**Сравнение хромато-масс-спектрометрических профилей оливкового и подсолнечного масел**

***Ягодина М.М., Колегова А.А., Загорская К.С.***

*Студентка, 2 курс специалитета*

*Московский государственный университет имени М.В. Ломоносова,
химический факультет, Москва, Россия*

*E-mail:* *16mynewacc@gmail.com*

Пищевые масла широко используются в повседневной жизни, влияя на вкус, аромат и текстуру блюд. Их состав, богатый насыщенными и ненасыщенными жирными кислотами, делает их ценными не только в кулинарии, но и в медицине и косметологии. Например, оливковое масло содержит лигнаны, обладающие антиоксидантной, противовоспалительной и противораковой активностью, что может снижать риск рака кожи. Подсолнечное масло, богатое олеиновой и линолевой кислотами, способствует снижению холестерина и предотвращает сердечные заболевания. Токоферолы в его составе нейтрализуют свободные радикалы, облегчая течение ревматоидного артрита и бронхиальной астмы.

Свойства масел зависят от их происхождения и условий хранения, что делает контроль качества важной задачей. Современный метод анализа — газовая хроматография с масс-спектрометрией (ГХ-МС) — позволяет детально изучить состав масел, выявив как основные, так и минорные компоненты. Это помогает подтвердить подлинность продуктов и раскрыть их потенциальные применения.

Целью данной работы стало сравнение хроматографических профилей оливкового и подсолнечного масел для оценки их состава и качества, что может способствовать улучшению их свойств и защите потребителей от фальсификации.

Для достижения поставленной цели был проанализирован набор из нескольких проб
оливковых и подсолнечных масел, на полученных хроматограммах были выбраны пики, характеризующие образцы каждого типа. Сравнивали расширенный профиль компонентов (пиков) и отдельный набор наиболее интенсивных пиков (признаков). Для этого, используя 2 разные схемы нормировки ("вертикальную" и "горизонтальную") для полученного набора данных, рассчитывали значения индекса схожести и коэффициента линейной корреляции по следующим формулам:

$SI=\frac{\sum\_{i=1}^{n}x\_{i}×y\_{i}}{\sqrt{\sum\_{i=1}^{n}x\_{i}^{2}×\sum\_{i=1}^{n}y\_{i}^{2}}} (формула 1)$, $LCC= \frac{\sum\_{i=1}^{n}(x\_{i}-\overbar{x})×(y\_{i}-\overbar{y})}{\sqrt{\sum\_{i=1}^{n}(x\_{i}-\overbar{x})^{2}×\sum\_{i=1}^{n}(y\_{i}-\overbar{y})^{2}}} \left(формула 2\right), $

где n — количество хроматографических пиков.

 Полученные коэффициенты линейной корреляции для образцов одного типа превышали 0.8 (0.82-0.85 — для подсолнечного масла и 0.82-0.86 для оливкового масла). Аналогично рассчитанные индексы схожести были в диапазоне 0.87- 0.93. Для образцов разных типов масел в случае использования отдельного набора из 44 признаков наблюдалась отрицательная корреляция (LLC = -0.88 / -0.55 в зависимости от способа нормировки). Предполагается, что данный способ может лечь в основу быстрого способа контроля качества масел по данным ГХ-МС анализа.

Поэтому на следующем этапе работы были усовершенствованы профили для обоих масел так, что они включают наиболее характерные пики, обеспечивающие хорошие показатели рассчитываемых коэффициентов.