

基于液质联用非靶向代谢组学的绿茶与茉莉花茶代谢差异比较

胡锦涛, 颜敏, 王岚, 袁亚宏*, 岳田利*

(西北大学食品科学与工程学院, 陕西省营养健康食品个性制造工程实验室, 陕西省食品安全风险识别控制研究中心, 陕西省食品安全与营养健康创新转化平台, 陕西西安 710069)

摘要: 为比较绿茶与茉莉花茶代谢差异, 分别选取三种不同地域绿茶和茉莉花茶样品, 利用超高效液相色谱-高分辨质谱联用技术对茶叶代谢物进行非靶向分析。共检测到 177 种代谢物, 对其进行非参数检验 Kruskal-Wallis 检验, 共筛选出 59 种代谢物, 通过皮尔逊聚类分析归为 3 组。富集分析发现代谢差异集中分布在多酚、黄酮和氨基酸相关通路中。偏最小二乘判别分析结果证明不同产地绿茶和茉莉花茶可在得分散点图上被良好区分, 模型参数变量投影重要性预测值筛选出差异代谢物 28 种。样品总多酚黄酮含量与差异代谢物相关分析发现呈最强正相关的是 γ -氨基丁酸, 最强负相关的是单酰基甘油磷酸胆碱 18:0。对不同产地绿茶和茉莉花茶进行分析分别发现有 10 和 55 种差异代谢物。12-氧代植物二烯酸、茉莉酮和间苯三酚在安徽、江西和陕西绿茶中含量最高, 苯乙酮、单二酰基甘油三甲基高丝氨酸 16:0 和 2-己烯醛在安徽、广西和四川茉莉花茶中含量最高。本研究为茶叶滋味形成及不同产地茶叶鉴定提供了一定参考价值。

关键词: 非靶向代谢组学; 绿茶; 茉莉花茶; 液相色谱-质谱联用; 差异代谢物

文章编号: 1673-9078(2025)11-127-134

DOI: 10.13982/j.mfst.1673-9078.2025.11.1298

Comparison of Metabolic Difference between Green Tea and Jasmine Tea by LC-MS-Based Untargeted Metabolomics

HU Jinpeng, YAN Min, WANG Lan, YUAN Yahong*, YUE Tianli*

(College of Food Science and Technology, Laboratory of Nutritional and Healthy Food-Individuation Manufacturing Engineering, Research Center of Food Safety Risk Assessment and Control, Innovation Transformation Platform of Food Safety and Nutritional Health, Northwest University, Xi'an 710069, China)

Abstract: To explore the metabolic differences between green and jasmine tea, untargeted metabolomics analysis of green tea and jasmine tea samples from three different regions was performed using ultra-high-performance liquid chromatography-high resolution mass spectrometry (UHPLC-HRMS). A total of 177 metabolites were detected and Kruskal-Wallis tests were performed, leading to the selection of 59 metabolites that were then classified into three groups through Pearson cluster analysis. Metabolic pathway enrichment analysis results indicated that metabolic differences mainly focused on polyphenol, flavone, and amino acid metabolism. The results of partial least squares-discriminant analysis indicated that jasmine tea and green tea can be clearly distinguished by score scatter plots. After filtering based on Variable Importance in Projection values, 28 differential metabolites

引文格式:

胡锦涛,颜敏,王岚,等.基于液质联用非靶向代谢组学的绿茶与茉莉花茶代谢差异比较[J].现代食品科技,2025,41(11):127-134.

HU Jinpeng, YAN Min, WANG Lan, et al. Comparison of metabolic difference between green tea and jasmine tea by LC-MS-based untargeted metabolomics [J]. Modern Food Science and Technology, 2025, 41(11): 127-134.

收稿日期: 2024-09-01; 修回日期: 2024-10-23; 接受日期: 2024-10-29

作者简介: 胡锦涛 (1999-), 男, 硕士研究生, 研究方向: 食品代谢组学, E-mail: hujinpeng@stumail.nwu.edu.cn

通讯作者: 岳田利 (1965-), 男, 博士, 教授, 研究方向: 食品加工技术与食品营养安全, E-mail: yuetl421@nwu.edu.cn; 共同通讯作者:

袁亚宏 (1971-), 女, 博士, 教授, 研究方向: 食品发酵工程及食品安全控制技术, E-mail: yyh324@tom.com

were retained. Correlation analysis between the total polyphenol and flavonoid contents and differential metabolites revealed that γ -aminobutyric acid and lyso-phosphatidylcholine 18:0 exhibited the strongest positive and negative correlation, respectively. Analysis of green tea and jasmine tea from different regions identified 10 and 55 differential metabolites, respectively. Among them, Anhui, Jiangxi, and Shaanxi green tea had the highest 12-oxo-phytodienoic acid, jasmone, and phloroglucinol contents. Moreover, Anhui, Guangxi, and Sichuan jasmine tea had the highest acetophenone, lyso-diacylglyceryltrimethylhomoserine 16:0, and 2-hexenal contents. This study provides reference for research on the formation of tea flavors and identification of tea from different producing areas.

Key words: untargeted metabolomics; green tea; jasmine tea; liquid chromatography–mass spectrometry; differential metabolites

绿茶因其悠久历史、良好口感和营养保健价值成为最广泛饮用饮品之一，是产销量最高的茶叶类型^[1]。其制作工艺主要是在清明节前后采摘鲜叶摊放、然后通过炒青、蒸青、烘青和晒青四种方法破坏茶叶中酶的活性使其不再能够氧化，通过揉捻使得茶香味释放、最后通过干燥去除水分使得茶叶能够成型和长期保存^[1]。茉莉花茶是中国传统花茶，已有千年加工史，制作工艺主要是茉莉花苞和绿茶经拼和窈制而成，窈制是融合茶味和花味的关键步骤，主要包括茶坯和茉莉花处理、拌和窈制、吸香等流程。窈制不但增加了茶坯的香气物质，其小分子滋味物质也会发生明显改变，使得其滋味更为浓郁，成为我国饮用最广泛的花茶饮品^[2]。相比绿茶，茉莉花茶结合了茉莉花独特风味，富含酯、醇和烯炔类风味物质，具有独特饮用价值^[3]。现有研究表明，氨基酸是影响绿茶品质的关键滋味物质，且加工中氨基酸经过合成转化，可形成独特的茶汤滋味，这和茶叶氨基酸的组成密切相关^[4]。茉莉花茶品质的主要特征是“茶引花香、花增茶味”，通过物理吸附和化学吸附滋味物质，形成了独特的风味风格，其中常见的风味物质有芳樟醇、乙酸苄酯、苯甲醇、吲哚等^[5]。然而，目前对茶叶分子层面研究较多，对花茶较少，少有研究比较花茶和茶叶差异，少数研究还主要集中在风味领域^[6,7]，缺乏滋味物质相关研究。

基于超高效液相色谱-高分辨质谱联用（UHPLC-HRMS）技术的代谢组学主要研究分子量在 1 000 Da 以下内源代谢物。借助于 UHPLC 和 HRMS 强大分离检测能力，整合多来源数据库可对茶叶小分子快速定性定量，已成为茶叶非挥发性代谢物检测良好手段^[8]。Chen 等^[9]通过 LC-MS 代谢组学方法研究不同产地和贮藏时间白茶样品，鉴定随储存年限变化发生改变的小分子。周闯等^[10]通过 LC-MS 代谢组学发现“铁观音”和“水仙”两种茶叶存在较大代谢差异，“铁观音”中生物碱、脂质和甲基儿茶素类含量高，反之“水仙”中黄酮、酚酸和儿茶素含量较高。张晓磊等^[11]通过 UHPLC-Q-Exactive/MS 分析不同烘焙时间对白化品种绿茶风味品质的影响，发现随着烘焙时间增长，咖啡碱和氨基酸含量上升。因此，基于 UHPLC-MS 代

组学可研究茶叶代谢组成，阐明绿茶和茉莉花茶代谢差异，为发现新差异代谢分子和通路提供帮助。

本研究为鉴别绿茶和茉莉花茶代谢差异，分别获取三种产地绿茶和茉莉花茶。提取代谢分子进行基于 UHPLC-QE Focus MS 代谢物组学分析，通过生物信息学方法寻找关键差异分子和通路，以期发掘出茉莉花茶和绿茶的关键滋味物质，这对于区分两者营养健康价值，改进茶叶和花茶的加工工艺，以及作为消费者进行选择时的参考，都具有一定的意义。

1 材料与方法

1.1 研究思路

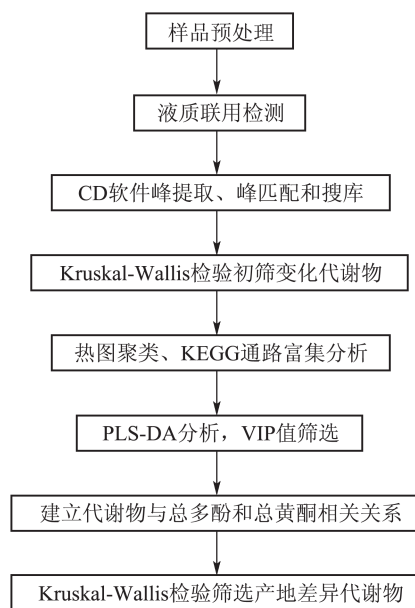


图 1 整体研究思路图

Fig.1 Overall research diagram of this study

整个研究中流程如图 1 所示。首先，提取了茶叶样品中的代谢物，随后用 UHPLC-HRMS 进行了代谢组学样品测定并通过搜库等方法鉴定了茶叶中的代谢物。进而通过非参数 Kruskal-Wallis 检验得到了绿茶和茉莉花茶间发生变化的代谢物，并将这些变化代谢物进一步进行热图聚类 and 代谢通路富集分析，初步明确

代谢物变化趋势和代谢通路变化范围。为缩小差异代谢物范围,将初步筛选得到的代谢物进行了PLS-DA分析,筛选出VIP值大于1的代谢物。随后建立差异代谢物和样品总黄酮和总多酚的关系,基于此分别锁定了正负相关性最强的两个代谢物。最后进行了同种茶叶在不同产地间的差异分析,发现了与产地相关的关键小分子(图1)。

1.2 材料与试剂

试验用到六种茶叶,分别是来自安徽黄山、江西婺源和陕西汉中的绿茶,来自广西横县、安徽黄山和四川雅安的茉莉花茶,它们都是在2023年生产的一级茶叶,且都为小叶类品种,其中绿茶均为烘青绿茶;茉莉花茶的加工方式均为拼和、窈制、烘焙,其中茉莉花茶窈制次数一致。每种样品取4份,放置在-80℃冰箱中。质谱级甲醇、水和乙腈购买自百灵威公司(中国,北京)。质谱级甲酸购买自Fluka公司(美国,北卡罗纳州,夏洛特),试验用纯净水购买自娃哈哈公司(中国,杭州)。代谢组学内标苯丙氨酸-d5购买自剑桥同位素实验室(美国,马萨诸塞州,图克斯伯里)。无水碳酸钠、硝酸铝、亚硝酸钠、氢氧化钠、无水乙醇购买自天力化学试剂有限公司(中国,天津),没食子酸生产于阿拉丁生化科技有限公司(中国,上海),芦丁购买自源叶生物科技有限公司(中国,上海),福林酚购买自索莱宝科技有限公司(中国,北京)。

1.3 仪器和设备

ATX124 万分之一天平,日本岛津;Z326K 高速冷冻离心机,德国Hermle公司;Infinite M2000 Pro酶标仪,瑞士帝肯公司;HWS-24 电热恒温水浴锅,上海一恒;UHPLC-Q Exactive Focus 超高相液相色谱-四极杆-高分辨质谱仪,美国赛默飞。

1.4 样品预处理

准确称量40 mg左右样品,加入质量浓度为20 μg/mL 苯丙氨酸-d5的300 μL 80% (V/V) 甲醇水提取剂,充分涡旋,70℃浸提30 min,冰上冷却10 min后,在4℃下,12 000 g离心15 min,取上清过0.22 μm有机滤膜,纯水稀释3倍,UHPLC-HRMS上样。另外,每组取等量上清样品混合质量控制(QC)样品,穿插在样品走样序列中,用于稳定性监测。

1.5 代谢组学分析

试验用Acquity HSS T3 色谱柱购买自沃特世公司(10 cm×2.1 mm, 1.8 μm, 美国,马萨诸塞州,米尔福德),仪器是赛默飞世尔科技公司的UHPLC-Q Exactive Focus 联用系统。分析柱温40℃,流动相A

和B分别为0.1% 甲酸水和乙腈(V/V)。初始流动相为5% B,保持1 min,在5 min上升为15% B,在10 min后升高为40% B,并在3 min内上升到95% B,保持2 min,随后快速恢复初始流动相,保持5 min后结束分析,整个梯度变化是线性的。质谱数据在正离子模式下采集,电喷雾电离源电压为3.5 kV,离子传输管温度为300℃,鞘气和辅助气流速分别设定为45和10 arb。全扫描过程中,质谱分辨率设定70 000,扫描范围设定70~1 050 m/z,数据采集方式为轮廓图,AGC目标增益设定10⁶,最大注入时间为50 ms。在ddms2分析中,质谱分辨率设定为17 500,扫描范围设定70~1 050 m/z,数据采集方式为轮廓图,AGC目标增益设定为10⁵,最大注入时间设定100 ms,打碎离子设定为前3。上述样品分析过程参考已发表论文^[12]。

1.6 总多酚和黄酮含量测定

精确称取200 mg样品,加入5 mL预热70% (V/V) 甲醇水,涡旋1 min,70℃水浴锅中浸提10 min,过程中每5 min取出涡旋一次。浸提结束,4℃、3 500 g离心10 min,将上清液转移至离心管中。残渣再用热70% (V/V) 的甲醇水浸提离心,并与初次离心上清合并,再经0.22 μm尼龙滤膜过滤,水稀释100倍得到待测液。

依据国标GB/T8313-2018^[13],采取福林酚比色法,取200 μL待测液、没食子酸标准溶液和纯水,加入1 mL 10% (m/V) 福林酚试剂,涡旋混匀静置5 min后,加入0.8 mL 7.5% (m/V) 碳酸钠溶液混匀,静置1 h。随后将结束反应的混合液经酶标仪765 nm下测定吸光度。

按文献报道^[14],在1 mL待测液、芦丁标准溶液和纯水中加入100 μL 5% (m/V) 亚硝酸钠溶液,涡旋混匀,室温静置6 min,随后加入100 μL 10% (m/V) 硝酸铝溶液,涡旋混匀后静置6 min。随后,加入1 mL浓度为1 mol/L氢氧化钠溶液,并加水定容到2.5 mL。混匀后酶标仪测得510 nm吸光度。

1.7 数据处理

代谢组学数据用赛默飞世尔科技公司Compound Discovery 3.2 软件进行峰检测,峰提取,基于mzCloud数据库(赛默飞世尔科技公司)、LipidBlast数据库^[15]和MassBank数据库^[16]搜库并积分,质量误差范围限定10 ppm。代谢物归类则基于HMDB数据库^[17]。峰面积用内标和样品重量校正。通过Kruskal-Wallis检验计算变化代谢物,代谢物热图聚类依据皮尔逊相关系数。通过MetaboAnalyst 6.0 软件计算代谢通路变化。通过Simca-P 14.1 软件建立偏最小二乘判

别分析 (PLS-DA) 多变量模型, 得到变量投影重要性预测 (VIP) 值, 绘制得分散点图和置换检验图。总多酚和黄酮与代谢物相关性计算依据皮尔逊相关系数。柱状图和受试者工作特征 (ROC) 曲线由 GraphPad 8.0 计算并绘制。

2 结果与分析

2.1 代谢物鉴定和稳定性分析

实验结果共定性出 177 种内源代谢物。根据 HMDB 数据库查询结果, 将代谢物分为 10 个主要类型, 包括苯丙烷类和聚酮类 (24.86%), 氨基酸、肽和类似物 (15.25%), 甘油磷脂类 (9.60%), 脂肪酸类、脂肪酰胺及其他衍生物 (8.47%), 核苷、核苷酸和类似物 (7.34%), 有机氧化合物 (4.52%), 有机杂环化合物 (4.52%), 吡啶及其衍生物 (2.82%)、有机氮化合物 (2.82%) 和鞘磷脂 (1.69%) 等 (图 2)。代谢物类型分布与已有文献报道^[18]茶叶中的代谢物类型符合, 可以进行后续研究。

此外, 还对比了文献中常见茶叶代谢分子。在此研究中检测到了黄酮类物质如槲皮素和山奈酚, 酚酸如没食子酸、儿茶素、表儿茶素、表没食子儿茶素没食子酸酯、表没食子儿茶素、儿茶素没食子酸酯等。同时还检测到了茶氨酸、精氨酸、谷氨酸等氨基酸物质及咖啡酸和咖啡因等。该结果符合之前关于茶叶中富含丰富黄酮类物质和氨基酸等^[19]的报道。并且还检测到了一些脂质分子, 包括甘油磷酸胆碱、甘油磷酸乙醇胺、N-酰基乙醇胺等, 这些代谢物也在茶叶脂质相关研究文献中报道过^[20]。为保证数据分析可靠, 我们仅保留 QC 样品中相对标准偏差小于 30% 的代谢物用作后续分析。

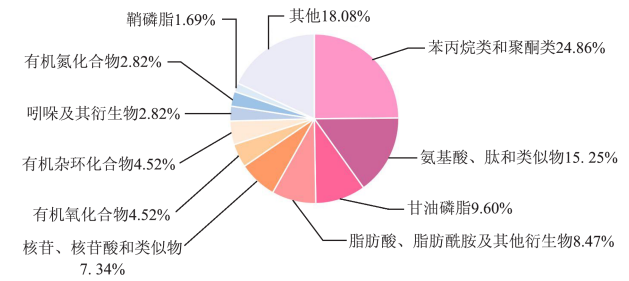


图 2 定性出的代谢物类别及比例

Fig.2 Category and proportion of identified metabolites

2.2 基于单变量分析初步挖掘代谢差异

为识别绿茶和茉莉花茶的代谢差异, 通过 Kruskal-Wallis 非参数检验, 筛选出 59 个差异分子 ($P<0.05$), 其比例占到所有代谢物的 35.8%。通过聚类分析, 可看到热图中这些变化代谢物被分为 3 组 (图 3a)。

第一组包括原花青素 B1、焦谷氨酸、腺苷、还原型谷胱甘肽、没食子酸、麦角硫因、 γ -氨基丁酸、熊果酸、单酰基甘油磷脂酰乙醇胺 18:2、柚皮素和香豆素。这些化合物在绿茶中含量较高, 在茉莉花茶中呈现降低趋势。其中, 熊果酸是一种三萜类化合物, 存在于多种天然植物中, 具有降脂、降糖、抗炎和抗癌功效^[21]。麦角硫因有保护皮肤、抗抑郁、保护眼睛、预防心脑血管疾病和糖尿病等功效^[22]。没食子酸作为结构最简单的天然多酚类化合物, 具有缓解高血压、心脏病、糖尿病以及肝纤维化的作用^[23]。

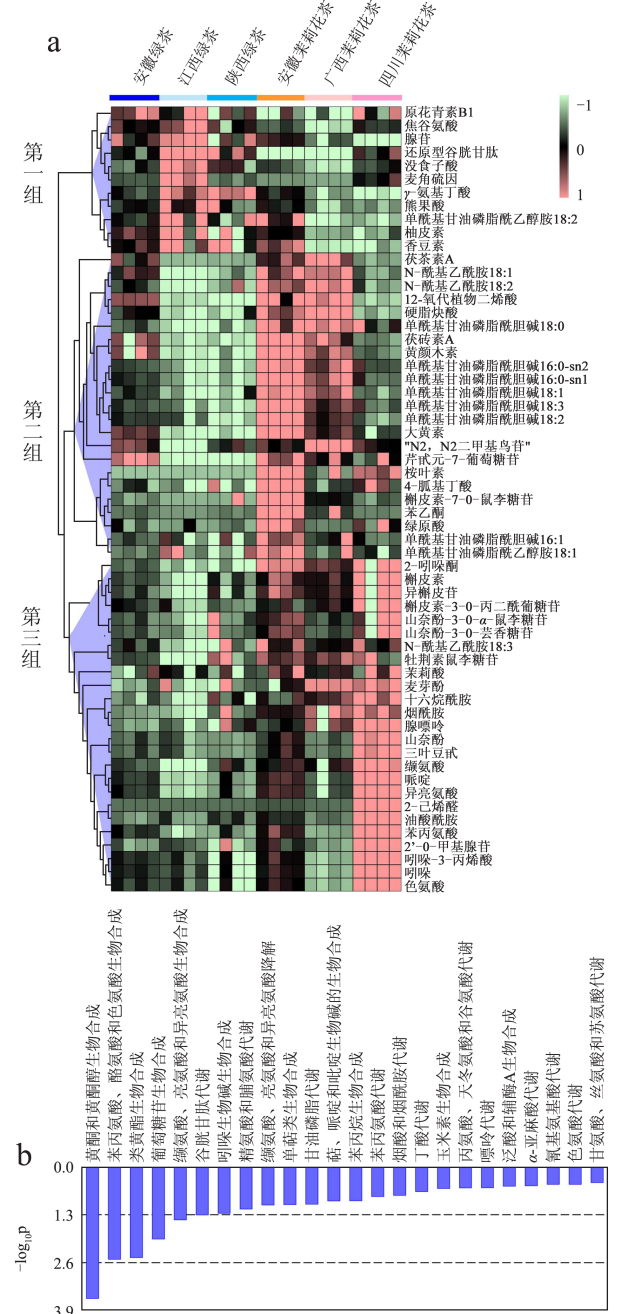


图 3 代谢物的热图 (a) 及 KEGG 通路富集分析结果 (b) of changed metabolites

Fig.3 Heatmap (a) and KEGG pathway analysis results (b) of changed metabolites

第二组代谢分子主要在茉莉花茶中升高，且升高趋势为安徽和广西茉莉花茶更为显著。主要包括多种单酰基甘油磷脂酰胆碱（16:0、16:1、18:0、18:1、18:2、18:3），N-酰基乙酰胺（18:1、18:2）、单酰基甘油磷脂酰乙醇胺 18:1，一些脂肪酸及其衍生物，核苷酸和多酚类化合物。甘油磷脂是细胞膜的组成成分，研究表明食物中的甘油磷脂具有降低血脂、改善脂肪肝^[24]、促进大脑发育、改善认知^[25]、改善肠道功能^[26]等保健功能。前人研究发现，甘油磷脂在黑茶发芽过程中发生显著变化^[27]。

第三组包括 2-吡啶酮、槲皮素、异槲皮苷、槲皮素-3-O-丙二酰葡萄糖苷、山奈酚-3-O- α -鼠李糖苷、山奈酚-3-O-芸香糖苷、N-酰基乙酰胺 18:3、牡荆素鼠李糖苷、茉莉酸、麦芽酚、十六烷酰胺、烟酰胺、腺嘌呤、山奈酚、三叶豆甙、缬氨酸、哌啶、异亮氨酸、2-己烯醛、油酸酰胺、苯丙氨酸、2'-O-甲基腺苷、吡啶-3-丙烯酸、吡啶、色氨酸，包含多酚类化合物、氨基酸类化合物、吡啶化合物和少数脂类物质。这些物质在绿茶中含量较低，在茉莉花茶中含量较高。该结果符合相关文献报道过的在茉莉花茶中富含多酚类物质^[28]。天然黄酮类物质如槲皮素和山奈酚等具有抗病毒、抗氧化、抗炎、抗肿瘤等功效，可以预防慢性疾病发生发展^[29,30]。茉莉花茶中富含的氨基酸具有一定的香味，是茶香气形成前体物质，与茶鲜味密切相关^[31]。

为明确差异代谢物所在通路，将差异代谢物基于 KEGG 数据库进行通路富集分析。根据 Metaboanalyst 软件计算出的 P 值，绘制了通路变化图，从图中看出变化最为显著的通路是黄酮和黄酮醇生物合成（ $P<0.001$ ），据其他研究结果表明黄酮和黄酮醇在不同来源植物中含量有显著差异，因茉莉花茶混合茶叶和茉莉花两种不同来源植物，可知此通路与单一来源绿茶表现显著差异的原因^[32]。其他显著变化的代谢通路包括：苯丙氨酸、酪氨酸和色氨酸生物合成，类黄酮生物合成，葡萄糖苷生物合成，缬氨酸、亮氨酸和异亮氨酸生物合成，谷胱甘肽代谢及吡啶生物碱生物合成。这些代谢通路主要和黄酮、类黄酮、葡萄糖苷以及氨基酸代谢相关，表明在茉莉花茶加工中这些代谢通路相关的物质发生变化（图 3b）。

2.3 基于多变量的差异代谢物分析

为进一步缩小差异代谢物范围，在单变量分析基础上进行了多变量分析。通过 PLS-DA 得分散点图中可看出三组不同产地绿茶和茉莉花茶组得到良好区分，

前两个主成分模型解释能力 R^2Y 为 0.95，模型预测能力 Q^2 为 0.77（图 4a）。不同产地绿茶和茉莉花茶间也有代谢差异，可能是不同产地和加工方式等差异造成的，但小于不同茶叶类型间差距。为验证模式可靠性，进行了 200 次置换检验，结果表明 R^2 截距为 0.39， Q^2 截距为 -0.29，且右侧点高于左侧，证明模型未过拟合（图 4b）^[33]。进而，根据模型 VIP 值筛选出大于 1 的代谢分子 28 个，预测值最大的是单酰基甘油磷脂酰胆碱 18:0、桉叶素、芹甙元-7-葡萄糖苷、2-吡啶酮、 γ -氨基丁酸和单酰基甘油磷脂酰胆碱 16:0（图 4c），可知这些代谢物在两种茶叶中变化较大。

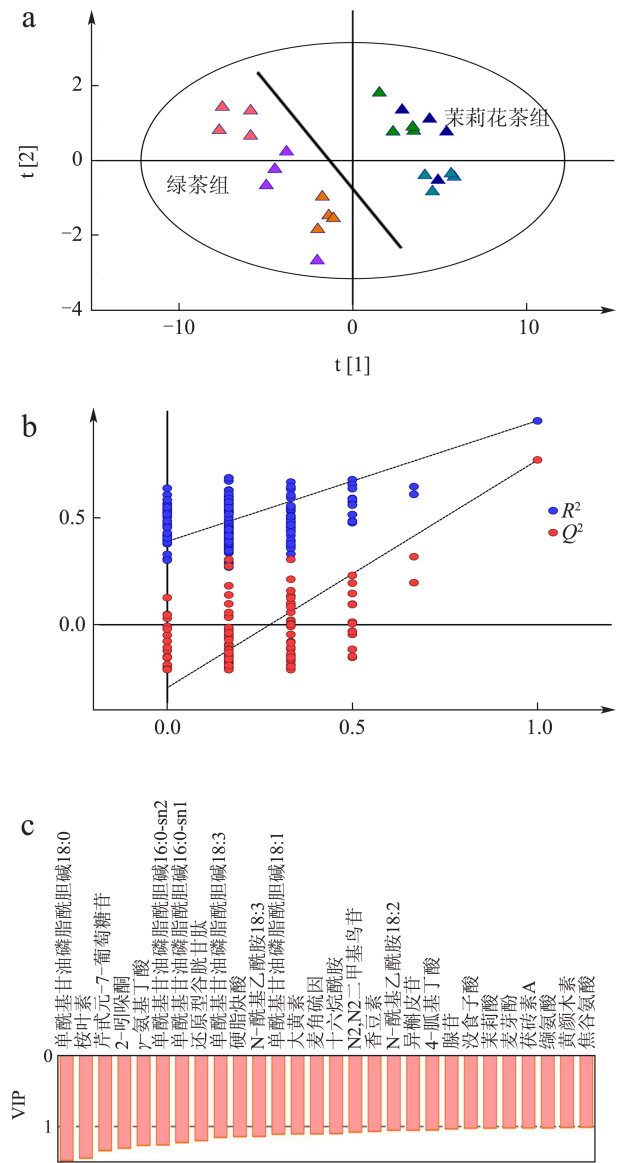


图 4 偏最小二乘判别分析结果

Fig.4 Results of partial least squares-discriminant analysis

注：a 为前两种主成分得分散点图，b 为置换检验图，c 为 VIP 值分布图。

2.4 代谢物与多酚和黄酮变化相关性分析

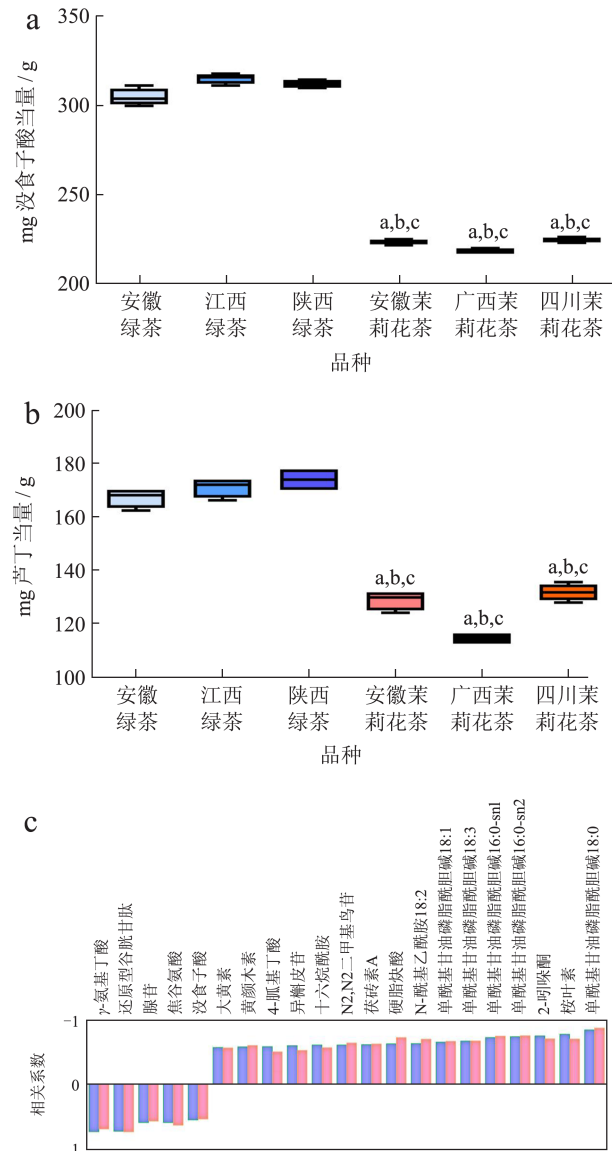


图5 茶叶样品中总多酚 (a) 和黄酮 (b) 含量及其与差异代谢物的相关系数图 (c)

Fig.5 Polyphenols (a) and flavonoids (b) in different tea sample (c) Pearson correlation coefficient between polyphenols, flavonoids with differential metabolites

注：a、b 和 c 分别代表不同产地的茉莉花茶和安徽、江西和陕西绿茶之间有显著性差异。

多酚和黄酮常用来评估食品抗氧化性，余等测定不同品种生菜总多酚和黄酮，并通过质谱定性定量多种酚类化合物，相关性分析发现生菜抗氧化能力与绿原酸、木犀草素葡萄糖醛酸苷和槲皮素葡萄糖苷有显

著相关性^[34]。加之前面通路分析结果，可知多种酚类和黄酮类物质发生显著变化，因此测定了样品多酚和黄酮含量，从结果可知三种绿茶样品中总多酚和总黄酮含量均显著高于茉莉花茶（图 5a、5b），可推测绿茶比茉莉花茶有更好的抗氧化性。另外，计算了总多酚、总黄酮与代谢物变化间的皮尔逊相关系数，结果可知 21 种代谢物和总多酚黄酮呈现较强相关性（系数大于 0.5），其中正相关代谢物 5 种，相关性最强的是 γ-氨基丁酸，其次是还原型谷胱甘肽、腺苷、焦谷氨酸、没食子酸。γ-氨基丁酸广泛存在于动植物体内，是一种神经递质，具有镇痛、抗抑郁和改善血压血糖等作用。茶富含 γ-氨基丁酸，是从谷氨酸合成，另外也可从多胺降解途径合成一部分^[35]。没食子酸是常见茶叶多酚类物质，与其他多酚类物质类似，具有抗氧化、抗癌等活性，且含量与茶叶品质密切相关^[36]。呈负相关的代谢物有 16 种，其中相关性最强的是单酰基甘油磷脂胆碱（16:0、18:0、18:1 和 18:3）、桉叶素和 2-吡啶酮（图 5c）。

茶叶中的非挥发性物质与茶汤的滋味密切相关。绿茶具有清新、鲜爽、醇厚回甘的滋味特征，同时具有一些苦涩的滋味。而茉莉花茶因融合了茉莉花的滋味物质则具有清爽、花香、香甜等滋味。一般认为，植物中的黄酮类物质呈苦涩的滋味，而文献报道 γ-氨基丁酸也是四川绿茶中苦味的主要贡献成分，腺苷和焦谷氨酸则呈现一定的鲜味^[37]。茉莉花茶中磷脂酯类物质较多，磷脂水解会产生丰富的脂肪酸类物质，具有芳香的滋味，磷脂氧化也会产生一些醛酮醇类物质，具有强烈的脂肪滋味。因此，从相关性分析结果可知，茶叶中较多的苦涩物质在茉莉花茶中得到了中和与改善^[38]。

为了找到同种茶叶的不同产地间的差异物质，进行了 3 组间非参数检验。其中，在绿茶中检测到有 10 种与产地相关的差异代谢物（ $P < 0.01$ ）。我们按照倍数变化对这些物质进行了排序，筛选升高最明显的化合物作为该产地特征物质。安徽、江西和陕西绿茶的特征物质分别是 12-氧代植物二烯酸、茉莉酮和间苯三酚。利用同样的方法，我们在茉莉花茶中也进行了分析，共筛选出 55 种发生变化的物质，其中安徽、广西和四川茉莉花茶中的特征物质分别为苯乙酮、单二酰基甘油三甲基高丝氨酸 16:0 和 2-己烯醛（图 6）。

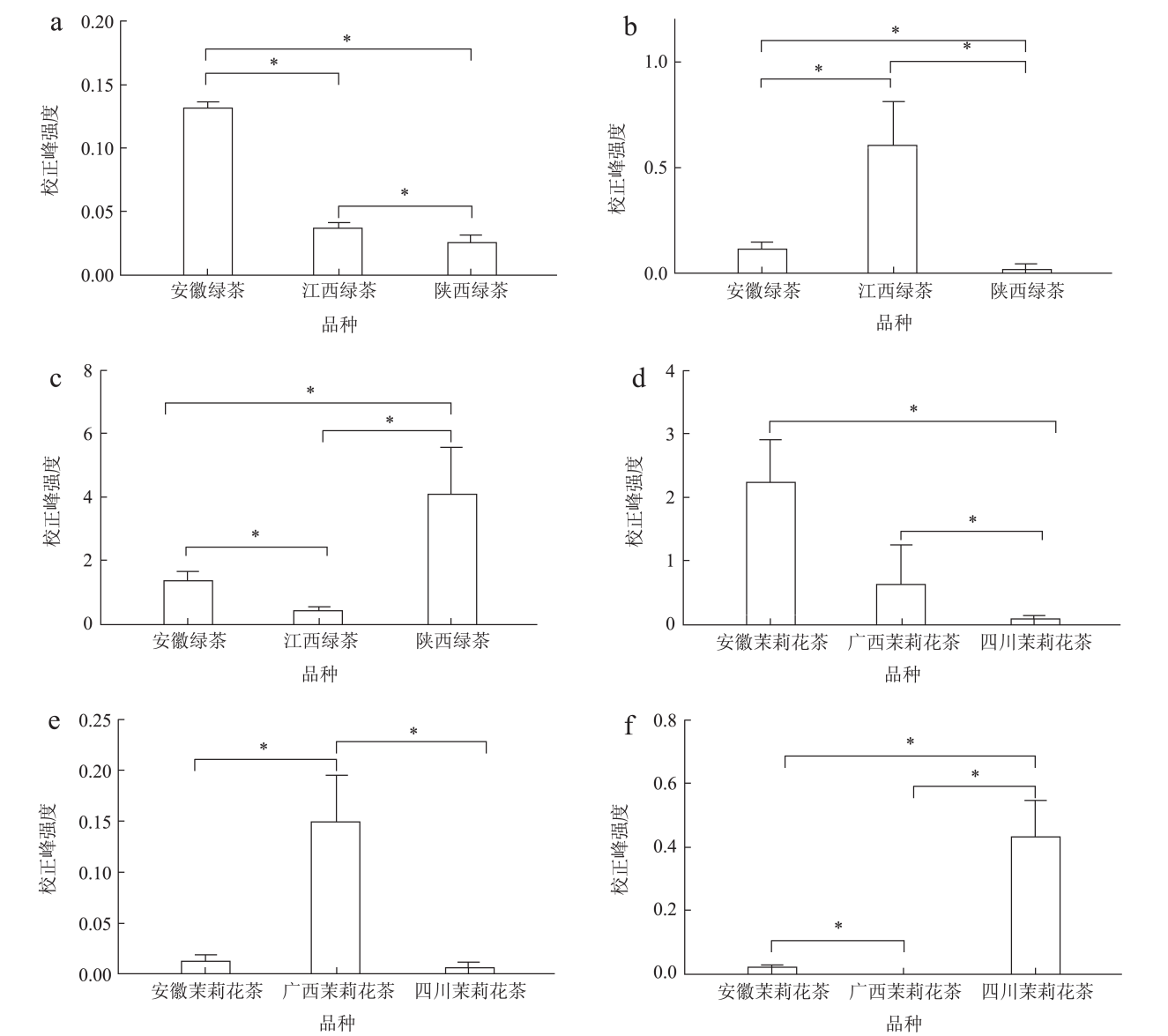


图 6 典型代谢物在不同产地绿茶和茉莉花茶中的变化趋势

Fig.6 The trends of typical metabolites in green tea and jasmine tea from different producing regions

注: (a) 12-氧代植物二烯酸、(b) 茉莉酮和 (c) 间苯三酚在不同产地绿茶中的变化趋势, (d) 苯乙酮 (e) 单二酰基甘油三甲基高丝氨酸 16:0 和 (f) 2-己烯醛在不同产地茉莉花茶中的变化趋势。

3 结论

本研究基于 UHPLC-MS 联用技术分析不同产地绿茶和茉莉花茶代谢差异, 整个分析过程稳定。通过代谢通路分析, 发现多酚黄酮和氨基酸等代谢过程显著改变, 且通过非参数检验和 PLS-DA 模型建立, 锁定 28 种差异代谢物, 并与总多酚黄酮指标建立联系, 其中最显著相关的物质是 γ -氨基丁酸和单酰基甘油磷脂酸胆碱 18:0, 这些差异物质与不同茶叶滋味形成具有一定联系。在对同种茶叶不同产地的代谢差异物进行分析中, 绿茶锁定 10 种差异代谢物, 茉莉花茶锁定 55 种差异代谢物, 选取了 12-氧代植物二烯酸、茉莉酮和间苯三酚作为不同产地的绿茶关键差异代谢物,

同时选取了 2-己烯醛、苯乙酮和单二酰基甘油三甲基高丝氨酸 16:0 作为不同产地茉莉花茶关键差异代谢物。综上所述, 本研究结果为揭示茶叶分子差异以及不同茶叶滋味形成机制的探究提供了一定理论基础。

参考文献

- [1] 尤秋爽,石亚丽,朱荫,等.加工工艺对绿茶关键呈香成分的影响[J].食品科学,2023,44(8):194-200.
- [2] 崔宏春,赵芸,黄海涛,等.茉莉花茶加工技术及风味品质研究进展[J].安徽农业科学,2024,52(1):17-20.
- [3] 叶秋萍,余雯,郑世仲,等.茉莉花茶窈制过程水分变化与香气品质变化的相关性分析[J].食品科学,2022,43(24):266-272.
- [4] 李玮轩,邵晨阳,严寒,等.绿茶及红茶中游离氨基酸对映异构体的分布特征及呈味特性研究[J].食品科学技术学报,2024,

- 42(5):51-67.
- [5] 狄英杰.茉莉花茶品质形成机理研究进展[J].茶叶科学技术, 2008,2:1-4.
- [6] SHEN J X, RANA M M, LIU G F, et al. Differential contribution of jasmine floral volatiles to the aroma of Scented green tea [J]. Journal of Food Quality, 2017, 5849501: 1-10.
- [7] CHEN Y, AN H, HUANG Y, et al. Analysis of non-volatile compounds in jasmine tea and jasmine based on metabolomics and sensory evaluation [J]. Foods, 2023, 12(19): 3708.
- [8] WANG J, LI Z. Effects of processing technology on tea quality analyzed using high-resolution mass spectrometry-based metabolomics [J]. Food Chemistry, 2024, 443: 138548.
- [9] CHEN Z, DAI W, XIONG M, et al. Metabolomics investigation of the chemical variations in white teas with different producing areas and storage durations [J]. Food Chemistry-X, 2024, 21: 101127.
- [10] 周闯,赵燕妮,周梦雪,等.基于代谢组学的‘铁观音’和‘水仙’品种茶叶化学成分解析[J].食品科学,2024,45(4):171-182.
- [11] 张晓磊,周汉琛,刘亚芹,等.基于代谢组学分析低温烘焙对白化品种绿茶风味品质的影响[J].食品工业科技,2024,45(17):352-362.
- [12] 陈丹,赵燕妮,彭佳堃,等.基于代谢组学的不同年份晒青红茶化学成分分析[J].食品科学,2022,43(4):150-159.
- [13] GB/T8313-2018,茶叶中茶多酚和儿茶素类含量的检测方法[S].国家市场监督管理总局;中国国家标准化管理委员会,2018.
- [14] 王丽丽,林清霞,宋振硕,等.分光光度法测定茶叶中总黄酮含量[J].茶叶学报,2021,62(1):1-6.
- [15] KIND T, LIU K H, LEE D Y, et al. Lipid blast in silico tandem mass spectrometry database for lipid identification [J]. Nature Methods, 2013, 10(8): 755-758.
- [16] HORAI H, ARITA M, KANAYA S, et al. Mass bank: a public repository for sharing mass spectral data for life sciences [J]. Journal of Mass Spectrometry, 2010, 45(7): 703-714.
- [17] WISHART D S, GUO A, OLER E, et al. HMDB 5.0: the human metabolome database for 2022 [J]. Nucleic Acids Research, 2022, 50(D1): D622-D631.
- [18] WANG H J, CAO X L, YUAN Z F, et al. Untargeted metabolomics coupled with chemometrics approach for Xinyang Maojian green tea with cultivar, elevation and processing variations [J]. Food Chemistry, 2021, 352: 129359.
- [19] YANG S, PATHAK S, TANG H, et al. Non-Targeted metabolomics reveals the effects of different rolling methods on black tea quality [J]. Foods, 2024, 13(2): 325.
- [20] ZHOU Z, CHEN M, WU Q, et al. Combined analysis of lipidomics and transcriptomics revealed the key pathways and genes of lipids in light-sensitive albino tea plant (*Camellia sinensis* cv. Baijiguan) [J]. Frontiers in Plant Science, 2022, 13: 1035119.
- [21] 田春风,郭宇帆,商佳琪,等.熊果酸的生物活性研究进展[J].中国食品卫生杂志,2022,34(6):1361-1365.
- [22] 潘虹余,郭丽琼,林俊芳.麦角硫因机体内的分布与代谢和其在疾病中的作用研究进展[J].食品科学,2019,40(23):334-340.
- [23] 郑雪花,杨君,杨跃辉.没食子酸药理作用的研究进展[J].中国医院药学杂志,2017,37(1):94-98,102.
- [24] OSIPOVA D, KOKOREVA K, LAZEBNIK L, et al. Regression of liver steatosis following phosphatidylcholine administration: a review of molecular and metabolic pathways involved [J]. Frontiers in Pharmacology, 2022, 13: 797923.
- [25] TAN W, ZHANG Q, DONG Z, et al. Phosphatidylcholine ameliorates LPS-induced systemic inflammation and cognitive impairments via mediating the gut-brain axis balance [J]. Journal of Agricultural and Food Chemistry, 2020, 68(50): 14884-14895.
- [26] LI Q, CHEN G, ZHU D, et al. Effects of dietary phosphatidylcholine and sphingomyelin on DSS-induced colitis by regulating metabolism and gut microbiota in mice [J]. Journal of Nutritional Biochemistry, 2022, 105: 109004.
- [27] 赵燕妮,陈丹,陈雪峰,等.基于脂质组学的不同原料茯茶“发花”前后脂类变化研究[J].陕西科技大学学报,2021,39(3):40-47.
- [28] 张仁堂,谷端银,黄守耀.茉莉花茶中茶多酚的提取分离纯化及其抗氧化性能研究[J].中国食物与营养,2010,4:47-51.
- [29] 张雅雯,邵东燕,师俊玲,等.山奈酚生物功能研究进展[J].生命科学,2017,29(4):400-405.
- [30] 马纳,李亚静,范吉平.槲皮素药理作用研究进展[J].辽宁中医药大学学报,2018,20(8):221-224.
- [31] 陈然,孟庆佳,刘海新,等.不同种类茶叶游离氨基酸组分差异分析[J].食品科技,2017,42(6):258-263.
- [32] 曹运琳,邢梦云,徐昌杰,等.植物黄酮醇生物合成及其调控研究进展[J].园艺学报,2018,45(1):177-192.
- [33] CHEN J, ZHOU L N, ZHANG X Y, et al. Urinary hydrophilic and hydrophobic metabolic profiling based on liquid chromatography-mass spectrometry methods: differential metabolite discovery specific to ovarian cancer [J]. Electrophoresis, 2012, 33(22): 3361-3369.
- [34] 余菲,赵晓燕,周昌艳,等.不同品种生菜的多酚、黄酮差异比较与抗氧化活性[J].食品科学,2024,45(13):17-25.
- [35] 沈强,罗金龙,张小琴,等.茶叶中 γ -氨基丁酸的形成机理及应用研究进展[J].贵茶,2023,1:11-16.
- [36] 李肖玲,崔岚,祝德秋.没食子酸生物学作用的研究进展[J].中国药师,2004,7(10):767-769.
- [37] 黄藩,罗凡,胥亚琼,等.四川绿茶滋味品质分析及风味轮构建[J].西南农业学报,2023,36(5):943-951.
- [38] 尤海琳,姜璐,刘锴锴,等.海洋磷脂氧化及其对食品风味的影响[J].食品与发酵工业,2019,45(11):268-273.