

HS - GC - IMS 结合 ROAV 分析不同制油工艺 对芜菁籽油特征香气成分的影响

岳 丽¹, 祖力皮牙·买买提¹, 王佳敏¹, 热依拉木·海力力²,
尼格尔热依·亚迪卡尔³, 毛红艳¹, 于 明¹

(1. 新疆维吾尔自治区农业科学院 作物研究所, 乌鲁木齐 830091; 2. 新疆艾力努尔农业科技开发有限公司,
新疆 阿克苏 843600; 3. 新疆农业大学 食品科学与药学学院, 乌鲁木齐 830052)

摘要:旨在为芜菁籽油的开发及品质提升提供依据,探究不同制油工艺对芜菁籽油挥发性成分及香气特征的影响。分别采用低温压榨法、热榨法和溶剂萃取法提取白皮、紫皮芜菁籽中油脂,采用顶空-气相色谱-离子迁移色谱法(HS-GC-IMS)对芜菁籽油的挥发性成分进行检测,结合相对气味活度值(ROAV)分析不同制油工艺白皮、紫皮芜菁籽油特征香气成分,通过正交偏最小二乘法判别分析(OPLS-DA)结合变量重要性投影值(VIP)研究不同制油工艺及不同品种芜菁籽油之间的差异香气化合物。结果表明:芜菁籽油中共检测出10类133种挥发性成分,主要为醛类、酮类、醇类、酯类,其次是杂环类、酸类、醚类等;紫皮芜菁籽油中挥发性物质种类多于白皮芜菁籽油的;热榨法芜菁籽油中挥发性物质种类多于低温压榨法的;溶剂萃取法芜菁籽油中硫醚类化合物总含量高于压榨法的;ROAV分析表明,3-甲硫基丙醛是芜菁籽油风味的主要贡献者;OPLS-DA结合VIP筛选出壬醛(二聚体)、辛醛、3-甲硫基丙醛、庚醛、己醛、异戊醛为差异挥发性化合物,可以用于区分不同制油工艺及不同品种的芜菁籽油。综上,制油工艺和品种影响芜菁籽油风味,可根据开发需求选择不同的制油工艺和品种。

关键词:芜菁籽油;制油工艺;相对气味活度值;正交偏最小二乘法判别分析;挥发性成分

中图分类号:TS225.1;TS224 文献标识码:A 文章编号:1003-7969(2025)08-0050-10

Effect of oil - processing technology on the characteristic aroma components of turnip seed oil by HS - GC - IMS combined with ROAV

YUE Li¹, ZULIPIYA · Maimaiti¹, WANG Jiamin¹, REYILAMU · Hailili²,
NIGEERREYI · Yadikaer³, MAO Hongyan¹, YU Ming¹

(1. Research Institute for Crops, Xinjiang Academy of Agricultural Sciences, Urumqi 830091, China; 2. Xinjiang
Alnuri Agricultural Science and Technology Development Co., Ltd., Akesu 843600, Xinjiang, China; 3. College
of Food Science and Pharmacy, Xinjiang Agricultural University, Urumqi 830052, China)

Abstract: In order to provide a basis for the development and quality improvement of turnip seed oil, the effects of oil - processing technology on the volatile components and aroma characteristics of turnip seed

收稿日期:2024-05-13;修回日期:2025-03-19

基金项目:新疆维吾尔自治区重点研发项目(2022B02058);
中国农村专业技术协会科技小院(柯坪县恰玛古优源农研
科技小院)

作者简介:岳 丽(1990),女,副研究员,硕士,研究方向为
农产品加工(E-mail)Yueli4467@163.com。

通信作者:毛红艳,副研究员,硕士(E-mail)maohongyan1226
@126.com;于 明,研究员,硕士(E-mail)2435742497@qq.com。

oil were analyzed. The oil was extracted from
white - skinned and purple - skinned turnip seed
by low - temperature pressing, hot pressing and
solvent extraction, respectively. The volatile
components of the obtained turnip seed oil were
detected by headspace - gas chromatography - ion
mobility spectrometry (HS - GC - IMS), and the
characteristic aroma components of the white -

skinned and purple – skinned turnip seed oils produced by different oil – processing technology were analyzed by combining with the relative odor activity value (ROAV), and the different aromatic components between different oil – processing technology and different varieties of turnip seed oils were investigated by the orthogonal partial least squares discrimination analysis (OPLS – DA) combined with the variable importance projection (VIP). The results showed that a total of 133 volatile components of 10 categories were detected in turnip seed oil, mainly aldehydes, ketones, alcohols, esters, followed by heterocyclic, acids, ethers, etc. There were more volatile components in purple – skinned turnip seed oil than in white – skinned turnip seed oil, more volatile components in hot pressed turnip seed oil than that in low – temperature pressed turnip seed oil, and the total content of sulfur ethers in turnip seed oil produce by solvent extraction was higher than that produced by pressing method. The results of ROAV showed that 3 – methylthiopropional was the main contributor to the flavor of the turnip seed oil. VIP combined with OPLS – DA screened out nonanal (dimer), octanal, 3 – methylthiopropional, heptanal, hexanal and isovaleraldehyde as differential volatile compounds, which could be used to distinguish between different oil – processing technology and different varieties of turnip seed oil. In conclusion, the oil – processing technology and varieties affect the flavor of turnip seed oil, and different oil – processing technology and varieties can be selected according to the development needs.

Key words: turnip seed oil; oil – processing technology; relative odor activity value; orthogonal partial least squares discrimination analysis; volatile components

芜菁 (*Brassica rapa* L.), 在维吾尔族语中被称为恰玛古, 属十字花科 (Brassicaceae) 芸薹属 (*Brassica*) 植物, 广泛分布于我国西藏、新疆、青海等高海拔地区^[1-3]。芜菁是一种药食两用植物, 具有缓解缺氧、疲劳等作用^[4]。芜菁籽是芜菁干燥成熟的种子, 味苦、辛, 性温, 无毒^[5], 具有开胃消食、温和脾胃、理气宽中、止咳化痰、利湿解毒等多种功效。芜菁籽中油脂含量丰富, 芜菁籽油含有亚油酸、油酸等多种不饱和脂肪酸, 具有降血压、调节血脂等生理功能, 是一种具有保健作用的油脂^[6]。

挥发性化合物的种类和含量是构成植物油风味品质的重要指标, 其易受植物品种、成熟度、贮藏条件和加工工艺等因素的影响^[7]。研究表明, 不同的加工方法对夏威夷果油^[8]和芍药籽油^[9]的理化性质、化学成分、抗氧化活性和挥发性成分有显著影响。辛明航等^[10]采用顶空固相微萃取 – 气相色谱 – 质谱 (HS – SPME – GC – MS) 及电子鼻比较了不同提取方法制备油莎豆油的香气成分差异, 结果表明, 油莎豆油挥发性化合物的组成及相对含量受提取方法的影响较大, 醛类化合物含量在超临界 CO₂ 萃取法及压榨法油莎豆油中最高, 烷烃类化合物含量在浸出法油莎豆油中最高。

目前, 油脂挥发性化合物的检测技术多样, 其中顶空 – 气相色谱 – 离子迁移色谱法 (HS – GC –

IMS) 是一种无需对样品进行预处理且具有高灵敏度的挥发性化合物可视化分析技术, 已被用于油脂挥发性风味物质检测与鉴定^[11]。当前关于芜菁籽油的研究集中于提取条件优化及脂肪酸组成分析^[12-13], 对于多种提取方法制备的芜菁籽油挥发性化合物的研究相对较少, 且不同品种之间挥发性化合物的比较研究也较少。本研究以白皮、紫皮芜菁籽为原料, 分别采用低温压榨法、热榨法和溶剂萃取法制备芜菁籽油, 利用 HS – GC – IMS 对芜菁籽油挥发性物质进行分析, 通过相对气味活度值 (ROAV) 分析芜菁籽油的特征香气成分, 再结合正交偏最小二乘法判别分析 (OPLS – DA) 和变量重要性投影值 (VIP) 研究不同制油工艺及不同品种芜菁籽油的差异香气化合物, 以期对芜菁籽油的开发及品质提升提供依据。

1 材料与方法

1.1 实验材料

1.1.1 原料与试剂

白皮、紫皮芜菁籽 (水分含量 4.0% ~ 5.0%), 产自新疆柯坪, 由新疆艾力努尔农业科技开发有限公司提供。石油醚 (60 ~ 90 ℃)、2 – 丁酮、2 – 戊酮、2 – 己酮、2 – 庚酮、2 – 辛酮、2 – 壬酮, 均为分析纯。

1.1.2 仪器与设备

DFY – 600 型高速万能粉碎机, AZ – B301 榨油

机,DZKW-9-4 电热恒温水浴锅,RE-52 旋转蒸发仪,气相色谱离子迁移谱联用仪。

1.2 实验方法

1.2.1 芜菁籽油的制备

低温压榨法:将芜菁籽筛选、除杂后,置于榨油机中,设置压榨模式为低温压榨,榨取芜菁籽油,4℃静置 12 h 后,过滤除去杂质,得到低温压榨法芜菁籽油(白皮、紫皮低温压榨芜菁籽油分别记为 oil 1、oil 5),置于 4℃冰箱保存。

热榨法:将芜菁籽筛选、除杂后,置于榨油机中,设置压榨模式为热榨,先炒制 15 min,然后开始榨油,4℃静置 12 h 后,过滤除去杂质,得到热榨法芜菁籽油(白皮、紫皮热榨芜菁籽油分别记为 oil 2、oil 4),置于 4℃冰箱保存。

溶剂萃取法:将芜菁籽筛选、除杂后,粉碎,采用索氏提取器,以石油醚为提取溶剂,于 80℃下提取 6 h,所得溶液经旋转蒸发除去石油醚后放入 105℃烘箱烘 2 h,待石油醚完全挥发后即得溶剂萃取法芜菁籽油(白皮、紫皮溶剂萃取法芜菁籽油分别记为 oil 3、oil 6),置于 4℃冰箱保存。

1.2.2 芜菁籽油酸值的测定

参照 GB 5009.229—2016《食品安全国家标准 食品中酸价的测定》测定芜菁籽油酸值。

1.2.3 芜菁籽油中挥发性成分的测定

取 0.1 g 样品于 20 mL 顶空瓶中,90℃孵育 20 min 进行 HS-GC-IMS 测定。测定条件:顶空进样针温度 95℃,进样量 500 μL;MXT-5 色谱柱(15 m × 0.53 mm × 1 μm),色谱柱温度 60℃;漂移气和载气均为高纯氮(99.999%),漂移气流速 75 mL/min,载气流速为 0~2 min 2.00 mL/min,2~10 min 从 2.00 mL/min 增至 10.00 mL/min,10~20 min 从 10.00 mL/min 增至 100.00 mL/min,20~30 min 从 100.00 mL/min 增至 150.00 mL/min;总分析时间 30 min。

定性分析:基于 GC 保留指数(RI)和 IMS 相对迁移时间,与内置的 NIST 数据库和 IMS 数据库进行匹配。

定量分析:基于峰信号值强度,通过 Quantification 功能进行半定量,按照峰面积归一化法计算各组分的相对含量。

1.2.4 芜菁籽油特征香气成分的确定

参考刘登勇等^[14]的方法计算每种挥发性成分的 ROAV,根据 ROAV 判断某一种挥发性成分对芜菁籽油风味的贡献程度,以此确定芜菁籽油的特征香气成分。设定对芜菁籽油风味贡献度最大(相对含量与气味阈值比值最大)的化合物 ROAV 为 100,

其他化合物的 ROAV 按式(1)计算^[15]。一般地,当某种挥发性物质的 ROAV 大于或等于 1 时可认为是该样品的特征香气物质,ROAV 大于或等于 0.1 而小于 1 时可认为对该样品的香气具有重要的修饰作用^[16]。

$$V_{\text{ROA}} = \frac{C_i}{C_{\text{stan}}} \times \frac{T_{\text{stan}}}{T_i} \times 100 \quad (1)$$

式中: V_{ROA} 为挥发性化合物的 ROVA; C_i 、 C_{stan} 分别为各挥发性化合物和对样品风味贡献度最大化合物的相对含量; T_i 、 T_{stan} 分别为各挥发性化合物和对样品风味贡献度最大化合物的气味阈值。

1.2.5 数据处理

所有实验均重复 3 次,结果以“均值 ± 标准差”表示。利用 Reporter 插件直接对比样品之间的谱图差异,通过 Gallery Plot 插件进行指纹图谱对比,采用 SIMCA 14.1 软件进行 OPLS-DA 确定样品间的差异性,利用 SPSS 25.0 软件进行单因素方差分析。

2 结果与分析

2.1 不同方法制备的芜菁籽油酸值

3 种方法制备的芜菁籽油酸值见表 1。

表 1 3 种方法制备的芜菁籽油酸值

Table 1 Acid value of turnip seed oil prepared by three methods

芜菁籽油	酸值(KOH)/(mg/g)
oil 1	0.56
oil 2	0.77
oil 3	0.80
oil 4	0.85
oil 5	0.78
oil 6	0.85

由表 1 可看出,同一品种 3 种制油工艺中低温压榨法的芜菁籽油酸值最低,同一制油工艺 2 个品种中白皮芜菁籽油酸值小于紫皮芜菁籽油的。

2.2 不同制油工艺芜菁籽油挥发性成分谱图差异

不同制油工艺芜菁籽油挥发性成分 HS-GC-IMS 二维图谱见图 1。图中左侧红色直线为反应离子峰,每个点代表样品中的一种挥发性有机化合物,图中颜色反映了峰强度,白色表示峰强度较低,即物质含量较低,红色则表示物质含量较高^[17]。

由图 1 可知,大多数信号出现在保留时间 0~800 s 和迁移时间 4~8 ms 内,不同品种及不同制油工艺芜菁籽油挥发性化合物存在一定的差异。相比于白皮芜菁籽油,紫皮芜菁籽油中挥发性物质种类更多,其中部分化合物含量更高。对比 3 种制油工艺可知,热榨法芜菁籽油中挥发性物质种类多于低温压榨法,溶剂萃取法芜菁籽油的挥发性物质种类居中。

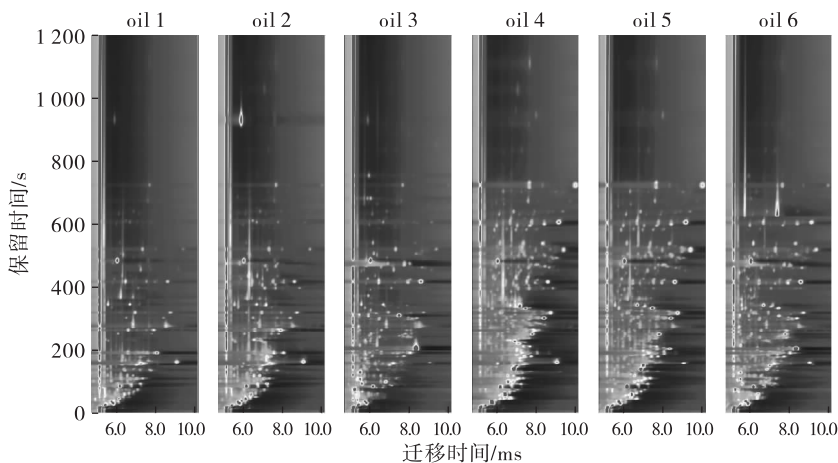


图 1 不同制油工艺芜菁籽油挥发性成分 HS - GC - IMS 二维图谱

Fig. 1 Two - dimensional chromatogram of volatile components of turnip seed oil produced by different oil - processing techniques using HS - GC - IMS

2.3 不同制油工艺芜菁籽油挥发性化合物指纹图谱分析

为比较不同制油工艺对芜菁籽油挥发性化合物种类及相对含量的影响,通过 Gallery Plot 插件生成芜菁籽油挥发性化合物指纹图谱,如图 2 所示,每行代表一个芜菁籽油样品中选取的全部信号峰,每列

代表不同品种或不同制油工艺芜菁籽油中同一挥发性化合物的信号峰,颜色深代表挥发性化合物含量高,颜色浅代表挥发性化合物含量低。未鉴定出的未知挥发性化合物以数字表示,部分挥发性化合物由于浓度和自身特性的不同存在单体(M)和二聚体(D)。

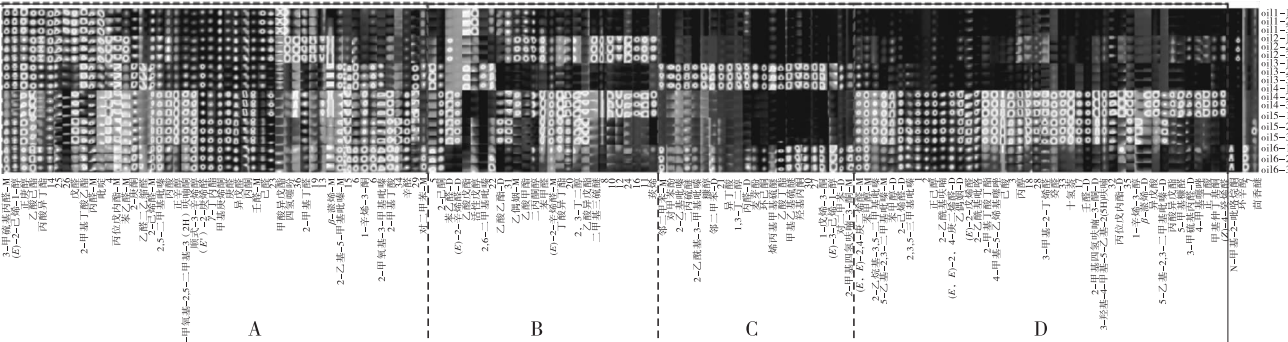


图 2 芜菁籽油挥发性成分 HS - GC - IMS 指纹图谱

Fig. 2 HS - GC - IMS fingerprints of volatile components of turnip seed oil

从图 2 可以看出,3 种制油工艺、不同品种芜菁籽油的挥发性化合物种类及含量存在差异,紫皮芜菁籽油中检出的化合物多于白皮芜菁籽油。A 区为不同制油工艺、不同品种芜菁籽油中共有的挥发性成分,共 50 种。B 区中苣烯、二甲基三硫醚、乙酸异戊酯、2,3 - 丁二醇、丁酸异丁酯、(E) - 2 - 辛烯醛、苯甲醛、二丙酮醇、乙酸甲酯、乙偶姻、乙酸乙酯(二聚体)为热榨法芜菁籽油相对含量较高的物质。C 区为溶剂萃取法芜菁籽油的特征峰区域,该区域共有 23 种挥发性物质,定性出 20 种,主要是硫醚类、杂环类等物质,推测这类物质含量升高与石油醚残留或此类物质在石油醚中溶解度^[18] 较高有关。D 区为与低温压榨法芜菁籽油相比,热榨法芜菁籽油中含量增加的挥发性化合物,且在紫皮芜菁籽油中

挥发性化合物相对含量更高,该区包括 10 种醛类、3 种酯类、5 种醇类、3 种酮类、3 种酸类、9 种杂环类、1 种烯烃类及 1 种其他类化合物。还有 4 种挥发性物质在不同制油工艺、不同品种芜菁籽油中的变化无规律。

2.4 不同制油工艺芜菁籽油挥发性化合物定性定量结果

芜菁籽油样品中共检测到 133 种挥发性成分,已定性 97 种,未定性 36 种。表 2 为定性的芜菁籽油挥发性化合物定量结果。

由表 2 可知,97 种已定性化合物包含 21 种醛类(总含量 22.27% ~ 33.31%)、13 种酮类(总含量 11.90% ~ 21.67%)、15 种醇类(总含量 9.53% ~ 21.03%)、14 种酯类(总含量 5.97% ~ 17.17%)、

16 种杂环类(总含量 4.51% ~ 8.12%)、6 种酸类(总含量 1.21% ~ 3.04%)、5 种醚类(总含量 0.55% ~ 4.00%)、2 种烯炔类(总含量 0.31% ~ 0.77%)、2 种酚类(总含量 0.15% ~ 1.33%)和 3 种其他类(总含量 0.44% ~ 2.18%)。芜菁籽油中醛类物质相对含量最高,其中:丙醛含量最高,主要呈现刺激性气味;其次为异戊醛、壬醛、(*E*)-2-庚烯醛、3-甲硫基丙醛。热榨法芜菁籽油中癸醛、(*E*)-2-辛烯醛、苯乙醛含量显著高于低温压榨法的,热榨法芜菁籽油中苯乙醛含量较高可能是热榨时苯丙氨酸热降解生成了苯乙醛导致。

酮类化合物是通过氨基酸降解和美拉德反应生成的,具有黄油味和果味^[19]。芜菁籽油中酮类化合物中丙酮含量最高,呈现黄油、奶油味(源自 <http://www.flavornet.org/flavornet.html>,下同),甲基庚烯酮含量次之,呈现甜香、柑橘果香,带有青草气。芜菁籽油酸类化合物中丙酸含量最高,且低温压榨法芜菁籽油中含量较高,具有刺激性气味。芜菁籽油酯类化合物中乙酸甲酯和 2-甲基丁酸乙酯含量最高,具有清鲜、甜香味。芜菁籽油中的硫醚类物质包括二丙硫醚、烯丙基甲基硫醚、二甲基三硫醚和甲基

乙基硫醚。溶剂萃取法芜菁籽油中的硫醚类化合物总含量高于压榨法芜菁籽油的,这可能与溶剂萃取时石油醚残留有关;热榨法芜菁籽油中二甲基三硫醚平均含量高于低温压榨法的,可能是热榨过程中 S-甲基蛋氨酸的热降解导致的^[20]。异硫氰酸酯类化合物为十字花科植物的特征挥发性风味成分。周琦等^[21]研究了不同种植区域浓香菜籽油中香气成分的含量,结果表明,双低浓香菜籽油中 3-丁烯基异硫氰酸酯的气味活度值大于 10,对双低浓香菜籽油整体气味有显著贡献。张欢欢等^[22]研究表明,3-丁烯基异硫氰酸酯是高芥酸浓香菜籽油中关键风味物质之一。本实验在芜菁籽油中未检出异硫氰酸酯类化合物,有可能是本研究中的原料芜菁籽中芥酸含量低或芜菁籽油中异硫氰酸酯类化合物含量低、易变化。

杂环类物质主要包括吡嗪、呋喃、吡咯等,是由美拉德反应生成的^[23]。吡嗪类化合物赋予芜菁籽油坚果香和焙烤香;呋喃类化合物主要呈现焦糖味和坚果香;吡咯类化合物具有令人愉悦的爆米花香和焦糖味,和美拉德反应中产生的烤、熟和烧焦味相关^[24-25]。

表 2 芜菁籽油挥发性化合物定性定量结果
Table 2 Quantitative and qualitative results of volatile compounds in turnip seed oil

化合物	RI	迁移 时间/ms	相对含量/%					
			oil 1	oil 2	oil 3	oil 4	oil 5	oil 6
醛类								
(<i>Z</i>)-4-癸烯醛	1 203.6	1.371 97	0.31 ± 0.05 ^c	0.55 ± 0.00 ^b	0.19 ± 0.01 ^d	0.11 ± 0.01 ^f	0.59 ± 0.02 ^a	0.16 ± 0.04 ^e
癸醛	1 180.3	1.545 27	0.16 ± 0.05 ^d	0.25 ± 0.00 ^c	0.14 ± 0.01 ^e	0.48 ± 0.01 ^a	0.42 ± 0.01 ^b	0.15 ± 0.04 ^d
壬醛	1 101.3	1.482 98	1.61 ± 0.05 ^{cd}	1.63 ± 0.00 ^{cd}	1.28 ± 0.01 ^d	5.13 ± 0.04 ^a	4.43 ± 0.01 ^b	1.78 ± 0.04 ^c
(<i>E</i>)-2-辛烯醛	1 065.1	1.335 52	0.34 ± 0.05 ^d	0.41 ± 0.00 ^c	0.36 ± 0.01 ^{cd}	0.88 ± 0.02 ^a	0.75 ± 0.01 ^b	0.32 ± 0.04 ^d
苯乙醛	1 066.0	1.537 94	0.40 ± 0.05 ^b	0.63 ± 0.00 ^a	0.32 ± 0.01 ^{cd}	0.34 ± 0.02 ^c	0.30 ± 0.00 ^{de}	0.28 ± 0.04 ^e
(<i>E,E</i>)-2,4-庚二烯醛	1 017.3	1.196 37	0.63 ± 0.05 ^d	0.66 ± 0.00 ^d	1.00 ± 0.01 ^c	1.59 ± 0.03 ^b	1.70 ± 0.04 ^b	1.89 ± 0.04 ^a
辛醛	1 006.5	1.818 56	0.50 ± 0.05 ^d	0.64 ± 0.00 ^d	0.49 ± 0.01 ^d	2.49 ± 0.08 ^a	1.61 ± 0.10 ^b	1.34 ± 0.04 ^c
5-甲基糠醛	964.0	1.470 98	0.11 ± 0.05 ^b	0.13 ± 0.00 ^b	0.09 ± 0.01 ^b	0.12 ± 0.01 ^b	0.54 ± 0.06 ^a	0.09 ± 0.04 ^b
苯甲醛	956.8	1.459 49	0.38 ± 0.05 ^b	0.62 ± 0.00 ^a	0.18 ± 0.11 ^c	0.53 ± 0.03 ^{ab}	0.53 ± 0.02 ^{ab}	0.20 ± 0.04 ^c
(<i>E</i>)-2-庚烯醛	955.6	1.667 98	1.62 ± 0.05 ^c	1.37 ± 0.00 ^c	3.08 ± 0.01 ^a	2.54 ± 0.23 ^b	1.58 ± 0.10 ^c	2.72 ± 0.04 ^b
3-甲硫基丙醛	916.6	1.081 78	2.00 ± 0.05 ^{bc}	2.31 ± 0.00 ^b	1.12 ± 0.01 ^d	1.72 ± 0.02 ^c	3.23 ± 0.02 ^a	1.88 ± 0.04 ^c
庚醛	898.7	1.693 38	0.89 ± 0.05 ^d	0.88 ± 0.00 ^d	0.98 ± 0.01 ^{cd}	2.14 ± 0.04 ^a	1.60 ± 0.05 ^b	1.07 ± 0.04 ^c
2-己烯醛	844.1	1.175 81	0.89 ± 0.05 ^d	0.88 ± 0.00 ^d	1.29 ± 0.01 ^c	2.46 ± 0.02 ^a	1.95 ± 0.00 ^b	1.98 ± 0.04 ^b
3-甲基-2-丁烯醛	798.2	1.359 73	0.51 ± 0.05 ^b	0.52 ± 0.00 ^b	0.31 ± 0.01 ^c	0.72 ± 0.05 ^a	0.74 ± 0.06 ^a	0.22 ± 0.04 ^d
己醛	787.1	1.558 83	3.31 ± 1.05 ^a	1.58 ± 0.00 ^b	1.65 ± 0.01 ^b	1.33 ± 0.12 ^c	0.90 ± 0.04 ^d	1.52 ± 1.04 ^b
(<i>E</i>)-2-戊烯醛	744.1	1.356 76	1.38 ± 0.05 ^c	1.10 ± 0.00 ^d	0.94 ± 0.01 ^e	2.09 ± 0.11 ^a	1.70 ± 0.05 ^b	1.35 ± 0.04 ^c
乙醛二乙缩醛	732.0	1.124 46	0.32 ± 0.05 ^b	0.15 ± 0.00 ^c	0.35 ± 0.01 ^a	0.06 ± 0.00 ^e	0.03 ± 0.00 ^f	0.12 ± 0.04 ^d
戊醛	690.3	1.422 76	0.79 ± 0.05 ^a	0.55 ± 0.00 ^b	0.23 ± 0.01 ^f	0.51 ± 0.03 ^c	0.41 ± 0.01 ^d	0.31 ± 0.04 ^e
2-甲基丁醛	653.6	1.401 64	1.20 ± 0.05 ^b	1.47 ± 0.00 ^a	0.33 ± 0.01 ^e	0.66 ± 0.08 ^c	0.76 ± 0.03 ^c	0.53 ± 0.04 ^d
异戊醛	629.5	1.198 37	4.43 ± 0.05 ^a	3.23 ± 0.00 ^b	3.00 ± 0.01 ^{bc}	4.45 ± 0.34 ^a	2.64 ± 0.01 ^c	2.73 ± 0.04 ^c
丙醛	456.2	1.054 50	5.86 ± 0.05 ^a	3.71 ± 0.05 ^c	4.95 ± 0.05 ^b	2.96 ± 0.12 ^d	2.23 ± 0.09 ^e	3.16 ± 1.04 ^d

续表 2

化合物	RI	迁移 时间/ms	相对含量/%					
			oil 1	oil 2	oil 3	oil 4	oil 5	oil 6
酮类								
N-甲基-2-吡咯烷酮	1 065.1	1.432 51	0.66 ± 0.05 ^b	0.57 ± 0.00 ^b	0.65 ± 0.01 ^b	0.65 ± 0.03 ^b	0.72 ± 0.01 ^b	7.54 ± 0.04 ^a
4-甲氧基-2,5-二甲 基-3(2H)-咪唑酮	1 061.8	1.190 03	0.30 ± 0.05 ^{bc}	0.19 ± 0.00 ^d	0.31 ± 0.01 ^{abc}	0.35 ± 0.02 ^a	0.28 ± 0.01 ^c	0.33 ± 0.04 ^{ab}
甲基庚烯酮	988.4	1.172 20	5.00 ± 0.05 ^a	3.08 ± 2.00 ^d	4.07 ± 0.01 ^b	3.55 ± 0.13 ^c	2.52 ± 0.06 ^c	4.18 ± 0.04 ^b
1-辛烯-3-酮	977.8	1.677 83	0.06 ± 0.05 ^e	0.06 ± 0.00 ^e	0.37 ± 0.01 ^b	0.18 ± 0.02 ^d	0.23 ± 0.01 ^c	0.44 ± 0.04 ^a
环己酮	893.2	1.452 35	0.36 ± 0.05 ^c	0.27 ± 0.00 ^d	3.16 ± 0.01 ^a	0.24 ± 0.03 ^d	0.34 ± 0.01 ^c	0.85 ± 0.04 ^b
2-庚酮	885.0	1.256 16	0.33 ± 0.05 ^c	0.35 ± 0.00 ^c	0.63 ± 0.01 ^a	0.25 ± 0.01 ^d	0.19 ± 0.01 ^e	0.45 ± 0.04 ^b
2-甲基四氢呋喃-3-酮	811.8	1.072 33	0.32 ± 0.05 ^c	0.28 ± 0.00 ^c	0.53 ± 0.01 ^b	0.36 ± 0.02 ^c	0.50 ± 0.00 ^b	0.84 ± 0.04 ^a
2-己酮	777.4	1.499 97	0.20 ± 0.05 ^e	0.18 ± 0.00 ^e	0.64 ± 0.01 ^d	0.80 ± 0.03 ^b	0.86 ± 0.03 ^a	0.75 ± 0.04 ^c
甲基仲丁基酮	751.5	1.174 48	0.03 ± 0.05 ^c	0.13 ± 0.00 ^b	0.13 ± 0.01 ^b	0.03 ± 0.00 ^c	0.30 ± 0.01 ^a	0.04 ± 0.04 ^c
1-戊烯-3-酮	685.4	1.075 62	0.07 ± 0.05 ^e	0.07 ± 0.00 ^e	1.12 ± 0.01 ^a	0.06 ± 0.04 ^c	0.02 ± 0.00 ^e	0.89 ± 0.04 ^b
羟基丙酮	680.8	1.041 30	0.26 ± 0.05 ^c	0.13 ± 0.00 ^d	0.83 ± 0.01 ^a	0.06 ± 0.03 ^e	0.02 ± 0.00 ^f	0.64 ± 0.04 ^b
丙酮	491.8	1.116 54	5.66 ± 0.05 ^b	4.52 ± 0.05 ^c	3.93 ± 0.05 ^d	4.12 ± 0.14 ^d	6.00 ± 0.07 ^a	3.19 ± 0.04 ^e
乙偶姻	729.2	1.333 00	1.34 ± 0.05 ^c	2.07 ± 0.00 ^b	0.59 ± 0.01 ^d	3.85 ± 0.11 ^a	4.16 ± 0.02 ^a	1.53 ± 0.04 ^c
醇类								
环辛醇	1 176.3	1.145 18	1.80 ± 0.05 ^b	11.10 ± 0.05 ^a	1.65 ± 0.05 ^b	0.44 ± 0.03 ^c	0.46 ± 0.02 ^c	0.65 ± 0.04 ^c
正辛醇	1 080.2	1.472 52	0.33 ± 0.05 ^b	0.26 ± 0.00 ^c	0.21 ± 0.01 ^d	0.37 ± 0.01 ^a	0.37 ± 0.01 ^a	0.21 ± 0.04 ^d
顺式-3-辛烯醇	1 051.0	1.296 41	0.66 ± 0.05 ^d	0.72 ± 0.00 ^d	0.66 ± 0.01 ^d	1.17 ± 0.06 ^b	0.95 ± 0.01 ^c	1.29 ± 0.04 ^a
苯甲醇	1 050.0	1.509 41	0.40 ± 0.05 ^e	0.54 ± 0.00 ^c	0.46 ± 0.01 ^d	1.06 ± 0.03 ^a	1.03 ± 0.04 ^a	0.86 ± 0.04 ^b
1-辛烯-3-醇	980.6	1.597 39	0.04 ± 0.05 ^e	0.11 ± 0.00 ^d	0.14 ± 0.01 ^c	0.25 ± 0.03 ^a	0.17 ± 0.00 ^b	0.18 ± 0.04 ^b
正庚醇	974.5	1.402 03	0.83 ± 0.05 ^a	0.37 ± 0.00 ^c	0.57 ± 0.01 ^b	0.32 ± 0.02 ^d	0.22 ± 0.01 ^e	0.29 ± 0.04 ^d
正己醇	886.4	1.629 85	0.47 ± 0.05 ^e	0.66 ± 0.00 ^d	1.13 ± 0.01 ^c	1.94 ± 0.02 ^b	2.28 ± 0.01 ^a	1.13 ± 0.04 ^c
(E)-2-己烯-1-醇	871.0	1.330 90	2.94 ± 0.05 ^a	1.49 ± 0.05 ^c	1.74 ± 0.05 ^b	1.03 ± 0.01 ^d	0.51 ± 0.01 ^e	0.95 ± 0.04 ^d
二丙酮醇	856.2	1.532 69	1.77 ± 0.05 ^c	3.47 ± 0.00 ^a	0.66 ± 0.01 ^e	0.87 ± 0.03 ^e	2.56 ± 0.05 ^b	1.26 ± 0.04 ^d
(E)-3-己烯-1-醇	836.2	1.525 94	0.02 ± 0.05 ^f	0.04 ± 0.00 ^e	0.21 ± 0.01 ^b	0.11 ± 0.02 ^c	0.08 ± 0.00 ^d	0.37 ± 0.04 ^a
糠醇	828.5	1.122 54	0.26 ± 0.05 ^b	0.14 ± 0.00 ^d	0.72 ± 0.01 ^a	0.11 ± 0.01 ^d	0.06 ± 0.00 ^e	0.20 ± 0.04 ^c
1,3-丁二醇	783.7	1.120 80	0.25 ± 0.05 ^b	0.05 ± 0.00 ^d	0.45 ± 0.01 ^a	0.04 ± 0.00 ^d	0.03 ± 0.00 ^e	0.08 ± 0.04 ^c
丙醇	571.5	1.245 89	1.81 ± 0.05 ^c	1.87 ± 0.00 ^c	0.71 ± 0.01 ^d	2.14 ± 0.04 ^b	2.86 ± 0.01 ^a	1.93 ± 0.04 ^c
2,3-丁二醇	781.7	1.365 07	0.16 ± 0.05 ^b	0.11 ± 0.00 ^c	0.08 ± 0.01 ^d	0.26 ± 0.01 ^a	0.24 ± 0.03 ^a	0.16 ± 0.04 ^b
活性戊醇	761.2	1.477 19	0.28 ± 0.05 ^a	0.10 ± 0.00 ^c	0.13 ± 0.01 ^b	0.10 ± 0.00 ^c	0.02 ± 0.00 ^d	0.12 ± 0.04 ^{bc}
酯类								
2-甲基丁酸丁酯	1 045.2	1.365 54	0.08 ± 0.05 ^d	0.12 ± 0.00 ^c	0.08 ± 0.01 ^d	0.29 ± 0.01 ^a	0.31 ± 0.01 ^a	0.17 ± 0.04 ^b
乙酸己酯	1 007.3	1.414 98	1.28 ± 0.05 ^a	1.10 ± 0.02 ^b	1.01 ± 0.01 ^{bc}	0.48 ± 0.01 ^d	0.56 ± 0.01 ^d	0.92 ± 1.04 ^c
丙位戊内酯	982.9	1.131 16	0.52 ± 0.05 ^c	0.64 ± 0.00 ^b	0.78 ± 0.01 ^a	0.33 ± 0.06 ^e	0.36 ± 0.01 ^e	0.44 ± 0.04 ^d
丙酸异戊酯	963.5	1.359 35	0.24 ± 0.05 ^{cd}	0.53 ± 0.00 ^b	0.20 ± 0.01 ^d	0.31 ± 0.02 ^c	0.76 ± 0.07 ^a	0.20 ± 0.04 ^d
γ-丁内酯	914.1	1.299 24	1.17 ± 0.05 ^a	0.91 ± 0.00 ^b	0.84 ± 0.01 ^b	1.22 ± 0.06 ^a	0.67 ± 0.05 ^c	1.24 ± 0.04 ^a
乙酸戊酯	911.4	1.755 04	0.09 ± 0.05 ^a	0.08 ± 0.00 ^b	0.08 ± 0.01 ^b	0.04 ± 0.01 ^c	0.02 ± 0.00 ^d	0.03 ± 0.04 ^c
乙酸异戊酯	890.4	1.308 47	0.23 ± 0.05 ^a	0.12 ± 0.00 ^c	0.07 ± 0.01 ^c	0.17 ± 0.01 ^b	0.10 ± 0.00 ^d	0.09 ± 0.04 ^d
2-甲基丁酸乙酯	867.9	1.652 27	2.23 ± 0.05 ^a	1.50 ± 0.00 ^b	1.39 ± 0.01 ^c	0.98 ± 0.02 ^d	0.58 ± 0.01 ^e	0.95 ± 0.04 ^d
丙酸异丁酯	857.2	1.276 71	1.42 ± 0.05 ^a	0.87 ± 0.00 ^b	0.48 ± 0.01 ^c	0.19 ± 0.01 ^e	0.19 ± 0.01 ^e	0.35 ± 0.04 ^d
乙酸丁酯	807.4	1.619 43	1.42 ± 0.05 ^c	1.06 ± 0.00 ^c	11.00 ± 0.01 ^a	1.17 ± 0.74 ^c	0.25 ± 0.00 ^d	6.19 ± 0.04 ^b
甲酸异戊酯	788.4	1.271 43	0.59 ± 0.05 ^a	0.20 ± 0.00 ^c	0.31 ± 0.01 ^b	0.04 ± 0.00 ^e	0.05 ± 0.00 ^e	0.09 ± 0.04 ^d
乙酸乙酯	593.7	1.335 64	0.61 ± 0.05 ^a	0.38 ± 0.00 ^b	0.03 ± 0.01 ^c	0.59 ± 0.03 ^a	0.42 ± 0.00 ^b	0.07 ± 0.04 ^c
乙酸甲酯	526.1	1.190 45	2.23 ± 0.05 ^b	2.78 ± 0.00 ^a	0.71 ± 0.01 ^c	1.16 ± 0.01 ^d	1.46 ± 0.01 ^c	1.05 ± 0.04 ^d
丁酸异丁酯	952.7	1.327 40	0.20 ± 0.05 ^{bc}	0.16 ± 0.00 ^d	0.19 ± 0.01 ^{cd}	0.25 ± 0.01 ^a	0.23 ± 0.02 ^{ab}	0.17 ± 0.04 ^{cd}
杂环类								
3-羟基-4-甲基-5- 乙基-2(5H)呋喃	1 227.1	1.485 36	0.53 ± 0.05 ^c	0.57 ± 0.00 ^c	0.33 ± 0.01 ^d	0.82 ± 0.11 ^b	0.95 ± 0.03 ^a	0.47 ± 0.04 ^c

续表 2

化合物	RI	迁移 时间/ms	相对含量/%					
			oil 1	oil 2	oil 3	oil 4	oil 5	oil 6
5-乙基-2,3-二甲基吡嗪	1 093.0	1.227 84	0.22±0.05 ^c	0.22±0.00 ^c	0.17±0.01 ^d	0.50±0.01 ^a	0.37±0.01 ^b	0.21±0.04 ^c
2-乙酰基-3-甲基吡嗪	1 082.7	1.175 56	0.14±0.05 ^c	0.13±0.00 ^c	0.81±0.01 ^a	0.09±0.00 ^d	0.11±0.00 ^{cd}	0.31±0.04 ^b
2-乙烷基-3,5-二甲基吡嗪	1 075.6	1.234 31	0.12±0.05 ^c	0.15±0.00 ^{bc}	0.18±0.01 ^b	0.25±0.04 ^a	0.17±0.01 ^{bc}	0.07±0.04 ^d
4-甲基-5-乙基噻唑	1 039.0	1.139 45	0.04±0.05 ^d	0.03±0.00 ^d	0.05±0.01 ^d	0.27±0.01 ^a	0.22±0.01 ^b	0.08±0.04 ^c
2,3,5-三甲基吡嗪	997.9	1.620 51	0.28±0.05 ^d	0.12±0.00 ^e	0.49±0.01 ^c	0.95±0.09 ^a	0.44±0.03 ^c	0.59±0.04 ^b
2-乙基-5-甲基吡嗪	998.3	1.203 39	0.30±0.05 ^b	0.24±0.00 ^c	0.40±0.01 ^a	0.20±0.02 ^d	0.13±0.00 ^e	0.29±0.04 ^b
2-甲氧基-3-甲基吡嗪	984.2	1.554 70	0.36±0.05 ^e	0.30±0.00 ^c	0.98±0.01 ^a	0.78±0.16 ^b	0.72±0.00 ^b	0.95±0.04 ^a
2-乙基吡嗪	931.3	1.155 99	0.15±0.05 ^b	0.13±0.00 ^b	0.50±0.01 ^a	0.08±0.01 ^c	0.08±0.01 ^c	0.15±0.04 ^b
2,6-二甲基吡嗪	913.1	1.530 50	0.07±0.05 ^b	0.06±0.00 ^c	0.16±0.01 ^a	0.03±0.00 ^e	0.03±0.00 ^e	0.04±0.04 ^d
2-乙酰基呋喃	908.5	1.444 87	0.17±0.05 ^d	0.23±0.00 ^d	0.22±0.01 ^d	2.70±0.20 ^a	1.94±0.04 ^b	1.18±0.04 ^c
2,5-二甲基吡嗪	908.5	1.119 76	0.37±0.05 ^c	0.45±0.00 ^a	0.29±0.01 ^d	0.41±0.01 ^b	0.27±0.02 ^d	0.40±0.04 ^b
4-甲基噻唑	824.7	1.344 15	0.35±0.05 ^d	0.98±0.00 ^b	0.16±0.01 ^c	0.25±0.01 ^{de}	1.40±0.00 ^a	0.53±0.04 ^c
四氢噻吩	830.8	1.060 21	0.36±0.05 ^a	0.26±0.00 ^b	0.06±0.01 ^c	0.05±0.01 ^{cd}	0.04±0.00 ^d	0.05±0.04 ^{cd}
2-乙酰基吡咯	1 044.8	1.492 51	0.12±0.05 ^d	0.12±0.00 ^d	0.12±0.01 ^d	0.64±0.01 ^b	0.68±0.01 ^a	0.43±0.04 ^c
吡啶	727.4	1.242 11	1.18±0.05 ^a	0.53±0.00 ^c	0.61±0.01 ^b	0.12±0.00 ^e	0.10±0.00 ^e	0.38±0.04 ^d
酸类								
己酸	1 028.2	1.308 47	0.21±0.05 ^c	0.23±0.00 ^c	0.20±0.01 ^c	1.21±0.10 ^a	0.77±0.08 ^b	0.72±0.04 ^b
2-甲基丁酸	898.7	1.196 37	0.26±0.05 ^b	0.26±0.00 ^b	0.11±0.01 ^d	0.23±0.01 ^c	0.28±0.01 ^b	0.34±0.04 ^a
异戊酸	884.1	1.484 11	0.07±0.05 ^d	0.09±0.00 ^c	0.04±0.01 ^c	0.11±0.00 ^b	0.23±0.00 ^a	0.04±0.04 ^c
正丁酸	819.1	1.380 50	0.09±0.05 ^d	0.55±0.00 ^b	0.07±0.01 ^d	0.25±0.01 ^c	1.01±0.02 ^a	0.18±0.04 ^{cd}
异丁酸	791.1	1.169 28	0.07±0.05 ^b	0.02±0.00 ^d	0.16±0.01 ^a	0.01±0.00 ^d	0.01±0.00 ^d	0.03±0.04 ^c
丙酸	701.3	1.273 61	0.85±0.05 ^a	0.77±0.00 ^b	0.63±0.01 ^d	0.75±0.02 ^{bc}	0.74±0.03 ^{bc}	0.66±0.04 ^{cd}
醚类								
二丙硫醚	893.7	1.155 26	0.30±0.05 ^c	0.21±0.00 ^d	0.81±0.01 ^a	0.22±0.02 ^d	0.15±0.01 ^e	0.39±0.04 ^b
烯丙基甲基硫醚	696.7	1.046 58	0.25±0.05 ^b	0.13±0.00 ^c	0.55±0.01 ^a	0.06±0.00 ^d	0.06±0.00 ^d	0.24±0.04 ^b
二甲基三硫醚	965.3	1.301 33	0.07±0.05 ^{bc}	0.36±0.00 ^a	0.04±0.01 ^c	0.08±0.00 ^b	0.09±0.01 ^b	0.07±0.04 ^{bc}
甲基乙基硫醚	611.2	1.020 44	0.71±0.05 ^c	0.39±0.00 ^d	2.14±0.01 ^a	0.23±0.04 ^e	0.13±0.00 ^f	1.33±0.04 ^b
茴香醚	923.0	1.048 99	0.78±0.05 ^a	0.39±0.00 ^b	0.46±0.01 ^b	0.40±0.17 ^b	0.12±0.01 ^c	0.30±0.04 ^b
酚类								
麦芽酚	1 113.6	1.158 02	0.05±0.05 ^d	0.05±0.00 ^d	0.72±0.01 ^a	0.06±0.01 ^{cd}	0.09±0.00 ^c	0.31±0.04 ^b
对甲苯酚	1 082.7	1.142 09	0.11±0.05 ^c	0.12±0.00 ^c	0.61±0.01 ^a	0.09±0.00 ^c	0.12±0.00 ^c	0.24±0.04 ^b
烯烃类								
β-蒎烯	980.4	1.636 79	0.30±0.05 ^d	0.51±0.00 ^{ab}	0.58±0.01 ^a	0.29±0.03 ^d	0.46±0.01 ^{bc}	0.38±0.04 ^{cd}
蒎烯	944.7	1.716 46	0.05±0.01 ^{cd}	0.27±0.00 ^b	0.05±0.01 ^{cd}	0.02±0.00 ^d	0.31±0.02 ^a	0.07±0.04 ^c
其他								
邻二甲苯	894.4	1.061 84	0.55±0.05 ^c	0.27±0.00 ^d	0.85±0.01 ^a	0.11±0.00 ^e	0.07±0.00 ^e	0.65±0.04 ^b
对二甲苯	866.6	1.056 23	1.14±0.05 ^b	0.47±0.00 ^c	1.31±0.01 ^a	0.31±0.02 ^d	0.18±0.00 ^e	1.11±0.04 ^b
十氢萘	1 038.1	1.353 76	0.04±0.05 ^c	0.06±0.00 ^c	0.02±0.01 ^d	0.17±0.01 ^b	0.19±0.02 ^a	0.05±0.04 ^c

注:同行不同肩标字母表示差异显著($p < 0.05$)。存在单聚体和二聚体物质的含量是两种形式之和
Note:Different letters in the same line indicate significant difference ($p < 0.05$). The content of substances with monomers and dimers is the sum of two forms

2.5 不同提取方法茺菁籽油的特征香气成分分析

本文仅列出 ROAV 不小于 0.1 的挥发性物质,结果见表 3。

由表 3 可看出,不同制油工艺的茺菁籽油特征香气化合物总体存在差异,相比低温压榨法,热榨法茺菁籽油的特征香气化合物数量更多,其中热榨法

紫皮茺菁籽油的特征香气化合物数量最多。在特征香气化合物中,醛类物质数量多,对整体的风味贡献大,主要呈现出油脂味、坚果味和辛辣味^[27]。3-甲硫基丙醛对不同制油工艺的茺菁籽油风味贡献均最大,主要呈现洋葱、肉类香气,异戊醛稀释后具有苹果香,辛醛可为茺菁籽油提供辛辣味,壬醛有强烈的脂肪气息,稀释时具有橙子及玫瑰香,与庚醛、己醛等化合物为6种茺菁籽油中共有的特征香气成分。

溶剂萃取法茺菁籽油中1-辛烯-3-酮的ROAV仅次于3-甲硫基丙醛的,呈现出土壤、蘑菇和金属味。乙酸丁酯和1-戊烯-3-酮是溶剂萃取法茺菁籽油中独有的特征香气成分,分别呈现水果香和强烈的特殊气味。2-甲氧基-3-甲基吡嗪、1-辛烯-3-醇、异丁酸、癸醛等挥发性化合物对茺菁籽油的风味起重要的修饰作用。

表 3 不同制油工艺茺菁籽油的挥发性物质 ROAV

Table 3 ROAV of volatiles in turnip seed oil from different oil-processing technology

化合物	感觉阈值 ^[26] / (mg/m ³)	风味描述	ROAV					
			oil 1	oil 2	oil 3	oil 4	oil 5	oil 6
癸醛	0.002 6	有显著的脂肪气息,甜香,稀释时有特殊的花香	0.20	0.27	0.29	0.67	0.31	0.20
壬醛	0.003 1	有强烈的脂肪气息,稀释时具有橙子及玫瑰香	1.63	1.44	2.34	6.05	2.80	1.93
(E)-2-辛烯醛	0.002 7	青香、坚果、脂肪	0.39	0.41	0.76	1.19	0.54	0.39
苯乙醛	0.000 72	呈强烈的风信子香气,低浓度时有杏仁香	1.76	2.38	2.50	1.72	0.81	1.29
(E,E)-2,4-庚二烯醛	0.057	-	0.03	0.03	0.10	0.10	0.06	0.11
辛醛	0.000 88	辛辣味	1.80	1.98	3.17	10.33	3.57	5.10
(E)-2-庚烯醛	0.052 5	油脂味	0.10	0.07	0.33	0.18	0.06	0.17
3-甲硫基丙醛	0.000 063	洋葱、肉类香气	100.00	100.00	100.00	100.00	100.00	100.00
庚醛	0.000 9	强烈和不愉快的油脂气味	3.11	2.67	6.13	8.70	3.47	3.98
2-己烯醛	0.03	青草香味	0.09	0.08	0.24	0.30	0.13	0.22
己醛	0.001 1	草腥味	9.46	3.93	8.46	4.41	1.60	4.64
戊醛	0.001 4	杏仁香、麦芽香、辛辣香	1.78	1.07	0.93	1.33	0.57	0.75
2-甲基丁醛	0.001 5	焦香、烘焙香	2.52	2.67	1.24	1.62	0.98	1.18
异戊醛	0.000 35	稀释后具有苹果香	39.89	25.26	48.42	46.50	14.71	26.12
丙醛	0.004 8	刺激性气味	3.84	2.12	5.82	2.26	0.91	2.20
甲基庚烯酮	0.018 89	甜香、柑橘果香,带有青草味	0.83	0.45	1.22	0.69	0.26	0.74
1-辛烯-3-酮	0.000 03	土壤、蘑菇、金属味	6.47	5.74	69.81	22.05	14.76	48.68
2-庚酮	0.023	香蕉、干酪及果香	0.05	0.04	0.15	0.04	0.02	0.07
乙偶姻	0.014	牛奶香气	0.30	0.40	0.24	1.00	0.58	0.37
1-戊烯-3-酮	0.000 7	强烈的特殊气味	0.33	0.26	9.02	0.31	0.06	4.28
1-辛烯-3-醇	0.002 7	泥土芳香、蔬菜、真菌清香	0.05	0.11	0.29	0.34	0.12	0.23
正庚醇	0.023	生青味、甜味	0.11	0.04	0.14	0.05	0.02	0.04
正己醇	0.034	特殊香味	0.04	0.05	0.19	0.21	0.13	0.11
乙酸丁酯	0.01	水果香	0.45	0.29	6.22	0.43	0.05	2.07
2-甲氧基-3-甲基吡嗪	0.007	爆米花味	0.16	0.12	0.79	0.41	0.20	0.46
四氢噻吩	0.001 831	强烈的不愉快气味	0.61	0.38	0.18	0.11	0.04	0.10
异戊酸	0.001 8	高度稀释后有甜润的果香	0.12	0.14	0.14	0.22	0.25	0.07
正丁酸	0.000 94	酸败奶油味	0.31	1.60	0.43	0.98	2.10	0.64
异丁酸	0.005 4	强烈的刺激性气味	0.04	0.01	0.17	0.01	0.00	0.02
丙酸	0.017	酸味	0.16	0.12	0.21	0.16	0.08	0.13
烯丙基甲基硫醚	0.022	大蒜味和洋葱味	0.04	0.02	0.14	0.01	0.01	0.04

注:风味描述来自数据库(<http://www.flavornet.org/flavornet.html>)。“-”表示未找到该物质的风味描述

Note: Flavor descriptions are taken from the database (<http://www.flavornet.org/flavornet.html>). “-” Indicates that the odor description of the substance has not been found

2.6 芜菁籽油挥发性风味物质 OPLS - DA 及模型验证

OPLS - DA 可实现复杂数据的可视化、判别分析和预测,通常认为 VIP 大于 1 的变量用于样品间

区分^[28]。对芜菁籽油中 133 种挥发性化合物进行 OPLS - DA,以研究不同制油工艺及品种芜菁籽油样品之间的差异香气化合物,结果如图 3 所示。

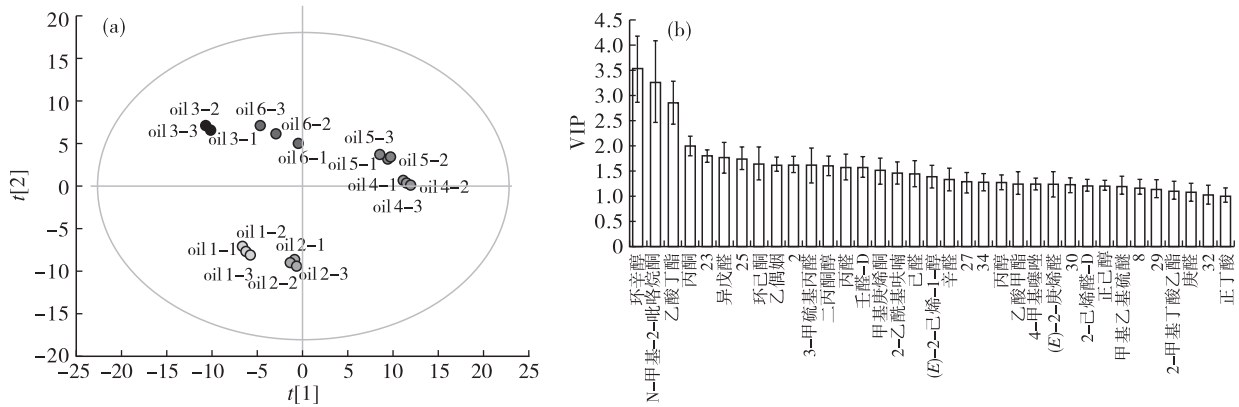


图 3 芜菁籽油挥发性风味物质的 OPLS - DA 得分图 (a) 及 VIP 预测值 (b)

Fig. 3 OPLS - DA score plot of volatile flavor substances of turnip seed oil (a) and VIP predicted values (b)

OPLS - DA 结果显示, R^2_X 为 0.991, R^2_Y 为 0.993, Q^2 为 0.987, R^2 与 Q^2 均大于 0.9,说明该模型具有准确的概括解释能力和预测能力。从图 3a 可看出,不同制油工艺及品种芜菁籽油能较好地分开,说明可以根据挥发性化合物区分低温压榨法、热榨法及溶剂萃取法白皮、紫皮芜菁籽油。由图 3b 可知,VIP 大于 1 的香气化合物有 35 种,定性出 26 种,分别为环辛醇、N - 甲基 - 2 - 吡咯烷酮、乙酸丁酯、丙酮、异戊醛、环己酮、乙偶姻、3 - 甲硫基丙醛、二丙酮醇、丙醛、壬醛(二聚体)、甲基庚烯酮、2 - 乙酰基呋喃、己醛、(E) - 2 - 己烯 - 1 - 醇、辛醛、丙醇、乙酸甲酯、4 - 甲基噻唑、(E) - 2 - 庚烯醛、2 - 己烯醛(二聚体)、正己醇、甲基乙基硫醚、2 - 甲基丁酸乙酯、庚醛、正丁酸。结合 ROAV 和 VIP 分析结果,进一步筛选出 ROAV 大于 1 且 VIP 大于 1 的化合物作为芜菁籽油的关键差异香气化合物。结果表明,壬醛(二聚体)、辛醛、3 - 甲硫基丙醛、庚醛、己醛、异戊醛为芜菁籽油的关键差异挥发性化合物。

3 结 论

本研究通过 HS - GC - IMS 技术,分析了不同制油工艺得到的白皮、紫皮芜菁籽油中挥发性化合物,共检测出 133 种挥发性化合物,定性出 97 种,其中醛类物质 21 种、醇类物质 15 种、酯类物质 14 种、酮类物质 13 种、杂环类物质 16 种、酸类物质 6 种、醚类物质 5 种、烯烃类物质 2 种、酚类物质 2 种和其他类物质 3 种。其中醛类、酮类、醇类、酯类物质的含量较高。对比指纹图谱发现,6 个样品中挥发性化合物种类相似,但含量存在较大差异。进一

步采用 ROAV 进行分析并结合 OPLS - DA 结果,筛选出壬醛(二聚体)、辛醛、3 - 甲硫基丙醛、庚醛、己醛、异戊醛为不同制油工艺和不同品种芜菁籽油中的关键差异香气化合物。本研究明确了芜菁籽油的特征香气成分,比较了不同制油工艺对芜菁籽油挥发性化合物的影响,对芜菁籽油的品质提升及制油工艺优选具有一定的指导作用。

参考文献:

[1] KHAN S, WAQAS M, DING F, et al. The influence of various biochars on the bioaccessibility and bioaccumulation of PAHs and potentially toxic elements to turnips (*Brassica rapa* L.) [J]. J Hazard Mater, 2015,300:243 - 253.

[2] WANG W, WANG X, YE H, et al. Optimization of extraction, characterization and antioxidant activity of polysaccharides from *Brassica rapa* L. [J]. Int J Biol Macromol, 2016,82:979 - 988.

[3] CHU B, CHEN C, LI J, et al. Effects of Tibetan turnip (*Brassica rapa* L.) on promoting hypoxia - tolerance in healthy humans[J]. J Ethnopharmacol, 2017,195:246 - 254.

[4] CHEN Z E, WUFUER R, JI J H, et al. Structural characterization and immunostimulatory activity of polysaccharides from *Brassica rapa* L. [J]. J Agric Food Chem, 2017,65(44):9685 - 9692.

[5] 维吾尔药材标准:上册[S]. 乌鲁木齐:新疆科技卫生出版社,1993.

[6] 王晨曦,夏依旦·买合苏木,房徐涵,等. 芜菁子油脂微波提取工艺及其脂肪酸和生物活性研究[J]. 粮食与油脂,2023,36(10):56 - 62.

[7] WEI C Q, LIU W Y, XI W P, et al. Comparison of volatile compounds of hot - pressed, cold - pressed and

- solvent – extracted flaxseed oils analyzed by SPME – GC/MS combined with electronic nose; Major volatiles can be used as markers to distinguish differently processed oils [J]. *Eur J Lipid Sci Technol*, 2015, 117(3): 320 – 330.
- [8] SHUAI X, DAI T, CHEN M, et al. Comparative study on the extraction of macadamia (*Macadamia integrifolia*) oil using different processing methods [J/OL]. *Food Sci Technol*, 2022, 154: 112614 [2024 – 05 – 13]. <https://doi.org/10.1016/j.lwt.2021.112614>.
- [9] NIE R, ZHANG Y, ZHANG H, et al. Effect of different processing methods on physicochemical properties, chemical compositions and *in vitro* antioxidant activities of *Paeonia lactiflora* Pall seed oils [J/OL]. *Food Chem*, 2020, 332: 127408 [2024 – 05 – 13]. <https://doi.org/10.1016/j.foodchem.2020.127408>.
- [10] 辛明航, 曹旭, 滕旭, 等. HS – SPME – GC – MS 联用及电子鼻分析不同提取方法油莎豆油香气特征[J]. *食品科学*, 2022, 43(10): 281 – 288.
- [11] WANG L, CHEN Z, HAN B, et al. Comprehensive analysis of volatile compounds in cold – pressed safflower seed oil from Xinjiang, China[J]. *Food Sci Nutr*, 2020, 8(2): 903 – 914.
- [12] 董海艳, 侯喜林, 张君萍, 等. 芜菁籽油的超临界 CO₂ 萃取及脂肪酸成分分析[J]. *中国油脂*, 2011, 36(2): 43 – 47.
- [13] 马和木提, 米丽班 · 霍加, 拜合提努尔. GC – MS 法测定芜菁子中油脂组成研究[J]. *新疆师范大学学报(自然科学版)*, 2012, 31(2): 49 – 51.
- [14] 刘登勇, 周光宏, 徐幸莲. 确定食品关键风味化合物的一种新方法: “ROAV” 法[J]. *食品科学*, 2008(7): 370 – 374.
- [15] 刘菲斐, 陈晋, 陈健乐, 等. 基于化学计量学鉴定不同甜橙精油挥发性成分[J]. *食品科学*, 2024, 45(7): 155 – 163.
- [16] 刘玉兰, 连四超, 陈璐, 等. 不同工艺制取油莎豆油中挥发性成分和特征风味成分的分析研究[J]. *中国粮油学报*, 2023, 38(7): 123 – 132.
- [17] 倪瑞洁, 詹萍, 田洪磊. 基于 GC – IMS 结合多元统计方法分析炸制时间对花椒调味油挥发性物质的影响[J]. *食品科学*, 2022, 43(6): 279 – 286.
- [18] 朱庆文. 提取方法对樟树籽仁原油活性物质和挥发组分及樟树籽仁蛋白特性的影响[D]. 南昌: 南昌大学, 2023.
- [19] WANG D, ZHANG J, ZHU Z, et al. Effect of ageing time on the flavour compounds in Nanjing water – boiled salted duck detected by HS – GC – IMS[J/OL]. *Food Sci Technol*, 2022, 155: 112870 [2024 – 05 – 13]. <https://doi.org/10.1016/j.lwt.2021.112870>.
- [20] GRACKA A, JELEN H H, MAJCHER M, et al. Flavoromics approach in monitoring changes in volatile compounds of virgin rapeseed oil caused by seed roasting[J]. *J Chromatogr A*, 2016, 1428: 292 – 304.
- [21] 周琦, 郑畅, 万楚筠, 等. 不同种植区域双低品种浓香菜籽油的呈香特征[J]. *食品科学*, 2023, 44(22): 287 – 295.
- [22] 张欢欢, 张玲, 黄桃翠, 等. 油菜籽品种对浓香菜籽油风味的影响[J]. *食品与发酵工业*, 2023, 49(2): 187 – 194.
- [23] 郝楠. 亚麻籽油特征香气成分的初步探究[D]. 河北保定: 河北农业大学, 2018.
- [24] SPADA F P, BALAGIANNIS D P, PURGATTO E, et al. Characterisation of the chocolate aroma in roast jackfruit seeds[J/OL]. *Food Chem*, 2021, 354: 129537 [2024 – 05 – 13]. <https://doi.org/10.1016/j.foodchem.2021.129537>.
- [25] PARK M, LEE K. Effect of roasting temperature and time on volatile compounds, total polyphenols, total flavonoids, and lignan of omija (*Schisandra chinensis* Baillon) fruit extract[J/OL]. *Food Chem*, 2021, 338: 127836 [2024 – 05 – 13]. <https://doi.org/10.1016/j.foodchem.2020.127836>.
- [26] 里奥 · 范海默特. 空气、水和其他介质中气味和味觉阈值汇编[M]. 2 版. 北京: 科学出版社, 2015: 1 – 200.
- [27] 张丽涵. 亚麻籽油风味分析及其在肉制品中的应用[D]. 辽宁 锦州: 渤海大学, 2021.
- [28] HE X, YANG M H, GÓRSKA – HORCZYK E, et al. Rapid analysis of Baijiu volatile compounds fingerprint for their aroma and regional origin authenticity assessment[J/OL]. *Food Chem*, 2021, 337: 128002 [2024 – 05 – 13]. <https://doi.org/10.1016/j.foodchem.2020.128002>.