

## SUPPLEMENTARY MATERIALS

### Terahertz Spectroscopic Analysis of Lactose in Infant Formula: Implications for Detection and Quantification

Sopant Datta <sup>1</sup>, Kiattiwut Prasertsuk <sup>2</sup>, Nuttawat Khammata <sup>3</sup>, Patharakorn Rattanawan <sup>2</sup>, Jia Yi Chia <sup>2</sup>,  
Rungroj Jintamethasawat <sup>2</sup>, Thawatchart Chulapakorn <sup>2,4</sup> and Taweetham Limpanuparb <sup>1,\*</sup>

<sup>1</sup> Science Division, Mahidol University International College, Mahidol University, Salaya, Phutthamonthon, Nakhon Pathom, 73170, Thailand; sopant.dat@student.mahidol.edu (S.D.)

<sup>2</sup> National Electronics and Computer Technology, National Science and Technology Development Agency, 112 Thailand Science Park, Pathum Thani, 12120, Thailand; kiattiwut.prasertsuk@nectec.or.th (K.P.); patharakorn.rattanawan@nectec.or.th (P.R.); jia.yi.chia@nectec.or.th (J.Y.C.); rungroj.jintamethasawat@nectec.or.th (R.J.)

<sup>3</sup> Department of Physics and Materials Science, Faculty of Science, Chiang Mai University, Chiang Mai, 50200, Thailand; nuttawat\_kh@cmu.ac.th

<sup>4</sup> Department of Construction Sciences, Lund, University, Lund, 22100, Sweden; thawatchart.chulapakorn@solid.lth.se

\*Correspondence: taweetham.lim@mahidol.edu

Table and figures in this document:

- Table S1 Pellet mass and thickness of pure  $\alpha$ -lactose monohydrate standards and infant formula samples for THz-TDS measurement
- Figure S1 Custom-made THz-TDS system in this study at National Electronics and Computer Technology Centre, Pathum Thani, Thailand (a zoom-in of the sample holder is framed in red)
- Figure S2 Product label of infant formula Sample 1
- Figure S3 Product label of infant formula Sample 2
- Figure S4 Product label of infant formula Sample 3

Items in separate folders (For convenience, PDF files of spreadsheet and codes are also included in addition to original files.):

## 1. data

- filelist.csv** contains a list of samples used in this study and their corresponding file names
- Nine dataset folders contain data from each replicate of THz-TDS measurement.

Set 1 (sampling rate = 250 times/measurement)	Set 2 (sampling rate = 500 times/measurement)
Ambient condition: <b>set1_ambient_1</b>	Ambient condition: <b>set2_ambient_1</b>
Nitrogen-rich atmosphere: <b>set1_N2_1</b> <b>set1_N2_2</b>	Nitrogen-rich atmosphere: <b>set2_N2_1</b> <b>set2_N2_2</b> <b>set2_N2_3</b> <b>set2_N2_4</b> <b>set2_N2_5</b>

Each of the nine folders contain the following subfolders and files.

- time\_domain** contains raw time-domain data from the machine in **csv files** for each sample with the following header.

Time (ps)	Sample signal (nA)	Reference signal (nA)
-----------	--------------------	-----------------------

- frequency\_domain** contains transmittance and absorbance vs frequency data (computed and exported from data-processing.ipynb) in **csv files** for each sample with the following header

Frequency (THz)	Transmittance (arbitrary unit)	Absorbance (arbitrary unit)
-----------------	--------------------------------	-----------------------------

and refractive index and absorption coefficient spectral data for each sample in **refractive-index.csv** and **absorption-coefficient.csv**, respectively.

- peak\_area\_and\_height** contains csv files of peak area and peak height values of the absorption spectra (in **absorption\_spectra** subfolder) and absorption coefficient spectra (in **absorption\_coefficient\_spectra** subfolder) for each sample, using the following baseline correction methods from Rampy Python library
  - peakvalues-poly.csv**: “poly” (polynomial fitting)
  - peakvalues-als.csv**: “als” (automatic least squares fitting)
  - peakvalues-arpls.csv**: “arpls” (asymmetrically reweighted penalized least squares smoothing)
  - peakvalues-drpls.csv**: “drpls” (doubly reweighted penalized least squares smoothing; used for the quantification model in the paper)

with the following header

Sample		Peak area		Peak height	
type	number	0.53 THz	1.37 THz	0.53 THz	1.37 THz

(sample type: L = lactose standard; S = infant formula sample)

- absorption\_spectra\_prediction.xlsx** contains results of the linear regression analysis ( $r^2$ , RMSE and predicted concentration values) using the absorption spectra, for each dataset and baseline correction method.  
**absorption\_coefficient\_spectra\_prediction.xlsx** contains results of the linear regression analysis ( $r^2$ , RMSE and predicted concentration values) using the absorption coefficient spectra, for each dataset and baseline correction method.

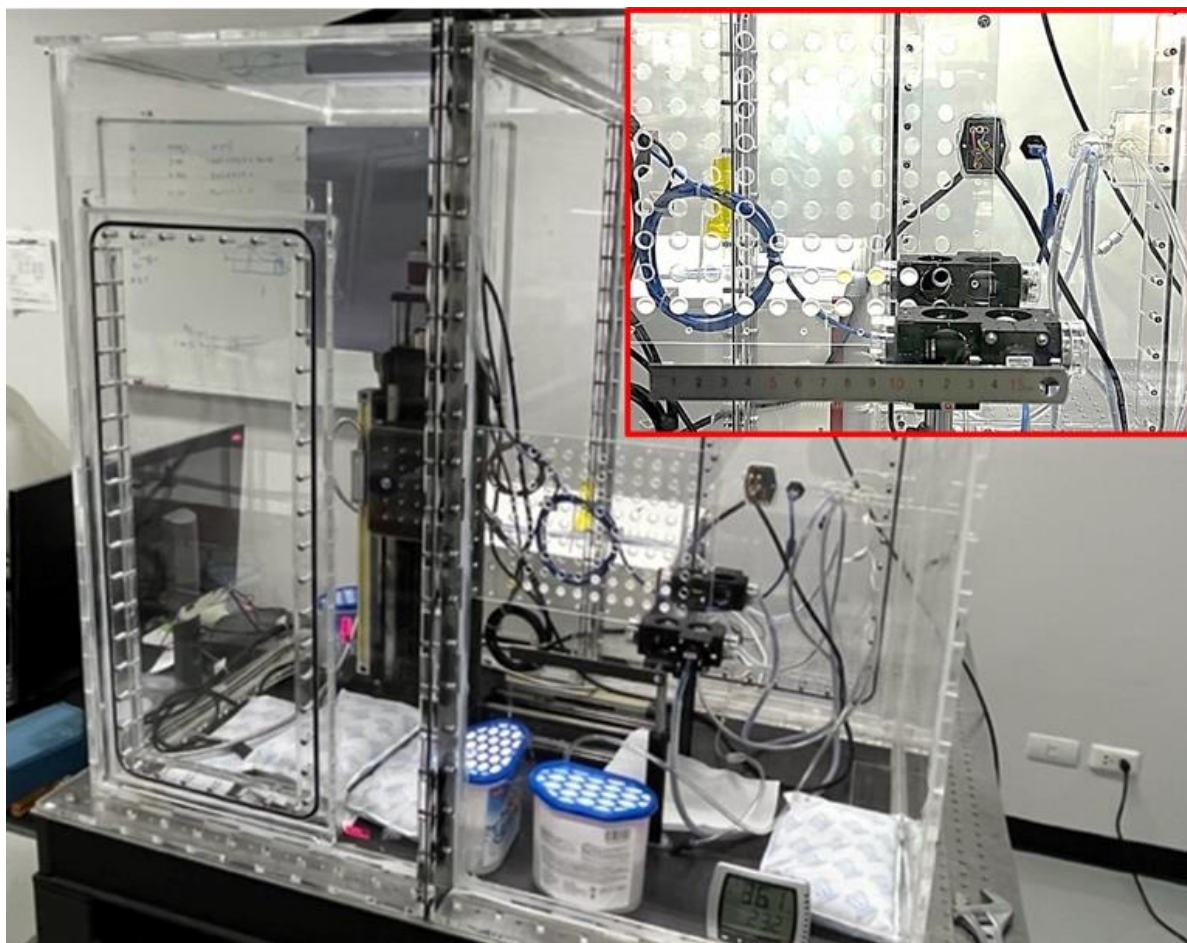
These results are from the analysis computed in **codes/regression.nb**.

## 2. codes

- Jupyter notebook **data-processing.ipynb** contains codes for the computation of the transmittance, absorbance, refractive index and absorption coefficient along with curve fitting and baseline correction for the computation of peak area and peak height
- Mathematica notebook **spectra-visualization.nb** contains codes for the visualization of the transmission, absorption, refractive index and absorption coefficient spectra
- Mathematica notebook **regression.nb** contains codes for the linear regression analysis and visualization of plots

**Table S1** Pellet mass and thickness of pure  $\alpha$ -lactose monohydrate standards and infant formula samples for THz-TDS measurement

	Mass of pellet (mg)	Thickness of pellet (mm)
<b>Pure standard</b>		
Concentration of $\alpha$ -lactose monohydrate in % (w/w)		
0	99.6	0.770
0	100.6	0.977
1	94.3	0.934
3	97.2	0.982
5	92.9	0.908
10	92.9	0.866
15	96.0	0.885
20	93.7	0.828
49	96.1	0.712
80	99.3	0.625
100	93.5	0.553
100	92.7	0.551
<b>Infant formula sample</b>		
1	98.3	0.587
2	97.9	0.582
3	99.0	0.585



**Figure S1** Custom-made THz-TDS system in this study at National Electronics and Computer Technology Center, Pathum Thani, Thailand (a zoom-in of the sample holder is framed in red)

ข้อมูลโภชนาการ (Nutrition Information)				
สารอาหารโดยเฉลี่ย Average composition		ต่อหน่วย 100 กรัม Per 100 g of powder	ต่อ 100 มล. ของนมที่ผสมน้ำแล้ว Per 100 ml of prepared formula	WHO RNI* ต่อ 100 มิลลิกรัม/ลิตรนมแม่ Per 100 ml of milk of prepared formula
พลังงาน/Energy	กิโลแคลอรี/kcal	512.6	67	**
	กิโลจูล/kJ	2144.72	280	**
ไขมัน/Fat	กรัม/g	26	3.4	**
กรดไขมันอิ่มตัว/Saturated acid	กรดไขมัน/mg	3280	29	**
กรดไขมันไม่อิ่มตัว/Unsaturated acid	กรดไขมัน/mg	400	52	**
กรดไขมันโอเลอิก (กรดไขมัน)/ Arachidonic acid (ARA)	กรดไขมัน/mg	48	6	**
กรดไขมันกรดไขมันโอเลอิก (กรดไขมัน)/ Docosahexaenoic acid (DHA)	กรดไขมัน/mg	48	6	**
โปรตีน/Protein	กรัม/g	9.8	1.3	**
คาร์โบไฮเดรต/Carbohydrate	กรัม/g	59.9	7.8	**
วิตามิน A/Vitamin A	หน่วยสากล/IU	1360	178	14
	ไมโครกรัมเรตินอล/μg RE	408	53	14
วิตามิน D/Vitamin D	หน่วยสากล/IU	216	28	14
	ไมโครกรัม/μg	5.40	0.71	14
วิตามิน E/Vitamin E	หน่วยสากล/IU	8	1	26
วิตามิน K1/Vitamin K1	ไมโครกรัม/μg	35.0	4.6	61
วิตามิน C/Vitamin C	มิลลิกรัม/mg	55.0	7.2	26
วิตามิน B1/Vitamin B1	ไมโครกรัม/μg	400	52	21
วิตามิน B2/Vitamin B2	ไมโครกรัม/μg	1000	131	37
ไนอาซิน/Niacin	ไมโครกรัม/μg	4300	562	19
วิตามิน B6/Vitamin B6	ไมโครกรัม/μg	280	37	18
กรดแพนโทเทอิก/Pantothenic acid	ไมโครกรัม/μg	64	8	17
วิตามิน B12/Vitamin B12	ไมโครกรัม/μg	3800	497	28
โคลีน/Choline	ไมโครกรัม/μg	0.8	0.1	19
อินอซิทอล/Inositol	มิลลิกรัม/mg	8	1	**
คาร์นิทีน/Carnitine	มิลลิกรัม/mg	44	5.8	**
โซเดียม/Sodium	มิลลิกรัม/mg	25	3.3	**
โพแทสเซียม/Potassium	มิลลิกรัม/mg	22	2.9	**
คลอไรด์/Chloride	มิลลิกรัม/mg	11	1.4	**
แคลเซียม/Calcium	มิลลิกรัม/mg	160	21	**
ฟอสฟอรัส/Phosphorus	มิลลิกรัม/mg	456	60	**
แมกนีเซียม/Magnesium	มิลลิกรัม/mg	308	40	9
เหล็ก/Iron	มิลลิกรัม/mg	290	38	**
สังกะสี/Zinc	มิลลิกรัม/mg	160	21	12
ทองแดง/Copper	มิลลิกรัม/mg	41	5.4	9
โครเมียม/Chromium	มิลลิกรัม/mg	4.2	1	8
นิโคตินิก/Nicotinic	ไมโครกรัม/μg	56	7	**
แมงกานีส/Manganese	ไมโครกรัม/μg	350	46	15
ซีลีเนียม/Selenium	ไมโครกรัม/μg	4	0.5	**
โคบอลต์/Cobalt	ไมโครกรัม/μg	76	10	20
วิตามิน B12/Vitamin B12	ไมโครกรัม/μg	12.0	1.6	**
วิตามิน B12/Vitamin B12	ไมโครกรัม/μg	12.0	1.6	**

\* Based on the WHO Recommended Nutrient Intakes for Infant 0-6 months and young children 7-12 months (2004).  
 \*\* Not determined/WHO not defined.

ส่วนผสม/Ingredients: แล็กโตส/Lactose 58.0450%, ไขมันพืชผสม (น้ำมันเมล็ดทานตะวัน, น้ำมันปาล์ม, น้ำมันถั่วเหลือง, น้ำมันรำข้าว) 24.3%, ผงโปรตีนนมวัว/Partial Hydrolyzed Whey Protein (Milk Protein) 12.0322%, วิตามินและแร่ธาตุผสม/Vitamins and Minerals Premix 1.43%, น้ำมันปลา/Palm Oil, Fish Oil, Arachidonic Acid Oil) 1.42%, แอล-อาร์จินีน/L-Arginine 0.2642%, กรดไขมันโอเลอิก/L-Histidine 0.1119%, โคลีน/Choline 0.1044%, กรดไขมันโอเลอิก/L-carnitine 0.01%, สารทำให้คงตัว (มอลโตดีกซ์ตริน)/Stabilizer (Maltodextrin), สารออกซิไดซ์/Antioxidant (INS304) และสารให้ความหวาน (INS330), สารป้องกันการเกิดออกซิเดชัน/Antioxidant (INS304) และสารให้ความหวาน (INS330).

Information for food allergic consumer: contain fish oil

**Figure S2** Product label of infant formula Sample 1  
 purchased from 7-Eleven, Thailand Science Park in late 2019



ส่วนประกอบที่สำคัญ/Ingredients:			
<p>แลคโตส/Lactose 37.2%, น้ำมันพืชผสม(น้ำมันดอกทานตะวันชนิดที่มีกรดโอเลอิกสูง, น้ำมันมะพร้าว, น้ำมันเรปซิด, น้ำมันดอกทานตะวัน)/Vegetable Oil Mixed (High Oleic Acid Sunflower Oil, Coconut Oil, Rapeseed Oil, Sunflower Oil) 25.1%, เวียทีสกีคัสตร้าคูลอกซ์/Whey Demineralized 20%, เบนนิจาคนันเบอ/Milk Skimmed Powder 11.8%, วิตามินและเกลือแร่/Vitamins and Minerals Premix 2.9%, น้ำมันที่ให้คอเลสเตอรอล/Oil Contains DHA &amp; ARA 1.48%, 2'-ฟุกซิลแลคโตส/2'-Fucosyllactose 0.21%, แอล-ฟีนิลอะลานีน/L-Phenylalanine 0.13%, โพรไบโอติกผสม (จุลินทรีย์บีฟิโดแบคทีเรียแลคติกัส)/Probiotic Blend (Bifidobacterium Lactis) 0.11%, นิวคลีโอไทด์ผสม/Nucleotide Premix 0.04%, แอล-ฮิสติดีน/L-Histidine 0.02%, แอล-คาร์นิทีน/L-Carnitine 0.01%, สารป้องกันการเกิดออกซิเดชัน/Antioxidant (INS304, INS307b), สารช่วยจับอนุภาค/สารควบคุมความเป็นกรด/Sequestrant and Acidity Regulator (INS330), อิมัลซิไฟเออร์/Emulsifier (INS322(i)), สารตัวพา (มอลโตเดกซ์ทริน)/Carrier (Maltodextrin)</p> <p>ข้อมูลสำหรับผู้แพ้อาหาร: มีผลิตภัณฑ์จากถั่วเหลือง และน้ำมันปลา</p> <p>Information for food allergic consumers: Contains soya product and fish oil</p>			
ข้อมูลโภชนาการ/Nutrition Information			
สารอาหาร Composition		ต่อ 100 กรัม Per 100 g of powder	ต่อ 100 มล. ของ ผลิตภัณฑ์ผสมน้ำแล้ว Per 100 ml of prepared formula
พลังงาน/Energy	กิโลแคลอรี/kcal	524	67.6
ไขมัน/Fat	กรัม/g	28.2	3.64
กรดไขมันโอเลอิก/Linoleic acid (โอเมก้า 6)	มิลลิกรัม/mg	3600	464
กรดไขมันลิโนเลนิก/Linolenic acid (โอเมก้า 3)	มิลลิกรัม/mg	320	41
กรดอะราชิไดนิก (เออาร์เอ)/Arachidonic acid (ARA)	มิลลิกรัม/mg	49	6.3
กรดโดโคซาเฮกซาอีนิก (ดีเอชเอ)/Docosahexaenoic acid (DHA)	มิลลิกรัม/mg	49	6.3
โปรตีน/Protein	กรัม/g	9.6	1.24
คาร์โบไฮเดรต/Carbohydrate	กรัม/g	58	7.5
วิตามินเอ/Vitamin A	ไมโครกรัมเรตินอล/μg RE	408	53
วิตามินดี/Vitamin D	หน่วยสากล/IU	256	33
วิตามินอี/Vitamin E	หน่วยสากล/IU	8.8	1.14
วิตามินเค1/Vitamin K1	ไมโครกรัม/μg	40	5.2
วิตามินซี/Vitamin C	มิลลิกรัม/mg	64	8.3
วิตามินบี1/Vitamin B1	ไมโครกรัม/μg	480	62
วิตามินบี2/Vitamin B2	ไมโครกรัม/μg	680	88
นิอาซิน/Niacin	ไมโครกรัม/μg	3600	464
วิตามินบี6/Vitamin B6	ไมโครกรัม/μg	320	41
กรดโฟลิก/Folic acid	ไมโครกรัม/μg	66.4	8.6
กรดแพนโทเทอิก/Pantothenic acid	ไมโครกรัม/μg	2800	361
วิตามินบี12/Vitamin B12	ไมโครกรัม/μg	0.82	0.11
ไบโอติน/Biotin	ไมโครกรัม/μg	9.6	1.24
โคลีน/Choline	มิลลิกรัม/mg	40	5.2
อินซิทอล/Inositol	มิลลิกรัม/mg	40	5.2
ทอรีน/Taurine	มิลลิกรัม/mg	28	3.61
คาร์นิทีน/Carnitine	มิลลิกรัม/mg	6.4	0.83
โซเดียม/Sodium	มิลลิกรัม/mg	112	14.4
โพแทสเซียม/Potassium	มิลลิกรัม/mg	480	62
คลอไรด์/Chloride	มิลลิกรัม/mg	292	38
แคลเซียม/Calcium	มิลลิกรัม/mg	304	39
ฟอสฟอรัส/Phosphorus	มิลลิกรัม/mg	176	22.7
แมกนีเซียม/Magnesium	มิลลิกรัม/mg	40	5.2
เหล็ก/Iron	มิลลิกรัม/mg	4.16	0.54
ไอโอดีน/Iodine	ไมโครกรัม/μg	80	10.3
ทองแดง/Copper	ไมโครกรัม/μg	320	41
สังกะสี/Zinc	มิลลิกรัม/mg	4.32	0.56
แมงกานีส/Manganese	ไมโครกรัม/μg	69.6	9.0
2'-ฟุกซิลแลคโตส(2'-ฟล)/2'-Fucosyllactose(2' FL)	มิลลิกรัม/mg	180	23.2
ซีลีเนียม/Selenium	ไมโครกรัม/μg	9.6	1.24
นิวคลีโอไทด์/Nucleotides	มิลลิกรัม/mg	12.5	1.61
<p>1 ช้อนคว่ำเท่ากับ 4.3 กรัม/ Scoop size 4.3 g NWPB149</p> <p>1 ลิตร = นมผง 129 กรัม + น้ำ 900 มล./ 1 litre = 129 g of powder + 900 ml of water</p>			

Figure S3 Product label of infant formula Sample 2 purchased from Lotus's Khlong Luang on 11 March 2022



Figure S4 Product label of infant formula Sample 3 purchased from Lotus's Khlong Luang on 11 March 2022