

DOI: <https://doi.org/10.30898/1684-1719.2025.1.6>

УДК: 535.343.4, 543.422

ИССЛЕДОВАНИЕ ПРОДУКТОВ ТЕРМИЧЕСКОГО РАЗЛОЖЕНИЯ ЗЕРНА (ЯЧМЕНЯ И ПШЕНИЦЫ) МЕТОДОМ ТЕРАГЕРЦОВОЙ ГАЗОВОЙ НЕСТАЦИОНАРНОЙ СПЕКТРОСКОПИИ ВЫСОКОГО РАЗРЕШЕНИЯ

В.Л. Вакс^{1,2}, В.А. Анфертьев^{1,2}, Е.Г. Домрачева^{1,2}, М.Б. Черняева^{1,2},
А.С. Черняева¹, А.А. Яблоков^{1,2}

¹ИФМ РАН, 603950, Нижний Новгород, ГСП-105

²ННГУ им. Н.И.Лобачевского, 603022, Нижний Новгород, пр. Гагарина, 23

Статья поступила в редакцию 16 декабря 2024 г.

Аннотация. Работа посвящена исследованию состава зерна (ячменя и пшеницы) методом терагерцовой газовой спектроскопии высокого разрешения. Сравнение состава химических соединений, образующихся при термическом разложении зерна и круп, полученных из зерна, проводилось с помощью разработанного авторами спектрометра высокого разрешения с фазовой манипуляцией воздействующего на исследуемый газ излучения диапазона 115-175 ГГц. Для идентификации веществ использовались бесплатные онлайн-базы данных по спектроскопии. Представлены результаты сравнения молекулярных профилей газовых смесей продуктов термического разложения двух сортов ячменя, перловой крупы и одного сорта пшеницы. Показано хорошее совпадение молекулярного состава для ячменя и перловой крупы и некоторое отличие от состава смеси, полученной при нагреве пшеницы.

Ключевые слова: ТГц спектроскопия высокого разрешения, зерно, пшеница, ячмень, химический состав, продукты термического разложения, линия поглощения

Финансирование: Программное обеспечение для обработки спектроскопических данных спектрометров разработано в рамках государственного задания FFUF-2022-0006. Спектроскопические измерения газовых смесей, полученных при терморазложении образцов зерна, выполнены в рамках государственного задания FFUF-2024-0024.

Автор для переписки: Черняева Александра Сергеевна, aleksacherny@ipmras.ru

Введение

Терагерцовый (ТГц) диапазон частот предоставляет большие возможности для создания методов как контроля качества, так и диагностики заболеваний зерна. И первые работы в этом направлении уже ведутся, например, с использованием технологии ТГц спектроскопии во временной области и ТГц визуализации оценивалось состояние семян (всхожесть) по степени превращения крахмала в мальтозу [1]. Перспективным спектроскопическим подходом является газовая нестационарная спектроскопия ТГц частотного диапазона. Метод спектроскопии высокого разрешения основан эффекте свободно затухающей поляризации и реализуется с использованием фазовой манипуляции воздействующего на газ излучения или быстрого свипирования частоты через резонанс, обеспечивающие высокую чувствительность и разрешение, ограниченное доплеровским уширением. Практическая реализация спектрометров связана с серьезными требованиями, предъявляемыми к источникам излучения, необходимыми для анализа состава веществ, содержащихся в следовых концентрациях (чувствительность должна давать возможность детектирования веществ в концентрации на уровне ppb (частей на миллиард); должно быть обеспечено высокое разрешение, позволяющее обнаруживать узкие линии поглощения; стабильность частоты излучения должна быть не хуже $10^{-8} \div 10^{-10}$). Такие приборы с коротким временем измерения порядка $1 \div 2$ с позволяют проводить анализ практически в режиме реального времени. Предварительное исследование возможности

использования спектроскопии высокого разрешения ТГц диапазона для анализа состава «запахов» зерновых культур при термическом разложении для проведения исследований в газовой фазе показало разницу в составе продуктов термического разложения для зерна разных культур [2].

Целью работы является исследование возможности использования ТГц спектроскопии высокого разрешения для анализа состава газовых смесей, полученных при термическом разложении зерна (на примере ячменя и пшеницы), выявление сходства и различия в продуктах термического разложения неочищенного зерна двух сортов ячменя и перловой крупы, вырабатываемой из ячменя, а также пшеницы. В дальнейшем полученные результаты будут использованы для создания метода диагностики степени грибкового поражения зерновых культур.

1. Методы

Для исследования «запахов» зерна использовался нестационарный газовый спектрометр (рабочий диапазон 115-175 ГГц), разработанный в ИФМ РАН [3].

В данном спектрометре реализован режим фазовой манипуляции, когда создается периодическое переключение (со сдвигом π) фазы зондирующего излучения. Это фазоманипулированное излучение резонансно взаимодействует с исследуемым газом. Происходят процессы нестационарного излучения и поглощения, вызванные периодическим созданием наведенной макроскопической поляризации и ее затуханием.

Источником излучения спектрометра является синтезатор на лампе обратной волны (ЛОВ) (диапазон частот 115-175 ГГц), которая стабилизирована системой фазовой автоподстройки частоты. Перестройка частоты генерации излучения ЛОВ осуществляется напряжением от высоковольтного источника питания. Данный источник излучения соответствует вышеперечисленным требованиям спектроскопии высокого разрешения. Приемный блок включает в себя детектор на основе диода

Шоттки, усилитель принимаемого сигнала; аналого-цифровой преобразователь, где принимаемый и усиленный сигнал преобразовывается в цифровую форму, и цифровое запоминающее устройство, где поступающие на его вход сигналы суммируются и усредняются в режиме реального времени.

Объектами исследования являлись семена сортов ярового ячменя «Владимир» и «Надежный». Ячмень «Владимир» выведен ФНЦ «Немчиновка», Рязанским НИИСХ, ФГУП «КОЛОС». Масса 1000 зерен – 42-51 г. Может использоваться как пивоваренный ячмень. Среднеустойчив к пыльной головне, сильно восприимчив к гельминтоспориозу, в полевых условиях поражается карликовой ржавчиной и мучнистой росой. [4]

Сорт ярового ячменя «Надежный» создан совместно Рязанским и Московским НИИСХ. Масса 1000 зерен – 40-46 г. Сорт используется для пивоварения. Слабо поражается пыльной головней, сетчатой, темно-бурой, полосатой пятнистостью, среднеустойчив к мучнистой росе.[5]

Скороспелый сорт яровой мягкой пшеницы «Ирень» выведен в Красноуфимском селекционном центре Уральского НИИСХ. Масса 1000 зерен – 32-38 г, содержание белка – 13-16 %, клейковины – 26-38 %, содержание лизина и треонина – 8,7 г/кг. Слабо восприимчив к корневым, довольно восприимчив к пыльной и твердой головне, умеренно восприимчив к бурой ржавчине. [6]

Перловая крупа представляет собой специально обработанные зерна ячменя, прошедшие процесс шлифовки несколько раз. Ячмень, очищенный от грубой оболочки, представляет собой зерна среднего размера светло-серого цвета с темной продольной полосой.

Подготовка образца заключалась в следующем [2]. Зерно или крупу (измельченную в порошок) помещали в колбу, колбу соединяли с измерительной газовой ячейкой через перепускной клапан. Ячейку вакуумировали с помощью насосной станции (Hi-Cube Eco 80, Pfeiffer). Для обезвоживания образца зерна проводили нагрев образца в условиях вакуума. Необходимо проводить предварительную откачку ячейки до давления

$1 \cdot 10^{-3}$ - $5 \cdot 10^{-3}$ мбар с целью исключения влияния паров воды на определение следовых концентраций компонентов смеси. После этого нагрев колбы с образцом зерна продолжали поэтапно до максимальной температуры 200°C . Образовавшаяся в процессе нагрева многокомпонентная газовая смесь напускалась в ячейку до давления $5 \cdot 10^{-2}$ мбар. Для качественного анализа изменений состава различных образцов можно подсчитать количество линий поглощения, зарегистрированных в измеренном спектре для каждого указанного вещества в смеси продуктов термического разложения зерна. Важно проводить измерения в одинаковых условиях (исследуемый образец должен иметь одинаковую массу в колбе перед измельчением в порошок, рабочее давление в ячейке поддерживаться на определенном уровне, одинаковая степень нагрева обезвоженного образца). При большей относительной концентрации определенного вещества в смеси число его линий поглощения будет увеличиваться за счет увеличения концентрации вещества. Для линий поглощения, имеющих большую интегральную интенсивность и регистрируемых при низкой концентрации, амплитуда сигнала детектора с ростом концентрации данного соединения в смеси также будет увеличиваться. Это справедливо для случая, когда в этом диапазоне лежат как сильные, так и слабые линии вещества. Следовательно, увеличение или уменьшение числа линий поглощения позволяет сделать качественный вывод об увеличении или уменьшении концентрации данного вещества от образца к образцу.

При нагревании образца макромолекулы, такие как крахмал, сахара и т.д. – разрушаются, образуя более легкие вещества – продукты термического разложения. Ряд органических химических соединений биологического происхождения при нагревании распадаются на наборы веществ (вторичные метаболиты), близкие по составу, но в этих наборах будут присутствовать продукты, отличающие смеси, полученные из разных исходных веществ. Среди образующихся продуктов термического разложения методами терагерцовой спектроскопии можно идентифицировать только вещества, являющиеся полярными молекулами, т. е. обладающие ненулевым дипольным моментом.

Кроме того, эти вещества должны иметь линии поглощения вращательного спектра, попадающие в рабочий диапазон спектрометра. Идентификация веществ по линиям поглощения проводилась с использованием электронных спектроскопических баз данных [7, 8], данные в которых регулярно обновляются и дополняются. Данные обо всех веществах, зарегистрированных в исследуемой смеси продуктов термического разложения данного образца во всех областях рабочего диапазона спектрометра, объединялись с учетом изотопологов и проводилось сравнение образцов между собой.

2. Результаты

Образцы зерна ячменя двух сортов и перловой крупы сравнивались по молекулярному составу и количеству линий поглощения.

Состав перловой крупы (на 100 г) [9]:

- Белки – 9,3 г, белок перловой крупы более ценен, чем белок пшеницы, так как содержит лизин – незаменимую аминокислоту;
- Жиры – 1,1 г;
- Крахмал – 65,6 г;
- Клетчатка – 1,0 г;
- Минеральные вещества – 10 мг натрия, 172 мг калия, 38 мг кальция, 40 мг магния, 32,3 мг фосфора, 1,8 мг железа, перловая крупа является лидером по количеству фосфора среди злаковых культур;
- Витамины – В1, В2, РР.

Анализ зарегистрированных спектров многокомпонентных газовых смесей продуктов термического разложения исследуемых образцов зерна позволил сделать следующие выводы относительно идентифицированных веществ. Молекулярный состав рассматриваемых сортов ячменя практически совпадает. Пример записи спектров ячменя двух сортов представлен на рис. 1.

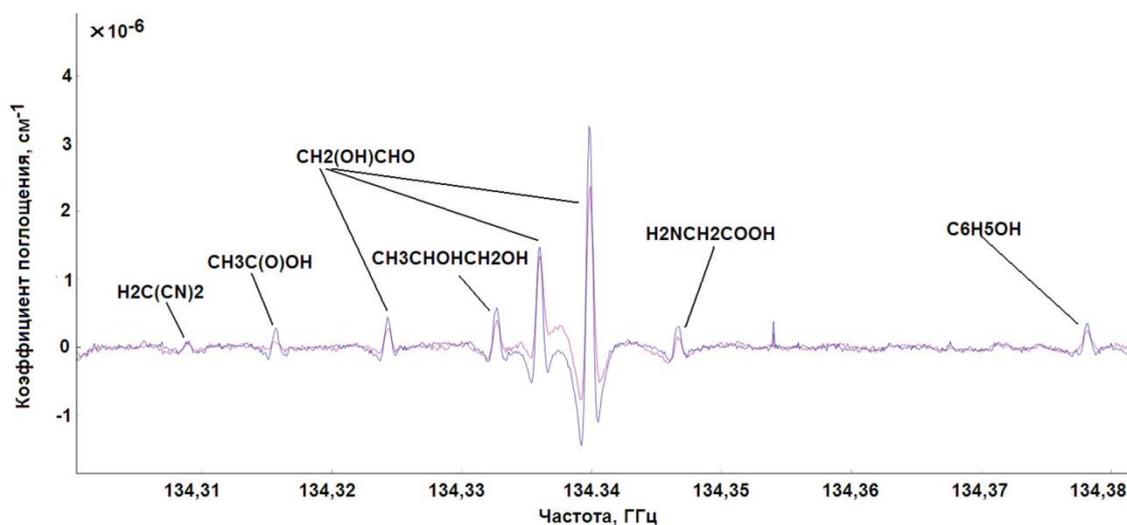


Рис. 1. Записи участка спектра смеси газообразных продуктов термического разложения зерна для двух сортов ячменя («Надежный» – синяя кривая и «Владимир» – розовая кривая), полученные с использованием спектрометра с фазовой манипуляцией воздействующего на газ излучения с линиями поглощения малонитрила ($\text{H}_2\text{C}(\text{CN})_2$) $f_{\text{эксп}} = 134308,8$ МГц ($f_{\text{кат}} = 134308,9935$ МГц), уксусной кислоты ($\text{CH}_3\text{C}(\text{O})\text{OH}$) $f_{\text{эксп}} = 134315,7$ МГц ($f_{\text{кат}} = 134315,7594$ МГц), гликольальдегида ($\text{CH}_2(\text{OH})\text{CHO}$) – три линии с центральными частотами $f_{1\text{эксп}} = 134324,3$ МГц ($f_{1\text{кат}} = 134324,2787$ МГц), $f_{2\text{эксп}} = 134336,0$ МГц ($f_{2\text{кат}} = 134335,9526$ МГц), $f_{3\text{эксп}} = 134339,8$ МГц ($f_{3\text{кат}} = 134339,875$ МГц), глицина ($\text{H}_2\text{NCH}_2\text{COOH}$) $f_{\text{эксп}} = 134346,7$ МГц ($f_{\text{кат}} = 134346,6744$ МГц), пропандиола ($\text{CH}_3\text{CHONCH}_2\text{OH}$) $f_{\text{эксп}} = 134332,7$ МГц ($f_{\text{кат}} = 134332,9084$ МГц) и фенола ($\text{C}_6\text{H}_5\text{OH}$) $f_{\text{эксп}} = 134378,2$ МГц ($f_{\text{кат}} = 134378,1507$ МГц).

В продуктах термического разложения образцов ячменя обоих сортов обнаружен ряд веществ с высоким числом линий поглощения в рабочем диапазоне частот спектрометра, такие как гликольальдегид, ацетальдегид, пропандиол (два изомера), фенилпропионитрил, мочеви́на, ацетон, гидроксиацетон, уксусная кислота, винилцианид, бутилцианид, изопропилцианид, аланин. В диапазоне частот 115-175 ГГц зарегистрировано более сотни линий поглощения этих веществ. Основную часть сырого ячменя и, следовательно, перловой крупы составляет крахмал. Крахмал – органическое вещество с формулой $(\text{C}_6\text{H}_{10}\text{O}_5)_n$, смесь полисахаридов амилозы и амилопектина, мономером которого является альфа-глюкоза. Амилоза – полисахарид, входящий в состав крахмала, образован линейными или слаборазветвленными цепями остатков альфа-глюкозы, соединенных

гликозидными связями. Амилопектин – полисахарид, входящий в состав крахмала, образован разветвленными цепями остатков глюкозы, соединенных гликозидными связями. При нагревании сухого крахмала до 200–250°C он частично разлагается и получается смесь полисахаридов (декстрин и др.), менее сложных, чем крахмал. При дальнейшем нагревании макромолекулы распадаются на более легкие соединения, которые и регистрируются при спектроскопическом исследовании.

В многокомпонентных газовых смесях продуктов термического разложения образцов перловой крупы и зерна ячменя сорта «Надежный» в измеренных спектрометром с фазовой манипуляцией излучения спектрах в диапазоне частот 115-175 ГГц были обнаружены спектральные линии веществ разных классов, идентифицированных с использованием спектроскопических баз данных [7, 8]. Состав продуктов термического разложения перловой крупы и ячменного зерна практически идентичен. Вещества и классы, которые присутствуют во всех типах образцов, следующие:

- Изоциановая кислота
- Азотсодержащие соединения – Амиды, Имины, Амины (R-NH₂ и т.д.)
- Спирты (R-OH)
- Альдегиды и кетоны (R-CHO)
- Кислоты (R-COOH)
- Нитрилы (R-CN)
- Ароматические соединения (C₆H₅-R)
- Серосодержащие соединения
- Фосфорсодержащие соединения

На рисунке 2 показано сходство состава многокомпонентных газовых смесей образцов обоих типов (крупка перловая – красный и ячмень «Надежный» – синий). Часть веществ соответствуют продуктам разложения более тяжелых органических веществ (прежде всего крахмала), содержащихся в зерне ячменя без оболочки.

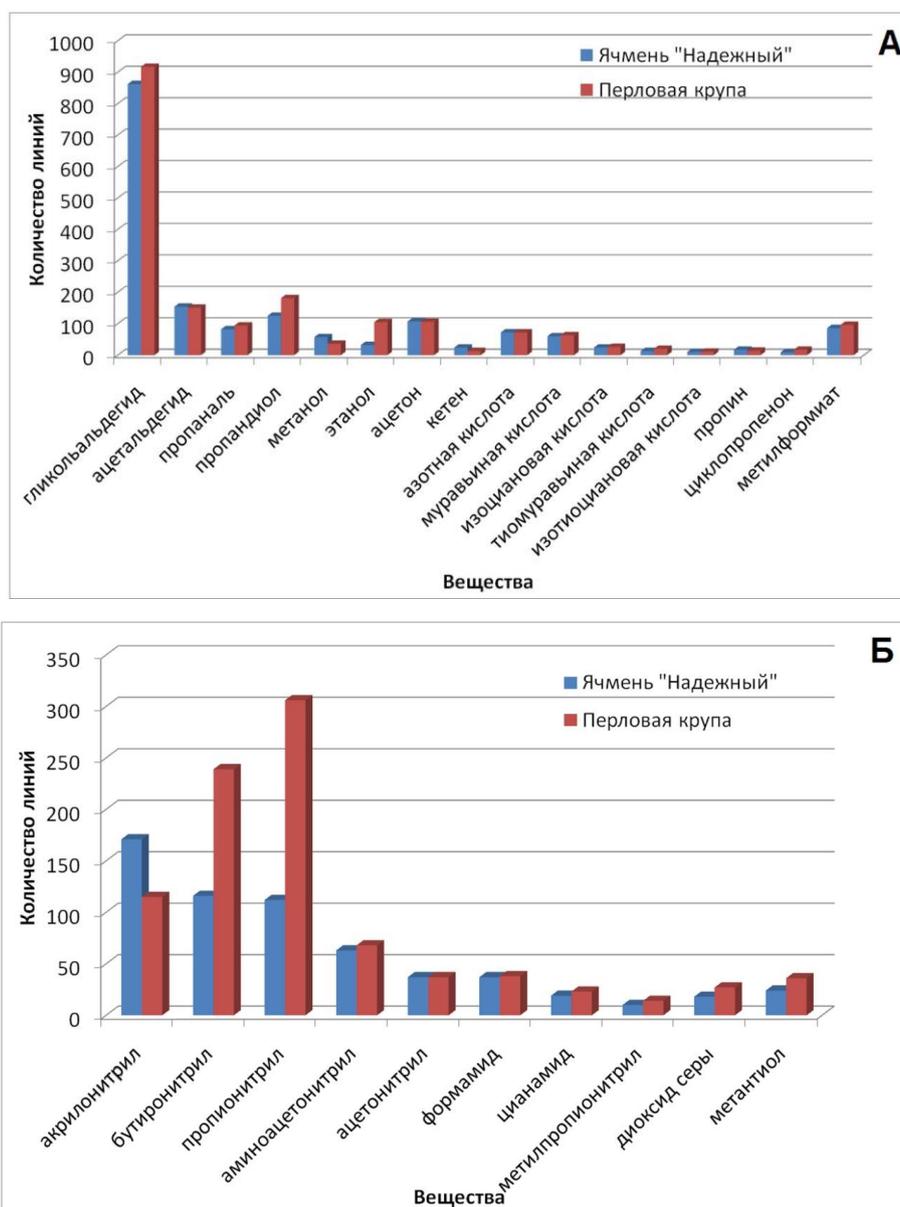


Рис. 2. Сравнение веществ, обнаруженных и идентифицированных в многокомпонентных газовых смесях продуктов термического разложения для обоих образцов (крупа перловая – красный и ячмень «Надежный» – синий): А) альдегиды, спирты, органические и неорганические кислоты и некоторые другие органические вещества; Б) азот- и серосодержащие вещества.

Обнаружено несколько веществ, линии поглощения которых проявляются в продуктах термического разложения образцов только для одного образца (или зерна ячменя, или крупы). В исследуемых смесях формальдегид, оксиран, антивиниловый спирт и метилизоцианат выявлены только в ячмене «Надежный». А тиоформальдегид, пропиаль, дитиоуглеводородная кислота, диметиловый эфир, дикетен, пропаргиловый спирт, метилцианат, пропионитрил, этантиол идентифицированы для образца перловой крупы.

Кроме того, количество линий для ряда нитрилов, представленных на рис. 2Б для образца перловой крупы, превышает их количество для необработанного зерна. Различие в составе может объясняться с одной стороны присутствием в необработанном зерне оболочки, а с другой стороны, возможными различиями состава зерна в рамках различия веществ в сортах, используемых для изготовления крупы и пивоварения.

Представленные результаты по сходству химического состава смеси при термическом разложении перловой крупы и необработанного ячменя можно использовать для создания потенциального набора веществ, присутствующих в незараженном зерне. В частности, часть этих соединений является продуктами распада полисахаридов, входящих в состав крахмала. При исследовании зерна, зараженного грибковыми заболеваниями, эти вещества будут присутствовать в составе смеси, а остальные соединения будут рассматриваться как потенциальные маркеры зараженности.

Проводилось также сравнение продуктов термического разложения зерна ячменя (сорт «Надежный») с продуктами термического разложения зерна пшеницы сорта «Ирень» в диапазоне частот 130-135 ГГц. Пример записи участка спектра поглощения вблизи 134,9 ГГц приведен на рис. 3. Кроме того, сравнение некоторых веществ для образцов ячменя («Надежный») и пшеницы («Ирень») для спектральной области шириной 5 ГГц (130-135 ГГц) приведено в таблице 1.

К веществам, линии которых зарегистрированы в спектрах, представленных на рис. 3 для обоих образцов, относится гликольальдегид, линии которого в спектре ячменя более интенсивные, что свидетельствует о большем содержании вещества в смеси. Две более слабые линии гликольальдегида ($\text{CH}_2(\text{OH})\text{CHO}$) с частотами $f_{2\text{экср}} = 134973.9$ МГц ($f_{2\text{кат}} = 134973.9202$ МГц), $f_{3\text{экср}} = 134979,5$ МГц ($f_{3\text{кат}} = 134979,5311$ МГц) имеют примерно одну интегральную интенсивность, но линия с частотой $f_{2\text{экср}} = 134973.9$ МГц может перекрываться с близлежащей, а, следовательно, не разрешаемой линией $^{13}\text{CH}_3(\text{CH}_3)\text{CHCN}$ $f_{\text{кат}} = 134974,0664$ МГц, линии

которого выявлены на других спектральных участках для обоих образцов, поэтому она зарегистрирована для обоих и для ячменя, и для пшеницы, а отдельно лежащая линия с частотой $f_{3\text{эксп}} = 134979,5$ МГц ($f_{3\text{кат}} = 134979,5311$ МГц) примерно с такой же интегральной интенсивностью присутствует только для ячменя.

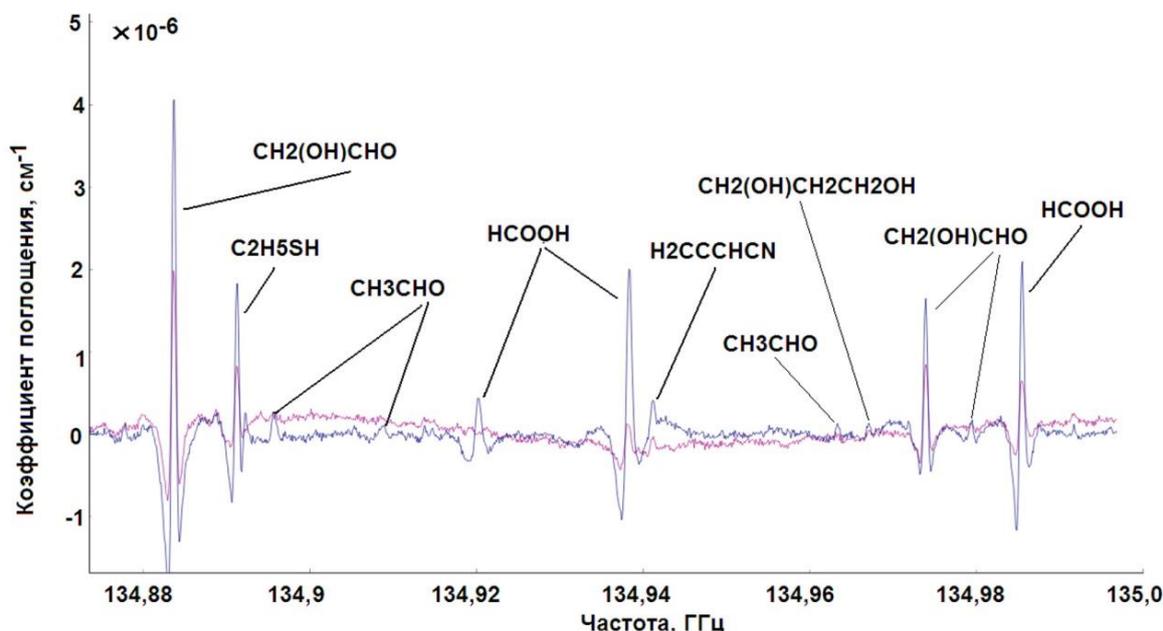


Рис. 3. Пример записи участка спектров поглощения вблизи 134,9 ГГц для смесей продуктов термического разложения зерна ячменя (сорт «Надежный» – синяя кривая) и зерна пшеницы (сорт «Ирень» – розовая кривая) с линиями поглощения гликоальдегида ($\text{CH}_2(\text{OH})\text{CHO}$) с центральными частотами

$$f_{1\text{эксп}} = 134883,7 \text{ МГц} (f_{1\text{кат}} = 134883,6226 \text{ МГц}),$$

$$f_{2\text{эксп}} = 134973,9 \text{ МГц} (f_{2\text{кат}} = 134973,9202 \text{ МГц}),$$

$$f_{3\text{эксп}} = 134979,5 \text{ МГц} (f_{3\text{кат}} = 134979,5311 \text{ МГц});$$

этантиола ($\text{C}_2\text{H}_5\text{SH}$) $f_{\text{эксп}} = 134888,6$ МГц ($f_{\text{кат}} = 134888,66$ МГц);

муравьиной кислоты (HCOOH) с частотами

$$f_{1\text{эксп}} = 134920,2 \text{ МГц} (f_{1\text{кат}} = 134920,2444 \text{ МГц}),$$

$$f_{2\text{эксп}} = 134938,3 \text{ МГц} (f_{2\text{кат}} = 134938,3853 \text{ МГц}),$$

$$f_{3\text{эксп}} = 134985,5 \text{ МГц} (f_{3\text{кат}} = 134985,3698 \text{ МГц});$$

цианоаллена (H_2CCCHCN) с частотой

$$f_{\text{эксп}} = 134941,2 \text{ МГц} (f_{\text{кат}} = 134941,2127 \text{ МГц});$$

пропандиола ($\text{CH}_2(\text{OH})\text{CH}_2\text{CH}_2\text{OH}$) с частотой

$$f_{\text{эксп}} = 134967,1 \text{ МГц} (f_{\text{кат}} = 134967,2548 \text{ МГц});$$

а также (для ячменя) ацетальдегида (CH_3CHO) с частотами

$$f_{1\text{эксп}} = 134895,6 \text{ МГц} (f_{1\text{кат}} = 134895,606 \text{ МГц}),$$

$$f_{2\text{эксп}} = 134908,7 \text{ МГц} (f_{2\text{кат}} = 134908,6558 \text{ МГц}),$$

$$f_{3\text{эксп}} = 134963,3 \text{ МГц} (f_{3\text{кат}} = 134963,2399 \text{ МГц}).$$

Линии ацетальдегида (CH_3CHO) в диапазоне 130-135 ГГц имеют интегральную интенсивность порядка $10^{-4} \text{ нм}^2 \cdot \text{МГц}$ [7] (таких линий по каталогу около 40 штук), и при выделившемся при нагреве количестве ацетальдегида его линии поглощения превосходят шумы, но не на всех участках. Поэтому для ячменя на данном участке спектра (CH_3CHO) (Рис. 3) зарегистрированы над шумами достаточно слабые линии ацетальдегида, а для пшеницы нет, хотя в других частях у образца пшеницы линии ацетальдегида есть. Муравьиной кислоты (НСООН) при записи участка вблизи 134,9 ГГц выделилось из ячменя больше, чем для пшеницы, что видно по двум последним линиям поглощения, поэтому более слабая по интегральной интенсивности линия поглощения с частотой $f_{1\text{эксп}} = 134920,2 \text{ МГц}$ ($f_{1\text{кат}} = 134920,2444 \text{ МГц}$) для пшеницы не зарегистрировалась над уровнем шумов.

Вещества, образующиеся в многокомпонентных газовых смесях продуктов термического разложения, относятся к одним классам, но их концентрации различны. Примером таких различий является наличие линий поглощения этанола ($\text{C}_2\text{H}_5\text{OH}$) в пшенице и их отсутствие в ячмене в этой области спектра (на других участках этанол в ячмене был выявлен). Количество линий поглощения уксусной кислоты ($\text{CH}_3\text{C}(\text{O})\text{OH}$) в образце пшеницы примерно в полтора раза больше, чем в ячмене. Такая же ситуация с мочевиной ($\text{H}_2\text{NC}(\text{O})\text{NH}_2$) и пентаннитрилом ($\text{C}_4\text{H}_9\text{CN}$). Количество линий поглощения пиррола ($\text{C}_4\text{H}_4\text{NH}$) в образце пшеницы существенно больше, чем в образце ячменя. Линий поглощения ацетона (CH_3COCH_3), дигидроксиацетона ($\text{C}_3\text{O}_3\text{H}_6$) и фенилпропионитрила ($\text{C}_6\text{H}_5\text{C}_3\text{N}$) в образце пшеницы зафиксировано примерно в два раза больше, чем в ячмене. Хотя количество линий поглощения для пшеницы и ячменя для некоторых веществ сильно различается, следует иметь в виду, что это свидетельствует о небольших различиях в концентрациях веществ. В этом диапазоне для ряда этих соединений наблюдается большое количество линий поглощения с близкими интегральными интенсивностями (см. базы данных [7,8]).

Таблица 1. Сравнение метаболитов для образцов ячменя («Надежный») и пшеницы («Ирень») (130-135 ГГц).

Вещества	Число линий	
	«Надежный»	«Ирень»
Альдегиды		
CH ₂ (OH)CHO,	92	88
c-C ₆ H ₅ CHO	18	19
CH ₃ CHO	19	24
s-C ₂ H ₅ CHO	6	8
C ₂ H ₃ CHO	6	6
CHOCHONCH ₂ OH	5	3
Кетоны		
CH ₃ COCH ₃	7	14
CH ₃ C(O)CH ₂ OH	24	21
C ₃ O ₃ H ₆	8	15
Кислоты		
HCOOH	13	12
CH ₃ C(O)OH	15	26
CH ₃ CHNH ₂ COOH	9	11
HNCO	8	7
HNO ₃	9	10
Нитрилы		
n-C ₄ H ₉ CN	23	34
(CH ₃) ₂ CHCH ₂ CN	13	18
c-C ₆ H ₅ CN	11	7
c-C ₂ H ₃ (O)CN	9	14
syn-CH ₂ CCHCH ₂ CN	9	11
Z-CH ₂ (CH) ₃ CN	8	12
anti-CH ₂ CCHCH ₂ CN	8	8
E-CH ₂ (CH) ₃ CN	7	7
C ₃ H ₇ CN	10	16
C ₂ H ₅ CN	29	32
C ₂ H ₃ CN	14	14
NH ₂ CH ₂ CH ₂ CN	5	11
C ₆ H ₅ C ₃ N	12	24
C ₂ H ₅ CHCNCH ₃	12	12
Спирты		
CH ₃ OH	3	3
C ₂ H ₅ OH	0	8
CH ₃ CHONCH ₂ OH	20	27
CH ₂ OHCH ₂ CH ₂ OH	16	16
NH ₂ CH ₂ CH ₂ OH	6	7
Серосодержащие соединения		
CH ₃ SH	2	3
C ₂ H ₅ SH	7	3
SO ₂	4	6
OCS	2	3
Амиды, амины		
H ₂ NC(O)NH ₂	17	26
H ₂ NCH ₂ C(O)NH ₂	8	8
HOCH ₂ C(O)NH ₂	6	7
HC(O)NH ₂	1	4
syn-C ₂ H ₃ C(O)NH ₂	7	10
C ₄ H ₄ NH	1	10

Представленные результаты по сравнению веществ при термическом разложении сырого зерна ячменя и пшеницы в узком спектральном диапазоне (5 ГГц) показывают как сходство по ряду веществ, так и их различия, обусловленные различным соотношением макросоединений в зерне этих двух разных культур. Планируется провести дальнейшие сравнения веществ во всем рабочем диапазоне спектрометра с целью выявления качественных соотношений для веществ, обнаруженных в продуктах термического разложения зерна.

Заключение

Представлены результаты спектроскопических исследований многокомпонентных газовых смесей продуктов термического разложения зерна ячменя в сравнении с перловой крупой и пшеницей. Термическое разложение зерна изучалось с использованием ТГц газового нестационарного спектрометра. Результаты показывают, что состав продуктов термического разложения перловой крупы и зерна ячменя практически идентичен. Имеются различия в концентрации веществ, что проявляется в разнице в числе обнаруженных линий поглощения специфических веществ. Состав веществ для ячменя и пшеницы относится к близким классам, но отличается концентрацией веществ. Полученные наборы веществ могут быть использованы в качестве эталонных для поиска соединений, продуцируемых патогенными грибковыми заболеваниями и микроорганизмами. Состав метаболитов перловой крупы может быть использован для сравнения с составом неочищенного зерна ячменя для выявления частей молекулярного состава, относящихся к общим веществам, а остальные характерны для патогенов, включая грибковые заболевания. Эти результаты демонстрируют перспективность ТГц нестационарной спектроскопии для приложений в сельском хозяйстве и пищевой промышленности.

Финансирование: Программное обеспечение для обработки спектроскопических данных спектрометров разработано в рамках

государственного задания FFUF-2022-0006. Спектроскопические измерения газовых смесей, полученных при терморазложении образцов зерна, выполнены в рамках государственного задания FFUF-2024-0024.

Литература

1. Ge H. et al. Applications of THz spectral imaging in the detection of agricultural products // *Photonics*. – MDPI, 2021. – Т. 8. – №. 11. – С. 518. <https://doi.org/10.3390/photonics8110518>
2. Vaks V. L. et al. Terahertz High Resolution Gas Spectroscopy for the Analysis of the Composition of Products of Thermal Decomposition of Cereal Grains (Oat, Barley) // *Journal of Applied Spectroscopy*. – 2019. – Т. 86. – С. 861-866. <https://doi.org/10.1007/s10812-019-00907-0>
3. Вакс В.Л. и др. Спектроскопия высокого разрешения терагерцевого частотного диапазона для аналитических приложений // *Успехи физических наук*. – 2020. – Т. 190. – №. 7. – С. 765-776. <https://doi.org/10.3367/UFNe.2019.07.038613>
4. Ячмень яровой сорт «Владимир» ПР2. АПК КОЛОС. <https://www.apk-kolos.ru/yachmen-jarovoi/c231.html>
5. Левакова О. В., Ерошенко Л. М., Ерошенко А. Н. Яровой ячмень Надежный // *Вестник российской сельскохозяйственной науки*. – 2018. – №. 2. – С. 43-44.
6. Пшеница ИРЕНЬ от Уральский НИИСХ. Глав Аграном. <https://glavagronom.ru/base/seeds/zernovie-pshenica-myagkaya-yarovaya-iren-uralskiy-niish-9601678>
7. Pickett H.M. et al. Submillimeter, millimeter, and microwave spectral line catalog // *Journal of Quantitative Spectroscopy and Radiative Transfer*. – 1998. – Т. 60. – №. 5. – С. 883-890.

8. Endres C.P. et al. The cologne database for molecular spectroscopy, CDMS, in the virtual atomic and molecular data centre, VAMDC // Journal of Molecular Spectroscopy. – 2016. – Т. 327. – С. 95-104.

9. Нилова Л.П. Товароведение и экспертиза зерномучных товаров. – 2011.

Для цитирования:

Вакс В.Л., Анфертьев В.А., Домрачева Е.Г., Черняева М.Б., Черняева А.С., Яблоков А.А. Исследование продуктов термического разложения зерна (ячменя и пшеницы) методом терагерцовой газовой нестационарной спектроскопии высокого разрешения // Журнал радиоэлектроники. – 2025. – №1. <https://doi.org/10.30898/1684-1719.2025.1.6>