

王思丹,何伟忠,盘菊秀,等. 基于核磁共振谱图的新疆3个产区小白杏果实化学成分差异分析[J]. 江苏农业学报,2025,41(9):1852-1859.

doi:10.3969/j.issn.1000-4440.2025.09.020

# 基于核磁共振谱图的新疆3个产区小白杏果实化学成分差异分析

王思丹<sup>1,2</sup>, 何伟忠<sup>2</sup>, 盘菊秀<sup>1,2</sup>, 马磊<sup>1,2</sup>, 宋凯洋<sup>1</sup>, 陶永霞<sup>1</sup>, 沈琦<sup>2</sup>

(1.新疆农业大学食品科学与药学院,新疆 乌鲁木齐 830052; 2.新疆农业科学院农业质量标准与检测技术研究所/农业农村部农产品质量安全风险评估实验室/农业农村部荒漠绿洲生态区特色农产品功能营养与健康重点实验室/新疆农产品质量安全重点实验室,新疆 乌鲁木齐 830091)

**摘要:** 为明确新疆阿克苏、巴音郭楞蒙古自治州和吐鲁番3个产区小白杏果实的差异营养成分,本研究基于核磁共振(NMR)技术对3个产区小白杏果实样品进行核磁共振氢谱(<sup>1</sup>H-NMR)分析,明确归属谱图中的主要化学成分,并利用主成分分析法和最小二乘判别分析法综合评价新疆3个产区小白杏果实的差异化学成分。结果表明,从3个产区的小白杏果实中共鉴定到34种化学成分,包括11种氨基酸、9种有机酸、4种糖类物质及10种其他化学成分。3个产区小白杏果实化学成分整体分离度较好,差异贡献较大的化学成分主要有琥珀酸、苹果酸、精氨酸、丝氨酸、蔗糖、D-果糖6种;阿克苏产区和巴音郭楞自治州产区小白杏果实蔗糖含量和D-果糖相对含量较高;吐鲁番产区小白杏果实丝氨酸、苹果酸相对含量较高;巴音郭楞自治州产区小白杏果实琥珀酸相对含量较高。本研究结果为新疆不同产区小白杏果实的开发利用提供了依据。

**关键词:** 小白杏; 核磁共振谱图; 化学成分

**中图分类号:** O657.2 **文献标识码:** A **文章编号:** 1000-4440(2025)09-1852-08

## Differences in chemical composition of Xiaobai apricot fruits from three production areas in Xinjiang based on nuclear magnetic resonance spectra

WANG Sidan<sup>1,2</sup>, HE Weizhong<sup>2</sup>, PAN Juxiu<sup>1,2</sup>, MA Lei<sup>1,2</sup>, SONG Kaiyang<sup>1</sup>, TAO Yongxia<sup>1</sup>, SHEN Qi<sup>2</sup>

(1. College of Food Science and Pharmacy, Xinjiang Agricultural University, Urumqi 830052, China; 2. Institute of Agricultural Quality Standards and Testing Technology, Xinjiang Academy of Agricultural Sciences/Laboratory of Agricultural Product Quality and Safety Risk Assessment, Ministry of Agriculture and Rural Affairs/Key Laboratory of Functional Nutrition and Health of Characteristic Agricultural Products in Desert Oasis Ecological Zone (Jointly Built by Ministry of Agriculture and Rural Affairs)/Key Laboratory of Quality and Safety of Xinjiang Agricultural Products, Urumqi 830091, China)

**Abstract:** In order to clarify the differences in nutritional components of Xiaobai apricot fruits in Aksu, Bayingol Mongolian Autonomous Prefecture and Turpan in Xinjiang, the nuclear magnetic resonance hydrogen spectrum (<sup>1</sup>H-NMR) analysis of Xiaobai apricot fruit samples from three producing areas was carried out to clarify the main chemical components in the attribution spectrum based on nuclear magnetic resonance (NMR) technology in this study. The differential chemical components of Xiaobai apricot fruits from three producing areas in Xinjiang were comprehensively evaluated by principal component analysis and least squares discriminant analysis. The results showed that a total of 34 chemical components were identified from the three producing areas, including 11 amino acids, nine organic acids, four carbohydrates and 10 other chemical components. The overall separation of chemi-

收稿日期:2024-12-19

基金项目:新疆维吾尔自治区重大科技专项(2022A02006-5)

作者简介:王思丹(1999-),女,甘肃酒泉人,硕士研究生,主要从事农产品质量安全及其功能营养特性研究。(E-mail) wang-sidan2020@163.com

通讯作者:陶永霞,(E-mail) taoyongxia2010@163.com; 沈琦,(E-mail) shenqi068@163.com

ponents of Xiaobai apricot fruits from three producing areas in Xinjiang were comprehensively evaluated by principal component analysis and least squares discriminant analysis. The results showed that a total of 34 chemical components were identified from the three producing areas, including 11 amino acids, nine organic acids, four carbohydrates and 10 other chemical components. The overall separation of chemi-

cal components of Xiaobai apricot samples in the three producing areas was good, and the chemical components with great differences were mainly succinic acid, malic acid, arginine, serine, sucrose and *D*-fructose. The relative contents of sucrose and *D*-fructose in Xiaobai apricot fruits in Aksu and Bayingol Mongolian Autonomous Prefecture were relatively high. The relative contents of serine and malic acid in Xiaobai apricot fruits from Turpan were relatively high. The relative content of succinic acid in Xiaobai apricot fruits from Bayingol Mongolian Autonomous Prefecture was higher. The results of this study provide a basis for the development and utilization of Xiaobai apricot fruits from different producing areas in Xinjiang.

**Key words:** Xiaobai apricot; nuclear magnetic resonance technology; chemical components

小白杏是新疆特有的杏栽培品种,主要种植在新疆阿克苏、巴音郭楞蒙古自治州、吐鲁番等地区。小白杏果实富含糖类、氨基酸、有机酸等多种营养成分<sup>[1-2]</sup>,这些营养成分的高低对小白杏果实的口感和品质有重要影响。目前,对新疆小白杏资源的研究主要集中在采后贮藏保鲜<sup>[3-6]</sup>、产品加工<sup>[7-8]</sup>、化学成分提取<sup>[9]</sup>等方面,而对新疆不同产区小白杏果实的营养品质差异还鲜有报道。

小白杏果实中化学成分组成多样,仅靠感官评价以及某一类化学成分含量不能全面体现果实品质。传统的研究方法往往容易忽略杏果中化学成分的整体特征,无法对小白杏果实中所含化学成分信息进行高通量捕获和不同产区小白杏果实化学成分的差异性鉴别。随着分析技术的快速发展,核磁共振(Nuclear magnetic resonance, NMR)技术作为一种定性和定量技术,凭借其强灵敏度、高通量检测等优势被广泛应用于农业和食品领域,其可以系统、全面地分析农产品及食品的化学成分,常用于作物品种间化学成分的差异分析<sup>[10-11]</sup>、果实成熟期化学成分的积累评估<sup>[12-13]</sup>、天然植物成分鉴定以及食品品质检测<sup>[14-17]</sup>等,是一种常用的代谢组学分析方法。主成分分析法(PCA)、偏最小二乘判别分析(PLS-DA)是将多维数据进行降维,同时保留数据集中对方差贡献较大特征的数据的多变量统计分析方法,在农产品营养品质综合评价中有较多应用<sup>[18]</sup>。NMR技术与主成分分析法相结合进行不同产区农产品化学成分的差异分析亦得到了开展<sup>[19-21]</sup>。安莉等<sup>[11]</sup>基于NMR技术从不同品种草莓的<sup>1</sup>H-NMR谱图中鉴定出20种化学成分。魏亮等<sup>[19]</sup>的研究结果表明,NMR技术可以较好地区别不同产地铁棍山药的化学成分,并从谱图信息中鉴定出糖类、氨基酸、有机酸等30种主要化学成分。针对不同产地杏果实化学成分的差异缺乏系统分析的现状,本研究利用NMR技术结合多元统计分析方法,分析新疆

阿克苏、巴音郭楞蒙古自治州和吐鲁番3个产区小白杏果实的营养品质差异,以期为新疆小白杏品种资源挖掘和保护提供依据。

## 1 材料与方法

### 1.1 试剂与仪器

*N,N*-二甲基甲酰胺(DMF)、二甲基亚砜(DMSO)、磷酸二氢钠( $\text{NaH}_2\text{PO}_4$ )、磷酸氢二钠( $\text{Na}_2\text{HPO}_4$ )化学纯购自国药集团化学试剂有限公司。

ADVANCE 400型核磁共振波谱仪购自瑞士Bruker公司;FA2004型电子天平购自上海舜宇恒平科学仪器有限公司;IKA RCT basic型磁力加热搅拌器和IKA VACSTAR digital真空泵购自德国IKA公司;LGJ-25C型真空冷冻干燥机购自北京四环科学仪器厂有限公司。

### 1.2 试验方法

1.2.1 样品采集 根据小白杏果实成熟及上市时间,于2024年5月至6月,采集新疆阿克苏、巴音郭楞蒙古自治州和吐鲁番3个产区的小白杏果实。其中,阿克苏产区10个样品,巴音郭楞蒙古自治州产区16个样品,吐鲁番产区15个样品,共41份样品。每份小白杏果实样品重量为 $3\text{ kg}\pm 500\text{ g}$ 。样品采集后运回实验室冷藏保存。由于核磁共振谱图采集成本较高,故将同产区内采集的样品以乡镇为单位进行混合,去核取果肉后打浆制成混合样品。共得到12份混样,每产区各4份。置于 $-80\text{ }^\circ\text{C}$ 冰箱预冻后、经冻干机冻干为粉末待测。

1.2.2 检测及分析方法 称取20 mg的小白杏果实冻干粉样品于2 mL离心管中,加入800  $\mu\text{L}$  0.2 mol/L磷酸盐缓冲溶液(由含0.05%磷酸三钠的氘代水配制得到, $\text{pH}=7.0$ ),超声波处理促进小白杏果实冻干粉溶解,用一次性注射器吸取样液,微量过滤器过滤,将滤液装入核磁管待测。核磁共振氢谱(<sup>1</sup>H-NMR)检测条件设置如下:室温,5 mm OneNMR探头,

脉冲序列为 PRESAT 以压制样品中的水峰,扫描次数 64,谱宽 4 800 Hz,采样点数 16 K,弛豫时间 2.000 s,采集时间 3.408 s。采集谱图后,根据核磁共振氢谱信息数据库和文献[10]、[11]、[19]、[22]对杏果<sup>1</sup>H-NMR 谱图中的化学成分进行识别和鉴定。

**1.2.3 核磁共振谱图数据预处理** 使用 MestReNova V9.0.1 软件(西班牙 Mestrelab Research 公司产品)对谱图进行傅里叶变换、相位调整、基线校正等处理,谱图在进行傅里叶变换时均乘以增宽因子为 0.3 Hz 的指数窗函数以提高信噪比。核磁共振谱图以磷酸三钠(TSP)在化学位移( $\delta$ )0 ppm 处的单峰定标。比较 3 个产区小白杏果实样品的<sup>1</sup>H-NMR 分段谱图,并对谱图进行分段积分。积分区间为  $\delta$  0.20~10.00 ppm,积分间距为 0.04 ppm。将全谱积分数据导出后进行归一化处理。为了消除基线波动和溶剂峰、水峰对分析结果带来的影响,在统计分析时去除  $\delta$  2.52~3.32 ppm 和  $\delta$  4.72~5.12 ppm 处的信号。

**1.2.4 核磁共振谱图数据分析** 使用 SIMCA-P14.0 软件对归一化后的核磁共振谱图数据进行主成分分析(PCA)和偏最小二乘判别分析(PLS-DA)。利用随机置换排列验证对 PLS-DA 模型进行可靠性验证。

基于 PLS-DA 分析构建新疆 3 个产区小白杏果实不同化学位移区间积分值的载荷散点图,并结合鉴定得到的化学成分在谱图中对应的化学位移区间,筛选变量投影重要度(VIP)>1 的化学位移区间所对应的化学成分作为有显著差异的化学成分。进一步利用 SIMCA-P14.0 软件分析潜在差异化学成分的相对含量及样本差异。

## 2 结果与分析

### 2.1 新疆 3 个产区小白杏果实化学成分

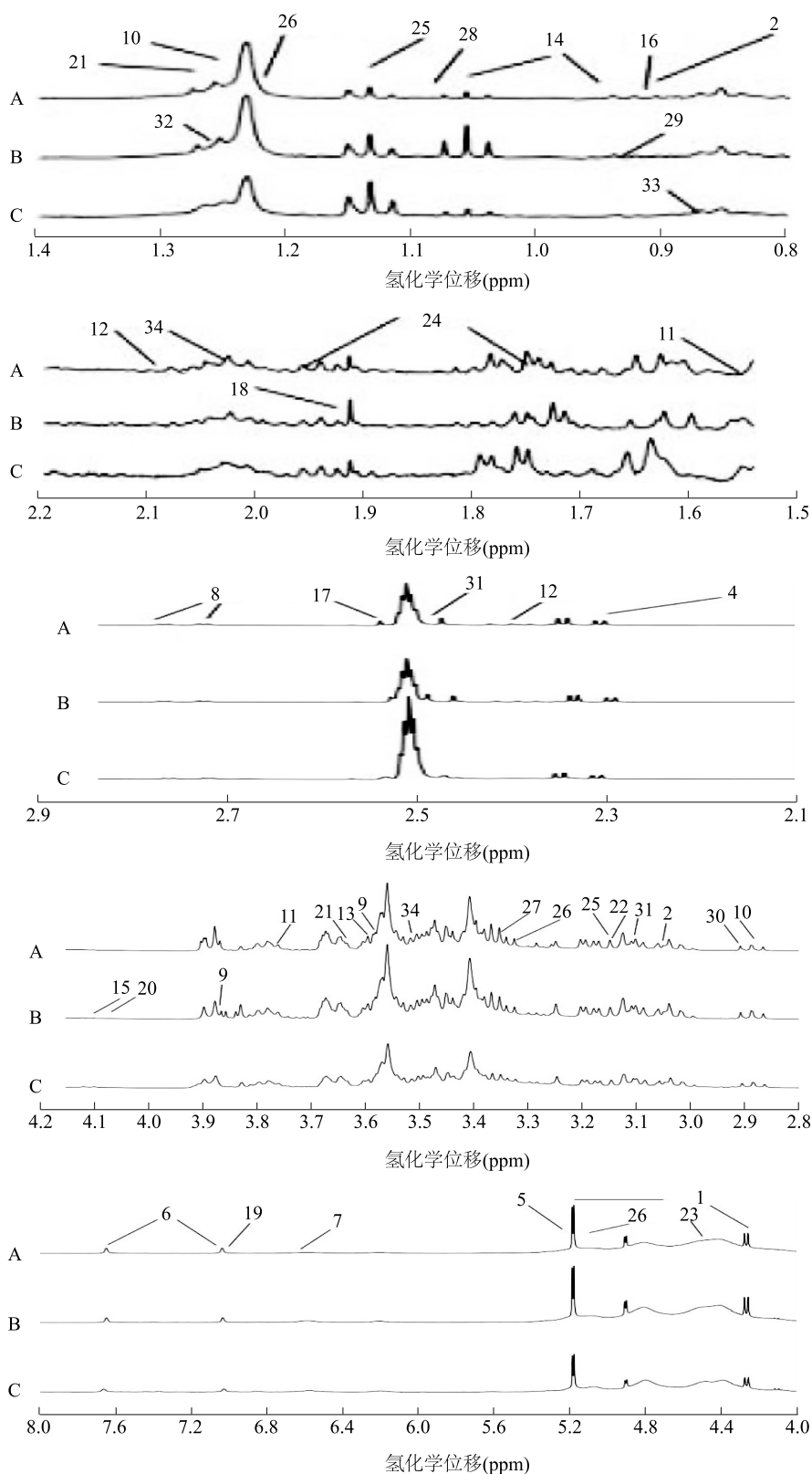
新疆 3 个产区小白杏果实混样的<sup>1</sup>H-NMR 分段谱图如图 1 所示。从图 1 可以看出,新疆 3 个产区小白杏果实的<sup>1</sup>H-NMR 谱图大致可分为 3 个区域,即脂肪区、碳水化合物区和芳香化合物区。从 3 个产区小白杏果实样品谱图中共鉴定出 34 种化学成分,包括精氨酸、亮氨酸、异亮氨酸、天冬酰胺、组氨酸、丙氨酸、谷氨酸、甘氨酸、赖氨酸、丝氨酸、缬氨酸等 11 种氨基酸,苹果酸、富马酸、柠檬酸、琥珀酸、乙酸、甲酸、没食子酸、抗坏血酸和丙二酸等 9 种有机酸,蔗糖、 $\alpha$ -D-葡萄糖、D-果糖、鼠李糖等 4 种糖类物质,其他化学成分 10 种。具体的特征化学成分见表 1。

3 个产区小白杏果实样品<sup>1</sup>H-NMR 谱图中都能清晰识别到组氨酸、甘氨酸、柠檬酸、丁二酸、苹果酸、异戊酸、丙二酸、 $\gamma$ -氨基丁酸、没食子酸、鼠李糖、蔗糖、 $\alpha$ -D-葡萄糖、乙酸乙酯等化学成分的信号峰,但部分化学成分信号峰的强弱存在地区间差异。在阿克苏产区和巴音郭楞蒙古自治州产区的部分小白杏果实样品中,丙氨酸的信号峰不明显;在 3 个产区超过半数小白杏果实样品中,精氨酸、赖氨酸、酮丁酸、乙酸等物质的信号峰明显;在阿克苏产区和巴音郭楞蒙古自治州产区小白杏果实样品中,谷氨酸的信号峰较明显;阿克苏产区小白杏果实样品中,亮氨酸和丝氨酸的信号峰较明显;吐鲁番产区小白杏果实样品中,抗坏血酸的信号峰较明显;在阿克苏产区和巴音郭楞蒙古自治州产区小白杏果实样品中,果糖信号峰较明显;在吐鲁番产区、巴音郭楞蒙古自治州产区小白杏果实样品中,富马酸、琥珀酸和氧代戊二酸等有机酸的信号峰均较为清晰,而在阿克苏产区的少数样品中没有识别到明显的富马酸、琥珀酸和氧代戊二酸等有机酸信号峰。

### 2.2 新疆 3 个产区小白杏果实潜在差异化学成分

对新疆 3 个产区小白杏果实的化学成分进行主成分分析,得到的主成分得分图如图 2 所示。从图中可以看出,小白杏果实化学成分可用 3 个主成分进行描述,其贡献率分别为 38.0%、25.5%、14.6%。12 个样本中未出现强异常值,没有离异样本存在。

新疆 3 个小白杏产区果实样品偏最小二乘判别(PLS-DA)主成分得分如图 3A 所示。从图中可以看出,第 1 主成分和第 2 主成分的贡献率分别为 31.7%、20.3%。吐鲁番产区 4 个小白杏果实样本的第 1 主成分得分均为负值,阿克苏和巴音郭楞蒙古自治州小白杏果实样本的第 1 主成分得分均为正值。阿克苏地区小白杏果实样本的第 2 主成分得分为正值,而巴音郭楞蒙古自治州和吐鲁番地区的小白杏果实样本的第 2 主成分得分总体上为负值。上述结果说明 3 个小白杏产区的果实总体有良好的分离度。对上述所建的 PLS-DA 模型进行 200 次随机置换排列检验结果如图 3B 所示。从图中可以看出,模型的预测率( $Q^2$ )和累积方差值( $R^2$ )大于将数据随机打乱建模后得到的  $Q^2$  和  $R^2$ ,且  $Q^2$  的回归线在 Y 轴上的截距小于 0,说明本研究所建立的 PLS-DA 模型具有统计意义,可靠且有效,可用于筛选新疆 3 个产区小白杏果实的潜在差异化学成分。



谱图中1~34分别表示;不同化学成分信号峰;A、B、C分别代表阿克苏产区小白杏果实、巴音郭楞蒙古自治州产区小白杏果实、吐鲁番产区小白杏果实。

图1 新疆3个产区小白杏果实样品分段 $^1\text{H-NMR}$ 谱图

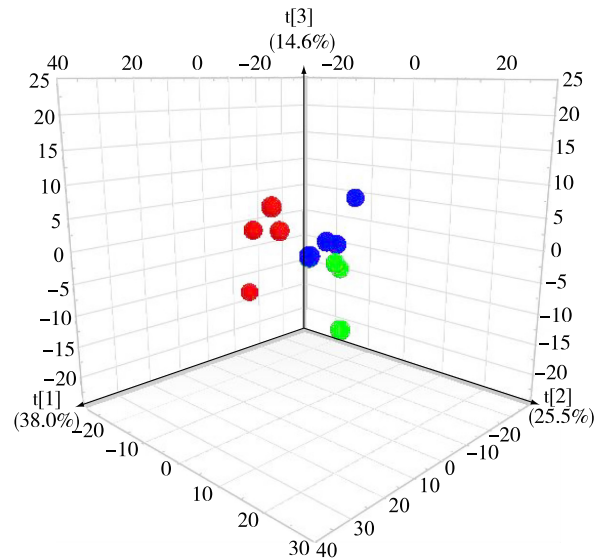
Fig.1 Segmented  $^1\text{H-NMR}$  spectra of Xiaobai apricot fruit samples from three production areas in Xinjiang

表 1 新疆 3 个产区小白杏果实主要化学成分谱图归属表

Table 1 Spectral assignment table of major chemical components in Xiaobai apricot fruit samples from three production areas in Xinjiang

| 序号 | 代谢物质            | 氢化学位移 (ppm) | 峰类型 |
|----|-----------------|-------------|-----|
| 1  | 蔗糖              | 5.18        | d   |
|    |                 | 4.27        | d   |
| 2  | 亮氨酸             | 0.94        | t   |
| 3  | 精氨酸             | 1.71        | m   |
| 4  | 苹果酸             | 2.36        | dd  |
| 5  | $\alpha$ -D-葡萄糖 | 5.18        | d   |
| 6  | 组氨酸             | 7.05        | s   |
|    |                 | 7.64        | s   |
| 7  | 富马酸             | 6.58        | s   |
| 8  | 柠檬酸             | 2.72        | d   |
|    |                 | 2.58        | d   |
| 9  | D-果糖            | 3.57        | m   |
|    |                 | 4.00        | dd  |
| 10 | 天冬酰胺            | 2.89        | dd  |
| 11 | 丙氨酸             | 3.72        | m   |
| 12 | 谷氨酸             | 2.10        | m   |
|    |                 | 2.43        | m   |
| 13 | 甘氨酸             | 3.57        | s   |
| 14 | 异亮氨酸            | 0.94        | t   |
|    |                 | 1.05        | d   |
| 15 | 丝氨酸             | 4.00        | dd  |
| 16 | 缬氨酸             | 1.03        | d   |
| 17 | 琥珀酸             | 2.55        | s   |
| 18 | 乙酸              | 1.91        | s   |
| 19 | 没食子酸            | 7.05        | s   |
| 20 | 乙酸己酯            | 4.03        | dd  |
| 21 | 乙醇              | 1.13        | t   |
|    |                 | 3.64        | d   |
| 22 | 胆碱              | 3.19        | s   |
| 23 | 抗坏血酸            | 4.44        | d   |
| 24 | 赖氨酸             | 1.75        | m   |
|    |                 | 1.90        | m   |
|    |                 | 3.04        | m   |
| 25 | 丙二酸             | 3.15        | s   |
| 26 | 鼠李糖             | 1.24        | t   |
|    |                 | 5.18        | d   |
| 27 | 甲酸              | 3.35        | s   |
| 28 | 2-酮丁酸           | 1.06        | t   |
| 29 | 异戊酸             | 0.85        | t   |
| 30 | $\gamma$ -氨基丁酸  | 2.88        | t   |
| 31 | 氧代戊二酸           | 2.46        | t   |
|    |                 | 3.09        | m   |
| 32 | 乙酸乙酯            | 1.24        | t   |
| 33 | 齐墩果酸            | 0.75        | s   |
|    |                 | 0.89        | s   |
|    |                 | 5.34        | m   |
| 34 | 绿原酸             | 3.49        | dd  |
|    |                 | 2.02        | m   |

s、d、t、q、m 和 dd 分别表示单峰、双峰、三重峰、四重峰、多重峰和双重双分裂峰。



●阿克苏地区小白杏果实样本; ●吐鲁番地区小白杏果实样本; ●巴音郭楞蒙古自治州产区小白杏果实样本

t[1]、t[2]、t[3] 分别表示第 1 主成分、第 2 主成分、第 3 主成分。

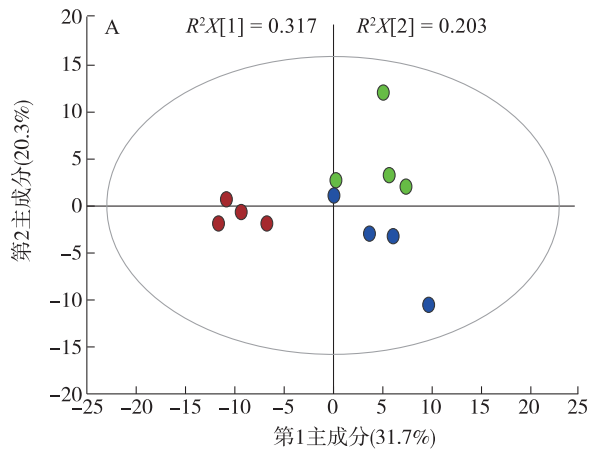
图 2 新疆 3 个产区小白杏样品主成分 3 维得分图

Fig.2 Principal component analysis (PCA) 3D score chart of Xiaobai apricot samples from three production areas in Xinjiang

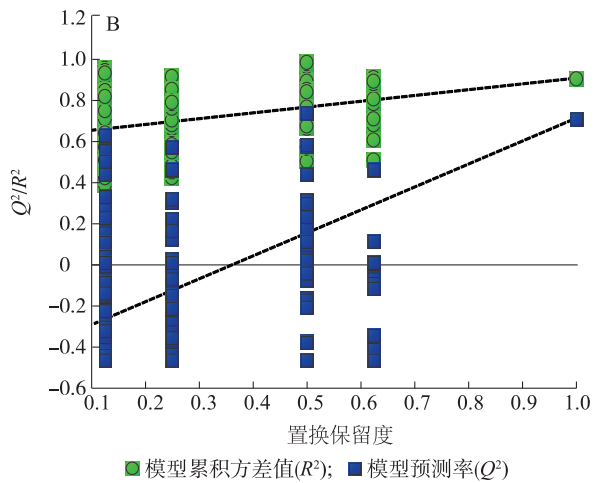
基于偏最小二乘判别分析 (PLS-DA 分析) 得到新疆 3 个小白杏产区果实不同化学位移区间积分值的载荷散点图 (图 4)。根据上述鉴定得到的 34 种化学成分在谱图中对应的化学位移区间, 筛选变量投影重要度 (VIP) > 1 化学位移区间所对应的化学成分作为有显著差异的化学成分。经过鉴别发现, 蔗糖、D-果糖、丝氨酸、精氨酸、苹果酸、琥珀酸等 6 种化学成分的 VIP 分别达 1.278、1.272、1.189、1.073、1.090、1.090, 因此, 本研究认为, 琥珀酸、苹果酸、精氨酸、丝氨酸、蔗糖、D-果糖是新疆 3 个产区小白杏果实的潜在差异化学成分。

### 2.3 新疆 3 个产区小白杏果实潜在差异化学成分相对含量

新疆 3 个产区小白杏果实的潜在差异化学成分相对含量热图如图 5 所示。从图中可以看出, 阿克苏产区小白杏果实糖类 (蔗糖和 D-果糖) 相对含量较高, 巴音郭楞蒙古自治州产区小白杏果实次之, 吐鲁番产区小白杏果实糖类相对含量较低。3 个产区小白杏果实精氨酸相对含量差异较小。吐鲁番产区小白杏果实丝氨酸相对含量和苹果酸相对含量较高, 巴音郭楞蒙古自治州产区小白杏果实次之, 阿克苏产区小白杏果实较低。巴音郭楞蒙古自治州产区



●阿克苏地区小白杏果实样本; ●吐鲁番地区小白杏果实样本;  
●巴音郭楞蒙古自治州产区小白杏果实样本



A: PLS-DA 得分图; B: 200 次随机置换排列图。

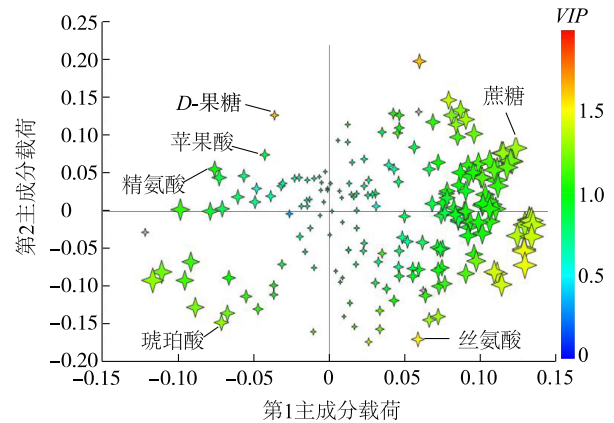
图3 新疆3个产区小白杏果实样品 PLS-DA 得分图和相应的200次随机置换排列图

Fig.3 PLS-DA score plot and corresponding permutation test plot ( $n = 200$ ) of Xiaobai apricot fruit samples from three production areas in Xinjiang

小白杏果实琥珀酸相对含量较高,吐鲁番产区小白杏果实次之,阿克苏产区小白杏果实较低。综上,巴音郭楞蒙古自治州产区小白杏果实琥珀酸、精氨酸、蔗糖、D-果糖等化学成分的相对含量较高。阿克苏产区和巴音郭楞蒙古自治州产区小白杏果实糖类物质相对含量较高,口感相对偏甜;而吐鲁番产区小白杏果实丝氨酸、苹果酸等化学成分的相对含量较高,口感相对偏酸甜。

### 3 讨论

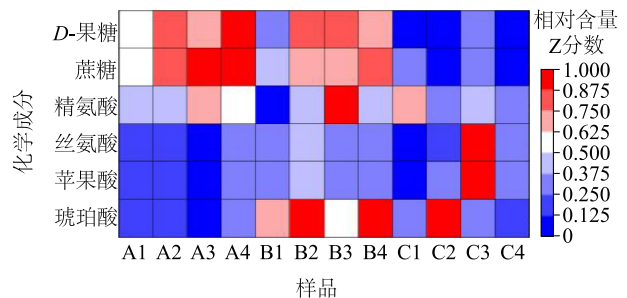
农产品化学成分的差异对农产品的贮存有重要



VIP: 变量投影重要度。

图4 新疆3个小白杏产区果实不同化学位移区间积分值的载荷散点图

Fig.4 Loadings scatter plot of integral values from different chemical shift regions for Xiaobai apricot fruit samples in three production areas of Xinjiang



A1~A4:阿克苏地区小白杏果实样本; B1~B4:巴音郭楞蒙古自治州产区小白杏果实样本; C1~C4:吐鲁番地区小白杏果实样本。

图5 新疆3个产区小白杏果实的潜在差异化学成分相对含量热图

Fig.5 Heat map of relative content of potential differential chemical components in Xiaobai apricot fruits from three producing areas in Xinjiang

影响。果实蔗糖含量较高不仅可以直接提高果实的抗寒性,还可以通过糖信号的作用调节其他与抗寒性相关的生理过程,减少果实冷害<sup>[23]</sup>。以丝氨酸为前体合成的丝氨酸蛋白酶处理枇杷果实不仅抑制病原真菌生长,还能提高果实抗病性相关基因的相对表达量,增强果实对病原真菌的抗性<sup>[24]</sup>。精氨酸处理石榴果实则可以通过调控果实中多胺、脯氨酸和一氧化氮等物质的合成以及增强抗氧化酶活性提高植物的抗冷性,减轻果实冷藏期的冷害<sup>[25-26]</sup>。本研究基于 NMR 技术对阿克苏、巴音郭楞蒙古自治州、

吐鲁番 3 个产区的小白杏果实进行化学成分鉴定,并从中找出 6 种存在潜在差异的化学成分——琥珀酸、苹果酸、精氨酸、丝氨酸、蔗糖、D-果糖等。对其相对含量进行分析发现,吐鲁番产区小白杏果实丝氨酸、苹果酸等物质相对含量高于其他 2 个产区,口感相对偏酸甜,而巴音郭楞蒙古自治州产区和阿克苏产区小白杏果实糖类相对含量明显高于吐鲁番产区。这可能是吐鲁番产区小白杏果实耐冷储的潜在因素。

大量研究结果表明,产区气候<sup>[27-28]</sup>、土壤<sup>[29-31]</sup>、种植方式<sup>[32]</sup>、农艺措施<sup>[33-34]</sup>等因素均对果实品质有重要影响。本研究 PLS-DA 分析结果表明,新疆 3 个产区小白杏果实的整体分离度较好。其中,吐鲁番产区小白杏果实与其他 2 个产区小白杏果实分离较明显,巴音郭楞蒙古自治州小白杏果实与阿克苏产区小白杏果实仅有 1 个样本较接近,这与谱图解析结果基本一致。吐鲁番产区小白杏果实解析出化学成分相对较多,巴音郭楞蒙古自治州产区小白杏果实和阿克苏产区小白杏果实解析出的化学成分数量基本一致。原因可能是巴音郭楞蒙古自治州和阿克苏地区都位于南疆,地理位置近,气候差异较小。新疆 3 个产区小白杏果实化学成分差异的成因尚有待进一步分析。

## 4 结论

基于 NMR 技术对阿克苏产区、巴音郭楞蒙古自治州产区、吐鲁番产区的小白杏果实进行<sup>1</sup>H-NMR 化学成分鉴定,并利用 PCA 和 PLS-DA 分析,从 3 个产区小白杏果实中鉴别出琥珀酸、苹果酸、丝氨酸、精氨酸、蔗糖、D-果糖等 6 种潜在差异化学成分。

### 参考文献:

- [1] 王 聘. 新疆小白杏果实采收后贮藏保鲜的研究[D]. 南京:南京农业大学,2012.
- [2] 潘 越,李婷婷,吴彩娥,等. 低温等离子体处理对新疆‘小白杏’保鲜效果及品质的影响[J]. 食品科学,2022,43(9):55-61.
- [3] 潘 越,李婷婷,吴彩娥. 低温等离子体处理对小白杏细胞壁代谢及软化特性的影响[J]. 食品科学,2024,45(8):168-175.
- [4] 刘雪艳. 基于 $\gamma$ -氨基丁酸代谢解析氯化钙雾化熏蒸对小白杏采收后衰老的影响[D]. 乌鲁木齐:新疆农业大学,2023.
- [5] 李自芹,王 倩,贾文婷,等. 精准相温控制结合 1-MCP 处理对小白杏贮藏期间品质的影响[J]. 食品科技,2023,48(5):42-48.
- [6] 阿丽耶·图尔荪. 壳聚糖复合涂膜剂结合纳米活性包装对小白杏贮藏品质的影响[D]. 阿拉尔:塔里木大学,2023.
- [7] 尹俊涛,张雪梅,雷 勇,等. 西梅小白杏复合果汁配方工艺优化及稳定性研究[J]. 食品工业,2022,43(10):14-18.
- [8] 王贝贝,王 欢,牛希跃,等. 小白杏复合果疏酵素发酵工艺及其抗氧化活性研究[J]. 粮食与油脂,2024,37(1):90-93,127.
- [9] 李 硕,尼格尔热依·亚迪卡尔,朱金芳,等. 小白杏生理落果中多酚提取及体外抗氧化活性分析[J]. 新疆农业科学,2024,61(3):623-631.
- [10] GIRELLI C R, ACCOGLI R, DEL COCO L, et al. <sup>1</sup>H-NMR-based metabolomic profiles of different sweet melon (*Cucumis melo* L.) salento varieties: analysis and comparison[J]. Food Research International, 2018, 114:81-89.
- [11] 安 莉,汪 红,马婧玮,等. 基于核磁共振代谢组学分析不同品种草莓的化学成分差异[J]. 食品安全质量检测学报,2020,11(14):4750-4756.
- [12] LEMAIRE-CHAMLEY M, MOUNET F, DEBORDE C, et al. NMR-based tissular and developmental metabolomics of tomato fruit[J]. Metabolites, 2019, 9(5):93.
- [13] AN L, MA J W, WANG H, et al. NMR-based global metabolomics approach to decipher the metabolic effects of three plant growth regulators on strawberry maturation[J]. Food Chemistry, 2018, 269:559-566.
- [14] 郑 馨,冯江华. 核磁共振结合多变量统计技术鉴别蜂蜜来源及成分定量分析[C]//中国物理学会波谱专业委员会. 第十八届全国波谱学学术年会论文集. 杭州:浙江大学,2014:291-292.
- [15] 张 琰. 基于核磁共振技术的食用植物油成分检测与品质鉴别研究[D]. 厦门:厦门大学,2017.
- [16] 陈季鹏. 核磁共振技术用于黄芩化学成分定量及细胞代谢组学研究[D]. 杭州:浙江工业大学,2020.
- [17] 陈 艳. 小花清风藤化学成分的研究和道地药材核磁共振指纹图谱的研究[D]. 贵阳:贵州大学,2016.
- [18] 陈泽历,高静娟,杨旭昆,等. 基于主成分分析的 3 个品种山药营养品质综合评价[J]. 农产品质量与安全,2024(2):25-30.
- [19] 魏 亮,张超楠,李科研,等. 基于核磁共振代谢组学技术比较不同产地铁棍山药的化学成分差异[J]. 分析测试学报,2022,41(5):774-780.
- [20] HUA Y J, HOU Y, WANG S N, et al. Comparison of chemical compositions in pseudostellariae *Radix* from different cultivated fields and germplasms by NMR-based metabolomics[J]. Molecules, 2016, 21(11):1538.
- [21] JIANG M M, WANG C H, ZHANG Y, et al. Sparse partial-least-squares discriminant analysis for different geographical origins of *Salvia miltiorrhiza* by <sup>1</sup>H-NMR-based metabolomics[J]. Phytochemical Analysis, 2014, 25(1):50-58.
- [22] 何晨曦. 核磁共振技术应用于柑橘属水果溯源分析和营养成分比较[D]. 厦门:厦门大学,2020.
- [23] WANG X X, WEI Y Y, CHEN Y, et al. NMR revealed that trehalose enhances sucrose accumulation and alleviates chilling injury

- in peach fruit[J]. *Scientia Horticulturae*,2022,303:111190.
- [24] YAN F, ZHANG D, WANG X, et al. Reduction of postharvest diseases of loquat fruit by serine protease and possible mechanisms involved[J]. *Scientia Horticulturae*,2022,304:111246.
- [25] ALI M H, KHAN A S, JASKANI M J, et al. Pre-storage application of L-arginine mitigates chilling injury and maintains quality of Sandhuri guava fruit[J]. *Journal of Food Processing and Preservation*,2022,46(3):e16405.
- [26] BABALAR M, PIRZAD F, SARCHESHMEH M A A, et al. Arginine treatment attenuates chilling injury of pomegranate fruit during cold storage by enhancing antioxidant system activity[J]. *Postharvest Biology and Technology*,2018,137:31-37.
- [27] WANG H Z, ZHAO M Y, WU Z Z, et al. Nutrient composition and functional constituents of daylily from different producing areas based on widely targeted metabolomics[J]. *Food Chemistry: X*,2024,21:101239.
- [28] LEE D H, KIM Y K, SON Y, et al. Multivariate analysis among marker compounds, environmental factors, and fruit quality of *Schisandra chinensis* at different locations in south Korea [J]. *Plants*,2023,12(22):3877.
- [29] 戴瑶瑶,闫滨滨,杨健,等. 不同产地丹参药材丹参酮类成分与土壤因子的相关性研究[J]. *中国中药杂志*,2024,49(7):1793-1801.
- [30] 刘引,戴蒙,鲍五洲,等. 麻城不同产地菊花中矿质元素含量特征及其与土壤养分和有效成分的相关性研究[J]. *中国中药杂志*,2021,46(2):281-289.
- [31] WEI J F, WANG Y J, TANG X Q, et al. Correlation analysis between active components of *Cornus officinalis* and inorganic elements in rhizosphere soil and rapid analysis of origin quality by near-infrared spectroscopy combined with machine learning [J]. *Industrial Crops and Products*,2024,210:118101.
- [32] 曹永建,赖敏婷,李怡欣,等. 不同种植模式及产区对铁皮石斛品质的影响[J]. *林业与环境科学*,2021,37(6):93-98.
- [33] LIPAN L, ROMERO A. Effects of agronomical practices on crop quality and sensory profile[J]. *Agronomy*,2024,14(6):1087.
- [34] GALLO V, MASTRORILLI P, CAFAGNA I, et al. Effects of agronomical practices on chemical composition of table grapes evaluated by NMR spectroscopy[J]. *Journal of Food Composition and Analysis*,2014,35(1):44-52.

(责任编辑:石春林)