

DOI: 10.12326/j.2096-9694.2021163

# 中草药释香型刨花板特征挥发性有机化合物的 指纹图谱分析

李善明<sup>1</sup>, 樊正强<sup>1</sup>, 黄成福<sup>2</sup>, 何伟<sup>2</sup>, 赵海誉<sup>3</sup>, 文天国<sup>4</sup>, 彭立民<sup>1</sup>

(1. 中国林业科学研究院木材工业研究所, 北京 100091; 2. 广东艾高智能家居有限公司, 广东佛山 528051;  
3. 中国中医科学院中药研究所, 北京 100700; 4. 云南新泽兴人造板有限公司, 云南昆明 650499)



**摘要:** 应用气相色谱-离子迁移谱 (GC-IMS) 采集添加中草药的释香型刨花板 (简称释香板) 的挥发性香气指纹信息, 并进行主成分分析和“最近邻”分析, 评价释香板的香气指纹信息, 确定其与普通刨花板的差异和辨别方法。结果表明: GC-IMS 共鉴定出释香板 37 种挥发性有机化合物 (VOCs), 主要 VOCs 为醛类、烯类、酮类和酯类化合物。释香板的特征 VOCs 为芳樟醇、石竹烯氧化物和樟脑。通过指纹图谱、主成分分析和“最近邻”指纹分析, 可区分释香板和普通板的 VOCs 差异, GC-IMS 可为快速判别释香板提供理论依据和数据支持。

**关键词:** 气相色谱-离子迁移谱; 中草药释香型刨花板; 挥发性有机化合物; 指纹图谱

中图分类号: TS653; S781 文献标识码: A 文章编号: 2096-9694 (2022) 04-0038-07

## Fingerprint Analysis of Characteristic Volatile Organic Compounds in Fragrance-Scented Particleboards with Added Chinese Herbal Medicine

LI Shan-ming<sup>1</sup>, FAN Zheng-qiang<sup>1</sup>, HUANG Cheng-fu<sup>2</sup>, HE Wei<sup>2</sup>,  
ZHAO Hai-yu<sup>3</sup>, WEN Tian-guo<sup>4</sup>, PENG Li-min<sup>1</sup>

(1. Research Institute of Wood Industry, Chinese Academy of Forestry, Beijing 100091, China;

2. Guangdong Aigao Smart Household Products Co., Ltd., Foshan 528051, Guangdong, China;

3. The Institute of Chinese Materia Medica, China Academy of Chinese Medicine Sciences, Beijing 100700, China;

4. Yunnan New Zexing Wood-Based Board Co., Ltd., Kunming 650499, Yunnan, China)

**Abstract:** In this study, the gas chromatography-ion mobility spectrometry (GC-IMS) was employed to collect the fingerprint information of volatile organic compounds (VOCs) of fragrance-scented particleboards added with the Chinese herbal medicine. The detailed information, i. e., the fragrance fingerprint, the difference and degree of differentiation of the fragrance-scented particleboards, and the control group were evaluated by the principal component analysis and the nearest-neighbor analysis. There are 37 kinds of VOCs identified by GC-IMS in fragrance-scented particleboards, among which aldehydes, alkenes, ketones, and esters are the main VOCs. Linalool, caryophyllene oxide, and camphor

收稿日期: 2021-11-26; 修改日期: 2022-03-23

基金项目: 中央级公益性科研院所基本科研业务费专项资金“释香型无醛实木复合地板制造关键技术与产业化应用”(CAFYBB2022ZB003)。

作者简介: 李善明 (1988—), 男, 助理研究员。Email: lishanming@caf.ac.cn

通讯作者: 彭立民, 男, 研究员。Email: penglm@caf.ac.cn

are the characteristic VOCs in the fragrance-scented particleboards. The fingerprint information, the principal component analysis, and the nearest-neighbor analysis diagrams can distinguish the difference of VOCs between the control group and fragrance-scented particleboards. The results show that GC-IMS provides theoretical basis and data supporting the rapid identification of scented particleboards with the Chinese herbal medicine.

**Key words:** gas chromatography-ion mobility spectrometry (GC-IMS); fragrance-scented particleboards with added Chinese herbal medicine; volatile organic compounds (VOCs); fingerprint

木质材料是人们喜爱的家具和装修材料,其构成的室内环境对人类健康和舒适性影响显著,木质家具释放挥发性有机化合物(volatile organic compounds, VOCs)与人类健康的关系,受到国内外研究者关注<sup>[1-3]</sup>。企业也一直在为生产更环保、更健康的人造板而不断研发新技术、改进生产工艺。某家居企业联合科研机构研发一种可释放有益中草药气味的新型功能板材,中草药释香型刨花板(简称“释香板”)应运而生。2021年6月,添加以艾草为主的中草药配方的释香板(商品名“艾香板”)上市,得到部分消费者的认可。

笔者前期对中草药释香板的物理力学性能、甲醛释放量、总挥发性有机化合物(total volatile organic compounds, TVOC)释放质量浓度、气味分级、VOCs和抗菌性能进行了研究。释香板相对普通刨花板,其物理力学性能变化不显著,均满足国家标准GB/T 4897—2015《刨花板》中干燥状态下使用的家具型刨花板(P2型)的要求,甲醛释放量满足GB/T 39600—2021《人造板及其制品甲醛释放量分级》E<sub>0</sub>级,TVOC释放质量浓度为90 μg/m<sup>3</sup>,气味分级为2级,对大肠杆菌和金黄色葡萄球菌的抑菌率>99%。同时固相微萃取-顶空-气相色谱-质谱(gas chromatography-mass spectrometer, GC-MS)分析出较多的中草药本征有益VOCs,但GC-MS谱图中色谱峰重叠现象较多,且普通板本身也有较多的VOCs,很难区分中草药释香板和普通板<sup>[4]</sup>。前期试验发现,中草药释香板的VOCs是复杂的,且VOCs种类受刨花来源、中草药来源、加工工艺等多种因素的影响,因此本研究的目的不仅仅是分析具体的VOCs成分,而且为区分中草药释香板和普通板VOCs的差异提供科学依据。

气相色谱-离子迁移谱(gas chromatography-ion mobility spectrometry, GC-IMS)技术是近年兴起的一种简单有效的气味成分分析技术,结合GC的分离能力和IMS检测能力,具有分辨率高、灵敏性强、分析高效和操作简便的优点<sup>[5]</sup>,已经被广泛应用于各类食品中风味物质研究、品质检测分析等<sup>[6-7]</sup>,但应用于人造板气味成分的研究还很少。GC-IMS和GC-MS均有其优缺点,可实现VOCs互补分析。GC-MS的优势在于检测范围广,对挥发性、半挥发性和难挥发性有机化合物均能同时检测,一般检测前样品需要进行富集浓缩,例如固相微萃取<sup>[8]</sup>。而GC-IMS优势在于痕量VOCs的检测,检测分子量300以内的VOCs,样品无需富集浓缩,能最大程度地保持真实VOCs,且其可视化指纹图谱,可使数据处理简单。

本研究通过GC-IMS技术,对中草药释香板的挥发性香气成分进行分析鉴定,并对刨花板本身和添加的中草药的特征香气成分及其对刨花板香气的贡献大小进行分析。旨在通过中草药释香板的VOCs指纹图谱研究,判定中草药释香板与普通板VOCs的差异性,建立一种快速、准确的中草药释香板辨别方法,为中草药释香板的品质控制提供理论依据和数据支持。

## 1 材料与方法

### 1.1 试验材料

中草药由多种芳香类中草药(艾叶、藿香、苍术、白芷、川芎、菖蒲组成)混合后打粉制备。普通板和释香板均制备于云南新泽兴人造板有限公司<sup>[4]</sup>,采用改性脲醛树脂胶,密度分别为0.717和0.705 g/cm<sup>3</sup>。板材放置约60天后,截取包含表层和芯层的小片试样加工成粉末10 g。

## 1.2 主要设备和仪器

GC-IMS FlavourSpec 风味分析仪 (德国 G.A.S. 公司), 多功能粉碎机。

## 1.3 试验方法

顶空-GC 条件: 1 g 样品于 20 mL 顶空进样瓶中, 60 °C 孵化 15 min, 转速 500 r/min。经顶空进样 500  $\mu$ L, 进样针温度 85 °C, 用 GC-IMS FlavourSpec 风味分析仪进行测试。FS-SE-54-CB-1 色谱柱 (15 m, 直径 0.53 mm), 载气流量: 0~2 min, 2 mL/min; 2~10 min, 2~10 mL/min; 10~20 min, 10~100 mL/min; 20~30 min, 100~150 mL/min。

IMS 条件: 漂移管温度 45 °C; 漂移气  $N_2$ ; 漂移气流速 150 mL/min; 放射源  $\beta$  射线 (氚,  $^3H$ ); 离子化模式: 正离子。

普通板、中草药和释香板分别平行测试 3 个试样。

## 1.4 数据处理

利用仪器配套的软件 VOCal 和三款插件进行分析, 其中 VOCal 用于查看分析谱图和数据的定性定量, 用软件内置的 NIST 数据库和 IMS 数据库进行定性分析, 建立标准曲线后进行定量分析。

插件 Reporter: 对比样品之间的谱图差异 (三维谱图、二维俯视图和差异谱图);

插件 Gallery Plot: 对比指纹图谱;

插件 Dynamic: 动态主成分分析, 将样品聚类分析, 并快速确定未知样品的种类。

## 2 结果与分析

### 2.1 挥发性有机化合物定性分析

中草药、普通刨花板和中草药释香板的 GC-IMS 差异三维图和二维图如图 1 所示, 图谱中左侧 1.0 处红色竖线为反应离子峰, 离子峰两侧的每个点代表一种挥发性有机化合物, 颜色代表有机化合物的浓度, 白色表示浓度较低, 红色表示浓度较高, 且颜色越红表示浓度越大, 整个谱图代表了样品的顶空 VOCs。从图 1 中可以看出, 中草药呈现最复杂的 VOCs, 在保留时间 1 000~2 500 s 的范围内依然存在较多的 VOCs, 而板材中此范围内无 VOCs。对比普通板, 释香板呈现相对复杂的 VOCs, 其差异来源于中草药。

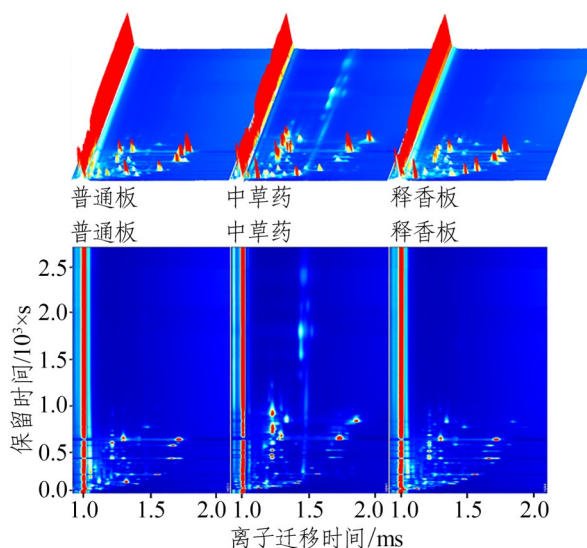


图1 普通板、中草药和释香板 GC-IMS 的 3D 图和 2D 图  
Fig.1 Gas chromatography-ion mobility spectrometry (GC-IMS) diagrams of the control group, the Chinese herbal medicine, and the fragrance-scented particleboard in three-dimension and two-dimension

从中草药和刨花板中检测出已定性的 VOCs 共 49 种。其中通过 GC-IMS 分析软件自带 VOCs 数据库, 普通板定性 33 种, 中草药定性 48 种, 释香板定性 37 种, 列于表 1, 未定性的 19 个峰有待进一步研究。

从表 1 可知, 普通板的 33 种 VOCs 中包含 9 种醛类 (5 个二聚体)、2 种醇类 (2 个二聚体)、5 种酮类 (1 个二聚体)、7 种烯类 (5 个二聚体, 1 个三聚体, 1 个四聚体)、5 种酯类 (1 个二聚体) 和 5 种其他类 (1 个二聚体)。中草药的 48 种 VOCs 中包含 11 种醛类 (7 个二聚体)、6 种醇类 (3 个二聚体)、6 种酮类 (1 个二聚体)、7 种烯类 (6 个二聚体, 2 个三聚体, 2 个四聚体)、6 种酯类 (1 个二聚体) 和 12 种其他类 (1 个二聚体)。释香板的 37 种 VOCs 中包含 9 种醛类 (6 个二聚体)、4 种醇类 (2 个二聚体)、5 种酮类 (1 个二聚体)、7 种烯类 (5 个二聚体, 2 个三聚体, 2 个四聚体)、5 种酯类 (1 个二聚体) 和 7 种其他类 (3 个二聚体)。其中二聚体、三聚体、四聚体是同一种化合物, 主要是由 VOCs 通过漂移区时被分析的离子和中性分子之间形成加合物<sup>[9]</sup>。释香板与普通板的主要差异在醇类和酮类两类 VOCs 中, 释香板 VOCs 峰强度是普通板的 1.4~3 倍, 而其他类型 VOCs 的变化不大。

产生这种现象的原因可能是在刨花板加工过程中, 尤其是热压过程中, 中草药的醇类和酮类 VOCs 挥发损失相对少些。从特征 VOCs 分析, 释香板中增

加了 1-丁醇、芳樟醇、石竹烯氧化物和 *d*-樟脑, 但 1-丁醇未在中草药中出现, 因此不将其作为释香板特征 VOCs。

表1 普通板、中草药和释香板的挥发性有机化合物鉴定结果

Tab.1 Volatile organic compounds in the control group, the Chinese herbal medicine and fragrance-scented particleboard

序号	分类	名称	CAS 登录号 <sup>①</sup>	分子式	保留指数	保留时间/s	迁移时间/ms	化合物峰强度(峰体积)/(a.u.)		
								普通板	中草药	释香板
1		2-甲基丁醛	96-17-3	C <sub>5</sub> H <sub>10</sub> O	647.1	155.473	1.398	1 031.19	2 813.61	1 159.96
2		戊醛 M	110-62-3	C <sub>5</sub> H <sub>10</sub> O	693.8	177.535	1.190	728.29	1 586.35	1 383.66
3		戊醛 D	110-62-3	C <sub>5</sub> H <sub>10</sub> O	694.2	177.817	1.243	207.83	1 128.84	1 272.49
4		己醛 M	66-25-1	C <sub>6</sub> H <sub>12</sub> O	794.7	259.896	1.257	1 466.12	1 618.51	1 322.13
5		己醛 D	66-25-1	C <sub>6</sub> H <sub>12</sub> O	792.4	257.439	1.561	4 493.77	1 986.64	6 198.19
6		2-己烯醛	505-57-7	C <sub>6</sub> H <sub>10</sub> O	848.2	318.045	1.180	73.31	134.06	122.73
7		2-糠醛 M	98-01-1	C <sub>5</sub> H <sub>4</sub> O <sub>2</sub>	859.5	330.330	1.083	1 602.45	388.10	1 626.71
8		2-糠醛 D	98-01-1	C <sub>5</sub> H <sub>4</sub> O <sub>2</sub>	857.3	327.873	1.330	315.13	153.98	250.33
9		庚醛 M	111-71-7	C <sub>7</sub> H <sub>14</sub> O	901.9	382.746	1.340	838.97	633.97	1 272.91
10	醛类	庚醛 D	111-71-7	C <sub>7</sub> H <sub>14</sub> O	900.7	380.699	1.690	223.35	159.87	682.16
11		反式-2-庚烯醛 M	18829-55-5	C <sub>7</sub> H <sub>12</sub> O	957.9	480.891	1.255	238.44	110.85	453.37
12		反式-2-庚烯醛 D	18829-55-5	C <sub>7</sub> H <sub>12</sub> O	957.3	479.856	1.664	-	-	68.03
13		反式-2-辛烯醛	2548-87-0	C <sub>8</sub> H <sub>14</sub> O	1 067.9	691.353	1.331	177.03	113.19	239.52
14		反式-2-戊烯醛 M	1576-87-0	C <sub>5</sub> H <sub>8</sub> O	758.1	228.029	1.109	-	291.48	-
15		反式-2-戊烯醛 D	1576-87-0	C <sub>5</sub> H <sub>8</sub> O	757.1	227.256	1.366	-	197.74	-
16		正壬醛 M	124-19-6	C <sub>9</sub> H <sub>18</sub> O	1 105.4	766.352	1.477	1 783.38	656.88	2 044.57
17		正壬醛 D	124-19-6	C <sub>9</sub> H <sub>18</sub> O	1 104.9	765.360	1.940	249.03	923.43	303.13
18		丁醛 M	123-72-8	C <sub>4</sub> H <sub>8</sub> O	574.1	123.886	1.114	-	474.48	-
19		丁醛 D	123-72-8	C <sub>4</sub> H <sub>8</sub> O	575.7	124.559	1.286	-	267.05	-
20		1-丁醇	71-36-3	C <sub>4</sub> H <sub>10</sub> O	650.0	156.716	1.380	-	-	924.40
21		1-戊醇 M	71-41-0	C <sub>5</sub> H <sub>12</sub> O	772.6	239.421	1.256	429.52	297.13	543.86
22		1-戊醇 D	71-41-0	C <sub>5</sub> H <sub>12</sub> O	770.5	237.783	1.509	78.22	3 050.00	153.93
23		2-乙基-1-己醇 M	104-76-7	C <sub>8</sub> H <sub>18</sub> O	1 013.0	581.481	1.410	831.60	614.34	1 467.42
24		2-乙基-1-己醇 D	104-76-7	C <sub>8</sub> H <sub>18</sub> O	1 011.3	578.198	1.816	146.54	85.70	380.94
25	醇类	2-甲基丁醇	137-32-6	C <sub>5</sub> H <sub>12</sub> O	745.9	218.445	1.231	-	213.55	-
26		芳樟醇	78-70-6	C <sub>10</sub> H <sub>18</sub> O	1 106.5	768.578	1.218	-	10 746.21	453.31
27		1-戊烯-3-醇	616-25-1	C <sub>5</sub> H <sub>10</sub> O	697.5	180.403	0.948	-	681.26	-
28		2-己烯-1-醇 M	2305-21-7	C <sub>6</sub> H <sub>12</sub> O	855.5	325.925	1.184	-	890.06	-
29		2-己烯-1-醇 D	2305-21-7	C <sub>6</sub> H <sub>12</sub> O	854.8	325.254	1.525	-	415.94	-
30		2-丙酮	67-64-1	C <sub>3</sub> H <sub>6</sub> O	527.9	103.877	1.122	2 229.20	4 853.97	5 161.60
31		4-甲基-2-戊酮 M	108-10-1	C <sub>6</sub> H <sub>12</sub> O	730.9	206.668	1.176	433.80	312.03	1 175.01
32		4-甲基-2-戊酮 D	108-10-1	C <sub>6</sub> H <sub>12</sub> O	730.3	206.183	1.477	274.84	196.08	1 733.84
33	酮类	2-庚酮	110-43-0	C <sub>7</sub> H <sub>14</sub> O	894.5	369.808	1.263	371.89	82.92	510.47
34		异佛尔酮	78-59-1	C <sub>9</sub> H <sub>14</sub> O	1 121.4	798.397	1.258	152.00	1 777.66	333.53
35		对甲基苯乙酮	122-00-9	C <sub>9</sub> H <sub>10</sub> O	1 172.9	901.336	1.219	1 107.60	22 015.60	1 927.77
36		1-戊烯-3-酮	1629-58-9	C <sub>5</sub> H <sub>8</sub> O	687.0	172.712	1.082	-	73.91	-
37		$\alpha$ -蒎烯 M	80-56-8	C <sub>10</sub> H <sub>16</sub>	931.2	434.154	1.217	4 441.15	5 547.97	4 618.15
38		$\alpha$ -蒎烯 D	80-56-8	C <sub>10</sub> H <sub>16</sub>	929.4	430.949	1.299	2 320.48	1 166.56	2 136.72
39		$\alpha$ -蒎烯 Tri	80-56-8	C <sub>10</sub> H <sub>16</sub>	929.8	431.750	1.666	5 567.12	2 094.25	5 341.21
40	烯类	$\alpha$ -蒎烯 Tet	80-56-8	C <sub>10</sub> H <sub>16</sub>	929.9	430.148	1.722	1 706.22	829.62	1 757.90
41		$\beta$ -蒎烯 M	127-91-3	C <sub>10</sub> H <sub>16</sub>	973.4	508.047	1.216	1 303.19	5 379.95	3 474.65
42		$\beta$ -蒎烯 D	127-91-3	C <sub>10</sub> H <sub>16</sub>	975.0	510.956	1.297	461.17	905.06	1 028.33
43		$\beta$ -蒎烯 Tri	127-91-3	C <sub>10</sub> H <sub>16</sub>	973.4	508.047	1.636	-	1 457.24	923.29

续表

序号	分类	名称	CAS 登录号 <sup>①</sup>	分子式	保留指数	保留时间/s	迁移时间/ms	化合物峰强度(峰体积)/(a.u.)		
								普通板	中草药	释香板
44		$\beta$ -蒎烯 Tet	127-91-3	C <sub>10</sub> H <sub>16</sub>	973.8	508.774	1.724	-	917.27	423.61
45		$\beta$ -月桂烯 M	123-35-3	C <sub>10</sub> H <sub>16</sub>	994.1	544.414	1.214	597.81	262.14	515.93
46		$\beta$ -月桂烯 D	123-35-3	C <sub>10</sub> H <sub>16</sub>	993.7	543.687	1.289	123.95	29.50	116.63
47		$\alpha$ -水芹烯 M	99-83-2	C <sub>10</sub> H <sub>16</sub>	1 007.7	570.867	1.214	2 169.51	375.54	2 227.24
48		$\alpha$ -水芹烯 D	99-83-2	C <sub>10</sub> H <sub>16</sub>	1 006.9	569.316	1.677	5 648.92	426.36	4 859.89
49		莜烯 M	79-92-5	C <sub>10</sub> H <sub>16</sub>	950.9	468.610	1.219	1 332.22	7 845.70	2 147.54
50		莜烯 D	79-92-5	C <sub>10</sub> H <sub>16</sub>	950.1	467.197	1.728	-	114.29	-
51		$\alpha$ -松油烯 M	99-86-5	C <sub>10</sub> H <sub>16</sub>	1 021.4	598.363	1.213	4 421.91	5 487.69	5 544.81
52		$\alpha$ -松油烯 D	99-86-5	C <sub>10</sub> H <sub>16</sub>	1 021.6	598.832	1.715	126.74	36.58	171.96
53		异松油烯	596-62-9	C <sub>10</sub> H <sub>16</sub>	1 086.5	728.584	1.217	493.00	9 826.10	754.65
54		乙酸乙酯	141-78-6	C <sub>4</sub> H <sub>8</sub> O <sub>2</sub>	603.8	136.710	1.097	205.86	108.72	165.96
55		乙酸丁酯 M	123-86-4	C <sub>6</sub> H <sub>12</sub> O <sub>2</sub>	804.9	270.953	1.239	210.51	243.27	230.11
56		乙酸丁酯 D	123-86-4	C <sub>6</sub> H <sub>12</sub> O <sub>2</sub>	803.3	269.315	1.618	115.73	22.83	106.32
57	酯类	己酸甲酯	106-70-7	C <sub>7</sub> H <sub>14</sub> O <sub>2</sub>	907.3	392.357	1.288	83.69	28.63	79.13
58		$\delta$ -己醇内酯	823-22-3	C <sub>6</sub> H <sub>10</sub> O <sub>2</sub>	1 089.2	733.889	1.163	88.25	107.16	127.01
59		丁二酸二乙酯	123-25-1	C <sub>8</sub> H <sub>14</sub> O <sub>4</sub>	1 206.6	968.694	1.296	317.36	1 048.87	536.31
60		甲酸香叶酯	105-86-2	C <sub>11</sub> H <sub>14</sub> O <sub>2</sub>	1 331.6	1218.730	1.222	-	1 697.94	-
61		石竹烯氧化物	1139-30-6	C <sub>15</sub> H <sub>24</sub> O	1 548.5	1652.408	1.440	-	14 729.78	1 521.09
62		1,4-二氧六环 M	123-91-1	C <sub>4</sub> H <sub>8</sub> O <sub>2</sub>	689.5	174.109	1.116	4 343.98	905.63	1 360.73
63		1,4-二氧六环 D	123-91-1	C <sub>4</sub> H <sub>8</sub> O <sub>2</sub>	687.4	172.889	1.321	8 351.29	1 229.57	2 068.94
64		2,5-二甲基呋喃	625-86-5	C <sub>6</sub> H <sub>8</sub> O	712.7	192.345	1.033	310.06	347.97	392.59
65		2-戊基呋喃	3777-69-3	C <sub>9</sub> H <sub>14</sub> O	995.3	546.533	1.252	152.04	62.82	324.58
66		2-乙酰呋喃	1192-62-7	C <sub>6</sub> H <sub>6</sub> O <sub>2</sub>	900.2	379.892	1.118	-	111.15	-
67		4-异丙基甲苯 M	99-87-6	C <sub>10</sub> H <sub>14</sub>	1 039.8	635.130	1.297	13 502.56	9 322.08	11 358.10
68	其他	4-异丙基甲苯 D	99-87-6	C <sub>10</sub> H <sub>14</sub>	1 038.7	632.920	1.724	18 633.65	26 691.44	11 638.22
69		乙酸	64-19-7	C <sub>2</sub> H <sub>4</sub> O <sub>2</sub>	584.3	128.290	1.053	480.46	624.89	589.22
70		正戊酸	109-52-4	C <sub>5</sub> H <sub>10</sub> O <sub>2</sub>	909.8	396.641	1.228	-	324.87	-
71		<i>d</i> -樟脑 M	464-49-3	C <sub>10</sub> H <sub>16</sub> O	1 135.6	826.825	1.344	-	9 778.52	4 339.89
72		<i>d</i> -樟脑 D	464-49-3	C <sub>10</sub> H <sub>16</sub> O	1 134.6	824.843	1.849	-	13 039.78	883.44
73		柏木脑	77-53-2	C <sub>15</sub> H <sub>26</sub> O	1 625.0	1805.540	1.440	-	16 999.67	-
74		甲基丁香酚	93-15-2	C <sub>11</sub> H <sub>14</sub> O <sub>2</sub>	1 389.2	1333.919	1.440	-	2 238.62	-
75		二甲基硫醚	75-18-3	C <sub>2</sub> H <sub>6</sub> S	562.7	118.933	0.968	-	498.99	-

注: M表示单体;D表示二聚体;Tri表示三聚体;Tet表示四聚体。

① CAS 登录号,即化学物质登录号(Chemical Abstracts Service Registry Number)。

## 2.2 挥发性有机化合物指纹图谱对比

为进一步比较普通板和释香板 VOCs 的差异,利用 GC-IMS 仪器自带分析软件插件 Gallery Plot 生成离子迁移指纹图谱,如图 2 所示。软件是以每种 VOC 的横向比较,以一张谱图为参照,被参比样品中的蓝色区域表示该 VOC 浓度低于参比样品,蓝色越深,表示浓度越低;被参比样品中的红色区域表示该 VOC 浓度高于参比样品,红色越深,表示浓度越高。因此当显示为蓝色,并不表示没有该类 VOC,只是相对浓度低。从图 2 中可以看出三组样品的完整 VOCs 信息,每组样品的三个平

行差异较小,含有共有的 VOCs,仅有浓度区别,可知样品组重复性较好。结合表 1 可知,指纹图谱可划为三区域: A 区域,普通板 VOCs 浓度高于或接近于释香板,1,4-二氧六烷、4-异丙基甲苯两种有机化合物浓度高于释香板,其他接近,这部分 VOCs 主要来源于木材; B 区域,释香板的 VOCs 浓度高于普通板,主要包括  $\beta$ -蒎烯、2,5-二甲基呋喃、2-戊基呋喃、*d*-樟脑、石竹烯氧化物、芳樟醇等,且浓度差别大,可作为释香板的特征峰区域; C 区域,只存在于中草药中,释香板中不存在,主要原因可能是这些 VOCs 是中草药易挥发物质,在



表2 对应于“最邻近”分析的样本间欧氏距离

Tab.2 Euclidean distance between samples corresponding to the nearest-neighbor analysis

全距离矩阵	普通板1	普通板2	普通板3	中草药1	中草药2	中草药3	释香板1	释香板2	释香板3
普通板1	0	57 555	896 910	33 360 218	32 930 621	34 156 273	12 577 221	9 602 660	11 535 084
普通板2	57 555	0	770 130	33 469 465	33 022 491	34 207 101	12 205 962	9 276 943	11 272 584
普通板3	896 910	770 130	0	35 480 426	34 945 921	36 104 471	13 257 093	9 853 731	12 371 473
中草药1	33 360 218	33 469 465	35 480 426	0	292 561	549 620	29 052 483	29 896 870	28 430 710
中草药2	32 930 621	33 022 491	34 945 921	292 561	0	192 611	28 458 697	29 228 249	27 854 465
中草药3	34 156 273	34 207 101	36 104 471	549 620	192 611	0	28 818 468	29 624 776	28 270 665
释香板1	12 577 221	12 205 962	13 257 093	29 052 483	28 458 697	28 818 468	0	909 524	69 191
释香板2	9 602 660	9 276 943	9 853 731	29 896 870	29 228 249	29 624 776	909 524	0	868 108
释香板3	11 535 084	11 272 584	12 371 473	28 430 710	27 854 465	28 270 665	69 191	868 108	0

### 3 结论与建议

1) 应用GC-IMS技术对中草药释香板进行VOCs指纹图谱分析。相对于GC-MS技术, GC-IMS技术操作简单, 无需样品前富集浓缩处理, 且样品分析的温度较低, 可实现更真实的VOCs被检出。

2) 从普通板、中草药和释香板中共检测出定性VOCs 49种, 其中普通板33种, 中草药48种, 释香板37种。释香板与普通板的主要差异在于醇类和酮类这两类VOCs中, 释香板的VOCs峰强度明显高于普通板。从特征VOCs分析, 芳樟醇、石竹烯氧化物和樟脑可作为释香板特征VOCs。

3) 通过绘制指纹图谱, 可确定释香板的特征峰区域。结合指纹图谱和主成分分析, 可直观快速地区分释香板和普通板的VOCs差异。相应结果可作为产品认证或产品检验检测的一种依据。

4) 释香板的特征有益VOCs可以通过GC-MS测试方法进行检测, 而快速判别释香板和普通板VOCs的差异, 可利用GC-IMS指纹图谱的方法。由于中草药释香板研发不久, 依然有较多内容值得深入研究, 如释香板的VOCs随时间的变化规律(气味释放动力学)、释香板GC-IMS指纹图谱数据库建立、释香特性以及释香板康养效果的试验验证等。

#### 参考文献:

[1] 沈嗣卿. 新装修民用建筑室内总挥发性有机物浓度变化规律研究[J]. 绿色建筑, 2017, 9(4): 14-16.

SHEN S Q. Study on change of volatile organic compounds concentration in new civil building[J]. Green Building, 2017, 9(4): 14-16.

[2] 李锐, 岳茂增, 宋玉峰, 等. 浅析人造板与木质家具中甲醛、TVOC释放量以及污染的降低、防范对策[J]. 绿色环保建材, 2019(2): 14-15.

[3] 沈隽, 蒋利群. 人造板VOCs释放研究进展[J]. 林业工程学报, 2018, 3(6): 1-10.

SHEN J, JIANG L Q. A review of research on VOCs release from wood-based panels[J]. Journal of Forestry Engineering, 2018, 3(6): 1-10.

[4] 李善明, 樊正强, 黄成福, 等. 中草药释香型刨花板的制备及其性能[J]. 林业工程学报, 2022, 7(3): 73-79.

LI S M, FAN Z Q, HUANG C F, et al. Preparation and properties of fragrant particleboards with added Chinese herbal medicine[J]. Journal of Forestry Engineering, 2022, 7(3): 73-79.

[5] YIN J X, WU M F, LIN R M, et al. Application and development trends of gas chromatography-ion mobility spectrometry for traditional Chinese medicine, clinical, food and environmental analysis[J]. Microchemical Journal, 2021, 168: 106527.

[6] WANG S Q, CHEN H T, SUN B G. Recent progress in food flavor analysis using gas chromatography-ion mobility spectrometry (GC-IMS)[J]. Food Chemistry, 2020, 315: 126158.

[7] 陈彦憬, 于建娜, 敬国兴, 等. 气相色谱-离子迁移谱技术在农业领域的应用[J]. 分析实验室, 2020, 39(12): 1480-1488.

CHEN Y J, YU J N, JING G X, et al. Application of gas chromatography-ion mobility spectrometry in agriculture[J]. Chinese Journal of Analysis Laboratory, 2020, 39(12): 1480-1488.

[8] 张茜, 刘炜伦, 路亚楠, 等. 顶空气相色谱-质谱联用技术的应用进展[J]. 色谱, 2018, 36(10): 962-971.

ZHANG X, LIU W L, LU Y N, et al. Recent advances in the application of headspace gas chromatography-mass spectrometry[J]. Chinese Journal of Chromatography, 2018, 36(10): 962-971.

[9] Rodríguez-Maecker R, Vyhmeister E, Meisen S, et al. Identification of terpenes and essential oils by means of static headspace gas chromatography-ion mobility spectrometry[J]. Analytical and Bioanalytical Chemistry, 2017, 409(28): 6595-6603.

[10] 赵蕾. 主成分分析方法综述[J]. 软件工程, 2016, 19(6): 1-3.

ZHAO Q. A review of principal component analysis[J]. Software Engineering, 2016, 19(6): 1-3.

(本文编校 向琴)