



郑凯,吴攀,肖辉,等. 基于 GC×GC-TOFMS 的 3 款中支卷烟香气风格差异及成因分析[J]. 轻工学报, 2026,41(1):90-100.
ZHENG K,WU P,XIAO H,et al. Analysis of aroma style differences and their formation mechanisms in three medium-sized cigarettes based on GC×GC-TOFMS[J]. Journal of Light Industry,2026,41(1):90-100.
DOI:10.12187/2026.01.009

基于 GC×GC-TOFMS 的 3 款中支卷烟香气风格差异及成因分析

郑凯¹,吴攀²,肖辉¹,陈治岍³,曲利利²,李华雨⁴,梁永伟²,许春平²

1. 河南中烟工业有限责任公司 许昌卷烟厂,河南 许昌 461000;
2. 郑州轻工业大学 烟草科学与工程学院,河南 郑州 450001;
3. 重庆中烟工业有限责任公司 技术中心,重庆 400000;
4. 河南卷烟工业烟草薄片有限公司 技术中心,河南 许昌 461000

摘要:【目的】以 3 款中支卷烟为研究对象,研究其香气风格差异及成因。【方法】采用热脱附(TDU)结合全二维气相色谱-飞行时间质谱(GC×GC-TOFMS)对 3 款中支卷烟烟丝的挥发性香气成分进行检测,并结合感官评价、正交偏最小二乘判别分析(OPLS-DA)、偏最小二乘回归(PLSR)等方法对比分析这 3 款中支卷烟香气风格差异形成的原因。【结果】3 款中支卷烟的香气风格不同,NX 样品甜香、药草香突出,LT 样品果香突出,SD 样品清香突出;共检测出 102 种挥发性香气成分,其中对卷烟香气风格差异的形成存在潜在影响的有 29 种标志性关键香气成分;这 29 种香气成分分别与卷烟的不同香气风格特征相关,其含量差异可能是造成 3 款卷烟香气风格差异的原因。【结论】该研究丰富了中支卷烟的风味分析方法及研究成果,可为中支卷烟香气风格的调控提供参考。

关键词:中支卷烟;全二维气相-飞行时间质谱;挥发性香气成分;正交偏最小二乘判别

中图分类号:TS411 **文献标识码:**A **文章编号:**2096-1553(2026)01-0090-11

0 引言

中支卷烟是近年来新兴的卷烟规格,因其在降焦减害、降本增效方面具有显著优势而成为中式卷烟的重要分支品类^[1-3]。目前,中支卷烟的研究主要集中于原料加工^[2,4]、材料设计与应用^[5-6]、烟气成分分析^[7-8]等方面。卷烟烟丝的香气特征是评价

烟草制品品质的重要指标,产品香味由烟丝香气和吃味共同决定^[9]。研究人员针对烟丝香气成分开展了大量研究,郭华诚等^[10]采用简单相关分析、逐步回归分析和主成分分析对烟丝各项指标进行分析,发现不同卷烟烟丝中致香成分与感官品质存在相关性。周茂忠等^[11]采用 GC-MS 结合化学计量学方法对不同窖制工艺下烟丝致香成分变化进行了

收稿日期:2024-12-15;修回日期:2025-08-13;出版日期:2026-02-15

基金项目:中国烟草总公司重大科技项目(110202201005(JY-05));河南省重大科技专项(231100310200);河南中烟工业有限责任公司许昌卷烟厂对外合作项目(XCW202202)

作者简介:郑凯(1981—),男,河南省许昌市人,河南中烟工业有限责任公司高级工程师,硕士,主要研究方向为烟草质量检测评价。E-mail:zk81@163.com

通信作者:许春平(1977—),男,河南省焦作市人,郑州轻工业大学教授,博士,主要研究方向为香精香料和烟草工程。E-mail:xuchunping05@163.com

分析,发现 20 ℃ 桶储 72 h 时,烟丝香气成分种类较丰富,感官质量最佳。

正交偏最小二乘判别分析 (OPLS-DA) 是一种有监督的多变量分析方法,通过最小二乘拟合和正交投影提升模型的准确性与解释性,可有效处理数据共线性问题,并识别导致类别差异的变量^[12]。近年来,OPLS-DA 在食品行业中多用于产品的香气成分差异分析。李少辉等^[13]利用 OPLS-DA 筛选出 18 种可区分不同生态区谷子风味特征的香气化合物。L. Jin 等^[14]采用主成分分析 (PCA) 结合 OPLS-DA,从 3 个川红刚果红茶代表性样品中鉴定出 30 种特征香气成分,并分析其相互作用。

热脱附 (Thermal Desorption Unit, TDU) 结合全二维气相色谱-飞行时间质谱 (GC×GC-TOFMS) 是一种高灵敏度、高分辨率的挥发性成分检测方法。TDU 操作简便,无需复杂前处理即可进样检测,样品经 TDU 处理后由冷阱系统 (Cooled Injection System, CIS) 捕集,再进入两根分离机理互补且串联的色谱柱实现二维分离,最后通过 TOFMS 进行快速分析检测^[15-16]。相较于普通一维 GC-MS, GC×GC-TOFMS 具有分辨率高、峰容量大、灵敏度好、分析速度快等优势^[17-19]。然而,目前采用该方法分析卷烟烟丝挥发性香气成分的研究仍较少。

鉴于此,本研究拟以 TDU-CIS 进行样品前处理,利用 GC×GC-TOFMS 对 3 款中支卷烟烟丝挥发性香气成分进行检测,并结合 OPLS-DA 对挥发性香气成分的差异性进行分析,进一步通过 PLSR、卷烟风格感官评价等方法探讨卷烟香气风格差异及其潜在成因,以期建立更准确、全面的中支卷烟烟丝挥发性香气成分分析方法,为中支卷烟风格差异解析及品质调控提供参考。

1 材料与方法

1.1 主要材料与仪器

主要材料:卷烟样品 NX、SD、LT,由河南中烟工业有限责任公司提供;二氯甲烷 (色谱级)、无水乙醇 (分析级),天津市富宇精细化工有限公司;乙酸苯乙酯 (纯度≥99%),上海麦克林生化科技股份有限公司。

主要仪器:0.000 1 g ATY124 型电子天平,日本岛津公司;Gerstel TDU 型热脱附模块和 CIS,德国 Gerstel 公司;6890-5973 型 GC-MS 仪,美国安捷伦科技有限公司;PEGASUS 4D 型 GC×GC-TOFMS 仪,美国 LECO 公司。

1.2 实验方法

1.2.1 感官评吸 参照文献^[20]调节试样水分,依据文献^[21],组织 12 名专业评吸人员对各卷烟样品进行卷烟风格特征感官评价,结果取平均值。

1.2.2 样品预处理 每种卷烟样本各取 3 包,剥离烟丝后混合均匀,在 40 ℃ 烘箱中干燥 12 h 后粉碎并混匀。使用前于热脱附管装入少量玻璃石英至底部卡槽处,并在 250 ℃ 条件下热脱附老化 30 min。准确称取 (0.20±0.01) mg 粉碎烟丝迅速转移至经老化处理的热脱附管内,随后将样品管自动送入热脱附仪的加热槽中进行吹扫加热,并在仪器工作条件下进行组分分析。

1.2.3 烟丝挥发性香气成分检测 TDU 条件:初始温度 50 ℃,保持 0.5 min,以 10 ℃/min 的速率升温至 60 ℃,保持 5 min。

CIS 条件:初始温度 -20 ℃,平衡 0.5 min,以 12 ℃/s 的速率升温至 250 ℃,保持 1 min,且溶剂保持放空模式。

GC 条件:色谱柱为 Rxi-5sil MS 一维柱,30 m×0.25 mm×0.25 μm; Rxi-17sil MS 二维柱,2 m×0.15 mm×0.15 μm。分流进样,分流比 50:1。载气为高纯 He,流速 1.0 mL/min;进样口温度 250 ℃。炉温平衡时间 1 min。采用程序升温方式,初始温度 50 ℃,初始时间 0.2 min,以 5 ℃/min 的速率升温至 280 ℃,保持 5 min,总运行时间 50 min。

TOFMS 条件:电子轰击源为 EI,电子能量 70 eV,溶剂延迟 4 min;电离电压 70 eV;离子源温度 250 ℃;传输线温度 250 ℃;MS 扫描范围 45~600 amu;MS 扫描方式为总离子流模式。

定性、定量分析:利用 NIST14 谱库,将检测到的挥发性香气成分的质/荷比 (m/z) 与标准谱图对比,筛选匹配度>800 的挥发性香气成分,进行定性分析。采用内标半定量法,以 22.422 μg/g 的乙酸苯乙酯为内标,对检测出的各挥发性香气成分进行定

量分析。

挥发性香气成分的香气活度值 (Odor Activity Value, OAV) 计算公式如下:

$$OAV = \frac{C_1}{C_2}$$

式中, C_1 表示某种香气成分在香料中的实测相对含量/ $(\mu\text{g} \cdot \text{g}^{-1})$, C_2 表示该成分的嗅觉阈值/ $(\mu\text{g} \cdot \text{g}^{-1})$ 。

1.3 数据分析

所有样品均设 3 组平行;使用 Excel 2023 进行数据预处理;采用 SIMCA14.1 对卷烟挥发性香气成分进行 OPLS-DA 及变量投影重要性 (Variable Importance in Projection, VIP) 分析;采用 The Unscrambler X 10.4 进行 PLSR 分析;采用 Origin 2024 绘制雷达图和堆叠柱状图;采用 TBtools- II 绘制聚类热图。

2 结果与分析

2.1 3 款中支卷烟香气风格感官评价分析

3 款中支卷烟香气风格感官评价得分雷达图如图 1 所示。由图 1 可知,3 款中支卷烟香气风格均以烤烟香、花香、果香和甜香为主,其中 NX 样品的甜香和药草香香韵较突出,SD 样品以清香为主,LT 样品的果香较突出。

2.2 3 款中支卷烟挥发性香气成分组成分析

为明确卷烟香气风格差异的物质基础,采用 TDU-CIS 前处理结合 GC×GC-TOFMS 对 3 款中支卷烟挥发性香气成分进行检测,结果见图 2 和表 1。图 2 中 nx、lt、sd 表示卷烟烟丝 GC-MS 色谱图, NX、LT、SD 表示 TDU-CIS-GC×GC-TOFMS 色谱图。由图 2 可知,相较于普通 GC-MS, GC×GC-TOFMS 得到的色谱图峰容量显著增加,可更全面地检测烟丝挥发性香气成分,为后续卷烟香气成分差异的准确分析提供数据保障。

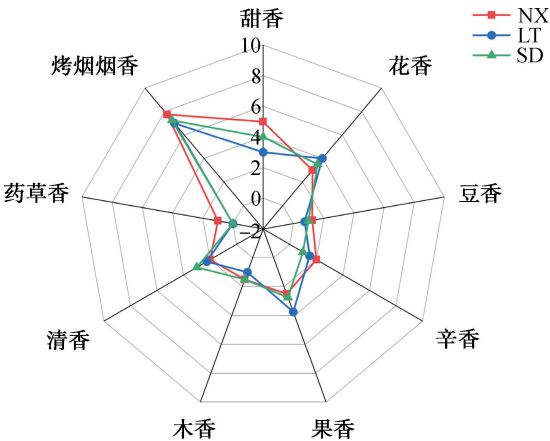


图 1 3 款中支卷烟香气风格感官评价得分雷达图
Fig. 1 Sensory evaluation scores of aroma styles of three medium-sized cigarettes

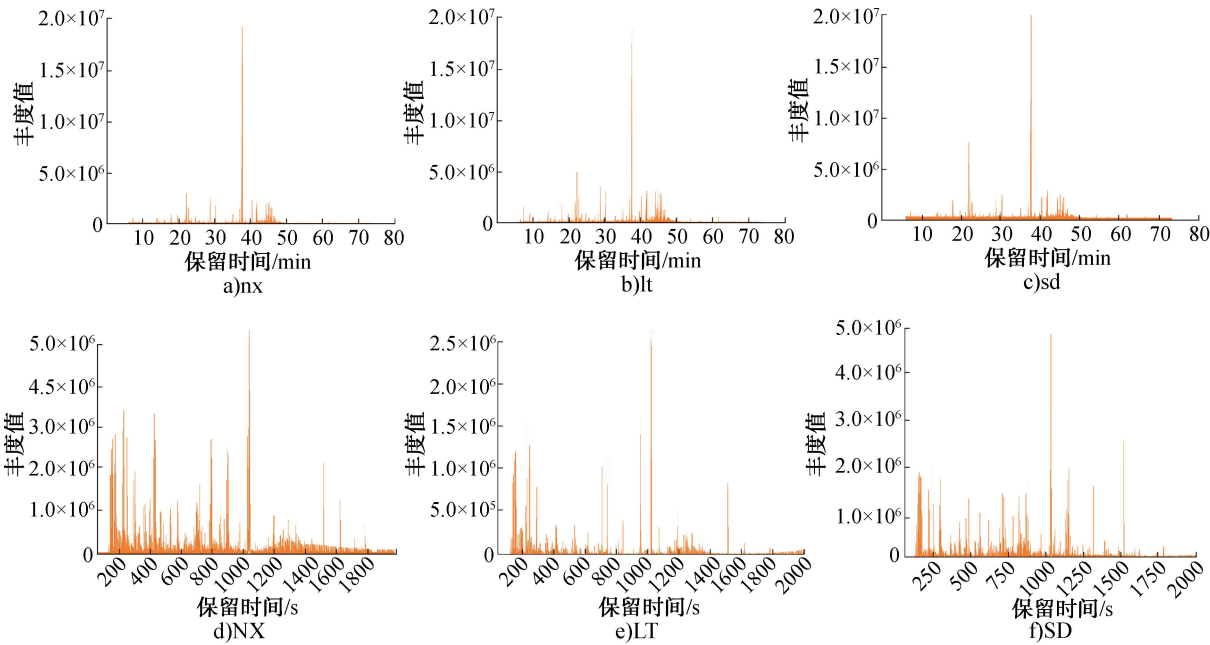


图 2 3 款中支卷烟烟丝的 GC-MS 及 TDU-CIS 结合 GC×GC-TOFMS 色谱图
Fig. 2 GC-MS and TDU-CIS coupled with GC × GC-TOFMS chromatograms of cut tobacco of three medium-sized cigarettes

表 1 3 款中支卷烟挥发性香气成分
Table 1 Volatile aroma compounds of three medium-sized cigarettes

类别	化合物名称	保留时间/s	含量/($\mu\text{g} \cdot \text{g}^{-1}$)		
			NX	LT	SD
醇类	1-戊烯-3-醇	285,1.47	0.56±0.03 ^a	—	—
	2-壬醇	430,1.39	2.13±0.03 ^a	0.51±0.01 ^c	0.69±0.01 ^b
	正戊醇	585,2.46	1.11±0.06 ^a	0.30±0.01 ^b	—
	2-乙基己醇	615,1.73	2.43±0.07 ^a	2.44±0.06 ^a	—
	苯甲醇	630,2.43	8.27±0.22 ^b	8.11±0.27 ^b	9.63±0.16 ^a
	正辛醇	670,1.78	3.73±0.22 ^b	1.05±0.07 ^c	4.41±0.18 ^a
	2-苯基-2-丙醇	695,2.28	—	1.16±0.03 ^b	15.13±0.5 ^a
	芳樟醇	710,1.80	0.14±0.01 ^c	0.38±0.01 ^b	0.46±0.03 ^a
	麦芽醇	730,2.79	26.67±1.4 ^a	0.59±0.02 ^c	1.40±0.16 ^b
	苯乙醇	740,2.43	4.76±0.07 ^b	0.75±0.01 ^c	13.48±0.80 ^a
	正壬醇	755,1.76	2.55±0.10 ^c	4.73±0.10 ^b	5.26±0.33 ^a
	α -松油醇	840,2.01	0.13±0.00 ^c	0.32±0.00 ^b	0.63±0.01 ^a
	(R)-(+)- β -香茅醇	875,1.77	0.47±0.01 ^b	0.04±0.00 ^c	1.52±0.14 ^a
	月桂醇	1160,1.78	—	0.21±0.00 ^b	2.56±0.07 ^a
	雪松醇	1320,2.03	0.28±0.01 ^c	1.27±0.02 ^b	1.77±0.11 ^a
醛类	异戊醛	220,1.32	0.99±0.04 ^a	0.18±0.00 ^c	0.19±0.00 ^b
	丙酮醛	315,1.15	1.41±0.13 ^c	10.07±0.45 ^b	45.03±1.64 ^a
	正己醛	330,1.61	0.37±0.02 ^b	1.94±0.10 ^a	0.09±0.00 ^c
	3-糠醛	340,2.08	1.18±0.07 ^b	0.74±0.02 ^c	3.76±0.10 ^a
	糠醛	365,2.25	—	27.18±1.56 ^b	48.85±2.39 ^a
	反式-2-己烯醛	385,1.35	0.01±0.00 ^c	0.32±0.01 ^a	0.12±0.00 ^b
	2-己醛	385,1.88	—	0.67±0.01 ^b	1.49±0.03 ^a
	庚醛	445,1.74	0.89±0.06 ^a	0.52±0.02 ^b	0.22±0.00 ^c
	5-甲基呋喃醛	525,2.51	79.97±2.77 ^a	9.78±0.50 ^c	23.95±0.45 ^b
	苯甲醛	530,2.42	1.29±0.24 ^c	2.03±0.20 ^b	2.34±0.08 ^a
	正辛醛	580,1.83	2.99±0.13 ^a	1.51±0.02 ^b	0.88±0.03 ^c
	苯乙醛	640,2.52	5.21±0.15 ^a	1.41±0.01 ^c	4.34±0.09 ^b
	3-甲基苯甲醛	675,2.43	—	0.32±0.03 ^b	1.29±0.01 ^a
	壬醛	720,1.83	20.48±1.01 ^a	13.06±0.22 ^b	9.60±0.60 ^c
	反式-2-壬烯醛	790,1.94	0.24±0.01 ^a	0.08±0.00 ^c	0.16±0.00 ^b
	癸醛	850,1.83	11.45±0.45 ^a	—	3.13±0.16 ^b
	5-羟甲基糠醛	885,3.04	2.66±0.27 ^b	1.59±0.01 ^c	35.41±0.84 ^a
	4-乙氧基苯甲醛	920,2.83	1.84±0.08 ^b	0.13±0.00 ^c	2.26±0.06 ^a
	(E)-3,7-二甲基-2,6-辛二烯醛	925,2.12	0.71±0.03 ^b	0.13±0.01 ^c	1.23±0.01 ^a
	1-紫苏醛	935,1.89	0.03±0.00 ^b	—	0.74±0.03 ^a
	十一醛	975,1.80	—	0.34±0.01 ^b	1.21±0.04 ^a
	十二醛	1090,1.81	1.01±0.07 ^b	0.26±0.00 ^c	1.31±0.09 ^a
	肉豆蔻醛	1310,1.62	—	2.56±0.06 ^a	0.06±0.00 ^b
酸类	异戊酸	375,1.65	5.06±0.18 ^a	2.32±0.03 ^b	—
	2-甲基丁酸	385,1.66	5.13±0.26 ^a	3.46±0.06 ^b	—
	丙酮酸	520,1.22	12.18±0.35 ^a	0.06±0.00 ^c	0.10±0.01 ^b
酮类	3-己酮	315,1.57	7.99±0.34 ^a	1.84±0.07 ^b	0.13±0.00 ^c
	环戊酮	320,1.96	3.41±0.25 ^a	4.22±0.15 ^b	4.08±0.13 ^b
	羟基丙酮	375,1.24	0.52±0.02 ^b	0.29±0.01 ^c	242.87±14.23 ^a
	2-庚酮	430,1.73	0.76±0.06 ^b	0.57±0.01 ^c	1.00±0.02 ^a
	甲基环戊烯醇酮	455,2.31	27.41±1.29 ^a	3.34±0.06 ^c	13.27±0.28 ^b

表1(续)

类别	化合物名称	保留时间/s	含量/($\mu\text{g} \cdot \text{g}^{-1}$)		
			NX	LT	SD
酮类	4-环戊烯-1,3-二酮	480,2.21	14.32±1.18 ^c	33.54±2.13 ^b	51.99±1.38 ^a
	3-甲基-2-环戊烯-1-酮	535,2.56	3.70±0.12 ^a	1.13±0.05 ^c	3.04±0.11 ^b
	甲基庚烯酮	555,1.93	4.85±0.17 ^a	2.77±0.06 ^c	3.44±0.04 ^b
	2-辛酮	565,1.78	—	0.26±0.00 ^a	—
	3-甲基-2-环己烯-1-酮	575,2.39	3.47±0.12 ^a	0.62±0.01 ^c	1.81±0.02 ^b
	苯乙酮	670,2.52	4.12±0.15 ^c	4.50±0.13 ^b	8.10±0.13 ^a
	2-壬酮	700,1.83	0.43±0.02 ^b	0.34±0.01 ^c	0.58±0.02 ^a
	乙基环戊烯醇酮	705,2.42	15.84±0.42 ^a	0.56±0.02 ^c	4.01±0.21 ^b
	2,3-辛二酮	770,3.02	0.39±0.02 ^a	0.04±0.00 ^b	0.02±0.00 ^c
	对甲基苯乙酮	810,2.46	5.44±0.25 ^b	0.41±0.02 ^c	8.62±0.14 ^a
	2-十一酮	955,1.82	1.38±0.01 ^b	0.20±0.01 ^c	4.49±0.02 ^a
	茄酮	1035,2.21	7.60±0.31 ^b	1.73±0.05 ^c	37.30±0.90 ^a
	大马士酮	1065,2.17	2.21±0.11 ^b	—	23.85±0.43 ^a
	甲位二氢突厥酮	1080,1.64	0.18±0.00 ^b	—	0.46±0.02 ^a
	二氢大马酮	1095,2.15	0.21±0.01 ^b	0.07±0.00 ^c	3.54±0.35 ^a
	香叶基丙酮	1135,1.98	6.42±0.45 ^b	1.39±0.01 ^c	68.13±1.03 ^a
酚类	β -紫罗兰酮	1170,2.18	0.06±0.00 ^b	—	0.92±0.03 ^a
	对甲酚	675,2.28	1.02±0.11 ^b	0.69±0.01 ^c	9.69±0.54 ^a
	愈创木酚	700,2.44	78.70±1.93 ^a	6.06±0.11 ^c	12.9±0.35 ^b
酯类	4-乙基苯酚	795,2.31	0.54±0.01 ^b	0.21±0.00 ^c	2.14±0.13 ^a
	乙醇酸甲酯	270,1.58	5.14±0.18 ^a	1.29±0.75 ^b	0.20±0.00 ^c
	乙二醇乙酸酯	320,1.15	0.78±0.05 ^a	—	—
	当归内酯	410,2.29	26.62±1.37 ^a	5.54±0.25 ^c	9.25±0.08 ^b
	2-羟基丙基乙酸酯	435,1.95	—	6.27±0.35 ^a	—
	γ -戊内酯	520,2.82	1.23±0.16 ^b	0.77±0.02 ^c	1.59±0.07 ^a
	乳酸甲酯	555,1.25	13.69±0.67 ^a	—	—
	丁二酸二甲酯	620,2.31	—	0.02±0.00 ^b	0.04±0.00 ^a
	δ -戊内酯	650,3.36	6.58±0.25 ^b	1.13±0.01 ^c	17.24±0.37 ^a
	2-甲基丁酸异戊酯	710,1.68	0.33±0.03 ^a	—	—
	苯酸甲酯	710,2.33	1.30±0.05 ^a	—	—
	异戊酸异戊酯	720,1.69	1.07±0.08 ^b	0.57±0.03 ^c	7.70±0.38 ^a
	戊二酸二甲酯	755,2.29	0.08±0.00 ^a	—	—
	丙位庚内酯	775,3.16	0.28±0.01 ^b	—	1.84±0.08 ^a
	乙酸烯丙酯	840,3.40	—	2.26±0.06 ^a	—
	辛酸异丁酯	1020,1.70	—	—	0.10±0.01 ^a
	γ -壬内酯	1035,2.55	—	0.05±0.00 ^b	4.59±0.25 ^a
	苯甲酸丁酯	1055,2.21	—	—	0.37±0.01 ^a
	甲酸甲酯	1320,0.94	—	—	0.12±0.00 ^a
	苯甲酸乙基己酯	1400,2.12	1.49±0.04 ^b	—	6.08±0.19 ^a
	十一酸甲酯	1410,1.78	0.17±0.01 ^b	—	0.32±0.01 ^a
杂环类	2-甲基吡嗪	355,2.01	0.94±0.10 ^a	0.06±0.00 ^c	0.10±0.01 ^b
	3-甲基吡咯	375,2.00	—	—	1.31±0.03 ^a
	2-乙酰基呋喃	465,2.26	10.28±0.74 ^b	5.60±0.11 ^c	31.99±1.50 ^a
	5-甲基-2-乙酰基呋喃	625,2.46	7.47±0.19 ^a	1.48±0.05 ^c	6.61±0.02 ^b
	2-乙酰基吡咯	665,2.63	5.25±3.03 ^b	0.21±0.01 ^c	8.41±0.25 ^a
	3-乙酰基吡啶	730,2.83	1.83±0.11 ^b	0.19±0.00 ^c	2.15±0.10 ^a
	1-(2-呋喃基甲基)-1H-吡咯	815,2.51	1.56±0.06 ^a	—	1.14±0.10 ^b

表1(续)

类别	化合物名称	保留时间/s	含量/($\mu\text{g} \cdot \text{g}^{-1}$)		
			NX	LT	SD
其他类	乙偶姻	1235, 1.04	1.66±0.06 ^b	0.23±0.00 ^c	3.25±0.13 ^a
	4-异丙基甲苯	615, 1.80	2.40±0.01 ^b	0.64±0.03 ^c	5.42±0.09 ^a
	(S)-(-)-柠檬烯	620, 1.67	6.31±0.13 ^b	3.49±0.18 ^c	16.36±0.73 ^a
	1-癸烯	830, 1.49	—	0.12±0.01 ^b	1.58±0.04 ^a
	3 醋精	1005, 2.38	—	1.12±0.01 ^b	11.75±0.52 ^a
	长叶烯	1105, 1.89	0.30±0.01 ^a	—	0.02±0.00 ^b
	(+)-香橙烯	1115, 1.86	—	—	0.30±0.01 ^a
	大根香叶烷	1155, 1.59	9.95±0.35 ^a	3.30±0.02 ^c	5.52±0.10 ^b
	α -法呢烯	1580, 1.84	—	0.02±0.00 ^b	0.30±0.01 ^a

注:保留时间一列中两个数字依次表示一维色谱柱和二维色谱柱保留时间;—表示未检测到;同行不同字母表示组间具有显著差异。

由表 1 可知,共检出 102 种挥发性香气成分,主要为醛类、酮类、酚类、酯类、醇类、酸类、杂环类及其他类化合物。NX、LT 和 SD 样品中分别检测到 82 种、82 种、90 种挥发性香气成分。3 款卷烟挥发性香气成分组成与分布存在差异,NX 样品中酮类、醛类化合物含量较高,主要成分有 5-甲基呋喃醛、乙基环戊烯醇酮及甲基环戊烯醇酮等,具有明显焦甜香,对卷烟增香和定香作用显著^[22-23];LT 样品中醛类化合物含量较高,主要成分有正己醛、肉豆蔻醛及反式-2-己烯醛等,其中正己醛和肉豆蔻醛均具有果香香气^[24-25],可能赋予卷烟果香特征;SD 样品的主要成分有香叶基丙酮、茄酮及 5-羟甲基糠醛等,香叶基丙酮及茄酮是增加卷烟清甜香的关键成分^[26-27],5-羟甲基糠醛能赋予卷烟焦甜香^[28]。综上,化合物种类和含量的差异是形成卷烟独特香气风格的重要因素。

2.3 3 款中支卷烟挥发性香气成分差异分析

2.3.1 卷烟挥发性香气成分的 OPLS-DA 结果 为进一步明确不同卷烟样品挥发性香气成分的差异情况,利用 SIMCA14.1 对其挥发性香气成分进行 OPLS-DA 分析,结果如图 3 所示。由图 3a)可知, R^2 与纵轴相交于 (0, 0.131), Q^2 与纵轴相交于 (0, -0.532),说明该模型未出现过拟合现象^[29];由图 3b)可知,所有样品均在 95%置信区间内,表明该模型稳定,且可靠性较高^[29-30]。SD、NX 和 LT 样品位于不同象限,各样品点分离明显,说明各样品的挥发性香气成分存在显著性差异。 VIP 是变量在投影

中的重要性数值,通常用于解释变量对模型分类结果的贡献程度, $VIP>1$ 的变量被认为是对分类判别具有重要贡献的变量^[31], $VIP>1$ 且 $P<0.05$ 的香气成分可作为区分不同卷烟样品的标志性香气成分^[32]。由图 3c)可知,102 种挥发性香气成分中,可用于区分 3 款中支卷烟的标志性香气成分有 42 种。

2.3.2 挥发性香气成分差异性分析 OAV 常用于评估复杂体系中各香气成分对整体香气的贡献程度。当某一化合物的 $OAV\geq 1$ 时,表明其在香气形成过程中具有显著贡献,可被视为关键香气成分^[29]。本研究利用 OAV 从 42 种标志性香气成分中筛选出对卷烟样品香气风格具有显著影响的关键香气成分,结果如图 4 所示。由图 4 可知,3 款中支卷烟样品中共检测到 29 种具有显著香气贡献的挥发性成分($OAV\geq 1$),这些成分均来源于 42 种标志性香气成分(图 3c))。结合前期 OPLS-DA 分析结果,可以将这些在 3 款中支卷烟样品之间含量差异显著($VIP>1, P<0.05$),且对卷烟香气形成具有关键作用($OAV\geq 1$)的挥发性成分定义为标志性关键香气成分($VIP>1, OAV\geq 1, P<0.05$)。同时,图 4 还进一步揭示了 3 款中支卷烟样品在标志性关键香气成分组成上的差异与聚类特征。上方的树状图展示了各卷烟样本的聚类关系,3 款中支卷烟均表现出良好的聚类一致性,说明各样品间香气组成稳定,与前述 OPLS-DA 分析结果(图 3c))一致。而左侧树状图则反映了标志性关键香气成分在不同卷烟之间的聚类差异,这些关键香气成分可分为多个类别,说明不

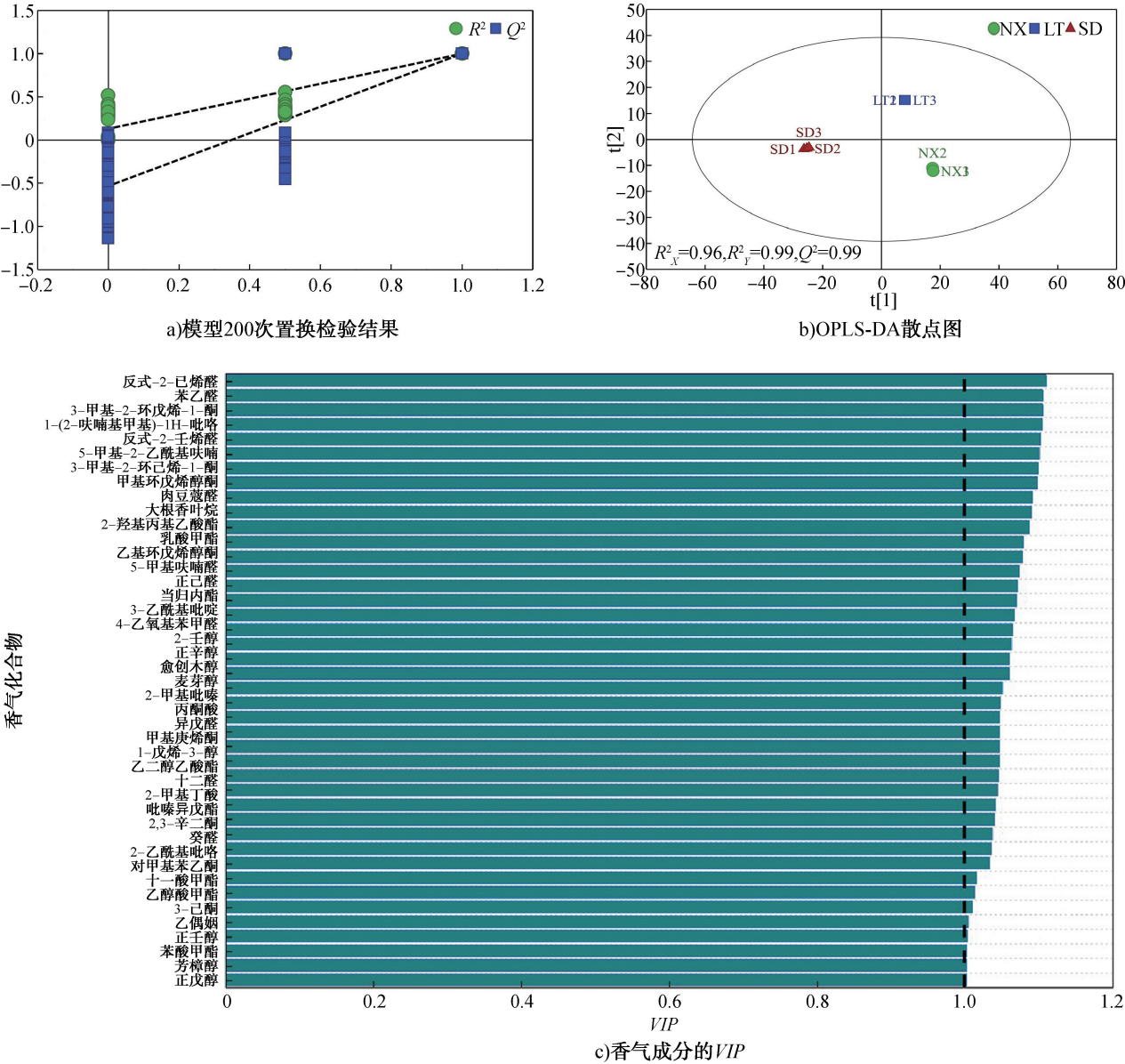


图 3 3 款中支卷烟挥发性香气成分 OPLS-DA 分析
Fig. 3 OPLS-DA analysis of volatile aroma components in three medium-cigarettes

同卷烟样品中这些成分的含量差异显著,这可能是造成 3 款卷烟香气风格差异的重要因素。

2.3.3 卷烟香气风格差异形成原因分析 为明确 3 款中支卷烟香气风格差异的成因,对其标志性关键香气成分与感官评价指标进行 PLSR 分析,结果如图 5 所示。由图 5 可知,所有香气风格描述点均分布在坐标范围内,果香和清香分布在 x 轴的负半轴,其余 7 种香气风格描述点分布在 x 轴的正半轴。香气风格描述点与感官评价指标点分布相似代表香气成分对特定香气风格有正向贡献^[33]。3 款中支卷烟的果香香气风格描述点和反式-2-己烯醛、

肉豆蔻醛及正己醛分布在同一象限,说明这 3 种香气成分对卷烟的果香香气风格形成有正向贡献,且在 LT 样品中质量浓度最高(图 4),这可能是导致 LT 样品果香香气突出的主要原因(图 1);正壬醇和 3-己酮与清香香气风格描述点位于同一象限,说明这 2 种香气成分对清香香气风格形成有正向贡献,且易挥发的 3-己酮在 SD 样品中质量浓度最高(图 4),这可能是 SD 样品清香香气风格更突出的原因(图 1);类似地,辛香、花香、烤烟烟香、豆香及药草香香气描述点与愈创木酚、2-甲基吡嗪、5-甲基呋喃醛、乙基环戊烯醇酮及当归内酯等化合物主要分

布在第一象限。甜香、木香香气描述点与甲基环戊烯醇酮、3-甲基-2-环戊烯-1-酮、(E)-3,7-二甲基-2,6-辛二烯醛、2-乙酰基吡咯等化合物主要

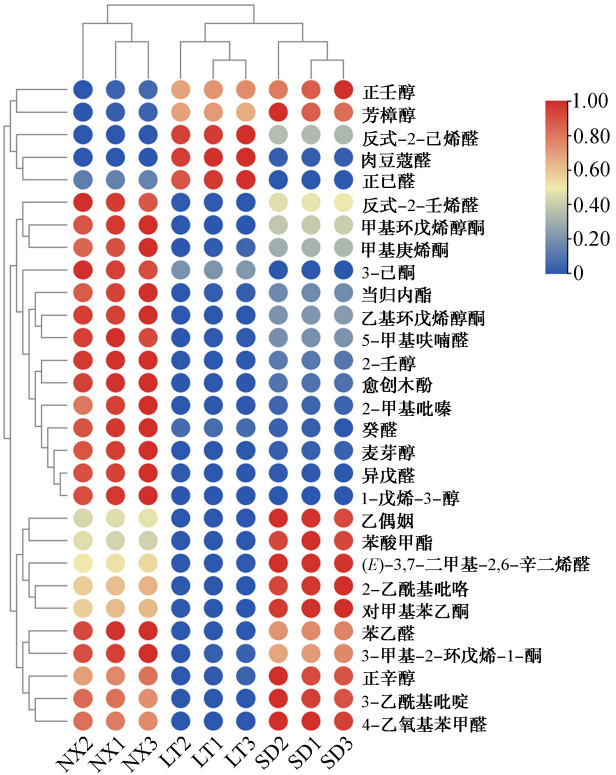


图 4 标志性关键香气成分聚类热图
Fig. 4 Cluster heat map of characteristic key aroma components

分布在第四象限。愈创木酚、2-甲基吡嗪、甲基环戊烯醇酮及当归内酯等对烤烟烟香、甜香及药草香香气风格有正向贡献的化合物在 NX 样品中质量浓度更高(图 4),这可能是导致该样品烤烟烟香、甜香及药草香香气风格突出的主要原因(图 1)。

3 结论

本研究采用 TDU-CIS 前处理结合 GC×GC-TOFMS 技术,对 NX、LT、SD 3 款中支卷烟样品的挥发性香气成分进行检测,并结合感官评价、OPLS-DA、PLSR 等方法,分析了这 3 款中支卷烟的香气风格和挥发性香气成分差异,以及香气风格差异的成因。结果表明:3 款中支卷烟样品呈现不同的香气风格特征,NX 样品的甜香和药草香较突出,SD 样品清香香气风格显著,LT 样品的果香较突出;共检测到 102 种挥发性香气成分,鉴定出 42 种标志性香气成分($VIP>1$ 且 $P<0.05$),进一步通过 OAV 分析筛选出对卷烟香气风格差异形成贡献显著的 29 种标志性关键香气成分($VIP>1$, $OA\geq 1$, $P<0.05$);卷烟各类香气风格特征与 29 种关键香气成分质量浓度差异有关。NX 样品的甜香与药草香突出,这可能分别源于其中较高质量浓度的甲基环戊烯醇酮和当归内酯等化合物。LT 样品果香特征突出,则可

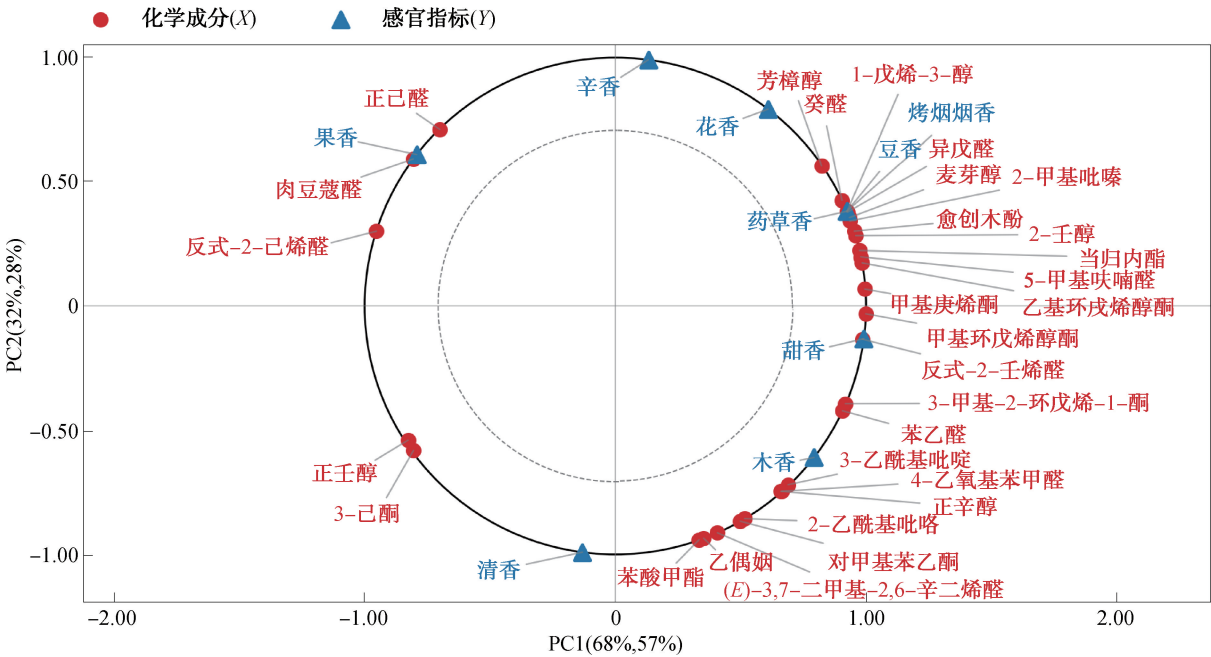


图 5 标志性关键香气成分与感官评价指标 PLSR 分析
Fig. 5 PLSR analysis of characteristic key aroma components and sensory evaluation indicators

能与其富含的正己醛和肉豆蔻醛有关。SD 样品清香特征突出,则可能与其所含较高质量浓度的正壬醇密切相关。综上可知,3 款中支卷烟样品香气风格的差异主要源于相关化合物的种类和含量的不同。

本研究分析确定了 3 款中支卷烟的特征香气成分与感官差异成因,可为企业调控卷烟特征感官风格、确保产品质量稳定性提供参考。但受限于特定样品,结果缺乏普遍适用性,后续研究可增加样本数量并利用机器学习、深度学习等手段实现大型数据集的处理和分析,建立泛化性能更好的中支卷烟香气风格调控模型。

参考文献:

- [1] 王宗英,史建新,王永红,等.切丝宽度对中支卷烟烟丝结构、烟支理化指标及感官质量的影响[J].烟草科技,2020,53(1): 81-88.
WANG Z Y,SHI J X,WANG Y H,et al. Influences of cut tobacco width on cut tobacco structure, physical and chemical indexes and sensory quality of cigarette with medium circumference [J]. Tobacco Science & Technology,2020,53(1): 81-88.
- [2] 祁林,范兴,唐习书,等.两段式烘丝控制模式对中支卷烟烟丝理化特性及感官质量的影响[J].烟草科技,2022,55(3): 88-97.
QI L,FAN X,TANG X S,et al. Two-section cylinder dryer's control mode on cut tobacco properties and sensory quality of demi-slim cigarettes [J]. Tobacco Science & Technology,2022,55(3): 88-97.
- [3] 唐小雪,范忠,李欢,等.卷烟通风分配对中支卷烟烟丝成分的影响[J].湖北农业科学,2023,62(S1): 173-178,186.
TANG X X,FAN Z,LI H,et al. The influence of cigarette ventilation distribution on the smoke composition of medium-stick cigarettes[J]. Hubei Agricultural Sciences,2023,62(S1): 173-178,186.
- [4] 郜明,张洪召,高复高,等.不同切丝宽度中支卷烟的包灰性能、主流烟气及感官质量变化规律[J].河南农业科学,2023,52(10): 172-180.
GAO M,ZHANG H Z,GAO F G,et al. Effect of cut tobacco width on the ash integrity,mainstream smoke and sensory quality of medium-sized cigarette[J]. Journal of Henan Agricultural Sciences,2023,52(10): 172-180.
- [5] 楚文娟,王宏伟,田海英,等.圆周及滤嘴通风对卷烟主流烟气碱性香味成分释放量的影响[J].烟草科技,2020,53(2): 34-41.
CHU W J,WANG H W,TIAN H Y. et al. Effects of cigarette circumference and filter ventilation rate on releases of alkaline aroma components in mainstream cigarette smoke [J]. Tobacco Science & Technology,2020,53(2): 34-41.
- [6] 戴路,张立立,彭钰涵,等.卷烟辅材参数对中支卷烟常规烟气指标及感官品质的影响[J].中国烟草学报,2023,29(3): 10-20.
DAI L,ZHANG L L,PENG Y H,et al. Effects of cigarette auxiliary material parameters on smoke indexes and sensory quality of medium-sized cigarette [J]. Acta Tabacaria Sinica,2023,29(3): 10-20.
- [7] 黄世杰,杨泽恩,吕阳波,等.中支卷烟丝束加香酯类和醇类单体香料的逐口转移行为[J].烟草科技,2023,56(8): 63-73.
HUANG S J,YANG Z E,LYU Y B,et al. Puff-by-puff transfer of ester and alcoholic monomer flavors from tow of demi-slim cigarettes[J]. Tobacco Science & Technology,2023,56(8): 63-73.
- [8] 许春平,陈治妍,郑凯,等.两种品牌中支卷烟主流烟气化学成分差异性研究[J].西南师范大学学报(自然科学版),2023,48(8): 103-112.
XU C P,CHEN Z Q,ZHENG K,et al. Study on the chemical composition differences of demi-slim cigarette smoke between two brands [J]. Artificial Intelligence Science and Engineering,2023,48(8): 103-112.
- [9] 赖燕华,肖明礼,卢嘉健,等.基于烟丝动态顶空香气成分的卷烟品牌分析[J].中国烟草科学,2017,38(6): 48-54.
LAI Y H,XIAO M L,LU J J,et al. Discrimination of different cigarette brands based on the dynamic volatile aroma components in cut tobacco [J]. Chinese Tobacco Science,2017,38(6): 48-54.
- [10] 郭华诚,张月华,李阳光,等.烟丝挥发性香味物质与卷烟感官质量的相关性研究[J].食品与机械,2019,35(1): 209-212.
GUO H C,ZHANG Y H,LI Y G,et al. Study on the correlation between volatile aroma substances and sensory quality of cigarettes [J]. Food & Machinery,2019,35(1): 209-212.
- [11] 周茂忠,李永福,杨洋,等.GC-MS 结合化学计量学方法分析窖制工艺对烟丝致香成分的影响[J].云南农业大学学报(自然科学),2023,38(4): 659-666.
ZHOU M Z,LI Y F,YANG Y,et al. Study on the effects of scenting process on aroma components of cut tobacco based on GC-MS and chemometrics analysis [J]. Journal of Yunnan Agricultural University (Natural Science),2023,38(4): 659-666.
- [12] 廖茂雯,韩琛,刘玮,等.植物乳杆菌发酵蓝莓汁发酵和贮藏过程中理化指标及挥发性风味物质的变化[J].食品工业科技,2025,46(1): 259-273.
LIAO M W,HAN C,LIU W,et al. Effects of *Lactobacillus plantarum* on physicochemical properties and volatile flavor substances of blueberry juice during fermentation

- and storage [J]. *Science and Technology of Food Industry*, 2025, 46(1): 259–273.
- [13] 李少辉,赵巍,刘松雁,等. SDE-GC-MS 结合 OPLS-DA 分析不同生态区谷子品种香气特征[J]. *中国农业科学*, 2023, 56(13): 2586–2596.
- LI S H, ZHAO W, LIU S Y, et al. Aroma characteristics of foxtail millet varieties from different ecological regions by analysis of SDE-GC-MS combined with OPLS-DA [J]. *Scientia Agricultura Sinica*, 2023, 56(13): 2586–2596.
- [14] JIN L, LIAN X, CHEN L, et al. Characteristic aroma analysis and interaction study of key aroma compounds of Chuanhong congou black tea [J]. *European Food Research and Technology*, 2024, 250(2): 441–454.
- [15] 陈凤明,张峰,高飞,等. 热脱附-冷阱系统-气相色谱-质谱法同时测定卷烟烟丝中 7 种生物碱和 9 种香精成分[J]. *分析化学*, 2021, 49(1): 128–136.
- CHEN F M, ZHANG F, GAO F, et al. Thermal desorption-cooled injection system-gas chromatography-mass spectrometry for simultaneous determination of seven kinds of alkaloids and nine kinds of flavor compounds in cigarette [J]. *Chinese Journal of Analytical Chemistry*, 2021, 49(1): 128–136.
- [16] CHOPRA M D, MENDER F A, DUONG B, et al. A fast thermal desorption unit for micro thermal desorption tubes, Part I: Development of the system and proof of concept measurements with hyper-fast gas chromatography [J]. *Journal of Chromatography A*, 2024, 1730: 465039.
- [17] YANG Y, QIAN M C, DENG Y, et al. Insight into aroma dynamic changes during the whole manufacturing process of chestnut-like aroma green tea by combining GC-E-Nose, GC-IMS, and GC×GC-TOFMS [J]. *Food Chemistry*, 2022, 387: 132813.
- [18] VEENAAS C, RIPSZAM M, HAGLUND P. Analysis of volatile organic compounds in indoor environments using thermal desorption with comprehensive two-dimensional gas chromatography and high-resolution time-of-flight mass spectrometry [J]. *Journal of Separation Science*, 2020, 43(8): 1489–1498.
- [19] ZOU Y, GAIDA M, FRANCHINA F A, et al. Distinguishing between decaffeinated and regular coffee by HS-SPME-GC×GC-TOFMS, chemometrics, and machine learning [J]. *Molecules*, 2022, 27(6): 1806.
- [20] 中华人民共和国国家质量监督检验检疫总局. 烟草及烟草制品 调节和测试的大气环境: GB/T 16447—2004 [S]. 北京: 中国标准出版社, 2004.
- General Administration of Quality Supervision, Inspection and Quarantine of the People's Republic of China. Tobacco and tobacco products—Atmosphere for conditioning and testing: GB/T 16447—2004 [S]. Beijing: Standards Press of China, 2004.
- [21] 国家烟草专卖局. 卷烟 中式卷烟风格感官评价方法: YC/T 497—2014 [S]. 北京: 中国标准出版社, 2014.
- State Tobacco Monopoly Administration. Cigarette—The sensory evaluation methods for Chinese-stylistic features: YC/T 216—2013 [S]. Beijing: Standards Press of China, 2014.
- [22] 窦玉青,王超,赵文涛,等. 基于加热卷烟的国内烟草原料低温热解香气成分差异性分析[J]. *甘肃农业大学学报*, 2024, 59(1): 203–210.
- DOU Y Q, WANG C, ZHAO W T, et al. Analysis on the difference in aroma components of domestic tobacco raw materials under low temperature pyrolysis based on heated cigarettes [J]. *Journal of Gansu Agricultural University*, 2024, 59(1): 203–210.
- [23] 王林,周平,贺佩,等. 糖类物质对烟草香气品质的影响研究进展[J]. *中国烟草科学*, 2021, 42(6): 92–98.
- WANG L, ZHOU P, HE P, et al. Research progress on the influence of carbohydrates on tobacco aroma quality [J]. *Chinese Tobacco Science*, 2021, 42(6): 92–98.
- [24] 田文秀,姚轩,张彬,等. 基于气相色谱-质谱法与气味活度值联合分析的芝麻香油特征风味成分分析方法[J]. *食品科技*, 2025, 50(9): 288–295.
- TIAN W X, YAO X, ZHANG B, et al. Analysis method of characteristic flavor components of sesame oil based on combined analysis of gas chromatography-mass spectrometry and odor activity value [J]. *Food Science and Technology*, 2025, 50(9): 288–295.
- [25] 陈菊,黄裕兵,王雪雅,等. 基于 HS-SPME-GC-MS 解析糟辣椒发酵过程中关键香气物质变化[J]. *中国酿造*, 2025, 44(7): 91–98.
- CHEN J, HUANG Y B, WANG X Y, et al. Changes of key aroma substances during Zaolajiao fermentation process based on HS-SPME-GC-MS [J]. *China Brewing*, 2025, 44(7): 91–98.
- [26] 安皓南,张凤梅,李振杰,等. 玫瑰提取物特征香气成分分析及其在卷烟中的应用[J]. *云南民族大学学报(自然科学版)*, 2023, 32(5): 563–568.
- AN H N, ZHANG F M, LI Z J, et al. Analysis of characteristic aromacomponents of extracts from *Rosa centifolia* and its application in cigarettes [J]. *Journal of Yunnan Minzu University (Natural Sciences Edition)*, 2023, 32(5): 563–568.
- [27] 张美芬,桑应华,赵红梅,等. 云南烤烟 KRK26 特征香气分析[J]. *云南农业大学学报(自然科学)*, 2023, 38(6): 973–979.
- ZHANG M F, SANG Y H, ZHAO H M, et al. analysis of characteristic aroma of flue-cured tobacco KRK26 in Yunnan province [J]. *Journal of Yunnan Minzu University (Natural Sciences Edition)*, 2023, 38(6): 973–979.
- [28] 刘鑫,肖永银,杜超,等. 丁香花蕾和果实热裂解成分分析及应用[J]. *食品工业*, 2022, 43(11): 305–310.
- LIU X, XIAO Y Y, DU C, et al. Pyrolysis composition analysis and application for clove bud and clove fruit [J]. *The Food Industry*, 2022, 43(11): 305–310.
- [29] AN H, OU X, ZHANG Y, et al. Study on the key volatile compounds and aroma quality of jasmine tea with different

scenting technology [J]. Food Chemistry, 2022, 385: 132718.

[30] 岳丽,祖力皮牙·买买提,王佳敏,等. HS-GC-IMS 结合 ROAV 分析不同制油工艺对芜菁籽油特征香气成分的影响[J]. 中国油脂,2025,50(8): 50-59.

YUE L,ZULIPIYA M M T,WANG J M,et al. Effect of oil-processing technology on the characteristic aroma components of turnip seed oil by HS-GC-IMS combined with ROAV [J]. China Oils and Fats, 2025, 50 (8) : 50-59.

[31] WANG Y,HE T,WANG J,et al. High performance liquid chromatography fingerprint and headspace gas chromatography-mass spectrometry combined with chemometrics for the species authentication of Curcuma Rhizoma [J]. Journal of Pharmaceutical and Biomedical Analysis,2021,202: 114144.

[32] 谭凤玲,詹萍,王鹏,等. 基于感官评价及 GC-MS 结合 OPLS-DA 分析热杀菌对蟠桃汁呈香品质的影响[J]. 中国农业科学,2022,55(12): 2425-2435.

TAN F L,ZHAN P,WANG P,et al. Effects of thermal sterilization on aroma quality of flat peach juice based on sensory evaluation and GC-MS combined with OPLS-DA [J]. Scientia Agricultura Sinica,2022,55(12): 2425-2435.

[33] 赵雅惠,廖鹏飞,陈璐,等. GC-MS/GC-O-MS 结合 PLSR 分析新型青稞白酒的关键香气物质[J]. 食品工业科技,2024,45(19): 228-239.

ZHAO Y H,LIAO P F,CHEN L,et al. Analysis of key aroma active compounds of novel Qingke baijiu by GC-MS/GC-O-MS combined with PLSR [J]. Science and Technology of Food Industry,2024,45(19): 228-239.

Analysis of aroma style differences and their formation mechanisms
in three dedium-sized cigarettes based on GC×GC-TOFMS

ZHENG Kai¹,WU Pan²,XIAO Hui¹,CHEN Zhiqian³,QU Lili²,LI Huayu⁴,LIANG Yongwei²,XU Chunping²

1. Xuchang Cigarette Factory, Henan China Tobacco Industry Co.,Ltd.,Xuchang 461000,China;
2. College of Tobacco Science and Engineering,Zhengzhou University of Light Industry,Zhengzhou 450001,China;
3. Technology Center,Chongqing China Tobacco Industry Co.,Ltd.,Chongqing 400000,China;
4. Technology Center,Henan Cigarette Industry Tobacco Sheet Co.,Ltd.,Xuchang 461000,China

Abstract: [Objective] This study aims to investigate the differences in sensory styles and their formation mechanisms among three medium-sized cigarettes. **[Methods]** Thermal desorption (TDU) coupled with comprehensive two-dimensional gas chromatography-time-of-flight mass spectrometry (GC×GC-TOFMS) was used to detect the volatile aroma compounds in the tobacco cuts of three medium-sized cigarettes. Combined with sensory evaluation, orthogonal partial least squares discriminant analysis (OPLS-DA) and partial least squares regression (PLSR), this study comparatively analyzed the formation mechanisms of aroma style differences among the three medium-sized cigarettes. **[Results]** The three medium-sized cigarettes have different aroma profiles. ,the NX sample features prominent sweet and herbal notes, the LT sample is characterized by distinct fruity notes, and the SD sample highlights fresh and clean notes. A total of 102 volatile aroma compounds were detected in the three medium-sized cigarettes, among which 29 characteristic key aroma compounds had potential effects on the formation of differences in cigarette aroma styles. PLSR analysis revealed that these 29 aroma compounds were respectively correlated with different aroma style characteristics of cigarettes, and the differences in their contents might be the reason for the differences in aroma styles among the three cigarettes. **[Conclusion]** This study enriches the flavor analysis method and research findings of medium-sized cigarettes and provide a reference for the regulation of aroma styles in medium-sized cigarettes.

Key words: medium-sized cigarettes; comprehensive two-dimensional gas chromatography-time-of-flight mass spectrometry;volatile aroma compounds;orthogonal partial least squares discriminat analysis

[责任编辑:王晓波 贾学伟]