

靖安白茶的风味特征及其关键物质表征

杨玉子¹, 安会敏¹, 陈圆¹, 应佳淇¹, 江游仓¹, 刘佳顺¹, 牛丽^{1,2}, 陈金华^{1,2}, 刘仲华^{1,2*}, 黄建安^{1,2*}

(1. 湖南农业大学教育部茶学重点实验室, 国家植物功能成分利用工程技术研究中心, 湖南长沙 410128)

(2. 湖南省植物功能成分利用省部共建协同创新中心, 农业农村部园艺作物基因资源评价
利用重点实验室, 湖南长沙 410128)

摘要:靖安白茶是由靖安县内繁育的珍稀白化茶树品种经摊青、杀青、做形和烘干加工而成的绿茶, 因其“清、嫩、鲜、醇”的风味备受消费者青睐。为明确靖安白茶品质风味特征, 该研究采用感官审评、全二维气相色谱-四极杆飞行时间质谱(GC×GC-Q-TOF-MS)、液相色谱-质谱联用(LC-MS)等技术分析靖安白茶香气和滋味。结果表明: 靖安白茶中被鉴定出的挥发性成分有439种, 其中, 2-乙基呋喃、芳樟醇、壬醛、顺-3-己烯基丁酯等17种化合物可能对靖安白茶呈现嫩香与清香特征具有重要贡献; 靖安白茶样品中定性出的非挥发性成分约219种, 其中, L-正亮氨酸、乙炔基苯、DL-精氨酸、L-茶氨酸、烟草胺、2-糠酸、磷化物a、腺苷、伊莫拉明、异槲皮素、胆碱、金丝桃苷、杨梅素-3-半乳糖苷、芸香苷共14种化合物被认定为靖安白茶鲜醇滋味的关键成分。这些关键物质对靖安白茶“嫩香、鲜醇”的品质形成起着重要的作用。

关键词:靖安白茶; 香气成分; 滋味成分; 风味特征; 品质

文章编号: 1673-9078(2025)11-269-290

DOI: 10.13982/j.mfst.1673-9078.2025.11.1241

Flavor Characteristics and Key Substance Characterization of Jing'an Baicha

YANG Yuzi¹, AN Huimin¹, CHEN Yuan¹, YING Jiaqi¹, JIANG Youcang¹, LIU Jiashun¹,

NIU Li^{1,2}, CHEN Jinhua^{1,2}, LIU Zhonghua^{1,2*}, HUANG Jian'an^{1,2*}

(1.Key Laboratory of Tea Science, Ministry of Education, National Research Center of Engineering Technology for Utilization Ingredients From Botanicai, Hunan Agricultural University, Changsha 410128, China)(2.Co-Innovation Center of Education Ministry for Utilization of Botanical Functional Ingredients, Key Laboratory for Evaluation and Utilization of Gene Resources of Horticultural Crops, Ministry of Agriculture and Rural Affairs, Hunan Agricultural University, Changsha 410128, China)

Abstract: Jing'an Baicha is a green tea produced from a rare albino tea cultivar bred in Jing'an County and processed through withering, fixation, shaping and drying. It is highly favored by consumers for its distinct flavor characterized by freshness, tenderness, briskness, and mellowness. To clarify the quality and flavor characteristics of Jing'an Baicha, sensory evaluation, comprehensive two-dimensional gas chromatography-quadrupole time-of-flight mass spectrometry (GC×GC-Q-TOF-MS), and liquid chromatography-mass spectrometry (LC-MS) were used to analyze its aroma and flavor components. The results indicated that 439

引文格式:

杨玉子,安会敏,陈圆,等.靖安白茶的风味特征及其关键物质表征[J].现代食品科技,2025,41(11):269-290.

YANG Yuzi, AN Huimin, CHEN Yuan, et al. Flavor characteristics and key substance characterization of Jing'an Baicha [J]. Modern Food Science and Technology, 2025, 41(11): 269-290.

收稿日期: 2024-08-21; 修回日期: 2024-10-12; 接受日期: 2024-10-18

基金项目: 国家茶叶产业技术体系岗位科学家(CARS-19); 靖安白茶的品质化学研究(xczx-2024063)

作者简介: 杨玉子(1998-), 女, 硕士, 研究方向: 茶叶加工与品质化学, E-mail: 2215509106@qq.com

通讯作者: 刘仲华(1965-), 男, 博士, 教授, 中国工程院院士, 研究方向: 茶叶加工理论与技术、茶叶深加工与功能成分利用、茶与健康, E-mail: larkin-liu@163.com; 共同通讯作者: 黄建安(1964-), 女, 博士, 教授, 研究方向: 茶叶加工与品质化学, E-mail: jian7513@sina.com

volatile components were identified in Jing'an Baicha samples, among which 17 compounds, such as 2-ethylfuran, linalool, nonanal, cis-3-hexenyl butyrate, might contribute to the tenderness and freshness of Jing'an Baicha. In addition, 219 non-volatile compounds were identified in the samples. Among them, 14 compounds, including L-norleucine, ethynylbenzene, DL-arginine, L-theanine, nicotinamide, 2-furoic acid, phosphate a, adenosine, imipramine, isoquercitrin, choline, hyperoside, myricetin-3-galactoside, and rutin, were considered key components that contributed to the freshness and mellowness of Jing'an Baicha. These key components play important roles in the quality of Jing'an Baicha, characterized by its tenderness, briskness, and mellowness.

Key words: Jing'an Baicha; aroma composition; flavor composition; flavor characteristics; quality

靖安白茶，产自江西省靖安县，采摘自地理标志产品保护范围内符合要求的由于叶绿素缺失导致的基因突变的白化茶树品种的新梢（靖安县内发展并繁育的珍稀白化茶树品种）（DB 36T712-2018《地理标志产品 靖安白茶》）^[1-4]，经摊青、杀青、做形和烘干工序加工而成。

挥发性成分是构成靖安白茶特征香气的物质基础。迄今为止，研究者们从茶叶中鉴定出的香气物质已达 1 200 余种，其中，只有少量香气物质对呈香起到重要作用，它们被认为是茶叶的关键香气成分^[5]。邓静等^[3]研究发现靖安白茶香气成分主要为醇类和烯炔类，其中薄荷醇含量远高于其他组分；陈熠敏等^[6]通过比较靖安白茶与安吉白茶的特征香气成分发现，两者在香气成分的组成上较为类似，均是由醇类、酮类、酯类、醛类、碳氢化合物类组成。目前，对于靖安白茶挥发性成分的研究仅停留在香气成分组成上，而对其关键香气成分鲜有报道。

非挥发性成分是影响靖安白茶滋味呈现的重要物质。茶叶中茶多酚类、生物碱类、氨基酸类、可溶性糖类、有机酸类等^[7-9]滋味物质的含量和比例决定茶汤滋味。Kaneko 等^[7]的研究表明氨基酸是绿茶茶汤鲜味来源的主要成分。金孝芳等^[10]和程启坤等^[11,12]认为茶多酚在水浸出物中所占比重较大，是决定茶汤浓度的主要成分之一。酚氨比是茶多酚与氨基酸的比值，一般认为在二者含量高且比值低的情况下茶汤滋味味感浓而鲜爽。Scharbert 等^[13]和黄媛等^[14]研究发现黄酮类化合物是茶叶中的主要酚类成分，占茶叶干重的 2%~3%，具有良好的抗氧化活性，同时也是茶叶苦涩味的重要成分。Troszynska 等^[15]研究认为糖类化合物是茶汤甜味的关键物质。目前，靖安白茶的研究主要集中在挥发性成分方面，关于其非挥发性成分组成及关键呈味成分仍缺乏系统研究。

近年来，关于靖安白茶的研究主要包括绿色防控^[16]、白化分子机制解析^[17]、气候品质^[18]、栽培特性^[19]、代谢通路^[20]、加工技术^[21]、成分分析^[22]、保健功能^[23]、组学研究^[24]等方面，对品质风味特征的研究

较少，DB36T712-2018《地理标志产品 靖安白茶》报道，“嫩香、鲜醇”是靖安白茶最为常见的品质特征之一，而全二维气相色谱-四极杆飞行时间质谱（GC×GC-Q-TOF-MS）、液相色谱-质谱联用（LC-MS）技术在茶叶品质的分析和鉴定上具有强大的优势^[25,26]。因此，本研究 18 个不同等级的靖安白茶为研究对象，分析靖安白茶香气和滋味成分，并采用描述性统计分析、主成分分析、聚类分析等分析方法研究靖安白茶风味品质特征，为靖安白茶的品质研究提供理论支撑。

1 材料与方法

1.1 材料

本研究所用特级靖安白茶（A1、B1、C1、D1、E1、F1）、一级靖安白茶（A2、B2、C2、D2、E2、F2）、二级靖安白茶（A3、B3、C3、D3、E3、F3）由靖安县人民政府提供。特级以一芽一叶鲜叶原料制成；一级以一芽一叶至一芽二叶鲜叶原料制成；二级以一芽二叶鲜叶原料制成。

1.2 试剂与仪器

1.2.1 试剂

癸酸乙酯，美国 Sigma-Aldrich 公司；C5~C25 正构烷烃标准品，美国 Organic Standards Solutions International 公司；乙醇（色谱纯），国药集团化学试剂有限公司。

1.2.2 仪器

MS204TS/00 型电子分析天平，美国 Mettler Toledo 公司；8890 气相色谱仪、7250 四极杆-飞行时间质谱联用仪，美国 Agilent 公司；SSM1800 调制器，雪景电子科技（上海）有限公司；瑞士 CTC 全自动多功能在线前处理进样平台，广州智达实验室科技有限公司；固相微萃取头（50/30 μm DVB/CAR/PDMS），美国 Supelco 公司；GC×GC-TOFMS，美国 Agilent 公司；Hypersil Gold C18（2.1 mm×100 mm，1.9 μm ）色谱柱，

赛默飞世尔科技公司；UPLC-Orbitrap/MS，赛默飞世尔科技公司。

1.3 方法

1.3.1 感官审评

由 7 位高级评茶员根据茶叶感官审评方法《GB/T 23776-2018》对靖安白茶进行品质评价。称取有代表性的靖安白茶样品 3.0 g，置于柱形评茶杯，注满 150 mL 沸水、加盖、计时，冲泡 4 min 后，滤出茶汤，留叶底于杯中，对样品的外形、汤色、香气、滋味和叶底 5 项因子进行审评和术语描述。其中，汤色审评要求审评茶汤颜色类型与色度、明暗度和清浊度。香气审评其类型、浓度、纯度、持久性。滋味审评其浓淡、厚薄、醇涩等。叶底审评其嫩度、色泽、匀整度等。

茶样感官审评结果按照茶叶感官审评术语《GB/T 14487-2017》使用统一的感官分析术语和描述词进行表述。

1.3.2 挥发性成分的检测

1.3.2.1 挥发性成分全自动顶空固相微萃取方法

称取靖安白茶样品磨碎茶样 1.0 g，放入 20 mL 顶空瓶中。设定全自动顶空萃取条件：样品分析萃取前老化温度为 250 ℃，老化时间为 15 min，孵化温度为 60 ℃，孵化时间为 15 min，振摇速度为 450 r/min，萃取温度为 60 ℃，萃取时间为 30 min，解析时间为 480 s，解析温度为 250 ℃。

1.3.2.2 全二维气相色谱-四极杆-飞行时间质谱(GC×GC-Q-TOF-MS)分析技术

GC 条件：第 1 根色谱柱为 HP-5 MS (30 m×0.25 mm×0.25 μm)；第 2 根色谱柱为 DB-17MS (2.89 m×0.18 mm×0.18 μm)；调制柱为 C5~C30 的 HV 系列。升温程序：初温 40 ℃保持 0 min，以 4 ℃/min 升到 180 ℃，保持 0 min，以 20 ℃/min 升至 250 ℃，保持 1 min；调制器：进口热区温度为初温 70 ℃，保持 1 min；再以 4 ℃/min 升到 210 ℃，保持 0 min；再以 20 ℃/min 升到 280 ℃，保持 40.5 min；出口热区为初温 160 ℃，保持 1 min；再以 4 ℃/min 升至 300 ℃，保持 0 min；再以 20 ℃/min 升到 320 ℃，保持 3.5 min；冷区温度为 -50 ℃；调制周期为 4 s。载气 (He, 99.999%) 流量 3.0 mL/min，分流比 10:1。

MS 条件：电子电离源；电子能量 70 eV；传输线温度 280 ℃；离子源温度 200 ℃；质量扫描范围 m/z 45~450。

1.3.2.3 挥发性成分定性定量分析

定性方法：使用 Canvas Panel 全二维数据处理工

作站软件导入数据，依据文献中的方法^[27]和 C5~C25 正构烷烃混合物的定位时间，对色谱峰的保留指数进行计算，结合 NIST 20 质谱库中的“mainlib”、“replib”和“nist_ri”数据库进行查询，筛选出正向匹配度超过 700、反向匹配度超过 800，以及保留指数误差在 ±30 范围内的化合物。

定量方法：通过内标法^[28]对各个香气成分的含量进行定量，即：

$$Ci = \frac{Cis \times Ai}{Ais} \quad (1)$$

式中：

Ci ——目标组分的质量浓度，μg/g；

Cis ——内标的质量浓度，μg/g；

Ai ——目标组分的色谱峰面积；

Ais ——内标的色谱峰面积。

1.3.3 非挥发性成分的检测

1.3.3.1 非挥发性化合物提取

将 0.5 g 靖安白茶磨碎样加入含有 25 mL 浓度为 70% 的甲醇溶液的锥形烧瓶中，将样品在室温下超声 30 min（每 10 min 摇动一次）。将上清液倒入离心管中，在转速为 12 000 g，温度为 10 ℃的条件下离心 10 min。然后经 0.22 μm 尼龙膜过滤过滤，移至液相瓶中进一步检测。

1.3.3.2 液相色谱-质谱联用 (LC-MS) 技术

液相色谱条件为：流动相 A 为 0.1% 水甲酸，流动相 B 为 0.1% 乙腈甲酸；B 相洗脱梯度为 0.0~1.6 min，0%~5%；1.6~18.0 min，5%~18%；18.0~38.4 min，18%~95%；38.4~42 min，0%；柱温度为 35 ℃，注入体积为 2 μL。质谱条件为：离子源类型：H-ESI；喷雾电压：正离子 (V)=3 500，负离子 (V)=2 500；离子传递管温度：325 ℃；喷雾温度：300 ℃；鞘气 (Arb)=3.5 MPa；辅助气体=1 MPa；吹扫气体=0.1 MPa；轨道分辨率：120 000；扫描范围 (m/z): 100~1 500；扫描周期 (s)=3。

1.3.3.3 非挥发性成分定性定量分析

定性定量方法^[29]：使用 Compound Discoverer 软件对原始数据进行分析。根据保留时间、质量电荷比、分子量和加合离子等信息来预测分子公式。然后将该预测公式与 mz 云数据库的信息进行比较，包括每个化合物的碎片离子和碰撞能量。选择样品中 CV 值低于 30% 的化合物作为最终定性结果。整合样品中检测到的色谱峰，每个特征峰的峰面积代表化合物的相对定量值。用总峰面积对定量结果进行归一化处理，最终得到代谢物的定量结果。

1.4 数据处理

本研究采用 Microsoft Excel 2019、IBM SPSS Statistics 26.0、Simca-p 14.1 软件进行统计分析并用 Graphpad Prism 7、Origin 2022 软件进行绘图。

2 结果与分析

2.1 靖安白茶感官品质分析

靖安白茶感官审评结果见表 1，靖安白茶整体品质特征为：凤羽形，芽心壮实，匀整，色泽翠绿泛玉色；汤色嫩绿明亮；香气鲜嫩；滋味鲜醇甘爽；叶底嫩匀。不同等级的靖安白茶因鲜叶采摘标准存在感官品质差异，二级靖安白茶香气特征为清香，滋味较醇爽，一级靖安白茶香气特征为嫩香，滋味较二级靖安白茶更为醇爽，特级靖安白茶香气较其他两级更为鲜嫩，滋味更为甘爽。由此可见，靖安白茶等级越高，品质越优。

2.2 靖安白茶香气物质表征

2.2.1 靖安白茶香气物质种类分析

香气是决定茶叶品质的重要因子之一，在茶叶质

量、等级划分、消费导向等方面占有重要地位^[30]。清香是绿茶香气中的一种典型特征，它对于评价绿茶香气品质起着关键作用^[5]。靖安白茶香气呈现嫩香、清香，醇类、醛类、酯类、酮类等香气成分构成了靖安白茶的香气特征。由图 1 可知，靖安白茶中香气种类丰富，400 余种挥发性成分被定性（表 2），包括醇类化合物（45 种）、酯类化合物（55 种）、酮类化合物（32 种）、醛类化合物（29 种）、烃类化合物（255 种）、杂环类化合物（18 种）以及其他类化合物（5 种）。

2.2.2 靖安白茶关键香气成分鉴定

靖安白茶香气种类丰富，各类香气化合物含量存在差异（图 2）。烃类化合物和酯类化合物是靖安白茶香气中含量最丰富的挥发性成分^[22]。而其他类化合物、醛类化合物和酮类化合物在靖安白茶香气中的含量较低。杂环化合物在部分样品中含量较高，主要是 2- 乙基呋喃和 2- 戊基呋喃含量的增加。石亚丽等^[31]研究表明安吉白茶中含量最高的种类为醇类，然后依次为酯类、酸类、酮类、醛类。与本文结果不一致，猜测可能与茶叶品种、加工技术等相关。

表 1 靖安白茶感官审评结果
Table 1 Sensory evaluation results of Jing'an Baicha

等级	外形	内质			
		汤色	香气	滋味	叶底
特级	凤羽形，芽心壮实，匀整，净，色翠绿泛玉色	嫩绿，清澈透亮	鲜嫩	鲜醇甘爽	细嫩，匀整，叶白脉翠
一级	凤羽形，芽心较壮实，较匀整，较净，色翠绿显玉色	嫩绿明亮	嫩香	醇爽尚鲜	嫩，较匀整，叶白脉翠
二级	凤羽形，芽心尚壮实，尚匀整，尚净，色翠绿带玉色	黄绿亮	清香	较醇爽	尚嫩，尚匀整，叶尚白脉翠

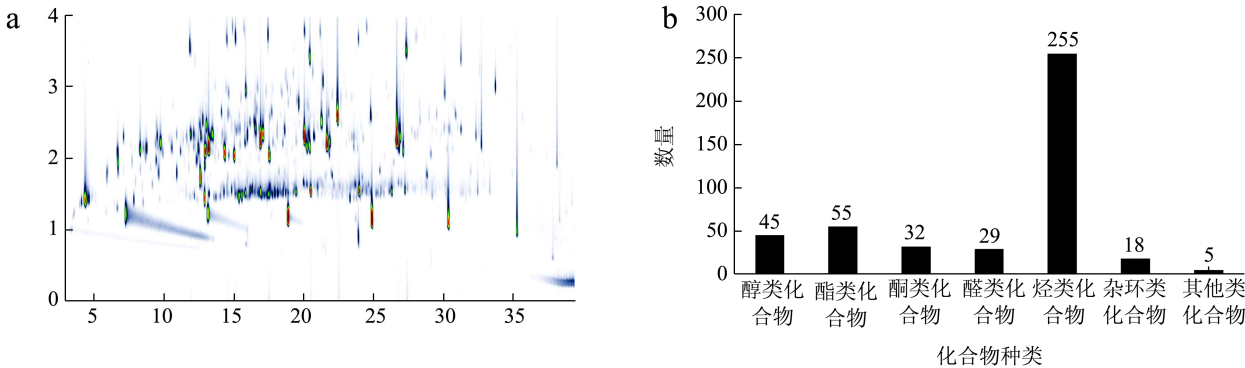


图 1 靖安白茶香气种类

Fig.1 Aroma types of Jing'an Baicha

注：a 为香气成分全二维图谱；b 为香气物质种类分析。

表 2 靖安白茶挥发性成分及含量
Table 2 Contents of volatile components in Jing'an Baicha

保留时间/min	化学式	挥发性化合物	相对含量/(μg/g)				
			A1	B1	C1	D1	E1
8.317	C ₆ H ₁₂ O	(Z)-3-己烯-1-醇	10.49 ± 0.42	3.95 ± 0.15	3.89 ± 0.15	9.26 ± 0.34	4.15 ± 0.16
8.650	C ₆ H ₁₂ O	(Z)-2-己烯-1-醇	—	—	0.61 ± 0.03	3.27 ± 0.07	—
9.183	C ₇ H ₁₄ O	庚烯-3-醇	0.82 ± 0.09	0.25 ± 0.01	0.55 ± 0.08	0.43 ± 0.01	0.23 ± 0.01
12.117	C ₇ H ₁₆ O	1-庚醇	1.2 ± 0.1	0.52 ± 0.07	0.76 ± 0.04	0.8 ± 0.09	0.11 ± 0.03
12.317	C ₇ H ₁₄ O	(E)-2-庚烯-1-醇	—	0.92 ± 0.02	1.18 ± 0.15	2.34 ± 0.28	1.48 ± 0.09
12.450	C ₈ H ₁₆ O	1-辛烯-3-醇	6.63 ± 0.02	7.22 ± 0.26	6.87 ± 0.12	9.49 ± 0.54	7.9 ± 0.2
12.584	C ₁₀ H ₁₂ O ₂	2,3-二氢-3-甲基-3-苯并呋喃甲醇	22.96 ± 2.28	0.41 ± 0.03	0.69 ± 0.05	16.21 ± 0.92	—
14.517	C ₇ H ₈ O	苯甲醇	3.42 ± 0.02	1.36 ± 0.03	1.22 ± 0.16	2.64 ± 0.07	1.57 ± 0.22
15.784	C ₈ H ₁₈ O	1-辛醇	2.83 ± 0.02	2.8 ± 0.04	2.84 ± 0.76	4.93 ± 0.13	1.54 ± 0.06
15.850	C ₈ H ₁₄ O	2,7-辛二烯-1-醇	—	0.46 ± 0.05	0.38 ± 0.02	0.74 ± 0.02	0.54 ± 0.01
15.984	C ₁₀ H ₁₈ O ₂	Cis-5-乙烯基四氢-α,α,5-三甲基-2-呋喃甲醇	5.3 ± 0.14	2.87 ± 0.05	2.76 ± 0.03	6.19 ± 0.19	5.63 ± 0.28
16.917	C ₁₀ H ₁₈ O	芳樟醇	84.98 ± 0.5	46.74 ± 2.48	49.36 ± 1.49	76.16 ± 2.51	57.31 ± 0.77
17.317	C ₈ H ₁₆ O	2,6-二甲基环己醇	0.68 ± 0.03	0.87 ± 0.02	0.54 ± 0.03	1.31 ± 0.03	0.18 ± 0.01
17.450	C ₈ H ₁₀ O	苯乙醇	5.57 ± 0.29	1.75 ± 0.02	2.72 ± 0.09	4.11 ± 0.18	2.3 ± 0.02
17.650	C ₁₀ H ₁₆ O	反式-1-甲基-4-(1-甲基乙烯基)-2-环己烯-1-醇	—	—	—	0.57 ± 0.02	—
19.450	C ₉ H ₂₀ O	1-壬醇	—	—	—	1.12 ± 0.03	0.67 ± 0.18
19.717	C ₁₀ H ₂₀ O	左旋薄荷醇	0.15 ± 0.02	—	—	0.33 ± 0.05	0.12 ± 0.02
醇类化合物19.850	C ₁₀ H ₁₈ O	(R)-4-甲基-1-(1-甲基乙基)-3-环己烯-1-醇	—	0.11 ± 0.01	—	0.26 ± 0.04	0.14 ± 0.02
20.317	C ₁₀ H ₁₈ O	α-松油醇	1.37 ± 0.46	0.64 ± 0.03	0.53 ± 0.06	1.07 ± 0.1	0.57 ± 0.02
21.517	C ₁₀ H ₁₈ O	(Z)-2,6-辛二烯-1-醇, 3,7-二甲基	0.47 ± 0.15	0.1 ± 0	—	0.53 ± 0.05	—
22.050	C ₁₀ H ₁₈ O ₂	2,6,6-三甲基双环(3.1.1)庚烷-2,3-二醇	—	0.41 ± 0.04	0.55 ± 0.02	0.83 ± 0.02	0.52 ± 0
22.450	C ₁₀ H ₁₈ O	香叶醇	66.66 ± 2.62	29.94 ± 0.93	40.8 ± 0.7	62.19 ± 2.35	41.62 ± 0.57
22.450	C ₁₀ H ₁₈ O	6,6-二甲基-双环[3.1.1]庚烷-2-甲醇	—	—	—	0.15 ± 0.05	0.12 ± 0.01
22.450	C ₁₀ H ₁₈ O	6,6-二甲基, [1S-(1α,2α,5α)]-双环[3.1.1]庚烷-2-甲醇	0.15 ± 0.02	—	—	0.19 ± 0.01	—
26.184	C ₁₀ H ₂₀ O ₄	2-(2-丁氧基乙氧基)-乙醇乙酸酯	0.31 ± 0.01	1.53 ± 0.02	—	0.29 ± 0.01	0.29 ± 0
32.317	C ₁₅ H ₂₆ O	(E)-3,7,11-三甲基-1,6,10-十二碳三醇	2.46 ± 0.03	7.5 ± 0.35	6.89 ± 0.45	9.23 ± 0.59	8.04 ± 0.31
32.517	C ₁₂ H ₂₄ O	环十二醇	—	—	—	0.98 ± 0.06	0.32 ± 0.05
18.250	C ₁₀ H ₁₇ ClF ₂ O ₂	蛇麻烯-1,6-二烯-3-醇	0.18 ± 0.03	0.08 ± 0.01	2.59 ± 0.34	0.28 ± 0.01	0.18 ± 0
34.717	C ₁₅ H ₂₆ O	α-毕橙茄醇	—	—	—	0.41 ± 0.04	0.1 ± 0
10.783	C ₇ H ₁₆ O	5-甲基-1-己醇	—	—	—	—	0.26 ± 0.02
15.717	C ₈ H ₁₆ O	(Z)-2-辛烯-1-醇	—	—	—	—	0.41 ± 0.04
22.250	C ₁₂ H ₁₇ F ₃ O ₂	三氟乙酰熏衣草醇	—	—	—	—	0.14 ± 0.02
23.250	C ₁₀ H ₁₈ O ₂	2,6-二甲基-1,7-辛二烯-3,6-二醇	—	—	—	—	0.4 ± 0.03
14.517	C ₁₀ H ₁₈ O	桉树脑	0.86 ± 0.23	0.32 ± 0.03	0.69 ± 0.07	—	—
17.984	C ₁₀ H ₁₈ O	(1S,3S,4S,5R)-1-异丙基-4-甲基二环[3.1.0]己烷-3-醇	0.29 ± 0.03	0.22 ± 0	3.16 ± 0.06	—	—
18.117	C ₁₀ H ₂₀ O	顺式-1-甲基-4-(1-甲基乙基)-环己醇	1.35 ± 0.22	1.33 ± 0.11	3.29 ± 0.12	—	—
14.317	C ₈ H ₁₈ O	2-乙基-1-己醇	—	0.05 ± 0.01	—	—	—

续表2

	保留时间/min	化学式	挥发性化合物	相对含量/(μg/g)				
				A1	B1	C1	D1	E1
醇类化合物	22.717	C ₁₀ H ₁₈ O	(-)-顺式没食子醇	0.29 ± 0.11	0.31 ± 0.01	—	—	—
	24.183	C ₁₁ H ₂₄ O	2-十一醇	2.25 ± 0.16	0.89 ± 0.17	—	—	—
	26.584	C ₁₂ H ₂₀ O ₂	6,6-二甲基双环 [3.1.1] 庚烷-2-甲醇 乙酸酯	0.23 ± 0.04	0.1 ± 0.01	—	—	—
	27.050	C ₉ H ₂₀ O ₂	1,9-壬二醇	—	0.07 ± 0	—	—	—
	34.717	C ₁₅ H ₂₆ O	7-表-A-桉叶醇	—	0.08 ± 0.01	—	—	—
	8.650	C ₆ H ₁₄ O	1-己醇	1.24 ± 0.4	—	—	—	—
	9.583	C ₅ H ₁₂ O ₂	新戊二醇	1.25 ± 0.22	—	—	—	—
	27.984	C ₁₂ H ₂₆ O	2-甲基-1-十一烷醇	0.76 ± 0.11	—	—	—	—
	6.783	C ₆ H ₁₂ O ₂	丁酸乙酯	—	—	—	0.27 ± 0.19	—
	7.450	C ₆ H ₁₂ O ₂	甲酸戊酯	0.15 ± 0.01	0.12 ± 0	—	0.14 ± 0	—
酯类化合物	10.583	C ₇ H ₁₄ O ₂	己酸甲酯	3.04 ± 0.18	1.27 ± 0.1	1.19 ± 0.01	2.14 ± 0.27	0.55 ± 0.05
	13.184	C ₈ H ₁₆ O ₂	己酸乙酯	2.73 ± 0.25	37.38 ± 1.24	54.71 ± 0.58	108.39 ± 3.16	61.16 ± 0.84
	13.450	C ₈ H ₁₄ O ₂	3-己烯酸乙酯	11.52 ± 0.39	6.89 ± 0.51	6.12 ± 0.14	16.49 ± 1.14	8.1 ± 0.3
	13.717	C ₈ H ₁₆ O ₂	乙酸己酯	0.35 ± 0.05	0.23 ± 0	0.76 ± 0.09	0.36 ± 0.02	0.2 ± 0.02
	13.850	C ₈ H ₁₄ O ₂	(E)-2-己烯-1-醇乙酸酯	0.25 ± 0.03	0.45 ± 0.01	—	0.64 ± 0.08	0.38 ± 0.02
	14.117	C ₈ H ₁₆ O ₂	庚酸甲酯	0.48 ± 0.05	—	—	0.28 ± 0.01	—
	16.850	C ₉ H ₁₈ O ₂	庚酸乙酯	—	—	1.37 ± 0.11	0.69 ± 0.03	0.41 ± 0.03
	17.784	C ₉ H ₁₈ O ₂	辛酸甲酯	1.18 ± 0.02	0.53 ± 0.04	2.95 ± 0.13	0.81 ± 0.06	0.24 ± 0.02
	18.250	C ₁₀ H ₁₈ O ₂	3-甲基丁-2-烯-1-基新戊酸酯	0.21 ± 0.02	—	—	0.38 ± 0.04	—
	18.517	C ₁₀ H ₁₈ O ₂	顺式-3-己烯基异丁酸酯	1.25 ± 0.04	0.5 ± 0.11	—	1.42 ± 0.03	0.96 ± 0.06
	20.050	C ₁₀ H ₁₈ O ₂	(Z)-3-己烯酯丁酸	60.79 ± 1.53	33.52 ± 0.71	21.94 ± 0.59	63.03 ± 1.41	32.57 ± 0.22
	20.250	C ₁₀ H ₂₀ O ₂	丁酸己酯	11.37 ± 0.61	4.5 ± 0.2	31.74 ± 0.33	6.12 ± 0.13	5.12 ± 0.13
	20.383	C ₁₀ H ₁₈ O ₂	(E)-2-己烯酯丁酸	4.25 ± 0.36	4.4 ± 0.08	1.11 ± 0.04	10.18 ± 0.32	4.57 ± 0.07
	20.450	C ₁₀ H ₂₀ O ₂	辛酸乙酯	13.51 ± 0.49	5.84 ± 0.08	29.55 ± 0.43	7.95 ± 0.3	8.23 ± 0.39
	20.450	C ₈ H ₈ O ₃	水杨酸甲酯	12.79 ± 0.34	3.95 ± 0.08	5.16 ± 0.18	12.66 ± 0.32	7.41 ± 0.26
	21.250	C ₂₁ H ₃₈ O ₆	2-乙基, 1,2,3-丙三酯丁酸	14.58 ± 1.22	14.51 ± 0.37	16.32 ± 0.6	27.83 ± 0.8	12.08 ± 0.13
	21.383	C ₁₀ H ₂₀ O ₂	壬酸甲酯	0.3 ± 0.06	0.21 ± 0.02	7.57 ± 0.13	0.67 ± 0.02	0.16 ± 0.02
	21.650	C ₁₁ H ₂₀ O ₂	顺式-3-己烯基-α-丁酸甲酯	57.89 ± 1.83	19.82 ± 1.21	13.49 ± 0.14	50.44 ± 1.13	29.44 ± 0.21
	21.850	C ₁₁ H ₂₂ O ₂	2-甲基己酯丁酸	1.46 ± 0.2	0.67 ± 0.14	—	2.56 ± 0.1	1.04 ± 0.07
	21.783	C ₁₁ H ₂₀ O ₂	顺-3-己烯基异戊酸酯	9.63 ± 1.33	6.04 ± 0.43	—	11.64 ± 0.58	8.27 ± 0.4
	23.583	C ₁₁ H ₂₂ O ₂	己酸戊酯	0.84 ± 0.2	0.96 ± 0.46	—	5.45 ± 0.14	1.04 ± 0.01
	23.650	C ₁₂ H ₂₀ O ₂	(+)-冰片乙酸酯	—	—	2.08 ± 0.02	0.78 ± 0.2	0.08 ± 0
	23.517	C ₁₁ H ₂₂ O ₂	壬酸乙酯	15.68 ± 0.81	0.44 ± 0.17	—	0.88 ± 0.08	0.22 ± 0.02
	24.783	C ₁₁ H ₁₈ O ₂	反式香叶酸甲酯	5.33 ± 0.15	2.74 ± 0.14	6.89 ± 0.43	8.35 ± 0.29	4.31 ± 0.22
	24.784	C ₁₁ H ₂₂ O ₂	癸酸甲酯	—	—	—	0.22 ± 0.02	—
	18.250	C ₁₀ H ₁₇ ClF ₂ O ₂	(E)-2-己烯惕各酸酯	0.18 ± 0.03	0.08 ± 0.01	2.59 ± 0.34	0.28 ± 0.01	0.18 ± 0
	25.717	C ₁₂ H ₂₀ O ₂	α-松油醇乙酸酯	0.11 ± 0	—	1.6 ± 0.05	0.3 ± 0.01	—
	26.517	C ₁₁ H ₁₄ O ₂	苯甲酸丁酯	0.14 ± 0.02	0.1 ± 0	—	0.1 ± 0.01	0.07 ± 0.01
	26.650	C ₁₂ H ₂₂ O ₂	(Z)-己酸 3-己烯酯	130.39 ± 5.09	70.22 ± 0.97	45 ± 0.48	129.77 ± 4.13	67.01 ± 0.06
	26.850	C ₁₂ H ₂₄ O ₂	己酸己酯	5.06 ± 0.02	2.65 ± 0.03	—	10 ± 0.34	5.41 ± 0.13
	26.850	C ₁₂ H ₂₀ O ₂	顺-3-己烯酸顺-3-己烯酯	4.78 ± 0.42	—	1.52 ± 0.19	5.62 ± 0.17	1.97 ± 0.16
	26.917	C ₁₂ H ₂₂ O ₂	(E)-己酸-2-己烯酯	8.66 ± 0.19	9.31 ± 1.16	—	22.4 ± 1.05	9.29 ± 0.17

续表2

	保留时间/min	化学式	挥发性化合物	相对含量/(μg/g)				
				A1	B1	C1	D1	E1
酯类化合物	27.117	C ₁₂ H ₂₄ O ₂	癸酸乙酯	10 ± 0	10 ± 0	—	9.88 ± 0.21	10 ± 0
	28.650	C ₁₂ H ₁₆ O ₂	丁酸苯乙酯	—	—	—	0.11 ± 0.01	—
	38.317	C ₁₆ H ₂₂ O ₄	1,2-苯二羧酸双(2-甲基丙基)酯	—	0.41 ± 0.19	0.74 ± 0.06	0.28 ± 0.19	0.76 ± 0.04
	38.784	C ₁₇ H ₃₄ O ₂	十六酸甲酯	—	—	—	0.19 ± 0.02	—
	39.184	C ₁₆ H ₂₂ O ₄	邻苯二甲酸二丁酯	0.46 ± 0.02	0.42 ± 0.04	0.89 ± 0.04	0.13 ± 0.02	0.2 ± 0.03
	39.383	C ₁₈ H ₃₆ O ₂	十六酸乙酯	—	0.2 ± 0.03	—	0.1 ± 0	0.07 ± 0.01
	18.250	C ₁₀ H ₁₇ ClF ₂ O ₂	4-己烯-1-基酯丙酸	0.18 ± 0.03	0.08 ± 0.01	2.59 ± 0.34	0.28 ± 0.01	0.18 ± 0
	22.517	C ₁₂ H ₂₀ O ₂	乙酸芳樟酯	—	—	—	—	0.08 ± 0
	13.117	C ₈ H ₁₆ O ₂	丁酸丁酯	—	—	3.49 ± 0.3	—	—
	10.183	C ₇ H ₁₄ O ₂	乙酸戊酯	—	0.07 ± 0.01	—	—	—
	14.850	C ₇ H ₁₄ O ₂	4,4-二甲基戊酸	2.55 ± 0.21	0.12 ± 0.01	—	—	—
	14.850	C ₉ H ₁₈ O ₂	2-乙基己酸甲酯	—	0.11 ± 0.02	—	—	—
	23.650	C ₁₁ H ₂₀ O ₂	3-甲基-2-丁烯酯己酸	—	1.48 ± 0.11	—	—	—
	25.450	C ₁₃ H ₂₃ F ₃ O ₂	三氟十一烷酸乙酯	0.13 ± 0.02	0.13 ± 0.02	—	—	—
	25.517	C ₈ H ₉ NO ₂	邻苯二甲酸甲酯	—	0.11 ± 0.04	—	—	—
	29.117	C ₁₀ H ₁₀ O ₄	邻苯二甲酸二甲酯	0.39 ± 0.03	0.22 ± 0.03	—	—	—
	32.584	C ₁₃ H ₁₆ O ₂	苯甲酸-3-己烯-1-醇酯	—	0.18 ± 0.02	—	—	—
	8.117	C ₇ H ₁₄ O ₂	2-甲基丁酸乙酯	0.15 ± 0.01	—	—	—	—
	9.717	C ₇ H ₁₄ O ₂	戊酸乙酯	0.11 ± 0.04	—	—	—	—
	28.184	C ₁₄ H ₂₅ F ₃ O ₂	三氟乙酸十二烷基酯	0.18 ± 0	—	—	—	—
	31.117	C ₁₅ H ₂₇ F ₃ O ₂	三氟乙酸正十三烷基酯	0.54 ± 0.05	—	—	—	—
酮类化合物	7.717	C ₇ H ₁₄ O	3-甲基-2-己酮	1.01 ± 0.07	0.73 ± 0.01	0.52 ± 0.03	0.8 ± 0.05	—
	9.383	C ₇ H ₁₄ O	2-庚酮	1.28 ± 0.24	0.88 ± 0.08	1.02 ± 0.03	1.22 ± 0.06	—
	11.650	C ₈ H ₁₆ O	6-甲基-2-庚酮	—	—	—	0.84 ± 0.02	0.35 ± 0.02
	12.650	C ₈ H ₁₄ O ₂	2,3-辛二酮	4.49 ± 0.19	4.65 ± 0.35	5.59 ± 0.29	4.67 ± 0.7	3.79 ± 0.07
	12.917	C ₈ H ₁₆ O	2-辛酮	—	—	1.14 ± 0.07	1.18 ± 0.14	—
	12.784	C ₈ H ₁₄ O	6-甲基-5-庚烯-2-酮	4.42 ± 0.36	3.76 ± 0.18	3.78 ± 0.54	3.98 ± 0.12	2.19 ± 0.1
	14.584	C ₉ H ₁₆ O	2,2,6-三甲基环己酮	1.58 ± 0.06	1.56 ± 0.02	0.75 ± 0.11	1.96 ± 0.06	0.69 ± 0.02
	14.717	C ₈ H ₁₄ O	3-辛烯-2-酮	0.48 ± 0.04	0.51 ± 0.03	0.4 ± 0.01	0.68 ± 0.02	0.27 ± 0.01
	15.517	C ₇ H ₁₀ O	3-甲基-2-环己烯-1-酮	0.59 ± 0.03	0.68 ± 0.04	0.35 ± 0	0.79 ± 0.03	0.22 ± 0
	15.717	C ₈ H ₈ O	苯乙酮	1.13 ± 0.19	0.48 ± 0.01	0.83 ± 0.1	1.2 ± 0.03	0.21 ± 0.01
	15.850	C ₈ H ₁₂ O	(E,E)-3,5-辛二烯-2-酮	8.3 ± 0.16	11.87 ± 0.16	7.36 ± 0.08	15.79 ± 0.55	2.93 ± 0.14
	16.717	C ₈ H ₁₂ O	3,5-辛二烯-2-酮	1.1 ± 0.03	1.92 ± 0.05	2.16 ± 0.03	2.48 ± 0.06	0.25 ± 0.01
	18.650	C ₁₀ H ₁₈ O	(R,S)-5-乙基-6-甲基-3E-庚-2-酮	3.79 ± 0.24	3.4 ± 0.11	3.05 ± 0.03	4.64 ± 0.22	1.51 ± 0.1
	18.717	C ₁₀ H ₁₆ O	(1S)-1,7,7-三甲基-双环[2.2.1]庚烷-2-酮	0.74 ± 0.02	0.52 ± 0.02	1.26 ± 0.03	0.57 ± 0.04	—
	19.050	C ₈ H ₁₄ O	2-乙基环己酮	—	—	—	0.95 ± 0.02	0.17 ± 0
	23.783	C ₁₁ H ₂₂ O	2-十一酮	0.28 ± 0.14	0.19 ± 0.01	—	0.77 ± 0.37	0.24 ± 0
	27.317	C ₁₁ H ₁₆ O	(Z)-3-甲基-2-(2-戊烯基)-2-环戊烯-1-酮	12.03 ± 0.54	12.45 ± 0.3	5.26 ± 0.12	23.74 ± 1.46	15 ± 0.42
	28.250	C ₁₃ H ₂₀ O	α-离子酮	0.3 ± 0.01	0.4 ± 0.02	—	0.74 ± 0.05	0.09 ± 0.01
	28.984	C ₁₃ H ₂₂ O	(E)-6,10-二甲基-5,9-十一碳二烯-2-酮	0.66 ± 0.16	0.69 ± 0.02	0.64 ± 0.05	1.33 ± 0.03	0.39 ± 0.02
	30.117	C ₁₃ H ₂₀ O	反式β-紫罗兰酮	3.63 ± 0.07	3.92 ± 0.15	2 ± 0.03	9.04 ± 0.32	0.74 ± 0.04

续表2

	保留时间/min	化学式	挥发性化合物	相对含量/(μg/g)				
				A1	B1	C1	D1	E1
酮类化合物	31.250	C ₁₀ H ₁₂ O ₃	3-(2-戊烯基)-1,2,4-环戊三酮	3.34 ± 0.19	6.22 ± 0.26	4.56 ± 0.26	13.16 ± 0.61	4.71 ± 0.19
	38.784	C ₁₇ H ₂₄ O ₃	7,9-二叔丁基-1-氧杂螺(4,5)癸烷-6,9-二烯-2,8-二酮	—	—	—	0.17 ± 0.05	—
	6.650	C ₆ H ₁₀ O	4-甲基-3-戊烯-2-酮	—	0.8 ± 0.08	—	—	0.52 ± 0.01
	16.450	C ₉ H ₁₈ O	3-壬酮	0.26 ± 0.01	—	—	—	0.1 ± 0.02
	18.384	C ₉ H ₁₆ O	3-壬烯-2-酮	—	0.16 ± 0.01	0.62 ± 0.25	—	0.11 ± 0
	23.917	C ₁₀ H ₁₂ O ₂	脱氢木醇酮	—	—	0.28 ± 0.08	—	—
	27.650	C ₁₃ H ₂₀ O	β-突厥烯酮	—	—	6.54 ± 0.14	—	—
	5.583	C ₆ H ₁₂ O	2-甲基-3-戊酮	0.28 ± 0.04	0.26 ± 0	—	—	—
	12.784	C ₈ H ₁₆ O	3-辛酮	0.58 ± 0.04	0.87 ± 0.03	—	—	—
	27.450	C ₁₃ H ₂₆ O	6,10-二甲基-2-十一酮	—	0.15 ± 0.03	—	—	—
	31.584	C ₁₁ H ₁₆ O ₂	5,6,7,7A-四氢-4,4,7A-三甲基-2(4H)-茚并呋喃酮	—	0.14 ± 0.01	—	—	—
	18.650	C ₁₀ H ₁₈ O	2-叔丁基环己酮	0.55 ± 0.04	—	—	—	—
	6.717	C ₆ H ₁₂ O	己醛	13.47 ± 1	10.64 ± 0.58	6.7 ± 0.38	14.15 ± 0.3	5.99 ± 0.24
	7.583	C ₆ H ₁₀ O	2-甲基-2-戊烯醛	0.37 ± 0.04	0.44 ± 0.01	1.34 ± 0.05	0.69 ± 0.04	—
醛类化合物	9.783	C ₇ H ₁₄ O	庚醛	11.91 ± 0.18	9.04 ± 0.13	3.45 ± 0.18	8.89 ± 0.33	3.91 ± 0.05
	11.717	C ₇ H ₁₂ O	(Z)-2-庚烯醛	—	—	—	0.24 ± 0.02	0.3 ± 0.03
	11.850	C ₇ H ₆ O	苯甲醛	7.05 ± 0.12	4.05 ± 0.13	4.77 ± 0.17	4.73 ± 0.44	2.31 ± 0.14
	13.650	C ₇ H ₁₀ O	(E,E)-2,4-庚二烯醛	0.74 ± 0.08	1.29 ± 0.02	—	0.86 ± 0.02	0.33 ± 0.01
	14.917	C ₈ H ₈ O	苯乙醛	1.68 ± 0.06	0.59 ± 0.02	0.88 ± 0.11	0.76 ± 0.06	0.57 ± 0.01
	15.250	C ₉ H ₁₆ O	2,6-二甲基-5-庚烯醛	—	0.49 ± 0.01	—	1.68 ± 0.09	1.15 ± 0.07
	15.384	C ₈ H ₁₄ O	(E)-2-辛烯醛	0.57 ± 0.06	0.68 ± 0.04	—	0.56 ± 0.07	0.29 ± 0.01
	16.184	C ₁₀ H ₁₆ O	光柠檬醛 B	0.28 ± 0.03	—	—	1.44 ± 0.04	0.25 ± 0
	17.117	C ₉ H ₁₈ O	壬醛	24.22 ± 0.96	22.3 ± 0.57	13.53 ± 0.53	27.4 ± 0.77	14.57 ± 0.53
	19.117	C ₉ H ₁₆ O	(E)-2-壬烯醛	—	0.17 ± 0.02	—	0.21 ± 0.04	0.13 ± 0.05
	19.317	C ₉ H ₁₀ O	3-乙基苯甲醛	0.16 ± 0.01	0.18 ± 0.01	—	0.24 ± 0.03	0.13 ± 0.03
	19.717	C ₉ H ₁₀ O	4-乙基苯甲醛	—	—	—	0.13 ± 0.01	—
	20.650	C ₁₀ H ₁₄ O	2,6,6-三甲基-1,3-环己二烯-1-羧醛	1.11 ± 0.06	0.45 ± 0.02	0.54 ± 0.02	0.88 ± 0.03	0.37 ± 0.01
	20.717	C ₁₀ H ₂₀ O	癸醛	4.58 ± 0.5	8.58 ± 0.26	3.6 ± 0.18	4.89 ± 0.46	3.42 ± 0.12
	21.050	C ₉ H ₁₄ O	(E,E)-2,4-壬二烯醛	—	—	—	0.15 ± 0.02	0.1 ± 0.01
	23.050	C ₁₀ H ₁₆ O	柠檬醛	0.39 ± 0.03	0.2 ± 0.04	—	0.67 ± 0.04	0.27 ± 0.03
	24.250	C ₁₁ H ₂₂ O	十一醛	—	—	—	0.78 ± 0.04	0.49 ± 0.03
	26.450	C ₁₂ H ₂₂ O	2-丁基-2-辛烯醛	0.38 ± 0.07	0.39 ± 0.01	—	1.21 ± 0.16	0.07 ± 0.01
	22.717	C ₁₀ H ₁₈ O	(E)-2-癸烯醛	—	—	—	—	0.39 ± 0
	27.583	C ₁₂ H ₂₄ O	十二醛	—	0.27 ± 0.01	—	—	0.17 ± 0.01
	13.384	C ₈ H ₁₆ O	辛醛	3.76 ± 0.26	3.94 ± 0.18	2.18 ± 0.08	—	—
	9.717	C ₇ H ₁₂ O	(Z)-4-庚烯醛	—	0.96 ± 0.05	—	—	—
	17.650	C ₁₀ H ₁₆ O	2,6,6-三甲基-2-环己烯-1-羧醛	—	0.31 ± 0.01	—	—	—
	21.250	C ₇ H ₇ NO	2-氨基苯甲醛	—	0.11 ± 0.02	—	—	—
	22.650	C ₁₁ H ₁₈ O	2,6,6-三甲基-1-环己烯-1-乙醛	0.9 ± 0.01	0.96 ± 0.06	—	—	—
	26.117	C ₁₁ H ₂₀ O	E-2-十一烯醛	0.21 ± 0	0.13 ± 0.01	—	—	—
	21.383	C ₁₀ H ₁₆ O	2,6,6-三甲基-1-环己烯-1-甲醛	5.41 ± 0.5	—	—	—	—

续表2

保留时间/min	化学式	挥发性化合物	相对含量/(μg/g)				
			A1	B1	C1	D1	E1
4.584	C ₇ H ₁₆	正庚烷	0.2 ± 0.05	0.1 ± 0.01	—	0.11 ± 0.02	—
5.917	C ₇ H ₈	甲苯	3.21 ± 0.02	2.93 ± 0.16	3.18 ± 0.06	2.33 ± 0.29	1.97 ± 0.01
6.650	C ₈ H ₁₈	辛烷	1.28 ± 0.09	0.75 ± 0.04	0.51 ± 0.04	2.72 ± 0.21	2.3 ± 0.18
7.983	C ₉ H ₁₄	1,2,5,5-四甲基-1,3-环戊二烯	0.55 ± 0.08	0.27 ± 0.04	—	0.49 ± 0.07	0.14 ± 0.01
8.317	C ₉ H ₁₆	3,3,5,5-四甲基环戊烯	0.61 ± 0.17	0.54 ± 0.03	0.31 ± 0.01	0.72 ± 0.02	0.32 ± 0.01
8.450	C ₉ H ₁₆	1,2,4,4-四甲基环戊烯	0.33 ± 0.03	0.25 ± 0.02	—	0.3 ± 0.06	—
8.783	C ₈ H ₁₀	对二甲苯	5.4 ± 0.41	3.45 ± 0.2	3.76 ± 0.26	3.36 ± 0.18	2.57 ± 0.34
9.050	C ₈ H ₁₂	1,3-顺,5-顺-辛三烯	0.4 ± 0.08	0.31 ± 0.02	0.33 ± 0.01	0.65 ± 0.03	0.3 ± 0.01
9.450	C ₈ H ₈	苯乙烯	0.62 ± 0.04	3.14 ± 0.25	1.11 ± 0.09	0.52 ± 0.01	0.32 ± 0.02
9.517	C ₈ H ₁₀	邻二甲苯	3.46 ± 0.16	1.63 ± 0.13	1.73 ± 0.14	2.48 ± 0.11	1.72 ± 0.17
9.717	C ₉ H ₂₀	壬烷	0.35 ± 0.02	0.26 ± 0.01	—	0.21 ± 0.03	0.17 ± 0.01
9.917	C ₇ H ₁₄ O	戊基环氧乙烷	1.44 ± 0.11	0.79 ± 0.07	0.51 ± 0.04	0.75 ± 0.07	0.45 ± 0.02
10.917	C ₁₀ H ₁₆	α-蒎烯	3.21 ± 0.27	0.87 ± 0.06	20.58 ± 0.34	1.94 ± 0.08	1.71 ± 0.17
11.183	C ₉ H ₁₆	3-丙基环己烯	1.95 ± 0.16	2.15 ± 0.13	1.48 ± 0.07	3.1 ± 0.08	1.23 ± 0.04
11.250	C ₈ H ₁₀ O	2,7-二甲基氧杂卓	—	0.18 ± 0.02	—	0.14 ± 0	—
11.383	C ₁₀ H ₂₂	4-乙基辛烷	0.17 ± 0.02	—	—	0.69 ± 0.02	1.18 ± 0.01
11.917	C ₉ H ₁₂	1-乙基-4-甲基苯	6.01 ± 0.56	0.71 ± 0.05	1.11 ± 0.08	1.34 ± 0.21	0.88 ± 0.05
11.917	C ₁₀ H ₂₂	2-甲基壬烷	—	—	—	0.2 ± 0.04	0.34 ± 0.02
12.184	C ₁₀ H ₂₂	3-乙基辛烷	0.7 ± 0.25	—	—	0.33 ± 0.04	0.82 ± 0.01
12.117	C ₉ H ₁₂	均三甲苯	3.84 ± 0.18	0.48 ± 0.03	—	0.94 ± 0.02	—
12.384	C ₁₀ H ₂₂	3-甲基壬烷	1.04 ± 0.47	0.11 ± 0.01	0.19 ± 0	1.42 ± 0.03	3.8 ± 0.15
12.317	C ₁₀ H ₁₆	4-亚甲基-1-(1-甲基乙基)-双环[3.1.0]己烷	3 ± 0.29	1.46 ± 0.15	7.44 ± 0.34	0.46 ± 0.05	1.23 ± 0
12.650	C ₉ H ₁₀	α-甲基苯乙烯	0.38 ± 0.02	—	2.12 ± 0.14	0.65 ± 0.03	—
13.317	C ₁₀ H ₁₈	2,6-二甲基-2-反式-6-辛二烯	0.41 ± 0.02	0.23 ± 0.02	0.39 ± 0.03	0.24 ± 0.04	—
12.917	C ₁₂ H ₂₆	2,2,4,6,6-五甲基庚烷	18.34 ± 1.76	0.3 ± 0.01	—	0.98 ± 0.04	27.84 ± 0.57
12.917	C ₁₀ H ₂₀	1-癸烯	—	0.16 ± 0	0.4 ± 0.02	0.32 ± 0.02	—
12.917	C ₁₀ H ₁₆	β-月桂烯	3.9 ± 0.19	3.33 ± 0.25	24.45 ± 1.38	3.79 ± 0.39	3.68 ± 0.22
13.050	C ₉ H ₁₂	1,2,4-三甲基苯	7.06 ± 0.87	1.23 ± 0.02	2.13 ± 0.06	2.49 ± 0.43	1.05 ± 0.05
13.250	C ₁₀ H ₂₂	癸烷	2.7 ± 0.61	0.26 ± 0.03	1.21 ± 0.06	1.49 ± 0.04	4.1 ± 0.04
13.317	C ₁₀ H ₁₈	2,6,6-三甲基-双环[3.1.1]庚烷	—	0.15 ± 0.02	0.24 ± 0.04	0.1 ± 0.01	0.11 ± 0.01
13.450	C ₁₀ H ₁₆	α-水芹烯	—	—	0.51 ± 0.01	0.41 ± 0.05	0.39 ± 0.03
13.650	C ₁₀ H ₁₆	3-薐烯	0.37 ± 0.02	0.26 ± 0.01	3.86 ± 0.2	0.27 ± 0.06	0.28 ± 0.01
13.717	C ₁₁ H ₂₄	2,6-二甲基壬烷	—	—	—	0.19 ± 0.01	0.24 ± 0.02
13.917	C ₁₀ H ₁₆	1-甲基-4-(1-甲基乙基)-1,3-环己二烯	0.44 ± 0.01	0.27 ± 0.01	0.56 ± 0.01	0.39 ± 0.03	0.49 ± 0.01
14.050	C ₁₀ H ₂₀ O	3-[(乙炔氧基)甲基]庚烷	1.89 ± 0.18	0.27 ± 0.02	0.34 ± 0.02	0.56 ± 0.07	0.48 ± 0.02
14.117	C ₉ H ₁₂	1,2,3-三甲基苯	2.15 ± 0.13	0.34 ± 0.02	0.59 ± 0.02	0.93 ± 0.11	0.46 ± 0
14.184	C ₁₀ H ₁₄	P-伞花烃	0.79 ± 0.02	0.75 ± 0.01	4.33 ± 0.24	1.31 ± 0.08	1.09 ± 0.1
14.384	C ₁₀ H ₁₆	D-柠檬烯	28.62 ± 0.77	20.76 ± 0.65	51.37 ± 1.9	22.1 ± 0.95	17.94 ± 0.05
14.650	C ₁₁ H ₂₄	3,7-二甲基壬烷	0.74 ± 0.04	—	—	0.68 ± 0.06	0.55 ± 0.14
14.450	C ₉ H ₁₆	3-乙基-2-甲基-1,3-己二烯	0.71 ± 0.07	0.88 ± 0.01	—	0.67 ± 0.11	0.39 ± 0.01
14.584	C ₁₀ H ₂₀	戊基环戊烷	0.41 ± 0.04	—	—	0.22 ± 0.04	0.19 ± 0.01
14.650	C ₁₀ H ₁₆	(Z)-3,7-二甲基-1,3,6-辛三烯	1.58 ± 0.17	0.92 ± 0.08	3.61 ± 0.19	1.21 ± 0.07	1.52 ± 0.03

续表2

保留时间/min	化学式	挥发性化合物	相对含量/(μg/g)				
			A1	B1	C1	D1	E1
14.650	C ₉ H ₁₀	环丙基苯	1.66 ± 0.03	0.17 ± 0.01	—	0.3 ± 0.08	0.23 ± 0.02
14.917	C ₁₁ H ₂₂	2,3,6-三甲基-4-辛烯	—	—	—	0.27 ± 0.03	—
14.850	C ₉ H ₁₂	2,3,4,7-四氢-1H-茚	0.64 ± 0.01	0.24 ± 0.01	—	0.51 ± 0.07	0.28 ± 0.03
15.050	C ₁₀ H ₁₆	反式-β-罗勒烯	17.03 ± 0.3	6.72 ± 0.43	30.21 ± 0.58	3.88 ± 0.12	16.46 ± 0.48
15.384	C ₁₂ H ₂₆	3,4-二甲基癸烷	9.85 ± 0.28	—	—	1.06 ± 0.13	0.48 ± 0.08
15.317	C ₁₁ H ₂₄	5-甲基癸烷	—	—	—	1.87 ± 0.18	—
15.450	C ₁₁ H ₂₄	4-甲基癸烷	3.93 ± 0.28	1.91 ± 0.03	—	1.41 ± 0.08	3.44 ± 0.01
15.517	C ₈ H ₁₇ Cl	1-氯辛烷	—	—	—	0.08 ± 0.04	—
15.450	C ₁₀ H ₁₆	γ-蒎品烯	0.69 ± 0.08	0.51 ± 0.09	1.07 ± 0.18	0.83 ± 0.04	0.8 ± 0
15.450	C ₁₀ H ₁₄	1-乙基-3,5-二甲基苯	1.57 ± 0.03	—	1.1 ± 0.06	0.59 ± 0.01	0.42 ± 0.07
15.584	C ₁₁ H ₂₄	2-甲基癸烷	7.57 ± 0.26	0.7 ± 0.04	—	2.19 ± 0.16	1.21 ± 0.09
15.850	C ₁₁ H ₂₄	3-甲基癸烷	6.49 ± 0.02	0.11 ± 0	—	2.73 ± 0.12	0.43 ± 0.02
16.184	C ₁₀ H ₁₄	1-乙基-2,4-二甲基苯	1.96 ± 0.06	—	0.84 ± 0.07	0.76 ± 0.05	0.56 ± 0
16.384	C ₁₁ H ₂₂	(E)-4-十一碳烯	—	—	—	0.96 ± 0.07	0.92 ± 0.01
16.650	C ₁₁ H ₁₆	1-乙基-4-(1-甲基乙基)苯	1.21 ± 0.04	1.39 ± 0.05	3.19 ± 0.2	0.92 ± 0.03	0.48 ± 0.01
16.917	C ₁₁ H ₂₄	十一烷	12.76 ± 0.25	1.73 ± 0.04	8.32 ± 0.13	5.09 ± 0.15	6.5 ± 0.27
16.784	C ₁₁ H ₁₈	8-(1-甲基亚乙基)-双环[5.1.0]辛烷	0.25 ± 0.04	—	0.5 ± 0.04	0.43 ± 0.01	—
17.184	C ₁₂ H ₂₆	2,4-二甲基癸烷	—	0.86 ± 0.07	—	0.67 ± 0.02	1.36 ± 0.02
17.517	C ₁₃ H ₂₈	2,5,6-三甲基癸烷	—	—	—	4.3 ± 0.21	1.69 ± 0.17
17.384	C ₁₁ H ₂₀	十氢-2-甲基萜	0.15 ± 0.03	0.09 ± 0.02	2.26 ± 0.03	0.23 ± 0.02	0.1 ± 0.01
17.517	C ₁₁ H ₁₈	(E)-4,8-二甲基壬基-1,3,7-三烯	23.98 ± 0.74	10.28 ± 0.26	33.88 ± 0.63	6.74 ± 0.21	30.07 ± 0.17
17.584	C ₁₂ H ₂₄	2,8-二甲基-4-亚甲基壬烷	—	0.39 ± 0.01	—	0.63 ± 0.01	1.52 ± 0.04
17.584	C ₁₀ H ₁₄	1,2,3,5-四甲基苯	1.01 ± 0.03	0.29 ± 0.01	0.46 ± 0.02	0.41 ± 0.04	0.36 ± 0.09
17.517	C ₁₃ H ₂₈	2,4,6-三甲基癸烷	14.5 ± 0.6	0.93 ± 0.02	—	1.38 ± 0.04	0.1 ± 0
17.717	C ₁₀ H ₁₄	1,3,8-对薄荷三烯	2.14 ± 0.07	0.49 ± 0.02	0.89 ± 0.09	0.92 ± 0.05	0.61 ± 0.01
17.784	C ₇ H ₆ Cl ₂	1,2-二氯-4-甲基苯	0.74 ± 0.07	0.4 ± 0.02	1.42 ± 0.18	0.54 ± 0.04	0.59 ± 0.01
17.784	C ₁₂ H ₂₆	3,7-二甲基癸烷	—	—	—	1.53 ± 0.07	—
18.250	C ₁₁ H ₂₂	戊基环己烷	0.79 ± 0.07	0.09 ± 0.01	—	0.21 ± 0.01	0.21 ± 0.01
18.384	C ₁₂ H ₂₆	3,8-二甲基癸烷	—	0.1 ± 0.01	—	0.41 ± 0.03	0.43 ± 0
18.117	C ₁₂ H ₂₆	4-乙基癸烷	—	—	—	1.89 ± 0.07	2.39 ± 0.08
18.717	C ₁₂ H ₂₆	5-甲基十一烷	—	0.24 ± 0.05	7.88 ± 0.18	1.14 ± 0.1	—
19.050	C ₁₂ H ₂₆	4-甲基十一烷	0.47 ± 0.08	0.05 ± 0	6.45 ± 0.3	0.37 ± 0.05	—
19.250	C ₁₂ H ₂₆	2-甲基十一烷	—	0.46 ± 0.01	7.09 ± 0.17	0.27 ± 0.02	—
19.250	C ₁₀ H ₁₂	1,2,3,4-四氢萜	0.46 ± 0.2	0.06 ± 0.01	—	0.08 ± 0	0.17 ± 0
19.450	C ₁₂ H ₂₆	3-甲基十一烷	6.52 ± 0.38	1.25 ± 0.05	11.32 ± 0.15	4.59 ± 0.18	6.96 ± 0.13
19.383	C ₁₂ H ₂₂	十氢-2,3-二甲基萜	—	—	9.49 ± 0.9	0.28 ± 0.06	—
19.650	C ₁₂ H ₂₄	(Z)-5-十二烯	0.4 ± 0.08	—	—	0.16 ± 0.03	0.18 ± 0.05
19.917	C ₁₂ H ₂₂	十氢-1,6-二甲基萜	—	—	15.72 ± 0.59	0.62 ± 0.01	0.35 ± 0
20.050	C ₁₀ H ₈	萜	3.07 ± 0.25	1.81 ± 0.03	4.91 ± 0.11	2.35 ± 0.05	1.38 ± 0.02
20.250	C ₁₂ H ₂₄	(E)-2-十二烯	—	0.75 ± 0.02	4.1 ± 0.04	0.25 ± 0.01	—
20.517	C ₁₂ H ₂₆	十二烷	26.19 ± 0.43	6.61 ± 0.17	33.94 ± 0.65	18.38 ± 0.39	18.97 ± 0.57
20.717	C ₁₂ H ₂₄	(Z)-2-十二烯	—	—	—	0.23 ± 0.04	—

续表2

保留时间/min	化学式	挥发性化合物	相对含量/(μg/g)				
			A1	B1	C1	D1	E1
21.383	C ₁₁ H ₁₄	1,2,3,4-四氢-1-甲基萜	—	4.69 ± 0.41	2.39 ± 0.05	6.73 ± 0.19	1.88 ± 0.03
21.517	C ₁₃ H ₂₈	3,8-二甲基十一烷	—	—	2.17 ± 0.07	0.25 ± 0.05	—
22.117	C ₁₃ H ₂₈	4-乙基十一烷	—	—	—	0.2 ± 0.06	—
21.917	C ₁₂ H ₂₄	己基环己烷	—	—	8.74 ± 0.2	0.24 ± 0.02	—
22.383	C ₁₃ H ₂₈	5-甲基十二烷	—	—	16.21 ± 0.17	1.17 ± 0.03	—
22.717	C ₁₃ H ₂₈	4-甲基十二烷	—	0.58 ± 0.01	7.41 ± 0.15	0.81 ± 0.07	—
22.983	C ₁₃ H ₂₈	2-甲基十二烷	—	—	9.44 ± 0.1	1.23 ± 0.07	—
22.850	C ₁₂ H ₂₀	2-乙基-三环 [3.3.1.1] 癸烷	—	—	1.15 ± 0.01	0.6 ± 0.07	—
22.983	C ₁₃ H ₂₈	3-甲基十二烷	—	—	10.1 ± 0.11	0.75 ± 0.02	—
22.917	C ₁₁ H ₁₄	1,2,3,4-四氢-6-甲基萜	—	0.06 ± 0.01	—	0.14 ± 0.01	0.07 ± 0
23.317	C ₁₅ H ₃₂	2,6,11-三甲基十二烷	4.32 ± 0.3	2.23 ± 0.13	9.58 ± 0.5	0.37 ± 0.03	3.39 ± 0.12
23.383	C ₁₃ H ₂₆	(Z)-3-十三碳烯	—	—	—	0.9 ± 0.02	—
23.450	C ₁₁ H ₁₆	1,5,6,7-四甲基双环 [3.2.0] 七-2,6-二烯	0.29 ± 0.02	0.21 ± 0	—	0.16 ± 0.02	0.1 ± 0.02
23.717	C ₁₃ H ₂₆	1-十三烯	4.44 ± 0.21	1.8 ± 0.1	10.8 ± 0.13	3.37 ± 0.31	3.51 ± 0.25
23.983	C ₁₃ H ₂₈	十三烷	22.76 ± 0.73	6.97 ± 0.57	45.13 ± 0.65	17.58 ± 0.4	14.89 ± 2.17
23.917	C ₁₁ H ₁₀	2-甲基萜	2.35 ± 0.16	1.39 ± 0.06	1.13 ± 0.02	1.47 ± 0.06	0.95 ± 0
24.117	C ₁₃ H ₂₂ O	2,6,10,10-四甲基-1-氧杂螺 [4.5]dec-6-烯	0.32 ± 0.07	0.23 ± 0	—	0.46 ± 0.14	0.2 ± 0.03
24.517	C ₁₁ H ₁₀	1-亚乙基-1H-茚	1.61 ± 0.11	0.83 ± 0.02	0.73 ± 0.07	0.92 ± 0.02	0.59 ± 0.04
24.650	C ₁₄ H ₃₀	2,3,5,8-四甲基癸烷	0.26 ± 0	0.25 ± 0.01	7.72 ± 0.38	0.63 ± 0.04	—
25.450	C ₁₃ H ₂₆	庚基环己烷	1.44 ± 0.05	0.28 ± 0.03	15.2 ± 0.52	1.04 ± 0.2	0.94 ± 0.13
25.317	C ₁₄ H ₃₀	6-甲基-十三烷	1.33 ± 0.08	—	0.23 ± 0	1.54 ± 0.26	—
25.717	C ₁₄ H ₃₀	5-甲基十三烷	1.33 ± 0.03	0.67 ± 0.01	10.33 ± 0.28	1.36 ± 0.03	1.17 ± 0.02
25.784	C ₁₅ H ₂₄	α-葑澄茄	0.24 ± 0.01	0.34 ± 0.05	—	0.85 ± 0.03	0.4 ± 0.05
25.917	C ₁₄ H ₃₀	4-甲基-十三烷	—	0.16 ± 0	4.12 ± 0.14	0.51 ± 0.02	—
25.917	C ₁₃ H ₁₆	1,2-二氢-1,1,6-三甲基萜	0.39 ± 0.03	0.15 ± 0.01	0.44 ± 0	0.48 ± 0.07	0.14 ± 0
25.850	C ₁₄ H ₂₈	(Z)-7-十四碳烯	0.81 ± 0.07	0.13 ± 0.02	—	0.35 ± 0.05	—
26.117	C ₁₅ H ₃₂	2,6,10-三甲基十二烷	2.13 ± 0.02	0.88 ± 0.03	7.82 ± 0.23	1.6 ± 0.37	1.25 ± 0.09
26.317	C ₁₄ H ₃₀	3-甲基-十三烷	8.7 ± 0.03	2.6 ± 0.12	7.25 ± 0.37	7.14 ± 0.2	6.28 ± 0.11
26.450	C ₁₅ H ₂₄	[1S-(1α,2α,3αβ,4α,8αβ,9R*)]-十氢-1,5,5,8A-四甲基-1,2,4-亚甲基	—	—	—	0.28 ± 0.17	—
26.450	C ₁₄ H ₂₈	(E)-4-十四碳烯	0.53 ± 0.05	—	—	0.39 ± 0.05	0.44 ± 0.04
26.784	C ₁₄ H ₂₈	(Z)-3-十四碳烯	—	—	—	0.79 ± 0.39	—
26.984	C ₁₄ H ₂₈	1-十四碳烯	1.19 ± 0.05	0.8 ± 0.09	—	1.2 ± 0.15	1.04 ± 0.09
27.250	C ₁₄ H ₃₀	十四烷	5.04 ± 0.11	2.52 ± 0.04	11.49 ± 0.22	5.54 ± 0.12	3.4 ± 0.17
27.384	C ₁₅ H ₃₂	4,8-二甲基十三烷	—	—	0.6 ± 0.08	1.15 ± 0.08	—
27.584	C ₁₄ H ₂₆	7-十四烷	—	—	—	0.29 ± 0.16	—
27.517	C ₁₂ H ₁₂	1,3-二甲基萜	—	0.33 ± 0.01	—	0.33 ± 0.05	0.08 ± 0
27.717	C ₁₅ H ₂₄	石竹烯	1.02 ± 0.05	0.31 ± 0	—	4.8 ± 0.24	0.78 ± 0.03
27.917	C ₁₅ H ₂₄	雪松烯	0.82 ± 0.1	0.96 ± 0.01	59.73 ± 0.84	15.95 ± 0.35	0.98 ± 0.01
27.917	C ₁₅ H ₂₄	顺式罗汉柏烯	—	—	—	0.27 ± 0.04	—
28.050	C ₁₂ H ₁₂	1,6-二甲基萜	—	0.55 ± 0.02	—	0.63 ± 0.01	—
28.117	C ₁₅ H ₂₄	(1R,2S,6S,7S,8S)-8-异丙基-1-甲基-3-亚甲基三环 [4.4.0.0 2.7] 癸烯-基	0.64 ± 0.02	0.21 ± 0.02	20.7 ± 0.23	5.96 ± 0.44	0.14 ± 0.01

续表2

保留时间/min	化学式	挥发性化合物	相对含量/(μg/g)					
			A1	B1	C1	D1	E1	
28.850	C ₁₅ H ₂₄	(4a <i>S</i> -顺式)-2,4a,5,6,7,8,9,9a-八氢-3,5,5-三甲基-9-亚甲基-1 <i>H</i> -苯环庚烯	—	—	—	1.19 ± 0.03	0.07 ± 0.01	
28.784	C ₁₆ H ₃₄	2,6,10-三甲基十三烷	1.56 ± 0.06	1.1 ± 0.09	—	2.31 ± 0.33	—	
28.850	C ₁₄ H ₂₈	壬基环戊烷	2.48 ± 0.2	1.47 ± 0.12	11.93 ± 0.59	2.7 ± 0.09	1.76 ± 0.08	
29.117	C ₁₅ H ₂₄	(<i>E</i>)-β-法尼烯	1.33 ± 0.04	4.99 ± 0.12	—	4.39 ± 0.09	11.3 ± 0.24	
29.050	C ₁₅ H ₂₄	7,11-二甲基-3-亚甲基-1,6,10-十二碳三烯	—	—	—	0.41 ± 0.07	—	
29.250	C ₁₆ H ₃₄	4,11-二甲基十四烷	2.51 ± 0.04	2.13 ± 0.05	3.58 ± 0.16	2.56 ± 0.18	—	
28.917	C ₁₅ H ₂₄	蛇麻烯	—	—	—	0.76 ± 0.02	0.4 ± 0.03	
29.517	C ₁₄ H ₂₀ O ₂	2,6-双(1,1-二甲基乙基)-2,5-环己二烯-1,4-二酮	0.45 ± 0.21	0.09 ± 0.01	—	0.27 ± 0.01	0.22 ± 0	
29.584	C ₁₅ H ₂₄	(1 <i>R</i> ,4 <i>R</i> ,5 <i>S</i>)-1,8-二甲基-4-(prop-1-烯-2-基)螺环[4.5]dec-7-烯	—	—	—	0.64 ± 0.2	—	
29.850	C ₁₅ H ₂₄	γ-茂伦烯	—	—	—	1.61 ± 0.25	0.51 ± 0.05	
29.850	C ₁₅ H ₂₄	大根香叶烯	0.38 ± 0.05	0.32 ± 0.05	—	2.63 ± 0.16	1.57 ± 0.2	
30.250	C ₁₅ H ₂₄	[<i>S</i> -(<i>R</i> *, <i>S</i> *)]-5-(1,5-二甲基-4-己烯基)-2-甲基-1,3-环己二烯	0.42 ± 0.04	0.87 ± 0.01	—	1.19 ± 0.21	—	
30.584	C ₁₅ H ₂₄	α-茂伦烯	—	0.14 ± 0	—	0.61 ± 0.15	—	
30.650	C ₁₅ H ₂₄	α-法尼烯	0.42 ± 0.03	0.38 ± 0	—	1.06 ± 0.03	1.59 ± 0.16	
30.850	C ₁₅ H ₂₂	(<i>R</i>)-1-甲基-4-(1,2,2-三甲基环戊基)-苯	—	—	1.65 ± 0.12	0.98 ± 0.06	—	
烃类化合物	31.250	C ₁₅ H ₂₄	姜烯	2.01 ± 0.06	1.89 ± 0.02	8.43 ± 0.32	1.35 ± 0.04	0.45 ± 0
	31.250	C ₁₅ H ₂₄	葎澄茄油宁烯	—	—	—	4.14 ± 0.12	2.57 ± 0.05
	31.250	C ₁₅ H ₂₂	反式菖蒲烯	—	—	—	0.31 ± 0.01	—
	31.250	C ₁₅ H ₂₂	顺式菖蒲烯	—	0.34 ± 0.01	0.77 ± 0.01	0.23 ± 0.02	0.21 ± 0.01
	31.450	C ₁₃ H ₁₄	1,4,6-三甲基萜	—	0.07 ± 0.02	—	0.1 ± 0.01	—
	31.717	C ₁₅ H ₂₄	Selina-3,7(11)-二烯	—	0.1 ± 0.01	—	0.17 ± 0.05	0.08 ± 0
	31.450	C ₁₆ H ₃₄	7-甲基戊二烷	0.68 ± 0.05	0.57 ± 0.02	—	0.84 ± 0.03	0.64 ± 0.04
	31.917	C ₁₆ H ₃₄	5-甲基-五癸烷	—	—	—	0.52 ± 0.06	0.5 ± 0.02
	31.917	C ₁₅ H ₃₀	正壬基环己烷	0.71 ± 0.02	0.44 ± 0.03	—	0.82 ± 0.09	0.45 ± 0.02
	31.917	C ₁₃ H ₁₄	2,3,6-三甲基萜	—	—	—	0.1 ± 0.01	—
	32.450	C ₁₆ H ₃₄	3-甲基戊二烷	1.13 ± 0.17	0.88 ± 0.02	1.82 ± 0.15	1.86 ± 0.21	1.02 ± 0.03
	32.917	C ₁₆ H ₃₂	(<i>Z</i>)-3-十六烯	0.3 ± 0.01	0.15 ± 0.03	—	0.29 ± 0.02	0.16 ± 0.01
	33.317	C ₁₆ H ₃₄	十六烷	1.08 ± 0.02	0.58 ± 0.04	2.97 ± 0.03	1.62 ± 0.08	0.75 ± 0.04
	34.917	C ₁₆ H ₃₂	十一烷基环戊烷	0.24 ± 0.01	0.27 ± 0	—	0.59 ± 0.11	0.23 ± 0.01
	35.650	C ₁₆ H ₁₈	(<i>E</i>)-1,2,3-三甲基-4-丙烯基萜	—	—	1.01 ± 0.03	1.36 ± 0.11	—
	35.717	C ₁₆ H ₁₈	3,4-二乙基-1,1'-联苯	—	—	0.71 ± 0.05	0.58 ± 0.03	—
	36.450	C ₁₆ H ₂₀	2,6-二异丙基萜	—	—	—	0.16 ± 0.04	—
	36.984	C ₁₈ H ₃₆	5-环己基十二烷	—	—	—	0.24 ± 0.03	0.07 ± 0.03
	37.183	C ₁₄ H ₁₀	蒽	—	0.09 ± 0.02	—	0.09 ± 0.03	—
	6.450	C ₈ H ₁₆	1-乙基-2-甲基环戊烷	0.33 ± 0.02	0.26 ± 0.05	—	—	0.66 ± 0.3
	8.517	C ₉ H ₂₀	4-甲基辛烷	0.71 ± 0.11	0.09 ± 0.01	—	—	0.1 ± 0.01
	8.517	C ₈ H ₁₀	乙苯	1.56 ± 0.09	0.78 ± 0.04	0.99 ± 0.07	—	0.76 ± 0.03
	11.050	C ₁₀ H ₂₂	2,6-二甲基辛烷	—	—	—	—	0.4 ± 0.04

续表2

保留时间/min	化学式	挥发性化合物	相对含量/(μg/g)				
			A1	B1	C1	D1	E1
11.450	C ₁₀ H ₁₆	樟脑	—	0.1 ± 0.01	0.78 ± 0.05	—	0.1 ± 0.01
11.850	C ₁₀ H ₂₀	3,7-二甲基-1-辛烯	—	—	—	—	0.27 ± 0.15
12.717	C ₁₀ H ₂₀	(E)-3-甲基-2-壬烯	—	0.06 ± 0	—	—	1.26 ± 0.09
13.450	C ₁₀ H ₂₀	(Z)-2-癸烯	—	—	—	—	0.1 ± 0
14.317	C ₇ H ₁₅ Br	3-溴-庚烷	—	—	—	—	2.94 ± 0.08
15.050	C ₁₁ H ₂₄	4,5-二甲基壬烷	—	—	—	—	0.48 ± 0.01
16.184	C ₁₁ H ₂₂	(E)-8-甲基-4-癸烯	—	—	—	—	1.13 ± 0.12
16.517	C ₁₂ H ₂₆	4,5-二乙基辛烷	—	—	—	—	0.14 ± 0.03
16.184	C ₁₁ H ₂₂	1-十一碳烯	4.11 ± 0.18	0.88 ± 0.02	—	—	0.43 ± 0.01
17.184	C ₁₁ H ₁₈	2-乙烯基-1,3,3-三甲基-环己烯	0.4 ± 0.02	0.24 ± 0.02	—	—	0.17 ± 0.01
17.984	C ₁₁ H ₂₄	2,3,7-三甲基辛烷	—	—	—	—	0.74 ± 0.02
18.317	C ₁₁ H ₁₆	1,3-二乙基-5-甲基苯	0.32 ± 0.03	—	—	—	0.14 ± 0.01
18.850	C ₁₁ H ₁₄	苯(1-乙基-1-丙烯基)	1.24 ± 0.07	0.15 ± 0.01	0.43 ± 0.03	—	0.22 ± 0.02
18.783	C ₁₂ H ₂₄	9-甲基-1-十一碳烯	0.23 ± 0.02	—	—	—	0.37 ± 0.01
18.917	C ₉ H ₁₀ O	1-乙烯基-4-甲氧基苯	0.7 ± 0.03	0.23 ± 0.01	0.68 ± 0.02	—	0.26 ± 0.02
19.050	C ₁₁ H ₁₆	戊基苯	—	—	—	—	0.06 ± 0
19.783	C ₁₂ H ₂₄	(E)-6-十二碳烯	—	—	—	—	0.18 ± 0
19.983	C ₁₂ H ₂₄	(Z)-3-十二碳烯	—	0.6 ± 0.02	-	—	2.25 ± 0.09
20.183	C ₁₂ H ₂₄	1-十二烯	—	—	—	—	1.73 ± 0.17
20.650	C ₁₂ H ₂₂	5-十二炔	—	—	4.44 ± 0.05	—	0.13 ± 0
21.783	C ₁₁ H ₁₆ O	2-甲氧基-4-甲基-1-(1-甲基乙基)苯	—	—	—	—	1.45 ± 0.06
26.784	C ₁₄ H ₂₈	(E)-3-十四碳烯	1.46 ± 0.06	0.91 ± 0.08	—	—	1.46 ± 0.18
27.784	C ₁₂ H ₁₂	2,7-二甲基萜	0.3 ± 0.05	—	—	—	0.1 ± 0
28.117	C ₁₂ H ₁₂	1,4-二甲基萜	—	—	—	—	0.11 ± 0.03
29.250	C ₁₅ H ₃₂	2-甲基-十四烷	—	—	—	—	0.53 ± 0.02
29.450	C ₁₅ H ₂₄	1,2,3,3A,4,5,6,7-八氢-1,4-二甲基-7-(1-甲基乙烯基)-[1R-(1α,3αβ,4α,7β)]-甘菊环	—	—	—	—	0.19 ± 0.01
30.117	C ₁₅ H ₃₀	1-十五碳烯	0.85 ± 0	0.32 ± 0.03	—	—	0.5 ± 0.35
30.050	C ₁₅ H ₂₄	(Z,E)-3,7,11-三甲基-1,3,6,10-十二四烯	—	—	—	—	3.7 ± 0.12
30.384	C ₁₅ H ₂₄	1,2,3,5,6,7,8,8A-八氢-1,4-二甲基-7-(1-甲基乙烯基)-[1S-(1α,7α,8αβ)]-甘菊环	—	—	—	—	7.6 ± 0.26
30.850	C ₁₅ H ₂₄ O	丁基化羟基甲苯	1.73 ± 0.05	—	—	—	1.1 ± 0.09
11.650	C ₉ H ₁₂	丙基苯	1.67 ± 0.11	0.74 ± 0.01	0.89 ± 0.01	—	—
13.184	C ₈ H ₂₄ O ₄ Si ₄	八甲基环四硅氧烷	24.97 ± 0.42	52.86 ± 3.12	30.49 ± 1.07	—	—
16.584	C ₁₀ H ₁₆	1-甲基-4-(1-甲基亚乙基)-环己烯	0.35 ± 0.04	0.4 ± 0.01	3.53 ± 0.08	—	—
18.450	C ₁₀ H ₁₂	2,3-二氢-4-甲基-1H-茚	2.06 ± 0.02	0.15 ± 0.01	0.47 ± 0.18	—	—
20.983	C ₁₃ H ₂₈	2,6-二甲基十一烷	—	0.59 ± 0.05	15.16 ± 0.43	—	—
21.050	C ₁₂ H ₂₂	十氢-1,2-二甲基萜	—	—	5.45 ± 0.08	—	—
21.317	C ₁₃ H ₂₈	2,8-二甲基十一烷	—	—	6.65 ± 0.59	—	—
21.717	C ₁₃ H ₂₈	5-乙基十一烷	—	—	3.12 ± 0.08	—	—
21.917	C ₁₃ H ₂₈	3,9-二甲基十一烷	—	—	1.58 ± 0.11	—	—
22.183	C ₁₃ H ₂₈	2,3-二甲基十一烷	—	—	1.17 ± 0.06	—	—

续表2

保留时间/min	化学式	挥发性化合物	相对含量/(μg/g)				
			A1	B1	C1	D1	E1
23.784	C ₁₃ H ₂₄	1-十三烷	—	—	0.68 ± 0.03	—	—
24.717	C ₁₄ H ₃₀	4,6-二甲基十二烷	—	—	2.75 ± 0.19	—	—
26.050	C ₁₄ H ₃₀	2-甲基十三烷	—	—	5.04 ± 0.09	—	—
28.984	C ₁₅ H ₃₂	5-甲基十四烷	—	—	0.74 ± 0.02	—	—
29.050	C ₁₅ H ₃₂	4-甲基十四烷	—	—	1.05 ± 0.02	—	—
29.450	C ₁₅ H ₃₂	3-甲基十四烷	—	—	1.05 ± 0.04	—	-
35.917	C ₁₆ H ₃₀	8-十六烯	—	—	1.37 ± 0.02	—	—
9.383	C ₉ H ₁₈	1-壬烯	—	0.23 ± 0.01	—	—	—
15.117	C ₁₃ H ₂₈	3-甲基-5-丙基壬烷	—	0.18 ± 0.01	—	—	—
15.184	C ₁₀ H ₁₄	1,2-二乙基苯	1.51 ± 0.21	0.25 ± 0.07	—	—	—
16.450	C ₁₀ H ₁₄	2-乙基-1,3-二甲基苯	2.43 ± 0.17	0.41 ± 0.04	—	—	—
16.317	C ₁₂ H ₂₁ F ₃ O ₂	2,6-二甲基-6-三氟乙酰氧基辛烷	4.22 ± 0.21	0.42 ± 0.02	—	—	—
16.584	C ₁₁ H ₂₂	辛基环丙烷	—	0.27 ± 0.01	—	—	—
18.384	C ₁₀ H ₁₂	2,3-二氢-5-甲基-1H-茚	—	0.26 ± 0.02	—	—	—
18.517	C ₁₂ H ₂₆	5-乙基癸烷	—	0.27 ± 0.01	—	—	—
18.584	C ₉ H ₁₂ O ₂	2,6,6-三甲基-2-环己烯-1,4-二酮	—	0.07 ± 0	—	—	—
19.450	C ₁₂ H ₂₄	(Z)-6-十二烯	1.08 ± 0.09	0.91 ± 0.05	—	—	—
21.050	C ₁₁ H ₁₄	1,2,3,4-四氢-2-甲基萘	—	0.1 ± 0.01	—	—	—
21.317	C ₁₃ H ₂₈	2,10-二甲基十一烷	—	0.31 ± 0.14	—	—	—
23.250	C ₁₃ H ₂₄	1,12-十三碳二烯	0.31 ± 0.15	0.74 ± 0.02	—	—	—
24.250	C ₁₂ H ₂₄ O	环氧癸烷	0.48 ± 0.17	0.6 ± 0.11	—	—	—
25.517	C ₁₄ H ₃₀	2,3-二甲基十二烷	2.12 ± 0.08	1.06 ± 0.03	—	—	—
26.717	C ₁₂ H ₁₀	联苯	0.12 ± 0.01	0.14 ± 0.08	—	—	—
28.650	C ₁₂ H ₁₂	1,5-二甲基萘	0.31 ± 0.03	0.13 ± 0.01	—	—	—
29.117	C ₁₂ H ₁₂	1,2-二甲基萘	0.19 ± 0.04	0.09 ± 0.01	—	—	—
30.050	C ₁₅ H ₂₄	1,2,4A,5,6,8A-六氢-4,7-二甲基-1-(1-甲基乙基)萘	0.96 ± 0.05	0.25 ± 0.02	—	—	—
30.050	C ₁₃ H ₁₂	4-甲基-1,1-联苯	—	0.09 ± 0.02	—	—	—
30.250	C ₁₅ H ₂₄	1,2,3,4,4A,5,6,8A-八氢-4A,8-二甲基-2-(1-甲基乙烯基)-萘 [2R-(2α,4αα,8αβ)]-	—	0.11 ± 0.01	—	—	—
31.050	C ₁₅ H ₂₄	(1S-顺式)-1,2,3,5,6,8A-六氢-4,7-二甲基-1-(1-甲基乙基)萘	0.47 ± 0.04	0.34 ± 0	—	—	—
31.717	C ₁₅ H ₂₄	1,2,4A,5,6,8A-六氢-4,7-二甲基-1-(1-甲基乙基)-萘, [1S-(1α,4αβ,8αα)]-	0.14 ± 0.01	0.15 ± 0.01	—	—	—
31.717	C ₁₆ H ₃₄	4-乙基十四烷	0.3 ± 0.01	0.19 ± 0	—	—	—
32.917	C ₁₄ H ₂₆	1,1-双环庚基	0.36 ± 0.03	0.1 ± 0.01	—	—	—
33.050	C ₁₃ H ₁₀	蒽	—	0.1 ± 0.01	—	—	—
18.250	C ₁₀ H ₁₇ ClF ₂ O ₂	2-亚甲基-5-(1-甲基乙烯基)-8-甲基双环 [5.3.0] 癸烷	0.18 ± 0.03	0.08 ± 0.01	2.59 ± 0.34	0.28 ± 0.01	0.18 ± 0
5.917	C ₈ H ₁₈	3-乙基-2-甲基戊烷	0.52 ± 0.06	—	—	—	—
7.850	C ₉ H ₁₈	2,4-二甲基-1-庚烯	2.46 ± 0.19	—	—	—	—
10.317	C ₁₀ H ₂₂	4,4-二甲基辛烷	0.14 ± 0.07	—	—	—	—
10.650	C ₁₀ H ₁₆	2-甲基-5-(1-甲基乙基)-二环 [3.1.0] 己-2-烯	0.28 ± 0.06	—	—	—	—

续表2

	保留时间/min	化学式	挥发性化合物	相对含量/(μg/g)				
				A1	B1	C1	D1	E1
烃类化合物	10.983	C ₁₀ H ₂₂	3-乙基-2-甲基-庚烷	0.13 ± 0.01	—	—	—	—
	12.584	C ₉ H ₁₂	1-乙基-2-甲基苯	2.78 ± 0.32	—	—	—	—
	14.650	C ₁₁ H ₂₂	1-乙基-2,2,6-三甲基环己烷	0.4 ± 0.04	—	—	—	—
	15.317	C ₁₀ H ₁₄	1-甲基-2-丙基苯	1.21 ± 0.12	—	—	—	—
	16.317	C ₁₀ H ₁₂	1-甲基-茚满	0.17 ± 0.02	—	—	—	—
	16.517	C ₁₀ H ₁₂	2-乙烯基-1,4-二甲基苯	0.88 ± 0.07	—	—	—	—
	16.784	C ₁₀ H ₁₆	1-环戊基环戊烯	0.95 ± 0.05	—	—	—	—
	17.250	C ₁₀ H ₁₄	1,2,4,5-四甲基苯	0.42 ± 0.06	—	—	—	—
	19.650	C ₁₂ H ₂₆	3-乙基-2,7-二甲基辛烷	0.14 ± 0.03	—	—	—	—
	19.783	C ₁₂ H ₂₄	(E)-4-十二碳烯	0.3 ± 0.15	—	—	—	—
	20.717	C ₁₃ H ₂₈	2,4-二甲基十一烷	3.29 ± 0.03	—	—	—	—
	21.183	C ₉ H ₁₀ O	2,3-二氢-1H-茚-1-醇	1.58 ± 0.16	—	—	—	—
	26.050	C ₁₄ H ₂₈	7-十四碳烯	0.49 ± 0.05	—	—	—	—
	29.184	C ₁₅ H ₂₄	别香树烯	0.29 ± 0	—	—	—	—
杂环类化合物	4.650	C ₆ H ₈ O	2-乙基呋喃	7.01 ± 0.52	12.55 ± 0.37	6.29 ± 0.37	58.49 ± 2.88	54.92 ± 1.47
	7.117	C ₆ H ₉ N	1-乙基-1H-吡咯	2.13 ± 0.22	1.49 ± 0.05	5.76 ± 0.28	2.11 ± 0.18	0.78 ± 0.03
	9.450	C ₈ H ₁₂ O	2-正丁基呋喃	2.31 ± 0.05	1.75 ± 0.11	1.16 ± 0.11	1.66 ± 0.09	0.91 ± 0.05
	12.984	C ₉ H ₁₄ O	2-戊基呋喃	30.39 ± 3.11	31.44 ± 0.97	25.99 ± 0.27	27.92 ± 0.75	12.13 ± 0.05
	15.117	C ₇ H ₉ NO	1-乙基-1H-吡咯-2-甲醛	4.8 ± 0.15	2.91 ± 0.07	3.85 ± 0.05	4.69 ± 0.14	2.3 ± 0.01
	16.184	C ₈ H ₁₂ N ₂	3-乙基-2,5-二甲基吡嗪	0.25 ± 0.04	0.27 ± 0	0.68 ± 0.13	0.4 ± 0.12	0.11 ± 0.05
	16.584	C ₁₀ H ₁₈ O ₂	反式-芳樟醇氧化物(呋喃型)	10.06 ± 0.13	6.54 ± 0.36	8.34 ± 1.28	16.26 ± 0.51	11.19 ± 0.02
	16.650	C ₁₀ H ₁₆ O	2-己基呋喃	0.41 ± 0.03	0.32 ± 0.01	0.24 ± 0	0.38 ± 0.02	0.07 ± 0.01
	19.517	C ₁₀ H ₁₈ O ₂	6-乙烯基四氢-2,2,6-三甲基-2H-吡喃-3-醇	1.09 ± 0.18	0.64 ± 0.03	0.6 ± 0.01	1.67 ± 0.22	1.52 ± 0.05
	19.650	C ₁₀ H ₁₈ O ₂	(3R,6S)-2,2,6-三甲基-6-乙烯基四氢-2H-吡喃-3-醇	4.69 ± 0.44	—	5.58 ± 0.13	8.42 ± 0.3	6.87 ± 0.48
	21.583	C ₇ H ₅ NS	苯并噻唑	—	0.19 ± 0.01	—	0.18 ± 0.04	0.14 ± 0.03
	23.917	C ₈ H ₇ N	吲哚	5.75 ± 0.63	14.63 ± 0.36	2.18 ± 0.12	13.82 ± 0.61	10.66 ± 0.23
	38.117	C ₈ H ₁₀ N ₄ O ₂	咖啡因	1.26 ± 0.03	9.49 ± 0.51	4.14 ± 0.26	4.34 ± 0.16	18.44 ± 2.06
	17.250	C ₁₀ H ₁₆ O ₂	6-乙烯基二氢-2,2,6-三甲基-2H-吡喃-3(4H)-酮	—	—	—	—	0.27 ± 0.03
其他类化合物	16.384	C ₉ H ₈ O ₂	2,2-亚甲基双呋喃	—	—	0.43 ± 0.12	—	—
	6.450	C ₇ H ₁₀ O	2-丙基呋喃	0.12 ± 0	0.2 ± 0.03	—	—	—
	7.117	C ₇ H ₁₀ O	2,3,5-三甲基呋喃	0.28 ± 0	0.12 ± 0	—	—	—
	28.517	C ₁₂ H ₁₆ O	4-甲基-4-苯基四氢-2H-吡喃	0.22 ± 0.01	—	—	—	—
	10.650	C ₇ H ₈ O	茴香醚	—	—	0.95 ± 0.02	0.34 ± 0.05	0.11 ± 0
	21.250	C ₇ H ₇ NO	N-苯基甲酰胺	—	—	—	0.12 ± 0.01	0.38 ± 0.07
	15.984	C ₇ H ₉ N	3-甲基苯胺	—	—	—	—	0.12 ± 0.01
	12.184	C ₂ H ₆ S ₃	二甲基三硫化物	0.29 ± 0.11	0.22 ± 0.01	—	—	—
	18.450	C ₈ H ₇ N	苺腈	0.14 ± 0.01	—	—	—	—

注：“—” 未检测到。

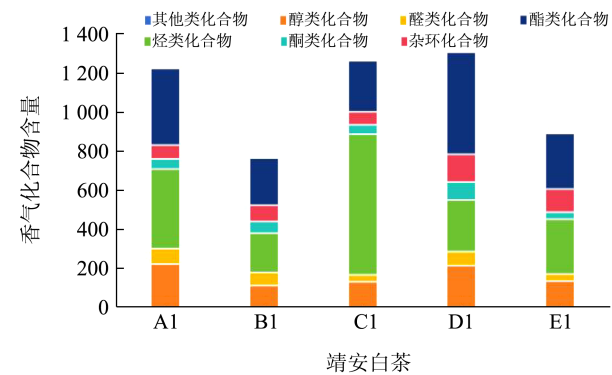


图2 靖安白茶香气化合物含量

Fig.2 Tea aroma compound content of Jing'an Baicha

主成分分析 (Principal Component Analysis, PCA) 和聚类分析 (Hierarchical Cluster Analysis, HCA) 通过全面的数据归纳、整理与统计分析, 能够较为客观地揭示样本的变化、分类等关键信息^[32,33]。为进一步探究靖安白茶关键香气成分, 对靖安白茶中已经鉴定出的 400 余种挥发性成分进行主成分分析 (PCA) 和聚类分析 (HCA)。样品分组信息显示 (图 3), 具有靖安白茶典型香气类型 (嫩香、清香) 的样品被分为 Group 2, 包含样品 A1、B1、D1 和 E1; 具有异味的靖安白茶样品 (C1) 被分为 Group 1。分组结果表明构成靖安白茶嫩香、清香香气类型的化合物与其他香型存在差异。

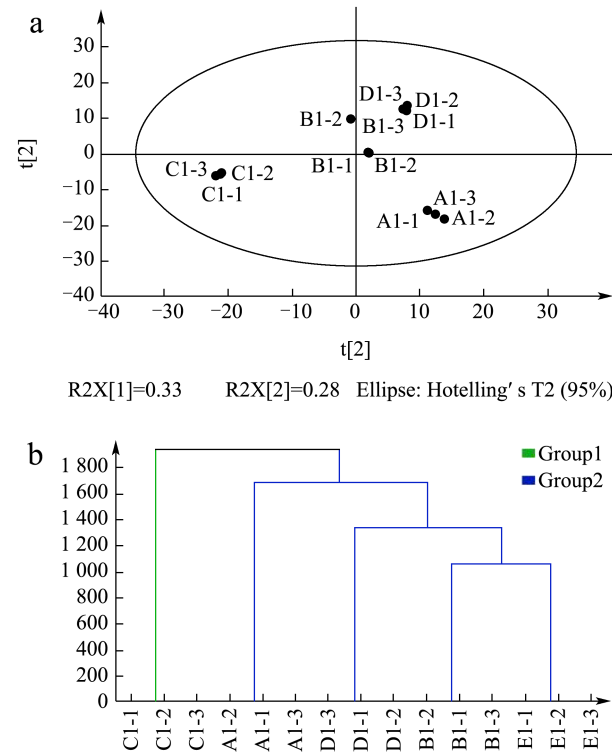


图3 靖安白茶香气化合物 PCA 和 HCA 分析

Fig.3 PCA and HCA analysis of aroma compounds of Jing'an Baicha

注: (a) PCA 分析图; (b) HCA 分析图。

正交偏最小二乘判别分析 (Orthogonal Partial Least Squares-Discriminant Analysis, OPLS-DA) 是一种应用于分类和特征选择的多变量统计分析技术^[34]。基于 HCA 分组结果, 进一步对两组靖安白茶样品进行 OPLS-DA 分析 (图 4a), 图 4b 是该模型的质量交叉验证检验结果, $R^2=0.0625$, $Q^2=-0.762$, 表明该 OPLS-DA 模型不存在过拟合现象, 并基于变量投影重要性 (Variable Importance in Projection, VIP) 值大于 1 可以将其视为判别模型中的潜在差异性物质^[35], 由此可以筛选出 82 个重要差异化合物 (图 4c), 这些重要化合物是使靖安白茶呈现嫩香、清香的主要香气成分。

载荷图结果 (图 5a) 显示, 靖安白茶 82 个重要差异化合物在两组样品中的含量分布存在显著差异。进一步结合热图 (图 5b) 可知, D-柠檬烯 (V70)、十三烷 (V196)、雪松烯 (V233) 等 62 种重要差异化合物在带有异味香型的靖安白茶样品 C1 中含量较高, 顺-3-己烯基丁酯 (V151)、二甲基丁酸叶醇酯 (V171)、己酸叶醇酯 (V221) 等 20 种化合物在 Group 2 组样品 (A1、B1、D1、E1) 中含量较高, 可能在靖安白茶典型香型的呈现中扮演重要角色。

综上所述, 如表 3 所示, 2-乙基呋喃 (V1, 甜香, 咖啡香)、芳樟醇 (V111, 花香)、壬醛 (V112, 玫瑰香, 油脂香)、顺-3-己烯基丁酯 (V151, 果香, 清香)、丁酸反-2-己烯基酯 (V155, 果香, 甜香)、二甲基丁酸叶醇酯 (V171, 苹果香, 胡椒香)、异戊酸叶醇酯 (V173, 果香)、香叶醇 (V178, 玫瑰香, 嫩香, 清香)、吲哚 (V195, 花香)、己酸叶醇酯 (V221, 清香, 果香)、己酸己酯 (V222, 嫩荚香, 青刀豆香, 果香)、己酸反-2-己烯酯 (V224, 清香, 草香)、顺茉莉酮 (V228, 花香, 果香)、正庚醛 (V24, 刺激气味)、反式- β -金合欢烯 (V243, 花香, 甜香)、2,3-二氢-3-甲基-3-苯并呋喃甲醇 (V44, -)、正己醛 (V5, 青草香)、2,2,4,6,6-五甲基庚烷 (V50, -)、3-己烯酸乙酯 (V59, 果香)、4-甲基-癸烷 (V88, -) 共 20 种化合物被鉴定为靖安白茶呈现嫩香与清香香型的關鍵香气成分, 且除 2,3-二氢-3-甲基-3-苯并呋喃甲醇、2,2,4,6,6-五甲基庚烷和 4-甲基-癸烷外的 17 种化合物可能发挥着更主要的作用。其中, 呈清香或嫩香香气的香叶醇、己酸叶醇酯、己酸己酯、己酸反-2-己烯酯和正己醛可能对靖安白茶“清香”、“嫩香”香气具有贡献^[5,36], 它们与具有甜香、果香属性的 2-乙基呋喃、顺-3-己烯基丁酯、3-己烯酸乙酯、丁酸反-2-己烯基酯、二甲基丁酸叶醇酯、异戊酸叶醇酯和具有花香属性的芳樟醇、壬醛、吲哚、反式- β -金合欢烯、顺茉莉酮通过协同或拮抗作用, 影响靖安白茶“清、嫩”香

气的纯度、浓度与协调性，是靖安白茶“清、嫩”香气综合呈现的表征性成分。刘盼盼等^[37]研究发现芳樟醇及其他6个主要组分对黄山毛峰的香气贡献较为显著，贡献率达96%，其中芳樟醇的整体香气贡献率高达76%，它在形成黄山毛峰茶特有的清香型香气中扮演了重要角色，本研究中均检测到芳樟醇、壬醛等化合物。Wang等^[38]和 Zheng 等^[39]的研究认为绿茶中挥发性香气成分相

对含量较高的依次为香叶醇、芳樟醇、橙花叔醇、己酸-顺-3-己烯酯、壬醛、3,7-二甲基-1,5,7-辛三烯-3-醇、顺-2-己烯醛、叶绿醇、庚醛、顺-茉莉酮，与此相似，本研究也检测到了包括香叶醇、芳樟醇、壬醛在内的多个化合物。Liu 等^[40]认为清香带花香型“绿宝石茶”的香气特征化合物包括吡嗪、1-辛烯-3-酮和(E,E)-2,4-庚二烯，与本研究结果有一定的相似性。

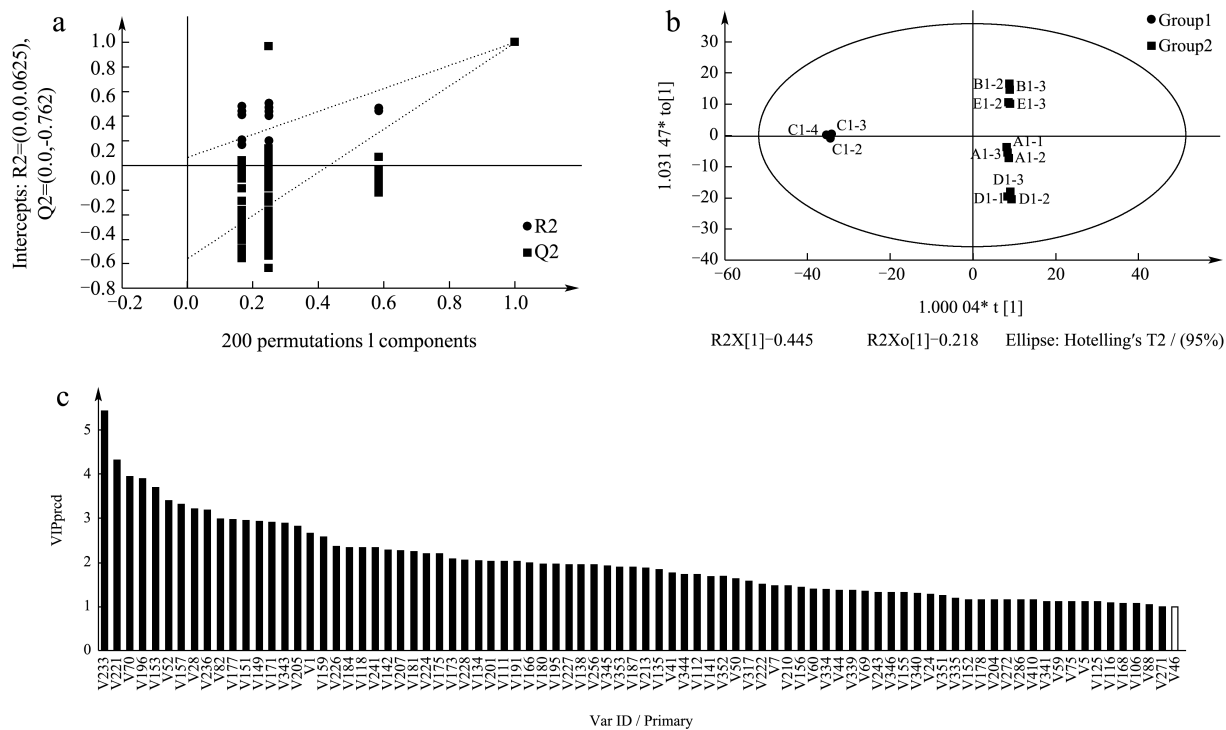
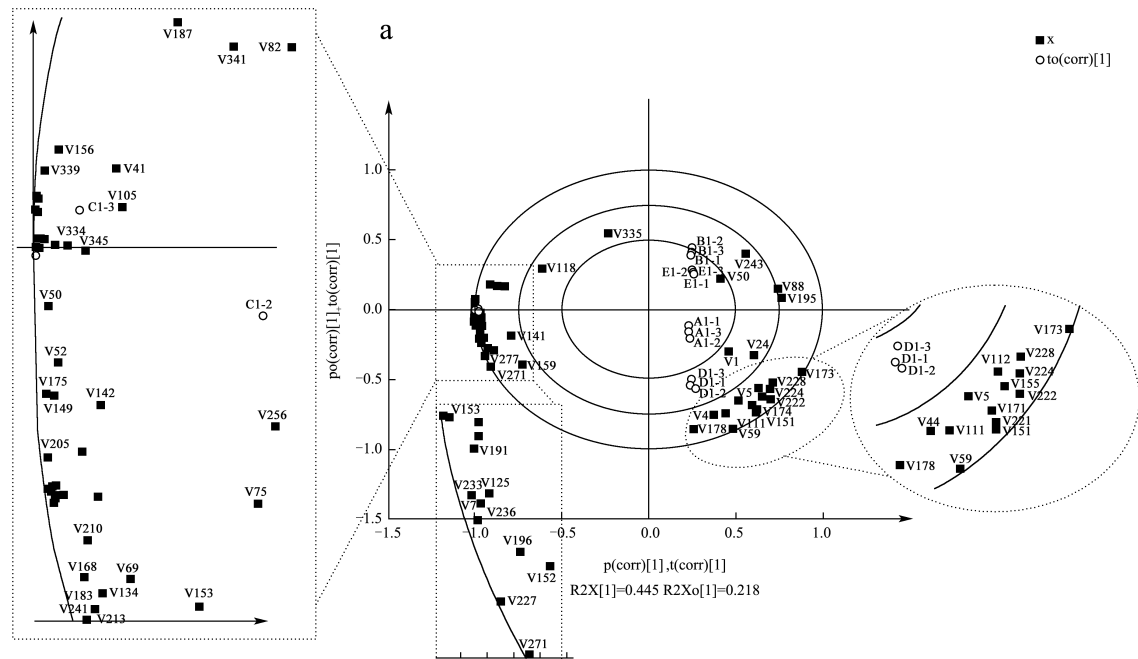


图 4 靖安白茶差异香气化合物分析

Fig.4 Thermogram of physicochemical fractions of different particle size of Jing'an Baicha

注：（a）OPLS-DA 得分图；（b）置换检验图；（c）化合物 VIPpre 值。



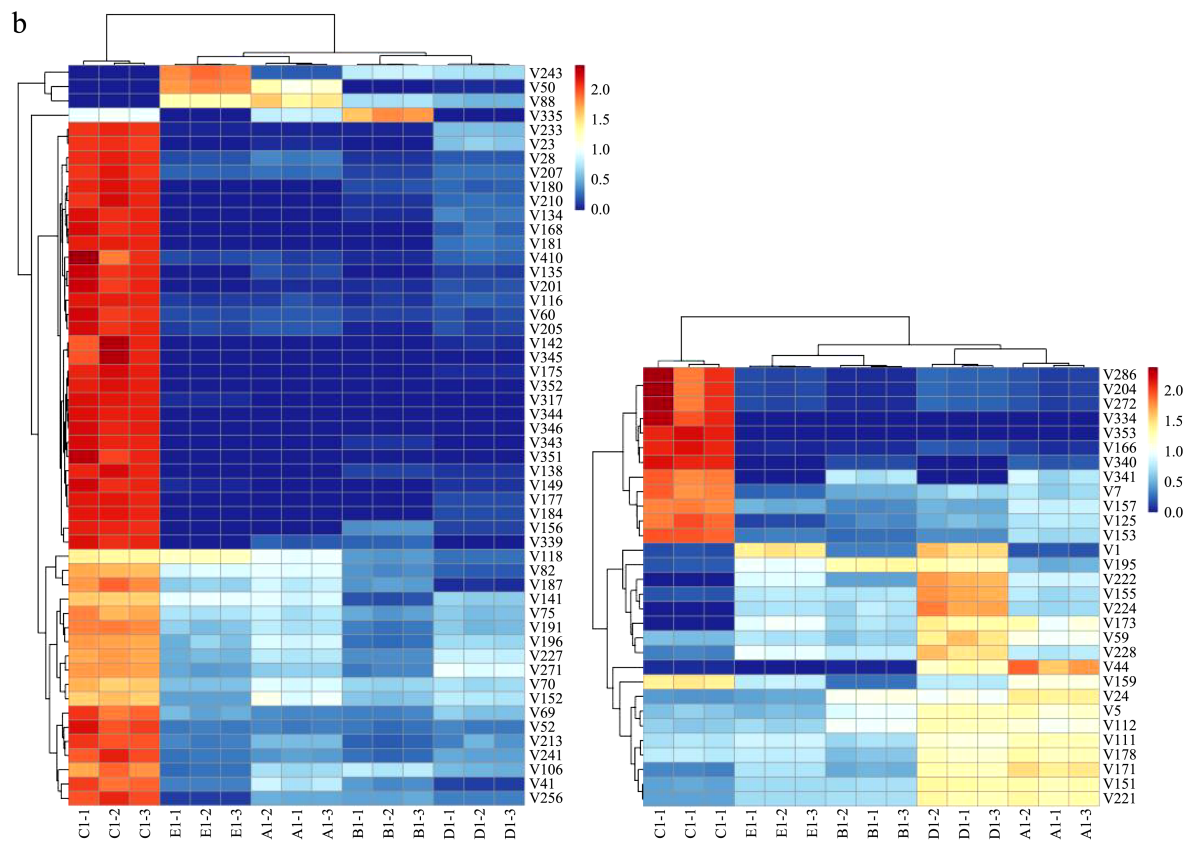


图 5 靖安白茶关键香气化合物分析

Fig.5 Analysis of key aroma compounds of Jing'an Baicha

注: (a) 载荷图; (b) 化合物含量热图。

表 3 靖安白茶关键香气化合物分析结果

Table 3 Analysis results of key aroma compounds of Jing'an baicha

编号	化合物		VIP 预测值	香气属性
V1	2-乙基呋喃	Furan, 2-ethyl-	2.67	甜香, 咖啡香
V111	芳樟醇	Linalool	2.03	花香
V112	壬醛	Nonanal	1.73	玫瑰香, 油脂香
V151	顺-3-己烯基丁酯	Butanoic acid, 3-hexenyl ester, (Z)-	2.96	果香, 清香
V155	丁酸反-2-己烯基酯	Butanoic acid, 2-hexenyl ester, (E)-	1.32	果香, 甜香
V171	二甲基丁酸叶醇酯	cis-3-Hexenyl- α -methylbutyrate	2.93	苹果香, 胡椒香
V173	Z-3-甲基丁酸-3-己烯酯	cis-3-Hexenyl isovalerate	2.10	果香
V178	香叶醇	Geraniol	1.16	玫瑰香, 嫩香, 清香
V195	吲哚	Indole	1.97	花香
V221	己酸叶醇酯	Hexanoic acid, 3-hexenyl ester, (Z)-	4.31	清香, 果香
V222	己酸己酯	Hexanoic acid, hexyl ester	1.51	嫩荚香, 青刀豆香, 果香
V224	己酸反-2-己烯酯	Hexanoic acid, 2-hexenyl ester, (E)-	2.21	清香, 草香
V228	顺茉莉酮	2-Cyclopenten-1-one, 3-methyl-2-(2-pentenyl)-, (Z)-	2.06	花香, 果香
V24	正庚醛	Heptanal	1.29	刺激气味
V243	反式- β -金合欢烯	(E)- β -Farnesene	1.33	花香, 甜香
V44	2,3-二氢-3-甲基-3-苯并呋喃甲醇	3-Benzofuranmethanol,2,3-dihydro-3-methyl-	1.37	—
V5	正己醛	Hexanal	1.11	青草香
V50	2,2,4,6,6-五甲基庚烷	Heptane, 2,2,4,6,6-pentamethyl-	1.64	—
V59	3-己烯酸乙酯	3-Hexenoic acid, ethyl ester	1.12	果香
V88	4-甲基-癸烷	Decane, 4-methyl-	1.05	—

2.3 靖安白茶滋味物质表征

滋味是构成茶叶品质的重要因素^[41]。靖安白茶具有鲜醇的滋味特征，探究构成这一典型滋味特征的物质组成，有利于进一步明确靖安白茶滋味特性。

2.3.1 靖安白茶滋味物质种类分析

滋味是构成茶叶品质的重要因素靖安白茶滋味物质种类多样。靖安白茶样品中 215 种滋味成分被定性分析（图 6），包括有机酸（37 种）、黄酮及其糖苷类化合物（34 种）、氨基酸及其衍生物（26 种）、杂环化合物（17 种）、核苷酸及其衍生物（14 种）、碳水化合物及其衍生物（13 种）、儿茶素（7 种）、维生素（6 种）、醇类化合物（5 种）、脂肪酸（5 种）、萜类化合物（4 种）、醛类化合物（3 种）、生物碱（3 种），以及其他类化合物（41 种）。

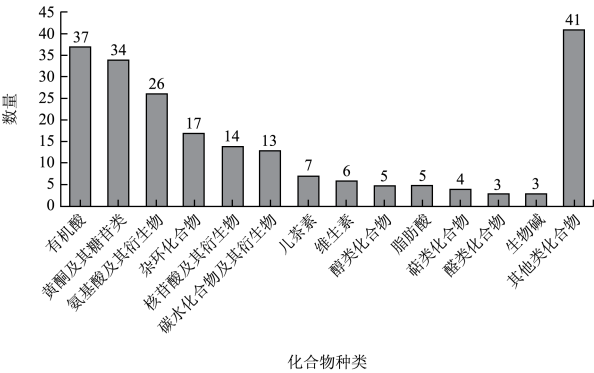


图 6 靖安白茶滋味化合物种类分析

Fig.6 Analysis of flavor compounds in Jing'an Baicha

2.3.2 靖安白茶关键滋味成分鉴定

为探究构成靖安白茶“鲜醇甘爽”滋味的关键成分，首先对靖安白茶中已经鉴定出的 200 余种滋味成分进行 PCA 分析^[32,33]。结果显示（图 7），不同滋味特征的靖安白茶中滋味成分组成存在显著差异，在 X 轴上从右至左按滋味“鲜醇甘爽至“较醇爽”规律分布。靖安白茶 A1 样品具有典型的“鲜醇甘爽”滋味特征，B1 和 C1 样品滋味呈“醇爽尚鲜”，D1 样品滋味呈“尚鲜，较醇爽”，E1 样品滋味呈“较醇爽”。

基于 PCA 分析结果，将滋味“鲜醇甘爽”的靖安白茶 A1 样品与滋味“较醇爽”的靖安白茶 E1 样品进

行 OPLS-DA 分析（图 8a）^[34]，以明确靖安白茶鲜醇滋味的物质组成。基于 $VIP_{pre} > 1$ ^[35] 的标准筛选出 34 个重要差异化合物（图 8c），其中，DL- 精氨酸（X46）、芸香苷（X32）、L- 正亮氨酸（X56）等 19 种差异化合物在滋味鲜醇的靖安白茶样品 A1 中含量较高，D- 半乳糖（X112）、奎宁酸（X106）、鸟嘌呤（X164）等 15 种化合物在滋味鲜醇甘爽的靖安白茶中含量较少，而在滋味“较醇爽”的靖安白茶 E1 中含量较高（图 8d）。

因此，进一步结合热图分析可知（图 9），E1 样品种鸟嘌呤（X164）、6- 氨基-1- 乙基-3- 丙基尿嘧啶（X188）和 7- 甲基-1,5,7- 三氮杂双环[4.4.0]癸-5- 烯（X190）三种化合物的含量显著高于其他样品，可能是影响靖安白茶 E1 呈现“较醇爽”滋味的关键成分^[29]。相反的，L - 正亮氨酸（X56，微苦）、乙炔基苯（X205，-）、DL- 精氨酸（X46，苦味）、L- 茶氨酸（X61，甜味）、烟草胺（X119，苦味）、2- 糠酸（X91，涩味、酸味）、磷化物 a（X143，-）、腺苷（X159，苦味）、伊莫拉明（X140，-）、异槲皮素（X31，苦味）、胆碱（X83，苦味）、金丝桃苷（X14，苦味）、杨梅素-3- 半乳糖苷（X1，-）、芸香苷（X32，苦味）共 14 种化合物在靖安白茶样品 A1 中的含量较高，这 14 种化合物与其他化合物相互协调，对靖安白茶 A1 “鲜醇甘爽”滋味具有重要贡献作用，被认定为靖安白茶鲜醇滋味的关键成分。

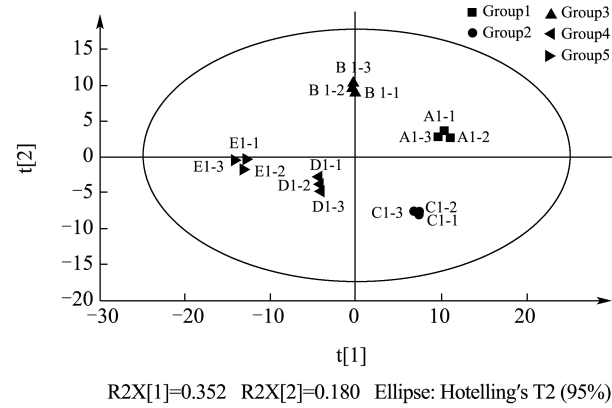


图 7 靖安白茶滋味化合物 PCA 分析

Fig.7 PCA analysis of flavor compounds in Jing'an Baicha

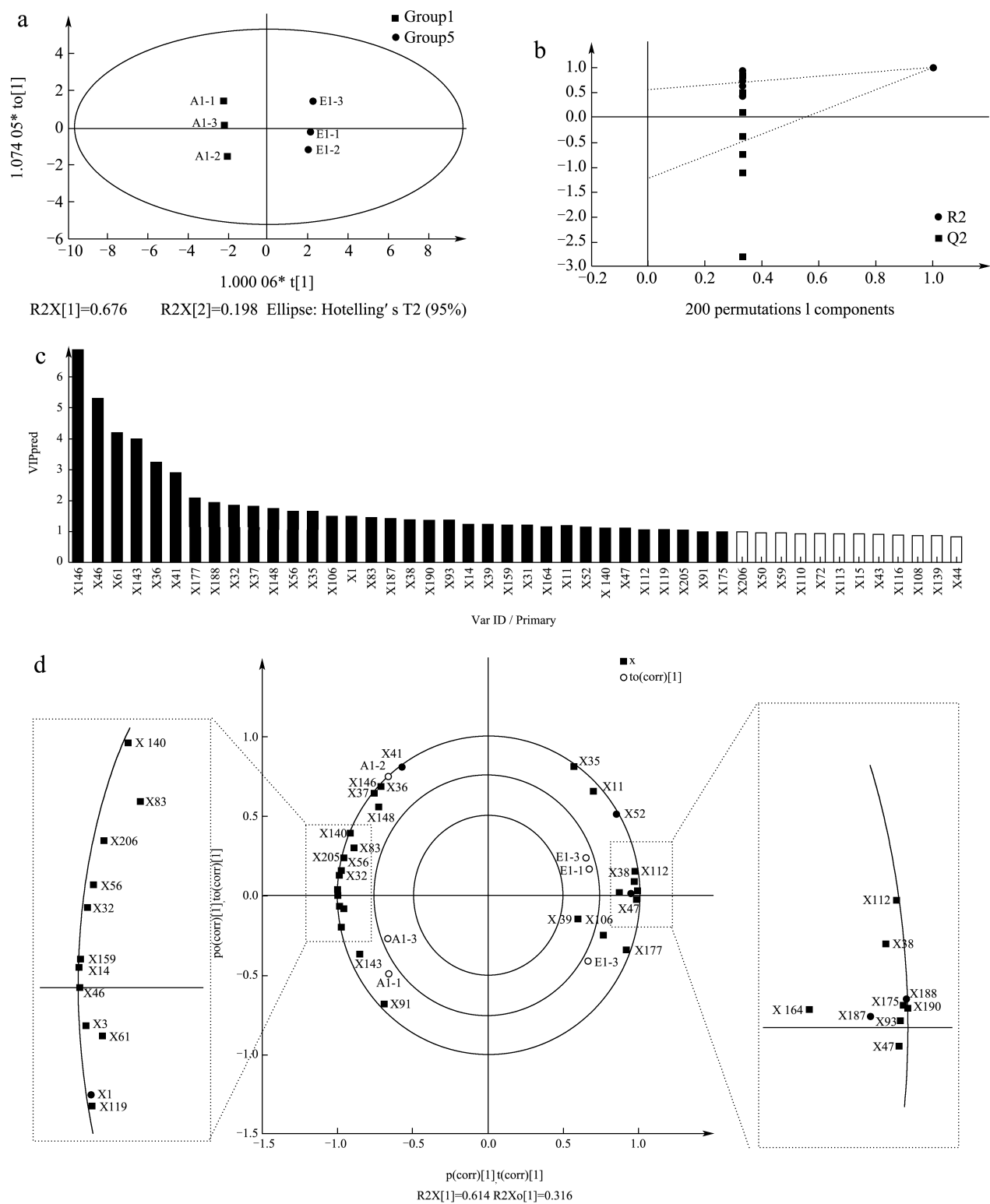


图 8 靖安白茶差异风味化合物分析

Fig.8 Analysis of differential flavor compounds in Jing'an Baicha

注: (a) OPLS-DA 得分图; (b) 置换检验图; (c) 化合物 VIP 预测值; (d) 载荷图。

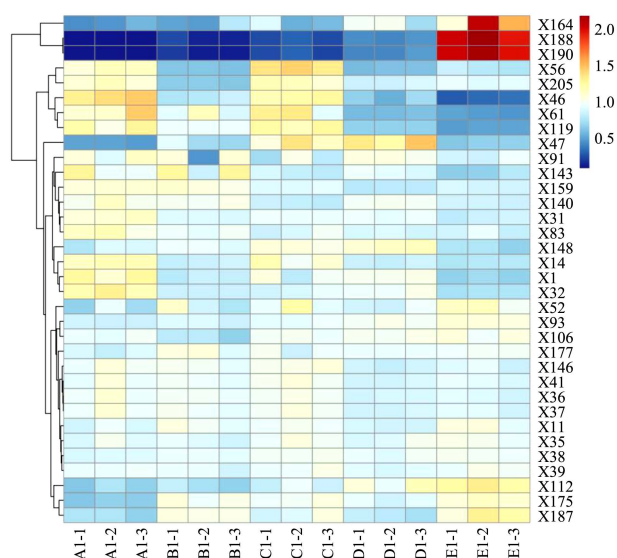


图9 靖安白茶关键滋味化合物热图

Fig.9 Thermogram of key flavor compounds in Jing'an Baicha

3 结论

感官审评结果表明靖安白茶整体品质特征为：凤羽形，芽心壮实，匀整，色泽翠绿泛玉色；汤色嫩绿明亮；香气鲜嫩；滋味鲜醇甘爽；叶底嫩匀。

采用全二维气相色谱-四极杆飞行时间质谱（GC×GC-Q-TOF-MS）技术鉴定出靖安白茶挥发性香气物质 439 种，其中，呈清香或嫩香香气的香叶醇、己酸叶醇酯、己酸己酯、己酸反-2-己烯酯和正己醛与具有甜香、果香属性的 2-乙基呋喃、顺-3-己烯基丁酯、3-己烯酸乙酯、丁酸反-2-己烯基酯、二甲基丁酸叶醇酯、异戊酸叶醇酯和具有花香属性的芳樟醇、壬醛、吲哚、反式- β -金合欢烯、顺茉莉酮是靖安白茶“清、嫩”香气综合呈现的表征性成分。

采用液相色谱-质谱联用（LC-MS）技术鉴定出靖安白茶非挥发性物质 219 种，其中，呈苦味的 L-正亮氨酸、DL-精氨酸、烟草胺、腺苷、异槲皮素、胆碱、金丝桃苷和芸香苷与呈甜味的 L-茶氨酸、呈酸涩味的 2-糠酸是表征靖安白茶“鲜醇”滋味的关键物质。这些具有不同味道属性的化合物与其他微量物质一起协调了靖安白茶“鲜醇”滋味的综合呈现。

后续将根据上述研究结果，对不同等级的靖安白茶挥发性成分以及非挥发性成分的差异进行研究，以期靖安白茶品种选育、香气、滋味品质的提升与调控奠定理论基础。

参考文献

[1] 蔡华春.白茶品质形成研究概述[J].茶叶科学技术,2012,1:15-17.
[2] 程玉龙.安吉白茶的历史渊源及栽培现状[J].茶叶通讯,2007,

3:26-27.
[3] 邓静,王远兴,丁建.白茶与安吉白茶的研究进展[J].食品工业科技,2013,34(4):368-371,377.
[4] 谢文钢,邵济波,韩楠,等.安吉白茶的研究进展[J].福建茶叶,2011,33(6):4-7.
[5] 王梦琪,朱荫,张悦,等.“清香”绿茶的挥发性成分及其关键香气成分分析[J].食品科学,2019,40(22):219-228.
[6] 陈熠敏,何洪,王远兴.靖安白茶与安吉白茶特征香气成分的比较[J].南昌大学学报(理科版),2015,39(6):573-578.
[7] KANEKO S, KUMAZAWA K, MASUDA H, et al. Molecular and sensory studies on the umami taste of Japanese green tea [J]. Journal of Agricultural and Food Chemistry, 2006, 54(7): 2688-2694.
[8] 宛晓春.茶叶生物化学[M].北京:中国农业出版社,2003.
[9] 钟萝.茶叶品质理化分析[M].上海:上海科技出版社,1988.
[10] 金孝芳.绿茶滋味化合物研究[D].重庆:西南大学,2007.
[11] 程启坤,王月根,刘维华,朱珩.绿茶滋味化学鉴定法[J].茶叶科学,1985,1:7-17.
[12] 程启坤.茶叶品种适制性的生化指标—酚氨比[J].中国茶叶,1983,1:38.
[13] SCHARBERT S, HOFMANN T. Molecular definition of black tea taste by means of quantitative studies, taste reconstitution, and omission experiments [J]. Journal of Agricultural and Food Chemistry, 2005, 53(13): 5377-5384.
[14] 黄媛,于娟,任玲,等.不同品种白茶品质及抗氧化活性研究[J].食品科技,2023,48(7):64-70.
[15] TROSZYŃSKA A, NAROLEWSKA O, ROBREDO S, et al. The effect of polysaccharides on the astringency induced by phenolic compounds [J]. Food Quality and Preference, 2009, 21(5): 463-464.
[16] 罗莎莎,舒平平,张萌,等.靖安白茶病虫害绿色防控技术浅析[J].热带农业工程,2022,46(1):24-26.
[17] LI C F, XU Y X, MA J Q, et al. Biochemical and transcriptomic analyses reveal different metabolite biosynthesis profiles among three color and developmental stages in ‘Anji Baicha’ [J]. BMC Plant Biology, 2016, 16(1): 195.
[18] 李芳芳,湛云鹏,郭水莲.靖安白茶气候品质评价分析[J].农业技术与装备,2023,6:129-131.
[19] HUANG S, ZUO T, ZHENG X, et al. Foliar application of glycinebetaine and Zn fertilizer improves both the apparent and functional qualities of albino tea [J]. Food & Function, 2021, 12(19): 9476-9485.
[20] 李明玺,王敏,甘玉迪,等.靖安白茶芽和叶的转录组数据组装及基因功能注释[J].现代食品科技,2018,34(5):93-100,235.
[21] 黄利,曾永强,陈克彪,等.靖安白茶制茶品质及管理、加工技术[J].中国茶叶,2023,45(5):37-41.
[22] 邓静,王远兴,陈赟喆,等.顶空-三重串联四极杆气-质联用法测定靖安白茶香气成分[J].食品科学,2013,34(22):115-118.
[23] 王学渊,刘静宜,洪艳平,等.不同类型江西名茶儿茶素含量及体外抗氧化能力比较[J].食品与机械,2019,35(6):152-158.
[24] CHEN X, YU H, ZHU J, et al. Widely targeted metabolomic analyses of albino tea germplasm ‘Huabai 1’ and ‘Baiye 1’ [J]. All Life, 2021, 14(1): 530-540.
[25] 陈文彬,匡菁,史毅,等.全二维气相色谱飞行时间质谱在现代分析中的应用进展[J].江西中医药,2019,50(3):69-72.

- [26] 许海舰,刘翠哲.液相色谱-质谱联用技术的研究进展[J].承德医学院学报,2017,34(6):513-516.
- [27] VANDENDOOL H, KRATZ P D. A generalization of the retention index system including linear temperature programmed gas-liquid partition chromatography [J]. Journal of Chromatography, 1963, 11: 463-471.
- [28] SHIMODA M, SHIGEMATSU H, SHIRATSUCHI H, et al. Comparison of the odor concentrates by SDE and adsorptive column method from green tea infusion [J]. Journal of Agricultural and Food Chemistry, 1995, 6: 43.
- [29] CHEN Y, HUANG Y W, AN H M, et al. Effects of isolated scenting on the taste quality of broken green tea based on metabolomics [J]. Food Chemistry, 2024, 22: 101454.
- [30] 查昱旻,吴悠,张梁.茶叶中挥发性香气物质研究进展[J].食品安全质量检测学报,2020,11(13):4298-4303.
- [31] 石亚丽,白艳,马婉君,等.安吉白茶挥发性成分及关键呈香成分分析[J].食品科学,2022,43(20):261-268.
- [32] 陶兴林,朱惠霞,张玉鑫,等.基于主成分和聚类分析的加工辣椒品质特性及相关性分析[J].食品研究与开发,2024,45(14):148-156.
- [33] 魏宁果,范芳芳,安瑜,等.基于主成分和聚类分析的不同产地花椒脂肪酸组成的研究[J].中国调味品,2024,49(8):170-174.
- [34] 施丹萍,沈敏,俞振伟,等.基于多组分定量联合主成分分析正交偏最小二乘法-判别分析及熵权优劣解距离法的抗菌消炎胶囊质量差异性评价[J].中国药物与临床,2024,24(12):749-755,817.
- [35] STUPAK M, GOODALL I, TOMANIOVA M, et al. A novel approach to assess the quality and authenticity of Scotch Whisky based on gas chromatography coupled to high resolution mass spectrometry [J]. Analytica Chimica Acta, 2018, 1042: 60-70.
- [36] 黄海涛,敖存,郭敏明,等.花香与清香绿茶的香气组分及品种相关性分析[J].浙江农业科学,2018,59(5):738-741,771.
- [37] 刘盼盼,许勇泉,尹军峰,等.主要水质因子对清香型黄山毛峰茶挥发性成分的影响[J].中国食品学报,2016,16(1):245-257.
- [38] WANG K B, LIU F, LIU Z H, et al. Comparison of catechins and volatile compounds among different types of tea using high performance liquid chromatograph and gas chromatograph mass spectrometer [J]. International Journal of Food Science & Technology, 2011, 46(7): 1406-1412.
- [39] ZHENG X Q, LI Q S, XIANG L P, et al. Recent advances in volatiles of teas [J]. Molecules, 2016, 21(3): 338.
- [40] LIU P P, ZHENG P C, GONG Z M, et al. Comparing characteristic aroma components of bead-shaped green teas from different regions using headspace solid-phase microextraction and gas chromatography-mass spectrometry/olfactometry combined with chemometrics [J]. European Food Research and Technology, 2020, 246(9): 1703-1714.
- [41] 乔大河,陈娟,梁思慧,等.绿茶风味品质形成的研究进展[J].贵茶, 2022,4:5-30.