

生物與毒性分析

應用高解析質譜法分析白蝦之化學指紋與鑑別白蝦產地

Applying High-Resolution Mass Spectrometry to White Shrimp's Chemical Fingerprinting and Geographic Origin Discrimination

胡小琪^{1*}, 陳玟伶¹, 冉繁華², 杜健瑋²

¹ 國立臺灣大學公共衛生學院食品安全與健康研究所 cj6vul3fu6@gmail.com

² 國立臺灣海洋大學生命科學院水產養殖學系

摘要

白蝦 (*Litopenaeus vannamei*) 的價格隨產地而有所差異，而養殖環境及飼育條件等產地因素可能影響白蝦的化學組成。本研究使用高解析質譜法 (high-resolution mass spectrometry) 進行非目標指紋分析，並建構鑑別模型，以探討白蝦的化學組成與產地的關係。

本研究共分析 21 個白蝦樣本，分別來自台灣東部及台灣西部的 15 個養殖場。東部樣本 (n=5) 養殖於池水鹽度介於 18‰–36‰ 的水泥池，西部樣本 (n=16) 則養殖於池水鹽度介於 2‰–14‰ 的土池。新鮮蝦肉剪碎後稱取 2 克，進行球磨震盪均質、溶劑萃取、管柱淨化及過濾。儀器分析使用超高效液相層析–四極桿飛行時間質譜系統，質量分析採資料獨立擷取模式 (data-independent acquisition mode)，收集小分子 (m/z 70–1,100) 的高解析質譜資料。我們利用從資料中萃取出分子波峰，以偏最小平方判別分析法 (partial least squares-discriminant analysis, PLS-DA) 建構鑑別模型，比較台灣東、西部白蝦的化學組成。本研究篩選 variable importance in projection 值大於 1.5 且 Wilcoxon 排序檢定有顯著差異 ($p < 0.01$) 小分子為候選指標化合物，並透過搜尋化學資料庫的方式鑑定指標化合物。

研究結果發現在台灣東部與西部生產的白蝦化學指紋相異。本研究共萃取出近 4,000 個分子波峰 (正離子模式及負離子模式分別萃取出 1,897 及 1,836 個)，以這些分子波峰建構的 PLS-DA 模型能明顯區分台灣東部與西部的白蝦樣本 (交叉驗證結果 $R^2 > 0.99$ 且 $Q^2 > 0.44$)。有 184 個小分子符合候選指標化合物篩選標準。指標化合物鑑定結果，目前已確認 6 個具有產地特異性的化合物 (與資料庫中化合物比對結果：質量誤差小於 5 ppm、且有至少兩個碎片離子相同)，包括脂質代謝物、胜肽、植物代謝物及飼料添加物等。本研究發現在台灣東部生產的白蝦中，色氨酸相對濃度為台灣西部白蝦的 5.01 倍，可能與飼料成分等飼育條件有關。

本研究成功將高解析質譜之非目標分析法應用於剖析白蝦的化學指紋與鑑別白蝦產地。後續完成鑑定之指標化合物，將有機會發展為產地鑑別指標，應用於實務溯源檢驗。

關鍵字：白蝦、高解析質譜法、非目標分析、化學指紋、產地鑑別

Keywords: white shrimp, high-resolution mass spectrometry, untargeted analysis, chemical fingerprinting, geographic origin discrimination