

DOI: 10.19812/j.cnki.jfsq11-5956/ts.20250109003

引用格式: 王佳敏, 岳丽, 祖力皮牙·买买提, 等. 基于顶空气相色谱-离子迁移质谱法结合化学计量对新疆黑小麦挥发性物质鉴定分析[J]. 食品安全质量检测学报, 2025, 16(11): 58-67.

WANG JM, YUE L, ZULIPIYA MMT, *et al.* Identification and analysis of volatile substances in black wheat in Xinjiang based on headspace gas chromatography-ion mobility mass spectrometry combined with stoichiometry [J]. Journal of Food Safety & Quality, 2025, 16(11): 58-67. (in Chinese with English abstract).

# 基于顶空气相色谱-离子迁移质谱法结合化学计量 对新疆黑小麦挥发性物质鉴定分析

王佳敏<sup>1</sup>, 岳丽<sup>1</sup>, 祖力皮牙·买买提<sup>1</sup>, 王俊平<sup>2</sup>, 毛红艳<sup>1\*</sup>, 于明<sup>1\*</sup>

(1. 新疆维吾尔自治区农业科学院作物研究所, 乌鲁木齐 830091;

2. 天津科技大学食品科学与工程学院, 天津 300457)

**摘要:** **目的** 分析新疆不同地区黑小麦面粉、全麦粉及籽粒中挥发性有机物的差异。**方法** 采用顶空气相色谱-离子迁移质谱法对新疆4个不同地区6种黑小麦的面粉、全麦粉及籽粒挥发性成分进行检测, 并结合正交偏最小二乘判别分析(orthogonal partial least squares discriminant analysis, OPLS-DA)方法对挥发性成分进行分类与特征选择。**结果** 共检测到黑小麦中134种挥发性物质, 定性出97种挥发性有机物, 主要包括醛类23种、酯类21种、醇类19种、酮类12种和酸类6种。相对气味活性值(relative odor activity value, ROAV)表明, 1-辛烯-3-酮、(E)-2-辛烯醛、1-丙硫醇、2-甲酰基-5-甲基噻吩、2-甲基丁醛、4-甲基苯甲醛、异戊酸、辛-1-烯-3-醇、原愈创木醇是黑小麦中关键挥发性风味物质, 发挥主导作用。OPLS-DA分析显示, 黑小麦面粉、全麦粉与籽粒的挥发物之间存在差异, 其中(E)-2-辛烯醛主要存在于籽粒中, 2-甲基丁醛在面粉中含量较高, 4-甲基苯甲醛在全麦粉中含量较高。**结论** 气相色谱-离子迁移质谱法可作为区分不同处理黑小麦挥发性化合物差异的技术手段, 研究结果为黑小麦优化制粉工艺提供了数据支撑, 同时也为黑小麦全麦粉掺假辨别提供了新方向。

**关键词:** 黑小麦; 顶空气相色谱-离子迁移质谱法; 挥发性有机物; 相对气味活性值

## Identification and analysis of volatile substances in black wheat in Xinjiang based on headspace gas chromatography-ion mobility mass spectrometry combined with stoichiometry

WANG Jia-Min<sup>1</sup>, YUE Li<sup>1</sup>, ZULIPIYA Mai-Mai-Ti<sup>1</sup>, WANG Jun-Ping<sup>2</sup>,  
MAO Hong-Yan<sup>1\*</sup>, YU Ming<sup>1\*</sup>

(1. Institute of Grain Crops, Xinjiang Academy of Agricultural Sciences, Urumqi 830091, China;

2. College of Food Science and Engineering, Tianjin University of Science and Technology, Tianjin 300457, China)

收稿日期: 2025-01-09

基金项目: 新疆维吾尔自治区重点研发专项(2023B02043-1); 新疆小麦产业技术体系项目(XJARS-01)

第一作者: 王佳敏(1998—), 女, 硕士, 助理研究员, 主要研究方向为农产品加工与开发利用。E-mail: 2359796082@qq.com

\*通信作者: 毛红艳(1988—), 女, 硕士, 副研究员, 主要研究方向为农产品加工与开发利用。E-mail: maohongyan1226@126.com

于明(1973—), 男, 硕士, 研究员, 主要研究方向为粮油精深加工研究。E-mail: 2435742497@qq.com

**ABSTRACT: Objective** To analyze the differences in volatile organic compounds in black wheat flour, whole wheat flour and seeds in different regions of Xinjiang. **Methods** The volatile components of flour, whole wheat flour and seeds of 6 kinds of black wheats from 4 different regions in Xinjiang were detected using headspace gas chromatography-ion mobility spectrometry, and the volatile components were classified and feature selected using orthogonal partial least squares discriminant analysis (OPLS-DA) method. **Results** A total of 134 kinds of volatiles were detected in black wheat, and 97 kinds of volatile organic compounds were characterized, mainly including 23 kinds of aldehydes, 21 kinds of esters, 19 kinds of alcohols, 12 kinds of ketones and 6 kinds of acids. Relative odor activity value (ROAV) showed that 1-octen-3-one, (*E*)-2-octenal, 1-propanethiol, 2-formyl-5-methylthiophene, 2-methylbutyraldehyde, 4-methylbenzaldehyde, isovaleric acid, 1-oct-1-ene-3-ol and proto-guaiacol were the major volatile odorants and played a dominant role in black wheat. OPLS-DA analysis showed that there were differences between the volatiles of black wheat flour, whole wheat flour and seeds, with (*E*)-2-octenal mainly present in seeds, 2-methylbutyraldehyde higher in flour and 4-methylbenzaldehyde higher in whole wheat flour. **Conclusion** Gas chromatography-ion mobility spectrometry can be used as a technical tool to distinguish the differences in volatile compounds between different treatments of black wheat, and the results of this study provide data support for optimizing the milling process of black wheat, as well as a new direction for the identification of adulteration of black wheat whole wheat flour.

**KEY WORDS:** black wheat; headspace gas chromatography-ion mobility mass spectrometry; volatile organic compounds; relative odor activity value

## 0 引言

随着分析技术的不断进步,对挥发性物质的研究逐渐深入。挥发性物质在食品科学的领域中至关重要,它们不仅是食品香气的主要贡献者,决定食品的感官特性,也是评价食品品质的关键指标。气相色谱-离子迁移质谱(gas chromatography-ion mobility spectrometry, GC-IMS)技术结合了 GC 的高分离能力和 IMS 的快速响应模式,成为目前检测分析挥发性物质的重要工具。GC-IMS 通过 GC 将样品中不同组分在色谱柱中分离后,利用 IMS 的离子源使分离出的组分子离子化,离子在电场作用下迁移,根据不同离子的迁移时间差异,实现对样品中挥发性物质的快速、准确检测和分析<sup>[1]</sup>。目前在食品领域已使用 GC-IMS 技术对橄榄油<sup>[2]</sup>、蜂蜜<sup>[3]</sup>、葡萄酒<sup>[4]</sup>、柑橘类水果<sup>[5]</sup>、肉类<sup>[6]</sup>和中药<sup>[7]</sup>等挥发性物质进行分析,结合化学计量技术,深入理解食品的香气特征和风味构成,为食品风味研究提供了新的视角。

尽管 GC-IMS 技术在多种食品中的应用已取得显著进展,对于黑小麦的挥发性物质研究仍显不足。黑小麦,一种特殊品种的小麦,因多酚等成分共同作用<sup>[8]</sup>,籽粒颜色通常呈黑色或近黑色<sup>[9]</sup>。黑小麦以其独特的颜色和营养特性引起了广泛关注。黑小麦除颜色外与普通小麦外观接近,但营养成分和功能活性远胜小麦。黑小麦蛋白质含量高、氨基酸种类丰富,且氨基酸总量和必需氨基酸含量均超过普通小麦<sup>[10]</sup>,不饱和脂肪酸、锌、硒等

微量元素<sup>[11]</sup>使黑小麦具备良好的抗氧化<sup>[9]</sup>、抗癌<sup>[12-13]</sup>等益生功能,为人体健康带来诸多益处。值得注意的是,黑小麦中的这些营养成分不仅对其营养价值有重要贡献,也可能对其挥发性物质的形成产生影响<sup>[14]</sup>。此外,已有研究表明,食品中的挥发性物质,如挥发油,具有抗肿瘤、抗炎和抗氧化作用<sup>[15]</sup>。同时,挥发性物质在很大程度上决定了黑小麦的香气和风味,而香气和风味是食品品质的关键组成部分。因此,深入研究黑小麦的挥发性物质,不仅有助于揭示其香气成分,还可能为黑小麦的健康功能提供新的科学依据,进一步阐明营养成分与挥发性物质之间的内在联系。

本研究选取新疆 4 个不同地区的 6 种黑小麦,运用 GC-IMS 技术对其面粉、全麦粉和籽粒中的挥发性物质进行分析,以期揭示黑小麦的主要香气成分,并为优化黑小麦的加工工艺以及黑小麦在食品开发中的应用提供理论依据和技术支持。

## 1 材料与方法

### 1.1 材料

采集 2024 年收获自新疆不同地区的 6 种黑小麦为材料,品种:新春 36:柯坪县黑小麦(6 月 20 日收获),编号为 1;奇台县黑小麦(7 月 17 日收获),编号为 2;和静县春黑小麦(7 月 25 日收获),编号为 3;和静县冬黑小麦(7 月 7 日收获),编号为 4;尼勒克县春黑小麦(8 月 18 日收获),编号为 5;尼勒克县冬黑小麦(8 月 4 日收获),编号为 6。

## 1.2 仪器与设备

FlavourSpec 气相色谱离子迁移谱联用仪(德国 G.A.S 公司); AL104 分析天平[精度 0.1 mg, 梅特勒-托利多仪器(上海)有限公司]; 布勒 ALMB 实验磨粉机[布勒(无锡)商业有限公司]; DFY-600 多功能高速粉碎机(温岭市林大机械有限公司)。

## 1.3 方法

### 1.3.1 黑小麦制粉

挑选颗粒饱满的黑小麦籽粒, 按 AACC26-21 方法用布勒实验磨制粉, 得到黑小麦面粉; 用多功能高速粉碎机将黑小麦破碎并过 80 目筛, 得到黑小麦全麦粉。黑小麦面粉、全麦粉及籽粒分别以 A、B、C 命名并保存于 4 °C 冰箱待测。

### 1.3.2 黑小麦挥发性有机物测定

分别称取 2.0 g 黑小麦面粉、黑小麦全麦粉、黑小麦籽粒样品于 20 mL 顶空瓶中, 密封, 用于 GC-IMS 分析。GC-IMS 实验条件参照许诺等<sup>[16]</sup>的方法并有所改动, 孵育时间 20 min, 孵育温度 75 °C, 进样针温度 80 °C, 分析时间 30 min。

## 1.4 数据处理

使用 FlavourSpec 设备配套软件 VOCal 内置 NIST2021 数据库和 IMS 数据库对检测出的挥发性有机物定性分析, 运用 Reporter 插件、Gallery Plot 插件和 Dynamic PCA 插件从多种角度对结果分析比对, 生成挥发性有机物指纹图谱及差异谱图。使用 SIMCA 14.1 和 Origin 2022 软件进行相关性分析。使用 SPSS 27.0 和 Excel 2021 整理数据及统计分析。

## 2 结果与分析

### 2.1 黑小麦挥发性有机物 GC-IMS 谱图

不同品种面粉挥发性化合物种类相似, 含量存在差异(图 1)。尼勒克县春黑小麦面粉、柯坪县黑小麦全麦粉及奇台县黑小麦籽粒挥发性化合物含量高于其他品种, 尼勒克县冬黑小麦面粉、和静县冬黑小麦全麦粉及尼勒克县春黑小麦籽粒中检测出化合物种类较多, 与面粉和全麦粉相比, 未经过磨粉处理的籽粒组检测出挥发性有机物含量与数量都有所增加。

采用差异比较模式, 比较 3 组总挥发性物质的种类与含量。选取面粉组作为参考, 扣除全麦粉组和籽粒组的光谱后得到差异扣减图谱(图 1d), 扣除后红色区域表示该化合物浓度高于参照物, 蓝色表示该物质浓度低于参照物, 若挥发性有机物浓度一致则显示白色。图中籽粒组相较于面粉组差异显著, 化合物种类与含量均高于前两组。面粉与全麦粉相比, 差异较小, 全麦粉存在少量面粉中未检测出的化合物, 在保留时间为 0~300 s 范围内的信号峰响应值更高, 相对分子量小的化合物较多。

### 2.2 黑小麦挥发性成分的定性分析

利用 GC-IMS 共检测出 134 种化合物并定性出 97 种挥发性有机物, 归类为 14 种不同的化学类别, 包括醛类 23 种、酯类 21 种、醇类 19 种、酮类 12 种、酸类 6 种、烯类 3 种、醚类 3 种、呋喃类 2 种、吡嗪类 2 种、胺类 2 种、吡啶类 1 种、烷类 1 种、酚类 1 种、噻唑类 1 种。具体分类和数量见表 1。

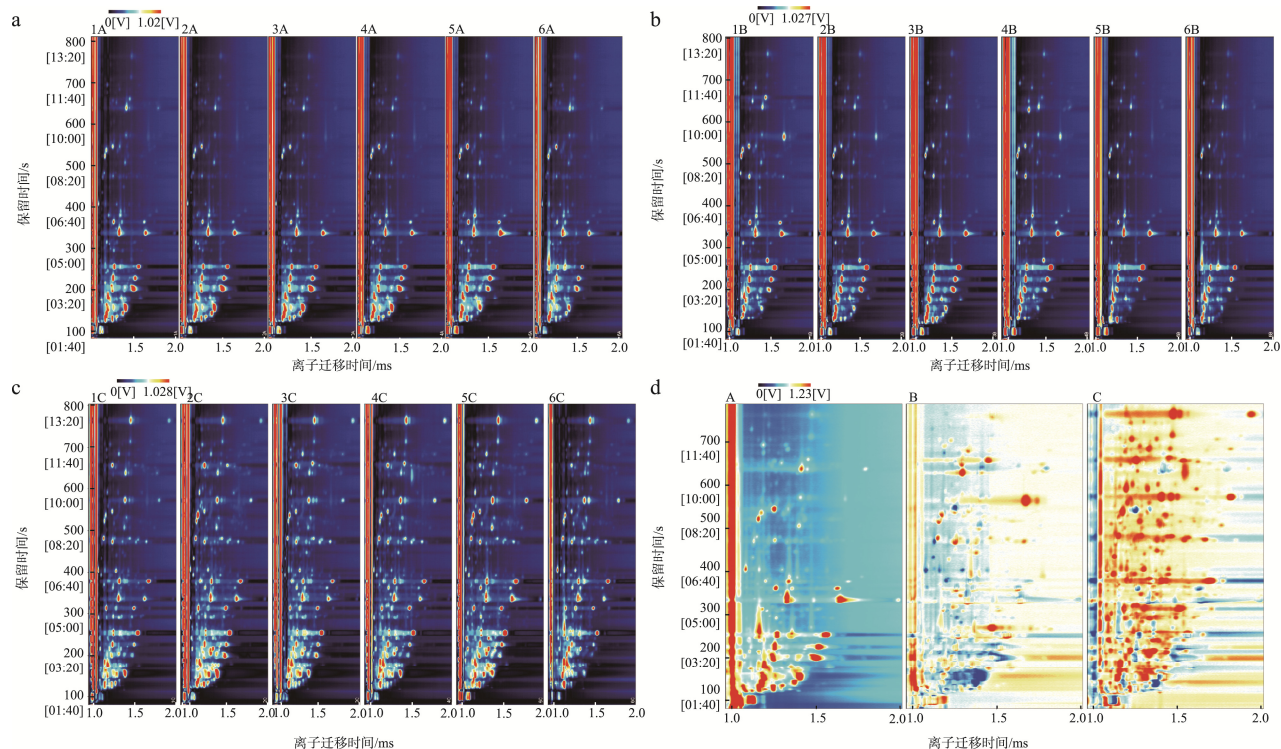


图 1 黑小麦挥发性化合物 GC-IMS 二维谱图

Fig.1 GC-IMS two-dimensional spectrum of volatile compounds in black wheat

表 1 黑小麦挥发性物质定性结果  
Table 1 Characterisation results of volatile substances in black wheat

名称	保留 指数/s	保留 时间/s	漂移 时间/min	相对含量/%																	
				1A	1B	1C	2A	2B	2C	3A	3B	3C	4A	4B	4C	5A	5B	5C	6A	6B	6C
辛-1-烯-3-醇	985	521.72	1.16	2.03± 0.04	3.55± 0.11	1.59± 0.10	1.80± 0.05	2.57± 0.36	2.59± 0.20	1.84± 0.07	2.64± 0.55	1.93± 0.05	2.21± 0.04	2.57± 0.42	1.88± 0.05	2.86± 0.03	2.37± 0.01	3.47± 0.19	2.18± 0.07	2.81± 0.29	2.18± 0.16
2-己醇(二聚体)	792	254.44	1.56	4.68± 0.28	9.44± 0.27	7.86± 0.24	5.22± 0.13	9.12± 0.24	9.03± 0.17	4.88± 0.05	10.22± 0.19	7.81± 0.26	6.34± 0.08	10.84± 0.22	8.01± 0.14	9.67± 0.16	11.36± 0.61	10.37± 0.78	3.15± 0.53	5.65± 0.14	5.71± 0.52
戊-1-醇	763	229.84	1.25	4.66± 0.15	4.99± 0.15	3.70± 0.09	4.89± 0.05	5.57± 0.06	3.65± 0.06	5.02± 0.02	5.77± 0.28	3.32± 0.07	5.11± 0.05	5.69± 0.05	3.56± 0.09	5.06± 0.05	5.57± 0.27	3.71± 0.01	3.74± 0.03	4.27± 0.13	3.55± 0.08
3-甲基-1-丁醇	734	207.11	1.23	1.42± 0.01	1.89± 0.10	1.28± 0.03	1.49± 0.06	2.32± 0.05	0.83± 0.05	1.38± 0.01	2.21± 0.20	1.06± 0.02	1.73± 0.00	1.98± 0.03	1.20± 0.01	1.98± 0.01	1.43± 0.07	1.28± 0.04	1.42± 0.00	1.75± 0.04	1.14± 0.03
2-丙硫醇	581	132.20	1.16	4.41± 0.15	2.56± 0.56	2.89± 0.30	4.29± 0.35	3.94± 1.22	4.71± 0.55	4.57± 0.33	3.68± 0.69	3.49± 0.26	4.49± 0.08	2.85± 0.53	3.45± 0.06	3.83± 0.30	2.96± 0.26	3.07± 0.14	4.48± 0.36	3.97± 0.13	5.44± 0.19
(E)-2-庚烯醛	959	473.71	1.25	0.86± 0.02	2.15± 0.04	2.66± 0.12	0.93± 0.02	1.96± 0.20	2.75± 0.09	0.94± 0.01	2.01± 0.33	2.98± 0.01	1.10± 0.01	2.17± 0.23	2.77± 0.06	1.53± 0.03	1.99± 0.00	2.67± 0.09	0.99± 0.05	1.66± 0.14	2.79± 0.09
庚醛	901	379.46	1.33	1.60± 0.02	2.32± 0.03	3.86± 0.08	1.73± 0.02	2.19± 0.12	3.71± 0.03	1.61± 0.03	2.11± 0.22	2.96± 0.08	1.97± 0.04	2.28± 0.19	3.58± 0.09	2.77± 0.06	2.16± 0.05	4.32± 0.07	1.54± 0.06	1.49± 0.03	3.66± 0.08
2-己烯醛	850	314.38	1.18	1.09± 0.03	1.45± 0.00	2.65± 0.05	1.10± 0.06	1.20± 0.12	3.20± 0.04	0.90± 0.02	1.06± 0.20	2.27± 0.06	1.22± 0.16	1.19± 0.15	2.75± 0.18	1.32± 0.05	1.11± 0.04	3.25± 0.16	1.47± 0.02	1.45± 0.23	2.71± 0.21
2-甲基戊醛	752	220.70	1.22	4.39± 0.28	5.01± 0.27	2.63± 0.11	4.84± 0.09	4.80± 0.40	4.65± 0.12	4.93± 0.02	6.02± 0.61	3.19± 0.20	5.03± 0.10	4.41± 0.47	2.80± 0.05	6.89± 0.11	4.63± 0.22	5.04± 0.38	3.84± 0.37	3.43± 0.19	1.77± 0.31
2-甲基丁醛	643	155.96	1.39	12.43± 0.63	3.99± 0.27	8.73± 0.25	12.71± 0.66	4.23± 0.52	13.73± 0.32	13.42± 0.35	4.98± 0.66	7.13± 0.41	11.98± 0.24	2.66± 0.23	7.63± 0.52	8.99± 0.20	1.54± 0.13	8.46± 0.68	7.27± 1.09	2.07± 0.15	3.77± 0.80
3-甲基丁酸丁酯	1046	638.53	1.41	2.59± 0.39	2.20± 0.02	2.44± 0.10	1.77± 0.27	1.94± 0.25	2.09± 0.04	1.58± 0.20	1.71± 0.36	1.96± 0.02	1.44± 0.06	1.83± 0.20	1.89± 0.31	1.25± 0.10	1.84± 0.06	1.94± 0.10	2.48± 0.46	2.10± 0.10	1.64± 0.15
乙酸己酯	1012	572.73	1.40	1.22± 0.04	1.45± 0.03	3.66± 0.26	1.03± 0.00	1.17± 0.09	3.69± 0.36	1.10± 0.05	1.19± 0.17	3.72± 0.15	1.22± 0.01	1.33± 0.13	4.64± 0.01	1.43± 0.01	1.25± 0.03	5.76± 0.26	1.08± 0.02	1.09± 0.04	4.75± 0.12
丁酸丙酯(二聚体)	888	361.154	1.26	2.19± 0.03	2.71± 0.06	1.33± 0.02	1.78± 0.03	1.91± 0.16	1.53± 0.02	1.71± 0.01	1.94± 0.24	1.64± 0.05	2.27± 0.02	1.87± 0.20	1.68± 0.02	2.65± 0.01	1.86± 0.04	2.02± 0.08	1.53± 0.01	1.43± 0.09	1.50± 0.08
甲酸丁酯	721	198.12	1.50	9.99± 0.5	4.48± 0.19	2.09± 0.04	11.44± 0.26	6.54± 0.37	9.16± 0.30	11.67± 0.05	8.48± 0.56	5.78± 0.33	10.26± 0.08	3.05± 0.31	2.59± 0.18	6.22± 0.08	1.34± 0.04	3.74± 0.40	7.31± 0.70	3.13± 0.16	1.74± 0.13
乙酸正丙酯	709	189.37	1.16	1.61± 0.09	1.72± 0.16	3.02± 0.25	1.29± 0.03	1.17± 0.06	2.28± 0.07	1.35± 0.01	1.15± 0.12	3.98± 0.27	1.29± 0.03	1.19± 0.03	4.21± 0.21	1.31± 0.05	1.23± 0.17	2.53± 0.32	1.88± 0.24	1.80± 0.08	6.37± 0.36
6-甲基-3,5-戊二烯-2-酮	1105	765.67	1.19	0.70± 0.03	0.74± 0.05	1.40± 0.01	0.69± 0.00	0.63± 0.04	1.95± 0.08	0.64± 0.02	0.60± 0.05	1.83± 0.05	0.70± 0.01	0.59± 0.02	1.87± 0.02	0.73± 0.06	0.55± 0.02	1.78± 0.01	0.53± 0.01	0.50± 0.02	1.62± 0.00

表 1(续)

名称	保留 指数/s	保留 时间/s	漂移 时间/min	相对含量/%																	
				1A	1B	1C	2A	2B	2C	3A	3B	3C	4A	4B	4C	5A	5B	5C	6A	6B	6C
1-甲基-2-吡咯烷酮	1057	660.76	1.45	0.87± 0.01	2.22± 0.06	0.48± 0.03	0.50± 0.01	0.76± 0.06	0.82± 0.08	0.62± 0.00	0.65± 0.11	1.99± 0.13	0.63± 0.05	0.54± 0.07	2.05± 0.14	0.36± 0.02	0.35± 0.02	0.90± 0.02	0.45± 0.02	0.49± 0.06	1.14± 0.05
二氢-2(3H)-呋喃酮	919	406.26	1.08	1.78± 0.24	1.13± 0.01	3.21± 0.15	1.88± 0.10	1.15± 0.17	2.75± 0.04	2.21± 0.09	1.01± 0.26	2.52± 0.12	1.42± 0.06	0.59± 0.09	2.12± 0.14	1.30± 0.10	0.41± 0.01	1.63± 0.08	1.69± 0.17	0.78± 0.07	2.60± 0.10
环己烯-2-酮	900	378.48	1.40	0.41± 0.04	0.50± 0.06	1.48± 0.07	0.37± 0.02	0.33± 0.04	1.13± 0.06	0.36± 0.01	0.29± 0.07	1.51± 0.03	0.37± 0.02	0.30± 0.04	1.62± 0.02	0.41± 0.01	0.32± 0.05	1.23± 0.13	0.64± 0.05	0.46± 0.02	2.36± 0.26
乙酰氨基丙酮	477	100.30	1.19	0.66± 0.06	1.02± 0.06	0.37± 0.06	0.70± 0.06	1.13± 0.06	0.49± 0.06	0.92± 0.06	1.59± 0.06	0.36± 0.06	1.02± 0.06	1.09± 0.06	0.33± 0.06	0.94± 0.06	0.66± 0.06	0.69± 0.06	0.68± 0.06	0.78± 0.06	0.40± 0.06
丁酸	798	260.62	1.16	0.58± 0.06	0.75± 0.01	0.56± 0.01	0.59± 0.01	0.70± 0.01	0.52± 0.01	0.57± 0.01	0.69± 0.02	0.45± 0.04	0.59± 0.00	0.70± 0.00	0.55± 0.03	0.64± 0.00	0.74± 0.01	0.52± 0.03	1.31± 0.42	1.29± 0.07	1.26± 0.30
丁酸(二聚体)	787	250.10	1.16	0.75± 0.16	0.73± 0.10	0.59± 0.03	0.60± 0.04	0.46± 0.05	0.88± 0.05	0.55± 0.01	0.54± 0.04	0.67± 0.10	0.59± 0.01	0.59± 0.02	1.05± 0.13	0.63± 0.02	0.81± 0.15	0.89± 0.10	2.27± 0.66	2.34± 0.07	1.84± 0.47
羧烯	962	477.33	1.21	0.75± 0.05	0.91± 0.01	1.20± 0.05	0.65± 0.03	0.68± 0.04	1.28± 0.00	0.67± 0.01	0.68± 0.10	1.33± 0.01	0.70± 0.01	0.71± 0.06	1.58± 0.01	0.78± 0.02	0.69± 0.03	1.62± 0.01	0.88± 0.01	0.76± 0.04	1.89± 0.09
二丙基二硫醚	1105	765.67	1.47	1.03± 0.03	1.50± 0.03	4.35± 0.03	0.91± 0.01	1.14± 0.09	4.25± 0.28	0.94± 0.07	1.05± 0.14	5.08± 0.08	1.05± 0.04	1.26± 0.14	5.69± 0.00	1.20± 0.06	1.13± 0.04	5.85± 0.17	1.05± 0.02	1.05± 0.03	4.60± 0.18
二乙二醇二甲醚	965	483.52	1.14	0.99± 0.04	1.40± 0.08	2.63± 0.03	0.84± 0.02	0.98± 0.05	2.74± 0.11	1.03± 0.01	0.95± 0.11	2.69± 0.02	1.07± 0.00	1.23± 0.09	2.85± 0.16	0.92± 0.02	0.93± 0.01	2.69± 0.04	0.85± 0.00	0.86± 0.03	2.57± 0.13
2-戊基呋喃	997	545.56	1.25	1.72± 0.01	2.26± 0.03	1.57± 0.11	2.03± 0.03	1.48± 0.21	1.82± 0.12	1.80± 0.02	1.68± 0.43	1.72± 0.04	2.41± 0.02	1.41± 0.27	1.62± 0.12	3.51± 0.01	1.31± 0.04	2.02± 0.18	2.50± 0.11	1.32± 0.18	1.35± 0.16
2-乙基-5-甲基吡嗪	993	538.31	1.18	2.3± 0.05	2.93± 0.11	2.05± 0.04	1.90± 0.04	2.09± 0.29	6.38± 0.06	1.74± 0.03	2.11± 0.46	3.14± 0.11	2.08± 0.01	2.14± 0.31	3.17± 0.07	2.2± 0.00	1.62± 0.05	5.34± 0.11	1.71± 0.01	1.77± 0.20	3.26± 0.11
二甲基胺	433	89.07	1.06	3.45± 0.30	3.38± 0.23	4.66± 0.43	3.49± 0.10	3.63± 0.18	4.83± 0.07	3.69± 0.01	3.67± 0.42	4.13± 0.41	3.46± 0.07	2.72± 0.21	2.64± 0.09	3.51± 0.01	2.24± 0.14	2.04± 0.12	3.04± 0.33	3.15± 0.21	0.40± 0.14
麦芽酚	1105	765.68	1.52	0.32± 0.02	0.49± 0.02	1.12± 0.09	0.30± 0.01	0.39± 0.01	1.03± 0.04	0.36± 0.02	0.35± 0.07	1.38± 0.11	0.34± 0.01	0.38± 0.04	1.58± 0.02	0.38± 0.05	0.35± 0.00	1.26± 0.06	0.37± 0.01	0.39± 0.02	1.69± 0.14
2-异丙基-4-甲基噻唑	1023	592.69	1.19	0.22± 0.04	0.27± 0.00	1.10± 0.03	0.21± 0.00	0.27± 0.02	1.95± 0.08	0.18± 0.01	0.20± 0.03	1.23± 0.11	0.23± 0.01	0.24± 0.02	1.21± 0.07	0.27± 0.01	0.21± 0.01	1.76± 0.13	0.25± 0.02	0.21± 0.01	1.34± 0.13
1,2-二甲氧乙烷	636	153.12	1.31	0.72± 0.01	0.56± 0.01	2.42± 0.14	0.69± 0.01	0.46± 0.01	3.15± 0.08	0.81± 0.00	0.47± 0.06	2.92± 0.16	0.80± 0.01	0.46± 0.01	2.34± 0.04	0.97± 0.01	0.35± 0.02	2.78± 0.18	0.57± 0.04	0.36± 0.02	1.28± 0.29

注:表中醇类、醛类、酯类、酮类物质仅列出每个类别中含量较高的前5种物质。



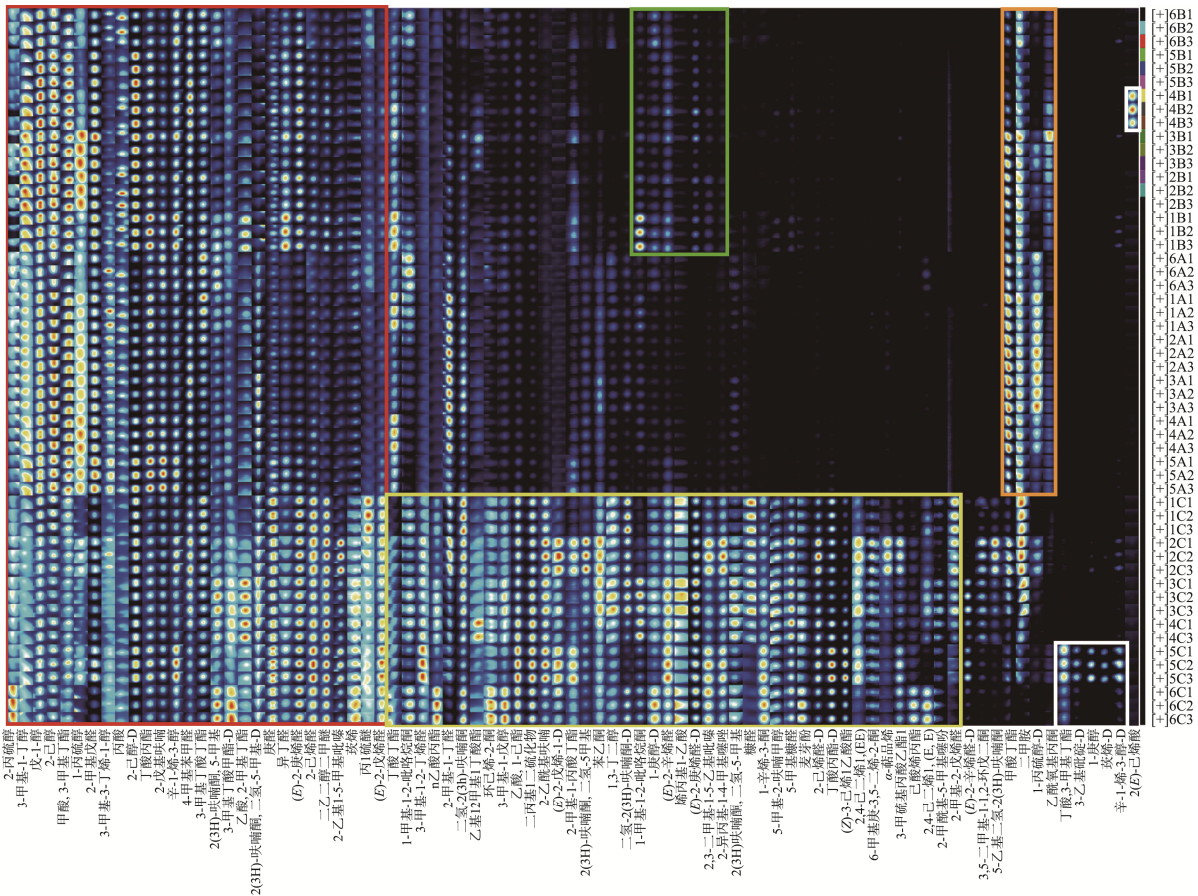


图 3 黑小麦挥发性有机物指纹图谱

Fig.3 Fingerprints of volatile organic compounds in black wheat

乎无影响<sup>[29]</sup>。由表 2 可知,面粉、全麦粉、籽粒 ROVA 值>0.1 挥发性有机物共有 28 种化合物,其中醛类 8 种,酯类物质 8 种,醇类物质 5 种,酸类物质 2 种,酮类物质 1 种,其他类 4 种,醛类阈值极低并随温度升高而增加,挥发令人愉悦的风味,酯类阈值低并赋予食品甜味和果味,醇类赋予植物和香料味,但酸类和酮类具有较高阈值,对食品总体风味影响有限。ROAV>1 的化合物共有 8 种,分别是 (*E*)-2-辛烯醛(脂肪、肉香)、1-辛烯-3-酮、1-丙硫醇(烤制品味)、2-甲酰基-5-甲基噻吩(甜杏仁味)、2-甲基丁醛(苹果味)、4-甲基苯甲醛(花香和杏仁气味)、异戊酸(果香及橘样香味)、辛-1-烯-3-醇(蘑菇味)、原愈创木醇(甜味),作为黑小麦不同组分的关键风味物质发挥着主导作用。0.1<ROAV<1 的化合物共 20 种,展现出丰富多样的风味特征,赋予黑小麦独特且富有层次的香气。

ROAV 分析发现(*E*)-2-辛烯醛主要存在于籽粒中并赋予籽粒脂肪和肉香,2-甲基丁醛在面粉中含量较高且呈现苹果味,4-甲基苯甲醛在全麦粉中具有显著影响并在特定样品中含量较高。闫文芝等<sup>[20]</sup>也将(*E*)-2-辛烯醛、2-甲基丁醛作为产生特殊香气的风味物质,认为是导致小麦麦香味

浓郁的物质基础。

## 2.5 黑小麦关键风味成分的正交偏最小二乘法判别分析

对面粉、全麦粉和籽粒样品的重要风味化合物(ROAV>0.1)进行正交偏最小二乘法判别(orthogonal partial least squares discriminant analysis, OPLS-DA)分析(图 4a),面粉组、全麦粉组和籽粒组分离效果良好,其中面粉与全麦粉挥发性有机物相似,两组距离较近。籽粒与其余两组差异明显,距离较远。OPLS-DA 模型的拟合参数( $R^2=0.968$ ,  $Q^2=0.909$ )表明其具有较强解释和预测能力,模型可靠性经过 200 次交叉置换检验  $Q^2$  回归线截距为-0.941,证明模型可靠,不存在过拟合<sup>[30]</sup>。

根据 OPLS-DA 模型形成的变量投影重要性值(variable importance in the projection, VIP)评价样品中挥发性有机物对区分样品风味的贡献度, VIP 值与贡献度成正相关<sup>[31]</sup>, VIP 大于 1 的化合物包括 1-辛烯-3-酮、1-辛烯-3-醇、1-丙硫醇、2-甲基丁醛,结合 ROAV 分析,可以将其确定为黑小麦关键风味物质,其余 24 种挥发性有机物对黑小麦风味产生具有修饰作用。

表 2 黑小麦关键挥发性风味物质阈值及气味特征  
 Table 2 Threshold and odor characteristics of key volatile flavor compounds in black wheat

名称	阈值/(mg/kg)	气味特征	ROAV 值																	
			1A	1B	1C	2A	2B	2C	3A	3B	3C	4A	4B	4C	5A	5B	5C	6A	6B	6C
(E)-2-辛烯醛	0.004	脂肪、肉香	0.76±0.03	2.45±0.03	3.03±0.01	0.79±0.01	1.92±0.08	2.26±0.07	0.76±0.04	1.96±0.04	4.01±0.01	0.94±0.01	2.35±0.05	3.05±0.05	1.78±0.08	2.58±0.09	3.82±0.03	0.99±0.03	1.84±0.05	3.23±0.06
(E)-2-庚烯醛	0.05	青草香气	0.35±0.01	0.90±0.06	0.88±0.09	0.38±0.05	0.86±0.01	0.69±0.03	0.38±0.09	0.83±0.06	0.87±0.07	0.44±0.02	1.02±0.10	0.75±0.09	0.60±0.07	1.05±0.09	0.71±0.06	0.46±0.07	0.88±0.02	0.87±0.04
1-辛烯-3-酮	0.00012	蘑菇味	13.06±0.03	22.85±0.05	51.52±0.08	13.75±0.05	17.44±0.10	38.52±0.07	12.34±0.06	18.30±0.10	54.59±0.07	13.41±0.08	19.51±0.06	40.27±0.09	14.75±0.05	23.14±0.05	74.75±0.01	18.62±0.08	27.41±0.07	100.00±0.09
1-丙硫醇	0.0031	烤制品味	13.55±0.06	14.34±0.02	4.27±0.06	14.49±0.06	21.74±0.07	7.77±0.09	14.61±0.03	20.78±0.04	4.65±0.07	16.81±0.01	13.54±0.03	7.79±0.05	15.21±0.06	10.63±0.09	6.86±0.04	11.24±0.05	13.82±0.02	5.88±0.06
2,6-二甲基-5-庚烯醛	0.016	青香、甜香	0.41±0.10	1.31±0.07	0.36±0.03	0.48±0.10	0.98±0.02	0.43±0.05	0.40±0.03	0.81±0.10	0.56±0.08	0.5±0.10	0.92±0.05	0.62±0.08	0.76±0.06	1.17±0.04	0.57±0.00	0.51±0.08	0.88±0.00	0.48±0.09
2-甲基丁醛	0.00175	甜杏仁味	4.11±0.01	4.66±0.06	6.02±0.02	3.67±0.04	4.40±0.06	4.10±0.05	3.76±0.08	4.35±0.00	7.07±0.05	3.95±0.02	4.99±0.02	5.62±0.01	3.81±0.04	5.25±0.06	5.52±0.09	4.82±0.06	5.66±0.07	5.85±0.02
2-甲基丁醛	0.0843	苹果味	3.02±0.06	0.99±0.09	1.71±0.00	3.08±0.00	1.10±0.07	2.04±0.09	3.20±0.00	1.23±0.10	1.24±0.07	2.82±0.02	0.74±0.08	1.53±0.04	2.09±0.03	0.48±0.02	1.32±0.01	2.00±0.03	0.65±0.00	0.70±0.08
4-甲基苯甲醛	0.0072	花香和杏仁香气味	1.93±0.03	1.75±0.09	1.61±0.01	2.32±0.01	2.18±0.10	1.48±0.02	2.37±0.06	2.33±0.00	1.74±0.06	2.16±0.09	3.08±0.10	1.57±0.04	1.71±0.03	3.11±0.07	1.19±0.06	2.16±0.08	2.72±0.05	1.19±0.05
异戊酸	0.01	果香及橘样香味	1.06±0.10	1.01±0.09	0.67±0.03	1.13±0.02	1.11±0.00	0.76±0.06	1.03±0.06	1.28±0.02	0.63±0.09	1.07±0.03	1.40±0.06	0.71±0.01	1.35±0.02	1.69±0.07	0.93±0.02	2.03±0.02	2.28±0.01	0.53±0.05
辛-1-烯-3-醇	0.001	蘑菇	41.58±0.03	74.00±0.09	26.28±0.10	37.00±0.07	56.52±0.07	32.55±0.06	37.20±0.06	54.80±0.03	28.31±0.01	43.85±0.07	60.55±0.07	35.44±0.07	56.00±0.07	62.58±0.04	45.82±0.06	50.62±0.03	74.22±0.04	34.12±0.04
原愈创木醇	0.0015	甜味	2.55±0.07	1.45±0.05	2.01±0.09	1.78±0.01	1.56±0.02	1.22±0.07	1.60±0.01	1.41±0.08	1.34±0.07	1.43±0.06	1.61±0.04	1.33±0.00	1.25±0.01	1.76±0.02	1.14±0.04	2.29±0.06	2.01±0.01	1.36±0.10

注: 表中仅列出 ROAV>1 的化合物。

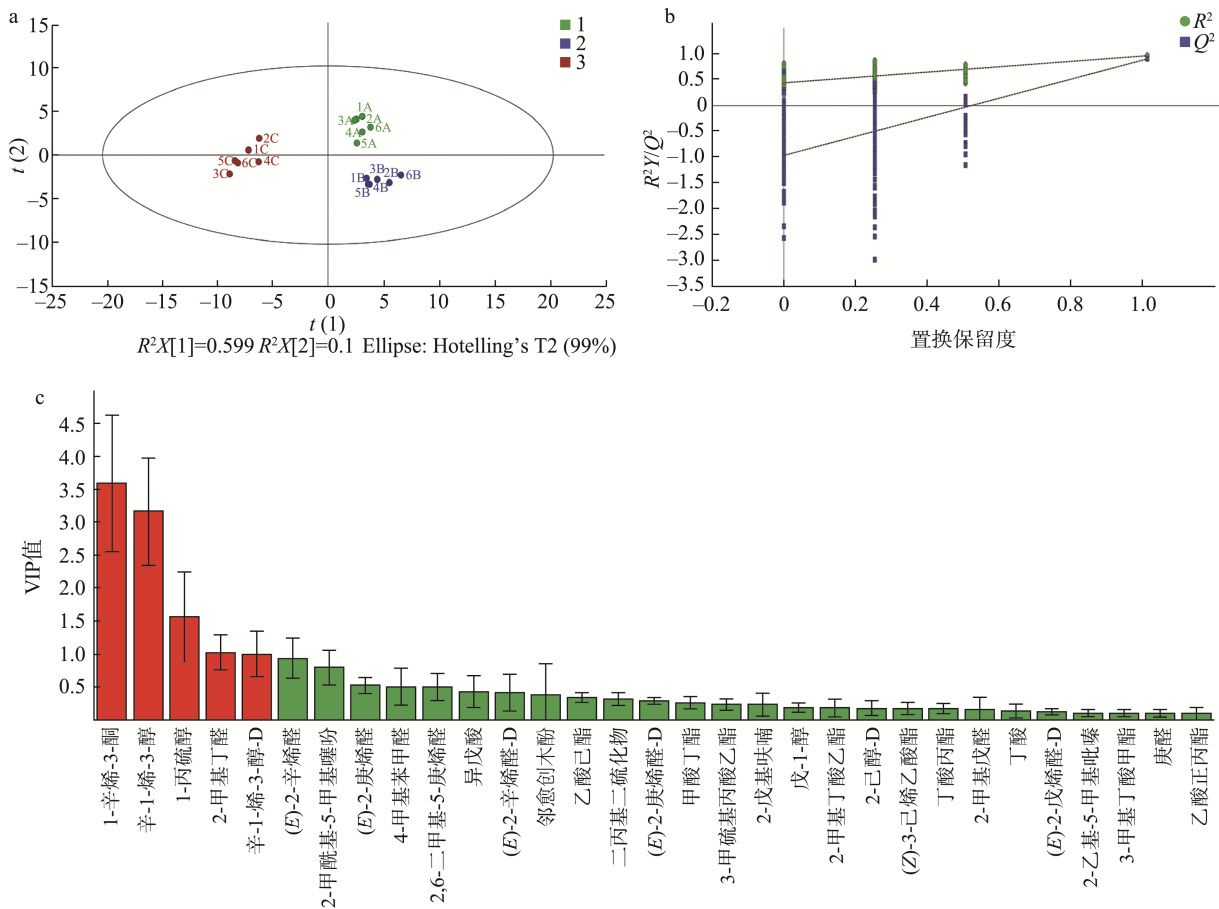


图4 黑小麦香气化合物相关性分析  
Fig.4 Correlation analysis of aroma compounds in black wheat

### 3 结论

本研究采用 GC-IMS 分析了黑小麦面粉、全麦粉及籽粒的挥发性成分,共检测到 134 种挥发性有机物,通过数据库检索确定了 97 种化合物。分析结果显示,尽管 3 组样品中挥发性有机物的化学成分相似,但其含量存在显著差异。醛类、酯类、醇类是黑小麦中最丰富的化合物,其中甲酸丁酯、2-甲基丁醛、2-己醇、2-甲基戊醛,2-丙硫醇在所有样品中含量最高。进一步分析表明,(*E*)-2-辛烯醛、1-辛烯-3-酮、1-丙硫醇、2-甲酰基-5-甲基噻吩、2-甲基丁醛、4-甲基苯甲醛、异戊酸、辛-1-烯-3-醇、原愈创木醇物质是黑小麦共有重要挥发性物质。ROAV 结合 VIP 值分析表明,1-辛烯-3-酮、1-辛烯-3-醇、1-丙硫醇、2-甲基丁醛为黑小麦关键风味物质。OPLS-DA 进一步验证了 GC-IMS 技术在区分不同处理黑小麦挥发性化合物差异方面的有效性,本研究可为黑小麦制粉提供科学依据,也为黑小麦全麦粉掺假鉴定提供新思路和方法。

#### 参考文献

[1] FU M, LIAN F. Mildew detection for stored wheat using gas chromatography-ion mobility spectrometry and broad learning network [J].

Food Analytical Methods, 2024, 17(5): 664–678.

- [2] GERHARDT N, SCHWOLOW S, ROHN S, *et al.* Quality assessment of olive oils based on temperature-ramped HS-GC-IMS and sensory evaluation: Comparison of different processing approaches by LDA, kNN, and SVM [J]. Food Chemistry, 2019, 278(10): 720–728.
- [3] GERHARDT N, BIRKENMEIER M, SCHWOLOW S, *et al.* Volatile-compound fingerprinting by headspace-gas-chromatography ion-mobility spectrometry (HS-GC-IMS) as a benchtop alternative to  $^1\text{H}$  NMR profiling for assessment of the authenticity of honey [J]. Analytical Chemistry, 2018, 90(3): 1777–1785.
- [4] ZHU W, BENKWITZ F, SARMADI B, *et al.* Validation study on the simultaneous quantitation of multiple wine aroma compounds with static headspace-gas chromatography-ion mobility spectrometry [J]. Journal of Agricultural and Food Chemistry, 2021, 69(49): 15020–15035.
- [5] BRENDL R, SCHWOLOW S, ROHN S, *et al.* Volatilomic profiling of citrus juices by dual-detection HS-GC-MS-IMS and machine learning-an alternative authentication approach [J]. Journal of Agricultural and Food Chemistry, 2021, 69(5): 1727–1738.
- [6] YAO W, CAI Y, LIU D, *et al.* Comparative analysis of characteristic volatile compounds in Chinese traditional smoked chicken (specialty poultry products) from different regions by headspace-gas chromatography-ion mobility spectrometry [J]. Poultry Science, 2020, 99(12): 7192–7201.
- [7] YUAN ZY, QU HY, XIE MZ, *et al.* Direct authentication of three Chinese

- materia medica species of the Lili Bulbus family in terms of volatile components by headspace-gas chromatography-ion mobility spectrometry [J]. Analytical Methods, 2019, 11(4): 530–536.
- [8] JIN HM, DANG B, ZHANG WG, *et al.* Polyphenol and anthocyanin composition and activity of highland barley with different colors [J]. Molecules, 2022, 27(11): 3411–3415.
- [9] GAUTAM A, KUMAR S. Health benefits of black wheat: A review [J]. International Journal for Research in Applied Science and Engineering Technology, 2022, 10(7): 1780–1783.
- [10] 刘玉平, 孟雅宁, 兰素缺, 等. 高营养黑小麦新种质冀麦 14 号的选育及品质分析[J]. 河北农业科学, 2019, 23(6): 61–64.  
LIU YP, MENG YN, LAN SQ, *et al.* Selection and quality analysis of new high-nutrition black wheat germplasm Ji Zimai 14 [J]. Hebei Agricultural Science, 2019, 23(6): 61–64.
- [11] 郝紫瑞, 贾玉库, 葛子菲, 等. 不同黑小麦品种面粉及馒头品质分析[J]. 河南农业科学, 2023, 52(8): 163–170.  
HAO ZR, JAI YK, GE ZF, *et al.* Analysis of flour and steamed bread quality of different black wheat varieties [J]. Henan Agricultural Science, 2023, 52(8): 163–170.
- [12] 刘玉秀, 刘苗苗, 张正茂. 黑小麦品种选育与营养加工研究[J]. 麦类作物学报, 2020, 40(6): 698–706.  
LIU YX, LIU MM, ZHANG ZM. Research on the selection and nutritional processing of black wheat varieties [J]. Journal of Wheat Crops, 2020, 40(6): 698–706.
- [13] WANG S, CHEN H, SUN B. Recent progress in food flavor analysis using gas chromatography-ion mobility spectrometry (GCIMS) [J]. Food Chemistry, 2020, 315(3): 126–158.
- [14] HE Y, YIN L, ZHOU W, *et al.* Evaluation of <sup>60</sup>Co irradiation on volatile components of turmeric (*curcuma longae rhizoma*) volatile oil with GC-IMS [J]. Foods, 2023, 12(13): 2489–2493.
- [15] 洪宗超, 吴和珍, 杨艳芳, 等. 基于 GC-MS 及 GC 技术对片姜黄挥发油成分的定性定量分析[J]. 中草药, 2019, 17(3): 426–434.  
HONG ZC, WU HZ, YANG YF, *et al.* Qualitative and quantitative analysis of volatile oil from *Rhizoma Wenyujin concisum* by GC-MS and GC [J]. Central South Pharmacy, 2019, 17(3): 426–434.
- [16] 许诺, 冯琴, 高玉树, 等. 基于 GC-IMS 技术分析小麦粉储存过程中挥发性物质的变化[J]. 中国粮油学报, 2024, 39(3): 192–200.  
XU N, GUO Q, GAO YS, *et al.* Changes of volatile substances in wheat flour during storage based on GC-IMS [J]. China Journal of Cereals and Oils, 2024, 39(3): 192–200.
- [17] 李聪, 武文斌, 林冬华, 等. 磨粉机磨辊物料粉碎摩擦生热分析计算研究[J]. 粮食加工, 2019, 44(1): 64–66.  
LI C, WU WB, LIN DH, *et al.* Research on analyzing and calculating the heat generation from material crushing friction of mill rolls in a grinding mill [J]. Grain Processing, 2019, 44(1): 64–66.
- [18] 王美婷, 王缤晨, 肖琳, 等. 发酵小麦粉加热过程中挥发性成分分析[J]. 食品与发酵工业, 2020, 46(20): 221–228.  
WANG MT, WANG BC, XIAO L, *et al.* Analysis of volatile compounds from fermented wheat flour during heating process [J]. Food and Fermentation Industries, 2020, 46(20): 221–228.
- [19] 李孟凡, 唐培安, 陈二虎, 等. 基于电子鼻与气相色谱-质谱法探究小麦与碎麦挥发性香气成分差异[J]. 食品安全质量检测学报, 2023, 14(12): 15–22.  
LI MF, TANG PAN, CHEN ERH, *et al.* Differences in volatile aroma components between wheat and cracked wheat based on electronic nose and gas chromatography-mass spectrometry [J]. Journal of Food Safety & Quality, 2023, 14(12): 15–22.
- [20] 闫文芝, 杨蕾, 刘静. 内蒙古河套地区小麦粉风味物质 GC-IMS 分析[J]. 中国农学通报, 2022, 38(24): 151–157.  
YAN WZ, YANG L, LIU J. GC-IMS analysis of flavor substances in wheat flour from Hetao Region of Inner Mongolia [J]. Chinese Agronomy Bulletin, 2022, 38(24): 151–157.
- [21] 刘倩, 白艳龙, 贾建华, 等. 基于 GC-MS 和 GC-IMS 技术比较不同种类麦芽的挥发性物质[J]. 食品工业科技, 2024, 45(14): 215–223.  
LIU Q, BAI YL, JIA JH, *et al.* Comparison of volatiles in different types of malt based on GC-MS and GC-IMS techniques [J]. Food Industry Science and Technology, 2024, 45(14): 215–223.
- [22] 燕雯. 黄淮海冬麦区小麦挥发性成分研究[D]. 杨凌: 西北农林科技大学, 2012.  
YAN W. Study on volatile components of wheat in the winter wheat region of Huanghuai [D]. Yangling: Northwest Agriculture and Forestry University, 2012.
- [23] FLAVIIS R, SACCHETTI G, MASTROCOLA D. Wheat classification according to its origin by an implemented volatile organic compounds analysis [J]. Food Chemistry, 2021, 341(1): 128–217.
- [24] 陈通, 李海瑜, 张定宇, 等. 基于风味特征的大米储藏过程脂肪酸值的预测研究[J]. 食品安全质量检测学报, 2022, 13(15): 4810–4815.  
CHEN T, LI HY, ZHANG DY, *et al.* Prediction of fatty acid values of rice during storage based on flavor characteristics [J]. Journal of Food Safety & Quality, 2022, 13(15): 4810–4815.
- [25] 康文翠, 林颢, 满忠秀. 基于 GC-MS 与多变量分析方法的同储藏期大米挥发特征气味的分析[J]. 中国粮油学报, 2018, 33(5): 94–101.  
KANG WC, LIN H, MAN ZX. Analysis of volatile characteristic odors of rice at different storage periods based on GC-MS and multivariate analysis methods [J]. Chinese Journal of Cereals and Oils, 2018, 33(5): 94–101.
- [26] 沙见宇, 张锦丽. 不同小麦粉对馒头品质及风味的影响[J]. 山东农业大学学报(自然科学版), 2021, 52(5): 753–758.  
SHA JY, ZHANG JL. Effects of different wheat flours on the quality and flavor of steamed bread [J]. Journal of Shandong Agricultural University (Natural Science Edition), 2021, 52(5): 753–758.
- [27] 徐鑫, 毛红艳, 王仙, 等. 顶空固相微萃取全麦粉中挥发性成分的研究[J]. 新疆农业科学, 2018, 55(10): 1902–1908.  
XU X, MAO HY, WANG X, *et al.* Headspace solid-phase microextraction of volatile components in whole wheat flour [J]. Xinjiang Agricultural Science, 2018, 55(10): 1902–1908.
- [28] XU J, ZHANG Y, YAN F, *et al.* Monitoring changes in the volatile compounds of tea made from summer tea leaves by GC-IMS and HS-SPME-GC-MS [J]. Foods, 2022, 12(1): 146.
- [29] 赵玉欣, 韩丽娟, 葛世鹏, 等. 基于 GC-IMS 分析不同提取方法对藏羊油脂挥发性风味的影响[J/OL]. 中国油脂, 2025, 1–15. [2025-03-05]. <https://doi.org/10.19902/j.cnki.zgyz.1003-7969.230517>  
ZHAO YX, HAN LJ, GE SP, *et al.* Effect of different extraction methods on the volatile flavor of Tibetan sheep oil based on GC-IMS analysis [J/OL]. China Oil and Fat, 2025, 1–15. [2025-03-05]. <https://doi.org/10.19902/j.cnki.zgyz.1003-7969.230517>
- [30] LI ZH, ZHANG GQ. Metabolomic analysis reveals the quality characteristics of Yi Gong tea leaves at different harvesting periods [J]. Journal of Food Biochemistry, 2022, 46(12): 130–131.
- [31] 杨学博, 陈秋翰, 刘寿春, 等. 基于 GC-IMS 和 OPLS-DA 分析酵母-霍香复合对罗非鱼脱腥效果的影响[J/OL]. 食品与发酵工业, 2025, 1–11. [2025-03-05]. <https://doi.org/10.13995/j.cnki.11-1802/ts.036573>  
YANG XB, CHEN QH, LIU SC, *et al.* Effect of yeast-patchouli complex on deodorization of tilapia based on GC-IMS and OPLS-DA [J/OL]. Food and Fermentation Industry, 2025, 1–11. [2025-03-05]. <https://doi.org/10.13995/j.cnki.11-1802/ts.036573>

(责任编辑: 于梦娇 安香玉)