

УДК 543.067.3; 543.068.8; 543.06

ХЕМОМЕТРИЧЕСКОЕ ИССЛЕДОВАНИЕ ИНФРАКРАСНЫХ СПЕКТРОВ МЁДА

Гопкало М.С. (Naaga-Helia University of Applied Sciences),

Нечипоренко А.П. (федеральное государственное автономное образовательное учреждение высшего образования «Национальный исследовательский университет ИТМО»)

Научный руководитель - к.т.н. Носенко Т.Н.

(федеральное государственное автономное образовательное учреждение высшего образования «Национальный исследовательский университет ИТМО»)

В докладе рассматривается возможность анализа и классификации выборки ИК-спектров различных видов мёда по критериям кристаллизации («засахаренности»). В работе создана выборка из 35 видов мёдов, статистическая обработка ИК-спектров данных образцов позволяет провести анализ выборки методами без обучения и методами с обучением, кластеризацию и регрессионный анализ. Такой подход к анализу близких по составу образцов дает возможность быстрого получения результата по принадлежности образца к той или иной группе.

Введение. Мед представляет собой сложную смесь органических веществ. Потребление меда в последнее время увеличивается благодаря увлечению людей здоровым питанием и здоровым образом жизни. В связи с этим выявление подделок меда, нарушения его состава, и нарушения условий хранения этого продукта является актуальной задачей. Существует множество способов фальсификации мёда. Анализ меда для выявления нарушения его состава является трудноразрешимой задачей, т.к. фальсификация производится путем изменений в углеводной составляющей мёдов, а в ее составе присутствуют несколько моносахаров и полисахариды. Идентификация моносахаров с применением ИК-спектроскопии является довольно трудоемкой задачей. Причина этому – сложность строения сахаров и одновременное наличие различных функциональных групп и таутомерных форм. Задача усложняется присутствием в составе меда, кроме углеводной составляющей, и других соединений, таких как белковые вещества, минеральные вещества, витамины, органические кислоты, ароматические вещества, флавоноиды, фитонциды, гормоны, липиды и оксиметилфурфурол. Проведение химического анализа одного образца может занимать часы и даже дни, значительное количество лабораторных ресурсов, таких как: лабораторная посуда, реактивы, приборы.

Основная часть. На 80% мед состоит из углеводов, это моносахара: такие как фруктоза и глюкоза, образовавшиеся в процессе инвертирования, т.е. в процессе расщепления сахарозы под действием фермента инвертазы; и дисахаридов и полисахаридов: сахарозы, мальтозы и декстринов. Соотношение глюкозы и фруктозы влияет на процесс кристаллизации меда, чем больше глюкозы, тем быстрее начинается кристаллизация.

С развитием возможностей вычислительной техники и появлением Фурье ИК спектроскопии получение ИК спектра вещества занимает несколько минут, компьютерная, аналитическая обработка полученных данных также осуществляется в течение короткого времени. Поэтому разработка методик, заменяющих рутинный труд лаборантов в химических лабораториях на компьютерные программы, обрабатывающие спектральные данные ведет к экономии человеческих и материальных ресурсов и в некоторых случаях к снижению экологической нагрузки на окружающую среду за счет неиспользования при химическом анализе агрессивных, ядовитых веществ.

Для исследования были получены ИК-спектры выборки образцов меда. Выборка была создана из 35 образцов мёдов различного происхождения, которые отличались местом сбора – различные регионы страны, биогеоценозом – условиями произрастания медоносов, временем сбора. Анализ выборки проводился хемометрическими методами с применением

метода кластеризации по эвклидовой мере, метода Главных Компонент, регрессионного анализа.

Выводы. В ходе работы получена компьютерная модель определения степени кристаллизации углеводов в меде по пикам поглощения на 915 и 918 см^{-1} , 852 и 865 см^{-1} , которые соответствуют колебаниям связи С-Н в кристаллитах и жидких формах глюкозы и фруктозы. Данная модель может определять степень кристаллизации нового неизвестного образца и соответственно делать выводы об условиях его хранения.