



Application Note AN-NIR-111

# Iodwert, FFA, Brechungsindex und Fettsäurezusammensetzung mit NIRS

## Multiparameteranalyse von Speiseölen innerhalb weniger Sekunden

Speiseöle sind für unsere Ernährung unerlässlich. Zur Bewertung der Ölqualität werden verschiedene Parameter verwendet, darunter die Bestimmung der Jodzahl, der freien Fettsäuren (FFA), des Brechungsindex und der Fettsäurezusammensetzung. Die Analyse der Fettsäurezusammensetzung gibt einen detaillierten Überblick über die Konzentration der verschiedenen im Öl vorhandenen Fettsäuren. Der Gehalt an essenzieller Linolsäure (C18:2) und Alpha-Linolensäure (C18:3) ist für Speiseölhersteller besonders interessant.

Herkömmliche Analysemethoden wie Titration oder Gaschromatographie sind zeitaufwändig und erfordern häufig die Verwendung gefährlicher Lösungsmittel, die ein Gesundheitsrisiko darstellen und die Analysekosten erhöhen können. Im Gegensatz zu diesen Standardmethoden kann mit dem OMNIS NIRS Analyzer jeder der genannten Qualitätsparameter für Speiseöl gleichzeitig, ohne Probenvorbereitung und in wenigen Sekunden mittels Nahinfrarotspektroskopie (NIRS) analysiert werden.

## EXPERIMENTELLE AUSRÜSTUNG

Mehr als 1000 Proben verschiedener Speiseöle (einschließlich Sonnenblumen-, Raps-, Sesam- und Sojaöl) wurden mit dem OMNIS NIR Analyzer Liquid im Transmissionsmodus (1000-2250 nm) unter Verwendung von 8-mm-Einwegfläschchen gemessen. Die Temperaturregelung des NIRS-Analysators wurde auf 40 °C eingestellt, um eine gleichbleibende Messleistung zu gewährleisten. Die OMNIS-Software wurde für die gesamte Datenerfassung und die Entwicklung von Vorhersagemodellen verwendet.



**Abbildung 1.** OMNIS NIR Analyzer und eine in ein Einwegvial gefüllte Probe.

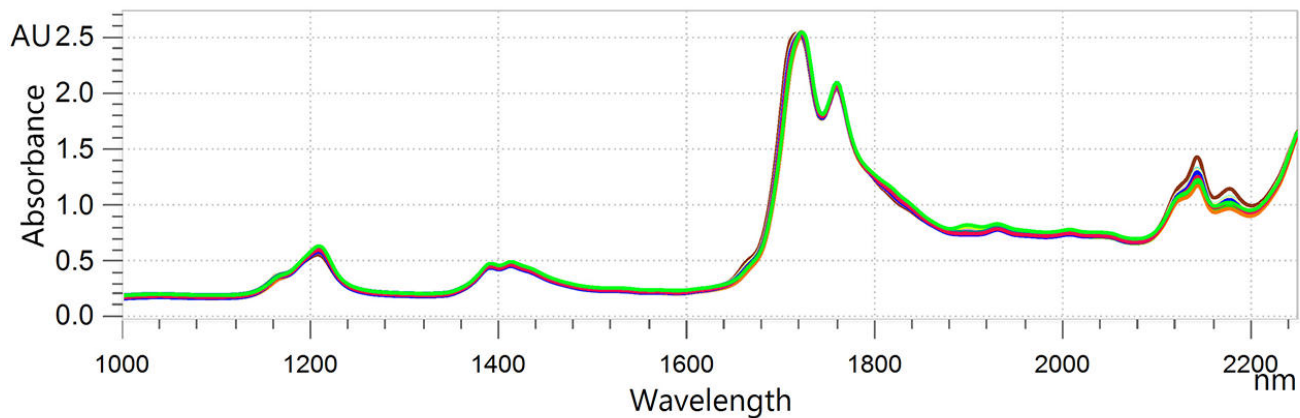
**Tabelle 1.** Übersicht über die Hard- und Softwareausstattung.

Ausrüstung	Metrohm-Artikelnummer
OMNIS NIR Analyzer Liquid	2.1070.0010
Halter OMNIS NIR, Vial, 8 mm	6.07401.070
Einwegvial, 8 mm, Transmission	6.7402.240
OMNIS Stand-Alone Lizenz	6.06003.010
Quant Development Software-Lizenz	6.06008.002

## ERGEBNIS

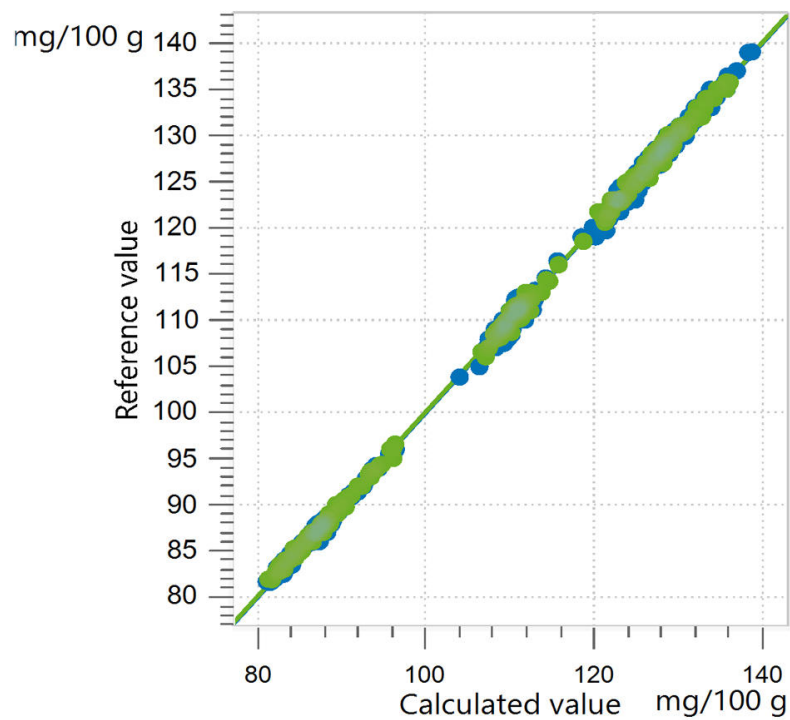
Die erhaltenen NIR-Spektren (**Abbildung 2**) wurden zur Erstellung von Vorhersagemodellen zur Quantifizierung aller acht Ölqualitätsparameter verwendet: Jodzahl (IV), FFA, Brechungsindex, Palmitinsäure (C16:0), Stearinsäure (C18:0), Ölsäure (C18:1), Linolsäure (C18:2) und Alpha-Linolensäure (C18:3). Die Qualität der Vorhersagemodelle wurde anhand von Korrelationsdiagrammen bewertet, die eine hohe Korrelation ( $R^2 > 0,94$ ) zwischen der NIR-

Vorhersage und den Standardreferenzmethoden für alle Parameter zeigen. Von der Gesamtmenge wurden 25 % der Proben als Validierungssatz und die anderen 75 % als Kalibrierungssatz ausgewählt. Die jeweiligen Leistungszahlen (FOM) zeigen die erwartete Präzision und bestätigen die Durchführbarkeit bei Routineanalysen (**Abbildungen 3-10**).



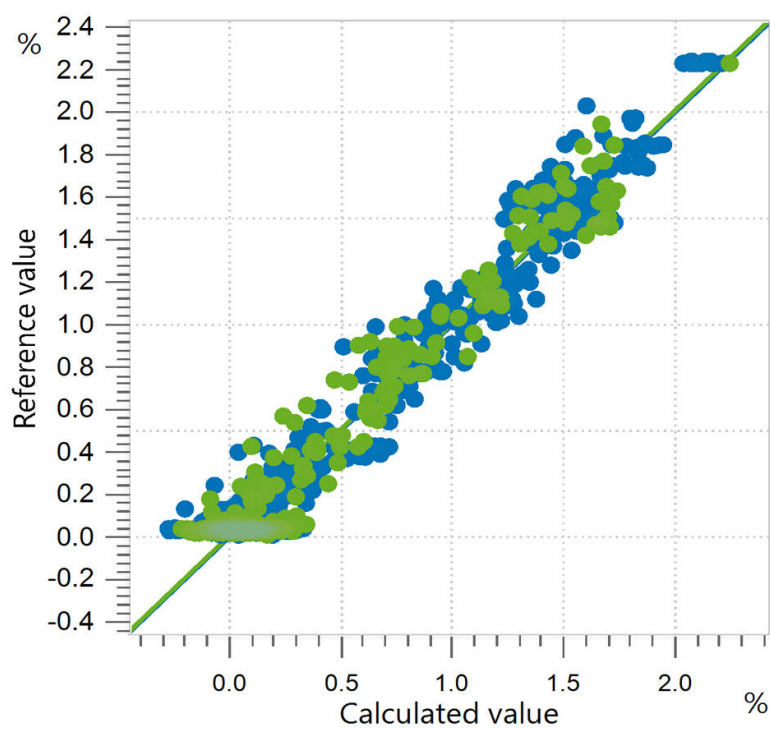
**Abbildung 2.** Überlagerte NIR-Spektren von Speiseölproben, die mit einem OMNIS NIR Analyzer Liquid bei 40 °C mit 8-mm-Fläschchen analysiert wurden.

## ERGEBNIS IODZAHL



**Abbildung 3.** Korrelationsdiagramm und die jeweiligen Gütezahlen für die Vorhersage der Iodzahl (auch bekannt als Iodwert) in Speiseölen unter Verwendung eines OMNIS NIR Analyzer Liquid. Die Referenzwerte wurden mittels Gaschromatographie ausgewertet.

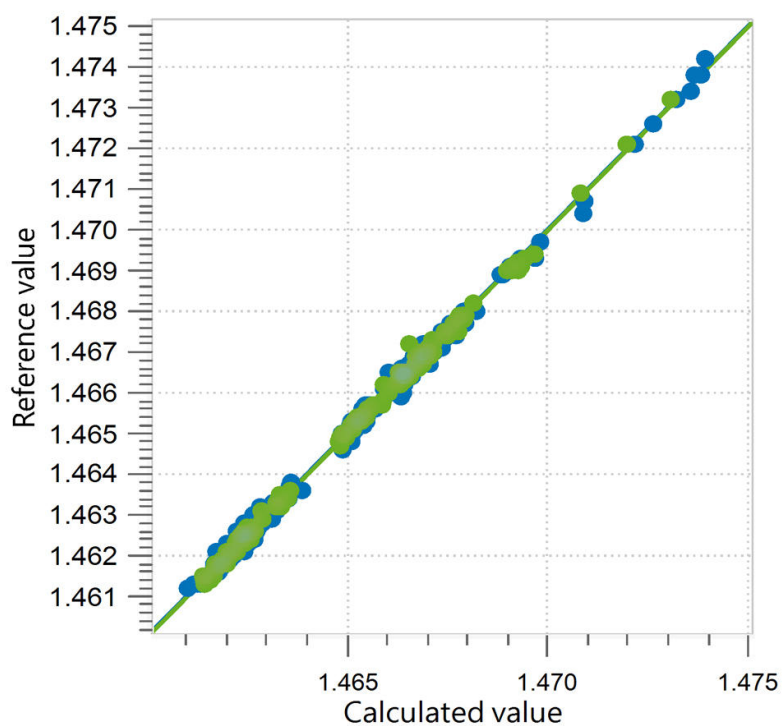
Parameter	SEC (mg/100g)	SECV (mg/100g)	SEP (mg/100g)	R2CV
IV	0,47	0,48	0,50	0,999



**Abbildung 4.** Korrelationsdiagramm und die jeweiligen Gütezahlen für die Vorhersage von FFA in Speiseölen mit einem OMNIS NIR Analyzer Liquid. Die Referenzwerte wurden mit einer Titrationsmethode bewertet.

Parameter	SEC (%)	SECV (%)	SEP (%)	R2CV
FFA	0,12	0,12	0,13	0,946

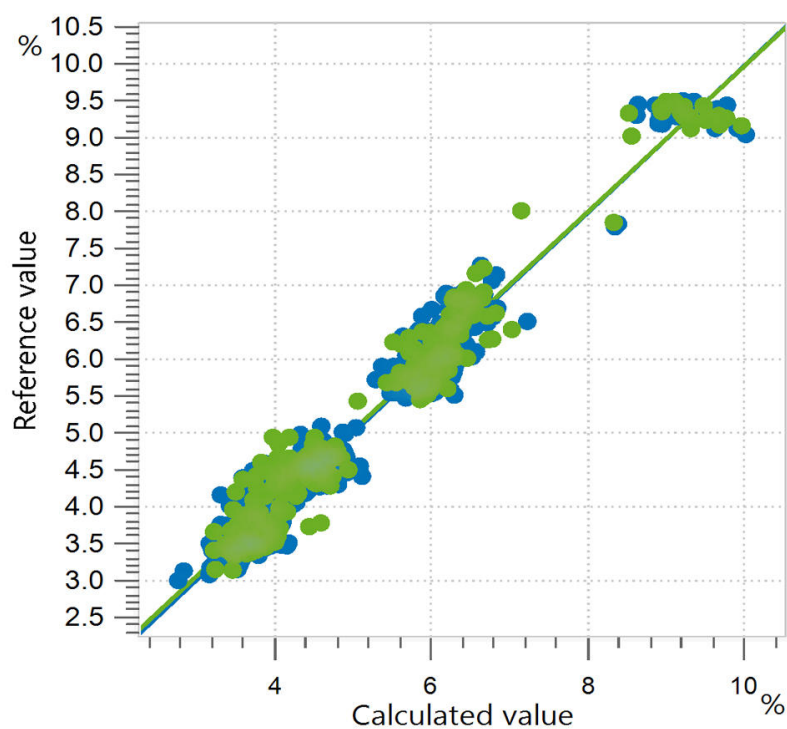
## ERGEBNIS BRECHUNGSINDEX



**Abbildung 5.** Korrelationsdiagramm und die jeweiligen Gütezahlen für die Vorhersage des Brechungsindex (RI) in Speiseölen unter Verwendung eines OMNIS NIR Analyzers Liquid. Die Referenzwerte wurden mit einem Refraktometer ermittelt.

Parameter	SEC (%)	SECV (%)	SEP (%)	R2CV
RI	0,00011	0,00012	0,00012	0,998

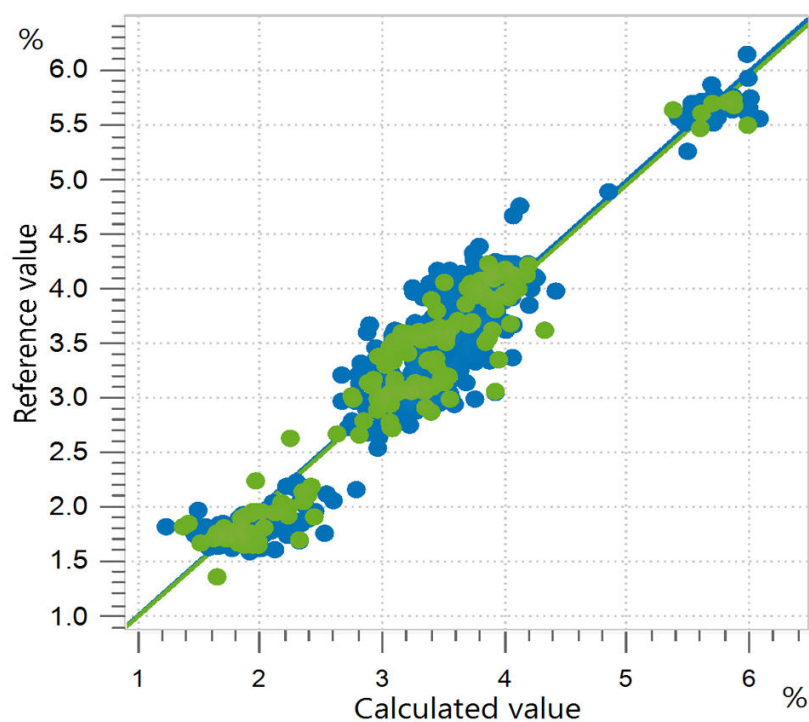
## ERGEBNIS C16:0-FETTSÄUREGEHALT



**Abbildung 6.** Korrelationsdiagramm und die jeweiligen Gütezahlen für die Vorhersage des relativen C16:0-Fettsäuregehalts (Palmitinsäure) in Speiseölen unter Verwendung eines OMNIS NIR Analyzers Liquid. Die Referenzwerte wurden mittels Gaschromatographie ausgewertet.

Parameter	SEC (%)	SECV (%)	SEP (%)	R2CV
C16:0	0,26	0,27	0,31	0,958

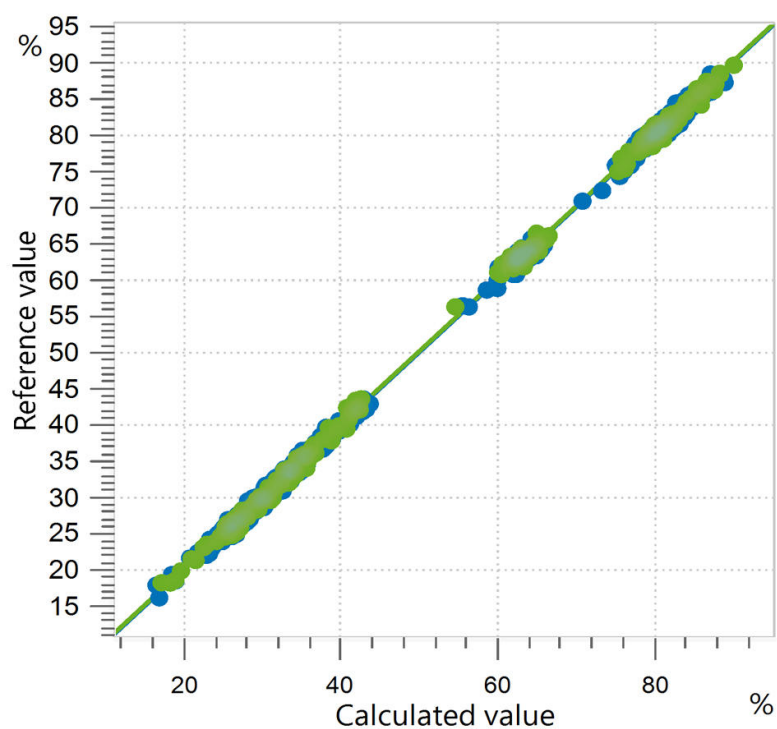
## ERGEBNIS C18:0-FETTSÄUREGEHALT



**Abbildung 7.** Korrelationsdiagramm und die jeweiligen Gütezahlen für die Vorhersage des C18:0-Fettsäuregehalts (Stearinsäure) in Speiseölen mit einem OMNIS NIR Analyzer Liquid. Die Referenzwerte wurden mittels Gaschromatographie ausgewertet.

Parameter	SEC (%)	SECV (%)	SEP (%)	R2CV
C18:0	0,26	0,27	0,25	0,936

## ERGEBNIS C18:1-FETTSÄUREGEHALT

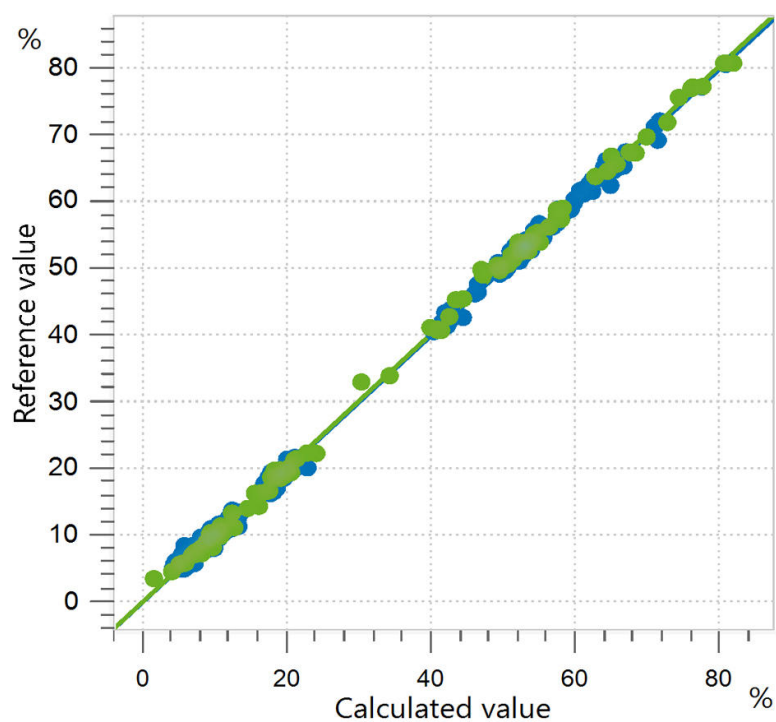


**Abbildung 8.** Korrelationsdiagramm und die jeweiligen Gütezahlen für die Vorhersage des relativen C18:1-Fettsäuregehalts (Ölsäure) in Speiseölen mit einem OMNIS NIR Analyzer Liquid. Die Referenzwerte wurden mittels Gaschromatographie ausgewertet.

Parameter	SEC (%)	SECV (%)	SEP (%)	R2CV
C18:1	0,64	0,67	0,71	0,999



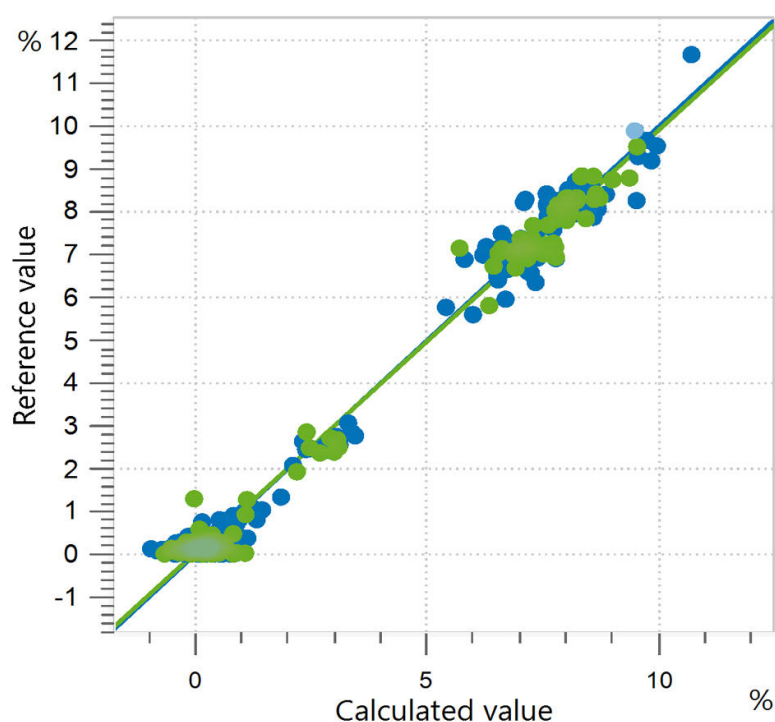
## ERGEBNIS C18:2-FETTSÄUREGEHALT



**Abbildung 9.** Korrelationsdiagramm und die jeweiligen Gütezahlen für die Vorhersage des relativen C18:2-Fettsäuregehalts (Linolsäure) in Speiseölen unter Verwendung eines OMNIS NIR Analyzers Liquid. Die Referenzwerte wurden mittels Gaschromatographie ausgewertet.

Parameter	SEC (%)	SECV (%)	SEP (%)	R2CV
C18:2	0,63	0,77	0,84	0,999

## ERGEBNIS C18:3-FETTSÄUREGEHALT



**Abbildung 10.** Korrelationsdiagramm und die jeweiligen Gütezahlen für die Vorhersage des relativen C18:3-Fettsäuregehalts (Alpha-Linolensäure) in Speiseölen mit einem OMNIS NIR Analyzer Liquid. Die Referenzwerte wurden mittels Gaschromatographie ausgewertet.

Parameter	SEC (%)	SECV (%)	SEP (%)	R2CV
C18:3	0,32	0,36	0,36	0,989

## FAZIT

Diese Application Note zeigt die Vorteile der Verwendung des OMNIS NIR Analyzer Liquid für die Routineanalyse verschiedener Qualitätsparameter in den Labors von Speiseölherstellern. Alle Qualitätsparameter können gleichzeitig in nur wenigen Sekunden gemessen werden. Im Vergleich zu anderen konventionellen Methoden sind für die

Messungen mit NIR-Spektroskopie keine Probenvorbereitung oder Lösungsmittel erforderlich. Dies führt letztlich zu einer Verringerung des Arbeitsaufwands (**Tabelle 2**) und der damit verbundenen Kosten sowie zu mehr Sicherheit für das Laborpersonal.

**Tabelle 2.** Übersicht über die Zeit bis zum Ergebnis für die Messung der Iodzahl, des FFA-Gehalts, des Brechungsindex und der Fettsäurezusammensetzung in Speiseölen mit Standard-Analyseverfahren.

Parameter	Methode	Zeit bis zum Ergebnis
Iodwert	Gaschromatographie	30 Minuten Probenvorbereitung (Methylveresterung + Probenvorbereitung) + 20 Minuten GC
FFA-Gehalt	Titration	10 Minuten pro Probe
Brechungsindex	Refraktometer	2 Minuten pro Probe
Fettsäurezusammensetzung	Gaschromatographie	30 Minuten pro Probe

Interne Referenz: AW NIR CH-0074-042023

## CONTACT

Metrohm Inula  
Shuttleworthstraße 25  
1210 Wien

[office@metrohm.at](mailto:office@metrohm.at)

## KONFIGURATION



### OMNIS NIR Analyzer Liquid

#### Nahinfrarot-Spektrometer für Flüssigproben.

Der OMNIS NIR Analyzer ist die nach Schweizer Qualitätsstandards entwickelte und produzierte Nahinfrarot-Spektroskopie (NIRS) Lösung für die Routineanalytik entlang der gesamten Produktionskette. Die Nutzung neuester Technologien und die Einbindung in die moderne OMNIS Software spiegeln sich in der Geschwindigkeit, der Bedienbarkeit und dem flexiblen Einsatz dieser NIR-Spektrometer wider.

Die Vorteile des OMNIS NIR Analyzer Liquid im Überblick:

- Messungen von Flüssigproben in weniger als 10 Sekunden
- Temperaturkontrolle an der Probe von 25°C – 80°C
- Automatische Erkennung des Einsetzen und der Entnahme des Probengefäßes
- Einfache Einbindung in ein Automationssystem oder Verknüpfung mit weiteren Analysetechnologien (Titration)
- Unterstützung zahlreicher Probengefäße mit unterschiedlicher Pfadlänge



### Halter OMNIS NIR, Vial, 8 mm

Vialhalter für den OMNIS NIR Analyzer für 8 mm Einwegvials (6.7402.240).



#### Einwegvial, 8 mm, Transmission, Anz. 100

100 Einwegvials aus Glas (Borosilikat) mit einer optischen Pfadlänge von 8 mm für Analysen von Flüssigkeiten in Transmission. Die Einwegvials werden mit den zugehörigen Verschlussstopfen (Stückzahl = 100) geliefert.

Kompatibel mit:

- Halter OMNIS NIR, Vial, 8 mm (6.07401.070)
- DS2500 Halter für 8 mm Einwegvials (6.7492.020)

OMNIS  
A WHOLE NEW LEVEL OF PERFORMANCE

#### OMNIS Stand-Alone Lizenz

Ermöglicht den Stand-Alone Betrieb der OMNIS Software auf einem Windows™ Computer.

Merkmale:

- Die Lizenz enthält bereits eine OMNIS Geräte Lizenz.
- Muss über das Metrohm Lizenzierungsportal aktiviert werden.
- Nicht auf einen anderen Computer übertragbar.

OMNIS  
A WHOLE NEW LEVEL OF PERFORMANCE

#### Softwarelizenz Quant Development

Softwarelizenz für die Erstellung und Bearbeitung von Quantifizierungsmodellen in einer Stand-Alone OMNIS Software Installation.