

# 吸光度-化学计量法测定饮料 中混合色素各组分

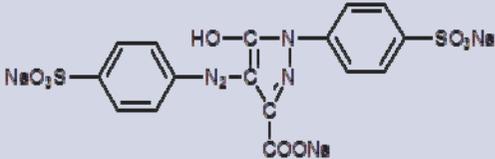
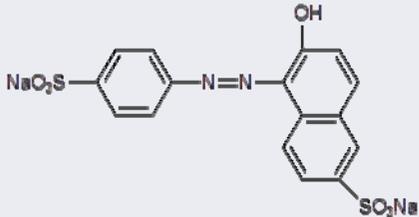
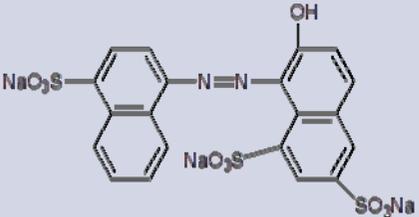
陈珍霞

- 实验目的
- 实验原理和内容
- TU-1901双光束紫外可见分光光度计使用
- Matlab软件使用及数据处理
- 思考题

# 实验目的

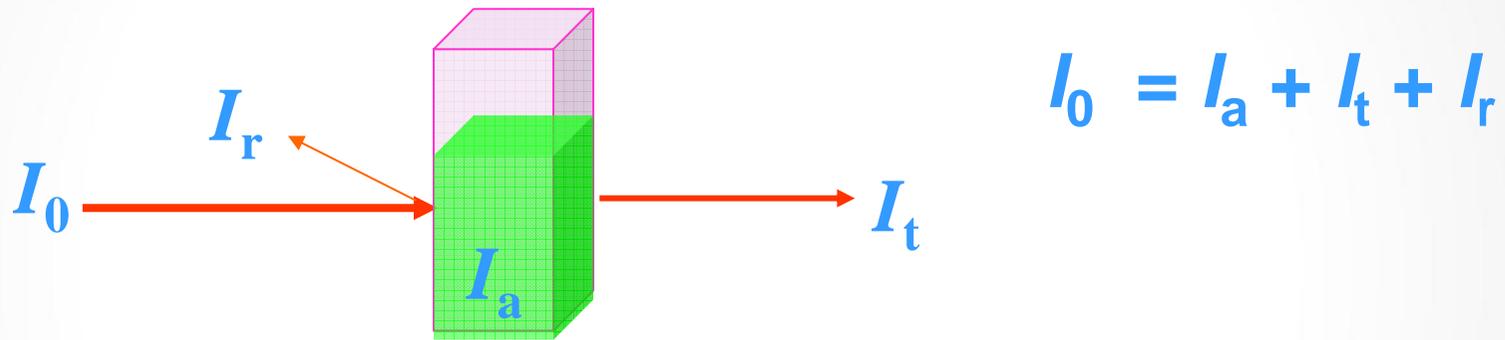
- 掌握相关色素的信息，绘制饮料中混合色素的紫外可见光谱，掌握求算相关色素的浓度的方法
- 掌握紫外-可见分光光度法原理及仪器操作
- 掌握通用标准加入法（**GSAM**）的测量原理和定量计算方法。

# 饮料中常见的人工合成色素

	结构式	最大波长 $\lambda_{\max}$ (nm)	最大允许使用量 (g·kg <sup>-1</sup> )
柠檬黄 Tartrazine		426	0.1
日落黄 Sunset yellow		482	0.1
胭脂红 Ponceau 4R		508	0.05

# 紫外-可见分光光度法

## 透射比（吸光度）和透射率



$$\frac{I_t}{I_0} = T$$

$$A = -\lg T = \lg \frac{I_0}{I_t}$$

$$100t = \%T$$

反射光强度大小近似可相互抵消(以参比溶液校正)

则  $I_0 = I_a + I_t$   
透射比  $\uparrow$ ，溶液对光的吸收  $\downarrow$

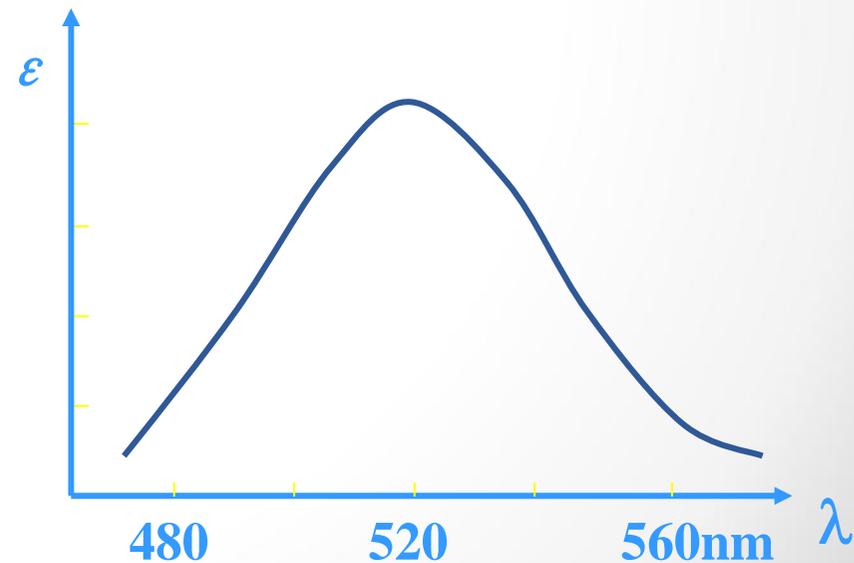
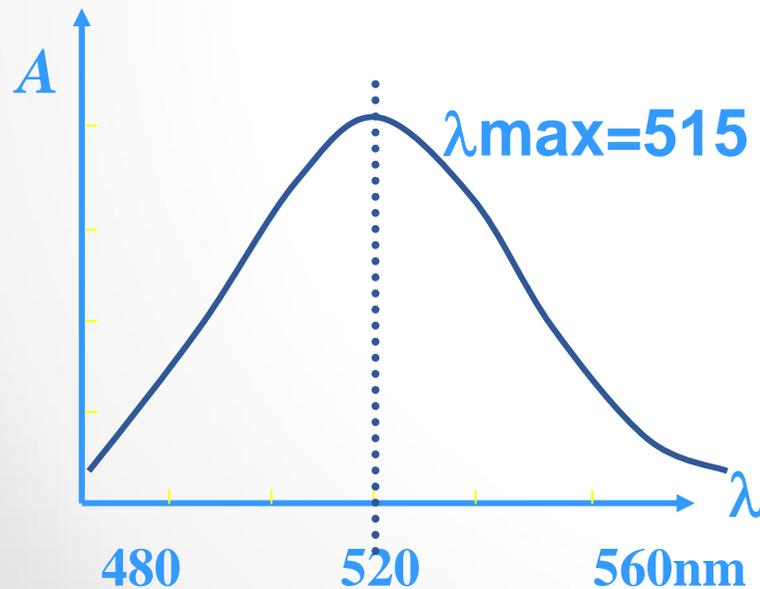
吸光度  $\uparrow$  吸收能  $\uparrow$  (在一定波长下)

# Lambert-Beer定律

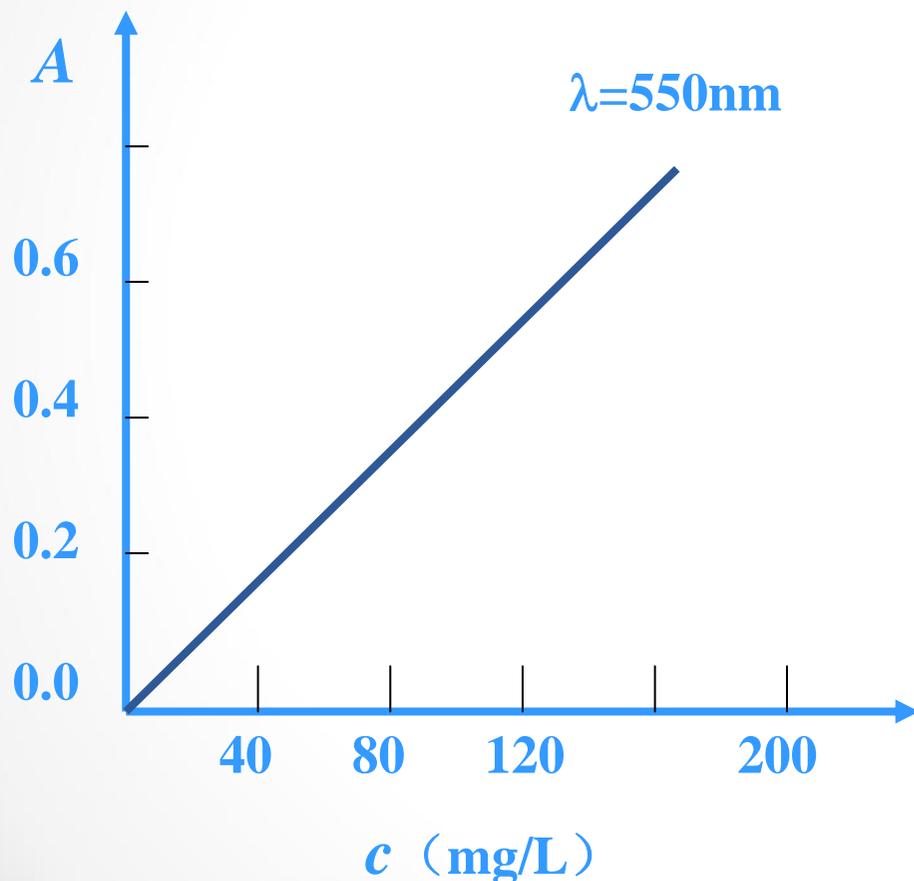
$$A = \lg \frac{I_0}{I_t} = \lg \frac{1}{T} = kbc$$

## 定量分析的理论基础

$A$  ( $\varepsilon$ ) 为纵坐标, 波长 $\lambda$ 为横坐标  
( $\varepsilon$ :  $c$ 为1mol/L,  $b$ 为1cm时溶液的 $A$ )



# 测单组分试液浓度



- 配制一系列不同浓度的标准溶液，在  $\lambda$  最佳处分别测定标准溶液的吸光度  $A$ ，然后以浓度为横坐标，以相应的吸光度为纵坐标绘制出标准曲线，在完全相同的条件下测定试液的吸光度，并从标准曲线上求得试液的浓度。该法适用于大批量样品的测定。

# 通用标准加入法 (GSAM)

在待测样品中按照正交设计直接多次加入多种待测标准物，从而构成一测量矩阵，并在此基础上进行多元校正

➤ 一含有n个组分的待测样品，各组份初始浓度为 $C_0$ ，进行m次标准加入，测试其在p个波长处的吸光度值为

$$A_{m \times p} = C_{m \times n} B_{n \times p} + E_{m \times p}$$

➤ 未加标准物质的待测样品吸光度值为

$$(A_0)_{m \times p} = (C_0)_{m \times n} B_{n \times p} + E_{m \times p}$$

➤ 两式相减，得标准物质的吸光度为

$$\Delta A_{m \times p} = \Delta C_{m \times n} B_{n \times p}$$

➤ 因此标准物质在p个波长处的吸光度系数矩阵为

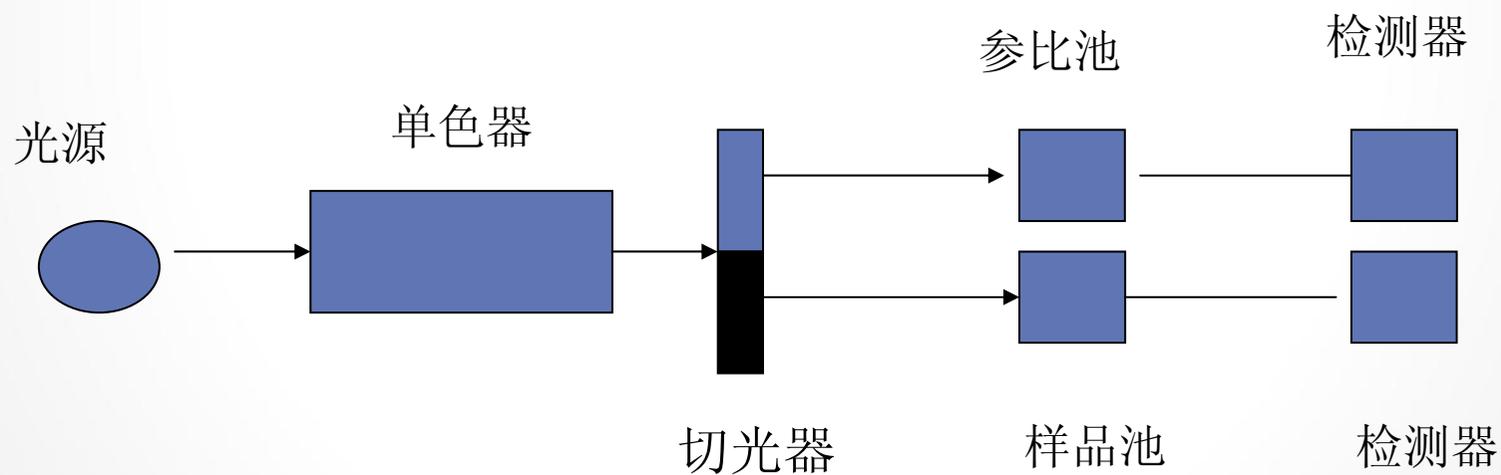
$$B = (\Delta C' \Delta C)^{-1} \Delta C' \Delta A$$

➤ 由吸光系数可计算出试样中各组份的初始浓度为

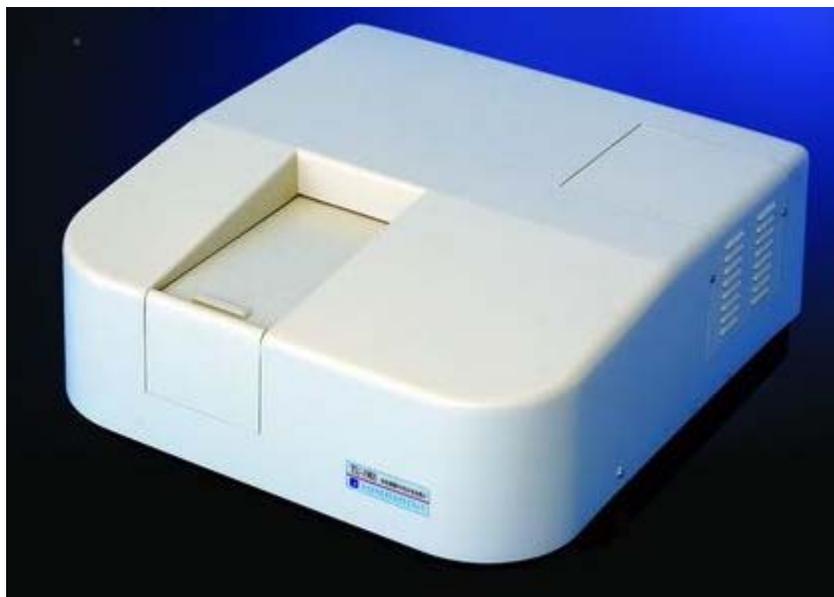
$$C_0 = (B' B)^{-1} B' A_0$$

# 仪器介绍

## 紫外-可见分光光度计的基本结构



# TU-1901双光束紫外-可见分光光度计



- 提前30 min开机预热，在Windows操作系统中[开始]菜单下选择[程序]-[紫外窗口]-[TU-1900 UVWin]，进入光度计自检过程，自检无误后进入主工作程序。
- 选择[应用]菜单下的[光谱测量]，进入光谱扫描窗口，选择[配置]菜单下[参数]进入参数设置界面。设置如下参数，[波长(nm)]，开始：600；结束：350；扫描：中速。[纵坐标范围]，低：0.0000，高：1.0000，光度方式：Abs。[扫描]，次数：1，采样间隔：5.0 nm。

# 吸收池（比色皿）选择与清洗

- 石英池： 紫外-可见光范围（测量波长范围内无吸收的材料）
- 玻璃池： 可见光用，用于370nm以上的波长范围。塑料池也可用于可见光范围
- 吸收池清洁： 通常用溶剂清洗，但对于不溶于水的溶剂可使用丙酮或乙醇清洗
- 比色皿使用注意事项：
  - ✓ 比色皿要配对使用
  - ✓ 拿取时，手指不能接触透光面，外壁液滴用吸水纸轻轻吸干，不得大力擦拭。使用时透光面垂直于入射光
  - ✓ 装入溶液应为比色皿高度的2/3~3/4，使用前要先用被测溶液润洗3遍以上

# 数据处理

- MATLAB计算模拟试样与美年达中柠檬黄、日落黄、胭脂红的浓度（用体积表示）
- 计算模拟试样中三种色素的回收率。
- 求出美年达中柠檬黄、日落黄、胭脂红的浓度，对比最大使用量是否超标。

# 思考题

1. 比较多元线形回归法与通用标准加入法的优缺点
2. 为什么通用标准加入法要采用正交设计？
3. 美年达苹果汁饮料中含有柠檬黄与亮蓝两种食用色素，试设计出采用通用标准加入法来检测柠檬黄与亮蓝的浓度的方法。