

烘焙程度对云南日晒和水洗咖啡豆理化性质及风味物质的影响

施雪颖^{1,2}, 李娜³, 李玥^{1,2}, 万顶阳⁴, 林晓珊⁴, 朱松^{1,2*}

¹江南大学食品科学与资源挖掘全国重点实验室 江苏无锡 214122

²江南大学食品学院 江苏无锡 214122

³广东顺大食品调料有限公司 广东潮州 515633

⁴昆山亿政咖啡有限公司 江苏苏州 215300

摘要 为研究烘焙程度对云南日晒咖啡豆和水洗咖啡豆理化性质和风味物质的影响,测定不同烘焙程度日晒豆和水洗豆的色差、粗脂肪含量、脂肪酸含量和氨基酸含量,并采用气相色谱-飞行时间质谱(GC-TOF-MS)和气相色谱-离子迁移谱(GC-IMS)分析它们的挥发性化合物。GC-TOF-MS 结果显示,6 个样品中共鉴定出 142 种挥发性化合物,如 5-甲基糠醛、糠醇等;气味活性值(OAV)分析共筛选出 35 种 OAV ≥ 1 的化合物,如 4-乙烯基愈创木酚等,这些物质对云南咖啡豆的整体香气具有重要贡献;偏最小二乘判别分析(PLS-DA)能较好地地区分日晒豆和水洗豆;通过 PLS-DA 的变量重要性投影(VIP)分析得到 53 种 VIP 值 >1 的挥发性化合物,如二甲基二硫醚等。GC-IMS 分析共定性识别出 105 种挥发性化合物。指纹图谱结果显示,2-甲基-1-丙醇、3-戊醇、2,3-丁二醇和(E)- β -石竹烯是日晒豆的特征挥发性化合物,2-己酮、辛酸乙酯、4-萜烯醇、1-苯乙酮、4-甲基-2-戊酮和 β -月桂烯是水洗豆的特征挥发性化合物。主成分分析(PCA)能够准确地地区分不同烘焙程度的云南日晒豆和水洗豆。本研究利用 GC-TOF-MS 和 GC-IMS 技术结合 PLS-DA 和 PCA 方法,对不同烘焙程度的云南日晒豆和水洗豆风味物质进行表征,筛选出特征挥发性化合物,为阐明两种采后加工方式咖啡豆的香气特征提供理论参考。

关键词 咖啡豆; 气相色谱-飞行时间质谱; 气相色谱-离子迁移谱; 气味活性值; 指纹图谱

文章编号 1009-7848(2024)12-0396-18 **DOI:** 10.16429/j.1009-7848.2024.12.036

咖啡属于茜草科咖啡属多年生常绿灌木或小乔木,为世界三大饮料之一,受到全世界各国人民的喜爱。全球咖啡贸易依赖于 100 多种咖啡属中的两种:阿拉比卡咖啡和罗布斯塔咖啡,其中阿拉比卡咖啡的风味备受推崇,占世界咖啡产量的 60%以上^[1]。我国的咖啡主要种植区分布在云南、海南、福建等地,适宜咖啡树生长的良好气候使云南成为我国最大的咖啡产区,其产量占全国咖啡总产量的 99%^[2-3]。阿拉比卡咖啡(又称小粒种咖啡)是云南的主要种植品种。咖啡香气的形成主要发生在烘焙过程中,通过一系列复杂的美拉德反应、焦糖化反应和其它热反应,咖啡生豆中的一些香气前体转化成呋喃、酮类、吡嗪、吡啶等各种风味成分,增添了咖啡的风味、酸味、余味和醇度^[4-5]。咖啡的感官特性受多种因素的影响:地理来源,气

候,海拔,采后加工,烘焙速度和烘焙程度等。

咖啡果实的采后加工方法有很多种,常见的加工方法有日晒法、水洗法、蜜处理法等,随着加工工艺的创新,一些新的加工方法被用于处理咖啡果实,如碳酸浸渍法等^[6]。相较于传统的日晒法,常用于处理阿拉比卡咖啡的水洗法能够洗去咖啡豆本身带有的泥土味、青草味等负面风味,使豆子的干净度更高,香气更加精致。烘焙过程使咖啡豆的生物活性和化学组成发生显著变化,同时为咖啡豆增添了美妙的烘烤香气。咖啡烘焙度的基本分类已经建立,一般情况下可以分为 4 类:浅度烘焙、中度烘焙、中深度烘焙和深度烘焙^[7]。

目前已有关于云南咖啡豆的研究,揭示了烘焙时间和烘焙程度对咖啡豆化学组成和挥发性成分的影响。刘亚玲等^[8]研究了云南 3 个主产区咖啡豆的主要成分及类黑精组成,发现不同产地、不同烘焙程度咖啡豆的类黑精组成差异明显。杨浩澜等^[9]结合高效液相色谱和多元化学计量学方法建立了水洗咖啡和日晒咖啡的鉴别模型,其中绿原

收稿日期: 2023-12-20

基金项目: 国家自然科学基金项目(32172197)

第一作者: 施雪颖,女,硕士生

通信作者: 朱松 E-mail: zhusong@jiangnan.edu.cn

酸为重要差异成分。此外,也有一些关于采后加工过程对咖啡豆理化性质和风味的影响研究。Cortés-Macías 等^[10]研究了采后加工方式和烘焙程度对哥伦比亚咖啡理化特性、抗氧化能力和生物活性物质含量的影响,发现不同的采后处理使咖啡产生感官差异。Várady 等^[11]以不同国家的生咖啡豆和烘焙咖啡豆为对象,研究采后加工方式对理化性质和挥发性化合物的影响,发现日晒咖啡和发酵咖啡的挥发性成分相对含量存在差异。目前对云南咖啡豆的研究集中于烘焙过程,而探究采后加工过程对咖啡豆理化性质和风味影响的则多是对国外品种的研究。本文以3种烘焙程度的云南日晒和水洗咖啡豆为材料,测定基本理化组成,采用GC-TOF-MS和GC-IMS对其挥发性化合物进行定性、定量分析,解析特征挥发性化合物及风味品质,为表征两种采后加工方式的咖啡豆风味特征提供参考依据。

1 材料与方法

1.1 材料与试剂

烘焙咖啡豆由江苏省苏州市昆山亿政咖啡有限公司提供,包括云南日晒豆(深烘、中烘、浅烘)和水洗豆(深烘、中烘、浅烘)。

主要试剂:石油醚(30~60℃)、氢氧化钠、甲醇、14%三氟化硼甲醇、盐酸,均为分析纯,国药集团化学试剂有限公司;正己烷、3-庚酮、甲醇,均为色谱纯,国药集团化学试剂有限公司。

1.2 主要仪器

UltraScan Pro1166型高精度分光测色仪,美国Hunterlab公司;GC-2030AF型气相色谱仪,日本岛津公司;Agilent 1260型高效液相色谱仪,美国安捷伦公司;Pegasus HRT+4D型气相色谱-高分辨飞行时间质谱仪,美国力可公司;S-IMS型气相离子迁移谱仪,德国G.A.S.公司;LE204E/02型精密天平,梅特勒-托利多仪器有限公司;RE-52A型旋转蒸发仪,上海亚荣生化仪器厂。

1.3 方法

1.3.1 咖啡样品的制备 取适量烘焙咖啡豆于研磨杯中,研磨30s使其呈均匀粉末状,装入自封袋中备用。

1.3.2 色差测定 称取20g烘焙咖啡豆样品,研

磨30s后装入自封袋中,使用高精度分光测色仪对袋装咖啡粉的色度进行测定,每个样品平行测定3次。

1.3.3 理化性质的测定 粗脂肪含量测定:根据《食品中脂肪的测定》(GB 5009.6-2016)索氏抽提法检测;脂肪酸组成测定:根据《食品中脂肪酸的测定》(GB 5009.168-2016)第一法检测脂肪酸组成及相对含量;氨基酸含量测定:根据《食品中氨基酸的测定》(GB 5009.124-2016)检测17种氨基酸含量。

1.3.4 GC-TOF-MS分析 准确称取2.00g咖啡粉末样品于20mL顶空瓶中,加入50μL 0.408mg/mL 3-庚酮/甲醇溶液(内标),加盖密封。固相微萃取头穿过顶空瓶的橡胶层插入瓶中,60℃顶空萃取30min后,迅速插入GC-MS进样口解析3min。GC条件:MXT-WAX色谱柱(30m×0.25mm×0.25μm),进样口温度250℃,载气为氦气,流速为1mL/min,不分流进样。升温程序:初始柱温40℃,保持5min,以10℃/min的速率升至230℃,保持6min,总运行时间28min。MS条件:EI离子源,离子源温度230℃,电离能量70eV。

挥发性成分定性和定量分析:使用NIST 14.0质谱数据库对各组分进行匹配检索,结合保留指数对挥发性成分进行定性分析,选择匹配度大于70%的化合物,并排除硅氧烷类等柱流失和隔垫流失物质。以3-庚酮作为内标物,使用内标法进行定量分析。

OAV的计算:OAV是单一挥发性化合物的半定量分析结果与水中该物质的感知阈值的比值^[12]。一般认为,芳香活性化合物的OAV大于或等于1,则对芳香有重大贡献,其贡献程度与其OAV值成正比。

1.3.5 GC-IMS分析 准确称取1.50g咖啡粉末样品于20mL顶空瓶中,80℃孵育30min后,固相微萃取头顶空进样至气相离子迁移谱仪FlavourSpec[®]进行分析。GC条件:DB-WAX UI色谱柱(30m×0.320mm×0.25μm),柱温60℃,载气/漂移气为N₂。升温程序:初始柱温50℃,保持3min,以3℃/min的速率升至150℃,保持3min,总运行时间40min。漂移电压选择正离子模式,漂移管温度45℃,进样针温度90℃,进样体积600μL。

1.4 数据处理

采用 Microsoft Excel 2021 和 Origin 2023 对数据进行统计整理和作图;采用 SPSS 27.0 对数据进行显著性分析;SIMCA14.1 软件进行偏最小二乘判别分析并计算 VIP 值;使用 VOCal 软件及插件进行 GC-IMS 指纹图谱、对比差异图和 PCA 分析。

2 结果与分析

2.1 烘焙程度对云南咖啡豆色泽的影响

表 1 烘焙程度对云南咖啡豆色泽的影响

Table 1 The effect of roasting degrees on the color of Yunnan coffee beans

样品名称	烘焙程度	L^*	a^*	b^*	ΔE
云南日晒	深烘	38.78 ± 0.34^d	4.21 ± 0.19^f	4.58 ± 0.76^d	39.28 ± 0.40^d
	中烘	40.19 ± 0.24^e	5.25 ± 0.19^d	5.70 ± 0.18^{bc}	40.93 ± 0.26^e
	浅烘	42.20 ± 0.69^b	7.01 ± 0.26^b	8.62 ± 0.91^a	43.64 ± 0.72^b
云南水洗	深烘	39.20 ± 0.43^d	4.56 ± 0.08^c	4.71 ± 0.46^{cd}	39.74 ± 0.46^d
	中烘	40.55 ± 0.24^e	5.55 ± 0.12^c	$5.94 \pm 0.77_b$	41.37 ± 0.11^e
	浅烘	43.44 ± 0.35^a	7.31 ± 0.12^a	9.53 ± 0.68^a	45.07 ± 0.46^a

注:同一列数字后标有不同字母表示存在显著性差异($P < 0.05$)。

2.2 烘焙程度对云南咖啡豆理化性质的影响

2.2.1 烘焙程度对云南咖啡豆粗脂肪含量的影响

不同烘焙程度日晒咖啡豆和水洗咖啡豆的粗脂肪含量有显著性差异,云南日晒深烘、中烘和浅烘豆的粗脂肪含量分别为 15.86, 14.73 g/100 g 和 13.16 g/100 g,云南水洗深烘、中烘和浅烘豆的粗脂肪含量分别为 15.07, 14.46 g/100 g 和 13.60 g/100 g。随着烘焙程度的加深,云南咖啡豆的粗脂肪含量逐渐升高,这可能是因为烘焙过程中,咖啡豆内部含有的大量前体物质在高温下相互作用,产生了一些脂溶性物质,并从豆体内部析出至表面^[8]。咖啡豆内部的微观结构在烘焙过程中发生了变化,随着温度的升高,咖啡豆内部的水分不断蒸发,水蒸气与挥发性风味物质和 CO₂ 大量聚集,产生了较高的压力,从而致使细胞壁和细胞膜破裂,形成不可逆的孔隙。同时,高温增加了油脂分子的热运动,降低其黏度和表面张力,油脂分子的流动性增强,更容易从内部排出^[13]。

2.2.2 烘焙程度对云南咖啡豆脂肪酸组成的影响

相关研究表明,烘焙咖啡油脂中的主要脂肪酸包括油酸、亚油酸、棕榈酸、硬脂酸和花生酸等^[14]。

烘焙咖啡豆色泽的深浅程度可以反映烘焙程度。 L^* 表示颜色的明暗程度,数值越大,亮度越高; a^* 值表示红绿色度,数值越大,颜色越红; b^* 值表示黄蓝色度,数值越大,颜色越黄; ΔE 表示整体色差。如表 1 所示,在烘焙过程中,随着温度的升高,咖啡豆内部美拉德反应和焦糖化反应等一系列化学反应加剧,咖啡豆的颜色随烘焙程度的加深而逐渐变暗。在烘焙程度相同的条件下,云南水洗咖啡豆的 L^* 值、 a^* 值、 b^* 值和 ΔE 值均比日晒咖啡豆高,其中在 a^* 值方面有较大差异。

如表 2 所示,本研究共鉴定出 13 种脂肪酸:月桂酸(C12:0)、肉豆蔻酸(C14:0)、棕榈酸(C16:0)、棕榈油酸(C16:1)、十七烷酸(C17:0)、硬脂酸(C18:0)、油酸(C18:1)、亚油酸(C18:2)、 α -亚麻酸(C18:3n3)、花生酸(C20:0)、花生烯酸(C20:1)、山嵛酸(C22:0)和木蜡酸(C24:0)。主要脂肪酸为亚油酸、棕榈酸、油酸和硬脂酸等。其中包括 5 种不饱和脂肪酸,即棕榈油酸、油酸、亚油酸、 α -亚麻酸和花生烯酸,总占比达到 54% 以上。咖啡豆中含有丰富的无法由人体自主合成的亚油酸和亚麻酸,具有较高的营养价值。

对比同一烘焙程度下的两种咖啡豆可以得知,水洗咖啡豆中棕榈酸含量略高于日晒咖啡豆,而日晒咖啡豆中的硬脂酸、油酸、亚油酸、 α -亚麻酸和花生酸含量均略高于水洗咖啡豆。烘焙程度对咖啡豆脂肪酸组成及含量的影响较小。

2.2.3 烘焙程度对云南咖啡豆氨基酸含量的影响

烘焙程度对两种云南咖啡豆氨基酸含量的影响如表 3 所示,17 种氨基酸的总含量随着烘焙程度的加深而降低。17 种氨基酸中,谷氨酸含量最高,其次是天冬氨酸和亮氨酸,胱氨酸含量最低。对比

同一烘焙程度下的两种咖啡豆可知,水洗咖啡豆由于水洗咖啡豆处理工序中的发酵过程使得咖啡的大部分氨基酸含量高于日晒咖啡豆,这可能是豆内部氨基酸含量升高。

表 2 烘焙程度对云南咖啡豆脂肪酸组成的影响

Table 2 The effect of roasting degree on fatty acid composition of Yunnan coffee beans

脂肪酸种类	云南日晒/%			云南水洗/%		
	深烘	中烘	浅烘	深烘	中烘	浅烘
C12:0	0.012	0.011	0.012	0.018	0.020	0.018
C14:0	0.071	0.070	0.068	0.065	0.072	0.067
C16:0	35.780	35.593	35.743	34.616	34.539	34.587
C16:1	0.021	0.022	0.021	0.015	0.018	0.016
C17:0	0.103	0.103	0.105	0.102	0.106	0.104
C18:0	6.564	6.568	6.545	6.805	6.806	6.768
C18:1	9.160	9.465	9.173	9.508	9.475	9.618
C18:2	43.610	43.506	43.604	43.956	43.976	43.866
C18:3n3	1.272	1.294	1.297	1.385	1.430	1.398
C20:0	2.398	2.416	2.403	2.492	2.510	2.494
C20:1	0.298	0.296	0.305	0.323	0.305	0.313
C22:0	0.497	0.502	0.504	0.508	0.505	0.532
C24:0	0.215	0.153	0.222	0.208	0.238	0.220

表 3 烘焙程度对云南咖啡豆氨基酸含量的影响

Table 3 The effect of roasting degree on amino acid content of Yunnan coffee beans

氨基酸种类	云南日晒/(g/100g)			云南水洗/(g/100g)		
	深烘	中烘	浅烘	深烘	中烘	浅烘
天冬氨酸	0.961	1.043	1.073	1.002	1.095	1.170
谷氨酸	2.227	2.255	2.206	2.306	2.372	2.419
丝氨酸	0.113	0.189	0.242	0.107	0.174	0.262
组氨酸	0.149	0.156	0.159	0.137	0.155	0.165
甘氨酸	0.538	0.553	0.548	0.564	0.596	0.614
苏氨酸	0.165	0.225	0.258	0.162	0.221	0.278
精氨酸	0.016	0.023	0.033	0.018	0.026	0.037
丙氨酸	0.483	0.483	0.477	0.500	0.509	0.512
酪氨酸	0.268	0.271	0.265	0.284	0.287	0.290
胱氨酸	0.004	0.007	0.009	0.005	0.008	0.010
缬氨酸	0.585	0.587	0.581	0.611	0.625	0.640
甲硫氨酸	0.084	0.083	0.082	0.090	0.090	0.100
苯丙氨酸	0.525	0.554	0.543	0.574	0.586	0.572
异亮氨酸	0.427	0.434	0.426	0.446	0.458	0.448
亮氨酸	0.882	0.894	0.880	0.926	0.944	0.952
赖氨酸	0.091	0.098	0.104	0.095	0.107	0.111
脯氨酸	0.447	0.423	0.461	0.505	0.462	0.504
总量	7.965	8.279	8.347	8.332	8.714	9.082

2.3 不同烘焙程度云南咖啡豆的 GC-TOF-MS 分析

2.3.1 挥发性化合物定量分析 通过 GC-TOF-

MS 分析,6 个样品中共定性得到 142 种挥发性化合物,根据化学性质分为 11 类,其中呋喃类 30 种,吡嗪类 17 种,酮类 18 种,吡咯类 15 种,吡啶

类 10 种,吡喃类 2 种,酸类 5 种,酯类 9 种,酚类 6 种,醚类 3 种,其它类物质 27 种。由图 1a 可知,日晒中烘豆中鉴定出的挥发性化合物含量最高,达到 952.0 $\mu\text{g/g}$,而水洗浅烘豆中挥发性化合物含量仅有 263.6 $\mu\text{g/g}$ 。

日晒咖啡豆中挥发性化合物含量高于水洗咖啡豆,这可能是由两种采后加工方式的特点决定

的。烘焙咖啡豆中的挥发性物质主要由大量风味前体物质通过美拉德反应和 Strecker 醛降解反应生成^[15],而还原糖类物质和氨基化合物是美拉德反应的重要前体物质。有研究表明,通过湿法加工的咖啡生豆相较于干法加工咖啡生豆中葡萄糖和果糖含量显著降低^[16],这可能解释了日晒和水洗咖啡豆挥发性化合物含量的差异。

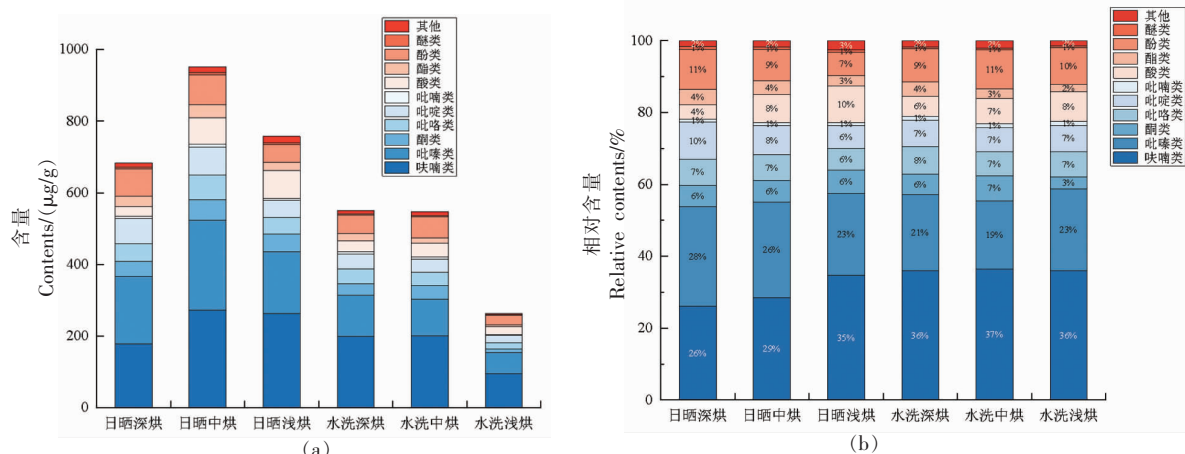


图 1 不同烘焙程度云南咖啡豆中各类挥发性化合物的含量(a)和相对含量(b)

Fig.1 Contents (a) and relative contents (b) of various volatile compounds in Yunnan coffee beans with different roasting degrees

呋喃类化合物是烘焙咖啡中最主要的挥发性化合物,这与之前的报道一致^[17]。呋喃类化合物并不存在于自然界中,通常是在各种食品的热处理过程中生成的,包括谷物、烘焙面包和罐头食品等^[18-19]。如表 4 所示,6 种样品中含量最高的呋喃类化合物是 5-甲基糠醛、糠醇、乙酸糠酯、1-(2-呋喃甲基)-1H-吡咯、2-乙酰基呋喃和糠醛等,其中 5-甲基糠醛和糠醛呈现出焦糖味、杏仁味和烤面包味^[20],糠醇和 2-乙酰基呋喃则具有甜香和坚果香^[21]。水洗浅烘豆中的上述化合物含量相较于深烘豆和中烘豆低,这可能是由于烘焙温度的升高和烘焙时间的延长使得中、深烘咖啡豆中的美拉德反应和焦糖化反应程度更高,从而生成了更高浓度具有焦糖风味的呋喃类物质。

吡啶类化合物在烘焙咖啡豆中的含量仅次于呋喃类化合物,主要提供烘焙香和巧克力香。17 种吡啶类化合物在多数样品中被检测到,甲基吡啶、2,5-二甲基吡啶、2,6-二甲基吡啶、3-乙基-2,5-二甲基吡啶、2-乙基-6-甲基吡啶和 2-乙基-3-

甲基吡啶等物质的含量较高,且它们在日晒豆中的含量高于水洗豆。日晒豆中吡啶类化合物含量以中度烘焙最高,而水洗豆则随着烘焙程度的加深而逐渐升高。

酮类化合物具有奶油味和水果味,含量较高的样品为日晒中烘豆(57.65 $\mu\text{g/g}$)和日晒浅烘豆(49.10 $\mu\text{g/g}$),酮类化合物中 1-羟基-2-丙酮和 1-(乙酰氧基)-2-丙酮的含量最高;吡啶和吡咯类化合物在各样品中的总含量较为接近,吡咯类物质中 2-乙酰基吡咯和 1-甲基-1H-吡咯-2-甲醛的含量较高,吡啶类物质中则以吡啶为主;酸类物质中乙酸占比最大,乙酸带来的酸味使咖啡的香气和口感更加丰富;酯类物质主要提供水果香气,在 6 种样品中均检测到的酯类物质有丁内酯、水杨酸甲酯和十六烷酸甲酯;酚类化合物被认为是咖啡风味所必需的,在烘焙过程中产生并释放,随着烘焙过程的加深而增多,主要表现为烟熏味^[22],样品中检测到 6 种酚类物质,包括愈创木酚、麦芽酚、苯酚、4-乙基愈创木酚、4-乙基愈创木酚和

表 4 不同烘焙程度云南咖啡挥发性化合物组成及含量

序号	保留时间/s	挥发性化合物	云南日晒/($\mu\text{g/g}$)			云南水洗/($\mu\text{g/g}$)		
			深烘	中烘	浅烘	深烘	中烘	浅烘
咪啉类								
1	225.824	2-甲基咪啉	4.20 ± 0.48	ND	ND	ND	1.06 ± 0.14	ND
2	450.777	2(3H)-咪啉酮	ND	ND	ND	ND	0.21 ± 0.08	ND
3	569.636	2-(2-丙烯基)-咪啉	0.23 ± 0.03	0.26 ± 0.06	ND	0.16 ± 0.04	0.14 ± 0.03	ND
4	598.7	2-(甲氧基甲基)-咪啉	4.94 ± 0.23	5.84 ± 0.16	3.79 ± 0.31	3.01 ± 0.36	2.83 ± 0.33	2.49 ± 0.37
5	802.316	糠醛	7.85 ± 1.28	13.15 ± 0.36	18.42 ± 1.42	9.33 ± 1.12	12.43 ± 1.77	8.76 ± 1.92
6	824.744	甲酸糠酯	4.04 ± 0.51	4.57 ± 0.29	2.44 ± 0.23	3.67 ± 0.59	3.02 ± 0.79	0.69 ± 0.23
7	835.748	2-乙酰基咪啉	13.35 ± 1.28	16.77 ± 0.86	13.73 ± 0.08	13.25 ± 1.57	13.16 ± 1.49	5.24 ± 1.04
8	845.072	2-丁基咪啉	0.53 ± 0.09	0.81 ± 0.09	ND	0.54 ± 0.05	ND	0.28 ± 0.11
9	853.976	乙酸糠酯	23.85 ± 3.44	32.50 ± 1.94	25.61 ± 0.55	26.39 ± 2.30	22.20 ± 2.24	7.55 ± 1.56
10	889.508	5-甲基糠醛	37.96 ± 5.44	71.12 ± 5.50	77.65 ± 2.78	42.91 ± 2.97	52.56 ± 3.56	30.40 ± 4.71
11	899.756	丙酸糠酯	1.50 ± 0.17	1.45 ± 0.07	0.64 ± 0.16	1.03 ± 0.17	0.68 ± 0.11	0.13 ± 0.04
12	904.628	联二咪啉	0.25 ± 0.02	0.43 ± 0.05	0.33 ± 0.07	0.26 ± 0.06	0.22 ± 0.05	0.08 ± 0.02
13	907.988	2-甲基苯并咪啉	0.63 ± 0.07	0.75 ± 0.09	0.34 ± 0.13	0.44 ± 0.15	0.29 ± 0.11	0.08 ± 0.03
14	911.714	2,2'-亚甲基二咪啉	1.75 ± 0.24	2.05 ± 0.12	3.38 ± 3.73	3.19 ± 2.34	1.12 ± 0.19	0.77 ± 0.80
15	920.336	2-乙酰基-5-甲基咪啉	4.98 ± 0.50	5.95 ± 0.58	3.14 ± 0.42	3.33 ± 1.02	3.15 ± 1.17	ND
16	944.132	糠醇	28.26 ± 6.01	56.76 ± 6.60	68.82 ± 2.04	49.05 ± 4.94	53.46 ± 7.78	22.79 ± 5.89
17	961.412	2-(2-咪啉基甲基)-5-甲基咪啉	0.66 ± 0.09	0.87 ± 0.17	1.18 ± 0.11	1.94 ± 0.32	1.34 ± 0.13	0.20 ± 0.05
18	1 034.66	1-(5-甲基-2-咪啉基)-2-丙酮	3.32 ± 0.28	5.37 ± 0.38	3.61 ± 0.29	3.09 ± 0.49	3.33 ± 0.44	1.67 ± 0.20
19	1 068.18	1-(2-咪啉甲基)-1H-吡咯	18.16 ± 1.97	20.57 ± 0.98	12.68 ± 0.22	14.01 ± 0.97	12.17 ± 1.29	5.52 ± 0.62
20	1 087.58	3-苯基咪啉	1.80 ± 0.35	1.73 ± 0.11	0.92 ± 0.16	0.93 ± 0.16	0.85 ± 0.13	0.39 ± 0.01
21	1 095.39	1-(二甲基咪啉基)-2-丙酮	ND	ND	8.86 ± 0.19	6.9 ± 0.75	ND	ND
22	1 102.36	1-(5-甲基-2-咪啉基)-1-丙烯-3-醛	1.39 ± 0.09	1.52 ± 0.14	0.73 ± 0.05	0.92 ± 0.10	0.78 ± 0.08	0.33 ± 0.07
23	1 103.37	1-(5-甲基咪啉基)-吡咯	ND	0.29 ± 0.06	ND	0.16 ± 0.01	0.15 ± 0.06	0.04 ± 0.01
24	1 165.2	2,2'-[氧基双(亚甲基)]双咪啉	12.73 ± 1.31	13.74 ± 0.94	7.29 ± 0.33	7.75 ± 0.81	7.17 ± 0.99	2.95 ± 0.28
25	1 180.23	2-(2'-咪啉基)-吡嗪	2.50 ± 0.30	8.11 ± 0.74	4.01 ± 0.07	4.72 ± 0.77	4.40 ± 0.73	ND
26	1 192.24	咪啉酮	0.72 ± 0.07	1.52 ± 0.24	2.12 ± 0.06	0.56 ± 0.05	1.02 ± 0.17	1.09 ± 0.13
27	1 213.5	4-(4-甲基苯基)-2(5H)-咪啉酮	ND	3.16 ± 0.20	ND	ND	ND	ND
28	1 349.24	4-乙酰基咪啉-2-乙酸乙酯	ND	ND	ND	0.01 ± 0.01	0.02 ± 0.01	ND
29	1 396.03	4-二甲氨基-2(5H)-咪啉酮	0.73 ± 0.21	ND	ND	ND	ND	ND
30	1 480.11	5-羟甲基糠醛	1.48 ± 0.27	2.41 ± 0.35	3.28 ± 0.59	0.91 ± 0.21	2.07 ± 0.72	3.51 ± 1.06

(续表 4)

序号	保留时间/s	挥发性化合物	云南日晒/($\mu\text{g/g}$)			云南水洗/($\mu\text{g/g}$)		
			深烘	中烘	浅烘	深烘	中烘	浅烘
		吡嗪类						
31	573.08	吡嗪	5.91 ± 0.44	6.31 ± 0.30	3.65 ± 0.44	3.00 ± 0.31	2.81 ± 0.47	1.68 ± 0.32
32	625.16	甲基吡嗪	43.23 ± 5.28	63.27 ± 3.92	51.45 ± 5.64	28.30 ± 2.19	28.52 ± 2.00	19.25 ± 2.78
33	677.24	2,5-二甲基吡嗪	18.61 ± 2.24	27.11 ± 1.48	23.42 ± 1.67	13.00 ± 1.19	12.94 ± 1.30	7.69 ± 1.11
34	682.616	2,6-二甲基吡嗪	18.73 ± 2.37	26.23 ± 1.39	21.16 ± 1.00	13.70 ± 1.26	13.40 ± 1.42	7.08 ± 1.13
35	688.58	乙基吡嗪	10.05 ± 1.31	12.46 ± 0.66	7.35 ± 1.20	5.42 ± 1.05	5.55 ± 0.77	2.36 ± 0.44
36	699.752	2,3-二甲基吡嗪	6.56 ± 0.67	8.25 ± 0.47	5.39 ± 0.71	3.77 ± 0.61	3.59 ± 0.60	1.48 ± 0.28
37	732.764	2-乙基-6-甲基吡嗪	21.73 ± 2.19	25.73 ± 1.81	ND	12.59 ± 1.49	ND	ND
38	738.392	2-乙基-5-甲基吡嗪	10.78 ± 0.98	13.45 ± 0.81	9.73 ± 0.46	5.93 ± 0.70	5.87 ± 0.60	3.58 ± 0.51
39	749.06	2-乙基-3-甲基吡嗪	16.71 ± 1.86	22.15 ± 1.12	18.69 ± 0.63	10.11 ± 1.01	9.96 ± 1.00	5.84 ± 0.71
40	761.912	2-(正丙基)-吡嗪	0.94 ± 0.10	1.08 ± 0.11	0.55 ± 0.10	0.48 ± 0.06	0.43 ± 0.05	0.22 ± 0.04
41	773.756	2,6-二乙基吡嗪	1.68 ± 0.27	2.11 ± 0.16	1.43 ± 0.24	0.81 ± 0.11	0.84 ± 0.09	0.59 ± 0.08
42	781.988	3-乙基-2,5-二甲基吡嗪	20.40 ± 2.02	24.39 ± 1.74	16.51 ± 1.02	9.67 ± 1.12	8.59 ± 0.61	5.91 ± 1.27
43	906.476	异丙烯基吡嗪	3.19 ± 0.38	3.82 ± 0.31	ND	ND	1.84 ± 0.41	ND
44	925.376	5H-5-甲基-6,7-二氢环戊基吡嗪	2.50 ± 0.79	2.08 ± 0.19	1.61 ± 0.43	0.93 ± 0.15	0.84 ± 0.12	0.36 ± 0.09
45	930.308	乙酰吡嗪	2.13 ± 0.18	2.93 ± 0.09	2.05 ± 0.31	1.71 ± 0.31	1.90 ± 0.36	0.70 ± 0.04
46	978.464	1-(6-甲基-2-吡嗪基)-1-乙酮	3.64 ± 0.72	7.20 ± 1.38	8.23 ± 0.68	4.85 ± 0.56	4.83 ± 0.81	1.92 ± 0.4
47	1 217.77	2-(2-呋喃基)-5-甲基吡嗪	2.58 ± 0.25	3.31 ± 0.17	1.91 ± 0.10	1.81 ± 0.25	1.77 ± 0.27	1.13 ± 0.25
		酮类						
48	324.944	2,3-丁二酮	1.08 ± 0.07	1.37 ± 0.11	1.66 ± 0.10	ND	1.21 ± 0.16	ND
49	412.472	2,3-戊二酮	ND	ND	1.06 ± 0.23	1.06 ± 0.21	1.40 ± 0.26	ND
50	487.484	2-甲基-3-己酮	0.27 ± 0.03	ND	0.26 ± 0.01	ND	ND	ND
51	588.743	3-己烯-2,5-二酮	0.96 ± 0.19	1.27 ± 0.05	0.99 ± 0.09	0.56 ± 0.06	0.64 ± 0.13	0.62 ± 0.13
52	644.816	3-羧基-2-丁酮	2.15 ± 0.22	3.18 ± 0.23	2.87 ± 0.21	2.16 ± 0.31	2.32 ± 0.43	1.06 ± 0.12
53	659.936	1-羧基-2-丙酮	6.97 ± 4.98	20.55 ± 0.5	23.08 ± 1.36	8.02 ± 6.92	11.41 ± 7.22	ND
54	713.863	2-环戊烯-1-酮	0.65 ± 0.04	0.49 ± 0.05	0.24 ± 0.05	ND	0.24 ± 0.02	ND
55	723.86	2-甲基-2-环戊烯-1-酮	0.64 ± 0.13	0.51 ± 0.04	0.22 ± 0.08	0.33 ± 0.02	0.19 ± 0.03	0.10 ± 0.02
56	726.128	1-羧基-2-丁酮	1.88 ± 0.19	2.24 ± 0.09	1.54 ± 0.16	1.00 ± 0.12	1.12 ± 0.14	0.66 ± 0.08
57	796.772	1-(乙酰氧基)-2-丙酮	11.39 ± 2.03	14.41 ± 0.94	9.74 ± 0.31	10.89 ± 1.30	9.55 ± 1.10	2.89 ± 0.57
58	829.73	2,3,4-三甲基-2-环戊烯-1-酮	0.33 ± 0.06	0.32 ± 0.02	ND	0.24 ± 0.05	ND	ND
59	831.632	2-甲基环己酮	1.88 ± 0.18	2.39 ± 0.12	ND	ND	1.49 ± 0.30	ND

(续表 4)

序号	保留时间/s	挥发性化合物	云南日晒/($\mu\text{g/g}$)			云南水洗/($\mu\text{g/g}$)		
			深烘	中烘	浅烘	深烘	中烘	浅烘
60	851.036	1-(乙酰氧基)-2-丁酮	3.65 ± 0.32	4.68 ± 0.27	3.71 ± 0.13	3.46 ± 0.48	3.41 ± 0.55	0.94 ± 0.23
61	866.324	2,3-二甲基-2-环戊烯-1-酮	1.70 ± 0.10	ND	0.86 ± 0.11	1.13 ± 0.18	0.92 ± 0.13	0.25 ± 0.05
62	901.94	1-环戊烯-3,4-二酮	0.04 ± 0.01	ND	0.01 ± 0.005	0.03 ± 0.01	ND	0.01 ± 0.005
63	1 041.21	2-羟基-3,4-二甲基-2-环戊烯-1-酮	0.82 ± 0.09	ND	ND	0.69 ± 0.05	0.59 ± 0.05	0.33 ± 0.09
64	1 109.08	3-乙基-2-羟基-2-环戊烯-1-酮	3.28 ± 0.32	2.94 ± 0.13	1.44 ± 0.09	2.11 ± 0.26	1.68 ± 0.21	1.00 ± 0.13
65	1 158.73	2-氨基-5-羟基-苯乙酮	3.56 ± 0.17	3.30 ± 0.06	1.43 ± 0.34	ND	1.98 ± 0.29	0.89 ± 0.28
66	500.336	吡咯类	1.15 ± 0.14	0.98 ± 0.03	0.56 ± 0.04	0.55 ± 0.07	0.53 ± 0.03	0.44 ± 0.10
67	632.384	1-甲基-1H-吡咯	0.25 ± 0.02	ND	ND	ND	ND	ND
68	722.625	3,4-二甲基-1H-吡咯	0.14 ± 0.04	ND	ND	ND	ND	ND
69	841.04	1-(2-甲基丁基)-吡咯	0.39 ± 0.03	0.47 ± 0.03	ND	0.21 ± 0.05	ND	ND
70	918.74	1H-吡咯	1.08 ± 0.14	1.14 ± 0.20	0.77 ± 0.12	0.78 ± 0.16	ND	ND
71	928.148	1-乙基-2-甲酰基吡咯	ND	19.51 ± 1.15	13.89 ± 0.95	10.25 ± 1.51	10.33 ± 1.49	3.79 ± 0.77
72	1 055.24	1-甲基-1H-吡咯-2-甲醛	4.23 ± 0.38	5.47 ± 0.21	3.67 ± 0.21	2.85 ± 0.42	2.98 ± 0.70	1.31 ± 0.17
73	1 086.61	2-甲酰基-4,5-二甲基吡咯	0.34 ± 0.04	0.30 ± 0.13	ND	ND	ND	ND
74	1 159.74	2-乙酰基吡咯	33.83 ± 3.36	37.39 ± 1.85	18.37 ± 1.41	24.62 ± 1.72	19.55 ± 1.21	7.91 ± 1.06
75	1 204.93	2-吡咯烷酮	ND	ND	ND	0.83 ± 0.13	0.80 ± 0.27	0.48 ± 0.12
76	1 241.8	5-甲基-1H-吡咯-2-甲醛	ND	ND	6.36 ± 0.41	ND	ND	3.16 ± 0.58
77	1 317.32	3,4-二甲基-1H-吡咯-2,5-二酮	0.05 ± 0.01	ND	ND	ND	ND	ND
78	1 328.32	1-呋喃基-2-甲酰基吡咯	2.40 ± 0.30	2.72 ± 0.15	1.93 ± 0.05	1.75 ± 0.27	1.94 ± 0.27	1.47 ± 0.31
79	1 345.8	3-甲酰基-2-甲基吡咯	ND	0.53 ± 0.26	ND	ND	ND	ND
80	1 391.04	2-(2-呋喃基)-3-甲基吡咯	0.99 ± 0.13	ND	ND	ND	ND	ND
81	540.908	吡啶类	60.98 ± 7.41	68.28 ± 2.66	47.39 ± 2.15	37.16 ± 3.25	33.26 ± 2.31	17.25 ± 2.33
82	551.498	吡啶	0.24 ± 0.12	0.53 ± 0.66	ND	ND	0.14 ± 0.06	ND
83	576.02	5,6-二氢-2-甲基-4-吡啶酮	1.40 ± 0.14	ND	0.96 ± 0.15	0.75 ± 0.15	0.69 ± 0.15	0.47 ± 0.07
84	606.638	2-甲基吡啶	0.55 ± 0.05	0.69 ± 0.05	ND	0.32 ± 0.05	0.34 ± 0.05	0.82 ± 0.15
85	680.936	2,6-二甲基吡啶	0.94 ± 0.59	0.92 ± 0.34	ND	ND	ND	ND
86	813.209	2,5-二甲基吡啶	0.05 ± 0.01	ND	ND	ND	ND	ND
87	931.088	3-乙基吡啶	0.86 ± 0.16	1.21 ± 0.05	ND	ND	ND	ND
88	1 049.95	2-乙酰基-4-甲基吡啶	0.22 ± 0.07	0.54 ± 0.04	0.22 ± 0.07	0.29 ± 0.01	0.21 ± 0.07	0.07 ± 0.05
89	1 206.66	3-乙酰基吡啶	0.86 ± 0.05	0.86 ± 0.06	ND	ND	ND	ND
90	1 423.5	2-甲氧基甲基吡啶	4.51 ± 0.87	4.86 ± 0.83	ND	2.40 ± 0.91	2.36 ± 0.2	0.95 ± 0.32
		3-吡啶醇						

(续表 4)

序号	保留时间/s	挥发性化合物	云南日晒/($\mu\text{g/g}$)			云南水洗/($\mu\text{g/g}$)		
			深烘	中烘	浅烘	深烘	中烘	浅烘
		吡喃类						
91	847.117	4-(羟甲基)-四氢吡喃-3-酮	5.91 ± 0.47	7.71 ± 0.43	5.68 ± 0.11	5.59 ± 0.84	5.62 ± 0.81	1.76 ± 0.41
92	1 334.62	2,3-二氢-3,5-二羟基-6-甲基-4H-吡喃-4-酮	ND	ND	ND	ND	ND	0.87 ± 0.29
		酸类						
93	783.164	乙酸	24.35 ± 4.27	47.06 ± 4.57	53.54 ± 2.73	30.94 ± 2.53	32.31 ± 2.82	17.92 ± 7.37
94	855.068	丙酸	3.14 ± 0.39	5.62 ± 0.33	4.31 ± 0.88	ND	ND	ND
95	951.299	3-甲基丁酸	ND	ND	3.58 ± 0.44	ND	2.22 ± 0.42	0.97 ± 0.35
96	1 042.14	3-甲基-2-丁烯酸	ND	6.35 ± 0.36	6.26 ± 0.52	ND	4.54 ± 1.14	2.78 ± 0.44
97	1 094.13	顺式-2-乙烯基环戊甲酸	ND	14.25 ± 0.37	9.37 ± 0.26	ND	ND	ND
		酯类						
98	882.617	4-氧代戊酸甲酯	ND	ND	ND	ND	0.41 ± 0.04	ND
99	938.06	丁内酯	15.92 ± 2.04	20.13 ± 2.16	14.76 ± 0.33	14.47 ± 1.03	10.13 ± 0.79	3.02 ± 0.73
100	1 037.26	烟酸甲酯	4.89 ± 0.54	5.18 ± 0.28	ND	2.93 ± 0.47	ND	ND
101	1 038.86	水杨酸甲酯	0.66 ± 0.10	0.77 ± 0.07	0.43 ± 0.08	0.44 ± 0.14	0.45 ± 0.11	0.44 ± 0.50
102	1 076.26	N-环己烷氧基乙酸乙酯	ND	ND	ND	0.51 ± 0.09	0.43 ± 0.10	0.11 ± 0.02
103	1 222.33	4-羟基-5-氧代己酸内酯	ND	5.36 ± 0.32	2.97 ± 0.15	ND	ND	ND
104	1 294.5	十六烷酸甲酯	4.43 ± 0.17	5.84 ± 1.03	4.43 ± 0.54	3.08 ± 0.60	2.54 ± 0.54	1.98 ± 0.31
105	1 508.17	1,2-苯二甲酸双(2-甲基丙基)酯	1.37 ± 0.68	ND	ND	ND	ND	ND
106	1 651.64	1,2-苯二甲酸二丁酯	1.09 ± 0.34	ND	ND	ND	ND	ND
		酚类						
107	1 088.84	愈创木酚	16.96 ± 1.78	16.75 ± 0.66	8.91 ± 0.57	9.33 ± 0.82	7.50 ± 0.77	ND
108	1 160.09	麦芽酚	ND	30.46 ± 17.62	ND	25.46 ± 1.83	20.82 ± 1.47	8.82 ± 1.23
109	1 178.55	苯酚	8.45 ± 0.85	1.99 ± 0.25	0.62 ± 0.04	1.30 ± 0.22	0.89 ± 0.15	0.23 ± 0.02
110	1 195.02	4-乙基愈创木酚	22.86 ± 2.23	ND	16.83 ± 0.39	ND	15.27 ± 2.05	6.92 ± 0.99
111	1 293.45	4-乙烯基愈创木酚	27.66 ± 2.76	32.70 ± 1.14	22.68 ± 1.44	15.11 ± 1.70	14.89 ± 1.28	10.81 ± 1.77
112	1 404.68	4-乙烯基苯酚	0.78 ± 0.17	0.77 ± 0.15	0.48 ± 0.04	ND	0.28 ± 0.08	ND
		醚类						
113	427.424	二甲基二硫醚	0.10 ± 0.02	ND	ND	ND	0.25 ± 0.16	ND
114	647.504	3-甲基苯甲醚	0.86 ± 0.09	1.08 ± 0.08	0.70 ± 0.14	0.45 ± 0.19	0.48 ± 0.18	0.26 ± 0.10
115	1 120.42	邻乙基苯甲醚	4.10 ± 0.43	5.42 ± 0.23	3.30 ± 0.24	2.33 ± 0.28	2.08 ± 0.30	1.07 ± 0.17

(续表 4)

序号	保留时间/s	挥发性化合物	云南日晒/($\mu\text{g/g}$)			云南水洗/($\mu\text{g/g}$)		
			深烘	中烘	浅烘	深烘	中烘	浅烘
		其它						
116	521.084	β -月桂烯	ND	ND	ND	0.25 \pm 0.06	ND	0.27 \pm 0.12
117	556.868	dl-柠檬烯	0.50 \pm 0.35	0.74 \pm 0.57	ND	ND	ND	ND
118	561.348	3-甲基-1-丁醇	0.08 \pm 0.05	0.13 \pm 0.08	ND	ND	ND	ND
119	608.948	3-萜烯	0.11 \pm 0.02	0.18 \pm 0.08	ND	ND	ND	ND
120	619.364	苯乙烯	ND	0.29 \pm 0.05	ND	0.13 \pm 0.02	ND	0.11 \pm 0.04
121	642.222	2-甲基-3-丁烯-1,2-二醇	ND	ND	ND	0.03 \pm 0.01	0.04 \pm 0.02	ND
122	695.284	1,4-二甲基环己烯	0.05 \pm 0.005	ND	ND	ND	ND	ND
123	697.904	(2,3,3-三甲基环氧乙基)甲醇	0.64 \pm 0.04	0.71 \pm 0.05	0.53 \pm 0.07	0.42 \pm 0.04	0.42 \pm 0.10	0.16 \pm 0.003
124	779.132	芳樟醇氧化物	ND	1.18 \pm 0.23	ND	ND	ND	ND
125	859.52	(3',5'-二甲基-1'-丙-2'-炔基)-1H-吡唑	0.55 \pm 0.06	0.81 \pm 0.06	0.69 \pm 0.04	ND	0.50 \pm 0.10	0.21 \pm 0.05
126	878.756	2,3-丁二醇	ND	2.42 \pm 0.14	1.90 \pm 0.09	ND	ND	ND
127	888.497	2-甲氧基-1,4-苯二胺	3.33 \pm 0.74	ND	9.74 \pm 0.63	4.55 \pm 0.44	5.61 \pm 0.62	ND
128	917.48	4-羟基-5-甲氧基噻吨	0.49 \pm 0.09	0.41 \pm 0.13	ND	0.29 \pm 0.10	ND	ND
129	964.97	2-甲氧基甲酰苯胺	ND	ND	0.74 \pm 0.08	0.84 \pm 0.08	0.64 \pm 0.04	0.12 \pm 0.03
130	982.076	2-噻吩甲醛	ND	ND	1.26 \pm 0.32	ND	ND	0.24 \pm 0.05
131	1 002.82	3-(3-噻吩基)-2-甲基丙醛	1.03 \pm 0.31	ND	0.80 \pm 0.46	ND	ND	0.13 \pm 0.02
132	1 013.07	5,6,7,8-四氢噻唞啉	ND	0.23 \pm 0.04	0.15 \pm 0.03	ND	0.09 \pm 0.01	ND
133	1 033.4	3-乙酰基噻唞啉	0.49 \pm 0.11	0.60 \pm 0.07	0.48 \pm 0.08	0.40 \pm 0.10	0.41 \pm 0.04	0.19 \pm 0.07
134	1 138.65	α -亚乙基苯乙醛	0.47 \pm 0.08	0.53 \pm 0.08	0.52 \pm 0.01	0.27 \pm 0.06	0.20 \pm 0.03	0.16 \pm 0.02
135	1 141	2-噻吩甲醇	ND	4.64 \pm 0.28	1.45 \pm 0.18	ND	1.8 \pm 0.18	0.83 \pm 0.20
136	1 153.77	3-苯硫基丙醛	0.67 \pm 0.21	1.15 \pm 0.03	0.44 \pm 0.08	0.56 \pm 0.11	0.44 \pm 0.06	0.28 \pm 0.04
137	1 169.5	(1'-丙烯基)噻唞啉	ND	ND	ND	ND	ND	0.70 \pm 0.20
138	1 189.22	2-羟甲基噻唞啉	0.21 \pm 0.02	0.27 \pm 0.05	0.25 \pm 0.07	0.23 \pm 0.06	ND	ND
139	1 246.71	4-乙基-2,6-二甲基苯胺	0.14 \pm 0.05	ND	ND	ND	ND	0.11 \pm 0.03
140	1 277.83	1-苯乙醇	ND	1.30 \pm 0.10	ND	0.70 \pm 0.19	0.57 \pm 0.20	ND
141	1 449.37	1H-吡唑	1.76 \pm 0.21	1.36 \pm 0.16	0.73 \pm 0.05	0.77 \pm 0.13	0.63 \pm 0.12	0.48 \pm 0.12
142	1 539.81	2-甲基-4,5-二羟基苯甲醛	0.76 \pm 0.26	ND	ND	ND	ND	ND

4-乙基苯酚,大多数表现出炒制食品的风味。

2.3.2 气味活性值(OAV)分析 挥发性化合物的含量并不能直接反映其对整体风味的贡献,气味阈值是香气物质的重要特征,单个挥发性化合物对整体风味的贡献程度与其 OAV 成正比^[21]。根据 GC-TOF-MS 对挥发性化合物定量分析结果,查阅相关文献中对应物质的气味阈值计算 OAV,6 个样品中共得到 43 种挥发性化合物的 OAV,主

要为呋喃类、吡嗪类、酮类、酚类和烯烃类物质。如表 5 所示,OAV ≥ 1 的挥发性成分共有 35 种,4-乙基愈创木酚、3-乙基-2,5-二甲基吡嗪、愈创木酚和 4-乙基愈创木酚是 OAV 最大的 4 种化合物,说明它们对云南咖啡豆的整体香气具有重要贡献,赋予炒花生香、巧克力香、烟熏味和坚果味等香气特征。

表 5 不同烘焙程度云南咖啡豆中关键挥发性化合物的 OAV

Table 5 OAV of key volatile compounds in Yunnan coffee beans with different roasting degrees

序号	挥发性化合物	阈值 /($\mu\text{g}\cdot\text{g}$) [12, 23-29]	香气特征	云南日晒			云南水洗		
				深烘	中烘	浅烘	深烘	中烘	浅烘
1	糠醛	0.282	烘烤、花生香	27.84	46.63	65.32	33.08	44.08	31.06
2	5-甲基糠醛	6	焦糖味、香辛料味	6.33	11.85	12.94	7.15	8.76	5.07
3	糠醇	1	甜的、焦糖味	28.26	56.76	68.82	49.05	53.46	22.79
4	呋喃酮	0.021		34.27	72.15	101.14	26.51	48.74	51.75
5	甲基吡嗪	27		1.60	2.34	1.91	1.05	1.06	0.71
6	2,5-二甲基吡嗪	0.8	坚果味	23.27	33.89	29.28	16.25	16.17	9.61
7	2,6-二甲基吡嗪	0.1576	坚果味、霉味	118.85	166.40	134.25	86.92	85.03	44.93
8	乙基吡嗪	5.55		1.81	2.24	1.33	0.98	1.00	0.43
9	2,3-二甲基吡嗪	0.1	烘焙香、奶油香、肉香	65.58	82.46	53.85	37.69	35.85	14.81
10	2-乙基-6-甲基吡嗪	0.04		543.28	643.17	—	314.64	—	—
11	2-乙基-5-甲基吡嗪	0.016		673.71	840.55	608.04	370.87	366.66	223.63
12	2,6-二乙基吡嗪	0.006		280.34	351.10	237.53	134.45	139.67	97.68
13	3-乙基-2,5-二甲基吡嗪	0.0086	花生香、巧克力香	2 372.15	2 835.51	1 919.42	1 123.86	998.84	687.49
14	乙酰吡嗪	0.1	烤香味	21.31	29.31	20.50	17.10	18.98	6.96
15	2,3-丁二酮	0.005	强烈的奶油香	216.17	274.29	331.04	—	241.68	—
16	2,3-戊二酮	0.005	奶油香、焦糖香、坚果香	—	—	211.70	212.51	279.32	—
17	3-羟基-2-丁酮	0.75		2.87	4.24	3.82	2.88	3.10	1.41
18	2-羟基-3,4-二甲基-2-环戊烯-1-酮	0.017		48.49	—	—	40.77	34.62	19.16
19	吡啶	2	特殊的臭味	30.49	34.14	23.69	18.58	16.63	8.63
20	芳樟醇氧化物	0.32		—	3.70	—	—	—	—
21	1-苯乙醇	0.5642	玫瑰香、蜂蜜香	—	2.31	—	1.23	1.00	—
22	乙酸	50		0.49	0.94	1.07	0.62	0.65	0.36
23	3-甲基丁酸	0.56		—	—	358.27	—	222.49	97.37
24	水杨酸甲酯	0.06	冬青油草药香、薄荷香	10.98	12.77	7.19	7.30	7.43	7.35
25	愈创木酚	0.013	烟熏味、山核桃味	1 304.64	1 288.53	685.34	717.76	576.87	0.00

(续表 5)

序号	挥发性化合物	阈值 $I/(\mu\text{g}\cdot\text{g})$ [12, 23-29]	香气特征	云南日晒			云南水洗		
				深烘	中烘	浅烘	深烘	中烘	浅烘
26	麦芽酚	20	焦糖味、奶油味	—	1.52	—	1.27	1.04	0.44
27	苯酚	5.5		1.54	0.36	0.11	0.24	0.16	0.04
28	4-乙基愈创木酚	0.025	烘烤香、坚果香	914.42	—	673.35	—	610.89	276.74
29	4-乙基愈创木酚	0.005	炒花生香、坚果香	5 532.19	6 539.23	4 536.27	3 021.02	2 977.97	2 162.07
30	4-乙基苯酚	0.085		9.14	9.00	5.60	—	3.28	—
31	β -月桂烯	0.015	木质香、霉味	—	—	—	16.85	—	17.90
32	dl-柠檬烯	0.01	柠檬味	50.38	73.81	—	—	—	—
33	3-萜烯	0.0004	松脂香、甜香	266.53	440.30	—	—	—	—
34	苯乙烯	0.12		—	2.42	—	1.05	0.61	0.88
35	1H-吡啶	0.5	樟脑味、烧焦味	3.52	2.72	1.45	1.54	1.27	0.97

注：“—”代表未检出。

2.3.3 偏最小二乘判别分析 (PLS-DA) 为进一步探究采后加工方法和烘焙程度对云南烘焙咖啡豆挥发性特征的影响, 根据 GC-TOF-MS 鉴定出的挥发性化合物种类和含量进行 PLS-DA 分析,

图 2a 可以实现部分组别的有效区分, 模型分析中的 R^2X 、 R^2Y 和 Q^2 分别为 0.934、0.986 和 0.954, 说明模型拟合结果可接受, 如图 2b 所示, Q^2 回归线在纵轴上的截距小于 0, 说明模型不存在过拟合。

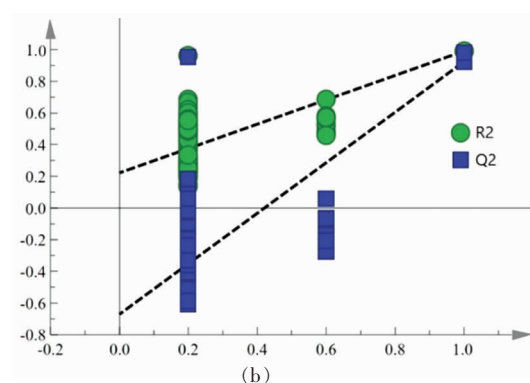
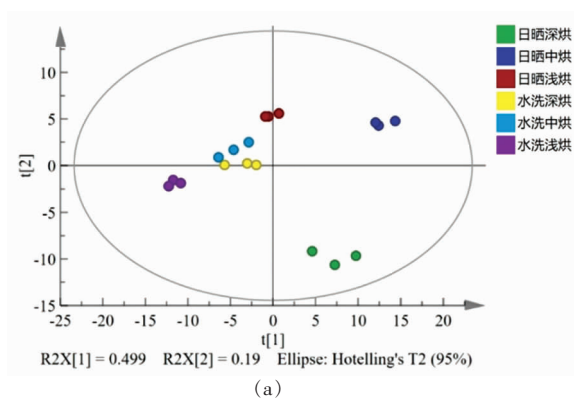


图 2 不同烘焙程度云南咖啡豆的 PLS-DA 得分图(a)和置换检验图(b)

Fig.2 Score (a) and permutation test (b) of PLS-DA of Yunnan coffee beans with different roasting degrees

如图 2a 所示, 日晒中烘豆、水洗浅烘豆和日晒深烘豆分别位于第 1、3、4 象限, 彼此之间区分明显, 日晒浅烘豆则位于第 1 象限和第 2 象限之间, 与其它组别区分较明显, 而水洗深烘豆和水洗中烘豆距离较近, 无法有效区分。根据采后加工方式的不同, 云南日晒豆和水洗豆分别位于第一主成分的正轴和和负轴, 区分明显; 根据烘焙程度的不同, 日晒深烘豆、中烘豆和浅烘豆距离较远, 区分明显, 而水洗豆只能实现浅烘豆与另两组之间

的区分。

通过 PLS-DA 的变量重要性投影 (VIP) 分析可知 (表 6), 有 53 种挥发性化合物的 VIP 值大于 1, 说明它们对造成不同组间差异的贡献度较大, 可作为区分 6 种咖啡豆的特征挥发性化合物。

2.4 不同烘焙程度云南咖啡豆的 GC-IMS 分析

2.4.1 GC-IMS 定性和指纹图谱分析 如图 3 所示, 可以较为直观地比较不同烘焙程度的日晒豆和水洗豆中挥发性化合物的差异。纵坐标代表气

表6 PLS-DA分析中特征挥发性化合物的VIP值

Table 6 VIP value of characteristic volatile compounds in PLS-DA analysis

序号	挥发性化合物	VIP值	序号	挥发性化合物	VIP值
1	2(3H)-呋喃酮	1.8135	28	2-甲基吡啶	1.2247
2	二甲基二硫醚	1.6903	29	2-氨基-5-羟基-苯乙酮	1.2172
3	1-(二甲基呋喃基)-2-丙酮	1.6684	30	呋喃酮	1.2056
4	4-乙基-2-甲氧基苯酚	1.4794	31	2-噻吩甲醇	1.1803
5	2-(2-呋喃基甲基)-5-甲基呋喃	1.4513	32	1-(5-甲基呋喃基)-吡咯	1.1788
6	4-氧代戊酸甲酯	1.4148	33	麦芽酚	1.1697
7	1-环戊烯-3,4-二酮	1.4092	34	3-(3-噻吩基)-2-甲基丙醛	1.1586
8	2-羟甲基喹啉	1.3637	35	(1'-丙烯基)噻吩	1.1532
9	2-甲氧基-1,4-苯二胺	1.3487	36	2-甲基呋喃	1.1410
10	β -月桂烯	1.3385	37	2,3-二氢-3,5-二羟基-6-甲基-4H-吡喃-4-酮	1.1404
11	2,6-二甲基吡啶	1.3370	38	2-羟基-3,4-二甲基-2-环戊烯-1-酮	1.1391
12	5-甲基-1H-吡咯-2-甲醛	1.3301	39	1-苯乙醇	1.1354
13	2,3-丁二酮	1.3169	40	异丙烯基吡嗪	1.1297
14	2-噻吩甲醛	1.3093	41	1-乙基-2-甲酰基吡咯	1.1282
15	2-甲基环己酮	1.2963	42	苯乙烯	1.1154
16	3-甲基丁酸	1.2955	43	糠醛	1.0997
17	2,3-戊二酮	1.2940	44	2-吡咯烷酮	1.0992
18	N-环己烷氨基甲酸乙酯	1.2897	45	4-乙基-2,6-二甲基苯胺	1.0978
19	2-甲氧基甲酰胺	1.2893	46	糠醇	1.0669
20	4-乙基呋喃-2-乙酸乙酯	1.2842	47	2,3,4-三甲基-2-环戊烯-1-酮	1.0189
21	3-甲基-2-丁烯酸	1.2835	48	1,4-二甲基环己烯	1.0127
22	2-甲基-3-己酮	1.2815	49	5,6,7,8-四氢喹啉	1.0120
23	2,3-二甲基-2-环戊烯-1-酮	1.2767	50	3,4-二甲基-1H-吡咯	1.0119
24	2-丁基呋喃	1.2757	51	2-(2-呋喃基)-3-甲基吡咯	1.0089
25	2-甲基-3-丁烯-1,2-二醇	1.2684	52	4-(4-甲基苯基)-2(5H)-呋喃酮	1.0065
26	(3',5'-二甲基-1'-丙-2'-炔基)-1H-吡啶	1.2463	53	2,3-丁二醇	1.0058
27	5-羟甲基糠醛	1.2344			

相色谱的保留时间,横坐标代表离子迁移时间,横坐标 1.0 处红色竖线为反应离子峰,反应离子峰两侧的每一个点代表一种挥发性化合物。图 3a 中白色表示含量较低,红色表示含量较高,颜色越深表示含量越高,图 3b 是所有样品的差异对比图,以日晒深烘豆为对照,其余样品谱图扣除与对照相同的信号峰,红色代表该物质在该样品中的含量高于对照样品,而蓝色则代表低于对照样品。根据图 3,可以初步判断出红色方框中的物质含量有较大差异,日晒豆中含量较高,而水洗豆中则几乎不含有。

为进一步比较不同烘焙程度日晒豆和水洗豆

中的挥发性化合物组成和含量差异,使用 C4~C9 正构酮作为外标参照物,将单个物质的保留时间和迁移时间与 GC-IMS 内置 NIST 数据库和 IMS 数据库进行匹配,从而实现对挥发性化合物的定性分析。根据数据库定性分析后,6 个样品中共定性识别出 105 种挥发性化合物,包括酮类 17 种、醛类 11 种、醇类 18 种、酯类 17 种、烃类 12 种、酸类 4 种、醚类 6 种、呋喃类 7 种、吡嗪类 8 种、吡啶类 2 种、噻唑类 2 种和噻吩类 1 种。图 4 为各个样品中每一类化合物的相对百分含量。

如图 5 所示,从数据库定性得到的 105 种挥发性化合物中选取 64 种差异较为显著的挥发性

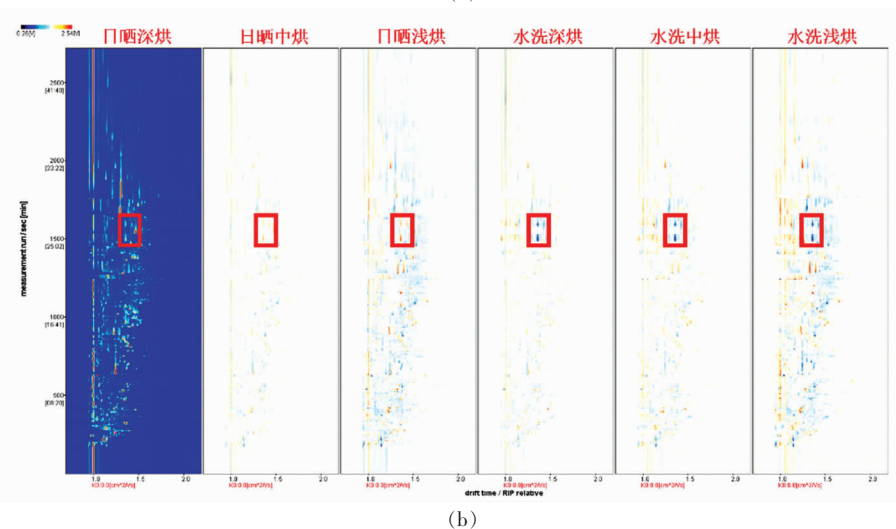
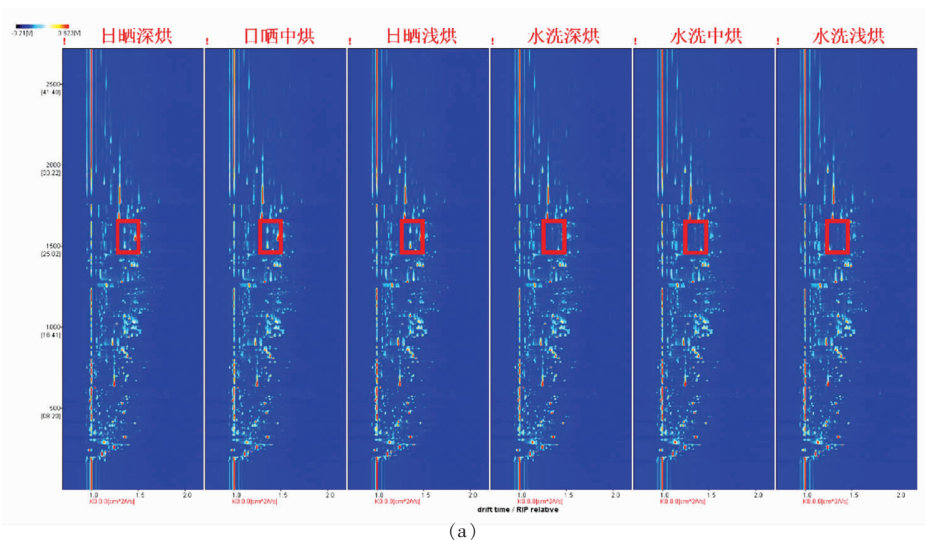


图 3 不同烘焙程度云南咖啡豆的 GC-IMS 谱图(a)和差异对比图(b)

Fig.3 GC-IMS spectra (a) and difference comparison (b) of Yunnan coffee beans with different roasting degrees

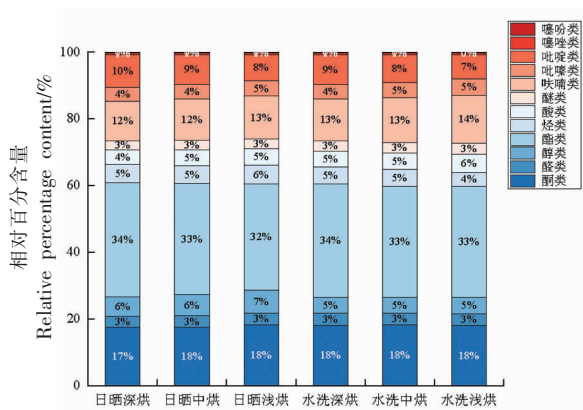


图 4 基于 GC-IMS 定性的不同烘焙程度云南咖啡豆挥发性化合物的相对含量

Fig.4 Relative volatile compounds content of Yunnan coffee beans with different roasting degrees based on GC-IMS

化合物,构建特征指纹图谱。图中的每一行代表一个样品的挥发性化合物图谱,每个样品 3 个重复,每一列代表同一种挥发性化合物在不同样品中的相对含量。图 5 中区域 A 为日晒咖啡豆的特征挥发性化合物,包括 2-甲基-1-丙醇(二聚体)、3-戊醇(单体)、3-戊醇(二聚体)、2,3-丁二醇和(E)-β-石竹烯,具有葡萄酒香、水果香和淡丁香味。区域 B 为水洗咖啡豆的特征挥发性化合物,包括 2-己酮(二聚体)、辛酸乙酯、4-萜烯醇、1-苯乙酮、4-甲基-2-戊酮和β-月桂烯,这些化合物在水洗咖啡豆中的含量高于日晒咖啡豆,具有菠萝甜香、胡椒香、橙子味和令人愉快的香脂香气。除区域 A 和区域 B 以外的其它区域为 6 个样品中共有的挥

发性化合物,但这些化合物在不同烘焙程度的咖啡豆中呈现出不同的相对含量。区域C中的挥发性化合物含量随着烘焙程度的加深而降低,在日晒和水洗浅烘豆中含量最高,其中2,3-丁二酮和2,3-戊二酮具有奶油香,2-乙基-5-甲基吡嗪具有焙烤和青草香气, δ -3-萜烯具有松脂香,乙酸丁酯呈现水果香,2-甲基-3-呋喃硫醇呈现烤肉和炒咖啡香气,(*E*)-3-己烯-1-醇和(*Z*)-3-己烯-1-醇呈

现青草香和水果香。区域D中的挥发性化合物含量随着烘焙程度的加深而升高,其中2-甲基丁酸乙酯和3-壬烯-2-酮具有水果香,柠檬烯、 α -萜品油烯和庚酸乙酯分别具有柠檬香和菠萝香,1-苯乙酸乙酯和苯乙醛具有蜂蜜香和花香,(*E*)-2-壬烯醛具有烤猪肉香气,二甲基三硫醚则具有薄荷气味和浓烈辛香味。

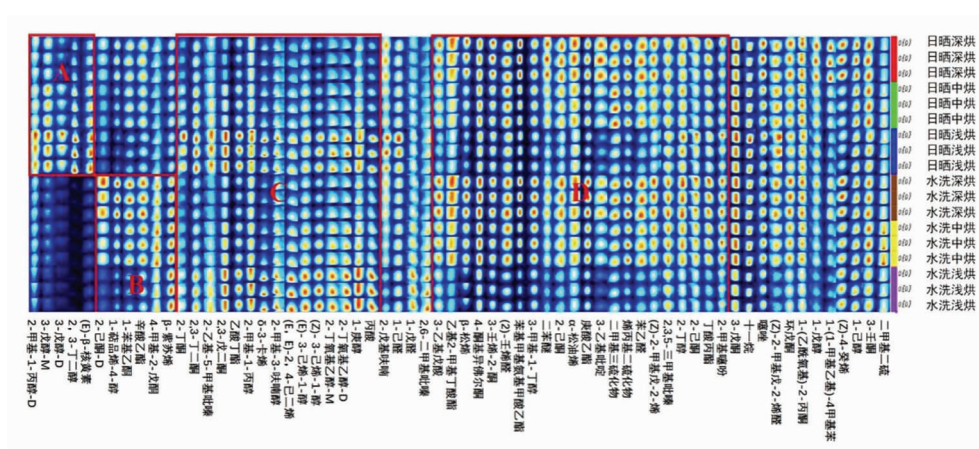


图5 不同烘焙程度云南咖啡豆的GC-IMS指纹图谱

Table 5 GC-IMS fingerprint of Yunnan coffee beans with different roasting degrees

通过比较6个样品的挥发性化合物指纹图谱,结合区域A、B可以看出,日晒咖啡豆和水洗咖啡豆风味的主要区别在于日晒咖啡豆主要以较淡的水果味为主,而水洗咖啡豆则具有较浓的水果甜香和香脂气味。不同烘焙程度咖啡豆的挥发性化合物组成无明显区别,但多数化合物的相对含量与烘焙程度十分相关。

2.4.2 GC-IMS的主成分分析(PCA) 利用6个样品在GC-IMS分析中定性出的105种挥发性化合物,对数据进行主成分分析。如图6所示,PC1和PC2的累计方差贡献率达到79.5%,说明通过PCA能够获取表征样品挥发性成分中的大部分信息^[30]。图中日晒豆位于PC2的负半轴,而水洗豆则位于PC2的正半轴,6个样品组间距离较远,区分明显。这说明不同采后加工方式和不同烘焙程度的咖啡豆中特征挥发性化合物的差异较大,PCA方法可以对它们进行准确的区分。

3 结论

随着烘焙程度的加深,两种采后处理咖啡豆

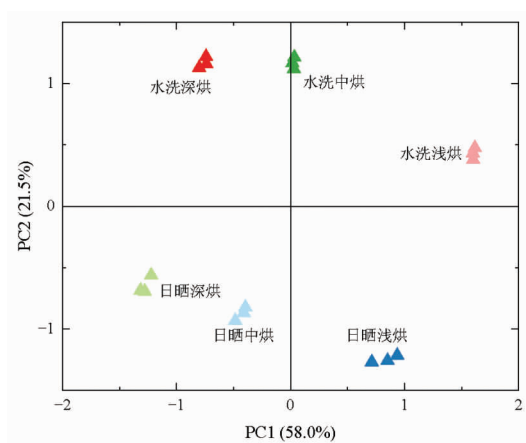


图6 基于GC-IMS的不同烘焙程度云南咖啡豆挥发性化合物的PCA

Fig.6 PCA of volatile compounds of Yunnan coffee beans with different roasting degrees based on GC-IMS

的色差值和粗脂肪含量均升高,而氨基酸含量则降低;在相同烘焙程度条件下,日晒豆的粗脂肪含量高于水洗豆,而氨基酸总含量则低于水洗豆,烘焙程度和采后处理方式对咖啡豆脂肪酸含量的影响无显著规律。本研究采用GC-TOF-MS和GC-

IMS技术,对不同烘焙程度的云南日晒豆和水洗豆的挥发性成分进行表征,GC-TOF-MS分析鉴定出142种挥发性化合物,GC-IMS分析鉴定出105种挥发性化合物。通过OAV的计算,共得到35种OAV ≥ 1 的挥发性化合物,4-乙基愈创木酚、3-乙基-2,5-二甲基吡嗪、愈创木酚和4-乙基愈创木酚等物质对云南咖啡豆的整体香气有突出贡献。PLS-DA构建的模型能够区分除水洗深烘豆和水洗中烘豆外的其它4种咖啡豆,基于VIP值,进一步筛选出2-(3H)-呋喃酮、二甲基二硫醚和1-(二甲基呋喃基)-2-丙酮等53种挥发性化合物,在6种咖啡豆中的含量差异达到显著水平。GC-IMS指纹图谱表明2-甲基-1-丙醇、3-戊醇、2,3-丁二醇和(E)- β -石竹烯是日晒咖啡豆的特征挥发性化合物,而2-己酮、辛酸乙酯、4-萜烯醇、1-苯乙酮、4-甲基-2-戊酮和 β -月桂烯是水洗咖啡豆的特征挥发性化合物。基于GC-IMS的结果进行PCA,前两个PC的累计方差贡献率达到79.5%,准确地区分了3种烘焙程度和2种采后加工方式的咖啡豆。本试验对不同烘焙程度的云南日晒豆和水洗豆的理化组成和风味特征进行对比分析,为辨别不同烘焙程度和采后加工方式(日晒、水洗)的云南咖啡豆提供理论依据。

参 考 文 献

- [1] DAVIS A P, CHADBURN H, MOAT J, et al. High extinction risk for wild coffee species and implications for coffee sector sustainability[J]. *Science Advances*, 2019, 5(1): 2375-2548.
- [2] 王志华, 毕晓菲, 鲁维艳. 中国咖啡消费趋势浅谈[J]. *农产品加工*, 2018, 2: 69-70.
WEN Z H, BI X F, LU W Y. Discussion on the trend of Chinese coffee consumption[J]. *Farm Products Processing*, 2018, 2: 69-70.
- [3] MA J Y, LI J P, HE H, et al. Characterization of sensory properties of Yunnan coffee[J]. *Current Research in Food Science*, 2022, 5: 1205-1215.
- [4] 何绮婷. 咖啡豆的化学之旅[J]. *大学化学*, 2023, 38(9): 80-88.
HE Q T. The chemical journey of coffee beans[J]. *University Chemistry*, 2023, 38(9): 80-88.
- [5] LEE L W, CHEONG M W, CURRAN P, et al. Coffee fermentation and flavor - An intricate and delicate relationship[J]. *Food Chemistry*, 2015, 185: 182-191.
- [6] BRIOSCHI JUNIOR D, CARVALHO GUARÇONI R, DE CÁSSIA SOARES DA SILVA M, et al. Microbial fermentation affects sensorial, chemical, and microbial profile of coffee under carbonic maceration[J]. *Food Chemistry*, 2021, 342: 128296.
- [7] KUČERA L, PAPOUŠEK R, KURKA O, et al. Study of composition of espresso coffee prepared from various roast degrees of *Coffea arabica* L. coffee beans[J]. *Food Chemistry*, 2016, 199: 727-735.
- [8] 刘亚玲, 谭超, 龚加顺. 云南不同地区烘焙咖啡豆主要成分分析及类黑精组成成分[J]. *食品科学*, 2017, 38(2): 176-183.
LIU Y L, TAN C, GONG J S. Main chemical composition and celanoidin composition of roasted coffee beans from different regions of Yunnan[J]. *Food Science*, 2017, 38(2): 176-183.
- [9] 杨浩瀚, 包亮英, 刘实琪, 等. HPLC结合多元化学计量学鉴别水洗和日晒咖啡[J]. *中国食品学报*, 2022, 22(9): 304-311.
YANG H L, BAO L Y, LIU S Q, et al. Identification of washed and sun-dried coffee by HPLC combined with multi-chemometrics[J]. *Journal of Chinese Institute of Food Science and Technology*, 2022, 22(9): 304-311.
- [10] CORTÉS-MACÍAS E T, LÓPEZ C F, GENTILE P, et al. Impact of post-harvest treatments on physico-chemical and sensory characteristics of coffee beans in Huila, Colombia[J]. *Postharvest Biology and Technology*, 2022, 187: 111852.
- [11] VÁRADY M, TAUCHEN J, FRAŇKOVÁ A, et al. Effect of method of processing specialty coffee beans (natural, washed, honey, fermentation, maceration) on bioactive and volatile compounds[J]. *LWT*, 2022, 172: 114245.
- [12] LI C, AL-DALALI S, WANG Z P, et al. Investigation of volatile flavor compounds and characterization of aroma-active compounds of water-boiled salted duck using GC-MS-O, GC-IMS, and E-nose[J]. *Food Chemistry*, 2022, 386: 132728.
- [13] 吕文佳, 翟晓娜, 杨剖舟, 等. 不同烘焙强度对云南咖啡主要挥发香气成分的影响[J]. *食品科学技术*

- 学报, 2015, 33(3): 13-21.
- LÜ W J, ZHAI X N, YANG K Z, et al. Effect of different roasting strength on main volatile aroma compounds in Yunnan Coffee Beans[J]. Journal of Food Science and Technology, 2015, 33(3): 13-21.
- [14] KOBELNILK M, FONTANARI G G, CASSIMIRO D L, et al. Thermal behavior of coffee oil (Robusta and Arabica species)[J]. Journal of Thermal Analysis and Calorimetry, 2014, 115(3): 2045-2052.
- [15] 吕文佳, 刘云, 杨凯舟, 等. 咖啡主要烘焙风味物质的形成及变化规律[J]. 食品工业科技, 2015, 36(3): 394-400.
- LÜ W J, LIU Y, YANG K Z, et al. Formation and characteristics of the main roasted coffee flavour compounds[J]. Science and Technology of Food Industry, 2015, 36(3): 394-400.
- [16] KNOPP S, BYTOF G, SELMAR D. Influence of processing on the content of sugars in green Arabica coffee beans[J]. European Food Research and Technology, 2006, 223(2): 195-201.
- [17] PETISCA C, PÉREZ-PALACIOS T, FARAH A, et al. Furans and other volatile compounds in ground roasted and espresso coffee using headspace solid-phase microextraction: Effect of roasting speed [J]. Food and Bioproducts Processing, 2013, 91(3): 233-241.
- [18] RAHN A, YERETZIAN C. Impact of consumer behavior on furan and furan-derivative exposure during coffee consumption. A comparison between brewing methods and drinking preferences[J]. Food Chemistry, 2019, 272: 514-522.
- [19] YUAN X M, ZHOU J M, ZHANG B C, et al. Identification, quantitation and organoleptic contributions of furan compounds in brandy[J]. Food Chemistry, 2023, 412: 135543.
- [20] ZHOU Z L, LIU S P, KONG X W, et al. Elucidation of the aroma compositions of Zhenjiang aromatic vinegar using comprehensive two dimensional gas chromatography coupled to time-of-flight mass spectrometry and gas chromatography-olfactometry[J]. Journal of Chromatography A, 2017, 1487: 218-226.
- [21] 黄梅, 胡荣锁, 董文江, 等. 酿酒酵母介导的半干法加工咖啡豆风味品质比较分析[J]. 现代食品科技, 2023, 39(4): 249-262.
- HUANG M, HU R S, DONG W J, et al. Comparative analysis of flavor quality of semi dry processed coffee beans mediated by *saccharomyces cerevisiae* [J]. Modern Food Science and Technology, 2023, 39(4): 249-262.
- [22] KIVANCLI J, ELMACI Y. Characterization of Turkish-Style boiled coffee aroma by gas chromatography and mass spectrometry and descriptive analysis techniques[J]. International Journal of Food Properties, 2016, 19(8): 1671-1686.
- [23] 刘强, 冒德寿, 汤峨. 化合物香味阈值汇编 [M]. 2版. 北京: 北京科学出版社, 2015: 1-276.
- LIU Q, MAO D S, TANG E. Compilations of flavour threshold values in water and other media [M]. Second edition. Beijing: Beijing Science Press, 2015: 1-276.
- [24] 黄琳洁, 徐凯, 周承哲, 等. 不同海拔政和白茶品质差异分析[J]. 食品科学, 2022, 44(16): 274-283.
- HUANG L J, XU K, ZHOU C Z, et al. Quality difference analysis of Zhenghe White tea at different altitudes[J]. Food Science, 2022, 44(16): 274-283.
- [25] WANG H L, YANG P, LIU C, et al. Characterization of key odor-active compounds in thermal reaction beef flavoring by SGCxGC-O-MS, AEDA, DHDA, OAV and quantitative measurements[J]. Journal of Food Composition and Analysis, 2022, 114: 104805.
- [26] YU M G, LI T, SONG H L. Characterization of key aroma-active compounds in four commercial oyster sauce by SGC-GC x GC-O-MS, AEDA, and OAV[J]. Journal of Food Composition and Analysis, 2022, 107: 104368.
- [27] YIN W T, MA X T, LI S J, et al. Comparison of key aroma-active compounds between roasted and cold-pressed sesame oils[J]. Food Research International, 2021, 150: 110794.
- [28] ZHU J C, WANG L Y, XIAO Z B, et al. Characterization of the key aroma compounds in mulberry fruits by application of gas chromatography-olfactometry (GC-O), odor activity value (OAV), gas chromatography-mass spectrometry (GC-MS) and flame photometric detection (FPD) [J]. Food Chemistry, 2018, 245: 775-785.
- [29] GAO P, JIANG Q X, XU Y S, et al. Aroma profiles of commercial Chinese traditional fermented fish (Suan yu) in Western Hunan: GC-MS, odor activity value and sensory evaluation by partial least

- squares regression[J]. *International Journal of Food Properties*, 2020, 23(1): 213–226.
- [30] 王子妍, 窦博鑫, 贾健辉, 等. GC-IMS 结合 PCA 法分析不同焙炒程度留胚米挥发性化合物指纹差异[J]. *食品科学*, 2023, 44(8): 212–218.
- WANG Z Y, DOU B X, JIA J H, et al. Differen-
- tial fingerprint analysis of volatile compounds in rice with remained germ roasted to different degrees by gas chromatography-ion mobility spectrometry and principal component analysis[J]. *Food Science*, 2023, 44(8): 212–218.

Effect of Roasting Degree on Physicochemical Properties and Flavor Substances of Yunnan Sun-dried and Washed Coffee Beans

Shi Xueying^{1,2}, Li Na³, Li Yue^{1,2}, Wan Dingyang⁴, Lin Xiaoshan⁴, Zhu Song^{1,2*}

¹State Key Laboratory of Food Science and Resources, Jiangnan University, Wuxi 214122, Jiangsu

²School of Food Science and Technology, Jiangnan University, Wuxi 214122, Jiangsu

³Shunda Food Flavor & Ingredients Co., Ltd., Chaozhou 515633, Guangdong

⁴Kunshan Yizheng Food Co., Ltd., Suzhou 215300, Jiangsu)

Abstract To investigate the effect of roasting degrees on physicochemical properties and flavor substances of Yunnan sun-dried and washed coffee beans, chromatic aberration, crude fat content, fatty acid content, and amino acid content of sun-dried and washed beans with different roasting degrees were measured. Their volatile compounds were analyzed using gas chromatography-time of flight-mass spectrometry (GC-TOF-MS) and gas chromatography-ion migration spectroscopy (GC-IMS). The GC-TOF-MS results showed that a total of 142 volatile compounds were identified in the 6 samples, and a total of 35 compounds with OAV \geq 1 were selected through odor activity value (OAV) analysis, which made an important contribution to the overall aroma of Yunnan coffee beans; partial least-squares discriminant analysis (PLS-DA) can better distinguish between sun-dried beans and washed beans; 53 volatile compounds with VIP values $>$ 1 were identified through variable importance in projection (VIP) analysis of PLS-DA. By GC-IMS analysis, 105 volatile compounds were identified qualitatively. The fingerprint showed that 2-methyl-1-propanol, 3-pentanol, 2,3-butanediol and (*E*)- β -caryophyllene are the characteristic volatile compounds of sun-dried beans, 2-hexanone, octanoic acid ethyl ester, 1-terpinen-4-ol, 1-phenylethanone, 4-methyl-2-pentanone and β -myrcene are characteristic volatile compounds of washed beans; principal component analysis (PCA) can accurately distinguish Yunnan sun-dried beans and washed beans with different roasting degrees. This study utilized GC-TOF-MS and GC-IMS techniques combined with PLS-DA and PCA methods to characterize the flavor compounds of Yunnan sun-dried beans and washed beans with different roasting degrees, and screened out characteristic volatile compounds, providing theoretical reference for elucidating the aroma characteristics of two post-harvest processing methods of coffee beans.

Keywords coffee bean; GC-TOF-MS; GC-IMS; OAV; fingerprint