

# 基于傅里叶红外光谱重组技术的食用油检测改进研究\*

于修焯 杜双奎 李志西 王玲

(西北农林科技大学食品科学与工程学院, 陕西杨凌 712100)

**【摘要】** 以食用油、无色矿物精油(OMS)、六羰基铬为试验材料,利用二维相关振动光谱技术对 FTIR 光谱重组(SR)检测中 OMS 特征吸收峰取代光谱标记物进行评价研究。结果表明在单一菜籽油体系中,有 9 个相关吸收峰可用于 TVF 预测定量分析。考虑不同因素影响,相关吸收峰减至 4 个。最优相关吸收峰测定 OMS 体积分数相关性好于标记物特征吸收峰,受混合样品极性变化影响较少。在食用油和 OMS 混合物中既可用光谱标记物也可用 OMS 溶剂本身相关吸收峰来扣除混合样品光谱中 OMS 部分。

**关键词:** 食用油 傅里叶红外光谱 光谱重组技术 光谱分析

**中图分类号:** TS225; O657.33

**文献标识码:** A

## Improved Application of FTIR Spectral Reconstitution Technique in Edible Oils Analysis

Yu Xiuzhu Du Shuangkui Li Zhixi Wang Ling

(College of Food Science and Engineering, Northwest A&F University, Yangling, Shaanxi 712100, China)

### Abstract

Edible oils, odorless mineral spirits (OMS), chromium hexacarbonyl (spectral marker) taken as raw materials, by using spectral reconstitution (SR-FTIR), the marker's ability to predict the true volume fraction (TVF) of OMS was evaluated and 2-D correlation spectroscopy was employed as a means to determine whether solvent bands could substitute for the marker. The results indicated 9 spectral wavelengths can be used to quantify the TVF in a single system of rapeseed oil. However, with the introduction of additional variables, including differing oil types and the presence of free fatty acids, the number of useful wavelengths was reduced to 4. The optimal wavelength exceeds the marker band in predicting OMS TVF and was insensitive to polarity changes associated with TVF changes. It was demonstrated that a very consistent, representative edible oil spectra can be derived using either marker or solvent wavelengths to remove the solvent spectral contribution.

**Key words** Edible oils, FTIR, Spectral reconstitution technique, Spectral analysis

### 引言

傅里叶变换红外(FTIR)光谱重组(spectral reconstitution, 简称 SR)技术已广泛应用于食用油和润滑油的快速检测分析<sup>[1~5]</sup>,它能解决室温下油脂黏度过高难以装进狭窄流通池(流通池光程一般小于 200  $\mu\text{m}$ )和快速检测等问题;样品制备过程中,无

需准确称取或量取稀释剂和待测样品质量或体积,样品制备非常便捷。但在食用油过氧化值和反式脂肪酸含量检测中<sup>[3,5]</sup>,表明光谱重组技术中光谱标记物可选择范围小,限制了其广泛应用。本文以食用油为待测样品,无色矿物精油(odorless mineral spirits, 简称 OMS)、六羰基铬为稀释剂和标记物,对食用油 FTIR 光谱重组检测应用条件进行研究。

收稿日期: 2009-02-09 修回日期: 2009-05-18

\* 西北农林科技大学青年学术骨干支持计划资助项目(Z111020711)

作者简介: 于修焯, 讲师, 博士, 主要从事功能性油脂及其安全检测研究, E-mail: xiuzhuyu1004@hotmail.com

通讯作者: 李志西, 教授, 博士生导师, 主要从事粮食工程与发酵技术创新研究, E-mail: lizhixi@nwsuaf.edu.cn

## 1 光谱重组技术的原理及分析过程

用传统 FTIR 分析高黏度液体样品时,遇到的最大问题是样品难以装进狭窄的流通池中及分析后流通池的清洗,无法实现样品的快速检测<sup>[1]</sup>。光谱重组技术是利用溶有标记物的稀释剂稀释油脂样品,降低黏度。根据标记物在稀释剂和油样混合物特征吸收峰吸光度与稀释剂中标记物特征吸收峰吸光度的比值  $r$  ( $r$  即稀释剂在混合样品中的体积分数),计算油脂样品的稀释倍数,通过稀释剂的体积分数和油脂的稀释倍数来计算重组油脂光谱,用于油脂的定性和定量分析。能满足稀释剂条件的溶剂来源十分广泛,本研究选择无色矿物精油 (OMS);而满足光谱标记物的物质较难得到,通过比较,选择六羰基铬作为光谱的标记物<sup>[5]</sup>。

光谱重组过程为:光谱减去稀释剂光谱乘以  $r$  的乘谱,减去稀释剂在混合样品中的光谱部分;将差减光谱乘以  $(1-r)^{-1}$  得到重组光谱。由光谱重组技术过程可知,光谱重组技术的可行性(准确性)与光谱标记物预测稀释剂体积分数有关。六羰基铬在红外光谱中有着独特的吸收峰 ( $1\ 986\ \text{cm}^{-1}$ ),在其特征吸收峰区域 ( $2\ 000\sim 1\ 975\ \text{cm}^{-1}$ ) 很少有其他物质吸收峰的干扰,是较为理想的光谱标记物,但六羰基铬在 OMS 中的溶解性及稳定性差。在光谱重组技术中,可能存在 OMS 本身特征吸收峰,它的吸光度变化只与 OMS 的体积变化有关,而不受食用油脂体积分数变化的影响,可作为标记吸收峰。

## 2 材料与方法

### 2.1 试验材料

食用油(菜籽油、花生油、葡萄籽油、橄榄油、葵花籽油等)均为市购,分析前所有食用油均通过活化硅胶柱处理以除去油中游离脂肪酸等;己酸,纯度 99% 以上,美国 Sigma 公司生产;六羰基铬 ( $\text{Cr}(\text{CO})_6$ ),分析纯,加拿大 Aldrich 公司生产;无色矿物精油,由加拿大 Thermal-Lube 公司提供;稀释剂为 OMS 溶有质量分数 0.03% 六羰基铬(作为光谱标记物)的溶液。配制时把六羰基铬溶解于 OMS 中,搅拌 24 h 使其充分溶解,并贮存在棕色试剂瓶中,备用。

### 2.2 仪器

Bomem WorkIR 型光谱仪(加拿大魁北克 ABB Bomem 公司)装备有 DTGS 检测器和 Balston 空气干燥器(美国列克星敦 Balston 公司),光谱仪通入干燥空气(不含  $\text{CO}_2$ ),使仪器内部保持干燥状态,并消除空气中  $\text{CO}_2$  和水蒸气的影响。光谱仪装备的计

算机为 IBM 兼容机,所使用的软件为:Windows 版的 UMPIRE 软件(加拿大 Thermal-Lube 公司)以及 TQ Analyst 7.2.0.161 Release 软件(美国尼高力公司)。

### 2.3 操作条件

光谱采集条件为:流通池光程为  $200\ \mu\text{m}$ 、分辨率为  $8\ \text{cm}^{-1}$ 、扫描次数为 16、以空气为背景,红外光谱范围为  $6\ 000\sim 500\ \text{cm}^{-1}$ 。

### 2.4 样品制备

在室温条件下,准确称取油脂和 OMS,按照一定的比例充分混合,OMS 和各食用油的密度由 Anton Paar 密度仪来测定,通过密度把各食用油与 OMS 的质量比转换为相应的体积比称之为真体积分数(true volume fraction,简称 TVF),并使得 OMS 的 TVF 范围为  $0.5\sim 0.9$ 。将 OMS 的 TVF 与相应用光谱标记物—— $\text{Cr}(\text{CO})_6$  六羰基铬吸收峰等预测 OMS 体积分数称之为表观真体积组分(apparent true volume fraction,简称 TVFa)进行比较分析,每个样品均做 2 次平行试验。

为确定 OMS 的吸收峰取代标记物 ( $\text{Cr}(\text{CO})_6$ ) 吸收峰的可能性,利用二维振动相关光谱技术寻找 OMS 吸收峰和标记物特征吸收峰的相关性<sup>[6~7]</sup>。先用菜籽油和 OMS 混合对 TVF 范围为  $0.5\sim 0.9$  的样品进行比较分析;再以多因素试验采用响应面分析<sup>[8]</sup>,确定 OMS 的 TVF 变化、油脂种类及游离脂肪酸的影响,利用中心旋转组合设计(CCRD)评价不同因素的变化对标记物预测 OMS 的 TVFa 准确性的影响,其因素水平编码如表 1 所示。

表 1 评价 OMS 取代六羰基铬特征吸收峰因素水平编码

Tab.1 Code and levels of evaluating OMS replacement of the  $\text{Cr}(\text{CO})_6$  marker

变量	编码与水平				
	-2	-1	0	1	2
己酸加量 $X_1/\%$	0	1	2	3	4
TVF $X_2$	0.50	0.60	0.70	0.80	0.90
油脂种类 (SN/IV) $X_3$	橄榄油	葵花籽油	菜籽油	花生油	葡萄籽油

油脂种类用红外光谱吸光度值来定义,通过皂化值(SN)和碘值(IV)的测量来确定。皂化值用酯键在  $3\ 467\ \text{cm}^{-1}$  (单点基线位于  $2\ 000\ \text{cm}^{-1}$ ) 倍频吸收峰的吸光度来表示;碘值用  $\text{C}=\text{C}$  双键在  $1\ 650\ \text{cm}^{-1}$  (单点基线位于  $2\ 000\ \text{cm}^{-1}$ ) 伸缩振动吸收峰的吸光度来表示,以考察不同油脂种类对 TVFa 测定准确性的影响。

## 2.5 二维相关振动光谱技术及分析

二维相关振动光谱技术(2-D correlation spectroscopy technique)用来寻找 OMS 与标记物特征吸收峰的相关吸收峰。先用于菜籽油和 OMS 体系中, 后在多种类型油脂(考虑不同影响因素)体系中寻找相关吸收峰。用 Wang 等人<sup>[9]</sup>设计的软件进行二维相关分析, 并把二维等高线图转化为三维等高线图。

在各混合样品中使 OMS 体积分数均在 0.5~0.9 之间, 通过 Wang 的二维相关软件对二维光谱选择区域为标记物( $\text{Cr}(\text{CO})_6$ )特征吸收峰范围  $2000\sim 1975\text{ cm}^{-1}$  与红外光谱其他区域范围( $6000\sim 2000\text{ cm}^{-1}$ 和  $1975\sim 500\text{ cm}^{-1}$ , 且吸收强度小于 1.5)进行二维相关分析。

在三维等高图中得到相应的波數位点, 根据比尔定律, 以相应波數位点回到原光谱的吸光度来计算 OMS 的体积分数并与 TVF 进行线性回归分析

判断其线性相关(相关系数大于 0.99); 考虑不同的体积分数、油脂种类和游离脂肪酸等因素, 利用中心旋转组合设计(CCRD)进行分析。三维等高图中波数与样品的 TVF 关系、最优波數位点峰高和基线都是通过 TurboQuant 软件获得。

## 3 结果与分析

### 3.1 标记物取代峰的评价与分析

二维振动相关分析是用来寻找隐藏的相关吸收峰的一种技术。在 OMS 和油脂的混合物中可能存在不受油脂体积分数变化影响的 OMS 吸收峰。为简化分析, 通过中特征吸收峰与 OMS 本身的特征吸光度建立相关, 来确定混合物中 OMS 与光谱标记物的相关吸收峰。利用二维振动相关分析建立菜籽油/OMS、六羰基铬混合物特征吸收区域( $2000\sim 1975\text{ cm}^{-1}$ )与其他光谱区域(吸收峰强度小于 1.5)的相关关系, 其结果如图 1 所示。

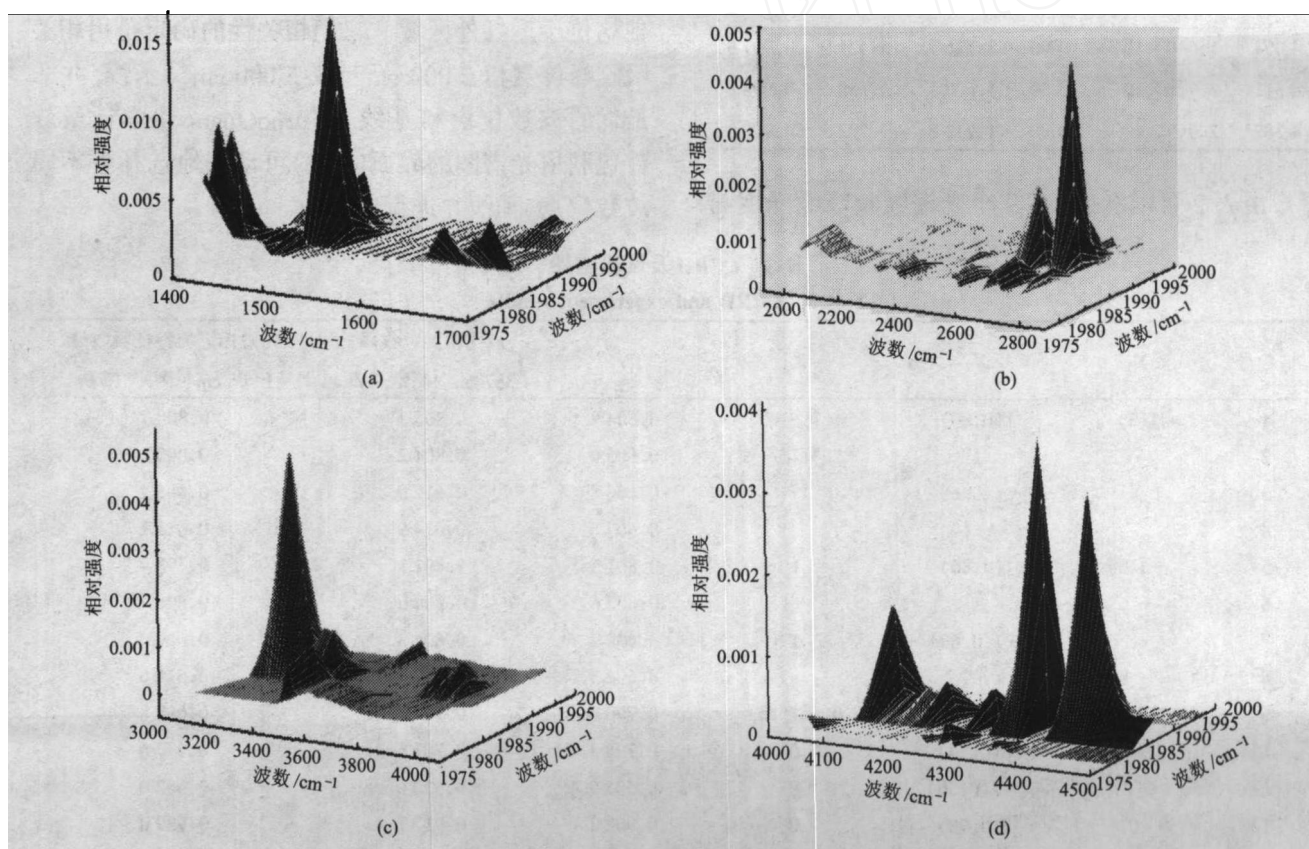


图 1 三维等高线图

Fig.1 3-D correlation plot

- (a)  $1700\sim 1400\text{ cm}^{-1}$  vs  $2000\sim 1975\text{ cm}^{-1}$  (b)  $2800\sim 2000\text{ cm}^{-1}$  vs  $2000\sim 1975\text{ cm}^{-1}$   
 (c)  $4000\sim 3100\text{ cm}^{-1}$  vs  $2000\sim 1975\text{ cm}^{-1}$  (d)  $4500\sim 4000\text{ cm}^{-1}$  vs  $2000\sim 1975\text{ cm}^{-1}$

由图 1 可以看出, 不同光谱区域与光谱标记吸收峰( $2000\sim 1975\text{ cm}^{-1}$ )相关吸收峰的情况, 这些吸收峰可作为光谱的标记物的特征吸收峰。它们的吸光度与 TVF 之间的关系需要通过回归分析来确定(相关系数大于 0.99)。

通过 TurboQuant 化学计量软件得到光谱标记物特征吸收峰( $1986/2001\text{ cm}^{-1}$ )的吸光度( $x$ )与 OMS TVF( $y$ )的关系, 其关系式为:  $y = 0.1906 + 1.3521x$  ( $R = 0.998$ ), 标准差为 0.009。进一步简化, 可以对从三维等高线图得到的相关吸收峰波数

位点和单点或者双点基线与混合物中 OMS TVF 建立相关。所用可能波数位点、线性回归方程如表 2 所示。

表 2 OMS 和菜籽油混合物二维相关吸收峰与 OMS TVF 回归方程

Tab.2 Regression relationships derived relating volume fraction and spectral measures made at selected correlating regions obtained by 2-D correlation spectroscopy for various OMS/Canola dilutions

波数位点 /cm <sup>-1</sup>	相对 强度	基线 /cm <sup>-1</sup>	截距	斜率	相关 系数
1 986	NA	2 000	0.190 8	1.352 1	0.998 0
2 399	1.419 × 10 <sup>-4</sup>	2 000	0.195 8	10.382 3	0.998 7
2 719	4.553 × 10 <sup>-3</sup>	2 000	-0.866 8	3.192 9	0.997 7
2 615	1.692 × 10 <sup>-3</sup>	2 000	0.747 7	5.937 1	0.999 1
3 178	4.976 × 10 <sup>-3</sup>	2 000	-0.007 4	3.054 8	0.999 4
3 367	1.036 × 10 <sup>-3</sup>	2 000	0.544 9	7.058 2	0.999 3
3 876	6.726 × 10 <sup>-4</sup>	2 000	0.408 7	7.995 4	0.998 8
4 054	1.549 × 10 <sup>-3</sup>	5 000	-2.736 7	15.421 9	0.997 9
4 311	3.726 × 10 <sup>-3</sup>	5 000	-1.600 1	6.150 6	0.998 8
4 387	2.997 × 10 <sup>-3</sup>	5 000	-1.213 8	7.792 5	0.999 2

由表 2 可以看出,有 9 个光谱吸收峰吸光度与

OMS TVF 有着良好线性相关性(相关系数大于 0.99)。与光谱标记物(Cr(CO)<sub>6</sub>)特征吸收峰的相关系数比较,可以看出相关吸收峰的相关系数高于或者接近标记物特征吸收峰,有的相关吸收峰预测 OMS 体积分数相关性好于光谱标记物(Cr(CO)<sub>6</sub>)特征吸收。在单一油脂(菜籽油)与 OMS 混合体系可以通过二维振动相关技术找到 OMS 本身的特征吸收峰以代替标记物,从而可进一步简化光谱重组技术在食用油检测中的应用。

### 3.2 多因素影响试验

为了确定光谱重组技术的应用范围,利用二维振动相关光谱技术分析不同油脂种类、不同体积分数和游离脂肪酸的影响。CCRD 因素水平编码如表 1 所示,试验方案及结果如表 3 所示,其部分区域光谱图如图 2 所示。

不同因素影响从单一油脂中 9 个相关吸收峰减少到 4 个,4 个吸收峰除了 1 个位于中红外区域,其他均位于近红外区域。它们相关性的确定是用相关吸收峰位点和 2 000 cm<sup>-1</sup>或 5 000 cm<sup>-1</sup>基线,并非最优的波数位点和基线。TurboQuant 化学计量软件包利用光谱图的界面(图 3)可动态地选择各不同波数位点、基线并进行优化。

表 3 CCRD 及试验结果

Tab.3 CCRD and experiment results

试验号	X <sub>1</sub>	X <sub>2</sub>	X <sub>3</sub>	TVF	最优相关吸收峰	光谱标记物特征吸收峰
					4 387 cm <sup>-1</sup> 测定 TVF <sub>a</sub>	1 986 cm <sup>-1</sup> 测定 TVF <sub>a</sub>
1	1(3)	1(0.80)	1(花生油)	0.804 9	0.805 8	0.800 7
2	1	1	-1(葵花籽油)	0.805 0	0.804 2	0.809 6
3	1	-1(0.60)	1	0.606 8	0.612 0	0.605 1
4	1	-1	-1	0.607 6	0.614 9	0.611 1
5	-1(1)	1(0.80)	1	0.801 5	0.802 1	0.798 4
6	-1	1	-1	0.802 6	0.800 0	0.806 7
7	-1	-1(0.60)	1	0.602 4	0.604 3	0.609 3
8	-1	-1	-1	0.602 5	0.612 6	0.611 6
9	-2(0)	0(0.70)	0(菜籽油)	0.700 0	0.702 3	0.698 8
10	2(4)	0(0.70)	0	0.708 3	0.701 5	0.697 6
11	0(2)	-2(0.50)	0	0.505 9	0.510 6	0.532 0
12	0	2(0.90)	0	0.902 2	0.917 7	0.929 0
13	0	0(0.70)	-2(橄榄油)	0.705 3	0.704 6	0.697 8
14	0	0	2(葡萄籽油)	0.706 0	0.704 5	0.704 8
15	0	0	0	0.704 7	0.705 4	0.698 6
16	0	0	0	0.704 4	0.701 9	0.698 4
17	0	0	0	0.704 5	0.703 5	0.704 5
18	0	0	0	0.703 8	0.705 2	0.703 1
19	0	0	0	0.705 4	0.699 1	0.699 7
20	0	0	0	0.704 7	0.701 5	0.702 2
21	0	0	0	0.704 2	0.698 6	0.697 7
22	0	0	0	0.705 2	0.696 7	0.698 0
23	0	0	0	0.704 9	0.703 7	0.701 7

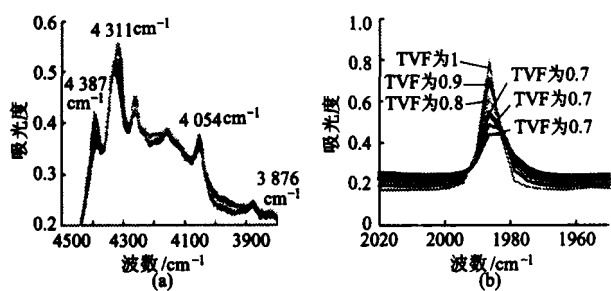


图 2 CCRD 各组合光谱图

Fig. 2 CCRD spectra

(a) 相关吸收峰区域(4 500~3 800 cm<sup>-1</sup>)  
(b) 标记物特征吸收区域(2 020~1 950 cm<sup>-1</sup>)

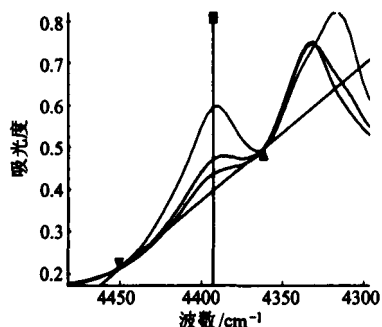


图 3 TurboQuant 化学计量软件包光谱界面

Fig. 3 Interactive region selection window in TurboQuant chemometrics package

根据比尔定律, 通过软件分析获得相关吸收峰与 OMS TVF 的优化方程。表 4 为优化相关吸收峰波数位点和基线以及它与 OMS TVFa 的回归方程的截距、斜率、相关系数和标准差。

表 4 优化相关吸收峰回归方程

Tab. 4 Optimized regression relationships derived relating TVF and the measures made at selected correlating regions

波数位点/cm <sup>-1</sup>	基线/cm <sup>-1</sup>	截距	斜率	相关系数	标准差
1 986	2 000~2 000	0.261 3	1.294 0	0.994 0	0.009
4 387	4 439~4 366	0.104 0	7.945 2	0.999 5	0.003
4 054	4 069~4 038	0.186 0	18.096 0	0.997 0	0.006
4 311	4 366~4 285	-0.161 0	6.604 1	0.997 0	0.007
3 876	2 000~2 000	0.541 0	6.420 9	0.991 0	0.014

由表 4 可以看出, 除吸收峰 3 876 cm<sup>-1</sup> 回归方程的标准差比标记物大外, 其他波数的标准差均比标记物特征吸收峰与 OMS TVF 回归方程的标准差小, 标记物特征吸收峰和 4 387 cm<sup>-1</sup> 的线性方程的标准差分别为 0.009 和 0.003, 在 TVF 均值为 0.7 时, 它们预测值变异系数(CV)分别为 1.3% 和 0.43%, 表明 4 387 cm<sup>-1</sup> 相关吸收峰预测 OMS TVF 的准确性和重现性均优于标记物特征吸收峰。由此可见, 用二维振动相关技术确定的相关吸收峰可以取代 Cr(CO)<sub>6</sub> 的特征吸收峰而作为光谱标记

物在光谱重组技术中应用, 可进一步降低光谱重组技术应用成本, 提高样品制备的简便性。图 4 为 OMS TVF 与标记物预测 OMS 体积分数以及相关吸收峰 4 387 cm<sup>-1</sup>/4 439~4 366 cm<sup>-1</sup> 预测 OMS 体积分数的关系曲线。

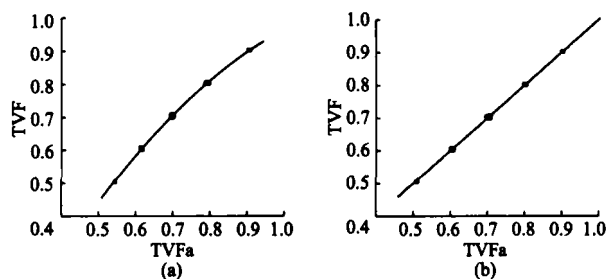


图 4 OMS TVF 与标记物预测 OMS 体积分数以及相关吸收峰 4 387 cm<sup>-1</sup>/4 439~4 366 cm<sup>-1</sup> 预测 OMS 体积分数的关系曲线

Fig. 4 Plots of diluent TVF vs predicted diluent using the marker bands and the 4 387 cm<sup>-1</sup> diluent wavelength with a baseline at 4 439~4 366 cm<sup>-1</sup> respectively  
(a) 光谱标记物 (b) 最优相关吸收峰(4 387 cm<sup>-1</sup>)

由图 4a、4b 可以看出, 标记物预测的 OMS 体积分数的效果比最优相关吸收峰 4 387 cm<sup>-1</sup> 差。这是由于不同油脂、游离脂肪酸改变了混合体系的极性。标记物的特征吸收很容易受到不同因素变化的影响, 而 OMS 本身相关吸收峰(在近红外区域的吸收峰)不易受到这些因素变化的影响。

为了评价不同因素的影响, 设计 CCRD 时考虑到 OMS/油的比例、油脂种类(分别用碘值和皂化值在红外光谱的吸光度来表示)以及游离脂肪酸的影响, 把这些因素影响归入

$$\alpha_{TVF} = a + b\beta_{TVFa} + c\gamma_{FFA} + d\delta_{IV} + e\epsilon_{SN}$$

式中  $\alpha_{TVF}$ 、 $\beta_{TVFa}$ ——真体积分数值和表观真体积分数值

$\gamma_{FFA}$ 、 $\delta_{IV}$ 、 $\epsilon_{SN}$ ——游离脂肪酸、碘值、皂化值在红外光谱吸光度

$a$ ——常数  $b$ 、 $c$ 、 $d$ 、 $e$ ——相应的系数

式中用逐步多元回归来确定各因素在统计学上对预测 OMS TVFa 影响的显著性以及相关系数。表 5 为逐步多元回归分析得到回归方程的相关系数和标准差(显著水平为 5%)。

由表 5 可以看出, 除了 3 878 cm<sup>-1</sup> 吸收峰的回归方程外, 其他吸收峰的回归方程中, 油脂种类、游离脂肪酸和 OMS 与油脂体积比对预测结果的影响均不显著。相关吸收峰 3 878 cm<sup>-1</sup> 的 SN 因素对其有显著的影响, 这结果与表 4 所反映结果一致, 油脂的本身对该波数有显著影响, 该波长不合作为光谱的标记物来预测混合物中 OMS 体积分数。

表5 CCRD中4个相关吸收峰多元回归方程

Tab.5 Significant multiple regression equation coefficients obtained for the factors considered using the four workable wavelengths determined for the CCRD

波数点/cm <sup>-1</sup>	a	b	c	d	e	相关系数	标准差
1 986	0.261 3	1.294	NA	NA	NA	0.993 8	0.008
4 387	0.170 7	7.331	0.002 21			0.999 6	0.002
4 054	0.164 4	18.762	0.001 97			0.997 9	0.005
4 311	-0.183 6	6.722	0.003 40			0.996 9	0.006
3 878	0.649 3	4.992	0.011 75		-0.355 0	0.993 5	0.009

为了评价油脂种类和游离脂肪酸对预测结果的影响,比较表4和表5可以看出,最优相关吸收峰4 387 cm<sup>-1</sup>的预测 OMS 体积分数标准差分别为0.003和0.002,在TVF均值为0.7时,在线性回归方程和逐步多元方程预测值CV分别为0.43%和0.29%,此偏差是可接受的,不同因素的影响对预测结果的准确性影响不大,可以忽略。此评价是基于OMS在0.5~0.9 TVF范围内获得的,如果混合样品用一个相对固定TVF来制备时,其CV将减小,预测精度将提高。

#### 4 讨论

在食用油和OMS混合物中,利用二维振动相关光谱技术确定并优化了OMS相关吸收峰,用相关吸收峰可以准确预测混合物中OMS体积分数。从普遍应用的角度来说,相关吸收峰的获得,关键取决于混合物的光谱特征,不同类型的混合物中OMS

相关吸收峰需要由二维相关振动光谱技术来确定,并用线性回归来优化。

#### 5 结束语

在单一油脂检测中,有9个相关吸收峰可用于TVF预测定量分析。考虑不同因素影响,相关吸收峰减至4个。最优相关吸收峰4 387 cm<sup>-1</sup>比Cr(CO)<sub>6</sub>标记峰预测OMS体积分数相关性更好,受溶剂极性变化影响少,通过大范围TVF的研究预测OMS体积分数的变异系数分别为0.29%和1.3%。在食用油和OMS系统中既可用光谱标记物特征吸收峰也可用OMS溶剂本身相关吸收峰来扣除混合样品光谱中OMS部分,而达到定量分析的目的。研究进一步明确了FTIR光谱重组技术的应用条件和范围,简化了FTIR光谱重组技术在食用油检测中的应用条件。

#### 参 考 文 献

- van de Voort F R, Sedman J, Cocciardi R, et al. FTIR condition monitoring of in-service lubricants: ongoing developments and future perspectives[J]. Tribology Transactions, 2006, 49(3): 1~9.
- van de Voort F R, Sedman J, Sherazi S T H. Improved trans analysis in edible oils using spectral reconstitution[J]. J. AOAC Int., 2007, 90(2): 446~451.
- Yu X, van de Voort F R, Sedman J. Determination of peroxide value of edible oils by FTIR spectroscopy with the use of the spectral reconstitution technique[J]. Talanta, 2007, 74(2): 241~246.
- van de Voort F R, Sedman J, Sherazi S T H. Correcting for underlying absorption interferences in FTIR trans analysis of edible oils using 2D correlation techniques[J]. J. Agric. Food Chem., 2008, 56(5): 1 532~1 537.
- 于修焯,杜双奎,岳田利,等.食用油反式脂肪酸傅里叶红外光谱重组检测技术[J].农业机械学报,2009,40(1):114~119.  
Yu Xiuzhu, Du Shuangkui, Yue Tianli, et al. FTIR measuring technique of trans fatty acids in edible oils using spectral reconstitution[J]. Transactions of the Chinese Society for Agricultural Machinery, 2009, 40(1):114~119. (in Chinese)
- Filosa A, Wang Y, Ismail A A, et al. Two-dimensional infrared correlation spectroscopy as a probe of sequential events in the thermal unfolding of cytochromes[J]. Biochemistry, 2001, 40: 8 256~8 263.
- Noda I, Ozaki Y. Two-dimensional correlation spectroscopy—applications in vibrational and optical spectroscopy[M]. NY: John Wiley and Sons Ltd., 2004.
- 刘钟栋,李坤,高莉,等.蔗糖多酯合成工艺的响应面法优化[J].农业机械学报,2008,39(2):85~88.  
Liu Zhongdong, Li Kun, Gao Li, et al. Study on synthesis of sucrose polyester by response surface method[J]. Transactions of the Chinese Society for Agricultural Machinery, 2008, 39(2):85~88. (in Chinese)
- Wang Y, Murayama K, Myojo Y, et al. Two-dimensional Fourier transform near-infrared spectroscopy study of heat denaturation of ovalbumin aqueous solutions[J]. The J. Phys. Chem. B, 1998, 102(34): 6 655~6 662.