

## ИСПОЛЬЗОВАНИЕ МАТЕМАТИЧЕСКОГО МОДЕЛИРОВАНИЯ ИК-СПЕКТРОВ ДЛЯ ЭКСПРЕСС-ОЦЕНКИ КОМПОНЕНТНОГО СОСТАВА БИОМАССЫ

*Асфандеев А.Ю.<sup>1</sup>, Карпунина Т.О.<sup>2</sup>,*

*<sup>1</sup>аспирант 3 года обучения, <sup>2</sup>студентка 5 курса Мордовского государственного университета имени Н.П. Огарёва, г. Саранск, Российская Федерация  
Научный руководитель – Кострюков С.Г., канд. хим. наук, доцент*

Определение содержания основных компонентов растительной биомассы (целлюлозы, лигнина и гемицеллюлоз) является важной задачей для биоэнергетики и целлюлозно-бумажной промышленности [1]. Традиционные химические методы анализа точны, но требуют значительных затрат времени, использования реактивов и сложной пробоподготовки. ИК-Фурье спектроскопия лишена многих из этих недостатков, однако классический подход к количественному анализу требует создания набора реальных калибровочных смесей, что также является трудоемким процессом [2]. Целью данной работы являлась апробация подхода к построению градуировочных зависимостей с использованием математически смоделированных спектров тройных смесей лигнин-целлюлоза-гемицеллюлоза.

**Материал и методы.** В качестве стандартов использовали микрокристаллическую целлюлозу (Sigma-Aldrich), технический лигнин крафт-процесса (Sigma-Aldrich) и ксилан (Молекулаб). Регистрацию ИК-спектров проводили на Фурье-спектрометре «Инфра ЛЮМ ФТ-08» в диапазоне 400-4000 см<sup>-1</sup> (разрешение 4 см<sup>-1</sup>). Образцы готовили в виде таблеток с KBr (соотношение 1:100). Модельные спектры тройных смесей получали путем математического сложения спектров индивидуальных компонентов с весовыми коэффициентами в программе «СпектраЛЮМ». Для построения градуировочных графиков использовали 36 модельных составов с варьированием содержания каждого компонента от 10 до 80 %. Градуировочные графики строились как зависимость относительных интенсивностей характеристических полос (для гемицеллюлозы – полоса 1710-1755 см<sup>-1</sup>, для лигнина – 1490-1520 см<sup>-1</sup> и для целлюлозы – 1308-1350 см<sup>-1</sup>) от содержания конкретного компонента. Для вычисления относительных интенсивностей площади указанных характеристических полос делили на площадь полосы 2910-2950 см<sup>-1</sup>, которая присутствует во всех основных компонентах растительных материалов (целлюлозе, гемицеллюлозе и лигнине) и незначительно меняется от природы материала. Были получены зависимости, представляющие уравнения линейной регрессии:  $y=0,671+0,007x$ ;  $R^2=0,989$  – для гемицеллюлозы,  $y=0,821+0,006x$ ;  $R^2=0,996$  – для лигнина,  $y=1.165+0.009x$ ,  $R^2=0.979$  – для целлюлозы.

Полученные уравнения применяли для анализа реальных образцов растительных материалов различного происхождения (древесина сосны, березы, дуба, тополя, ивы; солома ячменя, пшеницы, овса; стебли кукурузы, подсолнечника, рогоза, золотарника, лопуха, донника, цикория, крапивы; скорлупа семян подсолнечника, семян тыквы, грецких орехов и арахиса). Результаты сравнивали с данными химических методов (лигнин по Класону [3], целлюлоза по Кюршнеру-Хофферу [4], гемицеллюлоза щелочной экстракцией [5]).

**Результаты и их обсуждение.** Построенные градуировочные зависимости продемонстрировали высокую линейность. Коэффициенты корреляции ( $R^2$ ) составили: для гемицеллюлозы – 0,989, для лигнина – 0,996, для целлюлозы – 0,979. Анализ 20 растительных образцов показал удовлетворительную сходимость результатов ИК-спектроскопии с данными химических методов (таблица).

Таблица – Перечень образцов лигноцеллюлозной биомассы и массовая доля лигнина, целлюлозы и гемицеллюлозы

Образец	Содержание, масс. %					
	Лигнина		Целлюлозы		Гемицеллюлозы	
	ИК	Метод Класона	ИК	Метод Кюршнера-Хоффера	ИК	Щелочная экстракция с ультразвуком
Древесина сосны	22,4	25,0	45,5	44,9	23,4	20,5
Древесина березы	21,2	20,8	41,1	39,8	26,8	27,1
Древесина дуба	27,9	26,2	42,7	41,6	20,6	21,6

Древесина тополя	24,1	21,6	40,9	39,7	22,4	21,5
Древесина ивы	19,1	18,7	44,4	43,9	24,0	23,9
Ячменная солома	11,7	13,5	36,9	37,3	29,3	29,0
Пшеничная солома	13,2	13,8	36,3	35,5	31,2	30,7
Овсяная солома	14,1	15,7	40,1	41,5	27,1	25,7
Стебли кукурузы	13,8	14,2	41,2	42,2	33,2	32,8
Стебли подсолнечника	16,3	17,9	42,3	39,7	28,0	25,7
Стебли рогоза широко- лиственного	10,9	11,5	41,6	42,9	26,1	25,3
Стебли золотарника ка- надского	12,9	13,2	36,5	34,6	18,2	19,6
Стебли донника белого	10,7	12,2	32,8	31,0	21,4	18,9
Стебли лопуха	15,1	16,4	33,1	31,5	24,2	23,9
Стебли цикорий	13,8	14,7	32,7	33,5	27,2	24,7
Стебли крапивы дву- домной	12,1	11,7	41,3	42,4	20,2	19,9
Скорлупа семян подсол- нечника	24,1	26,1	43,2	39,1	21,7	20,6
Скорлупа семян тыквы	20,1	19,1	40,2	39,2	25,3	24,7
Скорлупа грецкого ореха	34,1	36,1	35,2	33,9	16,3	18,7
Скорлупа арахиса	24,1	26,1	32,2	29,9	21,3	20,7

**Заключение.** Показана принципиальная возможность использования математически смоделированных спектров для построения градуировочных зависимостей при количественном ИК-анализе растительного сырья. Методика обеспечивает приемлемую точность определений, значительно сокращая время и стоимость анализа, и может быть рекомендована для скрининговых исследований компонентного состава биомассы.

1 Krasznai, D.J. Compositional analysis of lignocellulosic biomass: conventional methodologies and future outlook / D.J. Krasznai, R. Champagne Hartley, H.M. Roy [et al.] // *Critical Reviews in Biotechnology*. – 2018. – Vol. 38, № 2. – P. 199-217.

2 Kostryukov, S.G. Determination of Lignin, Cellulose, and Hemicellulose in Plant Materials by FTIR Spectroscopy / S.G. Kostryukov, H.B. Matyakubov, Yu.Yu. Masterova, [et al.] // *Journal of Analytical Chemistry*. – 2023. – Vol. 78, № 6. – P. 718-727.

3 ГОСТ 11960-79 полуфабрикаты волокнистые и сырье из однолетних растений для целлюлозно-бумажного производства. Метод определения лигнина. Постановлением комитета СССР по стандартам от 21.12.1979 г. № 4931: дата введения 1992-01-01.

4 Носкова, О.А. Химия древесины и целлюлозы: учеб.-метод. пособие / О.А. Носкова, К.А. Синяев // Пермь: Изд-во Перм. нац. исслед. политехн. ун-та, 2016. – 45 с.

5 Cang Sun, R. Characterization of hemicelluloses obtained by classical and ultrasonically assisted extractions from wheat straw / R. Cang Sun, J. Tomkinson // *Carbohydrate Polymers*. – 2002. – Vol. 50, Iss. 3. – P. 263-271.

## ДИНАМИКА НАСЕЛЕНИЯ ПТИЦ ПАРКОВ Г. ВИТЕБСКА В ОСЕННЕ-ЗИМНИЙ ПЕРИОД

**Балтрук Я.В.,**

*студентка 4 курса ВГУ имени П.М. Машерова, г. Витебск, Республика Беларусь*

*Научный руководитель – Дорофеев С.А., канд. биол. наук, доцент*

Изучение пространственно-временной организации птиц в городской среде приобретает все большую значимость в условиях усиливающегося антропогенного давления и глобальных климатических изменений. Парки Витебска являются важными локалитетами биоразнообразия в пределах городской черты, особенно в осенне-зимний период, когда природные ресурсы становятся ограниченными. Анализ особенностей миграции и поведения птиц в этот период позволяет не только оценить степень экологической устойчивости городской фауны, но и разработать рекомендации по сохранению и обогащению орнитологического разнообразия в урбанизированных ландшафтах. Это имеет практическое значение для природоохранной деятельности, направленной на сохранение биоразнообразия птиц и целостности экосистем парковых зон, устойчивого городского планирования и экологического просвещения населения. Основными биотопами