

# 顶空固相微萃取气质联用法分析包装印刷品关键气味成分

朱翔<sup>1</sup>, 汪宣<sup>1\*</sup>, 梁德民<sup>2</sup>, 沈建敏<sup>1</sup>, 费婷<sup>2</sup>, 徐继俊<sup>1</sup>, 胡征<sup>1</sup>, 徐文君<sup>1</sup>

(1.上海烟草包装印刷有限公司, 上海 200137; 2.上海烟草集团有限责任公司, 上海 201206)

**摘要:** **目的** 采用顶空固相微萃取技术(HS-SPME)结合气质联用(GC-MS)技术分析5款包装印刷品中对气味贡献较大的成分。**方法** 通过考察不同类型的萃取头、平衡时间、萃取时间和萃取温度对挥发性/半挥发性成分的数量及含量的影响,建立一种包装印刷品气味成分检测方法。结合解卷积+匹配度法+保留指数法对检测出的化合物进行定性识别,通过归一化法和内标法对气味成分的含量进行分析,并结合化合物的气味阈值,筛选关键气味成分。**结果** 得到了最佳的分析条件,采用50/30 μm聚二乙烯苯/碳分子筛/聚二甲基硅氧烷固相微萃取头,平衡时间为30 min,萃取时间为30 min,萃取温度为80 °C,解吸时间为10 min。在上述最优条件下,5款包装印刷品被鉴别出43种关键性气味成分,包括醛类、酮类、醇类、芳香烃类、杂环类、酯类、醚类、胺类等八大类。**结论** 该方法可为后续包装印刷品气味分析、异味预警、新产品开发、工艺改进等提供技术支持。

**关键词:** 顶空固相微萃取气相色谱质谱联用法; 包装印刷品; 挥发性/半挥发性化合物; 气味阈值

**中图分类号:** TB487 **文献标志码:** A **文章编号:** 1001-3563(2024)05-0173-07

**DOI:** 10.19554/j.cnki.1001-3563.2024.05.021

## Analysis of Principal Odor Components in Packaging Printing by Headspace Solid Phase Microextraction-Gas Chromatography-Mass Spectrometry

ZHU Xiang<sup>1</sup>, WANG Xuan<sup>1\*</sup>, LIANG Demin<sup>2</sup>, SHEN Jianmin<sup>1</sup>, FEI Ting<sup>2</sup>,  
XU Jijun<sup>1</sup>, HU Zheng<sup>1</sup>, XU Wenjun<sup>1</sup>

(1. Shanghai Tobacco Packaging Printing Co., Ltd., Shanghai 200137, China;

2. Shanghai Tobacco Group Co., Ltd., Shanghai 201206, China)

**ABSTRACT:** The work aims to analyze the five packaging printing by headspace solid phase microextraction (HS-SPME) combined with gas chromatography-mass spectrometry (GC-MS) to determine the principal odor components. The determination method was established by investigating the effect of different types of extraction head, equilibrium time, extraction time and extraction temperature on the quantity and content of volatile/semi volatile components. To identify the detected compounds, deconvolution, matching and retention index method were utilized. The content of odor components was analyzed by peak area normalization method and internal standard method. Combined with the odor threshold of compounds, the principal odor components were screened. The optimal extraction efficiency was achieved under the following conditions, 50/30 μm divinylbenzene/carboxen/polydimethylsiloxane SPME fiber, equilibrium for 30 min, extraction for 30 min at 80 °C and desorption for 10 min. Under the above conditions, 43

收稿日期: 2023-08-15

基金项目: 上海烟草集团有限责任公司科技项目(K2022-007)

\*通信作者

compounds of five packaging printing were identified as principal odor components. These compounds included aldehydes, ketones, alcohols, aromatic hydrocarbons, heterocycles, esters, ethers, amines. This method provides technical support for odor analysis, odor warning, new product development and differential changes after technological improvement in packaging printing products.

**KEY WORDS:** headspace solid phase microextraction-gas chromatography-mass spectrometry; packaging printing; volatile/semi-volatile compounds; odor threshold

在包装印刷品中,挥发性/半挥发性成分的含量是产品质量安全的一项重要指标。即使这些检测指标合格,一些异常气味物质依旧会影响产品的品质。这归因于衡量挥发性/半挥发性物质的影响程度均基于这些物质的含量,而忽略了气味阈值特性。大量研究表明,挥发性/半挥发性化合物对气味的贡献由它在气味体系中的含量和气味阈值共同决定<sup>[1-2]</sup>。

气味成分的分析方法主要有嗅辨法和仪器法。嗅辨法利用鼻子直接对气味物质进行识别,灵敏度较高,但人为主观因素对测试结果的影响较大<sup>[3]</sup>。仪器法包括静态顶空法、动态顶空法、固相微萃取法、嗅闻仪法等,并结合气相色谱或者气相色谱质谱仪(GC-MS)、电子鼻等进行分析<sup>[4-7]</sup>。顶空-固相微萃取技术(HS-SPME)集采样、吸附、萃取、浓缩、进样等过程于一体,具有样品用量少、无需萃取溶剂、选择性好、灵敏度高等优点,比较适合于挥发性/半挥发性物质的检测<sup>[8]</sup>。随着自动化SPME技术的发展,分析结果的重复性和准确性得到极大提高。潘曦等<sup>[9]</sup>利用SPME-GC-MS对卷烟包装材料挥发性气体进行了定性和定量分析。仅从挥发性气体含量出发,无法准确评估挥发性气体影响包装材料异味的贡献度。

为了获取更多气味成分信息,特别是一些含量较低的成分,文中利用HS-SPME-GC-MS技术的富集、浓缩功能,对包装印刷品中气味成分进行分析。同时,开发一种解卷积+匹配度法+保留指数法相结合的定性识别模式,对检测出的化合物进行成分识别,以提高定性分析的准确性。此外,还兼顾考量气味成分的含量和阈值对气味成分贡献度的综合影响,建立一种包装印刷品中关键气味成分的分析方法,为包装印刷品中气味成分的分析提供一种更完备的方案。

## 1 实验

### 1.1 仪器、试剂与材料

主要试剂和材料:正构烷烃(C7-C20)混标(500 mg/L)、三醋酸甘油酯(99.0%),上海安谱科学仪器有限公司;氘代苯(99.5%),美国Cambridge-Isotope-Laboratories公司。

主要仪器:固相微萃取萃取头(SPME萃取头),美国Supelco公司,型号包括75 μm活性炭/聚二甲基硅氧烷(75 μm CAR/PDMS)、50/30 μm 二乙烯基苯/羧基/聚二甲基硅氧烷(50/30 μm DVB/CAR/PDMS)、85 μm 聚丙烯酸酯(85 μm PA)、100 μm 聚二甲基硅氧烷(100 μm PDMS)、65 μm 聚二甲基硅氧烷/二乙烯基苯(65 μm PDMS/DVB);7890B-5977B气相色谱-质谱联用仪,美国Agilent公司,该仪器配有PAL3 system(瑞士CTC Analytics AG公司);XPE204电子天平,瑞士Mettler-Toledo公司。

### 1.2 溶液的配制

1) 内标溶液的配制。称取氘代苯,用三醋酸甘油酯定容,配制成质量浓度为0.2 mg/mL的内标溶液。

2) 正构烷烃溶液的配制。取正构烷烃(C7-C20)混标(500 mg/L),用正己烷稀释,配制成质量浓度为10 mg/L的溶液。

### 1.3 样品前处理

准确裁取面积为121 cm<sup>2</sup>的纸质包装印刷品(含主包装面)试样,将所裁试样印刷面朝内,卷成筒状,并放入进样瓶。加入20 μL内标溶液,立即密封后进行分析,进行3次平行检测。

### 1.4 仪器条件

#### 1.4.1 色谱条件

色谱柱:安捷伦DB-WAX 60 m×0.320 μm×0.25 μm;进样口温度为250 °C;载气为氦气,纯度≥99.999%,恒流模式,流速为1.2 mL/min;进样口分流比为1:1。升温程序:40 °C,保持2 min;以4 °C/min的速率升温至200 °C,保持1 min;以10 °C/min的速率升温至240 °C,保持10 min。

#### 1.4.2 质谱条件

传输线温度为250 °C,离子源温度为230 °C,四极杆温度为150 °C。测定方式为全扫描模式,扫描范围(*m/z*)为33~500。

#### 1.4.3 固相萃取条件

平衡时间为30 min,萃取时间为30 min,萃取温

度为 80 °C, 解吸时间为 10 min。

#### 1.4.4 静态顶空-气质联用法测试条件

样品环体积为 3.0 mL, 样品平衡温度为 80 °C, 样品环温度为 160 °C, 样品平衡时间为 30.0 min, 加压时间为 0.20 min, 充气时间为 0.20 min, 样品环平衡时间为 0.05 min。测试时的色谱条件和质谱条件与 1.4.1 节、1.4.2 节保持一致。

### 1.5 数据处理

#### 1.5.1 保留指数计算

取 100  $\mu$ L 的正构烷烃溶液 (10 mg/L) 至样品瓶中, 迅速密封。采用液体进样方式, 质谱条件和色谱条件按 1.4.1、1.4.2 节的实验条件进行检测, 并记录正构烷烃的出峰信息及保留时间。按式 (1) 计算样品中各组分的保留指数 ( $R$ )<sup>[10]</sup>。

$$R = 100n + \frac{100(t_x + t_n)}{t_{n+1} - t_n} \quad (1)$$

式中:  $n$  为正构烷烃碳数;  $t_x$  为被测物质的保留时间;  $t_n$  为碳数  $n$  的正构烷烃的保留时间;  $t_{n+1}$  为碳数  $n+1$  的正构烷烃的保留时间。

#### 1.5.2 定性分析

先采用安捷伦未知物分析软件对检测出的物质进行解卷积分析。将匹配度大于 75% 的解卷积处理结果与 NIST20 库中的化合物进行对比, 进一步提高识别准确度。对正构烷烃标准品进行扫描, 以其保留时间计算前一步骤中化合物的保留指数, 并对照数据库保留指数。当保留指数的偏差阈值在 20 以内时确定定性结果, 否则重新检索定性。

#### 1.5.3 定量分析

通过内标化合物浓度、内标峰面积及化合物峰面积计算化合物的浓度。其中, 峰面积表示各化合物在总离子流色谱图中的峰面积, 采用式 (2) 进行计算<sup>[11]</sup>。

$$C_i = C_{ISTD} \frac{A_i}{A_{ISTD}} \quad (2)$$

式中:  $C_i$  为化合物的质量浓度, mg/mL;  $C_{ISTD}$  为内标溶液的质量浓度, mg/mL;  $A_i$  为化合物的峰面积;  $A_{ISTD}$  为内标峰面积。

### 1.6 关键气味成分的识别

筛查出有气味的化合物, 查找其气味阈值, 通过式 (3) 计算气味活性值。

$$O_i = \frac{C_i}{T_i} \quad (3)$$

式中:  $O_i$  为化合物气味活性值;  $C_i$  为化合物的浓度;  $T_i$  为该化合物的嗅觉阈值, mg/m<sup>3</sup>。当  $O_i \geq 1$  时, 该化合物对气味有贡献。当  $O_i \geq 10$  时, 则为重要气味物质<sup>[12-13]</sup>。

## 2 结果与讨论

### 2.1 方法优化

#### 2.1.1 方法的选择

静态顶空-气质联用法 (HS-GC-MS) 常用于分析挥发性/半挥发性物质。从检测出挥发性/半挥发性成分的峰数量和峰面积的角度, 对比 2 种方法的测试结果, 如图 1 所示。选用 HS-SPME-GC-MS 方法获得的色谱峰数量和峰面积均较大, 这是由于 SPME 技术的分析效果较好<sup>[8-9]</sup>, 故选择 HS-SPME-GC-MS 方法进行后续实验。

#### 2.1.2 萃取头种类的优化

不同萃取头对于气味物质的萃取效果差异较大, 这里选择 75  $\mu$ m CAR/PDMS、50/30  $\mu$ m DVB/CAR/PDMS、85  $\mu$ m PA、100  $\mu$ m PDMS、65  $\mu$ m PDMS/DVB 等 5 种萃取头进行测试。由图 2 可知, 50/30  $\mu$ m DVB/CAR/PDMS 的色谱峰数量和峰面积均大于其他 4 种萃取头, 故选择它进行后续实验。

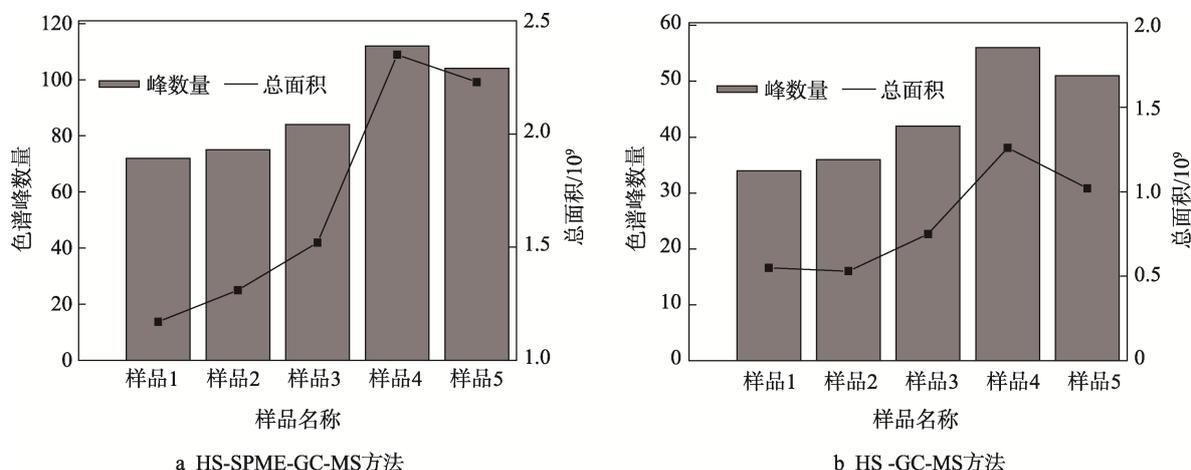


图 1 2 种方法的检测效果  
Fig.1 Determination effect of two methods

### 2.1.3 平衡时间优化

以 DVB/CAR/PDMS 为萃取头, 固定萃取时间、萃取温度 (暂定为 30 min、80 °C) 进行优化实验。考察平衡时间为 10、20、30、40、50 min 时的出峰数量和峰面积, 结果如图 3 所示。在平衡时间为 30 min 时出峰较多、峰面积之和较大, 因此确定平衡时间为 30 min。

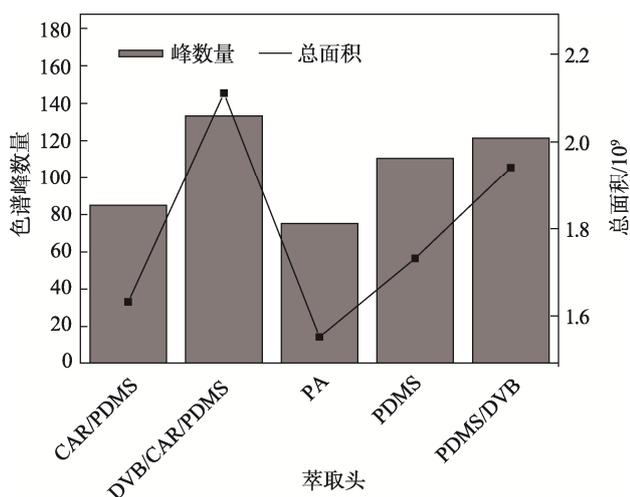


图 2 5 种 SPME 萃取头的萃取效果  
Fig.2 Extraction effects of five SPME fibers

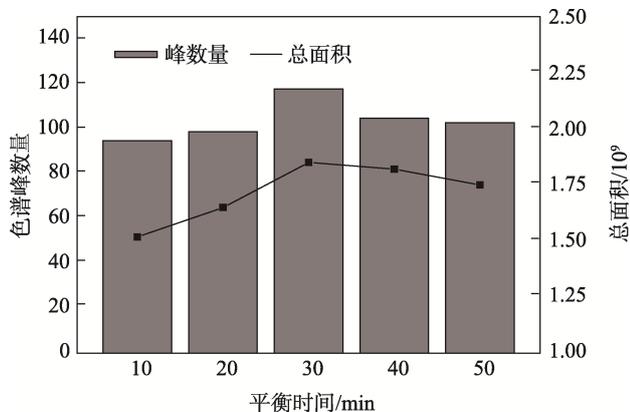


图 3 不同平衡时间的萃取效果  
Fig.3 Extraction effects under different equilibrium time

### 2.1.4 萃取时间优化

固定平衡时间为 30 min、萃取温度为 80 °C (暂定) 进行优化实验。考察萃取时间为 10、20、30、40、50 min 时的出峰数量及峰面积, 如图 4 所示。在萃取时间为 30 min 时出峰较多、峰面积之和较大, 因此确定萃取时间为 30 min。

### 2.1.5 萃取温度优化

固定平衡时间为 30 min、萃取时间为 30 min 进行萃取温度优化。考察萃取温度为 50、60、70、80、

90 °C 时的出峰数量及峰面积, 结果如图 5 所示。在萃取温度为 80 °C 时物质检出峰和峰面积都高于其他温度, 因此确定萃取温度为 80 °C。

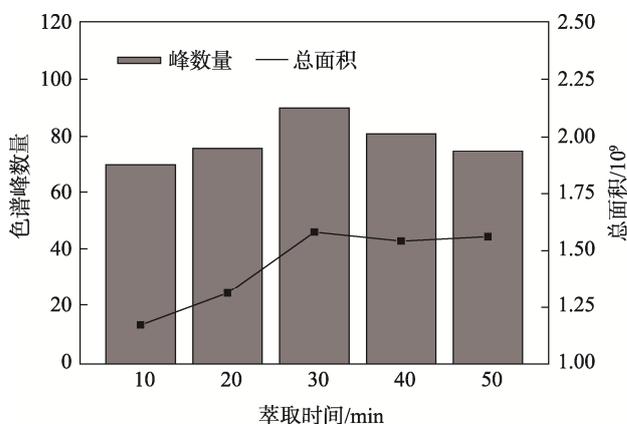


图 4 不同萃取时间的萃取效果  
Fig.4 Extraction effects under different extraction time

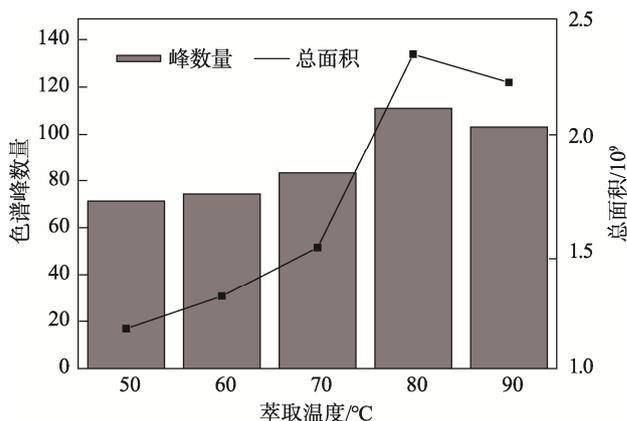


图 5 在不同萃取温度下的萃取效果  
Fig.5 Extraction effects under different extraction temperature

## 2.2 包装印刷品中挥发性/半挥发性成分的识别模式

包装印刷品中的成分较复杂, 将检测后的数据直接进行自动积分, 所产生的色谱峰数量庞杂, 因此这里采用解卷积+匹配度法+保留指数法对检测出的化合物进行成分识别, 其结果更准确。以包装印刷品 1 为例, 识别步骤如下。

1) 采用安捷伦未知物分析软件中的解卷积分析功能对检测出的化合物进行分析, 进一步确定化合物的识别结果比直接积分的结果少, 表明化合物的识别精度和准确度得到提高。

2) 将质谱匹配度大于 75% 的解卷积处理结果与 NIST 库中的化合物进行对比, 进一步提高识别准确度。

3) 经过前 2 个步骤的识别, 部分色谱峰依旧会有多个化合物与之匹配, 因此最后计算步骤 2) 中识别出的化合物的保留指数, 并与 NIST 库中的数据进行比较。若保留指数匹配后仍有多个化合物满足匹配条件, 则选择保留指数更接近的化合物作为最终的定性结果。

进一步研究 5 种产品中识别出的化合物, 具有气味的成分共计 82 种。其中, 酮类化合物有 9 种, 醛类化合物有 15 种, 酯类化合物有 15 种, 醇类化合物有 15 种, 醚类化合物有 4 种, 酸类化合物有 3 种, 芳香烃类化合物有 9 种, 杂环化合物有 6 种, 倍半萜类化合物有 2 种, 胺类化合物有 4 种。

对定性后的物质进行定量分析, 利用归一化法进行相关数据处理。通过内标化合物质量浓度、内标峰面积及化合物峰面积计算化合物的质量浓度。在一个样品中, 以可定性物质质量浓度的总和为分母, 单个可定性物质的质量浓度为分子, 计算其相对含量。如图 6 所示, 在样品 1 中, 醛类和醇类化合物的相对含量较高, 分别为 20.14%、20.88%, 酸类和胺类化合物相对含量较低, 均为 0%; 在样品 2 中, 醛类和醇类化合物的相对含量较高, 分别为 15.04%、31.92%, 酸类和胺类化合物相对含量较低, 均为 0%; 在样品 3 中, 酯类和胺类化合物的相对含量较高, 分别为 47.20%、11.55%, 酸类和倍半萜类化合物相对含量较低, 分别为 0.81%、0%; 在样品 4

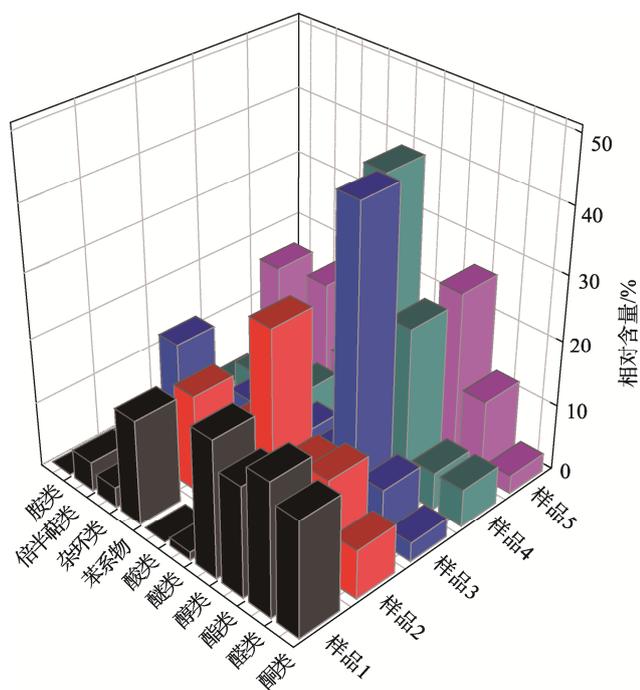


图 6 5 种样品中挥发性/半挥发性物质成分汇总  
Fig.6 Summary of volatile/semi-volatile components in five samples

中, 酯类和醇类化合物的相对含量较高, 分别为 25.24%、45.49%, 醚类和胺类化合物相对含量较低, 分别为 0%、0.62%; 在样品 5 中, 酯类和杂环类化合物的相对含量较高, 分别为 26.31%、17.07%, 酮类和倍半萜类化合物的相对含量较低, 分别为 2.76%、0%。这是由于 5 种样品采用的印刷工艺及原辅材料差异较大, 导致产品中的气味成分和含量差异较大。

## 2.3 包装印刷品中关键气味成分分析

通过资料可知 82 种气味成分的阈值<sup>[14]</sup>, 并计算 OAV 值。通常认为, OAV 值 $\geq 1$  的物质对整体气味有贡献, 而 OAV 值 $\geq 10$  的则为重要气味物质<sup>[13]</sup>。在本研究中, OAV 值 $\geq 1$  的气味物质共有 43 种, 选取 OAV 值 $\geq 10$  的气味物质为研究对象, 结果如表 1 所示。在所有样品中, 醛类、醇类和酯类物质均具有较高的 OAV 值, 表明这 3 类物质对包装印刷品气味的贡献较大。

在醛类物质中, 丁醛、壬醛、癸醛、苯甲醛、十二醛、对甲基苯甲醛、反-2-壬烯醛、乙缩醛和 2-乙基己醛具有很高的 OAV 值, 它们呈现出的气味特征主要为油脂味、果香味、坚果味、谷物味。研究表明, 包装材料中的醛类物质主要来源于印刷用基底材料, 特别是纸张材料, 醛类化合物可能溶解在纤维原料中, 或吸附在纸张纤维表面<sup>[15]</sup>。

在醇类物质中, 癸醇、1-十二醇、1-辛醇和 2-乙基己醇具有很高的 OAV 值, 它们呈现出的气味特征主要为油脂味、花香和刺激性气味。特别是十二醇, 虽然 GB 9685—2016 及烟草包装材料卫生要求等针对这类物质的使用要求是按生产需要适量使用<sup>[16]</sup>, 但基于其气味贡献较大, 因此在使用过程中需要引起重视。

在酯类物质中, 丁酸丁酯、甲基丙烯酸丁酯、丙烯酸丁酯、丙二醇甲醚醋酸酯、乙酸正丙酯、丙烯酸异辛酯和丙酸正丙酯具有很高的 OAV 值, 它们呈现出的气味特征为果香和脂肪香。酯类物质主要用作溶剂、助剂和印刷油墨连接料等, 其使用量较大, 在产品中可能有残留。研究表明, 丙烯酸酯类物质的 OAV 值不是所有物质中最大的, 但广泛存在于光油、油墨、胶水及纸张等原辅材料中, 因此有必要对这类物质的使用进行规范化管控。

除此之外, 芳香烃类物质(乙苯、丙苯、苯乙烯、1-甲基萘)、醚类物质(二乙二醇丁醚)、杂环类物质(2-戊基呋喃)、酮类物质(苯乙酮)都是样品中的关键性气味成分。

表 1 5 种样品中重要气味物质的 OAV 值  
Tab.1 OAV values of important odorants in five samples

| 化合物            | 阈值 <sup>[14]</sup> /<br>(mg·m <sup>-3</sup> ) | OAV 值          |                |                |                |                |
|----------------|---|----------------|----------------|----------------|----------------|----------------|
|                |   | 1 <sup>#</sup> | 2 <sup>#</sup> | 3 <sup>#</sup> | 4 <sup>#</sup> | 5 <sup>#</sup> |
| 丁醛             | 0.001 3                                       | 61.83          | 182.19         | 96.99          | 149.02         |                |
| 壬醛             | 0.02  | 30.29          | 130.47         | 136.81         | 164.41         | 50.16          |
| 癸醛             | 0.094   | —              | 29.09          |                | 53.68          |                |
| 苯甲醛            | 2.1   | 3.55           | 15.35          | 7.07           | 8.69           | 5.11           |
| 十二醛            | 0.033   | 41.66          | 54.20          |                | 141.61         | —              |
| 对甲基苯甲醛         | 0.007 2                                       | 491.36         | —              | —              | —              | —              |
| 反-2-壬烯醛        | 0.001 1                                       | —              | 644.80         | —              | —              | —              |
| 乙缩醛 1,1-二乙氧基乙烷 | 0.004 9                                       | —              | —              | 1.83           | 264.53         | —              |
| 2-乙基己醛         | 0.041   | —              | —              | 62.52          | 36.95          | —              |
| 癸醇             | 0.07  | 140.11         | 31.93          | —              | 16.62          | —              |
| 1-十二醇          | 0.004 1                                       | 1 765.63       | 10 705.29      | 1 691.80       | 3 000.46       | 1 284.58       |
| 1-辛醇           | 0.03  | —              | 47.64          | —              | —              | —              |
| 2-乙基己醇         | 0.74  | 107.95         | 51.59          | —              | —              | —              |
| 丁酸丁酯           | 0.028   | 1.92           | 109.60         | 209.92         | 4.42           | 311.45         |
| 甲基丙烯酸丁酯        | 0.1   | —              | —              | —              | 36.03          | 17.23          |
| 丙烯酸丁酯          | 0.01  | 2 807.23       | 142.74         | 1 689.72       | —              | 241.85         |
| 丙二醇甲醚醋酸酯       | 0.016   | —              | —              | 106.86         | —              | 59.22          |
| 乙酸正丙酯          | 0.6   | 5.41           | 3.18           | 50.35          | —              | —              |
| 丙烯酸异辛酯         | 1.35  | 7.30           | 10.66          | 44.32          | 20.85          | 10.65          |
| 丙酸丁酯           | 0.19  | 31.43          | —              | 47.76          | —              | —              |
| 二乙二醇丁醚醋酸酯      | 0.8   | —              | —              | 1.85           | —              | 24.27          |
| 二乙二醇丁醚         | 0.8   | —              | —              | 15.12          | —              | 2.14           |
| 苯乙酮            | 2.6   | 4.20           | 6.45           | 2.56           | 13.15          | 1.14           |
| 乙苯             | 0.026   | 20.39          | 61.02          | 41.58          | 2.45           | 80.21          |
| 丙苯             | 0.019   | 62.55          | 94.75          | —              | —              | —              |
| 苯乙烯            | 0.73  | 7.14           | 57.35          | 21.55          | 41.12          | 9.55           |
| 1-甲基萘          | 0.02  | —              | —              | —              | 314.24         | —              |
| 2-戊基呋喃         | 0.019   | 14.61          | 34.89          | 26.60          | —              | 35.38          |

### 3 结论

采用自动 HS-SPME-GC-MS 技术进行分析, 利用解卷积+匹配度法+保留指数法对分析出的物质进行定性分析。采用归一化法+内标法对物质的含量进行定量分析, 综合考量气味物质的含量及气味阈值, 开发了一种用于分析包装印刷品中关键气味成分的方法, 为评价气味成分在整个体系中的贡献度提供了一种解决思路。结合电子鼻、感官分析等手段, 可以形成更为完善的气味评价体系, 为产品的质量安全提供技术保障。

#### 参考文献:

- [1] WANG C, LI J, WU X J, et al. Pu-Erh Tea Unique Aroma: Volatile Components, Evaluation Methods and Metabolic Mechanism of Key Odor-Active Compounds[J]. Trends in Food Science & Technology, 2022, 124: 25-37.
- [2] 景波, 杨青华, 林勤保. 基于 GC-MS 和感官评价分析纸包装气味物质对巧克力风味的影响[J]. 包装工程, 2023, 44(1): 259-264.
- JING B, YANG Q H, LIN Q B. Analysis on the Effect of Odour Substances in Paper Packaging Materials on Chocolate Flavor Based on GC-MS and Sensory Evaluation[J]. Packaging Engineering, 2023, 44(1): 259-264.
- [3] 鲍辰卿, 顾文博, 杨程, 等. 气相色谱-质谱-嗅辨法辨析 4 种芹菜籽油树脂中关键香气成分[J]. 食品安全质量检测学报, 2023, 14(1): 204-210.
- BAO C Q, GU W B, YANG C, et al. Identification of

- Key Aroma Components in 4 Kinds of Celery Seed Oleoresin by Gas Chromatography-Mass Spectroscopy-Olfactometry[J]. *Journal of Food Safety & Quality*, 2023, 14(1): 204-210.
- [4] TAN J Z, XU J. Applications of Electronic Nose (E-Nose) and Electronic Tongue (E-Tongue) in Food Quality-Related Properties Determination: A Review[J]. *Artificial Intelligence in Agriculture*, 2020, 4: 104-115.
- [5] WANG X J, GUO M Y, SONG H L, et al. Characterization of Key Odor-Active Compounds in Commercial High-Salt Liquid-State Soy Sauce by Switchable GC/GC-GC-Olfactometry-MS and Sensory Evaluation[J]. *Food Chemistry*, 2021, 342: 128224.
- [6] UETA I, KOMATSU T, FUJIMURA K, et al. Porous Membrane-Assisted Purge and Trap Sampling for Determination of VOCs in Gas Chromatography with Needle-Type Extraction Device[J]. *Chromatographia*, 2022, 85(1): 7-12.
- [7] ZHANG Y C, LIN Q B, ZHONG H N, et al. Identification and Source Analysis of Volatile Flavor Compounds in Paper Packaged Yogurt by Headspace Solid-Phase Microextraction-Gas Chromatography-Mass Spectrometry[J]. *Food Packaging and Shelf Life*, 2022, 34: 100947.
- [8] CHEN Y, LI P, LIAO L Y, et al. Characteristic Fingerprints and Volatile Flavor Compound Variations in Liuyang Douchi during Fermentation via HS-GC-IMS and HS-SPME-GC-MS[J]. *Food Chemistry*, 2021, 361: 130055.
- [9] 潘曦, 杨俊鹏, 王昊, 等. 基于 SPME-GC-MS 分析卷烟包装材料挥发性气体的研究[J]. *包装工程*, 2021, 42(17): 118-124.
- PAN X, YANG J P, WANG H, et al. Analysis of Volatile Gas in Cigarette Packaging Materials Based on SPME-GC-MS[J]. *Packaging Engineering*, 2021, 42(17): 118-124.
- [10] ZELLNER B D, BICCHI C, DUGO P, et al. Linear Retention Indices in Gas Chromatographic Analysis: A Review[J]. *Flavour and Fragrance Journal*, 2008, 23(5): 297-314.
- [11] 李美萍, 李彩林, 王华瑞, 等. 顶空固相微萃取-气相色谱-嗅闻-质谱联用分析红香酥梨的香气成分[J]. *食品研究与开发*, 2020, 41(6): 130-139.
- LI M P, LI C L, WANG H R, et al. Analysis of Aroma Compounds in Red Fragrant Pear by Headspace Solid Phase Micro-Extraction and Gas Chromatography-Olfactometry-Mass Spectrometry[J]. *Food Research and Development*, 2020, 41(6): 130-139.
- [12] 荣波, 蒋青香, 林诗笛, 等. 基于 GC-MS-O 结合 OAV 比较铁观音和白芽奇兰茶叶的香气品质[J]. *现代食品科技*, 2022, 38(12): 351-363.
- RONG B, JIANG Q X, LIN S D, et al. Comparison of the Aroma Qualities of Tieguanyin and Baiyaqilan Teas Based on GC-MS-O and OAV[J]. *Modern Food Science and Technology*, 2022, 38(12): 351-363.
- [13] ZHU J C, NIU Y W, XIAO Z B. Characterization of the Key Aroma Compounds in Laoshan Green Teas by Application of Odour Activity Value (OAV), Gas Chromatography-Mass Spectrometry-Olfactometry (GC-MS-O) and Comprehensive Two-Dimensional Gas Chromatography Mass Spectrometry (GC-GC-MS)[J]. *Food Chemistry*, 2021, 339: 128136.
- [14] 里奥范海默特. 化合物嗅觉阈值汇编[M]. 2 版. 李智宇, 王凯, 冒德寿, 等, 译. 北京: 科学出版社, 2018: 230-469.
- VAN GEMERT L J. *Compilations of Odors Threshold Values in Air, Water and Other Media*[M]. 2nd ed. LI Z Y, WANG K, MAO D S, et al, Trans. Beijing: Science Press, 2018: 230-469.
- [15] 景波, 杨青华, 林勤保. 顶空/气相色谱-质谱联用结合化学计量学分析金属油墨印刷纸制品中气味物质[J]. *分析测试学报*, 2022, 41(6): 873-881.
- JING B, YANG Q H, LIN Q B. Determination of Odour Substances in Metallic Ink-Printed Paperboards by Headspace Gas Chromatography-Mass Spectrometry with Chemometrics Approach[J]. *Journal of Instrumental Analysis*, 2022, 41(6): 873-881.
- [16] 国家卫生和计划生育委员会. 食品安全国家标准食品接触材料及制品用添加剂使用标准: GB 9685—2016[S]. 北京: 中国标准出版社, 2017.
- National Food Safety Standard-Standard for Uses of Additives in Food Contact Materials and Their Products: GB 9685-2016[S]. Beijing: Standards Press of China, 2017.