

Magyar Agrár- és Élettudományi Egyetem  
Élelmiszertudományi Kar  
Élelmiszerkémia és Analitika Tanszék



**KÜLÖNBÖZŐ TÍPUSÚ CSOKOLÁDÉK MINŐSÉGI  
ATTRIBÚTUMAINAK ÖSSZEHASONLÍTÁSA FT-NIR  
TECHNIKÁVAL**

Prohászka Borbála

Budapest

2023

**Magyar Agrár- és Élettudományi Egyetem**  
**Élelmiszertudományi és Technológiai Intézet**

**Szak neve:** MSc Élelmiszerbiztonsági és –minőségi mérnök

**Diplomadolgozat készítés helye:** Élelmiszerkémia és Analitika Tanszék

**Hallgató:** Prohászka Borbála

**A diplomadolgozat címe:** Különböző típusú csokoládék minőségi attribútumainak összehasonlítása FT-NIR technikával

**Konzulens:** Dr. Fodor Marietta  
Külső konzulens esetén tanszéki felelős

**Beadás dátuma:** 2023. május 2.



---

Dr. Abrankó László  
diplomadolgozat készítés helyének vezetője



---

Dr. Fodor Marietta  
konzulens



---

Mohácsiné dr. Farkas Csilla  
szakfelelős

# TARTALOMJEGYZÉK

1. BEVEZETÉS .....	1
2. A MUNKA CÉLJA.....	3
3. IRODALMI ÁTTEKINTÉS .....	4
3.1. A <i>Theobroma cacao</i> L.....	4
3.1.1.A kakaó növény eredete és jellemzői.....	4
3.1.2. A kakaó termesztése, gazdasági vonatkozások és trendek .....	5
3.1.3.A kakaó betakarítása és elsődleges feldolgozása.....	7
3.1.4. A kakaó további feldolgozása .....	10
3.2. A csokoládé .....	12
3.2.1. Csokoládékra, kakaótermékekre jellemző trendek és piac .....	12
3.2.2. A csokoládé élettani hatásai.....	13
3.2.3. A csokoládé vizsgálati módszerei és azok fontossága.....	15
3.3. NIR – közeli infravörös spektroszkópia .....	17
3.3.1. A NIR spektroszkópia összehasonlítása más vibrációs spektroszkópiás technikákkal .....	17
3.3.2. NIR spektroszkópia az élelmiszeriparban.....	18
3.3.3. NIR spektroszkópia alkalmazása csokoládék esetén .....	18
4. ANYAGOK ÉS MÓDSZEREK.....	20
4.1. Vizsgált minták.....	20
4.2. Vizsgálati módszerek.....	22
4.2.1. Nominális adatok vizsgálata .....	22
4.2.2. FT-NIR vizsgálat .....	22
4.2.3. Spektrum-kiértékelési módszerek .....	22
<i>Főkomponens elemzés – PCA</i> .....	23
<i>Osztályozási modellek</i> .....	23
5. EREDMÉNYEK ÉS KIÉRTÉKELÉSÜK.....	24

5.1. Nominális adatok összehasonlító vizsgálata.....	24
5.2. FT-NIR spektrumok összehasonlító vizsgálata .....	26
5.3. Kemometriai kiértékelés .....	29
5.3.1. Főkomponens elemzés .....	29
5.3.2. Osztályozási modellek .....	31
6. ÖSSZEFOGLALÁS .....	35
7. IRODALMI HIVATKOZÁSOK.....	37
Internetes hivatkozások .....	42
Ábrák .....	43
NYILATKOZATOK.....	44
KÖSZÖNETNYILVÁNÍTÁS.....	46

# 1. BEVEZETÉS

A biztonságos és minőségi élelmiszerek elérhetősége globális prioritás az élelmiszerlánc és egészségügy minden tagja számára, így aktuálisan az élelmiszeriparban kihívást jelent a hordozható, olcsó, robusztus, pontos és érzékeny műszerek fejlesztése, melyek képesek valós-idejű mérésekre, minőségellenőrzésre. Az innovatív megoldások között egyre nagyobb teret nyer a közeli infravörös spektroszkópia (NIR), ugyanis gyors, roncsolásmentes méréseket tesz lehetővé, egyszerű berendezés, melyből létezik hordozható változat is, valamint újonnan megjelenő, folyamatosan fejlődő szenzortípusok alkalmazhatók. (Bwambok et al., 2020; Beć et al., 2020). Jelenleg már számos élelmiszeripari területen van példa a NIR spektroszkópia sikeres alkalmazására, legtöbb esetben hamisítások feltárására, eredet meghatározására, valamint minőségi paraméterek vizsgálatára láthatunk példákat (Bwambok et al., 2020).

Dolgozatomban a NIR spektroszkópiával vizsgálandó mintaként a csokoládékat választottuk, ugyanis az elmúlt években megnövekedett a fogyasztói óvatosság az élelmiszerekkel és összetevőikkel kapcsolatban és ezáltal a fekete csokoládék is egyre kedveltebb és keresettebb termékek a piacon, mert egészségre kedvező hatásokat feltételeznek magas polifenol, flavonoid tartalma, valamint theobromin tartalmának köszönhetően (Montagna et al., 2019; Jaćimović et al., 2022; Belščak et al., 2009).

Az elmúlt 40 év során a kakaótermelés jelentősen megnövekedett (Del Prete & Samoggia, 2020), 2018-as és 2021-es adatok alapján Svájc a legnagyobb kakaóbab felvásárló, és a csokoládétermékek nagy része a turizmusban töltenek be fontos szerepet (Wickramasuriya & Dunwell, 2018; Swiss Platform for Sustainable Cocoa, n.d.). 2021-es adatok alapján Svájc nem csak a legnagyobb kakaóbab felvásárló, hanem a csokoládéfogyasztásban is élen áll. Az egy főre eső éves csokoládéfogyasztás 11,6 kg, bár itt ismét megemlítenem a svájci csokoládé turizmusban betöltött szerepét (Swiss Platform for Sustainable Cocoa, n.d.). Dolgozatomban svájci kereskedelembe kapható csokoládétermékeket vizsgáltunk.

A NIR spektroszkópia alkalmazására a csokoládék területén is számos példát láthatunk. Ilyen a kakaóbabok héjas vagy héj nélküli minőségi paramétereinek vizsgálata (Forte et al., 2022), a héj mennyiségének kimutatására hamisítás feltárása céljából (Drees et al., 2023), a kakaó termékek szándékos vagy nem megfelelő technológia általi hamisításának (például husk-kal), vagy allergiát okozó mogyoróval történő hamisításának kimutatása (Bwambok et al., 2020). Továbbá a kakaóbabok bioaktív komponensei alapján történő genotípus identifikálását gyors screening módszerrel is végzik (Hernández-Hernández et al., 2022), valamint kakaóbabok fermentációs foka szerinti osztályozására (Saputro et al., 2022), a pH és nedvességtartalom

meghatározására elérő fermentációs fokok mellett (Priambodo et al., 2022) is vannak kísérletek. Dolgozatomban a különböző csokoládé kategóriák minőségi attribútumaiban mutatkozó eltéréseket vizsgáltunk.

## 2. A MUNKA CÉLJA

Munkám célja a közeli infravörös technika élelmiszeripari alkalmazásának további lehetőségének feltárása, kereskedelemben kapható különböző csokoládétermékek minőségbeli különbségeinek vizsgálata, esetlegesen osztályozási modellek kidolgozása által.

E célból a következő feladatokat elvégzését tűztem ki célul:

- különböző tölteléktől és daraboktól mentes csokoládétermékek, mint a fekete csokoládé, a tejszokoládé, a mogyorós tejszokoládé (gianduja) valamint fehér csokoládé minőségi attribútumainak összehasonlítása, statisztikai kiértékelése főkomponens elemzéssel,
- diffúz-reflexiós közeli infravörös spektrumok felvétele, a spektrumok minőségi kiértékelése, az esetleges eltérések feltárása,
- a spektrumok statisztikai kiértékelése főkomponens elemzéssel
- osztályozási vizsgálatok főkomponens elemzéssel és lineáris diszkriminancia analízissel

Az eredményektől függően, az alkalmazott módszer akár roncsolásmentes gyártásközi ellenőrzésre is alkalmazható, vagy adaptálható. Az eredmények várhatóan az asztali NIR technika osztályozó, szétválasztó képességéről, valamint egyes csokoládétermékek minőségéről szolgáltatnak információt.

Az adott munkán túlmutatóan az eredmények további vizsgálatokkal kiegészíthetők, összehasonlíthatók, mint például érzékszervi minősítéssel, vagy hagyományos kapcsolt analitikai módszerek eredményeivel, amelyek további információval szolgálhatnak és összetettebb képet adhatnak.

## 3. IRODALMI ÁTTEKINTÉS

### 3.1. A *Theobroma cacao* L.

#### 3.1.1.A kakaó növény eredete és jellemzői

A kakaó (*Theobroma*) a mályvavirágúak (*Malvaes*) rendjébe tartozó kakaóformák (*Byttnerioideae*) alcsaládjának legismertebb nemzetsége, megnevezése görög nyelven az Istenek eledelét jelenti. A növény Dél-Amerikából, az Andok keleti oldaláról (ICCO - Growing cocoa, 2020), az Amazon medencéből származik (Wickramasuriya & Dunwell, 2018). Feltehetőleg a Maják termesztették elsőként a kakaó növényt. A fizetőeszközként használt kakaóbabot Columbus fedezte fel első európaiként 1502-ben. (Montagna et al., 2019). A *Theobroma* nemzetségbe 22 faj sorolható (ICCO - Growing cocoa, 2020). A *Theobroma cacao* L. fajhoz három fő genetikai csoport tartozik, melyek eltérő morfológiai és anatómiai jellemzőkkel rendelkeznek, az 1. ábrán jól látható módon. Ezek a Criollo, a Forastero, és a Trinitario (Wickramasuriya & Dunwell, 2018). Frissebb genetikai kutatások SSR (simple sequence repeat) markereket használva precízebb, 10 genetikai csoportba történő besorolást tettek lehetővé. Említést érdemel a csokoládéipar által különösen áhított, virágos aromával rendelkező Nacional vagy „arriba” változat, amely az újonnan érkező, betegségekkel szemben ellenállóbb változatokkal (elsősorban Trinitarioval) kereszteződött, és tiszta változat mára már alig létezik, illetve az esőerdő irtás hatására fokozottan veszélyeztetett helyzetben van (Fouet et al., 2022).



1. ábra: *Theobroma cacao* faj három fő típusának, a Criollo, Forastero, Trinitario és Nacional termései (forrás: <https://barandcocoa.com/pages/varieties-of-cocoa-beans>)

Az 2. ábrán látható kakaó növény egy trópusi örökzöld fa, melynek természetes élőhelye az örökzöld esőerdők alacsonyabb szintjei. A termés héja vékony és kemény, általában pigmentált, a termésfal egy vastag, fehér, húsos állományú belső réteg. Ezen belül helyezkednek el a



kakaóbabok, melyeket pulp vesz körül. Egy termésen belül 30-40 kakaóbab található, egy kilogramm kereskedelmi kakaóbab előállításához általában 15-31 kakaó termés (pod) szükséges (de Souza et al., 2018; Montagna et al., 2019; Goya et al., 2022).



2. ábra: A kakaó növény, *Theobroma cacao* L (forrás:

[https://www2.klett.de/sixcms/list.php?page=infothek\\_artikel&extra=TERRA%20EWG-Online&artikel\\_id=88931&inhalt=klett71prod\\_1.c.132744.de](https://www2.klett.de/sixcms/list.php?page=infothek_artikel&extra=TERRA%20EWG-Online&artikel_id=88931&inhalt=klett71prod_1.c.132744.de))

A kakaóbab magbelsejének (nib) körülbelül 40-57%-a zsiradék, vagyis a kakaóvaj. A kakaóvaját 33%-a olajsav, 25%-a palmitinsav, 33%-a pedig sztearinsav jellemzi zsírsavösszetétel szempontjából. Jellemző fenolos komponensei a tanninok és flavonoidok. Fő flavonoidok a kakaóbabban a katechinek, antocianinek és a proantocianidinek. A kakaóbab száraz tömegének 10%-át teszik ki a polifenolok. A fermentált, szárított kakaóbabok 2,4% theobromint tartalmaznak, valamint kevés, 0,8% koffeint is (de Souza et al., 2018; Samanta et al., 2022).

### 3.1.2. A kakaó termesztése, gazdasági vonatkozások és trendek

A *Theobroma cacao* termesztése számos helyen zajlik a világban, a trópusi területeken, melyet a 3. ábra szemléltet. Az élelmiszeripari felhasználás mellett a kozmetikaipar és a gyógyszerészet is alkalmazza alapanyagként. Magas polifenol-, azon belül is flavonoid tartalmának köszönhetően egyre nagyobb érdeklődés övezi a kakaót, potenciális egészségre gyakorolt kedvező hatásait feltételezve (Wickramasuriya & Dunwell, 2018).



3. ábra: Kakaó termelést szemléltető világtérkép (forrás: [https://www.icco.org/wp-content/uploads/ICCO\\_producers\\_map-1500x1060.jpg](https://www.icco.org/wp-content/uploads/ICCO_producers_map-1500x1060.jpg))

Az elmúlt 40 év során a kakaótermelés jelentősen megnövekedett, a 2021/2022 szezonra 4,823 millió tonna értékre becsülték. Országokat tekintve Kamerun, Elefántcsontpart, Ghána és Nigéria adják az afrikai termelés fő részét. Amerikában elsősorban Brazília és Ecuador, Ázsiában pedig Indonézia és Pápua Új-Guinea a fő termelők (ICCO Quarterly Bulletin of Cocoa Statistics, Vol. XLVII, No.4, Cocoa year 2021/22; Del Prete & Samoggia, 2020). A kakaó utáni kereslet folyamatos növekvést mutat főleg a kiváló aromájú (fine-favour) változatok iránt, ebből adódóan a különböző variációk árai a fermentált kakaóbab aromáival hozhatók összefüggésbe (Tigrero-Vaca et al., 2022).

A kakaóbabok elsősorban a csokoládé, és az ahhoz kapcsolódó édesipari termékek termeléséhez kerülnek felhasználásra. 2018-as és 2021-es adatok alapján is Svájc a legnagyobb kakaóbab felvásárló, és a csokoládétermék nagy része a turizmusban tölt be fontos szerepet. Németország, Írország és az Egyesült Királyság a további nagy felvásárlók. 2021-es adatok alapján Svájcba érkező termékek elsősorban kakaóbab (44,3%) és kakaóvaj (31,8%) formában érkeznek, más feldolgozott formában, mint például kakaómasszaként vagy kakaóporként csak kis hányadban (Wickramasuriya & Dunwell, 2018; Swiss Platform for Sustainable Cocoa, n.d.).

A *Theobroma cacao* már említett három fő típusa közül a Criollo rendelkezik a legjobb aromával, így ezt a változatot használják a legjobb minőségű csokoládék előállításához. Ez a csokoládétermelés 5-10 %-át teszi ki. Azonban ez a típus alacsony terméshozattal rendelkezik, és érzékeny a kártevőkre és betegségekre, így a termelők körében kevésbé népszerű. A csokoládétermelés 80%-át a Forastero típus adja, amely a Criolloval szemben nagy terméshozattal és betegségekkel szembeni nagyobb ellenállósággal jellemezhető, illetve olcsóbb változat. A harmadik változat a Trinidadból származó Trinitario, amely egy hibrid a

Criollo és Forastero változatok között (Wickramasuriya & Dunwell, 2018). 2013-as adatok alapján úgy becsülték, hogy Ecuador felelős a fine-flavour kakaó előállításának több, mint feléért, amely a prémium csokoládék készítéséhez kerülnek felhasználásra. (Sepúlveda et al., 2022). A Nacional változat kiváló virágos aromákkal rendelkezik, azonban, mint már korábban említettem, tiszta változat minimális mennyiségben áll rendelkezésre. Azonban a Trinitario és Nacional változatok kereszteződésből származó hibridek továbbra is kívánatos aromajellelleggel rendelkeznek, és ezért a fine-flavour kategóriába tartoznak. Ezen hibridek tehát jó lehetőségeket jelentenek az ecuadori termelők számára (Tigrero-Vaca et al., 2022).

### **3.1.3.A kakaó betakarítása és elsődleges feldolgozása**

A nyers kávébabok még nem rendelkeznek a csokoládé előállításához szükséges aromával és ízekkel, így post harvest eljárásokra van szükség, mint például a fermentáció, a szárítás és pörkölés. A fermentáció hatására jelentősen csökken, a polifenol- (katechinek és epikatechinek) és alkaloidtartalom (theobromin, koffein - metilxantinok) (Wickramasuriya & Dunwell, 2018). A fermentáció negatív hatásáról (polifenolok és metilxantinok csökkenése) nincs általános egyetértés, néhány tanulmány kimutatta, hogy a feldolgozás növeli a bioaktív komponensek biológiai elérhetőségét, és így összességében a biológiai aktivitást (Goya et al., 2022). Az aroma prekursorainak változatosságáról megállapították, hogy nagyban függ a származási helytől, a talajtípustól, a kakaófa korától és a genotípustól vagy variációtól (Hinneh et al., 2019).

A kakaó betakarítása során fontos a megfelelő érettség, ugyanis bizonyított, hogy a nem eléggé érett termékek betakarításának hatására nem megfelelő ízkarakterisztika alakul ki. Az éretlen termékek kevesebb cukrot tartalmaznak, nem fermentálódnak megfelelően. Azt is megállapították, hogy az éretlen, vagy túlérett termékek esetén kevesebb a bioaktív komponensek mennyisége, mint a megfelelően érett termékekben (Goya et al., 2022).

A kakaótermés, vagyis a pod tárolása szintén hatással van az aromákra. Megfigyelték, hogy a ghánai termelők alkalmazzák a pod tárolást, bár nem tudatosan az aromafejlesztés céljából, hanem gazdaságossági szempontok miatt. Eközben Malajziában olyan beavatkozásként fogadták el, amely a fermentált kakaóbabok túlzott savasságát akadályozza meg. Kimutatták, hogy a 3-7 nap közötti tárolás megfelelő fermentáció mellett érezhető csökkenést eredményezett a nib savasodásában, a nem-redukáló cukrok, a teljes cukrok és a proteinek mennyiségében, növekedést eredményezve a redukáló cukrok és a szabad szírsavak szintjében. Néhány aroma prekursorának (cukrok és a szabad aminosavak) koncentráció növekedését is megfigyelték a pod tárolás időtartamának növelésének hatására. Összességében elmondható,

hogy a pod tárolása csökkentő hatással van az aromákra, azonban 7 napot meghaladó tárolás esetén a lejátszódó degradációs folyamatok hatására több aroma prekursor keletkezik. Az aromaprofil változatossága megfigyelhető, azon csokoládékban, ahol a pod nem esett át tároláson, az alkoholok gyümölcsös, virágos illatjegyekkel, a aldehidek kakaós és csokoládé illatjegyekkel, és a ketonok gyümölcsös, krémes illatjegyekkel dominálnak, míg a 7 napot meghaladó tároláson átesett termékekből készült csokoládék esetén a pirazinek kakaós, mogyorós és pörkölt illatjegyekkel, a savak savanykás illatjegyekkel, észterek gyümölcsös, virágos, édes illatjegyekkel, furánok pirított, sajtos, és zöld illatjegyekkel, valamint a pirrolok karamelles illatjegyekkel dominálnak. Kimutatták továbbá a pod tárolás hatására bekövetkező polifenol és metilxantin mennyiség szignifikáns csökkenését a fermentáció és szárítás után, ezáltal csökkentve a keserúséget, az sztringenciát (Hinneh et al., 2019; Jumnonpon et al., 2012; Goya et al., 2022).

A kakaó termésének betakarítását és tárolását követően feltörik a héjat, majd a kakaóbabokat eltávolítva a terméshústól banánlevelek alatt, halmokban, fadobozokban, platformokon, vagy kosarakban fermentálnak (variációtól függően) 3-6 napon át, amely során kialakulnak a jellemző aromaanyagok. A mikroorganizmusok elszaporodásához szükséges közeget a pulp biztosítja, amely gazdag forrása cukroknak, főként glükóznak, fruktóznak és szacharóznak; citromsavnak, vitaminoknak, főként C-vitaminnak, és ásványi anyagoknak ( $K^+$ ,  $Na^+$ ,  $Ca^+$ ,  $Mg^{+2}$ ,  $Fe^{+2}$  és  $Zn^{+2}$ ). A fermentáció első szakaszában (körülbelül az első 24 órában) az élesztőgombák dominánsak, alacsony pH (~3,6) és oxigéntartalom jellemző. A második szakaszban főként tejsavbaktériumok vannak jelen, a harmadik szakaszban pedig az ecetsavbaktériumok. A fermentáció élesztős szakaszában a glükóz, fruktóz és a szacharóz metabolizációja megy végbe, melynek során etanol és széndioxid keletkezik. Az pulp pektindegradációját követően az élesztők mennyisége csökken, a tejsavbaktériumok kezdenek elszaporodni, kedvező számukra az élesztők által termelt széndioxid tartalom, illetve az élesztők sejtlízise által felszabaduló vitaminok és egyéb tápanyagok jelenléte. A homofermentatív tejsavbaktériumok a glükózt, de a fruktózt is képesek hasznosítani. A fermentáció ezen szakasza anaerob, és a pod feltörését követő 48-72 órán keresztül tart. A fermentáció során emelkedik a hőmérséklet és az oxigéntartalom, amely az ecetsavbaktériumok elszaporodásának kedvez. Az aerob szakaszában magas hőmérsékleten,  $50^{\circ}C$  -on az etanolból ecetsav keletkezik. Az ecetsavbaktériumok az élesztőgombák által termelt etanolt használják elsődleges szénforrásként. A hőmérséklet növekedése, a pH (~6,5-ről ~4,8-ra) csökkenése és az ecetsav és etanol behatolása a magba azt eredményezi, hogy elpusztul maga a mag, számos szín és aroma prekursor molekula kibocsátását, és kívánatos enzimes- és nem

enzimes folyamatokat lehetővé téve, melyek szintén fontosak az aromafejlődés szempontjából. A szabad aminosavak és peptidek proteolitikus enzimaktivitás hatására keletkeznek, míg a redukáló cukrok (glükóz és fruktóz) a szacharóz hidrolízisének termékei az invertáz enzim által. Ezen vegyületek szerepelnek aroma prekursorokként. A bioaktív komponensek biokémiai módosulásokon mennek át, mint a polimerizáció vagy komplexképzés fehérjékkel, amely által csökken az oldhatóságuk és az asztringencia. A polifenolok mennyisége csökken a fermentáció előrehaladtával, a polifenol oxidázok fermentáció alatti aktivitása által. A metixantinek mennyiségének csökkenésében a maghéjába való diffúzió játszik közre. Az antocianinek, melyek lila színűek, a glükozidáz által hidrolizálódnak antocianidinekké, az enzim lehasítja galaktóz vagy arabinóz cukrokat, amely a lila szín átalakulását eredményezi barnává, valamint prekurzorként szolgáló redukáló cukrok is felszabadulnak. (Samanta et al., 2022; Gutiérriz-Ríos et al., 2022; Goya et al., 2022). A kakaó ültetvényeken általában több változat található meg egyszerre, annak elkerülése érdekében, hogy gombás fertőzés esetén az egész ültetvény elpusztuljon. Azonban ezek általában együtt kerülnek fermentációra, amely minőségbeli csökkenéshez vezethet, ugyanis az eltérő variációknak nem mindig azonos körülmények a kedvezők minőség szempontjából. Eltérő kakaótípusoknál eltérő fermentáltsági fok kedvező, de általában a fermentáció 4-7 napon át tart. A spontán fermentációban általában természetesen előforduló élesztőgombák, tejsavbaktériumok és ecetsavbaktériumok vesznek részt (Ramos et al., 2014; Goya et al., 2022).

A fermentációt követően szárítják a babokat, 7% nedvességtartalom eléréséig, a penészes befertőződés elkerülése, valamint a tárolás alatti Ochratoxin termelődés megakadályozása érdekében. Kisebb kakaófarmokon napon történik a babok szárítása, amely a legmegfelelőbb módszernek bizonyul a teljes aromafejlődés tekintetében. A fermentáció alatt beinduló reakciók a szárítás és pörkölés alatt folytatódnak, és a savasság és asztringencia csökkenéséhez vezetnek, a keserűséget, fanyarságot okozó fenolos vegyületek mennyisége is csökken, és a szín is tovább javul. Ha a szárítás túl gyors, a babok külseje megkeményedik, és ez megakadályozza az ecetsav kifele történő migrációját, így savas babokat eredményezve. Azonban, ha a szárítás túl lassú, penész növekedés, valamint nem kívánatos ízek alakulása következhet be (de Souza et al., 2018; Gutiérriz-Ríos et al., 2022; Goya et al., 2022).

A csokoládégyártás technológiája 10 nagyságrendű csökkentést eredményez polifenolok mennyiségében. Az epikatechinek 50%-a elvész a szárítás folyamata alatt, az antocianinek degradációja pedig a fermentáció alatt megy végbe hidrolízis következtében. A fermentáció alatt az antocianinek, epikatechinek, polifenolok és procianidinek csökkenése is drasztikus (Samanta et al., 2022).

### 3.1.4. A kakaó további feldolgozása

A szárított kakaóbabokat tisztítják, eltávolítják az idegen anyagokat, valamint megtörik a bab héját és ezt is eltávolítják, ugyanis jelenléte növeli a keserűséget, kellemetlen ízeket eredményez és nem megfelelő textúrát alakít ki. Ezt a lépést a pörkölés előtt és után is el lehet végezni, tradicionálisan pörkölés után végzik. A babokat továbbá sterilizálják, amely egy nyomás alatti telített gőzös kezelést jelent. Ezt a technológiai lépést is lehet mind a pörkölés előtt vagy után végezni, pörkölés után biztosítja a hőrezisztens baktériumok és spórák elpusztítását, amennyiben a pörkölést túléltek. Az alkalizáció egy opcionális technológiai lépés, amely során a babokat (a nibet, vagy a kakaóvaj préselése után maradt kakaó pelletet, vagy a kakaómasszát) kálium- vagy nátrium-bikarbonáttal kezelik, további színváltozás, ízváltozás, valamint a kakaópor vízben való diszpergálhatóságának javítása érdekében. Az alkalizáció hatással van a polifenolokra és metilxantinokra, a flavonoidok oxidációját és polimerizációját eredményezi, amely által tovább csökken az asztringencia. Az alkalizáció hatására a teljes polifenol tartalom 60% feletti vesztesége, valamint az epikatechinek, katechinek, theobromin és a quercetin tekintetében is itt alakulnak ki a legnagyobb veszteségek (Goya et al., 2022).

A kakaóbabok pörkölése szintén fontos a megfelelő aromák kialakulása érdekében. A Maillard reakció során a nemkívánatos aroma komponensek csökkennek, és a kedvező, csokoládéra jellemző aroma komponensek pedig kialakulnak, új vegyületek keletkeznek (Samanta et al., 2022; Clark et al., 2020). Általánosságban a pörkölési hőmérsékletről megállapítható, hogy növelésének hatására szignifikánsan nő az aromakoncentráció. Ez a növekedés annak köszönhető, hogy a komponensek felszabadulnak a mátrixból, vagy a Maillard reakció során keletkeznek (Hinneh et al., 2019). A pörkölés általában 120-150°C között, 15-45 percen keresztül végzik. A megfelelő kombináció megválasztása függ a kakaó típusától, a kívánt terméktől, valamint attól, hogy a babok vagy a kakaómassza pörkölését végzik. A polifenolok hőlabilis vegyületek, tehát a magas hőmérsékletek hatására szintén csökken a mennyiségük. A pörkölés az (-)-epikatechinek és a proanthocianidinek mennyiségében okoz csökkenést. A polifenolok megőrzése érdekében alacsony, 140°C-os pörkölést javasolnak, minél rövidebb időn keresztül. A pörkölés során a theobromin és koffein mennyisége is csökken, diketopiperazinokhoz kötődhetnek, ezzel csökkentve a szabad alkaloidtartalmat (Goya et al., 2022). A pörkölés során lejátszódó Maillard reakcióban résztvevő fehérjék nem csak az aromák és a szín kialakulásáért, hanem a textúrában bekövetkező változásokért is felelősek. A kakaóbabok polifenol tartalma csökkenti a Maillard reakciót. (Jumnonpon et al., 2012).

A kakaóbab őrlése, mint további feldolgozás, elsősorban Európában történik, nem pedig az előállító országokban. Az őrlés és keverés más összetevőkkel elsősorban a textúra kialakítása miatt fontos technológiai lépés. Általában két lépésben végzik, egy előőrlés és egy finomőrlés által, kontrollált hőmérséklet mellett.  $30\mu\text{m}$  szemcseméret felett a nyelv képes érzékelni az egyéni textúrát, viszont  $4\mu\text{m}$  alatt a túl nagy felület elérhetővé válik a zsírok számára, hogy bevonatot képezzenek a szemcséken, így a csokoládénak túl viszkózus, nyálkás textúrát kialakítva. Általában  $15\text{-}25\mu\text{m}$  vagy más források szerint  $15\text{-}75\mu\text{m}$  ( $99,5\% \leq 75\mu\text{m}$  eloszlással) szemcseméret tartomány a kívánatos, a megfelelő textúra kialakításához. Az őrlés aromákra kifejtett hatását vizsgálva megállapították, a 8 órás őrlés virágos, gyümölcsös illatjegyekkel jellemezhető. Ezek az illatjegyek a 16 órás őrlés esetén kevésbé voltak jelen, itt inkább a vajas, tejes illatjegyek a jellemzők, valamint avas, édeskés, és nem-tiszta illatjegyek is megjelennek. A 24 órán át tartó őrlést tartják legalkalmasabbnak a lekerékített aromaprofil kialakítására, ugyanis jelen voltak virágos, gyümölcsös, tejes, pirított, karamelles jegyekkel rendelkező komponensek, valamint az avas illatjegyekkel rendelkező komponensek. Megfigyelték, hogy egyes komponensek esetén nincs megállapítható konzisztens tendencia a változásukban, valamint ezen tanulmány kimenetele alapján megállapították, hogy az őrlésnek hasonló hatásai vannak a concholás, azaz a finomítás lépéshez mérten az aromák alakulását tekintve, viszont a polifenolok és metilxantinok mennyiségének csökkentéséről egyelőre nincs tudományos jelentés. (Clark et al., 2020; Goya et al., 2022).

A konsolás folyamata alatt szintén a textúra kerül kialakításra, viszont itt a megfelelő szín és folyási tulajdonságok elérése is cél, emellett az illékony savak eltávoznak, tehát az aromára is hatással van. Különböző idő és hőmérsékelt (általában  $> 40^\circ\text{C}$ ) kombinációit alkalmazzák a csokoládé típusától függően. Éticsokoládék esetén  $70\text{-}90^\circ\text{C}$  közötti hőmérséklet is használható, azonban tejsokoládé esetén  $50\text{-}60^\circ\text{C}$  a javasolt, a Maillard reakció termékek keletkezésének elkerülése érdekében. A konsolás polifenolokra és metilxantinokra kifejtett hatásáról limitált mennyiségű tanulmány áll rendelkezésre, és ezeknek eltérő eredményei vannak. Egyesek szerint az illékony polifenolok elpárolognak a nedvességtartalommal és rövid szénláncú zsírsavakkal együtt, jelentős, akár 80%-os veszteség is felléphet a polifenolok mennyiségében, és ezáltal az antioxidáns aktivitás is csökken. Más tanulmányok eredményei azonban azt jelentették, hogy nincs szignifikáns változás sem a fenolos vegyületek vagy a teljes polifenol tartalom mennyiségében, sem pedig a mintázatában, valamint az antioxidáns aktivitásban (Samanta et al., 2022; Clark et al., 2020; Goya et al., 2022).

A temperálás a megfelelő kristályszerkezet elérése érdekében fontos technológiai lépés, a csokoládé minőségének legbefolyásosabb technológiai lépése, azonban aromát befolyásoló

hatása azonban nincs. 40-50°C-ról 18-28°C-ra hűtik a folyékony csokoládét keverés mellett, megfelelő, V polimorf kristályszerkezetet kialakítva a zsíroknak, amely felelős a megfelelő olvadási tulajdonságokért, a fényes felületért. A temperálás polifenolokra és metilxantinokra gyakorolt hatásáról nincsenek tudományos jelentések (Samanta et al., 2022; Clark et al., 2020; Goya et al., 2022).

## **3.2. A csokoládé**

### **3.2.1. Csokoládéakra, kakaótermékekre jellemző trendek és piac**

Nem csak a kakaóbab, hanem a fekete csokoládé is egyre nagyobb népszerűségnek örvend, a már említett feltételezett kedvező hatások miatt. Emellett az organikus kakaótermékek iránti érdeklődés, kereslet is nő a környezeti problémáknak és megnövekedett élelmiszerbiztonsági tudatosságnak következményeként, azonban még nagyon csekély a mértéke a teljes kakaópiacon (0,5%) (Montagna et al., 2019). Az elmúlt években világszerte növekedett a fogyasztók óvatossága az élelmiszerekkel és összetevőikkel kapcsolatban. Egyre nagyobb az érdeklődés a növényi eredetű bioaktív komponensek, „multifunkcionális adalékanyagok” használata iránt (Jačimović et al., 2022; Belščak et al., 2009). Új receptek kutatása jellemző a kakaópiacra, a táplálkozási érték javítása a kalóriában szegény, akár cukormentes termékek által, és a kakaóvaj ár növekedésének kompenzálása érdekében, fenntarthatósági problémák miatt. Környezeti szempontból a tejszír használata kérdéses, alacsony fenntarthatóságú összetevőnek számít, emellett növekvő kereslet mutatkozik a vegán és tejmentes termékek iránt (Ewens et al., 2021; Del Prete & Samoggia, 2020). Szintén gyakori kutatási téma a fekete csokoládé dúsítása, a technológia során felmerülő bioaktív komponensek veszteségének kompenzálása érdekében (Samanta et al., 2022).

A csokoládé elsősorban egyedi organoleptikus tulajdonságai miatt kedvelt termék, az édes, karakterisztikus aromája miatt. Fogyasztása különleges kapcsolatban áll a stresszel, a stressz hatására a fogyasztók hajlamosak édesebb, magasabb zsírtartalmú ételeket fogyasztani. Megfigyelések alapján az egyének nagy része állította, hogy több csokoládét fogyaszt stressz hatására, azonban kevesebb mint felük fogyasztott ténylegesen többet (Kozelová et al., 2014; Miemann et al., 2022). A csokoládépiacon megfigyelt egyik legnagyobb változást a prémium csokoládék feltörekvése jelentette (IndexBox - Chocolate market trends and consumer behavior, 2022).



### 3.2.2. A csokoládé élettani hatásai

Kedvező élettani hatások csak a magas kakaótartalmú fekete csokoládéhoz köthetők, a többi csokoládéhoz a magas cukortartalom, csökkentett flavonoid és theobromin tartalom miatt nem. Általában a vizsgálatok a kakaóra vonatkoznak, és annak hatásai igazoltak, nem pedig a csokoládéra vonatkozóan (Montagna et al., 2019), azonban konkrétan a kakaótermékeket vizsgálva is elismerésre kerültek jótékony hatások, amelyek a polifenoloknak és azok antioxidáns kapacitásának tulajdonítható. A kakaóban bioaktív komponensként jelenlévő polifenolok antioxidáns, antiradikális és antikarcinogén hatású vegyületek. Az oligomer policianidinek oxidációs védelmet nyújtanak, és javítják az immunfunkciókat. Ezen felül a metilxantinoknak (theobromin és koffein) kedvező hatást tulajdonítanak a központi idegrendszerre, a szív- és érrendszerre, a gasztrointesztinális-, a légzőszervi-, és veserendszerre nézve. Ugyanakkor a csokoládéra jellemző a magas zsírtartalom, amely túlzott kalóriabevitelt eredményezhet, illetve a kakaóvajban sok a telített zsírsav, amely összefüggésbe hozható a szív- és érrendszeri megbetegedésekkel. Emellett a cukor fogyasztása fogászati problémákhoz vezethet és túlzott kalóriabevitelt eredményez. A polifenol tartalom a kakaótartalommal, kakaó szárazanyag tartalommal hozható összefüggésbe (Belščak et al., 2009).

Összességében a kakaó feltételezett módon kedvező hatást gyakorol a vérnyomásra, inzulin rezisztenciára és az érrendszeri funkciókra, ez által jó hatással van a szív- és érrendszerre. Emellett az agyi kondíciók kezelésében (mint például a stroke) szintén fontos szerepe van a kakaótermékeknek, összefüggésbe hozható az agy vérellátásának növekedése a kakaóbevitellel. Illetve kimutatták, hogy a rendszeres kakaófogyasztás gyulladáscsökkentő hatással is rendelkezik. Lehetséges antidiabetikus komponenseket is tartalmaz, a flavonolok javítják a glükóz homeosztázist azáltal, hogy lassítják a szénhidrátok emésztését és felszívódását a belekből. Ezen felül a fekete csokoládé fogyasztásának hatására jelentősen csökkenő LDL koleszterol szintet feltételeznek, míg nem vázlató vagy növekvő HDL koleszterol szintet. Ezek által jelentős szerepet feltételeznek az elhízás, vagy azzal kapcsolatos megbetegedések megelőzésében, illetve kezelésében, ezért a hatásért feltehetőleg a polifenolok, és a theobromin felelnek. A theobrominról megállapították, hogy az immunrendszer szabályozásában vesz részt valamint, hogy antidepresszáns hatással rendelkezik, kimutatható neurokognitív hatásai lehetnek, továbbá szintén antioxidáns hatású vegyület (Montagna et al., 2019; Samanta et al., 2022).

A csokoládéfogyasztás negatív hatásai közé sorolható az elhízás. Egy hat éven át tartó analízis által megállapították, hogy a csokoládéfogyasztás gyakorisága szignifikánsan összefügg a

nagyobb, hosszú távú testsúlygyarapodással, dózis-válasz mintázatot követve. (Greenberg & Buijsse, 2013). Egy szakirodalmat átfogó elemzés, melynek célja a kakaó polifenolok vagy csokoládéfogyasztás elhízással kapcsolatos kimeneteleinek felmérése volt (elhízottak esetén), megállapította a vizsgált tanulmányok alapján, hogy további kutatásokra van szükség a témában, ugyanis számos tanulmány a kakaó polifenoljainak kedvező hatását jelentette, azonban ellentétes eredményt közlő tanulmányok is vannak. A polifenolok a lipid metabolizációra, a zsírsavak oxidációjára és szintézisére kifejtett hatását, szerepét szintén további kutatások által lehet feltárni, valamint javasolják a teltségérzet hormonjainak (ghrelin, leptin, adiponectin) vizsgálatát, ugyanis a polifenolok illatának étvágycsökkentő hatása fordítottan köthető a ghrelinhez szintjéhez (Halib et al., 2020).

A kakaó feltehetőleg javítja a glükóz homeosztázist azáltal, hogy lassítja a szénhidrátok emésztését és felszívódását a belekben, a kakaó extraktum és procianidinek dózistól függően gátolják a hasnyál  $\alpha$ -amiláz és lipáz enzimeit, valamint a foszfolipáz A2 enzimet, emellett a flavonolok javítják az inzulin érzékenységet azáltal, hogy szabályozzák a glükóz transzportot és az inzulin jelző proteineket a májban, zsírszövetben és a vázizmokban, ezzel megelőzve az oxidatív és gyulladásos károkat, amelyek a 2. típusú cukorbetegséget jellemzik (Montagna et al., 2019). Az antidiabetikus hatását a kakaó polifenoloknak állatkísérletek alapján feltételezik, azonban egy diabéteszben szenvedőket vizsgáló tanulmányban sem igazolódott, így a jelenlegi adatok nem elégségesek a kakaó, csokoládé glikémiát szabályozó hatását igazolni (Halib et al., 2020). A korábbi összefoglaló tanulmányban megtalálhatók olyan eredmények, melyek a kakaótermékek fogyasztásához alacsonyabb valószínűséggel kialakuló 2. típusú diabéteszt kötnek. A kereskedelemben kapható kakaó- és csokoládétermékek általában kevés flavonolt tartalmaznak, viszont sok cukrot és kalóriában gazdagok, így a várt hatáshoz képest ellentétes következményei lehetnek a rendszeres fogyasztását tekintve. Az élettani hatásokat összevetve az eredmények alapján arra a következtetésre jutottak, hogy a csokoládé heti mennyiségének van egy optimális mértéke (45 g/hét) (Montagna et al., 2019).

A kakaó ásványi anyagok tekintetében is gazdag, a fő elemek és nyomelemek a kalcium, kálium, magnézium foszfor, kén, réz, vas, cink, mangán molibdén, szelén és a jód. A magnézium, a vas, a mangán és a réz mennyisége 100 g csokoládében az NRV értékhez mérten jelentős. A kadmium a biztonságos mennyiség alatti (Jaćimović et al., 2022; Samanta et al., 2022).

A csokoládét továbbá gyakran összefüggésbe hozzák a migrénnel. A migrén elsődleges kiváltó oka elismert módon az agyi véráramlás csökkenése, azonban számos, tudományosan nem tisztázott kiváltó, vagy súlyosbító okot felsorolnak, melyek között a csokoládé kiemelkedő

pozícióban található. Számos eredmény alapján a csokoládé fogyasztás és a fejfájásrohamok gyakorisága között nincs összefüggés, de ellenkező eredményekre is van példa. Emellett fontos megjegyezni, hogy frissebb kutatások a csokoládé kedvező hatásait feltételezik a migrénre nézve (Lippi et al., 2014).

### **3.2.3. A csokoládé vizsgálati módszerei és azok fontossága**

A csokoládé elsősorban az érzékszervi tulajdonságainak köszönhetően megbecsült termék, amelyek nagy mértékben függenek a kakaóbabok aromáitól, illetve a feldolgozási folyamatoktól. Ebből adódóan a kakaóbabok illékony komponenseinek feltérképezése gyakori témája elsősorban GC-MS (gázkromatográfia-tömegspektroszkópia) kutatásoknak, melyekben a cél főként a csokoládé minőségi attribútumainak, a kakaóbabok változatosságának, illetve a gyártásfolyamatok hatásainak felderítése, valamint a márkák jellemzése. Számos fontos GCO (gázkromatográfia olfaktometria) kutatás eredményeként a fekete és tejszokoládé fő aromakomponensei már azonosíthatók, sőt érzékszervi tulajdonságokkal is összevetésre kerültek. DIMS (közvetlen porlasztásos tömegspektrometria) módszer is jellemző a csokoládék vizsgálata, amelynek célja általában a változat vagy származás szerinti osztályozás, a relatív illékony szerves komponensmintázatuk mérése és összehasonlítása által, azonban a DIMS módszer által mért illékony szerves komponensmintázatok és panelek által meghatározott organoleptikus tulajdonságok kapcsolatáról szerzett ismeretek szűkösek. Vannak sikeres GCO kísérletek előre meghatározott érzékszervi tulajdonságok által csoportosított csokoládék fő diszkrimináló komponenseinek jellemzésére is (Deuscher et al., 2020). Az illékony komponensek profilozásához továbbá HS-SPME-vel (headspace szilárd fázisú microextrakció) kapcsolt GC-MS technika, valamint extrakciót követő GC-FID (láng ionizációs detector) technika alkalmazására is van példa (Cemin et al., 2022; Hinnéh et al., 2020; Roda & Lambri, 2019; Ooi et al., 2022). Általánosságban elmondható, hogy az illékony komponensek méréséhez gázkromatográfias módszereket használnak különböző előkészítési- és detektálási módokkal kapcsolva, de elektronikus orr használatára is van példa (Chun Lin & Meng Choong, 2021).

A csokoládé esetén az érzékszervi vizsgálatoknak is fontos szerepe van, számos különböző példa található alkalmazásukra. Gyakran technológiai lépések paramétereinek hatására irányulnak a vizsgálatok, de sokszor előfordul például egy adott helyről származó kakaóbabok aromaprofiljának jellemzése, fogyasztói preferenciák felmérése, valamint új technológiai megoldások, és új receptúrák esetén is érthető módon jelen van az érzékszervi vizsgálat

(Silveira et al., 2022; Hinneh et al., 2020; Roda & Lambri, 2019; Chun Lin & Meng Choong, 2021; Ooi et al., 2022; Cemin et al., 2022; Mejía et al., 2021; Selvasekaran & Chidambaram, 2021; Khemacheevakul et al., 2021; Medina-Mendoza et al., 2021). A fentebb hivatkozott tanulmányoknál az érzékszervileg minősített tulajdonságok elég hasonlóak, a legtöbb esetben a kakaós, csokoládés ízt vagy aromát, a savasságot, asztringenciát, keserúséget, virágos ízt vagy aromát, az édességet, a (friss) gyümölcsös ízt vagy aromát értékelték. Számos esetben került értékelésre a keménység vagy szilárdság, az olvadás, a mogyorós és a fás íz, valamint előfordult az általános aroma, íz, és számos egyéb íz és állag jellemzők értékelése is. Az általános elfogadottság, az összbenyomás és a fogyasztói kedveltség értékelésére is volt példa. Továbbá friss kutatások irányulnak a csokoládé érzékszervi tulajdonságai és a fogyasztók viselkedés, a hangulat, az ismertség, az elfogadottság, a hozzáállás, valamint az érzelmi válasz közötti kapcsolat megismerésére, mely információktól piaci versenyelőnyt remélnek, ugyanis az élelmiszerek által kiváltott érzelmek motivátorok a választás során (Mielmann et al., 2022).

A már említett növekvő fogyasztói tudatosság és a vélt pozitív egészségügyi hatások miatt csokoládé bioaktív komponenseit célzó mérések is jellemzők, vagyis a polifenolok (TPC – total polyphenol content), a flavonoidok (TFC – total flavonoid content), és ezek antioxidáns aktivitásának, vagyis az antioxidáns kapacitásának, vasredukáló képességének (FRAP – ferric reducing antioxidant power), DPPH szabadgyök fogó képességének vizsgálatát UV-Vis spektrofotometriás vizsgálatát végzik. Általánosságban elmondható, hogy a magasabb kakaótartalmú csokoládék polifenol és flavonoid tartalma nagyobb, és ezáltal ezen csokoládék antioxidáns aktivitása, azaz az antioxidáns kapacitása, a szabad gyökfogó képessége, és a vasredukáló képessége is magasabb (Jaćimović et al., 2022). Továbbá az epikatechinek és katechinek (flavonolok) mennyiségi meghatározására is található példa, UHPLC technikával (Medina-Mendoza et al., 2021).

A theobromin és a koffeintartalom meghatározása is fontos, hiszen a metilxantinoknak is számos pozitív élettani hatást. Leggyakrabban a theobromin meghatározás kromatográfiával történik, UV spektroszkópiai, tömegspektroszkópiai, elektrokémiai vagy egyéb detektálással, mint például a HPLC-DAD (diodasoros detektálás). Extrakciót követő UV-Vis spektrofotometriás meghatározásra is van példa (Haššo et al., 2023; Mejía et al., 2021; Roda & Lambri, 2019). Újjonnan direkt meghatározására is van lehetőség speciális mérőelektródák által, az elektrokémiai oxidáció mérésével. Továbbá innovatív elektroanalitikai módszerek is kidolgozásra és validálásra kerültek, mint például a theobromin meghatározása differenciál impulzus és négyszög hullám voltametriás technikák, BIA (batch injection analysis) rendszert használva amperometrikus detektálással kapcsolva (Haššo et al., 2023).

A fő nyomelemek mérése is fontos, multikomponenses ICP-OES (induktív csatolású plazma-optikai emissziós spektroszkópia) mérések során a kalcium, kálium, magnézium, kén, vas, réz és cink legnagyobb mennyiségben a legmagasabb kakaótartalmú csokoládékban volt jelen. Az étrendi bevétel 100 g fekete csokoládé esetén magnéziumra, vasra, mangánra és rézre nézve jelentős (Jaćimović et al., 2022).

### **3.3. NIR – közeli infravörös spektroszkópia**

A közeli infravörös tartomány 800-2500 nm hullámhossz, 12500-4000  $\text{cm}^{-1}$  hullámszám között található. Vibrációs spektroszkópiás technika, amely kvalitatív és kvantitatív meghatározásra is alkalmas. A NIR egy molekuláris vibráción alapuló spektroszkópiai módszer, az elektromágneses sugárzás deríti fel a molekulák szabadsági fokát, amelyek megfelelnek a kötések hosszaiban és szögeiben bekövetkező oszcillációs változásoknak, vagyis a nyúlási és deformációs rezgéseknek. A biológiai minták vizsgálatában a NIR teljes potenciálja még nem teljesen lefedett, egyedi módon alkalmazható technika, amely olyan információkat szolgáltat, amelyek a konkurens technikákkal nehezen megszerezhetők (Beć et al., 2020; Beć et al., 2022).

#### **3.3.1. A NIR spektroszkópia összehasonlítása más vibrációs spektroszkópiás technikákkal**

A többi, konkurens technika (IR, MIR, Raman) alapvető frekvenciák által okozott sávokat vizsgál, míg a NIR nem-alapvető sávokat, felhangokat, és kombinációs sávokat vizsgál. A nem-alapvető sávok megjelenése a molekuláris oszcilláció anharmonikus (többdimenziós) természetének következménye. A nem-alapvető átmenetek, főleg a kombinációk száma sokkal magasabb az alapvető átmenetek számánál, így az egyedi sávok száma is sokkal magasabb, mint az IR spektroszkópiában, így azonban átfedések lépnek fel, széles abszorpciós profilok keletkeznek. Annak valószínűsége, hogy nem-alapvető átmenet fordul elő, szignifikánsan kisebb az alapvető átmenetek előfordulási valószínűségénél, ebből adódóan a szerves molekulás elnyelése jelentősen alacsonyabb. A mintákban az IR esetén néhány  $\mu\text{m}$  mélységben hatol be a sugárzás a teljes elnyelésig, míg a NIR esetén ez a mélység néhány mm, így pl. teljes organizmusok, orvosi minták vizsgálhatók, a kismértékű inhomogenitás vagy a felszíni tulajdonságok nem befolyásolják a pontosságot. Az IR esetén a magas víztartalom problémákat okoz, a NIR jobban alkalmazható ilyen minták esetén. A Raman spektroszkópia alkalmas nagy nedvességtartalmú minták mérésére, ezzel szemben a NIR alkalmas fluoroflórokat (klorofillek, proteinek) tartalmazó minták mérésére is. Bár nagyobb mennyiségű mintára van szükség a NIR

esetén, mintaelőkészítésre nincs szükség, vagy csak minimálisan. Megemlítendő előnye még a NIR spektroszkópiának, a folyamatosan fejlődő kivitelezés, az újonnan megjelenő szenzor típusok, miniatürizált berendezések, míg az IR szenzorok limitáltak, lényegében az ATR (attenuated total reflection) szenzorra korlátozódnak (Beć et al., 2020).

### **3.3.2. NIR spektroszkópia az élelmiszeriparban**

Jelenleg az élelmiszeriparban nagy kihívást jelent az olyan berendezések fejlesztése, amelyek hordozhatóak, olcsók, robusztusak, érzékenyek, pontosak, képesek real-time mérésekre, minőségi ellenőrzésekre, ugyanis a biztonságos és minőségi élelmiszerek elérhetősége globális szinten elsőszámú prioritás, mind az egészségügy, az ellenőrző szervek, az elállítók és forgalmazók számára. Számos más innovatív megoldás mellett a NIR készülékek is megoldást jelenthetnek, ugyanis egyszerűek, roncsolásmentesek, hordozhatóak, valamint a módszer minimális mintaelőkészítést igényel, így jól alkalmazhatók gyors minőségellenőrzésre, mind élelmiszerek, mind alapanyagok esetén. Sikeres alkalmazására már számos példa létezik az élelmiszeripar minden területén. (Bwambok et al., 2020).

### **3.3.3. NIR spektroszkópia alkalmazása csokoládék esetén**

Fair-trade kakaóbabok héjjal és héj nélküli minőségi paramétereinek előrejelzésére is van példa hordozható, illetve asztali NIR készülékkel, reflexiós módban történő méréssel, intervallum PLS, PCR (principal component regression) adatelemzési módokkal társítva. A szárazanyag, a hamutartalom, a zsírtartalom, a teljes fenolos komponensek mennyisége, a fermentációs index, a pH és a titrálható savtartalom mérések adataival vetették össze a spektrális adatokat. A mérések teljesítményét befolyásolja a héj jelenléte, viszont az asztali készülék kiválóan alkalmas volt minőségi előrejelzésre (Forte et al., 2022). A héj mennyiségi meghatározását végezték FT-NIR technikával, többváltozós adatelemzés (PCA, PLS regresszió, és SVM (support vector machine) regresszió) alkalmazásával, és arra a megállapításra jutottak, hogy a módszer alkalmas az iparilag releváns 0-20% mértékben történő hamisítás meghatározására, alternatívát jelenthet a kakaó héjtartalmának meghatározására használt LC-MS technikára nézve, azonban a fejlesztett SVM regressziós modell nem független a származási helytől, a betakarítás időszakától, valamint a pörkölés fokától (Drees et al., 2023). A kakaó termékek szándékos vagy nem megfelelő technológia általi hamisításának (például héjjal) kimutatása fontos gazdasági és egészségügyi kérdés, továbbá a mogyoróval történő hamisítása is az
















allergiás egyének esetén jelentős egészségügyi kockázatot jelent. Ezeknek vizsgálatát, a hamisítás kimutatását, és mennyiségének meghatározását NIR technikával is kivitelezték (Bwambok et al., 2020). Kakaóbabok bioaktív komponensei alapján történő gyors screening módszer alkalmazására szintén található példa, ahol a zsír és fehérjetartalom, az összes cukor és összes fenoltartalom, a theobromin és fenolos komponensek, illetve az antioxidáns aktivitás adataival vetették össze a spektrális adatokat. Módosított PLS regressziót alkalmaztak az adatelemzés során, és úgy értékelték, hogy a NIR technika alkalmazható a kakaóbabok genotípusának identifikálására a fő bioaktív komponensek tartalma alapján, a zsírtartalom rutin mérése mellett (Hernández-Hernández et al., 2022). Bár nem kakaó esetén, de más tanulmányokban is van példa szabad fenolos komponensek mennyiségének, antioxidáns kapacitásnak és FT-NIR spektrumok összefüggésének vizsgálatára, ANOVA, PCA, PLS, valamint intervallum PLS adatelemzési módokkal társítva, ezzel lehetővé téve gyors, megbízható, roncsolásmentes mérésüket (*Lupinus mutabilis* magok esetén) (Estivi et al., 2022). Kakaóbabok fermentáció foka szerinti osztályozására is vannak kísérletek Vis-NIR technikával és PLS-DA adatelemzéssel, és az érzékenység, a specifikusság, a pontosság, megbízhatóság, valamint a fals negatív és pozitív eredmények alapján arra a következtetésre jutottak, hogy alkalmas a módszer a fermentáció foka szerinti osztályozásra, azonban a félig fermentált kakaóbabok esetén bizonyulnak pontosnak és megbízhatónak a mérések (Saputro et al., 2022). Ezen felül a pH és nedvességtartalom meghatározására tett kísérletek is léteznek, elérő fermentációs fokok mellett, Vis-NIR technikával és PLS regresszióval társítva. A számos spektrum előfeldolgozási mód közül az MSC (multiple scatter correction - többszörös szórás korrekció) eredményezte a legjobb modellt (Priambodo et al., 2022).

## 4. ANYAGOK ÉS MÓDSZEREK

### 4.1. Vizsgált minták

A csokoládék kiválasztásának szempontjai között csak az szerepelt, hogy ne tartalmazzanak tölteléket vagy szilárd darabokat, mint például mogyorót vagy gyümölcsöket. Egy svájci kiskereskedelmi lánc, a Denner Satellit üzletében kapható, a kritériumnak megfelelő csokoládékat vásároltuk meg, így 17 minta állt rendelkezésre, melyek között volt fekete csokoládé, tejszokoládé, gianduja tejszokoládé, valamint egy darab fehér csokoládé. Ezen felül volt egy BIO jelzéssel ellátott termék és egy sós termék is, valamint két termék belül krémes állaggal rendelkezett. A mintákat sorszámoztuk, 1-től 17-ig, és a későbbiekben ezeket a sorszámok szolgálták egyedi azonosítóként.

A minták képét és kakaótartalmát az 1. táblázat tartalmazza, valamint a minták összetevőit a 2. táblázatban foglaltam össze.

1		min. 72%	10		min. 31%
2		min. 47%	11		min. 31%
3		min. 60%	12		n.a.
4		min. 70 %	13		min. 25%
5		min. 90%	14		min. 30%
6		min. 64%	15		min. 31%
7		min. 60%	16		min. 34%
8		min. 46%	17		min. 44%
9		-			

1. táblázat: A csokoládék képe (saját képek), valamint a kakaótartalmuk



Minták sorszáma

	1	2	3	4	5	6	7	8	9	10	11	12	13	14	15	16	17
Cukor	x	x	x	x	x	x	x	x	x	x	x	x	x	x	x	x	x
Kakaóvaj	x	x	x	x	x	x	x	x	x	x	x	x	x	x	x	x	x
Kakaómassza	x	x	x	x	x	x	x	x		x	x	x	x	x	x	x	x
Zsírsegevény					x					x	x		x				
kakaópor/ Kakaó																	
Vaj		x				x	x			x	x	x	x	x			x
Sűrített, cukrozott tej										x	x		x				
Teljes tejpör							x	x				x			x	x	x
Zsíros tejpör							x	x				x		x	x		
Laktóz							x					x			x		
Növényi zsír							x					x					
Kókuszolaj																x	x
Pálmaolaj																x	x
Mogyoróolaj											x						
Mandulaolaj											x						
Mogyoró/ -massza											x		x			x	x
Mandula											x					x	x
Emulgeálószer	x	x				x	x	x	x	x	x	x	x	x	x	x	x
Aroma							x	x				x			x		
Természetes aroma	x					x	x				x		x	x		x	x
Vanília			x	x			x										
Só		x															
Árpamaláta kivonat							x					x			x		

2. táblázat: A csokoládé minták összetevői

## **4.2. Vizsgálati módszerek**

Kutatásunk során a különböző kakaótartalmú csokoládék FT-NIR vizsgálatát végeztük. A készítményeken feltüntetett nominális beltartalmi értékeket vettük alapul a minőségi és a mennyiségi vizsgálatok során.

### **4.2.1. Nominális adatok vizsgálata**

A készítményeken feltüntetett kakaó-, zsír-, szénhidrát- és fehérjetartalom értékeket statisztikai kiértékelésnek vetettük alá. Főkomponens elemzéssel vizsgáltuk, hogy a felsorolt fő paraméterek közül melyik és milyen mértékben befolyásolja a minták varianciáját. A főkomponens elemzést Unscrambler 10.4 (CAMO, Oslo, Norvégia) statisztikai szoftverrel végeztük.

### **4.2.2. FT-NIR vizsgálat**

Az FT-NIR vizsgálatokat Bruker MPA (BRUKER, Ettlingen, Németország) interferométer optikai egységet tartalmazó közeli infravörös spektroszkóppal végeztük. A spektrumok rögzítése a készülék OPUS 7.2 saját szoftverét alkalmazva 85 mm átmérőjű forgatható mintatartóban történt diffúz reflexiós mérési elrendezésben. A mérési tartomány 12 500 – 3800  $\text{cm}^{-1}$  hullámszám tartomány volt. A készülék felbontása 16  $\text{cm}^{-1}$ , léptetési sebesség 10 kHz volt. A mérési adatok detektálása PbS detektorral történt. Referenciaként arannyal bevont integráló gömböt alkalmaztunk ezáltal elkerülve az esetleges információ veszteséget. Egy-egy spektrum 1154 adatpontból épült fel. Mintánként 3 spektrumot rögzítettünk. Minden spektrum 32 alspektrum átlagaként alakult ki. A kiértékelés során a mintákról rögzített spektrumok átlagát vizsgáltuk. A mintákat kategóriákba soroltuk, mint fekete csokoládé (1.; 3.; 4.; 5.; 8. minta), tejsokoládé (2.; 6.; 7.; 10.; 12.; 14.; 15. minta), mogyorós tejsokoládé (melyek a gianduja termékek mogyoróval és mandulával) (11.; 13.; 16.; 17. minta), és fehér csokoládé (9. minta), és a kategóriába tartozó minták spektrumaiból is átlagspektrumot képeztünk.

### **4.2.3. Spektrum-kiértékelési módszerek**

A spektrumok kiértékelése során optikai és kemometriai szoftvert alkalmaztunk. A spektrum-transzformációk (első és második derivált kialakítása) az OPUS 7.2. szoftverrel történt, míg a kemometriai kiértékeléshez Unscrambler 10.4 statisztikai szoftvert alkalmaztunk.

### *Főkomponens elemzés – PCA*

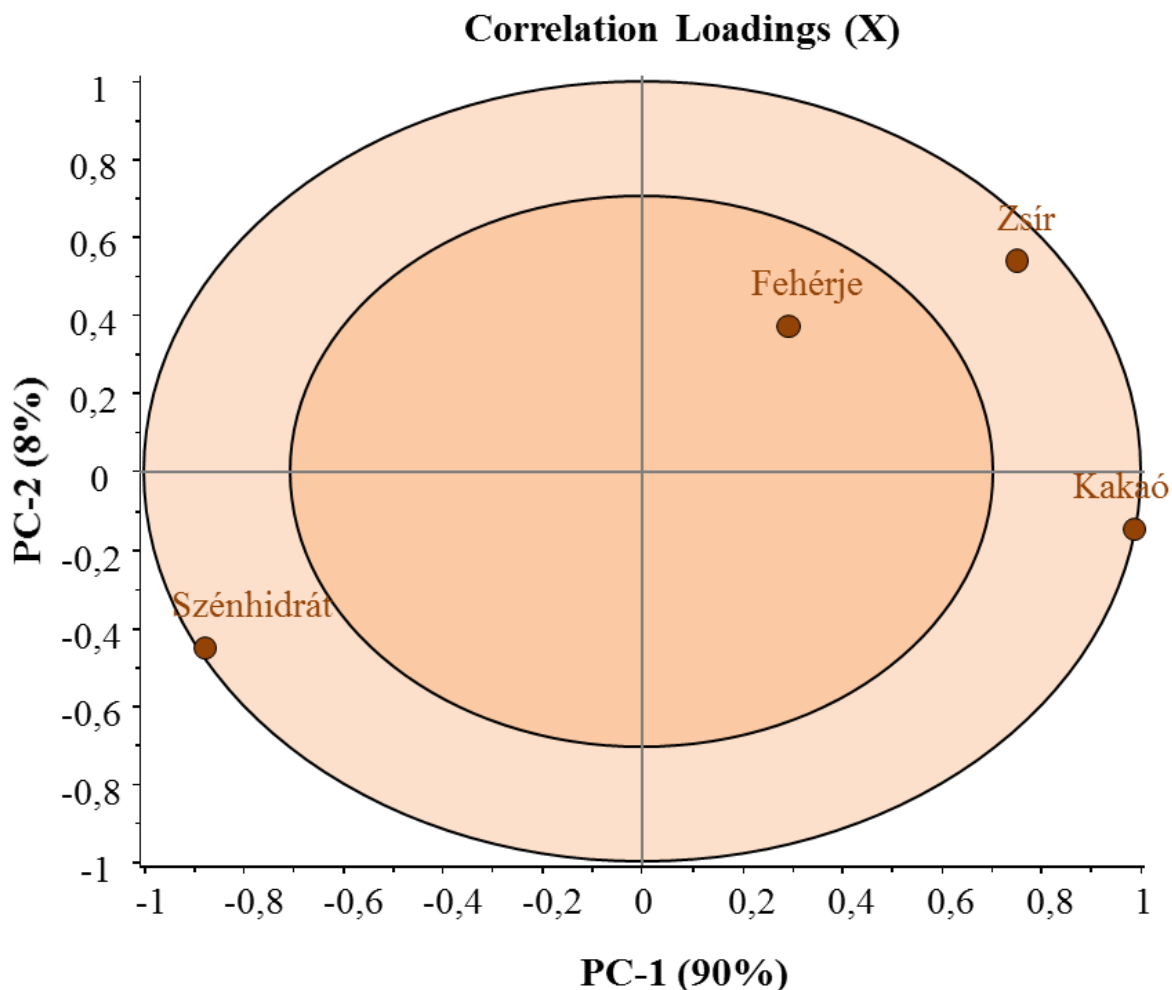
A főkomponens elemzés Unscrambler 10.4 (CAMO, Oslo, Norvégia) programban történt. A nyers spektrumok adatait vizsgáltuk véletlenszerű, 5 szegmenses keresztellenőrzéssel, annak megállapítása érdekében, hogy van-e spektrális kieső. Adatredukciós módszer lévén a spektrum tulajdonságait lecsúszítottuk úgy, hogy azt 7 főkomponens határozza meg. Ezen felül ellenőriztük a magyarázott varianciát, az F reziduális értékét, valamint Hotelling próbát is végeztünk a kieső minták ellenőrzésére.

### *Osztályozási modellek*

Az osztályozási vizsgálatok elvégzéséhez a nem felügyelt tanítású főkomponens elemzést és a felügyelt tanítású lineáris diszkriminancia analízist (LDA) alkalmaztunk, szintén az Unscrambler 10.4 (CAMO, Oslo, Norvégia) programban. Ez utóbbit elvégeztük három (fekete – tej – mogyorós -) és két (fekete – tej) csoportot vizsgálva.

## 5. EREDMÉNYEK ÉS KIÉRTÉKELÉSÜK

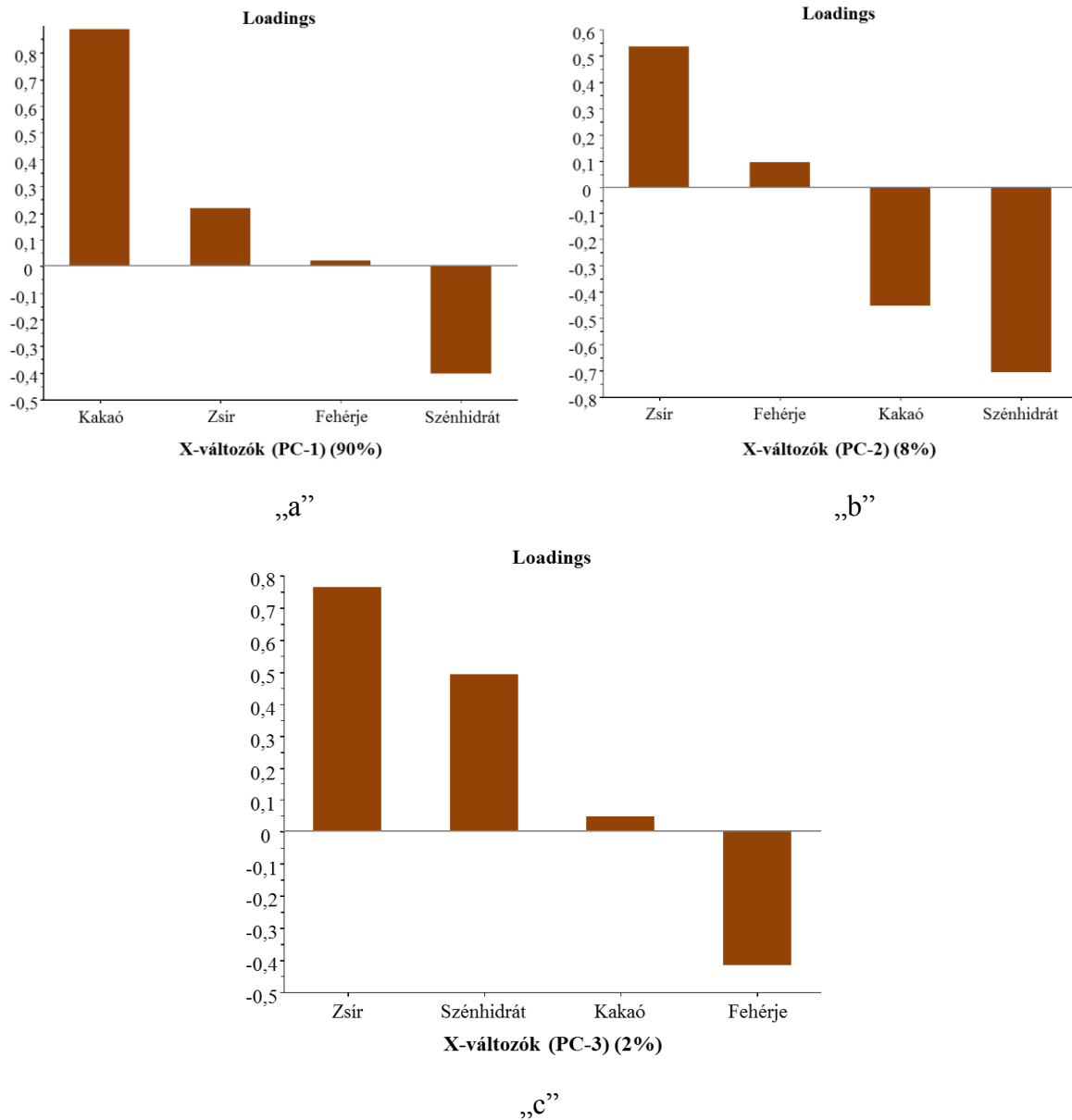
### 5.1. Nominális adatok összehasonlító vizsgálata



4. ábra: Beltartalmi paraméterekre elvégzett főkomponens elemzés

A 4. ábrán látható a beltartalmi paraméterekre, azaz a zsírra, szénhidrátra, fehérjére, valamint a kakaótartalomra lefuttatott főkomponens elemzés eredménye. Az ábrán látható külső elipszis 100%-ban, míg a belső elipszis 50%-ban magyarázza a varianciát. Ezek alapján megállapítható, hogy a kakaótartalom és a zsénhidráttartalom nagyon magas, közel 100%-ban, illetve a zsír is viszonylag magas százalékban befolyásolja a varianciát. A fehérjék vannak lekevésbé hatásosak a varianciára. A kakaótartalom tekintetében a minták értékei 0% és minimum 90% között találhatók, a szénhidrátok esetén pedig 14 g/100g és 62 g/100g közötti értékekkel rendelkeznek a minták. A zsírok esetén 30 g/100g és 55 g/100g értékek között találhatók a minták. A fehérjék esetén pedig 4,6 g/100g és 10 g/100g volt a két szélsőséges érték. Megállapítható, hogy minél

nagyobb értéktartományt fed le a mintahalmaz egy adott beltartalmi jellemzőre nézve, annál nagyobb százalékban befolyásolja a tulajdonságokat.



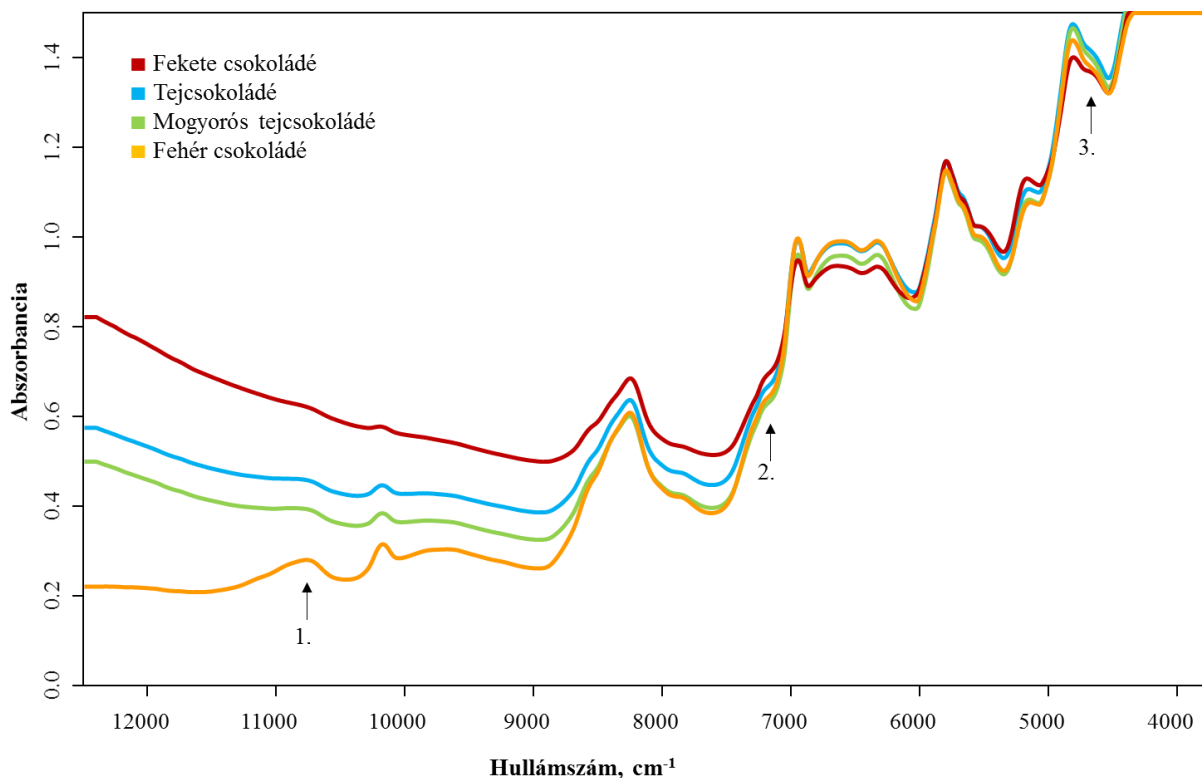
5. ábra: A beltartalmi paraméterek hatása – főkomponensek alapján

A vizsgált tulajdonságok közül a kakaótartalom (PC1 = 90%) (5.a ábra) a szénhidrát tartalom (PC2 = 8%) (5.b ábra), valamint a zsírtartalom (PC3 = 2%) (5.c ábra) határozza meg döntően a tulajdonságok varianciáját. Ez is igazolja a kakaótartalom kiemelkedő hatását.

## 5.2. FT-NIR spektrumok összehasonlító vizsgálata

A spektrumok kiértékelését  $12500\text{ cm}^{-1}$  és  $3800\text{ cm}^{-1}$  hullámszámok között végeztük. A 6. ábrán az egyes képviselők átlag spektrumát mutatom be. A  $11500\text{--}12500\text{ cm}^{-1}$  tartományban felületi szóródás, reflexió lép fel, a vegyületek színesek, ezért itt kiértékelés nem végezhető. Ez a zsírtartalommal hozható összefüggésbe, ennek függvényében van eltérés a kiindulópontok magasságában.

A spektrumok kiértékeléséhez Workman & Weyer (2012) munkáját használtuk fel.



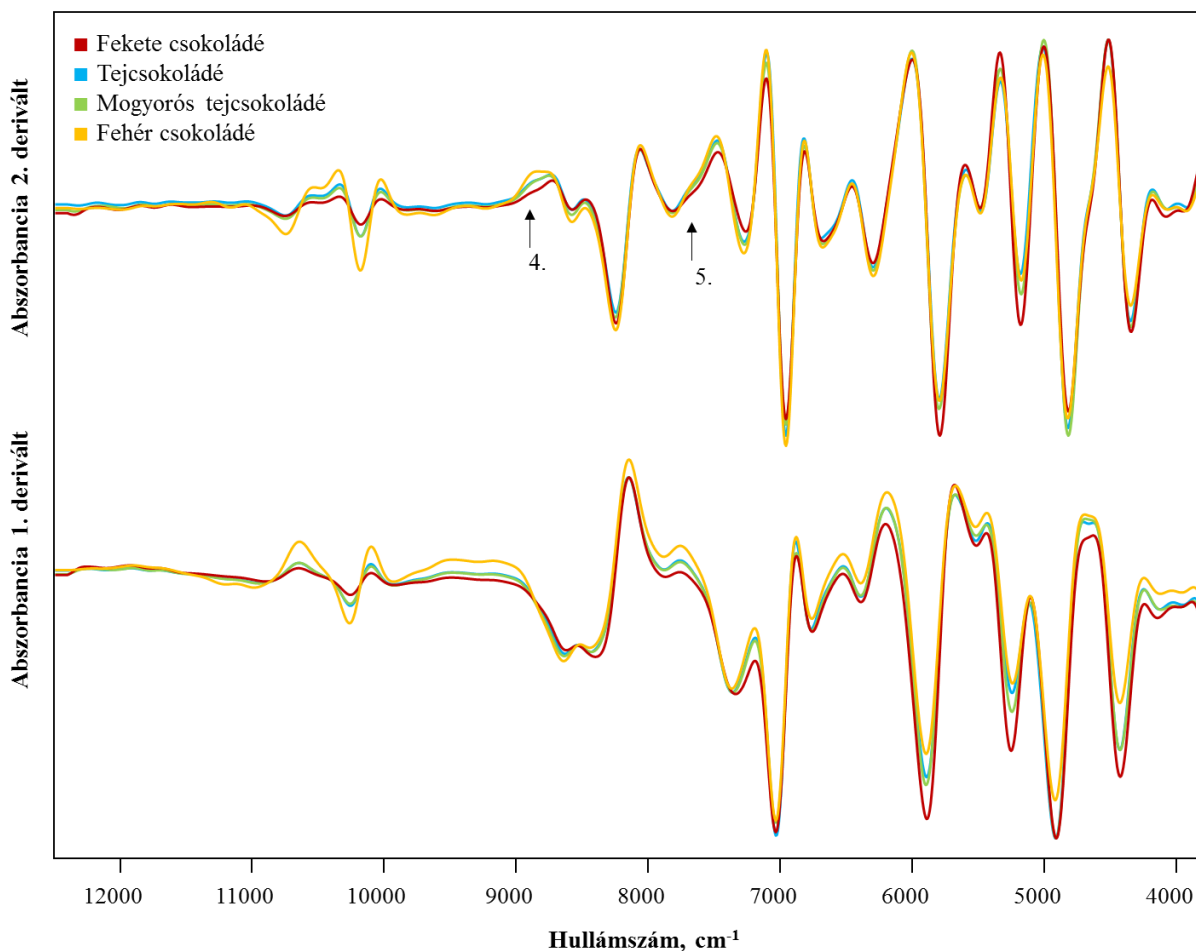
6. ábra: A kategóriák nyers átlagspektrumai

A  $12500\text{ cm}^{-1}$  tartomány felett a spektrumok jellegében mutatkoznak eltérések, vagyis a mintakategóriák között minőségbeli eltérések vannak. A spektrumok jellegében 3 fő eltérés mutatkozik, melyet a 6. ábrán a nyilak és sorszámok szemléltetnek.

1. A fehér csokoládé esetén  $10760\text{ cm}^{-1}$  hullámszámnál látható az első eltérés, egy csúcs, amely a többi kategória esetén alig jelenik meg. Ebben a mintában (egyben kategóriában) nincsen kakaópor, csak kakaóvaj, valamint tej és cukor. Ez az eltérés vélhetőleg a mintában lévő zsírsavak lánchosszával, valamint a szénhidrátokkal hozható összefüggésbe. Szénhidrátok, főleg a cukrok tekintetében a fehér csokoládé rendelkezik a legmagasabb (átlag) értékkel, amely  $55\text{ g}/100\text{g}$ , így vélhetőleg ennek

köszönhető, hogy ebben a kategóriában a legkifejezettebb a csúcs. A tejsokoládék, és a mogyorós tejsokoládék esetén (egész számokra kerekítve) 44g/100g valamint 47g/100g az átlag érték, és a spektrumban látható szintén a csúcs, viszont kevésbé kifejezett, mint a fehér csokoládé esetén. A fekete csokoládé kategória átlagspektrumában is látszik az ív, azonban csúcsnak ez nem nevezhető, és ez szintén egyeztethető a cukortartalommal, ennek a kategóriának volt a legkisebb az átlag cukortartalma, 32g/100g értékkel. A zsírtartalom tekintetében a fehér csokoládé rendelkezett a legalacsonyabb (átlag) értékkel, így amennyiben a zsírok is közrejátszanak a spektrum módosulásában az adott hullámszámnál, nem mennyiségi, hanem minőségi eltérések által.

2. A tejsokoládék esetén 7100  $\text{cm}^{-1}$  hullámszám körül figyelhető meg jellegbeli eltérés, a feketecsokoládé spektrumának lefurása eltér a tejsokoládé, a mogyorós tejsokoládé és a fehér csokoládé spektrumától. Ennek oka valószínűleg a magas kakaó tartalommal összefüggésben levő kakaóvaj
3. A tejsokoládék, továbbá a mogyorós tejsokoládék esetén 4300  $\text{cm}^{-1}$  hullámszám környékén jellegbeli eltérések figyelhetők meg a spektrumokban, ami a tej zsírtartalmával van összefüggésben, a tejszír eltérő minőségű a kakaóvajhoz képest. A fekete csokoládéban és a fehér csokoládéban főként kakaóvaj található zsiradéként, a tejsokoládékban és a mogyorós tejsokoládékban egyéb növényi zsírok/olajok is előfordulnak (pálma, kókusz, pálmamag, korpa, mogyoró, mandula), valamint nagyobb mennyiségben megtalálható a tej eredetű zsiradék is. Megjegyzendő azonban, hogy a fehér csokoládé is tartalmaz tej eredetű zsiradékot, viszont ez a spektrumban is észlelhető, a fehér csokoládé jellege a tejsokoládék, valamint a fekete csokoládé kategóriák jellege között alakul, nem azonos a feketecsokoládé jellegével.
- Minden kategória esetén látszik egy csúcs 10180  $\text{cm}^{-1}$  hullámszámnál, amely feltehetőleg a lecitinhez (hosszú szénláncához) köthető. A fekete csokoládé minták közül nem mind tartalmazott lecitint, aminek következtében az átlagspektrumban látható csúcs is kevésbé kifejezett, a többihez képest.



7. ábra: A nyers spektrumok első és második deriváltja

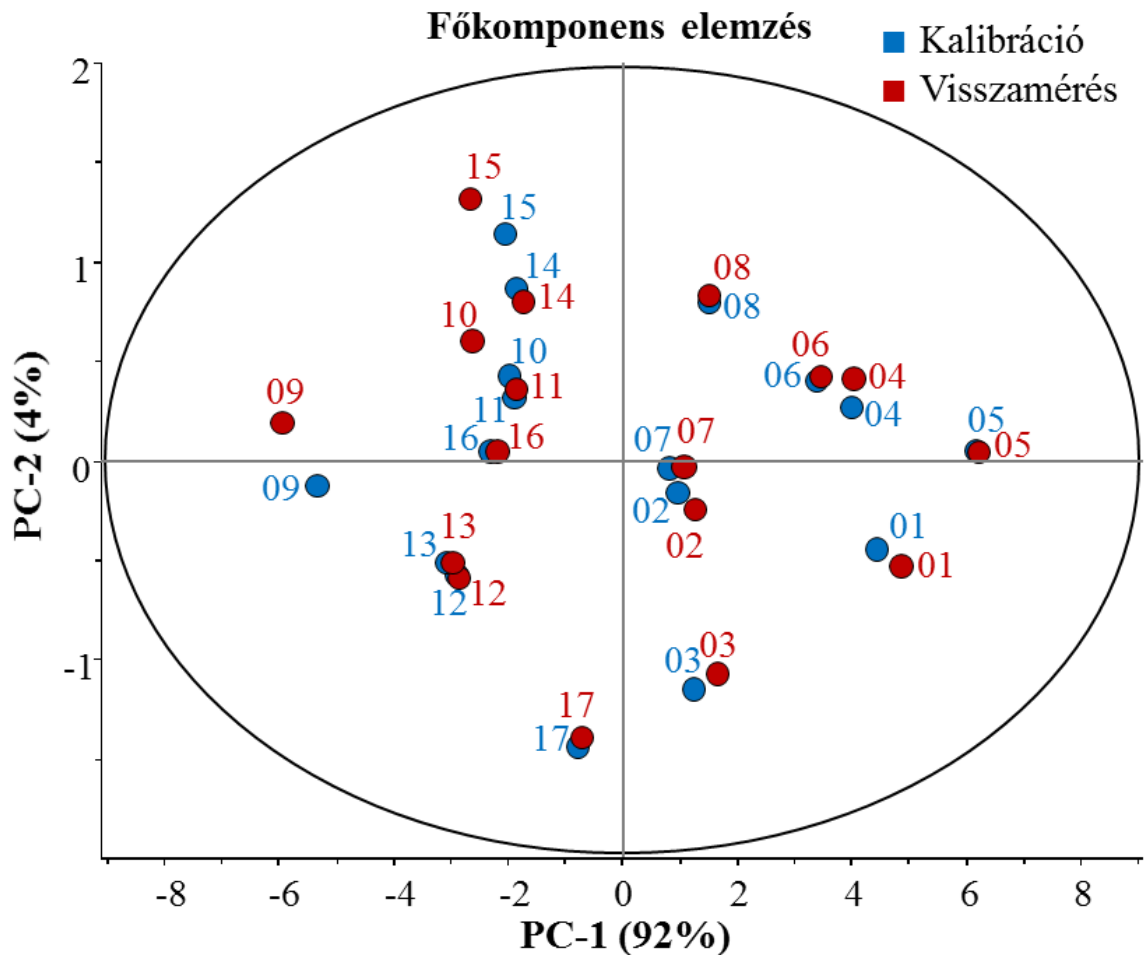
A fényszóródás, amely a minták nagy zsírtartalma miatt jelentős szerepet játszik a nyers spektrumok eltéréseiben, a deriválással kiküszöbölhető. Az első derivált esetén már kevésbé látszódnak a nyers spektrumok esetén érzékelhető eltérések, azonban a második deriváltnál jobban megfigyelhetők, ezt a 7. ábra szemlélteti. Az ábrán feltüntetett nyilaknak megfelelően:

4. A második derivált esetén  $8800\text{ cm}^{-1}$  hullámszámnál a fehér csokoládénál figyelhető meg leginkább eltérés, amely a zsírokhoz, szénhidrogén láncokhoz köthető, de a szénhidrátok, azon belül a rostok is közre játszhatnak.
5. Szintén a második derivált esetén megfigyelhető  $7600\text{ cm}^{-1}$  hullámszámnál, hogy általánosságban van eltérés a minőségi összetételben a zsíroknak és az olajoknak köszönhetően.



### 5.3. Kemometriai kiértékelés

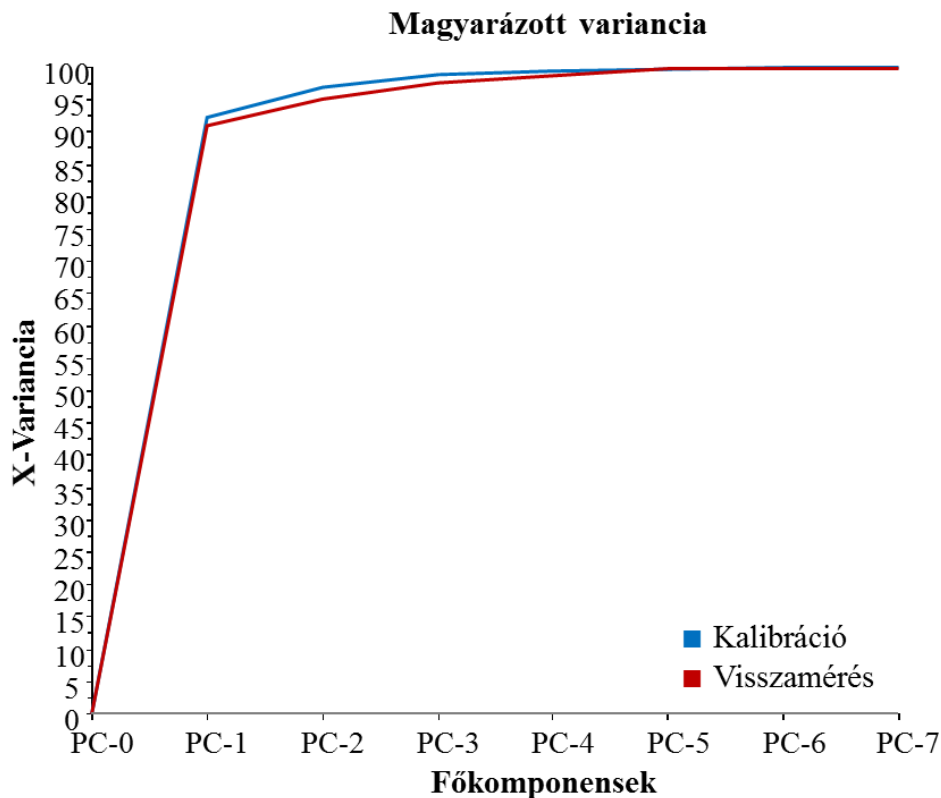
#### 5.3.1. Főkomponens elemzés



8. ábra: A főkomponens elemzés eredménye

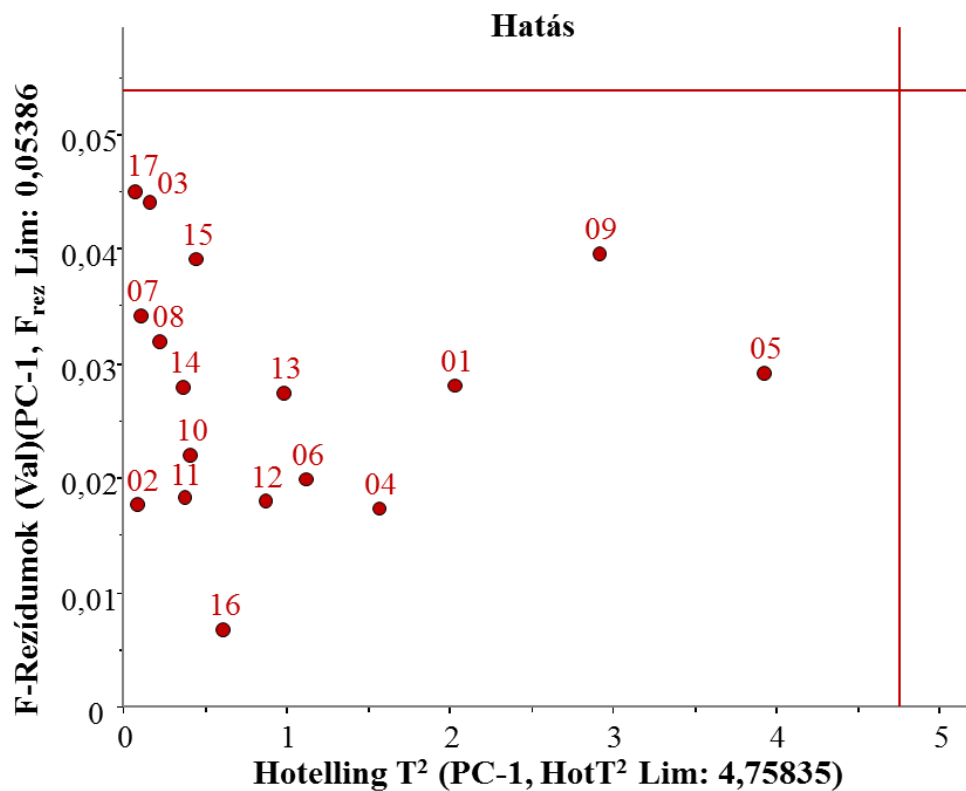
A főkomponens elemzést a nyers spektrumok adataiból végeztük, ennek eredményét a 8. ábra szemlélteti. Az első két főkomponens 96%-ban, nagy részben (92%-ban) az első, kisebb részben (4%-ban) a második magyarázza a minták tulajdonságainak varianciáját. 95%-os konfidencia intervallum mellett a mintahalmaz azonosnak tekinthető, vagyis nincs spektrális kieső. Az összefüggés ellenőrzése véletlenszerű 5 szegmenses keresztellenőrzéssel történt. Feltehetőleg az 1. főkomponens a kakaótartalom, 2 ismert kakaótartalmú minta esetén minimális eltérés van a sorrendben. A 16. és 14. minták 34% és 31% kakaótartalommal rendelkeznek, míg a 10.; 11.; 15. minták mind 31% kakaótartalommal, azonban ezek a pontok elég közel helyezkednek el egymáshoz. A 2.; 3.; 7.; 8. minták esetén azonban meglepő, hogy a pontok az 1. főkomponens szerint a látható sorrendben alakultak, ugyanis a 8. minta 46%, a 2.

minta 47%, a 3. és 7. minta pedig 60% kakaótartalommal rendelkezik, a 8. minta a 60% kakaótartalom fölé esik, valamint a 60% kakaótartalom közel azonos síkban helyezkedik el a 47%-os kakaótartalommal. A 2. főkomponens tekintetében az ismert tápértékadatok alapján nem mutatkozik a minták elhelyezkedésével azonos tendencia, így a 2. főkomponens megállapítására ezek alapján nincs lehetőség.



9. ábra: Magyarázott variancia

A magyarázott variancia (9. ábra) két szempontból is fontos. Egyrészt ahol a magyarázott variancia görbén törés van, az mutatja, hogy hány főkomponens hatását kell vizsgálni. A 8. ábrán is látható, hogy az első két főkomponens 96%-ban magyarázza a tulajdonságok varianciáját. A harmadik főkomponens hatása elenyésző. Másrészt a modell helyességére is választ kapunk, mert ha a kalibráció és az ellenőrzés görbéje közel – szinte egymáson – fut, az a modell helyességére, torzítás mentességére utal.

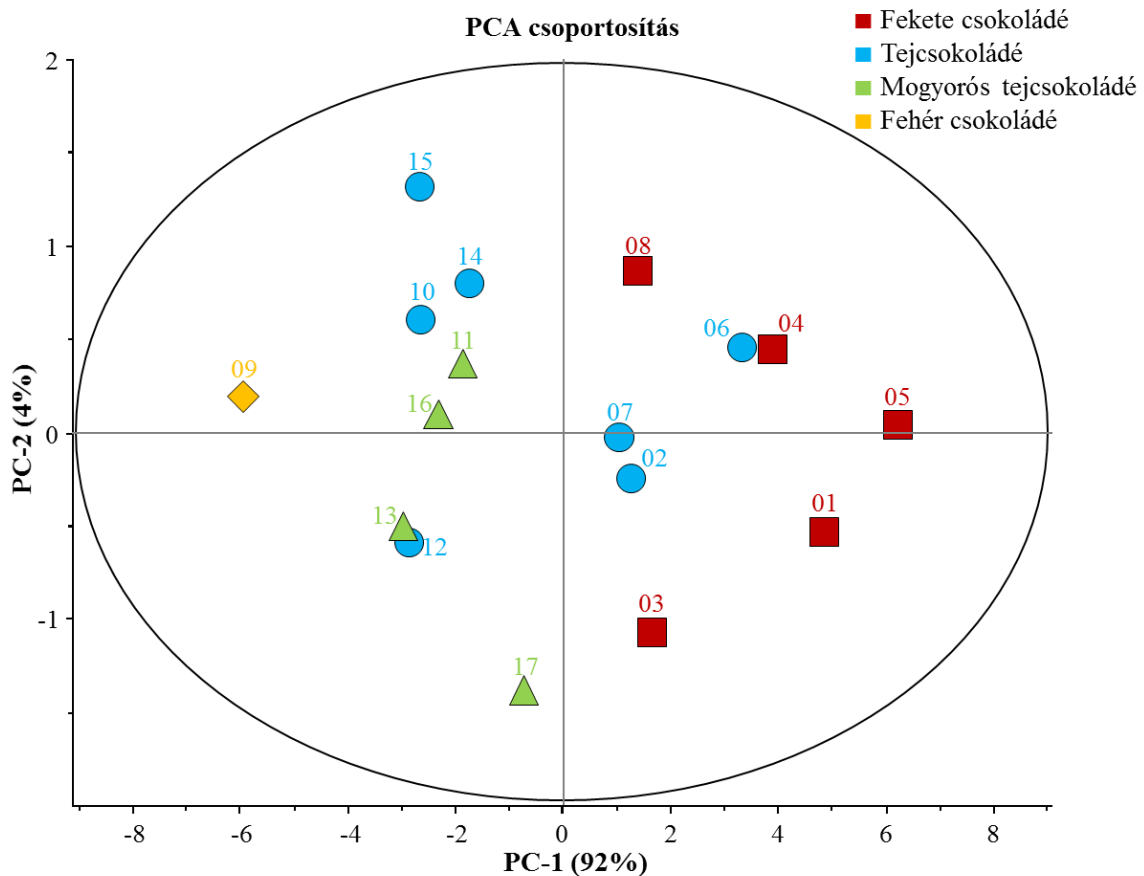


10. ábra: Hotelling próba

A mintahalmaz további ellenőrzését szolgálja az F-reziduális vs. Hotelling  $T^2$  összefüggés vizsgálata (10. ábra). A Hotelling  $T^2$  próba eredménye alapján a modell nem torzított, az összes minta a bal alsó kvadránsba esik.

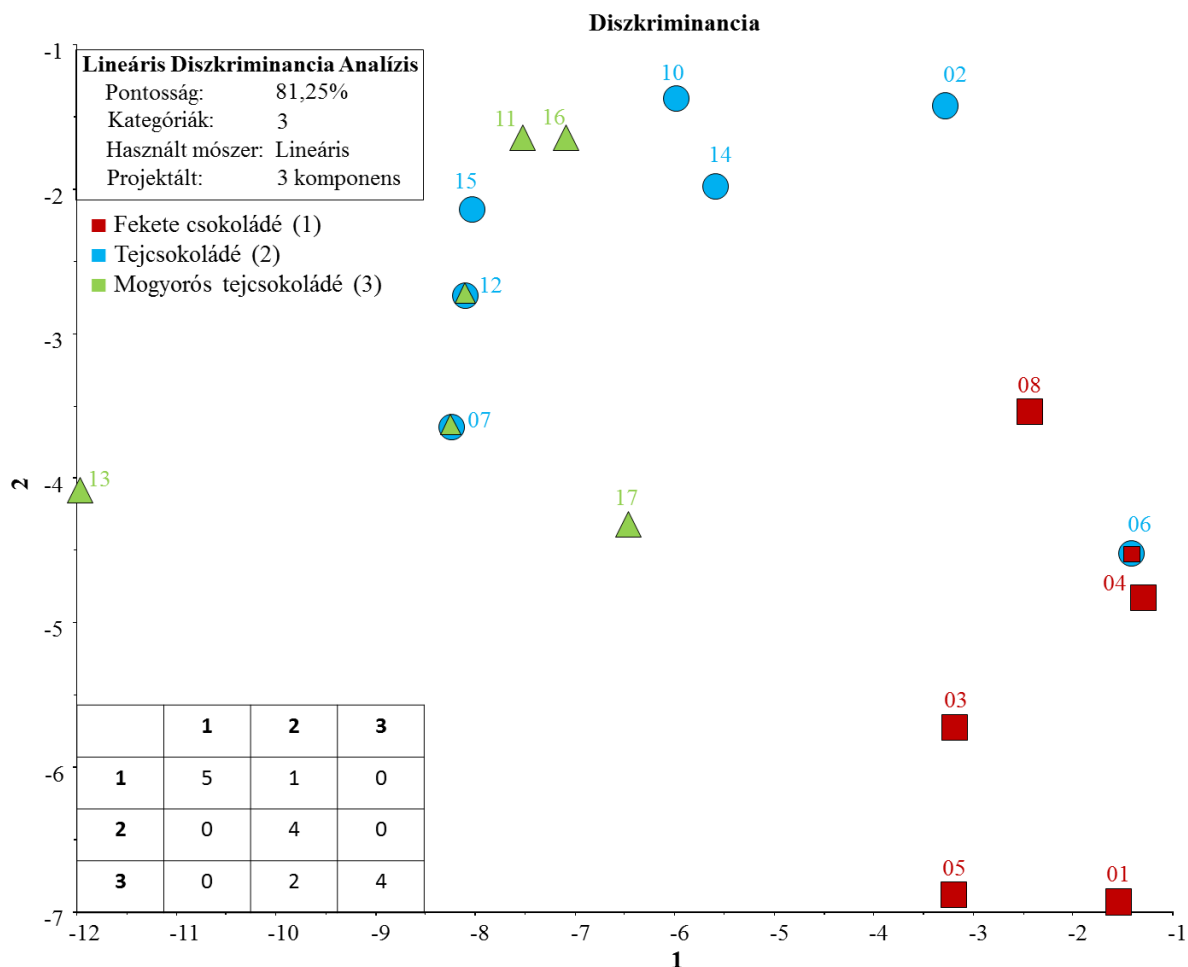
### 5.3.2. Osztályozási modellek

A főkomponens elemzést (11. ábra) megadott csoportokkal is elvégeztük, amelyen viszonylag jól elkülönülnek a csoportok.



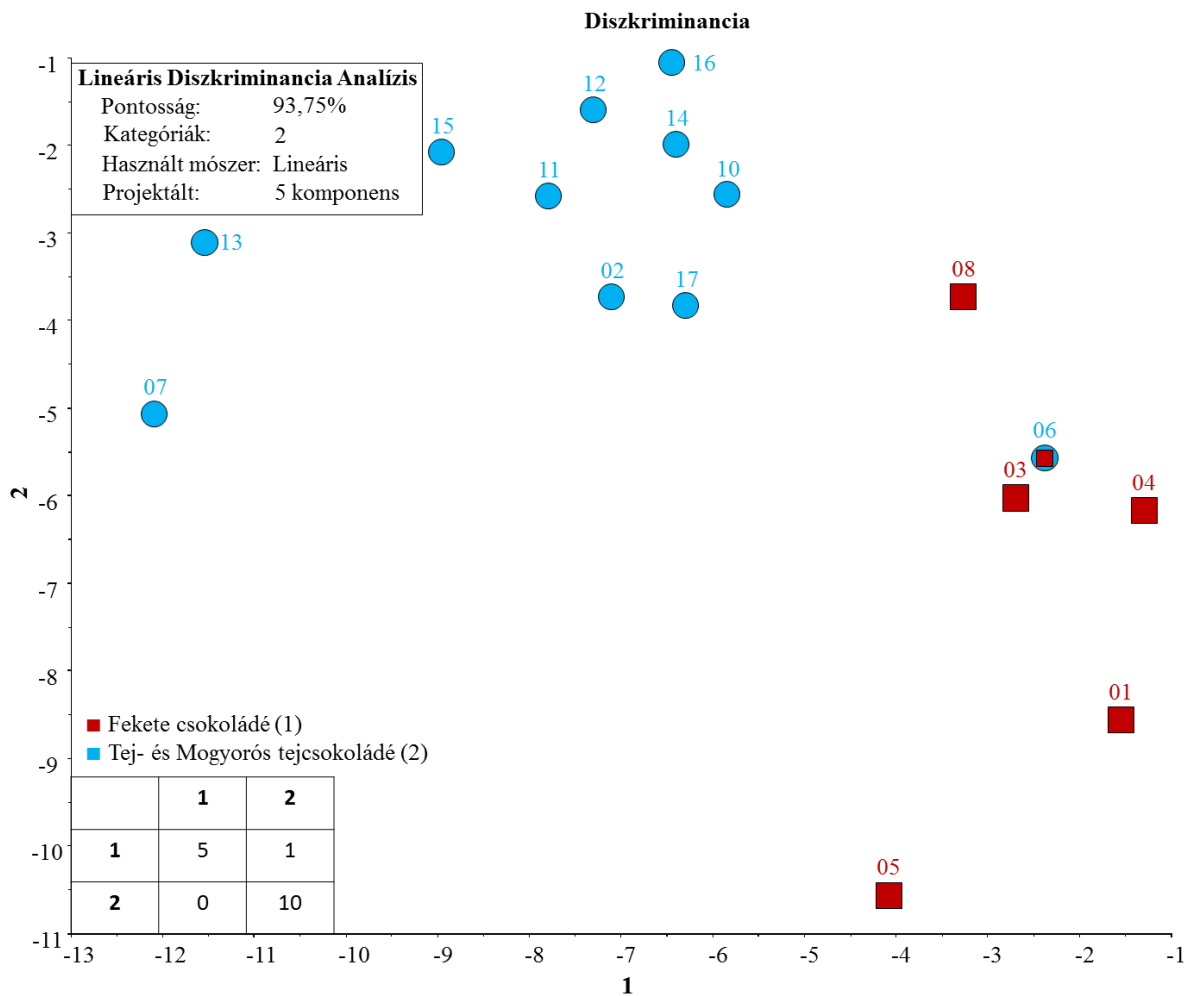
11. ábra: Főkomponens elemzés, csoportosítás

A kakaó tartalom miatt lehet átfedés az egyes csoportokban, a 6. tejsokoládé minta viszonylag nagy, 64% kakaótartalommal rendelkezik, míg a 8. minta feketecsokoládé lévén viszonylag alacsony, 46% kakaótartalmú minta volt. A már korábban említett módon, itt érdekes, hogy a 46-47% (2. és 8. minta) kakaótartalom azonos síkban helyezkedik el az x-tengely, azaz az 1. főkomponens, a kakaótartalom mentén a 60% kakaótartalmú (3. és 7.) mintákkal. Az, hogy a mogyorós tejsokoládék és a tejsokoládék viszonylag átfednek a kakaótartalom szempontjából, logikus, ugyanis a mogyorós minták is tejsokoládék voltak, hasonló kakaó tartalom értékekkel.



12. ábra: Lineáris diszkriminancia analízis 3 kategóriára

A lineáris diszkriminancia analízist 3 főkomponens alapján, 3 kategóriára futtattuk le, melynek eredménye a 12. ábrán látható. A fehércsokoládét kivettük ebből az értékelésből, tekintve, hogy mindössze egy mintával rendelkezünk. A fekete csokoládék és a mogyorós tejsokoládék esetén 100%-os az elkülönülés, a tejsokoládé esetén azonban 2 mintát a mogyorós tejsokoládé kategóriába, valamint 1 mintát a feketecsokoládé kategóriába sorolt, így 81,25% pontosságot eredményezve. A 6. minta a már említett módon viszonylag magas kakaó tartalmú tejsokoládé, vélhetőleg ennek következtében kategorizálódott a feketecsokoládék közé. A 12. és 7. tejsokoládé minták tekintetében a nem megfelelő besorolás oka feltehetőleg a kakaóvajtól eltérő növényi zsírok és olajok jelenléte. A 13. mintát leszámítva (ez eléggé el is különül az ábrán) minden mogyorós tejsokoládé minta tartalmaz pálma és kókusz olajat (16. és 17. minták) vagy mogyoró és mandula olajat (11. minta). A tejsokoládék közül azonban egyedül a 12. és a 7. minták tartalmaznak növényi olajat, a többi minta csak kakaóvaját és tej eredetű zsírokat tartalmaz.



13. ábra: Lineáris diszkriminancia analízis 2 kategóriára

Ezt követően 5 főkomponens alapján 2 kategóriára is lefuttattuk a lineáris diszkriminancia analízist (13. ábra). Ez a vizsgálat már 93,75%-os pontosságot eredményezett. A tejsokoládék és a mogyorós tejsokoládék alkották a második kategóriát a fekete csokoládék mellett. Egyetlen rosszul kategorizált minta akad, amely a 6., magas kakaótartalmú tejsokoládé minta.

## 6. ÖSSZEFOGLALÁS

Méréseink eredményei alapján szerzett információk önmagukban nem alkalmazhatók gyártásközi ellenőrzésre, azonban hasznosak lehetnek további kutatások céljára.

A beltartalmi jellemzők tekintetében megállapítható, hogy minél nagyobb értéktartományt fed le a mintahalmaz egy adott beltartalmi jellemzőre nézve, annál nagyobb százalékban befolyásolja a tulajdonságokat. A beltartalmi jellemzőkre futtatott főkomponens elemzés alapján a kakaó tartalom és a szénhidrát tartalom jelentősen befolyásolják a termékek minőségi attribútumait, valamint a zsírtartalom kisebb befolyással bír. A fehérjetartalom hatása elenyésző. Ebből a szempontból érdekes lehet alternatív és dúsított termékek vizsgálatával kiegészíteni az eredményeinket, ugyanis lehetséges, hogy fehérjével dúsított, más zsírokkal helyettesített, valamint cukor-csökkentett vagy mentes termékek esetén máshogy alakulna a terméktulajdonságokat befolyásoló beltartalmi jellemzők sorrendje. Azt, hogy 3 fő befolyásoló tényező van az adott mintahalmaz esetén, a NIR spektroszkópiával nyert nyerspektrumok adatai alapján végzett magyarázott variancia is alátámasztja, valamint a nyersspektrumok adataira vonatkozó főkomponens elemzés eredményeként is ugyan ez a következtetés vonható le, azonban számszerűsítve kisebb eltérések figyelhetők meg. A beltartalmi jellemzők esetén az első főkomponens 90%-ban, a második főkomponens 8%-ban, és a harmadik főkomponens 2%-ban határozzák meg a tulajdonságok varianciáját. A NIR nyersspektrum adatai alapján végzett PCA szerint azonban az első és a második főkomponensek 92% és 4%-ban vannak hatással a tulajdonságokra.

Megállapítható, hogy a NIR spektroszkópia jól el tudja különíteni a tejsokoládé és fekete csokoládé kategóriákat, bár a szokásosnál magasabb kakaótartalmú tejsokoládé hibát eredményezhet, ugyanis nem a tej jelenléte okozza a külön csoportokat, hanem a kakaótartalom. Ezen felül megállapítható, hogy a mogyoró, mandula jelenléte nem okozott külön csoportosulást a tejsokoládé kategóriában, ami alapján a gianduja termékek nem osztályozhatók ily módon. A fehér csokoládé 0% kakaótartalommal adott módon jól elkülönül a NIR nyersspektrumok adatai alapján végzett PCA szerint, ugyanakkor az LDA vizsgálatnál figyelmen kívül kellett hagynunk, mert mindössze egy mintánk volt és ez torzítja az összefüggést.

A NIR nyersspektrumok, valamint az 1. és 2. deriváljái vizsgálatánál felfedezett eltérések jól magyarázható a mintákon feltüntetett beltartalmi információkkal, összetevők jelenlétével vagy hiányával.

Javasolt lenne az egyes kategóriák mintaszámának bővítése, főként a fehér csokoládé esetén, ugyanis egyetlen termék került mérésre a jelen vizsgálat során. Ezen felül érdekes lenne az eredményeket kiegészíteni a minták kakaó-származási helye szerinti újrakategorizálással (amennyiben ismert), értékes eredmény lehet annak megállapítása, hogy képes-e a NIR spektroszkópia a termékek kakaó származási helye szerinti szétválasztására.



## 7. IRODALMI HIVATKOZÁSOK

1. Beć, K. B., Grabska, J., & Huck, C. W. (2020). Near-infrared spectroscopy in bio-applications. *Molecules* (Basel, Switzerland), 25(12), 2948. <https://doi.org/10.3390/molecules25122948>
2. Beć, K. B., Grabska, J., & Huck, C. W. (2022). Miniaturized NIR spectroscopy in food analysis and quality control: Promises, challenges, and perspectives. *Foods* (Basel, Switzerland), 11(10), 1465. <https://doi.org/10.3390/foods11101465>
3. Belščak, A., Komes, D., Horžić, D., Ganić, K. K., & Karlović, D. (2009). Comparative study of commercially available cocoa products in terms of their bioactive composition. *Food Research International* (Ottawa, Ont.), 42(5–6), 707–716. <https://doi.org/10.1016/j.foodres.2009.02.018>
4. Bwambok, D. K., Siraj, N., Macchi, S., Larm, N. E., Baker, G. A., Pérez, R. L., Ayala, C. E., Walgama, C., Pollard, D., Rodriguez, J. D., Banerjee, S., Elzey, B., Warner, I. M., & Fakayode, S. O. (2020). QCM sensor arrays, electroanalytical techniques and NIR spectroscopy coupled to multivariate analysis for quality assessment of food products, raw materials, ingredients and foodborne pathogen detection: Challenges and breakthroughs. *Sensors* (Basel, Switzerland), 20(23), 6982. <https://doi.org/10.3390/s20236982>
5. Cemin, P., Reis Ribeiro, S., de Candido de Oliveira, F., Leal Leães, F., Regina Dos Santos Nunes, M., Wagner, R., & Sant'Anna, V. (2022). Chocolates with Brazilian cocoa: Tracking volatile compounds according to consumers' preference. *Food Research International* (Ottawa, Ont.), 159(111618), 111618. <https://doi.org/10.1016/j.foodres.2022.111618>
6. Chun Lin, Y., & Meng Choong, Y. (2021). The influence on phenolic, aroma compounds, rheological and sensory properties of chocolates by different strains inoculated fermentation. *Journal of Food and Nutrition Research*, 9(3), 124–135. <https://doi.org/10.12691/jfnr-9-3-4>
7. Clark, C., Bettenhausen, H. M., Heuberger, A. L., Miller, J., Yao, L., & Stone, M. (2020). Effects of time and temperature during melanging on the volatile profile of dark chocolate. *Scientific Reports*, 10(1), 14922. <https://doi.org/10.1038/s41598-020-71822-0>

8. de Souza, P. A., Moreira, L. F., Sarmiento, D. H. A., & da Costa, F. B. (2018). Cacao—*Theobroma cacao*. In *Exotic Fruits* (pp. 69–76). Elsevier., ISBN 9780128031384, <https://doi.org/10.1016/B978-0-12-803138-4.00010-1>
9. Del Prete, M., & Samoggia, A. (2020). Chocolate consumption and purchasing behaviour review: Research issues and insights for future research. *Sustainability*, 12(14), 5586. <https://doi.org/10.3390/su12145586>
10. Deuscher, Z., Gourrat, K., Repoux, M., Boulanger, R., Labouré, H., & Le Quéré, J.-L. (2020). Key aroma compounds of dark chocolates differing in organoleptic properties: A GC-O comparative study. *Molecules* (Basel, Switzerland), 25(8), 1809. <https://doi.org/10.3390/molecules25081809>
11. Drees, A., Brockelt, J., Cvancar, L., & Fischer, M. (2023). Rapid determination of the shell content in cocoa products using FT-NIR spectroscopy and chemometrics. *Talanta*, 256(124310), 124310. <https://doi.org/10.1016/j.talanta.2023.124310>
12. Estivi, L., Grassi, S., Briceño-Berrú, L., Glorio-Paulet, P., Camarena, F., Hidalgo, A., & Brandolini, A. (2022). Free phenolic compounds, antioxidant capacity and FT-NIR survey of debittered *Lupinus mutabilis* seeds. *Processes* (Basel, Switzerland), 10(8), 1637. <https://doi.org/10.3390/pr10081637>
13. Ewens, H., Metilli, L., & Simone, E. (2021). Analysis of the effect of recent reformulation strategies on the crystallization behaviour of cocoa butter and the structural properties of chocolate. *Current Research in Food Science*, 4, 105–114. <https://doi.org/10.1016/j.crf.2021.02.009>
14. Forte, M., Currò, S., Van de Walle, D., Dewettinck, K., Mirisola, M., Fasolato, L., & Carletti, P. (2022). Quality evaluation of fair-trade cocoa beans from different origins using portable near-infrared spectroscopy (NIRS). *Foods* (Basel, Switzerland), 12(1), 4. <https://doi.org/10.3390/foods12010004>
15. Fouet, O., Llor Solórzano, R. G., Rhoné, B., Subía, C., Calderón, D., Fernández, F., Sotomayor, I., Rivallan, R., Colonges, K., Vignes, H., Angamarca, F., Yaguana, B., Costet, P., Argout, X., & Lanaud, C. (2022). Collection of native *Theobroma cacao* L. accessions from the Ecuadorian Amazon highlights a hotspot of cocoa diversity. *Plants, People, Planet*, 4(6), 605–617. <https://doi.org/10.1002/ppp3.10282>
16. Goya, L., Kongor, J. E., & de Pascual-Teresa, S. (2022). From cocoa to chocolate: Effect of processing on flavanols and methylxanthines and their mechanisms of action. *International Journal of Molecular Sciences*, 23(22), 14365. <https://doi.org/10.3390/ijms232214365>

17. Greenberg, J. A., & Buijsse, B. (2013). Habitual chocolate consumption may increase body weight in a dose-response manner. *PloS One*, 8(8), e70271. <https://doi.org/10.1371/journal.pone.0070271>
18. Gutiérrez-Ríos, H. G., Suárez-Quiroz, M. L., Hernández-Estrada, Z. J., Castellanos-Onorio, O. P., Alonso-Villegas, R., Rayas-Duarte, P., Cano-Sarmiento, C., Figueroa-Hernández, C. Y., & González-Rios, O. (2022). Yeasts as producers of flavor precursors during cocoa bean fermentation and their relevance as starter cultures: A review. *Fermentation*, 8(7), 331. <https://doi.org/10.3390/fermentation8070331>
19. Halib, H., Ismail, A., Mohd Yusof, B.-N., Osakabe, N., & Mat Daud, Z. A. (2020). Effects of cocoa polyphenols and dark chocolate on obese adults: A scoping review. *Nutrients*, 12(12), 3695. <https://doi.org/10.3390/nu12123695>
20. Haško, M., Matúšková, I., & Švorc, L. (2023). Easy, rapid and high-throughput analytical sensing platform for theobromine quantification in chocolate and cocoa products based on batch injection analysis with amperometric detection. *Journal of Food Composition and Analysis: An Official Publication of the United Nations University, International Network of Food Data Systems*, 115(105035), 105035. <https://doi.org/10.1016/j.jfca.2022.105035>
21. Hernández-Hernández, C., Fernández-Cabanás, V. M., Rodríguez-Gutiérrez, G., Fernández-Prior, Á., & Morales-Sillero, A. (2022). Rapid screening of unground cocoa beans based on their content of bioactive compounds by NIR spectroscopy. *Food Control*, 131(108347), 108347. <https://doi.org/10.1016/j.foodcont.2021.108347>
22. Hinneh, M., Abotsi, E. E., Van de Walle, D., Tzompa-Sosa, D. A., De Winne, A., Simonis, J., Messens, K., Van Durme, J., Afoakwa, E. O., De Cooman, L., & Dewettinck, K. (2019). Pod storage with roasting: A tool to diversifying the flavor profiles of dark chocolates produced from “bulk” cocoa beans? (part I: aroma profiling of chocolates). *Food Research International (Ottawa, Ont.)*, 119, 84–98. <https://doi.org/10.1016/j.foodres.2019.01.057>
23. Hinneh, M., Abotsi, E. E., Van de Walle, D., Tzompa-Sosa, D. A., De Winne, A., Simonis, J., Messens, K., Van Durme, J., Afoakwa, E. O., De Cooman, L., & Dewettinck, K. (2020). Pod storage with roasting: A tool to diversifying the flavor profiles of dark chocolates produced from “bulk” cocoa beans? (Part II: Quality and sensory profiling of chocolates). *Food Research International (Ottawa, Ont.)*, 132(109116), 109116. <https://doi.org/10.1016/j.foodres.2020.109116>
24. ICCO Monthly Cocoa Market Report – December 2022

25. ICCO Quarterly Bulletin of Cocoa Statistics, Vol. XLVII, No.4, Cocoa year 2021/22  
Published: 30.11.2022
26. Jaćimović, S., Popović-Djordjević, J., Sarić, B., Krstić, A., Mickovski-Stefanović, V., & Pantelić, N. Đ. (2022). Antioxidant activity and multi-elemental analysis of dark chocolate. *Foods* (Basel, Switzerland), 11(10), 1445. <https://doi.org/10.3390/foods11101445>
27. Jumnonpon, R., Chaiseri, S., Hongsprabhas, P., Healy, J. P., Meade, S. J., & Gerrard, J. A. (2012). Cocoa protein crosslinking using Maillard chemistry. *Food Chemistry*, 134(1), 375–380. <https://doi.org/10.1016/j.foodchem.2012.02.189>
28. Khemacheevakul, K., Wolodko, J., Nguyen, H., & Wismer, W. (2021). Temporal sensory perceptions of sugar-reduced 3D printed chocolates. *Foods* (Basel, Switzerland), 10(9). <https://doi.org/10.3390/foods10092082>
29. Kozelová, D., Matejková, E., Fikselová, M., & Děkányová, J. (2014). Analysis of consumer behavior at chocolate purchase. *Potravinarstvo*, 8(1), 62–66. <https://doi.org/10.5219/325>
30. Lippi, G., Mattiuzzi, C., & Cervellin, G. (2014). Chocolate and migraine: the history of an ambiguous association. *Acta Bio-Medica : Atenei Parmensis*, 85(3), 216–221.
31. Medina-Mendoza, M., Rodriguez-Pérez, R. J., Rojas-Ocampo, E., Torrejón-Valqui, L., Fernández-Jeri, A. B., Idrogo-Vásquez, G., Cayo-Colca, I. S., & Castro-Alayo, E. M. (2021). Rheological, bioactive properties and sensory preferences of dark chocolates with partial incorporation of Sacha Inchi (*Plukenetia volubilis* L.) oil. *Heliyon*, 7(2), e06154. <https://doi.org/10.1016/j.heliyon.2021.e06154>
32. Mejía, A., Meza, G., Espichán, F., Mogrovejo, J., & Rojas, R. (2021). Chemical and sensory profiles of Peruvian native cocoas and chocolates from the Bagua and Quillabamba regions. *Food Science and Technology*, 41(suppl 2), 576–582. <https://doi.org/10.1590/fst.08020>
33. Miellmann, A., Le Roux, N., & Taljaard, I. (2022). The impact of mood, familiarity, acceptability, sensory characteristics and attitude on consumers' emotional responses to chocolates. *Foods* (Basel, Switzerland), 11(11), 1621. <https://doi.org/10.3390/foods11111621>
34. Montagna, M. T., Diella, G., Triggiano, F., Caponio, G. R., De Giglio, O., Caggiano, G., Di Ciaula, A., & Portincasa, P. (2019). Chocolate, “food of the Gods”: History, science, and human health. *International Journal of Environmental Research and Public Health*, 16(24), 4960. <https://doi.org/10.3390/ijerph16244960>

35. Ooi, T. S., Ting, A. S. Y., & Siow, L. F. (2022). Volatile organic compounds and sensory profile of dark chocolates made with cocoa beans fermented with *Pichia kudriavzevii* and *Hanseniaspora thailandica*. *Journal of Food Science and Technology*, 59(7), 2714–2723. <https://doi.org/10.1007/s13197-021-05292-1>
36. Pérez-Cano, F. J., Massot-Cladera, M., Franch, A., Castellote, C., & Castell, M. (2013). The effects of cocoa on the immune system. *Frontiers in Pharmacology*, 4, 71. <https://doi.org/10.3389/fphar.2013.00071>
37. Priambodo, D. C., Saputro, D., Pahlawan, M. F. R., Saputro, A. D., & Masithoh, R. E. (2022). Determination of acid level (pH) and moisture content of cocoa beans at various fermentation level using visible near-infrared (Vis-NIR) spectroscopy. *IOP Conference Series. Earth and Environmental Science*, 985(1), 012045. <https://doi.org/10.1088/1755-1315/985/1/012045>
38. Ramos, C. L., Dias, D. R., Miguel, M. G. da C. P., & Schwan, R. F. (2014). Impact of different cocoa hybrids (*Theobroma cacao* L.) and *S. cerevisiae* UFLA CA11 inoculation on microbial communities and volatile compounds of cocoa fermentation. *Food Research International (Ottawa, Ont.)*, 64, 908–918. <https://doi.org/10.1016/j.foodres.2014.08.033>
39. Roda, A., & Lambri, M. (2019). Changes in antioxidants and sensory properties of Italian chocolates and related ingredients under controlled conditions during an eighteen-month storage period. *Nutrients*, 11(11), 2719. <https://doi.org/10.3390/nu11112719>
40. Samanta, S., Sarkar, T., Chakraborty, R., Rebezov, M., Shariati, M. A., Thiruvengadam, M., & Rengasamy, K. R. R. (2022). Dark chocolate: An overview of its biological activity, processing, and fortification approaches. *Current Research in Food Science*, 5, 1916–1943. <https://doi.org/10.1016/j.crf.2022.10.017>
41. Saputro, D., Priambodo, D., Pahlawan, M., & Masithoh, R. (2022). Classification of cocoa beans based on fermentation level using PLS-DA combined with visible near-infrared (VIS-NIR) spectroscopy. *Proceedings of the 2nd International Conference on Smart and Innovative Agriculture (ICoSIA 2021)*.
42. Selvasekaran, P., & Chidambaram, R. (2021). Advances in formulation for the production of low-fat, fat-free, low-sugar, and sugar-free chocolates: An overview of the past decade. *Trends in Food Science & Technology*, 113, 315–334. <https://doi.org/10.1016/j.tifs.2021.05.008>

43. Sepúlveda, W. S., Maza, M. T., Uldemolins, P., Cantos-Zambrano, E. G., & Ureta, I. (2022). Linking dark chocolate product attributes, consumer preferences, and consumer utility: Impact of quality labels, cocoa content, chocolate origin, and price. *Journal of International Food & Agribusiness Marketing*, 34(5), 518–537. <https://doi.org/10.1080/08974438.2021.1908924>
44. Silveira, P. T. de S., Pedroso, A. C. A., Muniz, C. P., Cristianini, M., & Efraim, P. (2022). Influence of refining and conching systems on rheological and sensory properties of chocolate. *Journal of Food Research*, 11(2), 69. <https://doi.org/10.5539/jfr.v11n2p69>
45. Tigrero-Vaca, J., Maridueña-Zavala, M. G., Liao, H.-L., Prado-Lince, M., Zambrano-Vera, C. S., Monserrate-Maggi, B., & Cevallos-Cevallos, J. M. (2022). Microbial diversity and contribution to the formation of volatile compounds during fine-flavor cacao bean fermentation. *Foods (Basel, Switzerland)*, 11(7). <https://doi.org/10.3390/foods11070915>
46. Wickramasuriya, A. M., & Dunwell, J. M. (2018). Cacao biotechnology: current status and future prospects. *Plant Biotechnology Journal*, 16(1), 4–17. <https://doi.org/10.1111/pbi.12848>
47. Workman, J., & Weyer, L. (2012). *Practical guide and spectral atlas for interpretive near-infrared spectroscopy* (2nd ed.). CRC Press.

## **Internetes hivatkozások**

1. ICCO - Growing cocoa. (2020, June 8). International Cocoa Organization. <https://www.icco.org/growing-cocoa/> (elérés: 2023.02.13)
2. IndexBox Market Intelligence Platform - IndexBox Inc. (2022, May 14). Chocolate market trends and consumer behavior. IndexBox Inc. <https://www.indexbox.io/blog/Chocolate-Market-Trends-and-Consumer-Behavior/> (elérés: 07.03.2023)
3. Swiss Platform for Sustainable Cocoa - Facts & figures. (n.d.). Chocosuisse.ch. <https://www.chocosuisse.ch/en/services/facts-figures> (elérés: 2023.02.27)

## Ábrák

1. ábra: Theobroma cacao faj három típusának, a Criollo, Forastero és Trinitario termései  
<https://barandcocoa.com/pages/varieties-of-cocoa-beans> (elérés: 2023.04.14)
2. ábra: A kakaó növény, Theobroma cocoa L.  
[https://www2.klett.de/sixcms/list.php?page=infothek\\_artikel&extra=TERRA%20EWG-Online&artikel\\_id=88931&inhalt=klett71prod\\_1.c.132744.de](https://www2.klett.de/sixcms/list.php?page=infothek_artikel&extra=TERRA%20EWG-Online&artikel_id=88931&inhalt=klett71prod_1.c.132744.de) (elérés: 2023.04.14)
3. ábra: Kakaó termelést szemléltető világtérkép [https://www.icco.org/wp-content/uploads/ICCO\\_producers\\_map-1500x1060.jpg](https://www.icco.org/wp-content/uploads/ICCO_producers_map-1500x1060.jpg) (elérés: 2023.02.13)

# NYILATKOZATOK

## NYILATKOZAT

### a diplomadolgozat nyilvános hozzáféréséről és eredetiségéről

A hallgató neve: Prohászka Borbála  
A Hallgató Neptun kódja: DIEKEB  
A dolgozat címe: **Különböző típusú csokoládék minőségi attribútumainak összehasonlítása FT-NIR technikával**  
A megjelenés éve: 2023  
A konzulens tanszék neve: Élelmiszerkémia és Analitika Tanszék

Kijelentem, hogy az általam benyújtott záródolgozat/szakdolgozat/diplomadolgozat/portfólió<sup>1</sup> egyéni, eredeti jellegű, saját szellemi alkotásom. Azon részeket, melyeket más szerzők munkájából vettem át, egyértelműen megjelöltem, s az irodalomjegyzékben szerepeltettem.

Ha a fenti nyilatkozattal valótlan állítottam, tudomásul veszem, hogy a Záróvizsga-bizottság a záróvizsgából kizár és a záróvizsgát csak új dolgozat készítése után tehetek.

A leadott dolgozat, mely PDF dokumentum, szerkesztését nem, megtekintését és nyomtatását engedélyezem.

Tudomásul veszem, hogy az általam készített dolgozatra, mint szellemi alkotás felhasználására, hasznosítására a Magyar Agrár- és Élettudományi Egyetem mindenkori szellemi tulajdonkezelési szabályzatában megfogalmazottak érvényesek.

Tudomásul veszem, hogy dolgozatom elektronikus változata feltöltésre kerül a Magyar Agrár- és Élettudományi Egyetem könyvtári repozitori rendszerébe.

Kelt: 2023 év 04 hó 21 nap

  
Hallgató aláírása

<sup>1</sup> A megfelelő dolgozattípus meghagyása mellett a többi típus törlendő.




## KONZULTÁCIÓS NYILATKOZAT

A PROHÁSZKA BORBÁLA (hallgató Neptun azonosítója: DIEKEB) konzulenseként nyilatkozom arról, hogy a diplomadolgozatot áttekintettem, a hallgatót az irodalmi források korrekt kezelésének követelményeiről, jogi és etikai szabályairól tájékoztattam.

A diplomadolgozatot a záróvizsgán történő védésre javaslom / nem javaslom<sup>1</sup>.

A dolgozat állam- vagy szolgálati titkot tartalmaz: igen nem\*<sup>2</sup>

Kelt: Budapest, 2023. év április hó 21 nap



---

Belső konzulens  
Dr. Fodor Marietta

---

<sup>1</sup> A megfelelő aláhúzendó.

<sup>2</sup> A megfelelő aláhúzendó.

## **KÖSZÖNETNYILVÁNÍTÁS**

Diplomamunkám elkészítésében, valamint a tanulmányaimban való előrehaladás érdekében nyújtott folytonos és ösztönző segítséget szeretném meleg szívvvel megköszönni Dr. Fodor Marietta Tanárnőnek.