

Profil etarskog ulja prirodne populacije *Origanum vulgare* subsp. *vulgare* sa Rtnja primenom hemometrijskih alata

Milica Aćimović¹, Lato Pezo², Stefan Ivanović³, Katarina Simić³, Jovana Ljujić⁴

1-Institut za ratarstvo i povrtarstvo Novi Sad - Nacionalni institut Republike Srbije, Maksima Gorkog 30, 21000 Novi Sad, Srbija

2-Univerzitet u Beogradu, Institut za opštu i fizičku hemiju, Studentski trg 12, 11000 Beograd, Srbija

3-Univerzitet u Beogradu, Institut za hemiju, tehnologiju i metalurgiju - Nacionalni institut Republike Srbije, Njegoševa 12, 11000 Beograd, Srbija

4-Univerzitet u Beogradu, Hemijski fakultet, Odsek za organsku hemiju, Studentski trg 12-16, 11000 Beograd, Srbija

SAŽETAK

Cilj ovog istraživanja je bio predviđanje retencionih indeksa hemijskih jedinjenja nađenih u etarskom ulju nadzemnog dela biljke *Origanum vulgare* subsp. *vulgare*, dobijenom hidrodestilacijom i analiziranom korišćenjem GC-MS. Ukupno 28 jedinjenja je detektovano u etarskom ulju. Jedinjenja sa najvišim relativnim koncentracijama su germakren D (21.5%), 1,8-cineol (14.2%), sabinen (14.0%) i *trans*-kariofilen (13.4%). Retencionna vremena su predviđena kvantitativnom vezom struktura-retencija, korišćenjem sedam molekulskih deskriptora izabranih faktorskom analizom i genetskim algoritmom. Izabrani deskriptori nisu međusobno povezani i korišćeni su za razvijanje modela veštačke neuronske mreže. Ukupan broj od 28 eksperimentalno dobijenih retencionih indeksa ($\log RI$) korišćen je za postavljanje prediktivno kvantitativnog modela zavisnosti struktura-retencija. Koeficijent određivanja za trening ciklus je bio 0.998, označavajući da se ovaj model može koristiti za predviđanje retencionih indeksa jedinjenja iz etarskog ulja biljke *O. vulgare* subsp. *vulgare*.

Ključne reči: origano, etarsko ulje, hidrodestilacija, GC-MS, QSSR, ANN