doi：10.13413/j.cnki.jdxblxb.2023243

基于 Fourier 变换红外光谱分析咖啡豆成分

于 跃，胡长城
（吉林大学 物理学院，长春 130012）

摘要：采用 Fourier 变换红外光谱对不同产区、不同海拔的 5 组浅中烘焙的咖啡豆样品进行分析，根据官能团的红外光谱特征峰分析样品主要成分；为进一步分析 5 组样品的成分差异，对原始光谱进行二阶导数处理，结合聚类分析理论建立平均偏离分析方法，计算出 5 组样品间的平均偏离大小并进行分析. 结果表明：5 组样品的红外光谱特征峰峰形相似，即主要成分相同；根据红外光谱得到平均偏离大小与产区海拔差值呈正相关. 研究结果为分析咖啡豆产区和海拔提供鉴别依据，并对红外光谱研究提供一定参考.

关键词：Fourier 变换红外光谱；平均偏离法；聚类分析；咖啡豆
中图分类号：O433.4 **文献标志码**：A **文章编号**：1671-5489(2024)04-0980-05

Analysis of Coffee Bean Components Based on Fourier Transform Infrared Spectroscopy

YU Yue, HU Changcheng
(*College of Physics, Jilin University, Changchun* 130012, *China*)

Abstract: Fourier transform infrared spectroscopy was used to analyze five groups of light-roasted coffee bean samples from different producing areas and different altitudes. The main components of the samples were analyzed according to the infrared spectral characteristic peaks of functional groups. In order to further analyze the compositional differences of the five groups of samples, the original spectra were subjected to second-order derivative processing. The average deviation analysis method was established based on the theory of cluster analysis, and the average deviation between the five groups of samples was calculated and analyzed. The results show that the infrared spectral characteristic peaks of the five groups of samples have similar peak shapes, that is, the main components are the same, the average deviation from the infrared spectrum is positively correlated with the altitude difference of the producing area. The research results provide identification basis for analyzing producing areas and the altitude of the coffee bean, and provide certain reference value for the study of infrared spectrum.

Keywords: Fourier transform infrared spectroscopy; mean deviation method; cluster analysis; coffee bean

咖啡豆经烘焙磨粉可制作咖啡饮品，它除了用作饮品，还用于提取咖啡碱和咖啡油等，在医药和

收稿日期：2023-06-12.

第一作者简介：于 跃(1993—)，女，汉族，硕士，工程师，从事量子光学和光谱的研究，E-mail：yuyue@jlu.edu.cn. **通信作者简介**：胡长城(1982—)，男，汉族，博士，高级工程师，从事磁性功能材料及新能源电池的研究，E-mail：hucc@jlu.edu.cn.

基金项目：吉林省自然科学基金(批准号：20220101001JC).

食品加工等领域应用广泛[1-4]. 牙买加、巴西、哥伦比亚和埃塞俄比亚等地为咖啡豆的主要产地[5]，于1898 年引入中国海南文昌开始种植，目前咖啡产业在中国迎来了快速发展时期，咖啡的品质已引起人们广泛关注. 研究表明，咖啡豆的品种、种植地的纬度和海拔对咖啡的品质影响较大[6].

目前，针对咖啡的研究成果较多：鲍一丹等[7]利用近红外高光谱成像技术对咖啡豆的鉴别进行了研究，并建立了 5 种判别分析模型；刘亚玲等[8]针对不同烘焙程度的咖啡豆，利用热裂解-气相色谱-质谱联用技术分析其化学组成；董盈红[9]利用 Fourier 变换红外光谱对保山小粒咖啡豆进行了鉴别研究；蒲泓君等[10]利用气相色谱法对咖啡中硫丹及其代谢物农药残留进行了定性和定量检测.

红外光谱分析法是鉴定化合物及其结构的重要方法之一[11-14]，通过观察红外吸收峰的位置可分析分子结构特点，确定化学基团鉴别结构组成，并具有快速、高效和简便等优点[15]. 利用光谱的指纹特性[16]，人们在对各样本的研究中发挥了重要作用，并广泛用于农副产品分析以及作物种子生理研究[17]. 目前利用红外光谱的研究十分广泛，例如文献[18]利用中红外梳状 Fourier 变换红外光谱观测了碘甲烷 $\nu 4$ 波段的谱线位置和强度；文献[19]利用 Fourier 变换角分辨反射光谱揭示了 Inp 平板型光子晶体的中红外色散关系.

本文利用中红外波段的 Fourier 变换红外光谱进行成分分析，并根据聚类分析理论建立红外光谱平均偏离法[20]，利用该方法分析咖啡豆的产地信息，从而为鉴别咖啡提供了参考方法，并可用于其他农作物或食品研究，对红外光谱在物理和化学领域的研究有一定的参考价值[21-26].

1　测试方法

1.1　实验设备和条件

设备：德国布鲁克公司 VERTEX 80v 型 Fourier 变换红外光谱仪；中红外分束器的波数范围为 400～4 000 cm^{-1}；硫酸三甘肽晶体的红外检测器(DTGS 检测器)，扫描次数为 16 次，分辨率为 4 cm^{-1}；英国 Specac 公司压片机(光谱纯溴化钾)；应用光谱测定软件(OPUS 软件).

条件：实验室环境温度 20～26 ℃，湿度为 30%±5%.

1.2　样品和制备

本文选择来自不同产区的 5 组咖啡豆，原材料的产区和海拔列于表 1. 经 210～215 ℃浅中烘焙后研磨成粉末，按质量比为 1∶150 的比例与光谱纯的溴化钾均匀混合，依次放入玛瑙研钵中研磨，将样品置于压片机上施加约 1.5 t 的压力压制成片[23]. 每组样品测量 3 次，扣除背景后取平均值，并进行归一化处理.

表 1　原材料的产区和海拔

Table 1　Producing areas and altitude of raw materials

编号	产区	海拔/m	编号	产区	海拔/m
1	米纳斯	900～1 000	4	埃塞俄比亚	1 800～2 000
2	苏门答腊	1 200～1 500	5	蕙兰	≥2 000
3	巴拿马	1 600			

2　结果与分析

2.1　5 组不同产区咖啡豆的 Fourier 变换红外光谱特征

分别测试 5 组来自不同产区咖啡豆的 Fourier 变换红外吸收光谱，对同一组样品求平均值，结果如图 1 所示. 由图 1 可见，5 组咖啡豆的光谱相似：在 3 435 cm^{-1}附近有较强的吸收峰，这是由于多糖和蛋白质中的—OH 和—NH_2 的伸缩振动所致；在 2 925，2 858 cm^{-1}附近有较强的吸收峰，这是由于—CH_2 的对称伸缩振动和—CH_3 的反对称伸缩振动所致，归属为脂质、蛋白质和碳水化合物；在 1 741 cm^{-1}附近的吸收峰为链状饱和羧酸酯的 C＝O 伸展振动所致；在 1 654 cm^{-1}附近的吸收峰为蛋白质酰胺Ⅰ带和酰胺Ⅱ带的 C＝O 伸缩振动和 N—H 伸缩振动及蛋白质 C＝N 伸缩振动所致；在 1 500～1 200 cm^{-1}内的吸收峰为蛋白质、脂肪酸和多糖的混合振动吸收区；在 1 251 cm^{-1}附近为

P═O伸缩振动或 PO^{2-} 的不对称拉伸振动和酰胺Ⅲ的 N—H 和 C—N 的伸缩振动吸收峰；在 1 161 cm^{-1} 附近的吸收峰为糖类 C—O—C 的反对称伸缩振动峰. 当 σ=1 900～600 cm^{-1} 时，5 组咖啡豆的二阶导数红外光谱如图 2 所示. 由图 2 可见，5 组不同产区的咖啡存在一定差别.

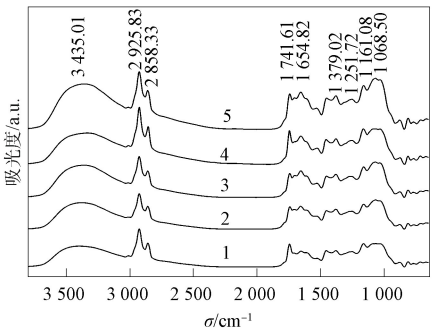


图 1 5 组咖啡豆的 Fourier 变换红外光谱

Fig. 1 Fourier transform infrared spectra of five groups of coffee beans

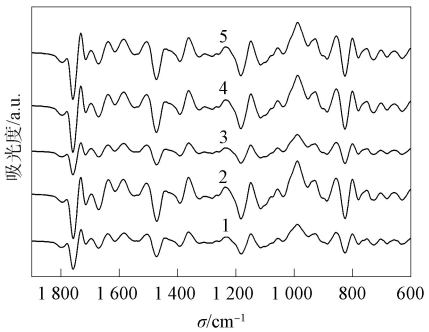


图 2 5 组咖啡豆的二阶导数红外光谱

Fig. 2 Second-order derivative infrared spectra of five groups of coffee beans

2.2 不同产区海拔咖啡豆平均偏离分析

将红外光谱的横坐标波数和纵坐标吸光度作为样本的 2 个特征值进行聚类分析，可分析不同产区咖啡豆亲疏远近，采用聚类分析法中最常用的方法欧氏距离(简称距离)进行分析，将 x 和 y 的欧氏距离定义为

$$D(x,y)=\sum_{i=1}^{d}\|x_i-y_i\|=\sqrt{\sum_{l=1}^{d}|x_i-y_i|^2}, \tag{1}$$

其中 d 为特征空间的维数. 由式(1)可见，样本的相似度高低与欧氏距离成正比，将 2 个不平行曲线 x 和 y 总的偏离距离分配到每个点上，即

$$\begin{aligned} S&=\sum_{i=1}^{n}\|x_i-y_i\|,\\ \delta&=\frac{S}{n}, \end{aligned} \tag{2}$$

平均偏离的表达式为

$$\begin{aligned} S&=\sum_{i=1}^{n}\|x_i-y_i\|,\\ \delta&=\sum_{i=1}^{N}\frac{\|\|(x_i-y_i)\|-S/N\|}{N}, \end{aligned} \tag{3}$$

其中 x_i 和 y_i 为 2 组光谱每个点的吸光度，S 为 2 个红外光谱间的整体偏离，δ 为平均偏离.

根据公式(3)，用 Python 编写程序，将 Fourier 变换光谱中每组数据经平滑、平均和归一化处理，导入编写的平均偏离程序中，得到不同样本间的平均偏离大小，5 组咖啡豆间的平均偏离大小列于表 2. 由表 2 可见，平均偏离大小随海拔差的增大而增大.

表 2 5 组咖啡豆间的平均偏离大小

Table 2 Average deviation between five groups of coffee beans

编号	1	2	3	4	5
1	0	0.019 4	0.041 2	0.062 7	0.109 3
2	—	0	0.023 0	0.044 3	0.090 9
3	—	—	0	0.022 7	0.068 2
4	—	—	—	0	0.048 0
5	—	—	—	—	0

海拔与平均偏离的关系如图 3 所示. 由图 3 可见，第 1 组米纳斯产区与第 5 组蕙兰产区的光谱偏

离距离最大，相邻产区均相对较小，且平均偏离大小随海拔差的增大而增大.

将海拔和平均偏离大小经线性拟合可见，二者呈正相关. 因此通过平均偏离大小可分析鉴别不同产地和海拔的咖啡豆.

综上，本文用 Fourier 变换红外光谱研究了 5 组不同产区的咖啡豆，根据红外光谱特征峰分析样品的主要成分，并建立了光谱平均偏离法. 结果表明：5 组样品的主要成分相似，平均偏离大小随海拔差的增大而增大. 通过该方法可准确分析咖啡的产地信息，从而为鉴别咖啡提供了参考方法，并可用于其他农作物或食品研究，对红外光谱在物理和化学领域的应用研究有一定的参考价值.

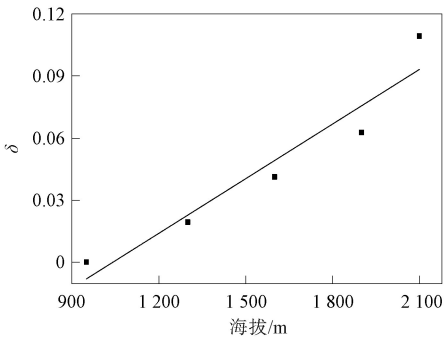


图 3　海拔与平均偏离的关系

Fig. 3　Relationship between altitude and mean deviation

参　考　文　献

[1] CLIFFORD M N, WILLSON K C. Coffee: Botany, Biochemistry and Production of Beans and Beverage [M]. London: Croom Helm, 1985: 305-374.

[2] 孙耀国，林敏，吕进，等. 近红外光谱法测定绿茶中氨基酸、咖啡碱和茶多酚的含量 [J]. 光谱实验室，2004，21(5)：940-943. (SUN Y G, LIN M, LÜ J, et al. Determination of the Contents of Free Amino Acids, Caffeine and Tea Polyphenols in Green Tea by Fourier Transform Near-Infrared Spectroscopy [J]. Chinese Journal of Spectroscopy Laboratory, 2004, 21(5): 940-943.)

[3] 沈强，孔维婷，于洋，等. 国内外茶叶咖啡碱研究进展 [J]. 中国茶叶，2010，32(1)：15-18. (SHEN Q, KONG W T, YU Y, et al. Tea Caffeine Research Progress at Native and Foreign [J]. China Tea, 2010, 32(1): 15-18.)

[4] 谭睿，申瑾，董文江，等. 复合凝聚法制备绿咖啡油微胶囊及其性能 [J]. 食品科学，2020，41(23)：144-152. (TAN R, SHEN J, DONG W J, et al. Preparation of Green Coffee Oil Microcapsules by Complex Coacervation Method and Its Physicochemical Properties [J]. Food Science, 2020, 41(23): 144-152.)

[5] NUHU A A. Bioactive Micronutrients in Coffee: Recent Analytical Approaches for Characterization and Quantification [J]. ISRN Nutrition, 2014, 2014: 384230-1-384230-13.

[6] BARBOSA J N, BOREM F M, CIRILLO M A. Coffee Quality and Its Interactions with Environmental Factors in Minas Gerais, Brazil [J]. Journal of Agricultural Science, 2012, 4(5): 176-181.

[7] 鲍一丹，陈纳，何勇. 近红外高光谱成像技术快速鉴别国产咖啡豆品种 [J]. 光学精密工程，2015，23(2)：349-355. (BAO Y D, CHEN N, HE Y. Rapid Identification of Coffee Bean Variety by Nearinfrared Hyperspectral Imaging Technology [J]. Optics and Precision Engineering, 2015, 23(2): 349-355.)

[8] 刘亚玲，谭超，龚加顺. 云南不同地区烘焙咖啡豆主要成分分析及类黑精组成成分 [J]. 食品科学，2017，38(2)：176-183. (LIU Y L, TAN C, GONG J S. Main Chemical Composition and Melanoidin Composition of Roasted Coffee Beans from Different Regions of Yunnan [J]. Food Science, 2017, 38(2): 176-183.)

[9] 董盈红. 基于傅里叶变换红外光谱对保山小粒咖啡豆的鉴别研究 [J]. 保山学院学报，2020，39(5)：49-52. (DONG Y H. Study on the Identification of Baoshan Coffee Arabica Based on Fourier Transform Infrared Spectroscopy [J]. Journal of Baoshan University, 2020, 39(5): 49-52.)

[10] 蒲泓君，邓洪燕，满红平. 气相色谱法测定咖啡生豆中硫丹及硫丹硫酸酯残留 [J]. 食品安全导刊，2023(12)：102-105. (PU H J, DENG H Y, MAN H P. Determination of Endosulfan and Endosulfan Sulfate Residues in Coffee Beans by Gas Chromatography [J]. China Food Safety Magazine, 2023(12): 102-105.)

[11] 王娟，杨笑迪. 光谱法鉴定手性化合物的绝对构型——从仪器表征到理论计算 [J]. 大学化学，2016，31(11)：37-44. (WANG J, YANG X D. Determination of Absolute Configuration of Chiral Compounds Based on Chiroptical Spectroscopic Methods: From Instrument Characterization to Computational Chemistry [J]. University Chemistry, 2016, 31(11): 37-44.)

[12] 李晓颖，张红医，范春林，等. 气相色谱-飞行时间质谱在化合物鉴定方面的应用进展 [J]. 化学通报，2014，77(2)：123-130.（LI X Y，ZHANG H Y，FAN C L，et al. Progress in Applications of Gas Chromatography Coupled to Time-of-Flight Mass Spectrometry for Identification of Compounds [J]. Chemistry，2014，77(2)：123-130.）

[13] 褚小立，陆婉珍. 近五年我国近红外光谱分析技术研究与应用进展 [J]. 光谱学与光谱分析，2014，34(10)：2595-2605.（CHU X L，LU W Z. Research and Application Progress of Near Infrared Spectroscopy Analytical Technology in China in the Past Five Years [J]. Spectroscopy and Spectral Analysis，2014，34(10)：2595-2605.）

[14] 孙通，徐惠荣，应义斌. 近红外光谱分析技术在农产品/食品品质在线无损检测中的应用研究进展 [J]. 光谱学与光谱分析，2009，29(1)：122-126.（SUN T，XU H R，YING Y B. Progress in Application of Near Infrared Spectroscopy to Nondestructive On-Line Detection of Products/Food Quality [J]. Spectroscopy and Spectral Analysis，2009，29(1)：122-126.）

[15] XIAO Y Z，ALIREZA S，WAN C H，et al. Measuring Thermal Emission Near Room Temperature Using Fourier-Transform Infrared Spectroscopy [J]. Physical Review Applied，2019，11(1)：014026-1-014026-12.

[16] KOENIG J L，SNIVELY C M. Fast FT-IR Imaging：Theory and Applications [J]. Spectroscopy，1998，13(11)：22-28.

[17] YU M K，RYO O，SHIGEKI T，et al. Quantum Fourier-Transform Infrared Spectroscopy in the Fingerprint Region [J]. Optics Express，2022，30(13)：22624-22636.

[18] IBRAHIM S，ADRIAN H，FRANCISCO S V，et al. Line Positions and Intensities of the υ_4 Band of Methyl Iodide Using Mid-Infrared Optical Frequency Comb Fourier Transform Spectroscopy [J]. Journal of Quantitative Spectroscopy and Radiative Transfer，2020，255：107263-1-107263-8.

[19] SITI C，YAO Y Z，NAOKI I，et al. Mid-Infrared Dispersion Relations in InP Based Photonic Crystal Slabs Revealed by Fourier-Transform Angle-Resolved Reflection Spectroscopy [J]. Physical Review Applied，2021，15(6)：064076-1-064076-7.

[20] MAURER G A，OZEN B F，MAUER L J，et al. Analysis of Hard-to-Cook Red and Black Common Beans Using Fourier Transform Infrared Spectroscopy [J]. Journal of Agricultural and Food Chemisrty，2004，52(6)：1470-1477.

[21] 周美立. 相似性科学 [M]. 北京：科学出版社，2004：144-165.（ZHOU M L. Similarity Science [M]. Beijing：Science Press，2004：144-165.）

[22] CHIARA L，SEBASTIAN W，JENS K，et al. Fourier Transform Infrared Spectroscopy with Visible Light [J]. Optics Express，2020，28(4)：4426-4432.

[23] 潘亚丽，王静平. 红外光谱样品制备中常见问题及解决办法 [J]. 山西化工，2000，20(1)：33-34.（PAN Y L，WANG J P. Common Problems and Solutions in the Preparation of Infrared Spectrum Samples [J]. Shanxi Chemical Industry，2000，20(1)：33-34.）

[24] 白云，胡光辉，李琴梅，等. 傅里叶变换红外光谱法在高分子材料研究中的应用 [J]. 分析仪器，2018(5)：26-29.（BAI Y，HU G H，LI Q M，et al. Application of Fourier Transform Infrared Spectroscopy in Polymer Materials [J]. Analytical Instrumentation，2018(5)：26-29.）

[25] 杨珊，蔡秀琴，张怡丰. 固体物质的红外光谱衰减全反射与透射测试方法的比较研究 [J]. 光谱学与光谱分析，2020，40(9)：2775-2780.（YANG S，CAI X Q，ZHANG Y F. A Comparative Study on the ATR and TR Methods of Infrared Spectroscopy of Solid Matters [J]. Spectroscopy and Spectral Analysis，2020，40(9)：2775-2780.）

[26] 高洪智，卢启鹏. 土壤主要养分近红外光谱分析及其测量系统 [J]. 光谱学与光谱分析，2011，31(5)：1245-1249.（GAO H Z，LU Q P. Near Infrared Spectral Analysis and Measuring System for Primary Nutrient of Soil [J]. Spectroscopy and Spectral Analysis，2011，31(5)：1245-1249.）

（责任编辑：王 健）