

**ХИМИЧЕСКИЙ СОСТАВ Н-ГЕКСАНОВОГО ЭКСТРАКТА ТРАВЫ ЧАБРЕЦА (ТИМЬЯНА ПОЛЗУЧЕГО) (*THYMUS SERPYLLUM L.*, СЕМЕЙСТВО ЯСНОТКОВЫЕ – *LAMIACEAE*)
(Сообщение I)**

В.В. ПЛАТОНОВ*, Б.Г. ВАЛЕНТИНОВ****, Г.Т. СУХИХ***, В.А. ДУНАЕВ**, М.В. ВОЛОЧАЕВА***, В.Е. ФРАНКЕВИЧ***

*ООО «Террапромвест», ул. Перекопская, д. 5б, г. Тула, 300045, Россия

**Медицинский институт, Тульский государственный университет,
ул. Болдина, д. 128, г. Тула, 300012, Россия

***ФГБУ Национальный медицинский исследовательский центр акушерства, гинекологии
и перинатологии им. В.И. Кулакова, ул. Опарина, д.4, г. Москва, 117513, Россия

****АНО «ФАРМА 2030», рабочий поселок Шаховская,
деревня Судислово, дом 2б часть 2, помещение 2, Московская область, 143700, Россия

Аннотация. Цель исследования – методом хромато-масс-спектрометрии изучить химический состав органического вещества травы чабреца на примере его н-гексанового экстракта, получив данные о качественном составе и количественном содержании соединений, их масс-спектры и структурные формулы. **Материалы и методы исследования.** Высушенные облиственные веточки травы чабреца (тимьяна) размолоты в лабораторной фарфоровой шаровой мельнице, полученный порошок просеяли, с целью удаления толстых деревянных стеблей, после чего определенное количество порошка подвергли экстракции в аппарате Сокслета при температуре кипения н-гексана. Процесс экстракции заканчивали при достижении коэффициента преломления н-гексана равного его исходному значению, что составило 40 часов. Химический состав н-гексанового экстракта был изучен методом хромато-масс-спектрометрии при следующих условиях: использовался газовый хроматограф GC-2010, соединенный с тройным квадрупольным масс-спектрометром GCMS-TQ-8030 под управлением программного обеспечения GCMS Solution 4.11. **Результаты и их обсуждение.** Регистрация аналитических сигналов проводилась при следующих параметрах масс-спектрометра: температура переходной линии и источника ионов 280 и 250 °С, соответственно, электронная ионизация, диапазон регистрируемых масс от 50 до 500 Да. В статье приведены результаты хромато-масс-спектрометрии н-гексанового экстракта травы чабреца (тимьяна ползучего), позволившей идентифицировать в его составе 162 индивидуальных соединения, для которых определено количественное содержание, получены масс-спектры и структурные формулы; выполнен расчет структурно-группового состава экстракта. Основу экстракта составляют углеводороды (масс. %) – 65,30, в составе которых – 17,14% (масс. %) – терпенов; спирты – 10,47, сложные эфиры – 6,49, карбоновые кислоты – 5,29, альдегиды – 3,63, стерины – 3,32 сотых (масс. % от экстракта), соответственно. В незначительном количестве присутствуют: кетоны – 0,44, фуран и пиранпроизводные – 0,17, фенолы (*Thymol*, *карвакрол*) – 1,2 (масс. % от экстракта); отсутствуют гликозиды, азот- и серосодержащие соединения. Существенное преобладание в экстракте н-, изо- и циклоалканов, циклоалкенов; широкой гаммы терпенов, наличие тимола и карвакрола указывает на то, что н-гексан преимущественно экстрагировал основную часть эфирного масла органического вещества травы чабреца. Направления фармакологического действия экстракта будет определяться указанным выше набором соединений. **Заключение.** Методом хромато-масс-спектрометрии впервые подробно изучены особенности химического состава эфирного масла травы чабреца на примере его н-гексанового экстракта, в котором идентифицировано 162 индивидуальных соединений, охарактеризованных масс-спектрами, структурными формулами, количественным содержанием каждого из них. Установлено, что н-гексан экстрагировал состав органического вещества травы чабреца соединения в большой степени отвечающей составу эфирного масла, соответственно этому делается определенный вывод о специфической фармакологической деятельности н-гексанового экстракта.

Ключевые слова: чабрец, экстракция, масс-спектрометрия.

CHEMICAL COMPOSITION OF N-HEXANE EXTRACT OF THYME HERB (CREEPING THYME)
(THYMUS SERPYLLUM L., FAMILY OF CLEAR-FLOWERED LAMIACEAE)
(Message I)

V.V. PLATONOV*, B.G. VALENTINOV****, G.T. SUKHIIH***, V.A. DUNAEV**, M.V. VOLOCHAEVA***,
V.E. FRANKEVICH****

*Terraprominvest LLC, 5b Perekopskaya str., Tula, 300045, Russia

**Medical Institute, Tula State University, Boldina str., 128, Tula, 300012, Russia

***Kulakov National Medical Research Center of Obstetrics, Gynecology and Perinatology,
Oparina str., 4, Moscow, 117513, Russia

****ANPO "Scientific and Educational Center for Innovative Medicine PHARMA 2030,
w/s Shakhovskaya, village Sudislovo, building 2b part 2, buil. 2, Moscow region, 143700, Russia

Abstract. The aim of the study was to study the chemical composition of organic matter of thyme herb by chromatography-mass spectrometry using the example of its n-hexane extract, obtaining data on the qualitative composition and quantitative content of compounds, their mass spectra and structural formulas. **Materials and methods of research.** Dried leafy twigs of thyme (thyme) grass were ground in a laboratory porcelain ball mill, the resulting powder was sifted to remove thick wooden stems, after which a certain amount of powder was extracted in a Soxlet apparatus at the boiling point of n-hexane. The extraction process was completed when the refractive index of n-hexane was reached equal to its initial value, which was 40 hours. The chemical composition of the n-hexane extract was studied by chromatography-mass spectrometry under the following conditions: a GC-2010 gas chromatograph was used, coupled with a GCMS-TQ-8030 triple quadrupole mass spectrometer running GCMS Solution 4.11 software. **Results and discussion.** The registration of analytical signals was carried out at the following parameters of the mass spectrometer: the temperature of the transition line and the ion source 280 and 250 ° C, respectively, electron ionization, the range of recorded masses from 50 to 500 Da. The article presents the results of chromatography-mass spectrometry of the n-hexane extract of thyme herb (creeping thyme), which made it possible to identify 162 individual compounds in its composition, for which the quantitative content was determined, mass spectra and structural formulas were obtained; the structural and group composition of the extract was calculated. The basis of the extract is made up of uglyovo-doroda (mass. %) – 65.30, of which - 17.14% (wt. %) - terpenes; alcohols - 10.47, esters - 6.49, carboxylic acids - 5.29, aldehydes - 3.63, sterols - 3.32 hundredths (wt. % of the extract), respectively. In a small amount there are: ketones - 0.44, furan and pyran derivatives - 0.17, phenols (Thymol, carvacrol) - 1.2 (wt. % of the extract); there are no glycosides, nitrogen- and sulfur-containing compounds. The significant predominance of n-, iso- and cycloalkanes, cycloalkens in the extract; a wide range of terpenes, the presence of thymol and carvacrol indicates that n-hexane mainly extracted the main part of the essential oil of the organic substance of thyme herb. The directions of the pharmacological action of the extract will be determined by the above set of compounds. **Conclusion.** Chromatography-mass spectrometry was used for the first time to study in detail the features of the chemical composition of thyme herb essential oil on the example of its n-hexane extract, in which 162 individual compounds were identified, characterized by mass spectra, structural formulas, and the quantitative content of each of them. It was found that n-hexane extracted the composition of the organic substance of the thyme herb of the compound largely corresponding to the composition of the essential oil, accordingly, a certain conclusion is made about the specific pharmacological activity of the n-hexane extract.

Keywords: thyme, extraction, mass spectrometry.

Введение. Чабрец (тимьян ползучий) – *Thymus serpyllum L.*, семейство яснотковые – *Lamiaceae* – многолетний стелющейся полукустарник, образующий дверновники. Стебли стелющиеся, в нижней части деревянистые, красно-бурые, несущие многочисленные цветоносные и олиственные веточки высотой до 15 см [1, 2, 5, 8, 15-17].

Цель исследования – методом хромато-масс-спектрометрии изучить химический состав органического вещества травы чабреца на примере его н-гексанового экстракта, получив данные о качественном составе и количественном содержании соединений, их масс-спектры и структурные формулы, что необходимо для обоснования различных направлений фармакологического действия препаратов травы чабреца, а также расширения наших знаний в данных вопросах, в дополнение к известным в научных публикациях.

Материалы и методы исследования. Высушенные облиственные веточки травы чабреца (тимьяна) размолоты в лабораторной фарфоровой шаровой мельнице, полученный порошок просеяли, с целью удаления толстых деревянных стеблей, после чего определённое количество порошка подвергли экстракции в аппарате Сокслета при температуре кипения н-гексана. Процесс экстракции заканчивали при

достижении коэффициента преломления н-гексана равного его исходному значению, что составило 40 часов.

По окончании процесса н-гексан отогнали в вакуумном роторном испарителе, получив светло-зеленый маслянистый экстракт, который для полного удаления н-гексана дополнительно выдержали в вакуумном сушильном шкафу. Полученный экстракт охладили до постоянной массы и взвесили, определив его выход (масс. % от исходного сырья).

Химический состав н-гексанового экстракта был изучен методом хромато-масс-спектрометрии при следующих условиях: использовался газовый хроматограф GC-2010, соединенный с тройным квадрупольным масс-спектрометром GCMS-TQ-8030 под управлением программного обеспечения (ПО) GCMS Solution 4.11.

Идентификация и количественное определение содержания соединений проводились при следующих условиях хроматографирования: ввод пробы с делением потока (1:10), колонка ZB-5MS (30 м × 0.25 мм × 0.25 мкм), температура инжектора 280 °С, газ-носитель – гелий, скорость газа через колонку 29 мл/мин.

Результаты и их обсуждение. Регистрация аналитических сигналов проводилась при следующих параметрах масс-спектрометра: температура переходной линии и источника ионов 280 и 250 °С, соответственно, электронная ионизация (ЭИ), диапазон регистрируемых масс от 50 до 500 Да [11].

Хроматограмма н-гексанового экстракта дана на рис.

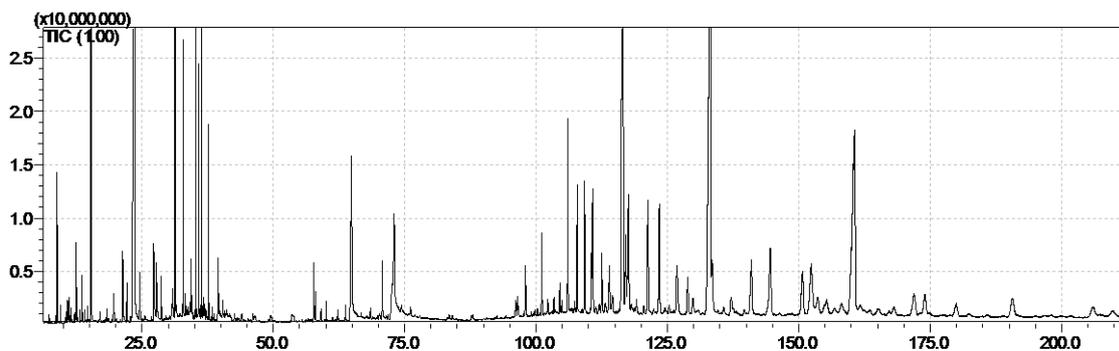


Рис. Хроматограмма

Перечень соединений, идентифицированных в экстракте травы чабреца, их количественное содержание, приведены в табл., данные которой были использованы для расчета структурно-группового состава экстракта.

Таблица

Список соединений

1	7.346	0,02	<i>o</i> -Xylene
2	8.567	0,03	(1 <i>R</i>)-2,6,6-Trimethylbicyclo[3.1.1]hept-2-ene
3	8.842	0,39	(1 <i>S</i>)-2,6,6-Trimethylbicyclo[3.1.1]hept-2-ene
4	9.470	0,04	Camphene
5	10.383	0,01	.alpha.-Pinene
6	10.545	0,03	Bicyclo[3.1.1]heptane, 6,6-dimethyl-2-methylene-, (1 <i>S</i>)-
7	10.856	0,07	1-Octen-3-ol
8	10.946	0,03	Bicyclo(3.1.1)heptane-2,3-diol, 2,6,6-trimethyl-
9	11.059	0,07	.beta.-Pinene
10	11.327	0	1,4-Pentadiene, 2,3,3-trimethyl-
11	11.463	0,03	3-Octanol
12	12.059	0,02	Cyclohexene, 1-methyl-4-(1-methylethylidene)-
13	12.376	0,21	<i>p</i> -Cymene
14	12.523	0,1	Cyclohexene, 1-methyl-4-(1-methylethenyl)-, (1 <i>S</i>)-
15	12.608	0,09	Eucalyptol
16	12.802	0,01	(1 <i>S</i>)-2,6,6-Trimethylbicyclo[3.1.1]hept-2-ene
17	13.185	0,03	.beta.-Ocimene

18	13.597	0,12	<i>.gamma.-Terpinene</i>
19	14.073	0,04	<i>.alpha.-Methyl-.alpha.-[4-methyl-3-pentenyl]oxiranemethanol</i>
20	14.547	0,01	<i>(3-tert-Butyl-5-hydroxymethyl-cyclohex-2-enyl)-methanol</i>
21	14.644	0,04	<i>.alpha.-Methyl-.alpha.-[4-methyl-3-pentenyl]oxiranemethanol</i>
22	15.053	0,01	<i>Octane, 2-bromo-</i>
23	15.290	5,58	<i>Cyclohexanol, 2-methyl-5-(1-methylethenyl)-, (1.alpha.,2.alpha.,5.beta.)-</i>
24	15.587	0	<i>7-Thiabicyclo[4.1.0]heptane, 3-methyl-</i>
25	17.006	0,05	<i>(+)-2-Bornanone</i>
26	18.049	0,01	<i>Cyclohexene, 1-methyl-3-vinyloxy-</i>
27	18.299	0,05	<i>endo-Borneol</i>
28	18.444	0,01	<i>2-Furanmethanol, 5-ethenyltetrahydro-.alpha.,.alpha.,5-trimethyl-, cis-</i>
29	18.595	0,02	<i>Carane, 4,5-epoxy-, trans</i>
30	19.553	0,15	<i>.alpha.-Terpineol</i>
31	19.703	0,05	<i>Butanoic acid, 3-hexenyl ester, (Z)-</i>
32	20.156	0,01	<i>Bicyclo[2.2.2]octane, 1-bromo-4-methyl-</i>
33	21.306	0,51	<i>2,6-Octadien-1-ol, 3,7-dimethyl-, (Z)-</i>
34	21.647	0,03	<i>Oxiranecarboxaldehyde, 3-methyl-3-(4-methyl-3-pentenyl)-</i>
35	22.120	0,21	<i>Bicyclo[3.1.1]hept-3-en-2-ol, 4,6,6-trimethyl-, [1S-(1.alpha.,2.beta.,5.alpha.)]-</i>
36	22.836	0,03	<i>1,6-Octadien-3-ol, 3,7-dimethyl-, 2-aminobenzoate</i>
37	23.710	13,63	<i>(-)-cis-Myrtanol</i>
38	24.565	0,32	<i>2,6-Octadienal, 3,7-dimethyl-, (Z)-</i>
39	25.579	0,04	<i>But-2-ynoic acid, 1,7,7-trimethyl-bicyclo[2.2.1]hept-2-yl ester</i>
40	26.797	0,02	<i>(R)-lavandulyl acetate</i>
41	27.228	0,7	<i>Thymol</i>
42	27.742	0,5	<i>Carvakrol</i>
43	28.040	0,04	<i>.gamma.-Elemene</i>
44	28.643	0,19	<i>Cyclohexane, 1-ethenyl-1-methyl-2-(1-methylethenyl)-4-(1-methylethylidene)-</i>
45	29.480	0,01	<i>.alpha.-Cubebene</i>
46	29.607	0,02	<i>Bicyclo[2.2.1]hept-2-ene, 1,7,7-trimethyl-</i>
47	30.307	0,01	<i>4-Hexen-1-ol, 5-methyl-2-(1-methylethenyl)-, acetate</i>
48	30.882	0,34	<i>Neric acid</i>
49	31.315	2,94	<i>Neryl (S)-2-ethylbutanoate</i>
50	31.631	0,04	<i>Cyclohexane, 1-ethenyl-1-methyl-2,4-bis(1-methylethenyl)-, [1S-(1.alpha.,2.beta.,4.beta.)]-</i>
51	32.853	1,07	<i>Bicyclo[5.2.0]nonane, 2-methylene-4,8,8-trimethyl-4-vinyl-</i>
52	33.279	0,15	<i>.beta.-Copaene</i>
53	33.627	0,04	<i>Guai-1(10),11-diene</i>
54	33.834	0,06	<i>1,6-Cyclodecadiene, 1-methyl-5-methylene-8-(1-methylethyl)-, [S-(E,E)]-</i>
55	34.267	0,35	<i>Bicyclo[7.2.0]undec-4-ene, 4,11,11-trimethyl-8-methylene-, [1R-(1R*,4Z,9S*)]-</i>
56	34.453	0,19	<i>Alloaromadendrene</i>
57	35.032	0,04	<i>.alfa.-Copaene</i>
58	35.250	1,6	<i>1,6-Cyclodecadiene, 1-methyl-5-methylene-8-(1-methylethyl)-, [S-(E,E)]-</i>
59	35.789	1,05	<i>1,6-Cyclodecadiene, 1-methyl-5-methylene-4-(1-methylethyl)-, [S-(E,E)]-</i>
60	36.332	1,72	<i>Bicyclo[5.2.0]nonane, 2-methylene-4,8,8-trimethyl-4-vinyl-</i>
61	36.523	0,06	<i>Isoledene</i>
62	36.716	0,11	<i>.alfa.-Copaene</i>
63	36.987	0,08	<i>Cedrene</i>
64	37.268	0,05	<i>2(4H)-Benzofuranone, 5,6,7,7a-tetrahydro-4,4,7a-trimethyl-, (R)-</i>

65	37.672	0,78	<i>cis</i> -.alpha.-Bisabolene
66	38.164	0,02	Isoaromadendrene epoxide
67	38.382	0,07	(R)-lavandulyl acetate
68	38.711	0,03	Caryophyllene
69	39.487	0,55	1H-Cycloprop[e]azulen-3-ol, decahydro-1,1,7-trimethyl-4-methylene-, [1ar-(1a.alpha.,4a.alpha.,7.beta.,7a.beta.,7b.alpha.)]-
70	40.406	0,17	Neryl (S)-2-methylbutanoate
71	40.825	0,11	Neryl (S)-3-methylbutanoate
72	41.161	0,15	1H-Cycloprop[e]azulen-5-ol, decahydro-1,1,7-trimethyl-4-methylene-, [1ar-(1a.alpha.,4a.alpha.,7.beta.,7a.beta.,7b.alpha.)]-
73	42.591	0,06	1H-Cycloprop[e]azulen-7-ol, decahydro-1,1,7-trimethyl-4-methylene-, [1ar-(1a.alpha.,4a.alpha.,7.beta.,7a.beta.,7b.alpha.)]-
74	43.189	0,07	Isoledene
75	44.041	0,06	Cubenol
76	45.223	0,04	Andrographolide
77	46.101	0,09	Andrographolide
78	46.482	0,08	Lanceol, cis
79	49.110	0,02	(-)-Spathulenol
80	49.485	0,11	Benzoic acid, 2,4-dihydroxy-3,6-dimethyl-, methyl ester
81	53.532	0,11	Tetradecanoic acid
82	55.477	0,01	Cholestane, 4,5-epoxy-, (4.alpha.,5.alpha.)-
83	56.588	0,02	1-Octadecyne
84	56.881	0,05	Longipinocarveol, trans-
85	57.671	0,32	3-Octadecyne
86	58.014	0,17	2-Pentadecanone, 6,10,14-trimethyl-
87	59.087	0,1	7-Octadecyne, 2-methyl-
88	60.057	0,1	7-Octadecyne, 3-methyl-
89	61.244	0,02	Nonane, 3-methyl-5-propyl-
90	62.052	0,02	9-Octadecenal, (Z)-
91	62.296	0,06	Cyclodecasiloxane, eicosamethyl-
92	62.507	0,01	Hexadecanoic acid, methyl ester
93	63.709	0,09	Dibutyl phthalate
94	64.886	2,04	n-Hexadecanoic acid
95	68.486	0,06	Cyclooctasiloxane, hexadecamethyl-
96	70.215	0,07	2-Acetoxy-1,1,10-trimethyl-6,9-epidioxydecalin
97	70.733	0,39	Phytol
98	71.461	0,05	5,8,11,14,17-Eicosapentaenoic acid
99	71.787	0,03	Cyclododecyne
100	72.996	2,75	9,12,15-Octadecatrienoic acid, (Z,Z,Z)-
101	74.400	0,46	Octadecanoic acid
102	76.111	0,25	Cyclononasiloxane, octadecamethyl-
103	77.920	0,02	1,1'-Bicyclopentyl, 2-hexadecyl-
104	83.147	0,04	Acetic acid, trifluoro-, undecyl ester
105	83.519	0,06	Hexadecanoic acid, 1-(hydroxymethyl)-1,2-ethanediyl ester
106	84.089	0,05	Heptacosane, 1-chloro-
107	88.005	0,11	2H-Pyran-2-one, tetrahydro-6-nonyl-
108	96.442	0,42	Methyl 8,11,14,17-eicosatetraenoate
109	97.992	0,43	2-methyloctacosane
110	99.093	0,08	Phthalic acid, 6-methylhept-2-yl octadecyl ester
111	99.787	0,12	Butanoic acid, 3-methyl-, 1-ethenyl-1,5-dimethyl-4-hexenyl ester
112	100.278	0,09	9,19-Cyclolanost-23-ene-3,25-diol, 3-acetate, (3.beta.,23E)-
113	101.094	0,56	Tetracontane
114	102.206	0,31	2-methyloctacosane
115	103.411	0,39	Tetradecanal-

116	104.516	0,34	<i>Tetracosane</i>
117	104.907	0,2	<i>Pentacosane</i>
118	106.043	1,56	<i>Hexacosane</i>
119	106.741	0,19	<i>Pentanoic acid, 1-ethenyl-1,5-dimethyl-4-hexenyl ester</i>
120	107.813	1,02	<i>Butanoic acid, 3-methyl-, 1-ethenyl-1,5-dimethyl-4-hexenyl ester</i>
121	108.747	0,1	<i>2-methyltetracosane</i>
122	109.233	1,15	<i>Heptacosane</i>
123	110.788	1,65	<i>6,10,14,18,22-Tetracosapentaen-2-ol, 3-bromo-2,6,10,15,19,23-hexamethyl-, (all-E)-</i>
124	112.523	0,65	<i>Pentadecanal-</i>
125	113.954	0,62	<i>Octacosane</i>
126	114.540	0,42	<i>2-methylheptacosane</i>
127	116.543	8,9	<i>2-methylhexacosane</i>
128	117.079	0,95	<i>(-)-trans-Myrtanyl acatate</i>
129	117.603	1,6	<i>i-Propyl 9,12,15-octadecatrienoate</i>
130	118.149	0,26	<i>2,6,10,14-Tetramethyl-7-(3-methylpent-4-enylidene) pentadecane</i>
131	119.116	0,37	<i>Bicyclo[4.1.0]heptan-3-ol, 4,7,7-trimethyl-, [1R-(1.alpha.,3.beta.,4.alpha.,6.alpha.)]-</i>
132	120.487	0,22	<i>2-methyloctacosane</i>
133	121.295	1,41	<i>Nonacosane</i>
134	123.452	1,49	<i>Decacosane</i>
135	124.541	0,24	<i>9-Hexacosene</i>
136	125.355	0,21	<i>Cholesta-4,6-dien-3-ol, (3.beta.)-</i>
137	126.240	0,15	<i>.gamma.-Tocopherol</i>
138	126.825	0,94	<i>Hexadecanal-</i>
139	128.835	0,63	<i>Triacosane</i>
140	129.841	0,36	<i>2-methylnonacosane</i>
141	130.987	0,2	<i>10-Nonadecanone</i>
142	133.149	10,82	<i>Heitricontane</i>
143	135.720	0,24	<i>9-Heptacosene</i>
144	137.136	0,44	<i>Tetracontane-1,40-diol</i>
145	139.612	0,12	<i>2-methyldocontane</i>
146	140.971	1,07	<i>Nonacosane</i>
147	144.562	1,46	<i>Dotricontane</i>
148	150.695	1,02	<i>Heptadecanal-</i>
149	152.365	1,66	<i>.beta.-Sitosterol</i>
150	153.595	0,57	<i>Nonacosane</i>
151	155.310	0,65	<i>2-methyltriacontane</i>
152	158.125	0,49	<i>1,1,4a-Trimethyl-5,6-dimethylenedecahydronaphthalene</i>
153	160.587	6,24	<i>Tritriacontane</i>
154	161.764	0,36	<i>(1S,6R,9S)-5,5,9,10-Tetramethyltricyclo[7.3.0.0(1,6)]dodec-10(11)-ene</i>
155	168.085	0,24	<i>3,7,11,15-Tetramethyl-2-hexadecen-1-ol</i>
156	171.918	0,69	<i>Cholest-4-en-3-one</i>
157	173.964	0,56	<i>Tetratriacontane</i>
158	179.955	0,37	<i>Tetratetracontane</i>
159	190.681	0,65	<i>Octadecanal-</i>
160	205.954	0,4	<i>Tetrapentacontane</i>
161	209.741	0,3	<i>Urs-12-en-28-al</i>
162	212.689	0,07	<i>2-Pentacosanone</i>

Характерной особенностью состава н-гексанового экстракта травы чабреца является значительное преобладание в нём углеводов – 65,30 (масс. % от экстракта), из которых до 26,25 (масс. % от суммы углеводов) приходится на терпены и их производные, например, *Camphen*, α - и β -*Pinen*, *n-Cymen*, β -*Ocimen*, γ -*Tetpinen*, α -*Cubeben*, α - и β -*Copaen*, *Cedren*, *Caryophyllen*, (+)-*2-Bornanon*, *endo-Borneol*, *Caren*, *4,5-epoxy-trans*; (-)-*cis Myrtanol*, γ -*Elemen*, *Jsolden* и другие. Среди углеводов доминируют н-алканы

(от C_{13} до C_{54}), алкилзамещенные циклогексаны и циклогексены (*Cyclohexan, 1-ethenyl-1-methyl-2-(1-methyl ethenyl)-4-(1-methylethyliden) Cyclohexen, 1-methyl-4-(1-methyl-ethyliden)*; *Cyclohexen, 1-methyl-3-vinyloxy*; *Cyclohexen, 1-ethenyl-1-methyl-2.4-bis(1-methylethenyl)-[1S-(1.α., 2.β., 4.β.)]*); бициклических углеводородов: *Bicyclo [3.1.1] heptan, 6,6-dimethyl-2-methylene-, (1s)*; *Bicyclo [2.2.2] octan, 1-bromo-4-methyl*; *Bicyclo [2,2.1] hept-2-ene, 1,7,7-trimethyl*; значительное количество алкинов (C_{18}, C_{19}): *1-Octadecyn, 3-Octadecyn, 7-Octadecyn, 2-methyl, 7-Octadecyn, 3-methyl, Cyclododecyn (C₁₂)*; аренов: *o-Xylen*; *1,1'-Bicyclopentyl, 2-hexadecyl*; *1,1,4a-Trimetgylenedecahydronaphalen* и др.

Перечень инфицированных терпенов и их производных соответствует составу эфирного масла травы чабреца, указанному в научных публикациях.

Среди карбоновых кислот отмечено преобладание количественного содержания: *9,12, 15-Octadecatrienoic acid (Z,Z,Z)*; C_{18} – 51.28 и 5.8, *11, 14, 17-Eicosapentaenoic acid (C₂₀)* – 0.95, а также *n-Hexadecanoic acid* – 38.56 (масс. % от суммы кислот), соответственно. Важным является присутствие в экстракте полиненасыщенных жирных карбоновых кислот, содержащих 3 и 5 двойных связей. Особую роль играет линолевая кислота: *9,12,15-Octadecatrienoic acid (Z,Z,Z)*, легко превращаются в организме в арахидоновую кислоту. Полиненасыщенные жирные карбоновые кислоты нередко именуют витамином F, недостаток которого сопровождается дерматитом, бесплодием, патологическими изменениями в почках, снижением сопряженности окисления и фосфорилирования, дыхательного контроля в митохондриях, гиперлипидемией.

Основная физиологическая роль ненасыщенных жирных кислот, по-видимому, состоит в их участии в построении клеточных мембран и в синтезе простагландинов. Арахидоновая кислота является необходимым исходным продуктом для биосинтеза всей суммы простагландинов, простаглицина, тромбоксанов, лейкотриенов, образующих «каскад арахидоновой кислоты». Они выполняют функцию тканевых регуляторов (аутокоидов), а также отрицательную роль при патологических состояниях (аллергии, воспалительных реакциях и т.п.).

Защита полиненасыщенных жирных кислот в различных тканях, особенно в печени, от перекисного окисления (антиоксидантный эффект) осуществляется витамином E (*α-Tocopherol*), который присутствует во фракции стероидов, среди которых также обнаружены: *β-Sitosterol, Cholest-4-en-3-one, Cholesta-4,6-dien-3-ol, (3.β.), Cholestan, 4,5-epoxy-, (4.α., 5.α.)*; *9,19-Cyclolanost-23-ene-3,25-diol, 3-acetat (3.β., 23 E)* и другие. Определенную роль в защите ненасыщенных соединений различных классов от перекисного окисления играют фенолы, например, тимол и корвакрол присутствующие в эфирном масле травы чабреца. Антиоксидантный эффект растительных фенолов сопоставим с активностью этанола – *α-Tocopherola*, или превосходит её. Растительные фенолы проявляют противомикробное, мембраностабилизирующее и цитозащитное действие.

Поставщиками различных ненасыщенных карбоновых кислот также являются (*9-Octadecenal (Z)*, *2,6-Octadeienal, 3,7-dimethyl-, (Z)*, а сложные эфиры – карбоновые кислоты, образующиеся при гидравлической и биохимической перэтерификации эфиров, доля которых в н-гексановом экстракте – 3,63 и 6,49 (масс.%) соответственно.

Фуран и производные (флавоноиды) представлены в экстракте соединениями: *2-Furannethanol, 5-ethenyltetrahydro-, α,α, 5trimethyl-, cis*; *2H-Puran-2-one, tetrahydro-6-nonyl* и *2(4H)-Benzofuranon, 5,6,7,7a-tetrahydro-4,4,7a-trimethyl-, - (R)*, в количестве – 0,17 (масс. %). Они проявляют капилляроукрепляющее (P-витаминное), кардиотропное, спазмолитическое и гипотензивное, кровоостанавливающие, мочегонное, желчегонное и защитное действия.

Например, спазмолитическое действие проявляется в отношении коронарных, меньше мозговых сосудов, кишечника, бронхов, матки, желчевыводящих путей; гипотензивное – при лечении начальных стадий гипертонической болезни; кардиотоническое – связано с первичным положительным влиянием на энергетический обмен миокарда (повышение утилизации глюкозы, коэффициента полезного действия использования кислорода), обогащением сердца ионами калия.

Спирты, присутствующие в н-гексановом экстракте травы чабреца, имеют достаточно сложную структуру их молекул; свободные спирты весьма ограничены: *1-Octen-3-ol, 3-Octanol, 2,6-Octadien-1-ol, 3,7-dimethyl-, (Z)*, а в основном они являются производными циклогексана, высокомолекулярных алканов и алкенов: *Bicyclo[3.1.1]heptan-2,3-diol, 2,6,6-trimethyl, Bicyclo[3.1.]hept-3-en-2-ol, 4,6,6-trimethyl, - [1S-(1.α., 2.β., 5.α.)]*, *Bicyclo [4.1.0] heptan-ol, 4,7,7-trimethyl-, [1R-(1.α., 3.β., 4.α., 6.α.)]*; *1H-Cycloprop [e] azulen-5-ol, decohydro-1,1,7-trimethyl-4-methylene-, [1ar(1a.α., 4a.α., 7.β., 7a.β., 76.α.)]*; *1H-Cycloprop[e]azulen-7-ol, decahydro-1,1,7-trimethyl-4-methylene-, [1ar(1a.α., 4a.α., 7.β., 7a.β., 76.α.)]*; *Tetracontan – 1.40-diol*; *4-Hexen-1-ol, 5-methyl-2-(1-methylethenyl)-, acetat*; *Cyclohexanol, 2methyl-5-(1-methylethenyl)-, (1.α., 2.α., 5.β)*, на который приходится – 57,29 (масс. % от суммы спиртов).

Кетоны представлены только тремя соединениями: *2-Pentadecanon, 6,10,14-trimethyl, 10-Nonadecanon, 2-Pentacosanon*, при общем содержании в экстракте – 0,44 (масс. %).

Перечень соединений, идентифицированных в н-гексановом экстракте, указывает на факт достаточно селективной экстракции н-гексаном основной доли эфирного масла – одной из составляющей час-

тей органического вещества травы чабреца, обогащённой широкой гаммой терпенов, азуленов, стериннов, n- и изоалканов, циклогексанов и циклогексенов, небольшим набором насыщенных и полиненасыщенных жирных карбоновых кислот, сложных эфиров, спиртов и кетонов. n-гексан, как неполярный растворитель, практически не затронул основных представителей фенолов, флавоноидов, ксантонов, азот- и серосодержащих соединений, гликозидов, альдегидов. Обогащение препаратов травы чабреца строго определенным набором соединений весьма важно для их получения с появлением специфической направленности фармакологического действия, только в узком спектре заболеваний [4, 6, 9, 13].

Заключение. Методом хромато-масс-спектрометрии впервые подробно изучены особенности химического состава эфирного масла травы чабреца на примере его n-гексанового экстракта, в котором идентифицировано 162 индивидуальных соединений, охарактеризованных масс-спектрами, структурными формулами, количественным содержанием каждого из них. Установлено, что n-гексан экстрагировал состав органического вещества травы чабреца соединения в большой степени отвечающей составу эфирного масла, соответственно этому делается определенный вывод о специфической фармакологической деятельности n-гексанового экстракта.

Литература

1. Булавин И.В. Морфолого-анатомическая и генетическая характеристика некоторых сортов чабреца из коллекции никитского ботанического сада // Ученые записки Крымского федерального университета имени В.И. Вернадского. Биология. Химия. 2020. Т. 6 (72), № 4. С. 24–35.
2. Бязиева Х.Г.В. Применение чабреца в народе и в медицине // Студенческий. 2021. № 22-1 (150). С. 80–81.
3. Гагуева А.У., Курбанов А.М., Степанова Э.Ф. способ получения жидкого экстракта чабреца. Патент на изобретение RU 2684780 C1, 15.04.2019. Заявка № 2018119074 от 23.05.2018.
4. Гагуева А.У., Степанова Э.Ф. Лекарственные препараты отхаркивающего действия. роль растительных источников в терапии кашля: изученность, ассортимент, востребованность // Астраханский медицинский журнал. 2018. Т. 13, № 4. С. 23–31.
5. Григорян К.М., Саргсян М.П., Овсепян В.В. Микробиологическая безопасность и антибактериальная активность сушеной травы чабреца, произрастающей в Армении. В сборнике: Научный и инновационный потенциал развития производства, переработки и применения эфиромасличных и лекарственных растений. Материалы Международной научно-практической конференции. Научный редактор В.С. Паштецкий. Ответственные редакторы Л.А. Радченко, Н.В. Невкрытая. 2019. С. 220–221.
6. Ермолаев И.И., Еканина С.В. Сравнительная оценка количественного содержания тимола в жидких экстрактах, полученных из тимьяна обыкновенного травы и тимьяна ползучего (чабреца) травы // Известия ГГТУ. Медицина, фармация. 2021. № 2. С. 21–27.
7. Кароматов И.Д., Асадова Ш.И. Лекарственное растение чабрец обыкновенный // Биология и интегративная медицина. 2017. № 11. С. 168–178.
8. Койшыманов Т.Т. Оптимизация внешних условий культивирования каллусов *Thymus serpyllum* L.-чабреца лекарственного. В сборнике: Фундаментальные и прикладные исследования: от теории к практике. Материалы II международной научно-практической конференции, приуроченной ко Дню российской науки. Воронежский экономико-правовой институт, Баткенский государственный университет, 2018. С. 220–222.
9. Маскурова Ю.В., Лалиева З.В., Гайворонская Т.В., Рисованная О.Н. Повышение эффективности лечения воспалительных заболеваний пародонта на фоне психоэмоционального напряжения // Современные проблемы науки и образования. 2018. № 6. С. 146.
10. Одинец А.Г., Сбежнева В.Г., Михайлов В.И. Фармакологические свойства и анализ природных соединений (антибиотики, растительное лекарственное сырье, содержащее сапонины, полиацетилены, флавоноиды). М.: Квадрига, 2011. 287 с.
11. Платонов В.В., Хадарцев А.А., Волочаева М.В., Датиева Ф.С., Дунаева И.В. Адсорбционная жидкостная хроматография n-гексанового элюата этанольного экстракта зелёного грецкого ореха и его листьев (*Juglas Regia* L., семейство ореховые – *Juglandaceae*) (сообщение I) // Вестник новых медицинских технологий. Электронное издание. 2021. №2. Публикация 3-3. URL: <http://www.medsu.tula.ru/VNMT/Bulletin/E2021-2/3-3.pdf> (дата обращения: 13.04.2021). DOI: 10.24412/2075-4094-2021-2-3-3
12. Тарасова В.Н. Аналитическая характеристика пектиновых веществ травы чабреца. В сборнике: Поколение будущего: Взгляд молодых ученых- 2017. Сборник научных статей 6-й Международной молодежной научной конференции. В 4-х томах. Ответственный редактор А.А. Горохов. 2017. С. 119–121.
13. Фурман Ю.В., Хвостовой В.В., Быканова А.М. Окислительная по активность экстрактов лекарственных трав // Российская наука и образование сегодня: проблемы и перспективы. 2018. № 6 (25). С. 36–38.

14. Хазиев Р.Ш., Гатиятуллина И.Р., Гумаров Р.Р., Елизарова Е.С. Новые подходы к стандартизации травы чабреца. В сборнике: Новые достижения в химии и химической технологии растительного сырья. Материалы VIII Всероссийской конференции с международным участием / Под ред. Н.Г. Базарновой, В.И. Маркина. 2020. С. 127–129.

15. Щербаков Д.М. Исследование состава эфирных масел чабреца. В сборнике: химия и химическая технология в XXI веке. Материалы XXI Международной научно-практической конференции студентов и молодых ученых имени выдающихся химиков Л.П. Кулёва и Н.М. Кижнера, посвященной 110-летию со дня рождения профессора А.Г. Стромберга. Томск, 2020. С. 628–629.

16. Anonymous. thumi-herba (<https://www.ema.europa.eu/en/medicines/herba/thumi-herba>) (англ). European Medicines Agency (17 September 2018) (Дата обращения 26 сентября 2019).

17. WHO Monographs on Selected Medicinal Plants - Volume 1: Herba Thymi (<http://apps.who.int/medicinedocs/en/d/js/2200e/28.html>). apps.who.int (Дата обращения 26 сентября 2019).

References

1. Bulavin IV. Morfolologo-anatomicheskaja i geneticheskaja harakteristika nekotoryh sortov chabreca iz kollekcii nikitskogo botanicheskogo sada [Morphological-anatomical and genetic characteristics of some thyme varieties from the collection of the Nikitsky Botanical Garden]. Uchenye zapiski Krymskogo federal'nogo universiteta imeni V.I. Vernadskogo. Biologija. Himija. 2020;6 (72): 24–35. Russian.

2. Bjazieva HGV. Primenenie chabreca v narode i v medicine [The use of thyme in the people and in medicine]. Studencheskij. 2021;22-1 (150):80-1. Russian.

3. Gagueva AU, Kurbanov AM, Stepanova JeF. sposob poluchenija zhidkogo jekstrakta chabreca [method of obtaining liquid thyme extract]. Russian Federation Patent na izobrenenie RU 2684780 C1, 15.04.2019. Zajavka № 2018119074 ot 23.05.2018. Russian.

4. Gagueva AU, Stepanova JeF. Lekarstvennyye preparaty otharkivajushhego dejstvija. rol' rastitel'nyh istochnikov v terapii kashlja: izuchennost', assortiment, vostrebovannost' [Expectorant drugs. the role of herbal sources in cough therapy: study, assortment, demand]. Astrahanskij medicinskij zhurnal. 2018;13(4):23-31. Russian.

5. Grigorjan KM, Sargsjan MP, Ovsepjan VV. Mikrobiologicheskaja bezopasnost' i antibakterial'naja aktivnost' sushennoj travy chabreca, proizrastajushhej v Armenii [Microbiological safety and antibacterial activity of dried thyme grass growing in Armenia. In the collection: Scientific and innovative potential for the development of production, processing and application of essential oil and medicinal plants]. V sbornike: Nauchnyj i innovacionnyj potencial razvitija proizvodstva, pererabotki i primeneniya jefiromaslichnyh i lekarstvennyh rastenij. Materialy Mezhdunarodnoj nauchno-prakticheskoj konferencii. Nauchnyj redaktor V.S. Pashtekij. Otvetstvennye redaktory L.A. Radchenko, N.V. Nevkrytaja; 2019. Russian.

6. Ermolaev II, Ekanina SV. Sravnitel'naja ocenka kolichestvennogo sodержaniya timola v zhidkih jekstraktah, poluchennyh iz tim'jana obyknovennogo travy i tim'jana polzuchego (chabreca) travy [omparative assessment of the quantitative content of thymol in liquid extracts obtained from common thyme grass and creeping thyme (thyme) grass]. Izvestija GGTU. Medicina, farmacija. 2021;2:21-7. Russian.

7. Karomatov ID, Asadova ShI. Lekarstvennoe rastenie chabrec obyknovennyj [Medicinal plant thyme ordinary]. Biologija i integrativnaja medicina. 2017;11:168-78. Russian.

8. Kojshymanov TT. Optimizacija vneshnih uslovij kul'tivirovanija kallusov Thymus serpullum L.-chabreca lekarstvennogo [Optimization of external conditions of cultivation of Thymus serpullum L.-thyme medicinal. In the collection]. V sbornike: Fundamental'nye i prikladnye issledovanija: ot teorii k praktike. Materialy II mezhdunarodnoj nauchno-prakticheskoj konferencii, priurochennoj ko Dnju rossijskoj nauki. Voronezhskij jekonomiko-pravovoj institut, Batkenskij gosudarstvennyj universitet; 2018.. Russian.

9. Maskurova JuV, Lalieva ZV, Gajvoronskaja TV, Risovannaja ON. Povyshenie jeffek-tivnosti lechenija vospalitel'nyh zabozevanij parodonta na fone psihojemocional'nogo naprjazhenija [Improving the effectiveness of treatment of inflammatory periodontal diseases against the background of psychoemotional stress]. Sovremennye problemy nauki i obrazovanija. 2018;6:146. Russian.

10. Odinec AG, Sbezheva VG, Mihajlov VI. Farmakologicheskie svojstva i analiz prirodnyh soedinenij (antibiotiki, rastitel'noe lekarstvennoe syr'e, sodержashhee saponiny, poliacetileny, flavonoidy) [Pharmacological properties and analysis of natural compounds (antibiotics, herbal medicinal raw materials containing saponins, polyacetylenes, flavonoids)]. Moscow: Kvadriga; 2011. Russian.

11. Platonov VV, Khadartsev AA, Volochaeva MV, Datieva FS, Dunaeva IV. Adsorbcionnaja zhidkostnaja hromatografija n-geksanovogo jel'juata jetanol'nogo jekstrakta zeljonogo greckogo oreha i ego list'ev (Juglas Regia L., semejstvo orehovye – Juglandaceae) (soobshhenie I) [Adsorption liquid chromatography of n-hexane eluate of ethanol extract of green walnut and its leaves (Juglas Regia L., Nut Family - Juglandaceae) (Report I)]. Journal of New Medical Technologies, e-edition. 2021 [cited 2021 Apr 13];2 [about 19 p.]. Russian. Available from: <http://www.medtsu.tula.ru/VNMT/Bulletin/E2021-2/3-3.pdf>. DOI: 10.24412/2075-4094-2021-2-3-3

12. Tarasova VN. Analiticheskaja karakteristika pektinovyh veshhestv travy chabreca [Analytical characteristics of the pectin substances of thyme grass]. V sbornike: Pokolenie budushhego: Vzglyad molodyh uchenyh- 2017. Sbornik nauchnyh statej 6-j Mezhdunarodnoj molodezhnoj nauchnoj konferencii. V 4-h tomah. Otvetstvennyj redaktor AA. Gorohov; 2017. Russian.

13. Furman JuV, Hvostovoj VV, Bykanova AM. Okislitel'naja po aktivnost' jekstraktov lekarstvennyh trav [Oxidative activity of extracts of medicinal herbs]. Rossijskaja nauka i obrazovanie segodnja: problemy i perspektivy. 2018;6 (25):36-8. Russian.

14. Haziev RSh, Gatijatullina IR, Gumarov RR, Elizarova ES. Novye podhody k standartizacii travy chabreca [New approaches to the standardization of thyme grass]. V sbornike: Novye dostizhenija v himii i himicheskoj tehnologii rastitel'nogo syr'ja. Materialy VIII Vserossijskoj konferencii s mezhdunarodnym uchastiem. Pod red. NG. Bazarnovoj, VI. Markina; 2020. Russian.

15. Shherbakov DM. Issledovanie sostava jefirnyh masel chabreca. V sbornike: himija i himicheskaja tehnologija v XXI veke [Investigation of the composition of thyme essential oils. In the collection: chemistry and chemical technology in the XXI century]. Materialy XXI Mezhdunarodnoj nauchno-prakticheskoj konferencii studentov i molodyh uchenyh imeni vydajushhihsja himikov LP. Kuljova i NM. Kizhnera, posvjashhennoj 110-letiju so dnja rozhdenija professora A.G. Stromberga. Tomsk; 2020. Russian.

16. Anonymous. thumi-herba (<https://www.ema.europa.eu/en/medicines/herba/thumi-herba>) (angl). European Medicines Agency (17 September 2018) (Data obrashhenija 26 sentjabrja 2019).

17. WHO Monographs on Selected Medicinal Plants - Volume 1: Herba Thymi (<http://apps.who.int/medicinedocs/en/d/js/2200e/28.html>). apps.who.int (Data obrashhenija 26 sentjabrja 2019).

Библиографическая ссылка:

Платонов В.В., Валентинов Б.Г., Сухих Г.Т., Дунаев В.А., Волочаева М.В., Франкевич В.Е. Химический состав n-гексанового экстракта травы чабреца (тимьяна ползучего) (*Thymus serpyllum L.*, семейство яснотковые – *Lamiaceae*) (сообщение I) // Вестник новых медицинских технологий. Электронное издание. 2021. №5. Публикация 3-2. URL: <http://www.medtsu.tula.ru/VNMT/Bulletin/E2021-5/3-2.pdf> (дата обращения: 10.09.2021). DOI: 10.24412/2075-4094-2021-5-3-2*

Bibliographic reference:

Platonov VV, Valentinov BG, Sukhikh GT, Dunaev VA, Volochaeva MV, Frankevich VE. Himicheskij sostav n-geksanovogo jekstrakta travy chabreca (tim'jana polzuchego) (*Thymus serpyllum L.*, semejstvo jasnotkovye – *Lamiaceae*) (soobshhenie I) [Chemical composition of n-hexane extract of thyme herb (creeping thyme) (*Thymus serpyllum L.*, family of clear-flowered *lamiaceae*) (message I)]. Journal of New Medical Technologies, e-edition. 2021 [cited 2021 Sep 10];5 [about 10 p.]. Russian. Available from: <http://www.medtsu.tula.ru/VNMT/Bulletin/E2021-5/3-2.pdf>. DOI: 10.24412/2075-4094-2021-5-3-2

* номера страниц смотреть после выхода полной версии журнала: URL: <http://medtsu.tula.ru/VNMT/Bulletin/E2021-5/e2021-5.pdf>