

# KÁBÍTÓSZEREK SZÁRMAZÉKKÉPZÉSI, FRAGMENTUM ANALITIKAI ÉS ADATGYUJTÉSI TANULMÁNYA A GÁZKROMATOGRÁFIA-TÖMEGSPEKTROMETRIA FELHASZNÁLÁSÁVAL

**Molnár Borbála, Zsigrainé Vasanits Anikó, Záray Gyula, Perlné Molnár Ibolya\***

*Eötvös Loránd Tudományegyetem, Környezettudományi Kooperációs Kutató Központ,  
1117 Budapest, Pázmány Péter sétány 1/A  
E-mail: perlne@chem.elte.hu*

Célunk, hogy a környezeti vizek szennyezőinek vizsgálatát célzó sokösszetevős elemző rendszerünket [1-7] a legkülönbözőbb szerkezetű kábítószerkegyidejű analízisével bővítsük.

A szakirodalomban a kábítószerkegyonosítása és mennyiségi meghatározása környezeti mintákban elsősorban folyadékromatográfiával történik, az elválasztás után tömegszelektív detektálással.

Munkánk során a leggyakrabban használt pszichoaktív vegyületek, köztük opioidok, amfetaminok, kannabinoidok és metabolitjaik részletes származékképzési, fragmentum analitikai és adatgyűjtési tanulmányával foglalkozunk, a gázkromatográfia-tömegspektrometria felhasználásával. E vizsgálatokhoz négy különböző szililező reagenssel – hexametildiszilazán és trifluoecetsav elegye (HMDS+TFA), *N,O*-bis(trimetilszilil)-trifluoroacetamid (BSTFA), *N*-metil-*N*-(trimetilszilil)-trifluoroacetamid (MSTFA), *N*-metil-*N-terc*.-butildimetilszilil-trifluoroacetamid (MTBSTFA) - nyert származékok választjelét hasonlítjuk össze. Meghatározzuk a vegyületek legkisebb mérhető mennyiségét három különböző adatgyűjtési eljárás mellett (Full Scan – FS, Multiple Ion Monitoring – MIM, Multiple Reaction Monitoring - MRM), majd az optimált eljárással a módszer hasznosíthatóságát környezeti vizek elemzése útján bizonyítjuk.

Bevezető vizsgálataink eredményeként bemutatom a célvegyületek trimetilszilil (oxim) éter/észter származékainak retenciórendjét és tömegspektrumát. A elúciós időket figyelembe véve, megfelelő optimálással, az eddig közel 100 szennyezőt tartalmazó elemző rendszert, várhatóan, a kábítószerkegyanalízisével egészíthetjük ki.

- [1] Á. Sebok, A. Vasanits-Zsigrai, Gy. Záray, I. Molnár-Perl, *Talanta*, 76 (2008) 642-650.
- [2] Á. Sebok, K. Sezer, A. Vasanits-Zsigrai, A. Helenkár, Gy. Záray, I. Molnár-Perl, *J. Chromatogr. A*, 1211 (2008) 104-112.
- [3] Á. Sebok, A. Vasanits-Zsigrai, A. Helenkár, Gy. Záray, I. Molnár-Perl, *J. Chromatogr. A*, 1216 (2009) 2288-2301.
- [4] A. Helenkár, Á. Sebok, Gy. Záray, I. Molnár-Perl, A. Vasanits-Zsigrai, *Talanta*, 82 (2010) 600-607.
- [5] N. András, A. Helenkár, A. Vasanits-Zsigrai, Gy. Záray, I. Molnár-Perl, *J. Chromatogr. A*, 1218 (2011) 8264-8272.
- [6] N. András, A. Helenkár, A. Vasanits-Zsigrai, Gy. Záray, I. Molnár-Perl, *J. Chromatogr. A*, 1218 (2011) 1878-1890.
- [7] Perlné Molnár Ibolya, Zsigrainé Vasanits Anikó, Sebok Ágnes, Helenkár András, András Nóra, Faludi Tamás, Molnár Borbála, Záray Gyula, *Magy. Kém. Folyóirat*, 118 (2012) 55-64.