

IDENTIFICAÇÃO ESTRUTURAL DE ÁC. GORDOS INSATURADOS POR GC-MS/MS COM ACETONITRILLO COMO REAGENTE DE IONIZAÇÃO QUÍMICA

S.P. Alves e R.J.B. Bessa

Estação Zootécnica Nacional, Instituto Nacional de Investigação Agrária e das Pescas, Fonte Boa, 2005-048 Vale de Santarém, Portugal

Os métodos clássicos de caracterização estrutural de ácidos gordos mono e poli-insaturados sob a forma de ésteres metílicos envolvem derivatização das duplas ligações ou do grupo carboxílico. Estes métodos requerem tratamentos químicos do analito, sujeitando a amostra a possíveis contaminações, reacções incompletas que reduzem a sensibilidade do método e possibilitam a formação de produtos secundários limitando assim a identificação estrutural dos ácidos gordos.

A cromatografia gasosa juntamente com a espectrometria de massa (GC/MS) permite a identificação das duplas ligações em ácidos gordos insaturados sem ser necessário recorrer a reacções químicas de derivatização. Esta técnica de GC/MS é uma técnica “tandem” (MS/MS) em que se utiliza acetonitrilo como reagente de ionização química. O acetonitrilo em condições de ionização química (CI) auto-reage produzindo um ião reagente de m/z 54. Este ião depois de adicionado covalentemente à dupla ligação do ácido gordo esterificado, gera um ião característico $[M+54]^+$. A dissociação induzida por colisão (MS/MS) do aducto $[M+54]^+$, produz uma série de iões filho que vão funcionar como iões diagnóstico da posição das duplas ligações.

A aplicação desta técnica permitiu-nos esclarecer que o C17:1 *cis*-9 é o isómero heptadecenóico predominantemente presente em gordura de leite e de carne de ruminantes. A definição isomérica deste ácido permanecia indefinida, ou mesmo incorrecta (*cis*-10) na maioria dos estudos recentes, em parte porque o C17:1 *cis*-10 é o único padrão comercialmente disponível.

O potencial de aplicação desta técnica é enorme, tendo em conta que as particularidades do processo digestivo e metabolismo lípidico em ruminantes originam a presença de um complexo perfil isomérico de ácidos gordos, tornando a sua identificação bastante difícil e apenas limitada a padrões comerciais.