

**ЦЕЛЕСООБРАЗНОСТЬ ОПРЕДЕЛЕНИЯ СОДЕРЖАНИЯ ОМЕГА-3
НЕНАСЫЩЕННЫХ КИСЛОТ В ЖИРНЫХ МАСЛАХ МЕТОДОМ
ЯМР ^1H СПЕКТРОСКОПИИ**

Известно, что для нормального функционирования человеческого организма крайне важное значение имеет сбалансированный прием насыщенных и ненасыщенных жиров. В особенности это касается содержания в жирах оптимального соотношения омега-3 и омега-6 жирных кислот [1]. Омега-3 кислоты необходимы как для роста и развития организма, так и могут быть использованы для предотвращения и лечения ишемической болезни сердца, гипертонии, диабета и ряда других заболеваний [2,3]. Этим обусловлены их востребованность, а также актуальность поиска и изучения новых потенциальных сырьевых источников омега-3 кислот в качестве возможных заменителей таких общеизвестных пищевых и лекарственных жиров, как рыбий жир, льняное и конопляное масла. Исходя из сказанного лаборатории химии лекарственных растений Института тонкой органической химии им. А.Л.Мнджояна были предприняты исследования по изучению жирных масел семян (плодов) ряда доступных во флоре Армении растений. В частности, нами исследованы семена 55 растений, экстракцией (гексаном) которых были выделены жирные масла, и подвергнуты, каждое в отдельности, ЯМР ^1H исследованию (на приборе "Varian Mercury-300VX" в растворе диметилсульфоксид с CCl_4 в соотношении 1:3).

Известно, что ЯМР ^1H спектры жиров (жирных масел) однотипны и состоят из восьми групп сигналов, соответствующих определенным структурным фрагментам жирных масел [4-6]. Расположение сигналов структурных фрагментов масел в ЯМР ^1H спектрах представлено в таблице.

**Расположение сигналов структурных фрагментов
жирных масел в ЯМР ^1H спектрах**

Группы							
1	2	3	4	5	6	7	8
$-\text{CH}_3$	$-(\text{CH}_2)-$	$\beta\text{-CH}_2-$ к $\text{C}=\text{O}$		$-\text{CH}_2-$ к $\text{C}=\text{O}$		2CH_2- глицерина	$(=)$ и CH- глицерина
0.85- 1.05 м.д.	1.22-1.40 м.д.	1.58- 1.70 м.д.	1.98-2.20 м.д.	2.28- 2.37 м.д.	2.70- 2.82 м.д.	4.08-4.35 м.д.	5.20- 5.40 м.д.

Приведенное в таблице расположение сигналов водородных атомов свойственно только жирам и характеризует общность их химической (триацилглицероловой) структуры. Составы жиров различаются интегральными интенсивностями сигналов всех групп, за исключением группы 7. Одним из самых неизменных и постоянных сигналов в ЯМР ^1H спектрах жиров являются сигналы группы 7 двух метиленовых групп глицериновой части жиров, проявляющиеся в виде двух симметричных мультиплетов в области 4.10-4.20 м.д. (2H) и 4.24-4.34 м.д. (2H). Полученные сигналы, по всей видимости, могут оказаться весьма полезными при изучении и структурном анализе жирных масел методом ЯМР ^1H спектроскопии. В первую очередь эти сигналы могут быть использованы для определения содержания в масле омега -3 кислот сравнением интегральных интенсивностей сигналов группы 7 с интенсивностью сигнала метильной группы омега-3 кислот, проявляющегося при их наличии в виде четкого триплета при 0.95-1.02 м.д. отдельно от группы сигналов в области 0.85-0.95 м.д. (рис.).

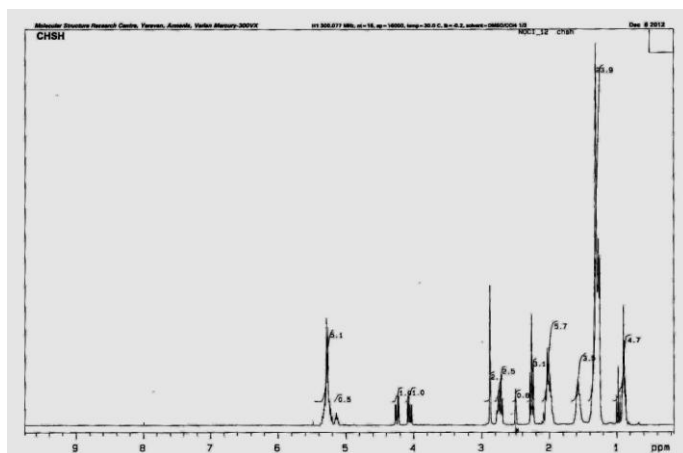


Рис. ЯМР ^1H спектр
жирного масла семян
шиповника
(*Rosa canina* L.)

В спектрах масел, очищенных от липофильных примесей (стеринов и свободных жирных кислот), соотношение интегральных интенсивностей глицериновых 2CH_2 групп и суммы метильных групп приближается к соотношению 4:9. В этом случае по интегральным интенсивностям 2CH_2 группы (J_7) и триплета омега-3 кислот (J_{tr}) можно вычислить содержание этих кислот в масле в пределах ошибки, зависящей от расхождения интегральной интенсивности суммы метильных групп (J_1) от интенсивности, соответствующей 9H. В представленном на рисунке спектре интегральная интенсивность омега-3 триплета J_{tr} равна 0.9, соотношение $J_7 : J_1$ составляет 2:4.7 (т.е. 4:9.4) и таким образом вычисленное содержание омега-3 кислот равно $0.9 \times 2 \times 100 / 9.4 = 19.1\%$. Вместе с этим, учитывая возможность завышенности интегральной интенсивности суммы метильных групп балластными веществами, теоретически возможным содержанием может быть $0.9 \times 2 \times 100 / 9 = 20\%$ и, следовательно, более реальным представляется усредненная величина вычисленных двух значений содержания, а именно, $19.5 \pm 0.5\%$.

Подобным же образом определялось содержание омега-3 кислот в семенах облепихи (*Hipporhae rhamnoides* L.), равное $27.4 \pm 0.8\%$, в семенах конопли (*Cannabis sativa* L.) — $22.4 \pm 0.2\%$, в семенах Melissa (*Melissa officinalis* L.) — $57.4 \pm 0.6\%$.

Приведенные выше результаты свидетельствуют о целесообразности использования метода ЯМР ^1H спектроскопии для относительно оперативного, быстрого обнаружения и количественной оценки содержания в растительном сырье омега-3 ненасыщенных кислот.

ՄՄՌ-1H ՍԳԵԿՏՐՈՍԿՈՊԻԱՅԻ ՄԵԹՈԴՈՎ ՃԱՐՊԱՅՈՒՂԵՐՈՒՄ ՕՄԵԳԱ-3 ՉՆԱԳԵՅԱԾ ՃԱՐՊԱԹ-ԹՈՒՆԵՐԻ ԲԱՂԱԴՐՈՒԹՅԱՆ ՈՐՈՇՄԱՆ ՆՊԱՏԱԿԱՏԱՐՄԱՐՈՒԹՅՈՒՆԸ

Ն. Ս. ԱՆԱՆԻԿՅԱՆ

Ուսումնասիրվել են Հայաստանում աճող 55 բույսերի սերմերից անջատված ճարպա-յուղերի ՄՄՌ- ^1H սպեկտրերը: Յուրաքանչյուր սպեկտրում տարբերակվել են ազդանիշների 8 խմբեր: Սպեկտրերից մի քանիսում ճարպա-յուղերի CH_3 խմբերի ազդանիշների հատվածում նկատվել են օմեգա-3 թթուներին համապատասխանող ազդանշաններ տրիպլետի ձևով: Օգտագործելով ճարպա-յուղերի CH_3 խմբերի ազդանիշների ինտեգրալ ինտենսիվությունները, որոշվել են օմեգա-3 ճարպաթթուների CH_3 խմբերի տրիպլետների ինտեգրալ ինտենսիվությունները: Այնուհետև որոշվել է օմեգա-3 թթուների տոկոսը յուրաքանչյուր յուղում: Ընդունելով, որ ճարպա-յուղի գլխիկին 2CH_2 խմբերի ազդանշանները տեսականորեն համապատասխանում են 4 H-ի, իսկ CH_3 խմբերի ազդանշանները՝ 9H-ի, հաշվարկվել է օմեգա-3 թթուների տոկոսը ամեն մի հետազոտվող յուղում: Այնուհետև համեմատելով ստացված տեսականորեն հաշվարկված և փորձնականորեն ստացված օմեգա-3 ճարպաթթուների տոկոսները յուղերում, որոշվել են փորձնական տվյալներով հաշվարկված օմեգա-3 ճարպաթթուների տոկոսների ճշտությունը: Հաշվարկների արդյունքում ցույց է տրված յուղերում օմեգա-3 ճարպաթթուների բաղադրությունը որոշման համար ՄՄՌ- ^1H հետազոտության օգտագործման նպատակահարմարությունը:

DETERMINATION EXPEDIENCY OF THE OMEGA-3 UNSATURATED ACIDS IN FATTY OILS BY NMR ^1H SPECTROSCOPY

H. S. ANANIYAN

The Scientific Technological Center of Organic
and Pharmaceutical Chemistry NAS RA
A.L. Mnjoyan Institute of Fine Organic Chemistry
26, Azatutyan Str., Yerevan, 0014, Armenia
Tel. +37410281754, E-mail: hrach63@mail.ru
National Polytechnic University of Armenia
105, Teryan Str., Yerevan, 0009, Armenia

^1H NMR spectra of fatty oils obtained from seeds of 55 plants were investigated 8 groups of signals were identified in all NMR spectra. Omega-3 fatty acids CH_3 groups signals were noticed in some of the spectra as a triplet in the area of 0.85-1.05 p.p.m. (oil CH_3 groups signals area). Integral intensities of omega-3 fatty acids CH_3 groups signals were calculated by using integral intensities of oils all CH_3 groups signals. Percents of omega-3 unsaturated fatty acids in each of the investigated oils were then calculated. Theoretical percents of omega-3 fatty acids in oils were calculated. For that it was assumed that the signals of 2 CH_2 groups corresponds to 4H signal and the signals of 3 CH_3 group corresponds to 9H signal. The experimental and theoretical percents of omega-3 fatty acids calculations were compared, and the accuracy of omega-3 fatty acids percent in oil was determined.

ЛИТЕРАТУРА

- [1] Назаров П.Е., Мягкова Г.И., Гроза Н.В. // Вестник МИТХТ, 2009, т. 4, №5, с. 3.
- [2] Connor W.E. // Ann. N.Y. Acad. Sci., 1993, v. 683, p. 337.
- [3] Simopoulos A.P. // Eur. J. Cancer Prev., 2004, v. 13, №3, p. 219.
- [4] Tai-Yow Shiao, Ming-Shi Shiao. // Bot.Bull Academia Sinica, 1989, v. 30 p. 191.
- [5] Мнацаканян В.А., Ерибемян М.И., Ананикян В.В. // ФАРМА, 2012, №5, с. 48.
- [6] Ananiyan H.S., Mnatsakanyan V.A., Avetisyan M.V. / International conference of young scientists "Chemistry Today — 2014", Book of Abstracts, August 18-22, 2014, Yerevan, YCA, p. 138.

Национальный политехнический университет Армении Г. С. АНАНИКЯН
Армения, 0009, Ереван, ул. Теряна, 105
Научно-технологический центр органической и
фармацевтической химии НАН Республики Армения
Институт тонкой органической химии им. А.Л.Мнджояна
Армения, 0014, Ереван, пр. Азатутян, 26
Тел. (374-10)281754. E-mail: hrach63@mail.ru

Поступило 2 III 2016