

GCMSMS 结合香味数据库分析烟叶中的气味成分

GCMSMS-259

摘要： 本文采用岛津 GCMS-TQ8050 NX 三重四极杆气质联用仪和 AOC-6000 多功能自动进样器，结合 Smart Aroma Database 香味数据库对六种不同烟叶中的气味成分进行测定，并对检测结果进行统计学分析。6 种烟叶共检测到 154 种香气成分。PCA 图显示福建烟叶、贵州烟叶和云南烟叶相似性比较高，而河南烟叶、晒红烟叶和白肋烟叶具有一定的独立性。聚类分析将六种烟叶分成两大类，四种不同产地烤烟为一类，晒红烟和白肋烟为一类。PLS-DA 模型筛选出烤烟、晒红烟和白肋烟三种不同类型烟草差异性比较大的 58 种香气成分。结果表明，该方法操作简便，分析速度快，可用于烟草样品中气味成分的快速筛查。

关键词： 气相色谱 - 三重四极杆气质联用仪 香味数据库 烟草 气味成分

技术特点：

- ◆ Smart Aroma Database 无需标准品可实现 500 多种气味成分的快速筛查
- ◆ PCA、PLS-DA 通过数据降维可直观查看不同烟叶间气味成分的差异情况。

烟草作为一种重要的经济作物，在评价烟草质量和商业价值时，挥发性气味成分尤为重要，它是香烟风味的主要贡献者，气味成分的组成差异构成了卷烟不同的特征风格。我国常见的烟草种类有烤烟、晾晒烟、白肋烟、香料烟等，不同类型的烟草香气成分差异很大。在同种类型的烟草中，比如烤烟，不同产地的烟叶香气成分也不同。香气成分不同会带来烟叶质量和感官上的差异。对于烟叶中香气成分的研究为卷烟生产过程中的选用提供参考，对于提高烟叶的利用率和提升卷烟产品质量具有重要意义。

目前，广泛应用于烟草中香气成分分析的方法是气相色谱质谱法，该方法多数采用全扫描模式进行检测，NIST 谱库检索定性，但是构成烟叶香气的

化学成分种类繁多且有些重要成分的浓度非常低，这样就会导致低浓度成分未检出的情况。Smart Aroma Database 香味数据库是预先收录有香气成分化合物信息的专用数据库，该数据库包括 500 多种重要香气成分的基本信息、SCAN 方法、SIM 方法和 MRM 方法，该数据库无需标准品可以采用高灵敏度的 SIM 模式和 MRM 模式实现重要香气成分的快速定性筛查。

本文利用岛津 GCMS-TQ8050 NX 三重四极杆气质联用仪和 AOC-6000 多功能自动进样器，结合 Smart Aroma Database 香味数据库分析不同烟叶中的气味成分，无需复杂前处理、无需标准品就能实现对烟叶中的气味成分进行快速的筛查分析。

■ 实验部分

1.1 仪器

AOC-6000 自动进样器

GCMS-TQ8050 NX 三重四极杆气质联用仪

1.2 分析条件

SPME 参数：

SPME 纤维：DVB/CWR/PDMS 80 μm

老化温度：260 $^{\circ}\text{C}$

老化时间：5 min

(萃取前)

平衡温度：70 $^{\circ}\text{C}$

平衡时间：10 min

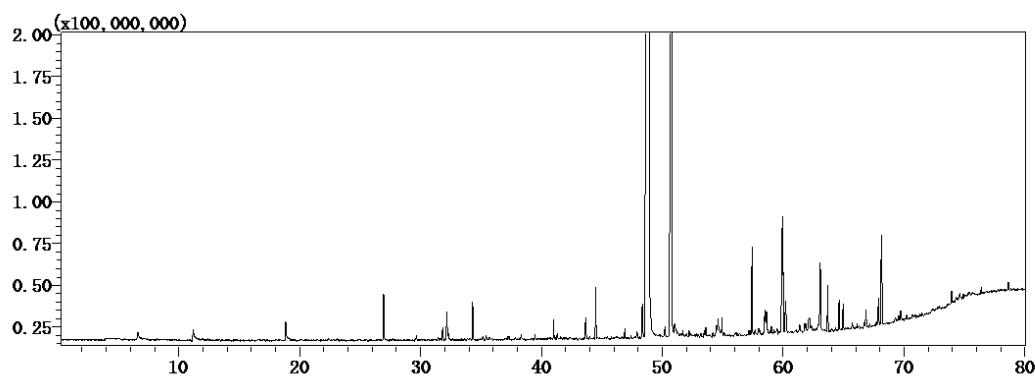
萃取时间：30 min

进样口温度：250 $^{\circ}\text{C}$

解吸时间：3 min

老化时间：2 min

(萃取后)



白肋烟烟叶

图 2 部分烟叶样品 TIC 图

本文对 6 种不同烟叶进行检测，分别是 4 种不同产地的烤烟烟叶：福建 (FJ)、贵州 (GZ)、河南 (HN) 和云南 (YN)，还包括晒红烟 (SH) 和白肋烟 (BL)，每种烟叶平行测定 3 次，部分烟叶样品 TIC 见图 2。扫描模式采用 FASST—MRM 和 Scan 模式相结合，MRM 可以实现数据库中约 500 种香气成分的高灵敏度检测，Scan 还可以对于数据库之外的挥发性组分进行检索定性。6 种烟叶共检测到 154 种香气成分，其中福建烟叶 141 种，贵州烟叶 138 种，河南烟叶 142 种，云南烟叶 141 种，晒红烟烟叶 129 种，白肋烟烟叶 119 种，6 种烟叶中共有香气成分 108 种。详细检测结果见表 1。

表 1 6 种烟叶样品气味成分检测结果

No.	名称	保留时间 /min	平均峰面积 (n=3)						CAS 号	气味描述
			福建	贵州	河南	云南	晒红烟	白肋烟		
1	2- 甲基咪喃	6.972	20216	19369	24169	27866	27136	----	534-22-5	巧克力味， 可可口味
2	2- 丁酮	7.709	46895	40398	51612	63602	80584	48652	78-93-3	醚味
3	2- 乙基咪喃	9.314	27801	19103	50852	42613	34266	----	3208-16-0	面包，麦芽， 咖啡味
4	二乙酰	10.267	216369	287643	262363	363402	136508	68010	431-03-8	黄油味
5	正戊醛	10.266	----	----	1267657	313958	277747	----	110-62-3	杏仁味， 大麦味
6	1- 戊烯 -3- 酮	11.9	247113	99101	453886	226928	48436	27049	1629-58-9	鱼腥味， 刺激气味
7	丁酸乙酯	12.532	----	----	----	----	345240	107305	105-54-4	苹果味
8	正己醛	14.629	235718	167487	455155	246631	307531	122094	66-25-1	脂肪味， 青草味
9	乙酸异戊酯	16.511	75856	133638	46774	202554	84142	43917	123-92-2	香蕉味
10	(E)-2- 戊烯醛	16.98	----	----	151704	----	----	----	1576-87-0	草莓，水果， 西红柿味
11	4- 甲基 -3 戊烯 -2- 酮	16.983	51633	63121	57847	82168	58375	31855	141-79-7	甜味， 化学品味
12	正丁醇	17.42	76918	114468	153451	92817	185788	117654	71-36-3	药味，水果味
13	吡啶	19.336	601951	531649	571889	781405	324121	363820	110-86-1	哈喇味
14	2- 庚酮	19.453	117897	59338	188723	100643	58851	22481	110-43-0	肥皂味
15	庚醛	19.597	120899	83423	188446	131571	132220	65385	111-71-7	脂肪味，柑橘 味，哈喇味
16	己酸甲酯	19.637	103784	140046	103445	285986	53529	29727	106-70-7	水果味， 清新的，甜味

17	双戊烯	20.095	41100	10238	41295	35646	24218	11884	138-86-3	柠檬味, 橙子味
18	异戊醇	20.494	506226	750610	424732	1013621	175212	158900	123-51-3	威士忌, 麦芽, 焦味
19	2- 甲基吡啶	20.998	11793	16463	41597	21231	----	21504	109-06-8	汗味
20	2- 己烯醛	21.264	159565	92880	326352	210399	151997	----	6728-26-3	苹果味, 绿植味
21	2- 正戊基呋喃	21.796	701687	747130	1375942	849296	445500	195531	3777-69-3	绿豆味, 黄油味
22	1- 戊醇	22.578	235583	276349	371631	245576	79160	53579	71-41-0	香脂的
23	3- 辛酮	22.955	130700	64447	160071	108045	106128	30724	106-68-3	草本味, 奶油 味, 树脂味
24	苯乙烯	23.103	66974	81381	77007	80289	1484073	825188	100-42-5	香脂的, 汽油味
25	2- 甲基吡嗪	23.467	----	41452	----	----	92857	227955	109-08-0	爆米花味
26	4- 异丙基甲苯	23.673	32324	25276	32690	35239	58802	25982	99-87-6	汽油味, 柑橘味
27	2- 乙基吡啶	24.202	27169	23729	117730	37803	69513	78744	100-71-0	青草味
28	1,2,4- 三甲基苯	24.258	128240	99483	222601	129771	629935	311980	95-63-6	塑料味
29	3- 羟基 -2- 丁酮	24.407	104499	100644	103613	140345	----	----	513-86-0	奶油味
30	乙酸叶醇酯	25.955	449341	493690	500750	876758	166868	51864	3681-71-8	绿植, 香蕉
31	(Z)-2- 戊烯醇	25.958	97725	103816	248193	170386	----	17043	1576-95-0	绿植, 塑料, 橡胶
32	异戊烯醇	26.004	148335	209812	275651	275651	----	----	556-82-1	草本味
33	2,5- 二甲基吡嗪	26.156	27248	43231	85839	37203	30561	18849	123-32-0	烤坚果味, 烤牛肉味
34	2- 乙基吡嗪	26.702						29150	13925-00-3	花生酱, 木头
35	庚酸乙酯	26.703	193067	24809	142921	79811	70762	7878	106-30-9	水果味
36	6- 甲基 -5- 庚 烯 -2- 酮	26.932	7211269	8893628	21242407	9139663	4341524	1444102	110-93-0	胡椒, 蘑菇, 橡胶
37	正己醇	27.459	152973	151489	268696	234387	154429	70766	111-27-3	树脂, 花, 绿植
38	2,6- 二甲基 -5- 庚烯醛	27.691	339419	283066	652596	322141	214327	62758	106-72-9	水果, 绿植, 甜瓜味
39	叶醇	28.928	196691	354284	397706	715841	56007	39306	928-96-1	青草味
40	二甲基三硫	28.965	7792	9509	8206	12473	8010	10340	3658-80-8	硫磺味, 鱼腥 味, 卷心菜味
41	2- 乙基 -5- 甲基 吡嗪	29.074	27038	32747	48323	32833	19286	13439	13360-64-0	水果味, 甜味
42	辛酸甲酯	29.306	79979	43451	49468	134167	25323	----	111-11-5	橙子味
43	壬醛	29.557	902265	325263	961074	833557	520670	141976	124-19-6	脂肪味, 柑橘味
44	2,3,5- 三甲基吡 嗪	29.949	276093	159007	218959	179352	34688	14853	14667-55-1	烘焙, 土豆味, 霉味
45	1,2,4,5- 四甲苯	30.995	71582	38060	94256	60855	47262	14293	95-93-2	哈喇味, 甜味
46	辛酸乙酯	31.328	24806	----	21374	16579	35419	7351	106-32-1	水果味, 脂肪味
47	1- 甲基 -4-(1- 甲 基乙烯基) 苯	31.556	120410	118896	125208	124740	109386	109234	1195-32-0	柑橘味, 松木味

48	(Z)- 氧化芳樟醇	31.654	269259	208561	689232	319446	140907	37477	5989-33-3	花香
49	2- 乙基 -3,6- 甲基吡嗪	31.77	16727	18769	41787	24907	5778	----	13360-65-1	土豆, 可可, 烤坚果
50	1- 辛烯 -3- 醇	31.894	62831	59609	113744	101352	----	----	3391-86-4	蘑菇味
51	醋酸	32.105	66299820	64034097	48139956	67929374	14449243	17123693	64-19-7	酸味
52	2- 乙基 -3,5- 甲基吡嗪	32.502	180174	54153	66409	78481	----	----	13925-07-0	土豆, 焙烤味
53	糠醛	32.756	741341	387658	575743	709020	160529	41094	98-01-1	面包, 杏仁, 甜味
54	E)- 氧化芳樟醇	32.922	179367	135345	467690	200446	85032	23918	34995-77-2	花香
55	2- 乙基己醇	33.617	191306	158793	373079	191095	480402	199126	104-76-7	玫瑰, 绿植
56	(E,E)-2,4- 庚二烯醛	34.127	305109	160030	1048833	454896	158483	----	4313-03-5	坚果, 脂肪
57	癸醛	34.23	49428	37718	31153	78040	133081	45331	112-31-2	橙皮味, 动物油
58	2- 乙酰基呋喃	34.543	1240140	980770	1021893	1166057	143912	69721	1192-62-7	香油味
59	苯甲醛	35.415	3252580	4298222	7815988	4221106	3326792	2289181	100-52-7	杏仁, 焦糖味
60	壬酸乙酯	35.734	----	----	----	----	61985	19248	123-29-5	水果味, 玫瑰, 坚果味
61	2,3- 丁二醇异构体 -1	35.712	5077999	3036981	2044779	3367380	838868	644417	513-85-9	水果味, 洋葱味
62	乙酸糠酯	35.748	306604	247101	155147	500763	----	----	623-17-6	酯味, 绿植, 香蕉皮味
63	丙酸	35.875	1918954	1476664	1977213	2042408	283521	234726	79-09-4	刺鼻的, 哈喇味, 豆腥味
64	芳樟醇	36.112	1562825	1026394	2893276	1632531	335888	37926	78-70-6	花香, 薰衣草味
65	辛醇	36.492	94039	61860	312781	197896	159952	60506	111-87-5	试剂味, 金属味, 焦味
66	异丁酸	37.094	848215	1051589	907836	1678568	223818	316463	79-31-2	哈喇味, 黄油芝士味
67	2,3- 丁二醇异构体 -2	37.227	6480241	3506137	1550719	2439275	575930	491098	513-85-9	水果味, 洋葱味
68	5- 甲基呋喃醛	37.48	507277	264860	366297	553649	78351	22826	620-02-0	杏仁味, 焦糖,
69	1-(2- 甲基 -1- 环戊烯基) 乙酮	38.263	2188568	1997785	5778472	2589060	1474251	257504	3168-90-9	
70	癸酸甲酯	38.199	59917	33126	29364	111129	41247	8433	110-42-9	酒味
71	2- 乙酰基吡啶	38.672	158308	132197	143928	149825	43242	----	1122-62-9	爆米花味
72	苯甲腈	38.865	13148	15844	30340	20351	29704	38554	100-47-0	哈喇味
73	β - 环柠檬醛	39.416	515759	357773	687711	736845	56995	10896	432-25-7	凉香、果香和清香
74	苯甲酸甲酯	39.454	322368	403219	394819	505966	94297	49259	93-58-3	西梅, 莴苣, 甜味
75	丁酸	39.55	1303957	1343042	2082900	2315070	464341	435589	107-92-6	哈喇味, 芝士味, 汗味
76	2- 乙酰基吡嗪	39.673	----	11289	26860	15792	----	----	22047-25-2	烧烤
77	L- 薄荷醇	39.993	54305	24872	106080	44227	103702	33571	2216-51-5	胡椒薄荷
78	苯乙醛	40.409	4846794	2865078	8840919	4423634	5678995	1140022	122-78-1	山楂树, 蜂蜜, 甜味

79	苯乙酮	40.662	1513633	1714658	2931659	1609692	1523432	912157	98-86-2	霉味, 花香, 杏仁
80	糠醇	40.737	2223554	2332964	2423343	3015877	575566	59029	98-00-0	焦味
81	异戊酸	41.195	3722203	2544281	2331465	4054149	1169365	1956046	503-74-2	汗味, 酸味, 哈喇味
82	茶香酮	42.294	526446	278329	716451	406916	186394	42801	1125-21-9	浓甜的茶叶香味
83	γ -己内酯	42.752	1122705	1158871	1071814	808551	201587	84217	695-06-7	香豆素, 甜味
84	巴伦西亚橘烯	43.228	161591	141905	113185	134946	974252	21175	4630-07-3	绿植, 油
85	3-甲基-2,4-壬烷二酮	43.317	1173970	887676	1553299	1359256	417748	----	113486-29-6	稻草, 水果
86	3-甲基-2-(5H)-呋喃酮	43.328	980407	956305	970442	975894	----	----	22122-36-7	/
87	茄酮	43.634	22519434	17902786	19521822	32999124	10825002	2670441	54868-48-3	新鲜胡萝卜样的香味
88	(E)-柠檬醛	43.765	----	----	196507	----	----	----	141-27-5	柠檬, 薄荷
89	正戊酸	43.823	7655293	5095851	14137681	6459312	1535640	909608	109-52-4	汗味
90	萘	44.222	349088	288888	474852	358793	235486	91011	91-20-3	柏油味
91	香茅醇	44.783	138082	77472	65650	77105	----	----	106-22-9	玫瑰
92	4'-甲基苯乙酮	45.501	501852	460677	655465	697360	353384	108363	122-00-9	苦杏仁
93	2-乙酰基噻吩	45.504	20973	----	----	----	----	----	88-15-3	硫磺味
94	水杨酸甲酯	45.51	1054258	632544	1289935	755347	392438	79901	119-36-8	胡椒薄荷
95	4-异丙基苯甲醛	45.739	41129	24339	32934	49294	----	----	122-03-2	酸味
96	苯乙酸乙酯	45.743	----	----	----	----	197718	180006	101-97-3	水果, 甜味
97	月桂酸甲酯	46.267	26485	14347	11617	33646	15827	12251	111-82-0	脂肪, 椰子味
98	水杨酸乙酯	46.787	130178	----	120923	92877	----	----	118-61-6	冬青, 薄荷
99	乙酸苯乙酯	46.875	4420660	5093769	2704878	6278133	----	----	103-45-7	玫瑰, 蜂蜜, 烟草
100	(E)- β -大马酮	46.945	3144606	2046728	2151962	3180818	1581805	241971	23726-91-2	苹果味
101	β -大马酮	47.114	6145725	2533837	6970989	3828162	2112726	178914	23696-85-7	炖苹果, 蜂蜜的, 草莓
102	(Z)-橙化基丙酮	47.318	17297	----	----	----	----	----	3879-26-3	脂肪, 金属味
103	甲基环戊烯醇酮	47.278	1512652	1229220	1135428	1870711	627378	59582	80-71-7	焦糖味, 枫叶味
104	己酸	47.776	2930341	1861923	5899634	4562290	5406394	1987963	142-62-1	汗味
105	(E)-橙化基丙酮	48.245	9138937	8475515	22269049	9597450	10989714	2802143	3796-70-1	花果绿植, 梨, 香蕉味
106	愈创木酚	48.446	2064235	1056953	786827	2381831	199903	----	90-05-1	烟味, 甜味, 药味
107	烟碱	48.728	33813296	60745132	30348267	39802234	55007039	120387379	1954-11-5	强烈辛辣味
108	苯甲醇	48.956	45002703	44737579	32319787	42437945	7735429	----	100-51-6	甜味, 花香
109	异戊酸橙花酯	49.063	807520	315196	376467	360829	122792	168150	3915-83-1	浓郁的花果香
110	抗氧化剂 264	50.271	138789	34990	59597	116565	91302	255534	128-37-0	霉味
111	苯乙醇	50.216	35304796	38751506	36199839	34229702	12317174	3870257	60-12-8	蜂蜜, 香料, 玫瑰

112	新植二烯	50.748	84132086	84700943	82153105	87283480	72895833	104796626	504-96-1	清香气
113	β -紫罗酮	51.317	2664065	2446268	3860809	3877239	1374650	365807	79-77-6	海草,紫罗兰,花香
114	十二醇	51.969	----	----	----	----	192746	131320	112-53-8	脂肪, 蜡脂
115	苯并噻唑	51.996	189310	141618	247238	195605	316689	183286	95-16-9	汽油, 橡胶
116	甲基麦芽酚	52.2	7110114	2869955	2452312	4103162	1407199	----	118-71-8	焦糖味
117	2-乙酰基吡咯	52.319	38905159	30994180	38473163	43592534	20018851	1723112	1072-83-9	坚果, 核桃, 面包
118	丁位辛内酯	52.476	94235	76915	58452	54058	63350	28219	698-76-0	桃子
119	邻甲酚	53.367	287374	67122	210430	286539	38656	27822	95-48-7	酚
120	1,3,7,7-四甲基-2-氧杂双环[4.4.0]-5-癸烯-9-酮	53.592	8100212	8135585	2865555	4696299	5699691	2039785	20194-67-6	烟香
121	五甲基呋喃溴酸酯	53.549	307429	168251	77655	436719	79342	74428	124-10-7	鸛尾草
122	苯酚	53.467	997980	400410	1201018	1532393	463918	307823	108-95-2	酚
123	4-乙基-2-甲氧基苯酚	54.327	103119	27443	25104	132959	----	----	2785-89-9	香料, 丁香
124	呋喃酮	54.271	85485	106342	93097	166137	----	----	3658-77-3	焦糖味
125	丙位壬内酯	54.515	338325	334535	467620	577073	1112575	441845	104-61-0	椰子, 桃子
126	DL-泛酰内酯	54.459	7517315	4090214	6683383	4826948	8186239	4629644	79-50-5	/
127	反式肉桂醛	54.92	63477	69767	94514	77172	105898	119009	14371-10-9	肉桂, 涂料
128	辛酸	55.121	498833	315315	393952	464975	717059	204375	124-07-2	汗味, 芝士
129	1-十三醇	55.415	----	----	----	----	263040	137680	112-70-9	霉味
130	对甲酚	56.256	1985475	1310976	857579	1025157	----	----	106-44-5	药味, 酚, 烟
131	壬酸	58.535	7482473	6090110	5416772	5704611	4589932	2134900	112-05-0	绿植, 脂肪
132	1-十四醇	58.724	----	----	----	----	359600	173140	112-72-1	椰子
133	4-乙基苯酚	59.191	195952	56064	323166	276765	----	----	123-07-9	酚, 香料
134	4-乙烯基-2-甲氧基苯酚	59.698	1415698	1047613	1370091	1573095	234610	152472	7786-61-0	丁香, 咖喱
135	巨豆三烯酮-1	59.983	8069697	10019720	7730286	6513045	9117321	9328010	13215-88-8	甜润的烟草香、干果香
136	棕榈酸甲酯	60.234	4941384	1070961	560494	4115565	369451	319990	112-39-0	甜味, 果香, 葡萄
137	2,6-二甲氧基苯酚	47.391	178189	----	----	226890	----	----	91-10-1	药味, 酚, 烟
138	正癸酸	61.807	374221	293281	240045	324999	205618	92203	334-48-5	脂肪
139	丙三醇	62.948	5705410	5468603	4557872	3496263	2619544	1520051	56-81-5	味甜
140	巨豆三烯酮-2	63.065	5424219	6713576	4990369	4274710	5353987	5215558	38818-55-2	甜润的烟草香、干果香
141	二烯烟碱	63.684	1513890	3413531	2095953	1944667	5200928	7025535	487-19-4	
142	二氢猕猴桃内酯	64.624	483108	403392	695294	660924	833658	343471	17092-92-1	香豆素样香气
143	硬脂酸甲酯 C18	66.381	44292	14407	6136	41564	----	----	112-61-8	脂肪
144	苯甲酸	66.689	6920673	5354654	7678001	4380124	9557234	6278217	65-85-0	尿味

145	吡嗪	67.152	64426	110921	129858	77990	578987	1972192	120-72-9	樟脑丸, 焦味
146	月桂酸	67.934	96897	81725	60381	73712	44122	26000	143-07-7	金属味
147	2,3- 联吡啶	68.137	6259220	5684855	4100104	4759419	11292345	29115377	581-50-0	
148	3- 甲基吡嗪	68.472	43651	79423	120249	81555	120758	63200	83-34-1	樟脑丸, 粪便味
149	5- 羟甲基糠醛	68.563	796498	217411	311182	621726	----	----	67-47-0	纸板味
150	圆柚酮	69.389	----	----	----	----	2105858	----	4674-50-4	葡萄
151	4- 羟基 - β - 二氢大马酮	69.553	571807	360452	597202	331117	281329	199284	102488-09-5	
152	香兰素		221239	141299	321678	245106	423905	113050	121-33-5	香草
153	9- 羟基 -4,7- 巨豆二烯 -3- 酮	72.295	1979988	1820664	1295645	1222054	1317152	503400	34318-21-3	
154	香草乙酮	72.46	800406	389888	333039	369274	263638	192536	498-02-2	香草

注: ---- 代表未检出。

3.3 数据结果分析

3.3.1 主成分分析 (PCA)

将6种不同烟叶样品香气成分检测结果导入SIMCA 14.1软件, 变量经标准化处理后得到PCA得分图(见图3)。PCA可以尽可能多地反映变量的原始信息, 直观显示不同样本之间的整体差异。样本间聚集程度越好说明香气相似性越高, 样本越分散说明差异越大。

从得分图可以看出, 每种烟叶的3针平行样品紧密聚集, 说明实验结果稳定性好。福建烟叶、贵州烟叶和云南烟叶样本点比较集中, 说明三者气味成分相似性比较高, 河南烟叶、晒红烟叶和白肋烟叶表现出具有一定的独立性, 说明这三种烟叶气味成分具有显著差异。河南烟叶与另三种烤烟烟叶(福建、贵州和云南)在第二主成分上差别较大, 但在第一主成分上差别不大, 说明在有些香气成分上具有一定的相似性。

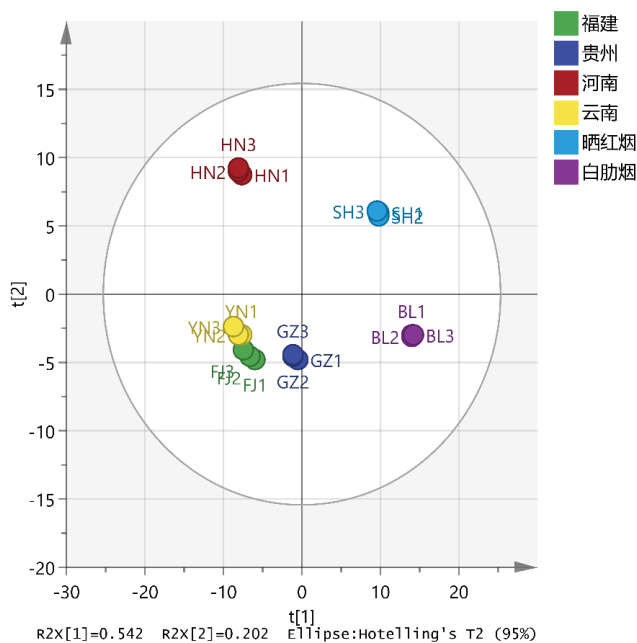


图3 香气成分 PCA 得分图

($R^2X[1]=0.542$ 为第一主成分的贡献率为 54.2%, $R^2X[2]=0.202$ 为第二主成分的贡献率为 20.2%)

3.3.2 聚类分析

聚类分析是一种分类的多元统计分析方法，通过对数据集的层次分解实现样品的自然分组，聚类热图可以实现数据的可视化。将检测到的香气成分响应值归一化后作为变量，对不同烟草进行聚类分析，不同烟叶的聚类热图见图 4。由图可知，首先将 6 种烟叶分成两类，四个产地的烤烟烟叶分成一类，晒红烟和白肋烟分成一类。四种不同产地烤烟烟叶中，福建和贵州烟叶香气成分最相近，其次是云南烟叶，差异最大的是河南烟叶。区域 A 是白肋烟中相对含量较高的香气成分，主要是吡嗪、二烯烟碱、反式肉桂醛、2-乙基吡嗪等，区域 B 是晒红烟中相对含量较高的香气成分，主要是辛酸、圆柚酮、苯甲酸、十四醇等，区域 C 中组分较多，这些组分在烤烟烟叶中较白肋烟和晒红烟偏高，主要有 2,3,5-三甲基吡嗪、丙酸、正戊酸、 γ -己内酯、2-乙酰基吡啶等。

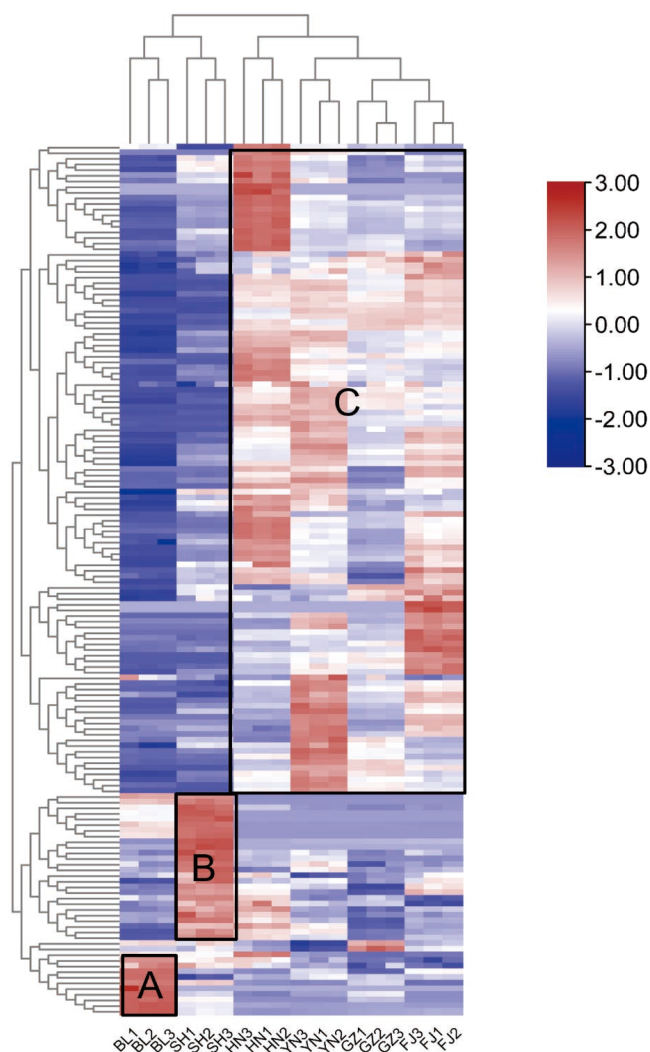


图 4 不同烟叶香气成分聚类热图

(横坐标为 6 种不同烟草 3 个平行样品名称，纵坐标为检测到的香气成分，不同颜色为响应值标准化处理后得到的数值，红色代表高含量，蓝色代表低含量。)

3.3.3 偏最小二乘法分析 (PLS-DA)

为进一步研究不同类型烟叶之间香气成分的差异，采用有监督的模式偏最小二乘判别分析 (PLS-DA)，对烤烟、晒红烟、白肋烟三种类型的烟叶香气成分进行分析，分析结果见图 5。由图可知，四种不同产地烤烟烟叶聚类良好，烤烟、晒红烟和白肋烟可显著分离。结合评价 PLS-DA 模型质量的 3 个关键指标可知， $R^2X=0.704$ ， $R^2Y=0.913$ ， $Q^2=0.879$ ，说明模型的稳定性和预测性较好。

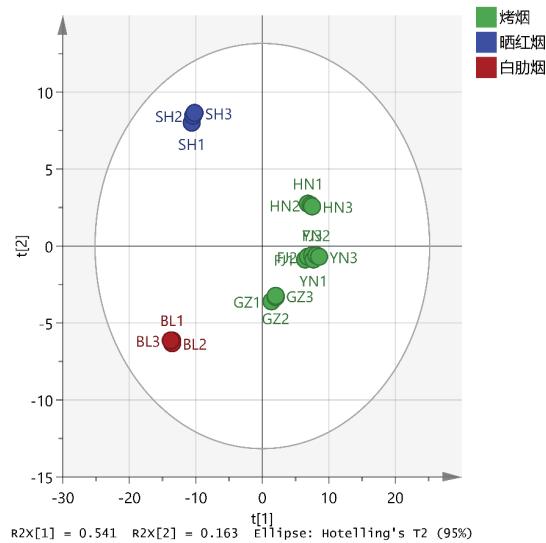


图 5 香气成分 PCA 得分图

采用变量权重重要性排序 (VIP) 对 PLS-DA 模型中差异性较大的香气成分进行筛选, 通常 VIP 值大于 1 的组分在不同样本组之间的区分中起重要作用, 通过 VIP > 1 筛选出 58 种差异较大的香气成分, 见图 6。

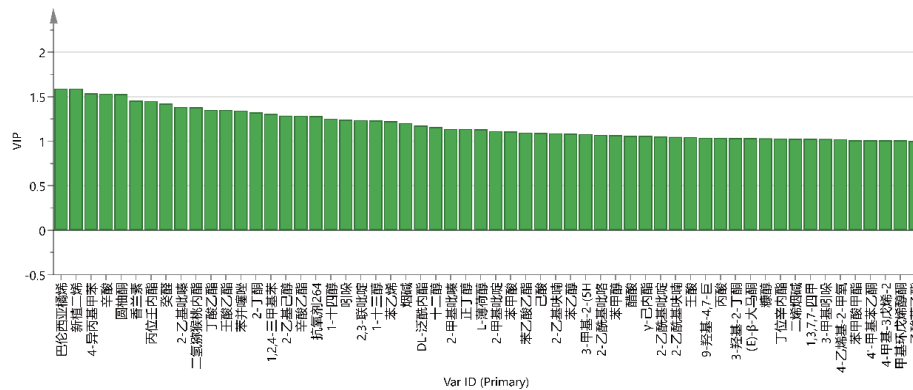


图 6 VIP > 1 的化合物

■ 结论

本文采用岛津 GCMS-TQ8050 NX 三重四极杆气质联用仪和 AOC-6000 多功能自动进样器, 结合 Smart Aroma Database 香味数据库对六种不同烟草烟叶中的气味成分进行测定, 并对检测结果进行统计学分析。6 种烟叶共检测到 154 种香气成分, 其中福建烟叶 141 种, 贵州烟叶 138 种, 河南烟叶 142 种, 云南烟叶 141 种, 晒红烟烟叶 129 种, 白肋烟烟叶 119 种。PCA 图显示福建烟叶、贵州烟叶和云南烟叶相似性比较高, 而河南烟叶、晒红烟烟叶和白肋烟烟叶具有一定的独立性。聚类分析将六种烟叶分成两大类, 四种不同产地烤烟为一类, 晒红烟和白肋烟为一类。PLS-DA 模型筛选出烤烟、晒红烟和白肋烟三种不同类型烟草差异性比较大的 58 种香气成分。结果表明, 该方法操作简便, 分析速度快, 可用于烟草样品中气味成分的快速筛查。

岛津应用云

