

# Пищевые ингредиенты, сырье и материалы

## Food ingredients, raw materials and materials

Научная статья

УДК 634.74: 664.64.014

DOI: 10.14529/food230402

### ИК-СПЕКТРОСКОПИЧЕСКИЕ ИССЛЕДОВАНИЯ ОБРАЗЦОВ ВЫЖИМОК ИЗ ЯГОД ДИКОРОСОВ

**О.В. Перегончая**<sup>1</sup>, *ovp177@yandex.ru*

**А.П. Покусаев**<sup>1</sup>, *aleksgoodpokusaev@yandex.ru*

**А.Н. Лукин**<sup>2</sup>, *скр\_49@mail.ru*

**Н.М. Дерканосова**<sup>1</sup>, *kommerce05@list.ru*

**В.В. Кубарь**<sup>3</sup>, *Vazadel@mail.ru*

<sup>1</sup> Воронежский государственный аграрный университет имени императора Петра I, Воронеж, Россия

<sup>2</sup> Воронежский государственный университет, Воронеж, Россия

<sup>3</sup> ООО «Чайный дом «ЧИСТОТА», ХМАО-Югра, Мегион, Россия

**Аннотация.** Проектирование пищевых продуктов, отвечающих принципам здорового питания, напрямую сопряжено с поиском новых и/или нетрадиционных ингредиентов, характеризующихся повышенным содержанием пищевых волокон, витаминов, биологически активных веществ. К таким ингредиентам относятся продукты переработки ягод дикорастущих растений – шикши, брусники, клюквы. В работе проведены исследования состава высушенных инфракрасным способом выжимок ягод дикоросов, полученных как вторичный продукт в технологии сока прямого отжима, методом ИК-спектроскопии. Исследование высушенных и измельченных образцов выжимок ягод шикши, брусники и клюквы методом инфракрасной спектроскопии проводили в диапазоне волновых чисел от 400 до 4000 см<sup>-1</sup> на приборе ИК-Фурье спектрометр Bruker Vertex 70 в однолучевом режиме нарушенного полного внутреннего отражения с применением приставки Platinum ATR. Спектральные характеристики демонстрируют достаточно близкий функциональный состав компонентов образцов выжимок дикоросов. Установлено, что основу высушенных образцов выжимок ягод дикоросов составляет целлюлоза. В составе образцов выжимок ягод идентифицированы кислородсодержащие соединения с первичными и вторичными спиртовыми группами, карбоксильными и сложноэфирными группировками, а также азотсодержащие вещества с амидными связями и вторичными аминогруппами. К ним можно отнести углеводы, карбоновые кислоты и их соли, аминокислоты и пептиды, а также витамины. Установлена разница межмолекулярного взаимодействия за счет связывания N-H групп амидных связей пептидов и белков в выжимках клюквы и брусники в сравнении с шикшей. Проведенные исследования подтвердили более ранние исследования вещественного состава выжимок дикоросов и показали целесообразность применения выжимок ягод шикши, клюквы и брусники в качестве ингредиентов при проектировании обогащенных пищевых продуктов.

**Ключевые слова:** шикша, брусника, клюква, дикоросы, выжимки, ИК-спектроскопия, спектральные характеристики

**Для цитирования:** ИК-спектроскопические исследования образцов выжимок из ягод дикоросов / О.В. Перегончая, А.П. Покусаев, А.Н. Лукин и др. // Вестник ЮУрГУ. Серия «Пищевые и биотехнологии». 2023. Т. 11, № 4. С. 19–26. DOI: 10.14529/food230402

Original article  
DOI: 10.14529/food230402

## IR SPECTROSCOPIC STUDIES OF POMACE SAMPLES FROM WILD BERRIES

**O.V. Peregonchaya<sup>1</sup>**, *ovp177@yandex.ru*  
**A.P. Pokusaev<sup>1</sup>**, *aleksgoodpokusaev@yandex.ru*  
**A.N. Lukin<sup>2</sup>**, *ckp\_49@mail.ru*  
**N.M. Derkanosova<sup>1</sup>**, *kommerce05@list.ru*  
**V.V. Kubar<sup>3</sup>**, *Vazadel@mail.ru*

<sup>1</sup> Voronezh State Agrarian University named after Emperor Peter I, Voronezh, Russia

<sup>2</sup> Voronezh State University, Voronezh, Russia

<sup>3</sup> LLC "Tea house "PURITY", Khanty-Mansi Autonomous Okrug, Megion, Russia

**Abstract.** The design of food products that meet the principles of healthy nutrition is directly connected with the search for new and/or non-traditional ingredients characterized by an increased content of dietary fiber, vitamins, biologically active substances. Such ingredients include products of processing berries of wild plants – shikshi, lingonberries, cranberries. In this work, studies of the composition of dried by infrared method pomace of wild berries obtained as a secondary product in the technology of direct-pressed juice by IR spectroscopy were carried out. The study of dried and crushed samples of pomace berries of shiksha, cranberries and cranberries by infrared spectroscopy was carried out in the range of wave numbers from 400 to 4000 cm<sup>-1</sup> on the device IR-Fourier spectrometer Bruker Vertex 70 in the single-beam mode of disturbed total internal reflection using the prefix Platinum ATR. The spectral characteristics demonstrate a fairly close functional composition of the components of the samples of pomace of wild plants. It is established that the basis of dried samples of pomace of wild berries is cellulose. In the composition of berry pomace samples, oxygen-containing compounds with primary and secondary alcohol groups, carboxyl and ester groups, as well as nitrogen-containing substances with amide bonds and secondary amino groups were identified. These include carbohydrates, carboxylic acids and their salts, amino acids and peptides, as well as vitamins. The difference in intermolecular interaction due to the binding of N-H groups of amide bonds of peptides and proteins in cranberry and lingonberry pomace in comparison with shiksha has been established. The conducted studies confirmed the previously conducted studies of the material composition of pomace of wild plants and showed the feasibility of using pomace of shiksha berries, cranberries and lingonberries as ingredients in the design of fortified foods.

**Keywords:** shiksha, lingonberries, cranberries, wild plants, pomace, IR spectroscopy, spectral characteristics

**For citation:** Peregonchaya O.V., Pokusaev A.P., Lukin A.N., Derkanosova N.M., Kubar V.V. IR spectroscopic studies of pomace samples from wild berries. *Bulletin of the South Ural State University. Ser. Food and Biotechnology*, 2023, vol. 11, no. 4, pp. 19–26. (In Russ.) DOI: 10.14529/food230402

Конкретизируя задачи, которые ставят перед наукой о пищевых системах основополагающие документы, принятые в последнее время, целесообразно остановиться на нутриентном составе пищевых продуктов [1]. Основные положения в этой области констатируют «наличие в составе ежедневного рациона пищевых продуктов со сниженным содержанием насыщенных жиров (включая трансизомеры жирных кислот), простых сахаров и поваренной соли, а также пищевых продук-

тов, обогащенных витаминами, пищевыми волокнами и биологически активными веществами» [2]. Соответственно, определяя направления конструирования новых продуктов, целесообразен поиск сырьевых источников, химический состав которых позволяет решать указанные выше проблемы.

Ягоды дикорастущих растений Сибири обладают комплексом как приемлемых для пищевых продуктов сенсорных характеристик, так и богатым вещественным составом

[3–5]. В продолжение приведенных и других исследований [6–9] остановимся на составе выжимок ягод дикоросов.

Целью исследований явилось исследование состава выжимок ягод дикоросов – шикши, брусники и клюквы с использованием метода ИК-спектроскопии.

В качестве объектов исследований были приняты выжимки сока прямого отжима шикши, брусники и клюквы. Реализуемая низкотемпературная технология концентрированного сока [10] позволяет в максимальной степени сохранить нутриентный состав ягод. С этой же целью была применена ИК-сушка выжимок. Сушка необходима для обеспечения сохранности и технологичности ингредиента с позиций его потенциального применения в промышленной технологии.

Исследование высушенных и измельченных образцов выжимок ягод шикши, брусники и клюквы методом инфракрасной спектроскопии проводили в диапазоне волновых чисел от 4000 до 4000  $\text{см}^{-1}$  на приборе ИК-Фурье спектрометр Bruker Vertex 70 в однолучевом режиме НПВО (нарушенного полного внутреннего отражения) с применением приставки Platinum ATR). Для данных измерений использовалась алмазная призма с углом отражения 45 град и показателем преломления 2.51. Обработка спектральных данных проводилась в программе Omnic-8 и включала в себя расширенную ATR коррекцию для исключения влияния дисперсии показателя преломления алмазной призмы в данном диапа-

зоне ИК-спектра, нормирование спектра на базовую линию и сглаживание спектра для исключения влияния на вид спектра паров воды и углекислого газа (атмосферных). Пробоподготовка заключалась в измельчении и высушивании образцов при 50 °С до постоянной массы.

Спектральные характеристики выжимок ягод дикоросов приведены на рис. 1–3.

Полученные спектральные данные демонстрируют близкий функциональный состав компонентов образцов. В таблице приведена расшифровка спектрограмм исследованных образцов.

Основу высушенных образцов выжимок ягод дикоросов составляет целлюлоза. Ее присутствие подтверждается в спектрограммах набором характеристических полос поглощения (см. рис. 1–3) углеводородного скелета, функциональных групп -ОН и глюкopiранозного кольца [11, 12]. Полученные данные позволяют также идентифицировать в составе образцов выжимок ягод кислородсодержащие соединения с первичными и вторичными спиртовыми группами, карбоксильными и сложноэфирными группировками, а также азотсодержащие вещества с амидными связями и вторичными аминогруппами (рис. 1–3, см. таблицу). К ним относятся углеводы, карбоновые кислоты и их соли, аминокислоты и пептиды, а также витамины.

Большинство характеристических полос поглощения для образцов выжимок ягод дикоросов совпадают (см. таблицу). Однако в

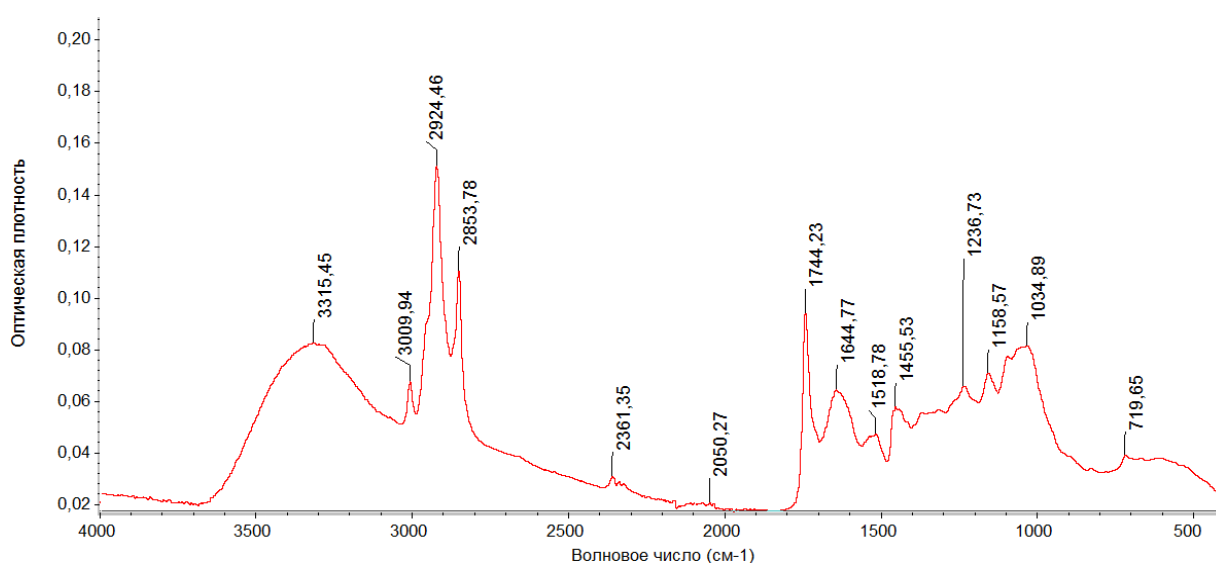


Рис. 1. Спектральные характеристики выжимок ягод шикши

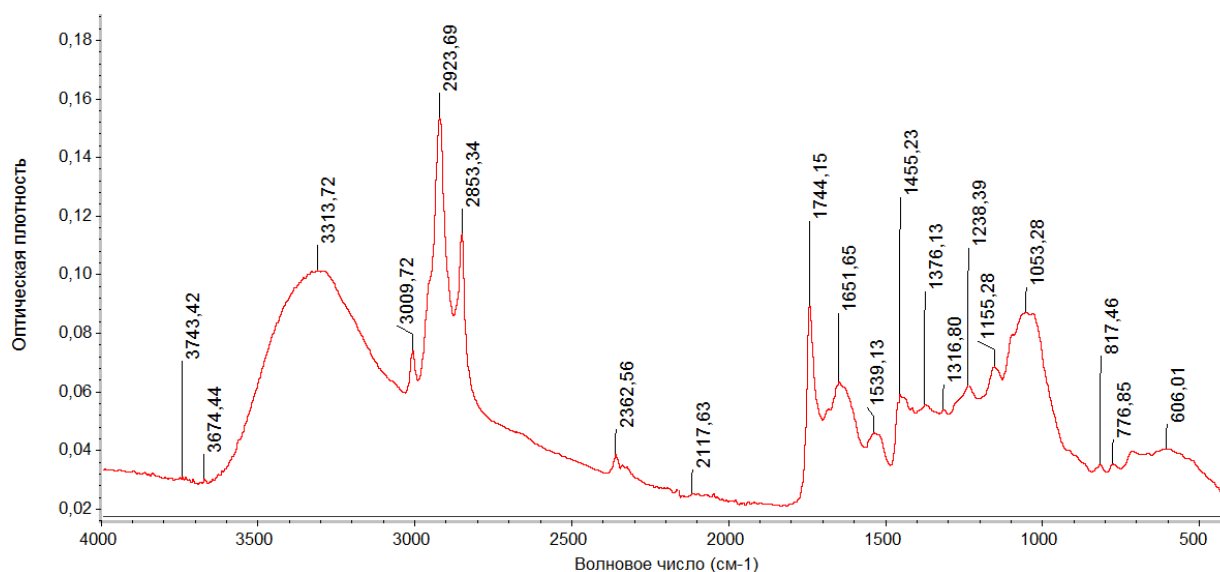


Рис. 2. Спектральные характеристики выжимок ягод брусники

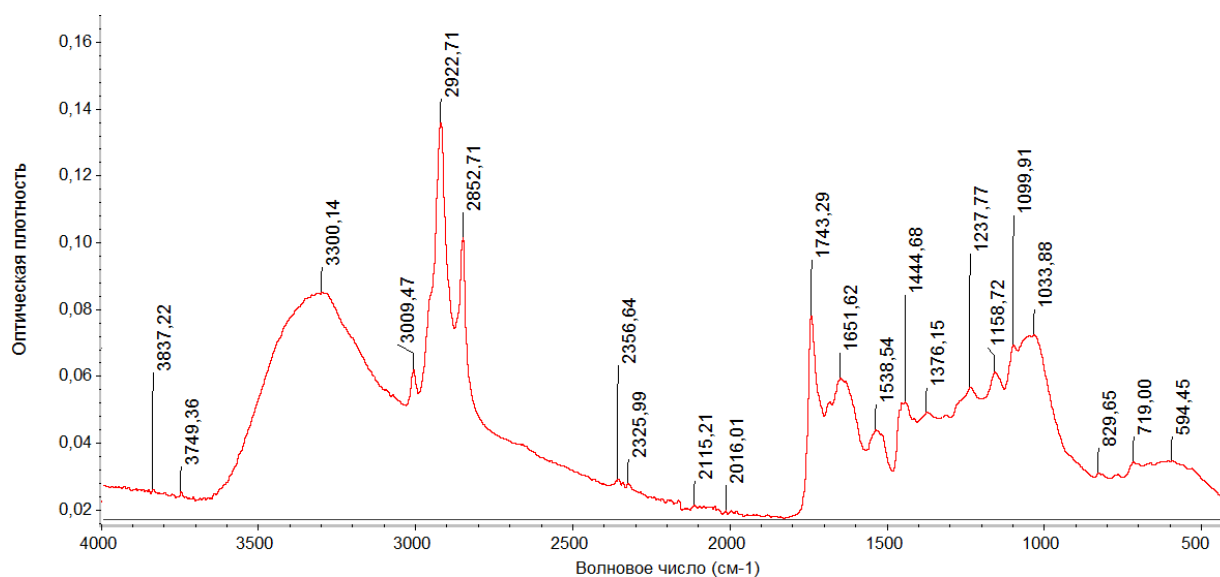


Рис. 3. Спектральные характеристики выжимок ягод клюквы

диапазоне  $1700\text{--}1500\text{ см}^{-1}$  для образца ягод шикши наблюдается изменение положения полосы Амид II относительно максимумов, характерных для клюквы и брусники, в сторону низкочастотных колебаний на  $20\text{ см}^{-1}$  (рис. 1–3, см. таблицу). Кроме того, для образца выжимок шикши наблюдается небольшое смещение полосы Амид I на  $7\text{ см}^{-1}$  также в низкочастотную область. Данная разница в

спектральных характеристиках, вероятно, связана с большей ассоциацией молекул, содержащих вторичные аминогруппы [13, 15], в составе образцов брусники и клюквы. Согласно [15, 16] подобное спектральное поведение характерно для усиления межмолекулярного взаимодействия за счет связывания N-H групп амидных связей пептидов и белков.

Характеристические полосы поглощения исследованных образцов

Полоса поглощения, см <sup>-1</sup> (№ образца)	Отнесение полосы поглощения
Колебания связей С–Н углеродного скелета	
3009 (1–3), 2924 (1), 2922 (2,3)	Валентные колебания С–Н связей в ароматических структурах и метильных группах –СН <sub>3</sub> , [11–14]
2853 (1–3)	Валентные колебания С–Н связей в метиленовых группах –СН <sub>2</sub> – [11–14]
1455 (1,2), 1444 (3)	Деформационные плоскостные и веерные колебания С–Н связей в метиленовых группах –СН <sub>2</sub> – [11–14]. Полоса 1450–1440 соответствует также валентным колебаниям бензольного кольца [14]
Колебания связей функциональных групп	
3315 (1,2), 3300 (3)	Валентные колебания ОН-групп (внутри- и межмолекулярные связи –ОН…О) и NH-групп [13, 14]
1053–1033 (1–3)	Валентные колебания С–О связи в первичной спиртовой группе –СН <sub>2</sub> –ОН и во вторичной гидроксильной группировке >СН–ОН [11, 12]
1455 (1,2), 1444 (3)	Деформационные колебания ОН-групп накладываются на валентные колебания углеводородного скелета [11–14]
1236 (1–3)	Валентные колебания С–О связей в гидроксильной группе алифатических спиртов и фенолов [11–14]
1744 (1–3)	Валентные колебания связи С=О в карбоновых кислотах и сложных эфирах [6, 7]
1651 (2,3), 1644 (1)	Симметричные и асимметричные колебания карбоксилат анионов СОО <sup>-</sup> и карбонильной группы в составе сложных эфиров [13, 14], а также колебания групп С–N и С–N–C в составе первичной, вторичной или третичной амидной групп (полоса Амид I) [13–15]
1539 (2,3), 1518 (1)	Деформационные колебания N–H связей вторичных амидов (полоса Амид II) [13–15]
Колебания глюкопиранозного кольца	
1158 (1–3), 1053–1034 (1–3)	Асимметричные валентные колебания моста С–О–С глюкопиранозного цикла [11, 12]
800–600 (1–3)	Колебания глюкопиранозного кольца, связанные с колебаниями групп –СНОН–, –СН <sub>2</sub> – и внеплоскостными колебаниями ОН-групп [13, 14]

В целом проведенные исследования подтвердили перспективность продуктов переработки дикоросов – шикши, брусники и

клюквы как обогащающих пищевыми волокнами ингредиентов и приоритетность шикши с позиций вещественного состава над клюквой и брусникой.

### Список литературы

1. Об утверждении Доктрины продовольственной безопасности Российской Федерации: указ Президента Российской Федерации от 21.01.2020 г. № 20 [Электронный ресурс]. URL: <https://www.garant.ru/products/ipo/prime/doc/73338425/> (дата обращения: 04.08.2023)
2. МР 2.3.1.0253-21 «Нормы физиологических потребностей в энергии и пищевых веществах для различных групп населения Российской Федерации». Утверждены Руководителем Федеральной службы по надзору в сфере защиты прав потребителей и благополучия человека, Главным государственным санитарным врачом Российской Федерации А.Ю. Поповой, 22 июля 2021 г. [Электронный ресурс]. URL: [https://www.rospotrebnadzor.ru/documents/details.php?ELEMENT\\_ID=18979](https://www.rospotrebnadzor.ru/documents/details.php?ELEMENT_ID=18979) (дата обращения: 04.08.2023)
3. Лютикова М.Н., Ботиров Э.Х. Химический состав и практическое применение ягод клюквы и брусники // Химия растительного сырья. 2015. № 2. С. 5--27.
4. Губина М.Д. Химический состав, хранение и использование дикорастущих плодов черники и брусники, произрастающих в Западной Сибири: автореф. дис. ... канд. техн. наук. Ленинград, 1983. 21 с.
5. Расщепкина Е.А., Субботина М.А., Расщепкина А.Н. Исследование химического состава брусники // Технология и продукты здорового питания. 2008. № 8. С. 117–118.
6. Zheng Z., Shetty K. Solid-state bioconversion of phenolics from cranberry pomace and role of lentinus edodes  $\beta$ -glucosidase // J. Agric. Food Chem. 2000. Vol. 48. P. 895–900. DOI: 10.1021/jf990972u
7. Borowska I., Szajdek A. Antioxidant Activity of Berry Fruits and Beverages // Pol. J. Natur. Sci. 2003. N 14. P. 521–528.
8. Lee J., Finn C.E. Lingonberry (*Vaccinium vitis-idaea* L.) grown in the Pacific Northwest of North America: Anthocyanin and free amino acid composition // J. of Functional Foods. 2012. Vol. 4. P. 213–218. DOI: 10.1016/j.jff.2011.10.007
9. Prior R.L., Lazarus S.A., Cao G., Muccitelli H., Hammerstone J.F. Identification of procyanidins and anthocyanins in blueberries and cranberries using high-performance liquid chromatography/mass spectrometry // J. Agric. Food Chem. 2001. Vol. 49. P. 1270–1276. DOI: 10.1021/jf001211q
10. Емельянов А.А., Золотарев А.Г., Емельянов К.А. Малогабаритная установка для концентрирования и сушки пищевых продуктов в вакууме // Пищевая промышленность. 2007. № 12. С. 52.
11. Целлюлоза и её производные / под ред. Н. Байклза, Л. Сегала: пер. с англ. под ред. З.А. Роговина. Москва: Мир, 1974. Т. 1. С. 13–36.
12. Методы исследования древесины и ее производных: учебное пособие / Н.Г. Базарнова, Е.В. Карпова, И.Б. Катраков и др.; под ред. Н.Г. Базарновой. Барнаул: Изд-во Алт. гос. ун-та, 2002. 160 с.
13. Казицына Л.А., Куплетская Н.Б. Применение УФ-, ИК-, ЯМР- и масс-спектропии в органической химии. М.: Изд-во Моск. ун-та, 1979. 240 с.
14. Тарасевич Б.Н. ИК спектры основных классов органических соединений: справочные материалы. М.: Изд-во МГУ, 2012. 55 с.
15. Анисимова, Н.А. Идентификация органических соединений: учебное пособие. – Горно-Алтайск: РИО ГАГУ, 2009. 95с.
16. Кантор Ч., Шиммель П. Биофизическая химия: в 3-х т.: пер. с англ. – М.: Мир, 1984. Т. 2. 496 с.

### References

1. *Ob utverzhdenii Doktriny prodovol'stvennoy bezopasnosti Rossiyskoy Federatsii: ukaz Prezidenta Rossiyskoy Federatsii ot 21.01.2020 g. № 20* [On the approval of the Food Security Doctrine of the Russian Federation: Decree of the President of the Russian Federation No. 20 dated 21.01.2020]. URL: <https://www.garant.ru/products/ipo/prime/doc/73338425/> (accessed: 08/04/2023)
2. *MR 2.3.1.0253-21 «Normy fiziologicheskikh potrebnoyey v energii i pishchevykh veshchestvakh dlya razlichnykh grupp naseleniya Rossiyskoy Federatsii»*. [MP 2.3.1.0253-21 “Norms of physiological needs for energy and nutrients for various groups of the population of the Russian Federation”]. Approved by the Head of the Federal Service for Supervision of Consumer Rights Protection and Human Well-being, Chief State Sanitary Doctor of the Russian Federation A.Y. Popova, July 22, 2021. URL: [https://www.rospotrebnadzor.ru/documents/details.php?ELEMENT\\_ID=18979](https://www.rospotrebnadzor.ru/documents/details.php?ELEMENT_ID=18979) (accessed: 08/04/2023)
3. Lyutikova M.N., Botirov E.H. Chemical composition and practical application of cranberry and lingonberry berries. *Khimiya rastitel'nogo syr'ya* [Chemistry of vegetable raw materials], 2015, no. 2, pp. 5–27. (In Russ.)
4. Gubina M.D. *Khimicheskiy sostav, khraneniye i ispol'zovaniye dikorastushchikh plodov cherniki i brusniki, proizrastayushchikh v Zapadnoy Sibiri* [Chemical composition, storage and use of wild blueberry and lingonberry fruits growing in Western Siberia: abstract. diss. ... candidate of technical Sciences]. Leningrad, 1983. 21 p.
5. Splavkina E.A., Subbotina M.A., Splavkina A.N. Investigation of the chemical composition of cranberries. *Tekhnologiya i produkty zdorovogo pitaniya* [Technology and healthy food products], 2008, no. 8, pp. 117–118. (In Russ.)
6. Zheng Z., Shetty K. Solid-state bioconversion of phenolics from cranberry pomace and role of *lentinus edodes*  $\beta$ -glucosidase. *J. Agric. Food Chem.*, 2000, vol. 48, pp. 895–900. DOI: 10.1021/jf990972u
7. Borowska I., Szajdek A. Antioxidant Activity of Berry Fruits and Beverages. *Pol. J. Natur. Sci.*, 2003, no. 14, pp. 521–528.
8. Lee J., Finn C.E. Lingonberry (*Vaccinium vitis-idaea* L.) grown in the Pacific Northwest of North America: Anthocyanin and free amino acid composition. *J. of Functional Foods*, 2012, vol. 4, pp. 213–218. DOI: 10.1016/j.jff.2011.10.007
9. Prior R.L., Lazarus S.A., Cao G., Muccitelli H., Hammerstane J.F. Identification of procyanidins and anthocyanins in blueberries and cranberries using high-performance liquid chromatography/mass spectrometry. *J. Agric. Food Chem.*, 2001, vol. 49, pp. 1270–1276. DOI: 10.1021/jf001211q
10. Emelyanov A.A., Zolotarev A.G., Emelyanov K.A. Small-sized installation for concentrating and drying food products in vacuum. *Pishchevaya promyshlennost'* [Food industry], 2007, no. 12, p. 52. (In Russ.)
11. Baykles N., Segal L. (Eds.) *Tsellyuloza i ee proizvodnye* [Cellulose and its derivatives]. Vol. 1. Translated from English. Moscow, 1974, pp. 13–36.
12. Bazarnova N.G., Karpova E.V., Katrakov I.B. et al. *Metody issledovaniya drevesiny i ee proizvodnykh* [Methods of research of wood and its derivatives]. Barnaul, 2002. 160 p.
13. Kazitsyna L.A., Kupletskaya N.B. *Primeneniye UF-, IK-, YaMR- i mass-spektroskopii v organicheskoy khimii* [Application of UV, IR, NMR and mass spectroscopy in organic chemistry]. Moscow, 1979. 240 p.
14. Tarasevich B.N. *IK spektry osnovnykh klassov organicheskikh soedineniy: spravochnye materialy* [IR spectra of the main classes of organic compounds. Reference materials]. Moscow, 2012. 55 p.
15. Anisimova N.A. *Identifikatsiya organicheskikh soedineniy* [Identification of organic compounds]. Gorno-Altaysk, 2009. 95 p.
16. Kantor Ch., Schimmel P. *Biofizicheskaya khimiya* [Biophysical chemistry]. Trans. from English. Moscow, 1984, vol. 2. 496 p.

*Информация об авторах*

**Перегончая Ольга Владимировна**, кандидат химических наук, доцент кафедры химии, Воронежский государственный аграрный университет имени императора Петра I, Воронеж, Россия, ovp177@yandex.ru

**Покусаев Александр Петрович**, аспирант кафедры товароведения и экспертизы товаров, Воронежский государственный аграрный университет имени императора Петра I, Воронеж, Россия, aleksgoodpokusaev@yandex.ru

**Лукин Анатолий Николаевич**, кандидат физико-математических наук, доцент, ведущий инженер физик Центра коллективного пользования научным оборудованием, Воронежский государственный университет, Воронеж, Россия, ckr\_49@mail.ru

**Дерканосова Наталья Митрофановна**, доктор технических наук, заведующая кафедрой товароведения и экспертизы товаров, Воронежский государственный аграрный университет имени императора Петра I, Воронеж Россия, kommerce05@list.ru

**Кубарь Василий Васильевич**, президент ООО «Чайный дом «ЧИСТОТА», Ханты-Мансийский автономный округ, Мегион, Россия, Vazadel@mail.ru

*Information about the authors*

**Olga V. Peregonchaya**, Candidate of Chemical Sciences, Associate Professor of the Department of Chemistry, Voronezh State Agrarian University named after Emperor Peter I, Voronezh, Russia, ovp177@yandex.ru

**Alexander P. Pokusaev**, Postgraduate student of the Department of Commodity Science and Examination of Goods, Voronezh State Agrarian University named after Emperor Peter I, Voronezh, Russia, aleksgoodpokusaev@yandex.ru

**Anatoly N. Lukin**, Candidate of Physical and Mathematical Sciences, Associate Professor, Leading Engineer Physicist of the Center for Collective Use of Scientific Equipment, Voronezh State University, Voronezh, Russia, ckr\_49@mail.ru

**Natalia M. Derkanosova**, Doctor of Technical Sciences, Head of the Department of Commodity Science and Examination of Goods, Voronezh State Agrarian University named after Emperor Peter I, Voronezh, Russia, kommerce05@list.ru

**Vasily V. Kubar**, President of LLC “Tea house “PURITY”, Khanty-Mansi Autonomous Okrug, Megion, Russia, Vazadel@mail.ru

*Статья поступила в редакцию 10.07.2023*

*The article was submitted 10.07.2023*