



Olio di oliva

Analisi dei pigmenti mediante
spettroscopia UV-visibile

VALENTINA DOMENICI

*DIPARTIMENTO DI CHIMICA E CHIMICA INDUSTRIALE
UNIVERSITA' DI PISA*

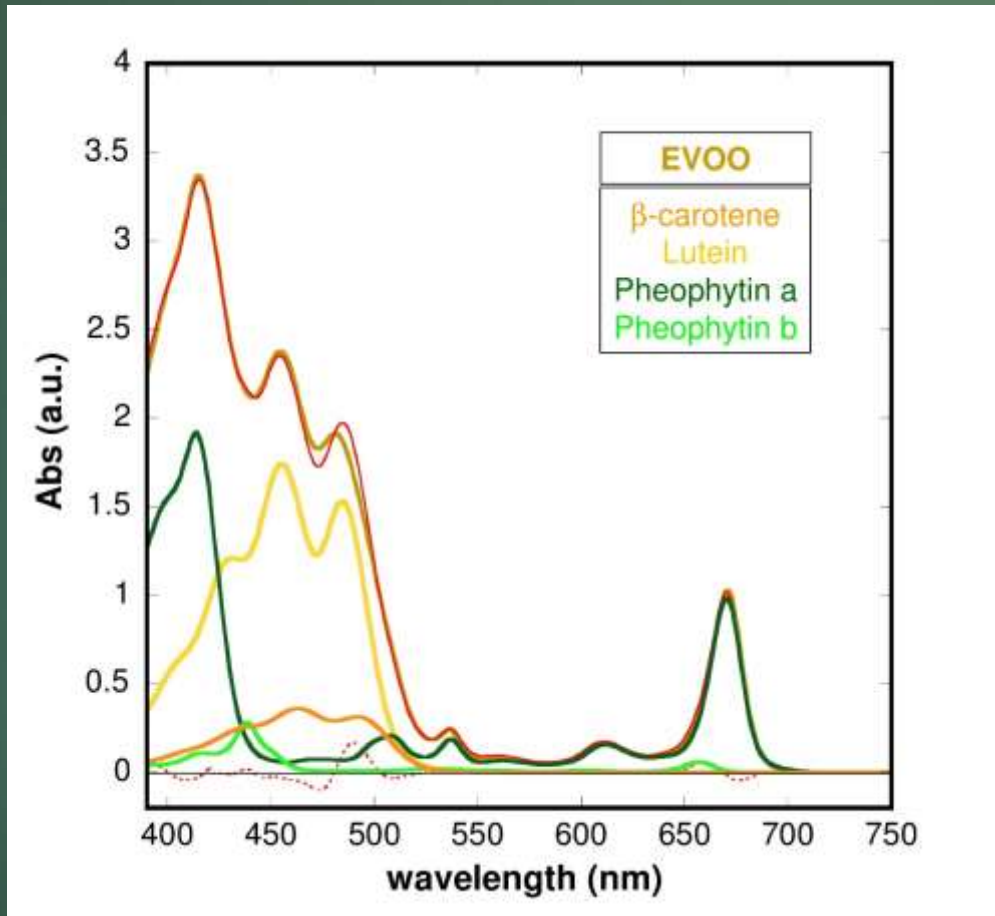
I pigmenti nell'olio di oliva

Utilizzo di parametri legati al contenuto di pigmenti per la caratterizzazione varietale e per l'autenticazione

Caratterizzazione varietale	<ul style="list-style-type: none">• $\text{Clorofille}_{\text{tot}}/\text{Carotenoidi}_{\text{tot}}$• Carotenoidi minoritari/luteina
Autenticazione	<ul style="list-style-type: none">• % violaxantina• % luteina• Contenuto Totale di Pigmenti• Luteina/β-carotene

I pigmenti nell'olio di oliva

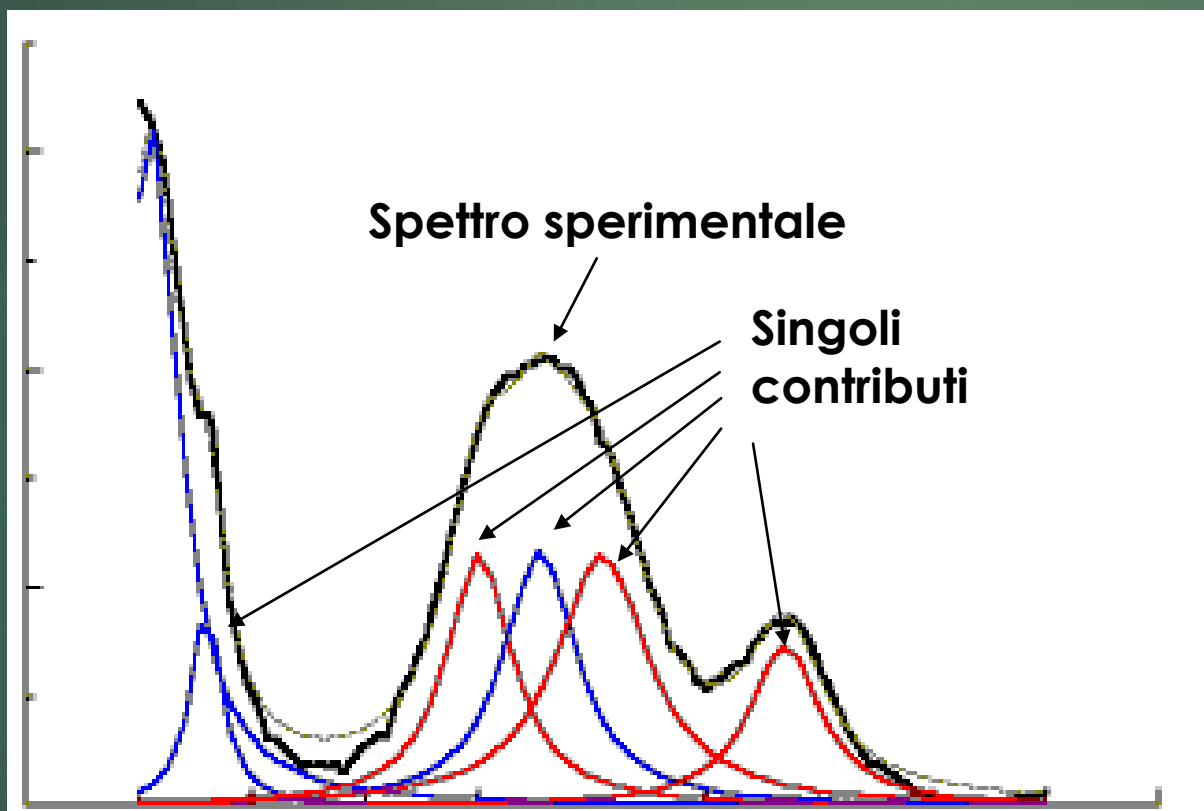
I pigmenti ovvero il colore dell'olio !



I principi dell'analisi spettrale

4

DECONVOLUZIONE DEI SEGNALE / DEGLI SPETTRI



Dal punto di vista grafico è piuttosto semplice. Se ho un segnale o uno spettro che è il risultato della somma di più segnali o più spettri, come faccio a trovare i singoli contributi?

Matematicamente si parla di «**deconvoluzione**» che significa scomporre un segnale o uno spettro in vari componenti.

I principi dell'analisi spettrale

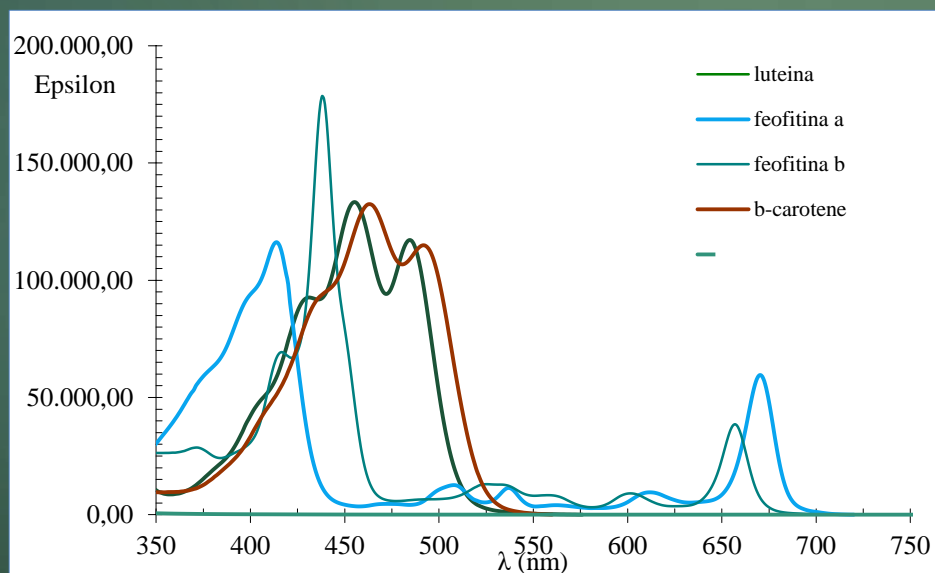
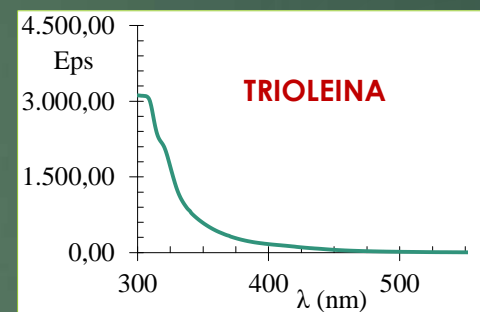
5

DECONVOLUZIONE DEI SEGNALE / DEGLI SPETTRI

Nel caso dello spettro di assorbimento UV-visibile di un olio di oliva, consideriamo che ci siano almeno **4 pigmenti** principali (che sono quelli presenti in concentrazione maggiore):

β -carotene e luteina, feofitina a e feofitina b.

A questi quattro pigmenti si aggiunge una sorta di linea di base, data dallo spettro della trioleina.



Queste sono le $\epsilon(\lambda)$

(coefficienti di assorbimento molare)

I principi dell'analisi spettrale

6

DECONVOLUZIONE DEI SEGNALE / DEGLI SPETTRI

Matematicamente, occorre verificare che le $\varepsilon(l)$ dei 4 pigmenti non siano una riconducibile all'altra (ovvero non devono essere sovrapponibili e linearmente indipendenti).

Si costruisce quindi la matrice di sovrapposizione:

$$S = CC^T = \int \varepsilon_j(\lambda) \varepsilon_i(\lambda) d\lambda$$

Poi si diagonalizza per trovare le «autofunzioni» corrispondenti ai 4 pigmenti e si esprime lo spettro reale sperimentale come «combinazione lineare di queste «autofunzioni».

$$\phi_j(\lambda) = \sum_r P_r^j \varepsilon_r(\lambda)$$

I principi dell'analisi spettrale

7

DECONVOLUZIONE DEI SEGNALI / DEGLI SPETTRI

Si esprime lo spettro reale sperimentale come «combinazione lineare di queste «autofunzioni»:

$$ABS(\lambda) = \sum_r \gamma_j \phi_j(\lambda)$$

I coefficienti moltiplicativi γ_j sono correlati linearmente alla concentrazione dei pigmenti:

$$\gamma_j = \frac{\int \phi_i(\lambda) ABS(\lambda) d\lambda}{\alpha_j}$$

$$ABS(\lambda) = \sum_r \gamma_j P_r^j \varepsilon_r$$

$$C_r = \sum_j \gamma_j P_r^j$$

I principi dell'analisi spettrale

8

DECONVOLUZIONE DEI SEGNALE / DEGLI SPETTRI

Abbiamo quindi sviluppato un software molto semplice che permette di fare la deconvoluzione degli spettri degli oli di oliva in funzione di vari pigmenti.

Sono stati anche aggiunti altri pigmenti (ad esempio le clorofille) per poter analizzare i campioni di olio freschi.

Valentina Domenici – APPUNTI DI CHIMICA FISICA 2020

Valentina Domenici; Donatella Ancora; Mario Cifelli; Maurizio Zandomeneghi; Carlo Alberto Veracini, [Extraction of Pigment Information from Near-UV Vis Absorption Spectra of Extra Virgin Olive Oils](#), JOURNAL OF AGRICULTURAL AND FOOD CHEMISTRY (2014).

