



Application Note AN-NIR-103

Qualitätskontrolle von Schokoriegeln mittels Nahinfrarotspektroskopie

Vereinfachte Bestimmung von Kalorien, Fett, gesättigten Fettsäuren, Kohlenhydraten, Zucker und Eiweiß

Die Herstellung von Lebensmitteln erfordert eine strenge Qualitätskontrolle, um ihre Qualität zu gewährleisten und den Verbraucher zu schützen. Süßwaren wie Schokolade unterliegen solchen Standards – ihre endgültige Produktkontrolle ist erforderlich, um die gesetzlichen Vorschriften zu erfüllen und eine gleichbleibende Qualität zu gewährleisten. Letzteres ist besonders wichtig für

Genussmittel.

Die Nahinfrarotspektroskopie (NIRS) ist eine schnelle, chemiefreie Analysemethode zur Bestimmung vieler wichtiger Qualitätskontrollparameter von Schokoladenriegeln ohne Probenvorbereitung. Die NIRS-Lösung ist einfach zu bedienen und kann entweder vor Ort oder in einem Qualitätskontrolllabor eingesetzt werden.

EXPERIMENTELLE GERÄTE

18 Schokoriegel verschiedener Anbieter wurden auf einem Metrohm DS2500 Solid Analyzer analysiert (**Abbildung 1**). Schokoriegel wurden direkt auf dem Probenfenster positioniert und im diffusen Reflexionsmodus gemessen. Um die Unterschiede zwischen den Proben zu berücksichtigen, wurde jeder

Schokoriegel an drei verschiedenen Orten gemessen und die gemittelten Spektren für die Modellentwicklung verwendet. Die Datenerfassung und die Entwicklung von Vorhersagemodellen wurden mit dem Softwarepaket Vision Air Complete durchgeführt (**Tabelle 1**).

Tabelle 1. Übersicht über die Hardware- und Softwareausstattung.

Equipment	Artikelnummer
DS2500 Solid Analyzer	2.922.0010
Vision Air 2.0 Complete	6.6072.208



Abbildung 1. Metrohm NIRS DS2500 Feststoffanalysator mit einem Schokoriegel, der das Probenfenster abdeckt.

ERGEBNIS

Die erhaltenen Vis-NIR-Spektren (**Abbildung 2**) wurden verwendet, um Vorhersagemodelle für die verschiedenen Referenzparameter zu erstellen. Es wurde ein Leave-One-Out-Validierungsverfahren angewandt. Korrelationsdiagramme, die den

Zusammenhang zwischen der Vis-NIR-Vorhersage und den Referenzwerten darstellen, sind in den **Abbildungen 3–8** zusammen mit den jeweiligen Leistungsmerkmalen dargestellt.

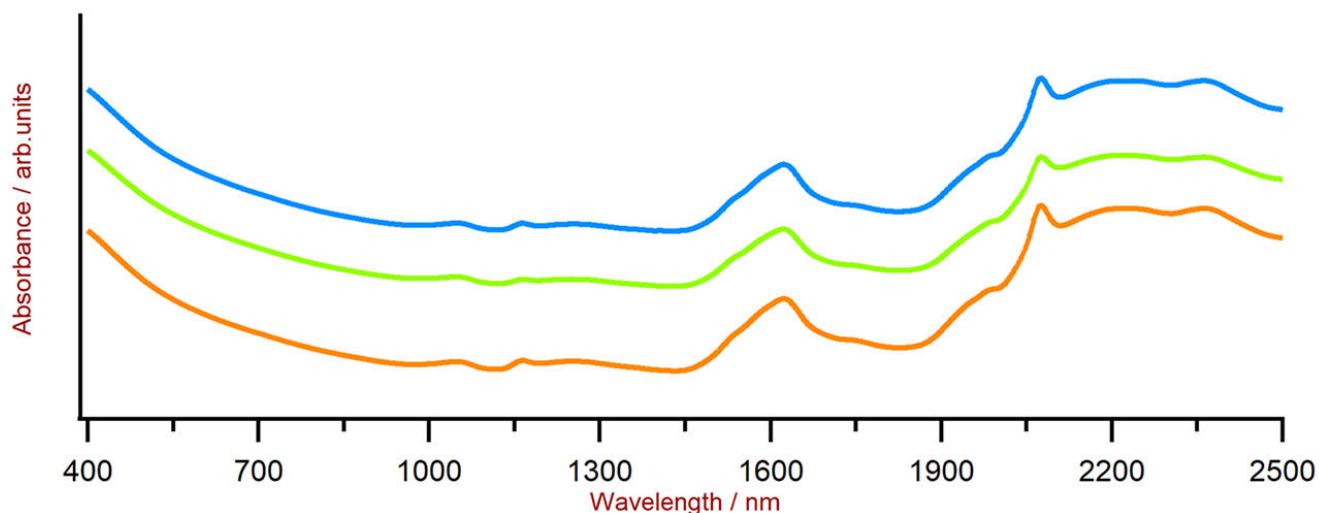
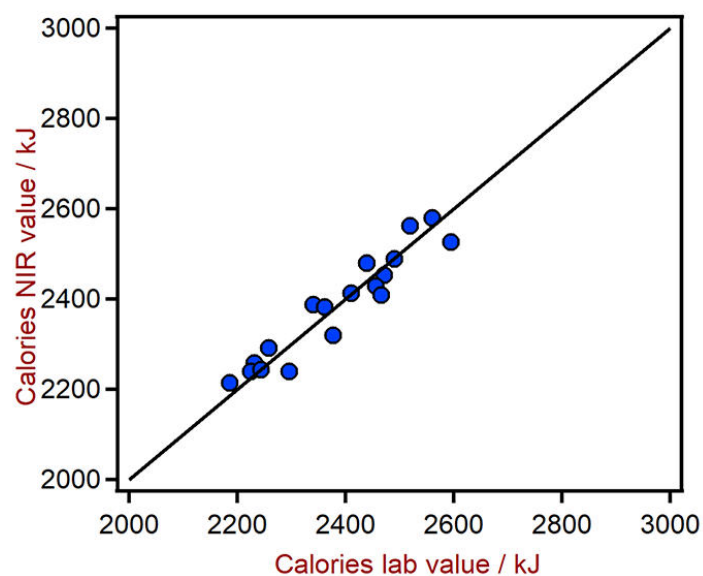


Abbildung 2. Auswahl von Vis-NIR-Spektren von Schokoriegelproben. Die Daten wurden mit einem DS2500 Solid Analyzer ermittelt. Zu Visualisierungszwecken wurde ein Spektrenversatz verwendet.

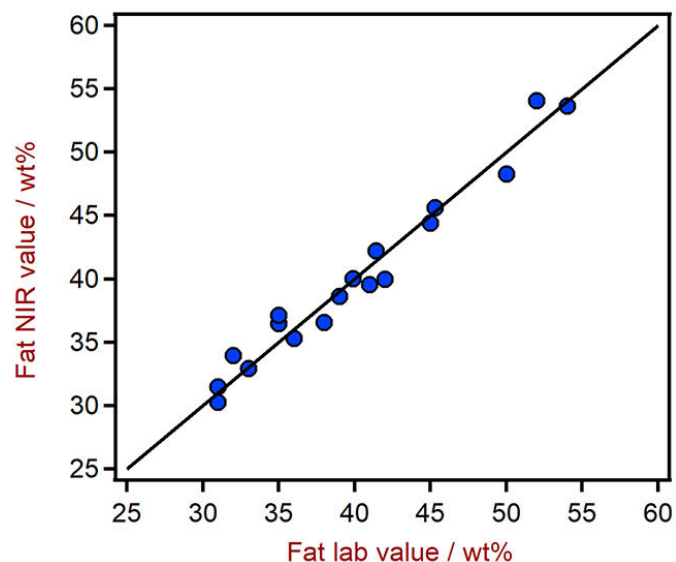
ERGEBNIS KALORIEN IN SCHOKORIEGELN



Figures of Merit	Value
R^2	0.90
Standard Error of Calibration	43.5 kJ
Standard Error of Cross-Validation	50.5 kJ

Abbildung 3. Korrelationsdiagramm und die jeweiligen Leistungsmerkmale für die Vorhersage von Kalorien in Schokoriegeln mit einem DS2500 Solid Analyzer.

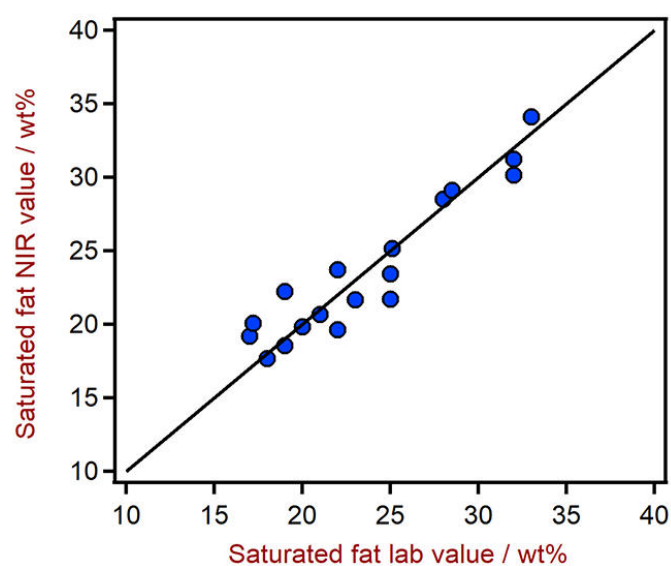
ERGEBNIS FETT IN SCHOKORIEGELN



Figures of Merit	Value
R^2	0.96
Standard Error of Calibration	1.38 wt%
Standard Error of Cross-Validation	1.73 wt%

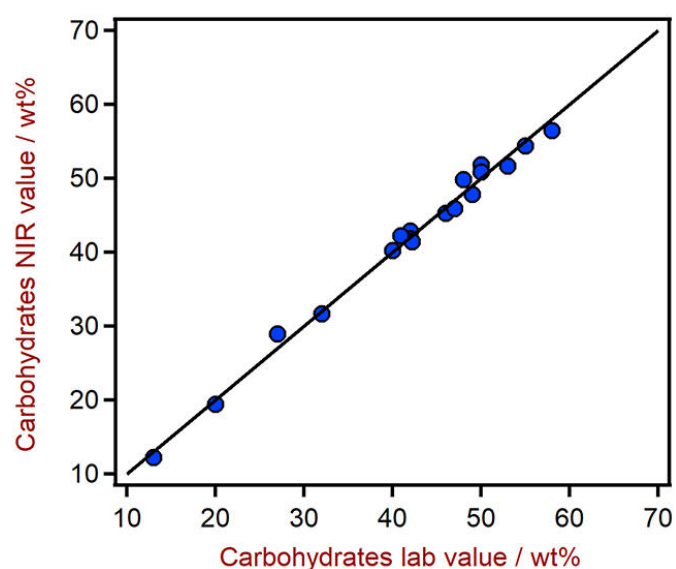
Abbildung 4. Korrelationsdiagramm und die entsprechenden Leistungsmerkmale für die Vorhersage von Fett in Schokoriegeln mit einem DS2500 Solid Analyzer.

ERGEBNIS GESÄTTIGTE FETTSÄUREN IN SCHOKORIEGELN



Figures of Merit	Value
R ²	0.88
Standard Error of Calibration	1.89 wt%
Standard Error of Cross-Validation	2.68 wt%

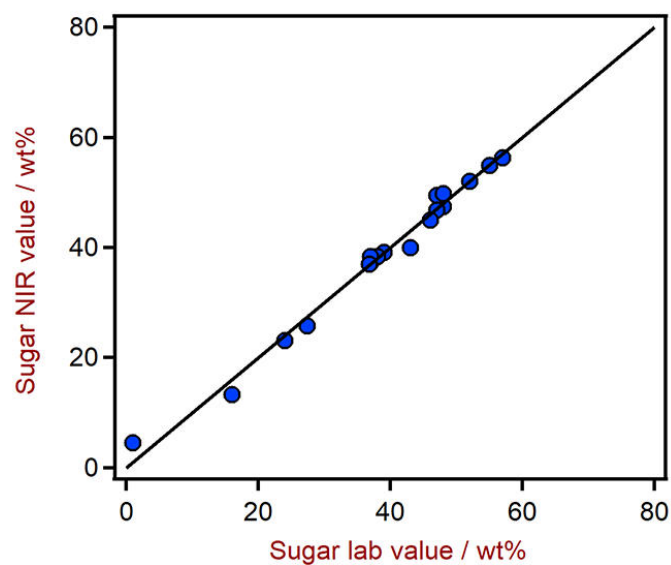
Abbildung 5. Korrelationsdiagramm und die jeweiligen Leistungsmerkmale für die Vorhersage von gesättigten Fettsäuren in Schokoriegeln mit einem DS2500 Solid Analyzer.



Figures of Merit	Value
R ²	0.99
Standard Error of Calibration	1.23 wt%
Standard Error of Cross-Validation	1.33 wt%

Abbildung 6. Korrelationsdiagramm und die jeweiligen Leistungsmerkmale für die Vorhersage von Kohlenhydraten in Schokoriegeln mit einem DS2500 Solid Analyzer.

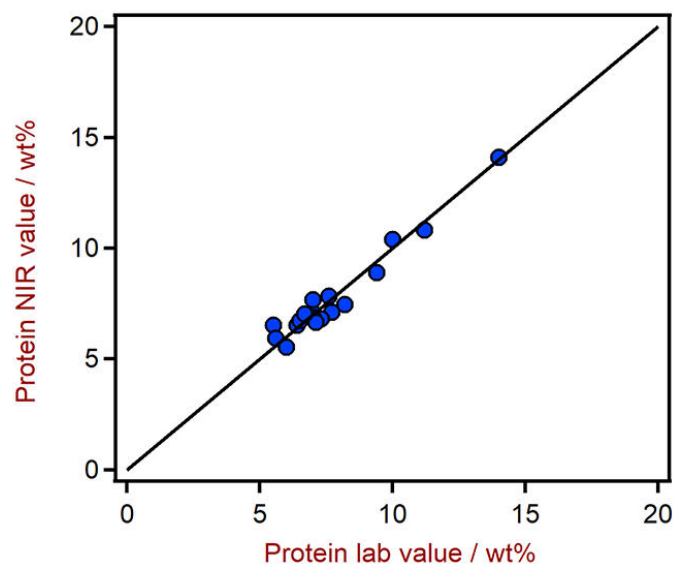
ERGEBNIS ZUCKER IN SCHOKORIEGELN



Figures of Merit	Value
R^2	0.99
Standard Error of Calibration	1.81 wt%
Standard Error of Cross-Validation	2.56 wt%

Abbildung 7. orrelationsdiagramm und die jeweiligen Leistungsmerkmale für die Vorhersage von Zucker in Schokoriegeln mit einem DS2500 Solid Analyzer.

ERGEBNIS PROTEIN IN SCHOKORIEGELN



Figures of Merit	Value
R^2	0.95
Standard Error of Calibration	0.53 wt%
Standard Error of Cross-Validation	0.65 wt%

Abbildung 8. Korrelationsdiagramm und die entsprechenden Leistungsmerkmale für die Vorhersage von Protein in Schokoriegeln mit einem DS2500 Solid Analyzer.

Diese Application Note zeigt die Machbarkeit der Nahinfrarotspektroskopie für die Analyse von Kalorien, Fett, gesättigten Fettsäuren, Kohlenhydraten, Zucker und Proteingehalt in Schokoriegeln. Im Vergleich zu den herkömmlichen Analysetechniken, die zur Bestimmung all dieser

Qualitätsparameter eingesetzt werden, spart die NIRS einen beträchtlichen Teil an Zeit und Kosten. Mit NIRS können diese Analysen ohne den Einsatz von chemischen Reagenzien durchgeführt werden, so dass der Anwender in Sekundenschnelle zuverlässige Ergebnisse erhält.

Internal reference: AW NIR CH-0067-042023

CONTACT

Metrohm Deutschland
In den Birken 3
70794 Filderstadt

info@metrohm.de

KONFIGURATION



DS2500 Solid Analyzer

Robuste Nahinfrarotspektroskopie für die Qualitätskontrolle im Labor sowie im Produktionsumfeld.

Der DS2500 Analyzer ist die bewährte, flexible Lösung für die Routineanalytik von Feststoffen, Cremes und optional auch Flüssigkeiten entlang der gesamten Produktionskette. Das robuste Design macht den DS2500 Analyzer unempfindlich gegen Staub, Feuchtigkeit, Vibrationen sowie Temperaturschwankungen und damit hervorragend geeignet für den Einsatz im rauen Produktionsumfeld.

Der DS2500 deckt den gesamten Spektralbereich von 400 bis 2500 nm ab und liefert in weniger als einer Minute genaue und reproduzierbare Ergebnisse. Der DS2500 Analyzer erfüllt die Anforderungen der pharmazeutischen Industrie und unterstützt durch die einfache Bedienung die Anwender in ihren täglichen Routineaufgaben.

Durch perfekt auf das Gerät abgestimmtes Zubehör werden bei jedem noch so herausfordernder Proben typ, wie z.B. grobkörnige Feststoffe wie Granulate oder halb fest-flüssige Proben wie Cremes, bestmögliche Ergebnisse erzielt. Bei Messungen von Feststoffen kann die Produktivität gesteigert werden durch Einsatz des MultiSample Cups, welches automatisierte Messungen in Serie von bis zu 9 Proben ermöglicht.