



后鼻腔烟气成分检测方法建立及差异性评价

沈迪^{1,2}, 张海瑜^{1,2}, 陈建华², 王晋², 范多青², 叶艳青^{1*}, 张承明^{2**}

(1. 云南民族大学 化学与环境学院, 云南 昆明 650504;

2. 云南中烟工业有限责任公司技术中心, 云南 昆明 650106)

摘要:借鉴食品后鼻腔香气研究相关理论, 基于烟草行业卷烟产品感官评吸方法和人体感知卷烟烟气中香气物质的实际暴露途径, 开展后鼻腔烟气成分测定及不同品牌卷烟烟气差异性评价。在后鼻腔烟气捕集装置搭建的基础上, 通过对吸烟方式、吸附管类型、抽吸口数等捕集方法关键参数的优化, 确定了最佳技术参数: 脱附温度为 290 °C, 脱附时间为 6 min, 冷阱最高温度为 270 °C, 建立了“后鼻腔烟气中挥发性成分测定热脱附-气相色谱-质谱联用(TD-GC/MS)法”。采用该方法, 开展 4 个市售卷烟产品的后鼻腔烟气中挥发性成分测定, 将后鼻腔烟气中挥发性成分检测数据导入统计分析软件(SIMCA), 对其进行主成分分析(PCA)和偏最小二乘法-判别分析(PLS-DA)。基于后鼻腔烟气中挥发性成分检测结果能够实现对 4 个不同品牌卷烟产品的明显区分, 实现差异性评价的目的。同时, 采用 Fisher 步进式线性判别分析方法, 对筛选出的卷烟后鼻腔烟气特征指标(10 个化合物)检测数据进行验证性研究, 原始验证和交叉验证结果表明, 基于烟气特征指标, 不同品牌的卷烟均被正确分类。

关键词:后鼻腔烟气; 挥发性物质; 捕集装置; 差异性评价; 卷烟产品区分

中图分类号: TS 41 **文献标志码:** A **文章编号:** 0258-7971(2025)06-1131-08

烟草香气^[1-2]是烟叶本身香气和烟叶经燃烧后产生香气、香味的总和, 是对烟草香气和吃味的综合感受。构成烟叶香气的化学成分种类繁多且有些成分含量很低, 但是卷烟的化学组成及其含量很大程度上决定了卷烟品质的好坏^[2], 因此掌握烟草中的香气化学成分对提升烟草制品质量具有重要的意义。

后鼻腔路径指食品口腔加工中所感知的食品香气^[3-4]。此外, 后鼻腔嗅觉感知需要味觉皮质参与并受多种皮质协同作用, 可与味觉、口腔触觉等多种感官存在跨模交互作用^[5-6], 最终形成后鼻腔香气感知。卷烟感官评价方法中也明确规定^[7]: 烟气香气感知路径不管是整体循环评吸法(又称大循环)或是局部循环评吸法(又称小循环), 烟气最后都从鼻腔徐徐排出, 鼻腔都是烟气中香气物质感知的唯一器官。对于卷烟的香气来说, 前鼻腔香气主要包括卷烟嗅香和卷烟测流烟气香气; 卷烟后鼻腔香气

是卷烟抽吸过程中, 烟气经过口腔加工后, 从后鼻腔进入而被人感知的香气, 这是影响卷烟吃味的主要香气。因此, 后鼻腔烟气成分决定卷烟产品抽吸香气品质的真实物质基础。

目前, 对于卷烟烟气捕集方式主要采用吸烟机-剑桥滤片捕集方式, 将颗粒物进行溶剂萃取和衍生化等前处理后, 利用气相色谱-质谱法进行分析测试。刘剑等^[8]采用 SH-GC-MS 实现了对烟草中风味物质的大批量快速检测; 黄祖刚^[9]采用吹扫捕集-气相色谱对不同工序加工方式对烟丝香气的影响进行了分析, 从而确定烟丝加工的最佳方式; 曲亚玲等^[10]采用 GC-MS 测定了卷烟侧流烟气中半挥发性化合物的含量; 杨靖等^[11]对卷烟主流烟气进行同时蒸馏萃取, 并进一步采用 GC-MS-O 对巨豆三烯酮 4 种同分异构体的香气活力值进行了测定。

近年来, 虽然检测设备花样翻新、异彩纷呈,

收稿日期: 2025-03-13; 接受日期: 2025-05-26; 网络出版日期: 2025-07-02

基金项目: 云南中烟工业有限责任公司项目(2023ZK01)。

作者简介: 沈迪(1998-), 女, 云南人, 硕士, 主要研究烟草化学。E-mail: 2564347892@qq.com。

** 通信作者: 叶艳青(1967-), 女, 云南人, 硕士, 教授, 主要研究分析化学。E-mail: yey-qing@163.com。

张承明(1971-), 男, 云南人, 硕士, 研究员, 主要研究烟草化学。E-mail: 13987643543@139.com。

但热脱附/气相色谱-质谱联用法是香气物质检测的常用主流技术,其具有全自动、快速、灵敏度高的特点.王兵等^[12]应用热脱附 TD-GC/MS 法对不同产地烤烟烟叶样品进行了挥发性香气成分指纹图谱研究,采用主成分分析方法比较了不同产地烟叶风格特征的差异.

本文通过对鼻后卷烟烟气捕集条件的优化,首次搭建了后鼻腔烟气捕集装置,通过对吸烟方式、吸附管类型、抽吸口数等捕集方法关键参数的优化,建立了“后鼻腔烟气中挥发性成分测定热脱附-气相色谱-质谱联用(TD-GC/MS)法”.采用该方法,开展了 4 个市售卷烟产品进行后鼻腔烟气中挥发性成分测定;采用主成分分析(PCA)和偏最小二乘法-判别分析(PLS-DA),对卷烟产品进行差异性评价;进一步采用 Fisher 步进式线性判别分析方法对差异性结果进行了验证.

1 材料与方 法

1.1 材料、试剂和仪器 气相色谱-质谱联用仪(型号 7890A-5975C),色谱柱 DB-WAX(30 m× ϕ 250 μ m, 0.25 μ m),美国 Agilent Technologies 公司;搅拌棒吸附-热脱附系统, Tenax TA 填料吸附管(60 mm/approx180 mg), TC2-吸附管老化器,德国 Gerstel 公司;氘代萘(分析标准品),上海阿拉丁生化科技股份有限公司;正己烷(色谱纯),德国 Merck 公司;无水氯化钙,广东西陇科学股份有限公司.

差异性评价样品通过超市购买,具体卷烟产品包括:南京(软九五)、黄金叶(天叶)、云烟(大重九)、中华(软).

1.2 实验方法

1.2.1 热脱附条件 TDS:初温 20 $^{\circ}$ C,然后以 50 $^{\circ}$ C/min 升至 290 $^{\circ}$ C 保持 6 min;传输线温度 290 $^{\circ}$ C.

CIS:初温 -70 $^{\circ}$ C,平衡 1 min,然后以 11 $^{\circ}$ C/s 升至 250 $^{\circ}$ C 保持 2 min.

1.2.2 色谱、质谱条件 DB-WAX 毛细管柱(30 m× ϕ 250 μ m, 0.25 μ m)固定相:聚乙二醇-PEG;溶剂放空模式,分流比 20 : 1;程序升温:初温 40 $^{\circ}$ C,保持 1 min,以 8 $^{\circ}$ C/min 升至 230 $^{\circ}$ C,保持 5 min. GC/MS 传输温度:260 $^{\circ}$ C;扫描质量范围: m/z 35 ~ 450;溶剂延迟 3 min,采集方式:Scan 和 SIM 模式,其中 SIM 扫描选择离子为 107、108、136(内标氘代萘特征离子).

1.3 定性定量分析 定性分析:通过与现有质谱

数据库(NIST2017 谱库)的质谱进行检索比较,对挥发及半挥发性成分进行定性分析;定量分析:采用内标法(内标物为 0.5 μ g/ μ L 的氘代甲苯)进行半定量测定,从而完成单个峰的识别.各组分含量按下式进行计算:

$$w_i = \frac{A_i}{A_0} \times \frac{m_0}{m}, \quad (1)$$

式(1)中: w_i 表示所测挥发性组分的质量分数,mg/kg; A_i 为各个化合物的峰面积; A_0 表示内标物的峰面积; m_0 表示内标物质的质量; m 为样品的质量.

1.4 数据处理 所有数据采用 SPSS 进行单因素方差分析, F 检验,显著性水平 $p < 0.05$,进行差异性分析,采用 SIMCA 软件进行主成分分析 PCA,偏最小二乘判别分析 PLS-DA 分析,使用 Office 2010 对所测数据汇总整理.

2 结果与讨论

2.1 后鼻腔烟气捕集装置的设计 便携式后鼻腔烟气捕集装置示意图详见图 1.将干燥管内填入无水氯化钙,装填高度 5 cm,捕集管中装填 Tenax TA 吸附材料,装填高度 5 cm,然后将卷烟烟气鼻后捕集装置连接安装好后,打开泵,稳定运行后,由专业测试人员抽吸卷烟.

2.2 后鼻腔烟气捕集条件优化

2.2.1 吸烟方式的选择 由专业吸烟人员采用大循环和小循环 2 种不同的抽烟方式抽烟,并用图 1 中的后鼻腔烟气捕集装置捕集烟气,每种抽烟方式抽 5 支平行样.不同抽烟方式色谱检测峰面积相对标准偏差详见表 1.大循环抽烟方式收集的烟气稳定性较好,挥发性成分出峰峰面积相对标准偏差都在 10% 以内;小循环抽烟方式收集的烟气不稳定,检测出的化合物平行性差,挥发性强度不同的化合物相对标准偏差都大于 10%.可见采用大循环模式抽吸时的稳定性优于小循环模式.

2.2.2 吸附管类型的选择 根据报道食品中后鼻腔香气多采用 Tenax TA 为填料的吸附管,本文选取了 3 种不同类型填料的吸附管各收集 3 口烟气进行 TD-GC/MS 测定,每种吸附管做 5 个平行样,用 Tenax TA 吸附管收集的后鼻腔烟气中共检测出了 55 种化合物,用 Tenax@GR 吸附管收集的后鼻腔烟气中共检测出了 34 种化合物,用 Carbotrap 300 吸附管收集的后鼻腔烟气中共检测出了 37 种化合物,通过实验对比,最终选用 Tenax TA 吸附管

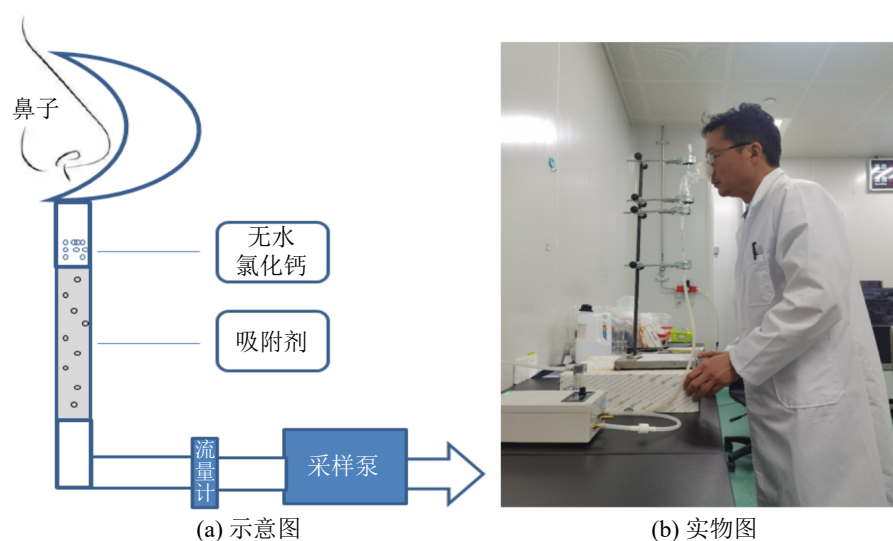


图 1 便携式后鼻腔烟气捕集示意图 (a) 和实物图 (b)

Fig. 1 Schematic diagram (a) and physical diagram (b) of portable posterior nasal smoke capture

表 1 不同抽烟方式色谱检测峰面积相对标准偏差

Tab. 1 Relative standard deviation of peak area of GC for different smoking methods

序号	保留时间/min	CAS	化合物名称	相对标准偏差 (RSD) /%	
				大循环	小循环
1	4.95	002609-23-6	2,6-二甲基-2-反式-6-辛二烯	5	20
2	5.35	001195-31-9	对薄荷烯	8	16
3	6.40	005989-27-5	(+)-柠檬烯	7	13
4	10.72	000098-01-1	糠醛	9	76
5	12.44	000620-02-0	5-甲基-2-呋喃甲醛	3	50
6	13.73	000098-00-0	糠醇	8	34
7	16.76	000054-11-5	烟碱	9	12
8	17.34	000504-96-1	新植二烯	2	13
9	29.07	000057-10-3	棕榈酸	8	4

作为后鼻腔烟气的捕集条件。

2.2.3 抽吸口数的选择 用后鼻腔烟气捕集装置依次捕集 1、2、3 口和 4 口卷烟烟气, 每个口数烟气捕集 5 个平行样, 取出填有 Tenax TA 的吸附管, 然后用微量注射器, 取 2 μL 氘代萘内标溶液 (质量浓度 10 $\mu\text{g}/\text{mL}$) 注入吸附管中, 采用热脱附-气相色谱/质谱 (TD-GC/MS) 进行检测。

定性结果: 采用美国国家标准与技术研究院 (NIST 17) 质谱数据库进行检索比对, 保留匹配度大于 80% 以上的化合物, 结果显示捕集 1 口烟气, 检测出 30 种化合物; 捕集 2 口烟气, 检测出 37 种化合物; 捕集 3 口烟气, 检测出 55 种化合物; 捕集 4

口烟时, 检测出 55 种化合物. 由此结果可见, 抽吸到 3 口或 4 口时, 能吸附的化合物种类已趋于平稳。

吸附剂穿透实验: 在吸附采样管后串联另一根吸附采样管, 同时采样. 每批样品应至少采集一根串联吸附采样管, 用于监视采样是否穿透, 串联两支吸附管采样, 若后边一支吸附管的分析结果超过前、后两支和的 10%, 则认为已经发生采样穿透. 收集 3 口烟气时, 设置穿透实验, 串联两支吸附管收集烟气进行 TD-GC/MS 测定, 吸附管未发现穿透, 详见表 2; 收集 4 口烟气时, 设置穿透实验, 发现烟气已经有 18 个化合物发生穿透, 其中穿透率超过 10% 的有 11 个化合物. 实验结果表明, 收集

表 2 收集 3 口烟气时吸附管的穿透结果

Tab. 2 Penetration results of adsorption tubes when collecting 3 smoke pipes

保留时间/min	CAS	化合物名称	不同吸附管对应化合物色谱峰面积/(mV·s)		色谱峰面积之比/%
			管1	管2	管2/(管1+管2)
5.57	000106-42-3	对二甲苯	1 871 859	159 112	7.8
6.53	005989-27-5	(+)-柠檬烯	5 687 676	145 610	2.5
7.47	000629-20-9	环辛四烯	427 988	12 070	2.7
9.17	000930-30-3	2-环戊烯酮	256 683	18 008	6.6
10.83	000098-01-1	糠醛	454 364	27 871	5.8
18.47	000108-95-2	苯酚	6 278 289	237 656	3.6
22.1	000056-81-5	丙三醇	4 391 598	266 043	5.7

4 口烟气时, 烟气产生量过大, 已超过吸附管吸附能力, 影响烟气收集量, 从而影响实验测试结果。

收集的 1、2、3 口和 4 口烟气测试结果表明, 1、2 口烟气检测结果平行性不好, 检出化合物较少; 3、4 口烟气平行性都较好, 检出的化合物也一致, 但是当收集 4 口烟气时, 吸附管发生了穿透, 不能吸附 4 口所有的烟气, 影响烟气特征成分的检测。因此, 实验最佳烟气收集的抽吸口数为 3 口。

2.3 卷烟后鼻腔烟气差异性评价

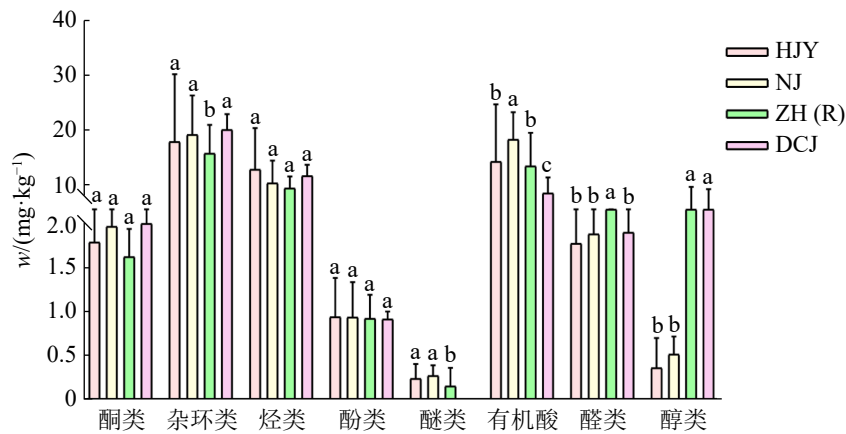
2.3.1 检测结果 采用本文优化建立的热脱附-气相色谱-质谱联用法(TD-GC/MS)对黄金叶(天叶)(HJY)、南京(软九五)(NJ)、中华(软)[ZH(R)]、云烟(大重九)(DCJ)4 个高端品牌卷烟产品进行了后鼻腔烟气特征成分的筛选与识别, 将测得的组分进行质谱数据库检索, 保留匹配度 $\geq 80\%$ 的组分, 定性、定量结果详见支撑材料附表 S1。

将支撑材料附表 S1 中 4 个高端品牌卷烟产品后鼻腔烟气中挥发性成分检测结果按化合物类型进行分析, 分析结果表明: 在后鼻腔烟气中共检出挥发性化合物 60 种, 其中杂环类(22 种)、烷烃类(14 种)、酚类(2 种)、醚类(1 种)、酮类(10 种)、有机酸类(4 种)、醛类(4 种)、醇类(3 种)。4 种不同品牌卷烟中, 相比其他 3 种品牌, 2,6-二甲基-2-反式-6-辛二烯、2-甲基呋喃、苯甲醛、3-己烯-2,5-二酮、3-甲基-2-(5H)-呋喃酮、香叶基丙酮、甘油为 DCJ 中特有; 在 DCJ 中, 2-乙酰基呋喃、1,2,4-三甲基苯、3-乙基甲苯、环戊烷-1,2-二酮、3,7,11-三甲基-2,6,10-十二碳三烯-1-醇、棕榈酸偏低, 均三甲苯、冰醋酸、5-甲基-2-呋喃甲醛、1-甲基茛、1-癸烯、2,5-二甲基呋喃-3,4(2H, 5H)-二酮偏高; 对甲苯甲

醚在 ZH(R) 中偏高; 3-甲基苯乙烯、(2E,4E,6E)-3,4-二甲基-2,4,6-辛三烯、环戊-4-烯-1,3-二酮、2-甲基苯并呋喃、新植二烯在 NJ 中含量偏高; 对二甲苯、间甲酚、(E)-5-异丙基-8-甲基壬-6,8-二烯-2-酮在 HJY 中含量偏低, 邻-异丙基苯、正十三烷、正十四烷、丙烯酸只在 HJY 中检出。

从图 2 结合支撑材料附表 S1 可以看出, 在不同品牌卷烟的鼻后烟气挥发性组分类别中, 除了含量最高的烟碱和新植二烯, 杂环类、烃类、有机酸类含量占比最大。不同品牌卷烟鼻后烟气的杂环类组分含量方面, 表现为 DCJ>NJ>HJY>ZH(R), 且 DCJ、NJ、HJY 杂环类含量显著高于 ZH(R) ($P<0.05$); 不同品牌卷烟鼻后烟气的有机酸类组分含量方面, 表现为 NJ>HJY>ZH(R)>DCJ, 且 NJ 品牌含量显著高于 HJY、DCJ、ZH(R) ($P<0.05$); 不同品牌卷烟鼻后烟气的醇类组分含量方面, NJ、DCJ 品牌含量显著高于 HJY、ZH(R) ($P<0.05$); 其他类别组分含量不同品牌之间无显著性差异 ($P>0.05$)。

2.3.2 差异性评价 为了区分不同品牌的卷烟, 筛选卷烟鼻后烟气的特征成分, 将检测的挥发性成分数据导入 SIMCA, 对其进行无监督的 PCA 分析和有监督的 PLS-DA 分析, 结果如图 3 所示, 主成分分析结合偏最小二乘法判别分析来看, 不同品牌的卷烟都能较明显区分。图 3(d) 为 PLS-DA 的载荷图, 通过不同品牌卷烟烟气质心与载荷距离, 同时结合支撑材料附表 S1 数据可知, NJ 化学挥发性成分特征为棕榈酸、正十五烷; HJY 化学挥发性成分特征为丙烯酸、1,2-二氢萘、正十四烷; ZH(R) 化学挥发性成分特征为 4-异丙基苯、间二甲苯; DCJ 化学挥发性成分特征为甘油、苯甲醛、2-甲基



注: 柱状图上的小写字母不同, 表示同一组分类别的含量差异达到了显著水平 ($P < 0.05$); HJY 代表黄金叶 (天叶), NJ 代表南京 (软九五), ZH (R) 代表中华 (软), DCJ 代表云烟 (大重九)。

图 2 4 个卷烟后鼻腔烟气中挥发性组分含量分布柱状图 (除了烟碱和新植二烯)

Fig. 2 Bar charts showing the distribution of volatile component content in the nasal smoke of four brands of cigarettes (excluding nicotine and neophytadiene)

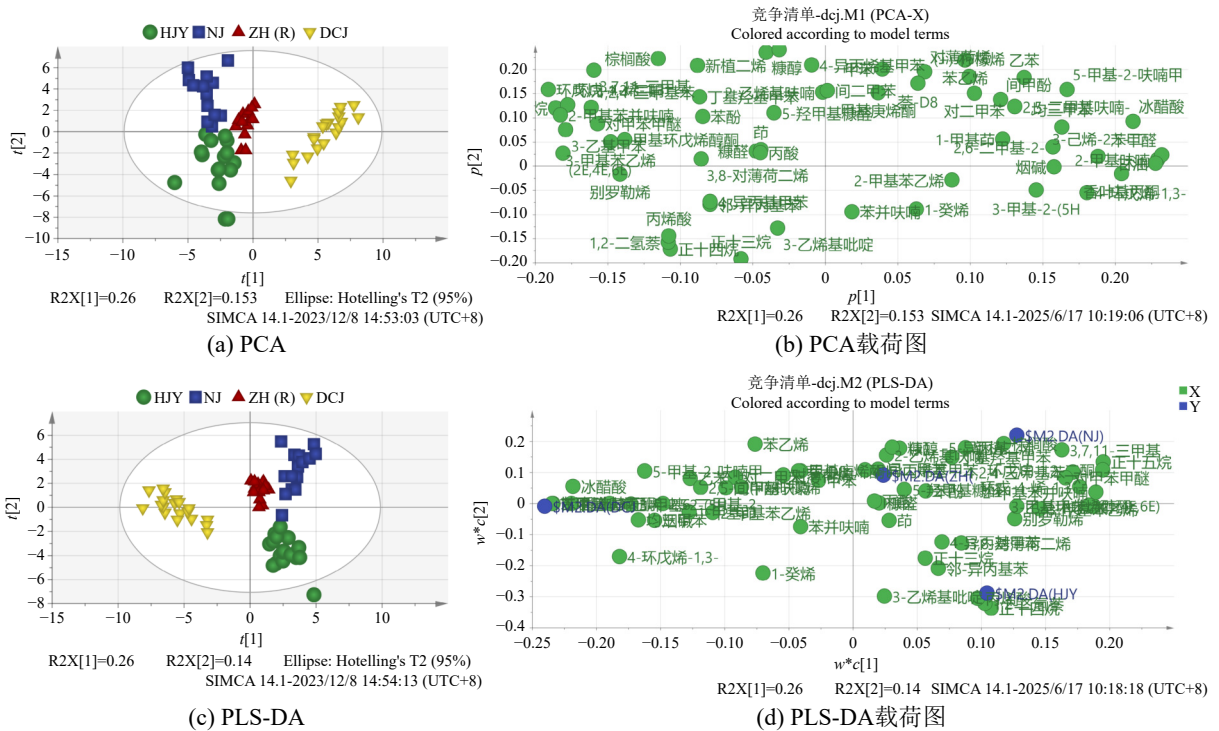


图 3 不同品牌卷烟鼻后烟气 PCA 和 PLS-DA 分析结果

Fig. 3 PCA and PLS-DA analysis results of nasal smoke from different brands of cigarettes

呋喃。

2.3.3 Fisher 判别分析及验证 为了进一步对不同品牌卷烟进行区分, 筛选出不同品牌卷烟后鼻腔烟气的特征指标, 采用 Fisher 步进式线性判别分析方法对其进行研究, 不同卷烟判别结果如表 3 所示。由表 3 可知, 通过 Fisher 步进式线性判别分析, 共筛选出 10 个后鼻腔烟气关键性指标: (+)-柠檬烯、对甲苯甲醚、正十四烷、4-异丙烯基甲苯、3-乙

基吡啶、正十五烷、苯甲醛、2-甲基苯并呋喃、3-甲基-2-(5H)-呋喃酮、甘油。

通过上述关键指标组成的判别函数, 进行了验证, 结果如表 4 所示。在原始验证和交叉验证中, 4 个不同品牌的卷烟均被正确分类, 验证识别正确率均为 100%。所以, 基于 Fisher 线性判别分析, 可实现不同品牌卷烟的鉴定, 而所选的 10 个关键指标就是其不同品牌卷烟的特征关键性指标。

表 3 4 个品牌卷烟产品 Fisher 线性判别函数
Tab. 3 Fisher linear discriminant function for different brands of cigarettes

挥发性成分	DCJ	HJY	NJ	ZH(R)
(+)-柠檬烯	5.89×10^{-7}	1.36×10^{-7}	-1.57×10^{-6}	2.38×10^{-6}
对甲苯甲醚	7.49×10^{-7}	-1.37×10^{-5}	1.11×10^{-5}	4.84×10^{-5}
正十四烷	-2.54×10^{-5}	0	-9.96×10^{-5}	-8.36×10^{-5}
4-异丙烯基甲苯	1.90×10^{-5}	-2.38×10^{-5}	4.43×10^{-5}	1.43×10^{-5}
3-乙烯基吡啶	5.15×10^{-6}	1.44×10^{-5}	-2.37×10^{-5}	6.97×10^{-6}
正十五烷	-5.07×10^{-7}	6.16×10^{-6}	-8.65×10^{-6}	3.55×10^{-5}
苯甲醛	7.23×10^{-5}	1.44×10^{-5}	-1.51×10^{-5}	-2.85×10^{-5}
2-甲基苯并呋喃	-5.30×10^{-5}	2.82×10^{-5}	0	0
3-甲基-2-(5H)-呋喃酮	8.62×10^{-5}	-4.09×10^{-6}	4.72×10^{-6}	6.10×10^{-6}
甘油	1.78×10^{-6}	3.15×10^{-8}	2.32×10^{-7}	-5.66×10^{-7}
(常量)	-35.695	-26.551	-27.744	-34.7

表 4 不同品牌卷烟 Fisher 线性判别预测结果验证
Tab. 4 Verification of fisher linear discriminant prediction results for different brand cigarettes

预测组成员信息	原始 ^a								交叉验证 ^b							
	计数				正确率/%				计数				正确率/%			
	DCJ	HJY	NJ	ZH(R)	DCJ	HJY	NJ	ZH(R)	DCJ	HJY	NJ	ZH(R)	DCJ	HJY	NJ	ZH(R)
DCJ	19	0	0	0	100	0	0	0	19	0	0	0	100	0	0	0
HJY	0	17	0	0	0	100	0	0	0	17	0	0	0	100	0	0
NJ	0	0	15	0	0	0	100	0	0	0	15	0	0	0	100	0
ZH(R)	0	0	0	13	0	0	0	100	0	0	0	13	0	0	0	100
总计	19	17	15	13	100	100	100	100	19	17	15	13	100	100	100	100

a. 正确地对 100.0% 个原始已分组个案进行了分类; b. 仅针对分析中的个案进行交叉验证. 在交叉验证中, 每个个案都由那些从该个案以外的所有个案派生的函数进行分类.

3 结论

本文确定了卷烟后鼻腔烟气捕集测试条件和烟气捕集物测定方法(热脱附-气相色谱/质谱联用法)参数, 建立了卷烟后鼻腔烟气中挥发性成分测定方法; 采用该方法开展了 4 个市售卷烟产品进行后鼻腔烟气中挥发性成分测定, 在后鼻腔烟气中共检出挥发性化合物 60 余种, 其中杂环类(22 种)、烷烃类(14 种)、酚类(2 种)、醚类(1 种)、酮类(10 种)、有机酸类(4 种)、醛类(4 种)、醇类(3 种). 与剑桥滤片捕集卷烟烟气的方法相比, 采用吸附采样管中的 Tenax TA 填料捕集烟气能够提升卷烟烟气中挥发性物质捕集的有效性, 克服了剑

桥滤片的吸附能力弱、前处理过程挥发性物质易丢失等方法缺陷. 采用热脱附管捕集烟气, 结合 TD-GC-MS 方法检测烟气中的香气成分, 能够较为准确地实现卷烟烟气中香气成分的定性定量测定.

将 4 个市售卷烟产品后鼻腔烟气中挥发性成分检测数据导入统计分析软件(SIMCA), 对其进行主成分分析(PCA)和偏最小二乘法-判别分析(PLS-DA). 统计分析结果表明, 基于后鼻腔烟气中挥发性成分检测结果能够实现对 4 个品牌卷烟产品的明显区分, 实现了差异性评价的目的. 挥发性成分对 4 个不同品牌的卷烟区分效果较好, 原始验证和交叉验证的准确率都达 100%. 其中不同品牌卷烟鼻后烟气挥发性化学特征为: 南京(软九五)化

学挥发性成分特征为棕榈酸、正十五烷; 黄金叶(天叶)化学挥发性成分特征为丙烯酸、正十四烷; 中华(软)化学挥发性成分特征为 4-异丙烯基甲苯、间二甲苯; 云烟(大重九)化学挥发性成分特征为甘油、苯甲醛、2-甲基咪喃。

参考文献:

- [1] Zhou H M, Hua Q, Tao L Q, et al. Release behaviors of aroma components from reconstituted tobacco particles under heat-not-burn condition[J]. *Transportation Research Part E: Logistics and Transportation Review*, 2019, 52(2): 62-71. DOI: 10.16135/j.issn1002-0861.2018.0370.
- [2] 文锦涛, 程传策, 张晓强, 等. 不同耕地时间及深度对植烟土壤质量及烤烟产质量的影响 [J]. *贵州农业科学*, 2019, 47(3): 26-30. DOI: 10.3969/j.issn.1001-3601.2019.03.007.
Wen J T, Cheng C C, Zhang X Q, et al. Effects of different cultivating time and depth on tobacco-growing soil quality and flue-cured tobacco yield and quality[J]. *Guizhou Agriculture Science*, 2019, 47(3): 26-30.
- [3] Buettner A, Schieberle P. Exhaled Odorant Measurement (EXOM): A new approach to quantify the degree of in-mouth release of food aroma compounds[J]. *Food Science and Technology*, 2000, 33 (8): 553-559. DOI: 10.1006/food.2000.0708.
- [4] Green B G, Nachtigal D, Hammond S, et al. Enhancement of retronasal odors by taste[J]. *Chemical Senses*, 2012, 37(1): 77-86. DOI: 10.1093/chemse/bjr068.
- [5] Spence C. Multisensory flavour perception[J]. *Current Biology*, 2013, 23(9): R365-R369. DOI: 10.1016/j.cub.2013.01.028.
- [6] Duizer L. Food oral processing: Fundamentals of eating and sensory perception[J]. *Trends in Food Science & Technology*, 2013, 29(1): 81-82. DOI: 10.1016/j.tifs.2012.09.001.
- [7] 烟草及烟草制品感官评价方法: YC/T 138—1998[S]. 北京: 中国标准出版社, 1998.
YC/T 138—1998. Sensory Evaluation Methods for Tobacco and Tobacco Products[S]. Beijing: Standards Press of China, 1998.
- [8] 刘剑, 姬厚伟, 韩伟, 等. 静态顶空-气相色谱质谱法应用于卷烟烟丝中美拉德反应风味物质快速分析 [J]. *安徽农业科学*, 2013(32): 12 718-12 721. DOI: 10.13989/j.cnki.0517-6611.2013.32.018.
Liu J, Ji H W, Han W, et al. Rapid detection of flavors from maillard reaction in cut tobacco of cigarette by static headspace gas chromatograph-mass spectrometry [J]. *Anhui Agricultural Science*, 2013(32): 12 718-12 721.
- [9] 黄祖刚. 电子鼻在卷烟鉴别和酒气检测中的应用 [D]. 北京: 中国科学院研究生院(电子学研究所), 2003.
Huang Z G. Application of electronic nose in cigarette identification and alcohol gas detection[D]. Beijing: Graduate University of Chinese Academy of Sciences (Institute of Electronics), 2003.
- [10] 曲亚玲, 白若石, 周骏, 等. GC-MS 法测定卷烟侧流烟气中半挥发性化合物吡啶、喹啉/苯乙烯 [J]. *中国烟草学报*, 2011, 17(1): 1-7. DOI: 10.3969/j.issn.1004-5708.2011.01.001.
Qu Y L, Bai R S, Zhou J, et al. Determination of semivolatiles pyridine, styrene and quinoline in side-stream cigarette smoke by GC/MS[J]. *Chinese Journal of Tobacco*, 2011, 17(1): 1-7.
- [11] 杨靖, 毛多斌, 陈芝飞, 等. GC-MS/O 技术测定卷烟烟气中巨豆三烯酮的香气活力值 [J]. *中国烟草学报*, 2016, 22(6): 11-17. DOI: 10.16472/j.chinatobacco.2015.491.
Yang J, Mao D B, Chen Z F, et al. Determination of odor active values of megastigmatrienone in cigarette mainstream smoke by GC-MS/O[J]. *Chinese Journal of Tobacco*, 2016, 22(6): 11-17.
- [12] 王兵, 杨凯, 陈磊, 等. 不同产地烟叶中半挥发性香气成分的指纹图谱 [J]. *烟草科技*, 2014(8): 42-46. DOI: 10.3969/j.issn.1002-0861.2014.08.010.
Wang B, Yang K, Chen L, et al. Fingerprints of semi-volatile aroma constituents in tobacco leaves from different growing areas[J]. *Tobacco Science & Technology*, 2014(8): 42-46.

Establishment and differential evaluation of a method for detecting the composition of retronasal smoke

SHEN Di^{1,2}, ZHANG Haiyu^{1,2}, CHEN Jianhua², WANG Jin², FAN Duoqing²,
YE Yanqing^{1**}, ZHANG Chengming^{2**}

(1. School of Chemistry and Environment, Yunnan Minzu University, Kunming 650504, Yunnan, China;

2. Technical Center, Yunnan Tobacco Industry Co., Ltd., Kunming 650106, Yunnan, China)

Abstract: This article draws on the relevant theories of post food nasal aroma research, and based on the sensory evaluation methods of cigarette products in the tobacco industry and the actual exposure pathways of aroma substances in cigarette smoke perceived by the human body, conducts post nasal smoke component determination and differential evaluation of cigarette smoke from different brands. On the basis of building a smoke capture device for the posterior nasal cavity, the optimal technical parameters were determined by optimizing key parameters such as smoking method, adsorption tube type, and number of suction ports: desorption temperature of 290 °C, desorption time of 6 minutes, and maximum temperature of the cold trap of 270 °C. A "Thermal desorption gas chromatography-mass spectrometry (TD-GC/MS) method for determining volatile components in posterior nasal cavity smoke" was established. Using this method, volatile components in the nasal smoke of four commercially available cigarette products were determined, import the volatile component detection data in the nasal smoke into the statistical analysis software (SIMCA), and perform principal component analysis (PCA) and partial least squares discriminant analysis (PLS-DA) on it. Based on the detection results of volatile components in the smoke from the posterior nasal cavity, it is possible to clearly distinguish four brands of cigarette products and achieve the purpose of differential evaluation. At the same time, the Fisher stepwise linear discriminant analysis method was used to validate the detection data of nasal smoke characteristic indicators (10 compounds) selected from cigarettes. The original validation and cross validation results showed that cigarettes from four different brands based on smoke characteristic indicators were correctly classified.

Key words: retronasal smoke; volatile substances; capture device; differential evaluation; cigarette brands classification