

แมสสเปกโตรเมตรี: เทคโนโลยีหลักในการพัฒนา foodomics

ศศิธร ลิ้มสุวรรณ

ฝ่ายเคมีและกายภาพอาหาร สถาบันคั่นคว่ำและพัฒนาผลิตภัณฑ์อาหาร มหาวิทยาลัยเกษตรศาสตร์

อีเมล : ifrsol@ku.ac.th

รับเมื่อ 27 มกราคม 2568 แก้ไขเมื่อ 22 เมษายน 2568 ตอรับเมื่อ 24 เมษายน 2568

จุดเด่น

- แมสสเปกโตรเมตรี (mass spectrometry หรือ MS) เป็นเทคโนโลยีที่สามารถระบุชนิดของโมเลกุลต่าง ๆ ในอาหารได้อย่างแม่นยำและรวดเร็ว
- MS นำมาใช้ศึกษาด้าน foodomics เพื่อระบุและหาปริมาณสารเมตาบอไลต์ โปรตีน และสารประกอบอื่น ๆ ในอาหาร
- การนำ MS มาประยุกต์ใช้ในการวิเคราะห์และวิจัยด้านอาหาร เป็นประโยชน์ต่อการพัฒนาผลิตภัณฑ์อาหารให้มีคุณภาพและความปลอดภัย

บทคัดย่อ

แมสสเปกโตรเมตรี (mass spectrometry หรือ MS) เป็นเทคโนโลยีที่มีประสิทธิภาพสูงในการวิเคราะห์อาหาร เนื่องจากความสามารถในการระบุชนิดของโมเลกุลต่าง ๆ ในอาหารได้อย่างแม่นยำและรวดเร็ว ช่วยให้สามารถเข้าใจองค์ประกอบทางเคมีของอาหารที่ซับซ้อนได้อย่างละเอียดลึกซึ้ง เทคโนโลยี MS นี้มีบทบาทสำคัญในการศึกษาด้านฟู้ดโอมิกส์ ซึ่งเป็นศาสตร์ที่ผสมผสานระหว่างวิทยาศาสตร์อาหาร เคมี และโอมิกส์ เพื่อศึกษาองค์ประกอบทางเคมีระดับโมเลกุลของอาหารและความสัมพันธ์กับคุณภาพ สุขภาพ และความปลอดภัยของอาหาร โดยเทคโนโลยี MS นี้สามารถระบุและหาปริมาณสารเมตาบอไลต์ โปรตีน และสารประกอบอื่น ๆ ในอาหารได้อย่างแม่นยำ นอกจากนี้ยังใช้ตรวจสอบสารปนเปื้อนและสารก่อภูมิแพ้ ช่วยพัฒนาผลิตภัณฑ์อาหารที่มีคุณภาพและปลอดภัยมากขึ้น การนำเทคโนโลยี MS มาประยุกต์ใช้ในการวิเคราะห์และวิจัยด้านอาหาร จึงเป็นประโยชน์อย่างยิ่งต่อการพัฒนาผลิตภัณฑ์อาหารเพื่อให้ได้มาซึ่งอาหารที่มีคุณภาพและปลอดภัย ตลอดจนการส่งเสริมสุขภาพของผู้บริโภค ในอนาคตเทคโนโลยี MS ยังคงพัฒนาอย่างต่อเนื่องและมีบทบาทสำคัญในการวิจัยทางด้านอาหาร ช่วยแก้ไขปัญหาความท้าทายด้านอาหารในอนาคต เช่น การผลิตอาหารที่ยั่งยืน การพัฒนาอาหารเพื่อสุขภาพ และการตรวจสอบคุณภาพอาหารอย่างรวดเร็วและแม่นยำ

คำสำคัญ : แมสสเปกโตรเมตรี การวิเคราะห์องค์ประกอบทางเคมีระดับโมเลกุลของอาหาร ฟู้ดโอมิกส์



Mass spectrometry: A key technology in advancing foodomics

Sasithorn Limsuwan

Department of Food Chemistry and Physics, Institute of Food Research and Product Development,
Kasetsart University

E-mail : ifrsol@ku.ac.th

Received 27 January 2025; Revised 22 April 2025; Accepted 24 April 2025

Highlights

- Mass spectrometry (MS) provides a precise and efficient method for identifying the molecular composition of food
- By applying MS to foodomics, researchers can accurately determine the levels of metabolites, proteins, and other compounds present in food
- The use of MS in food analysis is essential for advancing food product development and ensuring food safety

Abstract

Mass spectrometry (MS) has emerged as a powerful technique revolutionizing the field of food analysis. MS provides unparalleled insights into their chemical composition by precisely identifying and quantifying molecules within foods. Its versatility makes it invaluable for various food analysis applications, particularly in foodomics - a discipline integrating food science, chemistry, and omics to explore the complex chemical makeup of foods and their relation to quality, health, and safety. MS can accurately identify and quantify metabolites, proteins, and other compounds in foods, detect contaminants and allergens, and investigate correlations between food composition and consumer health. Popular techniques include LC-MS, GC-MS, and MALDI-TOF MS, each suited for analyzing different types of compounds. As a robust analytical tool, MS is driving research in foodomics. Providing molecular-level insights into food composition aids in developing high-quality and safe food products and promoting consumer health. With ongoing advancements, MS is poised to address future food challenges, such as sustainable food production, developing health-promoting foods, and ensuring rapid and accurate food quality assessment.

Keywords : mass spectrometry, molecular-level chemical composition analysis of food, foodomics

บทนำ

ในยุคที่เทคโนโลยีชีวภาพและวิทยาศาสตร์อาหารก้าวหน้าไปอย่างรวดเร็ว ความเข้าใจเชิงลึกเกี่ยวกับองค์ประกอบทางเคมีของอาหารได้กลายเป็นหัวใจสำคัญในการพัฒนาผลิตภัณฑ์อาหารที่ตอบสนองความต้องการของผู้บริโภคยุคใหม่ ซึ่งต้องการทั้งคุณภาพ และความปลอดภัย หนึ่งในเทคนิคที่ได้รับความนิยมและมีบทบาทสำคัญในการวิเคราะห์อาหารคือ แมสสเปกโตรเมตรี (mass spectrometry: MS) ซึ่งเป็นเทคนิคที่ใช้ในการวิเคราะห์องค์ประกอบของโมเลกุล โดยอาศัยหลักการแยกไอออนของสารตามอัตราส่วนมวลต่อประจุ (m/z) หลังจากนั้นจึงนำไอออนเหล่านั้นมาตรวจวัดและสร้างสเปกตรัมมวล (mass spectrum) ซึ่งเป็น fingerprint เฉพาะของสารแต่ละชนิด ทำให้นักวิทยาศาสตร์สามารถระบุตัวตนของสารได้อย่างแม่นยำ เป็นเอกลักษณ์ของโมเลกุลนั้น ๆ ซึ่งเป็นประโยชน์อย่างมากในการควบคุมคุณภาพ ความปลอดภัยของอาหาร นอกจากนี้การใช้ MS ยังช่วยในการค้นพบสารประกอบใหม่จากพืชที่มีฤทธิ์ทางชีวภาพ เพื่อการพัฒนาผลิตภัณฑ์อาหารใหม่ และใช้ศึกษาการเปลี่ยนแปลงทางเคมีที่เกิดขึ้นในระหว่างการแปรรูปและการเก็บรักษาอาหาร MS ยังมีบทบาทสำคัญในงานวิจัยด้าน foodomics ซึ่งเป็นศาสตร์แขนงใหม่ที่ผสมผสานระหว่างวิทยาศาสตร์อาหารและชีวสารสนเทศเพื่อศึกษาวิจัยด้านวิทยาศาสตร์อาหารและโภชนาการ โดยการศึกษาองค์ประกอบทางเคมีในอาหารระดับโมเลกุล เพื่อทำความเข้าใจความสัมพันธ์ระหว่างองค์ประกอบทางเคมีกับคุณภาพ ความปลอดภัย และคุณประโยชน์ทางโภชนาการของอาหาร และ

สร้างฐานข้อมูลสารประกอบในอาหารเพื่อการวิเคราะห์เชิงลึก ซึ่งข้อมูลเหล่านี้เป็นประโยชน์อย่างยิ่งในการพัฒนาผลิตภัณฑ์อาหารใหม่ที่มีคุณประโยชน์ต่อสุขภาพและปลอดภัยต่อผู้บริโภค

หลักการทํางานและส่วนประกอบของ MS

หลักการสำคัญของแมสสเปกโตรเมตรี คือ การวิเคราะห์ไอออน โดยเริ่มต้นจากการทำให้โมเลกุลของสารตัวอย่างเกิดการไอออไนเซชัน ซึ่งเป็นกระบวนการที่อะตอมหรือโมเลกุลได้รับหรือสูญเสียอิเล็กตรอนจนเกิดเป็นไอออนที่มีประจุไฟฟ้า จากนั้นไอออนเหล่านี้จะถูกเร่งและแยกออกจากกันตามอัตราส่วนมวลต่อประจุ (m/z) ภายใต้สภาวะสุญญากาศในสนามไฟฟ้าหรือสนามแม่เหล็ก ไอออนที่มีอัตราส่วน m/z ต่างกันจะถูกหักเหในระดับที่แตกต่างกัน และถูกตรวจวัดเพื่อสร้างแมสสเปกตรัม ซึ่งเป็นเหมือน fingerprint ของสารนั้น ๆ และสามารถนำไปใช้ในการระบุองค์ประกอบและโครงสร้างของสารในตัวอย่างได้ จากที่กล่าวมา MS ประกอบด้วย 3 ส่วนหลัก⁽¹⁾ แสดงตาม Figure 1 ได้แก่

1. แหล่งกำเนิดไอออน (ion source) ทำหน้าที่เปลี่ยนสารตัวอย่างให้เป็นไอออนที่มีประจุไฟฟ้า โดยสารตัวอย่างจะถูกนำเข้าจากเครื่องมือ เช่น HPLC, GC, ICP และถูกทำให้เป็นไอออน (ionization) ซึ่งมีหลายวิธี เช่น

การไอออไนเซชันด้วยอิเล็กตรอน (electron ionization, EI) โดยยิงอิเล็กตรอนพลังงานสูงเข้าไปชนกับโมเลกุลของสารตัวอย่าง ทำให้เกิดไอออน

การไอออนไนเซชันแบบอิเล็กโทรสเปรย์ (electrospray ionization, ESI) เปลี่ยนสารละลายตัวอย่างให้เป็นละอองฝอย และทำให้ละอองฝอยมีประจุ

การไอออนไนเซชันแบบ MALDI (matrix-assisted laser desorption/ionization) ใช้เลเซอร์ยิงไปที่สารตัวอย่างที่ผสมกับเมทริกซ์ ทำให้เกิดไอออน

2. ส่วนวิเคราะห์มวล (mass analyzer) ทำหน้าที่แยกไอออนตามอัตราส่วนมวลต่อประจุ โดยใช้สนามแม่เหล็กหรือสนามไฟฟ้าในการแยกไอออนที่มีมวลแตกต่างกันออกจากกัน mass analyzer มีหลายชนิด เช่น

ส่วนกรองมวลแบบควอดรูโพล (quadrupole mass filter) ใช้สนามไฟฟ้าสลับกันเพื่อคัดเลือกไอออนที่มีอัตราส่วนมวลต่อประจุที่ต้องการ

ส่วนวิเคราะห์มวลแบบไทม์ออฟฟลายท์ (time-of-flight mass analyzer, TOF) โดยการเร่งไอออนให้เคลื่อนที่ไปตามท่อสุญญากาศ และวัดเวลาที่ไอออนใช้ในการเดินทาง

ส่วนกักไอออน (ion trap) โดยการกักไอออนไว้ในสนามไฟฟ้า และปล่อยไอออนออกมาทีละกลุ่ม

3. ส่วนตรวจจับ (detector) ทำหน้าที่ตรวจจับไอออนที่ถูกแยกออกมาจาก mass analyzer และแปลงสัญญาณของไอออนให้เป็นสัญญาณไฟฟ้า ซึ่งจะถูกลำดับไปประมวลผลเพื่อให้ได้ผลลัพธ์ในรูปแบบของสเปกตรัมมวล (mass spectrum) หรือกราฟที่แสดงความสัมพันธ์ระหว่างความเข้มข้นของไอออน (ความสูงของ peak) กับค่า m/z แต่ละค่า โดยแต่ละ peak ในสเปกตรัมจะสอดคล้องกับไอออนชนิดหนึ่ง ซึ่งสามารถนำไปใช้ในการระบุชนิดของสารตัวอย่างได้

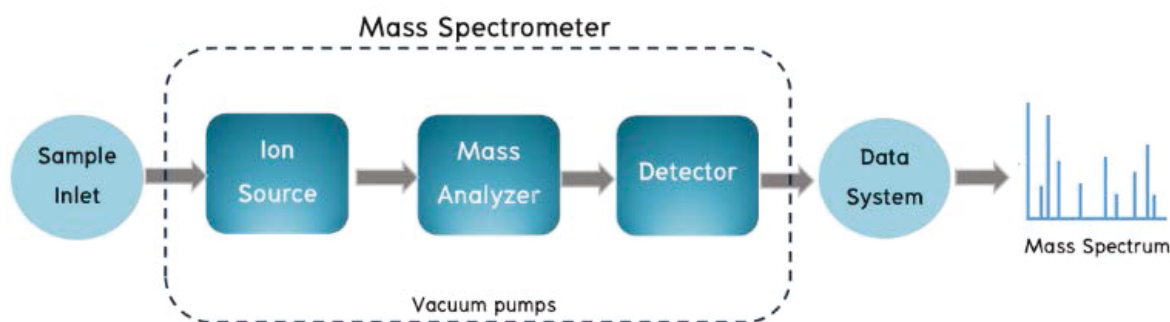


Figure 1 Mass spectrometer scheme

ยกตัวอย่างการวิเคราะห์ catechin ซึ่งเป็นสารฟลาโวนอยด์ชนิดหนึ่งที่พบมากในชา โกโก้ และผลไม้บางชนิด สามารถทำได้อย่างแม่นยำโดยใช้เทคนิค mass spectrometry (MS) โดยเฉพาะเมื่อนำมาวิเคราะห์ร่วมกับ liquid chromato-

graphy mass spectrometry (LC-MS) เริ่มจากการแยกสารด้วย liquid chromatography (LC) ตามด้วยการตรวจวัดด้วย mass spectrometry (MS) โดย catechin ซึ่งมีน้ำหนักโมเลกุล 290.27 g/mol จะให้ไอออนหลัก (precursor ion) ในโหมด

negative เป็น $[M-H]^-$ ที่ m/z 289.1 จากนั้นใช้ MS/MS วิเคราะห์ ion นี้เพื่อดูลักษณะการแตกตัวที่เฉพาะเจาะจง เช่น m/z 245, 205 และ 125 แสดงดัง Figure 2 ซึ่งช่วยพิสูจน์เอกลักษณ์ของ catechin ได้อย่างแม่นยำ การใช้ LC-MS มีข้อดีเหนือกว่า HPLC ในด้านความไว (sensitivity) และความจำเพาะ (specificity) โดยเฉพาะเมื่อต้องแยกและวิเคราะห์สารในปริมาณเล็กน้อยในตัวอย่างที่มีองค์ประกอบซับซ้อน เช่น อาหารหรือพืช ซึ่ง HPLC ที่ใช้ UV detector อย่างเดียวไม่สามารถแยกสารที่

มีโครงสร้างใกล้เคียงกันได้ดีเท่ากับ LC-MS จากตัวอย่างดังกล่าวจะเห็นได้ว่า MS เป็นเทคนิคที่ให้ข้อมูลที่เป็นเอกลักษณ์ของโมเลกุลนั้น ๆ และมีความสำคัญอย่างยิ่งในวงการวิทยาศาสตร์ โดยเฉพาะอย่างยิ่งในด้านการศึกษาการเปลี่ยนแปลงของสารเมตาบอไลต์ (metabolite) ที่เกิดขึ้น ในช่วงหลายปีที่ผ่านมา MS ได้เข้ามามีบทบาทสำคัญในการศึกษาการเปลี่ยนแปลงของสารอาหารและโภชนาการหรือที่เรียกว่า food metabolomics หรือในอีกชื่อคือ foodomics

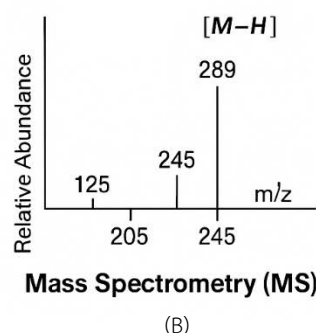
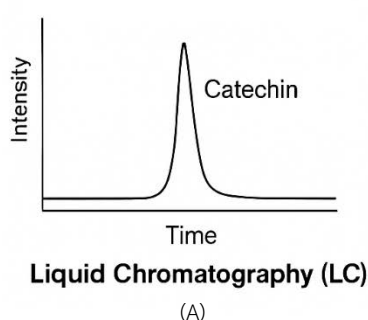


Figure 2 Chromatogram (A) and mass spectrum (B) of catechin

Foodomics การวิจัยอาหารเชิงลึก

ความสำเร็จในการจัดลำดับจีโนมมนุษย์เกือบทั้งหมดในศตวรรษที่ 21 นับเป็นก้าวสำคัญที่เปิดประตูสู่ยุคหลังจีโนม (post genomics era) นำมาซึ่งการพัฒนาเครื่องมือวิเคราะห์ทางพันธุกรรมที่มีประสิทธิภาพและแม่นยำยิ่งขึ้น เทคโนโลยีเหล่านี้ได้ปฏิวัติวงการวิทยาศาสตร์และนำไปสู่การเกิดขึ้นของศาสตร์สาขาใหม่ ๆ มากมาย หนึ่งในนั้นคือ foodomics ซึ่งเป็นการศึกษาวิทยาศาสตร์อาหารเชิงลึก

foodomics ถูกอ้างอิงอย่างเป็นทางการครั้งแรกในวารสาร SCI ในปี 2009⁽²⁾ ว่าเป็นสาขา

วิชาใหม่ที่ศึกษาเกี่ยวกับอาหารและโภชนาการ โดยใช้เทคโนโลยีโอมิกส์ขั้นสูง ได้แก่ genomics, transcriptomics, proteomics, metabolomics และ lipodomics ศาสตร์เหล่านี้เกิดขึ้นเพื่อทำความเข้าใจปฏิสัมพันธ์ที่ซับซ้อนระหว่างอาหารกับร่างกายในระดับโมเลกุล ผ่านการวิเคราะห์องค์ประกอบทางชีวเคมีในอาหารและการเปลี่ยนแปลงที่เกิดขึ้นในร่างกายหลังการบริโภคอาหาร ซึ่งจะช่วยให้นักวิจัยสามารถพัฒนาอาหารและโภชนาการที่ตรงตามความต้องการเฉพาะบุคคล และส่งเสริมสุขภาพที่ดีได้อย่างมีประสิทธิภาพ

MS เป็นเครื่องมือที่จำเป็นอย่างยิ่งในการวิจัยด้าน foodomics ช่วยให้สามารถวิเคราะห์องค์ประกอบทางเคมีและกระบวนการทางชีวภาพของอาหารได้อย่างครอบคลุม โดยการผสมผสานความไวและความจำเพาะของ MS กับเทคโนโลยีโอมิกส์ นักวิจัยสามารถได้รับข้อมูลเชิงลึกที่มีคุณค่าเกี่ยวกับคุณภาพ ความปลอดภัย และคุณค่าทางโภชนาการของอาหาร กระบวนการวิเคราะห์อาหารด้วย foodomics แสดงตัวอย่างตาม Figure 3 ประกอบด้วย

1. การเก็บตัวอย่าง เริ่มต้นจากการเก็บตัวอย่างอาหารหรือสิ่งมีชีวิตที่ต้องการศึกษา เช่น ผัก ผลไม้ เนื้อสัตว์ หรือตัวอย่างทางชีวภาพจากมนุษย์หรือสัตว์ทดลอง

2. การสกัด นำตัวอย่างที่ได้มาผ่านกระบวนการสกัดเพื่อแยกสารประกอบที่สนใจออกมา เช่น โปรตีน กรดนิวคลีอิก และเมตาบอไลต์

3. การวิเคราะห์ นำสารที่สกัดได้มาวิเคราะห์โดยใช้เทคนิคต่าง ๆ เช่น

genomics ศึกษาจีโนมทั้งหมดของสิ่งมีชีวิต ซึ่งรวมถึงยีนและหน้าที่ของยีน

transcriptomics วิเคราะห์ RNA transcripts ที่อยู่ในเซลล์หรือเนื้อเยื่อ เพื่อให้ข้อมูลเชิงลึกเกี่ยวกับการแสดงออกของยีน

proteomics ศึกษาโปรตีนที่ผลิตโดยสิ่งมีชีวิต เพื่อเปิดเผยลักษณะการทำงานของโปรตีน

metabolomics ศึกษาโมเลกุลขนาดเล็ก (เมตาบอไลต์) ที่เกี่ยวข้องกับการเผาผลาญของเซลล์ เพื่อให้ข้อมูลเกี่ยวกับกระบวนการทางชีวเคมีที่เกิดขึ้นในสิ่งมีชีวิต

กระบวนการวิเคราะห์เหล่านี้ใช้แพลตฟอร์มเครื่องมือการวิเคราะห์ต่อพ่วงกับ MS เช่น แก๊สโครมาโทกราฟี-แมสสเปกโตรเมตรี (gas chromatography mass spectrometry; GC-MS) โครมาโทกราฟีของเหลว-แมสสเปกโตรเมตรี (liquid chromatography mass spectrometry; LC-MS), การแยกไฟฟ้าแบบแคปิลลารี-แมสสเปกโตรเมตรี (CE-MS)

4. การวิเคราะห์ข้อมูล นำข้อมูลที่ได้จากการวิเคราะห์ด้วยเครื่องมือ MS ดังกล่าวด้านบนมาวิเคราะห์เชิงสถิติและชีวสารสนเทศ เพื่อหาความสัมพันธ์ระหว่างสารต่าง ๆ และระบุตัวบ่งชี้ทางชีวภาพ (biomarkers) ที่มีความสำคัญ

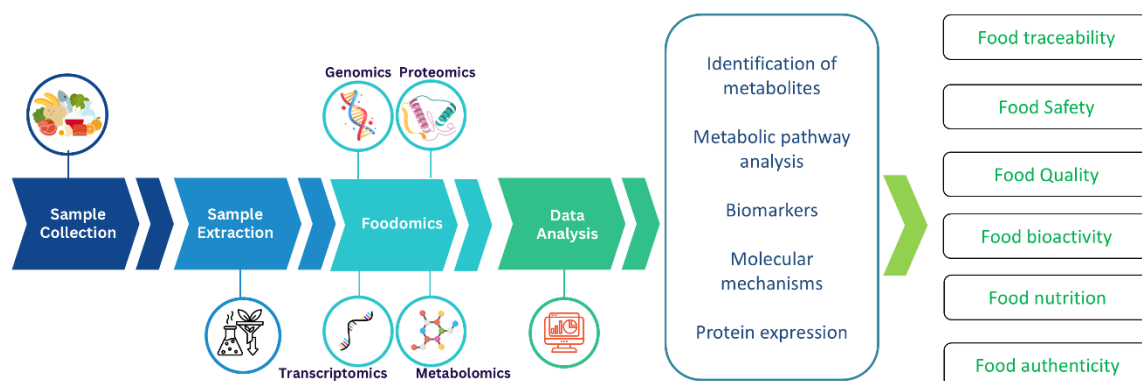


Figure 3 Foodomics-application in food sciences

จากที่กล่าวมาแล้ว MS เป็นเทคโนโลยีที่มีประสิทธิภาพสูง เมื่อนำมาศึกษาด้าน foodomics ซึ่งใช้เทคโนโลยีการวิเคราะห์ระดับโมเลกุลมาศึกษาความสัมพันธ์ระหว่างอาหารกับสุขภาพของมนุษย์ในระดับโมเลกุลและเซลล์ ทำให้ได้ผลวิจัยเชิงลึก ได้ข้อมูลสารอาหารแต่ละชนิดที่ส่งผลต่อร่างกาย การวิเคราะห์โดย foodomics แบ่งออกเป็น 2 ประเภทหลัก

1. การวิเคราะห์แบบ target (targeted analysis)

การวิเคราะห์แบบ target มุ่งเน้นการตรวจสอบสารประกอบหรือสารเมตาบอไลต์ชนิดเฉพาะที่เราสนใจ โดยมีขั้นตอนการหาปริมาณและระบุตัวตนของเมตาบอไลต์เหล่านั้นอย่างแม่นยำ⁽⁵⁾ วิธีนี้มีความละเอียดสูง แต่ต้องใช้ขั้นตอนการเตรียมตัวอย่างที่ซับซ้อน เช่น สารปนเปื้อน สารก่อภูมิแพ้ วิตามิน หรือสารประกอบเคมีที่มีฤทธิ์ทางชีวภาพบางชนิด โดยทั่วไปจะใช้เทคนิคทางเคมีวิเคราะห์ เช่น chromatography (โครมาโทกราฟี) และ mass spectrometry (แมสสเปกโตรเมตรี) ที่มีความไวและความจำเพาะสูง เพื่อแยกและระบุสารเป้าหมายเหล่านั้น ตัวอย่างเช่น การตรวจสอบสารปนเปื้อนในอาหารทะเล การใช้ LC-MS/MS เพื่อตรวจสอบสารปฏิชีวนะตกค้างในกุ้ง การวิเคราะห์วิตามินในผักผลไม้ การตรวจสอบสารก่อภูมิแพ้ในอาหารแปรรูป

2. การวิเคราะห์แบบ non-target (untargeted analysis)

การวิเคราะห์แบบ non-target คือการวิเคราะห์องค์ประกอบทางเคมีทั้งหมดในตัวอย่างอาหารโดยไม่กำหนดสารเป้าหมายล่วงหน้า เพื่อ

ค้นหาสารประกอบใหม่ ๆ โดยมุ่งเน้นการตรวจหาเมตาบอไลต์หลากหลายชนิด เพื่อสร้าง fingerprint ของอาหารแต่ละชนิด วิธีนี้ช่วยให้เราเห็นภาพรวมขององค์ประกอบทางเคมีในอาหารได้อย่างครอบคลุม⁽⁶⁻⁷⁾ การวิเคราะห์แบบ non-target ใช้เทคนิคทางเคมีวิเคราะห์ที่ให้ข้อมูลเชิงลึกเกี่ยวกับองค์ประกอบทางเคมีทั้งหมดของตัวอย่าง เช่น high-resolution mass spectrometry (HRMS) และ nuclear magnetic resonance (NMR) ตัวอย่างเช่น การค้นหาสารออกฤทธิ์ทางชีวภาพใหม่ในพืชสมุนไพร การใช้ HRMS เพื่อค้นหาสารประกอบที่มีฤทธิ์ต้านอนุมูลอิสระในใบชา การเปรียบเทียบองค์ประกอบทางเคมีของผลไม้ชนิดเดียวกันที่ปลูกในสภาพแวดล้อมที่ต่างกัน การตรวจสอบความถูกต้องของผลิตภัณฑ์อาหาร (food authenticity) การใช้ HRMS เพื่อเปรียบเทียบลายนิ้วมือทางเคมีของน้ำผึ้งธรรมชาติกับน้ำผึ้งปลอม

ทั้งสองวิธีการวิเคราะห์นี้เป็นส่วนเสริมซึ่งกันและกัน และเมื่อนำข้อมูลที่ได้จากการวิเคราะห์ทั้งสองวิธีมาวิเคราะห์ร่วมกัน จะช่วยให้เราเข้าใจถึงความซับซ้อนของปฏิสัมพันธ์ระหว่างอาหารกับร่างกายได้ดียิ่งขึ้น นำมาประยุกต์ใช้กับงานวิจัยเชิงลึกด้านอาหารได้อย่างหลากหลาย ตัวอย่างเช่น การศึกษาโปรไฟล์ทางเคมีของอาหาร

- การวิเคราะห์เมตาโบโลม ศึกษาสารเมตาบอไลต์ทั้งหมดในอาหาร เพื่อทำความเข้าใจกระบวนการทางชีวเคมีที่เกิดขึ้นในระหว่างการผลิตและการเก็บรักษาอาหาร ตัวอย่างเช่น การศึกษาการเปลี่ยนแปลงของสารโพลีฟีนอลในผลไม้ขณะสุก

- การวิเคราะห์โปรตีโอม ศึกษาโปรตีนทั้งหมดในอาหาร เพื่อทำความเข้าใจโครงสร้างและ

หน้าที่ของโปรตีน ซึ่งเกี่ยวข้องกับคุณภาพทางโภชนาการและความเป็นอันตรายของอาหาร ตัวอย่างเช่น การศึกษาโปรตีนที่เกี่ยวข้องกับการเกิดภูมิแพ้ในอาหารทะเล

- การวิเคราะห์จีโนม ศึกษาข้อมูลทางพันธุกรรมของจุลินทรีย์ในอาหาร เพื่อทำความเข้าใจบทบาทของจุลินทรีย์ในการหมักและการผลิตอาหาร ตัวอย่างเช่น การศึกษาจุลินทรีย์ในโยเกิร์ตที่ส่งผลต่อรสชาติและกลิ่น

การเชื่อมโยงโปรไฟล์ทางเคมีกับคุณภาพของอาหาร

- การพัฒนาระบบประเมินคุณภาพอาหาร ใช้ข้อมูลทางเคมีเพื่อพัฒนาระบบประเมินคุณภาพอาหารที่รวดเร็วและแม่นยำมากขึ้น ตัวอย่างเช่น การใช้สเปกโตรสโกปีอินฟราเรดใกล้ (near-infrared spectroscopy) เพื่อประเมินความสุกของผลไม้

- การค้นหาตัวบ่งชี้คุณภาพ ค้นหาสารเคมีที่สามารถใช้เป็นตัวบ่งชี้คุณภาพของอาหารได้ ตัวอย่างเช่น การใช้สารโพลีฟีนอลเป็นตัวบ่งชี้ความสดของผักใบเขียว

การศึกษาความสัมพันธ์ระหว่างอาหารกับสุขภาพ

- การค้นหาสารออกฤทธิ์ทางชีวภาพ ค้นหาสารออกฤทธิ์ทางชีวภาพที่มีผลต่อสุขภาพ เช่น สารต้านอนุมูลอิสระและสารที่ช่วยลดความเสี่ยงของโรคเรื้อรัง การศึกษาสารฟลาโวนอยด์ในผลไม้ที่มีฤทธิ์ต้านมะเร็ง

- การศึกษาปฏิสัมพันธ์ระหว่างสารอาหาร: ศึกษาปฏิสัมพันธ์ระหว่างสารอาหารต่าง ๆ ในอาหาร และผลกระทบต่อ การดูดซึมและการเผาผลาญ เช่น การศึกษาปฏิสัมพันธ์ระหว่างแคลเซียมและวิตามินดี

- อาหารเพื่อสุขภาพเฉพาะบุคคล การวิเคราะห์จีโนมของแต่ละบุคคลจะช่วยให้สามารถออกแบบอาหารที่เหมาะสมกับพันธุกรรมของแต่ละคน เพื่อลดความเสี่ยงในการเกิดโรคเรื้อรังต่าง ๆ

- การศึกษาผลกระทบของอาหารต่อโรค การวิเคราะห์โปรตีนและเมตาบอไลต์ในเลือดหรือปัสสาวะของผู้ป่วยโรคต่างๆ จะช่วยให้เข้าใจกลไกการเกิดโรคและพัฒนาอาหารเสริมเพื่อรักษาโรคได้อย่างมีประสิทธิภาพ

บทบาทของ foodomics ต่ออุตสาหกรรมอาหาร

foodomics ใช้เทคนิคการวิเคราะห์ขั้นสูงด้วย MS เพื่อศึกษาองค์ประกอบโมเลกุลของอาหาร ช่วยในการปฏิวัติวงการอาหารด้วยวิทยาศาสตร์ข้อมูล นำเสนอข้อมูลเชิงลึกที่มีคุณค่าเกี่ยวกับคุณภาพ ความปลอดภัย และการทำงานของอาหาร เทคโนโลยีเหล่านี้ช่วยให้เราเข้าใจถึงความซับซ้อนของอาหารในระดับโมเลกุล ซึ่งนำไปสู่การพัฒนาและปรับปรุงอุตสาหกรรมอาหารในหลายด้าน ดังนี้

1. *การพัฒนาผลิตภัณฑ์อาหารใหม่ ๆ*

- อาหารเพื่อสุขภาพเฉพาะบุคคล (personalized nutrition) foodomics ช่วยในการวิเคราะห์ปฏิสัมพันธ์ระหว่างอาหารกับพันธุกรรมของแต่ละบุคคล (nutrigenomics) ทำให้สามารถพัฒนาอาหารที่ปรับแต่งให้เหมาะสมกับความต้องการทางโภชนาการของแต่ละคนได้ ข้อมูลจาก foodomics โดยเฉพาะ metabolomics สามารถใช้ในการศึกษาการดูดซึม การกระจายตัว การเผาผลาญ และการขับถ่าย (ADME) ขององค์ประกอบอาหารในแต่ละบุคคล ซึ่งให้ข้อมูลเชิงลึกเกี่ยวกับผลกระทบทาง

ชีวภาพที่แตกต่างกันไป ข้อมูลนี้เป็นพื้นฐานในการพัฒนาอาหารที่ตอบสนองความต้องการเฉพาะของบุคคล เช่น ผู้ที่มีความเสี่ยงต่อโรคบางชนิด หรือผู้ที่มีความต้องการทางโภชนาการพิเศษ

- อาหารฟังก์ชัน (functional foods) การค้นพบสารออกฤทธิ์ทางชีวภาพในอาหาร ทำให้สามารถพัฒนาอาหารที่มีคุณสมบัติในการป้องกันและรักษาโรคได้ เทคนิค metabolomics screening ช่วยในการระบุสารประกอบที่มีศักยภาพในการส่งเสริมสุขภาพ (เช่น สารต้านอนุมูลอิสระ โพลีฟีนอล เปปไทด์จำเพาะ) ในวัตถุดิบหรือส่วนผสมอาหาร ข้อมูลนี้สนับสนุนการพัฒนาอาหารฟังก์ชันและผลิตภัณฑ์เสริมอาหารที่มีประโยชน์ต่อสุขภาพอย่างมีหลักฐานทางวิทยาศาสตร์

- อาหารจากพืช (plant-based foods) การศึกษาโครงสร้างโมเลกุลของพืช ทำให้สามารถพัฒนาวัตถุดิบจากพืชให้มีคุณสมบัติทางโภชนาการเทียบเท่ากับเนื้อสัตว์ ช่วยในการทำความเข้าใจโปรตีนจากพืชแต่ละชนิดและองค์ประกอบของกรดอะมิโน และมีคุณสมบัติทางเทคโนโลยีที่เหมาะสมสำหรับการนำไปพัฒนาเป็นผลิตภัณฑ์ทดแทนเนื้อสัตว์ นอกจากนี้ metabolomics ยังมีบทบาทในการวิเคราะห์สารประกอบอื่น ๆ ในพืช ที่มีผลต่อรสชาติ เนื้อสัมผัส และคุณค่าทางโภชนาการ ซึ่งเป็นข้อมูลสำคัญในการพัฒนาอาหารจากพืชให้ใกล้เคียงกับผลิตภัณฑ์จากสัตว์

2. การปรับปรุงคุณภาพและความปลอดภัยของอาหาร

- การตรวจสอบคุณภาพ foodomics ช่วยในการตรวจสอบคุณภาพของวัตถุดิบและผลิตภัณฑ์ขั้นสุดท้ายได้อย่างรวดเร็วและแม่นยำ metabolomics

และ lipidomics profiling สามารถติดตามตัวบ่งชี้คุณภาพที่สำคัญ เช่น ความสุก การพัฒนาของกลิ่นรส การเปลี่ยนแปลงสี และความเสถียรต่อการออกซิเดชัน ระหว่างการผลิต การแปรรูปและการเก็บรักษา ข้อมูลนี้ช่วยให้สามารถปรับกระบวนการผลิตให้เหมาะสม เพื่อให้ได้ผลิตภัณฑ์ที่มีคุณภาพสม่ำเสมอ

- การตรวจจับสารปนเปื้อน MS โดยเฉพาะ LC-MS/MS และ GC-MS/MS ช่วยในการตรวจจับและหาปริมาณสารเคมีอันตรายหลายชนิดในอาหารได้พร้อมกัน เช่น สารกำจัดศัตรูพืช สารตกค้างจากยาสัตว์ ไมโคทอกซิน สารปนเปื้อนในกระบวนการผลิต และสารปนเปื้อนจากสิ่งแวดล้อม นอกจากนี้ proteomics มีบทบาทสำคัญในการตรวจจับและหาปริมาณสารก่อภูมิแพ้ในอาหาร ซึ่งช่วยในการติดตามผลิตภัณฑ์อย่างถูกต้อง และปกป้องผู้บริโภคที่แพ้อาหาร

- การติดตามย้อนกลับแหล่งที่มาของอาหารช่วยให้สามารถตรวจสอบที่มาของวัตถุดิบและผลิตภัณฑ์ได้อย่างละเอียด โดยการวิเคราะห์ fingerprint ทางเคมีที่เป็นเอกลักษณ์ (เช่น เมทาบอลาइट โปรตีน ไขมัน ธาตุอาหารรอง) เพื่อระบุแหล่งที่มาทางภูมิศาสตร์ สายพันธุ์ หรือวิธีการผลิตของอาหาร ข้อมูลจาก foodomics สามารถนำไปใช้ในการเสริมสร้างระบบตรวจสอบย้อนกลับ ทำให้สามารถระบุแหล่งที่มาของปัญหาได้อย่างรวดเร็ว ในกรณีที่เกิดการปนเปื้อนหรือปัญหาด้านคุณภาพ

3. การเพิ่มประสิทธิภาพการผลิตอาหาร

- การปรับปรุงกระบวนการผลิต การใช้ข้อมูลจาก foodomics เพื่อปรับปรุงกระบวนการผลิตอาหารให้มีประสิทธิภาพมากขึ้น ลดต้นทุน และลด

การสูญเสีย ช่วยให้เข้าใจขั้นตอนการแปรรูปต่าง ๆ ส่งผลต่อองค์ประกอบโมเลกุลของอาหารอย่างไร ซึ่งนำไปสู่การปรับปรุงกระบวนการผลิตให้เหมาะสม ตัวอย่างเช่น การปรับสภาวะความร้อนเพื่อลดการสูญเสียสารอาหาร หรือการปรับปรุงกระบวนการหมักเพื่อให้ได้กลิ่นรสที่ดีขึ้น

- การพัฒนาวัตถุดิบใหม่ การค้นพบวัตถุดิบใหม่ที่มีคุณสมบัติทางโภชนาการสูงและมีความยั่งยืนด้วยเทคนิค metabolomics screening ช่วยในการค้นหาวัตถุดิบใหม่ ๆ ที่มีสารประกอบที่มีประโยชน์ต่อสุขภาพ หรือมีคุณสมบัติทางเทคโนโลยีที่น่าสนใจ ข้อมูลนี้สนับสนุนการพัฒนาอาหารที่มีคุณค่าทางโภชนาการสูง และมีความยั่งยืนต่อสิ่งแวดล้อม

4. การสร้างความยั่งยืนให้กับอุตสาหกรรมอาหาร

- การลดการสูญเสียอาหาร เทคนิค foodomics เช่น metabolomics และ lipidomics สามารถตรวจสอบการเปลี่ยนแปลงองค์ประกอบระดับโมเลกุลของอาหารระหว่างการแปรรูป ช่วยให้สามารถปรับพารามิเตอร์การผลิตได้อย่างแม่นยำ เพื่อเพิ่มคุณสมบัติที่ต้องการและลดการเปลี่ยนแปลงที่ไม่พึงประสงค์ ซึ่งนำไปสู่ผลผลิตที่สูงขึ้นและลดของเสีย เช่น เทคนิค metabolomics สามารถระบุสารบ่งชี้ของการเน่าเสีย ทำให้สามารถคาดการณ์อายุการเก็บรักษาของอาหารได้อย่างแม่นยำยิ่งขึ้น ข้อมูลนี้ช่วยในการพัฒนาวิธีการเก็บรักษาและบรรจุภัณฑ์ที่ดีขึ้น เพื่อลดการสูญเสียอาหารตลอดห่วงโซ่อุปทาน

- การพัฒนาการเกษตรอย่างยั่งยืน การใช้ข้อมูลจาก foodomics เพื่อปรับปรุงพันธุ์พืชและพัฒนาวิธีการปลูกพืชที่เป็นมิตรต่อสิ่งแวดล้อม เช่น

ข้อมูลจาก genomics และ metabolomics สามารถใช้ในการคัดเลือกพันธุ์พืชที่มีความต้านทานต่อโรคและแมลงศัตรูพืชมากขึ้น หรือมีประสิทธิภาพในการใช้น้ำและธาตุอาหารมากขึ้น ซึ่งช่วยลดการใช้สารเคมีและทรัพยากรในการเกษตร

การประยุกต์ใช้ MS ในอุตสาหกรรมอาหารเพื่อตรวจสอบแหล่งกำเนิดทางภูมิศาสตร์ของอาหาร (Applications of mass spectrometry in geographical origin verification)

เทคโนโลยี MS ยังมีบทบาทสำคัญในการตรวจสอบแหล่งกำเนิดทางภูมิศาสตร์ของอาหาร โดยอาศัยการวิเคราะห์สารบ่งชี้ที่ได้รับอิทธิพลจากสภาพแวดล้อมและกระบวนการผลิตในแต่ละภูมิภาค ตัวอย่างอาหาร GI ที่ใช้เช่น

ไวน์ (wine) เทคนิค IRMS ถูกใช้เพื่อวิเคราะห์ไอโซโทปเสถียร ($\delta^{18}\text{O}$, $\delta^2\text{H}$, $\delta^{13}\text{C}$) ของน้ำและเอทานอลในไวน์ ซึ่งสะท้อนถึงสภาพภูมิอากาศและแหล่งน้ำของแหล่งปลูกองุ่น⁽⁸⁾ เทคนิค ICP-MS (inductively coupled plasma mass spectrometry) ถูกใช้เพื่อหาโปรไฟล์ธาตุในไวน์ (เช่น Sr, B, Mn, Zn) ซึ่งได้รับอิทธิพลจากองค์ประกอบของดินในไร่องุ่น การรวมข้อมูลไอโซโทปและธาตุเข้ากับการวิเคราะห์ทางเคมีเมตริกส์ (chemometrics) ช่วยให้สามารถจำแนกแหล่งกำเนิดทางภูมิศาสตร์ของไวน์ได้อย่างแม่นยำ

ข้าว (rice) เทคนิค IRMS วิเคราะห์ไอโซโทปเสถียร ($\delta^{13}\text{C}$, $\delta^{15}\text{N}$, $\delta^{18}\text{O}$) เพื่อจำแนกข้าวตามแหล่งกำเนิดทางภูมิศาสตร์และแนวทางการทำเกษตร⁽⁹⁾ เทคนิค ICP-MS หา "ลายนิ้วมือ" ของธาตุต่าง ๆ ในข้าว ซึ่งแตกต่างกันไปตามองค์ประกอบ

ของดินในแหล่งปลูก (เช่น Mg, Al, K, Mn, Fe, Cu, Zn) การวิเคราะห์ข้อมูลไอโซโทปและธาตุด้วยสถิติแบบหลายตัวแปรช่วยให้สามารถจำแนกข้าวตามแหล่งกำเนิดทางภูมิศาสตร์ได้อย่างแม่นยำ

ผลไม้ (fruits) เทคนิค metabolomics โดยใช้ LC-MS/MS จำแนกแหล่งกำเนิดทางภูมิศาสตร์ของผลไม้ เช่น ลูกพีช โดยการวิเคราะห์โปรไฟล์เมทาบอลไลต์ ซึ่งได้รับอิทธิพลจากระบบนิเวศในแต่ละภูมิภาค⁽¹⁰⁾ เทคนิค ICP-MS และ MP-AES (microwave plasma atomic emission spectroscopy) ถูกใช้เพื่อวิเคราะห์องค์ประกอบของธาตุในผลไม้ (เช่น ส้ม ส้มแมนดาริน) เพื่อกำหนดแหล่งที่มาตาม

ปริมาณแร่ธาตุในดิน ทำให้เทคนิค IRMS สามารถใช้เพื่อวิเคราะห์ไอโซโทปเสถียรในผลไม้เพื่อตรวจสอบแหล่งกำเนิด⁽¹¹⁾

ในปัจจุบันบริษัทผู้ผลิตอาหารชั้นนำระดับโลกหลายบริษัท ได้นำ mass spectrometry (MS) มาประยุกต์ใช้ร่วมกับแนวคิด foodomics เพื่อยกระดับคุณภาพ ความปลอดภัย และนวัตกรรมของผลิตภัณฑ์อาหาร โดยเฉพาะในการวิเคราะห์เชิงลึกเกี่ยวกับองค์ประกอบทางชีวโมเลกุล เช่น โปรตีน เปปไทด์ สารต้านอนุมูลอิสระ และสารปนเปื้อนต่าง ๆ ตัวอย่างบริษัทที่นำเทคนิคนี้มาใช้แสดงดัง Table 1

Table 1 Example of food companies utilizing MS in foodomics

Company	MS technique	Application	Food product example	Reference
Nestlé	LC-MS/MS, GC-MS	Infant nutrition and quality assurance	Infant formula	(12)
Fonterra	RP-HPLC-MS, LC-MS/MS	Dairy product analysis	Infant formula, Milk powder	(13)
Cargill	IMS	Food ingredient quality and authenticity verification	Flour, Sweeteners, Protein, Oil	(14)
DuPont	LC-MS/MS, GC-MS	Food ingredient innovation and analysis	Emulsifiers, Enzymes, Probiotics, Plant-based proteins	(15)
Tate & Lyle	LC-MS/MS	Sweetener analysis and health impact assessment	Low-calorie and zero-calorie sweeteners	(16)
Symrise	IRMS	Natural ingredient authenticity verification and quality management	Vanilla extract, Fruit and Vegetable ingredients	(17)

ความท้าทาย ข้อจำกัด และแนวโน้มในอนาคต

(Challenges, limitations, and future trends)

แม้ว่าเทคโนโลยีแมสสเปกโตรเมตรี (mass spectrometry: MS) จะเป็นเครื่องมือทรงประสิทธิภาพในการตรวจสอบความถูกต้องและแหล่งกำเนิดทางภูมิศาสตร์ของอาหาร แต่ข้อจำกัดด้านต้นทุนเครื่องมือที่สูง ความซับซ้อนในการใช้งาน และความจำเป็นของบุคลากรผู้เชี่ยวชาญยังคงเป็นปัจจัยที่ต้องพิจารณา เนื่องจากการวิเคราะห์ข้อมูล MS นั้นซับซ้อนและต้องการซอฟต์แวร์เฉพาะทาง อย่างไรก็ตามปัจจุบันมีการพัฒนาเทคนิค ambient ionization MS (เช่น DESI, PADI, ASAP) ที่ลดขั้นตอนการเตรียมตัวอย่าง และเครื่อง MS ขนาดเล็กแบบพกพาสำหรับการตรวจสอบอาหารแบบเรียลไทม์ ซึ่งเทคนิค ambient ionization MS กำลังได้รับความนิยมสำหรับการคัดกรองอย่างรวดเร็ว การบูรณาการ MS กับเทคนิควิเคราะห์อื่น ๆ (เช่น โคโรนาโทกราฟี สเปกโทรสโกปี) และเคโมเมตริกส์ก็มีแนวโน้มเพิ่มขึ้นเพื่อเสริมประสิทธิภาพการวิเคราะห์ข้อมูล ความก้าวหน้าของ high-resolution MS และ tandem MS (MS/MS) ช่วยเพิ่มความไวในการตรวจหาสารปนเปื้อนในระดับต่ำมาก การประยุกต์ใช้ untargeted metabolomics และ proteomics ร่วมกับ MS กำลังขยายตัวเพื่อค้นหาสารปลอมปนและสารบ่งชี้ใหม่ ๆ นอกจากนี้การพัฒนาซอฟต์แวร์วิเคราะห์ข้อมูล MS ที่รวดเร็วและมีขีดความสามารถสูงขึ้น รวมถึงการใช้ AI และ machine learning จะช่วยเพิ่มความแม่นยำและประสิทธิภาพในอนาคต ทิศทางของ MS ในการตรวจสอบความถูกต้องและแหล่งกำเนิดอาหารจึงมุ่งเน้นไปที่การพัฒนาเทคโนโลยีที่เข้าถึงง่าย รวดเร็ว ใช้งานสะดวก ควบคุม

กับเครื่องมือประมวลผลข้อมูลขั้นสูง เพื่อให้สามารถนำไปใช้อย่างแพร่หลายและป้องกันการฉ้อโกงอาหารได้อย่างมีประสิทธิภาพยิ่งขึ้น

บทสรุป

เทคโนโลยีแมสสเปกโตรเมตรี เป็นเครื่องมือสำคัญที่ขับเคลื่อน foodomics หรือวิทยาศาสตร์การศึกษาอาหารในระดับโมเลกุลให้ก้าวหน้าไปอย่างมาก เทคโนโลยีนี้ช่วยให้เราเข้าใจถึงองค์ประกอบที่ซับซ้อนของอาหารในเชิงลึก ซึ่งนำไปสู่การพัฒนาผลิตภัณฑ์อาหารที่มีคุณภาพสูงปลอดภัย และตรงใจผู้บริโภคมากขึ้น นอกจากนี้ foodomics ยังมีบทบาทสำคัญในการสร้างความยั่งยืนให้กับอุตสาหกรรมอาหารและสิ่งแวดล้อมอีกด้วย ในอนาคต foodomics จะยังคงมีบทบาทสำคัญในการปฏิวัติวงการอาหารและสุขภาพ ด้วยการพัฒนาเทคโนโลยีใหม่ ๆ ที่จะช่วยให้การวิเคราะห์ข้อมูลทางชีวเคมีรวดเร็วและแม่นยำยิ่งขึ้น การนำ foodomics ไปประยุกต์ใช้ในอุตสาหกรรมอาหารจะช่วยให้เราได้เห็นผลิตภัณฑ์อาหารที่มีคุณค่าทางโภชนาการสูงและตอบสนองความต้องการที่หลากหลายของผู้บริโภคมากขึ้น

เอกสารอ้างอิง

1. Labster. Mass Spectrometer. Available from: <https://theory.labster.com/mass-spectrometer>
2. Cifuentes A. Food analysis and foodomics. *J Chromatogr A*. 2009;1216:7109-7110.
3. Valdés A, Álvarez RG, Socas RB, Herrero M, Ibáñez E, Cifuentes A. Foodomics: Analytical opportunities and challenges. *Anal Chem*. 2022;94:366-381.
4. Zhang, S, Qi X, Naggar Y, Wu L, Wang K. Understanding the gastrointestinal protective effects of polyphenols using foodomics-based approaches. *Frontiers in Immunology*. 2021;12:671150.
5. Mozzi F, Ortiz ME, Bleckwedel J, De Vuyst L, Pescuma M. Metabolomics as a tool for the comprehensive understanding of fermented and functional foods with lactic acid bacteria. *Food Res Int*. 2013;54:1152-1161.
6. Cevallos J, Corcuera J, Etcheberria E, Danyluk M, Rodrick G. Metabolomic analysis in food science: a review. *Trends Food Sci Technol*. 2009;20:557-566.
7. Monton J, Soga T. Metabolome analysis by capillary electrophoresis-mass spectrometry, *J Chromatogr A*. 2007;1168:237-246.
8. Geographical origin authentication via elemental fingerprint of food [Internet]. JRC Publications Repository; [cited 2025 Apr 18]. Available from: https://publications.jrc.ec.europa.eu/repository/bitstream/JRC132521/JRC132521_01.pdf
9. Y. Zhang, "Application of isotope analysis for food authenticity and traceability: Progress and challenges," Master's thesis, University of Virginia, 2015.
10. Zhao J, Li A, Jin X, Liang G, Pan L. Discrimination of geographical origin of agricultural products from small-scale districts by widely targeted metabolomics with a case study on pinggu peach. *Front Nutr*. 2022;9:891302. doi: 10.3389/fnut.2022.891302
11. Hidalgo MJ, Gaiad JE, Goicoechea HC, Mendoza A, Pérez-Rodríguez M, Pellerano RG. Geographical origin identification of mandarin fruits by analyzing fingerprint signatures based on multielemental composition. *Food Chem X*. 2023;20:101040.
12. Kussmann M, Fay L. Foodomics: Advanced mass spectrometry in modern food science and nutrition. 2013;167-189.
13. Gill BD, Saldo SC, McGrail IJ, Wood JE, Indyk HE. Rapid method for the determination of thiamine and pantothenic acid in infant formula and milk-based nutritional products by liquid chromatography–tandem mass spectrometry. *J AOAC Int*. 2020;103(3):812–817.
14. Ross KL, Dalluge JJ. Liquid chromatography/tandem mass spectrometry of glycolytic intermediates: deconvolution of coeluting structural isomers based on unique product ion ratios. *Anal Chem*. 2009 May 15;81(10):4021-6.
15. Baniasadi H, Vlahakis C, Hazebroek J, Zhong C, Asiago V. Effect of environment and genotype on commercial maize hybrids using LC/MS-Based metabolomics. *J Agric Food Chem*. 2014;62(6):1412-1422.
16. Van den Abbeele P, Poppe J, Deyaert S, Laurie I, Otto Gravert TK, Abrahamsson A, Baudot A, Karnik K, Risso D. Low-no-calorie sweeteners exert marked compound-specific impact on the human gut microbiota ex vivo. *Int J Food Sci Nutr*. 2023 Sep;74(5):630-644.
17. Geißler K, Greule M, Schäfer U, et al. Vanilla authenticity control by DNA barcoding and isotope data aggregation. *Flavour Fragr J*. 2017;32:228–237.