**Применение молекулярного нетворкинга для характеризации метаболома пивоваренных сортов хмеля**

***Ихалайнен Ю.А.1, Васильева Е.Н.1*, Родин И.А. *1***

*Аспирант 2ого года обучения*

*1Московский государственный университет имени М.В. Ломоносова,*

*химический факультет, Москва, Россия*

*E-mail:* *ikh.ya@yandex.ru*

Использование подходов ненаправленной метаболомики позволяет решать широкий круг задач: от классификации образцов, до выявления соединений-маркеров групп и процессов. При этом, важным шагом любого метаболомного исследования является идентификация неизвестных компонентов исследуемых образцов. В случае изучения объектов растительного мира, наблюдается отсутствие систематизированных источников описывающих как компонентный состав исследуемого объекта, так аналитические характеристики этих соединений. Это существенно усложняет процесс определения структур целевых компонентов, даже в контексте использования таких высокоинформативных методов анализа как хроматомасс-спектрометрия. Однако, использование современных подходов к обработке экспериментальных данных в сочетании с открытыми спектральными базами данных могут облегчить процесс этот этап.

Растения рода *Humulus* имеют богатую историю применения в пищевой промышленности, благодаря своим уникальным вкусо-ароматическим свойствам, а также используются в традиционных медицинских практиках, обладая широким спектром биологической активности. Разнообразие свойств этого растения обусловлено в первую очередь его компонентным составом, в том числе – горькими кислотами и хальканоидами, уникальными для хмеля классами соединений. В контексте пивоварения большую роль также играют продукты деградации этих компонентов, в особенности – горьких кислот, так как их окисленные и изомеризованные производные зачастую обладают более выраженной горечью. На настоящий момент для хмеля описано более 200 вторичных метаболитов, в том числе – уникальных для этого растения. Целью настоящей работы стала характеризация метаболома хмеля обыкновенного по результатам ВЭЖХ-МС профилирования и построения молекулярных сетей на основании данных о фрагментации детектируемых компонентов.

 Полученные молекулярные сети продемонстрировали кластеризацию узлов, привязанную к классу соединения. В ходе анализа полученных кластеров были выявлены группы узлов, относящиеся к α- и β-горьким кислотам и их продуктам деградации – гулупонам и гумулинонам, а также кластеры хальканоидов. По результатам ручного анализа спектров фрагментации, сопастовления с базами данных, а также рассчёта теоретических характеристик удерживания были идентифицированы 93 соединения, включая ранее не описанные горькие кислоты и хальконы. Для каждой группы соединений были предложены механизмы формирования ионов-фрагментов, образующихся при диссоциации. На основании полученных данных была сформирована база данных спектров фрагментации, информативность которой была проверена на примере анализа образцов 52 пивоваренных сортов хмеля с различными условиями хранения.