

赤霞珠葡萄酒的原产地区分

使用 UHPLC-Q-TOF/MS 的非靶向代谢组学研究

作者

Nana Liang、Ying Liu、Linli Wang、Peiyue Wang、Jinhua Wang 以及 Shen Han
北京出入境检验检疫局，中国北京

Meiling Lu 和 Shan Zhou
安捷伦科技（中国）有限公司

应用简报

食品检测

摘要

食品掺假和标签虚假行为可能会给消费者带来潜在健康风险并造成信任危机，对于高档葡萄酒产品而言尤其如此。目前的分析方法和防伪标签技术不足以确定这类产品的身份信息和原产地。本应用简报介绍了一种基于 Liang 等人的研究 [1] 开发的追踪葡萄酒产品原产地的代谢组学分析方法。参比赤霞珠葡萄酒来自五家酒庄（两家为美国酒庄，三家为中国酒庄），并使用安捷伦 UHPLC-Q-TOF/MS 平台在准确的 TOF/MS 扫描模式下进行了初步分析。所得原始数据通过分子特征查找提取方法进行了数据挖掘。将结果导入 Agilent Mass Profiler Professional (MPP) 化学计量学软件，以在各组之间查找特征化合物。所得差异化合物的主成分分析和聚类分析显示了该系统区分两组美国葡萄酒与中国产葡萄酒的能力。基于这些数据的偏最小二乘差异分析 (PLSDA) 模型能够高度准确地预测葡萄酒组别。通过使用针对葡萄酒的自定义多酚类化合物数据库和谱库以及其他可用的安捷伦 PCDL，我们对 23 种化合物进行了初步鉴定，其中大多数为葡萄中的内源性代谢物，表明在不同原产地的葡萄酒中，葡萄代谢物是区别葡萄酒主要特征的决定因素。本研究证明采用 UHPLC-Q-TOF/MS 结合化学计量学分析的代谢物组学分析方法是追踪葡萄酒原产地的有用方法。



Agilent Technologies

前言

葡萄酒在中国有广泛的受众。然而，市场上经常发现葡萄酒掺假和标签虚假问题，这些行为可对消费者带来潜在健康风险并降低消费者信任度 [1]。为改善并确保葡萄酒的质量和安全性，开发葡萄酒质量和真伪监测方法以及保护特殊原产地的产品非常重要。

葡萄酒的风味主要由葡萄中的特定次级代谢产物通过酿造工艺转移到成品酒中来获得。因此，来自某个特定酒庄的葡萄酒可具有一些由葡萄带来的特殊特性，这些特性归因于土壤、气候条件等环境变异性和不同的酿造工艺。即使同一基因型的葡萄，在不同地理区域之间的一些特定次级代谢产物水平也可能存在巨大差异，由此赋予了葡萄酒产品独特的风味。因此，可以通过特征代谢物分布来区分不同原产地的葡萄酒。传统分析方法不足以寻找这类特征分布并确定原产地。基于小分子特征分布的代谢组学分析方法是研究葡萄酒真伪和追踪来源的首选方法 [2-6]。UHPLC 与高分辨率 Q-TOF/MS 的联用是主要的代谢组学分析平台之一，可对样品中挥发性较弱的热不稳定小分子进行全面分析。此外，化学计量学分析通过数据挖掘来查找可作为潜在分类标准的具体特征分布。本文中，我们旨在联用 UHPLC-Q-TOF/MS 技术和化学计量学分析，通过发现特征性分布来测定美国产和中国产赤霞珠葡萄酒的原产地。

实验部分

材料和试剂

甲醇、甲酸和乙酸铵均为 LC/MS 级，分别购自 Merck、Tedia 与 Thermo Fisher 公司。实验用水来自 Milli-Q 水纯化系统新鲜制备的去离子水。

参比样品收集与前处理

参比赤霞珠 (CS) 葡萄酒样品 (共 113 个) 直接从酒庄收集，酒庄包括美国纳帕谷的 V Sattui (VS) 和 Robert Mondavi (RM) 酒庄，以及分别位于中国张家口 (ZJK)、秦皇岛 (QHD) 和山东省 (SD) 的三个酒庄。每个葡萄酒样品取 2 mL 并置于 2 mL 玻璃样品瓶中，通过离心去除所有颗粒物，然后用 UHPLC-Q-TOF/MS 进行分析。

葡萄酒代谢组学分析工作流程

利用 UHPLC-Q-TOF/MS 在 TOF 扫描模式下根据表 1 列出的条件采集原始数据。首先在 Agilent MassHunter 定性软件 (6.0 版) 中使用分子特征查找算法 (MFE) 对采集到的数据进行提取，然后将结果导出为 cef 文件。或者，将整个数据集加载到 Agilent MassHunter Profinder (7.0 版) 软件中进行递归 MFE 提取，并导出为 cef 文件。然后将 cef 文件和提取到的化合物信息导入 Agilent Mass Profiler Professional (13.1.1 版) 中进行保留时间/质量数校准、峰对齐、数据过滤、多变量和单变量统计分析、主成分分析 (PCA) 以及聚类分析，以查找 5 个样品组中具有显著变化的化合物。应用模型分析，尤其是偏最小二乘差异分析 (PLSDA) 创建模型以预测葡萄酒样品的原产地。应用实验室自定义的葡萄酒中多酚类化合物数据库和谱库 (葡萄酒 PCDL) 以及 METLIN PCDL 鉴定差异化合物。

详细 LC/MS 测定条件

表 1. 仪器条件

液相色谱条件

| | |
|--------|---|
| 仪器 | 内置脱气机的 Agilent 1290 Infinity 液相色谱系统 |
| 自动进样器 | 带温控功能的 Agilent 1290 Infinity 自动进样器 |
| 柱温箱 | Agilent 1290 Infinity 柱温箱 |
| 色谱柱 | Agilent ZORBAX Eclipse Plus C18, 2.1 × 100 mm, 1.8 μm |
| 柱温 | 40 °C |
| 流动相 | A) 含 5 mmol/L 乙酸铵和 0.1% 甲酸的水溶液 B) 含 5 mmol/L 乙酸铵和 0.1% 甲酸的甲醇/水 (95:5) |
| 流速 | 0.4 mL/min |
| 进样量 | 2.0 μL |
| 后运行时间 | 3 min |
| 梯度洗脱曲线 | 0-1 min: 1% B, 1-8 min: 1%-15% B, 8-15 min: 15%-45% B, 15-17 min: 45%-90% B, 17-20 min: 90% B |

ESI-MS/MS 条件

| | |
|-------|--|
| 仪器 | 配备安捷伦双喷射流电喷雾离子源的 Agilent 6530 Q-TOF LC/MS 系统 |
| 电离模式 | 正 |
| 干燥气温度 | 325 °C |
| 干燥气流速 | 11 L/min |
| 雾化气压力 | 35 psi |
| 鞘气温度 | 350 °C |
| 鞘气流速 | 12 L/min |
| 毛细管电压 | 3500 V |
| 喷嘴电压 | 500 V |
| 扫描模式 | TOF 扫描和目标 MS/MS 扫描 |
| 扫描速率 | 2 谱图/秒 (TOF 扫描) 3 谱图/秒 (目标 MS/MS) |
| 扫描范围 | 100-1100 (MS)/50-1100 (MS/MS) |
| 参比离子 | 121.0509/922.0098 |

结果与讨论

优化的 UHPLC 分离和准确的 Q-TOF/MS 检测

葡萄酒具有非常复杂的基质，其中含有数千种化合物。因此，需要适当的分离技术以足够高的灵敏度和在可接受的分析时间内洗脱尽可能多的化合物。图 1A 中的

总离子流色谱图显示了通过使用选定 C18 色谱柱和流动相，并仔细调节梯度洗脱程序，20 分钟的梯度洗脱方法可对葡萄酒样品中的大多数组分实现分离。通过 MFE 算法可从一个葡萄酒样品中提取出 3000 多个化合物（图 1B），表明该方法具有出色的分离效率。因此，这一梯度洗脱方法可用于进一步的葡萄酒样品分析。

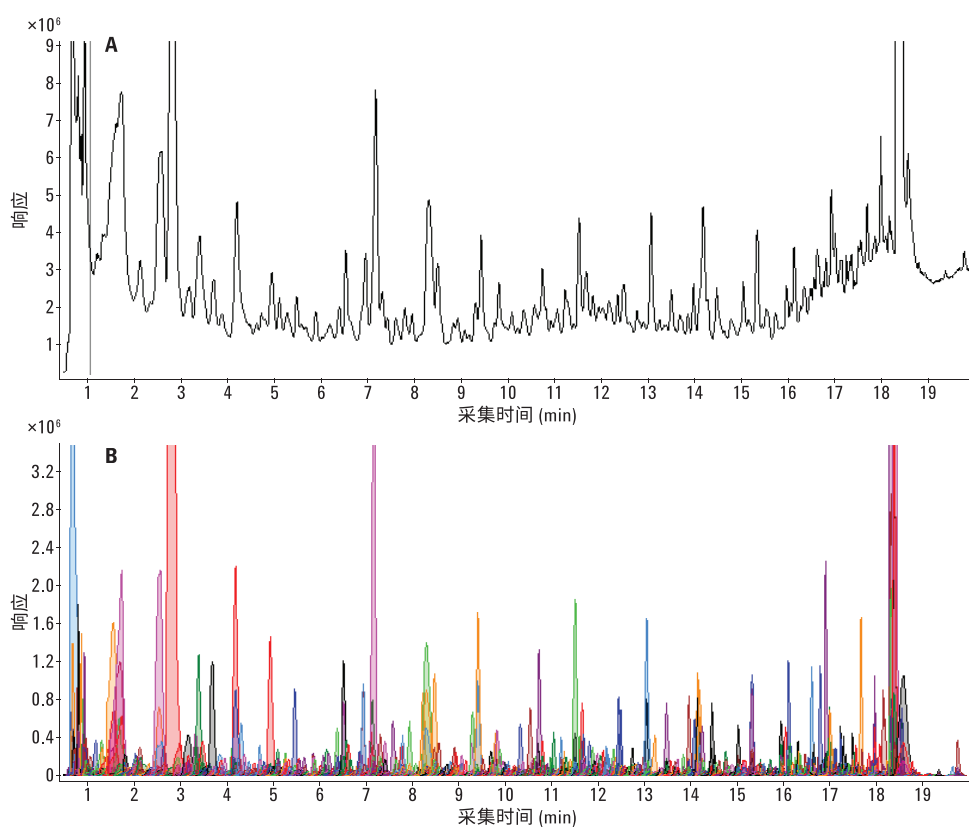


图 1. 典型的总离子流色谱图 (A) 和通过 MFE 提取的化合物叠加色谱图 (B)，显示了优化后 LC/MS 方法的高分离效率。样品为美国产 CS 葡萄酒

对葡萄酒样品组之间的不同化学特性进行化学计量学分析

对通过 Q-TOF 扫描模式采集的数据的保留时间 (RT) 和质荷比 (m/z) 重现性进行仔细检查。发现 RT 和 m/z ($|\Delta t_R|/t_{R,平均}$ 和 $|\Delta(m/z)|/(m/z)_{平均}$) 的相对偏差分别低于 2% 和 5 ppm, 表明用于代谢组学分析的数据是可靠的。随后使用 MFE 提取合格的数据, 并通过批处理软件 (DA reprocessor) 导出为 cef 文件。为研究化合物丰度如何在不同产地的葡萄酒样品之间变化, 将上述经过处理的数据导入 MPP 进行化学计量学分析。将使用 MFE 从所有收集的葡萄酒样品中提取的化合物 RT 和质量数信息在 MPP 的 RT 和质量数偏差窗口中对齐。然后将每个对齐后的化合物作为 MPP 中的独立条目, 并使用 RT 和准确质量数进行标注。通过上述处理, 我们获得了 98 个葡萄酒样品的 29564 个条目。然后依次使用以下条件对这些条目进行过滤: 出现频率 (至少一个组 $\geq 80\%$)、样品变异性 (至少一个组 $\leq 50\%$)、方差分析 (ANOVA, $P \leq 0.01$)、倍数变化 ($FC \geq 3$), 以及 $|P_{校正}| \geq 0.8$ 的 C-C 曲线。最终, 保留了 65 个在 5 个样品组之间具有显著性差异的条目。图 2 显示了每个条目在不同组之间平均丰度的变异性。

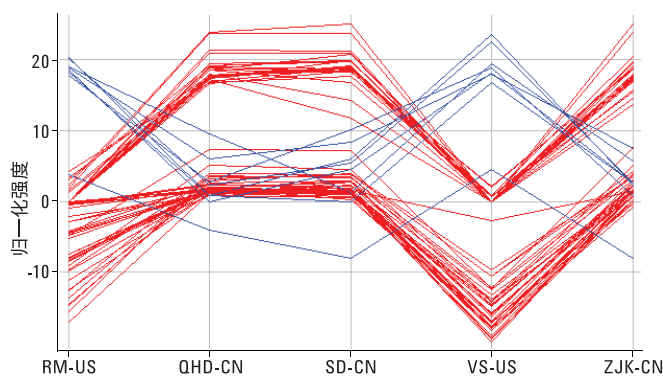


图 2. 数据过滤后, 样品组中 65 个差异条目的丰度变异性。过滤参数: 出现频率, 至少 1 个组中为 80%; 丰度变异性, 至少一个组 $\leq 50\%$; ANOVA, $P \leq 0.01$; 倍数变化, $FC \geq 3$, 其中 10 对中有 7 对的原始丰度差异截止值为 1×10^5 ; C-C 曲线, $|P_{校正}| \geq 0.8$

PCA 是用于查看复杂数据集结构的数学算法, 常用于查看样品之间的相似度。对以上步骤中获得的 65 个条目进行 PCA 分析。我们发现数据集可减少到 4 维, 其中最高三个维度或主成分 (PC) 的总和可表现为 84.76% 的总协方差 (图 3A)。而最高两个成分甚至可表现为 83.04% 的总协方差 (图 3B)。此外, 两个美国酒庄产的葡萄酒可以彼此区分, 也能与中国产葡萄酒得到明确区分。通过对比发现, 中国酒庄产的三个葡萄酒互相重叠 (图 3)。这表明上述 65 个条目是中国和美国产葡萄酒之间主要变异性的来源, 并且可用作标记物来区分来自两个所选美国酒庄和中国三个地区的葡萄酒。

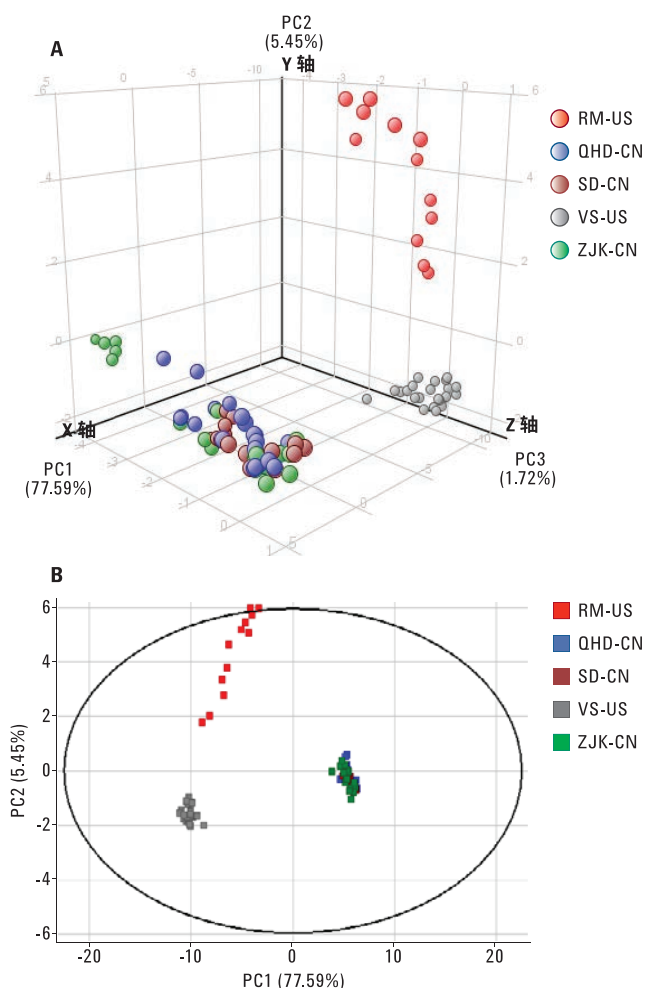


图 3. 65 个差异条目的 PCA 得分图。A) 3-D PCA 得分图。B) 2-D PCA 得分图

为更好地说明所选条目在所有葡萄酒样品组之间的变化，我们应用层次聚类分析 (HCA) 和 K 均值分析并基于条目丰度的相似度对数据集进行聚类。通过使用上述过滤方法获得的 65 个条目，我们获得了葡萄酒样品组和条目的层次条件树，如图 4A 所示。从节点高度来看，这些葡萄酒主要可分为 3 组：RM-US、VS-US 和 CN（包括来自中国三个地区的葡萄酒）。此外，可根据 65 个条目在所有葡萄酒样品组中的相似分布将其主要分为 C1 至 C3 三类。C1 组中的条目显示出在美国产葡萄酒中具有

相对较低的丰度，但在中国产葡萄酒中丰度较高。对于 C2 组，美国产葡萄酒中的丰度显著高于中国产葡萄酒。C3 组清晰显示出美国产葡萄酒中的强度比中国产葡萄酒更低。这些条目的丰度变化趋势与图 4B 所示的 K 均值分析相一致。所有 3 个条目类别可将三个中国样品组和两个美国样品组区分开来，同时 C1 组的一些可区分出两种美国产葡萄酒。此外，三个中国产葡萄酒样品组中有不足 10 个化合物显示出视觉差异，但这种差异不足以区分这三个葡萄酒样品组。

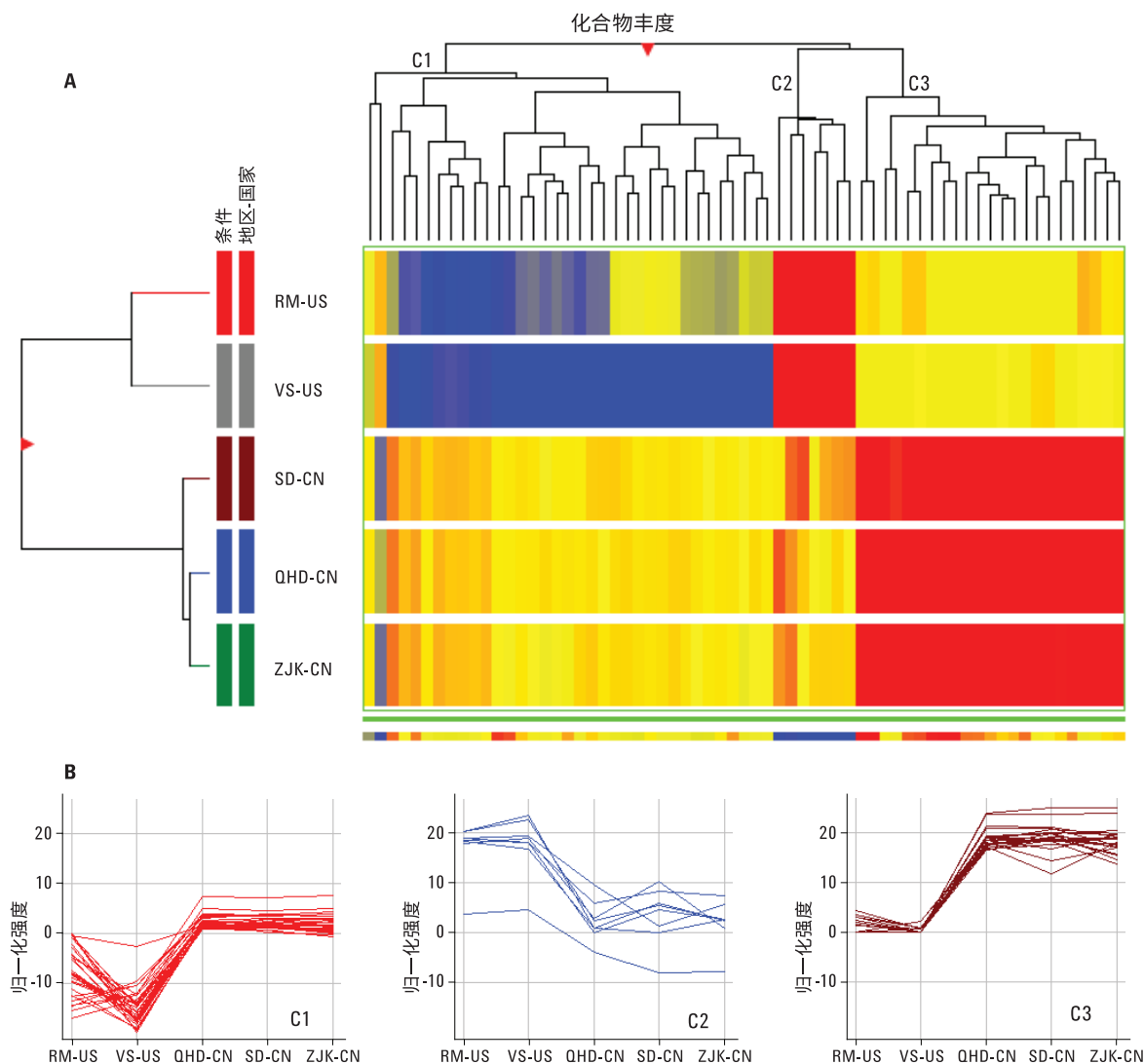


图 4. 基于 65 个条目的葡萄酒层次 (A) 和 K 均值 (B) 聚类分析，显示了美国产和中国产葡萄酒之间以及两组美国产葡萄酒之间存在明显差异

所选差异条目的验证

为避免化合物对齐期间的错误条目标注以及统计分析期间的假阳性结果，通过从所采集原始数据直接提取信息来验证所选的可能葡萄酒差异标记物条目。我们发现大多数选定条目是真实的化合物，并在所选美国和中国酒庄产的葡萄酒中具有明显差异。图 5 显示了代表性化合物。

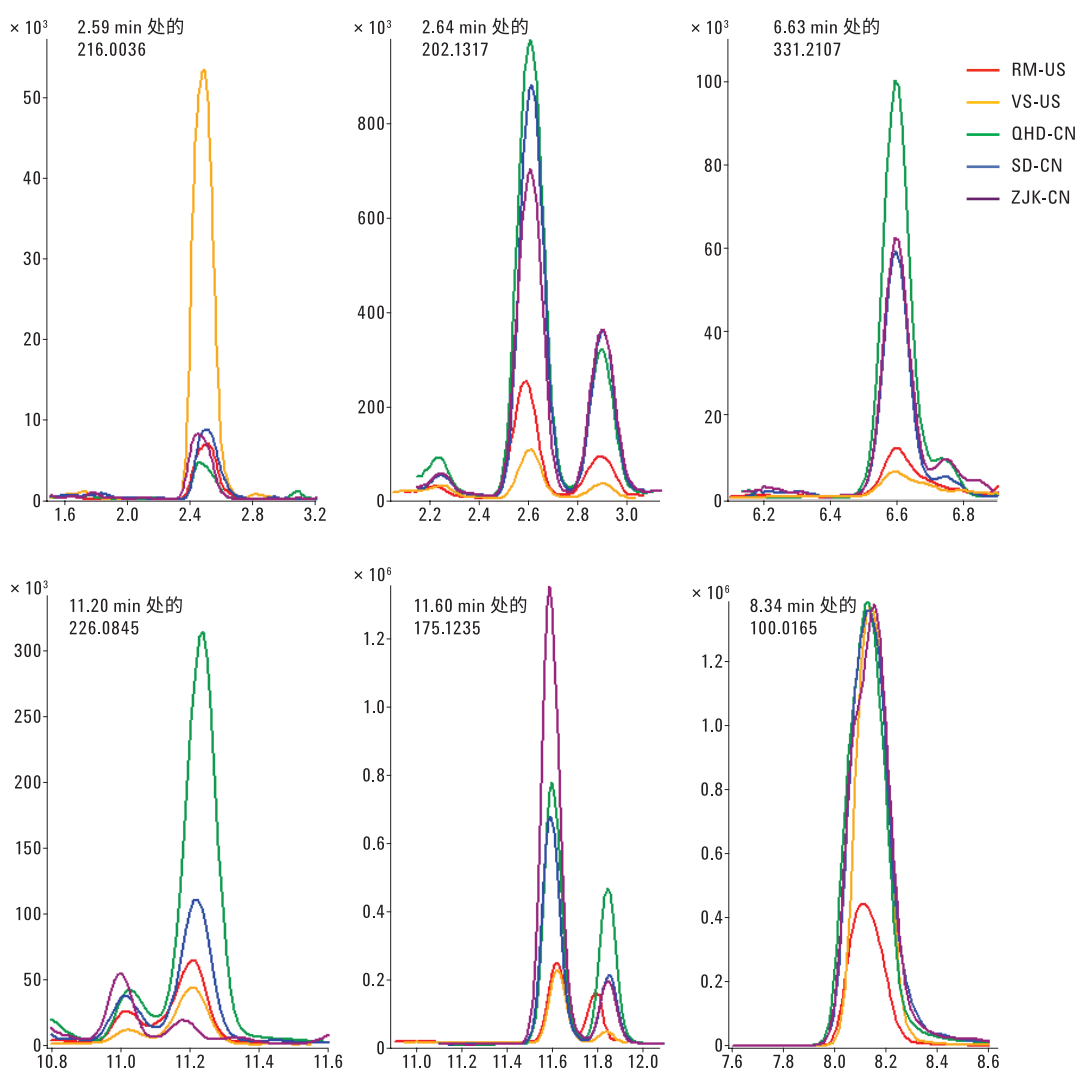


图 5. 表明不同葡萄酒中所选化合物存在明显丰度变异的提取色谱图

预测模型的建立

基于上述所选化合物建立了 PLSDA 模型来预测葡萄酒原产地。我们发现该模型可正确预测两组美国产葡萄酒 (图 6)。虽然此模型无法高度准确地预测中国产葡萄酒亚组, 但它可将这些亚组作为不同于美国样品组的一个整体加以区分。这表明所选标记物可用于区分美国和中国酒庄产葡萄酒。

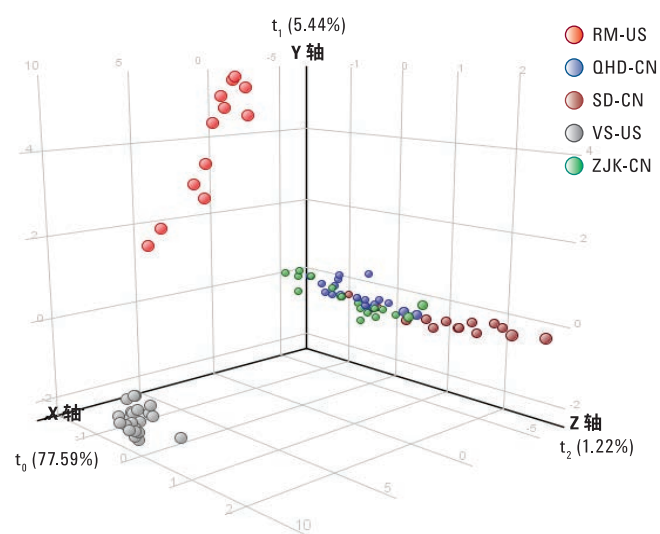


图 6. 基于 65 个条目的 PLSDA 得分图, 显示了两组美国产葡萄酒与中国产葡萄酒的明显差异

表 2. 使用所建模型进行的交叉验证, 表明实现了美国产和中国产葡萄酒的准确预测

| | RM-US | VS-US | QHD-CN | SD-CN | ZJK-CN | 准确度 (%) |
|-------------|-------|-------|--------|-------|--------|---------|
| (真实) RM-US | 12 | 0 | 0 | 0 | 0 | 100.0 |
| (真实) VS-US | 0 | 23 | 0 | 0 | 0 | 100.0 |
| (真实) QHD-CN | 0 | 0 | 18 | 2 | 1 | 85.71* |
| (真实) SD-CN | 0 | 0 | 3 | 12 | 0 | 80.00* |
| (真实) ZJK-CN | 0 | 0 | 4 | 2 | 13 | 68.42* |
| 整体准确度 | | | | | | 86.67* |

* 将来自中国三个地区的葡萄酒看作一个组时, 该组的预测准确度达到了 100%

特征化合物的鉴定

为研究哪些化合物是两个美国酒庄和中国酒庄产葡萄酒间变异性的决定因素，我们利用 MPP 中的集成式 ID 浏览器通过结合实验室自定义葡萄酒 PCDL（其中保留时间在同一实验条件下获得）来鉴定所选标记物。其中两种化合物很有可能是原花青素二聚体 B3 和表没食子儿茶素-表儿茶素二聚体 (EGCEC) 异构体，其质量数准确度和同位素模式与数据库中的理论值完美匹配（图 7）。此外，目标 MS/MS 分析显示了这两个化合物单体的特

征性碎片离子。这两个化合物是植物中常见的儿茶素二聚体，前者与葡萄酒颜色相关，后者可能与葡萄酒的风味和口感相关。对于未使用自定义 PCDL 鉴定的化合物，通过将准确质量数和同位素模式与可用 PCDL（例如 Metlin）进行匹配来进行初步鉴定。对另外 21 种化合物进行了初步鉴定（表 3），其中大多数是葡萄中的内源性化合物，包括多酚类、酯类、有机酸类以及小分子多肽，它们也可能成为葡萄酒特色风味的决定因素。

A

| Best | Name | Formula | Mass | Mass (DB) | Diff (mD) | Diff (abs. pp) | RT | RT Diff | Diff (pp) | Score |
|--------------------|--|-------------|------------|-----------|---------------|----------------|-----------------|--------------|--------------------|-------|
| • | Dimer (epi)gallocatechin-(epi)catechin-2 | C30 H26 O13 | 594.1377 | 594.1373 | -0.34 | 0.58 | 5.148 | -0.055 | -0.58 | 91.21 |
| Species | | | | | | | | | | |
| (M+H) ⁺ | 595.14 | 22867 | 96.68 | 99.59 | 99.53 | 87.42 | | | | |
| m/z | m/z (Calc) | Diff (ppm) | Diff (mDa) | Height | Height (Calc) | Height % | Height % (Calc) | Height Sum % | Height Sum% (Calc) | |
| 595.14 | 595.1446 | 0.39 | 0.2 | 22840.8 | 22867 | 100 | 100 | 70 | 70.1 | |
| 596.149 | 596.148 | -1.71 | -1 | 7477.8 | 7603.9 | 32.7 | 33.3 | 22.9 | 23.3 | |
| 597.15 | 597.1506 | -4.98 | -3 | 1924.3 | 1835 | 8.4 | 8 | 5.9 | 5.6 | |
| 598.16 | 598.1532 | -13.36 | -8 | 393.1 | 330 | 1.7 | 1.4 | 1.2 | 1 | |

B

| Best | Name | Formula | Mass | Mass (DB) | Diff (mDa) | Diff (abs. ppm) | RT | RT Diff | Diff (ppm) | Score |
|---------------------|-------------------------------------|-------------|------------|-----------|---------------|-----------------|-----------------|--------------|--------------------|-------|
| • | Procyanidin dimer B3 Cat-(4α→8)-Cat | C30 H26 O12 | 578.1427 | 578.1424 | -0.3 | 0.52 | 9.641 | -0.018 | -0.52 | 98.68 |
| Species | | | | | | | | | | |
| (M+Na) ⁺ | 601.133 | 6589.5 | 66.92 | 75.35 | 60.09 | 58.25 | | | | |
| (M+H) ⁺ | 579.14 | 201777.7 | 99.21 | 99.82 | 99.62 | 97.51 | | | | |
| m/z | m/z (Calc) | Diff (ppm) | Diff (mDa) | Height | Height (Calc) | Height % | Height % (Calc) | Height Sum % | Height Sum% (Calc) | |
| 579.14 | 579.1497 | -0.06 | 0 | 201777.7 | 200522 | 100 | 100 | 70.7 | 70.2 | |
| 580.15 | 580.1531 | -0.28 | -0.2 | 65283.6 | 66603 | 32.4 | 33.2 | 22.9 | 23.3 | |
| 581.15 | 581.1557 | -3.16 | -1.8 | 15479.7 | 15653.8 | 7.7 | 7.8 | 5.4 | 5.5 | |
| 582.16 | 582.1584 | -10.03 | -5.8 | 2988.8 | 2750.8 | 1.5 | 1.4 | 1 | 1 | |

图 7. 利用自定义葡萄酒 PCDL 中的标准品得到的化合物匹配结果。红色矩形框表明了质量数和保留时间分别与理论值和参考值的接近程度

表 3. 葡萄酒中初步鉴定的差异化合物汇总

| t_r /min | 实验分子量 | 理论分子量 | 质量数准确度/ppm | 分子式 | 归属 |
|---------------------------------|----------|----------|------------|--|------------------------------------|
| 与葡萄相关的内源性化合物 (12) | | | | | |
| 5.170 | 594.1374 | 594.1373 | 0.2 | C ₃₀ H ₂₆ O ₁₃ | (表) 没食子儿茶素- (表) 儿茶素-2 二聚体 |
| 6.157 | 620.1523 | 620.1530 | -1.1 | C ₃₂ H ₂₈ O ₁₃ | 芍药素 3-邻-乙酰基葡萄糖甙-4-乙烯基苯酚 |
| 9.648 | 578.1424 | 578.1424 | 0 | C ₃₀ H ₂₆ O ₁₃ | 原花青素二聚体 B3 Cat-(4 α →8)-Cat |
| 12.394 | 224.1410 | 224.1413 | -1.3 | C ₁₃ H ₂₀ O | (+)-7-异茉莉酸甲酯 |
| 10.527 | 196.0738 | 196.0736 | 1.0 | C ₁₀ H ₁₂ O ₄ | 香兰酸乙酯 |
| 11.749 | 146.0373 | 146.0368 | 3.4 | C ₉ H ₆ O ₂ | 香豆素 |
| 13.747 | 370.1057 | 370.1053 | 1.1 | C ₂₀ H ₁₈ O ₇ | 芝麻林素 |
| 4.641 | 226.0957 | 226.0954 | 1.3 | C ₁₀ H ₁₄ N ₂ O ₄ | 胆色素原 |
| 5.322 | 360.1424 | 360.1420 | 1.1 | C ₁₈ H ₂₄ O ₉ | 7-去氧马钱苷酸 |
| 8.363 | 260.1167 | 260.1161 | 2.3 | C ₁₄ H ₁₆ N | 萘酚洛尔 |
| 8.984 | 176.0687 | 176.0685 | 1.1 | C ₇ H ₁₂ O ₅ | 2-丙基苹果酸 |
| 6.470 | 130.0272 | 130.0266 | 2.6 | C ₅ H ₆ O ₄ | 柠康酸 |
| 与葡萄栽培和葡萄酒工艺相关的外源性化合物 (1) | | | | | |
| 9.125 | 212.0684 | 212.0685 | 0.5 | C ₁₀ H ₁₂ O ₅ | 曲林菌素 |
| 小分子多肽 (10) | | | | | |
| 4.430 | 232.1425 | 232.1423 | -0.9 | C ₁₀ H ₂₀ N ₂ O ₄ | Ile Thr |
| 4.545 | 287.1843 | 287.1845 | -0.3 | C ₁₃ H ₂₅ N ₃ O ₄ | Leu Gly Val |
| 4.797 | 317.1952 | 317.1951 | 0.3 | C ₁₄ H ₂₇ N ₃ O ₅ | Val Leu Ser |
| 5.189 | 228.1476 | 228.1474 | 0.9 | C ₁₁ H ₂₀ N ₂ O ₃ | Pro Leu |
| 5.271 | 260.1375 | 260.1372 | 1.2 | C ₁₁ H ₂₀ N ₂ O ₅ | Glu Leu |
| 5.681 | 446.1900 | 446.1914 | -3.1 | C ₂₀ H ₂₆ N ₆ O ₆ | Gly Phe Ser His |
| 7.801 | 301.2001 | 301.2002 | -0.3 | C ₁₄ H ₂₇ N ₃ O ₄ | Ile Ala Val |
| 8.736 | 386.2162 | 386.2165 | -0.8 | C ₁₇ H ₃₀ N ₄ O ₆ | Ile Thr Pro Gly |
| 11.573 | 329.2313 | 329.2315 | -0.6 | C ₁₆ H ₃₁ N ₃ O ₄ | Ile Val Val |
| 12.041 | 548.1867 | 549.1867 | 0 | C ₂₃ H ₂₈ N ₆ O ₁₀ | His Asp Asp Tyr |

结论

UHPLC-Q-TOF/MS 是对多种来源的葡萄酒进行代谢组学分析的强大技术。Agilent MPP 软件可帮助用户快速有效地对数据进行对齐、过滤和聚类。通过使用推荐的代谢组学分析方法，我们对美国和中国产葡萄酒中的 65 种差异葡萄酒标记物进行了测定。它们在所选葡萄酒样品组中的相对丰度可用于预测葡萄酒样品是来自美国 RM 或 VS 酒庄，还是来自所选的三个中国地区。在这些化合物中，有 23 种化合物得到了初步鉴定，其中一些可能与葡萄酒的颜色或风味/口感相关，表明地域差异对葡萄酒特性的影响。目前正在持续对这些标记物进行进一步确认。

参考文献

1. N. N. Liang, Y. Liu, B. L. Wang, *et al.* "Differentiation of grape wines from US and China using modeling building" *China Fermentation* **33(12)**, 23-28 (2014)
2. D. Serrano-Lourido, J. Saurina, S. Hernandez-Cassou, *et al.* "Classification and characterization of Spanish red wines according to their appellation of origin based on chromatographic profiles and chemometric data analysis" *Food Chem.* **135(3)**, 1425-31 (2012)
3. S. A. Bellomarino, X. A. Conlan, R. M. Parker, *et al.* "Geographical classification of some Australian wines by discriminant analysis using HPLC with UV and chemiluminescence detection" *Talanta* **80(2)**, 833-838 (2009)
4. S. Kallithraka, I. S. Arvanitoyannis, P. Kefalas, *et al.* "Instrumental and sensory analysis of Greek wines; implementation of principal component analysis (PCA) for classification according to geographical origin" *Food Chem.* **73(4)**, 501-504 (2001)
5. L. Vaclavik, O. Lacina, J. Hajslova, J. Zeigenbaum. The use of high performance liquid chromatography–quadrupole time-of-flight mass spectrometry coupled to advanced data mining and chemometric tools for discrimination and classification of red wines according to their variety. *Anal. Chim. Acta.* **45**, 685 (2011)
6. A. Cuadros-Inostroza, P. Giavalisco, J. Hummel, *et al.* Discrimination of wine attributes by metabolome analysis. *Anal. Chem.* **82**, 3573–3580 (2010)

更多信息

这些数据仅代表典型的结果。有关我们的产品与服务的信息，请访问我们的网站 www.agilent.com。

查找当地的安捷伦客户中心：

www.agilent.com/chem/contactus-cn

免费专线：

800-820-3278, 400-820-3278 (手机用户)

联系我们：

LSCA-China_800@agilent.com

在线询价：

www.agilent.com/chem/erfq-cn

www.agilent.com

安捷伦对本资料可能存在的错误或由于提供、展示或使用本资料所造成的间接损失不承担任何责任。

本文中的信息、说明和技术指标如有变更，恕不另行通知。

© 安捷伦科技（中国）有限公司，2016

2016年8月22日，中国出版

5991-7238CHCN



Agilent Technologies