

使用vAPCI-CMS质谱法分析不同等级的橄榄油

Pilar Perez Hurtado, Amy Giles, Matthew Turner, James Reynolds, Loughborough University
Lourdes Arce, Rocio Garrido-Delgado, University of Cordoba
David Tranchemontagne, Nigel Sousou, Simon Prosser, Jack Henion, Advion, Inc.

介绍

橄榄油是一种高价值商品。由于消费者希望他们购买的是无掺假和无造假的高质量产品，因此橄榄油在食品中的使用受到格外的关注。

特级初榨橄榄油因其优质口感而备受青睐。当然，特级初榨橄榄油的优质口感和质量源自严格的生产标准，但这会带来更高的生产成本，而这笔成本就会转嫁给消费者。

令人痛心的是，消费者购买的特级初榨橄榄油很有可能掺入不达标的橄榄油或其他植物油，而最糟糕的情况则是掺入一些非食用油。因此为确保标记为特级初榨橄榄油的产品确实是纯净的、最高品质的橄榄油，感官鉴别测试便是一道必经程序。

在本应用中，我们将演示如何使用配备挥发性APCI (vAPCI) 离子源的Advion *expression*^S CMS质谱仪，分析特级初榨橄榄油、初榨橄榄油和低级初榨橄榄油样品。我们也将展示统计分析过程，显示统计分析如何实现橄榄油样品等级的分类和鉴别。这种技术使我们可以测试个别橄榄油样品，确定它们是不是真正的特级初榨橄榄油、初榨橄榄油还是低级初榨橄榄油。



结果与讨论

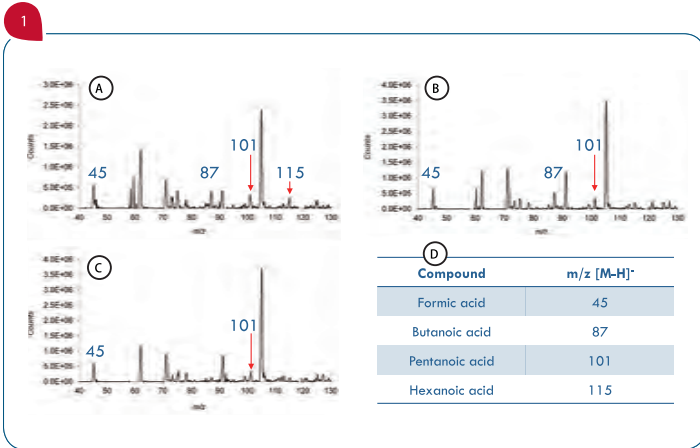
使用配备vAPCI离子源的CMS质谱仪，分析产自不同地区的、不同类型的特级初榨橄榄油、初榨橄榄油以及低级初榨橄榄油。由于不同等级橄榄油所呈现出的光谱不容易用肉眼区分，因此我们通过质谱进行统计分析，进而比较和对比等级。

使用获得的质量范围分段扫描的 (m/z 40–300) 谱图，对每一级别的橄榄油进行偏最小二乘判别分析 (PLS-DA)，以寻找相似性和差异性。

每个等级样品的测试结果都松散地聚集一起，不同级别橄榄油之间的概率分布以及特级初榨橄榄油和优级初榨橄榄油样品之间的确可能存在一些重叠，因为橄榄油产自同一批橄榄，而这是一系列复杂因素共同作用的结果。“最好的”优级初榨橄榄油和“最差的”特级初榨橄榄油可能出现相似的质谱图。

但是，特级初榨橄榄油和低级初榨橄榄油之间是一定存在明显的差异。化学成分的差异更加显著，因为如果不进行提炼，低级初榨橄榄油就不能用于消费。

使用PLS-DA方法，分类和预测百分比分别达到了87%和75%。这些方法可媲美目前使用的离子迁移技术（如GC-IMS），或较之更好。



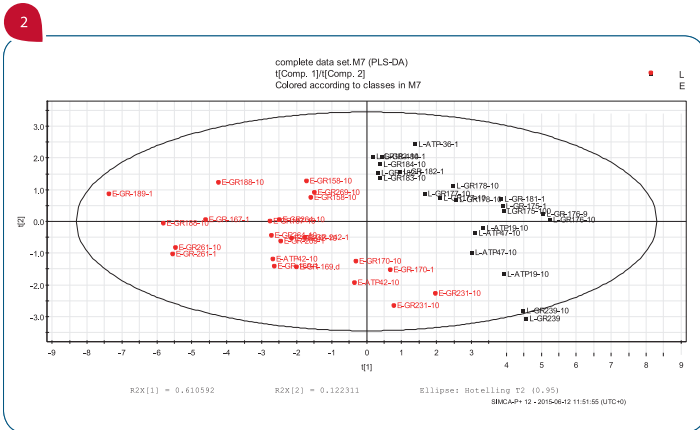
完整数据集M7 (PLS-DA) t[化合物1]/t[化合物2] 根据M7中的等级进行染色

结论

使用Advion expression^S CMS质谱仪和vAPCI离子源，我们可以分析不同等级的橄榄油。这些橄榄油在气相中含有复杂的化学混合物。使用数据统计分析，我们能够根据它们的等级对样本进行分类，并高度准确地预测样本的等级，可以达到与当前其他技术相当的水平。

图1：橄榄油的质谱图

代表橄榄油等级的质谱图：低级初榨橄榄油（A），初榨橄榄油（B）和特级初榨橄榄油（C）。表格（D）显示质谱图中标记的化合物信息。



完整数据集M7 (PLS-DA) t[化合物1]/t[化合物2] 根据M12中的等级进行染色

图2：特级初榨橄榄油与低级初榨橄榄油的PLS-DA

PLS-DA图比较两个橄榄油等级：特级初榨橄榄油（红色）vs低级初榨橄榄油（黑色）。PLS-DA图显示出两者的显著差别，表明使用CMS质谱仪进行蒸气分析，能够区分这些等级。

图3：特级初榨橄榄油与初榨橄榄油的PLS-DA

PLS-DA图比较两个橄榄油等级：特级初榨（红色）与初榨（蓝色）。PLS-DA图显示出两者有一定重叠，也有合理差别。

