

天登烟挥发性香气成分的聚类分析

李 锋^{a, c} 王洪云^b 周 瑾^a 王保兴^{a, c}

^a[云南瑞升烟草技术(集团)有限公司 昆明市高新技术开发区科医路 41 号 650106]

^b[红塔烟草(集团)有限责任公司大理卷烟厂 云南省大理市建设东路 191 号 615000]

^c(云南师范大学生命科学学院 昆明市一二一大街 298 号 650092)

摘 要 为更为系统的了解天登烟的品质特点, 采用同时蒸馏萃取-气相色谱/质谱法分析了烟叶样品中挥发性香气成分, 并结合 DSP 软件对 18 个烟叶样品中 13 个成分峰按欧式距离类平均法进行了聚类分析。结果表明, 各天登烟样品可以有效地聚为一类, 特别是 2003 年的样品差异非常小, 进一步说明, 天登烟自身的香气特征风格突出, 在烟草主要特征香气成分含量与组成方面同国产香料烟与烤烟较为接近, 而与白肋烟、晒黄烟之间的差异均较大。

关键词 天登烟; 挥发性香气成分; 聚类分析

中图分类号: O 657. 63

文献标识码: A

文章编号: 1004-8138(2009)04-0827-04

1 前言

天登烟的挥发性香气成分同烤烟差别明显, 且风格独特, 为了对天登烟的品质特点有一个更为系统的了解, 对天登烟、白肋烟、香料烟、烤烟、晒黄烟、晒红烟等多个不同品种的烟叶样品进行了挥发性致香成分的分析检测, 并选择其中的几个重要成分的含量数据进行了聚类分析, 以探求天登烟与这几种不同烟叶的品质相似性与差异性。

化学计量学作为一门计算机程序、统计方法和化学分析相结合的新兴学科, 其应用前景越来越受到大家的关注。聚类分析作为化学计量学的一种常用方法, 其原理是根据事物本身的特性研究个体的分类, 其原则是同一类中的个体有较大的相似性, 不同类别的个体差别较大^[1]。从现有的文献报道来看, 以往聚类分析主要用于烟草种植^[2-5]、虫害分析^[6]以及烟叶常规化学分析^[7-11]上。在天登烟的品质分析的研究中引入聚类分析方法可以更为准确的判断天登烟的品质特征, 给天登烟在卷烟产品中的合理应用提供指导。

2 实验部分

2.1 分析材料

选择 2001 嵩明 B2FL 烤烟、2002 红河 B2F 烤烟、2001 曲靖 B2FL 烤烟、2001 会泽 B2FL 烤烟、广东晒黄烟、云南白肋烟、湖北白肋烟、新疆香料烟、云南保山香料烟、AG-97 土耳其香料烟、B1-99 土耳其香料烟; 以及 2003 云龙天登烟大叶型上部、2003 云龙天登烟大叶型下部、2003 云龙天登烟上二、2003 云龙天登烟中二、2003 云龙天登烟柳叶烟、2003 云龙天登烟青杆烟、2002 云龙天登烟作

联系人, 电话: (0871)8325996; E-mail: bxwang@reascend.com.cn

作者简介: 李锋(1980—), 男, 昆明市人, 在读硕士研究生, 主要研究方向烟草及烟气化学分析。

收稿日期: 2008-11-13; 接受日期: 2009-01-16

为实验样品。

2.2 主要实验设备及应用软件

自制的同时蒸馏萃取装置; Agilent GC-MS 联用仪, 包括 6890 气相色谱、5973 质谱、7683B 自动液体进样器(美国 Agilent 公司); DPS3.01 for windows 数据统计分析软件。

2.3 样品的分析

将再造烟叶原料在平衡箱中于温度 22℃、湿度 60% 的条件下平衡 24h, 准确称取平衡后的原料样品 25.0g, 放入同时蒸馏萃取装置中, 并加入固定量的内标化合物, 采用二氯甲烷作为溶剂对烟丝连续进行动态萃取 2h。所得提取物经干燥后浓缩定容为 1.0mL, 进 GC-MS 分析。

所得图谱经计算机谱库(NIST98, Wiley275)检索, 并用内标校正归一化法计算各峰的相对含量。

2.4 GC-MS 的分析条件

进样口温度: 240℃; 分流比: 25:1; 毛细管柱: HP-5MS (30m × 0.25mm × 0.25μm); 载气: He, 流速: 1mL/min; 炉温: 50℃ (1min) — 80℃ /min — 160℃ (2min) — 80℃ /min — 260℃ (15min); GC-MS 接口温度 280℃; 离子源: EI 源; 电子能量: 70eV; 扫描范围: 35—455amu。

2.5 数据的分析处理

通过 DSP 软件的相关功能对 GC-MS 的分析结果采用欧式距离类平均法进行模糊聚类法分析。

3 结果与讨论

3.1 GC-MS 分析结果的整理与标准化

通过对图谱的分析比较, 对数据的相关性分析归纳, 精选匹配度较高、峰形分离较好、含量较显著的 13 个色谱峰作为聚类分析的标准点。色谱峰对应的物质的相对含量按公式(1)进行计算:

$$C_e = \beta \times \frac{C_r \times A_t}{A_r} \quad (1)$$

式中: C_e ——目标成分的相对校正含量; β ——校正系数(常量); C_r ——内标化合物峰面积归一化相对含量; A_t ——目标成分的峰面积; A_r ——内标的峰面积。

计算结果见表 1。

3.2 分析数据的聚类分析

依据上述精选出的 13 个标准点, 采取欧式距离类平均法进行模糊聚类分析, 结果见图 1。

从图 1 可以看出, 各天登烟原料样品可以有效地聚为一类, 特别是 2003 年的样品之间的差异非常小, 这表明天登烟在烟草主要特征香气成分含量与组成方面与烤烟、白肋烟、香料烟、晒黄烟之间的差异均较大, 自身的香气特征风格突出。相对而言, 天登烟主要香气成分的组成同国产香料烟与烤烟较为接近。而土耳其产香料烟与国产白肋烟同天登烟的主要特征香气成分差异较为明显。

4 结论

在天登烟的品质分析的研究中引入聚类分析方法可以更为准确的判断天登烟的品质特征, 给天登烟在卷烟产品中的合理应用提供指导。

表 1 样品主要挥发性致香成分含量 (μg/g)

编号	1	2	3	4	5	6	7	8	9	10	11	12	13
2001 嵩明 B2FL	2 973	4 902	0 727	1 36	0 38	19 709	5 188	0 696	2 311	8 602	90 926	2 501	2 342
2001 曲靖 B2FL	1 896	4 347	0 277	1 341	0 138	26 313	5 549	0 832	2 312	11 516	140 848	4 07	3 145
2001 会泽 B2FL	2 648	4 892	0 345	1 554	0 46	33 037	6 158	1 323	2 648	11 222	134 625	4 316	2 993
2002 红河 B2F	1 338	2 895	0 125	0 623	0 125	23 35	3 924	0 374	1 308	6 222	76 696	2 055	1 526
晒黄烟	2 604	2 279	1 694	1 136	2 85	25 765	9 48	1 171	6 401	11 515	24 96	11 699	5 405
云南白肋	0 619	2 553	9 301	0 479	11 434	35 914	6 346	1 806	2 598	29 11	58 819	9 871	1 592
湖北白肋	0 427	4 354	8 137	0 746	0 633	60 778	7 488	0 38	4 305	34 108	53 748	12 816	2 795
新疆香料烟-1	1 773	2 099	1 986	0 845	2 312	38 309	7 205	0 8	7 706	8 63	70 19	15 002	6 693
新疆香料烟-2	1 706	2 621	3 873	0 864	1 91	47 98	6 455	0 5	5 01	5 475	42 629	8 647	2 831
保山香料烟	1 81	3 852	3 624	1 235	2 544	46 888	6 061	0 814	7 563	6 833	61 6	12 591	3 803
AG-97 土耳其香料烟	2 106	1 417	2 609	1 009	1 269	27 995	3 45	0 751	7 625	11 254	106 159	14 7	47 985
B1-99 土耳其香料烟	2 96	2 309	3 926	1 125	0 963	28 815	4 099	0 493	4 438	12 21	127 205	9 254	28 523
2003 天登烟大叶型上部	1 996	0 567	1 651	0 261	N. D	19 521	3 187	1 441	6 276	1 216	24 176	2 435	N. D
2003 天登烟大叶型下部	1 68	0 574	3 182	0 265	N. D	23 689	0 972	1 282	5 834	1 812	46 192	3 227	N. D
2003 天登烟 上二	2 034	0 484	1 316	0 332	N. D	21 938	1 984	0 919	5 363	1 496	19 588	2 094	N. D
2003 天登烟 中二	2 011	0 526	1 646	0 28	N. D	21 548	3 219	1 377	7 017	1 566	21 32	2 064	N. D
2003 天登烟 柳叶烟	2 099	0 553	1 963	0 183	N. D	21 425	1 099	1 842	5 498	4 209	47 905	2 615	N. D
2003 天登烟 青杆烟	1 857	0 6	1 743	0 295	N. D	21 295	3 124	1 295	5 029	1 286	17 571	2 314	N. D
2002 云龙天登烟	2 915	0 25	2 03	0 889	N. D	34 28	5 966	1 589	4 702	6 03	67 071	6 73	N. D

注: N. D 代表未检出; 1——糠醛, 2——苯甲醇, 3——苯乙醛, 4——1-(1H-吡咯-2-基)-乙酮, 5——吡嗪, 6——茄酮, 7——BETA-大马酮, 8——2, 3-联吡啶, 9——二氢猕猴桃内酯, 10——巨豆三烯酮 D, 11——新植二烯, 12——金合欢基丙酮 A, 13——十六酸甲酯。

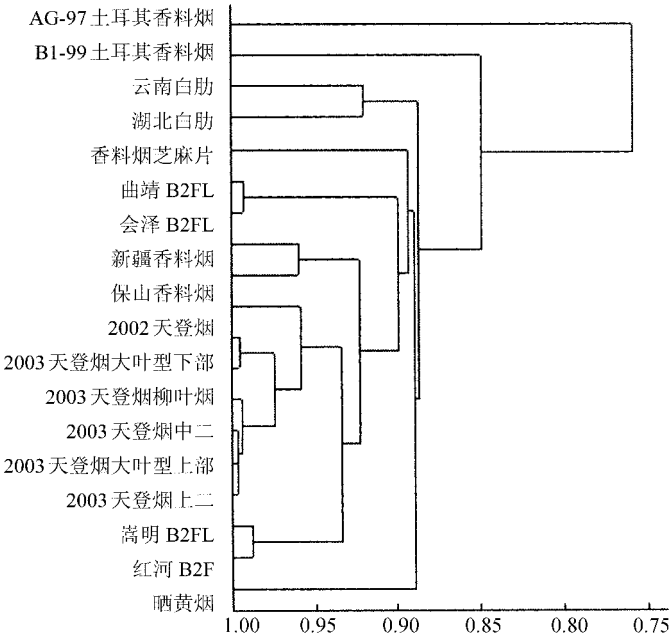


图 1 分析数据的聚类结果

参考文献

[1] 倪永年. 化学计量学在分析化学中的应用[M]. 北京: 科学出版社, 2004. 228
[2] 钱时祥, 陈学平, 郭家明. 聚类分析在烟草种植区划上的应用[J]. 安徽农业大学学报, 1994, 21(1): 21—25
[3] 黄学跃, 刘敬业, 赵丽红等. 晾晒烟品种资源农艺性状的聚类分析[J]. 昆明师范高等专科学校学报, 2001, 23(4): 40—46

- [4] 牛佩兰, 王元英 33 个烟草种植资源聚类分析[J]. 中国烟草, 1991, (2): 22—28
- [5] 何川生, 何兴金, 李天飞等 烤烟品种资源的聚类分析[J]. 中国农业科学, 2000, 33(3): 14—18
- [6] 陈茂华, 孟国玲, 龚信文 烟草甲对贮存烟叶选择危害的系统聚类分析[J]. 湖北农业科学, 2003, (1): 41—42
- [7] 冯建跃, 冯连梅 卷烟内在质量的气相色谱-数学聚类法研究[J]. 分析测试学报, 2004, (3): 21—25
- [8] 杨俊仙 山西省烟叶的聚类分析及综合评价[J]. 山西农业大学学报, 2003, 23(2): 120—124
- [9] 陈学平, 张良, 郭家明等 多个化学成分指标烟叶样品的聚类分析研究[J]. 中国烟草学报, 2002, 8(4): 21—26
- [10] 蔡宪杰, 王信民, 尹启生 烤烟外观质量指标量化分析初探[J]. 烟草科技, 2004, (6): 37—39
- [11] 肖炳光, 张燕春, 卢秀萍等 烤烟品种主成分分析和聚类分析[J]. 种子, 2000, (2): 27—29

Cluster Analysis of Tiandeng Tobacco Based on Volatile Aroma Components

LI Feng^{a, c} WANG Hong-Yun^b ZHOU Jin^a WANG Bao-Xing^{a, c}

a(Yunnan Reascend Tobacco Technology (Group) Co L td. , Kunming 650106, P. R. China)

b(Dali Cigarette Factory, Hongta Tobacco (Group) Co L td. , Dali, Yunnan 615000, P. R. China)

c(College of the Life Science, Yunnan Normal University, Kunming 650092, P. R. China)

Abstract To further understand quality characteristic of tiandeng tobacco, aromatic components of 18 tobacco samples were determined by simultaneous distillation extraction-gas chromatography mass spectrometry. The samples of 18 tobacco were classified based on 13 aroma components using euclidean distance group-average method of cluster analysis. The tiandeng tobacco samples were classified the same cluster, especially samples of 2003 showed little difference. Further illustrate characteristic odor of tiandeng tobacco was unique, and content of aroma components was close to domestic oriental tobacco and flue-cured tobacco, but they are great different from the burley tobacco and sun-cured tobacco.

Key words Tiandeng Tobacco; Volatile Aroma Components; Cluster Analysis

北京高校图书馆期刊工作研究会最新评选结果汇编 北 京 大 学 出 版 社 出 版 《中文核心期刊要目总览》(2008) 化学/晶体学类核心期刊一览表

序号	刊 名	序号	刊 名	序号	刊 名
1	高等学校化学学报	10	分析测试学报	19	化学试剂
2	分析化学	11	化学通报	20	功能高分子学报
3	化学学报	12	分子科学学报	21	光谱实验室
4	催化学报	13	分析科学学报	22	合成化学
5	无机化学学报	14	中国科学(B 辑), 化学	23	人工晶体学报
6	物理化学学报	15	化学进展	24	影像科学与光化学
7	有机化学	16	理化检验(化学分册)	25	计算机与应用化学
8	分析试验室	17	分子催化	26	核化学与放射化学
9	色谱	18	化学研究与应用		