

УДК 615.19.072

ИЗУЧЕНИЕ ВОЗМОЖНОСТИ ПРИМЕНЕНИЯ ИК-СПЕКТРОСКОПИИ ДЛЯ ИДЕНТИФИКАЦИИ СОРТА ПЛОДОВ ОБЛЕПИХИ КРУШИНОВИДНОЙ (*HIPPORHAES RHAMNOIDES L.*)*

© *О.В. Тринева***, *М.А. Рудая*, *Е.Ф. Сафонова*, *А.И. Сливкин*

*Воронежский государственный университет, ул. Студенческая, 3, Воронеж,
394006 (Россия), e-mail: trineevaov@mail.ru*

Целью данного исследования являлось изучение возможности применения ИК-спектроскопии (ИКС) для идентификации плодов облепихи крушиновидной и их сортовой принадлежности. Методом ИК-Фурье спектроскопии нарушенного полного внутреннего отражения (НПВО) проведена идентификация плодов облепихи крушиновидной изучаемых сортов. Для ИК-спектров плодов облепихи крушиновидной было характерно наличие специфических полос поглощения: для сортов «Галерит», «Ботаническая», «Трофимовская» и «Краснокарминовая» – в диапазонах 3009–3006; 1456–1443 и 1379–1375 см^{-1} ; для сортов «Рябиновая», «Ботаническая любительская» и «Студенческая» – в диапазоне 1338–1321 см^{-1} ; для сортов «Рябиновая», «Ботаническая ароматная» и «Краснокарминовая» – в диапазоне 1155–1146 см^{-1} ; для сортов «Рябиновая» и «Краснокарминовая» – при 914 см^{-1} ; для сортов «Галерит», «Ботаническая» и «Краснокарминовая» – в диапазоне 609–592 см^{-1} ; для сортов «Трофимовская» и «Краснокарминовая» – при 814–812 см^{-1} ; для сорта «Рябиновая» – при 424 см^{-1} и для сорта «Трофимовская» – при 771 см^{-1} . Наибольшая величина интенсивности в максимумах поглощения характерна для ИК-спектров плодов сортов «Рябиновая», «Ботаническая любительская», «Ботаническая ароматная» и «Студенческая». Выявленные в спектре специфические частоты можно считать характеристическими для определенного сорта и использовать их в качестве маркеров при определении подлинности и сортовой принадлежности высушенных плодов облепихи крушиновидной методом ИК-спектроскопии.

Установлено образование водородных связей (размер и энергия) между молекулами биологически активных веществ (БАВ) в изучаемом ЛРС. Выявленные межмолекулярные водородные связи относятся к типу сильных связей, так как энергия их превышает 5 ккал/моль, а длина около 2,7 Å. Полифенольные БАВ в плодах, по данным ИКС, образуют полиассоциаты с характерными частотами поглощения при 3400–3200 см^{-1} .

Ключевые слова: плоды облепихи крушиновидной различных сортов, ИК-спектроскопия, водородная связь, маркерные полосы поглощения.

Введение

В последние годы в исследовании качества пищевого и лекарственного сырья применяют новые методы спектроскопии [1]. Инфракрасная спектроскопия (ИКС), впервые введенная в Государственную фармакопею X издания для идентификации фторотана и натриевых солей полусинтетических пенициллинов, в

Тринева Ольга Валерьевна – доцент кафедры фармацевтической химии и фармацевтической технологии, доктор фармацевтических наук, e-mail: trineevaov@mail.ru

Рудая Маргарита Александровна – аспирант, e-mail: margaritkazmin@yandex.ru

Сафонова Елена Федоровна – заведующий кафедрой фармации, кандидат химических наук, доцент, e-mail: safonova@pharmvsu.ru

Сливкин Алексей Иванович – заведующий кафедрой фармацевтической химии и фармацевтической технологии, декан фармацевтического факультета, доктор фармацевтических наук, профессор, e-mail: slivkin@pharmvsu.ru

последнее время все чаще применяется в анализе различных классов лекарственных веществ. Спектральные методы позволяют устанавливать структуру органических соединений с гораздо меньшими затратами времени по сравнению с традиционными химическими методами [1].

Все большее распространение в исследовании качества и подлинности сырья находит метод ИК-Фурье спектроскопии нарушенного полного внутреннего отражения (НПВО). Инфракрасные спектры

* Данная статья имеет электронный дополнительный материал (приложение), который доступен читателям на сайте журнала. DOI: 10.14258/jcrpm.2019014210s.

** Автор, с которым следует вести переписку.

отличаются большой индивидуальностью, что и является ценным при идентификации, изучении строения и характера взаимодействия между различными соединениями. Метод имеет ряд преимуществ по сравнению с техникой измерения на пропускание. Исследовать можно любые образцы, в любой форме и агрегатном состоянии. Весь анализ занимает буквально минуту, включая размещение образца, сбор и обработку данных. Кроме того, при использовании ИКС для определения качественного и количественного состава природных смесей нет необходимости разрушать вещества, что позволяет применять их для дальнейших исследований.

В литературных источниках имеются ограниченные сведения о возможности использования ИКС в оценке подлинности лекарственного растительного сырья (ЛРС) [2–7]. Необходимым этапом исследования является интерпретация спектров, т.е. выделение определяющих положение полос в спектрах и их интенсивности. ИК-спектр ЛРС представляет собой суммарный спектр, в котором происходит наложение полос поглощения различных функциональных групп органических веществ, что делает его расшифровку весьма трудной задачей.

Цель настоящего исследования – изучение возможности применения ИК-спектроскопии для идентификации плодов облепихи крушиновидной и их сортовой принадлежности.

Экспериментальная часть

Объектом исследования являлись высушенные плоды облепихи крушиновидной различных сортов («Столичная» (1), «Галерит» (2), «Рябиновая» (3), «Ботаническая любительская» (4), «Ботаническая» (5), «Трофимовская» (6), «Студенческая» (7), «Ботаническая ароматная» (8), «Краснокарминовая» (9), «Нивелена» (10)), произрастающие на европейской территории России, заготовленные в 2017 году на базе Ботанического сада биологического факультета Московского государственного университета им. М.В. Ломоносова, согласно правилам заготовки ЛРС различных морфологических групп. Сушку плодов производили при температуре 60 °С до остаточной влажности не более 14%.

Исследования подлинности изучаемых объектов методом ИКС проведены с помощью научно-технической базы Центра коллективного пользования научным оборудованием ВГУ. ИК-спектры были получены без предварительной пробоподготовки (ЛРС измельчалось до размера частиц, проходящих через сито с диаметром отверстий 0,5 мм) на приборе ИК-Фурье спектрометр Bruker VERTEX 70 (Германия) методом НПВО и последующей обработкой программой OMNIC или GRAMS 4/32 (сам спектр (в шкале волновых чисел) получался после выполнения специальных математических расчетов над интерферограммой. Все функции по регистрации интерферограммы, преобразованию Фурье, управлению спектрометром и математической обработке спектров выполнялись программой OMNIC). Спектры НПВО получали на стандартной приставке с горизонтальным расположением элемента и устройством поджатия порошкообразных проб, что позволяло получать хорошо выраженные спектры при полном контакте образца со всей рабочей поверхностью кристалла. Вид полученных спектров представлен в электронном приложении к статье. Кратность эксперимента для одного сорта составляла не менее трех измерений.

Согласно выдвинутой научной гипотезе изучение полученных ИК-спектров ЛРС покажет отличия в рисунке и степени интенсивности полос поглощения для каждого сорта сырья.

Обсуждение результатов

Анализ спектров показывает, что их рисунок строго специфичен для каждого сорта сырья (табл. 1, рис. 2–4 приложения к статье). Тем не менее у всех сортов исследуемых плодов в ИК-спектрах имеются сходные области полос поглощения по положению, но различающиеся своей интенсивностью.

Фенольные соединения являются одним из многочисленных классов вторичных соединений растений, обуславливающих их биологическую ценность [8–13]. Полоса поглощения при 1174–1161 см⁻¹ характерна для деформационных колебаний свободной ОН-группы фенола. Максимальные пики поглощения выявлены в диапазоне частот 1100–1000 см⁻¹ у всех сортов плодов облепихи крушиновидной. Данные пики могут быть обусловлены колебаниями, связанными с группой С-О-Н некоторых фенольных соединений, первичных и вторичных спиртов, которые в большом количестве присутствуют в плодах растений. С наличием фенольных соединений связаны также полосы поглощения, обусловленные валентными колебаниями свободных групп ОН (частоты 3670–3580 см⁻¹), внутри- и межмолекулярных водородных связей в димерах и

полимерах (частоты 3400–3200 см⁻¹). Валентные колебания свободного фенольного гидроксила, по литературным данным [1, 14–19], находятся в диапазоне частот 3750–3700 см⁻¹.

О присутствии углеводов свидетельствуют полосы поглощения, обусловленные валентными колебаниями СН₂-групп при частоте ~ 2930 см⁻¹. Колебания, связанные с группой С-О-Н: R-O-H (частоты 1450–1250, 750–650 см⁻¹), первичные спирты (частоты 1075–1000; 1350–1260 см⁻¹), вторичные спирты (частоты 1350–1260 см⁻¹), третичные спирты (частоты 1170–1100; 1410–1310 см⁻¹), фенолы (частоты 1270–1140; 1410–1310 см⁻¹), колебания групп карбоновых кислот: валентные колебания групп СООН (частоты 1760; 1725–1700 см⁻¹), связанные ОН-группы (частоты 3300–2500 см⁻¹), любые группы ОН (частоты 995–890 см⁻¹), колебания С-О связей (частоты 1320–1210 см⁻¹); колебания С-О-С в эфирах ароматических кислот (частоты 1300–1250 см⁻¹). Симметрические деформационные колебания групп С-СН₃ и С-СН₂ расположены в области частот 1380–1300 см⁻¹. При этом интенсивность поглощения при 1379 см⁻¹ зависит от полноты метилирования бензольного кольца. Полоса поглощения в диапазоне частот около 1460–1450 см⁻¹ обусловлена ассиметрическими деформационными колебаниями групп С-СН₃ и С-СН₂. В области частот 1800–1200 см⁻¹ в основном проявляются характеристические полосы валентных колебаний групп -С=О и -С-С-, деформационных колебаний метильных и метиленовых групп, а также ОН-групп. Симметрические и ассиметрические колебания валентных связей С-О-С-группы представлены полосами поглощения в области частот 1280–1010 см⁻¹ [2–7].

Интервалу от 1300 до 200 см⁻¹ принадлежит «область отпечатков пальцев» – диапазон частот, в котором положение и интенсивность полос поглощения индивидуально для каждого органического соединения. Это область валентных колебаний: С-С, С-N, С-О и деформационных колебаний: С-Н, N-H, О-Н. Отнесение характеристических частот поглощения в ИК-спектрах исследуемых сортов плодов облепихи крушиновидной приведено в таблицах 1 и 2. При сравнении спектров образцов некоторых сортов плодов облепихи крушиновидной обнаружено их значительное сходство в области валентных и деформационных колебаний: 2926–2916; 2854–2848; 1174–1153; 1032–1018 см⁻¹ (рис. 1 приложения к статье), что указывает на определенную устойчивость химического состава вида.

Таблица 1. Характеристические частоты поглощения в полученных ИК-спектрах испытуемых сортов плодов облепихи крушиновидной, ν , см⁻¹ (на спектрах)

Сорт Диапазон частот	1*	2	3	4	5	6	7	8	9	10
3600–3200	3310	3279	3286	3279	3290	3286	3283	3285	3279	–
3013–3009	–	3009	–	–	3006	3006	–	–	3006	–
2960–2850	2924	2922	2926	2922	2924	2924	2922	2922	2922	2916
	2854	2852	2852	2852	2852	2852	2852	2852	2852	2848
1750–1730	1740	1740	–	–	1742	1742	–	1740	1742	1732
1716–1713	–	1713	1713	1716	–	–	1713	1714	–	–
1680–1620	–	1651	1653	–	1653	1655	1651	1651	1653	–
	1632	1635	1626	1626	–	1626	–	–	1633	–
1556–1539	1556	1547	1549	1543	1539	1542	1543	1543	1549	–
1460–1450	–	1443	–	–	1456	1456	–	–	1456	–
	–	1418	1406	1417	1418	–	1419	1417	–	–
1380–1300	–	1375	–	–	1379	1377	–	–	1377	–
	–	1321	1338	1336	–	–	1336	–	–	–
1280–1010	1232	1240	1240	1230	1227	1234	1232	1236	1232	–
	1163	1169	1174	1174	1161	1165	1174	1153	1155	1163
	–	–	1146	–	–	–	–	–	–	–
	1078	1076	1074	–	1099	1078	1070	1072	1070	1092
918–912	–	–	914	–	–	–	–	–	914	–
	840–800	–	885	887	889	889	–	881	–	893
750–720	–	–	–	–	–	812	–	–	814	–
	–	–	–	–	–	771	–	–	–	–
–	723	721	–	–	721	721	–	–	721	–
	–	609	611	–	592	–	–	–	606	–
	530	521	515	519	517	519	520	517	521	–
	467	465	465	463	453	468	455	465	459	–
–	–	424	–	–	–	–	–	–	–	–

* здесь и далее номер сорта соответствует названию, описанному в экспериментальной части работы.

Таблица 2. Отнесение характеристических частот поглощения в полученных ИК-спектрах испытуемых сортов плодов облепихи крушиновидной

ν , см ⁻¹ (на спектрах)	Интенсивность	Функциональная группа	Тип колебаний и соответствующий структурный фрагмент	Диапазон частот соответствующей функциональной группы [1, 14–19]	Интенсивность [1, 14–19]
3310–3279	Сильная	Фенольный гидроксил в межмолекулярных водородных связях	валентные колебания О-Н в межмолекулярных водородных связях	3650–3450 (димеры); 3400–3200 (полиассоциаты)	Сильная
2926–2916	Сильная		валентные колебания связей	2960–2850	
1456–1443	Слабая	C-CH ₃ C-CH ₂	асимметрические деформационные колебания групп	1460–1450	Сильная или очень сильная
1379–1375			симметрические деформационные колебания групп	1380–1300	
1338–1321			валентные колебания связи C=C ароматического ядра	группа полос 2000–1600	Слабая
1716–1713	Сильная	-HC=CH-	симметрические и асимметрические колебания валентных связей C-O		
1240–1230	Средняя	C-OH		1280–1010	Сильная
1174–1161	Сильная	Структура пирана	–	1097	Очень сильная
1032–1018	Сильная			813	Сильная
1099–1070	Сильная	-CH ₂	валентное, СН деформационные, аминокислотная полоса I	2853±10	Сильная
814–812	Сильная	(NH ₃ ⁺)	деформационные, аминокислотная полоса II	1660–1610	Слабая
2854–2848	Сильная		деформационное асимметрическое, СН	1550–1485	Средняя
1635–1626	Средняя	-CH ₃	(-CH ₂ -) ₄ , скелетные валентное, C=C, несопряженное связанная -ОН группа	1450±20	Средняя
1556–1539	Слабая	-CH ₂		750–720	Средняя
1456–1443	Средняя	-C=C-		1680–1620	Переменная
771–721	Сильная	C-OH		3300–2500	Слабая
1655–1651	Слабая	-C-O-	валентное симметрическое, карбоксилат-ион	1300–1400	Средняя
1635–1626	Слабая	RCOOR RCOR	валентное, C=O, насыщенная	1750–1730	Сильная
3009–3006	Слабая	=CH	деформационное, =C-H	885–855	Сильная
1418–1406	Слабая	-C=C- (цис-)	валентное, СН	840–800	Слабая
1742–1732	Слабая	-C-O-C-	эфиры	918	Очень слабая
893–881	Слабая	C-H	деформационное, -C-H	745–705	Сильная
814–812	Слабая				
914	Слабая				
771–721	Средняя				

По данным авторов [14–20], полосы поглощения в интервале 3650–3200 см⁻¹ характеризуют наличие группы –ОН в межмолекулярных водородных связях. Это обусловлено тем, что при образовании водородной связи силовая постоянная связи О–Н уменьшается, а полоса может сдвигаться до 3500–2500 см⁻¹ [14–20]. Чем прочнее возникающее взаимодействие, тем ниже частота колебаний. Полосы поглощения в диапазоне 3310–3279 см⁻¹ на ИК-спектрах плодов облепихи крушиновидной исследуемых сортов (рис. 1 приложения к статье) обусловлены валентными колебаниями фенольного гидроксила в межмолекулярных водородных связях. На основании полученных данных были рассчитаны термодинамические характеристики [14–20] выявленных связей, таких как энергия (E_H) и длина (R), которые представлены в таблице 3. Следует отметить, что для ИК-спектра плодов облепихи крушиновидной сорта «Нивелена» не характерно было наличие полосы ни в данной области, ни в области валентных колебаний свободной О–Н группы (рис. 2 и 4 приложения к статье).

Согласно данным авторов [14, 15, 20], выявленные межмолекулярные водородные связи относятся к типу сильных связей, так как энергия их превышает 5 ккал/моль, а длина около 2,7 Å. В случае фенолов данные связи могут приводить к образованию цепей, димеров, колец или пространственных сеток [14, 15, 20]. Полифенольные БАВ в плодах, по данным ИКС, образуют полиассоциаты с характерными частотами

поглощения при 3400–3200 см⁻¹, тогда как формирование димерных структур с участием фенольных гидроксильных групп БАВ приводит к появлению полосы в диапазоне 3650–3450 см⁻¹ [1, 14, 15, 20]. Одним из возможных вариантов ассоциации молекул БАВ является образование водородной связи между кислородом –ОН группы одной молекулы и водородом фенольного гидроксила другой.

Анализ спектров показывает, что практически у всех исследуемых сортов плодов облепихи крушиновидной с различной степенью интенсивности присутствуют полосы поглощения в указанных диапазонах частот (табл. 2). Изучение полученных ИК-спектров показало также, что у каждого сорта имеются отличия в рисунке и степени интенсивности полос поглощения, что, по-видимому, определяется особенностями химического состава сырья (табл. 4). Выявленные в спектре специфические частоты можно считать характеристическими для определенного сорта и использовать их в качестве маркеров при определении подлинности и сортовой принадлежности высушенных плодов облепихи крушиновидной методом ИКС (рис. 2–4 приложения к статье).

Таблица 3. Термодинамические характеристики межмолекулярных водородных связей БАВ в плодах облепихи крушиновидной испытываемых сортов по данным ИКС

№ п/п	Сорт	Частота, см ⁻¹	$\Delta \nu,^* \text{ см}^{-1}$	E _H		R, Å
				кДж/моль	ккал/моль	
1	«Столичная»	3310	390	27,59	6,59	2,75
2	«Галерит»	3279	421	29,77	7,11	2,74
3	«Рябиновая»	3286	414	29,27	6,99	2,75
4	«Ботаническая любительская»	3279	421	29,77	7,11	2,74
5	«Ботаническая»	3290	410	29,01	6,93	2,75
6	«Трофимовская»	3286	414	29,27	6,99	2,75
7	«Студенческая»	3283	417	29,48	7,04	2,75
8	«Ботаническая ароматная»	3285	415	29,35	7,01	2,75
9	«Краснокарминовая»	3279	421	29,77	7,11	2,74
10	«Нивелена»	–	–	–	–	–

Примечание. $\Delta \nu^*$ – смещение частоты поглощения. Формулы расчета термодинамических характеристик приведены в работах [14, 15, 20].

Таблица 4. Маркерные полосы поглощения в полученных ИК-спектрах испытываемых сортов плодов облепихи крушиновидной, $\nu, \text{ см}^{-1}$ (на спектрах)

Сорт № п/п	1	2	3	4	5	6	7	8	9	10
1	3310	3279	3286	3279	3290	3286	3283	3285	3279	–
2	–	3009	–	–	3006	3006	–	–	3006	–
3	1740	1740	–	–	1742	1742	–	1740	1742	1732
4	–	1713	1713	1716	–	–	1713	1714	–	–
5	–	1651	1653	–	1653	1655	1651	1651	1653	–
6	1632	1635	1626	1626	–	1626	–	–	1633	–
7	1556	1547	1549	1543	1539	1542	1543	1543	1549	–
8	–	1443	–	–	1456	1456	–	–	1456	–
9	–	1418	1406	1417	1418	–	1419	1417	–	–
10	–	1375	–	–	1379	1377	–	–	1377	–
11	–	1321	1338	1336	–	–	1336	–	–	–
12	1232	1240	1243	1230	1227	1234	1232	1236	1232	–
13	1163	1169	1174	1174	1161	1165	1174	–	–	1163
14	–	–	1146	–	–	–	–	1153	1155	–
15	1078	1076	1074	–	1099	1078	1070	1072	1070	1092
16	–	–	914	–	–	–	–	–	914	–
17	–	885	887	889	889	–	881	–	893	–
18	–	–	–	–	–	812	–	–	814	–
19	–	–	–	–	–	771	–	–	–	–
20	723	721	611	–	721	721	–	–	721	–
21	–	609	–	–	592	–	–	–	606	–
22	530	521	515	519	517	519	520	517	521	–
23	467	465	465	463	453	468	455	465	459	–
24	–	–	424	–	–	–	–	–	–	–

Для ИК-спектров плодов облепихи крушиновидной было характерно наличие специфических полос поглощения: для сортов «Галерит», «Ботаническая», «Трофимовская» и «Краснокарминовая» в диапазонах 3009–3006; 1456–1443 и 1379–1375 см⁻¹; для сортов «Рябиновая», «Ботаническая любительская» и «Студенческая» в диапазоне 1338–1321 см⁻¹; для сортов «Рябиновая», «Ботаническая ароматная» и «Краснокарминовая» в диапазоне 1155–1146 см⁻¹; для сортов «Рябиновая» и «Краснокарминовая» при 914 см⁻¹; для сортов «Галерит», «Ботаническая» и «Краснокарминовая» в диапазоне 609–592 см⁻¹; для сортов «Трофимовская» и «Краснокарминовая» при 814–812 см⁻¹; для сорта «Рябиновая» при 424 см⁻¹ и для сорта «Трофимовская» при 771 см⁻¹. Следует также отметить, что ИК-спектр плодов сорта «Нивелена» характеризовался наименьшим количеством полос и интенсивностью их поглощения, что также можно использовать в качестве характеристического признака. Наибольшая величина интенсивности поглощения в максимумах характерна для ИК-спектров плодов сортов «Рябиновая», «Ботаническая любительская», «Ботаническая ароматная» и «Студенческая».

Выводы

1. Метод ИК-Фурье спектроскопии НПВО позволяет идентифицировать плоды облепихи крушиновидной. Полученные индивидуальные ИК-спектры и спектральные характеристики (интенсивность и положение полосы поглощения) являются строго специфичными для каждого сорта сырья и обусловлены, по видимому, особенностями фитохимического состава.
2. Методом ИК-спектроскопии установлено образование водородных связей и их характер между молекулами БАВ в изучаемом ЛРС.
3. Выявленные в спектре специфические частоты можно считать характеристическими для определенного сорта и использовать их в качестве маркеров при определении подлинности и сортовой принадлежности высушенных плодов облепихи крушиновидной методом ИКС.

Список литературы

1. Казыцына Л.А., Куплетская Н.Б. Применение УФ-, ИК- и ЯМР-спектроскопии в органической химии. М., 1971. 264 с.
2. Голубцова Ю.В. Оценка качества и подлинности плодово-ягодного сырья методом ИК-Фурье спектроскопии нарушенного полного внутреннего отражения // Техника и технология пищевых производств. 2017. Т. 45, №2. С. 126–132.
3. Авилова И.А. Возможность использования метода ИК-спектроскопии для определения качества и подтверждения подлинности состава масел растительного происхождения // Технологии пищевой и перерабатывающей промышленности АПК-продукты здорового питания. 2016. №4. С. 71–74.
4. Выговтов А.А. Определение подлинности и обнаружение фальсификации пищевых продуктов методом ИК-Фурье-спектрометрии // Ученые записки СПб филиала РТА. 2010. №1(35). С. 193–196.
5. Мухутдинов Р.Р., Пилюпенко Т.В. Использование ИК-Фурье спектроскопии для анализа пищевых продуктов // Международная научно-практическая конференция, посвященная памяти Василия Матвеевича Горбатова: тезисы докладов. 2017. № 1. С. 243.
6. Генералов Е.А. Физико-химические подходы к анализу природных полисахаридов // Auditorium. 2015. №4(08). С. 38–54.
7. Съедин А.В., Орловская Т.В., Гаврилин М.В. Использование метода ИК-спектроскопии для экспресс – идентификации тиогликозидов в растительном сырье // Современные проблемы науки и образования. 2014. №1. С. 367.
8. Sabir S.M., Maqsood H., Hayat I., Khan M.Q., Khaliq A. Elemental and nutritional analysis of sea buckthorn (*Hippophae rhamnoides* ssp. *turkestanica*) Berries of Pakistani origin // Journal of Medicinal Food. 2005. Vol. 8, no. 4. Pp. 518–522. DOI: 10.1089/jmf.2005.8.518.
9. Skuridin G.M., Chankina O.V., Legkodymov A.A., Baginskaya N.V., Kremer V.K., Koutsenogii K.P. Elemental Composition and the Intensity of Chemical Elements Accumulation in the Fruits of Sea Buckthorn (*Hippophae rhamnoides* L.) // Chemistry for Sustainable Development. 2013. Vol. 21. Pp. 491–498.
10. Cheng Tigong, Ni Ming Kang, Li Rong, Ji Fen. Исследование биохимических свойств среднеазиатской облепихи, произрастающей в провинции Ганьсу (КНР) // Химия природных соединений. 1991. №1. С. 135–137.
11. Skuridin G.M., Chankina O.V., Legkodymov A.A. et al. Trace element composition of common sea buckthorn (*Hippophae rhamnoides* L.) tissues // Bull. Russ. Acad. Sci. Phys. 2013. Vol. 77, N2. Pp. 207–210. DOI: 10.3103/S1062873813020342.
12. Kukina T.P., Shcherbakov D.N., Gensh K.V., Tulysheva E.A., Salnikova O.I., Grazhdannikov A.E., Kolosova E.A. Bioactive Components of Sea Buckthorn *Hippophae rhamnoides* L. Foliage // Russian Journal of Bioorganic Chemistry. 2017. Vol. 43, N7. Pp. 747–751. DOI: 10.1134/S1068162017070093.

13. Lalit M. Bala, Venkatesh Meda, Naik S.N., Santosh Satya. Sea buckthorn berries: A potential source of valuable nutrients for nutraceuticals and cosmeceuticals // *Food Research International*. 2011. Vol. 44. Pp. 1718–1727. DOI: 10.1016/j.foodres.2011.03.002.
14. Водородная связь / под ред. В.М. Чулановского. М., 1964. 462 с.
15. Водородная связь / под ред. Н.Д. Соколова, В.М. Чулановского. М., 1964. 340 с.
16. Литтл Л. Инфракрасные спектры адсорбированных молекул / под ред. Лыгина В.И. М., 1969. 514 с.
17. Установление структуры органических соединений физическими и химическими методами / под ред. А. Вайсбергера. М., 1967. 532 с.
18. Наканиси К. Инфракрасная спектроскопия и строение органических соединений. М., 1965. 216 с.
19. Отто М. Современные методы аналитической химии. М., 2003. С. 151–290.
20. Чечета О.В., Сафонова Е.Ф., Сливкин А.И. Исследование водородных связей α -токоферола методом ИК-спектроскопии // *Вестник Воронежского государственного университета. Серия: Химия. Биология. Фармация*. 2010. №2. С. 164–167.

Поступила в редакцию 21 июня 2018 г.

После переработки 11 сентября 2018 г.

Принята к публикации 19 сентября 2018 г.

Для цитирования: Тринеева О.В., Рудая М.А., Сафонова Е.Ф., Сливкин А.И. Изучение возможности применения ИК-спектроскопии для идентификации сорта плодов облепихи крушиновидной (*Hippophaes rhamnoides L.*) // *Химия растительного сырья*. 2019. №1. С. 301–308. DOI: 10.14258/jcprm.2019014210.

*Trineeva O.V.**, *Rudaya M.A.*, *Safonova E.F.*, *Slivkin A.I.* STUDY OF THE POSSIBILITY OF USING IR-SPECTROSCOPY FOR THE IDENTIFICATION OF A VARIETY OF SEA BUCKTHORN FRUIT (*HIPPOPHAES RHAMNOIDES L.*)

Voronezh State University, Student st., 3, Voronezh, 394006 (Russia), e-mail: trineevaov@mail.ru

The purpose of this study was to study the feasibility of using IR spectroscopy (IRS) to identify the fruit of sea buckthorn and buckthorn varieties. Fourier species of sea-buckthorn of buckthorn species studied were analyzed by FT-IR spectroscopy of disturbed total internal reflection (FTIR). IR spectra of sea buckthorn fruits was characterized by the presence of specific absorption bands: for grades «Gallery», «Botanical», «Trofimovskaya» and «Krasnokarminovaya» in the range 3009-3006; 1456-1443 and 1379-1375 cm^{-1} ; for varieties «Rowan», «Botanical amateur» and «Student» in the range of 1338-1321 cm^{-1} ; for varieties «Rowan», «Botanical aromatic» and «Krasnokarminovaya» in the range of 1155-1146 cm^{-1} ; for varieties «Rowan» and «Krasnokarminovaya» at 914 cm^{-1} ; for varieties «Galerit», «Botanicheskaya» and «Krasnokarminovaya» in the range of 609-592 cm^{-1} ; for varieties «Trofimovskaya» and «Krasnokarminovaya» at 814-812 cm^{-1} ; for the variety «Rowan» at 424 cm^{-1} and for the variety «Trofimovskaya» at 771 cm^{-1} . The highest intensity in absorption maxima is characteristic for infrared spectra of the fruits of the varieties «Rowan», «Botanical Amateur», «Botanical Aromatic» and «Student». Identified specific frequency in the spectrum can be regarded as characteristic for a particular grade and use them as markers in determining the authenticity and graded supplies dry fruit of sea buckthorn by IR spectroscopy.

The formation of hydrogen bonds and their characteristics (size and energy) between molecules of biologically active substances (BAS) in the LRS studied are established. The revealed intermolecular hydrogen bonds belong to the type of strong bonds, since their energy exceeds 5 kcal/mol, and the length is about 2.7 Å. Polyphenolic BAS in fruits, according to the IRS, form polyassociates with characteristic absorption frequencies at 3400-3200 cm^{-1} .

Keywords: buckthorn fruit of various varieties, IR-spectroscopy, hydrogen bond, marker absorption bands.

* Corresponding author.

References

1. Kazitsyna L.A., Kupletskaya N.B. *Primeneniye UF-, IK- i YAMR- spektroskopii v organicheskoy khimii*. [The use of UV, IR and NMR spectroscopy in organic chemistry]. Moscow, 1971, 264 p. (in Russ.).
2. Golubtsova YU.V. *Tekhnika i tekhnologiya pishchevykh proizvodstv*, 2017, vol. 45, no. 2, pp. 126–132. (in Russ.).
3. Avilova I.A. *Tekhnologii pishchevoy i pererabatyvayushchey promyshlennosti APK-produkty zdorovogo pitaniya*, 2016, no. 4, pp. 71–74. (in Russ.).
4. Vytovtov A.A. *Uchenyye zapiski SPb filiiala RTA*, 2010, no. 1(35), pp. 193–196. (in Russ.).
5. Mukhutdinov R.R., Pilipenko T.V. *Mezhdunarodnaya nauchno-prakticheskaya konferentsiya, posvyashchennaya pamyati Vasiliya Matveyevicha Gorbatova: tezisy dokladov*. [International scientific-practical conference dedicated to the memory of Vasily Matveyevich Gorbatov: abstracts]. 2017, no. 1, pp. 243. (in Russ.).
6. Generalov Ye.A. *Auditorium*, 2015, no. 4(08), pp. 38–54. (in Russ.).
7. S'yedin A.V., Orlovskaya T.V., Gavrilin M.V. *Sovremennyye problemy nauki i obrazovaniya*, 2014, no. 1, pp. 367. (in Russ.).
8. Sabir S.M., Maqsood H., Hayat I., Khan M.Q., Khaliq A. *Journal of Medicinal Food*, 2005, vol. 8, no. 4, pp. 518–522. DOI: 10.1089/jmf.2005.8.518.
9. Skuridin G.M., Chankina O.V., Legkodymov A.A., Baginskaya N.V., Kremer V.K., Koutsenogii K.P. *Chemistry for Sustainable Development*, 2013, vol. 21, pp. 491–498.
10. Cheng Tigong, Ni Ming Kang, Li Rong, Ji Fen. *Chemistry of natural compounds*, 1991, no. 1, pp. 135–137.
11. Skuridin G.M., Chankina O.V., Legkodymov A.A. et al. *Bull. Russ. Acad. Sci. Phys.*, 2013, vol. 77, no. 2, pp. 207–210. DOI: 10.3103/S1062873813020342.
12. Kukina T.P., Shcherbakov D.N., Gensh K.V., Tulysheva E.A., Salnikova O.I., Grazhdannikov A.E., Kolosova E.A. *Russian Journal of Bioorganic Chemistry*, 2017, vol. 43, no. 7, pp. 747–751. DOI: 10.1134/S1068162017070093.
13. Lalit M. Bala, Venkatesh Meda, Naik S.N., Santosh Satya. *Food Research International*, 2011, vol. 44, pp. 1718–1727. DOI: 10.1016/j.foodres.2011.03.002.
14. Vodorodnaya svyaz'. [Hydrogen bond]. Ed. V.M. Chulanovskiy, Moscow, 1964, 462 p. (in Russ.).
15. Vodorodnaya svyaz'. [Hydrogen bond]. Ed. N.D. Sokolov, V.M. Chulanovskiy. Moscow, 1964, 340 p. (in Russ.).
16. Littl L. *Infrakrasnyye spektry adsorbirovannykh molekul*. [Infrared spectra of adsorbed molecules]. Ed. V.I. Lygin, Moscow, 1969, 514 p. (in Russ.).
17. *Ustanovleniye struktury organicheskikh soyedineniy fizicheskimi i khimicheskimi metodami*. [Establishing the structure of organic compounds by physical and chemical methods]. Ed. A. Vaysberger, Moscow, 1967, 532 p. (in Russ.).
18. Nakanisi K. *Infrakrasnaya spektroskopiya i stroyeniye organicheskikh soyedineniy*. [Infrared spectroscopy and the structure of organic compounds]. Moscow, 1965, 216 p. (in Russ.).
19. Otto M. *Sovremennyye metody analiticheskoy khimii* [Modern methods of analytical chemistry]. Moscow, 2003, pp. 151–290. (in Russ.).
20. Checheta O.V., Safonova Ye.F., Slivkin A.I. *Vestnik Voronezhskogo gosudarstvennogo universiteta. Seriya: Khimiya. Biologiya. Farmatsiya*, 2010, no. 2, pp. 164–167. (in Russ.).

Received June 21, 2018

Revised September 11, 2018

Accepted September 19, 2018

For citing: Trineeva O.V., Rudaya M.A., Safonova E.F., Slivkin A.I. *Khimiya Rastitel'nogo Syr'ya*, 2019, no. 1, pp. 301–308. (in Russ.). DOI: 10.14258/jcpr.2019014210.