

使用搭载LiveID的RADIANT ASAP通过直接分析鉴别可可脂真伪

Li Yan Chan, Yuwei Chang, Hong Peng, Guangtao Zhang

Waters Corporation, Mars Global Food Safety Center

这是一份应用简报，不包含详细的实验部分。

摘要

RADIANT ASAP与LiveID相结合是一种实用解决方案，可在样品前处理工作非常少甚至没有的情况下通过直接分析鉴别可可脂真伪。可可脂价格浮动导致欺诈行为有所增加，例如使用类可可脂(cocoa butter equivalents, CBE)部分替换可可脂以谋取非法经济收益。本文所述技术能够快速监测欧盟法规限定含量（不超过产品重量的5%）的CBE。可可脂中甘油三酯化合物（例如TG、三酰甘油、TAG或甘油三酯）的指纹图谱对于成功检测掺假行为具有重要意义。LiveID的实时识别功能在几分钟内即可提供结果，以便快速做出明智决策。

优势

- 简便易用 – 直接分析，只需极少甚至无需样品前处理工作
- 快速提供结果 – LiveID实时识别功能使研究人员在分析开始后几分钟内即可做出明智的决策
- 设计紧凑 – 体积小巧，部署非常灵活

简介

可可脂是巧克力产品中最重要且最昂贵的成分，其特有的三酰甘油(TAG)成分可以产生宜人的口感，巧克力产品非常具有吸引力的原因也是由此而来。由于可可脂价格浮动，越来越多糖果制造商使用类可可脂(CBE)全部或部分替

换可可脂，以降低生产成本。可可脂正品主要由三种TAG组成，即1,3-二棕榈酰-2-油酰甘油(POP)、1-棕榈酰-2-油酰基-3-硬脂酰基-甘油(POS)和1,3-二硬脂酰-2-油酰甘油(SOS)。存在的CBE会改变组成，从而影响在口中的结晶和融化特性¹。巧克力产品的标签规则在全球范围内各不相同。欧盟规定，巧克力中CBE的含量不得超过5%²。如果添加了CBE，必须使用适当的标签告知消费者。而现行FDA法规规定，标明为巧克力的产品不得含有可可脂以外的任何脂肪或来源于某些乳制品成分的脂肪。因此，区分优质可可脂正品与类可可脂对于食品制造商而言极其重要。CBE的化学组成和物理特性与可可脂非常接近，使其极难定量，某些情况下甚至难以检测。目前基于气相色谱的靶向方法非常耗时，并且需要密集样品前处理操作。

RADIAN ASAP是一款单四极杆质谱检测器，装配了大气压固相分析探头(ASAP)专用于直接分析。由于该技术操作简单且对样品前处理的要求非常少，因此各个专业水平的用户都可以使用。使用LiveID软件实时进行化学计量学建模，可缩短周转时间，这对于鉴定原料掺假行为至关重要。

本文展示了如何使用搭载LiveID的RADIAN ASAP快速鉴定掺假的可可脂。LiveID使我们能够将复杂的原始MS数据转换为易于解析的化学计量学模型。

结果与讨论

向可可脂中添加10% (w/w) CBE，相当于CBE约占成品的3%（欧盟法规允许<5%），将该含量用作本应用中的阈值。用玻璃毛细管探头分别轻轻涂擦六种纯可可脂、四种纯CBE和六种掺假可可脂（含10% CBE），然后引入RADIAN ASAP，重复分析两次，获得各样品的质谱数据。使用主成分分析(PCA)和线性判别分析(LDA)建立化学计量学模型，重点关注TAG区域(m/z 750~1050)。三种不同类别各自聚集充分，如使用成分1、2和3得到的3D PCA-LDA得分图（图1）所示。

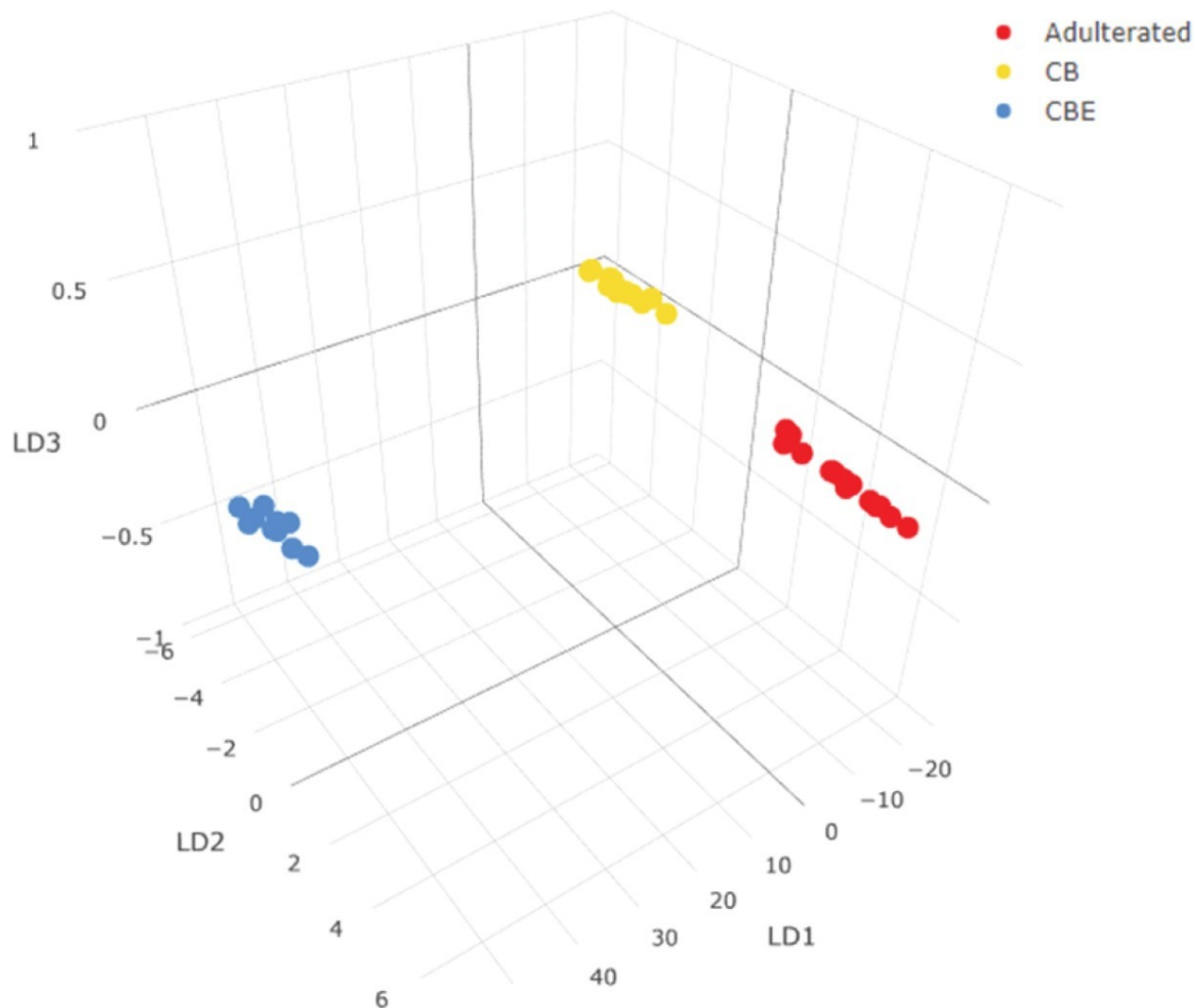


图1.可可脂（黄色）、CBE（蓝色）和掺假可可脂（红色）的3D PCA-LDA得分图

纯CBE与可可脂在LD1中得到明显区分，而纯可可脂和掺假可可脂在LD2中得到分离，如二维PCA-LDA得分图（图2B）所示。相应的Loadings plot（图2A）显示，834 (POP)、862 (POS)和891 (SOS)处的重要离子是LD2中的主要特征离子。结果与可可脂指纹图谱中TAG的已知重要性一致³。

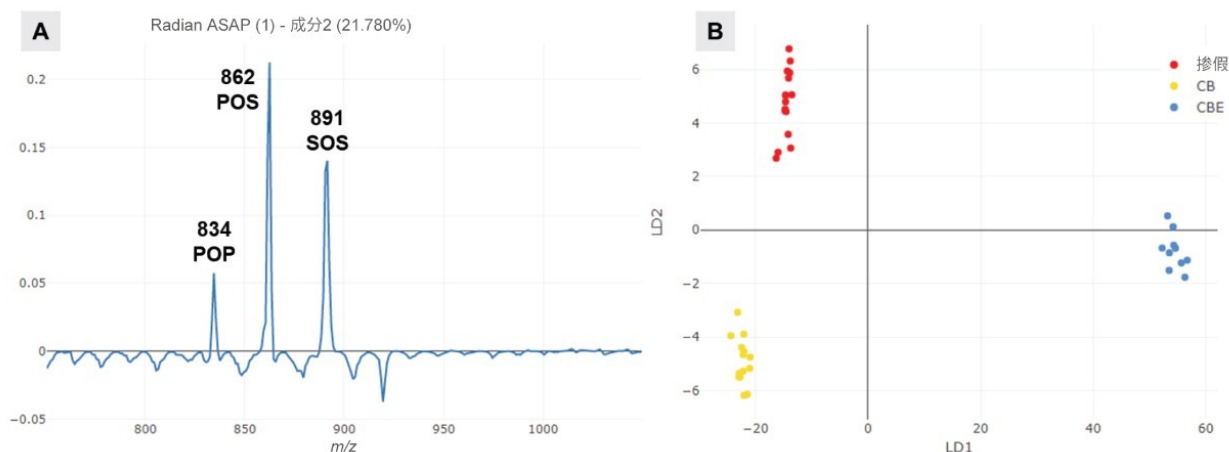


图2.A.单组分Loadings plot；B.2D PCA-LDA得分图。

通过三次重复进样分析建模过程中未使用的一种纯可可脂和一种掺假可可脂样品，对该模型进行独立验证。该模型在实时识别模式下以100%的匹配置信度将盲样正确分类，如图3所示。

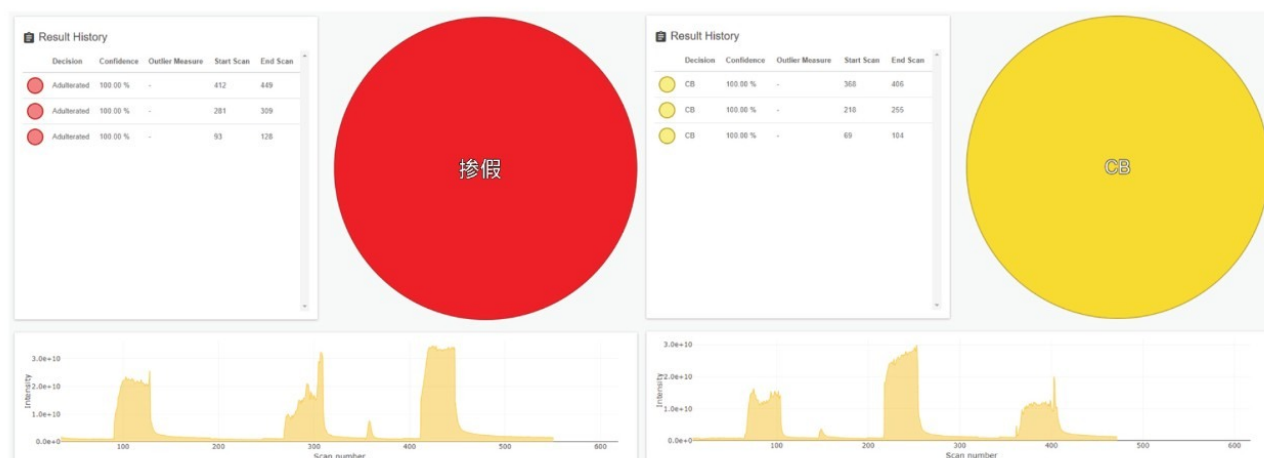


图3.LiveID实时识别纯可可脂或掺假可可脂

与其他类型的直接分析技术一样，RADIANT ASAP不涉及之前的样品净化或色谱分离。建议采用有效的离子源清洁方案，以确保结果的重现性并减少运行之间的残留。

结论

RADIANT ASAP与LiveID相结合，成功用于可可脂质量监测。该技术能够快速鉴定出法规限定含量的CBE。几分钟内即可检出阈值低至10% CBE的掺假可可脂，操作简单且模型易于可视化。实时识别功能有助于立即做出明智的

决策，这在原料真伪鉴别过程中至关重要。

参考资料

1. Perez M, Lopez-Yerena A, Vallverdú-Queralt A. *Crit Rev Food Sci Nutr*. 17 (2020), 1–15.
2. Council of the European Union, Directive 2000/36/EC.
3. Lipp M, Simoneau C, Ulberth F, Anklam E, Crews C, Brereton P, de Greyt W, Schwack W, Wiedmaier C. *J Food Compost Anal* (2001), 399-408.

致谢

本研究是沃特世国际食品与饮用水研究中心(IFWRC)与玛氏全球食品安全中心(GFSC)合作项目的一部分。

特色产品

- [MassLynx MS软件 <https://www.waters.com/513662>](https://www.waters.com/513662)
- [RADIANT ASAP直接质谱检测器 <https://www.waters.com/waters/nav.htm?cid=135073413>](https://www.waters.com/waters/nav.htm?cid=135073413)
- [LiveID软件 <https://www.waters.com/waters/nav.htm?cid=134939519>](https://www.waters.com/waters/nav.htm?cid=134939519)

720007100ZH, 2021年1月



© 2022 Waters Corporation. All Rights Reserved.