DOI:10.12441/spyswjs.20250418003 [文章编号] 1673-1689(2026)01-0025-08

GC-MS代谢组学技术在谷物发酵食品中的研究进展

刘海臣[1] 刘 畅[2] 霍红雁[1] 徐 惠[1] 朱顺茜[1] 刘 磊[1] 邹 奎[1]

(1. 内蒙古民族大学生命科学与食品学院,内蒙古 通辽 028042; 2. 天津农学院食品科学与生物工程学院,天津 300392)

摘要:作为一门新兴学科,代谢组学已逐步跃升为食品科学研究领域的焦点。在众多代谢组学分析手段中,气相色谱-质谱联用技术(GC-MS)以其广泛应用而备受瞩目。谷物发酵食品,既在全球饮食文化中占据重要地位,也是人们日常生活中不可或缺的食品类型。作者综述了基于GC-MS的代谢组学技术在对谷物发酵食品开发中的应用,内容涵盖样品制备、代谢物提取、数据分析及其在谷物发酵食品中的实际应用。同时,详尽阐述了GC-MS代谢组学技术的优势与局限性,以期为深入探究食品发酵原理及促进具有潜力的新产品的快速推广提供参考。

关键词:谷物;发酵食品;代谢组学;代谢物;气相色谱-质谱联用技术

Research Progress of GC-MS-based Metabolomics in Fermented Cereal Foods

LIU Haichen[1] *LIU Chang*[2] *HUO Hongyan*[1] *XU Hui*[1] *ZHU Shunxi*[1] *LIU Lei*[1] *ZOU Kui*[1]

(1. College of Life Sciences and Food, Inner Mongolia Minzu University, Tongliao 028042, China; 2. College of Food Science and Bioengineering, Tianjin Agricultural University, Tianjin 300392, China)

Abstract: As an emerging discipline, metabolomics has gradually become the focus of food science research. Among numerous metabolomics analysis methods, gas chromatography-mass spectrometry (GC-MS) has attracted much attention for its wide application. Fermented cereal foods occupy an important position in global dietary culture and are an indispensable type of foods in people's daily lives. The author reviewed the application of GC-MS based metabolomics for the development of fermented cereal foods, covering sample preparation, metabolite extraction, data analysis, and practical application in fermented cereal foods. Moreover, this paper elaborated on the advantages and limitations of GC-MS-based metabolomics in fermentation, aiming to provide a reference for further exploring the principles of food fermentation and facilitating the rapid promotion of potential new products.

Keywords: cereal; fermented food; metabolomics; metabolite; gas chromatography-mass spectrometry

谷物作为我国传统膳食结构中最重要的主食之一,是人体最经济的能量来源,也是B族维生素、矿物质、蛋白质和膳食纤维的重要来源,对维持机体健康发挥着重要作用[1]。发酵技术是现代化食品加工中的重要技术之一,谷物在发酵过程中,微生物通过代谢底物,将其转化为不同的代谢产物,这些代谢产物具有不同的用途和营养价值[2-3]。谷物经发酵后可生成含乙醇或不含乙醇的饮料、稀粥等[4]。由于谷物的种类不同,发酵过程中产生的代谢产物可能包括但不限于风味/香气相关成分(挥发物)、蛋白质水解产物(氨基酸和肽)、醇相关化合物、淀粉和碳水化合物组分以及次级代谢产物(包括植物化学物质)等[5-6]。多维代谢物的浓度、化学结构、亲和力和极性的差异使得

基金项目:内蒙古自治区高等学校科学技术研究项目(NJZY23108);内蒙古自治区直属高校基本科研业务费项目(GXKY25Z002)。

通信作者:刘海臣(1973—),男,硕士,高级实验师,主要从事植物抗逆生理与多组学研究。E-mail: liuhaichen3@126.com

收稿日期:2025-04-18 **修回日期:**2025-06-03

传统技术难以全面覆盖。代谢组学可以通过对生物基质中的代谢物进行定性和定量分析，从而全面表征食品加工产品，以便更好地了解发酵谷物食品的多功能性和复杂性。

代谢组学是在代谢组概念基础上提出的研究生物体内代谢产物的种类、数量及其变化规律的科学[7]。通过深入研究生物体内源性或外源性小分子代谢产物的代谢表达谱、代谢途径，以及这些途径受内在和外在因素影响的机制，并探索其随时间变化的规律，从而更加深入地揭示生物体的代谢特征。目前，GC-MS代谢组学技术已被广泛用于谷物食品发酵过程中差异代谢物的定量和定性分析[8-9]。其原因是GC-MS技术具有分辨率高、分离能力强、碎裂模式具有可重复性（化合物鉴定的优势）以及基质效应较小等特点。鉴于此，作者综述了国内外GC-MS代谢组学技术在谷物发酵食品研究中的重要应用进展，以期为代谢组学在谷物发酵食品领域的深入研究提供参考。

1 基于GC-MS的谷物发酵食品代谢组学技术

1.1 谷物发酵食品代谢组学技术

谷物发酵食品代谢组学是代谢组学在谷物发酵食品领域的具体应用，其核心是通过系统分析发酵过程中微生物代谢产生的小分子代谢物，揭示谷物成分与微生物活动的相互作用机制，进而优化发酵工艺、提升产品品质及安全性。根据研究策略可分为靶向和非靶向2种。靶向代谢组学针对特定代谢产物进行研究和分析，而非靶向代谢组学可以全面分析生物体所有代谢产物，其研究对象不确定。从理论上讲，非靶向方法可以产生假设，然后可以对选定的代谢物有针对性地进行进一步研究[10]。无论使用何种分析技术，谷物发酵食品代谢组学研究一般都遵循多步骤工作流程。作为一门高度交叉的学科，谷物发酵食品代谢组学融合了化学、生物学、数据科学、化学计量学和计算机科学等多个领域的知识，是系统生物学研究中不可或缺的一环。试验研究方案设计是谷物发酵食品代谢组学工作流程的第一步，通过该流程对下游步骤的关键方面进行认真评估和设计，确定使用的谷物发酵食品代谢组学方法（非靶向与靶向）。在统计学方面需要考虑样本量，每组样品数、批次和重复次数等，还要考虑应用的提取方法、使用的分析平台、挖掘的数据方法和研究的时间框架等。此试验设计步骤对于确保试验研究成功与否至关重要，同时可以最大限度地减少人为误差，确保研究的科学严谨，并满足试验要求。此外，提取方法的选择、分析平台的搭建、数据挖掘策略的制定以及研究时间框架的规划等，也是试验设计不可或缺的组成部分。这一系列精心的设计对于确保试验的顺利进行、减少人为误差、提升研究的科学严谨性以及满足试验要求具有至关重要的作用[11-15]。

1.2 发酵谷物样品制备和代谢物提取

一旦确定了研究方案，就必须按试验步骤提取目标代谢物。发酵谷物一般以固体、半固体或液体等多种形式存在，试验样品制备包括粉碎、均质化、冷冻干燥、氮吹等步骤，样品制备之后进行代谢物提取。提取的主要目的是将代谢物从（生物）基质中释放出来，对于靶向分析代谢物提取，要尽量减少不需要的化学物质的干扰；非靶向分析要尽量提高分析样品代谢物组的覆盖率和稳定性[16]。常用于发酵谷物基质中代谢物的提取方法主要包括：直接溶剂提取法、液-液连续萃取法、QuEChERS（快速、简单、经济、有效、稳定、安全）方法、蒸馏萃取法、固相微萃取法（solid-phase microextraction，SPME）、固相萃取法（solid phase extraction，SPE）、溶剂辅助风味蒸发法（solvent-assisted flavor evaporation，SAFE）等[17-18]。QuEChERS方法是美国农业部Anastassiades等[19]于2003年开发的一种基于固相萃取和基质固相分散技术的预处理方法。该方法通过结合液-液萃取和分散式固相萃取2种方式来提取和分离基质中的目标化合物，常用的有机溶剂有乙腈、丙酮、乙酸乙酯、氯仿、乙醇、甲醇等[20-32]。在气相色谱质谱分析中常见的化学衍生反应有酰化反应、烷基化反应、酯化反应、卤化反应、硅烷化反应等[22]。对于SPME来说，二乙烯基苯/羧基苯/聚二甲基硅氧烷是发酵谷物中常用的用于挥发性化合物吸附的涂层纤维[24]。这种基于SPME的方法无溶剂，且灵敏度高[25]。因此，SPME与GC-MS相结合（SPME-GC-MS），具有良好的重现性，便于对挥发性较好的代谢物进行高通量检测分析[26-27]。

1.3 数据采集和代谢物分析

在基于GC-MS的谷物发酵食品代谢组学分析方法中，样品组分的分离是通过GC进行的，而分离后代谢物的检测是通过MS系统完成的。样

品试验过程的质量控制（QC）和质量保证（QA）是确保生成数据质量的关键要素，即尽量减少（或消除）分析偏差、背景噪声、环境变化和人为因素等。另外，QA和QC也是确保数据分析结果稳定性、再现性和可重复性的重要手段，关于这方面的更多细节性实际指南已有较多文献报道[28-30]。GC-MS系统常采用电子冲击/EI电离法生成可重复的离子碎片模式，该模式电离效率高、图谱特征性强，易得到大量的结构信息。对代谢物进行鉴定的数据库多种多样，如Feihn数据库、Golm数据库、Mass Bank数据库、Wiley数据库和NIST数据库等[31-32]，这些数据库都是代谢物分析不可或缺的工具。随着GC-MS技术的进步，出现了与现代高分辨率质谱相结合的全二维气相色谱（GC×GC），GC×GC具有分辨率高、扫描速度快等优点。此外，气相色谱技术与质谱系统相耦合也可作为混合仪器使用，具有灵敏度高和定量重现性好等优点。目前，与气相色谱联用的质谱分析仪类型主要有三重四极杆（QqQ）、Q-orbitrap、TOF-MS和Q/TOF-MS等。综上所述，将这些现代质谱技术应用于发酵谷物中挥发性/半挥发性分析物的靶向和非靶向分析，并结合相关谱库的使用，可为谷物发酵食品中存在的代谢物提供更好、更全面的表征。

2 GC-MS代谢组学技术在谷物发酵食品中的应用

食品发酵一般是指通过微生物的作用将可食用的底物转化为新型产品的过程[33]。对于谷物发酵食品来说，参与这一过程的主要微生物是乳酸菌、霉菌和酵母。这些发酵微生物合成多种活性胞内酶，刺激大分子物质（碳水化合物、蛋白质和脂类）转化为有益的代谢物，如挥发性化合物、氨基酸、脂肪酸、肽、酚类等[2]。谷物是发酵食品的典型底物，因其发酵食品营养丰富、味道独特而深受人们喜爱[34-35]。目前，代谢组学作为一门新兴的科学，其技术已成为食品发酵领域研究的重要工具，同时也为食品科学领域的研究提供了新思路。

2.1 稻类

Seo等[36]通过GC-MS非靶向代谢组学技术系统解析了酵母菌株的发酵动力学特征，重点揭示了传统米酒在酒精发酵与陈酿阶段的关键代谢物演变规律。该研究表明，发酵初期酵母菌株呈指数增殖特征，伴随葡萄糖及磷酸盐类物质的快速消耗，同时检测到35种次级代谢产物显著积累（$P<0.05$）。这种现象被证实与不同菌株代谢通路的特异性激活密切相关。值得注意的是，在长达70 d的陈酿过程中，代谢物整体呈稳定状态，仅检测到4种萜烯类物质发生显著变化（变化幅度15%），这为传统发酵食品的品质稳定性研究提供了重要的数据支撑。

禹晓婷[37]采用GC-TOF-MS代谢组学方法研究了代谢物与黑糯米酒发酵时间的关系。结果表明，黑糯米酒发酵过程中共鉴定出344种代谢物，包括糖、糖醇、有机酸、氨基酸、脂肪酸、酚酸和未知名称的差异代谢物，其中33种被确定为显著差异代谢物（VIP>1且$P<0.05$）；不同发酵阶段差异代谢物的种类和数量存在差异，果糖和麦芽糖作为整个发酵过程出现次数最多的差异代谢物，可能对米酒的品质影响较大；随着发酵的进行，差异代谢物的数量和种类逐渐增加，60 h时的代谢物积累量最大且差异代谢物数量最多，因此60 h为黑糯米酒预发酵的最佳时间，这一发现为优化发酵工艺提供了科学的时间节点判定依据。该研究者还发现，丙氨酸、天冬氨酸和谷氨酸代谢、淀粉和蔗糖代谢以及戊糖磷酸途径都与发酵相关。在复合菌种协同机制研究方面，Lee等[21]对米曲霉和解淀粉芽孢杆菌在不同发酵时间生产的米曲代谢物谱进行了研究。结果表明，曲酒样品代谢物的变化受发酵剂种类和发酵持续时间的共同影响。米曲霉发酵的米曲与碳水化合物代谢中间体、脂肪酸和丝氨酸衍生氨基酸有关，而解淀粉芽孢杆菌发酵的米曲与芳香族氨基酸和支链氨基酸、溶血型磷脂和类黄酮有关。为了进一步探究发酵微生物在挥发性代谢物形成中的作用，Park等[8]采用乳酸菌、霉菌和酵母3种发酵剂发酵大米，并对发酵后的差异代谢物进行了研究，结果表明，与其他微生物相比，霉菌接种发酵大米的代谢物变化相对更活跃，这为进一步揭示发酵微生物在挥发性代谢物形成中的作用提供了重要参考。

2.2 麦类

啤酒有着“液体面包”之称，是以大麦芽为原料所酿造出的一种含二氧化碳的低乙醇含量饮料。郑心等[38]利用GC-TOF-MS技术，对啤酒发酵所用的酵母菌的胞内代谢物进行了定性和定量分

析，发现有16种代谢物与氨基酸代谢有关，琥珀酸是三羧酸循环（TCA）的重要中间产物，月桂酸、十六烷烯酸、十八烷烯酸是脂肪酸代谢的标志性产物。

Yin等[22]针对拉格啤酒风味化合物进行了系统的研究，鉴定并定量分析了62种细胞内代谢物。其中氨基酸被确定为最主要的代谢物；主要氨基酸浓度在发酵过程中均呈下降趋势，且差异较小；丙氨酸参与了许多代谢途径，包括糖酵解、糖异生和TCA。由此可见，氨基酸的生物合成和分解代谢在风味化合物的合成中发挥重要作用，该研究为深入理解啤酒发酵过程中特定香气化合物的形成机制提供了依据。

Ferri等[39]利用GC-MS代谢组学研究了不同植物乳植杆菌对2种小麦粉发酵风味和抗氧化特性的影响，旨在通过选择最佳面粉-微生物菌株组合来改善其风味和抗氧化特效，以提升谷物发酵食品在感官评价与功能特性方面的表现。在呼罗珊小麦发酵面团中，发现一组挥发性化合物（醇、羰基、十二酸和1，3-己二烯）与没食子酸（gallic acid，GA）、表没食子儿茶素没食子酸酯（epigallocatechin gallate，EGCG）、表没食子儿茶素（epigallocatechin，EGC）、类黄酮、原儿茶酸（protocatechuic acid，PCA）和总多酚（total polyphenols，TP）之间存在高度相关性。在硬粒小麦面团中，不同类型的挥发性物质（醇、羰基、酸和碳氢化合物）与EGC、EGCG、类黄酮和多聚磷酸盐（Polyp）高度相关。此外，该研究还发现植物乳植杆菌在发酵呼罗珊小麦面团时能够同时增强感官评价与健康促进物质，而植物乳植杆菌94A和植物乳植杆菌206在呼罗珊小麦面团中的表现尤为突出。Saa等[24]利用莲房多酚和酿酒酵母对2种小麦（成熟粒与未成熟粒）制成的面粉进行了酵母发酵处理，并通过SPME-GC-MS代谢组学方法对发酵过程中的挥发性物质进行深入研究，发现呼罗珊小麦利用酵母发酵产生的代谢物（含短链脂肪酸）具有潜在的应用价值。

Nissen等[40]通过SPME-GC-MS代谢组学技术，深入研究了3株单胞菌菌株在无酵母小麦面团中的发酵性能，并探究了添加葡萄糖及NaCl对其发酵性能的影响。结果表明，*Z. mobilis*菌株可产生约10 mg/g（以面团质量计）的乙醇，发酵2 h后面团体积达到了最大值（640~680 mL），而加入NaCl面团的体积在6 h后才达到了该最大值，且NaCl对3个菌株均有不利影响；另外，*Z. mobilis*菌株发酵面团产生的壬酸、十一酸、（2*E*）-2-十六碳烯醛、*L*-(+)-酒石酸二乙酯和（3*E*）-4-甲基-3-癸烯-5-酮是其特有的代谢产物。这些发现为*Z. mobilis*在烘焙食品中的应用提供了有力支持，同时也为无酵母发酵产品领域的研究与实践提供了重要参考。

2.3 高粱

Adebo等[41]基于非靶向GC-MS的代谢组学方法，分析了2种高粱类型（高单宁高粱和低单宁高粱）及其发酵衍生物中挥发性差异代谢物。结果表明，高粱中单宁含量影响了高粱原料及发酵衍生品代谢物的组成。2种高粱原料的差异代谢物主要包括环状化合物、2，4-二叔丁基酚、脂肪酸酯和糖衍生物等。此外，高粱原料的固有代谢物组成会导致其发酵产物代谢物的差异变化，从而对饮食和健康产生影响。

单宁作为一类关键的多酚类化合物，广泛存在于多种植物中，尤以红葡萄酒和高粱等食品为典型代表。这类化合物不仅赋予食品独特的口感和色泽，还对人体健康具有诸多益处。然而，高粱中单宁含量的差异会对发酵过程中微生物的生长和代谢途径产生直接影响[41]。具体而言，单宁含量高的高粱中，单宁会与发酵微生物中的酶和代谢途径发生相互作用，进而改变代谢产物的生成和积累情况。这种相互作用可能导致发酵衍生品中特定代谢物的含量和比例发生显著变化，从而赋予产品独特的风味和营养价值。

2.4 其他谷物（包括未知谷物发酵食品）

Song等[42]通过非靶向和靶向代谢组学分析，确定了来自不同地理来源的强香气型白酒（蒸馏酒）样品中潜在的挥发性成分标记物。结果表明，有29种潜在标记物和22种标记物可用于白酒样品的鉴别，其鉴别能力与白酒样品特征风味化合物（酸类、醇类、酯类、呋喃类、硫化物类和吡嗪类）密切相关。该方法还揭示了标记物对白酒样品具有很强的鉴别能力，并能将白酒样品的地理来源与代谢物联系起来，表明啤酒质量的评判结果很大程度上取决于不同风味化合物的配比。

Nissen等[40]评估了亚麻籽粉和酵母的添加对无麸质发酵面团中挥发性有机化合物（volatile organic compound，VOC）的影响。研究结果显示，与标准面团相比，添加亚麻籽粉的无麸质面包中

发酵代谢产物的增加与乙酸、乙醇、1,4-丁二醇和2-丁酮-3-羟基的丰度有关。发酵作为一种增值工艺，也在食品级少孢根霉接种的啤酒废粮加工中得到了应用。Cooray等[23]利用非靶向GC-MS代谢组学技术对废谷物发酵后的代谢物进行了分析。研究发现，经过发酵处理的啤酒渣中，氨基酸、抗氧化剂、柠檬酸和维生素等代谢物的含量明显提高，这为废谷物的增值利用开辟了新途径。

综上，基于GC-MS技术的代谢组学研究显著提升了发酵谷物食品特征体系的解析深度。研究证实，原料基质构成、功能性添加剂（如NaCl与亚麻籽粉）、发酵周期、微生物群落结构及发酵工艺类型等关键变量，共同塑造了发酵产物的品质特征。该技术体系不仅能够精准预测优质发酵产品的最佳工艺参数（包括发酵时间窗调控、基质与菌株适配性优化），还可实现发酵动力学过程的可视化监控及特征挥发性生物标志物的定量解析。值得注意的是，代谢组学大数据为食品工业技术革新提供了决策支持，特别是在新型发酵体系构建（无酵母发酵面团）、特殊膳食开发（低敏无麸质面包）以及副产物高值化利用（营养强化型谷物加工废料）等领域展现出重要的产业化指导价值。

3 GC-MS平台在代谢组学研究中的优势与局限性

3.1 GC-MS代谢组学技术的优势

GC-MS凭借其独特的分析性能，在小分子代谢组学领域确立了不可替代的地位。该平台的核心优势首先体现在标准化的电子电离（electron ionization，EI）源设计，其产生的稳定电离环境保障了代谢物检测的重复性。与传统化学电离源相比，EI源通过70 eV高能电子轰击产生的特征性碎片图谱，为化合物结构解析提供了分子指纹信息。这种碎片化模式与NIST数据库、Wiley数据库等权威质谱数据库的高度兼容性，构成了GC-MS技术的核心竞争力。

在代谢物覆盖方面，GC-MS对短链脂肪酸（如乙酸、丙酸等）、单糖及其衍生物等热稳定小分子的检测具有显著优势。通过衍生化技术扩展，该系统可检测的代谢物种类已突破1 000种，覆盖TCA、氨基酸代谢等主要代谢通路。在分析效率方面，现代GC-MS系统采用快速升温技术（如20 ℃/s），配合毛细管色谱柱（如DB-5MS 30 m×0.25 mm×0.25 μm），可在15 min内完成糯米酒样本中40余种代谢物的基线分离，较传统HPLC系统提速3~5倍[43]。这种高效分离能力与三重四极质谱的选择反应监测（SRM）模式相结合，使检测灵敏度达到fg级别。在技术经济性方面，GC-MS平台展现出显著的成本优势。其EI源维护周期可达12~18个月，远长于LC-MS常用的电喷雾离子源（ESI）3~6个月的维护周期。在耗材成本方面，氦气载气消耗量较LC-MS的液相流动相节省约60%的日常运营费用。值得关注的是，GC-MS的碎片图谱-谱库匹配分析范式大幅降低了技术门槛：NIST数据库集成的自动解卷积算法（AMDIS）能有效分离共流出峰，配合直观的相似度评分系统（Match Factor），使得初级研究人员经过短期培训即可完成80%以上已知代谢物的定性分析。这种标准化操作-智能化解析的特点，有力推动了代谢组学研究在实验室的普及应用。

3.2 GC-MS代谢组学技术的局限性

在代谢组学技术快速迭代的背景下，针对谷物发酵体系特性选择适配分析平台已成为研究成败的关键。GC-MS作为传统代谢组学研究的核心工具，其技术特征与研究目标的适配性正面临LC-MS、核磁共振（NMR）等分析平台的挑战，主要技术差异体现在以下维度。

3.2.1 样品前处理的差异性

GC-MS系统要求分析物必须具备挥发性与热稳定性双重特性，这从根本上决定了其样品前处理流程的复杂性。对于谷物发酵体系中的极性代谢物（如有机酸、氨基酸等），必须经过硅烷化或酰基化衍生处理（常用试剂包括BSTFA、MSTFA等），该过程不仅耗时（通常需要2~4 h衍生反应），还可能造成代谢物异构体的转化。例如，在米曲霉发酵代谢物分析中，柠檬酸经三甲基硅烷化后会产生3种衍生化产物，显著增加了质谱解析难度[21]。相比之下，LC-MS系统通过反相色谱柱（C18/C8）与ESI技术的配合，可直接分析极性化合物而无需衍生处理，其样品制备时间可缩短60%以上。NMR技术在此维度更具优势，冻干样品经氘代溶剂溶解后即可直接检测，完整保留了代谢物的原始构型[44]。

3.2.2 质量检测窗口的互补性

GC-MS的检测范围使其在初级代谢产物分析

中表现突出，能有效检测约82%的糖类、短链脂肪酸和氨基化合物[45]。但该范围难以覆盖发酵过程中产生的功能活性物质：1）多酚类物质，如阿魏酸酯（相对分子质量650~800）；2）微生物次级代谢产物，如红曲霉素类物质（相对分子质量300~800）。LC-MS系统通过超高效液相色谱（UHPLC）与高分辨质谱（HRMS）联用，可将检测上限扩展至2 000。NMR虽不具备相对分子质量筛选功能，但其^{1}H谱（400~600 MHz）在0.5~10 ppm可同时捕获从有机酸（δ为1.3~2.5）到芳香族化合物（δ为6.8~7.5）的广泛信号，特别适用于发酵体系中代谢物相互作用的动态监测。

3.2.3 数据解析能力的系统性差异

GC-MS依赖NIST等商业数据库进行代谢物鉴定，其匹配准确率受衍生化程度影响显著（平均匹配度约85%）[46]。LC-MS依托精确相对分子质量（质量误差≤±5 ppm）和二级质谱碎片信息，可使鉴定准确率提升至90%以上，但在同分异构体区分方面存在局限（如葡萄糖与果糖的区分准确率仅为68%）。NMR通过^{13}C-^{1}H相关谱（HSQC）和总相关谱（TOCSY）可有效解析空间构型差异，在乳酸立体异构体（*L*型与*D*型）鉴别中准确率达到96%[47]。这种技术差异导致研究结论的侧重不同：GC-MS主导的研究更关注能量代谢相关小分子物质，LC-MS研究侧重功能活性大分子物质，而NMR研究则擅长揭示代谢网络的动态平衡。

3.2.4 应用场景的特异性选择

在发酵过程监控中，GC-MS每小时可完成8~10个样品的全代谢组分析，适合高通量筛选挥发性风味物质（如酯类、醛酮类等）。LC-MS因色谱分离时间较长（每个样品通常需要15~30 min），更适用于终产物的深度表征。NMR虽然检测速度较慢（每个样品需要45~60 min），但其非破坏性特点在以下场景不可替代：1）珍稀历史菌株的代谢特征研究；2）发酵过程的原位动态监测（如结合魔角旋转技术）。

随着食品发酵代谢组学技术的不断进步，当前的发展趋势正朝着智能化整合的方向演进，如GC-MS与顶空固相微萃取（HS-SPME）联用可将挥发性代谢物检测灵敏度提升10~100倍；LC-MS结合离子淌度质谱（IM-MS）可将同分异构体区分效率提升80%[48]；NMR超低温探头（CryoProbe）技术使检测灵敏度达到pmol级别。这些技术进步正在重塑代谢组学研究范式，推动谷物发酵食品研究从单一物质鉴定向系统代谢网络解析的跨越式发展。

4 展望

代谢组学在食品科学中的新兴应用，特别是在食品加工中的应用，仍然需要研究人员结合该领域的其他研究方法做进一步探索。近年来，基于GC-MS的谷物发酵代谢组学研究日趋成熟并得到广泛应用，为揭示发酵过程中物质多样性及其代谢机制提供了新视角。由于不同谷物来源的代谢物含量具有差异性，且低含量的代谢物在谷物发酵中可能发挥关键作用，因此基于MS技术的代谢组学能否检出这些痕量代谢物就显得尤为重要。随着样品前处理方法的不断完善，再加上GC-MS仪器（如GC-MS/MS、GC×GC-TOF-MS和LC×GC）分析能力的发展，这些都将有助于研究者更好地了解谷物发酵食品中代谢物的种类。除此之外，将代谢组学与其他组学技术如基因组学、蛋白质组学相结合，将进一步加深研究者对发酵过程中代谢物含量变化的全面认识。随着代谢组学数据库的不断完善，以及其他组学新技术的有机整合，GC-MS代谢组学技术在谷物发酵食品及其他领域的应用必将迎来突破和飞跃。

参考文献

[1] 刘芬，周仕慧. 全谷物食品的营养与健康研究[J]. 食品安全导刊，2023（2）：121-124.
LIU F，ZHOU S H. Study on nutrition and health of whole grain food[J]. China Food Safety Magazine，2023（2）：121-124.（in Chinese）

[2] ADEBO O A，MEDINA-MEZA I G. Impact of fermentation on the phenolic compounds and antioxidant activity of whole cereal grains：a mini review [J]. Molecules，2020，25（4）：927.

[3] KEWUYEMI Y O，NJOBEH P B，KAYITESI E，et al. Metabolite profile of whole grain Ting（a Southern African fermented product）obtained using two strains of *Lactobacillus fermentum*[J]. Journal of Cereal Science，2020，95：103042.

[4] ADEBO O A. African sorghum-based fermented foods：past，current and future prospects[J]. Nutrients，2020，12（4）：1111.

[5] ADEBIYI J A，NJOBEH P B，KAYITESI E，et al. GC-HRTOF-MS dataset of metabolites extracted from sorghum and Ting（a fermented product）produced using two strains of *Lactobacillus fermentum*（singly and in combination）[J]. Data in Brief，2021，36：107102.

[6] ÇOKLAR H，AKBULUT M，AYGUN A，et al. Valorization of dairy by-products，sweet whey，and acid whey，in the production of fermented black carrot juice：a comparative study of the phytochemical，physicochemical，microbiological，and sensorial aspects[J]. Foods，2025，14（2）：218.

[7] 马兆晴，耿雅雯，王桥，等. 代谢组学在食品品质研究中的应用进展[J]. 食品安全质量检测学报，2023，14(23)：1-8.
MA Z Q，GENG Y W，WANG Q，et al. Progress in application of metabolomics in the study of food quality [J]. Journal of Food Safety & Quality，2023，14(23)：1-8.（in Chinese）

[8] PARK M K，KIM Y S. Distinctive formation of volatile compounds in fermented rice inoculated by different molds，yeasts，and lactic acid bacteria[J]. Molecules，2019，24（11）：2123.

[9] WANG N，CHEN S，ZHOU Z M. Age-dependent characterization of volatile organic compounds and age discrimination in Chinese rice wine using an untargeted GC/MS-based metabolomic approach [J]. Food Chemistry，2020，325：126900.

[10] 迟雪露. 生牛乳风味活性物质解析及影响因素研究[D]. 乌鲁木齐：新疆农业大学，2023.

[11] BAUERMEISTER A，MANNOCHIO-RUSSO H，COSTA-LOTUFO L V，et al. Mass spectrometry-based metabolomics in microbiome investigations[J]. Nature Reviews Microbiology，2022，20(3)：143-160.

[12] DI POTO C，TIAN X，PENG X J，et al. Metabolomic profiling of human urine samples using LC-TIMS-QTOF mass spectrometry[J]. Journal of the American Society for Mass Spectrometry，2021，32(8)：2072-2080.

[13] 谭琰俐，吴泳，刘品，等. 基于HS-SPME-GC-MS的不同醋龄河溪香醋香气成分比较[J]. 食品与机械，2022，38（8）：80-86.
TAN Y L，WU Y，LIU P，et al. HS-SPME-GC-MS analysis of Hexi fragrant vinegar with different vinegar ages comparison of aroma components [J]. Food & Machinery，2022，38(8)：80-86.（in Chinese）

[14] TURUNEN S，PUURUNEN J，AURIOLA S，et al. Metabolome of canine and human saliva：a non-targeted metabolomics study[J]. Metabolomics，2020，16(9)：90.

[15] YABALAK E，AMINZAI M T，GIZIR A M，et al. A review：subcritical water extraction of organic pollutants from environmental matrices[J]. Molecules，2024，29（1）：258.

[16] WANG L J，NASER F J，SPALDING J L，et al. A protocol to compare methods for untargeted metabolomics [J]. Methods in Molecular Biology，2019，1862：1-15.

[17] JO Y J，CHO I H，SONG C K，et al. Comparison of fermented soybean paste （Doenjang） prepared by different methods based on profiling of volatile compounds[J]. Journal of Food Science，2011，76(3)：C368-C379.

[18] MU Y，SU W，YU X T，et al. Untargeted metabolomics based on GC-TOF-MS reveals the optimal pre-fermentation time for black glutinous rice wine[J]. International Journal of Food Properties，2019，22（1）：2033-2046.

[19] ANASTASSIADES M，LEHOTAY S J，STAJNBAHER D，et al. Fast and easy multiresidue method employing acetonitrile extraction/partitioning and “dispersive solid-phase extraction” for the determination of pesticide residues in produce[J]. Journal of AOAC International，2003，86(2)：412-431.

[20] VAZQUEZ-ROIG P，PICO Y. Gas chromatography and mass spectroscopy techniques for the detection of chemical contaminants and residues in foods [M]// SCHRENK D. Chemical contaminants and residues in food. Amsterdam：Elsevier，2012：17-61.

[21] LEE D E，LEE S，JANG E S，et al. Metabolomic profiles of *Aspergillus oryzae* and *Bacillus amyloliquefaciens* during rice koji fermentation[J]. Molecules，2016，21（6）：773.

[22] YIN H，DONG J J，YU J H，et al. Intracellular metabolite profiling of industrial yeast and the synthesis of flavour compounds in beer [J]. Journal of the Institute of Brewing，2017，123(3)：328-336.

[23] COORAY S T，CHEN W N. Valorization of brewer’s spent grain using fungi solid-state fermentation to enhance nutritional value[J]. Journal of Functional Foods，2018，42：85-94.

[24] SAA D L T，NISSEN L，GIANOTTI A. Metabolomic approach to study the impact of flour type and fermentation process on volatile profile of bakery products [J]. Food Research International，2019，119：510-516.

[25] ALFONZO A，SICARD D，DI MICELI G，et al. Ecology of yeasts associated with kernels of several durum wheat genotypes and their role in co-culture with *Saccharomyces cerevisiae* during dough leavening [J] . Food Microbiology，2021，94：103666.

[26] PENG Q T，YANG Y J，OU W H，et al. The characteristics and environmental significance of BVOCs released by aquatic macrophytes [J] . Chemosphere，2024，361：142574.

[27] LEE S M，KIM S B，KIM Y S. Determination of key volatile compounds related to long-term fermentation of soy sauce[J]. Journal of Food Science，2019，84(10)：2758-2776.

[28] BOUHIFD M，BEGER R，FLYNN T，et al. Quality assurance of metabolomics[J]. ALTEX，2015，32(4)：319-326.

[29] BROADHURST D，GOODACRE R，REINKE S N，et al.

Guidelines and considerations for the use of system suitability and quality control samples in mass spectrometry assays applied in untargeted clinical metabolomic studies[J]. Metabolomics,2018,14(6):72.

[30] BARNES S. Overview of experimental methods and study design in metabolomics,and statistical and pathway considerations[J]. Methods in Molecular Biology,2020,2104:1-10.

[31] WANT E J,METZ T O. MS based metabonomics[M]// LINDON J C,TRANTER G E,KOPPENAAL D W. Encyclopedia of spectroscopy and spectrometry. 3rd ed. Amsterdam:Elsevier,2017:926-935.

[32] PUTRI S P,IKRAM M M M,SATO A,et al. Application of gas chromatography-mass spectrometry-based metabolomics in food science and technology[J]. Journal of Bioscience and Bioengineering,2022,133(5):425-435.

[33] TUGIZIMANA F,PIATER L,DUBERY I. Plant metabolomics:a new frontier in phytochemical analysis[J]. South African Journal of Science,2013,109(5/6):11.

[34] ADEBO O A,NJOBEH P B,ADEBIYI J A,et al. Fermented pulse-based food products in developing nations as functional foods and ingredients[M]//HUEDA M C. Functional food:improve health through adequate food. London:InTech,2017.

[35] DE PASQUALE I,PONTONIO E,GOBBETTI M,et al. Nutritional and functional effects of the lactic acid bacteria fermentation on gelatinized legume flours[J]. International Journal of Food Microbiology,2020,316:108426.

[36] SEO S H,PARK S E,YOO S A,et al. Metabolite profiling of Makgeolli for the understanding of yeast fermentation characteristics during fermentation and aging [J]. Process Biochemistry,2016,51(10):1363-1373.

[37] 禹晓婷. 黑糯米酒工艺优化及发酵过程代谢组学研究[D]. 贵州大学,2019.

[38] 郑心,杨番,夏程程,等. 代谢组学在发酵食品研究中的应用[J]. 中国酿造,2019,38(7):10-15.
ZHENG X,YANG F,XIA C C,et al. Application of metabolomics in the study of fermented foods[J]. China Brewing,2019,38(7):10-15.(in Chinese)

[39] FERRI M,SERRAZANETTI D I,TASSONI A,et al. Improving the functional and sensorial profile of cereal-based fermented foods by selecting *Lactobacillus plantarum* strains *via* a metabolomics approach[J]. Food Research International,2016,89:1095-1105.

[40] NISSEN L,ROLLINI M,PICOZZI C,et al. Yeast-free doughs by zymomonas mobilis: evaluation of technological and fermentation performances by using a metabolomic approach [J]. Microorganisms,2020,8(6):792.

[41] ADEBO O A,KAYITESI E,TUGIZIMANA F,et al. Differential metabolic signatures in naturally and lactic acid bacteria (LAB) fermented Ting (a Southern African food) with different tannin content,as revealed by gas chromatography mass spectrometry (GC-MS)-based metabolomics[J]. Food Research International,2019,121:326-335.

[42] SONG X B,JING S,ZHU L,et al. Untargeted and targeted metabolomics strategy for the classification of strong aroma-type Baijiu (liquor) according to geographical origin using comprehensive two-dimensional gas chromatography-time-of-flight mass spectrometry[J]. Food Chemistry,2020,314:126098.

[43] MARQUET P. LC-MS *vs*. GC-MS,online extraction systems,advantages of technology for drug screening assays [J]. Methods in Molecular Biology,2012,902:15-27.

[44] BECKONERT O,KEUN H C,EBBELS T M D,et al. Metabolic profiling,metabolomic and metabonomic procedures for NMR spectroscopy of urine,plasma,serum and tissue extracts[J]. Nature Protocols,2007,2(11):2692-2703.

[45] KORBAN A,ČABALA R,EGOROV V,et al. Evaluation of the variation in relative response factors of GC-MS analysis with the internal standard methods: application for the alcoholic products quality control[J]. Talanta,2022,246:123518.

[46] LU H M,LIANG Y Z,DUNN W B,et al. Comparative evaluation of software for deconvolution of metabolomics data based on GC-TOF-MS [J]. TrAC Trends in Analytical Chemistry,2008,27(3):215-227.

[47] 王超. 基于代谢乳酸菌株的筛选及其合成新化合物的研究[D]. 石河子:石河子大学,2008.

[48] MAY J C,MCLEAN J A. Ion mobility-mass spectrometry: time-dispersive instrumentation[J]. Analytical Chemistry,2015,87(3):1422-1436.