โครงการ

การเรียนการสอนเพื่อเสริมประสบการณ์

ชื่อโครงการ การพิสูจน์เอกลักษณ์ของสารระเหยง่ายในแกงเหลือง
โดยใช้เทคนิคเฮดสเปซโซลิดเฟส ไมโครเอกซ์แทรกชัน-แก๊สโครมาโทกราฟี
-แมสสเปกโทรเมตรี
Characterization of Volatile Compounds in Yellow Curry by
Headspace Solid Phase Microextraction–Gas Chromatography
–Mass Spectrometry

ชื่อนิสิต นางสาวศศิวิมล ภู่ศรี **เลขประจำตัว** 5833088923

ภาควิชา เคมี

ปีการศึกษา 2561

คณะวิทยาศาตร์ จุฬาลงกรณ์มหาวิทยาลัย

บทคัดย่อและแฟ้มข้อมูลฉบับเต็มของโครงงานทางวิชาการที่ให้บริการในคลังปัญญาจุฬาฯ (CUIR)
เป็นแฟ้มข้อมูลของนิสิตเจ้าของโครงงานทางวิชาการที่ส่งผ่านทางคณะที่สังกัด
The abstract and full text of senior projects in Chulalongkorn University Intellectual Repository(CUIR)
are the senior project authors' files submitted through the faculty.

การพิสูจน์เอกลักษณ์ของสารระเหยง่ายในแกงเหลือง โดยใช้เทคนิคเฮดสเปซโซลิดเฟส ไมโครเอกซ์แทรกชัน-แก๊สโครมาโทกราฟี-แมสสเปกโทรเมตรี

Characterization of Volatile Compounds in Yellow Curry by Headspace Solid Phase Microextraction–Gas Chromatography –Mass Spectrometry

โดย

นางสาวศศิวิมล ภู่ศรี

รายงานนี้เป็นส่วนหนึ่งของการศึกษาตามหลักสูตร

ปริญญาวิทยาศาสตรบัณฑิต

ภาควิชาเคมี คณะวิทยาศาสตร์

จุฬาลงกรณ์มหาวิทยาลัย

ปีการศึกษา 2561

โครงการ การพิสูจน์เอกลักษณ์ของสารระเหยง่ายในแกงเหลืองโดยใช้เทคนิคเฮดสเปซโซลิดเฟส ไมโครเอกซ์แทรกชัน-แก๊สโครมาโทกราฟี-แมสสเปกโทรเมตรี

โดย นางสาวศศิวิมล ภู่ศรี

ได้รับอนุมัติให้เป็นส่วนหนึ่งของการศึกษาตามหลักสูตรปริญญาวิทยาศาสตรบัณฑิต สาขาวิชาเคมี ภาควิชาเคมี คณะวิทยาศาสตร์ จุฬาลงกรณ์มหาวิทยาลัย

คณะกรรมการสอบโครงการ

..... ประธานกรรมการ
(รองศาสตรจารย์ ดร.สุรชัย พรภคกุล)

..... อาจารยที่ปรึกษา
(รองศาสตราจารย์ ดร.ธรรมนูญ หนูจักร)

..... กรรมการ
(อาจารย์ ดร.ชฎิล กุลสิงห์)

รายงานฉบับนี้ได้รับความเห็นชอบและอนุมัติโดยหัวหน้าภาควิชาเคมี

..... หัวหน้าภาควิชาเคมี
(รองศาสตราจารย์ ดร.วุฒิชัย พาราสุข)
วันที่ 24 เดือนพฤษภาคม พ.ศ. 2562

ชื่อโครงการ การพิสูจน์เอกลักษณ์ของสารระเหยง่ายในแกงเหลืองโดยใช้เทคนิคเฮดสเปซโซลิดเฟส ไมโครเอกซ์แทรกชัน-แก๊สโครมาโทกราฟี-แมสสเปกโทรเมตรี
ชื่อนิสิตในโครงการ นางสาวศศิวิมล ภู่ศรี เลขประจำตัว 5833088923
ชื่ออาจารย์ที่ปรึกษา รองศาสตราจารย์ ดร.ธรรมนูญ หนูจักร
ภาควิชาเคมี คณะวิทยาศาสตร์ จุฬาลงกรณ์มหาวิทยาลัย ปีการศึกษา 2561

บทคัดย่อ

ได้พิสูจน์ทราบเอกลักษณ์ของสารระเหยง่ายในพริกแกงเหลืองและส่วนประกอบย่อยของพริกแกงเหลือง โดยประยุกต์ใช้เทคนิคเทคนิคเฮดสเปซโซลิดเฟส ไมโครเอกซ์แทรกชัน (HS-SPME) ร่วมกับแก๊สโครมาโทกราฟี-แมสสเปกโทรเมตรี (GC-MS) ซึ่งใช้คอลัมน์คะปิลารีประเภท HP-5MS (30m × 0.25mm × 0.25 μm) พบว่าสภาวะที่เหมาะสมในการเตรียมตัวอย่างด้วย HS-SPME คือ สกัดที่อุณหภูมิ 60 องศาเซลเซียส ใช้เวลาในการสกัด 60 นาที จากนั้นสารที่ถูกสกัดมาได้จะถูกปลดปล่อยในส่วนฉีดสารที่อุณหภูมิ 250 องศาเซลเซียส เป็นเวลา 5 นาที โปรแกรมอุณหภูมิเตาอบของเครื่อง GC คือ เริ่มต้นที่ 50 องศาเซลเซียส ถึง 200 องศาเซลเซียส ที่อัตรา 3 องศาเซลเซียสต่อนาที จากนั้นเพิ่มอุณหภูมิจนถึง 250 องศาเซสเซียส ที่อัตรา 50 องศาเซสเซียสต่อนาที และคงที่อุณหภูมิสุดท้ายไว้ 2 นาที ซึ่งระบุเอกลักษณ์ของสารระเหยง่ายสำคัญได้ 131 สาร ได้แก่แอลกอฮอล์ แอลดีไฮด์ คีโตน เอสเทอร์ อีเทอร์ สารประกอบซัลเฟอร์ และไฮโดรคาร์บอน จากการเปรียบเทียบกับแมสสเปกตรัมและยืนยันด้วยค่า linear retention index (LRI) ของสารกับฐานข้อมูล NIST17 ซึ่งสารระเหยง่ายหลักของแกงเหลืองมาจากกระเทียมและขมิ้น จากการจัดกลุ่มข้อมูลโดยใช้วิธีวิเคราะห์องค์ประกอบหลัก (PCA) สามารถจำแนกกลุ่มของพริกแกงเหลืองที่ศึกษาได้เป็น 3 กลุ่มซึ่งกระจายตัวในบริเวณที่แตกต่างกันของ PCA พล็อต ดังนั้นจึงบ่งชี้ได้ว่าสามารถใช้วิธี HS-SPME-GC-MS ร่วมกับเคโมเมทริกซ์ในการ ระบุสารระเหยง่าย และพิสูจน์เปรียบเทียบพริกแกงเหลืองจากต่างแหล่งที่มาได้

คำสำคัญ : พริกแกงเหลือง, ขมิ้น, พริกเหลือง, กระเทียม, หอมแดง, สารระเหยง่าย, เฮดสเปซโซลิดเฟส ไมโครเอกซ์แทรกชัน, แก๊สโครมาโทกราฟี-แมสสเปกโทรเมตรี, เคโมเมตริกซ์

Project Title Characterization of Volatile Compounds in Yellow Curry by Headspace Solid Phase Microextraction–Gas Chromatography–Mass Spectrometry

Student Name Miss Sasiwimon Phoosri Student ID 5733126023

Advisor Name Associate Professor Thumnoon Nhujak, Ph.D.

Department of Chemistry, Faculty of Science, Chulalongkorn University, Academic Year 2018

Abstract

Volatile compounds in yellow curry paste and the individual ingredients were identified by headspace solid phase microextraction (HS-SPME) combined with gas chromatography-mass spectrometry (GC-MS) using a capillary column of HP-5MS (30 m × 0.25 mm × 0.25 μm). HS-SPME was performed using extraction temperature of 60 °C for 60 minutes. The extracted compounds were then desorbed at the GC inlet at 250 °C for 5 min. The GC oven temperature was programmed from 50 to 200 °C at 3 °C/min and then from 200 °C to 250 °C at 50 °C/min and hold at 250 °C for 2 min. 131 volatile compounds were identified including alcohols, aldehydes, ketones, esters, ethers, sulfur compounds and hydrocarbons by comparing their mass spectra and linear retention indices (LRI) with those from the NIST17 database. The main compounds detected in yellow curry paste were the constituents of the garlic and turmeric. By using principal component analysis (PCA), all the yellow curry pastes were classified into three groups within different regions in the PCA plots. This indicates that HS-SPME-GC-MS combined with chemometrics can be used to determine the volatile compounds and differentiate yellow curry pastes from different sources.

Keyword : Yellow Curry paste, Turmeric, Yellow pepper, Garlic, Shallot, Volatile Compound, Headspace-Solid Phase Microextraction, Gas Chromatography-Mass spectrometry, Chemometrics

กิตติกรรมประกาศ

ผู้วิจัยขอขอบพระคุณ รองศาสตราจารย์ ดร.ธรรมนูญ หนูจักร อาจารย์ที่ปรึกษาโครงการ ที่ท่านได้ดูและช่วยเหลือ และให้คำแนะนำเกี่ยวกับเนื้อหาที่เกี่ยวข้อง รวมทั้งท่านได้ให้คำปรึกษาในการเขียนรายงานฉบับนี้ให้สำเร็จลุล่วงไปด้วยดี

ขอขอบพระคุณ รองศาสตราจารย์ ดร.สุรชัย พรภคกุล ที่ท่านได้ให้คำปรึกษา และคำแนะนำเพิ่มเติมเกี่ยวกับเนื้อหาที่เกี่ยวข้องกับงานวิจัยนี้ อีกทั้งท่านยังได้กรุณาสละเวลาเพื่อตรวจทาน แก้ไข และให้เกียรติเป็นประธานกรรมการในการสอบงานวิจัยในครั้งนี้

ขอขอบพระคุณ อาจารย์ ดร.ชฎิล กุลสิงห์ ที่ท่านได้ให้คำปรึกษา และคำแนะนำเพิ่มเติมเกี่ยวกับการทดลอง เนื้อหาที่เกี่ยวข้องกับงานวิจัยนี้ อีกทั้งท่านยังได้กรุณาสละเวลาเพื่อตรวจทาน แก้ไข และให้เกียรติเป็นกรรมการในการสอบงานวิจัยในครั้งนี้

ขอขอบคุณ คุณพรรณิกา จันทา ที่คอยให้คำปรึกษาชี้แนะ ให้ความรู้ในการใช้เครื่องมือ คำแนะนำเกี่ยวกับเนื้อหา และให้ความช่วยเหลือทุกด้านที่เกี่ยวข้องกับงานวิจัยในครั้งนี้

ขอขอบคุณครอบครัว คุณพ่อ คุณแม่และพี่สาว สำหรับที่คอยช่วยเหลือ ให้คำปรึกษา ให้กำลังใจ และการสนับสนุน อีกทั้งเป็นกำลังที่สำคัญยิ่งของดิฉันตลอดมา

ขอขอบคุณโครงการการเรียนการสอนเพื่อเสริมประสบการณ์ คณะวิทยาศาสตร์ จุฬาลงกรณ์มหาวิทยาลัย ที่ให้การสนับสนุนการดำเนินงานวิจัยในครั้งนี้ และขอขอบพระคุณภาควิชาเคมี คณะวิทยาศาสตร์ จุฬาลงกรณ์มหาวิทยาลัย ที่เอื้อเฟื้ออุปกรณ์ และสารเคมี ต่าง ๆ ที่ใช้ในงานวิจัยครั้งนี้ ตลอดจนบุคลากรฝ่ายต่าง ๆ ที่เกี่ยวข้อง

สารบัญ

บทคัดย่อภาษาไทย ค

บทคัดย่อภาษาอังกฤษ ง

กิตติกรรมประกาศ จ

สารบัญ ฉ

สารบัญตาราง ฌ

สารบัญรูป ญ

สัญลักษณ์และคำย่อ ฏ

บทที่ 1 บทนำ 1

1.1 ความเป็นมาและความสำคัญของปัญหา 1

1.2 วัตถุประสงค์และขอบเขตการวิจัย 2

1.2.1 วัตถุประสงค์ 2

1.2.2 ขอบเขตการวิจัย 2

1.3 งานวิจัยที่เกี่ยวข้อง 2

1.4 ทฤษฎีและความรู้พื้นฐาน 4

1.4.1 แกงเหลือง 4

1.4.2 สมุนไพรที่เป็นส่วนประกอบของพริกแกงเหลือง 5

1.4.3 เทคนิคเฮดสเปซ-โซลิดเฟสไมโครเอกซ์แทรกชัน (HS-SPME) 7

1.4.4 แก๊สโครมาโทกราฟี-แมสสเปกโทรเมตรี (GC-MS) 10

1.4.4.1 ลักษณะของเครื่อง GC-MS 10

1.4.4.2 หลักการของเครื่อง GC-MS 12

1.4.5 การวิเคราะห์องค์ประกอบหลัก (Principal Component Analysis :PCA) 13
1.5 ประโยชน์ที่ได้รับจากงานวิจัย 14
บทที่ 2 การทดลอง 15
2.1 รายการเครื่องมืออุปกรณ์ 15
2.2 รายการสารเคมี 16
2.3 วิธีการทดลอง 17
2.3.1 การหาอัตราส่วนของสารที่เข้าคอลัมน์ (splitless and split ratio) 17
2.3.2 การหาสภาวะที่เหมาะสมในการเตรียมตัวอย่าง 18
2.3.2.1 การหาอุณหภูมิที่เหมาะสมในการสกัดสารระเหยง่าย 18
2.3.2.2 การหาเวลาที่เหมาะสมในการสกัดสารระเหยง่าย 19
2.3.3 การระบุชนิดสารระเหยง่ายที่สำคัญ 19
2.4 การวิเคราะห์ตัวอย่างน้ำพริกแกงเหลือง 20
2.5 การวิเคราะห์ตัวอย่างสมุนไพรที่ใช้เป็นส่วนประกอบ 20
2.6 การประมวลผลโดยวิธีเคโมเมทริกซ์ 21
บทที่ 3 ผลการทดลองและอภิปรายผลการทดลอง 22
3.1 การหาอัตราส่วนของสารที่เข้าคอลัมน์ (splitless and split ratio) 22
3.2 การหาสภาวะที่เหมาะสมในการเตรียมตัวอย่าง 24
3.2.1 การหาอุณหภูมิที่เหมาะสมในการสกัดสารระเหยง่าย 24
3.2.2 การหาเวลาที่เหมาะสมในการสกัดสารระเหยง่าย 26
3.3 การระบุชนิดสารระเหยง่ายที่สำคัญซึ่งจะใช้ในการวิเคราะห์ตัวอย่าง 27
3.3.1 น้ำพริกแกงเหลือง 27

3.3.2 สมุนไพรที่ใช้เป็นส่วนประกอบ 28

3.4 การประมวลผลโดยวิธีเคโมเมทริกซ์ 59

บทที่ 4 สรุปผลการทดลอง 60

เอกสารอ้างอิง 61

ภาคผนวก 65

ประวัติ 72

สารบัญตาราง

ตาราง 2-1 : แสดงปริมาณสมุนไพรที่ใช้เป็นส่วนประกอบที่ใช้ในการเตรียมตัวอย่าง 20

ตาราง 3-1 : แสดงข้อมูลและ %Normalization สารระเหยง่ายที่ตรวจพบในน้ำพริกแกงและสมุนไพรที่เป็นส่วนประกอบ 30

ตาราง 3-2 : แสดง %Normalization รวมของกลุ่มสารประกอบที่ตรวจพบในพริกแกงเหลืองและสมุนไพร 49

ตาราง 3-3 : แสดงร้อยละปริมาณเครื่องเทศที่ใช้เป็นส่วนประกอบในพริกแกงแต่ละชนิด 44

ตาราง ก-1 : แสดงสารระเหยง่ายสำคัญที่พบทั้งหมด 131 สาร 65

ตาราง ก-2 : แสดงแสดงตัวย่อและความหมายในหัวข้ออธิบายหมู่เกาะและฟังก์ชัน 71

ตาราง ก-3 : แสดงตัวย่อและความหมายตัวย่อภาษาอังกฤษหลังเลขลำดับพีก 71

สารบัญรูป

รูปที่ 1-1 : แสดงภาพอาหารคือแกงเหลืองไหลบัวกุ้งและแกงเหลืองปลากะพงหน่อไม้ 4

รูปที่ 1-2 : แสดงส่วนผสมของแกงเหลือง 5

รูปที่ 1-3 : แสดงส่วนประกอบอุปกรณ์โซลิดเฟสไมโครเอกซ์แทรกชัน 7

รูปที่ 1-4 : แสดงขั้นตอนการสกัดสาร 8

รูปที่ 1-5 : แสดงขั้นตอนการปลดปล่อยสาร 9

รูปที่ 1-6 : แสดงส่วนประกอบของระบบ GC-MS 10

รูปที่ 1-7 : แสดงการวิเคราะห์ด้วยเมทริกซ์ของการวิเคราะห์ข้อมูลแบบ PCA 14

รูปที่ 1-8 : แสดงการจัดกลุ่มด้วย PCA 14

รูปที่ 2-1 : แสดงตัวอย่างสมุนไพรที่เป็นส่วนประกอบที่ใช้ในการวิเคราะห์ 16

รูปที่ 3-1 : แสดงโครมาโทแกรมของตัวอย่างน้ำพริกแกงด้วยสภาวะ splitless 22

รูปที่ 3-2 : แสดงโครมาโทแกรมของตัวอย่างน้ำพริกแกงด้วยสภาวะ split ratio 5:1 23

รูปที่ 3-3 : แสดงโครมาโทแกรมของตัวอย่างน้ำพริกแกงด้วยสภาวะ split ratio 10:1 23

รูปที่ 3-4 : แสดงโครมาโทแกรมของตัวอย่างน้ำพริกแกงด้วยสภาวะ split ratio 20:1 23

รูปที่ 3-5 : แสดงโครมาโทแกรมของตัวอย่างน้ำพริกแกงซึ่งเปรียบเทียบอุณหภูมิที่ใช้สกัด 40, 60 และ 80 องศาเซลเซียสตามลำดับ 24

รูปที่ 3-6 : แสดงโครมาโทแกรมร่วมกันของตัวอย่างน้ำพริกแกงซึ่งเปรียบเทียบอุณหภูมิที่ใช้สกัด 40, 60 และ 80 องศาเซลเซียสตามลำดับ 25

รูปที่ 3-7 : แสดงกราฟความสัมพันธ์ระหว่างอุณหภูมิที่ใช้ในการสกัดสารระเหยง่ายในตัวอย่างน้ำพริกแกงเหลืองกับพื้นที่ใต้พีกรวมของสารในโครมาโทแกรมเฉลี่ย 25

รูปที่ 3-8 : แสดงโครมาโทแกรมของตัวอย่างน้ำพริกแกงซึ่งเปรียบเทียบเวลาที่ใช้
30, 45 และ 60 นาทีตามลำดับ 26

รูปที่ 3-9 : แสดงโครมาโทแกรมร่วมกันของตัวอย่างน้ำพริกแกงซึ่งเปรียบเทียบเวลาที่ใช้
30, 45 และ 60 นาทีตามลำดับ 26

รูปที่ 3-10 : กราฟแสดงความสัมพันธ์ระหว่างเวลาที่ใช้ในการสกัดสารระเหยง่ายในตัวอย่าง
น้ำพริกแกงเหลือง กับพื้นที่ใต้พีกรวมของสารในโครมาโทแกรมเฉลี่ย 27

รูปที่ 3-11 : แสดงโครมาโทแกรมของสารระเหยง่ายในตัวอย่างน้ำพริกแกง I 52

รูปที่ 3-12 : แสดงโครมาโทแกรมของสารระเหยง่ายในตัวอย่างน้ำพริกแกง II 53

รูปที่ 3-13 : แสดงโครมาโทแกรมของสารระเหยง่ายในตัวอย่างน้ำพริกแกง III 54

รูปที่ 3-14 : แสดงโครมาโทแกรมของสารระเหยง่ายในตัวอย่างขมิ้น 55

รูปที่ 3-15 : แสดงโครมาโทแกรมของสารระเหยง่ายในตัวอย่างพริกเหลือง 56

รูปที่ 3-16 : แสดงโครมาโทแกรมของสารระเหยง่ายในตัวอย่างกระเทียม 57

รูปที่ 3-17 : แสดงโครมาโทแกรมของสารระเหยง่ายในตัวอย่างหอมแดง 58

สัญลักษณ์และคำย่อ

สัญลักษณ์และคำย่อ	ความหมาย
CAR	carboxen
CAS	chemical abstracts service
°C	degree celsius
DVB	divinyl benzene
FID	flame ionization detector
GC	gas chromatography
HS	head space
IMS	ion mobility spectrometry
RI	retention index
MS	mass spectrometry
min	minute
NIST	National Institute of Standards and Technology
PDMS	polydimethylsiloxane
PCA	principal component analysis
RT	retention time
SPME	solid phase microextraction

บทที่ 1
บทนำ

1.1 ความเป็นมาและความสำคัญของปัญหา

แกงเหลือง (Yellow Curry) หรือเรียกอีกชื่อหนึ่งว่าแกงส้มใต้ เป็นหนึ่งในอาหารทางภาคใต้ของประเทศไทยที่ขึ้นชื่อและได้รับความนิยม เนื่องจากมีเอกลักษณ์เด่นในด้านสีของน้ำแกง รสชาติ และกลิ่น ความเป็นเอกลักษณ์นี้ล้วนมาจากสมุนไพรที่เป็นองค์ประกอบพื้นฐานของน้ำพริกแกง ได้แก่ พริก กระเทียม หอมแดง และขมิ้น เป็นต้น ซึ่งเป็นผลมาจากองค์ประกอบทางเคมีประเภทสารระเหยง่าย (Volatile compound) ที่มีอยู่ในสมุนไพรแต่ละชนิด โดยสมุนไพรแต่ละชนิดมีองค์ประกอบทางเคมีประเภทสารระเหยง่ายที่แตกต่างกัน อาทิเช่น สารระเหยง่ายหลักที่พบในพริกคือ beta-caryophyllene กระเทียมคือ allicin, alliin, allyl disulfide และ diallyl disulfide ขมิ้นคือ curcuminoid และ turmerone องค์ประกอบทางเคมี[1] ที่แตกต่างกันทำให้เกิดกลิ่นที่แตกต่างกัน

เนื่องจากการศึกษาเกี่ยวกับการพิสูจน์เอกลักษณ์ของสารระเหยง่ายในแกงเหลือง ยังไม่เป็นที่แพร่หลาย ดังนั้นงานวิจัยนี้จึงสนใจศึกษาสารระเหยง่ายในแกงเหลือง โดยใช้ตัวอย่างน้ำพริกแกงสำเร็จรูปจากแหล่งต่าง ๆ และตัวอย่างสมุนไพรที่เป็นส่วนประกอบย่อย เพื่อใช้ระบุแหล่งที่มาของสารระเหยง่ายดังกล่าว สมุนไพรที่ใช้ในโครงการนี้ได้แก่ ขมิ้น พริกเหลือง กระเทียม และหอมแดง

การวิเคราะห์สารระเหยง่ายในอาหาร โดยทั่วไปเทคนิคที่นิยมใช้คือแก๊สโครมาโทกราฟี-แมสสเปกโทรเมตรี (gas chromatography- mass spectrometry : GC-MS) เนื่องจากวิเคราะห์ได้แม่นยำ โดยการเปรียบเทียบแมสสเปกตรัมของสารกับระบบฐานข้อมูล และยืนยันด้วยค่า linear retention index (LRI) ของสารนั้น ๆ ในแต่ละคอลัมน์ โดยเทคนิคการเตรียมสารตัวอย่างที่นิยมใช้คู่กับ GC-MS คือเฮดสเปซโซลิดเฟส – ไมโครเอกซ์แทรกชัน (headspace-solid phase microextraction : HS-SPME) ซึ่งเป็นการเลือกสกัดสารจำเพาะที่อยู่ในรูปไอระเหยเท่านั้นให้มาจับไฟเบอร์โดยตรง เป็นเทคนิคที่ทำได้ง่าย ลดขั้นตอนความซับซ้อน รวดเร็ว และนิยมใช้กันอย่างแพร่หลายในการวิเคราะห์สารระเหยง่ายในอาหาร

เมื่อนำข้อมูลจากการวิเคราะห์ด้วย GC-MS ซึ่งมีปริมาณมากและซับซ้อน จึงใช้วิธีเคโมเมทริกซ์ (chemometrics) มาประยุกต์ใช้ ซึ่งวิธีเคโมเมทริกซ์เป็นการวิเคราะห์หารูปแบบ และเปรียบเทียบความแตกต่างของข้อมูลระหว่างตัวอย่างด้วยวิธีการที่เกี่ยวข้องกับสถิติหลายตัวแปร (multivariate statistical analysis) ในการช่วยประมวลผลการทดลอง และจัดกลุ่มข้อมูล ทำให้การวิเคราะห์ข้อมูลมีความเป็นระบบมากยิ่งขึ้น

1.2 วัตถุประสงค์และขอบเขตการวิจัย

1.2.1 วัตถุประสงค์

เพื่อหาส่วนประกอบของสารระเหยง่าย (volatile compounds) ในแกงเหลืองโดยใช้เทคนิคเฮดสเปซโซลิดเฟส ไมโครเอกซ์แทรกชัน-แก๊สโครมาโทกราฟี-แมสสเปกโทรเมตรีในการตรวจวัด
และใช้เคโมเมทริกซ์มาช่วยในการเปรียบเทียบ และแยกแยะพริกแกงเหลืองจากต่างแหล่งที่มา

1.2.2 ขอบเขตการวิจัย

- หาสภาวะที่เหมาะสมของการวิเคราะห์สารระเหยง่ายในพริกแกงเหลืองโดยเทคนิค HS-SPME-GC-MS
- วิเคราะห์สารระเหยง่ายในตัวอย่างพริกแกงสำเร็จรูป 3 แหล่ง โดยเทคนิค HS-SPME-GC-MS
- วิเคราะห์สารระเหยง่ายในตัวอย่างสมุนไพรที่เป็นส่วนประกอบ 4 ชนิด โดยเทคนิค HS-SPME-GC-MS
- ประมวลผลการทดลอง และจัดกลุ่มข้อมูลโดยวิธีเคโมเมทริกซ์ชนิด PCA

1.3 งานวิจัยที่เกี่ยวข้อง

ในปัจจุบันมีการศึกษาส่วนประกอบของสารระเหยง่ายในอาหารอย่างแพร่หลาย ซึ่งในการวิจัยหลายงานได้ใช้ตัวอย่างหลายชนิดไม่ว่าจะเป็นอาหารสำเร็จรูป ส่วนประกอบที่เป็นสมุนไพร ผัก ผลไม้ หรือเครื่องดื่ม โดยส่วนใหญ่นำมาวิเคราะห์เพื่อตรวจวัดหาสารระเหยง่ายด้วยเทคนิค GC-MS

Arthur และ Pawliszyn[2] ได้ศึกษาพัฒนาวิธีเตรียมสารที่สามารถนำไปตรวจวัดสารระเหยง่ายได้ โดยใช้เทคนิคเฮดสเปซโซลิดเฟส ไมโครเอกซ์แทรกชัน (HS-SPME) ในการสกัดสารระเหยง่ายให้ดูดซับบนไฟเบอร์แล้วนำไฟเบอร์ที่ดูดซับสารระเหยง่ายแล้วนำมาฉีดในส่วนฉีดสารของ GC-MS ให้

ความร้อนปลดปล่อยสารระเหยง่ายออกมา ซึ่งได้รับความนิยมอย่างมาก เนื่องจากเป็นเทคนิคที่ไม่ต้องใช้ตัวทำละลาย ทำได้ง่าย และประหยัดเวลา

เทคนิค HS-SPME นั้นยังสามารถใช้เตรียมสารที่สนใจวิเคราะห์ได้ในหลายสถานะ ตัวอย่างในงานวิจัยของ Ning และคณะ[3] ได้พิสูจน์เอกลักษณ์สารระเหยง่ายของตัวอย่างที่เป็นของแข็งคืออัลมอนด์คั่ว โดยใช้ไฟเบอร์ชนิด DVB/CAR/PDMS ร่วมกับ GC-MS ซึ่งส่วนประกอบของสารระเหยง่ายที่ถูกตรวจวัดได้นั้นมีส่วนเกี่ยวข้องในการกำหนดคุณสมบัติกลิ่นและรสของอัลมอนด์คั่วได้ และงานวิจัยของ Akkad และคณะ[4] ได้วิเคราะห์สารระเหยง่ายของถั่วฟาบะ (*Vicia faba* var. *minor*) ที่ปลูกในประเทศแคนาดา พบสารระเหยโดยระบุแบ่งออกเป็น 9 กลุ่มได้แก่ อะโรมาติกไฮโดรคาร์บอน อัลดีไฮด์ อัลเคน อัลคีน แอลกอฮอล์ คีโตน กรดอินทรีย์ เอสเทอร์ และอื่น ๆ

ตัวอย่างงานวิจัยที่วิเคราะห์ตัวอย่างในสถานะของเหลว เช่น งานวิจัยของ Liu และคณะ [5] ที่ได้วิเคราะห์กลิ่นจากสารระเหยง่ายในตัวอย่างน้ำแอปเปิ้ล 5 สายพันธุ์ในประเทศจีน และงานวิจัยของ Ziolkowska และคณะ[6] ที่ได้วิเคราะห์ ไวน์ 79 ชนิด: จากไวน์ขาว 38 ชนิดและ ไวน์แดง 41 ชนิด ด้วย SPME-MS และ SPME-GC-MS ร่วมกับการวิเคราะห์ด้วยเคโมเมทริกซ์ (chemometrics)

จากข้อมูลที่ได้จากการวิเคราะห์ด้วยเทคนิค GC-MS ในสารระเหยง่ายมีจำนวนมาก และเป็นข้อมูลที่ซับซ้อน จึงได้นำวิธีเคโมเมทริกซ์เข้ามาช่วยในการจำแนกข้อมูล เพื่อใช้ในการจัดกลุ่มโดยระบุความเหมือนและความแตกต่างของตัวอย่างแต่ละชนิดได้โดยอ้างอิงถึงสัดส่วนจำนวนของสารระเหยง่ายในตัวอย่าง [7]

Li และคณะ [8] ศึกษา fingerprint ทางเคมีของเห็ดมัสสึทาเกะ (*Tricholoma matsutake* Singer) โดยใช้เทคนิค HS-GC–IMS ร่วมกับ PCA ในการวิเคราะห์สารระเหยง่าย ผล PCA แสดงให้เห็นว่าเห็ดที่สดและแห้งแตกต่างกันอย่างชัดเจน และเห็ดจากต่างแหล่งที่มานั้นก็ยังมีความแตกต่างกันด้วย

1.4 ทฤษฎีและความรู้พื้นฐาน

1.4.1 แกงเหลือง

แกงเหลืองเป็นแกงพื้นเมืองของทางภาคใต้ หรือเรียกว่าแกงส้มใต้ มีรสรุนแรง เปรี้ยวปน เผ็ดที่มีลักษณะร่วมกับแกงส้มของภาคอื่น ๆ คนภาคใต้มักเรียกว่า แกงส้ม ซึ่งคำว่าส้มนั้นแสดงถึงรสชาติของแกง แสดงถึงความเปรี้ยว ยกตัวอย่างอาหารชนิดอื่นๆเช่น ปลาส้ม ผักส้ม กุ้งส้ม เป็นต้น

การเรียกว่า แกงเหลือง น่าจะเป็นชื่อภายหลังที่เรียกใหม่โดยคนนอกวัฒนธรรมภาคใต้ ซึ่งเดิมมีอาหารแกงส้มสำรับเดิมที่ตนเองคุ้นเคย และแกงรสเปรี้ยวสีเหลืองจัด มีส่วนผสมของกะปิเข้มข้น ทำให้มีความแตกต่างจากแกงส้มแบบภาคกลางมาก[9]

ส่วนประกอบของแกงเหลืองนั้นสามารถปรับเปลี่ยนได้หลายอย่าง เช่นเนื้อสัตว์ ไม่ว่าจะเป็นกุ้งหรือปลา ที่นิยมเป็นปลาเนื้ออ่อนได้แก่ ปลากะพงและปลาหมอ ซึ่งสามารถใช้ผักต่างๆ แทนหน่อไม้ดองได้ หรือใช้ผลไม้ที่มี รสเปรี้ยว แทนน้ำมะขามเปียกและน้ำมะนาวได้

รูปที่ 1-1 : แสดงภาพอาหารคือแกงเหลืองไหลบัวกุ้งและแกงเหลืองปลากะพงหน่อไม้[10]

ส่วนผสมที่เป็นหลักของแกงเหลืองคือขมิ้นที่เป็นส่วนประกอบอยู่ในน้ำพริกแกงเหลือง ซึ่งให้สีเหลืองสวย แล้วยังสามารถให้กลิ่นหอมกลบกลิ่นคาวของเนื้อสัตว์ได้ดีอีกด้วย

นอกจากประโยชน์ที่รับโดยตรงของสารอาหารจากเนื้อสัตว์ สมุนไพรและผักแล้วยังมีงานวิจัยที่เกี่ยวข้องของ รศ.ดร. สมศรี เจริญเกียรติกุล[11] ที่ได้ศึกษาลักษณะการตายของเซลล์มะเร็ง โดยป้อนน้ำแกงไทยยอดนิยมเช่น แกงเลียง แกงป่า แกงเหลือง แกงส้ม และต้มยำให้กับหนูทดลอง พบว่าแกงเหลืองสามารถแสดงผลของการต้านมะเร็งได้ถึง 25 % อีกด้วย

1.4.2 สมุนไพรที่เป็นส่วนประกอบของพริกแกงเหลือง

ส่วนผสมของแกงเหลืองประกอบด้วยสมุนไพร เช่น พริก ขมิ้น กระเทียม หอมแดง และส่วนผสมอื่น ๆ เช่นกะปิ กุ้งแห้ง เป็นต้น

เอกลักษณ์ของแกงเหลืองที่เด่นชัดคือ สีของน้ำแกง ซึ่งมาจากการใส่ขมิ้นเป็นส่วนประกอบ โดยขมิ้นนั้นเป็นสมุนไพรที่สามารถช่วยในเรื่องการต้านอนุมูลอิสระ ป้องกันการเกิดมะเร็งในตับ บรรเทาอาการปวดท้อง ท้องอืด แน่นจุกเสียด และยังมีวิตามินเอ วิตามินอี วิตามินซี และเกลือแร่อื่น ๆ [12] นอกจากนั้นแกงเหลืองยังอุดมไปด้วยคุณประโยชน์ทางอาหารจากพืชผัก และเนื้อสัตว์ ซึ่งเป็นส่วนประกอบอีกด้วย

รูปที่ 1-2 : แสดงส่วนผสมของแกงเหลือง[13]

ในการพิสูจน์เอกลักษณ์ของสารระเหยง่ายในสมุนไพรนั้นมีหลายงานวิจัยที่เกี่ยวข้อง เช่น งานวิจัยของ Junior และคณะ [14] ได้วิเคราะห์พริกโดยหาสภาวะที่เหมาะสมสำหรับการเตรียมด้วย HS-SPME ร่วมกับเทคนิค GC-FID และ GC-MS พบกลุ่มสารเคมีหลายประเภทเช่นเอสเทอร์ แอลกอฮอล์ อัลดีไฮด์ เทอร์พีน อัลเคนและคีโตน อีกทั้งงานวิจัยของ Patel และคณะ [15] ได้พิสูจน์หาสารระเหยง่ายในพริกพื้นเมืองของเปรู 50 ชนิดโดยใช้ HS-SPME-GCMS พบว่ามี 127 สารแบ่งออกเป็น 7 กลุ่มคือ ไฮโดรคาร์บอน เอสเทอร์ เทอร์พีน อัลดีไฮด์ และคีโตน

Molina-Calle และคณะ [16] ใช้เทคนิค GC-MS ศึกษาเพื่อเปรียบเทียบสารระเหยง่ายในกระเทียมดำและกระเทียมขาว ร่วมกันเทคนิค Headspace พบว่าสารระเหยง่าย 51 สาร มีองค์ประกอบหลักส่วนใหญ่เป็นสารระเหยง่ายจำพวกซัลเฟอร์

Soto และคณะ[17] ได้ศึกษาสารระเหยง่ายในหัวหอม พบว่ามีสารประอบ 96 สาร เป็นกลุ่ม เอสเทอร์ แอลกอฮอล์ อัลคีน ซัลไฟด์ เฮเทอโรไซเคิล กรดคาร์บอกซิลิก คีโตนและอัลดีไฮด์ โดยสารประกอบของซัลเฟอร์เป็นสารเคมีที่พบมากที่สุด สารระเหยง่ายเด่นคือ 1,3-dithiane, 2,2-dimethyl, dimethyl trisulfide, piperidine 4-methyl-3-pentenal, methyl(E)-1-propenyl sulfide, dipropyl trisulfide และ 3,4-dimethylthiophene ซึ่งในวิจัยของ Wang Y. และคณะ[18] ได้ศึกษาพืชสกุล *Allium* นี้เช่นกัน ได้แก่ หัวหอม กระเทียม และหอมแดง สามารถระบุสารที่พบกลุ่มใหญ่ 2 กลุ่มคือ สารประกอบซัลเฟอร์และคาร์บอนิล

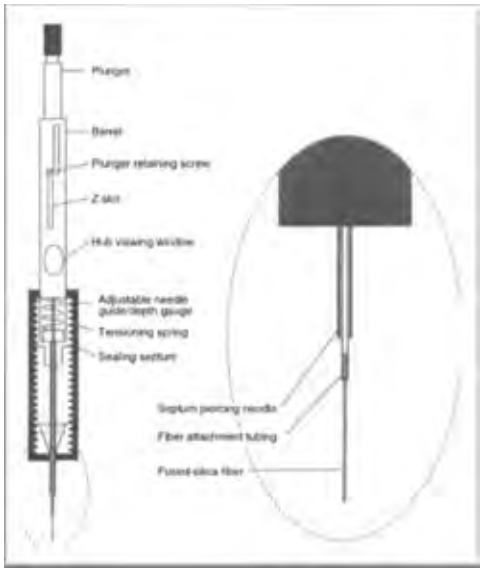
อีกงานวิจัยที่น่าสนใจเกี่ยวกับการศึกษาสารระเหยง่ายในสมุนไพรคือขมิ้น (Rhizoma Curcumae Longae) ซึ่งเป็นสมุนไพรที่ทำให้แกงเหลืองนั้นมีสีที่โดดเด่นโดย Ni และคณะ[19] ใช้เทคนิค GC-MS และ HPLC-DAD ในการศึกษา fingerprint ใน 1 มิติและ 2 มิติ ซึ่งจากเทคนิค GC-MS พบว่าสามารถระบุสารประกอบได้ 27 สาร

นอกจากสมุนไพรแล้วยังมีส่วนประกอบแล้วยังมีเครื่องปรุงรสที่เกี่ยวข้องเช่น กะปิ น้ำมะนาว และน้ำปลา เป็นต้น งานวิจัยของ Pongsetkul และคณะ[20] ได้ศึกษาสมบัติขององค์ประกอบเคมีของกะปิจาก 11 แหล่งของประเทศไทย สามารถระบุสาระเหยง่ายได้จำนวนมาก โดยสารกลุ่มหลักคือสารประเภทไพราซีน ส่วนงานวิจัยของ Leonés และคณะ[21] ได้พัฒนากระบวนการระบุเอกลักษณ์ของสารในน้ำส้มสายชูที่มีส่วนประกอบของน้ำมะนาวด้วยวิธี GC-MS โดยพบสารส่วนใหญ่เป็นสารกลุ่มเทอร์พีน ได้แก่ β-myrcene, α-terpinene, D-limonene, p-cymene, terpinolene และ β-bisabolene อีกทั้งยังมีงานวิจัยของ Giri และคณะ[22] ได้พิสูจน์เอกลักษณ์สารระเหยง่ายที่ให้กลิ่นของน้ำพริกปลา โดยเปรียบเทียบกับน้ำปลาและน้ำพริกถั่วเหลืองหมัก พบสารที่ให้กลิ่นแตกต่างกันหลายชนิด และใช้ข้อมูลทางสถิติในการเปรียบเทียบกลุ่มชนิด PCA

ในบางสูตรของแกงเหลืองจะมีการเติมตะไคร้ร่วมด้วย ซึ่งสามารถให้กลิ่นจากสารระเหยง่าย โดยงานวิจัยของ Tyagi และคณะ [23] ได้วิเคราะห์สารระเหยง่ายด้วยเทคนิค GC-MS พบสารระเหยง่ายเด่นคือ geranial (40.5%), neral (30.7%), geranyl acetate (5.1%) และ caryophyllene (2.5%)

1.4.3 เทคนิคเฮดสเปซ-โซลิดเฟสไมโครเอกซ์แทรกชัน (HS-SPME)

เทคนิค HS-SPME ถูกพัฒนาโดย Janus Pawliszyn[24] ในปี ค.ศ. 1990 เพื่อใช้ในการสกัดสารระเหยง่ายในตัวอย่างซึ่งสามารถใช้ได้ทั้งในสถานะของแข็ง ของเหลว หรือแก๊ส โดยจะให้สารตัวอย่างอยู่ในภาชนะปิด แล้วทำให้เกิดสมดุลระหว่างสารที่ต้องการวิเคราะห์กับช่องว่างด้านบนเหนือสารตัวอย่างเรียกว่าเฮดสเปซ (headspace)

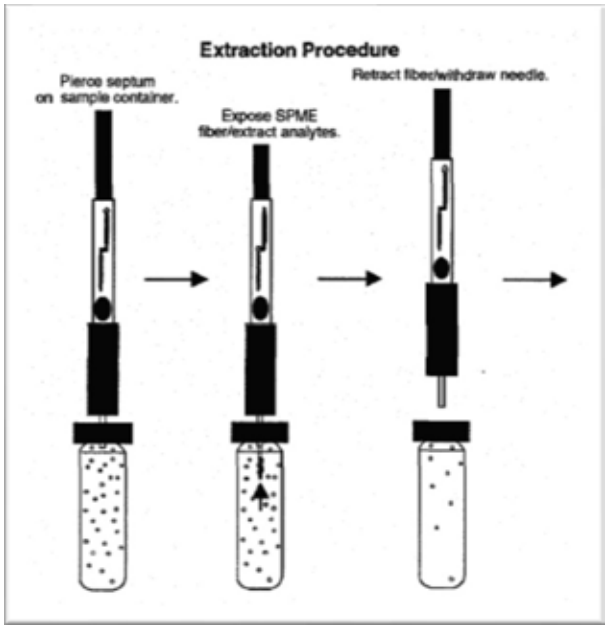


รูปที่ 1-3 : แสดงส่วนประกอบอุปกรณ์โซลิดเฟสไมโครเอกซ์แทรกชัน[24]

HS-SPME ประกอบด้วย 2 ขั้นตอน [24] คือ ขั้นตอนการสกัด และขั้นตอนการปลดปล่อยสาร

ขั้นตอนการสกัด (Extraction Step) คือการที่พอลิเมอร์ที่เคลือบอยู่บนไฟเบอร์นั้นจะทำหน้าที่ดูดซับสารระเหยง่ายจากตัวอย่างบริเวณเฮดสเปซในขวดเก็บตัวอย่าง ซึ่งประกอบด้วย 3 ขั้นตอนคือ

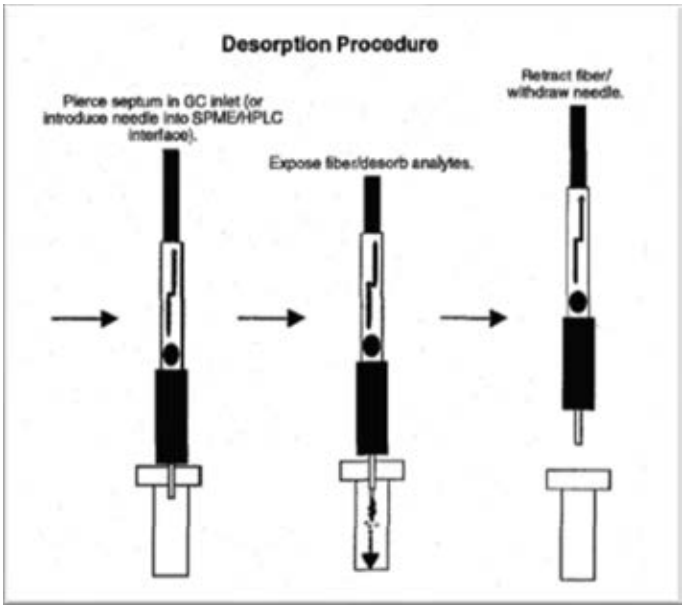
1. เจาะเข็ม SPME ผ่านผนังกั้นของขวดบรรจุสารตัวอย่าง (septum) หลังจากปล่อยให้อยู่ในสภาวะสมดุลของสารระเหยง่ายในเฮดสเปซของตัวอย่าง
2. ปล่อยให้ไฟเบอร์ออกมาจาก septum piercing needle ลงไปในบริเวณเฮดสเปซ เพื่อให้เกิดการดูดซับของสารระเหยง่ายบนไฟเบอร์
3. เก็บไฟเบอร์เข้าไปใน septum piercing needle และดึงเข็ม SPME ออกจากขวดบรรจุสารตัวอย่าง เพื่อเข้าสู่ขั้นตอนการปลดปล่อยสาร



รูปที่ 1-4 : แสดงขั้นตอนการสกัดสาร[25]

ขั้นตอนการปลดปล่อยสาร (Desorption Step) คือการนำไฟเบอร์ที่ดูดซับสารตัวอย่างแล้ว มาวิเคราะห์ด้วยเทคนิค GC-MS เพื่อปลดปล่อยสารตัวอย่างออกจากไฟเบอร์ที่บริเวณส่วนปล่อยสารของเครื่อง GC-MS ซึ่งประกอบด้วย 3 ขั้นตอนคือ

1. นำ septum piercing needle เจาะเข้าไปที่ส่วนฉีดสารของเครื่อง GC-MS ที่อุณหภูมิสูง
2. ปล่อยให้ไฟเบอร์ออกมาจาก septum piercing needle เพื่อปลดปล่อยสารที่ต้องการวิเคราะห์ให้เข้าสู่ส่วนฉีดสารของเครื่อง GC-MS
3. เมื่อครบกำหนดเวลาที่ปลดปล่อยสารออกจากไฟเบอร์จนหมดแล้ว เก็บไฟเบอร์เข้าไปใน septum piercing needle และนำเข็ม SPME ออกจากส่วนฉีดสารของเครื่อง GC-MS

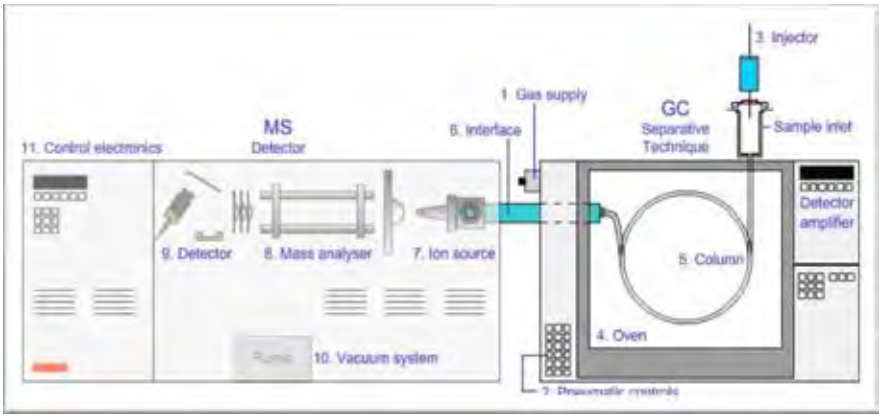


รูปที่ 1-5 : แสดงขั้นตอนการปลดปล่อยสาร[25]

การเตรียมสารโดยเทคนิค HS-SPME มีข้อดีคือ เป็นเทคนิคการสกัดที่ง่าย มีประสิทธิภาพสูง ใช้เวลาน้อย และไม่ต้องใช้ตัวทำละลายในการสกัดสารทำให้เกิดของเสียน้อย ส่วนข้อด้อยคือ เป็นอุปกรณ์ที่ต้องนำเข้าจากต่างประเทศ มีราคาสูง การใช้งานต้องระมัดระวัง เนื่องจากไฟเบอร์ค่อนข้างเปราะหักง่าย โดยเฉพาะในตัวอย่างที่เป็นของแข็งผลของสารรบกวน (matrix effect) จะส่งผลต่อการวิเคราะห์ค่อนข้างมาก

1.4.4 แก๊สโครมาโทกราฟี-แมสสเปกโทรเมตรี (GC-MS)

เป็นเทคนิคที่ใช้ในการวิเคราะห์สารประกอบอินทรีย์ประเภทต่าง ๆ ที่กลายเป็นไอได้ง่าย ซึ่งเป็นวิธีที่ได้รับความนิยมอย่างมาก เนื่องจากเป็นเครื่องมือที่ใช้เพื่อการวิเคราะห์เชิงคุณภาพและเชิงปริมาณที่ต้องการความแม่นยำสูง มีความจำเพาะ (specificity) และ มีสภาพไว (sensitivity) ในการวัดสูง ให้ข้อมูลแมสสเปกตรัม (mass spectrum) ของสาร เปรียบเทียบผลวิเคราะห์กับฐานข้อมูล (Library) เพื่อความถูกต้องได้โดยไม่จำเป็นต้องใช้สารมาตรฐาน ซึ่งถือเป็นข้อดีของเทคนิคของเครื่องมือทั้ง 2 ประเภท คือเครื่องแก๊สโครมาโทรกราฟี (Gas Chromatography) และเครื่องแมสสเปกโทรมิเตอร์ (Mass Spectrometer)



รูปที่ 1-6 : แสดงส่วนประกอบของระบบ GC-MS[26]

1.4.4.1 ลักษณะของเครื่อง GC-MS จะประกอบด้วยส่วนต่าง ๆ ดังนี้ [26]

1. Gas supply คือส่วนจ่ายแก๊สที่ใช้เป็นเฟสเคลื่อนที่ เป็นแก๊สเฉื่อยที่ไม่ทำปฏิกิริยากับโมเลกุล โดยทั่วไปจะมีตัวกรองเพื่อทำให้แก๊สมีความบริสุทธิ์สูง และมีตัวควบคุมแรงดันของแก๊ส (Regulator)
   - Carrier gas : ไฮโดรเจน ฮีเลียม และไนโตรเจน ซึ่งโดยทั่วไปนิยมใช้ฮีเลียมร่วมกับ MS detector
   - Make-up gas : ไฮโดรเจน ฮีเลียม และไนโตรเจน ใช้ในกรณีใช้ FID detector ร่วมกับ MS
   - Detector fuel gas : ไฮโดรเจน และอากาศบริสุทธิ์ ใช้ในกรณีใช้ FID detector ร่วมกับ MS
2. Pneumatic controls คือส่วนควบคุมของแก๊สให้มีความดันหรืออัตราเร็วการไหลของแก๊สที่ถูกต้องตามตั้งค่าก่อนที่จะไหลเข้าสู่ส่วนต่าง ๆ ของเครื่อง

3. Injector คือเครื่องฉีดสารตัวอย่างเข้าคอลัมน์ โดยทั่วไปจะฉีดสารตัวอย่างเข้าไปในส่วนฉีดสาร (inlet) มักจะมีตัวให้ความร้อน (heater) ติดตั้งอยู่ด้วยเพื่อทำให้สารตัวอย่างกลายเป็นไอ
4. Oven คือส่วนที่บรรจุคอลัมน์เอาไว้ ควบคุมอุณหภูมิของคอลัมน์ให้เปลี่ยนไปตามความเหมาะสมกับสารที่ฉีด สามารถปรับได้ 2 แบบคือ Isocratic temperature (isothermal) และ gradient temperature (program temperature) ข้อดีของ gradient temperature คือสามารถใช้กับสารผสมที่มีช่วงของจุดเดือดกว้าง และช่วยลดเวลาในการวิเคราะห์ได้
5. Column คือส่วนที่ใช้แยกสารตัวอย่าง คอลัมน์ที่ใช้กันทั่วไปใน GC นั้นมีอยู่ 2 ประเภท คือ packed column และ capillary column การเลือกใช้คอลัมน์แต่ละชนิดขึ้นอยู่กับคุณสมบัติของสารผสมที่ต้องการวิเคราะห์
6. Interface คือส่วนที่เชื่อมโยงระหว่าง GC กับ MS ซึ่งอาจเป็นหลอดแก้วหรือ Teflon ที่มีรูพรุนเพื่อแยกเอา carrier gas ออกก่อน จากนั้นสารตัวอย่างจะเข้าสู่ ionization chamber
7. Ion source คือส่วนที่ทำให้สารหรือโมเลกุลเกิดเป็นไอออนในสภาวะแก๊สเรียกว่า การเกิดไอออไนซชั่น (ionization) โดยทำให้เกิดไอออนได้ 2 เทคนิคคือ Electron Impact (EI) และ Chemical Impact (CI)
8. Mass analyzer คือส่วนที่ทำหน้าที่คัดแยกมวลต่อประจุ โดยสามารถทำงานได้เมื่อมีสภาวะเป็นสุญญากาศหรือมีความดันต่ำกว่า 10^{-5} Torr
9. Detector คือส่วนตรวจวัด เป็นอุปกรณ์ที่ใช้สำหรับตรวจวัดสารเชิงเดี่ยวที่ถูกแยกออกมาจากคอลัมน์แล้วส่งสัญญาณไฟฟ้าไปยังระบบประมวลผลการตรวจวัดตัวอย่างเช่น Flame Ionization Detector (FID) และ Electron Capture Detector (ECD) เป็นต้น
10. Vacuum system คือระบบสุญญากาศเพื่อควบคุมระบบให้ถูกต้อง MS ต้องทำงานภายใต้สุญญากาศเพื่อแน่ใจว่า ไอออน (ion) เดินทางไปยังตัวตรวจจับโดยไม่เกิดการชนกันกับอากาศใน MS
11. Control electronics คือส่วนเลือกและควบคุม MS parameters จากแผงหน้าปัด หรือสามารถตั้งค่าได้จากระบบซอฟต์แวร์ (software)

1.4.4.2 หลักการของเครื่อง GC-MS

โครมาโทกราฟี เป็นเทคนิคการแยกสารที่เกี่ยวข้องกับสมดุลการกระจายตัวขององค์ประกอบต่าง ๆ ในตัวอย่างระหว่างวัฏภาค 2 ชนิด คือ วัฏภาคเคลื่อนที่ ซึ่งทำหน้าที่พาองค์ประกอบของตัวอย่างให้เคลื่อนที่ผ่านวัฏภาคนิ่ง ซึ่งทำหน้าที่แยกสารผสมออกจากกัน โดยอาศัยความแตกต่างของการเกิดอันตรกิริยาระหว่างองค์ประกอบตัวอย่างแต่ละชนิดกับวัฏภาคนิ่ง โดยความแตกต่างดังกล่าวเป็นผลจากความแตกต่างของคุณสมบัติทางเคมีของสาร ทำให้สารแต่ละชนิดมีการเคลื่อนที่ผ่านวัฏภาคนิ่งด้วยอัตราการเคลื่อนย้ายที่แตกต่างกัน

สำหรับแก๊สโครมาโทกราฟีเป็นเทคนิคหนึ่งในโครมาโทกราฟีที่ใช้แก๊สพา เป็นวัฏภาคเคลื่อนที่ เหมาะสำหรับการใช้แยกสารที่ระเหยง่าย และมีเสถียรภาพทางความร้อน โดยแก๊สพาจะต้องมีความบริสุทธิ์สูง ซึ่งแก๊สที่นิยมใช้เป็นแก๊สพา คือ ไนโตรเจน ฮีเลียม หรือไฮโดรเจน โดยทั่วไปนิยมใช้แก๊สฮีเลียมสาหรับคอลัมน์คะปิลลารี เมื่อตัวอย่างที่กลายเป็นไอที่จุดฉีด แก๊สพาจะพาองค์ประกอบของตัวอย่างเคลื่อนที่ผ่านคอลัมน์คะปิลลารี ซึ่งเป็นท่อปลายเปิดที่ผนังด้านในเคลือบด้วยวัฏภาคนิ่งซึ่งโดยทั่วไปเป็นวัฏภาคของเหลวที่สามารถทนอุณหภูมิสูงของเตาได้ องค์ประกอบในตัวอย่างจะถูกแยกออกมาจากคอลัมน์ตามลำดับของจุดเดือด หรือความมีขั้วของสาร และตรวจวัดด้วยดีเทคเตอร์ที่เหมาะสม

ผลที่ได้จากการแยกและตรวจวัดสารที่ออกมาจากคอลัมน์เรียกว่า โครมาโทแกรม ซึ่งให้ข้อมูลที่สำคัญ 2 ชนิด คือ รีเทนชันไทม์ (retention time) เป็นเวลาที่สารแต่ละชนิดถูกรั้งอยู่ในคอลัมน์ เป็นข้อมูลที่ใช้ในการวิเคราะห์คุณภาพหรือบ่งบอกชนิดของสารเทียบกับรีเทนชันไทม์ของสารมาตรฐาน อีกชนิดหนึ่งคือ ความสูงหรือพื้นที่ของพีก (peak high หรือ peak area) การที่ผลการแยกของสารในเทคนิค GC ปรากฏให้เห็นเป็นพีกในโครมาโทแกรมนั้นเป็นผลจากการกระจายตัวขององค์ประกอบแต่ละชนิดในคอลัมน์ภายหลังการแยก ซึ่งสารแต่ละชนิดจะมีรีเทนชันไทม์ที่แตกต่างกันเป็นเอกลักษณ์เฉพาะตัว [27]

1.4.5 การวิเคราะห์องค์ประกอบหลัก (Principal Component Analysis :PCA)

เป็นหนึ่งในการวิเคราะห์ข้อมูลในเชิงสถิติในทางเคมีที่เรียกว่าเคโมเมทริกซ์ โดยเคโมเมทริกซ์ (chemometrics) คือวิธีการประมวลผลข้อมูลที่ถูกนามาใช้อย่างมากในทางเคมีวิเคราะห์ ซึ่งเป็นวิธีที่เหมาะสมสำหรับใช้จัดกลุ่มผลการทดลองที่มีปริมาณมาก และกรองข้อมูลที่สาคัญออกมาโดยใช้ความรู้พื้นฐานทางสถิติ การนำเสนอข้อมูลของเคโมเมทริกซ์สามารถแบ่งออกได้ 2 วิธี ได้แก่ Unsupervised method และ Supervised method[28]

1. Unsupervised method เป็นหลักการที่สามารถประยุกต์ใช้ทางเคมีได้ โดยเป็นหลักการวิเคราะห์ข้อมูลเชิงสำรวจซึ่งสามารถใช้จัดกลุ่มของตัวอย่าง แบ่งออกเป็น 2 วิธี ได้แก่ Hierarchiral Cluster Analysis (HCA) และ Principal Component Analysis (PCA)

2. Supervised method เป็นหลักการของการวิเคราะห์ข้อมูลแบบ supervised นั้นจะต้องจัดกลุ่มของข้อมูลก่อนจึงจะสามารถจัดกลุ่มของข้อมูลในระดับของคลาสได้ อีกทั้งยังเป็นวิธีการทำนายและจัดกลุ่มของข้อมูลที่ยังไม่ทราบกลุ่มได้อีกด้วย

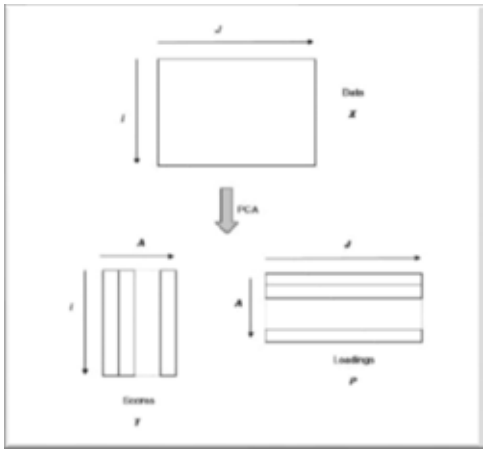
การวิเคราะห์องค์ประกอบหลัก เป็นวิธีการศึกษาความสัมพันธ์ของข้อมูลเพื่อหาสิ่งที่คล้ายคลึง และแตกต่างกันของชุดข้อมูล วิธีนี้สามารถลดปริมาณตัวแปรเมื่อข้อมูลนั้นมีความสัมพันธ์กัน โดย PCA จะประมวลผลข้อมูลในรูปแบบทางคณิตศาสตร์ คือ เมทริกซ์ โดยที่มีรูปแบบของสมการ คือ

$$X = T \cdot P + E$$

โดย T เรียกว่า score คือ ข้อมูลที่อยู่ในแนวแถว

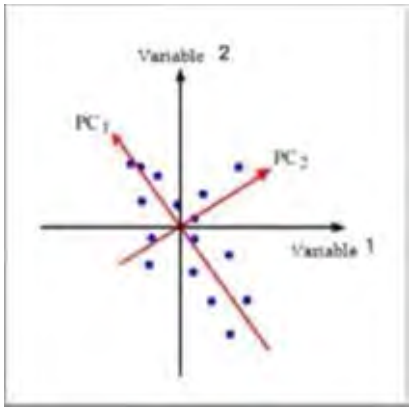
P เรียกว่า loading คือ ข้อมูลที่อยู่ในแนวคอลัมน์

และจำนวนคอลัมน์ในเมทริกซ์ T จะมีจำนวนเท่ากับจำนวนแถวในเมทริกซ์ P



รูปที่ 1-7 : แสดงการวิเคราะห์ด้วยเมทริกซ์ของการวิเคราะห์ข้อมูลแบบ PCA[29]

สำหรับการวิเคราะห์ด้วยวิธีนี้สิ่งที่จำเป็น คือ ชุดข้อมูลที่อยู่ในแนวคอลัมน์เรียกว่าตัวแปร (variable) เป็นปริมาณของสารชนิดต่าง ๆ ที่ตรวจวัดได้ และข้อมูลที่อยู่ในแนวแถวเรียกว่าตัวอย่าง (sample) ซึ่งเป็นชนิดของตัวอย่างที่ใช้ศึกษา และต้องใช้แกน PC1 และ PC2 ที่ลากผ่านจุดสำคัญขององค์ประกอบหลักในการอธิบายจุดสำคัญในกราฟ ดังรูปที่ 1-8



รูปที่ 1-8 : แสดงการจัดกลุ่มด้วย PCA [29]

1.5 ประโยชน์ที่ได้รับจากงานวิจัย

ทราบองค์ประกอบของสารระเหยง่ายต่าง ๆ ในพริกแกงเหลืองและส่วนประกอบในแกงเหลืองจากเทคนิคเฮดสเปซโซลิดเฟส ไมโครเอกซ์แทรกชัน–แก๊สโครมาโทกราฟี–แมสสเปกโทรเมตรี

บทที่ 2

การทดลอง

2.1 รายการเครื่องมืออุปกรณ์

1. เครื่องแก๊สโครมาโทกราฟ-แมสสเปกโตรมิเตอร์

   ซึ่งประกอบด้วย 1.1 เครื่องแก๊สโครมาโทกราฟของ Agilent รุ่น 7890A

   1.2 ตัวตรวจวัดแมสสเปกโตรมิเตอร์ของ Agilent รุ่น 7000

2. คอลัมน์คะปิลลารี (capillary column) ประเภท HP-5MS (30m × 0.25mm × 0.25μm)
3. อุปกรณ์โซลิดเฟส ไมโครเอกซ์แทรกชัน (Solid Phase Microextraction) ของ Supelco (50/30μm DVB/CAR/PDMS)
4. อ่างน้ำควบคุมอุณหภูมิ (water bath)
5. เครื่องให้ความร้อน (hot plate)
6. เครื่องชั่งน้ำหนัก (analytical balance)
7. ขวด (vials) ขนาด 20 มิลลิลิตร
8. ฝาอะลูมิเนียม (crimp)
9. เครื่องผนึกฝาอะลูมิเนียม (crimper)
10. บีกเกอร์ (beaker)
11. กระบอกตวง (cylinder)
12. ไมโครปิเปต (micro pipette)
13. แท่งแก้วคนสาร (stirring rod)

2.2 รายการสารเคมี

1. สารละลายมาตรฐานอัลเคน (C_8-C_{20}) ของ Sigma Aldrich
2. แก๊สฮีเลียม
3. น้ำ De-Ionization
4. ตัวอย่างพริกแกงเหลืองสำเร็จรูป 3 แหล่ง
   4.1 น้ำพริกแกงเหลือง ตราโลโบ
   4.2 น้ำพริกแกงเหลือง ตราแม่พลอย
   4.3 พริกแกงส้มใต้ (แกงเหลือง) ตราแม่น้อย
5. ตัวอย่างสมุนไพรที่เป็นส่วนประกอบของแกงเหลือง
   5.1 ขมิ้น
   5.2 พริกเหลือง
   5.3 กระเทียม
   5.4 หอมแดง

รูปที่ 2-1 : แสดงตัวอย่างสมุนไพรที่เป็นส่วนประกอบที่ใช้ในการวิเคราะห์

2.3 วิธีการทดลอง

2.3.1 การหาอัตราส่วนของสารที่เข้าคอลัมน์ (splitless and split ratio)

2.3.1.1 ชั่งตัวอย่างพริกแกงเหลือง ปริมาณ 50.000 ± 0.001 กรัม นำมาต้มในน้ำที่เดือดปริมาตร 300 มิลลิลิตรเป็นเวลา 1-2 นาที คนให้สารตัวอย่างละลาย ปิเปตด้วยไมโครปิเปต ปริมาตร 2000 ไมโครลิตรลงในขวดบรรจุขนาด 20 มิลลิลิตร แล้วปิดขวดด้วยฝาอะลูมิเนียม

2.3.1.2 นำตัวอย่างพริกแกงมาสกัดที่อุณหภูมิ 60 องศาเซลเซียส เป็นเวลา 30 นาที โดยใช้อ่างน้ำควบคุมอุณหภูมิ ระหว่างให้ความร้อนและใช้อุปกรณ์เฮดสเปซ โซลิดเฟสไมโครเอกซ์แทรกชันดูดซับสารระเหยง่าย แล้วฉีดเข้าส่วนฉีดสารของเครื่อง GC-MS เพื่อปลดปล่อยสารเป็นเวลา 5 นาที

โดยกำหนดสภาวะของเครื่อง GC-MS ดังนี้

อุณหภูมิของเตาอบ (oven temperature) :	50 องศาเซลเซียส
อุณหภูมิของส่วนฉีดสาร (injection temperature) :	250 องศาเซลเซียส
อุณหภูมิของแหล่งกำเนิดไอออน (ion-source temperature) :	230 องศาเซลเซียส
อุณหภูมิของ quadrupole (MS quadrupole temperature) :	150 องศาเซลเซียส
ช่วงกราดตรวจของ *m/z* (*m/z* scan window) :	30 ถึง 350
อัตราการไหลของแก๊สฮีเลียม (quench flow) :	2.25 มิลลิลิตรต่อนาที
อัตราการไหลของแก๊สตัวพา (carrier gas flow) เข้าสู่คอลัมน์ :	1.50 มิลลิลิตรต่อนาที

กำหนดสภาวะอุณหภูมิคอลัมน์ของเครื่อง GC-MS

อุณหภูมิเริ่มต้น (initial temperature) :	50 องศาเซลเซียส
อัตราการเพิ่มอุณหภูมิ 1 (rate temperature 1) :	3 องศาเซลเซียสต่อนาที
อุณหภูมิกลาง (intermediate temperature) :	200 องศาเซลเซียส
อัตราการเพิ่มอุณหภูมิ 2 (rate temperature 2) :	5 องศาเซลเซียสต่อนาที
อุณหภูมิสุดท้าย (final temperature) :	250 องศาเซลเซียส
เวลาที่ใช้อุณหภูมิสุดท้ายคงที่ไว้ (final hold time) :	2 นาที
เวลาที่ใช้ในการวิเคราะห์ (run time) :	53 นาที

2.3.1.3 ตั้งสภาวะของเครื่อง GC-MS เป็น splitless และทดลองฉีดสารสกัดระเหยง่ายในตัวอย่างพริกแกงเข้าเครื่อง GC-MS จากนั้นพิจารณาโครมาโทแกรมที่ได้

2.3.1.4 ตั้งสภาวะของเครื่อง GC-MS เป็น split ratio ต่างๆ (5:1 10:1 และ 20:1) เพื่อทดลองฉีดสารสกัดระเหยง่ายในตัวอย่างพริกแกงเข้าเครื่อง GC-MS ตามลำดับจากนั้นพิจารณาโครมาโทแกรมของแต่ละอัตราส่วนแล้วนำผลที่ได้มาเปรียบเทียบกัน โดย split ratio คำนวณจาก

$$\text{Split ratio} = \frac{(\text{อัตราการไหลของสารที่ฉีดเข้าสู่คอลัมน์} + \text{อัตราการไหลของสารที่ฉีดทิ้งทาง split vent})}{\text{อัตราการไหลของสารที่ฉีดเข้าสู่คอลัมน์}}$$

2.3.2.5 เลือกอัตราส่วนของสารที่ฉีดเข้าคอลัมน์ที่ให้โครมาโทแกรมที่มีลักษณะของพีกแยกออกจากกันได้มากที่สุด และเห็นพีกชัดเจน เพื่อนำไปใช้ในการทดลองต่อไป

2.3.2 การหาสภาวะที่เหมาะสมในการเตรียมตัวอย่าง

2.3.2.1 การหาอุณหภูมิที่เหมาะสมในการสกัดสารระเหยง่าย

2.3.2.1.1 ชั่งตัวอย่างน้ำพริกแกงเหลืองดังการทดลองที่ 2.3.1.1 แล้วให้ความร้อนด้วยเครื่องให้ความร้อนที่อุณหภูมิ 40, 60 และ 80 องศาเซลเซียสตามลำดับ เป็นเวลา 30 นาที โดยระหว่างให้ความร้อนใช้อุปกรณ์ HS-SPME สำหรับดูดซับสารระเหยง่าย และปลดปล่อยสารในส่วนปลดปล่อยสารของเครื่อง GC-MS เป็นเวลา 5 นาที กำหนดสภาวะของเครื่อง GC-MS ดังการทดลองที่ 2.3.1.2

2.3.2.1.2 พิจารณาพื้นที่ใต้พีกของสารรวม (total peak area) ในแต่ละโครมาโทแกรม และเลือกอุณหภูมิในการสกัดที่ให้โครมาโทแกรมที่มีพื้นที่ใต้พีกของสารมากที่สุด

2.3.2.2 การหาเวลาที่เหมาะสมในการสกัดสารระเหยง่าย

2.3.2.2.1 ชั่งตัวอย่างน้ำพริกแกงเหลืองดังการทดลองที่ 2.3.1.1 แล้วให้ความร้อนด้วยเครื่องให้ความร้อนที่อุณหภูมิ 60 องศาเซลเซียส เป็นเวลา 30, 45 และ 60 นาทีตามลำดับโดยระหว่างให้ความร้อนใช้อุปกรณ์ HS-SPME สำหรับดูดซับสารระเหยง่าย และปลดปล่อยสารในส่วนปลดปล่อยสารของเครื่อง GC-MS เป็นเวลา 5 นาที กำหนดสภาวะของเครื่อง GC-MS ดังการทดลองที่ 2.3.1.2

2.3.2.2.2 พิจารณาพื้นที่ใต้พีกของสารรวม (total peak area) ในแต่ละโครมาโทแกรม และเลือกอุณหภูมิในการสกัดที่ให้โครมาโทแกรมที่มีพื้นที่ใต้พีกของสารมากที่สุด

2.3.3 การระบุชนิดสารระเหยง่ายที่สำคัญ

2.3.3.1 นำโครมาโทแกรมของสารระเหยง่ายในตัวอย่างน้ำพริกแกงที่ได้จากการสกัดในสภาวะที่เหมาะสมมาเลือกพีกของสารระเหยง่ายที่สำคัญ

2.3.3.2 ระบุชนิดของสารระเหยง่ายที่สำคัญในตัวอย่าง โดยเปรียบเทียบข้อมูลสารดังกล่าวกับ mass spectrum library NIST17 ซึ่งเป็นซอฟต์แวร์ที่ติดตั้งไว้กับเครื่อง GC-MS และเปรียบเทียบค่า retention index (RI) ของสารระเหยง่ายที่สำคัญ ซึ่งได้จากการเปรียบเทียบค่า retention time (RT) ของสารดังกล่าวกับอัลเคนโซ่ตรง2 C_8-C_{20} กับงานวิจัยอื่น ๆ ซึ่ง LRI คำนวณจาก

$$\mathrm{RI} = 100\mathrm{n} + 100\left(\frac{\mathrm{t} - \mathrm{t_n}}{\mathrm{t_{n+1}} - \mathrm{t_n}}\right)$$

โดยกำหนดให้ n = จำนวนของคาร์บอน

t = retention time ของสารที่สนใจ (สารอยู่ระหว่าง C_n และ C_{n+1})

t_n = retention time ของ C_n

t_{n+1} = retention time ของ C_{n+1}

2.4 การวิเคราะห์ตัวอย่างน้ำพริกแกงเหลือง

2.4.1 ชั่งตัวอย่างน้ำพริกแกงเหลือง ปริมาณ 50.000 ± 0.001 กรัม นำมาต้มในน้ำที่เดือดปริมาตร 300 มิลลิลิตรเป็นเวลา 1-2 นาที คนให้สารตัวอย่างละลาย ปิเปตด้วยไมโครปิเปต ปริมาตร 2000 ไมโครลิตรลงในขวดบรรจุขนาด 20 มิลลิลิตร แล้วปิดขวดด้วยฝาอะลูมิเนียม

2.4.2 นำสารตัวอย่างมาการสกัดด้วย โดยใช้อุณหภูมิและเวลาในการสกัดจากการทดลองที่ 2.3.2 โดยระหว่างให้ความร้อนใช้อุปกรณ์ HS-SPME สำหรับดูดซับสารระเหยง่าย

2.4.3 นำอุปกรณ์ HS-SPME ที่ดูดซับสารระเหยง่ายแล้ว ปลดปล่อยสารในส่วนปลดปล่อยสารของเครื่อง GC-MS เป็นเวลา 5 นาทีโดยกำหนดอัตราส่วนของสารที่เข้าคอลัมน์จากการทดลองที่ 2.3.1

2.4.4 ทำการทดลองเช่นเดียวกันในตัวอย่างพริกแกงเหลืองทั้ง 3 แหล่ง จากนั้นพิจารณาโครมาโทแกรมของแต่ละตัวอย่างหาพื้นที่ใต้ใต้พีกของสารระเหยง่ายที่สำคัญในโครมาโทแกรมของแต่ละตัวอย่าง

2.5 การวิเคราะห์ตัวอย่างสมุนไพรที่ใช้เป็นส่วนประกอบ

2.5.1 ชั่งตัวอย่างสมุนไพร ปริมาณที่ระบุด้านหลังซอง ± 0.001 กรัม

อ้างอิงจากบรรจุภัณฑ์น้ำพริกแกงเหลือง I (น้ำหนักสุทธิ 50 กรัม) โดยระบุดังตารางที่ 2-1

ตารางที่ 2-1 : แสดงปริมาณสมุนไพรที่ใช้เป็นส่วนประกอบที่ใช้ในการเตรียมตัวอย่าง

ส่วนประกอบที่สำคัญ	**ร้อยละ**	**น้ำหนักที่ใช้ (กรัม)**
พริกเหลือง	30	15.0
หอมแดง	22	11.0
กระเทียม	21	10.5
ขมิ้น	1	0.5

นำมาต้มในน้ำที่เดือดปริมาตร 300 มิลลิลิตรเป็นเวลา 1-2 นาที คนให้สารตัวอย่างละลาย ปิเปตด้วยไมโครปิเปต ปริมาตร 2000 ไมโครลิตรลงในขวดบรรจุขนาด 20 มิลลิลิตร แล้วปิดขวดด้วยฝาอะลูมิเนียม

2.5.2 นำสารตัวอย่างสมุนไพรมาสกัดด้วย โดยใช้อุณหภูมิและเวลาในการสกัดจากการทดลองที่ 2.3.2 โดยระหว่างให้ความร้อนใช้อุปกรณ์ HS-SPME สำหรับดูดซับสารระเหยง่าย

2.5.3 นำอุปกรณ์ HS-SPME ที่ดูดซับสารระเหยง่ายแล้ว ปลดปล่อยสารในส่วนปลดปล่อยสารของเครื่อง GC-MS เป็นเวลา 5 นาทีโดยกำหนดอัตราส่วนของสารที่เข้าคอลัมน์จากการทดลองที่ 2.3.1 และกำหนดสภาวะของเครื่อง GC-MS จากการทดลองที่ 2.3.1.2

2.5.4 ทำการทดลองเช่นเดียวกันในตัวอย่างสมุนไพรอีกทั้ง 3 ชนิดจากนั้นพิจารณาโครมาโทแกรมของแต่ละตัวอย่างหาพื้นที่ใต้ใต้พีกของสารระเหยง่ายที่สำคัญในโครมาโทแกรมของแต่ละตัวอย่าง

2.6 การประมวลผลโดยวิธีเคโมเมทริกซ์

2.6.1 นำพื้นที่ใต้พีกของสารระเหยง่ายที่สำคัญที่ได้จากการทดลองที่ 2.5.4 มาคำนวณคิดเป็น %Normalization โดยคำนวณจาก

$$\%\text{Normalization} = \frac{\text{พื้นที่ใต้พีกของสารที่สนใจ}}{\text{พื้นที่ใต้พีกของสารทั้งหมด}}\ x\ 100$$

2.6.2 นำข้อมูลที่คำนวณได้ไปวิเคราะห์ผลด้วยวิธีเคโมเมทริกซ์ชนิด PCA โดยใช้โปรแกรม XLSTAT 2019 ในการจัดกลุ่มตัวอย่างของตัวอย่างพริกแกงเหลืองทั้ง 3 แหล่งและสมุนไพรที่ใช้เป็นส่วนประกอบทั้ง 4 ชนิด

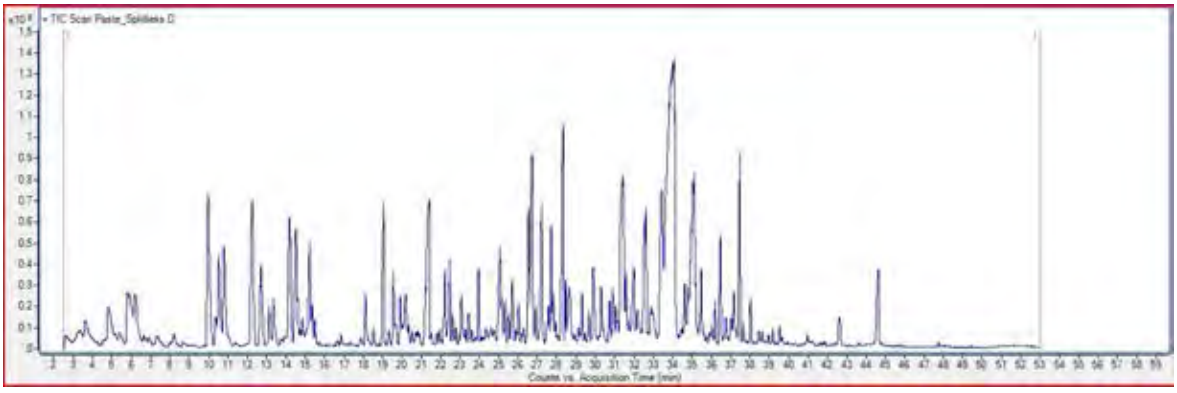
บทที่ 3

ผลการทดลองและอภิปรายผลการทดลอง

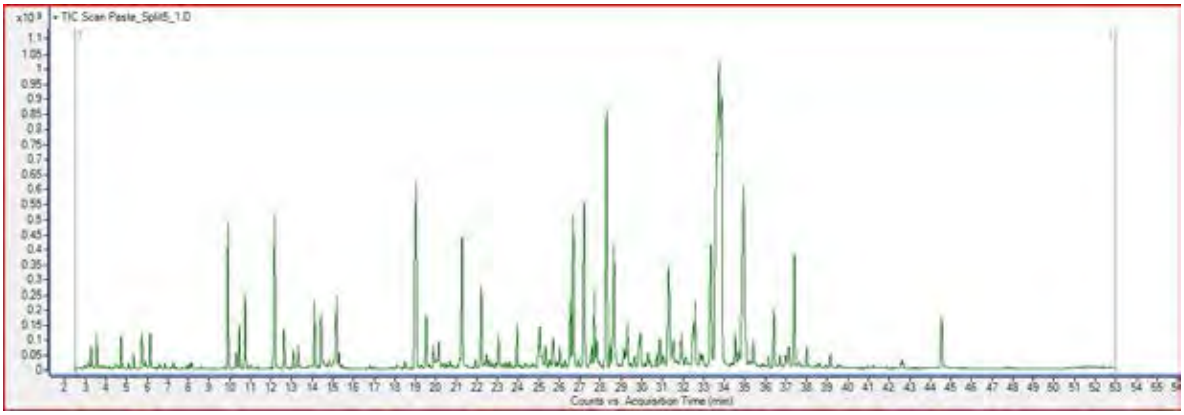
3.1 การหาอัตราส่วนของสารที่เข้าคอลัมน์ (splitless and split ratio)

วิเคราะห์ตัวอย่างน้ำพริกแกงเหลืองน้ำหนัก 50.000 ± 0.001 กรัม โดยเตรียมตัวอย่างน้ำพริกแกงเหลืองด้วยเทคนิค HS-SPME ตามการทดลองที่ 3.1 โดยมีสภาวะดังนั้น อุณหภูมิในการสกัด 60 องศาเซลเซียส เวลาที่ใช้ในการสกัด 30 นาที และเวลาที่ใช้ในการปลดปล่อยสารระเหยง่ายในเครื่อง GC-MS 5 นาที โดยเปลี่ยนอัตราส่วนของสารที่เข้าคอลัมน์ด้วยสภาวะ splitless และ split ratio อัตราส่วน 5:1 10:1 และ 20:1 ตามลำดับ

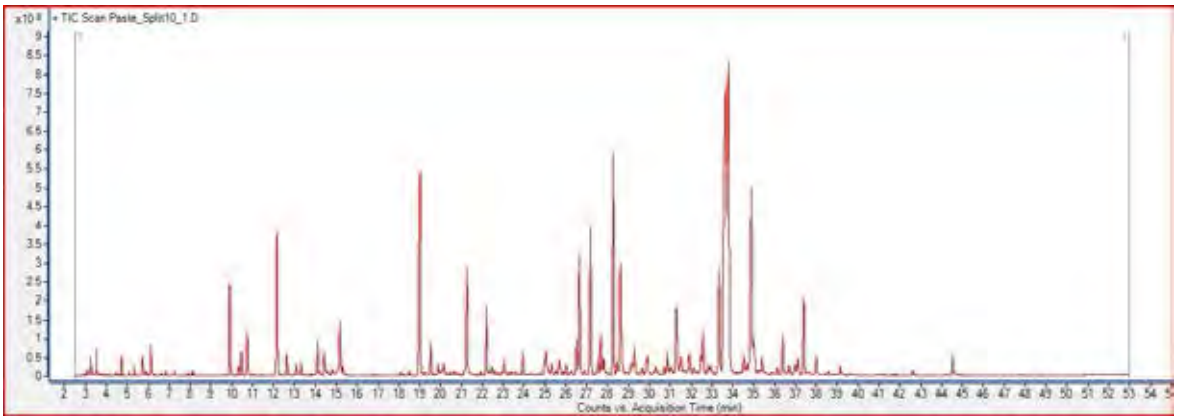
จากโครมาโทแกรมที่วิเคราะห์ด้วยสภาวะ splitless ซึ่งเป็นสภาวะที่สารระเหยง่ายทั้งหมดจะถูกพาเข้าสู่คอลัมน์ เนื่องจากมีปริมาณของสารระเหยง่ายที่ถูกพาเข้าสู่คอลัมน์มาก ทำให้โครมาโทแกรมของสารไม่สามารถแยกออกจากกันได้อย่างสมบูรณ์ แสดงดังรูปที่ 3-1



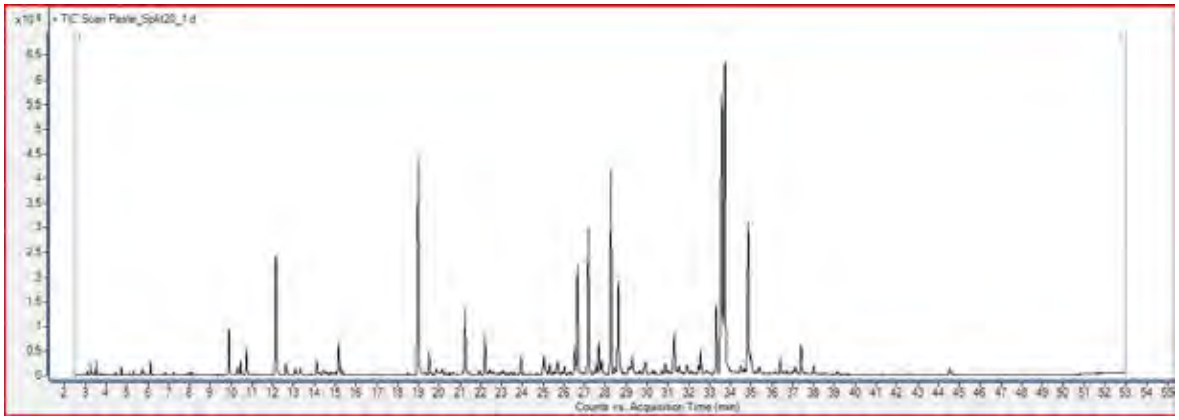
รูปที่ 3-1 : แสดงโครมาโทแกรมของตัวอย่างน้ำพริกแกงด้วยสภาวะ splitless



รูปที่ 3-2 : แสดงโครมาโทแกรมของตัวอย่างน้ำพริกแกงด้วยสภาวะ split ratio 5:1



รูปที่ 3-3 : แสดงโครมาโทแกรมของตัวอย่างน้ำพริกแกงด้วยสภาวะ split ratio 10:1



รูปที่ 3-4 : แสดงโครมาโทแกรมของตัวอย่างน้ำพริกแกงด้วยสภาวะ split ratio 20:1

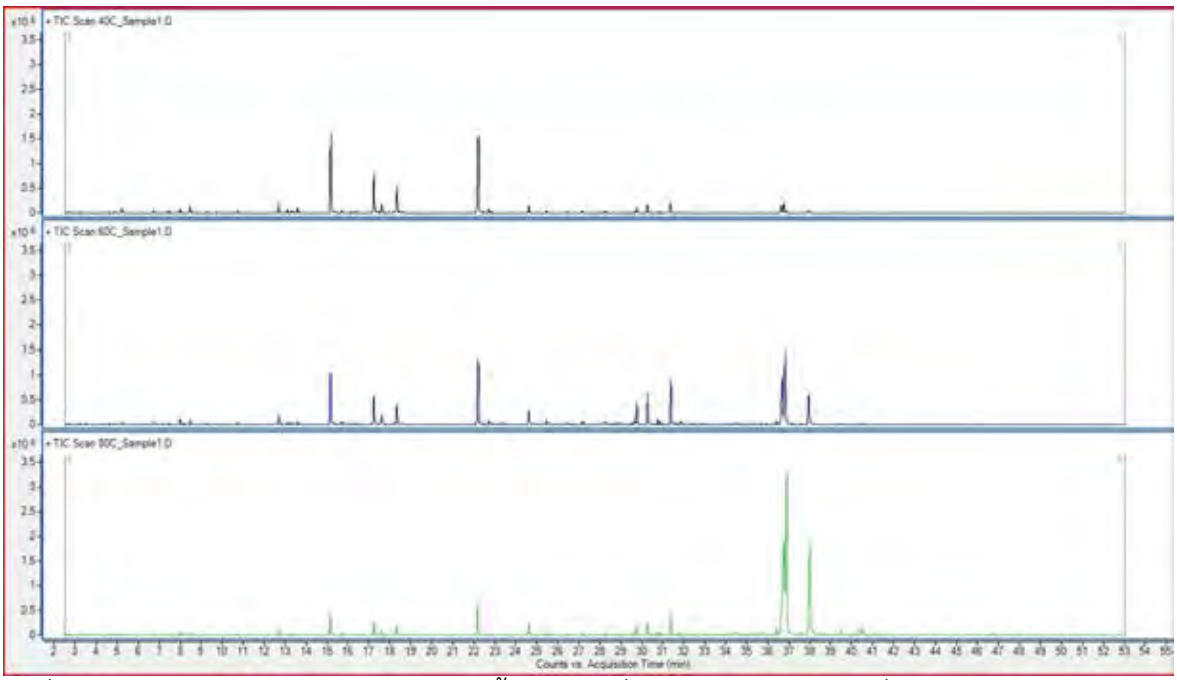
จากโครมาโทแกรมที่วิเคราะห์ด้วยสภาวะ split ratio ที่อัตราส่วน 5:1 10:1 และ 20:1 พบว่า อัตราส่วนที่ทำให้สารแยกออกจากกันได้ดีที่สุด คือ อัตราส่วน 10:1 ดังแสดงในรูปที่ 3-3

ดังนั้นเลือกการทดลองด้วยสภาวะsplit ratio ที่อัตราส่วน 10:1 หมายความว่าถ้าฉีดสารเข้าเครื่อง GC-MS 10 ส่วน จะมีสารที่เข้าคอลัมน์ 1 ส่วน ซึ่งการที่สารเข้าสู่คอลัมน์มากเกินไปจะทำให้แยกสารออกจากกันได้ไม่สมบูรณ์ และถ้าหากมีสารเข้าสู้คอลัมน์น้อยเกินไปจะทำให้ตรวจวัดสารได้ไม่ถูกต้อง

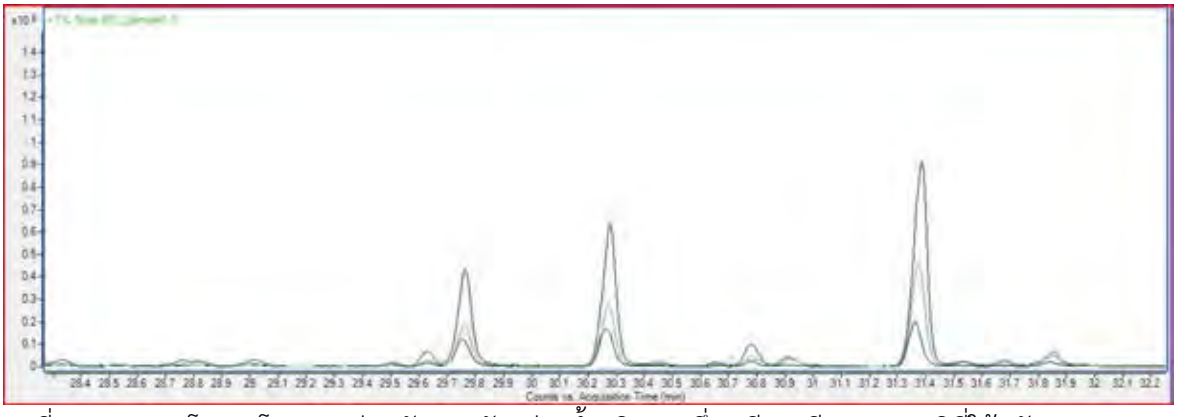
3.2 การหาสภาวะที่เหมาะสมในการเตรียมตัวอย่าง

3.2.1 การหาอุณหภูมิที่เหมาะสมในการสกัดสารระเหยง่าย

จากการหาสภาวะที่เหมาะสมในการเตรียมน้ำตัวอย่างพริกแกง ด้วย HS-SPME โดยเริ่มสกัดที่อุณหภูมิ 40 60 และ 80 องศาเซลเซียส ใช้เวลาในการสกัดไว้ที่ 30 นาที โดยแต่ละอุณหภูมิทำการทดลองซ้ำ 3 ครั้ง แล้วนำมาหาพื้นที่ใต้พีกรวมของสารในโครมาโทแกรมมาเฉลี่ยแล้วเปรียบเทียบ

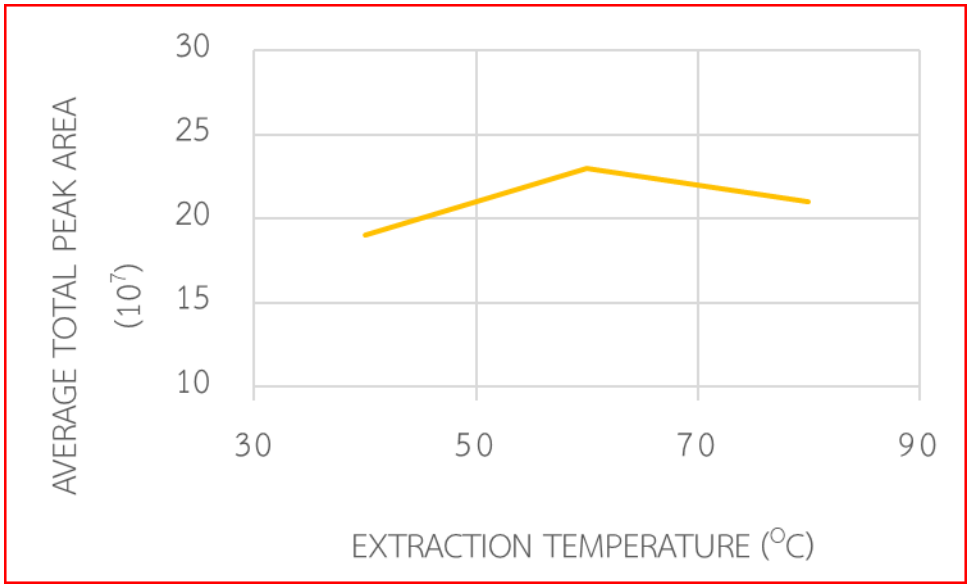


รูปที่ 3-5 : แสดงโครมาโทแกรมของตัวอย่างน้ำพริกแกงซึ่งเปรียบเทียบอุณหภูมิที่ใช้สกัด 40, 60 และ 80 องศาเซลเซียสตามลำดับ



รูปที่ 3-6 : แสดงโครมาโทแกรมร่วมกันของตัวอย่างน้ำพริกแกงซึ่งเปรียบเทียบอุณหภูมิที่ใช้สกัด 40, 60 และ 80 องศาเซลเซียสตามลำดับ

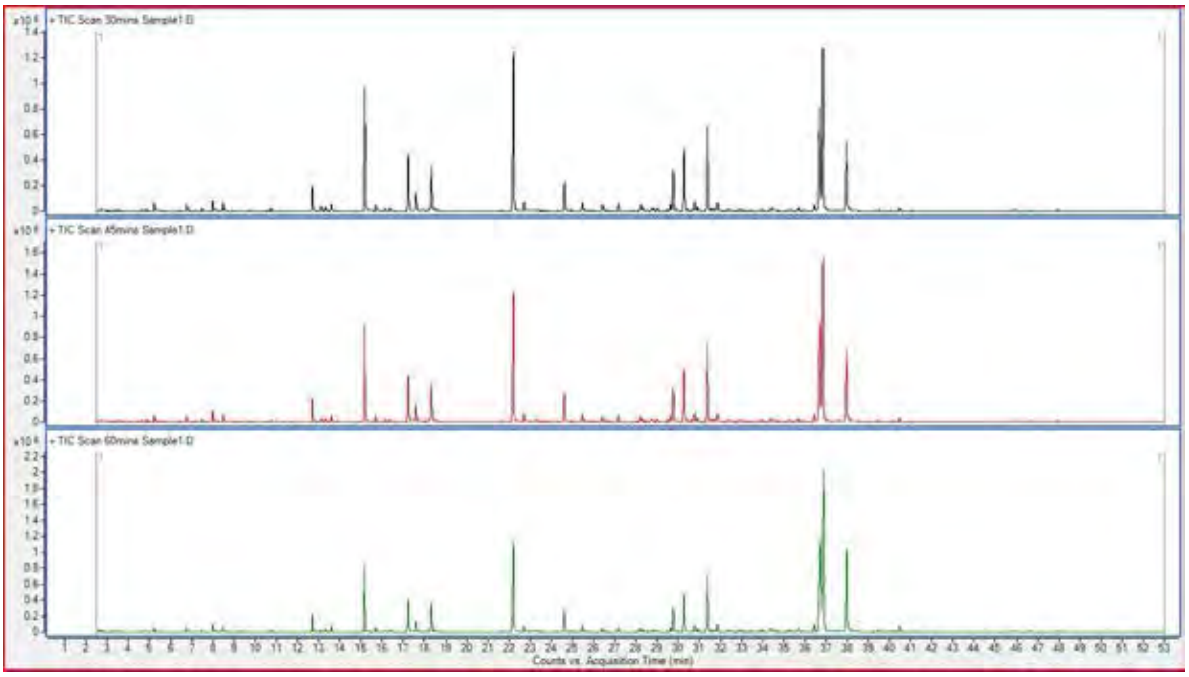
จากการทดลองพบว่าอุณหภูมิที่เหมาะสมในการสกัดสารระเหยง่ายของตัวอย่างน้ำพริกแกงเหลืองคือ 60 องศาเซลเซียส เนื่องจากให้พื้นที่ใต้พีกรวมของสารในโครมาโทแกรมเฉลี่ยแสดงดังรูปที่ 3-7



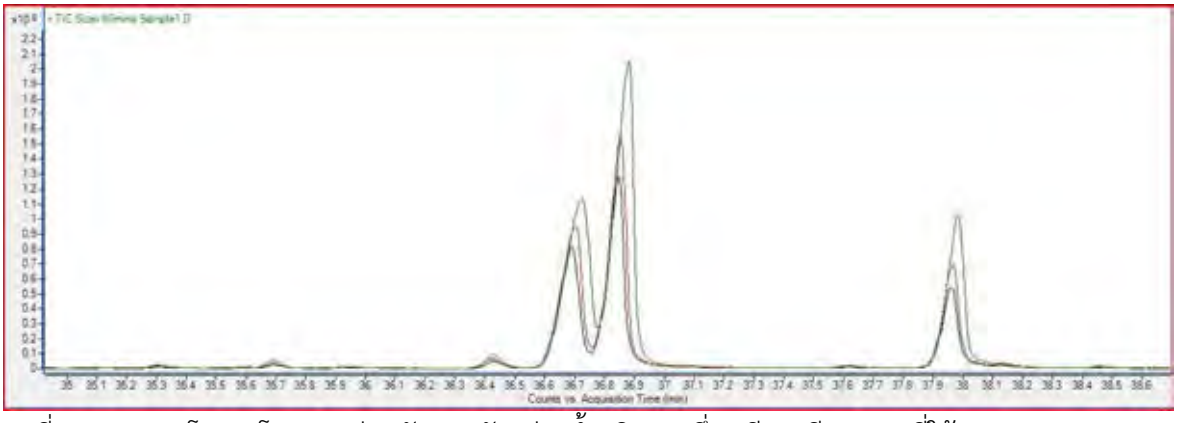
รูปที่ 3-7 : แสดงกราฟความสัมพันธ์ระหว่างอุณหภูมิที่ใช้ในการสกัดสารระเหยง่ายในตัวอย่างน้ำพริกแกงเหลืองกับพื้นที่ใต้พีกรวมของสารในโครมาโทแกรมเฉลี่ย

3.2.2 การหาเวลาที่เหมาะสมในการสกัดสารระเหยง่าย

จากการทดลองหาเวลาที่เหมาะสมในการสกัดสารระเหยง่ายในตัวอย่างน้ำพริกแกงเหลือง โดยเริ่มต้นสกัดที่เวลา 30 45 และ 60 นาที ซึ่งจะกำหนดอุณหภูมิในการสกัดไว้ที่ 60 องศาเซลเซียส โดยแต่ละเวลาทำการทดลองซ้ำ 3 ครั้ง แล้วนำพื้นที่ใต้พีกรวมของสารในโครมาโทแกรมมาเฉลี่ย

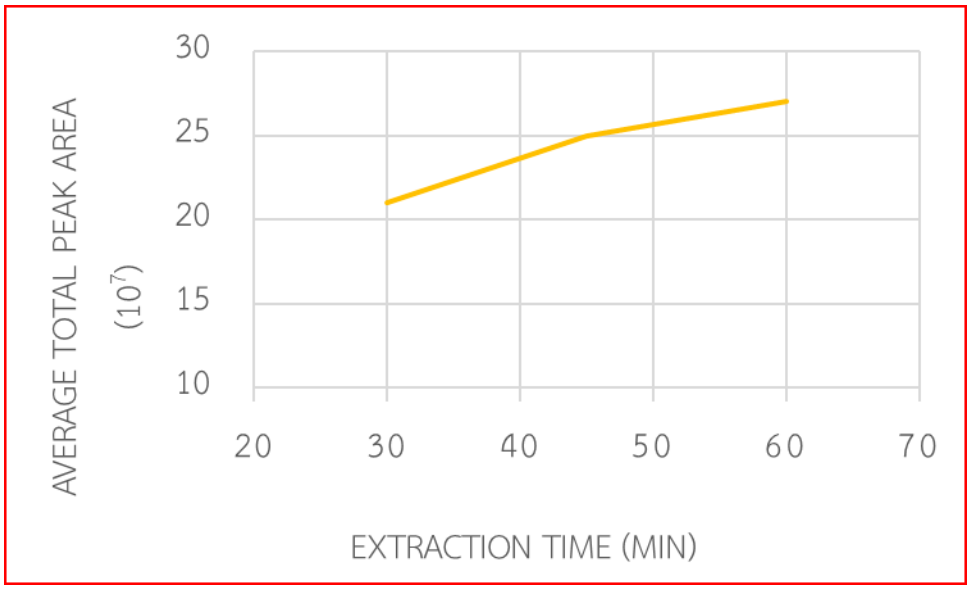


รูปที่ 3-8 : แสดงโครมาโทแกรมของตัวอย่างน้ำพริกแกงซึ่งเปรียบเทียบเวลาที่ใช้ 30, 45 และ 60 นาที ตามลำดับ



รูปที่ 3-9 : แสดงโครมาโทแกรมร่วมกันของตัวอย่างน้ำพริกแกงซึ่งเปรียบเทียบเวลาที่ใช้ 30, 45 และ 60 นาทีตามลำดับ

พบว่าเวลาที่เหมาะสมในการสกัดสารระเหยง่ายในตัวอย่างน้ำพริกแกงเหลืองคือ 60 นาที เนื่องจากให้พื้นที่ใต้พีกรวมของสารในโครมาโทแกรมเฉลี่ยมากที่สุด แสดงดังรูปที่ 3-10



รูปที่ 3-10 : กราฟแสดงความสัมพันธ์ระหว่างเวลาที่ใช้ในการสกัดสารระเหยง่ายในตัวอย่างน้ำพริกแกงเหลือง กับพื้นที่ใต้พีกรวมของสารในโครมาโทแกรมเฉลี่ย

3.3 การระบุชนิดสารระเหยง่ายที่สำคัญซึ่งจะใช้ในการวิเคราะห์ตัวอย่าง

ในการทดลองนี้ให้ตัวอย่างคือ น้ำพริกแกงเหลืองจากแหล่งที่มาต่างกัน 3 แหล่งคือ ตราโลโบ ตราแม่พลอย ตราแม่น้อย และสมุนไพรที่เป็นส่วนประกอบ 4 ชนิดได้แก่ ขมิ้น พริกเหลือง กระเทียม และหอมแดง

3.3.1 น้ำพริกแกงเหลือง

เมื่อนำโครมาโทแกรมของสารระเหยง่ายในตัวอย่างน้ำพริกแกงทั้ง 3 แหล่ง ที่ได้จากการสกัดในสภาวะที่เหมาะสม โดยใช้อุณหภูมิในการสกัด 60 องศาเซลเซียส และเวลาในการสกัด 60 นาที ใช้เวลาในการปลดปล่อยสารในเครื่อง GC-MS เป็นเวลา 5 นาที แต่ละตัวอย่างทำการทดลองซ้ำ 6 ครั้ง พิจารณาเลือกพีกของสารระเหยง่ายที่สำคัญ พบว่ามีสารระเหยง่ายที่สำคัญทั้งหมด 93 สาร

สาระเหยง่ายหลักที่พบในน้ำพริกแกงเหลือง 10 อันดับแรกดังนี้

สารระเหยง่ายในพริกแกงเหลือง I คือ Diallyl trisulfide (11.3%), aR-Turmerone(11.8%), (E)-γ-Atlantone (10.3%), β-Sesquiphellandrene (9.16%), Tumerone (7.15%), α-Zingiberene (6.20%), Allyl methyl trisulfide (5.97%), α-Curcumene (4.57%), 5-Methyl-1,2,3,4-tetrathiane(3.77%) และ Diallyl tetrasulfide (3.60%)

สารระเหยง่ายในพริกแกงเหลือง II คือ aR-Turmerone (10.4%), Diallyl trisulfide (9.10%), β-Sesquiphellandrene (7.34%), 3-Vinyl-1,2-dithiacyclohex-4-ene (5.80%), 2-Vinyl-4H-1,3-dithiine(5.60%), α-Zingiberene (5.08%), (Z)-γ-Atlantone(4.93%), α-Curcumene (4.54%), Allyl methyl trisulfide (4.43%) และ Tumerone (4.01%)

สารระเหยง่ายนพริกแกงเหลือง III คือ β-Sesquiphellandrene (12.9%), α-Zingiberene (11.14%), aR-Turmerone(7.33%), (Z)-γ-Atlantone (7.31%), Tumerone (7.25%), α-Curcumene(6.59%), β-Bisabolene (5.11%), α-Santalene(4.77%), α-Himachalene (2.91%) และ α-Humulene (2.80%)

3.3.2 สมุนไพรที่ใช้เป็นส่วนประกอบ

เมื่อนำโครมาโทแกรมของสารระเหยง่ายในตัวอย่างเครื่องเทศที่ใช้เป็นส่วนประกอบ ได้แก่ ขมิ้น พริกเหลือง กระเทียมและหอมแดง ที่ได้จากการสกัดในสภาวะที่เหมาะสม โดยใช้อุณหภูมิในการสกัด 60 องศาเซลเซียส และเวลาในการสกัด 60 นาที ใช้เวลาในการปลดปล่อยสารในเครื่อง GC-MS เป็นเวลา 5 นาที แต่ละตัวอย่างทำการทดลองซ้ำ 6 ครั้ง

พิจารณาเลือกพีกของสารระเหยง่ายที่สำคัญ พบว่ามีสารระเหยง่ายที่สำคัญในขมิ้น 42 สาร พริกเหลือง 19 สาร กระเทียม 34 สาร และหอมแดง 23 สาร

สาระเหยง่ายหลักที่พบในสมุนไพรที่เป็นส่วนประกอบ 10 อันดับแรกดังนี้

สารระเหยง่ายในขมิ้น คือ (E)-γ-Atlantone (17.85%), aR-Turmerone (12.94%), β-Sesquiphellandrene (10.14%), Tumerone (8.97%), (Z)-Linalool oxide (8.32%), (E)-Atlantone (2.99%), Eucalyptol (2.56%), (6R,7R)-Bisabolone (2.33%), Caryophyllene (2.10%) และ (Z)-β-curcumen-12-ol (2.07%)

สารระเหยง่ายสำคัญในพริกเหลือง คือ Decanal (67.99%), Isopropyl palmitate (9.56%), 2-Ethylhexyl salicylate (3.80%), 2-methoxy-3-(2-methylpropyl)-pyrazine (3.67%), Nonanal (3.20%), 4-Terpineol (1.93%), (E,E)-Farnesyl acetate (1.55%), β-Linalool (1.32%), (E)-Nerolidol (1.31%), และ 6,10-dimethyl-5,9-Undecadien-2-one (0.94%)

สารระเหยง่ายในกระเทียม คือ Diallyl disulphide (26.67%), Allyl (Z)-1-propenyl disulfide (15.49%), Diallyl trisulfide (12.17%), 1-Decanol (10.10%), 1-Dodecanol (6.37%), Allyl (E)-1-propenyl disulfide (4.49%), Allyl methyl trisulfide (3.37%), Allyl (E)-prop-1-enyl trisulfide (3.28%), Diallyl tetrasulfide (2.69%) และ Allyl (Z)-1-propeny trisulfide (2.5%)

สารระเหยง่ายในหอมแดง คือ1-Decanol (42.13%), Propyl disulfide (23.83%), (E)-Propenyl propyl disulfide (20.81%), Decanal (2.55%), Allyl methyl disulfide (1.34%), 2-Ethylhexyl salicylate (0.67%), Methyl propyl disulfide (1.01%), 2-methyl-2-pentenal (0.91%), 1-Dodecanol (0.69%) และ Dipropyl trisulfide (0.61%)

โดยเปรียบเทียบข้อมูลของสารระเหยง่ายที่พบในพริกแกงทั้ง 3 แหล่งและสมุนไพรที่เป็นองค์ประกอบย่อยทั้ง 4 ชนิดดังตาราง 3-1

ตาราง 3-1 : แสดงข้อมูลและ %Normalization สารระเหยง่ายที่ตรวจพบในน้ำพริกแกงและสมุนไพรที่เป็นส่วนประกอบ

ลำดับพีก	สารประกอบ	หมู่เกาะหรือฟังก์ชันเพิ่มเติม[1]	Cas No.	RI		ลักษณะของกลิ่นอ้างอิงจากฐานข้อมูล[31]	%Normalization ที่ตรวจพบในน้ำพริกแกง			%Normalization ที่ตรวจพบในสมุนไพรส่วนประกอบ พร้อมอ้างอิงที่พบในงานวิจัยที่ผ่านมา (ถ้ามี)			
				ค่าอ้างอิง[30]	การทดลองนี้		1	2	3	ขมิ้น	พริกเหลือง	กระเทียม	หอมแดง
Aldehydes													
1D	2-Methyl-2-pentenal	SAA	623-36-9	837	827±1(3)	powerful green grass somewhat fruity gassy	0.16	ND	0.05	ND	ND	ND	0.91
7D	Heptanal	SAA	111-71-7	901	902±1(3)	fresh aldehydic fatty green herbal wine-lee ozone	ND	ND	ND	ND	0.77	ND	ND
15D	Benzaldehyde	ARM	100-52-7	962	954±1(3)	strong sharp sweet bitter almond cherry	0.07 [16,18]	0.14	0.06	ND	ND	ND	ND
29D	Benzeneacetaldehyde	ARM	122-78-1	1045	1043±1(3)	green sweet floral hyacinth clover honey cocoa	0.04 [15,16]	0.06	0.03	ND	ND	ND	ND
38D	Nonanal	SAA	124-19-6	1104	1112±1(3)	waxy aldehydic rose fresh orris orange peel fatty peely	ND	ND	ND	0.06	3.22	0.16	ND

ตาราง 3-1 (ต่อ)

ลำดับพีก	สารประกอบ	หมู่เกาะหรือฟังก์ชันเพิ่มเติม[1]	Cas No.	RI		ลักษณะของกลิ่นอ้างอิงจากฐานข้อมูล[31]	%Normalization ที่ตรวจพบในน้ำพริกแกง			%Normalization ที่ตรวจพบในสมุนไพรส่วนประกอบ พร้อมอ้างอิงที่พบในงานวิจัยที่ผ่านมา (ถ้ามี)			
				ค่าอ้างอิง[30]	การทดลองนี้		1	2	3	ขมิ้น	พริกเหลือง	กระเทียม	หอมแดง
55D	Safranal	USC	116-26-7	1201	1192±1(3)	fresh herbal phenolic metallic rosemary tobacco spicy	0.11 [21]	0.03	0.06	ND	ND	ND	ND
57D	Decanal	SAA	112-31-2	1206	1201±0(3)	sweet aldehydic waxy orange peel citrus flora	ND	ND	ND	0.09	3.69	ND	2.55
66D	Undecanal	SAA	112-44-7	1307	1316	waxy soapy floral aldehydic citrus green fatty fresh laundry	ND	ND	ND	ND	0.39	ND	ND
Ketone													
19K	Sulcatone (6-Methyl-5-hepten-2-one)	SAA	110-93-0	986	985±2(4)	citrus green musty lemongrass apple	0.11 [21]	1.26	0.01	ND	0.39	ND	ND
42K	Camphor	SAC	21368-68-3	1145	1142	Camphoreous	ND	0.03	ND	ND	ND	ND	ND

ตาราง 3-1 (ต่อ)

ลำดับพีก	สารประกอบ	หมู่เกาะหรือฟังก์ชันเพิ่มเติม[1]	Cas No.	RI		ลักษณะของกลิ่นอ้างอิงจากฐานข้อมูล[31]	%Normalization ที่ตรวจพบในน้ำพริกแกง			%Normalization ที่ตรวจพบในสมุนไพรส่วนประกอบ พร้อมอ้างอิงที่พบในงานวิจัยที่ผ่านมา (ถ้ามี)			
				ค่าอ้างอิง[30]	การทดลองนี้		1	2	3	ขมิ้น	พริกเหลือง	กระเทียม	หอมแดง
45K	Myrcenone (2-Methyl-6-methyleneocta-2,7-dien-4-one)	USA	539-70-8	1145	1149	NA	ND	ND	ND	0.09	ND	ND	ND
60K	(+)-Carvotanacetone (p-Menth-6-en-2-one)	USC	499-71-8	1246	1246±0(2)	Minty	0.06	0.03	ND	ND	ND	ND	ND
89K	Geranyl acetone (6,10-Dimethyl-5,9-undecadien-2-one)	USA	689-67-8	1456	1452	fresh rose leaf floral green magnolia aldehydic fruity	ND	ND	ND	ND	0.94	ND	ND
95K	(E)-β-Ionone	USA USC	79-77-6	1486	1482	dry powdery floral woody orris	ND	ND	ND	ND	0.25	ND	ND
109K	Curlone	USC	87440-60-6	1647	1632±1(4)	NA	0.95	0.52	0.57	1.82 [15]	ND	ND	ND
110K	2-epi-α-Cedren-3-one	USC SAA	288249-25-2	1640	1635±1(4)	NA	0.80	0.24	0.32	0.36	ND	MD	ND

ตาราง 3-1 (ต่อ)

ลำดับพีก	สารประกอบ	หมู่เกาะหรือฟังก์ชันเพิ่มเติม[1]	Cas No.	RI		ลักษณะของกลิ่นอ้างอิงจากฐานข้อมูล[31]	%Normalization ที่ตรวจพบในน้ำพริกแกง			%Normalization ที่ตรวจพบในสมุนไพรส่วนประกอบ พร้อมอ้างอิงที่พบในงานวิจัยที่ผ่านมา (ถ้ามี)			
				ค่าอ้างอิง[30]	การทดลองนี้		1	2	3	ขมิ้น	พริกเหลือง	กระเทียม	หอมแดง
112K	aR-Turmerone	USA, ARM	532-65-0	1664	1666±2(4)	NA	10.8	10.4	7.33	13.1 [19]	ND	ND	ND
113K	Tumerone	USA, USC	180315-67-7	1680	1670±2(4)	NA	7.15	4.01	7.25	9.07 [19]	ND	ND	ND
115K	(Z)-γ-Atlantone	USA, USC	108549-48-0	1699	1695±6(3)	NA	0.29	4.93	7.31	ND	ND	ND	ND
116K	(E)-γ-Atlantone	USA, USC	108549-47-9	1712	1700±1(3)	NA	10.3	0.33	ND	18.1 [19]	ND	ND	ND
117K	Curdione	USC	13657-68-6	1707	1709	NA	ND	0.13	ND	ND	ND	ND	ND
118K	(Z)-α-Atlantone	USA, USC	56192-70-2	1717	1713±0(3)	NA	0.25	0.25	0.08	ND	ND	ND	ND
121K	(6R,7R)-Bisabolone	USA, USC	72441-71-5	1747	1741±1(4)	NA	0.81	1.92	0.81	2.35	ND	ND	ND

ตาราง 3-1 (ต่อ)

ลำดับพีก	สารประกอบ	หมู่เกาะหรือฟังก์ชันเพิ่มเติม[1]	Cas No.	RI		ลักษณะของกลิ่นอ้างอิงจากฐานข้อมูล[31]	%Normalization ที่ตรวจพบในน้ำพริกแกง			%Normalization ที่ตรวจพบในสมุนไพรส่วนประกอบ พร้อมอ้างอิงที่พบในงานวิจัยที่ผ่านมา (ถ้ามี)			
				ค่าอ้างอิง[30]	การทดลองนี้		1	2	3	ขมิ้น	พริกเหลือง	กระเทียม	หอมแดง
124K	(E)-Atlantone	USA, USC	108645-54-1	1773	1770±1(4)	NA	1.57	2.13	1.47	3.03	ND	ND	ND
Sulfur compound													
2S	Diallyl sulfide	USA	592-88-1	861	853±0(4)	sulfurous onion garlic horseradish metallic	0.54	1.31	0.04	ND	ND	0.25 [16]	ND
3S	Propyl hydrodisulfide	USA	137363-84-9	865	854	NA	ND	ND	ND	ND	ND	ND	0.17
4S	2,4-dimethylthiophene	UCS	638-00-6	875	874	NA	ND	ND	ND	ND	ND	ND	0.30
5S	(Z)-Allyl(prop-1-en-1-yl) sulfane	USA	104324-69-8	888	885	NA	ND	ND	ND	ND	ND	0.03	ND
6S	(E)-Allyl(prop-1-en-1-yl) sulfane	USA	104324-36-9	891	889	NA	ND	ND	ND	ND	ND	0.03	ND
8S	2,3-dimethylthiophene	UCS	632-16-6	896	904±1(5)	NA	0.06	0.02	0.02	ND	ND	0.14 [17]	1.34 [17]

ตาราง 3-1 (ต่อ)

ลำดับพีก	สารประกอบ	หมู่เกาะหรือฟังก์ชันเพิ่มเติม[1]	Cas No.	RI		ลักษณะของกลิ่นอ้างอิงจากฐานข้อมูล[31]	%Normalization ที่ตรวจพบในน้ำพริกแกง			%Normalization ที่ตรวจพบในสมุนไพรส่วนประกอบ พร้อมอ้างอิงที่พบในงานวิจัยที่ผ่านมา (ถ้ามี)			
				ค่าอ้างอิง[30]	การทดลองนี้		1	2	3	ขมิ้น	พริกเหลือง	กระเทียม	หอมแดง
9S	Allyl methyl disulfide	USA	2179-58-0	920	913±1(4)	alliaceous garlic green onion	0.51	0.50	0.05	ND	ND	2.23	ND
10S	Methyl (E)-1-propenyl disulfide	USA	23838-19-9	940	926±1(4)	NA	0.10	0.04	0.01	ND	ND	0.11	ND
11S	Methyl propyl disulfide	SAA	2179-60-4	932	927	sulfury onion radish mustard tomato	ND	ND	ND	ND	ND	ND	1.01
13S	Methyl (Z)-1-propenyl disulfide	USA	23838-18-8	932	934±1(5)	NA	0.25	0.10	0.03	ND	ND	0.63	0.53
14S	1,2-Dithiole	UCS	288-26-6	952	949±1(4)	NA	1.11	1.11	0.13	ND	ND	1.47 [16,17]	ND
16S	Dimethyl trisulfide	SAA	3658-80-8	970	963±1(5)	sulfurous cooked onion savory meaty	0.63	0.46	ND	ND	ND	0.05	0.21
33S	Diallyl disulfide	USA	2179-57-9	1081	1084±1(4)	alliaceous onion garlic metallic	2.64	3.50	1.29	ND	ND	26.67 [16]	ND

ตาราง 3-1 (ต่อ)

ลำดับพีก	สารประกอบ	หมู่เกาะหรือฟังก์ชันเพิ่มเติม[1]	Cas No.	RI		ลักษณะของกลิ่นอ้างอิงจากฐานข้อมูล[31]	%Normalization ที่ตรวจพบในน้ำพริกแกง			%Normalization ที่ตรวจพบในสมุนไพรส่วนประกอบ พร้อมอ้างอิงที่พบในงานวิจัยที่ผ่านมา (ถ้ามี)			
				ค่าอ้างอิง[30]	การทดลองนี้		1	2	3	ขมิ้น	พริกเหลือง	กระเทียม	หอมแดง
35S	Allyl 1E-propenyl disulfide	USA	122156-02-9	1103	1100±1(4)	NA	0.81	0.57	0.28	ND	ND	4.49	ND
36S	Allyl 1Z-propenyl disulfide	USA	122156-03-0	1107	1106±1(4)	NA	1.41	0.24	0.91	ND	ND	15.49	ND
39S	Propyl disulfide	SAA	629-19-6	1107	1119	sulfury earthy burnt green onion	ND	ND	ND	ND	ND	ND	23.83
40S	(E)-Propenyl-propyl disulfide	USA	23838-21-3	1118	1128	NA	ND	ND	ND	ND	ND	ND	20.81
41S	Allyl methyl trisulfide	USA	34135-85-8	1142	1136±1(4)	alliaceous creamy garlic onion	5.97	4.43	0.22	ND	ND	3.37	ND
43S	4-Methyl-1,2,3-trithiolane	SCS	116664-29-0	1154	1146±1(4)	NA	0.65	0.32	0.01	ND	ND	0.08 [17]	ND
44S	Methyl propyl trisulfide	SAA	17619-36-2	1154	1147	sulfurous onion garlic green metallic	ND	ND	ND	ND	ND	ND	0.48

ตาราง 3-1 (ต่อ)

ลำดับพีก	สารประกอบ	หมู่เกาะหรือฟังก์ชันเพิ่มเติม[1]	Cas No.	RI		ลักษณะของกลิ่นอ้างอิงจากฐานข้อมูล[31]	%Normalization ที่ตรวจพบในน้ำพริกแกง			%Normalization ที่ตรวจพบในสมุนไพรส่วนประกอบ พร้อมอ้างอิงที่พบในงานวิจัยที่ผ่านมา (ถ้ามี)			
				ค่าอ้างอิง[30]	การทดลองนี้		1	2	3	ขมิ้น	พริกเหลือง	กระเทียม	หอมแดง
46S	Methyl 1Z-propenyl trisulfide	USA	23838-24-6	1164	1156±1(4)	NA	0.32	0.01	0.01	ND	ND	0.15	ND
47S	Methyl 1E-propenyl trisulfide	USA	23838-25-7	1169	1161±1(4)	NA	0.38	0.02	0.01	ND	ND	0.15	ND
51S	3-Vinyl-3,6-dihydro-1,2-dithiine	UCA USA	62488-52-2	1198	1178±1(4)	NA	1.11	5.80	0.41	ND	ND	0.70 [16,17]	ND
53S	4H-1,2,3-Trithiine	SCS	290-30-2	1202	1185±1(5)	NA	1.17	2.35	0.29	0.13	ND	2.10 [16]	ND
56S	2-Vinyl-4H-1,3-dithiine	UCS USA	80028-57-5	1206	1201±1(4)	NA	1.50	5.60	0.66	ND	ND	1.92	ND
58S	Dimethyl tetrasulfide	SAA	5756-24-1	1224	1204±1(2)	garlic meaty	0.16	0.05	ND	ND	ND	ND	ND
59S	(Z,Z)-di-1-Propenyl disulfide	USA	23838-22-4	1210	1208±1(3)	NA	0.05	0.03	0.08	ND	ND	ND	ND
64S	Diallyl trisulfide	USA	2050-87-5	1297	1305±2(4)	garlic green onion metallic	11.3	9.10	2.00	ND	ND	12.2 [16,17]	ND

ตาราง 3-1 (ต่อ)

ลำดับพืก	สารประกอบ	หมู่เกาะหรือฟังก์ชันเพิ่มเติม[1]	Cas No.	RI		ลักษณะของกลิ่นอ้างอิงจากฐานข้อมูล[31]	%Normalization ที่ตรวจพบในน้ำพริกแกง			%Normalization ที่ตรวจพบในสมุนไพรส่วนประกอบ พร้อมอ้างอิงที่พบในงานวิจัยที่ผ่านมา (ถ้ามี)			
				ค่าอ้างอิง[30]	การทดลองนี้		1	2	3	ขมิ้น	พริกเหลือง	กระเทียม	หอมแดง
67S	Allyl propyl trisulfide	USA	33922-73-5	1314	1316±1(4)	sulfurous alliaceous garlic onion	1.15	0.83	0.13	ND	ND	0.04	ND
69S	Allyl (Z)-1-propeny trisulfide	USA	382161-75-3	1329	1324±1(4)	NA	0.34	0.02	0.36	ND	ND	2.50	ND
71S	Propyl (E)-1-propenyl trisulfide	USA	23838-26-8	1331	1326	NA	ND	ND	ND	ND	ND	ND	0.41
72S	Dipropyl trisulfide	SAA	6028-61-1	1328	1328	sulfurous green onion garlic tropical	ND	ND	ND	ND	ND	ND	0.61
73S	Allyl-1E-propenyl trisulfide	USA	382161-78-6	1346	1329±1(3)	NA	0.45	ND	0.22	ND	ND	3.28	ND
74S	1Z-Propenyl propyl trisulfide	USA	23838-26-8	1331	1333±1(2)	NA	0.05	ND	ND	ND	ND	ND	0.57
75S	1E-Propenyl propyl trisulfide	USA	23838-27-9	1345	1336	NA	ND	ND	ND	ND	ND	ND	0.27

ตาราง 3-1 (ต่อ)

ลำดับพีก	สารประกอบ	หมู่เกาะหรือฟังก์ชันเพิ่มเติม[1]	Cas No.	RI		ลักษณะของกลิ่นอ้างอิงจากฐานข้อมูล [31]	%Normalization ที่ตรวจพบในน้ำพริกแกง			%Normalization ที่ตรวจพบในสมุนไพรส่วนประกอบ พร้อมอ้างอิงที่พบในงานวิจัยที่ผ่านมา (ถ้ามี)			
				ค่าอ้างอิง[30]	การทดลองนี้		1	2	3	ขมิ้น	พริกเหลือง	กระเทียม	หอมแดง
76S	di-1E-propenyl trisulfide	USA	115321-81-8	1348	1341±2(4)	NA	0.11	ND	0.04	ND	ND	0.09	0.64
77S	5-Methyl-1,2,3,4-tetrathiane	SCS	116664-30-3	1364	1353±1(4)	NA	3.77	1.70	0.19	ND	ND	1.34	ND
103S	Diallyl tetrasulfide	USA	2444-49-7	1532	1530±1(3)	strong garlic onion	3.60	2.17	ND	ND	ND	2.69 [16]	ND
Alcohol													
32A	(Z)-Linalool oxide	SCO USA	5989-33-3	1074	1077±1(2)	earthy floral sweet woody	0.03	0.04	ND	ND	ND	ND	ND
37A	β-Linalool	USA	78-70-6	1099	1107±1(3)	citrus floral sweet bois de rose woody green blueberry	ND	0.21	0.06	ND	1.33 [20]	ND	ND
48A	Menthol (p-Menthan-3-ol)	SAC	1490-04-6	1169	1169	cooling mentholic minty	ND	ND	ND	ND	0.68	ND	ND

ตาราง 3-1 (ต่อ)

ลำดับพีก	สารประกอบ	หมู่เกาะหรือฟังก์ชันเพิ่มเติม[1]	Cas No.	RI		ลักษณะของกลิ่นอ้างอิงจากฐานข้อมูล [31]	%Normalization ที่ตรวจพบในน้ำพริกแกง			%Normalization ที่ตรวจพบในสมุนไพรส่วนประกอบ พร้อมอ้างอิงที่พบในงานวิจัยที่ผ่านมา (ถ้ามี)			
				ค่าอ้างอิง[30]	การทดลองนี้		1	2	3	ขมิ้น	พริกเหลือง	กระเทียม	หอมแดง
49A	4-Terpineol	USC	562-74-3	1177	1172±1(4)	pepper woody earth musty sweet	0.04	0.27	0.05	0.09	ND	ND	ND
52A	m-Cymen-8-ol	ARM	5208-37-7	1183	1180±0(4)	NA	0.05	0.03	0.03	0.28	ND	ND	ND
61A	β-Geraniol	USA	106-24-1	1255	1259	sweet floral fruity rose waxy citrus	ND	0.17	ND	ND	ND	ND	ND
62A	1-Decanol	SAA	112-30-1	1273	1281±2(7)	fatty waxy floral orange sweet clean watery	0.09	0.42	1.35	1.46 [15,23]	68.41	10.10	42.13
65A	Carvacrol (p-Cymen-2-ol)	USA	499-75-2	1299	1316±4(3)	spice woody camphor thymol	0.09	0.07	ND	0.18	ND	ND	ND
81A	1-Undecanol	SAA	112-42-5	1371	1377	fresh waxy rose soapy clean clothes floral citrus	ND	ND	ND	ND	ND	0.12	ND
92A	1-Dodecanol	SAA	112-53-8	1473	1475±3(3)	earthy soapy waxy fatty honey coconut	ND	ND	ND	ND	0.78	6.37	0.69
104A	α-Copaen-11-ol	USC	41370-56-3	1540	1537	NA	ND	ND	ND	0.11	ND	ND	ND

ตาราง 3-1 (ต่อ)

ลำดับพืก	สารประกอบ	หมู่เกาะหรือฟังก์ชันเพิ่มเติม[1]	Cas No.	RI		ลักษณะของกลิ่นอ้างอิงจากฐานข้อมูล[31]	%Normalization ที่ตรวจพบในน้ำพริกแกง			%Normalization ที่ตรวจพบในสมุนไพรส่วนประกอบ พร้อมอ้างอิงที่พบในงานวิจัยที่ผ่านมา (ถ้ามี)			
				ค่าอ้างอิง[30]	การทดลองนี้		1	2	3	ขมิ้น	พริกเหลือง	กระเทียม	หอมแดง
105A	(Z)-Nerolidol	USA	40716-66-3	1564	1563±1(4)	sweet woody floral nerol nerolidol rhodinol linalool	0.12	0.19	0.14	ND	1.31 [16]	ND	ND
108A	γ-Eudesmol	USC	1209-71-8	1631	1618	waxy sweet	ND	ND	ND	0.79	ND	ND	ND
111A	β-Eudesmol	USC	473-15-4	1649	1641	woody green	ND	ND	ND	0.36	ND	ND	ND
114A	α-Santalol	USA SAC	115-71-9	1681	1685	woody sandalwood	ND	ND	ND	0.16	ND	ND	ND
122A	(Z)-β-curcumen-12-ol	USC USA	698365-10-5	1761	1750	ND	ND	ND	ND	2.09	ND	ND	ND
Phenolic compound													
18P	Phenol	ARM	108-95-2	980	979±1(2)	phenolic plastic rubber	0.06	0.05	ND	ND	ND	ND	ND
68P	2-Methoxy-4-vinylphenol	ARM AKX	7786-61-0	1317	1319±1(3)	dry woody fresh amber cedar roasted peanut	0.05	0.06	0.09	ND	ND	ND	ND
78P	Eugenol	ARM	97-53-0	1357	1359±1(2)	sweet spicy clove woody	ND	0.26	0.10	ND	ND	ND	ND

ตาราง 3-1 (ต่อ)

ลำดับพีก	สารประกอบ	หมู่เกาะหรือฟังก์ชันเพิ่มเติม[1]	Cas No.	RI		ลักษณะของกลิ่นอ้างอิงจากฐานข้อมูล[31]	%Normalization ที่ตรวจพบในน้ำพริกแกง			%Normalization ที่ตรวจพบในสมุนไพรส่วนประกอบ พร้อมอ้างอิงที่พบในงานวิจัยที่ผ่านมา (ถ้ามี)			
				ค่าอ้างอิง[30]	การทดลองนี้		1	2	3	ขมิ้น	พริกเหลือง	กระเทียม	หอมแดง
119P	Curcuphenol	ARM	69301-27-5	1722	1715	NA	ND	ND	ND	0.20	ND	ND	ND
Ester													
24E	Methyl 2,4-hexadienoate (Methyl sorbate)	USA	1515-80-6	1020	1017	NA	ND	ND	0.11	ND	ND	ND	ND
54E	Methyl salicylate	ARM	119-36-8	1192	1188±1(3)	wintergreen mint	0.05	0.46	0.57	ND	ND	ND	ND
70E	4-Methylpentyl-4-methylpentanoate	SAA	35852-42-7	1315	1324	fruity waxy soapy herbal	ND	ND	ND	ND	0.35	ND	ND
80E	Geranyl acetate	USA	105-87-3	1382	1386	floral rose lavender green waxy	ND	0.18	ND	ND	ND	ND	ND
82E	Phenylethyl-2-methylpropanoate	SAA ARM	103-48-0	1396	1392	floral fruity rose tea rose peach pastry	ND	ND	ND	ND	ND	0.89	ND
106E	Diethyl Phthalate	ARM	84-66-2	1594	1593±1(3)	odorless	ND	ND	ND	ND	0.22	ND	0.67

ตาราง 3-1 (ต่อ)

ลำดับพีก	สารประกอบ	หมู่เกาะหรือฟังก์ชันเพิ่มเติม[1]	Cas No.	RI		ลักษณะของกลิ่นอ้างอิงจากฐานข้อมูล[31]	%Normalization ที่ตรวจพบในน้ำพริกแกง			%Normalization ที่ตรวจพบในสมุนไพรส่วนประกอบ พร้อมอ้างอิงที่พบในงานวิจัยที่ผ่านมา (ถ้ามี)			
				ค่าอ้างอิง[30]	การทดลองนี้		1	2	3	ขมิ้น	พริกเหลือง	กระเทียม	หอมแดง
120E	Methyl tetradecanoate	SAA	124-10-7	1725	1726±1(2)	fatty waxy petal	ND	0.16	0.12	ND	ND	ND	ND
123E	Benzyl benzoate	ARM	120-51-4	1762	1758	faint sweet balsam oily herbal	ND	ND	ND	ND	ND	0.12	ND
125E	2-Ethylhexyl salicylate	SAA ARM	118-60-5	1811	1800±1(3)	mild orchid sweet balsam	ND	ND	ND	ND	3.83	0.04	1.06
126E	Isopropyl myristate	SAA	110-27-0	1827	1828±1(2)	faint oily fatty	ND	ND	ND	ND	ND	0.02	0.47
127E	(E,E)-Farnesyl acetate	USA	4128-17-0	1843	1837	oily waxy	ND	ND	ND	ND	1.56	ND	ND
128E	Methyl hexadecanoate	SAA	112-39-0	1926	1939±5(5)	oily waxy fatty orris	0.18	3.65	0.79	0.23 [15]	ND	ND	0.14 [15]
129E	Isopropyl palmitate	SAA	142-91-6	2023	2027	bland oily	ND	ND	ND	ND	9.63	ND	ND
130E	Methyl-9Z,12Z-octadecadienoate	USA	112-63-0	2092	2092±1(3)	oily fatty woody	0.03	0.64	0.25	ND	ND	ND	ND

ตาราง 3-1 (ต่อ)

ลำดับพีก	สารประกอบ	หมู่เกาะหรือฟังก์ชันเพิ่มเติม[1]	Cas No.	RI		ลักษณะของกลิ่นอ้างอิงจากฐานข้อมูล[31]	%Normalization ที่ตรวจพบในน้ำพริกแกง			%Normalization ที่ตรวจพบในสมุนไพรส่วนประกอบ พร้อมอ้างอิงที่พบในงานวิจัยที่ผ่านมา (ถ้ามี)			
				ค่าอ้างอิง[30]	การทดลองนี้		1	2	3	ขมิ้น	พริกเหลือง	กระเทียม	หอมแดง
131E	Methyl-9Z-octadecenoate	USA	112-62-9	2103	2099±1(3)	mild fatty	0.02	0.20	0.13	ND	ND	ND	ND
Ether													
27F	Eucalyptol	SCO SAC	470-82-6	1032	1029±1(4)	eucalyptus herbal camphor medicinal	0.07	0.45	0.64	2.59 [19]	ND	ND	ND
63F	Anethole	ARM	104-46-1	1286	1292±1(3)	sweet anise licorice medicinal	0.10	0.16	0.24	ND	ND	ND	ND
Hydrocarbons													
12H	1S-α-Pinene	USC	7785-26-4	937	929	sharp warm resinous fresh pine	ND	ND	ND	0.05 [19]	ND	ND	ND
17H	Sabinene	USA SAC	3387-41-5	974	971±2(2)	woody terpene citrus pine spice	ND	0.18	0.01	ND	ND	ND	ND
20H	β-Myrcene	USA	123-35-3	991	988±1(3)	peppery terpene spicy balsam plastic	ND	0.19	0.05	0.19 [19]	ND	ND	ND

ตาราง 3-1 (ต่อ)

ลำดับพืก	สารประกอบ	หมู่เกาะหรือฟังก์ชันเพิ่มเติม[1]	Cas No.	RI		ลักษณะของกลิ่นอ้างอิงจากฐานข้อมูล[31]	%Normalization ที่ตรวจพบในน้ำพริกแกง			%Normalization ที่ตรวจพบในสมุนไพรส่วนประกอบ พร้อมอ้างอิงที่พบในงานวิจัยที่ผ่านมา (ถ้ามี)			
				ค่าอ้างอิง[30]	การทดลองนี้		1	2	3	ขมิ้น	พริกเหลือง	กระเทียม	หอมแดง
21H	α-Phellandrene	USC	99-83-2	1005	1002±1(4)	citrus herbal terpene green woody peppery	0.07	0.12	0.96	2.21 [19]	ND	ND	ND
22H	3-Carene	USC	13466-78-9	1011	1008±1(3)	sweet citrus terpenic fir needle	ND	0.76	0.02	0.11	ND	ND	ND
23H	α-Terpinene	USC	99-86-5	1017	1014±1(4)	woody terpene lemon herbal medicinal citrus	0.01	0.02	0.04	0.44 [21]	ND	ND	ND
25H	o-Cymene	ARM	527-84-4	1025	1023±1(4)	NA	0.05	0.16	0.23	0.88 [21]	ND	ND	ND
26H	α-Limonene	USC	138-86-3	1027	1027±1(3)	citrus herbal terpene camphor	0.05	0.47	0.06	ND	ND	ND	ND
28H	(Z)-β-Ocimene	USA	3338-55-4	1038	1039	warm floral herb flower sweet	ND	0.02	ND	ND	ND	ND	ND
30H	(E)-β-Ocimene	USA	3779-61-1	1049	1051	sweet herbal	ND	0.08	ND	ND	ND	ND	ND

ตาราง 3-1 (ต่อ)

ลำดับพืก	สารประกอบ	หมู่เกาะหรือฟังก์ชันเพิ่มเติม[1]	Cas No.	RI		ลักษณะของกลิ่นอ้างอิงจากฐานข้อมูล[31]	%Normalization ที่ตรวจพบในน้ำพริกแกง			%Normalization ที่ตรวจพบในสมุนไพรส่วนประกอบ พร้อมอ้างอิงที่พบในงานวิจัยที่ผ่านมา (ถ้ามี)			
				ค่าอ้างอิง[30]	การทดลองนี้		1	2	3	ขมิ้น	พริกเหลือง	กระเทียม	หอมแดง
31H	γ-Terpinene	USC	99-85-4	1060	1061±1(4)	oily woody terpene lemon/lime tropical herbal	0.02	0.03	0.06	0.16 [21]	ND	ND	ND
34H	α-Terpinolene	USC	586-62-9	1088	1095±1(4)	fresh woody sweet pine citrus	0.36	0.15	1.21	8.41 [21]	ND	ND	ND
79H	2-Methyltridecane	SAA	1560-96-9	1364	1368±1(2)	NA	0.14	ND	0.54	ND	ND	ND	ND
83H	Tetradecane	SAA	629-59-4	1400	1400	mild waxy	ND	ND	ND	ND	ND	ND	0.21
84H	Sesquithujene	USA USC	58319-06-5	1402	1404±1(4)	NA	0.09	0.25	0.91	0.18	ND	ND	ND
85H	β-Caryophyllene	USA USC	87-44-5	1419	1412±1(4)	sweet woody spice clove dry	0.83	2.36	2.14	2.12 [14,19,23]	ND	ND	ND
86H	α-Santalene	USA SAC	512-61-8	1420	1416±1(3)	woody	0.03	0.03	4.77	ND	ND	ND	ND
87H	(E)-α-Bergamotene	USA,USC	13474-59-4	1435	1432±0(3)	woody warm tea	0.04	0.20	2.71	ND	ND	ND	ND

ตาราง 3-1 (ต่อ)

ลำดับพีก	สารประกอบ	หมู่เกาะหรือฟังก์ชันเพิ่มเติม[1]	Cas No.	RI		ลักษณะของกลิ่นอ้างอิงจากฐานข้อมูล[31]	%Normalization ที่ตรวจพบในน้ำพริกแกง			%Normalization ที่ตรวจพบในสมุนไพรส่วนประกอบ พร้อมอ้างอิงที่พบในงานวิจัยที่ผ่านมา (ถ้ามี)			
				ค่าอ้างอิง[30]	การทดลองนี้		1	2	3	ขมิ้น	พริกเหลือง	กระเทียม	หอมแดง
88H	α-Humulene	USC	6753-98-6	1454	1446±1(4)	woody	0.40	0.26	2.80	0.29	ND	ND	ND
90H	α-Himachalene	USC USA	3853-83-6	1449	1456±2(4)	NA	0.72	0.36	2.91	1.47	ND	ND	ND
91H	2-Methyltetradecane	SAA	1560-95-8	1463	1464±0(3)	NA	0.34	0.02	1.69	ND	ND	ND	ND
93H	γ-Curcumene	USC USA	451-55-8	1480	1477±1(4)	NA	0.89	0.91	2.31	1.66 [19]	ND	ND	ND
94H	α-Curcumene	USC USA	644-30-4	1483	1480±1(4)	herbal	4.57	4.54	6.59	3.70 [19]	ND	ND	ND
96H	α-Zingiberene	USC USA	495-60-3	1493	1494±2(4)	spice fresh sharp	6.20	5.08	11.14	9.00	ND	ND	ND
97H	β-Bisabolene	USC USA	495-61-4	1506	1506±1(4)	balsamic woody	1.16	1.88	5.11	1.21 [21]	ND	ND	ND
98H	β-Curcumene	USC USA	28976-67-2	1509	1509±1(4)	NA	0.32	0.24	0.84	0.59 [19]	ND	ND	ND

ตาราง 3-1 (ต่อ)

ลำดับพีก	สารประกอบ	หมู่เกาะหรือฟังก์ชันเพิ่มเติม[1]	Cas No.	RI		ลักษณะของกลิ่นอ้างอิงจากฐานข้อมูล[31]	%Normalization ที่ตรวจพบในน้ำพริกแกง			%Normalization ที่ตรวจพบในสมุนไพรส่วนประกอบ พร้อมอ้างอิงที่พบในงานวิจัยที่ผ่านมา (ถ้ามี)			
				ค่าอ้างอิง[30]	การทดลองนี้		1	2	3	ขมิ้น	พริกเหลือง	กระเทียม	หอมแดง
100H	γ-Cadinene	USC USA	39029-41-9	1513	1515±1(2)	herbal woody	ND	0.06	1.13	ND	ND	ND	ND
101H	β-Sesquiphellandrene	USC USA	20307-83-9	1524	1521±2(4)	herbal fruity woody	9.16	7.34	12.86	10.3 [20]	ND	ND	ND
102H	(Z)-γ-Bisabolene	USC USA	13062-00-5	1515	1529±1(2)	NA	ND	ND	1.29	0.36 [21]	ND	ND	ND
107H	Hexadecane	SAA	544-76-3	1600	1600	NA	ND	ND	ND	ND	0.30	ND	ND
Hetercyclic N compounds													
50N	2-methoxy-3-(2-methylpropyl)-pyrazine	UCN AKX	24683-00-9	1183	1178	green pea green bell pepper green pea galbanum	ND	ND	ND	ND	1.94	ND	ND

[1] อักษรย่อของหมู่เกาะและฟังก์เพิ่มเติม คำอธิบายอยู่ในส่วนภาคผนวก ตารางที่ ก-2

- NA ย่อมาจาก Not Available - ND ย่อมาจาก Not Detected (น้อยกว่า 0.01%Normalization)

ตาราง 3-2 : แสดง %Normalization รวมของกลุ่มสารประกอบที่ตรวจพบในพริกแกงเหลืองและสมุนไพร

สารประกอบ	ประเภทของสาร	ตรวจพบในน้ำพริกแกง			ตรวจพบในเครื่องเทศหรือส่วนประกอบ			
		1	2	3	ขมิ้น	พริกเหลือง	กระเทียม	หอมแดง
Aldehyde (D)	อิ่มตัว	0.16	ND	0.05	0.15	8.07	0.16	3.46
	ไม่อิ่มตัว	0.22	0.23	0.15	ND	ND	ND	ND
Ketone (K)	อิ่มตัว	0.11	1.29	0.01	ND	0.39	ND	ND
	ไม่อิ่มตัว	33.0	24.9	25.1	47.2	1.19	ND	ND
Sulfur compound (S)	อิ่มตัว	6.38	4.88	0.51	0.13	ND	3.57	26.1
	ไม่อิ่มตัว	33.7	35.4	6.9	ND	ND	78.7	25.0
Alcohol (A)	อิ่มตัว	0.09	0.42	1.35	1.46	69.9	16.6	42.8
	ไม่อิ่มตัว	0.33	0.98	0.28	4.06	2.64	0	0
Phenolic compound (P)	ไม่อิ่มตัว	0.11	0.37	0.19	0.2	ND	ND	ND
Ester (E)	อิ่มตัว	0.18	3.81	0.91	0.23	9.98	0.02	0.61
	ไม่อิ่มตัว	0.1	1.47	1.06	ND	5.61	1.06	1.72
Ether (F)	อิ่มตัว	0.07	0.45	0.64	2.59	ND	ND	ND
	ไม่อิ่มตัว	0.1	0.16	0.24	ND	ND	ND	ND
Hydrocarbons (H)	อิ่มตัว	0.49	0.02	2.23	ND	0.3	ND	0.21
	ไม่อิ่มตัว	25.0	25.7	60.3	44.0	ND	ND	ND
Hertercyclic N compounds (N)	อิ่มตัว	ND	ND	ND	ND	ND	ND	ND
	ไม่อิ่มตัว	ND	ND	ND	ND	1.94	ND	ND

ND ย่อมาจาก Not Detected (น้อยกว่า 0.01%Normalization)

เมื่อพิจารณาจากตารางที่ 3-1 นำข้อมูลที่ได้มารวม %Normalization ของแต่ละกลุ่มสารประกอบได้ดังตารางที่ 3-2 พบว่า เครื่องเทศมีองค์ประกอบหลักเป็นกลุ่มสารระเหยง่ายที่มากกว่า 5% ดังนี้ ขมิ้น ได้แก่ คีโตนประเภทไม่อิ่มตัว (47.2%) ไฮโดนคาร์บอนประเภทไม่อิ่มตัว (44.0%)

พริกเหลือง ได้แก่ แอกอฮอล์ประเภทอิ่มตัว (69.9%) เอสเทอร์ประเภทอิ่มตัว (9.98%) แอลดีไฮด์ประเภทอิ่มตัว (8.07%) เอสเทอร์ประเภทไม่อิ่มตัว (5.61%)

กระเทียม ได้แก่ สารประกอบซัลเฟอร์ไม่อิ่มตัว (78.7%) แอลกอฮอล์ประเภทอิ่มตัว (16.6%)

หอมแดง ได้แก่ แอลกอฮอล์ประเภทอิ่มตัว (42.8%) สารประกอบซัลเฟอร์ประเภทอิ่มตัว (26.1%) ประเภทไม่อิ่มตัว (25.0%)

เมื่อพิจารณาเปรียบเทียบจากตารางที่ 3-1 สารระเหยง่ายที่พบในน้ำแกงเหลืองทั้ง 3 แหล่งกับสารระเหยง่ายต่าง ๆ ของสมุนไพรที่เป็นองค์ประกอบ พบว่ามีองค์ประกอบหลักที่เป็นสารระเหยง่ายดังนี้

ขมิ้นเป็นได้แก่ (E)-γ-Atlantone (18.1%), aR-Turmerone (13.1%), β-Sesquiphellandrene (10.3%), Tumerone (9.07%), α-Zingiberene (9.0%), α-Terpinolene(8.41%), (E)-Atlantone (3.03%), α-Curcumene(3.70%), α-Phellandrene(2.21%), Eucalyptol(2.59%), Caryophyllene (2.12%) และ (6R,7R)-Bisabolone (2.35%)

พริกเหลืองได้แก่ 1-Decanol (68.41%), β-Linalool(1.33%), (E)-Nerolidol (1.31%) และ Sulcatone (0.39%)

กระเทียมได้แก่ Diallyl disulphide (26.7%), Allyl (Z)-1-Propenyl disulfide (15.5%), Diallyl trisulfide (12.2%), 1-Decanol(10.1%), Allyl (E)-1-Propenyl disulfide (4.49%), Allyl methyl trisulfide (3.37%), Allyl (E) -prop-1-enyl trisulfide(3.28%), Diallyl tetrasulfide (2.69%), Allyl (Z)-1-propeny trisulfide(2.50%), Allyl methyl disulfide (2.23%) และ 4H-1,2,3-Trithiine (2.10%)

หอมแดงได้แก่ 1-Decanol(42.1%), Propyl disulfide(23.8%), (E)-Propenyl propyl disulfide (20.8%) 2,3-dimethylthiophene (1.34%), 2-Methyl-2-pentenal (0.91%), Methyl propyl disulfide(1.01%) และ 2-Ethylhexyl salicylate (1.06%)

พริกแกงเหลืองที่เป็นตัวอย่างในการทดลองนั้น เป็นผลิตภัณฑ์สำเร็จรูปที่จำหน่ายในท้องตลาดโดยที่ฉลากระบุว่า พริกที่เป็นส่วนประกอบในพริกแกงเหลือง I, II, III เป็นพริกเหลือง พริกชี้ฟ้าแห้ง และพริกขี้หนูแห้ง โดยที่มีส่วนประกอบอื่นที่เหมือนกันคือ ขมิ้น กระเทียม และหอมแดงในปริมาณปริมาณที่แตกต่างกัน

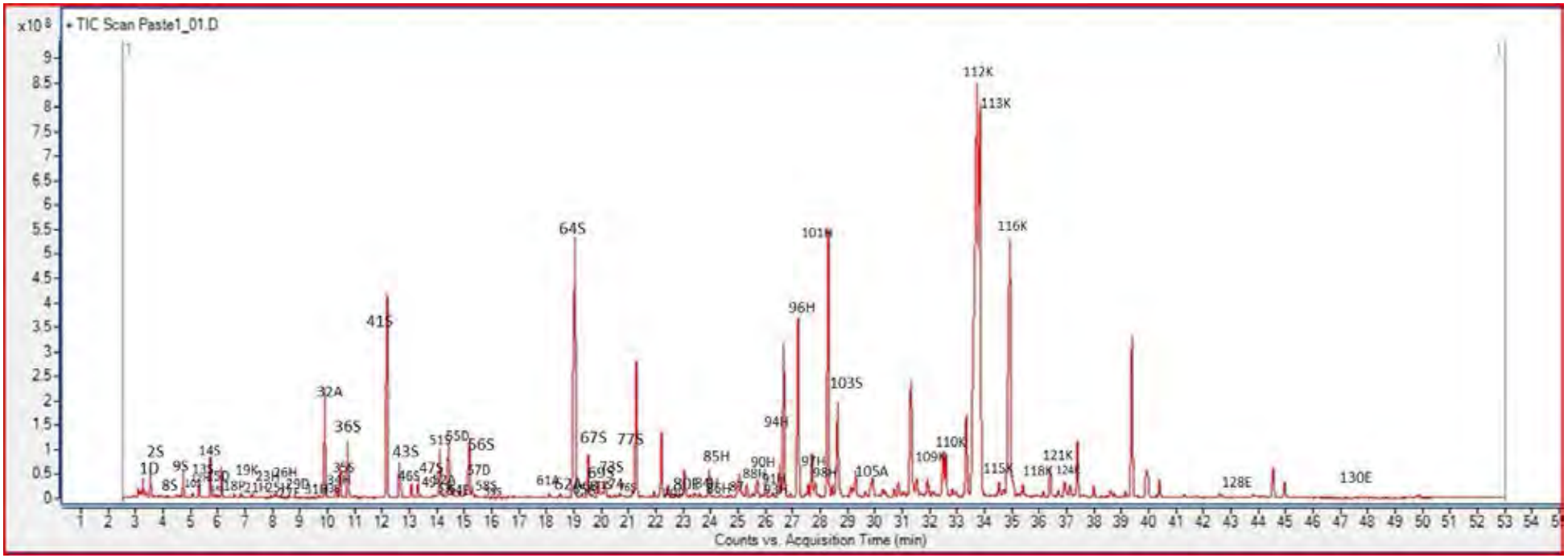
ตาราง 3-3 : แสดงร้อยละปริมาณเครื่องเทศที่ใช้เป็นส่วนประกอบในพริกแกงแต่ละชนิด

พริกแกงเหลือง	ขมิ้น	พริก	กระเทียม	หอมแดง	อื่น ๆ
I	1%	พริกเหลือง 30%	21%	22%	กะปิ 12% กรดมาลิก 2%
II	3.0%	พริกชี้ฟ้าแห้ง 11.0%	50.5%	-	ตะไคร้ 14.0% เกลือ 12.4% กะปิ 8.0% พริกไทย 1.0% กรดซิตริก 0.1%
III	15%	พริกขี้หนูแห้ง 25%	20%	25%	เกลือ 14.9%, สารกันเสีย 0.1%

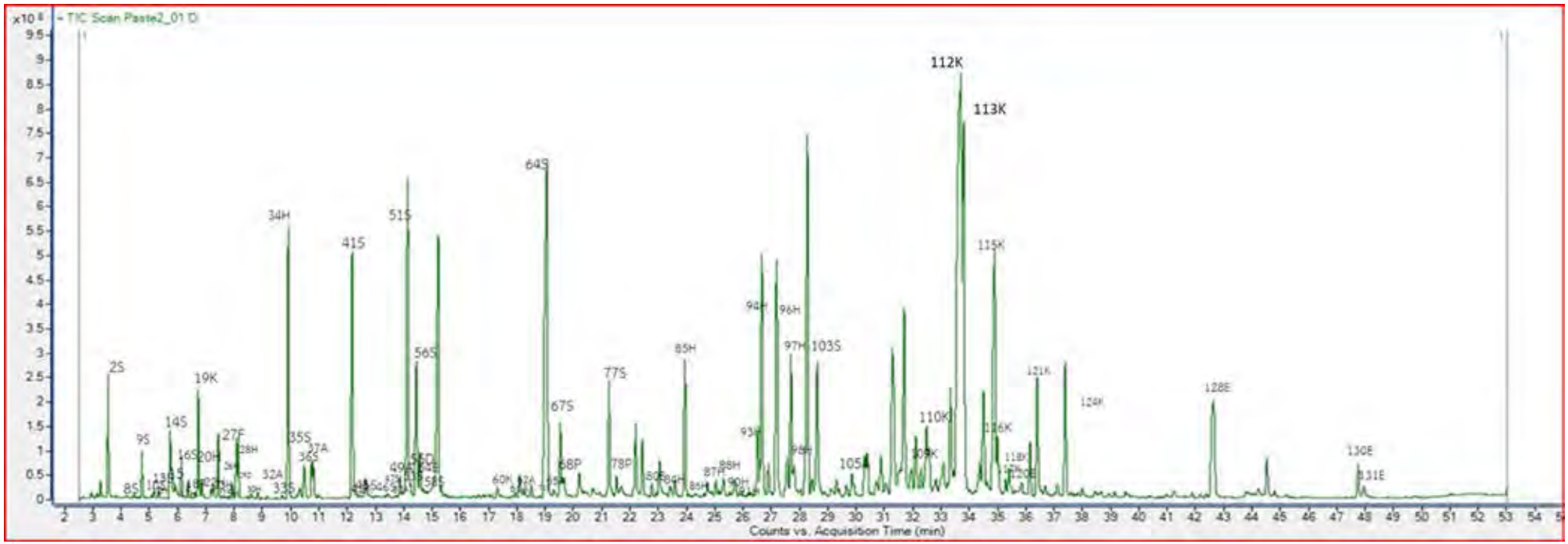
จากผลการทดลองดังตารางที่ 3-1 เปรียบเทียบพริกแกงเหลืองแต่ละแหล่งกับเครื่องเทศที่เป็นองค์ประกอบนั้นพบว่า สารประกอบประเภทคีโตนเช่น aR-Tumerone (7-11%), Tumerone (4-7%) Atlantone (2-8%) ที่ตรวจพบ คาดว่ามาจากขมิ้น อีกทั้งสารประกอบไฮโดรคาร์บอนส่วนใหญ่เป็นส่วนจำพวกเทอร์พีน นั้นมาจากขมิ้นเช่นกัน

สารประกอบซัลไฟด์ Diallyl disulfide (1-4%), Diallyl trisulfide (2-11%) คาดว่ามาจากกระเทียม และสารประกอบซัลไฟด์บางชนิด มาจากทั้งกระเทียมและหอมแดง

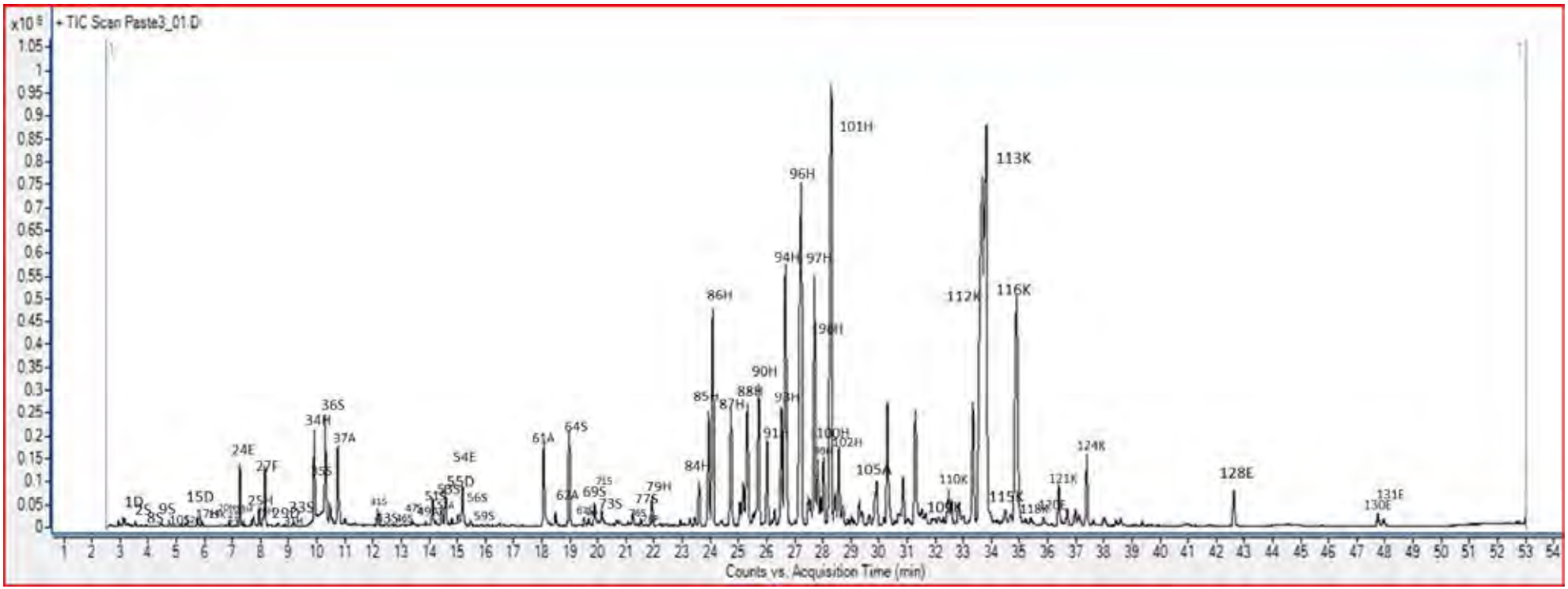
จากการสังเกต (E)-Propenyl-propyl disulfide และ Propyl disulfide ที่พบในหอมแดงนั้นมีปริมาณมากแต่ตรวจไม่พบในพริกแกง อาจเกิดมาจากการที่สารสามารถเกิดปฏิกิริยาและสลายตัวเป็นสารอื่นได้ หรือ ส่วนประกอบในพริกแกงอาจเป็นเครื่องเทศชนิดเดียวกันแต่ต่างแหล่งที่มาหรือต่างสายพันธุ์ก็สามารถมีสารระเหยง่ายที่แตกต่างกันได้



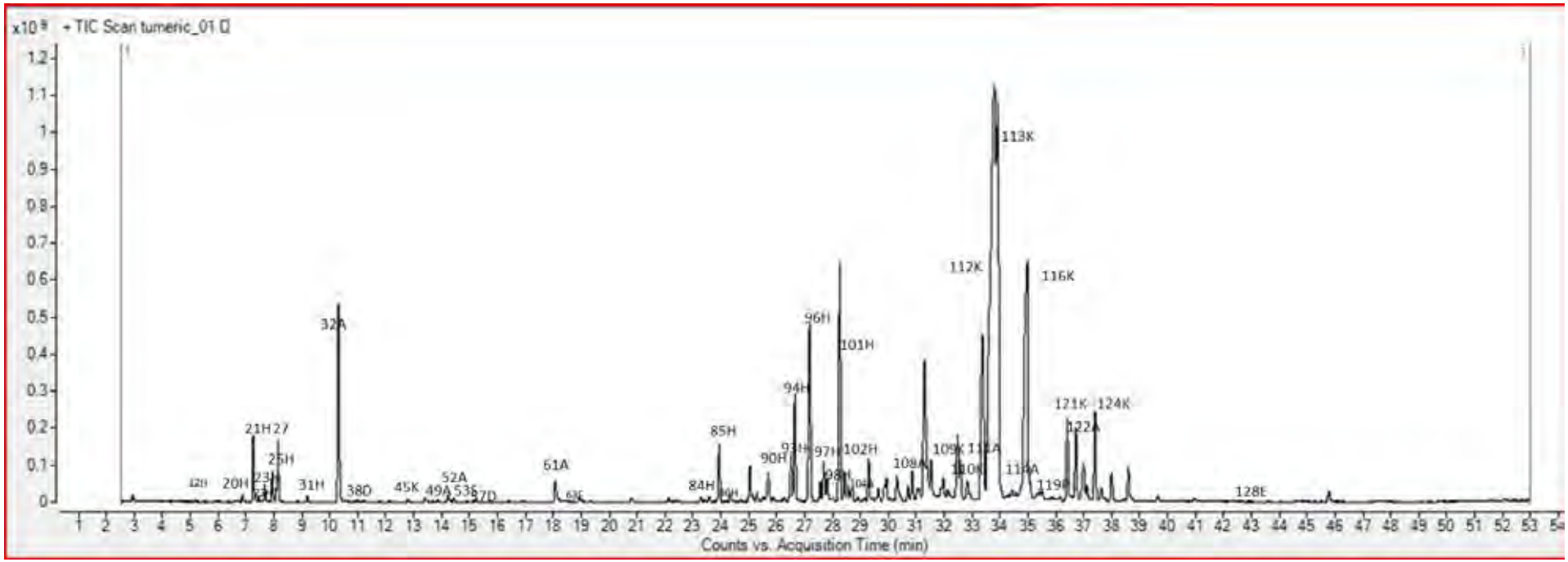
รูปที่ 3-11 : แสดงโครมาโทแกรมของสารระเหยง่ายในตัวอย่างน้ำพริกแกง I



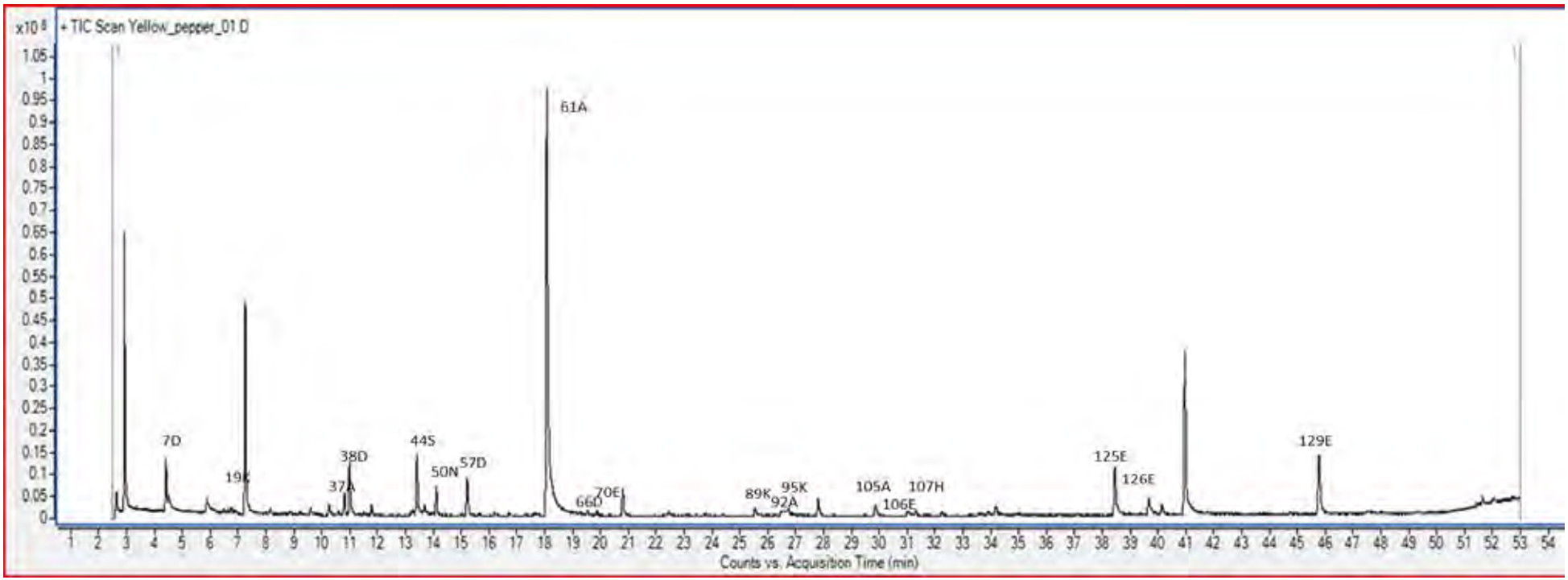
รูปที่ 3-12 : แสดงโครมาโทแกรมของสารระเหยง่ายในตัวอย่างน้ำพริกแกง II



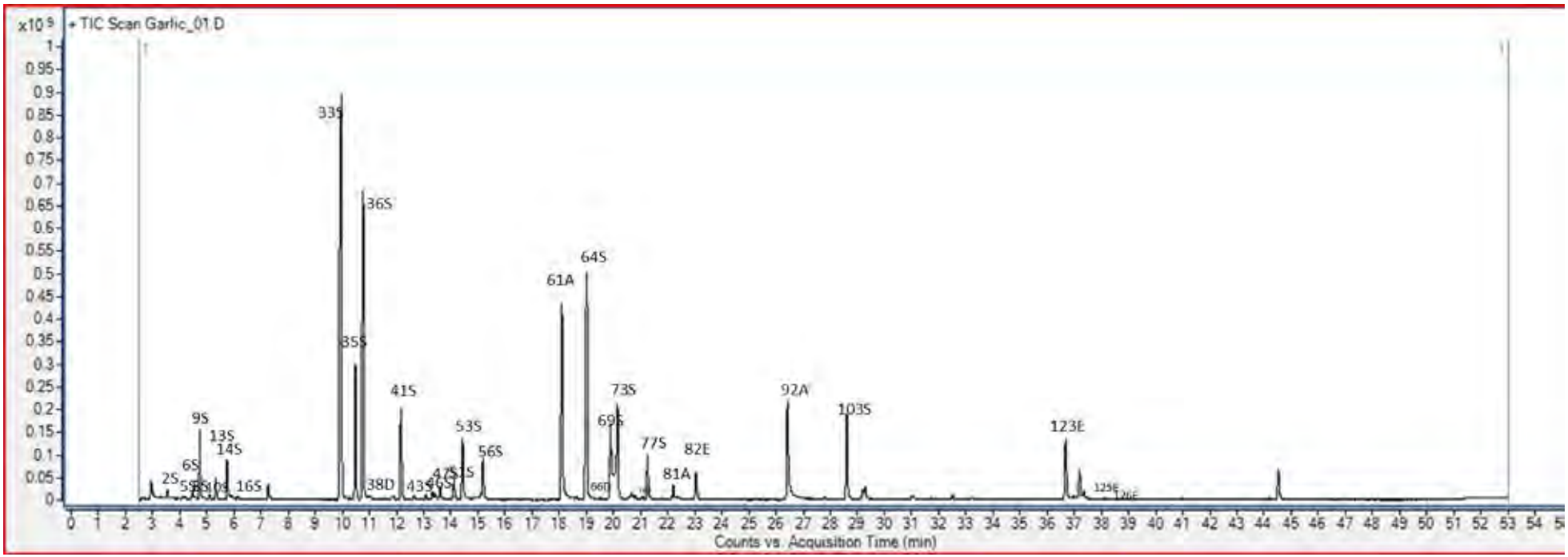
รูปที่ 3-13 : แสดงโครมาโทแกรมของสารระเหยง่ายในตัวอย่างน้ำพริกแกง III



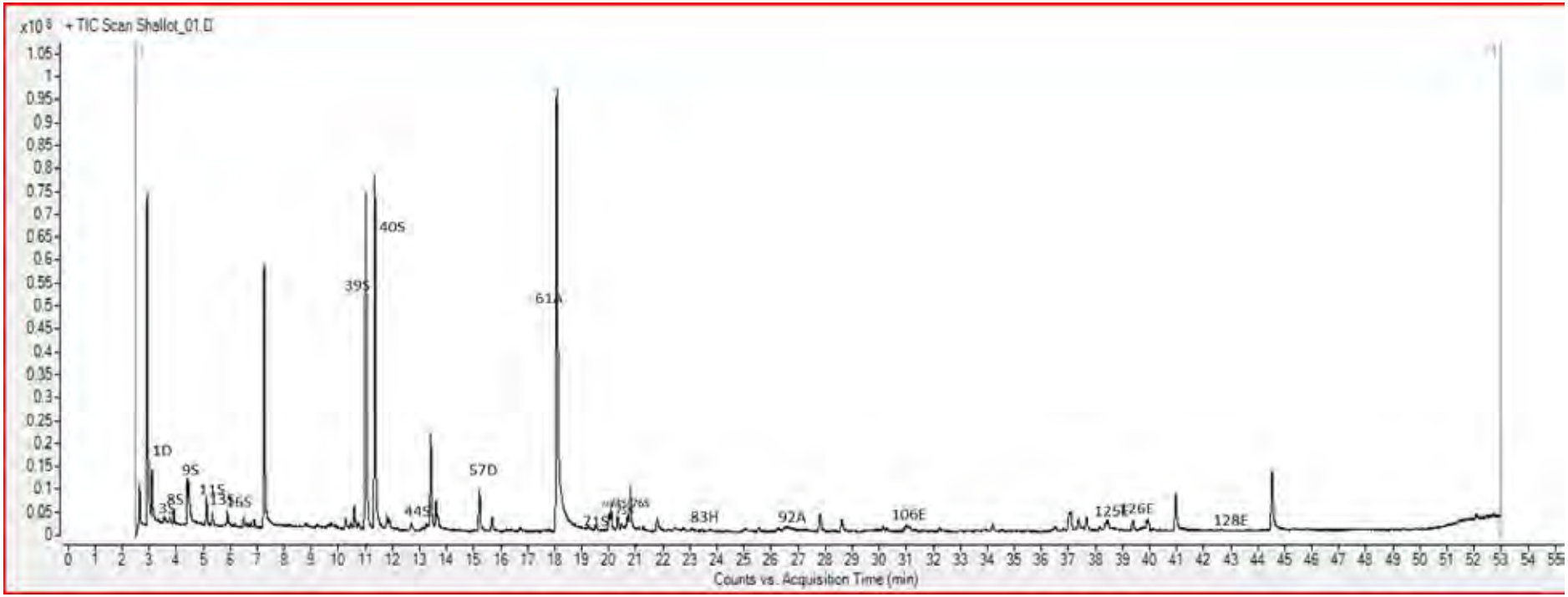
รูปที่ 3-14 : แสดงโครมาโทแกรมของสารระเหยง่ายในตัวอย่างขมิ้น



รูปที่ 3-15 : แสดงโครมาโทแกรมของสารระเหยง่ายในตัวอย่างพริกเหลือง



รูปที่ 3-16 : แสดงโครมาโทแกรมของสารระเหยง่ายในตัวอย่างกระเทียม

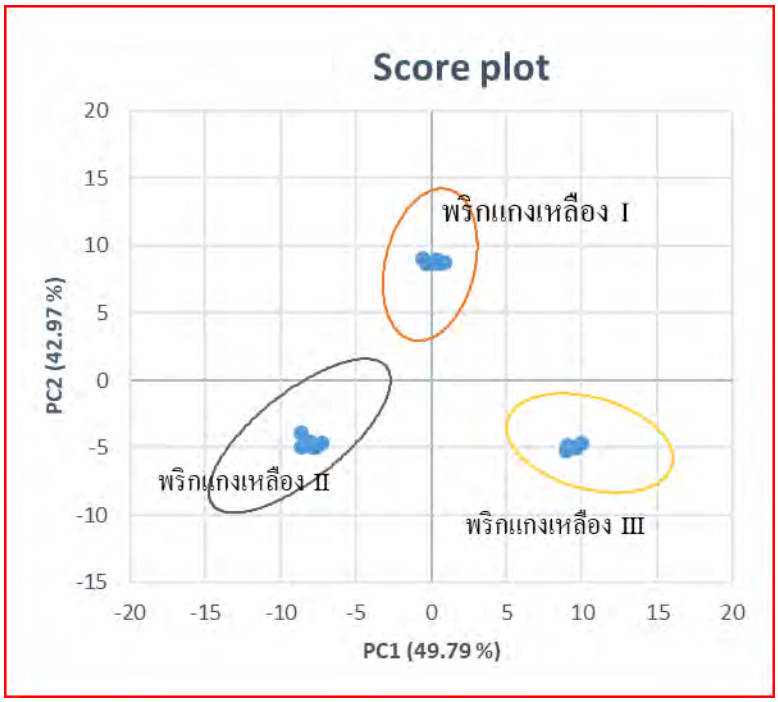


รูปที่ 3-17 : แสดงโครมาโทแกรมของสารระเหยง่ายในตัวอย่างหอมแดง

3.4 การประมวลผลโดยวิธีเคโมเมทริกซ์

นำผลวิเคราะห์ตัวอย่างน้ำพริกแกงเหลืองทั้ง 3 แหล่ง โดยแต่ละแหล่งทำการทดลองซ้ำ 6 ครั้ง รวมทั้งสมุนไพรที่เป็นส่วนประกอบของน้ำพริกแกงเหลืองทั้ง 4 ชนิดได้แก่ พริกเหลือง กระเทียม หอมแดง และขมิ้น ทำการทดลองซ้ำอย่างละ 6 ครั้ง รวมทั้งหมด 42 ตัวอย่าง คิดเป็น %Normalization แล้วนำมาวิเคราะห์โดยวิธีเคโมเมทริกซ์ ชนิด PCA ด้วยโปรแกรม XLSTAT 2019

เมื่อพิจารณาเปรียบเทียบสารระเหยง่ายในพริกแกงเหลืองทั้ง 3 แหล่งพบว่าแยกออกเป็น 3 กลุ่มอย่างชัดเจน แสดงว่าน้ำพริกแกงเหลืองทั้ง 3 แหล่งจากผลทดลองซ้ำ 6 ครั้ง มีองค์ประกอบและจำนวนของสารระเหยง่ายสำคัญแตกต่างกัน แสดงดังรูปที่ 3-18



รูปที่ 3-18 : แสดงกราฟผล PCA ในการจัดกลุ่มของน้ำพริกแกงทั้ง 3 แหล่ง

บทที่ 4

สรุปผลการทดลอง

จากการวิเคราะห์หาสารระเหยง่ายในตัวอย่างน้ำพริกแกงเหลืองทั้ง 3 แหล่งและเครื่องเทศที่ใช้เป็นส่วนประกอบ 4 ชนิดได้แก่ ขมิ้น พริกเหลือง กระเทียม หอมแดง โดยใช้เทคนิคเฮดสเปซโซลิดเฟส ไมโครเอกซ์แทรกชัน-แก๊สโครมาโทกราฟี-แมสสเปกโทรเมตรี (HS-SPME-GC-MS) ทดลองหาอัตราส่วนของสารที่เข้าคอลัมน์ต่อสารที่ฉีดทิ้งทาง split vent พบว่าอัตราส่วนที่ทำให้สารแยกออกจากกันได้ดีที่สุดและมีปริมาณของสารมากเพียงพอต่อการวิเคราะห์คือ 10:1 เมื่อหาสภาวะที่เหมาะสมในการเตรียมตัวอย่างด้วย HS-SPME พบว่าอุณหภูมิเหมาะสมในการสกัดคือ 60 องศาเซลเซียส และเวลาที่เหมาะสมในการสกัดคือ 45 นาที โดยใช้เวลาในการปลดปล่อยสารเข้าไปในส่วนฉีดสารของเครื่อง GC-MS 5 นาที

เมื่อได้ภาวะที่เหมาะสมแล้วจากนั้นจึงทำการวิเคราะห์หาสารระเหยง่ายในตัวอย่าง โดยพิสูจน์ทราบเอกลักษณ์ของสารระเหยง่ายจากการเปรียบเทียบกับฐานข้อมูล โดยระบุข้อมูลสารระเหยง่ายดังกล่าวกับ mass spectrum library NIST17 และยืนยันการระบุสารด้วยการเปรียบเทียบค่า linear retention index (LRI) โดยสามารถพิสูจน์ทราบเอกลักษณ์ของสารระเหยง่ายสำคัญได้ทั้งหมด 131 สาร ซึ่งพบในน้ำพริกแกงเหลืองทั้ง 3 แหล่งทั้งหมด 96 สาร พริกเหลือง 19 สาร กระเทียม 34 สาร หอมแดง 23 สาร และขมิ้น 42 สาร เป็นสารกลุ่มแอลดีไฮด์ คีโตน สารประกอบซัลไฟด์ แอลกอฮอล์ เอสเทอร์ อีเทอร์ สารประกอบไฮโดรคาร์บอน และสารประกอบวงปิดที่มีไนโตรเจนประกอบ ซึ่งสารระเหยง่ายสำคัญหลักของน้ำพริกแกงเหลืองได้แก่ ขมิ้น และกระเทียม และซึ่งพบเป็นสารกลุ่มสารประกอบไฮโดรคาร์บอนที่ไม่อิ่มตัว และสารประกอบซัลไฟด์ที่ไม่อิ่มตัว ตามลำดับ

เมื่อนำพื้นที่ใต้พีกของสารระเหยง่ายน้ำพริกแกงเหลืองทั้ง 3 แหล่งที่ได้จากโครมาโทแกรมของแต่ละตัวอย่าง มาคำนวณหาค่า %Normalization เพื่อใช้ในประมวลผลโดยวิธีเคโมเมทริกซ์ชนิด PCA ด้วยโปรแกรม XLSTAT 2019 พบว่า สามารถแบ่งกลุ่มตัวอย่างจากกันอย่างชัดเจนออกเป็น 3 กลุ่ม

เอกสารอ้างอิง

1. สุดารัตน์ หอมหวล (2018), ฐานข้อมูลเครื่องยาสมุนไพร. Retrieved February 21,2019 from http://www.medplant.mahidol.ac.th
2. Arthur, C.L.; Pawliszyn, J., Solid phase microextraction with thermal desorption using fused silica optical fibers. *Analytical Chemistry* **1990**, 62, 2145-2148.
3. Ning, L.; Fu-Ping, Z.; Hai-Tao, C.; Si-Yuan, L.; Chen, G.; Zhen-Yang, S.; Bao-Guo, S., Identification of volatile components in Chinese Sinkiang fermented camel milk using SAFE, SDE, and HS-SPME-GC/MS. *Food Chemistry* **2011**, 129 (3), 1242-52.
4. Akkad, R.; Kharraz, E.; Han, J.; House, J. D.; Curtis, J. M., Characterisation of the volatile flavour compounds in low and high tannin faba beans (Vicia faba var. minor) grown in Alberta, Canada. *Food Research International* **2019**, 120, 285-294.
5. Liu, X.; Deng, J.; Bi, J.; Wu, X.; Zhang, B., Cultivar classification of cloudy apple juices from substandard fruits in China based on aroma profile analyzed by HS-SPME/GC-MS. *LWT-Food Science and Technology* **2019**, 102, 304-309.
6. Ziolkowska, A.; Wasowicz, E.; Jelen, H. H., Differentiation of wines according to grape variety and geographical origin based on volatiles profiling using SPME-MS and SPME-GC/MS methods. *Food Chemistry* **2016**, 213, 714-720.
7. Skov, T.; Honoré, A. H.; Jensen, H. M.; Næs, T.; Engelsen, S. B., Chemometrics in foodomics: Handling data structures from multiple analytical platforms. *TrAC Trends in Analytical Chemistry* **2014**, 60, 71-79.

8. Li, M.; Yang, R.; Zhang, H.; Wang, S.; Chen, D.; Lin, S., Development of a flavor fingerprint by HS-GC-IMS with PCA for volatile compounds of Tricholoma matsutake Singer. *Food Chemistry* **2019**, 290, 32-39.

9. กฤช เหลือลมัย (2561), ต้นสายปลายจวัก: ค้นต้นตำรับ “แกงเหลือง” แกงส้มปักษ์ใต้ฉบับคนกรุง มาจากไหน พร้อมสูตรเด็ด. Retrieved March 12,2019 from https://www.silpa-mag.com/from-the-fingertip/article_19464

10. รวมสูตรอาหารทั้งสี่ภาค รสแซ่บ รสเด็ด และรสอร่อยแบบครบวงจร. Retrieved March 12, 2019 from http://foods-ban.blogspot.com/2014/11/blog-post.html

11. สมศรี เจริญเกียรติกุล. ศักยภาพต้านมะเร็งของตำรับอาหารไทย. วารสารพิษวิทยาไทย 2552, 24(2), 29-38

12. สุธิวงศ์ พงศ์ไพบูลย์. 2542. สารานุกรมวัฒนธรรมไทย ภาคใต้. กรุงเทพฯ : มูลนิธิสารานุกรมวัฒนธรรมไทย ธนาคารไทยพาณิชย์.

13. สูตร แกงเหลืองปลากระพง เข้มข้นด้วยพริกแกงทำเอง. Retrieved March 12,2019 from https://food.mthai.com/food-recipe/135545.html

14. Junior, S. B.; de Marchi Tavares de Melo, A.; Zini, C. A.; Godoy, H. T., Optimization of the extraction conditions of the volatile compounds from chili peppers by headspace solid phase micro-extraction. *Journal of Chromatography A* **2011**, 1218 (21), 3345-50.

15. Patel, K.; Ruiz, C.; Calderon, R.; Marcelo, M.; Rojas, R., Characterisation of volatile profiles in 50 native Peruvian chili pepper using solid phase microextraction-gas chromatography mass spectrometry (SPME-GCMS). *Food Research International* **2016**, 89 (Pt 1), 471-475.

16. Molina-Calle, M.; Priego-Capote, F.; Luque de Castro, M. D., Headspace–GC–MS volatile profile of black garlic vs fresh garlic: Evolution along fermentation and behavior under heating. *LWT-Food Science and Technology* **2017**, 80, 98-105.

17. Soto, V. C.; Maldonado, I. B.; Jofré, V. P.; Galmarini, C. R.; Silva, M. F., Direct analysis of nectar and floral volatile organic compounds in hybrid onions by HS- SPME/GC–MS: Relationship with pollination and seed production. *Microchemical Journal* **2015**, 122, 110-118.

18. Wang, Y.; Raghavan, S.; Ho, C. T., Process flavors of Allium vegetables in fruit and vegetable. *Flavour*, **2008**; 200-226.

19. Ni, Y.; Mei, M.; Kokot, S., One- and two-dimensional gas chromatography-mass spectrometry and high performance liquid chromatography-diode-array detector fingerprints of complex substances: A comparison of classification performance of similar, complex Rhizoma Curcumae samples with the aid of chemometrics. *Analytica Chimica Acta* **2012**, 712, 37-44

20. Pongsetkul, J.; Benjakul, S.; Sampavapol, P.; Osako, K.; Faithong, N., Chemical compositions, sensory and antioxidative properties of salted shrimp paste (Ka-pi) in Thailand. *International Food Research Journal* **2015,** 22(4), 1454- 1465

21. Leonés, A.; Durán-Guerrero, E.; Carbú, M.; Cantoral, J. M.; Barroso, C. G.; Castro, R., Development of vinegar obtained from lemon juice: Optimization and chemical characterization of the process. *LWT-Food Science and Technology* **2019**, 100, 314-321.

22. Giri, A.; Osako, K.; Okamoto, A.; Ohshima, T., Olfactometric characterization of aroma active compounds in fermented fish paste in comparison with fish sauce, fermented soy paste and sauce products. *Food Research International* **2010**, 43(4), 1027-1040.

23. Tyagi, A. K.; Gottardi, D.; Malik, A.; Guerzoni, M. E., Chemical composition, in vitro anti-yeast activity and fruit juice preservation potential of lemon grass oil. *LWT-Food Science and Technology* **2014**, 57(2), 731-737.

.24. Zhouyao, Z.; Janusz, P. Solid-phase microextraction. *Analytical Chemistry* **1994**, 66, 844-853.

25. Mark, O. (2005) Analysis of laminated documents using solid-phase microextraction.

26. แม้น อมรสิทธิ์ และ อมร เพชรสม. Principles and techniques of instrumental analysis. ชวนพิมพ์, 2539, 921-928.

27. Overview of a Typical GC-MS System. Retrieved March 20,2019 from https://www.chromacademy.com

28. Brereton, R.G. (2003). Chemometrics data analysis for the laboratory and chemical Plant.

29. Trygg, J., Wold, S. (2002). Homepage of chemometrics.

30. Shen, V.K., Siderius, D.W., Krekelberg, W.P., and Hatch, H.W., Eds., NIST Standard Reference Simulation Website, NIST Standard Reference Database Number 173, National Institute of Standards and Technology, Gaithersburg MD.

31. TGSC Information System. Retrieved May 7,2019 from http://www.thegoodscentscompany.com

ภาคผนวก

ตาราง ก-1 : แสดงสารระเหยง่ายสำคัญที่พบทั้งหมด 131 สารโดยเรียงตาม retention time

ลำดับพีก	สารประกอบ	Cas No.	RI
1D	2-Methyl-2-pentenal	623-36-9	837
2S	Diallyl sulfide	592-88-1	861
3S	Propyl hydrodisulfide	137363-84-9	865
4S	2,4-dimethylthiophene	638-00-6	875
5S	(Z)-Allyl(prop-1-en-1-yl) sulfane	104324-69-8	888
6S	(E)-Allyl(prop-1-en-1-yl) sulfane	104324-36-9	891
7D	Heptanal	111-71-7	901
8S	2,3-dimethylthiophene	632-16-6	896
9S	Allyl methyl disulfide	2179-58-0	920
10S	Methyl (E)-1-propenyl disulfide	23838-19-9	940
11S	Methyl propyl disulfide	2179-60-4	932
12H	1S-α-Pinene	7785-26-4	937
13S	Methyl (Z)-1-propenyl disulfide	23838-18-8	932
14S	1,2-Dithiole	288-26-6	952
15D	Benzaldehyde	100-52-7	962
16S	Dimethyl trisulfide	3658-80-8	970
17H	Sabinene	3387-41-5	974
18P	Phenol	108-95-2	980
19K	Sulcatone (6-Methyl-5-hepten-2-one)	110-93-0	986

ตาราง ก-1 (ต่อ)

ลำดับพีก	สารประกอบ	Cas No.	RI
20H	β-Myrcene	123-35-3	991
21H	α-Phellandrene	99-83-2	1005
22H	3-Carene	13466-78-9	1011
23H	α-Terpinene	99-86-5	1017
24E	Methyl 2,4-hexadienoate	1515-80-6	1020
25H	o-Cymene	527-84-4	1025
26H	α-Limonene	138-86-3	1027
27F	Eucalyptol	470-82-6	1032
28H	cis-β-Ocimene	3338-55-4	1038
29D	Benzeneacetaldehyde	122-78-1	1045
30H	(E)-β-Ocimene	3779-61-1	1049
31H	γ-Terpinene	99-85-4	1060
32A	(Z)-Linalool oxide	5989-33-3	1074
33S	Diallyl disulphide	2179-57-9	1081
34H	α-Terpinolene	586-62-9	1088
35S	Allyl (E)-1-Propenyl disulfide	122156-02-9	1103
36S	Allyl (Z)-1-Propenyl disulfide	122156-03-0	1107
37A	β-Linalool	78-70-6	1099
38D	Nonanal	124-19-6	1104
39S	Propyl disulfide	629-19-6	1107
40S	(E)-Propenyl propyl disulfide	23838-21-3	1118
41S	Allyl methyl trisulfide	34135-85-8	1142
42K	Camphor	21368-68-3	1145

ตาราง ก-1 (ต่อ)

ลำดับพีก	สารประกอบ	Cas No.	RI
43S	4-Methyl-1,2,3-trithiolane	116664-29-0	1154
44S	Methyl propyl trisulfide	17619-36-2	1154
45K	Myrcenone (2-Methyl-6-methyleneocta-2,7-dien-4-one)	539-70-8	1145
46S	Methyl (Z)-1-propenyl trisulfide	23838-24-6	1164
47S	Methyl (E)-1-propenyl trisulfide	23838-25-7	1169
48A	p-Menthan-3-ol	1490-04-6	1169
49A	4-Terpineol	562-74-3	1177
50N	2-methoxy-3-(2-methylpropyl)-pyrazine	24683-00-9	1183
51S	3-Vinyl-3,6-dihydro-1,2-dithiine	62488-52-2	1198
52A	m-Cymen-8-ol	5208-37-7	1183
53S	4H-1,2,3-trithiine	290-30-2	1202
54E	Methyl salicylate	119-36-8	1192
55D	Safranal (2,6,6-Trimethylcyclohexa-1,3-dienecarbaldehyde)	116-26-7	1201
56S	2-Vinyl-4H-1,3-dithiine	80028-57-5	1206
57D	Decanal	112-31-2	1206
58S	Dimethyl tetrasulfide	5756-24-1	1224
59S	(Z,Z)-di-1-propenyl disulfide	23838-22-4	1210
60K	(+)-Carvotanacetone (p-Menth-6-en-2-one)	23838-22-4	1210
61A	β-Geraniol	106-24-1	1255
62A	1-Decanol	112-30-1	1273
63F	Anethole	104-46-1	1286

ตาราง ก-1 (ต่อ)

ลำดับพีก	สารประกอบ	Cas No.	RI
64S	Diallyl trisulfide	2050-87-5	1297
65A	Carvacrol	499-75-2	1299
66D	Undecanal	112-44-7	1307
67S	Allyl propyl trisulfide	33922-73-5	1314
68P	2-Methoxy-4-vinylphenol	7786-61-0	1317
69S	Allyl (Z)-1-propeny trisulfide	382161-75-3	1329
70E	4-Methylpentyl 4-methylpentanoate	35852-42-7	1315
71S	Propyl (E)-1-propenyl trisulfide	23838-26-8	1331
72S	Dipropyl trisulfide	6028-61-1	1328
73S	Allyl (E)-prop-1-enyl trisulfide	382161-78-6	1346
74S	(Z)-1-Propenyl propyl trisulfide	23838-26-8	1331
75S	(E)-1-Propenyl propyl trisulfide	23838-27-9	1345
76S	(E,E)-di-1-propenyl trisulfide	115321-81-8	1348
77S	5-Methyl-1,2,3,4-tetrathiane	116664-30-3	1364
78P	Eugenol	97-53-0	1357
79H	2-Methyltridecane	1560-96-9	1364
80E	Geranyl acetate	105-87-3	1382
81A	1-Undecanol	112-42-5	1371
82E	Phenylethyl 2-methylpropanoate	103-48-0	1396
83H	Tetradecane	629-59-4	1400
84H	Sesquithujene	58319-06-5	1402
85H	Caryophyllene	87-44-5	1419
86H	α-Santalene	512-61-8	1420
87H	trans-α-Bergamotene	13474-59-4	1435

ตาราง ก-1 (ต่อ)

ลำดับพีก	สารประกอบ	Cas No.	RI
88H	α-Humulene	6753-98-6	1454
89K	Geranyl acetone (6,10-Dimethyl-5,9-undecadien-2-one)	689-67-8	1456
90H	α-Himachalene	3853-83-6	1449
91H	2-Methyltetradecane	1560-95-8	1463
92A	1-Dodecanol	112-53-8	1473
93H	γ-Curcumene	451-55-8	1480
94H	α-Curcumene	644-30-4	1483
95K	(E)-β-Ionone	79-77-6	1486
96H	α-Zingiberene	495-60-3	1493
97H	β-Bisabolene	495-61-4	1506
98H	β-Curcumene	28976-67-2	1509
99H	(Z)-γ-Bisabolene	13062-00-5	1515
100H	γ-Cadinene	39029-41-9	1513
101H	β-Sesquiphellandrene	20307-83-9	1524
102H	γ-Bisabolene	13062-00-5	1515
103S	Diallyl tetrasulfide	2444-49-7	1532
104A	α-Copaen-11-ol	41370-56-3	1540
105A	(E)-Nerolidol	40716-66-3	1564
106E	Diethyl Phthalate	84-66-2	1594
107H	Hexadecane	544-76-3	1600
108A	γ-Eudesmol	1209-71-8	1631
109K	Curlone	87440-60-6	1647

ตาราง ก-1 (ต่อ)

ลำดับพีก	สารประกอบ	Cas No.	RI
110K	2-epi-α-Cedren-3-one	288249-25-2	1640
111A	β-Eudesmol	473-15-4	1649
112K	aR-Turmerone	532-65-0	1664
113K	Tumerone	180315-67-7	1680
114A	α-Santalol	115-71-9	1681
115K	(Z)-γ-Atlantone	108549-48-0	1699
116K	(E)-γ-Atlantone	108549-47-9	1712
117K	Curdione	13657-68-6	1707
118K	(Z)-α-Atlantone	56192-70-2	1717
119P	Curcuphenol	69301-27-5	1722
120E	Methyl tetradecanoate	124-10-7	1725
121K	(6R,7R)-Bisabolone	72441-71-5	1747
122A	cis-β-curcumen-12-ol	698365-10-5	1761
123E	Benzyl benzoate	120-51-4	1762
124K	(E)-Atlantone	108645-54-1	1773
125E	2-Ethylhexyl salicylate	118-60-5	1811
126E	Isopropyl myristate	110-27-0	1827
127E	(E,E)-Farnesyl acetate	4128-17-0	1843
128E	Methyl hexadecanoate	112-39-0	1926
129E	Isopropyl palmitate	142-91-6	2023
130E	Methyl (Z,Z)-9,12-octadecadienoate	112-63-0	2092
131E	Methyl (E)-9-octadecenoate	112-62-9	2103

ตาราง ก-2 : แสดงแสดงตัวย่อและความหมายในหัวข้ออธิบายหมู่เกาะและฟังก์ชัน

SAA	Saturated aliphatic group/moiety	SAC	Saturated cyclic group/moiety
USA	Unsaturated aliphatic group/moiety	USC	Unsaturated cyclic group/moiety
ARM	Aromatic compound or Aromatic ring moiety	SCO	Saturated Heterocyclic-O-ring moiety
SCN	Saturated Heterocyclic-N-ring moiety	SCS	Saturated Heterocyclic-S-ring moiety
UCO	Unsaturated Heterocyclic-O-ring moiety	UCN	Unsaturated Heterocyclic-N-ring moiety
UCS	Unsaturated Heterocyclic-S-ring moiety	HDX	Hydroxy group
AKX	Alkoxy moiety		

ตารางที่ ก-3 : แสดงตัวย่อและความหมายตัวย่อภาษาอังกฤษหลังเลขลำดับพีก

A	Alcohol
D	Aldehyde
E	Ester
F	Ether
H	Hydrocarbon
K	Ketone
P	Phenolic compound
N	Heterocyclic N compound
S	Sulfur compound

ประวัติ

นางสาวศศิวิมล นามสกุล ภู่ศรี เกิดเมื่อวันที่ 21 เดือนกันยายน พ.ศ. 2539 ที่จังหวัดกรุงเทพมหานคร สำเร็จการศึกษาชั้นมัธยมศึกษาตอนปลายจากโรงเรียนวิเศษไชยชาญ “ตันติวิทยาภูมิ” จังหวัดอ่างทอง เมื่อปีการศึกษา 2557 เข้าศึกษาต่อในหลักสูตรวิทยาศาสตรบัณฑิต ภาควิชาเคมี คณะวิทยาศาสตร์ จุฬาลงกรณ์มหาวิทยาลัย เมื่อปีการศึกษา ที่อยู่ที่สามารถติดต่อได้ บ้านเลขที่ 50/1 ตำบลโพธิ์รังนก อำเภอโพธิ์ทอง จังหวัดอ่างทอง รหัสไปรษณีย์ 14120 อีเมล praewber@gmail.com