

ХРОМАТО-МАСС-СПЕКТРОМЕТРИЯ ЭТАНОЛЬНОГО ЭКСТРАКТА АИРА БОЛОТНОГО
(*Acorus Calamus L*; Семейство Ароидные – *Araceae*)

В.В. ПЛАТОНОВ*, А.А. ХАДАРЦЕВ**, Г.Т. СУХИХ***, В.А. ДУНАЕВ**, Э.М. НАУМОВА**

* ООО «Террапром инвест», ул. Перекопская, д.5б, Тула, 300045, Россия

** ФГБОУ ВПО «Тульский государственный университет», Медицинский институт,
ул. Болдина, д.128, Тула, 300028, Россия

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

Аннотация. Впервые выполнено детальное исследование химического состава органического вещества аира болотного методом хромато-масс-спектрометрии. Получены новые данные о качественном составе и количественном содержании соединений экстракта, масс-спектры и структурные формулы соединений, рассчитан структурно-групповой состав экстракта; проведена определенная корреляция особенностей химического состава последнего с физиологической активностью препаратов на основе аира болотного.

Ключевые слова: аир болотный, хромато-масс-спектрометрия.

CHROMATO-MASS SPECTROMETRY OF ACORUS CALAMUS ETHANOL EXTRACT
(*Acorus Calamus L*; Family of Aroids - *Araceae*)

V.V. PLATONOV*, A.A. KHADARTSEV**, G.T. SUKHNIKH***, V.A. DUNAIEV**, E.M. NAUMOVA**

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

** Tula State University, Medical Institute, Boldin Str., 128, Tula, 300012, Russia

*** National Medical Research Center of Obstetrics, Gynecology and Perinatology named after V.I. Kulakov,
Oparin Str., 4, Moscow, 117513, Russia

Abstract. For the first time, a detailed study of the chemical composition of the organic matter of acorus calamus was carried out using chromat-mass spectrometry. The authors obtained new data on the qualitative composition and quantitative content of the compounds of the extract, the mass spectra and structural formulas of the compounds, calculated the structural group composition of the extract; carried out a certain correlation of the characteristics of the chemical composition of the latter with the physiological activity of preparations based on acorus calamus.

Key words: acorus calamus, chromat-mass spectrometry.

Введение. Лекарственным сырьем аира болотного являются собранные осенью или ранней весной высушенные корневища дикорастущего растения.

Химический состав органического вещества аира болотного, согласно [1–10] определяется содержанием до 5% эфирного масла, в состав которого входят азарон – 73%, сесквитерпеновые кетоны – акорон и калакон, камфен – 7,3%, борнеол – 3%, камфара – 8%, а также крахмалы и проазулены, горький гликозид акорин, дубильные вещества, витамины С.

Препараты корневища аира болотного повышают аппетит и улучшают пищеварение. Акорин и эфирное масло повышают чувствительность вкусовых рецепторов, усиливают отделение желудочного сока, желчи, оказывают мочегонное, бактерицидное и противовоспалительное действие; средство в качестве тонизирующего при угнетении ЦНС, при нерегулярных менструациях, желтухе, диатезе, для улучшения слуха, зрения и памяти. В народной медицине препараты корневища аира болотного применяют для профилактики гриппа и геморроя, лечения почечнокаменной и желчнокаменной болезни [1–10].

Цель исследования – подтверждение имеющихся литературных сведений о химическом составе корневища аира болотного, а также получение новых данных о качественном составе и количественном содержании соединений, их структурной организации, что в конечном счете позволит детализировать особенности физиологического действия препаратов на основе изученного лекарственного сырья.

Объект и методы исследования. Исходным сырьем являлся порошок корневища аира болотного, который подвергался исчерпывающей экстракции этанолом с массовой долей 95%, массовое соотношение сырья: спирт – (1:10). Полученный экстракт освобождался от этанола с использованием вакуумного

роторного испарителя типа *RE-52AA Rotary Evaporator*, остаток взвешивался, после чего его химический состав изучался методом хромато-масс-спектрометрии.

Условия анализа: хромато-масс-спектрометрия осуществлялась с использованием газового хроматографа GC-2010, соединенного с тройным квадрупольным масс-спектрометром GCMS-TQ-8030 под управлением программного обеспечения (ПО) GCMS Solution 4.11.

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

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

Результаты и их обсуждение. Хроматограмма спиртового экстракта аира болотного (корневище) приведена на рис. 1.

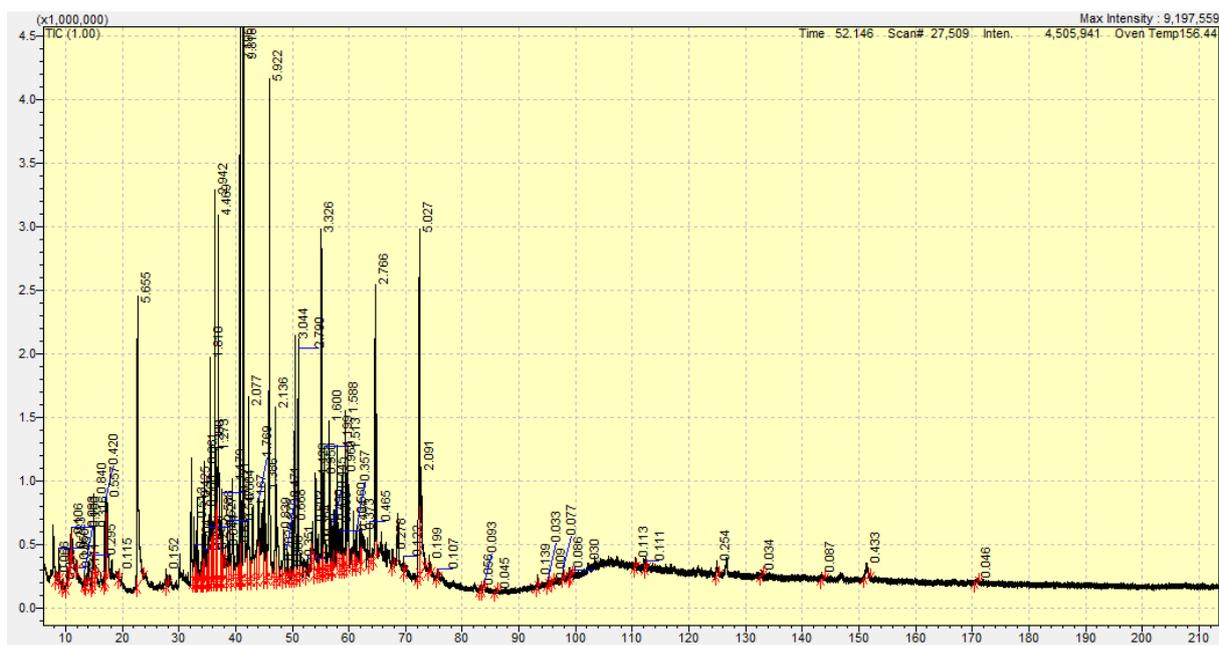


Рис.1. Хроматограмма

Перечень идентифицированных соединений, их количественное содержание (масс. % от экстракта) приведены в табл.

Список идентифицированных соединений

№	Retention time	Area %	Compound Name
1	8.346	0.07	<i>Butanoic acid, 4-chloro-</i>
2	8.798	0.22	<i>1,2-Cyclopentanedione</i>
3	9.420	0.03	<i>Camphene</i>
4	10.148	0.24	<i>2-Furancarboxaldehyde, 5-methyl-</i>
5	10.739	0.11	<i>2,4-Dihydroxy-2,5-dimethyl-3(2H)-furan-3-one</i>
6	10.939	0.16	<i>Ethyl(dimethyl)isopropoxysilane</i>
7	11.865	0.05	<i>2-Propyn-1-ol, propionate</i>
8	13.308	0.08	<i>Cyclobutanecarboxylic acid, pentyl ester</i>
9	13.655	0.11	<i>Oxazolidine, 2,2-diethyl-3-methyl-</i>
10	14.670	0.30	<i>Bicyclo[2.2.1]heptane-2-carboxylic acid isobutyl-amide</i>
11	14.995	0.84	<i>Cyclohexanamine, N-3-butenyl-N-methyl-</i>
12	15.141	0.32	<i>1,6-Octadien-3-ol, 3,7-dimethyl-</i>
13	16.909	0.42	<i>(+)-2-Bornanone</i>
14	17.195	0.56	<i>4H-Pyran-4-one, 2,3-dihydro-3,5-dihydroxy-6-methyl-</i>
15	19.390	0.11	<i>Benzoic acid</i>
16	22.699	5.65	<i>5-Hydroxymethylfurfural</i>
17	27.737	0.15	<i>Bicyclo[3.1.1]hept-2-en-6-one, 2,7,7-trimethyl-</i>
18	32.662	0.51	<i>.beta.-copaene</i>
19	32.898	0.24	<i>1H-3a,7-Methanoazulene, octahydro-3,8,8-trimethyl-6-methylene-, [3R-(3.alpha.,3a.beta.,7.beta.,8a.alpha.)]-</i>
20	33.158	0.43	<i>1H-Cyclopropa[a]naphthalene, 1a,2,3,5,6,7,7a,7b-octahydro-1,1,7,7a-tetramethyl-, [1aR-(1a.alpha.,7.alpha.,7a.alpha.,7b.alpha.)]</i>
21	33.346	0.20	<i>trans-.alpha.-Bergamotene</i>
22	33.992	0.25	<i>Butyl 4,7,10,13,16,19-docosahexaenoate</i>
23	34.185	0.57	<i>1,4-Methano-1H-indene, octahydro-4-methyl-8-methylene-7-(1-methylethyl)-, [1S-(1.alpha.,3a.beta.,4.alpha.,7.alpha.,7a.beta.)]-</i>
24	34.382	0.66	<i>Methyleugenol</i>
25	34.921	0.29	<i>trans-Sesquisabinene hydrate</i>
26	35.210	0.53	<i>Benzene, 1-(1,5-dimethyl-4-hexenyl)-4-methyl-</i>
27	35.468	1.81	<i>6-Epishyobunone</i>
28	35.716	1.30	<i>Guaia-1(10),11-diene</i>
29	36.366	2.94	<i>Shyobunone</i>
30	36.591	1.27	<i>4-epi-cubedol</i>
31	36.922	4.47	<i>Isoshyobunone</i>
32	37.364	0.59	<i>.beta.-Vatirenene</i>
33	37.606	0.72	<i>.alpha.-Calacorene</i>
34	38.144	0.04	<i>Spiro[2.5]octane, 5,5-dimethyl-4-(3-oxobutyl)-</i>
35	38.577	0.55	<i>(E)-1-(2,3,6-trimethylphenyl)buta-1,3-diene (TPB, 1)</i>
36	39.383	1.18	<i>1H-Cycloprop[e]azulen-7-ol, decahydro-1,1,7-trimethyl-4-methylene-, [1aR-(1a.alpha.,4a.alpha.,7.beta.,7a.beta.,7b.alpha.)]-</i>
37	40.303	0.61	<i>3-Hydroxy-2-(2-methylcyclohex-1-enyl)propionaldehyde</i>
38	40.799	7.20	<i>Z-3-Hexadecen-7-yne</i>
39	40.989	0.68	<i>Limonene oxide, cis-</i>
40	41.383	9.78	<i>Asarone</i>
41	42.260	2.08	<i>Dehydroxy-isocalamendiol</i>
42	43.003	1.17	<i>Spiro[4.5]dec-8-en-7-ol, 4,8-dimethyl-1-(1-methylethyl)-</i>
43	44.055	1.77	<i>Cadala-1(10),3,8-triene</i>
44	45.093	1.39	<i>2,2,7,7-Tetramethyltricyclo[6.2.1.0(1,6)]undec-4-en-3-one</i>
45	45.970	5.92	<i>Spiro[4.5]dec-6-en-8-one, 1,7-dimethyl-4-(1-methylethyl)-</i>
46	47.039	2.14	<i>6-(p-Tolyl)-2-methyl-2-heptenol, trans-</i>
47	47.393	0.84	<i>10,11-Dimethyl-tricyclo[4.3.1.1(2,5)]undecane-10,11-diol</i>

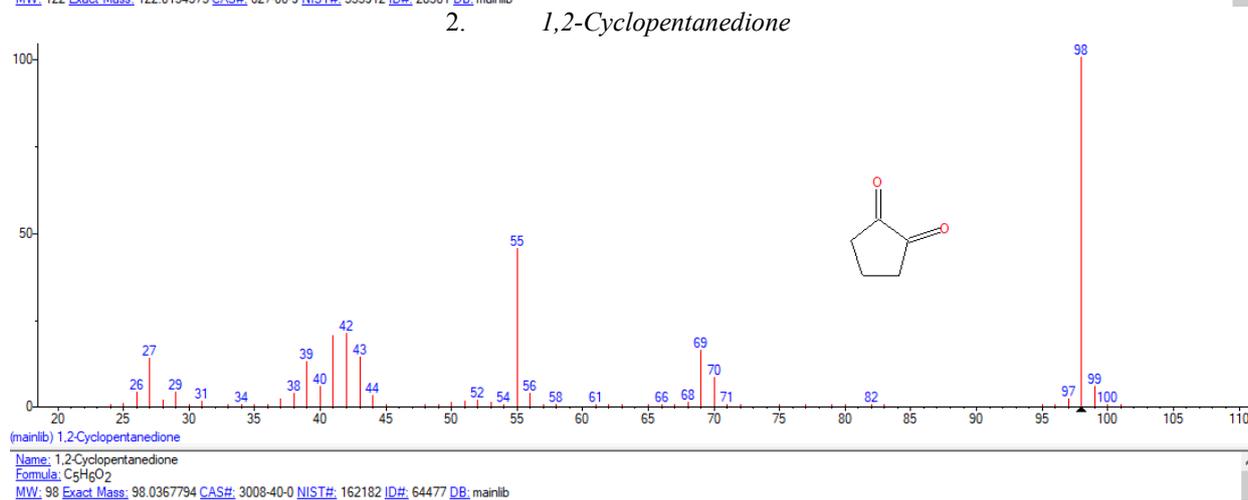
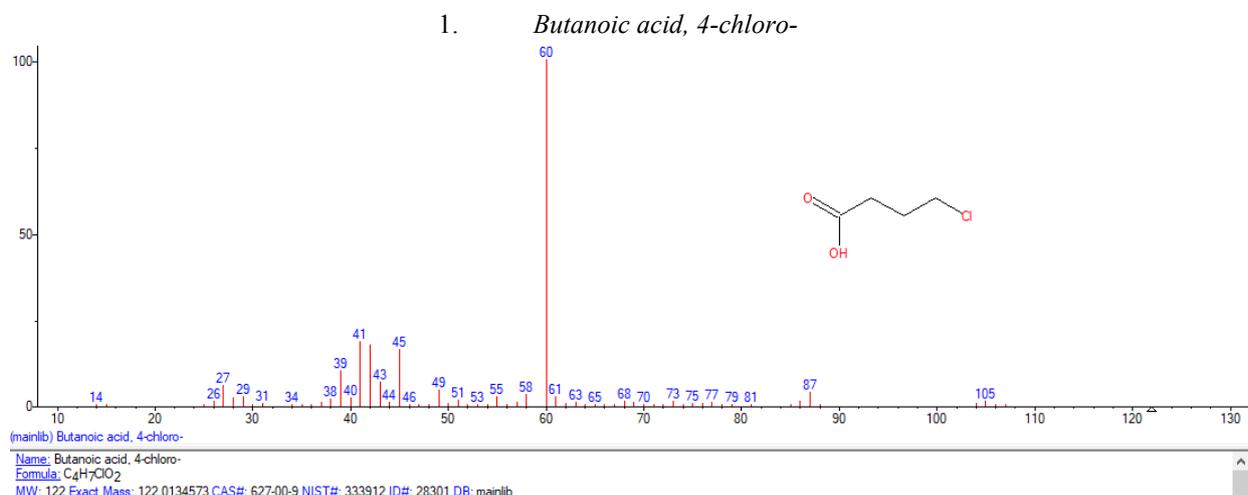
48	47.984	0.20	<i>Naphthalene, 6-(1-ethylpropyl)-1,2,3,4-tetrahydro-</i>
49	48.470	0.88	<i>Benzaldehyde, 2,4,5-trimethoxy-</i>
50	49.133	0.47	<i>Androstan-17-one, 3-ethyl-3-hydroxy-, (5.alpha.)-</i>
51	49.654	0.09	<i>Quinoline, 2,3,4-trimethyl-</i>
52	49.991	0.67	<i>Acetic acid, 2-[2,3-dihydro-4-(2-adamantylloxycarbonyl)-5-methyl-2-oxo-pyrrol-3-yl]-</i>
53	50.482	3.04	<i>3,4,5-trimethoxyphenyl-2-propanone</i>
54	51.065	2.79	<i>Isocalamendiol</i>
55	51.524	0.35	<i>6-(1,3-Dimethyl-buta-1,3-dienyl)-1,5,5-trimethyl-7-oxa-bicyclo[4.1.0]hept-2-ene</i>
56	52.694	0.20	<i>Retinal</i>
57	53.568	0.60	<i>22,26-Oxido-4,17-cholestadien-3.beta.,16.alpha.-diol</i>
58	54.089	1.43	<i>Longipinocarvone</i>
59	54.520	0.36	<i>Ketone, isopropylidenecyclopropyl methyl</i>
60	55.116	3.33	<i>1-Oxaspiro[2.5]octane, 2,4,4-trimethyl-8-methylene-</i>
61	55.400	0.95	<i>5,9-Dimethyl-2-(1-methylethylidene)-1-cyclodecanone</i>
62	55.650	1.20	<i>Spiro[4.5]decan-7-one, 1,8-dimethyl-4-(1-methylethyl)-</i>
63	56.061	0.39	<i>(-)-Spathulenol</i>
64	56.530	1.60	<i>1-Cyclohexene-1-acetaldehyde, 2,6,6-trimethyl-</i>
65	56.906	0.49	<i>6-Isopropenyl-4,8a-dimethyl-1,2,3,5,6,7,8,8a-octahydro-naphthalen-2-ol</i>
66	57.202	0.45	<i>1-Cycloheptene, 1,4-dimethyl-3-(2-methyl-1-propene-1-yl)-4-vinyl-</i>
67	58.187	0.39	<i>2-[4-methyl-6-(2,6,6-trimethylcyclohex-1-enyl)hexa-1,3,5-trienyl]cyclohex-1-en-1-carboxaldehyde</i>
68	58.502	0.49	<i>Spiro[2.5]octane, 5,5-dimethyl-4-(3-oxobutyl)-</i>
69	58.840	0.97	<i>(1S,2E,4S,5R,7E,11E)-Cembra-2,7,11-trien-4,5-diol</i>
70	59.393	1.59	<i>4-(1-Acetyl-cyclopentyl)-but-3-en-2-one</i>
71	59.795	1.51	<i>(-)-cis-3-Tosyloxy-trans-p-menthane</i>
72	60.810	0.56	<i>Androstane-3,17-dione</i>
73	61.316	0.36	<i>Isobornyl propionate</i>
74	62.197	0.37	<i>Bicyclo[2.2.1]heptan-2-ol, 1,3,3-trimethyl-</i>
75	63.654	0.47	<i>7,8-Epoxy-.alpha.-ionone</i>
76	64.624	2.77	<i>n-Hexadecanoic acid</i>
77	67.685	0.28	<i>Carotol</i>
78	69.658	0.12	<i>9,12-Octadecadienoic acid (Z,Z)-</i>
79	72.453	5.03	<i>1,E-11,Z-13-Octadecatriene</i>
80	72.705	2.09	<i>cis,cis,cis-7,10,13-Hexadecatrienal</i>
81	74.178	0.20	<i>Octadecanoic acid</i>
82	75.583	0.11	<i>Spiro[4.5]decan-7-one, 1,8-dimethyl-8,9-epoxy-4-isopropyl-</i>
83	83.244	0.06	<i>Hexadecanoic acid, 1-(hydroxymethyl)-1,2-ethanediyl ester \$\$ Palmitin, 1,2-di-</i>
84	83.799	0.09	<i>2-Bromotetradecane</i>
85	86.036	0.05	<i>1,E-6,Z-11-Hexadecatriene</i>
86	93.319	0.14	<i>Benzene, (3-nitropropyl)-</i>
87	95.114	0.03	<i>2H-Benzo[f]oxireno[2,3-E]benzofuran-8(9H)-one, 9-[[[2-(dimethylamino)ethyl]amino]methyl]octahydro-2,5a-dimethyl-</i>
88	95.944	0.01	<i>1,5,9,13-Tetradecatetraene</i>
89	97.841	0.08	<i>Heptadecane, 2,6,10,15-tetramethyl-</i>
90	98.937	0.09	<i>Bis(2-ethylhexyl) phthalate</i>
91	99.225	0.03	<i>9-Octadecen-1-ol, (Z)-</i>
92	110.582	0.11	<i>Squalene</i>
93	112.304	0.11	<i>1-Octadecyne</i>
94	124.923	0.25	<i>3.alpha.-(Trimethylsiloxy)cholest-5-ene</i>
95	132.805	0.03	<i>Vitamin E</i>
96	143.495	0.09	<i>Stigmasterol</i>
97	151.415	0.43	<i>22,23-Dibromostigmasterol acetate</i>
98	170.902	0.05	<i>Cholest-4-en-3-one</i>

Данные таблицы послужили основой для расчета структурно-группового состава экстракта. Основу экстракта корневища аира болотного составляют (масс. % от экстракта): углеводороды, среди которых значительное содержание терпенов (*Camphene*, β -*copaene*, *trans- α -Bergamotene*, *Guaia-1(10),11-diene*, β -*Vatirenene*, α -*Calacorene*, *Cadala-1(10),3,8-triene*); непредельных углеводородов (*1-Octadecyne*, *1,5,9,13-Tetradecatetraene*, *1,E-11,Z-13-Octadecatriene*, *Z-3-Hexadecen-7-yne*); производных нафталина, азулена, циклоалканов (20,77); Основу карбоновых кислот составляют *n-Hexadecanoic acid* (2,77); высокое содержание сложных по структуре кетонов (27,63), спиртов (14,61). Стерины представлены: *Androstan-17-one*, *3-ethyl-3-hydroxy-*, (5. α), *Androstane-3,17-dione*, *Vitamin E*, *Stigmasterol*, *Cholest-4-en-3-one*, *22,23-Dibromostigmasterol acetate*, *Retinal* и др.

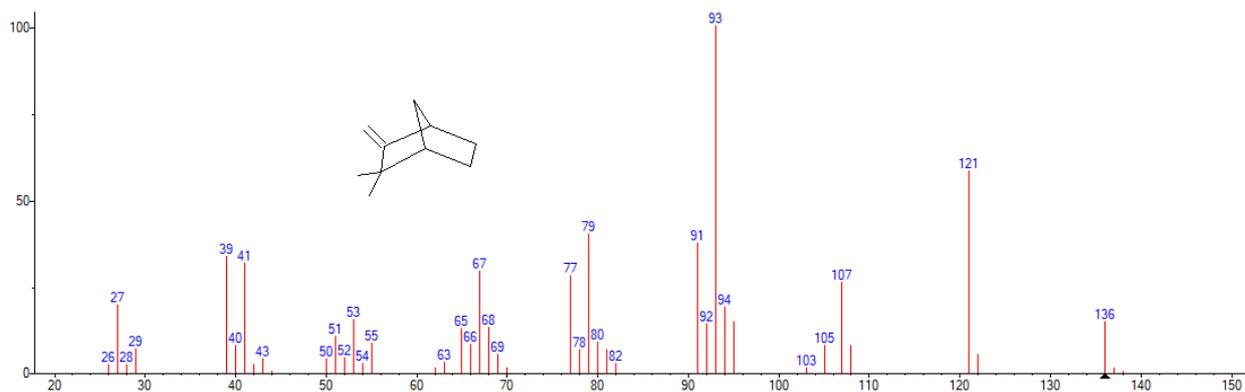
Характерной особенностью экстракта корневища аира болотного является значительное содержание различных альдегидов, которое составляет 11,46 (масс. % от экстракта). Альдегиды представлены: *5-Hydroxymethylfurfural*, *Benzaldehyde*, *2,4,5-trimethoxy*, *1-Cyclohexene-1-acetaldehyde*, *2,6,6-trimethyl, cis, cis-7,10,13-Hexadecatrienal*, *2-Furancarboxaldehyde*, *5-methyl* и др.

Азоторганические соединения содержатся в суммарном количестве, равном (2,15) (масс. % от экстракта): *Oxazolidine*, *2,2-diethyl-3-methyl*, *Cyclohexanamine*, *N-3-butenyl-N-methyl*, *Quinoline*, *2,3,4-trimethyl*, *Pyrrol*, *Benzene-3-nitropropyl* и др. Значительное содержание кремнийорганических соединений (15,76) (масс. % от экстракта).

Масс-спектры и структурные формулы идентифицированных соединений приведены на рис. 2.



3. *Camphene*



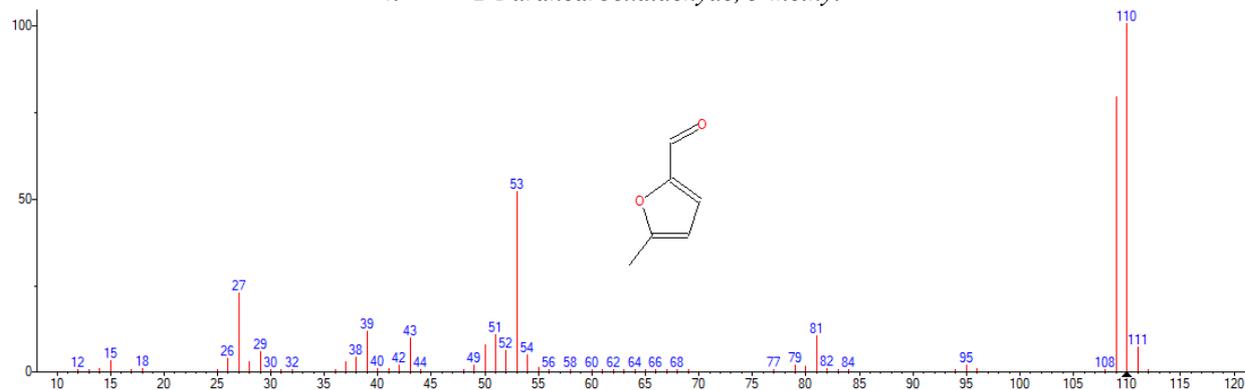
(mainlib) Camphene

Name: Camphene

Formula: C₁₀H₁₆

MW: 136 Exact Mass: 136.1252 CAS#: 79-92-5 NIST#: 114291 ID#: 60492 DB: mainlib

4. *2-Furancarboxaldehyde, 5-methyl-*



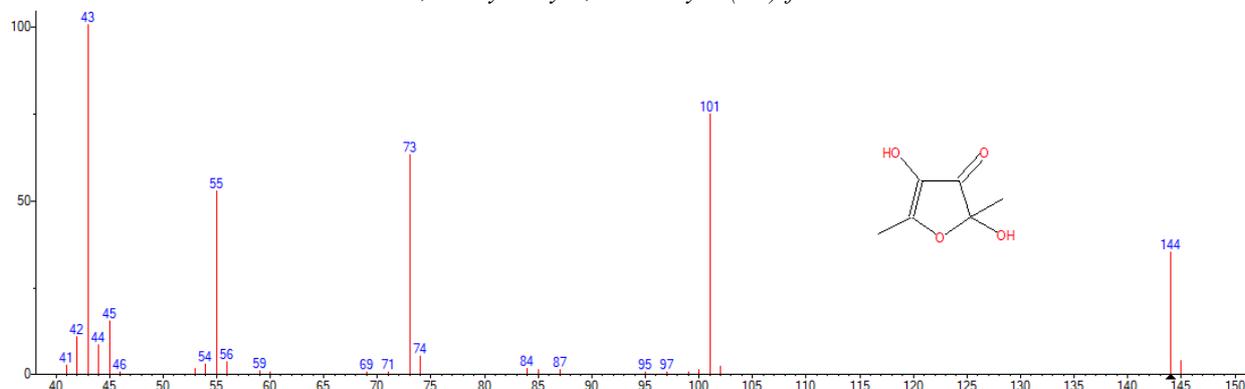
(mainlib) 2-Furancarboxaldehyde, 5-methyl-

Name: 2-Furancarboxaldehyde, 5-methyl-

Formula: C₆H₆O₂

MW: 110 Exact Mass: 110.0367794 CAS#: 620-02-0 NIST#: 233793 ID#: 78695 DB: mainlib

5. *2,4-Dihydroxy-2,5-dimethyl-3(2H)-furan-3-one*



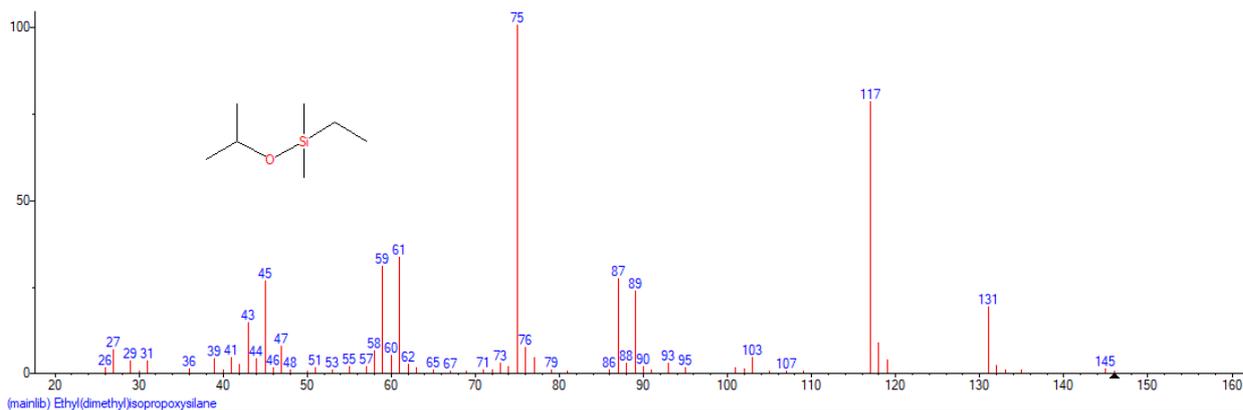
(mainlib) 2,4-Dihydroxy-2,5-dimethyl-3(2H)-furan-3-one

Name: 2,4-Dihydroxy-2,5-dimethyl-3(2H)-furan-3-one

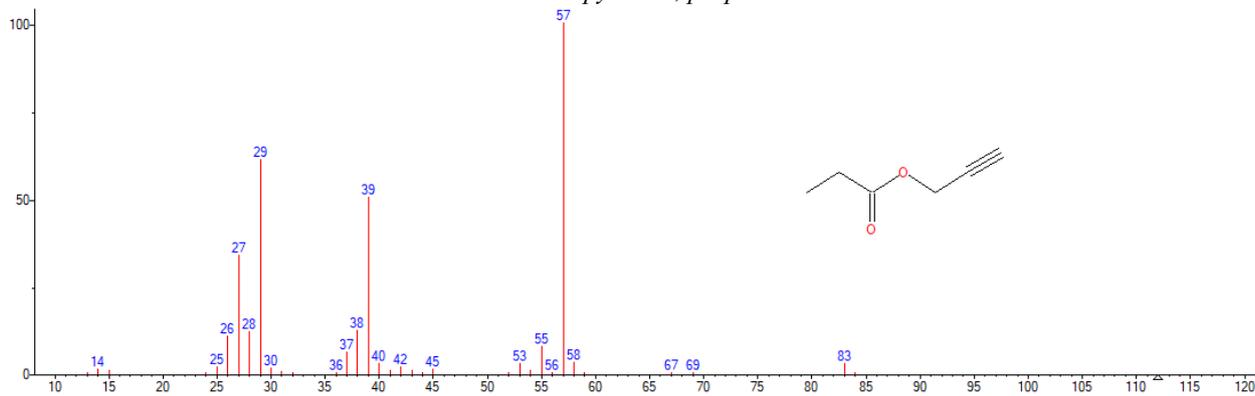
Formula: C₆H₈O₄

MW: 144 Exact Mass: 144.042258 CAS#: 10230-62-3 NIST#: 281424 ID#: 10139 DB: mainlib

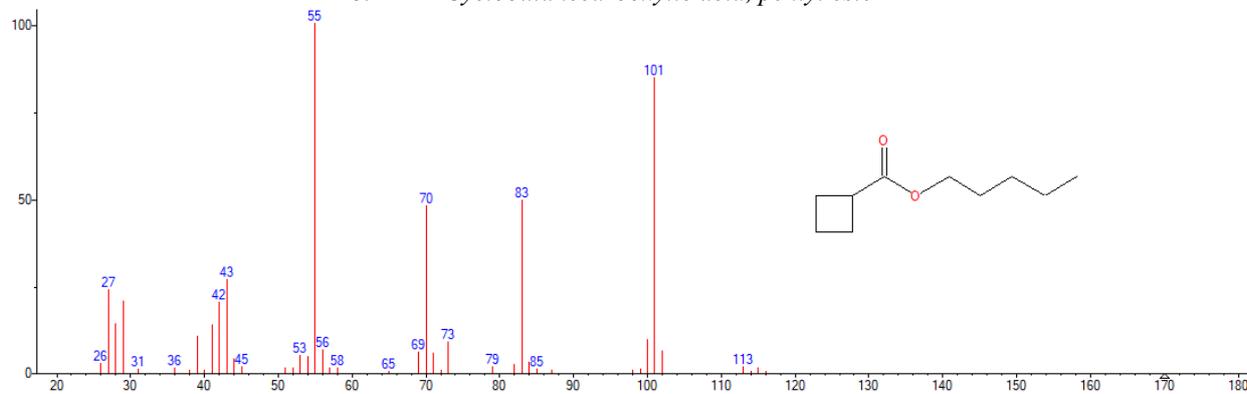
6. *Ethyl(dimethyl)isopropoxysilane*



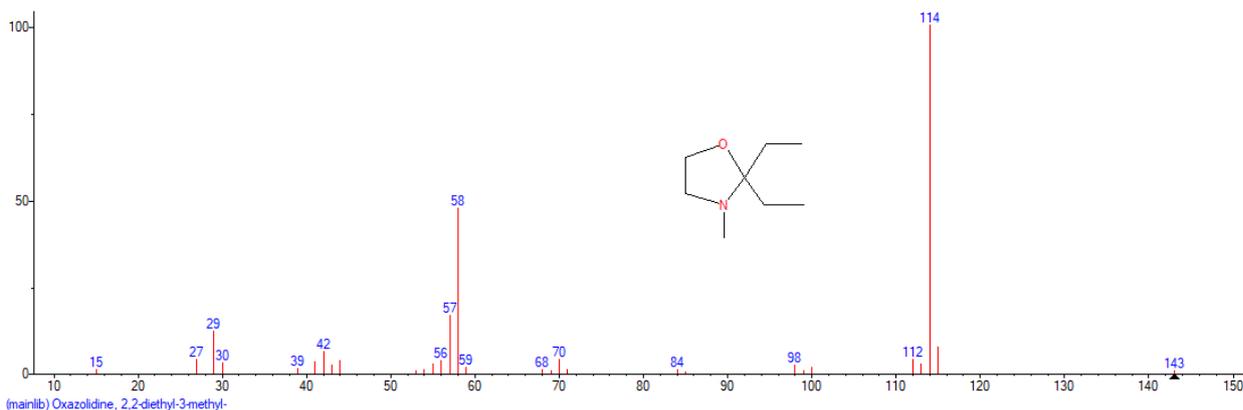
7. 2-Propyn-1-ol, propionate



8. Cyclobutanecarboxylic acid, pentyl ester



9. Oxazolidine, 2,2-diethyl-3-methyl-



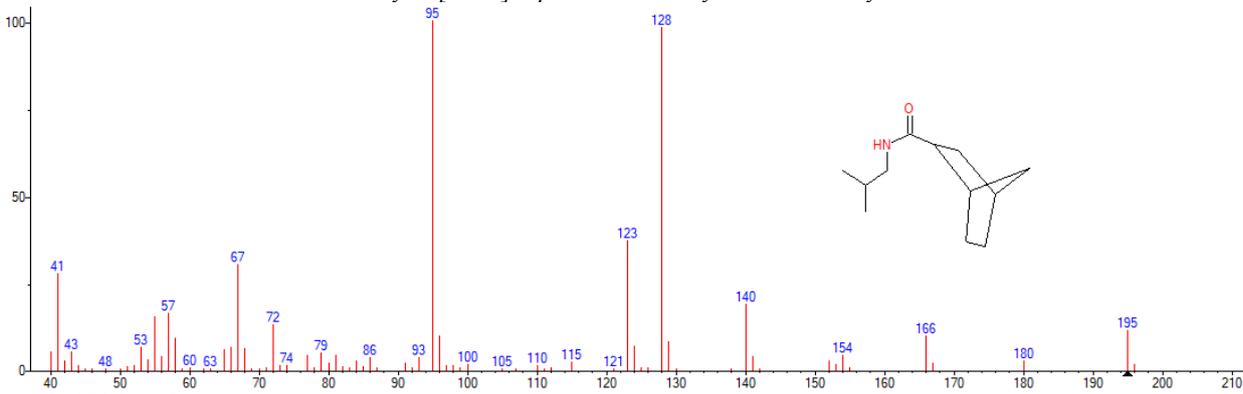
(mainlib) Oxazolidine, 2,2-diethyl-3-methyl-

Name: Oxazolidine, 2,2-diethyl-3-methyl-

Formula: C₈H₁₇NO

MW: 143 Exact Mass: 143.131014 CAS#: 161500-43-2 NIST#: 142097 ID#: 81873 DB: mainlib

10. Bicyclo[2.2.1]heptane-2-carboxylic acid isobutyl-amide



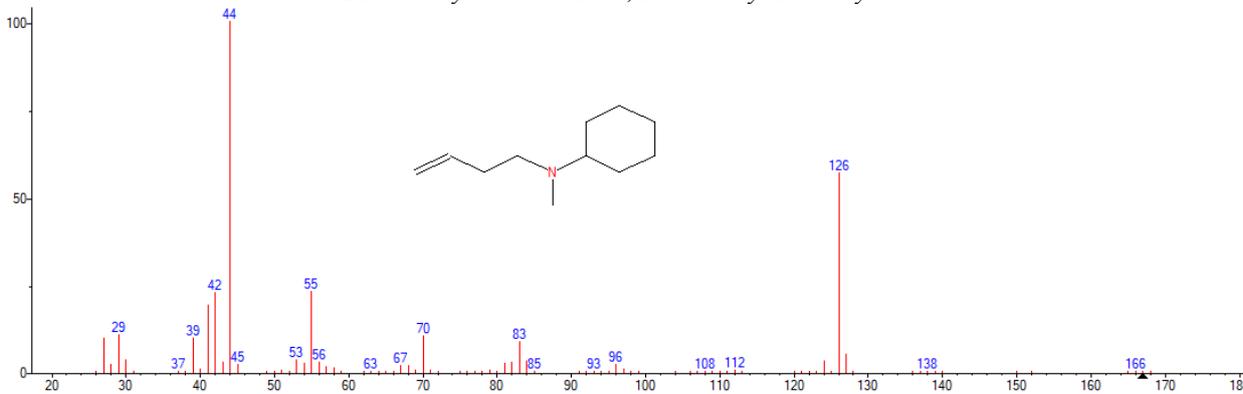
(mainlib) Bicyclo[2.2.1]heptane-2-carboxylic acid isobutyl-amide

Name: Bicyclo[2.2.1]heptane-2-carboxylic acid isobutyl-amide

Formula: C₁₂H₂₁NO

MW: 195 Exact Mass: 195.162314 CAS#: 275765 ID#: 62376 DB: mainlib

11. Cyclohexanamine, N-3-butenyl-N-methyl-



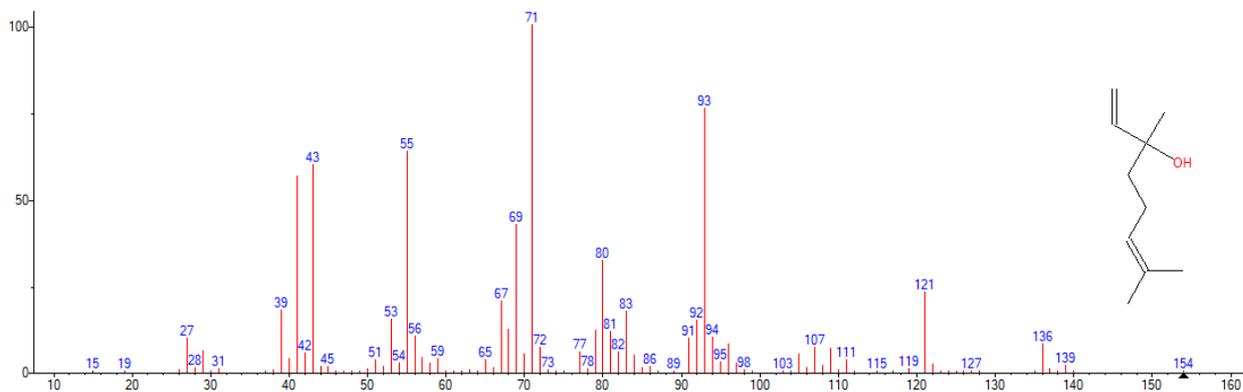
(mainlib) Cyclohexanamine, N-3-butenyl-N-methyl-

Name: Cyclohexanamine, N-3-butenyl-N-methyl-

Formula: C₁₁H₂₁N

MW: 167 Exact Mass: 167.167399 CAS#: 108144-20-3 NIST#: 151781 ID#: 15157 DB: mainlib

12. 1,6-Octadien-3-ol, 3,7-dimethyl-



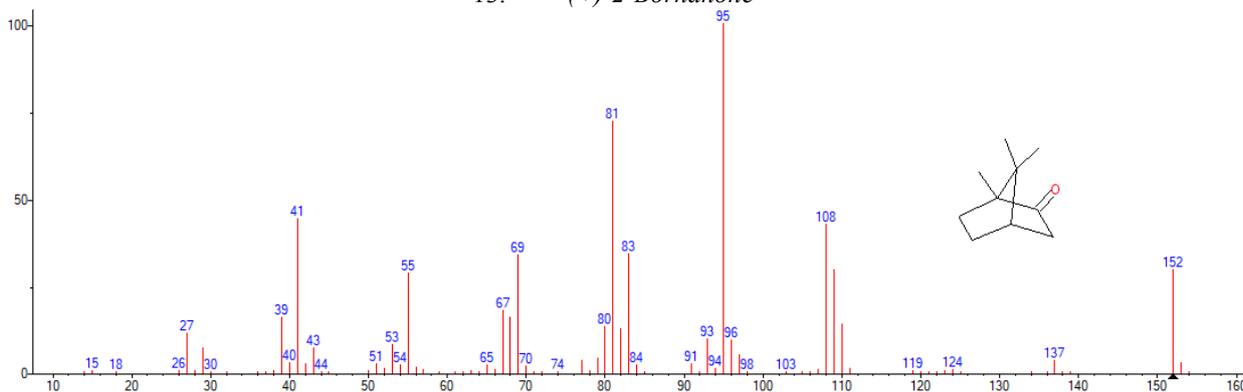
(mainlib) 1,6-Octadien-3-ol, 3,7-dimethyl-

Name: 1,6-Octadien-3-ol, 3,7-dimethyl-

Formula: C₁₀H₁₈O

MW: 154 Exact Mass: 154.135765 CAS#: 78-70-6 NIST#: 352637 ID#: 35691 DB: mainlib

13. (+)-2-Bornanone



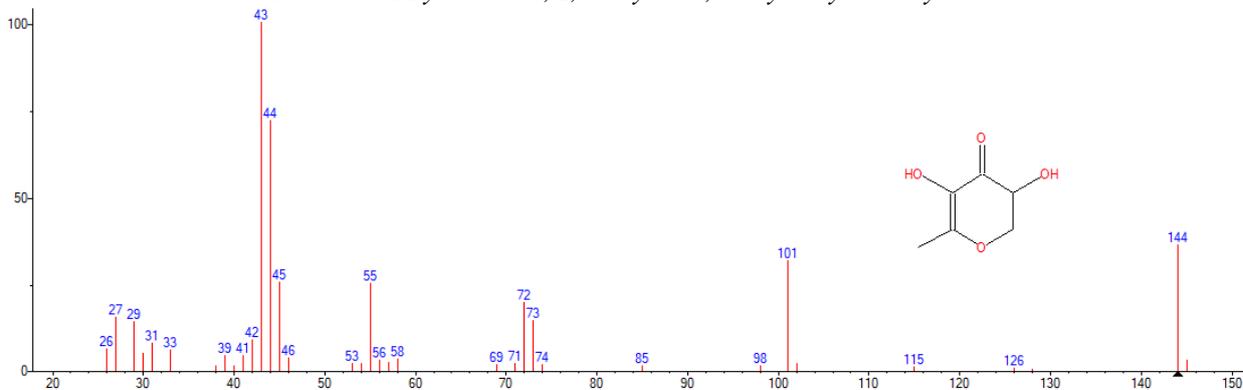
(mainlib) (+)-2-Bornanone

Name: (+)-2-Bornanone

Formula: C₁₀H₁₆O

MW: 152 Exact Mass: 152.120115 CAS#: 464-49-3 NIST#: 230538 ID#: 61983 DB: mainlib

14. 4H-Pyran-4-one, 2,3-dihydro-3,5-dihydroxy-6-methyl-



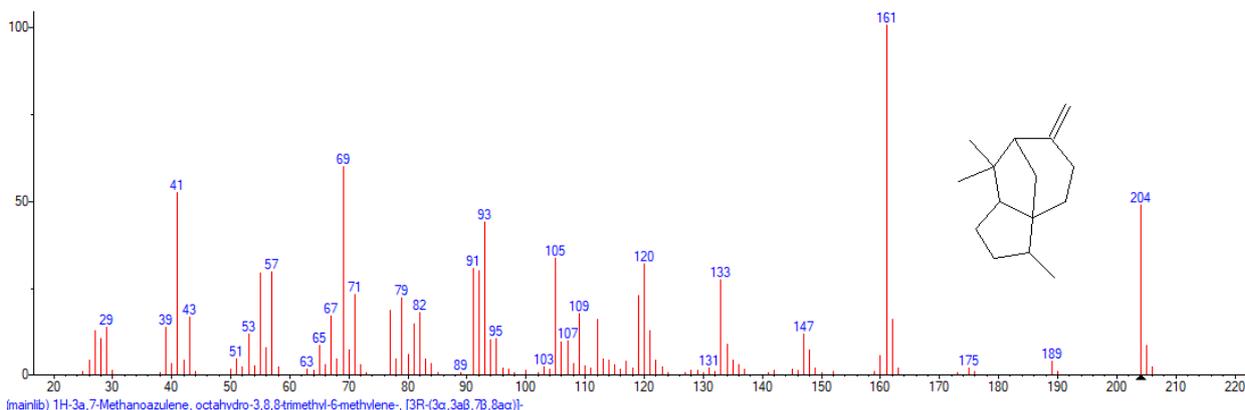
(mainlib) 4H-Pyran-4-one, 2,3-dihydro-3,5-dihydroxy-6-methyl-

Name: 4H-Pyran-4-one, 2,3-dihydro-3,5-dihydroxy-6-methyl-

Formula: C₆H₈O₄

MW: 144 Exact Mass: 144.042258 CAS#: 28564-83-2 NIST#: 156511 ID#: 6436 DB: mainlib

15. Benzoic acid



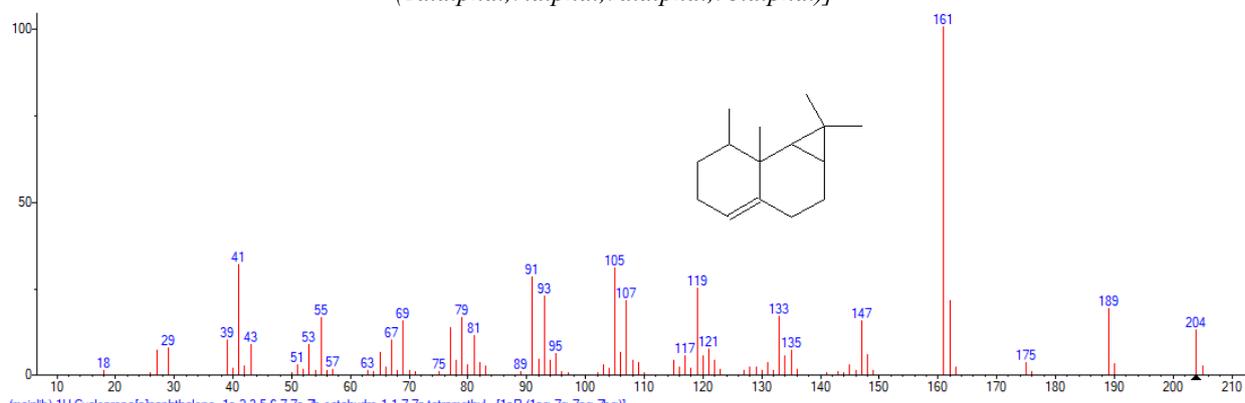
(mainlib) 1H-3a,7-Methanoazulene, octahydro-3,8,8-trimethyl-6-methylene-, [3R-(3a,3aβ,7β,8aα)]-

Name: 1H-3a,7-Methanoazulene, octahydro-3,8,8-trimethyl-6-methylene-, [3R-(3a,3aβ,7β,8aα)]-

Formula: C₁₅H₂₄

MW: 204 Exact Mass: 204.1878 CAS#: 546-28-1 NIST#: 156112 ID#: 132990 DB: mainlib

19. 1H-Cyclopropa[a]naphthalene, 1a,2,3,5,6,7,7a,7b-octahydro-1,1,7,7a-tetramethyl-, [1aR-(1a.alpha.,7.alpha.,7a.alpha.,7b.alpha.)]



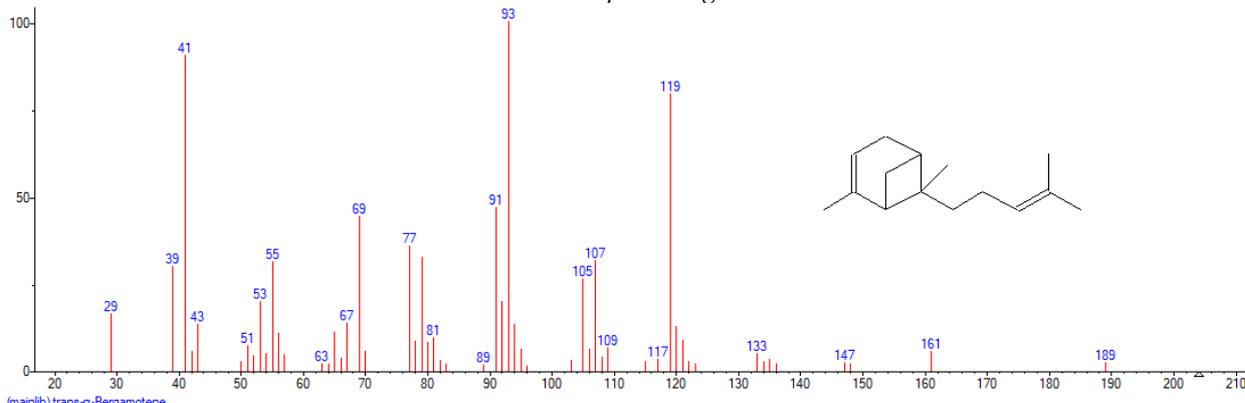
(mainlib) 1H-Cyclopropa[a]naphthalene, 1a,2,3,5,6,7,7a,7b-octahydro-1,1,7,7a-tetramethyl-, [1aR-(1a.alpha.,7.alpha.,7a.alpha.,7b.alpha.)]

Name: 1H-Cyclopropa[a]naphthalene, 1a,2,3,5,6,7,7a,7b-octahydro-1,1,7,7a-tetramethyl-, [1aR-(1a.alpha.,7.alpha.,7a.alpha.,7b.alpha.)]

Formula: C₁₅H₂₄

MW: 204 Exact Mass: 204.1878 CAS#: 17334-55-3 NIST#: 9242 ID#: 132902 DB: mainlib

20. trans- α -Bergamotene



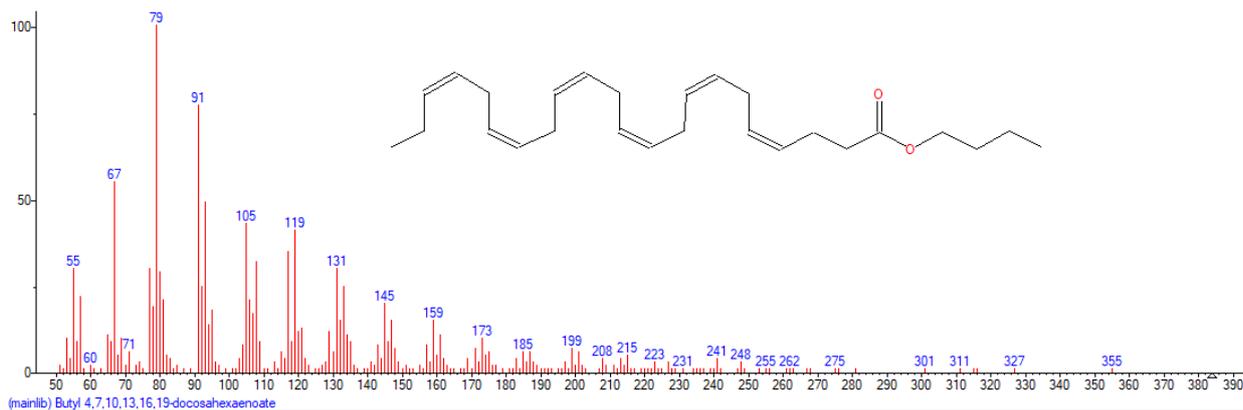
(mainlib) trans- α -Bergamotene

Name: trans- α -Bergamotene

Formula: C₁₅H₂₄

MW: 204 Exact Mass: 204.1878 CAS#: 13474-59-4 NIST#: 293015 ID#: 59858 DB: mainlib

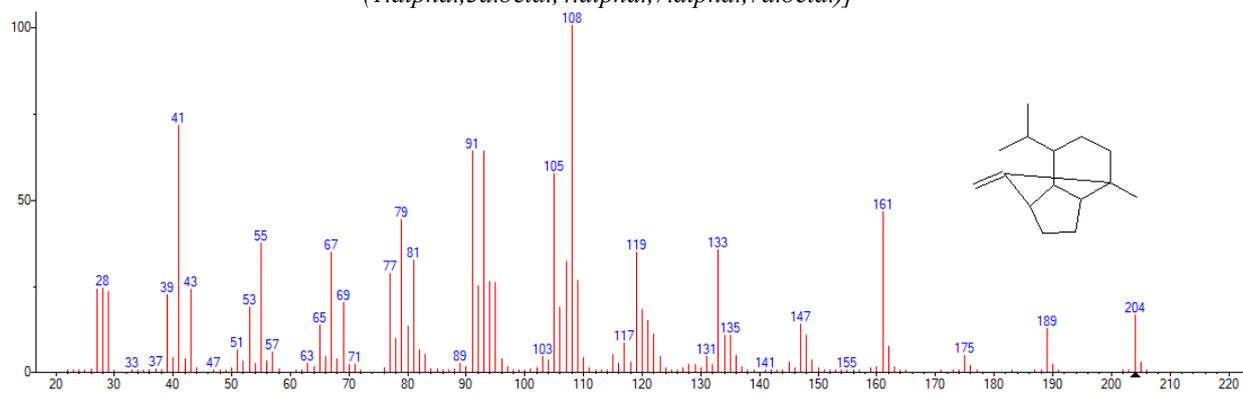
21. Butyl 4,7,10,13,16,19-docosahexaenoate



(mainlib) Butyl 4,7,10,13,16,19-docosahexaenoate

Name: Butyl 4,7,10,13,16,19-docosahexaenoate
Formula: C₂₆H₄₀O₂
MW: 384 Exact Mass: 384.30283 NIST#: 336803 ID#: 44567 DB: mainlib

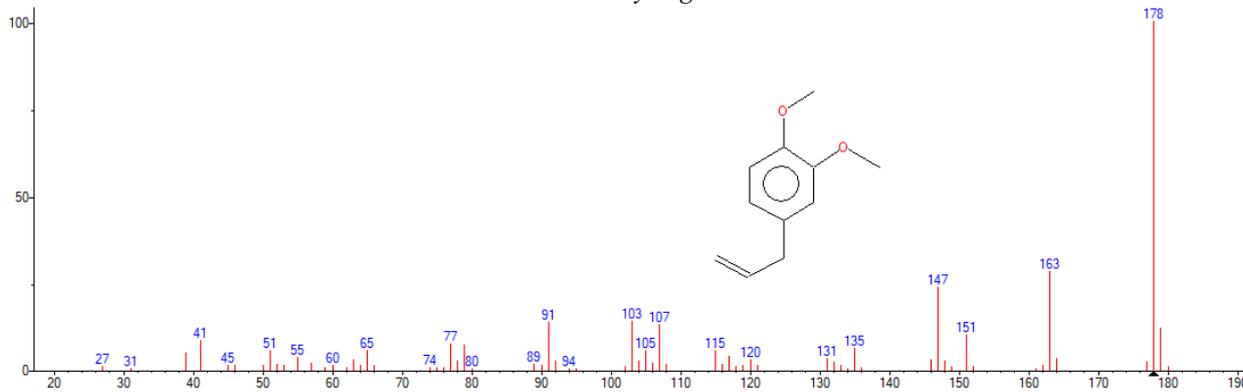
22. *1,4-Methano-1H-indene, octahydro-4-methyl-8-methylene-7-(1-methylethyl)-, [1S-(1.alpha.,3a.beta.,4.alpha.,7.alpha.,7a.beta.)]-*



(mainlib) 1,4-Methano-1H-indene, octahydro-4-methyl-8-methylene-7-(1-methylethyl)-, [1S-(1.alpha.,3a.beta.,4.alpha.,7.alpha.,7a.beta.)]-

Name: 1,4-Methano-1H-indene, octahydro-4-methyl-8-methylene-7-(1-methylethyl)-, [1S-(1.alpha.,3a.beta.,4.alpha.,7.alpha.,7a.beta.)]-
Formula: C₁₅H₂₄
MW: 204 Exact Mass: 204.1878 CAS#: 3650-28-0 NIST#: 62949 ID#: 76337 DB: mainlib

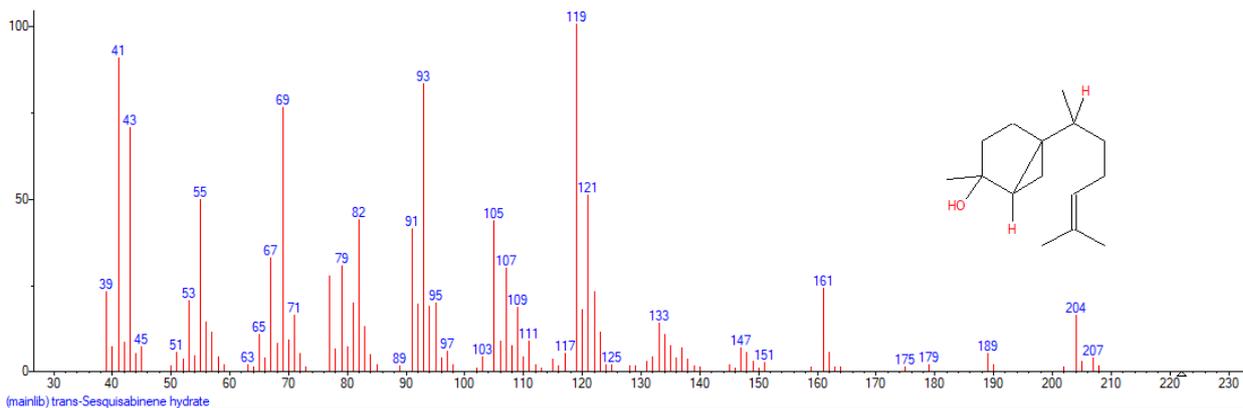
23. *Methyleugenol*



(mainlib) Methyleugenol

Name: Methyleugenol
Formula: C₁₁H₁₄O₂
MW: 178 Exact Mass: 178.09938 CAS#: 93-15-2 NIST#: 107171 ID#: 146614 DB: mainlib

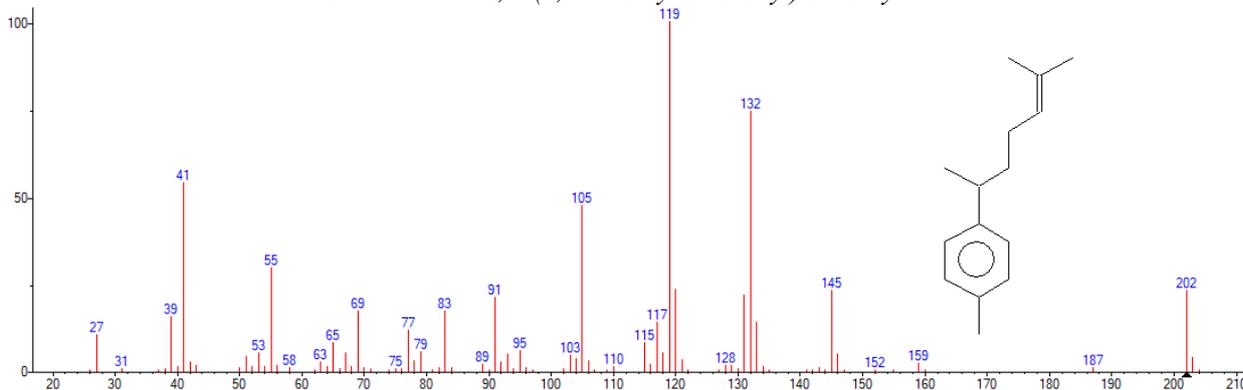
24. *trans-Sesquisabinene hydrate*



(mainlib) trans-Sesquisabinene hydrate

Name: trans-Sesquisabinene hydrate
Formula: C₁₅H₂₆O
MW: 222 Exact Mass: 222.198365 NIST#: 374176 ID#: 88290 DB: mainlib

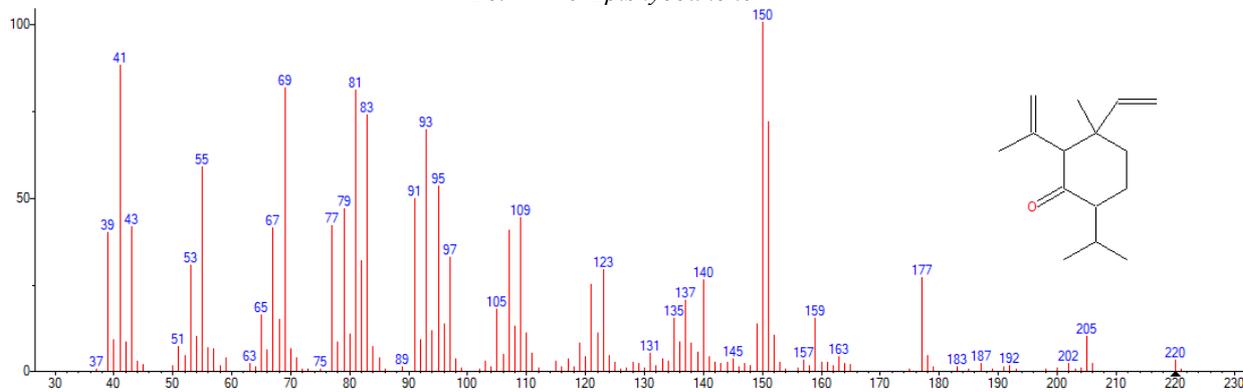
25. Benzene, 1-(1,5-dimethyl-4-hexenyl)-4-methyl-



(mainlib) Benzene, 1-(1,5-dimethyl-4-hexenyl)-4-methyl-

Name: Benzene, 1-(1,5-dimethyl-4-hexenyl)-4-methyl-
Formula: C₁₅H₂₂
MW: 202 Exact Mass: 202.172151 CAS#: 644-30-4 NIST#: 249520 ID#: 89593 DB: mainlib

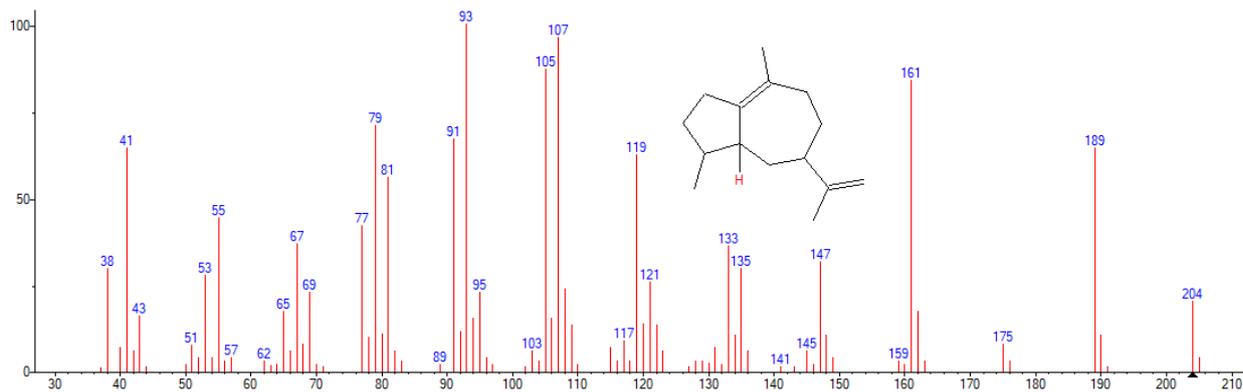
26. 6-Epishyobunone



(mainlib) 6-Epishyobunone

Name: 6-Epishyobunone
Formula: C₁₅H₂₄O
MW: 220 Exact Mass: 220.182715 NIST#: 360299 ID#: 123728 DB: mainlib

27. Guaia-1(10),11-diene



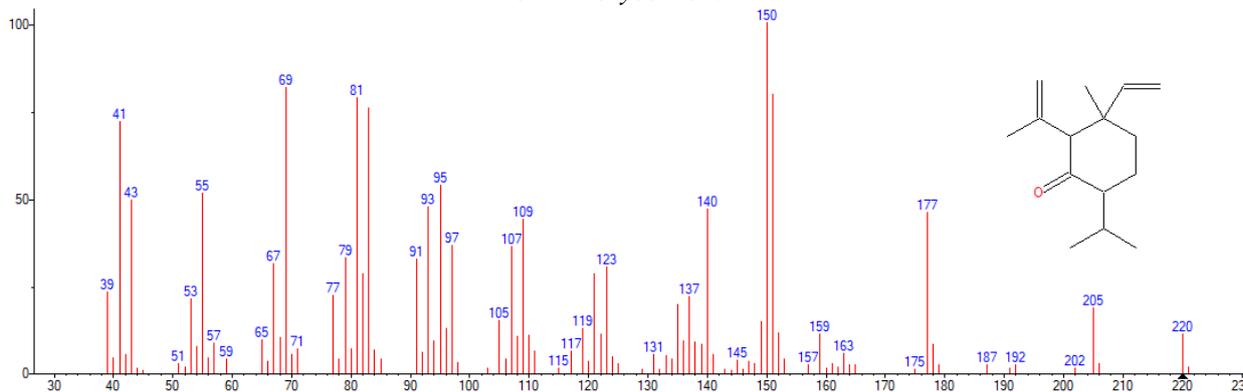
(mainlib) Guaia-1(10),11-diene

Name: Guaia-1(10),11-diene

Formula: C₁₅H₂₄

MW: 204 Exact Mass: 204.1878 NIST#: 374197 ID#: 60384 DB: mainlib

28. *Shyobunone*



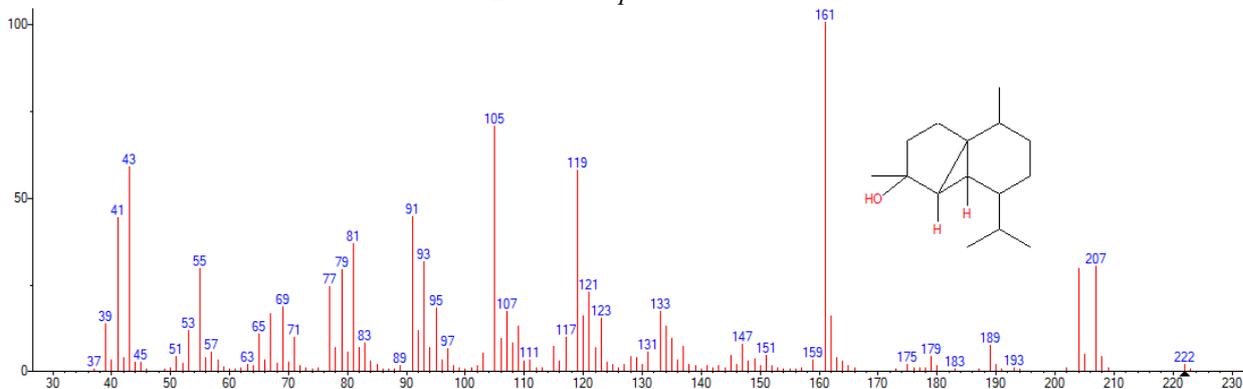
(mainlib) Shyobunone

Name: Shyobunone

Formula: C₁₅H₂₄O

MW: 220 Exact Mass: 220.182715 CAS#: 21698-44-2 NIST#: 140217 ID#: 123865 DB: mainlib

29. *4-epi-cubedol*



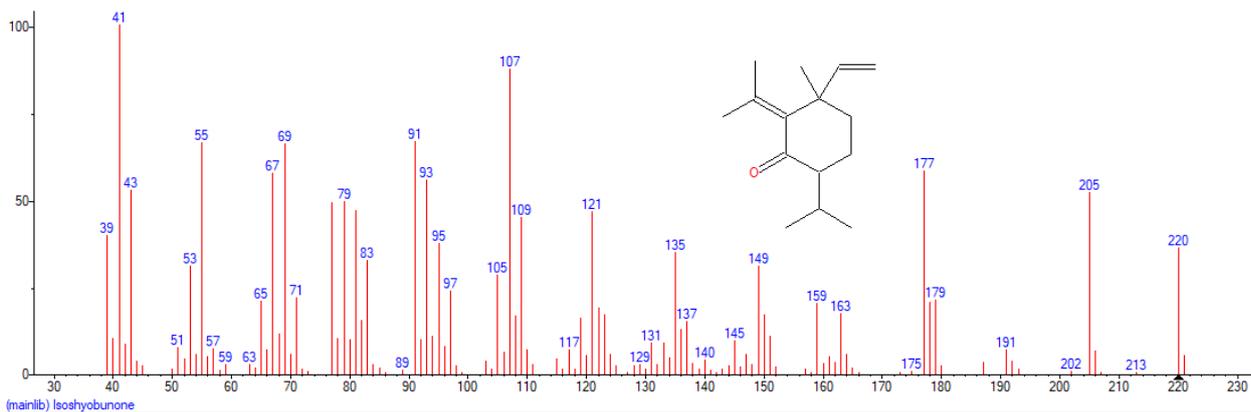
(mainlib) 4-epi-cubedol

Name: 4-epi-cubedol

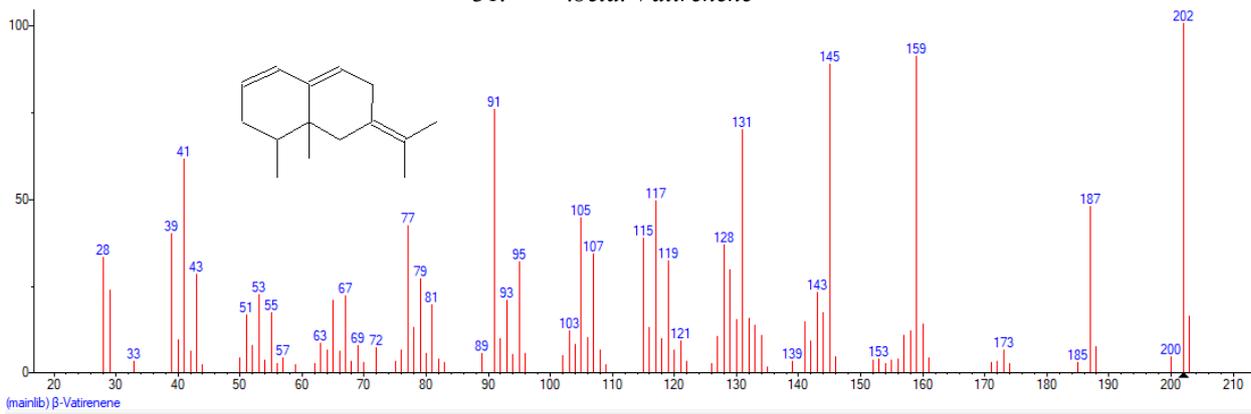
Formula: C₁₅H₂₆O

MW: 222 Exact Mass: 222.198365 NIST#: 374160 ID#: 133124 DB: mainlib

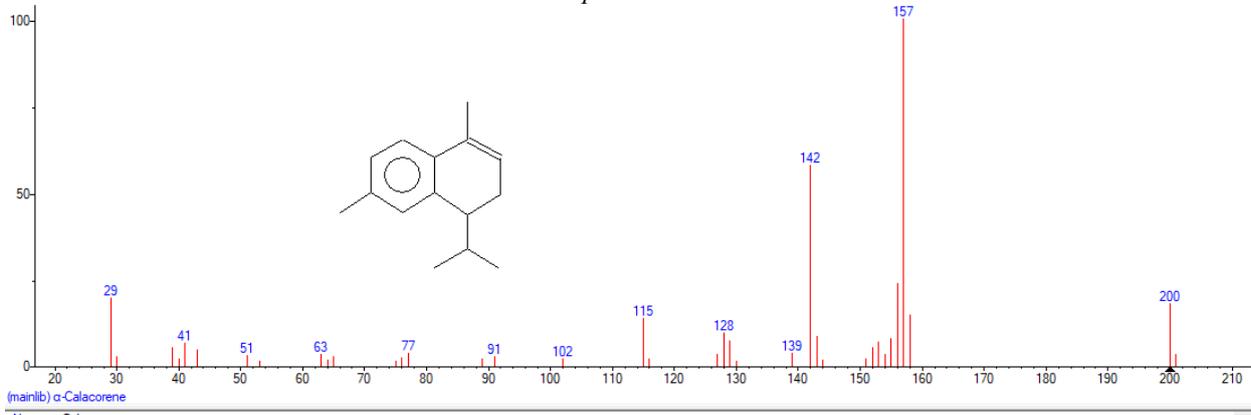
30. *Isoshyobunone*



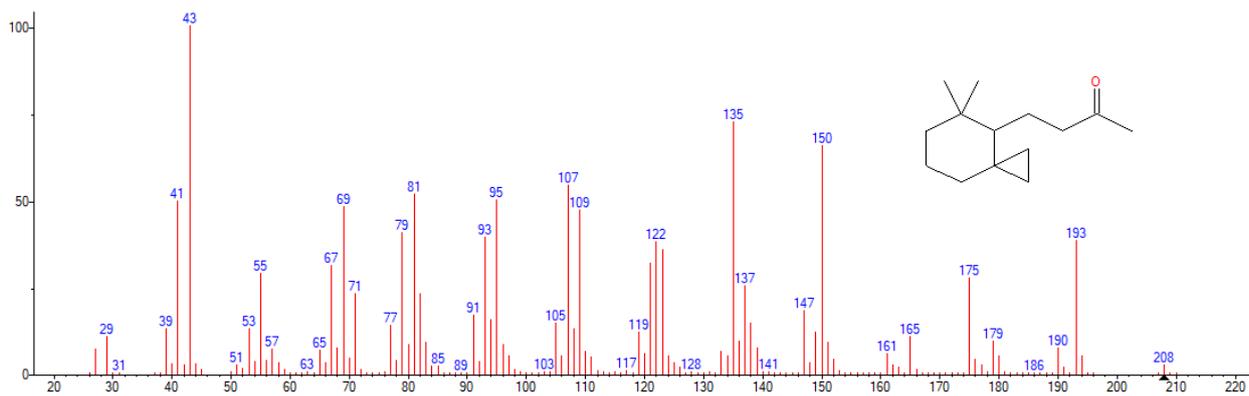
31. *.beta.-Vatirenene*



32. *.alpha.-Calacorene*



33. *Spiro[2.5]octane, 5,5-dimethyl-4-(3-oxobutyl)-*



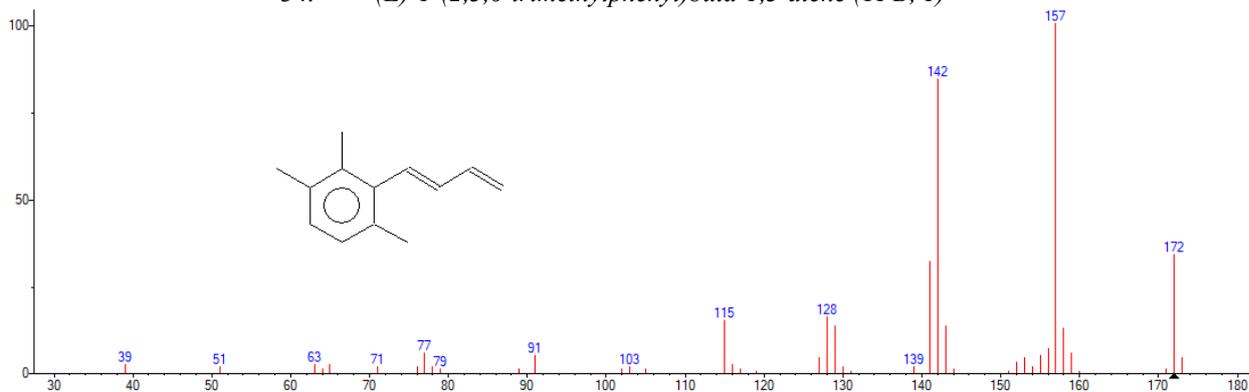
(mainlib) Spiro[2.5]octane, 5,5-dimethyl-4-(3-oxobutyl)-

Name: Spiro[2.5]octane, 5,5-dimethyl-4-(3-oxobutyl)-

Formula: C₁₄H₂₄O

MW: 208 Exact Mass: 208.182715 CAS#: 77143-32-9 NIST#: 197082 ID#: 11417 DB: mainlib

34. (E)-1-(2,3,6-trimethylphenyl)buta-1,3-diene (TPB, 1)



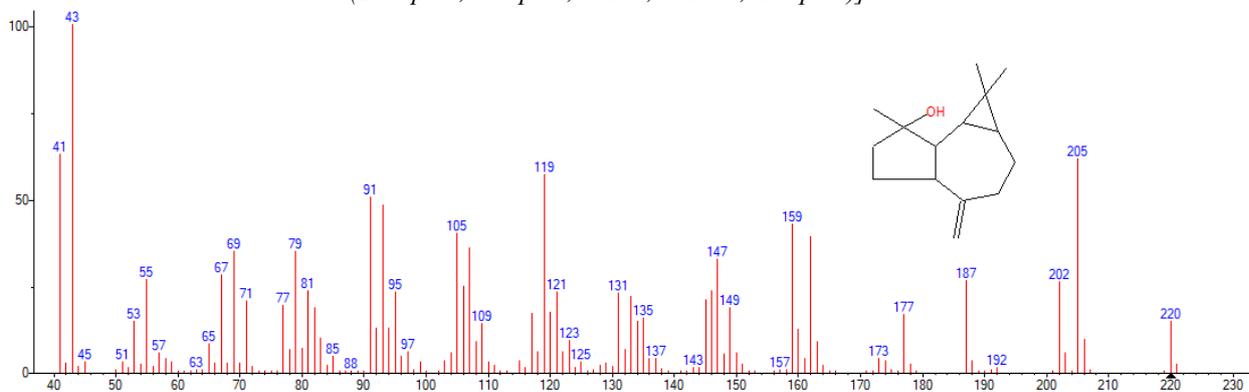
(mainlib) (E)-1-(2,3,6-trimethylphenyl)buta-1,3-diene (TPB, 1)

Name: (E)-1-(2,3,6-trimethylphenyl)buta-1,3-diene (TPB, 1)

Formula: C₁₃H₁₆

MW: 172 Exact Mass: 172.1252 NIST#: 357257 ID#: 129975 DB: mainlib

35. 1H-Cycloprop[e]azulen-7-ol, decahydro-1,1,7-trimethyl-4-methylene-, [1ar-(1a.alpha.,4a.alpha.,7.beta.,7a.beta.,7b.alpha.)]-



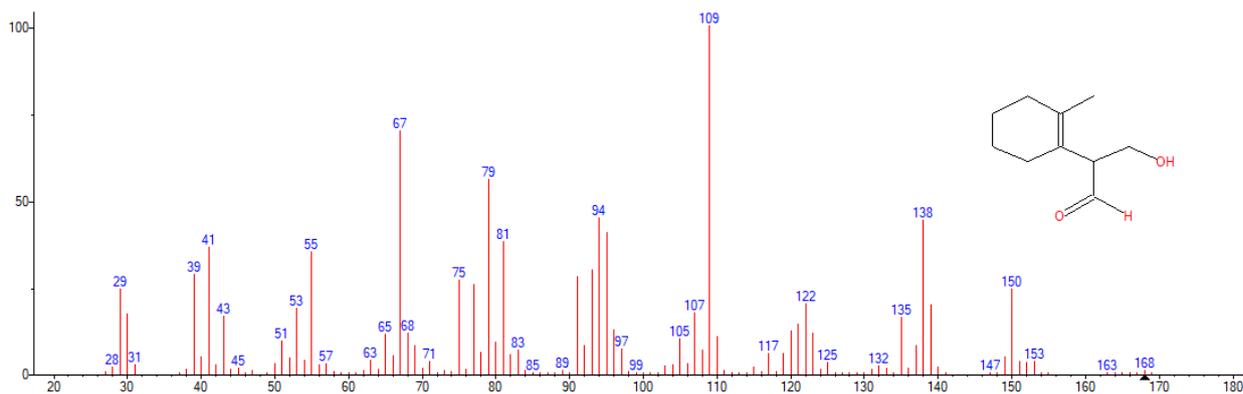
(mainlib) 1H-Cycloprop[e]azulen-7-ol, decahydro-1,1,7-trimethyl-4-methylene-, [1ar-(1a.alpha.,4a.alpha.,7.beta.,7a.beta.,7b.alpha.)]-

Name: 1H-Cycloprop[e]azulen-7-ol, decahydro-1,1,7-trimethyl-4-methylene-, [1ar-(1a.alpha.,4a.alpha.,7.beta.,7a.beta.,7b.alpha.)]-

Formula: C₁₅H₂₄O

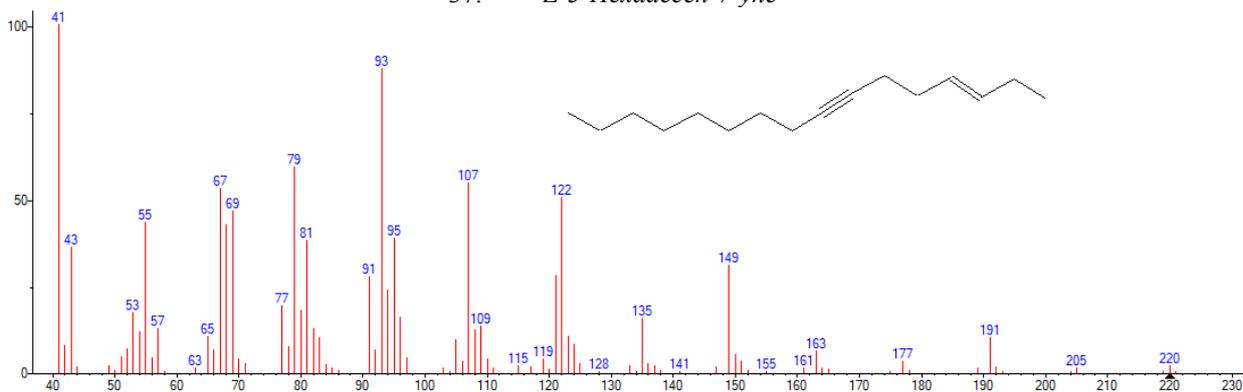
MW: 220 Exact Mass: 220.182715 CAS#: 6750-60-3 NIST#: 153105 ID#: 6115 DB: mainlib

36. 3-Hydroxy-2-(2-methylcyclohex-1-enyl)propionaldehyde



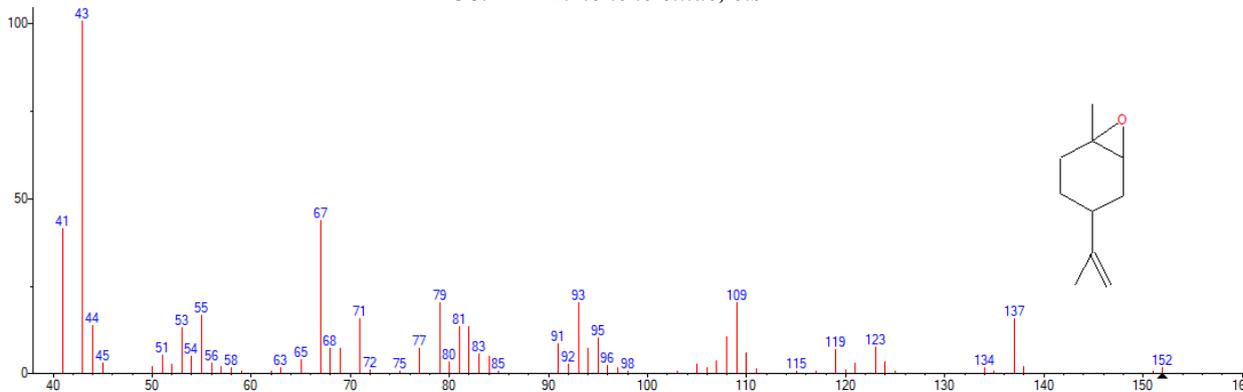
Name: 3-Hydroxy-2-(2-methylcyclohex-1-enyl)propionaldehyde
Formula: C₁₀H₁₆O₂
MW: 168 Exact Mass: 168.115029 NIST#: 186245 ID#: 77301 DB: mainlib

37. *Z*-3-Hexadecen-7-yne



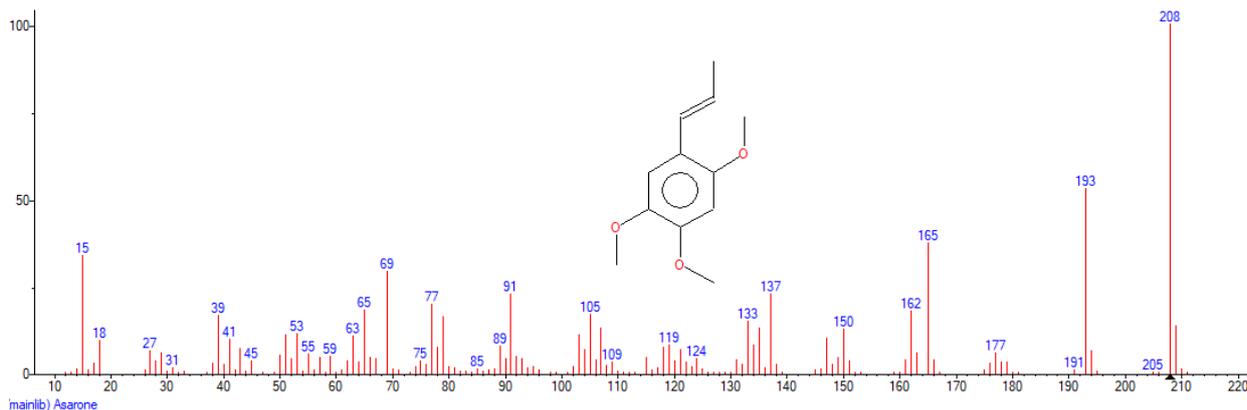
Name: Z-3-Hexadecen-7-yne
Formula: C₁₆H₂₈
MW: 220 Exact Mass: 220.219101 NIST#: 130913 ID#: 3578 DB: mainlib

38. *Limonene oxide, cis-*



Name: Limonene oxide, cis-
Formula: C₁₀H₁₆O
MW: 152 Exact Mass: 152.120115 CAS#: 13837-75-7 NIST#: 141140 ID#: 7924 DB: mainlib

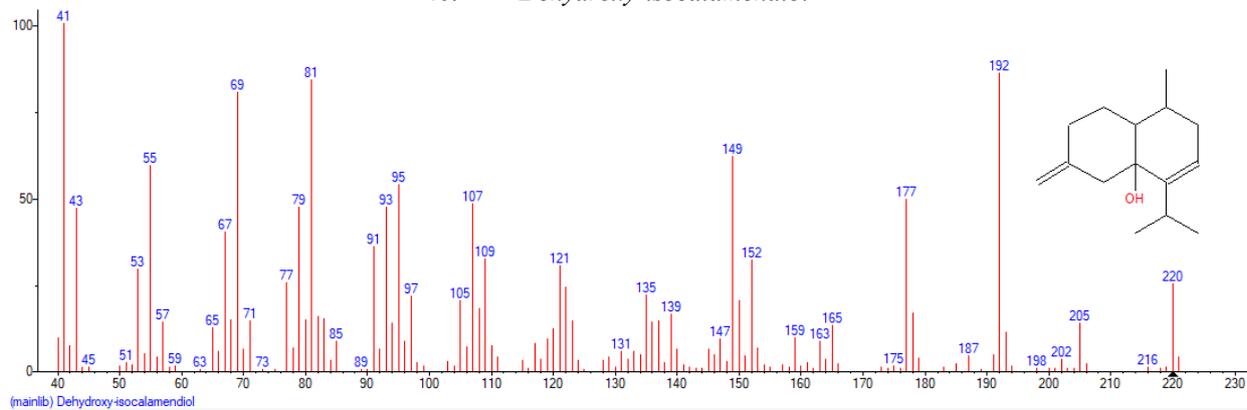
39. *Asarone*



(mainlib) Asarone

Name: Asarone
Formula: C₁₂H₁₆O₃
MW: 208 Exact Mass: 208.109944 CAS#: 2883-98-9 NIST#: 286968 ID#: 166932 DB: mainlib

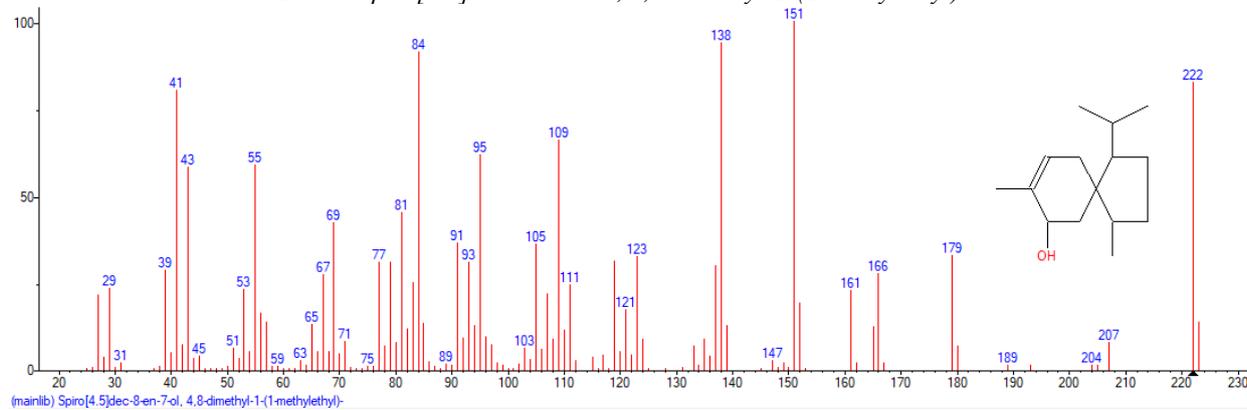
40. Dehydroxy-isocalamendiol



(mainlib) Dehydroxy-isocalamendiol

Name: Dehydroxy-isocalamendiol
Formula: C₁₅H₂₄O
MW: 220 Exact Mass: 220.182715 NIST#: 111151 ID#: 3983 DB: mainlib

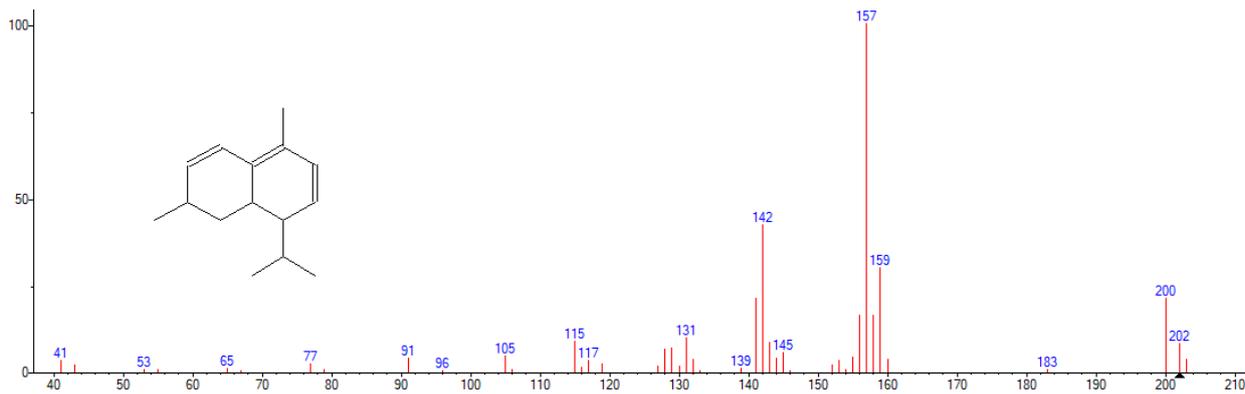
41. Spiro[4.5]dec-8-en-7-ol, 4,8-dimethyl-1-(1-methylethyl)-



(mainlib) Spiro[4.5]dec-8-en-7-ol, 4,8-dimethyl-1-(1-methylethyl)-

Name: Spiro[4.5]dec-8-en-7-ol, 4,8-dimethyl-1-(1-methylethyl)-
Formula: C₁₅H₂₆O
MW: 222 Exact Mass: 222.198365 CAS#: 61050-89-3 NIST#: 190812 ID#: 125237 DB: mainlib

42. Cadala-1(10),3,8-triene



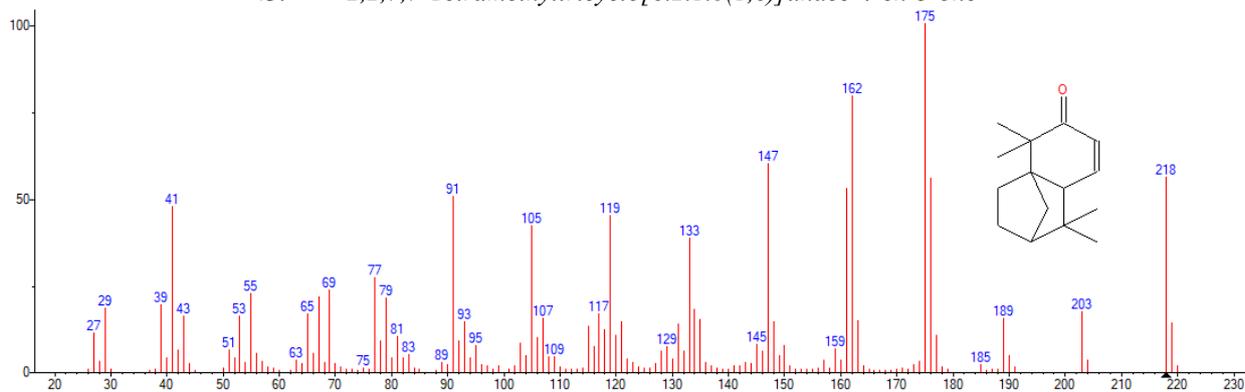
(mainlib) Cadala-1(10),3,8-triene

Name: Cadala-1(10),3,8-triene

Formula: C₁₅H₂₂

MW: 202 Exact Mass: 202.172151 NIST#: 140056 ID#: 129973 DB: mainlib

43. 2,2,7,7-Tetramethyltricyclo[6.2.1.0(1,6)]undec-4-en-3-one



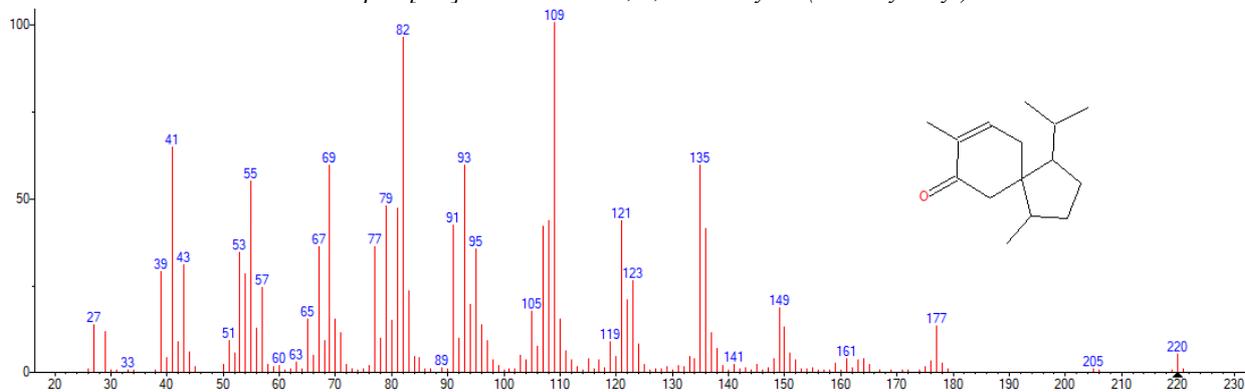
(mainlib) 2,2,7,7-Tetramethyltricyclo[6.2.1.0(1,6)]undec-4-en-3-one

Name: 2,2,7,7-Tetramethyltricyclo[6.2.1.0(1,6)]undec-4-en-3-one

Formula: C₁₅H₂₂O

MW: 218 Exact Mass: 218.167066 NIST#: 189499 ID#: 144784 DB: mainlib

44. Spiro[4.5]dec-6-en-8-one, 1,7-dimethyl-4-(1-methylethyl)-



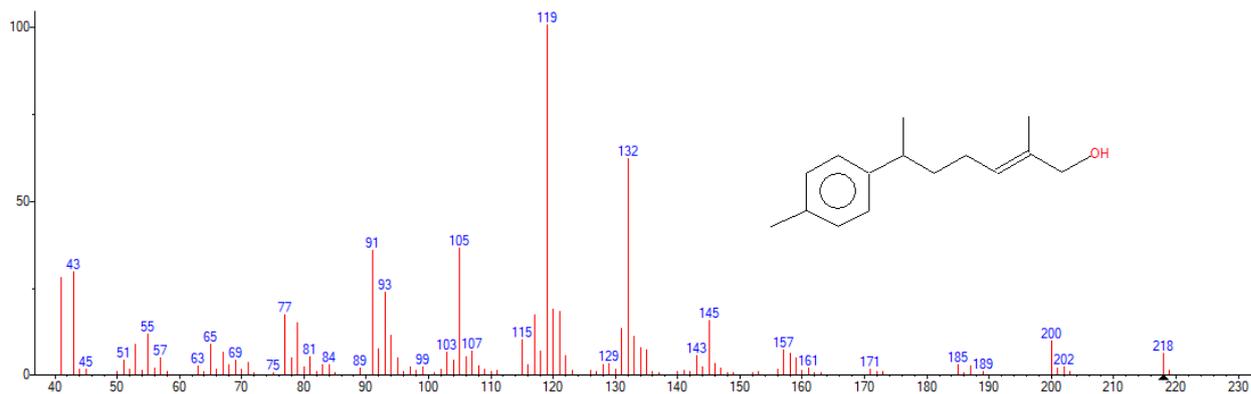
(mainlib) Spiro[4.5]dec-6-en-8-one, 1,7-dimethyl-4-(1-methylethyl)-

Name: Spiro[4.5]dec-6-en-8-one, 1,7-dimethyl-4-(1-methylethyl)-

Formula: C₁₅H₂₄O

MW: 220 Exact Mass: 220.182715 CAS#: 39510-36-6 NIST#: 185494 ID#: 77427 DB: mainlib

45. 6-(p-Tolyl)-2-methyl-2-heptenol, trans-



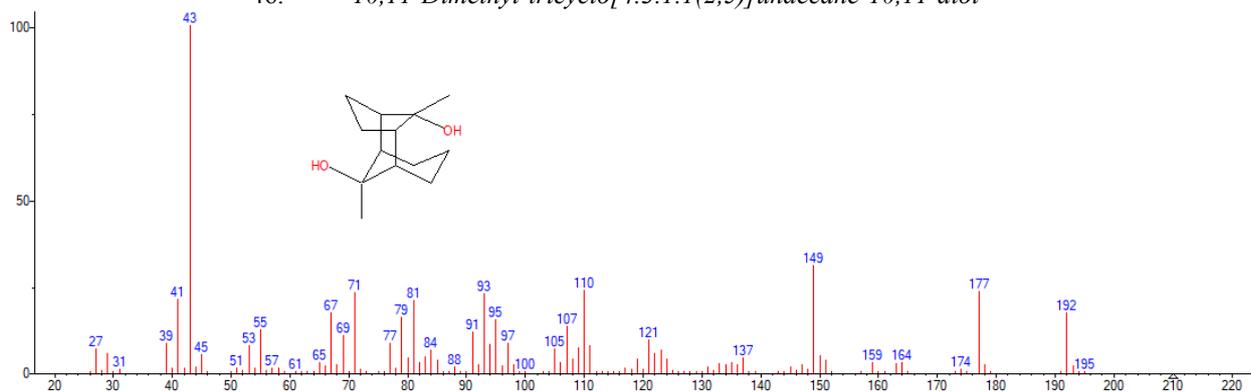
(mainlib) 6-(p-Tolyl)-2-methyl-2-heptenol, trans-

Name: 6-(p-Tolyl)-2-methyl-2-heptenol, trans-

Formula: C₁₅H₂₂O

MW: 218 Exact Mass: 218.167066 CAS#: 39599-18-3 NIST#: 141052 ID#: 89596 DB: mainlib

46. *10,11-Dimethyl-tricyclo[4.3.1.1(2,5)]undecane-10,11-diol*



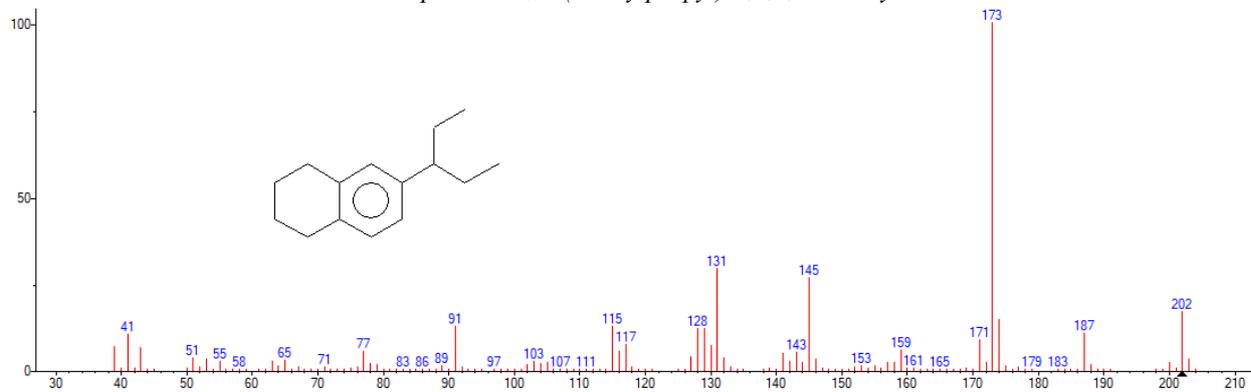
(mainlib) 10,11-Dimethyl-tricyclo[4.3.1.1(2,5)]undecane-10,11-diol

Name: 10,11-Dimethyl-tricyclo[4.3.1.1(2,5)]undecane-10,11-diol

Formula: C₁₃H₂₂O₂

MW: 210 Exact Mass: 210.16198 CAS#: 174226-41-6 NIST#: 193964 ID#: 11787 DB: mainlib

47. *Naphthalene, 6-(1-ethylpropyl)-1,2,3,4-tetrahydro-*



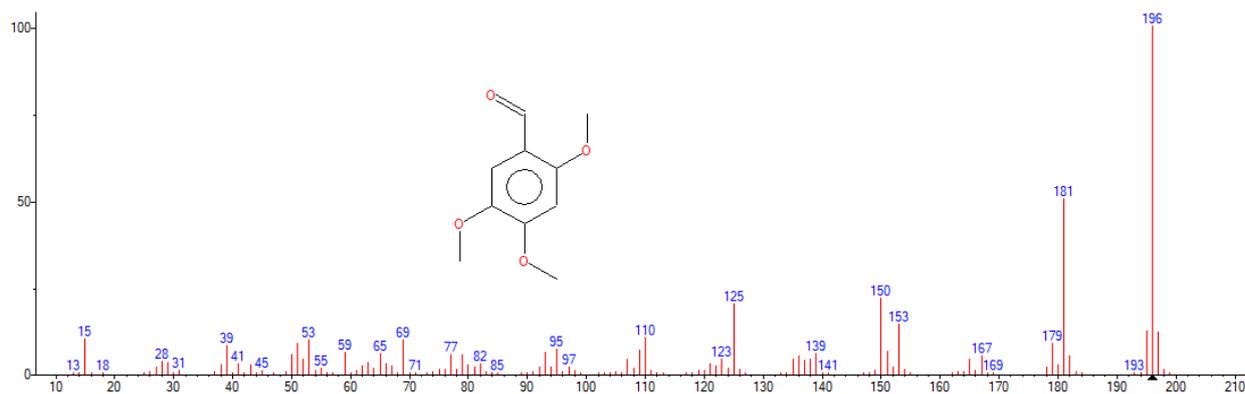
(mainlib) Naphthalene, 6-(1-ethylpropyl)-1,2,3,4-tetrahydro-

Name: Naphthalene, 6-(1-ethylpropyl)-1,2,3,4-tetrahydro-

Formula: C₁₅H₂₂

MW: 202 Exact Mass: 202.172151 CAS#: 54889-56-4 NIST#: 9070 ID#: 142786 DB: mainlib

48. *Benzaldehyde, 2,4,5-trimethoxy-*



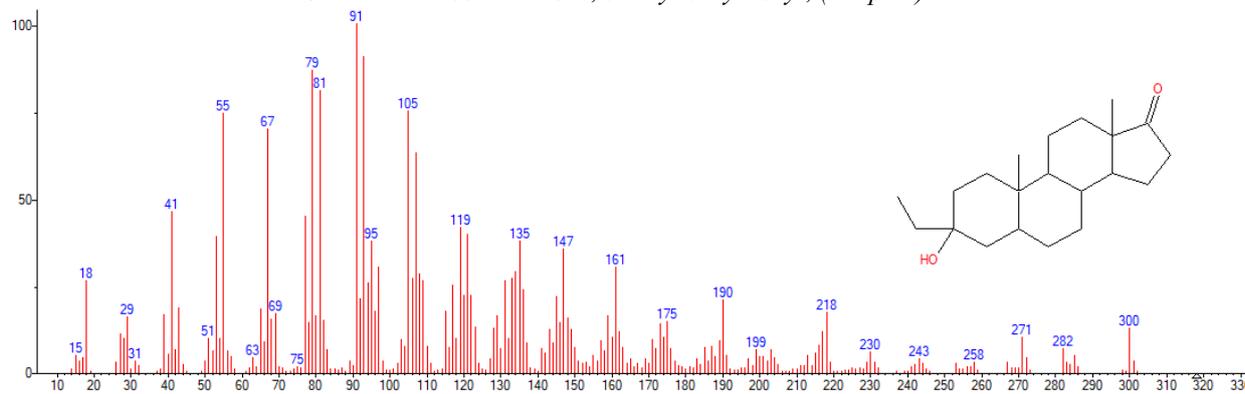
(mainlib) Benzaldehyde, 2,4,5-trimethoxy-

Name: Benzaldehyde, 2,4,5-trimethoxy-

Formula: C₁₀H₁₂O₄

MW: 196 Exact Mass: 196.073559 CAS#: 4460-86-0 NIST#: 237823 ID#: 160548 DB: mainlib

49. *Androstan-17-one, 3-ethyl-3-hydroxy-, (5.alpha.)-*



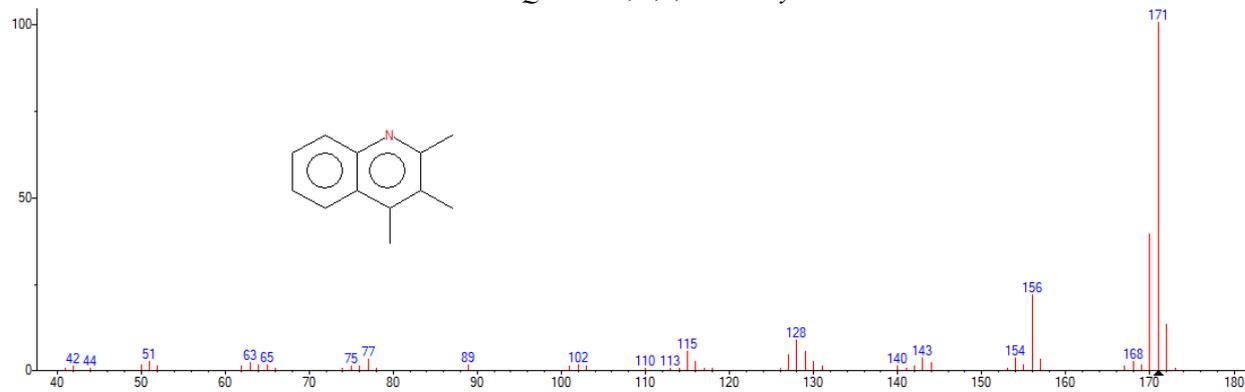
(mainlib) Androstan-17-one, 3-ethyl-3-hydroxy-, (5.alpha.)-

Name: Androstan-17-one, 3-ethyl-3-hydroxy-, (5.alpha.)-

Formula: C₂₁H₃₄O₂

MW: 318 Exact Mass: 318.25588 CAS#: 57344-99-7 NIST#: 42880 ID#: 55206 DB: mainlib

50. *Quinoline, 2,3,4-trimethyl-*



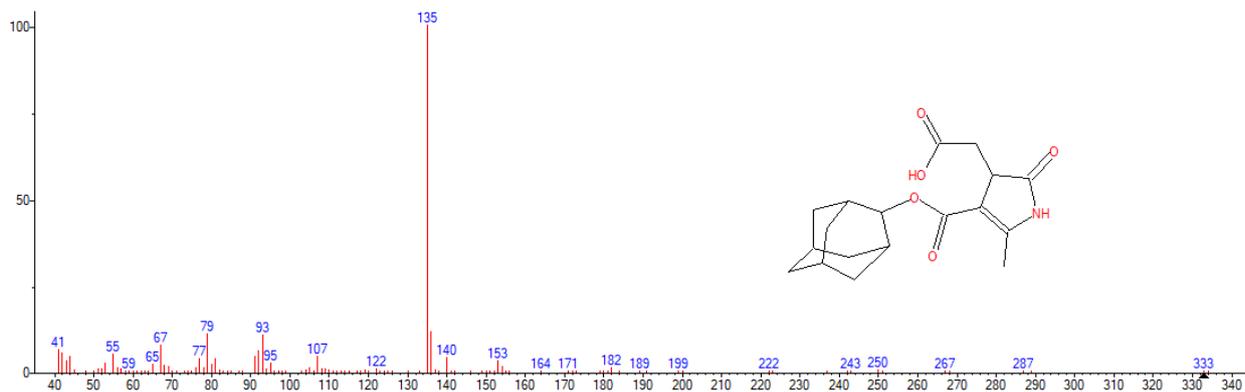
(mainlib) Quinoline, 2,3,4-trimethyl-

Name: Quinoline, 2,3,4-trimethyl-

Formula: C₁₂H₁₃N

MW: 171 Exact Mass: 171.104799 CAS#: 2437-72-1 NIST#: 47003 ID#: 141456 DB: mainlib

51. *Acetic acid, 2-[2,3-dihydro-4-(2-adamantyloxycarbonyl)-5-methyl-2-oxo-pyrrol-3-yl]-*



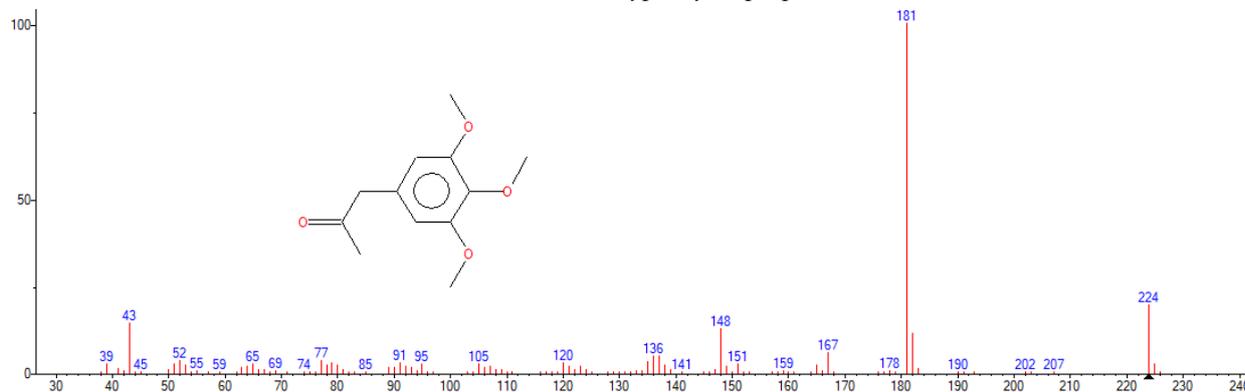
(mainlib) Acetic acid, 2-[2,3-dihydro-4-(2-adamantyloxycarbonyl)-5-methyl-2-oxo-pyrrol-3-yl]-

Name: Acetic acid, 2-[2,3-dihydro-4-(2-adamantyloxycarbonyl)-5-methyl-2-oxo-pyrrol-3-yl]-

Formula: C₁₈H₂₃NO₅

MW: 333 Exact Mass: 333.157623 NIST#: 294103 ID#: 107515 DB: mainlib

52. 3,4,5-trimethoxyphenyl-2-propanone



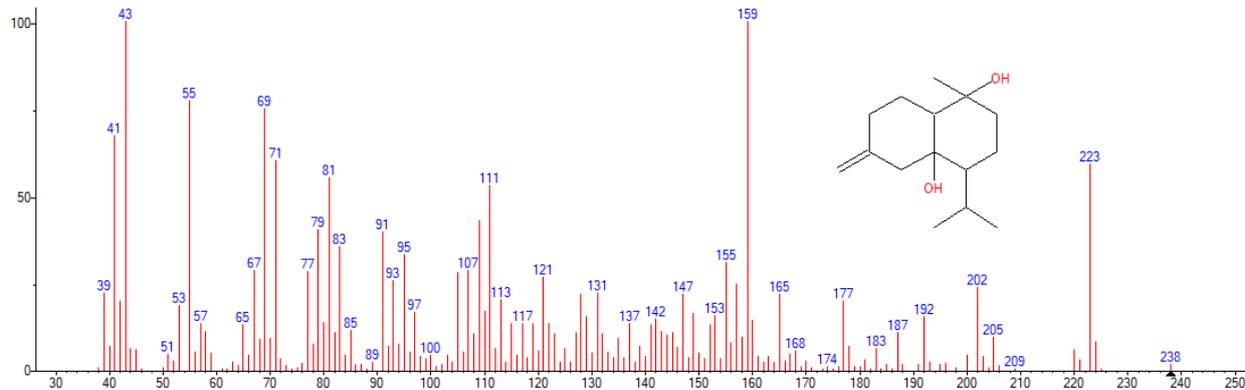
(mainlib) 3,4,5-trimethoxyphenyl-2-propanone

Name: 3,4,5-trimethoxyphenyl-2-propanone

Formula: C₁₂H₁₆O₄

MW: 224 Exact Mass: 224.104859 NIST#: 378976 ID#: 149000 DB: mainlib

53. Isocalamendiol



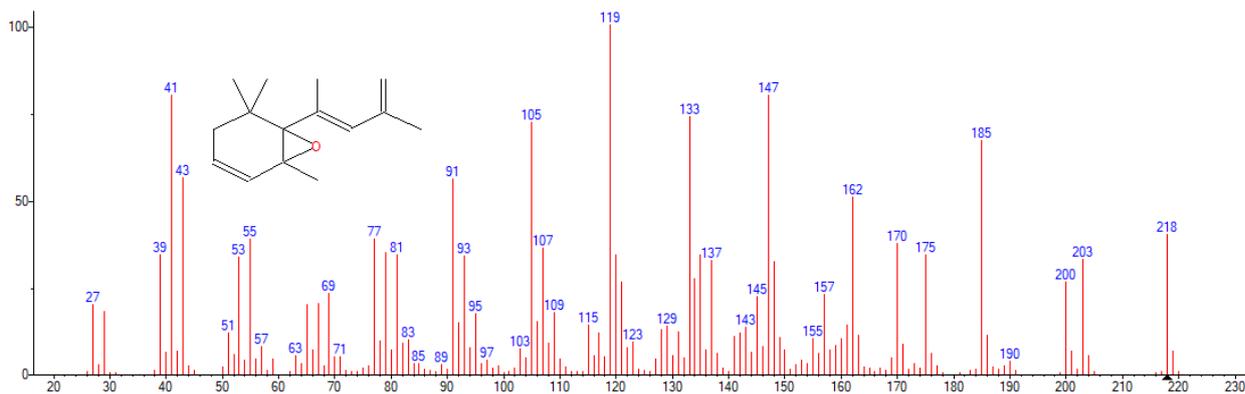
(mainlib) Isocalamendiol

Name: Isocalamendiol

Formula: C₁₅H₂₆O₂

MW: 238 Exact Mass: 238.19328 NIST#: 360302 ID#: 12002 DB: mainlib

54. 6-(1,3-Dimethyl-buta-1,3-dienyl)-1,5,5-trimethyl-7-oxa-bicyclo[4.1.0]hept-2-ene



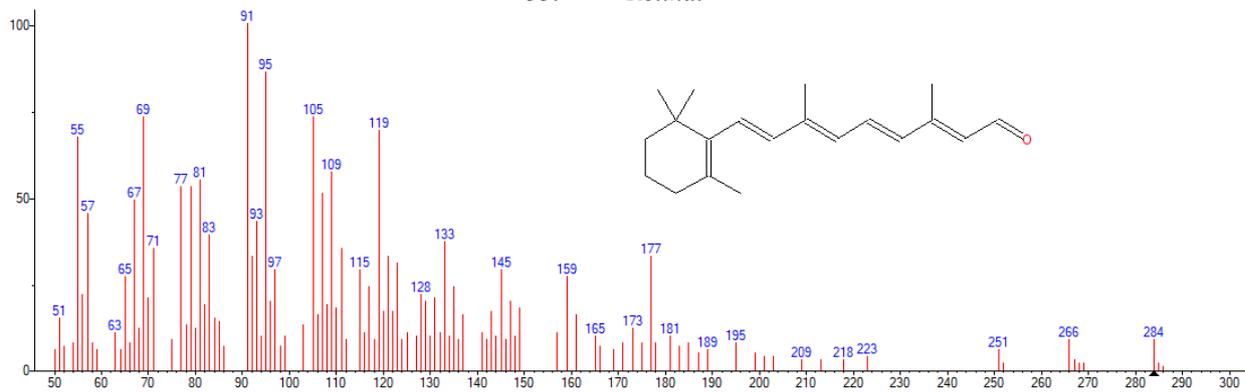
(mainlib) 6-(1,3-Dimethylbuta-1,3-dienyl)-1,5,5-trimethyl-7-oxa-bicyclo[4.1.0]hept-2-ene

Name: 6-(1,3-Dimethylbuta-1,3-dienyl)-1,5,5-trimethyl-7-oxa-bicyclo[4.1.0]hept-2-ene

Formula: C₁₅H₂₂O

MW: 218 Exact Mass: 218.167066 NIST#: 189264 ID#: 89735 DB: mainlib

55. Retinal



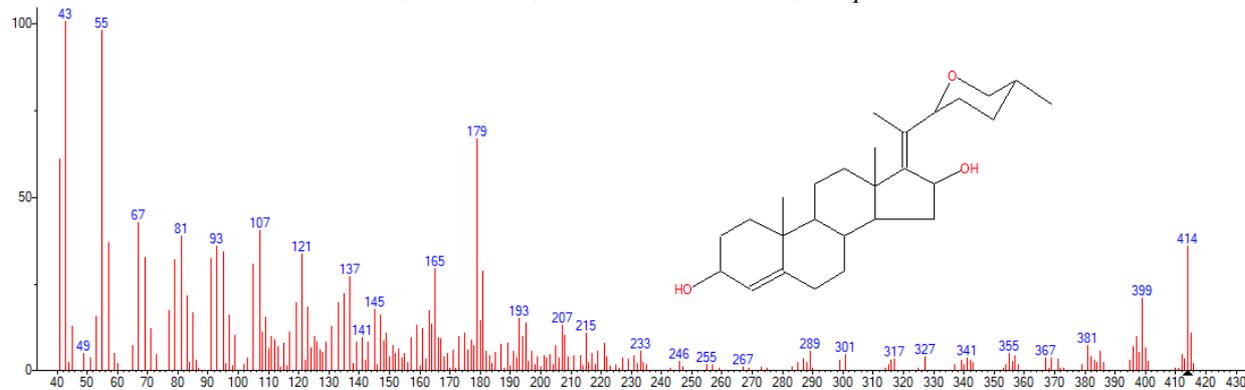
(mainlib) Retinal

Name: Retinal

Formula: C₂₀H₂₈O

MW: 284 Exact Mass: 284.214016 CAS#: 116-31-4 NIST#: 68281 ID#: 55230 DB: mainlib

56. 22,26-Oxido-4,17-cholestadien-3.beta.,16.alpha.-diol



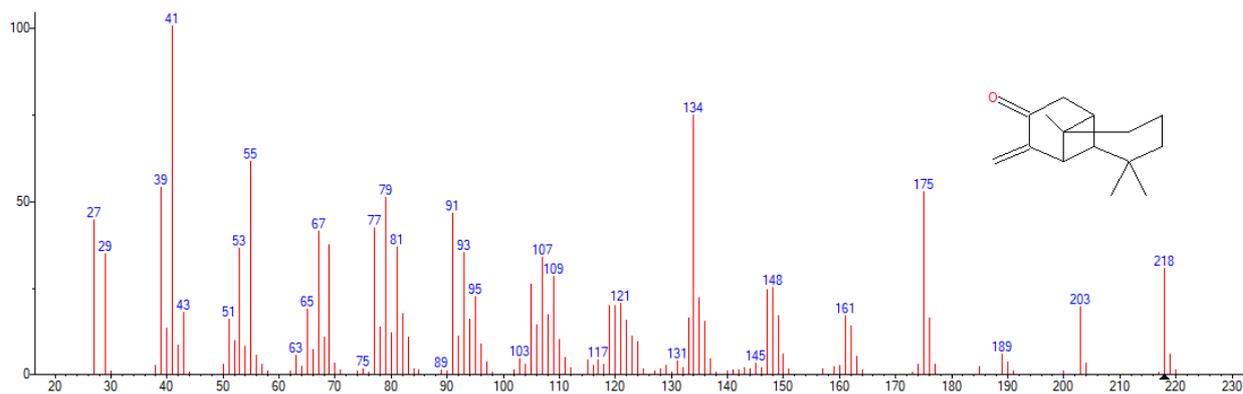
(mainlib) 22,26-Oxido-4,17-cholestadien-3β,16α-diol

Name: 22,26-Oxido-4,17-cholestadien-3β,16α-diol

Formula: C₂₇H₄₂O₃

MW: 414 Exact Mass: 414.313395 NIST#: 252804 ID#: 7090 DB: mainlib

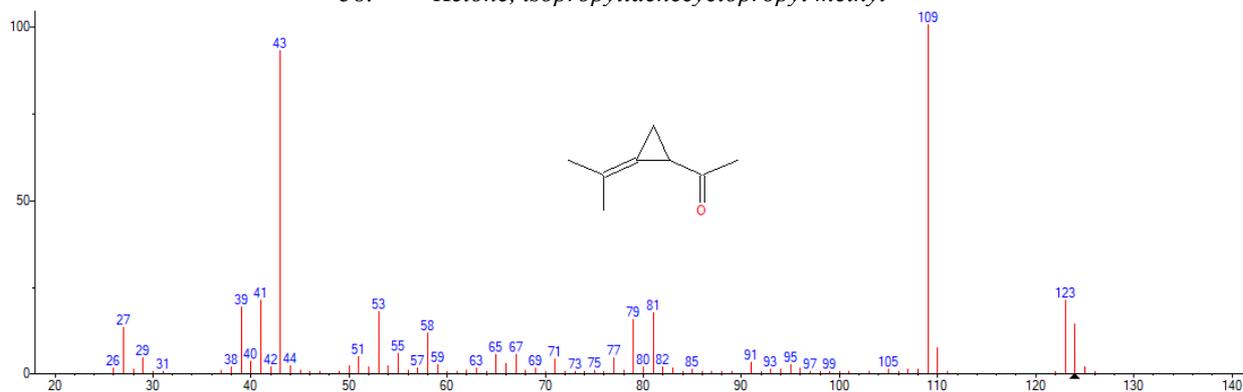
57. Longipinocarvone



(mainlib) Longipinocarvone

Name: Longipinocarvone
Formula: C₁₅H₂₂O
MW: 218 Exact Mass: 218.167066 NIST#: 151871 ID#: 3831 DB: mainlib

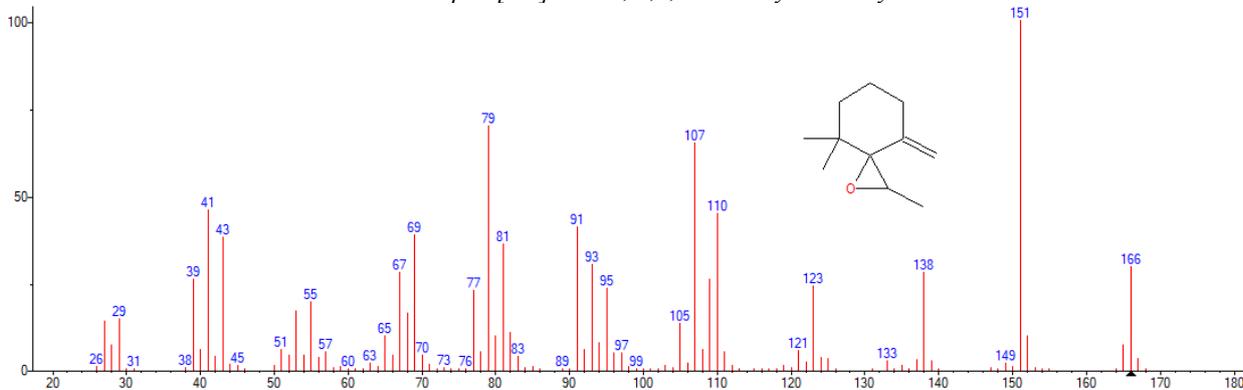
58. *Ketone, isopropylidenecyclopropyl methyl*



(mainlib) Ketone, isopropylidenecyclopropyl methyl

Name: Ketone, isopropylidenecyclopropyl methyl
Formula: C₉H₁₂O
MW: 124 Exact Mass: 124.088815 CAS#: 29765-67-1 NIST#: 157419 ID#: 77201 DB: mainlib

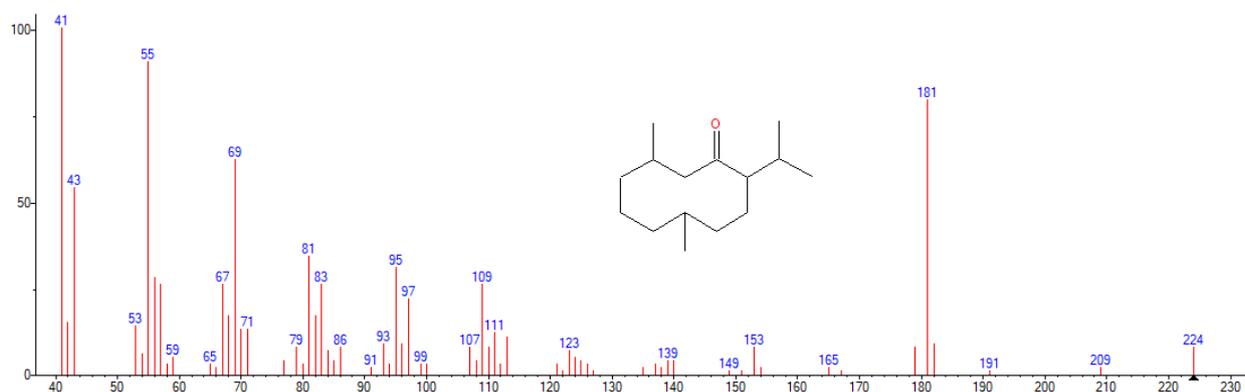
59. *1-Oxaspiro[2.5]octane, 2,4,4-trimethyl-8-methylene-*



(mainlib) 1-Oxaspiro[2.5]octane, 2,4,4-trimethyl-8-methylene-

Name: 1-Oxaspiro[2.5]octane, 2,4,4-trimethyl-8-methylene-
Formula: C₁₁H₁₈O
MW: 166 Exact Mass: 166.135765 CAS#: 54345-62-9 NIST#: 190644 ID#: 125006 DB: mainlib

60. *5,9-Dimethyl-2-(1-methylethylidene)-1-cyclodecanone*



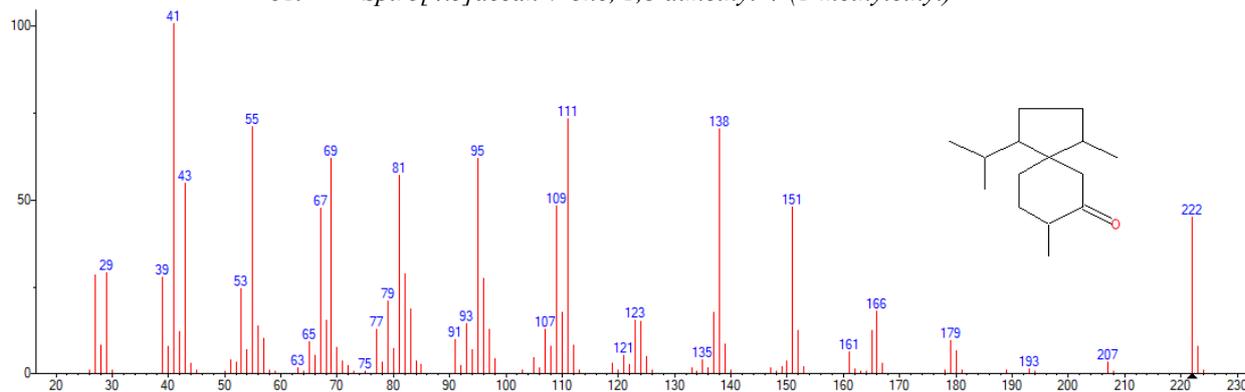
(mainlib) 5,9-Dimethyl-2-(1-methylethyl)-1-cyclodecanone

Name: 5,9-Dimethyl-2-(1-methylethyl)-1-cyclodecanone

Formula: C₁₅H₂₈O

MW: 224 Exact Mass: 224.214016 CAS#: 4570-15-4 NIST#: 72822 ID#: 2755 DB: mainlib

61. Spiro[4.5]decan-7-one, 1,8-dimethyl-4-(1-methylethyl)-



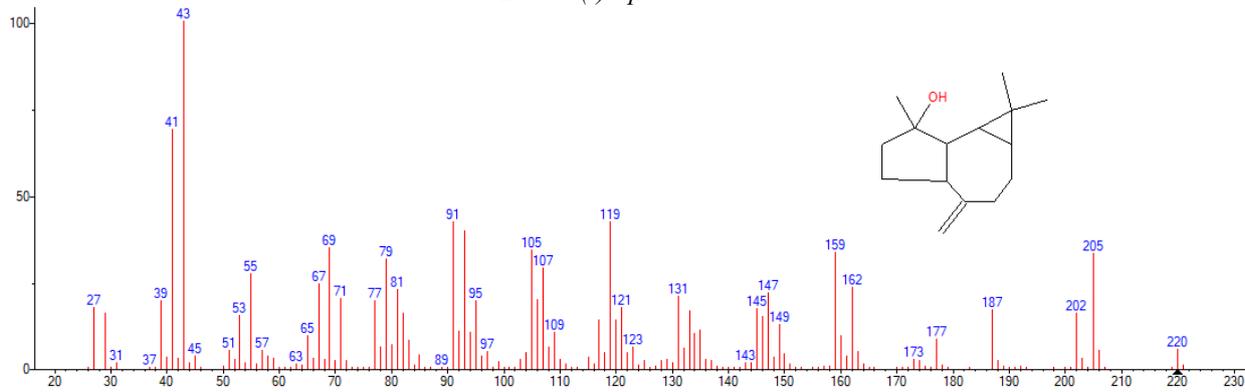
(mainlib) Spiro[4.5]decan-7-one, 1,8-dimethyl-4-(1-methylethyl)-

Name: Spiro[4.5]decan-7-one, 1,8-dimethyl-4-(1-methylethyl)-

Formula: C₁₅H₂₆O

MW: 222 Exact Mass: 222.198365 CAS#: 39510-26-4 NIST#: 185861 ID#: 3721 DB: mainlib

62. (-)-Spathulenol



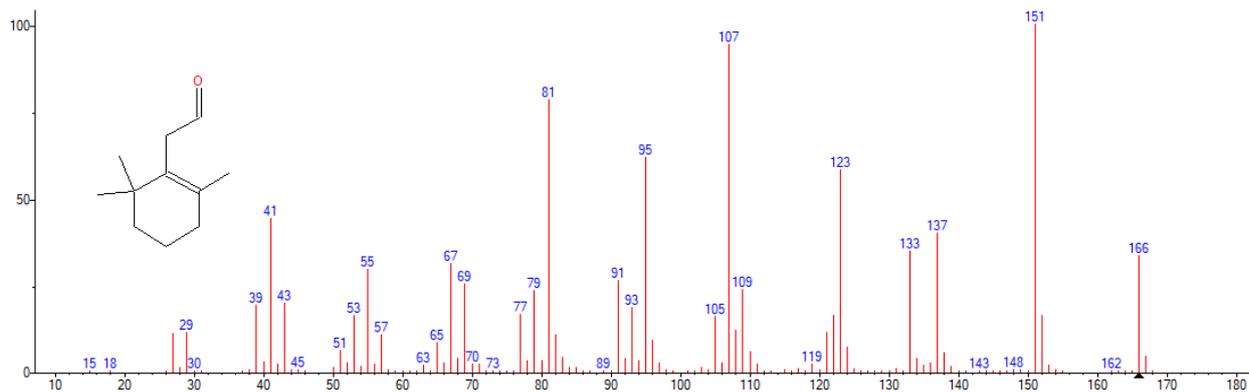
(mainlib) (-)-Spathulenol

Name: (-)-Spathulenol

Formula: C₁₅H₂₄O

MW: 220 Exact Mass: 220.182715 CAS#: 77171-55-2 NIST#: 90666 ID#: 5991 DB: mainlib

63. 1-Cyclohexene-1-acetaldehyde, 2,6,6-trimethyl-



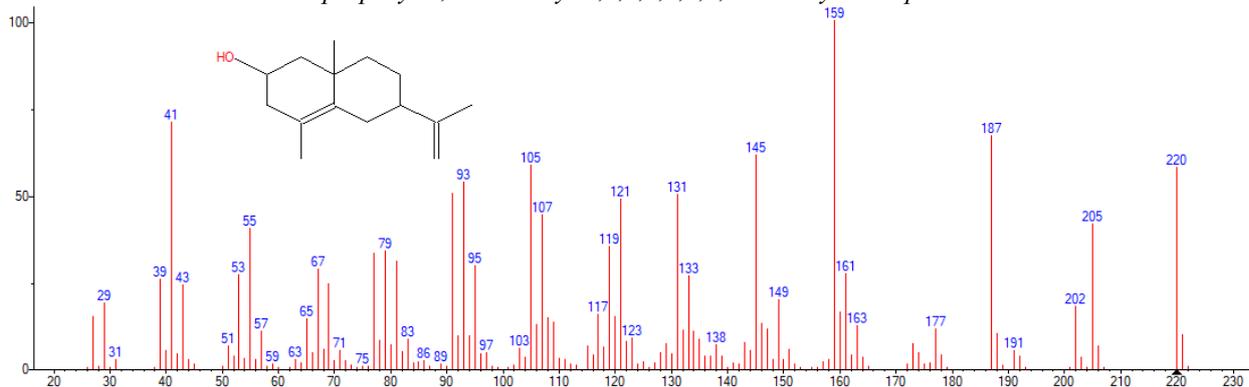
(mainlib) 1-Cyclohexene-1-acetaldehyde, 2,6,6-trimethyl-

Name: 1-Cyclohexene-1-acetaldehyde, 2,6,6-trimethyl-

Formula: C₁₁H₁₈O

MW: 166 Exact Mass: 166.135765 CAS#: 472-66-2 NIST#: 238242 ID#: 125112 DB: mainlib

64. 6-Isopropenyl-4,8a-dimethyl-1,2,3,5,6,7,8,8a-octahydro-naphthalen-2-ol



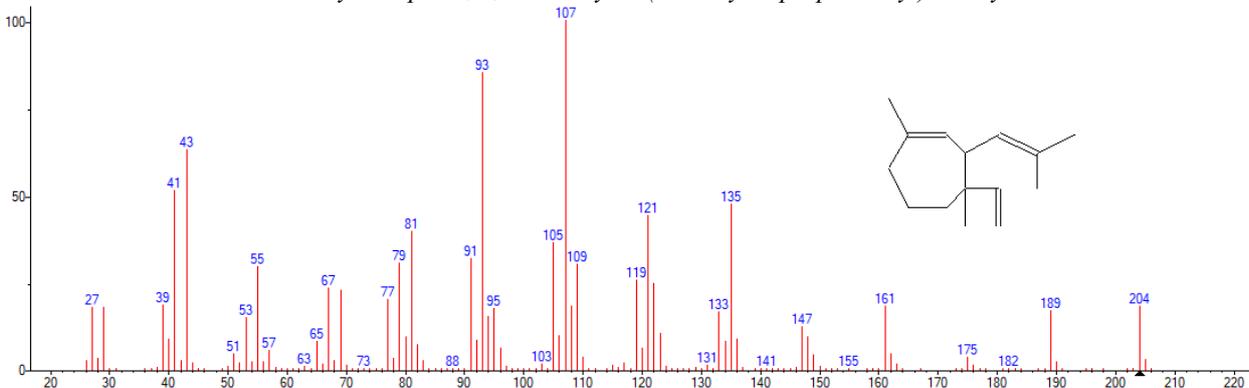
(mainlib) 6-Isopropenyl-4,8a-dimethyl-1,2,3,5,6,7,8,8a-octahydro-naphthalen-2-ol

Name: 6-Isopropenyl-4,8a-dimethyl-1,2,3,5,6,7,8,8a-octahydro-naphthalen-2-ol

Formula: C₁₅H₂₄O

MW: 220 Exact Mass: 220.182715 NIST#: 189102 ID#: 131103 DB: mainlib

65. 1-Cycloheptene, 1,4-dimethyl-3-(2-methyl-1-propene-1-yl)-4-vinyl-



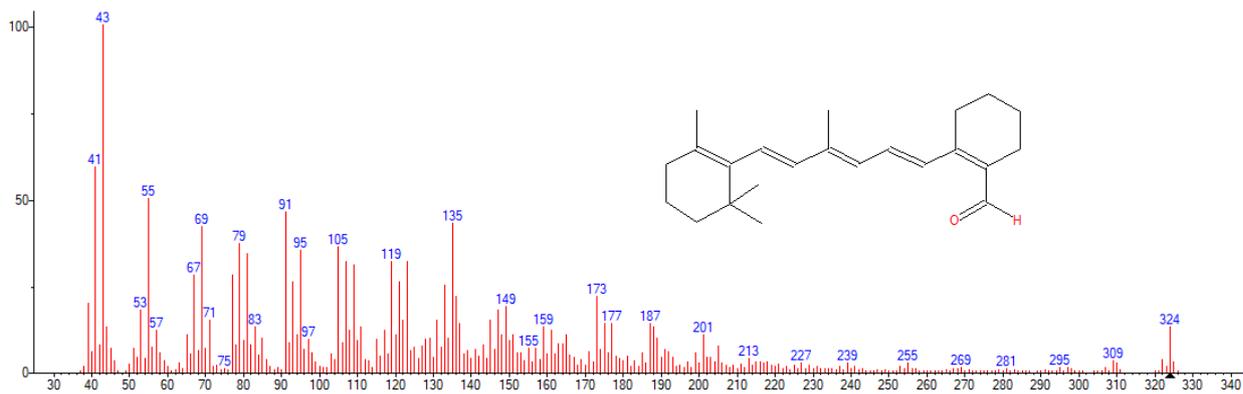
(mainlib) 1-Cycloheptene, 1,4-dimethyl-3-(2-methyl-1-propene-1-yl)-4-vinyl-

Name: 1-Cycloheptene, 1,4-dimethyl-3-(2-methyl-1-propene-1-yl)-4-vinyl-

Formula: C₁₅H₂₄

MW: 204 Exact Mass: 204.1878 NIST#: 159386 ID#: 75590 DB: mainlib

66. 2-[4-methyl-6-(2,6,6-trimethylcyclohex-1-enyl)hexa-1,3,5-trienyl]cyclohex-1-en-1-carboxaldehyde



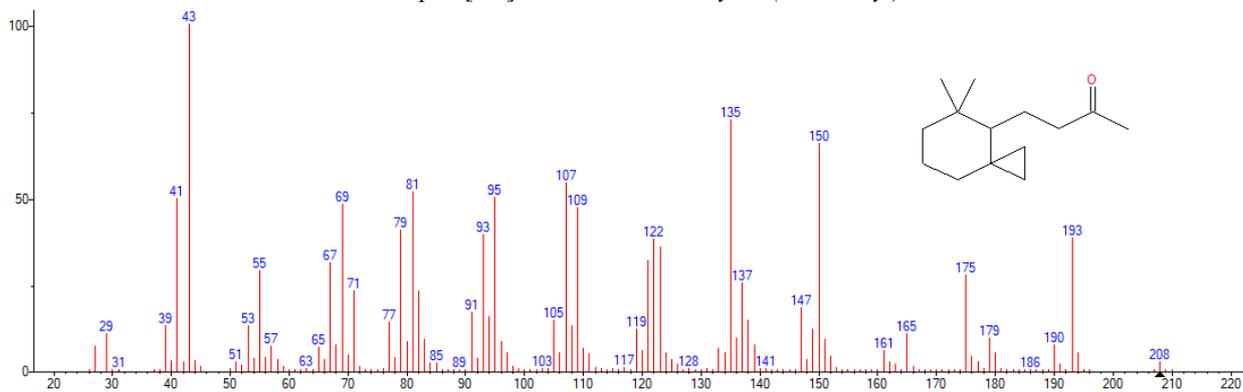
(mainlib) 2-[4-methyl-6-(2,6,6-trimethylcyclohex-1-enyl)hexa-1,3,5-trienyl]cyclohex-1-en-1-carboxaldehyde

Name: 2-[4-methyl-6-(2,6,6-trimethylcyclohex-1-enyl)hexa-1,3,5-trienyl]cyclohex-1-en-1-carboxaldehyde

Formula: C₂₃H₃₂O

MW: 324 Exact Mass: 324.245316 NIST#: 216092 ID#: 5606 DB: mainlib

67. Spiro[2.5]octane, 5,5-dimethyl-4-(3-oxobutyl)-



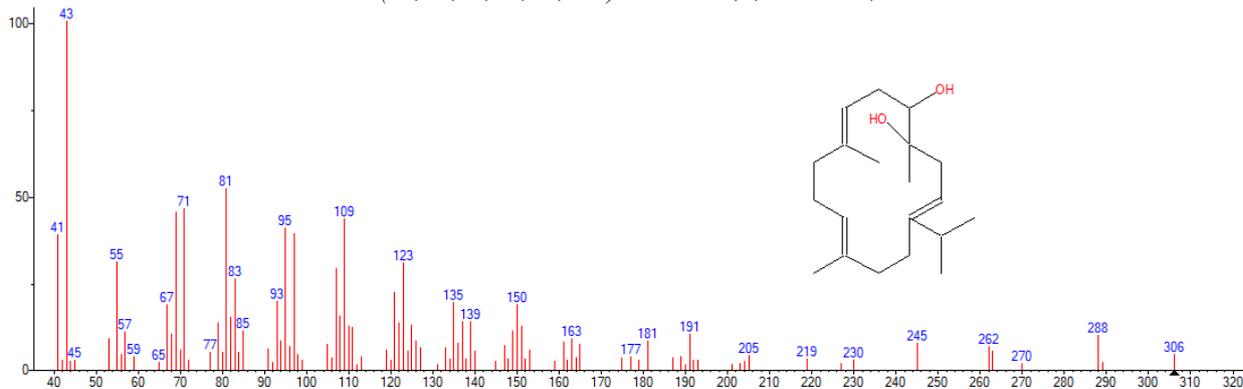
(mainlib) Spiro[2.5]octane, 5,5-dimethyl-4-(3-oxobutyl)-

Name: Spiro[2.5]octane, 5,5-dimethyl-4-(3-oxobutyl)-

Formula: C₁₄H₂₄O

MW: 208 Exact Mass: 208.182715 CAS#: 77143-32-9 NIST#: 197082 ID#: 11417 DB: mainlib

68. (1S,2E,4S,5R,7E,11E)-Cembra-2,7,11-trien-4,5-diol



(mainlib) (1S,2E,4S,5R,7E,11E)-Cembra-2,7,11-trien-4,5-diol

Name: (1S,2E,4S,5R,7E,11E)-Cembra-2,7,11-trien-4,5-diol

Formula: C₂₀H₃₄O₂

MW: 306 Exact Mass: 306.25588 NIST#: 140923 ID#: 8949 DB: mainlib

69. 4-(1-Acetyl-cyclopentyl)-but-3-en-2-one

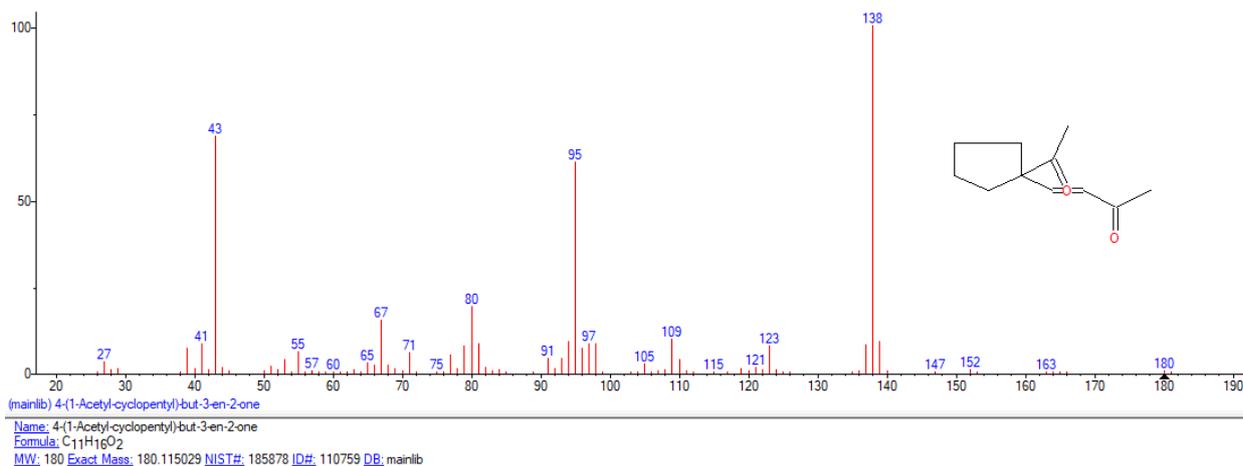


Рис. 2. Структуры наиболее представительных соединений корневища аира болотного

Приведенный перечень идентифицированных соединений, наличие их структурных формул существенно углубили наши знания об особенностях химического состава органического вещества аира болотного, что является важным для уяснения специфики физиологического действия препаратов на основе изученного лекарственного сырья.

Выводы:

1. Выполнена исчерпывающая экстракция порошка корневища аира болотного, для которого проведены исследования методом хромато-масс-спектрометрии.
2. Определены качественный состав и количественное содержание идентифицированных в составе экстракта соединений, получены масс-спектры и структурные формулы последних.
3. Рассчитан структурно-групповой состав экстракта, основу которого определяют углеводороды, кетоны, альдегиды, спирты весьма сложного строения, что позволило объяснить специфику физиологического действия препаратов на основе корневища аира болотного.

Литература

1. Балицкий К.П., Коронцова А.П. Лекарственные растения и рак. Киев: Наукова думка, 1982. 375 с.
2. Виноградов Т.А., Гажев Б.Н. Практическая фитотерапия. Серия «Полная энциклопедия». М.: «ОЛМА-ПРЕСС»; СПб.: Издательский дом «Нева», «Велери СПД», 1998. 640 с.: ил.
3. Георгиевский В.П., Комиссаренко Н.Ф., Дмитрук С.Е. Биологически активные вещества лекарственных растений. Новосибирск: Наука, 1990. 328 с.
4. Горяев М.И., Шарипова Ф.С. Растения, обладающие противоопухолевой активностью. Алма-Ата: Наука, 1993. 172 с.
5. Никонов Г.К., Мануйлов Б.М. Основы современной фитотерапии. ОАО Издательство «Медицина», 2005. 520 с.: ил.
6. Новейшая энциклопедия домашней медицины. М.: Престиж Бук, 2012. 480 с.: илл.
7. Попов А.П. Лекарственные растения в народной медицине. Киев: Здоровье, 1970. 313 с.
8. Пронченко Г.Е. Лекарственные растительные средства. М.: ГЭОТАР-МЕД, 2002. 283 с.
9. Середин Р.М., Соколов С.Д. Лекарственные растения и их применение. Ставрополь, 1973. 342 с.
10. Ушбаев К.У., Курамысова И.И., Аксанова В.Ф. Целебные травы. Алма-Ата: Кайнар, 1994. 215 с.

References

1. Balickij KP, Koroncova AP. Lekarstvennyye rasteniya i rak [Medicinal plants and cancer]. Kiev: Naukova dumka; 1982. Russian.
2. Vinogradov TA, Gazhev BN. Prakticheskaya fitoterapiya [Practical herbal medicine]. Seriya «Polnaya ehnciklopediya». Moscow: «OLMA-PRESS»; Sankt-Peterburg: Izdatel'skij dom «Neva», «Veleri SPD»; 1998. Russian.
3. Georgievskij VP, Komissarenko NF, Dmitruk SE. Biologicheski aktivnye veshchestva lekarstvennyh rastenij [Biologically active substances of medicinal plants]. Novosibirsk: Nauka; 1990. Russian.
4. Goryaev MI, SHaripova FS. Rasteniya, obladayushchie protivoopuholevoj aktivnost'yu [Plants with antitumor activity]. Alma-Ata: Nauka; 1993. Russian.
5. Nikonov GK, Manujlov BM. Osnovy sovremennoj fitoterapii [Fundamentals of modern herbal medicine]. ОАО Izdatel'stvo «Medicina»; 2005. Russian.

6. Novejshaya ehnciklopediya domashnej mediciny [The newest encyclopedia of home medicine]. Moscow: Prestizh Buk; 2012. Russian.
7. Popov AP. Lekarstvennyye rasteniya v narodnoj medicine [medicinal plants In folk medicine]. Kiev: Zdorov'e; 1970. Russian.
8. Pronchenko GE. Lekarstvennyye rastitel'nye sredstva [Medicinal herbal remedies]. Moscow: GEHO-TAR–MED; 2002. Russian.
9. Seredin RM, Sokolov SD. Lekarstvennyye rasteniya i ih primeneniye [Medicinal plants and their application]. Stavropol'; 1973. Russian.
10. Ushbaev KU, Kuramysova II, Aksanova VF. Celebnye travy [Medicinal herbs]. Alma-Ata: Kajnar; 1994. Russian.

Библиографическая ссылка:

Платонов В.В., Хадарцев А.А., Сухих Г.Т., Дунаев В.А., Наумова Э.М. Хромато-масс-спектрометрия этанольного экстракта аира болотного (*Acorus Calamus L*; семейство Ароидные – *Araceae*) // Вестник новых медицинских технологий. Электронное издание. 2018. №6. Публикация 3-5. URL: <http://www.medtsu.tula.ru/VNMT/Bulletin/E2018-6/3-5.pdf> (дата обращения: 22.11.2018). DOI: 10.24411/2075-4094-2018-16284. *

* номера страниц смотреть после выхода полной версии журнала: URL: <http://medtsu.tula.ru/VNMT/Bulletin/E2018-6/e2018-6.pdf>