**Вирюс, Эдуард Даниэлевич.**

## Развитие жидкостной хромато-масс-спектрометрии сверхвысокого разрешения как метода скрининга физиологически активных веществ в сложных по составу смесях : диссертация ... доктора химических наук : 02.00.02 / Вирюс Эдуард Даниэлевич; [Место защиты: ФГБУН Ордена Ленина и Ордена Октябрьской Революции Институт геохимии и аналитической химии им. В.И. Вернадского Российской академии наук]. - Москва, 2020. - 267 с. : ил.

## Оглавление диссертациидоктор наук Вирюс Эдуард Даниэлевич

ОГЛАВЛЕНИЕ

СПИСОК ИСПОЛЬЗУЕМЫХ СОКРАЩЕНИЙ

ВВЕДЕНИЕ

ГЛАВА 1 ПРОБЛЕМА МНОГОКОМПОНЕНТНОГО ОБНАРУЖЕНИЯ ФИЗИОЛОГИЧЕСКИ АКТИВНЫХ ВЕЩЕСТВ В БИОЛОГИЧЕСКИХ ЖИДКОСТЯХ (НА ПРИМЕРЕ ЗАДАЧ СПОРТИВНОЙ МЕДИЦИНЫ).

ОРБИТАЛЬНАЯ ИОННАЯ ЛОВУШКА

1.1 Методология обнаружения физиологически активных веществ (на примере биоаналитических лабораторий спортивной медицины)

1.2 Систематизация физиологически активных веществ

1.3 Подходы обнаружения физиологически активных веществ с применением хроматографических и хромато-масс-спектрометрических методов

1.3.1 Амфетамины (стимуляторы) и наркотики

1.3.2 Бета-адреноблокаторы и Бета-адреномиметики

1.3.3 Мочегонные препараты (диуретики)

1.3.4 Глюкокортикоиды

1.3.5 Гормоны и модуляторы метаболизма (вещества с антиэстрогенной активностью

1.3.6 Экзогенные синтетические стероиды

1.4 Проблемы обнаружения широкого спектра физиологически активных веществ

1.5 Орбитальная ионная ловушка

1.5.1 Краткая история масс-спектрометрии с орбитальной ионной ловушкой

1.5.2 Современная орбитальная ионная ловушка Макарова

ГЛАВА 2 ЭКСПЕРИМЕНТАЛЬНАЯ ЧАСТЬ

2.1 Реагенты и исследуемые соединения

2.2 Оборудование

2.3 Условия изучения матричных эффектов

2.3.1 Подготовка образцов для оценки матричного эффекта

2.3.2 Хроматографические условия

2.3.3 Масс-спектрометрометрические условия

2.3.3.1 Тандемная масс-спектрометрия

2.3.3.2 Масс-спектрометрия сверхвысокого разрешения с селективным детектированием ионов

2.3.3.3 Масс-спектрометрия сверхвысокого разрешения с детектированием в режиме полного сканирования

2.4 Хроматографические условия скрининга

2.5 Масс-спектрометрические условия скрининга

2.5.1 Масс-спектрометрия высокого разрешения с электронной ионизацией

2.5.2 Тандемная масс-спектрометрия с электронной ионизацией

2.6 Подготовка проб для скрининговых процедур

2.7 Прием препаратов добровольцами и отбор проб

2.7.1 Прием препарата Оксандролон

2.7.2 Прием препарата Parabolan

ГЛАВА 3 ОГРАНИЧЕНИЯ ВЭЖХ-МСВР/ОЛ(ИЭР)

3.1 Изучение матричных эффектов в условиях электрораспылительной ионизации

3.2 Определение метаболита орал туринабола в реальных образцах мочи

методом ВЭЖХ-МСВР/ОЛ(ИЭР)

ГЛАВА 4 ВЭЖХ-МСВР/ОЛ В СОЧЕТАНИИ С ХИАД

4.1 Исследование матричного эффекта в условиях ХИАД

4.2 Определение веществ с антиэстрогенной активностью в моче

методами ВЭЖХ-МС/МС(ИЭР) и ВЭЖХ-МСВР/ОЛ(ХИАД)

4.3 Определение 17а-метил-2-окса-5а-андростан-3-он-17р-ола и его

метаболита в моче методом ВЭЖХ-МСВР/ОЛ(ХИАД) после прекращения его приема

4.4 Изучение фрагментации агонистов PPAR в условиях столкновительной диссоциации методами ВЭЖХ-МС/МС и ВЭЖХ-

МСВР/ОЛ(ХИАД)

4.5 Скрининг ФАВ методом ВЭЖХ-МСВР/ОЛ(ХИАД)

ГЛАВА 5 ВЭЖХ-МСВР/ОЛ И ВТЖХ-МСВР/ОЛ В СОЧЕТАНИИ С ФХИАД

5.1 Исследование матричного эффекта при сочетании ВЭЖХ-МСВР/ОЛ с ФХИАД

5.2 Определение стероидов в реальных образцах мочи методом ВЭЖХ-МСВР/ОЛ с ФХИАД

5.3 Исследование матричного эффекта при сочетании ВТЖХ-МСВР/ОЛ с ФХИАД

5.4 Определение стероидов в моче методом ВТЖХ-МСВР/ОЛ с ФХИАД

5.4.1 Поиск оптимальной подвижной фазы для ВТЖХ-МСВР/ОЛ с ФХИАД при определении стероидов

5.4.2 Скрининг ультрамалых количеств стероидов методом ВТЖХ-МСВР/ОЛ с ФХИАД

5.4.3 Сравнение способа определения стероидов методом ВТЖХ-

МСВР/ОЛ в условиях ФХИАД с ГХ-МС/МС и ГХ-МСВР

ГЛАВА 6 ВЭЖХ-МСВР/ОЛ В СОЧЕТАНИИ С ХИИЭР

6.1 История вопроса

6.2 Исследование матричного эффекта при сочетании ВЭЖХ-МСВР/ОЛ

с ХИИЭР

6.3 Скрининг ФАВ в моче методом УЭЖХ-МСВР/ОЛ в сочетании с

ХИИЭР

ГЛАВА 7 НОВАЯ МЕТОДОЛОГИЯ ХРОМАТО-МАСС-СПЕКТРОМЕТРИЧЕСКОГО СКРИНИНГА ЭКЗОГЕННЫХ ФАВ В

БИОЛОГИЧЕСКИХ ЖИДКОСТЯХ И ПОДХОДЫ ДОСТИЖЕНИЯ КОМПЛЕМЕНТАРНОСТИ С РЕФЕРЕНСНЫМИ МЕТОДАМИ АНАЛИЗА

7.1 Выявление «труднодериватизируемых» ФАВ для референсного

метода ГХ-МС

7.2 Твердофазная экстракция на магнитных частицах как подход к снижению эффекта подавления ионизации матрицей для референсного

метода ВЭЖХ-МС/МС

ЗАКЛЮЧЕНИЕ

ВЫВОДЫ

СПИСОК ИСПОЛЬЗОВАННЫХ ИСТОЧНИКОВ

ПРИЛОЖЕНИЕ

ПРИЛОЖЕНИЕ

ПРИЛОЖЕНИЕ