张爱琴, 柳利龙, 郭斌, 等. 基于广泛靶向代谢组学的庆阳酒谷和陇谷 23 品种小米代谢物差异分析 [J]. 食品工业科技, 2026, 47(16): 336−345. doi: 10.13386/j.issn1002-0306.2025060253
ZHANG Aiqin, LIU Lilong, GUO Bin, et al. Analysis of Differential Metabolites in Qingyang Jiugu and Longgu 23 Millet Varieties Using Widely Targeted Metabolomics[J]. Science and Technology of Food Industry, 2026, 47(16): 336−345. (in Chinese with English abstract). doi: 10.13386/j.issn1002-0306.2025060253

· 分析检测 ·

基于广泛靶向代谢组学的庆阳酒谷和陇谷 23 品种小米代谢物差异分析

张爱琴[1], 柳利龙[2,*], 郭　斌[1], 张　环[1], 徐　瑞[1], 于安芬[1], 李瑞琴[1], 许文艳[1]
(1.甘肃省农业科学院畜草与绿色农业研究所, 甘肃兰州 730070;
2.甘肃省农业科学院小麦研究所, 甘肃兰州 730070)

摘　要: 为了探究不同特色小米品种的营养特性，本研究选取特色地方小米品种庆阳酒谷（QYJG）和现代优良小米品种陇谷 23（LG23）为研究对象，系统比较两种小米营养品质差异及代谢物特征。通过测定 2 种小米的理化成分，并利用广泛靶向代谢组学技术对其代谢物进行测定，结合主成分分析、正交偏最小二乘判别分析、聚类分析及代谢通路分析等方法，对 QYJG 和 LG23 的代谢特征进行系统研究。结果表明：QYJG 直链淀粉含量仅为 0.91%，是一种典型的糯性小米品种，其不饱和脂肪酸（90.85%）、多酚（1.00 mg GAE/g）及非淀粉多糖（7.66 mg/g）含量显著高于 LG23（P<0.05），脂肪酸构成相对较优，而 LG23 中黄酮（15.72 mg RE/g）、必需氨基酸的含量（96.88 mg/kg）及氨基酸的总量（1765.72 mg/kg）显著高于 QYJG（P<0.01），且支链氨基酸和限制性氨基酸含量丰富，因此，LG23 在氨基酸合成方面优势明显；QYJG 和 LG23 中共鉴定出了 1408 种代谢物，其组成主要包括脂质、生物碱、黄酮和氨基酸及其衍生物等；筛选出了 587 种显著差异代谢物，QYJG 中上调 366 种，LG23 中上调 221 种，差异代谢物主要富集在其他次生代谢物、氨基酸、碳水化合物、维生素与辅因子及脂质生物合成与代谢途径，其中 QYJG 中脂质和糖类的代谢通路相对活跃，赋予它抗氧化稳定性与低升糖指数的特性，LG23 中氨基酸及黄酮类的代谢通路增强，表明其抗氧化及氮代谢能力较突出。本研究从理化组分和代谢组学两方面揭示了 QYJG 和 LG23 营养品质差异以及代谢特征，为小米品种精准选育及产品开发和利用提供理论基础。

关键词: 庆阳酒谷, 陇谷 23, 广泛靶向代谢组学, 营养成分, 差异代谢物, 代谢通路
中图分类号: TS213; O657　　**文献标识码:** A　　**文章编号:** 1002−0306(2026)16−0336−10
DOI: 10.13386/j.issn1002-0306.2025060253　　本文网刊:

Analysis of Differential Metabolites in Qingyang Jiugu and Longgu 23 Millet Varieties Using Widely Targeted Metabolomics

ZHANG Aiqin[1], LIU Lilong[2,*], GUO Bin[1], ZHANG Huan[1], XU Rui[1], YU Anfen[1], LI Ruiqin[1], XU Wenyan[1]
(1.Animal Husbandry, Pasture and Green Agriculture Institute, Gansu Academy of Agricultural Sciences, Lanzhou 730070, China;
2.Wheat Research Institute, Gansu Academy of Agricultural Science, Lanzhou 730070, China)

Abstract: To investigate the nutritional characteristics of different specialty millet varieties, this study selected the local specialty variety Qingyang Jiugu (QYJG) and the modern elite cultivar Longgu 23 (LG23) as research subjects, systematically comparing their differences in nutritional quality and metabolite profiles. The physicochemical components of both varieties were measured, and their metabolites were analyzed using widely targeted metabolomics technology. Metabolite characteristics were analyzed by principal component analysis, orthogonal partial least squares discriminant analysis, cluster analysis and metabolic pathway analysis. Results showed that the amylose content of QYJG was only 0.91%, indicating that

收稿日期: 2025−06−20
基金项目: 甘肃省农业科学院中青年基金（2023GAAS28, 2022GAAS49）; 甘肃省青年科技基金计划项目（20JR10RA462）。
作者简介: 张爱琴（1988−）, 女, 硕士, 助理研究员, 研究方向: 农产品营养品质挖掘与评价, E-mail: 2009aiqinhai@163.com。
*** 通信作者:** 柳利龙（1987−）, 男, 硕士, 副研究员, 研究方向: 农产品营养品质评价, E-mail: liulilong2020@163.com。

it was a typical waxy millet variety. QYJG exhibited higher contents of unsaturated fatty acids (90.85%), polyphenols (1.00 mg GAE/g) and polysaccharides (7.66 mg/g) than LG23 (P<0.05), along with a relatively favorable fatty acid composition. In contrast, the contents of flavonoids (15.72 mg RE/g), essential amino acids (96.88 mg/kg) and total amino acids (1765.72 mg/kg) in LG23 were significantly higher than those in QYJG (P<0.01). LG23 also contained abundant levels of branched-chain amino acids and limiting amino acids, which confered a significant advantage in amino acid synthesis. A total of 1408 metabolites were identified in QYJG and LG23, primarily consisting of lipids, alkaloids, flavonoids, amino acids and their derivatives. And 587 significantly differential metabolites were screened, with 366 up-regulated in QYJG and 221 up-regulated in LG23. These differential metabolites were mainly involved in pathways related to the biosynthesis and metabolic pathways of secondary metabolites, amino acids, carbohydrates, vitamins and cofactors, as well as lipid. Lipid and carbohydrate metabolic pathways were more active in QYJG, which might contribute to its antioxidant stability and low glycemic properties. LG23 exhibited enhanced amino acid and flavonoid metabolic pathways, highlighting its superior antioxidant capacity and nitrogen metabolism efficiency. This study revealed the differences in nutritional quality and metabolic profiles between QYJG and LG23 from the perspectives of physicochemical properties and metabolomics, which provided a theoretical basis for precise breeding of millet varieties and the development and utilization of related products.

Key words: Qingyang Jiugu (QYJG); Longgu 23 (LG23); widely targeted metabolomics; nutrient composition; differential metabolites; metabolic pathways

小米（*Setaria italica* L. Beauv）作为我国主要的杂粮作物之一，具有抗旱性、耐瘠薄及 C_4 光合途径的高光效等特点，主要种植在我国山西、内蒙古、陕西和甘肃等干旱或半干旱区域[1−3]。小米具有药食同源的功能，营养价值极高，不仅含有丰富的蛋白质、膳食纤维、脂肪酸和维生素等基本营养成分，还富含多酚、黄酮和多糖等功能成分，而且其营养成分易被人体消化吸收，是兼具营养与功能特性的潜在健康食品资源，对人们膳食结构的调整具有重要的作用[4−6]。

广泛靶向代谢组学为一门新发展起来的学科，同时兼具了非靶向代谢组学技术的高通量筛查优势与靶向代谢组学技术的精准定量特性，不仅能够实现数百种已知代谢物的精准鉴定与定量分析，还可定量大量未知代谢物[7−8]，在谷物代谢特征和品质研究中已有较多应用[9−13]。康庆芳等[9] 基于 UPLC-MS/MS 技术对‘晋谷 21’与矮秆品系‘21DG’差异代谢物进行分析，共筛选到 213 种差异代谢物，两组小米样品中氨基酸、黄酮以及糖类的生物合成与代谢差异明显，这些代谢物与小米的营养品质关系密切。Liu 等[10] 利用广泛靶向代谢组技术系统比较了小米、荞麦、藜麦等六种粗粮的代谢物谱差异，发现藜麦和荞麦与其他粗粮相比表现出显著不同的代谢组学特征，同时鉴定了每种粗粮中的特异性代谢物。Zhao 等[13] 对两类黑米和两类白米进行了广泛靶向代谢组检测分析，解析了普通稻米与糯米间代谢组差异，揭示了糯米在维生素、氨基酸及其能量代谢通路中的独特优势。

陇谷 23 号是由甘肃省农业科学院选育的一种高产优质小米新品种，白谷黄米，在第十四届全国优质食用粟米评选活动中获得了“一级优质米”称号[14]，2024 年本课题组对甘肃省会宁县中川镇小米种植示范基地的 10 种不同品种小米的营养成分进行分析评价，发现陇谷 23 号中黄酮、粗多糖、总酚、脂肪、蛋白质、锌、硒等 14 项营养指标的含量明显高于其他品种小米，综合评价结果表明陇谷 23 的营养品质最优[15]。庆阳酒谷是一种糯性小米，红谷黄米，胚乳中直链淀粉含量较低，米饭口感柔软，适口性佳[16]。2022 年本课题组对甘肃省陇东地区的庆阳酒谷与其他小米营养品质研究发现，庆阳酒谷中蛋白质、淀粉、油酸和矿物元素等营养品质指标的含量高于其他小米，主成分综合评价结果表明庆阳酒谷综合营养品质最好[17]。综上所述，陇谷 23 号和庆阳酒谷的综合营养品质较优，但目前，陇谷 23 号与庆阳酒谷这两个优质小米品种间营养品质特征与代谢物差异尚不清楚。

为深入分析甘肃省名优小米陇谷 23 号和庆阳酒谷的营养品质特征及代谢物差异，本研究对陇谷 23 号和庆阳酒谷的营养品质进行测定分析，采用广泛靶向代谢组学技术对 2 种小米的代谢物进行全面鉴定与分析，解析两种小米间营养品质和代谢差异特征，旨在明确它们营养品质的差异化优势，为小米营养价值开发、品种的精准选育与高值化加工提供科学依据。

1　材料与方法

1.1　材料与仪器

本实验以陇谷 23 号（LG23）和庆阳酒谷（QYJG）为研究对象，LG23 为甘肃省农业科学院培育的小米品种，在 2024 年收获季采集于甘肃省白银市会宁县中川镇谷子种植示范基地，QYJG 为一种糯性小米，属于地方品种，同年收获季采集于甘肃省庆阳市庆城县太白梁乡。每组样品设置 3 个生物学重复；甲酸、乙腈、甲醇　色谱纯，德国默克公司；直链淀粉、没食子酸、葡萄糖、芦丁标准品　纯度≥98.0%，上海源叶生物科技公司；氨基酸标准品　纯度≥99.0%，美国 Sigma 试剂公司；其他试剂均为优级纯。

Agilent 6495 超高效液相色谱串联质谱仪　美国安捷伦科技公司；GC-2000 气相色谱分析仪　杭

州聚光科技股份有限公司; 5424R 冷冻离心机　艾本德生命科学公司; Kjeltec™ 8200 凯氏定氮仪　瑞典福斯分析仪器公司; Cary 50 紫外可见分光光度计　美国瓦里安科技公司。

1.2　实验方法

1.2.1　样品前处理　谷子样品经手工脱壳, 去除杂质和碎米粒后, 将其置于冻干机中真空冷冻干燥 63 h, 随后利用研磨机将其研磨至粉末状, 用于后续理化指标和广泛靶向代谢组学测定。

1.2.2　理化指标测定　灰分含量的测定依据 GB 5009.4-2016《食品安全国家标准 食品中灰分的测定》; 蛋白质含量的测定依据 GB 5009.5-2016《食品安全国家标准 食品中蛋白质的测定》; 粗脂肪含量的测定依据 GB 5009.6-2016《食品安全国家标准 食品中脂肪的测定》; 粗淀粉含量的测定依据 GB 5009.9-2023《食品安全国家标准 食品中淀粉的测定》; 直链淀粉含量的测定依据 NY/T 4479-2025《谷物籽粒中直链淀粉的测定 分光光度法》; 脂肪酸组分含量的检测依据 GB 5009.168-2016《食品安全国家标准 食品中脂肪酸的测定》; 氨基酸组分含量的测定采用液相色谱-串联质谱法[18]; 黄酮、多酚和非淀粉多糖含量的测定分别采用芦丁比色法[15]、福林酚比色法[19−20]和苯酚-硫酸比色法[21]。

1.2.3　广泛靶向代谢组学测定

1.2.3.1　样品制备　精确称取 50 mg 小米粉末样品, 加入 1.20 mL 70% 甲醇溶液, 涡旋 30 s, 每 30 min 涡旋 1 次, 共涡旋 6 次。12000 r/min 条件离心 3 min 后, 吸取上清液, 采用 0.22 μm 微孔有机滤膜进行过滤后, 将滤液贮存于棕色进样瓶中, 用于后续代谢物测定[22]。

1.2.3.2　色谱质谱条件　代谢数据采集仪器系统主要包括超高效液相色谱(Ultra performance liquid chromatography, UPLC)(ExionLC™ AD)和串联质谱(Tandem mass spectrometry, MS/MS), 色谱质谱条件如下[22]。

液相条件: 采用 Agilent SB-C_{18} 反向色谱柱(1.8 μm, 2.1 mm×100 mm); 流动相 A 是含有 0.1% 甲酸的超纯水体系, 流动相 B 是含有 0.1% 甲酸的乙腈体系; 洗脱梯度的起始条件为 95% A 相与 5% B 相, 至 9.00 min 时将 B 相比例线性提升到 95%, 并保持 1 min, B 相比例在 10.00~11.10 min 时降到 5%, 以 5% 平衡至 14 min; 流动相的流速为 0.35 mL/min, 柱温箱的温度为 40 ℃; 样品进样量为 2 μL。

质谱条件: 电喷雾离子源(ESI)的温度设定为 500 ℃, 离子喷雾电压(IS)在正离子模式下设定为 5500 V, 负离子模式设定为−4500 V。碰撞诱导的电离参数设定为高, 三重四极杆(QQQ)的扫描采用多反应监测模式(MRM), 同时将碰撞气体(氮气)设置为中等浓度。

1.2.3.3　定性定量方法　基于迈维代谢自建数据库(Metware database, MWDB), 对样本的代谢物进行质谱定性定量分析。通过三重四极杆筛选出每个物质的特征离子, 在检测器中获得特征离子的信号强度, 用 MultiQuant 软件进行色谱峰积分和校正, 每个色谱峰的峰面积代表对应物质的相对含量[22]。

1.3　数据处理

采用 SPSS 28.0 软件分析小米理化指标数据; 小米代谢物的多元统计分析参照兰天等[22] 方法; 小米差异代谢物的筛选以 OPLS-DA 的变量重要性投影(VIP)、差异倍数(FC)及显著性 P 值为依据。

2　结果与分析

2.1　小米主要成分分析

2.1.1　主要营养物质　从表 1 可以看出, 两种小米中灰分、粗脂肪和粗淀粉含量无显著差异, QYJG 中蛋白质含量显著低于 LG23(P<0.05), 而其直链淀粉含量仅为 0.91%(<3.5%), 表明 QYJG 属于典型的糯性谷物品种[23]。小米脂肪酸组分分析结果表明, 亚油酸是两种小米脂肪酸的主要组分, 其相对含量约占脂肪酸总量的 70%, QYJG 中棕榈酸和油酸的含量显著高于 LG23(P<0.01), 而 LG23 中硬脂酸和亚麻酸含量相对较高。从脂肪酸营养成分特征分析, QYJG 中不饱和脂肪酸含量为 90.85%, 显著高于 LG23(P<0.05), 同时饱和脂肪酸含量为 9.49%, 显著低于 LG23(P<0.01), 因此, QYJG 脂肪酸营养配比更合理。在功能营养成分方面, QYJG 中多酚和非淀粉多糖的含量分别为 1.00 mg GAE/g、7.66 mg/g, 均显著高于 LG23(P<0.01), 而 LG23 黄酮含量为 15.72 mg RE/g, 显著高于 QYJG(P<0.05)。

表 1　QYJG 和 LG23 中主要营养物质含量
Table 1　Contents of major nutrients in QYJG and LG23

项目	指标	QYJG	LG23
基本营养成分	灰分(%)	1.88±0.10	1.73±0.16
	蛋白质(%)	12.29±0.03	12.90±0.04*
	粗脂肪(%)	4.80±0.11	4.46±0.27
	粗淀粉(%)	73.59±0.79	72.49±0.48
	直链淀粉(%)	0.91±0.06	15.32±0.38**
脂肪酸组分	棕榈酸(%)	8.33±0.24**	6.04±0.17
	硬脂酸(%)	1.16±0.076	5.82±1.16**
	油酸(%)	18.11±0.33**	12.92±0.16
	亚油酸(%)	69.86±0.77	70.60±0.60
	亚麻酸(%)	2.88±0.23	4.18±0.21**
	不饱和脂肪酸(%)	90.85±1.02*	87.70±0.54
	饱和脂肪酸(%)	9.49±0.31	11.86±0.11**
功能营养成分	黄酮(mg RE/g)	12.32±0.50	15.72±0.63*
	多酚(mg GAE/g)	1.00±0.0085**	0.79±0.031
	非淀粉多糖(mg/g)	7.66±0.040**	4.93±0.11

注: **代表P<0.01, *代表P<0.05, 表2同。

2.1.2　氨基酸组分及含量　如表 2 所示, 两种小米中共检测出 21 种游离氨基酸, Ala 在 QYJG 中未检出,

Ser 在 LG23 中未检出，这可能与小米品种特异性及其代谢调控差异有关。QYJG 与 LG23 中氨基酸的组成及含量存在明显差异。必需氨基酸中，LG23 中 Val、Lys、Trp 含量显著高于 QYJG（P<0.01），Lys 属于谷物的限制性氨基酸，Val 属于支链氨基酸，表明 LG23 中支链氨基酸及限制性氨基酸的供给更优，而 QYJG 中 Thr 含量远高于 LG23。LG23 中 Arg、His 和 Gln 3 种半必需氨基酸激增，表示其免疫或代谢调节潜力更强。非必需氨基酸中，LG23 中 Pro、Glu、Gly 含量显著高于 QYJG（P<0.01），QYJG 中 Asp 和 Asn 含量显著占优，同时富含 GABA，Asp 具有较强的氮代谢和解毒能力[24]，GABA 是一种非蛋白质源的功能性氨基酸[24]，共同赋予了 QYJG 独特的生理活性。氨基酸总量分析表明，LG23 中必需氨基酸、半必需氨基酸以及总氨基酸含量均显著高于 QYJG（P<0.01），尤其是半必需氨基酸的含量为 QYJG 的 2.30 倍。

表 2　QYJG 和 LG23 中游离氨基酸组分与含量（mg/kg）
Table 2　Compositions and contents of free amino acids in QYJG and LG23 (mg/kg)

类型	氨基酸	QYJG	LG23
必需氨基酸（EAA）	苯丙氨酸（Phe）	7.78±0.06	8.65±0.07*
	亮氨酸（Leu）	8.88±0.39	9.25±0.08
	异亮氨酸（Ile）	8.30±0.8	8.99±0.46
	甲硫氨酸（Met）	3.61±0.21*	3.14±0.13
	缬氨酸（Val）	12.69±0.15	25.97±1.16**
	苏氨酸（Thr）	20.84±0.44**	5.13±0.13
	赖氨酸（Lys）	18.00±0.46	28.13±1.39**
	色氨酸（Trp）	5.69±0.1	7.61±0.34**
半必需氨基酸（SEAA）	精氨酸（Arg）	92.47±4.31	164.06±3.28**
	组氨酸（His）	47.8±0.95	84.00±0.19**
	谷氨酰胺（Gln）	31.99±2.65	148.81±8.17**
非必需氨基酸（NAA）	天冬氨酸（Asp）	340.15±45.21**	159.39±4.4
	酪氨酸（Tyr）	7.70±0.09	7.71±0.32
	脯氨酸（Pro）	35.27±1.52	100.15±2.79**
	谷氨酸（Glu）	227.11±4.58	314.39±11.44**
	半胱氨酸（Cys）	11.01±0.06	11.14±0.14
	天冬酰胺（Asn）	469.01±8.86**	398.14±7.33
	丙氨酸（Ala）	–	4.33±1.12
	丝氨酸（Ser）	3.56±0.62	–
	甘氨酸（Gly）	99.42±3.85	251.45±8.58**
非蛋白质氨基酸（NPAA）	γ-氨基丁酸（GABA）	33.18±0.85*	25.28±1.19
	必需氨基酸（EAA）	85.80±1.44	96.88±1.17**
	半必需氨基酸（CEAA）	172.25±7.59	396.87±8.29**
	非必需氨基酸（NAA）	1193.23±41.16	1246.70±23.81
	氨基酸总量（TAA）	1484.46±44.36	1765.72±24.91**

注：EAA=Phe+Leu+Ile+Met+Val+Thr+Lys+Trp；CEAA =Arg+His+Gln；NAA=Asp+Tyr+Pro+Glu+Cys+Asn+Ala+Ser+Gly；“–”表示未检出。

本研究 2 种小米中蛋白质、脂肪、灰分含量高于杜冰等[25] 报道的 66 份小米样品的平均含量（分别为 10.53%、4.70%、1.25%）；多酚含量显著高于延莎等[26] 报道的 6 种小米多酚的最高值（0.52 mg/g）；不饱和脂肪酸含量高于本课题组此前报道[17] 的甘肃省陇东地区小米平均水平（85.15%）；TAA 含量高于柳利龙等[18] 对陇中地区小米的测定均值（1317.14 mg/kg），其中，LG23 的 EAA 与 CEAA 含量更是远高于该研究结果（EAA 为 88.01 mg/kg；CEAA 为 204.21 mg/kg）。因此，本研究选取的 2 种小米在主要营养成分方面表现突出，具有更优的营养品质。

综上所述，QYJG 与 LG23 中主要营养物质及氨基酸组分存在显著差异，为了进一步研究两种小米营养品质表型差异的原因，利用植物广泛靶向代谢组学技术对 QYJG 和 LG23 中全谱代谢物进行系统的鉴定分析。

2.2　小米代谢物组成分析

2.2.1　样品质控分析　代谢组学分析中，质控样本分析是质谱数据质量评估的核心环节，由正负离子模式（+/−）总离子流图可看出（图 1），代谢物检测的总离子流图峰形分布均匀，基线平稳，不同时间点上曲线的重叠性较好，说明质谱对同一样本在不同时间节点检测时，信号的稳定性良好，测定的数据真实可信。

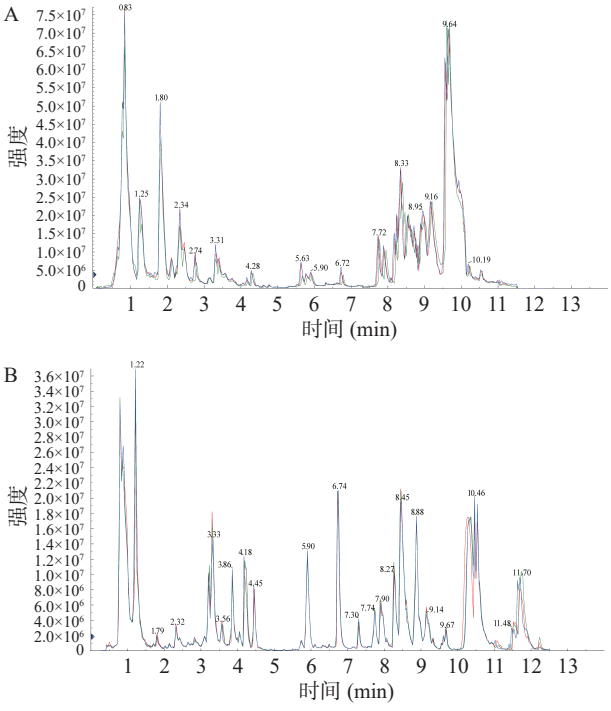


图 1　质控样本总离子流图
Fig.1　Total ion chromatogram for quality control samples
注：A 表示负离子模式；B 表示正离子模式。

2.2.2　代谢物的鉴定及种类　通过广泛靶向代谢组学从 QYLG 和 LG23 中共鉴定出 12 类 1408 种代谢物（图 2），所有已鉴定的代谢物成分都是两种小米共有成分，其中脂质 263 种（包括游离脂肪酸、甘油酯、溶血磷脂酰乙醇胺、鞘脂以及溶血磷脂酰胆碱等）、黄酮 211 种（包括黄酮、黄酮醇、黄烷醇类及二氢黄酮等）、生物碱 204 种（包括生物碱、酚胺、吲哚类生物碱、吡啶类生物碱以及喹啉类生物碱等）和氨

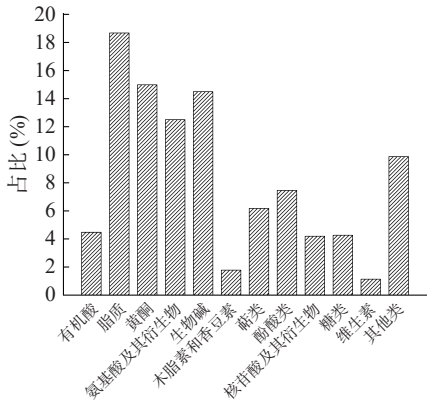


图 2 QYJG 和 LG23 中代谢物类别

Fig.2 Categories of metabolites from QYJG and LG23

基酸及其衍生物 176 种，上述四类代谢物种类最多，占代谢物总数量的 60.66%。此外，还包括酚酸类、有机酸类、糖类、萜类和核苷酸及其衍生物等。

2.2.3 不同种类代谢物相对含量分析 QYJG 与 LG23 总代谢物相对含量（用峰面积表示）分别为 3.62×10^9 和 3.90×10^9，代谢物含量水平接近。对代谢物种类占比最高的四类化合物的相对含量进行分析（图 3），结果发现脂质类代谢物在 2 种小米样品中的相对含量均最高，其次为氨基酸及其衍生物和生物碱，而黄酮相对含量则最低。QYJG 中脂质类代谢物相对含量显著高于 LG23（$P<0.01$），而 LG23 中氨基酸及其衍生物、黄酮类化合物的相对含量显著高于 QYJG（$P<0.01$），生物碱类代谢物在 2 个小米品种中的相对含量相近。两种小米的代谢特征分析表明，QYJG 可能借助增强脂质合成途径来维系其代谢物优势，而 LG23 更倾向优先对氨基酸及黄酮类代谢物的生物合成过程进行调控。

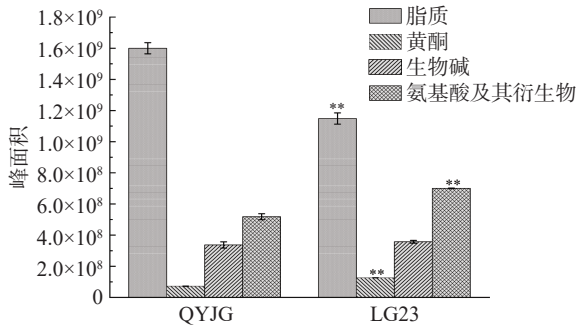


图 3 QYLG 和 LG23 中主要类别代谢物相对含量

Fig.3 Relative content of major classes of metabolites in QYLG and LG23

注：**代表 $P<0.01$。

2.3 差异代谢物分析

2.3.1 代谢物 PCA 和 OPLS-DA 为了比较 QYJG 与 LG23 间代谢物差异，利用主成分分析（PCA）对两种小米样品的代谢物进行统计分析，结果如图 4 所示，PC1 与 PC2 的方差贡献率分别是 73.08% 和 8.12%，前两个主成分的累计方差贡献率为 81.20%，

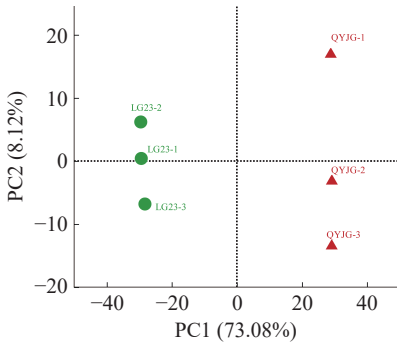


图 4 小米 PCA 的得分图

Fig.4 Score plot of PCA in millet

表明该模型可以有效呈现代谢物数据的整体变异情况。组内样本在 PCA 空间中较紧密聚集，说明样品组内变异度较小，重复性较高；QYJG 与 LG23 沿 PC1 轴显著分离，分布于 PC1 轴的左右两侧，表明 QYJG 和 LG23 间代谢物组分差异明显。PCA 测定结果的重复性和可靠性较好，可以用于 2 种小米差异代谢产物的分析。

尽管 PCA 可以提取代谢物数据的主要信息，但它对相关性较低的变量敏感度不够，正交偏最小二乘判别分析（OPLS-DA）可以通过正交信号校正技术有效分离与分类变量无关的变异噪声，有效提升对差异代谢物的解析能力[27]。因此，采用 OPLS-DA 进一步分析 QYJG 和 LG23 代谢物的差异，并绘制 OPLS-DA 得分图，同时对模型做了 200 次的交叉验证。从图 5A 可以看出两个小米样本分离趋势明显，品种间代谢物差异显著。OPLS-DA 模型预测参数为 R^2X、R^2Y、Q^2，R^2X 与 R^2Y 值愈发趋近 1，说明该模型的可靠性越高，若 $Q^2>0.90$，则表示该模型的预测能力是

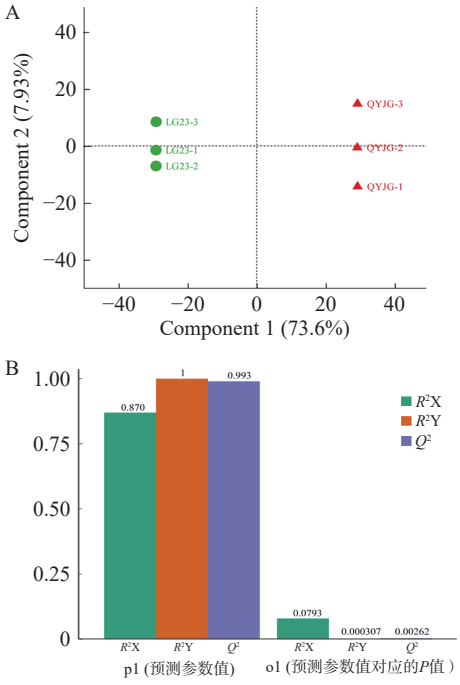


图 5 OPLS-DA 得分图（A）和评价参数（B）

Fig.5 OPLS-DA score plot (A) and evaluation parameter (B)

有效出色的。o1 为 3 个预测参数值对应的 P 值，若 P<0.05 表示模型最佳[28]。由图 5B 可知，QYJG 和 LG23 OPLS-DA 模型的 R^2X=0.870，R^2Y=1.000，Q^2=0.993，说明该模型可靠出色，可以用于小米后续差异代谢物的筛选分析。

2.3.2　差异代谢物的鉴定与分析　以 VIP>1、FC>2 或 FC<0.5 和 P<0.05 为依据标准，筛选 2 种小米中显著差异代谢物[29]，图 6A 为 QYJG 与 LG23 中差异代谢物的聚类树状图，表明 QYJG 与 LG23 间存在显著的代谢物丰度差异。在 QYJG 与 LG23 中共鉴定出 587 种具有显著差异的代谢物，占总代谢物数量的 41.69%。差异代谢物的分布特征通过火山图直观呈现（图 6B），QYJG 与 LG23 相比较上调代谢物 366 种，占差异代谢物总数量 62.35%，下调代谢物为 221 种，占差异代谢物总数量的 37.65%。如表 3 所示，QYJG 中脂质、生物碱、萜类、酚酸类、有机酸、糖类和维生素等代谢物上调，LG23 中则氨基酸及其衍生物和核苷酸及其衍生物等代谢物上调，尽管 2 种小米中黄酮类化合物上调数量相同，但 LG23 中黄酮类显著差异代谢物的相对含量较 QYJG 提升 2.21 倍，表明 LG23 中一些关键黄酮代谢物高度积累。在差异代谢物中，数量分布较多的为脂质类和黄酮类代谢物，其次为氨基酸和衍生物类及生物碱类。总体来看，上调代谢物数量明显多于下调代谢物，且两组小米差异代谢物在火山图中分布较为离散，表明 QYJG 相较于 LG23 拥有更多高丰度代谢物，2 种小米差异代谢物差异程度较大。

表 3　QYLG 与 LG23 中显著差异代谢物的数量

Table 3　Number of significantly differential metabolites between QYJG and LG23

分类	上调代谢物数量（个）	下调代谢物数量（个）	总差异代谢物数量（个）
脂质	94	27	121
黄酮	54	54	108
氨基酸及其衍生物	31	45	76
生物碱	39	27	66
萜类	37	6	43
酚酸类	31	9	40
糖类	14	13	27
有机酸	14	10	24
核苷酸及其衍生物	4	20	24
维生素	7	0	7
木脂素和香豆素	5	1	6
其他类	36	9	45

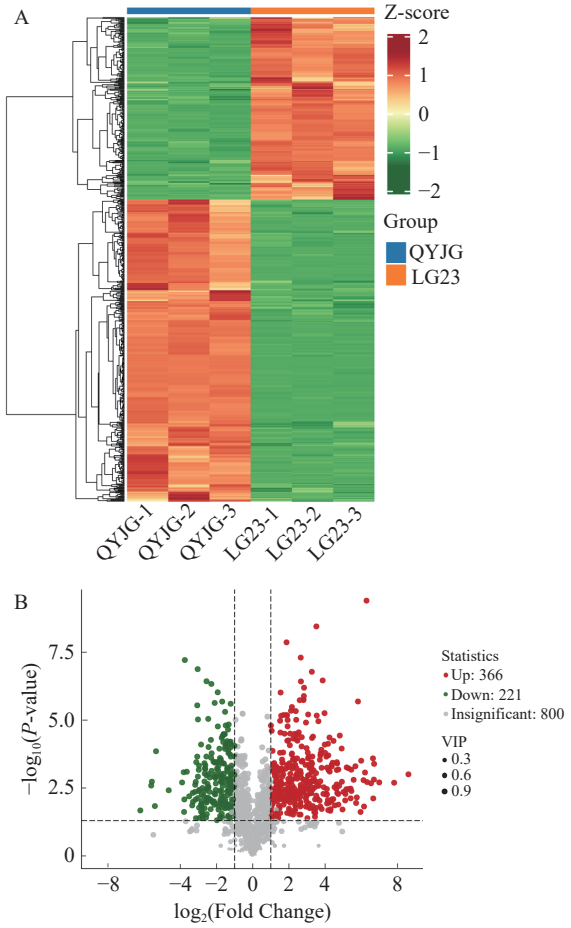


图 6　显著差异代谢物的聚类图（A）和火山图（B）

Fig.6　Cluster heatmap (A) and volcano plot (B) of significantly differential metabolites

注：红色表示差异代谢物上调，绿色表示下调。

2.4　差异代谢物代谢通路分析

利用 KEGG 数据库，开展 QYJG 与 LG23 间差异代谢物的代谢通路富集分析，共有 132 种显著差异代谢物被富集到 87 条代谢通路中（图 7A），其他次生代谢物生物合成通路（主要有类黄酮和生物碱的生

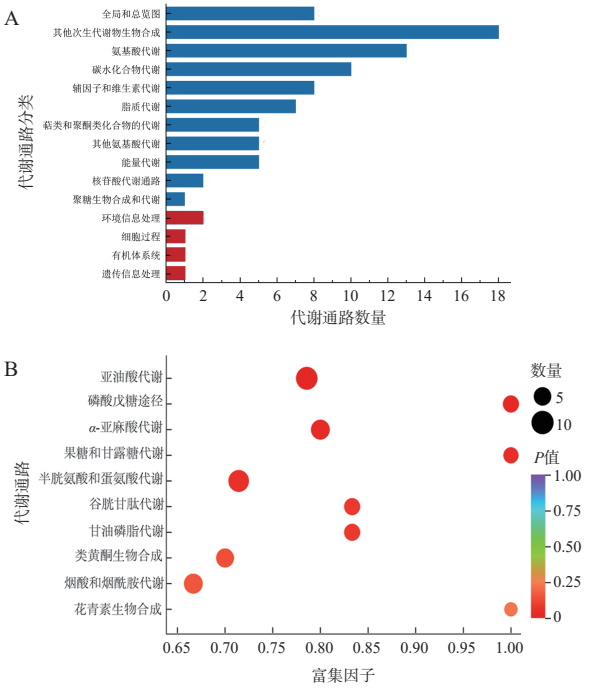


图 7　KEGG 功能注释条形图（A）和显著差异代谢物 KEGG 富集气泡图（B）

Fig.7　Bar chart of KEGG functional annotation (A) and bubble map of KEGG enrichment of significantly differential metabolites (B)

物合成通路)占比最高,为 20.69%,其次为氨基酸代谢通路(14.94%)和碳水化合物代谢通路(11.49%)。进一步选取 *P* 值排名前 10 的代谢通路进行展示,如图 7B 所示,发现 9 条代谢通路与小米的营养品质密切相关,共涉及 59 种显著差异的代谢物。

如图 8 所示,亚油酸和 α-亚麻酸代谢通路中共鉴定到 19 种差异脂肪酸类代谢物。QYJG 中显著积累了 18 种羟基化以及环氧化的十八碳烯酸衍生物,除 9,10-二羟基-12,13-环氧十八酸外,其余的均属于不饱和脂肪酸及其衍生物,它们既可以抑制脂质氧化,又能调控炎症信号传导通路,从而增强小米的功能特性。因此,QYJG 不饱和脂肪酸的代谢活跃度高,籽粒拥有更强的抗氧化稳定性,是人体补充优质脂肪酸的最佳来源。

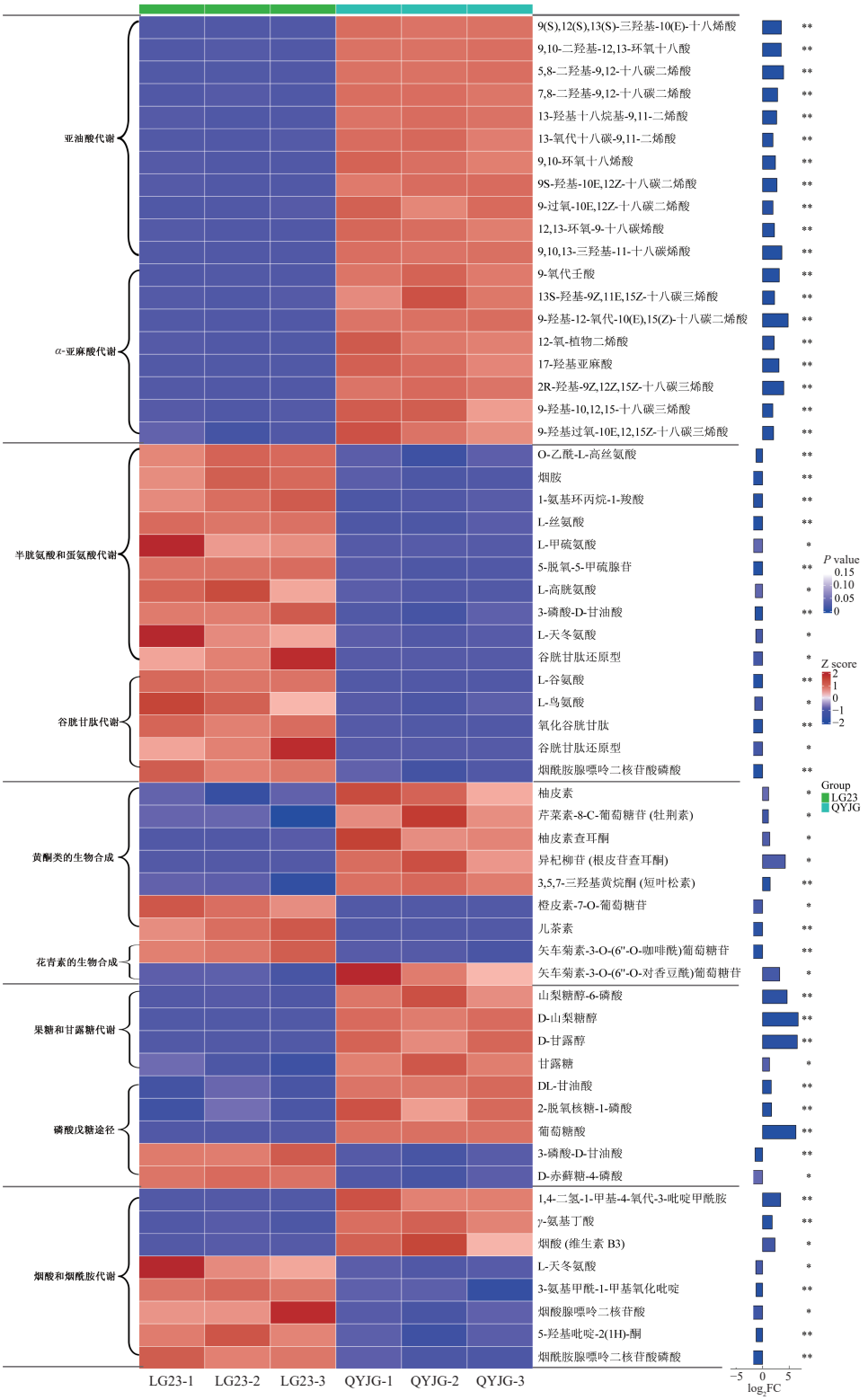


图 8 主要代谢通路中差异代谢物聚类热图

Fig.8 Clustered heatmap of differential metabolites in key metabolic pathways

半胱氨酸和蛋氨酸代谢及谷胱甘肽代谢通路共富集 15 种代谢物，均在 LG23 中显著上调，与 LG23 高蛋白特性密切相关，其中 10 种代谢物属于氨基酸及其衍生物类，谷胱甘肽还原型为两条代谢通路共有的代谢物，在 LG23 中相对含量显著高于 QYJG，log_2FC 达 5.42，表明其具有更强的氧化还原稳态调控能力。此外，半胱氨酸和蛋氨酸代谢中的烟胺为维生素 B_3 的酰胺形式，是一种水溶性维生素，是维持人体正常生理功能的重要营养素，作为氧化还原辅酶，在半胱氨酸和蛋氨酸代谢中发挥关键作用[30−31]。

黄酮类生物合成通路共涉及 7 种显著差异代谢物，柚皮素、柚皮素查耳酮、牡荆素、短叶松素、根皮苷查耳酮在 QYJG 中显著上调，尤其是柚皮素查耳酮在 QYJG 中相对含量为 2.76×10^4，而 LG23 中相对含量只有 1.41×10^3，log_2FC 值为 4.28，LG23 中仅橙皮素-7-O-葡萄糖苷和儿茶素相对含量较高。因此，QYJG 的黄酮类生物合成途径活跃度较高，造成特定黄酮类代谢物积累水平高，但鉴于关键代谢通路合成效率偏低，其总黄酮的含量低于 LG23。花青素的生物合成通路只涉及到两种代谢物，LG23 中矢车菊素-3-O-(6"-O-咖啡酰)葡萄糖苷相对含量显著上调，而 QYJG 中矢车菊素-3-O-(6"-O-对香豆酰)葡萄糖苷相对含量相对较高，这可能与两种小米籽粒颜色特征有一定关系[32]。

磷酸戊糖代谢通路中的葡萄糖酸在 QYJG 中的相对含量约为 LG23 中的 80 倍，葡萄糖酸作为抗坏血酸前体，它的超高积累可以延缓脂质氧化，维持谷物的新鲜度[33]。果糖和甘露糖代谢通路中 4 种糖类差异代谢物均在 QYJG 中显著上调，尤其是 D-山梨糖醇和 D-甘露醇在 QYJG 中积累显著，相对含量分别是 1.49×10^7 和 5.23×10^6，log_2FC 分别为 6.70 和 6.54，D-山梨糖醇作为还原性糖醇，可以清除活性氧，延缓脂质氧化，保护小米籽粒中的多不饱和脂肪酸[34]，同时赋予了 QYJG 低升糖指数特性。尽管糖类代谢物在两种小米中占比相对较低，但含量差异较大，可能与 QYJG 糯性淀粉（支链淀粉占比>95%）水解生成短链寡糖的代谢优势有关[35]。此外，烟酸和烟酰胺代谢通路共涉及 8 种差异代谢物，QYJG 在烟酸（维生素 B_3）和 γ-氨基丁酸（GABA）的积累上显著高于 LG23，GABA 是一种重要的中枢抑制性神经递质[24]，因此 QYJG 具备更高的维生素营养价值及潜在的抗应激作用。烟酰胺腺嘌呤二核苷酸磷酸（NADPH）可以为谷胱甘肽再生提供还原力，LG23 中 NADPH 含量相对较高，表明其具有良好的氧化还原调节功能[36]。

3　结论

本研究系统比较了 QYJG 与 LG23 两种小米的理化性质与代谢特征。结果表明，QYJG 为典型的糯质谷物，其不饱和脂肪酸的含量较高，脂肪酸比例合理，同时多酚和非淀粉多糖含量显著较高。LG23 的蛋白质和黄酮含量水平较高，而且在必需氨基酸和半必需氨基酸方面呈现显著优势。QYJG 和 LG23 中共鉴定出 1408 种代谢物，其中 587 种为显著差异代谢物。QYJG 中有 366 种差异代谢物显著上调，主要以脂质和糖类化合物为主，LG23 中有 221 种差异代谢物显著上调，主要以氨基酸及其衍生物为主；QYJG 的脂肪酸和糖类代谢通路活跃度较高，不饱和脂肪酸以及糖醇类化合物积累十分显著，因而 QYJG 具有低升糖指数的特性；LG23 中氨基酸代谢通路增强趋势明显，表明它在氧化还原态调控及蛋白相关代谢方面具有一定优势。黄酮类物质在 LG23 中总含量更高，但 QYJG 中部分特定黄酮代谢物积累突出，提示二者在黄酮合成通路上存在机制差异。

本研究仍存在一定局限性。广泛靶向代谢组学虽测定的代谢物种类广泛，但检测过程中存在假阳性信号的可能，后续研究中需对已鉴定出的重要差异代谢物开展靶向代谢组学分析验证。此外，结果仅从代谢层面揭示差异，未来应结合转录组学等多组学技术，深入解析两种小米营养品质形成的分子机制，推动小米精准育种技术的实际应用，从而更全面地指导我国小米产业的持续发展。

© 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] 樊瑀，董淑琦，原向阳，等. 谷子种质资源萌发期抗旱性综合评价及抗旱指标筛选[J]. 中国农业大学学报，2022，27(6)：42−54. [FAN Yu, DONG Shuqi, YUAN Xiangyang, et al. Comprehensive evaluation of drought resistance of foxtail millet germplasm resources during germination period and drought resistance index screening[J]. Journal of China Agricultural University, 2022, 27(6): 42−54.]

[2] 王成，刘梦珂，郭浩杰，等. 谷子高代品系农艺和品质性状遗传多样性分析及综合筛选[J]. 干旱地区农业研究，2024，42(6)：276−284,294. [WANG Cheng, LIU Mengke, GUO Haojie, et al. Analysis and comprehensive screening of genetic diversity of agronomic and quality traits of high generation millet lines[J]. Agricultural Research in the Arid Areas, 2024, 42(6): 276−284,294.]

[3] YANG Zhirong, ZHANG Haoshan, LI Xukai, et al. A mini foxtail millet with an *Arabidopsis*-like life cycle as a C4 model system[J]. Nature Plants, 2020, 6(9): 1167−1178.

[4] LI Shaohui, ZHAO Wei, LIU Songyan, et al. Characterization of nutritional properties and aroma compounds in different colored kernel varieties of foxtail millet (*Setaria italica*)[J]. Journal of Cereal Science, 2021, 100: 103248.

[5] LIU Zhenyu, WANG Zhanzhan, FU Yongxia, et al. The role of long-term storage and temperature in modulating cooking qualities and physicochemical properties of foxtail millet[J]. Journal of Cereal Science, 2023, 110: 103644.

[6] REN X L, LI S G, CUI J H, et al. Evaluation of nutritional components of different foxtail millet (*Setaria italica*) germplasm for hay[J]. The Indian Journal of Agricultural Sciences, 2020, 90(4): 713−716.

［7］ 田菁, 王宇哲, 闫世雄, 等. 代谢组学技术发展及其在农业动植物研究中的应用[J]. 遗传, 2020, 42(5): 452−465. ［TIAN Jing, WANG Yuzhe, YAN Shixiong, et al. Metabolomics technology and its applications in agricultural animal and plant research[J]. Hereditas, 2020, 42(5): 452−465.］
［8］ CHEN Wei, GONG Liang, GUO Zilong, et al. A novel integrated method for large-scale detection, identification, and quantification of widely targeted metabolites: Application in the study of rice metabolomics[J]. Molecular Plant, 2013, 6(6): 1769−1780.
［9］ 康庆芳, 赵孟瑶, 赵影, 等. ‘晋谷 21’和矮秆品系‘21DG’营养品质及代谢组学分析[J]. 山西农业大学学报(自然科学版), 2022, 42(5): 66−75. ［KANG Qingfang, ZHAO Mengyao, ZHAO Ying, et al. Nutritional quality and metabonomics analysis of Foxtail millet var. 'Jingu 21' and dwarf line '21DG'[J]. Journal of Shanxi Agricultural University (Natural Science Edition), 2022, 42(5): 66−75.］
［10］ LIU Yongjiang, LIU Junna, KONG Zhiyou, et al. Transcriptomics and metabolomics analyses of the mechanism of flavonoid synthesis in seeds of differently colored quinoa strains[J]. Genomics, 2022, 114(1): 138−148.
［11］ ZHAO Yao, ZHAI Guowei, LI Xuetong, et al. Metabolomics reveals nutritional diversity among six coarse cereals and antioxidant activity analysis of grain sorghum and sweet sorghum[J]. Antioxidants, 2022, 11(10): 1984.
［12］ ZHAO Mingchao, ZHAI Linan, TANG Qingjie, et al. Comparative metabolic profiling of different colored rice grains reveals the distribution of major active compounds and key secondary metabolites in green rice[J]. Foods, 2024, 13(12): 1899.
［13］ ZHAO Mingchao, HUANG Jingfen, REN Junfang, et al. Metabolomic insights into primary and secondary metabolites variation in common and glutinous rice (*Oryza sativa* L.)[J]. Agronomy, 2024, 14(7): 1383.
［14］ 刘天鹏, 何继红, 董孔军, 等. 谷子新品种陇谷 23 号选育及 SSR 指纹图谱[J]. 寒旱农业科学, 2024, 3(12): 1097−1102. ［LIU Tianpeng, HE Jihong, DONG Kongjun, et al. Systematic breeding and SSR fingerprint of the new foxtail millet variety Longgu 23[J]. Journal of Cold-Arid Agricultural Sciences, 2024, 3(12): 1097−1102.］
［15］ 张爱琴, 郭斌, 柳利龙, 等. 基于主成分分析和隶属函数法的谷子营养品质综合评价[J]. 河南农业科学, 2025, 54(1): 28−39. ［ZHANG Aiqin, GUO Bin, LIU Lilong, et al. Comprehensive evaluation of nutritional quality of foxtail millet based on principal component analysis and membership function method[J]. Journal of Henan Agricultural Sciences, 2025, 54(1): 28−39.］
［16］ 杨慧卿, 王根全, 郝晓芬, 等. 糯质谷子育种研究进展[J]. 江苏农业科学, 2019, 47(20): 41−47. ［YANG Huiqing, WANG Genquan, HAO Xiaofen, et al. Research progress on breeding of waxy foxtail millet[J]. Jiangsu Agricultural Sciences, 2019, 47(20): 41−47.］
［17］ 张爱琴, 郭斌, 柳利龙, 等. 甘肃省陇东地区小米营养成分分析与综合评价[J]. 食品安全质量检测学报, 2022, 13(23): 7788−7797. ［ZHANG Aiqin, GUO Bin, LIU Lilong, et al. Analysis and comprehensive evaluation of nutritional components of millets from Longdong area in Gansu Province[J]. Journal of Food Safety & Quality, 2022, 13(23): 7788−7797.］
［18］ 柳利龙, 张爱琴, 徐瑞, 等. 甘肃省陇中地区小米游离氨基酸组成及综合评价[J]. 食品工业科技, 2024, 45(13): 281−291. ［LIU Lilong, ZHANG Aiqin, XU Rui, et al. Composition and comprehensive evaluation of free amino acids in millet from Longzhong area in Gansu Province[J]. Science and Technology of Food Industry, 2024, 45(13): 281−291.］
［19］ 郑茜, 杨俊, 张富贵, 等. 凌霄花多酚微波提取工艺优化及其抗氧化研究[J]. 化学试剂, 2021, 43(9): 1275−1280. ［ZHENG Xi, YANG Jun, ZHANG Fugui, et al. Study on microwave extraction process of polyphenols from *Campsis radicans* (L.) and its antioxidant activity[J]. Chemical Reagents, 2021, 43(9): 1275−1280.］
［20］ ADOM K K, SORRELLS M E, LIU R H. Phytochemical profiles and antioxidant activity of wheat varieties[J]. Journal of Agricultural and Food Chemistry, 2003, 51(26): 7825−7834.
［21］ 李洪亮. 鲜食水稻籽粒非淀粉多糖组成与活性研究[D]. 大庆: 黑龙江八一农垦大学, 2020. ［LI Hongliang. Study on the composition and activity of non-starch polysaccharides in fresh edible rice seeds[D]. Daqing: Heilongjiang Bayi Agricultural University, 2020.］
［22］ 兰天, 段国珍, 祁有朝, 等. 红果枸杞和黄果枸杞广泛靶向代谢组学分析[J]. 食品工业科技, 2024, 45(24): 9−20. ［LAN Tian, DUAN Guozhen, QI Youchao, et al. Extensively targeted metabolomics analysis of red and yellow wolfberries[J]. Science and Technology of Food Industry, 2024, 45(24): 9−20.］
［23］ NAKAYAMA H, AFZAL M, OKUNO K. Intraspecific differentiation and geographical distribution of Wx alleles for low amylose content in endosperm of foxtail millet, *Setaria italica* (L.) Beauv[J]. Euphytica, 1998, 102(3): 289−293.
［24］ 梁恒宇, 邓立康, 林海龙, 等. 新资源食品: γ-氨基丁酸(GABA)的研究进展[J]. 食品研究与开发, 2013, 34(15): 119−123. ［LIANG Hengyu, DENG Likang, LIN Hailong, et al. Research progress of new resource food: γ-aminobutanoic acid (GABA)[J]. Food Research and Development, 2013, 34(15): 119−123.］
［25］ 杜冰, 杨馥熔, 王成, 等. 66 份谷子品种籽粒钙含量、品质与农艺性状的分析[J]. 作物杂志, 2025(4): 87−94. ［DU Bing, YANG Furong, WANG Cheng, et al. Analysis of grain calcium content, quality and agronomic characteristics of 66 foxtail millet varieties[J]. Crops, 2025(4): 87−94.］
［26］ 延莎, 祁鹏煜, 张苏慧, 等. 不同米色小米多酚提取物的体外抗氧化活性[J]. 中国粮油学报, 2017, 32(10): 33−38,44. ［YAN Sha, QI Pengyu, ZHANG Suhui, et al. Antioxidant activity of polyphenol extracts from different beige millet *in vitro*[J]. Journal of the Chinese Cereals and Oils Association, 2017, 32(10): 33−38,44.］
［27］ THÉVENOT E A, ROUX A, YING X, et al. Analysis of the human adult urinary metabolome variations with age, body mass index, and gender by implementing a comprehensive workflow for univariate and OPLS statistical analyses[J]. Journal of Proteome Research, 2015, 14(8): 3322−3335.
［28］ 朱婉, 吴颖, 黎晓湘, 等. 基于广泛靶向代谢组学结合高效液相色谱法分析‘紫娟’和‘迎霜’茶树花代谢物差异[J]. 浙江大学学报(农业与生命科学版), 2023, 49(6): 825−839. ［ZHU Wan, WU Ying, LI Xiaoxiang, et al. Analysis of differential metabolites between 'Zijuan' and 'Yingshuang' tea flowers based on widely targeted metabolomics combined with high performance liquid chromatography[J]. Journal of Zhejiang University (Agriculture & Life Sciences), 2023, 49(6): 825−839.］
［29］ 姚建霞, 王丹丹, 夏亚男, 等. 基于多组学解析传统奶酪菌群与代谢物特征[J]. 中国食品学报, 2025, 25(2): 388−398. ［YAO Jianxia, WANG Dandan, XIA Yanan, et al. Analysis of microbial community and metabolite characteristics of traditional cheese based

on multi-omics[J]. Journal of Chinese Institute of Food Science and Technology, 2025, 25(2): 388−398.]

[30] BERG J M, TYMOCZKO J L, GATTO G J J. Biochemistry[M]. 8th ed. New York: W H Freeman, 2015: 687−692,778−784.

[31] COMBS G F, MCCLUNG J P. The vitamins: Fundamental aspects in nutrition and health[M]. 5th ed. London; Amsterdam: Academic Press, 2017: 242−248,250−254.

[32] LI Yan, CHEN Qiyan, XIE Xiaodong, et al. Integrated metabolomics and transcriptomics analyses reveal the molecular mechanisms underlying the accumulation of anthocyanins and other flavonoids in cowpea pod (*Vigna unguiculata* L.)[J]. Journal of Agricultural and Food Chemistry, 2020, 68(34): 9260−9275.

[33] DAVEY M W, van MONTAGU M, INZÉ D, et al. Plant L-ascorbic acid: Chemistry, function, metabolism, bioavailability and effects of processing[J]. Journal of the Science of Food and Agriculture, 2000, 80(7): 825−860.

[34] KAUR C, KAPOOR H C. Antioxidants in fruits and vegetables-the millennium's health[J]. International Journal of Food Science & Technology, 2001, 36(7): 703−725.

[35] 陈双琴, 顾雪, 黄菊媛, 等. 糯稻种质胚乳淀粉组分含量及其消化特性[J]. 食品科学, 2023, 44(20): 309−314. [CHEN Shuangqin, GU Xue, HUANG Juyuan, et al. Composition and digestion characteristics of starch in endosperm of glutinous rice varieties[J]. Food Science, 2023, 44(20): 309−314.]

[36] SAUVE A A. NAD^+ and vitamin B3: From metabolism to therapies[J]. The Journal of Pharmacology and Experimental Therapeutics, 2008, 324(3): 883−893.