

УДК 543.42:577.1:633/635

DOI 10.31654/2786-8478-2026-BN-2-80-92

Осипчук Р. П.

аспірант кафедри біології
Ніжинського державного університету імені Миколи Гоголя
ruslan0399os@gmail.com
orcid.org/0009-0007-2193-0839

Кучменко О. Б.

доктор біологічних наук, професор,
завідувач кафедри біології
Ніжинського державного університету імені Миколи Гоголя
kuchmenko1978@gmail.com
orcid.org/0000-0002-3021-8583

Мельничук О. В.

доктор фізико-математичних наук, професор,
професор кафедри інформаційних технологій,
фізико-математичних на економічних наук
Ніжинського державного університету імені Миколи Гоголя
melnychuk.ov@ndu.edu.ua
orcid.org/0000-0002-6768-8765

**ЗАСТОСУВАННЯ МЕТОДУ ІНФРАЧЕРВОНОЇ СПЕКТРОСКОПІЇ
ДЛЯ ОЦІНКИ БІОХІМІЧНОГО СКЛАДУ ЛИСТЯ ВИНОГРАДУ,
КВІТОК РОБІНІЇ, НАСІННЯ БАЗИЛІКА ТА ЗЕРЕН ПШЕНИЦІ**

Інфрачервона спектроскопія – це метод якісного та кількісного аналізу. Суть цього методу полягає у вивченні спектрів поглинання і пропускання електромагнітного випромінювання в інфрачервоній області.

Використання інфрачервоної спектроскопії для аналізу рослин не є новинкою. Було проведено багато успішних досліджень для визначення географічного походження рослинної сировини, фальсифікації, і т. д. В нашому дослідженні ми провели інфрачервону спектроскопію сухого рослинного матеріалу: зерна пшениці, листя винограду, квіток робінії та насіння базиліка. Ці рослини використовують у косметичній, фармацевтичній та харчовій промисловості.

Встановлено, що ІЧ спектр сухого зерна пшениці вказує на наявність високого рівня крохмалю, білків, води та ліпідів. Аналіз ІЧ спектру висушеного водного екстракту демонструє вищий рівень білків та полісахаридів. Натомість, видно нижчий вміст крохмалю, що може бути пов'язано з його поганою розчинністю у воді. ІЧ спектр сухого листя винограду демонструє можливий високий вміст фенольних сполук, целюлози, пектину, білків, поліфенолів та полісахаридів. Також, імовірно, зафіксовано наявність ліпідів. Натомість, ІЧ спектр висушеного водного екстракту вказує на наявність меншої кількості ліпідів та суттєво вищого рівня поліфенолів.

Аналізуючи ІЧ спектр сухих квіток робінії встановлено наявність високого рівня фенольних сполук та флавоноїдів. Проте, ІЧ спектр висушеного водного екстракту демонструє значно вищу концентрацію поліфенолів та флавоноїдів. ІЧ спектр сухого насіння базиліка демонструє високий рівень полісахаридів, ліпідів та білків. Натомість, ІЧ спектр висушеного водного екстракту вказує на суттєво вищий рівень полісахаридів, білків та сильне зниження рівня ліпідів, що може бути пов'язано з гідрофобністю жирів.

Отримані результати доводять високу ефективність використання ІЧ спектроскопії для вивчення рослинної сировини. Отримані результати можуть бути використанні в подальших дослідженнях біохімії рослин та рослинних екстрактів. **Ключові слова:** спектр, ІЧ спектроскопія, екстракти, сухий рослинний матеріал, білки, ліпіди, вуглеводи, флавоноїди, поліфеноли.

Вступ. Інфрачервона спектроскопія – це широковикористовуваний метод якісного та кількісного аналізу. Він використовується для дослідження молекулярних структур на рівні хімічних зв'язків та функціональних груп. Цей метод швидкий, простий у використанні та екологічно чистий. Суть методу інфрачервоної спектроскопії полягає у вивченні спектрів поглинання і пропускання електромагнітного випромінювання в інфрачервоній області. Цей метод часто поєднують із хемометричними методами, які дозволяють адекватно обробляти отримані спектри та покращують вилучення релевантної спектральної інформації [1, 2].

Важливий крок у обробці даних є попередня обробка спектрів. Основна мета – усунення шуму та підвищення чутливості. Найпоширенішими методами усунення шуму є нормалізація, стандартна нормальна варіація та мультиплікативна корекція розсіювання. Для підвищення чутливості найпоширенішою технікою є деривація. Дуже важливим є баланс між техніками згладжування та підвищення чутливості [3, 4]. Золотим стандартом багатовимірної кількісної моделі є метод часткових найменших квадратів [5]. Метод допомагає будувати модель із використанням незалежних змінних для прогнозування залежної змінної, що цікавить вчених під час проведення дослідження [6].

Використання інфрачервоної спектроскопії для аналізу рослин не є новинкою [7]. Найчастіше за допомогою цього методу досліджують рослинну олію. Було проведено багато успішних досліджень для визначення географічного походження рослинної сировини, фальсифікації, кількісного визначення параметрів протікання процесів окислення [8-10]. Більшість досліджень проводиться на оливковій олії та харчових оліях, що використовуються для смаження [11-13]. В даному дослідженні проводили дослідження зерна пшениці, листя винограду, квіток робінії та насіння базиліка за допомогою інфрачервоної спектроскопії. Дослідження цих рослин набирає популярності, оскільки вони є доступними, популярними в косметичних, фармацевтичних та харчових галузях [14].

Базилік (Ocimum basilicum L.) зустрічається по всьому світу і використовується в харчовій, фармацевтичній та косметичній промисловості [14]. В попередніх дослідженнях було продемонстровано, що насіння базиліка володіє найвищим рівнем вмісту загальних та білкових SH-груп, відновленого глутатіону та ТБК-позитивних продуктів, а також найвищою активністю каталази та аскорбатпероксидази [14]. Листя винограду (*Vitis vinifera L.*) містить найвищий рівень вітаміну С, антоціанових пігментів та фенольних сполук [14]. Квітки робінії (*Robinia pseudoacacia L.*) володіють найвищим вмістом небілкових SH-груп та білку [14]. Пшениця (*Triticum sp.*) є одним з найважливіших злаків як джерело природних антиоксидантів. Зерно пшениці містить високий вміст біоактивних сполук: фенолкарбонові кислоти, фітостероли, токофероли, алкілрезорцини [15]

Метою роботи є дослідження методом інфрачервоної спектроскопії сухого рослинного матеріалу (зерна пшениці, листя винограду, квітки робінії та насіння базиліка) та висушених водних екстрактів із досліджуваних рослин.

Методи та організація дослідження. Для дослідження використовували листя винограду (*Vitis vinifera L.*), квітки робінії (*Robinia pseudoacacia L.*), насіння базиліка (*Ocimum basilicum L.*) та зерна пшениці (*Triticum aestivum L.*). Робінія та виноград були зібрані навесні 2024 року в місті Коростень, Житомирської області. Пшениця та насіння базиліка було зібране восени того ж року. Висушування проводилось у добре

прівітрюваному приміщенні за температури 23-28°C без прямого потрапляння сонячних променів. Сухий рослинний матеріал розтирали до порошкоподібного стану в ступці.

Для дослідження висушених водних екстрактів із досліджуваних рослин готували екстракти шляхом змішування води та сухої рослинної сировини у пропорції 7:3 з подальшою екстракцією за температури 90°C протягом 40 хв. Готові екстракти фільтрували, охолоджували та висушували в роторному випарнику за температури 35°C до повного висушування. Отриманий матеріал також подрібнювали до порошкоподібного стану.

Для аналізу оптичних властивостей досліджуваних зразків проводили вимірювання спектрів дифузного відбивання в інфрачервоному діапазоні, які реєстрували за кімнатної температури за допомогою спектрофотометра високої роздільної здатності Shimadzu IRTTracer-100, оснащеного приставкою дифузного відбивання DRS-8000A, що забезпечує можливість проведення досліджень у спектральному діапазоні 240–4000 cm^{-1} . Реєстрацію спектрів здійснювали з роздільною здатністю 1 cm^{-1} , що забезпечувало високу точність аналізу спектральних особливостей порошкових зразків у досліджуваному діапазоні частот.

Для побудови графіків та аналізу отриманих спектрів використовували програмне забезпечення OriginPro 2024.

Результати досліджень та їх обговорення. Досліджуючи сухе зерно пшениці встановлено високий вміст білків та крохмалю, що є типовим для цієї культури. Широкий пік сильної інтенсивності за частоти коливань 3400 cm^{-1} вказує на наявність великої кількості R-O-H зв'язків (Рис. 1) [16-21].

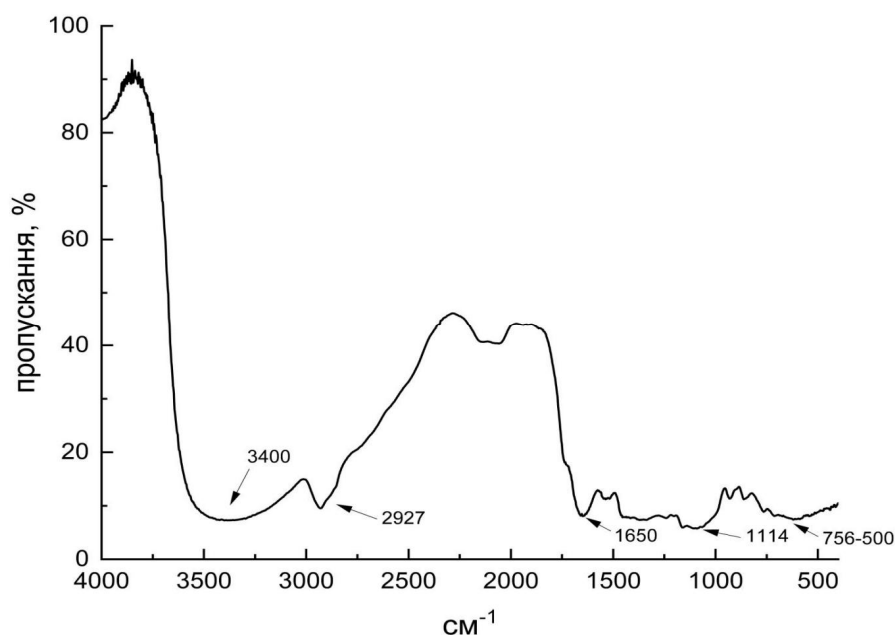


Рисунок 1. ІЧ спектр сухого зерна пшениці

Це може бути пов'язано з наявністю вологи в зразку та частково з наявністю крохмалю, целюлози та білків. Пік середньої інтенсивності за частоти коливань 297 cm^{-1} вказує на наявність CH_3/CH_2 функціональних груп, що може бути пов'язаним з наявністю в зразку ліпідів, вуглеводів та білків [20, 21]. Гострий пік сильної інтенсивності за частоти коливань 1650 cm^{-1} чітко вказує на коливання C=O зв'язків, що, можливо, підтверджує наявність високого вмісту білка, більшою мірою глютену [21]. Наявність піку середньої інтенсивності за частоти коливань 1114 cm^{-1} доводить

вміст крохмалю, оскільки вказує на коливання C-O-C глікозидних зв'язків. Слабкий широкий пік за частоти коливань 756-500 cm^{-1} вказує на наявність коливань C-H зв'язків, що також може вказувати на наявність полісахаридів та целюлози [20, 21].

Досліджуючи ІЧ спектри сухого листа винограду встановлена наявність поліфенолів, флавоноїдів, води та целюлози. Це підтверджується дуже сильним широким піком за частоти коливань 3400 cm^{-1} та сильним піком за частоти 1640 cm^{-1} , що вказує на наявність великої кількості O-H/N-H зв'язків та ароматичних структур (Рис. 2) [20-23].

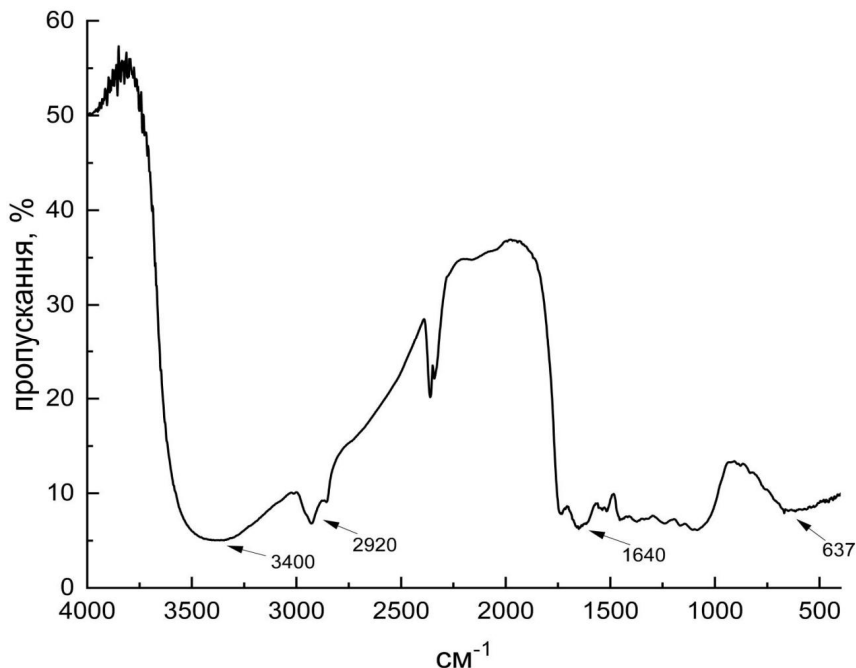


Рисунок 2. ІЧ спектр сухого листа винограду

Ці дані підтверджують результати нещодавніх досліджень, щодо високого вмісту вторинних метаболітів у листі винограду [24, 25]. Пік середньої інтенсивності за частоти коливань 2920 cm^{-1} вказує на наявність CH_2/CH_3 функціональних груп, що характерні для ліпідів. Імовірно, ці результати вказують на наявність ліпідів кутикулярної мембрани листа винограду [20, 21, 24, 25].

Разом з тим, дослідження ІЧ спектрів сухих квіток робінії також вказують на наявність поліфенолів, флавоноїдів, целюлози та води. Це підтверджує широкий пік середньої інтенсивності за частоти коливань 3300 cm^{-1} , що також, як і у листі винограду, вказує на коливання валентних зв'язків O-H та N-H (Рис. 3) [20, 21].

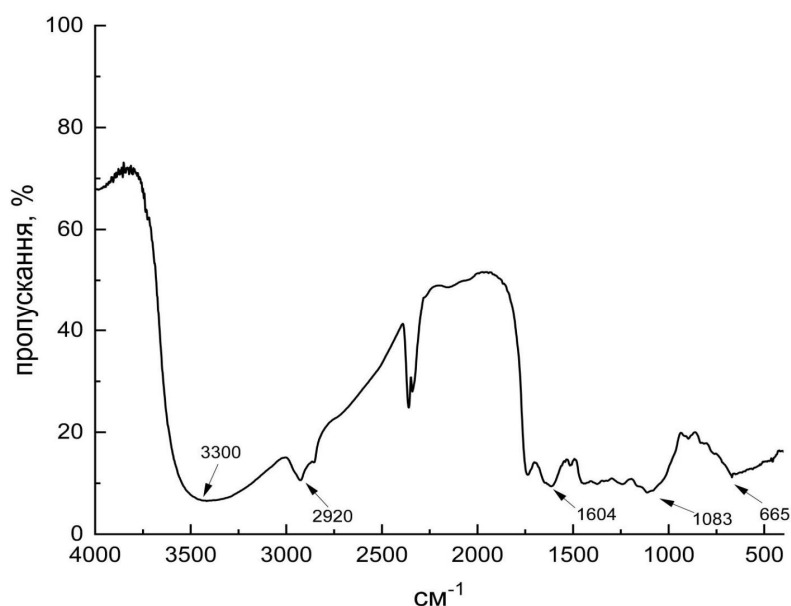


Рисунок 3. ІЧ спектр сухих квіток робінії

Пік середньої інтенсивності за частоти коливань 2920 cm^{-1} вказує на можливий вміст ліпідів, восків та аліфатичних сполук. Пік сильної інтенсивності за частоти коливань 1604 cm^{-1} може вказувати на наявність $\text{C}=\text{C}$ зв'язків та COO^- функціональної групи, характерної для робініну, кверцетину та інших флавоноїдів [14, 21]. Наявність флавоноїдів підтверджується слабким піком за частоти 665 cm^{-1} , що вказує на наявність коливань $\text{C}-\text{H}/\text{C}-\text{O}$ зв'язків у ароматичних кільцях. Спектр типовий для квіток робінії, що містять підтверджений високий вміст антиоксидантних флавоноїдів [14, 20, 21].

Досліджуючи ІЧ спектр сухого насіння базилика встановлена наявність невеликої кількості води, полісахаридів, білків та фенольних сполук. Це підтверджується сильним дуже широким піком за частоти коливань $3770\text{-}3100\text{ cm}^{-1}$, що вказує на коливання валентних зв'язків $\text{O}-\text{H}/\text{N}-\text{H}$ (Рис. 4) [20, 26].

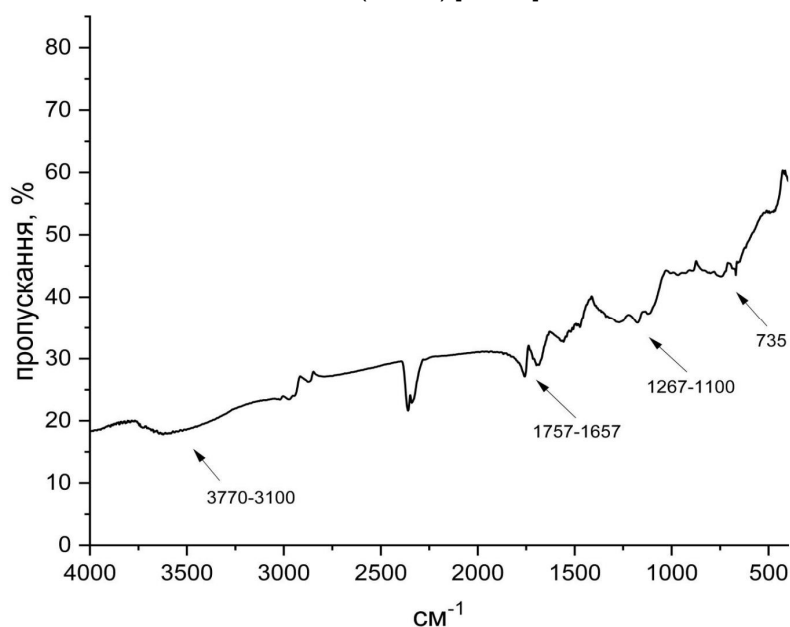


Рисунок 4. ІЧ спектр сухого насіння базилика

Сильний широкий пік за частоти 1267-1100 cm^{-1} вказує на коливання глікозидних зв'язків С-О-С та С-О. Це може бути пов'язано з наявністю в насінні базилика полісахаридів та пектину [14, 20, 21, 27, 28]. Сильний пік за частоти коливань 1757-1657 cm^{-1} вказує на наявність карбонільної групи С=О, що може бути пов'язано з високим вмістом ліпідів (тригліцеридів) [14, 20, 21, 27, 28]. Наявність піку середньої інтенсивності за частоти коливань 735 cm^{-1} вказує на наявність функціональної групи CH_2 характерної для довгих аліфатичних ланцюгів ліпідів [20, 21].

Досліджуючи ІЧ спектр висушеного водного екстракту із зерен пшениці була встановлена наявність високого вмісту води, що підтверджується сильним широким піком за частоти коливань 3370 cm^{-1} (Рис. 5) [20, 21].

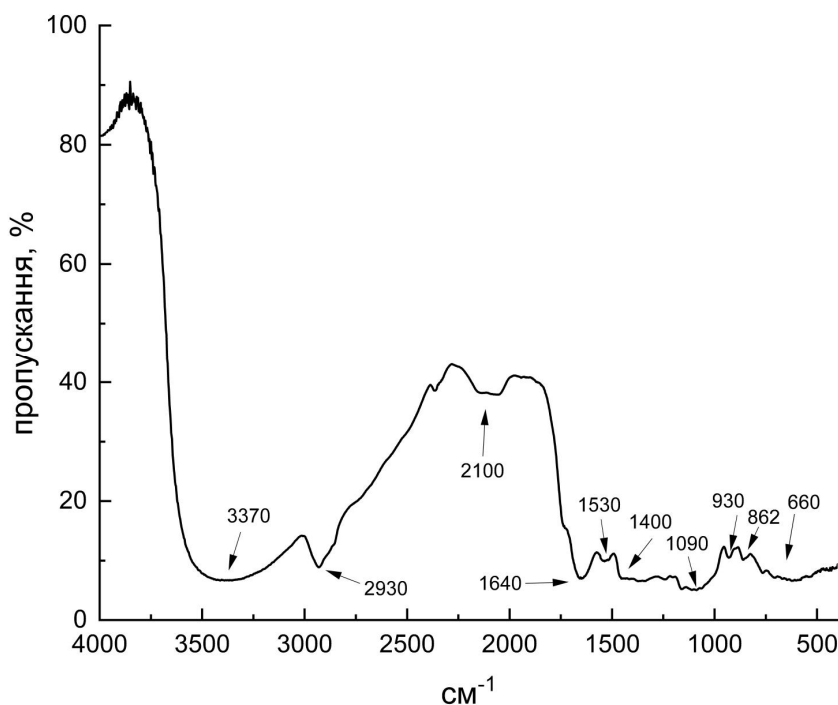


Рисунок 5. ІЧ спектр висушеного водного екстракту із зерен пшениці

Пік середньої інтенсивності за частоти 2930 cm^{-1} вказує на наявність CH_3/CH_2 функціональних груп, що є свідченням вмісту білків та невеликої кількості ліпідів. Високий вміст білків також підтверджується піками середньої інтенсивності за частоти коливань 1640 cm^{-1} , 1530 cm^{-1} , 1400 cm^{-1} та 862 cm^{-1} , що вказують на наявність коливань С=О та N-H зв'язків, CH_2 функціональних груп та β -глікозидних зв'язків відповідно. Наявність піків середньої інтенсивності за частоти коливань 1090 cm^{-1} та слабкої інтенсивності за частоти 930 cm^{-1} та 660 cm^{-1} вказують на коливання С-О-С глікозидних зв'язків, аномального карбону та С-О/С-Н зв'язків відповідно [20, 21]. Це може свідчити про наявність високого вмісту вуглеводів у досліджуваному зразку (водорозчинні β -глюкани, арабіноксилан, олігосахариди тощо) [16, 17, 18]. Пік середньої інтенсивності за частоти 2100 cm^{-1} вказує на коливання С \equiv N зв'язків. Цей пік є нетиповим і може бути результатом коливань у залишках амінів або артефактом підготовки зразка [20].

У порівнянні з ІЧ спектром сухого зерна пшениці, спектр висушеного екстракту вказує на вищий вміст білка та водорозчинних полісахаридів. Натомість, фіксується суттєве зниження вмісту крохмалю, що може бути пов'язаним з його поганою розчинністю у воді.

Досліджуючи ІЧ спектр висушеного водного екстракту з листя винограду встановлено наявність високого вмісту води, поліфенолів та флавоноїдів, що підтверджується піком дуже сильної інтенсивності на частоти коливань 3370 cm^{-1} (Рис. 6) [20, 21].

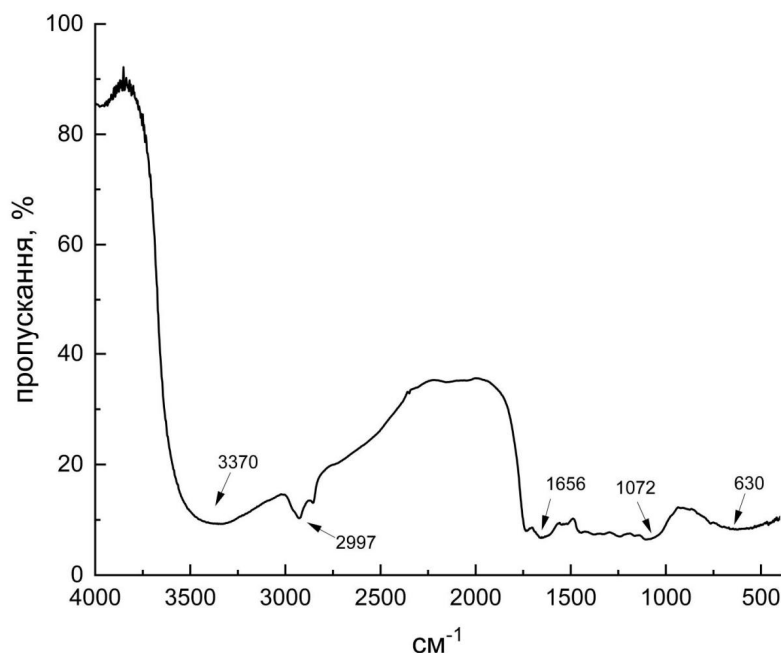


Рисунок 6. ІЧ спектр висушеного водного екстракту з листя винограду

Піки за частоти коливань 1656 см⁻¹, 1072 см⁻¹ та 630 см⁻¹ вказують на наявність коливань С=О зв'язків, С-О-С глікозидних зв'язків та С-Н/С-О зв'язків у ароматичних кільцях, що підтверджує можливу наявність флавоноїдів та фенольних сполук [14, 20-24]. Пік за частоти 2997 см⁻¹ є нетиповим та може вказувати на наявність специфічної сполуки чи бути артефактом, пов'язаним із особливістю підготовки зразка [20].

Порівнюючи ІЧ спектр висушеного екстракту з листя винограду із спектром сухого листа встановлено вищий рівень вмісту поліфенолів та суттєво нижчий рівень ліпідів.

Аналіз ІЧ спектру висушеного водного екстракту з квіток робінії показав високий вміст води, флавоноїдів, поліфенолів та полісахаридів. Це доводить наявність широкого піку сильної інтенсивності за частоти коливань 3350 см⁻¹ (Рис. 7) [20, 21].

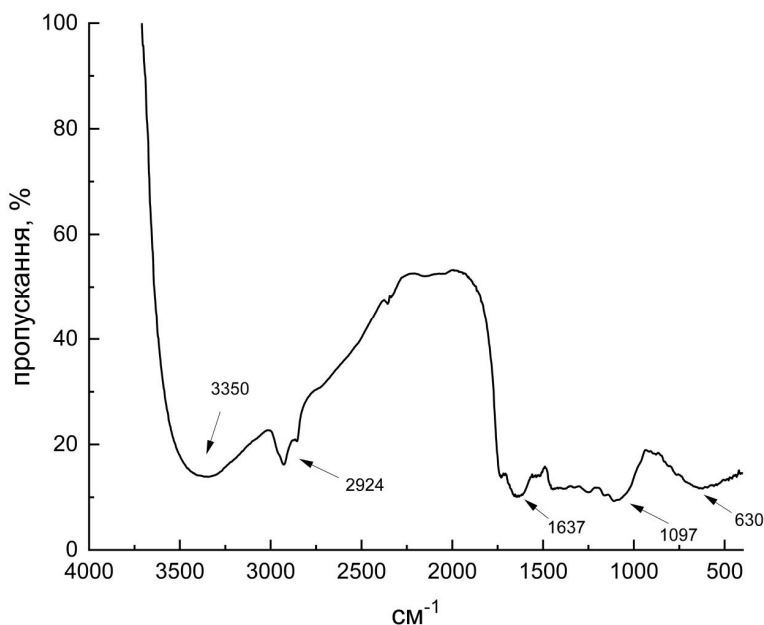


Рис. 7. ІЧ спектр висушеного водного екстракту з квіток робінії

Наявність високого рівня вмісту флавоноїдів доводять середньої інтенсивності піки за частоти 2924 см^{-1} , 1097 см^{-1} та пік сильної інтенсивності за частоти 1637 см^{-1} , що вказують на наявність CH_2 функціональної групи, коливань глікозидних C-O-C/C-O та C=C зв'язків відповідно. Слабкий пік за частоти 630 см^{-1} вказує на наявність коливань C-H/C-O зв'язків у ароматичних кільцях, що доводить можливу наявність фенольних сполук [14, 20, 21].

Порівнюючи ІЧ спектр висушеного водного екстракту з спектром сухих квіток робінії можна зробити висновок, що водний екстракт збагачений більшим вмістом водорозчинних поліфенолів та флавоноїдів та містить суттєво нижчий вміст ліпідів. Пік ароматичних структур зсунувся з частоти коливань 1604 см^{-1} до 1637 см^{-1} . Це типове явище при переході від цільної рослинної сировини до водного екстракту, оскільки флавоноїди (робінін, кверцетин тощо) переходять у водне середовище. Збільшення інтенсивності коливань O-H зв'язків (пік за частоти 3350 см^{-1}) вказує на імовірне збільшення концентрації фенольних сполук та води. Сигнал у районі 2924 см^{-1} слабший, порівняно з ліпідним сигналом у сухому матеріалі. Це може бути пов'язано з поганою екстракцією жирів та восків у водне середовище.

Досліджуючи ІЧ спектри висушеного водного екстракту з насіння базилика було встановлено наявність великої кількості води та полісахаридів. По це свідчить широкий пік дуже сильної інтенсивності за частоти коливань 3370 см^{-1} (Рис. 8) [20, 21].

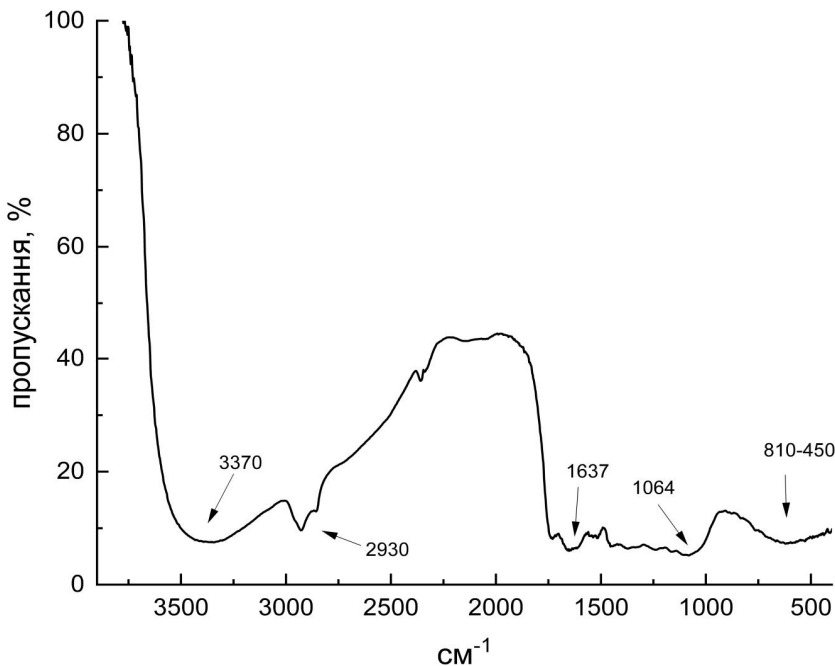


Рис. 8. ІЧ спектр висушеного водного екстракту з насіння базилика

Наявність високого рівня вмісту полісахаридів також доводить наявність сильних піків за частот 1064 см^{-1} та $810-450\text{ см}^{-1}$, оскільки вони відповідають за коливання C-O-C/C-O глікозидних зв'язків та C-H/C-O/C-S зв'язків. Сильний сигнал за частоти 1637 см^{-1} вказує на наявність C=O та C=C зв'язків, що, імовірно, пов'язано з наявністю високого рівня вмісту білків. Можливу наявність високого вмісту білків та ліпідів також доводить наявність функціональних груп CH_3 та CH_2 , що підтверджує сигнал середньої інтенсивності за частоти коливань 2930 см^{-1} [20, 21].

Порівнюючи ІЧ спектр висушеного водного екстракту з спектром сухого насіння встановлено вищу концентрацію полісахаридів та білків. Натомість, встановлено суттєво нижчий рівень вмісту ліпідів. Пік карбонільних продуктів за частоти коливань 1757 см^{-1} , який був добре вираженим у ІЧ спектрі сухого насіння базилика, практично

зник. Це може бути пов'язано з гідрофобністю ліпідів [14, 20, 21, 27, 28]. В цілому, спектр висушеного екстракту демонструє менше "шумів", характерних для спектру сухого насіння (ліпіди, целюлоза, пігменти тощо).

Висновки. Аналізуючи отримані результати встановлено, що ІЧ спектр сухого зерна пшениці вказує на наявність високого рівня вмісту крохмалю, білків, води та ліпідів. Аналіз ІЧ спектру висушеного водного екстракту демонструє вищий рівень білків у екстракті та полісахаридів. Натомість, видно нижчий вміст крохмалю, що може бути пов'язано з його поганою розчинністю у воді.

ІЧ спектр сухого листа винограду демонструє можливий високий вміст фенольних сполук, целюлози, пектину, білків, поліфенолів та полісахаридів. Також, імовірно, зафіксовано наявність ліпідів. Натомість ІЧ спектр висушеного водного екстракту з листа винограду вказує на наявність меншої кількості ліпідів та суттєво вищого рівня вмісту поліфенолів.

Аналізуючи ІЧ спектр сухих квіток робінії встановлено наявність високого вмісту фенольних сполук та ароматичних структур флавоноїдів. Проте, ІЧ спектр висушеного водного екстракту з квіток робінії демонструє суттєво вищу концентрацію поліфенолів та флавоноїдів.

ІЧ спектр сухого насіння базиліка демонструє високий вміст полісахаридів, ліпідів та білків. Натомість, ІЧ спектр висушеного водного екстракту з насіння базиліка вказує на суттєво вищий рівень вмісту полісахаридів, білків та сильне зниження рівня ліпідів, що може бути пов'язано з гідрофобністю жирів.

Отримані результати доводять ефективність використання ІЧ спектроскопії для вивчення рослинної сировини. Отримані результати можуть бути використанні в подальших дослідженнях біохімії рослин та рослинних екстрактів.

Список використаної літератури

1. Geana E.I., Ciucure C.T., Apetrei C., Artem V. Application of Spectroscopic UV-Vis and FT-IR Screening Techniques Coupled with Multivariate Statistical Analysis for Red Wine Authentication: Varietal and Vintage Year Discrimination. *Molecules*. 2019. Vol. 24. № 22. P. 1-15. DOI: [10.3390/molecules24224166](https://doi.org/10.3390/molecules24224166).
2. Wu Z., Zhao Y., Zhang J., Wang Y. Quality Assessment of *Gentiana Rigescens* from Different Geographical Origins Using FT-IR Spectroscopy Combined with HPLC. *Molecules*. 2017. Vol. 22. №7. P. 1-17. DOI: [10.3390/molecules22071238](https://doi.org/10.3390/molecules22071238).
3. Kokalj M., Rihtarič M., Kreft S. Commonly Applied Smoothing of IR Spectra Showed Unappropriate for the Identification of Plant Leaf Samples. *Chemom. Intell. Lab. Syst.* 2011. Vol. 108. №2. P. 154-161. DOI: [10.1016/j.chemolab.2011.07.001](https://doi.org/10.1016/j.chemolab.2011.07.001).
4. Junaedi E., Lestari K., Muchtaridi M. Infrared Spectroscopy Technique for Quantification of Compounds in Plant-Based Medicine and Supplement. *J. Adv. Pharm. Technol. Res.* 2021. Vol. 12. №1. P. 1-7. DOI: [10.4103/japtr.JAPTR_96_20](https://doi.org/10.4103/japtr.JAPTR_96_20).
5. Geladi P., Martens H., Hadjiiski L., Hopke P. A Calibration Tutorial for Spectral Data. Part 2. Partial Least Squares Regression Using Matlab and Some Neural Network Results. *J. Near Infrared Spectrosc.* 1996. Vol. 4. P. 243-255. DOI: [10.1255/jnirs.94](https://doi.org/10.1255/jnirs.94).
6. Kokalj M., Strgulc Krajšek S., Omahen Bratuša J., Kreft S. Comparison and Improvement of Commonly Applied Statistical Approaches for Identification of Plant Species from IR Spectra. *J. Chemom.* 2010. Vol. 24. P. 611-616. DOI: [10.1002/cem.1336](https://doi.org/10.1002/cem.1336).
7. Guille D., Cabo N. Infrared Spectroscopy in the Study of Edible Oils and Fats. *J. Sci. Food Agric.* 1997. Vol. 75. P. 1-11. DOI: [10.1002/\(SICI\)1097-0010\(199709\)75:1<1::AID-JSFA842>3.0.CO;2-R](https://doi.org/10.1002/(SICI)1097-0010(199709)75:1<1::AID-JSFA842>3.0.CO;2-R).
8. Vlachos N., Skopelitis Y., Psaroudaki M., Konstantinidou V., Chatzilazarou A., Tegou E. Applications of Fourier Transform-Infrared Spectroscopy to Edible Oils. *Anal. Chim. Acta.* 2006. Vol. 573-574. P. 459-465. DOI: [10.1016/j.aca.2006.05.034](https://doi.org/10.1016/j.aca.2006.05.034).
9. Zhang Q., Liu C., Sun Z., Hu X., Shen Q., Wu J. Authentication of Edible Vegetable Oils Adulterated with Used Frying Oil by Fourier Transform Infrared Spectroscopy. *Food Chem.* 2012. Vol. 132. P. 1607-1613. DOI: [10.1016/j.foodchem.2011.11.129](https://doi.org/10.1016/j.foodchem.2011.11.129).

10. Liang P., Chen C., Zhao S., Ge F., Liu D., Liu B., Fan Q., Han B., Xiong X. Application of Fourier Transform Infrared Spectroscopy for the Oxidation and Peroxide Value Evaluation in Virgin Walnut Oil. *J. Spectrosc.* 2013. Vol. 2013. P. 138728. DOI: 10.1155/2013/138728.
11. Bendini A., Cerretani L., Di Virgilio F., Belloni P., Bonoli-Carbognin M., Lercker G. Preliminary evaluation of the application of the FTIR spectroscopy to control the geographic origin and quality of virgin olive oils. *J. Food Qual.* 2007. Vol. 30. P. 424–437. DOI: 10.1111/j.1745-4557.2007.00132.x.
12. Mahboubifar M., Yousefinejad S., Alizadeh M., Hemmateenejad B. Prediction of the Acid Value, Peroxide Value and the Percentage of Some Fatty Acids in Edible Oils during Long Heating Time by Chemometrics Analysis of FTIR-ATR Spectra. *J. Iran. Chem. Soc.* 2016. Vol. 13. P. 2291–2299. DOI: 10.1007/s13738-016-0948-1.
13. Wójcicki K., Khmelinskii I., Sikorski M., Sikorska E. Near and Mid Infrared Spectroscopy and Multivariate Data Analysis in Studies of Oxidation of Edible Oils. *Food Chem.* 2015. Vol. 187. P. 416–423. DOI: 10.1016/j.foodchem.2015.04.046.
14. Осипчук Р., Кучменко О. Оцінка антиоксидантного потенціалу водних екстрактів із листя винограду, квіток робінії, насіння базиліку та зерен пшениці. *Наукові записки. Біологічні науки.* 2024. №3. С. 25-33.
15. Antonenko K., Duma M., Kreicberg V., Kunkulberga D. The influence of microelements selenium and copper on the rye malt amylase activity and flour technological properties. *Agronomy Research.* 2016. P. 1261–1270.
16. Amir R., Anjum F. Application of Fourier transform infrared (FTIR) spectroscopy for the identification of wheat varieties. *J. Food Sci. Technol.* 2011. Vol. 50. №5. P. 1018-1023.
17. Daminbek Z. et al. Study and Identification of Flour Samples by IR Spectra. *ECAMPUZ CAMP3 REPORT.* 2025. P. 1-16.
18. Zhang Y. et al. Starch content and physicochemical properties of green wheat. *International Journal of Food Properties.* 2019. Vol. 22. P. 1463-1474.
19. Lončarić P. et al. FTIR-Based Study of Starch Retrogradation and Protein Secondary Structure in Bread. *Foods.* 2026. Vol. 15. №3. P. 1-23.
20. Silverstein R.M. et al. Spectrometric Identification of Organic Compounds. *John Wiley & Sons.* 2014. 464 p.
21. Stuart B.H. *Infrared Spectroscopy: Fundamentals and Applications.* John Wiley & Sons. 2004. 224 p.
22. Álvarez et al. Simple distinction of grapevine (*Vitis vinifera* L.) genotypes by direct ATR-FTIR. *Food Chemistry.* 2020. Vol. 328. P. 127164.
23. Topalä C.M. et al. FTIR spectra of grapevines (*Vitis vinifera* L.) in the presence of virus infections. *Acta Horticulturae.* 2017. Vol. 1188. P. 313–318.
24. Murru et al. Artificial Neural Network and Attenuated Total Reflectance-Fourier Transform Infrared Spectroscopy to identify the chemical variables related to ripeness and variety classification of grapes for Protected. Designation of Origin wine production. *Computers and Electronics in Agriculture.* 2019. Vol. 164. P. 104922.
25. Martín-Tornero et al. Comparative quantification of chlorophyll and polyphenol levels in grapevine leaves sampled from different geographical locations. *Scientific Reports.* 2020. Vol. 10. P. 1-13.
26. Fedenko V.S. Spectral characteristics of flavonoids of *Robinia pseudoacacia* L. and *Robinia hispida* L. flowers. *J. of Chemistry & Chemical Technology.* 2025. Vol. 33. №3. P. 602-610.
27. Tyśkiewicz K. Characterization of bioactive compounds in the biomass of black locust, poplar and willow. *Trees.* 2019. Vol. 33. P. 1235-1263.
28. Nazir S. Functional characterization of basil (*Ocimum basilicum* L.) seed mucilage. *Bioactive Carbohydrates and Dietary Fibre.* 2021. Vol. 25. P. 100261.

References

1. Geana E.I., Ciucure C.T., Apetrei C., Artem V. (2019) Application of Spectroscopic UV-Vis and FT-IR Screening Techniques Coupled with Multivariate Statistical Analysis for Red Wine Authentication: Varietal and Vintage Year Discrimination. *Molecules.* 24(22). 1-15 [in English]

2. Wu Z., Zhao Y., Zhang J., Wang Y. (2017) Quality Assessment of *Gentiana Rigescens* from Different Geographical Origins Using FT-IR Spectroscopy Combined with HPLC. *Molecules*. 22(7). 1-17 [in English]
3. Kokalj M., Rihtarič M., Kreft S. (2011) Commonly Applied Smoothing of IR Spectra Showed Unappropriate for the Identification of Plant Leaf Samples. *Chemom. Intell. Lab. Syst.* 108(2). 154-161 [in English].
4. Junaedi E., Lestari K., Muchtaridi M. (2021) Infrared Spectroscopy Technique for Quantification of Compounds in Plant-Based Medicine and Supplement. *J. Adv. Pharm. Technol. Res.* 12(1). 1-7 [in English].
5. Geladi P., Martens H., Hadjiiski L., Hopke P. (1996) A Calibration Tutorial for Spectral Data. Part 2. Partial Least Squares Regression Using Matlab and Some Neural Network Results. *J. Near Infrared Spectrosc.* 4. 243-255 [in English].
6. Kokalj M., Strgulc Krajšek S., Omahen Bratuša J., Kreft S. (2010) Comparison and Improvement of Commonly Applied Statistical Approaches for Identification of Plant Species from IR Spectra. *J. Chemom.* 24. 611-616 [in English].
7. Guille D., Cabo N. (1997) Infrared Spectroscopy in the Study of Edible Oils and Fats. *J. Sci. Food Agric.* 15. 1-11 [in English].
8. Vlachos N., Skopelitis Y., Psaroudaki M., Konstantinidou V., Chatzilazarou A., Tegou E. (2006) Applications of Fourier Transform-Infrared Spectroscopy to Edible Oils. *Anal. Chim. Acta.* 573-574. 459-465 [in English].
9. Zhang Q., Liu C., Sun Z., Hu X., Shen Q., Wu J. (2012) Authentication of Edible Vegetable Oils Adulterated with Used Frying Oil by Fourier Transform Infrared Spectroscopy. *Food Chem.* 132. 1607-1613 [in English].
10. Liang P., Chen C., Zhao S. (2013) Application of Fourier Transform Infrared Spectroscopy for the Oxidation and Peroxide Value Evaluation in Virgin Walnut Oil. *J. Spectrosc.* 2013. 1-5 [in English].
11. Bendini A., Cerretani L., Di Virgilio F., Belloni P., Bonoli-Carbognin M., Lercker G. (2007) Preliminary evaluation of the application of the ftir spectroscopy to control the geographic origin and quality of virgin olive oils. *J. Food Qual.* 30. 424-437 [in English].
12. Mahboubifar M., Yousefinejad S., Alizadeh M., Hemmateenejad B. (2016) Prediction of the Acid Value, Peroxide Value and the Percentage of Some Fatty Acids in Edible Oils during Long Heating Time by Chemometrics Analysis of FTIR-ATR Spectra. *J. Iran. Chem. Soc.* 13. 2291-2299 [in English].
13. Wójcicki K., Khmelinskii I., Sikorski M., Sikorska E. Near and Mid (2015) Infrared Spectroscopy and Multivariate Data Analysis in Studies of Oxidation of Edible Oils. *Food Chem.* 187. 416-423 [in English].
14. Osypchuk R., Kuchmenko O. (2024) Otsinka antyoksydantnoho potentsialu vodnykh ekstraktiv iz lystia vynuhradu, kvitok robinii, nasinnia bazyliku ta zeren pshenytsi [Assessment of the antioxidant potential of aqueous extracts from grape leaves, robinia flowers, basil seeds and wheat grains.]. *Naukovi zapysky. Biolohichni nauky.* 3. 25-33 [in Ukrainian].
15. Antonenko K., Duma M., Kreicberg V., Kunkulberga D. (2016) The influence of microelements selenium and cooper on the rye malt amylase activity and flour technological properties. *Agronomy Research.* 261-1270 [in English].
16. Amir R., Anjum F. (2011) Application of Fourier transform infrared (FTIR) spectroscopy for the identification of wheat varieties. *J. Food Sci. Technol.* 50(5). 1018-1023 [in English].
17. Daminbek Z. et al. (2025) Study and Identification of Flour Samples by IR Spectra. *ECAMPUZ CAMP3 REPORT.* 1-16 [in English].
18. Zhang Y. et al. (2019) Starch content and physicochemical properties of green wheat. *International Journal of Food Properties.* 22. 1463-1474 [in English].
19. Lončarić P. et al. (2026) FTIR-Based Study of Starch Retrogradation and Protein Secondary Structure in Bread. *Foods.* 15(3). 1-23 [in English].
20. Silverstein R.M. et al. (2014) Spectrometric Identification of Organic Compounds. *John Wiley & Sons.* 464 [in English].
21. Stuart B.H. (2004) Infrared Spectroscopy: Fundamentals and Applications. *John Wiley & Sons.* 224 [in English].

22. Álvarez et al. (2020) Simple distinction of grapevine (*Vitis vinifera* L.) genotypes by direct ATR-FTIR. *Food Chemistry*. 328. 127164 [in English].
23. Topalá C.M. et al. (2017) FTIR spectra of grapevines (*Vitis vinifera* L.) in the presence of virus infections. *Acta Horticulturae*. 1188. 313–318 [in English].
24. Murru et al. (2019) Artificial Neural Network and Attenuated Total Reflectance-Fourier Transform Infrared Spectroscopy to identify the chemical variables related to ripeness and variety classification of grapes for Protected. Designation of Origin wine production. *Computers and Electronics in Agriculture*. 164. 104922 [in English].
25. Martín-Tornero et al. (2020) Comparative quantification of chlorophyll and polyphenol levels in grapevine leaves sampled from different geographical locations. *Scientific Reports*. 10. 1-13 [in English].
26. Fedenko V.S. (2025) Spectral characteristics of flavonoids of *Robinia pseudoacacia* L. and *Robinia hispida* L. flowers. *J. of Chemistry & Chemical Technology*. 33(3). 602-610 [in English].
27. Tyśkiewicz K. (2019) Characterization of bioactive compounds in the biomass of black locust, poplar and willow. *Trees*. 33. 1235-1263 [in English].
28. Nazir S. (2021) Functional characterization of basil (*Ocimum basilicum* L.) seed mucilage. *Bioactive Carbohydrates and Dietary Fibre*. 25. 100261 [in English].
-
-

Osypchuk R.

PhD student, Department of Biology
Nizhyn Mykola Gogol State University
ruslan0399os@gmail.com
orcid.org/0009-0007-2193-0839

Kuchmenko O.

Doctor of Biological Sciences, Professor,
Head of the Biology Department of
Nizhyn Mykola Gogol State University
kuchmenko1978@gmail.com
orcid.org/0000-0002-3021-8583

Melnychuk O.

Doctor of Physical and Mathematical Sciences, Professor,
Professor of the Department of Information Technologies,
Physical, Mathematical, and Economic Sciences
Nizhyn Mykola Gogol State University
melnychuk.ov@ndu.edu.ua
orcid.org/0000-0002-6768-8765

APPLICATION OF THE INFRARED SPECTROSCOPY METHOD FOR ASSESSING THE BIOCHEMICAL COMPOSITION OF GRAPE LEAVES, ROBINIA FLOWERS, BASIL SEEDS, AND WHEAT GRAINS

Infrared spectroscopy is a method of qualitative and quantitative analysis. The essence of this method lies in the study of absorption and transmission spectra of electromagnetic radiation in the infrared region.

The use of infrared spectroscopy for plant analysis is not new. Numerous successful studies have been conducted to determine the geographical origin of plant raw materials, detect adulteration, and address other related issues. In our study, we performed infrared spectroscopy of dried plant materials, namely wheat grains, grape leaves, Robinia flowers, and basil seeds. These plants are widely used in the cosmetic, pharmaceutical, and food industries.

It was established that the IR spectrum of dry wheat grains indicates the presence of high levels of starch, proteins, water, and lipids. The analysis of the IR spectrum of the dried aqueous extract demonstrates higher levels of proteins and polysaccharides. In contrast, a lower starch content is observed, which may be associated with its poor solubility in water.

The IR spectrum of dry grape leaves demonstrates a potentially high content of phenolic compounds, cellulose, pectin, proteins, polyphenols, and polysaccharides. The presence of lipids was also likely detected. In contrast, the IR spectrum of the dried aqueous extract indicates the presence of a lower amount of lipids and a significantly higher level of polyphenols.

The analysis of the IR spectrum of dried Robinia flowers revealed the presence of high levels of phenolic compounds and flavonoids. However, the IR spectrum of the dried aqueous extract demonstrates a significantly higher concentration of polyphenols and flavonoids.

The IR spectrum of dry basil seeds demonstrates high levels of polysaccharides, lipids, and proteins. In contrast, the IR spectrum of the dried aqueous extract indicates significantly higher levels of polysaccharides and proteins, along with a substantial decrease in lipid content, which may be associated with the hydrophobic nature of fats.

The obtained results demonstrate the high effectiveness of using IR spectroscopy for the study of plant raw materials. These findings may be applied in further research on plant biochemistry and plant extracts.

Keywords: spectrum, IR spectroscopy, extracts, dried plant material, proteins, lipids, carbohydrates, flavonoids, polyphenols.

*Стаття до редакції надійшла 09.04.2026 року
Рецензія на статтю надійшла 28.04.2026 року*