

THÔNG TIN VỀ LUẬN ÁN TIẾN SĨ

1. Họ và tên nghiên cứu sinh: **Trần Thị Huế**
2. Giới tính: nữ
3. Ngày sinh: 08/01/1986
4. Nơi sinh: Mỹ Thắng, Mỹ Lộc, Nam Định
5. Quyết định công nhận nghiên cứu sinh: quyết định 4438 /QĐ-ĐHKHTN, ngày 26/11 /2015 của Hiệu trưởng trường Đại học Khoa học Tự nhiên, Đại học Quốc gia Hà Nội.
6. Các thay đổi trong quá trình đào tạo: Thay đổi tên đề tài và tập thể cán bộ hướng dẫn theo quyết định 1161 /QĐ-ĐHKHTN, ngày 27/4/2017 của Hiệu trưởng trường Đại học Khoa học Tự nhiên, Đại học Quốc gia Hà Nội.
7. Tên đề tài luận án: Nghiên cứu định lượng đồng thời một số chất nhóm methylxanthines trong chè bằng phổ UV-VIS, IR và bước đầu nhận dạng chè xanh
8. Chuyên ngành: Hoá Phân tích
9. Mã số: 9440112.03
10. Cán bộ hướng dẫn khoa học: Hướng dẫn chính: PGS. TS. Tạ Thị Thảo
Hướng dẫn phụ: PGS. TS. Nguyễn Văn Ri
11. Tóm tắt các kết quả mới của luận án:
 - Phát triển và xây dựng mới được các phương pháp định lượng theobromine, theophylline và caffeine trong mẫu chè
 - + *Phát triển phương pháp HPLC* định lượng theobromine (TB), theophylline (TP), caffeine (CF) thành phương pháp tham chiếu: sử dụng cột C18 (250 x 4,6 mm; 5 µm), pha động acetonitril – đệm phosphate nồng độ 0,02M, pH=3; detector UV phát hiện tại 272 nm; Giới hạn phát hiện (MDL) đối với TB, TP và CF lần lượt là 0,29 mg/g; 0,30 mg/g và 5,30 mg/g.
 - + *Xây dựng phương pháp UV-Vis* kết hợp với thuật toán hồi quy đa biến nhằm định lượng các thành phần TB, TP và CF trong chè: sử dụng các thuật toán PCR, PLS và SANAS định lượng ba methylxanthines trong 35 mẫu chè xanh. Trong đó, phương pháp thêm chuẩn đa biến SANAS cho kết quả tốt nhất, hàm lượng caffeine, theobromine khi đối chứng với HPLC cho kết quả độ lệch tương đối dưới 10%.
 - + *Xây dựng phương pháp NIR* kết hợp với thuật toán hồi quy đa biến nhằm định lượng các thành phần TB, TP và CF trong chè: dựa trên dữ liệu phổ có tiền xử lý số liệu và dữ liệu hàm

lượng TB, TP và CF đã xác định bằng HPLC; trong hai thuật toán hồi quy đa biến PCR và PLS đã sử dụng, thuật toán PLS cho kết quả định lượng tốt hơn thuật toán PCR, số thành phần chính tối ưu là 14 với thuật toán tiền xử lý số liệu MC. Hệ số tương quan R giữa hàm lượng tìm được theo mô hình và hàm lượng biết trước trong mẫu kiểm tra đạt 0,99 với giá trị RMSE của TB, TP và CF lần lượt là 0,22; 0,11 và 1,12.

- Đánh giá hàm lượng ba methylxanthine trong các mẫu chè thuộc các vùng địa lý khác nhau.

Tổng hàm lượng TB, TP và CF trong các mẫu chè Thái Nguyên cao hơn trong các mẫu chè Lâm Đồng và Phú Thọ. Cụ thể như sau: các mẫu ở Lâm Đồng, Phú Thọ có tổng hàm lượng ba methylxanthines trung bình lần lượt là 39,02mg/g; 40,12mg/g; trong khi đó các mẫu ở Thái Nguyên có tổng hàm lượng ba methylxanthines là 68,14mg/g.

- Áp dụng phương pháp phân tích đa biến để phân loại và nhận dạng nguồn gốc địa lý chè xanh Việt Nam

+ Sử dụng phương pháp phổ NIR kết hợp với thuật toán nhận dạng PLS-DA cho kết quả phân loại tốt hơn phương pháp phổ UV-Vis, độ chính xác của mô hình trong mẫu xây dựng mô hình là 100%, mẫu kiểm tra là 96% tại PC=18.

+ Đã tiến hành ghép nối phổ IR phản xạ và phổ UV-Vis tăng khả năng phân loại nguồn gốc địa lý chè xanh. Kết quả phân loại dựa trên dữ liệu phổ ghép nối kết hợp với các thuật toán nhận dạng PLS-DA và PCA-ANN có độ chính xác cao (trên 96%).

12. Khả năng ứng dụng thực tiễn:

- Nghiên cứu xây dựng và phát triển một số phương pháp định lượng các methylxanthines trong mẫu chè xanh Việt Nam là cơ sở khoa học để nghiên cứu sử dụng một cơ sở dữ liệu phổ xác định nhiều hợp chất nếu có bộ số liệu chuẩn từ phương pháp HPLC.

- Kết quả hàm lượng caffeine, theobromine, theophylline trong 125 mẫu chè Việt Nam giúp các nhà khoa học có thêm thông tin nhằm bước đầu đánh giá chất lượng các mẫu chè.

- Xây dựng một số phương pháp phân loại và nhận dạng nguồn gốc địa lý mẫu chè xanh.

13. Các hướng nghiên cứu tiếp theo: Định lượng các hợp chất, phân loại và nhận dạng nguồn gốc thực phẩm dựa trên dữ liệu phổ

14. Các công trình công bố liên quan đến luận án:

[1]. Trần Thị Huệ, Nguyễn Thế Anh, Trần Thị Thuỳ Dung, Tạ Thị Thảo, Nguyễn Văn Ri, (2017), “Định lượng đồng thời caffeine, theobromin, theophyllin trong chè đen và chè xanh Hà

Giang bằng phương pháp phổ hấp thụ phân tử sử dụng phương pháp thêm chuẩn đa biến”, Tạp chí Hóa học, tập 55(5e34), trang 110-117.

[2]. Trần Thị Huệ, Bùi Đức Thọ, Tạ Thị Thảo, Nguyễn Văn Ri, (2018), “Định lượng đồng thời caffein, theobromin, theophyllin trong chè bằng phương pháp quang phổ hồng ngoại phản xạ sử dụng thuật toán hồi quy đa biến”, Tạp chí Phân tích Hóa, Lý và Sinh học, tập 23(2), trang 67 -72.

[3]. Trần Thị Huệ, Nguyễn Tân Thành, Ngô Thị Lương, Tạ Thị Thảo, Nguyễn Văn Ri, (2019), “Phân tích và đánh giá hàm lượng cafein, theobromin, theophylline trong các loại chè xanh Việt Nam có nguồn gốc địa lý khác nhau”, Tạp chí Phân tích Hóa, Lý và Sinh học, tập 24(1), trang 181 - 186.

[4]. Trần Thị Huệ, Trần Thùy Dung, Tạ Thị Thảo, Nguyễn Văn Ri, (2019), “Định lượng đồng thời caffein, theobromin, theophyllin trong chè bằng phương pháp quang phổ hấp thụ phân tử kết hợp với hồi quy đa biến”, Tạp chí Phân tích Hóa, Lý và Sinh học, tập 24(1), trang 192 - 196.

[5]. Tran Thi Hue, Bui Duc Tho, Nguyen Van Ri, Ta Thi Thao (2019), “Geographic origin classification and simultaneous determination of methylxanthines in Vietnamese tea using chemometrics based on the near infrared reflectance spectroscopy”, Analytica Vietnam conference, pp. 264-273.

Ngày 17 tháng 6 năm 2020

Người hướng dẫn luận án

Nghiên cứu sinh

PGS.TS. Tạ Thị Thảo

Trần Thị Huệ

