

УДК 543.424.2  
AGRIS F60

<https://doi.org/10.33619/2414-2948/121/03>

## АНАЛИЗ ВЛИЯНИЯ ФРАКЦИОННОГО СОСТАВА ЗЁРЕН ПШЕНИЦЫ НА СПЕКТРЫ КОМБИНАЦИОННОГО РАССЕЯНИЯ СВЕТА

©Кузнецов С. М., ORCID: 0000-0002-8378-7085, SPIN-код: 5144-7999, канд. физ.-мат. наук,  
Федеральный научный агрономический центр ВИМ; Институт общей физики им. А.М.  
Прохорова Российской академии наук, г. Москва, Россия, [kuznetsovsm@kapella.gpi.ru](mailto:kuznetsovsm@kapella.gpi.ru)

## ANALYSIS OF THE INFLUENCE OF THE FRACTIONAL COMPOSITION OF WHEAT GRAINS ON RAMAN SPECTRA

©Kuznetsov S., ORCID: 0000-0002-8378-7085, SPIN-code: 5144-7999, Ph.D.,  
Federal Scientific Agronomic and Engineering Center VIM; Prokhorov General Physics Institute of  
the Russian Academy of Sciences, Moscow, Russia, [kuznetsovsm@kapella.gpi.ru](mailto:kuznetsovsm@kapella.gpi.ru)

**Аннотация.** Исследование качества сельскохозяйственной продукции, в частности пшеницы, имеет важное значение для обеспечения продовольственной безопасности и устойчивого развития агропромышленного комплекса. В работе рассматривается применение спектроскопии комбинационного рассеяния (КР) света для анализа структурных особенностей зёрен пшеницы разных фракций. Метод КР, обладая высокой информативностью, неразрушающим характером и скоростью анализа, представляет собой перспективный инструмент для оценки качества сельскохозяйственной продукции. Результаты показали зависимость интенсивности спектральных линий от фракции зерна: с увеличением размера зерна возрастила интенсивность сигналов, относящихся к колебаниям фенильных и ароматических колец, а также C–C и C–N связей. Это свидетельствует о возможном повышении концентрации аминокислот и пептидов в более крупных зёрнах. Было отмечено также усиление фоновой флуоресценции при увеличении фракции, что отражает различия в соотношении оболочки и внутренней части зерна.

**Abstract.** Studying the quality of agricultural products, particularly wheat, is essential for ensuring food security and sustainable development of the agro-industrial complex. This paper examines the use of Raman spectroscopy to analyze the structural features of wheat grains of different fractions. Raman spectroscopy, with its high information content, non-destructive nature, and rapid analysis, represents a promising tool for assessing the quality of agricultural products. The results demonstrated a dependence of the intensity of spectral lines on grain fraction: with increasing grain size, the intensity of signals related to vibrations of phenyl and aromatic rings, as well as C–C and C–N bonds, increased. This indicates a possible increase in the concentration of amino acids and peptides in larger grains. An increase in background fluorescence was also noted with increasing fraction, reflecting differences in the ratio of the grain shell to the core.

**Ключевые слова:** пшеница, зерновые культуры, фракция, спектроскопия комбинационного рассеяния света.

**Keywords:** wheat, grain crops, fraction, Raman spectroscopy.

Пшеница является одной из основных зерновых культур в мире и служит ключевым источником белка, углеводов и микроэлементов в рационе человека [1-3].

Качество зерна напрямую влияет на его питательную ценность, технологические свойства и пригодность для производства муки, хлеба и других продуктов. Кроме того, мониторинг химического состава и выявление возможных загрязнений (например, пестицидов, микотоксинов или тяжёлых металлов) имеют решающее значение для охраны здоровья потребителей и соответствия международным стандартам качества. В условиях изменения климата и интенсификации земледелия своевременная и точная оценка качества пшеницы позволяет оптимизировать методы хранения, переработки и селекции, что делает исследования в этой области особенно актуальными. В настоящее время для анализа состава и качества сельскохозяйственной продукции широко применяются различные физико-химические и спектроскопические методы [4-7].

Среди них — инфракрасная (ИК) и ближняя ИК-спектроскопия, ультрафиолетовая и видимая спектроскопия (UV-Vis), флуоресцентный анализ, хроматографические методы (газовая и жидкостная хроматография), а также масс-спектрометрия. Эти методы позволяют определять содержание основных питательных веществ, пестицидов, токсинов, влаги и других параметров, характеризующих качество и безопасность сельскохозяйственной продукции. Наряду с вышеперечисленными методами можно выделить спектроскопию комбинационного рассеяния (КР) света, которая чаще рассматривается как перспективная альтернатива благодаря сочетанию скорости, универсальности и отсутствия необходимости в сложной пробоподготовке.

Спектроскопия КР представляет собой высокоинформационный, быстрый и неразрушающий метод анализа структуры различных веществ и материалов. Этот подход обладает уникальными возможностями для проведения количественных исследований как молекулярной, так и надмолекулярной структуры вещества. Количество и положение линий в спектрах КР дают ценную информацию о строении рассеивающих молекул, а привлечение количественных характеристик линий КР, таких как частота, интенсивность и полуширина, позволяет значительно расширить интерпретационные возможности метода и повысить точность анализа.

Среди несомненных достоинств спектроскопии КР по сравнению с другими традиционными методами исследования сельскохозяйственной продукции (например, ИК или флуоресцентной спектроскопией) можно выделить возможность изучения образцов без предварительной подготовки, в малом объёме и с высоким пространственным разрешением — до единиц микрон как по поверхности, так и по глубине образца. Ещё одним важным преимуществом является высокая скорость анализа: исследование одного образца может занимать менее минуты.

Кроме того, этот метод отличается высокой селективностью, что позволяет различать химически сходные соединения, а также стойкостью к влиянию влаги и флуоресценции, которая часто мешает другим оптическим методам. Современные системы на основе КР спектроскопии могут быть совмещены с микроскопией или волоконно-оптическими зондами, что делает возможным встраивание метода в производственные линии и проведение *in situ* мониторинга качества продукции.

### *Материалы и методы исследования*

В данной работе методом спектроскопии КР было проведено исследование состава зёрен пшеницы разного размера и массы. В качестве образцов для исследования были взяты зёрна пшеницы сорта «Тимирязевка 150». Этот сорт озимый, среднепоздний,

высокоурожайный, короткостебельный с вегетационным периодом 214-306 дней. Сорт устойчив к полеганию. Оригинатор сорта: КНИИСХ им. П. П. Лукьяненко (г. Краснодар), производитель зёрен: АгроМир-Сидс (Краснодарский край). Сорт устойчив к бурой ржавчине, жёлтой ржавчине, стеблевой ржавчине, мучнистой росе; средне восприимчив к фузариозу и септориозу. Восприимчив к твёрдой головне и вирусным болезням. Для исследования были отобраны и очищены зёрна различной фракции (т.е. массы 1000 семян) от 32 до 47 г.

Для проведения спектрального анализа 20 г зёрен каждой фракции измельчались до состояния муки в одинаковых условиях. Получившаяся мука помещалась на алюминиевую подложку, на которой проводилась регистрация спектров. Спектры КР регистрировались с помощью спектрометра Senterra II (Bruker, США), оснащённого диодным лазером с длиной волны возбуждающего излучения  $\lambda = 785$  нм и с выходной мощностью 100 мВт, ПЗС-матричным детектором, охлаждаемого элементами Пельтье и объективом Olympus с 20-кратным увеличением (NA = 0.4).

Для подавления рэлеевского рассеяния применялись краевые светофильтры. Спектры регистрировались при комнатной температуре в режиме рассеяния на  $180^\circ$  со спектральным разрешением  $4 \text{ см}^{-1}$ . Время регистрации каждого спектра не превышало 3 мин.

Перед тем как перейти к обсуждению результатов, стоит отметить некоторые особенности процесса получения спектров КР. Во-первых, для каждого образца спектры регистрировались в 5 разных точках. Полученные спектры были схожи друг с другом, что позволяет сделать вывод о том, что образцы были пространственно однородными по составу. Во-вторых, в каждой точке регистрировалось несколько спектров подряд (от 10 до 20). Эти серии спектров также не отличались друг от друга, что говорит о том, что во время работы лазера образцы не деградировали.

Спектры, представленные в разделе «Результаты и обсуждение», являются суммой всех спектров, полученных для каждого образца во всех его точках. Во время математической обработки из зарегистрированных спектров вычитался фон флюoresценции, который был аппроксимирован полиномом второго порядка.

### Результаты и обсуждение

Зарегистрированные спектры измельчённых зёрен пшеницы разной фракции представлены на Рисунке 1. Все спектры нормированы на пиковую интенсивность линии с максимумом около  $480 \text{ см}^{-1}$ , которая относится к валентным колебаниям C–H связей. Видно, что с увеличением фракции зерна растёт интенсивность отдельных областей спектров. Наиболее заметные изменения наблюдаются для области колебаний фенильных колец ( $850 - 950 \text{ см}^{-1}$ ), а также ароматических колец и C–C и C–N связей ( $1000-1150 \text{ см}^{-1}$ ) [8-11].

Предположительно это может быть связано с двумя факторами. Во-первых, в более крупных зёдрах может содержаться большая концентрация различных свободных аминокислот и пептидов, нежели в зёдрах меньшего размера.

Во-вторых, необходимо учитывать состав образца. При измельчении зёрен в получившейся муке содержатся частицы как внутренней части зерна, так и оболочки. Объёмная доля частиц оболочки в зёдрах фракции  $>45$  значительно меньше, чем в зёдрах фракции 32-33, поскольку площадь поверхности зерна с увеличением фракции растёт медленнее, чем его объём, а масса всех образцов одинакова. При этом твёрдая оболочка сама по себе не имеет выраженного спектра КР, при её анализе был обнаружен только фон флюoresценции.

Таким образом, спектры КР муки, полученной из зёрен малой фракции, содержат большую фоновую долю, а в случае крупной фракции спектр внутренней части зерна имеет намного большую интенсивность, чем фон. Стоит отметить, что внутренняя часть также даёт свой дополнительный фоновый вклад в общий спектр, но при этом её полезный сигнал (т.е. интенсивность линий КР по отношению к интенсивности фона) значительно выше.

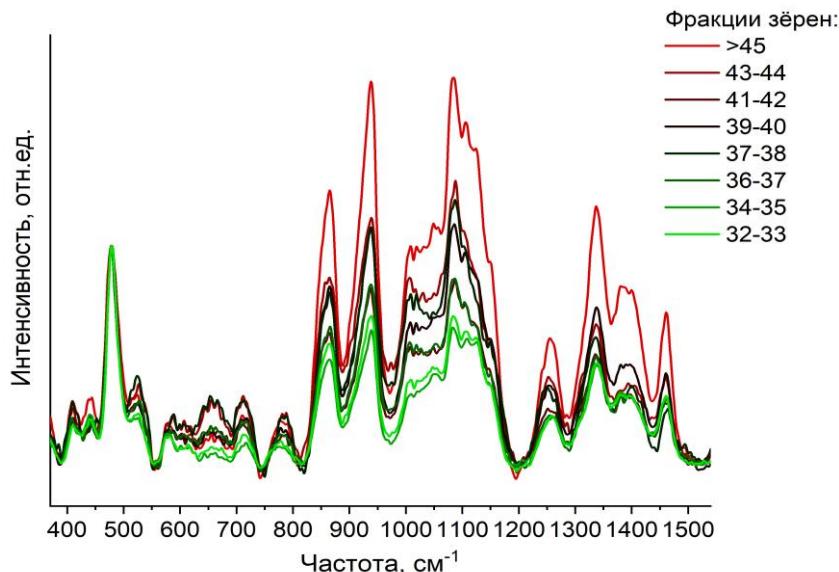


Рисунок 1. Обработанные спектры КР образцов измельчённых зёрен пшеницы разных фракций

Помимо роста интенсивности отдельных областей в обработанных спектрах стоит отметить наблюдение, сделанное при анализе необработанных спектров КР. Было обнаружено, что фон флюoresценции, который присущ спектрам сложных органических соединений, также растёт с увеличением фракции зерна. Это связано с ростом фонового сигнала и от оболочки зёрен, и от их внутренней части, чей вклад при этом становится больше.

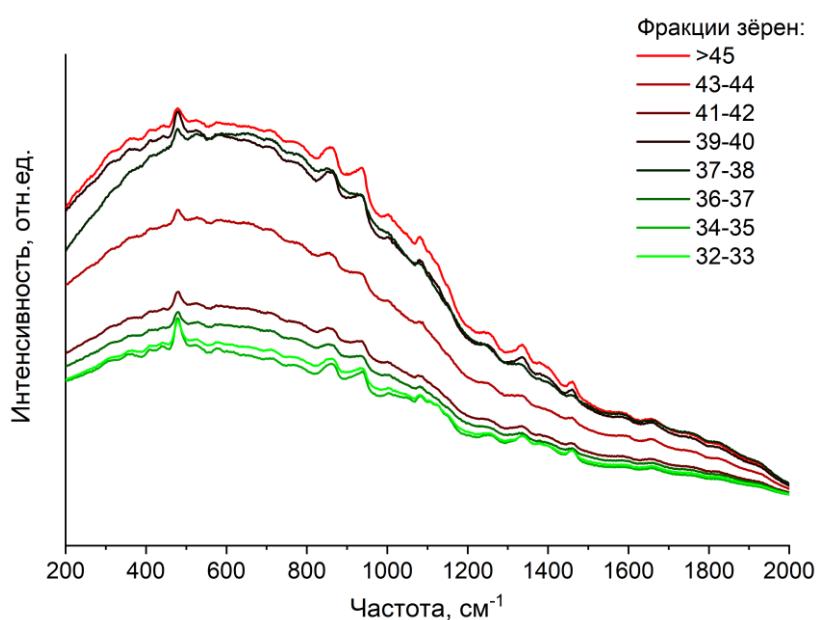


Рисунок 2. Необработанные спектры КР образцов измельчённых зёрен пшеницы разных фракций

Несмотря на то, что анализ фоновой компоненты — это сложный процесс, который связан с большим количеством сложностей, статистика, полученная в случае зёрен, исследованных в данной работе, даёт увидеть тенденцию, объединяющую фон флюоресценции и размер зерна. Это позволяет проводить более быстрый оценочный анализ фракционного состава зерновых продуктов, так как не требует последующей обработки спектральных данных.

### Заключение

Проведённые исследования подтвердили возможность применения спектроскопии комбинационного рассеяния для анализа структурных особенностей зёрен пшеницы. Метод продемонстрировал высокую чувствительность к изменению фракционного состава зерна и позволил выявить корреляцию между размером зёрен и интенсивностью характерных спектральных линий, связанных с белковыми и углеводными компонентами. Повышение интенсивности спектров для крупных зёрен указывает на более высокое содержание органических соединений, что может использоваться при сортировке и оценке качества зерна.

### Список литературы:

1. Жидков С. А., Воронина Е. А. Состояние и перспективы развития мирового рынка продовольственного зерна // Вестник Мичуринского государственного аграрного университета. 2019. Т. 1. С. 154-156.
2. Масалов В. Н., Березина Н. А., Червонова И. В. Состояние зернового хозяйства России, роль зерновых в кормлении сельскохозяйственных животных и питании человека // Вестник аграрной науки. 2021. №2 (89). С. 3-15. <https://doi.org/10.17238/issn2587-666X.2021.2.3>
3. Zakharova N. N., Zakharov N. G. Wheat grain production in the world and its dynamics // E3S web of Conferences. EDP Sciences, 2024. V. 480. P. 03001. <https://doi.org/10.1051/e3sconf/202448003001>
4. Федоренко В. Ф., Буклагин Д. С. Методы и инструменты контроля качества сельскохозяйственной продукции. М.: Росинформагротех, 2017. 290 с.
5. Aby R. G., Maier D. E. Advances in techniques for monitoring the quality of stored cereal grains // Advances in postharvest management of cereals and grains. Burleigh Dodds Science Publishing, 2020. P. 363-388.
6. Liu Y., Zhang J., Yuan H., Song M., Zhu Y., Cao W., Ni J. Non-destructive quality-detection techniques for cereal grains: A systematic review // Agronomy. 2022. V. 12. №12. P. 3187.
7. Pandiselvam R., Sruthi N. U., Kumar A., Kothakota A., Thirumdas R., Ramesh S. V., Cozzolino D. Recent applications of vibrational spectroscopic techniques in the grain industry // Food Reviews International. 2023. V. 39. №1. P. 209-239. <https://doi.org/10.1080/87559129.2021.1904253>
8. Stawoska I., Staszak A. M., Ciereszko I., Oliwa J., Skoczowski A. (Using isothermal calorimetry and FT-Raman spectroscopy for step-by-step monitoring of maize seed germination: case study // Journal of Thermal Analysis & Calorimetry. 2020. V. 142. №2. <https://doi.org/10.1007/s10973-020-09525-x>

9. Payne W. Z., Kurouski D. Raman spectroscopy enables phenotyping and assessment of nutrition values of plants: a review // *Plant Methods*. 2021. V. 17. №1. P. 78. <https://doi.org/10.1186/s13007-021-00781-y>
10. Sun Y., Yanagisawa M., Kunimoto M., Nakamura M., Homma T. Depth profiling of APTES self-assembled monolayers using surface-enhanced confocal Raman microspectroscopy // *Spectrochimica Acta Part A: Molecular and Biomolecular Spectroscopy*. 2017. V. 184. P. 1-6. <https://doi.org/10.1016/j.saa.2017.04.036>
11. Kaulich P. T., Cassidy L., Winkels K., Tholey A. Improved identification of proteoforms in top-down proteomics using FAIMS with internal CV stepping // *Analytical Chemistry*. 2022. V. 94. №8. P. 3600-3607. <https://doi.org/10.1021/acs.analchem.1c05123>

*References:*

1. Zhidkov, S. A., & Voronina, E. A. (2019). Sostoyanie i perspektivy razvitiya mirovogo rynka prodovol'stvennogo zerna. *Vestnik Michurinskogo gosudarstvennogo agrarnogo universiteta*, 1, 154-156. (in Russian).
2. Masalov, V. N., Berezina, N. A., & Chervonova, I. V. (2021). Sostoyanie zernovogo khozyaistva Rossii, rol' zernovykh v kormlenii sel'skokhozyaistvennykh zhivotnykh i pitanii cheloveka. *Vestnik agrarnoi nauki*, (2 (89)), 3-15. (in Russian). <https://doi.org/10.17238/issn2587-666X.2021.2.3>
3. Zakharova, N. N., & Zakharov, N. G. (2024). Wheat grain production in the world and its dynamics. In *E3S web of Conferences* (Vol. 480, p. 03001). EDP Sciences. <https://doi.org/10.1051/e3sconf/202448003001>
4. Fedorenko, V. F. (2017). Metody i instrumenty kontrolya kachestva sel'skokhozyaistvennoi produktsii. Moscow. (in Russian).
5. Aby, R. G., & Maier, D. E. (2020). Advances in techniques for monitoring the quality of stored cereal grains. In *Advances in postharvest management of cereals and grains* (pp. 363-388). Burleigh Dodds Science Publishing.
6. Liu, Y., Zhang, J., Yuan, H., Song, M., Zhu, Y., Cao, W., ... & Ni, J. (2022). Non-destructive quality-detection techniques for cereal grains: A systematic review. *Agronomy*, 12(12), 3187.
7. Pandiselvam, R., Sruthi, N. U., Kumar, A., Kothakota, A., Thirumdas, R., Ramesh, S. V., & Cozzolino, D. (2023). Recent applications of vibrational spectroscopic techniques in the grain industry. *Food Reviews International*, 39(1), 209-239. <https://doi.org/10.1080/87559129.2021.1904253>
8. Stawoska, I., Staszak, A. M., Ciereszko, I., Oliwa, J., & Skoczowski, A. (2020). Using isothermal calorimetry and FT-Raman spectroscopy for step-by-step monitoring of maize seed germination: case study. *Journal of Thermal Analysis & Calorimetry*, 142(2). <https://doi.org/10.1007/s10973-020-09525-x>
9. Payne, W. Z., & Kurouski, D. (2021). Raman spectroscopy enables phenotyping and assessment of nutrition values of plants: a review. *Plant Methods*, 17(1), 78. <https://doi.org/10.1186/s13007-021-00781-y>
10. Sun, Y., Yanagisawa, M., Kunimoto, M., Nakamura, M., & Homma, T. (2017). Depth profiling of APTES self-assembled monolayers using surface-enhanced confocal Raman microspectroscopy. *Spectrochimica Acta Part A: Molecular and Biomolecular Spectroscopy*, 184, 1-6. <https://doi.org/10.1016/j.saa.2017.04.036>

11. Kaulich, P. T., Cassidy, L., Winkels, K., & Tholey, A. (2022). Improved identification of proteoforms in top-down proteomics using FAIMS with internal CV stepping. *Analytical Chemistry*, 94(8), 3600-3607. <https://doi.org/10.1021/acs.analchem.1c05123>

Поступила в редакцию  
13.11.2025 г.

Принята к публикации  
21.11.2025 г.

*Ссылка для цитирования:*

Кузнецов С. М. Анализ влияния фракционного состава зёрен пшеницы на спектры комбинационного рассеяния света // Бюллетень науки и практики. 2025. Т. 11. №12. С. 28-34. <https://doi.org/10.33619/2414-2948/121/03>

*Cite as (APA):*

Kuznetsov, S. (2025). Analysis of the Influence of the Fractional Composition of Wheat Grains on Raman Spectra. *Bulletin of Science and Practice*, 11(12), 28-34. (in Russian). <https://doi.org/10.33619/2414-2948/121/03>