

ABSZORPCIÓS SPEKTRUMOK ANALÍZISÉNEK ÉLELMISZERIPARI ALKALMAZHATÓSÁGA

VARGA L.* - PÉCSVÁRADIA.** - HEVES CS.***

*KÉE ÉFK Alkalmazott Matematika- Fizika Tanszék

** JATE Növényélettani Tanszék

*** KÉE ÉFK Irányítástechnika és Informatika Tanszék

ÖSSZEFOGLALÓ

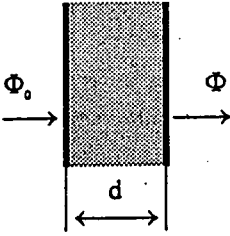
Az optikai sugárzás abszorpciójára vonatkozó Lambert - Beer - féle törvény módot ad az optikailag elemezhető formában előállítható élelmiszeripari termékek, félkésztermékek és nyersanyagok vizsgálatára. A JATE Növényélettani Tanszéke UVIKON 930 típusú spektrofotométerével lehetővé vált az abszorpciós spektrumok digitális formában történő rögzítése, majd az adatok számítógépes feldolgozása. Ezen munkánkban e fizikai módszer élelmiszeripari minőségvizsgálati lehetőségeiről, valamint az eddig elért eredményeinkről kívánunk számot adni.

BEVEZETÉS

Általánosan elfogadott az az irányzat, hogy az alapvető élelmiszereket nem célszerű mesterségesen színezni. A fogyasztói konzervatizmus, valamint a termék ízét virtuálisan befolyásoló színhatás azonban megköveteli a megszokott színek kialakítását. Világnéretű az a törekvés, hogy a mesterséges élelmiszerszínezékek felhasználását minimumra csökkentsék. Az abszorpciós spektroszkópia bizonyos körülmények között elméleti alapjait képezheti egy olyan mérőrendszer kidolgozásának, amely lehetőséget ad a színezőanyagok kvantitatív és kvalitatív kimutatására. Ezen módszer alkalmazhatóságát szeretnénk a következőkben felvázolni.

ANYAG ÉS MÓDSZER

Az abszorpciós spektrumanalízis alapja az optikai sugárzás abszorpciójára vonatkozó Lambert - Beer - féle törvény. E törvény értelmében olyan homogén közegben, amelyben a fény csak kevésbé szóródik, a gyakorlatilag monokromatikus és párhuzamos sugárnyaláb intenzitása a közegben megtett úttal exponenciálisan csökken (1. ábra):



1. ábra

$$\tau = \frac{\Phi}{\Phi_0} = e^{-K(\lambda) d} \quad (1)$$

ahol τ az átérésztési tényező, $K(\lambda)$ az extinkcióállandó, λ a hullámhossz, d pedig az elnyelő közeg rétegvastagsága.

A közeg mellső lapján belépő Φ_0 sugárzásteljesítmény és a közeg hátsó lapján kilépő Φ gyengített sugárzásteljesítmény hányadosának tízes alapú logaritmusát extinkciónak (E), vagy optikai denzitásnak nevezzük. Abban az esetben, ha a fényelnyelés csupán egyetlen c moláris koncentrációjú egységes anyagösszetevőnek tulajdonítható, akkor az extinkció a következő alakban írható:

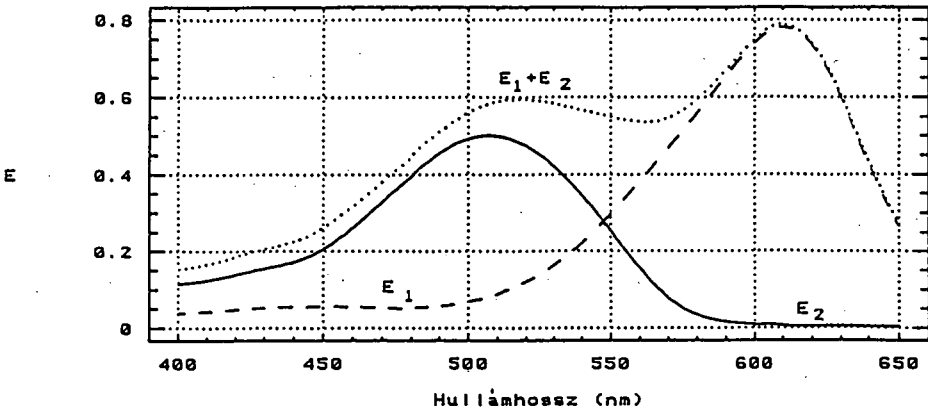
$$E(\lambda) = \lg \frac{1}{\tau} = K(\lambda) \lg e d = \varepsilon(\lambda) c d \quad (2)$$

ahol ε a moláris extinkció-koefficiens. A fenti kifejezés hullámhossz függvényét nevezzük abszorpciós spektrumnak.

Több szerző bizonyította (Hampel 1962, Joslin 1970), hogy adott feltételek mellett egy m komponensű keverékoldat egy-egy hullámhosszon mért extinkciója a részkomponensek ugyanazon hullámhosszon mért extinkcióiból összegzéssel állítható elő:

$$E(\lambda_i) = E_1(\lambda_i) + E_2(\lambda_i) + E_3(\lambda_i) + \dots + E_m(\lambda_i), \quad (3)$$

ahol E a keverékoldat, E_j az összetevők azonos rétegvastagságon mért extinkcióit jelenti (2. ábra).



2. ábra

Az abszorpciós spektrumok superponálódásának szemléltetése

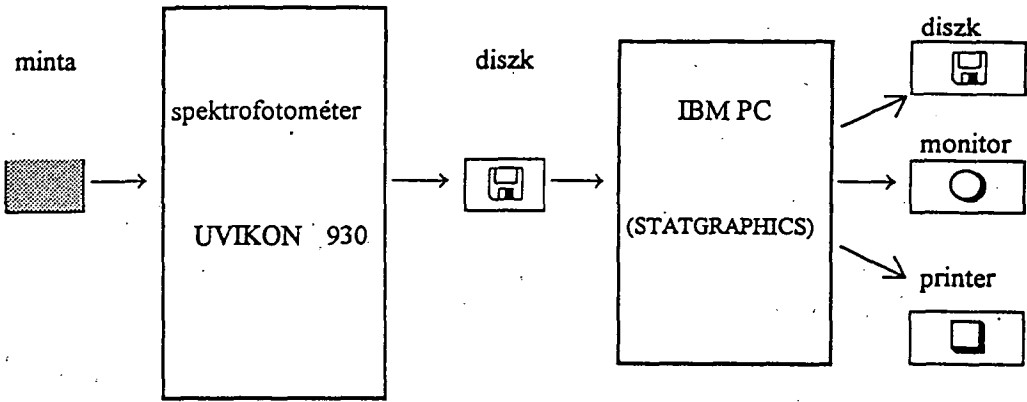
A (2) és (3) egyenlet alapján

$$E(\lambda_i) = \varepsilon_1(\lambda_i) c_1 d + \varepsilon_2(\lambda_i) c_2 d + \dots + \varepsilon_m(\lambda_i) c_m d \quad (4)$$

alakot kapjuk, amelyből következik, hogy egy m komponensű keverékoldat esetén az ismeretlen c koncentrációk egy m egyenletből álló m különböző hullámhosszon történő méréssel előállított lineáris egyenletrendszer megoldásával határozhatók meg, feltéve, hogy a sorok egymástól lineárisan függetlenek.

Kezdetben az oldatok spektrumait PYE UNICAM SP8-100 Ultraviolet spektrofotométerrel regisztráltuk. Többek között vizsgáltuk a fűszerpaprika őrleményben található színezőanyagok összmenységét, valamint a komponensek arányát (Varga 1984), a csöves fűszerpaprika érettségi fokát (Varga 1987), a többkomponensű cukorkaszínezékeket (Varga 1990). Az egyes hullámhosszokon fellépő relatív mérési hibák befolyásoló hatásának csökkentése érdekében a spektrumok lehető legszélesebb tartományát vettük figyelembe. Mivel eddig nem volt mód a spektrumok digitális formában történő tárolására, ezért a műszer által kirajzolt diagramról vizuális úton nyertünk adatokat, amelyeket a számítógépbe tápláltuk. Ez a tény nagyban hátráltatta a módszer nagy sorozatokra való alkalmazhatóságát, valamint az áttételes adatbevitel jelentősen befolyásolta a mérési és számítási eredmények pontosságát.

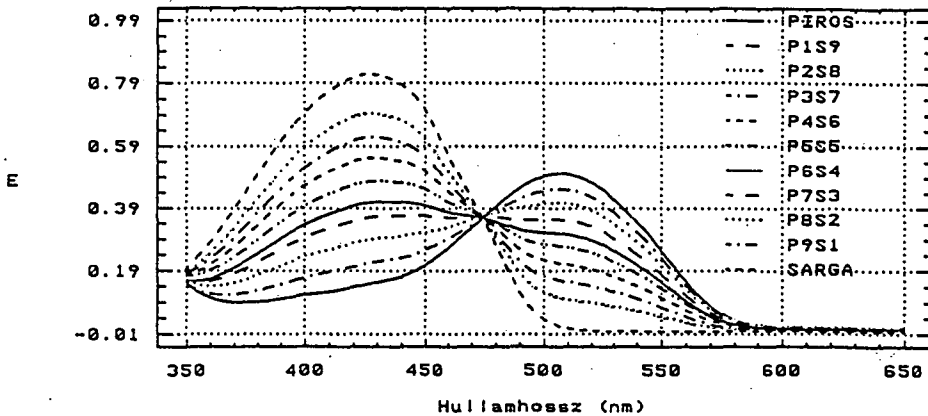
A JATE és a KÉE ÉFK szakmai kapcsolata révén 1996-ban lehetőség nyílt arra, hogy a Növényélettani Tanszék UVIKON 930 típusú modern spektrofotométerének segítségével digitális formában rögzíthessük a spektrumokat. Problémát jelentett, hogy az alapeset szerint tárolt adatokat a használni kívánt statisztikai program nem tudta fogadni. A spektrofotométer képes volt az adatokat a legegyszerűbb szöveges formátumban, ASCII kódban floppy-ra menteni és ezt a file-t már a legkisebb négyzetek elvén alapuló egyenletrendszer megoldó program (IBM PC AT/STATGRAPHICS) importálni tudta önmaga számára, azaz átalakította olyan formátumúvá, amelyet fel tudott dolgozni. Az így létrehozott rendszer blokkképét a 3. ábra tartalmazza.



3. ábra
A mérési rendszer bloksémája

EREDMÉNYEK

A JATE Növényélettani Tanszéke UVIKON 930 típusú spektrofotométerének segítségével digitális formában tudtuk rögzíteni az oldatok abszorpciós spektrumait. Ennek köszönhetően a feldolgozott adatok pontosság tekintetében jóval meghaladták a korábban alkalmazott eljárás eredményeit. Ezt szemléltetik a 4. ábrán feltüntetett spektrumok - piros és sárga színezékek különböző arányú keverékei - számítógépes kiértékelésének I. táblázatba közlített adatai.



4. ábra Modell oldatok különböző keverési arányainak spektrumai

1. táblázat

Modell oldatok keverési arányainak ellenőrzése az abszorpciós spektrumok alapján

Modell oldatok keverési arányai		Számított arányok			
		Vizuális leolvasás		Digitális adatbevitel	
piros	sárga	piros	sárga	piros	sárga
1,0	0,0	0,962	0,038	0,995	0,005
0,9	0,1	0,931	0,069	0,907	0,093
0,8	0,2	0,785	0,215	0,795	0,205
0,7	0,3	0,677	0,323	0,691	0,309
0,6	0,4	0,613	0,387	0,605	0,395
0,5	0,5	0,472	0,528	0,491	0,509
0,4	0,6	0,416	0,584	0,407	0,593
0,3	0,7	0,325	0,675	0,309	0,691
0,2	0,8	0,192	0,808	0,197	0,803
0,1	0,9	0,120	0,880	0,105	0,895
0,0	1,0	0,009	0,991	0,006	0,994

Az eddig elvégzett mérések alapján az általunk kidolgozott abszorpciós spektrumanalízis módszere alkalmasnak bizonyult élelmiszerek minőségi osztályba sorolására, a nyersanyagok, félkész- és késztermékek mennyiségi összetevőinek meghatározására. Az elmúlt évben adódott lehetőségnek köszönhetően e módszer alkalmazhatóságának, továbbfejlesztésének lehetőségei kiszélesedtek, mely lehetőséggel a jövőben kívánunk élni.

IRODALOM

HAMPEL B. (1962): *Absorptions - spektroskopie im ultravioletten und sichtbaren Spektralereich.* F. Vieweg et Sohn, Braunschweig, 82-91.

JOSLIN M.A. (1970): *Methods in food analysis. Colorometry and spectrofotometry.* Academic Press, New York and London, pp. 283-317.

VARGA L. - FEKETE M. - KOZMA L. (1984): *Quantitative determination by computerized spectrum analysis of the pigment components in ground paprika.* Acta Alimentaria, 16, pp. 295--302.

VARGA L. (1987): *A fűszepaprikabőr abszorpciós spektruma és az érettségi fok kapcsolata.* KÉE ÉFK Tudományos Közlemények, 29-35.

VARGA L. (1990): *Többkomponensű cukorkaszínezékek vizsgálata spektrofotometrián.* Műszaki Főiskolák Matematika, Fizika, Számítástechnika Oktatóinak 15. Országos Tanácskozása Budapest, Összefoglaló, 32-33.

**APPLICABILITY OF THE ANALYSIS OF
THE ABSORPTION SPECTRA IN THE FOOD INDUSTRY**

VARGA, L.* - PÉCSVÁRADY, A.** - HEVES, CS.*

⁽¹⁾University of Horticulture and Food Industry

College of Food Industry

H-6701 Szeged, P.O. Box 433

** JATE Department of Plant Physiology

ABSTARCT

The Lambert-Beer law relating to the optical radiation gives a possibility for investigation of the raw materials semi-finished and finished food products which can be products in the form suiting for optical analysis.

It became possible the digital registration and dataprocessing registration of the absorption spectra on a spectrophotometer (tipe UVIKON) deriving from Department of Plant Physiology.

The authors would like to report about the quality investigation possibility of this physical method in the food industry and about the results reached till today.