

空间偏移拉曼光谱分析技术及其在食品次表层检测中的应用

黄桂军 赖丽琼

广西壮族自治区粮油质量检验中心

DOI:10.32629/as.v9i2.3743

[摘要] 空间偏移拉曼光谱SORS是一种能穿透包装或表皮,无损检测食品内部成分的技术,解决了传统方法只能看表层的难题。空间偏移拉曼光谱(spatially offset Raman spectroscopy, sors)是Matousek为了克服复杂分层样品的测量缺陷提出的一种新型拉曼光谱分析技术。将激光入射位置和探测器采集位置区分开,有效抑制表层物质的拉曼信号和荧光干扰,通常这些干扰会掩盖传统后向散射拉曼光谱中更深层的较弱信号,最终获取比传统拉曼光谱检测深两个数量级的物质光谱信息。相比近红外和荧光光谱层析成像、断层扫描等深层探测技术,sors在获取深层信息的同时保留了拉曼光谱的高化学特异性,具有更高的应用潜力。

[关键词] 空间偏移拉曼光谱; 次表层无损检测; 食品品质检测; 信号识别

中图分类号: F768.2 **文献标识码:** A

Spatially Offset Raman Spectroscopy Technology and Its Application in Subsurface Food Detection

Guijun Huang Liqiong Lai

Guangxi Zhuang Autonomous Region Grain and Oil Quality Inspection Center

[Abstract] Spatially offset Raman spectroscopy (SORS) is a technology that can penetrate packaging or skin to non-destructively detect the internal components of food, addressing the limitation of traditional methods that can only examine surface layers. Spatially offset Raman spectroscopy (SORS) was proposed by Matousek as a novel Raman spectroscopy analysis technique to overcome the measurement shortcomings of complex layered samples. By separating the laser incident position from the detector collection position, it effectively suppresses Raman signals and fluorescence interference from surface substances, which often obscure weaker signals from deeper layers in traditional backscattering Raman spectroscopy. This ultimately allows the acquisition of material spectral information from depths two orders of magnitude greater than conventional Raman spectroscopy. Compared with other deep-detection techniques such as near-infrared and fluorescence spectroscopy tomography imaging or computed tomography, SORS retains the high chemical specificity of Raman spectroscopy while obtaining deep-layer information, offering greater application potential.

[Key words] Spatially Offset Raman Spectroscopy (SORS); Sub-surface Non-destructive Testing; Food Quality Detection; Signal Identification;

空间偏移拉曼光谱(sors)是一种应用于浑浊/分层介质深层无损检测的新型拉曼光谱分析技术。分层物质不同深度的拉曼信号随传输距离增加对探测器的贡献产生规律性变化,sors技术通过采集偏移激光入射点不同距离的拉曼光谱,结合最佳偏移距离信号增强、次表层谱峰识别、次表层信号分离等方法降低表层的干扰,获取纯净的次表层物质拉曼信号,然后借助拉曼的分子特异性实现无损的次表层物质定性和定量检测。

1 核心技术: 如何穿透干扰

利用光子散射特性: 光子在生物组织中散射强烈, 深层光子

比表层光子更容易横向迁移。SORS通过在远离激光入射点的位置收集光子, 优先捕捉到深层信息。空间偏移实现分层: 通过改变激光入射点与探测器的距离(空间偏移量), 采集不同深度的光谱。小偏移量探测浅层, 大偏移量探测深层, 从而分离表层与次表层信号。信号处理增强: 结合算法(如主成分分析、机器学习)对不同偏移量的光谱数据进行处理, 抑制表层背景干扰, 增强次表层目标信号。应用场景中的食品次表层检测: 无损检测包装内部食品的成分、污染物或内部缺陷, 如检测水果内部糖分、肉类中的添加剂或包装内的异物。优势: 无需破坏样品,

可穿透不透明包装,适用于在线快速检测。局限性:检测深度有限(目前约10-14厘米,受组织类型和激光安全限制)。对高度不均匀或强吸收样品效果可能下降。需要复杂的数据分析和校准模型^[1]。SORS通过物理偏移和信号处理的结合,有效穿透表层干扰,实现食品次表层的无损检测,在食品安全和质量控制领域具有重要应用价值。

2 空间偏移拉曼光谱测量

2.1 分层样品空间偏移拉曼特性

分层样品的SORS特性,深度选择性:不同偏移距离对应不同探测深度,实现非破坏性层析分析。抑制表层干扰:有效克服荧光和强散射背景,获取纯净的内部物质光谱。适用性广:适用于多层混浊介质,如生物组织、药片、包装内物品等。应用与技术发展,应用:无损检测(如药品成分分析、安检)、生物医学(如无创血糖监测、组织病变诊断)。技术发展:如多重微空间偏移拉曼光谱(μ SORS)可实现皮下不同深度的同步探测,提高信噪比。SORS通过空间偏移实现分层样品的深度分辨和无损检测,是材料科学和生物医学的强大工具。

2.2 空间偏移拉曼测量技术

它通过巧妙地让激光照射点和信号收集点分开,实现了对不透明包装或浑浊介质内部物质的无损、快速、精准分析。核心原理是:它利用了光在漫散射介质(如生物组织、塑料包装)中传播的特性:从深层散射回来的光子比表层光子更容易发生横向偏移。通过设置激光入射点和收集点之间的空间偏移距离(ΔS),就能选择性地接收来自不同深度的信号,从而抑制表层干扰,获取纯净的内部物质光谱。技术优势:非侵入性,无需破坏样品包装或容器。穿透性强:可分析几毫米厚的不透明材料,如塑料、玻璃、纸张、生物组织等。抗干扰:有效抑制表层荧光和拉曼散射,提高信噪比。快速无损:适合现场快速筛查和在线过程监控。应用领域:制药与生物制药,快速鉴别不透明容器内的原料药和辅料,加速质量放行。安全与安检:在机场、车站等场所无损检测爆炸物、毒品等违禁品。食品与农业:检测水果内部品质、食品掺假、包装内污染物等。科学研究:用于生物组织深层成像、材料科学中的多层结构分析等。技术挑战:检测深度有限:在生物组织等强散射介质中,穿透深度通常在厘米级别。信号强度弱:深层散射光子信号较弱,需要高灵敏度探测器和信号处理技术。数据处理复杂:需要通过多元分析等方法分离不同深度的光谱信号。技术变体,逆向空间偏移拉曼光谱(Inverse SORS):采用环形照明并在中心收集,可使用更高激光功率,适用于人体安全检测等场景。表面增强空间偏移拉曼光谱(SE-SORS):结合SERS技术,极大增强特定位置(如标记纳米颗粒)的拉曼信号,用于超高灵敏度检测。这项技术正从实验室走向实际应用,尤其在需要“透过现象看本质”的无损检测领域潜力巨大。

3 在食品检测中的四大应用场景

3.1 食品内部品质无损评估

技术原理:一眼看透“表里”,SORS通过偏移激光入射点和

信号收集点,利用光在分层介质(如食品)中传播的特性。不同偏移距离采集的光谱,表层和次表层贡献不同,通过算法(如BTEM)就能分离出纯净的次表层信号,实现“透视”^[2]。食品次表层检测应用:从农田到餐桌,内部成分无损分析:检测苹果内部糖分、淀粉分布,或火腿内部脂肪、蛋白质含量,无需切开。异物与污染物检测:识别包裹在包装内的塑料、金属碎片,或检测蛋壳内细菌污染。成熟度与品质评估:通过分析次表层化学成分(如糖酸比)判断水果成熟度,减少损耗。过程与安全监控:实时监测发酵罐内物质变化,或检测药品原辅料真伪。优势与挑战,优势:无损、快速、无需样品前处理,可穿透纸张、塑料、玻璃等。挑战:信号较弱,对仪器灵敏度要求高;复杂食品基质需更精准算法;设备成本和便携性有待优化。未来展望,技术正向更高灵敏度、更强算法、更便携设备发展,结合AI和大数据,有望实现食品品质的实时、智能评估,从生产到消费全程保障安全。SORS是食品次表层检测的强大工具,正推动行业向更高效、安全的无损检测迈进。

3.2 检测食品掺假

如何实现“次表层”检测?传统拉曼光谱易受表层干扰,而SORS通过偏移激光入射点与信号收集点,采集多组光谱,利用算法分离表层与次表层信号,从而获得纯净的次表层物质化学指纹。应用场景:穿透包装,直击问题,SORS可直接检测密封包装内的食品,无需开箱或取样,适用于:乳制品:如包装牛奶中尿素掺假的定量检测,检测限达0.22 g/L。蜂蜜:鉴别植物来源,即使去除花粉或加工处理,准确率仍达100%。食用油:如高油酸葵花籽油的真伪鉴别,区分不同油酸含量类型。其他:如酒类、果汁等液体食品的掺假筛查。优势与局限,优势:无损、快速(单次测量约0.6秒)、无需样品前处理、可穿透多种非金属材料。局限:对深色或高吸收性样品效果较差,检测深度有限(通常几毫米),设备成本较高。未来展望,SORS正从实验室走向现场,便携式设备的发展将推动其在海关、超市、生产线的应用。未来研究将聚焦于提升算法鲁棒性、拓展应用范围,并与其他技术(如SERS)联动。SORS为食品掺假检测提供了强大的工具,尤其适合需要无损、快速、准确的场景。

3.3 食品安全与污染物筛查

技术原理,SORS利用光在分层介质(如食品)中传输时,不同深度的拉曼信号随偏移距离变化的规律。通过采集多个偏移距离的光谱并进行信号处理,可分离出次表层物质的纯净光谱,实现无损检测。应用场景,食品内部污染物检测:可检测包装内食品的掺假物(如糖浆中的乙二醇、牛奶中的尿素),检测限达0.5%-5%,适用于供应链筛查。次表层品质评估:用于评估水果内部腐烂、鱼肉新鲜度等,避免破坏样品。药用糖浆安全筛查:快速检测糖浆中的有害成分,检测限为0.5%-5%,虽未达到国际药典标准,但能有效筛查重大污染事件。技术优势,非破坏性:无需开瓶或破坏包装,保持产品完整性。快速便携:单次检测仅需1.5分钟,适合多节点筛查。深度敏感:通过调整偏移距离,可检测不同深度的次表层物质。局限性,检测限:当前检测限

(0.5%~5%) 高于国际药典标准(0.1%), 适用于筛查而非精确量化。信号干扰: 食品基质复杂, 可能影响信号分离精度。设备成本: 商业设备成本较高, 限制普及^[3]。未来展望, 研究正致力于开发更灵敏的算法、便携设备和标准化流程, 以提升检测精度和适用性。SORS技术为食品安全检测提供了强大的无损分析工具, 尤其适合内部污染物筛查和次表层品质评估, 未来随着技术优化, 应用前景将更广阔。

3.4 过程监控与质量控制

空间偏移拉曼光谱(SORS)技术通过采集不同偏移距离的光谱, 结合算法分离表层干扰, 实现对食品次表层的无损、精准检测, 为过程监控与质量控制提供了高效工具。SORS技术在食品次表层检测中的应用过程, 数据采集: 使用激光照射样品表面, 在不同空间偏移距离下采集拉曼光谱, 获取包含表层与次表层信息的混合信号。信号分离与增强: 通过算法(如广义高斯模型、注意力机制LSTM网络)分离表层与次表层信号, 增强次表层特征峰, 降低干扰。定性与定量分析: 利用拉曼光谱的分子指纹特性, 识别次表层物质的化学成分(如糖分、脂肪、污染物)并进行定量评估。在过程监控与质量控制中的具体应用, 新鲜度实时评估: 对带壳虾等水产品进行非破坏性检测, 通过次表层信号评估新鲜度指标, 实现生产线在线分级^[4]。内部品质无损筛查: 检测包装内食品的成分均匀性、异物或掺假(如塑料adulteration), 确保出厂品质。过程参数优化: 监控加工过程(如干燥、发酵)中的次表层变化, 为工艺调整提供数据支持。优势与挑战, 优势: 非接触、无损、快速, 可穿透不透明包装, 适合在线实时监控。挑战: 信号易受噪声影响, 需要复杂算法处理, 设备成本较高。实现了食品次表层的精准、无损检测, 为过程监控与质量控制提供了高效工具, 尤其适用于自动化生产线的在线筛查与实时反馈。

4 未来展望

空间偏移拉曼光谱(SORS)技术在食品次表层检测中的应用前景非常广阔, 它能突破传统光学检测的局限, 实现对食品内部品质的无损、精准评估, 未来将在食品安全、品质控制和智能检测方面发挥关键作用。技术原理与核心优势, SORS通过采集不同空间偏移距离的拉曼光谱, 利用深层信号对偏移不敏感而表层信号衰减快的特性, 分离出深层物质的光谱信息。其核心优势在于: 无损穿透: 可穿透包装、果壳等表层, 直接探测内部成分。分子特异性: 基于拉曼光谱的“指纹”特性, 可识别特定分子。定量能力: 通过信号强度分析, 可实现对目标物的定量检测。食品次表层检测中的应用, SORS已成功应用于多个领域: 内部品质

无损评价: 如实时监测水果(苹果、橙子)内部的糖度、酸度, 评估成熟度与新鲜度。污染物与掺假物检测: 识别包装内部的异物、塑化剂, 或检测蜂蜜、果汁中的掺假行为。内部缺陷与病害识别: 早期发现坚果、薯类等内部的霉变、虫蛀或褐变。未来展望, 未来SORS技术将向以下方向发展: 设备便携化与智能化: 开发手持式、便携式SORS设备, 结合AI算法, 实现现场快速检测与实时数据分析。检测效率与灵敏度提升: 优化算法和探测器, 缩短检测时间, 提高痕量物质(如农药残留、病原体)的检测能力。多模态融合检测: 结合高光谱、近红外等技术, 构建多维信息融合平台, 提升检测全面性与准确性。标准化与数据库建设: 建立食品拉曼光谱数据库和检测标准, 推动技术在监管和工业中的规范化应用。应用场景拓展: 从实验室走向生产线、流通环节和消费终端, 实现全链条品质监控。

总之, 空间偏移拉曼技术能透过表层或包装实现内部物质的无损检测, 检测过程主要受样品的拉曼激发强度和光谱分析算法影响, 因此拉曼信号的物理增强和数据增强是未来研究的重点内容。空间偏移拉曼技术的深层探测能力和分子特异性表征被广泛认可且不受行业领域的限制, 因此不同科学背景的研究人员对于sors技术的创新性研究在其他领域具有一定的通用性, 所综述的次表层信号识别方法和次表层信号分离方法也可拓展应用在医药、生物、材料等领域。在未来几年内, 随着价格低廉、操作便携、分析智能的拉曼设备开发, sors技术将不断拓展到新的无损检测领域。

[参考文献]

- [1]王华. 空间偏移拉曼光谱分析技术及其在食品次表层检测中的运用[J]. 生物光子学报, 2021(3):11-13.
- [2]赵小林. 空间偏移拉曼光谱分析技术及其在食品次表层检测中的应用探讨[J]. 智慧农业, 2023(2):5-8.
- [3]孙宏娟. 生物检测技术在食品检测中的应用[J]. 现代食品, 2025(1):111-113.
- [4]曾现富, 田伟卿. 食品质量检测技术实施现状及对策研究[J]. 食品安全导刊, 2024(19):78-79.

[作者简介]

黄桂军(1981--), 男, 壮族, 广西桂平市人, 大学本科, 高级工程师, 政治面貌: 中共党员, 单位: 广西壮族自治区粮油质量检验中心壮族, 研究方向: 粮油食品检验监测。

赖丽琼(1982--), 女, 汉族, 广西南宁市人, 大学本科, 工程师, 政治面貌: 中共党员, 单位: 广西壮族自治区粮油质量检验中心, 研究方向: 粮油食品检验监测。