

ИЗУЧЕНИЕ И ИСПОЛЬЗОВАНИЕ ГЕНЕТИЧЕСКИХ РЕСУРСОВ РАСТЕНИЙ

Научная статья
УДК 633.1:581.192:543.421/.424:582.661.21
DOI: 10.30901/2227-8834-2025-1-52-60



Экспресс-оценка биохимических показателей хозяйственной ценности образцов семян амаранта из коллекции ВИР с помощью БИК-спектроскопии

Т. В. Шеленга, А. Е. Соловьева, Д. В. Соколова, В. В. Васипов, А. Е. Смоленская, В. С. Попов

Федеральный исследовательский центр Всероссийский институт генетических ресурсов растений имени Н.И. Вавилова Санкт-Петербург, Россия

Автор, ответственный за переписку: Алла Евгеньевна Соловьева, alsol64@mail.ru

Актуальность. Разработанные калибровочные модели для экспресс-оценки хозяйственно ценных признаков семян амаранта с помощью спектроскопии в ближней области инфракрасного спектра (БИК) позволяют сохранить ценный селекционный материал и снизить себестоимость анализа.

Материалы и методы. Материалом для изучения послужили 30 образцов семян амаранта (*Amaranthus hypochondriacus* L., *A. cruentus* L., *A. caudatus* L.) из коллекции Всероссийского института генетических ресурсов растений имени Н.И. Вавилова (ВИР). Биохимические показатели качества и жирнокислотный состав масла изучали с помощью аналитических методов, принятых в ВИР: содержание белка – методом Кьельдаля; масла – методом сухого обезжиренного остатка; влажность – воздушно-тепловым методом; жирнокислотный состав масла – методом газо-жидкостной хроматографии. Калибровочные модели выполнены с использованием программного обеспечения OPUS, разработанного для ИК-анализатора MATRIX-I (Bruker Optics, Германия).

Результаты и заключение. Калибровочные модели, полученные на ИК-анализаторе MATRIX-I с помощью программного обеспечения OPUS LAB для определения содержания белка, влажности, пальмитиновой, олеиновой кислот, позволяют проводить массовый анализ семян амаранта из коллекции ВИР с точностью до 1,5%. Модели, разработанные для количественного определения масла, стеариновой, линолевой и α -линоленовой кислот, нуждаются в доработке. Использование БИК-спектроскопии позволяет ускорить процесс получения данных по основным хозяйственно ценным показателям семян амаранта, сохраняет ценный материал и помогает определить дальнейшее направление селекционной работы.

Ключевые слова: *Amaranthus* L., калибровочная модель, белок, масло, влажность, жирнокислотный состав

Благодарности: работа выполнена при финансовой поддержке Российского научного фонда (соглашение № 24-26-00218 от 29.12.2023 «Взаимосвязь содержания сквалена в семенах зернового амаранта с анатомо-морфологическими характеристиками и биохимическими показателями в условиях Северо-Запада РФ»).

Авторы благодарят рецензентов за их вклад в экспертную оценку этой работы.

Для цитирования: Шеленга Т.В., Соловьева А.Е., Соколова Д.В., Васипов В.В., Смоленская А.Е., Попов В.С. Экспресс-оценка биохимических показателей хозяйственной ценности образцов семян амаранта из коллекции ВИР с помощью БИК-спектроскопии. *Труды по прикладной ботанике, генетике и селекции*. 2025;186(1):52-60. DOI: 10.30901/2227-8834-2025-1-52-60

STUDYING AND UTILIZATION OF PLANT GENETIC RESOURCES

Original article

DOI: 10.30901/2227-8834-2025-1-52-60

Rapid assessment of biochemical indicators of agronomic value in amaranth seed accessions from the VIR collection using NIR spectroscopy

Tatiana V. Shelenga, Alla E. Solovyeva, Diana V. Sokolova, Vladimir V. Vasipov, Anastasiya E. Smolenskaya, Vitaliy S. Popov

N.I. Vavilov All-Russian Institute of Plant Genetic Resources, St. Petersburg, Russia

Corresponding author: Alla E. Solovyeva, alsol64@mail.ru

Background. Amaranth (*Amaranthus* L.) is a relatively new crop for the Russian Federation, with huge potential for growth intensity, productivity, and other agronomic traits. Development of new amaranth cultivars is an important solution to the problem of food quality improvement through the use of plant raw materials enriched with health-friendly and highly nutritious components. Calibration models were developed for rapid assessment of useful agronomic characters (the content of protein, oil, moisture, and basic fatty acids: palmitic, stearic, oleic, linoleic, and α -linolenic) in amaranth seeds preserved at the N.I. Vavilov All-Russian Institute of Plant Genetic Resources (VIR) using near-infrared (NIR) spectroscopy.

Materials and methods. Thirty accessions of amaranth seeds (*A. hypochondriacus* L., *A. cruentus* L., and *A. caudatus* L.) from the VIR collection served as the material for the study. Biochemical indicators of seed quality and fatty acid composition of oil were studied using analytical methods adopted at VIR: the Kjeldahl method for protein content, the dry fat-free residue method for oil, the thermogravimetric method for moisture, and gas-liquid chromatography for fatty acid composition. Calibration models were constructed with the OPUS software developed for the MATRIX-I IR analyzer (Bruker Optics, Germany).

Results and conclusion. Calibration models obtained on a MATRIX-I IR analyzer for measuring the content of protein, moisture, palmitic and oleic acids facilitate mass analysis of amaranth seeds from the VIR collection with an accuracy of 1.5%. Models developed for the quantification of oil, stearic, linoleic and α -linolenic acids require improvement. NIR spectroscopy makes it possible to accelerate the process of obtaining data on major agronomic indicators of amaranth seeds, preserve valuable materials, and determine further steps in breeding practice.

Keywords: *Amaranthus* L., calibration model, protein, oil, moisture, fatty acid profile

Acknowledgements: this research was supported by the Russian Science Foundation under Agreement No. 24-26-00218 (*Interaction of phenotypic and biochemical characteristics of grain amaranth with squalene content in seeds under the conditions of the Northwest of the Russian Federation*) dated Dec. 29, 2023.

The authors thank the reviewers for their contribution to the peer review of this work.

For citation: Shelenga T.V., Solovyeva A.E., Sokolova D.V., Vasipov V.V., Smolenskaya A.E., Popov V.S. Rapid assessment of biochemical indicators of agronomic value in amaranth seed accessions from the VIR collection using NIR spectroscopy. *Proceedings on Applied Botany, Genetics and Breeding*. 2025;186(1):52-60. DOI: 10.30901/2227-8834-2025-1-52-60

Введение

Амарант (*Amaranthus L.*) – относительно новая для Российской Федерации сельскохозяйственная культура, обладающая многообещающим потенциалом продуктивности и высоким содержанием белка в семенах и листовой биомассе (Taipova, Kuluev, 2015). Амарант считается «суперпродуктом» благодаря его питательной ценности: содержанию высококачественного белка, ненасыщенных жирных кислот (ЖК), пищевых волокон, флавоноидов, витаминов (тиамин, рибофлавин, аскорбиновая кислота, никотиновая кислота), макро- и микроэлементов (кальций, магний и медь, а также натрий, железо, фосфор, цинк) (Soriano-García et al., 2018; Sokolova et al., 2021). В семенах содержится метионин (15,8 мг/г общего белка) и лизин (55,8 мг/г общего белка), что обеспечивает его высокую пищевую ценность в сравнении с большинством злаков (Tang, Tsao, 2017). Специфической особенностью культуры является значительное количество в семенах высокоусвояемого безглютенового белка, превышающее этот показатель в семенах традиционных зерновых культур: ржи, кукурузы и риса (Grobelnik Mlakar et al., 2009). Возрождение интереса к амаранту в конце XX века связано с работами по изучению механизма четырехстадийного фотосинтеза, или C_4 -фотосинтеза, который свойственен амаранту как представителю «аспартатной» подгруппы C_4 -растений (Magomedov, Chirkova, 2015). Комплексное изучение амаранта, развитие его селекции и создание новых сортов – крайне важное направление для решения проблемы повышения качества пищевой продукции путем использования растительного сырья, обогащенного полезными и высокопитательными сырьевыми компонентами.

Амарант – однолетняя культура, имеющая пищевое, кормовое, техническое и декоративное значение. Семена используются для изготовления круп, хлеба, макарон, кондитерских изделий, стебли и листья – для салатов, супов, чая (Grobelnik Mlakar et al., 2009; Sokolova, 2023). Зерновыми видами амаранта считаются *A. cruentus L.* и *A. hypochondriacus L.*, берущие свое начало из Центральной и Северной Америки, а также *A. caudatus L.* южноамериканского происхождения (Covas, 1994). В течение тысячелетий амарант оставался одной из основных сельскохозяйственных культур Южной Америки, где был известен как «пшеница ацтеков», «хлеб инков».

Амарант отличается от других культур высокой продуктивностью, экологической пластичностью и устойчивостью к стрессовым факторам окружающей среды (Вуков, 2008). Широкое использование амаранта объясняется его биохимическим составом. Семена амаранта содержат до 16–20% протеина, где присутствие незаменимой аминокислоты лизина может достигать 6–7%, масла – 6–9%, крахмала – до 60–65%. Листья амаранта обладают высокой антиоксидантной активностью за счет накопления разных групп соединений фенольной природы (Hue et al., 2014; Sokolova et al., 2021).

Содержание липидов в семенах амаранта сильно варьирует в зависимости от вида и генотипа и колеблется в пределах 2–8%. Масло семян амаранта содержит около 70% ненасыщенных ЖК и 30% – насыщенных, из которых основными являются α -линоленовая (> 40%) и пальмитиновая (> 20%). Ценность масла определяется соотношением $\omega 6$ (линолевой) и $\omega 3$ (α -линоленовой) ЖК, которое в основном равняется 1–2 : 1, что является оптимальным для питания человека (Hue et al., 2014). Важно отметить, что в масле амаранта содержится зна-

чительное количество полиненасыщенного углевода сквалена (до 8%). Сквален ($C_{30}H_{50}$) имеет широкое применение в медицине, например в качестве адьюванта в вакцинах, антиоксиданта и иммуномодулятора в комплексной терапии ряда заболеваний, таких как диабет, ишемическая болезнь сердца и другие, а также в составе косметических средств (Gonor et al., 2006; Huang et al., 2009). Опубликованы данные о положительном влиянии сквалена на снижение риска развития онкологических заболеваний и уровня холестерина (Smith, 2000). По данным К. Хуе с соавторами (Hue et al., 2014), в черносезонных сортах амаранта концентрация сквалена в среднем составляет 7%, в белосезонных сортах – около 6,5%.

Уникальная коллекция амаранта ВИР, начало которой положено в 1930 г., на сегодняшний день включает 570 образцов из разных стран мира. Изучение коллекционного материала дает возможность выделить образцы, имеющие потенциал для включения в селекционные программы, связанные с получением новых высокоурожайных районированных сортов амаранта с улучшенным качеством семян. Наибольшее распространение в качестве зерновых форм получили виды *A. hypochondriacus*, *A. caudatus*, *A. cruentus* и *A. tricolor L.* (Taipova, Kuluev, 2015).

Для проведения скрининга образцов семян амаранта по основным хозяйственно ценным биохимическим показателям применяется спектроскопия в ближней области инфракрасного спектра (БИК) БИК-анализатора типа MATRIX-I (Bruker, Германия). Метод основан на зависимости индивидуальных характеристик ИК-спектров от данных, полученных классическими аналитическими методами (Khoreva et al., 2022; Popov et al., 2024).

Цель данной работы – разработка калибровочных моделей для ИК-анализатора по следующим показателям хозяйственной ценности: содержание белка, масла, крахмала, влажности и основных ЖК (пальмитиновой, стеариновой, олеиновой, линолевой, α -линоленовой) в образцах семян амаранта с использованием зернового модуля анализатора.

Калибровочные модели с подтвержденной достоверностью можно будет использовать для скрининга большого количества образцов. Использование ИК-калибровочных моделей снижает себестоимость анализа, позволяет сделать исследование безопасным для семенного материала и получать результаты сразу по нескольким значимым параметрам.

Материалы и методы

Материалом для построения калибровочных моделей послужила выборка из 30 образцов семян зернового амаранта видов *A. hypochondriacus* (10 образцов), *A. cruentus* (12 образцов), *A. caudatus* (8 образцов) из коллекции ВИР (табл. 1). Все образцы семян репродукции 2020 г. были выращены в условиях научно-производственной базы «Пушкинские и Павловские лаборатории ВИР» (59°7'11"1275'N, 30°4'30"32647'E). Район выращивания относится к атлантико-континентальной области умеренного климатического пояса. Почвы г. Пушкина преимущественно дерново-подзолистые супесчаные. Образцы выращивали на естественном фоне, без применения удобрений и пестицидов. Сумма активных температур в год репродукции составила 1966°С, осадки – 175 мм, что соответствует типичным климатическим показателям региона.

Таблица 1. Список опытных образцов семян *Amaranthus* L. из коллекции ВИР
Table 1. List of experimental *Amaranthus* L. seed accessions from the VIR collection

№ по каталогу ВИР / VIR catalogue No.	Вид / Species	Происхождение / Origin
128	<i>A. hypochondriacus</i>	Венесуэла
231	<i>A. hypochondriacus</i>	Германия
232	<i>A. cruentus</i>	США
266	<i>A. caudatus</i>	Венгрия
279	<i>A. caudatus</i>	Россия
286	<i>A. cruentus</i>	Мексика
289	<i>A. cruentus</i>	Мексика
295	<i>A. hypochondriacus</i>	Мексика
300	<i>A. cruentus</i>	Мексика
301	<i>A. cruentus</i>	Мексика
314	<i>A. cruentus</i>	Венгрия
317	<i>A. caudatus</i>	Бенин
318	<i>A. cruentus</i>	Россия
326	<i>A. caudatus</i>	Великобритания
327	<i>A. hypochondriacus</i>	Боливия
329	<i>A. cruentus</i>	Эквадор
332	<i>A. hypochondriacus</i>	США
333	<i>A. hypochondriacus</i>	Непал
334	<i>A. hypochondriacus</i>	Непал
335	<i>A. cruentus</i>	США
340	<i>A. caudatus</i>	Россия
343	<i>A. hypochondriacus</i>	Мексика
345	<i>A. hypochondriacus</i>	Мексика
349	<i>A. cruentus</i>	США
351	<i>A. cruentus</i>	Аргентина
353	<i>A. cruentus</i>	Германия
356	<i>A. caudatus</i>	Великобритания
358	<i>A. caudatus</i>	Танзания
370	<i>A. hypochondriacus</i>	Австралия
375	<i>A. caudatus</i>	Эквадор

Биохимический анализ проводили в 2024 г. по методикам, принятым в ВИР (Ermakov et al., 1987). Содержание белка определяли по методу Кьельдаля на автоматическом анализаторе белка VELP SCIENTIFICA UDK 159 (VELP, Италия) (Kjeldahl, 1883). Белок рассчитывали по общему содержанию азота с использованием коэффициента

6,25. Содержание масла оценивали по массе сухого обезжиренного остатка с использованием аппарата Сокслета. Влажность семян – воздушно-тепловым методом согласно ГОСТ 9404-88 с помощью сушильного шкафа МЕММЕРТ UNPlus160 (Германия) (GOST 9404-88..., 2007). Жирнокислотный состав определяли путем разде-

ления метиловых эфиров ЖК с помощью полярной колонки Omagawax TM 250, полиэтиленгликоль (30,0 м, 250,00 мкм, 0,25 мкм; США) на газовом хроматографе Agilent 6850, сопряженном с квадрупольным масс-селективным детектором Agilent 5975B VL MSD фирмы Agilent Technologies (США), по методике ВИР (Shelenga et al, 2020).

Спектры образцов семян амаранта регистрировали в трех повторностях (навеска для каждой повторности – 20–30 г) в диапазоне 4000–12 800 см⁻¹ с разрешением 16 см⁻¹ в соответствии с руководством к ИК-спектрометру MATRIX-I, используя зерновой модуль (кювета диаметром 51 мм).

Калибровочные модели по определению содержания белка, масла, основных ЖК масла (пальмитиновой, стеариновой, олеиновой, линолевой, α-линоленовой) и влажности в образцах семян амаранта построили методом векторной нормализации. Построение моделей калибровочных кривых осуществляли с помощью программного обеспечения OPUS Software.

Результаты и их обсуждение

В результате получено 90 спектров для 30 образцов семян амаранта (в трех повторностях) (рис. 1).

В ходе конструирования калибровочных моделей установлена зависимость содержания белка (рис. 2, a), влажности (рис. 2, b), масла (рис. 2, c), пальмитиновой (рис. 2, d), стеариновой (рис. 2, e), олеиновой (рис. 2, f), линолевой (рис. 2, g), α-линоленовой кислот (рис. 2, h) в семенах амаранта от индивидуальных спектральных характеристик соответствующих образцов (в % на сухое вещество). В созданные калибровочные модели заложены следующие диапазоны изменчивости (в %): для белка (12,68–19,47); для масла (2,56–6,58); для влажности (6,46–18,54); для ЖК: пальмитиновой (3,23–18,14), стеари-

риновой (1,97–4,40), олеиновой (15,81–51,51), линолевой (23,68–50,64), α-линоленовой (4,62–49,88). На всех представленных моделях большинство полученных аналитических путей значений располагаются либо на самой калибровочной кривой, либо в непосредственной близости от нее (см. рис. 2). Несколько большую степень дисперсии продемонстрировали показатели влажности, содержания стеариновой и олеиновой кислот (рис. 2, b, e, f).

Наиболее достоверные калибровочные модели со значениями коэффициента детерминации (R²) более 80 были получены для определения в семенах амаранта содержания белка (87,3), пальмитиновой (87,0), линолевой (81,1), α-линоленовой (92,0) кислот. Для оценки влажности (76,6) и содержания олеиновой (75,1) кислоты R² установлен близкий к 80. Такие калибровочные модели являются удовлетворительными и также могут применяться для скрининга семян амаранта. У моделей, созданных для оценки значений масла и стеариновой кислоты, отмечен R² менее 70, что является недостаточным для получения точных величин при работе с такими калибровочными моделями. Следовательно, калибровочные модели для содержания масла и стеариновой кислоты в семенах амаранта нуждаются в доработке. Количество рангов для всех разработанных калибровочных моделей: «Амарант. Белок», «Амарант. Пальмитиновая кислота», «Амарант. Линолевая кислота», «Амарант. α-Линоленовая кислота», «Амарант. Влажность», «Амарант. Олеиновая кислота», «Амарант. Масло» и «Амарант. Стеариновая кислота» было относительно небольшим и равнялось 14, 19, 13, 8, 7, 18, 7 и 19 соответственно; это является удовлетворительным для вышеперечисленных калибровочных моделей.

Оценка качества построенной калибровочной модели дана с помощью среднеквадратичной ошибки в порядке перекрестной проверки RMSEPCV (Root Mean Squa-

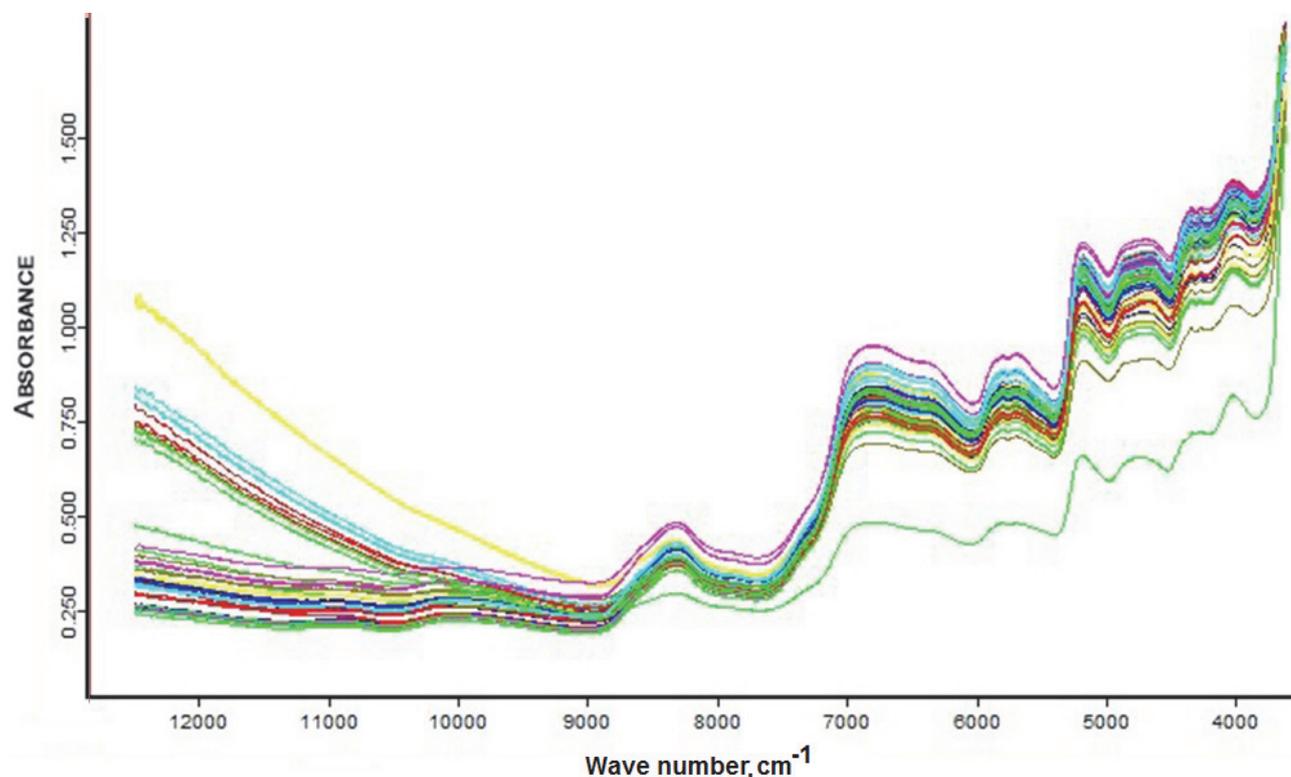


Рис. 1. ИК-спектры опытных образцов семян амаранта

Fig. 1. IR spectra of experimental amaranth seed accessions

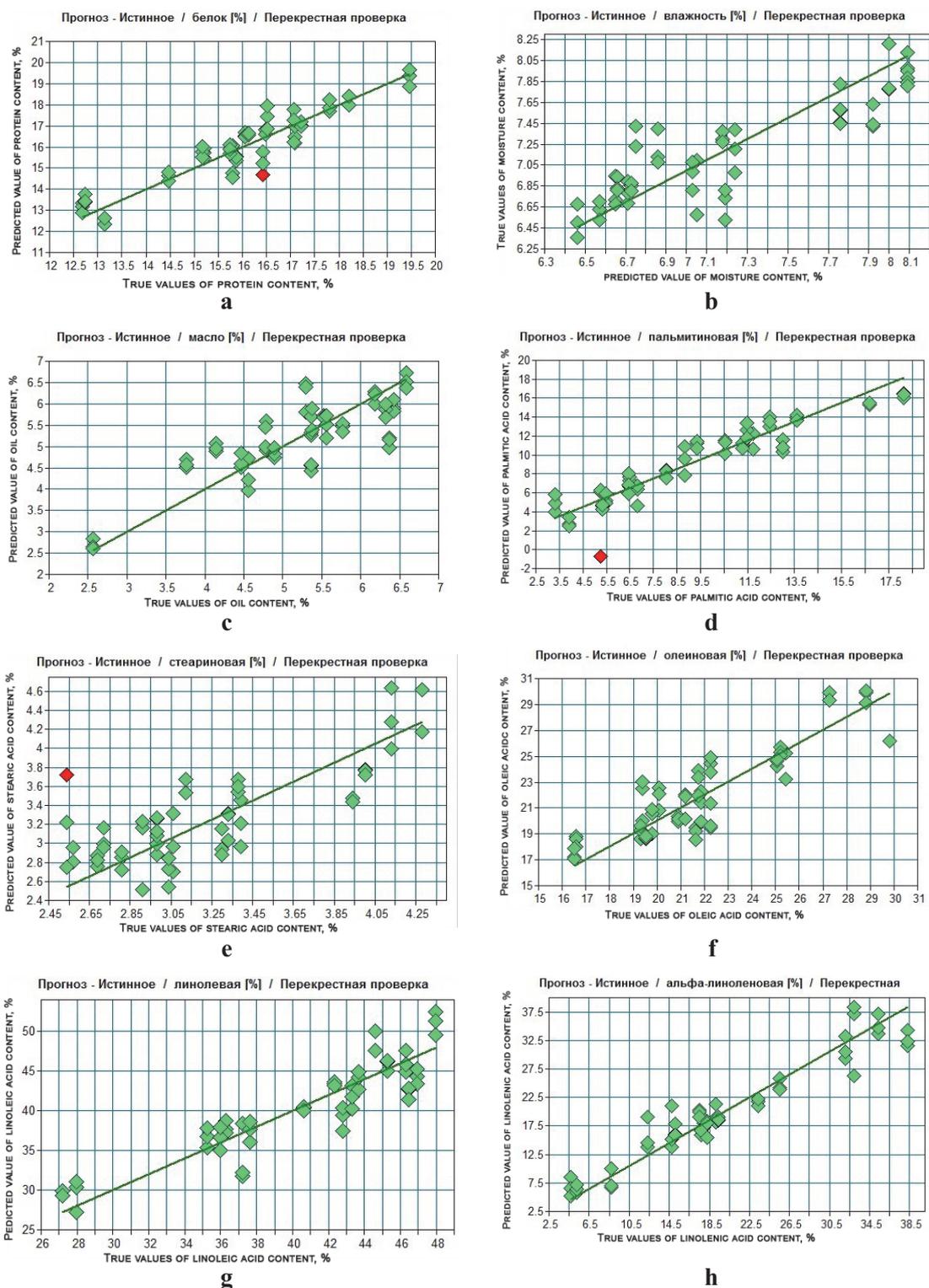


Рис. 2. График предсказанных значений содержания белка (а), влаги (b), масла (с), пальмитиновой (d), стеариновой (е), олеиновой (f), линолевой (g), α-линоленовой кислот (h) (ось Y) по сравнению с истинными значениями (ось X) согласно калибровочной модели: (а) – «Амарант. Белок», (b) – «Амарант. Влажность», (с) – «Амарант. Масло», (d) – «Амарант. Пальмитиновая кислота», (е) – «Амарант. Стеариновая кислота», (f) – «Амарант. Олеиновая кислота» (g) – «Амарант. Линолевая кислота», (h) – «Амарант. α-Линоленовая кислота» (зеленым отмечены учтенные, красным – не учтенные значения для образцов семян амаранта при построении калибровочной кривой)

Fig. 2. Graph of predicted values for the content of protein (a), moisture (b), oil (c), and palmitic (d), stearic (e), oleic (f), linoleic (g) and α-linolenic acids (h) (Y axis) compared with true values (X axis) according to the calibration models: (a) – *Amaranth. Protein*; (b) – *Amaranth. Moisture*; (c) – *Amaranth. Oil*; (d) – *Amaranth. Palmitic Acid*; (e) – *Amaranth. Stearic Acid*; (f) – *Amaranth. Oleic Acid*; (g) – *Amaranth. Linoleic Acid*; (h) – *Amaranth. α-Linolenic Acid* (green are the values taken into account, while red are the values not taken into account for amaranth seed accessions when constructing the calibration curve)

red Error of Prediction – RMSEP), которая отражает степень дисперсии значений, предсказанных сконструированной моделью, вокруг линии регрессии при перекрестной валидации (Cross-Validation – CV) (Sadegaski et al., 2023). Значения RMSEPCV калибровочных моделей для определения содержания белка, влажности, масла, стеариновой кислоты в семенах амаранта были ниже 1%: 0,6; 0,3; 0,6 и 0,3% соответственно; для пальмитиновой, олеиновой, линолевой, α -линоленовой кислот – выше 1%: 1,4; 1,7; 2,5 и 2,7% соответственно. Значения RMSEPCV \leq 5% указывают на приемлемые характеристики сконструированной модели, следовательно вышеперечисленные калибровочные модели могут быть приняты для практического применения (Sadegaski et al., 2023).

Показатель остаточного отклонения прогноза для ранга (Residual Prediction Deviation – RPD) оценивает устойчивость полученной зависимости (Popov et al., 2024). Он составлял 2,82; 2,08; 1,76; 2,78; 1,49; 2,02; 2,30 и 3,53 соответственно для белка, влажности, масла, пальмитиновой, стеариновой, олеиновой, линолевой, α -линоленовой кислот. RPD соответствует отношению допусти-

мостью калибровочной модели, с результатами, полученными аналитическим методом (Reichert, Schuwirth, 2012). Для сконструированных калибровочных кривых с целью определения содержания белка, влажности, масла, пальмитиновой, стеариновой, олеиновой, линолевой и α -линоленовой кислот BIAS соответствовал следующим значениям: –0,0592; 0,0279; –0,0144; 0,0611; –0,0409; –0,215; 0,0209; –0,0813 и –0,00704, то есть результаты, полученные с помощью данных калибровок, не будут иметь значительного отклонения от истинного.

По результатам Л. Садергаски с сотрудниками (Sadegaski et al., 2023), калибровки считаются достоверными, если значения $R^2 > 75\%$. Таким образом, калибровочные модели, построенные для определения содержания белка, влажности, пальмитиновой, олеиновой, линолевой, α -линоленовой кислот, могут использоваться для скрининга семян амаранта, тогда как для масла и стеариновой кислоты нуждаются в доработке.

Достоверность данных для калибровок с $R^2 > 75\%$ была подтверждена с помощью контрольной выборки из 15 образцов семян амаранта 2020 г. репродукции. Сверка данных представлена в таблице 2.

Таблица 2. Проверка ИК-калибровочной модели для определения содержания белка, влажности, пальмитиновой (16:0), олеиновой (18:1), линолевой (18:2), α -линоленовой (18:3) кислот в семенах коллекционных образцов амаранта

Table 2. Verification of the IR calibration models for the content of protein, moisture, and palmitic (16:0), oleic (18:1), linoleic (18:2) and α -linolenic (18:3) acids in amaranth seed accessions

Показатель / Indicator	$X_1 \pm Sd$	$X_2 \pm Sd$	$ X_1 - X_2 $
белок*	16,09 \pm 2,16	16,31 \pm 1,85	0,22
влажность*	7,02 \pm 0,50	5,70 \pm 0,50	1,32
С 16:0*	8,19 \pm 4,41	8,98 \pm 4,02	0,79
С 18:0*	3,15 \pm 0,68	3,19 \pm 0,75	0,04
С 18:1*	22,58 \pm 4,60	23,84 \pm 4,23	1,26
С 18:2	36,94 \pm 7,91	32,53 \pm 3,28	4,42
С 18:3	26,87 \pm 14,31	29,79 \pm 8,60	2,93
масло*	5,38 \pm 1,21	5,77 \pm 1,26	0,39

Примечание: X_1 – средняя значений, полученных с помощью методов биохимического анализа; X_2 – средняя значений, полученных с помощью модельных калибровочных кривых; Sd – стандартное отклонение; $|X_1 - X_2|$ – расхождение значений, полученных с помощью калибровочных моделей и аналитическим путем; * – отмечены показатели, для которых значение $|X_1 - X_2|$ не выходило за рамки технической погрешности прибора MATRIX-I (Bruker, Германия)

Note: X_1 is the mean for values obtained using biochemical analysis techniques; X_2 is the mean for values obtained using model calibration curves; Sd is the standard deviation; $|X_1 - X_2|$ is the divergence between the values obtained with calibration models and biochemical analysis; * – marks the indicators for which the $|X_1 - X_2|$ value did not exceed the technical error of the MATRIX-I device (Bruker, Germany)

мого отклонения фактических измеренных качественных параметров к корню квадрата средней ошибки. В соответствии с работой С. W. Chang с сотрудниками (Chang et al., 2001), значения RPD были интерпретированы следующим образом: при RPD $>$ 2 калибровочные модели можно считать «отличными», при $1,4 <$ RPD $<$ 2 – «стандартными», при RPD $<$ 1,4 – «ненадежными». Поскольку значения RPD представленных нами моделей входят в референс «отличных» и «стандартных», их можно отнести к категории «надежных».

Показатель смещения, или статистической предвзятости (BIAS), выявляет, насколько существенно отклоняется прогнозируемое значение от истинного, то есть характеризует соответствие результатов, полученных с по-

Допустимая погрешность при измерении с использованием БИК-анализатора не должна превышать 2% (Khoreva et al., 2022), поэтому возможность практического использования новых градуировочных моделей должна оцениваться в том числе и по этому параметру. Различие между данными, полученными с помощью ИК-анализатора и аналитическими методами, представлено в таблице 2. Для показателей белка, масла, пальмитиновой и стеариновой кислот оно составило менее 1%, для влажности и олеиновой кислоты – менее 1,5%, что укладывается в рамки допустимой погрешности измерения. Для линолевой и α -линоленовой кислот различие составляет более 2,5%, что превышает допустимую ошибку, поэтому две последних калибровочных модели не

подходят для практического применения. Принимая во внимание значения коэффициентов R^2 , RMSEPCV, RPD, BIAS и результаты проверки всех полученных калибровочных моделей, установлено, что модели для определения в семенах амаранта содержания белка, влажности, пальмитиновой, олеиновой кислот могут быть рекомендованы для практического применения, тогда как модели для масла, стеариновой, линолевой и линоленовой кислот – нет.

Заключение

Калибровочные модели, полученные на ИК-анализаторе MATRIX-I (BRUKER, Германия) с помощью программного обеспечения OPUS LAB для измерения содержания белка, влажности, пальмитиновой, олеиновой кислот, позволяют проводить массовый скрининг данных хозяйственно ценных показателей семян амаранта из коллекции ВИР с точностью до 1,5%, что дает возможность оперативно определить направление использования конкретных генотипов и сохранить ценный селекционный материал. Модели, разработанные для количественного определения масла, стеариновой линолевой и α -линоленовой кислот, нуждаются в доработке.

References / Литература

- Bykov A. The problem of fodder fiber and the basic ways of its decision. *Agrarian Bulletin of the Urals*. 2008;4(46):71-72. [in Russian] (Быков А.И. Проблема кормового белка в Зауралье и основные пути ее решения. *Аграрный вестник Урала*. 2008;4(46):71-72).
- Covas G. Publicación miscelánea N° 13: Perspectivas del cultivo de los amarantos en la República Argentina. Anquil: Estación Experimental Agropecuaria; 1994. [in Spanish]
- Ermakov A.I., Arasimovich V.V., Yarosh N.P., Peruanskiy Yu.V., Lukovnikova G.A., Ikonnikova M.I. Methods of biochemical research in plants (Metody biokhimicheskogo issledovaniya rasteniy). A.I. Ermakov (ed.). 3rd ed. Leningrad: Agropromizdat; 1987. [in Russian] (Ермаков А.И., Арасимович В.В., Ярош Н.П., Перуанский Ю.В., Луковникова Г.А., Иконникова М.И. Методы биохимического исследования растений / под ред. А.И. Ермакова. 3-е изд. Ленинград: Агропромиздат; 1987).
- Gonor K.V., Pogozheva A.V., Derbeneva S.A., Maltsev G.Yu., Trushina E.N., Mustaphina O.K. The influence of a diet with including amaranth oil antioxidant and immune status in patients with ischemic heart disease and hyperlipoproteidemia. *Problems of Nutrition*. 2006;75(6):30-33. [in Russian] (Гонор К.В., Погожева А.В., Дербенева С.А., Мальцев Г.Ю., Трушина Э.Н., Мустафина О.К. Влияние антиатерогенной диеты с применением масла амаранта на антиоксидантный и иммунный статус у больных ишемической болезнью сердца и гиперлиппротеидемией. *Вопросы питания*. 2006;75(6):30-33).
- GOST 9404-88. Interstate standard. Flour and bran. Method of moisture content determination. Moscow: Standartinform; 2007. [in Russian] (ГОСТ 9404-88. Межгосударственный стандарт. Мука и отруби. Метод определения влажности. Москва: Стандартинформ; 2007). URL: <https://docs.cntd.ru/document/1200022334> [дата обращения: 22.05.2024].
- Grobelnik Mlakar S., Turinek M., Jakop M., Bavec M., Bavec F. Nutrition value and use of grain amaranth: potential future application in bread making. *Agricultura*. 2009;6:43-53.
- Huang Z.R., Lin Y.K., Fang J.Y. Biological and pharmacological activities of squalene and related compounds: potential uses in cosmetic dermatology. *Molecules*. 2009;14(1):540-554. DOI: 10.3390/molecules14010540
- Hue C.T., Hang N.T.M., Thanh L.N., Spiridovich E.V., Alekseeva E.I., Hung N.V. Study on biochemical composition of amaranth seeds (by the samples of Vietnam). *Vestnik of Astrakhan State Technical University*. 2014,9(1):62-66. [in Russian] (Хуе К.Т., Ханг Н.Т.М., Тхань Л.Н., Хунг Л.Н., Спиридович Е.В., Алексеева Е.И. Семена амаранта как источник биологически активных веществ. *Вестник Астраханского государственного технического университета*. 2014,9(1):62-66).
- Khoreva V.I., Popov V.S., Kon'kova N.G. Application of the IR spectrometry method in the screening study of various oat species. *Ecological Genetics*. 2022;20(4):349-357. DOI: 10.17816/ecogen108503
- Kjeldahl J. A new method for the determination of nitrogen in organic matter. *Zeitschrift für Analytische Chemie*. 1883;22:366-382. DOI: 10.1007/BF01338151
- Magomedov I.M., Chirkova T.V. Amaranth – past, present and future. *Advances in Current Natural Sciences*. 2015;1(Pt 7):1108-1113. [in Russian] (Магомедов И.М., Чиркова Т.В. Амарант – прошлое, настоящее и будущее. *Успехи современного естествознания*. 2015;1(ч. 7):1108-1113).
- Popov V.S., Shelenga T.V., Blinova E.V., Khoreva V.I. Application of NIR spectroscopy to determine the basic biochemical parameters of black oat grain quality. *Plant Biotechnology and Breeding*. 2024;7(2):31-41. [in Russian] (Попов В.С., Шеленга Т.В., Блинова Е.В., Хорева В.И. Применение БИК-спектроскопии для определения основных биохимических показателей качества у овса песчаного. *Биотехнология и селекция растений*. 2024;7(2):31-41). DOI: 10.30901/2658-6266-2024-2-01
- Reichert P., Schuwirth N. Linking statistical bias description to multiobjective model calibration. *Water Resources Research*. 2012;48(9):W09543. DOI: 10.1029/2011wr011391
- Sadargaski L.R., Manard B.T., Andrews H.B. Analysis of trace elements in uranium by inductively coupled plasma-optical emission spectroscopy, design of experiments, and partial least squares regression. *Journal of Analytical Atomic Spectrometry*. 2023;38(4):800-809. DOI: 10.1039/d3ja00013c
- Shelenga T.V., Piskunova T.M., Malyshev L.L., Taipakova A.A., Solovyeva A.E. Seed oil biochemical composition of cultivated *Cucurbita L.* species from the VIR collections grown in the Astrakhan Province of the Russian Federation. *Agronomy*. 2020;10(10):1491. DOI: 10.3390/agronomy10101491
- Smith T.J. Squalene: potential chemopreventive agent. *Expert Opinion on Investigational Drugs*. 2000;9(8):1841-1848. DOI: 10.1517/13543784.9.8.1841
- Sokolova D., Shelenga T., Zvereva O., Solovieva A. Comparative characteristics of the amino acid composition in amaranth accessions from the VIR Collection. *Turkish Journal of Agriculture and Forestry*. 2021;45(1):68-78. DOI: 10.3906/tar-2007-7
- Sokolova D.V. Method for producing fermented tea from red-coloured *Amaranth* varieties. Russian Federation; patent number 2793627; 2023. [in Russian] (Соколова Д.В. Способ производства ферментированного чая из красноокрашенных сортов амаранта. Российская Федерация; патент № 2793627; 2023).
- Soriano-García M., Arias-Olguín I.I., Montes J.P.C., Ramírez D.G.R., Figueroa J.S.M., Valverde E.F. et al. Nutritional functional value and therapeutic utilization of ama-

ranth. *Journal of Analytical and Pharmaceutical Research*. 2018;7(5):596-600. DOI: 10.15406/japlr.2018.07.00288

Taipova R.M., Kuluev B.R. Amaranth: features of culture, prospects of cultivation in Russia and generation of transgenic Russian varieties. *Biomics*. 2015;7(4):284-299. [in Russian] (Таипова Р.М., Кулуев Б.Р. Амарант: особенности культуры, применение, перспективы возделывания

в России и создания трансгенных отечественных сортов. *Биомика*. 2015;7(4):284-299).

Tang Y., Tsao R. Phytochemicals in quinoa and amaranth grains and their antioxidant, anti-inflammatory, and potential health beneficial effects: a review. *Molecular Nutrition and Food Research*. 2017;61(7):1600767. DOI: 10.1002/mnfr.201600767

Информация об авторах

Татьяна Васильевна Шеленга, кандидат биологических наук, ведущий научный сотрудник, Федеральный исследовательский центр Всероссийский институт генетических ресурсов растений имени Н.И. Вавилова, 190000 Россия, Санкт-Петербург, ул. Б. Морская, 42, 44, tatianashelenga@yandex.ru, <https://orcid.org/0000-0003-3992-5353>

Алла Евгеньевна Соловьева, кандидат биологических наук, старший научный сотрудник, Федеральный исследовательский центр Всероссийский институт генетических ресурсов растений имени Н.И. Вавилова, 190000 Россия, Санкт-Петербург, ул. Б. Морская, 42, 44, alsol64@yandex.ru, <https://orcid.org/0000-0002-6201-4294>

Диана Викторовна Соколова, кандидат биологических наук, старший научный сотрудник, Федеральный исследовательский центр Всероссийский институт генетических ресурсов растений имени Н.И. Вавилова, 190000 Россия, Санкт-Петербург, ул. Б. Морская, 42, 44, dianasokol@bk.ru, <https://orcid.org/0000-0002-9967-7454>

Владимир Вячеславович Васипов, младший научный сотрудник Федерального исследовательского центра Всероссийский институт генетических ресурсов растений имени Н.И. Вавилова, 190000 Россия, Санкт-Петербург, ул. Б. Морская, 42, 44, v.vasipov@vir.nw.ru, <https://orcid.org/0000-0002-3829-7714>

Анастасия Евгеньевна Смоленская, ведущий специалист, Федеральный исследовательский центр Всероссийский институт генетических ресурсов растений имени Н.И. Вавилова, 190000 Россия, Санкт-Петербург, ул. Б. Морская, 42, 44, nastya-smolenska.n@yandex.ru, <https://orcid.org/0000-0001-6062-4139>

Виталий Сергеевич Попов, кандидат технических наук, старший научный сотрудник, Федеральный исследовательский центр Всероссийский институт генетических ресурсов растений имени Н.И. Вавилова, 190000 Россия, Санкт-Петербург, ул. Б. Морская, 42, 44, v.popov@vir.nw.ru, <https://orcid.org/0000-0003-3274-7662>

Information about the authors

Tatiana V. Shelenga, Cand. Sci. (Biology), Leading Researcher, N.I. Vavilov All-Russian Institute of Plant Genetic Resources, 42, 44 Bolshaya Morskaya Street, St. Petersburg 190000, Russia, tatianashelenga@yandex.ru, <https://orcid.org/0000-0003-3992-5353>

Alla E. Solovyeva, Cand. Sci. (Biology), Senior Researcher, N.I. Vavilov All-Russian Institute of Plant Genetic Resources, 42, 44 Bolshaya Morskaya Street, St. Petersburg 190000, Russia, alsol64@yandex.ru, <https://orcid.org/0000-0002-6201-4294>

Diana V. Sokolova, Cand. Sci. (Biology), Senior Researcher, N.I. Vavilov All-Russian Institute of Plant Genetic Resources, 42, 44 Bolshaya Morskaya Street, St. Petersburg 190000, Russia, dianasokol@bk.ru, <https://orcid.org/0000-0002-9967-7454>

Vladimir V. Vasipov, Associate Researcher, N.I. Vavilov All-Russian Institute of Plant Genetic Resources, 42, 44 Bolshaya Morskaya Street, St. Petersburg 190000, Russia, v.vasipov@vir.nw.ru, <https://orcid.org/0000-0002-3829-7714>

Anastasiya E. Smolenskaya, Leading Specialist, N.I. Vavilov All-Russian Institute of Plant Genetic Resources, 42, 44 Bolshaya Morskaya Street, St. Petersburg 190000, Russia, nastya-smolenska.n@yandex.ru, <https://orcid.org/0000-0001-6062-4139>

Vitaliy S. Popov, Cand. Sci. (Engineering), Senior Researcher, N.I. Vavilov All-Russian Institute of Plant Genetic Resources, 42, 44 Bolshaya Morskaya Street, St. Petersburg 190000, Russia, v.popov@vir.nw.ru, <https://orcid.org/0000-0003-3274-7662>

Вклад авторов: все авторы сделали эквивалентный вклад в подготовку публикации.

Contribution of the authors: the authors contributed equally to this article.

Конфликт интересов: авторы заявляют об отсутствии конфликта интересов.

Conflict of interests: the authors declare no conflicts of interests.

Статья поступила в редакцию 29.05.2024; одобрена после рецензирования 24.09.2024; принята к публикации 03.12.2024. The article was submitted on 29.05.2024; approved after reviewing on 24.09.2024; accepted for publication on 03.12.2024.