

基于红外光谱的 花椒蛋白质含量的快速检测

吉 卉, 郭康权*, 胡耀华

(西北农林科技大学机械与电子工程学院, 陕西杨凌 712100)

摘 要:为了开发花椒品质的快速检测新技术, 本文用红外光谱漫反射技术对不同品种花椒的蛋白质含量进行了检测。首先采用常规的凯氏定氮仪测试了花椒样品的蛋白质含量, 同时采集该样品的红外漫反射光谱, 并进行二阶导数预处理, 再分别用多元线性回归、主成分分析和偏最小二乘法进行回归分析。结果表明, 多元线性回归法优于其他两种方法, 其决定系数、剩余标准差分别为 0.9317、0.1658。因此, 多元线性回归法是花椒蛋白质含量红外检测的最优建模方法。

关键词:花椒, 红外光谱, 凯氏定氮, 蛋白质

Rapid detection of protein content in *Zanthoxylum bungeanum* Maxim by infrared spectroscopy

Ji Hui, GUO Kang-quan*, HU Yao-hua

(College of Mechanical and Electronic Engineering, Northwest A&F University, Yangling 712100, China)

Abstract: The protein content in different kinds of *Zanthoxylum bungeanum* Maxim were measured by infrared reflectance spectroscopy to develop a new rapid detection technique about the quality of *Zanthoxylum bungeanum* Maxim. First, used traditional method—gerhard kjedahl determination device to determine the protein content in *Zanthoxylum bungeanum* Maxim, collected the spectrum of the sample and applied second derivative to pre-treat the spectrum. Then, the regression analysis was made basing on multiple linear regression (MLR), principal component analysis (PCA) and partial least squares (PLS) respectively. The results indicated that the model developed by MLR was better than others for protein, the coefficient of determination was 0.9317, and the residual standard deviation was 0.1658. Hence, MLR was the best model method of detecting the protein content in *Zanthoxylum bungeanum* Maxim by infrared spectroscopy.

Key words: *Zanthoxylum bungeanum* Maxim; infrared spectroscopy; Kjeldahl nitrogen determination; protein

中图分类号: TS255.7

文献标识码: A

文章编号: 1002-0306(2010)06-0339-02

花椒 (*Zanthoxylum bungeanum* Maxim) 原产于中国, 属芸香科、花椒属落叶灌木或小乔木, 其果皮被誉为“八大调味品”之一, 是主要的经济栽培品种。花椒在我国具有悠久的栽培历史, 并广泛种植, 其中以四川汉源、重庆江津、陕西韩城、凤县、山西芮城、甘肃武都、秦安等地区为主要产区。蛋白质是花椒中的主要营养物质^[1-2], 含量在 10% 左右, 但在我国花椒仅作为调味品使用, 其产品主要局限于整粒或磨碎的花椒, 有效成分利用低, 深加工产品极其缺乏。红外光谱是一种快速、高效、绿色的分析工具^[3-5], 利用红外光谱测定花椒中的蛋白质含量, 解决了传统方法测定蛋白质时间长、投资大、步骤多等

缺点, 从而为花椒的深加工和提高它的营养价值及经济价值提供一些基础性的研究。

1 材料与方法

1.1 实验材料

花椒 本实验收集了 110 份样品, 分别来自陕西韩城、四川汉源、甘肃陇南和山西平顺等地, 覆盖了全国主要产区的典型品种, 其中红花椒 80 份, 青花椒 30 份。

1.2 实验方法

1.2.1 蛋白质含量的测定 用万能粉碎机将每份样品进行粉碎, 过 40 目标准筛, 得 40 目颗粒大小的粉末样品。

用北京通润源机电技术有限公司的 KDY-9810 型半自动凯氏定氮仪测定花椒的蛋白质, 凯氏定氮法测定的蛋白质含量为含氮量乘以 6.25。样品测定值统计结果如表 1 所示。

收稿日期: 2009-06-15 * 通讯联系人

作者简介: 吉卉 (1984-), 女, 在读硕士, 研究方向: 农产品品质检测与资源利用新技术。

表1 花椒样品中蛋白质含量统计

	样品数	最大值 (%)	最小值 (%)	平均值 (%)	标准偏差
总样品	110	11.25	8.05	9.71	0.6081
定标集	85	11.25	8.05	9.71	0.6156
预测集	25	11.21	8.49	9.72	0.5819

1.2.2 光谱测量方法 采用布鲁克公司 (Bruker Optics) 的 TENSOR27 红外光谱仪进行花椒的红外光谱测量。测量时,实验室温度保持在 20℃ 左右,湿度保持在 40% 左右。

将未经粉碎的完整花椒颗粒样品放入石英样品池中,用手动压片机压紧样品进行扫描,扫描范围为 400~4000 cm^{-1} ,扫描次数为 32。

1.2.3 建立预测模型 首先利用红外光谱仪自带的 OPUS 软件对每个样品的图谱进行二次微分处理,从 110 个样品中任选 85 个样品组成定标集,然后分别采用多元线性回归 (MLR)、主成分分析 (PCA) 和偏最小二乘法 (PLS) 建立定标集样品光谱与蛋白质含量之间的预测模型,再用预测模型对其余 25 个样品组成的预测集中的蛋白质含量进行预测,检验模型预测的准确性。

2 结果与分析

2.1 花椒的红外漫反射光谱

在 400~4000 cm^{-1} 谱区内,花椒的红外漫反射吸收光谱如图 1 所示,蛋白质含有大量的 C-H、N-H、O-H、C-N 基团,在 3000 cm^{-1} 左右、1560 cm^{-1} 左右、3500~3200 cm^{-1} 、1340~1020 cm^{-1} 出现了强烈的吸收,从而为蛋白质的定量分析提供了丰富的信息^[6-7]。

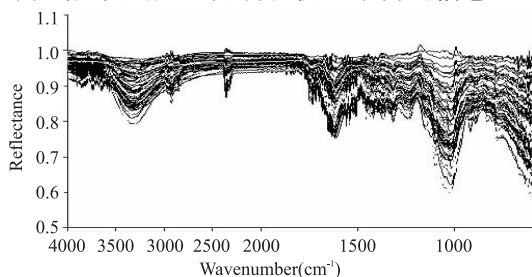


图1 花椒颗粒的二阶红外光谱

2.2 预测模型的最佳条件

通过对多元线性回归、主成分分析和偏最小二乘法三种分析方法的比较,得到适合测定花椒蛋白质含量的最优建模方法。

由表 2 可以看出,多元线性回归法建立的回归模型优于其他两种方法。

2.3 预测效果分析

(上接第 338 页)

for the measurement of lipid oxidation in various meats and meat products[J].Meat Science,2004,67:683-687.

[7] Ohya T. Reactivity of alkanals towards malondialdehyde (MDA) and the effect of alkanals on MDA determination in thiobarbituric acid test[J].Biol Pharm Bull,1993,16(11):1078-1082.

[8] Guillen-Sans R, Guzman-Choza M. Aldehydes in food and its relation with the TBA test for rancidity[J].Fat Sci Technol, 1995(7):285-286.

表2 三种分析方法的比较

	多元线性 回归	主成分 分析	偏最小 二乘法
定标集决定系数	0.9378	0.9317	0.8929
定标集剩余标准差	0.1582	0.1658	0.3790

选择一批与定标集无关的样品对模型进行外部验证。在此,选择 25 份样品构成验证集进行验证。结果表明,其决定系数和剩余标准差分别为 0.9479、0.1416。样品测定值与红外光谱预测值的绝对误差范围为 -0.2817~0.1804。说明红外光谱法能代替化学法测定花椒中的蛋白质含量。外部验证结果如图 2 所示。

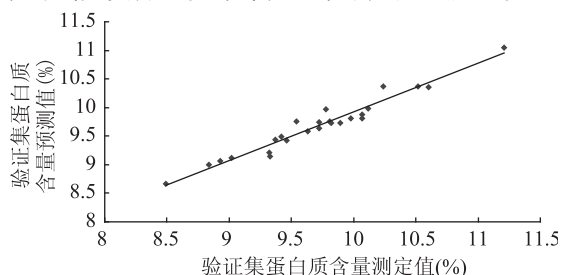


图2 验证集样品蛋白质测定值与模型预测值相关关系

3 结论

3.1 以红外漫反射技术为基础,用 3 种不同的化学计量学方法建立花椒蛋白质含量的数学模型,结果表明,多元线性回归建立的模型其决定系数和剩余标准差均优于其他两种方法建立的模型。

3.2 用红外光谱建立的预测模型能较准确地检测花椒中的蛋白质含量,可以达到快速检测的目的,简化了常规分析的程序。

参考文献

- [1] 邓振义,樊鸿章,等.大红袍花椒营养成分分析[J].陕西农业科学,2006(2):22-23.
- [2] 孙小文,段志兴.花椒属药用植物研究进展[J].药学学报,1996,31(3):231.
- [3] Ciurczak E W. Use of near infrared spectroscopy in cereal products[J].Food Testing and Analysis,1995(5):35-39.
- [4] 陆婉珍.现代近红外光谱分析技术[M].中国石化出版社,2007:9-11.
- [5] 陈允魁.红外吸收光谱法及其应用[M].上海交通大学出版社,1993:68-70.
- [6] 中西香尔 P H,索罗曼.红外吸收光谱[M].中国化工出版社,1980:31-32.
- [7] 戴军.食品仪器分析技术[M].化学工业出版社,2006:232-233.

[9] 张松山.用于评价腌腊肉制品脂肪氧化程度的 TBA 方法的改进[D].中国农业大学硕士论文,2007:21-27.

[10] 黄伟坤.食品检验与分析[M].北京:中国轻工业出版社,1989:398-399.

[11] M R Rosimini, F Perlo. TBA Test by an Method Applied to 'Pate' [J].Meat Science,1995:103-105.

[12] Kojima T, Kikugawa K, Kosugi H. Is the thiobarbituric acid - reactivity of blood plasma specific to lipid peroxidation[J].Chem Pharm Bull(Tokyo),1990,38(12):3414-3418.