

· 园艺 ·

DOI: 10.15886/j.cnki.rds wxb.20230051



主持人: 朱国鹏

葡萄欧亚种与杂交种的营养品质差异研究

陈琪玉¹, 李宇飞^{1,2}, 徐航^{1,2}, 刘贤青^{1,2}, 罗杰^{1,2}

(1. 海南大学 热带作物学院/海南省热带生物资源可持续利用重点实验室, 海口 570228;

2. 海南省三亚崖州湾种子实验室, 三亚 572000)

摘要: 葡萄(*grape*)是葡萄科葡萄属的藤本类植物, 主要包括四大种群: 欧亚种、美洲种、东亚种以及三大种群杂交选育出来的杂交种。目前国内主要种植的葡萄类型为欧亚种和杂交种。葡萄因其果肉的鲜美受到消费者的喜爱。为研究葡萄中的营养物质的分布与积累, 本研究收集了来自葡萄欧亚种群(*V. vinifera*)和杂交种群的 20 份葡萄品种, 运用代谢组检测方法进行研究, 结合多类物质注释方式, 建立了 1 个包含 768 个已知代谢物的葡萄代谢数据库, 涵盖了类黄酮、脂质、氨基酸、维生素、有机酸、萜类、多酚、酚胺以及其他共 9 类代谢物大类。通过代谢分析手段, 发现葡萄代谢物在欧亚种和杂交种之间的积累差异, 葡萄杂交种中总氨基酸、维生素 B3、总脂肪酸以及 4 种花青素的含量高于葡萄欧亚种, 而维生素 B6 和黄烷醇等代谢物的含量在葡萄欧亚种中相对更高。

关键词: 葡萄; 代谢组学; 数据库

中图分类号: S663.1; Q946

文献标志码: A

文章编号: 1674 - 7054(2023)05 - 0521 - 09

陈琪玉, 李宇飞, 徐航, 等. 葡萄欧亚种与杂交种的营养品质差异研究 [J]. 热带生物学报, 2023, 14(5): 521-529.

doi: 10.15886/j.cnki.rds wxb.20230051

葡萄(*grape*)是葡萄科葡萄属的藤本类植物, 不仅具有悠久的种植历史, 也是目前全球种植面积最大以及产量最高的经济水果之一^[1]。葡萄属可分为真葡萄和麝香葡萄两个亚属共计 70 多个种, 但具有经济价值的驯化栽培种仅有 20 多个种且均属于真葡萄属, 主要包括 4 大种群: 欧亚种、美洲种、东亚种以及三大种群杂交选育出来的杂交种(以下简称种间杂交种)^[2]。目前中国主要种植的类型为欧亚种与杂交种, 其中杂交种的抗病性与环境适应性强于欧亚品种^[3]。葡萄作为人们喜爱的水果之一, 除了果肉的鲜美以外, 以葡萄为原料的副产品如葡萄酒、葡萄汁和葡萄干等也受人们的欢迎^[4-5]。在当今社会, 消费者对食物的追求除最基本的口感外, 对食物中的营养成分及含量水平也提出了更多的要求, 因此探究葡萄中所

含的营养物质的分布与含量成为研究热点^[6-7]。

氨基酸、维生素、脂质以及类黄酮等物质作为四类常见营养元素, 已有研究人员对其在葡萄中的分布情况开展研究。徐雯等^[8]对中国河北省内主要种植的 6 个葡萄品种进行氨基酸的检测, 发现葡萄中主要的氨基酸为谷氨酸、精氨酸、脯氨酸和天冬氨酸等。此外, Tassoni A 等^[9]通过研究抗病型和感病型葡萄品种的氨基酸水平差异, 发现在抗病性强的葡萄品种中, 谷氨酰胺、精氨酸、脯氨酸和苏氨酸等氨基酸的含量均高于感病型的葡萄品种。维生素是生物体维持正常生命活动所必需的营养物质, 在生物体的生长发育等代谢过程中发挥重要作用。金洪艳等^[10]对葡萄中所含的维生素进行检测, 发现在葡萄中的维生素主要包括维生素 B 族和 C 族。脂质主要在葡萄籽中积累,

收稿日期: 2023 - 04 - 19

修回日期: 2023 - 05 - 01

基金项目: 111 引智计划项目 (D20024); 海南省院士创新平台项目 (HD-YSZX-202003); 海大科研启动经费 KYQD(ZR)1866 资助

第一作者: 陈琪玉 (1998-), 女, 海南大学热带作物学院 2020 级硕士研究生. E-mail: qiyuchen@hainanu.edu.cn

通信作者: 罗杰 (1971-), 男, 教授. 研究方向: 植物次生代谢调控及代谢组学. E-mail: jie.luo@hainanu.edu.cn

Pérez-Navarro J等^[11]对葡萄中所含的脂质进行检测,发现在果肉中广泛存在棕榈酸、硬脂酸、亚油酸和甘油磷脂等脂质,还发现在葡萄籽中不饱和脂肪酸的比例相对较高。类黄酮是葡萄中种类最多且含量最高的营养代谢物,其在葡萄中的分布与含量受到研究人员的广泛关注,葡萄中主要的类黄酮化合物包括花青素、黄酮醇和黄烷醇等^[12]。研究人员还发现类黄酮在葡萄品种间存在很大的积累差异^[13],例如,在大多数红葡萄品种中,黄烷醇和花青素是类黄酮化合物的主要组成成分,而在白葡萄品种中,酚类物质的含量相对较低,其中黄酮醇和黄烷醇占主导地位^[14]。

代谢组学(metabonomics)是通过组群指标分析,进行高通量检测和数据处理,研究生物体整体或组织细胞系统的动态代谢变化,特别是对内源代谢、遗传变异、环境变化乃至各种物质进入代谢系统的特征和影响的学科。代谢组与基因组、转录组和蛋白组一起构成了系统生物学,代谢物是基因转录与蛋白表达的终端产物,承载着生物体众多的生命活动并体现生物的生命状态^[15]。目前代谢领域常用的研究分析平台分别是液相色谱质谱联用系统(LC-MS)、气相色谱质谱联用系统(GC-MS)以及核磁共振(NMR)等。因LC-MS具有高灵敏和高重现性的双重优势,LC-MS是目前代谢组学研究中应用最广泛的检测手段。随着科学技术的不断进步与发展,液相色谱体系也从高效液相色谱体系(HPLC)发展到分离比更高的超高效液相色谱体系(UPLC),体系的升级使得物质分离效果和检测效率得到了大幅度的提升^[16]。代谢组学常用物质检测方法有非靶向代谢检测^[17]、靶向代谢检测^[18]以及广泛靶向代谢检测方法^[19],非靶向代谢检测和靶向代谢检测的检测方法各有优劣,而广泛靶向检测方法综合两者优势在代谢领域得到了广泛应用。代谢组学在植物相关研究中至关重要^[20],在植物的品种鉴定、中医药学以及园艺作物的品质研究等领域均有广泛应用^[21-23]。

葡萄作为高经济价值的水果之一,培育味道鲜美和营养价值高且具有广泛环境适应能力的葡萄品种是研究人员不断努力的方向。本研究收集了起源于欧亚种群(*V. vinifera*)或种间杂交种群两大种群共20份葡萄栽培品种,利用广泛靶向代谢检测方法对葡萄群体进行高通量代谢检测分析,

建立了涵盖多类代谢物质葡萄代谢数据库,比较了几类营养代谢物在葡萄欧亚种和种间杂交种之间的分布情况,意为葡萄高营养品种的培育提供新的思路以及理论基础。

1 材料与方法

1.1 材料 本研究使用的20份葡萄种质资源起源于葡萄欧亚种群(*V. vinifera*)或杂交种群两大种群,主要从北京、山西和山东等地的种质资源中心收集。在挑选材料时根据品种来源、果皮颜色以及品种用途等方面进行考量,所有的材料都使用统一的管理方法,包括栽培、灌溉、施肥、修剪和疾病控制等方面。

1.2 代谢样品提取 先利用真空低温冻干机将葡萄鲜样中的水分去除,将冻干后的样品磨成粉末装在2 mL离心管中。将冻干粉样按每份50 mg进行分装,将分装后的样品置于冰上按照 $W_{\text{冻干粉样}}:V_{\text{提取液}}=1\text{ mg}:8\text{ mL}$ 加入由甲醇、乙腈和超纯水按 $V_{\text{甲醇}}:V_{\text{乙腈}}:V_{\text{超纯水}}=2:2:1$ 混合配制而成的提取液,再进行10 s涡旋混匀,然后放入加了冰块超声仪中超声10 min,涡旋超声步骤共重复3次。超声结束后将样品置于预冻好的4℃高速离心机中离心10 min,吸取上清液打入装有0.22 μm尼龙滤膜的针筒进行过滤,将滤液装入含有内插管的棕色代谢瓶中等待上机检测,整个过程在冰上操作。代谢样品提取全过程中,除磨样和样品分装2个步骤外,其余操作均需在黑暗条件下进行。

1.3 代谢样品检测

1.3.1 液相分离参数 分离使用的液相仪器分别为UltiMate 3000高效液相色谱仪(赛默飞世尔科技公司)和DGU-20A5R高效液相色谱仪(岛津公司)。检测用的色谱柱为Shim-pack GISS C18(1.9 μm, 2.1 × 100 mm)反向色谱柱(岛津公司),柱温设为40℃。流动相体系为A相(含0.04%乙酸水溶液);B相(含0.04%乙酸的甲醇溶液)。液相洗脱时间为20 min,梯度为:0~5 min,流动相B相的比例由5%逐渐增高至95%,在B相占比达95%时保持5 min,15.1 min时迅速降至B相比例5%并保持至洗脱时间结束。在样品正式检测前必须使仪器达到平衡状态,平衡时间大约为3 min。

1.3.2 高分辨质谱检测参数 使用Q Exactive

Plus Orbitrap HRMS 仪器进行高分辨数据采集,扫描模式为 Full MS/ddMS2,母离子扫描范围 100~1 000 Da,二级谱图采集范围 50~1 000 Da,正离子模式下喷雾电压 3.5 kV,毛细管温度 325℃,加热器温度 350℃,鞘气 30 arb,辅助气 10 arb。

1.3.3 低分辨质谱检测参数 Q-Trap 6500+ MS 用于进行代谢物的定量检测,检测模式为 sMRM。ESI 源参数设置:温度 500℃,喷雾气(GS1)50,辅助加热气(GS2)60,气帘气(CUR)35 psi。正离子扫描模式:离子喷雾电压(IS)5 000 V,去簇电压(DP)50 V,碰撞电压(CE)30 V。对代谢信号进行扫描时,分成多个文件,每个文件内放置 1 000 个离子对进行扫描,扫描窗口设定为 70,总的循环时间为 0.8 s。数据采集完后由 Analyst 软件导出然后导入 MultiaQuant 软件进行后续的定量分析。

1.4 数据统计与分析

1.4.1 代谢数据的定性和定量 非靶检测所得的原始数据均由 Compound Discoverer 3.1 软件进行了峰对齐、反褶积和空白扣除等工作。代谢物定量数据使用 MultiQuant 3.0.3 软件进行处理。

1.4.2 代谢数据的处理由 EXCEL 完成 代谢物的聚类热图由 R 语言的 pheatmap R 包完成;主成分分析(PCA)使用线上网站 HIPILOT (<https://hiplot.com.cn/>)完成。

2 结果与分析

2.1 葡萄代谢物数据库的建立 利用高分辨仪器 UPLC-Q Exactive Plus Orbitrap 对葡萄群体的代表性样本进行非靶向代谢组检测,并基于以下两个原则对代谢信号数据进行初步筛选:(1)是否拥有二级碎片;(2)前体离子(Q1)与产物离子(Q3)之差是否小于 14,以此将质量较差以及冗余的信号去除。最终,通过非靶检测共计得到了 2 353 个代谢信号。为进一步对筛选得到的信号进行定量检测以及二次筛选,利用 Q-Trap 6500+ MS 对葡萄群体的代谢信号进行靶向检测。利用 MultiQuant 软件对靶向检测所得数据进行处理,去除峰型较差以及信噪比在 10 以下的代谢信号,最终得到了 1 328 个代谢信号,完成葡萄代谢物数据库的初步建立。

葡萄代谢物数据库初步建立后,利用多种方

法对葡萄代谢物数据库中未知代谢信号进行物质注释。运用高分辨仪器配套的 CD(Compound Discover)软件对采集到的代谢物质进行一个初步匹配,但因软件的局限性,匹配结果还需结合碎片信息以及出峰时间进行人工核对,再通过由已知到未知的顺序,结合实验室已有代谢数据库,根据 Q1、Q3、碎片信息和保留时间(样品和检测仪器的不同会影响 RT 值,但出峰时间的差异范围大约在 0.5~1 min)等信息注释了 373 个代谢物。再利用标准品核验,将标准品采用样品同样的检测方法进行代谢检测,根据所得的 RT、Q1 和 Q3 的值与已有数据进行匹配,通过该方法注释了 247 个物质。

此外,还对部分未知代谢信号进行了人工注释,如代谢物 GRP0421 的保留时间是 4.97 min (图 1-A),质荷比(m/z)为 627.1562,根据其二级谱图(图 1-B),发现其主要的碎片为 303.0496,除此之外还有 1 个小的碎片 465.1026。通过分析该物质的质谱信息,其碎裂模式与糖基化类黄酮类物质的裂解方式非常相似,结合常见黄酮类物质的出峰时间大约在 4~8 min,因此笔者推测该物质为类黄酮的糖基化修饰物。对该物质的二级谱图进行分析,303.0496 为该黄酮物质母核的特征质荷比,其特征碎片 303 与另一个主要碎片 465 以及 465 与母离子 627 的中性丢失特征值均为 162,恰好符合六碳糖丢失 1 个水(MW-H₂O, 162)的质荷比,因此推测在该物质中存在 2 个六碳糖和 1 个羟基,再结合 CD 软件的匹配结果人为核对后,将该物质注释为 Quercetin 3-glucosylgalactoside,结构式以及物质断裂模式如图 1-C 所示。

本研究通过一系列代谢物注释方法后,在去除冗余值后,建立了 1 个包含 768 个已知代谢物的葡萄代谢数据库,涵盖了类黄酮、脂质、氨基酸、维生素、有机酸、萜类、多酚及酰胺等九类代谢物(图 1-D),其中类黄酮和脂质化合物的占比比较高。

2.2 葡萄代谢谱分析 基于所得代谢物数据库对葡萄群体进行定量分析后,本研究展开了初步的代谢轮廓分析。根据所得 768 个已知代谢物对 20 份葡萄品种利用 R 语言进行主成分分析(PCA)和聚类热图分析(图 2)。由图 2-A 可知代谢物可

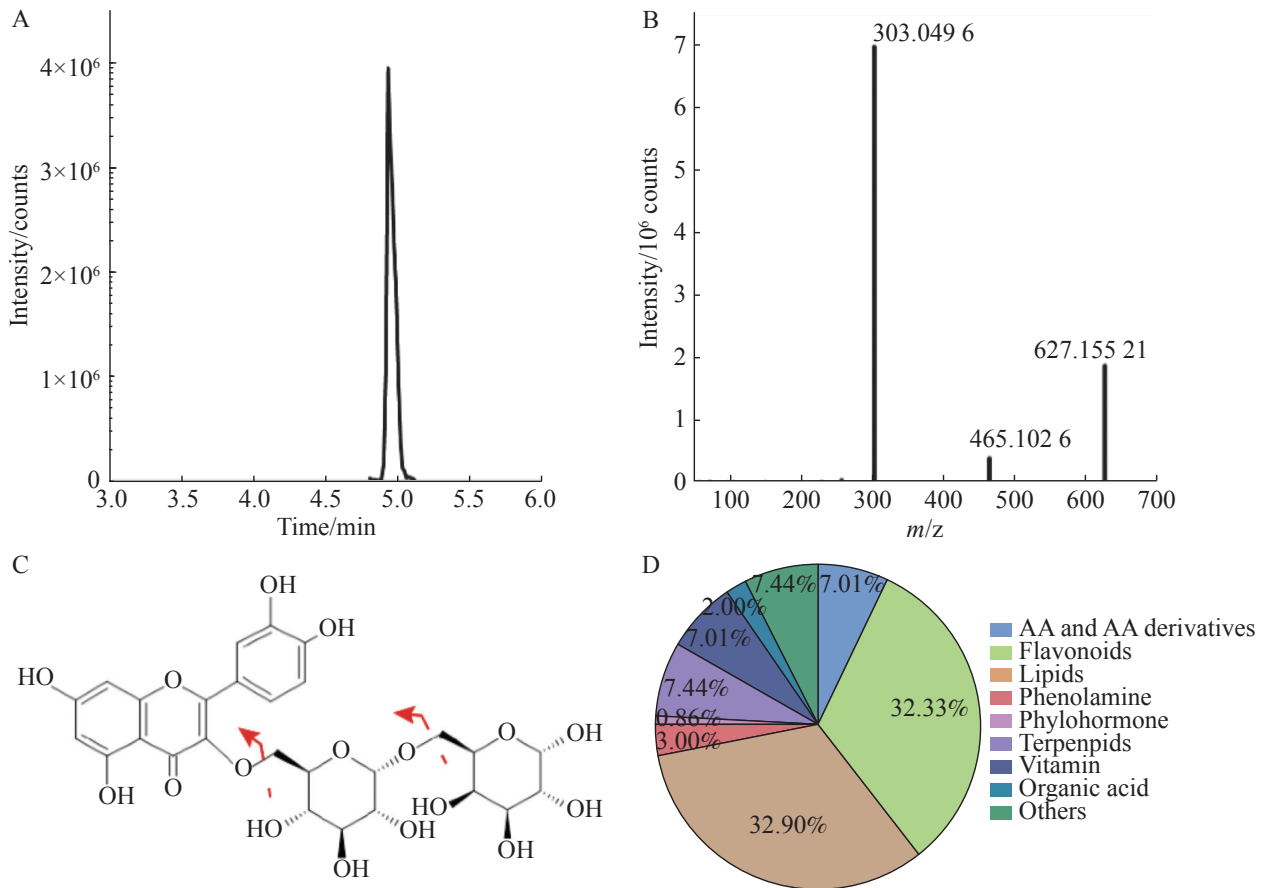


图1 代谢物的鉴定,代谢数据库物质分类

A: 代谢物 GRP0421 的保留时间; B: 质荷比为 627.1552 的碎片信息; C: Quercetin 3-glucosyl-galactoside 的分子结构与断裂模式; D: 葡萄代谢库所含代谢物的主要类型。

以将葡萄欧亚种和杂交种区分开。为了探究是哪些化合物在葡萄不同种群之间存在差异,对 80 份栽培葡萄品种进行聚类热图分析,由图 2-B 可知类黄酮化合物、脂质、萜类化合物以及多酚化合物是造成葡萄品种存在代谢差异的几类主要化合物,其中萜类化合物在葡萄杂交种中的积累相对高于葡萄欧亚种而类黄酮物质和脂质在葡萄不同种群中的积累存在较大差异。此外,本研究统计了葡萄代谢库中的 768 个代谢物的变异系数,发现有 482 个代谢物的变异系数超过了 60%,这说明在本研究中测得的代谢物在葡萄欧亚种和杂交种之间存在较大的积累差异(图 2-C)。

2.3 葡萄欧亚种和杂交种差异代谢物分析 为明确在葡萄欧亚种和杂交种之间的代谢物的差异,本研究结合变量权重值(VIP 值>1)和差异倍数的计算(Fold Chang<0.8 或 Fold Chang>1.2)两种分析代谢物的差异的方法,选取两种方法的交集,最终共筛选到了 185 个在葡萄欧亚种和种间杂交种

之间的差异代谢物,其中在葡萄种间杂交种中呈现上调的有 90 种代谢物,有 95 种代谢物是在葡萄杂交种中出现下调(图 3-A)。

对 185 个差异的代谢物的注释信息进行统计,共有 172 个代谢物属于常见代谢物注释的类别,包含了 14 种氨基酸及其衍生物、85 种类黄酮化合物、40 种脂质、4 种有机酸、3 种酰胺类化合物、3 种植物激素、8 种萜类化合物以及 15 种维生素(图 3-B)。这说明了在葡萄不同群体之间代谢物的差异主要由类黄酮、脂质和氨基酸等化合物引起。

2.4 葡萄欧亚种和杂交种营养代谢物的差异 利用前述在葡萄中测得到的代谢数据库,对氨基酸、维生素、脂质和多酚等 4 类常见营养物质在葡萄的欧亚种和杂交种之间的含量差异进行分析。如图 4-A 所示,与欧亚种相比杂交种的总氨基酸的相对含量更高,其中脯氨酸(Proline)和谷氨酰胺(Glutamine)的相对含量分别高于葡萄欧亚种

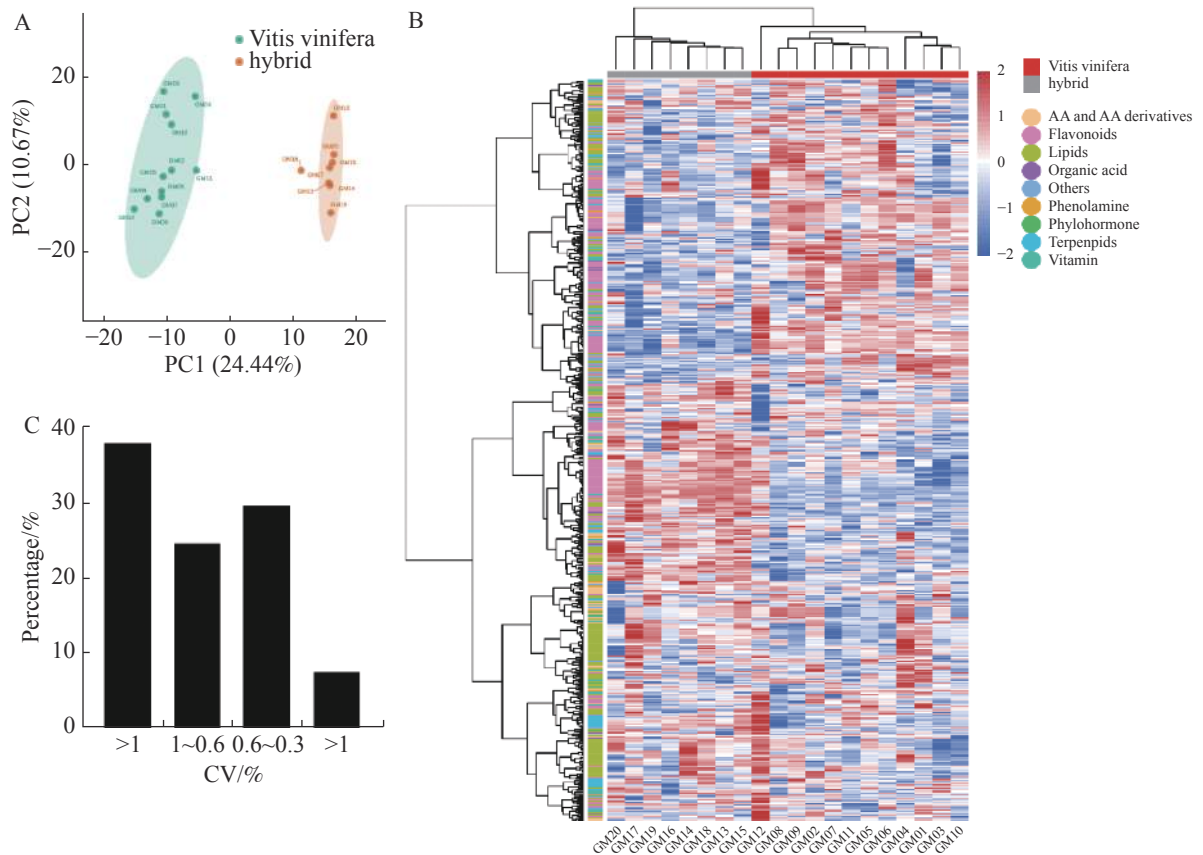


图 2 葡萄群体代谢组分析

A: 20 份葡萄栽培种的主成分分析, 绿色圆圈代表葡萄欧亚种, 黄色圆圈为葡萄杂交种; B: 葡萄栽培品种的热图分析, 红色为葡萄欧亚种灰色为葡萄杂交种; C: 768 种代谢物在葡萄群体中的变异系数。

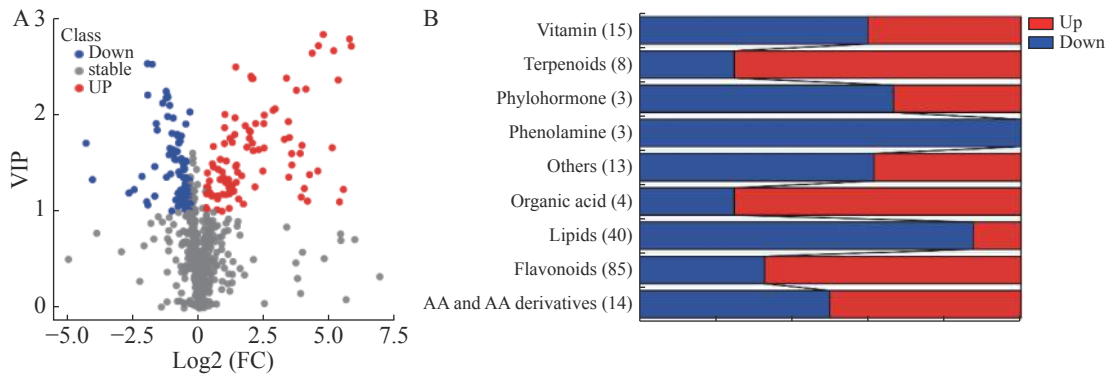


图 3 葡萄不同种群间差异代谢物分析

A: 差异代谢物的火山图; B: 葡萄栽培群体差异代谢物的主要物质类别。

1.5 倍和 2.6 倍, 而酪氨酸(Tyrosine)和 L-异亮氨酸(L-Isoleucine)在葡萄欧亚种与杂交种的积累含量无显著差异(图 4-B), 说明与欧亚种相比杂交种中氨基酸类化合物的积累相对更多。

本研究发现, 在葡萄中维生素 B 族的代谢物积累存在差异, 维生素 B3 物质在葡萄杂交种中的积累极显著地高于欧亚种, 但维生素 B6 化合物则在欧亚种中的积累更高(图 4-C)。本研究还发现,

维生素 C 化合物 L-抗坏血酸(L-Ascorbic acid)在属于欧亚种的品种中的相对含量普遍高于属于杂交种的葡萄品种(图 4-D)。甘油磷酸类化合物在葡萄不同种群中的积累也存在一定的差异, 葡萄杂交种中总脂肪酸的相对含量显著高于欧亚种(图 4-E), 但亚麻酸(Linolenic acid)的相对含量在葡萄欧亚种中略高于杂交种(图 4-F)。

类黄酮是葡萄中非常重要的一类营养物质,

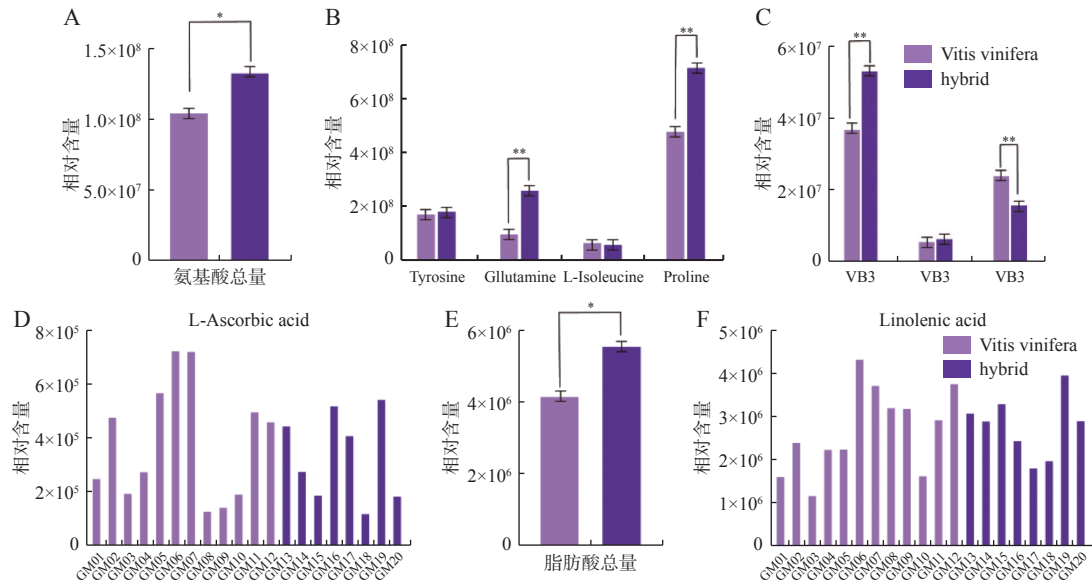


图4 葡萄欧亚种和杂交种间营养代谢物含量差异

A: 氨基酸总含量差异; B: 酪氨酸、谷氨酰胺、异亮氨酸和脯氨酸含量差异; C: 维生素 B3、B5 和 B6 族的含量差异; D: 抗坏血酸在不同品种间的含量差异; E: 脂肪酸总含量差异; F: 亚麻酸在不同品种间的含量差异; *: 差异显著; **: 差异极显著。

本研究通过靶向代谢检测方法共检测得到 225 个多酚类化合物, 主要包含黄酮、黄酮醇、黄烷酮、黄烷醇、异黄酮、查尔酮、花青素和芪类化合物等九大类型。对检测到的多酚类物质进行聚类分

析, 如图 5 所示多酚类化合物在葡萄欧亚种和种间杂交种中存在较大的积累差异, 其中黄酮醇类化合物在葡萄欧亚种和种间杂交种的积累模式与总的多酚类化合物在葡萄不同种群中的积累模式

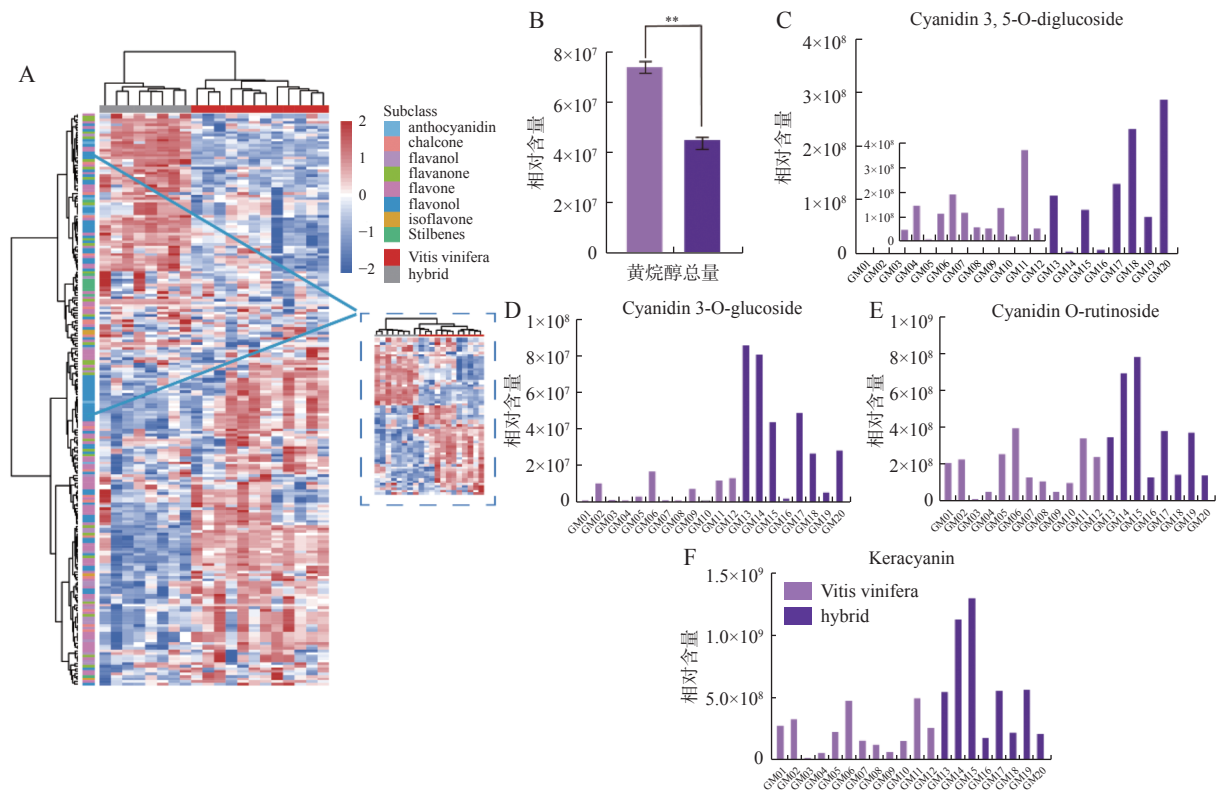


图5 葡萄欧亚种和杂交种多酚类物质含量差异

A: 葡萄栽培品种多酚类化合物聚类热图; B: 黄烷醇总含量差异; C~E: Cyanidin 3,5-O-diglucoside、Cyanidin 3-O-glucoside、Cyanidin O-rutinoside 和 Keracyanin 分别在不同品种间的含量差异; *: 差异显著; **: 差异极显著。

相似(图 5-A), 说明黄烷醇是形成多酚化合物在葡萄中存在显著积累差异的主要代谢物。与黄酮醇类物质不同, 黄烷醇类化合物在葡萄欧亚种中的总相对含量极显著高于种间杂交种(图 5-B)。对 4 种检测到的花青素在葡萄中的含量进行分析, 发现花青素类物质在种间杂交种的品种中相对含量普遍高于葡萄欧亚种的品种(图 5C-F), 说明葡萄不同种群之间的杂交可以增加葡萄花青素的积累。

3 讨论

本研究以葡萄果实群体为材料, 基于代谢组学策略建立了 1 个包含多类营养物质的葡萄代谢物数据库。尽管该数据库包含 768 个注释代谢物, 但依旧有许多能被检测到的代谢信号仍未被注释出来。目前领域内常用的物质注释方式主要包括利用标准品比对, 以及运用数据库匹配软件例如 CD、MSDIAL 和 Sirius 等通过导入已测得的高分辨数据进行匹配处理^[24-25], 这些物质注释方式方法多少都存在假阳性率过高的局限性。人工解谱也是研究人员会运用到物质注释方法之一, 但这一方法对相关专业要求较高因此使用范围更加狭窄。本研究主要是运用液相质谱的靶向代谢检测方式对葡萄群体进行研究, 以及主要运用标准品匹配和软件匹配对代谢物进行注释, 所运用的检测方法手段还有很大的提升空间, 想要构建包含更多注释代谢物的葡萄代谢物数据库, 还需进一步开发利用更多的方式策略加以完善。

本研究发现, 脯氨酸、谷氨酰胺和维生素 B3 等代谢物在葡萄种间杂交种的相对含量显著高于葡萄欧亚种, 这些代谢物已被报道与植物抗性相关, 而种间杂交种群的培育是研究人员为了提高葡萄的抗性以及对于不同环境的适应性而产生的, 本研究结果从代谢角度的方面验证了这一说法。本研究还发现几种参与葡萄果皮颜色形成的花青素在葡萄种间杂交种的品种中的相对含量高于欧亚品种, 已有研究^[26]表明运用嫁接砧木的育种方式培育出来的杂交葡萄品种, 其果皮中花青素化合物的积累增加, 促进了果皮着色, 而葡萄颜色是迎合消费者审美的一种非常重要的农艺性状, 这一结果为今后培育色泽鲜艳的葡萄品种提供了理论基础。通过利用营养成分不同的葡萄种

群能为今后提高葡萄产业的价值品质提供代谢方面的物质基础。

随着代谢组学的高度发展, 以代谢组学为基础的多组学研究已成为作物育种研究领域常用的手段之一, 在蓝莓、咖啡和香菜等经济植物的研究上已被应用^[27-29]。本研究建立的葡萄代谢物数据库为后续基于代谢组结果进一步开展葡萄基于代谢组的多组学分析奠定了代谢研究基础, 有助于有针对性地对葡萄代谢品质等性质进行遗传机制的解析, 为今后葡萄品种选育提供新方向与代谢基础。

参考文献:

- [1] 金良, 陈尚武, 马会勤. 葡萄蛋白质组学研究进展[J]. *中国生物工程杂志*, 2010, 30(10): 100-107.
- [2] 李顺雨, 潘学军, 张文娥, 等. 葡萄属种质资源多样性及利用[J]. *种子*, 2010, 29(1): 61-64.
- [3] 蔡之博, 李军, 王鑫, 等. 如何选择葡萄品种[J]. *北方果树*, 2017, 198(2): 26-28.
- [4] 黄丽萍, 马小河, 王敏, 等. 鲜食葡萄种质酸甜风味指标评价与分析[J]. *中外葡萄与葡萄酒*, 2022, 243(3): 55-58.
- [5] 刘春艳, 张静, 李栋梅, 等. 葡萄酒风味物质研究进展[J]. *食品工业科技*, 2017, 38(14): 310-313.
- [6] HAVLIN J L, AUSTIN R, HARDY D, et al. Nutrient management effects on wine grape tissue nutrient content [J]. *Plants (Basel)*, 2022, 11(2): 158.
- [7] SANTA K. Grape phytochemicals and vitamin D in the alleviation of lung disorders [J]. *Endocr Metab Immune*, 2022, 22(13): 1276-1292.
- [8] 徐雯, 苏雅, 陈秋生, 等. 不同葡萄品种果实中氨基酸含量分析[J]. *天津农学院学报*, 2020, 27(3): 30-34.
- [9] TASSONI A, ZAPPI A, MELUCCI D, et al. Seasonal changes in amino acids and phenolic compounds in fruits from hybrid cross populations of American grapes differing in disease resistance [J]. *Plant Physiology and Biochemistry*, 2019, 135: 182-193.
- [10] 金洪艳, 裴立楠. 葡萄酒中的营养物质分析[J]. *食品安全导刊*, 2020, 280(21): 43.
- [11] PÉREZ-NAVARRO J, DA ROS A, MASUERO D, et al. LC-MS/MS analysis of free fatty acid composition and other lipids in skins and seeds of *Vitis vinifera* grape cultivars [J]. *Food Research International*, 2019, 125: 108556.
- [12] FLAMINI R, MATTIVI F, DE ROSSO M, et al. Advanced knowledge of three important classes of grape phenolics: anthocyanins, stilbenes and flavonols [J]. *International Journal of Molecular Sciences*, 2013, 14(10): 19651-19669.

- [13] ZHU L, LI X, HU X, et al. Quality characteristics and anthocyanin profiles of different *Vitis amurensis* grape cultivars and hybrids from Chinese germplasm [J]. *Molecules*, 2021, 26(21): 6696.
- [14] LINGUA M S, FABANI M P, WUNDERLIN D A, et al. From grape to wine: changes in phenolic composition and its influence on antioxidant activity [J]. *Food Chemistry*, 2016, 208: 228 – 238.
- [15] KATAM R, LIN C, GRANT K, et al. Advances in plant metabolomics and its applications in stress and single-cell biology [J]. *International Journal of Molecular Sciences*, 2022, 23(13): 6985.
- [16] EVANS A M, DEHAVEN C D, BARRETT T, et al. Integrated, nontargeted ultrahigh performance liquid chromatography/electrospray ionization tandem mass spectrometry platform for the identification and relative quantification of the small-molecule complement of biological systems [J]. *Analytical Chemistry*, 2009, 81(16): 6656 – 6667.
- [17] FIEHN O. Metabolomics-the link between genotypes and phenotypes [J]. *Plant Mol Biol*, 2002, 48(1/2): 155 – 171.
- [18] WILSON I D. High-performance liquid chromatography-mass spectrometry (HPLC-MS)-based drug metabolite profiling [J]. *Metabolic Profiling*, 2011, 708: 173 – 190.
- [19] CHEN W, GONG L, GUO Z, et al. A novel integrated method for large-scale detection, identification, and quantification of widely targeted metabolites: application in the study of rice metabolomics [J]. *Molecular Plant*, 2013, 6(6): 1769 – 1780.
- [20] SAITO K, MATSUDA F. Metabolomics for functional genomics, systems biology, and biotechnology [J]. *Annual Review of Plant Biology*, 2010, 61: 463 – 489.
- [21] ZOU Q, GUO Q, WANG T, et al. Comparison of metabolome characteristics and screening of chemical markers in *Chrysanthemum indicum* from different habitats [J]. *Physiology and Molecular Biology of Plants*, 2022, 28(1): 65 – 76.
- [22] WEI G, TIAN P, ZHANG F, et al. Integrative analyses of nontargeted volatile profiling and transcriptome data provide molecular insight into VOC diversity in cucumber plants (*Cucumis sativus*) [J]. *Plant Physiology*, 2016, 172(1): 603 – 618.
- [23] ROTHENBERG D O, YANG H, CHEN M, et al. Metabolome and transcriptome sequencing analysis reveals anthocyanin metabolism in pink flowers of anthocyanin-rich tea (*Camellia sinensis*) [J]. *Molecules*, 2019, 24(6): 1064.
- [24] LUDWIG M, FLEISCHAUER M, DÜHRKOP K, et al. De novo molecular formula annotation and structure elucidation using SIRIUS 4 [J]. *Methods Mol Biol*, 2020, 2104: 185 – 207.
- [25] REN R, SUN X E, HU L. A new method for hosting and sharing MATLAB Web App [J]. *Scientific Reports*, 2022, 12(1): 21645.
- [26] ZHONG H, LIU Z, ZHANG F, et al. Metabolomic and transcriptomic analyses reveal the effects of self- and hetero-grafting on anthocyanin biosynthesis in grapevine [J]. *Horticulture Research*, 2022, 9: uhac103 – 103.
- [27] FERRÃO L F V, AMADEU R R, BENEVENUTO J, et al. Genomic selection in an outcrossing autotetraploid fruit crop: lessons from blueberry breeding [J]. *Frontiers in Plant Science*, 2021, 12: 676326.
- [28] GAMBOA-BECERRA R, HERNÁNDEZ-HERNÁNDEZ M C, GONZÁLEZ-RÍOS ó, et al. Metabolomic markers for the early selection of *Coffea canephora* plants with desirable cup quality traits [J]. *Metabolites*, 2019, 9(10): 214.
- [29] SONG X, NIE F, CHEN W, et al. Coriander genomics database: A genomic, transcriptomic, and metabolic database for coriander [J]. *Horticulture Research*, 2020, 7: 55.

Analysis of difference in nutritional quality between grapes of the Eurasian group and hybrids

CHEN Qiyu¹, LI Yufei^{1,2}, XU Hang^{1,2}, LIU Xianqing^{1,2}, LUO Jie^{1,2}

(1. School of Tropical Crops/ Hainan Key Laboratory of Sustainable Utilization of Tropical Biological Resources, Hainan University, Haikou, Hainan 570228; 2. Hainan Yazhou Bay Seed Laboratory, Sanya, Hainan 572000, China)

Abstract: Grapes are vining plants of the genus *Vitis*, consisting of four major groups of *Vitis* species: Eurasian, American, East Asian, and hybrids selected from crosses of the three major groups. Twenty grape varieties from the Eurasian group (*V. vinifera*) and their hybrid populations were collected and analyzed by using a wide range of targeted metabolic assays, combined with multiple substance annotation methods to analyze the distribution and accumulation of nutrients in the grapes. A grape metabolic database was established containing 768 known metabolites, covering flavonoids, lipids, amino acids, vitamins, organic acids, terpenoids, polyphenols, phenolamines, and others. Metabolic analysis showed that there were differences in the accumulation of metabolites between the Eurasian group and the hybrids. The relative contents of total amino acids, vitamin B3 group, total fatty acids and four anthocyanins were higher in the hybrids than in the Eurasian group, while the relative contents of metabolites such as vitamin B6 and flavanols were higher in the Eurasian group.

Keywords: *Vitis vinifera*; metabolomics; database

(责任编辑:叶 静)