

# СРАВНИТЕЛЬНАЯ ХАРАКТЕРИСТИКА ХИМИЧЕСКОГО СОСТАВА И НАПРАВЛЕННОСТИ ФАРМАКОЛОГИЧЕСКОГО ДЕЙСТВИЯ ЭКСТРАКТА ТРАВЫ ЧАБРЕЦА (ТИМЬЯНА ПОЛЗУЧЕГО) (*THYMUS SERPYLLUM L.*, СЕМЕЙСТВО ЯСНОТКОВЫЕ — *LAMIACEAE*) (Сообщений IV)

В. В. ПЛАТОНОВ<sup>1</sup>, Б. Г. ВАЛЕНТИНОВ<sup>4</sup>, Г. Т. СУХИХ<sup>3</sup>,  
М. В. ВОЛОЧАЕВА<sup>3</sup>, В. А. ДУНАЕВ<sup>2</sup>, Ф. С. ДАТИЕВА<sup>5</sup>

<sup>1</sup> ООО «Террапроминвест», Тула

<sup>2</sup> Тульский государственный университет, медицинский институт, Тула

<sup>3</sup> Национальный медицинский исследовательский центр акушерства,  
гинекологии и перинатологии им. В. И. Кулакова, Москва

<sup>4</sup> АНО «ФАРМА 2030», Московская область

<sup>5</sup> ИМБИ Владикавказского научного центра РАН, Владикавказ

**Цель исследования** — показать целесообразность последовательно исчерпывающий экстракции растительного лекарственного сырья растворителями в порядке возрастания их полярности, выявить характер распределения как различных групп соединений, так и отдельных из них, в органическом веществе чабреца (тимьяна ползучего). **Результаты и их обсуждение.** Приведены результаты сравнительной характеристики химического состава и направленности фармакологического действия *n*-гексанового, хороформного и этанольного экстрактов последовательно исчерпывающий экстракции травы чабреца (тимьяна ползучего), полученной с использованием хромато-масс-спектрометрии, масс-спектров и структурных формул индивидуальных соединений, которых было идентифицировано 162 (*n*-гексановый), 101 (хлороформный) и 150 (этанольный) экстрактах. Установлено влияние природы растворителя как на выход экстрактов, так и на структурно-групповой состав последних, особенности структурной организации экстрагируемых соединений, специфичность направленности фармакологического действия каждого из экстрактов, что позволило обосновать целесообразность последовательно исчерпывающий экстракции исходного лекарственного сырья растворителями в порядке возрастания их полярности.

**Ключевые слова:** чабрец, экстракция, масс-спектрометрия.

**Цель исследования** — показать целесообразность последовательно исчерпывающий экстракции растительного лекарственного сырья растворителями в порядке возрастания их полярности, выявить характер распределения как различных групп соединений, так и отдельных из них, в органическом веществе чабреца (тимьяна ползучего), природу химической связи соединений в нем — для углубления знаний об особенностях его структурной организации, а также областей применения препаратов, на его основе.

**Материалы и методы исследования.** Описание травы чабреца (тимьяна ползучего), её заготовка, химический состав и фармакологическое действие даны в [1–13].

Методика проведения последовательно исчерпывающий экстракции сырья *n*-гексаном, хлороформом и этанолом приведена в [11–18], в которых также указаны условия хромато-масс-спектрометрии экстрактов.

**Результаты и их обсуждение.** Хроматограммы экстрактов даны на рис. 1–3.

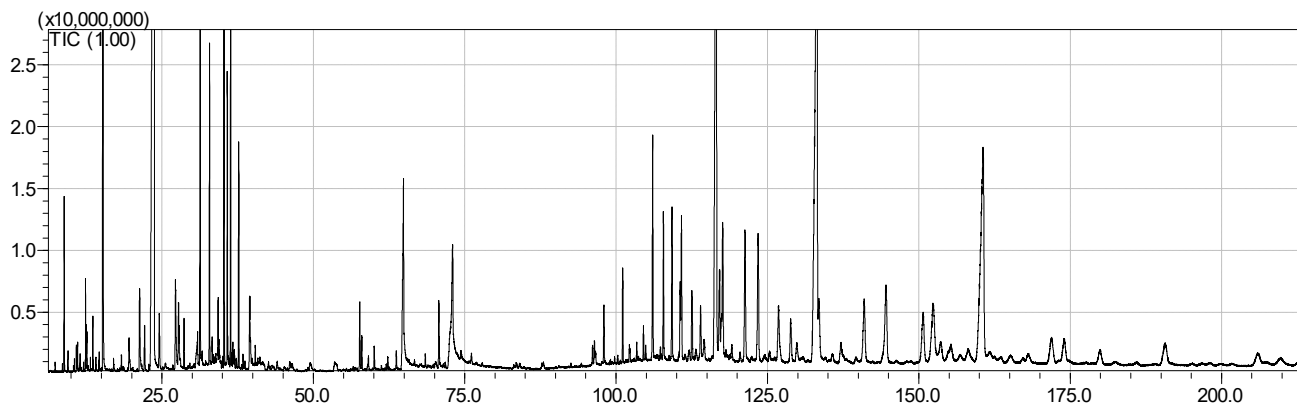


Рис. 1. Хроматограмма гексанового экстракта

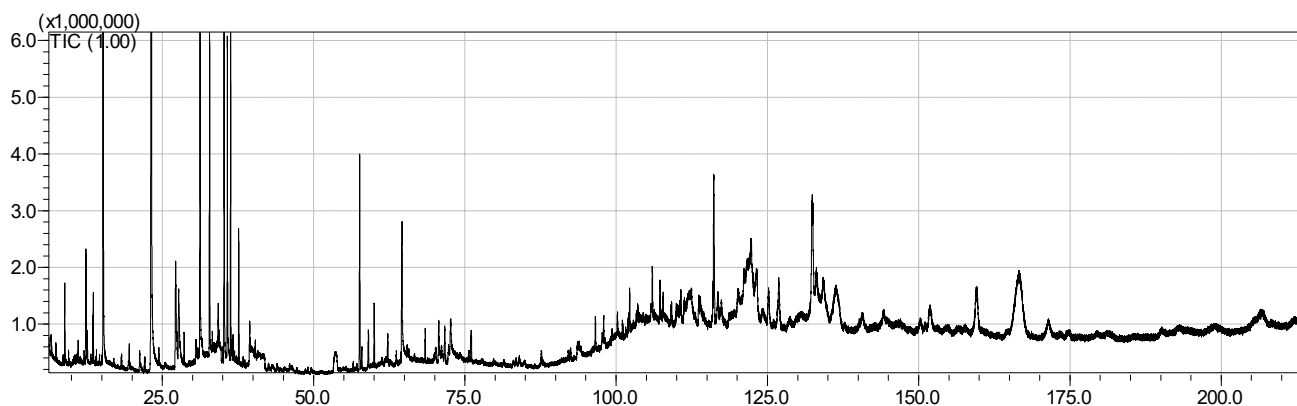


Рис. 2. Хроматограмма хлороформного экстракта

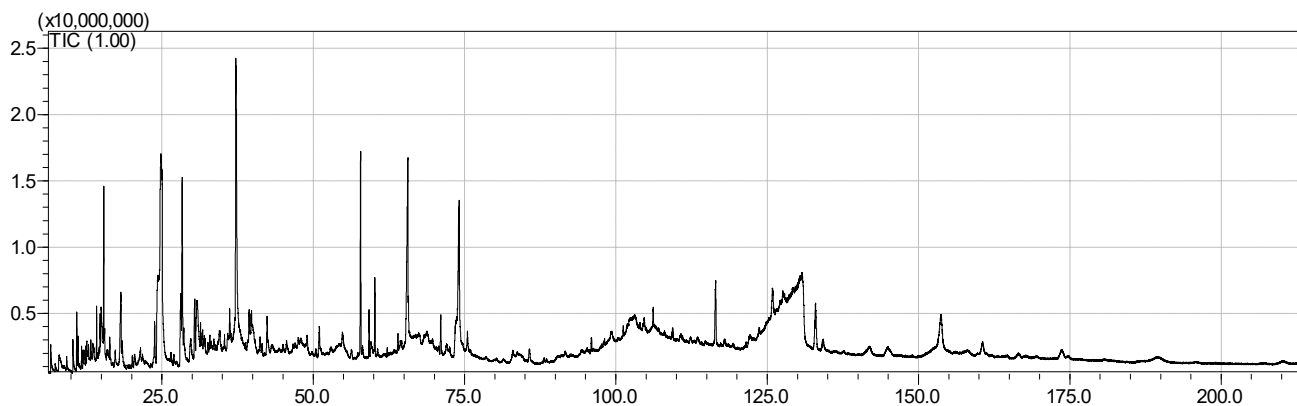


Рис. 3. Хроматограмма этанольного экстракта

Перечень соединений идентифицированных в экстрактах, их количественное содержание даны в табл. 1–3, результаты которых были использованы

для расчета структурно-группового состава каждого экстракта — табл. 4.

Таблица 1

Список соединений гексанового экстракта			
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	45	29.480	0,01	.alpha.-Cubebene
12	12.059	0,02	Cyclohexene, 1-methyl-4-(1-methylethylidene)-	46	29.607	0,02	Bicyclo[2.2.1]hept-2-ene, 1,7,7-trimethyl-
13	12.376	0,21	p-Cymene	47	30.307	0,01	4-Hexen-1-ol, 5-methyl-2-(1-methylethenyl)-, acetate
14	12.523	0,1	Cyclohexene, 1-methyl-4-(1-methylethenyl)-, (S)-	48	30.882	0,34	Neric acid
15	12.608	0,09	Eucalyptol	49	31.315	2,94	Neryl (S)-2-ethylbutanoate
16	12.802	0,01	(1S)-2,6,6-Trimethylbicyclo[3.1.1]hept-2-ene	50	31.631	0,04	Cyclohexane, 1-ethenyl-1-methyl-2,4-bis(1-methylethenyl)-, [1S-(1.alpha.,2.beta.,4.beta.)]-
17	13.185	0,03	.beta.-Ocimene	51	32.853	1,07	Bicyclo[5.2.0]nonane, 2-methylene-4,8,8-trimethyl-4-vinyl-
18	13.597	0,12	.gamma.-Terpinene	52	33.279	0,15	.beta.-copaene
19	14.073	0,04	.alpha.-Methyl-.alpha.-[4-methyl-3-pentenyl]oxiranemethanol	53	33.627	0,04	Guaia-1(10),11-diene
20	14.547	0,01	(3-tert-Butyl-5-hydroxymethyl-cyclohex-2-enyl)-methanol	54	33.834	0,06	1,6-Cyclodecadiene, 1-methyl-5-methylene-8-(1-methylethyl)-, [S-(E, E)]-
21	14.644	0,04	.alpha.-Methyl-.alpha.-[4-methyl-3-pentenyl]oxiranemethanol	55	34.267	0,35	Bicyclo[7.2.0]undec-4-ene, 4,11,11-trimethyl-8-methylene-, [1R-(1R*,4Z,9S*)]-
22	15.053	0,01	Octane, 2-bromo-	56	34.453	0,19	Alloaromadendrene
23	15.290	5,58	Cyclohexanol, 2-methyl-5-(1-methylethenyl)-, (1.alpha.,2.alpha.,5.beta.)-	57	35.032	0,04	.alfa.-Copaene
24	15.587	0	7-Thiabicyclo[4.1.0]heptane, 3-methyl-	58	35.250	1,6	1,6-Cyclodecadiene, 1-methyl-5-methylene-8-(1-methylethyl)-, [S-(E, E)]-
25	17.006	0,05	(+)-2-Bornanone	59	35.789	1,05	1,6-Cyclodecadiene, 1-methyl-5-methylene-4-(1-methylethyl)-, [S-(E, E)]-
26	18.049	0,01	Cyclohexene, 1-methyl-3-vinyloxy-	60	36.332	1,72	Bicyclo[5.2.0]nonane, 2-methylene-4,8,8-trimethyl-4-vinyl-
27	18.299	0,05	endo-Borneol	61	36.523	0,06	Isolatedene
28	18.444	0,01	2-Furanmethanol, 5-ethenyltetrahydro-.alpha.,.alpha.,5-trimethyl-, cis-	62	36.716	0,11	.alfa.-Copaene
29	18.595	0,02	Carane, 4,5-epoxy-, trans	63	36.987	0,08	Cedrene
30	19.553	0,15	.alpha.-Terpineol	64	37.268	0,05	2(4H)-Benzofuranone, 5,6,7,7a-tetrahydro-4,4,7a-trimethyl-, (R)-
31	19.703	0,05	Butanoic acid, 3-hexenyl ester, (Z)-	65	37.672	0,78	cis-.alpha.-Bisabolene
32	20.156	0,01	Bicyclo[2.2.2]octane, 1-bromo-4-methyl-	66	38.164	0,02	Isoaromadendrene epoxide
33	21.306	0,51	2,6-Octadien-1-ol, 3,7-dimethyl-, (Z)-	67	38.382	0,07	(R)-lavandulyl acetate
34	21.647	0,03	Oxiranecarboxaldehyde, 3-methyl-3-(4-methyl-3-pentenyl)-	68	38.711	0,03	Caryophyllene
35	22.120	0,21	Bicyclo[3.1.1]hept-3-en-2-ol, 4,6,6-trimethyl-, [1S-(1.alpha.,2.beta.,5.alpha.)]-	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.)]-
36	22.836	0,03	1,6-Octadien-3-ol, 3,7-dimethyl-, 2-aminobenzoate	70	40.406	0,17	Neryl (S)-2-methylbutanoate
37	23.710	13,63	(-)-cis-Myrtranol	71	40.825	0,11	Neryl (S)-3-methylbutanoate
38	24.565	0,32	2,6-Octadienal, 3,7-dimethyl-, (Z)-	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.)]-
39	25.579	0,04	But-2-ynoic acid, 1,7,7-trimethyl-bicyclo[2.2.1]hept-2-yl ester	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.)]-
40	26.797	0,02	(R)-lavandulyl acetate	74	43.189	0,07	Isolatedene
41	27.228	0,7	Thymol				
42	27.742	0,5	Carvakrol				
43	28.040	0,04	.gamma.-Elemene				
44	28.643	0,19	Cyclohexane, 1-ethenyl-1-methyl-2-(1-methylethenyl)-4-(1-methylethylidene)-				

75	44.041	0,06	<i>Cubenol</i>	115	103.411	0,39	<i>Tetradecanal-</i>
76	45.223	0,04	<i>Andrographolide</i>	116	104.516	0,34	<i>Tetracosane</i>
77	46.101	0,09	<i>Andrographolide</i>	117	104.907	0,2	<i>Pentacosane</i>
78	46.482	0,08	<i>Lanceol, cis</i>	118	106.043	1,56	<i>Hexacosane</i>
79	49.110	0,02	<i>(-)-Spathulenol</i>	119	106.741	0,19	<i>Pentanoic acid, 1-ethenyl-1,5-dimethyl-4-hexenyl ester</i>
80	49.485	0,11	<i>Benzoic acid, 2,4-dihydroxy-3,6-dimethyl-, methyl ester</i>	120	107.813	1,02	<i>Butanoic acid, 3-methyl-, 1-ethenyl-1,5-dimethyl-4-hexenyl ester</i>
81	53.532	0,11	<i>Tetradecanoic acid</i>	121	108.747	0,1	<i>2-methyltetracosane</i>
82	55.477	0,01	<i>Cholestane, 4,5-epoxy-, (4.alpha.,5.alpha.)-</i>	122	109.233	1,15	<i>Heptacosane</i>
83	56.588	0,02	<i>1-Octadecyne</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>
84	56.881	0,05	<i>Longipinocarveol, trans-</i>	124	112.523	0,65	<i>Pentadecanal-</i>
85	57.671	0,32	<i>3-Octadecyne</i>	125	113.954	0,62	<i>Octacosane</i>
86	58.014	0,17	<i>2-Pentadecanone, 6,10,14-trimethyl-</i>	126	114.540	0,42	<i>2-methylheptacosane</i>
87	59.087	0,1	<i>7-Octadecyne, 2-methyl-</i>	127	116.543	8,9	<i>2-methylhexacosane</i>
88	60.057	0,1	<i>7-Octadecyne, 3-methyl-</i>	128	117.079	0,95	<i>(-)-trans-Myrtanyl acatate</i>
89	61.244	0,02	<i>Nonane, 3-methyl-5-propyl-</i>	129	117.603	1,6	<i>i-Propyl 9,12,15-octadecatrienoate</i>
90	62.052	0,02	<i>9-Octadecenal, (Z)-</i>	130	118.149	0,26	<i>2,6,10,14-Tetramethyl-7-(3-methylpent-4-enylidene) pentadecane</i>
91	62.296	0,06	<i>Cyclodecasiloxane, eicosamethyl-</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>
92	62.507	0,01	<i>Hexadecanoic acid, methyl ester</i>	132	120.487	0,22	<i>2-methyloctacosane</i>
93	63.709	0,09	<i>Dibutyl phthalate</i>	133	121.295	1,41	<i>Nonacosane</i>
94	64.886	2,04	<i>n-Hexadecanoic acid</i>	134	123.452	1,49	<i>Decacosane</i>
95	68.486	0,06	<i>Cyclooctasiloxane, hexadecamethyl-</i>	135	124.541	0,24	<i>9-Hexacosene</i>
96	70.215	0,07	<i>2-Acetoxy-1,1,10-trimethyl-6,9-epidioxydecalin</i>	136	125.355	0,21	<i>Cholesta-4,6-dien-3-ol, (3.beta.)-</i>
97	70.733	0,39	<i>Phytol</i>	137	126.240	0,15	<i>.gamma.-Tocopherol</i>
98	71.461	0,05	<i>5,8,11,14,17-Eicosapentaenoic acid</i>	138	126.825	0,94	<i>Hexadecanal-</i>
99	71.787	0,03	<i>Cyclododecyne</i>	139	128.835	0,63	<i>Triacosane</i>
100	72.996	2,75	<i>9,12,15-Octadecatrienoic acid, (Z, Z, Z)-</i>	140	129.841	0,36	<i>2-methylnonacosane</i>
101	74.400	0,46	<i>Octadecanoic acid</i>	141	130.987	0,2	<i>10-Nonadecanone</i>
102	76.111	0,25	<i>Cyclononasiloxane, octadecamethyl-</i>	142	133.149	10,82	<i>Heitricontane</i>
103	77.920	0,02	<i>1,1'-Bicyclopentyl, 2-hexadecyl-</i>	143	135.720	0,24	<i>9-Heptacosene</i>
104	83.147	0,04	<i>Acetic acid, trifluoro-, undecyl ester</i>	144	137.136	0,44	<i>Tetracontane-1,40-diol</i>
105	83.519	0,06	<i>Hexadecanoic acid, 1-(hydroxymethyl)-1,2-ethanediyl ester</i>	145	139.612	0,12	<i>2-methyldocontane</i>
106	84.089	0,05	<i>Heptacosane, 1-chloro-</i>	146	140.971	1,07	<i>Nonacosane</i>
107	88.005	0,11	<i>2H-Pyran-2-one, tetrahydro-6-nonyl-</i>	147	144.562	1,46	<i>Dotricontane</i>
108	96.442	0,42	<i>Methyl 8,11,14,17-eicosatetraenoate</i>	148	150.695	1,02	<i>Heptadecanal-</i>
109	97.992	0,43	<i>2-methyloctacosane</i>	149	152.365	1,66	<i>.beta.-Sitosterol</i>
110	99.093	0,08	<i>Phthalic acid, 6-methylhept-2-yl octadecyl ester</i>	150	153.595	0,57	<i>Nonacosane</i>
111	99.787	0,12	<i>Butanoic acid, 3-methyl-, 1-ethenyl-1,5-dimethyl-4-hexenyl ester</i>	151	155.310	0,65	<i>2-methyltriacontane</i>
112	100.278	0,09	<i>9,19-Cyclolanost-23-ene-3,25-diol, 3-acetate, (3.beta.,23E)-</i>	152	158.125	0,49	<i>1,1,4a-Trimethyl-5,6-dimethylenedecahydronaphthalene</i>
113	101.094	0,56	<i>Tetracontane</i>	153	160.587	6,24	<i>Tritriacontane</i>
114	102.206	0,31	<i>2-methyloctacosane</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	3,7,11,15-Tetramethyl-2-hexadecen-1-ol	31	30.579	0,35	Neric acid
156	171.918	0,69	Cholest-4-en-3-one	32	30.879	0,09	.alpha.-Cubebene
157	173.964	0,56	Tetratriacontane	33	31.229	4,88	(R)-lavandulyl acetate
158	179.955	0,37	Tetratetracontane	34	31.593	0,04	10,12-Tricosadiynoic acid
159	190.681	0,65	Octadecanal-	35	32.807	3,4	Bicyclo[5.2.0]nonane, 2-methylene-4,8,8-trimethyl-4-vinyl-
160	205.954	0,4	Tetrapentacontane	36	33.244	0,11	.beta.-Copaene
161	209.741	0,3	Urs-12-en-28-al	37	33.577	0,06	Caryophyllene-(I1)
162	212.689	0,07	2-Pentacosanone	38	34.231	0,9	Bicyclo[7.2.0]undec-4-ene, 4,11,11-trimethyl-8-methylene-, [1R-(1R*,4Z,9S*)]-
				39	34.395	0,34	Alloaromadendrene
				40	34.999	0,08	.alfa.-Copaene
				41	35.209	4,26	1,6-Cyclodecadiene, 1-methyl-5-methylene-8-(1-methylethyl)-, [S-(E, E)]-
				42	35.747	2,86	.gamma.-Elemene
				43	36.281	2,41	Bicyclo[7.2.0]undec-3-ene, 4,11,11-trimethyl-8-methylene-, [1R-(1R*,4Z,9S*)]-
				44	36.487	0,18	Isoledene
				45	36.676	0,25	Naphthalene, 1,2,3,5,6,8a-hexahydro-4,7-dimethyl-1-(1-methylethyl)-, (1S-cis)-
				46	36.935	0,15	1,6-Cyclodecadiene, 1-methyl-5-methylene-8-(1-methylethyl)-, [S-(E, E)]-
				47	37.630	1,04	cis-.alpha.-Bisabolene
				48	38.341	0,11	Butanoic acid, 3,7-dimethyl-2,6-octadienyl ester, (E)-
				49	38.668	0,05	trans-Sesquisabinene hydrate
				50	39.438	0,39	1H-Cycloprop[e]azulen-7-ol, decahydro-1,1,7-trimethyl-4-methylene-, [1ar-(1a.alpha.,4a.alpha.,7.beta.,7a.beta.,7b.alpha.)]-
				51	40.368	0,15	2,6-Octadien-1-ol, 3,7-dimethyl-, propanoate, (E)-
				52	43.981	0,08	Cubenol
				53	56.537	0,07	9-Eicosyne
				54	57.168	0,05	2-Hexadecene, 3,7,11,15-tetramethyl-, [R-[R*, R*-(E)]]-
				55	57.619	2,07	3-Octadecyne
				56	57.968	0,24	Z-28-Heptatriaconten-2-one
				57	59.049	0,38	7-Octadecyne, 2-methyl-
				58	60.006	0,56	7-Octadecyne, 3-methyl-
				59	62.256	0,38	Cyclodecasiloxane, eicosamethyl-
				60	63.671	0,11	Dibutyl phthalate
				61	64.604	1,84	n-Hexadecanoic acid
				62	65.749	0,08	Sulfurous acid, 2-propyl undecyl ester
				63	68.440	0,27	Cyclooctasiloxane, hexadecamethyl-
				64	69.917	0,07	Acetic acid, trifluoro-, dodecyl ester

Таблица 2

## Список соединений хлороформного экстракта

1	6.613	0,07	Benzene, 1,2-dimethyl-
2	6.653	0,06	Benzene, 1,4-dimethyl-
3	7.411	0,1	Benzene, 1,3-dimethyl-
4	8.881	0,42	.alpha.-Pinene
5	9.499	0,06	Santolina triene
6	10.409	0,02	Tetracyclo[3.3.1.1(3,7).0(2,4)]decane
7	10.560	0,02	1,3,6-Heptatriene, 5-methyl-
8	10.873	0,03	1-Octen-3-ol
9	11.073	0,1	.beta.-Pinene
10	12.063	0,06	Cyclohexene, 1-methyl-4-(1-methylethylidene)-
11	12.381	0,57	p-Cymene
12	12.523	0,11	Cyclohexene, 1-methyl-4-(1-methylethenyl)-, (S)-
13	12.612	0,15	Eucalyptol
14	13.189	0,03	.beta.-Ocimene
15	13.594	0,31	.gamma.-Terpinene
16	14.105	0,07	Cyclohexanol, 1-methyl-4-(1-methylethenyl)-, cis-
17	14.630	0,03	Ethyl 2-(5-methyl-5-vinyltetrahydrofuran-2-yl)propan-2-yl carbonate
18	15.046	0,03	Oxalic acid, isobutyl nonyl ester
19	15.203	15,13	1,6-Octadien-3-ol, 3,7-dimethyl-
20	16.982	0,04	Camphor
21	18.277	0,09	endo-Borneol
22	19.387	0,06	Butanoic acid, 3-hexenyl ester, (E)-
23	19.526	0,25	.alpha.-Terpineol
24	21.251	0,17	3,6-Octadien-1-ol, 3,7-dimethyl-, (Z)-
25	22.097	0,16	cis-Verbenol
26	23.174	10,79	2,6-Octadien-1-ol, 3,7-dimethyl-, (Z)-
27	24.426	0,19	Citral
28	27.203	2,17	Thymol
29	27.707	1,92	Карвакрол
30	28.594	0,31	Cyclohexane, 1-ethenyl-1-methyl-2-(1-methylethenyl)-4-(1-methylethylidene)-

65	70.679	0,76	Phytol
66	71.664	0,59	1, E-11, Z-13-Octadecatriene
67	72.315	0,24	9,12-Octadecadienoic acid (Z, Z)-
68	72.651	0,77	9,12,15-Octadecatrien-1-ol, (Z, Z, Z)-
69	75.654	0,16	1-Eicosene
70	76.042	0,39	Cyclononasiloxane, octadecamethyl-
71	83.439	0,08	Bromoacetic acid, tridecyl ester
72	84.002	0,1	2-methyltetracosane
73	87.649	0,2	Cyclononasiloxane, octadecamethyl-
74	92.095	0,12	n-Nonadecanol-1
75	92.446	0,16	Heptacosane, 1-chloro-
76	96.565	0,36	Cyclononasiloxane, dodecamethyl-
77	97.687	0,22	Hexadecane-1,2-diol
78	97.939	0,36	2-methylpentacosane
79	99.320	0,11	Eicosen-1-ol, cis-9-
80	100.222	0,23	9,19-Cyclolanost-23-ene-3,25-diol, 3-acetate, (3.beta.,23E)-
81	101.033	0,15	2-methylhexacosane
82	101.967	0,14	9-Tricosene, (Z)-
83	102.245	0,56	Cyclononasiloxane, eicosamethyl-
84	105.970	0,59	Tritetracontane
85	107.260	0,41	Cyclononasiloxane, octadecamethyl-
86	107.736	0,26	1,6-Octadien-3-ol, 3,7-dimethyl-, propanoate
87	109.159	0,24	Tetrapentacontane
88	110.492	0,27	Heitetracontane
89	110.696	0,42	5,9,13-Pentadecatrien-2-one, 6,10,14-trimethyl-, (E, E)-
90	113.658	0,36	Cyclodecasiloxane, heieicosanemethyl-
91	116.127	2,78	Dotetracontane
92	116.826	0,77	Tricyclo[2.2.1.0(2,6)]heptane, 1,7-dimethyl-7-(4-methyl-3-pentenyl)-, (-)-
93	126.894	1,54	Cholest-5-en-3-ol (3.beta.)-, carbonochloridate
94	132.403	4,5	Tetratetracontane
95	133.090	2,69	dl-.alpha.-Tocopherol
96	136.309	3,58	Hentriacontane
97	140.682	0,99	2-methylheptacosane
98	144.255	0,62	Sulfurous acid, pentadecyl 2-propyl ester
99	151.896	1,17	.beta.-Sitosterol
100	159.569	2,21	Tripentacontane
101	166.568	9,08	Tetrapentacontane

Таблица 3

Список соединений этанольного экстракта			
1	6.638	0,34	2-Furanmethanol
2	7.359	0,09	But-1-ene-3-yne, 1-ethoxy-
3	8.032	0,41	Ethoxy(dimethyl)isopropylsilane
4	9.259	0,15	6-Oxa-bicyclo[3.1.0]hexan-3-one
5	10.296	0,18	2-Furancarboxaldehyde, 5-methyl-
6	10.931	0,25	2,4-Dihydroxy-2,5-dimethyl-3(2H)-furan-3-one
7	11.153	0,22	3,6-Nonadien-1-ol, (E, Z)-
8	11.732	0,11	3-Oxatricyclo[4.1.1.0(2,4)]octane, 2,7,7-trimethyl-
9	12.123	0,07	2H-Pyran-2,6(3H)-dione
10	12.459	0,07	o-Cymene
11	12.601	0,18	Borazine, 2,4-dimethyl-
12	12.873	0,05	(1S)-2,6,6-Trimethylbicyclo[3.1.1]hept-2-ene
13	13.254	0,07	.beta.-Ocimene
14	13.369	0,03	Toluene
15	13.594	0,27	L-Glutamine, N2-[(phenylmethoxy) carbonyl]-
16	14.215	0,19	2-Furanmethanol, 5-ethenyltetrahydro-.alpha.,.alpha.,5-trimethyl-, cis-
17	14.641	0,03	(+)-4-Carene
18	14.791	0,17	trans-Linalool oxide (furanoid)
19	14.949	0,32	Bicyclo[2.2.1]heptane-2-carboxylic acid isobutyl-amide
20	15.017	0,27	Phenol, 2-methoxy-
21	15.140	0,23	3,8,11-Trioxatetracyclo[4.4.1.0(2,4).0(7,9)]undecane, (1.alpha.,2.alpha.,4.alpha.,6.alpha.,7.beta.,9.beta.)-
22	15.396	0,79	1,6-Octadien-3-ol, 3,7-dimethyl-
23	15.541	0,14	Butanoic acid, 3-hexenyl ester, (Z)-
24	15.910	0,08	1,2,4-Benzenetriol
25	16.395	0,2	1,4-Cyclohexadiene, 3-ethenyl-1,2-dimethyl-
26	17.273	0,21	2-Furoic acid, 3-methylbut-2-enyl ester
27	18.233	0,89	4H-Pyran-4-one, 2,3-dihydro-3,5-dihydroxy-6-methyl-
28	18.412	0,25	2,4,5,6,7-Pentamethoxyheptanoic acid, methyl ester
29	20.118	0,11	Butanoic acid,4-hexen-1-yl ester
30	20.502	0,16	4H-Pyran-4-one, 3,5-dihydroxy-2-methyl-
31	21.464	0,25	Heptanediamide, N, N'-di-benzoyloxy-
32	21.783	0,14	Spiro (6,6-dimethyl-2,3-diazobicyclo [3.1.0] hex-2-ene-4,1'-cyclopropane)
33	23.803	0,43	2,6-Octadien-1-ol, 3,7-dimethyl-, (Z)-
34	24.350	1,47	Benzofuran, 2,3-dihydro-
35	24.845	7,35	Catechol
36	26.506	0,13	Cyclopentene,3-hexyl-

37	26.974	0,13	Hexane, 1-chloro-5-methyl-	73	42.371	0,55	syn-Tricyclo[5.1.0.0(2,4)]oct-5-ene, 3,3,5,6,8,8-hexamethyl-
38	27.431	0,07	Mevalonic lactone, trimethylsilyl	74	43.294	0,21	Benzoic acid, 4-hydroxy-
39	28.134	0,91	2-Methyl-benzaldoxime	75	45.018	0,1	Benzenepropanol, 4-hydroxy-3-methoxy-
40	28.352	1,72	2-Methoxy-4-vinylphenol	76	45.596	0,17	.gamma.-Elemene
41	28.624	0,58	Thymol	77	46.645	0,13	(1R,7S,E)-7-Isopropyl-4,10-dimethylenecyclodec-5-enol
42	29.763	0,57	Glutaric acid, 2,4,5-trifluorobenzyl heptyl ester	78	47.005	0,21	3-Cyclohexene-1-carboxaldehyde, 1,3,4-trimethyl-
43	30.438	0,83	Phenol, 2-methoxy-4-(2-propenyl)-, acetate	79	47.548	0,31	cis, cis-7,10,-Hexadecadienal
44	30.831	1,89	Hydroquinone	80	47.955	0,44	16-Heptadecen-2,5,8-trione
45	31.403	0,34	4-Hexen-1-ol, 5-methyl-2-(1-methylethenyl)-, acetate	81	48.430	0,19	Phenol, 2,6-dimethoxy-4-(2-propenyl)-
46	31.733	0,51	Neric acid	82	48.985	0,45	Cyclododecanol
47	32.009	0,41	2,3-Diazabicyclo[2.2.1]hept-2-ene, 7,7-dimethyl-5-phenyl-, (1.alpha.,4.alpha.,5.beta.)-	83	49.835	0,08	Benzenepropanoic acid, 4-hydroxy-
48	32.123	0,26	2-Cyclopenten-1-one, 3-methyl-2-(2-pentenyl)-, (Z)-	84	50.439	0,09	(3E,10Z)-Oxacyclotrideca-3,10-diene-2,7-dione
49	32.600	0,37	Cyclopentylphenylmethanol	85	51.001	0,45	2-(2-Methylpropenyl)cyclopropanecarboxylic acid, 2-isopropyl-5-methyl-cyclohexyl ester
50	32.915	0,38	.gamma.-Muurolene	86	52.920	0,18	4-((1E)-3-Hydroxy-1-propenyl)-2-methoxyphenol
51	33.170	0,27	Tricyclo[3.2.2.0]nonane-2-carboxylic acid	87	53.817	0,7	Benzene, 1,1'-butylidenebis-
52	33.581	0,45	1-Hexadecyn-3-ol, 3,7,11,15-tetramethyl-	88	54.818	0,81	Pentadecanoic acid
53	33.895	0,14	1,4-Dihydro-1-methylcinnolin-4-oxo-3-carboxylic acid	89	56.313	0,12	1,3-Benzenediol, 5-pentadecyl-
54	34.017	0,12	Spirio-10-(2,11-dioxabicyclo[4.4.1]undeca-3,5-diene)-2'-(oxirane), 1,3,7,7-tetramethyl-	90	57.822	1,52	3-Octadecyne
55	34.275	0,26	2-Propen-1-ol, 3-(2,6,6-trimethyl-1-cyclohexen-1-yl)-	91	58.136	0,15	2-Hexadecene, 3,7,11,15-tetramethyl-, [R-[R*, R*-(E)]]-
56	34.493	0,36	cis-p-mentha-1(7),8-dien-2-ol	92	59.218	0,31	7-Octadecyne, 2-methyl-
57	34.594	0,35	trans-Isoeugenol	93	59.545	0,32	3-Hydroxy-4,5-dimethoxybenzoic acid
58	35.097	0,24	Bicyclo[2.2.1]heptane, 2-cyclopropylidene-1,7,7-trimethyl-	94	60.184	0,59	9-Eicosyne
59	35.332	0,39	Coumarin, 3,4-dihydro-4,4,7-trimethyl-	95	63.988	0,15	Dibutyl phthalate
60	35.850	0,41	2-(2-Bromopropionyl)phenylglyoxylic acid	96	64.406	0,19	Tricyclo[20.8.0.0(7,16)]triacontane, 1(22),7(16)-diepoxy-
61	36.043	0,2	2,6-Dimethyl-3,5,7-octatriene-2-ol, Z, Z-	97	64.617	0,15	(R)-(-)-14-Methyl-8-hexadecyn-1-ol
62	36.194	0,58	Apocynin	98	65.609	4,11	n-Hexadecanoic acid
63	36.403	0,25	Bicyclo[5.2.0]nonane, 2-methylene-4,8,8-trimethyl-4-vinyl-	99	67.427	1,61	Acetamide, N-methyl-
64	36.617	0,3	1,6-Cyclodecadiene, 1-methyl-5-methylene-8-(1-methylethyl)-, [S-(E, E)]-	100	68.806	1,38	Oleic Acid
65	37.227	6,23	(3-Nitrophenyl) methanol, n-propyl ether	101	69.763	0,6	3,5-Dimethyl-1-dimethylsilyloxycyclohexane
66	38.003	0,36	2-Butyn-1-one, 1-cyclohexyl-4,4-diethoxy-	102	70.350	0,18	2-Cyclohexen-1-ol, 4-ethyl-1,4-dimethyl-
67	38.270	0,56	1,6-Octadiene, 3-ethoxy-3,7-dimethyl-	103	71.067	0,45	Phytol
68	38.838	0,18	Alloaromadendrene	104	72.034	0,33	Maltose
69	39.398	0,89	3-tert-Butyl-4-hydroxyanisole	105	74.109	4,98	9,12,15-Octadecatrienoic acid, (Z, Z, Z)-
70	39.803	1,69	10,12-Tricosadiynoic acid	106	76.285	0,01	Octadecanoic acid, 2-(2-hydroxyethoxy) ethyl ester
71	41.217	0,27	p-Cymene-2,5-diol	107	78.556	0,19	D-Glucopyranose, 4,6-O-heptylidene-
72	41.544	0,13	Megastigmatrienone	108	80.246	0,21	9,12-Octadecadienoic acid (Z, Z)-, phenylmethyl ester

109	81.396	0,12	2-Dodecen-1-yl(-)succinic anhydride	145	173.665	0,4	.gamma.-Sitostenone
110	82.996	0,43	2-Dimethylaminoethyl benzylthiocarbamate	146	174.708	0,15	Cholest-22-ene-21-ol, 3,5-dehydro-6-methoxy-, pivalate
111	84.643	0,44	1,25-Dihydroxyvitamin D3, TMS derivative	147	180.711	0,09	Eicosyl isopropyl ether
112	85.701	0,38	cis-9-Hexadecenal	148	189.288	0,75	2H,8H-Benzo[1,2-b:5,4-b']dipyran-2-one, 4-hydroxy-3-(4-hydroxyphenyl)-5-methoxy-8,8-dimethyl-10-(3-methyl-2-butenyl)-
113	88.149	0,05	2-Tridecenal, (E)-	149	195.838	0,06	Olean-12-en-28-oic acid, 3-(acetyloxy)-, methyl ester, (3.beta.)-
114	90.403	0,27	Octadecanoic acid, (2-phenyl-1,3-dioxolan-4-yl)methyl ester, cis-	150	210.104	0,21	Urs-12-en-28-oic acid, 3-hydroxy-, methyl ester, (3.beta.)-
115	91.634	0,18	n-Tridecanoic acid, methyl(tetramethylene)silyl ester				
116	94.412	0,26	.beta.-D-Mannofuranoside, farnesyl-				
117	95.237	0,29	bis([(2Z)-3,7-Dimethylocta-2,6-dien-1-yl]oxy)(dimethyl)silane				
118	95.947	0,21	Carbamic acid, 2-(dimethylamino)ethyl ester				
119	96.323	0,17	7-Hexadecenal, (Z)-				
120	97.952	0,77	n-Nonadecanol-1				
121	99.171	1,67	Octadecanoic acid, 2,3-dihydroxypropyl ester				
122	101.230	1,24	Triacotane, 1-iodo-				
123	104.003	0,88	2H-Quinolizine-1-methanol, octahydro-				
124	104.661	1,31	Silane, dimethyl(4-phenylphenoxy)ethoxy-				
125	106.158	3,16	2-Methyltetracosane				
126	108.057	1,02	Pentanoic acid, 1-ethenyl-1,5-dimethyl-4-hexenyl ester				
127	110.736	0,86	Tridecanol, 2-ethyl-2-methyl-				
128	112.300	0,39	.alpha.-Tocospiro A				
129	113.515	0,17	.alpha.-Tocospiro B				
130	116.466	0,85	Tetratetracontane				
131	117.988	0,11	.beta. Carotene				
132	121.504	0,13	Tetrapentacontane				
133	122.193	0,52	Pectolinarigenin				
134	123.679	1,21	2-Methylhexacosane				
135	125.895	2,13	Cholesta-4,6-dien-3-ol, (3.beta.)-				
136	127.590	4,47	Cholest-5-en-3-ol (3.beta.)-, carbonochloridate				
137	130.607	8,22	2H,6H-Benzo[1,2-b:5,4-b']dipyran-6-one, 5-hydroxy-7-(4-hydroxyphenyl)-2,2-dimethyl-10-(3-methyl-2-butenyl)-				
138	134.217	0,28	Vitamin E				
139	141.847	0,49	6,7-Epoxyregn-4-ene-9,11,18-triol-3,20-dione, 11,18-diacetate				
140	144.893	0,45	1-Bromodocosane				
141	153.714	2,05	.gamma.-Sitosterol				
142	160.585	0,34	Dotriacontane, 1-iodo-				
143	166.501	0,2	Stigmasta-3,5-dien-7-one				
144	167.672	0,1	9-Hexacosene				

Из табл. 4 видно, что основные группы соединений экстрагируются этанолом, как полярным растворителем, особенно карбоновые кислоты, стеринны, спирты, фенолы, азот- и серосодержащие соединения, фуран и пиранпроизводные (флавоноиды, ксантоны), гликозиды. Следует отметить, что фенолы в н-гексановом и хлороформном экстрактах представлены только тимолом и карвакролом, в этанольном эти соединения отсутствуют, но значительна доля катехина, 2-метоксивинилфенола, гидрохинона, эвгенола. Аналогично распределение азот- и серосодержащих соединений, которые сконцентрированы только в этанольном экстракте и представлены аминокислотами (*L-Glutamin*, *N-2-[(phenylmethoxy)carbonyl]*; амидами (*Heptanediamid*, *N, N'-dibenzoyloxy: Acetamid*, *N-methyl, Bicyclo [2.2.1] Heptane-2-carboxylic acid isobutyl amid*); diazosоединениями (*Spiro (6,6-dimethyl-2,3-diazobicyclo[3.1.0]hex-Z-ene-4,11-cyclopropan; 2,3-Diazobicyclo[2.2.1]hept-z-ene, -7,7-dimethyl-5-phenyl-(1.alpha., 4.alpha., 5.beta.)*), нитропроизводными (*3-Nitrophenol, m-propyl ether*), а также амизола — (*3-Tert-Butyl-4-hydroxyanisol*); альдоксинами (*2-Methyl-denz-aldoxim*).

Гликозиды, присутствующие только в этанольном экстракте, представлены: *Maltose*, *D-Glucopyranose*, *4,6-0-heptyliden* и  $\beta$ -*D-Mannofuranoside, farnesyl*.

Этанольный экстракт сконцентрировал в своем составе фуран и пиранпроизводные; при этом гетероциклы фурана замещены спиртовыми, альдегидными и кетонными группами (*2-Furanmetyhanol, 2-Furancarboxadehyd, -5-methyl, 2,4-Dihydroxy-2,5-dimethyl-3(2H) furan-3-one*); пирановые — кетонзамещенные (*4H-Puran-4-one-Z,3-dihydro-3,5-dihydroxy-6-methyl, 4H-Puran-4-one, 3,5-dihydroxy-Z-methyl*), а также присутствуют: *Benzfuuran, 2,3-dihydro, Coumarin, 3,4-dihydro, 4,4,7-trimethyl*. Данные функциональные группы являются наиболее ответственными за физиологическую активность. Азот-, серосодержащие, фуран и пиранпроизводные проявляют широкий спектр



Структурно-групповой состав экстрактов

№ п/п	Группы соединений	Экстракты		
		Гексановый	Хлороформный	Этанольный
		Выход экстракта (масс.% от экстрагируемой ОМ сырья)*		
		5,5	15,5	79,0
		Выход групп соединений (масс.% от экстракта); (*) * масс.% от экстрагируемой ОМ сырья		
1	Углеводороды, в т.ч. терпены	65,30 / 17,14	48,90 / 6,66	16,31 / 1,04
		* 3,59 / 0,62	7,58 / 1,03	12,88 / 0,82
2	Карбоновые кислоты, в т.ч. непредельные	5,29 / 3,13	2,47 / 0,63	14,91 / 8,01
		* 0,29 / 0,17	0,38 / 0,097	11,78 / 6,33
3	Стерины	3,32	6,02	11,20
		* 0,18	0,93	8,85
4	Спирты, в т.ч. непредельные	10,47	28,71	6,78
		0,58	4,45	5,36
5	Альдегиды	* 3,63	0,14	1,12
		0,20	0,02	0,88
6	Кетоны	0,44	0,66	0,94
		* 0,03	0,10	0,74
7	Гликозиды	-	-	0,78
		* -	-	0,62
8	Фенолы	*1,20	4,09	13,20
		* 0,07	0,63	10,43
9	Сложные эфиры	* 6,49	6,45	5,16
		-	-	-
10	N, S — соединения	-	-	12,69
		-	-	* 10,03
11	Фуран, пиранпроизводные	0,14	0,03	13,29
		* 0,008	0,005	10,50
12	Кремнийорганические соединения	3,70	2,52	3,53
		* 0,20	0,39	2,79

фармакологического действия этанольного экстракта. При этом обязательно следует учитывать значительную обогащенность данного экстракта различными производными пергидропроизводных фенантрена, антрацена, пиренстеринов, на долю которых приходится — 11,20 (масс.% от экстракта), а в н-гексановом и хлороформном, соответственно 3,32 и 6,02; и они отличаются не только количественным содержанием в экстракте, но и, самое главное, структурой.

Так, если основу стеринов н-гексанового экстракта составляют  $\beta$ -*Sitosterol* — 50,0; *Chlester4-en-3-one* — 16,87,  $\gamma$ -*Tocopherol* — 4,52, *Cholesta-dien-4,6-dien-3-ol*, (3. $\beta$ ) — 6,33 (масс.% от стеринов); в хлороформном: *dl*- $\alpha$ -*Tocopherol* — 44,68;  $\gamma$ -*Sitosterol* — 19,44 и *Cholest-5-en-3-ol*,

(3. $\beta$ ), — *carbonocholidat* — 25,5 (масс.% от стеринов), то в этанольном: *Cholest-5-en-3-ol*, (3. $\beta$ )-*carbonochloridat* — 43,52;  $\gamma$ -*sitosterol* — 19,96; *Apocynin* — 5,65; *Pectolingenin* — 5,06;  $\alpha$ -*Tocospiro-A* — 3,80; *dl*- $\alpha$ -*Tocopherol* — 2,73; *1.25-Dihydroxyvitamin D<sub>3</sub>* — 4,38 (масс.% от стеринов). Для этого экстракта отмечается больший набор стеринов, кроме указанных также присутствуют: *Olean-12-en-28-oic acid*, 3-(*acetoxyl*), — *methyl ester: cholest-22-ene-21-ol, 3,5-dehydro-6-methoxy-, pivalate*:  $\gamma$ -*Sitostenon*, *Stigmata-3,5-dien-7-one*;  $\beta$ -*Caroten*,  $\alpha$ -*Tocospiro-B*: *Megastigmatrienon*,  $\gamma$ -*Elemen*,  $\gamma$ -*Muurolen*; *Urs-12-en-28-oic acid*, 3-*hydroxy-, methyl ester*, (3. $\beta$ ), которые отсутствуют в других экстрактах.

Несомненно, определённую роль в направлении фармакологической деятельности препара-

тов травы чабреца (тимьяна ползучего) играют терпены и их производные в форме спиртов, кетонов. В данном случае существенно выделяются н-гексановый и хлороформный экстракты, содержащие — 17,14 и 6,66 (масс.% от экстракта) различных терпенов, в то время как в этанольном их содержание — 1,04 (масс.%), т.е. в 16,5 раз меньше, чем в н-гексановом и 6,40 раза, чем хлороформном. Причём отмечается различие не только в общем количественном содержании терпенов, но в их качественном спектре (табл. 1–3). Наиболее представительными терпенами во всех экстрактах являются:  $\alpha$ - и  $\beta$ -*Pinen*,  $\gamma$ -*Terpinen*,  $\alpha$ - и  $\beta$ -*Copaen*, *Caryophyllen*,  $\alpha$ -*Terpineol*,  $\alpha$ -*Cubenene*, (+)-*2-Bornanon*, *endo-Borneol*; (–)-*cis-Myrtranol* — 79,97 (масс.% от стеринов) для н-гексанового экстракта. Н-гексановый экстракт также значительно отличается от хлороформного, и особенно, от этанольного экстрактов, как количественным содержанием углеводов, так и их качественным составом (табл. 4, 1–3). Так, группы углеводов в этанольном экстракте распределились следующим образом (масс.% от суммы углеводов): циклоалканы — 30,77, изоалканы — 27,99, н-алканы — 15,70; алкины — ( $C_{18}$ ,  $C_{19}$ ,  $C_{20}$ ) — 15,45; алкены ( $C_{12}$ ,  $C_{20}$ ,  $C_{26}$ ) — 4,97, арены — 4,48, терпены — 1,04. Среди циклоалканов доминируют трициклические структуры типа: *syn-Tricyclo[5.1.0.0(2,4)]oct-5-ene-3,3,5,6,8,8-hexamethyl*; *Tricyclo[20.8.0.0(7,16)]triacontane*, *1(22),7(16)-diepoxy*; и бициклические: *Bicyclo[2.2.1]heptane*, *-2-cyclopropyliden-1,7,7-trimethyl*; *Bicyclo[5.2.0]nonane*, *2-methylene-4,8,8-trimethyl-4-vinyl* и др.

Для н-гексанового экстракта распределение групп углеводов следующей (масс.% от экстракта): н-алканы — 45,63, изоалканы — 17,66, алкины — 0,83, алкены — 0,74, терпены и их производные — 26,65; циклоалканы, циклоалкены — 8,46, среди которых присутствуют: *Cyclohexen*, *1-methyl-4-(1-methylethyliden)*, *Cyclohexen*, *1-methyl-3-vinyl-oxo*, *Cyclohexan*, *1-ethenyl-1-methyl-2-(1-methylethynyl)-4-(1-methylethyliden)*; *Bicyclo[2.2.1]hept-2-ene*, *1,7,7-trimethyl*, *Bicyclo[3.1.1]heptane*, *6,6-dimethyl-2-methylen-(IS)*; *7-Thiabiacyclo[4.1.0]heptan*, *3-methyl* и другие; арены представлены только — о-ксилолом — 0,03 (масс.% от экстракта).

Сравнение данных, как по количественному содержанию суммы углеводов, так и по распределению отдельных групп, а именно, н-, изоалканов, алкинов и алкенов, терпенов, циклоалканов и циклоалкенов, аренов указывает на весьма существенную разницу, что несомненно было определено природой используемого при экстракции растворителя — от неполярного н-гексана, до полярного этанола. Первый из них затронул компоненты

эфирного масла, являющегося основой молекулярной части, а этанол — надмолекулярной — органического вещества исходного растения — травы чабреца. Если связь соединений в молекулярной части определяет, в основном, водородные и в меньшей степени ковалентные и донорно-акцепторные связи, то в надмолекулярной, сетчатой структуре преобладают последние два типа связей, тем более, этанольный экстракт характеризуется высоким содержанием гетероатомов — азот, сера, кремний и кислород в составе гетероциклов и различных функциональных групп.

Н-гексановый экстракт отличается высоким содержанием *альдегидов*, что в 25,90 и 3,24 раза больше, чем хлороформом и этанольном экстрактах, которые представлены в н-гексановом экстракте: *Pentadecanal*, *9-Octadecenal*, *2,6-Octadienal*, *3,7-dimethyl-*, (*Z*) и *Oxiranecarboxaldehyd*, *3-methyl-3-(4-methyl-3-pentenyl)*; *кетонами* обогащен этанольный экстракт, в 2,14 раза больше, чем в н-гексановом, которые различны по структуре их молекул (табл. 1, 3).

Одной из групп соединений, определяющих направления и специфику фармакологического действия препаратов травы чабреца, также являются спирты, в основном концентрированные в хлороформном экстракте (табл. 4), составляя — 28,71 (масс.% от экстракта). Следует отметить, что они являются непредельными типа: *1-Octen-3-ol*, *1,6-Octadien-3-ol*, *3,7-dimethyl*; *3,6-Octadien-1-ol*, *3,7-dimethyl (Z)*, *2,6-Octadien-1-ol*, *3,7-dimethyl (Z)*, *9,12,15-Octadecatrien-1-ol,(Z,Z,Z)*, *Eicosen-1-ol*, *cis-9,Phytol*; присутствует двухатомный — *Hexadecan-1,2-diol*, производные азуленф, замещенных — ОН-спиртовой группой: *1P-Cycloprop [e]azulen-7-ol*, *decahydro-1,1,7-trimethyl-4-methylene-*, [*1ar-(1a. A, 4a.  $\alpha$ , 7.  $\beta$ ., 7a.  $\beta$ ., 7b.  $\alpha$ .)*].

Н-гексановый экстракт содержит более широкое разнообразие спиртов типа: *1-Octen-3-ol*; *3-Octanol*; *2,6-Octadien-1-ol*, *3,7-dimethyl*, — (*Z*); *Cyclohexanol*, *2-methyl-5-(1-methylethenyl)-*, (*1.  $\alpha$ ., 2.  $\alpha$ , 5.  $\beta$ )* — 57,29 (масс.% от спиртов); *Bicyclo[3.1.1]hept-3-en-2-ol,-4,6,6-trimethyl-*, [*IS-(1.  $\alpha$ , 2.  $\beta$ ., 5.  $\alpha$ )*]; *Bicyclo[4.1.0]heptan-3-ol,-4,7,-trimethyl-*, [*1R-(1.  $\alpha$ ., 3.  $\beta$ ., 4.  $\alpha$ ., 6.  $\alpha$ )*]; *Tetracontan-1.40-diol*; *6,10,14,18,22-Tetracosapentaen-2-ol*, *3-bromo-2,6,10,15,-19,23-hexamethyl-*, (*all-E*); *1H-Cycloprop [e] azulen-5-ol*, *decahydro-1,1,7-trimethyl-4-methylene-*, [*1ar-(1a.  $\alpha$ ., 4a.  $\alpha$ ., 7.  $\beta$ ., 7a.  $\beta$ ., 7b.  $\alpha$ )*] и другие. Как и в случае н-гексанового экстракта, в этанольном, значительная доля непредельных спиртов, содержащих в углеводородной цепи двойные и тройные связи: *3,6-Nonadien-1-ol*, (*E, Z*); *1,6-Octadien-3-ol*, *3,7-dimethyl*; *2,6-Octadien-1-ol*, *3,7-dimethyl-*,

(Z); 4-Hexen-1-ol, 5-methyl-2-(1-methylethenyl), — acetat; 1-Hexadecyn-3-ol, 3,7,11,15-tetramethyl; 2,6-Dimethyl-3,5,7-Octatrien-2-ol, (Z, Z), Phytol; присутствуют отдельные циклические спирты: Cyclopentylphenylmethanol, cyclododecanol, 2-Cyclohexen-1-ol. 4-ethyl-1,4-dimethyl (табл. 1,3).

Анализ данных табл. 1–4 на примере изучения последовательной исчерпывающей экстракции травы чабреца (тимьяна ползучего) растворителями в порядке возрастания их полярности, с последующим использованием хромато-масс-спектрометрии полученных экстрактов, позволило сделать вывод о целесообразности применения указанного метода экстракции при детальном исследовании особенности состава органического вещества растительного сырья. Отмечены существенные различия как по выходу экстрактов, их структурно-группового состава (табл. 4), а самое главное структуре соединений различных групп, что позволяет заключить о достаточно сложном составе органического вещества травы чабреца, его молекулярной и надмолекулярной структур, характере типа связи соединений, зависимости от их углеродного скелета, природе функциональных групп, наличия водородных, ковалентных, или донорно-акцепторных связей в молекулярной и надмолекулярных структурах органического вещества. Всё перечисленные отразилось на формировании химического состава экстрактов, и как следствие этого, на специфичности и направленности фармакологического действия каждого из них. Предоставлена возможность целенаправленного получения препаратов с определенным набором соединений и как результат этого научно-обоснованного их применения для лечения строго определенных заболеваний.

Например, учитывая химический состав этанольного экстракта, а именно, значительное содержание в нем различных по структуре углеводов, в т. ч. терпенов и их производных, полиненасыщенных жирных карбоновых кислот, спиртов, стероидов, гликозидов, фенолов, азот-содержащих соединений, включающих азот в гетероциклы и различных функциональные группы; фуран и пиранпроизводные со спиртовыми, альдегидными и кетонными группами, позволяет объяснить следующие основные направления его фармакологического действия. Так, стероиды обладают выраженным кардиотоническим, стимулирующим и адаптогенным действием, повышают умственную и физическую работоспособность, улучшают функции эндокринных желез, стимулируют иммунитет, пищеварительные функции. Многие стеролы растений, например,  $\beta$ -Sitosterol,  $\gamma$ -Sitostenon, Megastigmatrienon и другие имеют структурное сходство с холестерином и способны влиять на его обмен в организме

человека. Гликозиды: Maltose, D-Glucopyranose, 4,6-*o*-heptyliden и  $\beta$ -D-Mannofuranosid, farnesyl, имея связь со стероидами, очень физиологически активны в сочетании с последними. Тетра-терпен- $\beta$ -Caroten обеспечивает специфические функции палочек сетчатки, от которых зависит восприятие фоновый освещенности и темновая адаптация глаза; участвует в синтезе хондроитинсульфата — главного полисахарида хрящевой ткани, органической матрицы кости; в построении клеточных мембран и в трофике эпителия дыхательных путей, протоков различных желез; проявляет бальзамирующий, ранозаживляющий эффект.

Производные фурана и пирана также проявляют широкий спектр фармакологического действия: капилляроукрепляющее (P-витаминное), кардиотропное, спазмолитическое, гипотензивное, гепатозащитное, кровоостанавливающие, мочегонное, противовоспалительные, противоопухолевое, вероятно, связанное с их антиоксидантной активностью. Именно сумма действующих начал (флавоноиды, кумарины, полифенолы) оказывает более надёжный цитозащитный эффект, нежели отдельные соединения, сильнее ингибируют перекисное окисление липидов (ПОЛ) и другие свободнорадикальные реакции.

В этом отношении весьма важна роль фенолов, идентифицированных в этанольном экстракте, особенно: Catechol 2-Methoxy-4-vinyl-phenol, Hydroquinon, trans-Jsoeugenol, проявляющие противомикробное, антиоксидантное (мембраностабилизирующее, цитозащитное), вяжущее действие, что объясняется их более высокой, чем у других действующих начал, противорадикальной активностью. Свободные радикалы способны необратимо повреждать мембраны клеток и внутриклеточных органелл, нуклеиновые кислоты, белки, принимают участие в процессах старения, злокачественного перерождения клеток, играют важную роль в патогенезе атеросклероза, инфаркта миокарда, хронических заболеваниях и т. п.

Карбоновые кислоты, особенно содержащие углеводородной цепи двойные и тройные связи, ареновые, типа бензойной и её производных, также проявляют высокую физиологическую активность, в частности, в отношении злокачественных новообразований, ингибируя их развитие, останавливая процесс метастазирования, в конечном итоге разрушая раковую клетку. Данный процесс в значительной степени ингибируется наличием в экстракте флавоноидов, ксантонов и фенолов. Полиненасыщенные жирные карбоновые кислоты участвуют в синтезе арахидоновой кислоты, дефицит которой в организме сопровождается дерматитом, бесплодием, патологическими изменениями

в почках, снижением сопряженности окисления и фосфолирования, дыхательного контроля в митохондриях, гиперлипидемией, явной тенденцией к развитию атеросклероза. Основная физиологическая роль ненасыщенных жирных кислот, по-видимому, состоит в их участии в построении клеточных мембранах и в синтезе постгландинов, выполняющих функцию тканевых регуляторов (аутокоидов), а также отрицательную роль при патологических состояниях (аллергии, воспалительных реакциях и т.п.). Защита ненасыщенных жирных кислот осуществляется витамином *E*, присутствующим в этанольном экстракте.

Углеводородная фракция экстракта, доля которой особенно значительна в *n*-гексановом и хлороформном экстрактах, является сложной смесью алифатических и циклических терпенов (преимущественно моно- и сесквитерпенов), их спиртов и кетонов, моно-, би- и трициклических циклоалканов и циклоалкенов, алкинов, и алкенов, составляет основу эфирного масла травы чабреца (тимьяна ползучего). Количество и структура соединений, определяющих основу эфирного масла позволяют во многом прогнозировать лечебные свойства растительных экстрактов. К числу наиболее постоянных и доказанных видов их активности можно отнести несколько важных в практическом отношении действий: противомикробные, противовоспалительное, эпителизирующее (бальзамическое, репаративное, ранозаживляющее), спазмолитическое, отхаркивающее, стимуляция пищеварительных функций. Бактериологическое и бактерицидное действия состоит в основном в деструкции цитоплазматической мембраны бактерий с последующим нарушением обмена, аэробного дыхания, процентов синтеза. Противовоспалительное действие проявляется в защите клеток от дальнейшего разрушения, в ослаблении экссудативный фазы процесса, в лейкоцитарной и макрофагальной инфильтрации, в усилении пролиферации клеток, антиоксидантным эффектом, то есть способностью составляющих эфирных масел тормозить свободно радикальные реакции путем прямого связывания окисляющих веществ.

Спазмолитическое действие на коронарные и мозговые сосуды (отчасти рефлекторное), бронхи и полные органы, имеет, видимо, миотропную природу.

#### 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 RU2684780 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 зеленого 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.medtsu.tula.ru/VNMT/Bulletin/E2021-2/3-3.pdf> (дата обращения: 13.04.2021). DOI: 10.24412/2075-4094-2021-2-3-3
12. Платонов В.В., Валентинов Б.Г., Сухих Г.Т., Дунаев В.А., Волочаева М.В., Франкевич В.Е. Химический

- состав нгексанового 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
13. 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.
  14. 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.
  15. 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.
  16. 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.
  17. 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).
  18. 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).

## **COMPARATIVE CHARACTERISTICS OF THE CHEMICAL COMPOSITION AND DIRECTION OF PHARMACOLOGICAL ACTION OF THYME HERB EXTRACT (THYME CREEPING) (THYMUS SERPYLLUM L., FAMILY OF CLEAR-FLOWERED — LAMIACEAC) (MESSAGES IV)**

**B. G. VALENTINOV, G. T. SUKHOI, M. V. VOLCHAEVA, V. A. DUNAIEV, F. S. DATIEVA**

*The purpose of the study is to show the expediency of sequentially extracting herbal medicinal raw materials with solvents in order of increasing their polarity, to reveal the nature of the distribution of both different groups of compounds and individual ones in the organic matter of thyme (thyme creeping). Results and their discussion. The results of comparative characterization of the chemical composition and direction of pharmacological action of n-hexane, chloroform and ethanol extracts of sequential exhaustive extraction of thyme herb (creeping thyme) obtained using chromatography-mass spectrometry, mass spectra and structural formulas of individual compounds, which were identified in 162 (n-hexane), 101 (chloroform) and 150 (ethanol) extracts. The influence of the nature of the solvent on both the yield of extracts and the structural and group composition of the latter, the features of the structural organization of the extracted compounds have been established, the specificity of the direction of the pharmacological action of each of the extracts, which made it possible to justify the expediency of successive exhaustive extraction of the initial medicinal raw materials with solvents in ascending order of their polarity.*

**Keywords:** *thyme, extraction, mass spectrometry.*