



赵璐,王丙武,高玉龙,等. 基于非烤烟型烟草的加热卷烟化学成分与感官品质关系研究[J]. 轻工学报, 2024,39(3):90-98.
ZHAO L, WANG B W, GAO Y L, et al. Study on the relationship between chemical composition and sensory quality of heated cigarettes based on non-flue-cured tobacco[J]. Journal of Light Industry, 2024,39(3):90-98.
DOI: 10.12187/2024.03.011

基于非烤烟型烟草的加热卷烟化学成分与感官品质关系研究

赵璐¹, 王丙武¹, 高玉龙¹, 张晓宇², 周顺²

1. 云南省烟草农业科学研究院, 云南 昆明 650021;
2. 安徽中烟工业有限责任公司 技术中心, 安徽 合肥 230031

摘要: 为研究非烤烟型烟草品种的烟叶化学成分与由其制得的加热卷烟感官品质的关系, 对香料烟、晾晒烟、白肋烟、雪茄烟 4 种类型非烤烟型烟草烟叶样品的常规化学成分进行检测, 通过代谢组学检测技术分析烟叶原料的挥发性代谢谱, 采用正交偏最小二乘判别分析筛选出不同烟叶样品间的差异挥发性代谢物, 并解析其与加热卷烟感官品质的相关关系。结果表明: 香料烟烟叶的总糖和还原糖含量较高, 白肋烟、晾晒烟和雪茄烟烟叶的植物碱、氮含量较高; 白肋烟、晾晒烟、雪茄烟烟叶的挥发性代谢谱特征较相似, 而与香料烟差异较大; 在不同烟叶样品中, 共筛选出 130 种差异挥发性代谢物, 主要为酯类、酮类、杂环类和萜类物质; 差异挥发性代谢物主要与加热卷烟烟气的细腻柔和、刺激性、干燥感、干净度得分呈显著正相关, 与杂气和劲头得分呈显著负相关。

关键词: 非烤烟型烟草; 化学成分; 挥发性代谢物; 感官品质; 加热卷烟

中图分类号: TS41⁺1 **文献标识码:** A **文章编号:** 2096-1553(2024)03-0090-09

0 引言

加热卷烟是一种新型烟草制品, 其工作原理是在 200~350 °C 条件下加热含有烟草原料的再造烟叶, 从而产生含有烟碱和芳香物质的气溶胶^[1]。加热卷烟专用再造烟叶是将烟叶进行结构重塑并添加外源物(如甘油、丙二醇和乙二醇)处理后的烟草基材, 主要包括薄片和颗粒两种形式^[2]。相较于燃烧温度超过 800 °C 的传统卷烟, 加热卷烟的工作温度相对较低, 可以显著减少主流烟气中焦油、一氧化碳

等有害物质的含量^[3], 这导致相同品种烟草在加热卷烟中的感官品质表现与传统卷烟有所不同^[4-5]。为增加加热卷烟的烟草风味特征, 多种非烤烟型烟草品种以直接添加或烟草提取物的形式被用于再造烟叶的制备, 以提升加热卷烟的整体感官品质^[6]。然而, 在这些非烤烟型烟草品种中, 影响加热卷烟感官品质的关键化学成分尚不明确。烟叶的化学成分是形成烟草风味特征的基石^[7-8], 而传统化学分析手段所检测到的香味物质数量和种类较为局限, 难以全面反映不同类型烟草品种的烟叶化学成分特

收稿日期: 2023-09-19; 修回日期: 2023-12-05; 出版日期: 2024-06-15

基金项目: 中国烟草总公司重大科技项目(110202201049(XX-08), 2023530401641009); 中国烟草总公司云南省公司重大科技项目(2021530000241007, 2018530000241023)

作者简介: 赵璐(1988—), 女, 云南省昆明市人, 云南省烟草农业科学研究院助理研究员, 博士, 主要研究方向为新型烟草烟叶原料。E-mail: zhaolu66@outlook.com

征,更不利于筛选影响加热卷烟感官品质的关键化学成分。

挥发性代谢物是烟草中与风味特征关联度较高的化学成分。代谢组学和感官评价联合分析技术主要通过多元统计分析(如主成分分析(PCA)、正交偏最小二乘判别分析(OPLS-DA)和相关性分析等)识别样品中显著影响感官特征的挥发性代谢物^[9-11],已成功应用于食品工业领域。为了解析非烤烟型烟草的烟叶化学成分与由其制得的加热卷烟感官品质之间的关系,本研究拟以地方性晾晒烟、白肋烟、雪茄烟、香料烟4种类型非烤烟型烟草烟叶样品为研究对象,检测其常规化学成分含量,利用代谢组学检测技术结合OPLS-DA在大样本挥发性代谢谱数据中,筛选获得非烤烟型烟草的关键挥发性代谢物,并分析其与加热卷烟感官品质的相关性,以期明确不同烟草样品的化学成分构成和感官品质特征,并深入挖掘影响加热卷烟感官品质的关键挥发性代谢物,进而为加热卷烟制品的烟叶原料选择和配方开发提供理论依据。

1 材料与方法

1.1 材料、试剂与仪器

主要材料:15份非烤烟型烟草烟叶样品,2022年收集于云南省典型产区,包括临沧产区的白肋烟(TN86、TN90),雪茄烟云雪1号(YX1)、云雪2号(YX2);保山产区的香料烟BS14×Prilep-1(BSP1)、BS14×Prilep-2(BSP2)、依兹密尔(LZMR)、云香巴斯玛1号(YBM1)、沙姆逊(SM);地方性晾晒烟,包括蒙自土烟(ML)、会泽旱烟(LY)、大柳叶(DLY)、小柳叶(XLY)、普洱九甲(PJJ)、昭通土烟(ZT),分别从红河产区、曲靖产区、普洱产区和昭通产区收集获得。

主要试剂:氯化钠(分析纯),国药集团有限公司;正己烷(色谱纯),美国BioBioPha/Sigma-Aldrich公司。

主要仪器:8890-7000 D型气相色谱-质谱(GC-MS)联用仪,美国Agilent公司;MS105DU型电子天平,美国METTLER TOLEDO公司;箭型固相微萃取进样器、120 μm DVB/CWR/PDMS萃取头,瑞士CTC分析仪器有限公司。

1.2 实验方法

1.2.1 烟叶样品常规化学成分检测 取调制后的烟叶样品进行常规化学成分(包括总糖、还原糖、总氮、总植物碱和氯)含量检测,检测方法见文献[12]。

1.2.2 GC-MS检测样品前处理 称取500 mg烟末样品于20 mL顶空瓶中,分别加入饱和NaCl溶液,10 μL内标溶液(50 μg/mL乙酸苯乙酯溶液),在60 ℃恒温条件下,振荡5 min。采样前将120 μm DVB/CWR/PDMS萃取头在纤维调节状态(Fiber Conditioning Station)下,于250 ℃老化5 min,然后插入样品顶空瓶中顶空萃取15 min,于250 ℃解吸5 min后进行GC-MS分离鉴定。

1.2.3 GC-MS条件 GC条件:DB-5 MS毛细管柱(30 m×0.25 mm×0.25 μm);载气为高纯氦气,恒流流速1.2 mL/min;进样口温度250 ℃,不分流进样;溶剂延迟3.5 min。升温程序为40 ℃保持3.5 min,以10 ℃/min的速率升温至100 ℃,再以7 ℃/min的速率升温至180 ℃,最后以25 ℃/min的速率升温至280 ℃,保持5 min。

MS条件:电子轰击离子源(EI);离子源温度230 ℃;四级杆温度150 ℃;MS接口温度280 ℃;电子能量70 eV;扫描方式为全扫描,扫描范围50~650 amu^[13]。

1.2.4 加热卷烟感官品质评价 将烟叶样品置于50 ℃烘箱中干燥4 h,粉碎,过100目筛网,按照 $m(\text{烟粉}):m(\text{甘油})=3:1$ 混合后搅拌均匀,取出后置于可变密度挤出机中均匀挤出,以500 r/min的转速在滚圆机上滚圆,得到烟草颗粒,将其填充于加热卷烟烟管中制成加热卷烟烟支^[14]。加热卷烟感官品质评价参考文献[5]的方法,由6名呼吸专家对烟支的香气质、香气量、杂气、劲头、烟气浓度、细腻柔和、刺激性、干燥感、干净度、甜润度、总分共11项指标进行评价打分,除总分分值为100分外,其他单项指标的分值均为10分,取平均值作为各项指标的评价得分。

1.3 数据处理

质谱分析后的数据通过MassHunter软件进行解析,采用NIST标准质谱数据库,以及项目前期联合迈维代谢建立的质谱数据库^[16]检索离子片段,并

结合保留指数等校正结果,对烟叶挥发性代谢物进行定性分析。采用内标法进行定量分析,计算挥发性代谢物的相对含量^[17],共鉴定出 700 余种烟草挥发性代谢物。原始数据经标准化处理后,通过 SIM-CA 软件进行 PCA、层次聚类分析(HCA)和 OPLS-DA,以 $VIP>1.2$ 、 $P<0.01$ 及差异倍数 >1.5 或 <0.5 作为标准筛选差异代谢物。采用 SPSS 25.0 软件对数据进行方差分析及相关性分析,计算 Pearson 相关系数;平均值采用单因素 ANOVA 检验,多重比较使用 Tukey 测试,使用 Origin 软件制图。

2 结果与分析

2.1 烟叶常规化学成分分析

不同烟叶样品常规化学成分含量(质量分数,下同)见表 1。由表 1 可知,晾晒烟、白肋烟和雪茄烟烟叶的总糖和还原糖含量显著低于香料烟。晾晒烟和雪茄烟烟叶的总植物碱含量显著高于白肋烟和香料烟,其中除蒙自土烟外,其他晾晒烟烟叶的总植物碱含量显著高于雪茄烟。香料烟烟叶的总氮含量显著低于白肋烟、晾晒烟和雪茄烟。除普洱九甲外,5 种晾晒烟和白肋烟烟叶的氯含量差异不显著。常规化学成分与烟草制品的感官评吸品质相关性已有研究报道,刘天择等^[17]发现,总糖、还原糖含量与烟气的生理劲头呈极显著负相关,总植物碱含

量与生理劲头呈极显著正相关,而与口感呈极显著负相关。本研究中,晾晒烟和雪茄烟烟叶的烟碱含量较高,总糖和还原糖含量相对较低,这可能是导致其生理劲头较大、刺激性和干燥感强、烟气不够细腻柔和的原因。因此,这两种类型的烟叶通常仅作为丰富烟草特征香的辅料,被添加在烤烟型传统卷烟中^[6]。香料烟烟叶的总植物碱含量较低,可以中和主料烟烟叶的香气,同时不影响主料烟特征风格的彰显,在传统燃烧型卷烟和加热卷烟中均具有较好的配伍性^[18]。与烤烟相比,本研究中大部分的晾晒烟、白肋烟、香料烟和云雪 2 号烟叶的氯含量较高,推测可能与不同品种烟叶氯吸收效率、烟叶材料种植地土壤氯含量及施肥等因素有关^[19],未来需通过同田比较试验进一步明确这些因素的具体影响。

2.2 烟叶挥发性代谢物分析

不同烟叶样品挥发性代谢物 HCA 图如图 1 所示。由图 1 可知,根据挥发性代谢谱差异,不同烟叶样品被聚类为 3 个组。组 1 包括香料烟 BS14×Prilep-1、BS14×Prilep-2、云香巴斯玛 1 号、沙姆逊和依兹密尔样品,组 2 包括蒙自土烟、昭通土烟样品,以及雪茄烟云雪 1 号、云雪 2 号和白肋烟 TN86、TN90 样品;晾晒烟大柳叶、小柳叶、会泽旱烟、普洱九甲被单独归为组 3。该结果表明,采用相似调制方法获得的烟叶样品其代谢谱特征也较为相似。

表 1 不同烟叶样品常规化学成分含量

类型	样品	总糖	还原糖	总氮	总植物碱	氯
香料烟	BS14×Prilep-1	22.83 ^d	20.90 ^d	1.50 ^f	0.23 ^f	1.74 ^b
	BS14×Prilep-2	21.80 ^d	20.90 ^d	1.82 ^f	0.36 ^f	2.87 ^a
	沙姆逊	27.40 ^b	26.03 ^b	1.68 ^f	0.08 ^g	1.29 ^c
	云香巴斯玛 1 号	25.37 ^c	23.00 ^c	1.67 ^f	0.61 ^e	0.52 ^d
	依兹密尔	34.97 ^a	31.37 ^a	1.47 ^f	0.15 ^{fg}	1.28 ^c
白肋烟	TN86	0.26 ^f	0.14 ^e	3.95 ^d	0.77 ^{de}	1.58 ^{bc}
	TN90	0.13 ^f	0.16 ^e	4.07 ^{ed}	1.19 ^d	1.51 ^{bc}
晾晒烟	蒙自土烟	0.40 ^e	0.18 ^e	3.55 ^e	4.15 ^{bc}	1.78 ^b
	会泽旱烟	0.40 ^e	0.17 ^e	4.08 ^{ed}	6.16 ^a	1.59 ^{bc}
	小柳叶	0.21 ^f	0.12 ^e	4.34 ^{bc}	4.49 ^b	1.22 ^c
	大柳叶	0.37 ^e	0.18 ^e	4.08 ^{ed}	5.52 ^{ab}	2.12 ^{ab}
	昭通土烟	0.41 ^e	0.23 ^e	4.19 ^c	6.14 ^a	1.91 ^b
雪茄烟	普洱九甲	0.46 ^e	0.14 ^e	5.16 ^a	6.64 ^a	2.95 ^a
	云雪 1 号	0.13 ^f	0.15 ^e	4.07 ^{ed}	2.81 ^c	0.57 ^d
	云雪 2 号	0.37 ^e	0.20 ^e	4.70 ^b	3.13 ^c	1.32 ^c

注:同列数字后不同字母代表在 $P<0.05$ 水平的差异显著性,下同。 $n=3$ 。

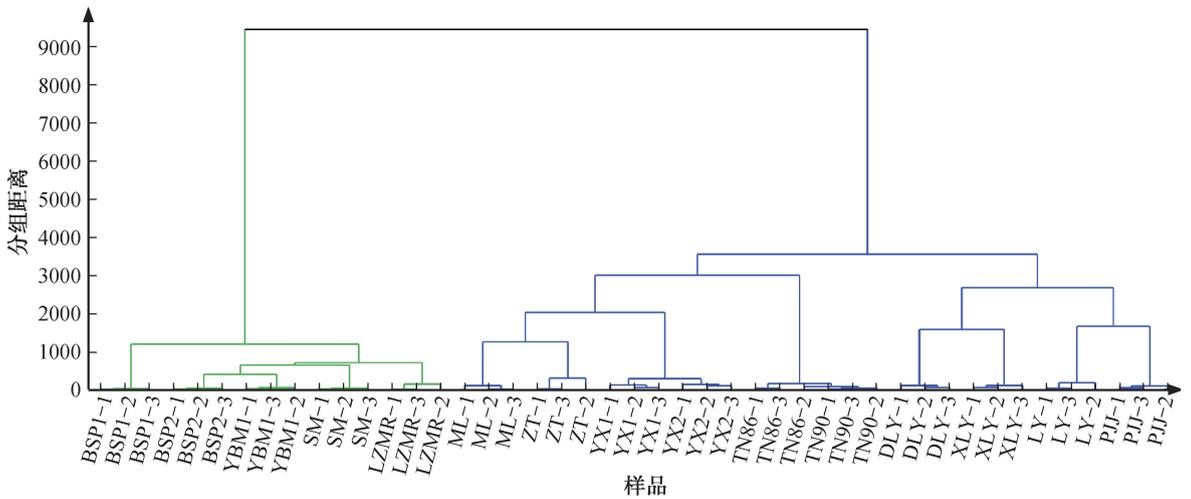


图1 不同烟叶样品的挥发性代谢物 HCA 图

Fig. 1 HCA diagram of volatile metabolites in different tobacco leaf samples

不同烟叶样品挥发性代谢物 PCA 图如图 2 所示。由图 2 可知,烟叶样品主要可以聚类为 3 组,其中香料烟 BS14×Prilep-1、BS14×Prilep-2、依兹密尔、云香巴斯玛一号、沙姆逊的挥发性代谢谱特征相似,白肋烟 TN86、TN90 与雪茄烟云雪 1 号、云雪 2 号及晾晒烟蒙自土烟的挥发性代谢谱特征差异较小,晾晒烟大柳叶、小柳叶、普洱九甲、会泽早烟、昭通土烟样品之间的挥发性代谢谱差异较小,而香料烟与晾晒烟、雪茄烟、白肋烟烟叶样品的挥发性代谢谱轮廓明显分离,说明香料烟与其他 3 类烟叶样品的代谢轮廓差异较大,这与 HCA 结果基本一致。

2.3 烟叶差异挥发性代谢物筛选结果

为进一步了解不同烟叶样品中挥发性代谢物的差异,根据 HCA 和 PCA 结果,选择挥发性代谢谱轮廓差异较明显的 3 组进行 OPLS-DA 分析,结果见

图 3。由图 3 可知,OPLS-DA 模型的 R^2X 为 0.991, R^2Y 为 0.985, Q^2 为 0.961,表明该模型可靠。

分别设立组 1 和组 2、组 1 和组 3、组 2 和组 3 的对比组,筛选组间差异较大的挥发性代谢物,获得了 130 种差异挥发性代谢物,包括 3 种酸类、13 种醇类、12 种醛类、9 种芳香烃、24 种酯类、26 种杂环类、20 种酮类、2 种酚类和 21 种萜类物质(见图 4)。在这些挥发性代谢物中,占比最高的是酯类、杂环类、酮类和萜类物质。杂环类、酯类和酮类物质是雪茄烟烟叶中的主要香气物质,占香气总量的 84% 以上^[20]。萜类物质中类胡萝卜素是多种挥发性香气物质(如 β -大马烯酮、巨豆三烯酮、香叶基丙酮、紫罗兰酮)的前体物质,是预测烟叶香气品质的重要评价指标^[21-23]。上述结果说明不同调制方法、不同烟草品种对烟叶化学成分的影响较大,这与 J. Chen

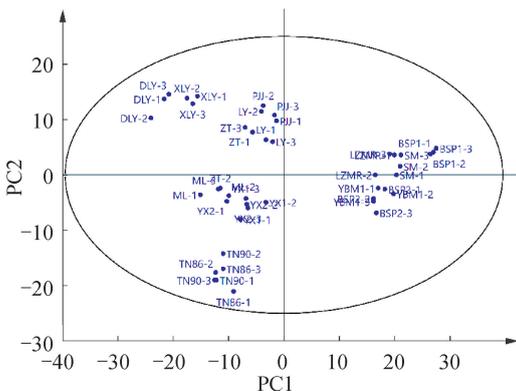


图2 不同烟叶样品挥发性代谢物 PCA 图

Fig. 2 PCA diagram of volatile metabolites in different tobacco leaf samples

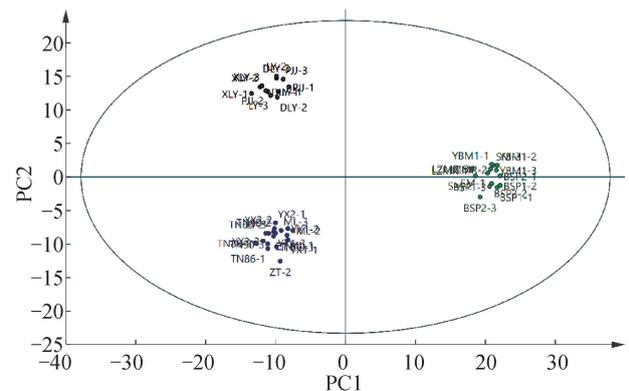


图3 不同烟叶样品挥发性代谢物 OPLS-DA 图

Fig. 3 OPLS-DA diagram of volatile metabolites in different tobacco leaf samples

等^[24]的研究结果一致。

2.4 加热卷烟感官品质评价结果

不同烟叶样品制得的加热卷烟感官品质评价结果见表2。由表2可知,香料烟的整体表现得分显著高于其他烟叶类型,其烟气细腻柔和、刺激性、干燥感、干净度、甜润度等指标的得分显著高于其他烟叶类型,而劲头得分显著低于晾晒烟、雪茄烟和白肋烟烟叶样品。上述结果表明,采用相似调制方法加工的烟草品种在加热体系下的感官品质指标得分接近,其中香料烟烟叶样品的感官品质指标得分普遍高于晾晒烟,上述研究结果与 J. Chen 等^[25]报道

的结果一致。在单料烟评价体系中,虽然非烤烟型烟草品种的感官品质指标得分相对较低,但它们可用作辅料来协调和丰富烟香,从而提高加热卷烟制品的综合感官表现^[6]。

2.5 烟叶差异挥发性代谢物与感官品质相关性分析

为筛选与感官品质相关的关键差异挥发性代谢物,对不同烟叶样品差异挥发性代谢物与感官指标得分进行相关性分析,所得相关系数如图5—6所示,图中红色数字和红色粗体数字分别表示在 $P < 0.05$ 和 $P < 0.01$ 水平具有显著性, $n = 3$ 。由图5—6可知,除了十三烷醇、2,6,6-四甲基-1-环己烯-1-丙醇、3-甲氧基肉桂醛、甲基壬基甲酮、2,2,6-三甲基-环己酮、4'-羟基-苯乙酮、4-乙酰氧基-3-甲氧基苯乙烯外,其他差异性酸类、醇类、醛类、芳香烃和酮类物质与感官指标得分均呈显著相关性。其中大部分挥发性代谢物与烟气的细腻柔和、刺激性、干燥感、干净度得分和总分均呈显著或极显著正相关,而与杂气和劲头得分均呈显著或极显著负相关。与香气量或甜润度得分显著相关的挥发性代谢物较少,其中香气量得分与2-乙酰氧基苯乙酮呈显著正相关,与4-甲基-苯甲酸呈显著负相关,甜润度得分与1,2,4-三甲氧基苯显著正相关。与上述结果类似,大部分差异性酯类、杂环类、酚类和萜类物质与烟气

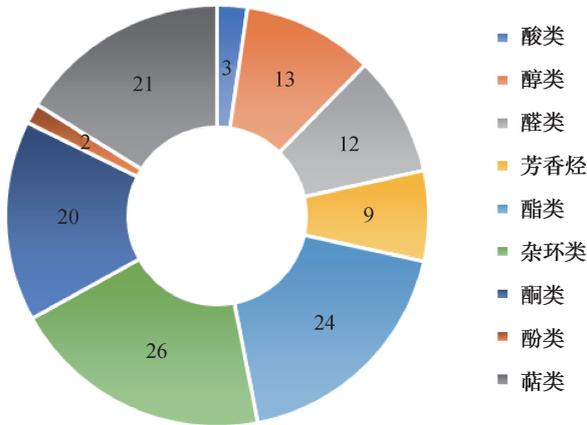


图4 OPLS-DA分析鉴定获得的烟叶差异性挥发性代谢物

Fig. 4 Differential volatile metabolites identified in OPLS-DA analysis

表2 不同烟叶样品制得的加热卷烟感官品质评价结果

Table 2 Sensory quality of heated tobacco made from different tobacco leaf samples

类型	样品	香气质	香气量	杂气	劲头	烟气浓度	细腻柔和	刺激性	干燥感	干净度	甜润度	总分
香料烟	BS14×Prilep-1	7.6 ^{bc}	8.0 ^b	6.4 ^d	6.1 ^c	8.0 ^b	8.3 ^a	8.1 ^a	8.1 ^{ab}	8.3 ^a	7.7 ^{bc}	79.4 ^a
	BS14×Prilep-2	8.2 ^{ab}	7.9 ^{bc}	7.7 ^b	6.5 ^{dc}	8.3 ^{ab}	8.5 ^a	8.2 ^a	8.2 ^a	8.3 ^a	8.5 ^a	80.4 ^a
	沙姆逊	8.4 ^a	8.3 ^a	7.8 ^b	6.2 ^c	7.9 ^b	8.5 ^a	8.1 ^a	8.2 ^a	8.3 ^a	8.3 ^a	79.6 ^a
	云香巴斯玛1号	8.6 ^a	8.4 ^a	8.1 ^a	6.2 ^c	8.0 ^b	8.6 ^a	8.2 ^a	8.2 ^a	8.2 ^a	8.2 ^a	82.2 ^a
	依兹密尔	7.6 ^{bc}	7.5 ^c	6.5 ^d	6.1 ^c	8.1 ^{ab}	8.3 ^a	8.1 ^a	8.0 ^{ab}	7.8 ^b	7.6 ^c	79.8 ^a
白肋烟	TN86	8.1 ^b	8.0 ^b	7.6 ^{bc}	8.2 ^b	8.1 ^{ab}	7.5 ^b	6.1 ^c	7.1 ^c	7.4 ^c	7.6 ^c	75.8 ^c
	TN90	8.1 ^b	8.3 ^a	8.0 ^a	8.3 ^b	8.1 ^{ab}	7.9 ^{ab}	6.5 ^c	7.6 ^b	7.9 ^{ab}	7.3 ^c	77.9 ^b
晾晒烟	蒙自土烟	7.9 ^b	8.1 ^{ab}	7.8 ^b	8.3 ^b	8.0 ^b	7.3 ^b	5.4 ^d	7.0 ^c	7.4 ^c	5.9 ^d	72.9 ^d
	会泽旱烟	7.8 ^b	8.0 ^b	8.0 ^a	9.0 ^a	8.1 ^{ab}	7.0 ^c	5.5 ^d	7.0 ^c	7.4 ^c	7.5 ^c	75.5 ^c
	小柳叶	8.5 ^a	8.0 ^b	8.2 ^a	7.2 ^{cd}	8.2 ^{ab}	8.0 ^{ab}	7.4 ^b	7.6 ^b	7.8 ^b	8.0 ^{ab}	78.6 ^b
	大柳叶	8.2 ^{ab}	8.0 ^b	8.1 ^a	7.6 ^c	8.5 ^a	8.3 ^a	7.2 ^b	7.4 ^{bc}	7.9 ^{ab}	7.7 ^{bc}	78.0 ^b
	昭通土烟	7.9 ^b	8.0 ^b	8.1 ^a	8.5 ^b	8.1 ^{ab}	7.1 ^{bc}	5.4 ^d	7.3 ^c	7.8 ^b	7.9 ^b	75.9 ^c
雪茄烟	普洱九甲	7.6 ^b	7.8 ^{bc}	7.9 ^{ab}	8.7 ^{ab}	8.1 ^{ab}	7.1 ^{bc}	5.3 ^d	7.1 ^c	7.5 ^c	7.4 ^c	75.5 ^c
	云雪1号	7.4 ^c	8.0 ^b	8.0 ^a	8.7 ^{ab}	8.1 ^{ab}	7.2 ^b	5.2 ^d	7.3 ^c	7.5 ^c	5.8 ^d	72.8 ^d
	云雪2号	7.8 ^b	8.0 ^b	7.4 ^c	8.5 ^b	8.0 ^b	7.4 ^b	5.3 ^d	7.1 ^c	7.6 ^{bc}	5.7 ^d	72.9 ^d

注: $n = 9$ 。

0.048	-0.094	-0.654	0.448	-0.251	0.508	0.676	0.673	0.544	0.092	0.287	甲酸异冰片酯	1.0
0.068	0.151	0.436	0.389	0.126	-0.300	-0.354	0.414	-0.394	-0.148	-0.172	3-(2-羟苯基)-2-丙酸	0.8
0.097	0.051	0.226	0.104	0.343	-0.129	0.027	-0.164	-0.057	-0.138	0.060	肉桂酸	0.6
-0.148	-0.046	0.329	0.505	0.041	-0.545	-0.441	0.462	-0.318	-0.104	-0.204	β -檀香醇	0.4
0.075	0.066	0.240	0.091	0.126	-0.216	-0.079	-0.144	-0.035	-0.054	0.035	十三烷醇	0.2
-0.026	-0.081	-0.022	0.031	0.227	-0.096	0.111	-0.073	0.021	-0.141	0.081	2,6,6-四甲基-1-环己烯-1-丙醇	0.0
-0.270	-0.017	0.287	0.652	0.159	-0.486	-0.664	0.583	0.600	-0.217	-0.448	2-环己烯-1-基-苯甲醇	-0.2
0.042	-0.129	-0.598	-0.687	-0.196	0.531	0.673	0.660	0.544	0.118	0.289	4-甲基- α -(1-甲基-2-丙烯基)-苯甲醇	-0.4
0.047	0.010	-0.554	-0.623	-0.338	0.413	0.549	0.586	0.551	0.045	0.235	2,6-二甲基-1-壬烯基-5-醇	-0.6
0.116	0.147	0.437	0.322	0.182	-0.225	-0.241	-0.338	-0.254	-0.157	-0.076	1,3-二氧戊环-2,2-二醇	-0.8
0.049	0.013	-0.625	-0.629	-0.312	0.436	0.570	0.579	0.535	0.019	0.185	4-异丙基苯甲醇	-1.0
0.050	-0.028	-0.606	-0.700	-0.204	0.455	0.625	0.631	0.529	0.141	0.304	1,2-辛二醇	
0.182	0.183	0.391	0.139	0.223	-0.168	-0.102	-0.245	-0.093	-0.075	-0.015	4-羟基-苯乙醇	
0.053	-0.151	-0.586	-0.700	-0.169	0.550	0.688	0.673	0.545	0.120	0.300	1,2-癸二醇	
0.169	0.088	0.304	0.048	0.232	-0.139	0.016	-0.176	-0.019	-0.077	0.084	2,6-二甲基-环己醇	
0.306	0.155	-0.356	0.794	-0.205	0.594	0.716	0.705	0.587	0.268	0.543	苯甲醇	
-0.272	-0.020	0.286	0.652	0.161	-0.486	-0.665	0.584	0.602	-0.217	-0.449	2-甲基-4-(2,6,6-三甲基-1-环己烯-1-基)-2-丁烯醇	
-0.133	-0.125	0.086	0.174	0.163	-0.325	-0.193	-0.232	-0.210	-0.149	-0.156	4-(4-甲基-3-戊烯基)-3-环己烯-1-甲酯	
-0.022	-0.096	0.092	0.125	0.322	-0.142	0.043	-0.147	-0.057	-0.121	0.068	2,6-十二碳-1-醇	
0.171	0.097	-0.582	-0.704	-0.314	0.558	0.703	0.705	0.608	0.184	0.355	2-甲氧基-乙缩醛	
0.022	-0.077	0.029	0.067	0.272	-0.115	0.085	-0.129	-0.016	-0.134	0.063	3-甲氧基丙醛	
0.057	-0.003	-0.640	-0.688	-0.281	0.470	0.634	0.625	0.555	0.063	0.239	7-甲基-3-亚甲基-6-辛烯醛	
0.089	-0.005	-0.609	-0.735	-0.284	0.515	0.668	0.682	0.586	0.110	0.307	4-(1-甲基乙基)-3-环己烯-1-甲酯	
0.113	0.122	0.503	0.317	0.210	-0.344	-0.256	0.415	-0.207	-0.123	-0.084	2,6,6-三甲基环己-1,4-二烯甲酯	
-0.046	-0.074	-0.714	-0.615	-0.254	0.387	0.548	0.556	0.461	0.013	0.119	5-乙基环戊-1-烯甲酯	
-0.045	-0.193	-0.468	-0.283	-0.170	0.113	0.355	0.308	0.223	-0.047	0.098	2,5-呋喃甲酯	
0.293	0.154	-0.417	-0.700	0.069	0.639	0.744	0.673	0.581	0.164	0.439	2,4-己二醛	
-0.066	-0.140	-0.700	-0.629	-0.203	0.410	0.566	0.576	0.430	0.081	0.115	3-呋喃甲酯	
-0.351	-0.181	0.233	0.719	0.049	-0.645	-0.712	0.683	0.686	-0.262	-0.487	6,10,14-三甲基-2-十五烷酮	
-0.270	-0.009	0.258	0.615	0.148	-0.452	-0.637	0.546	0.579	-0.206	-0.437	4,4-二甲基-1-苯基-1,3-戊二酮	
-0.020	-0.227	-0.495	-0.562	0.007	0.353	0.575	0.451	0.323	-0.054	0.199	4-十三烷醇	
-0.023	-0.096	0.094	0.130	0.324	-0.145	0.039	-0.150	-0.062	-0.123	0.066	6,10-二甲基-5,9-十一碳烯-2-醇	
-0.170	0.006	0.163	0.271	0.191	-0.282	-0.179	-0.184	-0.095	0.041	0.031	1-(3-乙氧基苯基)丙酮	
0.231	0.227	0.474	0.177	0.281	-0.178	-0.118	-0.260	-0.123	-0.120	0.010	1-苯基-3-己酮	
-0.173	0.041	0.041	0.146	0.179	-0.266	-0.051	-0.177	-0.033	-0.117	-0.037	甲基壬基甲酯	
0.043	-0.130	-0.597	-0.688	-0.193	0.533	0.674	0.661	0.546	0.119	0.291	1-(4-甲氧基苯基)-2-丙酮醇	
0.048	0.163	0.535	0.494	0.258	-0.447	-0.424	0.555	-0.355	-0.197	-0.215	3-甲基-2H-1-苯并吡喃-2-酮	
0.033	-0.020	-0.613	-0.680	-0.251	0.444	0.635	0.623	0.562	0.124	0.282	2,5-辛二酮	
0.135	0.088	-0.571	-0.748	-0.293	0.539	0.677	0.701	0.590	0.149	0.353	四氢-6-丙基-2H-吡喃-2-酮	
-0.075	-0.152	-0.069	-0.067	-0.003	-0.090	0.073	0.015	0.067	0.045	0.083	2,2,6-三甲基-环己酮	
0.158	0.174	0.374	0.159	0.234	-0.179	-0.111	-0.263	-0.101	-0.085	-0.037	1-(3-羟苯基)-乙酮	
0.007	-0.078	-0.008	-0.001	0.267	-0.046	0.158	-0.036	0.052	-0.127	0.109	4'-羟基-苯乙醇	
-0.038	-0.039	-0.655	-0.615	-0.290	0.402	0.546	0.586	0.521	0.017	0.152	2-甲基-4,6-辛二酮-3-酮	
0.018	-0.152	-0.669	-0.692	-0.143	0.430	0.622	0.569	0.451	0.043	0.211	对甲基苯乙醇	
0.303	0.218	-0.008	-0.411	0.063	0.210	0.435	0.265	0.289	0.028	0.254	3,5-辛二酮醇	
0.010	0.129	0.429	0.466	0.319	-0.356	-0.374	0.477	-0.350	-0.160	-0.189	苯乙醇	
-0.114	0.005	-0.065	0.063	-0.355	-0.010	-0.119	-0.028	-0.025	0.012	-0.118	ϵ -己内酯	
-0.021	0.057	-0.199	-0.186	-0.360	0.133	0.102	0.196	0.155	0.127	0.027	1,2-环己二酮	
-0.259	-0.006	0.287	0.642	0.161	0.475	0.654	0.575	0.594	-0.215	-0.441	愈创木醇	
-0.343	-0.170	0.245	0.683	0.052	0.639	0.700	0.652	0.665	-0.235	-0.442	4-壬基苯酚	
0.052	-0.050	0.091	0.053	0.284	-0.090	0.108	-0.100	-0.006	-0.117	0.109	4-乙酰氧基-3-甲氧基苯乙醇	
0.476	0.313	-0.097	0.789	-0.211	0.669	0.705	0.688	0.607	0.283	0.618	2-乙酰氧基苯乙醇	
0.307	0.188	-0.359	-0.744	-0.205	0.589	0.725	0.708	0.645	0.298	0.521	1,2,4-三甲氧基苯	
0.037	-0.131	-0.643	-0.708	-0.216	0.454	0.641	0.614	0.499	0.090	0.281	3,4-二甲氧基苯	
0.120	0.110	0.495	0.313	0.193	-0.341	-0.260	0.426	-0.198	-0.124	-0.098	1-乙基-4-甲氧基-苯	
-0.198	-0.327	-0.335	-0.174	-0.008	-0.023	0.127	0.147	0.062	0.056	0.029	4-甲基-苯甲酸	
-0.016	0.147	0.391	0.396	0.325	-0.326	-0.246	0.416	-0.225	-0.105	-0.065	苯甲腈	
香气质	香气量	杂气	劲头	烟气浓度	细腻柔和	刺激性	干燥感	干净度	甜润度	总分		

图5 烟叶差异性酸类、醇类、醛类、芳香烃、酮类物质与加热卷烟感官指标得分的相关系数

Fig. 5 Correlation coefficient between differential acids, alcohols, aldehydes, aromatics, ketones and sensory attributes of heated tobacco

的细腻柔和、刺激性、干燥感、干净度得分和总分均呈显著或极显著正相关,与杂气和劲头得分呈显著或极显著负相关。除2-戊基吡啶和长叶烯外,其余挥发性代谢物与香气量得分的相关性不显著。差异性酯类、杂环类、酚类和萜类物质与甜润度得分无明显相关性。

大部分差异挥发性代谢物与烟气的细腻柔和、刺激性、干燥感和干净度得分及总分均呈显著正相关。例如,紫罗兰酮是影响加热卷烟感官品质的主要挥发性代谢物之一,其在以晒红烟为原料的加热卷烟气溶胶中的含量显著高于其他类型的烟叶原料^[26]。L. Zhao等^[16]也在德宏种植的香料烟和生切

烟丝中发现,大部分挥发性烟叶代谢物与加热卷烟感官品质指标得分呈正相关。烟碱是烟叶热解气溶胶中的主要挥发碱^[26],本研究发现其与加热卷烟的杂气、劲头得分呈显著正相关,而与烟气的细腻柔和、刺激性、干燥感和干净度得分呈显著负相关,这与刘天择等^[17]的研究结果一致。愈创木酚是木质素热解产生的代表性酚类物质,在晒黄烟为原料的加热卷烟样品中释放量最高^[26],本研究发现,愈创木酚与劲头、杂气得分呈显著负相关,而其在以烤烟为原料的薄片型加热卷烟中与劲头得分则呈显著正相关^[17]。烟草类型(如非烤烟和烤烟)不同或再造烟叶类型(如颗粒型和薄片型)不同,都可能导致相

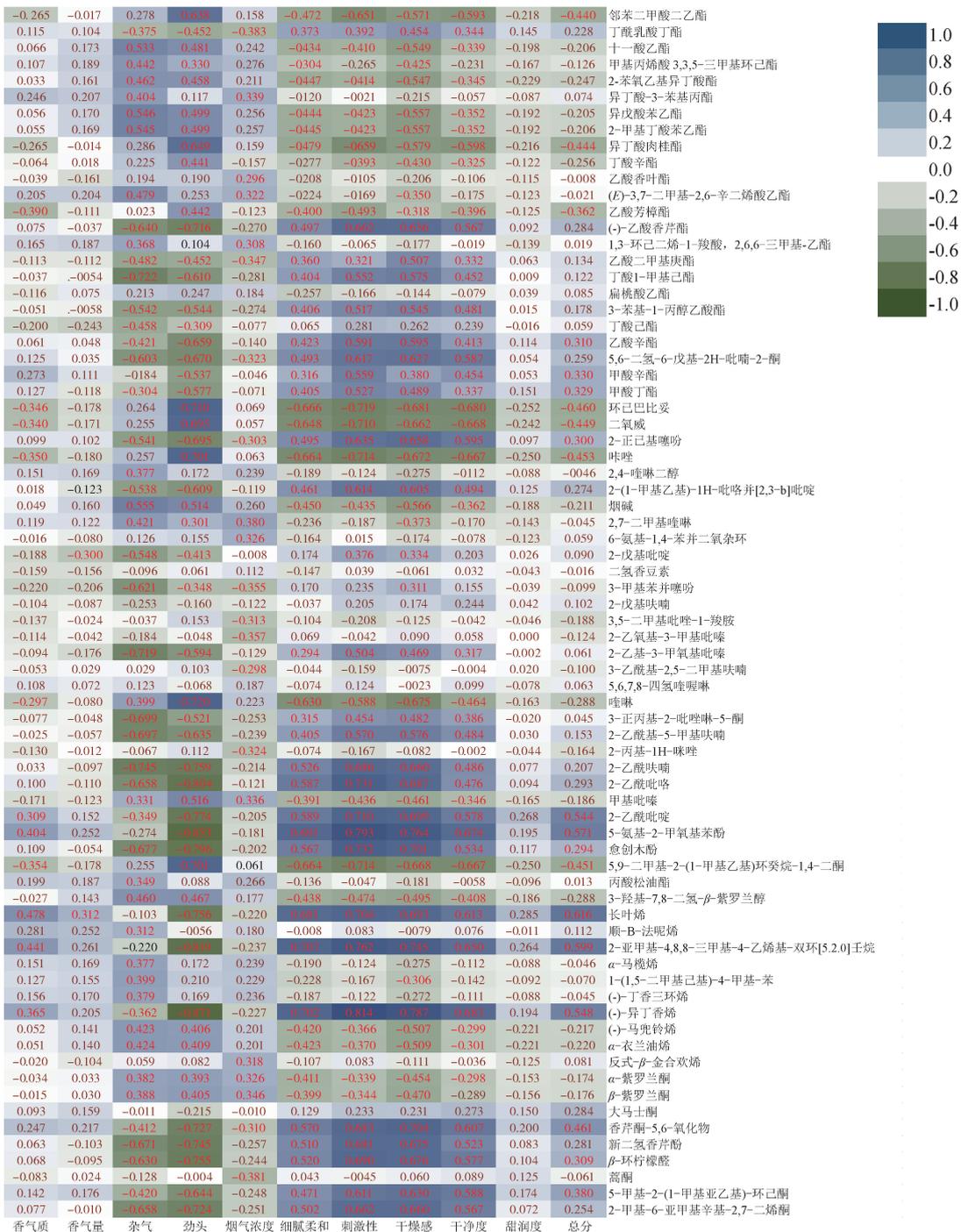


图6 烟叶差异性酯类、杂环类、酚类、萜类物质与加热卷烟感官指标得分的相关系数
 Fig. 6 Correlation coefficient between differential esters, heterocyclics, phenols, terpenes and sensory attributes of heated tobacco

关性研究结果的差异,尤其是颗粒型加热卷烟烟叶原料的热解产物与感官品质之间的关系,尚需进一步研究明确。

3 结论

本研究采用代谢组学检测技术结合 OPLS-DA

分析了 15 个非烤烟型烟草的烟叶常规化学成分、挥发性代谢谱特征,评价了其制得的加热卷烟的感官品质,发现香料烟烟叶的总糖、还原糖含量较高,烟碱含量较低,其与晾晒烟、雪茄烟和白肋烟烟叶的挥发性代谢谱和感官品质表现差异较大。利用 OPLS-DA 筛选获得了 130 种不同烟叶样品间的差

异挥发性代谢物,以酯类、杂环类、酮类和萜类物质占比最高。差异挥发性代谢物主要与烟气的细腻柔和、刺激性、干燥感和干净度得分呈显著正相关,而与杂气和劲头得分呈显著负相关。因此,这些挥发性代谢物可作为区分非烤烟型烟草品种的参考化学指标,也可根据加热卷烟配方需求,依据这些差异挥发性代谢物对非烤烟型烟叶原料进行选择。

参考文献:

- [1] SIMONAVICIUS E, MCNEILL A, SHAHAB L, et al. Heat-not-burn tobacco products: A systematic literature review[J]. Tobacco Control, 2019, 28(5): 582-594.
- [2] CZÉGÉNY Z, BOZI J, SEBESTYÉN Z, et al. Thermal behaviour of selected flavour ingredients and additives under simulated cigarette combustion and tobacco heating conditions[J]. Journal of Analytical and Applied Pyrolysis, 2016, 121: 190-204.
- [3] FARSALINOS K E, YANNOVITS N, SARRI T, et al. Nicotine delivery to the aerosol of a heat-not-burn tobacco product: Comparison with a tobacco cigarette and E-cigarettes[J]. Nicotine & Tobacco Research (Official Journal of the Society for Research on Nicotine and Tobacco), 2018, 20(8): 1004-1009.
- [4] CANCELADA L, SLEIMAN M, TANG X C, et al. Heated tobacco products: Volatile emissions and their predicted impact on indoor air quality[J]. Environmental Science & Technology, 2019, 53(13): 7866-7876.
- [5] GASPARYAN H, MARINER D, WRIGHT C, et al. Accurate measurement of main aerosol constituents from heated tobacco products (HTPs): Implications for a fundamentally different aerosol[J]. Regulatory Toxicology and Pharmacology, 2018, 99: 131-141.
- [6] 赵铭钦, 韩富根, 董志坚, 等. 香料烟浸膏提取工艺条件研究[J]. 烟草科技, 1999(3): 11-13.
- [7] WEEKS W W, SISSON V A, CHAPLIN J F. Differences in aroma, chemistry, solubilities, and smoking quality of cured flue-cured tobaccos with aglandular and glandular trichomes[J]. Journal of Agricultural and Food Chemistry, 1992, 40(10): 1911-1916.
- [8] CARPENTER C M, WAYNE G F, CONNOLLY G N. The role of sensory perception in the development and targeting of tobacco products[J]. Addiction, 2007, 102(1): 136-147.
- [9] ROMANINI E, COLANGELO D, LUCINI L, et al. Identifying chemical parameters and discriminant phenolic compounds from metabolomics to gain insight into the oxidation status of bottled white wines[J]. Food Chemistry, 2019, 288: 78-85.
- [10] SCHMIDTKE L M, BLACKMAN J W, CLARK A C, et al. Wine metabolomics: Objective measures of sensory properties of semillon from GC-MS profiles[J]. Journal of Agricultural and Food Chemistry, 2013, 61(49): 11957-11967.
- [11] SHERMAN E, COE M, GROSE C, et al. Metabolomics approach to assess the relative contributions of the volatile and non-volatile composition to expert quality ratings of pinot noir wine quality[J]. Journal of Agricultural and Food Chemistry, 2020, 68(47): 13380-13396.
- [12] 吴兴富, 焦芳婵, 张谊寒, 等. 清香型烟叶产区云烟 116 农艺性状及品质特点分析[J]. 江西农业大学学报, 2018, 40(5): 925-931.
- [13] YUAN H, CAO G, HOU X, et al. Development of a widely targeted volatilomics method for profiling volatiles in plants[J]. Molecular Plant, 2022, 15(1): 189-202.
- [14] 曹芸, 张劲, 王鹏, 等. 烟草颗粒热解与释烟特性影响因素研究[J]. 中国烟草学报, 2021, 27(1): 18-26.
- [15] 赵璐, 王丙武, 宋中邦, 等. 基于感官评价的加热不燃烧卷烟原料品种(系)筛选[J]. 烟草科技, 2020, 53(1): 21-28.
- [16] ZHAO L, SHANG S Z, TIAN Y F, et al. Integrative analysis of sensory evaluation and non-targeted metabolomics to unravel tobacco leaf metabolites associated with sensory quality of heated tobacco[J]. Frontiers in Plant Science, 2023, 14: 1123100.
- [17] 刘天择, 杨菁, 汪旭, 等. 不同部位烤烟化学成分及热解产物与加热卷烟感官质量的关系[J]. 中国烟草科学, 2023, 44(1): 77-84.
- [18] 赵铭钦, 董顺德, 于建军, 等. 香料烟浸膏对烤烟烟叶品质效应的影响[J]. 河南农业大学学报, 1999, 33(3): 286-288, 292.
- [19] 姜超强, 李德成, 王火焰, 等. 亳州烟区烤烟不同品种和产区烟叶钾氯含量的差异分析[J]. 中国农业科技导报, 2016, 18(1): 120-128.
- [20] 贺佩, 王以慧, 耿召良, 等. 不同产区雪茄茄芯烟叶关键挥发性香气成分分析[J]. 中国烟草科学, 2023, 44(1): 92-99.
- [21] SLAGHENAUF D, PERELLO M C, MARCHAND S, et al. Quantification of megastigmatrienone, a potential contributor to tobacco aroma in spirits[J]. Food Chemistry, 2016, 203: 41-48.
- [22] POPOVA V, IVANOVA T, PROKOPOV T, et al. Carotenoid-related volatile compounds of tobacco (*Nicotiana tabacum* L.) essential oils[J]. Molecules, 2019, 24(19): 3446.
- [23] YAN N, DU Y M, LIU X M, et al. Chemical structures, biosynthesis, bioactivities, biocatalysis and semisynthesis of tobacco cembranoids: An overview[J]. Industrial Crops and Products, 2016, 83: 66-80.

- [24] CHEN J, LI Y, HE X, et al. Influences of different curing methods on chemical compositions in different types of tobaccos [J]. *Industrial Crops and Products*, 2021, 167: 113534.
- [25] CHEN J, HE X, ZHANG X Y, et al. The applicability of different tobacco types to heated tobacco products [J]. *Industrial Crops and Products*, 2021, 168: 113579.
- [26] 司晓喜, 唐石云, 朱瑞芝, 等. 不同原料稠浆法再造烟叶加热卷烟的气溶胶释放特性 [J]. *中国烟草学报*, 2021, 27(6): 1-9.

Study on the relationship between chemical composition and sensory quality of heated cigarettes based on non-flue-cured tobacco

ZHAO Lu¹, WANG Bingwu¹, GAO Yulong¹, ZHANG Xiaoyu², ZHOU Shun²

1. *Yunnan Academy of Tobacco Agricultural Sciences, Kunming 650021, China;*

2. *Technology center, China Tobacco Anhui Industrial Co., Ltd., Hefei 230031, China*

Abstract: In order to study the relationship between the chemical composition of tobacco leaves of non-flue-cured tobacco varieties and the sensory quality of heated cigarettes made from them, the conventional chemical composition of four types of non-flue-cured tobacco leaf samples such as oriental tobacco, air/sun-cured tobacco, burley tobacco and cigar tobacco samples were detected. Volatile metabolite profiles were analyzed by metabolomic technique, the differential volatile metabolites in different tobacco leaves were screened by orthogonal partial least square discriminant analysis, and the correlation between them and sensory quality of heated tobacco leaves was analyzed. The results showed that the contents of total sugar and reducing sugar were higher in oriental tobacco leaves, and the contents of alkaloid and nitrogen were higher in burley tobacco, air/sun-cured tobacco and cigar tobacco leaves. The characteristics of volatile metabolites of burley tobacco, air/sun-cured tobacco and cigar tobacco were similar, but different from those of oriental tobacco. A total of 130 differential volatile metabolites were obtained from different tobacco types, mainly esters, ketones, heterocycles and terpenoids. The differential volatile metabolites were positively correlated with the attributes of the smoothness of smoke, irritancy, dry sensation and cleanliness, and negatively correlated with the attributes of unpleasant odor and strength. The results provide a reference for the formulation of heated cigarette products from non-flue-cured tobacco leaves.

Key words: non-flue-cured tobacco; chemical components; volatile metabolites; sensory quality; heated cigarettes

[责任编辑:吴晓亭]