定量结构-色谱保留相关联方法分析 食用植物油中脂肪酸组成

李 焕,陈侨侨,刘 辉,张生万* (山西大学生命科学学院,山西 太原 030006)

摘 要:采用气相色谱-氢火焰离子化检测器分别测定8种食用植物油中脂肪酸组分的色谱保留时间,并结合定量结构-色谱保留相关联(quantitative structure-retention relationship,QSRR)方法和标准品分别对每种植物油中的脂肪酸组分进行定性分析,将这2种方法的定性分析结果作对比,以验证QSRR方法在食用油中脂肪酸定性分析方面的实际应用能力。结果表明:QSRR方法的定性结果与标准品对脂肪酸的定性结果基本一致,QSRR方法具有很好的实际应用性,为脂肪酸的测定提供了一条新途径,对食用植物油中脂肪酸的分析测定有一定的参考价值。

关键词:食用植物油;脂肪酸;气相色谱保留时间;定量结构-色谱保留相关

Analysis of Fatty Acid Composition in Edible Vegetable Oil Using Quantitative Structure-Chromatographic Retention Relationship Method

LI Huan, CHENG Qiao-qiao, LIU Hui, ZHANG Sheng-wan*
(College of Life Science, Shanxi University, Taiyuan 030006, China)

Abstract: The retention times of fatty acids in eight kinds of edible vegetable oils were determined by gas chromatography with flame ionization detector. Comparative quantitative analysis of the fatty acid composition of each vegetable oil was carried out by quantitative structure-chromatographic retention relationship (QSRR) method and standard calibration method with the aim of verifying the practical applicability of QSRR method in fatty acid analysis. Results indicated that the qualitative results obtained by QSRR method were basically consistent with those from standard calibration method, suggesting good practical applicability of QSRR method as a new way for the determination of fatty acids in edible vegetable oils.

Key words: edible vegetable oils; fatty acids; gas chromatographic retention time; quantitative structure-retention relationship (QSRR)

中图分类号: TS221

文献标志码: A

文章编号: 1002-6630 (2014) 04-0086-05

doi:10.7506/spkx1002-6630-201404018

食用油脂作为人体三大营养物质之一,除了能够为人体提供热量以外,也是机体生命活动所需的脂肪酸的重要来源。无论是动物油脂还是植物油脂,其主要组成成分均为脂肪酸。脂肪酸的组成是衡量某种食用油营养价值的重要指标,因此食用油中脂肪酸组成的分析测定显得尤为重要。目前,使用最为普遍且技术较为成熟的脂肪酸分析检测方法有气相色谱(gas chromatography-Mass spectrometry,GC-MS)法^[1-2]和气相色谱-质谱联用(gas chromatography-mass spectrometry,GC-MS)法^[3-4]。而定量结构-色谱保留(quantitative structure-retention relationship,QSRR)方法的相关研究对预测保留时间、选择分离条件及探索色谱保留机理都有重要意义^[5],该方法利用化合物的色谱

保留值及其保留规律之间的关系进行定性,是色谱定性分析工作中较为简单的方法。近几年,对脂肪酸QSRR方法的研究相继有一些文献报道。景举华等^[6]将三维全息原子场作用矢量和脂肪酸气相色谱保留指数相关联,研究了脂肪酸定量结构与色谱保留指数之间的关系,并建立了定量构效关系模型。陆建坚等^[7]选用分子连接性指数,探讨了12 种脂肪酸的化学结构与其气相色谱保留值之间关系。Farkas等^[8]比较了描述符的不同选取方法,并建立了预测脂肪酸保留指数的QSRR模型。但这些工作只是停留在理论研究上,而实际应用QSRR方法定性识别脂肪酸方面的工作尚未见报道。

李焕等[9]选用文献[10]中32种脂肪酸的数据进行定

收稿日期: 2013-05-30

基金项目: 国家自然科学基金面上项目(31171748): 山西省普通高校特色重点学科建设项目

作者简介: 李焕(1987—), 女,硕士研究生,研究方向为食品化学。E-mail: 1615089247@qq.com

*通信作者: 张生万(1955—),男,教授,本科,研究方向为食品科学、化学计量学、药物合成。E-mail: zswan@sxu.edu.cn

量构效关系的研究,建立了预测脂肪酸气相色谱保留时间的QSRR模型。首先对37种脂肪酸进行气相色谱分离,然后采用三维分子结构信息(steric and electronic descriptors,SEDs)表征了脂肪酸甲酯的结构特征,并与其色谱保留时间进行了相关性研究,建立了脂肪酸甲酯的结构与其气相色谱保留时间的QSRR模型[11]。在上述研究基础之上,本研究对几种市售食用植物油中脂肪酸组分进行气相色谱分离,并运用已建立的QSRR模型对主要脂肪酸做定性识别;同时采用标准品定性,以此验证QSRR方法定性结果的准确性,以期为脂肪酸的测定提供新途径。

1 材料与方法

1.1 材料与仪器

菜籽油 盂县西烟镇农家自榨;华健纯香胡麻油、福临门一级小磨香油、鲁花浓香葵花仁油、鲁花5 S一级压榨花生油、多力橄榄油、长寿花金胚玉米油、招财鱼冷榨一级核桃油均购于当地超市;37种脂肪酸甲酯混标标准品 上海安谱科学仪器有限公司;正己烷(≥95.0%,色谱纯) 天津市光复精细化工研究所;GC-7890A气相色谱仪(配有FID检测器) 美国Agilent公司。

1.2.1 油样甲酯化处理

1.2 方法

取 $0.2\,\mathrm{g}$ 油样于比色管中,加入 $5\,\mathrm{mL}$ 正己烷,振荡使油样完全溶解,然后加入 $1.4\,\mathrm{mL}$ $2\,\mathrm{mol/L}$ 的KOH-甲醇溶液,充分振荡 $1\,\mathrm{min}$ 后,静置 $15\,\mathrm{min}$,然后每次加入 $2\,\mathrm{mL}$ 超纯水摇匀,静置分层,除去水相,重复 $2\,\mathrm{次}$,有机相用无水 $\mathrm{Na_2SO_4}$ 干燥,得甲酯化样品,冰箱保存待测。

1.2.2 色谱条件

色 谱 柱: R t x - W a x 石 英 毛 细 管 色 谱 柱 $(30 \text{ m} \times 0.25 \text{ mm}, 0.5 \text{ µm})$; 进样口温度250 \mathbb{C} ; 柱流量0.60 mL/min;升温程序:50 \mathbb{C} 保持2 min,以5 \mathbb{C} /min升到140 \mathbb{C} ,保持10 min,以1 \mathbb{C} /min升到180 \mathbb{C} ,保持10 min,以1 \mathbb{C} /min升到200 \mathbb{C} ,保持10 min,以1 \mathbb{C} /min升到230 \mathbb{C} ,保持10 min,然后以2 \mathbb{C} /min升到230 \mathbb{C} ,保持30 min;检测器温度250 \mathbb{C} ;检测器气体:氢气;气体流速40 mL/min;空气流速450 mL/min;尾吹氦气流速30 mL/min;进样量0.2 µL;分流比10:1。

1.2.3 定性、定量方法

定性方法:在上述色谱分离条件下,测定各食用植物油甲酯化样品中各组分的保留时间,并与QSRR模型预测值比较,进行定性。用于定性识别食用植物油中脂肪

酸组分的QSRR模型及其建立方法均引自文献[11],所建QSRR模型如下所示:

 $t_{\rm R}$ =0.116Tvcon+0.483SVDe+0.980Windex-0.395Bindex

N = 3.7, m = 4, R = 0.9990, SD = 2.2795, F = 3.712.6633

交互检验: R_{CV} =0.9951, SD_{CV} =4.9251, F_{CV} =789.1953

式中: Tvcon指全价连接; SVDe指分子中所有原子点价之和; Windex指分子骨架中各碳原子间距离总和; Bindex是建立在分子图的距离矩阵基础上而构造产生的,反映了分子的大小和形状等结构信息; N为回归样本数; m为变量个数; R为相关系数; SD为标准偏差; F为Fisher检验值; $R_{\rm Cv}$ 、SD $_{\rm cv}$ 、 $F_{\rm cv}$ 分别为继以留一法(leave-one-out,LOO)交互检验的相关系数、标准偏差和F检验值。

定量方法: 采用峰面积归一化法,确定每种脂肪酸甲酯的相对含量,即为脂肪酸的相对含量。

2 结果与分析

2.1 油样中脂肪酸组分测定及OSRR方法定性分析

采用1.2.1节甲酯化方法对上述8 种食用植物油样品进行甲酯化前处理,并运用1.2.2节方法对甲酯化的样品油进行气相色谱测定,得到每种油中脂肪酸甲酯的色谱保留时间。将样品油中脂肪酸组分的色谱保留时间与QSRR模型的预测值比较,模型对8 种油样中主要脂肪酸组分的定性结果见表1。

2.2 QSRR方法定性分析与采用标准品验证的结果

为了验证QSRR模型对油样中脂肪酸组分确认结果的准确性,同时也测定了标准品的保留时间。在1.2.2节所述的色谱条件下对37种脂肪酸甲酯混标进行测定,结果如图1、表2所示。不同方法对测试样品油中脂肪酸的定性结果及脂肪酸的相对含量见表1。

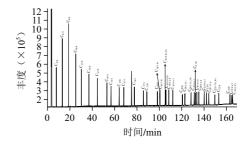


图 1 37 种脂肪酸甲酯混标气相色谱图

Fig.1 Gas chromatogram of a mixture of 37 fatty acid methyl esters

表 1 2 种方法对样品油中脂肪酸定性、定量结果
Table 1 Qualitative and quantitative analysis results of fatty acids in vegetable oils by two methods

| | | | vegetabl | e oils by t | MO IIICI | mous | | | |
|--------------|------------------|------------------|----------------------|-------------|----------|---------------|----------------|-----------------|---------|
| 植物油 | GC实测保 留时间/min | QSRR预 测时间/min | QSRR定 性结果 | 混标定 性结果 | 相对含量/% | 饱和脂肪 酸含量/% | 不饱和脂肪 酸含量/% | 多不饱和脂 肪酸含量/% | n-6/n-3 |
| | 74.850 | 75.604 1 | 棕榈酸 | 棕榈酸 | 5.633 | | | | |
| 华建纯香 胡麻油 | 98.060 | 96.8668 | 硬脂酸 | 硬脂酸 | 4.306 | | | | |
| | 100.338 | 100.7645 | 油酸 | 油酸 | 21.295 | | | | |
| | 100.863 | 100.7645 | 反油酸 | 反油酸 | 0.676 | 10.056 | 21.971 | 67.745 | 0.253 |
| | 105.229 | 104.6877 | 亚油酸 | 亚油酸 | 13.713 | | | | |
| | 112.302 | 108.6278 | α/γ -亚麻酸 | α-亚麻酸 | 54.032 | | | | |
| | 141.829 | 141.771 1 | 山嵛酸 | 山嵛酸 | 0.117 | | | | |
| | 74.923 | 75.6041 | 棕榈酸 | 棕榈酸 | 9.581 | | | | |
| 福临门一级小磨 | 98.151 | 96.866 8 | 硬脂酸 | 硬脂酸 | 5.655 | | | | |
| | 100.528 | 100.7645 | 油酸 | 油酸 | 38.804 | | | | |
| | 100.944 | 100.7645 | 反油酸 | 反油酸 | 0.816 | | | | |
| | 105.556 | 104.6877 | 亚油酸 | 亚油酸 | 43.720 | 15.807 | 39.773 | 44.276 | 123.50 |
| | 105.798 | 104.6877 | 反亚油酸 | 反亚油酸 | 0.202 | | | | |
| | 111.680 | 108.627 8 | α/γ-亚麻酸 | α-亚麻酸 | 0.354 | | | | |
| | 120.195 | 119.1737 | 花生酸 | 花生酸 | 0.571 | | | | |
| | 122.425 | 123.109 5 | 二十碳烯酸 | 二十碳烯酸 | 0.153 | | | | |
| | 74.872 | 75.604 1 | 棕榈酸 | 棕榈酸 | 6.165 | | | | |
| | 98.135 | 96.866 8 | 硬脂酸 | 硬脂酸 | 5.243 | | | | |
| | 100.356 | 100.7645 | 油酸 | 油酸 | 21.436 | | | | |
| | 100.902 | 100.7645 | 反油酸 | 反油酸 | 0.461 | | | | |
| 鲁花浓香 葵花仁油 | 105.734 | 104.6877 | 亚油酸 | 亚油酸 | 65.219 | 12.632 | 22.002 | 65.219 | |
| 大化レ仙 | 120.194 | 119.1737 | 花生酸 | 花生酸 | 0.297 | | | | |
| | 122.426 | 123.109 5 | 二十碳烯酸 | 二十碳烯酸 | 0.105 | | | | |
| | 141.879 | 141.771 1 | 山嵛酸 | 山嵛酸 | 0.737 | | | | |
| | 162.756 | 163.7188 | 二十四烷酸 | 二十四烷酸 | 0.190 | | | | |
| | 75.018 | 75.604 1 | 棕榈酸 | 棕榈酸 | 12.601 | | | | |
| | 98.156 | 96.866 8 | 硬脂酸 | 硬脂酸 | 3.741 | | | | |
| 鲁花5S一 | 100.613 | 100.7645 | 油酸 | 油酸 | 39.751 | | | | |
| | 100.981 | 100.7645 | 反油酸 | 反油酸 | 0.418 | | | | |
| 级压榨 | 105.572 | 104.6877 | 亚油酸 | 亚油酸 | 36.611 | 22.258 | 41.047 | 36.611 | |
| 花生油 | 120.254 | 119.1737 | 花生酸 | 花生酸 | 1.592 | | | | |
| | 122.467 | 123.109 5 | 二十碳烯酸 | 二十碳烯酸 | 0.878 | | | | |
| | 141.975 | 141.771 1 | 山嵛酸 | 山嵛酸 | 2.954 | | | | |
| | 162.820 | 163.7188 | 二十四烷酸 | 二十四烷酸 | 1.370 | | | | |
| | 74.880 | 75.604 1 | 棕榈酸 | 棕榈酸 | 11.541 | | | | |
| | 77.293 | 79.425 7 | 棕榈油酸 | 棕榈油酸 | 0.833 | | | | |
| | 98.029 | 96.866 8 | 硬脂酸 | 硬脂酸 | 4.204 | | | | |
| 力上 | 100.574 | 100.7645 | 油酸 | 油酸 | 73.379 | | | | |
| 多力 橄欖油 | 100.960 | 100.7645 | 反油酸 | 反油酸 | 1.920 | 16.152 | 76.337 | 6.931 | 9.223 |
| PA DUTH | 105.039 | 104.6877 | 亚油酸 | 亚油酸 | 6.253 | | | | |
| | 111.643 | 108.627 8 | α/γ-亚麻酸 | α-亚麻酸 | 0.678 | | | | |
| | 120.144 | 119.1737 | 花生酸 | 花生酸 | 0.407 | | | | |
| | 122.408 | 123.109 5 | 二十碳烯酸 | 二十碳烯酸 | 0.205 | | | | |
| 长寿花金 胚玉米油 | 74.962 | 75.604 1 | 棕榈酸 | 棕榈酸 | 13.680 | | | | |
| | 98.007 | 96.866 8 | 硬脂酸 | 硬脂酸 | 1.772 | | | | |
| | 100.386 | 100.7645 | 油酸 | 油酸 | 31.068 | | | | |
| | 100.881 | 100.7645 | 反油酸 | 反油酸 | 0.581 | | | | |
| | 105.544 | | 亚油酸 | 亚油酸 | 49.533 | 15.856 | 31.901 | 51.115 | 127.33 |
| | | 104.6877 | | | | 13.030 | J1.7UI | J1.11J | 141.33 |
| | 105.803 | 104.6877 | 反亚油酸 | 反亚油酸 | 1.193 | | | | |
| | 111.672 | 108.627 8 | a/y-亚麻酸 | α-亚麻酸 | 0.389 | | | | |
| | 120.174 | 119.1737 | 花生酸 | 花生酸 | 0.404 | | | | |
| | 122.404 | 123.109 5 | 二十碳烯酸 | 二十碳烯酸 | 0.252 | | | | |

续表1

| 植物油 | GC实测保 留时间/min | QSRR预 测时间/min | QSRR定 性结果 | 混标定 性结果 | 相对含量/% | 饱和脂肪 酸含量/% | 不饱和脂肪 酸含量/% | 多不饱和脂 肪酸含量/% | n-6/n-3 |
|--------------------|------------------|------------------|----------------------|------------|--------|---------------|----------------|-----------------|---------|
| | 74.804 | 75.604 1 | 棕榈酸 | 棕榈酸 | 3.063 | | | | |
| 招财鱼冷 榨一级 核桃油 | 98.008 | 96.866 8 | 硬脂酸 | 硬脂酸 | 0.829 | | | | |
| | 100.271 | 100.7645 | 油酸 | 油酸 | 15.508 | | | | |
| | 100.885 | 100.7645 | 反油酸 | 反油酸 | 1.041 | 4.105 | 16.549 | 79.249 | 6.158 |
| | 105.762 | 104.6877 | 亚油酸 | 亚油酸 | 68.177 | | | | |
| | 111.888 | 108.627 8 | α/γ -亚麻酸 | α-亚麻酸 | 11.072 | | | | |
| | 122.421 | 119.1737 | 花生酸 | 花生酸 | 0.213 | | | | |
| | 74.776 | 75.604 1 | 棕榈酸 | 棕榈酸 | 3.656 | | | | |
| | 77.257 | 79.425 7 | 棕榈油酸 | 棕榈油酸 | 0.149 | | | | |
| | 97.950 | 96.866 8 | 硬脂酸 | 硬脂酸 | 2.049 | | | | |
| | 100.293 | 100.7645 | 油酸 | 油酸 | 20.721 | | | | |
| | 100.832 | 100.7645 | 反油酸 | 反油酸 | 1.472 | 7.035 | 49.279 | 42.918 | 0.949 |
| | 105.281 | 104.6877 | 亚油酸 | 亚油酸 | 20.231 | | | | |
| | 111.960 | 108.627 8 | α/γ -亚麻酸 | α-亚麻酸 | 21.319 | | | | |
| 菜籽油 | 120.157 | 119.173 7 | 花生酸 | 花生酸 | 0.701 | | | | |
| 水石間 | 122.611 | 123.109 5 | 二十碳烯酸 | 二十碳烯酸 | 8.769 | | | | |
| | 127.885 | 127.058 1 | 二十碳二烯酸 | 二十碳二烯酸 | 0.864 | | | | |
| | 134.858 | 134.977 8 | 花生四烯酸 | n-3-二十碳三烯酸 | 0.167 | | | | |
| | 141.850 | 141.771 1 | 山嵛酸 | 山嵛酸 | 0.361 | | | | |
| | 144.170 | 145.7260 | 芥酸 | 芥酸 | 16.940 | | | | |
| | 149.127 | 149.687 2 | 二十二碳二烯酸 | 二十二碳二烯酸 | 0.337 | | | | |
| | 162.644 | 163.718 8 | 二十四烷酸 | 二十四烷酸 | 0.268 | | | | |
| | 165.043 | 165.562 7 | 二十二碳六烯酸 | 二十四碳烯酸 | 1.228 | | | | |

表 2 37 种脂肪酸甲酯标准品气相色谱保留时间 Table 2 GC retention times of 37 fatty acid methyl esters

| 脂肪酸甲酯 | GC实测保留时间/min | 脂肪酸甲酯 GC实测保留时间/min |
|---------|--------------|----------------------|
| 丁酸甲酯 | 7.886 | 反亚油酸甲酯 105.984 |
| 己酸甲酯 | 13.254 | γ-亚麻酸甲酯 108.463 |
| 辛酸甲酯 | 18.828 | a-亚麻酸甲酯 112.035 |
| 癸酸甲酯 | 25.209 | 花生酸甲酯 120.646 |
| 十一烷酸甲酯 | 30.335 | 二十碳烯酸甲酯 122.863 |
| 月桂酸甲酯 | 37.028 | 二十碳二烯酸甲酯 128.364 |
| 十三烷酸甲酯 | 44.681 | n-6-二十碳三烯酸甲酯 131.226 |
| 肉豆蔻酸甲酯 | 53.116 | 二十一烷酸甲酯 132.232 |
| 肉豆蔻烯酸甲酯 | 56.780 | 花生四烯酸甲酯 133.546 |
| 十五烷酸甲酯 | 64.071 | n-3-二十碳三烯酸甲酯 135.342 |
| 十五烯酸甲酯 | 66.183 | 二十碳五烯酸甲酯 140.126 |
| 棕榈酸甲酯 | 75.161 | 山嵛酸甲酯 142.248 |
| 棕榈油酸甲酯 | 77.660 | 芥酸甲酯 144.248 |
| 十七烷酸甲酯 | 85.791 | 二十二碳二烯酸甲酯 149.660 |
| 十七烯酸甲酯 | 88.807 | 二十三烷酸甲酯 153.198 |
| 硬脂酸甲酯 | 98.261 | 二十四烷酸甲酯 163.207 |
| 油酸甲酯 | 100.317 | 二十二碳六烯酸甲酯 164.803 |
| 反油酸甲酯 | 100.645 | 二十四碳烯酸甲酯 165.600 |
| 亚油酸甲酯 | 105.332 | |

如表2所示,将QSRR方法定性结果与标准品定性结果相比较,结果表明所建模型能够对不同食用植物油中的脂肪酸组分进行较为准确的识别,具有较好的实际应用性,对于实际油样中脂肪酸的检测分析有一定的参考价值和适用性。QSRR方法对油酸和反油酸、亚油酸和反亚油酸2组顺、反异构体定性识别时,是结合其相对含量来确定的,植物油中脂肪酸以顺式结构为主,所以当某一油样中同时含有顺、反异构体时,含量高的为顺式(油酸或亚油酸),含量低的为反式(反油酸或反亚

油酸)。另外,模型对样品中检出的个别化合物的识别不够准确,例如通过标准品定性,在华建纯香胡麻油、福临门一级小磨香油、多力橄榄油、长寿花金胚玉米油、招财鱼冷榨一级核桃油及菜籽油中,都检测出α-亚麻酸,但由于QSRR模型对α-亚麻酸和γ-亚麻酸的预测时间是相同的,故模型无法确定该物质是α-亚麻酸还是γ-亚麻酸;对华健纯香胡麻油和菜籽油中的脂肪酸组分确认时,模型将n-3-二十碳三烯酸误认为是花生四烯酸;模型将菜籽油中的二十四碳烯酸误认为是二十二碳六烯酸,说明模型对这4种物质的识别存在一定的缺陷。另外,模型对油样中检测到的另外某些化合物尚不能识别预测,这些化合物可能是植物油中的非脂肪酸类物质,也可能是建模时引用的37种脂肪酸以外的其他脂肪酸,说明模型只能应用在用于建模的37种脂肪酸的识别预测,存在一定局限性。

2.3 脂肪酸相对含量

植物油中脂肪酸组成的测定结果与食用植物油国家标准相比较,大部分脂肪酸均在标准的规定范围^[12-19]。其中,菜籽油的芥酸含量较高(16.940%),属于高芥酸菜籽油,长期食用有害健康。另外菜籽油中还检出少量*n*-3二十碳三烯酸。此外,在8种被测食用植物油中均检出少量反式脂肪酸,但其含量都在2%的安全范围之内^[20]。

脂肪酸组成作为食用植物油的重要指标,是衡量 其营养价值的重要依据。由表1可知,日常食用植物油 中的脂肪酸绝大多数以顺式结构存在, 最主要的有棕榈 酸 $(C_{16:0})$ 、硬脂酸 $(C_{18:0})$ 、油酸 $(C_{18:1})$ 和亚油酸 (C_{18:2}),被测油样中均含有这4种脂肪酸,且以不饱 和脂肪酸为主。单不饱和脂肪酸主要是油酸,多不饱和 脂肪酸主要是亚油酸。上述8种测试油样中,不饱和脂 肪酸的相对含量均在75%以上,而招财鱼冷榨一级核桃 油和菜籽油中不饱和脂肪酸达到了90%以上。其中,花 生油中饱和脂肪酸的含量相对较高,为22.258%,其他 植物油中饱和脂肪酸的含量都在17%以下;单不饱和脂 肪酸含量最高的为橄榄油(76.337%),主要是油酸, 其次是菜籽油(49.279%);多不饱和脂肪酸含量较高 的有招财鱼冷榨一级核桃油、华健纯香胡麻油、鲁花 浓香葵花仁油、长寿花金胚玉米油,分别为79.249%、 67.745%、65.219%、51.115%,均在50%以上。另外,某 些植物油有其特征脂肪酸: 华健纯香胡麻油中α-亚麻酸 的含量高达54.032%; 芥酸属于菜籽油的特征脂肪酸, 文 献[21]报道,长期食用高芥酸含量的食用油,可导致心肌 脂肪沉积和血管壁增厚,易诱发血栓和心肌梗塞。本实 验测试的菜籽油是未经过精炼加工的, 其芥酸含量高达 16.940%,超过了联合国粮农组织及世界卫生组织对菜籽 油中芥酸含量的规定上限(5%)[21]。

随着健康意识的不断提高,人们对膳食中脂肪酸

的比例问题越来越重视,而现在发病率较高的心脑血管疾病可能主要是由脂肪酸摄入不均衡所导致的[22-25]。目前,国际及国内公认的膳食脂肪酸比例应符合饱和脂肪酸:单不饱和脂肪酸:多不饱和脂肪酸为1:1:1,多不饱和脂肪酸中n-6:n-3为(4~6):1^[26]。通过分析上述被测植物油的脂肪酸组成发现,任何单一植物油中饱和脂肪酸、单不饱和脂肪酸及多不饱和脂肪酸的比值都无法达到1:1:1,而且n-6多不饱和脂肪酸与n-3多不饱和脂肪酸的比例除了招财鱼冷榨一级核桃油接近(4~6):1(6.158),其他测试植物油中均差距较大。因此,仅从某一种食用植物油中获得脂肪酸是无法达到体内脂肪酸平衡的,必须结合其他脂肪酸来源或多种食用油搭配食用,以保证膳食脂肪酸的均衡。

3 结论

以往的文献报道中,对脂肪酸QSRR方法的研究只是停留在理论上,而没有真正应用QSRR方法来分析测定实际油样中脂肪酸组分的相关报道。本研究运用已建立的预测脂肪酸气相色谱保留时间的QSRR模型,对8种市售食用植物油中的主要脂肪酸进行定性识别,取得了较为满意的结果,尽管模型无法确认油样中个别检出物,但对实际油样中绝大多数检出物的识别是准确的,仍具有较强的实际应用性。结果表明采用QSRR方法能够在一定程度上代替标准品或质谱法对脂肪酸进行定性、定量分析,大大节约了检测成本。本研究为植物油中脂肪酸组分的分析测定提供了一条新途径,尤其对脂肪酸的定性分析工作具有一定的实用价值。

参考文献:

- [1] 李丹华, 朱圣陶. 气相色谱法测定常见植物油中脂肪酸[J]. 粮食与油脂, 2006(8): 46-48.
- [2] PIERLUIGI D, ALI R F, JOHN K G K, et al. Evaluation of highly polar ionic liquid gas chromatographic column for the determination of the fatty acids in milk fat[J]. Journal of Chromatography A, 2012, 1233: 137-146.
- [3] 盛灵慧,黄峥,王晶.气相色谱质谱法测定植物油中脂肪酸[J]. 化学分析计量,2010.19(2):35-38.
- [4] 杨春英, 刘学铭, 陈智毅. 15 种食用植物油脂肪酸的气相色谱-质谱分析[J]. 食品科学, 2013, 34(6): 211-214.
- [5] XIE Lijuan, YE Xingqian, LIU Donghong, et al. Prediction of titratable acidity, malic acid, and citric acid in bayberry fruit by nearinfrared spectroscopy[J]. Food Research International, 2011, 44(7): 2198-2204.
- [6] 景举华, 张巧霞, 李志良. 三维全息原子场作用矢量用于脂肪酸的 OSRR研究[J]. 化学分析计量, 2008, 17(2): 13-15.
- [7] 陆建坚, 林润国. 12 种脂肪酸的分子连接性指数与其气相色谱保留值的相关关系研究[J]. 贵州化工, 2006, 31(2): 1-4.
- [8] FARKAS O, ZENKEVICH I G, STOUT F, et al. Prediction of retention indices for identification of fatty acid methyl esters[J].

- Journal of Chromatography A, 2008, 1198/1199: 188-195.
- [9] 李焕, 李美萍, 马艳红, 等. 食用油中脂肪酸的QSRR研究[J]. 食品科学, 2013, 34(20): 228-231.
- [10] 李新华, 车欣, 邵帅. 营养型植物调和油配方数学模型的建立及应用[J]. 食品科学, 2010, 31(13): 118-121.
- [11] 李焕, 李美萍, 张生万. 37 种脂肪酸甲酯的色谱分离及QSRR研究[J]. 食品工业科技, 2013, 34(19): 49-53.
- [12] 国家粮食局标准质量中心,国家粮食局西安油脂食品及饲料质量 监督检验测试中心. GB 1536—2004 菜籽油[S]. 北京: 中国标准出 版社 2004
- [13] 国家粮食局科学研究院. GB/T 22327—2008 核桃油[S]. 北京: 中国标准出版社, 2008.
- [14] 国家粮食储备局西安油脂科学研究设计院,内蒙古锡林郭勒盟红井源油脂有限责任公司. GB/T 8235—2008 亚麻籽油[S]. 北京:中国标准出版社,2009.
- [15] 中国林业科学研究院林业研究所,国家粮食局科学研究院.GB 23347—2009 橄榄油、油橄榄果渣油[S].北京:中国标准出版社,2009.
- [16] 国家粮食局标准质量中心,国家粮食局西安油脂食品及饲料质量 监督检验测试中心.GB 10464—2003 葵花籽油[S].北京:中国标准 出版社,2003.
- [17] 国家粮食局科学研究院. GB 8233-2008 芝麻油[S]. 北京: 中国标

- 准出版社, 2009.
- [18] 国家粮食局标准质量中心,国家粮食局西安油脂食品及饲料质量监督检验测试中心.GB 1534—2003 花生油[S]. 北京:中国标准出版社,2003.
- [19] 国家粮食局西安油脂食品及饲料质量监督检验测试中心,国家粮食局标准质量中心. GB 19111—2003 玉米油[S]. 北京:中国标准出版社,2003.
- [20] 王瑞元, 王兴国, 金青哲, 等. 科学、全面、正确认识反式脂肪酸安全问题[J]. 中国油脂, 2011, 36(1): 1-4.
- [21] 邓荣沙. 常见食用油的营养特性及适宜人群[J]. 食品与药品, 2005, 7(1B): 65-67.
- [22] 郭红卫, 席静. 膳食脂肪对高血压人群血脂水平的影响[J]. 中华预防医学杂志, 2002, 36(4): 250-253.
- [23] 黄文繁, 俞慕华, 戴传文, 等. 不同脂肪酸构成比食用调和油对高脂血症患者血脂代谢的影响[J]. 现代预防医学, 2004, 31(5): 668-670.
- [24] 周斌,彭淑牖, 牟一平. 茶油对梗阻性黄疸心脏保护作用的实验研究[J]. 肝胆外科杂志, 2000, 8(4): 308-310.
- [25] 蔡妙颜, 李冰, 袁向华. 膳食中的脂肪酸平衡[J]. 粮油食品科技, 2003, 11(2): 37-39.
- [26] 黄玉华, 邓元泽. 植物油中脂肪酸成分的调查与分析[J]. 食品科技, 2007, 32(10): 248-250.