ПРИЛОЖЕНИЯ

к статье «Хемотаксономическое исследование представителей триб Maleae и Amygdaleae (Rosaceae) на основе анализа липофильных метаболитов»

А.Р. Васильева, Н.М. Слынько, С.В. Асбаганов, А.В. Локтева, Л.Е. Татарова, Л.В. Куйбида, С.Е. Пельтек

Таблица S1. Наименование, таксономическая принадлежность и географическое расположение образцов

В работе использовали материалы биоресурсной научной коллекции ЦСБС СО РАН «Коллекция живых растений в открытом и закрытом грунте», № USU 440534. В колонке «гибрид» под значением «гибрид» учитываются также предполагаемые межродовые гибриды (×*Sorbocotoneaster* Pojark.). Образцы, различавшиеся по хемотипу (*Sorbus aucuparia* L. ct. lupeol и ct. prunasin), приведены к базовому видовому названию, отраженному в колонке «образец». Принадлежность к хемотипу указана в отдельной колонке «хемотип».

Образец	Триба	Род	Гибрид	Хемотип	Место сбора образца
Prunus fruticosa Pall.	Amygdaleae	*Prunus*	Нет	Нет	USU 440534
P. fruticosa × *P. maackii* (hybrid *Prunus fruticosa* Pall. & *Prunus maackii* Rupr.)			Гибрид	Нет	USU 440534
P. sargentii × *P. fruticosa* (гибрид *Prunus sargentii* Rehder & *Prunus fruticosa* Pall.			Гибрид	Нет	USU 440534
Prunus padus L.			Нет	Нет	USU 440534
Prunus virginiana L.			Нет	Нет	USU 440534
Prunus maackii Rupr.			Нет	Нет	1) 54.846278; 83.115388 2) 54.847348; 83.118230 3) 54.847733; 83.119664
P. padus × *P. virginiana* (`Krasnyi Shater`, гибрид *Prunus padus* L. & *Prunus virginiana* L.)			Гибрид	Нет	USU 440534
Prunus domestica L.			Нет	Нет	USU 440534
Prunus spinosa L.			Нет	Нет	USU 440534
P. spinosa × *P. domestica* (гибрид *Prunus spinosa* L. & *Prunus domestica* L.)			Гибрид	Нет	USU 440534
P. ussuriensis × *P. salicina* ('Zheltaya Xopty', open pollinated гибрид *Prunus ussuriensis* Kovalev & Kostina & *Prunus salicina* Lindl.)			Гибрид	Нет	USU 440534
Aronia mitschurinii A.K. Skvortsov & Maitul. (avtotetraploid *Aronia melanocarpa* (Michx.) Elliott)	Maleae	*Aronia*	Нет	Нет	1) 54.848224. 83.105258 2) 54.888367; 83.055196 3) 54.888479; 83.055270
Amelanchier alnifolia (Nutt.)		*Amelanchier*	Нет	Нет	USU 440534
× *Amelanchier lamarckii* F.G. Schroed. (natural interspecific hybrid)			Гибрид	Нет	USU 440534
Cotoneaster melanocarpus Fisch. ex Blytt		*Cotoneaster*	Нет	Нет	USU 440534
Crataegus macracantha Lodd. ex Loudon		*Crataegus*	Нет	Нет	1) 54.846673; 83.117007 2) 54.841441; 83.093728 3) 54.826771; 83.132771
Crataegus pinnatifida Bunge			Нет	Нет	USU 440534
Malus sylvestris (L.) Mill.		*Malus*	Нет	Нет	1) 54.846608; 83.117152 2) 54.844653; 83.117621 3) 54.848231; 83.104870
Sorbus aucuparia subsp. *sibirica* (Hedl.) Krylov, chemotype 's'		*Sorbus*	Нет	Да	1) 54.846893; 83.118399 2) 54.845737; 83.111898
Sorbus aucuparia subsp. *sibirica* (Hedl.) Krylov, chemotype 'c'			Нет	Да	1) 54.846924; 83.118521 2) 54.845761; 83.116250
× *Sorbaronia fallax* (C.K. Schneid.) C.K. Schneid. (гибрид *Sorbus aucuparia* L. & *Aronia melanocarpa* (Michx.) Elliott)			Гибрид	Нет	USU 440534
Sorbus commixta Hedl.			Нет	Нет	USU 440534
× *Sorbocotoneaster pozdnjakovii* Pojark. (*Sorbocotoneaster* Pozdnyakova, intermediate tetraploid form)			Гибрид	Нет	USU 440534
Sorbus aucuparia L. ('Nevezhinskaya')			Нет	Нет	USU 440534
Sorbus commixta var. *rufoferruginea* Shirai ex C.K. Schneid			Нет	Нет	USU 440534
Sorbus tianschanica Rupr.			Нет	Нет	USU 440534
× *Sorbaronia* C.K. Schneid. 'Titan', complex hybrid var. Burka (× *Sorbaronia alpina* (Willd.) C.K. Schneid. [*Sorbus aria* (L.) Crantz × *Aronia arbutifolia* (L.) Pers.] × *Sorbus aucuparia* L.) with species of the genera *Malus* Mill. & *Pyrus* L.)			Гибрид	Нет	USU 440534

Таблица S2. Относительные содержания компонентов каждого из метаболических путей, просуммированные по путям, для образцов трибы Amygdaleae.

№ п/п	Образец	Метаболический путь, %			
		Алкановый	Немевалонатный	Шикиматный	Цианогенный
1	*Prunus fruticosa*	7.06	6.31	59.62	27.0
2	*P. fruticosa* × *P. maackii*	33.29	10.88	53.28	2.56
3	*P. sargentii* × *P. fruticosa*	25.93	7.06	65.93	0.93
4	*Prunus padus*	14.16	10.1	16.92	57.83
5	*Prunus virginiana*	9.46	2.82	19.16	68.5
6	*Prunus maackii*	16.83	6.01	73.34	3.81
7	*P. padus* × *P. virginiana* 'Krasnyi Shater'	18.42	4.85	2.17	74.53
8	*Prunus domestica*	21.88	4.54	9.16	64.42
9	*Prunus spinosa*	8.11	3.14	78.8	9.95
10	*P. spinosa* × *P. domestica*	8.47	2.1	78.23	11.19
11	*P. ussuriensis* × *P. salicina* 'Zheltaya Xopty'	70.88	12.05	8.23	8.85

Таблица S3. Относительные содержания компонентов каждого из метаболических путей, просуммированные по путям, для образцов трибы Maleae

№ п/п	Образец	Метаболический путь, %			
		Алкановый	Немевалонатный	Шикиматный	Цианогенный
1	*Cotoneaster melanocarpus*	29.54	8.03	14.64	47.8
2	*Amelanchier alnifolia*	33.25	12.07	12.27	42.4
3	× *Amelanchier lamarckii*	30.62	18.27	13.43	37.67
4	*Crataegus macracantha*	25.79	26.73	46.26	1.22
5	*Crataegus pinnatifida*	70.54	24.92	4.09	0.72
6	*Malus sylvestris*	33.16	24.25	42.56	0
7	*Sorbus aucuparia* subsp. *Sibirica,* chemotype 's'	35.64	52.05	4.93	7.03
8	*Sorbus aucuparia* subsp. *sibirica*, chemotype 'c'	13.08	4.48	15.12	67.32
9	× *Sorbaronia fallax*	22.15	5.16	1.59	71.17
10	*Sorbus commixta*	24.48	12.97	14.25	48.3
11	× *Sorbocotoneaster pozdnjakovii*	38.59	16.83	18.7	25.88
12	*Sorbus aucuparia* 'Nevezhinskaya'	28.46	18.62	20.88	32.02
13	*Sorbus commixta* var. *rufoferruginea*	18.27	11.91	11.74	57.08
14	*Sorbus tianschanica*	17.4	12.0	29.15	32.44
15	× *Sorbaronia* 'Titan'	46.94	12.02	17.4	23.66
16	*Aronia mitschurinii*	12.46	4.98	23.65	52.62

Таблица S4. Компонентный состав каждого из метаболических путей

Образец	Компонент	RI (индекс удерживания)	RI_{Lit} (литературный индекс удерживания)	Q_m
Алкановый метаболический путь				
Crataegus pinnatifida	Undecane, 3,8-dimethyl-	1289		57
Crataegus pinnatifida	Dodecane, 4,6-dimethyl-	1292	1325	43
Crataegus pinnatifida	Nonane, 2-methyl-5-propyl-	1338		57
Amelanchier alnifolia	n-Decanoic acid	1364	1372	60
Crataegus pinnatifida	Tetradecane	1400	1400	57
Crataegus pinnatifida	Tetradecane, 2,4-dimethyl-	1463		57
Crataegus pinnatifida	2,6,10-Trimethyltridecane	1472	1449	71
Crataegus pinnatifida	Dodecane, 2,7,10-trimethyl-	1473		57
× *Sorbocotoneaster pozdnjakovii*	n-Hexadecanoic acid	1963	1968	43
Prunus maackii	9-Octadecen-1-ol, (E)-	2060	2068	55
× *Sorbocotoneaster pozdnjakovii*	9,12,15-Octadecatrienoic acid, (Z,Z,Z)- (Linolenic acid)	2153	2159	79
× *Sorbocotoneaster pozdnjakovii*	9,12-Octadecadienoic acid (Z,Z)- (Linoleic acid)	2155	2133	67
Cotoneaster melanocarpus	(9E,11E)-Octadecadienoic acid	2250	2237	67
P. fruticosa × *P. maackii*	Nonadecanoic acid	2270	2272	60
Sorbus commixta	Behenic alcohol	2485	2496	57
Sorbus tianschanica	Docosanoic acid	2543	2568	43
Sorbus tianschanica	n-Tetracosanol-1	2675	2698	57
Sorbus aucuparia ('Nevezhinskaya')	Heptacos-1-ene	2685	2693	57
× *Sorbaronia* ('Titan')	Heptacosane	2700	2700	57
Amelanchier alnifolia	Docosadienoic acid, methyl ester	2725		67
× *Sorbaronia* ('Titan')	Octacosane, 2-methyl-	2840	2863	57
Amelanchier alnifolia	Isoalkane	2880		57
Prunus spinosa	9-Nonacosene, (E)-	2880		57
× *Sorbaronia* ('Titan')	1-Heptacosanol	2900		57
Malus sylvestris	Nonacosane	2900	2900	57
Sorbus aucuparia ('Nevezhinskaya')	1,28-Nonacosadiene	2907		69
Sorbus tianschanica	Nonacos-1-ene	2917	2887	43
Cotoneaster melanocarpus	Hexacosanoic acid, methyl ester	2935	2935	74
× *Sorbocotoneaster pozdnjakovii*	Hentriacont-9-ene	3088		57
Amelanchier alnifolia	Nonacosan-10-ol	3100	3109	83
P. ussuriensis × *P. salicina* ('Zheltaya Xopty')	Hentriacontane	3100	3100	57
Amelanchier alnifolia	1,30-Hentriacontadiene	3125		67
Немевалонатный метаболический путь				
Amelanchier alnifolia	2,6-Octadienoic acid, 3,7-dimethyl-, (E)- (Geranic acid)	1352	1355	69
Amelanchier alnifolia	1,1,5-Trimethyl-1, 2-dihydronaphthalene	1363		157
Sorbus aucuparia ('Nevezhinskaya')	Squalene	2820	2827	69
Sorbus aucuparia ('Nevezhinskaya')	Vitamin E	3150	3130	165
Prunus maackii	dl-α-Tocopherol	3152	3150	165
Amelanchier alnifolia	24-Norursa-3,12-diene	3162	3105	163
Prunus maackii	β-Sitosterol acetate	3313	3364	43
Prunus maackii	γ-Sitosterol	3342	3321	43
Amelanchier alnifolia	28-Norolean-17-en-3-ol	3430	3423	163
Sorbus aucuparia ('Nevezhinskaya')	Lupeol	3430	3399	81

Продолжение табл. S4

Образец	Компонент	RI (индекс удерживания)	RI_{Lit} (литературный индекс удерживания)	Q_m
	Цианогенный метаболический путь			
Malus sylvestris	Oxime-, methoxy-phenyl-	948		133
Cotoneaster melanocarpus	Benzaldehyde	954	962	77
× *Sorbocotoneaster pozdnjakovii*	Benzyl alcohol	1036	1036	79
Prunus maackii	Benzaldehyde dimethyl acetal	1113		121
Amelanchier alnifolia	Benzyl nitrile	1140	1144	117
Sorbus commixta	Phenylglyoxal	1143		77
Crataegus macracantha	Acetic acid, phenylmethyl ester (Benzyl acetate)	1164	1164	108
Prunus virginiana	Benzeneacetonitrile, α-hydroxy-	1326	1322	77
Prunus padus	Mandelamide	1564	1567	60
Amelanchier alnifolia	Benzeneacetic acid, α-cyano-, ethyl ester	1600		117
Prunus padus	Benzeneacetonitrile, 4-hydroxy-	1785		77
Malus sylvestris	Benzeneacetic acid, 4-hydroxy-, methyl ester	2039		107
Cotoneaster melanocarpus	Benzyl β-d-glucoside	2262		91
Crataegus macracantha	Benzeneacetonitrile, α-(β-D-glucopyranosyloxy)-, (R)-	2526		117
	Шикиматный метаболический путь			
Malus sylvestris	Phenol	994	981	94
Prunus maackii	trans-Cinnamic acid	1095	1090	109
Prunus fruticosa	4H-Pyran-4-one, 2,3-dihydro-3,5-dihydroxy-6-methyl-	1157	1150	240
Malus sylvestris	Methyl salicylate	1196	1192	120
P. sargentii × *P. fruticosa*	Mequinol	1218	1240	109
Prunus fruticosa	Benzofuran, 2,3-dihydro- (Coumaran)	1218	1224	120
Prunus virginiana	4-Vinylphenol	1230	1223	120
Amelanchier alnifolia	Hydrocoumarin	1281	1275	57
Prunus spinosa	1,2-Benzenediol, 4-methyl-	1291	1294	124
Amelanchier alnifolia	2-Methoxy-4-vinylphenol	1318	1316	150
Amelanchier alnifolia	1,2-Propanediol, 1-phenyl-	1329	1327	79
Amelanchier alnifolia	Phenol, 2,6-dimethoxy-	1352	1355	154
Amelanchier alnifolia	Eugenol	1360	1358	164
Prunus spinosa	4-Ethylcatechol	1393	1383	123
Amelanchier alnifolia	Vanillin	1400	1404	151
P. spinosa × *P. domestica*	Resorcinol	1427	1376	110
Prunus maackii	2-Propenoic acid, 3-phenyl-	1436	1435	103
Sorbus tianschanica	4-Vinylbenzene-1,2-diol	1445	1432	136
Prunus fruticosa	Coumarin	1527	1558	121
P. sargentii × *P. fruticosa*	2′,4′-Dimethoxy-3′-methylpropiophenone	1536		179
Prunus spinosa	Flamenol	1546	1546	140
Malus sylvestris	2-Butanone, 4-(4-hydroxyphenyl)- (Raspberry ketone)	1553	1553	107
P. spinosa × *P. domestica*	1,3,5-Benzenetriol	1614	1610	126
Prunus spinosa	Catechol	1634	1654	107
Malus sylvestris	Benzenepropanoic acid, 4-hydroxy- (Phloretic acid)	1635	1654	107
Prunus fruticosa	6-Methoxychroman-2-one	1648		178
Prunus maackii	p-Coumaric acid	1657	1635	164
Malus sylvestris	Phloroglucinol, acetate	1700		126
Malus sylvestris	2,4,6-Trihydroxybenzoic acid	1710	1728	126
Prunus fruticosa	2H-1-Benzopyran-2-one, 7-methoxy- (Herniarin)	1739	1732	133

Окончание табл. S4

Образец	Компонент	RI (индекс удерживания)	RI_{Lit} (литературный индекс удерживания)	Q_m
P. spinosa × *P. domestica*	p-Hydroxycinnamic acid, ethyl ester	1836		147
Prunus maackii	2-Propenoic acid, 3-(4-hydroxy-3-methoxyphenyl)- (Ferulic acid)	1869	1897	194
Amelanchier alnifolia	Salicylic acid	2167	2172	60
P. spinosa × *P. domestica*	2H-1-Benzopyran-2-one, 7,8-dihydroxy-6-methoxy- (Fraxetin)	2178		193
Prunus virginiana	2-Propenoic acid, 3-(3-hydroxyphenyl)-, (E)-	2178		164
Prunus maackii	Pinosylvin	2399	2391	212
Malus sylvestris	Arbutin	2478		110
Prunus fruticosa	4H-1-Benzopyran-4-one, 2,3-dihydro-5-hydroxy-2-(4-hydroxyphenyl)-7-methoxy-, (S)- (Sakuranetin)	2808	2877	167
Prunus fruticosa	4H-1-Benzopyran-4-one, 5-hydroxy-3-(4-hydroxyphenyl)-7-methoxy- (Prunusetin)	2917	2895	284
Crataegus macracantha	4'-Methoxy-5,7-dihydroxy isoflavone (Biochanin)	2936	2992	132
Шикиматный, цианогенный метаболический путь				
Prunus fruticosa	Benzoic acid, methyl ester	1099	1094	105
Prunus maackii	Benzoic acid	1165	1177	105
Amelanchier alnifolia	Benzaldehyde, 4-hydroxy-	1360	1364	121

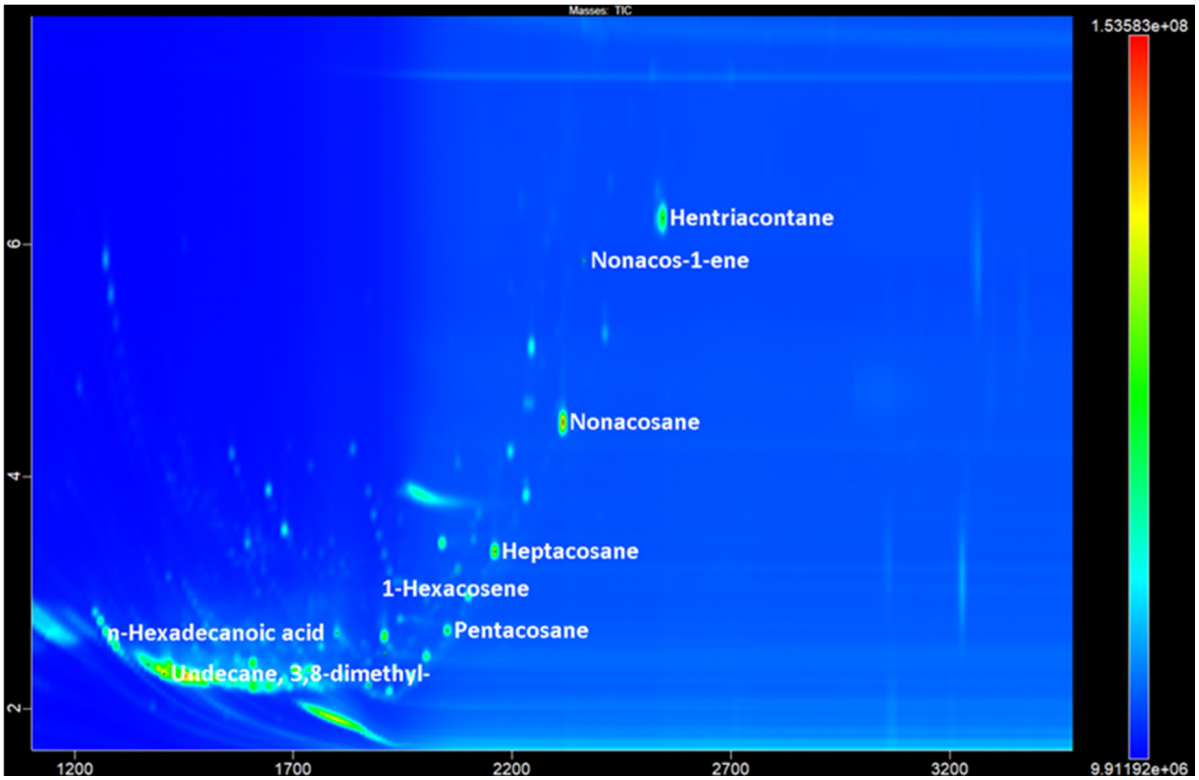


Рис. S1. Фрагмент 3D-хроматограммы образца *Crataegus pinnatifida*, содержащего большие количества соединений алканового метаболического пути.

По оси абсцисс откладывается время по первой колонке, по оси ординат – время по второй колонке. Цветовая шкала справа отражает содержание каждого вещества (площадь пика соединения).

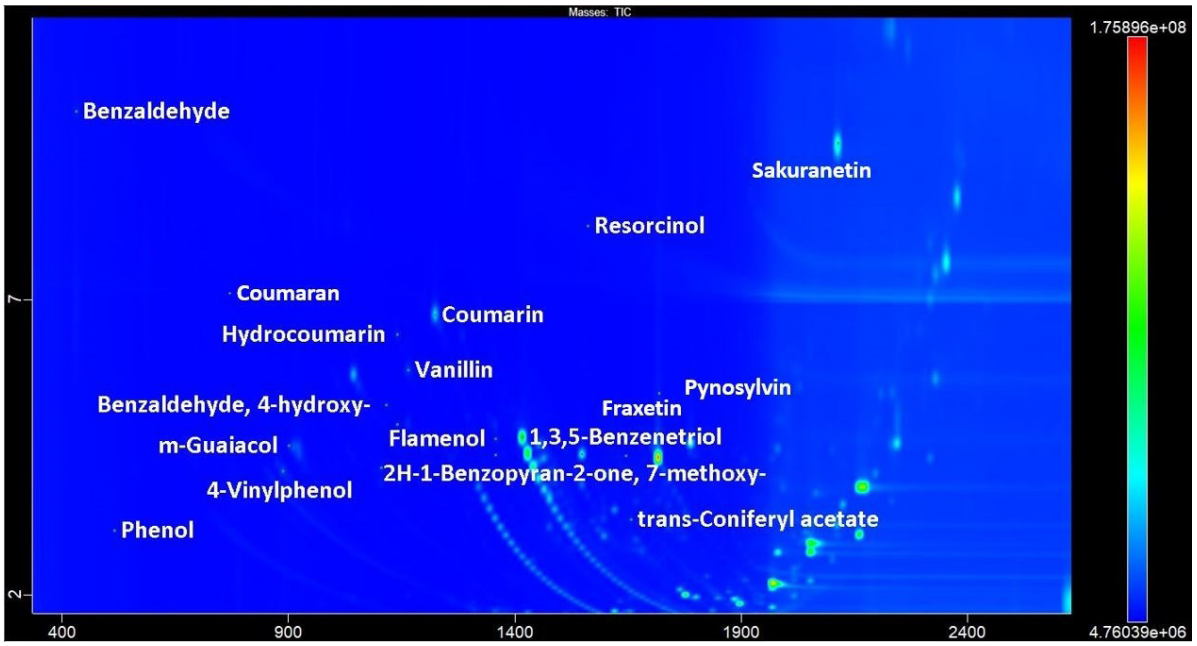


Рис. S2. Фрагмент 3D-хроматограммы образца *P. sargentii* × *P. fruticosa*, содержащего большие количества соединений шикиматного метаболического пути.

По оси абсцисс откладывается время по первой колонке, по оси ординат – время по второй колонке. Цветовая шкала справа отражает содержание каждого вещества (площадь пика соединения).

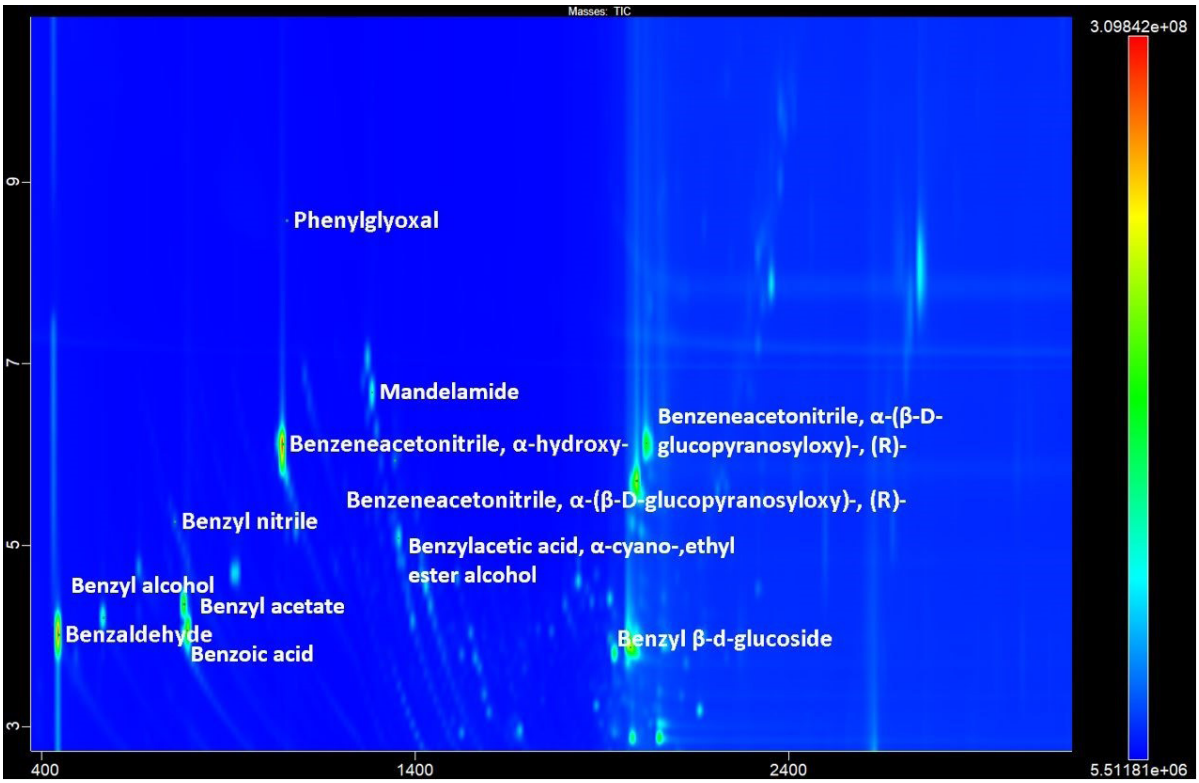


Рис. S3. Фрагмент 3D-хроматограммы образца *Cotoneaster melanocarpus* Fisch. ex Blytt, содержащего большие количества соединений цианогенного метаболического пути.

По оси абсцисс откладывается время по первой колонке, по оси ординат – время по второй колонке. Цветовая шкала справа отражает содержание каждого вещества (площадь пика соединения).

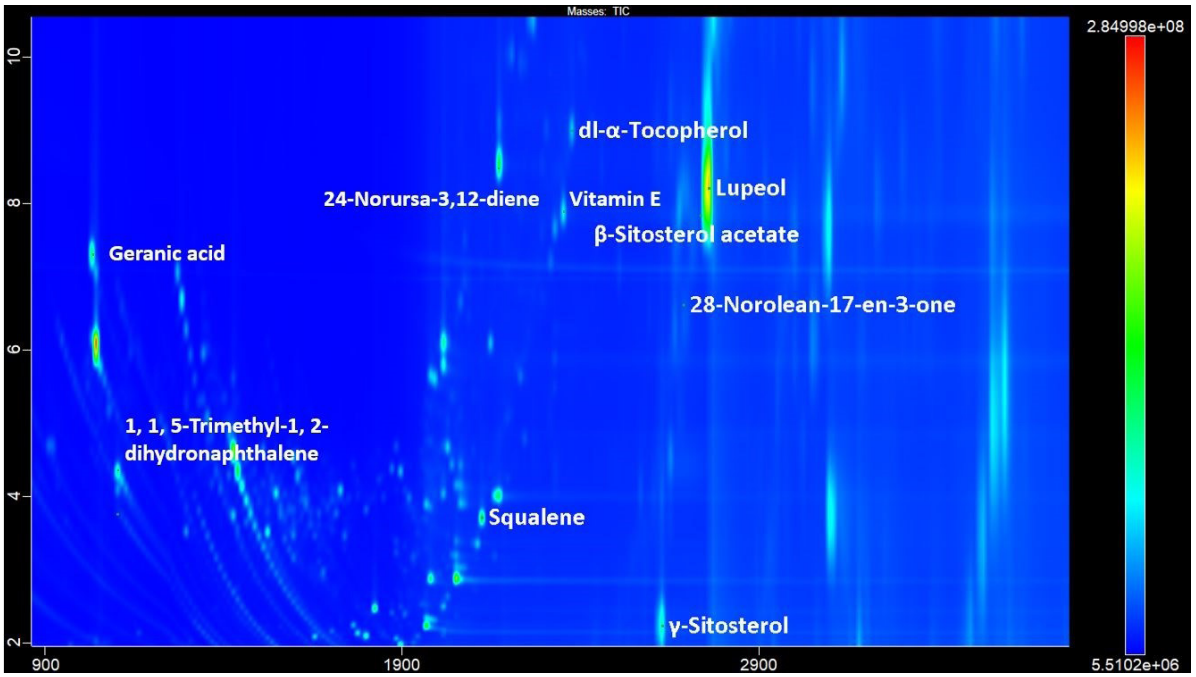


Рис. S4. Фрагмент 3D-хроматограммы образца *Sorbus aucuparia* 'Nevezhinskaya', содержащего большие количества соединений немевалонатного метаболического пути.

По оси абсцисс откладывается время по первой колонке, по оси ординат – время по второй колонке. Цветовая шкала справа отражает содержание каждого вещества (площадь пика соединения).