

基于 GC-IMS 对不同温湿度贮藏条件下变质毛椰子果椰肉中挥发性物质分析

王媛媛^{1,2,3}, 沈晓君¹, 宋 菲^{1,2,3}, 阚金涛^{1,2,3}, 张建国^{1,2,3}, 张玉锋^{1,2,3*}

1. 中国热带农业科学院椰子研究所, 海南文昌 571339; 2. 海南省椰子深加工工程技术研究中心, 海南文昌 571339; 3. 椰子产业技术创新战略联盟, 海南文昌 571339

摘 要: 椰肉是椰子产品加工的主要原料, 获取方式以集装箱进口毛椰子果为主, 在运输及贮藏过程中坏果率高。为了探寻快速区分和鉴别的方法, 本研究利用气相色谱-离子迁移谱 (gas chromatography-ion mobility spectrometry, GC-IMS) 结合主成分分析 (principal component analysis, PCA) 和正交偏最小二乘法判别分析 (orthogonal partial least squares discriminant analysis, OPLS-DA) 对未贮藏正常毛椰子果椰肉 (FCM) 和 25 °C/70%、35 °C/80%、45 °C/90% 3 种温湿度贮藏条件下变质毛椰子果椰肉 (DCM-25、DCM-35 和 DCM-45) 中挥发性物质进行分析。结果显示: 在 4 种椰肉中均定性出 42 种挥发性物质, 其中醇类 13 种, 酸类 5 种, 酮类 8 种, 酯类 10 种, 醛类 4 种, 吡嗪类化合物 2 种, 未定性的化合物 3 种。醇类最多 (包括乙醇、丁醇和丙醇等), 其次是酸类 (包括乙酸和 2-甲基丙酸等)、酮类 (包括丙酮、3-羟基-2-丁酮和环戊酮等)、酯类 (包括己酸丁酯、乙酸乙酯、丁酸丁酯和丁酸乙酯等)、醛类 (包括 3-甲基丁醛、戊醛和庚醛等) 和吡嗪类 (2-乙基-3-甲基吡嗪) 物质。变质后醇、酸、酮类挥发性物质增多。利用 OPLS-DA 分析出 3-甲基丁醛、环戊酮、3-甲基丁醇单体、丁醇单体、庚醛、丙酮、2-甲基丙醇单体、2-庚酮单体、庚酸、丁酸丁酯单体、乙酸乙酯、乙醇二聚体和 2-乙基-3-甲基吡嗪单体 13 种变量投影重要性因子 (variable importance in projection, VIP) 大于 1 的特征挥发性物质。利用差异热图确定了在 FCM 中的特征挥发性物质为环戊酮和丁醇单体; DCM-25 中的特征挥发性物质为 2-庚酮单体、丁酸丁酯单体、乙酸乙酯、乙醇二聚体和 2-乙基-3-甲基吡嗪单体 (以酯、醇、酮类为主); DCM-35 中的特征挥发性物质是庚酸 (主要是酸类); DCM-45 中的特征挥发性物质是 3-甲基丁醛、庚醛和丙酮 (以醛、酮类为主)。该研究结果为变质果的筛选提供了更多的理论依据。

关键词: 变质毛椰子果; 挥发性物质; 气相色谱-离子迁移谱; 正交偏最小二乘法判别分析

中图分类号: S667.4 文献标志码: A

Analysis of Volatile Compounds in Coconut Meat of Deteriorated Dehusked Coconut Fruits under Different Temperature and Humidity by GC-IMS

WANG Yuanyuan^{1,2,3}, SHEN Xiaojun¹, SONG Fei^{1,2,3}, KAN Jintao^{1,2,3}, ZHANG Jianguo^{1,2,3}, ZHANG Yufeng^{1,2,3*}

1. Coconut Research Institute, Chinese Academy of Tropical Agricultural Sciences, Wenchang, Hainan 571339, China; 2. Hainan Engineering Center of Coconut Further Processing, Wenchang, Hainan 571339, China; 3. Coconut Industry Technology Innovation Strategic Alliance, Wenchang, Hainan 571339, China

Abstract: Coconut meat is the main raw material for coconut products processing, which is mainly obtained by import-

收稿日期 2024-03-19; 修回日期 2024-04-27

基金项目 海南省自然科学基金项目 (No. 321MS0807, No.322RC790); 中央级公益性科研院所基本科研业务费专项 (No. 1630152022002)。

作者简介 王媛媛 (1982—), 女, 硕士, 助理研究员, 研究方向: 热带农产品加工与贮藏保鲜。*通信作者 (Corresponding author): 张玉锋 (ZHANG Yufeng), E-mail: zhangyufeng062@163.com。

ing dehusked coconut fruits in containers, and the rate of bad fruit is high in the process of transportation and storage. In order to explore the method of rapid differentiation and identification, this study used gas chromatography-ion mobility spectrometry (GC-IMS) combined with principal component analysis (PCA) and orthogonal partial least squares discriminant analysis (OPLS-DA) to analyze the volatile compounds in coconut meat of unstored normal dehusked fresh coconut fruits (FCM) and deteriorated dehusked coconut fruits under 25 °C/70%, 35 °C/80% and 45 °C/90% (DCM-25, DCM-35 and DCM-45). The results showed that 42 volatile compounds were identified in the four coconut meat, including thirteen alcohols, five acids, eight ketones, ten esters, four aldehydes, two pyrazines and three unknown compounds. The alcohols were the most (including ethanol, butanol and propanol, etc.), followed by acids (including acetic acid and 2-methylpropionic acid, etc.), ketones (including acetone, 3-hydroxy-2-butanone and cyclopentanone, etc.), esters (including butyl caproate, ethyl acetate, butyl butyrate and ethyl butyrate, etc.), aldehydes (including 3-methylbutyraldehyde, pentanaldehyde and heptyl aldehyde, etc.) and pyrazines (2-ethyl-3-methylpyrazine). After deterioration, alcohol, acid and ketone volatile compounds increased. Thirteen characteristic volatile compounds, including 3-methylbutyral, cyclopentanone, 3-methylbutanol monomer, butanol monomer, heptaldehyde, acetone, 2-methylpropanol monomer, 2-heptanone monomer, heptanoic acid, butyl butyrate monomer, ethyl acetate, ethanol dimer and 2-ethyl-3-methylpyrazine monomer, were analyzed by OPLS-DA, with variable importance in projection greater than 1. The characteristic volatile compounds in FCM were cyclopentanone and butanol monomer by differential heat map. The characteristic volatile compounds in DCM-25 were 2-heptanone monomer, butyl butyrate monomer, ethyl acetate, ethanol dimer and 2-ethyl-3-methylpyrazine monomer (mainly esters, alcohols and ketones). The characteristic volatile compounds in DCM-35 was heptanoic acid (mainly acids). The characteristic volatile compounds in DCM-45 were 3-methylbutyraldehyde, heptyl aldehyde and acetone (mainly aldehydes and ketones). This study would provide theoretical basis for the screening of deteriorated dehusked coconut fruits.

Keywords: deteriorated dehusked coconut fruit; volatile compound; GC-IMS; OPLS-DA

DOI: 10.3969/j.issn.1000-2561.2024.10.021

椰肉是椰子产品的主要加工原料, 其营养丰富、风味独特。获取的主要方式是进口毛椰子果, 毛椰子果贮藏品质直接影响椰肉品质。在长时间、远距离进口运输过程中毛椰子果被封闭在集装箱内, 容易产生高温高湿环境而使毛椰子果坏果率增加。为了保障加工产品的质量需要对变质果加以剔除, 在前期的研究中发现变质果与正常果品存在较大差异, 变质果椰肉油脂的酸价高、脂肪酸含量低^[1]。贮藏温湿度越高、时间越长, 毛椰子果中椰肉油脂的酸价就越高、脂肪酸含量也越低。为了探索变质果挥发性物质的差异, 前期利用顶空固相微萃取-气相色谱-质谱联用 (headspace solid-phase microextraction-gas chromatography-mass spectrometry, HS-SPME-GC-MS) 和电子鼻 (electronic nose, E-nose) 技术对未贮藏正常新鲜毛椰子果和不同温湿度贮藏条件下变质毛椰子果的椰肉挥发性物质进行了研究, 筛选出特征挥发性物质^[2]。变质果椰肉在电子鼻 W2W (对芳香成分和有机硫化物敏感) 传感器的响应值显著高于未贮藏正常新鲜毛椰子果椰肉。

气相色谱-离子迁移谱 (gas chromatography-ion mobility spectrometry, GC-IMS) 技术是气相色谱和离子迁移谱联用的技术。该技术利用色谱突

出的分离特性, 对待测样品的挥发性组分进行预分离, 使其成为单一组分, 再通过离子迁移进行二次分离, 获得漂移时间、保留时间和信号强度的三维谱图, 从而大大提高了检测的精度^[3]。与常规色谱相比, 该技术无需对样品进行蒸馏、萃取等繁琐的前处理, 即使痕量的挥发性风味化合物也能在很短的时间内完成, 检测操作简便, 风味损失小, 能更真实地保存样品真正的风味。对同分异构体和极性相近的物质具有理想的鉴别能力, 特别适用于醛、醇、酮、酯类和芳香族化合物等高素质亲和力和高电负性的食品风味组分的现场快速分析。相比于 HS-SPME-GC-MS 技术, GC-IMS 鉴定的挥发性物质种类和数量均相对较少, 但是由于检测的挥发性物质的沸点比 GC-MS 的低, 对高挥发性物质更敏感, 近年来 GC-MS 已被广泛应用于食品贮藏过程挥发性物质分析等领域^[4-6]。

因此, 为了更全面探究变质果在挥发性物质方面的差异, 本文采用 GC-IMS 技术对未贮藏正常毛椰子果椰肉和 3 种不同温湿度 (25 °C/70%、35 °C/80% 和 45 °C/90%) 贮藏条件下的变质毛椰子果椰肉进行分析。采用正交偏最小二乘法判别分析 (orthogonal partial least squares discriminant

analysis, OPLS-DA) 构建模型, 依据变量投影重要性因子 (variable importance in projection, VIP) 分析变质毛椰子果椰肉中特征挥发性物质, 为变质果的鉴别和筛选提供更多的方法和技术。

1 材料与方法

1.1 材料

1.1.1 供试椰果 参考王媛媛等^[1]的方法, 选用可用于加工、未经贮运的海南本地高种成熟老椰子果为研究对象, 剥去外部椰衣, 修整成与国外进口的毛椰子果相同的形态, 分别贮藏于 25 °C/70%、35 °C/80%和 45 °C/90% 3 种不同温湿度条件下。取未经贮藏正常毛椰子果和 3 种不同温湿度条件下变质毛椰子果 (25 °C/70%条件下贮藏 6 周; 35 °C/80%条件下贮藏至 4 周; 45 °C/90%条件下贮藏至 3 周), 破壳后削去种皮, 取肉, 分别标注为 FCM、DCM-25、DCM-35 和 DCM-45, 用粉碎机粉碎后存放于 -80 °C 冰箱中待检。

1.1.2 仪器与设备 MGC-450HP 人工气候箱, 上海一恒科学仪器有限公司; FlavourSpec[®]气相离子迁移谱联用仪, 德国 G.A.S. 公司。

1.2 方法

GC-IMS 分析: 称取椰肉样品 1.0 g, 置于 20 mL 顶空瓶中, 80 °C 孵育 15 min 后利用 FlavourSpec[®]气相离子迁移谱联用仪进行检测。

自动顶空进样条件: 孵育温度 80 °C, 孵育时间 15 min, 进样体积 500 μ L, 进样针温度 85 °C, 孵化转速 500 r/min。

GC 条件: 美国 RESTEK 公司色谱柱, WAX 柱 (30 m $\times$ 0.53 mm, 1.0 μ m), 色谱柱温度 60 °C, 载气 N₂ (纯度 $\geq$ 99.999%)。载气流速: 初始流速 0~2 min, 2 mL/min; 2~10 min, 2~10 mL/min; 10~20 min, 10~100 mL/min; 20~30 min, 100 mL/min; 分析时间: 30 min。

IMS 检测条件: 漂移管长度 98 mm, 管内线性电压 500 V/cm, 漂移管温度 45 °C, 漂移气流量 150 mL/min (高纯氮气, 纯度 $\geq$ 99.999%), 放射源 β 射线 (氚, 3H), 正离子模式。

定性与定量: 利用正构酮 C₄~C₉ (正丁酮、正戊酮、正己酮、正庚酮、正辛酮、正壬酮) 建立保留时间和保留指数的校准曲线, 通过目标物的保留时间计算该物质的保留指数, 并采用 VOCal 软件内置的 IMS 数据库和 NIST2020 数据

库对物质进行定性; 利用 Reporter 插件和 Gallery Plot 插件绘制不同样品的差异图谱和指纹图谱。

1.3 数据处理

每个样品进行 3 次重复试验。利用 Office Excel 对所有数据进行处理和分析; 利用 IBM SPSS Statistics 25.0 软件进行差异显著性检验 ($P<0.05$); 应用 SIMCA14.1 和 Origin9.0 软件进行绘图; 利用 SIMCA14.1 软件进行主成分分析 (PCA) 和正交偏最小二乘判别分析 (OPLS-DA)。

2 结果与分析

2.1 不同温湿度贮藏条件下变质毛椰子果椰肉中挥发性物质 GC-IMS 谱图分析

基于 Reporter 插件程序获取不同温湿度贮藏条件下毛椰子果椰肉中挥发性物质的 GC-IMS 三维谱图、二维俯视图和差异谱图。不同温湿度贮藏条件下毛椰子果椰肉中挥发性物质的三维谱图如图 1A 所示。整个图背景为蓝色, x 轴方向表征离子迁移时间, y 轴方向表征气相色谱保留时间。颜色代表物质的浓度, 白色表示含量较低, 红色表示含量较高, 颜色越深表示含量越高。

与 GC-IMS 三维谱图相对应的二维俯视图如图 1B 所示, RIP 峰两侧的每一个点代表一种风味特征物质, 其颜色深浅和面积大小代表物质浓度的高低^[7]。图中大部分数据位于迁移时间 1.0~2.0 和保留时间 100~1600 s 的区域。为更明显地比较 4 种毛椰子果椰肉的挥发性物质成分差异, 通过 Reporter 插件以 FCM 样品图为参照, 其他样品谱图做颜色抵消, 如图 1C 所示, 当风味特征物质浓度高于参照时颜色呈现红色, 反之呈现蓝色^[8]。

2.2 变质毛椰子果与未贮藏正常毛椰子果椰肉中 GC-IMS 挥发性物质定性分析

运用 NIST 气相保留指数数据库与 IMS 迁移时间数据库资料, 根据挥发性物质气相色谱保留时间和 IMS 迁移时间对挥发性组分进行定性分析, 如表 1 所示, 共定性出 42 种挥发性物质。其中醇类化合物 13 种, 酸类化合物 5 种, 酮类化合物 8 种, 酯类化合物 10 种, 醛类化合物 4 种, 吡嗪类化合物 2 种, 未定性的化合物 3 种。醇类物质峰体积最大 (图 2A), 占比最多 (54.86%~78.64%), 包括乙醇、丁醇、丙醇、2-甲基丙醇、3-甲基丁醇、己醇、戊醇。其次是酸类 (7.60%~20.23%) 和酮类 (8.20%~17.36%), 包

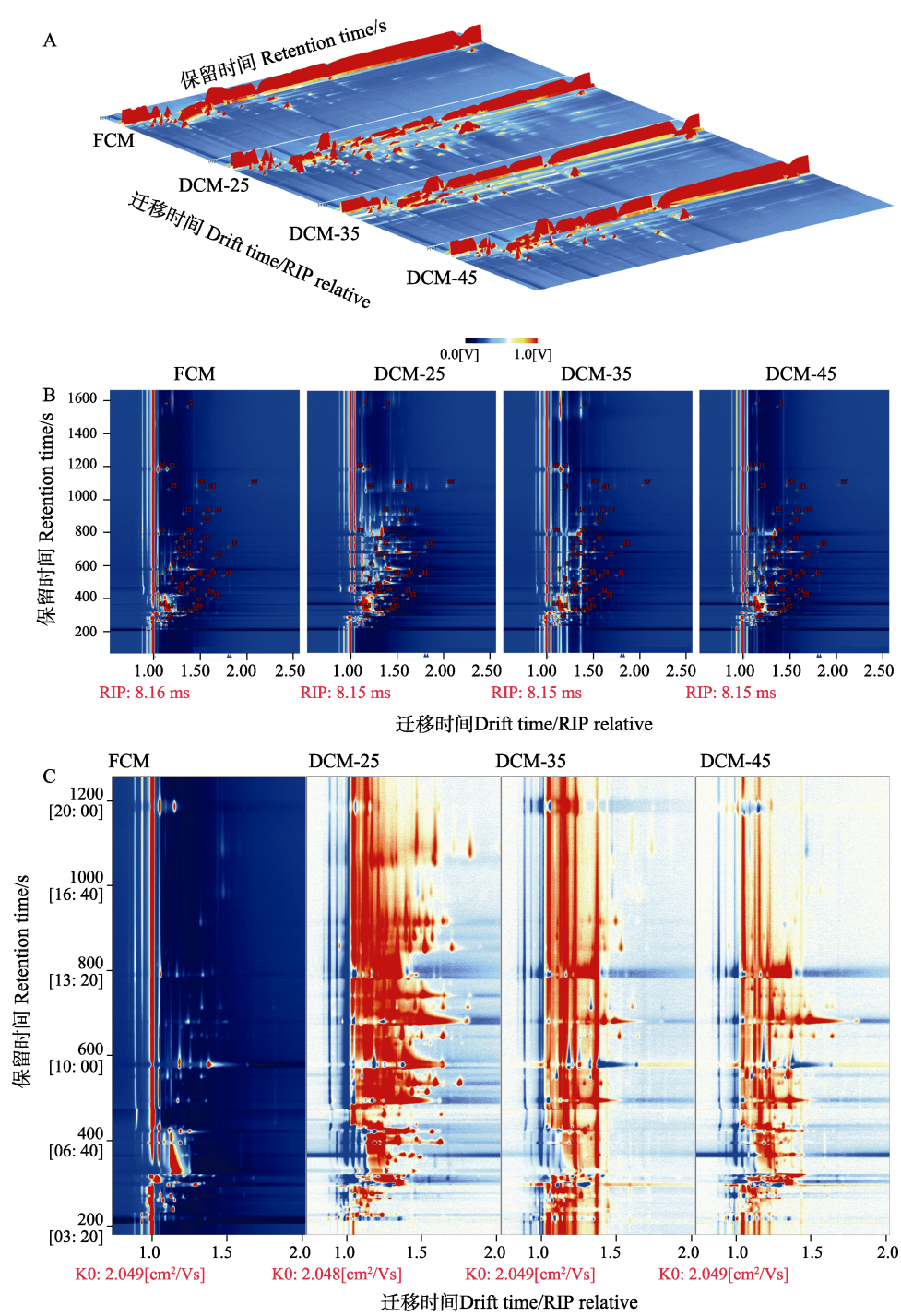


图 1 不同温湿度贮藏条件下变质毛椰子果椰肉中挥发性物质 GC-IMS 三维谱图 (A)、二维谱图 (B) 和差异谱图 (C)
Fig. 1 Three-dimensional (A), two-dimensional (B) and difference (C) spectrum of volatile compounds of coconut meat in deteriorated dehusked coconut fruits under different temperature and humidity storage conditions by GC-IMS

括乙酸、2-甲基丙酸、庚酸以及丙酮、3-羟基-2-丁酮、环戊酮、2-丁酮、2-庚酮和 4-甲基 3-戊烯-2-酮。检测到的酯类物质占比为 1.90%~8.77%，包括己酸丁酯、乙酸乙酯、丁酸丁酯、丁酸乙酯、2-甲基丁酸乙酯、2-甲基戊酸乙酯、2-羟基丙酸乙酯和丙酸乙酯。醛类物质占比在 0.38%~1.68%之

间，包括 3-甲基丁醛、戊醛、庚醛和己醛。吡嗪类是 2-乙基-3-甲基吡嗪 (0.31%~1.91%)。未定性的物质占比为 0.50%~2.60% (图 2B)。

2.3 变质毛椰子果与未贮藏正常毛椰子果椰肉中 GC-IMS 挥发性物质指纹图谱分析

为进一步探索不同温湿度贮藏条件下变质毛

表 1 基于 GC-IMS 分析的不同温湿度贮藏条件下变质毛椰子果椰肉的挥发性物质
Tab. 1 Volatile compounds of coconut meat in deteriorated dehusked coconut fruits under different temperature and humidity storage conditions by GC-IMS

序号 No.	化合物 Compound	CAS [#]	分子式 Molecule formula	分子量 Molecular weight	保留指数 Retention index	迁移时间 Drift time/RIP relative	峰面积 Peak volume/(V·s ⁻¹ ·ms ⁻¹)			
							FCM	DCM-25	DCM-35	DCM-45
醇类（13 种）										
45	乙醇-D	C64175	C ₂ H ₆ O	46.1	950.6	1.13	77 367.50±771.84 ^b	88 058.18±2899.43 ^a	78 818.03±3898.09 ^b	86 161.62±916.70 ^a
44	乙醇-M	C64175	C ₂ H ₆ O	46.1	967.1	1.04	16 329.92±313.16 ^a	8588.65±356.83 ^d	11 743.19±681.06 ^c	14 090.92±283.85 ^b
6	丁醇-D	C71363	C ₄ H ₁₀ O	74.1	1157.5	1.38	9263.88±299.64 ^b	23 075.13±263.55 ^a	5055.81±1103.63 ^c	4799.83±39.75 ^c
5	丁醇-M	C71363	C ₄ H ₁₀ O	74.1	1160.6	1.18	5066.00±61.77 ^a	2717.37±171.28 ^c	2391.05±143.75 ^d	2947.01±67.58 ^b
42	丙醇	C71238	C ₃ H ₈ O	60.1	1049.9	1.25	2791.67±50.12 ^c	8907.73±177.37 ^a	4898.24±61.22 ^b	5048.80±35.21 ^b
9	2-甲基丙醇(异丁醇)-D	C78831	C ₄ H ₁₀ O	74.1	1107.8	1.38	1180.06±7.47 ^d	19 138.24±256.72 ^a	10 626.25±617.51 ^b	7043.61±118.70 ^c
8	2-甲基丙醇(异丁醇)-M	C78831	C ₄ H ₁₀ O	74.1	1106.7	1.17	1157.92±44.47 ^b	877.79±144.87 ^c	2784.57±196.45 ^a	2720.38±46.70 ^a
3	3-甲基丁醇(异戊醇)-M	C123513	C ₅ H ₁₂ O	88.1	1217.5	1.25	1131.91±53.18 ^b	1282.39±262.57 ^b	2817.14±14.37 ^a	2933.03±10.31 ^a
4	3-甲基丁醇(异戊醇)-D	C123513	C ₅ H ₁₂ O	88.1	1216.2	1.48	877.34±25.29 ^c	14 832.90±2298.60 ^a	2917.14±469.68 ^c	8162.97±360.94 ^b
12	己醇-M	C111273	C ₆ H ₁₄ O	102.1	1368.8	1.33	469.71±24.87 ^c	1204.29±55.99 ^a	702.15±53.17 ^b	386.20±7.60 ^d
16	戊醇-D	C71410	C ₅ H ₁₂ O	88.1	1261.7	1.52	400.27±61.47 ^b	2920.20±631.39 ^a	382.08±16.06 ^b	358.92±23.99 ^b
15	戊醇-M	C71410	C ₅ H ₁₂ O	88.1	1261.4	1.25	110.35±8.20 ^c	926.05±58.08 ^a	120.72±13.74 ^c	341.47±2.49 ^b
13	己醇-D	C111273	C ₆ H ₁₄ O	102.1	1368.8	1.65	78.29±3.67 ^b	505.36±41.38 ^a	122.51±13.00 ^b	88.45±14.32 ^b
酸类（5 种）										
10	乙酸-M	C64197	C ₂ H ₄ O ₂	60.1	1450.8	1.05	7861.84±1321.29 ^b	10 743.86±836.15 ^a	10 237.81±965.30 ^a	8311.15±298.04 ^b
11	乙酸-D	C64197	C ₂ H ₄ O ₂	60.1	1450.4	1.15	2523.95±1203.00 ^b	11 365.15±4982.14 ^a	8342.37±5698.20 ^{ab}	2326.70±320.79 ^b
1	2-甲基丙酸(异丁酸)-M	C79312	C ₄ H ₈ O ₂	88.1	1526.3	1.14	1504.97±310.29 ^b	13 754.79±7441.62 ^a	12 478.82±9311.51 ^{ab}	2822.80±375.32 ^{ab}
2	2-甲基丙酸(异丁酸)-D	C79312	C ₄ H ₈ O ₂	88.1	1523.0	1.37	1169.46±43.97 ^a	5551.26±4012.79 ^a	3821.70±3957.58 ^a	1103.71±29.35 ^a
36	庚酸	C111148	C ₇ H ₁₄ O ₂	130.1	1058.7	1.37	519.44±25.59 ^b	2086.76±478.12 ^b	4204.81±2173.66 ^a	975.36±85.43 ^b
酮类（8 种）										
43	丙酮	C67641	C ₃ H ₆ O	58.1	848.7	1.13	4518.23±170.90 ^c	8680.42±351.94 ^b	4507.66±182.95 ^c	9410.76±51.49 ^a
19	3-羟基-2-丁酮(乙偶姻)-M	C513860	C ₄ H ₈ O ₂	88.1	1295.4	1.05	3529.59±176.30 ^b	1357.79±113.96 ^c	4436.78±615.79 ^a	4573.15±141.22 ^a
20	3-羟基-2-丁酮(乙偶姻)-D	C513860	C ₄ H ₈ O ₂	88.1	1294.3	1.34	1294.51±115.05 ^c	31 089.79±1040.84 ^a	10 248.50±8984.90 ^b	17 105.33±621.13 ^b
7	环戊酮	C120923	C ₅ H ₈ O	84.1	1141.8	1.10	1140.12±50.08 ^a	901.06±127.64 ^b	522.27±82.13 ^d	687.71±62.44 ^c
31	2-丁酮	C78933	C ₄ H ₈ O	72.1	917.9	1.26	641.02±25.89 ^c	7292.05±170.37 ^a	1023.50±145.95 ^b	1124.10±12.92 ^b
23	2-庚酮-M	C110430	C ₇ H ₁₄ O	114.2	1190.1	1.64	385.47±20.45 ^b	696.51±115.37 ^a	371.17±64.48 ^b	762.25±33.71 ^a
38	4-甲基 3-戊烯-2-酮	C141797	C ₆ H ₁₀ O	98.1	1131.8	1.45	316.36±3.50 ^b	3167.68±341.58 ^a	440.29±36.50 ^b	469.04±11.30 ^b
22	2-庚酮-D	C110430	C ₇ H ₁₄ O	114.2	1190.1	1.26	287.71±18.15 ^c	1587.59±122.49 ^a	323.02±22.92 ^c	634.57±7.90 ^b

续表 1 基于 GC-IMS 分析的不同温湿度贮藏条件下变质毛椰子果椰肉的挥发性物质
Tab. 1 Volatile compounds of coconut meat in deteriorated dehusked coconut fruits under different temperature and humidity storage conditions by GC-IMS (continued)

序号 No.	化合物 Compound	CAS [#]	分子式 Molecule formula	分子量 Molecular weight	保留指数 Retention index	迁移时间 Drift time/RIP relative	峰体积 Peak volume/(V·s ⁻¹ ·ms ⁻¹)			
							FCM	DCM-25	DCM-35	DCM-45
酯类 (10 种)										
26	己酸丁酯-M	C626824	C ₁₀ H ₂₀ O ₂	172.3	1427.4	1.47	1522.61±72.58 ^b	4488.41±318.87 ^a	1039.44±155.64 ^c	1073.08±46.63 ^c
32	乙酸乙酯	C141786	C ₄ H ₈ O ₂	88.1	904.0	1.35	463.43±41.71 ^d	14 605.31±30.21 ^a	1063.34±407.17 ^c	10 649.28±337.46 ^b
17	丁酸丁酯-M	C109217	C ₈ H ₁₆ O ₂	144.2	1242.5	1.33	444.12±8.88 ^b	707.10±170.85 ^a	142.24±38.16 ^c	547.46±25.77 ^{ab}
34	丁酸乙酯	C105544	C ₆ H ₁₂ O ₂	116.2	1049.4	1.57	418.20±21.86 ^b	996.67±93.93 ^a	437.04±23.67 ^b	400.61±19.96 ^b
35	2-甲基丁酸乙酯	C7452791	C ₇ H ₁₄ O ₂	130.2	1028.1	1.62	227.21±18.32 ^b	2241.01±217.10 ^a	262.23±24.56 ^b	222.11±48.11 ^b
41	2-甲基戊酸乙酯	C39255328	C ₈ H ₁₆ O ₂	144.2	1131.3	1.76	244.48±33.48 ^{bc}	1332.80±151.05 ^a	202.53±7.39 ^c	377.61±59.16 ^b
27	己酸丁酯-D	C626824	C ₁₀ H ₂₀ O ₂	172.3	1427.2	2.04	180.62±5.11 ^b	1280.88±125.22 ^a	211.88±44.08 ^b	159.79±12.98 ^b
14	2-羟基丙酸乙酯	C97643	C ₅ H ₁₀ O ₃	118.1	1368.1	1.54	128.75±17.07 ^b	1474.27±69.67 ^a	148.24±16.62 ^b	137.30±4.90 ^b
18	丁酸丁酯-D	C109217	C ₈ H ₁₆ O ₂	144.2	1240.9	1.81	114.43±10.14 ^c	357.20±7.02 ^a	91.15±5.16 ^d	171.46±15.19 ^b
30	丙酸乙酯	C105373	C ₅ H ₁₀ O ₂	102.1	946.0	1.45	37.50±2.37 ^c	175.39±27.59 ^a	63.11±1.70 ^{bc}	70.65±5.41 ^b
醛类 (4 种)										
33	3-甲基丁醛(异戊醛)	C590863	C ₅ H ₁₀ O	86.1	930.4	1.41	384.15±11.13 ^b	226.41±12.90 ^c	282.62±24.04 ^c	2752.31±72.93 ^a
37	戊醛	C110623	C ₅ H ₁₀ O	86.1	996.9	1.43	189.83±9.07 ^c	873.24±19.69 ^a	214.01±7.64 ^c	338.82±18.55 ^b
21	庚醛	C111717	C ₇ H ₁₄ O	114.2	1192.2	1.33	160.90±4.54 ^b	164.22±20.15 ^{ab}	116.98±18.10 ^c	189.99±2.07 ^a
29	己醛	C66251	C ₆ H ₁₂ O	100.2	1083.4	1.25	85.04±5.06 ^c	981.59±74.45 ^a	128.53±9.95 ^{bc}	161.84±5.72 ^b
吡嗪类 (2 种)										
25	2-乙基-3-甲基吡嗪-D	C15707230	C ₇ H ₁₀ N ₂	122.2	1420.3	1.17	227.80±17.43 ^b	1485.14±129.78 ^a	255.26±45.72 ^b	230.76±23.51 ^b
24	2-乙基-3-甲基吡嗪-M	C15707230	C ₇ H ₁₀ N ₂	122.2	1421.3	1.58	230.38±16.25 ^c	4527.92±505.05 ^a	2841.43±1074.48 ^b	594.63±165.64 ^c
未定性 (3 种)										
28	1	—	—	—	1333.6	1.52	446.42±26.56 ^b	4550.66±463.41 ^a	829.48±201.05 ^b	441.49±26.74 ^b
39	2	—	—	—	1119.0	1.59	190.30±6.04 ^c	2196.99±50.33 ^a	203.47±15.46 ^c	284.28±14.49 ^b
40	3	—	—	—	1132.5	1.54	171.41±0.64 ^b	1462.89±165.10 ^a	302.40±18.45 ^b	288.45±27.20 ^b

注: M 为单体; D 为二聚体; 同行不同小写字母表示差异显著 (P<0.05); 1、2、3 为未定性挥发性物质。
Note: M indicates monomer; D indicates dimer; Different lowercase letters in the same row indicate significant difference (P<0.05); 1, 2, 3 indicate unidentified volatiles.

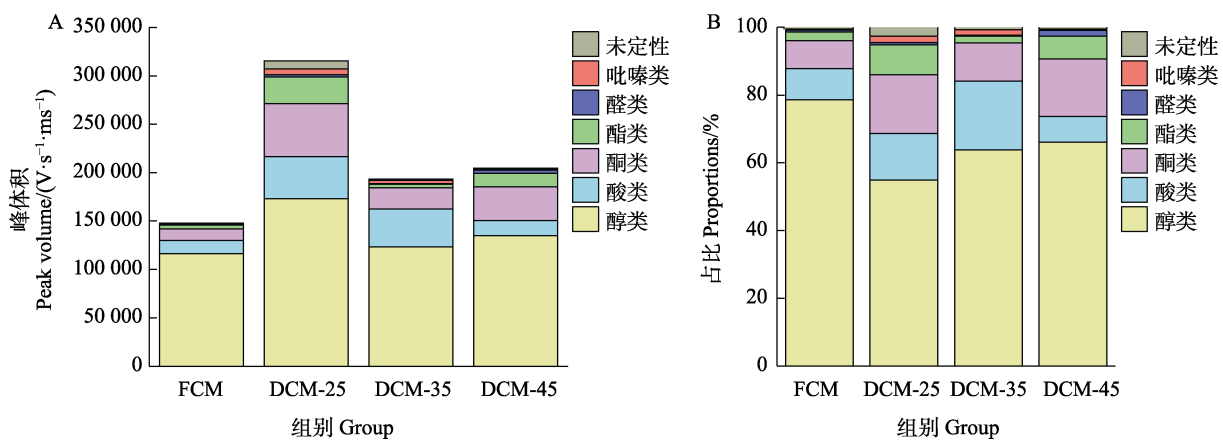


图 2 不同温湿度贮藏条件下变质毛椰子果椰肉中挥发性物质的 GC-IMS 峰体积 (A) 和各类物质峰体积占比 (B)
Fig. 2 Peak volume (A) and proportions (B) of volatile compounds of coconut meat in deteriorated dehusked coconut fruits under different temperature and humidity storage conditions by GC-IMS

椰子果椰肉与未贮藏正常毛椰子果椰肉中挥发性物质的差异，采用 GalleryPlot 插件制得指纹图谱（图 3）。每一行代表同一样品的全部信号峰，每一列代表同一挥发性物质在不同样品中的信号离子峰，颜色深浅代表其浓度高低。通过指纹图谱的比较可作为辨别不同毛椰子果椰肉中挥发性物质的依据^[9]。这种可视化有助于辨别样品中挥发性有机化合物及其标志性风味分子的差异。

如图 3 中 A 区域内所示，在 FCM 中峰体积较高的挥发性物质主要是环戊酮和丁醇单体 2 种。乙酸二聚体、丁醇二聚体、己酸丁酯单体和二聚体、戊醇单体和二聚体、2-庚酮二聚体、2-

甲基丙醇二聚体、4-甲基-3-戊烯-2-酮、2-甲基戊酸乙酯、丁酸乙酯、2-甲基丁酸乙酯、戊醛、己醛、2-乙基-3-甲基吡嗪单体和二聚体、2-羟基丙酸乙酯、2-丁酮、丙酸乙酯、己醇单体和二聚体、丁酸丁酯单体和二聚体、3-甲基丁醇二聚体（24 种）以及 3 种未定性物质在 DCM-25 中峰体积高于其他毛椰子果椰肉，而 2-甲基丙醇单体、3-羟基-2-丁酮单体和乙醇单体在 DCM-25 中峰体积较低。3-羟基-2-丁酮二聚体、丙酮和乙酸乙酯在 DCM-25 和 DCM-45 中的峰体积均较高（C 区域内）。如红色箭头所示，庚酸在 DCM-35 中的峰体积最高。3-甲基丁醛和 3-甲基丁醇单体在 DCM-45 中的峰体积高于其他处理（D 区域内）。

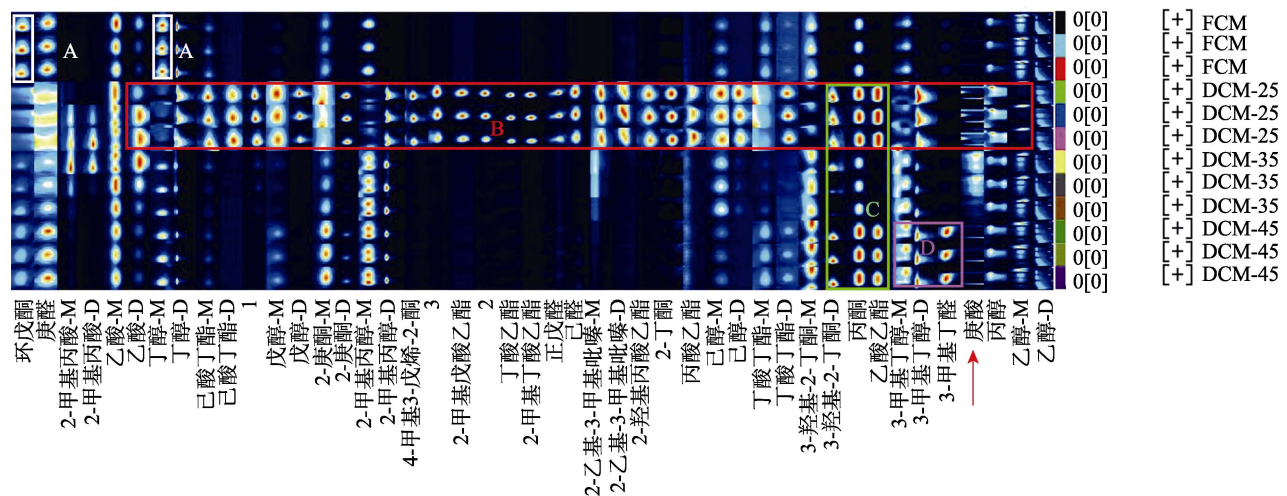


图 3 不同温湿度贮藏条件下变质毛椰子果椰肉中挥发性物质 GC-IMS 指纹谱图
Fig. 3 Fingerprints spectrum of volatile compounds of coconut meat in deteriorated dehusked coconut fruits under different temperature and humidity storage conditions by GC-IMS

2.4 基于 PCA 和 OPLS-DA 变质毛椰子果椰肉中挥发性物质分析

指纹图谱仅对不同温湿度贮藏条件下变质毛椰子果和正常果椰肉中挥发性成分进行粗略区分。较难精确地确定是哪种挥发性化合物造成了差异, PCA 和 OPLS-DA 能够有效区分不同组间的观测值, 发现导致各组间差异的重要变量。样本间的异同可以通过模型的分值图直观地表示出来^[10]。如图 4A 所示, 以前 2 个主成分绘制得分图, 方差贡献率分别为 68.5%和 15.6%, 累计方差贡献率为 84.1% ($\geq 80\%$), 说明 PCA 分析可以将 FCM 与 DCM-25、DCM-35 和 DCM-45 中检测出的挥发性物质种类进行有效区分。FCM 与 DCM-45 在一个象限内其挥发性物质相似, DCM-35 与 DCM-45 均在不同的象限其差异较大。为了进一步提高识别能力, 采用了监督化学计量技术, 进行 OPLS-DA 分析, 如图 4B 所示, 与 PCA 结果一致, FCM 和 DCM-45 位于同一个象限, 较为相似, 与其余 2 种位于不同空间位置, 彼此保持一定的距离, 实现了很好的分离。表明 DCM-45 虽然贮藏温湿度高但到达变质的时间较短, 与正常果挥发性物质的差异也较小。OPLS-DA 模型的拟合参数 ($R^2=1$, $Q^2=0.970$) 表明该模型具有很强的解释和预测能力。同样, 进行 200 次重复排列检验以评估 OPLS-DA 模型的稳健性, 如图 4C 所示, $R^2=0.275$, $Q^2=-0.999$, 证明该模型是可靠的, 不存在过拟合, 能够用来描述 4 种毛椰子果椰肉中挥发性化合物的差异。根据挥发性物质载荷散点图 (图 4D), 丁醇单体在 FCM 的峰体积高于其他样品; 己醛、戊醇二聚体、2-羟基丙酸乙酯、4-甲基 3-戊烯-2-酮、未知物质 3、2-乙基-3-甲基吡嗪单体和二聚体、2-丁酮和 2-甲基丁酸乙酯等在 DCM-25 的峰体积高于其他样品; 庚酸在 DCM-35 的峰体积高于其他样品; 3-甲基丁醛在 DCM-45 的峰体积高于其他样品。

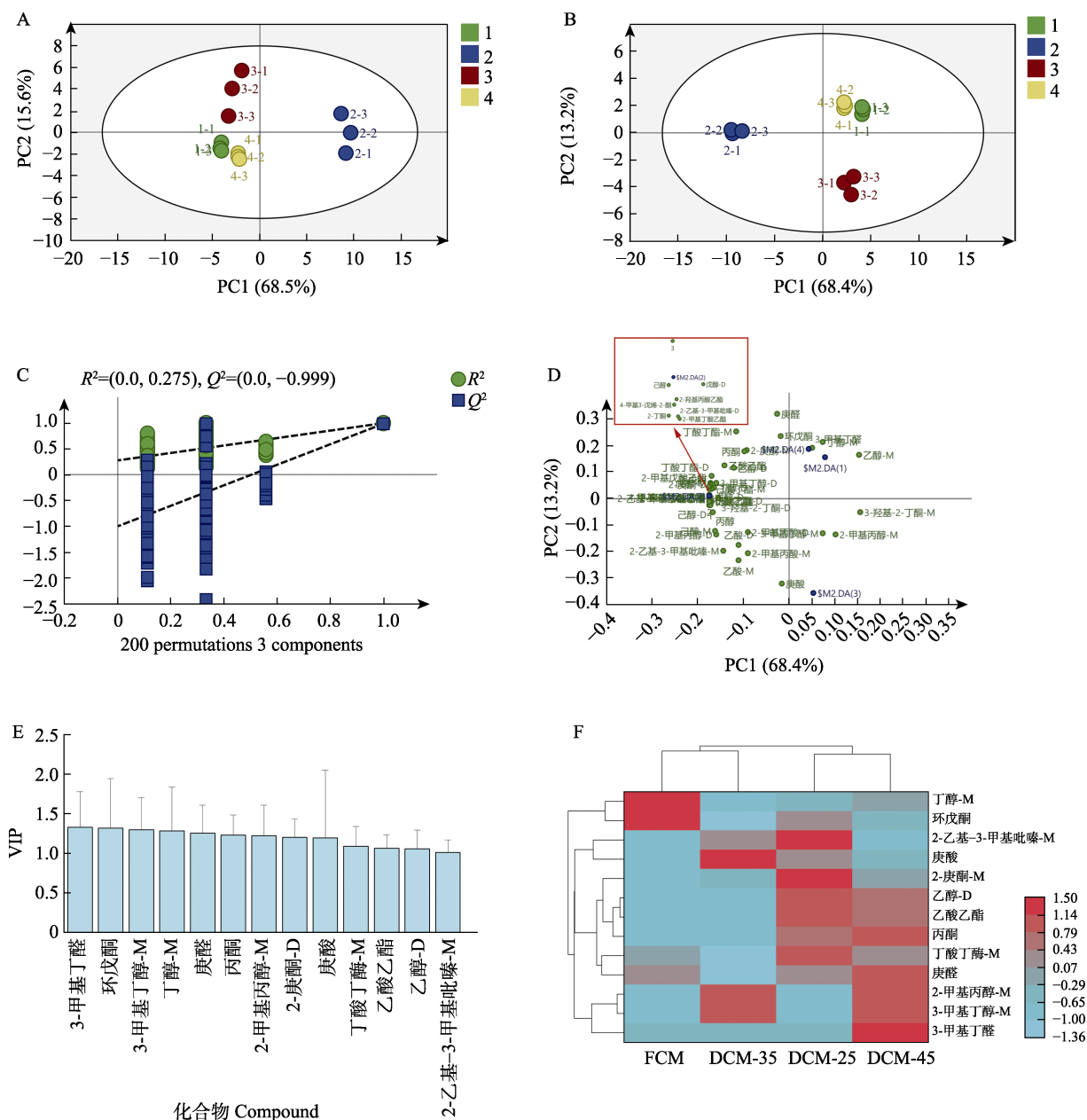
从图 4E 可见, VIP 大于 1 的特征挥发性物质共有 13 种, 分别为: 3-甲基丁醛、环戊酮、3-甲基丁醇单体、丁醇单体、庚醛、丙酮、2-甲基丙醇单体、2-庚酮单体、庚酸、丁酸丁酯单体、乙酸乙酯、乙醇二聚体和 2-乙基-3-甲基吡嗪单体。通过绘制特征挥发性物质含量的差异热图可知 (图 4F), 在 FCM 中的特征挥发性物质为环戊酮和丁醇单体; DCM-25 中的特征挥发性物质为 2-

庚酮单体、丁酸丁酯单体、乙酸乙酯、乙醇二聚体和 2-乙基-3-甲基吡嗪单体; DCM-35 中的特征挥发性物质是庚酸; DCM-45 中的特征挥发性物质是 3-甲基丁醛、庚醛和丙酮。

3 讨论

与 GC-MS 相比, 利用 GC-IMS 对样品处理和分析的温度更低, 能够检测到一些热稳定性差和分子量较小的挥发性物质^[11-12]。本研究利用 GC-IMS 检测出 DCM-25 的挥发性物质峰体积最大, 而 HS-SPME-GC-MS 分析 DCM-45 的挥发性物质含量最多^[2], 说明在 25 °C/70% 正常温湿度条件下, 由于贮藏时间长 (6 周), 毛椰子果发生了较为严重的脂质氧化降解^[1], 生成了较多分子量小的脂质氧化降解产物, 可被 GC-IMS 检测出来。毛椰子果椰肉中的醇、酸、酮类挥发性物质较多, 且变质后均增加。醇类中增加较为明显的为丙醇、2-甲基丙醇二聚体和 3-甲基丁醇二聚体等。醇类物质主要来源于脂肪酸的降解、氨基酸代谢、碳水化合物发酵和甲基酮还原等多种途径^[13], 在感官分析上具有较高的阈值。酸类物质形成与乳酸发酵、糖类和蛋白质代谢有关^[14]。酮类中增加较为明显的是 3-羟基-2-丁酮二聚体和 2-丁酮等。酮类物质大多来源于脂肪氧化、热降解、氨基酸降解作用以及微生物代谢等, 其香气阈值较高^[15]。此外, 利用 GC-IMS 还分析出 2-乙基-3-甲基吡嗪化合物, 且变质后增加。

在 FCM 特征挥发性物质中环戊酮具有令人愉快的薄荷气味, 丁醇具有酒味。DCM-25 特征挥发性物质中 2-庚酮具有奶油香和果香, 主要由亚油酸氧化降解产生^[16]。丁酸丁酯具有苹果、香蕉、菠萝等果香香味, 在自然界存在于苹果、香蕉、葡萄、梨、草莓等水果之中^[17]; 乙酸乙酯有酯香、果香气味^[18]; 乙醇具有酒香的气味; 2-乙基-3-甲基吡嗪则具有坚果、焙烤和甜香味道^[19], 是一类通过含氮基化合物和羰基化合物发生的 Maillard 反应形成的含氮杂环化合物, 通过 Strecker 降解反应产生^[20]。在前期的报道中也发现毛椰子果长时间贮藏后会出现 Maillard 的褐变反应^[1]。DCM-25 中的特征挥发性物质以酯、醇、酮类为主。酯、醇类物质多存在于发酵型食品中尤其是酒类, 丁酸丁酯、乙酸乙酯、乙醇在白酒中均有报道^[21-22]。可能是因为 25 °C/70% 的正常温湿度



A: PCA 分析; B: OPLS-DA 分析; 1、2、3 和 4 分别表示 FCM、DCM-25、DCM-35 和 DCM-45。C: 随机置换检验; D: 载荷散点图; E: 特征挥发性物质 (VIP>1); F: 特征挥发性物质差异热图。

A: PCA analysis; B: OPLS-DA analysis; 1, 2, 3 and 4 represent FCM, DCM-25, DCM-35 and DCM-45, respectively. C: Random permutation test; D: Scatter plot of load; E: Characteristic volatile compound (VIP>1); F: Difference heat map of the characteristic volatile compound.

图 4 不同温湿度贮藏条件下变质与正常毛椰子果椰肉中 GC-IMS 挥发性物质的 PCA 和 OPLS-DA 分析

Fig. 4 PCA and OPLS-DA analysis of volatile compounds of coconut meat in deteriorated dehusked coconut fruits under different temperature and humidity storage conditions and normal coconut fruits by GC-IMS

贮藏过程中, 贮藏时间相对较长, 毛椰子果椰肉中糖类物质代谢生成醇类, 醇类进一步与酸类酯化而成酯类物质。庚酸是 DCM-35 中的特征挥发性物质, 具有发酵香和果香, 在贮藏后期产生^[23]。稍高的 35 °C/80% 贮藏温湿度, 贮藏时间较短, 抑制了醇类和酯类物质的生成, 但加速了酸类物质的积累。DCM-45 特征挥发性物质中 3-甲基丁醛具有

水果香/坚果香/奶酪香^[24], 主要是由亮氨酸通过生物合成和 Strecker 降解途径产生^[25]。由于 Strecker 降解途径需要在一定温度下进行, 本研究中的 3-甲基丁醛可能主要由于 45 °C/90% 的高温高湿条件发生的 Strecker 降解途径产生的。庚醛具有鱼腥和油脂味^[26], 主要由亚麻酸分解产生; 丙酮则具有苦杏仁味、苹果香和梨香^[27]。DCM-45 中的

特征挥发性物质主要为醛、酮类物质。脂肪中不饱和脂肪酸在温度较高的情况下容易被氧化生成过氧化物,继而进一步分解为风味阈值较低的醛、酮等挥发性物质。醛类在低浓度下具有特征性的脂肪香气,但高于临界值的较高浓度会产生腐烂、腐臭或其他异味^[28]。

综上所述,在 4 种椰肉样品中均定性出 42 种挥发性物质,其中醇类 13 种,酸类 5 种,酮类 8 种,酯类 10 种,醛类 4 种,吡嗪类化合物 2 种。醇类最多,其次是酸、酮、酯、醛和吡嗪类物质,且变质后醇、酸、酮类均增多。利用 OPLS-DA 分析出 13 种特征挥发性物质,其中 FCM 中的特征挥发性物质有环戊酮和丁醇单体; DCM-25 中有 2-庚酮单体、丁酸丁酯单体、乙酸乙酯、乙醇二聚体和 2-乙基-3-甲基吡嗪单体(以酯、醇、酮为主); DCM-35 中有庚酸(主要是酸类);而 DCM-45 中有 3-甲基丁醛、庚醛和丙酮(以醛、酮类为主)。本研究为变质果的筛选提供了更多的理论依据。

参考文献

- [1] 王媛媛, 杨家敏, 沈晓君, 阚金涛, 张玉锋, 宋菲, 龚胜华. 毛椰子果不同温湿度贮藏条件下的品质变化[J/OL]. 现代食品科技, 1-12(2023-11-16)[2023-12-04] <https://doi.org/10.13982/j.mfst.1673-9078.2024.9.0922>.
WANG Y Y, YANG J M, SHEN X J, KAN J T, ZHANG Y F, SONG F, GONG S H. Quality changes of dehusked coconut fruits under different temperature and humidity storage [J/OL]. Modern Food Science and Technology, 1-12 (2023-11-16)[2023-12-04]. <https://doi.org/10.13982/j.mfst.1673-9078.2024.9.0922>. (in Chinese)
- [2] 王媛媛, 沈晓君, 陈华, 阚金涛, 宋菲, 张建国, 张玉锋, 龚胜华. 基于 HS-SPME-GC-MS 和 E-nose 分析不同温湿度贮藏条件下变质毛椰子果中椰肉的挥发性物质变化[J/OL]. 现代食品科技, 1-15(2024-04-19)[2024-04-19]. <https://doi.org/10.13982/j.mfst.1673-9078.2024.2.0059>.
WANG Y Y, SHEN X J, CHEN H, KAN J T, SONG F, ZHANG J G, ZHANG Y F, GONG S H. Changes of volatile compounds in coconut meat of deteriorated dehusked coconut fruits under different temperature and humidity storage conditions base on HS-SPME-GC-MS and E-nose analysis[J/OL]. Modern Food Science and Technology, 1-15 (2024-04-19)[2024-04-19]. <https://doi.org/10.13982/j.mfst.1673-9078.2024.2.0059>. (in Chinese)
- [3] 韩艳秋, 叶春苗, 王琛, 张晓黎, 李潇, 高雅. 基于气相色谱-离子迁移谱技术的隔年东北酸菜风味鉴别研究[J]. 食品与发酵工业, 2023, 49(8): 251-257.
HAN Y Q, YE C M, WANG C, ZHANG X L, LI X, GAO Y. Flavor identification of over-year Dongbei Suancai based on GC-IMS[J]. Food and Fermentation Industries, 2023, 49(8): 251-257. (in Chinese)
- [4] 孙达锋, 胡小松, 张沙沙. 电子鼻结合气相-离子迁移谱联用技术分析兰茂牛肝菌气调贮藏期间挥发性风味物质的变化[J]. 食品工业科技, 2021, 42(21): 111-117.
SUN D F, HU X S, ZHANG S S. Changes in volatile compounds of *Lanmaoa asiatica* during controlled atmosphere storage using electronic nose combined with gas chromatography-ion mobility spectroscopy[J]. Science and Technology of Food Industry, 2021, 42(21): 111-117. (in Chinese)
- [5] 李亚会, 龚霄, 任芳, 程志华, 周伟, 李积华. 基于气相离子迁移谱分析不同贮藏条件下番荔枝的风味变化[J]. 食品工业科技, 2019, 40(18): 263-266, 272.
LI Y H, GONG X, REN F, CHENG Z H, ZHOU W, LI J H. Flavor changes of *Annona squamosa* L. under different storage conditions by GC-IMS[J]. Science and Technology of Food Industry, 2019, 40(18): 263-266, 272. (in Chinese)
- [6] XUAN X T, SUN R Y, ZHANG X Y, CUI Y, LIN X D, SUN Y, DENG W Y, LIAO X Y, LING J G. Novel application of HS-GC-IMS with PCA for characteristic fingerprints and flavor compound variations in NFC Chinese bayberry (*Myrica rubra*) juice during storage[J]. Food Chemistry, 2018, 255: 323-331.
- [7] 白万明, 王菊花, 马赛买, 白小勇, 孔维宝, 马君义, 张继. 基于 HS-GC-IMS 分析陇南主栽品种初榨橄榄油的风味特征成分[J]. 中国油脂, 2024, 49(3): 21-26.
BAI W M, WANG J H, MA S M, BAI X Y, KONG W B, MA J Y, ZHANG J. Analysis of flavor characteristic components in the main cultivars of virgin olive oil from Longnan based on HS-GC-IMS[J]. China Oils and Fats, 2024, 49(3): 21-26. (in Chinese)
- [8] 周晨曦, 郑福平, 孙宝国. 离子迁移谱技术在食品风味分析中的应用研究进展[J]. 食品工业科技, 2019, 40(18): 309-318.
ZHOU C X, ZHENG F P, SUN B G. Research progress on the application of ion mobility spectrometry (IMS) in food flavor analysis[J]. Science and Technology of Food Industry, 2019, 40(18): 309-318. (in Chinese)
- [9] ZHANG X X, DAI Z, FAN X J, LIU M, MA J F, SHANG W T, LIU J G, STRAPPE P, BLANCHARD C, ZHOU Z K. A study on volatile metabolites screening by HS-SPME-GC-MS and HS-GC-IMS for discrimination and characterization of white and yellowed rice[J]. Cereal Chemistry, 2020, 97(2): 496-504.
- [10] RONG Y T, XIE J L, YUAN H B, WANG L L, LIU F Q,

- DENG Y L, JIANG Y W, YANG Y Q. Characterization of volatile metabolites in Pu-erh teas with different storage years by combining GC-E-Nose, GC-MS, and GC-IMS[J]. Food Chemistry: X, 2023, 18: 100693.
- [11] 郭雅红, 佟立涛, 王丽丽, 范蓓, 杨希娟, 张烁, 孙晶, 王凤忠, 刘丽娅. 基于 GC-IMS 分析炒制温度对青稞糰粑粉挥发性风味物质的影响[J]. 食品工业科技, 2023, 44(14): 326-335.
- GUO Y H, TONG L T, WANG L L, FAN B, YANG X J, ZHANG S, SUN J, WANG F Z, LIU L Y. GC-IMS-based analysis of the effect of frying temperature on volatile flavor substances in highland barley tsampa flour[J]. Science and Technology of Food Industry, 2023, 44(14): 326-335. (in Chinese)
- [12] 王海波, 邓宝仲, 吴榕榕, 沈玲儿, 郭嘉怡, 任芳. 基于气相离子迁移谱的热处理对催熟香蕉的挥发性物质分析[J]. 热带作物学报, 2020, 41(6): 1227-1233.
- WANG H B, DENG B Z, WU R R, SHEN L E, GUO J Y, REN F. Analysis of volatile compounds in ripening bananas by heat treatment based on gas chromatography-ion mobility spectrometry[J]. Chinese Journal of Tropical Crops, 2020, 41(6): 1227-1233. (in Chinese)
- [13] SIDIRA M, KANDYLIS P, KANELAKI M, KOURKOUTAS Y. Effect of immobilized *Lactobacillus casei* on the evolution of flavor compounds in probiotic dry-fermented sausages during ripening[J]. Meat Science, 2015, 100: 41-51.
- [14] BATISTA A L D, SILVA R, CAPPATO L P, FERREIRA M V S, NASCIMENTO K O, SCHMIELE M, ESMERINO E A, BALTHAZAR C F, SILVA H L A, MORAES J, PIMENTEL T C, FREITAS M Q, RAICES R S L, SILVA M C, CRUZ A G. Developing a symbiotic fermented milk using probiotic bacteria and organic green banana flour[J]. Journal of Functional Foods, 2017, 38: 242-250.
- [15] LU X, CHEN J H, ZHENG M J, GUO J J, QI J X, CHEN Y T, MIAO S, ZHENG B D. Effect of high-intensity ultrasound irradiation on the stability and structural features of coconut-grain milk composite systems utilizing maize kernels and starch with different amylose contents[J]. Ultrasonics-Sonochemistry, 2019, 55: 135-148.
- [16] 牛婕, 甘伯中, 乔海军, 刘兴龙. 同时蒸馏萃取法分析美国蓝多湖硬质干酪风味物质[J]. 甘肃农业大学学报, 2010, 45(4): 130-134, 138.
- NIU J, GAN B Z, QIAO H J, LIU X L. Flavor components extracted with simultaneous distillation and analyzed with GC-MS from American blue lake hard cheese[J]. Journal of Gansu Agricultural University, 2010, 45(4): 130-134, 138. (in Chinese)
- [17] 陈丹云, 李继红. 丁酸丁酯催化合成研究进展[J]. 贵州化工, 2004(1): 28-29.
- CHEN D Y, LI J H. Research progress in the synthesis of butyl butyrate[J]. Guizhou Chemical Industry, 2004(1): 28-29. (in Chinese)
- [18] 王金华, 刘雯玄, 陈佳妮, 平洪睿, 冯红霞, 刘宇, 陈泽雨, 常云鹤, 葛永辉, 马立志. 基于气相色谱-离子迁移法解析山桐子油挥发性风味物质成分及精炼过程中变化规律[J]. 食品安全质量检测学报, 2023, 14(8): 52-63.
- WANG J H, LIU W X, CHEN J N, PING H R, FENG H X, LIU Y, CHEN Z Y, CHANG Y H, GE Y H, MA L Z. Analysis of volatile flavor components of oil of *Idesia polycarpa* and their changes during refining process based on gas chromatography-ion mobility spectrometry technique[J]. Journal of Food Safety & Quality, 2023, 14(8): 52-63. (in Chinese)
- [19] 张浩, 易宇文, 朱开宪, 邓静, 胡金祥, 刘阳, 乔明锋, 白婷. 基于 GC-IMS 结合化学计量法分析烧烤过程中温度对牦牛肉风味物质的影响[J]. 食品科学, 2023, 44(22): 337-344.
- ZHANG H, YI Y W, ZHU K X, DENG J, HU J X, LIU Y, QIAO M F, BAI T. Effect of temperature on flavor substances of yak meat during roasting as analyzed by chromatography-ion mobility spectrometry and chemometrics[J]. Food Science, 2023, 44(22): 337-344. (in Chinese)
- [20] SHEN C, CAI Y, WU X N, GAI S M, WANG B, LIU D Y. Characterization of selected commercially available grilled lamb shashliks based on flavor profiles using GC-MS, GC×GC-TOF-MS, GC-IMS, E-nose and E-tongue combined with chemometrics[J]. Food Chemistry, 2023, 423: 136257.
- [21] 蒲璐璐, 戴怡凤, 李豆南, 郭灿, 姚键梅, 徐浩, 邱树毅. 电子鼻和气质联用技术分析不同酒龄酱香型白酒挥发性成分[J]. 中国酿造, 2021, 40(7): 171-175.
- PU L L, DAI Y F, LI D N, GUO C, YAO J M, XU H, QIU S Y. Analysis of volatile components in sauce-flavor Baijiu with different ages by electronic nose and GC-MS[J]. China Brewing, 2021, 40(7): 171-175. (in Chinese)
- [22] 唐平, 山其木格, 王丽, 王凡, 李长文, 卢君. 白酒风味化学研究方法及其酱香型白酒风味化学研究进展[J]. 食品科学, 2020, 41(17): 315-324.
- TANG P, SHAN Q M G, WANG L, WANG F, LI C W, LU J. Studies on flavor chemistry of Baijiu and research progress on flavor chemistry of Maotai flavor Baijiu[J]. Food Science, 2020, 41(17): 315-324. (in Chinese)
- [23] 丛莎, 董文江, 赵建平, 迟晓星, 陈治华, 蒋快乐, 山云辉. 采用 HS-SPME-GC/MS 和电子鼻技术解析生咖啡豆加速贮藏期挥发性组分的变化规律[J]. 现代食品科技, 2020, 36(7): 250-262.
- CONG S, DONG W J, ZHAO J P, CHI X X, CHEN Z H, JIANG K L, SHAN Y H. Changing trend of the volatile

- compounds in robusta green coffee beans during an accelerated storage analyzed by HS-SPME-GC/MS and electronic nose technology[J]. *Modern Food Science and Technology*, 2020, 36(7): 250-262. (in Chinese)
- [24] 马勇, 魏从娇, 王雍雍, 葛庆丰, 吴满刚, 席军, 赵宁, 单艳琴, 刘瑞, 于海. 发酵香肠中 3-甲基丁醛产生途径的研究进展[J]. *食品与发酵工业*, 2023, 49(9): 324-333.
- MA Y, WEI C J, WANG Y Y, GE Q F, WU M G, XI J, ZHAO N, SHAN Y Q, LIU R, YU H. Research progress on the production pathway of 3-methylbutanal in fermented sausage[J]. *Food and Fermentation Industries*, 2023, 49(9): 324-333. (in Chinese)
- [25] 陈臣, 周文雅, 袁佳杰, 于海燕, 田怀香. 3-甲基丁醛对奶酪坚果风味的贡献及其生物合成的研究进展[J]. *食品科学*, 2020, 41(7): 228-233.
- CHEN C, ZHOU W Y, YUAN J J, YU H Y, TIAN H X. Recent progress in biosynthesis of 3-methylbutanal and its contribution to nutty flavor in cheese[J]. *Food Science*, 2020, 41(7): 228-233. (in Chinese)
- [26] 杨学博, 陈秋翰, 刘寿春, 刘美娇, 黎铸毅, 周春霞, 洪鹏志. 基于 GC-IMS 和 OPLS-DA 分析酵母-藿香复合对罗非鱼脱腥效果的影响[J/OL]. *食品与发酵工业*, 1-11(2023-09-27)[2024-03-13]. <https://doi.org/10.13995/j.cnki.11-1802/ts.036573>.
- YANG X B, CHEN Q H, LIU S C, LIU M J, LI Z Y, ZHOU C X, HONG P Z. Effect of yeast-*Agastache rugosus* complex on deodorization of tilapia based on GC-IMS and OPLS-DA[J/OL]. *Food and Fermentation Industries*, 1-11 (2023-09-27)[2024-03-13]. <https://doi.org/10.13995/j.cnki.11-1802/ts.036573>. (in Chinese)
- [27] 赛里木汗·阿斯米, 任欣, 张敏, 刘东晓, 关丽娜. 基于气相色谱-离子迁移谱和电子鼻技术研究糙米口腔加工过程中的风味释放[J]. *食品科学*, 2022, 43(16): 261-268.
- SAILIMUHAN A, REN X, ZHANG M, LIU D X, GUAN L N. Study on flavor release of Indica rice during oral processing based on gas chromatography ion mobility spectroscopy and electronic nose technology[J]. *Food Science*, 2022, 43(16): 261-268. (in Chinese)
- [28] 马杰, 周建中, 张婷, 张涛, 周芷夷, 年国芳. 基于气相离子迁移色谱结合感官评价法对植物基杏仁酸奶挥发性风味物质的表征及分析[J]. *食品与发酵工业*, 2023, 49(20): 280-287.
- MA J, ZHOU J Z, ZHANG T, ZHANG T, ZHOU Z Y, NIAN G F. Characterization of volatile flavor compounds of plant-based almond yogurt based on GC-IMS[J]. *Food and Fermentation Industries*, 2023, 49(20): 280-287. (in Chinese)