孟从燕, 李建伟, 吴杰, 等. GC-IMS 联合 HS-SPME-GC-MS 及化学计量学对 3 种咖啡果皮茶特征风味物质的表征与鉴别 [J]. 食品工业科技, 2026, 47(8): 347−358. doi: 10.13386/j.issn1002-0306.2025080186

MENG Congyan, LI Jianwei, WU Jie, et al. Characterization and Discrimination of Characteristic Flavor Compounds in Three Types of Cascara Tea by GC-IMS Combined with HS-SPME-GC-MS and Chemometrics[J]. Science and Technology of Food Industry, 2026, 47(8): 347−358. (in Chinese with English abstract). doi: 10.13386/j.issn1002-0306.2025080186

· 分析检测 ·

GC-IMS 联合 HS-SPME-GC-MS 及化学计量学对 3 种咖啡果皮茶特征风味物质的表征与鉴别

孟从燕[1], 李建伟[1], 吴　杰[1], 冯浩春[2], 陈伟祥[2], 李治林[3], 徐　娟[1], 侯　英[1,*]

（1.西南林业大学材料与化学工程学院, 云南昆明 650224;
2.云南佳汇检测技术有限公司, 云南昆明 650220;
3.云南咖啡厂有限公司, 云南昆明 650217）

摘　要: 为探究不同初加工咖啡果皮茶中特征风味物质的差异，采用气相-离子迁移谱（gas chromatography-ion mobility spectrometry，GC-IMS）技术和顶空-固相微萃取-气相色谱-质谱（headspace solid phase microextraction-gas chromatography-mass spectrometry，HS-SPME-GC-MS）联用技术测定 3 种不同初加工咖啡果皮茶的挥发性成分，并进一步结合相对气味活性值（relative odor activity value，ROAV）和化学计量学方法探究不同咖啡果皮茶风味品质的差异性。结果表明：采用 GC-IMS 法共定性出 3 种果皮茶 104 种挥发性有机化合物（volatile organic compounds，VOCs），以醇类、酮类、酯类和醛类等香气物质为主。采用 HS-SPME-GC-MS 法鉴定出 55 种 VOCs，干法处理样品（CX）中共鉴定出 45 种 VOCs，蜜处理样品（FY）48 种，湿法处理样品（GT）48 种，以酮类、醛类香气物质为主，醇类、酯类香气物质次之。主成分分析（principal component analysis，PCA）和偏最小二乘回归分析（partial least squares-discriminant analysis，PLS-DA）结果表明，不同初加工三种果皮茶在组成成分和含量上均具有一定的差异。CX 样品的风味物质主要与丙酸甲酯、2-丁酮、2,3-二氢-3,5-二羟基-6-甲基-4H-吡喃-4-酮和 2,4-二羟基-2,5-二甲基-3(2H)-呋喃-3-酮相关联，FY 样品主要与 (E)-2-癸烯醛、丙酸丁酯、糠醛和 5-乙酰氧基甲基-2-呋喃甲醛物质呈现出较强的相关性，与 GT 样品相关性较强的风味物质则是乙酸己酯、仲辛酮、香叶基丙酮和月桂酸。通过 PLS-DA 中的变量重要性投影（variable importance in projection，VIP）和 ROAV 共筛选出 (E)-2-癸烯醛、1-己醇、3-甲基丁醛、乙酸丁酯、庚酸乙酯、2-呋喃甲硫醇、2,4-二羟基-2,5-二甲基-3(2H)-呋喃-3-酮 7 种关键气味标志物。香气轮廓剖析结果表明不同初加工咖啡果皮茶的香气特征存在差异，GT 样品呈现出更浓郁的酸香、辛香、坚果香与烤香；FY 样品则呈现出最为突出的花香特征；而 CX 样品则表现出较为浓郁的坚果香与烤香。本研究为咖啡果皮茶初加工工艺过程中原料筛选和风味品质评价提供参考。

关键词: 咖啡果皮茶, 气相离子迁移谱, 顶空固相微萃取-气相色谱-质谱联用, 挥发性有机化合物

中图分类号: TS273　　**文献标识码:** A　　**文章编号:** 1002−0306(2026)08−0347−12

DOI: 10.13386/j.issn1002-0306.2025080186

本文网刊:

Characterization and Discrimination of Characteristic Flavor Compounds in Three Types of Cascara Tea by GC-IMS Combined with HS-SPME-GC-MS and Chemometrics

MENG Congyan[1], LI Jianwei[1], WU Jie[1], FENG Haochun[2], CHEN Weixiang[2], LI Zhilin[3], XU Juan[1], HOU Ying[1,*]

收稿日期: 2025−08−18

基金项目: 云南省科技厅科技计划项目-农业联合专项（202301BD070001-236）。

作者简介: 孟从燕（2000−）, 女, 硕士研究生, 研究方向: 天然产物化学成分分析, E-mail: 1931169886@qq.com。

*** 通信作者:** 侯英（1973−）, 女, 硕士, 正高级工程师, 研究方向: 天然产物分析研究, E-mail: houying@SWFU.edu.com。

（1.College of Materials and Chemical Engineering, Southwest Forestry University, Kunming 650224, China；
2.Yunnan Jiahui Detection Technology Co., Ltd., Kunming 650220, China；
3.Yunnan Coffee Processing Plant Co., Ltd., Kunming 650217, China）

Abstract: To investigate the characteristic flavor profiles of cascara tea produced via different initial processing methods, the volatile compounds of three primary-processed samples were analyzed using gas chromatography–ion mobility spectrometry (GC-IMS) and headspace solid phase microextraction coupled with gas chromatography–mass spectrometry (HS-SPME-GC-MS). The relative odor activity value (ROAV), in combination with chemometric analyses, was employed to evaluate differences in flavor quality among the samples. The results showed that a total of 104 volatile organic compounds (VOCs) were identified in the three Cascara Tea samples using GC-IMS, mainly including alcohols, ketones, esters, and aldehydes. Using HS-SPME-GC-MS, a total of 55 volatile organic compounds (VOCs) were identified. Specifically, 45 VOCs were detected in the dry processing sample (CX), 48 in the honey processing sample (FY), and 48 in the wet processing sample (GT). Ketones and aldehydes were the predominant aroma compounds, followed by alcohols and esters. Principal component analysis (PCA) and partial least squares-discriminant analysis (PLS-DA) revealed that the three *Cascara* Tea samples produced by different primary processing methods exhibited distinct differences in their compositions and concentrations of volatile compounds. The flavor profile of the CX sample was primarily associated with methyl propanoate, 2-butanone, 2,3-dihydro-3,5-dihydroxy-6-methyl-4H-pyran-4-one and 2,4-dihydroxy-2,5-dimethyl-3(2H)-furan-3-one. In contrast, the FY sample showed strong correlations with compounds such as (E)-2-decenal, butyl propanoate, furfural and 5-(acetoxymethyl)-2-furaldehyde. Meanwhile, GT sample was most strongly correlated with hexyl acetate, 2-octanone, geranyl acetone and dodecanoic acid. Based on the variable importance in projection (VIP) values from the PLS-DA model and the relative odor activity value (ROAV), seven key aroma markers were identified: (E)-2-decenal, 1-hexanol, 3-methylbutanal, butyl acetate, ethyl heptanoate, 2-furfurylthiol and 2,4-dihydroxy-2,5-dimethyl-3(2H)-furan-3-one. Aroma profile analysis indicated that the aroma characteristics of cascara tea varied among different primary processing methods. The GT sample was characterized by more pronounced acidic, spicy, nutty, and roasted notes, whereas the FY sample displayed a distinctive floral aroma. The CX sample, on the other hand, exhibited stronger nutty and roasted characteristics. This study provides a scientific reference for raw material selection and evaluation and optimization of the flavor quality of cascara tea during primary processing.

Key words: cascara tea; gas chromatography-ion mobility spectrometry (GC-IMS); headspace solid phase microextraction-gas chromatography-mass spectrometry (HS-SPME-GC-MS); volatile organic compounds (VOCs)

咖啡属茜草科（Rubiaceae）咖啡属（*Coffea*），是重要的多年生常绿经济作物[1]，与可可、茶同为流行于世界的主要饮品[2]。目前，云南作为中国咖啡主产栽培核心地区，截至 2024 年年底，咖啡种植面积达 126.7 万亩、产量 14.6 万吨，出口量猛增 358%，远销欧美亚等 29 个国家。在咖啡加工生产中，除得到生咖啡豆外，还产生高达 40%~45% 的废弃物，其中含量最高的咖啡果皮占 29.9%[3]。咖啡果皮富含糖类、蛋白质、纤维素等主要成分，并含有多酚类、生物碱等多种活性物质，具有较高的营养价值和开发潜力[4]。匡钰等[4] 成功利用咖啡果皮发酵制备出风味独特的咖啡果酒；罗娅婷等[5] 和孙岳等[6] 通过工艺优化，开发出风味独特、口感优良的咖啡果皮茶产品。另外，咖啡果皮还可用于乳酸发酵[7]、鼠李饮料开发[8]、生物乙醇制备[9]、沼气生产[10] 以及植物缓蚀剂开发[11] 等领域。

咖啡果皮茶是咖啡果皮经烘烤加工而得，由于其抗氧化成分含量是普通浆果的 8 倍，因此，被认为是一种经济实惠、酸味柔和的茶叶替代品[12]。咖啡果皮茶的香气特征是决定其品质和市场接受度的关键因素，而香气成分的形成与咖啡果皮的初加工方式密切相关。初加工方式是决定咖啡果皮中风味前体物质组成、微生物种类及其代谢活性的关键变量。不同的初加工方式会通过引发一系列不同的复杂生化反应途径，从而调控终端风味产物的形成，导致咖啡果皮茶风味品质的形成存在差异。目前，湿法、干法和半干法（蜜处理）是三种常见的咖啡果实初加工方式。湿法加工是指将去除果皮果肉后的咖啡鲜豆转移至发酵桶或发酵池，注入水为咖啡果实内源酶和微生物发酵分解果胶层创造厌氧环境，经发酵后进行干燥处理；干法加工是指整个咖啡果实直接进行干燥处理；蜜处理是指对保留部分果肉的咖啡鲜豆进行干燥处理[13]。近年来，多种高精度联用分析技术在食品香味成分剖析中得到广泛应用。SPME-GC-MS 联用技术因其能够通过测定相对分子质量准确鉴定 VOCs，已成为一种常规分析方法[14]，该方法对高分子量物质的测定具有高灵敏度，但在低分子量物质和痕量成分分析方面效果不佳[15]。GC-IMS 技术是一种较新的气体分离检测技术，具有分辨率高和选择性好[16]、异构体分离能力强[17] 及低检测限[18] 等优势，且无需复杂样品前处理即可快速检测痕量 VOCs，尤其是针对醇类、醛类和酮类的检测[19]。因此，GC-IMS 可有效弥补 GC-MS 因分析速度慢和预处理过程中香气物质易损失等局限性[20]。虽然已有研究利用这些技

术表征咖啡豆的风味特征[21−23]，如陆羽霜等[24] 比较了云南与西达摩咖啡豆冷萃与热萃液的风味特征差异，翟慧楠[25] 比较了 7 种不同初加工方法制备的咖啡豆挥发性风味成分的差异，但针对不同初加工工艺所得的咖啡果皮茶中特征风味物质的表征与鉴别研究的相关报道较少。

本研究联合采用 GC-IMS 和 HS-SPME-GC-MS 技术，系统分析 3 种不同初加工工艺咖啡果皮茶中的挥发性风味特征成分。通过相对气味活性值分析确定 3 种咖啡果皮茶关键香气成分（ROAV≥1），借助化学计量学方法（主成分分析和偏最小二乘判别分析）对风味差异进行模式识别，并综合 VIP 值筛选 3 种咖啡果皮茶的关键差异标志化合物。研究结果可为咖啡果皮茶加工的原料挑选和风味品质评价提供参考。

1　材料与方法

1.1　材料与仪器

三种咖啡果皮茶　干法处理咖啡果皮茶样品编号为 CX、蜜处理为 FY、湿法处理为 GT，云南保山；正构酮：2-丁酮、2-戊酮、2-己酮、2-庚酮、2-辛酮、2-壬酮　色谱纯，购于上海阿拉丁生化科技股份有限公司。

FlavourSpec®风味分析仪　德国 G.A.S 公司；TQ8050 NXnci SYSTEM 气相色谱-质谱联用仪　日本岛津公司；DFY-500 摇摆式粉碎机　温岭市林大机械有限公司；75 μm CAR/PDMS 固相微萃取头　美国 Supelco 公司。

1.2　实验方法

1.2.1　GC-IMS 检测　参照侯晓慧等[26] 方法略作修改。准确称取经 60 目标准筛过筛的样品粉末 0.5 g 至 20 mL 标准顶空瓶中，密封，放入自动采样盘。每个样品设置 3 次平行测定样本。

自动进样条件：80 ℃ 下孵育 15 min，孵化转速 500 r/min，顶空自动进样，进样体积 300 μL，进样针温度 85 ℃，不分流进样。

GC-IMS 仪器条件：MXT-WAX 毛细管柱（30 m×0.53 mmID×1.0 μm/df），色谱柱温度为 60 ℃，载气为高纯氮气（纯度≥99.999%），载气梯度为：初始 0~2 min 流量为 2 mL/min，2~10 min 流量增至 10 mL/min，10~40 min 流量增至 100 mL/min。IMS 检测温度为 45 ℃，电离源为氚源，漂移气体为 N_2（>99.999%），以流量 75 mL/min 的恒定速率通过漂移管。根据挥发性化合物的保留指数，应用软件内置的 NIST 数据库和 IMS 数据库检索和比对，对目标物进行定性分析。采用峰面积归一化法进行定量分析。

1.2.2　HS-SPME-GC-MS 检测　准确称取经 60 目标准筛过筛的样品粉末 0.5 g 样品转移至 20 mL 顶空瓶中，立即密封顶空瓶，于 65 ℃ 平衡 10 min。插入已老化（老化条件：260 ℃ 下保持 3 min）的固相微萃取头采样，顶空吸附 20 min。吸附完成立即将萃取头插入 GC 进样口，在 260 ℃ 下解吸 5 min，同时启动数据采集系统。

GC-MS 条件：配备 RTX-5MS 色谱柱（30 m×0.25 mm×0.25 μm），自动进样不分流模式，进样口温度 260 ℃，载气为高纯氦气（纯度为 99.999%），流速为 1.00 mL/min，梯度升温程序如下：初始温度 50 ℃，保持 2 min，以 5 ℃/min 的速率升至 160 ℃，保持 2 min，最后以 10 ℃/min 的速率升至 260 ℃，保持 1.5 min。MS 电子轰击能量 70 eV，离子源温度 230 ℃，接口温度 280 ℃，扫描模式为全扫描模式，质量扫描范围为 m/z 35~350。所有样品进行 3 次平行测定，去除烷氧硅类等杂峰后，将色谱图中的每个峰与系统图谱库 NIST17 中已知化合物的质谱数据进行比对，保留相似度≥80 的化合物。

1.2.3　被测组分的相对含量　利用峰面积归一化法进行计算，计算公式如公式（1）[27] 所示：

$$\text{挥发性成分的相对含量}(\%) = \frac{\text{单个挥发性成分的峰面积}}{\text{挥发性成分的总面积}} \times 100 \qquad \text{式（1）}$$

1.2.4　ROAV 计算　参考吴东源等[27] 报道的方法计算各挥发性化合物的 ROAV。计算方法如公式（2）所示：

$$ROAV_a(\%) = \frac{C_A}{C_{max}} \times \frac{T_{max}}{T_A} \times 100 \qquad \text{式（2）}$$

式中：C_A 与 T_A 分别表示目标物的相对百分含量（%）和阈值（mg/kg）；C_{max} 与 T_{max} 分别表示样品中香气贡献最大的组分含量（%）和阈值（mg/kg）。

1.3　数据处理

采用 SPSS Statistics 27.0 软件进行单因素 ANOVA 分析（P<0.05 表示差异显著，反之则不显著），所有测试和分析均进行三次重复，测量数据以平均值±标准差（mean±SD, n=3）的形式显示；利用 Origin2024 软件、SIMCA 14.1 软件绘图；聚类热图绘制通过 https://www.chiplot.online 网站完成。

2　结果与分析

2.1　GC-IMS 分析

采用气相色谱-离子迁移谱技术分析 CX、FY、GT 三种咖啡果皮茶的挥发性有机物，结果如图 1(a)~图 1(b)所示。由图 1(a)可知，三种样品的 3D 谱图显示其挥发性成分在特征峰强度以及分布上存在差异，FY 和 GT 的信号峰强度高于 CX，表明发酵和机械去皮水洗处理能够促进果皮细胞结构的破坏，从而释放更多前体物质参与风味形成。对三维光谱进行投影，得到自下而上的二维光谱图。如图 1(b)所示，整个图背景为蓝色，横坐标 1.0 处红色竖线为反应离子峰（reaction ion peak, RIP），RIP 峰两侧的每个点代表一种 VOCs 信号，颜色梯度直观表征物质浓度，白色表示低浓度组分，红色表示高浓度组分。高浓度化

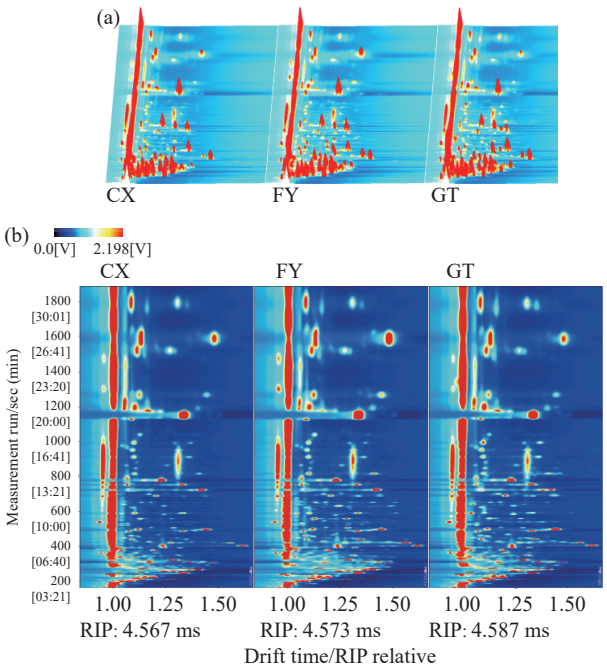


图 1　3 种咖啡果皮茶 VOCs 三维谱图(a)及二维谱图(b)

Fig.1　3D spectrum (a) and 2D spectrum (b) of VOCs profiles in three types of cascara tea

合物的离子在漂移管中运动时,因其具有高质子亲和力,可以形成二聚体[28],与单体具有相近的保留时间及不同的漂移时间[29]。不同初加工咖啡果皮茶的挥发性成分组成相似,差异主要体现在风味物质浓度上。经分析发现,3 种样品中绝大多数 VOCs 的信号峰出现在保留时间 200~600 s 的区间内,个别组分信号峰延伸至 1500 s。这可能是由于这些化合物极性较低,导致在非极性柱上保留时间延长[30]。该结果从整体上揭示了不同咖啡果皮茶样品中挥发性物质的极性分布特征,也印证了 GC-IMS方法对不同性质小分子化合物的良好分离能力。

3 种咖啡果皮茶经 GC-IMS 技术共识别出 108 个特征峰,其中 104 个特征峰被成功定性,相同化合物的单体和二聚体形式分别标记为 M 和 D。这些成分可分为 14 类,包括醇类 16 种、醛类 14 种、酯类 22 种、酮类 15 种、醚类 6 种等含氧化合物;呋喃环类 5 种、苯环类 8 种等芳香族化合物;烯烃类 5 种、萜烯类 4 种等碳氢化合物。此外还检测到少量含氮化合物(吡嗪类 2 种、吡啶类 1 种)和其他特殊组分(杂环类 3 种、酸类 1 种、其他 2 种),未能定性组分有 4 种 VOCs(附表 1,详见本刊官网 http://www.spgykj.com/文章的网络版)。

为了明确不同初加工样品间风味特征差异性,利用 GC-IMS 系统内置的 Gallery Plot 插件绘制指纹图谱(见图 2)。如图 2 所示,3 种咖啡果皮茶在挥发性组分上既存在共性物质又有差异性物质,可将指纹图谱分为 A、B、C、D、E 5 个区域。CX、FY、GT 样品均检出 26 种 VOCs(A 区),以醇类、醛类、酮类和酯类为主,包括正丁醛(麦芽香)、丙醛(坚果香)、羟基丙酮(焦糖香)、糠醛(焦糖香)、乳酸乙酯(奶油香)、2-戊酮(果香)、糠醇(烘焙坚果香)、3-呋喃甲醇(焦糖甜香)、2-乙酰基呋喃(M)(烘烤香)、乙酸乙酯(梨香和酒香)、2-丁酮(果香和樟脑香)、1-己醇(青草香和果香)等共同构成了咖啡果皮茶的典型香气特征。B 区域为 CX 与 FY 样品的特征香气组分区,包括 2-甲基异戊醇、苯乙烯、未定性-109 及戊醛,共同赋予两款产品特殊芳香与杏仁风味。C 区域为 FY 咖啡果皮茶的香气专属区(23 种 VOCs),该区域的物质组成呈现出显著的风味多样性:酯类物质(丁酸甲酯、己酸乙酯等)贡献了突出的果香和奶油香;内酯类(γ-丁内酯)和呋喃类(2-乙酰基呋喃)带来甜美的焦糖风味;醛类((E)-2-癸烯醛、庚醛等)提供清新的青草香和脂肪香;醇类(3-甲基丁醇等)形成丰富的酒香基底;含硫化合物(2-甲基四氢噻吩等)增添独特的肉香味。D 区域为 FY 与 GT 咖啡果皮茶的专属香气区(7 种 VOCs),苎烯贡献清新的樟脑香,乙酸丁酯、乙酸丙酯、2-甲基丁酸乙酯形成柔和的水果香(苹果、香蕉、梨等),二甲基硫醚提供典型的蔬菜香,3-戊酮和 1,4-二氧六环完善整体香气的层次感。GT 咖啡果皮茶在 E 区域呈现出 18 种特征香气成分,包括 2-呋喃甲硫醇(焦糖香)、(-)-α-侧柏酮(清凉药草香)、丙苯(花香)、(E)-3-己烯酸甲酯(青苹果香)、环戊酮(烟熏香)、(E)-3-十一碳烯(青香)、氯苯(杏仁香)、乙酸己酯(苹果香)、仲辛酮(蓝奶酪霉香)、丙醇(醇香)、2-甲基吡嗪(坚果香)、2,3-二甲基-5-乙基吡嗪(烘烤香)、γ-松油烯(松木香)、3-庚酮(青草香)等。

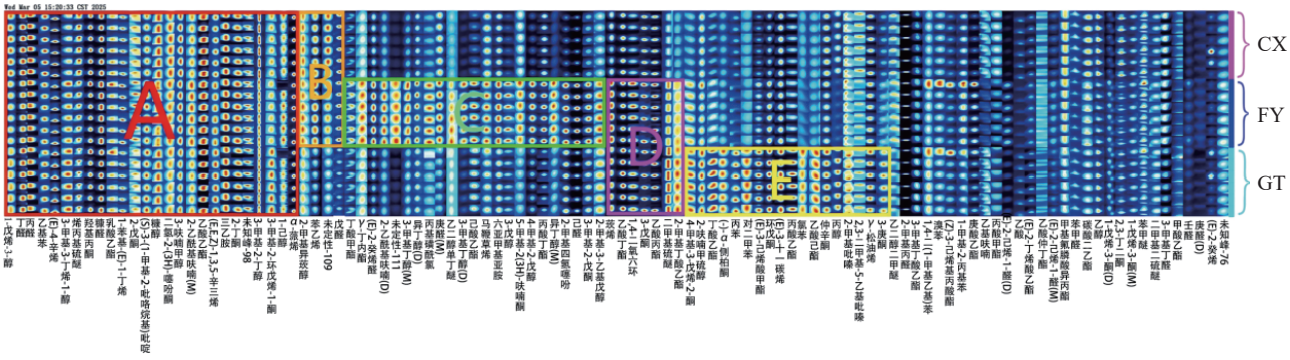


图 2　3 种咖啡果皮茶 VOCs 指纹图谱

Fig.2　Fingerprint of VOCs in three types of cascara tea

为系统分析 3 种不同咖啡果皮茶 VOCs 的组成特征，绘制各类化合物相对含量占比图和层次聚类热图以实现对 VOCs 种类及相对含量的可视化表征，结果如图 3、图 4 所示。成分组成分析显示，三种咖啡果皮茶的主要挥发性成分包括醇类、酮类、醛类、酯类化合物，其总量占比在 CX、FY 果皮茶中达 72% 以上，在 GT 果皮茶中达 70% 以上。CX 样品中醇类含量占比最高(24.23%)，其次是醛类(23.58%)、酮类(15.21%)、酯类(9.41%)；FY 样品中醛类含量占比最高(25.77%)、其次是醇类(22.45%)、酮类(13.64%)、酯类(10.59%)；GT 样品中含量占比依次是醇类(22.51%)、醛类(21.12%)、酮类(15.84%)、酯类(10.97%)。烯烃类在三种咖啡果皮茶样品中含量占比也相对较高，分别是 4.98%(CX 组)、4.78%(FY 组)和 6.19%(GT 组)。层次聚类分析表明，将 GT 与 CX 聚为一类，表明其化合物的种类和含量更为相似。从热图中可以看出 7 种相对含量较高的 VOCs，按其香气特征可分为：焦糖香型：糠醛(高达 10.93%)、羟基丙酮(3.34%)、3-甲基-2-环戊烯-1-酮(2.91%)；青香型：(E)-2-癸烯醛(7.70%)、1-己醇(6.75%)；甜香型：糠醇(5.73%)；木质香型：3-呋喃甲醇(5.63%)。

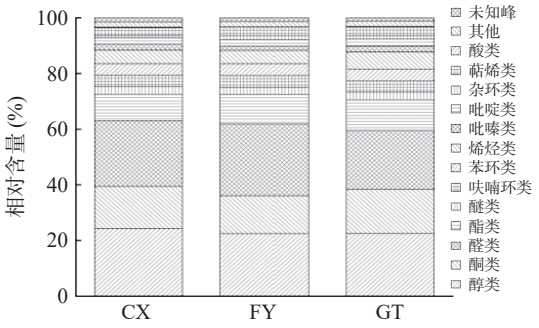


图 3　3 种咖啡果皮茶 VOCs 的相对含量图

Fig.3　Relative content diagrams of VOCs in three types of cascara tea

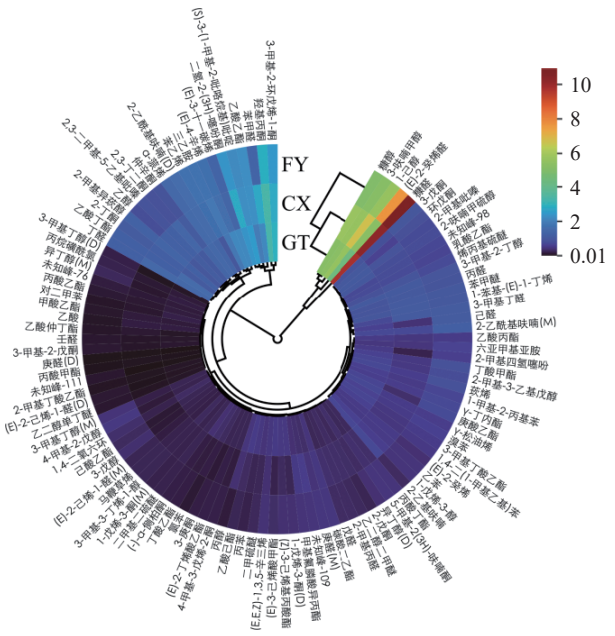


图 4　3 种咖啡果皮茶 VOCs 的聚类热图

Fig.4　Cluster heat map of VOCs in three types of cascara tea

2.2　HS-SPME-GC-MS 分析

采用 HS-SPME-GC-MS 技术对 3 种咖啡果皮茶进行分析，共鉴定出 55 种挥发性成分，FY 和 GT 样品的挥发性风味物质种类较 CX 更为丰富，CX 样品中共鉴定出 45 种 VOCs，FY 样品 48 种，GT 样品 48 种，可分为 10 类。其中酮类(14 种)种类最为丰富，其次为醛类(11 种)，酯类(10 种)和醇类(9 种)，此外还检测到酸类(3 种)，吡嗪类(2 种)，酚类(3 种)，吡咯类(1 种)，杂环类(1 种)及其他(1 种)(附表 2，详见本刊官网 http://www.spgykj.com/文章的网络版)。

图 5 是根据三种果皮茶样品中 VOCs 类型的相似性，使用堆叠条形图比较 VOCs 含量的差异。由图 5 可知，CX 样品中超过 88% 的物质包括酮类(46.04%)和醛类(42.88%)；FY 样品中超过 92% 的 VOCs 由酮类(38.22%)和醛类(53.84%)组成；在 GT 样品中，酮类(43.08%)和醛类(43.34%)占 86% 以上。而醇类和酯类含量相对酮类和醛类较少，在 CX 组其两者总量为 9.40%，FY 组为 6.17%，GT 组为 8.42%。HS-SPME-GC-MS 结果分析表明，酮类和醛类作为关键香气物质，在 CX、FY、GT 样品中的比例保持相对稳定，构成了咖啡果皮茶区别于其他果皮茶的核心风味基础。

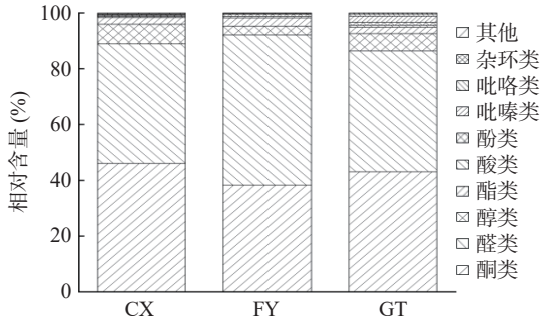


图 5　3 种咖啡果皮茶 VOCs 的相对含量图

Fig.5　Relative content diagrams of VOCs in three types of cascara tea

由图 6 韦恩图可知，三种咖啡果皮茶中挥发性化合物组成呈现一定的差异性。在三种咖啡果皮茶样品中均鉴定出 38 种 VOCs。CX 组中检出的所有香气物质均存在于 FY 和 GT 样品中。GT 样品含有 5 种特有 VOCs，分别为 2-乙基-5-甲基吡嗪、三甲基吡嗪、3-乙基-4-甲基-1-戊醇、3,4-二甲基-2,5-呋喃二酮、3-甲基苯酚，这些成分共同增强了 GT 的风味轮廓，呈现出咖啡坚果香、烤花生香、木质青草香以及焦糖烟熏气息。FY 样品则含有 2 种特有 VOCs，即 1-(2-呋喃基)-1-丙酮(奶油焦糖香)和间苯三酚(药香-木质调)。此外，1H-吡咯-2-甲醛和 1-(2-呋喃甲基)-1H-吡咯为 CX 与 GT 果皮茶中所共有，这两种物质为 CX 和 GT 带来了霉味、尖锐感与金属感等

负面风味属性。GT 与 FY 中还含有少量共有组分，包括 1-乙基-1H-吡咯-2-甲醛、5-乙基-2-呋喃甲醛、(E)-2-壬烯醛，则赋予果皮茶微弱的绿黄瓜气息与脂肪烧焦味。CX 与 FY 则共享 5 种成分，包括 1-苯并呋喃-5-醇、N-甲基-N-异丁基-2-呋喃甲酰胺、乙二醇单乙酸酯、α-丙基-2-呋喃乙醛、5-异丙基-2-羟基-2,4,6-环庚三烯-1-酮。

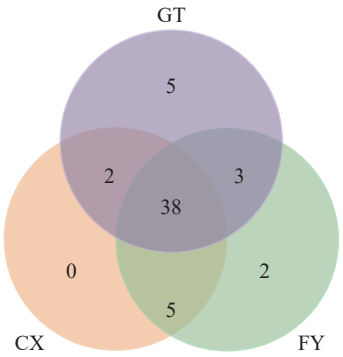


图 6 3 种咖啡果皮茶 VOCs 韦恩图

Fig.6 Venn diagram of VOCs in three types of cascara tea

采用层次聚类分析 3 种果皮茶的 VOCs 变量并绘制热图。如图 7 聚类分析热图所示，3 种果皮茶含有的 VOCs 聚集为不同的类别，其中 GT 与 CX 聚为一类，这与 GC-IMS 检测分析结果一致。从热图来看，相对含量较高的物质包括 5-甲基-2-呋喃甲醛、糠醛、2,3-二氢-3,5-二羟基-6-甲基-4(H)-吡喃-4-酮、2,5-二甲基呋喃-3,4(2H,5H)-二酮、2,4-二羟基-2,5-二甲基-3(2H)-呋喃-3-酮、5-羟甲基糠醛、1-(2-呋喃基)乙酮、1-(1H-吡咯-2-基)乙酮和糠醇。其中，5-甲基-2-呋喃甲醛在 FY 样品中含量为 25.76%，高于 CX(19.56%)和 GT(20.38%)，为 FY 贡献了突出的焦糖甜味、坚果香和果脯感[31]。CX 样品中 2,3-二氢-3,5-二羟基-6-甲基-4(H)-吡喃-4-酮相对含量(22.46%)显著高于 FY(16.90%)和 GT(15.49%)(P<0.05)，表明其在香气构成中具有重要贡献。而 GT 样品中检测

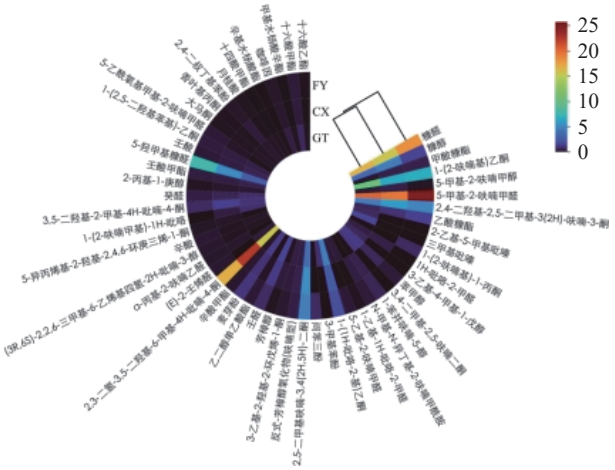


图 7 3 种咖啡果皮茶 VOCs 聚类热图

Fig.7 Clustering heatmap of VOCs in three types of cascara tea

到特有的吡嗪类物质(2-乙基-5-甲基吡嗪和三甲基吡嗪)，呈现出典型的泥土和坚果香气。上述结果表明，不同初加工方式显著影响了挥发性物质的组成与分布，进而差异化塑造了咖啡果皮茶的风味轮廓。

2.3 GC-IMS 和 HS-SPME-GC-MS 综合分析

将 GC-IMS 和 HS-SPME-GC-MS 检测到的 VOCs 绘制韦恩图，如图 8 所示。研究表明，共同检测出的风味物质为 3 种，分别为糠醛、糠醇和壬醛，表明两种检测分析技术间存在较大的差异性。GC-IMS 与 HS-SPME-GC-MS 的联用分析通过技术互补，显著提升了复杂体系中 VOCs 的分析范围。该联用测定技术兼具 GC-IMS 的高通量、快速筛查能力与 HS-SPME-GC-MS 的高分辨率、精准定性优势，可系统解析样品的挥发性组分。

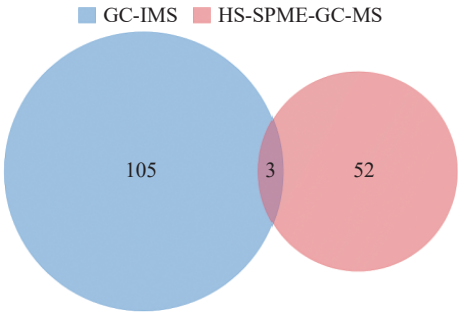


图 8 两种分析技术 VOCs 韦恩图

Fig.8 Venn diagram of VOCs from two analytical techniques

GC-IMS 和 HS-SPME-GC-MS 检测结果均以酮类、醛类、醇类和酯类风味物质为主，酮类物质主要通过美拉德反应、不饱和脂肪的氧化或降解以及氨基酸降解[32]，通常具有较高的阈值，因此对果皮茶的风味贡献较小，赋予产品霉味、黄油味、花果香等多元香气[15]；醛类物质源自氨基酸和脂肪酸代谢[33]，通常阈值较低，气味浓郁，为产品贡献脂肪香、辛辣味、焦香、坚果香等特征；酯类则主要来自于醇和酸的酯化反应[34]，阈值较低，主要呈现青香味、蜜香味等；醇类物质主要来源于脂肪氧化，氨基酸降解和碳水化合物生成产生[35]，通常阈值较高，多表现为酸败味、芳香、苹果香及焦糖香等[36−37]。这些成分的协同作用共同构成了咖啡果皮茶的风味轮廓。

2.4 差异挥发性化合物筛选

PCA 是一种无监督的多变量统计分析方法，通过线性变换将多个变量综合为少数几个重要变量。为了揭示不同咖啡果皮茶挥发性化合物的差异，分别对 GC-IMS 和 HS-SPME-GC-MS 检测的挥发性香气成分数据进行降维处理，分析结果如图 9、图 10 所示，GC-IMS 中第一、二主成分的贡献率分别为 47.3%、41.2%，累计贡献率达 88.5%；HS-SPME-GC-MS 中第一、二主成分的贡献率分别为 63.7%、29.4%，两者的累计贡献率达 93.1%，表明前两个主成分能够充分表征 3 种咖啡果皮茶挥发性风味成分的整体特征。在基于 GC-IMS 和 HS-SPME-GC-

MS 技术构建的 PCA 图中，三种样品在空间中明显分离，分布距离较远，表明其挥发性成分在组成与含量上均存在一定的差异。该结果印证了 PCA 模型可有效区分不同咖啡果皮茶的风味属性。两种分析技术所揭示的判别趋势具有一致性，为咖啡果皮茶的原料甄选与风味品质评价提供了可靠的统计学依据。

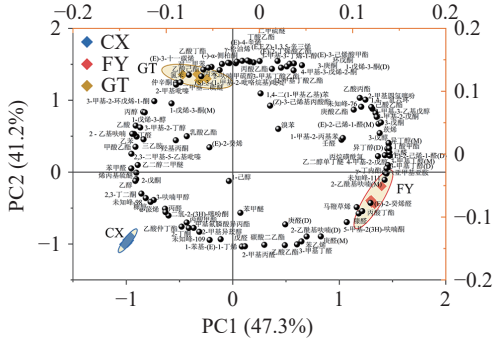


图 9　3 种咖啡果皮茶在 GC-IMS 中 VOCs PCA 图

Fig.9　PCA plot of VOCs in three types of cascara tea by GC-IMS

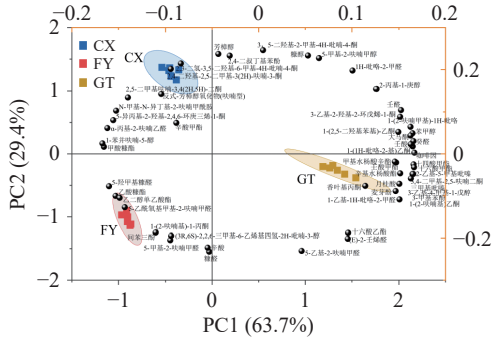


图 10　3 种咖啡果皮茶在 HS-SPME-GC-MS 中 VOCs PCA 图

Fig.10　PCA plot of VOCs in three types of cascara tea by HS-SPME-GC-MS

PLS-DA 是一种有监督的多元统计分析方法，能按照预先定义的分类（Y 变量）最大化组间的差异，可获得比 PCA 更好的分离效果。分别以两种检测技术获得的 VOCs 相对含量为因变量，3 种咖啡果皮茶为自变量建立了 PLS-DA 判别模型（见图 11）。不同颜色的点代表不同样品，模型评估结果为：GC-IMS 数据分析中解释方差 R_x^2 为 0.824，R_y^2 为 0.992，预测能力 Q^2 为 0.991；HS-SPME-GC-MS 的 PLS-DA 分析中解释方差 R_x^2 为 0.984，R_y^2 为 0.999，预测能力 Q^2 为 0.999。所有模型的 R^2 和 Q^2 值均接近于 1，表示该模型具有优异的拟合优度和预测能力。为了确定模型是否存在过拟合，经 200 次置换检验验证（见图 12）。结果表明，两种检测方法中 R^2 和 Q^2 的截距分别为 0.036、−0.028 和−0.324、−0.371。所有验证参数截距均接近 0 且 Q^2 截距为负值，证实模型稳定可靠，不存在过拟合现象。该模型不仅能够有效区分不同咖啡果皮茶的风味特征，其优异的预测性

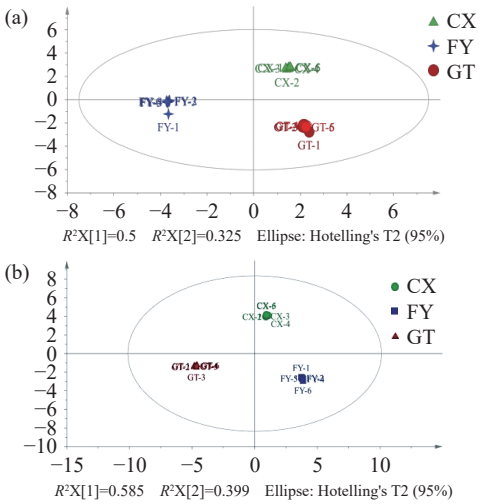


图 11　3 种咖啡果皮茶 VOCs PLS-DA 分析

Fig.11　PLS-DA analysis of VOCs in three types of cascara tea

注：(a)GC-IMS；(b)HS-SPME-GC-MS。

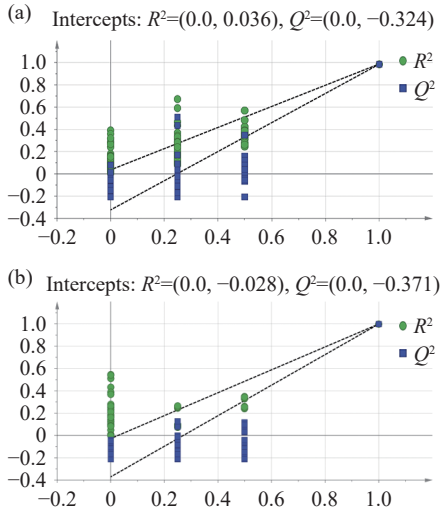


图 12　3 种咖啡果皮茶 VOCs 置换检验

Fig.12　Replacement test of VOCs in three types of cascara tea

注：(a)GC-IMS；(b)HS-SPME-GC-MS。

能（Q^2>0.99）更为产品质量控制和风味定向调控提供了可靠的分析工具。

为深入评估各变量在分类模型中的贡献程度，本研究基于 PLS-DA 模型计算各挥发性成分的 VIP，以 VIP 评分评价各化合物对样品差异的解释能力，VIP 评分>1 且 P 值<0.05 的变量被视为对样本分类具有显著影响的判别因子，VIP 值越大，影响越大。两种检测方法最终确定的显著性差异化合物如图 13 所示。在 GC-IMS 鉴定结果中，显著性差异化合物共36 种，包括 5 种醛类、6 种醇类、5 种酮类、8 种酯类、3 种烯烃类、1 种吡嗪类、2 种萜烯类、1 种苯环类、1种醚类、1 种呋喃类、1 种吡啶类、1 种杂环类和 1 种其他挥发性化合物。根据 VIP 评分高低，识别出显著性差异化合物排名前 10 的挥发性化合物为(E)-2-癸烯醛、苯甲醛、(E)-3-十一碳烯、糠醛、苯乙烯、糠醇、(E)-4-辛烯、己醛、2,3-丁二酮、二氢-2-(3H)-噻吩酮。在 HS-SPME-GC-MS 分析中，共鉴定出 11 种

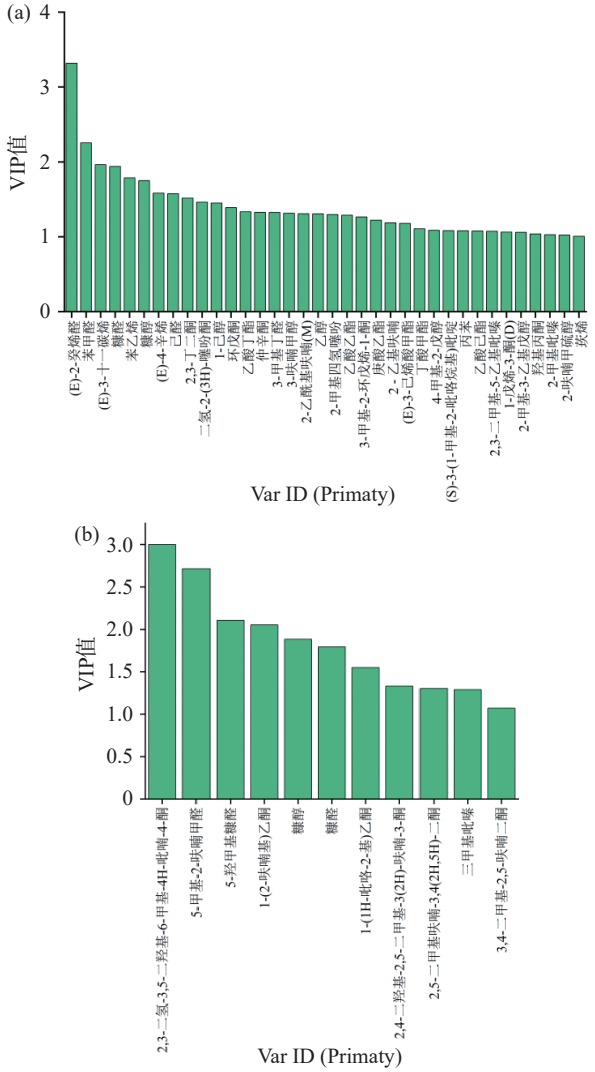


图 13　3 种咖啡果皮茶 VOCs VIP 图

Fig.13　VIP plot of VOCs in three types of cascara tea

注:(a)GC-IMS;(b)HS-SPME-GC-MS。

VIP>1 的显著性差异化合物,包括 6 种酮类、3 种醛类、1 种醇类和 1 种吡嗪类化合物,按照 VIP 值大小排序为 2,3-二氢-3,5-二羟基-6-甲基-4H-吡喃-4-酮、5-甲基-2-呋喃甲醛、5-羟甲基糠醛、1-(2-呋喃基)乙酮、糠醇、糠醛、1-(1H-吡咯-2-基)乙酮、2,4-二羟基-2,5-二甲基-3(2H)-呋喃-3-酮、2,5-二甲基呋喃-3,4(2H,5H)-二酮、三甲基吡嗪、3,4-二甲基-2,5-呋喃二酮。

2.5　关键香气成分鉴定

挥发性成分对样品风味的实际贡献度不仅取决于其相对含量,更需结合各物质的风味阈值进行综合评估[38]。食品香气特征主要取决于香气活度值较高的关键化合物。单一挥发性化合物对整体风味的贡献与其 ROAV 正相关。一般认为 ROAV≥1 时,该物质对样本整体风味产生贡献,被判定为关键风味物质,0.1≤ROAV<1 时,该物质对总体风味有修饰作用,定为修饰性风味化合物[39],ROAV<0.1,说明该物质对总体风味无显著影响。结合(E)-2-癸烯醛和苯甲醇在 GC-IMS 和 HS-SPME-GC-MS检测数据中不仅含量较高,而且气味阈值较低,表明其对整体风味具有显著影响,因此选定该两种物质为果皮茶样品的关键风味物质,定义其 $ROAV_{max}$ 为 100,根据已知相关气味阈值,通过式(2)求出各挥发性组分的 ROAV,如表 1 所示,共确定出 42 种香气化合物。两种检测分析技术共鉴别出 ROAV≥1 的关键风味成分有 1-己醇、2,3-丁二酮、3-甲基丁醛、2-甲基丙醛、正丁醛、乙酸丁酯、3-甲基丁酸乙酯、丁酸乙酯、庚酸乙酯、2-甲基丁酸乙酯、二甲基二硫醚、二甲基硫醚、2-呋喃甲硫醇、芳樟醇、2,4-二羟基-2,5-二甲基-3(2H)-呋喃-3-酮、大马酮、壬醛、(E)-2-壬烯醛和癸醛。在样品 CX 和样品 GT 中,2-呋喃甲硫醇的

表 1　3 种咖啡果皮茶香气组分相对气味活性值

Table 1　ROAV of aroma compounds in three types of cascara tea

化合物	气味阈值(mg/kg)	香气属性	ROAV(%)		
			CX	FY	GT
1-己醇	0.0056	酸香	6.86	3.91	6.87
3-甲基丁醇(M)	0.004	酸香	0.27	0.40	0.39
3-甲基丁醇(D)	0.004	酸香	0.05	0.18	0.10
2-甲基异莰醇	0.016	酚香	0.48	0.31	0.52
仲辛酮	0.0502	酚香	0.12	0.07	0.19
2,3-丁二酮	0.00774	焦糖香	1.04	0.43	0.93
1-戊烯-3-酮(D)	0.023	辛香	0.06	0.06	0.14
3-戊酮	0.04	酸香	0.11	0.09	0.15
壬醛	0.0011	花香	0.34	0.33	0.49
(E)-2-癸烯醛	0.0003	酚香	100.00	100.00	100.00
3-甲基丁醛	0.0011	坚果香	5.52	3.85	4.47
庚醛(M)	0.0028	酸香	0.84	0.62	0.80
己醛	0.005	酚香	0.44	0.85	0.83
2-甲基丙醛	0.0015	坚果香	1.26	0.80	1.22
戊醛	0.012	坚果香	0.16	0.10	0.14
丙醛	0.0151	坚果香	0.38	0.23	0.41
正丁醛	0.000182	坚果香	46.41	25.94	55.45

续表 1

化合物	气味阈值(mg/kg)	香气属性	ROAV(%)		
			CX	FY	GT
乙酸丁酯	0.000176	酸香	38.67	26.44	60.98
3-甲基丁酸乙酯	0.00022	酸香	11.86	9.44	20.10
丙酸乙酯	0.01	酸香	0.05	0.04	0.10
乙酸仲丁酯	0.006	酸香	0.10	0.04	0.07
丁酸乙酯	0.001	酸香	0.85	0.67	2.26
庚酸乙酯	0.0019	酸香	1.03	1.50	2.34
己酸乙酯	0.005	酸香	0.13	0.22	0.33
2-甲基丁酸乙酯	0.000063	酸香	3.62	3.09	6.56
二甲基二硫醚	0.0011	烤香	1.17	0.74	1.55
二甲基硫醚	0.00012	辛香	11.72	8.86	23.42
2-呋喃甲硫醇	0.00008	烤香	54.96	36.27	85.68
苯乙烯	0.065	花香	0.14	0.10	0.11
α-蒎烯	0.041	辛香	0.21	0.14	0.25
苯甲醇	0.0001	酸香	100.00	100.00	100.00
芳樟醇	0.00022	酸香	20.86	10.39	3.22
2,4-二羟基-2,5-二甲基-3(2H)-呋喃-3-酮	0.0223	烤香	4.19	7.45	1.71
大马酮	0.000126	酸香	11.30	18.96	8.34
5-甲基-2-呋喃甲醛	1.11	焦糖香	0.28	0.79	0.16
壬醛	0.0011	花香	17.48	22.09	12.10
(E)-2-壬烯醛	0.00019	酸香	–	38.26	13.41
癸醛	0.003	酸香	2.81	4.57	2.29
壬酸甲酯	0.04	酸香	0.14	0.29	0.10
月桂酸	0.004	酚香	0.21	0.51	0.26
3-甲基苯酚	0.031	酚香	–	–	0.23
2-乙基-5-甲基吡嗪	0.016	坚果香	–	–	0.34

注: 阈值查阅自文献[40−42]; 香气特征由http://www.perflavory.com/search.php检索得到, “–”代表该物质未检出。

ROAV 为 54.96、85.68, 高于其他物质, 可认为 2-呋喃甲硫醇强烈的烤肉香、咖啡香是 CX 和 GT 果皮茶的主要香气类型, 而(E)-2-壬烯醛在 FY 样品中 ROVA 值最高, 是 FY 果皮茶脂肪香、柑橘类香气形成的关键贡献物质。在样品 CX 中, 丁酸乙酯作为修饰性风味物质存在; 在 FY 样品中, 丁酸乙酯、2,3-丁二酮、2-甲基丙醛、二甲基二硫醚发挥修饰风味作用; 而在 GT 样品中, 2,3-丁二酮亦被识别为修饰性风味成分。0.1≤ROAV<1 的 VOCs 包括 3-甲基丁醇(M)、2-甲基异获醇、壬醛、庚醛(M)、己醛、戊醛、丙醛等 13 种修饰性风味化合物。其中, 3-甲基丁醇(D)、1-戊烯-3-酮(D)及丙酸乙酯香气对 CX 样品的整体风味轮廓不显著; 仲辛酮、1-戊烯-3-酮(D)、3-戊酮、丙酸乙酯与乙酸仲丁酯香气对 FY 样品的风味构成几乎无影响, 在 GT 样品中, 乙酸仲丁酯的香气贡献亦可以忽略。(E)-2-壬烯醛在 CX 组中未被检测到, 3-甲基苯酚和 2-乙基-5-甲基吡嗪在 CX、FY 样品中均未检出, 可能的原因是咖啡果皮在干法加工与蜜处理过程中, 其风味前体物质发生了显著变化。具体而言, (E)-2-壬烯醛的前体亚油酸、3-甲基苯酚的前体绿原酸, 以及 2-乙基-5-甲基吡嗪合成所依赖的氨基酸和糖类, 可能在加工阶段因微生物活动或酶促反应而被部分消耗, 或降解转化为其他代谢产物, 从而导致相应挥发性物质在后续分析中未能检出。

为了更精确地确定关键风味物质, 对满足 VIP 值≥1 和相对气味活度值(ROAV)≥1 这两个条件的挥发性风味物质进行综合分析与比对, 确定出(E)-2-癸烯醛、1-己醇、3-甲基丁醛、乙酸丁酯、庚酸丁酯、2-呋喃甲硫醇、2,4-二羟基-2,5 二甲基-3(2H)-呋喃-3-酮共 7 种挥发性化合物, 作为 3 种咖啡果皮茶核心气味标志物。

参考美国精品咖啡协会(Specialty Coffee Association of America, SCAA)提出的咖啡风味分类, 共确定出 7 个用于描述咖啡香气的属性词, 分别是酸香、酚香、坚果香、焦糖香、烤香、花香以及辛香, 本研究也采用 7 个香气来描述咖啡果皮茶香气。通过对关键香气化合物 ROAV 值的累计贡献, 获得了不同咖啡果皮茶的香气特征雷达图(见图 14)。结果表明, 在三种果皮茶的香气属性中, 酸香维度的响应值显著高于其余 6 种香气维度, 其强度依次为 GT> FY>CX。在酚香(CX: ROAV=101.25; FY: ROAV=101.74; GT: ROAV=102.03)与焦糖香(CX: ROAV=1.32; FY: ROAV=1.22; GT: ROAV=1.09)维度上, 三者表现差异不明显。然而, GT 样品在酸香、辛香、坚果香与烤香方面均表现出更高的浓郁度; FY 样品则呈现出最为突出的花香特征; 而 CX 样品在坚果香与烤香方面相对较为浓郁。

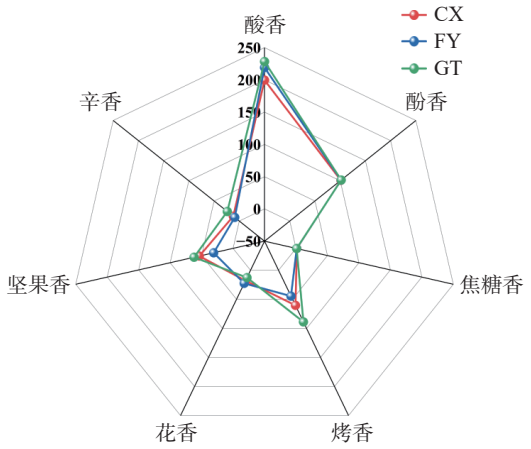


图 14 3 种咖啡果皮茶香气特征雷达图

Fig.14 Radar chart of aroma characteristics of three types of cascara tea

3 结论

本研究采用 GC-IMS 和 HS-SPME-GC-MS 技术对 3 种不同初加工咖啡果皮茶的挥发性成分进行了测定，并结合多元统计分析对 3 种咖啡果皮茶的风味特征进行综合表征。通过 GC-IMS 共定性出三种果皮茶 104 种 VOCs，其中酮类、醛类、酯类和醇类等为主要风味物质。HS-SPME-GC-MS 共鉴定出 55 种 VOCs，CX 样品中共鉴定出 45 种 VOCs，FY 样品 48 种，GT 样品 48 种，酮类、醛类风味物质在 CX、FY、GT 果皮茶中含量占比高达 86% 以上。两者检测手段得到的 VOCs 重合度低，但作为一种较新的检测方法，GC-IMS 具有方便快捷的优势，无需复杂的手动过程，在风味成分研究中可与 GC-MS 结合使用形成互补优势。通过 PLS-DA 中的 VIP 和 ROAV 共筛选出(E)-2-癸烯醛、1-己醇、3-甲基丁醛、乙酸丁酯、庚酸乙酯、2-呋喃甲硫醇、2,4-二羟基-2,5-二甲基-3(2H)-呋喃-3-酮 7 种关键气味标志物。香气轮廓剖析结果显示不同初加工咖啡果皮茶的香气特征存在差异，GT 样品呈现出更浓郁的酸香、辛香、坚果香与烤香；FY 样品则呈现出最为突出的花香特征；而 CX 样品则表现出较为浓郁的坚果香与烤香。本研究进一步明晰了不同初加工咖啡果皮茶饮的香气组分构成及特征差异，为咖啡果皮的综合开发利用提供数据支持。

© 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] 苗玥. 咖啡豆水提物化学组成及其对骨细胞和骨代谢的作用机制研究[D]. 昆明：云南农业大学, 2023. [MIAO Y. Chemical composition of coffee bean aqueous extract and its mechanism of action on bone cells and bone metabolism[D]. Kunming: Yunnan Agricultural University, 2023.]

[2] 黄家雄, 黄琳, 吕玉兰, 等. 中国咖啡产业发展前景分析[J]. 云南农业科技, 2018(6): 4−7. [HUANG J X, HUANG L, LÜ Y L, et al. Analysis of development prospects for coffee industry in China[J]. Yunnan Agricultural Science and Technology, 2018(6): 4−7.]

[3] BESSADA F M S, ALVES C R, OLIVEIRA P P B M. Coffee silverskin: A review on potential cosmetic applications[J]. Cosmetics, 2018, 5(1): 5.

[4] 匡钰, 梁建平, 廖留萍, 等. 咖啡果酒发酵菌种筛选及香气成分分析[J]. 热带农业科技, 2020, 43(2): 12−17,23. [KUANG Y, LIANG J P, LIAO L P, et al. Strain selection for coffee fruit wine fermentation and analysis of aroma components[J]. Tropical Agricultural Science and Technology, 2020, 43(2): 12−17,23.]

[5] 罗娅婷, 张国忠, 谢恩翰, 等. 咖啡果皮茶制作工艺初步研究[J]. 普洱学院学报, 2018, 34(6): 15−17. [LUO Y T, ZHANG G Z, XIE E H, et al. Preliminary study on processing technology of coffee peel tea[J]. Journal of Pu`er University, 2018, 34(6): 15−17.]

[6] 孙岳, 周地娇, 何飞飞, 等. 咖啡果皮茶冲泡条件研究[J]. 食品研究与开发, 2021, 42(12): 97−101. [SUN Y, ZHOU D J, HE F F, et al. Optimization of brewing conditions for coffee peel tea[J]. Food Research and Development, 2021, 42(12): 97−101.]

[7] PLEISSNER D, NEU A K, MEHLMANN K, et al. Fermentative lactic acid production from coffee pulp hydrolysate using *Bacillus coagulans* at laboratory and pilot scales[J]. Bioresource Technology, 2016, 218: 167−173.

[8] HEEGER A, KOSIŃSKA-CAGNAZZO A, CANTERGIANI E, et al. Bioactives of coffee cherry pulp and its utilization for production of Cascara beverage[J]. Food Chemistry, 2017, 221: 969−975.

[9] MENEZES E G T, CARMO J R D, ALVES J G L F, et al. Optimization of alkaline pretreatment of coffee pulp for production of bioethanol[J]. Biotechnology Progress, 2014, 30(2): 451−462.

[10] CORRO G, PANIAGUA L, PAL U, et al. Generation of biogas from coffee-pulp and cow-dung co-digestion: Infrared studies of postcombustion emissions[J]. Energy Conversion and Management, 2013, 74(10): 471−481.

[11] 穆昱菊, 李向红, 雷然, 等. 咖啡果皮提取物对钢在三氯乙酸溶液中的缓蚀性能[J]. 中国腐蚀与防护学报, 2024, 44(6): 1465−1475. [MU X J, LI X H, LEI R, et al. Corrosion inhibition performance of coffee peel extract for steel in trichloroacetic acid solution[J]. Journal of Chinese Society for Corrosion and Protection, 2024, 44(6): 1465−1475.]

[12] 文志华, 程金焕, 何红艳. 咖啡果皮茶的加工技术[J]. 食品安全导刊, 2019(18): 163. [WEN Z H, CHENG J H, HE H Y. Processing technology of coffee peel tea[J]. China Food Safety Magazine, 2019(18): 163.]

[13] PEREIRA T S, BATISTA N N, SANTOS P L P, et al. Self-in-duced anaerobiosis coffee fermentation: Impact on microbial communities, chemical composition and sensory quality of coffee[J]. Food Microbiology, 2022, 103: 103962.

[14] WU S H, CHEN B J, WANG X, et al. Analysis of the effects of steaming and spray-drying on volatile flavor components of sweet corn beverage based on HS-SPME-GC–MS and HS-GC-IMS[J]. Food Chemistry: X, 2025, 27: 102478.

[15] LI Y, YUAN L, LIU H J, et al. Analysis of the changes of volatile flavor compounds in a traditional Chinese shrimp paste during fermentation based on electronic nose, SPME-GC-MS and HS-

GC-IMS[J]. Food Science and Human Wellness, 2023, 12(1): 173−182.
[16] ZHANG Y, TONG X Y, CHEN B J, et al. Novel application of HS-GC-IMS for characteristic fingerprints and flavor compound variations in *Citrus reticulatae* pericarpium during storage with different *Aspergillus niger* fermentation[J]. Food Chemistry: X, 2023, 18: 100653.
[17] LU S, HE W L, LIN M H, et al. Comprehensive analysis of volatile flavor components in pear fruit spanning the entire development stages[J]. Food Chemistry, 2025, 485: 144493.
[18] PENG Q, HUANG J X, LI S S, et al. Comprehensive origin authentication of wolfberry pulp (*Lycium barbarum* L.) using multimodal sensory analysis and chemometrics[J]. Industrial Crops and Products, 2024, 219: 119023.
[19] HU M Y, WANG S Y, LIU Q, et al. Flavor profile of dried shrimp at different processing stages[J]. LWT, 2021, 146: 111403.
[20] ZHANG H Y, ZHANG J X, LIU S T, et al. Characterization of the key volatile compounds in longjing tea (*Camellia sinensis*) with different aroma types at different steeping temperatures by GC–MS and GC–IMS[J]. LWT, 2024, 200: 116183.
[21] BRESSANELLO D, LIBERTO E, CORDERO C, et al. Coffee aroma: Chemometric comparison of the chemical information provided by three different samplings combined with GC–MS to describe the sensory properties in cup[J]. Food Chemistry, 2017, 214: 218−226.
[22] COUTO C D C, CHÁVEZ H W D, OLIVEIRA M M E, et al. SPME-GC-MS untargeted metabolomics approach to identify potential volatile compounds as markers for fraud detection in roasted and ground coffee.[J]. Food chemistry, 2024, 446: 138862.
[23] VELÁSQUEZ S, PEÑA N, BOHÓRQUEZ C J, et al. Volatile and sensory characterization of roast coffees-Effects of cherry maturity[J]. Food Chemistry, 2019, 274: 137−145.
[24] 陆羽霜, 施政廷, 杨震南. SPME-GC-MS 结合多元统计方法探究冷萃与热萃对咖啡萃取液香气的影响[J]. 食品工业科技, 2023, 44(24): 79−86. [LU Y S, SHI Z T, YANG Z N. Effects of cold and hot brew on the aroma of coffee extract by SPME-GC-MS combined with multivariate statistical method[J]. Science and Technology of Food Industry, 2023, 44(24): 79−86.]
[25] 翟慧楠. 不同初加工处理云南咖啡风味化学组成及品质研究[D]. 银川: 宁夏大学, 2023. [ZHAI H N. Study on the flavor chemical components and quality of Yunnan coffee prepared by different primary processing[D]. Yinchuan: Ningxia University, 2023.]
[26] 侯晓慧, 张婷, 张萌, 等. 基于 GC-IMS 和 HS-SPME-GC-MS 分析泾阳茯砖茶的特征风味物质[J]. 食品科学, 2023, 44(14): 245−257. [HOU X H, ZHANG T, ZHANG M, et al. Identification of characteristic flavor substances of jingyang fu brick tea by gas chromatography-ion mobility spectrometry and headspace solid phase microextraction-gas chromatography- mass spectrometry[J]. Food Science, 2023, 44(14): 245−257.]
[27] 吴东源, 林海生, 陆大鹏, 等. 基于电子鼻、GC-IMS 和 GC-MS 分析干燥方式对墨西哥湾扇贝挥发性成分的影响[J/OL]. 食品工业科技, 1−15[2025-11-02]. https://doi.org/10.13386/j.issn1002-0306.2025070209. [WU D Y, LIN H S, LU D P, et al. Effect of drying method on volatile compounds of *Argopecten irradians concentricus* based on electronic nose, GC-IMS and GC-MS[J]. Science and Technology of Food Industry, 1−15[2025-11-02]. https://doi.org/10.13386/j.issn1002-0306.2025070209.]
[28] LENG L, HU H W, CUI A H, et al. HS-GC-IMS with PCA to analyze volatile flavor compounds of honey peach packaged with different preservation methods during storage[J]. LWT, 2021, 149: 111963.
[29] LI M Q, YANG R W, ZHANG H, et al. Development of aflavor fingerprint by HS-GC-IMS with PCA for volatile compounds of *Tricholoma matsutake* Singer[J]. Food Chemistry, 2019, 290: 32−39.
[30] CHEN T, CHEN X Y, LU D L, et al. Detection of adulteration in canola oil by using GC-IMS and chemometric analysis[J]. International Journal of Analytical Chemistry, 2018: 3160265.
[31] 曾桥, 吕生华, 段洁, 等. 基于气相离子迁移谱技术分析杜仲叶茯砖茶加工过程中挥发性成分[J]. 食品工业科技, 2021, 42(21): 73−82. [ZENG Q, LÜ S H, DUAN J, et al. Analysis of volatile components in *Eucommia ulmoide*s leaf Fu brick tea during processing based on gas chromatography-ion mobility spectrometry [J]. Science and Technology of Food Industry, 2021, 42(21): 73−82.]
[32] DOMÍNGUEZ R, PURRIÑOS L, PÉREZ-SANTAESCOLÁSTICA C, et al. Characterization of volatile compounds of dry-cured meat products using HS-SPME-GC/MS technique[J]. Food Analytical Methods, 2019, 12(6): 1263−1284.
[33] 陈家齐, 李佳霖, 赵吉春, 等. 基于 HS-SPME-GC-MS 和 HS-GC-IMS 联用分析不同干燥方式对红托竹荪挥发性物质的影响[J]. 食品工业科技, 2025, 46(12): 284−295. [CHEN J Q, LI J L, ZHAO J C, et al. Analysis of the effects of different drying methods on volatile compounds in *Phallus rubrovolvatus* using HS-SPME-GC-MS and HS-GC-IMS[J]. Science and Technology of Food Industry, 2025, 46(12): 284−295.]
[34] JIANG H, DUAN W S, ZHAO Y C, et al. Development of a flavor fingerprint using HS-GC-IMS for volatile compounds from steamed potatoes of different varieties[J]. Foods, 2023, 12(11): 2252.
[35] 廖国钊, 时小东, 王嘉, 等. 基于 GC-IMS 和 GC-MS 比较不同桑叶茶的香气成分[J]. 现代食品科技, 2025, 41(1): 262−272. [LIAO G Z, SHI X D, WANG J, et al. Comparison of aroma components in different mulberry leaf teas based on GC-IMS and GC-MS[J]. Modern Food Science and Technology, 2025, 41(1): 262−272.]
[36] 赵泽伟, 丁筑红, 许培振, 等. 基于 SPME-GC-MS 和电子鼻分析方法分析薏仁饮料贮藏过程风味化合物变化[J]. 食品科学, 2018, 39(14): 276−281. [ZHAO Z W, DING Z H, XU P Z, et al. Change of flavor compounds in coix seed beverage during storage analyzed by SPME-GC-MS and electronic nose[J]. Food Science, 2019, 39(14): 276−281.]
[37] 孙莹, 苗榕芯, 江连洲. 电子鼻结合气相色谱-质谱联用技术分析贮存条件对马铃薯面包挥发性成分的影响[J]. 食品科学, 2019, 40(2): 222−228. [SUN Y, MIAO R X, JIANG L Z. Analysis of volatile components of potato bread under different storage conditions by electronic nose combined with HS-SPME-GC-MS[J]. Food Science, 2019, 40(2): 222−228.]
[38] ZHANG Y R, ZHANG S W, FAN W X, et al. Identification of volatile compounds and odour activity values in Quinoa porridge by gas chromatography-mass spectrometry[J]. Journal of the Science of Food and Agriculture, 2019, 99(8): 3957−3966.
[39] 岳凤丽, 黄忠民, 白杨, 等. 基于电子鼻和 GC-IMS 分析香茅

提取物对黄河鲤鱼脱腥效果的影响[J/OL]. 食品工业科技, 1−19[2025-10-31]. https://doi.org/10.13386/j.issn1002-0306.2025050016. [YUE F L, HUANG Z M, BAI Y, et al. The influence of citronella extract on the deodorization effect of yellow river carp was analyzed based on electronic nose and GC-IMS[J/OL]. Science and Technology of Food Industry, 1−19[2025-10-31]. https://doi.org/10.13386/j.issn1002-0306.2025050016.]

[40] GEMERT L J V. Compilations of odour threshold values in air, water and other media[M]. Huizen, the Netherlands: Oliemans Punter & Partners, 2003.

[41] 王道科, 吴正鹏, 王墨阳, 等. 毕赤酵母降解发酵对沙棘汁品质及风味的影响[J/OL]. 食品与发酵工业, 1−11[2025-07-22]. https://doi.org/10.13995/j.cnki.11-1802/ts.042500. [WANG D K, WU Z P, WANG M Y, et al. Effect of acid reducing fermentation by *Pichia terricola* on the quality and flavor of sea buckthorn juice [J/OL]. Food and Fermentation Industries, 1−11[2025-07-19]. https://doi.org/10.13995/j. cnki.11-1802/ts.042500.]

[42] 常诗瑜, 韩俊逸, 曹闪, 等. SAFE 结合 GC-O-MS 探究不同烘焙度耶加雪菲小粒咖啡香气特征差异[J/OL]. 甘肃农业大学学报, 1−13[2025-07-22]. http://kns.cnki.net/kcms/detail/62.1055.S.20241216.1646.002.html. [CHANG S Y, HAN J Y, CAO S, et al. Comparative study of aroma characteristic of Yirgacheffe coffee with different roasting degrees by SAFE and GC-O-MS[J/OL]. Journal of Gansu Agricultural University, 1−13[2025-07-22]. http://kns.cnki.net/kcms/detail/62.1055.S.20241216.1646.002.html.]