

DOI:10.13995/j.cnki.11-1802/ts.027969

引用格式: 闫鉴, 兰天, 王家琪, 等. 基于电子鼻和气质联用技术分析市售牡丹籽油产品的香气差异性 [J]. 食品与发酵工业, 2021, 47(19): 264-270. YAN Jian, LAN Tian, WANG Jiaqi, et al. Aroma analysis of different commercial peony seed oil by electronic nose and GC-MS [J]. Food and Fermentation Industries, 2021, 47(19): 264-270.

基于电子鼻和气质联用技术分析市售牡丹籽油产品的香气差异性

闫鉴¹, 兰天², 王家琪², 鲍诗晗², 王悦², 孙翔宇³, 马婷婷^{2*}

1(石圪节智华生物科技有限公司, 山西 长治, 046299)

2(西北农林科技大学 食品科学与工程学院, 陕西 杨凌, 712100) 3(西北农林科技大学 葡萄酒学院, 陕西 杨凌, 712100)

摘要 为了解市售牡丹籽油的香气特征和呈香物质的差异性, 选取了 10 款销量较高的市售牡丹籽油为研究对象, 利用电子鼻和 GC-MS 对其香气差异性进行分析。结果表明, 现有市售牡丹籽油的香气及呈香物质存在显著差异。不同牡丹籽油产品中挥发性成分对电子鼻传感器的敏感性大致相同, 但响应值有所差异, 结合线性判别分析可实现对不同牡丹籽油产品整体香气特征的快速区分。GC-MS 结果显示, 在 10 种市售牡丹籽油产品中共检出 133 种挥发性化合物, 其在各样品中的组成和比例不同, 分别形成了不同牡丹籽油产品的独特风味。采用相对气味活度值法分析得到 3 种关键风味化合物和 5 种修饰性风味化合物, 是造成不同牡丹籽油产品香气差异的主要物质。对这些物质进行主成分分析, 可以简单区分不同牡丹籽油产品。研究可为后续牡丹籽油风味物质的研究以及控制和优化其香气品质提供参考。

关键词 牡丹籽油; 香气; 关键香气化合物; 电子鼻; 气质联用技术

油用牡丹 (*Paeonia suffruticosa* Andr) 为毛茛目毛茛科芍药属植物, 原产于中国, 现在山东、河南、安徽、陕西 4 省有较大规模的集中种植, 并在甘肃、四川及云南北部等地有少量种植^[1]。油用牡丹的牡丹籽含油量在 29% ~ 34% 左右^[2], 经过压榨、浸渍等提取工艺得到金黄色透明的牡丹籽油^[3]。研究表明, 牡丹籽油中含有 90% 以上的不饱和脂肪酸, 其中, 亚麻酸含量最高, 占 38.7% 以上^[4-6], 远高于其他常用植物油, 如葵花籽油 (4.5%), 大豆油 (6.7%) 以及菜籽油 (8.4%)^[4]。此外, 牡丹籽油中还含有丰富的植物甾醇, 角鲨烯, 维生素 E 以及多种对人体有益的矿物质^[1,6-7]。因此, 其具有保护肝脏、降血脂血糖、抗氧化、预防心血管疾病、调节免疫力等多种功能^[1,7-8], 被称为“液体黄金”^[7]。

近年来, 随着人民生活水平的不断提高, 人们在选择食用油时已不仅仅停留在安全卫生的水平, 而是更加注重其健康与营养^[9]。牡丹籽油因成分结构合理、营养价值极高、无毒性等特点^[1], 逐渐被消费者所接受。2011 年原卫生部 (现国家卫生健康委员会) 将牡丹籽油列为新资源食品。在此基础上, 牡丹籽油产业在多个主要牡丹种植省份迅速发展, 并成为了食品、医药和健康领域的关注热点^[1]。

目前, 关于牡丹籽油的研究多集中于提取工艺优化^[2,10]、成分构成及功能活性分析^[1,6,11]、氧化稳定性研究^[4,8] 以及产业发展分析^[1,5,7] 等方面。对于牡丹籽油的气味成分分析却鲜有报道。

牡丹籽油作为一种食用油, 其感官品质对消费者至关重要。植物油中的挥发性香气成分存在于油中的次生特异性标志, 赋予了植物油独特的风味^[12], 也是评价植物油品质的重要组成成分^[13]。因此, 实验以 10 款不同市售牡丹籽油为对象, 对其进行电子鼻和 GC-MS 检测, 分析不同牡丹籽油产品的香气差异性, 以期对牡丹籽油的风味物质研究提供参考。

1 材料与方法

1.1 实验材料

选择市场上常见的牡丹籽油共 10 个品牌, 均购自京东网上商城, 并在 4 °C 下保存, 备用。10 个品牌的牡丹籽油分别编号 P1 ~ P10。

1.2 仪器与设备

GC-MS-QP2010 气质联用仪, 日本岛津公司; SPME 萃取装置 (50/30 μm, DVB/CAR/PDMS), 美国 Supelco 公司; PEN 3 电子鼻, 德国 Airsense 公司。

第一作者: 闫鉴高级工程师和兰天硕士研究生为共同第一作者 (马婷婷副教授为通讯作者, E-mail: matingting@nwfufu.edu.cn)

基金项目: 山西潞安石圪节智华生物科技有限公司科技计划项目 (2020-4; 2020-62)

收稿日期: 2021-05-07, 改回日期: 2021-06-08

1.3 实验方法

1.3.1 电子鼻检测

采用电子鼻对不同市售牡丹籽油产品的整体香气特征进行检测,在 MA 等^[14]的测试方法基础上稍作修改。将 5 mL 牡丹籽油样品置于 20 mL 样品瓶中,25 °C 平衡 10 min 后,插入电子鼻探头吸取顶端空气进行检测,每个样品至少测定 8 次。电子鼻检测参数:样品检测时间 60 s,清洗时间 300 s,载气速度 300 mL/min,进样流量 300 mL/min。

1.3.2 GC-MS 分析

采用顶空固相微萃取法结合气相色谱串联质谱技术(headspace solid phase microextraction-gas chromatography mass spectrometry, HS-SPME-GC-MS)对不同市售牡丹籽油产品中的挥发性香气成分进行测定,在 LAN 等^[15]的测定方法上稍作修改。将 5 mL 牡丹籽油置于 20 mL 顶空瓶中,45 °C 平衡 30 min,将老化后(250 °C, 120 min)的萃取头插入样品瓶顶空部分萃取 30 min,随后插入气相色谱进样口,250 °C 解吸 2 min,同时启动仪器采集数据,用于 GC-MS 的分离与鉴定。GC 条件:采用 DB-1MS 熔融石英毛细管柱(30 m × 0.25 mm × 0.25 μm)和氦气(1.93 mL/min)检测。升温程序:初始温度 40 °C,保持 3 min,以 4 °C/min 升温至 120 °C,然后以 6 °C/min 的速度上升至 240 °C,并保持 9 min。MS 条件:EI 离子源,电子轰击能量 70 eV,离子源温度 230 °C;全扫描:质量扫描范围 m/z 35 ~ 500。所有测试重复 3 次。

1.3.3 定性定量方法

定性方法^[16]:牡丹籽油的挥发性物质是根据 NIST 14 质谱数据库通过匹配度和保留时间并结合保留指数(retention index, RI)确定的,并选择与匹配度大于 85% 的成分为有效香气成分。RI 根据公式(1)计算得到,其中正构烷烃的碳原子数为 $C_7 \sim C_{30}$ 。

$$RI = 100 \times n + \frac{100 \times t_x \times t_n}{t_{(n+1)} \times t_n} \quad (1)$$

式中: n 和 $n+1$ 分别为待测组分前后正构烷烃的碳原子数, t_n 和 t_{n+1} 为相应的正构烷烃出峰保留时间, t_x 为待测组分出峰保留时间,其中 $t_n < t_x < t_{n+1}$

相对定量方法:采用峰面积归一化法进行定量分析,得到挥发性物质的相对含量。

1.3.4 相对气味活度值(relative odor activity value, ROAV)

基于化合物的相对含量,在评价各组分对牡丹籽油风味的贡献时,引入 ROAV^[17],设定对样品风味贡

献最大化合物: $ROAV_{\max} = 100$,其他化合物计算如公式(2)所示:

$$ROAV_i \approx \frac{C_i \times T_{\max}}{C_{\max} \times T_i} \times 100 \quad (2)$$

式中: C_i 和 T_i 分别为各化合物的相对百分含量和对应的感觉阈值; C_{\max} 和 T_{\max} 分别为样品风味贡献最大组分的相对百分含量和感觉阈值

1.4 统计分析

电子鼻数据利用 Excel 16.44 进行整合,并采用 SPSS 26.0.0.0 进行线性判别分析。挥发性物质数据采用 SPSS 26.0.0.0 进行方差分析及多重比较, $P < 0.05$ 为显著相关。关键香气化合物的主成分分析采用 SPSS 26.0.0.0 软件进行处理。

2 结果与分析

2.1 电子鼻测定结果分析

电子鼻是一种基于模拟人类嗅觉系统的挥发性成分分析仪器,可以快速、无损的对产品风味轮廓信息进行综合分析^[18-19]。本研究采用的 PEN3 型电子鼻是一种金属氧化物传感器型的电子鼻,具有 10 个金属氧化物气体传感器阵列,如表 1 所示^[18]。

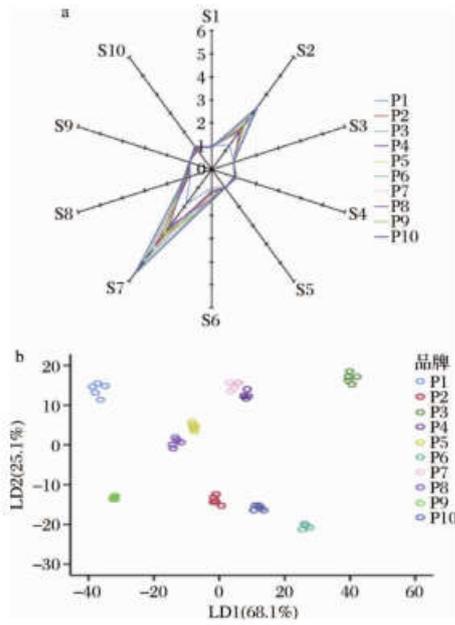
表 1 PEN3 型电子鼻传感器敏感物质

Table 1 Sensitive substances of PEN3 electronic nose sensor

阵列序号	传感器	性能描述
S1	W1C	对芳烃成分,苯类灵敏
S2	W5S	灵敏度大,对氮氧化物敏感
S3	W3C	对芳香成分灵敏,氨类敏感
S4	W6S	主要对氢类敏感
S5	W5C	对短链烷烃、芳香成分敏感
S6	W1S	对甲基类灵敏
S7	W1 W	对硫化物灵敏
S8	W2S	对醇类、醛酮类灵敏
S9	W2 W	对芳香成分,有机硫化物灵敏
S10	W3S	对长链烷烃灵敏

图 1-a 为 10 种牡丹籽油电子鼻传感器响应信号平衡后的响应雷达图。不同牡丹籽油产品挥发性成分对传感器的敏感性大致相同,但响应值有所差异。总体而言,对于所有的牡丹籽油产品,传感器 S2 (W5S) 和 S7 (W1 W) 的响应信号均普遍较强,它们分别对氮氧化物以及硫化物较为敏感,其中, P1 的响应值最小, P10 和 P6 的响应值最大。而其他传感器对牡丹籽油的响应值均较小。

在此基础上,对不同牡丹籽油产品的电子鼻响应值进行判别分析(linear discriminant analysis, LDA)。



a-电子鼻响应值雷达图;b-基于电子鼻响应的 LDA

图1 市售牡丹籽油产品电子鼻结果分析

Fig. 1 Results of electronic nose analysis of different commercially peony seed oil products

LDA 是一种模式识别的典型算法,性质相似的样品会在空间距离上表现的较为接近^[18-19]。由图 1-b 可以看出,LD1 的贡献率为 68.1%,LD2 的贡献率为 25.1%,LD1 和 LD2 的总贡献率为 93.2%,且 10 组样品之间无交叉区域,区分明显,这表明不同牡丹籽油产品的风味特征之间存在差异,可以通过电子鼻较好地分开。P4 和 P7,P5 和 P8 的距离较近,说明香气特征比较接近。

2.2 GC-MS 分析结果

在电子鼻的基础上,本研究采用 HS-SPME-GC-MS 对多个市售牡丹籽油的挥发性香气成分进行了测定,其挥发性物质种类和相对含量见增强出版附表 1。研究表明,不同牡丹籽油产品对挥发性物质的种类和含量均存在显著差异。

2.2.1 挥发性物质种类分析

就挥发性物质种类而言,10 种牡丹籽油中共检测出 133 种挥发性物质,根据官能团将挥发性成分分为 7 类,包括 23 种醛类、7 种酸类、28 种烷烃类、21 种烯烃类、12 种醇类、15 种酮类、11 种酯类以及 16 种其他类物质。不同牡丹籽油产品中存在的挥发性物质种类存在较大的差异。P3 含挥发性物质种类最多(80),其次是 P7(77)、P4(65)、P10(64)、P2(63)、P9(60)、P8(57)、P6(56)、P5(51)和 P1(35)。其中,

10 种不同市售牡丹籽油产品共有的挥发性物质有 17 种,分别是丁醛、己醛、(E,E)-2,4-庚二烯醛、癸醛、乙酸、己酸、1-戊烯、(E)-2-戊二烯、柠檬烯、乙醇、1-戊烯-3-醇、2-丁酮、3-辛酮、辛酸乙酯、2,3-二氢咪喃、苯、2-乙咪喃。10 种不同市售牡丹籽油产品特有的挥发性物质有 34 种,P9 含有最多的特有挥发性物质共 8 种,其次是 P10(5)。P2、P3、P4、P5、P6 和 P8 均有 3 种特有挥发性物质,P7 有 2 种,P1 则只有 1 种。造成不同牡丹籽油产品挥发性物质种类存在差异的原因可能是产地、品种、提取方式等的不同。

2.2.2 挥发性物质相对含量分析

由图 2 可知,不同市售牡丹籽油产品的挥发性物质相对含量以及不同类别挥发性物质在总挥发性物质中的占比均存在显著差异。在 10 种不同品牌牡丹籽油样品中,除 P1 和 P6 外,其余样品中的醛类物质含量占比最高(24.51%~52.15%),且不同样品之间差异显著($P < 0.05$)。P3 和 P7 的醛类物质占比高达 50% 以上,其中己醛的占比高达 20% 以上,是主要的醛类化合物,并且其在 P4、P5、P9 和 P10 也是占比最高的醛类物质。2-丙烯醛则是 P2、P6 和 P8 中占比最高的醛类物质,分别为 8.12%、6.04% 和 10.42%。而在 P1 中,醛类占比仅达 5.92%。由于醛类物质阈值较低,对香气贡献度相对较大^[19],其可能是造成不同市售牡丹籽油产品香气差异的主要香气化合物,同时,也是导致 P1 的香气较淡的主要原因之一。

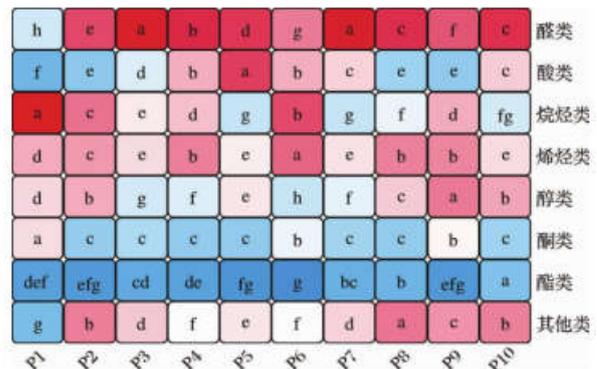


图2 牡丹籽油产品中不同类别挥发性化合物在总挥发性物质中的占比热图

Fig. 2 Heat map of proportion of volatile compounds in total volatile compounds in different peony seed oil products

注:每一行不同小写字母表示具有显著差异($P < 0.05$);红色到蓝色,表示的值逐渐减小

此外,在 P1 和 P6 中,烷烃类物质在所有挥发性物质中的占比最高,特别是在 P1 中达到了 55.95%,这可能作为区分 P1 和其他牡丹籽油产品的关键香气

成分。而烷烃类物质阈值较高,大多香气较弱或者无味^[9],可能造成了P1的香气不够突出,这与之前P1在电子鼻检测中表现出的低响应值是相吻合的。同时,烷烃类物质在P2中占比也较高,为19.34%。除P7、P8和P10中不含有戊烷外,其他牡丹籽油产品中戊烷是烷烃类物质中占比最高的物质(2.49%~43.77%)。

除此之外,酸类物质在P5和P4中表现较为突出,分别占总挥发性物质的30.34%和12.73%。其中,甲酸和乙酸的含量最高,特别是乙酸,存在于所有样品中。而甲酸是P5和P10占比最高的酸类物质,也是P5和P10中特有的酸类物质。烯炔类物质在P1、P4和P6中均有较高的占比,其中,柠檬烯仅在P1中表现出了较为突出的地位,其可能为P1提供部分柠檬与橙子的香气。醇类物质则在P9中占比较高,其中,乙醇是所有醇类物质中占比最高的,但因其高阈值而没有对牡丹籽油的风味产生主要贡献。酸类化合物主要是游离脂肪酸形成的,具有刺鼻的酸味,烯炔类物质主要来自脂肪酸烷氧自由基的均裂,而醇类物质则是由醛类物质经乙醇脱氢酶转化而成的,但因三者的阈值相对较高,对整体的风味贡献程度一般^[20-21],但可能对提高牡丹籽油整体风味有重要作用。酯类物质和酮类物质在牡丹籽油样品中也有较少的检出,这些物质可能为样品提供了一些辛辣等刺激性气味或花果香。而在其他类物质中,呋喃类物质表现较好,可能是牡丹籽油中的重要香气物质。

2.3 关键香气化合物的差异分析

挥发性香气物质对样品总体风味特性的贡献度是由风味体系中挥发性物质的浓度与察觉阈值共同决定的^[21]。通常来说,仅有一小部分对样品的总体

风味具有显著贡献,这些挥发性物质对总体风味其主导作用,被称为关键风味化合物^[9]。为了进一步分析不同牡丹籽油产品香气的差异性,采用ROAV法来确定其关键风味化合物。ROAV越大的挥发性物质对样品总体风味的贡献也越大。基于前人的研究^[17,22],ROAV ≥ 1 的物质为样品的关键风味化合物,而 $0.1 \leq \text{ROAV} < 1$ 的物质对样品总体风味也有重要贡献,被称为修饰性风味化合物。

由表2可知,10种不同牡丹籽油产品中的关键风味化合物(ROAV ≥ 1)共有3种,即乙醛、1-戊烯-3-酮和2,3-戊二酮。2-甲基丁醛、(Z)-4-庚烯醛、(E)-2-庚烯醛、(E)-2-辛烯醛和1-辛烯-3-醇也对牡丹籽油的总体风味有重要贡献,被认为是牡丹籽油的修饰性风味化合物($0.1 \leq \text{ROAV} < 1$)。这些重要的关键风味化合物以及修饰性风味化合物以不同的含量和比例分别形成了不同品牌牡丹籽油的独特风味。醛类物质种类最多且ROAV高,特别是乙醛,被认为是P2~P10中贡献最大的关键香气化合物。而其余醛类物质在不同样品中ROAV差异较大。醛类物质是脂肪酸由脂氧合酶及过氧化物裂解酶二级降解得到的产物,阈值较低,可以为样品提供一些积极的感官特性,如果香味、麦芽味、油脂香和青草香等^[20]。因此,醛类物质被认为是造成不同牡丹籽油产品香气差异的一类主要化合物。此外,酮类物质在牡丹籽油中,特别是P1中表现出了对总体风味特征的较大贡献。酮类化合物是由不饱和脂肪酸降解得到的氢过氧化物在经微生物氧化或热氧化产生的,阈值相对较低,具有胡椒、大蒜、洋葱的辛辣刺激气味,以及黄油味^[20]。1-辛烯-3-醇作为一种修饰性风味化合物,能够加强基质中特征香气成分的显现^[20]。

表2 牡丹籽油中的关键风味化合物

Table 3 Key flavor compounds in peony seed oil

序号	化合物名称	样品 ROAV										气味阈值/ ($\mu\text{g}\cdot\text{kg}^{-1}$) ^[23]	气味 描述 ^[18,24-26]
		P1	P2	P3	P4	P5	P6	P7	P8	P9	P10		
K1	乙醛	-	100	100	100	100	100	100	100	100	100	0.22	果香
K2	2-甲基丁醛	-	0.10	-	0.023	-	-	-	-	-	-	2.20	麦芽香,水果香
K3	(Z)-4-庚烯醛	-	-	0.10	0.090	0.029	-	0.037	-	-	-	2.00	樟脑球味
K4	(E)-2-庚烯醛	-	-	0.28	0.15	-	-	-	-	-	-	5.00	油脂香,青草,果香
K5	(E)-2-辛烯醛	-	-	0.10	0.033	-	-	0.034	-	-	0.043	4.00	脂香,青草味
K6	1-辛烯-3-醇	-	0.13	-	-	-	-	0.24	-	-	-	1.00	泥土,蘑菇
K7	1-戊烯-3-酮	-	0.85	1.01	1.05	0.47	5.22	0.39	1.17	2.54	0.90	0.70	香辣、胡椒,大蒜,洋葱
K8	2,3-戊二酮	100	-	-	-	-	-	3.98	-	4.56	-	0.30	黄油,芝士味

2.4 关键香气化合物的主成分分析

对采用ROAV法确定的关键风味化合物和修饰

性风味化合物进行主成分分析(图3)。前3个主成分贡献的累积贡献率为75.924%,可以代表样品的

整体信息。P1 的第 1 主成分得分为负值,第 2 和 3 主成分得分为正值,K8 (2,3-戊二酮) 在第 1 和 2 主成分的载荷可以将 P1 从其他样品中区分开来。P2 的第 1 主成分得分为正值,第 2 和 3 主成分得分为负值,K2 (2-甲基丁醛) 和 K6 (1-辛烯-3-醇) 可以将 P2 从其他样品中区分开来。P3 和 P4 的 3 个主成分得

分均为正值,K3 [(Z)-4-庚烯醛] 和 K5 [(E)-2-辛烯醛],可以将 P3 和 P4 从其他样品中区分开来。P6、P9 和 P8 的 3 个主成分得分为负值,K7 (1-戊烯-3-酮),可以将它们从其他样品中区分开来。总体而言,不同牡丹籽油产品之间香气特征存在显著差异,可以通过主成分分析进行较好的区分。

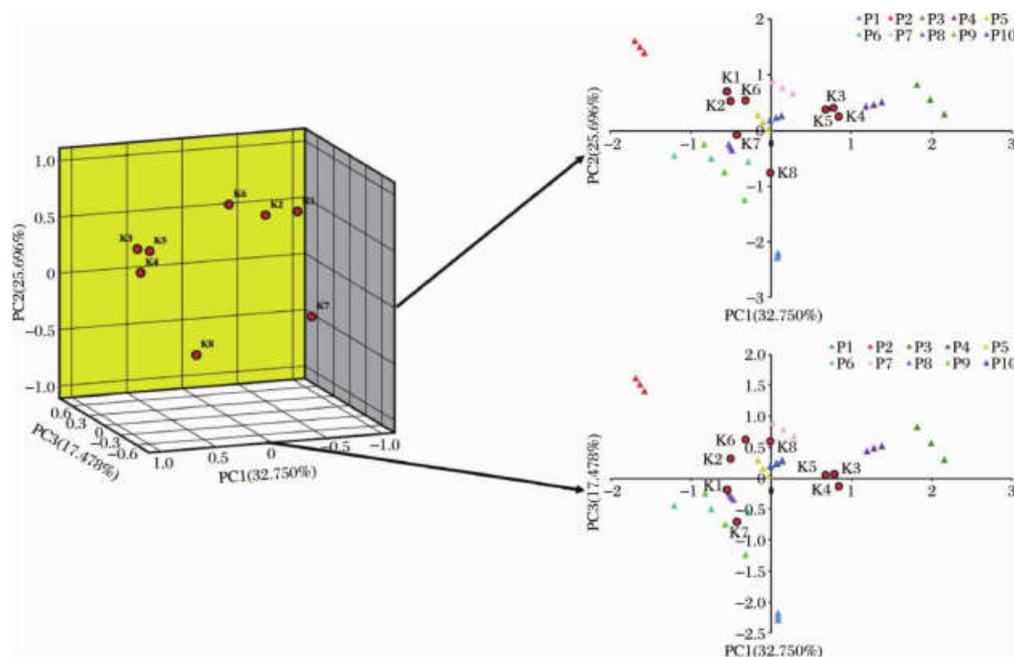


图 4 基于关键风味化合物的牡丹籽油产品主成分分析

Fig. 4 PCA of different peony seed oil products based on key flavor compounds

3 结论

电子鼻结合气质联用技术可以有效、全面的分析不同牡丹籽油产品的香气差异。10 种不同牡丹籽油产品中共检出 133 种挥发性香气物质,其中有 17 种物质存在于所有牡丹籽油样品中。不同牡丹籽油产品中存在的挥发性香气物质的种类和相对含量均存在显著差异,这使得不同牡丹籽油产品形成了独特的风味。采用 ROAV 法确定了 3 种关键风味化合物以及 5 种修饰性风味化合物,其中有 5 种醛类化合物、1 种醇类化合物以及 2 种酮类化合物。乙醛被认为是 P2 ~ P10 中最重要的关键风味化合物,而 2,3-戊二酮被认为是 P1 中最重要的关键风味化合物。这些物质是造成不同牡丹籽油产品香气差异的主要物质。基于对关键风味化合物和修饰性风味化合物的主成分分析,可以对不同牡丹籽油产品进行简单的区分。通过对不同牡丹籽油产品的香气差异性研究,可增加消费者对牡丹籽油的品质进行进一步了解,并提供选购

依据,同时还可以为控制和优化牡丹籽油的香气品质提供参考。

参考文献

- [1] 聂莹, 朱大洲, 孙君茂, 等. 牡丹籽油成分研究及基于营养视角下的产业对策 [J]. 食品科技, 2020, 45 (11): 192 - 196.
NIE Y, ZHU D Z, SUN J M, et al. Study on the components from peony seeds oil and its strategy in nutritional view [J]. Food Science and Technology, 2020, 45 (11): 192 - 196.
- [2] 彭常梅, 方锐琳, 赖敏, 等. 不同提取方法对牡丹籽油品质的影响 [J]. 食品科学, 2021, 42 (3): 104 - 111.
PENG C M, FANG R L, LAI M, et al. Effects of different extraction methods on the quality of peony (*Paeonia suffruticosa* Andr.) seed oil [J]. Food Science, 2021, 42 (3): 104 - 111.
- [3] 冯西娅, 黄威, 索化夷, 等. 牡丹籽油甘油三酯结构及理化特性分析 [J]. 食品与发酵工业, 2019, 45 (21): 258 - 263.
FENG X Y, HUANG W, SUO H Y, et al. Physicochemical composition and structure of triglyceride in peony seed oil [J]. Food and Fermentation Industries, 2019, 45 (21): 258 - 263.
- [4] 张玉, 罗婧文, 马燕卿, 等. 不同干燥技术对牡丹籽油微胶囊品质的影响 [J]. 食品与发酵工业, 2020, 46 (15): 128 - 133.
ZHANG Y, LUO J W, MA Y Q, et al. Effect of different drying techniques on the quality of peony seed oil microcapsules [J]. Food and

- Fermentation Industries, 2020, 46 (15) : 128 - 133.
- [5] 陈淑慧. 基于文献计量分析牡丹籽油的研究现状 [J]. 中国油脂, 2020, 45 (10) : 5 - 9.
CHEN S H. Current situation of peony seed oil based on bibliometric analysis [J]. China Oils and Fats, 2020, 45 (10) : 5 - 9.
- [6] WANG X Q, LI C H, CONTRETAS M D M, et al. Integrated profiling of fatty acids, sterols and phenolic compounds in tree and herbaceous peony seed oils: Marker screening for new resources of vegetable oil [J]. Foods, 2020, 37 (4) : 770.
- [7] 卢艳慧, 李迎秋. 牡丹籽油的研究进展及应用 [J]. 江苏调味副食品, 2020, 37 (4) : 8 - 10; 36.
LU Y H, LI Y Q. Research progress of peony seed oil [J]. Jiangsu Condiment and Subsidiary Food, 2020, 37 (4) : 8 - 10; 36.
- [8] 张超奇, 兰小中, 袁雷, 等. 精炼过程对大花黄牡丹籽油品质及氧化稳定性的影响 [J]. 粮油食品科技, 2020, 28 (5) : 125 - 130.
ZHANG C Q, LAN X Z, YUAN L, et al. Study on the effect of refining process on the quality and oxidation stability of *Paeonia ludlowii* seed oil [J]. Science and Technology of Cereals, Oils and Foods, 2020, 28 (5) : 125 - 130.
- [9] 刘颖, 刘晓谦, 梁曜华, 等. 11 种植物油的脂肪酸组成与抗氧化活性比较 [J]. 中国油脂, 2020, 45 (10) : 52 - 56; 61.
LIU Y, LIU X Q, LIANG Y H, et al. Comparison of fatty acid compositions and antioxidant activities of eleven vegetable oils [J]. China Oils and Fats, 2020, 45 (10) : 52 - 56; 61.
- [10] 洪晴悦, 张玉. 超声波辅助提取牡丹籽毛油的工艺优化及脂肪酸组成分析 [J]. 食品与发酵工业, 2018, 44 (3) : 159 - 164.
HONG Q Y, ZHANG Y. Optimization of ultrasonic-assisted extraction of peony seed oil and its fatty acid composition [J]. Food and Fermentation Industries, 2018, 44 (3) : 159 - 164.
- [11] QIU S, WANG X, ZAN M, et al. The insight into separation of oleic, linoleic, and α -linolenic acid in peony seed oil from eutectic behaviors, polymorphic transition and solid-liquid phase equilibrium [J]. LWT, 2021, 138 (9) : 110 738.
- [12] 陈侨侨, 张生万, 李美萍, 等. 顶空固相微萃取-气相色谱-质谱联用法对食用植物油中易挥发成分的分析 [J]. 食品科学, 2014, 35 (14) : 97 - 101.
CHEN Q Q, ZHANG S W, LI M P, et al. Analysis of volatile compounds in edible vegetable oils using headspace solid phase micro-extraction and GC-MS [J]. Food Science, 2014, 35 (14) : 97 - 101.
- [13] 斯中发, 王月, 黄金品, 等. 基于气味指纹信息的瓜蒌籽油产地识别 [J]. 食品工业, 2020, 41 (2) : 181 - 184.
SI Z F, WANG Y, HUANG J J, et al. Recognition of production areas for *Trichosanthes kirilowii* oils based on odor fingerprint information [J]. The Food Industry, 2020, 41 (2) : 181 - 184.
- [14] MA T T, WANG J Q, WANG H L, et al. Is overnight fresh juice drinkable? The shelf life prediction of non-industrial fresh watermelon juice based on the nutritional quality, microbial safety quality, and sensory quality [J]. Food & Nutrition Research, 2020, 64 : 4 237.
- [15] LAN T, BAO S H, WANG J Q, et al. Shelf life of non-industrial fresh mango juice: Microbial safety, nutritional and sensory characteristics [J]. Food Bioscience, 2021, 42 : 101 060.
- [16] 胡荣锁, 郭培培, 宗迎, 等. 基于 HS-SPME/GC-MS 的 8 种露兜树属叶片挥发性组分差异分析 [J]. 热带作物学报, 2021, 42 (3) : 897 - 907.
HU R S, GUO P P, ZONG Y, et al. Difference analysis of volatile flavor components of 8 *Pandanus* L. leaves based on HS-SPME/GC-MS [J]. Chinese Journal of Tropical Crops, 2021, 42 (3) : 897 - 907.
- [17] 刘登勇, 周光宏, 徐幸莲. 金华火腿主体风味成分及其确定方法 [J]. 南京农业大学学报, 2009, 32 (2) : 173 - 176.
LIU D Y, ZHOU G H, XU X L. Study on key odor compounds of Jinhua Ham [J]. Journal of Nanjing Agricultural University, 2009, 32 (2) : 173 - 176.
- [18] 彭旭怡, 郑经绍, 刘宇航, 等. 基于电子鼻、顶空气相色谱-离子迁移谱分析比较不同杀菌处理紫米甜酒酿中的挥发性成分 [J]. 现代食品科技, 2021, 37 (7) : 259 - 268.
PENG X Y, ZHENG J S, LIU Y H, et al. Analysis and comparison of volatile components in purple rice sweet wine with different sterilization treatments by electronic nose and headspace gas chromatography-ion mobility spectrometry [J]. Modern Food Science and Technology, 2021, 37 (7) : 259 - 268.
- [19] 孙灵霞, 李苗云, 靳春杰, 等. 基于电子鼻和气质联用技术分析不同品牌道口烧鸡的香气差异性 [J]. 食品与发酵工业, 2020, 46 (6) : 238 - 243.
SUN L X, LI M Y, JIN C J, et al. Analysis of the aroma of different brands Daokou stewed chicken by electronic nose and GC-MS [J]. Food and Fermentation Industries, 2020, 46 (6) : 238 - 243.
- [20] 刘少敏. 橄榄油关键香气成分及基于风味指纹图谱的鉴别研究 [D]. 北京: 北京工商大学, 2018.
LIU S M. Identification of the key aroma components and authenticity estimation based on flavor fingerprint in olive oil [D]. Beijing: Beijing Technology and Business University, 2018.
- [21] 周慧敏, 张顺亮, 郝艳芳, 等. HS-SPME-GC-MS-O 结合电子鼻对坨坨猪肉主体风味评价分析 [J]. 食品科学, 2021, 42 (2) : 218 - 226.
ZHOU H M, ZHANG S L, HAO Y F, et al. Analysis of major flavor components of Tuotuo Pork, a traditional meat product in Liangshan, southwest China's Sichuan, by HS-SPME-GC-MS-O combined with electronic nose [J]. Food Science, 2021, 42 (2) : 218 - 226.
- [22] 吴林, 张强, 臧慧明, 等. 气味活度值法评价蓝莓果皮、果肉、果汁挥发性香气成分 [J]. 食品工业科技, 2020, 41 (1) : 195 - 200.
WU L, ZHANG Q, ZANG H M, et al. Evaluation of volatile aroma components in blueberry peel, pulp and juice by odor activity value [J]. Science and Technology of Food Industry, 2020, 41 (1) : 195 - 200.
- [23] 里奥·范海默特. 化合物嗅觉阈值汇编 [M]. 第二版. 北京: 科学出版社, 2018.
VAN GEMERT L J. Compilations of odour threshold values in air, water and other media [M]. 2nd ed. Beijing: Science Press, 2018.
- [24] 赵鹏涛. 西拉葡萄酒的香气活性物质以及影响瓶装葡萄酒香气因素的研究 [D]. 杨凌: 西北农林科技大学, 2017.
ZHAO P T. Characterization of Syrah wine aroma and study of the influence factors of the bottle wine flavor [D]. Yangling: Northwest A & F University, 2017.
- [25] 孙钰清. 多酚对热加工甜瓜汁异味生成的抑制作用研究 [D]. 北京: 中国农业科学院, 2020.
SUN Y Q. Inhibitory effect of polyphenols on the formation of off-odors in heated-treated muskmelon juice [D]. Beijing: Chinese Academy of Agricultural Sciences, 2020.
- [26] 季德胜, 郑桂青, 孙俊, 等. 顶空固相微萃取-气相色谱-质谱联

用分析辣椒油中的风味物质 [J]. 现代食品科技, 2017, 33 (6) : 276 - 284.

Ji D S, ZHEN G G Q, SUN J, et al. Analysis of flavor compounds in

chili oil by head-space solid-phase micro-extraction gas chromatography mass spectrometry [J]. Modern Food Science and Technology, 2017, 33 (6) : 276 - 284.

Aroma analysis of different commercial peony seed oil by electronic nose and GC-MS

YAN Jian¹, LAN Tian², WANG Jiaqi², BAO Shihan², WANG Yue²,
SUN Xiangyu³, MA Tingting^{2*}

1 (Shigejie Zhihua Biotechnology Co. Ltd., Changzhi 046299, China)

2 (College of Food Science and Engineering, Northwest A&F University, Yangling 712100, China)

3 (College of Enology, Northwest A & F University, Yangling 712100, China)

ABSTRACT To understand the dissimilarity of aroma characteristics and aroma substances of commercial peony seed oil, 10 peony seed oil with high sales in the market were selected as the research object in this study, and the aroma was analyzed by using electronic nose and gas chromatography-mass spectrometer (GC-MS). The results showed that there were significant differences in the aroma characteristics and aroma substances of the commercial peony seed oil. The volatile components in different peony seed oil products had roughly the same sensitivity as electronic nose sensors, but the response values were different. Combining with linear discriminant analysis (LDA), this method could quickly distinguish the overall aroma characteristics of different peony seed oil products. Based on GC-MS, 133 volatile compounds were detected in 10 commercial peony seed oil products. Their components and ratios in the samples were different which formed the unique aroma of each peony seed oil product. The relative odor activity value (ROAV) was used to analyze the 3 key flavor compounds and 5 modified flavor compounds which were the main substances that contributed to differences in the aroma of samples. Based on the PCA, different peony seed oil products could be roughly distinguished. This study provides a reference for the follow-up study of the flavor compounds of peony seed oil, the control and optimization of its aroma quality.

Key words peony seed oil; aroma; key aroma compounds; electronic nose; gas chromatography-mass spectrometry

附表 1 摇牡丹籽油的香气化合物及相对含量

Appendix 1 Aroma compounds and relative content of peony seed oil

序号	化合物名称	保留 指数	CAS号	相对含量/%										
				P1	P2	P3	P4	P5	P6	P7	P8	P9	P10	
醛类														
1	乙醛	408	75-07-0	-	7.74±0.68 ^{ab}	2.59±1.75 ^d	3.39±0.15 ^{cd}	6.26±0.81 ^a	4.31±0.85 ^{bcd}	5.41±0.63 ^{bc}	5.23±0.33 ^{bc}	4.71±3.00 ^{bcd}	5.83±0.07 ^{ab}	
2	丙醛	498	107-02-8	-	8.12±0.05 ^b	1.55±0.38 ^a	1.43±0.10 ^d	9.62±0.27 ^a	6.04±0.03 ^e	5.98±0.02 ^c	10.42±2.53 ^a	1.35±0.37 ^d	-	
3	丙醛	508	123-38-6	-	-	3.53±0.45 ^e	4.20±0.04 ^d	-	-	4.59±0.02 ^{cd}	5.71±0.53 ^b	4.99±0.69 ^c	9.83±0.02 ^a	
4	丁醛	607	123-72-8	0.14±0.01 ^e	0.89±0.01 ^b	0.46±0.01 ^e	0.57±0.05 ^d	0.97±0.02 ^b	0.69±0.03 ^e	0.35±0.00 ^f	1.19±0.13 ^a	0.89±0.08 ^b	0.36±0.06 ^f	
5	2-甲基丁醛	643	96-17-3	-	0.64±0.01 ^a	-	0.08±0.01 ^b	-	-	-	-	-	-	
6	己醛	806	66-25-1	1.14±0.02 ^f	5.99±0.33 ^b	25.04±1.10 ^a	18.96±0.76 ^c	11.71±0.01 ^e	4.70±0.22 ^f	22.29±0.26 ^b	7.13±0.35 ^e	8.02±0.29 ^f	12.65±0.08 ^d	
7	2-己醛	814	505-57-7	-	-	-	-	-	-	0.45±0.02 ^a	-	-	-	
8	叶醛	814	6 728-26-3	3.44±0.10 ^a	1.18±0.09 ^e	3.63±0.18 ^a	2.45±0.47 ^b	2.15±0.14 ^{bc}	0.65±0.02 ^f	3.46±0.05 ^a	1.74±0.20 ^d	-	1.98±0.15 ^{cd}	
9	庚醛	913	6 728-31-0	-	-	0.22±0.03 ^b	0.25±0.02 ^a	0.15±0.00 ^c	-	0.16±0.02 ^c	-	-	-	
10	庚醛	913	111-71-7	-	-	1.85±0.02 ^a	0.66±0.01 ^d	0.38±0.04 ^e	-	1.54±0.01 ^b	-	0.77±0.04 ^e	0.28±0.02 ^f	
11	庚醛	982	100-52-7	-	-	-	-	-	-	-	1.71±0.12 ^a	1.44±0.09 ^b	-	
12	2-乙基己醛	941	123-05-7	-	-	3.72±0.16 ^a	2.54±0.22 ^b	-	-	-	0.21±0.06 ^a	-	-	
13	庚醛	921	4 313-03-5	0.26±0.01 ^e	2.27±0.23 ^{de}	4.79±0.32 ^a	2.68±0.33 ^c	1.05±0.19 ^f	1.12±0.03 ^f	3.76±0.05 ^b	1.97±0.15 ^d	1.08±0.11 ^f	2.30±0.04 ^d	
14	庚醛	1013	2 548-87-0	-	-	0.83±0.07 ^a	0.37±0.09 ^c	-	-	0.60±0.01 ^b	-	-	0.82±0.09 ^a	
15	壬醛	1104	124-19-6	-	-	1.81±0.19 ^a	0.79±0.05 ^{bc}	0.37±0.04 ^d	0.19±0.02 ^d	1.74±0.01 ^a	0.77±0.30 ^{bc}	0.60±0.07 ^e	0.86±0.11 ^b	
16	壬醛	1104	124-19-6	-	-	0.20±0.04 ^b	-	-	-	0.26±0.02 ^a	-	-	-	
17	2,6-十二碳二烯醛	1112	18 829-56-6	0.42±0.07 ^b	0.39±0.05 ^b	0.89±0.11 ^a	-	-	-	0.91±0.03 ^a	-	-	0.84±0.07 ^a	
18	癸醛	1204	112-31-2	0.30±0.02 ^{bc}	0.17±0.04 ^{cd}	0.26±0.04 ^{bcd}	0.40±0.14 ^a	0.30±0.04 ^{bc}	0.11±0.01 ^f	0.32±0.03 ^{ab}	0.24±0.01 ^{bcde}	0.19±0.02 ^{def}	0.21±0.02 ^{cd}	
19	癸醛	1212	3 913-81-3	-	-	0.22±0.04 ^a	0.09±0.00 ^b	-	-	0.22±0.02 ^a	-	-	-	
20	癸醛	1418	21 662-16-8	-	-	0.08±0.00 ^b	-	-	-	-	-	0.12±0.01 ^a	-	
21	癸醛	1220	25 152-84-5	-	0.19±0.01 ^d	0.15±0.05 ^{de}	0.27±0.09 ^b	-	-	0.12±0.06 ^f	0.35±0.02 ^a	0.20±0.01 ^{bcd}	0.23±0.06 ^{bc}	
22	月桂醛	1402	112-54-9	0.21±0.01 ^{bc}	0.24±0.06 ^{ab}	0.10±0.01 ^{ef}	0.27±0.06 ^a	0.18±0.01 ^{cd}	0.07±0.00 ^f	-	0.22±0.05 ^{abc}	0.15±0.02 ^{de}	0.14±0.00 ^{de}	
酸类														
24	甲酸	0	64-18-6	-	-	-	-	14.76±0.04 ^a	-	-	-	-	4.63±0.72 ^b	
25	乙酸	576	64-19-7	1.81±0.57 ^a	2.50±0.70 ^f	4.28±0.12 ^d	8.16±0.18 ^c	9.32±0.16 ^a	8.37±0.17 ^{bc}	8.84±0.08 ^{ab}	3.35±0.07 ^e	2.97±0.05 ^{ef}	4.37±0.09 ^d	
26	丙酸	676	79-09-4	-	-	0.89±0.04 ^d	2.21±0.10 ^c	4.48±0.02 ^a	4.00±0.09 ^b	0.65±0.01 ^e	-	-	0.88±0.03 ^d	
27	己酸	974	142-62-1	0.16±0.01 ^e	0.34±0.21 ^{bc}	0.91±0.13 ^c	2.01±0.05 ^a	1.33±0.22 ^b	0.27±0.01 ^e	0.57±0.17 ^d	0.37±0.07 ^{bc}	0.24±0.03 ^e	0.83±0.20 ^e	
28	戊酸	875	109-52-4	-	-	-	-	0.45±0.00 ^a	-	-	-	-	-	
29	庚酸	1073	111-14-8	-	0.04±0.01 ^d	0.28±0.03 ^a	0.13±0.07 ^c	-	-	0.23±0.02 ^b	-	-	-	
30	辛酸	1173	124-07-2	-	0.18±0.00 ^a	0.20±0.02 ^a	0.21±0.07 ^a	-	-	-	-	-	-	
烷烃														
31	双环[1.1.0]丁烷	382	157-33-5	-	-	-	3.45±0.61 ^a	-	-	-	-	-	-	
32	异戊烷	454	78-78-4	11.92±0.47 ^a	-	-	-	-	-	1.29±0.02 ^b	-	-	-	
33	氧杂环丁烷	469	503-30-0	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	
34	戊烷	518	109-66-0	43.77±1.51 ^a	8.34±0.01 ^c	2.91±0.31 ^c	4.14±0.01 ^d	2.49±0.03 ^e	16.35±0.46 ^b	-	-	3.99±0.34 ^d	-	
35	反式-1,2-二甲基-环丙烷	482	2 402-06-4	-	-	0.70±0.29 ^b	-	-	7.06±0.25 ^a	-	-	-	-	

附表 1 续

序号	化合物名称	保留 指数	CAS 号	相对含量/%											
				P1	P2	P3	P4	P5	P6	P7	P8	P9	P10		
36	2-乙氧基环丁烷	0	04004	-	1.11±0.01 ^b	1.04±0.03 ^b	0.68±0.05 ^c	-	-	-	-	1.42±0.23 ^a	0.65±0.07 ^c	-	
37	4-甲基-环戊烷	643	1759-81-5	-	0.11±0.01 ^d	0.23±0.01 ^c	-	-	-	-	0.43±0.01 ^b	0.51±0.14 ^a	0.10±0.02 ^d	-	
38	1-甲基-环戊烷	671	693-89-0	-	0.17±0.01 ^a	-	-	-	-	0.14±0.01 ^b	-	-	-	-	
39	环己烷	719	110-82-7	-	0.31±0.03 ^b	-	-	-	-	1.68±0.05 ^a	-	0.20±0.12 ^c	0.05±0.01 ^d	-	
40	庚烷	717	142-82-5	-	2.42±0.06 ^b	1.12±0.11 ^c	0.93±0.05 ^{cd}	0.73±0.02 ^{de}	-	-	0.91±0.06 ^{cd}	2.75±0.31 ^a	2.51±0.19 ^b	0.53±0.01 ^e	
41	2,4-二甲基己烷	688	589-43-5	-	-	-	-	-	-	-	-	-	0.37±0.07 ^a	-	
42	3,3,4-三甲基癸烷	1165	49 622-18-6	-	-	-	-	-	-	-	-	-	0.34±0.01 ^a	-	
43	2,5-二甲基己烷	688	592-13-2	-	-	-	-	-	-	-	-	-	0.76±0.05 ^a	-	
44	2,3,6-三甲基庚烷	823	4 032-93-3	-	-	-	-	-	-	-	-	-	0.76±0.11 ^a	-	
45	3-甲基庚烷	752	589-81-1	-	-	-	-	-	-	-	-	0.36±0.07 ^c	1.14±0.01 ^b	1.53±0.03 ^a	
46	辛烷	816	111-65-9	-	1.89±0.06 ^b	2.06±0.09 ^a	0.97±0.01 ^e	0.66±0.03 ^f	0.70±0.03 ^f	0.11±0.01 ^a	1.72±0.01 ^c	1.54±0.07 ^d	1.77±0.10 ^c	0.64±0.02 ^f	
47	丁基-环氧乙烷	708	1436-34-6	-	-	-	-	-	-	0.11±0.01 ^a	-	-	-	-	
48	戊基-环氧乙烷	807	5063-65-0	-	-	-	-	-	-	0.11±0.01 ^a	-	-	-	-	
49	2,2,3,3-四甲基己烷	913	1071-81-4	-	-	0.14±0.02 ^b	-	-	-	-	0.15±0.01 ^a	-	-	-	
50	4-甲基亚乙基-环己烷	980	5 749-72-4	-	0.14±0.00 ^e	0.36±0.04 ^c	0.81±0.06 ^b	1.07±0.05 ^a	0.38±0.02 ^c	0.38±0.02 ^c	0.40±0.02 ^c	-	0.27±0.01 ^d	0.78±0.02 ^b	
51	十一烷	1115	1120-21-4	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	0.47±0.03 ^a	
52	十二烷	1214	112-40-3	-	-	0.37±0.01 ^b	0.11±0.00 ^c	-	0.05±0.00 ^e	-	-	0.25±0.01 ^{bc}	-	1.13±0.36 ^a	
53	2,6,10-三甲基十三烷	0	3 891-99-4	-	-	-	-	-	-	-	-	0.21±0.00	-	-	
54	3,8-二甲基十一烷	1185	17 301-30-3	0.26±0.03 ^{ab}	0.14±0.01 ^b	-	0.17±0.01 ^b	0.15±0.00 ^b	-	-	0.44±0.36 ^a	-	-	0.15±0.01 ^b	
55	4,5-二丙基辛烷	1285	20 905-05-9	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	0.49±0.01 ^a	
56	3-甲基-5-丙基壬烷	1185	31 081-18-2	-	0.10±0.03 ^{cd}	0.12±0.05 ^c	0.16±0.00 ^b	-	0.10±0.00 ^{cd}	0.07±0.00 ^d	0.16±0.01 ^b	-	0.12±0.03 ^c	0.43±0.02 ^a	
57	2,7,10-三甲基-十二烷	1320	74 645-98-0	-	-	-	-	0.11±0.01 ^a	0.08±0.00 ^b	-	-	-	-	-	
58	十四烷	1601	124-25-4	-	-	-	-	0.17±0.00 ^a	-	-	-	-	-	-	
烯烃															
59	2-丁烯	427	624-64-6	-	-	-	-	-	-	-	-	6.26±0.15 ^a	-	-	
60	1-戊烯	58	109-67-1	1.52±0.08 ^{de}	2.29±0.01 ^c	0.77±0.43 ^f	2.37±0.10 ^c	2.60±0.12 ^{bc}	3.24±0.13 ^a	1.21±0.03 ^{cd}	1.73±0.69 ^d	2.97±0.05 ^{ab}	1.73±0.69 ^d	1.11±0.01 ^{cd}	
61	2-甲基-1-丁烯	58	109-67-1	-	4.89±0.01 ^c	1.65±0.27 ^d	6.26±0.07 ^b	-	14.28±0.48 ^a	1.89±0.02 ^d	-	-	5.93±0.73 ^b	1.65±0.05 ^d	
62	2-戊烯	526	109-68-2	-	-	-	-	-	-	-	-	-	4.26±0.47 ^a	-	
63	1,3-十五烯	516	2 004-70-8	-	0.20±0.002 ^b	0.17±0.06 ^{bc}	-	0.10±0.01 ^{cd}	-	0.23±0.001 ^b	1.07±0.13 ^a	-	0.09±0.01 ^d	-	
64	1-氯-2-甲基-1-丙烯	580	513-37-1	-	-	-	-	-	-	-	-	-	0.11±0.003 ^a	-	
65	2-戊二烯	715	1576-87-0	0.25±0.03 ^a	2.80±0.09 ^b	3.35±0.06 ^a	1.88±0.08 ^e	2.14±0.15 ^d	1.67±0.06 ^f	2.54±0.002 ^c	2.38±0.13 ^c	2.02±0.21 ^{de}	2.88±0.002 ^b	2.88±0.002 ^b	
66	1-辛烯	807	111-66-0	-	-	0.58±0.06 ^a	0.66±0.26 ^a	-	0.35±0.01 ^b	0.60±0.01 ^a	0.63±0.01 ^a	-	0.40±0.03 ^b	0.40±0.03 ^b	
67	2-辛烯	824	7 642-04-8	-	0.20±0.004 ^{bc}	0.23±0.02 ^b	0.62±0.02 ^a	0.13±0.06 ^d	0.15±0.03 ^d	0.22±0.02 ^b	0.22±0.03 ^b	0.16±0.02 ^{cd}	0.16±0.02 ^{cd}	0.14±0.01 ^d	
68	2,4-辛二烯	832	13 643-08-8	-	0.38±0.02 ^{ab}	0.13±0.004 ^a	0.42±0.01 ^a	0.09±0.002 ^c	0.16±0.10 ^c	0.13±0.02 ^c	0.38±0.02 ^{ab}	0.38±0.02 ^{ab}	0.32±0.03 ^b	0.14±0.02 ^c	
69	3-甲基-1,4-庚二烯	750	1 603-01-6	-	-	-	-	0.07±0.000 ^{4a}	-	-	-	-	-	-	
70	甲基乙基环戊烯	860	19 780-56-4	-	-	0.05±0.001 ^a	-	-	-	-	-	-	-	-	
71	1-丙基环戊烯	870	3 074-61-1	-	-	0.17±0.002 ^a	-	-	-	0.16±0.01 ^a	-	-	-	-	
72	2,4-亚乙基环己烯	886	16 631-66-6	-	-	-	1.24±0.04 ^a	0.82±0.04 ^c	0.70±0.05 ^d	-	1.04±0.07 ^b	-	-	0.17±0.01 ^e	

附表 1 续

序号	化合物名称	保留 指数	CAS 号	相对含量/%											
				P1	P2	P3	P4	P5	P6	P7	P8	P9	P10		
73	(E)-3-壬烯	924	20 063-92-7	-	-	0.04 ± 0.001 ^a	-	-	-	-	-	0.02 ± 0.000 2 ^b	-	-	
74	(E)-1,3-壬二烯	914	56 700-77-7	-	-	0.18 ± 0.02 ^a	-	-	-	-	-	0.18 ± 0.004 ^a	-	-	
75	(E)-4-氧-2-己烯	950	0400-0	-	-	0.28 ± 0.02 ^b	-	-	-	-	-	0.33 ± 0.01 ^a	-	0.21 ± 0.004 ^c	
76	4-萜烯	919	29 050-33-7	-	-	0.11 ± 0.003 ^c	-	-	-	-	-	0.12 ± 0.001 ^b	-	0.12 ± 0.000 4 ^a	
77	(E)-1-乙氧基-4-甲基-2-戊烯	836	51 149-75-8	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	0.46 ± 0.03 ^a	
78	柠檬烯	1 018	5 989-27-5	11.16 ± 0.13 ^a	3.98 ± 0.39 ^b	1.89 ± 0.11 ^{de}	3.91 ± 0.70 ^b	2.86 ± 0.61 ^e	0.62 ± 0.03 ^f	0.62 ± 0.002 ^a	1.66 ± 0.06 ^e	2.30 ± 0.20 ^{de}	1.98 ± 0.56 ^{de}	2.47 ± 0.13 ^{cd}	
79	β-罗勒烯	976	13 877-91-3	-	-	0.14 ± 0.004 ^b	-	-	-	-	0.16 ± 0.002 ^a	-	-	-	
醇类															
80	乙醇	463	64-17-5	7.04 ± 0.27 ^b	3.38 ± 0.04 ^c	1.43 ± 0.80 ^f	2.29 ± 0.04 ^d	3.24 ± 0.05 ^e	1.20 ± 0.04 ^f	1.20 ± 0.04 ^d	2.33 ± 0.04 ^d	3.41 ± 0.20 ^c	10.75 ± 0.91 ^a	2.91 ± 0.05 ^{cd}	
81	异戊醇	697	123-51-3	-	-	-	-	-	-	-	-	-	2.89 ± 0.39 ^a	-	
82	1-戊烯-3-醇	671	616-25-1	0.94 ± 0.04 ^f	8.83 ± 0.11 ^b	3.86 ± 0.17 ^f	3.54 ± 0.04 ^{ef}	5.10 ± 0.15 ^d	4.15 ± 0.14 ^c	4.15 ± 0.14 ^c	3.22 ± 0.00 ^b	7.05 ± 0.08 ^c	3.99 ± 0.32 ^{cd}	9.41 ± 0.16 ^a	
83	庚醇	960	111-70-6	-	-	-	-	-	-	-	0.36 ± 0.02 ^a	-	-	-	
84	异庚醇	896	627-98-5	-	-	0.25 ± 0.01 ^a	-	-	-	-	0.19 ± 0.01 ^b	-	-	-	
85	1-辛基-3-醇	969	3 391-86-4	-	0.20 ± 0.01 ^b	-	-	-	-	-	0.26 ± 0.02 ^a	-	-	-	
86	仲辛醇	979	123-96-6	1.08 ± 0.25 ^a	0.28 ± 0.03 ^e	-	0.44 ± 0.01 ^{cd}	0.70 ± 0.03 ^b	-	-	-	0.31 ± 0.002 ^{de}	0.56 ± 0.01 ^c	-	
87	癸醇	1 036	100-51-6	-	-	0.24 ± 0.03 ^c	-	-	-	-	0.36 ± 0.01 ^a	-	0.18 ± 0.001 ^d	0.28 ± 0.07 ^b	
88	癸乙醇	1 136	60-12-8	0.91 ± 0.06 ^a	0.44 ± 0.02 ^b	0.34 ± 0.03 ^c	0.20 ± 0.01 ^d	0.21 ± 0.004 ^d	0.09 ± 0.001 ^e	0.09 ± 0.001 ^e	0.18 ± 0.01 ^d	-	-	-	
89	2-乙基-1-丙醇	1 393	21 078-65-9	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	0.84 ± 0.03 ^a	
90	十一醇	1 357	112-42-5	-	-	-	0.11 ± 0.003 ^a	-	-	-	-	-	-	-	
91	柏木醇	1 543	77-53-2	-	-	-	-	-	0.04 ± 0.003 ^a	-	-	-	-	-	
酯类															
92	2-丁酯	555	78-93-3	0.10 ± 0.002 ^d	1.01 ± 0.01 ^b	0.87 ± 0.01 ^b	0.53 ± 0.02 ^c	1.19 ± 0.002 ^b	0.18 ± 0.01 ^d	0.18 ± 0.01 ^d	0.89 ± 0.01 ^b	1.13 ± 0.004 ^b	6.35 ± 0.57 ^a	1.12 ± 0.08 ^b	
93	1-戊烯-3-酯	644	1 629-58-9	-	0.67 ± 0.003 ^b	0.27 ± 0.01 ^b	0.36 ± 0.002 ^b	0.30 ± 0.004 ^b	2.28 ± 1.94 ^a	2.28 ± 1.94 ^a	0.22 ± 0.005 ^b	0.62 ± 0.03 ^b	1.21 ± 0.10 ^b	0.53 ± 0.01 ^b	
94	2,3-戊二酯	790	600-14-6	1.35 ± 0.06 ^a	-	-	-	-	-	-	0.40 ± 0.002 ^b	-	0.40 ± 0.05 ^b	-	
95	1-庚基-2-丁酯	798	5 077-67-8	-	-	0.52 ± 0.02 ^b	-	-	-	-	0.33 ± 0.02 ^c	-	-	1.37 ± 0.05 ^a	
96	2-己酯	754	591-78-6	-	-	0.10 ± 0.003 ^a	0.10 ± 0.02 ^a	0.11 ± 0.00 ^a	-	-	0.07 ± 0.001 ^b	0.06 ± 0.001 ^b	-	-	
97	3-己烯-2-酯	762	763-93-9	-	-	0.42 ± 0.01 ^a	-	-	-	-	0.35 ± 0.01 ^b	-	-	0.13 ± 0.004 ^c	
98	2-庚酯	853	110-43-0	-	0.17 ± 0.04 ^e	1.02 ± 0.01 ^a	1.01 ± 0.01 ^a	0.43 ± 0.03 ^c	-	-	0.97 ± 0.02 ^b	-	0.16 ± 0.01 ^e	0.37 ± 0.02 ^d	
99	3-辛酯	952	106-68-3	5.75 ± 0.49 ^a	1.40 ± 0.30 ^c	0.71 ± 0.06 ^{df}	0.42 ± 0.10 ^{df}	0.39 ± 0.04 ^f	4.12 ± 0.004 ^b	4.12 ± 0.004 ^b	0.23 ± 0.03 ^f	0.93 ± 0.71 ^{cd}	0.19 ± 0.08 ^f	0.18 ± 0.02 ^f	
100	2-辛酯	952	111-13-7	2.20 ± 0.17 ^a	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	
101	3-辛烯-2-酯	960	1 669-44-9	-	-	0.11 ± 0.01 ^a	-	-	-	-	-	-	-	-	
102	3,5-辛二烯-2-酯	968	38 284-27-4	0.26 ± 0.02 ^d	-	0.27 ± 0.02 ^d	0.47 ± 0.07 ^b	0.30 ± 0.01 ^{cd}	0.69 ± 0.02 ^a	0.69 ± 0.02 ^a	0.32 ± 0.01 ^e	0.14 ± 0.01 ^e	-	-	
103	3-壬酯	1 052	925-78-0	-	0.12 ± 0.04 ^e	-	-	0.27 ± 0.003 ^a	0.12 ± 0.004 ^c	0.12 ± 0.004 ^c	-	0.14 ± 0.01 ^b	-	-	
104	2-壬酯	1 052	821-55-6	0.15 ± 0.04 ^{cd}	-	-	0.35 ± 0.06 ^a	0.22 ± 0.04 ^{bc}	-	-	0.11 ± 0.07 ^d	0.24 ± 0.09 ^b	0.23 ± 0.03 ^{bc}	-	
105	1-, 0-, 5-, 二甲基苯基)-乙醇	1 255	2 142-73-6	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	
106	香叶基丙酯	1 420	3 796-70-1	-	0.05 ± 0.001 ^a	-	-	-	-	-	-	-	-	-	

附表 1 续

序号	化合物名称	保留 指数	CAS 号	相对含量/%									
				P1	P2	P3	P4	P5	P6	P7	P8	P9	P10
酯类													
107	乙酸仲丁酯	721	105-46-4	-	-	-	-	-	0.19 ± 0.001 ^a	0.12 ± 0.003 ^c	-	0.16 ± 0.01 ^b	0.06 ± 0.002 ^d
108	苯甲酸甲酯	1060	93-58-3	-	0.17 ± 0.02 ^d	0.71 ± 0.03 ^b	0.29 ± 0.003 ^c	-	-	0.72 ± 0.03 ^b	-	-	1.16 ± 0.05 ^a
109	亚硫酸 2-乙基己基异己酯	1908	959 067-41-5	-	-	-	-	-	-	-	-	-	0.21 ± 0.03 ^a
110	苯甲酸乙酯	1160	93-89-0	-	-	0.42 ± 0.05 ^{ab}	-	-	-	0.37 ± 0.03 ^b	-	-	0.47 ± 0.08 ^a
111	琥珀酸二乙酯	1151	123-25-1	0.28 ± 0.01 ^a	0.19 ± 0.02 ^b	-	0.10 ± 0.000 3 ^c	-	-	-	-	-	-
112	辛酸乙酯	1183	106-32-1	0.35 ± 0.02 ^a	0.21 ± 0.01 ^b	0.13 ± 0.02 ^{cd}	0.17 ± 0.04 ^{bc}	0.17 ± 0.06 ^{bc}	0.04 ± 0.002 ^c	0.07 ± 0.001 ^c	0.16 ± 0.04 ^c	0.09 ± 0.01 ^{de}	0.07 ± 0.03 ^c
113	己二酸二甲酯	1151	627-93-0	-	0.06 ± 0.001 ^a	-	-	-	-	-	-	-	-
114	癸酸乙酯	1381	110-38-3	0.26 ± 0.08 ^a	0.23 ± 0.01 ^a	0.13 ± 0.02 ^{bc}	-	0.18 ± 0.04 ^b	0.09 ± 0.002 ^c	0.12 ± 0.003 ^c	-	-	0.12 ± 0.002 ^c
115	邻苯二甲酸二甲酯	1440	131-11-3	-	-	-	0.18 ± 0.01 ^b	-	0.09 ± 0.002 ^b	0.12 ± 0.002 ^c	0.20 ± 0.02 ^a	0.17 ± 0.01 ^b	-
116	1,2-苯二甲酸双(2-甲基丙基)酯	1908	84-69-5	-	-	-	0.09 ± 0.002 ^b	-	-	-	0.25 ± 0.14 ^a	-	-
117	增塑剂 (ORP)	2 037	84-74-2	0.18 ± 0.004 ^{cd}	-	-	0.30 ± 0.05 ^{bcd}	0.37 ± 0.02 ^{bcd}	0.09 ± 0.002 ^d	0.20 ± 0.005 ^{cd}	1.27 ± 0.47 ^a	0.39 ± 0.04 ^{bc}	0.50 ± 0.02 ^b
其他类													
118	2,3-二氢呋喃	571	1191-99-7	0.51 ± 0.01 ^e	5.54 ± 0.73 ^a	2.63 ± 0.13 ^b	2.10 ± 0.03 ^c	2.15 ± 0.14 ^{bc}	1.85 ± 0.38 ^{cd}	1.85 ± 0.02 ^{cd}	5.23 ± 0.36 ^a	1.56 ± 0.12 ^d	5.05 ± 0.02 ^a
119	苯	680	71-43-2	0.20 ± 0.01 ^f	2.11 ± 0.26 ^b	0.92 ± 0.000 4 ^e	0.64 ± 0.09 ^d	2.56 ± 0.14 ^a	1.34 ± 0.05 ^c	0.93 ± 0.01 ^d	2.05 ± 0.02 ^b	2.11 ± 0.20 ^b	1.35 ± 0.07 ^c
120	2-乙炔萘	742	3 208-16-0	1.10 ± 0.58 ^a	4.73 ± 0.02 ^b	3.62 ± 0.19 ^c	4.32 ± 0.002 ^c	4.27 ± 0.02 ^{cd}	1.61 ± 0.10 ^f	4.08 ± 0.26 ^{cd}	5.31 ± 0.07 ^a	3.87 ± 0.08 ^{de}	3.65 ± 0.25 ^c
121	四氢-3-甲基呋喃	650	13 423-15-9	-	-	-	0.13 ± 0.003 ^a	-	-	-	-	-	-
122	甲苯	794	108-88-3	0.21 ± 0.03 ^e	2.88 ± 0.12 ^b	-	-	-	-	-	4.15 ± 0.32 ^a	2.83 ± 0.26 ^b	4.04 ± 0.38 ^a
123	异戊醛	963	544-01-4	-	-	-	-	-	-	-	-	0.32 ± 0.01 ^a	-
124	4-辛炔	834	1 942-45-6	-	0.25 ± 0.002 ^b	0.19 ± 0.01 ^c	0.24 ± 0.002 ^b	-	0.19 ± 0.01 ^c	0.19 ± 0.01 ^{cd}	0.32 ± 0.04 ^a	-	0.16 ± 0.002 ^d
125	乙苯	893	100-41-4	-	0.33 ± 0.03 ^c	-	0.18 ± 0.000 4 ^d	0.09 ± 0.003 ^d	0.56 ± 0.004 ^b	0.14 ± 0.001 ^d	0.50 ± 0.03 ^b	1.99 ± 0.17 ^a	-
126	间二甲苯	907	108-38-3	-	0.67 ± 0.06 ^c	0.42 ± 0.04 ^d	0.20 ± 0.01 ^f	-	0.41 ± 0.004 ^d	0.32 ± 0.02 ^c	0.83 ± 0.04 ^b	2.06 ± 0.07 ^a	0.25 ± 0.03 ^f
127	正丙苯	992	103-65-1	-	0.18 ± 0.000 2 ^c	0.19 ± 0.07 ^{bc}	-	-	0.07 ± 0.003 ^d	0.15 ± 0.005 ^e	0.24 ± 0.04 ^b	-	0.36 ± 0.03 ^a
128	2-戊基呋喃	1040	3 777-69-3	-	0.10 ± 0.002 ^f	1.07 ± 0.05 ^b	0.33 ± 0.01 ^d	0.10 ± 0.00 ^f	1.49 ± 0.03 ^a	0.90 ± 0.01 ^c	0.21 ± 0.04 ^e	-	0.34 ± 0.04 ^d
129	邻苯花烃	1042	527-84-4	-	-	0.16 ± 0.002 ^c	-	-	0.03 ± 0.00 ^d	0.18 ± 0.01 ^a	-	-	0.16 ± 0.01 ^b
130	萘	1231	91-20-3	-	0.10 ± 0.00 ^a	0.08 ± 0.002 ^b	-	-	-	-	-	-	-
131	4,7-二甲苯并呋喃	1244	28 715-26-6	0.15 ± 0.001 ^e	0.25 ± 0.02 ^d	1.35 ± 0.13 ^b	-	-	0.29 ± 0.02 ^{cd}	1.40 ± 0.12 ^b	-	0.38 ± 0.05 ^c	1.90 ± 0.04 ^a
132	1-甲氧基-2,4-甲基乙炔基)苯	1149	10 278-02-1	-	0.21 ± 0.001 ^b	0.05 ± 0.001 ^d	-	-	0.32 ± 0.01 ^a	0.06 ± 0.01 ^e	-	-	-
133	2,4-二叔丁基苯酚	1555	96-76-4	0.21 ± 0.05 ^b	0.30 ± 0.11 ^a	0.22 ± 0.08 ^{ab}	-	-	-	-	-	-	-

标注: 同一行不同小写字母代表差异显著性, $P < 0.05$