**Визначення поліхлорованих екотоксикантів методами хромато-мас-спектрометрії**

*Войціцький В.М., Хижняк С.В., Мідик С.В., Корнієнко В.І.*

*(Національний університет біоресурсів і природокористування України,*

*E -mail:* *VolodymyrV1950@gmail.com* )

До найбільш токсичних забрудників довкілля (атмосферного повітря, ґрунту, води, біоти), харчових продуктів, кормів для сільськогосподарських тварин, а також питної води належать поліхлоровані дибензодіоксини (ПХДД), дибензофурани (ПХДФ) і біфеніли (ПХБ), які віднесені Стокгольмською Конвенцією про стійкі органічні забруднювачі до так званої «брудної дюжини» найнебезпечніших для людини хімічних речовин.



Структурна формула поліхлорованих дибензофуранів.



Структурна формула поліхлорованих біфенілів.

(Положення атомів Хлору (Cl) показано схематично, їх кількість (n) різна у конкретних представників цих сполук.)

Ці сполуки здатні проявляти канцерогенну, мутагенну, тератогенну, ембріотоксичну, гонадотропну та гепатотоксичну дію, яка залежить від фізико-хімічних властивостей, дози, частоти і терміну дії, шляхів потрапляння до організму, механізмів дії.

Діоксини – найбільш небезпечні токсиканти серед поліхлорованих сполук, а серед них – 2,3,7,8-тетрахлордибензо-n-діоксин (ТХДД), з токсичністю якого порівнюють токсичність інших подібних сполук, а це не менше 75 конгенерів ТХДД і 135 конгенерів поліхлорованих дибензофуранів (ПХДФ).

Джерелами діоксинів є підприємства, які під час виробництва використовують Хлор (нафтопереробні, хімічні, металургійні, целюлозо-паперові, де використовуються процеси відбілювання Хлором або його сполуками, підприємства з виробництва теплової та електричної енергії, які працюють на вугіллі, мазуті, дизельному паливі тощо). Ці речовини здатні утворюватися як побічний продукт у процесах органічного синтезу, при спалюванні органічних хлорвмісних сполук, а також можуть міститися у викидах автотранспорту чи пестицидах, які використовують у сільському господарстві.

Гранично допустима концентрація (ГДК) 2,3,7,8-ТХДД для атмосферного повітря – 0,1 нг/м3, для питної води – 0,1 нг/дм3. Для 2,3,7,8-ТХДФ ці показники наступні: для атмосферного повітря ГДКап. – 1 нг/м3, а для питної води ГДКпв – 1 нг/дм3.

Поліхлоровані біфеніли (ПХБ) – це група із нині відомих 209 сполук, що мають формулу С12Н10–nCln, де n – знаходиться в межах від 0 до 10.

Основні джерела забруднення ПХБ: при спалюванні побутових і промислових відходів, при займанні промислового обладнання (особливо масляних трансформаторів і конденсаторів, мастил тощо, які містять ПХБ), випаровування при застосуванні холодогенів, фарб, лаків, клеїв, розчинників, пластифікаторів, наповнювачів у пластмасах тощо, витоки зі звалищ (смітників).

Значення ГДК для суміші ПХБ наступні: для атмосферного повітря – 1 мкг/м3, питної води – 1 мкг/дм3.

Визначення ПХДД, ПХДФ і ПХБ в очищеному і концентрованому екстракті зразку проводиться, як правило, хроматографічними методами з використанням спектрометричних (особливо в ультрафіолетовій ділянці світлового спектру), флуориметричних, з використанням електронно-захватного (ЕЗД) та мас-спектрометричного детекторів. Саме мас-спектрометричні методи реєстрації є найбільш точними. Вони широко використовуються в комбінованих методах якісного і кількісного аналізу складних сумішей, які поєднують хроматографічне розділення речовин з мас-спектрометричним аналізом.

У цих методах розділення речовин та їх аналіз проводиться незалежно одне від одного. Досліджувану суміш речовин вводять у хроматограф. Там її компоненти розділяються і почергово потрапляють до мас-спектрометра. Іонізація, розділення утворених іонів та їх реєстрація дає можливість отримати мас-спектри, за якими досліджувані речовини ідентифікуються та визначається їх кількість (концентрація) у зразку.

Серед хроматографічних методів, у випадку дослідження ПХДД, ПХДФ і ПХБ застосовують, як правило, газову хроматографію (ГХ), а саме адсорбційну, з використанням відповідного газу-носія (гелію чи азоту).

Мас-спектрометрія – це метод ідентифікації (за встановленою будовою) та кількісного визначення речовини, у тому числі у суміші. Відносна межа виявлення речовин становить 10-4 – 10-8 %, абсолютна коливається в межах від 10-10 до 10-17 г.

Метод мас-спектрометрії базується на явищі іонізації – перетворені нейтральних атомів або молекул в іони. Це викликається бомбардуванням електронами, хімічною іонізацією, зокрема при приєднанні до атомів чи молекул, які іонізуються Н+, опроміненням ультрафіолетовим світлом з довжиною хвилі меншою ніж 20 нм (іонізуючим), а також α-, β- і γ-іонізуючим випромінюванням, дією сильного електричного поля або високих температур та ін. Утворені іони розділяють в магнітному полі (магнітне та електростатичне секторне розділення, застосування іонно-циклотронного резонансу з Фур’є перетворенням, час-пролітне розділення тощо).

За виміру інтенсивності іонного струму, виконується окремий підрахунок частки кожного компоненту, це здійснюється за використання отриманого мас-спектру – залежності інтенсивності іонного струму (свідчить про кількість речовини) від відношення маси (m) до заряду (z) – m/z.

Поширеним способом встановлення будови досліджуваної сполуки (її ідентифікації) є автоматичне порівняння отриманого мас-спектру з банком («бібліотекою») таких спектрів (у них кількість речовин досягає сотень тисяч). Нині існують спеціальні програми для автоматичної інтерпретації мас-спектрів.

Результати дослідження речовин, зокрема, ПХДД, ПХДФ і ПХБ методами хромато-мас-спектрометрії свідчать, що ці методи є адекватними за ефективністю, чутливістю, точністю, продуктивністю, універсальністю, вибірковістю і у багатьох випадках переважають інші методи, які можуть бути застосовані для аналізу поліхлорованих сполук. Безумовно ці методи можуть і використовуються науково-дослідними та виробничими лабораторіями також для дослідження інших речовин та сполук.