

ПРИМЕНЕНИЕ ИК-СПЕКТРОСКОПИИ В АНАЛИЗЕ ЛЕКАРСТВЕННОГО РАСТИТЕЛЬНОГО СЫРЬЯ

О. В. Тринеева, М. А. Рудая, А. А. Гудкова, А. И. Сливкин

ФГБОУ ВО «Воронежский государственный университет»

Поступила в редакцию 02.07.2018 г.

Аннотация. ИК-спектроскопия является фундаментальным методом исследования структуры химических соединений. В настоящее время имеются доступные базы ИК-спектров технических и пищевых добавок, лекарственных препаратов, поли- и мономеров, пластификаторов, ядохимикатов, растворителей, нефтепродуктов, токсичных веществ, стероидов и других соединений, имеющих, в основном, однокомпонентный состав. Однако отсутствует достоверная, полная и доступная база ИК-спектров пищевых продуктов и лекарственного растительного сырья, имеющих многокомпонентный состав, необходимая для решения конкретных практических задач. Методом ИК-Фурье спектроскопии нарушенного полного внутреннего отражения проведена идентификация лекарственного растительного сырья различных видов и морфологических групп (на примере плодов облепихи крушиновидной, травы сушеницы топяной, корневищ с корнями синюхи голубой, травы фиалки трехцветной и венчиков цветков коровьяка скипетровидного). Выявленные в спектре специфические частоты можно считать характеристическими для определенного вида и использовать их в качестве маркеров при определении подлинности растительного сырья методом ИК-спектроскопии. Установлено образование водородных связей и их характеристики (размер и энергия) между молекулами биологически активных веществ в изучаемом лекарственном растительном сырье. Исследована возможность и установлена перспективность применения метода ИК-спектроскопии для экспресс-диагностики подлинности изучаемого лекарственного растительного сырья. В настоящее время принято считать, что БИК является более специфичным, позволяющим точно идентифицировать соединение по «отпечаткам пальцев». Применение метода БИК для целей оценки подлинности и доброкачественности исследуемого лекарственного растительного сырья требует проведения более углубленных исследований.

Ключевые слова: плоды облепихи крушиновидной, трава сушеницы топяной, корневище с корнями синюхи голубой, трава фиалки трехцветной, венчики цветков коровьяка скипетровидного, ИК-спектроскопия, водородная связь, маркерные полосы поглощения, БИК-спектроскопия.

Метод ИК-спектроскопии (ИКС) основан на поглощении электромагнитного излучения инфракрасного диапазона молекулами изучаемого вещества, при котором происходит возбуждение колебательных и вращательных состояний. ИКС является фундаментальным методом исследования структуры химических соединений. ИК-спектры поглощения, отражения или рассеяния несут чрезвычайно богатую информацию о составе и свойствах пробы. Сопоставляя ИК-спектр исследуемого «неизвестного» образца со спектрами известных, можно идентифицировать исследуемый, определить основной состав пищевых продуктов, обнаружить примеси, провести фракционный или структур-

но-групповой анализ. Методом корреляционного анализа по ИК-спектру пробы также можно определить его физико-химические или биологические характеристики, например, всхожесть семян, калорийность пищевых продуктов, химический состав, размер гранул, плотность и т.д. В настоящее время имеются доступные базы ИК-спектров технических и пищевых добавок, лекарственных препаратов, поли- и мономеров, ПАВ, пластификаторов, ядохимикатов, растворителей, нефтепродуктов, токсичных веществ, стероидов и других соединений, имеющих, в основном, однокомпонентный состав. Однако отсутствует достоверная, полная и доступная база ИК-спектров пищевых продуктов и лекарственного растительного сырья (ЛРС), имеющих многокомпонентный состав, необходимая для решения конкретных практических задач [1-7].

Известно, что растения способны накапливать разные БАВ. Для их идентификации широко используются как сепарационные, так и спектральные методы, при этом идентификация предполагает выделение суммы экстрактивных веществ и, как правило, выделение целевой фракции. В то же время представляет интерес использование для этих целей экспресс-методов неразрушающего контроля, которые позволяют проводить идентификацию сырья в максимально короткое время. Для идентификации ЛРС может быть более объективным использование ИК-спектроскопии с Фурье преобразованием. Следует отметить, что использование данного метода в анализе ЛРС крайне мало распространено, лишь в некоторых работах приводятся результаты таких исследований [2-7]. Поскольку получать таблетки измельченного ЛРС с калия бромидом достаточно сложно, представляется возможным использование метода нарушенного полного внутреннего отражения (НПВО). При этом в качестве объекта исследования может выступать измельчённое до необходимых размеров ЛРС. В связи с этим представляется актуальным изучение возможности использования метода ИК-спектроскопии с Фурье преобразованием для оценки подлинности ЛРС.

Целью настоящего исследования являлось изучение возможности применения ИК – спектроскопии для идентификации лекарственного растительного сырья различных видов и морфологических групп.

МЕТОДИКА ЭКСПЕРИМЕНТА

Объектом исследования являлось высушенное измельченное ЛРС различных морфологических групп следующих видов: плоды облепихи крушиновидной (1), произрастающие на европейской территории России, заготовленные в 2017 году на базе Ботанического сада биологического факультета МГУ им. М.В. Ломоносова; трава сушеницы топяной (2), корневище с корнями синюхи голубой (3), трава фиалки трехцветной (4) и венчики цветков коровяка скипетровидного (5), заготовленные самостоятельно в экологически безопасных местах в окрестностях г. Воронежа в 2017 году от дикорастущих растений. При сборе руководствовались правилами заготовки различных морфологических групп сырья.

Изучение подлинности объектов исследования методом ИКС проведены с помощью научнотехнической базы Центра коллективного пользования научным оборудованием ВГУ. ИК-спектры

были получены без предварительной пробоподготовки на приборе ИК-Фурье спектрометр Bruker VERTEX 70 (Германия) методом НПВО и последующей обработкой программой OMNIC или GRAMS 4/32. Вид полученных спектров представлен на рис. 1.



Рис. 1. Вид полученных ИК-спектров ЛРС исследуемых видов

Согласно выдвинутой научной гипотезе изучение полученных ИК-спектров ЛРС покажет отличия в рисунке и степени интенсивности полос поглощения для каждого вида сырья в виду различий в химическом составе, так как выбранные объекты являются представителями не только разных видов, но и разных семейств (таблица 1).

ОБСУЖДЕНИЕ РЕЗУЛЬТАТОВ

Диапазон основных колебаний молекул, называемый «средний инфракрасный», лежит между волновыми числами от 4000 до 400 см⁻¹. Во всех спектрах исследованных образцов обнаружены полосы поглощения, отражающие общий химический состав.

В ИК-спектрах порошков изучаемого ЛРС можно выделить характерные для ароматической части флавоноидов полосы поглощения: 3385-2850 см⁻¹ (фенольные оксигруппы), 1680-1615 см⁻¹ (карбонильная группа γ -пирона), 1620-1470 см⁻¹ (скелетные колебания ароматических колец), максимумы при 2950-2880 см⁻¹ свидетельствуют о наличии метоксильных групп. С наличием фенольных соединений связаны также полосы поглощения, обусловленные валентными колебаниями свободных групп -ОН (частоты 3750-3700 см⁻¹), внутри- и межмолекулярных водородных связей в димерах и полимерах (частоты 3400-3200 см⁻¹). Характерные пики отмечаются в области от 2000 до 1380 см⁻¹. Главная полоса при 1657-1628 см⁻¹ вызвана двойной связью кислородного цикла, который сопряжен с бензольным ядром. Некоторые полосы в этом диапазоне характерны

Характеристика объектов исследования

№ п/п	Объект исследования	Семейство	Химический состав
1	Плоды облепихи крушиновидной (<i>Hippophae rhamnoides fructus</i>)	Лоховые (<i>Eleagnaceae</i>)	Химический состав плодов облепихи представлен, в первую очередь, жирным маслом, богатым каротиноидами, токоферолами, фосфолипидами, эссенциальными жирными кислотами, витаминами различных групп (С, В ₁ , В ₂ , РР), органическими кислотами, сахарами, флавоноидами, аминокислотами, дубильными и другими БАВ [8]
2	Трава сушеницы топяной (<i>Gnaphalii uliginosi herba</i>)	Астровые (<i>Asteraceae</i>)	Основные действующие вещества - флавоноиды (гнафалозид А - 40%, гнафалозид Б - 32%, 7-О-β-D-глюкопиранозид skutellарина - 6% [9])
3	Корневище с корнями синюхи голубой (<i>Polemonii coerulei rhizomata cum radicibus</i>)	Синюховые (<i>Polemoniaceae</i>)	Тритерпеновые сапонины (20-30%), производные группы β-амирина - полемониозиды. Агликоны полемониозидов содержат в себе эфиры тритерпеновых спиртов (лонгиспиогенол, АR ₁ -барригенол, R ₁ -барригенол, камеллиагенин Е и др.) и уксусной, тиглиновой, ангеликовой, α-метилмасляной, пропионовой и изобутиловой кислот. В сырье содержатся также смолы, органические кислоты, кумарины, флавоноиды, жирное масло, крахмал [10]
4	Трава фиалки трехцветной (<i>Violae tricoloris herba</i>)	Фиалковые (<i>Violaceae</i>)	Основными группами биологически активных веществ (БАВ) являются полисахариды, сапонины и флавоноиды, антоциановые гликозиды: дельфинидина, пеонидина, виоланин, последний состоит из дельфинидина, глюкозы, рамнозы и β-оксикоричной кислоты [11]
5	Венчики цветков коровяка скипетровидного (<i>Verbasci densiflori flores</i>)	Норичниковые (<i>Scrophulariaceae</i>)	Основными компонентами являются полисахариды, флавоноиды (нарингенин) [12]

для бензольного ядра. У всех флавоноидов два адсорбционных максимума - около 1580 см⁻¹ и 1520 см⁻¹, которые имеют большую и среднюю интенсивность. Полоса 1720 см⁻¹ характерна для ацилированной кофейной кислоты, при 1690 см⁻¹ - н-кумаровой, 1726 см⁻¹ - уксусной [1-7].

Сильный пик при 1460-1440 см⁻¹ - деформационные колебания -СН- в -СН₂-, пик слабой интенсивности при 1440 см⁻¹ - совместная полоса валентных колебаний С-О и плоскостных деформационных колебаний -ОН в -СООН. Необходимо отметить группу слабых полос в области от 1200 см⁻¹ до 1400 см⁻¹, что характерно для колебаний в -СН₂- карбоновых кислот, число которых дает сведения о длине углеродной цепи.

О присутствии углеводов свидетельствуют полосы поглощения, обусловленные валентными колебаниями -СН₂-групп при частоте 2930 см⁻¹. Колебания, связанные с группой С-О-Н: R-О-Н (частоты 1450-1250 см⁻¹, 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 груп-

пы 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) [1-7].

Область спектра от 1300 до 625 см⁻¹ известна как область «отпечатков пальцев». Сюда попадают полосы поглощения, отвечающие колебаниям групп С-С, С-О, С-N, а также деформационные колебания. В результате сильного взаимодействия этих колебаний отнесение полос поглощения к отдельным связям невозможно. Однако, весь набор полос поглощения в этой области является индивидуальной характеристикой соединения. Совпадение всех полос неизвестного (исследуемого) вещества со спектром заведомо известного эталона является прекрасным доказательством их идентичности.

Анализ спектров показывает, что их рисунок строго специфичен для каждого вида сырья (рис. 1, табл. 2). Тем не менее, у всех видов исследуемого ЛРС в ИК- спектрах имеются сходные области полос поглощения по положению, но различающиеся своей интенсивностью. Отнесение характеристических частот поглощения в ИК-спектрах ЛРС исследуемых видов приведено в табл. 2 и 3.

По данным авторов [13-19], полосы поглощения в интервале 3650-3200 см⁻¹ характеризуют наличие группы -ОН в межмолекулярных водородных связях. Это обусловлено тем, что при об-

Таблица 2
Характеристические частоты поглощения в полученных ИК-спектрах изучаемого ЛРС

ЛРС Диапазон частот	1*	2	3	4	5
	ν, см ⁻¹ (на спектрах)				
3600-3200	3279	3317	3300	3296	3313
3013-3009	3009	-	-	-	-
2960-2850	2922	2922	2972	2924	2920
	-	-	2943	-	-
	2852	2853	2887	-	2850
	-	-	2840	-	-
1750-1730	1740	-	-	-	-
1716-1713	1713	1701	1716	1720	1709
1680-1620	1651	-	-	-	1657
	1635	-	-	-	1628
2000-1600	-	1599	1596	1599	1603
1556-1512	1547	1516	1512	1512	1516
1460-1450	1443	1452	-	-	1444
	1418	-	-	-	1410
1380-1300	1375	1358	1358	1354	1377
	1321	-	1313	1310	-
1280-1010	1240	1259	1259	1252	1259
	-	-	-	1220	1230
	1169	1157	-	-	1203
	1076	1041	1040	1041	1041
	1028	-	-	-	-
918-912	-	-	924	922	922
840-800	885	-	874	874	877
	-	814	829	826	835
750-720	-	-	777	777	-
	721	-	-	-	-
-	609	-	552	552	-
	521	520	519	518	517
	465	457	-	-	-
	-	-	422	424	420

* - здесь и далее номер образца соответствует виду, описанному в экспериментальной части работы

разовании водородной связи силовая постоянная связи О–Н уменьшается, а полоса может сдвигаться до 3500-2500 см⁻¹ [13-19]. Чем прочнее возникающее взаимодействие, тем ниже частота колебаний. Полосы поглощения в диапазоне 3317-3279 см⁻¹ на ИК-спектрах ЛРС исследуемых видов (рис. 1) обусловлены валентными колебаниями фенольного гидроксила в межмолекулярных водородных связях. На основании полученных данных были рассчитаны термодинамические характеристики [13-19] выявленных связей, таких как энергия (E_H) и длина (R), которые представлены в табл. 4.

Согласно данным авторов [13,14,19-21], 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 [13,14,19-21]. Полифенольные БАВ в ЛРС, по данным ИКС, образуются 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 [1,13,14,19-21]. 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 видов ЛРС с различной степенью интенсивности присутствуют полосы поглощения в указанных диапазонах частот (табл. 3). Изучение полученных ИК-спектров показало также, что у каждого вида имеются отличия в рисунке и степени интенсивности полос поглощения, что, по-видимому, определяется особенностями химического состава сырья (табл. 1 и 5). Выявленные в спектре специфические частоты можно считать характеристическими для определенного вида ЛРС и использовать их в качестве маркеров при определении подлинности и видовой принадлежности методом ИКС (рис. 1 и табл. 5).

Для ИК-спектров плодов облепихи крушиновидной было характерно наличие специфических полос поглощения при 3009, 1740, 1651, 1635, 1443, 1169, 1028, 721, 465 см⁻¹; для травы сушеницы топяной - 1452, 1157, 457 см⁻¹; для корневищ с корнями синюхи голубой - 2943, 2840, 1313, 777 см⁻¹; для травы фиалки трехцветной – 1310, 1220, 777 см⁻¹; для венчиков цветков коровяка скипетровидного – 1657, 1628, 1444, 1410, 1230, 420 см⁻¹.

Использование БИК-метода (спектрометрия в ближней инфракрасной области), зарекомендовавшего себя с положительной стороны в анализе фармацевтических субстанций и готовых лекарственных препаратов, характеризующихся относительно постоянными характеристиками, становится все более популярным. БИК-спектрометрия - метод, основанный на способности веществ поглощать электро-магнитное излучение в диапазоне частот от 12500 до 4000 см⁻¹. В настоящее время принято считать, что БИК является более специфичным, позволяющим точно идентифицировать соединение по «отпечаткам пальцев». Прогрессивные фармацевтические компании-производители лекарственных средств давно используют БИК не только для установления подлинности своей продукции, но и для оценки накопления раз-

Таблица 3

Отнесение характеристических частот поглощения в полученных ИК-спектрах исследуемого ЛРС

ν , см ⁻¹ (на спектрах)	Интенсивность	Функциональная группа	Тип колебаний и соответствующий структурный фрагмент	Диапазон частот соответствующей функциональной группы [1,13-18]	Интенсивность [1,13-18]
3317-3279	Сильная	Фенольный гидроксил в межмолекулярных водородных связях	валентные колебания О-Н в межмолекулярных водородных связях	3650-3450 (димеры); 3400-3200 (полиассоциаты)	Сильная
2972-2920	Сильная	C-CH ₃ C-CH ₂	валентные колебания связей	2960-2850	Сильная или очень сильная
1452-1443	Средняя		асимметрические деформационные колебания групп	1460-1450	
1377-1354			симметрические деформационные колебания групп	1380-1300	
1321-1310					
1657-1628 1603-1596	Сильная	-HC=CH-	валентные колебания связи C=C ароматического ядра	группа полос 2000-1600	Слабая
1259-1240 1203-1157 1076-1028	Средняя Сильная	C-OH	симметрические и асимметрические колебания валентных связей C-O	1280-1010	Сильная
1076-1040 835-814	Сильная	Структура пирана	-	1097 813	Очень сильная
2887-2850 1657-1628	Сильная Сильная	-CH ₂	валентное, СН	2853±10	Сильная
1556-1512	Средняя	(NH ₃ ⁺)	деформационные, аминокислотная полоса I	1660-1610	Слабая
			деформационные, аминокислотная полоса II	1550-1485	Средняя
1452-1410	Средняя	-CH ₃	деформационное асимметрическое, СН	1450±20	Средняя
777-721	Средняя	-CH ₂	(-CH ₂ -) _n , скелетные	750-720	Средняя
1657-1628	Сильная	-C=C-	валентное, C=C, сопряженное	1680-1620	Переменная
Группа полос	Слабая	C-OH	связанная -ОН группа	3300-2500	Слабая
1377-1310	Сильная	-C-O-	валентное, симметрическое, карбоксилат-ион	1400-1300	Средняя
1740	Сильная	RCOOR RCOR	валентное, C=O, насыщенная	1750-1730	Сильная
885-874	Средняя	=CH	деформационное, =C-H	885-855	Сильная
835-814		-C=C- (цис-)	валентное, СН	840-800	Слабая
924-922	Средняя	-C-O-C-	эферы	918	Очень слабая
777-721	Средняя	C-H	деформационное, -C-H	745-705	Сильная

Таблица 4

Термодинамические характеристики межмолекулярных водородных связей БАВ в ЛРС изучаемых видов по данным ИКС

№ п/п	ЛРС	Частота, см ⁻¹	$\Delta \nu$,* см ⁻¹	E _н		R, Å
				кДж/моль	ккал/моль	
1	Плоды облепихи крушиновидной	3279	421	29.77	7.11	2.74
2	Трава сушеницы топяной	3317	383	27.09	6.47	2.75
3	Корневище с корнями синюхи голубой	3300	400	28.30	6.76	2.75
4	Трава фиалки трехцветной	3296	404	28.57	6.82	2.75
5	Венчики цветков коровяка скипетровидного	3313	387	27.37	6.54	2.75

$\Delta \nu$ * - смещение частоты поглощения. Формулы расчета термодинамических характеристик приведены в работах [13,14,19].

личных БАВ-маркеров в ЛРС при культивировании его в промышленных масштабах («Бионорика SE», Германия) и определения рационального времени заготовки с максимальным содержанием компонентов, отвечающих за фармакологическую активность будущих лекарственных раститель-

ных препаратов. Поглощение в БИК-диапазоне связано, как правило, с обертонами основных колебательных частот связей C-H, N-H, O-H и S-H и их комбинациями. Наиболее информативным диапазоном является область от 6000 до 4000 см⁻¹ [1-7]. При этом необходимым условием является

создание обработки целой серии спектров анализируемого соединения или лекарственного препарата. В связи с тем, что химический состав ЛРС

Таблица 5
Маркерные полосы поглощения в полученных ИК-спектрах ЛРС изучаемых видов

ЛРС № п/п	v, см ⁻¹ (на спектрах)				
	1	3009	-	-	-
2	-	-	2943	-	-
3	2852	2853	2887	-	2850
4	-	-	2840	-	-
5	1740	-	-	-	-
6	1651	-	-	-	1657
7	1635	-	-	-	1628
8	-	1599	1596	1599	1603
9	1443	1452	-	-	1444
10	1418	-	-	-	1410
11	1321	-	1313	1310	-
12	-	-	-	1220	1230
13	1169	1157	-	-	1203
14	1028	-	-	-	-
15	-	-	924	922	922
16	885	-	874	874	877
17	-	814	829	826	835
18	-	-	777	777	-
19	721	-	-	-	-
20	609	-	552	552	-
21	465	457	-	-	-
22	-	-	422	424	420

очень вариабелен, использование БИК метода, как показали наши исследования, может быть затруднительным (рис. 2). Полученные данные требуют дальнейших углубленных исследований.

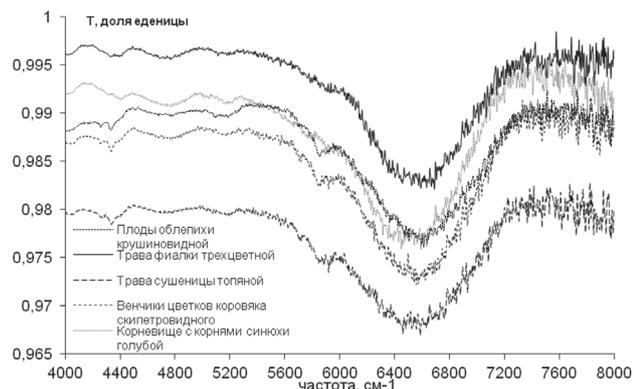


Рис. 2. Вид полученных БИК-спектров ЛРС исследуемых видов

ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Проведенные исследования показали, что с помощью метода ИК-Фурье спектроскопии НПВО можно получить индивидуальные ИК-спектры ЛРС различных морфологических групп. Экспериментально установлено, что рисунок ИК-спектра и интенсивность полосы поглощения яв-

ляются строго специфичными для каждого вида сырья и позволяют идентифицировать видовую принадлежность при введении в библиотеку прибора стандартного спектра образца. Методом ИК – спектроскопии установлено образование водородных связей и их характер между молекулами БАВ в изучаемом ЛРС. Полученные результаты свидетельствуют о перспективности используемого метода для экспресс-оценки подлинности ЛРС. Применение метода БИК для этих целей требует проведения более углубленных исследований.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Казицына Л.А., Куплетская Н.Б. Применение УФ-, ИК- и ЯМР- спектроскопии в органической химии. Москва, «Высшая школа», 1971, 264 с.
2. Голубцова Ю.В. // Техника и технология пищевых производств. 2017. Т. 45, № 2. С. 126-132.
3. Авилова И.А. // Технологии пищевой и перерабатывающей промышленности АПК-продукты здорового питания. 2016. №4. С. 71-74.
4. Выговтов А.А. // Ученые записки СПб филиала РТА. 2010. №1 (35). С. 193-196.
5. Мухутдинов Р.Р., Пилипенко Т.В. // Международная научно-практическая конференция, посвященная памяти Василия Матвеевича Горбатова. 2017. № 1. С. 243.
6. Генералов Е.А. // Auditorium. 2015. № 4 (08). С. 38-54.
7. Съедин А.В., Орловская Т.В., Гаврилин М.В. // Современные проблемы науки и образования. 2014. № 1. С. 367.
8. Тринеева О.В. Комплексное исследование содержания и специфического профиля биологически активных веществ плодов облепихи крушиновидной. Воронеж, Издательский дом ВГУ, 2016, 224 с.
9. Николашкин А.Н., Селезнев Н.Г., Попов Д.М. // Здоровье и образование в XXI веке 2017. Vol. 19. №11. <http://dx.doi.org/10.26787/ny-dha-2226-7425-2017-19-11>.
10. Ким В.Э., Правдюк М.Ф., Коновалов Д.А. // Вестник ВГУ, Серия: Химия. Биология. Фармация. 2015. № 1. С. 129-131.
11. Мартынов А.М., Даргаева Т.Д., Чупарина Е.В. // Сибирский медицинский журнал. 2010. №5. С. 121-125.
12. Копнин А.А. Автореф. дисс. канд. фарм. наук. Москва, 2007, 24 с.
13. Водородная связь. Под ред. В.М. Чулановского. Москва, Мир, 1964, 462 с.

14. Водородная связь. Под ред. Н.Д. Соколова, В.М. Чулановского. Москва, Наука, 1964, 340 с.

15. Литтл Л. Инфракрасные спектры адсорбированных молекул / Под ред. Лыгина В.И. Москва, Мир, 1969, 514 с.

16. Установление структуры органических соединений физическими и химическими методами / Под ред. Вайсбергера А. Москва, Химия, 1967, 532 с.

17. Наканиси К. Инфракрасная спектроскопия и строение органических соединений. Москва, Мир, 1965, 216 с.

18. Отто М. Современные методы аналитической химии. Москва, Мир, 2003, С. 151-290.

19. Чечета О.В., Сафонова Е.Ф., Сливкин А.И. // Вестник ВГУ. Серия: Хи-мия. Биология. Фармация. 2010. № 2. С. 164-167.

20. Чечета О.В. Дисс. канд. фарм. наук. Курск, 2009, 22 с.

21. Тринеева О.В. Дисс. докт. фарм. наук. Москва, 2017, 48 с.

*Воронежский государственный университет
Тринеева О. В., доктор фармацевтических наук, доцент кафедры фармацевтической химии и фармацевтической технологии

Тел. +7 906 583-63-90

E-mail: trineevaov@mail.ru

*Voronezh state university
Trineeva O. V., PhD., DSci., Associate Professor of the Department of Pharmaceutical Chemistry and Pharmaceutical Technology

Ph.: +7 906 583-63-90

E-mail: trineevaov@mail.ru

Рудая М. А., аспирант 3-ого года

E-mail: margaritkazmin@yandex.ru

Rudaya M. A., post-graduate student

E-mail: margaritkazmin@yandex.ru

Гудкова А. А., кандидат фармацевтических наук, доцент кафедры управления и экономики фармации и фармакогнозии

E-mail: alinevoroneg@mail.ru

Gudkova A. A., PhD., Associate Professor of the Department of Management and Economics of Pharmacy and Pharmacognosy

E-mail: alinevoroneg@mail.ru

Сливкин А. И., доктор фарм. наук, профессор, зав. кафедрой фармацевтической химии и фармацевтической технологии, декан фармацевтического факультета

E-mail: slivkin@pharmvsu.ru

Slivkin A. I., PhD., DSci., Full Professor, Head of Pharmaceutical Chemistry and Pharmaceutical Technology Department, Dean of the Pharmaceutical Faculty

E-mail: slivkin@pharmvsu.ru

APPLICATION OF IR-SPECTROSCOPY IN THE ANALYSIS OF VEGETABLE PLANT RAW MATERIAL

O. V. Trineeva, M. A. Rudaya, A. A. Gudkova, A. I. Slivkin

Voronezh State University

Abstract. IR-spectroscopy is a fundamental method for studying the structure of chemical compounds. Currently, there are available bases of the IR-spectra of technical and food additives, drugs, polymers, plasticizers, toxic chemicals, solvents, petroleum products, toxic substances, steroids and other compounds, which are mostly one-component. However, there is no reliable, complete and accessible base of the IR-spectra of food products and medicinal plant materials that have a multicomponent composition necessary to solve specific practical problems. The method of FT-IR spectroscopy of impaired total internal reflection carried out the identification of medicinal plant raw materials of various types and morphological groups (using the example of buckthorn sea buckthorn berries, dried bog grass, rhizomes with blue bluish roots, tricolor violet grass, and scepter-like flowers of corolla). Identified in the spectrum of specific frequencies can be considered characteristic for a particular type and use them as markers in determining the authenticity of plant materials using IR-spectroscopy. The formation of hydrogen bonds and their characteristics (size and

energy) between the molecules of biologically active substances in the studied medicinal plant materials. The possibility of using the IR-spectroscopy method for express-diagnosing the authenticity of the studied medicinal plant materials has been investigated and established. Currently, it is considered that the NIR-spectroscopy is more specific, allowing you to accurately identify the connection by «fingerprints». The use of the NIR-spectroscopy method for the purpose of assessing the authenticity and good quality of the studied medicinal plant material requires more in-depth studies.

Keywords: sea buckthorn fruits, buckwheat grass, rhizome with blue cyanobium roots, tricolor violet grass, corolla flowers, checkered pendant, IR spectroscopy, hydrogen bond, absorption marker bands, IR spectroscopy.

REFERENCES

1. Kazicyna L.A., Kupletskaya N.B. *Primenenie UF-, IK- i YAMR- spektros-kopii v organicheskoy himii*. Moskva, Vysshaya shkola, 1971, 264 p.
2. Golubcova YU.V., *Tekhnika i tekhnologiya pishchevyh proizvodstv*, 2017, T. 45, №2, pp. 126-132.
3. Avilova I.A., *Tekhnologii pishchevoj i pererabatyvayushchej promyshlennosti APK-produkty zdorovogo pitaniya*, 2016, №4, pp. 71-74.
4. Vytovtov A.A., *Uchenye zapiski SPb filiala RTA.*, 2010, №1 (35), pp. 193-196.
5. Muhutdinov R.R., Pilipenko T.V., *Mezhdunarodnaya nauchno-prakticheskaya konferenciya, posvyashchennaya pamyati Vasiliya Mat-veevicha Gorbatova*, 2017, № 1, pp. 243.
6. Generalov E.A., *Auditorium*, 2015, № 4 (08), pp. 38-54.
7. Sedin A.V., Orlovskaya T.V., Gavrilin M.V., *Sovremennye problemy nauki i obrazovaniya*, 2014, № 1, pp. 367.
8. Trineeva O.V. *Kompleksnoe issledovanie sodержaniya i specificheskogo profilya biologicheskikh aktivnykh veshchestv plodov oblepihi krushinovidnoj Voronezh*, Izdatel'skij dom VGU, 2016, 224 p.
9. Nikolashkin A.N., Selezenev N.G., Popov D.M., *Zdorov'e i obrazovanie v XXI veke*, 2017, Vol. 19, №11, <http://dx.doi.org/10.26787/nydha-2226-7425-2017-19-11>.
10. Kim V.E.H., Pravdyuk M.F., Konovalov D.A., *Vestnik VGU, Seriya: Himiya. Biologiya. Farmaciya*, 2015, № 1, pp. 129-131.
11. Martynov A.M., Dargaeva T.D., Chuparina E.V., *Sibirskij medicinskij zhurnal*, 2010, №5, pp. 121-125.
12. Kopnin A.A. *Avtoref. diss. kand. farm. nauk*. Moskva, 2007, 24 p.
13. *Vodorodnaya svyaz'*. Pod red. V.M. Chulanovskogo. Moskva, Mir, 1964, 462 p.
14. *Vodorodnaya svyaz'*. Pod red. N.D. Sokolova, V.M. Chulanovskogo. Moskva, Nauka, 1964, 340 p.
15. Littl L. *Infrakrasnye spektry adsorbirovannykh molekul*. Pod red. Lygina V.I. Moskva, Mir, 1969, 514 p.
16. *Ustanovlenie struktury organicheskikh soedinenij fizicheskimi i himicheskimi metodami*. Pod red. Vajsbergera A. Moskva, Himiya, 1967, 532 p.
17. Nakanisi K. *Infrakrasnaya spektroskopiya i stroenie organicheskikh soedinenij*. Moskva, Mir, 1965, 216 p.
18. Otto M. *Sovremennye metody analiticheskoy himii*. Mosuva, Mir, 2003, pp. 151-290.
19. Checheta O.V., Safonova E.F., Slivkin A.I., *Vestnik VGU. Seriya: Himiya. Biologiya. Farmaciya*, 2010, № 2, pp. 164-167.
20. Checheta O.V. *Diss. cand. farm. nauk. Kursk*, 2009, 22 p.
21. Trineeva O.V. *Diss. dokt. farm. nauk*. Moskva, 2017, 48 p.