4DOI: 10.19812/j.cnki.jfsq11-5956/ts.20251223002
引用格式: 周雪艳, 朱娜, 刘琳. 顶空气相色谱-离子迁移谱法在农产品风味分析中的应用研究进展[J]. 食品安全质量检测学报, 2026, 17(6): 271–279.
ZHOU XY, ZHU N, LIU L. Research progress in the application of headspace gas chromatography-ion mobility spectrometry in the analysis of agricultural product flavors [J]. Journal of Food Safety & Quality, 2026, 17(6): 271–279. (in Chinese with English abstract).

顶空气相色谱-离子迁移谱法在农产品风味分析中的应用研究进展

周雪艳, 朱　娜*, 刘　琳

(石家庄市食品药品检验中心, 石家庄　050031)

摘　要: 顶空气相色谱-离子迁移谱法(headspace gas chromatography-ion mobility spectrometry, HS-GC-IMS)可精准识别并定量农产品中的挥发性有机化合物(volatile organic compounds, VOCs), 凭借响应快、灵敏度高、操作简便、成本低廉等优势, 在农产品风味分析领域发展迅速。本文系统阐述 HS-GC-IMS 的工作原理、指纹图谱特征提取方法, 综述该技术在酒类、果蔬、茶叶、油脂、乳制品、蜂蜜等常见农产品中的应用进展, 重点涵盖农产品分类与掺假鉴别、加工及贮藏过程中挥发性代谢物动态变化、新鲜度与腐败变质评价、异味溯源等研究方向, 并展望其未来发展趋势。综上, HS-GC-IMS 在农产品风味研究中应用潜力广阔, 可为农产品品质评价、质量管控及风味机制解析提供高效可靠的分析手段, 对推动农产品品质检测技术创新与产业高质量发展具有重要意义。

关键词: 顶空气相色谱-离子迁移谱法; 挥发性有机化合物; 工作原理; 农产品; 发展方向

Research progress in the application of headspace gas chromatography-ion mobility spectrometry in the analysis of agricultural product flavors

ZHOU Xue-Yan, ZHU Na*, LIU Lin

(*Shijiazhuang Food and Drug Inspection Center*, *Shijiazhuang* 050031, *China*)

ABSTRACT: Headspace gas chromatography-ion mobility spectrometry (HS-GC-IMS) can accurately identify and quantify volatile organic compounds (VOCs) in agricultural products. Benefiting from its advantages such as fast response, high sensitivity, simple operation and low cost, HS-GC-IMS has developed rapidly in the field of flavor analysis of agricultural products. This paper systematically expounded the working principle of HS-GC-IMS and the feature extraction methods of its fingerprint profiles, and reviewed the application progress of this technology in common agricultural products including alcoholic beverages, fruits and vegetables, tea, oils and fats, dairy products

收稿日期: 2025-12-23
基金项目: 河北省重大科技支撑计划项目(252G2503D)
第一作者: 周雪艳(1986—), 女, 硕士, 高级工程师, 主要研究方向为食品与药品分析。E-mail: zhou.xue.yan@163.com
***通信作者:** 朱娜(1987—), 女, 工程师, 主要研究方向为食品与药品分析。E-mail: 675053755@qq.com

and honey. It focused on research directions such as the classification and adulteration identification of agricultural products, the dynamic changes of volatile metabolites during processing and storage, the evaluation of freshness and spoilage and the traceability of off-flavors, and forecasted its future development trends. In summary, HS-GC-IMS has broad application potential in the research on the flavor of agricultural products. It can provide efficient and reliable analytical methods for the quality evaluation, quality control and flavor mechanism analysis of agricultural products, and is of great significance for promoting the innovation of agricultural product quality detection technologies and the high-quality development of the industry.

KEY WORDS: headspace gas chromatography-ion mobility spectrometry; volatile organic compounds; working principle; agricultural products; development direction

0 引 言

农产品主要是由植物、动物、微生物及其加工制品组成, 农产品不单是人类获取碳水化合物的来源, 而且农产品和相关产业也是大多数国家的主要支柱产业[1]。农产品种类丰富, 包括酒、果蔬、茶叶、油类、乳制品、肉蛋还有蜂蜜等[2]。农产品的价值不仅仅和其营养、口感、外观有关, 并且挥发性有机化合物(volatile organic compounds, VOCs)也是评价其价值的主要因素, 而农产品中 VOCs 主要通过人的感官评定或仪器来测定以进行评价[3]。

感官分析是指人对农产品的感官评估, 其结果主观性偏大, 无法对某一具体化合物进行精确分析, 因此, 仪器分析技术已经被开发来识别和定量农产品中的 VOCs[4]。其中, 气相色谱-质谱法(gas chromatography-mass spectrometry, GC-MS)是首选的挥发性化合物分析技术, 应用广泛[5−6]。然而, 由于农产品基质的复杂性, 分析前通常需要进行复杂的前处理, 且检测时间较长, 无法满足快速检测要求[7]。二维气相色谱由于两根色谱柱的优势展现出较强的分离能力, 在复杂的农产品中 VOCs 的测定得到广泛应用, 但它仍然是一项相对不成熟的技术, 需要很大的改进[8]。气相色谱-嗅觉-质谱法(gas chromatography-olfactometry-mass spectrometry, GC-O-MS)可以从复杂的混合物中筛选出芳香活性化合物, 但其需要大量重复且耗时的工作, 例如需要采用香气提取物稀释分析(aromaextraction dilution analysis, AEDA), 以识别农产品中的关键香气物质[9]。电子鼻提供了一种低成本、实时的方法, 无需预处理, 然而, 它仍然无法针对某一化合物进行分析且数据处理方法不成熟, 导致其应用受限[10]。

顶空气相色谱-离子迁移谱法(headspace gas chromatography-ion mobility spectrometry, HS-GC-IMS)作为一项新兴技术, 其相对简单的系统设置、灵敏度和稳健性, 在分析领域迅速发展[11−12]。由于 HS-GC-IMS 将 GC 仪的高效分离与 IMS 的痕量快速检测优势相结合, 结果将包含大量数据(可能高达 10^{-6} ppm 甚至 10^{-7} ppm), 随后将 HS-GC-IMS 数据进行适当的化学计量处理可获得较好的数据信息, 并用于后续的机制研究和分析[13]。此外, 经常使用的化学计量学方法包括聚类分析(hierarchical cluster analysis, HCA)、主成分分析(principal component analysis, PCA)、最小偏二乘法分析(partial least squares, PLS)、K 最近邻算法(K-nearest neighbor, KNN)、线性判别式分析(linear discriminant analysis, LDA)和偏最小二乘回归(partial least squares regression, PLSR)用于其数据处理分析[14]。近年来, HS-GC-IMS 在农产品领域(如酒、果蔬、茶叶、油脂、乳制品、蜂蜜等)广泛应用, 其适用于表征具有各种特性的 VOCs, 如农产品的分类掺假、加工和储藏过程中的挥发性代谢物变化、农产品新鲜度、腐败程度以及异味检测的评价和一些其他应用等[15−20]。然而, 关于介绍 HS-GC-IMS 在农产品中的应用现状的综述较少, 不便于 HS-GC-IMS 的广泛应用。本文综述了 HS-GC-IMS 的工作原理和在农产品风味分析的应用现状, 并讨论了其发展趋势和面对的挑战。并系统梳理了 HS-GC-IMS 在农产品风味分析中的最新研究进展, 弥补了相关领域现有文献的不足。通过对典型应用场景、技术特点及其面临挑战的全面总结, 有助于为后续研究者提供理论借鉴和方法指导, 促进 HS-GC-IMS 技术在农产品风味质量分析和安全评价中的深入应用。

1 HS-GC-IMS 原理与技术特征

1.1 HS-GC-IMS 及其结构

图 1 阐述了 IMS 的基本结构及检测原理示意图, GC-IMS 设备的主要构成包括漂移管, 电离区以及分离区。在电场的作用下, 离子产物逐渐移动, 漂移气体不同的迁移效果, 这导致离子在不同迁移时间被察觉到, 从而提供了风味物质的种类和浓度相关信息。离子在惰性气体中穿过弱均匀电场的漂移时间和离子的迁移率有关。在低场条件下, 每个离子的迁移系数 K 由公式(1)~(2)计算。

$$v_d = \frac{L}{t_d} \tag{1}$$

$$K = \frac{v_d}{E} \tag{2}$$

式中: v_d 为离子的漂移速度, cm/s; L 为单位厘米的漂移区域的长度, cm; t_d 为离子漂移的时间, s; E 为电场的强度, V/cm。为了掌握在不同环境下的迁移值, 对约化迁移率(K_0)系数进行了分析, 按照公式(3)进行计算。

$$K_0=\frac{L}{E_{td}}\times\frac{273.15}{T}\times\frac{p}{760} \tag{3}$$

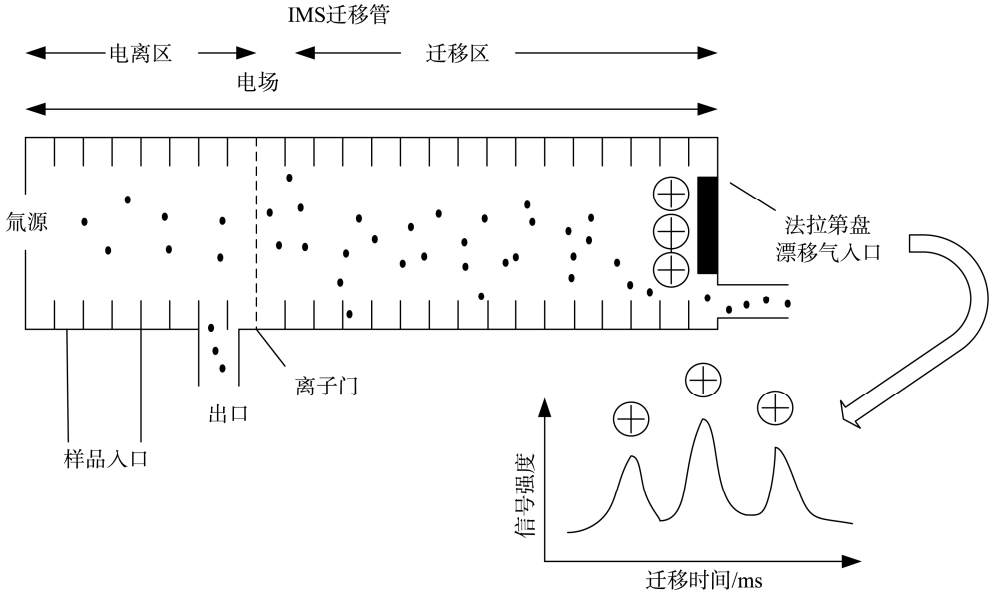


图 1　IMS 基本结构及检测原理示意图[11]

Fig.1　Basic structure and detection principle of IMS[11]

式中: T 为漂移管内绝对温度, K; p 为漂移管内压力, Pa; E_{td} 为离子在漂移管内迁移路径上的总电压降, V。通过精确测量漂移管内 T 和 p, 结合实测 t_d, 可计算得到 K_0。将该计算值与标准数据库中已知化合物的 K_0 标准值进行比对, 即可实现对挥发性有机化合物的定性分析。

1.2　HS-GC-IMS 仪器工作流程和优势

HS-GC-IMS 的工作流程主要包括样品顶空制备、自动进样、GC 分离、IMS 检测及数据分析。样品首先密封于顶空瓶, 经过预定时间与温度的平衡后, 通过自动进样器注入 GC 仪。GC 仪使用特定毛细管柱对挥发性组分进行分离, 各组分在色谱柱上分离后, 与载气一起进入 IMS 装置。在电离区, 样品分子受特定电离源作用形成离子, 通过漂移区在恒定电场下迁移, 根据迁移时间与迁移率差异实现分离。最终, 由检测器收集信号并生成二维谱图, 通过对实验温度与压力的精确控制, 可确保结果的准确性与重复性。

HS-GC-IMS 广泛应用于食品风味、环境监测、药物分析等领域, 尤其适合痕量挥发性有机物的定性与定量分析。本仪器对样品前处理要求低, 可实现快速、无损检测, 尤其在复杂基体或需要现场定性筛查时具有优势。主要适用于空气、液体、固体样品的顶空分析。

与传统 GC-MS、气相色谱-氢火焰离子化检测器等分析方法相比, HS-GC-IMS 具备分析速度快、检测灵敏度高、样品处理简便、设备体积小便于现场应用等优势。尤其在快速筛查和痕量分析领域表现突出。如在腌制萝卜贮藏期风味分析中, HS-GC-IMS 可在无需复杂前处理的情况下, 快速识别 48 种挥发性香气化合物, 清晰区分不同贮藏阶段的样品 aroma 图谱, 为关键香气成分筛选提供高效数据支撑[21], 在牡蛎肽风味改良研究中, 该技术可精准检测 64 个挥发性成分信号峰, 包括 13 种醛类、6 种酮类等, 直观揭示超热蒸汽糖基化处理对腥味物质(如庚醛、壬醛)的去除效果[22]。但该仪器对数据库的依赖较强, 在某些复杂基体中定量能力有限, 且部分物质分离度不及质谱技术。例如在谷物真实性研究中, HS-GC-MS 可识别 48 种高特异性挥发性标志物, 而 HS-GC-IMS 对醛类、酯类等共流出化合物的分辨能力较弱[23]; 在藏红花真伪鉴别中, 需结合自建 GC-IMS-MS 联用装置与美国国家标准与技术研究院(National Institute of Standards and Technology, NIST)质谱数据库, 才能实现藏花醛、α-异佛尔酮等特征成分的准确鉴定[24]。因此, HS-GC-IMS 适合与其他分析手段联合使用, 以实现更全面、准确的风味物质分析。在蒸制马铃薯品种风味区分中, HS-GC-IMS 结合感官评价可明确 63 种代表性挥发性成分的差异, 其中醛类、醇类和酮类物质是品种间风味区分的核心指标, 且 PCA 结果与感官评价结论高度一致, 验证了该技术在不同烹饪方式农产品风味检测中的适用性[25]; 在番石榴采后贮藏研究中, HS-GC-IMS 与 HS-SPME-GC-MS 联用可互补解析 38 种挥发性成分(含 11 种酯类、7 种醇类), 清晰呈现不同品种番石榴在常温和

冷藏条件下的香气动态变化, 为采后风味调控提供多维度数据[26]。

1.3 HS-GC-IMS 技术参数差异分析

HS-GC-IMS 的检测性能与色谱分离、离子迁移检测相关的关键技术参数密切相关, 不同研究中针对不同农产品基质及目标 VOCs 特性, 对核心技术参数的设置有一定的差异, 其差异主要体现在色谱柱型号、柱温程序、漂移管温度、漂移气体流速等核心参数, 具体如表 1 所示。

1.3.1 色谱柱型号选择

色谱柱的选择直接决定 VOCs 的分离效率, 其核心主要根据目标化合物的极性匹配色谱柱极性。色谱柱极性与目标 VOCs 不匹配时, 会导致峰形拖尾、分离度下降, 甚至出现共流出峰, 无法准确识别化合物, 而匹配的色谱柱可实现复杂基质中 VOCs 的高效分离, 为后续 IMS 检测提供纯净的组分信号[12−13]。极性色谱柱(如 DB-WAX、HP-INNOWAX、HP-WAX 等)比较适合分离醇类、醛类、酮类、酯类等极性较强的挥发性成分, 如松茸中的醇类[16]、牦牛奶粉中的醛酮类[30]、绿茶中的香气酯类[32]; 非极性/弱极性色谱柱(如 HP-5、HP-5MS、DB-5MS、SE-54 等)比较适用于分离烷烃、烯烃、芳香烃等非极性 VOCs, 如白兰地中的酯类[27]、鱼肌肉中的烃类腐败标志物[34]。

1.3.2 柱温程序设置

柱温程序的核心主要是兼顾低沸点化合物的保留与高沸点化合物的快速洗脱。初始温度一般设置在 35~50 ℃, 且保持 2~3 min, 目的是让低沸点 VOCs(如小分子醛、醇)充分吸附在色谱柱固定相上, 避免因洗脱过快导致峰形重叠; 若初始温度过高, 低沸点化合物可能无法有效分离; 温度过低则会延长分析时间[28,33]。多数研究采用 4~10 ℃/min 的梯度升温速率, 极性强、沸点高的化合物(如长链酯类、高级醇)需较低升温速率(4~6 ℃/min)以保证分离度, 如牛油果中高沸点脂肪酸酯的检测[29]; 非极性、沸点范围较窄的化合物可采用较高升温速率(8~10 ℃/min), 如芝麻油中的非极性掺假标志物[31]; 终温通常设置在 180~250 ℃, 保持 3~6 min, 用于彻底洗脱色谱柱中残留的高沸点化合物, 避免污染后续样品; 若终温不足或保持时间过短, 会导致残留污染, 影响检测重复性[27,31]。

1.3.3 漂移管温度控制

漂移管温度是 IMS 检测的关键参数, 直接影响离子迁移率(K_0)的稳定性, 其温度一般控制在 35~65 ℃范围内, 漂移管温度波动会导致 K_0 偏移, 若温度未精确控制, 可能出现化合物定性错误(与标准数据库 K_0 不匹配); 而稳定的温度可确保离子迁移率的重复性, 提升定性定量的准确性[11,14]。低温范围(45~50 ℃)适用于热稳定性较差的 VOCs, 如小分子醛类(己醛、丁醛)、易分解的酯类, 可减少离子裂解, 保证检测灵敏度[27,29,34]; 中高温范围(55~65 ℃)适用于黏度较高、离子迁移速率慢的化合物(如长链醇、大分子酯类), 升高温度可降低漂移气体黏度, 加快离子迁移, 缩短检测时间, 同时减少峰展宽, 如芝麻油中大分子掺假成分的检测[31]。

1.3.4 漂移气体流速调节

漂移气体(通常为氮气)的核心作用是推动离子在漂移管中迁移, 流速一般与漂移管温度同步优化, 保证离子迁移效率。合适的漂移气体流速可使不同离子按迁移率差异

表 1 GC-IMS 在农产品风味分析中技术参数差异

Table 1 Differences in technical parameters of GC-IMS in flavor analysis of agricultural products

研究对象	色谱柱型号	柱温程序	漂移管温度/℃	漂移气体流速/(mL/min)	参考文献
松茸	DB-WAX (30 m×0.32 mm, 0.25 μm)	初始温度 40 ℃保持 3 min, 以 8 ℃/min 升至 200 ℃, 保持 5 min	60	180	[16]
白兰地	HP-5MS (30 m×0.25 mm, 0.25 μm)	初始温度 40 ℃保持 2 min, 以 5 ℃/min 升至 250 ℃, 保持 5 min	45	150	[27]
金桔蜜饯	HP-INNOWAX (30 m×0.25 mm, 0.25 μm)	初始温度 35 ℃保持 2 min, 以 6 ℃/min 升至 220 ℃, 保持 4 min	50	160	[28]
牛油果	DB-5MS (30 m×0.25 mm, 0.25 μm)	初始温度 40 ℃保持 1 min, 以 4 ℃/min 升至 180 ℃, 保持 3 min	45	140	[29]
绿茶	HP-WAX (30 m×0.25 mm, 0.25 μm)	初始温度 38 ℃保持 3 min, 以 7 ℃/min 升至 210 ℃, 保持 5 min	55	170	[30]
芝麻油	SE-54 (30 m×0.32 mm, 0.25 μm)	初始温度 50 ℃保持 2 min, 以 10 ℃/min 升至 230 ℃, 保持 6 min	65	200	[31]
牦牛奶粉	DB-WAX (30 m×0.25 mm, 0.25 μm)	初始温度 40 ℃保持 2 min, 以 5 ℃/min 升至 200 ℃, 保持 4 min	50	150	[32]
蜂蜜	HP-5 (30 m×0.25 mm, 0.25 μm)	初始温度 35 ℃保持 3 min, 以 8 ℃/min 升至 220 ℃, 保持 5 min	55	180	[33]
鱼肉	DB-5 (30 m×0.25 mm, 0.25 μm)	初始温度 45 ℃保持 2 min, 以 6 ℃/min 升至 190 ℃, 保持 3 min	48	160	[34]

实现有效分离, 获得清晰的 IMS 峰形, 提高化合物定性的准确性; 流速不当会导致峰重叠或峰形畸变, 无法准确提取指纹图谱特征[13,35]。多数流速范围设置在 140~200 mL/min 内, 流速过低时, 离子迁移时间延长, 峰形展宽, 分辨率下降; 流速过高则会导致离子碰撞加剧, 迁移时间不稳定, 甚至出现峰分裂[16,31]。流速一般与漂移管温度成正比优化。当漂移管温度升高时, 通常需适当提高流速以平衡离子迁移速率, 如漂移管温度 65 ℃时, 流速设置为 200 mL/min[31]; 漂移管温度 45 ℃时, 流速可降至 140~150 mL/min[27,29]。

HS-GC-IMS 技术参数的选择需遵循“基质适配-化合物特性匹配-分离与效率平衡”的原则: 非极性 VOCs 优先选择非极性色谱柱, 极性成分匹配极性色谱柱; 柱温程序需兼顾高低沸点化合物的分离效果; 漂移管温度与漂移气体流速协同优化以保证离子迁移稳定性。参数设置的合理性直接决定 VOCs 的分离度、检测灵敏度及定性定量准确性, 不当参数会导致分离失效、指纹图谱失真, 影响后续化学计量学分析的可靠性[12,14]。后期研究中, 可基于农产品基质类型和目标 VOCs 特性, 建立标准化的参数优化流程, 进一步提升检测结果的重现性与可比性, 该技术可能会成为鉴别、掺假的标准方法。

2　HS-GC-IMS 指纹的特征提取

由于每次运行的变量数量很大, HS-GC-IMS 会生成大数据集。作为减少噪声信号干扰的强制性步骤, 有必要从这个复杂的数据集中提取化学差异的完整轮廓。因此, 需要适当的三维数据处理程序, 以避免在随后的多变量统计分析中出现重大错误。各种特征提取方法将在以下各节中详细讨论。

2.1　靶向标记分析方法

靶向特异性标记分析是使用 HS-GC-IMS 中常见的特征提取方法。从样本地形图中选择单个信号(标记)是该策略的基础, 并且基于对所有研究样本的地形图的检查来选择标记。QI 等[36]采用 HS-GC-IMS 和 HS-SPME-GC-MS 将不同柑桔茶的特征挥发性指纹图谱与气味活性值(odor activity values, OAVs), 结果表明, 基于 HS-GC-IMS 数据建立柑橘茶味指纹图谱, 此外, 鉴定出 68 种挥发性化合物(OAV>1), 柑橘茶香气的综合评价将指导柑橘茶风味的质量控制和批量生产。YANG 等[37]基于 GC-IMS 挥发性指纹图谱, 采用 PLSR 较好地鉴别了具有花香气、甜香气和甜花香的红茶, 在鉴定的 38 种香气化合物中, 有 15 种挥发物在 3 种芳香红茶中同时被鉴定为 OAV>1 的重要气味物质。

2.2　非靶向标记分析方法

该策略使用整个光谱指纹中包含的信息, 在这种情况下, 将考虑所有基础数据信息, 包括可能不可见的信号。一般来说, 这种方法获得的数据量非常大。将 3D 矩阵简化为 2D 矩阵后可获得数百万量级的海量数据, 为满足后续化学计量学分析需求, 需通过 PCA 对 2D 矩阵进一步降维。GERHARDT 等[35]描述了一种基于 HS-GC-IMS 结合优化的化学计量技术(即 PCA、LDA 和 KNN)对蜂蜜挥发性化合物进行非目标分析技术, 用于鉴定其植物来源, 结果表明, HS-GC-IMS 分析可以用作基于核磁共振(nuclear magnetic resonance, NMR)的蜂蜜样品分析的补充工具, 构建模型的方法可以作为其他农产品类型认证的基础。WANG 等[38]利用 HS-GC-IMS 对中华蜜蜂和意大利蜜蜂蜂蜜中的挥发性成分进行了非靶向代谢组学分析。结果表明, 所开发的非靶向和靶向代谢组学方法在区分蜜蜂和蜜蜂蜂蜜时表现良好, 1-壬醇、1-庚醇和乙酸苯乙醛被认为是中华蜜蜂蜂蜜的标记物。

目前, 一些研究比较了基于靶向和非靶向方法的样本分类的准确性。CONTRERAS 等[39]比较了峰区特征(标记)和非目标指纹方法用于橄榄油分类的研究, 以获得最稳健的模型。结果表明, 两种方法都适合 2014—2015 年和 2015—2016 年两次收获的 701 份橄榄样品样本分类(成功率为 74%)。然而, 当这些模型应用于 2015—2016 年的样本分类时, 使用峰区特征(标记)获得了更好的值。

3　GC-IMS 在农产品风味分析中的应用

如表 2 所示, 近年来, HS-GC-IMS 越来越多地应用于农产品检测的各个领域(酒、果蔬、茶叶、油脂、乳制品、蜂蜜等), 丰富的数据信息耦合适当的化学计量处理可获得较好的实验结果, 可用于后续的目标研究和机制分析。

3.1　农产品的分类与掺假

农产品的分类与掺假鉴别是农产品质量管控领域的重要研究方向, 它可以检测可能的欺诈行为, 以确保它们的质量进入不断扩大的国际市场。一般来说, 基于训练有素的专家小组测试的感官分析在农产品分类和掺假任务中是有用的, 但由于成本高, 耗时长, 重复性差, 并不总是可行的。香气成分与化学计量工具相结合可以作为一种指纹识别技术, 保护原产地产品和真实性。GARRIDO-DELGADOA 等[40]将 HS-GC-IMS 应用到 4 种不同品类白酒的分析, 通过 PCA、LDA 和 KNN 分类器对数据进行降维, 获得了最佳的分类性能, 其模型分类率最高可达 92.0%。WANG 等[33]通过 HS-GC-IMS 和化学计量学方法(PCA 和 PLS-DA)来区分不同种类的蜂蜜。结果表明, 苯甲醛二聚体和苯乙醛二聚体是冬蜜的可靠标记, 乙酸苯乙酯二聚体是安赛蜜的可靠标记, 且采用三重锁定策略分析对不同掺假比例的蜂蜜样品进行掺假鉴定。这些研究共同表明, HS-GC-IMS 的应用已从基于图谱差异的初步区分, 发展到通过鉴定关键差异 VOCs 作为标志物, 并建立定量模型的更精准阶段。这不仅提升了分类与掺假鉴别模型的解释性与稳健性, 也为应对更隐

蔽的掺假手段提供了可靠方法，标志着该技术在农产品真实性管控中正向更深入、更精准的方向发展

3.2 农产品加工过程中的挥发性代谢物

研究表明，风味可以决定农产品独特的感官价值，对农产品新鲜度和营养价值的鉴定也有一定的作用。GC-IMS 的高灵敏度和分辨率特性，在监测农产品加工过程中的挥发性代谢物的变化发挥重要作用。HU 等[28]采用 HS-GC-IMS 研究了两种不同加工方法对金桔蜜饯挥发性

表 2 GC-IMS 在农产品风味分析中的部分应用

Table 2 Some applications of GC-IMS in food flavor analysis

分析物/目的	仪器/方法	主要结论/发现	文献
白酒、分类	连续流动进样-气相色谱-紫外检测-离子迁移谱联用技术、PCA、LDA 和 KNN	独立验证集的分类率高达 92.0%	[40]
白兰地、不同年龄分类	GC-IMS、GC-MS、PLS-DA	建立了以 VIP>1 的 GC-IMS 检测到的化合物为基础的模型，且 GC-IMS 在检测性能上优于 GC-MS	[27]
啤酒花、加工质量控制	HS-GC-MS-IMS、PLSR	啤酒花挥发物特征与 α-酸含量之间具有较好的相关性	[41]
松茸、不同部位和地区	HS-GC-MS-IMS、PCA	对松茸不同部位和不同地区的样品进行了区分	[42]
松茸、不同部位和加工	HS-GC-IMS、指纹图谱	松茸不同部位和加工时期的特征成分	[16]
金桔蜜饯、不同加工	HS-GC-MS-IMS、PCA	验证了不同加工金桔及其挥发性成分的相似性和差异性	[28]
牛油果、新鲜度	HS-GC-MS-IMS、PCA	该方法在未来预测水果成熟度方面具有很大的潜力	[29]
铁观音和大红袍乌龙茶、分类	HS-GC-IMS、KNN	准确度可达 86.7%	[43]
柑桔茶、加工工艺	HS-GC-IMS 和 HS-SPME-GC-MS、指纹图谱	为不同柑橘品种的快速鉴别和溯源提供有效手段	[36]
绿茶、加工工艺	HS-GC-MS-IMS、PLS-DA	3-甲基丁醛、异丙醇、苯甲酸甲酯和庚醛对不同阶段的区分有重要作用	[24]
红茶、分类	HS-GC-MS-IMS、PLS-DA	鉴别了具有花香气、甜香气和甜花香的红茶	[37]
花生、高温储藏	HS-GC-IMS、指纹图谱	相对漂移时间约为 1.7 的 IMS 峰有很大的潜力被用作酸败指标	[44]
芝麻油、掺杂	HS-GC-IMS、正则化支持向量机	建立的判别模型对掺伪香油样品(10%)的识别准确率为 94.2%	[31]
茶籽油、加工	电子鼻、HS-SPME-GC-MS、HS-GC-IMS、指纹图谱	不同微波时间茶籽油的特征性挥发成分	[45]
乳酸菌、分类	HS-GC-IMS、指纹图谱	2-丁酮、2-戊酮、2-庚酮和 3-甲基-1-丁醇是干酪乳杆菌和类干酪乳杆菌的相关挥发性有机化合物等	[46]
牦牛奶粉、加工	HS-GC-IMS、PCA 和欧氏距离	喷雾干燥法加工的牦牛奶粉中酮类、醛类和酸类的含量高于冷冻法加工的牦牛奶粉	[32]
牛奶、加工	HS-GC-IMS、指纹图谱和 PLS-DA	区分发酵温度的挥发性代谢物有己醛、丁醛、乙酸乙酯、乙醇、3-甲基丁醛、3-甲基丁酸和 2-甲基丙酸等	[47]
蜂蜜、分类	HS-GC-IMS、PCA 和 PLS-DA	采用三重锁定策略分析对不同掺假比例的蜂蜜样品进行掺假鉴定	[33]
蜂蜜、认证	HS-GC-IMS、PCA、LDA 和 KNN	可以用作基于 NMR 的蜂蜜样品分析的补充工具	[35]
蜂蜜、区分	HS-GC-IMS、PCA 和 PLS-DA	所开发的非靶向和靶向代谢组学方法在区分蜂蜜时表现良好	[38]
曲霉属细菌感染精米、农产品腐败	HS-GC-IMS、PCA、KNN 和 PLSR	建立快速、无损、高效的稻米真菌检测系统提供了科学依据	[48]
酸枣、储藏	HS-GC-IMS、指纹图谱、PCA 和 HCA	根据挥发性成分的不同对不同时期的红枣果实进行分类	[49]
鱼肌肉、储藏	HS-GC-IMS、指纹图谱	鉴定出鱼肌肉新鲜/腐败的腐败标记物(如 1-丙醇、丁酮、2-己酮等)	[34]
白面包口感加工、其他	HS-GC-IMS、指纹图谱、时序优势感官评价法和 PLSR	确定了丁酸乙酯、乙酸丁酯、己醛、3-甲硫基-丙醛、3-甲基丁醛和 2, 3-丁二酮是影响白面包咀嚼香气的主要香气物质	[50]

成分的影响, 利用三维地形图建立了桔蜜饯指纹图谱, 且 PCA 分析表明, 分布在不同空间内的样品可以很好地区分, 以及通过热图 HCA 验证了不同加工金桔及其挥发性成分的相似性。GUO 等[47]基于 HS-GC-IMS 分析的代谢组学用于区分不同时间节点和发酵温度对嗜热链球菌发酵牛奶的挥发性成分的影响。结果表明, 不同的发酵温度影响挥发性代谢特征, 可用来区分发酵温度的挥发性代谢物有己醛、丁醛、乙酸乙酯、乙醇、3-甲基丁醛、3-甲基丁酸和 2-甲基丙酸。综上所述, GC-IMS 结合多维统计方法能够实现农产品加工过程挥发性代谢物的有效鉴别与分型, 为产品品质控制和工艺优化提供了可靠技术支撑。

3.3　农产品新鲜度、腐败程度以及异味检测的评价

培养基中微生物种类的气味识别是前期研究的重点, 许多研究人员也在研究如何以非破坏性方式及时检测农产品中的微生物污染。农产品通常由复杂的成分组成, 当微生物开始在营养丰富的农产品中繁殖时, 它们可以分解农产品成分并产生各种自排放的挥发性有机化合物。GALLEGOS 等[46]利用 GC-IMS 通过目标识别和挥发性代谢物指纹图谱鉴别 4 种乳酸菌的潜力, 结果表明, 2-丁酮、2-戊酮、2-庚酮和 3-甲基-1-丁醇是干酪乳杆菌和类干酪乳杆菌的相关挥发性有机化合物, 而在乳酸乳球菌和乳脂链球菌中鉴定出 2-丁酮和 3-甲基-1-丁醇。GU 等[48]利用 HS-GC-IMS 和电子鼻结合 PCA、KNN 和 PLSR 等化学计量学方法研究了曲霉属细菌感染精米的快速检测方法。结果表明, HS-GC-IMS 和电子鼻方法均可用于精米中真菌污染水平的检测, HS-GC-IMS 指纹图谱与化学计量学相结合可作为一种高灵敏度方法的替代工具, 该研究为建立快速、无损、高效的稻米真菌检测系统提供了科学依据。综合来看, GC-IMS 及其数据分析方法能够高效、无损地评价农产品新鲜度和微生物污染, 为产品质量控制和食品安全检测提供了坚实的技术支撑。

3.4　农产品储存过程中挥发性成分的变化

GC-IMS 还被用来研究不同储存时间农产品中香气化合物的变化。YANG 等[49]采用 HS-GC-IMS 对 4 种酸枣不同冷藏间下的挥发性成分进行分析, 结果表明, 共鉴定 47 个化合物, 主要为醇、醛、酯、酮等, 且地形图和指纹图谱可以很容易地识别出酸枣果实中的挥发性成分, 并利用 PCA 和 HCA 根据挥发性成分的不同对不同时期的红枣果实进行分类。JIA 等[34]给冷藏鲢鱼接种了 3 种优势菌, 并在 4 ℃下保存 14 d, 利用 HS-GC-IMS 对鱼肌肉中的 VOCs 进行了测定。共检测出 25 种 VOCs, 并鉴定出鱼肌肉新鲜/腐败的腐败标记物(如 1-丙醇、丁酮、2-己酮等), 这项研究有助于更好地了解鲢鱼的腐败情况以及腐败监测的发展。TZSCHOPPE 等[44]评价 GC-IMS 在高温贮藏花生中挥发性变质指标检测中的适用性。结果表明, 自氧化水平显著影响特定漂移区域的信号强度, 在相对漂移时间约为 1.7 的 IMS 峰有很大的潜力被用作酸败指标。综上, GC-IMS 能够高效分辨并动态追踪不同农产品在储存期内的挥发性成分变化, 提升了腐败监测与质量评价的科学性和准确性。

3.5　其他领域方向

GC-IMS 也被用于表征动态农产品加工过程中的香气释放和感知, 研究了白面包咀嚼过程中的口腔崩解、感官特性和挥发性物质的释放。PU 等[50]采用 GC-IMS 和时序优势感官评价法研究了白面包口感加工过程中香气的释放和感知, 根据 PLSR 分析, 8 种香气化合物被预测为对咀嚼白面包的香气感觉有贡献的 8 种香气化合物, 通过气味活力值分析和添加实验, 确定了丁酸乙酯、乙酸丁酯、己醛、3-甲硫基-丙醛、3-甲基丁醛和 2,3-丁二酮是影响白面包咀嚼香气的主要香气物质。该研究展示了 GC-IMS 在动态、实时风味分析中的独特优势, 其与感官评价方法的结合, 不仅实现了对关键香气物质的精准识别, 更揭示了加工过程中香气释放的时序规律。

4　结束语

HS-GC-IMS 技术在常见农产品(酒、果蔬、茶叶、油脂、乳制品、蜂蜜等)得到广泛应用, 其在农产品领域的 VOCs 分析方面具有如下明显的优势: (1)检测限更低, 灵敏度非常高, 适于痕量组分的分析; (2)无须真空系统, 在大气压条件下即可工作; (3)样品无须复杂的浓缩富集便可进样检测, 有利于保持风味物质的稳定性; (4)体积小, 检测速度快, 可用于现场快速检测。然而, GC-MS 仍然是农产品风味分析仪器的金标准, GC-IMS 目前无法取代它。目前, HS-GC-IMS 最具挑战性的方面之一是未知化合物的鉴定, 由于目前的 HS-GC-IMS 数据库不足, 一些挥发性物质无法鉴定。因为 IMS 响应是非线性的, 因此作为 GC 检测器在精确定量分析方面存在局限性, 这意味着提供十亿分之一体积和万亿分之一体积水平的浓度可能会带来挑战。GC-IMS 的未来发展方向应该是建立完整的 HS-GC-IMS 数据库, 以实现快速、灵敏、自动的表征。GC-IMS 的未来发展方向应该是建立完整的 HS-GC-IMS 数据库, 以实现快速、灵敏、自动的表征。针对数据库建设, 建议以多中心协作的模式, 制定统一的样品前处理、检测及数据标准, 鼓励企业和科研机构共同参与数据库的原始数据采集、标准品入库及公开共享平台的搭建, 从而加速数据库的丰富与完善。同时, 还应逐步引入人工智能算法, 实现对大规模光谱数据的自动标注和快速检索, 提高未知组分解析效率。

GC-IMS 也可以与其他检测技术连接使用, 例如将二维气相色谱法和 IMS 相结合, 可以提高分辨率, 其形成的四维解析可以获得包括 2 组保留时间、漂移时间和离子强

度在内的信息，从而可以分析非常复杂的农产品基质。今后建议加强与二维 GC 法、高分辨质谱法等技术的协同联用，通过开发标准化的接口和数据融合算法，构建一体化的高通量风味物质检测平台，以显著提升复杂基质下的分离鉴定能力，使其适应实际生产和溯源鉴别的需求。HS-GC-IMS 是一种重要的分析手段，未来随着数据库的完善和其他技术的联合使用，可使其在农产品风味检测领域中获得广泛的数据，可用于相近产地的识别，未来其在农产品的风味检测领域可能会发挥越来越重要的作用。

参考文献

[1] HUI H, LI L, MICHAEL ON. Recent developments in hyperspectral imaging for assessment of food quality and safety [J]. Sensors, 2014, 14(4): 7248–7276.

[2] MAIMUNAH MA, NORHASHILA H, SAMSUZANA AA, *et al*. Principles and recent advances in electronic nose for quality inspection of agricultural and food products [J]. Trends in Food Science & Technology, 2020, 99: 1–10.

[3] SCHIEBERLEP. New developments in methods for analysis of volatile flavor compounds and their precursors [J]. Characterization of Food, 1995: 403–431. DOI:10.1016/B978-044481499-9/50018-4

[4] LINFORTH TA, LINFORTH RT. Associations of volatile compounds with sensory aroma and flavor: The complex nature of flavor [J]. Critical Reviews in Food Science and Nutrition, 2013, 53(11): 1129-1146.

[5] JIANG KX, XU KL, WANG J, *et al*. 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(15): 136257.

[6] SHEN C, CAI Y, WU XN, *et al*. Based on HS-SPME-GC-MS combined with GC-O-MS to analyze the changes of aroma compounds in the aging process of citri reticulatae pericarpium [J]. Food Bioscience, 2023, 54: 102798.

[7] MD G, LOONG CL, HUKIL S, *et al*. Review of contemporary chemometric strategies applied on preparing GC–MS data in forensic analysis [J]. Microchemical Journal, 2022, 181: 107732.

[8] IEDA T, HASHIMOTO S. GC×GC and computational strategies for detecting and analyzing environmental contaminants [J]. TrAC Trends in Analytical Chemistry, 2023, 165: 117118.

[9] SONG HL, LIU JB. GC-O-MS technique and its applications in food flavor analysis [J]. Food Research International, 2018, 114: 187–198.

[10] VAGIN MY, WINQUIST F. Electronic noses and tongues in food safety assurance [J]. High Throughput Screening for Food Safety Assessment, 2015: 265–283. DOI:10.1016/B978-0-85709-801-6.00011-3

[11] KARPAS Z. Applications of ion mobility spectrometry (IMS) in the field of foodomics [J]. Food Research International, 2013, 54(1): 1146–1151.

[12] GU S, ZHANG J, WANG J, *et al*. Recent development of HS-GC-IMS technology in rapid and non-destructive detection of quality and contamination in agri-food products [J]. TrAC Trends in Analytical Chemistry, 2021, 144: 116435.

[13] WANG S, CHEN H, SUN B. Recent progress in food flavor analysis using gas chromatography–ion mobility spectrometry (GC–IMS) [J]. Food Chemistry, 2020, 315: 126158.

[14] MEDINA S, PERESTRELO R, SILVA P, *et al*. Current trends and recent advances on food authenticity technologies and chemometric approaches [J]. Trends in Food Science & Technology, 2019, 85: 163–176.

[15] 李凤林, 向思敏, 李静, 等. 基于顶空-气相色谱-离子迁移谱法分析不同类型精酿啤酒的挥发性香气成分[J]. 食品安全质量检测学报, 2023, 14(7): 305–314.
LI FL, XIANG SM, LI J, *et al*. Analysis of volatile aroma components in different types of craft beer based on headspace-gas chromatography-ion mobility spectrometry [J]. Journal of Food Safety & Quality, 2023, 14(7): 305–314.

[16] GUO Y, CHEN D, DONG Y, *et al*. Characteristic volatiles fingerprints and changes of volatile compounds in fresh and dried *Tricholoma matsutake* singer by HS-GC-IMS and HS-SPME-GC-MS [J]. Journal of Chromatography, B. Analytical Technologies in the Biomedical and Life Sciences, 2018, 1099: 46–55.

[17] LIU H, XU Y, WU J, *et al*. GC-IMS and olfactometry analysis on the tea aroma of Yingde black teas harvested in different seasons [J]. Food Research International, 2021, 150: 110784.

[18] JURADO-CAMPOS N, ARROYO-MANZANARES N, VIÑAS P, *et al*. Quality authentication of virgin olive oils using orthogonal techniques and chemometrics based on individual and high-level data fusion information [J]. Talanta, 2020, 219: 121260.

[19] ZHAO XQ, CHENG M, WANG CF, *et al*. Effects of dairy bioactive peptides and lotus seeds/lily bulb powder on flavor and quality characteristics of goat milk yogurt [J]. Food Bioscience, 2021, 47: 101510.

[20] MARÍA J, MARTA FG, ESPADA-BELLIDO E, *et al*. Novel method based on ion mobility spectroscopy for the quantification of adulterants in honeys [J]. Food Control, 2020, 114: 107236.

[21] KIM J, LEE S, PARK H. Effects of lemongrass essential oil on key aromas of pickled radish during storage using HS-GC-IMS and *in silico* approaches [J]. Journal of Agricultural and Food Chemistry, 2025, 73(45): 14007–14018.

[22] ZHANG Y, WANG L, LI M. Combination of GC-IMS and nano-LC/HRMS reveals the mechanism of superheated steam glycosylation modification in improving oyster peptide flavor [J]. Foods, 2026, 15(2): 236.

[23] JIANG H, LIU J, ZZHAO X. Development of a flavor fingerprint using HS-GC-IMS for volatile compounds from steamed potatoes of different varieties [J]. PLoS One, 2025, 20(7): e0252913.

[24] CHEN X, LI Y, ASIMI SM. Research progress and application prospects of GC-IMS in grain and oil processing: Analysis based on volatile organic compounds (VOCs) fingerprinting [J]. International Journal of Food Science and Agriculture, 2025, 10(3): 45–62.

[25] LI W, LIU A, ZHANG S. Authentication and adulteration detection of saffron (*Crocus sativus* L.) using headspace-gas chromatography-ion mobility spectrometry (HS-GC-IMS) and untargeted volatilomics with multivariate curve resolution [J]. Food Chemistry, 2025, 489: 133125.

[26] ZHONG K, LI J, CHEN H. Comparative analysis of the aroma characteristics of three different cultivars of guavas under different storage conditions using HS-SPME-GC–MS and HS-GC-IMS [J]. Food Chemistry: X, 2025, 18: 101028.

[27] LI S, YANG H, TIAN H, *et al*. Correlation analysis of the age of brandy

and volatiles in brandy by gas chromatography-mass spectrometry and gas chromatography-ion mobility spectrometry [J]. Microchemical Journal, 2020, 157: 104948.

[28] HU X, WANG R, GUO J, *et al*. Changes in the volatile components of candied kumquats in different processing methodologies with headspace–gas chromatography–ion mobility spectrometry [J]. Molecules, 2019, 24(17): 3053.

[29] LIU Y, BU M, GONG X, *et al*. Characterization of the volatile organic compounds produced from avocado during ripening by gas chromatography ion mobility spectrometry [J]. Journal of the Science of Food and Agriculture, 2021, 101(2): 666–672.

[30] YANG YQ, CHEN JY, JIANG YW, *et al*. Aroma dynamic characteristics during the drying process of green tea by gas phase electronic nose and gas chromatography-ion mobility spectrometry [J]. LWT-Food Science and Technology, 2021, 154(15): 112691.

[31] ZHANG LX, SHUAI Q, LI PW, *et al*. Ion mobility spectrometry fingerprints: A rapid detection technology for adulteration of sesame oil [J]. Food Chemistry, 2016, 192: 60–66.

[32] FENG D, WANG J, JI XJ, *et al*. HS-GC-IMS detection of volatile organic compounds in yak milk powder processed by different drying methods [J]. LWT-Food Science and Technology, 2021, 141: 110855.

[33] WANG X, YANG S, HE J, *et al*. A green triple-locked strategy based on volatile-compound imaging, chemometrics, and markers to discriminate winter honey and sapium honey using headspace gas chromatography-ion mobility spectrometry [J]. Food Research International, 2019, 119(3): 960–967.

[34] JIA S, LI Y, ZHUANG S, *et al*. Biochemical changes induced by dominant bacteria in chill-stored silver carp (*Hypophthalmichthy smolitrix*) and GC-IMS identification of volatile organic compounds [J]. Food Microbiology, 2019, 84103248. DOI: 10.1016/j.fm.2019.103248

[35] 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 1H NMR profiling for assessment of the authenticity of honey [J]. Analytical Chemistry, 2018, 90(3): 1777.

[36] QI H, DING S, PAN Z, *et al*. Characteristic volatile fingerprints and odor activity values in different citrus-tea by HS-GC-IMS and HS-SPME-GC-MS [J]. Molecules, 2020, 25(24): 6027.

[37] YANG YQ, ZHU HK, CHEN JY, *et al*. Characterization of the key aroma compounds in black teas with different aroma types by using gas chromatography electronic nose, gas chromatography-ion mobility spectrometry, and odor activity value analysis [J]. LWT-Food Science and Technology, 2022, 163(15): 113492.

[38] WANG X, ROGERS KM, LI Y, *et al*. Untargeted and targeted discrimination of honey collected by apis cerana and apis mellifera based on volatiles using HS-GC-IMS and HS-SPME-GC-MS [J]. Journal of Agricultural and Food Chemistry, 2019, 67(43): 12144–12152.

[39] CONTRERAS M, ARROYO-MANZANARES N, JURADO-CAMPOS N, *et al*. Authentication of virgin olive oils by headspace gas chromatography-ion mobility spectrometry (HS-GC-IMS) combined with chemometrics [J]. Food Chemistry, 2020, 319: 126654.

[40] GARRIDO-DELGADO R, ARCE L, GUAMÁN AV, *et al*. Direct coupling of a gas–liquid separator to an ion mobility spectrometer for the classification of different white wines using chemometrics tools [J]. Talanta, 2011, 84: 471–479.

[41] BRENDEL R, SCHWOLOW S, ROHN S, *et al*. Gas-phase volatilomic approaches for quality control of brewing hops based on simultaneous GC-MS-IMS and machine learning [J]. Analytical and Bioanalytical Chemistry, 2020, 412(26): 7085–7097.

[42] LI M, YANG R, ZHANG H, *et al*. Development of a flavor fingerprint by HS-GC–IMS with PCA for volatile compounds of *Tricholoma matsutake* singer [J]. Food Chemistry, 2019, 290: 32–39.

[43] JIN J, ZHAO M, ZHANG N, *et al*. Stable isotope signatures versus gas chromatography-ion mobility spectrometry to determine the geographical origin of Fujian Oolong tea (*Camellia sinensis*) samples [J]. European Food Research and Technology, 2020, 246(5): 955–964.

[44] TZSCHOPPE M, HAASE H, MICHAELA H, *et al*. Using ion mobility spectrometry for screening the autoxidation of peanuts [J]. Food Control, 2016, 64: 17–21.

[45] HE J, WU X, YU Z. Microwave pretreatment of camellia (*Camellia oleifera* Abel.) seeds: Effect on oil flavor [J]. Food Chemistry, 2021, 364(2): 130388.

[46] GALLEGOS J, ARCE C, JORDANO R, *et al*. Target identification of volatile metabolites to allow the differentiation of lactic acid bacteria by gas chromatography-ion mobility spectrometry [J]. Food Chemistry, 2017, 220(1): 362–370.

[47] GUO S, WU T, PENG C, *et al*. Metabolic footprint analysis of volatile metabolites by gas chromatography-ion mobility spectrometry to discriminate between different fermentation temperatures during *Streptococcus thermophilus* milk fermentation [J]. Journal of dairy science, 2021, 104(8): 8541–8553.

[48] GU S, CHENW, WANGZ, *et al*. Rapid detection of *Aspergillus* spp. infection levels on milled rice by headspace-gas chromatography ion-mobility spectrometry (HS-GC-IMS) and E-nose [J]. LWT, 2020, 132(prepublish). DOI: 10.1016/j.lwt.2020.109832

[49] YANG L, LIU J, WANG X, *et al*. Characterization of volatile component changes in jujube fruits during cold storage by using headspace-gas chromatography-ion mobility spectrometry [J]. Molecules, 2019, 24(21): 3904–3904.

[50] PU D, ZHANG H, ZHANG Y, *et al*. Characterization of the aroma release and perception of white bread during oral processing by gas chromatography-ion mobility spectrometry and temporal dominance of sensations analysis [J]. Food Research International, 2019, 123: 612–622.

(责任编辑: 蔡世佳　安香玉)