

Профиль эфирных масел *Origanum vulgare* subsp. *vulgare* коренное население из Ртани с помощью инструментов хемометрии

Милица Ачимович¹, Лато Пезо², Стефан Иванович³, Катарина Шимич³, Йована Люйич⁴

1-Институт полевых и овощных культур Нови-Сад - Национальный институт Республики Сербия, улица Максима Горького 30, 21000 Нови-Сад, Сербия

2-Университет в Белграде, Институт общей и физической химии, Студенческая площадь, 12, 11000 Белград, Сербия

3- Университет в Белграде, Институт химии, технологии и металлургии - Национальный институт Республики Сербия, Негошева 12, 11000 Белград, Сербия

4- Университет в Белграде, химический факультет, кафедра органической химии, Студенческая площадь, 12-16, 11000 Белград, Сербия

АННОТАЦИЯ

Целью данного исследования было прогнозирование индексов удерживания химических соединений, обнаруженных в надземных частях *Origanum vulgare* subsp. *vulgare* эфирного масла, полученное гидродистилляцией и проанализированное с помощью ГХ-МС. Всего в эфирном масле было обнаружено 28 соединений. Соединения с самой высокой относительной концентрацией представляют собой гермакрен D (21,5%), 1,8-цинеол (14,2%), сабинен (14,0%) и транс-кариофиллен (13,4%). Время удерживания было предсказано путем использования количественного отношения структура – удерживание, с использованием семи молекулярных дескрипторов, выбранных с помощью факторного анализа и генетического алгоритма. Выбранные дескрипторы не коррелируют друг с другом, и они были использованы для разработки модели искусственной нейронной сети. Всего 28 экспериментально полученных индексов удерживания ($\log RI$) были использованы для создания прогнозирующей количественной модели взаимосвязи структура-удерживание. Коэффициент детерминации для цикла обучения составил 0,998, что указывает на то, что эту модель можно использовать для прогнозирования индексов удерживания для *O. vulgare* subsp. *vulgare* соединения эфирных масел.

Ключевые слова: орегано, эфирное масло, гидродистилляция, ГХ-МС, QSSR, ANN