张涛, 黄晨, 郭德军, 等. 基于 GC-IMS 结合化学模式识别分析的广西主栽品种澳洲坚果干燥过程挥发性物质评价 [J]. 食品工业科技, 2026, 47(12): 315−328. doi: 10.13386/j.issn1002-0306.2025050097

ZHANG Tao, HUANG Chen, GUO Dejun, et al. Evaluation of Volatile Substances in the Drying Process of *Macadamia* Nuts of Guangxi's Main Cultivars Based on GC-IMS Combined with Chemical Pattern Recognition Analysis[J]. Science and Technology of Food Industry, 2026, 47(12): 315−328. (in Chinese with English abstract). doi: 10.13386/j.issn1002-0306.2025050097

· 分析检测 ·

基于 GC-IMS 结合化学模式识别分析的广西主栽品种澳洲坚果干燥过程挥发性物质评价

张　涛[1], 黄　晨[2], 郭德军[2], 宋海云[1], 贺　鹏[1,*], 陈　茜[1], 涂行浩[3], 谭秋锦[1,*]

（1.广西农业科学院广西南亚热带农业科学研究所, 广西龙州 532415;
2.北部湾大学食品工程学院, 广西钦州 535011;
3.中国热带农业科学院南亚热带作物研究所, 广东湛江 524091）

摘　要: 为筛选适宜的澳洲坚果带壳果干燥条件并初步探索干燥过程中挥发性物质的形成机制，为澳洲坚果初加工过程的品质控制提供理论参考。以广西 6 个主栽澳洲坚果品种‘桂热 1 号’（以下简称 1HAO）、695、OC、H2、A38、A16 为试验材料，采用气相色谱-离子迁移谱联用技术（gas chromatography-ion mobility spectrometry，GC-IMS）对 40 ℃ 处理组（40 ℃ 干燥 1 周）、50 ℃ 处理组（50 ℃ 干燥 96 h）、60 ℃ 处理组（60 ℃ 干燥 48 h）三种干燥处理的澳洲坚果样品的挥发性有机物质进行检测分析，并结合化学模式识别、感官评价以及 ROAV 分析解析干燥过程产生的挥发性组分，探究不同品种间挥发性组分的差异。结果表明：三种干燥处理共定性检出 32 种挥发性成分，包括 11 种醇类、7 种醛类、5 种酮类、1 种酸类、6 种酯类及 2 种其他物质，其中醇类和酮类含量较高，醛类含量较低。方差分析显示，酯类在三种处理间存在显著差异（P<0.05），其余类别在不同处理间差异程度不一。结合挥发性组分特征及前人研究，推测干燥过程中挥发性物质主要来源于脂质氧化和酶促反应。具有奶油香气的关键风味物质 2,3-丁二酮在 40 ℃ 处理组与 50 ℃、60 ℃ 处理组间存在显著差异，而 50 ℃ 与 60 ℃ 处理组间无显著差异。感官评价与能耗分析表明，50 ℃ 处理在改善坚果质地、香气及整体可接受性方面效果最佳，且未引起明显不良风味。因此，综合品质与能耗因素，确定 50 ℃ 干燥 96 h 为带壳澳洲坚果的最优干燥工艺。基于该条件下 GC-IMS 数据，结合化学模式识别与 ROAV 分析，进一步筛选出 8 种特征挥发性组分，其中异丁醇、异戊醇和乙酸为整体风味贡献较大的关键化合物。OPLS-DA 结合聚类热图以及方差分析显示乙酸为 A38 的特征性组分，2,5-二甲基呋喃为 1HAO 和 OC 所共有的特征性组分，乙酸乙酯、异丁醇和丙醇为 H2 的特征性组分，异戊醇为 695 的特征性组分，乙醇为 A16 的特征性组分，异丙醇为 OC 的另一特征性组分。不同品种澳洲坚果因内含物质（如糖和氨基酸）含量的差异，可能在干燥过程中通过不同代谢途径影响挥发性物质的生成。然而，挥发性组分与内在成分之间的具体关联仍需从代谢途径层面开展更深入的机制研究。

关键词: 澳洲坚果, GC-IMS, 化学模式识别, 干燥过程, 挥发性物质评价

中图分类号: S664.9　　**文献标识码:** A　　**文章编号:** 1002−0306(2026)12−0315−14

DOI: 10.13386/j.issn1002-0306.2025050097

本文网刊:

Evaluation of Volatile Substances in the Drying Process of *Macadamia* Nuts of Guangxi's Main Cultivars Based on GC-IMS Combined with Chemical Pattern Recognition Analysis

收稿日期: 2025−05−14

基金项目: 广西自然科学基金面上项目（2023GXNSFAA026499）; 广西农业科学院科技先锋队专项行动计划项目（桂农科盟 202504）; 中国热带农业科学院国家热带农业科学中心科技创新团队项目（CATASCXTD202512）; 广西南亚热带农业科学研究所稳定资助科研团队项目（NYS2025ST01）; 广西农业科学院基本科研业务专项项目（桂农科 2021YT156）。

作者简介: 张涛（1986−）, 男, 硕士, 副研究员, 研究方向: 热带亚热带水果加工及其副产物综合利用, E-mail: zhangtaohjs@163.com。

*** 通信作者:** 贺鹏（1990−）, 男, 硕士, 高级农艺师, 研究方向: 果品加工与贮藏, E-mail: 727250894@qq.com。

谭秋锦（1986−）, 女, 硕士, 研究员, 研究方向: 热带果树遗传育种与栽培, E-mail: 13481146175@163.com。

ZHANG Tao[1], HUANG Chen[2], GUO Dejun[2], SONG Haiyun[1], HE Peng[1,*], CHEN Xi[1], TU Xinghao[3], TAN Qiujin[1,*]

(1.Guangxi South Subtropical Agricultural Scientific Research Institute, Guangxi Academy of Agricultural Sciences, Longzhou 532415, China;
2.College of Food Engineering, Beibu Gulf University, Qinzhou 535011, China;
3.South Subtropical Crops Research Institute, Chinese Academy of Tropical Agricultural Sciences, Zhanjiang 524091, China)

Abstract: This study aimed to identify optimal drying conditions for shelled *Macadamia* nuts and to investigate the mechanisms underlying the formation of volatile compounds during the drying process, thereby offering a theoretical framework for quality control in the initial processing of *Macadamia* nuts. The study utilized six primary varieties of Australian *Macadamia* nuts cultivated in Guangxi—namely 'Gui Re 1' (designated as 1HAO), 695, OC, H2, A38, and A16—as experimental subjects. Gas chromatography-ion mobility spectrometry (GC-IMS) was employed to detect and analyze the volatile organic compounds present in *Macadamia* nuts subjected to drying at 40 ℃ for one week, 50 ℃ for 96 hours, and 60 ℃ for 48 hours. The volatile components generated during the drying process were examined through the integration of chemical pattern recognition, sensory evaluation, and relative odor activity value (ROAV) analysis, with the aim of elucidating the differences in volatile components among the various nut varieties. The analysis identified a total of 32 volatile compounds across the three drying treatments, comprising 11 alcohols, 7 aldehydes, 5 ketones, 1 acid, 6 esters, and 2 additional substances. Notably, the concentrations of alcohols and ketones were higher, whereas the aldehydes were present in lower concentrations. The analysis of variance revealed statistically significant differences (P<0.05) in ester concentrations across the three treatments. However, the extent of differences in other categories varied among the treatments. Drawing on the characteristics of volatile components and existing literature, it was hypothesized that the volatile substances produced during the drying process primarily originated from lipid oxidation and enzymatic reactions. The principal flavor compound, 2,3-butanedione, known for its creamy aroma, exhibited significant differences between the 40 ℃ treatment group and the 50 ℃ and 60 ℃ treatment groups. However, no significant difference was observed between the 50 ℃ and 60 ℃ treatment groups. Sensory evaluation and energy consumption analysis indicated that the 50 ℃ treatment most effectively enhanced the texture, aroma, and overall acceptability of the nuts, without introducing significant adverse flavors. Consequently, when considering both quality and energy consumption factors, the optimal drying process for shelled *Macadamia* nuts was identified as 96 hours at 50 ℃. Utilizing the GC-IMS data under this condition, combined with chemical pattern recognition and ROAV analysis, eight distinctive volatile components were identified. Among these, isobutanol, isoamyl alcohol, and acetic acid emerged as the principal compounds that significantly influenced the overall flavor profile. Through the application of OPLS-DA, in conjunction with clustering heatmaps and analysis of variance, it has been demonstrated that acetic acid was a distinctive component of A38. Similarly, 2,5-dimethylfuran was identified as a shared characteristic component of both 1HAO and OC. The compounds ethyl acetate, isobutanol, and propanol were distinctive to H2, while isoamyl alcohol was specific to 695, ethanol to A16, and isopropanol to OC. The generation of volatile compounds during the drying process of various *Macadamia* nut varieties may be influenced by distinct metabolic pathways, which were in turn affected by variations in the internal content of substances such as sugars and amino acids. Nonetheless, the precise relationship between volatile components and intrinsic substances necessitated further investigation at the level of metabolic pathways.

Key words: *Macadamia*; GC-IMS; chemical pattern recognition; drying process; evaluation of volatile substances

澳洲坚果(*Macadamia integrifolia*),又名夏威夷果、昆士兰坚果,为山龙眼科(Proteaceae)澳洲坚果属(*Macadamia* F. Muell.)热带、亚热带多年生的常绿乔木果树[1−2]。目前已在云南、广西、广东等地大面积种植,我国澳洲坚果种植面积已位居世界第一位,现已被国家列入特色木本粮油推广种植树种[3]。近年来广西多地出台相关支持政策,将澳洲坚果作为特色产业大力发展,澳洲坚果已成为广西喀斯特石漠化地区的重要收入来源和实现乡村振兴的主要途径[4]。澳洲坚果带壳果的干燥处理是澳洲坚果初加工的关键环节,是后续加工获得优质原料的基础,因此开展澳洲坚果带壳果干燥处理相关研究对延长产业链、促进产业健康发展意义重大。

坚果类产品的最终风味受到果实生长和成熟过程中生成的挥发性化合物的影响。在果实收获后的贮藏以及加工过程中,挥发性组分会进一步地发生变化,从而影响加工产品的感官品质[5]。挥发性有机化合物(volatile organic compounds, VOCs)的前体主要是果实中存在的脂肪酸、碳水化合物和氨基酸等[6]。研究显示澳洲坚果果仁中含有油脂、糖类、蛋白质、游离脂肪酸与氨基酸,油脂平均含量在 70% 左右[7],其油脂富含单不饱和脂肪酸,主要是油酸和棕榈油酸[8−9],且不同品种、产区间的澳洲坚果所含脂肪酸的种类相似,但是含量存在一定差异[10]。因此澳洲坚

果果仁中含有生成挥发性有机化合物的各种前体物质。尤其是坚果的主要成分脂类，其含量及脂肪酸组成对坚果焙烤后香气的感官特征有着重要影响[11]。坚果的香气及特征风味主要由挥发性有机化合物（volatile organic compounds，VOCs）的相互作用而形成，不仅与浓度和味道特征有关，还与阈值密不可分[12]，通过计算气味活性值（odor activity value，OAV）和相对气味活度值（relative odor activity values，ROAV）可以较好地判断该 VOCs 是否为关键香气活性物质[13]。这一分析方法已广泛应用于茶叶[14−15]、乳制品[16] 等关键挥发性物质分析。

离子迁移谱（ion mobility spectrometry，IMS）通过利用不同气相离子在电场中迁移率的差异来进行痕量化合物的检测、鉴别及监测[17]。气相色谱-离子迁移谱联用（GC-IMS）技术结合了气相色谱高分离度和离子迁移谱高灵敏度的优势，可快速检测样品中的痕量挥发性有机化合物，广泛应用于各类食品风味物质的检测分析[18−22]。化学模式识别（chemical pattern recognition，CPR）是利用统计学、信号处理、数学等工具从化学量测数据中找出样本的特征，进而将原始数据集中差异性信息提取并对样本进行识别和归类的化学计量学方法[23]。化学模式识别按照有无训练可划分为无监督模式识别和有监督模式识别方法。两者的本质区别在于是否对实验样本所属的类别进行预先分类[24]。前者只有样本的数据但样本的类别（属性、特征）未知，通过样本本身的数据信息实现分类，包括聚类分析（cluster analysis，CA）、主成分分析（principal component analysis，PCA）等；后者是用一组已知类别的样本作为训练集建立分类模型，或称类模型，然后再利用模型对待测样本的类别进行预测，包括簇类独立软模式法（soindependent modeling of class analogy，SIMCA）、判别分析（discriminant analysis，DA）、偏最小二乘法-判别分析（partial least squares discriminant analysis，PLS-DA）、人工神经网络（artificial neural networks，ANNS）等[24−25]。已广泛应用于食品、中草药等的品质评价[23−27]。

生干的澳洲坚果原料几乎没有任何特征香气，但经过焙烤后果仁会呈现典型的奶油香味，可能就是焙烤过程导致某些特征风味化合物物质的形成或增加所致[28]。国外有学者研究表明焙烤可以显著提升澳洲坚果果仁品质，同时对果仁蔗糖、葡萄糖和果糖成分影响最小，还可以获得更佳的产品货架期[29−32]。国内研究则更深入地探讨了焙烤引发的物质变化规律及其机制。研究发现，焙烤过程中产生的吡嗪类等挥发性物质可作为焙烤程度的标志；同时，焙烤虽会引起脂质变化，但也能显著提升多酚的生物利用度并增强果仁的氧化稳定性[33−35]。可见，烘烤有助于澳洲坚果品质的提升，但现阶段国内外研究主要集中在高温短时烘烤对澳洲坚果果仁感官以及挥发性组分的影响，作为澳洲坚果初加工关键阶段的带壳果干燥过程挥发性组分的产生却未见报道，而开展澳洲坚果带壳果干燥过程挥发性组分研究，对选择合适的干燥处理条件，以获得高品质澳洲坚果果仁原料至关重要。故本研究以广西 6 个主栽品种澳洲坚果为试验样品，采用 GC-IMS 对不同干燥处理下的澳洲坚果的挥发性有机物质进行检测分析，并结合化学模式识别解析干燥过程产生的挥发性组分，探究不同品种间挥发性组分的差异，确定澳洲坚果带壳果合适的干燥处理条件，初步探索干燥过程澳洲坚果挥发性物质的产生机制，以期为澳洲坚果初加工过程的品质控制提供理论参考。

1　材料与方法

1.1　材料与仪器

‘桂热 1 号’（以下简称 1HAO）、695、OC、H2、A38、A16　广西主栽品种澳洲坚果样品：2024 年果实成熟期（8 月下旬至 9 月上旬）于广西南亚热带农业科学研究所澳洲坚果资源圃采摘获得。

AFTP-6.0 澳洲坚果脱皮机、AFPK-6.0 澳洲坚果破壳机　奥福智能装备股份有限公司；FR2202CN 电子分析天平　奥豪斯仪器有限公司；FD53 恒温烘箱　德国 Binder 公司；GC-IMS　德国 G.A.S 公司；CTC-PAL 自动顶空进样装置　瑞士 CTC Analytics 公司。

1.2　实验方法

1.2.1　样品前处理　采摘获得的 6 个广西主栽品种澳洲坚果样品，脱去外层青皮后得到带壳果，清洗干净后摊晾于晾果架上，并置于阴凉通风处备用。

1.2.2　样品干燥处理　6 个品种澳洲坚果带壳果，每个品种进行三组干燥试验，每组 50 个坚果。40 ℃ 处理组：40 ℃ 干燥 1 周（7 d）；50 ℃ 处理组：50 ℃ 干燥 96 h（4 d）；60 ℃ 处理组：60 ℃ 干燥 48 h（2 d），至果仁水分 3.5% 左右。每组坚果干燥结束即进行下一步分析试验。

1.2.3　GC-IMS 分析　通过 GC-IMS 技术测定不同品种不同干燥处理的挥发性风味物质，参照周春红等[36] 的研究方法与条件，并进行改良，具体实验方法如下：

不同品种澳洲坚果经不同干燥处理后的带壳果经破壳机处理获得果仁，然后利用研钵将果仁样品碾碎，使用精密度为 0.01 g 的电子天平，分别称取 1.00 g 不同坚果样品于 20 mL 顶空瓶中，在 80 ℃ 条件下顶空孵育 15 min 后进样。顶空进样的体积为 500 μL；进样针温度为 85 ℃；孵化转速为 500 r/min。每份样品做 3 组平行实验。

GC 条件：MXT-WAX（15 m×0.53 mm×1 μm）；柱温：60 ℃；载气：高纯 N_2，纯度≥99.999%；运行时间：30 min；气体流量：载气起始流速 2 mL/min，保持 2 min 后，18 min 内线性增至 100 mL/min，漂移气持续 20 min 保持 150 mL/min 的流速。

IMS 条件：漂移管长度 9.8 cm；管内线性电压 400 V/cm；温度 45 ℃；漂移气流速 150 mL/min(N_2，纯度≥99.99%)。

GC-IMS 数据分析：使用仪器自带的 VOCal 软件和插件进行结果分析。VOCal 用于分析谱图和数据的定性定量，应用软件内置的 NIST 数据库和 IMS 数据库可对物质进行定性分析；Gallery Plot 插件可直观且定量地比较不同样品之间的挥发性有机物差异得到指纹图谱；面积归一化法计算样品中物质相对含量，SPSS、SIMCA 软件进行分析。

1.2.4 不同品种澳洲坚果干燥前后感官评价 对 6 个品种的澳洲坚果样品在经过三种干燥处理后，立即进行感官评价。评价小组成员(5 名男性和 5 名女性)经验丰富，从 21 岁到 50 岁不等，被要求评估 6 个品种澳洲坚果样品干燥后的品质，从质地、香气、酸味(苦味)、整体外观等多方面入手。具体的感官评分标准见表 1 所示，并将这些指标的平均值作为感官品质的评估[35]。

表 1 感官评分标准

Table 1 Sensory scale of the quality

评分	1	2	3	4	5
口感	非常松软	松软	中等	脆	非常脆
香气	差	良	良好(合格)	很好	极好
外观色泽	差	良	良好(合格)	很好	极好
不良风味	无	轻度	中度	较重	严重

1.2.5 ROAV 分析 采用刘登勇等[37]报道的方法计算各挥发性化合物的 ROAV。将对样品风味贡献最大的组分的 ROAV 定义为 100，其他化合物的 ROAV 计算如式(1)所示。若某化合物 ROAV 大于 1，表明其对样品风味有贡献，为样品的关键风味化合物；当 ROAV 在 0.1 与 1 之间时，表明其对样品风味有修饰作用。

$$ROAV \approx \frac{C}{C_{stan}} \times \frac{T_{stan}}{T} \times 100 \quad 式(1)$$

式中：C_{stan} 与 T_{stan} 分别为对样品风味贡献最大组分的相对含量(%)及阈值(mg/L)；C 与 T 分别为各挥发性物质的相对含量(%)和阈值(mg/L)。

1.3 数据处理

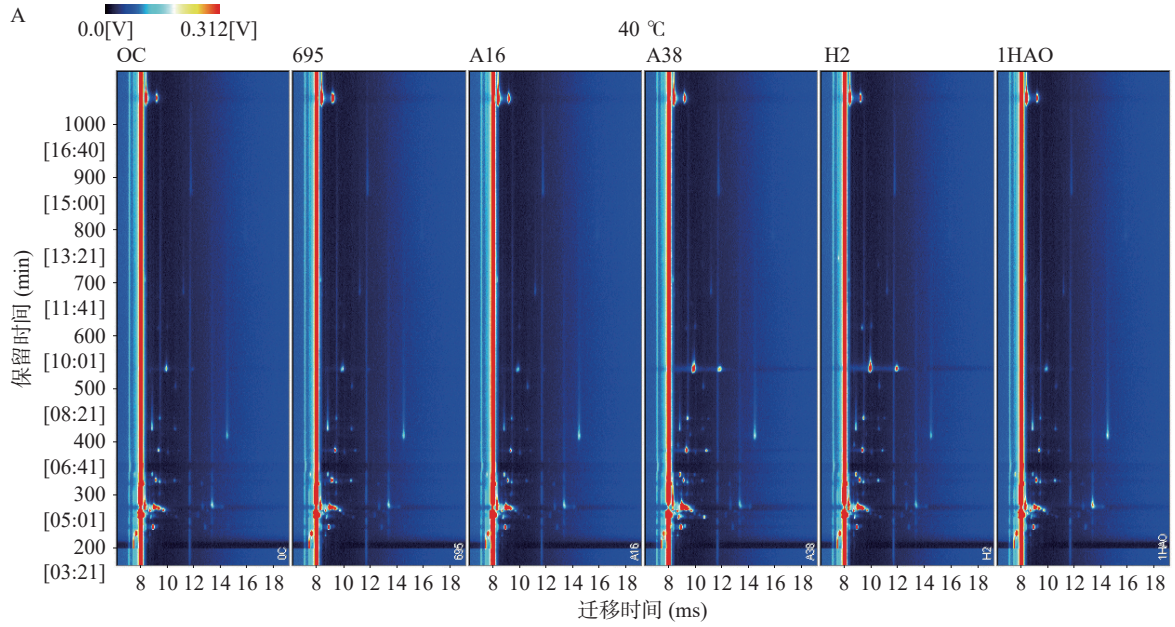
采用 Excel 2013 软件对测定数据进行整理统计；利用 SPSS 26.0 统计分析软件进行系统聚类分析(hierarchical cluster analysis, HCA)以及方差分析，并采用 Duncan's 新复极差法进行 Post-hoc 显著性检验；利用 SIMCA14.1 分析软件进行主成分分析(principal component analysis, PCA)和正交偏最小二乘法判别分析(orthogonal partial least squares-discriminant analysis, OPLS-DA)分析[38]；采用 OriginPro2021 的 HeatMap Dendrogram 工具制作聚类热图[39]。

2 结果与分析

2.1 不同干燥处理下澳洲坚果果实挥发性组分 GC-IMS 分析

2.1.1 GC-IMS 二维谱分析 采用 GC-IMS 确定不同干燥处理下澳洲坚果果实的挥发性物质，通过获得离子迁移时间和离子峰强度，对每种成分进行定性分析，同一干燥处理下制备的不同品种澳洲坚果果实样品，其挥发性化合物具有一定的差异性，不同干燥处理下制备的相同品种澳洲坚果果实样品，其挥发性化合物具有一定的相似性，但个别信号强度略有不同[40−42]。

从二维 GC-IMS 谱图(图 1)可见，整个图背景为蓝色，图中反应离子峰两侧的每一个点代表一种挥发性有机物，一种物质可能产生多个信号，白色表示浓度较低，红色表示浓度较高，颜色越深表示浓度越大[40−42]。不同干燥处理下各个品种澳洲坚果果实的



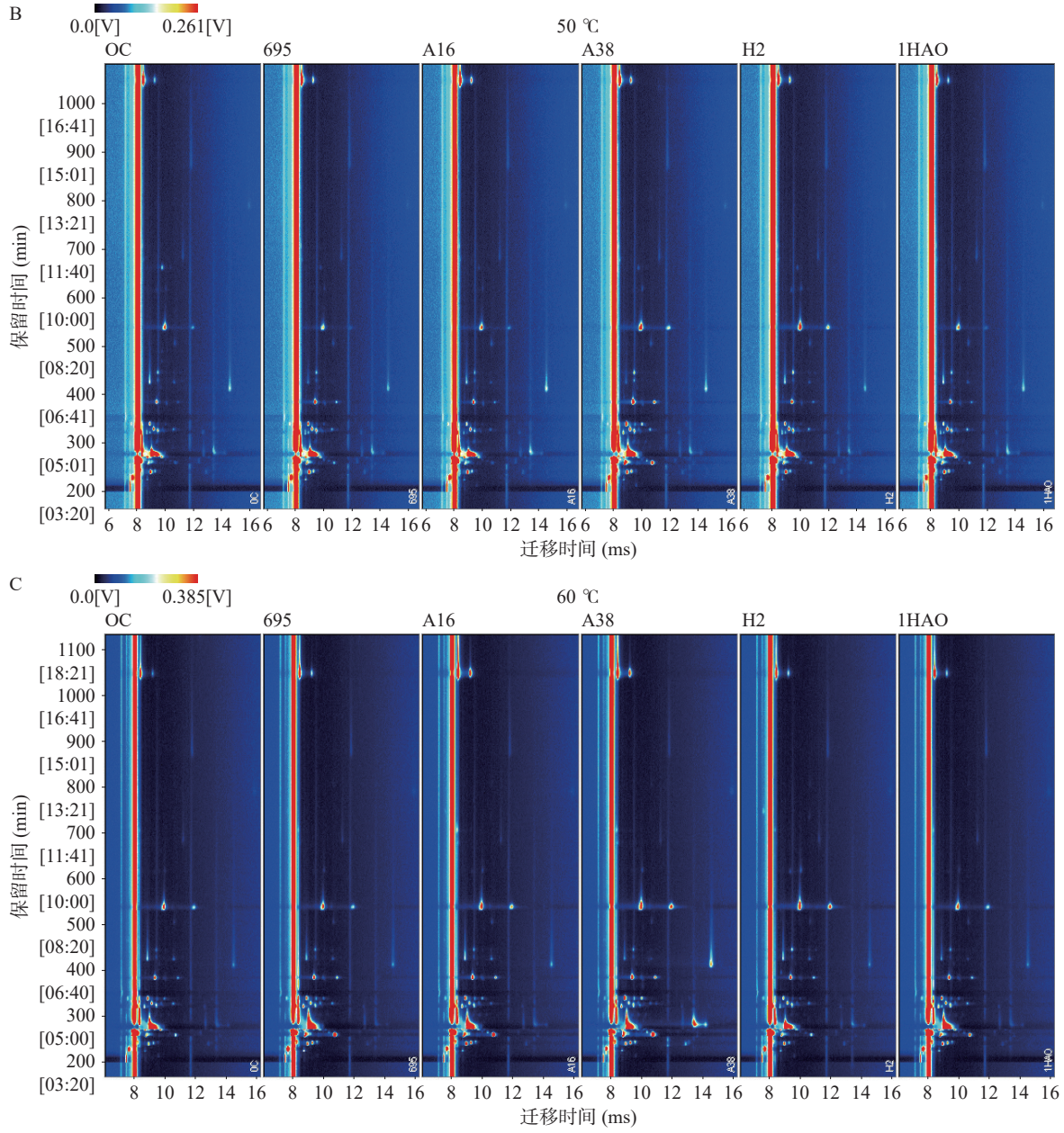


图 1　不同干燥处理下澳洲坚果挥发性组分二维 GC-IMS 谱图

Fig.1　Two-dimensional GC-IMS spectra of volatile components of *Macadamia* nuts under different drying treatment

挥发性物质通过 GC-IMS 得到很好分离，而且大多数挥发性物质信号出现在 200~600 min 的保留时间和 8.0~10.0 ms 的迁移时间，同时从第一组干燥处理到第三组，随着处理温度的上升，可以直观地看出其间的差异，表明干燥温度的变化对澳洲坚果果实挥发性成分变化具有不同的作用。

2.1.2　挥发性组分分析　通过 GC-IMS 内置的 NIST 数据库和 IMS 数据库对不同干燥处理下澳洲坚果挥发性组分进行定性分析，在三种干燥处理下 6 个品种澳洲坚果样品中共检测出 55 种挥发性成分，定性 32 种。定性的 32 种挥发性成分包括醇类物质 11 种、醛类 7 种、酮类 5 种、酸类 1 种、酯类 6 种以及其他 2 种。其中醇类和酮类的含量相对较高。方差分析显示醇类在三种处理下无显著差异，其他类在 50 ℃ 处理组与 40 ℃ 处理组和 60 ℃ 处理组间存在显著差异（P<0.05）；醛类在 60 ℃ 处理组与 40 ℃ 处理组和 50 ℃ 处理组间存在显著差异（P<0.05）；酮类在 40 ℃ 处理组与 50 ℃ 处理组和 60 ℃ 处理组间存在显著差异（P<0.05），酯类在 40 ℃ 处理组与 50 ℃ 处理组与 60 ℃ 处理组间均存在显著差异（P<0.05）；酸类在 40 ℃ 处理组与 50 ℃ 处理组和 60 ℃ 处理组间存在显著差异（P<0.05），详见图 2。

涂行浩[35] 研究生干、轻度以及中度烘烤产生的挥发性组分与本文干燥过程产生的挥发性组分存在一定的相似性，比如，乙酸、己醛、辛醛。而在深度烘烤中产生的吡嗪类化合物，在本研究三种干燥处理条件下都未出现。现有研究表明醛和醇类是脂肪酸氧化产生的最具代表性的挥发性物质[43]，例如辛醛、壬醛是油酸的主要氧化产物[44]，己醛、2-壬烯醛一般认为是亚油酸的氧化产物，同时这些醇类、醛类还可以

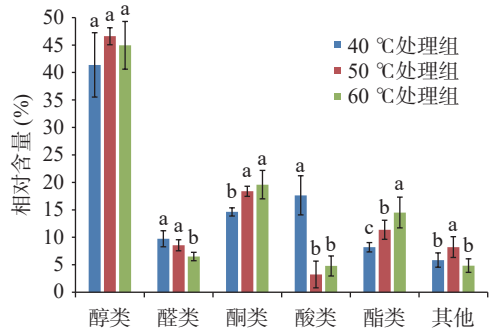


图 2 不同干燥处理下澳洲坚果挥发性组分分类含量变化图

Fig.2 Changes in the categorized content of volatile components of *Macadamia* nuts under different drying treatment

注：不同字母表示不同处理组间差异显著（P<0.05），图 3、图 4 同。

进一步氧化成酸类。还有样品果实内源酶的作用，如淀粉酶和糖酵解相关酶，导致糖类物质代谢分解，产生更多中间产物如乙醇和乙酸[45]；还有就是脂质水解和氨基酸降解也可以产生醇类和酸类[46−48]。吡嗪类化合物主要是脂质氧化与美拉德反应产物相互作用产生的化合物，同时美拉德反应受温度的影响较大[49]。而澳洲坚果果仁中富含油酸、棕榈油酸、亚油酸等不饱和脂肪酸[50]，极易氧化。另外在干燥的初始阶段可能提供了一个较为温和的环境，让糖代谢相关的酶在未被完全破坏的情况下继续作用，导致糖类分解增加，同时脂质水解和氨基酸降解，共同作用从而导致产生更多中间产物乙醇和乙酸。本研究的三种干燥处理温度条件相对温和，且经过处理的果仁呈现乳白色，无明显褐变，我们可以认为本研究干燥处理下美拉德反应不明显，导致吡嗪类化合物产生较少而未被检测到。因此我们推测本研究干燥处理下挥发性物质主要是脂质氧化和酶促反应的结果。

六个品种澳洲坚果样品经三种不同温度干燥处理后的感官品质变化如图 3 所示。与 40 ℃ 处理组相比，50 ℃ 和 60 ℃ 处理组在质地、香气及整体外观方面均有显著提升（P<0.05），但 60 ℃ 与 50 ℃ 处理组之间差异不显著。感官评估结果一致表明，所有品种经 50 ℃ 干燥后，其酥脆度和香气均较 40 ℃ 处理显著增强（P<0.05），而 60 ℃ 处理与 50 ℃ 处理相比改善幅度有限，差异不显著。此外，随着干燥温度升高，样品中未出现明显的不良气味（如酸味），相关指标得分增长均低于 1 分，说明提高干燥温度并未引入明显异味。依据以上结果，50 ℃ 干燥处理在改善澳洲坚果感官品质方面已达到最佳效果，既能有效提升风味和质地，又避免了高温可能带来的负面风味影响。

新鲜澳洲坚果干燥后果仁会带有浓郁的奶香味，而奶油香味的呈味物质是 2,3-丁二酮[51]，不同干燥处理下 2,3-丁二酮含量变化如图 4 所示。40 ℃ 低温干燥与 50 ℃、60 ℃ 干燥产生的 2,3-丁二酮含量存在显著差异（P<0.05），但是 50 ℃ 与 60 ℃ 间不

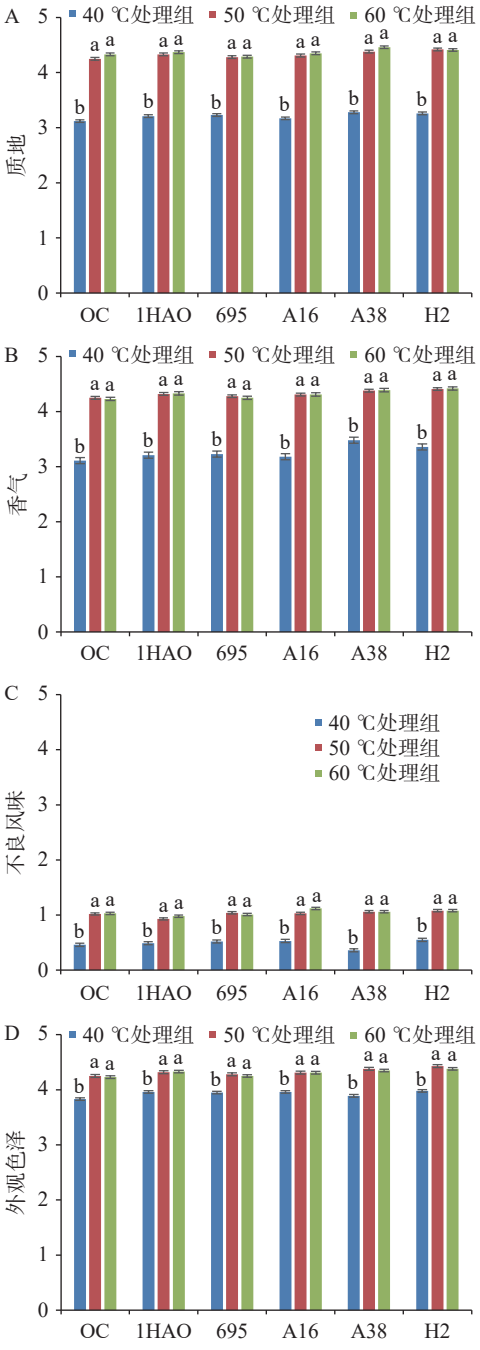


图 3 不同干燥处理下澳洲坚果感官品质的变化

Fig.3 Changes of sensory quality of *Macadamia* nuts under different drying treatment

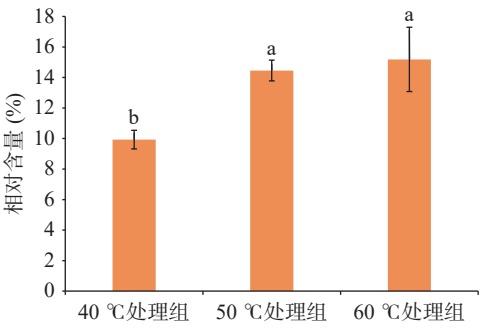


图 4 不同干燥处理下 2,3-丁二酮含量变化图

Fig.4 Variation of 2,3-butanedione content under different drying treatment

存在显著差异。表明 50 ℃ 以后，温度的上升对干燥过程奶香味的产生影响不大。

故综合上述试验结果，在 50 ℃ 处理组干燥条件下，澳洲坚果果仁中心内部几乎没有发生褐变现象，而且感官品质指标得到显著改善。为避免乙酸过多影响果仁口感风味，保持澳洲坚果特有的奶香味，并从能耗的角度综合考量，选择 50 ℃ 处理组（50 ℃ 干燥 96 h）这一方案，下一步的分析依据这一干燥处理下获得的数据进行。

为了进一步对 50 ℃ 处理组各品种澳洲坚果的挥发性成分定性分析，通过 GC-IMS 自带的 Gallery Plot 插件绘制指纹图谱，结果如图 5 所示。从指纹图谱中可直观地比较 50 ℃ 处理组各品种澳洲坚果的相似性化合物与差异性化合物，尽管乙醇、乙酸、2,3-丁二酮及异丙醇为各品种所共有（图 5 区域 A），表明干燥过程中脂质氧化和酶促反应等基础路径的普遍发生，同时结合表 2 的方差分析结果，OC 中异松油烯与环戊酮的特异积累、1HAO 中仲丁醇的显著生成，以及 A38 中己醛与 H2 中乙酸乙酯的突出表现，均表明干燥工艺并非简单促发挥发性物质的生成，而是与品种自身的代谢背景协同作用，调控关键挥发性物质的形成路径与积累水平。

2.2　化学模式识别分析

2.2.1　HCA　基于 50 ℃ 处理组（50 ℃ 烘烤 96 h）获得的澳洲坚果挥发性组分数据，采用 Ward 法（离差平方和法），根据欧氏距离对 6 个品种澳洲坚果进

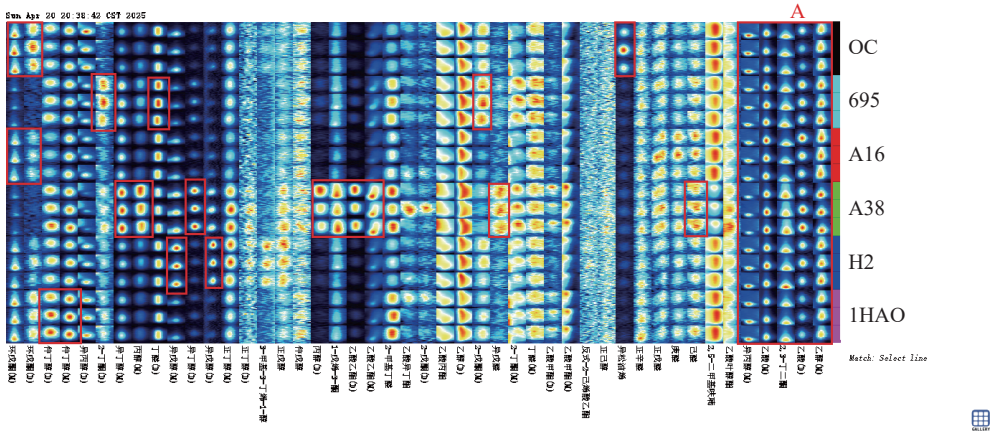


图 5　50 ℃ 处理组各品种澳洲坚果挥发性有机物指纹图谱

Fig.5　Fingerprints of volatile organic compounds in *Macadamia* nuts of various species treated at 50 ℃

表 2　50 ℃ 处理组各个品种澳洲坚果挥发性组分差异性分析

Table 2　Differential analysis of volatile components in various varieties of *Macadamia* nuts treated at 50 ℃

代码	挥发性成分		CAS号	分子量	保留指数	保留时间(s)	迁移时间(ms)	相对含量(%)					
	中文名称	英文名称						OC	1HAO	695	A16	A38	H2
Z01	异戊醇	1-Butanol,3-methyl	123-51-3	88.1	1223.2	539.342	1.24371	8.36±0.14^{c}	6.86±0.31^{d}	12.64±0.66^{a}	5.73±0.18^{c}	8.46±0.46^{c}	9.78±0.46^{b}
Z02	正丁醇	1-butanol	71-36-3	74.1	1157.9	444.806	1.18037	1.04±0.11^{b}	1.02±0.06^{bc}	1.21±0.06^{a}	0.90±0.01^{cd}	0.84±0.07^{d}	1.06±0.07^{b}
Z03	异丁醇	1-Propanol, 2-methyl	78-83-1	74.1	1108.7	385.475	1.16979	5.03±0.21^{e}	6.16±0.17^{c}	5.46±0.09^{d}	7.34±0.10^{b}	6.08±0.19^{c}	9.05±0.03^{a}
Z04	仲丁醇	2-butanol	78-92-2	74.1	1039.3	328.281	1.32053	2.68±0.17^{b}	3.38±0.12^{a}	2.46±0.04^{cd}	2.61±0.10^{bc}	2.50±0.08^{bcd}	2.35±0.10^{d}
Z05	丙醇	1-Propanol	71-23-8	60.1	1055.9	340.456	1.11155	1.88±0.05^{c}	1.57±0.03^{c}	1.82±0.02^{c}	2.36±0.16^{b}	1.73±0.05^{c}	4.88±0.38^{a}
Z06	3-甲基-3-丁烯-1-醇	3-Methyl-3-buten-1-ol	763-32-6	86.1	1267.6	615.936	1.16796	0.32±0.02^{b}	0.28±0.03^{b}	0.43±0.06^{a}	0.30±0.06^{b}	0.33±0.10^{b}	0.24±0.02^{b}
Z07	正戊醇	1-Pentanol	71-41-0	88.1	1270.2	620.806	1.25487	0.23±0.03^{d}	0.32±0.06^{bc}	0.35±0.03^{a}	0.26±0.03^{cd}	0.28±0.05^{bcd}	0.26±0.03^{cd}
Z08	2-戊醇	2-Pentanol	6032-29-7	88.1	1134.4	415.365	1.20642	0.19±0.03^{a}	0.18±0.03^{b}	0.14±0.01^{c}	0.17±0.01^{bc}	0.16±0.01^{bc}	0.17±0.01^{bc}
Z09	异丙醇	2-Propanol	67-63-0	60.1	935	271.593	1.08936	6.18±0.10^{a}	5.6±0.06^{b}	4.78±0.20^{d}	4.57±0.16^{d}	5.10±0.21^{c}	3.56±0.04^{e}
Z10	正己醇	1-hexanol	111-27-3	102.2	1374	808.651	1.32708	0.38±0.02^{bc}	0.45±0.05^{a}	0.38±0.03^{bc}	0.39±0.03^{b}	0.35±0.03^{bc}	0.32±0.02^{c}
Z11	乙醇	Ethanol	64-17-5	46.1	938.9	273.25	1.04316	20.07±0.21^{ab}	19.82±0.42^{bc}	18.85±0.14^{c}	20.91±0.52^{a}	19.18±0.70^{bc}	16.89±0.82^{d}
Z12	庚醛	Heptaldehyde	111-71-7	114.2	1200.4	503.808	1.33027	0.42±0.04^{b}	0.43±0.06^{b}	0.40±0.03^{b}	0.40±0.01^{b}	0.51±0.03^{a}	0.36±0.07^{b}
Z13	己醛	1-hexanal	66-25-1	100.2	1104.8	381.036	1.25852	0.40±0.04^{bc}	0.46±0.06^{ab}	0.37±0.04^{c}	0.39±0.04^{bc}	0.50±0.05^{a}	0.43±0.04^{abc}
Z14	正辛醛	1-octanal	124-13-0	128.2	1308.4	690.475	1.40182	1.06±0.09^{b}	1.17±0.02^{a}	0.94±0.03^{c}	1.02±0.09^{bc}	0.99±0.04^{bc}	0.76±0.04^{d}
Z15	戊醛	n-Pentanal	110-62-3	86.1	1004.7	304.256	1.17789	0.45±0.03^{b}	0.45±0.05^{b}	0.35±0.02^{c}	0.40±0.06^{bc}	0.55±0.04^{a}	0.39±0.06^{bc}
Z16	2-甲基丁醛	2-Methylbutanal	96-17-3	86.1	863.1	242.967	1.15945	0.65±0.04^{d}	1.14±0.07^{a}	0.61±0.06^{d}	1.00±0.06^{b}	0.81±0.03^{c}	0.89±0.10^{bc}
Z17	丁醛	Butanal	123-72-8	72.1	857.3	240.814	1.09008	5.33±0.47^{b}	5.37±0.04^{b}	4.84±0.15^{c}	6.24±0.21^{a}	5.76±0.17^{b}	4.02±0.17^{d}
Z18	异戊醛	3-Methyl butanal	590-86-3	86.1	908	260.468	1.20554	0.18±0.03^{b}	0.17±0.02^{b}	0.18±0.02^{b}	0.19±0.02^{b}	0.17±0.04^{b}	0.24±0.03^{a}
Z19	环戊酮	Cyclopentanone	120-92-3	84.1	1142.5	425.344	1.10847	3.29±0.18^{a}	2.93±0.10^{b}	2.18±0.14^{c}	1.34±0.08^{d}	2.36±0.11^{c}	1.18±0.03^{d}
Z20	1-戊烯-3-酮	1-Penten-3-one	1629-58-9	84.1	1030.7	322.125	1.08747	0.68±0.06^{bc}	0.68±0.02^{bc}	0.63±0.05^{cd}	0.76±0.02^{b}	0.54±0.02^{d}	0.92±0.13^{a}
Z21	2-戊酮	2-Pentanone	107-87-9	86.1	1030.6	322.051	1.11272	0.37±0.01^{a}	0.33±0.03^{ab}	0.30±0.02^{b}	0.37±0.03^{a}	0.20±0.02^{c}	0.17±0.02^{c}

续表 2

代码	挥发性成分		CAS号	分子量	保留指数	保留时间(s)	迁移时间(ms)	相对含量(%)					
	中文名称	英文名称						OC	1HAO	695	A16	A38	H2
Z22	2,3-丁二酮	2,3-Butanedione	431-03-8	86.1	965.3	284.669	1.04371	14.58±0.40^{ab}	14.67±0.50^{ab}	13.77±0.90^{bc}	15.07±0.23^{a}	13.49±0.30^{c}	15.14±0.41^{a}
Z23	2-丁酮	2-Butanone	78-93-3	72.1	921.5	265.993	1.05817	0.61±0.05^{c}	0.82±0.04^{a}	0.68±0.02^{bc}	0.87±0.02^{a}	0.72±0.04^{b}	0.62±0.06^{c}
Z24	乙酸	Acetic acid	64-19-7	60.1	1482.1	1048.791	1.15177	0.12±0.11^{d}	0.83±0.01^{cd}	4.53±0.70^{ab}	4.30±1.51^{ab}	6.60±2.15^{a}	3.04±1.48^{bc}
Z25	乙酸乙酯	Acetic acid ethyl ester	141-78-6	88.1	902.5	258.281	1.34397	1.78±0.04^{c}	2.27±0.06^{b}	1.90±0.06^{c}	2.59±0.08^{b}	1.74±0.03^{c}	6.53±0.44^{a}
Z26	乙酸丙酯	Propyl acetate	109-60-4	102.1	943.4	275.173	1.17033	5.56±0.25^{a}	5.63±0.12^{a}	5.08±0.13^{b}	5.41±0.13^{a}	4.69±0.24^{c}	4.87±0.18^{bc}
Z27	乙酸异丁酯	2-methyl-1-propyl acetate	110-19-0	116.2	1034.8	325.057	1.23494	0.24±0.04^{a}	0.25±0.08^{a}	0.21±0.03^{a}	0.23±0.01^{a}	0.20±0.06^{a}	0.22±0.07^{a}
Z28	乙酸甲酯	methyl acetate	79-20-9	74.1	865.6	243.933	1.03509	1.77±0.20^{bc}	2.19±0.02^{a}	1.62±0.05^{c}	1.74±0.04^{bc}	1.87±0.18^{b}	1.87±0.11^{b}
Z29	乙酸叶醇酯	(Z)-3-hexenyl acetate	3681-71-8	142.2	1317.9	706.485	1.04505	1.02±0.06^{ab}	1.06±0.07^{a}	0.92±0.04^{bc}	1.01±0.03^{ab}	1.02±0.05^{ab}	0.91±0.06^{c}
Z30	反式-2-己烯酸乙酯	(E)-Ethyl-2-hexenoate	27829-72-7	142.2	1334.1	734.465	1.32072	0.33±0.05^{a}	0.33±0.05^{a}	0.31±0.01^{a}	0.31±0.03^{a}	0.32±0.04^{a}	0.23±0.03^{b}
Z31	2,5-二甲基呋喃	2,5-Dimethylfuran	625-86-5	96.1	914.7	263.192	1.02483	9.01±0.32^{a}	8.89±0.31^{a}	7.20±0.13^{c}	7.59±0.21^{c}	8.28±0.17^{b}	4.47±0.17^{d}
Z32	异松油烯	alpha-terpinolene	586-62-9	136.2	1292.1	662.868	1.21822	1.52±0.40^{a}	0.42±0.08^{b}	0.46±0.01^{b}	0.48±0.05^{b}	0.51±0.04^{b}	0.51±0.03^{b}

注: 不同字母表示同类化合物在不同品种样品间差异显著(P<0.05)。

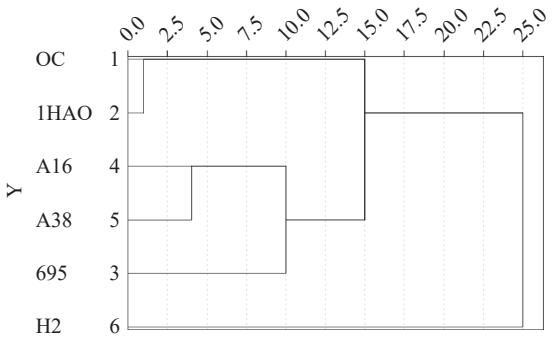


图 6 基于挥发性组分的不同品种澳洲坚果的聚类分析结果

Fig.6 Results of cluster analysis of different varieties of *Macadamia* nuts based on volatile fractions

行聚类分析[52], 结果见图 6。结果表明: 在欧氏距离为 12.5 处, 供试 6 个品种澳洲坚果被分成 3 组, 其中, OC、'桂热 1 号'两个品种聚为一组, A16、A38、695 三个品种聚为一组, H2 单独为一组。表明从干燥处理后挥发性组分的角度分析, 不同品种间存在一定的相似性, HCA 分析结果为下一步的 PCA 分析提供了可能。

2.2.2 PCA 采用 SIMCA14.0 软件对 6 个品种澳洲坚果的果实 32 种挥发性组分指标进行 PCA 分析, 结果显示 PCA 模型有良好的拟合参数, 其中 R^2_x为 0.987, 大于 0.7, 表明模型对数据特征的捕捉能力较强, 同时Q^2为 0.936, 大于 0.5, 表明模型具有较好的预测稳定性。样本可信度全部处于 95% 置信区间内, 样本分布区域未出现异常值, 表明模型的预测能力较强。

主成分的贡献率较大的挥发性组分如图 7 所示, 载荷数值反映原始变量对各主成分影响的大小, 正负表示影响的方向[53−54]。第 1 主成分的异戊醇(Z01)、异丁醇(Z03)、异丙醇(Z09)、乙醇(Z11)、丁醛(Z17)、2,3-丁二酮(Z22)、乙酸(Z24)、乙酸丙酯(Z26)、2,5-二甲基呋喃(Z31)有较高载荷系数, 表明这 9 个组分指标与第 1 主成分相关性较强; 第 2 主

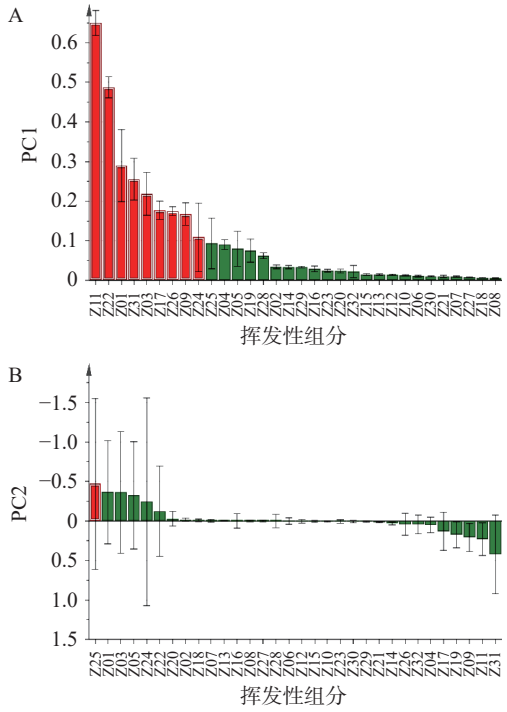


图 7 主成分 1(A)和主成分 2(B)贡献率较大的挥发性组分

Fig.7 Volatile components with large contributions from principal component 1 (A) and principal component 2 (B)

成分中乙酸乙酯(Z25)有较高载荷系数, 表明这个组分指标对第 2 主成分的贡献大。

同时, 以 32 种澳洲坚果挥发性组分指标为变量, 建立 6 个澳洲坚果品种的 PCA 得分模型[54], 结果如图 8 所示。由 PCA 得分图可知, OC、'桂热 1 号'两个品种聚为一类, A16、A38、695 三个品种聚为一类, H2 单独为一类, 与"2.2.1"的 HCA 结果相符合, 也再次证明从干燥处理后挥发性组分的角度分析, 不同品种间存在一定的相似性, HCA 结合 PCA 分析为下一步的 OPLS-DA 分析奠定了基础。

2.2.3 OPLS-DA 结合 HCA 与 PCA 分析的聚类结果, 以 32 种挥发性组分数据为 X 变量, 6 种不同

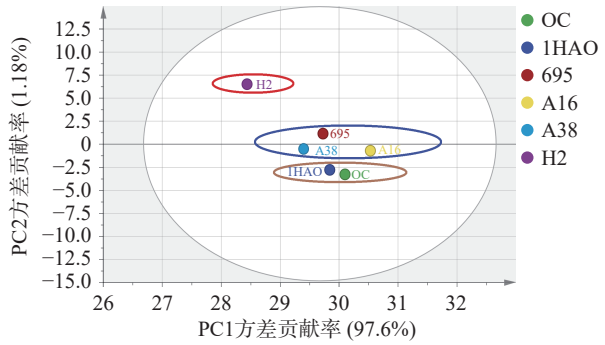


图 8　基于挥发性组分的不同品种澳洲坚果的 PCA 得分图

Fig.8　PCA score plots of different varieties of *Macadamia* nuts based on volatile fractions

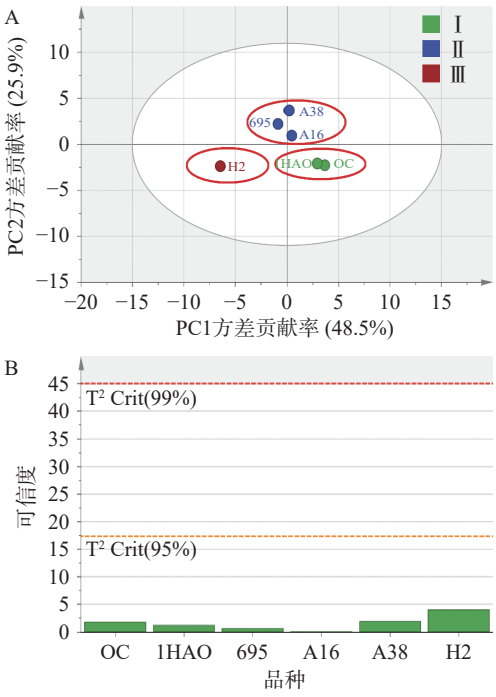


图 9　不同品种澳洲坚果的 OPLS-DA 得分图(A)和 Hotelling T^2 分布图(B)

Fig.9　Plot of OPLS-DA scores (A) and Hotelling T^2 distribution (B) for different varieties of *Macadamia* nuts

注：Ⅰ、Ⅱ、Ⅲ分别代表三个聚类。

澳洲坚果品种为 Y 变量进行 OPLS-DA 分析，建立挥发性组分与三类澳洲坚果品种样本之间的关系模型，通过 S-plot 图初步筛选具有代表性的组分，观察置换 200 次检验图的直线斜率判定模型是否存在过拟合现象，并且通过计算变量投影重要度（variable important for the projection, VIP）判别挥发性组分对各类样本分类判别的影响强度和解释能力，达到辅助筛选特征性组分的目的[55−56]。

由图 9A 可知，各类澳洲坚果品种聚类趋势明显，结果与 HCA、PCA 结果相一致。建立的 OPLS-DA 模型有良好的拟合参数，其中R_x^2为 0.744，R_x^2越接近 1，模型越稳定；R_y^2为 0.930，R_y^2越大，模型的解释能力越强，Q^2为 0.757，大于 0.5；同时样本可信度全部处于 95% 置信区间内（图 9B），表明模型的预测能力较强。

为验证模型拟合程度的可靠性，分别对 3 类澳洲坚果品种的 Y 矩阵变量进行 200 次置换后验证，检验结果如图 10 所示。结果最右侧的R^2值和Q^2值均高于左侧的R^2值和Q^2值，Q^2回归线在 Y 轴截距分别为−1.060、−0.669、−0.464，均小于零，说明模型未出现过拟合现象，模型可靠，可用于判别分析 3 类澳洲坚果品种挥发性组分的组间差异[57]。

图 11A 是 OPLS-DA 分析得到的二维载荷图，反映了各组分变量对不同品种澳洲坚果在得分图上的分布，离密集区越远的变量对不同品种澳洲坚果区分的影响越大[39]。通过变量重要性投影值（variable importance for the projection, VIP），以 VIP>1 为标准筛选出乙酸（Z24）、乙酸乙酯（Z25）、2,5-二甲基呋喃（Z31）、异丁醇（Z03）、丙醇（Z05）、异戊醇（Z01）、乙醇（Z11）、异丙醇（Z09）8 种关键组分指标。VIP 值详见图 11B。通常认为 VIP>1.0 的变量在判别过程中具有重要作用[58]，VIP 值越大，所对应的组分在不同品种澳洲坚果间差异越显著，因此以上 8 种指标可能是不同品种澳洲坚果间差异显著的特征性挥发性组分，而且乙酸（Z24）离密集区最远，是对样本区分的影响最大的指标，己醛（Z13）处于密集区的中心，是对样本区分的影响最小的指标。与“2.2.2”的 PCA 结果基本一致。

50 ℃ 处理组各品种澳洲坚果挥发性组分的 ROAV 如表 3 所示。异戊醇、异丁醇、丁醛、异戊醛、2,3-丁二酮、乙酸、乙酸叶醇酯 7 种挥发性组分的 ROAV 值大于 1，表明这 7 种物质对样品整体风味有贡献，为本研究 50 ℃ 处理组澳洲坚果的关键风

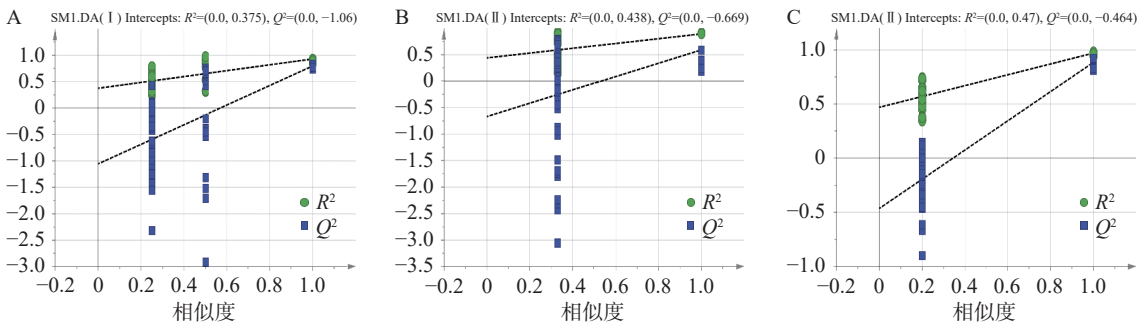


图 10　OPLS-DA 模型置换验证

Fig.10　OPLS-DA model replacement validation

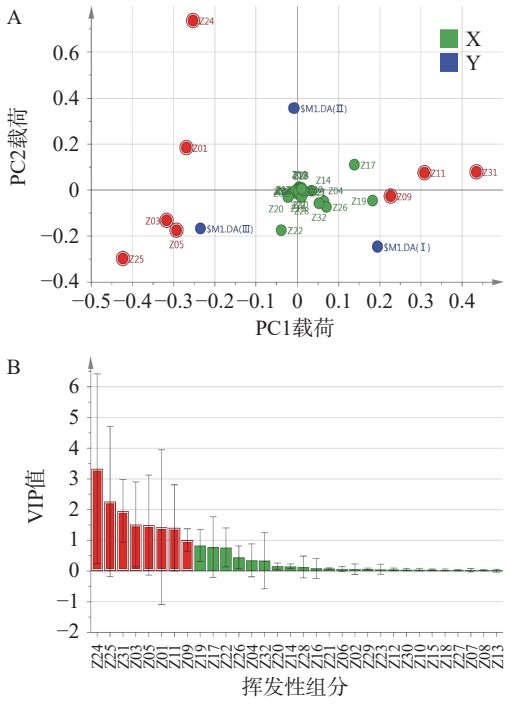


图 11 挥发性组分的 OPLS-DA 载荷图(A)和 VIP 值(B)

Fig.11 OPLS-DA loading plot (A) and and VIP values (B) of volatile component

注: 图 A 中 X 表示 32 种挥发性组分, Y 表示聚为 3 类的 6 种澳洲坚果品种; 红色同心圆表示 VIP>1.0 的挥发性组分。

味化合物。其中的异丁醇、异戊醇、乙酸三种物质也是 OPLS-DA 筛选的特征性组分, OPLS-DA 特征性组分的筛选主要依据相对含量高低, 而 ROAV 分析则是依据相对含量与阈值的共同作用, 由表 2 可知这三种物质的相对含量较高, 由表 3 可知这三种物质的阈值相对较低, 因此这三种物质的 ROAV 值高, 大于 1, 而其他 OPLS-DA 筛选的特征性组分, 虽然其相对含量相对较高, 但阈值也较高, 导致 ROAV 值小于 1。因此异丁醇、异戊醇、乙酸三种物质是对整体风味具有显著贡献的关键化合物。

基于筛选出的 8 种关键差异挥发性化合物在不同品种澳洲坚果中的相对含量分布情况, 绘制了热图(图 12)。通过 OPLS-DA 分析发现, VIP 值最高的化合物为乙酸(Z24)。结合聚类热图结果可知, 乙酸是品种 A38 的特征性挥发性组分。进一步根据表 2 的方差分析及表 3 的 ROAV 分析结果, A38 中乙酸的相对含量显著高于其他三个品种(P<0.05), 且其 ROAV 值也最高。依据谭秋锦等[59] 的研究, A38 中较高的可溶性糖和游离氨基酸含量可能通过糖酵解和氨基酸降解途径促进了乙酸的生成。VIP 值次高的化合物为乙酸乙酯(Z25), 其形成途径主要包括乙酸与乙醇的酯化反应, 以及酵母菌和霉菌等微生物的代谢活动[60]。聚类热图分析表明, 乙酸乙酯、异丁醇和丙醇是品种 H2 的特征挥发性组分。表 2 的方差分析结果显示, H2 中这三种化合物的相对含量显著高于其他五个品种(P<0.05)。VIP 值大于 1 且排名第三的化合物是 2,5-二甲基呋喃(Z31)。热图显示

表 3 50 ℃ 处理组各个品种澳洲坚果挥发性组分的 ROAV

Table 3 ROAV of volatile fractions of individual varieties of *Macadamia* nuts treated at 50 ℃

代码	挥发性成分		阈值 (mg/L)[61]	ROAV					
	中文名称	英文名称		OC	1HAO	695	A16	A38	H2
Z01	异戊醇	1-Butanol,3-methyl	0.160	1.612±0.017	1.315±0.015	2.583±0.034	1.069±0.017	1.763±0.058	1.816±0.036
Z02	正丁醇	1-butanol	48.000	0.0007±0.000	0.0006±0.000	0.0008±0.000	0.0006±0.000	0.0005±0.000	0.0007±0.000
Z03	异丁醇	1-Propanol, 2-methyl	0.036	4.311±0.062	5.249±0.034	4.967±0.243	6.088±0.010	5.633±0.051	7.475±0.177
Z04	仲丁醇	2- butanol	14.400	0.006±0.000	0.007±0.000	0.005±0.000	0.005±0.000	0.006±0.000	0.005±0.000
Z05	丙醇	1-Propanol	0.800	0.072±0.000	0.060±0.000	0.074±0.004	0.088±0.005	0.072±0.000	0.181±0.009
Z06	3-甲基-3-丁烯-1-醇	3-Methyl-3-buten-1-ol	ND	ND	ND	ND	ND	ND	ND
Z07	正戊醇	1-Pentanol	30.000	0.000±0.000	0.0003±0.000	0.0003±0.000	0.0003±0.000	0.0003±0.000	0.0003±0.000
Z08	2-戊醇	2-Pentanol	1.000	0.006±0.000	0.005±0.000	0.004±0.000	0.005±0.000	0.005±0.000	0.005±0.000
Z09	异丙醇	2-Propanol	2.500	0.076±0.000	0.068±0.002	0.062±0.001	0.054±0.001	0.068±0.001	0.042±0.000
Z10	正己醇	1 -hexanol	0.740	0.016±0.000	0.018±0.001	0.017±0.000	0.016±0.000	0.016±0.001	0.013±0.000
Z11	乙醇	Ethanol	7.800	0.079±0.001	0.078±0.001	0.079±0.004	0.080±0.000	0.082±0.001	0.064±0.001
Z12	庚醛	Heptaldehyde	0.150	0.086±0.006	0.088±0.009	0.087±0.000	0.079±0.000	0.113±0.004	0.071±0.012
Z13	己醛	1-hexanal	0.160	0.077±0.005	0.088±0.008	0.075±0.003	0.073±0.006	0.104±0.008	0.079±0.005
Z14	正辛醛	1-octanal	0.170	0.192±0.011	0.211±0.003	0.181±0.006	0.179±0.013	0.194±0.003	0.133±0.003
Z15	戊醛	n-Pentanal	0.100	0.139±0.005	0.138±0.011	0.114±0.000	0.119±0.016	0.183±0.009	0.116±0.014
Z16	2-甲基丁醛	2-Methylbutanal	0.100	0.200±0.007	0.349±0.009	0.199±0.006	0.298±0.013	0.270±0.004	0.264±0.022
Z17	丁醛	Butanal	0.027	6.086±0.370	6.104±0.162	5.867±0.202	6.899±0.127	7.116±0.052	4.424±0.067
Z18	异戊醛	3-Methyl butanal	0.0016	3.463±0.483	3.253±0.273	3.669±0.169	3.543±0.319	3.533±0.756	4.451±0.437
Z19	环戊酮	Cyclopentanone	35.000	0.003±0.000	0.002±0.000	0.002±0.000	0.001±0.000	0.002±0.000	0.001±0.000
Z20	1-戊烯-3-酮	1-Penten-3-one	ND	ND	ND	ND	ND	ND	ND
Z21	2-戊酮	2-Pentanone	12.000	0.001±0.000	0.0008±0.000	0.0008±0.000	0.0009±0.000	0.0005±0.000	0.0004±0.000
Z22	2,3-丁二酮	2,3 Butanedione	0.0045	100±2.743	100±3.408	100±6.536	100±1.526	100±2.224	100±2.708
Z23	2-丁酮	2-Butanone	ND	ND	ND	ND	ND	ND	ND

续表 3

代码	挥发性成分		阈值 (mg/L)[61]	ROAV					
	中文名称	英文名称		OC	1HAO	695	A16	A38	H2
Z24	乙酸	Acetic acid	0.025	0.146±0.132	1.018±0.022	5.898±0.530	5.118±1.725	8.767±2.674	3.584±1.663
Z25	乙酸乙酯	Acetic acid ethyl ester	0.600	0.092±0.000	0.116±0.000	0.104±0.003	0.129±0.002	0.097±0.000	0.323±0.013
Z26	乙酸丙酯	Propyl acetate	0.350	0.490±0.008	0.493±0.006	0.475±0.018	0.462±0.004	0.447±0.013	0.413±0.004
Z27	乙酸异丁酯	2-methyl-1-propyl acetate	2.400	0.003±0.000	0.003±0.000	0.003±0.000	0.002±0.000	0.003±0.000	0.003±0.000
Z28	乙酸甲酯	methyl acetate	0.700	0.078±0.007	0.096±0.002	0.076±0.003	0.074±0.000	0.089±0.006	0.079±0.002
Z29	乙酸叶醇酯	(Z)-3-hexenyl acetate	0.020	1.573±0.049	1.624±0.052	1.505±0.033	1.508±0.022	1.701±0.045	1.351±0.052
Z30	反式-2-己烯酸乙酯	(E)-Ethyl-2-hexenoate	0.200	0.051±0.006	0.050±0.006	0.051±0.002	0.046±0.004	0.053±0.005	0.034±0.003
Z31	2,5-二甲基呋喃	2,5-Dimethylfuran	100.000	0.003±0.000	0.003±0.000	0.002±0.000	0.002±0.000	0.003±0.000	0.001±0.000
Z32	异松油烯	alpha-terpinolene	1.500	0.031±0.007	0.008±0.001	0.010±0.000	0.009±0.000	0.011±0.000	0.010±0.000

注：“ND”表示因为无法查到该化合物的阈值而未作分析。

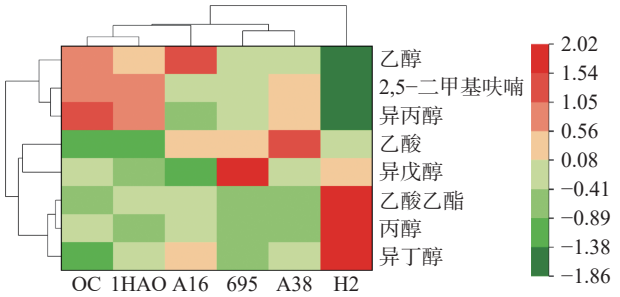


图 12　基于不同品种澳洲坚果中 8 种关键差异性挥发性组分的聚类热图

Fig.12　Cluster heatmap based on 8 key differential volatile components in different varieties of *Macadamia* nuts

注：热图以颜色梯度表示相对含量高低，绿色代表含量较低，红色代表含量较高。

该化合物是品种 1HAO 和 OC 的特征组分，表 2 的方差分析也证实其在这两个品种中的相对含量最高，且与其他四个品种存在显著差异（P<0.05）。异戊醇（Z01）和乙醇（Z11）的 VIP 值大于 1 但排名相对靠后。其中，异戊醇被确定为品种 695 的特征性组分，其在该品种中的相对含量最高，并与其他五个品种差异显著（P<0.05）。乙醇则是品种 A16 的特征组分，其相对含量在 A16 与 OC 之间无显著差异，但显著高于另外四个品种（P<0.05）。VIP 值大于 1 的化合物中排名最后的是异丙醇（Z09）。聚类热图表明其为 OC 的特征组分，但方差分析显示其在 695 与 A16 之间差异不显著，而这两个品种与其他四个品种均存在显著差异（P<0.05）。其中，OC 的异丙醇相对含量最高，且显著高于其他五个品种（P<0.05）。综上所述，不同品种澳洲坚果因内含物质（如糖和氨基酸）含量的差异，可能在干燥过程中通过不同代谢途径影响挥发性物质的生成。然而，挥发性组分与内在成分之间的具体关联仍需从代谢途径层面开展更深入的机制研究。

酮类化合物主要由不饱和脂肪酸或氨基酸的热氧化降解产生[62]。结合本研究前期的结论—脂质氧化是挥发性物质形成的主要途径，我们推测此类酮类物质主要来源于不饱和脂肪酸的氧化降解。作为澳洲坚果中具有典型奶油香味的呈味物质，2,3-丁二酮在干燥阶段可能生成量有限，加之在后续加工或储存过程中的挥发损失，可能导致其在最终检测中的相对含量较低。

3　结论

本研究采用 GC-IMS 技术，结合化学模式识别方法，系统分析了三种干燥处理对广西 6 个主栽品种澳洲坚果挥发性物质的影响。结果表明，干燥过程中挥发性物质的形成主要源于脂质氧化和酶促反应；综合感官评价与能耗分析，50 ℃ 干燥 96 h 可较好保持澳洲坚果特有的奶油香气，为带壳果较优干燥条件。基于该条件下 GC-IMS 数据与化学模式识别分析，共筛选出 8 种特征挥发性组分，其中异丁醇、异戊醇和乙酸为对整体风味贡献较大的关键化合物。OPLS-DA 结合聚类热图以及方差分析显示乙酸为 A38 的特征性组分，2,5-二甲基呋喃为 1HAO 与 OC 所共有的特征性组分，乙酸乙酯、异丁醇和丙醇为 H2 的特征性组分，异戊醇为 695 的特征性组分，乙醇为 A16 的特征性组分，异丙醇为 OC 的另一特征性组分。不同品种澳洲坚果因内含物质（如糖和氨基酸）含量的差异，可能在干燥过程中通过不同代谢途径影响挥发性物质的生成。然而，挥发性组分与内在成分之间的具体关联仍需从代谢途径层面开展更深入的机制研究。

本研究为澳洲坚果初加工品质控制提供了理论依据，也为基于品种风味差异的多元化产品开发提供了数据支持。后续研究将重点优化干燥工艺以更好地保留奶油风味，并深入解析挥发性物质与内在成分之间的代谢关联。

© The Author(s) 2026. This is an Open Access article distributed under the terms of the Creative Commons Attribution License (https://creativecommons.org/licenses/by-nc-nd/4.0/).

参考文献

[1] 陆超忠. 澳洲坚果优质高效栽培技术[M]. 北京：中国农业出版社，2000：1−3. [LU Chaozhong. High-quality and efficient cultivation techniques for Macadamia nuts[M]. Beijing: China Agricul-

ture Press, 2000: 1−3.]
[2] YANG Jun. Brazil nuts and associated health benefits: A review[J]. LWT-Food Science and Technology, 2009, 42(10): 1573−1580.
[3] 国家发展改革委, 国家林草局, 科技部, 等. 关于科学利用林地资源促进木本粮油和林下经济高质量发展的意见[EB/OL](2020-11-18)[2024-12-30]. http://www.gov.cn/zhengce/zhengceku/2020-11/27/content_5565304.htm. [Opinions of the National Development and Reform Commission, National Forestry and Grassland Administration, Ministry of Science and Technology, et al. Opinions on the scientific utilization of forest land resources to promote the high-quality development of wood-based grain and oil crops and understory economy[EB/OL]. (2020-11-18)[2024-12-30]. http://www.gov.cn/zhengce/zhengceku/2020-11/27/content_5565304.htm.]
[4] 广西壮族自治区林业局. 广西壮族自治区林业局对自治区政协十三届二次会议第 20240265 号提案的答复[EB/OL]. (2024-08-27)[2024-12-30]. http://lyj.gxzf.gov.cn/zfxxgkzl/fdzdgknr/rdzxta/t18894892.shtml. [Forestry Bureau of the Guangxi Zhuang Autonomous Region. Response of the forestry bureau of the guangxi Zhuang autonomous region to proposal No. 20240265 of the second session of the 13th Guangxi Zhuang autonomous region committee of the Chinese people's political consultative conference [EB/OL]. (August 27, 2024) [December 30, 2024]. http://lyj.gxzf.gov.cn/zfxxgkzl/fdzdgknr/rdzxta/t18894892.shtml.]
[5] BELTRÁN A, RAMOS M, GRANÉ N, et al. Monitoring the oxidation of almond oils by HS-SPME–GC–MS and ATR-FTIR: Application of volatile compounds determination to cultivar authenticity[J]. Food Chemistry, 2011, 126(2): 603−609.
[6] SCHWAB W, DAVIDOVICH-RIKANATI R, LEWINSOHN E. Biosynthesis of plant-derived flavor compounds[J]. The Plant Journal, 2008, 54(4): 712−732.
[7] 宋海云, 张涛, 王文林, 等. 澳洲坚果果仁脂肪酸分析及评价[J]. 食品研究与开发, 2021, 42(21): 128−136. [SONG Haiyun, ZHANG Tao, WANG Wenlin, et al. Analysis and evaluation of fatty acids in Macadamia nut kernel[J]. Food Research and Development, 2021, 42(21): 128−136.]
[8] 梁燕理, 杨湘良, 韦素梅, 等. 澳洲坚果油脂肪酸组成及氧化稳定性分析[J]. 粮油食品科技, 2019, 27(5): 33−36. [LIANG Yanli, YANG Xiangliang, WEI Sumei, et al. Analysis of fatty acid composition and oxidative stability of Macadamia nut oil[J]. Grain, Oil and Food Science and Technology, 2019, 27(5): 33−36.]
[9] SHUAI Xixiang, DAI Taotao, CHEN Mingshun, et al. Comparative study of chemical compositions and antioxidant capacities of oils obtained from 15 *Macadamia* (*Macadamia integrifolia*) cultivars in China[J]. Foods, 2021, 10(5): 1031.
[10] 帅希祥. 澳洲坚果油组成、营养及其油凝胶体系构建和应用[D]. 南昌: 南昌大学, 2023. [SHUAI X X. Composition, nutrition and construction and application of Macadamia nut oil gel system[D]. Nanchang: Nanchang University, 2023.]
[11] NG E C, DUNFORD N T. Flavour characteristics of peanut cultivars developed for southwestern United States[J]. International Journal of Food Science & Technology, 2009, 44(3): 603−609.
[12] GUO Xiangyang, SCHWAB W, HO C T, et al. Characterization of the aroma profiles of oolong tea made from three tea cultivars by both GC–MS and GC-IMS[J]. Food Chemistry, 2022, 376: 131933.
[13] CHEN Shuang, TANG Jie, FAN Shanshan, et al. Comparison of potent odorants in traditional and modern types of Chinese xiaoqu liquor (Baijiu) based on odor activity values and multivariate analyses[J]. Foods, 2021, 10(10): 2392.
[14] 李沅达, 吴婷, 黄刚骅, 等. SPME-GC-MS 技术结合 ROAV 分析不同加工工艺紫娟白茶的关键香气物质[J]. 食品工业科技, 2023, 44(9): 324−332. [LI Yuanda, WU Ting, HUANG Ganghua, et al. SPME-GC-MS technology combined with ROAV analysis of key aroma compounds in different processing techniques of Zijuan white tea[J]. Food Industry Science and Technology, 2023, 44(9): 324−332.]
[15] 黄刚骅, 李沅达, 邓秀娟, 等. 四种干燥方式云南白茶的香气组分分析[J]. 食品工业科技, 2022, 43(18): 283−292. [HUANG Ganghua, LI Yuanda, DENG Xiujuan, et al. Analysis of aroma components of Yunnan White Tea by four drying methods[J]. Food Industry Science and Technology, 2022, 43(18): 283−292.]
[16] 李扬, 李妍, 李栋, 等. 基于 ROAV 和嗅闻技术分析乳脂的关键风味化合物[J]. 食品科学, 2023, 44(6): 262−267. [LI Yang, LI Yan, LI Dong, et al. Analysis of key flavor compounds in breast fat based on ROAV and olfactory techniques[J]. Food Science, 2023, 44(6): 262−267.]
[17] HOPFGARTNER G. Current developments in ion mobility spectrometry[J]. Analytical and Bioanalytical Chemistry, 2019, 411(24): 6227.
[18] WU Feifan, LIN Kewei, ZHANG Jixiang, et al. Volatile flavor analysis of flesh oil and liver oil from *Doederleinia berycoides* based on HS-GC-IMS, HS-SPME-GC-MS and lipidomics[J]. Grain & Oil Science and Technology, 2025, 8(1): 1−12.
[19] 蒋娟, 倪学理, 陈正峻, 等. 基于 HS-GC-IMS 陕西渭北旱塬地区赤霞珠桃红葡萄酒挥发性风味成分分析[J]. 中国酿造, 2025, 44(3): 264−271. [JIANG Juan, NI Xueli, CHEN Zhengjun, et al. Volatile flavor components of Cabernet Sauvignon rose wine from Weibei Dryland region, Shaanxi based on HS-GC-IMS[J]. China Brewing, 2025, 44(3): 264−271.]
[20] 杨正瑞, 易宇文, 朱开宪, 等. 基于 QDA 与 GC-IMS 技术分析不同油脂热加工处理对松茸风味的影响[J]. 保鲜与加工, 2025, 25(1): 91−100. [YANG Zhengrui, YI Yuwen, ZHU Kaixian, et al. Analysis of the effect of different oil heat processing treatment on the flavor of Matsutake mushroom based on QDA and GC-IMS technology[J]. Preservation and Processing, 2025, 25(1): 91−100.]
[21] 孟新涛, 许铭强, 张婷, 等. 基于 GC-IMS 技术分析新疆不同品种核桃油挥发性成分的差异[J]. 中国油脂, 2025, 50(3): 102−109. [MENG Xintao, XU Mingqiang, ZHANG Ting, et al. Analysis of differences in volatile components of walnut oil from different varieties in Xinjiang based on GC-IMS technology[J]. Chinese Journal of Oils and Fats, 2025, 50(3): 102−109.]
[22] HOU Z W, CHEN Z Y, LI L, et al. Comparison of volatile compounds in Jingshan green tea scented with different flowers using GC-IMS and GC-MS analyses[J]. Foods, 2024, 13(17): 2653.
[23] 尹燕, 王淼, 阳志强, 等. 化学模式识别在中药炮制中的应用[J]. 中草药, 2021, 52(17): 5369−5377. [YIN Yan, WANG Miao, YANG Zhiqiang, et al. Application of chemical pattern recognition in traditional chinese medicine processing[J]. Chinese Herbal Medicine, 2021, 52(17): 5369−5377.]
[24] LIU Kaishuang, JIN Yibao, GU Lifei, et al. Classification and authentication of *Lonicerae* japonicae *Flos* and *Lonicerae flos* by using ^{1}H-NMR spectroscopy and chemical pattern recognition analysis[J]. Molecules, 2023, 28(19): 6860.
[25] 杨颜溶, 田瀚举, 李莹莹, 等. 基于化学模式识别筛选清炒香附的差异标志物[J]. 中草药, 2023, 54(5): 1411−1418. [YANG

Yanrong, TIAN Hanju, LI Yingying, et al. Screening of differential biomarkers for stir fried Aconitum based on chemical pattern recognition[J]. Chinese Herbal Medicine, 2023, 54(5): 1411−1418.]
[26] 江涛, 王庆亮, 孟亦浩, 等. 基于 ICP-MS 结合化学计量法的竹叶青酒无机元素模式识别分析[J]. 分析科学学报, 2025, 41(2): 169−176. [JIANG Tao, WANG Qingliang, MENG Yihao, et al. Pattern recognition analysis of inorganic elements in bamboo leaf green wine based on ICP-MS combined with chemical stoichiometry[J]. Journal of Analytical Science, 2025, 41(2): 169−176.]
[27] 杨乐怡, 林天凤, 黄蓉, 等. 高效液相色谱法联合化学模式识别分析不同产地荷叶中生物碱类成分差异[J]. 化学分析计量, 2025, 34(2): 99−107. [YANG Leyi, LIN Tianfeng, HUANG Rong, et al. High performance liquid chromatography combined with chemical pattern recognition analysis of differences in alkaloid components in lotus leaves from different origins[J]. Chemical Analysis Metrology, 2025, 34(2): 99−107.]
[28] CHANG S K, ALASALVAR C, BOLLING B W, et al. Nuts and their co-products: The impact of processing (roasting) on phenolics, bioavailability, and health benefits–A comprehensive review[J]. Journal of Functional Foods, 2016, 26: 88−122.
[29] WALTON D A, WALLACE H M. Dropping *Macadamia* nuts-in-shell reduces kernel roasting quality[J]. Journal of the Science of Food and Agriculture, 2010, 90(13): 2163−2167.
[30] DUDUZILE BUTHELEZI N M, SAMUKELO MAGWAZA L, ZERAY TESFAY S. Postharvest pre-storage processing improves antioxidants, nutritional and sensory quality of *Macadamia* nuts[J]. Scientia Horticulturae, 2019, 251: 197−208.
[31] WALTON D A, WALLACE H M. Delayed harvest reduces quality of raw and roasted *Macadamia* kernels[J]. Journal of the Science of Food and Agriculture, 2009, 89(2): 221−226.
[32] MASON R L, BOWDEN R P, NOTTINGHAM S M. Effects of oil roasting temperature and time on the quality of two *Macadamia integrifolia* cultivars[J]. Journal of the Science of Food and Agriculture, 1995, 68(4): 471−475.
[33] 静玮, 苏子鹏, 刘义军, 等. HS-SPME_GC-MS 测定澳洲坚果焙烤香气成分[J]. 食品工业, 2016, 37(9): 241−245. [JING Wei, SU Zipeng, LIU Yijun, et al. HS-SPME-GC-MS determination of aroma components in Macadamia nut baking[J]. Food Industry, 2016, 37(9): 241−245.]
[34] TU Xinghao, WU Bangfu, XIE Ya, et al. A comprehensive study of raw and roasted *Macadamia* nuts: Lipid profile, physicochemical, nutritional, and sensory properties[J]. Food Science & Nutrition, 2021, 9(3): 1688−1697.
[35] 涂行浩. 基于脂质组学解析澳洲坚果焙烤过程中品质与风味形成途径[D]. 北京: 中国农业科学院, 2021. [TU Xinghao. Analysis of quality and flavor formation pathway in Macadamia nut baking process based on lipidomics[D]. Beijing: Chinese Academy of Agricultural Sciences, 2021.]
[36] 周春红, 王雪娇, 段筱筠, 等. 基于气相色谱-离子迁移谱法分析不同种类功能性油脂中挥发性成分[J]. 中国食品添加剂, 2024(7): 178−188. [ZHOU Chunhong, WANG Xuejiao, DUAN Xiaoyun, et al. Analysis of volatile components in different types of functional oils and fats based on gas chromatography ion mobility spectrometry[J]. China Food Additives, 2024(7): 178−188.]
[37] 刘登勇, 周光宏, 徐幸莲. 确定食品关键风味化合物的一种新方法: "ROAV"法[J]. 食品科学, 2008, 29(7): 370−374. [LIU Dengyong, ZHOU Guanghong, XU Xinglian. A new method for determining key flavor compounds in food: "ROAV" method[J]. Food Science, 2008, 29(7): 370−374.]
[38] 刘彬球, 陈孝权, 吴晓刚, 等. PCA 和 PLS-DA 用于晒青毛茶级别分类研究[J]. 茶叶科学, 2015, 35(2): 179−184. [LIU Binqiu, CHEN Xiaoquan, WU Xiaogang, et al. PCA and PLS-DA for classification of sun dried green tea grades[J]. Tea Science, 2015, 35(2): 179−184.]
[39] 田甜, 韦锦坚, 文金华, 等. 不同季节凌云白毫绿茶的香气成分差异分析[J]. 食品科学, 2020, 41(22): 252−259. [TIAN Tian, WEI Jinjian, WEN Jinhua, et al. Analysis of the differences in aroma components of Lingyun Baihao Green Tea in different seasons[J]. Food Science, 2020, 41(22): 252−259.]
[40] 尹含靓, 肖何, 邓高文, 等. 基于 GC-IMS 技术分析不同香辛料水煮液的风味物质组成差异[J]. 食品工业科技, 2021, 42(17): 278−284. [YIN Hanliang, XIAO He, DENG Gaowen, et al. Analysis of flavor compound composition differences in different spice boiling solutions based on GC-IMS technology[J]. Food Industry Science and Technology, 2021, 42(17): 278−284.]
[41] 孔天宇, 闫新焕, 李根, 等. 气相色谱-离子迁移谱在果蔬制品分析中的应用: 综述[J]. 现代食品科技, 2025, 41(8): 326−337. [KONG Tianyu, YAN Xinhua, LI Gen, et al. Application of gas chromatography ion mobility spectroscopy in the analysis of fruit and vegetable products: A review[J]. Modern Food Technology, 2025, 41(8): 326−337.]
[42] WANG Xinran, ROGERS K M, LI Yi, 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.
[43] ALASALVAR C, SHAHIDI F. Tree nuts: Composition, phytochemicals and health effects[M]. CRC Press: Boca Raton, FL, USA, 2008.
[44] RIBEIRO S R, RIBEIRO Q M, KLEIN B, et al. Effect of low oxygen on quality attributes of 'Barton' pecan nuts after long-term storage at different temperatures[J]. Scientia Horticulturae, 2020, 263: 109098.
[45] 王克夷. 糖类的合成和降解[J]. 生命的化学, 2009, 29(2): 155−161. [WANG Keyi. Synthesis and degradation of sugars[J]. Chemistry of Life, 2009, 29(2): 155−161.]
[46] 权化丽. 黑芝麻相关组分在不同热处理条件下的变化机制初探[D]. 南昌: 南昌大学, 2021. [QUAN Huali. Preliminary study on the mechanism of changes in components related to Black Sesame under different heat treatment conditions[D]. Nanchang: Nanchang University, 2021.]
[47] 刘玫初. 基于脂质组学 UHPLC-QE Orbitrap/MS/MS 的焙烤榛子挥发性物质形成影响研究[D]. 沈阳: 沈阳农业大学, 2024. [LIU Meichu. Study on the effect of volatile organic compound formation in baked hazelnuts based on lipidomics UHPLC-QE Orbitrap/MS/MS[D]. Shenyang: Shenyang Agricultural University, 2024.]
[48] SHI Cuiping, GUO Hao, WU Tingting, et al. Effect of three types of thermal processing methods on the lipidomics profile of tilapia fillets by UPLC-Q-Extractive Orbitrap mass spectrometry[J]. Food Chemistry, 2019, 298: 125029.
[49] 李鑫, 付娜, 王红强. 基于可控氧化-美拉德反应的牛油风味特征分析[J]. 现代食品科技, 2025, 41(12): 278−290. [LI Xin, FU Na, WANG Hongqiang. Analysis of flavor characteristics of butter based on controllable oxidation Maillard reaction[J]. Modern Food Technology, 2025, 41(12): 278−290.]
[50] 张涛, 宋海云, 涂行浩, 等. 澳洲坚果油脂性状在广西不同产

地间的稳定性及差异性分析[J]. 中国粮油学报, 2025, 40(5): 135−143. [ZHANG Tao, SONG Haiyun, TU Xinghao, et al. Stability and differential analysis of Macadamia nut oil characteristics among different production areas in Guangxi[J]. Chinese Journal of Grain and Oil, 2025, 40(5): 135−143.]

[51] ROSSO M C, LIBERTO E, SPIGOLON N, et al. Evolution of potent odorants within the volatile metabolome of high-quality hazelnuts (*Corylus avellana* L.): Evaluation by comprehensive two-dimensional gas chromatography coupled with mass spectrometry [J]. Analytical and Bioanalytical Chemistry, 2018, 410(15): 3491−3506.

[52] 张涛, 贺鹏, 宋海云, 等. 基于因子分析和聚类分析的 30 份山黄皮种质资源评价[J]. 热带作物学报, 2020, 41(7): 1326−1334. [ZHANG Tao, HE Peng, SONG Haiyun, et al. Evaluation of 30 Shanhuangpi germplasm resources based on factor analysis and cluster analysis[J]. Journal of Tropical Crops, 2020, 41(7): 1326−1334.]

[53] 张涛, 贺鹏, 宋海云, 等. 基于因子分析的澳洲坚果露酒香气品质研究[J]. 中国南方果树, 2019, 48(4): 46−52. [ZHANG Tao, HE Peng, SONG Haiyun, et al. Research on the aroma quality of Macadamia nut wine based on factor analysis[J]. Chinese Southern Fruit Tree, 2019, 48(4): 46−52.]

[54] 刘伟, 张群, 李志坚, 等. 不同品种黄花菜游离氨基酸组成的主成分分析及聚类分析[J]. 食品科学, 2019, 40(10): 243−250. [LIU Wei, ZHANG Qun, LI Zhijian, et al. Principal component analysis and cluster analysis of free amino acid composition in different varieties of Yellow Flower Vegetables[J]. Food Science, 2019, 40(10): 243−250.]

[55] 李少辉, 赵巍, 刘松雁, 等. SDE-GC-MS 结合 OPLS-DA 分析不同生态区谷子品种香气特征[J]. 中国农业科学, 2023, 56(13): 2586−2596. [LI Shaohui, ZHAO Wei, LIU Songyan, et al. SDE-GC-MS combined with OPLS-DA analysis of aroma characteristics of foxtail millet varieties in different ecological regions[J]. Chinese Journal of Agricultural Sciences, 2023, 56(13): 2586−2596.]

[56] 赵文华, 王桂瑛, 荀文, 等. 基于代谢组学筛选表征茶花鸡肌肉中特征风味的水溶性化合物[J]. 中国农业科学, 2020, 53(8): 1627−1642. [ZHAO Wenhua, WANG Guiying, XUN Wen, et al. Screening of water-soluble compounds characterizing the characteristic flavor of Camellia chicken muscle based on metabolomics[J]. Chinese Journal of Agricultural Sciences, 2020, 53(8): 1627−1642.]

[57] 李惠敏, 李凤超, 高必兴, 等. 基于 HPLC 指纹图谱及化学模式识别对比研究曲花紫堇及同属药材[J]. 中草药, 2024, 55(5): 1709−1716. [LI Huimin, LI Fengchao, GAO Bixing, et al. Comparative study on Quhua Zijin and other medicinal herbs based on HPLC fingerprint and chemical pattern recognition[J]. Chinese Herbal Medicine, 2024, 55(5): 1709−1716.]

[58] 李波, 吴嘉慧, 黄晶, 等. 基于 HPLC 指纹特征关联 O2PLS-DA 模型分析低温干燥当归药材、饮片、标准汤剂物质基础差异[J]. 中华中医药学刊, 2023, 41(4): 120−126. [LI Bo, WU Jiahui, HUANG Jing, et al. Analysis of the differences in the material basis of low-temperature dried *Angelica sinensis* medicinal materials, decoction pieces, and standard decoctions based on HPLC fingerprint feature correlation O2PLS-DA model[J]. Chinese Journal of Traditional Chinese Medicine, 2023, 41(4): 120−126.]

[59] 谭秋锦, 韦媛荣, 黄锡云, 等. 10 份澳洲坚果种质果实性状与营养成分分析[J]. 果树学报, 2021, 38(5): 672−680. [TAN Qiujin, WEI Yuanrong, HUANG Xiyun, et al. Analysis of fruit characteristics and nutritional components of 10 Macadamia nut germplasms[J]. Journal of Fruit Science, 2021, 38(5): 672−680.]

[60] 李媚媛, 刘安琪, 唐道埔, 等. 产香气化合物微生物的研究进展[J]. 食品科学, 2023, 44(19): 259−269. [LI Meiyuan, LIU Anqi, TANG Daopu, et al. Research progress on microorganisms producing aromatic compounds[J]. Food Science, 2023, 44(19): 259−269.]

[61] [荷]里奥·范海默特. 化合物嗅觉阈值汇编[M]. 李智宇, 王凯, 冒德寿, 等译. 北京: 科学出版社, 2018. [[Netherlands] LEO V H. Compilation of olfactory thresholds for compounds [M]. Translated by LI Zhiyu, WANG Kai, MAO Deshou, et al. Beijing: Science Press, 2018.]

[62] YIN Huiyong, XU Libin, PORTER N A. Free radical lipid peroxidation: Mechanisms and analysis[J]. Chemical Reviews, 2011, 111(10): 5944−5972.