

# T/ GZTPA

## 贵州省绿茶品牌发展促进会团体标准

T/ GZTPA 0009-2021

### 贵州茶叶中风味挥发性物质的测定 气相色谱质谱法

Determination of volatile flavoured compounds in Guizhou tea

Gas chromatography mass spectrometry

2021-11-25 发布

2021-11-26 实施

贵州省绿茶品牌发展促进会 发布

## 前 言

本文件按照 GB/T 1.1-2020《标准化工作导则 第1部分：标准化文件的结构和起草规则》的规定起草。

请注意本文件的某些内容可能涉及专利，本文件的发布机构不承担识别专利的责任。

本文件由贵州省农产品质量安全监督检验测试中心提出。

本文件由贵州省绿茶品牌发展促进会提出并归口。

本文件起草单位：贵州省农产品质量安全监督检验测试中心、广东省科学院测试分析研究所（中国广州分析测试中心）、贵州省绿茶品牌发展促进会。

本文件主要起草人：李俊、蔡滔、王震、向章敏、刘凯、熊胜利、赖飞、徐嘉民、方舒婷、丁静、祝愿、王志、杜楠、张兴伦、周雪丽、王艺蓉、刘佳、王晓鹭、苏美丞。

T/GZTPA

# 贵州茶叶中风味挥发性物质的测定 气相色谱质谱法

## 1 范围

本文件规定了贵州茶叶中主要风味挥发物质组成及含量的方法。

本文件适用于贵州茶叶中主要风味挥发物质含量的测定。

## 2 规范性引用文件

下列文件中的内容通过文中的规范性引用而构成本文件必不可少的条款。其中，注日期的引用文件，仅该日期对应的版本适用于本文件；不注日期的引用文件，其最新版本（包括所有的修改单）适用于本文件。

GB/T 6379.2 测量方法与结果的准确度（正确度与精密度） 第2部分：确定标准测量方法重复性与再现性的基本方法

NY/T 2102 茶叶抽样技术规范

## 3 术语与定义

本文件没有需要界定的术语和定义。

## 4 原理

在一定温度条件下，顶空瓶内茶叶样品的挥发性组分向上空间挥发，产生蒸气压，在气-固二相达到热力学动态平衡时，其物质组成和浓度在两相基本保持一致，再采用固相微萃取纤维头对气相部分物质进行吸附萃取，通过进样口解析后进行色谱分离，然后再通过质谱仪进行物质定性分析，并采用内标相对含量法对风味挥发物质进行相对含量测定。

## 5 试剂或材料

除非另有规定，仅使用分析纯试剂。

5.1 氯化钠（NaCl）；

5.2 乙酸苯乙酯（C<sub>10</sub>H<sub>12</sub>O<sub>2</sub>）：色谱纯，；

5.3 正己烷（C<sub>6</sub>H<sub>14</sub>）：色谱纯；

## 6 仪器设备

6.1 气相色谱-质谱联用仪：气相色谱-质谱，EI 源。

6.2 固相微萃取仪；

6.3 萃取纤维头：50/30 μm，PDMS/DVB/CAR；

6.4 顶空瓶：20 mL；

6.5 分析天平：感量 0.1 mg。

## 7 样品制备与保存

### 7.1 制样

茶叶样品按照 NY/T 2102 进行采样和分样后，取样品约 200 g，经粉碎机粉碎，过 60 目筛，制成茶叶粉末，一式两份。

### 7.2 保存

试样密封避光保存于4℃冰箱，待用。

## 8 分析步骤

### 8.1 样品制备处理

称取茶叶样品 0.2g（精确至 0.000 1 g）至 20 mL 顶空样品瓶中，加入 0.2g（精确至 0.00 1 g）氯化钠，用玻璃棒混匀，同时加入 50 ng 的内标物乙酸苯乙酯，用顶空瓶盖将其密封。然后将顶空瓶放入到固相微萃取仪加热装置中，在 60℃条件下平衡 20 min，利用固相微萃取纤维头吸附 20 min，在 250℃进样口解析进行气相色谱质谱分析。

### 8.2 分析条件

#### 8.2.1 固相微萃取条件

- a) 纤维头 PDMS/DVB/CAR;
- b) 样品孵化温度：60℃；
- c) 样品孵化时间：20 min；
- d) 萃取吸附时间：20 min；
- e) 解析温度：250℃；
- f) 解析时间：3 min。

#### 8.2.2 色谱条件

- a) 色谱柱 1: HP-FFAP(50 m×200 μm, 0.3 μm)或等效柱；色谱柱 2: DB-WAX(30 m×250 μm, 0.25μm)毛细管气相色谱柱或等效柱；
- b) 载气条件：流速 1.0 mL/min，不分流进样；
- c) 进样口温度：250℃；
- d) 色谱柱 1 柱温箱升温程序：炉温初始为 40℃，保持 2 min，以 2℃/min 升温至 220℃，保 4min；样品运行时间：92 min），溶剂延迟时间：4 min；
- e) 色谱柱 2 柱温箱升温程序等同于色谱柱 1 柱温箱升温程序。
- f) 传输线温度：260℃。

#### 8.2.3 质谱条件

- a) 扫描方式：质量全扫描模式，扫描质量数范围：40 m/z~450 m/z；
- b) 电离方式：电子轰击电离源(EI 源，电子能量 70 eV)；

- c) 离子源温度: 230℃;
- d) 四级杆温度: 150℃;
- e) 电离电压: 70 eV。

### 8.3 定性与定量

#### 8.3.1 保留指数定性

在相同的条件下进行样品测定,被测试样中目标化合物色谱峰的保留指数与附录中提供化合物或查阅资料的保留指数相比较,相对误差应在±2.0%之内。

#### 8.3.2 物质鉴定定性

实验质谱数据采用 NIST 标准谱库自动检索相识度匹配与人工解析相结合,查阅有关质谱资料,对质荷比、相对峰度、分子离子峰等进行分析,质谱信息的正向和反向匹配相似度≥800 的色谱峰可定性。

#### 8.3.3 定量分析

采用乙酸苯乙酯的内标相对含量法或面积归一法半定量。

### 8.4 样品测定

将试样注入气相色谱-质谱联用仪,经色谱分离,质谱检测采集质谱数据,设定自动识别信噪比大于 100 的色谱峰,使用 NIST 数据库进行相识度匹配;所检索的化合物的正向和反向匹配相似度均>800 以上的色谱峰,采用内标相对定量法(假定校正因子 F=1),得到各风味挥发物质的相对含量。3 种典型茶叶中风味挥发物质参见附录 A。

### 8.5 平行试验

按以上步骤对同一试样进行平行试验测定。

### 8.6 空白试验

除不加试料外,采用完全相同的测定步骤进行平行操作。

## 9 结果计算

### 9.1 内标相对定量

以乙酸苯乙酯为内标,采用内标相对定量法(假定校正因子 F=1),按公式(1)计算:

$$\rho_i = \rho_{is} \times \frac{A_i}{A_{is}} \times F \quad (1)$$

式中:

$\rho_i$ —试验中某种风味挥发物质的质量浓度(ng·kg<sup>-1</sup>);

$\rho_{is}$ —试验中内标的质量浓度(ng·kg<sup>-1</sup>);

$A_i$ —试验中某种风味挥发物质的色谱峰面积;

$A_{is}$ —试验中内标的色谱峰面积;

F—校正因子。

计算结果应扣除空白值,计算结果以重复性条件下获得的两次独立测定结果的算术平均值表示,保留两位小数。

## 9.2 面积归一法定量

试样中某种风味挥发物质的百分比  $Y$  按式(2)计算,通过测定相应峰面积对所有成分峰面积总和的百分数来计算给定组分  $i$  的含量:

$$Y_i = \frac{A_{s_i}}{\sum A_{s_i}} \times 100\% \quad (2)$$

式中:

$Y_i$ —试样中某种风味挥发物质占总风味挥发物质的百分比,单位为百分率(%) ;

$A_{s_i}$ —试样测定液中组分  $i$  的峰面积;

$\sum A_s$ —试样测定液中各风味挥发物质的峰面积之和。

如果符合(10.2),取两次测量的算数平均值作为结果,结果保留3位有效数字。

## 10 实验要求

### 10.1 空白及平行样实验要求

每次实验均要求带入样品空白和样品平行样实验,每个平行进样一次即可,取平均值作为实验结果。

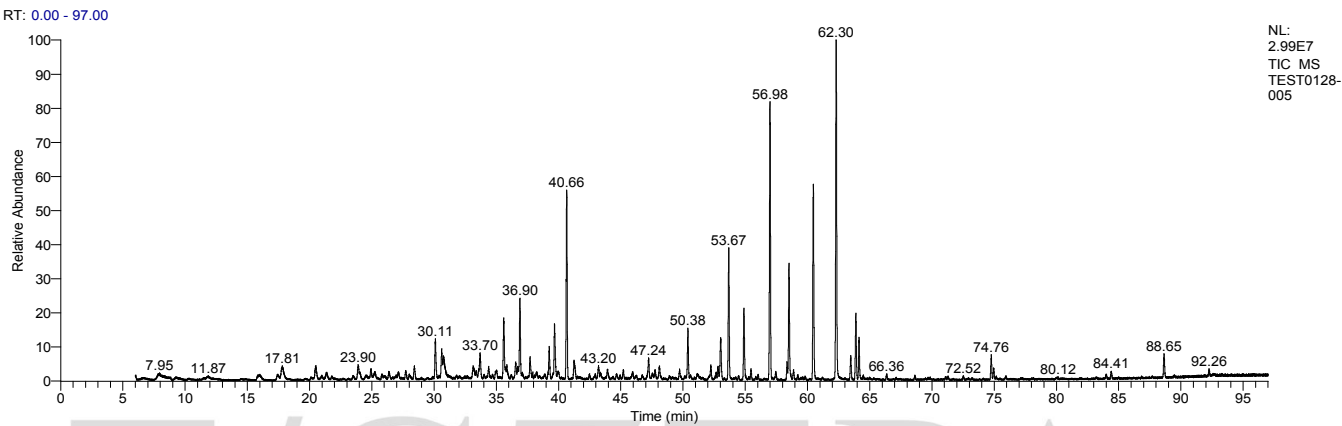
### 10.2 重复性

在重复条件下同一样品获得的测定结果的绝对差值不得超过算术平均值的 15%。

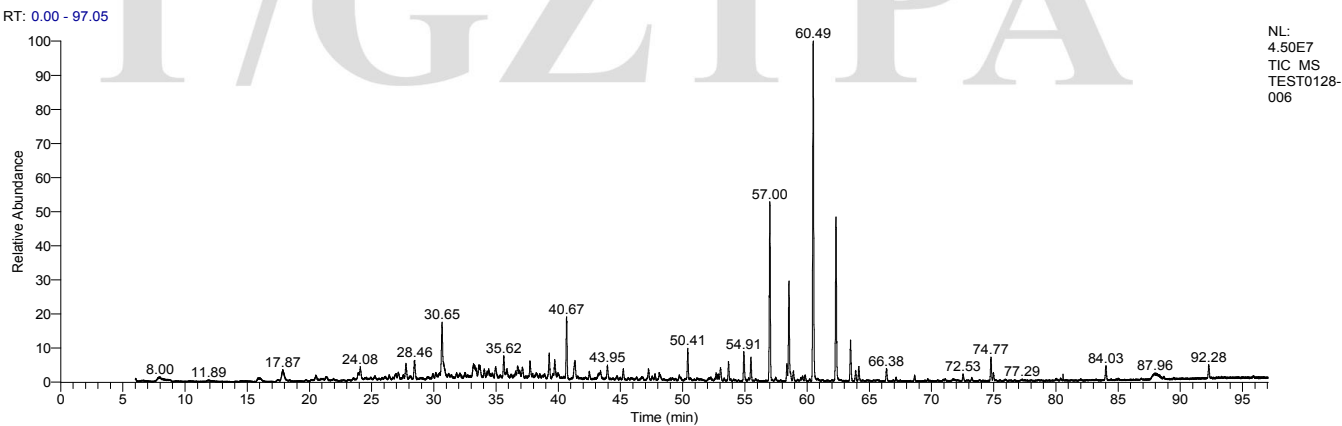
附录 A  
(资料性)

贵州典型绿茶风味挥发物质信息

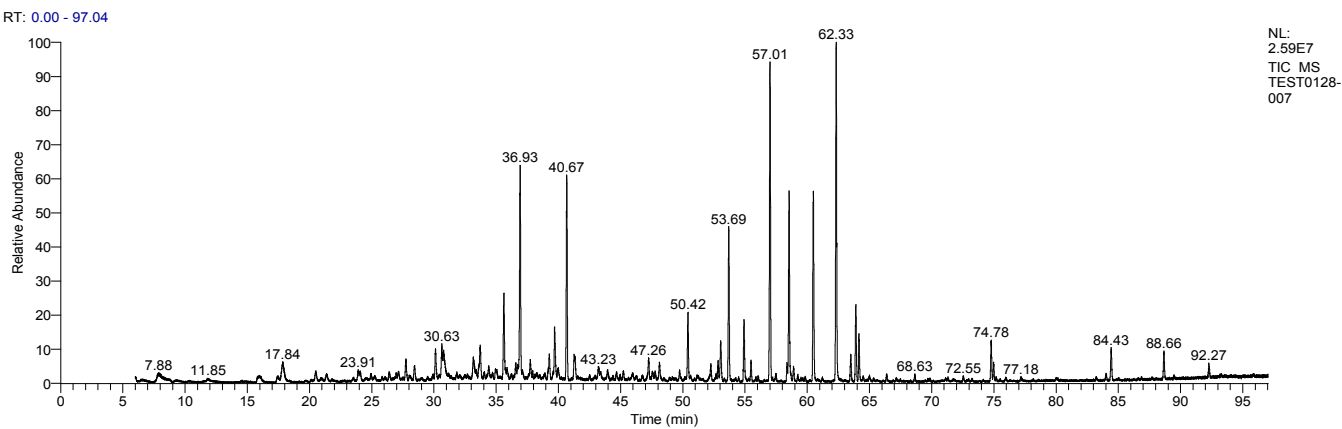
A. 1 贵州典型绿茶风味挥发物质总离子流(TIC)质谱色谱图见图 A. 1



a) 安顺普定朵叻毛峰绿茶



b) 石阡毛尖绿茶



c) 都匀毛尖绿茶

图 A. 1 贵州典型绿茶风味挥发物质总离子流(TIC)质谱色谱图

A. 2 贵州典型绿茶风味挥发物质色谱峰对应化合物信息见表 A. 2

表 A. 2 贵州典型绿茶风味挥发物质色谱峰对应化合物列表

| 序号   | 保留<br>时间<br>RT | 保留指数 RI <sup>a</sup><br>(FFAP 柱) | 识别 <sup>b</sup> | 化合物名称                       | 英文名字                                                     | cas 号      | 平均含量            |               |
|------|----------------|----------------------------------|-----------------|-----------------------------|----------------------------------------------------------|------------|-----------------|---------------|
|      |                |                                  |                 |                             |                                                          |            | 相对含<br>量<br>(%) | 含量<br>(µg/kg) |
| A1   | 21.15          | 1201.03                          | MS,RI           | 1-戊醇                        | 1-Pentalol                                               | 71-41-0    | 1.20            | 71.43         |
| A2   | 25.86          | 1300.30                          | MS,RI           | 顺-2-戊烯醇                     | Shun-2-pentenol                                          | 1576-95-0  | 0.42            | 25.00         |
| A3   | 30.01          | 1306.11                          | MS,RI           | 3-己烯醇                       | 3-hexenol                                                | 928-96-1   | 2.29            | 136.31        |
| A4   | 31.51          | 1400.10                          | MS,RI           | 反式-2-己烯-1-醇                 | Trans-2-hexene-1-alcohol                                 | 928-95-0   | 0.18            | 10.71         |
| A5   | 34.31          | 1401.07                          | MS,RI           | 1-辛烯-3-醇                    | 1-Simene-3-alcohol                                       | 3391-86-4  | 1.37            | 81.55         |
| A6   | 36.90          | 1410.64                          | MS,RI           | 2-乙基己醇                      | 2-Ethylhexanol                                           | 104-76-7   | 8.56            | 509.52        |
| A7   | 40.68          | 1501.05                          | MS,RI           | 芳樟醇                         | Althol                                                   | 78-70-6    | 4.67            | 277.98        |
| A8   | 41.18          | 1501.45                          | MS,RI           | 正辛醇                         | Positive-octanol                                         | 111-87-5   | 0.65            | 38.69         |
| A9   | 43.08          | 1508.52                          | MS,RI           | 二氢胆固醇                       | Dihydrogen Cholesterol                                   | 80-97-7    | 0.40            | 23.81         |
| A10  | 44.59          | 1600.17                          | MS,RI           | 二氢芳樟醇                       | Dihydrosylol                                             | 29957-43-5 | 1.58            | 94.05         |
| A11  | 48.10          | 1602.67                          | MS,RI           | 4-(2-甲基-1,3-二氧戊环-2-基)-1-丁醇  | 4-(2-methyl-1,3-pentoxyl ring-2-group)-1-butanol         | 5745-75-5  | 0.94            | 55.95         |
| A12  | 53.69          | 1702.28                          | MS,RI           | 2,2,6-三甲基-6-乙烯基四氢-2H-呋喃-3-醇 | 2,2,6-trimethyl-6-vinyl tetrahydrogen-2H-furan-3-alcohol | 14049-11-7 | 4.36            | 259.52        |
| A13  | 58.54          | 1801.33                          | MS,RI           | 香叶醇                         | Xiangfoliol                                              | 106-24-1   | 4.79            | 285.12        |
| A14  | 60.49          | 1812.97                          | MS,RI           | 苯甲醇                         | Benzoyl-methanol                                         | 100-51-6   | 5.62            | 334.52        |
| A15  | 62.32          | 1900.38                          | MS,RI           | 苯乙醇                         | Benzoyl-alcohol                                          | 1960/12/8  | 5.25            | 312.50        |
| A16  | 68.64          | 2000.70                          | MS,RI           | 反式-橙花叔醇                     | Trans-Ool                                                | 40716-66-3 | 0.22            | 13.10         |
| A17  | 78.19          | 2117.11                          | MS,RI           | Α-毕橙茄醇                      | 1-Pentalol                                               | 481-34-5   | 0.14            | 8.33          |
| 醇类合计 |                |                                  |                 |                             |                                                          |            | 42.64           | 2538.10       |
| B1   | 7.37           | #N/A                             | MS,RI           | 戊醛                          | Glutaraldehyde                                           | 110-62-3   | 2.75            | 163.69        |
| B2   | 11.59          | 1005.38                          | MS,RI           | 己醛                          | Achexaldehyde                                            | 66-25-1    | 2.74            | 163.10        |
| B3   | 14.27          | 1100.56                          | MS,RI           | 2-氟-4-(三氟甲基)苯甲醛             | 2-fluorine-4-(trifluoromethane) benzaldehyde             | 763-93-9   | 1.00            | 59.52         |
| B4   | 17.26          | 1107.95                          | MS,RI           | 庚醛                          | Hepptanaldehyde                                          | 111-71-7   | 1.45            | 86.31         |
| B5   | 19.44          | 1200.32                          | MS,RI           | 2-己烯醛                       | 2-hexenin                                                | 505-57-7   | 0.71            | 42.26         |
| B6   | 23.85          | 1212.42                          | MS,RI           | 辛醛                          | Syntanaldehyde                                           | 124-13-0   | 0.97            | 57.74         |
| B7   | 30.72          | 1329.05                          | MS,RI           | 壬醛                          | Nononyaldehyde                                           | 124-19-6   | 2.38            | 141.67        |
| B8   | 33.17          | 1400.52                          | MS,RI           | 反-2-辛烯醛                     | Anti-2-oclinaldehyde                                     | 2548-87-0  | 0.78            | 46.43         |
| B9   | 37.61          | 1500.02                          | MS,RI           | (E,E)-2,4-庚二烯醛              | (E,E)-2,4-hepdienaldehyde                                | 4313-03-5  | 1.52            | 90.48         |
| B10  | 37.73          | 1500.04                          | MS,RI           | 2,4-庚二烯醛                    | 2,4-Ghepdilonin                                          | 881395     | 0.97            | 57.74         |
| B11  | 39.70          | 1500.55                          | MS,RI           | 苯甲醛                         | Benzoaldehyde                                            | 100-52-7   | 2.16            | 128.57        |
| B12  | 40.01          | 1500.68                          | MS,RI           | 反-2-十二烯醛                    | Anti-2-dodecenaldehyde                                   | 20407-84-5 | 0.58            | 34.52         |
| B13  | 45.22          | 1600.33                          | MS,RI           | 环柠檬醛                        | Cyclic citaldehyde                                       | 432-25-7   | 0.61            | 36.31         |
| B14  | 46.70          | 1600.98                          | MS,RI           | 反式-2-癸烯醛                    | Trans-2-decanenaldehyde                                  | 3913-81-3  | 0.31            | 18.45         |
| B15  | 47.10          | 1601.28                          | MS,RI           | 苯乙醛                         | Benzoacetaldehyde                                        | 122-78-1   | 0.17            | 10.12         |
| B16  | 49.11          | 1608.66                          | MS,RI           | 9,12,15-十八碳三烯醛              | 9,12,15-18 carbon triallaldehyde                         | 26537-71-3 | 0.46            | 27.38         |
| 醛类合计 |                |                                  |                 |                             |                                                          |            | 19.56           | 1164.29       |
| C1   | 34.76          | 1401.41                          | MS,RI           | 乙酸                          | Ethenic acid                                             | 64-19-7    | 0.67            | 39.88         |
| C2   | 58.34          | 1801.15                          | MS,RI           | 己酸                          | Apic Acid                                                | 142-62-1   | 0.67            | 39.88         |
| C3   | 64.16          | 1901.65                          | MS,RI           | 庚酸                          | Heppic acid                                              | 111-14-8   | 1.63            | 97.02         |
| C4   | 64.45          | 1902.10                          | MS,RI           | 反式-3-己烯酸                    | Trans-3-hexadiene acid                                   | 1577-18-0  | 0.12            | 7.14          |
| C5   | 74.98          | 2100.78                          | MS,RI           | 壬酸                          | Nononylic acid                                           | 112-05-0   | 0.69            | 41.07         |
| 酸类合计 |                |                                  |                 |                             |                                                          |            | 3.78            | 225.00        |
| D1   | 24.67          | 1300.05                          | MS,RI           | 1-辛烯-3-酮                    | 1-Synene-3-ketone                                        | 4312-99-6  | 0.38            | 22.62         |
| D2   | 27.09          | 1300.72                          | MS,RI           | 6-甲基-5-庚烯-2 酮               | 6-methyl-5-hepenene-2 ketone                             | 110-93-0   | 0.72            | 42.86         |
| D3   | 30.36          | 1310.40                          | MS,RI           | 甲基庚基甲酮                      | Methylheppmethmethone                                    | 821-55-6   | 0.19            | 11.31         |
| D4   | 31.71          | 1400.13                          | MS,RI           | 3-辛烯-2-酮                    | 3-Synene-2-ketone                                        | 1669-44-9  | 0.20            | 11.90         |
| D5   | 39.27          | 1500.40                          | MS,RI           | 3,5-辛二烯-2-酮                 | 3,5-ocadiene-2-ketone                                    | 38284-27-4 | 1.17            | 69.64         |
| D6   | 43.92          | 1600.03                          | MS,RI           | 6-甲基-2-庚酮                   | 6-methyl-2-heptonone                                     | 928-68-7   | 1.63            | 97.02         |
| D7   | 50.57          | 1700.17                          | MS,RI           | 2,3-辛二酮                     | 2,3-Syndiketone                                          | 585-25-1   | 0.43            | 25.60         |
| D8   | 58.68          | 1801.48                          | MS,RI           | α-紫罗兰酮                      | α-Violandone                                             | 127-41-3   | 0.15            | 8.93          |
| D9   | 58.90          | 1801.75                          | MS,RI           | 香叶基丙酮                       | Xiangleaf yl acetone                                     | 3796-70-1  | 0.27            | 16.07         |



|       |       |         |       |                                                   |                                                                                              |            |      |        |
|-------|-------|---------|-------|---------------------------------------------------|----------------------------------------------------------------------------------------------|------------|------|--------|
| D10   | 63.50 | 1900.99 | MS,RI | $\beta$ -紫罗兰酮                                     | $\beta$ -Violandone                                                                          | 79-77-6    | 1.00 | 59.52  |
| D11   | 63.91 | 1901.35 | MS,RI | 茉莉酮                                               | Jasmine one                                                                                  | 488-10-8   | 2.75 | 163.69 |
| D12   | 66.40 | 2000.04 | MS,RI | 4-[2,2,6-三甲基-7-氧杂<br>二环[4.1.0]庚-1-基]-3-<br>丁烯-2-酮 | 4-[2,2,6-trimethyl-7-oxygen<br>heterocyclic [4.1.0]<br>Geng-1-group]<br>-3-butylene-2-ketone | 23267-57-4 | 0.28 | 16.67  |
| 酮类合计  |       |         |       |                                                   |                                                                                              |            | 9.17 | 545.83 |
| E1    | 25.66 | 1300.25 | MS,RI | 乙酸叶醇酯                                             | Luethyl acetate                                                                              | 3681-71-8  | 0.17 | 10.12  |
| E2    | 35.12 | 1401.79 | MS,RI | 乙二醇丁醚醋酸酯                                          | Ethylene glycol-butyl-ether<br>acetate                                                       | 112-07-2   | 0.33 | 19.64  |
| E3    | 46.39 | 1600.79 | MS,RI | 丁内酯                                               | Butantone                                                                                    | 96-48-0    | 0.15 | 8.93   |
| E4    | 47.26 | 1601.43 | MS,RI | (Z)-己酸-3-己烯酯                                      | (Z)-hexane acid-3-hexene ester                                                               | 31501-11-8 | 1.09 | 64.88  |
| E5    | 47.49 | 1601.67 | MS,RI | 苯甲酸叶醇酯                                            | Folyl ol benzoate                                                                            | 25152-85-6 | 0.25 | 14.88  |
| E6    | 47.78 | 1602.07 | MS,RI | 3,7,11-三甲基-1,6,10-十<br>二烷三烯-3-醇乙酸酯                | 3,7,11-trimethyl-1,6,10-dodecane<br>triene-3-alcohol acetate                                 | 2306-78-7  | 0.26 | 15.48  |
| E7    | 54.88 | 1709.36 | MS,RI | 水杨酸甲酯                                             | Methyl salicylate                                                                            | 119-36-8   | 0.31 | 18.45  |
| E8    | 57.01 | 1800.41 | MS,RI | 乙酸苯乙酯（内标）                                         | Benzoyl acetate (internal)                                                                   | 103-45-7   | 4.20 | 250.00 |
| 酯类合计  |       |         |       |                                                   |                                                                                              |            | 6.76 | 402.38 |
| F1    | 20.05 | 1200.50 | MS,RI | 2-戊基呋喃                                            | 2-Pentalofuran                                                                               | 3777-69-3  | 0.20 | 11.90  |
| F2    | 44.89 | 1600.24 | MS,RI | 茶吡咯                                               | Tea Pyogrel                                                                                  | 2167-14-8  | 1.03 | 61.31  |
| F3    | 54.92 | 1710.18 | MS,RI | 2-氨基-N-羟基苯甲酰胺                                     | 2-ammonia-N-hydroxyphenylami<br>de                                                           | 5623-04-1  | 2.39 | 142.26 |
| F4    | 72.59 | 2100.07 | MS,RI | 柏木脑                                               | Cypress brain                                                                                | 77-53-2    | 0.11 | 6.55   |
| F5    | 88.66 | 2299.00 | MS,RI | 吡啶                                                | indl                                                                                         | 120-72-9   | 1.10 | 65.48  |
| 其他类合计 |       |         |       |                                                   |                                                                                              |            | 4.83 | 287.50 |

a:化合物在 HP-FFAP 色谱柱上的保留指数。

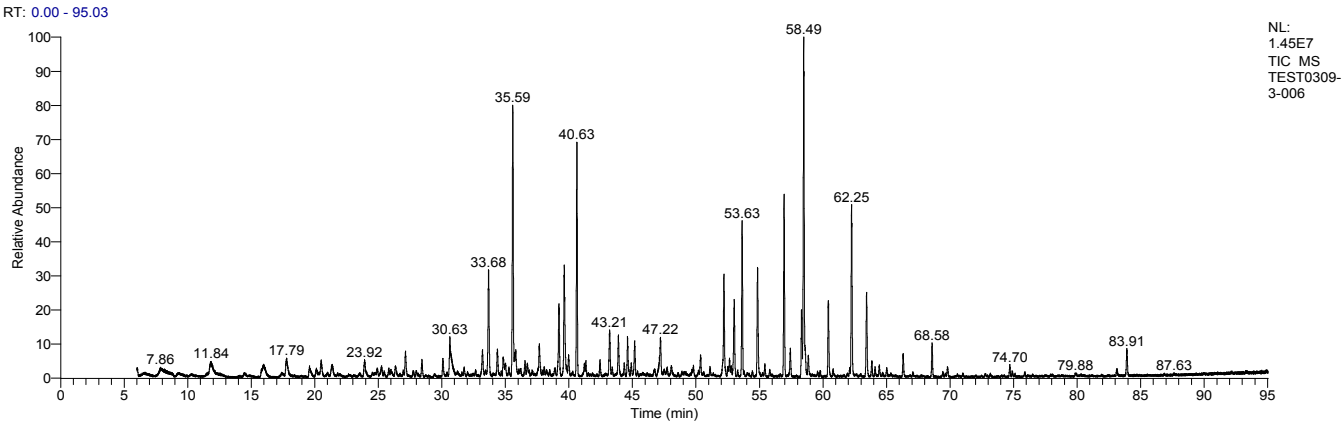
b:化合物定性的方式，MS 为 NIST 标准谱库自动检索相似度匹配与人工解析相结合定性，RI 为保留指数定性。

使用色谱柱：HP-FFAP(50 m×200  $\mu$ m，0.3  $\mu$ m)分析。

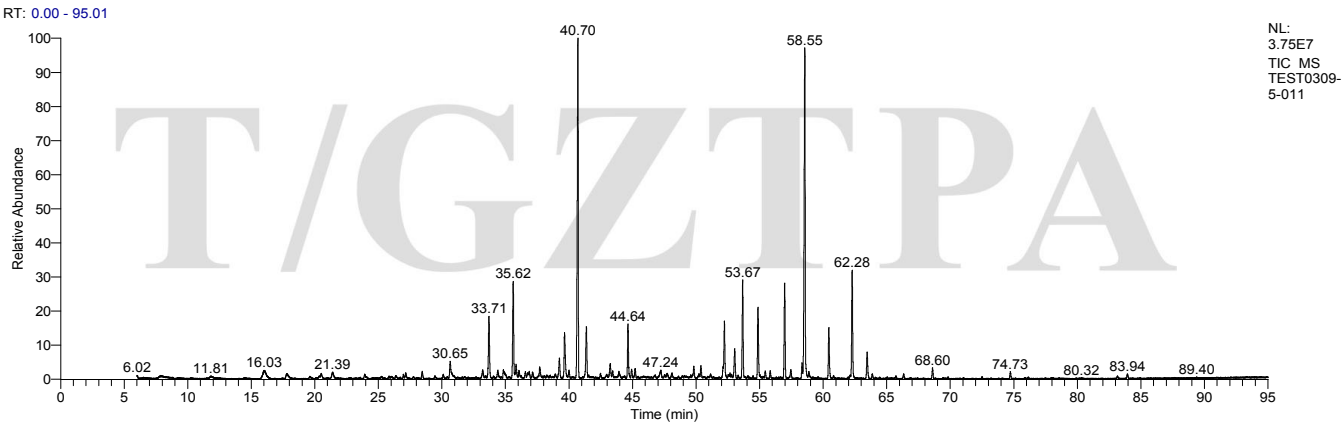
附录 B  
(资料性)

贵州典型红茶风味挥发物质信息

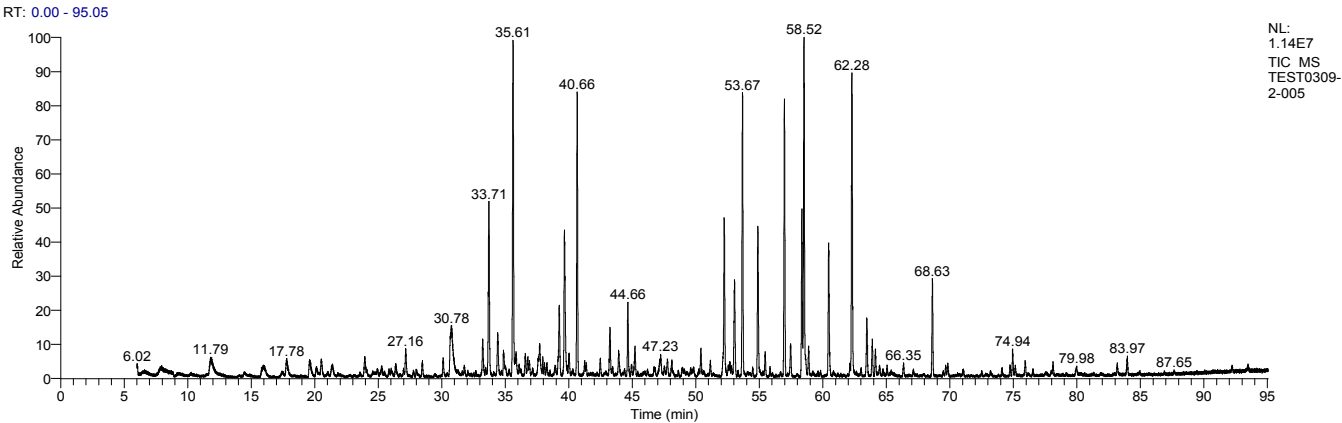
B. 1 贵州典型绿茶风味挥发物质总离子流(TIC)质谱色谱图见图 B. 1



a) 贵州典型红茶—遵义红



b) 贵州典型红茶—普安红



c) 贵州典型红茶—都匀红

图 B. 1 贵州典型绿茶风味挥发物质总离子流(TIC)质谱色谱图

## B.2 贵州典型红茶风味挥发物质色谱峰对应化合物信息见表 B.2

表 B.2 贵州典型红茶风味挥发物质色谱峰对应化合物列表

| 序号   | 时间    | 保留指数 RI <sup>a</sup><br>(FFAP 柱) | 识别 <sup>b</sup> | 化合物名称                             | 英文名称                                                        | cas 号      | 平均含量        |               |
|------|-------|----------------------------------|-----------------|-----------------------------------|-------------------------------------------------------------|------------|-------------|---------------|
|      |       |                                  |                 |                                   |                                                             |            | 相对含量<br>(%) | 含量<br>(μg/kg) |
| A1   | 20.16 | 1200.54                          | MS,RI           | 4-仲丁基-环己醇                         | 4-(butan-2-yl)cyclohexanol                                  | 6292-20-2  | 0.21        | 12.96         |
| A2   | 26.00 | 1300.34                          | MS,RI           | 反-2-辛烯醇                           | trans-2-Octen-1-ol                                          | 18409-17-1 | 0.27        | 16.49         |
| A3   | 28.00 | 1301.25                          | MS,RI           | 己醇                                | n-Hexanol                                                   | 111-27-3   | 0.2         | 12.2          |
| A4   | 30.10 | 1306.87                          | MS,RI           | 反-3-己烯醇                           | trans-hex-3-en-1-ol                                         | 928-97-2   | 0.49        | 30.69         |
| A5   | 31.60 | 1400.11                          | MS,RI           | 反-2-己烯醇                           | trans-2-hexen-1-ol                                          | 928-95-0   | 0.19        | 11.97         |
| A6   | 33.69 | 1400.73                          | MS,RI           | 顺式-氧化芳樟醇                          | (Z)-Linalool oxide                                          | 5989-33-3  | 3.03        | 188.15        |
| A7   | 35.60 | 1402.51                          | MS,RI           | 反式-氧化芳樟醇                          | (E)-Linalool oxide                                          | 34995-77-2 | 7.12        | 442.22        |
| A8   | 38.26 | 1500.15                          | MS,RI           | 植物醇                               | Phytol                                                      | 150-86-7   | 0.2         | 12.51         |
| A9   | 40.65 | 1501.03                          | MS,RI           | 芳樟醇                               | Linalool                                                    | 78-70-6    | 9.78        | 607.11        |
| A10  | 43.96 | 1600.04                          | MS,RI           | 2,6-二甲基环己醇                        | 2,6-dimethyl cyclohexanol                                   | 5337-72-4  | 0.69        | 42.96         |
| A11  | 44.64 | 1600.18                          | MS,RI           | 二氢芳樟醇                             | dihydrolinalool                                             | 29957-43-5 | 0.95        | 59            |
| A12  | 44.91 | 1600.24                          | MS,RI           | 4-氨基-3-甲基苯酚                       | 4-Amino-m-cresol                                            | 2835-99-6  | 0.47        | 28.96         |
| A13  | 48.10 | 1602.67                          | MS,RI           | 3-呋喃甲醇                            | 3-furan methanol                                            | 4412-91-3  | 0.46        | 28.47         |
| A14  | 49.83 | 1700.02                          | MS,RI           | α-松油醇                             | Alpha-Terpineol                                             | 10482-56-1 | 0.33        | 20.34         |
| A15  | 52.23 | 1700.78                          | MS,RI           | 顺-2,2,6-三甲基-6-乙基四氢-2H-吡喃-3-醇      | tetrahydro-2,2,6-trimethyl-6-vinyl-2-H-pyran-3-ol           | 14049-11-7 | 2.41        | 149.86        |
| A16  | 53.67 | 1702.24                          | MS,RI           | 反-2,2,6-三甲基-6-乙基四氢-2H-吡喃-3-醇      | tetrahydro-2,2,6-trimethyl-6-vinyl-2-H-pyran-3-ol           | 14049-11-7 | 5.53        | 343.08        |
| A17  | 55.45 | 1800.00                          | MS,RI           | 1-(2-丁氧基乙氧基)-乙醇                   | 1-(2-butoxyethoxy)ethanol                                   | 54446-78-5 | 0.34        | 21.15         |
| A18  | 55.85 | 1800.08                          | MS,RI           | 橙花醇                               | Nerol                                                       | 106-25-2   | 0.31        | 19            |
| A19  | 58.59 | 1801.38                          | MS,RI           | 香叶醇                               | Geraniol                                                    | 106-24-1   | 12.71       | 788.84        |
| A20  | 60.45 | 1811.67                          | MS,RI           | 苯甲醇                               | Benzyl alcohol                                              | 100-51-6   | 3.74        | 231.92        |
| A21  | 62.28 | 1900.36                          | MS,RI           | 苯乙醇                               | Phenethyl alcohol                                           | 22258      | 4.76        | 295.21        |
| A22  | 68.61 | 2000.69                          | MS,RI           | S-(Z)-3,7,11-三甲基-1,6,10-十二烷三烯-3-醇 | (+)-nerolidol                                               | 142-50-7   | 0.84        | 51.91         |
| A23  | 74.74 | 2100.67                          | MS,RI           | 橄榄醇                               | Olivetol                                                    | 500-66-3   | 0.25        | 15.82         |
| 醇类合计 |       |                                  |                 |                                   |                                                             |            | 55.28       | 3430.82       |
| B1   | 11.81 | 1008.57                          | MS,RI           | 己醛                                | Hexaldehyde                                                 | 66-25-1    | 0.58        | 35.81         |
| B2   | 17.44 | 1111.53                          | MS,RI           | 5-甲基己醛                            | 5-Methylhexanal                                             | 1860-39-5  | 0.13        | 8.31          |
| B3   | 35.28 | 1401.99                          | MS,RI           | 顺-11-十六碳醛                         | cis-11-hexadecenal                                          | 53939-28-9 | 0.21        | 13.3          |
| B4   | 36.08 | 1403.72                          | MS,RI           | 糠醛                                | 2-Furaldehyde                                               | 35796      | 0.59        | 36.32         |
| B5   | 37.60 | 1500.02                          | MS,RI           | 十三醛                               | tridecanal                                                  | 10486-19-8 | 0.17        | 10.28         |
| B6   | 37.70 | 1500.04                          | MS,RI           | 反-2,4-庚二烯醛                        | trans,trans-2,4-Heptadienal                                 | 881395     | 0.66        | 41.04         |
| B7   | 39.66 | 1500.54                          | MS,RI           | 苯甲醛                               | Benzaldehyde                                                | 100-52-7   | 2.56        | 159.03        |
| B8   | 45.20 | 1600.32                          | MS,RI           | β-环柠檬醛                            | beta-Cyclocitral                                            | 432-25-7   | 0.66        | 40.77         |
| B9   | 46.79 | 1601.04                          | MS,RI           | 藏红花醛                              | safranal                                                    | 116-26-7   | 0.25        | 15.32         |
| B10  | 52.12 | 1700.72                          | MS,RI           | 柠檬醛                               | Citral                                                      | 5392-40-5  | 0.32        | 19.86         |
| 醛类合计 |       |                                  |                 |                                   |                                                             |            | 6.13        | 380.04        |
| C1   | 17.85 | 1240.00                          | MS,RI           | 1,4-二甲基-4-乙烯基环己烯                  | 1,4-dimethyl-4-vinylcyclohexene                             | 1743-61-9  | 0.77        | 47.84         |
| C2   | 19.61 | 1200.36                          | MS,RI           | 反-2-己烯醛                           | trans-2-hexenal                                             | 6728-26-3  | 0.35        | 21.6          |
| C3   | 20.33 | 1200.61                          | MS,RI           | 罗勒烯                               | (Z)-beta-Ocimene                                            | 3338-55-4  | 0.23        | 14            |
| C4   | 21.4  | 1201.20                          | MS,RI           | 3-蒎烯                              | 3-carene                                                    | 13466-78-9 | 0.55        | 33.93         |
| C5   | 29.46 | 1303.47                          | MS,RI           | 2-甲基-1-(2,2,3-三甲基环丙基)-1-丙烯        | 1,1,2-trimethyl-3-(2-methylprop-1-en-1-ylidene)cyclopropane | 14803-30-6 | 0.17        | 10.86         |
| C6   | 34.4  | 1401.13                          | MS,RI           | 反-α-蒎烯                            | alpha-cubebene                                              | 17699-14-8 | 0.53        | 33.17         |
| C7   | 43.24 | 1511.56                          | MS,RI           | L-石竹烯                             | Caryophyllene                                               | 87-44-5    | 0.9         | 56            |
| C8   | 52.53 | 1700.97                          | MS,RI           | 1,1,6-三甲基-1,2-二氢萘                 | 1,2-Dihydro-1,1,6-trimethylnaphthalene                      | 30364-38-6 | 0.31        | 19.37         |
| C9   | 53.03 | 1701.38                          | MS,RI           | δ-杜松烯                             | delta-cadinene                                              | 483-76-1   | 1.03        | 63.82         |
| C10  | 57.46 | 1800.59                          | MS,RI           | 顺-菖蒲烯                             | (E)-calamenene                                              | 73209-42-4 | 0.38        | 23.82         |
| C11  | 62.15 | 1900.32                          | MS,RI           | α-二氢菖蒲烯                           | Naphthalene                                                 | 21391-99-1 | 0.15        | 9.18          |
| 烃类合计 |       |                                  |                 |                                   |                                                             |            | 5.37        | 333.59        |
| D1   | 16.01 | 1102.00                          | MS,RI           | 月桂烯                               | Myrcene                                                     | 127-91-3   | 0.97        | 60.34         |
| D2   | 27.17 | 1300.75                          | MS,RI           | 甲基庚烯酮                             | 6-Methyl-5-hepten-2-one                                     | 110-93-0   | 0.44        | 27.42         |

|      |       |         |       |                                                   |                                        |            |      |        |
|------|-------|---------|-------|---------------------------------------------------|----------------------------------------|------------|------|--------|
| D3   | 39.24 | 1500.40 | MS,RI | 3,5-辛二烯-2-酮                                       | 3,5-octadienone,3,5-octadien-2-one     | 38284-27-4 | 1.17 | 72.32  |
| D4   | 42.46 | 1500.40 | MS,RI | 3,5-辛二烯-2-酮                                       | 3,5-octadienone,3,5-octadien-2-one     | 38284-27-4 | 0.3  | 18.39  |
| D5   | 49.12 | 1608.82 | MS,RI | 六氢假紫罗兰酮                                           | 6,10-dimethylundecan-2-one             | 1604-34-8  | 0.19 | 11.85  |
| D6   | 58.64 | 1801.43 | MS,RI | $\alpha$ -紫罗兰酮                                    | alpha-Ionone                           | 127-41-3   | 0.32 | 19.89  |
| D7   | 58.89 | 1801.74 | MS,RI | 香叶基丙酮                                             | (E)-6,10-Dimethyl-5,9-undecadien-2-one | 3796-70-1  | 0.47 | 29.22  |
| D8   | 63.47 | 1900.97 | MS,RI | $\beta$ -紫罗兰酮                                     | beta-ionone                            | 79-77-6    | 1.49 | 92.25  |
| D9   | 63.88 | 1901.32 | MS,RI | 茉莉酮                                               | Jasmone                                | 488-10-8   | 0.37 | 22.88  |
| D10  | 66.35 | 2000.03 | MS,RI | 4-[2,2,6-三甲基-7-氧杂<br>二环[4.1.0]庚-1-基]-3-<br>丁烯-2-酮 | beta-ionone epoxide                    | 23267-57-4 | 0.35 | 21.92  |
| 酮类合计 |       |         |       |                                                   |                                        |            | 6.07 | 376.48 |
| E1   | 34.75 | 1401.41 | MS,RI | 乙酸                                                | Acetic acid                            | 64-19-7    | 1.12 | 69.44  |
| E2   | 40.30 | 1500.83 | MS,RI | 丙酸                                                | Propionic acid                         | 29102      | 0.19 | 11.67  |
| E3   | 48.20 | 1602.92 | MS,RI | 4-甲基戊酸                                            | 4-methylvaleric acid                   | 646-07-1   | 0.26 | 16.35  |
| E4   | 58.34 | 1801.15 | MS,RI | 己酸                                                | Hexanoic acid                          | 142-62-1   | 1.58 | 97.81  |
| E5   | 64.13 | 1901.61 | MS,RI | 庚酸                                                | Heptanoic acid                         | 111-14-8   | 0.24 | 14.82  |
| E6   | 64.45 | 1902.10 | MS,RI | 反-2-己烯酸                                           | hex-2-enoic acid                       | 13419-69-7 | 0.87 | 54.13  |
| E7   | 65.05 | 1903.79 | MS,RI | 反-3-己烯酸                                           | trans-3-Hexenoic Acid                  | 1577-18-0  | 0.39 | 24.04  |
| E8   | 69.67 | 2001.39 | MS,RI | 辛酸                                                | Octanoic acid                          | 124-07-2   | 0.16 | 10.11  |
| E9   | 74.93 | 2100.76 | MS,RI | 壬酸                                                | Nonanoic acid                          | 112-05-0   | 0.2  | 12.2   |
| 酸类合计 |       |         |       |                                                   |                                        |            | 5.01 | 310.57 |
| F1   | 83.16 | 2204.86 | MS,RI | (E)-3,7-二甲基-2,6-辛<br>二烯酸                          | (E)-Geranic acid                       | 1022164    | 0.3  | 18.62  |
| F2   | 44.38 | 1600.12 | MS,RI | 己酸己酯                                              | hexyl hexanoate                        | 6378-65-0  | 0.24 | 14.59  |
| F3   | 53.31 | 1701.69 | MS,RI | 乙酸香叶酯                                             | Geranyl acetate                        | 105-87-3   | 0.17 | 10.42  |
| F4   | 54.87 | 1709.18 | MS,RI | 水杨酸甲酯                                             | Methyl salicylate                      | 119-36-8   | 3.05 | 189.31 |
| F5   | 56.97 | 1800.39 | MS,RI | 乙酸苯乙酯(内标)                                         | Phenethyl acetate                      | 103-45-7   | 4.03 | 250    |
| F6   | 83.96 | 2236.13 | MS,RI | 二氢猕猴桃内酯                                           | Dihydroactinidiolide                   | 17092-92-1 | 0.42 | 26.11  |
| 酯类合计 |       |         |       |                                                   |                                        |            | 7.91 | 490.43 |
| G1   | 44.91 | 1600.24 | MS,RI | 4-氨基-3-甲基苯酚                                       | 4-Amino-m-cresol                       | 2835-99-6  | 0.47 | 28.96  |
| G2   | 50.38 | 1700.13 | MS,RI | 香叶基乙基醚                                            | Geranylvinylether                      | 17957-93-6 | 0.53 | 32.94  |
| G3   | 60.82 | 1889.83 | MS,RI | N-乙基琥珀酰亚胺                                         | Ethylsuccinimide                       | 2314-78-5  | 0.28 | 17.57  |
| G4   | 65.72 | 1911.26 | MS,RI | 2-乙酰基吡咯                                           | 2-acetylpyrrole                        | 1072-83-9  | 0.21 | 13.25  |
| 其他合计 |       |         |       |                                                   |                                        |            | 1.49 | 92.72  |

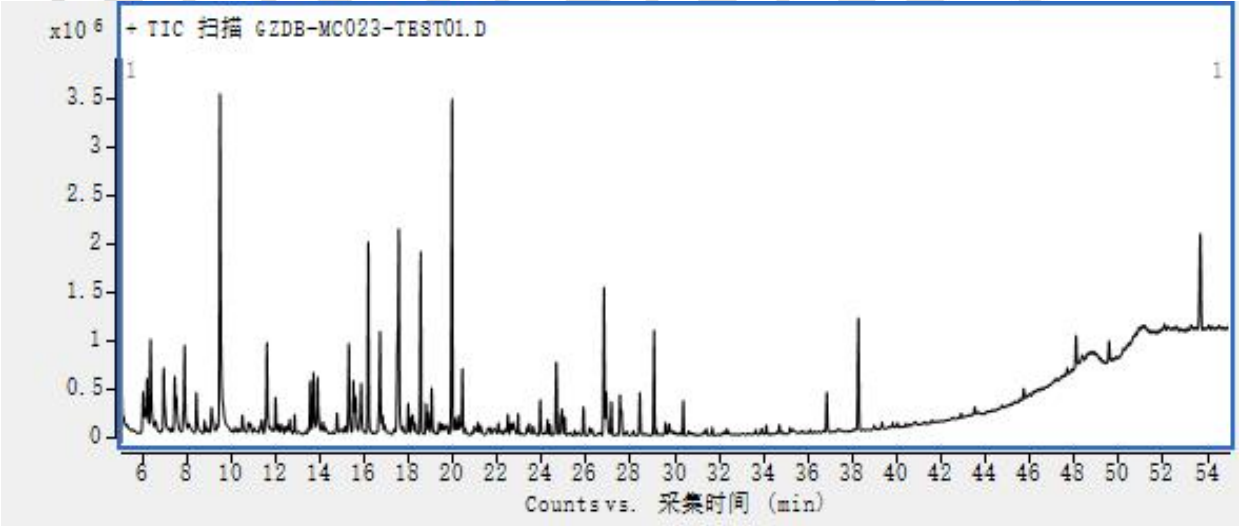
使用色谱柱: HP-FFAP(50 m $\times$ 200  $\mu$ m, 0.3  $\mu$ m)分析。

附录 C  
(资料性)

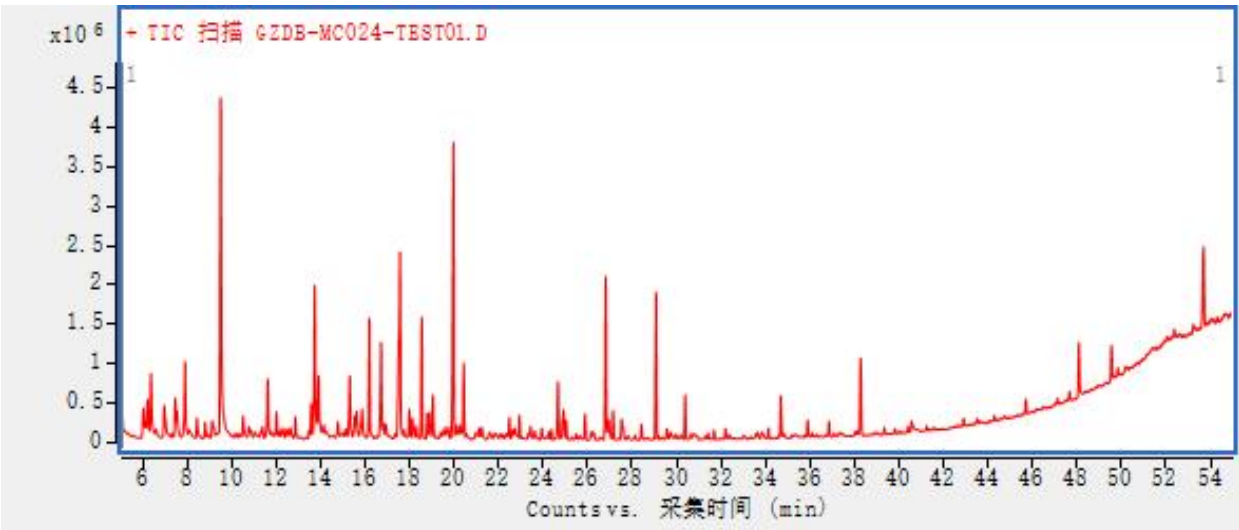
贵州抹茶风味挥发物质信息

C.1 贵州抹茶风味挥发物质总离子流(TIC)质谱色谱图见图 C. 1

贵州抹茶风味挥发物质总离子流(TIC)质谱色谱图，贵州抹茶风味挥发物质色谱峰对应化合物列表



a) 贵州抹茶—抹茶 1 号



b) 贵州抹茶—抹茶 2 号

图 C.1 贵州抹茶风味挥发物质总离子流(TIC)质谱色谱图

C. 2 贵州抹茶风味挥发物质谱峰对应化合物信息见表 C. 2

表 C. 3 贵州抹茶典型风味挥发物质谱峰对应化合物列表

| 序号   | 时间    | 保留指数 RI <sup>a</sup><br>(MAX 柱) | 识别 <sup>b</sup> | 化合物名称              | 英文名字                             | cas 号      | 平均含量        |               |
|------|-------|---------------------------------|-----------------|--------------------|----------------------------------|------------|-------------|---------------|
|      |       |                                 |                 |                    |                                  |            | 相对含量<br>(%) | 含量<br>(μg/kg) |
| A1   | 6.96  | 1146                            | MS,RI           | 1-戊烯-3-醇           | 1-Penten-3-ol                    | 616-25-1   | 2.26        | 116.3         |
| A2   | 11.62 | 1322                            | MS,RI           | 2-戊烯-1-醇           | 2-Penten-1-ol                    | 1576-95-0  | 3.34        | 172.3         |
| A3   | 12.64 | 1357                            | MS,RI           | 己醇                 | Hexanol                          | 111-27-3   | 0.49        | 25.1          |
| A4   | 13.56 | 1388                            | MS,RI           | 叶醇                 | 3-Hexen-1-ol                     | 928-96-1   | 1.98        | 102.0         |
| A5   | 15.31 | 1446                            | MS,RI           | (cis)-氧化芳樟醇        | cis-Linalool oxide               | 5989-33-3  | 3.24        | 167.1         |
| A6   | 15.61 | 1456                            | MS,RI           | 1-辛烯-3-醇           | 1-Octen-3-ol                     | 3391-86-4  | 1.04        | 53.5          |
| A7   | 16.18 | 1475                            | MS,RI           | (trans)-氧化芳樟醇      | trans-Linalool oxide             | 34995-77-2 | 5.55        | 286.0         |
| A8   | 18.54 | 1554                            | MS,RI           | 芳樟醇                | Linalool                         | 78-70-6    | 4.76        | 245.6         |
| A9   | 19.95 | 1602                            | MS,RI           | 2,6-二甲基环己醇         | Cyclohexanol, 2,6-dimethyl-      | 5337-72-4  | 13.17       | 679.1         |
| A10  | 26.90 | 1855                            | MS,RI           | 香叶醇                | Geraniol                         | 5337-72-5  | 0.68        | 34.8          |
| A11  | 27.53 | 1879                            | MS,RI           | 苯甲醇                | Benzyl alcohol                   | 432-25-8   | 1.00        | 51.4          |
| A12  | 28.42 | 1913                            | MS,RI           | 苯甲醇                | Phenylethyl Alcohol              | 109-52-5   | 0.82        | 42.3          |
| A13  | 31.68 | 2046                            | MS,RI           | 橙花叔醇               | Nerolidol                        | 5337-72-6  | 0.27        | 14.1          |
| 醇类合计 |       |                                 |                 |                    |                                  |            | 38.58       | 1989.5        |
| B1   | 7.53  | 1171                            | MS,RI           | 庚醛                 | Heptanal                         | 111-71-7   | 1.54        | 79.3          |
| B2   | 8.44  | 1208                            | MS,RI           | 2-己烯醛              | 2-Hexenal                        | 505-57-7   | 1.18        | 61.0          |
| B3   | 9.12  | 1233                            | MS,RI           | 4-庚烯醛              | 4-Heptenal                       | 6728-31-0  | 0.96        | 49.4          |
| B4   | 10.51 | 1284                            | MS,RI           | 辛醛                 | octanal                          | 124-13-0   | 0.69        | 35.5          |
| B5   | 13.71 | 1393                            | MS,RI           | 壬醛                 | Nonanal                          | 124-19-6   | 1.83        | 94.2          |
| B6   | 14.77 | 1428                            | MS,RI           | 2-辛烯醛              | 2-Octenal                        | 2548-87-0  | 0.67        | 34.5          |
| B7   | 15.86 | 1464                            | MS,RI           | 反-2,4-庚二烯醛         | 2,4-Heptadienal                  | 4313--3-5  | 1.48        | 76.3          |
| B8   | 16.71 | 1492                            | MS,RI           | 顺-2,4-庚二烯醛         | 2,4-Heptadienal                  | 4313--3-5  | 4.13        | 213.2         |
| B9   | 17.55 | 1520                            | MS,RI           | 苯甲醛                | Benzaldehyde                     | 100-52-7   | 3.23        | 166.8         |
| B10  | 20.42 | 1618                            | MS,RI           | β-环柠檬醛             | β-Cyclocitral                    | 432-25-7   | 2.70        | 139.4         |
| 醛类合计 |       |                                 |                 |                    |                                  |            | 18.41       | 949.5         |
| C1   | 15.51 | 1452                            | MS,RI           | 乙酸                 | Acetic acid                      | 64-19-7    | 1.37        | 70.4          |
| C2   | 23.93 | 1743                            | MS,RI           | 戊酸                 | Pentanoic acid                   | 109-52-4   | 0.78        | 40.0          |
| C3   | 29.57 | 1959                            | MS,RI           | 庚酸                 | Heptanoic acid                   | 30086-02-5 | 0.37        | 19.3          |
| C4   | 29.74 | 1966                            | MS,RI           | 3-己烯酸              | 3-Hexenoic acid                  | 78-70-8    | 0.35        | 18.3          |
| C5   | 34.70 | 2175                            | MS,RI           | 壬酸                 | Nonanoic acid                    | 1125-21-11 | 1.18        | 61.1          |
| 酸类合计 |       |                                 |                 |                    |                                  |            | 4.06        | 209.1         |
| D1   | 12.00 | 1335                            | MS,RI           | 6-甲基-5-庚烯-2-酮      | 6-Methyl-hepten-2-one            | 110-93-0   | 1.09        | 56.5          |
| D2   | 17.56 | 1521                            | MS,RI           | 3,5-辛二烯-2-酮        | 3,5-Octadien-2-one               | 38284-27-4 | 7.28        | 375.5         |
| D3   | 17.98 | 1535                            | MS,RI           | 3-壬烯-2-酮           | 3-Nonen-2-one                    | 30086-02-3 | 1.17        | 60.2          |
| D4   | 19.04 | 1571                            | MS,RI           | (E,E)-3,5-辛二烯-2-酮  | 3,5-Octadien-2-one, (E,E)-       | 30086-02-3 | 1.67        | 86.3          |
| D5   | 22.47 | 1690                            | MS,RI           | 茶香酮                | 4-Oxoisophorone                  | 1125-21-9  | 0.81        | 41.9          |
| D6   | 24.26 | 1755                            | MS,RI           | 5-乙基-2(5H)-呋喃酮     | 2(5H)-Furanone, 5-ethyl-         | 2407-43-4  | 0.37        | 19.3          |
| D7   | 26.80 | 1851                            | MS,RI           | α-紫罗兰酮             | α-Ionone                         | 30086-02-4 | 5.77        | 297.5         |
| D8   | 29.05 | 1939                            | MS,RI           | β-紫罗兰酮             | β-Ionone                         | 2407-43-5  | 4.71        | 243.1         |
| D9   | 30.37 | 1992                            | MS,RI           | β-氧化紫罗兰酮           | β-Ionone epoxide                 | 30086-02-5 | 1.53        | 78.8          |
| D10  | 33.63 | 2128                            | MS,RI           | 植酮                 | Perhydrofarnesyl acetone         | 432-25-9   | 0.25        | 12.7          |
| D11  | 36.84 | 2270                            | MS,RI           | 3-乙基-4-甲基吡咯-2,5-二酮 | Methylethylmaleimide             | 109-52-6   | 0.92        | 47.4          |
| 酮类合计 |       |                                 |                 |                    |                                  |            | 25.58       | 1319.1        |
| E1   | 24.65 | 1770                            | MS,RI           | 水杨酸甲酯              | Methyl salicylate                | 30086-02-4 | 2.68        | 138.2         |
| E2   | 38.26 | 2336                            | MS,RI           | 二氢猕猴桃内酯            | Dihydroactinidiolide             | 2407-43-6  | 3.65        | 188.4         |
| E3   | 25.87 | 1815                            | MS,RI           | 乙酸苯乙酯(ISTD)        | Acetic acid, 2-phenylethyl ester | 78-70-7    | 0.97        | 50.0          |
| 酯类合计 |       |                                 |                 |                    |                                  |            | 7.30        | 376.6         |
| F1   | 8.80  | 1222                            | MS,RI           | 2-正戊基呋喃            | 2-Pentylfuran                    | 3777-69-3  | 0.54        | 27.8          |
| F2   | 27.59 | 1881                            | MS,RI           | N-乙基琥珀酰亚胺          | 2,5-Pyrrolidinedione, 1-ethyl-   | 1125-21-10 | 0.53        | 27.5          |
| F3   | 53.67 | 3086                            | MS,RI           | 咖啡碱                | Caffeine                         | 30086-02-6 | 4.99        | 257.6         |
| 其他合计 |       |                                 |                 |                    |                                  |            | 6.07        | 312.9         |

使用色谱柱 DB-WAX(30 m×250μm, 0.25 μm)分析

