

Modelowanie nioselektywnych sygnałów analitycznych w kontekście kontroli jakości wybranych produktów

Ocena jakości produktów, która zależy od wielu parametrów (w tym składu chemicznego) z definicji wymaga podejścia globalnego. W większości przypadków nie jest to możliwe poprzez kontrolę wyłącznie jednego czy dwóch parametrów. Dlatego produkty opisuje się przez sygnał analityczny (potencjalnie bogaty w informację chemiczną). Sygnał taki będzie złożony, gdyż zawiera wkłady pochodzące od indywidualnych komponentów badanych produktów. Często do opisu produktów używa się **sygnałów nioselektywnych** (np. chromatogramy czy widma spektroskopowe). Zasób informacji w nich zawartej pozwala rozpatrywać je jako tzw. **chemiczne odciski palca**, które oddają unikalność badanych próbek. Ze względu na złożony skład chemiczny często obserwuje się interferencje sygnałów pochodzących od poszczególnych komponentów. **Techniki chemometryczne** umożliwiają izolację użytecznej informacji, która z tego powodu nie jest bezpośrednio dostępna. Zalety chemicznych odcisków palca powodują, że są one coraz częściej wykorzystywane do oceny jakości produktów, zwłaszcza w kontekście badań próbek spożywczych, analityki procesowej czy monitoringu środowiska.

Celem zrealizowanych badań było **efektywne wykorzystanie informacji** zawartej w nioselektywnych sygnałach analitycznych do rozwiązywania problemów szeroko pojętej chemii analitycznej. Opracowano szereg rozwiązań analitycznych służących ocenie jakości cukru (ze względu na zabarwienie i zawartość popiołu), oleju napędowego (ze względu na normy prawne dotyczące wysokości podatku akcyzowego) oraz produktów spożywczych takich jak kawa, mięta pieprzowa, bazylia, oregano, pasta pomidorowa i herbata typu rooibos (ze względu na całkowitą zawartość antyoksydantów i polifenoli). Produkty scharakteryzowano poprzez nioselektywne sygnały analityczne takie jak: fluorescencyjne widma synchroniczne – fluorescencyjne obrazy, widma rejestrowane w zakresie podczerwieni oraz chromatogramy zarejestrowane z wykorzystaniem techniki wysokosprawnej chromatografii cieczowej sprzężonej z detektorem DAD (HPLC-DAD). Dla każdego celu badawczego wybrano niezbędne techniki chemometryczne, które umożliwiły opracowanie funkcjonalnych metodyk analitycznych i sformułowanie konstruktywnych wniosków. Metodyki uzupełniono dokonując walidacji podstawowych parametrów charakteryzujących procedury analityczne.

Proponowane rozwiązania eliminują konieczność wykonywania kosztownych i czasochłonnych analiz dzięki zastosowaniu sygnałów nioselektywnych. Wszystkie eksperymenty projektowane były tak, aby ograniczyć produkcję szkodliwych odpadów chemicznych – zgodnie z zasadami zielonej chemii. Sygnały nioselektywne, tam gdzie to możliwe, rejestrowano dla próbek bez wstępnego przygotowania do analizy lub używając wyłącznie wody destylowanej jako rozpuszczalnika. Wysoka efektywność proponowanych rozwiązań sprawia, że mogą one być rekomendowane do zastosowań praktycznych w laboratoryjnych badaniach rutynowych oraz typu on-line, do kontroli jakości produktów. Taka adaptacja wymaga jednak przeprowadzenia dodatkowych badań, zwłaszcza z uwzględnieniem możliwych zmian składu chemicznego próbek.