

邓亚淋, 代惠珍, 谢明月, 等. 基于非靶向代谢组学解析不同水稻品种的品质差异[J]. 江苏农业学报, 2026, 42(7): 1305-1316.
doi: 10.3969/j.issn.1000-4440.2026.07.002

基于非靶向代谢组学解析不同水稻品种的品质差异

邓亚淋¹, 代惠珍¹, 谢明月¹, 茹颖晶¹, 唐菊¹, 曾珍¹, 周敏道¹, 张声浩¹,
刘孟泽¹, 吴合周², 胡景涛¹

(1. 重庆三峡科技大学生物与食品工程学院, 重庆 404000; 2. 湖南桃花源农业科技股份有限公司, 湖南 常德 415000)

摘要: 为比较相同储藏温度下不同品种稻米中品质相关代谢物的构成差异, 采用超高效液相色谱-串联质谱 (UPLC-MS/MS) 非靶向代谢组学技术, 对籼稻桃湘优 188 (TXY188) 和五优 308 (WY308) 储藏前与恒温条件储藏 90 d 后的差异代谢产物进行分析并解析其代谢通路。结果表明, 通过 UPLC-MS/MS 共检测出 3 055 种代谢物。储藏初期, 与 WY308 相比有 239 种代谢物在 TXY188 中高度积累, 丁香亭、香草醛、肉桂酸和松柏醛等代谢物在 TXY188 中显著富集。储藏 90 d 后, 香草醛、肉桂酸和松柏醛等代谢物含量仍高于 WY308。京都基因与基因组百科全书 (KEGG) 富集分析结果显示, 类黄酮生物合成和苯丙烷代谢是主要代谢通路。本研究从风味代谢物动态变化角度, 为稻谷储藏过程中品质的调控提供了数据支持。

关键词: 风味; 品质; 储藏; 水稻; 非靶向代谢组学

中图分类号: S511.2⁺1 **文献标识码:** A **文章编号:** 1000-4440(2026)07-1305-12

Untargeted-metabolomics dissection of quality differences among rice cultivars

DENG Yalin¹, DAI Huizhen¹, XIE Mingyue¹, RU Yingjing¹, TANG Ju¹, ZENG Zhen¹,
ZHOU Minxiao¹, ZHANG Shenghao¹, LIU Mengze¹, WU Hezhou², HU Jingtao¹

(1. College of Biology and Food Engineering, Chongqing Sanxia University of Science and Technology, Chongqing 404000, China; 2. Hunan Taohuayuan Agricultural Science and Technology Co., Ltd., Changde 415000, China)

Abstract: To compare the differences in the composition of quality-related metabolites in rice among varieties stored at the same temperature, untargeted metabolomics approach based on ultraperformance liquid chromatography - tandem mass spectrometry (UPLC-MS/MS) was used to analyze differential metabolites and elucidate metabolic pathways in the indica rice varieties, Taolangyou 188 (TXY188) and Wuyou 308 (WY308), before storage and after 90 d of storage under constant-temperature conditions. The results showed that a total of 3 055 metabolites were detected by UPLC-MS/MS. At the initial stage of storage, 239 metabolites were accumulated at higher levels in TXY188 than in WY308, and metabolites such as assyringetin, vanillin, cinnamic acid, and coniferaldehyde were significantly enriched in TXY188. After 90 d of storage, the contents of metabolites such as vanillin, cinnamic acid and coniferaldehyde remained higher in TXY188 than in WY308. Kyoto Encyclopedia of Genes and Genomes (KEGG) enrichment analysis revealed that flavonoid biosynthesis and

phenylpropanoid metabolism were the major metabolic pathways involved. This study provides data support for regulation of grain quality during rice storage from the perspective of dynamic changes in flavor-related metabolites.

Key words: flavor; quality; storage; rice; untargeted metabolomics

收稿日期: 2026-02-25

基金项目: 西南作物基因资源发掘与利用国家重点实验室开放课题 (SKL-KF202424); 重庆三峡科技大学生物与食品工程学院 (YJSKY25027)

作者简介: 邓亚淋 (1999-), 女, 重庆人, 硕士研究生, 研究方向为作物品质及逆境生物学调控。 (E-mail) dengyalin0903@163.com。代惠珍为共同第一作者。

通讯作者: 胡景涛, (E-mail) 20180016@sanxiau.edu.cn

水稻 (*Oryza sativa* L.) 是全球超过一半人口的

主食作物^[1]。随着人们生活水平的不断提高,大家更倾向于关注稻米的口感与品质,这两方面直接影响消费者对大米的接受度与复购率^[2-4]。稻米中的风味物质主要包括醇类、酚类、醛类、酮类、杂环类、酯类^[5-6],其含量与米饭的口感密切相关^[7]。因此,稻米风味物质种类及含量可作为评价其口感的重要依据。稻谷在长期储藏过程中易发生脂质氧化、蛋白质降解、淀粉结构变化和抗氧化成分流失,导致食味、营养和加工特性下降^[8]。近年来,非靶向代谢组学(Untargeted metabolomics)技术已被广泛应用于稻米品质形成机制解析及品种间代谢差异研究。该技术能够在系统水平上定量检测数百至数千种内源代谢物,并借助多变量统计和通路分析,揭示储藏过程中引起代谢网络的重构和调控机制^[9-10]。已有研究表明,脂肪酸氧化产物、苯丙烷、多酚类化合物、氨基酸及激素衍生物等物质的含量变化与稻米品质劣变、种子活力下降密切相关^[8-9]。

稻米的遗传背景和品质性状对储藏代谢响应具有重要影响。不同品种在能量代谢、苯丙烷合成、抗氧化防御和脂质稳定性等方面的代谢模式存在显著差异^[11-12]。因此,通过比较不同品种在储藏条件下的代谢差异,有助于阐明耐储藏性与品质保持的代谢基础。国家水稻数据中心数据显示,桃湘优 188(TXY188)和五优 308(WY308)均为籼型三系杂交稻品种,2 个品种的整精米率、垩白度和直链淀粉含量等指标不同,提示其品质形成基础存在差异,因而具有较好的研究价值。

本研究拟采用非靶向代谢组学,系统比较 TXY188 与 WY308 在储藏前与恒温储藏 90 d 后的代谢差异,旨在揭示不同水稻品种间影响稻米品质的关键代谢物以及相关代谢通路,以期为优质耐储藏水稻品种选育提供代谢组学依据。

1 材料与方法

1.1 供试材料

试验材料[籼稻桃湘优 188(TXY188)和五优 308(WY308)]均由湖南省桃花源农业科技有限公司提供,2 个品种的稻谷于同一时间同一地点收获后自然风干。储藏前的种子用液氮速冻后立即于 -80 ℃ 保存;储藏样品于恒温(温度 25 ℃,相对湿度约 60%)储藏 90 d,用液氮速冻后 -80 ℃ 保存备用。随后委托北京诺禾致源科技股份有限公司对样

本开展非靶向代谢组学分析。

1.2 代谢组样品制备与提取

每个样品取适量稻谷去壳后,使用液氮充分研磨,设置 3 个生物学重复。称取 100 mg 研磨后的样品置于 EP 管中,加入 500 μ L 80% 甲醇溶液,涡旋混匀后冰浴静置 5 min,以 15 000 r/min、4 ℃ 离心 20 min。取上清液用于后续分析。

1.3 质量控制与空白样

在检测过程中,使用等体积混合样品制备质量控制样,以监测仪器稳定性和检测重复性;空白样采用 53% 甲醇水溶液替代样品,按照相同的前处理流程处理。

1.4 高效液相色谱条件

通过超高效液相色谱系统联用高分辨质谱仪(赛默飞世尔科技公司产品),进行超高效液相色谱-串联质谱(UPLC-MS/MS)分析。样品以 0.2 mL/min 的流速进样,色谱分离在 Hypersil Gold C18 色谱柱(柱长 100.0 mm,内径 2.1 mm,粒径 1.9 μ m)上进行,采用 17 min 线性梯度洗脱,流动相分别为 0.1% 甲酸水溶液(A)与甲醇(B),溶剂梯度设置如下:0~1.50 min,B 相(甲醇)体积分数保持 2%;1.51~12.00 min,B 相体积分数由 2% 线性升至 100%;12.01~14.00 min,B 相体积分数保持 100%;14.01~14.10 min,B 相体积分数由 100% 降至 2%;14.11~17.00 min,B 相体积分数保持 2%。

1.5 质谱条件

质谱检测在正离子(ESI^+)和负离子(ESI^-)双模式下进行,扫描范围设置为 100~1 500 m/z ,喷雾电压设置为 3 500 V;鞘气流速和辅助气流速分别为 2.41×10^5 Pa 和 10 L/min;离子传输管温度与辅助气加热器温度分别为 320 ℃ 和 350 ℃。二级质谱(MS/MS)扫描采用数据依赖性扫描(DDA)模式,自动选取前体离子进行碎裂。

1.6 代谢物定性与定量分析

定性分析基于高分辨质荷比、保留时间及 MS/MS 二级碎片信息,并与 mzCloud、mzVault、人类代谢组(HMDB)和京都基因与基因组百科全书(KEGG)数据库进行比对确认。代谢物注释采用 0.001% 质量误差阈值并结合加合离子信息进行匹配,MS/MS 匹配得分阈值为 0.5。代谢物鉴定置信度分为 3 级:Level 1,一级质谱、二级质谱和保留时间均匹配;Level 2,一级质谱和二级质谱匹配;Level 3,仅一级

质谱匹配。

定量分析采用峰面积相对定量法,通过内标物及总离子流(TIC)归一化以减少样品处理及仪器漂移造成的系统偏差。经标准化的峰面积数据在统计分析前进行对数化转换(以2为底取对数),以减小数据偏态并提高可比性。

1.7 数据处理与分析

使用Compound Discoverer 3.1(赛默飞世尔科技公司产品)对原始液相色谱-质谱联用(LC-MS)数据文件进行检测,包括峰检测、保留时间校正、峰面积提取。使用京都基因与基因组百科全书(KEGG)数据库(<https://www.genome.jp/kegg/pathway.html>)、人类代谢组(HMDB)数据库(<https://hmdb.ca/metabolites>)和LIPIDMaps数据库(<http://www.lipidmaps.org/>)对鉴定到的代谢物进行注释,同时基于京都基因与基因组百科全书(KEGG)数据库进行差异代谢通路富集分析,采用超几何检验($P<0.05$)评估显著性。

在多元统计分析部分,利用代谢组学数据处理软件metaX对数据进行转换,再进行主成分分析(PCA)和正交偏最小二乘判别分析(OPLS-DA),从而得到每个代谢物的变量投影重要性(VIP)值。单变量分析采用*t*检验计算各代谢物在两组间统计学显著性(根据*P*值判断),并计算其差异倍数(*FC*)。所有统计分析及数据可视化通过R语言(v4.3.0)完成,主要使用ropls、ggplot2和pheatmap软件包。差异代谢物筛选的默认标准为VIP>1.000, $P<0.050$ 且 $FC\geq 2.000$ 或 $FC\leq 0.500$ 。

2 结果与分析

2.1 样品代谢差异分析

利用非靶向代谢组学对TXY188和WY308储藏前后的籽粒进行代谢物检测分析,共检测到3 055种代谢物(正离子模式1 804种,负离子模式1 251种)。在正、负离子模式下对所有样品进行主成分分析,结果(图1)显示,PC1、PC2和PC3分别解释26.89%、20.04%和10.68%的总变异,累计解释率为57.61%。不同组样本呈现出一定的分离趋势,表明其代谢谱存在差异。各组重复样本聚集较好,说明数据重复性和可靠性较高。

将检测到的代谢物基于HMDB数据库(<http://www.hmdb.ca>)进行分类,共分为17类(表1)。主要

包括脂类及类脂分子(28.98%)、有机酸及其衍生物(17.04%)、有机杂环化合物(16.37%)、苯丙烷类及多聚酮类(10.42%)、有机含氧化合物(10.19%)等。

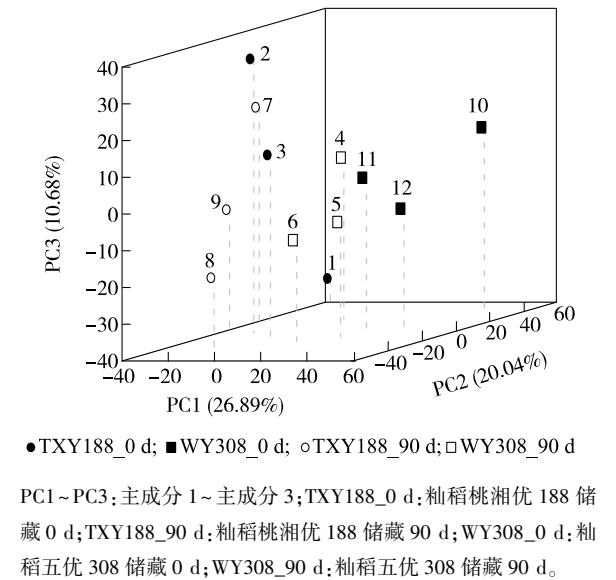


图1 正离子模式和负离子模式下的三维主成分分析
Fig.1 Principal component analysis under positive and negative ionization modes between the two rice varieties

表1 代谢物化学类别分布
Table 1 Distribution of metabolite chemical classes

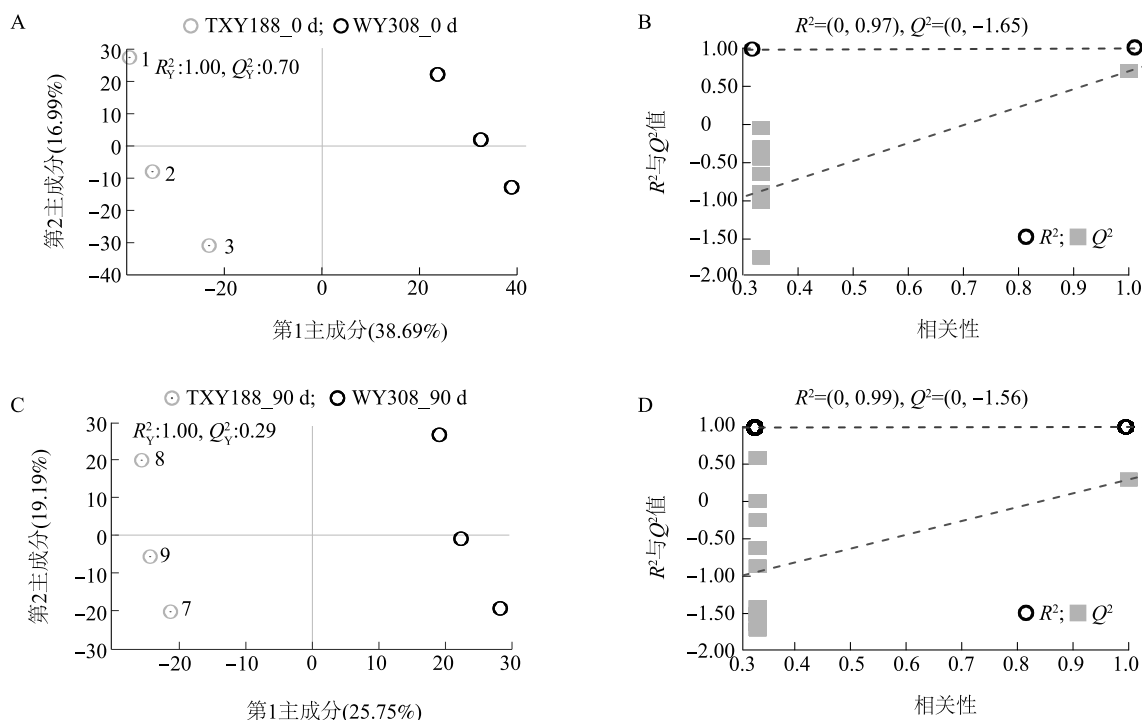
名称	数量(种)
脂类及类脂分子	876
有机酸及其衍生物	515
有机杂环化合物	495
苯丙烷类及多聚酮类	315
有机含氧化合物	308
苯系化合物	293
生物碱及其衍生物	67
有机含氮化合物	54
核苷、核苷酸及其类似物	38
木脂素、新木脂素及相关化合物	28
有机含硫化合物	14
烃类化合物	8
有机卤化合物	4
烃类衍生物	4
均质非金属化合物	2
乙炔化物	1
有机1,3-偶极化合物	1

代谢物分类依据人类代谢组(HMDB)数据库注释结果进行统计,完成化学分类的代谢物总数为3 023种。

2.2 OPLS-DA 分析结果

为进一步验证不同处理组之间的代谢差异,在 PCA 分析基础上对各样本进行正交偏最小二乘判别分析(OPLS-DA)。结果(图 2)显示,2 个水稻品种在储藏前后均能够实现清晰分离。储藏前比较组中,第一主成分(PC1)与第二主成分(PC2)分别解释 38.69% 和 16.99% 的变异,模型拟合优度

(R^2_Y) 和预测能力(Q^2_Y) 分别为 1.00 和 0.70; 储藏 90 d 后比较组中同样观察到明显的分离,第一主成分(PC1)与第二主成分(PC2)分别解释 25.75% 和 19.19% 的变异,模型拟合优度和预测能力分别为 1.00 和 0.29。置换检验结果显示,储藏前和储藏 90 d 后比较组的 Q^2 截距分别为 -1.65 和 -1.56,表明模型未出现明显过拟合。



A: TXY188_0 d 与 WY308_0 d 的 OPLS-DA 得分图; B: TXY188_0 d 与 WY308_0 d 置换检验图; C: TXY188_90 d 与 WY308_90 d 的 OPLS-DA 得分图; D: TXY188_90 d 与 WY308_90 d 置换检验图。TXY188_0 d: 籼稻桃湘优 188 储藏 0 d; TXY188_90 d: 籼稻桃湘优 188 储藏 90 d; WY308_0 d: 籼稻五优 308 储藏 0 d; WY308_90 d: 籼稻五优 308 储藏 90 d。 R^2 表示模型拟合优度, Q^2 表示模型预测能力。

图 2 不同品种在相同储藏时间的正交偏最小二乘判别分析(OPLS-DA)得分图

Fig.2 Orthogonal projections to latent structures discriminant analysis (OPLS-DA) score plot of different varieties at the same storage time

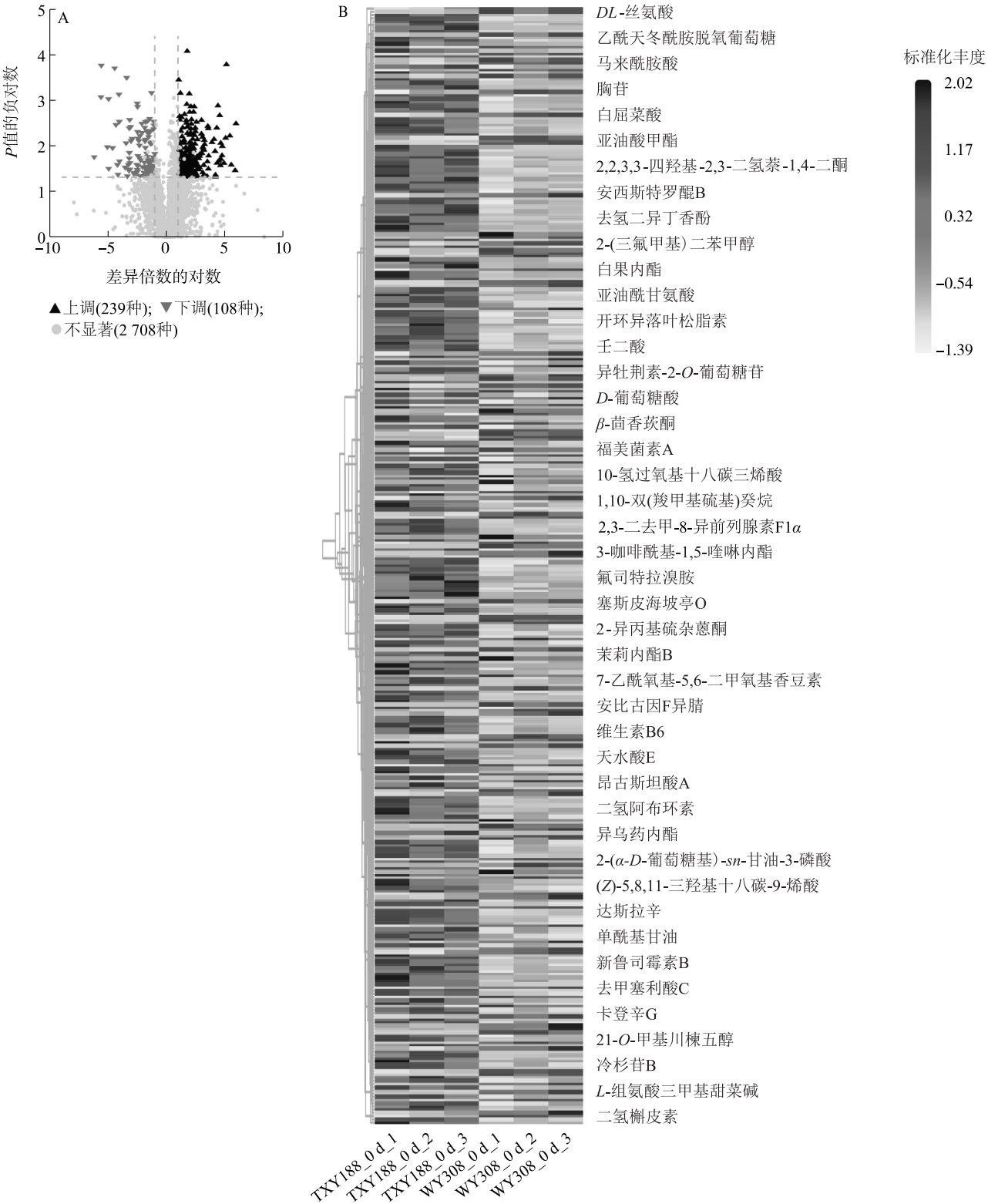
2.3 2 个水稻品种间的差异代谢物分析

2.3.1 2 个水稻品种储藏前差异代谢物分析

通过已构建的模型对差异积累代谢物(DAM)进行筛选,阈值设定为 $VIP > 1.000$ 、 $P < 0.050$, 且 $FC \geq 2.000$ 或 $FC \leq 0.500$ 。2 个水稻品种比较组共鉴定出 347 种 DAM(图 3A), 其中 TXY188 中相对含量较高的代谢物有 239 种, WY308 中相对含量较高的代谢物 108 种。热图聚类结果(图 3B)显示, 2 个水稻品种样本可清晰分离且组内重复性良好, 表明 DAM 具有稳定的分组特

征, 能够较好地地区分 2 个水稻品种本身的差异代谢。

对代表性 DAM 进一步归纳可见, 2 个水稻品种差异主要集中于芳香族风味相关物质、类黄酮代谢相关代谢物以及膜脂类分子(表 2)。其中, TXY188 中类黄酮衍生物如丁香亭相较于 WY308 显著富集。同时, 与苯丙烷途径相关芳香性物质如香草醛、松柏醛和肉桂酸等代谢物相对含量较高。相比之下, WY308 中黄酮类、膜脂类及氨基酸相关代谢物相对富集。



A:TXY188_0 d 和 WY308_0 d 差异代谢物火山图;B:TXY188_0 d 和 WY308_0 d 差异代谢物热图。火山图中,上调表示 TXY188 中代谢物相对含量较高,下调表示 WY308 中代谢物相对含量较高;热图中,颜色深浅表示代谢物标准化丰度的高低。TXY188_0 d: 籼稻桃湘优 188 储藏 0 d;WY308_0 d: 籼稻五优 308 储藏 0 d。

图 3 2 个水稻品种储藏 0 d 的火山图与热图
Fig.3 Volcano plot and heatmap of the two rice varieties at 0 d of storage

表 2 2 个水稻品种储藏 0 d 代表性差异代谢物

Table 2 Representative differential metabolites of the two rice varieties at 0 d of storage

代谢物	差异倍数(FC)	变量权重值	P 值
丁香亭	30.974	1.661	0.024
二氢猕猴桃内酯	4.549	1.552	0.009
水杨酸	4.383	1.756	0.003
十五醛	3.995	1.823	0.002
十四烷醛	3.905	1.838	0
香草醛	3.537	1.563	0.025
肉桂酸	3.487	2.145	0.003
松柏醛	2.558	1.346	0.022
对羟基苯甲醛	2.299	1.338	0.016
二氢槲皮素	0.364	1.396	0.005
L-谷氨酸	0.306	1.678	0.005
L-脯氨酸	0.177	1.909	0.005
L-蛋氨酸	0.176	1.695	0.026
圣草酚	0.118	1.731	0.004
柳穿鱼黄素-7-O-葡萄糖苷	0.108	1.698	0.004
柚皮素	0.045	1.574	0
磷脂酰胆碱	0.020	1.897	0

代表性差异代谢物筛选标准为变量权重值(VIP)>1.000, $P<0.050$, 且 FC (差异倍数) ≥ 2.000 或 $FC\leq 0.500$ 。 FC 为该代谢物在桃湘优 188 (TXY188) 与五优 308 (WY308) 间相对含量比值, $FC>1.000$ 表示该代谢物在 TXY188 中相对含量较高, $FC<1.000$ 表示该代谢物在 WY308 中相对含量较高。

2.3.2 2 个水稻品种间品质差异代谢物分析 为进一步解析 2 个水稻品种间品质差异的代谢基础, 筛选并汇总了相关差异代谢物。结果(表 3)显示, TXY188 中丁香亭、3-O-甲基槲皮素、4-异丙烯基苯甲醛、香草醛和二氢猕猴桃内酯等芳香醛类和内酯类化合物相

对含量显著高于 WY308。同时, 肉桂酸和二氢松柏醇在 TXY188 中也表现出较高积累。相比之下, WY308 中柚皮素、圣草酚与二氢槲皮素等黄酮通路相关代谢物相对含量较高。总体来看, 储藏前 2 个水稻品种在品质相关代谢物组成上已表现出明显差异。

表 3 2 个水稻品种间主要风味相关差异代谢物

Table 3 Key flavor-related differential metabolites between the two rice varieties

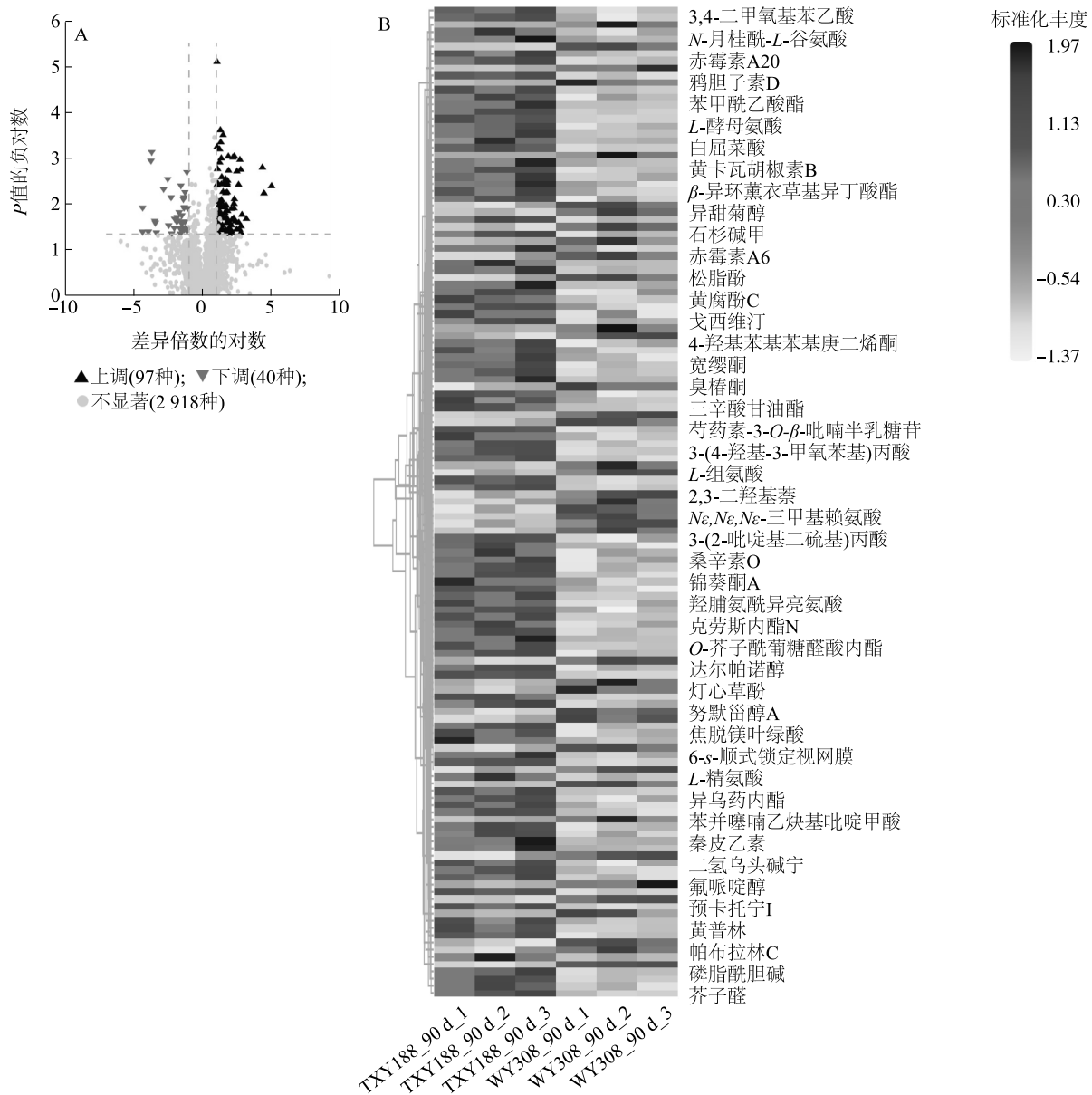
序号	代谢物	分类	差异倍数(FC)	变量权重值	P 值
1	丁香亭	苯丙素类和聚酮类	30.974	1.661	0.024
2	3-O-甲基槲皮素	苯丙素类和聚酮类	6.089	1.731	0.026
3	4-异丙烯基苯甲醛	苯类化合物	4.974	1.844	0.013
4	二氢猕猴桃内酯	有机杂环化合物	4.549	1.552	0.009
5	D-果糖	有机氧化合物	3.817	1.398	0.048
6	二氢松柏醇	苯类化合物	3.726	1.312	0.029
7	香草醛	苯类化合物	3.537	1.563	0.025
8	肉桂酸	苯丙素类和聚酮类	3.029	1.465	0.033
9	松柏醛	苯类化合物	2.558	1.346	0.023
10	α -酮戊二酸	有机酸及其衍生物	2.747	1.286	0.025
11	二氢槲皮素	苯丙素类和聚酮类	0.364	1.396	0.005
12	圣草酚	苯丙素类和聚酮类	0.118	1.731	0.004
13	柚皮素	苯丙素类和聚酮类	0.045	1.574	0

FC 表示 2 个水稻品种间代谢物相对含量比值。 FC (差异倍数) >1.000 表示该代谢物在桃湘优 188 (TXY188) 中相对含量高于五优 308 (WY308), $FC<1.000$ 表示该代谢物在 WY308 中相对含量更高。化学类别依据代谢物注释结果归类。

2.4 2个水稻品种储藏90 d后差异代谢物分析

2.4.1 储藏90 d后差异代谢物分析 储藏90 d后2个水稻品种共鉴定出137种差异代谢物。其中, TXY188中相对含量较高的代谢物有97种, WY308中相对含量较高的代谢物有40种(图4A)。热图聚类分析结果(图4B)进一步显示, 2组样本呈相反积累趋势且组内重复聚集较好, 表明2个水稻品种在储藏90 d后仍具有较明显的代谢分化特征。

进一步分析发现, 差异代谢物主要涉及芳香族相关代谢物、抗坏血酸衍生物、含硫氨基酸相关代谢物及花色苷相关代谢物(表4)。其中, TXY188中苯丙烷途径相关芳香族代谢物如肉桂酸、香草醛和芥子醛等相对富集, 同时异香草酸、二氢阿魏酸和松脂酚等代谢物含量也较高。相比之下, WY308中维生素C乙基醚、胱硫氨酸、矢车菊素-3-葡萄糖苷和氯化芍药素等代谢物相对富集。



A: TXY188_90 d 和 WY308_90 d 差异代谢物火山图; B: TXY188_90 d 和 WY308_90 d 差异代谢物热图。TXY188_90 d: 籼稻桃湘优 188 储藏 90 d; WY308_90 d: 籼稻五优 308 储藏 90 d。火山图中, 上调表示 TXY188 中代谢物相对含量较高, 下调表示 WY308 中代谢物相对含量较高; 热图中, 颜色深浅表示代谢物标准化丰度的高低。

图 4 2 个水稻品种储藏 90 d 的火山图与热图

Fig.4 Volcano plot and heatmap of the two rice varieties after 90 d of storage

表 4 2 个水稻品种储藏 90 d 后代表性差异代谢物

Table 4 Representative differential metabolites between the two rice varieties after 90 d of storage

代谢物	差异倍数(FC)	变量权重值(VIP)	P 值
松脂酚	4.821	2.357	0.014
肉桂酸	3.487	2.145	0.003
3,4-二羟基扁桃醛	2.380	2.021	0.033
异香草酸	2.556	1.997	0.009
秦皮乙素	4.304	1.974	0.024
苯乙醇葡萄糖苷	2.535	1.958	0.001
松柏醛	2.590	1.892	0.018
芥子醛	2.139	1.864	0.004
二氢阿魏酸	2.096	1.839	0.002
茶香酮	2.046	1.711	0
香草醛	2.786	1.684	0
7-乙酰氧基-5,6-二甲氧基香豆素	2.040	1.624	0
赤霉素	5.222	1.474	0.026
磷脂酰胆碱	0.200	2.702	0.008
维生素 C 乙基醚	0.072	2.563	0.001
矢车菊素-3-葡萄糖苷	0.239	2.069	0.023
胱硫氨酸	0.047	2.060	0.013
色氨酸天冬酰胺	0.087	1.912	0.025
柳穿鱼黄素-7-O-葡萄糖苷	0.168	1.894	0.003
氯化芍药素	0.343	1.868	0.019
硫酸胍基丁胺	0.176	1.740	0.032

代表性差异代谢物筛选标准为 $VIP>1$ 、 $P<0.05$ ，且 $FC\geq 2.000$ 或 $FC\leq 0.500$ 。 FC 为该代谢物在桃湘优 188(TXY188)与五优 308(WY308)间的相对含量比值， $FC>1.000$ 表示该代谢物在 TXY188 中相对含量较高， $FC<1.000$ 表示该代谢物在 WY308 中相对含量较高。

2.4.2 储藏 90 d 后风味与品质相关差异代谢物分析 为进一步解析储藏 90 d 后 2 个水稻品种间风味与品质差异的代谢基础，筛选并汇总了相关差异代谢物。结果(表 5)显示，TXY188 中肉桂酸、香草醛、松柏醛、苯乙醇葡萄糖苷、芥子醛等代谢物相对

含量显著高于 WY308。相比之下，WY308 中 *L*-精氨酸和 *L*-组氨酸等游离氨基酸含量整体水平更高。总体来看，储藏 90 d 后 2 个水稻品种在品质与风味相关代谢物上仍存在明显差异。

表 5 2 个水稻品种间储存 90 d 后主要风味品质相关差异代谢物

Table 5 Key flavor- and quality-related differential metabolites between the two rice varieties after 90 d of storage

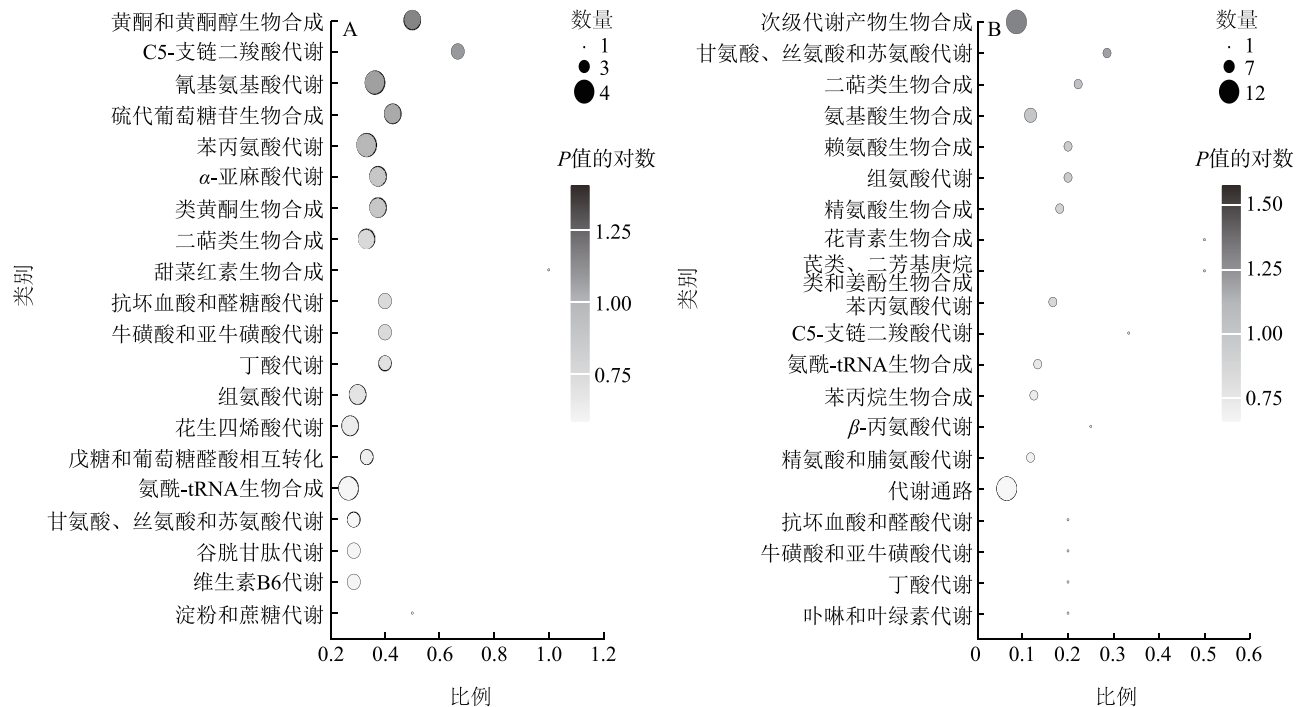
序号	代谢物	分类	差异倍数(FC)	变量权重值	P 值
1	肉桂酸	苯丙素类和聚酮类	3.488	2.145	0.003
2	香草醛	苯类化合物	2.786	1.684	0
3	松柏醛	苯类化合物	2.590	1.892	0.018
4	苯乙醇葡萄糖苷	有机氧化合物	2.535	1.958	0.001
5	芥子醛	苯类化合物	2.139	1.864	0.004
6	<i>L</i> -组氨酸	有机酸及其衍生物	0.441	1.136	0.038
7	<i>L</i> -精氨酸	有机酸及其衍生物	0.346	1.445	0.029

FC 表示 2 个水稻品种间代谢物相对含量比值。 $FC>1.000$ 表示该代谢物在桃湘优 188(TXY188)中含量高于五优 308(WY308)， $FC<1.000$ 表示在 WY308 中含量更高。化学类别依据代谢物注释结果归类。

2.5 差异代谢物 KEGG 富集分析

KEGG 数据库是解析生物体代谢网络及信号转导过程的常用公共资源。本研究将差异积累代谢物 (DAM) 映射至 KEGG 通路完成注释,并选取富集程度排名前 20 的通路进行可视化展示。结果(图 5)显示,2 个水稻品种储藏前的差异代谢物主要富集于黄酮和黄酮醇生物合成、类黄酮生物合成等次生

代谢通路以及氨基酸代谢与有机酸代谢通路(图 5A)。其中,黄酮和黄酮醇生物合成通路的富集系数最高且 P 值最小。储藏 90 d 后,DAM 主要富集在次级代谢产物生物合成、苯丙氨酸代谢以及花青素生物合成等通路(图 5B)。上述结果表明,2 个水稻品种在储藏前后均存在明显的次生代谢通路差异。



A: TXY188_0 d 与 WY308_0 d 比较组富集结果; B: TXY188_90 d 与 WY308_90 d 比较组富集结果。TXY188_0 d: 秈稻桃湘优 188 储藏 0 d; TXY188_90 d: 秈稻桃湘优 188 储藏 90 d; WY308_0 d: 秈稻五优 308 储藏 0 d; WY308_90 d: 秈稻五优 308 储藏 90 d。

图 5 2 个水稻品种间 KEGG 通路图

Fig.5 KEGG pathway enrichment plots between the two rice varieties

2.6 不同品种在储藏前后差异通路解析

为解析 2 个水稻品种固有的代谢差异,本研究基于类黄酮生物合成通路对 TXY188 与 WY308 的差异代谢物进行通路层面比较。结果(图 6)显示,通路上游关键代谢物肉桂酸在 TXY188 中相对含量更高。下游分支中,TXY188 中的柚皮素 ($FC=0.045$)、圣草酚 ($FC=0.118$) 和二氢槲皮素 ($FC=0.364$) 等黄酮类物质含量低于 WY308。值得注意的是,TXY188 中 3- O -甲基槲皮素 ($FC=6.089$) 与丁香亭 ($FC=30.974$) 的相对含量显著高于 WY308,表明 2 个水稻品种在类黄酮通路不同分支上的代谢分配存在差异。

贮藏 90 d 后,TXY188 与 WY308 在苯丙烷代谢通路中呈现出明显的代谢分化(图 7)。在剔除 0 d 共有代谢物后,保留的差异代谢物反映了 2 个水稻品种在储藏后的通路响应差异。结果显示,TXY188 中肉桂酸 ($FC=3.488$)、香草醛 ($FC=2.786$)、松柏醛 ($FC=2.590$) 和芥子醛 ($FC=2.139$) 等苯丙烷途径相关代谢物含量相对较高,其中肉桂酸位于通路上游,香草醛、松柏醛和芥子醛属于芳香族醛类衍生物,松柏醇则为木质素相关代谢中间体。相比之下,WY308 中上述代谢物的积累水平相对较低。说明 2 个水稻品种在储藏 90 d 后苯丙烷代谢途径中的代谢响应模式存在明显差异。

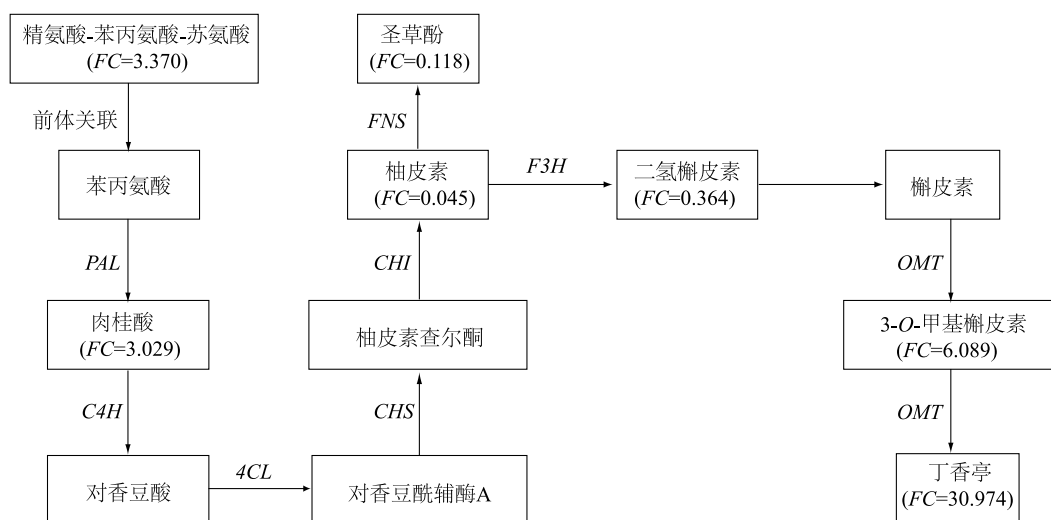


图 6 类黄酮生物合成通路

Fig.6 Flavonoid biosynthesis pathway

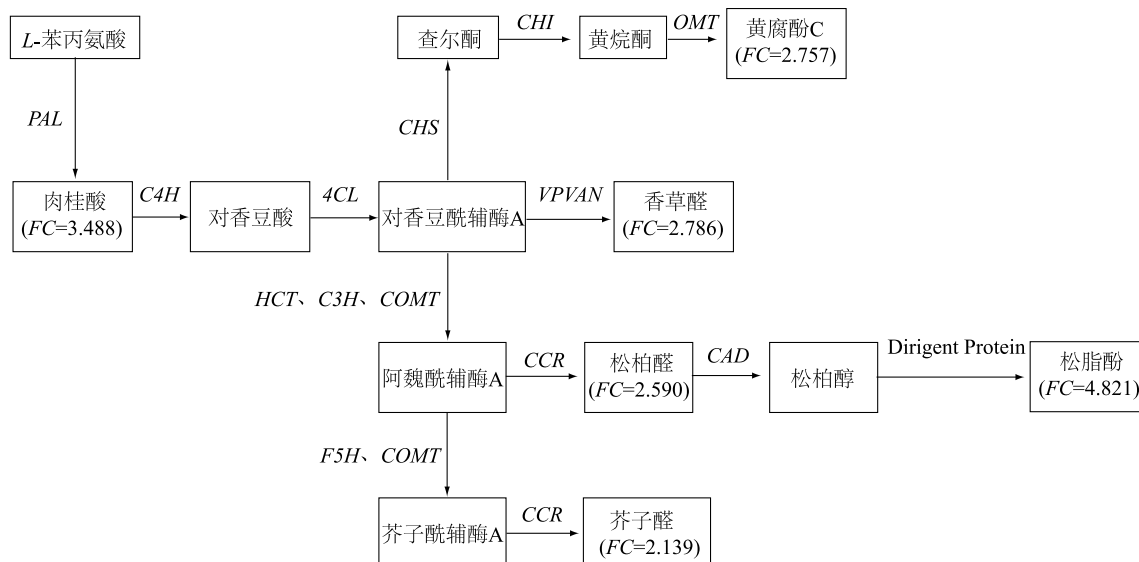


图7 苯丙烷代谢通路

Fig.7 Phenylpropanoid biosynthesis pathway

3 讨论

本研究基于 UPLC-MS/MS 非靶向代谢组学,对

TXY188 与 WY308 在储藏前后的差异代谢物进行比较分析。结果表明,2 个水稻品种在储藏前即存在明显代谢差异,储藏 90 d 后仍保持不同的代谢积

累模式。

储藏前, TXY188 中丁香亭、香草醛、肉桂酸和松柏醛等代谢物含量较高, 提示 2 个水稻品种在芳香族物质积累及苯丙烷-类黄酮代谢方面存在差异。丁香亭为 *O*-甲基化黄酮醇类次生代谢物, 隶属于苯丙烷途径分支中类黄酮生物合成分支^[13-14], 其在 TXY188 中有较多积累提示 2 个水稻品种在苯丙烷-类黄酮代谢通量分配上存在差异。该代谢差异可能有助于提高储藏过程中对氧化胁迫的响应能力, 减缓脂质过氧化及品质劣变^[14-16], 进而对风味与品质产生间接促进作用。香草醛是稻米挥发性风味成分之一, 具有甜香与香草等气味特征, 对稻米香气具有重要贡献^[17]。结合通路层面看, TXY188 中肉桂酸等前体物质积累较多, 同时丁香亭等黄酮类衍生物显著富集, 表明其在芳香族衍生物和黄酮修饰产物积累方面具有活跃的代谢特征。

储藏 90 d 后, TXY188 中肉桂酸、香草醛和松柏醛等芳香族相关代谢物含量仍高于 WY308, 说明其在储藏后期仍保持较高水平的苯丙烷途径及芳香族次生代谢产物积累。肉桂酸为苯丙烷途径关键酚酸, 与食品风味形成密切相关^[18-22]。松柏醛是苯丙烷途径中经典芳香族醛类衍生物, 与食品风味形成密切相关, 同时也具有一定抗氧化活性^[21, 23]。值得注意的是, 储藏 90 d 后 TXY188 中肉桂酸、香草醛与松柏醛等芳香族化合物仍保持较高水平的积累, 这可能是 2 个水稻品种在储藏后风味品质相关代谢存在差异的重要原因。

综合类黄酮生物合成通路和苯丙烷代谢通路分析结果可见, TXY188 在储藏前后均表现出苯丙烷途径上游前体、下游芳香族衍生物以及 *O*-甲基化黄酮衍生物相对富集的特征。该特征不仅有利于芳香族风味相关代谢物及其前体持续积累, 也可能增强其对储藏过程中氧化胁迫的缓冲能力, 从而为储藏期风味和品质保持提供代谢基础。相比之下, WY308 在类黄酮骨架类、膜脂类及氨基酸相关代谢物方面积累更为突出, 提示其在储藏过程中具有不同的代谢调节方式。总体而言, 2 个水稻品种在苯丙烷-类黄酮代谢通路中的代谢分配差异可能是造成其储藏后品质表现差异的重要原因。

4 结论

本研究基于 UPLC-MS/MS 非靶向代谢组学技

术, 对 2 个水稻品种在储藏前及恒温储藏 90 d 后的差异代谢物进行比较分析。结果表明, 2 个水稻品种的风味与品质相关代谢物存在显著差异, 丁香亭、肉桂酸、香草醛、松柏醛等代谢物是区分 2 个水稻品种品质差异的关键代谢物。总的来说, TXY188 中苯丙烷途径及芳香族相关代谢物积累更为突出, 表现出更有利于储藏期风味保持的代谢特征。本研究为优质耐储藏水稻品种的筛选与培育提供了代谢组学依据。不足的是, 本研究设置的储藏条件单一且非靶向结果仅以相对定量为主, 后续将增加时间点并结合靶向定量开展试验。

参考文献:

- [1] Pereira C, Lourenço V M, Menezes R, et al. Rice compounds with impact on diabetes control[J]. *Foods*, 2021, 10(9):1992.
- [2] 王乐惠, 张继宁, 张鲜鲜, 等. 我国稻米食味品质的研究进展及其影响因素[J]. *上海农业学报*, 2023, 39(3):148-154.
- [3] 许锐, 隋勇, 李书艺, 等. 稻米食味品质影响因素研究进展[J]. *食品安全质量检测学报*, 2024, 15(7):234-241.
- [4] Heuberger A L, Lewis M R, Chen M H, et al. Metabolomic and functional genomic analyses reveal varietal differences in bioactive compounds of cooked rice[J]. *PLoS One*, 2010, 5(9):e12915.
- [5] 刘瑶. 泰国香米和五常大米品质分析和特征性风味成分的研究[D]. 沈阳: 沈阳农业大学, 2018.
- [6] Hu X Q, Lu L, Guo Z L, et al. Volatile compounds, affecting factors and evaluation methods for rice aroma: a review[J]. *Trends in Food Science & Technology*, 2020, 97:136-146.
- [7] 张敏, 苗菁, 苏慧敏, 等. 不同品种稻米的米饭风味分析[J]. *食品科学*, 2017, 38(16):110-114.
- [8] Wang Q, Zhang D, Zhao L Y, et al. Metabolomic analysis reveals insights into deterioration of rice quality during storage[J]. *Foods*, 2022, 11(12):1729.
- [9] Chen B X, Fu H, Gao J D, et al. Identification of metabolomic biomarkers of seed vigor and aging in hybrid rice[J]. *Rice*, 2022, 15(1):7.
- [10] Xiong Q Q, Sun C H, Wang R N, et al. The key metabolites in rice quality formation of conventional Japonica varieties[J]. *Current Issues in Molecular Biology*, 2023, 45(2):990-1001.
- [11] Nie X H, Yang S Y, Guo Y, et al. Metabolomic analysis of rice cultivars from diverse production areas[J]. *PeerJ*, 2024, 12:e18496.
- [12] Zhou D H, Jing H, Yuan J, et al. Non-targeted GC-MS metabolomics-based differences in Indica rice seeds of different varieties[J]. *BMC Plant Biology*, 2024, 24(1):519.
- [13] Chagas M D S S, Behrens M D, Moragas-Tellis C J, et al. Flavonols and flavones as potential anti-inflammatory, antioxidant, and antibacterial compounds[J]. *Oxidative Medicine and Cellular*

- Longevity, 2022, 2022(1):9966750.
- [14] Chmiel M, Stompor-Goracy M. The spectrum of pharmacological actions of syringetin and its natural derivatives: a summary review [J]. *Nutrients*, 2022, 14(23):5157.
- [15] Qu L Y, Zhao Y, Li Y F, et al. Effect of storage temperature on the quality of brown rice revealed by integrated GC-MS and lipidomics analysis [J]. *Food Chemistry*, 2025, 465:142107.
- [16] Zhao Y N, Li Y F, Gong Z G, et al. Changes in quality characteristics and metabolite composition of low-temperature and nitrogen-modified atmosphere in indica rice during storage [J]. *Foods*, 2024, 13(18):2968.
- [17] 关丽娜, 叶国栋, 张敏, 等. 籼稻米饭关键香气成分鉴定及感官特性形成分析 [J]. *浙江大学学报(农业与生命科学版)*, 2024, 50(3):431-442, 454.
- [18] 王聪, 肖更生, 徐玉娟, 等. 响应面法优化低共熔溶剂提取荔枝果肉多酚及其抗氧化性和酪氨酸酶抑制活性分析 [J]. *南方农业学报*, 2025, 56(7):2274-2284.
- [19] 黄泽, 杨春亮. 不同干燥方式对鸡屎藤中酚类代谢物及抗氧化活性的影响 [J]. *南方农业学报*, 2024, 55(7):1992-2005.
- [20] 杨鸿宇, 郑煜, 耿召良, 等. 海南五指山产区不同雪茄品种晾制后烟叶感官质量和代谢组的差异分析 [J]. *南方农业学报*, 2024, 55(6):1753-1764.
- [21] Jiang D S, Peterson D G. Role of hydroxycinnamic acids in food flavor: a brief overview [J]. *Phytochemistry Reviews*, 2010, 9(1):187-193.
- [22] Behne S, Franke H, Schwarz S, et al. Risk assessment of chlorogenic and isochlorogenic acids in coffee by-products [J]. *Molecules*, 2023, 28(14):5540.
- [23] Fotakis C, Andreou V, Christodouleas D C, et al. The metabolic and antioxidant activity profiles of aged Greek grape marc spirits [J]. *Foods*, 2024, 13(11):1664.

(责任编辑:陈海霞)