

TB

团体标准

T/ NAIA XXX—XXXX

食用植物油鉴定 红外光谱法

edible vegetable oil identification — Infrared
spectrometric method

XXXX-XX-XX 发布

XXXX-XX-XX 实施

宁夏化学分析测试协会 发布

前言

本标准按照 GB/T 1.1-2020 《标准化工作导则 第 1 部分：标准化文件的结构和起草规则》的规定编写。

本标准由宁夏化学分析测试协会提出并归口。

本标准起草单位：宁夏粮油检测中心、宁夏化学分析测试协会。

本标准主要起草人：

食用植物油鉴定 红外光谱法

1 范围

本文件规定了使用红外光谱法对食用植物油进行鉴定的方法。

典型的红外光谱图见附录。

本方法应由有试验经验人员进行样品的前处理和红外光谱分析。为获得更好的结果，按照产品说明书操作光谱仪。本文件不包括红外光谱仪的详细操作说明。

本方法适用于定性分析。

2 规范性引用文件

下列文件对于本文件的应用是必不可少的。凡是注日期的引用文件，仅所注日期的版本适用于本文件。不注日期的引用文件，其最新版本（包括所有的修改单）适用于本文件。

3 术语和定义

4 原理

食用植物油进入石英样品池，**保证样品在无气泡、无杂物的情况下**，进行红外光谱分析。记录红外光谱，建立LSD多重比较模型，利用Bayes公式比较差值进行鉴定。

5 油品种类

5.1 食用植物油

以食用植物油料或植物原油为原料制成的食用油脂。

5.2

6 仪器和设备

6.1 红外光谱仪：红外光谱仪或傅里叶变换型或色散型红外光谱仪，波数范围超过 $1650\text{cm}^{-1}\sim 900\text{cm}^{-1}$ ，光谱分辨率为 4cm^{-1} 或更优。

6.2 抛光溴化钾盐片

也可以使用在 $1650\text{cm}^{-1}\sim 900\text{cm}^{-1}$ 范围内有足够红外透射性的其他材料。

6.3 选配：可直接测定液体样品的石英样品池。

6.4 选配：自动进样装置。

7 测定

- 7.1 在溴化钾盐片上滴几滴样品，使样品平铺均匀。
- 7.2 或将样品直接注入石英样品池中，保证样品在池中无气泡、无杂物。
- 7.3 进行红外光谱扫描测定，波数范围 $1650\text{cm}^{-1}\sim 900\text{cm}^{-1}$ 。
- 7.4 同时做空白试验，减去本底，得到样品红外光谱信息。
- 7.5 光谱记录之后，检查谱带没有偏差或吸收太弱。如果没有达到要求，需要用新样品重复上述步骤重新记录光谱。

8 光谱解析

8.1 光谱

8.1.1 由于不同仪器光谱图扫描方式不同，对于未知样品的分析，应在进行测试的同一台红外光谱仪上得出谱图加以比较。

8.1.2 不可避免的是，试验条件和仪器特性的微小变化，均可能会引起光谱图的微小差别。不同时间获得的光谱图可能其峰高度和吸光度也不同。

8.2 数据模型

8.2.1 利用化学计量学软件建立出多重比较（LSD）定性分类判别模型。将模型简化为 Bayes 线性判别函数。

8.2.2 记录样品中 10 个特征波长 1180nm、1360nm、1380nm、1390nm、1400nm、1420nm、1440nm、1460nm、1480nm 和 1560nm 处吸光度数值。

8.2.3 将所测样品数据输入公式，通过计算结果进行判别。

8.2.4 同样考虑 8.1.1 与 8.1.2 相同情况。

9 结果计算

9.1 Bayes 函数 1

$$Y_1 = -13185.281 - 31992.512 \times X_1 - 302571.424 \times X_2 + 334533.477 \times X_3 - 224540.837 \times X_4 + 203365.108 \times X_5 + 169481.669 \times X_6 - 122029.189 \times X_7 - 147750.513 \times X_8 + 162316.675 \times X_9 - 40272.973 \times X_{10}$$

X_1 ——样品 1180nm 处吸光度值；

X_2 ——样品 1360nm 处吸光度值；

X_3 ——样品 1380nm 处吸光度值；

X_4 ——样品 1390nm 处吸光度值；

X_5 ——样品 1400nm 处吸光度值；

X_6 ——样品 1420nm 处吸光度值；

X_7 ——样品 1440nm 处吸光度值；

X_8 ——样品 1460nm 处吸光度值；

X_9 ——样品 1480nm 处吸光度值；

X_{10} ——样品 1560nm 处吸光度值。

9.2 Bayes 函数 2

$$Y_2 = -13642.944 - 25734.678 \times X_1 - 305320.488 \times X_2 + 310769.352 \times X_3 - 231665.692 \times X_4 + 234289.890 \times X_5 + 165395.340 \times X_6 - 125388.373 \times X_7 - 137196.736 \times X_8 + 152933.947 \times X_9 - 38150.100 \times X_{10}$$

X_1 ——样品 1180nm 处吸光度值；

X_2 ——样品 1360nm 处吸光度值；

X₃——样品1380nm处吸光度值；
X₄——样品1390nm处吸光度值；
X₅——样品1400nm处吸光度值；
X₆——样品1420nm处吸光度值；
X₇——样品1440nm处吸光度值；
X₈——样品1460nm处吸光度值；
X₉——样品1480nm处吸光度值；
X₁₀——样品1560nm处吸光度值。

9.3 鉴定判别

将各吸光度值代入公式计算后，得到Y₁和Y₂。

$$Z = Y_2 - Y_1;$$

如Z>0，判定此样品为食用植物油；

Z<0，判定此样品不是食用植物油，可能是其他油品或掺杂油。

Z=0，此样品无法判断。

10 试验报告

试验报告应包含如下信息：

- a) 样品情况：
 - 1) 样品描述；
 - 2) 如果有需要的话，给出制样方法
- b) 试验方法：
 - 1) 参考的本标准编号；
 - 2) 试验步骤（直接进样、盐片涂膜或ATR等）。
- c) 任何本文件没有规定的操作。
- d) 试验结果，如样品的油种类。
- e) 试验日期。

附录 A

(资料性附录)

图 1 食用植物油参比谱图

