

ПРИМЕНЕНИЕ ИК-СПЕКТРОСКОПИИ В АНАЛИЗЕ ЗЕРНА (ОБЗОР)

*A.I.S. Kazachenko, A.S. Kazachenko,  
I.A. Chaplygina, T.V. Stupko*

USING IR-SPECTROSCOPY IN THE ANALYSIS OF GRAIN (REVIEW)

**Казаченко Ал.С.** – канд. хим. наук, ст. преп. каф. химии Красноярского государственного аграрного университета, науч. сотр. лаб. каталитической химии угля и биомассы Института химии и химической технологии СО РАН – обособленного подразделения ФИЦ КНЦ СО РАН, г. Красноярск.

E-mail: leo\_lion\_leo@mail.ru

**Казаченко А.С.** – канд. хим. наук, доц. каф. физической и неорганической химии Института цветных металлов и материаловедения Сибирского федерального университета, г. Красноярск.

E-mail: kaalla@list.ru

**Чаплыгина И.А.** – канд. биол. наук, доц. каф. товароведения и управления качеством продукции АПК Красноярского государственного аграрного университета, г. Красноярск.

E-mail: ledum\_palustre@mail.ru

**Ступко Т.В.** – д-р техн. наук, проф., зав. каф. химии Красноярского государственного аграрного университета, г. Красноярск.

E-mail: tat-stupko@yandex.ru

**Kazachenko A.I.S.** – Cand. Chem. Sci., Senior Lecturer, Chair of Chemistry, Krasnoyarsk State Agrarian University, Staff Scientist, Lab. of Catalytic Chemistry of Coal and Biomass, Institute of Chemistry and Chemical Technology, SB RAS – Separate Division FRC KRC SB RAS, Krasnoyarsk.

E-mail: leo\_lion\_leo@mail.ru

**Kazachenko A.S.** – Cand. Chem. Sci., Assoc. Prof., Chair of Physical and Inorganic Chemistry, Institute of Non-Ferrous Metals and Materials Science, Siberian Federal University, Krasnoyarsk.

E-mail: kaalla@list.ru

**Chaplygina I.A.** – Cand. Biol. Sci., Assoc. Prof., Chair of Merchandizing and Product Quality Control of Agrarian and Industrial Complex, Krasnoyarsk State Agrarian University, Krasnoyarsk.

E-mail: ledum\_palustre@mail.ru

**Stupko T.V.** – Dr. Techn. Sci., Prof., Head, Chair of Chemistry, Krasnoyarsk State Agrarian University, Krasnoyarsk.

E-mail: tat-stupko@yandex.ru

Качественные характеристики пшеницы определяются различными физико-химическими и реологическими анализами. Большинство методов анализа являются дорогими, требуют много времени и вызывают разрушение образцов. Инфракрасная спектроскопия с Фурье-преобразованием является одним из наиболее важных и перспективных инструментов, используемых для анализа пшеницы на различные параметры качества. Этот метод является быстрым и чувствительным, с большим разнообразием методов отбора проб. В ряде исследований различные сорта пшеницы были проанализированы для оценки качества методами ИК-спектроскопии. ИК-спектроскопия работает на основе функ-

циональных групп и предоставляет информацию в виде пиков. На основе пиков определяют содержание влажности, белка, жира, золы, углеводов и твердости зерна. Пики для воды наблюдаются в диапазоне длин волн  $1640\text{ см}^{-1}$  и  $3300\text{ см}^{-1}$  на основе функциональной группы Н и ОН. Характеристические колебания белка наблюдаются в диапазоне от  $1600$  до  $1700\text{ см}^{-1}$  и от  $1550$  до  $1570\text{ см}^{-1}$  на основе связанной группы амида I и амида II соответственно. Характеристические колебания жиров также наблюдаются в этих диапазонах, но на основе связи С-Н, а также крахмала наблюдали в диапазоне от  $2800$  до  $3000\text{ см}^{-1}$  (область растяжения С-Н) и в диапазоне  $3000$  и  $3600\text{ см}^{-1}$  (область растяжения О-Н). Поскольку ИК-

спектроскопия является быстрым инструментом, его можно легко использовать для идентификации сортов пшеницы в соответствии с установленным критерием. В данном обзоре рассматривается применение ИК-спектроскопии в анализе зерна, а также применение данного метода в проверке его качества.

**Ключевые слова:** инфракрасная спектроскопия, зерновые, пшеница, анализ.

*Qualitative characteristics of wheat are determined by various physical and -chemical and rheological analyzes. Most analysis methods are expensive, time consuming and cause sample destruction. Fourier transform infrared spectroscopy is one of the most important and promising tools used to analyze wheat for various quality parameters. This method is fast and sensitive with a large variety of sampling methods. In a number of studies, different wheat varieties were analyzed for quality assessment using IR-spectroscopy. IR-spectroscopy works on the basis of functional groups and provides information in the form of peaks. On the basis of peaks the content of moisture, protein, fat, ash, carbohydrates and grain hardness are determined. Peaks for water are observed in the wavelength range of  $1\ 640\ \text{cm}^{-1}$  and  $3300\ \text{cm}^{-1}$  based on the functional groups H and OH. Characteristic fluctuations of the protein are observed in the range from  $1600\ \text{cm}^{-1}$  to  $1700\ \text{cm}^{-1}$  and from  $1550\ \text{cm}^{-1}$  to  $1570\ \text{cm}^{-1}$  based on the bound group of amide I and amide II, respectively. Characteristic variations in fats are also observed in these ranges, but on the basis of the C-H bond, as well as starch, it was observed in the range from  $2800$  to  $3000\ \text{cm}^{-1}$  (stretching region C-H) and in the range  $3000$  and  $3600\ \text{cm}^{-1}$  (stretching region O-H). Since IR-spectroscopy is a fast tool, it can be easily used to identify wheat varieties in accordance with established criteria. This review examines the use of IR-spectroscopy in the analysis of grain, as well as the application of this method in verifying its quality.*

**Keywords:** infrared spectroscopy, grain, wheat, analysis.

**Введение.** Структура и состав зерновых культур являются важными факторами при рассмотрении вопроса об их использовании в про-

мышленных пищевых процессах. Состав зерна также влияет на его усвоение в кишечнике человека и животного, внося свой вклад в пищевую ценность и возможную пользу для здоровья. В связи с этим возрастает значение поиска способов быстрой и точной идентификации структуры зерновых [1].

Инфракрасная (ИК) спектроскопия является широко применяемым методом для установления характеристик химической структуры растительных материалов. В подавляющем большинстве экспериментов инфракрасная спектроскопия использовалась для определения объемной структуры образцов [2]. Тем не менее некоторые исследователи применили потенциал инфракрасной спектроскопии для определения структурных особенностей отдельных областей в зерне [3], например клеточных стенок и эндосперма [4–6] или вторичной структуры белка [7] во время созревания зерна [8], его деструкции [9].

Методы, которые используются для проверки различий в зерне разных сортов пшеницы, включают ИК-спектроскопический анализ [5], спектроскопический анализ с использованием атомно-абсорбционной спектроскопии и некоторые другие стандартные методы [10]. Химическое картирование с использованием ИК-спектроскопии с Фурье-преобразованием было успешно применено для широкого спектра сельскохозяйственных продуктов, таких как стебель льна, пшеница, кукуруза, овес, рожь, злаки, семена сои [11]. Инфракрасная спектроскопия с Фурье-преобразованием является инструментом для композиционного анализа, широко использовалась для анализа клеточной стенки зерновых культур и состава пшеницы [12].

**Цель и задачи.** Анализ возможностей применения ИК-спектроскопии для оценки качества пищевых и сельскохозяйственных продуктов, в том числе и зерна; оценка перспектив применения (а также достоинств и недостатков) метода ИК-спектроскопии в анализе зерновых сельскохозяйственных культур.

**Результаты исследования и их обсуждение.** Инфракрасная спектроскопия с преобразованием Фурье. Пшеница является основной зерновой культурой и важным компонентом питания человека. Считается уникальной среди

зерновых во многом благодаря тому, что ее зерно проявляет уникальные химические и физические свойства. Помимо того, что пшеница является богатым источником углеводов, она содержит другие ценные компоненты, такие как белки, минералы и витамины [13, 14]. Основные методы, которые используются для проверки различий в зерне разных сортов пшеницы, включают ИК-спектроскопический анализ [3, 5], спектроскопический анализ с использованием атомно-абсорбционной спектроскопии и некоторые другие стандартные методы [10].

ИК-спектроскопия – это быстрый, неразрушающий, экономичный метод, который может обнаруживать множество функциональных групп и чувствителен к изменениям в молекулярной структуре. Инфракрасная спектроскопия предоставляет информацию на основе химического состава и физического состояния всего образца [15]. Инфракрасная спектроскопия с Фурье-преобразованием использовалась в качестве быстрого, точного и неразрушающего метода для измерения многих параметров качества пшеницы, она является мощным инструментом для исследования характеристик первичной клеточной стенки на молекулярном уровне и предоставляет дополнительную информацию. Кроме того, чувствительность и точность ИК-детекторов наряду с широким спектром программных алгоритмов значительно увеличили практическое использование инфракрасного излучения для количественного анализа [16, 17].

ИК-спектроскопия позволяет качественно и количественно определять пищевые макрокомпоненты, такие как белки, липиды, сахара и содержание влаги [18–29]. ИК-спектроскопия все чаще применяется в исследованиях пищевых продуктов, таких как пироженные и хлопья, мука, орехи, масла, мясо и спиртные напитки [30–38]. Исследования в основном направлены на такие культуры, как кукуруза, пшеница, рис, овес и продукты, полученные из них [39–43]. Однако наибольшее распространение в анализе зерна получила спектроскопия в ближней инфракрасной области [43–47].

Спектроскопия ближнего инфракрасного диапазона (БИК) широко применяется в научных исследованиях в области пищевых продуктов и является одним из наиболее распространенных

аналитических методов в этом секторе благодаря его низкой стоимости, скорости и неразрушающему характеру [48]. Среди параметров качества, рассматриваемых для пшеницы, наиболее важными являются физические характеристики, содержание влаги, твердость ядра, содержание белка. В настоящее время БИК-спектроскопия является общепризнанным методом в пшеничной и перерабатывающей промышленности для регулярной оценки качества [49, 50].

Показано, что надежный прогноз состава пшеницы возможен с использованием БИК-спектроскопии непосредственно на цельном зерне, что представляет собой большой прогресс в плане подготовки образцов, стоимости и применимости [47]. БИК показывает хорошие результаты, поэтому в некоторых случаях он предпочтителен по сравнению с традиционными методами химии для рутинного анализа [43].

Измельчение делает однородным материал для анализа, поэтому обычно получают более точные результаты по сравнению с измерениями цельного зерна, но измельчение занимает много времени, и оно представляет собой ограничение при необходимости сканировать большое количество образцов. В работах [43–50] применена БИК-спектроскопия для анализа содержания белка на основе одного ядра. Например, одноядерная БИК-спектроскопия была также применена для европейской пшеницы. Авторы изучили белок одного семени, стекловидность, плотность и индекс твердости в области БИК в режиме пропускания и получили хорошую калибровку, особенно для твердости [50].

БИК также применяли к отдельным ядрам пшеницы для идентификации сортов в селекции. Тем не менее основная трудность идентификации сортов заключается в сходстве спектров БИК пшеницы. Любые тонкие спектральные различия между различными сортами обычно маскируются внутренними вариациями между отдельными зернами.

Способность предсказывать с помощью БИК на отдельных ядрах ячменя для количественного определения содержания белка представлена в работах [43, 44]. Сообщалось о широкой вариативности содержания белка в отдельных зернах ячменя, так как в пределах одной партии

и сорта содержание белка находилось в диапазоне от 5,0 до 14,5 % [40–50].

Солодовый ячмень исследован для мониторинга процесса соложения с помощью ИК-спектроскопии. Цельные зерна ячменя сканировали до и после процесса соложения с использованием увеличения времени прорастания (2, 3, 4 и 5 дней). Параметры, которые наблюдались во время процесса соложения: хрупкость, содержание  $\beta$ -глюкана, вязкость суслу и экстракт солода, а также растворимый азот, свободный аминный азот. Показано, что хороший прогноз может быть достигнут для общего количества фенольных соединений и содержания свободной *p*-кумаровой кислоты в зернах ячменя с помощью БИК-спектроскопии [48–50].

Тритикале, гибрид пшеницы и ржи, выращивается в основном для кормовых целей, а также применяется для выпечки и в качестве источника биотоплива. В трудах [25–35] разработана БИК-калибровка для прогнозирования содержания белка, влаги и незаменимых аминокислот в некоторых злаках, включая тритикале. В литературе также представлено много других примеров обычной ИК-спектроскопии, применяемой к зерновым культурам, особенно для массового анализа измельченного материала.

Важным аспектом применения ИК-спектроскопии является выявление микотоксинов в злаковых культурах. Инфекция *Fusarium* может вызывать болезни растений, а гриб может продуцировать токсины, которые представляют собой небольшие токсичные молекулы, выделяемые в виде микотоксинов. Эти микотоксины оказывают существенное влияние не только на общественное здравоохранение, но и на сельское хозяйство и экономику, снижая урожайность и общее качество зерновых культур [45].

Грибами, производящими микотоксины, поражены 25 % мировых продовольственных культур [45].

Наиболее широко используемыми методами мониторинга микотоксинов являются хроматографические и иммунологические методы [45]. Иммунологические методы могут обнаружить большинство микотоксинов, но они в основном используются для скрининга. Фактически качество зерновых можно контролировать с помощью инфракрасной спектроскопии путем опре-

деления приблизительных параметров (влажность, белок, масло и др.) [45].

Изменения в свойствах зерновых, таких как содержание белка или углеводов, содержание или текстура липидов, связаны с изменениями грибкового загрязнения [43–45]. Поражения грибом повреждают ткани, клетки, молекулы, и такие повреждения отражаются на их спектрах [45]. В работе [45] авторы выделили области спектра, связанные с присутствием грибов в структурах  $\text{CH}_3$ ,  $\text{CH}_2$ ,  $\text{CO}$ ,  $\text{NH}_2$ , амида, крахмала и целлюлозы.

Интерпретация средних инфракрасных спектров проста из-за специфики пиков поглощения. Напротив, интерпретация спектров БИК является более сложной, поскольку они включают суперпозиции спектральных пиков. Это также требует использования хемометрики, то есть математических инструментов для получения максимально возможной информации из химических данных [41–50].

**Выводы.** В результате проведенного обзора научных работ зарубежных авторов установлено:

- применение методов ИК-спектроскопии позволяет определять качественное и количественное содержание белков, жиров, углеводов и влаги в анализируемом образце;
- методы ИК-спектроскопии эффективно применяются при оценке качества зерна (при анализе на содержание микотоксинов);
- основными преимуществами ИК-спектроскопии являются быстрота выполнения анализа, а также необходимость использования малой навески для его выполнения;
- основным недостатком данного метода является то, что в данный момент времени отсутствуют компактные высокоточные ИК-спектрометры, которые могли быть использованы в полевых условиях.

### Литература

1. *Jaaskelainen A.S., Galvis Rojas L., Bertinetto C.G. Localization of Cereal Grain Components by Vibrational Microscopy and Chemometric Analysis // Imaging Technologies and Data Processing for Food Engineers. – 2016. – V. 21. – P. 41–68.*

2. *Gholizadeh H., Naserian A.A., Xin H.* Detecting carbohydrate molecular structural makeup in different types of cereal grains and different cultivars within each type of grain grown in semi-arid area using FTIR spectroscopy with uni- and multi-variate molecular spectral analyses // *Anim Feed Sci Technol.* – 2014. – V. 194. – P. 136–144.
3. *Mills E.N.C., Parker M.L., Wellner N.* Chemical imaging: the distribution of ions and molecules in developing and mature wheat grain // *J Cereal Sci.* – 2005. – V. 41. – P. 193–201.
4. *Barron C., Parker M.L., Mills E.N.C.* FTIR imaging of wheat endosperm cell walls in situ reveals compositional and architectural heterogeneity related to grain hardness // *Planta.* – 2005. – V. 220. – P. 667–677.
5. *Jamme F., Robert P., Bouchet B.* Aleurone cell walls of wheat grain: high spatial resolution investigation using synchrotron infrared microspectroscopy // *Appl Spectrosc.* – 2008. – V. 62. – P. 895–900.
6. *Saulnier L., Robert P., Grintchenko M.* Wheat endosperm cell walls: spatial heterogeneity of polysaccharide structure and composition using micro-scale enzymatic fingerprinting and FT-IR microspectroscopy // *J Cereal Sci.* – 2009. – V. 50. – P. 312–317.
7. *Bonwell E.S., Fisher T.L., Fritz A.K.* [et al.]. Determination of endosperm protein secondary structure in hard wheat breeding lines using synchrotron infrared microspectroscopy // *Vib Spectrosc.* – 2008. – V. 48. – P. 76–81.
8. *Toole G.A., Wilson R.H., Parker M.L.* The effect of environment on endosperm cellwall development in *Triticum aestivum* during grain filling: an infrared spectroscopic imaging study // *Planta.* – 2007. – V. 225. – P. 1393–1403.
9. *Walker A.M., Yu P., Christensen C.R.* Fourier transform infrared microspectroscopic analysis of the effects of cereal type and variety within a type of grain on structural makeup in relation to rumen degradation kinetics // *J Agric Food Chem.* – 2009. – V. 57. – P. 6871–6878.
10. *Cubadda F., Carcea M., Aureli F.* Minerals and trace elements in the Italian wheat and products // *Tecnica Molitoria Intel.* – 2004. – V. 58. – P. 129–139.
11. *Himmelsbach D.S., Khahili S., Akin D.E.* Microspectroscopic imaging of flax // *Cell Mol Biol.* – 1998. – V. 44. – P. 99–108.
12. *Rai M.A., Faqir M.A., Muhammad I.K.* [et al.]. Application of Fourier transform infrared (FTIR) spectroscopy for the identification of wheat varieties // *J Food Sci Technol.* – 2013. – V. 50(5). – P. 1018–1023.
13. *Anjum F.M., Ahmad I., Butt M.S.* [et al.]. Improvement in end-use quality of spring wheat varieties grown in different eras // *J Food Chem.* – 2008. – V. 106. – P. 482–486.
14. *Harold E., Fred R., Leonard M.* Antioxidant content of whole grain breakfast cereals, fruits and vegetable // *J Am Coll Nutr.* – 2005. – V. 19. – P. 312–319.
15. *Cocchi M., Foca G., Lucisano M.* [et al.]. Classification of cereal flours by chemometric analysis of MIR spectra // *J Agric Food Chem.* – 2004. – V. 52. – P. 1062–1067.
16. *Dowell F.E., Maghirang E.B., Xie F.* [et al.]. Predicting wheat quality characteristics and functionality using near-infrared spectroscopy // *Cer. Chem.* – 2006. – V. 83. – P. 529–536.
17. *Rai M.A., Faqir M.A., Muhammad I.K.* [et al.]. Application of Fourier transform infrared (FTIR) spectroscopy for the identification of wheat varieties // *J Food Sci Technol.* – 2013. – V. 50(5). – P. 1018–1023.
18. *Manley M., Zyl L.V., Osborne B.G.* Using Fourier transform near-infrared spectroscopy in determining kernel hardness, protein, and moisture content of whole wheat flour // *J Near Infrared Spectrosc.* – 2002. – V. 10. – P. 71–76.
19. *Che-Man Y.B., Setiowaty G.* Application of Fourier transform infrared Spectroscopy to determine free fatty acid contents palmolein // *Food Chem.* – 1999. – V. 66. – P. 109–111.
20. *Armstrong P.R., Maghirang E., Xie F.* [et al.]. Comparison of dispersive and Fourier-transform БИК instruments for measuring grain and flour attributes // *Appl Eng Agric.* – 2006. – V. 22. – P. 453–459.
21. *Belton P.S., Goodfellow B.J., Wilson R.H.* Comparison Fourier transform mid infrared spectroscopy and near infrared reflectance spectroscopy with differential scanning and calorimetry for the study of the staling of bread

- // *Sci Food Agric.* – 1991. – V. 51. – P. 453–471.
22. Alvarez P.A., Ramaswamy H.S., Ismail A.A. High pressure gelation of soy proteins: effect of concentration, pH and additives // *Journal of Food Engineering.* – 2008. – V. 88(3). – P. 331–340.
  23. Ferreira D.S., Galao O.F., Pallone J.A.L. [et al.]. Comparison and application of near-infrared and midinfrared spectroscopy for determination of quality parameters in soybean samples // *Food Control.* – 2014. – V. 35(1). – P. 227–232.
  24. Yano J., Sato K. FT-IR studies on polymorphism of fats: molecular structures and interactions // *Food Research International.* – 1999. – V. 32(4). – P. 249–259.
  25. Hernandez-Martinez M., Gallardo-Velazquez T., Osorio-Revilla G. [et al.]. Prediction of total fat, fatty acid composition and nutritional parameters in fish fillets using MID FTIR spectroscopy and chemometrics // *Food Science and Technology.* – 2013. – V. 52(1). – P. 12–20.
  26. Yuen S.N., Choi S.M., Phillips D.L. [et al.]. Raman and FTIR spectroscopic study of carboxymethylated non-starch polysaccharides // *Food Chemistry.* – 2009. – V. 114(3). – P. 1091–1098.
  27. Anjos O., Graca M., Campos P. [et al.]. Application of FTIR-ATR spectroscopy to the quantification of sugarinhoney // *Food Chemistry.* – 2015. – V. 169. – P. 218–223.
  28. Buning-Pfaue H. Analysis of water in food by near infrared spectroscopy // *Food Chemistry.* – 2003. – V. 82(1). – P. 107–115.
  29. Meng X., Sedman J., Van De Voort F.R. Improving the determination of moisture in edibleoils by FTIR spectroscopy using acetonitrile extraction // *Food Chemistry.* – 2012. – V. 135(2). – P. 722–729.
  30. Reder M., Koczon P., Wirkowska M. [et al.]. The application of FT-MIR spectroscopy for the evaluation of energy value, fat content, and fatty acid composition in selected organic oat products // *Food Analytical Methods.* – 2014. – V. 7(3). – P. 547–554.
  31. Sohn M., Barton F.E., McClung A.M. [et al.]. Near-infrared spectroscopy for determination of protein and amylose in rice flour through use of derivatives // *Cereal Chemistry.* – 2004. – V. 81(3). – P. 341–344.
  32. Dogan A., Siyakus G., Severcan F. FTIR spectroscopic characterization of irradiated hazelnut // *Food Chemistry.* – 2007. – V. 100(3). – P. 1106–1114.
  33. Ciemniowska-Zytkiewicz H., Brys J., Sujka K. [et al.]. Assessment of the hazelnuts roasting process by pressure differential scanning calorimetry and MID-FT-IR spectroscopy // *Food Analytical Methods.* – 2015. – V. 8(10). – P. 2465–2473.
  34. Quinones-Islas N., Meza-Marquez O.G., Osorio-Revilla G. [et al.]. Detection of adulterants in avocado oil by Mid-FTIR spectroscopy and multivariate analysis // *Food Research International.* – 2013. – V. 51(1). – P. 148–154.
  35. Rohman A., Erwanto Y., CheMan Y.B. Analysis of pork adulteration in beef meat ball using Fourier transform infrared spectroscopy // *Meat Science.* – 2011. – V. 88(1). – P. 91–95.
  36. Xu L., Cai C.B., Cui H.F. [et al.]. Rapid discrimination of pork in Halal and non-Halal Chinese ham sausages by Fourier transform infrared spectroscopy and chemometrics // *Meat Science.* – 2012. – V. 92(4). – P. 506–510.
  37. Sujkaand K., Koczon P. Zastosowanie spektroskopii FT-IR do oznaczania zawartosci alkoholu etylowego w komercyjnych wodkach // *Zeszyty Problemowe Postepow Nauk Rolniczych.* – 2012. – V. 571. – P. 107–114.
  38. Sujka K., Reder M., Ciemniowska-Zytkiewicz H. [et al.]. Zastosowanie spektroskopii FT-IR I analizydyskrym inacyjnej dorozr ozniania wodekpodwzglę demsuowca // *Bromatologia I Chemia Toksykologiczna.* – 2014. – V. 47(3). – P. 760–764.
  39. Delwiche S.R., McKenzie K.S., Webb B.D. Quality characteristics in rice by near-infrared reflectance analysis of whole grain milled samples // *Cereal Chemistry.* – 1996. – V. 73(2). – P. 257–263.
  40. Windham W.R., Lyon B.G., Champagne E.T. Prediction of cooked rice texture quality using near-infrared reflectance analysis of whole-grain milled samples // *Cereal Chemistry.* – 1997. – V. 74(5). – P. 626–632.
  41. Meullenet J.F., Mauromoustakos A., Horner T.B. [et al.]. Prediction of texture of cooked white rice by near-infrared reflectance analysis

- of whole-grain milled samples // *Cereal Chemistry*. – 2002. – V. 79(1). – P. 52–57.
42. Sun D.W. *Infrared Spectroscopy for Food Quality Analysis and Control*; Sun, D.W., Ed.; National University of Ireland: Dublin, Ireland; Academic Press: Cambridge, MA, USA; Elsevier Science: New York, NY, USA, 2009. – P. 424.
  43. Roggo Y., Chalou P., Maurer L. [et al.]. A review of near infrared spectroscopy and chemometrics in pharmaceutical technologies // *J.Pharm. Biomed. Anal.* – 2007. – V. 44. – P. 683–700.
  44. Fearn T. Chemometrics: An enabling tool for NIR // *NIR News*. – 2005. – V. 16. – P. 17–19.
  45. Levasseur-Garcia C. Overview of Infrared Spectroscopy Methods for Detecting Mycotoxins on Cereals // *Toxins*. – 2018. – V. 10. – P. 38.
  46. Caporaso N., Whitworth M.B., Fisk I.D. Near-Infrared spectroscopy and hyperspectral imaging for non-destructive quality assessment of cereal grains // *Applied spectroscopy reviews*. – 2018. – V. 53(8). – P. 667–687.
  47. Suchowilska E., Kandler W., Wiwart M. [et al.]. Fourier transform infrared – attenuated total reflection for wheat grain // *Int. Agrophys.* – 2012. – V. 26. – P. 207–210.
  48. Ibrahim A., Csurgu Varga A., Jolankai M. [et al.]. Applying Infrared Technique as a Nondestructive Method To Assess Wheat Grain Hardness // *International Journal of Science and Qualitative Analysis*. – 2018. – V. 4(3). – P. 100–107.
  49. Pandey P., Srivastava S., Mishra H.N. Comparison of FT-NIR and NIR for evaluation of physico-chemical properties of stored wheat grains // *Food Quality and Safety*. – 2018. – V. 3. – P. 165–172.
  50. Sujka K., Koczko P., Ceglinska A. [et al.]. The Application of FT-IR Spectroscopy for Quality Control of Flours Obtained from Polish Producers // *Journal of Analytical Methods in Chemistry*. – 2017. – V. 23. – P. 100–109.
- Literatura**
1. Jaaskelainen A.S., Galvis Rojas L., Bertinotto C.G. Localization of Cereal Grain Components by Vibrational Microscopy and Chemometric Analysis // *Imaging Technologies and Data Processing for Food Engineers*. – 2016. – V. 21. – P. 41–68.
  2. Gholizadeh H., Naserian A.A., Xin H. Detecting carbohydrate molecular structural makeup in different types of cereal grains and different cultivars within each type of grain grown in semi-arid area using FTIR spectroscopy with uni- and multi-variate molecular spectral analyses // *Anim Feed Sci Technol.* – 2014. – V. 194. – P. 136–144.
  3. Mills E.N.C., Parker M.L., Wellner N. Chemical imaging: the distribution of ions and molecules in developing and mature wheat grain // *J Cereal Sci.* – 2005. – V. 41. – P. 193–201.
  4. Barron C., Parker M.L., Mills E.N.C. FTIR imaging of wheat endosperm cell walls in situ reveals compositional and architectural heterogeneity related to grain hardness // *Planta*. – 2005. – V. 220. – P. 667–677.
  5. Jamme F., Robert P., Bouchet B. Aleurone cell walls of wheat grain: high spatial resolution investigation using synchrotron infrared microspectroscopy // *Appl Spectrosc.* – 2008. – V. 62. – P. 895–900.
  6. Saulnier L., Robert P., Grintchenko M. Wheat endosperm cell walls: spatial heterogeneity of polysaccharide structure and composition using micro-scale enzymatic fingerprinting and FT-IR microspectroscopy // *J Cereal Sci.* – 2009. – V. 50. – P. 312–317.
  7. Bonwell E.S., Fisher T.L., Fritz A.K. [et al.]. Determination of endosperm protein secondary structure in hard wheat breeding lines using synchrotron infrared microspectroscopy // *Vib Spectrosc.* – 2008. – V. 48. – P. 76–81.
  8. Toole G.A., Wilson R.H., Parker M.L. The effect of environment on endosperm cellwall development in *Triticum aestivum* during grain filling: an infrared spectroscopic imaging study // *Planta*. – 2007. – V. 225. – P. 1393–1403.
  9. Walker A.M., Yu P., Christensen C.R. Fourier transform infrared microspectroscopic analysis of the effects of cereal type and variety within a type of grain on structural makeup in relation to rumen degradation kinetics // *J Agric Food Chem.* – 2009. – V. 57. – P. 6871–6878.
  10. Cubadda F., Carcea M., Aureli F. Minerals and trace elements in the Italian wheat and products // *Tecnica Molitoria Intel.* – 2004. – V. 58. – P. 129–139.

11. *Himmelsbach D.S., Khahili S., Akin D.E.* Microspectroscopic imaging of flax // *Cell Mol Biol.* – 1998. – V. 44. – P. 99–108.
12. *Rai M.A., Faqir M.A., Muhammad I.K.* [et al.]. Application of Fourier transform infrared (FTIR) spectroscopy for the identification of wheat varieties // *J Food Sci Technol.* – 2013. – V. 50(5). – P. 1018–1023.
13. *Anjum F.M., Ahmad I., Butt M.S.* [et al.]. Improvement in end-use quality of spring wheat varieties grown in different eras // *J Food Chem.* – 2008. – V. 106. – P. 482–486.
14. *Harold E., Fred R., Leonard M.* Antioxidant content of whole grain breakfast cereals, fruits and vegetable // *J Am Coll Nutr.* – 2005. – V. 19. – P. 312–319.
15. *Cocchi M., Foca G., Lucisano M.* [et al.]. Classification of cereal flours by chemometric analysis of MIR spectra // *J Agric Food Chem.* – 2004. – V. 52. – P. 1062–1067.
16. *Dowell F.E., Maghirang E.B., Xie F.* [et al.]. Predicting wheat quality characteristics and functionality using near-infrared spectroscopy // *Cer. Chem.* – 2006. – V. 83. – P. 529–536.
17. *Rai M.A., Faqir M.A., Muhammad I.K.* [et al.]. Application of Fourier transform infrared (FTIR) spectroscopy for the identification of wheat varieties // *J Food Sci Technol.* – 2013. – V. 50(5). – P. 1018–1023.
18. *Manley M., Zyl L.V., Osborne B.G.* Using Fourier transform near-infrared spectroscopy in determining kernel hardness, protein, and moisture content of whole wheat flour // *J Near Infrared Spectrosc.* – 2002. – V. 10. – P. 71–76.
19. *Che-Man Y.B., Setiowaty G.* Application of Fourier transform infrared Spectroscopy to determine free fatty acid contents palmolein // *Food Chem.* – 1999. – V. 66. – P. 109–111.
20. *Armstrong P.R., Maghirang E., Xie F.* [et al.]. Comparison of dispersive and Fourier-transform BIK instruments for measuring grain and flour attributes // *Appl Eng Agric.* – 2006. – V. 22. – P. 453–459.
21. *Belton P.S., Goodfellow B.J., Wilson R.H.* Comparison Fourier transform mid infrared spectroscopy and near infrared reflectance spectroscopy with differential scanning and calorimetry for the study of the staling of bread // *Sci Food Agric.* – 1991. – V. 51. – P. 453–471.
22. *Alvarez P.A., Ramaswamy H.S., Ismail A.A.* High pressure gelation of soy proteins: effect of concentration, pH and additives // *Journal of Food Engineering.* – 2008. – V. 88(3). – P. 331–340.
23. *Ferreira D.S., Galao O.F., Pallone J.A.L.* [et al.]. Comparison and application of near-infrared and midinfrared spectroscopy for determination of quality parameters in soybean samples // *Food Control.* – 2014. – V. 35(1). – P. 227–232.
24. *Yano J., Sato K.* FT-IR studies on polymorphism of fats: molecular structures and interactions // *Food Research International.* – 1999. – V. 32(4). – P. 249–259.
25. *Hernandez-Martinez M., Gallardo-Velazquez T., Osorio-Revilla G.* [et al.]. Prediction of total fat, fatty acid composition and nutritional parameters in fish fillets using MID FTIR spectroscopy and chemometrics // *Food Science and Technology.* – 2013. – V. 52(1). – P. 12–20.
26. *Yuen S.N., Choi S.M., Phillips D.L.* [et al.]. Raman and FTIR spectroscopic study of carboxymethylated non-starch polysaccharides // *Food Chemistry.* – 2009. – V. 114(3). – P. 1091–1098.
27. *Anjos O., Graca M., Campos P.* [et al.]. Application of FTIR-ATR spectroscopy to the quantification of sugarinhoney // *Food Chemistry.* – 2015. – V. 169. – P. 218–223.
28. *Buning-Pfaue H.* Analysis of water in food by near infrared spectroscopy // *Food Chemistry.* – 2003. – V. 82(1). – P. 107–115.
29. *Meng X., Sedman J., Van De Voort F.R.* Improving the determination of moisture in edibleoils by FTIR spectroscopy using acetonitrile extraction // *Food Chemistry.* – 2012. – V. 135(2). – P. 722–729.
30. *Reder M., Koczon P., Wirkowska M.* [et al.]. The application of FT-MIR spectroscopy for the evaluation of energy value, fat content, and fatty acid composition in selected organic oat products // *Food Analytical Methods.* – 2014. – V. 7(3). – P. 547–554.
31. *Sohn M., Barton F.E., McClung A.M.* [et al.]. Near-infrared spectroscopy for determination of protein and amylose in rice flour through



- use of derivatives // *Cereal Chemistry*. – 2004. – V. 81(3). – P. 341–344.
32. Dogan A., Siyakus G., Severcan F. FTIR spectroscopic characterization of irradiated hazelnut // *Food Chemistry*. – 2007. – V. 100(3). – P. 1106–1114.
  33. Ciemniowska-Zytkiewicz H., Brys J., Sujka K. [et al.]. Assessment of the hazelnuts roasting process by pressure differential scanning calorimetry and MID-FT-IR spectroscopy // *Food Analytical Methods*. – 2015. – V. 8(10). – P. 2465–2473.
  34. Quinones-Islas N., Meza-Marquez O.G., Osorio-Revilla G. [et al.]. Detection of adulterants in avocado oil by Mid-FTIR spectroscopy and multivariate analysis // *Food Research International*. – 2013. – V. 51(1). – P. 148–154.
  35. Rohman A., Erwanto Y., CheMan Y.B. Analysis of pork adulteration in beef meat ball using Fourier transform infrared spectroscopy // *Meat Science*. – 2011. – V. 88(1). – P. 91–95.
  36. Xu L., Cai C.B., Cui H.F. [et al.]. Rapid discrimination of pork in Halal and non-Halal Chinese ham sausages by Fourier transform infrared spectroscopy and chemometrics // *Meat Science*. – 2012. – V. 92(4). – P. 506–510.
  37. Sujkaand K., Koczon P. Zastosowanie spektroskopii FT-IR do oznaczania zawartosci alkoholu etylowego w komercyjnych wodkach // *Zeszyty Problemowe Postępow Nauk Rolniczych*. – 2012. – V. 571. – P. 107–114.
  38. Sujka K., Reder M., Ciemniowska-Zytkiewicz H. [et al.]. Zastosowanie spektroskopii FT-IR I analizy dyskryminacyjnej do oznaczenia wodek podwzglę demsurowca // *Bromatologia I Chemia Toksykologiczna*. – 2014. – V. 47(3). – P. 760–764.
  39. Delwiche S.R., McKenzie K.S., Webb B.D. Quality characteristics in rice by near-infrared reflectance analysis of whole grain milled samples // *Cereal Chemistry*. – 1996. – V. 73(2). – P. 257–263.
  40. Windham W.R., Lyon B.G., Champagne E.T. Prediction of cooked rice texture quality using near-infrared reflectance analysis of whole-grain milled samples // *Cereal Chemistry*. – 1997. – V. 74(5). – P. 626–632.
  41. Meullenet J.F., Mauromoustakos A., Horner T.B. [et al.]. Prediction of texture of cooked white rice by near-infrared reflectance analysis of whole-grain milled samples // *Cereal Chemistry*. – 2002. – V. 79(1). – P. 52–57.
  42. Sun D.W. *Infrared Spectroscopy for Food Quality Analysis and Control*; Sun, D.W., Ed.; National University of Ireland: Dublin, Ireland; Academic Press: Cambridge, MA, USA; Elsevier Science: New York, NY, USA, 2009. – P. 424.
  43. Roggo Y., Chalou P., Maurer L. [et al.]. A review of near infrared spectroscopy and chemometrics in pharmaceutical technologies // *J.Pharm. Biomed. Anal.* – 2007. – V. 44. – P. 683–700.
  44. Fearn T. Chemometrics: An enabling tool for NIR // *NIR News*. – 2005. – V. 16. – P. 17–19.
  45. Levasseur-Garcia C. Overview of Infrared Spectroscopy Methods for Detecting Mycotoxins on Cereals // *Toxins*. – 2018. – V. 10. – P. 38.
  46. Caporaso N., Whitworth M.B., Fisk I.D. Near-Infrared spectroscopy and hyperspectral imaging for non-destructive quality assessment of cereal grains // *Applied spectroscopy reviews*. – 2018. – V. 53(8). – P. 667–687.
  47. Suchowilska E., Kandler W., Wiwart M. [et al.]. Fourier transform infrared – attenuated total reflection for wheat grain // *Int. Agrophys.* – 2012. – V. 26. – P. 207–210.
  48. Ibrahim A., Csur Varga A., Jolankai M. [et al.]. Applying Infrared Technique as a Nondestructive Method To Assess Wheat Grain Hardness // *International Journal of Science and Qualitative Analysis*. – 2018. – V. 4(3). – P. 100–107.
  49. Pandey P., Srivastava S., Mishra H.N. Comparison of FT-NIR and NIR for evaluation of physico-chemical properties of stored wheat grains // *Food Quality and Safety*. – 2018. – V. 3. – P. 165–172.
  50. Sujka K., Koczo P., Ceglinska A. [et al.]. The Application of FT-IR Spectroscopy for Quality Control of Flours Obtained from Polish Producers // *Journal of Analytical Methods in Chemistry*. – 2017. – V. 23. – P. 100–109.