

Bestimmung von Omega 3-Fettsäuren in Fischölen mittels $^1\text{H-NMR}$ -, FTIR- und FT-NIR-Spektroskopie: Methodenvergleich

E. Giese, Ole Winkelmann, Sascha Rohn, Jan Fritsche*

*Prof. Dr. Jan Fritsche, Max Rubner-Institut, Institut für Sicherheit und Qualität bei Milch und Fisch, Hermann-Weigmann-Straße 1, 24103 Kiel/D

Der Konsum fischölbasierter Nahrungsergänzungsmittel hat in den letzten Jahren stetig zugenommen, was hauptsächlich auf deren hohen Gehalten an den nachweislich gesundheitsförderlichen Omega 3-Fettsäuren zurückzuführen ist. In dieser Arbeit wurde das Potential von $^1\text{H-NMR}$ -, FTIR- und FT-NIR-Spektroskopie als Alternativmethoden zur Bestimmung des Gesamtgehalts an Omega 3-Fettsäuren sowie des Gehalts an Docosahexaensäure (DHA) und Eicosapentaensäure (EPA) als mengenmäßig bedeutendste Omega 3-Fettsäuren in Fischöl untersucht. Die Fettsäuregehalte wurden dabei mithilfe von künstlichen neuronalen Netzen aus den NMR-, FTIR- und FT-NIR-Spektren ermittelt. Dazu wurden verschiedene Methoden der Spektrenvorbehandlung und der Variablenreduktion angewendet. Zudem wurde die Genauigkeit der für NMR-Spektren entwickelten Modelle mit der Methode des internen Standards verglichen. NMR-, IR- und NIR-Spektroskopie bieten gegenüber der klassischen Fettsäurebestimmung mittels GC-FID nach Umesterung den Vorteil, dass sie innerhalb deutlich kürzerer Zeit Ergebnisse liefern, keiner bzw. weniger Chemikalien bedürfen und direkt auf die zu untersuchenden Proben angewendet werden können. Außerdem lassen sich aus den Spektren eine Fülle weiterer Informationen zur Zusammensetzung bzw. Qualität der Fischöle ableiten, die im Rahmen des Vortrages präsentiert werden.