**Установление структурного состава триацилглицеридов растительных масел методом масс-спектрометрии МАЛДИ с предварительной дериватизацией**

***Слюндина Мария Сергеевна, Горяинов Сергей Владимирович***

*студент, аспирант*

*Российский университет дружбы народов, Москва, Россия*

Масс-спектрометрия является одним из наиболее важных и надежных современных методов анализа органических соединений, отличительными особенностями которой являются экспрессность, высокая чувствительность и информативность при установлении строения органических веществ и анализе реакционных смесей. В последнее время в области анализа сложных многокомпонентных смесей все большую популярность приобретают мягкие десорбционные методы ионизации, к которым, в частности, относится масс-спектрометрия с матрично-активированной лазерной десорбцией/ионизацией (МАЛДИ). Основное преимущество этого метода при установлении триацилглицеридного (ТАГ) состава различных объектов заключается в отсутствии трудоемких и времязатратных стадий пробоподготовки (например, ацидолиза ТАГ с одновременным метилированием) и хроматографирования образцов, которые необходимы при использовании общепринятых подходов при анализе подобных объектов. Существенным недостатком такого подхода является ограниченность получаемой структурной информации, в частности, при определении числа и положения кратных связей в кислотных остатках ТАГ. Одним из решений этой проблемы может быть использование различных методов химической модификации триацилглицеридов с последующей регистрацией их масс-спектров МАЛДИ.

Для изучения возможности применения этой методики использовались растительные масла льна, граната и абрикоса. Жирнокислотный состав ТАГ этих образцов устанавливали двумя методами: газовой хроматографией/масс-спектрометрией (ГХ/МС) и масс-спектрометрией МАЛДИ. Для анализа методом ГХ/МС 10 мг образца помещали в стеклянную виалу объемом 5 мл, добавляли 900 мкл абсолютизированного метанола, 100 мкл раствора маргариновой кислоты (С17:0, внутренний стандарт) и 50 мкл ацетилхлорида. Полученную смесь выдерживали при температуре 70 ºС до полного растворения образца. Образующиеся метиловые эфиры жирных кислот экстрагировали 1 мл гексана, и 1 мкл экстракта вводили в хроматограф. Химическую модификацию ТАГ для последующего анализа методом МАЛДИ осуществляли путем обработки соответствующих масел избытком 3-хлорнадбензойной кислоты. Анализ методом ГХ/МС осуществлялся на масс-спектрометре Thermo Focus DSQ II (ионизация электронами, энергия ионизации 70 эВ, хроматографическая колонка Restek RTX-5MS 30m\*0.25мм\*0.25мкм) с использованием масс-спектральной базы данных NIST 11. Регистрацию масс-спектров МАЛДИ проводили на масс-спектрометре Bruker autoflex speed, оснащенном твердотельным УФ-лазером с λ=355 нм, с использованием следующей процедуры пробоподготовки (в качестве матрицы использовали 2,4-дигидроксибензойную кислоту (DHB)): 2 мг масла или продуктов его химической модификации растворяли в 1 мл гексана, отбирали 20 мкл раствора и смешивали с 20 мкл раствора матрицы (50 мг/мл); 1 мкл смеси наносили на мишень.

Анализ полученных данных показал, что масс-спектры МАЛДИ продуктов химической модификации содержали пики ионов, массовые числа которых соответствовали катионизированным молекулам продуктов химической модификации ТАГ, что позволило установить число кратных связей в каждом из ТАГ, присутствующих в смеси.