

01

Применение ИК спектроскопии и метода теории функционала плотности для оценки относительного содержания триглицеридов олеиновой и линолевой кислот в смеси оливкового масла и масла семян подсолнечника

© К.В. Березин¹, К.Н. Дворецкий^{2,¶}, М.Л. Чернавина¹, А.В. Новоселова¹, В.В. Нечаев³,
А.М. Лихтер⁴, И.Т. Шагаутдинова⁴, В.В. Смирнов⁴, Е.М. Антонова⁵, О.Н. Гречухина⁶

¹ Саратовский национальный исследовательский государственный университет,
410012 Саратов, Россия

² Саратовский государственный медицинский университет,
410012 Саратов, Россия

³ Саратовский государственный технический университет,
410054 Саратов, Россия

⁴ Астраханский государственный университет,
414056 Астрахань, Россия

⁵ Астраханский государственный медицинский университет,
414000 Астрахань, Россия

⁶ Каспийский институт морского и речного транспорта,
414014 Астрахань, Россия

¶ e-mail: dcn@yandex.ru

Поступила в редакцию 25.03.2019 г.

В окончательной редакции 25.03.2019 г.

Принята к публикации 12.08.2019 г.

Зарегистрированы ИК спектры пяти образцов масел семян подсолнечника и пяти образцов оливкового масла холодного отжима различных торговых марок в диапазоне $650\text{--}3800\text{ см}^{-1}$. В рамках методов B3LYP/6-31G(d) построены структурные модели восьми жирных кислот: олеиновой, линолевой, пальмитиновой, стеариновой, альфа-линоленовой, арахидиновой, эйкозапентаеновой и докозагексаеновой, а также триглицеридов первых четырех из вышеописанных кислот. Рассчитаны колебательные волновые числа и интенсивности в ИК спектрах. Используя супермолекулярный подход, проведено моделирование ИК спектров оливкового масла и масла семян подсолнечника. Исследована зависимость интенсивности колебательных полос $\nu_{\text{экс}} = 914\text{ см}^{-1}$ и $\nu_{\text{экс}} = 3009\text{ см}^{-1}$ от содержания в маслах триглицеридов олеиновой и линолевой кислот. Исследована зависимость интенсивности этих полос от степени насыщенности жирных кислот. Построены экспериментальная и эмпирические зависимости для оценки относительного содержания триглицеридов олеиновой и линолевой кислот в смеси оливкового масла и масла семян подсолнечника. Обсуждена применимость теории функционала плотности совместно с ИК спектроскопией для определения смесей растительных масел.

Ключевые слова: ИК спектроскопия, теория функционала плотности, триглицериды жирных кислот.

DOI: 10.21883/OS.2019.12.48680.127-19

Введение

В последние годы использование ИК спектроскопии с использованием фурье-преобразования (FTIR) находит применение в качестве аналитического инструмента при анализе пищевых продуктов [1] и, в частности, растительных и животных масел и жиров. В работах [2–4] с помощью ИК спектроскопии изучался процесс окисления ряда образцов пищевых масел, нагреваемых в конвекционной печи при 70°C . В работе [5] с помощью ИК спектроскопии изучалось качество соевого масла при его обжарке на 180°C . В [6] проводился мониторинг степени окисления четырех пищевых масел с помощью ИК спектроскопии. Определение биологически активных добавок в пищевых маслах проводилось в работе [7]. Так,

например, с помощью ИК спектроскопии проводится определение транс-ненасыщенности в маслах посредством измерения интенсивности полосы поглощения 967 см^{-1} , этот метод является стандартизированным IUPAC (1987), AOCS (1989) и AOAC (1990) [2]. Количественный анализ потенциальных примесей оливкового масла с использованием ИК спектроскопии проводился в работе [8]. Определение качества оливкового масла и других масел с применением ИК спектроскопии и использования статистического метода многомерного анализа и метода частичных наименьших квадратов применялся в работах [8–10]. Фальсификация масел в настоящее время является проблемой для пищевой промышленности, особенно для дорогостоящих масел, таких как

оливковое масло, и существует потребность в быстрых и простых методах обнаружения фальсификации масла. В настоящей работе мы используем ИК спектроскопию с супермолекулярным моделированием [11] спектральных свойств ряда оливковых масел и рафинированных масел семян подсолнечника для определения содержания примеси рафинированного подсолнечного масла в оливковом масле холодного отжима путем оценки относительного содержания в их смеси триглицеридов олеиновой и линолевой кислот.

По экспериментальным данным [12] известно, что в жирнокислотную основу оливкового масла и масла подсолнечника входят олеиновые (омега-9) и линолевые (омега-6) триглицериды, из которых линолевая кислота незаменима, т.е. не синтезируется организмом из других кислот, а попадает в него только с пищей. При составлении правильного рациона питания очень важно соблюдать баланс как между незаменимыми полиненасыщенными кислотами омега-3 и омега-6, так и между полиненасыщенными и мононенасыщенными, из которых олеиновая кислота является самой распространенной. Таким образом, экспресс-анализ жирнокислотного состава наиболее употребляемых в пищевом рационе растительных масел необходим не только для выявления их фальсификации, но и для составления правильного рациона питания.

Настоящая работа является продолжением исследования авторами способов применения колебательной спектроскопии и теории функционала плотности для оценки относительного содержания триглицеридов жирных кислот в смеси растительных масел [13].

Методика и результаты эксперимента

Экспериментальные исследования проводились на ИК фурье-спектрометре Frontier фирмы Perkin Elmer в диапазоне $650\text{--}3800\text{ см}^{-1}$. Инфракрасные спектры были сняты на приставке НПВО. Общие условия проведения экспериментов были следующие: атмосферное давление — 762 ммHg , температура — 25°C , относительная влажность — 42% , разрешение прибора — 0.4 см^{-1} , режим — 32 scan . Для исследования были выбраны 5 образцов масел семян подсолнечника и 5 образцов оливкового масла, для которых экспериментально определен жирнокислотный состав [14]. Все образцы растительных масел были закуплены в продуктовых магазинах г. Саратова, РФ. Для анализа зависимости интенсивности ИК полос от относительного содержания в смеси масел триглицеридов олеиновой и линолевой жирных кислот дополнительно были зарегистрированы ИК спектры объемных смесей оливкового масла и масла семян подсолнечника (доля каждого масла в смеси варьировалась от 10 до 90% с шагом 10%).

Расчеты спектров жирных кислот (олеиновой, линолевой, стеариновой и пальмитиновой) и их триглицеридов проводились методом V3LYP/6-31G(d) по про-

грамме [15]. Дополнительно для исследования зависимости интенсивности некоторых ИК полос от степени насыщенности кислот были рассчитаны структуры и ИК спектры четырех жирных кислот, относящихся к классу омега-3: альфа-линоленовой, арахидиновой, эйкозапентаеновой и докозагексаеновой.

Молекулярные модели оливкового масла и масла семян подсолнечника строились на основе четырех моделей триглицеридов жирных кислот (олеиновой, линолевой, пальмитиновой и стеариновой). Содержание этих триглицеридов жирных кислот в моделях устанавливалось таким, чтобы оно соответствовало усредненному значению для пяти исследуемых масел. Затем значения нормировались, чтобы их сумма была равна 100%, так как содержание в маслах других типов жирных кислот не учитывалось. Таким образом, в модели оливкового масла содержание триглицеридов олеиновой кислоты составило 81.7%, линолевой — 6.3%, пальмитиновой — 9.2%, стеариновой — 2.7%, а для модели масла семян подсолнечника 19.1, 69.1, 7.2 и 4.6% соответственно. Теоретическое моделирование процесса фальсификации оливкового масла маслом семян подсолнечника проводилось путем изменения взаимного отношения триглицеридов олеиновой и линолевой кислот с учетом общего изменения содержания насыщенных кислот при переходе от модели оливкового масла к модели масла семян подсолнечника. Теоретические ИК спектры моделей исследуемых масел строились по программе [16]. Полуширина всех лоренцевых контуров задавалась равной 10 см^{-1} . Для лучшего согласия с экспериментом вычисленные значения колебательных волновых чисел были скорректированы с помощью метода линейного масштабирования частот [17]. Интегральная интенсивность экспериментальных полос определялась путем подсчета количества пикселей в ограниченном снизу контуре при разрешении спектрограммы 600 dpi.

Результаты и обсуждение

Экспериментальные ИК спектры образцов оливкового масла и масла семян подсолнечника показаны на рис. 1. Теоретическая интерпретация экспериментального ИК спектра одного из образцов масла семян подсолнечника представлена в табл. 1. Для нашего исследования в качестве аналитических мы выбрали следующие две полосы в ИК спектре. Первая, $\nu_{\text{эксп}} = 914\text{ см}^{-1}$, согласно расчету образована валентным колебанием C—C-связей между углеродом CH_2 -групп и атомами углерода, относящимися к ненасыщенным связям. Вторая, $\nu_{\text{эксп}} = 3009\text{ см}^{-1}$, образована валентными C—H-колебаниями ненасыщенных частей жирнокислотных цепей. Изменение степени ненасыщенности жирнокислотных цепей естественным образом отражается на интенсивности этих полос, что позволяет использовать их для оценки относительного содержания в растительных маслах ненасыщенных кислот.

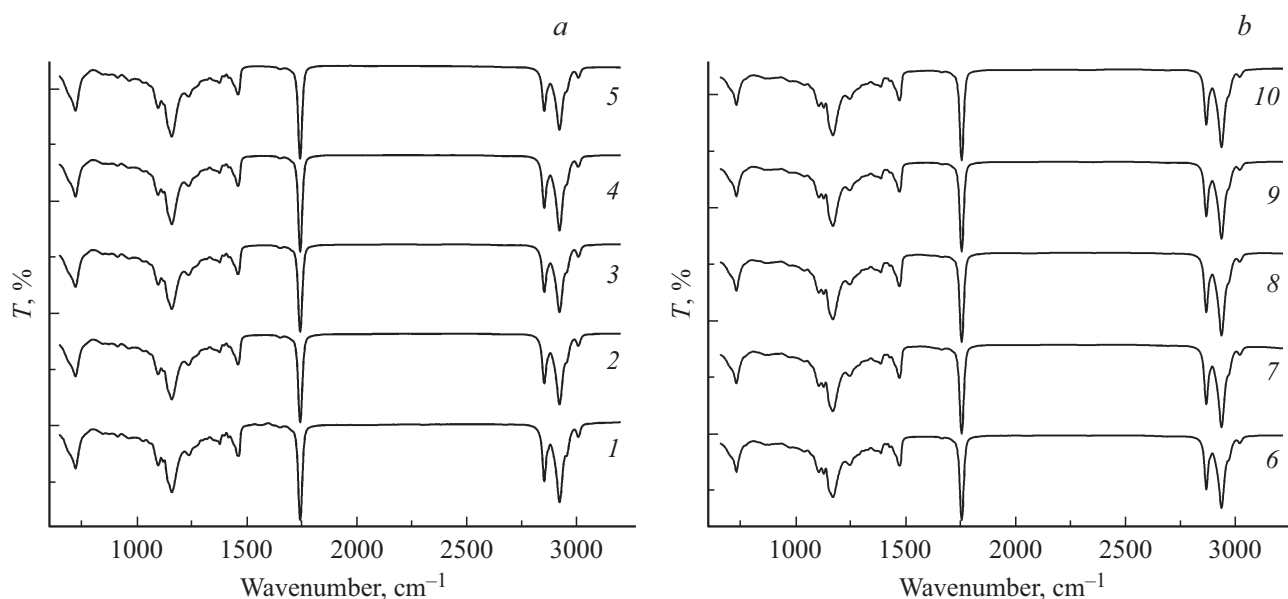


Рис. 1. Экспериментальные ИК спектры масел семян подсолнечника (a) и оливковых масел (b) в области 650–3200 см⁻¹. Цифрами на графиках обозначены номера образцов масел.

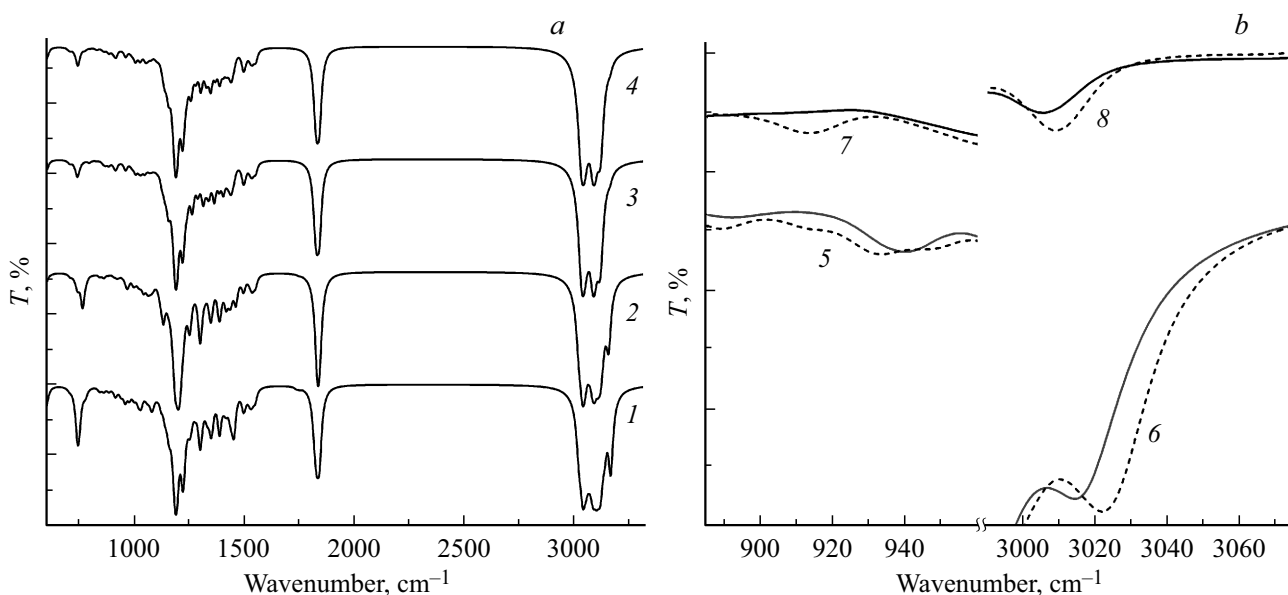


Рис. 2. Теоретические ИК спектры триглицеридов (a) линолевой (1), олеиновой (2), пальмитиновой (3) и стеариновой (4) жирных кислот, а также (b) теоретические (5, 6) и экспериментальные полосы (7, 8) $\nu_{\text{эксп}} = 914 \text{ см}^{-1}$ и $\nu_{\text{эксп}} = 3009 \text{ см}^{-1}$ для оливкового масла (штриховая линия) и масла семян подсолнечника (сплошная линия).

На рис. 2 представлены теоретические ИК спектры триглицеридов линолевой, олеиновой, пальмитиновой и стеариновой жирных кислот, а также сравнение выбранных для анализа экспериментальных и теоретических ИК полос двух типов растительных масел (образцы 3 и 8). Как видно из рис. 2, b, полоса с $\nu_{\text{эксп}} = 914 \text{ см}^{-1}$, образованная валентными колебаниями C–C-связей между ненасыщенными фрагментами цепей, гораздо сильнее проявляется в спектре подсолнечного масла. Это связано с тем, что интенсивность этой

полосы зависит только от концентрации триглицеридов полиненасыщенных кислот, входящих в состав растительных масел (рис. 3, a). Из четырех основных жирных кислот, входящих в состав рассматриваемых растительных масел, эта полоса наблюдается (рис. 3, a) только у полиненасыщенной линолевой кислоты. Следовательно, наблюдаемое различие в ИК спектрах растительных масел обусловлено тем, что в среднем концентрация линолевой кислоты у масла семян подсолнечника почти в 7 раз больше, чем у оливкового масла.

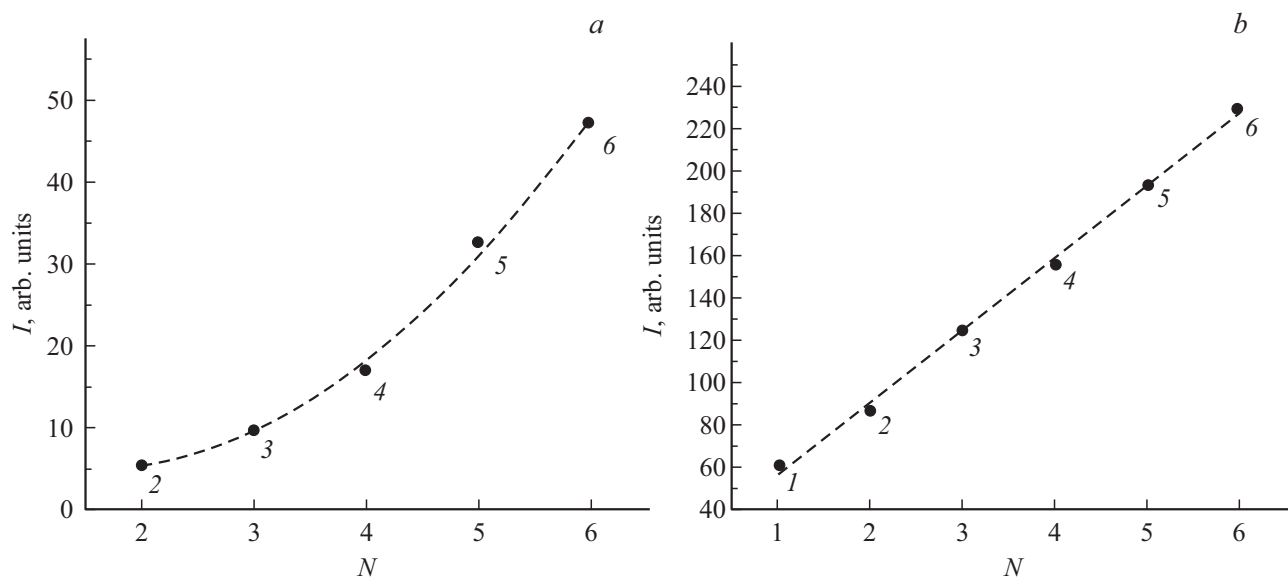


Рис. 3. Теоретические зависимости интенсивностей ИК полос (а) $\nu_{\text{эксп}} = 914 \text{ cm}^{-1}$ от числа валентных колебаний С–С-связей, находящихся между ненасыщенными фрагментами цепи, и (б) $\nu_{\text{эксп}} = 3009 \text{ cm}^{-1}$ от числа валентных колебаний связей С–Н, принадлежащих этим фрагментам, рассчитанные методом ВЗЛР/6-31G(d). Цифрами на графиках обозначены следующие жирные кислоты: олеиновая (1); линолевая (2); α -линоленовая (3); арахидоновая (4); эйкозапентаеновая (5) и докозагексаеновая (6).

Вторая полоса с $\nu_{\text{эксп}} = 3009 \text{ cm}^{-1}$ образована валентными С–Н-колебаниями ненасыщенных частей жирнокислотных цепей и, следовательно, проявляется у всех ненасыщенных жирных кислот, входящих в состав растительных масел. На рис. 3, б представлены теоретические зависимости интенсивности рассматриваемой ИК полосы от числа колебаний ненасыщенных частей жирнокислотных цепей (валентные колебания связей СН, входящих в состав С=C-групп). Из рис. 3, б видно, что с увеличением степени ненасыщенности жирнокислотной цепи интенсивность этой ИК полосы довольно быстро линейно возрастает.

Для удобства сравнения спектров различных масел между собой интенсивности обеих полос нормировались на интенсивность полосы $\nu_{\text{эксп}} = 1744 \text{ cm}^{-1}$, которая образована валентными колебаниями С=О-связей карбонильных групп и практически не зависит (рис. 2, а) от длины жирнокислотных цепей и степени их ненасыщенности.

На рис. 4, а представлены экспериментальные и теоретические зависимости относительной интенсивности полосы с $\nu_{\text{эксп}} = 914 \text{ cm}^{-1}$ от соотношений концентраций олеиновой и линолевой кислот для различных образцов оливкового масла и масла семян подсолнечника, а также для их смесей (образцы 5 и 7). Также из рисунка видно, что теоретическая и экспериментальная зависимости относительной интенсивности для различных смесей растительных масел хорошо описываются логарифмической регрессионной моделью (коэффициент детерминации R^2 лежит в интервале от 97.3 до 93.8%). Для теоретической зависимости эта модель может быть описана уравнением типа $Y = -0.0079 \ln(X) + 0.0251$,

а для экспериментальной $Y = -0.0055 \ln(X) + 0.0144$, где X — отношение концентраций олеиновой и линолевой кислот, Y — отношение интенсивности ИК полосы на частоте 914 cm^{-1} к интенсивности на частоте 1744 cm^{-1} .

Зависимость между полученными экспериментально интенсивностями ИК полосы с $\nu_{\text{эксп}} = 914 \text{ cm}^{-1}$ и их теоретическими оценками представлена на рис. 4, б. Из рисунка видно, что эта зависимость хорошо описывается линейной регрессионной моделью (коэффициент линейной корреляции $r = 0.99$) $Y = 0.7018X - 0.0032$, где X и Y — теоретические и экспериментальные относительные интенсивности ИК полосы на частоте $\nu_{\text{эксп}} = 914 \text{ cm}^{-1}$. Эту зависимость можно использовать для предварительной оценки результатов эксперимента по регистрации ИК спектра на данной частоте для смесей растительных масел с помощью теоретического моделирования.

Полученная зависимость была использована нами для оценки результатов моделирования эксперимента по смешиванию оливкового масла и масла семян подсолнечника с усредненным жирнокислотным составом (рис. 4, а). Полученная зависимость относительной интенсивности ИК полосы от соотношений концентраций олеиновой и линолевой кислот также хорошо описывается логарифмической регрессионной моделью $Y = -0.0091 \ln(X) + 0.0246$ (коэффициент детерминации $R^2 = 99.4\%$). С помощью этой зависимости были оценены результаты эксперимента по смешиванию оливкового масла и масла семян подсолнечника (образцы 3 и 8). Средняя ошибка в определении доли оливкового масла в смеси двух масел составила 6.5%. Эта погреш-

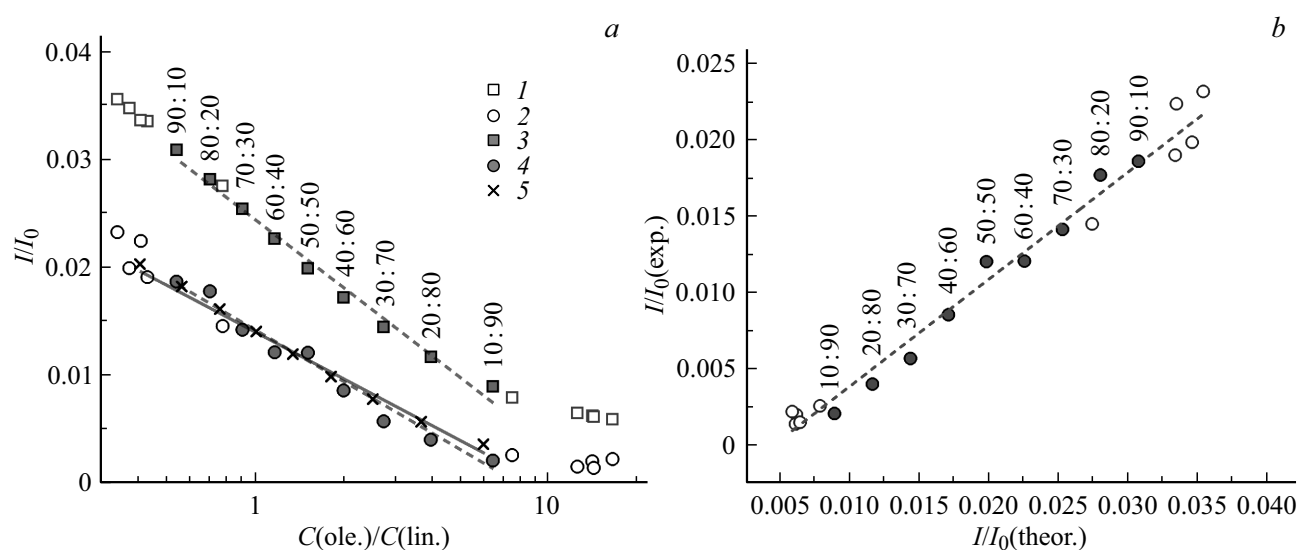


Рис. 4. Зависимость (а) относительной интенсивности двух ИК полос ($\nu_{\text{эксп}} = 914 \text{ cm}^{-1}$ к $\nu_{\text{эксп}} = 1744 \text{ cm}^{-1}$), полученных в ходе моделирования ИК спектров 10 образцов растительных масел (1), а также их экспериментальных значений (2) от соотношений концентраций олеиновой и линолевой кислот. Аналогичные теоретические и экспериментальные зависимости для смесей одного из образцов масла семян подсолнечника и оливкового масла обозначены как (3) и (4). Результаты моделирования эксперимента по смешиванию оливкового масла и масла семян подсолнечника с усредненным жирнокислотным составом обозначены как (5). Взаимосвязь (b) между экспериментальными значениями относительной интенсивности ИК полос и полученными в ходе моделирования спектров для образцов оливкового масла (группа светлых точек слева) и масел семян подсолнечника (группа светлых точек справа); темными точками обозначены результаты для смеси одного из образцов масла семян подсолнечника и оливкового масла. Цифрами на графиках дано соотношение концентраций этих масел в смеси, линиями — результаты аппроксимации данных.

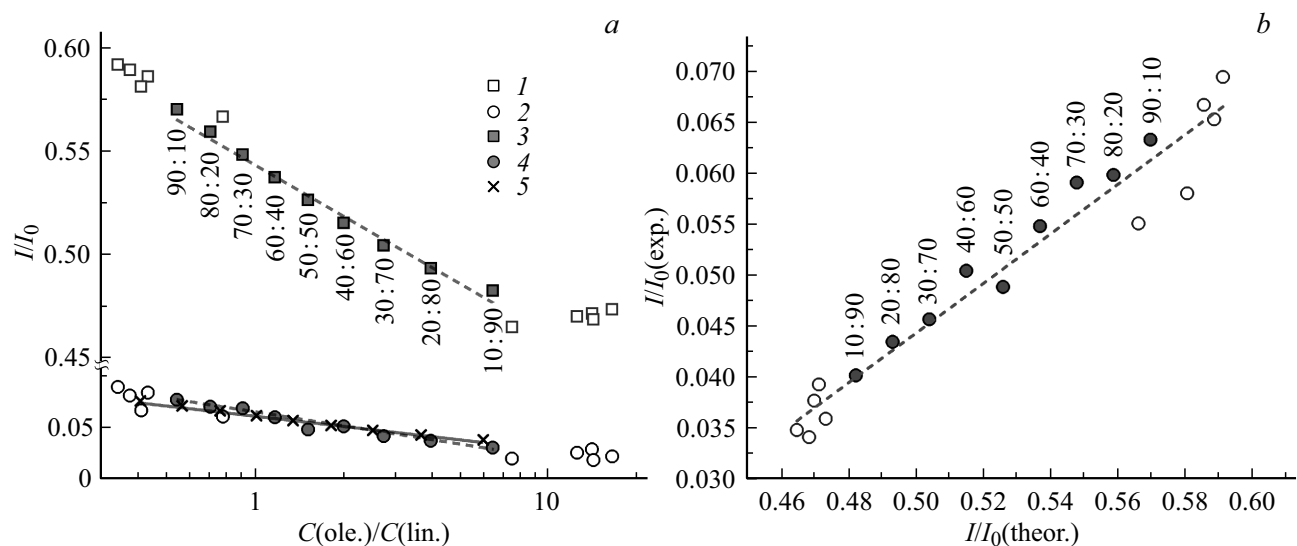


Рис. 5. Зависимость (а) относительной интенсивности двух ИК полос ($\nu_{\text{эксп}} = 3009 \text{ cm}^{-1}$ к $\nu_{\text{эксп}} = 1744 \text{ cm}^{-1}$), полученных в ходе моделирования ИК спектров 10 образцов растительных масел (1), а также их экспериментальных значений (2) от соотношений концентраций олеиновой и линолевой кислот. Аналогичные теоретические и экспериментальные зависимости для смесей одного из образцов масла семян подсолнечника и оливкового масла обозначены как (3) и (4). Результаты моделирования эксперимента по смешиванию оливкового масла и масла семян подсолнечника с усредненным жирнокислотным составом обозначены как (5). Взаимосвязь (b) между экспериментальными значениями относительной интенсивности ИК полос и полученными в ходе моделирования спектров для образцов оливкового масла (группа светлых точек слева) и масел семян подсолнечника (группа светлых точек справа); темными точками обозначены результаты для смеси одного из образцов масла семян подсолнечника и оливкового масла. Цифрами на графиках дано соотношение концентраций этих масел в смеси, линиями — результаты аппроксимации данных.

Теоретическая интерпретация экспериментального ИК спектра масла семян подсолнечника (образец номер 3, рис. 1)

Волновое число, эксперимент, cm^{-1}	Интенсивность экспериментальных полос	Волновое число, теория, cm^{-1}	Теоретическая интерпретация	
3009	Слабая	3012	Валентные С–Н-колебания ненасыщенных частей цепей Валентные С–Н-колебания CH_3 -групп Валентные С–Н-колебания CH_2 -групп	
2954	Крыло	2968		
2924	Очень сильная	2952		
2854	Сильная	2897		
1744	Очень сильная	1767		Валентные колебания С=О-связей Валентные колебания С=C-связей
1652	Очень слабая	1674		
1462	Средняя	1475		Ножничные колебания CH_2 -групп
1420	Крыло	1443		
1396	Крыло			Маятниковые (плоские) колебания С–Н-связей ненасыщенных фрагментов и веерные колебания CH_2 -групп Веерные колебания CH_2 -групп Веерные и маятниковые колебания CH_2 -групп Валентные колебания С–О глицириновой шивки Деформационные колебания (угловые) глицириновой шивки Валентные колебания С–С-связей цепей Валентные колебания С–С-связей цепей Валентные колебания С–С-связей между ненасыщенными фрагментами цепей Деформационные колебания цепей Деформационные колебания глицириновой шивки Маятниковые (не плоские) колебания С–Н-связей ненасыщенных фрагментов и маятниковые колебания CH_2
1376	Слабая	1400		
1318	Крыло	1339		
1236	Слабая	1255		
1160	Очень сильная	1151,1181		
1098	Слабая	1121		
1034	Крыло	1046		
966	Очень слабая	994		
914	Очень слабая	910		
874	Очень слабая	885		
844	Очень слабая	857		
722	Сильная	719		

ность во многом объясняется отличием использованных в эксперименте образцов масел от использованных в регрессионной модели масел с усредненными составами.

Аналогичные результаты для интенсивности ИК полосы с $\nu_{\text{эксп}} = 3009 \text{ cm}^{-1}$ представлены на рис. 5, а. Видно, что в отличие от рассмотренной выше полосы с $\nu_{\text{эксп}} = 914 \text{ cm}^{-1}$ наблюдается гораздо большее различие между экспериментальными данными и их теоретическими оценками. Тем не менее видно, что на данной частоте как теоретическая, так и экспериментальная зависимости относительной интенсивности для различных смесей растительных масел также хорошо описывается логарифмической регрессионной моделью (коэффициент детерминации R^2 лежит в интервале от 98.8 до 95.6%). Для теоретической зависимости эта модель может быть описана уравнением типа $Y = -0.0364 \ln(X) + 0.544$, а для экспериментальной $Y = -0.00956 \ln(X) + 0.0564$, где X — отношение концентраций олеиновой и линолевой кислот, Y — отношение интенсивности полосы на частоте 3009 cm^{-1} к интенсивности полосы на частоте 1744 cm^{-1} .

Также на рис. 5, б отображена зависимость между полученными экспериментально интенсивностями ИК полосы с $\nu_{\text{эксп}} = 3009 \text{ cm}^{-1}$ и их теоретическими оценками. Видно, что эта зависимость, так же как и для полосы

914 cm^{-1} , хорошо описывается линейной регрессионной моделью (коэффициент линейной корреляции $r = 0.976$) $Y = 0.2431X - 0.0773$, где X и Y — теоретические и экспериментальные относительные интенсивности ИК полосы на частоте $\nu_{\text{эксп}} = 3009 \text{ cm}^{-1}$. Эту зависимость также можно использовать для оценки результатов эксперимента по регистрации ИК спектра на данной частоте для смесей растительных масел с помощью теоретического моделирования.

На рис. 5, а также представлены результаты моделирования эксперимента по смешиванию оливкового масла и масла семян подсолнечника с усредненным жирнокислотным составом (рис. 5, а). Полученная зависимость относительной интенсивности ИК полосы 3009 cm^{-1} от соотношений концентраций олеиновой и линолевой кислот хорошо описывается логарифмической регрессионной моделью $Y = -0.0073 \ln(X) + 0.0558$ (коэффициент детерминации $R^2 = 99.4\%$). Также с помощью этой зависимости были оценены результаты эксперимента по смешиванию оливкового масла и масла семян подсолнечника (образцы 3 и 8). Средняя ошибка в определении доли оливкового масла в смеси двух масел составила 7.5%. Эта погрешность также связана с отличием использованных в эксперименте образцов масел от использованных в регрессионной модели масел с усредненными составами.

Заключение

Зарегистрированы ИК спектры пяти образцов масел семян подсолнечника и пяти образцов оливкового масла холодного отжима различных торговых марок в диапазоне $650\text{--}3800\text{ cm}^{-1}$. В рамках методов ВЗЛУР/6-31G(d) построены структурные модели восьми жирных кислот: олеиновой, линолевой, пальмитиновой, стеариновой, альфа-линоленовой, арахидоновой, эйкозапентаеновой и докозагексаеновой, а также триглицеридов первых четырех из вышеупомянутых кислот.

Используя супермолекулярный подход, проведено моделирование колебательного ИК спектра оливкового масла холодного отжима и масла семян подсолнечника. Установлена функциональная связь между интенсивностью двух экспериментально наблюдаемых ИК полос $\nu_{\text{эксп}} = 914\text{ cm}^{-1}$ и $\nu_{\text{эксп}} = 3009\text{ cm}^{-1}$ от содержания в маслах триглицеридов олеиновой и линолевой кислот, которая хорошо аппроксимируется логарифмической зависимостью.

Проведено экспериментальное и теоретическое моделирование процесса разбавления оливкового масла холодного отжима маслом семян подсолнечника, в результате которого получены функциональные зависимости, которые могут быть использованы на практике как для оценки относительного содержания олеиновых и линолевых кислот в оливковых маслах и маслах семян подсолнечника, так и для оценки доли масла семян подсолнечника в смеси при фальсификации оливкового масла холодного отжима. Средняя ошибка в определении доли оливкового масла в смеси двух масел при использовании спектральных полос $\nu_{\text{эксп}} = 914\text{ cm}^{-1}$ и $\nu_{\text{эксп}} = 3009\text{ cm}^{-1}$ составила 6.5 и 7.5% соответственно.

Финансирование работы

Работа была выполнена при финансовой поддержке в рамках государственных заданий высшим учебным заведениям и научным организациям в сфере научной деятельности, полученных от Минобрнауки (рег. номер 3.9128.2017/БЧ).

Конфликт интересов

Авторы заявляют, что у них нет конфликта интересов.

Список литературы

- [1] *Cozzolino D.* // *Appl. Spectrosc. Rev.* 2012. V. 47. N 7. P. 518. doi 10.1080/05704928.2012.667858
- [2] *Guillen M.D., Cabo N.* // *J. Agric. Food Chem.* 1999. V. 47. N 2. P. 709. doi 10.1021/jf9808123
- [3] *Guillen M.D., Cabo N.* // *J. Sci. Food Agric.* 2000. V. 80. N 14. P. 2028. doi 10.1002/1097-0010(200011)80:14<2028::AID-JSFA713>3.0.CO;2-4
- [4] *Guillen M.D., Cabo N.* // *Food Chem.* 2002. V. 77. N 4. P. 503. doi 10.1016/S0308-8146(01)00371-5
- [5] *Goburdhun D., Jhaumeer-Laulloo S.B., Musruck R.* // *Int. J. Food Sci.* 2001. V. 52. N 1. P. 31. doi 10.1080/09637480020027183
- [6] *Russin T., van de Voort F.R.* // *J. Am. Oil Chem. Soc.* 2004. V. 81. N 2. C. 111. doi 10.1007/s11744-004-0867-x
- [7] *Ozen B.F., Weiss I., Mauer L.J.* // *J. Agric. Food Chem.* 2003. V. 51. N 20. P. 5871. doi 10.1021/jf034245h
- [8] *Lai Y.W., Kemsley E.K., Wilson R.H.* // *Food Chem.* 1995. V. 53. N 1. P. 95. doi 10.1016/0308-8146(95)95793-6
- [9] *Tay A., Singh R.K., Krishnan S.S., Gore J.P.* // *Lebensm.-Wiss. u.-Technol.* 2002. V. 35. N 1. P. 99. doi 10.1006/fstl.2001.0864
- [10] *Ozen B.F., Mauer L.J.* // *J. Agric. Food Chem.* 2002. V. 50. N 14. P. 3898. doi 10.1021/jf0201834
- [11] *Березин К.В., Шагаутдинова И.Т., Чернавина М.Л., Новоселова А.В., Дворецкий К.Н., Лухтер А.М.* // *Опт. и спектр.* 2017. Т. 123. № 3. С. 472; *Berezin K.V., Shagautdinova I.T., Chernavina M.L., Novoselova A.V., Dvoretzkii K.N., Likhter A.M.* // *Opt. Spectrosc.* 2017. V. 123. N 3. P. 495. doi 10.1134/S0030400X17090089
- [12] Кодекс Алиментариус. Жиры, масла и производные продукты. М.: Весь Мир, 2007. 68 с.
- [13] *Березин К.В., Дворецкий К.Н., Чернавина М.Л., Новоселова А.В., Нечаев В.В., Антонова Е.М., Шагаутдинова И.Т., Лухтер А.М.* // *Опт. и спектр.* 2018. Т. 125. В. 9. С. 297; *Berezin K.V., Dvoretzkii K.N., Chernavina M.L., Novoselova A.V., Nechaev V.V., Antonova E.M., Shagautdinova I.T., Likhter A.M.* // *Opt. Spectrosc.* 2018. V. 125. N 3. P. 311. doi 10.1134/S0030400X18090059
- [14] [Электронный ресурс] Режим доступа: https://roscontrol.com/category/produkti/rastitelnoe_maslo/
- [15] *Frisch M.J., Trucks G.W., Schlegel H.B. et al.* *Gaussian09, Revision A.02.* Pittsburgh PA: Gaussian, Inc. 2009.
- [16] *Файфель А.Б., Березин К.В., Нечаев В.В.* Программа для моделирования и визуализации колебательных ИК и КР спектров по данным квантово-механических расчетов. Проблемы оптической физики. Саратов: Изд-во ГосУНЦ „Колледж“, 2003. С. 74.
- [17] *Березин К.В., Нечаев В.В., Кривохижина Т.В.* // *Опт. и спектр.* 2003. Т. 94. № 3. С. 398; *Berezin K.V., Nechaev V.V., Krivokhizhina T.V.* // *Opt. Spectrosc.* 2003. V. 94. N 3. P. 357. doi 10.1134/1.1563679