

## СОВРЕМЕННЫЕ МЕТОДЫ АНАЛИЗА ВЕЩЕСТВ И МАТЕРИАЛОВ

Научная статья

УДК 543.424.2

<https://doi.org/10.20915/2077-1177-2025-21-1-22-37>



# Мера волновых чисел рамановских сдвигов и возможности ее применения для количественного анализа

А. А. Юшина ✉, М. К. Аленичев , А. В. Саакян , А. Д. Левин

ФГБУ «Всероссийский научно-исследовательский институт оптико-физических измерений»,

г. Москва, Россия

✉ [yushina@vniiofi.ru](mailto:yushina@vniiofi.ru)

**Аннотация:** Рамановская спектроскопия в основном используется для качественного анализа, поскольку интенсивность рамановских линий зависит от прибора, на котором измерен спектр. В то же время высокая селективность рамановских спектров стимулирует интерес к поиску способов их использования также и для количественного анализа. В этой связи особую актуальность приобретает разработка способов эффективного применения рамановской спектроскопии для количественного анализа.

Целью настоящего исследования являлось изучение возможностей применения для количественного анализа по рамановским спектрам разработанной в ФГБУ «ВНИИОФИ» меры, предназначенной для калибровки рамановских приборов по шкале волновых чисел рамановских сдвигов.

Разработанная мера (93847-24 – регистрационный номер в Федеральном информационном фонде по обеспечению единства измерений) представляет собой полимерную пленку из полистирола с добавлением серы. Мера позволяет хранить и передавать единицу волновых чисел рамановских сдвигов для длин волн возбуждения рамановского рассеяния 532, 633 и 785 нм.

В статье описано исследование, в ходе которого рассмотрена возможность применения данной меры для количественного анализа веществ за счет измерения интенсивности рамановских линий в приборно-независимых единицах. Установлено, что применение меры позволяет определять объемную долю индивидуальных веществ (на примере этанола) с относительной случайной погрешностью менее 3 % и относительной систематической погрешностью менее 6 %. Для анализа многокомпонентных смесей (спиртов, сахаров) с помощью меры строилась многомерная градуировка с применением метода частичных наименьших квадратов. При этом объемная доля компонентов в неизвестном образце определялась с относительной погрешностью, не превышающей 15 %.

Практическая значимость полученных результатов исследования позволяет производить калибровку рамановских микроскопов и спектрометров по шкале волновых чисел рамановских сдвигов, а также осуществлять количественный анализ индивидуальных веществ в многокомпонентных системах с помощью рамановской спектроскопии.

**Ключевые слова:** рамановская спектроскопия, меры, калибровка по шкале волновых чисел, количественный анализ, хеометрика, многокомпонентные смеси

**Принятые сокращения:** ФИФ ОЕИ – Федеральный информационный фонд по обеспечению единства измерений; КР – комбинационное рассеяние; PLS – Partial Least Squares.

**Для цитирования:** Мера волновых чисел рамановских сдвигов и возможности ее применения для количественного анализа / А. А. Юшина [и др.] // Эталоны. Стандартные образцы. 2025. Т. 21, № 1. С. 22–37. <https://doi.org/10.20915/2077-1177-2025-21-1-22-37>.

Статья поступила в редакцию 13.01.2025; одобрена после рецензирования 10.02.2025; принята к публикации 25.03.2025.

## MODERN METHODS OF ANALYSIS OF SUBSTANCES AND MATERIALS

Research Article

# The Raman Shift Wavenumber Measure and the Possibilities of its Application for Quantitative Analysis

Anna A. Yushina ✉, Mikhail K. Alenichev , Aram V. Saakian , Aleksander D. Levin 

All-Russian Research Institute for Optical and Physical Measurements,  
Moscow, Russia  
✉ yushina@vniiofi.ru

**Abstract:** Raman spectroscopy is mainly used for qualitative analysis, since the intensity of Raman lines is instrument dependent. At the same time, the high selectivity of Raman spectra stimulates interest in finding ways to use them for quantitative analysis as well, and the development of methods to effectively apply Raman spectroscopy for quantitative analysis is quite relevant.

The aim of the study was to investigate the possibilities of using the measure developed at the All-Russian Scientific Research Institute for Optical and Physical Measurements and designed for calibration of Raman instruments on the Raman shift wavenumber scale for quantitative analysis from Raman spectra.

The developed measure (registration number in the Federal Information Fund for Ensuring Uniformity of Measurements 93847-24) is a polymer film made of polystyrene with sulfur addition and allows storing and transmitting a unit of Raman shift wavenumber for Raman scattering excitation wavelengths of 532, 633 and 785 nm.

The possibility of using this measure for quantitative analysis of substances by measuring the intensity of Raman lines in instrument-independent units is considered. It was found that the use of the measure allows to determine the volume fraction of individual substances (ethanol) with relative random error less than 3% and relative systematic error less than 6%. To analyze multicomponent mixtures (alcohols, sugars) with the help of the measure, a multivariate calibration was constructed using the Partial Least Squares method. In this case, the volume fraction of components in an unknown sample was determined with a relative error not exceeding 15%.

The practical significance of the obtained study results allows to calibrate Raman microscopes and spectrometers on the Raman shift wavenumber scale, as well as to carry out quantitative analysis of individual substances and multicomponent systems using Raman spectroscopy.

**Keywords:** Raman spectroscopy, measures, wavenumber calibration, quantitative analysis, chemometrics, multicomponent mixtures

**Abbreviations used:** FIF OEI – Federal Information Fund for Ensuring the Uniformity of Measurements. RS – Raman Scattering; PLS – Partial Least Squares.

---

**For citation:** Yushina A. A., Alenichev M. K., Saakian A. V., Levin A. D. The Raman shift wavenumber measure and the possibilities of its application for quantitative analysis. *Measurement Standards. Reference Materials*. 2025;21(1):22–37. (In Russ.). <https://doi.org/10.20915/2077-1177-2025-21-1-22-37>.

---

The article was submitted 13.01.2025; approved after reviewing 10.02.2025; accepted for publication 25.03.2025.

## Введение

Рамановская спектроскопия (спектроскопия комбинационного рассеяния (КР) света) – метод спектрального анализа, достаточно широко распространенный, активно развивающийся и совершенствующийся. Рамановская спектроскопия используется для идентификации соединений в химической промышленности, медицинской диагностике, фармацевтике, криминалистике, для деятельности по обеспечению пищевой безопасности и других сферах [1–7].

В последнее время получает все большее распространение обработка данных оптической спектроскопии, в том числе рамановской, методами хемометрики и машинного обучения. Различают два типа подходов для решения задач хемометрики – классификация и регрессия. Классификация (качественный анализ) устанавливает принадлежность образца к определенному классу. Регрессия (количественный анализ) подразумевает построение градуировочных зависимостей между аналитическим сигналом и содержанием анализируемого компонента в пробе [8].

Рамановская спектроскопия в сочетании с методами классификации используется при решении множества задач. Например, для идентификации алкогольных напитков – определения их торговой марки, сорта, географического происхождения [9–11]. Другим перспективным направлением является идентификация углерода: классификация частиц черного углерода по источнику происхождения [12] и анализ двухслойного графена [13]. Кроме того, данный подход может использоваться для выявления фальсификации меда [14], обнаружения микропластика [15] и бактериальных патогенов [16], диагностики опухолей [17] и иного применения в биомедицине, медицинской диагностике и других областях [8].

Пример применения рамановской спектроскопии в сочетании с хемометрической обработкой данных для количественного анализа – исследование по определению органических компонентов в сложных органоминеральных смесях [18].

Применение рамановской спектроскопии для количественного анализа затруднено из-за аппаратной зависимости интенсивности линий комбинационного рассеяния. Для устранения

данной проблемы апробирована разработанная ФГБУ «ВНИИОФИ» мера волновых чисел рамановских сдвигов (далее по тексту – мера) [19]. Указанная мера, первоначально предназначенная для хранения и передачи волновых чисел рамановских сдвигов, была использована с целью получения интенсивности линий КР в более удобных единицах, зависящих только от характеристик исследуемого образца и толщины конфокальной области прибора.

Мера, представляющая собой помещенную в специальную оправку полистирольную пленку с добавлением серы (рис. 1), предназначена для хранения и передачи единицы шкалы волновых чисел рамановских сдвигов. Мера была испытана при длинах волн возбуждения рамановского рассеяния 532, 633 и 785 нм. Метрологическими характеристиками меры являются значения волновых чисел рамановских сдвигов в диапазоне от 80 до 3000  $\text{см}^{-1}$ , предел допускаемой абсолютной погрешности передачи волновых чисел в этом диапазоне не превышает 1  $\text{см}^{-1}$ .

Мера успешно прошла испытания в целях утверждения типа средства измерения (93847–24 – регистрационный номер в ФИФ ОЕИ).



Рис. 1. Фотография меры волновых чисел рамановских сдвигов

Fig. 1. Photograph of the Raman shift wavenumber measure

Мера позволяет измерять интенсивность рамановских линий в приборно-независимых единицах (п. н. е). При этом следует иметь в виду, что интенсивность рамановских линий пропорциональна количеству анализируемого вещества (числу молекул или массе), участвующего в рассеянии. Поэтому при измерениях на рамановском спектрометре или микроскопе зависимость интенсивности линий КР

$I$  от массовой концентрации анализируемого компонента  $C$  имеет вид

$$I = I_0 \cdot \sigma \cdot A \cdot S \cdot h \cdot C, \quad (1)$$

где  $I_0$  – интенсивность излучения, возбуждающего КР, Вт/см<sup>2</sup>;  $\sigma$  – массовое сечение КР для используемой спектральной линии, см<sup>2</sup>/г;  $A$  – безразмерный коэффициент, учитывающий особенности прибора, не зависящие от образца (эффективность сбора рассеянного излучения, чувствительность фотоприемника и т. п.);  $S$  и  $h$  соответственно – поперечное сечение и толщина области в образце, от которой собирается рассеяние (в случае используемой в большинстве рамановских спектрометров и микроскопов конфокальной оптической схемы эта область называется конфокальной), см<sup>2</sup> и см соответственно;  $C$  – концентрация анализируемого компонента, г/см<sup>3</sup>.

Параметры  $I_0$ ,  $A$  и  $S$  зависят только от характеристик и настроек прибора; параметры  $\sigma$  и  $C$  – только от свойств образца; параметр  $h$  в случае объемного образца также зависит от прибора (равен толщине его конфокальной области  $h_{\text{конф}}$ ); в случае образца в виде пленки – ее толщине  $h_{\text{пл}}$ .

Численное значение интенсивности линии образца в предлагаемых единицах равно отношению регистрируемой прибором интенсивности линии КР исследуемого вещества к опорной интенсивности линии меры, расположенной вблизи используемой линии образца по шкале волновых чисел. Из (1) следует, что при измерениях спектров КР на разных приборах (либо на одном приборе при различных конфокальных объективах или диафрагмах) интенсивность линии КР исследуемого вещества в этих единицах  $I_{\text{норм}}$  определяется выражением

$$I_{\text{норм}} = \frac{I_{\text{обр.}}}{I_{\text{меры}}} = \left( \frac{h_{\text{конф.}} \cdot C_{\text{обр.}}}{h_{\text{меры}} \cdot C_{\text{меры}}} \right), \quad (2)$$

где  $I_{\text{обр.}}$  – интенсивность линии КР образца;  $I_{\text{мера}}$  – интенсивность линии КР меры волновых чисел рамановских сдвигов.

Таким образом, интенсивность линии КР в предлагаемых единицах пропорциональна количественному содержанию анализируемого компонента в образце. Единственным параметром прибора, от которого зависит эта

интенсивность, является толщина его конфокальной области.

Далее можно построить градуировочную зависимость интенсивности рамановской линии, выраженной в предлагаемых единицах, от количественного содержания определяемого вещества. Такая зависимость может быть использована для определения количества (мольной концентрации, массовой концентрации или объемной доли) веществ в анализируемых образцах по рамановским спектрам, измеренным на других приборах или на том же приборе, но при измененных условиях. При этом потребуются вводить поправку, учитывающую соотношение толщин конфокальных областей при построении градуировочной зависимости и измерениях в анализируемых образцах.

Целью данного исследования является изучение возможности использования меры волновых чисел рамановских сдвигов на основе пленки из полимерного материала для количественного анализа, в том числе с применением хемометрики.

В задачи исследования входит проверка возможности применения меры для определения объемных долей индивидуальных химических веществ в двух-, трех- и четырехкомпонентных смесях по рамановским спектрам, обработанным с помощью метода частичных наименьших квадратов (Partial Least Squares, PLS).

## Материалы и методы

### Реактивы

Для проведения количественного анализа использовались следующие химические реактивы производства Sigma-Aldrich (Германия): этанол (C<sub>2</sub>H<sub>5</sub>OH), CAS № 64-17-5, кат. № 493511<sup>1</sup>, степень чистоты не менее 95,0 %; метанол (CH<sub>3</sub>OH), CAS № 67-56-1, кат. № 34885<sup>2</sup>, степень чистоты не менее 99,9 %; сахароза (C<sub>12</sub>H<sub>22</sub>O<sub>11</sub>), CAS № 57-50-1, кат. № S0389<sup>3</sup>, сте-

<sup>1</sup> Ethyl alcohol, Pure 190 proof, ACS spectrophotometric grade, suitable for UV/Vis spectroscopy 64-17-5 // Sigma-Aldrich [Сайт]. URL: <https://www.sigmaaldrich.com/RU/en/product/sial/493511> (дата обращения: 27.12.2024).

<sup>2</sup> Methanol for HPLC, gradient grade, =99.967-56-1 // Sigma-Aldrich [Сайт]. URL: <https://www.sigmaaldrich.com/RU/en/product/sigald/34885> (дата обращения: 27.12.2024).

<sup>3</sup> Sucrose 57-50-01, Molecular Biology Grade, S0389, Sigma-Aldrich // Sigma-Aldrich [Сайт]. URL: <https://www.>

пень чистоты не менее 99,5 %; глюкоза кристаллическая ( $C_6H_{12}O_6$ ), CAS № 50-99-7, кат. № G8270<sup>4</sup>, степень чистоты не менее 99,5 %; фруктоза ( $C_6H_{12}O_6$ ), CAS № 57-48-7, кат. № F0127<sup>5</sup>, степень чистоты не менее 99 %.

### Оборудование

Измерения рамановских спектров проводились на раман-люминесцентном портативном спектрометре «ИнСпектр» R532 фирмы «Спектр-М» (Черноголовка, Россия): метрологические характеристики спектрометра (табл. 1).

Измерения массы используемых реагентов проводили на весах лабораторных аналитических Pioneer модификации PA214C I класса

[sigmaaldrich.com/RU/en/product/sigma/s0389](https://sigmaaldrich.com/RU/en/product/sigma/s0389) (дата обращения: 27.12.2024).

<sup>4</sup> D-(+)-Glucose = 99.5 GC50-99-7 // Sigma-Aldrich [Сайт]. URL: <https://www.sigmaaldrich.com/RU/en/product/sigma/g8270> (дата обращения: 27.12.2024).

<sup>5</sup> D-(-)-Fructose = 99.57-48-7 // Sigma-Aldrich [Сайт]. URL: <https://www.sigmaaldrich.com/RU/en/product/sigma/f0127> (дата обращения: 27.12.2024).

точности, с дискретностью 0,1 мг (38796-08 – регистрационный номер в ФИФ ОЕИ).

Для приготовления растворов использовали дозатор пипеточный одноканальный с переменным объемом от 100 до 1 000 мкл ДПОП-1-100-1000 (37432-013 – регистрационный номер в ФИФ ОЕИ). Пределы допускаемой систематической составляющей основной относительной погрешности  $\pm$  (от 1,5 до 1,0)%. Предел допускаемого среднеквадратичного отклонения случайной составляющей относительной погрешности от 2,0 до 1,0 %.

### Методы и процедура исследований

*Количественный анализ этанола в водных растворах (двухкомпонентная смесь).* Для количественного анализа этанола проводили измерение рамановских спектров образцов растворов этанола со следующими объемными долями вещества: 40, 30, 20 и 10 %. Параметры измерения на раман-люминесцентном портативном спектрометре (табл. 2).

Таблица 1. Метрологические характеристики раман-люминесцентного портативного спектрометра «ИнСпектр» R532\*

Table 1. Metrological characteristics of the Raman-luminescent portable spectrometer “InSpectr” R532

| Наименование характеристики                                                                                           | Значение характеристики |
|-----------------------------------------------------------------------------------------------------------------------|-------------------------|
| Спектральный диапазон измерений волновых чисел, $cm^{-1}$                                                             | от 380 до 3 000         |
| Спектральное разрешение, $cm^{-1}$ , не более                                                                         | 25                      |
| Предел допускаемого значения относительного среднего квадратического отклонения измерений волновых чисел, %, не более | 1                       |
| Предел допускаемой относительной погрешности измерений волновых чисел, %, не более                                    | $\pm 1$                 |

\* Приложение к свидетельству № 67741 об утверждении типа средств измерений. Описание типа средства измерений. Экспресс-анализаторы рамановские портативные «ИнСпектр».

Таблица 2. Условия измерения рамановских спектров образцов этанола

Table 2. Conditions for measuring Raman spectra of ethanol samples

| Наименование параметра                         | Значение параметра |
|------------------------------------------------|--------------------|
| Время накопления, мс                           | 2 000              |
| Количество кадров в одном измерении            | 100                |
| Количество последовательных измерений спектров | 10                 |



При указанных условиях измеряли рамановские спектры этанола с разной объемной долей и вычисляли отношение интенсивностей пика этанола к интенсивности близкорасположенного пика меры ( $1\,002\text{ см}^{-1}$ )  $I_{\text{норм}}$  по (2).

Затем по градуировочному графику в координатах «объемная доля этанола – соотношение интенсивностей» убеждались в линейности зависимости и далее проводили определение концентрации неизвестного образца по одному образцу с известной объемной долей по формуле

$$x_x = \frac{x_1 \cdot I_{\text{норм},x}}{I_{\text{норм},l}}, \quad (3)$$

где  $x_1$  – известная объемная доля этанола, %;  $I_{\text{норм},l}$  – отношение интенсивностей пиков этанола и меры для образца с известной концентрацией;  $I_{\text{норм},x}$  – отношение интенсивностей пиков этанола и меры для образца с неизвестной объемной долей.

Поскольку спектры КР для построения градуировочных графиков и определения объемной доли компонентов в неизвестных образцах измерялись на одном и том же приборе, не было необходимости ввода упомянутых выше поправок, связанных с толщиной конфокальной области.

Среднее значение определяемой объемной доли этанола рассчитывали по формуле

$$x_{x,cp} = \frac{\sum_{i=1}^N x_{x,i}}{N}, \quad (4)$$

где  $x_{x,i}$  – рассчитанная объемная доля этанола в  $i$ -м измерении, %;  $N$  – количество измерений.

Относительное среднеквадратическое отклонение случайной составляющей погрешности определения объемной доли этанола оценивали по формуле

$$S = \frac{1}{x_{x,cp}} \sqrt{\frac{\sum_{i=1}^N (x_{x,i} - x_{cp})^2}{N-1}} \cdot 100\%. \quad (5)$$

Относительную систематическую составляющую погрешности определения объемной доли этанола оценивали по формуле

$$\Delta = \frac{|x_{cp} - x_{ном}|}{x_{ном}} \cdot 100\%, \quad (6)$$

где  $x_{ном}$  – объемная доля этанола в образце, определенная по процедуре приготовления.

Относительную погрешность приготовления растворов с использованием пипеточного дозатора рассчитывали по формуле

$$\Theta_\phi = \frac{\sqrt{\sum_{j=1}^M \Theta_j^2}}{V_\phi} \cdot 100\%, \quad (7)$$

где  $\Theta_j$  – погрешность  $j$ -го дозирования жидкости пипеточным дозатором, равная половине цены деления дозатора;  $M$  – число дозирования, необходимых для приготовления раствора;  $V$  – объем дозирования, мкл.

*Количественный анализ многокомпонентных смесей.* Для количественного анализа смеси спиртов была проведена серия измерений рамановских спектров образцов водных смесей этанола и метанола с разными объемными долями. Ниже представлены параметры измерения (табл. 3), соотношение компонентов в образцах (табл. 4).

Для количественного анализа смеси сахаров была проведена серия измерений рамановских спектров образцов водных смесей глюкозы, фруктозы и сахарозы с разными объемными долями. Смесей готовились из модельных растворов глюкозы, фруктозы и сахарозы с массовой концентрацией вещества 1 г/л в каждом. Ниже приведены параметры измерения (табл. 5), соотношение компонентов в образцах (табл. 6).

Количественный анализ веществ в многокомпонентных смесях предполагал исследование наиболее информативных для проведения анализа фрагментов рамановских спектров, интенсивность которых выражена в упоминавшихся выше единицах, и построение многомерной градуировки с применением метода PLS.

Построение многомерной градуировки заключалось в установлении зависимости между информативными фрагментами рамановских спектров образцов обучающего набора, представленными в виде матрицы  $X$  (матрицы независимых переменных, или предикторов),

Таблица 3. Условия измерения рамановских спектров образцов водных смесей этанола и метанола

Table 3. Conditions for measuring Raman spectra of samples of aqueous mixtures of ethanol and methanol

| Наименование параметра                         | Значение параметра |
|------------------------------------------------|--------------------|
| Время накопления, мс                           | 1 000              |
| Количество кадров в одном измерении            | 20                 |
| Количество последовательных измерений спектров | 5                  |

Таблица 4. Соотношение компонентов в образцах водных смесей этанола и метанола

Table 4. Ratio of components in samples of aqueous mixtures of ethanol and methanol

| № образца | Объемная доля этанола, % | Объемная доля метанола, % |
|-----------|--------------------------|---------------------------|
| 1         | 80                       | 10                        |
| 2         | 10                       | 80                        |
| 3         | 45                       | 45                        |
| 4         | 10                       | 10                        |
| 5         | 60                       | 30                        |
| 6         | 30                       | 60                        |
| 7         | 40                       | 20                        |

Таблица 5. Условия измерения рамановских спектров образцов водных смесей глюкозы, фруктозы и сахарозы

Table 5. Conditions for measuring Raman spectra of samples of aqueous mixtures of glucose, fructose and sucrose

| Наименование параметра                         | Значение параметра |
|------------------------------------------------|--------------------|
| Время накопления, мс                           | 1 500              |
| Количество кадров в одном измерении            | 20                 |
| Количество последовательных измерений спектров | 5                  |

и значениями объемной доли анализируемых компонентов в этих образцах, представленных в виде матрицы  $Y$  (матрицы зависимых переменных, или откликов). Число строк в каждой из этих матриц равно числу образцов обучающего набора  $n$ , число столбцов в матрице  $X$  соответствует числу волновых чисел  $f$  в каждом фрагменте спектра, а в матрице  $Y$  – числу анализируемых компонент  $m$ .

Под градуировочной моделью понимается регрессионная зависимость в матричном виде,

связывающая предикторы и отклики, то есть позволяющая предсказать концентрации компонентов анализируемого образца по информативному фрагменту его спектра.

В процессе построения такой модели методом PLS происходит понижение размерности задачи путем перехода к новым переменным, обеспечивающим оптимальную корреляцию между предикторами и откликами. Математически такой переход осуществляется путем декомпозиции матриц  $X$  и  $Y$ . При этом

Таблица 6. Соотношение компонентов в образцах водных смесей глюкозы, фруктозы и сахарозы

Table 6. Ratio of components in samples of aqueous mixtures of glucose, fructose and sucrose

| № образца | Объемная доля фруктозы, % | Объемная доля глюкозы, % | Объемная доля сахарозы, % |
|-----------|---------------------------|--------------------------|---------------------------|
| 1         | 50                        | 25                       | 25                        |
| 2         | 25                        | 50                       | 25                        |
| 3         | 25                        | 25                       | 50                        |
| 4         | 33,3                      | 33,3                     | 33,3                      |
| 5         | 75                        | 15                       | 10                        |
| 6         | 15                        | 10                       | 75                        |
| 7         | 20                        | 20                       | 60                        |
| 8         | 60                        | 30                       | 10                        |
| 9         | 15                        | 70                       | 15                        |
| 10        | 60                        | 10                       | 30                        |
| 11        | 30                        | 0                        | 70                        |
| 12        | 29                        | 71                       | 0                         |
| 13        | 80                        | 0                        | 20                        |
| 14        | 20                        | 80                       | 0                         |

генерируются новые предикторы, называемые главными компонентами, каждый из которых является линейной комбинацией исходных предикторов. PLS формирует главные компоненты так, чтобы обеспечить их наилучшую корреляцию с откликами, что способствует разработке простой модели с высокой предсказательной способностью.

Метод PLS, подробно описанный в [20], является одним из наиболее эффективных и используемых в хемометрике методов построения многомерных градуировок.

При выполнении исследований использовано два набора спектров: один – для построения градуировки, второй – для проверки ее работоспособности. Все спектры нормировались на спектр меры волновых чисел рамановских сдвигов для представления данных в новых единицах, независимых от всех параметров прибора, кроме толщины конфокальной области.

По градуировочному набору спектров

исследуемых смесей строилась многомерная градуировка, и затем производилась процедура перекрестной валидации (кросс-валидации). Дальнейшая проверка градуировки проводилась с помощью набора спектров, которые не использовались в обучающем наборе.

Все спектры при построении и проверке многомерной градуировки прошли предварительную обработку фильтром Савицкого-Голея (размер окна – 15, степень полинома – 2) и процедуру нормировки. Для количественного анализа смеси спиртов был выбран наиболее информативный диапазон спектра от 117 до 3 000 см<sup>-1</sup>, для смеси сахаров – от 117 до 1 700 см<sup>-1</sup>. Для обеих серий анализа определено 7 главных компонент.

Описанные выше операции производились с помощью программы обработки спектров веществ и материалов методами хемометрики и машинного обучения «ИнтелСпектр», разработанной в ФГБУ «ВНИИОФИ» (рег.



№ 2024680485) [21]. Для программной реализации PLSRegression была использована библиотека sklearn Python.

Среднее значение определяемой объемной доли индивидуальных компонентов, относительное среднеквадратическое отклонение случайной составляющей погрешности определения объемной доли, относительную систематическую составляющую погрешности определения объемной доли и относительную погрешность приготовления растворов с использованием пипеточного дозатора вычисляли по формулам (4–7).

Относительную погрешность взвешивания определяли по формуле

$$\Theta_e = \frac{\theta_e}{m_n} \cdot 100\%, \quad (8)$$

где  $\theta_e$  – погрешность взвешивания, равная пределу допускаемой погрешности весов в эксплуатации;  $m_n$  – масса навески, г.

Относительную погрешность приготовления растворов рассчитывали по формуле

$$\Theta = \sqrt{\Theta_o^2 + \Theta_e^2}. \quad (9)$$

Относительную погрешность определения объемной доли компонентов в неизвестном образце при коэффициенте охвата  $k=2$  рассчитывали по формуле

$$S_o = \sqrt{S^2 \cdot t + \Delta^2 + \Theta^2}, \quad (10)$$

где  $t$  – коэффициент Стьюдента, соответствующий доверительной вероятности  $P=0,95$  и числу степеней свободы  $n-1$ , где  $n$  – число измерений.

## Результаты и обсуждение

На первом этапе исследования была рассмотрена возможность применения меры волновых чисел рамановских сдвигов для количественного анализа путем сравнения интенсивности пика меры с интенсивностью пика определяемого соединения.

При этом проводилась серия измерений рамановских спектров растворов с разной объемной долей этанола и устанавливалось соотношение между близко расположенными характеристическими пиками этанола и меры (рис. 2). Линейность зависимости между объемной долей этанола и соотношением интенсивностей

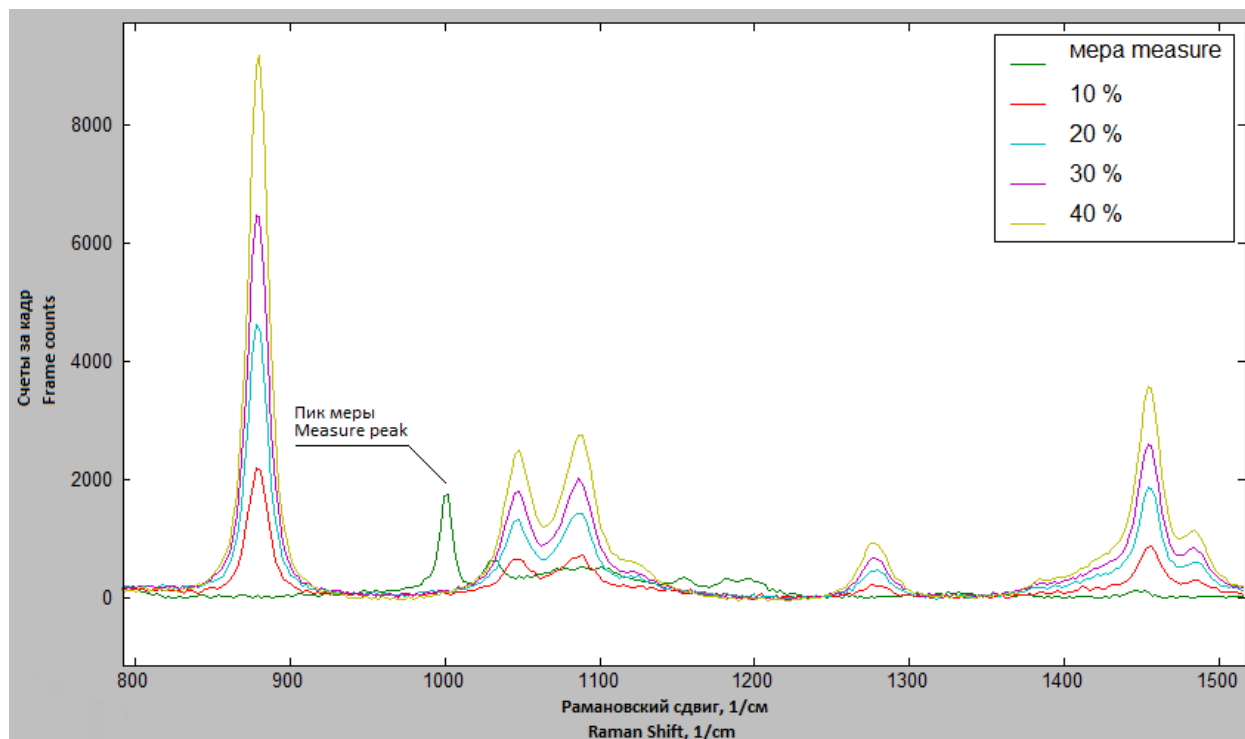


Рис. 2. Фрагменты рамановских спектров меры и растворов с разной объемной долей этанола  
Fig. 2. Fragments of Raman spectra of measure and ethanol solutions with different volume fraction of ethanol

образца и меры подтверждается градуировочным графиком (рис. 3) (коэффициент детерминации  $R^2 = 1,00$ ).

Линейная зависимость позволила определять объемную долю этанола в неизвестном образце путем сравнения отношения интенсивности его характеристического пика и пика меры с данным отношением для любого образца этанола с известной объемной долей: результаты (табл. 7).

На втором этапе исследования определялась объемная доля этанола и метанола в трехкомпонентной смеси «этанол – метанол – вода» и объемная доля фруктозы, глюкозы и сахарозы в водной смеси сахаров. При этом измерялся ряд рамановских спектров многокомпонентных смесей с разной объемной долей индивидуальных компонентов (рис. 4), и по этим спектрам, отнормированным на меру волновых чисел рамановских сдвигов, строилась

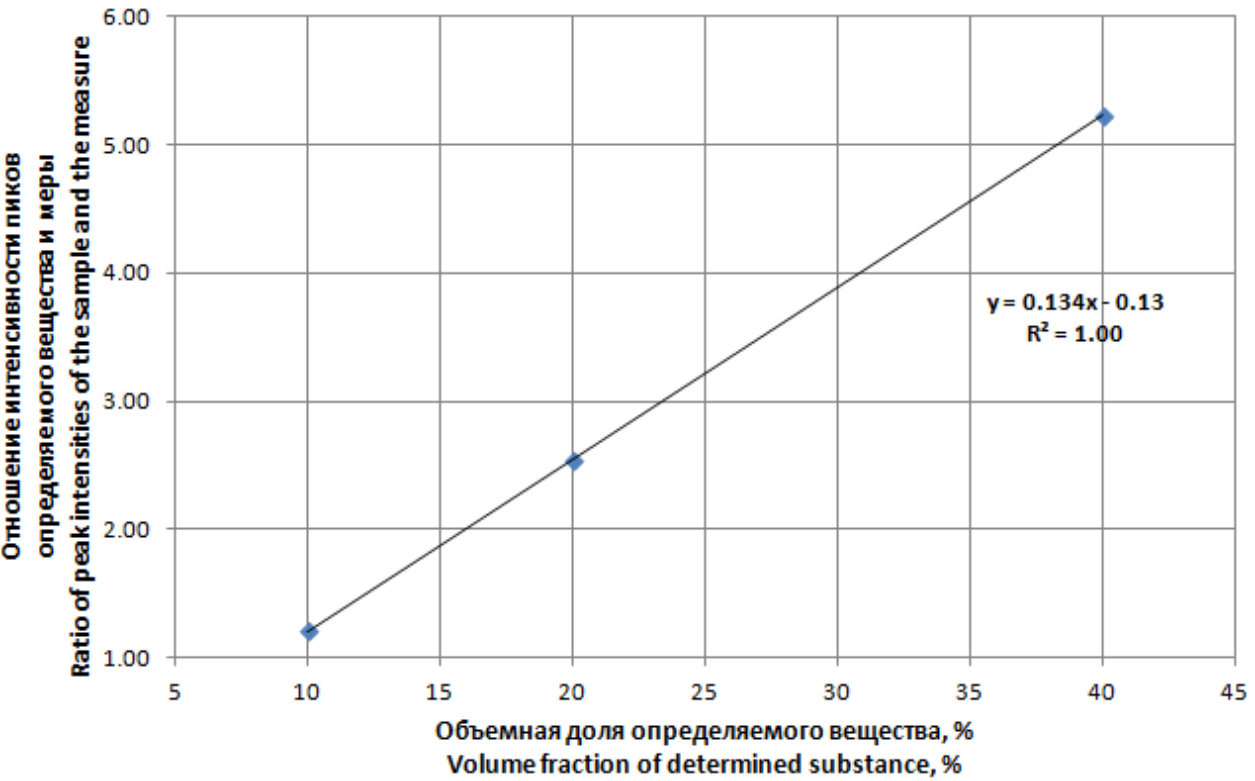


Рис. 3. Градуировочный график для определения объемной доли этанола в неизвестном образце  
Fig. 3. Calibration graph for determining the ethanol volume fraction in an unknown sample

Таблица 7. Результаты определения объемной доли этанола с помощью меры волновых чисел рамановских сдвигов  
Table 7. Results of determining the ethanol volume fraction using Raman shift wavenumber measure

| Результаты измерения                                | %    |
|-----------------------------------------------------|------|
| Номинальная объемная доля этанола                   | 30   |
| Расчетная объемная доля этанола                     | 28,3 |
| Относительная случайная погрешность измерения       | 2,2  |
| Относительная систематическая погрешность измерения | 5,7  |

многомерная градуировка методом PLS, а после построения градуировки производилась кросс-валидация (рис. 5).

Результаты проверки многомерной градуировки с помощью отнормированных на меру

рамановских спектров многокомпонентных смесей, не использовавшихся при ее построении (табл. 8 и 9).

С помощью градуировки, построенной по рамановским спектрам смеси спиртов,

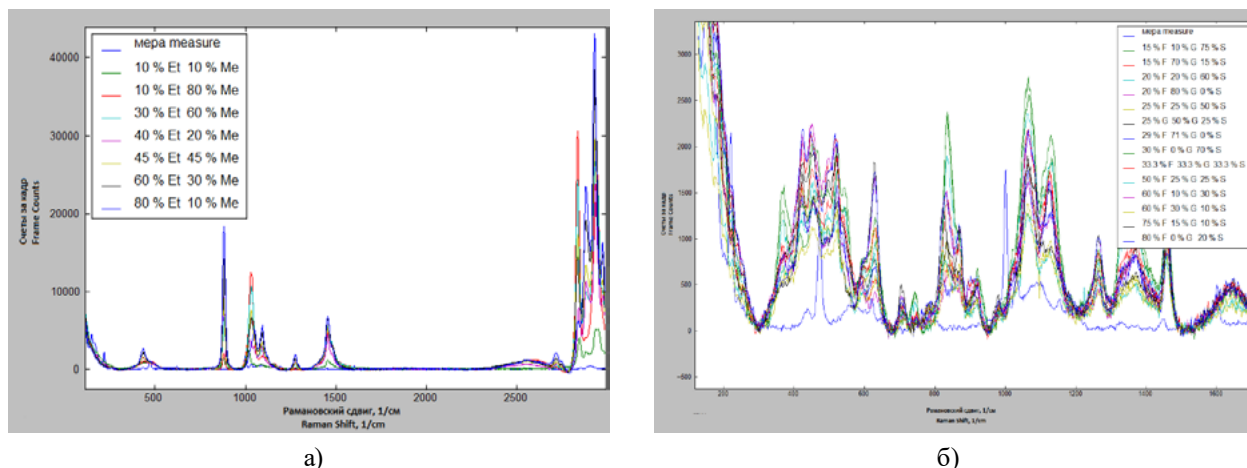


Рис. 4. Фрагменты рамановских спектров меры и образцов, использованные для количественного анализа: а) смеси спиртов; б) смеси сахаров

Fig. 4. Fragments of Raman spectra of the measure and samples used for quantitative analysis of: а) the mixtures of alcohols; б) the mixture of sugars

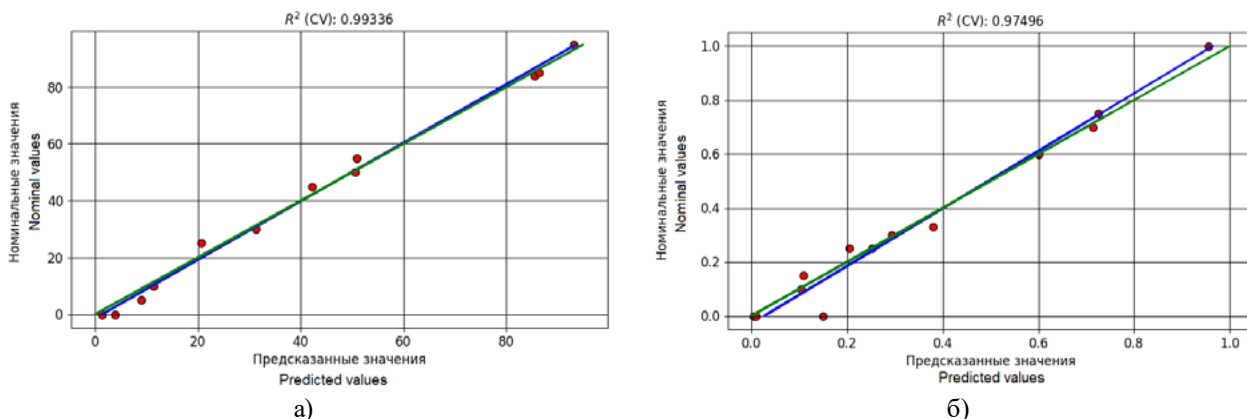


Рис. 5. Результаты кросс-валидации: а) для смеси спиртов; б) для смеси сахаров

Fig. 5. Cross-validation results for: а) the mixture of alcohols; б) the mixture of sugars

Таблица 8. Результаты определения объемной доли компонентов в смеси спиртов с помощью меры волновых чисел рамановских сдвигов и метода PLS

Table 8. Results of determining the volume fraction of components in a mixture of alcohols using the Raman shift wavenumber measure and the PLS method

| Результаты измерения                   | Этанол | Метанол | Вода |
|----------------------------------------|--------|---------|------|
| Номинальная объемная доля, %           | 50     | 30      | 20   |
| Предсказанная объемная доля, %         | 48,6   | 31,1    | 23,7 |
| Относительная погрешность измерения, % | 5,7    | 4,2     | 8,1  |

Таблица 9. Результаты определения объемной доли компонентов в смеси сахаров с помощью меры волновых чисел рамановских сдвигов и метода PLS

Table 9. Results of determining the volume fraction of components in a mixture of sugars using the Raman shift wavenumber measure and the PLS method

| Результаты измерения                   | Фруктоза | Глюкоза | Сахароза |
|----------------------------------------|----------|---------|----------|
| Номинальная объемная доля, %           | 10       | 75      | 15       |
| Предсказанная объемная доля, %         | 10,8     | 71,9    | 17       |
| Относительная погрешность измерения, % | 9,1      | 7,1     | 14,3     |

объемная доля отдельных компонентов определяется с относительной погрешностью, не превышающей 8,1 %. Многомерная градуировка, построенная по спектрам смеси сахаров, позволяет определять объемную долю компонентов в неизвестном образце с относительной погрешностью, не превышающей 14,3 %.

Таким образом, мера волновых чисел рамановских сдвигов действительно позволяет не только получать рамановские спектры, независимые от всех параметров прибора, кроме толщины конфокальной области, но и эффективно проводить количественный анализ. Использование при этом методов хемометрики позволяет определять индивидуальные компоненты в сложных многокомпонентных смесях, что открывает перспективное направление для дальнейших исследований.

При использовании для построения градуировки и измерения спектров КР анализируемых образцов разных приборов, необходимо учитывать отношение толщин конфокальных областей этих приборов. В настоящее время в ФГБУ «ВНИИОФИ» разрабатывается способ экспериментального определения этого отношения.

### Заключение

В настоящей статье мы рассмотрели перспективы использования меры волновых чисел рамановских сдвигов на основе полистирольной пленки с добавлением серы, разработанной ФГБУ «ВНИИОФИ» (93847–24 – регистрационный номер в ФИФ ОЕИ), для количественного анализа индивидуальных соединений и многокомпонентных систем. В основе такого подхода лежит возможность получения с помощью меры рамановских спектров в единицах,

независимых от всех параметров прибора, кроме толщины конфокальной области

В ходе экспериментальных исследований установлена возможность применения меры для определения объемной доли химических веществ, при этом для обеспечения приборной независимости спектров осуществляется прямое сравнение интенсивности линий КР в спектре измеряемого образца с интенсивностью линий КР в спектре меры. Относительная случайная погрешность измерения объемной доли образца этанола при этом составляет 2,2 %, а относительная систематическая погрешность – 5,7 %.

Также определена возможность использования меры для количественного анализа многокомпонентных смесей с применением хемометрики. В этом случае для определения объемной доли используются наиболее информативные фрагменты нормированных рамановских спектров, на основе которых строится многомерная градуировка с применением метода частичных наименьших квадратов. Данный подход позволяет определять объемную долю индивидуальных компонентов в смеси спиртов с относительной погрешностью, не превышающей 8,1 %. Для смеси сахаров относительная погрешность измерения объемной доли компонентов в неизвестном образце не превышает 14,3 %.

Таким образом, установлена возможность применения меры волновых чисел рамановских сдвигов для эффективного количественного анализа. Разработанный метод в дальнейшем будет усовершенствован за счет введения поправок на толщину конфокальной области, что позволит использовать градуировки, построенные с помощью одного прибора, для

определения концентраций по спектрам КР, измеренным на других рамановских спектрометрах или микроскопах.

**Благодарности:** Авторы выражают благодарность Федеральному агентству по техническому регулированию и метрологии (Росстандарт) за финансовую поддержку в рамках опытно-конструкторской работы по теме «Разработка и выпуск новых комплексов стандартных образцов и мер для обеспечения единства измерений по приоритетным направлениям в целях технологического суверенитета Российской Федерации» (шифр ОКР «Суверенитет»), сотруднику ФГБУ «ВНИИОФИ» Сергею Александровичу Тарелкину за полезные обсуждения, а также сотрудникам Института органической химии им. Н. Д. Зелинского Российской академии наук Николаю Эдуардовичу Нифантьеву и Вадиму Борисовичу Крылову за предоставление реактивов для проведения экспериментов.

**Acknowledgments:** The authors express gratitude to the Federal Agency on Technical Regulating and Metrology for financial support within the framework of the implementation of experimental design work on the subject «Development and release of new sets of standard reference materials and measures to ensure the uniformity of measurements in priority areas for the purposes of technological sovereignty of the Russian Federation» (code of the Development Work «SUVERENITET»), to employee of the All-Russian Scientific Research Institute for Optical and Physical Measurements Sergey A. Tarelkin for useful discussions, as well as to employees of the Institute of Organic Chemistry named after N. D. Zelinsky Russian Academy of Sciences Nikolai E. Nifantiev and Vadim B. Krylov for providing reagents for conducting experiments.

**Вклад авторов:** Все авторы внесли вклад в концепцию и дизайн исследования. Юшина А. А. – проведение исследовательских работ, написание текста рукописи, формулировка выводов, создание визуальных

материалов и др.; Аленичев М. К. – разработка замысла исследования, проведение исследовательских работ и др.; Саакян А. В. – программирование, осуществление формального анализа, работа с источниками литературы и др.; Левин А. Д. – концепция работы, разработка методологии, курирование данных, руководство.

**Contribution of the authors:** All authors contributed to the study's conception and design. Yushina A. A. – conducting research, writing the text of the manuscript, formulating conclusions, creating visual materials, etc.; Alenichev M. K. – developing the research idea; conducting research, etc.; Saakian A. V. – programming; carrying out formal analysis; working with literature sources, etc.; Levin A. D. – work concept; methodology development; data curation; leadership.

**Конфликт интересов:** Авторы заявляют об отсутствии конфликта интересов.

**Conflict of interest:** The authors declare no conflict of interest requiring disclosure in this article.

**Финансирование:** Работа выполнена в рамках Договора № 108-ЕП/223/2023 от 19.06.2023, являющегося составной частью ГК № 120–38/2023 от 17.05.2023 на выполнение опытно-конструкторской работы по теме «Разработка и выпуск новых комплексов стандартных образцов и мер для обеспечения единства измерений по приоритетным направлениям в целях технологического суверенитета Российской Федерации» (шифр ОКР «Суверенитет»).

**Funding:** The work was carried out within the framework of Agreement No. 108-EP/223/2023 dated 19.06.2023, which is an integral part of the Government Contract No. 120–38/2023 dated 17.05.2023 for the implementation of experimental design work on the subject «Development and release of new sets of standard reference materials and measures to ensure the uniformity of measurements in priority areas for the purposes of technological sovereignty of the Russian Federation» (code of the Development Work «SUVERENITET»).



**СПИСОК ИСТОЧНИКОВ**

1. Benattia F. K., Arrar Z., Dergal F. Methods and applications of Raman spectroscopy: a powerful technique in modern research, diagnosis, and food quality control // *Current Nutrition & Food Science*. 2024. Vol. 20, № 1. P. 41–61. <https://doi.org/10.2174/1573401319666230503150005>
2. Xiao L., Feng S., Lu X. Raman spectroscopy: Principles and recent applications in food safety // *Advances in Food and Nutrition Research*. 2023. Vol. 106. P. 1–29. <https://doi.org/10.1016/bs.afnr.2023.03.007>
3. Khristoforova Y., Bratchenko L., Bratchenko I. Raman-based techniques in medical applications for diagnostic tasks: a review // *International Journal of Molecular Sciences*. 2023. Vol. 24, № 21. P. 15605. <https://doi.org/10.3390/ijms242115605>
4. Raman spectroscopy for viral diagnostics / J. Lukose [et al.] // *Biophysical Reviews*. 2023. Vol. 15, № 2. P. 199–221. <https://doi.org/10.1007/s12551-023-01059-4>
5. Recent advancements and applications of Raman spectroscopy in pharmaceutical analysis / K. C. Shah [et al.] // *Journal of Molecular Structure*. 2023. Vol. 1278. P. 134914. <https://doi.org/10.1016/j.molstruc.2023.134914>
6. Ott C. E., Arroyo L. E. Transitioning surface-enhanced Raman spectroscopy (SERS) into the forensic drug chemistry and toxicology laboratory: Current and future perspectives // *Wiley Interdisciplinary Reviews: Forensic Science*. 2023. Vol. 5, № 4. P. e1483. <https://doi.org/10.1002/wfs2.1483>
7. Chauhan S., Sharma S. Applications of Raman spectroscopy in the analysis of biological evidence // *Forensic Science, Medicine and Pathology*. 2024. Vol. 20, № 3. P. 1066–1090. <https://doi.org/10.1007/s12024-023-00660-z>
8. Recent progresses in machine learning assisted Raman spectroscopy / Y. Qi [et al.] // *Advanced Optical Materials*. 2023. Vol. 11, № 14. P. 2203104. <https://doi.org/10.1002/adom.202203104>
9. Berghian-Grosan C., Magdas D. A. Application of Raman spectroscopy and Machine Learning algorithms for fruit distillates discrimination // *Scientific reports*. 2020. Vol. 10, № 1. P. 21152. <https://doi.org/10.1038/s41598-020-78159-8>
10. Using Raman spectroscopy as a fast tool to classify and analyze Bulgarian wines-A feasibility study / V. Deneva [et al.] // *Molecules*. 2019. Vol. 25, № 1. P. 170. <https://doi.org/10.3390/molecules25010170>
11. Learning algorithms for identification of whisky using portable Raman spectroscopy / K. J. Lee [et al.] // *Current Research in Food Science*. 2024. Vol. 8. P. 100729. <https://doi.org/10.1016/j.crfs.2024.100729>
12. Black Carbon characterization with Raman spectroscopy and machine learning techniques: first results for urban and rural area / L. Drudi [et al.] // *Global NEST International Conference on Environmental Science & Technology: Collection of works 18th International Conference on Environmental Science and Technology CEST 2023, Athens, Greece, 30 August to 2 September 2023*. <https://doi.org/10.30955/gnc2023.00088>
13. Machine-learning models for Raman spectra analysis of twisted bilayer graphene / N. Sheremetyeva [et al.] // *Carbon*. 2020. Vol. 169. P. 455–464. <https://doi.org/10.1016/j.carbon.2020.06.077>
14. Raman spectroscopy combined with machine learning algorithms to detect adulterated Suichang native honey / S. Hu [et al.] // *Scientific reports*. 2022. Vol. 12, № 1. P. 3456. <https://doi.org/10.1038/s41598-022-07222-3>
15. Machine learning assisted Raman spectroscopy: A viable approach for the detection of microplastics / M. Sunil [et al.] // *Journal of Water Process Engineering*. 2024. Vol. 60. P. 105150. <https://doi.org/10.1016/j.jwpe.2024.105150>
16. Machine learning-assisted raman spectroscopy and SERS for bacterial pathogen detection: clinical, food safety, and environmental applications / M. H. U. Rahman [et al.] // *Chemosensors*. 2024. Vol. 12, № 7. P. 140. <https://doi.org/10.3390/chemosensors12070140>
17. Qi Y., Liu Y., Luo J. Recent application of Raman spectroscopy in tumor diagnosis: from conventional methods to artificial intelligence fusion // *Photonix*. 2023. Vol. 4, № 1. P. 22. <https://doi.org/10.1186/s43074-023-00098-0>
18. Machine learning analysis of Raman spectra to quantify the organic constituents in complex organic-mineral mixtures / M. Zarei [et al.] // *Analytical Chemistry*. 2023. Vol. 95, № 43. P. 15908–15916. <https://doi.org/10.1021/acs.analchem.3c02348>
19. Аленичев М. К., Юшина А. А. Мера волновых чисел рамановских сдвигов широкого диапазона на основе полимерного материала обучения // *Измерительная техника*. (В печати.)
20. Kumar K. Partial least square (PLS) analysis: Most favorite tool in chemometrics to build a calibration model // *Resonance*. 2021. Vol. 26. P. 429–442. <https://doi.org/10.1007/s12045-021-1140-1>
21. Саакян А. В., Левин А. Д. Программное обеспечение для обработки спектральных данных методами хе-мометрики и машинного обучения // *Аналитика*. 2024. Т. 14, № 2. С. 154–160. <https://doi.org/10.22184/2227-572X.2024.14.2.154.160>

**REFERENCES**

1. Benattia F. K., Arrar Z., Dergal F. Methods and applications of Raman spectroscopy: a powerful technique in modern research, diagnosis, and food quality control. *Current Nutrition & Food Science*. 2024;20(1):41–61. <https://doi.org/10.2174/1573401319666230503150005>

2. Xiao L., Feng S., Lu X. Raman spectroscopy: Principles and recent applications in food safety. *Advances in Food and Nutrition Research*. 2024;106:1–29. <https://doi.org/10.1016/bs.afnr.2023.03.007>
3. Khristoforova Y., Bratchenko L., Bratchenko, I. Raman-Based Techniques in Medical Applications for Diagnostic Tasks: A Review. *International Journal of Molecular Sciences*. 2024;24(21):15605. <https://doi.org/10.3390/ijms242115605>
4. Lukose J., Barik A. K., Mithun N., Pavithran S., George S. D., Murukeshan V. M. et al. Raman spectroscopy for viral diagnostics. *Biophysical Reviews*. 2023;15(2):199–221. <https://doi.org/10.1007/s12551-023-01059-4>
5. Shah K. C., Shah M. B., Solanki S. J., Makwana V. D., Sureja D. K., Gajjar A. K. et al. Recent advancements and applications of Raman spectroscopy in pharmaceutical analysis. *Journal of Molecular Structure*. 2023;1278:134914. <https://doi.org/10.1016/j.molstruc.2023.134914>
6. Ott C. E., Arroyo L. E. Transitioning surface-enhanced Raman spectroscopy (SERS) into the forensic drug chemistry and toxicology laboratory: Current and future perspectives. *Wiley Interdisciplinary Reviews: Forensic Science*. 2023;5(4):e1483. <https://doi.org/10.1002/wfs2.1483>
7. Chauhan S., Sharma S. Applications of Raman spectroscopy in the analysis of biological evidence. *Forensic Science, Medicine and Pathology*. 2024;20(3):1066–1090. <https://doi.org/10.1007/s12024-023-00660-z>
8. Qi Y., Hu D., Jiang Y., Wu Z., Zheng M., Chen E. X. et al. Recent progresses in machine learning assisted Raman spectroscopy. *Advanced Optical Materials*. 2023;11(14):2203104. <https://doi.org/10.1002/adom.202203104>
9. Berghian-Grosan C., Magdas D. A. Application of Raman spectroscopy and Machine Learning algorithms for fruit distillates discrimination. *Scientific reports*. 2020;10(1):21152. <https://doi.org/10.1038/s41598-020-78159-8>
10. Deneva V., Bakardzhiyski I., Bambalov K., Antonova D., Tsobanova D., Bambalov V. et al. Using Raman spectroscopy as a fast tool to classify and analyze Bulgarian wines-A feasibility study. *Molecules*. 2019;25(1):170. <https://doi.org/10.3390/molecules25010170>
11. Lee K. J., Trowbridge A. C., Bruce G. D., Dwapanyin, G. O., Dunning K. R., Dholakia K. Learning algorithms for identification of whisky using portable Raman spectroscopy. *Current Research in Food Science*. 2024;8:100729. <https://doi.org/10.1016/j.crf.2024.100729>
12. Drudi L., Giardino M., Janner D., Pognant F., Matera F., Sacco M., Bellopede R. Black Carbon characterization with Raman spectroscopy and machine learning techniques: first results for urban and rural area. In: *Global NEST International Conference on Environmental Science & Technology: Collection of works 18<sup>th</sup> International Conference on Environmental Science and Technology CEST 2023, 30 August to 2 September 2023, Athens, Greece*. <https://doi.org/10.30955/gnc2023.00088>
13. Sheremetyeva N., Lamparski M., Daniels C., Van Troeye B., Meunier V. Machine-learning models for Raman spectra analysis of twisted bilayer graphene. *Carbon*. 2020;169:455–464. <https://doi.org/10.1016/j.carbon.2020.06.077>
14. Hu S., Li H., Chen C., Chen C., Zhao D., Dong B. et al. Raman spectroscopy combined with machine learning algorithms to detect adulterated Suichang native honey. *Scientific reports*. 2022;12(1):3456. <https://doi.org/10.1038/s41598-022-07222-3>
15. Sunil M., Pallikkavaliyaveetil N., Gopinath A., Chidangil S., Kumar S., Lukose J. Machine learning assisted Raman spectroscopy: A viable approach for the detection of microplastics. *Journal of Water Process Engineering*. 2024;60:105150. <https://doi.org/10.1016/j.jwpe.2024.105150>
16. Rahman M. H. U., Sikder R., Tripathi M., Zahan M., Ye T., Gnimpieba Z. E. et al. Machine learning-assisted Raman spectroscopy and SERS for bacterial pathogen detection: clinical, food safety, and environmental applications. *Chemosensors*. 2024;12(7):140. <https://doi.org/10.3390/chemosensors12070140>
17. Qi Y., Liu Y., Luo J. Recent application of Raman spectroscopy in tumor diagnosis: from conventional methods to artificial intelligence fusion *Photonix*. 2023;4(1):22. <https://doi.org/10.1186/s43074-023-00098-0>
18. Zarei M., Solomatova N. V., Aghaei H., Rothwell A., Wiens J., Melo L. et al. Machine Learning Analysis of Raman Spectra To Quantify the Organic Constituents in Complex Organic-Mineral Mixtures. *Analytical Chemistry*. 2023;95(43):15908–15916. <https://doi.org/10.1021/acs.analchem.3c02348>
19. Alenichev M. K., Yushina A. A. A wide-range Raman shift wavenumber measure based on a polymer material. *Izmeritelnaya Tekhnika*. (In Russ.). (In press.)
20. Kumar K. Partial least square (PLS) analysis: Most favorite tool in chemometrics to build a calibration model. *Resonance*. 2021;26:429–442. <https://doi.org/10.1007/s12045-021-1140-1>
21. Sahakyan A. V., Levin A. D. Software for spectral data processing by chemometrics and machine learning methods. *Analitika*. 2024;14(2):154–160. (In Russ.). <https://doi.org/10.22184/2227-572X.2024.14.2.154.160>

## ИНФОРМАЦИЯ ОБ АВТОРАХ

**Юшина Анна Андреевна** – инженер лаборатории аналитической спектроскопии и метрологии наночастиц ФГБУ «ВНИИОФИ»

119361, г. Москва, ул. Озерная, 46

e-mail: yushina@vniiofi.ru

Researcher ID: ABP-6840-2022

**Аленичев Михаил Константинович** – научный сотрудник лаборатории аналитической спектроскопии и метрологии наночастиц ФГБУ «ВНИИОФИ»

119361, г. Москва, ул. Озерная, 46

e-mail: alenichev@vniiofi.ru

<https://orcid.org/0000-0001-6336-8900>

**Саакян Арам Ваганович** – инженер-программист лаборатории аналитической спектроскопии и метрологии наночастиц ФГБУ «ВНИИОФИ»

119361, г. Москва, ул. Озерная, 46

e-mail: saakian.av@phystech.edu

<https://orcid.org/0000-0002-4012-4935>

**Левин Александр Давидович** – д-р техн. наук, ведущий научный сотрудник лаборатории аналитической спектроскопии и метрологии наночастиц ФГБУ «ВНИИОФИ»

119361, г. Москва, ул. Озерная, 46

e-mail: levin-ad@vniiofi.ru

<https://orcid.org/0000-0001-9087-952X>

## INFORMATION ABOUT THE AUTHORS

**Anna A. Yushina** – Engineer of the Laboratory of Analytical Spectroscopy and Metrology of Nanoparticles, All-Russian Scientific Research Institute for Optical and Physical Measurements (VNIIOFI)

46 Ozernaya st., Moscow, 119361, Russia

e-mail: yushina@vniiofi.ru

Researcher ID: ABP-6840-2022

**Mikhail K. Alenichev** – Researcher of the Laboratory of Analytical Spectroscopy and Metrology of Nanoparticles, All-Russian Scientific Research Institute for Optical and Physical Measurements (VNIIOFI)

46 Ozernaya st., Moscow, 119361, Russia

e-mail: alenichev@vniiofi.ru

<https://orcid.org/0000-0001-6336-8900>

**Aram V. Saakian** – Software Engineer of the Laboratory of Analytical Spectroscopy and Metrology of Nanoparticles, All-Russian Scientific Research Institute for Optical and Physical Measurements (VNIIOFI)

46 Ozernaya st., Moscow, 119361, Russia

e-mail: saakian.av@phystech.edu

<https://orcid.org/0000-0002-4012-4935>

**Alexander D. Levin** – Dr. Sci. (Eng.), Leading Researcher of the Laboratory of Analytical Spectroscopy and Metrology of Nanoparticles, All-Russian Scientific Research Institute for Optical and Physical Measurements (VNIIOFI)

46 Ozernaya st., Moscow, 119361, Russia

e-mail: levin-ad@vniiofi.ru

<https://orcid.org/0000-0001-9087-952X>