

**ИЗУЧЕНИЕ МАСС-ФРАГМЕНТАЦИИ ФАЛЬКАРИНОЛА  
С ПРИМЕНЕНИЕМ МАСС-СПЕКТРОМЕТРИИ  
ВЫСОКОГО РАЗРЕШЕНИЯ**

*Жестовская Е.С.<sup>(1)</sup>, Антохин А.М.<sup>(1)</sup>, Таранченко В.Ф.<sup>(1)</sup>, Василевский С.В.<sup>(1)</sup>,  
Аксенов А.В.<sup>(1)</sup>, Шалабай В.В.<sup>(1)</sup>, Родин И.А.<sup>(2)</sup>, Штигун О.А.<sup>(2)</sup>*

<sup>(1)</sup> ФГУП НЦ «Сигнал»

107014, г. Москва, ул. Большая Оленья, д. 8

<sup>(2)</sup> Московский государственный университет

119991, г. Москва, Ленинские горы, д. 1

В работе представлены результаты исследования особенностей масс-спектрометрического детектирования фалькаринола с помощью анализатора типа орбитальная ионная ловушка Q-Exactive («Thermo Scientific»), оснащенного источником химической ионизации при атмосферном давлении (ХИАД). Хроматографирование проводили с использованием жидкостного хроматографа Ultimate 3000 на колонке Agilent C18 (150×3 мм, 5 мкм «Agilent Technologies»). Детектирование осуществляли в режиме регистрации положительно заряженных ионов с применением масс-спектрометрии высокого разрешения, что позволило определить моноизотопные массы фрагментных ионов фалькаринола с погрешностью менее 5 ppm.

В ходе проведенных экспериментальных исследований установлено, что в условиях ХИАД молекула фалькаринола претерпевает частичную фрагментацию за счет элиминирования гидроксильной группы с образованием аддукта  $[M-H_2O]^+$  с  $m/z$  227,1794. При этом молекулярный протонированный ион  $[M+H]^+$  с  $m/z$  245,1899 обладает малой интенсивностью, либо отсутствует совсем.

Выявлено, что значительное влияние на процесс ионизации оказывает состав подвижной фазы. Так, в случае использования ацетонитрила (MeCN), образуется ион-аддукт  $[M-H_2O+MeCN]^+$  с  $m/z$  268,2059, который является наиболее интенсивным в масс-спектре.

Масс-спектры второго порядка высокого разрешения получены диссоциацией, активированной соударением при повышенной энергии. В качестве ион-предшественника использовали ион  $[M-H_2O]^+$  с  $m/z$  227,1794. При значении энергии соударительной ячейки 30% наблюдается образование основных ион-продуктов:  $[C_{12}H_{13}]^+$  с  $m/z$  157,1014,  $[C_{13}H_{15}]^+$  с  $m/z$  171,1171 и  $[C_{14}H_{17}]^+$  с  $m/z$  185,1328 с относительной интенсивностью 65%, 100% и 77% соответственно.

Полученные данные могут быть использованы при разработке методик идентификации и количественного определения фалькаринола.