

## **ВОЗМОЖНОСТЬ ИДЕНТИФИКАЦИИ ПРОИЗВОДНЫХ ФЕНОЛА В РАСТИТЕЛЬНЫХ ЭКСТРАКТАХ С ИСПОЛЬЗОВАНИЕМ АДДИТИВНЫХ СХЕМ РАСЧЕТА ИНДЕКСОВ УДЕРЖИВАНИЯ**

**В. А. Седакова**

(Учреждение образования «Могилевский государственный университет имени А. А. Кулешова»,  
кафедра естествознания)

*Приведены основные результаты литературного обзора по перспективному направлению исследования растительных экстрактов и идентификации в них фенольных производных.*

Согласно литературным данным [1; 2; 3] изучение фенольных соединений на сегодняшний день одно из ведущих направлений исследований в биохимии, фармакологии и пищевой промышленности, что обусловлено разнообразием их функций и высокой биологической активностью. Многие фенольные соединения проявляют противоопухолевую, противовоспалительную и антиаллергенную активность. Источниками фенольных соединений являются различные растительные экстракты [1].

Для идентификации фенольных производных в растительных экстрактах широко используются хроматографические методы анализа [2; 4], прежде всего такие как высокоэффективная жидкостная и газо-жидкостная. Указанные методы хроматографии характеризуются высокой специфичностью и чувствительностью, хорошей воспроизводимостью результатов анализа. Основной проблемой при хроматографическом анализе растительных экстрактов является наличие стандартов веществ, подлежащих идентификации [5], а также сведения о химическом составе экстрактов. Одним из решений данной проблемы является использование хромато-масс – спектроскопии при идентификации фенольных соединений в экстрактах, что предусматривает наличие специального дорогостоящего оборудования. Другим способом идентификации неизвестных фенольных соединений может быть установление их структуры с использованием аддитивных схем оценки газохроматографических индексов удерживания, предложенных И. Г. Зенкевичем с соавторами [6; 7; 8]. Идеей данного способа идентификации является возможность предварительного расчета газохроматографических индексов удерживания веществ, о которых отсутствует информация в базах данных.

Индекс удерживания Ковача соединения является его важнейшей характеристикой, которая определяется только физико-химическими свойствами анализируемого вещества, природой неподвижной фазы и температурным режимом колонки [8]. Расчет индексов удерживания проводят с использованием формулы:

$$RI = 100n \frac{\lg R_x - \lg R_N}{\lg R_{N+n} + \lg R_N} + 100N,$$

где  $R_x$ ,  $R_N$  и  $R_{N+n}$  – приведенные величины удерживания исследуемого вещества и  $n$  – алканов с  $N$  и  $N+n$  углеродными атомами.

По мнению авторов исследования [7], наиболее перспективным способом предварительного расчета индексов удерживания неизвестных соединений является модифицированная («безынкрементная») аддитивная схема, согласно которой необходимо выполнить следующие этапы [7]:

- из базы данных выбирают индексы удерживания соединений, наиболее полно отражающие структуры искомого вещества;
- из выбранных соединений составляют «суперпозицию», из которой вычитают дублирующие фрагменты;
- с индексами удерживания при этом выполняют аналогичные арифметические действия.

Таким образом, определение индексов удерживания органических соединений и их расчет с использованием аддитивных схем для малоизученных веществ (о которых отсутствует информация в базах данных) является перспективным направлением исследований для установления состава экстрактов и определения в них фенольных производных.

## Литература

1. Емельянова, И. А. Антиоксидантная и биологическая активность алкилметильных производных гидрохинона / И. А. Емельянова, Т. К. Багавиева, А. Е. Просенко // Фенольные соединения: свойства, активность, инновации : сборник научных статей по материалам X Международного симпозиума «Фенольные соединения : фундаментальные и прикладные аспекты», Москва, 14–19 мая 2018 г. – М. : ИФР РАН, 2018. – С. 71–75.
2. Леонтьев, В. Н. Газохроматографическая идентификация эфирных масел / В. Н. Леонтьев, А. Г. Шутова, Н. А. Коваленко, Г. Н. Супиченко, Е. В. Спиридович // Труды Белорусского государственного университета, 2006. – Том 1. Часть 1. <https://elib.bsu.by/handle/123456789/16076>
3. Хабибрахманова, В. Р. Комплексный подход по исследованию фенольных соединений лекарственного сырья / В. Р. Хабибрахманова, С. А. Коваленко, А. А. Пермякова, К. О. Сидорова, А. Ю. Капитонова, Н. С. Карамова, М. А. Сысоева // Фенольные соединения: свойства, активность, инновации : сборник научных статей по материалам X Международного симпозиума «Фенольные соединения: фундаментальные и прикладные аспекты», Москва, 14–19 мая 2018 г. – М. : ИФР РАН, 2018. – С. 541–544.
4. Колесникова, О. Н. Разработка и валидация методики количественного определения фенола методом газожидкостной хроматографии в биологических лекарственных препаратах / О. Н. Колесникова, О. Б. Рунова, О. Б. Устинникова // Химико-фармацевтический журнал, 2018. – Том 52. – № 5. – С. 60–64.
5. Бакова, Е. Ю. О фенольных соединениях мирта обыкновенного *Myrtus communis* L. / Е. Ю. Бакова, А. Е. Палий, Н. Н. Бакова // Фенольные соединения : свойства, активность, инновации : сборник научных статей по материалам X Международного симпозиума «Фенольные соединения: фундаментальные и прикладные аспекты», Москва, 14–19 мая 2018 г. – М. : ИФР РАН, 2018. – С. 222–226.
6. Зенкевич, И. Г. Интерпретация зависимости температур кипения изомерных органических соединений от динамических молекулярных параметров / И. Г. Зенкевич // Вестник СПбГУ, 2004. – Сер. 4. – Вып. 2. – С. 85–93.
7. Уколов, А. И. Установление структуры изомерных продуктов алкилирования аренов с использованием аддитивных схем оценки газохроматографических индексов удерживания / А. И. Уколов, И. Г. Зенкевич // Вестник СПбГУ, 2011. – Сер. 4. – Вып. 1. – С. 83–93.

8. Зенкевич, И. Г. Зависимость газохроматографических индексов удерживания от соотношения характеризующих и реперных компонентов / И. Г. Зенкевич, Е. С. Ивлева // Журнал аналитической химии, 2011. – Том 66. – № 1. – С. 47–55.

9. Царев, Н. И. Практическая газовая хроматография : учебно-методическое пособие для студентов химического факультета по спецкурсу «Газохроматографические методы анализа» / Н. И. Царев, В. И. Царев, И. Б. Катраков. – Барнаул : Изд-во Алт. ун-та, 2000. – 156 с.