

УДК 581.192; 543.544

АНАЛИЗ ВТОРИЧНЫХ МЕТАБОЛИТОВ В ЛИСТЬЯХ И ПЛОДАХ *SORBUS AUCUPARIA* SUBSP. *SIBIRICA* С ИСПОЛЬЗОВАНИЕМ МЕТОДА ГХ-МС: ХЕМОТАКСОНОМИЧЕСКИЕ АСПЕКТЫ*

© А.Р. Васильева^{1**}, Н.М. Слынько¹, С.В. Асбаганов², Л.Е. Татарова¹, Л.В. Куйбида³, С.Е. Пельтек¹

¹ Федеральный исследовательский центр Институт цитологии
и генетики СО РАН, пр. Академика Лаврентьева, 10, Новосибирск, 630090,
Россия, asya_sr@mail.ru

² Центральный сибирский ботанический сад СО РАН, ул. Золотодолинская,
101, Новосибирск, 630090, Россия

³ Институт химической кинетики и горения им. В.В. Воеводского СО РАН,
ул. Институтская, 3, Новосибирск, 630090, Россия

Настоящая работа посвящена исследованию липофильных метаболитов, содержащихся в различных органах *Sorbus aucuparia* subsp. *sibirica* (листья, экзокарп, семена), методом газовой хроматографии-масс-спектрометрии (ГХ-МС). Исследование направлено на выявление межорганных различий в метаболических профилях и расширение знаний о метаболической пластичности вида. В экстрактах листьев идентифицировано 72 соединения, включая насыщенные, ненасыщенные и гидроксизамещенные жирные кислоты, спирты, алканы и стероиды. В экзокарпе и семенах обнаружено 39 и 50 соединений, принадлежащих к тем же классам. Основными соединениями стали линоленовая кислота, пальмитиновая кислота и нонакозан-10-ол (гиннол), играющий ключевую роль в защитных функциях эпикутикулярных восков и обладающий перспективными антибактериальными и антиоксидантными свойствами. Статистический анализ методом главных компонент (РСА) подтвердил наличие межорганных различий, особенно выраженных в листьях, для которых выявлены локальные хемотипы. Это свидетельствует о сложных адаптивных механизмах и высокой метаболической пластичности *S. aucuparia* subsp. *sibirica*. Полученные данные имеют потенциал для применения в фармакогнозии, хемосистематике и стандартизации растительного сырья.

Ключевые слова: рябина обыкновенная, листья и плоды, метаболиты, хемотаксономия, ГХ-МС.

Для цитирования: Васильева А.Р., Слынько Н.М., Асбаганов С.В., Татарова Л.Е., Куйбида Л.В., Пельтек С.Е. Анализ вторичных метаболитов в листьях и плодах *Sorbus aucuparia* subsp. *sibirica* с использованием метода ГХ-МС: хемотаксономические аспекты // Химия растительного сырья. 2026. №1. С. 208–216. <https://doi.org/10.14258/jcprm.20260116860>.

Введение

Изучение полиморфизма растений на уровне их метаболитов – важная задача современной химической таксономии. Оно позволяет глубже понять видовое разнообразие и эколого-географические адаптации. Такой подход позволяет выявить хемотипы, которые могут различаться по содержанию и составу вторичных метаболитов, играющих важную роль в защите растений и их взаимодействии с окружающей средой. Определение хемотипов важно для изучения лекарственных и экономически значимых видов. Метаболические профили могут влиять как на их фармакологические свойства, так и на устойчивость к стрессам.

Одним из наиболее точных и информативных методов для анализа метаболитов является газовая хроматография, сопряженная с масс-спектрометрией (ГХ-МС). Этот метод позволяет идентифицировать и количественно анализировать широкий спектр соединений, обеспечивая точное и высокоразрешающее разделение летучих компонентов сложных биологических матриц. ГХ-МС играет ключевую роль в химической

* Данная статья имеет электронный дополнительный материал (приложение), который доступен читателям на сайте журнала. DOI: 10.14258/jcprm.20260116860s

** Автор, с которым следует вести переписку.

таксономии. Этот метод классифицирует растения и их органы на основе химических профилей, что помогает создавать хемосистематические ключи.

Перспективным объектом для изучения метаболического полиморфизма является рябина обыкновенная *Sorbus aucuparia* L. s.l. – самый обширный и полиморфный вид рода *Sorbus* L., который широко распространен в северных регионах и является одним из самых холодостойких древесных растений. В пределах трансевроазиатского ареала *S. aucuparia* s.l. дифференцирован на ряд субвидовых таксонов. Для Сибири принято выделять *S. aucuparia* subsp. *sibirica* (Hedl.) Krylov, который отличается слабоопушенными или почти голыми листьями и черешками, слабовыраженными киями и кармашками на жилках листьев, редкоопушенными почками [1, 2]. Однако в зависимости от широты местообитания и условий среды популяции сибирской рябины могут в большей или меньшей степени отклоняться в сторону *S. aucuparia* s.str. или сочетать признаки нескольких подтаксонов [3]. Для популяций из окрестностей Новосибирска характерно проявление промежуточных признаков [2].

Рябина обычно используется как декоративное и лекарственное растение, реже – как пищевое [4, 5], однако, как можно судить из названия посвященного ей обзора [6], эта культура остается в категории недооцененных. Изучение ее метаболитов сосредоточено в основном на аннотировании фенольных антиоксидантов. Малополярные метаболиты привлекают гораздо меньшее внимание.

В работе [7] было выполнено исследование полиморфизма популяции *S. aucuparia* посредством сравнительного анализа метаболических профилей липофильных соединений, содержащихся в коре деревьев. Такое исследование позволило выявить различия в составе липофильных метаболитов, что свидетельствует о существовании внутривидовой химической изменчивости. Это исследование ограничивалось анализом коры и не охватывало другие органы растений, которые также могут содержать уникальные метаболиты, потенциально обладающие различными биологическими функциями.

В настоящем исследовании поставлена цель расширения изучения полиморфизма метаболитов *S. aucuparia* за счет включения в анализ таких частей растения, как листья, кожицы плодов (экзокарп) и семена. Планируется не только выявить химическое разнообразие этих органов, но и провести сравнительный анализ с ранее полученными данными по содержанию метаболитов в коре, чтобы оценить межорганные различия в метаболическом профиле. Этот подход даст возможность детализировать метаболическую пластичность вида и выявить потенциальные хемотипы, которые могут служить основой для дальнейших биохимических и экологических исследований.

Экспериментальная часть

Отбор проб листьев проводился в сентябре 2023 года, плодов – в январе 2023 года. Кроме того, для изучения сезонных изменений пробы выборочно отбирались в межсезонный период (апрель 2022 года). Листья были немедленно направлены на обработку после сбора, в то время как плоды хранили при $-20\text{ }^{\circ}\text{C}$ с последующим размораживанием перед обработкой. Географическое положение собранных образцов приведено в электронном приложении (табл. 1).

Все химические реактивы и растворители (особо чистые для ГХ-МС), использованные в данной работе, были приобретены у компании Sigma-Aldrich, Inc. (Штайнхайм, Германия). Стандартная смесь углеводородов была предоставлена компанией Agilent Technologies (North Kingstown, RI, USA). Стандартная смесь метиловых эфиров жирных кислот была получена от Sigma-Aldrich (Штайнхайм, Германия). Нонакан-10-ол выделяли из хвои голубой ели *Picea pungens* Engelm экстракцией хлороформом и двукратной кристаллизацией из этанола упаренного экстракта. Т.пл. $80.5\text{--}81.5\text{ }^{\circ}\text{C}$ (лит. $81\text{--}81.5\text{ }^{\circ}\text{C}$ [8]), масс-спектр соответствует литературному [9].

Идентификация экстрактивных соединений: из плодов выдавливался сок, твердая часть разделялась на семена и экзокарп, каждый из которых тщательно промывался водой для удаления органических кислот, содержащихся в соке, а затем высушивался с использованием фильтровальной бумаги. (Хотя экзокарп содержит остаточные количества мезокарпа, дальнейшее описание будет осуществляться с использованием термина «экзокарп»). Затем 1.00 г подготовленной части растения заливали 15 мл смеси метанол-соляная кислота (концентрированная), в объемном соотношении 1 : 1, с добавлением 5.00 мл гептана. Смесь инкубировалась стационарно с периодическим перемешиванием при $25\text{ }^{\circ}\text{C}$ в течение 48 ч. Гептановый слой отделялся и высушивался над безводным Na_2SO_4 , после чего экстракт фильтровался через стеклянный фильтр

Шотта с пористостью 10–16 мкм. После подготовки 1 мкл экстракта каждого образца вводился в инжектор газового хроматографа.

Для количественного анализа проводилась одномерная ГХ-МС с последующим статистическим анализом этих данных. Условия проведения анализа в одномерном режиме были следующими: хроматограф Agilent Technologies 6890 с масс-спектрофотометрическим детектором 5973; капиллярная хроматографическая колонка DB-1 J&W с внутренним диаметром 0.25 мм и длиной 30 м; скорость потока газа-носителя (гелия) – 1.0 мл/мин; температура нагревателя для ввода пробы – 250 °С; температура термостата программировалась от 50 до 250 °С со скоростью 25 °С/мин. Ввод пробы в хроматографическую колонку осуществлялся без разделения потока.

Индексы удерживания (RI) определялись по хроматографическим данным смеси стандартов (гомологических линейных алканов (C8-C32)) и рассчитывались по временам удерживания пиков в соответствии с рекомендациями [10]. Пики интегрировали как в режиме сканирования с измерением суммарного ионного тока в диапазоне масс 10–800 Da, так и в режиме селективного сканирования ионов, соответствующих m/z значению характеристического иона, который, как правило, имеет наибольшую интенсивность (Q_m). Площади пиков всех компонентов экстракта рассчитывали с помощью программы Xcalibur 2.0. Для однокомпонентных пиков рассчитывали отношение $RQ_m = S_t/S_s$ для каждого из соединений, где S_t – площадь, полученная в режиме полного ионного тока, а S_s – площадь, определенная в режиме селективной ионизации с удельным Q_m . Эти значения RQ_m использовались в качестве коэффициентов для определения площадей компонентов в многокомпонентных пиках.

Идентификацию компонентов экстракта проводили с помощью встроенной базы данных масс-спектров – NIST Mass Spectral Search Program for the NIST/EPA/NIH Mass Spectral Library Version 2.0a, а также путем сравнения полученных RI с RI из расширенной версии той же базы ($RI_{лит}$) [9]. Значения в таблице S1 представляют собой отношение площадей пиков соединения, связанного с реакцией внутреннего стандарта и отнесенного к данному метаболическому пути, к суммарным площадям пиков идентифицированных соединений, полученных на колонке DB-1 J&W, где площади пиков рассчитывались относительно площадей пиков внутреннего стандарта. Значения в таблице выражены в процентах.

Анализ образцов в двумерном режиме проводили на приборе Pegasus 4D GCxGC-TOF MS со следующими настройками: ввод пробы в инжектор осуществлялся с делением потока 1 : 100, вводился 1 мкл; температура инжектора – 250 °С; поток газа-носителя (He) – 1.4 мл/мин; колонка первая: Rxi-5MS, 30 м × 0.25 мм, покрытие – 0.25 мкм (Restek); колонка вторая: Rxi-17Sil MS, 1.75 м × 0.25 мм, покрытие – 0.25 мкм (Restek); температурная программа: 50 °С (1 мин), затем со скоростью 5 °С/мин до 150 °С, со скоростью 10 °С/мин до 250 °С и со скоростью 20 °С/мин до 280 °С (и удерживается в этом положении 60 мин); первичная печь поддерживается на 5 °С выше вторичной; модуляция 12 сек с поддержанием температуры на 15 °С выше вторичной печи; температура линии передачи – 280 °С; температура источника ионов – 280 °С; диапазон масс (m/z) – 40–850. Специфичность (селективность) определялась следующим образом: растворитель в качестве холостого контроля анализировался для подтверждения отсутствия ложных пиков в целевом диапазоне времен удерживания. Полученные хроматограммы обрабатывались с помощью программного обеспечения LECO ChromaTOF, которое осуществляет автоматический поиск и сравнение выбранных масс-спектров с электронными базами данных NIST [9].

Для статистического анализа полученных данных использовали анализ методом главных компонент (PCA), в качестве переменных для которого рассматривались все идентифицированные соединения по каждому органу отдельно, содержащиеся в таблицах 2–4 электронного приложения. Многомерный анализ проводили в программе Past 3 v3.25 [11].

Обсуждение результатов

При идентификации компонентов экстрактов листьев, семян и экзокарпа *S. aucuparia* руководствовались тем, что аннотирование метиловых эфиров подразумевает наличие исходных карбоновых кислот в экстракте, а присутствие диметилацеталей свидетельствует о наличии альдегидов. Согласно процентным соотношениям площадей, общая доля полностью или частично идентифицированных веществ в образцах экстрактов коры рябины была высокой: от 95.48 до 98.14%.

В экстрактах листьев исследованных образцов методом ГХ-МС было идентифицировано 72 соединения (табл. 2 электронного приложения), включая насыщенные, ненасыщенные и гидроксизамещенные жирные кислоты, алканола, алканы, фитолы, ароматические соединения, стероиды (рис. 1).

Наиболее представленными по процентному содержанию в листьях оказались ненасыщенные жирные кислоты. В этой группе преобладает линоленовая кислота (среднее значение по всем образцам – $25.4 \pm 1.79\%$; максимальное значение – 43.7% в образце №8). В группе гидроксизамещенных жирных кислот наибольшее содержание имеет 10-гидроксипальмитиновая кислота (среднее значение по всем образцам – $2.25 \pm 0.95\%$; максимальное значение – 25.7% в образце №24). Насыщенные жирные кислоты представлены гомологическим рядом соединений от C14 до C32, в котором кислоты с четным числом атомов углерода преобладают над соседними нечетными. Ведущим представителем этой группы является пальмитиновая кислота (среднее значение по всем образцам – $14.0 \pm 0.68\%$; максимальное значение – 19.76% в образце №7).

Среди соединений, отнесенных к алканолом, определены первичные моноспирты: бегенол, лигноцерол, стеарол в виде ацетата; вторичный спирт наонаксан-10-ол (гиннол) и соответствующий ему олефин – наонакс-10-ен, кроме того, в экстрактах присутствуют 1,28-октакозандиол и 1,30-триаконтандиол.

Алканы в основном представлены гомологическим рядом с линейным строением от гексакозана до гентриаконтана с максимумом по содержанию, представленным наонаксаном (среднее значение по всем образцам $6.3 \pm 0.7\%$; максимальное значение 15.7% в образце №23).

В экстрактах экзокарпа исследованных образцов методом ГХ-МС было идентифицировано 39 соединений (табл. 3 электронного приложения), включая насыщенные, ненасыщенные и гидроксизамещенные жирные кислоты, алканола, алканы, альдегиды, стероиды (рис. 1).

Среди алканолов преобладающим по содержанию оказался гиннол (среднее значение по всем образцам – $29.3 \pm 1.40\%$; максимальное значение – 47.0% в образце №5).

Лидером содержания в группе ненасыщенных жирных кислот является линолевая кислота (среднее значение по всем образцам – $10.3 \pm 0.58\%$; максимальное значение – 20.8% в образце №14). В группе гидроксизамещенных жирных кислот наибольшее содержание имеет 10-гидроксипальмитиновая кислота (среднее значение по всем образцам – $9.0 \pm 0.77\%$; максимальное значение – 16.7% в образце №29). Насыщенные жирные кислоты представлены гомологическим рядом кислот с четным числом атомов углерода от C14 до C30. Ведущим представителем этой группы является пальмитиновая кислота (среднее значение по всем образцам – $7.1 \pm 0.35\%$; максимальное значение – 13.8% в образце №14).

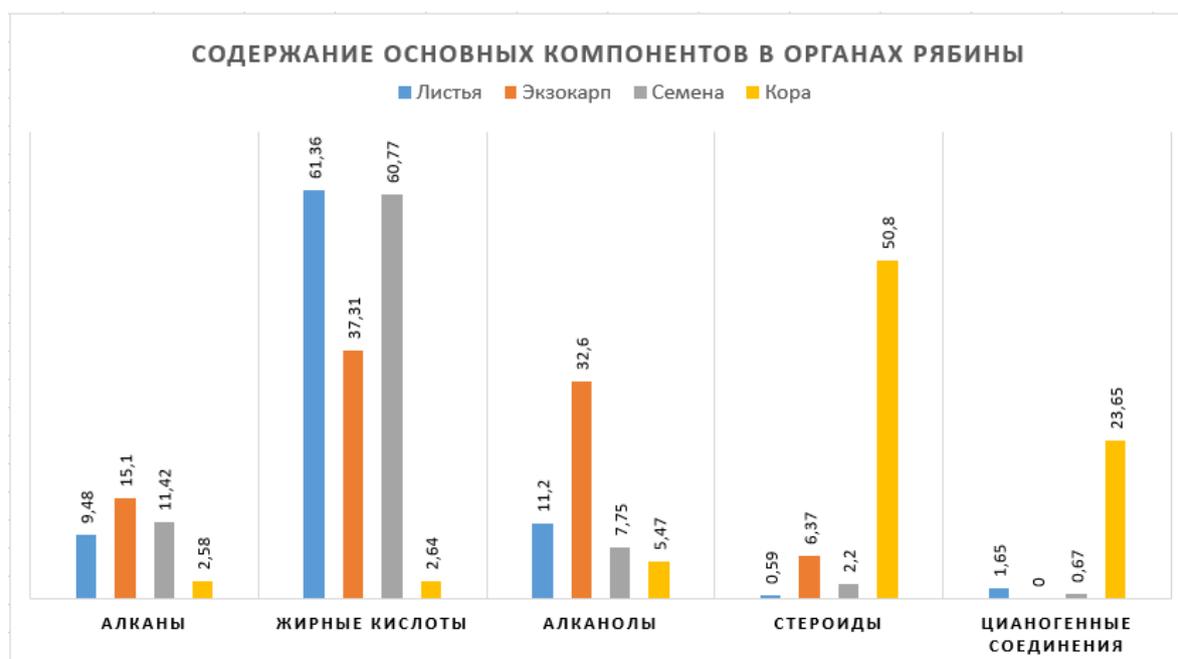


Рис. 1. Диаграмма, отображающая вклад в % отношении соединений разных химических классов, определенных в экстрактах разных органов исследованных образцов рябины, данные по коре взяты из [7]

Как и в экстрактах листьев, преобладающим по содержанию среди алканов в экстрактах экзокарпа является нонакозан (среднее значение по всем образцам – $11.3 \pm 0.85\%$; максимальное значение – 21.3% в образце №15).

В экстрактах семян исследованных образцов методом ГХ-МС было идентифицировано 50 соединений (табл. 4 электронного приложения), включая насыщенные, ненасыщенные и гидроксизамещенные жирные кислоты, алканола, линейные и разветвленные алканы, стероиды (рис. 1).

В группе ненасыщенных жирных кислот большую часть составляют линолевая кислота (среднее значение по всем образцам – $26.0 \pm 1.24\%$; максимальное значение – 40.1% в образце №27) и олеиновая кислота (среднее значение по всем образцам – $19.10 \pm 0.92\%$; максимальное значение – 33.7% в образце №18). Насыщенные кислоты представлены пятью гомологами, среди которых превалирует пальмитиновая кислота (среднее значение по всем образцам – $9.0 \pm 0.24\%$; максимальное значение – 12.1% в образце №1).

Линейные алканы представлены соединениями гомологического ряда с четным числом атомов углерода от C12 до C28, разветвленные углеводороды также содержат в своем составе только четное число атомов углерода.

Алифатические спирты в экстрактах семян не обнаружены, однако присутствует заметное количество алкенов-1, метаболитическими предшественниками которых могут быть алифатические спирты.

В результате проведенного исследования были выявлены различия в метаболическом составе липофильных соединений различных органов *S. aucuparia* (листья, экзокарп плодов и семена). Полученные данные были дополнены значениями содержания метаболитов в коре рябины по [7] и сведены в диаграмму, представленную на рисунке 1.

Анализ биplotов PCA метаболитов, содержащихся в экстрактах семян и экзокарпов, не обнаруживает очевидного полиморфизма в составе вторичных метаболитов рябины в этих органах и в целом является постоянным для вида.

Биplot PCA (рис. 2) метаболитов, содержащихся в экстрактах листьев, рассчитанный по данным всех идентифицированных соединений, позволил выделить кластер с повышенным содержанием гиннола, который может быть маркерным соединением, чье присутствие или концентрация отражает специфические биохимические изменения, происходящие в образцах. Хотя он редко является главным компонентом по концентрации, его влияние на различие между образцами может быть существенным за счет корреляции с другими метаболитами или биохимическими путями.

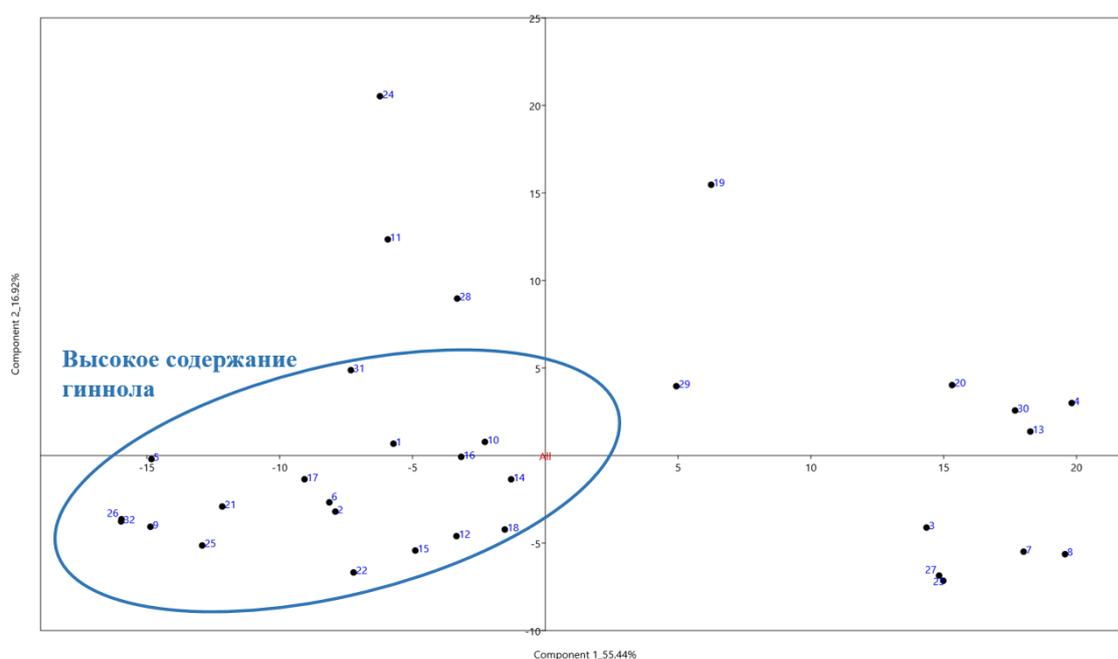


Рис. 2. Биplot PCA на основе всех идентифицированных соединений в 32 образцах листьев рябины

Особое внимание стоит уделить выявленной роли гиннола в экстрактах листьев и экзокарпа плодов. (S)-Нонакозан-10-ол [(+)-гиннол] обнаружен в листьях многих растительных объектов, от трав [12], кустарников [13], до деревьев [14]. Но особенно много этого соединения в игловках хвои деревьев семейства Сосновые, где его содержание в экстрактах может превышать 70% [15]. Гиннол примечателен тем, что его кристаллы в воске могут собираться в трубчатые структуры, что защищает растение от критической потери воды [16]. Он может также обеспечивать эффект супергидрофобности, который способствует оптимальному существованию растений, живущих в водной среде и придавать особые свойства покрытиям [17]. Гиннол обладает антибактериальными и антиоксидантными свойствами, что делает его перспективным компонентом для защиты кожи от окислительного стресса, воспаления и воздействия внешних факторов, таких как ультрафиолетовое излучение и загрязнение окружающей среды [18]. В составе кремов для кожи он способствует укреплению эпидермального барьера и улучшает эластичность кожи. Возможно, гиннол, имеющий структурно много общего с поликозанолами, способен проявлять как и последние, антиатеросклеротические свойства.

Потребление полиненасыщенных жирных кислот может улучшить липидный профиль, снижая уровень триглицеридов, общего холестерина, липопротеинов высокой и низкой плотности. Это приводит к более низким рискам сердечно-сосудистых заболеваний и снижению риска смертельной ишемической болезни сердца [19].

Из полученных результатов следует, что для листьев рябины (как и для коры [7]), в отличие от экзокарпа и семян, наличие хемотипов с резко различающимися профилями метаболитов в локально ограниченной популяции делает несостоятельной практику генеральной выборки для получения усредненных данных при описании популяции. Установлено, что видовая принадлежность является не единственным фактором, определяющим профиль метаболитов, и это наблюдение может быть полезным для возможного практического использования этих растений.

Выводы

Метод ГХ-МС продемонстрировал высокую эффективность для идентификации липофильных метаболитов *S. aucuparia*.

Выявлены межорганные различия в составе липофильных метаболитов, что указывает на высокую метаболическую пластичность и адаптивные возможности вида.

Гиннол и линоленовая кислота играют ключевую роль в формировании защитных функций эпикутикулярных восков и являются потенциально полезными соединениями, что открывает перспективы их использования в фармакогнозии и промышленности.

Полученные результаты могут быть использованы для разработки хемосистематических ключей и стандартизации растительного сырья.

Дополнительная информация

В электронном приложении к статье (DOI: <https://www.doi.org/10.14258/jcprm.20260116860s>) приведен дополнительный экспериментальный материал, раскрывающий основные положения, изложенные в статье.

Финансирование

Исследование выполнено при финансовой поддержке Министерства науки и высшего образования РФ по гранту № ФВНР-2022-0022 в Федеральном исследовательском центре ИЦиГ СО РАН.

Конфликт интересов

Авторы данной работы заявляют, что у них нет конфликта интересов.

Открытый доступ

Эта статья распространяется на условиях международной лицензии Creative Commons Attribution 4.0 (<https://creativecommons.org/licenses/by/4.0/>), которая разрешает неограниченное использование, распространение и воспроизведение на любом носителе при условии, что вы дадите соответствующие ссылки на автора(ов) и источник и предоставите ссылку на Лицензию Creative Commons и укажете, были ли внесены изменения.

Список литературы

1. Polozhij A.V., Malyshev L.I. Rosaceae // Flora of Siberia. Science Publishers Inc.: Enfield, NH, USA, 2004. Vol. 8. P. 208.

2. Шауло Д.Н., Драчев Н.С., Кузьмин И.В. Интрогрессивная гибридизация в роде *Sorbus* (Rosaceae) таежной зоны Тюменской области // Вестник Тюменского государственного университета. 2009. Т. 3. С. 209–215.
3. Асбаганов С.В. Вариабельность морфологических признаков листа *Sorbus aucuparia* в российской части ареала // Проблемы изучения растительного покрова Сибири: материалы V Международной научной конференции. Томск, 2015. С. 56–59.
4. Ренгартен Г.А., Сорокопудов В.Н. Селекция рябины как декоративной культуры в России и европейских странах // Вестник КрасГАУ. Агрон. 2019. Т. 6. С. 9–15.
5. Гончаров Н.П., Савельев Н.И. К 160-летию со дня рождения Ивана Владимировича Мичурина // Вавиловский журнал генетики и селекции. 2015. Т. 19. С. 339–358.
6. Softys A., Galanty A., Podolak I. Ethnopharmacologically important but underestimated genus *Sorbus*: a comprehensive review // Phytochem Rev. 2020. Vol. 19. Pp. 491–526. <https://doi.org/10.1007/s11101-020-09674-9>.
7. Vasilieva A.R., Slynko N.M., Tatarova L.E., Efimov V.M., Kuibida L.V., Asbaganov S.V., Peltek S.E. A GC-MS Chemotaxonomic Study on Lipophilic Compounds in the Bark of *S. aucuparia* subsp. *sibirica* Trees from the Population Growing in Akademgorodok, Novosibirsk (Russia) // Metabolites. 2023. Vol. 13(6). 768. <https://doi.org/10.3390/metabo13060768>.
8. Human Metabolite DataBase (HMDB) [Электронный ресурс]. URL: <https://hmdb.ca/metabolites/HMDB0034287>.
9. Gas Chromatographic Retention Data. NIST Chemistry WebBook [Электронный ресурс]. URL: <https://webbook.nist.gov/chemistry/gc-ri/>.
10. Van Den Dool H., Kratz P.D. A Generalization of the Retention Index System Including Linear Temperature Programmed Gas-Liquid Partition Chromatography // J. Chromatogr. A. 1963. Vol. 11. Pp. 463–471. [https://doi.org/10.1016/S0021-9673\(01\)80947-X](https://doi.org/10.1016/S0021-9673(01)80947-X).
11. Hammer Ø.H., Harper D.A.T., Ryan P.D. Past: Paleontological Statistics Software Package for Education and Data Analysis // Palaeontol. Electron. 2001. Vol. 4. Pp. 1–9.
12. Nelumbo N., Ensikat H.J., Ditsche-Kuru P., Neinhuis C., Barthlott W. Superhydrophobicity in perfection: the outstanding properties of the lotus leaf // Beilstein J. Nanotechnol. 2011. Vol. 2. Pp. 152–161.
13. Choi Y.H., Kim J., Noh M.J., Park E.M., Yoo K.-P. Extraction of epicuticular wax and nonacosan-10-ol from *Ephedra* herb utilizing supercritical carbon dioxide // Korean J. Chem. Eng. 1996. Vol. 13. Pp. 216–219. <https://doi.org/10.1007/BF02705912>.
14. Morimoto H., Kawamatsu Y., Sugihara H. Sterische Struktur der Giftstoffe aus dem Fruchtfleisch von *Ginkgo biloba* L. // Chem. Pharm. Bull. 1968. Vol. 16. Pp. 2282–2286.
15. Simmleit N., Schulten H.-R. Differentiation of spruce needles by integrated mass spectra and principal component analysis // Biomed. Environ. Mass Spectrom. 1989. Vol. 18. Pp. 1023–1029. <https://doi.org/10.1002/bms.1200181112>.
16. Jetter R., Riederer M. Epicuticular crystals of nonacosan-10-ol: *In-vitro* reconstitution and factors influencing crystal habits // Planta. 1994. Vol. 195. Pp. 257–270. <https://doi.org/10.1007/BF00199686>.
17. Barthlott W., Mail M., Neinhuis C. Superhydrophobic hierarchically structured surfaces in biology: evolution, structural principles and biomimetic applications // Phil. Trans. R. Soc. 2016. Vol. 374. 20160191. <https://doi.org/10.1098/rsta.2016.0191>.
18. The Good Scents Company [Электронный ресурс]. URL: <http://www.thegoodscentscompany.com/data/rw1587881.html>.
19. Hao Y., Bin Q., Min J., Wei L., Xiao-fei G., Na L., Zhi-xiang X., Fang-ling D., Tongcheng X., Duo L. Effects of α -linolenic acid intake on blood lipid profiles: a systematic review and meta-analysis of randomized controlled trials // Crit. Rev. Food Sci. 2020. Vol. 61. Pp. 2894–2910. <https://doi.org/10.1080/10408398.2020.1790496>.

Поступила в редакцию 30 января 2025 г.

После переработки 13 марта 2025 г.

Принята к публикации 9 декабря 2025 г.

Vasilieva A.R.^{1*}, Slyngo N.M.¹, Asbaganov S.V.², Tatarova L.E.¹, Kuibida L.V.³, Peltek S.E.¹ ANALYSIS OF SECONDARY METABOLITES IN LEAVES AND FRUITS OF *SORBUS AUCUPARIA* SUBSP. *SIBIRICA* USING GC-MS: CHEMOTAXONOMIC ASPECTS

¹ Federal Research Center Institute of Cytology and Genetics SB RAS, ave. Akademika Lavrentyeva, 10, Novosibirsk, 630090, Russia, asya_sr@mail.ru

² Central Siberian Botanical Garden SB RAS, st. Zolotodolinskaya, 101, Novosibirsk, 630090, Russia

³ Institute of Chemical Kinetics and Combustion named after V.V. Voievodskogo SB RAS, st. Institutskaya, 3, Novosibirsk, 630090, Russia

This study focuses on the investigation of lipophilic metabolites found in various organs of *Sorbus aucuparia* subsp. *sibirica* (leaves, exocarp, and seeds) using gas chromatography–mass spectrometry (GC-MS). The research aims to identify inter-organ differences in metabolic profiles and expand the understanding of the species' metabolic plasticity. In leaf extracts, 72 compounds were identified, including saturated, unsaturated, and hydroxy-substituted fatty acids, alcohols, alkanes, and steroids. In the exocarp and seeds, 39 and 50 compounds belonging to the same classes were identified. Key compounds included linolenic acid, palmitic acid, and nonacosan-10-ol (ginnol), which plays a vital role in the protective functions of epicuticular waxes and demonstrates promising antibacterial and antioxidant properties. Principal component analysis (PCA) confirmed the presence of inter-organ differences, particularly pronounced in leaves, where local chemotypes were identified. These findings highlight the complex adaptive mechanisms and high metabolic plasticity of *S. aucuparia* subsp. *sibirica*. The results offer potential applications in pharmacognosy, chemotaxonomy, and the standardization of plant-derived raw materials.

Keywords: *Sorbus aucuparia*, leaves and fruits, metabolites, chemotaxonomy, GC-MS.

For citing: Vasilieva A.R., Slyngo N.M., Asbaganov S.V., Tatarova L.E., Kuibida L.V., Peltek S.E. *Khimiya Ras-titel'nogo Syr'ya*, 2026, no. 1, pp. 208–216. (in Russ.). <https://doi.org/10.14258/jcprm.20260116860>.

References

- Polozhij A.V., Malyshev L.I. *Flora of Siberia*. Science Publishers Inc.: Enfield, NH, USA, 2004, vol. 8, p. 208.
- Shaulo D.N., Drachev N.S., Kuz'min I.V. *Vestnik Tyumenskogo gosudarstvennogo universiteta*, 2009, vol. 3, pp. 209–215. (in Russ.).
- Asbaganov S.V. *Problemy izucheniya rastitel'nogo pokrova Sibiri: materialy V Mezhdunarodnoy nauchnoy konferentsii*. [Problems of studying the vegetation cover of Siberia. Proceedings of the V International Scientific Conference]. Tomsk, 2015, pp. 56–59. (in Russ.).
- Rengarten G.A., Sorokopudov V.N. *Vestnik KrasGAU. Agron.*, 2019, vol. 6, pp. 9–15. (in Russ.).
- Goncharov N.P., Savel'yev N.I. *Vavilovskiy zhurnal genetiki i selektsii*, 2015, vol. 19, pp. 339–358. (in Russ.).
- Softys A., Galanty A., Podolak I. *Phytochem Rev.*, 2020, vol. 19, pp. 491–526. <https://doi.org/10.1007/s11101-020-09674-9>.
- Vasilieva A.R., Slyngo N.M., Tatarova L.E., Efimov V.M., Kuibida L.V., Asbaganov S.V., Peltek S.E. *Metabolites*, 2023, vol. 13(6), 768. <https://doi.org/10.3390/metabo13060768>.
- Human Metabolite DataBase (HMDB)*. URL: <https://hmdb.ca/metabolites/HMDB0034287>.
- Gas Chromatographic Retention Data. NIST Chemistry WebBook*. URL: <https://webbook.nist.gov/chemistry/gc-ri/>.
- Van Den Dool H., Kratz P.D. *J. Chromatogr. A.*, 1963, vol. 11, pp. 463–471. [https://doi.org/10.1016/S0021-9673\(01\)80947-X](https://doi.org/10.1016/S0021-9673(01)80947-X).
- Hammer Ø.H., Harper D.A.T., Ryan P.D. *Palaeontol. Electron.*, 2001, vol. 4, pp. 1–9.
- Nelumbo N., Ensikat H.J., Ditsche-Kuru P., Neinhuis C., Barthlott W. *Beilstein J. Nanotechnol.*, 2011, vol. 2, pp. 152–161.
- Choi Y.H., Kim J., Noh M.J., Park E.M., Yoo K.-P. *Korean J. Chem. Eng.*, 1996, vol. 13, pp. 216–219. <https://doi.org/10.1007/BF02705912>.
- Morimoto H., Kawamatsu Y., Sugihara H. Sterische Struktur der Giftstoffe aus dem Fruchtfleisch von *Ginkgo biloba* L. // *Chem. Pharm. Bull.* 1968, vol. 16, pp. 2282–2286.
- Simmleit N., Schulten H.-R. Differentiation of spruce needles by integrated mass spectra and principal component analysis // *Biomed. Environ. Mass Spectrom.* 1989, vol. 18, pp. 1023–1029. <https://doi.org/10.1002/bms.1200181112>.
- Jetter R., Riederer M. *Planta*, 1994, vol. 195, pp. 257–270. <https://doi.org/10.1007/BF00199686>.
- Barthlott W., Mail M., Neinhuis C. *Phil. Trans. R. Soc.*, 2016, vol. 374, 20160191. <https://doi.org/10.1098/rsta.2016.0191>.
- The Good Scents Company*. URL: <http://www.thegoodscentscompany.com/data/rw1587881.html>.
- Hao Y., Bin Q., Min J., Wei L., Xiao-fei G., Na L., Zhi-xiang X., Fang-ling D., Tongcheng X., Duo L. *Crit. Rev. Food Sci.*, 2020, vol. 61, pp. 2894–2910. <https://doi.org/10.1080/10408398.2020.1790496>.

Received January 30, 2025

Revised March 13, 2025

Accepted December 9, 2025

* Corresponding author.

Сведения об авторах

Васильева Ася Рифхатовна – младший научный сотрудник, asya_sr@mail.ru

Слынько Николай Мефодьевич – кандидат химических наук, старший научный сотрудник, nslynko@mail.ru

Асбаганов Сергей Валентинович – кандидат биологических наук, заведующий лабораторией, старший научный сотрудник, cryonus@mail.ru

Татарова Людмила Евгеньевна – ведущий инженер, ljudatat@mail.ru

Куйбида Леонид Васильевич – кандидат физико-математических наук, старший научный сотрудник, kuibida@kinetics.nsc.ru

Пельтек Сергей Евгеньевич – кандидат биологических наук, заведующий лабораторией, главный научный сотрудник, peltek@bionet.nsc.ru

Information about authors

Vasilyeva Asya Rifkhatovna – junior researcher, asya_sr@mail.ru

Slynko Nikolay Mefodievich – Candidate of Chemical Sciences, Senior Researcher, nslynko@mail.ru

Asbaganov Sergey Valentinovich – Candidate of Biological Sciences, Head of Laboratory, Senior Researcher, cryonus@mail.ru

Tatarova Lyudmila Evgenievna – leading engineer, ljudatat@mail.ru

Kuibida Leonid Vasilyevich – Candidate of Physical and Mathematical Sciences, Senior Researcher, kuibida@kinetics.nsc.ru

Peltek Sergey Evgenievich – Candidate of Biological Sciences, Head of the Laboratory, Chief Researcher, peltek@bionet.nsc.ru