

Application Note AN-NIR-108

Measuring Brix and individual sugars in fruit juices with NIR spectroscopy

Fast multiparameter determination of sugars with NIRS

Fruit juices are produced and consumed for their refreshing character, nutritional benefits, and for a quick energy boost. The determination of different sugar components in these sweet beverages is highly important in this industry. In particular, fructose, glucose, and sucrose are controlled and monitored. Fruit juice sugar content analysis usually involves the use of polarimetric and refractive index measurements as well as high-performance liquid chromatography (HPLC). These measurements take a significant amount of time and require different types of laboratory equipment. Near-infrared spectroscopy (NIRS) is a chemical-free analytical technique that can simultaneously measure glucose, fructose, glucose, and Brix in juices in a few seconds. Sample preparation is not necessary when using NIRS, and automation with an OMNIS Sample Robot makes the analysis even easier.

EXPERIMENTAL EQUIPMENT

A total of 15 samples, including aqueous solutions of glucose (1–8 g/100 mL), fructose (1–8 g/100 mL), and sucrose (1–8 g/100 mL), were prepared to create prediction models for quantification. All samples were measured in transmission mode on an OMNIS NIR Analyzer Liquid (1000–2250 nm) with a 2 mm cuvette flow-cell and a holder for flow-through cells (Figure 1). For liquid transfer, the built-in peristaltic pump from the OMNIS Sample Robot S Pick&Place was used.



Figure 1. OMNIS NIR Analyzer Liquid and OMNIS Sample Robot S Pick&Place with pipetting system.

Samples of six different fruit juices (various orange juices, pineapple juice, multifruit juice, and apple juice) were measured with this setup. The sugar concentration, glucose (%), fructose (%), sucrose (%), and Brix (°Brix) were predicted using the prediction models mentioned above. Ion chromatography (IC) was used as the primary reference method to measure the concentration of different sugars in the juice samples (according to AN-P-072) and a digital refractometer was used to measure Brix. OMNIS Software was used for all data acquisition and prediction model development.

RESULT

The obtained NIR spectra (Figure 2) were used to create a prediction model for quantification of glucose, fructose, sucrose, and Brix. The quality of the prediction models was evaluated using correlation diagrams which display a very high correlation between the NIR prediction and the reference values. The respective figures of merit (FOM) display the expected precision of a prediction during routine analysis (Figures 3–6).

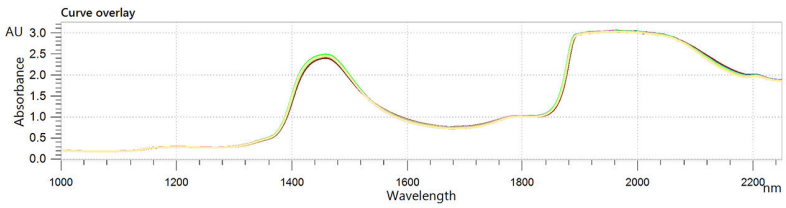


Figure 2. NIR spectra of a mixture of glucose, fructose, and sucrose in water analyzed on an OMNIS NIR Analyzer Liquid.

RESULT FRUCTOSE CONTENT

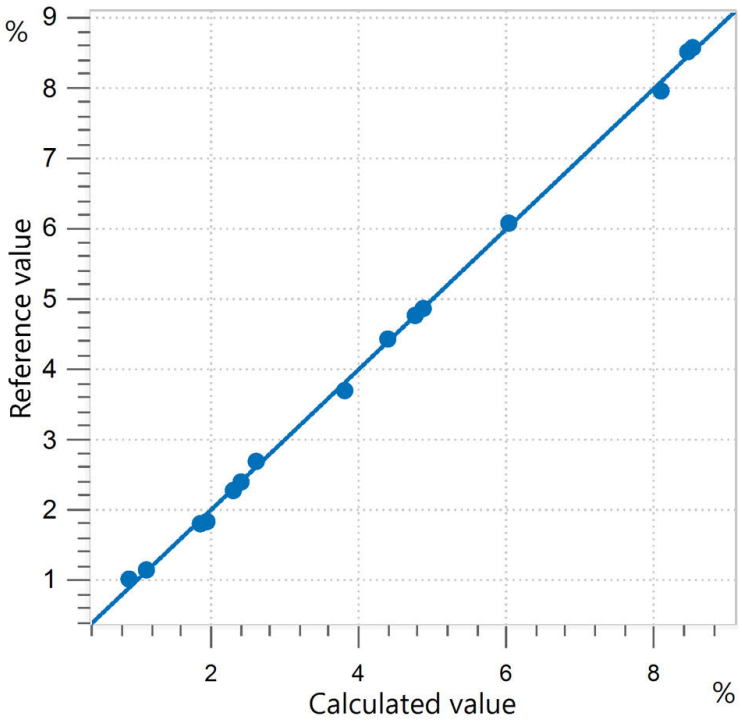


Figure 3. Correlation diagram and the respective figures of merit for the prediction of fructose content in a mixture of sugars in water using an OMNIS NIR Analyzer Liquid.

R^2	SEC (%)	SECV (%)
0.999	0.06	0.07

RESULT GLUCOSE CONTENT

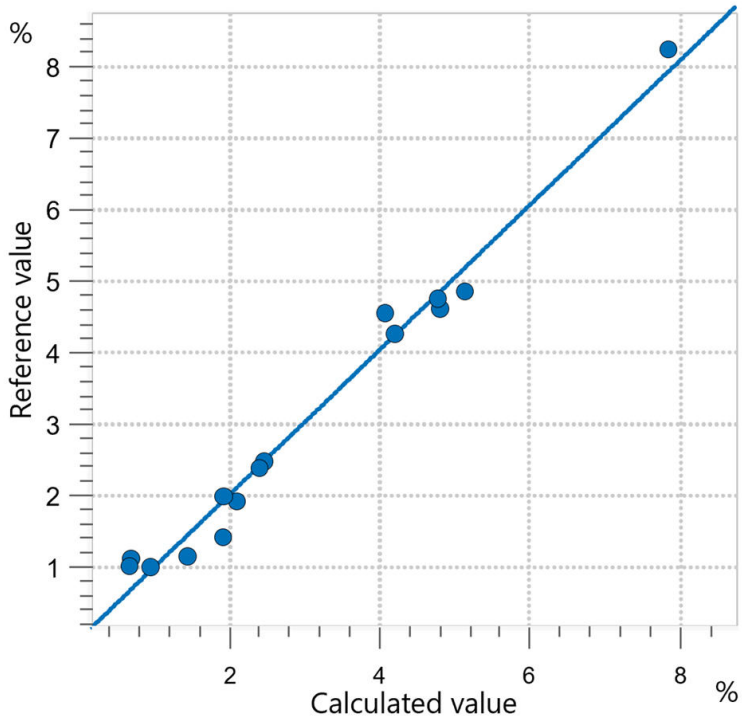


Figure 4. Correlation diagram and the respective figures of merit for the prediction of glucose content in a mixture of sugars in water using an OMNIS NIR Analyzer Liquid.

R^2	SEC (%)	SECV (%)
0.981	0.28	0.21

RESULT SUCROSE CONTENT

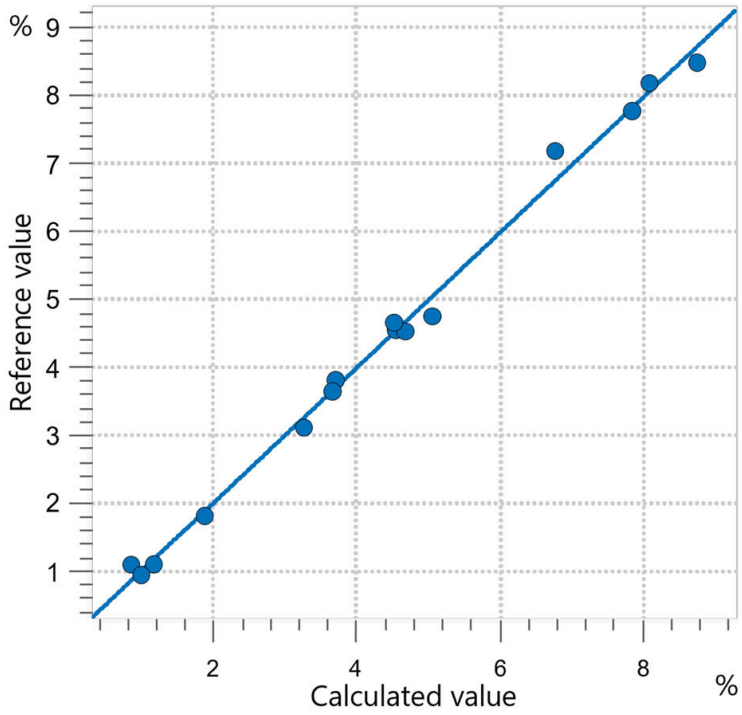


Figure 5. Correlation diagram and the respective figures of merit for the prediction of sucrose content in a mixture of sugars in water using an OMNIS NIR Analyzer Liquid.

R^2	SEC (%)	SECV (%)
0.995	0.14	0.18

RESULT BRIX

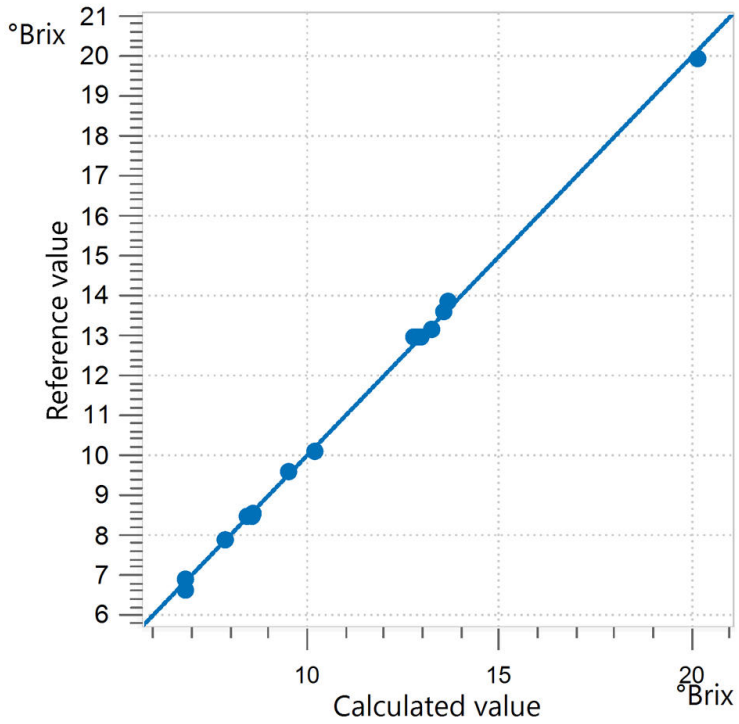


Figure 6. Correlation diagram and the respective figures of merit for the prediction of Brix in a mixture of sugars in water using an OMNIS NIR Analyzer Liquid.

R^2	SEC (%)	SECV (%)
0.999	0.08	0.12

PREDICTED VALUES OF COMMERCIAL FRUIT JUICES

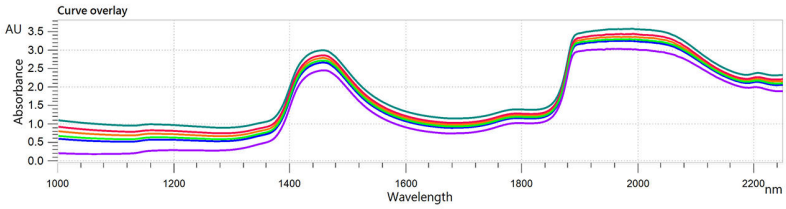


Figure 7. NIR spectra of fruit juice samples analyzed on an OMNIS NIR Analyzer Liquid.

Using the prediction models described earlier, commercial fruit juices samples were measured with NIR spectroscopy (Figure 7) using the automated setup in Figure 1. The predicted values of glucose, fructose, sucrose, and Brix in commercial fruit juices (1 to 6) are shown in Tables 2–5.

Table 2. NIR-predicted results of Brix compared with reference method (refractometer).

Fruit juice no.	Brix Refractometer (°Brix)	Brix Predicted NIR (°Brix)
1	11.32	11.11
2	11.32	10.96
3	12.59	12.68
4	11.32	10.94
5	11.63	11.79
6	11.06	11.74

Table 3. NIR-predicted results of fructose compared with reference method (IC).

Fruit juice no.	Fructose (%) (IC)	Fructose Predicted NIR (%)
1	2.47	2.27
2	2.29	2.79
3	2.47	2.73
4	2.22	2.55
5	4.08	3.09
6	5.70	5.80

Table 4. NIR-predicted results of sucrose compared with reference method (IC).

Fruit juice no.	Sucrose (%) (IC)	Sucrose Predicted NIR (%)
1	3.7	2.6
2	3.86	4.21
3	5.33	4.77
4	3.95	3.33
5	3.09	2.94
6	1.04	3.29

CONCLUSION

This Application Note demonstrates the feasibility to determine glucose, fructose, sucrose, and Brix in various fruit juices with near-infrared spectroscopy. NIR spectroscopy offers users fast and extremely accurate results without the need for highly trained analysts, chemicals, or sample preparation. Therefore, NIRS represents a suitable alternative to the traditional HPLC and Brix analysis methods (Table 6). Additionally, the possibility of automating NIR spectroscopy for fruit juice analysis saves even more time and costs. Measuring sugar content in fruit juice has never been easier.

Table 6. Time to result overview for the different sugar parameters commonly analyzed in juices.

Parameter	Method	Time to result
Glucose, Fructose, Sucrose	HPLC	5 min (preparation) + 40 min (HPLC)
Brix	Refractometer	1 min

CONTACT

Metrohm Suisse SA
Industriestrasse 13
4800 Zofingen

info@metrohm.ch

CONFIGURATION



OMNIS NIR Analyzer Liquid

Spectromètre proche infrarouge pour échantillons liquides.

L'OMNIS NIR Analyzer est la solution de spectroscopie proche infrarouge (NIRS) développée et produite selon les normes de qualité suisses pour les analyses de routine tout au long de la chaine de fabrication. L'application des technologies les plus récentes et l'intégration dans le logiciel OMNIS moderne se reflètent dans la vitesse, le maniement et la flexibilité d'utilisation de ce spectromètre NIR.

Apercu des avantages de l'OMNIS NIR Analyzer Liquid :

- Mesures d'échantillons liquides en moins de 10 secondes
- Régulation de température sur l'échantillon de 25 à 80 °C
- Détection automatique de l'insertion et du retrait d'échantillons du récipient d'échantillon
- Intégration simple dans un système d'automatisation ou liaison avec d'autres technologies d'analyse (titrage)
- Prise en charge de nombreux récipients d'échantillon de différentes longueurs de chemin



NIRS 12,5 mm Cuve en quartz débit 2 mm

Les cuves en quartz à débit permettent de contrôler en continu des processus de dissolution de comprimés par exemple et les cinétiques de réaction. La haute résistance à la pression et un système spécial de capture des bulles rendent toutes les mesures particulièrement aisées.

Les fenêtres en verre de quartz d'une très grande pureté et homogénéité garantissent une transmission supérieure à 80 % dans la gamme de longueurs d'ondes de 200 à 2 500 nm.

Différentes épaisseurs de revêtement sont disponibles :

Revêtement de 0,5 mm d'épaisseur et volume = 175 µL (**numéro de commande : 67401300**)

Revêtement de 1 mm d'épaisseur et volume = 350 µL (**numéro de commande : 67401310**)

Revêtement de 2 mm d'épaisseur et volume = 700 µL (**numéro de commande : 67401320**)

Revêtement de 5 mm d'épaisseur et volume = 1 750 µL (**numéro de commande : 67401330**)

Revêtement de 10 mm d'épaisseur et volume = 3 500 µL (**numéro de commande : 67401340**)

Caractéristiques H x L x l = 35 mm x 12,5 mm x 12,5 mm

Hauteur de fenêtre = 8,5 - 15 mm

Compatible avec l'écarteur NIRS pour le XDS Rapidliquid Analyzer et le support DS2500 pour le DS2500 Liquid Analyzer.



Support OMNIS NIR, cellules à flux continu

Support de cuve pour l'OMNIS NIR Analyzer pour cellules à flux continu

(6.7401.300 ; 6.7401.310 ; 6.7401.320 ; 6.7401.330 ; 6.7401.340).

OMNIS
A WHOLE NEW LEVEL OF PERFORMANCE

Licence OMNIS autonome

Elle permet l'exploitation autonome du logiciel OMNIS sur un ordinateur WindowsTM.

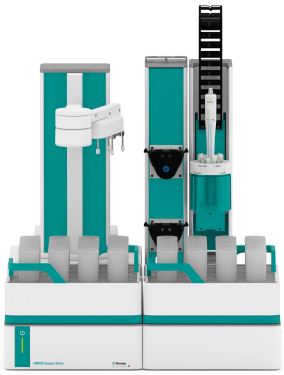
Caractéristiques :

- La licence comprend déjà une licence pour appareils OMNIS.
- Elle doit être activée via le portail d'octroi de licences Metrohm.

OMNIS
A WHOLE NEW LEVEL OF PERFORMANCE

Licence logicielle Quant Development

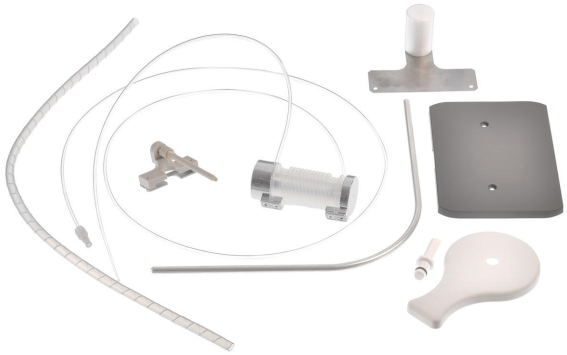
Licence logicielle pour la création et l'édition de modèles de quantification dans une installation du logiciel OMNIS Stand-Alone.



OMNIS Sample Robot S Pick and Place

OMNIS Sample Robot S avec un module de pompe « péristaltique » (2 canaux) et un module Pick&Place et de nombreux accessoires pour un accès direct au titrage entièrement automatisé. Le système offre, dans ses deux racks d'échantillons, de la place pour 32 béchers d'échantillon de 120 mL. Ce système modulaire est livré entièrement monté et peut donc être mis en service dans un temps record.

Sur demande, il est encore possible d'ajouter au système deux pompes péristaltiques et un autre module Pick&Place, ce qui permet de doubler le débit. Si d'autres stations de travail sont nécessaires, ce Sample Robot peut évoluer jusqu'à la taille L de l'OMNIS Sample Robot. Les échantillons de sept racks peuvent ainsi être traités en parallèle sur quatre modules Pick&Place maximum, ce qui multiplie par quatre le débit d'échantillons.



Équipement de pipetage OMNIS

Jeu complet d'accessoires pour convertir l'OMNIS Sample Robot Pick&Place en un modèle avec options de pipetage. Le jeu peut être monté sur toutes les versions de l'OMNIS Sample Robot (S, M et L).