

Bestimmung gesättigter und ungesättigter Fettsäuren in Lebensmitteln mittels NIR-Spektroskopie



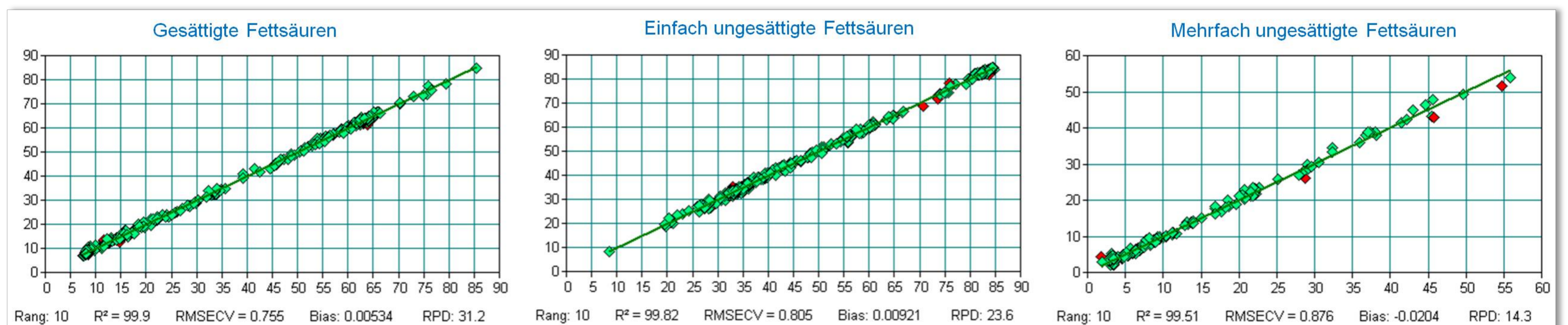
L. Tais¹; A. Braun¹; A. Niemöller²; E. Becker¹; E. Kirchhoff¹
¹Institut Kirchhoff Berlin GmbH, Oudenarder Straße 16, 13347 Berlin/D
²Bruker Optik GmbH, Rudolf-Plank-Str. 27, 76275 Ettlingen/D

Einleitung

Die Bestimmung von gesättigten und ungesättigten Fettsäuren stellt, insbesondere in Hinblick auf die Deklaration von Lebensmitteln, einen wichtigen Bestandteil der Routineanalytik von Fetten dar. Nach der LMIV zählen die gesättigten Fettsäuren zu den verpflichtenden Nährwertangaben. Bei der Bestimmung von Fettsäuren kommen vor allem gaschromatographische Verfahren, wie in der DGF-Einheitmethode C-VI 10/11 d beschrieben, zum Einsatz. Diese sind allerdings zeit- sowie kostenintensiv. Infrarotspektroskopische Methoden in Kombination mit chemometrischen Auswerteverfahren haben sich für die Analyse und Beurteilung von Fettparametern bewährt, da sie schnell, kostengünstig sowie mit geringem präparativen Aufwand zu betreiben sind.

Methode

Für die Bestimmung des Gehaltes an gesättigten und ungesättigten Fettsäuren wurden mit Hilfe des Fourier-Transform-Nahinfrarot-Spektrometers MPA (Bruker Optik GmbH) Spektren extrahierter Fette unterschiedlicher Lebensmittel wie Schokoladen, Schokoladenerzeugnisse, feine Backwaren, Milchprodukte sowie Nüsse aufgenommen und die Fettsäureverteilung mit Hilfe der DGF-Einheitmethode bestimmt. Aus den rund 450 Spektren und Referenzwerten wurden, unter Verwendung spezifischer CH₂- bzw. CH-Schwingungen, Kalibrationsmodelle erstellt. Alle erstellten Kalibrationsmodelle zeigten eine gute Korrelation. So liegt das Bestimmtheitsmaß der gesättigten Fettsäuren bei 99,9 % und für die einfach und mehrfach ungesättigten Fettsäuren bei 99,8 % bzw. 99,5 %.



Ergebnisse

Anhand der Modelle wurden für die Matrices Schokolade, Flips, Kekes, Erdnussriegel und Milchpulver Werte vorhergesagt und diese mit der DGF-Einheitmethode C-VI 10/11 d verglichen. Der Vergleich zeigt sehr gute Ergebnisse für die Bestimmung von gesättigten und einfach ungesättigten Fettsäuren. Das Modell der mehrfach ungesättigten Fettsäuren zeigt vergleichbare Werte zur DGF-Methode, allerdings bei den Matrices Milchpulver und Erdnussriegel Ergebnisse die mehr als 5 % zur Referenzmethode abweichen. Für diese Matrices muss das Modell noch mit weiteren Datenpunkten erweitert werden, um genauere Werte vorhersagen zu können.

Matrix	Gesättigte FS			Einfach ungesättigte FS			Mehrfach ungesättigte FS		
	NIR [g/100g]	DGF	Diff. [%]	NIR [g/100g]	DGF	Diff. [%]	NIR [g/100g]	DGF	Diff. [%]
Milchpulver	30,1	29,5	2,2	49,2	51,3	-4,1	21,0	19,2	9,6
Schokolade	67,1	64,4	-0,4	24,5	25,4	-3,5	5,1	5,3	3,8
Bitterschokolade	63,5	63,6	-0,2	34,1	33,3	3,0	3,2	3,1	3,2
Erdnussriegel	12,1	12,3	1,6	78,4	77,4	1,3	7,8	9,3	16,1
Schokoladenkekse	41,8	42,2	-0,4	46,9	47,4	-1,1	10,0	10,4	-4,0
Erdnussflips	10,0	9,8	1,7	79,8	81,2	-1,7	8,7	9,0	-3,3

Fazit

Der Vergleich mit der gaschromatographischen Referenzmethode zeigt gute Übereinstimmungen für die Vorhersage von gesättigten und ungesättigten Fettsäuren. Die Kalibrationen werden durch die stetige Einmessung von neuen Spektren und Referenzwerten fortlaufend erweitert und verbessert, um die Werte der DGF-Methode weiter anzunähern.