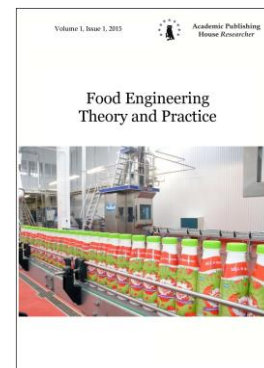


Copyright © 2016 by Academic Publishing House *Researcher*

Published in the Russian Federation
 Food Engineering Theory and Practice
 Has been issued since 2015.
 ISSN: 2412-2254
 E-ISSN: 2500-3720
 Vol. 2, Is. (2), pp. 35-67, 2016

DOI: 10.13187/fetp.2016.2.35
www.ejournal35.com



UDC 637.13 + 637.1.023 + 535.15 + 543.421/.424

Infrared Spectrophotometry, Infrared Spectroscopy and Infrared Spectrometry in Dairy Spectral Qualimetry: Contemporary Ideas and Retro-Engineering

T.K. Orehov

Institute of Chemical Physics of the Russian Academy of Sciences (ICP RAS), Russian Federation
 E-mail: theorehov@gmail.com

Abstract

Infrared spectrophotometry, infrared spectroscopy and infrared spectrometry are basic quality testing techniques for different dairy industry aims. Vibrational spectroscopy, as well as rotational spectroscopy, is a power instrument for the structural analysis of different biological media and, consequently, for structural analysis for food qualimetry. This article presents a precision review of qualimetry of dairy samples and their components based on infrared techniques. Author also present some retrophysical / retrotechnical investigations for adaptation of retro-spectral devices for dairy qualimetry.

Keywords: NIR, MIR, infrared spectrophotometry, infrared spectroscopy, infrared spectrometry, spectral qualimetry, structural analysis, dairy industry, vibrational spectra.

Введение

Методы инфракрасной спектроскопии являются мощным многопрофильным средством анализа молока, молочных продуктов и производных субстанций, имеющим достаточно длительную (много десятилетий - первый коммерческий инфракрасный анализатор молока близкой к современной конструкции был продемонстрирован в начале 1970-х [1]) историю применимости в молочном хозяйстве. Для промышленного применения немаловажно, что, в отличие от ряда других, альтернативных современных способов, он является методом неразрушающего контроля [2], не влияющим на параметры пробы при поточном анализе. Новые автоматизированные подходы категорически изменили бытовавшее ещё недавно мнение об ограниченной применимости инфракрасной спектроскопии в массовой практике ферм и производственных предприятий; в особенности – учитывая распространение DIY подхода и модернизации оборудования с устаревающим интерфейсом, но работоспособной схемой оптической регистрации [3]. Поэтому имеет смысл рассмотрение последних трендов развития методов ИК спектроскопии, используемых в молочной отрасли, с целью распространения аналогичных подходов в условиях России. Если для 1970–1980-х гг. немногочисленные комплексные исследования, включавшие в себя инфракрасную спектроскопию молока, были внове и представляли собой высокодифференцированные коллаборационные работы – продукты взаимодействия лабораторий разного профиля [4, 5], то в настоящее время во многих местах они являются стандартными процедурами определения качества на потоке и не вызывают затруднений даже для одного лаборанта – пользователя автоматизированного оборудования. Поэтому

мы лишь вкратце перечислим возможности данных методов и рассмотрим наиболее доступное для модернизации и DIY приборостроения приборное оснащение, описав в общих чертах те попытки адаптации и модификации подобного оборудования, которые были предприняты нами в характерных для центральной России малобюджетных условиях.

Основной областью применимости инфракрасных спектрометров и анализаторов в молочном хозяйстве и молочной промышленности является определение базовых компонент сырья [6] – белка, жира, лактозы [7-9]. Стандартные инфракрасные анализаторы молока с преобразованием Фурье позволяют также вычислять долю сухого и обезжиренного вещества [8] или, наоборот, производить определение влаги в молочном порошке с использованием спектроскопии ближнего ИК диапазона (NIR) [10]. Спектроскопия же или спектрометрия среднего ИК диапазона (MIR - Mid-InfraRed Spectroscopy) позволяет также производить определение и предсказание содержания жирных кислот в молоке [11, 12]. С точки зрения потребительской ценности и пищевого производства, из вышеизложенного следует возможность оценки содержания макронутриентов в молоке посредством инфракрасной спектроскопии, как это делается при анализе детского питания в раннем развитии [13-16]. Это логично с энергетических и метаболических позиций, так как известно, что по подобным параметрам вычислима энергетическая ценность молока и молочных продуктов [17], а недавно возникшая отрасль исследований – молочная метаболомика базируется, во многом, именно на инфракрасном спектральном анализе (в частности – среднего ИК диапазона [18]). Следует отметить и другую сторону энергетического подхода – спектральный анализ молока в среднем инфракрасном диапазоне позволяет определять и прогнозировать энергетический статус самих коров [19]. В связи с этим, так как энергетический статус регулируется АТФ и клеточными редокс-процессами, а метаболический алкалоз и ацидоз в организме являются крайними фазами данного редокс-состояния, необходимо указать на тот факт, что как кетоацидоз, сопряженный с образованием кетоновых тел (гиперкетонемия), так и кетоз молочных коров (его возможно определить как состояние, при котором источником энергии становится переработка кетоновых тел, и он часто сопряжен с гиперкетонемией), могут быть диагностированы с использованием инфракрасного спектрального анализа молока [20-23].

Кроме базовых органических веществ, инфракрасная спектрометрия позволяет также детектировать важнейшие минеральные/неорганические вещества в молоке, влияющие на молекулярную структуру его компонент [24]. В частности, возможно определение этим методом соединений кальция, фосфатов и цитратов с применением хемометрических подходов к интерпретации данных и флуоресцентной спектроскопии. Недавно были найдены математико-статистические подходы к определению Ca, K, Mg, Na и P в коровьем молоке с использованием спектрометрии среднего инфракрасного диапазона [25]. Эта задача также имеет обратную сторону, так как содержание неорганических ионов и минеральных компонент в молоке зависит от их содержания в кормах для скота, поэтому для современных методов зарубежной молочно-хозяйственной деятельности характерен также инфракрасный анализ кормов на входе, а не только конечного продукта – молока на выходе ферм. Характерные дефицитные проявления гипокальциемии у молочного скота носят характер пареза или лихорадки, а гипомагниемии провоцируют тетанические состояния; предотвратить их (и им подобные дефицитные состояния) можно, обнаруживая концентрации минеральных веществ в кормах молочного скота с использованием инфракрасной спектроскопии ближнего диапазона (NIR) [26].

Возможность определения физиологического состояния скота по свойствам молока в ближнем и среднем ИК диапазоне является в настоящее время общепризнанным фактом в зарубежной сельскохозяйственной науке. Так как при мастите увеличиваются параметры жирности и процент белка в молоке, а уровень лактозы понижается, возможно определять клинический и субклинический мастит у молочных овец посредством инфракрасной термографии молока [27], а поскольку лактоферритин в молоке является явным индикатором мастита, анализ в среднем инфракрасном диапазоне позволяет, определяя его, корректно диагностировать эту патологию [28]. Фурье-ИК-спектроскопия молока используется для определения течки у коров [29], поэтому возможен анализ состояний, характеризующихся сдвигом сроков течки, неинвазивным путем – посредством анализа секретлируемого молока в известные дни. Циклический подход при анализе анатомо-

физиологического состояния скота с использованием инфракрасного излучения на разных стадиях лактации характерен и для "унгулологии" молочного скота – известны закономерности изменения инфракрасных термограмм копыт на характеристических стадиях лактации [30], поэтому нет ничего удивительного в возможности неинвазивного биофенологического и хронопатологического исследования состояния молочного скота по инфракрасным характеристикам продуктов секреции желез или же результатам гистогенеза и минерализации его собственной биомассы (равно как и по газохимическим результатам его продукционной физиологической активности [31]*).

Очевидным, в связи с этим, направлением применения инфракрасной спектроскопии молока, должно считаться определение физиологически опосредуемых примесей или фаз, являющихся продуктами метаболических сдвигов, в нем. Другим смежным применением этого метода может считаться определение ксенобиотиков и техногенных примесей в ходе производства и пробоподготовки молока. Известны методы определения алкалоидов [32], антибиотиков [33], биоцида - диметилфумарата [34] и меламина [35] в молоке[†] методами инфракрасного спектрального анализа. К известным методам анализа примесей подобным путем [37] сравнительно недавно были добавлены методы микроспектроскопии на чипах в MIR-диапазоне и подходы хемометрики (SIMCA) [38]. Существуют разнородные данные о возможности определения изотопных примесей в молоке с использованием ИК-методов, но это относится, преимущественно, к изотопам легких элементов [39, 40].

Следующий пункт применимости – обнаружение клеток в молоке; речь здесь идет не только о собственных соматических клетках организмов молочного скота (SCC) [41, 42], но и об обнаружении бактерий, таких, как *Cronobacter sakazakii* [43], *Staphylococcus aureus* [44, 45], *Lactococcus lactis* [45] и многих других [46]. В связи с этим, учитывая взаимосвязь параметров процессов свертывания молока и активности молочнокислых бактерий, любопытно отметить наличие большого количества работ, посвященных использованию ИК-спектроскопии для исследования коагуляции молока [47, 48]. В частности, Фурье-ИК-спектроскопия используется для оценки протеолитической активности *Yarrowia lipolytica* и эффективности её вклада в созревание сыра [49], причем матричные физико-химические свойства сыра при нагреве и плавлении, являющиеся коррелятом динамики его созревания под вышеуказанным действием, могут предсказываться по данным совмещенного метода флуоресцентного анализа и инфракрасной спектроскопии в среднем (MIR) диапазоне [50]. Определение процента молока в сырах с различными сроками созревания осуществляется с использованием инфракрасной спектроскопии ближнего (NIR) диапазона и технологии оптоволоконного зондирования [51]. Характеристические коагуляционные параметры для разных сыров также могут быть измерены с использованием волоконно-оптического датчика ближнего инфракрасного диапазона (≈ 880 нм) [52]. Теоретический базис подобных работ заложен в модельных работах, рассматривавших изменение обратного рассеяния в ИК-диапазоне при агрегации казеина и формировании творога [53]. Существующие в ряде развитых стран селекционные программы, направленные, в конечном итоге, на улучшение коагуляционных свойств молока [54], вполне могут опираться на такие подходы, так как механические / реологические[‡] свойства молока коррелируют с оптическими свойствами; в частности – регистрируемыми в красном и ближнем инфракрасном (NIR) диапазоне [56].

На молекулярном уровне коагуляцию молока можно связать с конформационными изменениями на уровне отдельных белковых компонент (в частности, с позиций QSAR, об этом говорят недавние данные об обнаружении расплавленных глобул в молоке [57]). Эти конформационные изменения, что общеизвестно, обычно регистрируют с использованием ИК-спектроскопии. Так как при изменении кислотности – pH сред происходят обратимые конформационные переходы, возможно анализировать и прогнозировать коагуляционные свойства молока, его титруемую кислотность и pH

* Известно, что крупный рогатый скот, основной производитель молока, является и основным источником метана (40% выбросов метана в атмосферу или 10% антропогенного форсирования парникового эффекта). Одна корова способна давать до сотен литров метана в сутки.

† И последствий применения молока с меламином - продуктов введения в метаболизм - в твердой фазе [36].

‡ См. также обзор на русском языке в статье [55].

методами ИК-спектроскопии среднего диапазона [58]. Недавно были получены высокоточные (с разрешением 2.0 Å) данные об изменении конформации коровьей лактопероксидазы как функции рН с использованием ИК-спектров [59]; ранее были исследованы лигандно-индуцированные конформационные изменения в фолат-связывающем белке при молочной пурификации с учетом буферности и рН среды [60] – в этой работе также использовалась ИК-спектроскопия ближнего (NIR) диапазона и Фурье-ИК-спектроскопия. В связи с этим целесообразно отметить воздействие "стерических" протекторов на конформационные и физико-химические свойства молока и молочных компонент, регистрируемое также и с помощью инфракрасной спектроскопии - известны работы по Фурье-ИК-исследованию систем с молочной липазой в обращенных мицеллах [61], и изучению молекулярного уровня организации бета-лактоглобулинов при взаимодействии с фосфолипидными бислоями [62], выполняющими подобную функцию. Более того, протеолиз и липолиз, сопровождающиеся, как известно, конформационными изменениями, используют для специфической калибровки анализаторов молока ближнего инфракрасного диапазона [63], наряду с другими принципами калибровки анализаторов в инфракрасном диапазоне, разрабатываемыми той же международной группой [64-66], что дает возможность рассматривать конформационные изменения молочных компонент как весьма достоверный принцип контроля и автоматической юстировки в ИК-диапазоне при анализе молока и молочных продуктов.

В действительности, это не просто фундаментальный факт, так как скорректированные измерения и их точность в молочном деле напрямую определяют качество продукции на выходе и её органолептические и флейвохимические свойства. С ранней фазы внедрения инфракрасного анализа в хозяйственную практику специалистов-молочников интересовала стабильность регистрации инфракрасных анализаторов [67] и корректность соотношения сигналов [68], регистрируемых с их помощью, но только впоследствии, по мере развития программно-аппаратных комплексов, возник тренд на сопоставление изменений в форме и точности регистрации сигнала конкретным биохимическим трансформациям или компонентам в образце (например, проанализирован эффект воздействия состава и содержания жирных кислот на точность анализа молока в среднем инфракрасном диапазоне [69], измерена точность Фурье-ИК определения казеина как белка с различными конформационными состояниями [70] и пр.). Таким образом, для практики важно, что, зная эти эффекты, можно регулировать и прогнозировать объективную надежность (своего рода – робастность) и стабильность молочного производства, опираясь на физико-химические представления, а не на устоявшиеся за десятилетия, не столь оптимизированные для новых условий и продуктов подходы.

В действительности, до сих пор не существует такого метода инфракрасного анализа молока, который бы обладал физико-химической предсказательной силой для множества параметров одновременно, так как многие из них имеют выражено-специфическое биологическое и географическое происхождение. Проиллюстрируем это на характерных примерах. Как жирность молока [71], так и параметры сыров [72] зависят от сезона и, соответственно, количественно варьируются при изменении географической зональности, что относится к компетенции фенологии и биогеографии. Содержание жирных кислот в молоке у коров различных пород, различного географического происхождения, типов скрещивания и стран, по данным инфракрасного анализа [73, 74], имеет ярко выраженное различие и может быть прокартировано в корреляции с этими параметрами на географической карте, показав биогеографическую зональность распределения в случае существования факторов объективного биогеографического генезиса. Аналогичная ситуация складывается по ряду других ключевых индикаторов, например, по содержанию мочевины в молоке в корреляции с эффективностью использования азота кормов [75], что может быть использовано на практике для оптимизации рациона молочных стад (в цитированной статье по результатам анализа было принято решение об переходе на более дешевые, но более оптимальные по усвояемости корма, что привело к росту доходов молочных ферм сверх расходов на корма в Онтарио). Возможна аутентификация типов вскармливания и географического происхождения коров по спектроскопии молока в видимой и ближней ИК

– областях* [76]. Данные методы, индицирующие биологические или географические параметры по инфракрасным спектрам молока, успешно дополняют инфракрасные методы, применяемые, собственно, для анализа ветеринарно-биологических (таких как гемодинамика процесса лактации [77]) и генетически-определимых эколого-биогеографических параметров (к числу таких работ можно отнести новое направление по синхронизированному качественному определению генетических и эколого-средовых характеристик по Фурье-ИК-спектрам молока [78]). Так как в генетическом анализе биохимических характеристик молока инфракрасные спектры используются с недавних времен довольно часто [79-81][†], последнее направление является закономерным обобщением этого тренда. Привязка же к географии или точкам выработки продукта без учета генетических характеристик, в частности - установление брендов или марок конечного продукта по его инфракрасным спектрам, в принципе, является рутинной практикой, позволяющей однозначно определить источник сырья или полуфабриката [82].

Естественно, что постоянно нарастающее количество информации, извлекаемой при инфракрасной спектроскопии молока (биогеографической, экологической, генетической, онтогенетической, ветеринарно-физиологической, физико-химической и биохимической), требует усложнения подходов к обработке и автоматизированной интерпретации данных. Для этого используются робастные калиброванные алгоритмы [83] на всех стадиях сбора данных методами инфракрасной спектроскопии по технологической цепочке в молочной промышленности, включая технологии распознавания образов [84, 85], функциональные сетевые подходы [86], многомерные и векторно-машинные методы [87, 88] и гибридные методы подбора переменных [89]. Расширение или увеличение размерности пространства переменных увеличивает информационную ценность анализа молока по соответственному ряду не прямых параметров и формирует предпосылки для становления корреляции между ними с использованием соответствующих координатных систем в многомерном анализе. Также увеличение информационной ценности получаемых данных осуществимо в случае расширения спектрального диапазона и взаимно-однозначного сопоставления (мэппинга, имиджинга – по зарубежной терминологии) спектрозонального или мультиспектрального анализа [90, 91] с данными инфракрасной спектроскопии совместно с мультивариантным анализом получаемых рядов данных [92]. Использование максимально широкого спектра анализа позволяет получить максимальное количество информации для стандартизации и определения качества молока.

В настоящее время основной массив методов обработки, предполагающих владение разнообразными математическими методами и подходами в программировании, сложен и недоступен для "полевого" применения рядовыми специалистами-молочниками, в связи с чем пока сложно рекомендовать их для повсеместного внедрения, так как это потребует (и требует в большинстве европейских стран) солидных вложений в инфраструктуру, курсы переподготовки кадров и аппаратное оснащение местных лабораторий и ферм. Поэтому в настоящее время акцент делается на создание доступных портативных и малобюджетных инфракрасных спектрометров и анализаторов для молока и молочно-хозяйственной сферы [93-96]. Из отечественных разработок можно назвать, пожалуй, только одну [97], да и та, в сущности, не является анализатором молока как таковым, поскольку в указанной статье её применение рекомендуется также в текстильной, нефтяной, мукомольной промышленной отраслях, а также - в полевом экологическом анализе в целом. Развитие микроэлектроники

* Существуют подобные методы и для определения систем вскармливания овец по средним инфракрасным и флуоресцентно-спектроскопическим данным: Karoui R., Hammami M., Rouissi H., Blecker C. Mid infrared and fluorescence spectroscopies coupled with factorial discriminant analysis technique to identify sheep milk from different feeding systems. *Food Chem.*, Vol. 127, Issue 2, pp. 743-748 (2011).

[†] Следует обратить также внимание на то, что таким образом можно детерминировать и дифференцировать друг от друга усредненные фенотипические характеристики по поголовью от индивидуальной генетической изменчивости в рамках поголовья одной породы: Bonfatti V., Di Martino G., Carnier P. Effectiveness of mid-infrared spectroscopy for the prediction of detailed protein composition and contents of protein genetic variants of individual milk of Simmental cows. *Journ. Dairy Sci.*, Vol. 94, Issue 12, pp. 5776-5785 (2011).

и оптоволоконной техники, микроминиатюризация элементной базы и компьютеризация сбора и предобработки данных, в том числе – с использованием одноплатных компьютеров, ноутбуков и КПК привели к созданию множества компактных высокоскоростных средств инфракрасного анализа молока и молочной продукции, основанных, преимущественно, на отражательных принципах. Вероятно, это связано с тем, что создание охлаждаемого блока (для резервуара с аналитом) для компактного переносного полевого прибора представляет известные технические трудности. Отражательная спектроскопия в ближней ИК-области используется в молочной практике не первое десятилетие [98-100], причем в последнее время - не только для анализа коровьего молока [101, 102]. Целесообразность применения того или иного метода диктуется целями его применения. Например, дискуссионным до настоящего времени вопросом является целесообразность применения ИК-спектроскопии диффузного отражения при анализе состояния здоровья поголовья молочного скота. Еще в 2011 году в "Journal of Dairy Science" выходили статьи с провокационными названиями по подобным направлениям: *visible and near-infrared spectroscopic analysis of raw milk for cow health monitoring: reflectance or transmittance?* [103]. Поэтому следует думать, что развитие и разрешение основных противоречий большинства методических подходов к аналитике молочной продукции в инфракрасном диапазоне* – дело будущего, а сами её ответвления обладают большой методической перспективой развития.

Об одном из направлений этого развития и его техническом оснащении планируется рассказать в настоящей работе. Оно не является мейнстримом молочной промышленности на глобальном уровне, однако оно хорошо известно на территории бывшего СССР, так как советские специалисты внесли большой вклад в его развитие. Речь идет об инфракрасной пастеризации молока. На мировом уровне известны имена многих отечественных ученых, работавших в этой области - Е.И. Герцен, В.Г. Гизатуллин, М.Ш. Исаков, В.И. Магда и др. Работы в этом направлении интенсивно велись в СССР с начала 1970-х гг. по середину 1980-х гг. [105-115]. Очевидно, что использование инфракрасного излучения в процессе пастеризации подразумевает возможность инфракрасного анализа процесса пастеризации и биохимических изменений в облучаемом объеме (то, что таковые изменения в процессе пастеризации вообще имеются, причем влияют на пищевые качества, является очевидным [116-118]). Известно, что в настоящее время инфракрасные методы используются в целях определения качества мембранной и хроматографической очистки молока и детерминации качества фильтрующих поверхностей [119, 120]. Отсюда следует, что очистка от агентов биологического плана, каковой, в сущности, является инфракрасная пастеризация, также может изучаться посредством инфракрасных методов ИК – фотометрической регистрации. Логично сопрягать источник инфракрасного излучения для лабораторной пастеризации и спектральный инфракрасный источник аналитического прибора, используемый при сборе спектроскопических данных.

* Выше при цитировании работ [98-100] обращалось внимание на использование спектроскопии диффузного отражения в ближней ИК-области для анализа молока, из чего у читателя может сложиться впечатление, что единственно пригодным для анализа молока является анализ спектров отражения в ближнем ИК-диапазоне или только спектров диффузного отражения; однако это не так - существуют множественные работы (напр., [104]), в которых используется спектроскопия в среднем инфракрасном диапазоне, причем спектроскопия полного отражения (это используется, в частности, для определения концентраций белка в молоке).

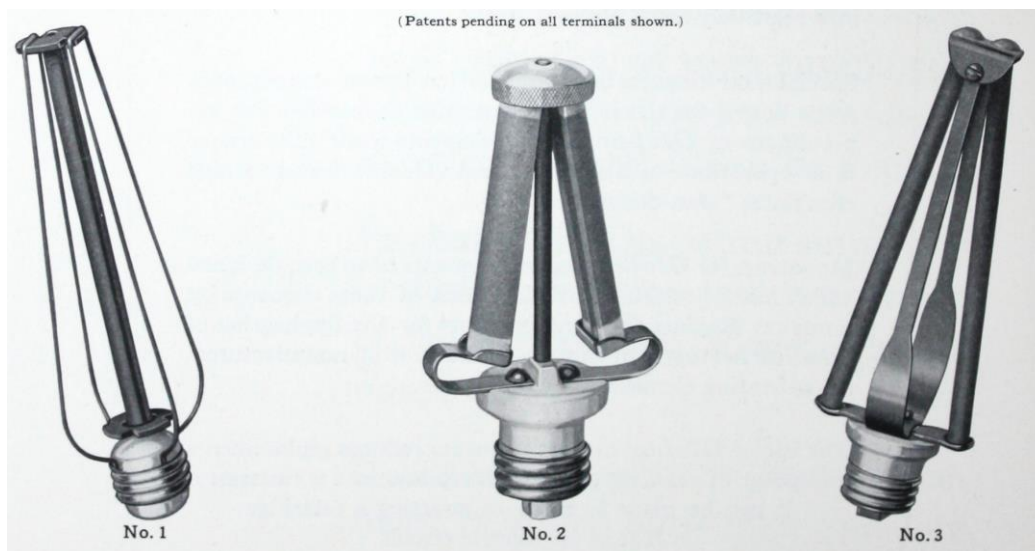


Рис. 1. Изображения трех первых патентованных конструкций глобаров American Resistor Company (1925)* по данным "The Story of Globar". American Resistor Corp., New York - Philadelphia - Milwaukee, 1925, 20 p.

Известно, что в инфракрасной спектрофотометрии, на практике, в качестве источников излучения, как правило, используют глобары – карборундовые стержни, нагреваемые за счет сопротивления до температуры от 1000°C до 1650°C при рабочем диапазоне длин волн в общем случае от 0.8 мкм до 25 мкм (в более узком зарубежном варианте – от 4 мкм до 15 мкм), хотя имеют место также сведения об эмиссионной эффективности глобаров в диапазоне 50–200 мкм [121, 122]. Первые глобары различных конструкций, патентованные фирмой "American Resistor Corporation" в 1920-х гг., приведены на Рис. 1. В технической статье "Fortschritte auf dem Gebiete der Ultrarottechnik" за 1938 год [123] еще упоминаются первичные конструктивные подходы к использованию глобаров в инфракрасной технике (Ultrarottechnik), а уже в 1940-е начинается разработка прогрессивно специализированных типов глобаров с различной контролируемой эмиссионной способностью, вследствие чего в 1940–1960-е регулярно появляются работы с измерениями эмиссионных параметров различных глобаров (см., напр.: [124-127]). В 1990-е был найден способ их гибридизации с оптоволоконными системами [128], что позволило совмещать инфракрасную аппаратуру с портативными оптоволоконными детекторами для полевого и фабричного применения[†]. В отличие от ламп Нернста, катушек из хромоникелевых сплавов или ртутных ламп сверхвысокого давления, это было достаточно оптимизированным вариантом для компактного сбора практически-важных данных с допустимой точностью, поэтому в целом ряде систем для анализа в молочной промышленности, животноводстве и агрономии этот подход нашел определенное применение. За счет высоких возможностей глобара как термоэлектронагревательного

* Термин "глобар" исходно был торговой маркой "American Resistor Company", зарегистрированной в United States Patent and Trademark Office в 1925 г. (No. 0200201) и перерегистрированной в 1927 г. (No. 0234147).

[†] В последнее время возможности полевого использования анализа в NIR-диапазоне с использованием оптоволоконной техники существенно расширились за счет внедрения микрочипов [38] и лабораторий на чипе с инфракрасным детектированием [129], широко применимых в контроле качества в пищевой биотехнологии и микробиологии и сельскохозяйственных отраслях [130]. Одним из преимуществ использования подобных технологий является возможность работы с пленками [131], являющимися коррелятом крематокрита молока скота (если этот термин применим в молочной животноводстве [132]), который, как известно [133], измеряем с использованием инфракрасной спектроскопии. В случае позиционно-чувствительного детектирования или NIR-HDRI-термографии [129] это может быть использовано как дополнительный критерий неомогенности (гетерогенности) молочных композиций в ИК-диапазоне [134].

элемента (ТЭНа) целесообразно включать его в системы анализа данных о качестве пастеризации в режиме реального времени и их модельные аналоги. За счет этого избегается необходимость использования двух источников одновременно, а вместо этого нагрев и подача инфракрасного излучения происходит синхронно.

Материалы и методы

Нами в качестве образца-прототипа для отработки технологии использовался исходно неисправный инфракрасный спектрофотометр Zeiss UR-20 (частично – Zeiss UR-10), из которого создавалась экспериментальная установка инфракрасного нагрева-пастеризации с параллельным анализом спектров. Этот прибор был широко распространен в Советском союзе и странах СЭВ во второй половине XX века, поэтому найти неисправный прибор для проведения аналогичных манипуляций для DIY-приборостроения не составит труда. Этот прибор обладает диапазоном регистрации $400\text{--}4000\text{ см}^{-1}$ при разрешении $4\text{--}6\text{ см}^{-1}$ и фотометрической точности $\pm 1\%$ в интервале $20\text{--}80\%$, что достаточно неплохо в рутинных измерениях, хотя уже не соответствует оптимальности точности современной аппаратуры. Несмотря на конструктивное устаревание (его разработка относится к 1950-м - 1960-м гг.), оптическая схема прибора, охлаждаемая камера и многие системотехнические решения не устарели до настоящего времени, что позволяет получать и публиковать сделанные на нем результаты в читаемых международных журналах до настоящего времени. В частности:

1) работы по биохимии нуклеиновых кислот, сделанные с его использованием, встречаются и в 1990-е [135], и в 2000-е [136, 137], что позволяет использовать его при исследовании генетических аспектов молочной продуктивности методами инфракрасной спектроскопии [78-81];

2) исследования комплексообразования в биоорганических полимерных матрицах и полимерной иммобилизации [138, 139] также производятся на приборах UR-20, что дает возможность экстраполировать их применимость также и на изучение матричных физико-химических свойств сыров, являющихся, в общем случае, биокolloидными мультикомпонентными матрицами [50];

3) в силу актуальности исследования продуктов ферментации молока методами инфракрасной спектроскопии [99], вызывают интерес методы мониторинга бактериальной ферментации с использованием UR-20 [140];

4) существование перечисленных в первом разделе инфракрасных методов определения биохимических агентов и ксенобиотиков в молоке позволяет использовать данный прибор в этих целях, поскольку с 1970-х гг. до последнего (2012 год) времени накоплено достаточное количество работ по биохимическому применению данного прибора (напр.: [141-145]), а в органической химии (включая химический анализ того, что в молочной отрасли считалось бы ксенобиотиком) он используется с 1960-х гг. [146] по 2000-е гг. [147-152];

5) применимость инфракрасного анализа к пленкам молочной продукции [131] позволяет использовать UR-20 для промера последних, поскольку существует немало работ (последняя относится к 2012 году [155]), в которых накоплен опыт и выработаны эффективные методические подходы к измерению органических пленок [153-155] (впрочем, как и неорганических [156-158]) на нем, причем, с точки зрения эффектов инфракрасной пастеризации [105-115], небезынтересны работы по изучению детектирования теплового инфракрасного излучения этими пленками* [159];

6) если рассматривать пастеризуемые сыры (в т.ч. плавленые) как гетерогенные системы, что имеет корреляцию с [134], то в пределах возможно использование UR-20 для их изучения как биокomпозитных материалов и нанобиокomпозитов, поскольку (с середины 2000-х гг. по настоящее время [162]) имеет место тренд на внедрение данного прибора в эту отрасль исследований [160-162];

* Фактически общеизвестно, что пенка – пленочный продукт термической денатурации и дегидратационной поликонденсации биомолекулярных компонент молока – возникает при пастеризации; необходимо отличать её от сливочной "пленки" - продукта самопроизвольной фазовой сепарации молочной эмульсии с обычным энтропийным обогащением верхних слоев наиболее легкими липидными компонентами, идущим лучше на холоду как коррелят энтропийного процесса.

7) поскольку во введении указывалось, что состав исследуемого молочного анализатора зависит от систем вскармливания [75-76], а наличие минеральных веществ в сыром молоке зависит от их содержания в кормах молочного скота [24-26], целесообразно инфракрасное обнаружение и измерение этих компонент в растительном сырье или кормовой базе молочного скота, а также явлений координационно-химического и, в частности, координационного металлохимического связывания, с использованием UR-20, предпосылки к чему имеются в виде множества работ по промерам состава растительного сырья (как зарубежных [163-165], так и свежих отечественных [166-169]) и координации или ковалентной фиксации неорганических или минеральных, преимущественно металлических, ионов органическими соединениями [170-172] с использованием UR-20;

8) так как известна выявляемая и оцениваемая инфракрасными методами связь между спектрохимическими и коагулятивными свойствами молочных субстанций [47-54], что, в свою очередь, коррелирует с механическими и реологическими параметрами [56], логично использовать данные, получаемые с использованием UR-20, в задачах корреляционного сравнительного анализа реологии и молекулярно-механической и конформационной лабильности/устойчивости компонент молочного анализатора (это возможно, так как имеются ряд публикаций в области механохимического синтеза, в которых используются данные, полученные с использованием UR-20 [173-175]);

9) поскольку в хроматографии и фильтрационной очистке молока часто используются неорганические сорбенты, загрязненность которых после анализа молока - анализатора проверяется посредством ИК-измерений [119, 120], логично, пользуясь тем, что для структурного анализа цеолитов и сорбированных к ним агентов классически, с 80-х гг. прошлого века используют этот прибор [176-178]*, адаптировать UR-20 таким образом под выполнение смежных задач, чтобы фильтрация и элементарные виды хроматографии могли проходить напрямую в приборе в ходе ИК-регистрации (хотя при малой скорости сбора данных, свойственной системотехнике данного прибора, это может быть чревато артефактами, которые требуется искоренить еще на стадии проектирования элементов указанной модернизации);

10) методы оценки энергетических параметров молока и секретирующих коров [17, 19] дают возможность косвенного использования инфракрасных спектрофотометров (и специально автоматизируемых для этой цели программно-аппаратных комплексов) типа UR-20 для оценки энергии, благо данные приборы использовались ранее для термохимических изысканий [179], для снятия вибрационных спектров в процессе переноса протона во внешнем поле при электрохромизме [180], изучения различий в поведении сред с различным распределением сети водородных связей, то есть, в конечном итоге, коррелята энергии связей [181],

11) в силу частоты использования стеклянных носителей и подложек в хроматографии и спектрометрии, целесообразно, наконец, упомянуть о большом количестве работ по исследованию спектральных свойств оптических стекол, выполненных на UR-20 только в последнее время - в начале текущего века [182-186] (хотя очевиден также и тот факт, что новейшие из них публикуются в журналах всё более низкого уровня и цитируемости [187, 188], что говорит о том, что "уровень техники", как говорят патентоведы, по данному прибору необратимо пройден и без фундаментальных его доделок получение принципиально новых результатов невозможно).

* До последнего времени (до середины 2000-х гг.) приборы этой модели использовались для этих целей и в России - см. работы химиков МГУ: Kubasov A.A., Kitaev L.E., Yushchenko V.V., Tikhii Y.V. The effect of small quantities of water and ammonia on the nature of adsorption complexes in a zeolite Y (2005); Kitaev L.E., Kubasov A.A., Malyishev S.V. Study of n-Butanol Adsorption on the Surface of Modified Silica by Means of ^{13}C NMR and Infrared Spectroscopy (2006). К сожалению, не удалось установить точно координаты публикации, поскольку выданный нашими коллегами из МГУ автоматически распознанный манускрипт на английском языке в электронном виде не содержал данных об источнике.

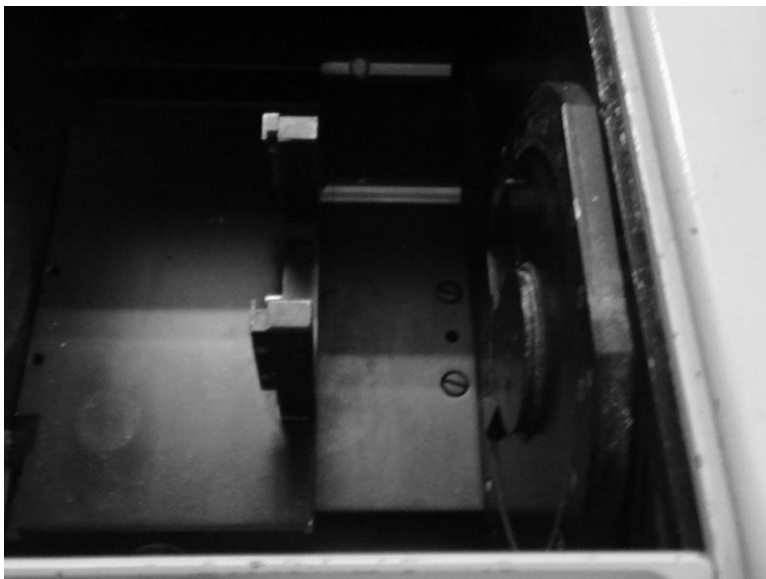


Рис. 2. Вместимость кюветного отделения

Таким образом, как следует из изложенного, необходима принципиальная реконструкция прибора до того, как его можно будет рассматривать как специфический количественный анализатор молочных сред. В исходном виде оптическая схема аппарата включает в себя призмный столик с призмами из бромистого калия, хлористого натрия и фтористого лития, фотоэлектрический приемник излучения, линзу из бромистого калия для установки на входной щели и окно из бромистого калия для установки на корпусе источника излучения. Призмный столик имеет свой обогреваемый эксикатор. Набор кювет прибора UR-20 включает в себя неразборные и разборные кюветы из бромистого калия, хлористого натрия, фтористого лития, фтористого кальция, смешанных галогенидов таллия (KRS-5), сульфид-мышьякового стекла с толщиной слоев 0.02, 0.04, 0.06, 0.1, 0.16, 0.25, 0.4, 0.6, 1.0, 2.6 мм. Общий диапазон волновых чисел 400–5000 см^{-1} , причем с KBr призмой 400–850 см^{-1} , с NaCl призмой 670–4000 см^{-1} , с LiF призмой см^{-1} . Абсолютная погрешность измерений волнового числа при 400 см^{-1} - $\pm 4 \text{ см}^{-1}$, при 700 см^{-1} - $\pm 1.5 \text{ см}^{-1}$, при 4000 см^{-1} - $\pm 10 \text{ см}^{-1}$, при 5000 см^{-1} - $\pm 14 \text{ см}^{-1}$ при точности отсчета по градуированному диску $\pm 1 \text{ см}^{-1}$ и погрешности $\pm 1\%$ в диапазоне 20-80% и $\pm 1.5\%$ в диапазонах 0-20% и 80-100%. При нижней определяемой границе излучения в фотоприемнике 10^{-10} Вт (частота подачи облучения 10 Гц) воспроизводимость показаний лучше, чем $\pm 0.5\%$. Разрешение прибора также достаточно высоко и составляет 0.6 см^{-1} при 2000 см^{-1} с призмой LiF. Используемый силитовый глобар длиной 210 мм (собственно, длина накаливания 60 мм) имеет сопротивление в холодном состоянии 6 Ом, но при потребляемой мощности ≈ 500 Вт и рабочем токе 12–14 ампер имеет задаваемую величину черной температуры 1200-1400°C. Предварительный разлагатель для первого рефлектора имеет диапазон 400-700 см^{-1} при использовании KBr призмы, а для второго – 700-850 см^{-1} при призме KBr и 670-850 см^{-1} при призме NaCl, а также плоское зеркало (NaCl, LiF) от 850 до 500 см^{-1} . Чувствительный элемент имеет поверхность 1 мм^2 (0.5 мм x 2 мм), чувствительность 6.5-9 В/Вт при действующем сопротивлении 30 Ом и соответствующем ему напряжении шумов 10^{-9} В. Высоко стабилизированная электроника (± 3 мВ при колебаниях в сети ± 20 В) обеспечивает постоянное усиление 5×10^4 (не считая наличия селективности – резонансной частоты 10 Гц, ширина полосы 6-9 Гц с шумоподавлением на сопротивлении) и включает в себя такие прогрессивные для тех лет решения как фазочувствительный демодулятор - фазовый детектор с последующей постоянной времени (50, 200, 800 мсек) и двутавровый заградительный фильтр на 50 Гц (напряжение входа главного усилителя за полупериод поочередно снимается с обоих выходов). При наличии многих архаичных характеристик прибор программируемый, причем программирование производится штифтовым способом – в UR существует 100 контактных штифтов, на каждый из которых приходится программируемый интервал

50 см⁻¹. Из всего изложенного следует, что по техническим параметрам используемый прибор много лучше большинства современных компактных / портативных анализаторов молока, хотя весьма сильно уступает большинству зарубежных аналитических лабораторных приборов нашего времени. Это определяет границы применимости его как прибора-прототипа.

Большая ширина кюветного отделения (Рис. 2) позволяет разместить в нем любой нагревательный элемент, помимо основного глобара, установленного под кожухом. Этот подход используется обычно при необходимости термостатирования в ходе измерений, но может быть использован и в экспериментальных целях – при динамической спектроскопии глобарной пастеризации. Следует отметить, что термостатирование в приборе ZEISS UR-20 стоит на очень хорошем уровне. Существуют отдельные боксы для поддержания температуры (Рис. 3), держащие её очень точно даже после многих лет эксплуатации. Легко переключаемая и допускающая встраивание в цепь измерительных устройств коммутация позволяет не только контролировать, но и регулировать (по электрическим параметрам на данном участке цепи) температурные режимы исследования, как это можно себе представить на Рис. 4. Наличие программатора (первого в своем роде на приборах такого типа) на верхней крышке прибора (Рис. 5) и прецизионного спирального микроскопа для точного измерения ширины щели (Рис. 6) выводят получаемые при этом измерения на уровень, недостижимый для большинства дешевых аналогов – даже современных. По существу, на данном приборе возможна еще микроскопическая регистрация потока по ширине щели. В настоящее время нами ведутся прикладные НИОКР для достижения этой возможности.



Рис. 3. Термостатирующий бокс



Рис. 4. Эргономичный винтовой контакт, позволяющий встраивать в электрическую цепь прибора дополнительные звенья



Рис. 5. Программирующее устройство на верхней крышке прибора

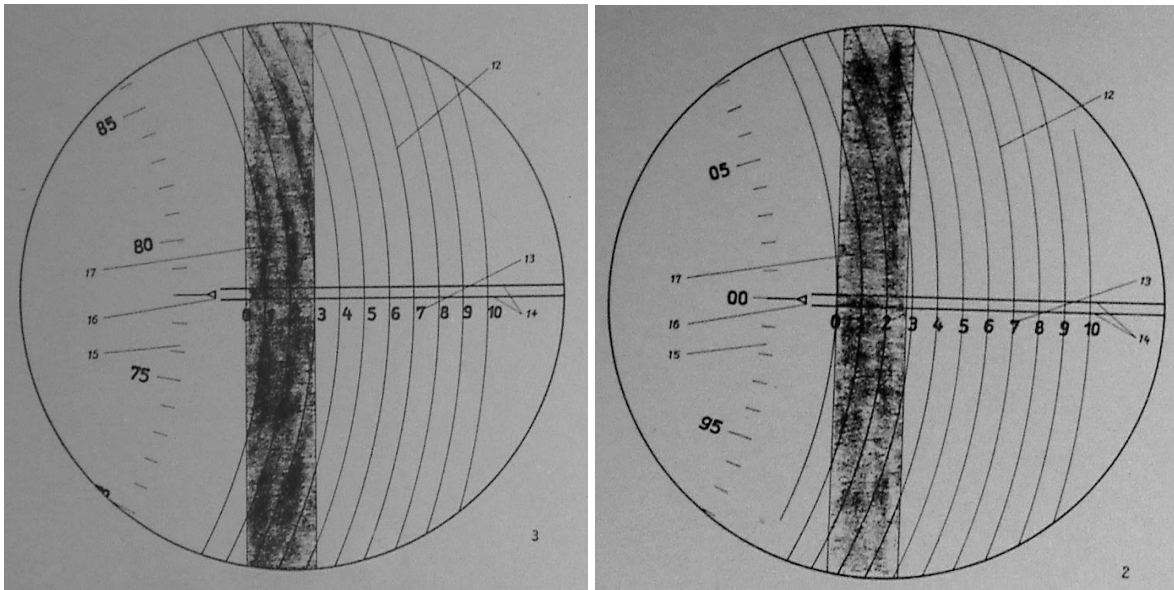


Рис. 6. Спиральный микроскоп при измерении ширины щели

Результаты автоматизации.

В сущности, была произведена не реконструкция, а функциональная модернизация с полной заменой некоторых частей прибора и изготовлением некоторых агрегатов с нуля в условиях мастерских. Были изготовленные сменные нагреватели, создана методология и описана процедура калибровки прибора при параллельной пастеризации и спектральной регистрации изменений, заключающаяся в прохождении определенных точек прибором на автомате под управлением программной системы с возможностью ввода данных о режиме из специального файла. Для управления прибором была создана программа ORENOV UR-20 Suite, с помощью которой управлялись: калибровка, выбор марки нагревателя/глобара (из библиотеки файлов), старт и режим нагрева, мониторинг, сбор данных, визуализация - построение трехмерных отображений во времени или в зависимости от температуры, NIR картирование (включая отображение в единицах IRE, luma-визуализацию и фотометрию с индексной ASCII привязкой значений) и выбор единиц измерений. Этот функционал был полностью локализован по управлению в едином графическом интерфейсе пользователя с большим количеством опциональных возможностей, дизайн которого на одной из первых стадий разработки показан на Рис. 7. Основная часть кода разработки исходно писалась на Visual Basic, но впоследствии после замены датчиков и системотехники коммутации был осуществлен переход на SCADA-оболочку. Поскольку, в отличие от автономных систем сбора данных, последняя может варьироваться пользователем и не является разработкой по существу истинно-программного воплощения аутентичных алгоритмов и эргономики автоматизации, ниже будет рассмотрен дизайн оболочки, разработанной на основе Visual Basic (частично код писался автором "с нуля", частично - заимствовался из программного обеспечения Freeware с вскрываемым кодом или из официально распространяемых частей определенного функционального назначения, частично – заказывался в профессиональной компании за счет средств автора и затем сводился воедино в течение трех месяцев).

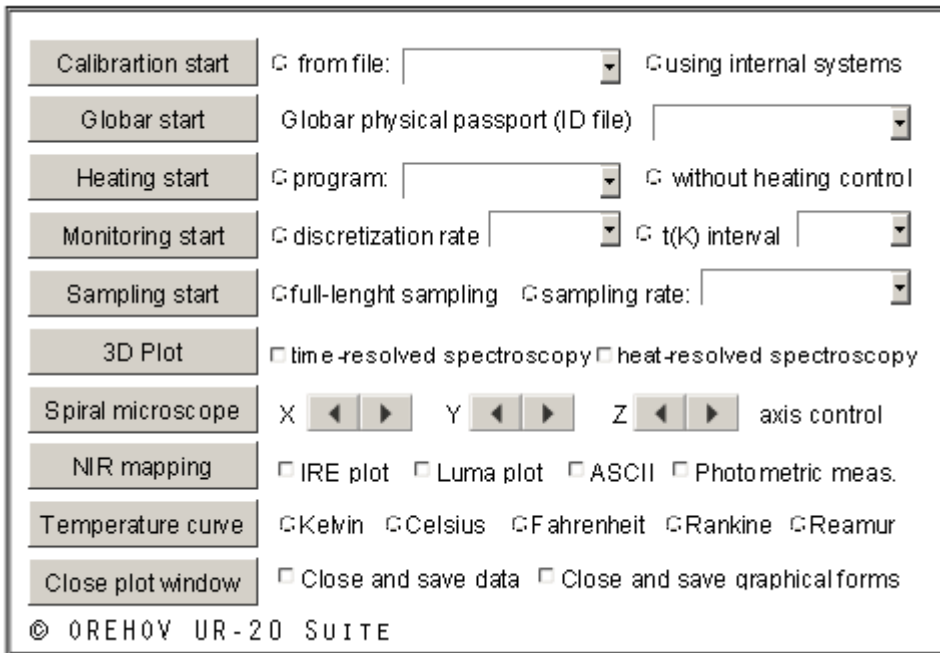


Рис. 7. Основное окно параметризации "OREHOV UR-20 Suite"

Использование программно-аппаратного комплекса начинается с пароля, содержание которого зависит от топологии эксперимента и индивидуальных номеров составляющих, вводимых предварительно инженером-настройщиком программно аппаратного комплекса в специализированный файл. Таким образом, пароль является не средством ограничения возможностей неавторизованного пользователя, а средством защиты прибора от выхода из строя при подаче неправильных настроек. Сам пароль и представляет собой, по существу, контроль знания оператором установки или лаборантом этих настроек. Более того, так как ряд режимов и комбинаций являются несовместимыми, ввод соответствующих реальной конфигурации прибора, но технически неприемлемых (несовместимых с жизнью прибора) комбинаций, не означенных в файле совместимостей, также не приведет к инициализации системы. Таким образом, система парольного доступа контролирует не только знание, но и понимание персоналом технических принципов работы прибора. Это исключает частые в лабораторно-технической практике сбои и поломки приборов вследствие некорректной самостоятельной замены подозреваемых на поломку (или выработавших ресурс) модулей персоналом, что, впрочем, не исключает эту замену, если она проведена корректно и этот модуль обладает техническими характеристиками, соответствующими означенным в базе данных спецификации, откуда черпается информация при заполнении файлов комбинаций (совместимости). Компонент, пароль на который введен не был, не будет открываться под управлением данной сессии*. Окно инициализации (ввода пароля) показано на Рис. 8. На данном рисунке видно, что запрашиваются только: номер глобара, вольтаж, тип призмы и калибровка прибора. Валидация конкретного пользователя на этапе инициализации ЭВМ не используется – лишь бы правильно были установлены параметры (однако возможность смены пользователя во время сеанса или сессии имеет место).

* В настоящее время это осуществляется на программном уровне - не открываются интерфейсы управления, но далее в случае продолжения работ по данной тематике (в настоящее время данная тематика ОКР закрыта ввиду отсутствия ассигнований на средства автоматизации, сам автор находится вне Москвы и вне доступа к прибору) планируется организовать расширенный сбор данных датчиками непосредственно внутри прибора и аппаратное управление блокированием при поступлении соответствующих сигналов от датчиков.

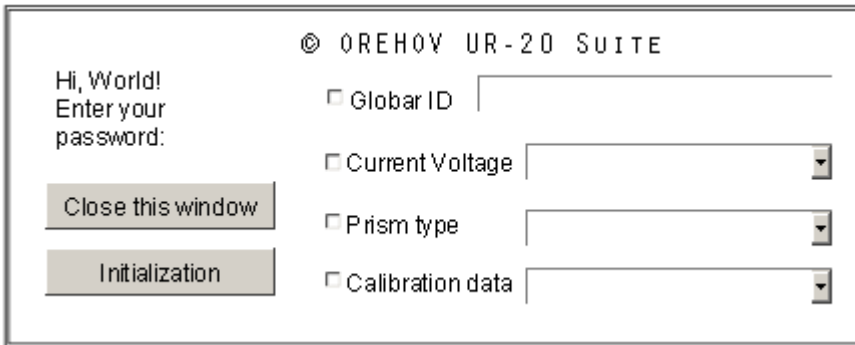


Рис. 8. Окно "парольной" инициализации "OREHOV UR-20 Suite"

Рассмотрим детально процесс настройки в окне, показанном на Рис. 7. Калибровка, идущая первой в инициализации прибора, может быть осуществлена из файла или путем использования внутренних настроек. В последнем случае она может быть осуществлена в ручном режиме или с принятием по умолчанию предложенных значений. Инфракрасный источник (глобар) имеет собственный физический паспорт в виде файла, полученного при тестировании на ряде поверочных установок. Этот файл можно выбрать из меню "Global physical passport (ID-file)", после чего следует нажать кнопку "Global start" для запуска ему соответствующего режима прогрева. Прогрев может осуществляться в оптимизированном для максимизации КПД аппаратном варианте и в программном режиме - с охлаждением и работой на разных температурах нагрева. В отличие от обычной спектрофотометрической сессии, запускающейся кнопкой "Global start", эти опции запускаются "Heating start", так как температура во время регистрации не выходит на контролируемый стационар. Данный процесс может быть управляем программой, в которую закладываются точки термической кривой (выпадающее меню "program" в строке "Heating start"), либо не управляться ЭВМ, а контролироваться с помощью ручек регуляции на панели или выносном пульте прибора ("without heating control"). Соответственно, должны существовать, минимум, два режима спектральной регистрации - с временным разрешением и с температурным разрешением, причем им должны соответствовать различные интервалы сбора данных и температурного сканирования. Это осуществляется в строке с кнопкой "Monitoring start" с возможностью выбора файла управления по времени в меню "discretization rate" и по термодинамическим интервалам в меню "t(K) interval"* в той же строке окна "OREHOV UR-20 Suite". Отсюда следует, что наивысшая точность измерения одного и другого достигнута быть не может, а значит должна существовать система управления точностью / скоростью сбора данных и возможность выбора режима максимальной эффективности сбора данных. Эта структура закреплена в строке с кнопкой "Sampling start": можно выбрать режим полнодиапазонного сканирования "full-length sampling" либо интервал (точность) сканирования (открывается через меню "sampling rate"). Перед тем как осуществлять выбор всего этого пользователь должен определиться с выбором режима сбора и трехмерного отображения результатов измерений - это будет спектроскопия с временным разрешением или же спектроскопия по ходу нагрева? Пользователю предоставлена возможность выбора этого в строке с кнопкой "3D Plot", где можно поставить галочку-флаг на "time-resolved spectroscopy" и / или "heat-resolved spectroscopy", причем выбор паллиативного варианта приводит к отображению в окне визуализации обоих графиков и возможности компенсации проблемных диапазонов одного типа измерений результатами восстановления данных из второго массива данных по ряду формул с последующим статистическим фиттингом. Эта процедура выполняется также

* Выбор единиц измерения температуры осуществляется с помощью строки с кнопкой "temperature curve", перед нажатием которой следует выбрать один из вариантов: по Кельвину (Kelvin), по Цельсию (Celsius), по Фаренгейту (Fahrenheit), по Ранкину (Rankine), по Реомюру (Reamur). Имеется возможность усилить набор единиц пересчета, введя шкалы Делиля, Гука, Ньютона, Уэджвуда и логарифмическую шкалу Дальтона или ввести измерение в долях планковской температуры, но это нецелесообразно для обычного пользователя.

через MATLAB и ряд специализированных программных пакетов, в которые файлы данных, полученные с помощью "ORENOV UR-20 Suite", могут импортированы. Причем объективная производительность вычислений будет порядочно выше, чем на данном ПО.

Особый интерес представляет автоматизированный сбор данных с использованием спирального микроскопа для определения ширины щели, входящего в комплект Zeiss UR-20. В ходе описываемой автоматизации он был частично реализован и введен в систему управления "ORENOV UR-20 Suite". Управление с использованием шаговых двигателей и управления от параллельного (LPT) порта дало возможность относительно прецизионного сбора данных с камеры, поставленной на прибор. Спиральный микроскоп управляется от окна, показанного на Рис. 7, через строку с одноименной кнопкой "Spiral microscope". Это осуществляется с помощью кнопок управления осями X, Y и Z. Графические результаты могут быть отображены в единицах IRE, в единицах фотографической светимости "Luma plot", в кодировке ASCII, а также в 256-рядной фотометрии. Для этого одной строкой ниже (строка с кнопкой "NIR mapping") существует ряд элементов выбора отображения и режима анализа "IRE plot", "Luma plot", "ASCII", "Photometric meas.". Визуализация может быть проведена с использованием любого из них или их набора. В случае закрытия окна, система предложит сохранить данные и / или графики (без этого окно не закрывается), для чего в строке "Close plot window" существуют пункты "Close and save data" и "Close and save graphical forms". Программа может быть также закрыта с помощью диспетчера задач.

Следует отметить, что такая программа может быть создана любым пользователем с навыками программирования для своей установки. К сожалению, несмотря на то, что при изготовлении программно-аппаратного комплекса использовались только промышленные общедоступные модули, их комплексирование представляло собой большую проблему в силу того, что многие из них имели ранние - не совместимые с новыми операционными системами драйвера и утилиты настройки, а многие из них уже отсутствовали в торговых сетях и находились только через сетевые аукционы. Значительно более удобным является использование SCADA, но оно не рассматривается в данной работе в силу ограниченного и без того немалого объема статьи.

Обсуждение

Очевиден вопрос: целесообразны ли, по мировым меркам, восстановление подобных приборов, их модернизация и построение на их базе программно-аппаратных комплексов нового поколения; иными словами, можно ли получить ценные по мировым меркам (или просто публикуемые в читаемых и цитируемых международных англоязычных журналах) данные, используя эту платформу. Для ответа на данный вопрос необходимо обратиться к практике публикации данных, полученных с UR-20, за пределами России в национальных журналах тех стран, в которых используются или использовались эти приборы, либо (что также является критерием) существует готовность принимать публикации с результатами, выполненными на UR-20 в последнее время.

В США (напр., [189, 190]) и Канаде (напр., [191, 192]) с 1970-х по 2000-е гг. активно публиковались статьи, в т.ч. - статьи отечественных авторов, выполненные с применением Zeiss UR-20. В западной Европе прибор применялся и статьи с его применением активно печатались, начиная с 1960-х гг. (см., напр., французскую статью [193]). В ГДР как стране производителе количество опубликованных работ с его использованием идёт на тысячи, а в ФРГ имелось сравнительно небольшое количество приборов, что не мешало публикации работ с использованием UR-20 в крупных высокорейтинговых журналах: так, "Monatshefte für Chemie" до конца 1989 года (т.е. до периода разрушения Берлинской стены, которое предшествовало слиянию ГДР и ФРГ и соответствующему изменению политики научных журналов) [194, 195] и ранее (см., напр.: [196, 197]) публиковал многочисленные работы с UR-20. По недостаточно репрезентативным (поскольку включающим в себя совпадения и формально-аналогичную внеконтекстную аббревиацию), однако, в целом, отображающим реальное положение дел, данным БД "SpringerLink", обнаруживается 179 статей с "UR-20" на немецком языке, 4 на французском и 10633 на английском языке*. Таким образом, для США

и Западной Европы до сравнительно недавнего периода было не исключительным, а стандартным использование данного прибора.

Для большинства восточноевропейских стран* - Польши [198-201], Венгрии [202][†], Чехословакии (в 1970–1980-е гг. в ней практически ежегодно выходили работы с данными измерений на UR-20 [205-212], а после её разделения в 1993 г. - отдельные работы пошли от Чехии и Словакии), Словении [213, 214], Латвии [215], Румынии [216-222] (особенно, в румынской биохимии [223-226]) до последних лет характерно было наличие публикаций с использованием спектральных данных, полученных на UR-20. Учитывая, что публикации такого рода, особенно, когда выполнялись в коллаборации с Западной Европой, проходят и в типично западные, например британские [227] журналы, можно приравнять категорию восточноевропейских и западноевропейских англоязычных журналов, тем более, что и те, и другие зачастую находятся в открытом доступе, вследствие чего внимание читателей из сети зачастую останавливается на доколе неизвестных изданиях (в случае соответствия их тематики запросам читателя как будущего автора цитирующей их публикации).

Про бывший СССР можно, вероятно, не говорить, хотя следует отметить, что в СНГ на русском языке до сих пор публикуется огромное количество материалов, выполненных с использованием UR-20: Украина [228-230], Армения [231-234], Азербайджан [235-237], Узбекистан (ранее указывалось, что в издающемся при Институте химии растительных веществ Академии наук Республики Узбекистан журнале "Химия природных соединений" за время его существования напечатано 957 статей с использованием "UR-20", исходя из чего можно сделать вывод, что этот узбекский журнал входит в пятерку лидеров по числу опубликованных работ, выполненных с использованием данного прибора), не говоря уже о множественных региональных вестниках в России [238-242], до сих пор публикуют (и этот поток, вероятно, не закончится до физического разрушения данных приборов) статьи с использованием UR-20, хотя это, в отличие от работ, опубликованных в США, Европе и ряде бывших стран СЭВ и прибалтийских республик, вовсе не является критерием работы современного уровня и, как следствие, применимости данного инфракрасного аппарата на современном уровне развития аналитических задач.

Поэтому следует ответить ещё на один вопрос: насколько фундаментальные задачи решались с его использованием, то есть насколько высока планка потенциально решаемых с его помощью задач в настоящем. Внимательный анализ показывает, что самые крупные работы, проведенные с его использованием, связаны с: космохимией и астрофизикой [243, 244]; ядерно-физическими направлениями, включая сцинтилляционные эффекты и среды [245-248], ядерную геохимию и минералогия [249-252], оптоэлектронику фотодетекторов и конвертеров [253]; квантовой электроникой или оптоэлектроникой [254-256] (хотя, ради научной точности, следует прояснить, что уровень техники подобных работ не отличается от уровня первых измерений такого рода, выполненных на этом приборе [257]); химией и оптикой атмосферы (целый цикл работ по этому направлению был опубликован недавно в "Proceedings of the Tenth Atmospheric Radiation Measurement (ARM) Science Team Meeting" [258-260]); "мембранологией" и ионикой твердого тела [261, 262]. Поэтому сомнений нет в том, что этого уровня более, чем достаточно для решения конкретных задач измерений в молочных средах, в том числе - в гетерогенных, для которых требуется дифференциация

* В числе лидеров по публикации с использованием данного прибора многие известные и, в т.ч. - переводные отечественные англоязычные издания. В числе журналов, количество статей с использованием UR-20 в которых выходит за сотню, можно назвать: Chemistry of Heterocyclic Compounds - 2 836, Pharmaceutical Chemistry Journal - 991, Chemistry of Natural Compounds - 957, Journal of Applied Spectroscopy - 503, Theoretical and Experimental Chemistry - 140, Journal of Structural Chemistry - 102, Chemistry and Technology of Fuels and Oils - 111. Из уже не существующих отечественных журналов в лидерах Известия Академии Наук СССР, серия химическая, переводившийся под импринтом "Plenum Publishing" как "Bulletin of the Academy of Sciences of the USSR: Division of chemical science" - 2389 статей в базе данных.

* В данном случае термин "восточноевропейские" применен в политэкономическом смысле, определявшем возможность оснащения приборным парком во времена холодной войны.

[†] Прим: любопытно отметить, что это не первая статья по данному вопросу в серии. Так, 106-я часть данной работы вышла в 1998 г. [203], а в 1999 году вышла также и 110-я часть [204] в журнале "Journal of Thermal Analysis and Calorimetry" издательства Springer.

методов и задач. Так, например, методы Фурье-ИК-спектроскопии полного внутреннего отражения (ATR-FTIR) могут быть применены для исследования йогуртов как продуктов [263], но одновременно их компоненты - мальтодекстрин и сахароза, воздействующие на высушивание культур *Lactobacillus bulgaricus*, могут быть детектированы инфракрасными методами, поэтому процессы высушивания или лиофилизации могут быть исследованы с использованием инфракрасной спектроскопии [264]), что, с позиций пользователя UR-20, знающего о возможности его использования для наблюдения процессов сополимеризации и комплексообразования в многофазных гетерогенных системах [265], позволяет внедрить гибридную методику, изменив и физико-химический характер заданных измерений, взяв за основу совокупность смежных методов анализа и пробоподготовки.

Иначе говоря, при наличии понимания возможностей этого прибора (для создания которого у исследователя в пищевой области, собственно, писалась настоящая статья) модернизированный UR-20 может дать ещё очень много полезной междисциплинарной* информации фудомике [269-273] в России.

Выводы

Итого:

а) Проведен комплексный аналитический обзор применимости комплекса инфракрасных спектральных методов для молекулярной квалитметрии и идентификации качества молокопродуктов и сопутствующих аналитов.

б) Показана актуальность реконструкции и модернизации спектрометров и спектрофотометров ИК-диапазона без преобразования Фурье в целях молочно-хозяйственного и молочно-промышленного анализа.

в) Произведена успешная попытка модернизации одного из приборов, для которого написано программное обеспечение (утилита для управления драйверами вновь внедренных устройств с GUI и DAQ для регистрации с системы датчиков контроля релевантных параметров).

г) Приведены данные по использованию данных ИК-спектрофотометров без преобразования Фурье в постсоветской и современной практике, в том числе – после 2000-го года.

е) Указано, что при понимании возможностей таких приборов, физики и метрологической адекватности подобного анализа, модифицированные приборы данного типа могут дать много альтернативной качественной (комплементарной к современным методам) информации «омиксным» исследованиям в областях пищевой индустрии – т.н. «фудомике».

Примечания

1. Biggs D.A. Infrared milk analyzer. Journ. Dairy Sci., Vol. 55, Issue 5, pp. 650-651 (1972).

2. Wu D, Feng S, He Y. Infrared spectroscopy technique for the nondestructive measurement of fat content in milk powder. Journ. Dairy Sci., Vol. 90, Issue 8, pp. 3613-3619 (2007).

3. Li L.-J., Sun F.-J., Wang C. Micro-Computerized Upgrade and Regeneration of Infrared Spectrometer. Infrared Technology (Hongwai jishu; Kunming Institute of Physics), Vol. 29, Issue 3, pp. 151-154 (2007).

4. Biggs D.A. Instrumental infrared estimation of fat, protein, and lactose in milk: collaborative study. Journ. Assoc. Off. Anal. Chem., Vol. 61, Issue 5, pp. 1015-1034 (1978)

* В частности, в силу наших профессиональных интересов [266], учитывая наличие работ с использованием UR-20 для радиационно-физических приложений [249-252, 267], хотелось бы отметить возможность создания многопрофильных установок (по аналогии с [266]), в которых ИК-спектроскопия и радиометрия (и дозиметрия) синхронизированы и модульно сопряжены. Применение этого подхода в столь же "глобальном" масштабе, сколь много на территории РФ / СНГ осталось подобных приборов, доступных для модернизации (или каннибализации), позволит производить широкомасштабное и локальное (в виде сети станций со стационарными приборами) прогнозирование и определение свойств молока в корреляции с радиационной обстановкой территории поставщика (по аналогии с [268]). Это весьма актуально, учитывая импорт в Россию украинского и японского молочного полуфабриката и порошка.

5. Biggs D.A., McKenna D. Alternative methods for infrared analysis of fat in milk: interlaboratory study. *Journ. Assoc. Off. Anal. Chem.*, Vol. 72, Issue 5, pp. 724-734 (1989)
6. Wu D., He Y., Feng S. Short-wave near-infrared spectroscopy analysis of major compounds in milk powder and wavelength assignment. *Anal. Chim. Acta.*, Vol. 610, Issue 2, pp. 232-242 (2008).
7. Harris W.M. Automated determination of fat, crude protein and lactose in ewe milk by infrared spectrometry. *Analyst*, Vol. 111, Issue 1, pp. 37-39 (1986)
8. Lanher B.S. Evaluation of Aegys Mi 600 Fourier transform infrared milk analyzer for analysis of fat, protein, lactose, and solids nonfat: a compilation of eight independent studies. *Journ. AOAC Int.*, Vol. 79, Issue 6, pp. 1388-1399 (1996).
9. Lefier D., Grappin R., Pochet S. Determination of fat, protein, and lactose in raw milk by Fourier transform infrared spectroscopy and by analysis with a conventional filter-based milk analyzer. *Journ. AOAC Int.*, Vol. 79, Issue 3, pp. 711-717 (1996).
10. Nagarajan R., Singh P., Mehrotra R. Direct determination of moisture in powder milk using near infrared spectroscopy. *Journ. Autom. Methods Manag. Chem.* 2006, ID 51342 (2006).
11. De Marchi M., Penasa M., Cecchinato A., Mele M., Secchiari P., Bittante G. Effectiveness of mid-infrared spectroscopy to predict fatty acid composition of Brown Swiss bovine milk. *Animal*, Vol. 5, Issue 10, pp. 1653-1658 (2011)
12. Maurice-Van Eijndhoven M.H., Soyeurt H., Dehareng F., Calus M.P. Validation of fatty acid predictions in milk using mid-infrared spectrometry across cattle breeds. *Animal*, Vol. 7, Issue 2, pp. 328-354 (2013)
13. Casadio Y.S., Williams T.M., Lai C.T., Olsson S.E., Hepworth A.R., Hartmann P.E. Evaluation of a mid-infrared analyzer for the determination of the macronutrient composition of human milk. *Journ. Hum Lact.*, Vol. 26, issue 4, pp. 376-383 (2010).
14. Sauer C.W., Kim J.H. Human milk macronutrient analysis using point-of-care near-infrared spectrophotometry. *Journ. Perinatol.*, Vol. 31, Issue 5, pp. 339-343 (2011).
15. Vieira A.A., Soares F.V., Pimenta H.P., Abranches A.D., Moreira M.E. Analysis of the influence of pasteurization, freezing/thawing, and offer processes on human milk's macronutrient concentrations. *Early Hum. Dev.*, Vol. 87, Issue 8, pp. 577-580 (2011).
16. Silvestre D., Fraga M., Gormaz M., Torres E., Vento M. Comparison of mid-infrared transmission spectroscopy with biochemical methods for the determination of macronutrients in human milk. *Mater. Child Nutr.* (in press; doi: 10.1111/j.1740-8709.2012.00431.x).
17. Martemucci G., D'Alessandro A.G. Fat content, energy value and fatty acid profile of donkey milk during lactation and implications for humannutrition. *Lipids Health Dis.*, Vol. 11, Art, No. 113, 14 p. (2012).
18. Aernouts B., Polshin E., Saeys W., Lammertyn J. Mid-infrared spectrometry of milk for dairy metabolomics: a comparison of two sampling techniques and effect of homogenization. *Anal. Chim. Acta.*, Vol. 705, Iss. 1-2, pp. 88-97 (2011).
19. McParland S., Banos G., McCarthy B., Lewis E., Coffey M.P., O'Neill B., O'Donovan M., Wall E., Berry D.P. Validation of mid-infrared spectrometry in milk for predicting body energy status in Holstein-Friesian cows. *Journ. Dairy Sci.*, Vol. 95, Issue 12, pp. 722-735 (2012).
20. Hansen P.W. Screening of dairy cows for ketosis by use of infrared spectroscopy and multivariate calibration. *Journ. Dairy Sci.*, Vol. 82, Issue 9, pp. 2005-2010 (1999).
21. Heuer C., Luinge H.J., Lutz E.T., Schukken Y.H., van der Maas J.H., Wilmink H., Noordhuizen J.P. Determination of acetone in cow milk by Fourier transform infrared spectroscopy for the detection of subclinical ketosis. *Journ. Dairy Sci.*, Vol. 84, Issue 3, pp. 575-582 (2001).
22. van Knegsel A.T., van der Drift S.G., Horneman M., de Roos A.P., Kemp B., Graat E.A. Short communication: ketone body concentration in milk determined by Fourier transform infrared spectroscopy: value for the detection of hyperketonemia in dairy cows. *Journ. Dairy Sci.*, Vol. 93, Issue 7, pp. 3065-3069 (2010).
23. van der Drift S.G., Jorritsma R., Schonewille J.T., Knijn H.M., Stegeman J.A. Routine detection of hyperketonemia in dairy cows using Fourier transform infrared spectroscopy analysis of β -hydroxybutyrate and acetone in milk in combination with test-day information. *Journ. Dairy Sci.*, Vol. 95, Issue 9, pp. 48865-4898 (2012).

24. Boubellouta T., Galtier V., Dufour E. Effects of added minerals (calcium, phosphate, and citrate) on the molecular structure of skim milk as investigated by mid-infrared and synchronous fluorescence spectroscopies coupled with chemometrics. *App. Spectrosc.*, Vol. 63, Issue 10, pp. 1134-1141 (2009).
25. Soyeurt H., Bruwier D., Romnee J.M., Gengler N., Bertozzi C., Veselko D., Dardenne P. Potential estimation of major mineral contents in cow milk using mid-infrared spectrometry. *Journ. Dairy Sci.*, Vol. 92, Issue 6, pp. 2444-2454 (2009).
26. Tremblay G.F., Nie Z., Bélanger G., Pelletier S., Allard G. Predicting timothy mineral concentrations, dietary cation-anion difference, and grass tetany index by near-infrared reflectance spectroscopy. *Journ. Dairy Sci.*, Vol. 92, Issue 9, pp. 4499-4506 (2009).
27. Martins R.F., do Prado Paim T., de Abreu Cardoso C., Stéfano Lima Dallago B., de Melo C.B., Louvandini H., McManus C. Mastitis detection in sheep by infrared thermography. *Res Vet Sci.*, Vol. 94, Issue 3, pp. 722-724 (2013)
28. Soyeurt H., Bastin C., Colinet F.G., Arnould V.M., Berry D.P., Wall E., Dehareng F., Nguyen H.N., Dardenne P., Schefers J., Vandenplas J., Weigel K., Coffey M., Theron L., Detilleux J., Reding E., Gengler N., McParland S. Mid-infrared prediction of lactoferrin content in bovine milk: potential indicator of mastitis. *Animal*, Vol. 6, Issue 11, pp. 1830-1838 (2012).
29. Norup L.R., Hansen P.W., Ingvarstsen K.L., Friggens N.C. An attempt to detect oestrus from changes in Fourier transform infrared spectra of milk from dairy heifers. *Anim. Repr. Sci.*, Vol. 65, Iss. 1-2, pp. 43-50 (2001).
30. Nikkhah A., Plaizier J.C., Einarson M.S., Berry R.J., Scott S.L., Kennedy A.D. Short communication: infrared thermography and visual examination of hooves of dairy cows in two stages of lactation. *Journ. Dairy Sci.*, Vol. 88, Issue 8, pp. 2749-2753 (2005)
31. Dehareng F., Delfosse C., Froidmont E., Soyeurt H., Martin C., Gengler N., Vanlierde A., Dardenne P. Potential use of milk mid-infrared spectra to predict individual methane emission of dairy cows. *Animal*, Vol. 6, Issue 10, pp. 1694-1701 (2012).
32. Schulz H., Baranska M., Quilitzsch R., Schütze W. Determination of alkaloids in capsules, milk and ethanolic extracts of poppy (*Papaver somniferum* L.) by ATR-FT-IR and FT-Raman spectroscopy. *Analyst*, Vol. 129, Issue 10, pp. 917-920 (2004).
33. Sivakesava S, Irudayaraj J. Rapid determination of tetracycline in milk by FT-MIR and FT-NIR spectroscopy. *Journ. Dairy Sci.*, Vol. 85, Issue 3, pp. 487-493 (2002).
34. Xie Y.J., Wang Z., Hu W.P., Xu S. Fast determination of trace dimethyl fumarate in milk with near infrared spectroscopy following fluidized bed enrichment. *Anal. Bioanal. Chem.*, Vol. 404, Issue 10, pp. 3189-3194 (2012).
35. Balabin R.M., Smirnov S.V. Melamine detection by mid- and near-infrared (MIR/NIR) spectroscopy: a quick and sensitive method for dairy products analysis including liquid milk, infant formula, and milk powder. *Talanta*, Vol. 85, Issue 1, pp. 562-568 (2011).
36. Sun X., Shen L., Cong X., Zhu H., Ly J., He L. Infrared spectroscopic analysis of urinary stones (including stones induced by melamine-contaminated milkpowder) in 189 Chinese children. *Journ. Pediatr. Surg.*, Vol. 46, Issue 4, pp. 723-728 (2011).
37. Kasemsumran S., Thanapase W., Kiatsoonthon A. Feasibility of near-infrared spectroscopy to detect and to quantify adulterants in cow milk. *Anal. Sci.*, Vol. 23, Issue 7, pp. 907-910 (2007).
38. Santos P.M., Pereira-Filho E.R., Rodriguez-Saona L.E. Rapid detection and quantification of milk adulteration using infrared microspectroscopy and chemometrics analysis. *Food Chem.*, Vol. 138, Issue 1, pp. 19-24 (2013).
39. Caire G., Calderon de la Barca A.M., Bolanos A.V., Valencia M.E., Coward A.W., Salazar G., Casanueva E. Measurement of deuterium oxide by infrared spectroscopy and isotope ratio mass spectrometry for quantifying daily milk intake in breastfed infants and maternal body fat. *Food Nutr. Bull.*, Vol. 23, Suppl. 3, pp. 38-41 (2002).
40. Cisse A.S., Bluck L., Diahm B., Dossou N., Guiro A.T., Wade S. Use of Fourier transformed infrared spectrophotometer (FTIR) for determination of breastmilk output by the deuterium dilution method among Senegalese women. *Food Nutr. Bull.*, Vol. 23, Suppl. 3, pp. 138-141 (2002).

41. Tsenkova R., Atanassova S., Kawano S., Toyoda K. Somatic cell count determination in cow's milk by near-infrared spectroscopy: a new diagnostic tool. *Journ. Anim. Sci.*, Vol. 79, Issue 10, pp. 2550-2557 (2001).
42. Albanell E., Caja G., Such X., Rovai M., Salama A.A., Casals R. Determination of fat, protein, casein, total solids, and somatic cell count in goat's milk by near-infrared reflectance spectroscopy. *Journ. AOAC Intern.*, Vol. 86, Issue 4, pp. 746-752 (2003).
43. Liu Q., Lu X., Swanson B.G., Rasco B.A., Kang D.H. Monitoring ultraviolet (UV) radiation inactivation of *Cronobacter sakazakii* in dry infant formula using Fourier transform infrared spectroscopy. *Journ. Food Sci.*, Vol. 77, Issue 1, pp. M86-M93 (2012).
44. Lamprell H., Mazerolles G., Kodjo A., Chamba J.F., Noël Y., Beuvier E. Discrimination of *Staphylococcus aureus* strains from different species of *Staphylococcus* using Fourier transform infrared (FTIR) spectroscopy. *Int. Journ. Food Microbiol.*, Vol. 108, Issue 1, pp. 125-129 (2006).
45. Nicolaou N., Xu Y., Goodacre R. Fourier transform infrared and Raman spectroscopies for the rapid detection, enumeration, and growth interaction of the bacteria *Staphylococcus aureus* and *Lactococcus lactis* ssp. *cremoris* in milk. *Anal. Chem.*, Vol. 83, Issue 14, pp. 5681-5687 (2011).
46. Fehrmann A., Franz M., Hoffmann A., Rudzik L., Wüst E. Dairy product analysis: identification of microorganisms by mid-infrared spectroscopy and determination of constituents by Raman spectroscopy. *Journ. AOAC Intern.*, Vol. 78, Issue 6, pp. 1537-1542 (1995).
47. Leitner G., Merin U., Lemberskiy-Kuzin L., Bezman D., Katz G. Real-time visual/near-infrared analysis of milk-clotting parameters for industrial applications. *Animal*, Vol. 6, Issue 7, pp. 1170-1177 (2012).
48. De Marchi M., Toffanin V., Cassandro M., Penasa M. Prediction of coagulating and noncoagulating milk samples using mid-infrared spectroscopy. *Journ. Dairy Sci.*, Vol. 96, Issue 7, pp. 4707-4715 (2013).
49. Lucia V., Daniela B., Rosalba L. Use of Fourier transform infrared spectroscopy to evaluate the proteolytic activity of *Yarrowia lipolytica* and its contribution to cheese ripening. *Intern. Journ. Food Microbiol.*, Vol. 69, Iss. 1-2, pp. 113-123 (2001).
50. Boubellouta T., Dufour E. Cheese-Matrix Characteristics During Heating and Cheese Melting Temperature Prediction by Synchronous Fluorescence and Mid-infrared Spectroscopies. *Food and Bioprocess Technology*, Vol. 5, Issue 1, pp. 273-284 (2012).
51. Gonzalez-Martin I., Hernandez-Hierro J.M., Moron-Sancho R., Salvador-Esteban J., Vivar-Quintana A., Revilla I. Determination of the percentage of milk (cow's, ewe's and goat's) in cheeses with different ripening times using near infrared spectroscopy technology and a remote reflectance fibre-optic probe. *Anal. Chim. Acta.*, Vol. 604, Issue 2, pp. 191-196 (2007).
52. Castillo M., Payne F.A., Hicks C.L., Laencina J., Lopez M.B. Effect of protein and temperature on cutting time prediction in goats' milk using an optical reflectance sensor. *Journ. Dairy Res.*, Vol. 70, Issue 2, pp. 205-215 (2003).
53. Castillo M.Z., Payne F.A., Hicks C.L., Laencina J.S., Lopez M.B. Modelling casein aggregation and curd firming in goats' milk from backscatter of infrared light. *Journ. Dairy Res.*, Vol. 70, Issue 3, pp. 335-348 (2003).
54. Cecchinato A., De Marchi M., Gallo L., Bittante G., Carnier P. Mid-infrared spectroscopy predictions as indicator traits in breeding programs for enhanced coagulation properties of milk. *Journ. Dairy Sci.*, Vol. 92, Issue 10, pp. 5304-5313 (2009).
55. Градов О.В. Лазерный ДИУ-реогониометр для наблюдения эффекта Вайсенберга в стуженных молокопродуктах как неньютоновских жидкостях. *Молочнохозяйственный вестник*, №2 (10), II кв. 2013, сс. 36-56 (2012).
56. Cipolat-Gotet C., Cecchinato A., De Marchi M., Penasa M., Bittante G. Comparison between mechanical and near-infrared methods for assessing coagulation properties of bovine milk. *Journ. Dairy Sci.*, Vol. 95, Issue 11, pp. 6806-6819 (2012).
57. Farrell H.M., Qi P.X., Brown E.M., Cooke P.H., Tunick M.H., Wickham E.D., Unruh J.J. Molten globule structures in milk proteins: implications for potential new structure-function relationships. *Journ. Dairy Sci.*, Vol. 85, Issue 3, pp. 459-471 (2002).
58. De Marchi M., Fagan C.C., O'Donnell C.P., Cecchinato A., Dal Zotto R., Cassandro M., Penasa M., Bittante G. Prediction of coagulation properties, titratable acidity, and pH of

bovine milk using mid-infrared spectroscopy. *Journ. Dairy Sci.*, Vol. 92, Issue 1, pp. 423-432 (2009).

59. Singh A.K., Smith M.L., Yamini S., Ohlsson P.I., Sinha M., Kaur P., Sharma S., Paul J.A., Singh T.P., Paul K.G. Bovine carbonyl lactoperoxidase structure at 2.0Å resolution and infrared spectra as a function of pH. *Protein Journ.*, Vol. 31, Issue 7, pp. 598-608 (2012).

60. Bruun S.W., Holm J., Hansen S.I., Jacobsen S. Application of near-infrared and Fourier transform infrared spectroscopy in the characterization of ligand-induced conformation changes in folate binding protein purified from bovine milk: influence of buffer type and pH. *Appl. Spectrosc.*, Vol. 60, Issue 7, pp. 737-746 (2006).

61. O'Connor C.J., Cleverly D.R. Fourier-transform infrared assay of bile salt-stimulated lipase activity in reversed micelles. *Journ. Chem. Technol. Biotechnol.*, Vol. 61, Issue 3, pp. 209-214 (1994).

62. Lefevre T., Subirade M. Interaction of beta-lactoglobulin with phospholipid bilayers: a molecular level elucidation as revealed by infrared spectroscopy. *Int. Journ. Biol. Macromol.*, Vol. 28, Issue 1, pp. 59-67 (2000).

63. Kaylegian K.E., Lynch J.M., Fleming J.R., Barbano D.M. Lipolysis and proteolysis of modified and producer milks used for calibration of mid-infrared milk analyzers. *Journ. Dairy Sci.*, Vol. 90, Issue 2, pp. 602-615 (2007).

64. Lynch J.M., Barbano D.M., Schweisthal M., Fleming J.R.. Precalibration evaluation procedures for mid-infrared milk analyzers. *Journ. Dairy Sci.*, Vol. 89, Issue 7, pp. 2761-2774 (2006).

65. Kaylegian K.E., Houghton G.E., Lynch J.M., Fleming J.R., Barbano D.M. Calibration of infrared milk analyzers: modified milk versus producer milk. *Journ. Dairy Sci.*, Vol. 89, Issue 8, pp. 2817-2832 (2006).

66. Kaylegian K.E., Lynch J.M., Houghton G.E., Fleming J.R., Barbano D.M. Modified versus producer milk calibration: mid-infrared analyzer performance validation. *Journ. Dairy Sci.*, Vol. 89, Issue 8, pp. 2833-2845 (2006).

67. van de Voort F.R., Kermasha S., Smith J.P., Mills B.L., Ng-Kwai-Hang K.F. A study of the stability of Record of Performance milk samples for infrared milk analysis. *Journ. Dairy Sci.*, Vol. 70, Issue 8, pp. 1515-1523 (1987).

68. Smith E.B., Barbano D.M., Lynch J.M., Fleming J.R. Effect of infrared analyzer homogenization efficiency on repeatability of uncorrected fat A and fat B signals. *Journ. AOAC Int.*, Vol. 77, Issue 6, pp. 1217-1223 (1994).

69. Kaylegian K.E., Dwyer D.A., Lynch J.M., Bauman D.E., Fleming J.R., Barbano D.M. Impact of fatty acid composition on the accuracy of mid-infrared fat analysis of farm milks. *Journ. Dairy Sci.*, Vol. 92, Issue 6, pp. 2502-2513 (2009).

70. Sørensen L.K., Lund M., Juul B. Accuracy of Fourier transform infrared spectrometry in determination of casein in dairy cows' milk. *Journ. Dairy Res.*, Vol. 70, Issue 4, pp. 445-452 (2003).

71. Rutten M.J., Bovenhuis H., Hettinga K.A., van Valenberg H.J., van Arendonk J.A. Predicting bovine milk fat composition using infrared spectroscopy based on milk samples collected in winter and summer. *Journ. Dairy Sci.*, Vol. 92, Issue 12, pp. 6202-6209 (2009).

72. Gonzalez-Martin I., Hernandez-Hierro J.M., Salvador-Esteban J., Gonzalez-Perez C., Revilla I., Vivar-Quintana A. Discrimination of seasonality in cheeses by near-infrared technology. *Journ. Sci. Food Agric.*, Vol. 91, Issue 6, pp. 1064-1069 (2011).

73. Maurice-Van Eijndhoven M.H., Bovenhuis H., Soyeurt H., Calus M.P. Differences in milk fat composition predicted by mid-infrared spectrometry among dairy cattle breeds in the Netherlands. *Journ. Dairy Sci.*, Vol. 96, Issue 4, pp. 2570-2582 (2013).

74. Soyeurt H., Dehareng F., Gengler N., McParland S., Wall E., Berry D.P., Coffey M., Dardenne P. Mid-infrared prediction of bovine milk fatty acids across multiple breeds, production systems, and countries. *Journ. Dairy Sci.*, Vol. 94, Issue 4, pp. 1657-1667 (2011).

75. Godden S.M., Lissemore K.D., Kelton D.F., Leslie K.E., Walton J.S., Lumsden J.H. Relationships between milk urea concentrations and nutritional management, production, and economic variables in Ontario dairy herds. *Journ. Dairy Sci.*, Vol. 84, Issue 5, pp. 1128-1139 (2001).

76. Coppa M., Martin B., Agabriel C., Chassaing C., Sibra C., Constant I., Graulet B., Andueza D. Authentication of cow feeding and geographic origin on milk using visible and near-infrared spectroscopy. *Journ. Dairy Sci.*, Vol. 95, Issue 10, pp. 5544-5551 (2012).
77. Oya S., Inoue H., Nakade T., Ogata A., Tamura M., Kato S. Near-infrared spectroscopy evaluated as a technique for estimating udder haemodynamics in the lactating cow. *Journ. Vet. Med. A: Physiol. Pathol. Clin. Med.*, Vol. 50, Issue 5, pp. 230-234 (2003).
78. Dagnachew B.S., Kohler A., Adnøy T. Genetic and environmental information in goat milk Fourier transform infrared spectra. *Journ. Dairy Sci.*, Vol. 96, Issue 6, pp. 3973-3985 (2013).
79. Rutten M.J., Bovenhuis H., Heck J.M., van Arendonk J.A. Prediction of β -lactoglobulin genotypes based on milk Fourier transform infrared spectra. *Journ. Dairy Sci.*, Vol. 94, Issue 8, pp. 4183-4188 (2011).
80. Bastin C., Berry D.P., Soyeurt H., Gengler N. Genetic correlations of days open with production traits and contents in milk of major fatty acids predicted by mid-infrared spectrometry. *Journ. Dairy Sci.*, Vol. 95, Issue 10, pp. 6113-6121 (2012).
81. van der Drift S.G., van Hulzen K.J., Teweldemedhn T.G., Jorritsma R., Nielen M., Heuven H.C. Genetic and nongenetic variation in plasma and milk β -hydroxybutyrate and milk acetone concentrations of early-lactation dairy cows. *Journ. Dairy Sci.*, Vol. 95, Issue 11, pp. 6781-6787 (2012).
82. Wu D., Feng S., He Y. Short-wave near-infrared spectroscopy of milk powder for brand identification and component analysis. *Journ. Dairy Sci.*, Vol. 91, Issue 3, pp. 939-949 (2008).
83. Melfsen A., Hartung E., Haeussermann A. Robustness of near-infrared calibration models for the prediction of milk constituents during the milking process. *Journ. Dairy Res.*, Vol. 80, Issue 1, pp. 103-112 (2013).
84. Cen H., Bao Y., Huang M., He Y. Comparison of Data Pre-processing in Pattern Recognition of Milk Powder Vis / NIR Spectra. *Lecture Notes in Computer Science*, Vol. 4093, pp. 1000-1007 (2006).
85. Sun M., Feng Q., An D., Wei Y., Si J., Fu L. Discrimination of Reconstructed Milk in Raw Milk by Combining Near Infrared Spectroscopy with Biomimetic Pattern Recognition. *Lecture Notes in Computer Science*, Vol. 5263, pp. 168-175 (2008).
86. Hsieh C.L., Hung C.-Y., Lin M.J. Application of Radial Bases Function Network and Response Surface Method to Quantify Compositions of Raw Goat Milk with Visible / Near Infrared Spectroscopy. *IFIP Advances in Information and Communication Technology (Engineering Applications of Neural Networks)*, Vol. 363, pp. 156-161 (2011).
87. Kulmyrzaev A.A., Dufour É. Relations Between Spectral and Physicochemical Properties of Cheese, Milk, and Whey Examined Using Multidimensional Analysis. *Food and Bioprocess Technology*. Vol. 3, Issue 2, pp 247-256 (2010).
88. Borin A., Ferrao M.F., Mello C., Maretto D.A., Poppi R.J. Least-squares support vector machines and near infrared spectroscopy for quantification of common adulterants in powdered milk. *Anal. Chim. Acta*, Vol. 579, Issue 1, pp. 25-32 (2006).
89. Chen X., Lei X. Application of a hybrid variable selection method for determination of carbohydrate content in soy milk powder using visible and near infrared spectroscopy. *Journ. Agric. Food Chem.*, Vol. 57, Issue 2, pp. 332-340 (2009).
90. Mateo M.J., O'Callaghan D.J., O'Donnell C.P. Comparison between red-green-blue imaging and visible-near infrared reflectance as potential process analytical tools for monitoring syneresis. *Journ. Dairy Sci.*, Vol. 93, Issue 5, pp. 1882-1889 (2010).
91. Biggs D.A. Infrared estimation of fat, protein, and lactose in milk: evaluation of multispec instrument. *Journ. Assoc. Off. Anal. Chem.*, Vol. 62, Issue 6, pp. 1202-1207 (1979).
92. Nicolaou N., Xu Y., Goodacre R. Fourier transform infrared spectroscopy and multivariate analysis for the detection and quantification of different milk species. *Journ. Dairy Sci.*, Vol. 93, Issue 12, pp. 5651-5660 (2010).
93. Kawamura S., Kawasaki M., Nakatsuji H., Natsuga M. Near-infrared spectroscopic sensing system for online monitoring of milk quality during milking. *Sensing and Instrumentation for Food Quality and Safety*, Vol. 1, Issue 1, pp. 37-43 (2007).

94. Meagher L.P., Holroyd S.E., Illingworth D., van de Ven F., Lane S. At-line near-infrared spectroscopy for prediction of the solid fat content of milk fat from New Zealand butter. *Journ. Agric. Food Chem.*, Vol. 55, Issue 18, pp. 2791-2796 (2007).
95. Villar A., Gorritxategi E., Aranzabe E., Fernandez S., Otaduy D., Fernandez L.A. Low-cost visible-near infrared sensor for on-line monitoring of fat and fatty acids content during the manufacturing process of the milk. *Food Chem.*, Vol. 135, Issue 4, pp. 2756-2760 (2012).
96. Santos P.M., Pereira-Filho E.R., Rodriguez-Saona L.E. Application of hand-held and portable infrared spectrometers in bovine milk analysis. *Journ. Agric. Food Chem.*, Vol. 61, Issue 6, pp. 1205-1211 (2013).
97. Borisevich N.A., Zakharich M.P., Komar V.P., Nikonovich F.N., Skorniyakov I.V. Analytical potential of the ANB-315 infrared filter analyzer. *Journal of Applied Spectroscopy*, Vol. 64, Issue 5, pp. 694-700 (1997).
98. Baer R.J., Frank J.F., Loewenstein M. Compositional analysis of nonfat dry milk by using near infrared diffuse reflectance spectroscopy. *Journ. Assoc. Off. Anal. Chem.*, Vol. 66, Issue 4, pp. 858-863 (1983).
99. Rodríguez-Otero J.L., Hermida M. Analysis of fermented milk products by near-infrared reflectance spectroscopy. *Journ. AOAC Int.*, Vol. 79, Issue 3, pp. 817-821 (1996).
100. Melfsen A., Hartung E., Haeussermann A. Accuracy of in-line milk composition analysis with diffuse reflectance near-infrared spectroscopy. *Journ. Dairy Sci.*, Vol. 95, Issue 11, pp. 6465-6476 (2012).
101. Corvaglia L., Battistini B., Paoletti V., Aceti A., Capretti M.G., Faldella G. Near-infrared reflectance analysis to evaluate the nitrogen and fat content of human milk in neonatal intensive care units. *Arch. Dis. Ch. Fet. Neonat. Ed.*, Vol. 93, Issue 5, pp. F372-F375 (2008).
102. Corvaglia L., Aceti A., Paoletti V., Mariani E., Patrono D., Ancora G., Capretti M.G., Faldella G. Standard fortification of preterm human milk fails to meet recommended protein intake: Bedside evaluation by Near-Infrared-Reflectance-Analysis. *Early Hum Dev.*, Vol. 86, Issue 4, pp. 237-240 (2010).
103. Aernouts B., Polshin E., Lammertyn J., Saeys W. Visible and near-infrared spectroscopic analysis of raw milk for cow health monitoring: reflectance or transmittance? *Journ. Dairy Sci.*, Vol. 94, Issue 11, pp. 5315-5329 (2011).
104. Etzion Y., Linker R., Cogan U., Shmulevich I. Determination of protein concentration in raw milk by mid-infrared fourier transform infrared / attenuated total reflectance spectroscopy. *Journ. Dairy Sci.*, Vol. 87, Issue 9, pp. 2779-2788 (2004).
105. Гизатуллин В.Г., Баранов Н.Н. Пастеризация молока инфракрасным излучением. *Ветеринария*, No. 5, сс. 28-30 (1971).
106. Магда В.И., Симонов Б.П. Оптические свойства молока в инфракрасной области спектра. *НТБ НИИЖ Лесостепи и Полесья УССР*, No. 3, сс. 35-56 (1972).
107. Мохова З.Г. Влияние инфракрасных лучей на микрофлору молока. *Труды МВА*, Том 68, сс. 157-158 (1973).
108. Гизатуллин В.Г. Применение ИК-излучения для обработки молока. *Механизация и электрификация социалистического сельского хозяйства*. No. 5, сс. 25-27 (1975).
109. Гизатуллин В.Г. Выбор источников ИК-излучения для пастеризации молока. *Механизация и электрификация социалистического сельского хозяйства*, No. 5, сс. 20-22 (1976).
110. Гизатуллин В.Г. Пастеризация молока инфракрасным излучением. *Вестник сельскохозяйственной науки*, No. 10, сс. 89-96 (1976).
111. Герцен Е.И., Атраментова В.Г., Магда В.И. Качество молока при пастеризации инфракрасным излучением. *XIX Междунар. конгресс по молочному делу*, 1978.- с. 278.
112. Мяндр А.Э., Магда В.И., Симонов Б.П. Установка для пастеризации молока инфракрасным нагревом. *Молочная промышленность*, No. 9, сс. 6-9 (1980).
113. Серветник-Чалая Г. Влияние пастеризации молока инфракрасными лучами на его пищевую ценность. *Молочное и мясное скотоводство*, No. 1, сс. 15-16 (1983).
114. Искаков М.Ш. Влияние инфракрасных лучей на химические и бактериологические свойства молока. *Вестник сельскохозяйственной науки Казахстана*, No. 3, сс. 83-85 (1984).
115. Искаков М.Ш. Пастеризация молока с помощью инфракрасного излучения. *Труды ВНИИВС за 1984 г.*, сс. 83-85 (1984).

116. de Segura A.G., Escuder D., Montilla A., Bustos G., Pallas C., Fernandez L., Corzo N., Rodriguez J.M. Heating-induced bacteriological and biochemical modifications in human donor milk after holder pasteurisation. *Journ. Pediatr. Gastr. Nutr.*, Vol. 54, Issue 2, pp. 197-203 (2012)
117. Macdonald L.E., Brett J., Kelton D., Majowicz S.E., Snedeker K., Sargeant J.M. A systematic review and meta-analysis of the effects of pasteurization on milk vitamins, and evidence for raw milk consumption and other health-related outcomes. *Journ. Food Prot.*, Vol. 74, Issue 11, pp. 1814-1832 (2011).
118. Braga L.P., Palhares D.B. Effect of evaporation and pasteurization in the biochemical and immunological composition of human milk. *Journ. Pediatr. (Rio J)*, Vol. 83, Issue 1, pp. 59-63 (2007).
119. Daufin G., Merin U., Labbe J.P., Quemerais A., Kerherve F.L. Cleaning of inorganic membranes after whey and milk ultrafiltration. *Biotechnol Bioeng.*, Vol. 38, Issue 1, pp. 82-89 (1991).
120. Duthie A.H., Patton S. Purification of phospholipids recovered from thin-layer chromatograms for infrared spectral analysis. *Journ. Lipid Res.*, Vol. 6, pp. 320-322 (1965).
121. Ukhanov E.V., Filippov O.K. Emissivity of globar at 50–200 μm . *Journal of Applied Spectroscopy*, Vol. 10, Issue 6, pp. 700-701 (1969).
122. Ukhanov E.V. Spectroradiometric equipment for investigating radiative sources in the infrared. *Journal of Applied Spectroscopy*, Vol. 31, Issue 2, pp. 1058-1061 (1979)
123. Czerny M., Röder H. Fortschritte auf dem Gebiete der Ultrarottechnik. *Ergebnisse der Exakten Naturwissenschaften*, Vol. 17, pp. 70-107 (1938).
124. Friedel R.A., Sharkey A.G. Comparison of Glower and Globar Sources for Infra-Red Spectrometry. *Review of Scientific Instruments*, Vol. 18, Issue 12, p. 928 (1947)
125. Silverman S. The emissivity of globar. *Journal of the Optical Society of America*, Vol. 38, Issue 11, p. 989 (1948).
126. Morris J.C. Comments on the Measurement of Emittance of the Globar Radiation Source. *Journal of the Optical Society of America*, Vol. 51, Issue 7, pp. 798-799 (1961)
127. Mitchell C.A. Emissivity of Globar. *Journal of the Optical Society of America*, Vol. 52, Issue 3, pp. 341-342 (1962)
128. Bao X., Lu P., Whidden T.K. Novel way of improving the collection efficiency and image quality of Globar to mid-IR fibers. *Proc. SPIE* Vol. 3416, p. 213-219 (1998)
129. Градов О.В., Нотченко А.В. Картирование градиента в NIR-HDRI-термографии в CMOS-лабораториях на чипе. Сб. трудов. II Межд. конф. «Современные методы и средства исследований теплофизических свойств веществ» (28-30.11.2012 г.), сс. 245-246, СПб., НИУ ИТМО, ИХиБТ, 514с., 2012.
130. Gradov O. Digital lab-on-a-chip as analog of soil chambers & Rossi-Cholodny slides. VII Int. Symp. Cooperation in Biotechnology, Agriculture, Forestry, Fisheries and Food (7th Framework Prog. EU-RF), pp. 17-18, 2012.
131. Afseth N.K., Martens H., Randby A., Gidskehaug L., Narum B., Jørgensen K., Lien S., Kohler A. Predicting the fatty acid composition of milk: a comparison of two Fourier transform infrared sampling techniques. *Appl. Spectrosc.*, Vol. 64, Issue 7, pp. 700-707 (2010).
132. Lucas A., Gibbs J.A., Lyster R.L., Baum J.D. Creamatocrit: simple clinical technique for estimating fat concentration and energy value of human milk. *Br. Med. Journ.*, No. 1, Issue 6119, pp. 1018-1020 (1978).
133. O'Neill E.F., Radmacher P.G., Sparks B., Adamkin D.H. Creamatocrit analysis of human milk overestimates fat and energy content when compared to a human milk analyzer using mid-infrared spectroscopy. *Journ. Pediatr. Gastroenterol. Nutr.*, Vol. 56, Issue 2, pp. 569-572 (2013).
134. Tsenkova R., Atanassova S., Toyoda K., Ozaki Y., Itoh K., Fearn T. Near-infrared spectroscopy for dairy management: measurement of unhomogenized milk composition. *Journ. Dairy Sci.*, Vol. 82, Issue 11, pp. 2344-2351 (1999)
135. Basiuk V.A., Chuiko A.A. Selectivity of Bonded Stationary Phases Containing Uracil Derivatives for Liquid Chromatography of Nucleic Acid Components. *Journ. Chromatogr. Sci.*, Vol. 31, No. 4, pp. 120-126 (1993)

136. Hackl E.V., Blagoi Y.P. DNA structural transitions under Cu^{2+} ions action in aqueous solution: role of Cu^{2+} ions interaction with DAN bases. *Metal Ions in Biology and Medicine*, Vol. 6, pp. 361-363 (2000).
137. Stepanyugin A.V., Samijlenko S.P., Martynenko O.I., Hovorun D.M. ATR-IR spectroscopy as applied to nucleic acid films. *Spectrochimica Acta Part A*, Vol. 61, pp. 2267–2269 (2005).
138. Mikhailov O.V., Chachkov D.V. Mild template synthesis in the iron(III)-ethanedithioamide-1,2-formaldehyde triple system on a $\text{K}[\text{Fe}_2(\text{CN})_6]$ gelatin-immobilized matrix. *Journal of Coordination Chemistry*, Vol. 62, No. 7, pp. 1058–1066 (2009).
139. Mikhailov O.V. Low-Temperature Template Synthesis of Nickel-Containing Heterocyclic Compound with 2,8-Dithio-3,5,7-triazanonandithioamide-1,9 in Gelatin-Immobilized Matrix. *Heterocyclic Communications*. Vol. 7, Issue 1, pp. 79–82 (2011).
140. Grube M., Gapes J.R., Schuster K.C. Application of quantitative IR spectral analysis of bacterial cells to acetone-butanol-ethanol fermentation monitoring. *Analytica Chimica Acta*, Vol. 471, pp. 127-133 (2002)
141. Denisov G.S., Rumynskaya I.G., Shraiber V.M. IR spectra and structure of certain amino acids in solutions and in the gas phase. Dibutylglycine and glycine. *Journal of Applied Spectroscopy*, Vol. 31, Issue 2, pp. 999-1004 (1979).
142. Gorshkova R.P., Korchahina N.I., Ovodov Y.S. Structural Studies on the o-Specific Side-Chain Polysaccharide of Lipopolysaccharide from the *Yersinia pseudotuberculosis* VA serovar. *European Journal of Biochemistry*, Vol. 131, pp. 345-347 (1983)
143. Pivovarov V.B., Stepanian S.G., Reva I.D., Sheina G.G., Blagoi Yu.P. Infrared spectra and the structure of l-methyladenine in an argon matrix and solutions. *Spectrochimica Acta*, Vol. 51A, No. 5, pp. 843-853 (1995).
144. Fernández-Bertrán J., Reguera E., Dago A., López-Hernández C., Infante G. Synthesis and characterization of two complexes of glycine with lanthanum hexacyanoferrate(III) and hexacyanocobaltate(III). *Polyhedron*, Vol. 15, No. 2, pp. 315-319 (1996).
145. Baltac T., Braniste M., Turca C., Sebe I. Synthesis of Dyes of Histological/Histochemical Interest. *U.P.B. Scientific Bulletin. B*, Vol. 74, No. 4, pp. 61-68 (2012).
146. Petkovic D.M. Some correlations of trialkyl phosphates dimerization constants. *Journ. Inorg. Nucl. Chem.*, Vol. 30, pp. 603-609 (1968).
147. Pud A.A., Rogalsky S.P., Shapoval G.S., Kharitonov A.P., Teplyakov V.V., Strathmann H., Poncin-Epaillard F. Reactions and stability of fluorinated poly(vinyl trimethylsilane) in electrochemical systems. *Polymer*, Vol. 42, pp. 1907-1913 (2001)
148. Shklyayev Y.V., Ismagilov R.R., Nifontov Y.V., Abdrachmanov I.B., Tolstikov A.H. Synthesis of derivatives of 6,7-tetramethylene and 6,7-trimethylene-3,3-dimethyl-3,4-dihydroisoquinoline. *Chemistry and Computational Simulation. Butlerov Communications*, Vol. 2, No.6, pp. 67-70 (2002).
149. Maleev V., Semenov M., Kashpur V., Bolbukh T., Shestopalova A., Anishchenko D. Structure and hydration of polycytidylic acid from the data of infrared spectroscopy, EHF dielectrometry and computer modeling. *Journal of Molecular Structure*, Vol. 605, pp. 51-61 (2002)
150. Ivonin S.P., Lapandin A.V. Conversions of unsymmetrical benzoin in basic media. *ARKIVOC (ARKAT USA), Regional Issue*, Vol. 2005, Part VIII, pp. 4-9 (2005).
151. Caira M.R., Dumitrascu F., Draghici C., Dumitrescu D., Cristea M. Synthesis and X-ray structure of a new pyrrolo[1,2-b]-pyridazine derivative. *Molecules*, Vol. 10, pp. 360-366 (2005).
152. Petride H., Corbu A., Florea C., Petride A., Udrea S. *N*- α -cyano derivatives of some *N*-benzyl azacycloalkanes. *Revue Roumaine de Chimie*, Vol. 51, No. 7-8, pp. 635-642 (2006)
153. Mikhailovskii Y.K., Agabekov V.E., Azarko V.A. Film-forming and photochemical properties of some nitrons. *Journal of Applied Spectroscopy*, Vol. 63, Issue 3, pp. 361-367 (1996)
154. Kabajev M., Prosycevas I., Kazakeviciute G., Valiene V. Plasma Modification of Structure and some Properties of Polyethylene Terephthalate Films and Fibers. *Mater. Sci. (Med.)*, Vol. 10, Issue 2, pp. 173-176 (2004)
155. Jitian S. Determination of optical constants of polystyrene films from IR reflection-absorption spectra. *Analele Universității "Eftimie Murgu"*, Vol. XVIII, No. 1, pp. 41-48 (2011)

- Jitian S. The use of IR-RA spectroscopy to study the thermal degradation of polyvinyl acetate films. *Acta Technica Corviniensis, Bulletin of Engineering*, Vol. 5, No. 2, pp. 47-50 (2012)
156. Shiyanovskaya I.V. The Role of Adsorbed Water Molecules in Bulk Restructuring of Amorphous Tungsten Trioxide Films. *MRS Proceedings*, Vol. 417, p. 391 (1995).
157. Gyorgy E., Mihalescu I.N., Baleva M., Abrashev M., Trifonova E.P., Szekeres A., Perrone A. Correlation between the chemical bonding and the physical properties of the CN_x films obtained by pulse laser deposition from C targets in low-pressure N₂. *Materials Science and Engineering B*, Vol. 97, pp. 251-257 (2003)
158. Nascu H.I., Popescu V. CuS thin films obtained by spray pyrolysis. *Leonardo Electronic Journal of Practices and Technologies*, Issue 4, pp. 22-29 (2004)
159. Zhukov A.A., Zdobnikov A.E., Klemm S.N., Tarasov V.V., Filatov L.A., Chetverov Y.S. Particularities of IR-radiation absorbing in fine polyimide structures and microbolometer detector on their base (From: Fifth Seminar on Problems of Theoretical and Applied Electron and Ion Optics), *Proceedings of the SPIE*, Volume 5025, pp. 160-164 (2003).
160. Sukhodub L.F., Moseke C., Sukhodub I.B., Sulkio-Cleff B., Maleev V.Ya., Semenov M.A., bereznyiak E.G., Bolbukh T.V. Collagen-hydroxyapatite-water interactions investigated by XRD, piezogravimetry, infrared and Raman spectroscopy. *Journal of Molecular Structure*, Vol. 704, pp. 53-58 (2004)
161. Sukhov B.G., Aleksandrova G.P., Grishchenko L.A., Feoktistova L.P., Sapozhnikov A.N., Proidakova O.A., Tkov A.V., Medvedeva S.A., Trofimov B.A. Nanobiocomposites of noble metals based on arabinogalactan: Preparation and properties. *Journal of Structural Chemistry*, Vol. 48, Issue 5, pp. 922-927 (2007).
162. Mansurov Z., Digel I., Biisenbaev M., Savitskaya I., Kistaubaeva A., Akimbekov N., Zhubanova A. Heterogeneous Composites on the Basis of Microbial Cells and Nanostructured Carbonized Sorbents. In: *Composites and Their Applications* (Ed. by N. Hu), pp. 249-272, INTECH, Rijeka, Croatia, 2012.
163. Schneider B., Schjtte H.R., Tewes A. Comparative Investigations on the Metabolism of (2,4-Dichlorophenoxy)Isobutyric Acid in Plants and Cell Suspension Cultures of *Lycopersicon esculentum*. *Plant Physiology*, Vol. 76, No. 4, pp. 989-992 (1984).
164. Tulyaganov T.S., Nazarov O.M., Levkovich M.G., Abdullaev N.D. Alkaloids of the *Nitraria* Genus. Komavine and Acetylkomavine. *Chemistry of Natural Compounds*, Vol. 37, No. 1, pp. 61-64 (2001).
165. Salmanov M., Aliyeva S., Veliyev M., Bekrashi N. The study of degradation ability of oil products and oil hydrocarbons by microscopic fungi isolated from polluted coastal areas of *Absheron peninsula* of Caspian sea. *Ekoloji*, Vol. 17, No. 68, pp. 59-64 (2008)
166. Ботиров Э.Х., Дренин А.А., Макарова А.В. Химическое исследование флавоноидов лекарственных и пищевых растений. *Химия растительного сырья*, № 1, сс. 45-48 (2006)
- Серкерев С.В., Мустафаева С.Дж. Новый компонент *Achillea Filipendulina Lam.* *Химия растительного сырья*, №2, сс. 101-103 (2009)
167. Тожибоев М.М., Ботиров Э.Х., Усманова Г.А. Фитохимическое исследование ксантонов и флавоноидов *Gentiana Karelinii*. *Химия растительного сырья*, №1, сс. 127-130 (2010).
168. Азизов Ю.М., Серкерев С.В. К химическому изучению *Laser trilobium (L.) Borkh.* флоры Азербайджана. *Химия растительного сырья*, №4, сс. 169-172, (2011).
169. Курбанова Ф.К., Серкерев С.В. Архангелицин - новый компонент *Seseli transcaucasicum*. *Химия растительного сырья*, № 2, сс. 89-92 (2012).
170. Bertran J.F., Reguera-Ruiz E., Pascual J.B. The CN stretch of hexacyano metallates as sensor of ligand-outer cation interactions - II. Ferrocyanides, *Spectrochimica Acta*, Vol. 46A, No. 12, pp. 1679-1682 (1990).
171. Mel'nyk O.P., Filinchuk Ya.E., Schollmeyer D., Mys'kiv M.G. π -Complexes of copper(I) ionic salts: synthesis and crystal structure of (4-allylthiosemicarbazide)(sulfamato)copper(I) and bis(4-allylthiosemicarbazide)(sulfamato-O)dicopper(I). *Zeitschrift für anorganische und allgemeine Chemie*, Vol. 627, pp. 287-293 (2001)

172. Cozar O., Micu-Semeniuc R., David L., Haiduc I. Local structure and metal-metal interactions in some Cr(III)-dithiophosphate compounds. *Modern Physics Letters B*, Vol. 16, No. 10-11, pp. 401-407 (2002).
173. Mikhailenko M.A., Shakhtshneider T.P., Boldyrev V.V. On the mechanism of mechanochemical synthesis of phthalylsulphathiazole. *Journal of Materials Science*, Vol. 39, Iss. 16-17, pp. 5435-5439 (2004).
174. Mikhailenko I.A., Shakhtshneider T.P., Boldyrev V.V. On the Mechanism of Mechanochemical Synthesis of Phthalylsulphathiazole. *Chemistry for Sustainable Development*, Vol. 12, pp. 367-371 (2004).
175. Volkov V.V., Myakishev K.G., Ilinchik E.A. Borazine and its derivatives: Synthesis, mechanochemical synthesis reactions and outlooks for technological applications. *Chemistry for Sustainable Development*, Vol. 17, pp. 225-234 (2009).
176. Tsitsishvili G.V., Charkviani M.K. Preparation and Properties of a New Synthetic Analogue of Natural Zeolite Mazzite. *Studies in Surface Science and Catalysis*, Vol. 28, pp. 161-168 (1986).
177. Froessner F., Steinberg K.-H., Freude D., Hunger M., Pfeifer H. NMR and IR studies of zeolites of the erionite type. *Studies in Surface Science and Catalysis*, Vol. 46, pp. 421-428 (1989).
178. Fink P., Datka J. Infrared spectroscopic studies of amination of ZSM-5 zeolites. *Journ. Chem. Soc., (Faraday Transactions 1; Physical Chemistry in Condensed Phases)*, Vol. 85, Issue 10, pp. 3079-3086 (1989).
179. Kürthy-Komlósi J. Thermal decomposition of industrial C_2Cl_6 containing salts. *Thermochimica Acta*, Vol. 92, pp. 735-737 (1985).
180. Chranina O.V., Czerniakowski F.P., Denisov G.S. UV-VIS electrochromism due to proton transfer. *Journal of Molecular Structure*, Vol. 177, pp. 309-315 (1988).
181. Chumaevskii N.A., Rodnikova M.N., Barthel J. Some peculiarities of compounds with spatial H-bond network: H_2O , H_2O_2 , $HOCH_2CH_2OH$. *Journal of Molecular Liquids*, Vol. 115, No. 2-3, pp. 63-67 (2004).
182. Gnatyuk I., Puchkovska G., Yaroshchuk O., Otto K., Pelzl G., Morawska-Kowal T. Interaction of LC with a substrate in a system LC - porous glass studied by IR spectroscopy. *Journal of Molecular Structure*, Vol 555, pp. 235-242 (2000).
183. Simon S., Ardelean I., Simon V. Structural effect of thorium on the local order in a phosphate glass matrix. *Mod. Phys. Lett. B*, Vol. 14, No. 13, pp. 473-477 (2000).
184. Culea E., Bratu I. Structural and magnetic behaviour of some borate glasses containing dysprosium ions. *Journal of Non-Crystalline Solids*, Vol. 262, pp. 287-290 (2000).
185. Culea E., Bratu I. Infrared spectroscopic and magnetic behaviour of $xNd_2O_3(1-x)Na_2B_4O_7$ glasses. *Acta Materialia*, Vol. 49, pp. 123-125 (2001).
186. Cozar O., Ardelean I., Bratu I., Simon S., Craciun C., David L., Cefan C. IR and EPR studies of some lithium-borate glasses with vanadium ions. *Journal of Molecular Structure*, Vol. 563-564, pp. 421-425 (2001).
187. Simon V., Spinu M., Stefan R. Corrosion properties of calcium-bismuth-borate glasses with silver. *Romanian Journal of Biophysics*, Vol. 15, No. 1-4, pp. 85-91 (2005).
188. Popescu V., Nascu H.I. Analytical Equivalent Optical Properties of $CdS-Cu_xS$ Thin Films Deposited on Glass Substrate by Spray Pyrolysis. *Iraqi Journal of Applied Physics Letters*, Vol. 2, No. 4, pp. 37-40 (2009).
189. Sumin de Portilla V.I. The nature of hydrogen bonds and water in legrandite by IR spectroscopy. *American Mineralogist*, Vol. 61, pp. 95-99 (1976).
190. Sumin de Portilla V.S., Quevedo M. P., Stepanov V.I. The structure of bayldonite: chemical analysis, differential thermal analysis, and IR spectroscopy. *American Mineralogist*, Vol. 66, pp. 148-153 (1981).
191. Britvin S.N., Pakhomovskii Y.A., Bogdanova A.N., Skiba V. Strontiowhitlockite $Sr_9Mg(PO_3OH)(PO_4)_6$, a new mineral species from the Kovdor Deposit, Kola Peninsula U.S.S.R., *Canadian Mineralogist*, Vol. 29, pp. 87-93 (1991).
192. Liferovich R.P., Sokolova E.V., Hawthorne F.C., Laajoki K.V.O., Gehör S., Pakhomovsky Y.A., Sorokhtina N.V. Gladiusite, $Fe^{3+}_2(Fe^{2+}, Mg)_4(PO_4)(OH)_{11}(H_2O)$, a New Hydrothermal Mineral Species From the Phoscorite-Carbonatite Unit, Kovdor Complex, Kola Peninsula, Russia. *The Canadian Mineralogist*, Vol. 38, pp. 1477-1485 (2000).

193. Hollo J., Kurucz E., Torky A.A., Biacs P. Application de la CCM à l'étude des huiles volatiles. *Qualitas Plantarum et Materiae Vegetabiles*, Vol. 16, Issue 1-4, pp. 51-62 (1968).
194. Kindt P., Dölling W., Augustin M. Dithiocarboxylierung von α -Stickstoff-Carbanionen. *Monatshefte für Chemie*, Vol. 120, Issue 10, pp. 871-878 (1989).
195. Schulze K., Uhlig H. Riechstoffsynthesen mit Fencholenaldehyd. *Monatshefte für Chemie*, Vol. 120, Issue 6-7, pp. 547-559 (1989).
196. Schroth W., Richter M., Dobner B., Spitzner R., Freitag S. Synthese und Reaktionsverhalten von 6-sec-Amino-1,3-thiazin-2-thionen. *Monatshefte für Chemie*, Vol. 119, Issue 4, pp. 463-476 (1988).
197. Schroth W., Spitzner R. Synthese von 4-(sec-Amino)-1,3-oxazin-2-onen und 4-(sec-Amino)-1,3-oxazin-2-thionen über elektrocyclische Ringschlußreaktion. *Monatshefte für Chemie*, Vol. 118, Issue 11, pp. 1263-1277 (1987).
198. Maskos K. Interaction of metal ions with nucleic acids. Interaction of copper(II) with guanosine and its derivatives. *Acta Biochimica Polonica*, Vol. 25, No. 2, pp. 101-111 (1978).
199. Uzarewicz A., Scianowski J., Bakowska-Janiszewska J. Reaction of (+)-3-Carene and (+)-2-Carene with *t*-Butyl Hypochlorite or *N*-Chlorsuccinimide in the Presence of Free Radical Catalysts. *Polish Journ. Chem.*, Vol. 74, No. 6, pp. 777-783 (2000).
200. Muszynski A., Lebkowska M. Biodegradation of used metalworking fluids in wastewater treatment. *Polish Journal of Environmental Studies*, Vol. 14., No. 1, pp. 73-79 (2005).
201. Muszyński A., Lebkowska M. Biodegradation of Used Metalworking Fluids in Wastewater Treatment. *Polish Journal of Environmental Studies* Vol. 14, No. 1, pp. 73-79 (2005).
202. Varhelyi C., Zsako J., Megyes T.J., Majdik K., Liptay G. On the oximine complexes of transition metals, Part CXIII Protolytic equilibria in the solutions of some complexes of the type [Co(Diox.H)₂AB] with alpha-benzilyldioxime and alpha-furyldioxime. *Per. Polytech., Ser.: Chem. Eng.*, Vol. 43, No. 1, pp. 41-49 (1999).
203. Zsako J., Nagy L., Várhelyi C., Novák C., Lovasz E. On the Oximine Complexes of Transition Metals. Spectroscopic and DSC Study of Some Complexes of the Types [Cu(DioxH)₂] and [CuX₂·DioxH₂]. *Journal of Thermal Analysis and Calorimetry*, Vol. 53, issue 2, pp. 421-429 (1998).
204. Nagy L., Zsako J., Novák C., Várhelyi C., Vankó G., Liptay G. On the Oximine Complexes of Transition Metals: Spectroscopic and DSC study on some [Fe(Diox·H)₂L₂] and [Fe(Diox)₃(BOR)₂] type chelates and clathrochelates. *Journal of Thermal Analysis and Calorimetry*, Vol. 57, Issue 2, pp. 433-445 (1999).
205. Stankovsky S., Kovao S. Infrared spectra of heterocumulenes. IV. The influence of substituents on the $\nu_{as}(\text{NNN})$ bands of some substituted phenyl azides. *Chem. Papers (Chem. Zv.)*, Vol. 28, No. 2, pp. 243-246 (1974).
206. Gregan F., Konecny, Hrcnciar T. Synthesis and insecticidal and acaricidal activities of O,O-dialkyl S-(5-methyl-5,6-dihydro-1,4-dithiin-2,3-dicarboximidomethyl)thio- and dithiophosphates. *Chem. Papers (Chem. Zv.)*, Vol. 29, No. 2, pp. 250-255 (1975).
207. Uher M., Rybar A., Martvon A., Lesko J. Transformation of 1,2,3-thiadiazoles into 1,2,3-triazoles. *Collect. Czech. Chem. Commun.*, Vol. 41, pp. 1551-1556 (1976).
208. Kristian P., Hritzova O., Talan P. Infrared spectroscopy, dipole moment, and structure study of benzoyl isothiocyanates. *Collect. Czech. Chem. Commun.*, Vol. 42, pp. 671-677 (1977).
209. Štetinová J., Dandárová M., Knoppová V., Kováč J. 5-Nitro-2-furfuryl-N-onium bromides. *Collect. Czech. Chem. Commun.*, Vol. 43, pp. 2041-2045 (1978).
210. Stankovsky S., Kovao S. Infrared spectra of heterocumulenes. VIII. Nature of the $\nu_{as}(\text{NCS})$ complex band of aromatic isothiocyanates. *Chem. Papers (Chem. Zv.)*, Vol. 34, No. 5, pp. 683-687 (1980).
211. Uher M., Božanský M., Kováč Š., Rajniaková O. Reactions of arenecarbonyl isothiocyanates with hydrazones. *Chem. Papers (Chem. Zv.)*, Vol. 35, No. 5, pp. 707-712 (1981).
212. Gregan F., Konecny B.V., Kmec J. Preparation of S-[2,3 bis(ethylthio)maleimidomethyl]thio- and dithiophosphates, their spectral and biological properties. *Chem. Papers (Chem. Zv.)*, Vol. 36, pp. 547-557 (1982).
213. David L., Craciun C., Balan C., Cozar O., Ghizdavu L., Batiu C. New Transition Metal Complexes of γ -L-glutamyl-5-(2-metoxy-*p*-nitroanilide): Synthesis, Spectroscopic, Magnetic and Thermal Investigations. *Acta Chim. Slov.*, Vol. 48, pp. 407-415 (2001).

214. Vegh D., Kovac J. (5-Nitro-2-furyl)vinylene-2-trimethylammonium bromide and method of preparing same. United States Patent No. 4243596 (1976).
215. Мысык Д.Д., Перепичка И.Ф., Эджиня А.С., Нейланд О.Я. Электроноакцепторы флуоренового ряда IV: синтез и оценка по редокспотенциалам электроноакцепторных свойств нитрозамещенных 4-цианофлуоренов. Латвийский химический журнал (Latvijas Ķīmijas), № 6, сс. 727-735 (1991).
216. Ianovici V., Neacsu G., Neacsu V. Li-bearing stevensite from Moldova Noua, Romania. Clays and Clay Minerals, Vol. 38, No. 2, pp. 171-178 (1990).
217. Tosa N., Bende A., Bratu I., Grosu I. Theoretical Modeling and Experimental Study of Intramolecular Hydrogen-bond in Tetramethyl 3,7-dihydroxybicyclo[3.3.1]nona-2,6-diene-2,4,6,8-tetracarboxylate. Studia Universitatis Babes-Boluai Chemia, Vol. L., Spec. Iss. 2, pp. 157-162 (2005).
218. Olar R., Badea M., Paraschivescu C., Marinescu D., Baciu I. Complexes with amides. Part 3. Synthesis, spectroscopic and thermal characterization of a Cu(II) complex with 2-iodoanilide-3-chlorobenzo[b]thiophene-2-carboxylic acid. Analele Universității din București – Chimie, Anul XIV (serie nouă), Vol. I-II, pg. 135-140 (2005).
219. Petride H., Corbu A., Florea C., Petride A., Udrea S. N- α -cyano derivatives of some N-benzyl azacycloalkanes. Revue Roumaine de Chimie, Vol. 51, No. 7-8, pp. 635-642 (2006).
220. Bogatian M.V., Bogatian G., Udrea S., Corbu A.C., Chiraleu F., Maganu M., Deleanu C. Pyridines with long alkyl substituents as ligands in oligomerization of isoprene. Revue Roumaine de Chimie, Vol. 51, No. 7-8, pp. 735-741 (2006).
221. Jitian S. The determination of thickness and optical constants for PbSe film from IR reflectance spectra. Annals of Faculty Engineering Hunedoara - Int. Journ. Eng., Vol. IX, No. 3, pp. 153-156 (2011).
222. Jitian S. Determination of Optical Constants of Polystyrene Films from IR Reflection-Absorption Spectra. Analele Universității "Eftimie Murgu" Reșița, Vol. XVIII, No. 1, pp. 41-48 (2011).
223. Topala C., Ionita G., Meltzer V., Pincu E., Draghici C. Inclusion complex of steroidal heterocyclic compounds with cyclodextrins in aqueous solution and in the solid state. ARKIVOC, 2002, Vol. No. 2, pp. 87-96 (2002).
224. Topala C., Caproiu M.T., Draghici C. Cholesteryl derivatives with a sulfonyl moiety. ARKIVOC, Vol. 2005, No. 10, pp. 63-70 (2005).
225. Vijan L.E., Topala C., Draghici C., Conci M. The Interaction of Amphotericin B with Cholesteryl Trifluoromethylphenyl-carbamate. Rev. Chim., Vol. 60, No. 2, pp. 142-146 (2009).
226. Basant N. Complex of steroidal heterocyclic compounds with cyclodextrins in aqueous solution and in the solid state. Oriental Journal of Chemistry, Vol. 26, No 3, pp. 975-981 (2010).
227. Povarennykh A.S., Clark A.M., Jones G.C. The infra-red spectrum of painite. Mineralogical Magazine, Vol. 42, pp. 518-519 (1978).
228. Шейх-Заде М.И. Исследование молекулярных форм антраниловой кислоты в разбавленных растворах в CCl_4 . Ученые записки Таврического национального университета им. В. И. Вернадского, серия "Биология, химия", Том 22 (61), № 2, сс. 207-211 (2009).
229. Шейх-Заде М.И. Оценка энергии димеризации антраниловой кислоты. Ученые записки Таврического национального университета им. В. И. Вернадского, серия "Биология, химия", Том 23 (62), №1, сс. 224-228 (2010).
230. Валиев Э.В., Шейх-Заде М.И. Оценка энергии цис-транс перехода в нитрофеноле. Ученые записки Таврического национального университета им. В. И. Вернадского, серия "Биология, химия", Том 24 (63), № 2, сс. 347-351 (2011).
231. Месропян Э.Г., Амбарцумян Г.Б., Аветисян А.А., Саргсян М.Г. Синтез новых производных 2-(Π -аминобензолсульфамидо)-тиазола и 2,3-дигидро-2-метил-1,4-нафтохинон-2-сульфоната. Химический журнал Армении, Том 56, № 1-2, сс. 109-113 (2003).
232. Сиреканян И.Н., Сафарян Э.П., Геворкян С.С., Ерицян М.Л. Реакционноспособные производные биурета и комплексы на их основе. Химический журнал Армении, Том 60, № 3, сс. 486-491 (2007).
233. Исаханян А.У., Геворгян Г.А., Паносян Г.А. Синтез гидрохлоридов 1-(4'-этоксифенил)-1-алкил(арил)-2-фенил-3-пирролидинопропан-1-олов. Химический журнал Армении, Том 61, № 3-4, сс. 435-440 (2008)

234. Акопян Г.В., Карамян Р.А., Ерицян М.Л. Сополимеры акриловой кислоты и хелатного комплекса его производных. Химический журнал Армении, Том 61, № 3-4, сс. 496-503 (2008).
235. Ахмедов Р.М., Фарзалиев В.М., Сафаров Ю.Д., Набиев М.З., Портянский А.Е. ИК-спектроскопическое изучение некоторых алифатических β -аминонитрилов. Вестник Бакинского университета, серия естественных наук, №4, сс. 39-47 (2006).
236. Исмаилов З.И., Мамедов Э.Г., Бабаева Р.З., Гасанов А.Г., Аюбов И.Г., Мамедова И.М., Сулейманова Э.И., Мамедов М.М. Синтез никелевых солей моноэфиров дикарбоновых кислот циклогексенового ряда. Вестник Бакинского университета, серия естественных наук, №2, сс. 24-26 (2008).
237. Садыхова Н.Д., Исмаилов З.И., Гусейнова Э.Ш., Гасанов А.Г., Мамедов Э.Г., Гусейнов Н.С., Аюбов И.Б., Рустамов Р.А. Изучение влияния параметров реакции на химический и оптический выходы три- и тетракарбоновых кислот. Вестник Бакинского университета, серия естественных наук, № 3, сс. 32-35 (2008).
238. Скреплева И.Ю., Волошенко Г.И., Либрович Н.Б., Майоров В.Д., Вишнецкая М.В., Мельников М.Я. Исследование взаимодействий в системе трифторуксусная кислота - диоксид серы методом ИК-спектроскопии. Вестник Московского университета, серия "Химия", Том 52, № 4, сс. 281-284 (2011).
239. Васин А.Я., Маринина Л.К., Аносова Е.Б. Пожаровзрывоопасность производных фенацетина и бензимидазола. Вектор науки Тольяттинского государственного университета, серия "Химия", № 3 (17), сс. 37-41 (2011).
240. Клименко Л.С., Мартыанов Т.П. Синтез и исследование свойств краунсодержащих антра- и нафтохинонов. Вестник Югорского государственного университета, № 3 (14), сс. 37-43 (2009).
241. Кузнецов М.С., Матвеев Д.М. Научно-исследовательские учреждения сибирского отделения академии наук СССР г. Томска: история создания и развития материально-технической базы (1969-1991 гг.). Вестник Томского Государственного Университета, № 359, сс. 90-94 (2012).
242. Никитин А.Н., Ермакова Е.В. Шламовые отходы тепловых электростанций - источники загрязнения атмосферного воздуха и потенциальные ресурсы минерального сырья. Известия Тульского государственного университета, серия "Физика", № 6, сс. 96-111 (2006).
243. Guertler J., Schmidt R., Dorschner J., Friedemann C. Can silicon monoxide grains be responsible for the interstellar 9.7 micrometer absorption band. *Astrophysics and Space Science*, Vol. 80, No. 1, p. 249-255 (1981).
244. Friedemann C., Gürtler J., Dorschner J. The 10- and 20- μ m interstellar absorption bands: Comparison with the infrared spectrum of the Nogoya meteorite. *Astrophysics and Space Science*, Vol. 60, No. 2, pp. 297-304 (1979).
245. Shpilinskaya L.N., Vasetsky S.I., Kovaleva L.V., Kudin A.M., Mitichkin A.I., Charkina T.A. Transformations of molecular anions in irradiated cesium iodide crystals. *Functional Materials*, Vol. 6, No. 3, pp. 364-368 (1999).
246. Shpilinskaya L.N., Zaslavsky B.G., Kovaleva L.V., Vasetsky S.I., Kudin A.M., Mitichkin A.I., Charkina T.A. The effect of oxygen containing anions on luminescent properties of CsI. *Semiconductor Physics, Quantum Electronics & Optoelectronics*, Vol. 3, No. 2, pp. 178-180 (2000).
247. Trefilova I.N., Kudin A.M., Kovaleva L.V., Charkina T.A., Mitichkin A.I., Belenko L.E. Role of sodium in radiation defect formation in CsI crystals. *Radiation Measurements*, Vol. 33, pp. 687-692 (2001).
248. Prezhdo O.V., Lysova I.V., Distanov V.B., Prezhdo V.V. Synthesis and scintillating efficiencies of 2,5-diarylthiazoles with intramolecular hydrogen bond. *Tetrahedron Letters*, Vol. 45, pp. 5291-5294 (2004).
249. Неклюдов И.М., Шевякова И.П., Березняк И.П., Уваров В.Л., Саенко Л.А., Борц Е.А. Влияние облучения на оптические свойства гранитных пород Украины. *Вопросы атомной науки и техники*, № 4, сс. 60-66 (2006).

250. Шевякова Э.П., Борц Б.В., Березняк Е.П., Саенко Л.А., Рыбальченко Н.Д., Белкин Ф.В. Влияние электронного облучения на структуру и свойства природных кварцитов Украины. Вопросы атомной науки и техники, № 1, сс. 36-41 (2010).

251. Березняк Е.П., Саенко Л.А., Шевякова Э.П. Радиационная стойкость темноцветных минералов, входящих в состав гранитоидов. Вестник Харьковского национального университета, серия "Физика", № 915, Вып. 14, сс. 44-47 (2010).

252. Березняк Е.П., Колодий И.В., Саенко Л.А. Влияние структурной упорядоченности на радиационную стойкость микроклинов. Вопросы атомной науки и техники, №2, сс.26-35 (2012).

253. Dovbnya A.N., Yefimov V.P., Abyzov A.S., Rybka A.V., Berezhnyak E.P., Zakutin V.V., Reshetnyak N.G., Blinkin A.A., Romas'ko V.P., Gabelkov S.V., Tarasov R.V. Stabilization of nano-sized structures in the volume of single-crystalline silicon for photoconverters. Problems of Atomic Science and Technology, Ser. Nuclear Physics Investigation, No. 5, pp. 75-80 (2009).

254. Goriletsky V.I., Mitichkin A.I., Belenko L.E., Rebrova T.P. IR spectroscopy of KBr salt and crystals. Semiconductor Physics, Quantum Electronics & Optoelectronics, Vol. 4, No. 2, pp. 139-141 (2001).

255. Popescu V., Nascu H.I., Darvasi E. Optical properties of PbS-CdS multilayers and mixed (CdS+PbS) thin films deposited on glass substrate by spray pyrolysis. Journal of Optoelectronics and advanced Materials, Vol. 8, No. 3, pp. 187-1193 (2006).

256. Kshnyakina S.I., Lopatkin Yu.M., Havrilko T.A. Investigation of Davydov splitting in the IR spectra of crystalline dicarboxylic acids. Journ. Nano-Electron. Phys., Vol. 1, No. 3, pp. 37-42 (2009).

257. Jain S.C., Warriar A.V.R., Abha Mrs. Infrared absorption studies on $\text{Ni}(\text{CN})_4^{2-}$ doped NaCl crystals. J. Chem. Phys., Vol. 64, No. 9, pp. 3804-3806 (1976).

258. Shukurov A.Kh., Tchlenova G.V., Golitsyn G.S. On the water vapor continuum absorption in the spectral range 400 cm^{-1} to 600 cm^{-1} from near the ground measurements. Tenth ARM Science Team Meeting Proceedings, Texas, 4 p. (2000)

259. Shukurova L.M., Elokhov A.S., Shukurov K.A., Gruzdev A.N., Golitsyn G.S. Measurements of NO_2 and analysis of submicron aerosol composition in the ARM-related experiment at Zvenigorod in March-April 2002 and during forest and peatbog fires in July-September 2002. Tenth ARM Science Team Meeting Proceedings, Texas, 4 p. (2000).

260. Shukurova L.M., Elokhov A.S., Olshansky D.I., Gruzdev A.N., Golitsyn G.S. Determination of nitrogen compounds in atmospheric air and aerosol samples during the first Zvenigorod winter cloudiness-aerosol-radiation experiment. Tenth ARM Science Team Meeting Proceedings, Texas, 6 p. (2000).

261. Добровольский Ю.А., Писарева А.В., Леонова Л.С., Карелин А.И. Новые протонпроводящие мембраны для топливных элементов и газовых сенсоров. Альтернативная энергетика и экология, № 12 (20), с. 36-41 (2004).

262. Левченко А.В., Добровольский Ю.А. Лаборатория ионки твердого тела. Альтернативная энергетика и экология, №2 (58), сс. 68-70 (2008).

263. Moros J., Inon F.A., Khanmohammadi M., Garrigues S., de la Guardia M. Evaluation of the application of attenuated total reflectance-Fourier transform infrared spectrometry (ATR-FTIR) and chemometrics to the determination of nutritional parameters of yogurt samples. Anal. Bioanal. Chem., Vol. 385, Issue 4, pp. 708-715 (2006).

264. Oldenhof H., Wolkers W.F., Fonseca F., Passot S., Marin M. Effect of sucrose and maltodextrin on the physical properties and survival of air-dried *Lactobacillus bulgaricus*: an in situ fourier transform infrared spectroscopy study. Biotechnol Prog., Vol. 21, Issue 3, pp. 885-892 (2005).

265. Gazizov A.D., Zhumadilova G.T., Bimendina L.A., Kudaibergenov S.E. Interpolymer complexes of some vinyl copolymers in a solution and on the boundary of two liquid phases. Polymer, Vol. 41, pp. 5793-5797 (2000).

266. Панкратов С.К., Закотеев Ю.А., Орехов Ф.К. Жидкостной сцинтилляционный анализатор молока с лазерным спектральным калибровочным позиционированием на базе флуоресцентного спектрофотометра. Молочнохозяйственный вестник, №3 (11), III кв. 2013, сс. 34-55 (2013).

267. Starzhinskiy N.G., Ryzhikov V.D., Gal'chinetsiy L.P., Nagornaya L.L., Silin V.I. Radiation-induced processes in A²B⁶ and oxide compounds under proton and gamma-irradiation. ВАНТ, No. 3, 43-46 (2005).
268. Tran H., Salgado P., Tillard E., Dardenne P., Nguyen X.T., Lecomte P. "Global" and "local" predictions of dairy diet nutritional quality using near infrared reflectance spectroscopy. Journ. Dairy Sci., Vol. 93, Issue 10, pp. 4961-4975 (2010).
269. Cifuentes A. Food analysis and foodomics. Journ. Chromatogr A., Vol. 1216, p. 7109 (2009).
270. Ibáñez C., Valdés A., García-Cañas V., Simó C., Celebier M., Rocamora-Reverte L., Gómez-Martínez A., Herrero M., Castro-Puyana M., Segura-Carretero A., Ibáñez E., Ferragut J.A., Cifuentes A. Global Foodomics strategy to investigate the health benefits of dietary constituents. Journ. Chromatogr. A., Vol. 1248, pp. 139-153 (2012).
271. Cifuentes A. Food science, foodomics and capillary electromigration methods. Electroph., Vol. 31, Issue 13, p. 2091 (2010).
272. García-Cañas V., Simó C., Herrero M., Ibáñez E., Cifuentes A. Present and future challenges in food analysis: foodomics. Anal. Chem., Vol. 84, Issue 23, pp. 10150-10159 (2012)
273. Capozzi F., Bordoni A. Foodomics: a new comprehensive approach to food and nutrition. Gen. Nutr., Vol. 8, Issue 1, pp. 1-4 (2013).

УДК 637.13 + 637.1.023 + 535.15 + 543.421/.424

Инфракрасная спектрофотометрия, инфракрасная спектроскопия и инфракрасная спектрометрия в квалиметрии молокопродуктов: современные идеи и «ретро-инжиниринг» классических приборов

Ф.К. Орехов

Институт химической физики им. Н.Н. Семенова РАН (ИХФ РАН), Российская Федерация
E-mail: theorehov@gmail.com

Аннотация. Инфракрасная спектрофотометрия, инфракрасная спектроскопия и инфракрасная спектрометрия являются базовыми технологиями для многих стандартов оценки качества молока, молочных продуктов, их компонентов. Вибрационная спектроскопия, также, как и вращательная спектроскопия, в настоящее время является наиболее доступным из наиболее точных типов методов структурной химии и, следовательно, структурой квалиметрии на базе спектрохимических данных. Данная статья представляет собой обзор ИК-техник анализа образцов и англитов молочной промышленности. Автор также приводит некоторые результаты личных технико-методических и инженерно-спектрохимических изысканий в области создания технических систем для спектральной/структурной квалиметрии молочных продуктов, основанных на применении аппаратных средств ИК-спектрофотометрии, в частности – классических приборов без преобразования Фурье.

Ключевые слова: ИК, инфракрасная спектрофотометрия, инфракрасная спектроскопия, инфракрасная спектрометрия, квалиметрия, структурный анализ, молокопродукты, колебательная спектроскопия.