Advances in Analytical Chemistry 分析化学进展, 2026, 16(4), 272-286
Published Online November 2026 in Hans. https://www.hanspub.org/journal/aac
https://doi.org/10.12677/aac.2026.164029

Hans汉斯

基于HS-SPME-GC-MS与化学计量学的不同品种宣木瓜挥发性成分解析

朱茹燕[1*]，王小粤[1*]，宋慧欣[1]，王　伟[2]，柴新义[1]，Abdullah Gera[3]，徐延平[3#]，于士军[1#]

[1]滁州学院现代农业与食品工程学院，安徽　滁州
[2]宣城市农业农村局农产品质量安全中心，安徽　宣城
[3]潍坊理工学院现代农业与环境学院，山东　潍坊

收稿日期：2026年10月11日；录用日期：2026年11月2日；发布日期：2026年11月13日

摘　要

本研究采用顶空固相微萃取－气相色谱－质谱联用(HS-SPME-GC-MS)技术，结合主成分分析(PCA)、偏最小二乘判别分析(PLS-DA)和正交偏最小二乘判别分析(OPLS-DA)等化学计量学方法，系统地分析了安徽宣城产的罗汉脐(LHQ)、苹果红(PGH)和芝麻点(ZMD)三个不同品种宣木瓜的挥发性成分。研究共鉴定出123种挥发性化合物，其中83种为三品种共有。结果显示，LHQ品种检出的挥发性化合物种类最多；三个品种均以烯烃类物质占比最高，与PGH和ZMD相比，LHQ中醇类和环氧化合物的相对峰面积占比较高。多变量统计分析清晰地将三个品种区分开，并成功筛选出29种品种潜在差异标志物。通过两两比较，进一步确定了*β*-Selinene、(R)-Camphor、Longifolene等七种化合物是区分这三个品种的共同核心判别物质。研究为宣木瓜的品种鉴别、品质评价和定向开发利用提供了化学依据。

关键词

木瓜，顶空固相微萃取－气相色谱－质谱联用，挥发性化合物，化学计量学，品种判别

Integrating HS-SPME-GC-MS and Chemometrics to Decode the Volatile Profiles in Different Cultivars of *Chaenomeles speciosa* Fruits

Ruyan Zhu[1*], Xiaoyue Wang[1*], Huixin Song[1], Wei Wang[2], Xinyi Chai[1], Abdullah Gera[3], Yanping Xu[3#], Shijun Yu[1#]

[*]共一作者。
[#]通讯作者。

文章引用: 朱茹燕, 王小粤, 宋慧欣, 王伟, 柴新义, AbdullahGera, 徐延平, 于士军. 基于 HS-SPME-GC-MS 与化学计量学的不同品种宣木瓜挥发性成分解析[J]. 分析化学进展, 2026, 16(4): 272-286. DOI: 10.12677/aac.2026.164029

[1]School of Modern Agriculture and Food Engineering, Chuzhou University, Chuzhou Anhui
[2]Agricultural Product Quality and Safety Center, Xuancheng Municipal Bureau of Agriculture and Rural Affairs, Xuancheng Anhui
[3]School of Modern Agriculture and Environment, Weifang Institute of Technology, Weifang Shandong

Received: October 11, 2026; accepted: November 2, 2026; published: November 13, 2026

Abstract

The volatile profiles of three *Chaenomeles speciosa* cultivars grown in Xuancheng, Anhui Province, China, Luohanqi (LHQ), Pingguohong (PGH), and Zhimadian (ZMD), were characterized by headspace solid-phase microextraction coupled with gas chromatography-mass spectrometry (HS-SPME-GC-MS) and analyzed using principal component analysis (PCA), partial least squares discriminant analysis (PLS-DA), and orthogonal PLS-DA (OPLS-DA). In total, 123 volatile compounds were identified, of which 83 were shared by all three cultivars. The results showed that the LHQ variety had the highest number of volatile compounds. Alkene compounds accounted for the highest proportion in all three varieties. Compared with PGH and ZMD, LHQ exhibited higher relative peak area percentages of alcohols and epoxy compounds. Multivariate analyses clearly differentiated the three cultivars and identified 29 candidate discriminatory markers. Pairwise comparisons further highlighted seven compounds, including *β*-Selinene, (R)-Camphor and Longifolene, as key discriminants among the cultivars. These findings provide a chemical basis for cultivar authentication, quality evaluation, and targeted utilization of *C. speciosa* fruit.

Keywords

***Chaenomeles speciosa*, HS-SPME-GC-MS, Volatile Compounds, Chemometrics, Cultivar Discrimination**

Copyright © 2026 by author(s) and Hans Publishers Inc.
This work is licensed under the Creative Commons Attribution International License (CC BY 4.0).
http://creativecommons.org/licenses/by/4.0/
Open Access

1. 引言

宣木瓜(*Chaenomeles speciosa* (Sweet) Nakai)隶属于蔷薇科，在我国通称“木瓜”，长期以来兼具食用与药用价值[1] [2]。其干燥成熟果实在《名医别录》《本草纲目》等中医药典籍中均有记载，其中以安徽宣城所产木瓜品质为佳。植物化学研究表明，木瓜果实富含酚酸、黄酮类、三萜类、多糖及挥发性成分[3]-[7]，这些成分与其抗氧化、抗炎、抗菌、保肝、降血糖及免疫调节等生物活性密切相关[8]-[12]。另有研究报道，木瓜果实中维生素 C 和类胡萝卜素的含量明显高于多种常见食用水果，表明其具有较高的营养潜力[13]。宣木瓜的生物活性主要归因于多酚和黄酮类等化合物的共同作用[14] [15]，具有自由基清除能力，并可调控 NF-*κ*B 和 MAPK 等炎症相关信号通路[16]。此外，宣木瓜果实中含有齐墩果酸和熊果酸等代表性三萜类化合物，其保肝和抗炎作用与这些成分有关[17]。宣木瓜的营养价值与生物学功能为其在功能性食品配料、营养保健产品及天然风味配料开发中的应用提供了依据[18] [19]。

香气通常是影响消费者偏好和果品市场接受度的首要感官属性。木瓜的特征香气来源于多种挥发性成分构成的复杂混合物，其组成及相对比例随品种、产地、成熟阶段和加工方式而变化[6]。安徽宣城广泛种植的罗汉脐、苹果红和芝麻点三个木瓜品种，在果实形态、农艺性状及感官特征方面存在明显差异，

但其品种特异性香气形成的化学基础尚不明确。既往有关木瓜的研究主要集中于非挥发性生物活性成分，包括多酚、黄酮类、三萜类和多糖的提取、结构表征及生物活性评价[20]-[22]。尽管挥发性成分与香气形成和品种区分直接相关，针对这类成分的研究仍较为匮乏。Ma 等采用非靶向代谢组学方法，揭示了木瓜次生代谢物谱存在明显的产地差异[23]。然而，该研究主要涉及非挥发性代谢物，对香气相关成分的解析较为有限。因此，挥发性成分系统表征的不足，制约了对木瓜品种特异性风味特征的深入认识，也限制了基于化学标志物的原料评价与品质分级体系的建立。

顶空固相微萃取－气相色谱－质谱联用已成为一种成熟的分析技术，广泛用于水果、蔬菜、茶叶、药用植物及发酵食品等多种基质中挥发性成分的全面表征[24]-[27]。该技术无需使用溶剂，将采样、萃取、富集与进样集成于单一分析步骤，具有灵敏度高、重复性好等优点，可有效检测痕量挥发性成分[24] [25]。挥发性化合物通常通过质谱匹配结合保留指数验证进行鉴定，其相对含量或绝对含量则可采用峰面积归一化法、内标法或标准品校准法进行估算[26] [27]。

主成分分析、偏最小二乘判别分析和正交偏最小二乘判别分析等多变量化学计量学方法，可通过可视化呈现样品间的关系，并筛选对品种区分贡献最大的挥发性成分，为实现上述目标提供有效途径[26]。结合气味活度值(OAVs)或气相色谱－嗅闻联用(GC-O)技术，这些方法还可进一步区分含量较高的化合物与直接贡献于香气感知的化合物。尽管 HS-SPME-GC-MS 结合化学计量学已形成较为成熟的分析流程，但其在木瓜(*C. speciosa*)风味特征研究中的应用仍较少。因此，罗汉脐、苹果红和芝麻点的香气特征尚缺乏充分表征，其品种特异性香气及差异化合物仍有待深入解析，同时亟需建立稳健、可重复的挥发性成分谱评价方法。

本研究建立了适用于宣木瓜挥发性成分提取的 HS-SPME 方法，用于表征宣城产罗汉脐(LHQ)、苹果红(PGH)和芝麻点(ZMD)三个品种的挥发性成分组成。并结合 PCA、HCA、PLS-DA 和 OPLS-DA 对三个品种宣木瓜挥发性成分进行分析，筛选反映其挥发性成分差异标志物。该分析方法可为宣木瓜原料的品种鉴别和定向利用提供依据，并为风味化学研究提供可重复的技术方案。

2. 材料与方法

2.1. 材料与试剂

供试材料为宣木瓜的三个品种，即罗汉脐(LHQ)、苹果红(PGH)和芝麻点(ZMD)，均于商品成熟期采自中国安徽省宣城市的果园(30˚42′44.5″N, 118˚43′54.9″E)，该地区是木瓜道地产区。各果园的土壤、气候、灌溉、施肥及栽培管理条件基本一致，以尽量减少环境与农艺因素造成的差异。各品种均从生长健康的 6 年生树上随机采集果实，采样覆盖树冠不同高度及东、南、西、北四个方位。每个生物学重复由 5 株树上采集的果实按等质量混合组成，每个品种设置 3 个此类混合样生物学重复。

选取无明显机械损伤和病害的新鲜果实，依次用自来水和蒸馏水清洗，于室温下自然晾干。随后，手工将果实切成厚度约为 3 mm 的均匀薄片，置于热风干燥机中，在 50℃下干燥 48 h。干燥后的果片置于干燥器中冷却至室温，粉碎后过 100 目筛(150 μm)。采用高纯氦气(99.999%)作为载气，并使用色谱纯 C_7~C_{40} 正构烷烃混合物进行保留指数(RI)校准。

2.2. 仪器与设备

挥发性成分分析采用 Agilent 8890 气相色谱仪与 5977B 质谱检测器联用系统(Agilent Technologies，美国)进行。顶空固相微萃取(HS-SPME)采用手动装置，配备 50/30 μm 二乙烯基苯/碳分子筛/聚二甲基硅氧烷(DVB/CAR/PDMS)萃取纤维(Supelco，美国)。萃取纤维首次使用前，按照制造商说明进行老化处理。

其他仪器设备包括恒温水浴锅、实验室粉碎机、鼓风干燥箱及最小读数为 0.0001 g 的分析天平。

2.3. HS-SPME 萃取方法

为比较不同样品的挥发性成分谱，分别称取 2.0 g 粉末样品，置于 10 mL 顶空瓶中。采用 50/30 μm DVB/CAR/PDMS 萃取纤维，在 70℃恒温水浴条件下顶空萃取 40 min。萃取完成后，立即将萃取纤维转移至 GC-MS 进样口，于 250℃下热解吸 5 min，使吸附的挥发性成分释放并进入分析系统。

2.4. GC-MS 分析方法

采用 HP-5MS UI 超惰性毛细管色谱柱(30 m × 0.25 mm × 0.25 μm, Agilent Technologies)分离挥发性成分。柱温箱程序升温条件为：初始温度 50℃，保持 1 min；以 5℃/min 升至 110℃，再以 5℃/min 升至 130℃，随后以 10℃/min 升至 250℃，保持 3 min。进样口温度设为 250℃。以纯度为 99.999%的氦气作为载气，采用恒流模式，流速为 1.0 mL/min，进样方式为不分流进样。质谱分析采用电子电离(EI)模式，电离能量为 70 eV。离子源、四极杆和传输线温度分别设为 230℃、150℃和 230℃。采用全扫描模式采集质谱数据，扫描范围为 m/z 50~550。

通过将挥发性化合物的质谱与 NIST 20 质谱库进行匹配，并将实验测定的保留指数(RI)与已发表的参考值进行比较，对化合物进行鉴定。RI 以相同色谱条件下测定的 C_7~C_{40} 正构烷烃系列为参照计算。当质谱相似度 ≥80%，且实验 RI 与参考 RI 的偏差不超过 20 个指数单位时，接受该化合物的鉴定结果。采用峰面积归一化法计算各化合物的相对丰度，以其峰面积占所有已鉴定挥发性化合物总峰面积的百分比表示。

2.5. 数据分析

对经对齐处理的挥发性化合物数据集进行多变量化学计量学分析，以表征品种间差异并筛选潜在判别标志物。首先对各品种 3 个生物学重复的峰面积数据进行标准化处理，以降低变量数值量级差异的影响。采用 SIMCA 14.1 软件进行主成分分析，通过偏最小二乘判别分析评价罗汉脐、苹果红和芝麻点三个品种的总体判别效果，并确定各挥发性化合物对品种分类的贡献。基于 PLS-DA 模型计算变量投影重要性(VIP)得分。并结合单因素方差分析，以 $P<0.05$ 为差异具有统计学意义的判定标准。将同时满足 VIP > 1.0 和 $P<0.05$ 的挥发性化合物确定为品种判别差异标志物。为进一步解析对品种间两两区分具有重要贡献的挥发性化合物，分别对罗汉脐与苹果红、罗汉脐与芝麻点以及苹果红与芝麻点进行正交偏最小二乘判别分析。

3. 结果与分析

3.1. 不同品种宣木瓜挥发性成分组成

采用 HS-SPME 提取罗汉脐、苹果红和芝麻点的挥发性成分，并通过 GC-MS 进行表征。通过 NIST 20 质谱库匹配，并将实验测定的保留指数与已发表的参考值进行比较，共鉴定出 123 种挥发性化合物(详见附表 1)，其中 68 种化合物的相对丰度在品种间存在显著差异($P < 0.05$)，具体如表 1 所示。LHQ 的挥发性成分种类最为丰富，共检出 118 种化合物，其次为 PGH 和 ZMD，分别检出 98 种和 96 种。三个品种中均检出的化合物共有 83 种(如图 1(a)所示)，分别占 LHQ、PGH 和 ZMD 已鉴定挥发性化合物总数的 70.3%、84.7%和 86.5%，构成了宣木瓜共有的核心挥发性成分群。此外，仅由 LHQ 与 PGH 共有的化合物为 11 种，仅由 LHQ 与 ZMD 共有的化合物同样为 11 种，仅在 PGH 和 ZMD 中检出的共有化合物为 1 种。LHQ 中检出 13 种品种特有化合物，包括(+)-4-Carene、α-Farnesene、Calarene epoxide、Ylangenal、τ-Cadinol 和 Cedrol 等。PGH 中检出 3 种品种特有化合物：2-Isopropenyl-5-methylhex-4-enal、Anethole 和

(2E,3Z)-2-Ethylidene-6-methyl-3,5-heptadienal；而 l-Zingiberene 仅在 ZMD 中检出。各品种特有化合物的完整名单见表 1。

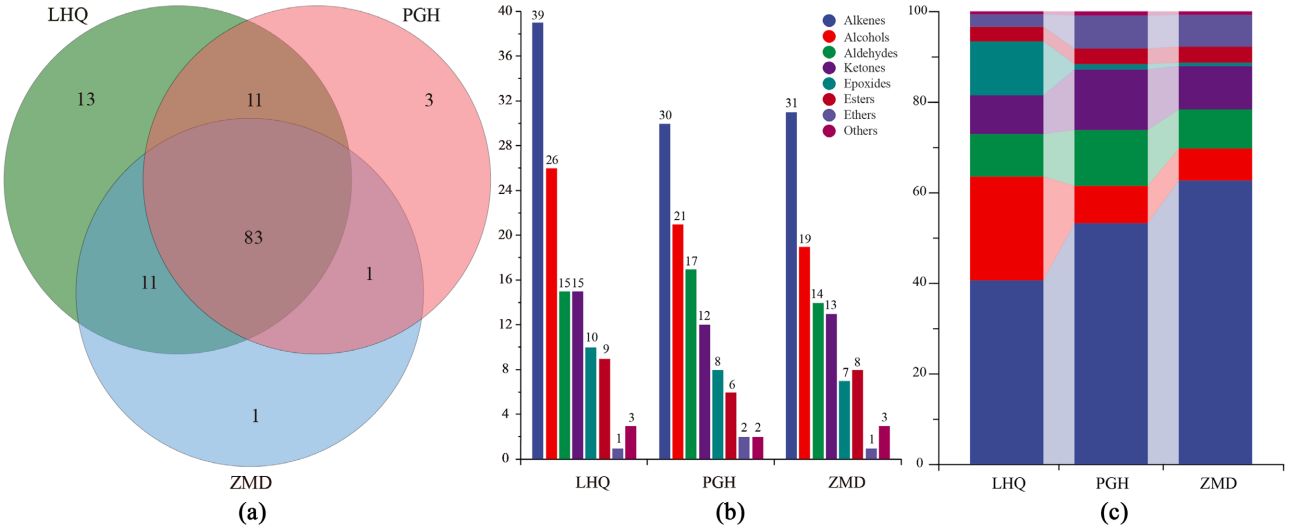


Figure 1. Distribution and chemical classification of volatile compounds detected in three *C. speciosa* cultivars. (a) Venn diagram showing shared and cultivar-specific volatile compounds; (b) Numbers of volatile compounds assigned to different chemical classes; (c) Relative peak-area proportions of the different chemical classes in LHQ, PGH and ZMD

图 1. 三个品种宣木瓜挥发性化合物的分布及化学分类。(a) 共有及品种特有挥发性化合物的韦恩图；(b) 不同化学类别的挥发性化合物数量；(c) LHQ、PGH 和 ZMD 中不同化学类别挥发性成分的相对峰面积占比

Table 1. Volatile compounds with significant differences in relative abundance among three cultivars of *C. speciosa* (%)

表 1. 三个宣木瓜品种间相对丰度存在显著差异的挥发性化合物(%)

保留时间/min	化合物名称	分子式	分子量	CAS 码	LHQ	PGH	ZMD
8.29	1,5,5-Trimethyl-6-methylene-cyclohexene	$C_{10}H_{16}$	136.125	514-95-4	0.026 ± 0.017^{b}	0.034 ± 0.010^{ab}	0.069 ± 0.029^{a}
8.52	trans-(+/-)-1,2-Cycloheptane-diol	$C_7H_{14}O_2$	130.099	90970-69-7	0.038 ± 0.008^{b}	0.106 ± 0.019^{a}	/
9.98	6-Methyl-5-hepten-2-one	$C_8H_{14}O$	126.1	110-93-0	0.678 ± 0.333^{b}	2.841 ± 0.905^{a}	1.348 ± 0.617^{b}
10.08	5,9-Dimethyl-(E)-5,8-deca-dien-2-one	$C_{12}H_{20}O$	180.2	130876-99-2	0.361 ± 0.058^{b}	1.409 ± 0.769^{a}	/
10.38	(E,E)-2,4-Heptadienal	$C_7H_{10}O$	110.1	4313-03-5	0.098 ± 0.059^{b}	0.447 ± 0.212^{a}	0.201 ± 0.083^{ab}
10.59	Octanal	$C_8H_{16}O$	128.12	124-13-0	/	1.055 ± 0.512^{a}	0.336 ± 0.100^{b}
11.44	*β*-Cymene	$C_{10}H_{14}$	134.11	535-77-3	0.848 ± 0.106^{a}	0.345 ± 0.101^{b}	0.358 ± 0.164^{b}
11.60	D-Limonene	$C_{10}H_{16}$	136.125	5989-27-5	0.682 ± 0.140^{a}	0.610 ± 0.114^{ab}	0.369 ± 0.118^{b}
12.63	2-(Aminomethyl)-phenol	C_7H_9NO	123.068	932-30-9	0.073 ± 0.017^{b}	/	0.146 ± 0.027^{a}
13.18	(E)-2-Octenal	$C_8H_{14}O$	126.104	2548-87-0	0.057 ± 0.021^{b}	0.252 ± 0.039^{a}	0.157 ± 0.071^{a}
14.33	(2-Methyl-1-propenyl)-ben-zene	$C_{10}H_{12}$	132.094	768-49-0	1.319 ± 0.224^{a}	/	0.426 ± 0.282^{b}
15.10	Nonanal	$C_9H_{18}O$	142.136	124-19-6	0.602 ± 0.063^{c}	1.963 ± 0.351^{a}	1.365 ± 0.339^{b}
15.22	2-(1-Methylethyl)-cyclohexa-nol	$C_9H_{18}O$	142.136	96-07-1	0.241 ± 0.033^{c}	1.103 ± 0.192^{a}	0.586 ± 0.152^{b}

续表

15.62	cis-Chrysanthenol	$C_{10}H_{16}O$	152.12	55722-60-6	0.096 ± 0.013^{b}	0.447 ± 0.099^{a}	0.314 ± 0.261^{ab}
15.86	2,7,7-Trimethyl-bicyclo[3.1.1]hept-2-en-6-one	$C_{10}H_{14}O$	150.10	473-06-3	0.020 ± 0.006^{b}	/	0.088 ± 0.051^{a}
16.40	Carveol	$C_{10}H_{16}O$	152.12	99-48-9	0.042 ± 0.011^{b}	0.103 ± 0.047^{a}	/
16.49	trans-Chrysanthenol	$C_{10}H_{16}O$	152.12	38043-83-3	0.062 ± 0.023^{b}	0.334 ± 0.115^{a}	0.123 ± 0.063^{b}
16.84	(R)-Camphor	$C_{10}H_{16}O$	152.12	464-49-3	1.280 ± 0.166^{c}	4.617 ± 0.583^{a}	3.436 ± 0.419^{b}
19.43	Estragole	$C_{10}H_{12}O$	148.09	140-67-0	2.746 ± 0.820^{b}	2.460 ± 1.427^{b}	7.076 ± 2.482^{a}
19.74	Decanal	$C_{10}H_{20}O$	156.15	112-31-2	0.162 ± 0.006^{b}	0.616 ± 0.320^{a}	0.488 ± 0.133^{ab}
21.72	Perilla ketone	$C_{10}H_{14}O_2$	166.10	553-84-4	0.841 ± 0.157^{b}	2.355 ± 0.426^{a}	2.345 ± 0.745^{a}
22.25	(E)-2-Decenal	$C_{10}H_{18}O$	154.14	3913-81-3	0.165 ± 0.206^{b}	1.132 ± 0.306^{a}	0.196 ± 0.194^{b}
23.33	(+)-Borneol acetate	$C_{12}H_{20}O_2$	196.15	20347-65-3	0.579 ± 0.129^{b}	2.112 ± 0.639^{a}	2.272 ± 0.883^{a}
24.15	Minacide	$C_{12}H_{17}NO_2$	207.13	2631-37-0	0.222 ± 0.034^{a}	0.062 ± 0.015^{b}	0.072 ± 0.028^{b}
25.96	4-(2,2,6-Trimethyl-bicyclo[4.1.0]hept-1-yl)-butan-2-one	$C_{14}H_{24}O$	208.18	77143-20-5	0.074 ± 0.023^{b}	0.236 ± 0.092^{a}	0.158 ± 0.063^{ab}
26.27	*α*-Longipinene	$C_{15}H_{24}$	204.19	5989-08-2	0.210 ± 0.053^{b}	/	1.736 ± 0.094^{a}
26.37	Dehydro-ar-ionene	$C_{13}H_{16}$	172.13	30364-38-6	0.309 ± 0.104^{b}	0.517 ± 0.127^{a}	/
26.74	Chavibetol	$C_{10}H_{12}O_2$	164.08	501-19-9	0.384 ± 0.038^{a}	0.062 ± 0.049^{b}	0.309 ± 0.042^{a}
27.19	Longicyclene	$C_{15}H_{24}$	204.19	1137-12-8	0.253 ± 0.101^{b}	0.114 ± 0.074^{b}	5.321 ± 0.274^{a}
27.36	2-Bromo dodecane	$C_{12}H_{25}Br$	248.11	13187-99-0	0.053 ± 0.037^{b}	0.159 ± 0.094^{ab}	0.257 ± 0.085^{a}
27.54	Copaene	$C_{15}H_{24}$	204.19	3856-25-5	0.313 ± 0.154^{b}	0.455 ± 0.211^{b}	0.842 ± 0.164^{a}
27.97	Ethyl 4E-decenoate	$C_{12}H_{22}O_2$	198.16	76649-16-6	0.405 ± 0.150^{a}	0.155 ± 0.086^{b}	0.253 ± 0.063^{ab}
28.39	(-)-*β*-Elemene	$C_{15}H_{24}$	204.19	515-13-9	0.429 ± 0.258^{b}	1.112 ± 0.284^{a}	0.912 ± 0.097^{a}
28.68	D-Verbenone	$C_{10}H_{14}O$	150.10	18309-32-5	0.528 ± 0.092^{b}	0.649 ± 0.165^{ab}	0.785 ± 0.089^{a}
28.92	Longifolene	$C_{15}H_{24}$	204.19	475-20-7	0.604 ± 0.187^{c}	2.167 ± 0.303^{b}	3.544 ± 0.197^{a}
29.14	cis-Sesquisabinenhydrate	$C_{15}H_{26}O$	222.20	58319-05-4	0.031 ± 0.023^{b}	0.065 ± 0.029^{b}	0.148 ± 0.002^{a}
29.41	4-Methyl-5-penta-1,3-dienyl-tetrahydrofuran-2-one	$C_{10}H_{14}O_2$	166.10	1000185-21-1	0.256 ± 0.028^{c}	0.339 ± 0.041^{b}	0.535 ± 0.048^{a}
29.69	Caryophyllene	$C_{15}H_{24}$	204.19	87-44-5	2.191 ± 0.198^{a}	1.706 ± 0.194^{b}	2.456 ± 0.149^{a}
30.19	(+)-epi-Bicyclosesquiphellandrene	$C_{15}H_{24}$	204.19	54274-73-6	0.079 ± 0.013^{b}	0.048 ± 0.013^{c}	0.114 ± 0.008^{a}
30.62	cis-*α*-Bergamotene	$C_{15}H_{24}$	204.19	18252-46-5	0.212 ± 0.056^{b}	0.321 ± 0.025^{ab}	0.384 ± 0.081^{a}
31.28	(+)-*δ*-Cadinene	$C_{15}H_{24}$	204.19	483-76-1	0.187 ± 0.092^{b}	0.107 ± 0.022^{b}	0.310 ± 0.032^{a}
31.42	1,5,9,9-tetramethyl-, Z,Z,Z-1,4,7,-Cycloundecatriene	$C_{15}H_{24}$	204.19	1000062-61-9	0.401 ± 0.012^{a}	0.089 ± 0.006^{c}	0.153 ± 0.017^{b}
31.63	Geranyl acetone	$C_{13}H_{22}O$	194.17	3796-70-1	0.182 ± 0.037^{b}	0.504 ± 0.069^{a}	0.411 ± 0.037^{a}
31.82	cis-*β*-Farnesene	$C_{15}H_{24}$	204.19	28973-97-9	1.984 ± 0.629^{b}	2.382 ± 0.280^{ab}	2.940 ± 0.293^{a}
32.62	14-Hydroxycaryophyllene	$C_{15}H_{24}$	204.19	515-17-3	0.773 ± 0.078^{a}	0.277 ± 0.067^{b}	0.211 ± 0.033^{b}

续表

33.15	*β*-Selinene	$C_{15}H_{24}$	204.19	17066-67-0	19.195 ± 1.719^{b}	32.924 ± 1.333^{a}	32.767 ± 1.384^{a}
34.86	Bornyl isovalerate	$C_{15}H_{26}O_2$	238.19	76-50-6	0.687 ± 0.152^{a}	0.319 ± 0.148^{b}	0.101 ± 0.029^{b}
35.21	*β*-Sesquiphellandrene	$C_{15}H_{24}$	204.19	20307-83-9	4.130 ± 0.707^{b}	5.238 ± 0.595^{a}	5.472 ± 0.215^{a}
35.57	*γ*-Himalachene	$C_{15}H_{24}$	204.19	53111-25-4	0.122 ± 0.029^{a}	/	0.026 ± 0.006^{b}
36.11	*α*-Calacorene	$C_{15}H_{20}$	200.16	21391-99-1	0.816 ± 0.160^{a}	0.278 ± 0.254^{b}	0.166 ± 0.018^{b}
36.61	trans-4-Methyleneoctahydro-1-azulenone	$C_{11}H_{16}O$	164.12	111615-51-1	3.850 ± 1.072^{a}	0.091 ± 0.083^{b}	0.032 ± 0.004^{b}
36.93	Alloaromadendrene oxide-(1)	$C_{15}H_{24}O$	220.18	1000156-12-8	0.291 ± 0.057^{a}	0.038 ± 0.007^{b}	0.043 ± 0.003^{b}
37.20	Bornyl angelate	$C_{15}H_{24}O_2$	236.18	85758-37-8	0.559 ± 0.104^{a}	0.217 ± 0.006^{b}	0.259 ± 0.023^{b}
37.42	cis-Z-*α*-Bisabolene epoxide	$C_{15}H_{24}O$	220.18	1000131-71-2	0.470 ± 0.164^{a}	0.065 ± 0.023^{b}	0.077 ± 0.003^{b}
37.94	Espatulenol	$C_{15}H_{24}O$	220.18	6750-60-3	3.281 ± 0.639^{a}	/	0.125 ± 0.112^{b}
38.19	Caryophyllene oxide	$C_{15}H_{24}O$	220.18	1139-30-6	7.371 ± 0.745^{a}	0.127 ± 0.030^{b}	0.167 ± 0.042^{b}
38.73	Isoaromadendrene epoxide	$C_{15}H_{24}O$	220.18	1000159-36-6	0.650 ± 0.265^{a}	0.071 ± 0.024^{b}	0.089 ± 0.007^{b}
39.02	Aristolene epoxide	$C_{15}H_{24}O$	220.18	1000151-48-9	0.271 ± 0.104^{a}	0.040 ± 0.020^{b}	/
39.24	(-)-Spathulenol	$C_{15}H_{24}O$	220.18	77171-55-2	0.598 ± 0.127^{a}	0.170 ± 0.027^{b}	0.435 ± 0.057^{a}
39.75	Diepicedrene-1-oxide	$C_{15}H_{24}O$	220.18	1000156-11-0	0.203 ± 0.042^{a}	0.115 ± 0.016^{b}	0.181 ± 0.020^{a}
39.94	Junenol	$C_{15}H_{26}O$	222.19	472-07-1	0.666 ± 0.061^{a}	0.196 ± 0.287^{b}	/
40.54	Longifolenaldehyde	$C_{15}H_{24}O$	220.18	19890-84-7	1.559 ± 0.133^{a}	0.336 ± 0.067^{b}	0.260 ± 0.099^{b}
41.68	Caryophylla-4(12),8(13)-dien-5*β*-ol	$C_{15}H_{24}O$	220.18	19431-80-2	0.546 ± 0.114^{a}	/	0.028 ± 0.009^{b}
41.91	Neointermedeol	$C_{15}H_{26}O$	222.20	5945-72-2	7.827 ± 0.584^{a}	0.545 ± 0.240^{b}	0.661 ± 0.017^{b}
44.17	ent-Germacra-4(15),5,10(14)-trien-1*β*-ol	$C_{15}H_{24}O$	220.18	81968-62-9	1.245 ± 0.095^{a}	0.028 ± 0.009^{b}	/
46.36	*α*-Cyperone	$C_{15}H_{22}O$	218.17	473-08-5	0.190 ± 0.023^{a}	0.060 ± 0.012^{c}	0.124 ± 0.020^{b}
47.39	Methyl isocostate	$C_{16}H_{24}O_2$	248.18	132342-55-3	0.136 ± 0.024^{a}	/	0.038 ± 0.017^{b}
47.75	9.11(13)-Eremophiladien-12-oic acid, methyl ester	$C_{16}H_{24}O_2$	248.18	69905-04-0	0.255 ± 0.051^{a}	/	0.072 ± 0.015^{b}

注：“/”表示未检出，同一行中不同字母表示差异显著($p < 0.05$)。

将已鉴定的挥发性化合物分为烯烃类、醇类、醛类、酮类、环氧化合物、酯类、醚类及其他类等八类。按检出的化合物种类数统计，烯烃类在三个品种中均为种类最多的类别(图 1(b))，LHQ、PGH 和 ZMD 中分别检出 39、30 和 31 种。醇类的种类数位居第二，在 LHQ、PGH 和 ZMD 中分别检出 26、21 和 19 种。此外，LHQ 中还检出 15 种醛类、15 种酮类、10 种环氧化合物、9 种酯类、1 种醚类及 3 种其他化合物；PGH 中上述类别的化合物数量分别为 17、12、8、6、2 和 2 种；ZMD 中则分别为 14、13、7、8、1 和 3 种。因此，LHQ 在多数化学类别中表现出较高的化合物丰富度，而 PGH 的醛类化合物种类最多。

与单纯比较化合物数量相比，基于峰面积的相对丰度更清晰地反映了品种间的差异(图 1(c))。烯烃类在三个品种中均占主导地位，其峰面积分别占 LHQ、PGH 和 ZMD 总峰面积的 40.5%、53.2%和 62.7%，呈依次升高的趋势，其中 ZMD 的烯烃类占比最高。醇类则呈现相反的变化趋势，其在 LHQ 中的峰面积占比约为 22%，而在其他两个品种中均低于 10%。LHQ 中环氧化合物的相对峰面积占比较高，PGH 和 ZMD 中的占比较低，其中 ZMD 最低。醛类和酮类在各品种中均占有一定比例，是次要但不可忽视的组分；酯类、醚类及其他化合物的占比则较低。

β-Selinene、Longifolene、Longicyclene、*α*-Longipinene 和 l-Zingiberene 等倍半萜烃的差异为理解宣木瓜品种间萜类代谢分化提供了线索。植物倍半萜通常以 Farnesyl diphosphate (FPP)为直接前体，在不同萜类合成酶(Terpene Synthase, TPS)的催化下，经环化、重排及反应终止等过程形成多样化骨架。其前体供给通常与细胞质中的甲羟戊酸途径(Mevalonate pathway, MVA)途径相关，但并非完全独立于质体甲基赤藓醇磷酸途径(Methylerythritol phosphate, MEP)途径；金鱼草中的同位素示踪和抑制剂实验已证明，MEP 途径也可为倍半萜形成提供前体[28]。此外，挪威云杉的酶功能研究表明，同一种 Longifolene synthase 能够同时生成 Longifolene、Longicyclene 和 *α*-Longipinene 等多个产物[29]。据此推测，ZMD 中 Longicyclene 和 *α*-Longipinene 的相对富集，可能与相关 TPS 的表达、催化特异性或共同前体的分配有关。多个萜类标志物的协同变化因而可能反映同一合成分支或相关分支的共同调节，而不必分别对应彼此独立的代谢过程。

LHQ 中 Neointermedeol、Spathulenol、*τ*-Cadinol、Caryophyllene oxide 和 Calarene epoxide 等含氧倍半萜的较高相对丰度，则提示其差异不仅涉及萜类骨架形成，还可能涉及含氧产物的生成与保存。含氧倍半萜可通过不同途径形成：部分倍半萜醇可在 TPS 催化过程中，通过水分子捕获碳正离子中间体而直接生成；另一些含氧产物则需要后续氧化修饰。姜和姜黄中的功能研究已鉴定出能够直接生成 Neointermedeol 的 TPS，说明倍半萜醇的积累不一定依赖萜烃形成后的氧化[30]。另一方面，空气氧化实验表明，*β*-Caryophyllene 可形成 Caryophyllene oxide [31]。因此，LHQ 中含氧倍半萜较为丰富，可能同时涉及 TPS 产物差异、下游酶促修饰以及采后非酶氧化。

PGH 中 Octanal、Nonanal 和(E)-2-Decenal 等直链醛类的相对富集，可能与脂肪酸底物供给及其氧化裂解有关。在植物组织中，脂氧合酶(LOX)能够催化多不饱和脂肪酸生成氢过氧化物，随后经氢过氧化物裂解酶(HPL)等作用形成挥发性醛类。番茄转基因研究证实，抑制 TomloxC 可明显降低组织破碎后部分脂肪酸来源挥发物的形成，支持了 LOX 途径与果实挥发性成分之间的功能联系[32]。食用油加速氧化研究发现，Octanal、Nonanal 和 2-Decenal 的形成与初始 Oleic acid 含量相关，说明脂质非酶氧化也可能贡献这些成分[33]。因此，PGH 的醛类特征可能反映其脂肪酸组成、氧化底物可及性及采后氧化稳定性的共同差异。

3.2. 主成分分析

为评价三个木瓜品种间挥发性成分组成的总体差异，对标准化后的峰面积数据集进行主成分分析(PCA)。第一主成分(PC1)和第二主成分(PC2)分别解释了总方差的 48.5%和 22.2%，累计方差解释率为 70.7% (图 2)。所有样品点均位于 Hotelling's T^2 的 95%置信界限内，提示未发现明显的离群样品。

各品种的 3 个生物学重复均紧密聚集，表明品种内重复性良好。同时，LHQ、PGH 和 ZMD 之间呈现清晰的分离。LHQ 样品分布于 PC1 负向区域，而 PGH 和 ZMD 位于 PC1 正向区域，表明 LHQ 的挥发性成分谱与其他两个品种存在明显差异。PGH 和 ZMD 沿 PC2 进一步分离，其中 ZMD 分布于 PC2 正向区域，PGH 则位于 PC2 负向区域。这些结果表明，三个品种具有明显不同的挥发性成分谱，PC1 和 PC2 共同反映了其品种间差异。

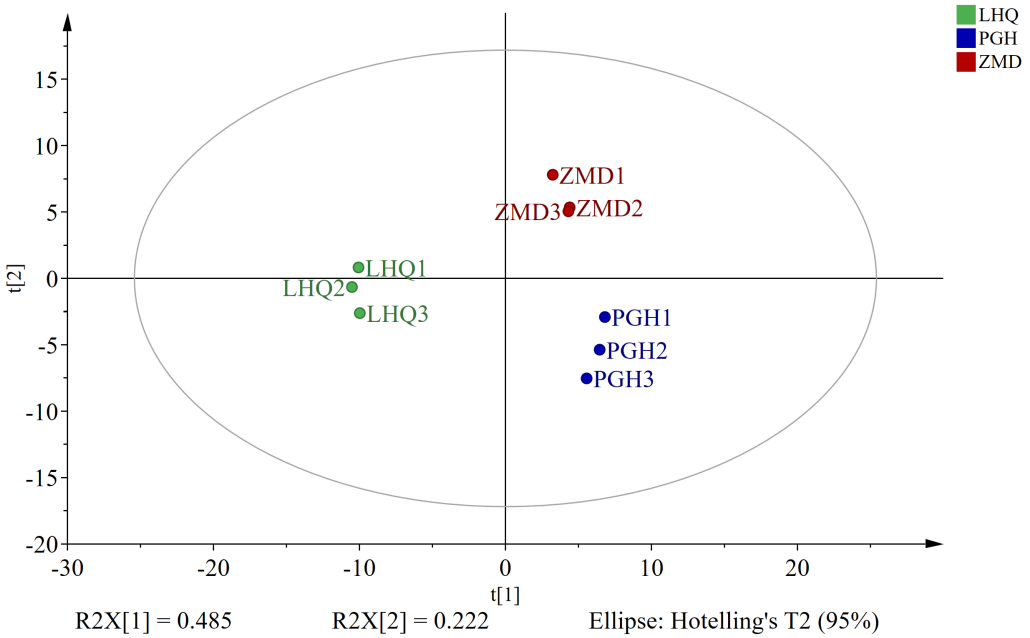


Figure 2. PCA score plot of three *C. speciosa* cultivars. LHQ, Luohanqi; PGH, Pingguohong; ZMD, Zhimadian. The ellipse indicates the 95% Hotelling's T^2 confidence region
图 2. 三个木瓜品种的主成分分析(PCA)得分图。LHQ，罗汉脐；PGH，苹果红；ZMD，芝麻点。椭圆表示 Hotelling's T^2 的 95%置信区域

3.3. 偏最小二乘判别分析

运用偏最小二乘判别分析(PLS-DA)对挥发性化合物进行品种判别分析，依据变量投影重要性(VIP)得分筛选对分类贡献显著的关键成分。结合单因素方差分析，共筛选出 29 种同时满足 VIP > 1.0 和 $P < 0.05$ 的挥发性化合物，将其确定为品种判别差异标志物(图 3(a))。这些化合物包括 9 种烯烃或烃类相关化合物、5 种醇类、5 种醛类、5 种酮类、2 种环氧化合物、2 种醚类和 1 种酯类。根据化学结构，将 Dehydro-ar-ionene 和(2-Methyl-1-propenyl)benzene 归为不饱和烃类相关化合物。Longicyclene、β-Selinene、Anethole、Estragole 和 Caryophyllene oxide 的 VIP 得分最高，表明这些成分对基于 PLS-DA 的三个品种判别具有突出贡献。

29 种差异标志物分别是 6-Methyl-5-hepten-2-one、5,9-Dimethyl-(E)-5,8-decadien-2-one、Octanal、(2-Methyl-1-propenyl)benzene、Nonanal、2-(1-Methylethyl)cyclohexanol、(R)-Camphor、Anethole、Estragole、Perilla ketone、(E)-2-Decenal、(+)-Borneol acetate、α-Longipinene、Dehydro-ar-ionene、Longicyclene、Longifolene、Caryophyllene、β-Selinene、l-Zingiberene、γ-Muurolene、trans-4-Methyleneoctahydro-1-azulenone、Spathulenol、Caryophyllene oxide、Calarene epoxide、Longifolenaldehyde、Ylangenal、τ-Cadinol、Neointermedeol 和 ent-Germacra-4(15),5,10(14)-trien-1β-ol。这些判别化合物在不同品种中的检出情况存在差异(图 3(b))。其中，16 种化合物在三个品种中均被检出，表明其判别能力主要与相对丰度差异有关，而非仅取决于是否存在。此外，3 种化合物仅在 LHQ 中检出，PGH 和 ZMD 则分别具有 1 种特有化合物。仅由 LHQ 与 PGH 共有的化合物为 4 种，仅由 LHQ 与 ZMD 共有的化合物为 3 种，仅由 PGH 与 ZMD 共有的化合物为 1 种。因此，品种特有化合物与共有挥发性成分的相对丰度差异均对品种判别具有贡献。

聚类热图进一步揭示了不同品种中挥发性成分的特异性积累模式(图 3(c))。LHQ 中 Longifolenaldehyde、Calarene epoxide、Caryophyllene oxide、Neointermedeol、τ-Cadinol、Ylangenal、Spathulenol 和 trans-4-Methyleneoctahydro-1-azulenone 的相对丰度较高。相比之下，ZMD 中多种烃类挥发性成分的相对丰度

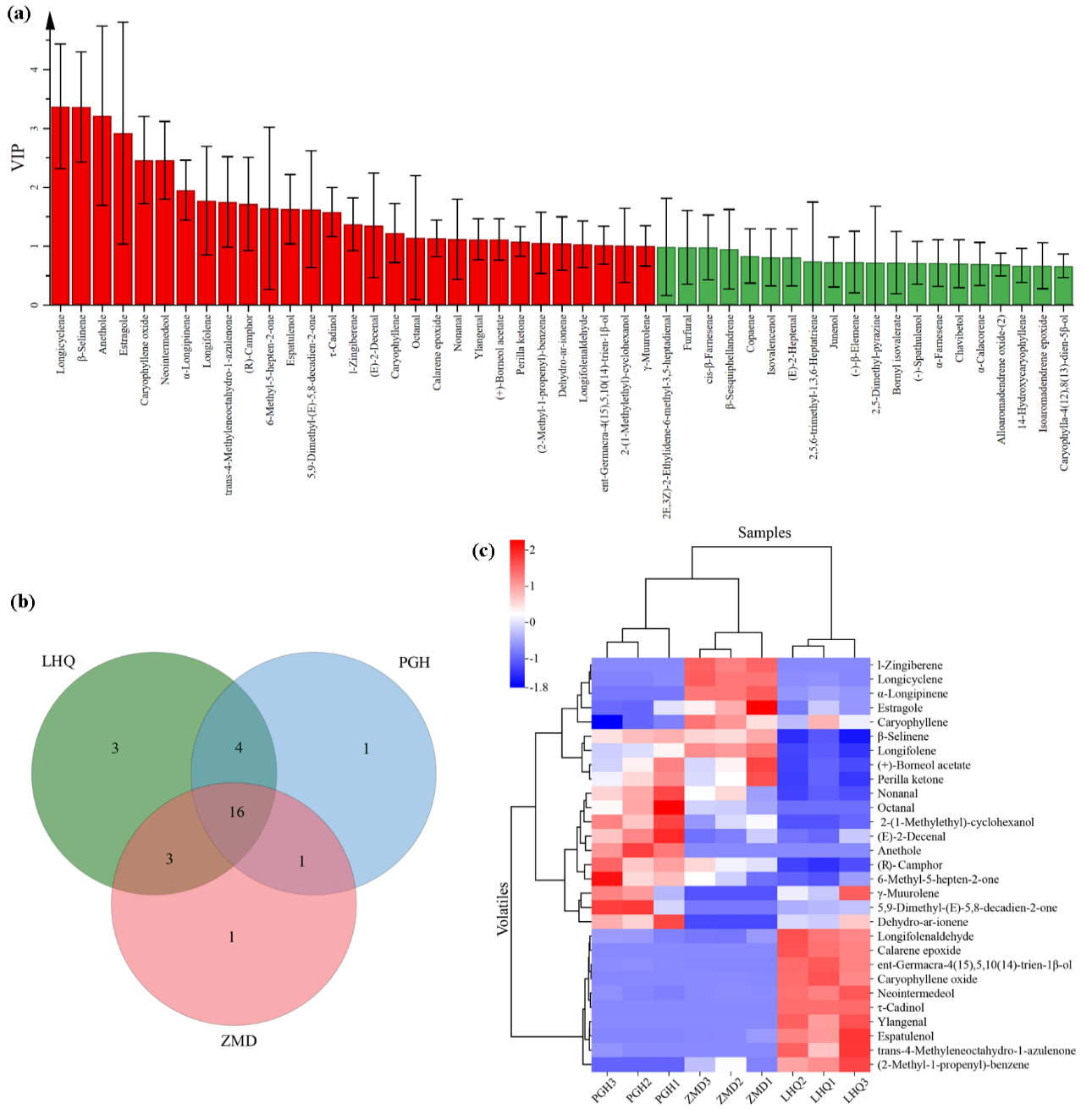


Figure 3. PLS-DA-based screening and distribution of candidate cultivar-discriminatory volatile compounds in three C. speciosa cultivars. (a) VIP scores of volatile compounds in the PLS-DA model; red and green bars indicate compounds with VIP > 1.0 and VIP ≤ 1.0, respectively. (b) Venn diagram showing the occurrence patterns of the 29 candidate discriminatory compounds among LHQ, PGH and ZMD. (c) Hierarchical clustering heatmap of the 29 candidate markers

图 3. 基于 PLS-DA 的三个木瓜品种差异挥发性判别标志物的筛选及分布。(a) PLS-DA 模型中挥发性化合物的 VIP 得分，红色和绿色柱分别表示 VIP > 1.0 和 VIP ≤ 1.0 的化合物；(b) 29 种差异判别化合物在 LHQ、PGH 和 ZMD 中检出分布的韦恩图；(c) 29 种差异标志物的层次聚类热图

较高，包括 l-Zingiberene、Longicyclene 和 *α*-Longipinene；PGH 中则有多种醛类和酮类成分表现出较高的相对丰度，如 Nonanal、Octanal、(E)-2-Decenal、(R)-Camphor 和 6-Methyl-5-hepten-2-one。样品聚类将三个品种清晰地划分为不同类群，并显示 PGH 与 ZMD 之间的相似性高于二者各自与 LHQ 之间的相似

性，这与 PCA 和 HCA 结果一致。上述结果表明，品种间的区分源于多个化学类别挥发性成分相对丰度的共同变化，而非由单一特征化合物决定。

不同品种间挥发性成分差异还可能涉及萜类骨架合成和脂质氧化之外的代谢来源。例如，6-Methyl-5-hepten-2-one 可由类胡萝卜素裂解产生；体外酶学研究已证明，部分植物的 Carotenoid cleavage dioxygenase 1 (CCD1)能够裂解 Lycopene 并生成该化合物[34]。因此，PGH 中 6-Methyl-5-hepten-2-one 的较高相对丰度，也可能与类胡萝卜素前体组成及其裂解过程有关。Anethole 和 Estragole 则属于苯丙烷来源的芳香族成分，相关植物中的研究显示，其形成与前体选择及 O-methyltransferase 介导的甲基化有关[35]。这些证据提示，本研究的候选判别标志物可能反映多个代谢分支的共同差异，单纯以“萜类合成增强”解释全部挥发性变化并不充分。

3.4. 基于 OPLS-DA 的挥发性成分谱差异分析

为解析各品种间的挥发性成分差异，分别对三个品种进行两两 OPLS-DA 分析，并根据相应的 S-plot 图筛选判别标志物。各组比较的得分图均显示，两个品种沿预测成分方向完全分离，所有样品均位于 Hotelling's T^2 的 95%置信椭圆内(图 4(a)、图 4(c)、图 4(e))；同一品种的生物学重复紧密聚集，表明组内一致性良好。相应 S-plot 图中，位于协方差和相关系数坐标轴两端的变量对品种间两两判别的贡献最为突出(图 4(b)、图 4(d)、图 4(f))。

在 LHQ 与 PGH 的比较中，预测成分解释了 78.2%的模型变异，并使两个品种完全分离，第一正交成分则解释了 11.0%的模型变异(图 4(a))。依据预设筛选标准，共筛选出 23 种差异挥发性判别标志物，包括 *β*-Selinene、Neointermedeol、Caryophyllene oxide、Anethole、trans-4-Methyleneoctahydro-1-Azulenone、(R)-Camphor、Spathulenol、*τ*-Cadinol、6-Methyl-5-hepten-2-one、Longifolene、Calarene epoxide、Perilla ketone、Ylangenal、(+)-Borneol acetate、Nonanal、(2-Methyl-1-propenyl)benzene、Longifolenaldehyde、ent-Germacra-4(15),5,10(14)-trien-1*β*-ol、Octanal、5,9-Dimethyl-(E)-5,8-decadien-2-one、(E)-2-Decenal、2-(1-Methylethyl)cyclohexanol 和 *β*-Sesquiphellandrene。S-plot 图中变量的分布表明，两个品种的分离反映了萜烃类、含氧倍半萜类、醛类及酮类成分的共同贡献，而非由某一种挥发性成分单独决定。

LHQ 与 ZMD 之间同样呈现清晰的分离。预测成分解释了 80.1%的模型变异，第一正交成分进一步解释了 11.5%的模型变异(图 4(c))。共筛选出 21 种潜在差异标志物，包括 *β*-Selinene、Neointermedeol、Caryophyllene oxide、Longicyclene、Estragole、trans-4-Methyleneoctahydro-1-azulenone、Spathulenol、*τ*-Cadinol、Longifolene、(R)-Camphor、(+)-Borneol acetate、Calarene epoxide、*α*-Longipinene、Ylangenal、Perilla ketone、Longifolenaldehyde、ent-Germacra-4(15),5,10(14)-trien-1*β*-ol、*β*-Sesquiphellandrene、cis-*β*-Farnesene、l-Zingiberene 和(2-Methyl-1-propenyl)benzene。LHQ 与 ZMD 之间的差异与萜烃及其含氧倍半萜衍生物的变化密切相关，提示萜类氧化过程可能参与了上述差异的形成。

虽然 PGH 与 ZMD 在 PCA 和 HCA 结果中表现出较高的相似性，但两两 OPLS-DA 仍能够清晰区分这两个品种，两组样品未发生重叠(图 4(e))。预测成分和第一正交成分分别解释了 54.3%和 26.0%的模型变异。共筛选出 24 种差异化合物，包括 Longicyclene、Anethole、Estragole、*α*-Longipinene、6-Methyl-5-hepten-2-one、Longifolene、5,9-Dimethyl-(E)-5,8-decadien-2-one、(R)-Camphor、(E)-2-Decenal、l-Zingiberene、*β*-Selinene、Caryophyllene、Octanal、cis-*β*-Farnesene、*γ*-Muurolene、(+)-Borneol acetate、Dehydro-ar-ionene、2-(1-Methylethyl)cyclohexanol、(2E,3Z)-2-Ethylidene-6-methyl-3,5-heptadienal、Nonanal、Isovalencenol、Perilla ketone、(E)-2-Heptenal 和(2-Methyl-1-propenyl)benzene。虽然 PGH 与 ZMD 的整体挥发性成分谱较为相似，但多种萜类、芳香醚类、醛类及酮类化合物的检出情况和相对丰度仍存在明显的品种间差异。

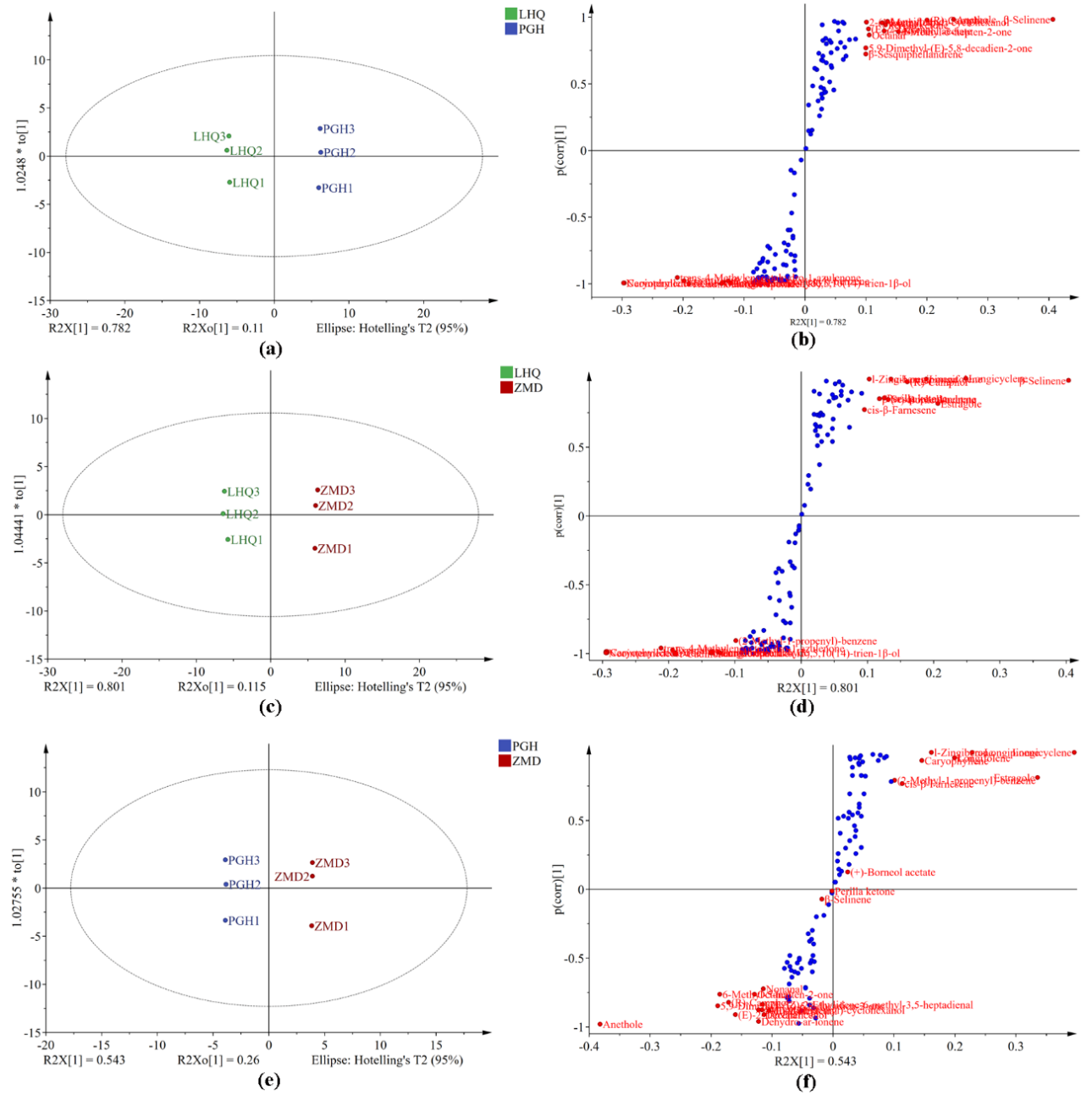


Figure 4. Pairwise OPLS-DA of the volatile profiles of three C. speciosa cultivars. Score plots and corresponding S-plots are shown for LHQ versus PGH (a), (b), LHQ versus ZMD (c), (d), and PGH versus ZMD (e), (f)

图 4. 三个木瓜品种挥发性成分谱的两两 OPLS-DA 分析。LHQ 与 PGH (a)、(b)、LHQ 与 ZMD (c)、(d)以及 PGH 与 ZMD (e)、(f)的得分图及对应的 S-plot 图

上述成分差异还可能受到果实生理成熟进程的影响。已有宣木瓜代谢组与转录组研究表明，果实成熟过程中糖、有机酸、氨基酸及苯丙烷类成分与相关基因表达发生变化，表明挥发性成分形成所依赖的代谢背景具有发育阶段依赖性[36]。本研究采用相近栽培条件并在商品成熟期采样，有助于降低环境与管理因素的影响，但商品成熟度相近并不必然意味着不同品种具有完全一致的生理成熟状态。因此，LHQ、PGH 和 ZMD 的挥发性差异可能同时包含品种遗传背景及成熟进程的影响。

此外，样品经过切片、50℃热风干燥 48 h 及粉碎处理，其挥发性成分反映了采前代谢积累与采后加工转化的共同结果。组织破碎可能改变酶与底物的接触机会，持续受热和接触空气也可能影响萜类氧化、脂质裂解及挥发物损失；相关组织破碎和氧化实验为这些可能性提供了依据[31]-[33]。即使采用相同加工条件，不同品种的基质组成与底物储量仍可能导致不同的成分保留率和转化程度。因此，本研究结果支持不同品种在萜烃、含氧萜类及脂质来源挥发物之间具有不同的组成分配特征；其具体调控机制仍需通过鲜果与干燥样品的配对比较、关键成分绝对定量，以及相关酶活性和基因表达分析进一步验证。

4. 结论

本研究采用 HS-SPME-GC-MS 结合化学计量学分析，系统表征了宣城产罗汉脐(LHQ)、苹果红(PGH)和芝麻点(ZMD)三个木瓜品种的挥发性成分谱。共鉴定出 123 种挥发性化合物，其中 83 种为三个品种共有，表明其具有相对保守的核心挥发性成分群。但不同品种在挥发性成分组成及相对丰度方面仍存在一定差异。LHQ 的挥发性成分种类最为丰富，共检出 118 种化合物，而 PGH 和 ZMD 分别检出 98 种和 96 种。LHQ、PGH 和 ZMD 中分别鉴定出 13 种、3 种和 1 种品种特有化合物。烯烃类在各品种的挥发性成分谱中均占主导地位，其中 ZMD 的占比最高；LHQ 则表现出醇类、环氧化合物及其他含氧挥发性成分占比较高的特征。

PCA 和 HCA 均能清晰区分三个品种，且各品种内均表现出良好的重复性。前两个主成分累计解释了 70.7%的总方差，其中 LHQ 的挥发性成分组成与其他两个品种的差异最为明显，而 PGH 与 ZMD 的相似性相对较高。PLS-DA 结合单因素方差分析共筛选出 29 种品种判别差异挥发性标志物。两两 OPLS-DA 进一步揭示了分别用于 LHQ-PGH、LHQ-ZMD 和 PGH-ZMD 区分的不同化合物组合。其中，*β*-Selinene、(R)-Camphor、Longifolene、Perilla ketone、(+)-Borneol acetate 和(2-Methyl-1-propenyl)benzene 六种化合物在三组两两比较中均被筛选出，有望作为品种鉴别及靶向定量验证的潜在候选化合物。本研究建立的分析框架为木瓜的品种鉴别、原料分级及面向不同品种的定向加工提供了初步的化学信息。后续仍需通过标准品确认、气味活度值分析、气相色谱－嗅闻联用分析、由经过训练的评价员开展的感官评价，以及独立样本集验证，进一步确认所筛选挥发性标志物与感官特征的关联及其在实际应用中的稳健性。

基金项目

本研究得到国家级大学生创新创业训练计划项目(202410377044)和安徽省大学生创新创业训练计划项目(2024CXXL114)，谨致谢忱。

参考文献

[1] Hou, M., Lin, C., Zhu, L. and Bian, Z. (2025) Phenolics from *Chaenomeles speciosa* Leaves: Ionic Liquid-Based Ultrasound-Assisted Extraction, Adsorptive Purification, UPLC-QqQ-MS/MS Quantification, and Bioactivity Assessment. *Ultrasonics Sonochemistry*, **114**, Article ID: 107282. https://doi.org/10.1016/j.ultsonch.2025.107282

[2] Duan, Z., Jin, C., Deng, Y., Liu, J., Gu, C., Wang, J., *et al*. (2023) Exploring the Chondroprotective Effect of *Chaenomeles speciosa* on Glucose-6-Phosphate Isomerase Model Mice Using an Integrated Approach of Network Pharmacology and Experimental Validation. *Journal of Ethnopharmacology*, **314**, Article ID: 116553. https://doi.org/10.1016/j.jep.2023.116553

[3] Miao, J., Zhao, C., Li, X., Chen, X., Mao, X., Huang, H., *et al*. (2016) Chemical Composition and Bioactivities of Two Common Chaenomeles Fruits in China: *Chaenomeles speciosa* and *Chaenomeles sinensis*. *Journal of Food Science*, **81**, 2049-2058. https://doi.org/10.1111/1750-3841.13377

[4] Zheng, X., Wang, H., Zhang, P., Gao, L., Yan, N., Li, P., *et al*. (2018) Chemical Composition, Antioxidant Activity and A-Glucosidase Inhibitory Activity of *Chaenomeles speciosa* from Four Production Areas in China. *Molecules*, **23**, Article No. 2518. https://doi.org/10.3390/molecules23102518

[5] Huang, G., Xi, Z., Li, J., Chen, C., Yang, G., Sun, L., *et al*. (2013) Isolation of Two New Phenolic Compounds from the

Fruit of *Chaenomeles speciosa* (Sweet) Nakai. *Phytochemistry Letters*, **6**, 526-530. https://doi.org/10.1016/j.phytol.2013.06.011

[6] Zhang, R., Li, S., Zhu, Z. and He, J. (2019) Recent Advances in Valorization of Chaenomeles Fruit: A Review of Botanical Profile, Phytochemistry, Advanced Extraction Technologies and Bioactivities. *Trends in Food Science & Technology*, **91**, 467-482. https://doi.org/10.1016/j.tifs.2019.07.012

[7] Hou, M., Shi, J., Lin, C., Zhu, L. and Bian, Z. (2024) Ultrasound-Assisted Extraction of Triterpenoids from *Chaenomeles speciosa* Leaves: Process Optimization, Adsorptive Enrichment, Chemical Profiling, and Protection against Ulcerative Colitis. *Ultrasonics Sonochemistry*, **111**, Article ID: 107136. https://doi.org/10.1016/j.ultsonch.2024.107136

[8] Turkiewicz, I.P., Wojdyło, A., Tkacz, K. and Nowicka, P. (2020) Carotenoids, Chlorophylls, Vitamin E and Amino Acid Profile in Fruits of Nineteen Chaenomeles Cultivars. *Journal of Food Composition and Analysis*, **93**, Article ID: 103608. https://doi.org/10.1016/j.jfca.2020.103608

[9] Yu, A., Hu, W., Bi, H., Fu, L., Wang, Z., Wang, M., *et al*. (2024) Recent Advances in Polysaccharides from *Chaenomeles speciosa* (Sweet) Nakai.: Extraction, Purification, Structural Characteristics, Health Benefits, and Applications. *Molecules*, **29**, Article No. 2984. https://doi.org/10.3390/molecules29132984

[10] Huang, D.D., Jiang, S.G., Du, Z.N., Chen, Y., Xue, D., Wang, X., *et al*. (2022) Analgesic and Anti-Arthritic Activities of Polysaccharides in *Chaenomeles speciosa*. *Frontiers in Pharmacology*, **13**, Article ID: 744915. https://doi.org/10.3389/fphar.2022.744915

[11] Xu, R., Deng, P., Ma, Y., Li, K., Ren, F. and Li, N. (2024) Anti-Hyperuricemic Effects of Extracts from *Chaenomeles speciosa* (Sweet) Nakai Fruits on Hyperuricemic Rats. *Metabolites*, **14**, Article No. 117. https://doi.org/10.3390/metabo14020117

[12] Zhang, L., Cheng, Y., Liu, A., Wang, H., Wang, Y. and Du, G. (2010) Antioxidant, Anti-Inflammatory and Anti-Influenza Properties of Components from *Chaenomeles speciosa*. *Molecules*, **15**, 8507-8517. https://doi.org/10.3390/molecules15118507

[13] Cheng, X., Shi, S., Su, J., Xu, Y., Ordaz-Ortiz, J.J., Li, N., *et al*. (2020) Structural Characterization of a Heteropolysaccharide from Fruit of *Chaenomelese speciosa* (Sweet) Nakai and Its Antitumor Activity. *Carbohydrate Polymers*, **236**, Article ID: 116065. https://doi.org/10.1016/j.carbpol.2020.116065

[14] Wang, W., An, M., Zhao, G., Wang, Y., Yang, D., Zhang, D., *et al*. (2023) Ultrasonic-Assisted Customized Natural Deep Eutectic Solvents Extraction of Polyphenols from *Chaenomeles speciosa*. *Microchemical Journal*, **193**, Article ID: 108952. https://doi.org/10.1016/j.microc.2023.108952

[15] Deng, Y., Huang, L., Zhang, C., Xie, P., Cheng, J., Wang, X., *et al*. (2020) Novel Polysaccharide from *Chaenomeles speciosa* Seeds: Structural Characterization, α-Amylase and α-Glucosidase Inhibitory Activity Evaluation. *International Journal of Biological Macromolecules*, **153**, 755-766. https://doi.org/10.1016/j.ijbiomac.2020.03.057

[16] Hu, F.X., Liu, C., Wang, F., Zhou, C., Zhu, M., Sun-Waterhouse, D., *et al*. (2023) Phenolic Compounds from *Chaenomeles speciosa* Alleviate Inflammation in Lipopolysaccharide-Treated RAW264.7 Macrophages via the NF-κB and MAPK Pathways. *Food Science and Human Wellness*, **12**, 1071-1080. https://doi.org/10.1016/j.fshw.2022.10.025

[17] Zhang, S., Ren, Y., Zhao, Q., Wu, Y., Zhuo, Y. and Li, H. (2023) Drought-Induced CsMYB6 Interacts with CsbHLH111 to Regulate Anthocyanin Biosynthesis in *Chaenomeles speciosa*. *Physiologia Plantarum*, **175**, e13859. https://doi.org/10.1111/ppl.13859

[18] Deng, Y., Huang, L., Zhang, C., *et al*. (2019) Physicochemical and Functional Properties of Water Soluble Gum from Wrinkle Floweringquince (*Chaenomeles speciosa*) Seeds. *Journal of Bioresources and Bioproducts*, **4**, 222-230.

[19] Hu, F., Li, F., Zheng, Z., Sun-Waterhouse, D. and Wang, Z. (2022) Surfactant-Mediated Ultrasonic-Assisted Extraction and Purification of Antioxidants from *Chaenomeles speciosa* (Sweet) Nakai for Chemical- and Cell-Based Antioxidant Capacity Evaluation. *Molecules*, **27**, Article No. 7970. https://doi.org/10.3390/molecules27227970

[20] Tan, W. and Li, Z. (2026) Network Pharmacology-Based Exploration: Non-Targeted Metabolites of Lactobacillus-Fermented *Chaenomeles speciosa* (Sweet) Nakai, *Smilax glabra* Roxb. and *Pueraria montana* var. Lobata in Uric Acid Metabolism Intervention. *Biologics*: *Targets and Therapy*, **20**, Article ID: 578004. https://doi.org/10.2147/btt.s578004

[21] Zhu, Q., Liao, C., Liu, Y., Wang, P., Guo, W., He, M., *et al*. (2012) Ethanolic Extract and Water-Soluble Polysaccharide from *Chaenomeles speciosa* Fruit Modulate Lipopolysaccharide-Induced Nitric Oxide Production in RAW264.7 Macrophage Cells. *Journal of Ethnopharmacology*, **144**, 441-447. https://doi.org/10.1016/j.jep.2012.09.042

[22] Zhou, L., Li, Y., Gong, X., Li, Z., Wang, H., Ma, L., *et al*. (2022) Preparation, Characterization, and Antitumor Activity of *Chaenomeles speciosa* Polysaccharide-Based Selenium Nanoparticles. *Arabian Journal of Chemistry*, **15**, Article ID: 103943. https://doi.org/10.1016/j.arabjc.2022.103943

[23] Ma, Y., Li, J., Li, J., Yang, L., Wu, G. and Liu, S. (2022) Comparative Metabolomics Study of *Chaenomeles speciosa* (Sweet) Nakai from Different Geographical Regions. *Foods*, **11**, Article No. 1019. https://doi.org/10.3390/foods11071019

[24] Zhang, X., Yu, X., Hu, R., Zhang, J. and Dong, W. (2026) Effects of Different Roasting Temperatures on the Flavor

Characteristics of Shelled Macadamia Kernels: Analysis Based on HS-GC-IMS and HS-SPME-GC-MS. *Food Research International*, **232**, Article ID: 118878. https://doi.org/10.1016/j.foodres.2026.118878

[25] Song, X., Dai, F., Yao, J., Li, Z., Huang, Z., Liu, H., *et al*. (2023) Characterization of the Volatile Profile of Feijoa (*Acca sellowiana*) Fruit at Different Ripening Stages by HS-SPME-GC/MS. *LWT*, **184**, Article ID: 115011. https://doi.org/10.1016/j.lwt.2023.115011

[26] Song, Y., Li, J., Ding, Q., Yang, X., Yu, J., Zhang, Y., *et al*. (2025) Exploring Key Aroma Differences of Three Fenghuang Dancong Oolong Teas and Their Perception Interactions with Caffeine via Sensomics Approach. *Food Research International*, **202**, Article ID: 115665. https://doi.org/10.1016/j.foodres.2025.115665

[27] Gao, Y., Wang, J., Li, M., Wang, J., Qiao, L., Zhang, N., *et al*. (2025) Aroma Profiling of Chinese Chrysanthemum (*Chrysanthemum morifolium* Ramat.) Using Flavoromics Analysis. *Journal of Food Composition and Analysis*, **138**, Article ID: 107014. https://doi.org/10.1016/j.jfca.2024.107014

[28] Dudareva, N., Andersson, S., Orlova, I., Gatto, N., Reichelt, M., Rhodes, D., *et al*. (2005) The Nonmevalonate Pathway Supports Both Monoterpene and Sesquiterpene Formation in Snapdragon Flowers. *Proceedings of the National Academy of Sciences*, **102**, 933-938. https://doi.org/10.1073/pnas.0407360102

[29] Martin, D.M., Fäldt, J. and Bohlmann, J. (2004) Functional Characterization of Nine Norway Spruce TPS Genes and Evolution of Gymnosperm Terpene Synthases of the TPS-D Subfamily. *Plant Physiology*, **135**, 1908-1927. https://doi.org/10.1104/pp.104.042028

[30] Koo, H.J. and Gang, D.R. (2012) Suites of Terpene Synthases Explain Differential Terpenoid Production in Ginger and Turmeric Tissues. *PLOS ONE*, **7**, e51481. https://doi.org/10.1371/journal.pone.0051481

[31] Sköld, M., Karlberg, A., Matura, M. and Börje, A. (2006) The Fragrance Chemical *β*-Caryophyllene—Air Oxidation and Skin Sensitization. *Food and Chemical Toxicology*, **44**, 538-545. https://doi.org/10.1016/j.fct.2005.08.028

[32] Chen, G., Hackett, R., Walker, D., Taylor, A., Lin, Z. and Grierson, D. (2004) Identification of a Specific Isoform of Tomato Lipoxygenase (TomloxC) Involved in the Generation of Fatty Acid-Derived Flavor Compounds. *Plant Physiology*, **136**, 2641-2651. https://doi.org/10.1104/pp.104.041608

[33] Cao, J., Zou, X., Deng, L., Fan, Y., Li, H., Li, J., *et al*. (2014) Analysis of Nonpolar Lipophilic Aldehydes/Ketones in Oxidized Edible Oils Using HPLC-QqQ-MS for the Evaluation of Their Parent Fatty Acids. *Food Research International*, **64**, 901-907. https://doi.org/10.1016/j.foodres.2014.08.042

[34] Vogel, J.T., Tan, B., McCarty, D.R. and Klee, H.J. (2008) The Carotenoid Cleavage Dioxygenase 1 Enzyme Has Broad Substrate Specificity, Cleaving Multiple Carotenoids at Two Different Bond Positions. *Journal of Biological Chemistry*, **283**, 11364-11373. https://doi.org/10.1074/jbc.m710106200

[35] Gross, M., Friedman, J., Dudai, N., Larkov, O., Cohen, Y., Bar, E., *et al*. (2002) Biosynthesis of Estragole and T-Anethole in Bitter Fennel (*Foeniculum vulgare* Mill. Var. Vulgare) Chemotypes. Changes in SAM: Phenylpropene O-Methyltransferase Activities during Development. *Plant Science*, **163**, 1047-1053. https://doi.org/10.1016/s0168-9452(02)00279-0

[36] Fang, Q., Zheng, H., Fu, G., Yin, M., Jiang, L., Zhao, Y., *et al*. (2023) Integrated Untargeted Metabolome, Full-Length Sequencing, and Transcriptome Analyses Reveal Insights into the Fruit Quality at Different Harvest Times of *Chaenomeles speciosa*. *Food Research International*, **164**, Article ID: 112314. https://doi.org/10.1016/j.foodres.2022.112314