Grigory V. Tsaplin, Assistant, Department of Chemistry and Technology of Organic Synthesis, Mendeleev University of Chemical Technology of Russia (9, Miusskaya pl., Moscow, 1125047, Russia). E-mail: tsaplingv@muctr.ru. Scopus Author ID 57202814506, RSCI SPIN-code 2276-9939, <https://orcid.org/0000-0001-9469-2682>

Yuri B. Sinkevich, Training Master, Department of Chemistry and Technology of Organic Synthesis, Mendeleev University of Chemical Technology of Russia (9, Miusskaya pl., Moscow, 1125047, Russia). E-mail: sinkevich_y@mail.ru. Scopus Author ID 16029689600, <https://orcid.org/0000-0001-5987-7673>

Anatoliy A. Fenin, Senior Lecturer, Department of High Energy Chemistry and Radioecology, Mendeleev University of Chemical Technology of Russia (9, Miusskaya pl., Moscow, 1125047, Russia). E-mail: fenin@muctr.ru. Scopus Author ID 16202751400, ResearcherID T-9318-2017, <https://orcid.org/0000-0002-5193-3607>

Julia R. Shaltaeva, Senior Lecturer, Division of Nanotechnologies in Electronics, Spintronics and Photonics, Office of Academic Programs (414), Institute of Nanoengineering in Electronics, Spintronics and Photonics, National Research Nuclear University MEPhI (31, Kashirskoe sh., Moscow, 115409, Russia). E-mail: YRShaltayeva@mephi.ru. Scopus Author ID 56018762000, RSCI SPIN-code 8644-7631, <https://orcid.org/0000-0002-9856-6031>

Vladimir V. Belyakov, Cand. Sci. (Eng.), Associate Professor, Division of Nanotechnologies in Electronics, Spintronics and Photonics, Office of Academic Programs (414), Institute of Nanoengineering in Electronics, Spintronics and Photonics, National Research Nuclear University MEPhI (31, Kashirskoe sh., Moscow, 115409, Russia). E-mail: VVBelyakov@mephi.ru. Scopus Author ID 7103252626, RSCI SPIN-code 5436-8927, <https://orcid.org/0000-0002-0236-1243>

Aleksey O. Shablya, Deputy General Director, Modus (56-2, Varshavskoe sh., Moscow, 117638, Russia). E-mail: a.shablya@analizator.ru. <https://orcid.org/0000-0002-4605-945X>

Andrey G. Sazonov, General Director, Modus (56-2, Varshavskoe sh., Moscow, 117638, Russia). E-mail: kerber@analizator.ru. <https://orcid.org/0009-0008-1540-6739>

Отпечатано в МИРЭА – Российском технологическом
университете.

119454, РФ, Москва, пр-т Вернадского, д. 78.

Подписано в печать 30.10.2024.

Формат 60×90/8. Печать цифровая.

Уч.-изд. листов 11.5.

Тираж 100 экз. Заказ № 1759.

Printed in MIREA – Russian Technological
University.

78, Vernadskogo pr., Moscow, 119454, Russian Federation.

Signed to print on October 30, 2024.

Format 60×90/8. Digital print.

C.p.l. 11.5.

100 copies. Order no. 1759.

Подписку на печатную версию журнала

Тонкие химические технологии = *Fine Chemical Technologies*
можно оформить через ООО «Агентство «Книга-Сервис»,
www.akc.ru.

Подписной индекс: **36924**.

Subscription to the

Tonkie Khimicheskie Tekhnologii = *Fine Chemical Technologies*
printed version can be made through the *Kniga-Servis* Agency,
www.akc.ru.

Subscription index: **36924**.