

# 质谱特征结合等效链长用于牡丹籽油 脂肪酸组成分析

孙晓曼<sup>1,2,3</sup>, 王照飞<sup>4</sup>, 张良晓<sup>1,3,5\*</sup>, 李培武<sup>1,3,5,6\*</sup>, 马飞<sup>1,3</sup>, 张奇<sup>1,2,6</sup>,  
王秀嫔<sup>1,3</sup>, 丁小霞<sup>1,3,5</sup>

- (1. 中国农业科学院油料作物研究所, 武汉 430062; 2. 农业部油料作物生物学与遗传改良重点实验室, 武汉 430062;  
3. 农业部油料作物风险评估重点实验室, 武汉 430062; 4. 江西春源绿色食品有限公司, 上饶 334700;  
5. 农业部油料及制品质量监督检验测试中心, 武汉 430062; 6. 农业部生物毒素检测重点实验室, 武汉 430062)

**摘要:** **目的** 全面分析牡丹籽油的脂肪酸组成, 为牡丹籽油的保真和掺伪鉴别提供基础。 **方法** 采用氢氧化钾甲醇溶液对牡丹籽油中的脂肪酸甲酯化得到脂肪酸甲酯, 采用 DB-23 毛细管柱对脂肪酸甲酯进行分离, 利用质谱选择离子扫描的方式进行检测分析。根据脂肪酸甲酯的质谱特征确定脂肪酸的类型, 并识别出样品中的直链饱和脂肪酸甲酯, 利用样品中的直链饱和脂肪酸甲酯的保留时间计算其它脂肪酸甲酯的等效链长, 然后与相同或相近色谱条件下测定标准品的等效链长比较确定其它脂肪酸甲酯的结构, 并利用其质谱特征进行验证。 **结果** 本方法可以在不使用标准品的情况下鉴定出牡丹籽油中 27 种脂肪酸。 **结论** 本法测定的牡丹籽油脂肪酸数据明显多于现有方法, 为全面认识牡丹籽油的脂肪酸组成并将之应用于保真和掺伪鉴别提供基础。

**关键词:** 牡丹籽油; 脂肪酸; 质谱特征; 等效链长; 结构鉴定

## Analysis of fatty acid composition of peony seed oil using mass spectral characteristics and equivalent chain length

SUN Xiao-Man<sup>1,2,3</sup>, WANG Zhao-Fei<sup>4</sup>, ZHANG Liang-Xiao<sup>1,3,5\*</sup>, LI Pei-Wu<sup>1,3,5,6\*</sup>, MA Fei<sup>1,3</sup>,  
ZHANG Qi<sup>1,2,6</sup>, WANG Xiu-Pin<sup>1,3</sup>, DING Xiao-Xia<sup>1,3,5</sup>

- (1. Oil Crops Research Institute, Chinese Academy of Agricultural Sciences, Wuhan 430062, China; 2. Key Laboratory of Biology and Genetic Improvement of Oil Crops, Ministry of Agriculture, Wuhan 430062, China; 3. Laboratory of Risk Assessment for Oilseeds Products (Wuhan), Ministry of Agriculture, Wuhan 430062, China; 4. Jiangxi Chunyuan Greed Food Company, Shangrao 334700, China; 5. Quality Inspection and Test Center for Oilseeds and Products, Ministry of Agriculture, Wuhan 430062, China; 6. Key Laboratory of Detection for Mycotoxins, Ministry of Agriculture, Wuhan 430062, China)

基金项目: 国家科技支撑计划项目(2012BAK08B03)、国家自然科学基金项目(21205118 与 31201447)、国家农产品质量安全风险评估重大项目(GJFP2014006)、“双打”相关产品检验鉴定方法研究专项(2012104010-4)、江西春源绿色食品有限公司合作研究项目(春科赣 13-6)

**Fund:** Supported by the National Key Technologies R&D Program (2012BAK08B03), the National Natural Science Foundation of China (21205118 and 31201447), National Key Project for Agro-product Quality & Safety Risk Assessment, PRC (GJFP2014006), the Special Fund for “Quality Inspection” Research in the Public Interest (2012104010-4) and the Research Project from Jiangxi Chunyuan Greed Food Company (chunkegan13-6)

\*通讯作者: 张良晓, 博士, 副研究员, 硕士生导师, 主要研究方向为食品质量与安全、化学计量学。E-mail: liangxiao\_zhang@hotmail.com

李培武, 博士, 研究员, 博士生导师, 主要研究方向为食品、农产品质量与食品安全标准与检测技术研究。E-mail: peiwuli@oilcrops.cn

\*Corresponding author: ZHANG Liang-Xiao, Associate Professor, Oil Crops Research Institute of the Chinese Academy of Agricultural Sciences, No.2, Xudong 2<sup>nd</sup> Road, Wuchang District, Wuhan 430062, China. E-mail: liangxiao\_zhang@hotmail.com

LI Pei-Wu, Professor, Oil Crops Research Institute of the Chinese Academy of Agricultural Sciences, No.2, Xudong 2<sup>nd</sup> Road, Wuchang District, Wuhan 430062, China. E-mail: peiwuli@oilcrops.cn

**ABSTRACT: Objective** To fully analyze the fatty acid composition of peony seed oil for subsequent potential adulteration detection. **Methods** Fatty acids in peony seed oil were derived and analyzed by gas chromatography-mass spectrometry(GC-MS) in selected ion monitoring mode (SIM). Subsequently, structure identification of FAMES in the peony seed oil was conducted by comparing their mass spectral characteristics and equivalent chain length (ECL) values with those of the fatty acids in Chrombox. The mass spectral characteristics were used to determine the kinds of FAMES. The ECLs were calculated and used to infer the structure of FAMES. Finally, fatty acids in peony seed oils were identified and partially validated by reference standards. **Results** Fatty acids in peony seed oil were identified and partially validated by reference standards. The results showed that 27 fatty acids were identified in peony seed oil. **Conclusion** The identification method based on the combination of ECL and MS could identify more fatty acids than the existing methods without using reference standards and might benefit the subsequent potential adulteration detection of peony seed oil.

**KEY WORDS:** peony seed oil; fatty acids; mass spectral characteristics; equivalent chain length; structural identification

## 1 引言

食用油是人们生活的必需品之一,其品质优劣直接影响人的身体健康。近年来,食用油掺伪和废弃油的非法回收再利用事件引起了广泛的社会关注<sup>[1-3]</sup>。牡丹籽油因具有抗肿瘤、抗炎、改善心血管和调节免疫等医疗保健功能<sup>[4-7]</sup>,其价格远高于普通食用油,利益驱动的掺伪潜在风险较大。建立牡丹籽油保真和掺伪鉴别技术对保障老百姓合法权益不受侵害具有重要意义。目前,食用油保真技术主要包括两个策略:(1)建立食用油特征组分的指纹图谱,结合化学计量学模式识别的方法,从特征成分整体相似程度上制定食用油的质量标准;(2)筛选内源性或外源性特征标记物,建立标记物的高灵敏度快速检测技术。脂肪酸是食用油的最主要成分,以游离脂肪酸和结合脂肪酸(例如甘油三酯)的形式存在。开展食用油中脂肪酸的组成和含量分析,建立食用油脂肪酸特征指纹图谱,有利于建立食用油的保真技术<sup>[8]</sup>。

气相色谱质谱法是分析食用油中脂肪酸组成的主要检测方法之一<sup>[8-9]</sup>。脂肪酸的结构鉴定主要采用质谱相似度匹配和标准品验证的方法。食用油中含有丰富的不饱和脂肪酸,甲酯化后得到脂肪酸甲酯,双键数目相同而位置不同的异构体的裂解方式基本一致,得到的质谱图十分相似,只利用相似度匹配的方法很难实现脂肪酸的准确定性分析<sup>[10]</sup>,因此发展新的结构鉴定方法对脂肪酸的定性是非常必要的。近年来,作者针对脂肪酸结构鉴定的难题,根据质谱特征

和保留指数(等效链长)<sup>[9,11]</sup>,在特定条件下建立质谱和等效链长数据库<sup>[12]</sup>,异源质谱数据转化<sup>[13]</sup>等方法。

目前对牡丹籽油中脂肪酸的分析主要针对含量较高的脂肪酸<sup>[6-7]</sup>,为了更多脂肪酸组成信息,本文利用选择离子扫描(selected ion scan, SIM)的方式对牡丹籽油中的脂肪酸进行分析,该方法灵敏度高,选择性强。最近,通过挖掘脂肪酸色谱质谱信息数据库(Chrombox)中质谱和等效链长的数据,总结了脂肪酸甲酯的质谱特征和等效链长的规律,并采用质谱特征结合保留指数的方法对部分食用油中脂肪酸的组成进行分析,该方法为在不使用标准品的情况下,实现食用油中脂肪酸的定性分析提供了可能<sup>[8]</sup>。本文将该技术用于牡丹籽油脂肪酸组成分析。

## 2 材料与方法

### 2.1 仪器与试剂

WH-2 微型涡旋混合器(上海沪西分析仪器有限公司); YP6002 电子分析天平(上好越平科学仪器有限公司); 安捷伦 GC-7890/MS-5973 气相色谱质谱联用仪; 37 种脂肪酸甲酯混合标准品(百灵威公司, No.47885-U); 甲醇(色谱纯), 氢氧化钾(分析纯)、正己烷(分析纯)。

### 2.2 样品处理

牡丹籽油由菏泽尧舜牡丹生物科技有限公司提供。样品处理方法参考文献<sup>[8]</sup>,准确称取 0.06 g 油样,加入 2 mL 体积比为 1:1 的乙醚和石油醚的混合溶液,

涡旋混匀; 再加入 1 mL 0.4 mol/L KOH-CH<sub>3</sub>OH 溶液, 静置反应 2.5 h; 再次涡旋, 静置 30 min, 加入 2 mL 蒸馏水, 静置分层; 取上层有机相 50 μL, 用石油醚稀释至 1 mL。

### 2.3 气相色谱-质谱条件

参照文献<sup>[8]</sup>, 安捷伦 GC-7890/MS-5973 气相色谱质谱联用仪; DB-23 色谱柱(30 m×0.25 mm×0.25 μm); 分流比 20:1; 气化温度 220 °C; 色谱柱初始温度为 100 °C, 保持 0.2 min, 以 10 °C/min 程序升温至 215 °C, 保持 0.1 min; 接着以 2 °C/min 升至 224 °C, 保持 0.2 min; 载气为高纯氦气; 柱流量 1.2 mL/min; 进样量 1 μL。EI 源; 电子能量: 70 eV; 离子源温度: 230 °C; 检测器温度: 150 °C; 溶剂延迟: 3 min; 扫描方式: SIM 扫描, 选择离子: 55, 67, 74, 79。

### 2.4 数据处理

采用质谱相似度匹配结合保留指数的方法对牡丹籽油样品中的脂肪酸进行定性分析。首先, 对得到的 GC/MS 数据进行背景扣除并利用多元分辨方法获得各组分的纯色谱和纯质谱。根据等式(1)用正构饱和脂肪酸甲酯的保留时间计算不饱和脂肪酸甲酯的等效链长(ECL)。

$$ECL(x) = n + \frac{RT(x) - RT(n)}{RT(n+1) - RT(n)} \quad (1)$$

式(1)中  $n$  和  $n+1$  分别表示在目标化合物之前和之后流出色谱柱的正构饱和脂肪酸甲酯的碳原子数目。

在特定条件下建立了常见脂肪酸甲酯的质谱和等效链长的数据库<sup>[14]</sup>, 其网址为 [www.chrombox.org/data/](http://www.chrombox.org/data/)。该数据库包含饱和脂肪酸, 单不饱和脂肪酸, 双不饱和脂肪酸, 多不饱和脂肪酸, 含支链饱和脂肪酸, 含环氧基脂肪酸, 含羟基脂肪酸, 含呋喃环脂肪酸, 脂肪醇等 505 个注册化合物。包括食品, 海产品, 富含 Omega-3 产品等中脂肪酸甲酯质谱和保留时间, 保留指数信息子数据库。这个数据库中包含的宝贵的质谱和保留时间信息对于脂肪酸等化合物的结构鉴定提供了重要的支撑。

由于脂肪酸顺反异构间质谱相似度极高, 等效链长非常相近, 容易受到色谱条件差异的影响。为了保证定性结果的准确度, 该数据库要求在相同类型色谱柱、相同的色谱条件下对样本进行检测, 这在一定程度上制约了该方法的广泛使用。利用脂肪酸质谱质谱信息数据(Chrombox)<sup>[14]</sup>, 对数据库中的标准品

的质谱和等效链长数据进行挖掘, 总结了脂肪酸甲酯的质谱特征和等效链长规律, 并利用这些规律, 建立了质谱特征结合等效链长鉴定脂肪酸甲酯的方法, 并用于食用油中脂肪酸的结构鉴定。

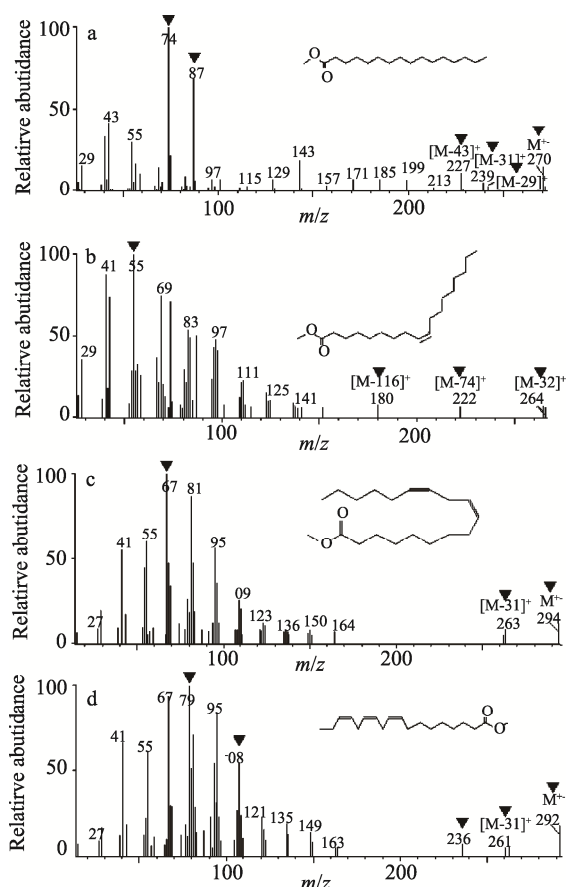
## 3 结果与讨论

### 3.1 食用油中主要脂肪酸的质谱特征

食用油中的脂肪酸主要是直链脂肪酸, 包括饱和脂肪酸、单不饱和脂肪酸、双不饱和脂肪酸、多不饱和脂肪酸。其中不饱和脂肪酸以全顺式为主, 部分顺式不饱和脂肪酸在高温下发生构象变化转化为反式脂肪酸; 多不饱和脂肪酸以  $\omega$ -3 和  $\omega$ -6 的单亚甲基间隔结构为主<sup>[15]</sup>。其中饱和脂肪酸, 经甲酯化后得到脂肪酸甲酯的质谱规律简单, 可根据特征离子 55, 67, 74, 79, 87 的相对强度推断脂肪酸结构<sup>[8]</sup>。根据分子离子峰和保留时间判定饱和脂肪酸的碳原子数目。正构饱和脂肪酸甲酯经过麦氏重排产生碎片离子  $m/z$  74(质谱图中的基峰), 通过甲氧基的断裂引起质量数为 31 的中性丢失, C<sub>2</sub> 和 C<sub>4</sub> 之间的键断裂失去 C<sub>3</sub>H<sub>7</sub> 得到 [M-43]<sup>+</sup> 离子, C<sub>3</sub>-C<sub>4</sub> 间的键断裂后得到 [M-29]<sup>+</sup> 离子<sup>[8]</sup>。因此可得出如下规律: 饱和脂肪酸甲酯基峰离子是  $m/z$  74, 单不饱和脂肪酸甲酯基峰离子为  $m/z$  55, 双不饱和脂肪酸甲酯的基峰  $m/z$  67 或 81, 含 3 个及以上双键的多不饱和脂肪酸甲酯的基峰离子一般为  $m/z$  79。通过基峰可确定脂肪酸甲酯的类型, 四种饱和脂肪酸甲酯的质谱图如图 1 所示。此外, 各类脂肪酸甲酯的质谱还有其他一些特征离子, 饱和脂肪酸往往有分子离子峰, 可以推测脂肪酸的分子式, 利用保留指数确定是否为直链饱和脂肪酸; 单不饱和脂肪酸质谱的特征是 [M-32]<sup>+</sup> 和 [M-74]<sup>+</sup> 的碎片离子, 利用保留指数确定双键的位置和顺反式; 双不饱和脂肪酸甲酯和多不饱和脂肪酸甲酯需要通过与信息库内已知脂肪酸的保留指数比对确定双键的个数, 位置和顺反式<sup>[12]</sup>。

### 3.2 牡丹籽油脂肪酸组成

从上面的脂肪酸甲酯质谱特征分析发现, 不同饱和度的脂肪酸甲酯最主要的特征是基峰不同, 利用四个主要特征离子( $m/z$  55, 67, 74, 79)结合保留时间, 可以识别出样品中的直链饱和脂肪酸甲酯, 利用样品中的直链饱和脂肪酸甲酯的保留时间计算其他脂肪酸甲酯的等效链长, 然后与相同或相近色谱条

图 1 四类脂肪酸甲酯典型质谱图<sup>[9]</sup>Fig. 1 Representative mass spectra of four classes of FAMES<sup>[9]</sup>

件下测定标准品的等效链长比较确定非直链饱和脂肪酸甲酯的结构, 并利用其质谱特征(即: 四个特征离子相对强度大小顺序)进行验证<sup>[8-9]</sup>。

本文利用该技术对牡丹籽油中脂肪酸进行定性分析。首先, 利用质谱特征基峰( $m/z$  74)确定牡丹籽油中的直链饱和脂肪酸。然后利用直链饱和脂肪酸的保留时间计算不饱和脂肪酸和支链饱和脂肪酸的保留指数(等效链长, ECL), 进而与脂肪酸甲酯色谱质谱信息数据(Chrombox)和文献<sup>[12]</sup>中标准品等效链长数据进行比较, 确定不饱和脂肪酸或支链饱和脂肪酸的结构。

由于多不饱和脂肪酸(尤其是碳原子数大于 20)在食用油中的含量较低, 获得的质谱中往往包含很多噪声和杂质峰, 而且多不饱和脂肪酸甲酯的质谱中分子离子峰很少出现, 因此无论是通过人工的质谱解析还是相似度匹配都很难准确的确定多不饱和脂肪酸的双键个数, 位置和顺反式, 只能利用知识背

景和分析检测经验积累建立专业脂肪酸甲酯质谱和等效链长数据库, 然后利用等效链长确定多不饱和脂肪酸的双键个数、位置和顺反式。特定条件下脂肪酸甲酯色谱质谱数据库<sup>[12]</sup>和 Chrombox 数据库正是在这种背景下建立的专业数据库。

牡丹籽油中脂肪酸甲酯的 GC-MS 总离子流图如图 2 所示。首先利用质谱特征(基峰为 74)识别出 10

表 1 牡丹籽油脂肪酸组成

Table 1 Fatty acid composition in peony seed oil

序号	脂肪酸 <sup>a</sup>	保留时间 (min)	等效链长 (计算)	等效链长 (数据库) <sup>b</sup>
1	10:0	4.020	10.00	10.00
2	12:0	5.692	12.00	12.00
3	14:0	7.421	14.00	14.00
4	15:0	8.260	15.00	15.00
5	16:0	9.077	16.00	16.00
6	16:1 n-9c	9.245	16.22	16.22
7	16:1 n-7c	9.311	16.30	16.33
8	16:1 n-5c	9.410	16.43	<b>16.38<sup>d</sup></b>
9	16:2 n-6c	9.612	16.69	<b>16.79<sup>d</sup></b>
10	17:0	9.852	17.00	17.00
11	17:1 n-7c	10.060	17.27	17.34
12	17:2	10.475	17.82	-
13	18:0	10.610	18.00	18.00
14	18:1 n-9c	10.805	18.28	18.27
15	18:1 n-7c	10.845	18.33	18.36
16	18:1 n-x	11.084	18.67	-
17	18:2 n-6c	11.170	18.80	18.76
18	18:2	11.230	18.88	-
19	18:3 n-6c	11.442	19.18	19.09
20	19:1 n-8c	11.499	19.26	<b>19.22</b>
21	18:3 n-3c	11.621	19.44	19.44
22	20:0	12.017	20.00	20.00
23	20:1 n-9c	12.216	20.25	20.28
24	20:2 n-6	12.632	20.77	20.84
25	22:0	13.607	22.00	22.00
26	22:1 n-9c	13.879	22.32	22.30
27	24:0	15.602	15.60	15.602

<sup>a</sup> 缩写包括分子酸或醇部分中碳原子数目, 不饱和度, 双键的位置, 双键的顺反异构情况(c 表示顺式)

<sup>b</sup> 利用文献 8 等效链长数据定性

x 羧基最远端双键的位置, 从羧基最远端碳原子计算

<sup>d</sup> 利用 Chrombox 数据库中等效链长定性

<sup>e</sup>: 利用质谱特征推断结构

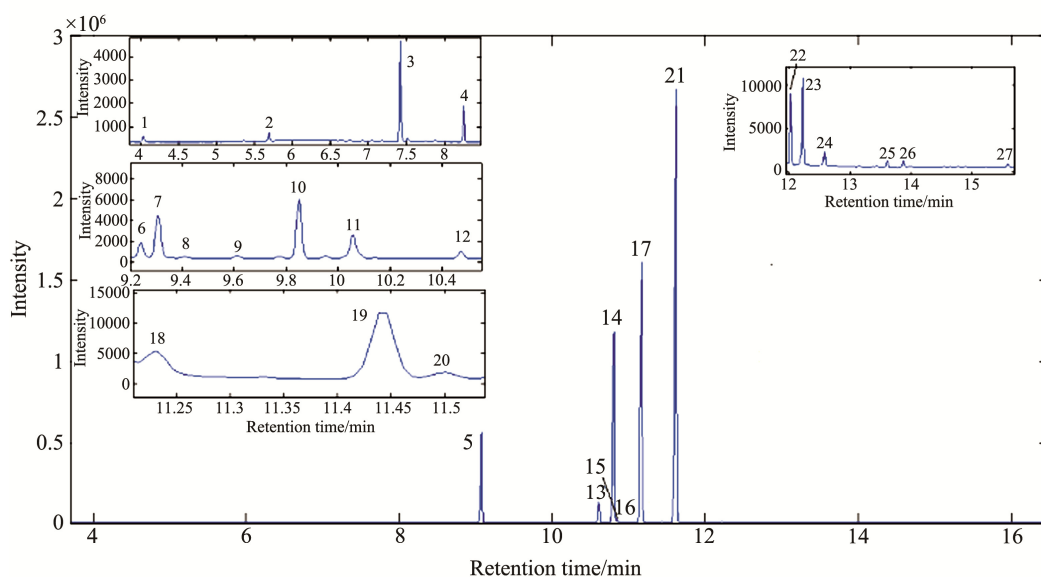


图 2 牡丹籽油样中脂肪酸甲酯的 GC-MS 总离子流图

Fig. 2 GC-MS total ion current chromatograms of FAMES in peony seed oil

个直链饱和脂肪酸甲酯, 然后利用 10 个直链饱和脂肪酸的时间计算其他脂肪酸甲酯的等效链长, 与文献[12]数据库与 Chrombox 数据库<sup>[14]</sup>进行比照, 等效链长数值最相近的被认定为目标化合物, 对牡丹籽油中脂肪酸进行了定性分析。由数据库可知, 不饱和脂肪酸甲酯顺反异构体的等效链长之间的差异大于 0.1, 为了更好地地区分顺反异构体, 将等效链长的阈值设置为 0.1, 最终确定了牡丹籽油中 27 种脂肪酸, 定性结果如表 1 所示。通过标准品的质谱结合等效链长的验证(同等条件下标准品等效链长数据详见文献<sup>[12]</sup>), 利用标准品的质谱特征和保留时间验证, 证明了本方法的可靠性。

#### 4 结论

本文使用气相色谱质谱联用仪通过选择离子 ( $m/z$  55, 67, 74, 79)扫描检测牡丹籽油中脂肪酸, 采用质谱特征、等效链长结合数据库搜索方法对牡丹籽油的脂肪酸进行了定性分析, 结果鉴定出牡丹籽油中脂肪酸 27 个, 明显多于现有报道的 17 个<sup>[16]</sup>。该方法操作简单, 分离效果好, 结果稳定可靠, 无需使用标准品, 且能消除气相色谱保留时间变化对定性的影响, 为全面认识牡丹籽油组成和建立牡丹籽油掺伪鉴别方法鉴定了基础。

致谢 感谢挪威王国卑尔根大学化学斯韦恩(Svein M.A.)博士和中南大学梁逸曾教授在本文完成过程中的建议和讨论。

#### 参考文献

- [1] 魏丽芳, 李培武, 谢立华, 等. 食用油中反式脂肪酸研究进展[J]. 食品工业科技, 2008, 29(2): 294-298.  
Wei LF, Li PW, Xie LH, *et al.* Research progress of trans fatty acids in edible oils and fats[J]. *Sci Tech Food Ind*, 2008, 29(2): 294-298.
- [2] 李培武, 谢立华, 魏丽芳, 等. 反式脂肪酸检测方法研究与进展[J]. 中国油料作物学报. 2009, 31(3): 374-379.  
Li PW, Xie LH, Wei LF, *et al.* Study and application of the method for trans fatty acids determination[J]. *Chin J Oil Crop Sci*, 2009, 31(3): 374-379.
- [3] 魏永生, 郑敏燕, 耿薇, 等. 常用动植物食用油中脂肪酸组成的分析[J]. 食品科学. 2012, 33(16): 188-193.  
Wei YS, Zheng MY, Geng W, *et al.* Fatty Acid Composition Analysis of Common Animal Fats and Vegetable Oils[J]. *Chin J Food Sci*, 2012, 33(16): 188-193.
- [4] 董振兴, 彭代银, 宣自华, 等. 牡丹籽油降血脂、降血糖作用的实验研究[J]. 安徽医药, 2013, 17(8): 1286-1288.  
Dong ZX, Peng DY, Xuan ZH, *et al.* Experimental study on hypolipidemic and hypoglycemic effects of peony seed oil[J]. *Anhui Med Pharm J*, 2013, 17(8): 1286-1288.
- [5] 朱献标, 翟文婷, 董秀勋, 等. 牡丹籽油化学成分及功能研究进展[J]. 中国油脂, 2014, 39(1): 88-91.

- Zhu XB, Zhai WT, Dong XX, *et al.* Progress on chemical composition and function of peony seed oil [J]. *China Oils and Fats*, 2014, 39(1): 88–91.
- [6] 韩雪源, 张延龙, 牛立新, 等. 不同产地‘凤丹’牡丹籽油主要脂肪酸成分分析[J]. *食品科学*, 2014, (5): 1–6.  
Han XY, Zhang YL, Niu LX, *et al.* Fatty acid composition of ‘Feng Dan’ peony seed oils from different regions[J]. *Food Sci*, 2014, (5): 1–6.
- [7] 高婷婷, 王亚芸, 任建武. GC-MS 法分析牡丹籽油的成分及其防晒效果的评定[J]. *食品科技*, 2013, 38(6): 296–299.  
Gao TT, Wang YY, Ren JW. Analysis of the composition in peony seed oil by GC/MS and evaluation in the sunscreen effect[J]. *Food Sci Tech*, 2013, 38(6): 296–299.
- [8] Zhang LX, Li PW, Sun XM, *et al.* Untargeted fatty acid profiles based on the selected ion monitoring mode [J]. *Anal Chim Acta*, 2014, 839: 44–50.
- [9] 梁楠楠, 张良晓, 王向利, 等. 质谱特征结合等效链长定性分析植物油中的脂肪酸[J]. *分析化学*, 2011, 39(8): 1166–1170.  
Liang NN, Zhang LX, Wang XL, *et al.* Identification of Fatty Acids in Vegetable Oils by Mass Spectrometry and Equivalent Chain Length [J]. *Chin J Anal Chem*, 2011, 39(8): 1166–1170.
- [10] Zhang LX, Tang CL, Cao DS, *et al.* Strategies for structure elucidation of small molecules using gas chromatography-mass spectrometric data[J]. *TrAC-Trend Anal Chem*, 2013, 47: 37–46.
- [11] Zhang LX, Ji XY, Tan BB, *et al.* Discovery of mass spectral characteristics and automatic identification of wax esters from GC/MS data[J]. *Food Chem*, 2010, 121: 815–819.
- [12] Zhang LX, Tan BB, Zeng MM, *et al.* Establishment of reliable mass spectra and retention indices library: identification of fatty acids in human plasma without authentic standards [J]. *Talanta*, 2012, 88: 311–317.
- [13] Zhang LX, Mjøs SA, Meier S, *et al.* Detection and use of selective ions for providing initial estimates of the concentration vector in iterative target transformation factor analysis [J]. *J Chromatogr A*, 2010, 1217: 5986–5994.
- [14] Wasta Z, Mjøs SA. A database of chromatographic properties and mass spectra of fatty acid methyl esters from omega-3 products [J]. *J Chromatogr A*, 2013, 1299: 94–102.
- [15] The AOCS Lipid Library: <http://lipidlibrary.aocs.org/ms/masspec.html>, 2014.
- [16] 周海梅, 马锦琦, 苗春雨, 等. 牡丹籽油的理化指标与脂肪酸成分分析[J]. *中国油脂*, 2009, 34(7): 72–74.  
Zhou HM, Ma JQ, Miao CY, *et al.* Physicochemical indexes and fatty acid composition of peony seed oil [J]. *China Oil and Fat*, 2009, 34(7): 72–74.

(责任编辑: 赵静)

### 作者简介



孙晓曼, 硕士, 研究员, 主要研究方向为食品分析与检验。

E-mail: sunxiaoman2007@163.com



张良晓, 博士, 副研究员, 硕士生导师, 主要研究方向为食品质量与安全、代谢组学、化学计量学。

E-mail: liangxiao\_zhang@hotmail.com



李培武, 博士, 研究员, 博士生导师, 主要研究方向为食品、农产品质量与食品安全标准与检测技术研究。

E-mail: peiwuli@oilcrops.cn