



Application Note AN-NIR-106

# Qualitätskontrolle nicht nahrhafter Süßstoffe mittels NIR-Spektroskopie

## NIRS liefert Ergebnisse der Mischungsanalyse innerhalb einer Minute

Die Verwendung nicht-nahrhafter Süßstoffe als Zuckerersatz in Lebensmitteln hat im letzten Jahrzehnt dramatisch zugenommen, beispielsweise in Erfrischungsgetränken und Snacks. Zwei Beispiele sind Sucralose, ein halogeniertes Saccharose-Derivat, und Stevia, das aus den Blättern der Pflanze *Stevia rebaudiana* gewonnen wird. Beide sind viel süßer als Zucker und werden in Lebensmitteln in viel geringeren Konzentrationen verwendet. Um die Lebensmittelsicherheit zu gewährleisten, werden die Vorschriften für nicht nahrhafte Süßstoffe immer

strenger. Zur Bestimmung verschiedener Süßstoffe stehen mehrere Analysemethoden zur Verfügung, z. B. Hochleistungsflüssigkeitschromatographie (HPLC), Ionenchromatographie und Dünnschichtchromatographie. Diese Methoden sind jedoch zeitaufwändig und verursachen hohe laufende Kosten. Die Nahinfrarotspektroskopie (NIRS) ermöglicht die gleichzeitige Bestimmung mehrerer Süßstoffe in weniger als einer Minute ohne jegliche Chemikalien oder Probenvorbereitung.

## EXPERIMENTELLE GERÄTE

Mischungen aus Stevia (0,5–4,5 %) und Sucralose (0,5–4,5 %) in Saccharose (95 %) wurden hergestellt und analysiert, um ein Vorhersagemodell für die Quantifizierung zu erstellen.

Die Proben wurden mit einem Metrohm NIRS DS2500 Feststoffanalysator gemessen (Abbildung 1) mit 15-

mm-Einwegfläschchen, einem DS2500-Halter und einer DS2500-Iris im Reflexionsmodus. Für die gesamte Datenerfassung und Vorhersagemodellentwicklung wurde das Metrohm-Softwarepaket Vision Air Complete verwendet.

**Tabelle 1.** Übersicht über die Hardware- und Softwareausstattung.

| Equipment               | Artikelnummer |
|-------------------------|---------------|
| DS2500 Solid Analyzer   | 2.922.0010    |
| DS2500 Iris             | 6.7425.100    |
| Einwegfläschchen, 15 mm | 6.7402.110    |
| Vision Air 2.0 Complete | 6.6072.208    |

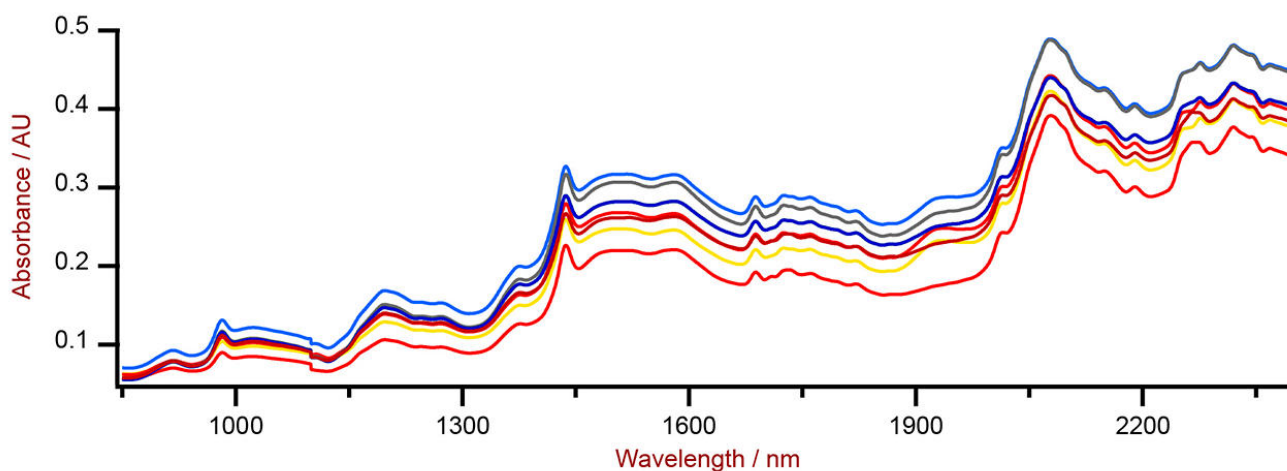


**Abbildung 1.** Metrohm NIRS DS2500 Feststoffanalysator zur Bestimmung des Stevia- und Sucralose-Gehalts in Saccharosemischungen.

## ERGEBNIS

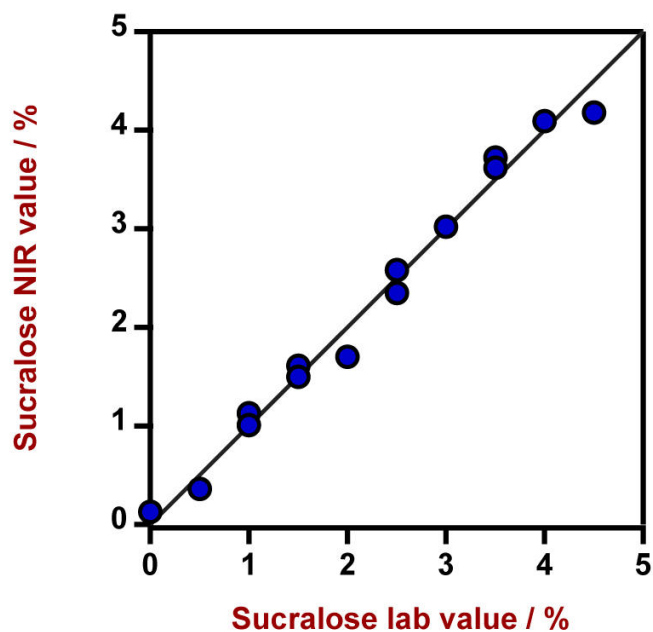
Alle gemessenen Vis-NIR-Spektren (**Abbildung 2**) wurden verwendet, um ein Vorhersagemodell für die Quantifizierung von Sucralose und Stevia in Saccharose zu erstellen. Die Qualität der Vorhersagemodelle wurde anhand von Korrelationsdiagrammen bewertet, die eine sehr hohe

Korrelation zwischen der Vis-NIR-Vorhersage und den Referenzwerten zeigen. Die jeweiligen Gütezahlen (FOM) zeigen die erwartete Präzision einer Vorhersage während der Routineanalyse an (**Abbildungen 3–4**).



**Abbildung 2.** Auswahl von Vis-NIR-Spektren von Stevia und Sucralose in Saccharoseproben, die auf einem DS2500 Solid Analyzer analysiert wurden.

## ERGEBNIS SUCRALOSEGEHALT IN SACCHAROSE



**Abbildung 3.** Korrelationsdiagramm und die jeweiligen Gütezahlen für die Vorhersage des Sucralosegehalts in Saccharose mit einem DS2500 Solid Analyzer. Die Laborwerte wurden mittels HPLC ermittelt.

| Leistungsmerkmale                   | Wert    |
|-------------------------------------|---------|
| $R^2$                               | 0.9854  |
| Standardfehler der Kalibrierung     | 0.1898% |
| Standardfehler der Kreuzvalidierung | 0.1997% |

## ERGEBNIS STEVIA-GEHALT IN SACCHAROSE



**Abbildung 4.** Korrelationsdiagramm und die jeweiligen Gütezahlen für die Vorhersage des Stevia-Gehalts in Saccharose mit einem DS2500 Solid Analyzer. Die Laborwerte wurden mittels HPLC ermittelt.

| Leistungsmerkmale                   | Wert    |
|-------------------------------------|---------|
| $R^2$                               | 0.9885  |
| Standardfehler der Kalibrierung     | 0.1500% |
| Standardfehler der Kreuzvalidierung | 0.1997% |

### FAZIT

Diese Application Note demonstriert die Möglichkeit, die Konzentration der nicht nahrhaften Süßstoffe Sucralose und Stevia in Saccharosemischungen mittels NIR-Spektroskopie zu bestimmen. Die Vis-NIR-

Spektroskopie ermöglicht schnelle und kostengünstige Messungen mit hoher Genauigkeit und bietet damit eine geeignete Alternative zu anderen Standardanalysemethoden (Tabelle 2).

**Tabelle 2.** Übersicht über die Zeit bis zum Ergebnis für die verschiedenen nicht nahrhaften Süßstoffe, die in dieser Studie untersucht wurden.

| Parameter | Methode | Zeit zum Ergebnis                      |
|-----------|---------|----------------------------------------|
| Stevia    | HPLC    | 5 Min. (Vorbereitung) + 40 Min. (HPLC) |
| Sucralose | HPLC    | 5 Min. (Vorbereitung) + 40 Min. (HPLC) |

Internal reference: AW NIR AE10-0002-072021

## CONTACT

Metrohm Schweiz AG  
Industriestrasse 13  
4800 Zofingen

[info@metrohm.ch](mailto:info@metrohm.ch)

## KONFIGURATION



### DS2500 Solid Analyzer

**Robuste Nahinfrarotspektroskopie für die Qualitätskontrolle im Labor sowie im Produktionsumfeld.**

Der DS2500 Analyzer ist die bewährte, flexible Lösung für die Routineanalytik von Feststoffen, Cremes und optional auch Flüssigkeiten entlang der gesamten Produktionskette. Das robuste Design macht den DS2500 Analyzer unempfindlich gegen Staub, Feuchtigkeit, Vibrationen sowie Temperaturschwankungen und damit hervorragend geeignet für den Einsatz im rauen Produktionsumfeld.

Der DS2500 deckt den gesamten Spektralbereich von 400 bis 2500 nm ab und liefert in weniger als einer Minute genaue und reproduzierbare Ergebnisse. Der DS2500 Analyzer erfüllt die Anforderungen der pharmazeutischen Industrie und unterstützt durch die einfache Bedienung die Anwender in ihren täglichen Routineaufgaben.

Durch perfekt auf das Gerät abgestimmtes Zubehör werden bei jedem noch so herausfordernder Proben typ, wie z.B. grobkörnige Feststoffe wie Granulate oder halb fest-flüssige Proben wie Cremes, bestmögliche Ergebnisse erzielt. Bei Messungen von Feststoffen kann die Produktivität gesteigert werden durch Einsatz des MultiSample Cups, welches automatisierte Messungen in Serie von bis zu 9 Proben ermöglicht.