

<https://doi.org/10.51301/jemet.2024.i4.05>

FTIR spectra research of table salt for high-performance screening of food samples

D. Yerezhep¹, O. Golikov^{2*}, B. Dossanova², A. Kenbay²

¹Satbayev University, Almaty, Kazakhstan

²Al-Farabi Kazakh national university, Almaty, Kazakhstan

*Corresponding author: golikov.ua@gmail.com

Abstract. This paper presents the method and results of research on several samples of table salt using the sensitive Fourier-transform infrared spectroscopy method, followed by a comparison with reference spectra of the NaCl compound. The data obtained indicates a difference in the structural composition of the researched samples. However, comparison with the NIST reference spectra database allows to conclude that the performed measurements were reliable and the choice of the spectral resolution was correct. Based on the results obtained, it is possible to anticipate the use of this method as a faster and simpler method compared with the available ones for the analysis of salt samples in order to determine their composition and the presence of impurities in them. Such a device would significantly simplify the quality control of salt products as their analysis would no longer have to be conducted in a laboratory.

Keywords: *spectral analysis, screening, infrared spectroscopy, food, salts.*

1. Введение

В настоящее время отслеживание качества продуктов по всей цепочке поставок стало неотъемлемой частью обеспечения безопасности и надежности продуктов, которые мы потребляем ежедневно. Сложность задачи усугубляется постоянно растущим населением планеты, уязвимостью цепочек поставок продовольствия и мошенничества с пищевыми продуктами [1–3].

Одним из важнейших питательных веществ в пищевой промышленности является натрий (Na), который необходим для нормальной функции клеток и для нейротрансмиссии [4,5]. Так, во множестве работ указывается на высокую связь между потреблением соли и развитием неинфекционных заболеваний, включая сердечно-сосудистые и почечные заболевания [6–10]. Необходимо отметить важность пищевой соли (NaCl), в силу ее частого использования в качестве пищевого ингредиента с целью улучшения вкуса и сохранения продукта. Так, Всемирная организация здравоохранения (ВОЗ) рекомендует взрослым потреблять менее 5 г соли в день для снижения сердечно-сосудистых рисков от чрезмерного потребления соли. Соль добавляют в основные группы продуктов питания: хлеб и хлебобулочные изделия, крупы, мясо, сыр и молочные продукты. Более высокими источниками соли являются полуфабрикаты и готовые к употреблению блюда, и супы [11]. В США большая часть потребляемой соли (70%) приходится на добавляемый в еду быстрого приготовления натрий [12–14].

Известно, что на сегодняшний день контроль количества соли в готовых пищевых продуктах влечет за собой сбор проб и транспортировку их в лабораторию для исследования аналитическими методами, требующими обработки проб и инструментального анализа, что явля-

ется затруднительным. Для определения соли обычно используют один из двух основных способов. Первый, по содержанию натрия, путем кислотного расщепления. После растворения исследуемого образца определяется содержание натрия с помощью спектрофотометрии, используя его характерные спектры излучения или поглощения (атомно-абсорбционная спектроскопия, индуктивно-связанная плазма или пламенный фотометр) [15]. Вторым является способ определения по содержанию хлоридов, основанный на кислотном разложении и проведении классических методов, таких как титрование по Фольгарду (метод Фольгарда) или титрование по Морю (метод Мора), с использованием реакции хлорида с ионами серебра [16]. Время, связанное с таким анализом, препятствует действиям в реальном времени либо за счет превентивных мер, либо даже за счет коррекции соли, содержащейся в еде. Также для проверки и контроля качества продуктов, а также борьбы с мошенничеством и обеспечения целостности пищевых продуктов, можно использовать аналитические методы, которые сосредоточены на молекулярном отпечатке пальца, ДНК, электрохимическом, элементном или изотропном профиле пищевого материала [17–20].

Исходя из обзора современных аналитических подходов к анализу качества и подлинности пищевых продуктов становится очевидным, что не существует универсального решения в данном вопросе. Таким образом, выявлены общие проблемы, свойственные вышеупомянутым аналитическим методам, такие как: высокая стоимость образца (учитывая стоимость оборудования и реагентов); квалифицированный персонал для анализа и интерпретации данных; значительное время для экстракции и инкубации; невозможность применения большинства методов для анализа в режиме реального времени

или в условиях производства, а не в лаборатории; сложные процедуры с использованием опасных растворителей, приводящие к разрушению образца.

К настоящему моменту многообещающие технологические достижения были достигнуты в области спектроскопических исследований, что позволяет преодолеть вышесказанные проблемы, связанные с анализом подлинности пищевых продуктов и проверки на качество [21–29]. Так, в последнее время инфракрасная спектроскопия с преобразованием Фурье используется в качестве инструмента обнаружения следов различных химических веществ в пищевых продуктах [30–32]. Отдельные вещества можно анализировать на основе характеристических полос в многокомпонентной пробе, не прибегая к какому-либо физическому разделению отдельных компонентов, и при этом не требуется строгого соблюдения состава растворителя пробы, что является обязательным в УФ-видимой спектрофотометрии, поскольку растворитель полярность, pH и присутствие ионов могут влиять на спектральные свойства окрашенных частиц. Использование метода инфракрасной спектроскопии с преобразованием Фурье безопасен для окружающей среды и является подходящей альтернативой УФ-видимой спектрофотометрии. Таким образом, необходимы быстрые, портативные и надежные методы для контроля и качества солей в большом количестве образцов пищевых продуктов.

В данной работе будет показана возможность применения простого и чувствительного метода инфракрасной спектроскопии с преобразованием Фурье для анализа ИК-спектров различных образцов соли. В дальнейшем возможно использовать данный метод для целей скрининга как более дешевый и быстрый вариант в отличие от сбора образцов и отправки их в сторонние лаборатории.

2. Методы и материалы

В данной работе, в качестве материалов использовались несколько видов пищевой соли, которые были приобретены на различных точках рынка города Алматы, Республика Казахстан. Образцы пищевой соли (NaCl) разного помола приведены на рисунке 1. В дальнейшем образцы взвешивались с помощью лабораторных ювелирных весов фирмы «Pocket Scale» серии MH-500 (производство Китай), с точностью до 0.01 грамм. В среднем, масса каждого образца составлял около 0.50 грамма, в пропорциональном соотношении с бромидом калия.

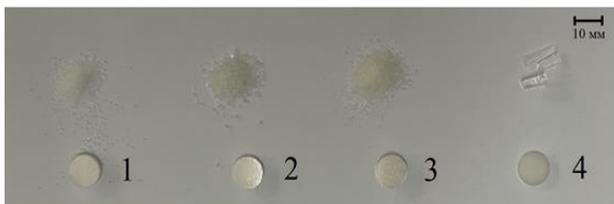


Рисунок 1. Образцы соли, используемые в работе. 1 – Образец 1 (NaCl), 2 – Образец 2 (NaCl), 3 – Образец 3 (NaCl), 4 – Бромид калия (KBr)

Измельчение смеси NaCl/KBr, в пропорции 3/1, происходило с помощью фарфоровой лабораторной ступки и пестика, изготовленного по стандарту DIN 12906. Каждую смесь перемешивали и измельчали в чистой ступке в течение 60 секунд с помощью

лабораторного пестика. После измельчения и получения однородного порошка, порошок аккуратно засыпался в матрицу пресс-формы. Матрица пресс-формы с порошкообразным веществом помещалась специальным образом в гидравлический ручной пресс, и для формирования таблеток прикладывалось давление в 150 бар (160 кН). Для формирования таблеток использовался пресс гидравлический ручной серии ПГР400 с заводским номером 210726 фирмы ООО «Инфраспек» (Санкт-Петербург, Россия) с максимальным рабочим усилием в 100 кН и максимальным рабочим давлением в 270 бар.

В последующем таблетка (образец) закреплялась в подставке для кювета ПК 50-75 (рисунок 2), который помещался в кюветное отделение лабораторного ИК Фурье-спектрометра (повышенного спектрального разрешения) «ФСМ 2203» с заводским номером 210794 производства компании ООО «Инфраспек» (Санкт-Петербург, Россия). Рабочая область спектра ИК Фурье-спектрометра «ФСМ 2203» составляет от 370 до 7800 1/см. Максимальное спектральное разрешение составляет 0.125 1/см с абсолютной погрешностью градуировки шкалы волновых чисел не более 0.02 1/см. В спектральном диапазоне от 2100 до 2200 1/см с разрешением 4 1/см и при условии 20 сканов, отклонение линии 100% пропускания от номинального значения составляет не более 0.5%, а средне квадратическое отклонение 100% пропускания не более 0.01%. Эксплуатация ИК Фурье-спектрометра проходила в помещении, удовлетворяющим требованиям, предъявляемым к лабораторным помещениям. Наборы спектров для каждого измерения повторялись трижды с различным спектральным разрешением.

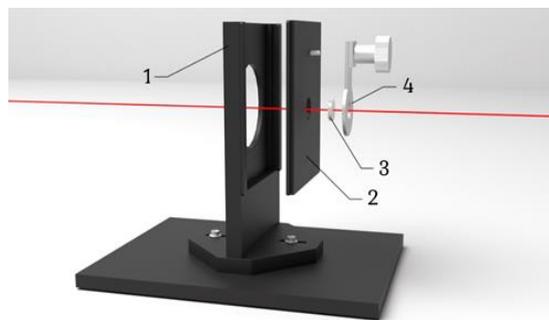


Рисунок 2. Схематичное изображение подставки для кювета ПК 50-75. 1 – основное тело подставки, 2 – часть подставки, 3 – образец, 4 – прижимной элемент для фиксации образца в подставке

Полученные спектральные данные анализировали на ПК с использованием программного обеспечения «FSpec», которая разработана компанией для многомерного анализа данных «Инфраспек» (Санкт-Петербург, РФ). Дальнейшую обработку ИК спектров проводили с помощью программного обеспечения «Origin 2018» разработанного фирмой OriginLab Corporation (Нортгемптон, штат Массачусетс, США) для численного анализа данных и научной графики.

3. Результаты и обсуждение

Необходимо отметить, что ИК спектры поглощения в инфракрасной области основаны на взаимодействии

инфракрасного излучения с исследуемым веществом. Так, данный аналитический метод является хорошим инструментом для исследования строения органических и неорганических молекул, а также высокомолекулярных соединений [33,34].

Инфракрасное излучение классифицируется как электромагнитное излучение и состоит из чередующихся электрических и магнитных полей, которые классически описываются непрерывным синусоидальным волнообразным движением электрического и магнитного полей. Как правило, для ИК-спектроскопии и спектроскопии комбинационного рассеяния в основном рассматривают только электрическое поле, и пренебрегают компонентой магнитного поля [35]. Таким образом, важными параметрами являются длина волны (λ), частота (ν), волновые числа ($\bar{\nu}$) и они связаны друг с другом следующим выражением:

$$\bar{\nu} = \frac{\nu}{(c/n)} = \frac{1}{\lambda} \quad (1)$$

где c — скорость света, а n — показатель преломления среды, через которую он проходит. В квантовой теории излучение испускается источником дискретными единицами, называемыми фотонами, где частота фотона ν и энергия фотона E_p связаны соотношением:

$$E_p = h\nu$$

где h — постоянная Планка ($6.62607015 \cdot 10^{-34}$ Дж·с).

Фотоны с определенной энергией могут поглощаться (или испускаться) молекулой, что приводит к передаче энергии. В абсорбционной спектроскопии это приведет к повышению энергии молекулы от основного до определенного возбужденного состояния. Так, молекулярное движение, возникающее в результате характеристических колебаний молекул, описывается внутренними степенями свободы, что приводит к хорошо известным эмпирическим правилам $3n-6$ и $3n-5$ для колебаний нелинейных и линейных молекул соответственно. Эти три вибрации включают синфазное (или симметричное) и противофазное (или асимметричное) растяжение и деформационное (или изгибающее) колебание. Следовательно, точный колебательный анализ требует оптимизации молекулярной структуры и волновых функций для получения минимального энергетического состояния молекулы [36].

Далее, в работе будут рассмотрены ИК спектры различных видов соли NaCl с помощью методики описанной в пункте «материалы и методы исследований». Принято считать, что соли «прозрачны» в ИК диапазоне, однако в данной работе будут показаны ИК спектры различных видов пищевой соли и показана возможность использования данного метода для идентификации соли в пищевых продуктах с помощью специальных приставок.

Таким образом, для начала нам необходимо было определить оптимальное разрешение ИК-Фурье спектрометра ФСМ 2203 для получения наилучших ИК спектров с соотношением сигнал/шум. Были сняты ИК

спектры с разрешением 4 1/см, 1 1/см и 0.5 1/см для анализа наилучшего соотношения. Полученные результаты представлены на рисунке 3.

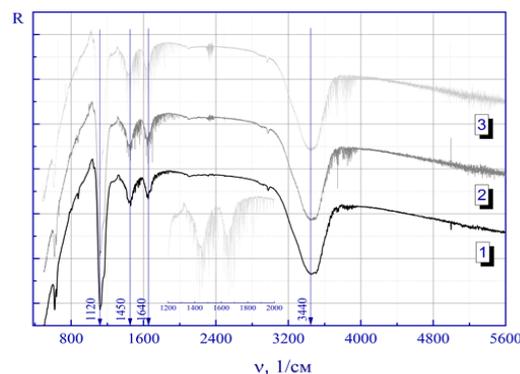


Рисунок 3. ИК спектры первого образца соли с различным разрешением. 1 – разрешение 4 1/см, 2 – разрешение 1 1/см, 3 – разрешение 0.5 1/см

Как можно заметить, с повышением разрешения увеличивается шум, но не появляются дополнительные полосы поглощения. Так, мы отчетливо видим пики на частоте 1120, 1450 и 1640 1/см, а также широкую полосу поглощения в диапазоне с 3200 1/см до 3600 1/см. Таким образом, в дальнейших исследованиях будет использоваться разрешение 4 1/см, которого достаточно для обнаружения характеристических полос поглощения. Так, на полученных результатах ИК спектров соли, с различных разрешением, можем видеть характеристические интенсивные полосы поглощения, которые подробнее рассмотрим ниже.

Существенной интенсивности пик в данной области наблюдается в третьем образце, а в первом образце интенсивность практически в два раза ниже.

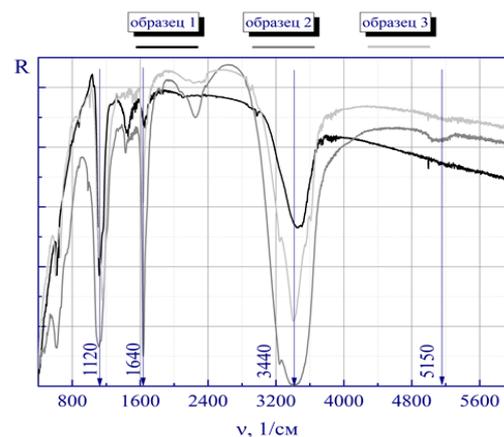


Рисунок 4. ИК спектры сравнения 3 образцов соли (NaCl)

Для проверки экспериментального ИК спектра образца соли, его сравнили с эталонным образцом соли NaCl с базы данных NIST Chemistry WebBook, полученным при помощи ИК Фурье спектрометра Bruker Tensor 37 FTIR со спектральным разрешением 4 1/см и точностью волнового числа ± 0.4 1/см [37]. Результаты данного сравнения показаны на рисунке 5. Как можно видеть из рисунка, основные характеристические полосы поглощения ИК спектра экспериментального образца соли совпадают с

эталонным образцом соли NaCl, что может говорить об успешной реализации данного метода для экспресс-анализа.

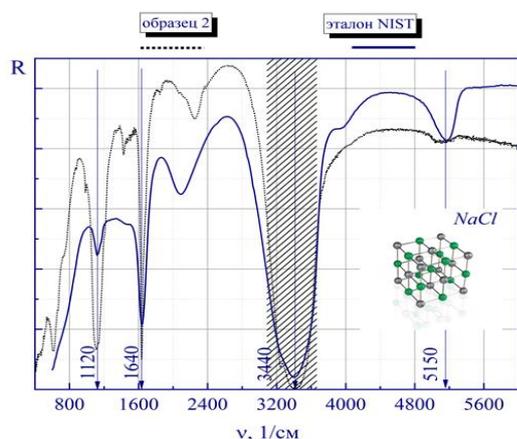


Рисунок 5. ИК спектры сравнения 2 образца соли (NaCl) и эталонного образца соли (NaCl) из базы NIST Chemistry WebBook

4. Выводы

Исследование ИК спектров инфракрасной спектроскопии с преобразованием Фурье показало возможность использования данного метода для идентификации пищевой соли (NaCl). Были продемонстрированы различные спектры образцов пищевой соли (NaCl) и сравнены спектры с эталонным образцом NaCl базы NIST Chemistry WebBook, снятым с помощью ИК Фурье спектрометра Bruker Tensor 37 FTIR со спектральным разрешением 4 1/см. После значительной доработки, данную методику можно применить для скрининга образцов пищевых продуктов как быстрый и доступный методом. На данный момент необходимы дальнейшие исследования, которые могли бы подтвердить корреляцию между структурными изменениями и функциональными свойствами соли и их смесей, с применением различных приставок для измерения ИК спектра исследуемых образцов.

Благодарность

Работа выполнена при финансовой поддержке Министерства образования и науки Республики Казахстан, грант № AP08855738.

References / Литература

[1] Galvin-King, P., Haughey, S.A. & Elliott, C. T. (2018). Herb and spice fraud; the drivers, challenges and detection. *Food Control*, 88, 85–97. <https://doi.org/10.1016/j.foodcont.2017.12.031>

[2] Robson, K., Dean, M., Haughey, S.A. & Elliott, C. T. (2021). A comprehensive review of food fraud terminologies and food fraud mitigation guides. *Food Control*, 120, 107516. <https://doi.org/10.1016/j.foodcont.2020.107516>

[3] McVey, C., Elliott, C.T., Cannavan, A., Kelly, S., Petchkongkaew, A. & Haughey, S. A. (2021). Portable spectroscopy for high throughput food authenticity screening: Advancements in technology and integration into digital traceability systems. *Trends in Food Science and Technology*, 118, 777–790. <https://doi.org/10.1016/j.tifs.2021.11.003>

[4] Elliott, P., Stamler, J., Nichols, R., Dyer, A. R., Stamler, R., Kesteloot, H. & Marmot, M. (1996). Intersalt revisited: Further

analyses of 24-hour sodium excretion and blood pressure within and across populations. *The BMJ*, 312(7041), 1249–1253. <https://doi.org/10.1136/bmj.312.7041.1249>

[5] Sonuch, P., Kantachuesiri, S., Vathesatogkit, P., Lappichetpai-boon, R., Chailimpamontri, W., Thokanit, N.S. & Aekplakorn, W. (2021). Estimation of sodium consumption by novel formulas derived from random spot and 12-hour urine collection. *PLOS ONE*, 16(12), e0260408. <https://doi.org/10.1371/journal.pone.0260408>

[6] He, F. J. & MacGregor, G. A. (2008). A comprehensive review on salt and health and current experience of worldwide salt reduction programmes. *Journal of Human Hypertension*, 23(6), 363–384. <https://doi.org/10.1038/jhh.2008.144>

[7] Tuomilehto, J., Jousilahti, P., Rastenyte, D., Moltchanov, V., Tanskanen, A., Pietinen, P. & Nissinen, A. (2001). Urinary sodium excretion and cardiovascular mortality in Finland: A prospective study. *The Lancet*, 357(9259), 848–851. [https://doi.org/10.1016/s0140-6736\(00\)04199-4](https://doi.org/10.1016/s0140-6736(00)04199-4)

[8] Vaudin, A., Wambogo, E., Moshfegh, A. & Sahyoun, N. R. (2022). Sodium and potassium intake, the sodium to potassium ratio, and associated characteristics in older adults, NHANES 2011-2016. *Journal of the Academy of Nutrition and Dietetics*, 122(1), 64–77. <https://doi.org/10.1016/j.jand.2021.06.012>

[9] Zou, M., Chen, Y., Zheng, Z., Sheng, S., Jia, Y., Wang, X., Ren, S., Yang, Y., Li, X., Dong, W., Guan, M. & Zhang, Q. (2021). High-Salt attenuates the efficacy of dapagliflozin in tubular protection by impairing fatty acid metabolism in diabetic kidney disease. *Frontiers in Pharmacology*, 12. <https://doi.org/10.3389/fphar.2021.741087>

[10] Ghimire, K., Mishra, S. R., Sathesh, G., Neupane, D., Sharma, A., Panda, R., Kallestrup, P. & McLachlan, C.S. (2021). Salt intake and salt-reduction strategies in South Asia: From evidence to action. *Journal of Clinical Hypertension*, 23(10), 1815–1829. <https://doi.org/10.1111/jch.14365>

[11] Kloss, L., Meyer, J. D., Graeve, L. & Vetter, W. (2015). Sodium intake and its reduction by food reformulation in the European Union — A review. *NFS Journal*, 1, 9–19. <https://doi.org/10.1016/j.nfs.2015.03.001>

[12] Harnack, L., Cogswell, M.E., Shikany, J.M., Gardner, C.D., Gillespie, C., Loria, C.M., Zhou, X., Yuan, K., & Steffen, L.M. (2017). Sources of sodium in US adults from 3 geographic regions. *Circulation*, 135(19), 1775–1783. <https://doi.org/10.1161/circulationaha.116.024446>

[13] Mayne, S.T., McKinnon, R.A., & Woodcock, J. (2021). Reducing sodium intake in the US. *JAMA*, 326(17), 1675. <https://doi.org/10.1001/jama.2021.18611>

[14] Dehmer, S.P., Cogswell, M.E., Ritchey, M.D., Hong, Y., Maciosek, M.V., LaFrance, A.B. & Roy, K. (2020). Health and budgetary impact of achieving 10-Year U.S. sodium reduction targets. *American Journal of Preventive Medicine*, 59(2), 211–218. <https://doi.org/10.1016/j.amepre.2020.03.010>

[15] Fairulnizal, M.N.M., Vimala, B., Rathi, D. & Naeem, M. (2019). Atomic absorption spectroscopy for food quality evaluation. *In Elsevier eBooks (pp. 145–173)*. <https://doi.org/10.1016/b978-0-12-814217-2.00009-3>

[16] Belcher, R., Macdonald, A.M.G. & Parry, E. (1957). On mohr's method for the determination of chlorides. *Anal. Chim. Acta*, 16, 524–529

[17] Black, C., Chevallier, O.P., Cooper, K.M., Haughey, S.A., Balog, J., Takáts, Z., Elliott, C.T., & Cavin, C. (2019). Rapid detection and specific identification of offals within minced beef samples utilising ambient mass spectrometry. *Scientific Reports*, 9(1). <https://doi.org/10.1038/s41598-019-42796-5>

[18] Gao, B., Holroyd, S.E., Moore, J.C., Laurvick, K., Gendel, S. M., & Xie, Z. (2019). Opportunities and challenges using non-targeted methods for food fraud detection. *Journal of Agricultural and Food Chemistry*, 67(31), 8425–8430. <https://doi.org/10.1021/acs.jafc.9b03085>

[19] Buratti, S., Malegori, C., Benedetti, S., Oliveri, P. & Giovanelli, G. (2018). E-nose, e-tongue and e-eye for edible olive oil charac-

- terization and shelf life assessment: A powerful data fusion approach. *Talanta*, 182, 131–141. <https://doi.org/10.1016/j.talanta.2018.01.096>
- [20] Esteki, M., Simal-Gándara, J., Shahsavari, Z., Zandbaaf, S., Dashtaki, E. & Heyden, Y. V. (2018). A review on the application of chromatographic methods, coupled to chemometrics, for food authentication. *Food Control*, 93, 165–182. <https://doi.org/10.1016/j.foodcont.2018.06.015>
- [21] Gupta, M., Jain, A. & Verma, K. K. (2022). Dispersive liquid–liquid microextraction and diffuse reflectance-Fourier transform infrared spectroscopy for iodate determination in food grade salt and food samples. *Food Chemistry*, 368, 130810. <https://doi.org/10.1016/j.foodchem.2021.130810>
- [22] Wang, Z., Erasmus, S.W., Liu, X. & Van Ruth, S. M. (2020). Study on the Relations between Hyperspectral Images of Bananas (*Musa spp.*) from Different Countries, Their Compositional Traits and Growing Conditions. *Sensors*, 20(20), 5793. <https://doi.org/10.3390/s20205793>
- [23] Crichton, S., Kirchner, S., Porley, V., Retz, S., Von Gersdorff, G., Hensel, O., Weygandt, M. & Sturm, B. (2017). Classification of organic beef freshness using VNIR hyperspectral imaging. *Meat Science*, 129, 20–27. <https://doi.org/10.1016/j.meatsci.2017.02.005>
- [24] Vincent, J., Wang, H., Nibouche, O. & Maguire, P. (2018). Differentiation of Apple varieties and investigation of organic status using portable visible range reflectance spectroscopy. *Sensors*, 18(6), 1708. <https://doi.org/10.3390/s18061708>
- [25] Abu-Khalaf, N. & Hmidat, M. (2020). Visible/Near Infrared (VIS/NIR) spectroscopy as an optical sensor for evaluating olive oil quality. *Computers and Electronics in Agriculture*, 173, 105445. <https://doi.org/10.1016/j.compag.2020.105445>
- [26] Karunathilaka, S.R., Yakes, B.J., He, K., Brückner, L. & Mossoba, M.M. (2018). First use of handheld Raman spectroscopic devices and on-board chemometric analysis for the detection of milk powder adulteration. *Food Control*, 92, 137–146. <https://doi.org/10.1016/j.foodcont.2018.04.046>
- [27] Dumalisile, P., Manley, M., Hoffman, L.C. & Williams, P.J. (2020). Discriminating muscle type of selected game species using near infrared (NIR) spectroscopy. *Food Control*, 110, 106981. <https://doi.org/10.1016/j.foodcont.2019.106981>
- [28] Schmutzler, M., Beganović, A., Böhler, G. & Huck, C.W. (2015). Methods for detection of pork adulteration in veal product based on FT-NIR spectroscopy for laboratory, industrial and on-site analysis. *Food Control*, 57, 258–267. <https://doi.org/10.1016/j.foodcont.2015.04.019>
- [29] Li, Q., Huang, Y., Song, X., Zhang, J. & Min, S. (2019). Spectral interval optimization on rapid determination of prohibited addition in pesticide by ATR-FTIR. *Pest Management Science*, 75(6), 1743–1749. <https://doi.org/10.1002/ps.5295>
- [30] Yun, Y., Li, H., Deng, B. & Cao, D. (2019). An overview of variable selection methods in multivariate analysis of near-infrared spectra. *TrAC Trends in Analytical Chemistry*, 113, 102–115. <https://doi.org/10.1016/j.trac.2019.01.018>
- [31] Xie, L., Zhu, J., Wang, Y., Wang, N., Liu, F., Chen, Z., Wang, P., Wang, S. & Shen, X. (2022). Rapid and accurate determination of prohibited components in pesticides based on near infrared spectroscopy. *Infrared Physics & Technology*, 121, 104038. <https://doi.org/10.1016/j.infrared.2022.104038>
- [32] Bernath, P.F. (2000). Infrared emission spectroscopy. *Annual Reports on the Progress of Chemistry*, 96(1), 177–224. <https://doi.org/10.1039/b001200i>
- [33] Larkin, P.J. (2018). Introduction. In *Infrared and Raman Spectroscopy*, 1–5
- [34] Larkin, P.J. (2018). Basic Principles. In *Infrared and Raman Spectroscopy*, 7–28
- [35] Larkin, P.J. (2018). Instrumentation and Sampling Methods. In *Infrared and Raman Spectroscopy*, 29–61
- [36] Linstrom, P.J. & Mallard, W.G. (2021). NIST Chemistry Web-Book. *NIST Standard Reference Database Number 69*

Тағам үлгілерінің жоғары өнімді скринингі үшін ас тұзының FTIR спектрлерін зерттеу

Д. Ережеп¹, О. Голиков^{2*}, Б. Досанова², А. Кенбай²

¹Satbayev University, Алматы, Қазақстан

²Әл-Фараби атындағы Қазақ ұлттық университеті, Алматы, Қазақстан

*Корреспонденция үшін автор: golikov.ua@gmail.com

Аңдатпа. Бұл жұмыста Фурье-түрлендіру инфрақызыл спектроскопиясының сезімтал әдісіне негізделген ас тұздың бірнеше үлгілерін зерттеу әдісі мен нәтижелері, содан кейін оларды NaCl қосындысының эталондық спектрлерімен салыстырмалары берілген. Алынған мәліметтер зерттелетін үлгілердің құрылымдық құрамының айырмашылығын көрсетеді. Екінші жағынан, NIST спектрлердің эталон базасымен салыстыру өлшеулердің сенімділігі мен спектрлік ажыратымдығын дұрыс таңдау туралы айтуға негіздеме береді. Қолданымдағы әдістерге қарағанда тұз үлгісінің құрамын және ішіндегі қоспалардың бар-жоғын анықтау мақсатымен жасалатын әлдеқайда тез әрі оңай талдау ретінде осы әдісті қолдану мүмкіндігі алынған нәтижелер негізінде болжаланды. Мұндай құрылғы тұз өнімінің талдауын зертханадан тәуелсіз етіп, сапа бақылауын айтарлықтай жеңілдетеді.

Негізгі сөздер: спектрлік талдау, скрининг, инфрақызыл спектроскопия, тағам өнімдері, тұздар.

Исследование FTIR спектров пищевой соли для высокопроизводительного скрининга образцов пищевых продуктов

Д. Ережеп¹, О. Голиков^{2*}, Б. Досанова², А. Кенбай²

¹*Satbayev University, Алматы, Казахстан*

²*Казахский национальный университет имени аль-Фараби, Алматы, Казахстан*

*Автор для корреспонденции: golikov.ua@gmail.com

Аннотация. В данной работе представлен метод и результаты исследования нескольких образцов пищевой соли на основе чувствительного метода инфракрасной спектроскопии с преобразованием Фурье, с последующим их сравнением с эталонными спектрами соединения NaCl. Полученные данные указывают на различие в структурном составе исследуемых образцов. С другой стороны, сравнение с эталонной базой спектров NIST дает право говорить о достоверности произведенных измерений и правильности выбора спектрального разрешения. На основе полученных результатов предсказана возможность использования данного метода в качестве более быстрого и простого, в сравнении с существующими, анализа образцов соли с целью определения ее состава и наличия в ней примесей. Подобное устройство значительно упростит контроль качества солевой продукции, сделав ее анализ лабораторно независимым.

Ключевые слова: *спектральный анализ, скрининг, инфракрасная спектроскопия, пищевая продукция, соли.*

Received: 14 August 2024

Accepted: 16 December 2024

Available online: 31 December 2024