**Дериватизация 3-хлорпропандиола-1,2 для детектирования мягкими методами ионизации**

***Зименс М.Е.1, Борисова А.Р.2***

*мнс*

*1* *Институт нефтехимического синтеза им. А.В.Топчиева РАН, Москва, Россия*

*2* *Российский университет дружбы народов, Москва, Россия  
E-mail: zimens@ips.ac.ru*

Моно- и диацильные производные 3-хлорпропандиола-1,2 (3-МПХД) были впервые выделены из растительного масла в 1983 г. В 2004 г. было обнаружено, что свободный 3-хлорпропандиол-1,2 и продукты его ацилирования жирными кислотами присутствуют в большом наборе пищевых продуктов, включая картофель фри, хлеб и соевый соус. Основным источником этих соединений является растительные масла, где эфиры 3-хлорпропандиола-1,2 образуются в результате дезодорирования и других высокотемпературных процессов. 3-МХПД и его эфиры имеют крайне негативное влияние на здоровье человека [1]. Несмотря на то, что механизм участия этих соединений в метаболизме до сих пор обсуждается, многочисленные исследования в этой области подтверждают их канцерогенную активность. Поэтому был введен контроль за содержанием 3-МХПД в масложировой продукции и соевых соусах в США и в странах Евросоюза. Основным методом идентификации и количественного определения 3-МХПД является газохроматомасс-спектрометрия, которая используется для детектирования продукта дериватизации 3-МХПД фенилбороновой кислотой. Недостатком этого подхода являются значительное время необходимое для проведения анализа. Для ускорения анализа можно использовать «мягкие» методы ионизации, которые, однако, требуют разработки способов химической модификации 3-МХПД для повышения его эффективности ионизации. В настоящей работе для этого было использовано взаимодействие аналита 4-бромбутил- и 4-(бромметил)бензилбороновыми кислотами с последующей кватернизацией производных пиридином.

Дератизацию модельных соединений (этиленгликоль, 2,3-бутнадиол) и 3-МПХД проводили путем их обработки дериватизирующими агентами: 3-бромбутилбороновой и 3-бромметилфенилбороновой кислотами. Реакцию проводили в ацетонитриле в присутствии сульфата магния с последующим добавлением пиридина. Масс-спектры МАЛДИ получали на масс-спектрометре Bruker autoflex speed (Bruker Daltonics Inc., Германия), оснащенном твердотельным УФ-лазером с λ = 355 нм, в режиме регистрации положительно заряженных ионов с использованием рефлектрона. Масс-спектры ИЭР, а также спектры ДАС регистрировали на масс-спектрометре Agilent 6470, оснащенном тройным квадрупольным масс-анализатором, в режиме детектирования положительно заряженных ионов.

Зарегистрированные масс-спектры МАЛДИ и ИЭР продуктов дериватизации модельных соединений и 3-МПХД содержали интенсивные пики ионов катионных частей получаемых солей. Анализ масс-спектров ДАС производных показал, что они претерпевают предсказуемый и воспроизводимый распад с образованием протонированной молекулы пиридина. Наблюдаемая закономерность может быть использована для детектирования 3-МХПД в масложировой продукции.

**Литература**

1. Weißhaar R. Fatty acid esters of 3-MCPD: Overview of occurrence and exposure estimates // Eur. J. Lipid Sci. Technol. 2011. Vol. 113. № 3. P. 304–308.