

# 苦水玫瑰花露中挥发性香气成分分析

雷春妮,王 波,解迎双,周小平\*,孙苗苗,王亚琴

兰州海关技术中心<sup>1</sup>,兰州 730010

**摘要:**以苦水玫瑰花水为原料,分别采用液液萃取法、顶空法、固相微萃取法和吹扫捕集法提取玫瑰花水香气成分,使用气相色谱-质谱法(GC-MS)结合 Massworks™ 质谱解析软件鉴定分析,结果表明,吹扫捕集法因提取效果好、操作简单、重复性好、绿色环保、自动化程度高等优点,更适用于玫瑰花露香气成分的批量快速分析。玫瑰花水和细胞液共鉴定出香气成分 74 种,其中玫瑰花水 70 种,细胞液 67 种;玫瑰花水和细胞液共有成分 62 种,相对含量之和分别为 81.17%、90.75%;玫瑰花水特有成分 7 种,相对含量之和为 5.90%,细胞液特有成分 4 种,相对含量之和为 1.45%。玫瑰花水和细胞液香气成分存在差异。

**关键词:**玫瑰花水;细胞液;香气;吹扫捕集-气相色谱/质谱联用技术

中图分类号:S573+.7;O657.7

文献标识码:A

文章编号:1001-6880(2019)Suppl-0058-06

DOI:10.16333/j.1001-6880.2019.S.008

## Analysis of volatile aroma components in Kushui rose water

LEI Chun-ni, WANG Bo, XIE Ying-shuang, ZHOU Xiao-ping\*, SUN Miao-miao, WANG Ya-qin

Lanzhou Customs Technology Center, Lanzhou 730010, China

**Abstract:** The Kushui rose water was used as the raw material to extract the aroma components of rose water by liquid-liquid extraction, headspace method, solid phase microextraction and purging and trapping, respectively. Gas chromatography-mass spectrometry (GC-MS) was combined with Massworks™. The identification analysis of mass spectrometry software shows that the purging and trapping method is more suitable for batch rapid analysis of rose aroma components because of its good extraction effect, simple operation, good repeatability, green environmental protection and high degree of automation. A total of 74 kinds of aroma components were identified in rose water and cell fluid, including 70 kinds of rose water and 67 kinds of cell fluid. There are 62 kinds of ingredients in rose water and cell fluid, and the relative content is 81.17% and 90.75% respectively. There are 7 unique components of rose water, the sum of relative contents is 5.90%, the unique components of cell fluid are 4, and the sum of relative contents is 1.45%. There was a difference between rose water and cell liquid aroma components.

**Key words:** rose water; cell fluid; aroma; purging and trapping-gas chromatography/mass spectrometry

中国苦水玫瑰是中国玫瑰和钝齿蔷薇的杂交种,主要种植地在中国西北部的甘肃永登县,历经 200 多年的栽培,形成了闻名遐迩的“苦水玫瑰”品牌,苦水镇也因此享有“中国玫瑰第一乡”的美誉。苦水玫瑰花主要用途是用来提取玫瑰精油,近几年为了综合利用玫瑰花资源,提高玫瑰花的附加值,市面上出现了玫瑰花水和玫瑰鲜花细胞液等产品。玫瑰花水是玫瑰精油在蒸馏萃取过程中产生的一种副

产品,含有微量玫瑰精油成分的产品,适量的玫瑰花水具有抗衰老的功效<sup>[1]</sup>;玫瑰鲜花细胞液是玫瑰鲜花细胞中的挥发性物质在低温条件下冷凝而成的液体,具有玫瑰鲜花的自然花香<sup>[2]</sup>。本文中玫瑰花水和玫瑰鲜花细胞液均称为“玫瑰花露”。由于国内外还没有玫瑰花露相关的加工工艺标准以及产品的行业和国家标准,玫瑰花露生产工艺不尽合理,生产过程没有质量控制措施,生产的玫瑰花露产品质量层次不齐。玫瑰花露香气与其质量和经济效益呈正相关,是消费者重点关注的一个指标,是确定玫瑰花水质量优劣的主要依据。苦水玫瑰的研究主要集中在玫瑰精油方面<sup>[3-7]</sup>,而对玫瑰花露的研究较少,目

收稿日期:2019-07-01 接受日期:2019-07-11

基金项目:兰州海关科技计划(2017GK003);甘肃省科技支撑计划(1604NKCA079)

\*通信作者 Tel:86-018153636915;E-mail:zhxp1123@163.com

前,尚未见到对玫瑰花水和玫瑰花细胞液香气成分差异的研究报道。

本研究以中国苦水玫瑰花露为研究对象,采用顶空法、固相微萃取法、液-液萃取法和吹扫捕集法富集其香气组分,经气相色谱分离,对其主要香气组分进行定性定量分析,并对玫瑰花水和玫瑰鲜花细胞液香气成分的差异进行研究分析,旨在建立玫瑰花露香气成分快速批量检测方法,为玫瑰花露相关标准的制定提供技术支撑和数据支持。

## 1 材料与方法

### 1.1 材料与设备

样品:玫瑰花水和玫瑰鲜花细胞液均由甘肃皓思玫瑰有限公司提供。

仪器:Sigma 3K30 高速冷冻离心机 德国 Sigma 公司;AutoHS 自动顶空进样器 中国成都科林仪器公司;手动固相微萃取装置、萃取纤维头(2 cm ~ 50/30  $\mu\text{m}$  DVB/CAR/PDMS、85  $\mu\text{m}$ PA、100  $\mu\text{m}$ PDMS) 美国 Supelco 公司;吹扫捕集浓缩仪 美国 OI 公司;Clarus 600 气相色谱仪 美国 PE 公司;GCMS-QP2010 Ultra 气相色谱/质谱联用仪 日本岛津公司;Massworks<sup>TM</sup> 质谱解析软件 美国 Cerno Bioscience 公司。

### 1.2 实验方法

#### 1.2.1 顶空法

用 10 mL 移液枪准确吸取 10.00 mL 玫瑰花露样品置于 20 mL 顶空瓶中,加入 2 g NaCl,用聚四氟乙烯隔垫密封后,待 HS-GC 分析。

顶空仪参数:加压-置换时间:120 s;进样时间:60 s;放空时间:20 s;恒温时间:40 min;循环时间:35 min;振动时间:5 min;炉温:80  $^{\circ}\text{C}$ ;针温:105  $^{\circ}\text{C}$ ;传输线温度:105  $^{\circ}\text{C}$ ;载气压力:90 kpa。

#### 1.2.2 固相微萃取法

用 10 mL 移液枪准确吸取 10.00 mL 玫瑰花露样品置于 20 mL 顶空瓶中,加入 2 g NaCl,用聚四氟乙烯隔垫密封,置于集热式恒温加热器中,在 70  $^{\circ}\text{C}$  下平衡 30 min 后,将已活化好的 SPME 纤维头(250  $^{\circ}\text{C}$  活化 20 min)插入顶空瓶中萃取 40 min 后,立刻 GC 进样分析。

#### 1.2.3 液-液萃取法

用 10 mL 移液枪准确吸取 10.00 mL 的玫瑰花露样品于 50 mL 离心管中,加入 5 mL 二氯甲烷,涡旋 2 min,高速冷冻离心 5 min(转速 13 000 rpm)后,取二氯甲烷层于进样小瓶,待 GC 分析。

#### 1.2.4 吹扫捕集法

用 10 mL 移液枪准确吸取 10.00 mL 玫瑰花露样品置于 40 mL 吹扫瓶中,加入 2 g NaCl,待吹扫捕集-气相色谱仪、吹扫捕集-气相色谱/质谱仪进样分析。

吹扫捕集仪参数:吹扫流量:40 mL/min;吹扫温度:40  $^{\circ}\text{C}$ ;预热时间:2 min;吹扫时间:13 min;干吹时间:2 min;预脱附温度:180  $^{\circ}\text{C}$ ;脱附温度:190  $^{\circ}\text{C}$ ;脱附时间:2 min;烘烤温度:200  $^{\circ}\text{C}$ ;烘烤时间:8 min;传输线温度:200  $^{\circ}\text{C}$ ;载气:高纯氮气(纯度  $\geq 99.999\%$ )。

#### 1.2.5 色谱参数

色谱参数:色谱柱:HP-INNOWAX(60 m  $\times$  0.250 mm  $\times$  0.50  $\mu\text{m}$ );程序升温:初始温度 60  $^{\circ}\text{C}$ ,保持 1.0 min,以 2  $^{\circ}\text{C}/\text{min}$  升至 212  $^{\circ}\text{C}$ ,保持 1 min;载气:高纯氮;流量:0.8 mL/min;分流比:30:1;FID 检测器温度:260  $^{\circ}\text{C}$ ;进样口温度:260  $^{\circ}\text{C}$ 。

质谱参数:离子源温度:230  $^{\circ}\text{C}$ ;传输线温度:250  $^{\circ}\text{C}$ ;电离方式:EI;电子能量:70 eV;扫描范围: $m/z$  30 ~ 500;采集方式为全扫描模式。

## 2 结果与讨论

### 2.1 提取方法的选择

以玫瑰花水为原料,选择玫瑰花水香气组分的总峰面积、总峰个数作为分析依据<sup>[8]</sup>,对提取方法进行优选。同一玫瑰花水样品在不同的提取方式下富集香气组分,气相色谱仪器进样参数一致,色谱图在同一积分事件下获得色谱图峰面积和峰个数数据,顶空法、固相微萃取法、液液萃取法和吹扫捕集法提取玫瑰花水香气组分对比结果见图 1。液-液萃取法,色谱图出峰较少,峰响应也较低,且需消耗大量有机溶剂,危害人体健康,造成环境污染;顶空-气相色谱法虽然操作简单,但色谱图出峰较少且峰响应较低;顶空-固相微萃取富集效果好,峰形好,出峰也多,但由于萃取头涂层的选择性,样品成分富集不完全,并且前处理所花费的时间较长,试验成本较高,不适用于玫瑰花水挥发性香气成分的大批量快速检测。吹扫捕集法获得的峰较多,峰响应也高,该法绿色环保,自动化纯度高,可实现苦水玫瑰花水中的挥发性香气组分快速检测的需求,故本研究选用吹扫捕集法富集玫瑰花水的香气组分。

### 2.2 玫瑰花露香气组分分析

Massworks<sup>TM</sup> 质谱解析软件利用其精确质量数测定和同位素峰形校正专利技术,让低分辨质谱真

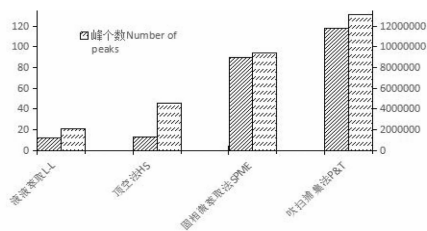


图1 不同提取方法对萃取效果的影响

Fig. 1 Comparison of extraction efficiencies of different extraction methods for volatile compounds in olive oil

正实现高分辨的功能,在地分辨的质谱上进行精确质量数测定,并且对候选化合物进行同位素峰型检索,确定最为可能的唯一化合物分子式,提高了低分辨质谱定性的准确度<sup>[9,10]</sup>。本文采用吹扫捕集-气相色谱/质谱法分析玫瑰花露的香气成分,利用NIST 11标准谱库对其香气组分进行初步定性,然后用Massworks<sup>TM</sup>质谱解析软件对GC-MS谱图进行

校正,测定各组分的模拟精准分子量,对香气组分进一步鉴定,最后鉴定结果,采用标准品对玫瑰花露香气的部分组分进行验证,最终得到玫瑰花露香气组分的定性结果。其总离子流图见图2,定性定量结果见表1。

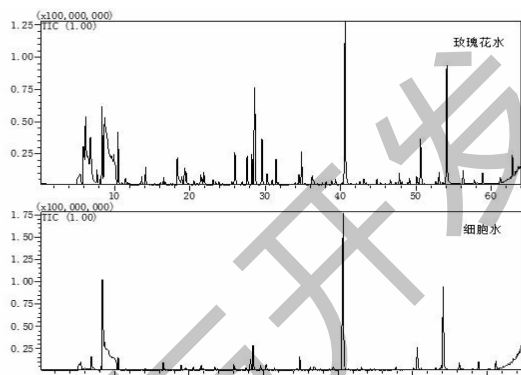


图2 玫瑰花水和细胞水的香气成分总离子流图

Fig. 2 Total ion flow diagram of aroma components of rose water and rosette cell water

表1 玫瑰花露香气组分鉴定结果及相对含量

Table 1 Identification results and relative content of rose aroma components

序号 No.	化合物 Compound	保留时间 $t_R$ (min)	峰面积 Peak area		峰面积百分比 Peak area percentage (%)		定性方式 Qualitative way
			玫瑰花水 Rose water	细胞液 Cell fluid	玫瑰花水 Rose water	细胞液 Cell fluid	
1	甲硫醚	6.180	649 598 585	ND	4.95	ND	NIST11、Massworks <sup>TM</sup>
2	丙酮	6.823	518 791 532	126 003 912	3.95	1.48	NIST11、Massworks <sup>TM</sup>
3	乙酸乙酯	7.689	97 344 435	1 039 813	0.74	0.01	NIST11、Massworks <sup>TM</sup>
4	2-丁酮	8.101	21 990 602	21 454 484	0.17	0.25	NIST11、Massworks <sup>TM</sup>
5	乙醇	9.654	2 882 357 714	2 889 915 327	21.97	34.00	NIST11、Massworks <sup>TM</sup>
6	3-庚烯-2-酮	10.482	290 323 135	82 843 395	2.21	0.97	NIST11、Massworks <sup>TM</sup>
7	2,3-辛二醇	10.772	ND	5 383 774	ND	0.06	NIST11、Massworks <sup>TM</sup>
8	仲丁酮	11.006	12 275 178	2 994 746	0.09	0.04	NIST11、Massworks <sup>TM</sup>
9	2-甲基-3-丁烯-2-醇	11.460	55 865 695	11 374 393	0.43	0.13	NIST11、Massworks <sup>TM</sup>
10	2-硝基-1-丁醇	11.778	11 433 501	791 541	0.09	0.01	NIST11、Massworks <sup>TM</sup>
11	正己醛	13.338	10 817 920	2 438 931	0.08	0.03	NIST11、Massworks <sup>TM</sup>
12	异丁醇	13.610	58 150 680	3 925 610	0.44	0.05	NIST11、Massworks <sup>TM</sup>
13	2-乙基-2,6,6-三甲基四氢-2H-吡喃	14.148	93 562 036	13 252 457	0.71	0.16	NIST11、Massworks <sup>TM</sup>
14	3-甲基-1-戊烯-3-醇	15.354	7 207 323	2 883 199	0.05	0.03	NIST11、Massworks <sup>TM</sup>
15	正己醇	16.135	18 504 562	6 196 204	0.14	0.07	NIST11、Massworks <sup>TM</sup>
16	月桂烯	16.530	33 822 608	54 142 920	0.26	0.64	NIST11、Massworks <sup>TM</sup>
17	1-戊烯-3-醇	16.729	18 638 674	9 193 900	0.14	0.11	NIST11、Massworks <sup>TM</sup>
18	A-水芹烯	17.005	5 024 677	8 087 913	0.04	0.1	NIST11、Massworks <sup>TM</sup>

续表 1 (Continued Tab. 1)

序号 No.	化合物 Compound	保留时间 $t_R$ (min)	峰面积 Peak area		峰面积百分比 Peak area percentage (%)		定性方式 Qualitative way
			玫瑰花水 Rose water	细胞液 Cell fluid	玫瑰花水 Rose water	细胞液 Cell fluid	
19	异戊酸丁酯	17.431	8 551 441	ND	0.07	ND	NIST11、Massworks <sup>TM</sup>
20	4-卡烯	17.789	5 971 826	7 775 111	0.05	0.09	NIST11、Massworks <sup>TM</sup>
21	2-庚酮	18.350	204 151 148	7 466 701	1.56	0.09	NIST11、Massworks <sup>TM</sup>
22	庚醛	18.680	32 260 924	1 064 731	0.25	0.01	NIST11、Massworks <sup>TM</sup>
23	(+)-柠檬烯	18.934	61 355 041	39 870 810	0.47	0.47	NIST11、Massworks <sup>TM</sup>
24	2-甲基丁醇	19.250	64 205 853	5 845 628	0.49	0.07	NIST11、Massworks <sup>TM</sup>
25	异戊醇	19.363	143 384 825	15 145 830	1.09	0.18	NIST11、Massworks <sup>TM</sup>
26	桉叶油素	19.856	10 100 182	5 053 277	0.08	0.06	NIST11、Massworks <sup>TM</sup>
27	2,2-二甲基-5-(1-甲基-1-丙烯基) 四氢呋喃	20.069	11 658 961	ND	0.09	ND	NIST11、Massworks <sup>TM</sup>
28	(E)- $\beta$ -罗勒烯	20.569	26 887 125	24 302 040	0.20	0.29	NIST11、Massworks <sup>TM</sup>
29	2-己烯醛	20.949	18 022 827	ND	0.14	ND	NIST11、Massworks <sup>TM</sup>
30	罗勒烯	21.480	68 966 077	14 931 127	0.53	0.18	NIST11、Massworks <sup>TM</sup>
31	正戊醇	21.868	90 227 476	26 164 083	0.69	0.31	NIST11、Massworks <sup>TM</sup>
32	乙酸己酯	23.104	31 392 763	31 913 763	0.24	0.38	NIST11、Massworks <sup>TM</sup>
33	萜品油烯	23.864	16 719 607	12 646 421	0.13	0.15	NIST11、Massworks <sup>TM</sup>
34	1-甲基庚基乙酸酯	24.350	10 598 122	2 797 430	0.08	0.03	NIST11、Massworks <sup>TM</sup>
35	2,3-二甲基-1-丁醇	25.595	18 506 716	1 395 883	0.14	0.02	NIST11、Massworks <sup>TM</sup>
36	2-庚醇	25.991	246 212 427	75 705 124	1.88	0.89	NIST11、Massworks <sup>TM</sup>
37	甲基庚烯酮	27.634	154 487 005	26 396 982	1.18	0.31	NIST11、Massworks <sup>TM</sup>
38	正己醇	28.245	173 809 734	110 260 130	1.32	1.3	NIST11、Massworks <sup>TM</sup>
39	(+)-玫瑰醚	28.622	710 417 694	255 592 713	5.41	3.01	NIST11、Massworks <sup>TM</sup>
40	(-)-玫瑰醚	29.598	302 536 417	49 791 650	2.31	0.59	NIST11、Massworks <sup>TM</sup>
41	2-乙基己基乙酸	30.088	3 895 026	8 841 795	0.03	0.1	NIST11、Massworks <sup>TM</sup>
42	叶醇	30.376	ND	69 240 402	ND	0.81	NIST11、Massworks <sup>TM</sup>
43	2-壬酮	30.946	30 699 481	5 620 171	0.23	0.07	NIST11、Massworks <sup>TM</sup>
44	苜甲醚	31.449	145 183 402	19 544 420	1.11	0.23	NIST11、Massworks <sup>TM</sup>
45	顺-2-己烯-1-醇	31.730	16 067 023	7 291 758	0.12	0.09	NIST11、Massworks <sup>TM</sup>
46	1-(1-甲基-2-环戊烯基)乙酮	33.993	16 608 600	4 879 202	0.13	0.06	NIST11、Massworks <sup>TM</sup>
47	氧化芳樟醇	34.496	74 553 112	23 915 354	0.57	0.28	NIST11、Massworks <sup>TM</sup>
48	正庚醇	34.839	199 383 356	129 099 580	1.52	1.52	NIST11、Massworks <sup>TM</sup>
49	6-甲基-5-庚烯-2-醇	35.278	16 237 078	6 642 694	0.12	0.08	NIST11、Massworks <sup>TM</sup>
50	2-壬烯醇	36.916	11 279 315	62 827 443	0.09	0.74	NIST11、Massworks <sup>TM</sup>
51	2-壬醇	38.832	26 220 207	19 280 637	0.20	0.23	NIST11、Massworks <sup>TM</sup>
52	乙酸松油酯	39.339	34 839 422	35 105 450	0.27	0.41	NIST11、Massworks <sup>TM</sup>
53	r-萜品醇	40.255	20 623 293	10 522 535	0.16	0.12	NIST11、Massworks <sup>TM</sup>
54	芳樟醇	40.642	1 392 227 104	2 028 482 024	10.61	23.87	NIST11、Massworks <sup>TM</sup> 、标准品
55	正辛醇	41.394	9 259 927	16 196 492	0.07	0.19	NIST11、Massworks <sup>TM</sup>
56	异蒲勒醇	42.581	ND	13 973 102	ND	0.16	NIST11、Massworks <sup>TM</sup>
57	2-十一酮	44.327	5 798 206	14 232 565	0.04	0.17	NIST11、Massworks <sup>TM</sup>
58	4-萜烯醇	44.849	42 260 320	9 558 457	0.32	0.11	NIST11、Massworks <sup>TM</sup>
59	甲酸香草酯	45.350	11 850 388	5 837 038	0.09	0.07	NIST11、Massworks <sup>TM</sup>
60	苯酸甲酯	46.634	25 971 914	ND	0.20	ND	NIST11、Massworks <sup>TM</sup>

续表 1 (Continued Tab. 1)

序号 No.	化合物 Compound	保留时间 $t_r$ (min)	峰面积 Peak area		峰面积百分比 Peak area percentage (%)		定性方式 Qualitative way
			玫瑰花水 Rose water	细胞液 Cell fluid	玫瑰花水 Rose water	细胞液 Cell fluid	
61	乙酸香茅酯	47.824	64 757 941	38 173 261	0.49	0.45	NIST11、Massworks <sup>TM</sup> 、标准品
62	2,6-二甲基-5,7-辛二烯-2-醇	48.172	19 480 372	ND	0.15	ND	NIST11、Massworks <sup>TM</sup>
63	苯甲酸乙酯	49.138	39 323 239	ND	0.30	ND	NIST11、Massworks <sup>TM</sup>
64	(Z)-3,7-二甲基-2,6-辛二烯醛	50.103	47 013 295	20 491 543	0.36	0.24	NIST11、Massworks <sup>TM</sup>
65	A-松油醇	50.290	8 549 311	1089923	0.07	0.01	NIST11、Massworks <sup>TM</sup> 、标准品
66	乙酸苜酯	52.632	17 996 306	4 330 231	0.14	0.05	NIST11、Massworks <sup>TM</sup>
67	(E)-3,7-二甲基-2,6-辛二烯醛	53.082	71 973 559	20 269 622	0.55	0.24	NIST11、Massworks <sup>TM</sup>
68	3,7-二甲基-6-辛烯-1-醇	53.848	ND	35 876 868	ND	0.42	NIST11、Massworks <sup>TM</sup>
69	香茅醇	54.115	889 741 216	912 236 822	6.78	10.73	NIST11、Massworks <sup>TM</sup> 、标准品
70	橙花醇	56.284	83 609 921	70 390 399	0.64	0.83	NIST11、Massworks <sup>TM</sup> 、标准品
71	乙酸苯乙酯	57.764	20 721 591	3 211 379	0.16	0.04	NIST11、Massworks <sup>TM</sup>
72	香叶醇	58.857	60 710 933	73 242 911	0.46	0.86	NIST11、Massworks <sup>TM</sup> 、标准品
73	苯甲醇	61.204	38 806 019	79 006 651	0.30	0.93	NIST11、Massworks <sup>TM</sup> 、标准品
74	苯乙醇	61.953	4 472 166	6 014 707	0.03	0.07	NIST11、Massworks <sup>TM</sup> 、标准品

苦水玫瑰花水和细胞水共鉴定出 74 种香气组分,主要有醇类、酮类、醛类、酯类、萜烯类和醚类,其中玫瑰花水 70 种,细胞液 67 种。由表 1 看出,苦水玫瑰花水和细胞液在种类和含量上均存在差异,二者共有成分包括香茅醇、橙花醇、香叶醇、苯乙醇等 62 种,在苦水玫瑰花水和细胞水中相对含量之和分别为 81.17%、90.75%;玫瑰花水特有成分有甲硫醚、异戊酸丁酯、2,2-二甲基-5-(1-甲基-1-丙烯基)四氢呋喃、2-己烯醛、苯甲酸甲酯、2,6-二甲基-5,7-辛二烯-2-醇、苯甲酸乙酯 7 种,相对总含量为 5.90%;细胞液特有成分有 2,3-辛二醇、叶醇、异蒲勒醇、3,7-二甲基-6-辛烯-1-醇 4 种,相对总含量为 1.45%。

苦水玫瑰花露独特的香型是由一种或几种香气成分起主导作用,其余起协调作用,由于各种成分的比例不同,从而表现出不同的香韵。玫瑰花露香气成分分类比较结果如图 3 所示:苦水玫瑰花水和细胞液中醇类化合物含量明显高于其他化合物,共鉴定出 35 种醇类化合物,玫瑰花水 31 种,细胞液 34 种,相对含量分别为 51.16%、79.34%,主要醇类物质有乙醇、正己醇、正庚醇、芳樟醇、香茅醇等,这些化合物对玫瑰花露的香气特征有积极的贡献。细胞液中芳樟醇、香茅醇含量均高于玫瑰花水,导致这方面的原因可能是细胞液和玫瑰花水加工工艺不同,

玫瑰花水加工工艺中,油水分离得到玫瑰精油和玫瑰花水,据 GB/T 22443-2018 知苦水玫瑰精油中芳樟醇、香茅醇相对含量分别高达 1.0~3.5%、38.0~50.0%<sup>[11]</sup>,因此可能导致玫瑰花水中芳樟醇、香茅醇含量较低。GB/T 22443-2018 中中国苦水玫瑰精油代表性和特征性组分苯乙醇、橙花醇、香叶醇,在玫瑰花水和细胞液中也均有检出。此外,玫瑰花水特有成分有 2,6-二甲基-5,7-辛二烯-2-醇,细胞液特有成分有 2,3-辛二醇、叶醇、异蒲勒醇、3,7-二甲基-6-辛烯-1-醇,其中叶醇具有叶青香和淡月季的清香<sup>[12]</sup>。

酮类、醛类、酯类和萜烯类各化合物也是玫瑰花露香气组分中的重要组成成分。玫瑰花水和细胞液中酮类物质差异显著,相对总含量分别为 9.56%、3.44%,据文献<sup>[13]</sup>报道,这些成分使玫瑰花露类带有油脂气。醛类物质在玫瑰花水和细胞液中的种类、含量均存在差异,玫瑰花水鉴定出 5 种,相对含量之和为 1.30%,特有成分有 2-己烯醛;细胞液 4 种,相对含量之和为 0.49%;其中共有成分正己醛呈清香和草香。玫瑰花水和细胞液鉴定出 7 种萜烯类物质,其(+)-柠檬烯有类似柠檬的香味,罗勒烯有草香、花香并伴有橙花油气息。萜醛类化合物是玫瑰香气成分中不可缺少的组成部分,它赋予玫瑰花露以新鲜的头香和天然感<sup>[14]</sup>。酯类物质在玫瑰

花水识别出 11 种, 相对含量为 2.78%; 细胞液 8 种, 相对含量为 1.44%, 主要为玫瑰花露提供水果香。此外, 醚类和其他类化合物也是玫瑰花露香气不可或缺的成分, 玫瑰花水中玫瑰醚含量明显高于细胞液, 玫瑰醚有青甜的花香香气, 稀释是有玫瑰和新鲜的香叶香气; (+)-玫瑰醚香气偏甜又细腻, (-)-玫瑰醚偏青, 左旋体香气较右旋体甜, 右旋体稍带辛香气息。以上讨论表明, 醇类、酮类、醛类、酯类、萜烯类和醚类在玫瑰花水和细胞液香气中的贡献存在差异。

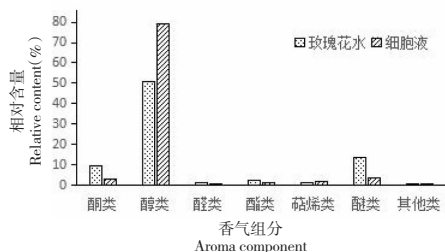


图 3 玫瑰花露香气成分分类分析

Fig. 3 Classification analysis of aroma components of rose flower

### 3 结论

3.1 吹扫捕集法相较于液液萃取法、顶空法及固相微萃取法, 因其提取效果好, 操作简单, 绿色环保, 自动化程度高, 可实现苦水玫瑰花露香气组分的批量快速检测, 更适用于玫瑰花露香气成分的提取分析。

3.2 吹扫捕集-气相色谱/质谱法结合 Massworks™ 质谱解析软件共鉴定出玫瑰花水成分 70 种, 主要包括醇类(51.16%)、酮类(9.56%)、醛类(1.30%)、酯类(2.78%)、萜烯类(1.68%)、醚类(13.78%)、其他类(0.83%); 与细胞液比较, 玫瑰花水特有成分有甲硫醚、异戊酸丁酯、2,2-二甲基-5-(1-甲基-1-丙烯基)四氢呋喃、2-己烯醛、苯甲酸甲酯、2,6-二甲基-5,7-辛二烯-2-醇、苯甲酸乙酯 7 种, 相对总含量为 5.90%。

3.3 吹扫捕集-气相色谱/质谱法结合 Massworks™ 质谱解析软件共鉴定出细胞液成分 67 种, 主要包括醇类(79.34%)、酮类(3.44%)、醛类(0.49%)、酯类(1.44%)、萜烯类(1.92%)、醚类(3.83%)、其他类(0.26%); 与玫瑰花水比较, 细胞液特有成分有 2,3-辛二醇、叶醇、异蒲勒醇、3,7-二甲基-6-辛烯-1-醇 4 种, 相对总含量为 1.45%。

### 参考文献

1 Song WY, Liu YL, Yao L. Comparison of extracted volatile

- compounds from rose water between organic solvent extraction and SPME[J]. J Shanghai Jiao Tong Univ: Agric Sci(上海交通大学学报: 农科版), 2016, 34(4): 57-64.
- Zhang HY, Meng XS, Peng XZ, et al. Analysis and control of flocculent sediments in rose flowers cell sap[J]. Flav Frag Cos(香料香精化妆品), 2011, 5: 13-16.
- Song J, Meng QH, Pan XH. Study on the correlation between the chemical components and the odor type of rose essential oil[J]. Flav Frag Cos(香料香精化妆品), 2018, 1: 5-12.
- Yu F, Zhang B, Zhou W, et al. Extraction and physicochemical properties analysis of rose essential oil[J]. Nat Prod Res Dev(天然产物研究与开发), 2012, 24: 784-789.
- Zhou XS, Jiang YM, Bi Y, et al. Extraction of essential oil from Ku-shui rose and component analysis by GC/MS[J]. Sci Tech Food Ind(食品工业科技), 2009, 30: 226-229.
- Yi Fp, Sun J, Bao XL, et al. Influence of molecular distillation on antioxidant and antimicrobial activities of rose essential oils[J]. LWT, 2019: 102.
- Xiao ZB, Luo J, Niu YW, et al. Characterization of key aroma compounds from different rose essential oils using gas chromatography-mass spectrometry, gas chromatography-olfactometry and partial least squares regression[J]. Nat Prod Res, 2018, 32: 1567-1572.
- Lei CN, Zhou W, Jiang YM, et al. Thermal desorption coupled to gc-ms for analyzing aroma components in fresh corn[J]. Sci Tech Food Ind(食品工业科技), 2014, 35(2): 71-75.
- Li W, Yuan YR, Ouyang WM, et al. Application of MassWorks™ molecular recognition technology in mass spectrometry[J]. Mod Instrum(现代仪器), 2010, 16(5): 11-14.
- Erve JL, Gu M, Wang Y D, et al. Spectral Accuracy of molecular ions in an LTQ/Orbitrap mass spectrometer and implications for elemental composition determination[J]. J Am Soc Mass Spectr, 2009, 20: 2058-2069.
- [11] GB/T 22443-2018 Essential oil of rose, Chinese Kushui type(Rosa sertata × Rosa rugosa).
- Xiao ZB, Li J, Niu YW, et al. Characterization of the key odorants in rose oil by gas chromatography-olfactometry/aroma extract dilution analysis(AEDA), aroma recombination[J]. J Chin Inst Food Sci Tech(中国食品学报), 2018, 18: 319-324.
- Yang L, Cui YN, Liu S, et al. Analysis of the aromatic compositions in Rose damascene[J]. J Beijing Univ Agric(北京农学院学报), 2015, 30(3): 19-23.
- Xu JY, Li Y, Zhang XM, et al. Comparison on components and aroma of rose essential oil from Xinjing Province and Bulgaria[J]. Bev & Fast Froz Food Ind(冷饮与速冻食品工业), 2006, 3: 29-31.