DOI:10.12161/j.issn.1005-6521.2026.16.024

HS-SPME-GC-MS 结合 PLS-DA 分析 4 种果形草果的挥发性香气化合物

张映萍[1],徐飞[2,3,4],和秀丽[1],穆明兴[1],周怀烨[1],周继兰[1],吴莲张[1],吉训志[2,3,4],苏凡[2,3,4],秦晓威[2,3,4],和俊才[1*]

(1. 怒江傈僳族自治州草果产业创新发展中心,云南 泸水 673200;2. 中国热带农业科学院香料饮料研究所,海南 万宁 571533;3. 海南省热带香辛饮料作物遗传改良与品质调控重点实验室,海南 万宁 571533;4. 海南省特色热带作物适宜性加工与品质控制重点实验室,海南 万宁 571533)

摘　要:为探明 4 种主要果形草果中挥发性香气化合物的差异性,以怒江州福贡县 4 种果形的草果果实为原料,采用顶空固相微萃取气相色谱质谱联用技术分析 4 种果形草果的挥发性香气化合物,结合主成分分析、偏最小二乘法判别分析方法对 4 种果形草果进行多元统计分析,筛选关键挥发性香气成分。结果表明,4 种果形草果果实样品中挥发性香气化合物种类及相对含量存在一定差异,4 种果形草果中共检测出 30 种挥发性香气化合物,球形草果中检出 25 种、纺锤形草果中检出 24 种、椭圆形草果中检出 23 种、卵形草果中检出 26 种。其中共有挥发性化合物 18 种,包括反式-2-癸烯醛、桉叶油醇、柠檬醛、顺式-柠檬醛、α-松油醇等,非共有的挥发性化合物有 12 种,包括芳樟醇、香叶醇、反式-橙花叔醇、辛醛、乙酸香叶酯、β-蒎烯等。通过多元统计分析,从 4 种果形草果中挑选出变量投影重要性(variable importance for the projection,VIP)值>1 的关键挥发性香气化合物 13 种,主要包括反式-2-癸烯醛、香叶醇、芳樟醇、3-苯基-2-丁烯醛、α-松油醇、桉叶油醇、α-甲基肉桂醛等。

关键词:草果;挥发性香气化合物;顶空固相微萃取气相色谱质谱联用技术;果形;偏最小二乘判别分析

Analysis of Volatile Aroma Compounds in Rour Fruit Shapes of *Amomum tsaoko* by HS-SPME-GC-MS Combined with PLS-DA

ZHANG Yingping[1], XU Fei[2,3,4], HE Xiuli[1], MU Mingxing[1], ZHOU Huaiye[1], ZHOU Jilan[1], WU Lianzhang[1], JI Xunzhi[2,3,4], SU Fan[2,3,4], QIN Xiaowei[2,3,4], HE Juncai[1*]

(1. Nujiang Lisu Autonomous Prefecture Amomum tsaoko Industry Innovation and Development Center, Lushui 673200, Yunnan, China; 2. Spice and Beverage Research Institute, Chinese Academy of Tropical Agricultural Sciences, Wanning 571533, Hainan, China; 3. Hainan Provincial Key Laboratory of Genetic Improvement and Quality Regulation for Tropical Spice and Beverage Crops, Wanning 571533, Hainan, China; 4. Key Laboratory of Processing Suitability and Quality Control of the Special Tropical Crops of Hainan Province, Wanning 571533, Hainan, China)

Abstract: In order to find out the differences of volatile aroma compounds in several main fruit shapes of *Amomum tsaoko*. The volatile aroma compounds of four main fruit shapes of *Amomum tsaoko* in Fugong County, Nujiang Prefecture were analyzed by head space-solid phase microextraction-gas chromatography-mass spectrometry. Combined with principal component analysis and partial least squares discriminant analysis, multivariate statistical analysis was carried out on the four main fruit shapes of *Amomum tsaoko* to screen the key volatile aroma components. The results showed that there were some differences in the types and relative contents of volatile aroma compounds in the four main fruit shapes of *Amomum tsaoko*. A total of 30 volatile aroma compounds were detected in the four main fruit shapes of *Amomum tsaoko*, 25 were detected in the globular shape *Amomum tsaoko*, 24 were detected in the spindle shape *Amomum tsaoko*, 23 were detected in the elliptic shape *Amomum tsaoko*, and 26 were detected in the oval shape *Amomum tsaoko*. Among them, there were 18 common

基金项目:云南省科技人才与平台计划(院士专家工作站)(202205AF150050、202305AF150176);云南省重大科技专项计划(202202AE090035)
作者简介:张映萍(1996—),女(汉),农艺师,硕士研究生,研究方向:香料加工。
*通信作者:和俊才(1983—),男,高级农艺师,本科,研究方向:农学。

compounds, including trans-2-decenal, eucalyptol, citral, cis-citral, α-terpineol, etc., and 12 non-common volatile compounds, including linalool, geraniol, trans-nerolidol, octanal, geranyl acetate, β-pinene, etc. Through multivariate statistical analysis, a total of 13 key volatile aroma compounds with variable importance for the projection value>1 were selected from four main fruit shapes of *Amomum tsaoko*, including trans-2-decenal, geraniol, linalool, 3-phenyl-2-butenal, α-terpineol, eucalyptol, α-methylcinnamaldehyde and other volatile aroma compounds.

Key words: *Amomum tsaoko*; volatile aroma components; head space-solid phase microextraction-gas chromatography-mass spectrometry; fruit shape traits; partial least squares-discriminant analysis

引文格式：

张映萍，徐飞，和秀丽，等 . HS-SPME-GC-MS 结合 PLS-DA 分析 4 种果形草果的挥发性香气化合物[J]. 食品研究与开发，2026，47(16)：188-195.

ZHANG Yingping, XU Fei, HE Xiuli, et al. Analysis of Volatile Aroma Compounds in Rour Fruit Shapes of *Amomum tsaoko* by HS-SPME-GC-MS Combined with PLS-DA[J]. Food Research and Development, 2026, 47(16): 188-195.

草果(*Amomum tsaoko* Crevost et Lemarie)别名草果子、草果仁，为姜科豆蔻属类多年生常绿草本香料植物，草果主要分布于中国、越南、老挝、缅甸等国家，在我国云南、广西、贵州、四川等地广泛种植[1-2]。目前，云南省草果种植面积和产量均占全国 90% 以上，其中怒江州草果的种植面积达 74 300 hm^2，挂果面积 34 666.67 hm^2，怒江州已发展为云南省草果核心产区之一[3]。草果为药食同源植物，草果干果通常被作为中药材原料和天然食品香料，其应用十分广泛。草果作为传统中草药材，具有燥湿温中、截疟除痰等功效，可用于治疗寒湿内阻、脘腹胀痛、痞满呕吐、疟疾寒热、瘟疫发热等疾病[4]。现代临床医学研究表明，草果能治疗腹胀，具有较强的抗氧化作用，有保肝、抑制癌细胞、降血糖、抗菌和抗炎镇痛等功效[5-7]。作为天然食品香料，草果果实具有浓郁的辛香气味，可作为调味香料，直接用于菜肴烹饪，增加菜肴风味、增香开胃、去油解腻、去腥除膻[8]。

挥发性香气化合物是评价草果品质的重要指标之一。草果中挥发性化合物丰富，主要为桉叶油素、α-水芹烯、香叶醇、橙花醛、(*E*)-2-癸烯醛、香叶醛、α-蒎烯、β-蒎烯等，其挥发性化合物含量不仅影响其呈香效果还与抗菌、抗氧化等生物活性作用密切相关。而草果和草果挥发油的挥发性香气成分组成和含量受多种因素影响，包括基因型、地理条件[9]、栽培环境、草果品种[10]、采收时间、干燥方法[11]和储存条件等，相比基因型、地理条件、采收时间等因素，草果品种的挥发性香气成分受到的关注相对较少，这也可能归因于草果品种还没有明确的区分标准。果实形状是区别作物品种的重要特征之一。本课题组对 7 种不同果型(果实形状)草果果粉的理化指标及挥发性成分进行研究，发现不同果型草果果粉在色差、挥发油含量、挥发性香气成分、水分含量、粒径、表面微观结构等方面都存在着一定差异[12]。相关研究发现草果的一般主要果实形态为球形、纺锤形、椭圆形、卵形 4 种，且 4 种果形草果的果长、种仁个数存在差异，果实挥发油得率与果长显著相关[5,13]。但是几种主要果形草果果实中挥发性香气成分组成和含量的具体差异性及其关键差异性成分还尚未可知。

气相色谱-质谱联用(gas chromatography-mass spectrometry，GC-MS)技术已被广泛应用于草果挥发油中挥发性香气物质的分析。顶空固相微萃取(head space-solid phase microextraction，HS-SPME)是一种灵敏度高、快速、自动化、无溶剂萃取、低成本且简单的萃取方法，同时，HS-SPME 也能有效缩短预处理时间，样品不需要蒸馏冷凝萃取，能最大限度保留原有香气风味[14]。相关研究表明，顶空固相微萃取气相色谱质谱联用技术是将 HS-SPME 与 GC-MS 组合的分析方法，已被广泛用于鉴定许多香料植物(例如草果)的挥发性香气化合物。吴桂苹等[15]采用顶空固相微萃取气相色谱质谱联用(head space-solid phase microextraction-gas chromatography-mass spectrometry，HS-SPME-GC-MS)技术对草果果实、果穗、叶及茎杆等不同部位的挥发性风味物质的含量及组成进行定性分析，分别鉴定出 66、76、70、44 种挥发性风味物质，结果发现草果不同部位的挥发性风味物质的含量和组成存在较大差异。Qin 等[16]采用 HS-SPME-GC-MS 方法对草果和拟草果两种姜科植物果实的挥发性香气化合物进行分析，并运用主成分分析(principal component analysis，PCA)和偏最小二乘判别分析(partial least squares-discriminant analysis，PLS-DA)进行统计，结果发现两个品种的挥发性香气化合物 1，8-桉叶素、α-水芹烯、(*E*)-2-癸烯醛、(−)-β-蒎烯、(*E*)-2-辛烯醛、1-辛醛、*D*-柠檬烯和癸醛含量存在明显差异。

基于 HS-SPME-GC-MS 的挥发性香气化合物分析

通常与 PCA 和 PLS-DA 统计分析方法相结合。PLS-DA 是一种有监督的判别分析统计方法，建立目标对象与样品类别之间的关系模型，通过数据之间的相关性来量化样品之间的差异程度[17]。PLS-DA 有助于识别模型中差异相关变量的关键因素。因此，它已被广泛应用于代谢组学和风味组学的研究。而目前，PLS-DA 统计分析方法在草果挥发性香气化合物分析中应用较少，基于挥发性香气化合物分析及多元统计分析方法，对不同果形草果进行有效区分及筛选关键差异性香气化合物的研究鲜见。

本研究以怒江州福贡县 4 种果形草果果实样品为原料，采用 HS-SPME-GC-MS，结合 PCA、PLS-DA 的统计分析方法，对 4 种果形草果样本进行多元统计分析，探究 4 种果形草果中挥发性香气化合物组分和含量的差异性，并筛选出 4 种不同果形草果香气品质形成的关键差异化合物，以期为依据果形特征区分草果的品种分类提供一定的理论基础，也为 4 种果形草果在食品和医药领域的综合利用提供参考。

1 材料与方法

1.1 材料与设备

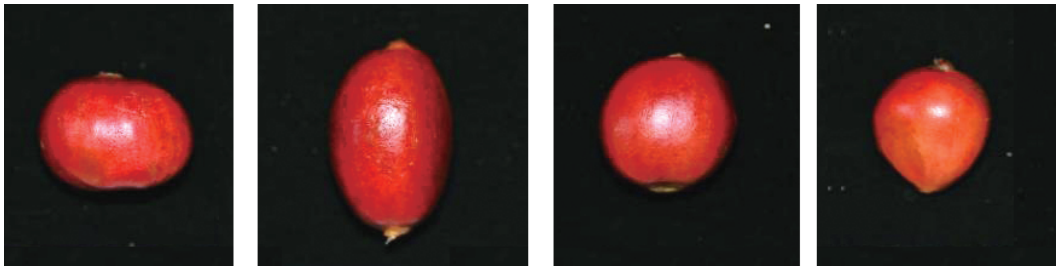
1.1.1 材料

4 种果形草果均采自云南省怒江州福贡县，果实特征信息见表 1，4 种果形草果外观见图 1。

表 1 4 种果形草果果实特征信息

Table 1 Fruit characteristics information of four fruit shapes of *Amomum tsaoko*

编号	采样地点	果实形状	纵径/mm	横径/mm	果形指数	果实质量/g
1	福贡县马吉乡布施村	球形	31.24±0.48	29.46±1.41	1.06±0.05	119.8
2	福贡县马吉乡布施村	纺锤形	46.28±2.93	27.03±1.80	1.71±0.11	123.2
3	福贡县马吉乡布施村	椭圆形	45.39±2.37	33.23±0.82	1.37±0.04	170.2
4	福贡县马吉乡布施村	卵形	31.61±3.18	27.95±1.53	1.13±0.06	97.6



球形　纺锤形　椭圆形　卵形

图 1 4 种果形草果外观

Fig.1 Appearance of four main fruit shapes of *Amomum tsaoko*

1.1.2 仪器与设备

相机（EOS1500D）：佳能（中国）有限公司；电热恒温鼓风干燥箱（DGX-9243BC-1）：宁波海曙赛福实验仪器厂；千分之一电子天平（AR2140）：梅特勒-托利多仪器（上海）有限公司；高速中药粉碎机（YF-1000）：浙江瑞安市永历制药机械有限公司；气相色谱质谱联用仪（7890B - 5977B）、毛细管色谱柱（30 m×0.25 mm，0.25 μm）（DB-WAX）：美国 Agilent 公司；固相微萃取头（DVB/CAR/PDMS）：上海安谱实验科技股份有限公司。

1.2 HS-SPME-GC-MS 分析

草果样品预处理：将 4 种果形草果原料洗净、去除杂质，于（55±3）℃下热风干燥 32 h 后，将干燥草果经粉碎机粉碎，过 40 目筛，获得草果粉末样品，待测。

HS-SPME 处理：称取 0.50 g 草果粉末样品，装入 15 mL 顶空进样瓶中，40 ℃下预热 15 min，插入 DVB/CAR/PDMS 固相微萃取头吸附 15 min，样品在 230 ℃解吸附 5 min。

GC 分析条件：选用 DB - WAX 色谱柱（30 m×0.25 mm，0.25 μm），载气为氦气，流速为 1.0 mL/min，不分流进样；升温程序：以 50 ℃初始柱温，保持 1 min，以 4 ℃/min 升至 90 ℃，保持 1 min，以 2 ℃/min 升至 160 ℃，再以 20 ℃/min 升至 220 ℃保持 2 min。

MS 检测条件：离子源为电子轰击离子源（electron impact ionization source，EI），电子能量 70 eV，传输线温度 250 ℃，离子源温度 230 ℃、四极杆温度 150 ℃，质量扫描范围 m/z 30~350。

结果采用 GC-MS 进行评价，以峰面积归一化法计算各个化合物相对含量。通过保留时间、相对分子质量等信息与 NIST 17 质谱库比对，鉴定化合物。

1.3 数据分析

采用 Excel 2010 软件对香气数据进行整合。数据采用 IBM SPSS 20.0 软件进行方差分析。结果以平均值±标准差表示，$P<0.05$ 被认为具有显著性差异。图由 Orgin2019b 绘制。采用 SIMCA 14.1 软件进行 PCA 和 PLS-DA。

2 结果与分析

2.1 4种果形草果挥发性香气化合物的HS-SPME-GC-MS定性分析

为评价4种果形草果果实挥发性香气化合物的差异变化，采用HS-SPME-GC-MS技术对球形、纺锤形、椭圆形、卵形草果果实的挥发性香气化合物进行分析检测，结果如表2所示。

由表2可知，4种果形草果果实样品中挥发性香气化合物种类及数量存在一定差异，共检测出30种挥发性香气化合物，包含醇类8种、醛类12种、萜烯类7种、酯类1种、酮类1种、其它1种。其中球形草果中检出挥发性香气化合物25种，纺锤形草果检出24种、椭圆形草果检出23种、卵形草果检出26种。4种果形草果果实样品所检出的挥发性香气化合物中共有化合物18种，主要包括反式-2-癸烯醛、桉叶油醇、柠檬醛、顺式-柠檬醛、α-松油醇等。其中反式-2-癸烯醛、桉叶油醇、柠檬醛、顺式-柠檬醛的相对含量较高。非共有的挥发性化合物有12种，主要包括芳樟醇、香叶醇、反式-橙花叔醇、辛醛、乙酸香叶酯、β-蒎烯等。其中芳樟醇在球形、纺锤形、卵形草果中均有检出，而在椭圆形草果中未检出，香叶醇仅在球形草果中有检出，反式-橙花叔醇仅在球形、纺锤形草果中检出，辛醛在球形、椭圆形、卵形草果中检出，乙酸香叶酯仅在椭圆形草果中有检出，β-蒎烯在纺锤形、椭圆形、卵形草果中有检出，2-壬酮仅在卵形草果中有检出。

由表2可知，4种主要果形草果果实中挥发性香

表2 4种果形草果的挥发性香气化合物及其相对含量

Table 2 Volatile aroma components and their relative contents in four fruit shapes of *Amomum tsaoko*

类别	编号	化合物名称	CAS	相对含量/%			
				球形	纺锤形	椭圆形	卵形
醇类	A1	桉叶油醇	470-82-6	15.13±2.97^{b}	18.80±0.32^{a}	16.42±1.94^{ab}	15.03±0.77^{b}
	A2	4-侧柏醇	546-79-2	0.77±0.11^{a}	0.79±0.04^{a}	0.49±0.03^{b}	0.45±0.11^{b}
	A3	芳樟醇	78-70-6	5.11±0.43^{a}	3.32±0.17^{b}	–	1.95±0.28^{c}
	A4	(–)-4-萜品醇	20126-76-5	1.29±0.20^{b}	1.62±0.15^{a}	1.21±0.05^{b}	1.07±0.11^{b}
	A5	α-松油醇	7785-53-7	6.05±0.74^{a}	6.19±0.29^{a}	3.53±0.19^{b}	3.78±0.23^{b}
	A6	香茅醇	106-22-9	0.47±0.25^{a}	0.49±0.13^{a}	0.46±0.12^{a}	0.53±0.25^{a}
	A7	香叶醇	106-24-1	4.56±0.41^{a}	–	–	–
	A8	反式-橙花叔醇	40716-66-3	1.11±0.17^{a}	0.77±0.06^{b}	–	–
醛类	B1	辛醛	124-13-0	0.90±0.29^{a}	–	1.65±0.69^{a}	1.25±0.52^{a}
	B2	反-2-辛烯醛	2548-87-0	–	2.53±0.53^{ab}	3.28±0.82^{a}	2.24±0.55^{b}
	B3	(+)-香茅醛	2385-77-5	0.38±0.09^{ab}	0.45±0.04^{a}	0.32±0.03^{bc}	0.27±0.04^{c}
	B4	癸醛	112-31-2	1.05±0.13^{ab}	0.76±0.07^{b}	1.24±0.13^{a}	1.36±0.28^{a}
	B5	3,7-二甲基-3,6-辛二烯醛	55722-59-3	2.97±0.31^{b}	3.83±0.30^{a}	4.17±0.11^{a}	3.67±0.44^{a}
	B6	反式-2-癸烯醛	3913-81-3	23.26±0.98^{a}	15.63±0.96^{c}	19.16±0.85^{b}	21.68±1.65^{a}
	B7	顺式-柠檬醛	106-26-3	13.43±0.03^{a}	13.11±0.70^{a}	13.26±0.21^{a}	12.41±0.85^{a}
	B8	柠檬醛	5392-40-5	13.96±0.62^{a}	14.69±1.24^{a}	15.66±0.20^{a}	14.51±0.90^{a}
	B9	反式-2-十四醛	51534-36-2	6.07±0.45^{a}	4.03±0.48^{bc}	3.36±0.19^{c}	4.71±0.80^{b}
	B10	α-亚乙基-苯乙醛	51932-70-8	6.32±0.35^{a}	6.23±0.62^{a}	5.94±0.35^{a}	6.38±0.96^{a}
	B11	3-苯基-2-丁烯醛	1196-67-4	–	0.16±0.01^{b}	–	1.13±0.24^{a}
	B12	α-甲基肉桂醛	101-39-3	0.84±0.06^{c}	1.02±0.15^{a}	0.97±0.06^{ab}	–
萜烯类	C1	β-蒎烯	555-10-2	–	0.53±0.06^{a}	0.64±0.44^{a}	0.51±0.25^{a}
	C2	α-水芹烯	99-83-2	0.60±0.21^{b}	2.42±0.34^{a}	1.63±0.99^{ab}	2.03±1.59^{ab}
	C3	3-蒈烯	13466-78-9	0.63±0.25^{a}	1.22±0.53^{a}	1.56±0.98^{a}	1.08±0.64^{a}
	C4	对伞花烃	99-87-6	0.56±0.10^{a}	0.67±0.20^{a}	1.27±0.75^{a}	0.76±0.35^{a}
	C5	(–)-A-荜澄茄油烯	17699-14-8	0.20±0.01^{a}	–	–	0.16±0.02^{b}
	C6	α-蒎烯	3856-25-5	0.41±0.06^{a}	0.23±0.02^{c}	0.29±0.04^{bc}	0.34±0.07^{ab}
	C7	Δ-杜松烯	16729-01-4	0.34±0.03^{b}	–	–	0.52±0.08^{a}
酯类	D1	乙酸香叶酯	105-87-3	–	–	0.89±0.04^{a}	–
酮类	E1	2-壬酮	821-55-6	–	–	–	0.17±0.07^{a}
其它	F1	(*Z*)-3,7-二甲基-3,6-辛二烯醛	1000414-18-0	1.18±0.19^{ab}	1.16±0.10^{b}	1.46±0.06^{a}	1.30±0.19^{ab}

注：同行不同小写字母表示存在显著性差异（$P<0.05$）。–表示该化合物未检出。

气化合物的相对含量存在一定的差异，其中球形和卵形草果中的反式-2-癸烯醛相对含量显著较高，分别为23.26%、21.68%，纺锤形草果中反式-2-癸烯醛相对含量则明显较低，仅为 15.63%；纺锤形草果中桉叶油醇的相对含量较高，为 18.80%；球形、纺锤形草果中 α-松油醇、4-侧柏醇相对含量明显高于椭圆形、卵形草果；纺锤形草果中 α-水芹烯相对含量较高。

2.2　4 种果形草果挥发性香气化合物种类分析

根据 4 种果形草果的挥发性香气化合物的组成及含量，将其按照化合物种类、数量进行分类，如图 2、图 3 所示。

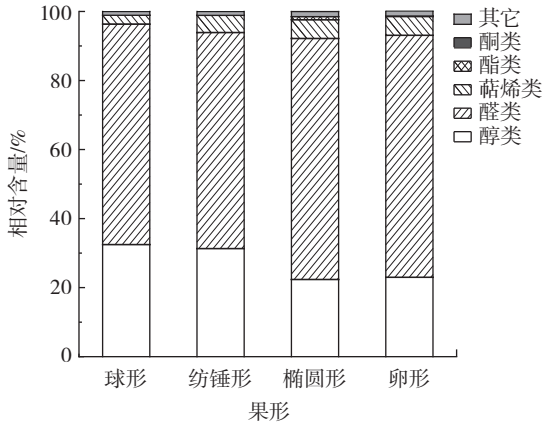


图 2　4 种果形草果中挥发性香气化合物的组成

Fig.2　Composition of volatile aroma compounds in four fruit shapes of *Amomum tsaoko*

由图 2 可知，4 种果形草果中的挥发性香气化合物类型存在差异，不同类型化合物的相对含量也存在一定差异。其中 4 种主要果形草果中均检出醇类、醛类、萜烯类及其它化合物，球形、纺锤形草果中未检出酯类、酮类化合物，椭圆形草果中未检出酮类化合物，卵形草果中未检出酯类化合物。在 4 种果形草果样品中醛类化合物的相对含量较高，其次是醇类化合物，此两种化合物为 4 种果形草果样品中的主要挥发性香气化合物种类。其中，4 种果形草果样品中醛类化合物相对含量在 63.68%~69.61% 范围内，其中卵形、椭圆形草果中醛类化合物的相对含量较高，分别为 69.61%、69.02%，纺锤形草果中醛类化合物的相对含量较低，为 63.68%；4 种果形草果样品中醇类化合物相对含量为 22.11%~34.50%，其中球形草果中醇类化合物的相对含量最高，椭圆形草果中醇类化合物的相对含量最低。除此之外，4 种果形草果样品中萜烯类化合物相对含量也相对较高，相对含量在 2.74%~5.41% 范围内，其中纺锤形、椭圆形、卵形果实中萜烯类化合物相对含量较高。

由图 3 可知，球形草果样品中检出的挥发性化合物包含 8 种醇类、10 种醛类、6 种萜烯类、1 种其它化

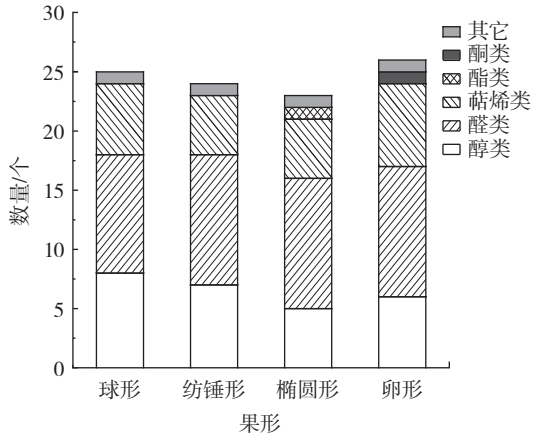


图 3　4 种果形草果中挥发性香气化合物的数量

Fig.3　Quantity of volatile aroma compounds in four fruit shapes of *Amomum tsaoko*

合物，纺锤形草果样品中包含 7 种醇类、11 种醛类、5 种萜烯类、1 种其它类化合物，椭圆形草果样品中包含 5 种醇类、11 种醛类、5 种萜烯类、1 种酯类、1 种其它类化合物，卵形草果样品中包含 6 种醇类、11 种醛类、7 种萜烯类、1 种酮类、1 种其它类化合物。由此得出，4 种果形草果中挥发性香气化合物类型及数量存在一定差异，其中球形、纺锤形草果样品中醛类和醇类化合物数量较多，椭圆形草果中醛类化合物数量较多，卵形草果中醛类、萜烯类化合物数量较多。

2.3　4 种果形草果挥发性香气化合物的 PLS-DA

2.3.1　PLS-DA 建模与模型评价

为进一步分析 4 种果形草果样品之间挥发性香气化合物的差异性，明确草果 4 种主要果形对其挥发性香气化合物的影响，采用 SIMCA 14.1 软件对 4 种果形草果中挥发性香气化合物相对含量数据进行统计分析，建立 PLS-DA 模型，结果如图 4 所示。

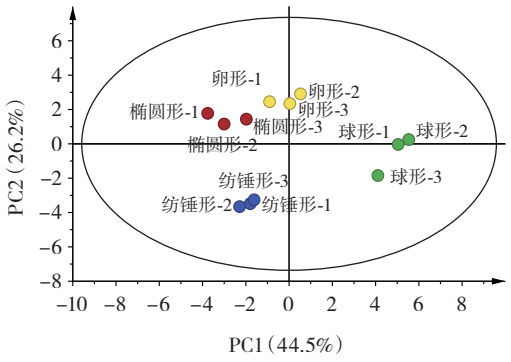


图 4　4 种果形草果中挥发性香气化合物 PLS-DA 得分图

Fig.4　PLS-DA score plot of volatile aroma compounds in four fruit shapes of *Amomum tsaoko*

由图 4 可知，PLS-DA 模型的 PC1 贡献率为 44.5%，PC2 贡献率为 26.2%，主成分贡献率总和在 70%~80% 范围内，说明结果可接受[18]。4 种果形草果

样品组间实现完全分离，说明球形、纺锤形、椭圆形、卵形 4 种果形草果的挥发性香气化合物整体存在一定差异。纺锤形草果样品的组内距离较近，说明其重复性较好。椭圆形和卵形草果样品之间距离较近，而球形、纺锤形与椭圆形和卵形草果样品之间距离较远，表明椭圆形和卵形草果样品挥发性香气化合物的差异较小，而球形、纺锤形与椭圆形和卵形的草果挥发性香气化合物存在显著差异。通过 PLS-DA 可知，其拟合参数为 R^2_X=0.887、R^2_Y=0.972、Q^2=0.864，Q^2>0.4 说明该模型可接受，且稳定性良好。为考察该模型的建模效果，利用置换检验分析进行 200 次交叉验证，结果见图 5。

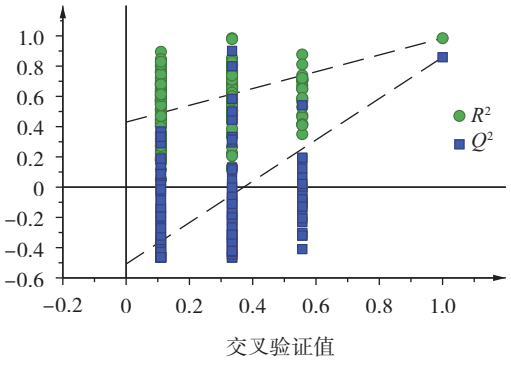


图 5　4 种果形草果中挥发性香气化合物的交叉验证模型

Fig.5　Cross validation model of volatile aroma compounds in four fruit shapes of *Amomum tsaoko*

由图 5 可知，R^2=0.430、Q^2=−0.508，Q^2 为负值说明该 PLS-DA 模型可靠[19]，且不存在过拟合现象，可以用于不同处理组的判别分析。

2.3.2　潜在差异性挥发性香气化合物分析

为进一步体现 4 种果形草果挥发性香气化合物差异，对 PLS-DA 模型的变量投影重要性（variable importance for the projection，VIP）值进行计算，VIP 值能量化 PLS-DA 的各变量对分类的贡献大小。VIP 值>1 时表明该变量具有重要的作用，VIP 值越大，说明该变量在不同处理组间的差异越显著[20]。通常认为 VIP 值>1 是差异代谢物筛选标准[21]。因此，在挑选不同处理组间的关键挥发性香气化合物时，通常认为 VIP 值>1 的挥发性香气化合物为该组样品的关键挥发性香气化合物。基于 PLS-DA 模型分析 VIP 值>1 的挥发性香气化合物，结果见表 3。

如表 3 所示，4 种果形草果中有 13 种挥发性香气化合物的 VIP 值>1，包括反-2-癸烯醛、香叶醇、芳樟醇、3-苯基-2-丁烯醛、α-松油醇、桉叶油醇、α-甲基肉桂醛、乙酸香叶酯、辛醛、反-2-辛烯醛、α-水芹烯、顺式-柠檬醛、反式-2-十四醛。说明这些挥发性香气化合物在 4 种果形草果间的差异具有统计学意义，是区分球形、纺锤形、椭圆形、卵形 4 种果形草果挥发性香气化合物差异的关键性指标。

表 3　基于 PLS-DA 模型分析 VIP 值>1 的挥发性香气化合物

Table 3　Volatile aroma compounds with VIP value>1 in PLS-DA model analysis

序号	编号	化合物名称	VIP 值
1	B6	反-2-癸烯醛	1.904 41
2	A7	香叶醇	1.742 76
3	A3	芳樟醇	1.648 45
4	B11	3-苯基-2-丁烯醛	1.459 75
5	A5	α-松油醇	1.395 89
6	A1	桉叶油醇	1.382 76
7	B12	α-甲基肉桂醛	1.259 01
8	D1	乙酸香叶酯	1.218 44
9	B1	辛醛	1.135 93
10	B2	反-2-辛烯醛	1.111 17
11	C2	α-水芹烯	1.091 39
12	B7	顺式-柠檬醛	1.071 17
13	B9	反式-2-十四醛	1.051 66

3　讨论与结论

挥发性香气化合物是评价草果品质的重要因素之一，具有功能特性和药用价值的桉叶油醇、α-松油醇、α-蒎烯、α-水芹烯等成分均为挥发性香气化合物。本研究在发现不同果实形状草果果粉挥发性香气化合物存在一定差异的基础上，以怒江州福贡县球形、纺锤形、椭圆形、卵形 4 种果实形态样品为原料，采用 HS-SPME-GC-MS 法分析其挥发性香气化合物，结果得出 4 种果形草果果实样品中挥发性香气化合物种类及相对含量存在一定差异，4 种果形草果中共检测出 30 种挥发性香气化合物，球形草果中检出 25 种、纺锤形草果检出 24 种、椭圆形草果检出 23 种、卵形草果检出 26 种。其中所检出的挥发性香气化合物中共有化合物 18 种，主要包括反式-2-癸烯醛、桉叶油醇、柠檬醛、顺式-柠檬醛、α-松油醇等。其中反式-2-癸烯醛、桉叶油醇、柠檬醛、顺式-柠檬醛的相对含量较高。该结果与徐士琪等[22]的研究结果相似，反式-2-癸烯醛、桉叶油醇、柠檬醛、α-松油醇等均为草果中检出的主要挥发性香气成分。

草果的香气是由其产地来源、生长环境、加工工艺、干燥程度等因素共同决定的[23-24]，而草果果实包括果皮和种仁，且其所含挥发性香气成分略有差异[25]。本研究中 4 种果形草果的挥发性香气化合物 GC-MS 分析结果显示，芳樟醇在球形、纺锤形、卵形草果中均有检出，而在椭圆形草果中未检出，香叶醇仅在球形草果中有检出，反式-橙花叔醇仅在球形、纺锤形草果中有检出，辛醛在球形、椭圆形、卵形草果中有检出，乙酸香叶酯仅在椭圆形草果中有检出，β-蒎烯在纺锤形、椭圆形、卵形草果中有检出，2-壬酮仅在卵形草果中有检出。挥发性香气化合物的 PLS-DA 得分图结果也显示，椭圆形和卵形草果样品之间距离较近，而球形、纺

锤形与椭圆形和卵形草果样品之间距离较远，表明椭圆形和卵形草果样品挥发性香气化合物的差异较小，而球形、纺锤形与椭圆形和卵形的草果挥发性香气化合物存在显著性差异。说明，球形、纺锤形草果与椭圆形和卵形草果的挥发性香气化合物差异明显，椭圆形和卵形草果间差异较小。由此推测，其原因可能是果实形状不同，其单果中果皮和种仁含量占比略有不同，检测出的挥发性香气化合物存在一定差异。

通过 PLS-DA，从球形、纺锤形、椭圆形、卵形 4 种果形草果的挥发性香气化合物中挑选出 VIP 值>1 的关键差异性挥发性香气化合物共有 13 种，主要包括反式-2-癸烯醛、香叶醇、芳樟醇、3-苯基-2-丁烯醛、α-松油醇、桉叶油醇、α-甲基肉桂醛、乙酸香叶酯、辛醛、反-2-辛烯醛、α-水芹烯等挥发性香气化合物。该研究结果可为 4 种果形草果的品种鉴定、表型性状分类，功能性、药用价值挖掘，以及有特定风味需求相关的产品开发利用提供理论支持。

参考文献：

[1] 权美平 . 草果精油功能性研究进展[J]. 中国调味品, 2016, 41(3): 142-145.
QUAN Meiping. Research progress on functionality of essential oil in *Amomum tsaoko* fruit[J].China Condiment, 2016, 41(3): 142-145.

[2] 韩林, 汪开拓, 王兆丹, 等 . 草果精油的化学组成、抗氧化及抑菌活性研究[J]. 食品工业科技, 2013, 34(14): 152-155.
HAN Lin, WANG Kaituo, WANG Zhaodan, et al. Chemical composition, antioxidant and antibacterial activities of the essential oil from *Amomum tsaoko*[J]. Science and Technology of Food Industry, 2013, 34(14): 152-155.

[3] 练强, 杨毅, 吴莲张 . 怒江草果产业发展存在的问题及对策[J]. 现代农业科技, 2020(20): 234-235.
LIAN Qiang, YANG Yi, WU Lianzhang. Problems and countermeasures of Nujiang *Amomum tsaoko* industry development[J]. Modern Agricultural Science and Technology, 2020(20): 234-235.

[4] 迟玉广, 李中阳, 黄爱华, 等 . 不同炮制方法对草果中挥发性成分的影响[J]. 安徽农业科学, 2021, 49(6): 175-177, 219.
CHI Yuguang, LI Zhongyang, HUANG Aihua, et al. Effects of different processing methods on volatile components in *Amomum tsaoko*[J].Anhui Agricultural Sciences, 2021, 49(6): 175-177, 219.

[5] ZHANG W, LU B Y, MENG H L, et al. Phenotypic diversity analysis of the fruit of *Amomum tsaoko* Crevost et Lemarie, an important medicinal plant in Yunnan, China[J]. Genetic Resources and Crop Evolution, 2019, 66(5): 1145-1154.

[6] HE X F, ZHANG X K, GENG C G, et al. Tsaokopyranols A-M, 2, 6-epoxydiarylheptanoids from *Amomum tsaoko* and their α-glucosidase inhibitory activity[J]. Bioorganic Chemistry, 2020, 96: 103638.

[7] CHEN C, YOU F, WU F H, et al. Antiangiogenesis efficacy of ethanol extract from *Amomum tsaoko* in ovarian cancer through inducing ER stress to suppress p-STAT3/NF-kB/IL-6 and VEGF loop[J]. Evidence-Based Complementary and Alternative Medicine, 2020, 2020(1): 2390125.

[8] 姜薇, 强宇, 刘成江, 等 . 香辛料对酱卤牛肉的赋味效应解析[J]. 现代食品科技, 2022, 38(10): 249-260.
JIANG Wei, QIANG Yu, LIU Chengjiang, et al. Profile analysis of tastant compounds contributed by spices to stewed beef[J]. Modern Food Science & Technology, 2022, 38(10): 249-260.

[9] 谷风林, 张林辉, 房一明, 等 . 云南不同地区草果物理性状、精油含量及组成分析[J]. 热带作物学报, 2018, 39(7): 1440-1446.
GU Fenglin, ZHANG Linhui, FANG Yiming, et al. Analysis of physical properties, essential oil content and composi-tion of *Amomum tsaoko* from different origins of Yunnan[J]. Chinese Journal of Tropical Crops, 2018, 39(7): 1440-1446.

[10] 徐萍, 于梦雯, 李新华, 等 . 不同品系草果挥发油成分分析[J/OL]. 分子植物育种[2025-05-04]. https://link.cnki.net/urlid/46.1068.S.20230912.1246.004.
XU Ping, YU Mengwen, LI Xinhua, et al. Analysis of essential oil from different strains of *Amomum tsaoko*[J/OL]. Molecular Plant Breeding[2025-05-04]. https://link.cnki.net/urlid/46.1068.S.20230912.1246.004.

[11] YANG H J, GE X H, GU L S, et al. Characterization of key flavor compounds of different dried *Amomum tsaoko* using a sensomics approach[J]. Journal of Food Composition and Analysis, 2025, 139: 107101.

[12] 张映萍, 徐飞, 穆明兴, 等 . 7 种不同果型草果果粉的理化指标及挥发性成分分析[J]. 热带作物学报, 2024, 45(4): 813-824.
ZHANG Yingping, XU Fei, MU Mingxing, et al. Analysis of physicochemical indexes and volatile components of seven *Amomum tsaoko* powder[J]. Chinese Journal of Tropical Crops, 2024, 45(4): 813-824.

[13] 许倬卉, 杨绍兵, 杨天梅, 等 . 草果地理分布特征及表型变异分析[J]. 植物遗传资源学报, 2021, 22(4): 1009-1020.
XU Zhuohui, YANG Shaobing, YANG Tianmei, et al. Analysis on geographical distribution and phenotypic variation of *Amomum tsaoko* crevost & lemarié[J]. Journal of Plant Genetic Resources, 2021, 22(4): 1009-1020.

[14] QUINTERO RAMÍREZ M, ALVAREZ VALDEZ E, CEBALLOS AGUIRRE N, et al. Volatilomic profile of the tree tomato (*Solanum betaceum* Cav.) pulp during ripening and senescence using HS-SPME with GC-MS[J]. LWT-Food Science and Technology, 2023, 186: 115213.

[15] 吴桂苹, 段君宇, 朱科学, 等 . HS-SPME-GC-TOF-MS 分析云南怒江草果不同部位的挥发性风味物质[J]. 食品研究与开发, 2020, 41(18): 169-176, 218.
WU Guiping, DUAN Junyu, ZHU Kexue, et al. Analysis of volatile flavor compounds in different parts of *Amomum tsaoko* from Nujiang of Yunnan Province by HS-SPME-GC-TOF-MS[J]. Food Research and Development, 2020, 41(18): 169-176, 218.

[16] QIN H W, WANG Y Z, YANG W Z, et al. Comparison of metabolites and variety authentication of *Amomum tsaoko* and *Amomum paratsaoko* using GC-MS and NIR spectroscopy[J]. Scientific Reports, 2021, 11: 15200.

[17] 欧阳红军, 刘义军, 袁源, 等 . HS-SPME-GC-MS 结合 OPLS-DA 分析提取方法对牛油果油挥发性香气化合物的影响[J]. 南方农业学报, 2021, 52(3): 779-788.
OUYANG Hongjun, LIU Yijun, YUAN Yuan, et al. HS-SPME-GC-MS coupled with OPLS-DA to analyze the effects of extraction methods on volatile aroma compounds of avocado oil[J]. Journal of Southern Agriculture, 2021, 52(3): 779-788.

[18] 陆华瑜, 罗鎏欣, 李圣胜, 等 . 添加红曲米对发酵萝卜品质及挥发性风味的影响[J]. 食品工业科技, 2025, 46(17): 14-24.
LU Huayu, LUO Liuxin, LI Shengsheng, et al. Effect of adding red yeast rice on the quality and volatile flavor of fermented radish[J]. Science and Technology of Food Industry, 2025, 46(17): 14-24.

[19] 冯花, 王飞权, 张渤, 等 . 不同茶树品种白牡丹茶香气成分的 HS-

SPME-GC-MS 分析[J]. 现代食品科技, 2021, 37(12): 252-264, 251.
FENG Hua, WANG Feiquan, ZHANG Bo, et al. Analysis of aroma components of baimudan tea from different tea plant varieties using HS-SPME-GC-MS[J]. Modern Food Science & Technology, 2021, 37(12): 252-264, 251.

[20] 尹洪旭, 杨艳芹, 姚月凤, 等 . 基于气相色谱-质谱技术与多元统计分析对不同栗香特征绿茶判别分析[J]. 食品科学, 2019, 40(4): 192-198.
YIN Hongxu, YANG Yanqin, YAO Yuefeng, et al. Discrimination of different characteristics of chestnut-like green tea based on gas chromatography-mass spectrometry and multivariate statistical data analysis[J]. Food Science, 2019, 40(4): 192-198.

[21] LIU H C, WEN J, XU Y J, et al. Evaluation of dynamic changes and formation regularity in volatile flavor compounds in Citrus reticulata 'Chachi' peel at different collection periods using gas chromatography-ion mobility spectrometry[J] LWT-Food Science and Technology, 2022, 171: 114126.

[22] 徐士琪, 白佳伟, 杨文熙, 等 . 干草果中的关键香气成分分析[J]. 精细化工, 2019, 36(9): 1857-1862, 1873.
XU Shiqi, BAI Jiawei, YANG Wenxi, et al. Analysis of the key odorants in dried *Amomum tsaoko* Crevost et Lemaire[J]. Fine Chemicals, 2019, 36(9): 1857-1862, 1873.

[23] 梁淼, 张祉敏, 吴雅健, 等 . 辛香料草果的研究及精油应用进展[J]. 食品工业科技, 2023, 44(2): 427-435.
LIANG Miao, ZHANG Zhimin, WU Yajian, et al. Progress on research of spice amomumtsaokoand application of its essential oil[J]. Science and Technology of Food Industry, 2023, 44(2): 427-435.

[24] 许倬卉, 杨绍兵, 杨天梅, 等 . 不同干燥程度草果果实形态及种仁挥发油的变化规律[J]. 中国调味品, 2021, 46(10): 21-26.
XU Zhuohui, YANG Shaobing, YANG Tianmei, et al. The changes of fruit morphology of *Amomum tsaoko* with different drying degrees and volatile oil of seed kernel[J]. China Condiment, 2021, 46(10): 21-26.

[25] 黄元猛, 黄琦, 耗才清, 等 . 基于 GC-MS 的 3 个不同地区草果皮和籽挥发油成分分析[J]. 绿色科技, 2024, 26(19): 49-53, 68.
HUANG Yuanmeng, HUANG Qi, HAO Caiqing, et al. Analysis of the volatile oil components of the peel and seeds of *Amomum tsaoko* Crevost et Lemarie from three different regions by GC-MS[J]. Journal of Green Science and Technology, 2024, 26(19): 49-53, 68.

加工编辑:王雪
收稿日期:2025-06-04