

代谢组学技术在果蔬风味物质分析中的研究进展

国勇¹, 李婷², 窦斌斌³

(1.哈尔滨体育学院 科研处, 黑龙江 哈尔滨 150008; 2.哈尔滨体育学院 运动人体科学学院, 黑龙江 哈尔滨 150008; 3.哈尔滨体育学院 研究生院, 黑龙江 哈尔滨 150008)

摘要: 随着高通量组学技术的发展, 代谢组学成为探究果蔬风味化学物质生物合成途径和分子调控作用机制的重要手段。该文从品种产地、发育阶段、加工方式、培育方式的角度出发, 对代谢组学用于果蔬风味物质分析方面的最新研究进行梳理和归纳, 总结出通过高通量的代谢组学可以用于评估果蔬中的风味相关代谢物变化并广泛应用于果蔬培育、加工储存中质量评估、新产品开发和优化育种等方面。同时, 利用代谢组学技术能够揭示果蔬挥发性呈香物质和非挥发性呈味物质的重要化学成分和影响因素, 以为果蔬风味物质形成的基因功能研究提供理论基础, 为果蔬风味品质调控、遗传育种、食品加工的发展方向提供新思路。

关键词: 果蔬; 风味; 代谢组学; 代谢物; 高通量

Research Progress of Metabonomics in the Analysis of Flavor Compounds in Fruits and Vegetables

GUO Yong¹, LI Ting², DOU Binbin³

(1. Science and Technology Department, Harbin Sport University, Harbin 150008, Heilongjiang, China;
2. Institute of Sports Human Science, Harbin Sport University, Harbin 150008, Heilongjiang, China;
3. Graduate School, Harbin Sport University, Harbin 150008, Heilongjiang, China)

Abstract: With the development of high-throughput genomics technology, metabolomics has become an important means of exploring the biosynthesis pathways and molecular regulatory mechanisms of flavor compounds in fruits and vegetables. In this paper, from the perspectives of variety origin, developmental stage, processing mode and cultivation mode, the latest research on the use of metabolomics in the analysis of flavor compounds in fruits and vegetables was sorted out and summarized, and it was concluded that high-throughput metabolomics could be used to assess the changes of flavor-related metabolites in fruits and vegetables, and be widely used in the cultivation of fruits and vegetables, the quality assessment in processing and storage, the development of new products, and the optimization of the breeding and so on. At the same time, using metabolomics technology can reveal the important chemical components and influencing factors of volatile and non-volatile flavor presenting substances in fruits and vegetables, so as to provide a theoretical basis for the study of gene function in the formation of flavor compounds in fruits and vegetables, and to provide new ideas for the development of flavor and quality control of fruits and vegetables, genetic breeding, and food processing.

Key words: fruits and vegetables; flavor; metabolomics; metabolites; high-throughput

引文格式:

国勇, 李婷, 窦斌斌. 代谢组学技术在果蔬风味物质分析中的研究进展[J]. 食品研究与开发, 2024, 45(5): 217-224.

GUO Yong, LI Ting, DOU Binbin. Research Progress of Metabonomics in the Analysis of Flavor Compounds in Fruits and Vegetables[J]. Food Research and Development, 2024, 45(5): 217-224.

水果和蔬菜富含矿物质、维生素、抗氧化剂及膳食纤维等,在人体健康饮食中不可或缺,而风味是果蔬最重要的感官品质指标之一,其特征性风味也是影响消费者选择的重要因素。果蔬风味受其内生因素(基因型)和环境因素(纬度、天气条件和采后处理)的影响^[1]。果蔬风味物质的组成复杂、种类繁多,包括挥发性呈香物质和非挥发性呈味物质。前者体现了果蔬的气味,后者体现了果蔬的滋味,这两者共同构成果蔬的风味体系。其中,挥发性呈香物质主要为C6~C9的醛类和醇类化合物,此外还包括酯类、酸类、酮类和萜类化合物等,这些挥发性风味物质被鼻腔黏膜上的嗅觉受体识别来引起感受,呈现出花香、甜香、果香和青香等^[2]。非挥发性风味物质是味感物质,果蔬中的非挥发性物质主要包括可溶性糖和有机酸,可溶性糖包括蔗糖、果糖和葡萄糖等,有机酸则包括苹果酸、喆酸和柠檬酸等^[3]。随着高通量组学技术的发展,多种挥发性风味物质的生物合成酶基因被成功分离,为深入探究果蔬风味物质产生涉及的分子调控途径提供了可能。代谢组学是一种非选择性的、全面的分析方法,用于鉴定和定量生物系统中的代谢物^[4],识别各种代谢途径的底物和产物。对果蔬进行代谢组学的研究可以确定其化学成分,并阐明影响果蔬风味或营养品质的关键成分,包括各种糖、有机酸、氨基酸、脂类和胺类等小分子化合物^[5-8]。代谢组学通过对果蔬中化合物尤其是风味物质的生物合成途径和分子调控机制的分析可为果蔬风味及品质调控、遗传育种、食品开发及加工的健康发展提供重要的理论基础^[9-10]。基于现有研究,本文从果蔬风味物质的产生、代谢组学技术及其在果蔬风味物质分析中的应用进行综述,旨在为果蔬风味物质相关研究人员提供参考,为果蔬从品种选育到食品加工整个产业链的风味品质调控提供新思路。

1 果蔬风味物质的产生

许多因素会影响果蔬风味物质的产生,如生长环境条件、成熟度、采后的储存方式和加工方式等。果蔬在成熟阶段,将来自外界环境或者自身细胞内储存的一些大分子量前体物质在酶的催化下,转化成一些糖类、酸类及挥发性化合物进而产生风味物质^[11]。

果蔬风味物质的合成途径主要是碳水化合物代谢途径,植物通过光合作用吸收能量将二氧化碳转变成糖类,再代谢为其他的养分,因此果蔬中的大部分挥发性香气成分属于碳水化合物次生代谢产物^[12-13]。脂肪酸是果蔬合成香气成分的主要前体物质,脂肪酸氧化也是果蔬风味产生的重要途径,脂肪酸氧化可产生醇、醛、酮和酯类风味化合物。在多种果蔬的研究中已证明脂肪酸氧化主要通过 β 氧化和酶促氧化两种途径形成香气成分。例如梨中亚麻油酸经 β 氧化产生癸二

烯酸酯,葡萄中脂肪酸 β 氧化增加乙酸乙酯的含量,桃果实在脂肪氧化酶的作用下合成己醛、反-2-乙烯醛等己醛类和醇类芳香化合物,猕猴桃经酶促氧化产生酯类和醛酮类风味物质,玉米在储存期间产生不良风味也是酶促氧化的结果^[14-15]。水果的香气成分也可通过氨基酸代谢产生。水果中的氨基酸(如丙氨酸、缬氨酸、亮氨酸、异亮氨酸、苯丙氨酸和天冬氨酸)可直接作为前体参与芳香化合物合成,它们经脱氨、脱羧、脱氢过程产生包括醛、醇、酯类等风味物质^[16]。萜类化合物是植物体内的一类次级代谢产物,也是果蔬中挥发性香气成分的重要组成部分,萜类香气物质来源于C5单位异戊烯焦磷酸和它的丙烯基异构体二甲基丙烯基焦磷酸,可通过甲羟戊酸途径和2-C-甲基-D-赤藓糖醇-4-磷酸(2-C-methyl-D-erythritol 4-phosphate, MEP)途径两种不同途径合成。果蔬采摘后在运输和贮藏期间也会通过内源性乙烯和自身呼吸作用产生风味物质^[17]。

2 代谢组学分析方法

代谢组学是一种新兴的组学技术,可灵敏、高效、快速地发现生物体内的代谢产物并进行鉴定分析,进而研究生物体系的代谢情况^[10]。代谢组学根据研究内容分为靶向代谢组学和非靶向代谢组学,靶向代谢组学分析特定代谢物,研究一种或几种代谢物代谢通路;非靶向代谢组学,广泛分析多种代谢物,更全面地分析研究对象中整体代谢物^[18-19]。目前代谢组学已被广泛应用于食品领域,如食品成分分析、食品质量鉴别、食品消费监控、饮食营养监控等^[20]。代谢组学在果蔬中的应用主要是通过代谢组学技术鉴定果蔬的代谢产物,进而研究果蔬风味的形成机制。对食物中风味-基质相互作用的行为研究可以更好地理解食物中风味化合物的形成与释放。此外,风味化合物-基质相互作用不仅是风味释放研究的关键步骤,而且与代谢组学分析方法的开发具有高度的相关性^[8]。目前,常用于果蔬代谢组学的高通量分析平台主要有气相色谱-质谱联用(gas chromatography-mass spectrometry, GC-MS)技术、液相色谱-质谱联用(liquid chromatography-mass spectrometry, LC-MS)技术和核磁共振(nuclear magnetic resonance, NMR)技术,3种分析技术各有优缺点,相互补充,其特点与应用见表1。

2.1 液相色谱-质谱联用技术

液相色谱-质谱联用技术以液相色谱作为分离系统,质谱为检测系统,样品在质谱部分被离子化后,经质谱的质量分析器将离子碎片按质量数分开,经检测器得到质谱图。LC-MS与NMR相比,LC-MS的优点是适用性广、灵敏度高、特异性强、检测的线性范围宽且可实现高通量分析,因此被广泛应用于代谢组学研究中。相较GC-MS,LC-MS的样品不需要衍生化处

表 1 不同代谢组学分析技术的特点与应用

Table 1 Characteristics and applications of different metabolomics analysis techniques

分析技术	适用范围	特点	优势	缺点	应用
GC-MS	全组分分析,识别挥发性小分子代谢物	最有效、可重复和使用最广泛的代谢组学研究技术	具有可重复性和选择性,精度高	不适用于固体,样品预处理繁琐	农产品产地溯源、香气研究
LC-MS	广泛应用,提取物分析、代谢物分析	对代谢物的定性和定量分析	灵敏度高、特异性好、能够量化大量的代谢产物,灵敏度高	有明显的离子抑制效应,仪器昂贵	分析农产品代谢物、产地溯源
NMR	广泛应用,食品掺假检测	样品的快速无损检测	高度重现性、样品无需繁琐的前处理、可同时测定多种物质	灵敏度相对较低,仪器昂贵	可实现农产品的地理区分

理。基于 LC-MS 的方法通常用于检测次生植物代谢物,包括生物碱、皂苷、酚酸、苯丙素、黄酮类化合物、硫代葡萄糖苷、多胺及其衍生物^[21]。LC-MS 同时也广泛应用于鉴定植物性食品中新的生物活性化合物^[22]。

2.2 气相色谱-质谱联用技术法

GC-MS 的测定原理为当样品注入气相色谱,经色谱柱分离后的物质由分子分离器进入电离室,被电子轰击形成离子,其中部分离子进入离子检测器。经过质谱快速扫描后导出组分的质谱图,以此作为定性、定量分析的依据。GC-MS 是代谢组学领域的一个重要工具,尤其是在植物代谢轮廓分析中^[23]。与 LC-MS 或 NMR 相比,GC-MS 由于其成本相对较低、数据重现性好、稳定性强和方便的数据处理等特点被广泛应用于代谢组学研究,主要适用于沸点较低、热稳定好的小分子化合物的分析。然而,GC-MS 在非挥发性化合物(糖、有机酸、氨基酸)分析中,需要对样品进行衍生化处理。衍生化处理可能导致样品中氨基酸的不稳定衍生化,致使其几何异构体产生两个峰和产生多个糖峰,从而阻止准确的定量和鉴定,或产生额外的反应^[24]。GC-MS 已应用于鉴别和认证食品样品包括食品真伪,描述独特的食品样品的代谢物特征,评估食品生产链的压力,优化水果和蔬菜的采后过程,通过观察代谢物的变化来监控植物生长或食品加工了解所涉及的过程,评价和预测食物的品质,并评估食物的储存条件和保质期^[25]。

2.3 核磁共振技术

NMR 是通过鉴定化合物的结构来进行代谢物的检测。其中 ¹HNMR,因其高效性、普适性,样品前处理简单的特点成为代谢组学中常用的分析技术^[25]。此外,使用核磁共振可以同时检测初级和次生代谢物,而基于 NMR 的技术通常能够识别植物样本中的 30~150 种代谢物。核磁共振的主要局限性是其灵敏度较低^[26],检测的动态范围有限,很难同时检测同一样品中含量相差很大的物质,故需要更大的样品量。尽管如此,与质谱方法相比,较低的灵敏度使 NMR 成为不需要高灵敏度的质量控制应用的理想选择。核磁

共振也受到光谱上大量信号重叠的限制,重叠信号使复合识别更加困难,降低了峰值积分的精度。然而,与传统的 ¹HNMR 相比,二维核磁共振的信号重叠显著减少。核磁共振已成功地用于许多研究,以检测食品中因农业实践、基因系、加工和储存而变化的主要化合物^[27]。

3 代谢组学在果蔬风味物质研究中的应用

3.1 代谢组学在不同品种产地的果蔬风味物质研究中的应用

代谢物在植物的生长发育过程中发挥着重要作用,不同品种中代谢物的数量和类型决定了其风味和营养价值^[28],气候或地理条件会影响果蔬品种间不同的表型特征。因此,不仅要寻找特定地理区域的关键化学物质,而且要确定其来源,从而提高果蔬的风味品质。代谢组学可作为研究果蔬与不同品种产地的代谢组学特征的有效工具,例如,Nascimento 等^[29]通过代谢组学分析了不同地区收获的成熟香蕉果实的代谢差异,发现 γ -氨基丁酸和腐胺水平变化明显以及不饱和脂肪酸含量的变化会影响成熟果实的营养及感官质量。Baky 等^[30]采用顶空固相微萃取(headspace solid phase microextraction,HS-SPME)技术结合气相色谱质谱研究了花椰菜、萝卜等 6 种十字花科蔬菜的香气和营养成分的成分异质性,发现所有十字花科叶片中均含有醛、酮和氧化物/醚,葡萄糖在可食用叶片中含量最丰富,在非食用十字花科叶中,萝卜叶的硫源异硫氰酸酯含量丰富,氮化合物含量最高,可以确定十字花科叶片间生物活性次生代谢产物谱的差异,以此进一步研究十字花科蔬菜对健康的影响。Sirijan 等^[31]运用 GC-MS 代谢组学技术对不同草莓品种进行鉴定,发现不同品种中的蔗糖、单宁酸(原花青素)、黄酮类化合物、挥发性酯含量均有差别,不同品种之间的香气形成存在遗传差异,因此通过代谢组学鉴定含量变化的化合物有利于区分草莓品种。也有学者采用超高效液相色谱-高分辨质谱非靶向代谢组学方法对 3 种秘鲁本地辣椒进行了鉴别和生物标志物的鉴定,结果发

现黄酮类化合物是主要影响辣椒来发挥其独特的颜色和香味的化合物^[32]。而 Mi 等^[33]研究也证实了黄酮类化合物是辣椒发挥独特风味的主要差异化合物。Li 等^[34]采用靶向代谢组学(LC-MS/MS)对 7 个不同气候条件下的水果样品的次生代谢物进行了糖、有机酸、维生素、多酚和柠檬酸等代谢物的鉴定和定量分析,结果

表明在亚热带气候不同亚型下生长的果汁中几种代谢物(多酚、柠檬素等)的浓度存在显著差异,因此说明气候条件对代谢谱有一定的影响,有助于工业确定新鲜和加工用柑橘水果的适宜性和来源。除此之外,也有许多学者利用代谢组学对常见的果蔬进行品种与产地的差异分析,其结果分析见表 2。

表 2 不同果蔬品种和产地的代谢组学分析

Table 2 Metabolomic analysis of different fruit and vegetable varieties and origins

检测样品	检测方法	检测的代谢产物	检测结果	参考文献
中国北方 5 个主要栽培地区的蜜桃	超高效液相色谱-质谱联用仪	槲皮苷、植物苷、3-p-香豆素酰奎宁酸、原花青素和奎宁酸等	上述代谢产物是影响蜜桃风味和营养特性的关键因素	[35]
不同品种的芒果	广泛靶向代谢组	有机酸、酯、萜烯、糖和醇,柠檬酸循环、氨基酸、类胡萝卜素	不同品种的芒果滋味与其代谢产物存在相关性	[36]
不同果肉颜色木薯品种的根(白色、浅黄色和黄色)	高效液相色谱-电喷雾串联质谱联用仪	黄酮、苯丙素和生物碱;氨基酸和衍生物;类黄酮、甾衍生物	浅黄色果肉木薯中次生代谢物含量较高,黄肉木薯的氨基酸和衍生物含量较高,白肉木薯中初级代谢物含量较高	[37]
不同欧洲气候下生长的 4 种覆盆子品种	气相色谱与飞行时间质谱联用仪、液质联用、反相高效液相色谱-紫外分析仪	花青素、鞣花单宁	相关代谢物会影响风味	[38]
大蒜	超高效液相色谱仪与四极杆飞行时间串联质谱仪	含硫二肽(γ -Glu-Phe、 γ -Glu-甲基-cys 衍生物)、功能低聚糖(1-雌糖、水苏糖、甲二糖)、脂质和植物激素(β -谷甾醇、 β -3-乳酸)和挥发性分子(大蒜肽)	上述代谢产物是影响大蒜复杂的香气和风味的化合物	[39]
枇杷新品种果实	顶空固相微萃取与质谱联用仪	挥发性化合物代谢图谱	羧酸、酯类、醛类、酮类和醇类是主要的挥发性成分	[40]
不同枇杷品种	广泛靶向代谢组	碳水化合物、有机酸、氨基酸和酚类物质	品种间的味觉差异受代谢产物组成和丰度的差异变化影响	[41]
净种植和露天条件种植的番茄品种	顶空固相微萃取与质谱联用仪	1-戊烯-3-酮、(E)-2-庚烯醛、(E)-3-己烯-1-醇、2-异丁基噻唑和 6-甲基-5-戊烯-3-酮	大多数挥发性物质在净种植的番茄中显著较高;香叶乳酮和 D-柠檬烯对保存或改善番茄理想的香气性状起重要作用	[42]
不同产地的柚子品种(井冈蜜柚、沙田柚、琯溪蜜柚)	超高效液相色谱仪与四极杆飞行时间串联质谱仪	柚皮素、柚皮苷	柚皮素和柚皮苷在井冈蜜柚中含量最高,但蔗糖相对最低,说明井冈蜜柚的微苦风味主要来源柚皮苷和柚皮素	[43]

3.2 代谢组学在不同发育阶段及采后贮藏的果蔬风味物质研究中的应用

在果实的成熟过程中,风味、香气代谢物、颜色、质地和植物激素会发生显著的变化,了解果实代谢程度变化可以作为其成熟度的指标。而果蔬风味的形成是一个动态过程,果蔬采摘后在运输和贮藏期间也会通过自身呼吸作用产生风味物质,代谢物是采后果实保质期和对贮藏环境响应的感官和营养质量属性的生化和生理结果。通过代谢组学分析可以更好地理解果蔬生理活动的相关组成,阐明果蔬成熟、衰老、对储存环境和采后处理的感官和营养质量以及保质期的机制,有助于促进采后果实发育和成熟的研究。例如,施用外源乙烯可以迅速均匀地加速果实成熟到最佳食用阶段,外源乙烯通过显著加速成熟来增强口感(特别是甜味、软化度、酸味和多汁性)和风味,大量的脂质、有机酸和酚酸在百香果果肉成熟过程中减少,糖醇含量增加,这些化合物含量的变化与百香果的味道和香气有

关,为影响百香果品质的主要代谢物提供新的思路。

采后果实在贮藏过程中对贮藏环境的响应所引发的代谢变化不当会导致品质恶化,包括质地软化、颜色不均匀、风味流失和营养减少,例如果皮褐变就是果实采后贮藏过程中的一种重要生理现象,严重影响果实的风味品质和市场价值。许多研究已经探讨了采后果实果皮褐变的原因和机制,低温胁迫、失水、多酚氧化酶被认为是导致果皮褐变的主要因素。代谢组学分析已成功应用于研究多种果蔬的变质和褐变机制中,一些果蔬的次生代谢产物的生物合成与假种皮褐变有关,主要涉及类黄酮、黄酮醇和异类黄酮,特别是苯丙酮类化合物的生物合成。例如石榴对低温敏感,果皮褐变被认为是寒伤的典型症状,而温度是延长果蔬保质期的因素,采后果实在贮藏过程中会受贮藏温度的影响,导致果蔬香气形成的相关酶活性发生变化,较低的贮藏温度会抑制酶活性进而导致果蔬挥发性香气成分形成减少^[44]。有研究利用代谢组学技术及

电子舌分析发现有机酸和部分游离氨基酸含量与桃果实的风味有关,甘氨酸甜菜碱处理可以提高低温贮藏时桃果实的风味品质和耐寒性^[45]。其他果蔬不同发育阶段及采后贮藏的风味物质的研究如表 3 所示。

表 3 不同果蔬发育阶段及采后贮藏的代谢组学分析

Table 3 Metabolomic analysis of different fruit and vegetable development stages and postharvest storage

发育阶段	检测样品	检测方法	检测的代谢产物	检测结果	参考文献
果实成熟	甜瓜	红外光谱分析、核磁共振技术	蔗糖、脂肪酸和β-胡萝卜素,葡萄糖、果糖、柠檬酸、氨基酸和多酚	果实成熟度的增加会导致蔗糖、脂肪酸和β-胡萝卜素含量的增加,同时葡萄糖、果糖、柠檬酸、氨基酸和多酚含量的降低	[46]
果实成熟	山竹	气相色谱-质谱联用技术	果皮、果肉和种子的代谢物(2-氨基异丁酸、青糖和氨基酸)	代谢物增加与山竹果成熟的进程有关	[47]
不同成熟阶段	樱桃	代谢谱分析	未成熟和成熟的樱桃中化学物质含量变化	氨基酸、黄酮类、脂类和萜类主要积累在成熟果实中,参与风味形成	[48]
采后衰老	葡萄	高效液相色谱-质谱联用技术	差异类黄酮(天竺葵素 3-O-葡萄糖苷、槲皮素-3-O-葡萄糖苷和花青素 3-O-葡萄糖苷)、酚酸(反式-4-羟基肉桂酸甲酯)	采后衰老过程中大多数差异类黄酮和 L-天冬氨酸的水平下降,酚酸和泛醇的含量增加	[49]
采后衰老	香蕉	核磁共振技术	初级和次生代谢物(有机酸、氨基酸、碳水化合物和酚类物质)	多巴胺转化产生盐酚醇,是香蕉果实采后衰老的特征标志物	[50]
果皮褐变	荔枝	偏最小二乘法判别分析、正交偏最小二乘判别分析	氨基酸、可溶性糖、倍半萜和部分游离氨基酸	褐变后氨基酸含量增加,果皮褐变可诱导代谢产物从氨基酸转化为萜烯	[44]

3.3 代谢组学在不同加工方式的果蔬风味物质研究中的应用

切割是果蔬最主要的加工方式,在切割过程中,会造成果蔬组织破损、细胞破裂、水分流失、乙烯生成增加、呼吸上升,并诱发各种次生代谢过程^[51]。这些次生代谢过程的发生会产生大量香气成分,影响果蔬的风味,代谢组学可为评估切割技术对果实品质的影响提供依据。冷冻和脱水是果蔬储存和加工方式,冻融产品的质量会受到许多因素的影响,热加工对其他关键黑树莓化合物基团鞣花素含量也有着重要影响。多酚对食物的味道也有重要贡献,主要包括儿茶素、类黄酮、花青素、绿原酸等,在茶、咖啡、可可和许多植物源食品中含量丰富,热处理会对果蔬中的多酚的转化有显著影响^[52]。果蔬加工储存中,常用的包括烟熏、干

燥、罐装、腌制和冷冻,而腌制是果蔬中常用的延长保质期的重要加工方法之一。目前对果蔬腌制过程果蔬长期储存后的代谢变化的详细分析较少。因此代谢物分析有助于更好地了解果蔬的腌制过程,并解释腌制后水果的感官特性的改善情况,能够为果蔬腌制过程中质量控制,风味调控做理论基础。发酵是果蔬醋及果酒的主要加工方式,风味也是决定果蔬醋质量和可接受性的最重要因素之一。在发酵过程中,水果本身所含的物质发生较大变化。相关性分析表明脂肪酸甲酯与甾醇、糖、高级醇、酮、醛、萜烯和挥发性酸之间存在很强的正相关关系。因此通过代谢组学技术手段有助于深层次发现果蔬在深加工中风味物质的变化,为果蔬深加工中品质的控制提供有力支撑。表 4 对不同果蔬加工方式的代谢组学分析进行了总结。

表 4 不同果蔬加工方式的代谢组学分析

Table 4 Metabolomic analysis of different fruit and vegetable processing methods

加工方式	检测样品	检测方法	检测的代谢产物	检测结果	参考文献
切割	整体甜瓜和鲜切甜瓜	液相色谱-质谱联用仪	水杨酸-d-葡萄糖苷、类黄酮、吡喃酮素 A	与整个甜瓜相比,鲜切甜瓜在贮藏期间发现了 17 种独特的差异代谢产物,包括 L-天冬氨酸和水杨酸-d-葡萄糖苷。同样,与鲜切甜瓜相比,在整个甜瓜贮藏过程中发现了 10 种差异代谢物,包括肉桂酸和吡喃蓝蛋白 A	[53]
腌制	未腌制和腌制橄榄	气相色谱-质谱联用仪、超高效液相色谱-质谱联用仪	糖和糖醇	发现品种间的差异主要发生在糖、糖醇、二环烯醚和黄酮之间,除二环烯醚外,糖和糖醇是橄榄果实的主要代谢物,其中二环烯醚可作为酸洗过程的标记物,脱氧橄榄苦苷可以解释不同品种间适口性和健康益处的差异	[54]
发酵	白菜醋	核磁共振技术、气相色谱-质谱联用仪	水溶性和挥发性化合物分析	白菜发酵产生焦谷氨酸和巴豆酸;胆碱、甲烷、硫化物、腈和 3-己烯-1-醇来源于白菜自身,这些化合物是白菜醋独特的味道和风味的关键物质	[55]
发酵	哈密瓜汁	核磁共振氢谱分析技术	发酵和非发酵哈密瓜汁 23 种代谢物	发酵哈密瓜汁中含乳酸、γ-氨基丁酸、乙酰蛋白、乙酰乙酸、纤维二糖和丙氨酸;非发酵哈密瓜汁中含蔗糖、葡萄糖、甘露糖和表儿茶素	[56]

3.4 代谢组学在不同培育方式的果蔬风味物质研究中的应用

农药和肥料能够提高果蔬的产量和品质,结果表明,农药与叶面肥混合施用可显著提高叶绿素、氮和有机酸含量^[57]。在不添加叶面肥料的情况下,黄瓜果实的莽草酸-苯丙素途径上调。而用叶面肥料施用农药后,三羧酸循环量上调了1.1倍,提高了其抗氧化能力,促进了农药的消散,提高黄瓜果实风味品质。利用代谢组学技术分析不同农药及肥料对果蔬培育过程中代谢产物的变化,能够更精确了解果蔬栽培过程中的影响果蔬风味物质的变化,提高果蔬培育中的关键技术。无土栽培系统,即在装满无土基质的容器中种植植物,在一些土壤不适合的果蔬生产的地区越来越受欢迎。通过使用适当的营养和水分管理策略,使得植物质量很容易控制,然而对果蔬在不同无土有机基质中生长的性能研究较少。综合转录组学和代谢组学数据表明,4个差异基因 *VcPAL*、*VcHCT*、*VcF14G24.3* 和 *VcCHS* 的表达与类黄酮生物合成密切相关。该结果为蓝莓生长在不同基质中的适应性的调节机制提供了思路。营养液的配制和管理是无土栽培的关键环节,有机营养液对樱桃番茄成熟果实风味具有影响,发现添加营养液的樱桃番茄果实中可溶性糖、有机酸和香气挥发物含量改变,其次,苯丙氨酸及其下游酚类挥发物含量增加,水杨酸甲酯下降,还观察到有机酸代谢和果糖和葡萄糖的合成得到了促进,这有助于进一步优化无土番茄栽培的营养液配方。

4 结论

风味质量是消费者选择蔬菜和水果的最重要的标准之一,因此,在育种计划中全面了解果蔬风味相关的代谢物与改进方法可以更好地指导育种。代谢组学在食品科学领域的快速发展表明了其鉴别、预测和信息分析的潜力,并为食品工业提供重要的信息。利用代谢组学评估果蔬中的风味相关代谢物变化将广泛应用于果蔬质量评估、新产品开发和优化育种等方面。

然而,利用组学方法研究果蔬品质性状也存在一些问题和瓶颈。首先,果蔬中代谢物高度多样化,有数千种代谢物,大量数据难以进行分析和比较。大多数研究只集中在共同性状(果蔬的味道、颜色和大小)背后的遗传机制上,而许多其他有用的性状仍未被破译,如活性与功能成分。此外,相对较少的果实性状可以归因于单基因,而由基因网络控制的复杂生物表型仍难以阐明。目前,通过代谢组学研究能够阐明影响果蔬挥发性呈香物质和非挥发性呈味物质的重要化学成分和影响因素,可为果蔬风味物质形成的基因功能研究提供理论基础,同时为果蔬风味品质调控、遗传育种,食品加工的健康发展提供未来研究方向。

参考文献:

- [1] 曾凡斌,潘思轶.食品加工中风味规律的探索[J].农业工程学报,2011,27(S2):316-320.
ZENG Fanbin, PAN Siyi. Exploration of flavor law in food processing[J]. Transactions of the Chinese Society of Agricultural Engineering, 2011, 27(S2): 316-320.
- [2] EL HADI M A M, ZHANG F J, WU F F, et al. Advances in fruit aroma volatile research[J]. Molecules, 2013, 18(7): 8200-8229.
- [3] 汤泽波,冯涛,庄海宁.大宗水果风味物质的研究进展[J].中国果菜,2020,40(6):2-9,22.
TANG Zebo, FENG Tao, ZHUANG Haining. Research progress of flavor compounds in bulk fruits[J]. China Fruit & Vegetable, 2020, 40(6): 2-9, 22.
- [4] WOLFENDER J L, MARTI G, THOMAS A, et al. Current approaches and challenges for the metabolite profiling of complex natural extracts[J]. Journal of Chromatography A, 2015, 1382: 136-164.
- [5] D'URSO G, PIZZA C, PIACENTE S, et al. Combination of LC-MS based metabolomics and antioxidant activity for evaluation of bioactive compounds in *Fragaria vesca* leaves from Italy[J]. Journal of Pharmaceutical and Biomedical Analysis, 2018, 150: 233-240.
- [6] 王倩,张长青,李广平,等.基于UPLC-QTOF/MS的蓝莓果实发育代谢组学差异分析[J].江苏农业科学,2020,48(24):148-152,197.
WANG Qian, ZHANG Changqing, LI Guangping, et al. Metabolomics difference analysis of blueberry fruit development based on UPLC-QTOF/MS[J]. Jiangsu Agricultural Sciences, 2020, 48(24): 148-152, 197.
- [7] HUA Q Z, CHEN C B, TEL ZUR N, et al. Metabolomic characterization of pitaya fruit from three red-skinned cultivars with different pulp colors[J]. Plant Physiology and Biochemistry, 2018, 126: 117-125.
- [8] PAVAGADHI S, SWARUP S. Metabolomics for evaluating flavor-associated metabolites in plant-based products[J]. Metabolites, 2020, 10(5): 197.
- [9] XU L, ZANG E H, SUN S Y, et al. Main flavor compounds and molecular regulation mechanisms in fruits and vegetables[J]. Critical Reviews in Food Science and Nutrition, 2023, 63(33): 11859-11879.
- [10] LI S B, TIAN Y F, JIANG P, et al. Recent advances in the application of metabolomics for food safety control and food quality analyses[J]. Critical Reviews in Food Science and Nutrition, 2021, 61(9): 1448-1469.
- [11] 孙嘉卿,冯涛,宋诗清,等.果蔬风味物质形成的生物化学基础[J].中国果菜,2020,40(6):10-17.
SUN Jiaqing, FENG Tao, SONG Shiqing, et al. Biochemical basis for the formation of flavor substances in fruits and vegetables[J]. China Fruit & Vegetable, 2020, 40(6): 10-17.
- [12] 伊兴凯.果实香气物质代谢谱及单糖转运体功能的研究[D].合肥:安徽农业大学,2015.
YI Xingkai. Aromatic metabolite profiling and functional analysis for monosaccharide transporters in fruit[D]. Hefei: Anhui Agricultural University, 2015.
- [13] 徐红霞,李晓颖,陈俊伟.枇杷花发育进程中氨基酸和碳水化合物代谢的变化[J].园艺学报,2020,47(2):233-241.
XU Hongxia, LI Xiaoying, CHEN Junwei. Studies on the amino acid metabolism and carbohydrate metabolism variation during flower development in *Eriobotrya japonica*[J]. Acta Horticulturae Sinica, 2020, 47(2): 233-241.
- [14] 张文文.鲜食葡萄香气特征与感官品评的研究[D].上海:上海交通大学,2018.

- ZHANG Wenwen. Study on the characteristics of aroma and sensory evaluation of table grapes[D]. Shanghai: Shanghai Jiao Tong University, 2018.
- [15] 程焕, 陈健乐, 周晓舟, 等. 水果香气物质分析及合成途径研究进展[J]. 中国食品学报, 2016, 16(1): 211-218.
- CHENG Huan, CHEN Jianle, ZHOU Xiaozhou, et al. Advances in identification and biosynthetic pathway of key aroma in fruits[J]. Journal of Chinese Institute of Food Science and Technology, 2016, 16(1): 211-218.
- [16] KLEE H J. Improving the flavor of fresh fruits: Genomics, biochemistry, and biotechnology[J]. The New Phytologist, 2010, 187(1): 44-56.
- [17] 蒋跃明, 段学武. 我国果蔬采后生理学进展[J]. 热带亚热带植物学报, 2019, 27(5): 558-564.
- JIANG Yueming, DUAN Xuewu. Advances in postharvest physiology of fruits and vegetables in China[J]. Journal of Tropical and Subtropical Botany, 2019, 27(5): 558-564.
- [18] LU W Y, BENNETT B D, RABINOWITZ J D. Analytical strategies for LC-MS-based targeted metabolomics[J]. Journal of Chromatography B, 2008, 871(2): 236-242.
- [19] DE VOS R C, MOCO S, LOMMEN A, et al. Untargeted large-scale plant metabolomics using liquid chromatography coupled to mass spectrometry[J]. Nature Protocols, 2007, 2: 778-791.
- [20] DIEZ-SIMON C, MUMM R, HALL R D. Mass spectrometry-based metabolomics of volatiles as a new tool for understanding aroma and flavour chemistry in processed food products[J]. Metabolomics, 2019, 15(3): 41.
- [21] STRAUBE H, WITTE C P, HERDE M. Analysis of nucleosides and nucleotides in plants: An update on sample preparation and LC-MS techniques[J]. Cells, 2021, 10(3): 689.
- [22] CHOUDHURY F K, PANDEY P, MEITEI R, et al. GC-MS/MS profiling of plant metabolites[J]. Methods in Molecular Biology, 2022, 2396: 101-115.
- [23] ADEBO O A, OYEYINKA S A, ADEBIYI J A, et al. Application of gas chromatography-mass spectrometry (GC-MS)-based metabolomics for the study of fermented cereal and legume foods: A review[J]. International Journal of Food Science & Technology, 2021, 56(4): 1514-1534.
- [24] PUTRI S P, IKRAM M M M, SATO A, et al. Application of gas chromatography-mass spectrometry-based metabolomics in food science and technology[J]. Journal of Bioscience and Bioengineering, 2022, 133(5): 425-435.
- [25] KIM H K, CHOI Y H, VERPOORTE R. NMR-based plant metabolomics: Where do we stand, where do we go?[J]. Trends in Biotechnology, 2011, 29(6): 267-275.
- [26] VALENTINO G, GRAZIANI V, D'ABROSCA B, et al. NMR-based plant metabolomics in nutraceutical research: An overview[J]. Molecules, 2020, 25(6): 1444.
- [27] CAO R G, LIU X R, LIU Y Q, et al. Applications of nuclear magnetic resonance spectroscopy to the evaluation of complex food constituents[J]. Food Chemistry, 2021, 342: 128258.
- [28] WANG S C, ALSEKHE S, FERNIE A R, et al. The structure and function of major plant metabolite modifications[J]. Molecular Plant, 2019, 12(7): 899-919.
- [29] NASCIMENTO T P, CASTRO-ALVES V C, CASTELAN F P, et al. Metabolomic profiling reveals that natural biodiversity surrounding a banana crop may positively influence the nutritional/sensorial profile of ripe fruits[J]. Food Research International, 2019, 124: 165-174.
- [30] BAKY M H, SHAMMA S N, XIAO J B, et al. Comparative aroma and nutrients profiling in six edible versus nonedible cruciferous vegetables using MS based metabolomics[J]. Food Chemistry, 2022, 383: 132374.
- [31] SIRIJAN M, DRAPAL M, CHAIPRASART P, et al. Characterisation of Thai strawberry (*Fragaria × ananassa* Duch.) cultivars with RAPD markers and metabolite profiling techniques[J]. Phytochemistry, 2020, 180: 112522.
- [32] ESPICHÁN F, ROJAS R, QUISPE F, et al. Metabolomic characterization of 5 native Peruvian chili peppers (*Capsicum* spp.) as a tool for species discrimination[J]. Food Chemistry, 2022, 386: 132704.
- [33] MI S, YU W L, LI J, et al. Characterization and discrimination of chilli peppers based on multi-element and non-targeted metabolomics analysis[J]. LWT-Food Science and Technology, 2020, 131: 109742.
- [34] LI Q Q, YANG S P, LI B, et al. Exploring critical metabolites of honey peach [*Prunus persica* (L.) Batsch] from five main cultivation regions in the north of China by UPLC-Q-TOF/MS combined with chemometrics and modeling[J]. Food Research International, 2022, 157: 111213.
- [35] PENG L, GAO W K, SONG M Y, et al. Integrated metabolome and transcriptome analysis of fruit flavor and carotenoids biosynthesis differences between mature-green and tree-ripe of cv. 'golden Phoenix' mangoes (*Mangifera indica* L.)[J]. Frontiers in Plant Science, 2022, 13: 816492.
- [36] XIAO L, CAO S, SHANG X H, et al. Metabolomic and transcriptomic profiling reveals distinct nutritional properties of cassavas with different flesh colors[J]. Food Chemistry: Molecular Sciences, 2021, 2: 100016.
- [37] DURÁN-SORIA S, POTT D M, WILL F, et al. Exploring genotype-by-environment interactions of chemical composition of raspberry by using a metabolomics approach[J]. Metabolites, 2021, 11(8): 490.
- [38] MOLINO R J E J, RELLIN K F B, NELLAS R B, et al. Small in size, big on taste: Metabolomics analysis of flavor compounds from Philippine garlic[J]. PLoS One, 2021, 16(5): e0247289.
- [39] BESADA C, SANCHEZ G, GIL R, et al. Volatile metabolite profiling reveals the changes in the volatile compounds of new spontaneously generated loquat cultivars[J]. Food Research International, 2017, 100(Pt 1): 234-243.
- [40] ZOU S C, WU J C, SHAHID M Q, et al. Identification of key taste components in loquat using widely targeted metabolomics[J]. Food Chemistry, 2020, 323: 126822.
- [41] LEE J H J, JAYAPRAKASHA G K, AVILA C A, et al. Metabolomic studies of volatiles from tomatoes grown in net-house and open-field conditions[J]. Food Chemistry, 2019, 275: 282-291.
- [42] 林凯, 胡重怡, 郭平, 等. 井冈蜜柚特色风味代谢基础解析[J]. 江西农业学报, 2021, 33(11): 126-130, 137.
- LIN Kai, HU Zhongyi, GUO Ping, et al. Analysis of flavor metabolism basis of jinggang honey pomelo[J]. Acta Agriculturae Jiangxi, 2021, 33(11): 126-130, 137.
- [43] SHI J L, WANG S, TONG R R, et al. Widely targeted secondary metabolomics explored pomegranate aril browning during cold storage[J]. Postharvest Biology and Technology, 2022, 186: 111839.
- [44] CHEN X, WU Q X, CHEN Z, et al. Changes in pericarp metabolite profiling of four litchi cultivars during browning[J]. Food Research International, 2019, 120: 339-351.
- [45] JIA Z Y, WANG Y, WANG L, et al. Amino acid metabolomic analysis involved in flavor quality and cold tolerance in peach fruit treated with exogenous glycine betaine[J]. Food Research International, 2022, 157: 111204.

- [46] TRISTÁN A I, ABREU A C, AGUILERA-SÁEZ L M, et al. Evaluation of ORAC, IR and NMR metabolomics for predicting ripening stage and variety in melon (*Cucumis melo* L.)[J]. Food Chemistry, 2022, 372: 131263.
- [47] LIU D K, XU C C, GUO C X, et al. Sub-zero temperature preservation of fruits and vegetables: A review[J]. Journal of Food Engineering, 2020, 275: 109881.
- [48] XU T F, YANG X, ZHANG M, et al. The use of widely targeted metabolite profiling to reveal the senescence changes in postharvest 'Red Globe' (*Vitis vinifera*) grape berries[J]. Journal of Integrative Agriculture, 2022, 21(4): 1028-1043.
- [49] YUAN Y F, ZHAO Y P, YANG J L, et al. Metabolomic analyses of banana during postharvest senescence by ¹H - high resolution - NMR[J]. Food Chemistry, 2017, 218: 406-412.
- [50] XU M F, SHEN C J, ZHENG H, et al. Metabolomic analysis of acerola cherry (*Malpighia emarginata*) fruit during ripening development via UPLC-Q-TOF and contribution to the antioxidant activity[J]. Food Research International, 2020, 130: 108915.
- [51] RASEETHA S, AIDA F M N A, SUKOR R, et al. Disintegration of fruits and vegetables with little changes in form: Husking, shelling, pitting, coring, snapping, and destemming[M]//Postharvest and Post-mortem Processing of Raw Food Materials. Amsterdam: Elsevier, 2022: 121-180.
- [52] XU S Z, MA Z W, CHEN Y, et al. Characterization of the flavor and nutritional value of coconut water vinegar based on metabolomics[J]. Food Chemistry, 2022, 369: 130872.
- [53] WU Z F, SHI Z X, YANG X P, et al. Comparative metabolomics profiling reveals the molecular information of whole and fresh-cut melon fruit (cv. Xizhoumi-17) during storage[J]. Scientia Horticulturae, 2022, 296: 110914.
- [54] FAYEK N M, FARAG M A, SABER F R. Metabolome classification via GC/MS and UHPLC/MS of olive fruit varieties grown in Egypt reveal pickling process impact on their composition[J]. Food Chemistry, 2021, 339: 127861.
- [55] ISHIHARA S, INAOKA T, NAKAMURA T, et al. Nuclear magnetic resonance- and gas chromatography/mass spectrometry-based metabolomic characterization of water-soluble and volatile compound profiles in cabbage vinegar[J]. Journal of Bioscience and Bioengineering, 2018, 126(1): 53-62.
- [56] MUHIALDIN B J, KADUM H, MEOR HUSSIN A S. Metabolomics profiling of fermented cantaloupe juice and the potential application to extend the shelf life of fresh cantaloupe juice for six months at 8 °C[J]. Food Control, 2021, 120: 107555.
- [57] PAN L X, ZHOU C G, JING J, et al. Metabolomics analysis of cucumber fruit in response to foliar fertilizer and pesticides using UHPLC-Q-Orbitrap-HRMS[J]. Food Chemistry, 2022, 369: 130960.

加工编辑:刘艳美
收稿日期:2023-11-24