

Application News

No. C134

LC/MS
Liquid Chromatography Mass Spectrometry

5 种啤酒的多成分测定

Multi-Component Analysis of Five Beers

一直以来对食品质量的定量方法大多数采用感官检测，即通过味道和气味进行数值化评估。最近，通过对食品中所含成分进行全面测定，将得到的代谢组学数据与感官测试的分析结果相结合，可以获取更多的信息。为从多方面研究样品所含成分的差异，对全面的分析数据进行多变量分析是颇为有效的一种方法。将多变量分析与代谢组学进行组合，有望广泛应用于质量评估、质量改进以及功能性食品的开发。此分析从市售的 5 种啤酒（2 种拉格啤酒：品牌 A 和品牌 B、爱尔啤酒、发泡酒和无醇啤酒）中取样，使用初生代谢物方法包在三重四极质谱联用仪（LCMS-8060）上进行同时分析，并对分析得出的数据集使用 Traverse™ MS 软件进行主成分分析。根据分析结果对 5 种啤酒所含成分的差异进行分类，并检测到各种啤酒中的特征成分。而且通过层次聚类分析，验证了 5 种啤酒的分类依据。

表 1 分析条件
Analytical Conditions

LC 分析条件	
色谱柱	: 反相色谱柱
流动相 A	: 0.1% 甲酸 - 水
流动相 B	: 0.1% 甲酸 - 乙腈
流速	: 0.25 mL/min
模式	: 梯度洗脱
MS 分析条件	
离子化模式	: ESI (+) / (-)
雾化气流速	: 2 L/min
加热气流速	: 10 L/min
干燥气流速	: 10 L/min
离子源电压	: 4 kV (+) / -3 kV (-)
接口温度	: 300 °C
DL 温度	: 250 °C
加热模块温度	: 400 °C

■ 啤酒样品的制备和分析

Beer Sample Preparation and Analysis

取 0.2 mL 已除气的啤酒作样品，在添加内标物质后，使用分子过滤器进行超滤。回收滤液，将其稀释至 200 倍，使用 LC/MS 进行同时分析。LC/MS 的分析按照初生代谢物方法包的分析条件进行。表 1 为分析条件。图 1 为 5 种啤酒中的拉格啤酒 A、发泡酒、无醇啤酒样品的 MRM 色谱图。由图可知，啤酒种类不同，以氨基酸为主的各种啤酒成分的差异也较大。

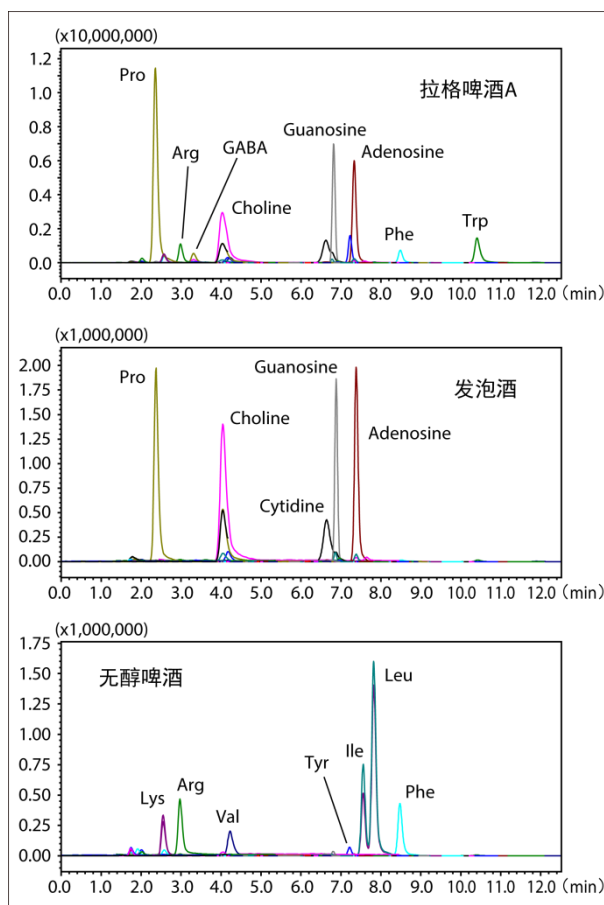


图 1 3 种啤酒的 MRM 色谱图
MRM Chromatograms of Three Beers

■ 使用 Traverse™ MS 软件进行多变量分析

Multivariate Analysis with Traverse™ MS Software

使用各成分与内标物质的面积比(58 种成分),通过 Traverse™ MS 软件对 5 种啤酒进行主成分分析 (Principal Component Analysis)。图 2 以得分图和负荷图方式显示主成分的分析结果。由图可知各啤酒所含成分的差异。得分图显示 5 种啤酒的悬殊非常大; 负荷图中显示成功测定了各啤酒中所含的特征成分。由此可以判断成分差异主要是几种氨基酸和核苷。

使用测得成分的面积比, 通过 Traverse™ MS 软件对 5 种啤酒进行层次聚类分析 (Hierarchical Clustering Analysis), 图 3 为测定结果。我们使用 Autoscaling 对样品间的面积比进行了归一化。由图 3 可知, 拉格啤酒和艾尔啤酒成分相似, 被归为同类。发泡酒和无醇啤酒因成分相近, 也被归为同类。由此可知, 通过层次聚类分析, 可以直观地判断各啤酒成分的相似度。

综上所述, 通过对食品成分的全面分析, 并结合多变量分析, 可简单测定哪种成分会对食品质量和功能有影响。这种将全面同时分析方法与多变量分析相组合的测定方法有望在今后的食品质量评价中得到广泛应用。

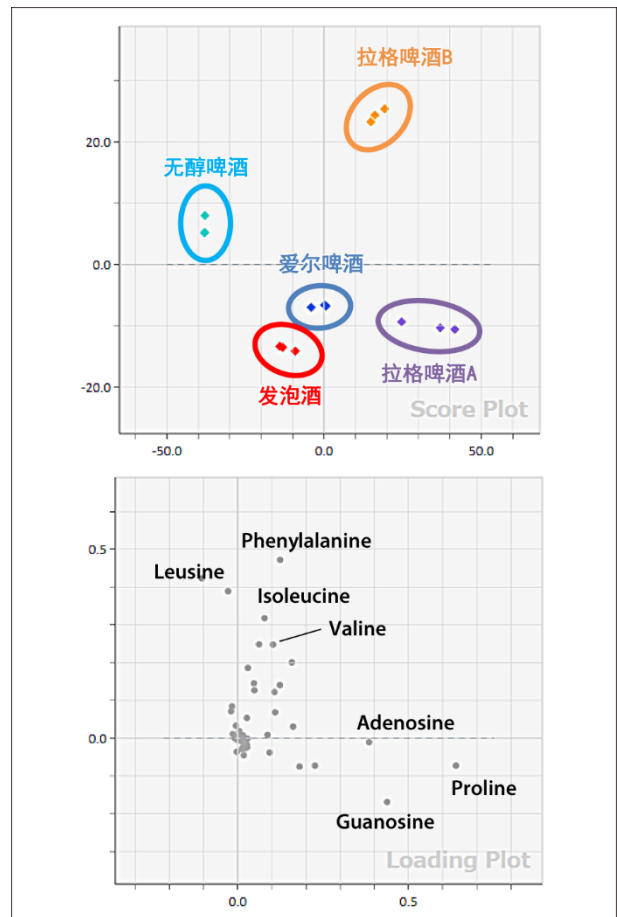


图 2 5 种啤酒的主成分分析
Principal Component Analysis of Five Beers

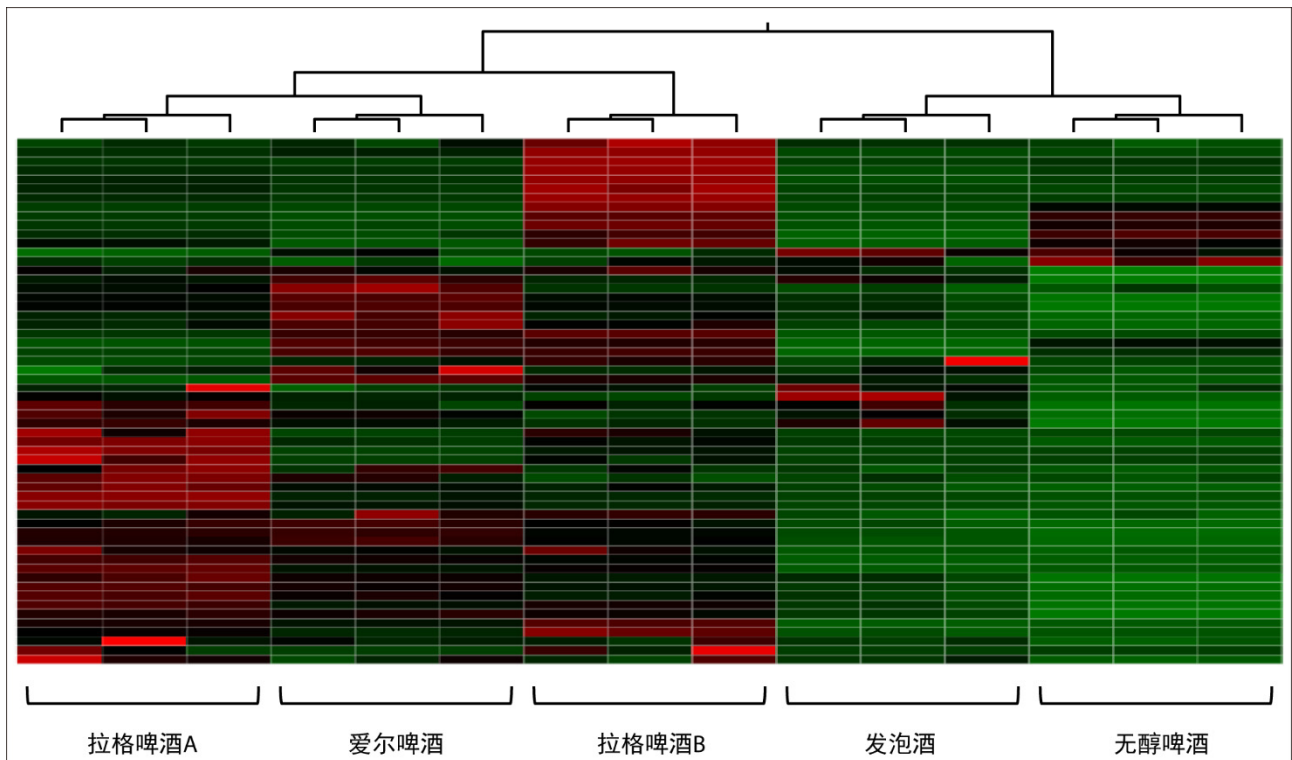


图 3 5 种啤酒的层次聚类分析
Hierarchical Clustering Analysis of Five Beers



岛津企业管理(中国)有限公司
岛津(香港)有限公司

<http://www.shimadzu.com.cn>

用户服务热线电话: 800-810-0439
400-650-0439

免责声明:

* 本资料未经许可不得擅自修改、转载、销售;
* 本资料中的所有信息仅供参考, 不予任何保证。
如有变动, 恕不另行通知。

第一版发行日: 2016 年 7 月