

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



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

Prohászka Borbála

Budapest

2023

Diplomamunkám témájaként a NIR spektroszkópia alkalmazását választottam, amely gyors, roncsolásmentes méréseket tesz lehetővé, egyszerű berendezés, amely az élelmiszeriparban jellemző innovatív megoldások között egyre nagyobb teret nyer. Különböző típusú töltetlen csokoládék vizsgálatával foglalkoztam, ugyanis az elmúlt években megnövekedett a fogyasztói elvárás 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.

Munkám célja a közeli infravörös technika élelmiszeripari alkalmazásának további lehetőségének feltárása, kereskedelemben kapható különböző csokoládétermékek minőségbeli különbségeinek vizsgálata, esetlegesen osztályozási modellek kidolgozása által. Különböző töltelék nélküli és daraboktól mentes csokoládétermékek, mint a fekete csokoládé, a tejszokoládé, a mogyorós tejszokoládé (gianduja) valamint fehér csokoládé minőségi attribútumainak összehasonlítása, statisztikai kiértékelését, a NIR spektrumok statisztikai kiértékelését végeztem el főkomponens elemzéssel valamint osztályozási vizsgálatokat hajtottam végre főkomponens elemzéssel és lineáris diszkriminancia analízissel.

Egy svájci kiskereskedelmi lánc, a Denner Satellit üzletében kapható, a kritériumnak megfelelő csokoládékat vásároltam meg, így 17 minta állt rendelkezésre, melyek között volt feketecsokoládé, 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 készítményeken feltüntetett kakaó-, zsír-, szénhidrát- és fehérjetartalom értékeket statisztikai kiértékelésnek vettem alá. Főkomponens elemzéssel (Unscrambler 10.4 - CAMO, Oslo, Norvégia) vizsgáltam, hogy a felsorolt fő paraméterek közül melyik és milyen mértékben befolyásolja a minták variációját. Ezen vizsgálatok alapján megállapítható, hogy a kakaótartalom és a szénhidráttartalom nagyon magas, 98%-ban, illetve a zsírtartalom, mint harmadik főkomponens 2%-ban befolyásolja a variációt. A fehérjék vannak lekevesébé hatással a variációra. Megállapítható, hogy minél nagyobb értéktartományt fed le a mintahalmaz egy adott beltartalmi jellemzőre nézve, annál nagyobb százalékban befolyásolja a tulajdonságokat. Ebből a szempontból érdekes lehet alternatív és dúsított termékek vizsgálatával kiegészíteni az eredményeket, ugyanis lehetséges, hogy fehérjével dúsított, más zsírokkal helyettesített, valamint cukor-csökkentett vagy mentes termékek esetén máshogy alakulna a terméktulajdonságokat befolyásoló beltartalmi jellemzők sorrendje.

Az FT-NIR vizsgálatokat Bruker MPA (BRUKER, Ettlingen, Németország) interferométer optikai egységet tartalmazó közeli infravörös spektroszkóppal végeztem diffúz reflexiós mérési elrendezésben. Mintánként 3 spektrumot rögzítettem. Minden spektrum 32 alspektrum átlagaként alakult ki. A kiértékelés során a mintákról rögzített spektrumok átlagát vizsgáltam. A mintákat kategóriákba soroltam: feketecsokoládé, tejsokoládé, mogyorós tejsokoládé (melyek a gianduja termékek mogyoróval és mandulával), és fehér csokoládé.

A spektrumok kiértékelését  $12500 - 3800 \text{ cm}^{-1}$  hullámszám tartományban végeztem. A spektrumok jellegében 3 fő eltérés mutatkozik, 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 nincsen kakaópor, csak kakaóvaj, valamint tej és cukor. Ez az eltérés vélhetőleg a mintában lévő zsírsavakkal, valamint a szénhidrátokkal hozható összefüggésbe. A tejsokoládék esetén  $7100 \text{ cm}^{-1}$  hullámszám körül figyelhető meg a második jellegbeli eltérés, a feketecsokoládé spektrumának lefutása eltér a tejsokoládé, a mogyorós tejsokoládé és a fehér csokoládé spektrumától. Ennek oka valószínűleg a magas kakaótartalommal összefüggésben levő kakaóvaj, továbbá szintén a tejsokoládék, valamint a mogyorós tejsokoládék esetén  $4300 \text{ cm}^{-1}$  hullámszám környékén jellegbeli eltérések figyelhetők meg a spektrumokban, ami a tej zsírtartalmával hozható összefüggésbe, a tejszír eltérő minőségű a kakaóvajhoz képest. A fényszóródás, amely a minták nagy zsírtartalma miatt jelentős szerepet játszik a nyers spektrumok eltéréseiben, a deriválással kiküszöbölhető. A második deriváltnál jól megfigyelhető eltérések mutatkoznak  $8800 \text{ cm}^{-1}$  hullámszámnál a fehér csokoládénál, amely a zsírokhoz, szénhidrogén-láncokhoz köthető, de a rosttartalom is közre játszhat az eltérésben.  $7600 \text{ cm}^{-1}$  hullámszámnál, a zsíroknak és az olajoknak köszönhetően van eltérés a minőségi összetételben. A NIR nyersspektrumok, valamint az 1. és 2. deriváltjaik vizsgálatánál felfedezett eltérések jól magyarázhatók a mintákon feltüntetett beltartalmi információkkal, összetevők jelenlétével vagy hiányával.

Az osztályozási vizsgálatok elvégzéséhez a nem felügyelt tanítású főkomponens elemzést, szintén az Unscrambler 10.4 (CAMO, Oslo, Norvégia) programmal végeztem. A nyers spektrumok adatait vizsgáltam véletlenszerű, 5 szegmenses keresztellenőrzéssel, annak megállapítása érdekében, hogy van-e spektrális kieső. Ezen felül ellenőriztem a magyarázott varianciát, valamint Hotelling próbát végeztem a kieső minták ellenőrzésére. Az első két főkomponens 96%-ban magyarázza a minták tulajdonságainak varianciáját, a mintahalmaz azonosnak tekinthető, vagyis nincs spektrális kieső.

A beltartalmi adatokra elvégzett főkomponens elemzés eredményeként megállapítható, hogy elsősorban a kakaótartalom (90%), másodsorban a szénhidráttartalom (8%), harmadrészt a

zsírtartalom (2%) határozza meg a tulajdonságok varianciáját. A főkomponens elemzés során viszonylag jól elkülönülnek a csoportok, azonban a kakaótartalom miatt átfedés jött létre az egyes csoportok között. A mogyoró és mandula jelenléte nem okozott külön csoportosulást a tejsokoládé kategóriában, ami alapján a gianduja termékek nem osztályozhatók ily módon. Ezek a lineáris diszkriminancia analízis eredményei alapján is elmondhatók.

Ezen felül felügyelt tanítású lineáris diszkriminancia analízist (LDA) alkalmaztam, melyet ugyancsak az Unscrambler 10.4 (CAMO, Oslo, Norvégia) programmal hajtottam végre. Az LDA vizsgálat három (fekete – tej – mogyorós) és két (fekete – tej) csoportot vizsgálva végeztem. Az LDA három kategóriára futtatva 81,25% pontosságot eredményezett, két magas kakaótartalmat illetve a kakaóvajtól eltérő növényi zsiradékot is tartalmazó tejsokoládé mintát osztályozott helytelenül. A két kategóriára futtatott LDA 93,75%-os pontosságot eredményezett. Az utóbbi esetén a tejsokoládék és a mogyorós tejsokoládék alkották a második kategóriát a feketecsokoládék mellett. Egyetlen rosszul kategorizált minta akad, amely a magas kakaótartalmú tejsokoládé minta volt. 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.

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.