

代谢组学在食品安全风险监测与评估中的应用

胡传芹*, 曹学丽

(北京工商大学食品学院, 北京工商大学食品添加剂与配料北京高校工程研究中心,
食品质量与安全北京实验室, 北京 100048)

摘要: 近年来, 食品安全问题成为各国关注的焦点问题。食品安全风险监测工作正面临巨大的挑战。代谢组学技术作为一个新兴的重要研究技术, 在食品质量与安全、临床诊断和环境科学等领域广泛应用, 食品及其危害物残留对机体的影响等食品安全问题可用代谢组学的技术进行全面分析。随着仪器手段的创新以及化学计量学的发展, 代谢组学将与基因组学、蛋白质组学和转录组学的数据库相互衔接, 推动系统生物学的发展, 为食品质量与安全研究提供一个高通量、高灵敏度、高准确性平台。本文主要介绍代谢组学的研究方法及其在食品安全风险监测与评估方面的应用, 以推动我国在快速检测检验方面的技术进步和突破, 从而达到保障食品安全的目的。

关键词: 代谢组学; 食品安全; 风险监测与评估

Application of metabolomics method in food safety risk monitoring and assessment

HU Chuan-Qin*, CAO Xue-Li

(Beijing Laboratory of Food Quality and Safety, Beijing Higher Institution Engineering Research Center of Food Additives and Ingredients, College of Food and Chemical Engineering, Beijing Technology and Business University, Beijing 100048, China)

ABSTRACT: Food safety has become the focus of many countries in recent years. Food safety risk monitoring is facing huge challenges. Metabolomics is an emerged important research tool besides genomics and proteomics. Recently, metabolomics has been widely used in many fields, including food quality and safety, clinical diagnosis, and environmental science. Moreover, it can be used to analyze the influence of food and its hazard residues on organism. With the development of instruments and stoichiometry, metabolomics will combine with database of genomics and proteomics to promote the growth of system biology for providing a platform with high throughput, sensitivity and precision. The paper summarized metabolomics methods and its potential applications in food safety risk monitoring and assessment in order to improve the development of rapid detection technology in China and ensure food safety.

KEY WORDS: metabolomics; food safety; risk monitoring and assessment

基金项目:北京市自然科学基金重点项目 B 类(KZ201410011016)、北京工商大学 2013 年度青年基金项目(QNJJ20123-26)

Fund: Supported by Key Project B of Beijing Natural Science Foundation (KZ201410011016), Youth Fund Project of the Natural Science Foundation of Beijing Technology and Business University (QNJJ20123-26)

*通讯作者: 胡传芹, 讲师, 主要研究方向为食品质量与安全。E-mail: huchuanqin@btbu.edu.cn

*Corresponding author: HU Chuan-Qin, Lecturer, Beijing Technology and Business University, Beijing 100048, China. E-mail: huchuanqin@btbu.edu.cn

1 引言

食物是人的第一需求。在很大程度上,个人的健康会取决于所吃的食物。可以说,食物是生命的物质基础,为人类提供营养物质和能量。根据世界卫生组织(WHO)的定义,食品安全(food safety)是指食品无毒、无害,符合应当有的营养要求,对人体健康不造成任何急性、亚急性或者慢性危害^[1]。近年来,食品安全已成为全球性重要问题。危及人类健康、生命安全的重大食品安全事件不断发生。如德国的二噁英事件、美国的鸡蛋沙门氏菌事件以及我国的苏丹红、三聚氰胺事件等^[2]。

食品安全风险监测工作正面临巨大的挑战。在常规的食品分析中,常规色谱仪、质谱仪和其他一些仪器设备对已知目标化合物进行检测可以起到很好的检测效果,但是由于不法商贩制作假冒伪劣食品时所使用的原料都是国家明文规定禁止在食品中使用的化学品,常规的检测方法往往很难检测出上述问题食品^[3]。从分析生物科学的角度,代谢组学(metabolomics 或 metabonomics)可以作为宝贵工具,解决世界食品科学中的问题,以打造个性化健康、提供重要信息、链接食品与人体的健康。

代谢组学是继基因组学、转录组学和蛋白质组学之后兴起的系统生物学的一个新的分支,为当前研究的热点之一^[4]。代谢组学研究的目标比转录组学和蛋白质组学更丰富,代谢产物影响表型最直接。而且,最重要的是,代谢组学得益于丰富的生化知识。有了这些优势,代谢组学可以建立链接到生物科学的各个方面,当然也包括食品科学。食品中的代谢组学是利用先进的组学技术研究食品和营养问题,从而提高消费者的健康和幸福感。自诞生以来,由于食品在人类营养和健康中的重要性而使其成为生物学领域前沿的一个焦点。

代谢组学主要的技术手段有核磁共振法(NMR)^[5-8]、液相色谱-串联质谱法(LC-QTOFMS/MS)^[9-15]和气相色谱-质谱法(GC-MS/MS)^[16-20]。通过分析获得的代谢指纹谱,转换为多维复杂数据,利用生物统计学领域的新方法对其进行降维和信息挖掘。最终获得生物标记物,并结合目前相对成熟的代谢组学相关数据库^[21],完成其功能分析和确认。

食品安全和质量是一个永恒的话题。近年来,有文献报道利用代谢组学技术对食品质量与安全领域中的问题进行研究^[22-24]。本文针对代谢组学技术在食品质量与安全领域中的应用进行综述,为进一步应用代谢组学开展食品安全风险监测与评估提供一定的参考。

2 代谢组学的研究步骤

在质谱(MS)的代谢组学研究中,大致顺序是取样、制样、仪器分析、数据分析、潜在的生物标志物和生物学解

释。在所有的程序中,仪器分析是必不可少的,因为它直接影响代谢组学数据的质量。

2.1 代谢组学的研究程序

代谢组学的研究程序为:取样与样品处理→分析样品→代谢物组的数据测定→数据分析→代谢途径分析及其生物学阐述等。

2.2 取样与保存

生物样品的采集与保存是影响代谢组学重现性的重要步骤。研究表明,样品采集的一致性和及时冷冻保存可减小分析误差,保证数据的准确性^[25,26]。由于样品结构的复杂性和代谢产物多样性,在生物系统中没有任何偏差地检测所有代谢物几乎是不可能的。然而,基于MS的代谢组学方法可以涵盖尽可能多组分的代谢产物或某个特定组的许多代谢物的每个方面。首先,采样不能对潜在的代谢产物产生偏差。植物生理学家研究表明,采样时间(如昼夜效应)可以极大地影响植物样品中代谢物组成^[27]。若生物样品中酶活性很强,可非常容易、迅速地引发酶催化反应,导致分析样品中代谢物的变化。由于温和的温度和水是酶促反应的两个要素,抑制代谢反应的一种方法是由液态氮冷冻样品或在取样后立即-40℃以下储存样品,防止酶被激活。值得注意的是,在样品制备前必须避免冷冻样品局部的解冻。防止酶激活的另一种方法是将样品完全冻干,没有水,酶就不能工作。总之,取样的时间和方法是非常重要的,因为它们会极大地影响分析样品的质量^[28]。

2.3 样品的提取

代谢组学实验中,样品提供了代谢物的概况。代谢的复杂性决定了目标生物样品中代谢物的提取不会彻底。以非目标性的代谢组学方法为例,样品的提取通常是以非选择性的方法尽可能地提取最多的代谢物。对固体样品(例如,谷物、豆类、大米和水果内核),提取前需要对其均匀化。因此,样本在液氮环境下用研钵和研棒磨成粉末或采用预冷粉球磨机。当使用液体生物样品时(例如,果汁、牛奶、酒和油),样品制备可以直接进行。在非目标性的代谢组学实验中,为了得到更多的代谢物,需要对溶剂和提取方法进行优化。在大部分情况下,不同配比的甲醇-氯仿-水在食品中使用最多,因为它对极性和非极性化合物有强大的提取能力。当采用质谱技术分析检测样品时,在进行样品前处理过程中,在去除蛋白质的同时,不可避免地带来代谢物的流失,因此,需要对前处理方案进行优化以尽可能克服基质效应,同时获取更多靶标代谢物或代谢组的信息^[29,30]。

2.4 分析检测

样品处理完成后,一般采用色谱-质谱联用(LC-MS, GC-MS等),核磁共振(NMR)等分析技术对样品进行分析。

现有的分析检测技术平台有高效液相色谱(HPLC)、超高效液相色谱(UPLC)、气相色谱(GC)、毛细管电泳(CE)等分离方法以及紫外(UV)、质谱(MS)、核磁共振(NMR)和近红外光谱(NIR)等检测方法。目前,代谢组学的数据采集主要采用质谱(MS)和核磁共振谱(NMR)为核心的分析技术^[31]。由于代谢物的化学复杂性和浓度差异,单一的技术并不足以进行分析。通常情况下采用多种分析技术联用,在食品的代谢组学中最常用的分析技术是MS和NMR。由于结构特异性强和灵敏度高和分辨率高的优点,MS是首选。ESI和MALDI是蛋白质组学和代谢组学研究中最常用的质谱技术。

2.5 数据处理及分析

原始数据经预处理后生成二维数据阵,以峰面积作为变量,利用化学计量学和多元统计分析方法挖掘在不同组间整体强度存在显著差异的变量。分离的化学物质通过色谱数据库检索并和标准品的保留时间进行对比来定性鉴别。代谢组学的大量数据结果需要利用统计学软件来分析,其中包括SIMCA、MZmine、MET-IDEA等,这些软件可以在线免费使用。Hiller等^[32]设计了一个MetaboliteDetector的免费软件,专门用来处理气质色谱数据分析。另外,许多仪器公司为客户提供他们自己的软件(如Agilent的MassHunter和MassProfiler, Waters的MarkerLynx等)。数据处理在代谢组学研究中至关重要,因为如果处理数据不合适,会极大地影响整个方法,导致偏差或出现错误的结果。

2.6 可能生物标志物的发现和确认

代谢组学的最后步骤是利用相关分析,代谢途径分析或代谢网络的数学建模等方法将得到的代谢信息从生物学角度进行解释。经过LC-MS、GC-MS谱数据的采集、数据预处理及统计分析后,发现与病理及生理变化相关的可能生物标志物,对其需要进行结构鉴定。一些已知代谢物具有明确、详细的特征或结构信息,可通过KEGG、HMDB和METLIN数据库检索到候选的分子式及MS/MS谱数据。NMR技术应用于代谢组学研究中,经常使用一维¹H-NMR波谱法鉴定代谢物结构^[33,34]。将代谢物放入代谢组学数据库,完成其功能分析和确认,进一步寻找潜在的生物标记物与关键的代谢通路,从而可作为指示物为相关食品安全预警监督提供一个预知平台^[35]。

3 代谢组学在食品安全风险监测与评估中的应用

3.1 代谢组学在转基因食品中应用

代谢组学研究已应用到转基因食品的质量与安全,如谷物^[36]、果汁^[37]、啤酒^[38]等。Catchpole等^[39]用FTIR和NMR对转基因马铃薯和非转基因马铃薯做比较分析,

结果显示两者之间并无显著差别。Catchpole等^[39]对处理后的转基因土豆进行质谱检测,得到其代谢物的指纹图,GC-MS和LC-MS的结果和数据分析表明引入基因后会产生某些新的代谢物,而它本身的有毒物质glycoalkaloid在转基因前后并未发生变化。研究表明,代谢组学技术可以快速而简便地评估转基因食品与非转基因食品之间的代谢差异,从而检测是否对人类健康造成影响。

3.2 在检测食品掺假中的应用

为降低成本,一些食品制造商减少主料,以次充好,严重危害消费者利益。常规的食品分析检测只检测目标化合物,往往不能检出这些掺假食品。代谢组学技术侧重于食品所有成分组成的整体定性定量分析,因此,可以对掺假食品进行科学的分析鉴别^[40,41]。在乳品工业中,廉价牛奶与高价牛奶掺假事件频繁发生。MALDI-MS为基础的研究方法速度快,灵敏度高,易于自动化。Nicolaou等^[42,43]利用MALDI-MS与多元统计分析方法相结合检测和定量特异性标记物(如蛋白质中的氨基酸序列)来评价牛奶掺假或变质,具有一定的实际应用价值。Vardin等^[44]在FTIR光谱信息的基础上开发出一种快速敏感、高通量且重现性好的分析手段,用于检测果汁真伪。代谢组学技术极大地保证了高品质和安全性,促进人类健康和减少疾病发生风险的食品的生产。

3.3 在食品或食品包装材料有害物质中的应用

代谢组学方法可以在食品质量与安全监测中实现最大价值。例如,UPLC-MS/MS方法已经被应用于奶粉中喹诺酮类和氟喹诺酮类药物的快速检测(不到10 min),牛奶中抗生素残留检测^[45]。该方法已成功应用于分析16种西班牙市场上的不同类型、产地和组成的婴幼儿奶粉样品。幸运的是,牛奶样品中没有检测到目标抗生素残留。这一方法可用于定期监测市场上奶粉中抗生素残留。另外,全氟化合物经常被用做食品包装材料或不粘锅涂层,但其对人们的身体健康是否有害,还没有明确的结论。唐惠儒等^[46]利用代谢组学和转录组学对全氟十二烷酸进行研究,表明全氟十二烷酸具有慢性毒性,可作用于过氧化物酶增殖体激活受体,可能会导致能量代谢和氨基酸代谢紊乱,因而造成肝脏的脂肪变性。

3.4 在指导合理的膳食结构方面的应用

现代社会中,生活方式相关的危险因素(如过量摄入高脂高糖食物)是人类发病和死亡的主要原因。肥胖,糖尿病和心血管病等,都与不良的饮食习惯导致营养过剩密切相关。探索饮食成分对人类营养和健康的影响,利用代谢组学技术对动物模型进行短期或长期饮食暴露,对人进行营养干预。Hall等^[47]研究了117名绝经妇女食用含有丰富

大豆异黄酮食物后血浆中脂和糖的代谢变化,结果表明大豆异黄酮对血脂、血糖或其他绝经妇女心血管疾病的风险相关的代谢标志物没有明显的改善作用,但可能会引起高密度脂蛋白胆固醇的升高。Wang等^[48]应用NMR研究了饮用菊花茶后人的代谢轮廓,结果发现,代谢效应可以延续到停止服用后两周。在营养和健康方面,代谢组学可以定义有益的食物成分,发现健康的生物标记物,发现疾病的早期征兆等。

4 结论

总之,代谢组学是组学领域的一个新兴科学,自诞生以来,因为食品在人类营养和健康中的重要性而成为生物学领域前沿的一个焦点,为食品质量与安全研究提供了新的思路和方法。随着代谢组学的进一步发展,建立大规模的标准化代谢组学数据库,这些数据库应该与基因组、蛋白质组、转录组的数据库相互衔接,形成系统生物学数据链。它将为食品质量与安全研究提供一个高通量、高灵敏度、高准确性平台。在我国,利用代谢组学技术开展的食品质量与安全领域的研究起步比较晚,相关参考文献比较少,因此,还有待进一步努力。开展相关研究对于监控检测食品掺假、确保食品质量与安全、指导合理的膳食结构、预防和减少食源性疾病的发生、保障人民群众健康等都具有重要的现实意义。

参考文献

- [1] 陈孝武. 液相色谱-质谱联用技术在食品安全分析中的应用[D]. 郑州: 郑州大学, 2011.
Chen XW. The application of LC-MS used in of food safety analysis [D]. Zhengzhou: Zhengzhou University, 2011.
- [2] 王凤池. 液质联用技术在食品安全检测中的应用研究[D]. 保定: 河北大学, 2008.
Wang FC. Application research of online HPLC-MS technology for food safety analysis [D]. Baoding: Hebei University, 2008.
- [3] 刘思洁, 吴永宁, 方亦光. 代谢组学技术在食品安全中的应用[J]. 食品安全质量检测学报, 2014, 5(4): 1081-1086.
Liu SJ, Wu YN, Fang CG. Review on the application of metabonomics approach in food safety [J]. J Food Saf Qual, 2014, 5(4): 1081-1086.
- [4] Nicholson JK, Connelly J, Lindon JC, et al. Metabonomics: a platform for studying drug toxicity and gene function [J]. Nat Rev Drug Discov, 2002, 1(2): 153-161.
- [5] Lee JE, Lee BJ, Chung JO, et al. Metabolomic unveiling of a diverse range of green tea(*Camellia sinensis*)metabolites dependent on geography [J]. Food Chem, 2015, 174: 452-459.
- [6] Alvaro MV, Zhao JP, Maxleene S, et al. Phytochemical distinction between *Pelargonium sidoides* ("Umckaloabo") and *P. reniforme* through 1H-NMR and UHPLC-MS metabolomic profiling [J]. Metabol, 2015, 11(3): 594-602.
- [7] Harrigan GG, Skogerson K, Maclsaac S, et al. Application of 1HNMR Profiling to assess seed metabolomic diversity. A case study on a soybean era population [J]. J Agric Food Chem, 2015, 63: 4690-4697.
- [8] Li AP, Li ZY, Sun HF, et al. Comparison of two different astragali radix by a HNMR-based metabolomic approach [J]. J Proteome Res, 2015, 14(5): 2005-2016.
- [9] Li K, Wang X, Pidatala VR, et al. Novel quantitative metabolomic approach for the study of stress responses of plant root metabolism [J]. J Proteome Res, 2014, 13(12): 5879-5887.
- [10] Xu J, Hu FL, Wang W, et al. Investigation on biochemical compositional changes during the microbial fermentation process of Fu brick tea by LC-MS based metabolomics [J]. Food Chem, 2015, 186(1): 176-184.
- [11] Struck LW, Kordalewska M, Bukjak R. Urine metabolic fingerprinting using LC-MS and GC-MS reveals metabolite changes in prostate cancer: A pilot study [J]. J Pharm Biomed, 2015, 111: 351-361.
- [12] Klepacki J, Klawitter J, Klawitter J. A high-performance liquid chromatography-tandem mass spectrometry-based targeted metabolomics kidney dysfunction marker panel in human urine [J]. Clin Chim Acta, 2015, 446: 43-53.
- [13] Rofiee MS, Yusof MIM, Hisam EE, et al. Isolating the metabolic pathways involved in the hepatoprotective effect of *Muntingia calabura* against CCl4-induced liver injury using LC/MS Q-TOF [J]. J Ethnopharmacol, 2015, 166: 109-118.
- [14] Pieragostino D, D'Alessandro M, Diloia M, et al. An integrated metabolomics approach for the research of new cerebrospinal fluid biomarkers of multiple sclerosis [J]. Mol Biosyst, 2015, 11(6): 1563-1572.
- [15] Dong F, Deng D, Chen H, et al. Serum metabolomics study of polycystic ovary syndrome based on UPLC-QTOF-MS coupled with a pattern recognition approach [J]. Anal Bioanal Chem, 2015, 407(16): 4683-4695.
- [16] Hu CQ, Lin SH, Cai ZW. Fatty acid profiles reveal toxic responses in adipose tissue of C57BL/6J mice exposed to 2,3,7,8-tetrachlorodibenzo-p-dioxin [J]. Anal Method, 2014, 6: 8207-8211.
- [17] Yi LZ, Dong NP, Liu S, et al. Chemical features of pericarpium citri reticulatae and pericarpium citri reticulatae viride revealed by GC-MS metabolomics analysis [J]. Food Chem, 2015, 186: 192-199.
- [18] Warth B, Parich A, Bueschl C, et al. GC-MS based targeted metabolic profiling identifies changes in the wheat metabolome following deoxynivalenol treatment [J]. Metabolomics, 2015, 11(3): 722-738.
- [19] Mahdavi V, Farimani MM, Fathi F, et al. A targeted metabolomics approach toward understanding metabolic variations in rice under pesticide stress [J]. Anal Biochem, 2015, 478: 65-72.
- [20] Li PL, Sun HG, Hua YL, et al. Metabolomics study of hematopoietic function of *Angelica sinensis* on blood deficiency mice model [J]. J Ethnopharmacol, 2015, 166: 261-269.
- [21] Wishart DS, Tzur D, Knox C, et al. HMDB: the human metabolome database [J]. Nucleic Acids Res, 2007, 35: 521-526.
- [22] Zeng W, Hazebroek J, Beatty M, et al. Analytical method evaluation and discovery of variation within maize varieties in the context of food safety: transcript profiling and metabolomics [J]. J Agric Food Chem, 2014, 62(13): 2997-3009.
- [23] Watanabe M, Ohta Y, Licang S, et al. Profiling contents of water-soluble metabolites and mineral nutrients to evaluate the effects of pesticides and organic and chemical fertilizers on tomato fruit quality [J]. Food Chem, 2015, 169(15): 387-395.

- [24] Rizzuti A, Aguilera-Sáez LM, Gallo V, *et al.* On the use of *Ethephon* as abscising agent in cv. crimson seedless table grape production: combination of fruit detachment force, fruit drop and metabolomics [J]. *Food Chem*, 2015, 171: 341–350.
- [25] Zivkovic A, Wiest M, Nguyen U, *et al.* Effects of sample handling and storage on quantitative lipid analysis in human serum [J]. *Metabolomics*, 2009, 5: 507–516.
- [26] Wuolikainen A, Hedenstrom M, Moritz T, *et al.* Optimization of procedures for collecting and storing of CSF for studying the metabolome in ALS [J]. *Amyotrophic Lateral Scler*, 2009, 10: 229–236.
- [27] Spyros A, Dais P. Application of $(31)P$ NMR spectroscopy in food analysis. 1. quantitative determination of the mono- and diglyceride composition of olive oils [J]. *J Agric Food Chem*, 2000, 48: 802–805.
- [28] Hu CX, Xu GW. Mass-spectrometry-based metabolomics analysis for foodomics [J]. *Trend Anal Chem*, 2013, 52: 36–46.
- [29] Rabinowitz, JD, Kimball E. Acidic acetonitrile for cellular metabolome extraction from *Escherichia coli* [J]. *Anal Chem*, 2007, 79: 6167–6173.
- [30] Lu W, Bennett BD, Rabinowitz JD. Advantages of tandem LC-MS for the rapid assessment of tissue-specific metabolic complexity using a pentafluorophenylpropyl stationary phase [J]. *J Chromatogr B*, 2008, 871: 236–242.
- [31] 邱绪建, 耿伟, 刘光明, 等. 代谢组学方法在食品安全中的应用研究进展[J]. *食品工业科技*, 2012, 33(21): 369–373.
Qiu XJ, Geng W, Liu GM, *et al.* A review on the application of metabolomics method in food safety [J]. *Sci Technol Food Ind*, 2012, 33(21): 369–373.
- [32] Hiller K, Hangebrauk J, Jager C, *et al.* Metabolite detector: comprehensive analysis tool for targeted and nontargeted GC/MSbased metabolome analysis [J]. *Anal Chem*, 2009, 81(9): 3429–3439.
- [33] Chen YH, Zhang RP, Song YM, *et al.* RRLC-MS/MS-based metabolomics combined with in-depth analysis of metabolic correlation network: finding potential biomarkers for breast cancer [J]. *Analyst*, 2009, 134(10): 2003–2011.
- [34] SunY, Lian Z, Jiang C, *et al.* Beneficial metabolic effects of 2'-3',5'-tri-acetyl-N⁶-(3-Hydroxylaniline) adenosine in the liver and plasma of hyperlipidemic hamsters [J]. *PLoS One*, 2012, 7(3): e32115.
- [35] Beger RD, Sun J, Schnackenberg LK. Metabolomics approaches for discovering biomarkers of drug-induced hepatotoxicity and nephrotoxicity [J]. *Toxicol Appl Pharm*, 2010, 243 (2): 154–166.
- [36] Takino M, Daishima S, Nakahara T, *et al.* Liquid chromatography/mass spectrometric determination of patulin in apple juice using atmospheric pressure photoionization [J]. *Rapid Commun Mass Sp*, 2003, 17: 1965–1972.
- [37] Socaci SA, Socaciu C, Tofana M, *et al.* In-tube extraction and GC-MS analysis of volatile components from wild and cultivated seabuckthorn (*Hippophae rhamnoides* L. ssp. *Carpatica*) berry varieties and juice [J]. *Phytochem Anal*, 2013, 24: 319–328.
- [38] Inui T, Tsuchiya F, Ishimaru M, *et al.* Different beers with different hops, relevant compounds for their aroma characteristics [J]. *J Agric Food Chem*, 2013, 61: 4758–4764.
- [39] Catchpole GS, Beckmann M, Enot DP, *et al.* Hierarchical metabolomics demonstrates substantial compositional similarity between genetically modified and conventional potato crops[J]. *Proceedings of the National Academy of Sciences*, 2005, 102(40):14458-14462.
- [40] Calvano CD, De CC, Monopoli A, *et al.* Detection of sheep and goat milk adulterations by direct MALDI-TOF MS analysis of milk tryptic digests [J]. *J Mass Spectr*, 2012, 47: 1141–1149.
- [41] Cozzolino R, Passalacqua S, Salemi S, *et al.* Identification of adulteration in milk by matrix-assisted laser desorption/ionization time-of-flight mass spectrometry [J]. *J Mass Spectr*, 2001, 36: 1031–1037.
- [42] Nicolaou N, Xu Y, Goodacre R. MALDI-MS and multivariate analysis for the detection and quantification of different milk species [J]. *Anal Bioanal Chem*, 2011, 399: 3491–3502.
- [43] Nicolaou N, Xu Y, Goodacre R. Detection and quantification of bacterial spoilage in milk and pork meat using MALDI-TOF-MS and multivariate analysis [J]. *Anal Chem*, 2012, 84: 5951–5958.
- [44] Vardin H, Tay A, Ozen B, *et al.* Authentication of pomegranate juice concentrate using FTIR spectroscopy and chemometrics [J]. *Food Chem*, 2008, 108(2): 742–748.
- [45] Herrera AV, Hernandez BJ, Rodriguez MA, *et al.* Determination of quinolone residues in infant and young children powdered milk combining solid-phase extraction and ultraperformance liquid chromatography-tandem mass spectrometry [J]. *J Chromatogr A*, 2011, 1218: 7608–7614.
- [46] Ding L, Hao F, Tang HR, *et al.* Systems biological responses to chronic perfluorodecanoic acid exposure by integrated metabolomic and transcriptomic studies [J]. *J Proteome Res*, 2009, 8: 2882–2891.
- [47] Hall WL, Vafeiadou K, Hallund J, *et al.* Soyisoflavone-enriched foods and markers of lipid and glucose metabolism in postmenopausal women: interactions with genotype and equol production [J]. *Am J Clin Nutr*, 2006, 83: 592–600.
- [48] Wang Y, Tang H, Nicholson JK, *et al.* A metabolomic strategy for the detection of the metabolic effects of chamomile (*Matricaria recutita* L.) ingestion [J]. *J Agric Food Chem*, 2005, 53 (2):191-196.

(责任编辑: 李振飞)

作者简介



胡传芹, 讲师, 博士, 主要研究方向为食品质量与安全。
E-mail: huchuanqin@btbu.edu.cn