

# T/ GZTPA

## 团体标准

T/ GZTPA 0001-2021

---

### 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:

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

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%。

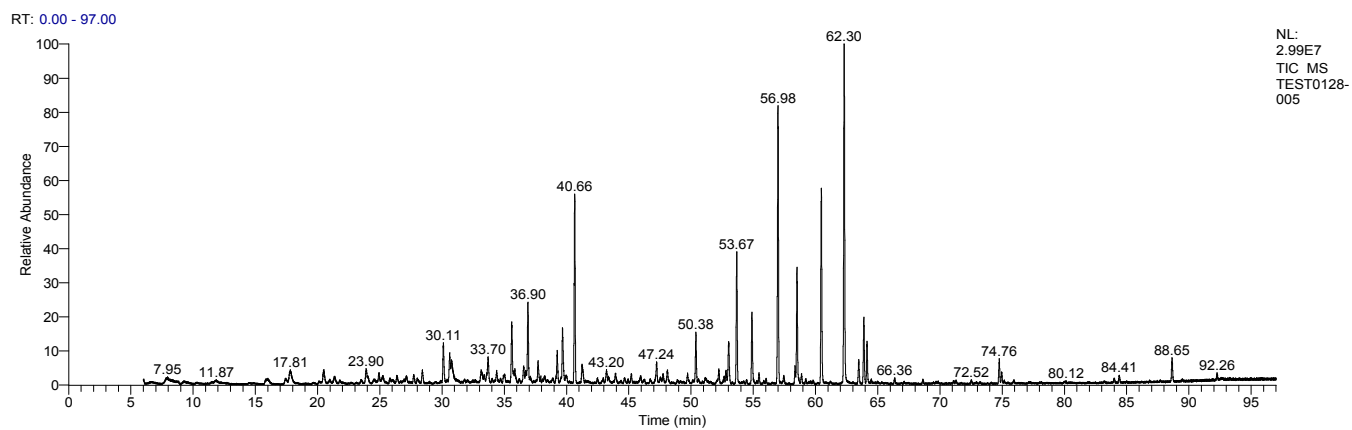
T/GZTPA

## 附录 A

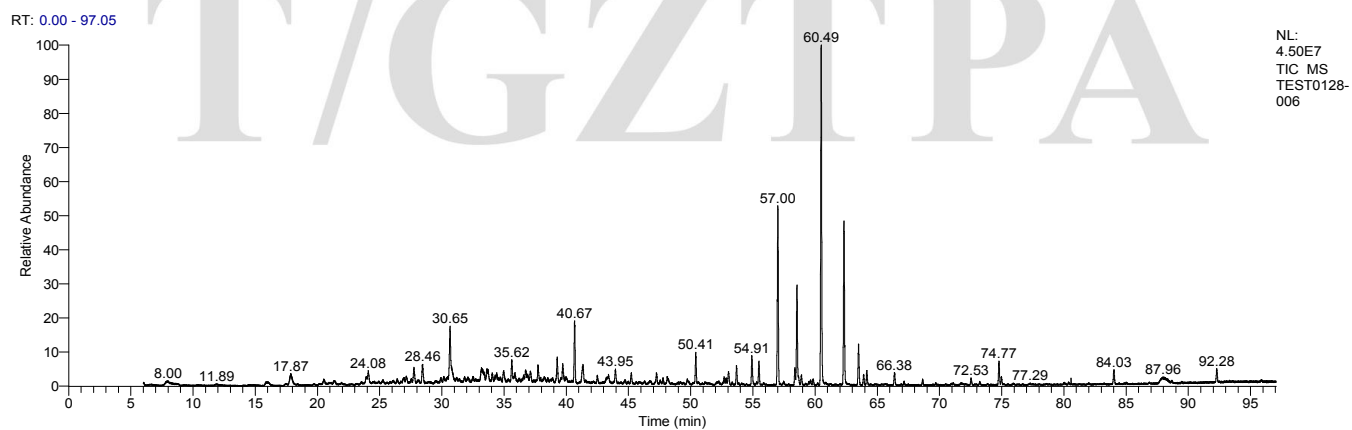
(资料性)

贵州典型绿茶风味挥发物质信息

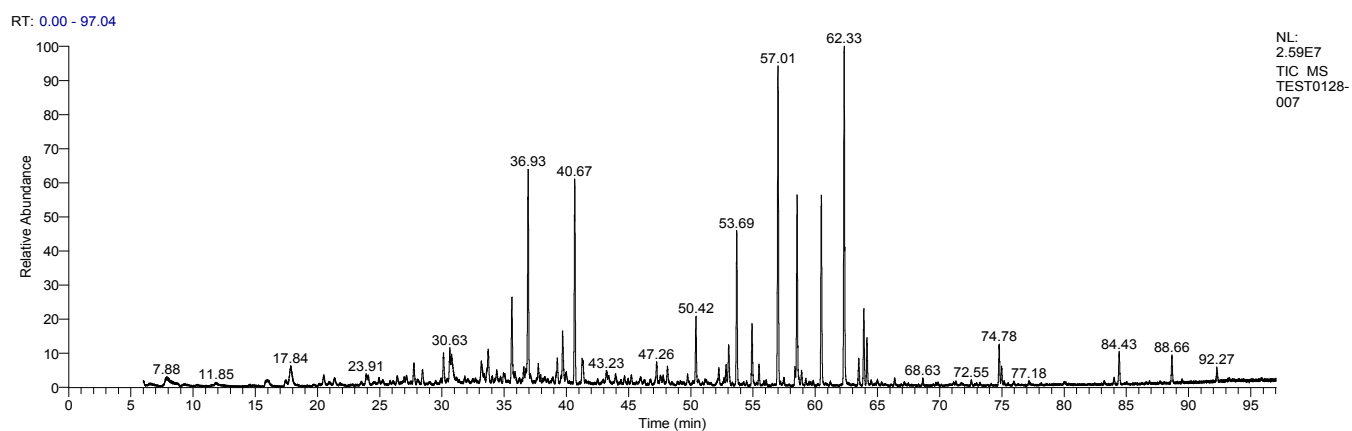
## A. 1 贵州典型绿茶风味挥发物质总离子流(TIC)质谱色谱图见图 A. 1



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谱峰对应化合物列表

序号	保留时间 RT	保留指数 RI <sup>a</sup> (FFAP 柱)	识别 <sup>b</sup>	化合物名称	英文名字	cas 号	平均含量	
							相对含量 (%)	含量 (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	Δ-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 二环[4.1.0]庚-1-基]-3- 丁烯-2-酮	4-[2,2,6-trimethyl-7-oxygen heterocyclic [4.1.0] Geng-1-group] -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	乙酸丁醇酯	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 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 二烷三烯-3-醇乙酸酯	3,7,11-trimethyl-1,6,10-dodecane 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 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。

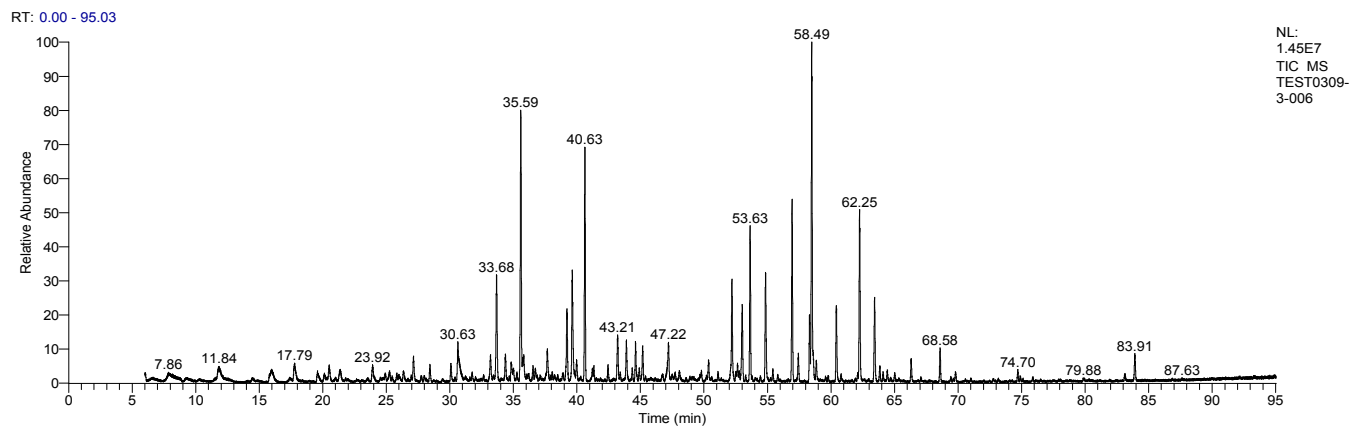
使用色谱柱: HP-FFAP(50 m $\times$ 200  $\mu$ m, 0.3  $\mu$ m)分析。

T/GZTPA

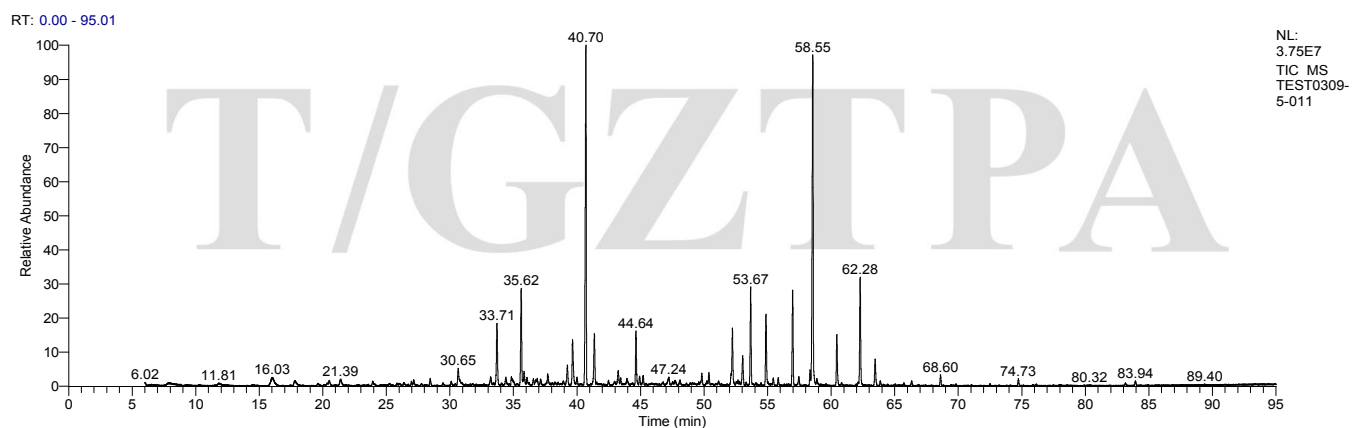
## 附录 B (资料性)

### 贵州典型红茶风味挥发物质信息

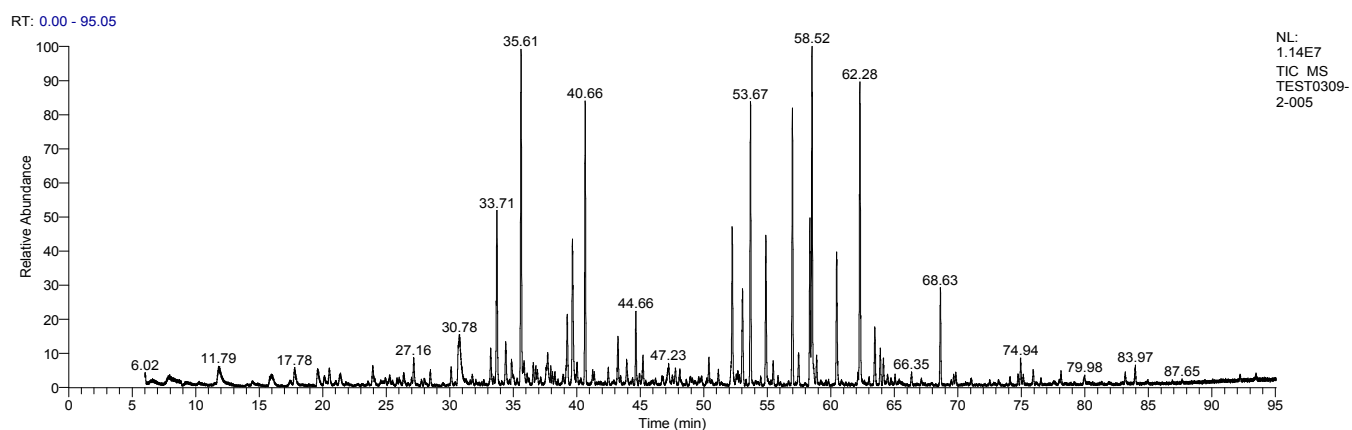
#### B.1 贵州典型绿茶风味挥发物质总离子流(TIC)质谱色谱图见图 B.1



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质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质谱峰对应化合物列表

序号	时间	保留指数 RI <sup>a</sup> (FFAP 柱)	识别 <sup>b</sup>	化合物名称	英文名字	cas 号	平均含量	
							相对含量 (%)	含量 (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-乙炔基四氢-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-乙炔基四氢-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-乙炔基环己烯	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-薜烯	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亚基)-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-萜烯油烯	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
烯类合计							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 二环[4.1.0]庚-1-基]-3- 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 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	香叶基乙烯基醚	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×200  $\mu$ m, 0.3  $\mu$ m)分析。

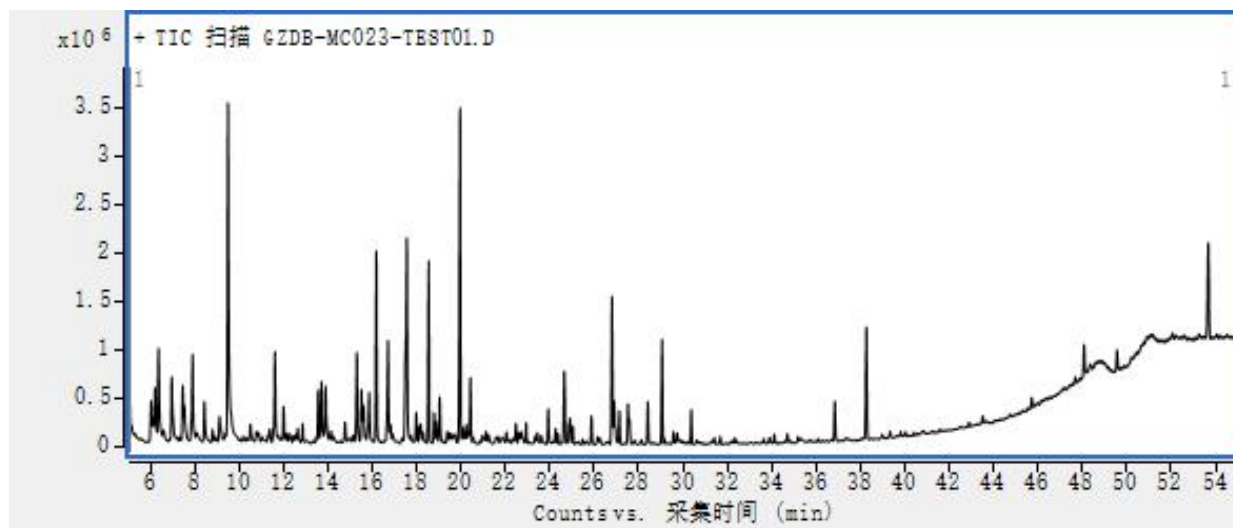
## 附录 C

(资料性)

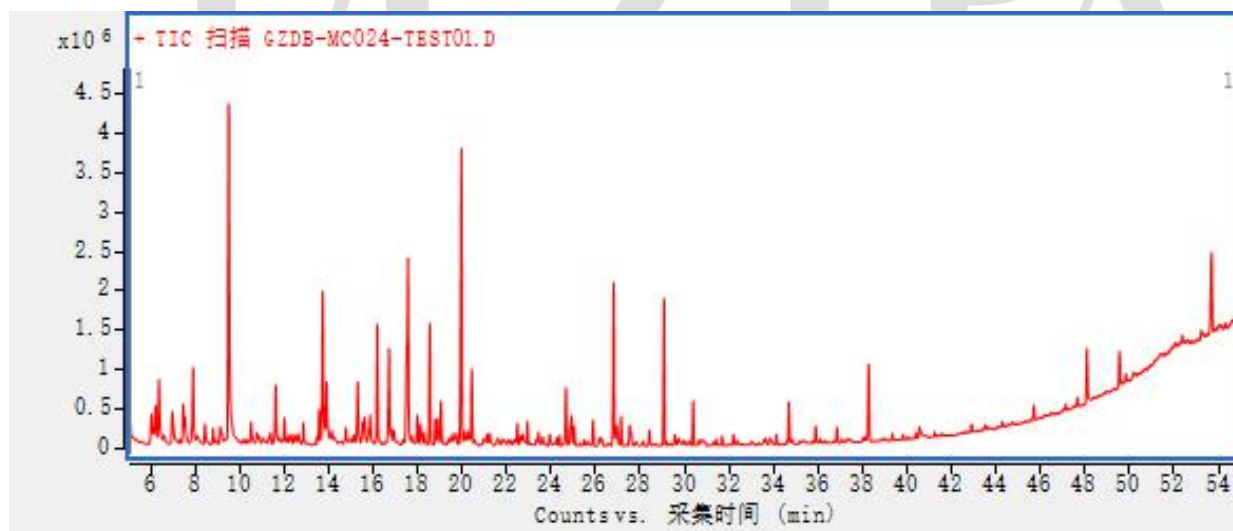
贵州抹茶风味挥发物质信息

## 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> (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 (%)	含量 (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。

