

文章编号: 1672-8785(2006)03-0028-04

近红外光谱分析在食品药品检测中的应用

周德成, 刘木清, 周小丽, 韩磊

(复旦大学光源与照明工程系, 上海 200433)

摘 要: 近红外光谱分析技术能提供快速、精确的定性和定量分析而不损伤样品, 使其相对传统的化学实验方法更具优势, 因此在食品药品检测方面更具有应用价值。

关键词: 近红外光谱; 食品药品检测

中图分类号: TN219 **文献标识码:** A

Application of Near-infrared Spectroscopy in Food and Medicine Analysis

ZHOU De-cheng, LIU Mu-qing, ZHOU Xiao-li, HAN Lei

(Department of Illuminating Engineering and Light Sources of Fudan University, Shanghai 200433, China)

Abstract: Near-Infrared Spectroscopy can provide fast, precise qualitative and quantitative analysis without damaging samples and has more advantages over the traditional chemical experimental methods. So, it has great use values in food and medicine analysis.

Key words: Near-infrared spectroscopy ; food and medicine analysis

1 引言

近红外光谱技术是近几年发展起来的一种快速检测技术, 目前国外在很多领域已有较广泛的应用。自从 Karl Norris 1986 年使用近红外光谱技术和多元线性回归分析测定水分、蛋白质和脂肪的含量取得成功, 推进了人类对于近红外技术的应用研究。由于近红外谱区的信息量较为丰富, 且近红外技术本身具有无污染、无前处理、无破坏性、在线检测及多组分同时测定等优点, 因此在食品、医药、化工、石油等领域获得了空前的发展。

2 光谱原理

近红外光谱属于分子振动光谱, 是由基频分子振动的倍频和合频吸收产生的。在该谱区产生吸收的官能团主要是含氢基团 X-H 键(X 为

C、O、N、S 等)的特征信息, 因此, 几乎所有的有机物的一些主要结构和组成都可以在它们的近红外光谱中找到特征信号。由于它们的图谱稳定, 获取光谱容易。在计算机的配合下, 人们可以通过近红外光谱之间的细微差异, 从多组分的反射或透射吸收的重叠和交叉中找出有益于分析用的吸收波长。经过一系列的数学处理, 最后完成该成分的分析测定。由于食品及药品的主要成分大部分都是有机物, 而有机物又大都是由这些基团组成的, 所以根据这些基团的近红外吸收频谱出现的位置、吸收强度等信息特征, 就可以对这些成分作定性和定量的分析。

3 近红外技术的特点

(1) 很多物质在近红外区域的吸收系数小, 使分析过程变得简单

收稿日期: 2005-09-26

基金支持: 2002 年上海市科委科技攻关项目 021409009 支持

作者简介: 周德成(1982—), 男, 复旦大学电光源研究所在读硕士生, 主要从事近红外方面的研究。

作为分子振动能级跃迁产生的吸收光谱, 近红外区域的倍频或合频吸收系数很小, 一般较红外基频吸收小 1 至 3 个数量级, 故样品无需用溶剂稀释即可以直接测定, 便于生产过程的实时测定。所用样品池的光程不像中红外区常在 1mm 以下, 近红外区光程可以是 1mm ~ 100mm, 虽然吸光系数小会妨碍样品中微量杂质的测定, 但也保证了微量杂质或在近红外吸收弱的组分不至于干扰测定。

(2) 近红外光可以在玻璃或石英介质中穿透

近红外光的波长短, 因而不会被玻璃或石英介质所吸收。所用的样品池容器可以用常用的玻璃或石英制作, 价格较低, 使用也方便。近红外光的这一特性使一般玻璃或石英光纤可以用于近红外光谱技术。光导纤维的引进使传统的近红外光谱技术扩展到了过程分析及有毒材料或恶劣环境中样品的远程分析, 同时也使光谱仪的设计得以多样化和小型化。

(3) 可以用于样品的定性分析, 也可以得到精度较高的定量结果

采用化学计量学中的多元校正方法及一组已知的同类样品所建立的定量模型, 可以快速得到相对误差小于 0.5% 的测量结果。定性分析可以确定食品或药品的归属及真假情况。

(4) 不破坏样品, 不用试剂, 故不污染环境
近红外光谱分析只是取样品的光谱信号,

有时甚至可以在原容器中进行测定, 因此不需要其它试剂, 是一种“绿色”的环保测试方法。

(5) 测定速度极快

一般一个样品取得光谱数据后可以立刻得到定性或定量分析结果, 整个过程相比传统的化学方法要快得多。

4 近红外技术在食品和农产品品质检测中的应用

由于近红外测定方法具有方便快捷、无污染的特点, 其在食品和农产品分析中获得了广泛的应用, 如表 1 所示。

食品和农产品加工过程中的成分分析、品质检测以及在线品质监测与控制, 是质量管理和市场选择的需要, 而品质检测和在线监测与控制往往是基于成分分析之上的。常规化学分析具有较高的准确度和可靠性, 而且还是许多近代仪器分析技术的基础。但是, 无论是化学分析还是仪器分析, 其试样的前处理、实验本身的耗时性以及物料的破坏性又是许多场合所不允许的。例如: 小麦和油菜籽按品质分仓输运, 用标准化学分析测定小麦中蛋白质需 2h, 测定油菜籽中油脂含量需 18h, 测定赖氨酸含量大约需要两天, 而卡车的卸货时间仅需 5min。货车到站后, 用化学分析鉴定其品质, 再进行按质分

表 1

食品分析	酒制品: 葡萄酒(乙醇、含糖量、有机酸, 含氮量, pH 值等), 白酒(原料中的水分, 淀粉, 支链淀粉, 酒醅中的水分, pH 值, 淀粉和残糖等), 啤酒(大麦原料中的水分, 麦芽糖, 啤酒中的乙醇和麦芽糖等), 以及产地鉴别, 真伪鉴别等。
	饮料: 咖啡因, 糖分, 酸度, 果汁真伪鉴别。
	乳制品: 乳糖, 脂肪, 蛋白质, 乳酸, 灰分, 固体物质。
	玉米浆: 果糖, 水分, 葡萄糖, 多糖类。
	食用油: 脂肪酸, 含水量, 蛋白质, 氧化程度, 不饱和程度, 真伪鉴别。
农产品分析	肉类: 蛋白质, 脂肪, 水分, 各种氨基酸, 脂肪酸, 纤维素等, 以及新鲜及冷冻程度, 产品种类, 真伪鉴别。
	豆类, 小麦, 面粉, 水稻及其它谷类: 脂肪, 蛋白质, 水分, 纤维量, 淀粉量, 小麦产地, 产季鉴别, 品质分级, 谷物老化程度。
	烟草作物: 尼古丁, 水分, 总糖, 还原糖, 多酚类, 香料, 添加物, 产地鉴别, 等级分类。
	咖啡: 咖啡因, 水分, 绿原酸, 产品种类, 产地鉴别, 品质分级。
	木材: 组织分析, 水分, 品质分级。
水果蔬菜: 糖分, 酸度, 维生素, 水分, 纤维素, 品质分级, 成熟程度。	

仓,需要很长的等待时间,在管理环节上必将出现很大的不合理性。近红外技术则能以它的快速(测定小麦中的蛋白质需 5min)、准确和实时性,及时反馈有关信息,弥补这一缺陷,因此受到许多行业研究者的青睐。

在乳制品行业中,随着人类生活水平的提高,奶制品在人类生活中的地位越来越重要。正确、快速的成分测定不仅可以为奶制品的加工过程提供适时指导,还可以为动物的优良培育提供参考。近红外光谱在奶制品工业中早期的应用是分析干燥后的奶制品、测定奶粉中的蛋白质、水分、脂肪和乳糖含量,后来又推广到半干奶酪的分析。奶酪和奶粉加工者采用近红外光谱监控加工过程中液体奶制品在进入蒸发系统时脂肪和水分的损失,从而进行现场调控,优化干燥过程,提高效率,以得到湿度和成分合适的奶酪和奶粉。

近红外光谱在液体牛奶研究中的应用崛起于 20 世纪 80 年代。当时,传统的化学分析检测碰到了奶制品易变质的问题,且需要采集样本带到实验室来分析,这样不仅耗时耗力,还要受到地点的限制。采用近红外光谱及多元校正方法建立不同地方、不同培育类型奶牛牛奶中脂肪总量、固体、蛋白质和乳糖含量的校正模型,结合光纤技术,就可对奶制样品进行实时在线检测,为动态控制牛奶产品的质量提供了一种新的检测方法。

从近红外技术应用于食品和农产品研究的发展历史来看,世界各国的研究者已将近红外技术用在了各种可能的食品和农产品的成分分析方面:面粉加工中的淀粉损失分析,油料作物中的油脂含量测定,大豆中的植物蛋白含量测定,啤酒中的酒精含量测定,酒中的酒精和糖分测定,烟叶中的糖、碱、多酚含量测定以及蛋黄酱中的油和蛋含量测定,洋葱中的干物质含量测定以及牛奶中的脂肪、蛋白质等的测量。

5 近红外光谱在制药工业及临床医学中的应用

由于药物加工过程自动化程度的提高,药物的制备是通过混合、加工、成型及包装等一系列过程统一完成的。这就要求在每一步加工过

程中都必须对所有组分进行全面表征,因为任何疏失的操作都可能带来很严重的后果。传统的分析方法需要将样品取出带到实验室进行分析,然后将信息反馈回生产车间控制加工过程。由于分析速度慢且常常需要使加工停止下来,这就大大减慢了生产速度。一些固体药剂生产车间是将一整批粉末混合物或颗粒压片封入胶囊,然后随机抽出一些片剂或胶囊进行分析表征的。如果此样品不合格,则整批产品报废,这将会带来巨大的经济损失。近红外光谱仪由于具有体积小,分析速度快及受温度、压力和振动等外界因素影响小的特点,可以安装在药物生产流水线上,直接非破坏性地监测每一步加工过程中各个组分的含量和性质,及时发现问题,进行调整,从而避免整批产品的损失。近红外光谱可以在一秒钟内甚至几分之一秒内完成一个片剂的扫描,因而它可以在很短时间内监测大量的药剂,从而保证整批产品的质量。另外,近红外光谱仪还可以随时监测加工过程中可能引入的各种污染物。由于快速、非破坏性的特点,它几乎不影响药物的生产速度,同时还能进行全面的质量监控。

另外,中药品种繁多,应用历史悠久,产区广泛。传统的经验鉴别主要根据药材的外观形状直接利用感官达到鉴别的目的。这种方法虽然直观、简便,但其不足之处是不同基原的药材偶然性貌似而实异,或近缘品种外形大同小异,此时靠直观观察难以下结论。要解决这些问题,应借助现代科学鉴定手段,即合理的植物分类学方法,显微鉴定方法与理化鉴定方法,将经验的与现代的方法相结合,建立简便、快速、直观的方法,才能保证中药材的质量和用药安全有效。近红外方法相对来说更加快速、简便。在基原上具有疏远亲缘关系的药材或其混伪品,无论其外形如何近似,由于基原远缘、遗传特性显著相异,在理化性质上均有较大的不同,这会导致含氢基团的倍频与合频振动频率的不同,反映在近红外图谱上就是峰位、峰数及峰强的不同。成分差异越大,近红外图谱的特征性越强。采用峰位鉴别法和聚类方法就可以对这一类中药材进行正确鉴别。

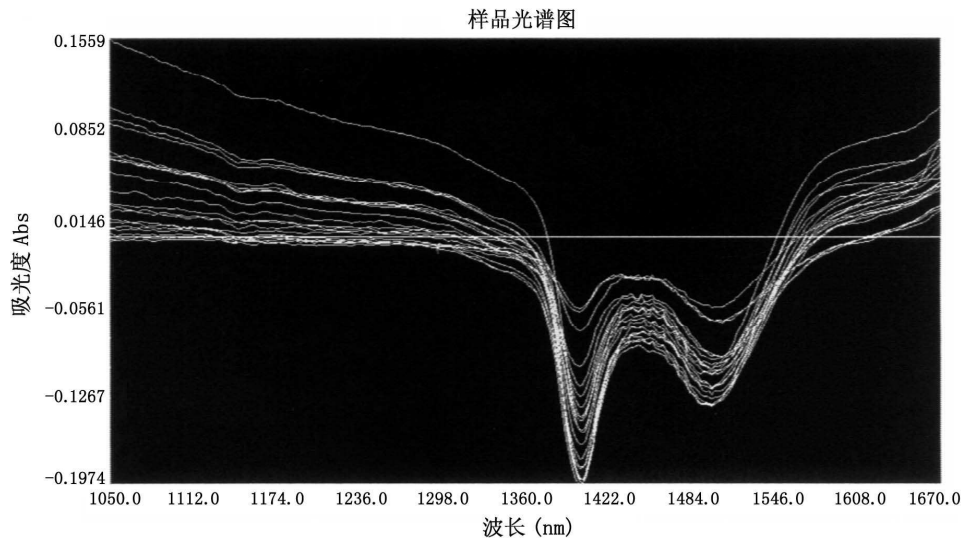


图 1 食醋样品吸光度图

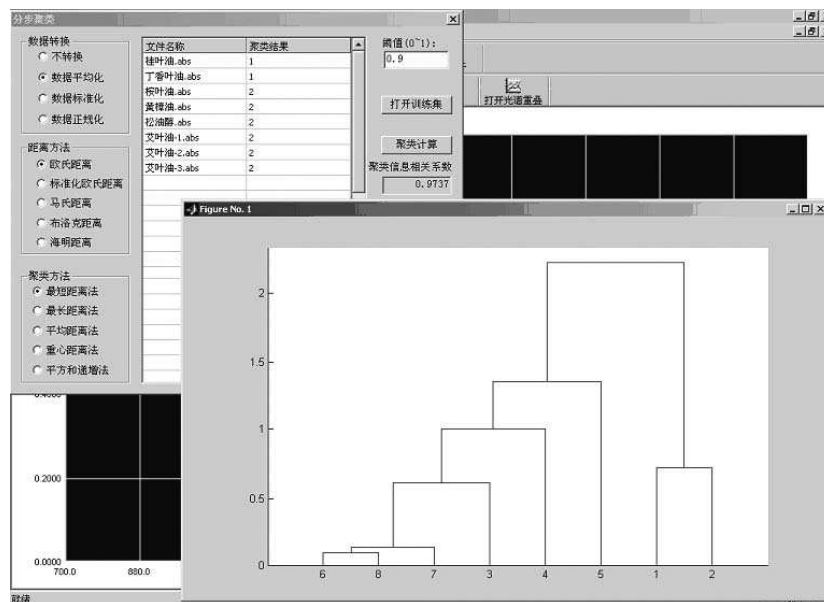


图 2 药品聚类谱系图

6 相关实验

基于上述关于近红外在食品和药品中应用的阐述,我们也采用自行研制的多通道近红外光谱仪器对相关食品(食醋)和药品进行了大量的实验,为近红外技术用于食品和药品检测提供了实验参考。图 1 是 20 个食醋样品的吸光度图,图 2 是药品的聚类谱系图。

参考文献

[1] 陆婉珍,袁洪福,徐广通,等.现代近红外光谱分析技术[M].北京:中国石化出版社,2000.

[2] 冯新沪,史永刚.近红外光谱及其在石油产品分析中的应用[M].北京:中国石化出版社,2002.

[3] 刘国林,莱金娜,李伟.近红外光谱技术在中药蛇床子分类中的应用[C].傅立叶红外光谱仪技术及应用论文集,武汉:2000,11-12.

[4] Brian G Osborne. Near-infrared Spectroscopy in Food Analysis [J]. Encyclopedia of Analytical Chemistry, 1999, 1, 12.

[5] Williams Phil, Norris Karl. Near-Infrared Technology in the Agricultural and Food Industries [C]. American Association of cereal chemists, Inc St Paul, Minnesota, USA, 1987.