

PHÂN TÍCH XÁC ĐỊNH THÀNH PHẦN ĐỂ BAY HƠI TRONG MỘT SỐ LOẠI GẠO VIỆT NAM

Đến tòa soạn 26-10-2022

Nguyễn Quỳnh Hoa¹, Đào Hải Yến¹, Quân Cẩm Thúy²

1. Viện Hóa học, Viện Hàn lâm KH&CN Việt Nam

2. Trường đại học Công nghiệp Việt Trì

Email: hoanq8x@gmail.com

SUMMARY

AN ANALYSIS OF VOLATILE AROMATIC COMPOUNDS FOR THE DISCRIMINATION OF SENGCU RICE FROM OTHER RICE TYPES IN VIETNAM

Sengcu rice is highland speciality that has gaining popularities recently. Various authentication methods for the discrimination of high-quality Sengcu rice have been proposed; however, those relying on aromatic properties have not yet been proposed. In this study, an analysis is presented for the determination of volatile aromatic compounds (VAC) in rice using solid-phase microextraction combined with gas chromatography-tandem mass spectrometry. The method was then applied for the delimitation of Sengcu rice from other rice types including ST25, Tam, Bac Huong, Jasmine collected from several markets in Hanoi, Vietnam. The results show that in total, there were 48 VACs detected from rice samples. Principal component analysis extracted 16 PCs explaining more than 70% of the total variance, in which PC1 and PC2 explained 14.23% and 5.9% of the total variance, respectively. Partial least square-discriminant analysis (PLSDA) clearly separated Sengcu from other rice types based on their VAC composition. Generalized linear model for the principal-component-transformed intensity exhibited significant difference between Sengcu and other rice types. In particular, Sengcu rice stood out as the most significantly different one, whereas there was no significant difference detected among other types. 2-acetyl-1-pyrroline, 3-hydroxymandelic acid and 6-methyl-5-hepten-2-one were those compounds that mostly contributed to the difference among rice types. Further research expanding the number of rice types and sample size would greatly contribute to this procedure for the discrimination of Sengcu rice on the market.

Keyword(s): volatile aromatic compound, gas chromatography, mass spectrometry, Sengcu rice, 2-acetyl-1-pyrroline, 3-hydroxymandelic, 6-methyl-5-hepten-2-one

1. ĐẶT VẤN ĐỀ

Hương thơm là một trong những đặc tính quan trọng của gạo ảnh hưởng trực tiếp đến việc đánh giá cảm quan và xu hướng tiêu thụ của người tiêu dùng. Người tiêu dùng luôn xem hương thơm là một trong những tiêu chí đánh giá “cảm quan” về chất lượng gạo và dựa vào đặc tính này để so sánh chất lượng và giá trị của sản phẩm gạo trên thị trường [1-3].

Các nghiên cứu về hương thơm gạo khởi nguồn từ hơn 30 năm trước [2, 4], nhưng chỉ đến khi kỹ thuật sắc ký, đặc biệt là sắc ký khí (gas chromatography – GC), được phát hiện, phát triển và ứng dụng rộng rãi thì các nghiên cứu về mùi hương mới đạt được những bước tiến rõ rệt. Khi kết hợp GC với khối phổ (mass spectroscopy - MS), việc định tính và định lượng các hợp chất mùi hương trở nên dễ dàng

hơn trong các nền mẫu khác nhau và đã nâng cao kiến thức về thành phần mùi thơm trong gạo. Cho đến thời điểm hiện tại, có hơn 500 hợp chất tạo mùi hương dễ bay hơi (volatile aromatic compounds - VAC) được phát hiện trong các giống lúa có hương thơm và không có hương thơm khác nhau [2, 5].

Các hợp chất VAC cũng là một trong những đặc điểm quan trọng của gạo, các nhóm gạo khác nhau có các nhóm hợp chất VAC khác nhau [6]. Sém Cù là một trong những giống gạo đặc sản của vùng núi Tây Bắc nhờ chất lượng thơm ngon và mùi hương được cho là khác biệt so với các loại gạo khác. Chính vì vậy, sản phẩm gạo Sém Cù ngày càng được ưa chuộng và trở nên phổ biến trong thời gian gần đây, từ đó dễ bị đánh tráo với các loại gạo thương phẩm kém chất lượng hoặc giá trị kinh tế thấp hơn trên thị trường. Các hợp chất VAC trong gạo có thể đóng vai trò quan trọng đối với việc phân biệt gạo Sém Cù và các loại gạo khác.

Việc phân tích các chất VAC chủ yếu được thực hiện bằng cách kết hợp phương pháp xử lý mẫu thích hợp và GC-MS, trong đó, vi chiết pha rắn (solid-phase microextraction – SPME) là phương pháp chiết tách được sử dụng rộng rãi khi phân tích các hợp chất VAC [7]. Ưu điểm của SPME khi so sánh với các phương pháp chiết tách khác bao gồm thao tác thực hiện đơn giản, độ nhạy, độ chính xác và độ tái lập cao [8, 9].

Tuy nhiên nghiên cứu đã được thực hiện để tìm hiểu các hợp chất VAC đặc trưng và cơ chế hình thành mùi thơm của gạo [5,6], vẫn chưa có nghiên cứu nào đưa ra được con đường chính xác và cơ chế tạo ra từng loại mùi hương nhất định trong gạo. Chất lượng, mùi hương của gạo khá phức tạp do đây là hỗn hợp phối trộn của nhiều hợp chất dễ bay hơi cũng như phụ thuộc vào nhiều yếu tố ảnh hưởng, chẳng hạn, giống, các điều kiện môi trường trong quá trình trồng, và cách thức chế biến. Chính vì vậy, mục tiêu của nghiên cứu này hướng đến việc xác định được phương pháp phân tích các hợp chất VAC có trong gạo. Sau đó, phương pháp sẽ được áp dụng để phân tích và so sánh

gạo Sém Cù và các giống gạo khác dựa trên đặc điểm về VAC.

2. PHƯƠNG PHÁP NGHIÊN CỨU

2.1. Thu thập mẫu

Tổng cộng 69 mẫu gạo được phân tích trong nghiên cứu này bao gồm: gạo Sém Cù (n = 30), gạo ST25 (n = 5), gạo Tám (n = 17), gạo Bắc Hương (n = 8), gạo Jasmine (n = 4) và các loại gạo khác (n = 5) được thu thập từ các cơ sở kinh doanh ở Hà Nội, Việt Nam từ tháng 4 đến tháng 6 năm 2021. Các mẫu gạo sau khi thu gom được trữ trong túi nhựa kín và bảo quản trong tủ lạnh (4°C) cho tới khi thực hiện các thí nghiệm tiếp theo.

2.2. Thiết bị và hóa chất

Các dung môi hữu cơ được sử dụng trong nghiên cứu được cung cấp từ hãng Sigma-Aldrich (St. Louis, Hoa Kỳ). Nước tinh khiết lấy từ hệ thống nước khử ion Milli-Q Integral (Merck KGaA, Darmstadt, Đức) được sử dụng trong quá trình chế biến gạo. Hợp chất 2,4,6-trimethylpyridine (TMP) (độ tinh khiết 99%) được cung cấp bởi Sigma-Aldrich. Sợi vi chiết pha rắn (SPME) có thành phần divinylbenzen/carboxen/ polydimethylsiloxan (DVB/CAR/PDMS) được cung cấp bởi Supelco (Bellefonte, United States) và lọ thủy tinh không gian hơi 20 mL được cung cấp bởi Thermo Scientific (Waltham, Hoa Kỳ). Dung môi acetonitrile (đạt độ tinh khiết phân tích) được cung cấp bởi Merck (Merck KGaA, Darmstadt, Đức).

Hệ thống GC-MS/MS được sử dụng trong nghiên cứu bao gồm hệ thống Trace 1310 kết nối với khối phổ TSQ 9000 (Thermo Fisher Scientific, Waltham, Hoa Kỳ). Cột sắc kí DB-WAX (30 m × 0,25 mm, 0,25 µm) được cung cấp bởi Agilent Technologies (California, Hoa Kỳ).

2.3. Điều kiện vận hành hệ thống GC-MS

Điều kiện sắc kí khí: Chương trình nhiệt độ: 70°C (giữ trong 2 phút), tăng 8°C/phút lên 150°C (giữ trong 3 phút), tăng 8,5°C/phút lên 320°C (giữ trong 3 phút). Tổng thời gian phân tích là 38 phút. Nhiệt độ buồng bơm mẫu: 150°C. Chế độ tiêm mẫu không chia dòng. Khí mang Heli, tốc độ dòng 1,0 mL/phút. Nhiệt độ

bộ phận kết nối sắc kí khí và khối phổ: 320°C. Thể tích tiêm mẫu 1 µL.

Điều kiện khối phổ: Nguồn ion hoá: EI 70 eV, nhiệt độ nguồn ion 280°C. Thời gian cất dung môi: 0 phút. Chế độ Full scan (khoảng m/z: 35 – 500 Da).

2.4. Quá trình xử lý mẫu

Gạo thô được tiền xử lý bằng cách làm khô đến độ ẩm 12% bằng tủ sấy ở nhiệt độ 30°C, sau đó trữ ở tủ đông lạnh. Sau khi lấy mẫu ra khỏi tủ đông lạnh, các mẫu gạo được để cân bằng ở nhiệt độ phòng (21 – 23°C) qua đêm, sau đó xay nhỏ bằng máy nghiền, sàng qua rây 0,2 mm với độ giảm khối lượng từ 10 – 12% so với khối lượng ban đầu. Cân 3±0,001 g mẫu gạo rồi cho vào lọ 20 mL, sau đó thêm 4 mL nước siêu tinh khiết chứa 1 ng TMP làm chất chuẩn nội và lọ được đậy kín bằng nắp Teflon. Đun cách thủy mẫu trong 15 phút, sau đó sử dụng SPME (DVB/CAR/PDMS) hấp thu vùng hơi phía trên của lọ thủy tinh sau khi đun trong 20 phút ở nhiệt độ 80°C. Sau đó, SPME được chuyển đến bộ phận tiêm mẫu và giải hấp nhiệt, phần hơi được tiến hành phân tích trên hệ thống GC-MS. Các dữ liệu thu thập được xử lý bằng phần mềm Compound Discoverer 3.2 (Thermo Fisher Scientific, Waltham, Hoa Kỳ). Diện tích mũi sắc kí của hợp chất dễ bay hơi được chia cho diện tích mũi sắc kí của hợp chất TMP. Tỷ lệ này tương ứng với cường độ các hợp chất VAC và được sử dụng để làm dữ liệu cho các phương pháp phân tích dữ liệu đa biến.

2.5. Xử lý số liệu thống kê

Do số lượng các hợp chất thơm dễ bay hơi thu được lớn, các dữ liệu thu thập được sẽ được phân tích thành phần chính (principal component analysis), sau đó trích xuất các thành phần chính mang ý nghĩa đại diện cho toàn bộ số liệu (có khả năng giải thích nhiều nhất phương sai của toàn bộ bộ số liệu). Sau đó, các thành phần chính đại diện sẽ được phân tích hồi quy tuyến tính tổng quát hoá (generalized linear model) để so sánh cường độ các hợp chất VAC giữa các nhóm gạo khác nhau. Các cặp so sánh sẽ được hiệu chỉnh bằng phương pháp Bonferroni. Ngoài ra, phân tích

biệt thức kết hợp với bình phương tối thiểu từng phần (partial least squares-discriminant analysis) cũng được sử dụng để phân biệt gạo Sém Cù với các loại gạo khác. Các phép phân tích thống kê được thực hiện trên chương trình R (R Core Team, 2022).

3. KẾT QUẢ VÀ THẢO LUẬN

3.1. Xác định các hợp chất thơm dễ bay hơi

Tổng cộng 48 hợp chất VAC được phát hiện và phân tích từ các nhóm mẫu gạo thu được trong nghiên cứu này. Trong số đó, ancol là nhóm có số lượng hợp chất nhiều nhất, với 13 hợp chất chiếm 26,5% tổng số hợp chất. Andehit và keton là hai nhóm có số lượng hợp chất đứng thứ hai, với 7 hợp chất mỗi nhóm, chiếm 14,2% tổng số hợp chất. Ngoài ra, các hợp chất thuộc các nhóm khác như anken, este, etc... Tỷ lệ cường độ tín hiệu các hợp chất (so với TMP) tương đối tương đồng, nằm trong khoảng 4 – 8, với giá trị trung bình ± độ lệch chuẩn là 5,85 ± 0,98. Các thông tin chi tiết về từng hợp chất được trình bày trong Bảng S1. Hình S2 thể hiện sắc kí đồ của hợp chất 2-acetyl-1-pyrroline (2-AP), một trong những hợp chất VAC thường được phân tích trong gạo.

3.2. Phân tích thành phần chính

Do không có dữ liệu nào bất thường và các chất được phân tích trong cùng một điều kiện, dữ liệu được tiền xử lý bằng phương pháp centering trước khi tiến hành phân tích thành phần chính. PCA thu được 16 thành phần chính và 16 thành phần này giải thích được 70,7% tổng phương sai của bộ dữ liệu. Trong đó, ba thành phần chính đầu tiên lần lượt giải thích được 14,2; 5,9 và 5,0% tổng lượng phương sai của bộ dữ liệu. Mức độ đóng góp của từng hợp chất đối với ba PC đầu tiên được thể hiện chi tiết ở Bảng 1. Ở thành phần chính 1, có 10 hợp chất có mức độ đóng góp trên 0,5, trong đó, 2-AP, axit 3-hydroxymandelic và 5-hepten-2-one, 6-methyl- là các hợp chất quan trọng nhất với tỉ trọng lần lượt là 0,84, 0,71 và 0,74. Ở thành phần chính 2, không có hợp chất nào có mức độ đóng góp trên 0,5 và ở thành phần chính 3, chỉ có spironolactone là chất duy nhất có mức độ đóng góp 0,63. Chính vì vậy, thành phần chính 1 được lựa chọn để tiến hành

phân tích mô hình hồi quy tuyến tính tổng quát hoá. Sự phân bố của các mẫu gạo theo hai thành phần chính đầu tiên được trình bày trong Hình 1. Theo đó, thành phần chính thứ nhất tách biệt hoàn toàn gạo Ség Cù với các loại gạo khác.

3.3. Phân tích mô hình hồi quy tuyến tính tổng quát hoá

Đối với mô hình hồi quy tuyến tính tổng quát hoá, nhóm mẫu gạo được sử dụng là biến giải thích (explanatory variable) và tỉ lệ cường độ tín hiệu của các mẫu gạo theo thành phần chính thứ nhất là biến phụ thuộc (response variable). Kiểm định Omnibus cho thấy mô hình mang ý nghĩa thống kê, với các chỉ số χ^2 là 144,02, bậc tự do là 5 và trị số $p < 0,001$. Kiểm định về từng thông số của mô hình cho thấy, yếu tố nhóm đóng vai trò quan trọng đối với sự biến thiên của tỉ lệ cường độ tín hiệu các mẫu gạo theo thành phần chính thứ nhất. Cụ thể, hệ số Wald χ^2 của yếu tố nhóm là 487,33 với 5 bậc tự do và trị số $p < 0,001$. Khi so sánh tỉ lệ cường độ tín hiệu giữa các nhóm bằng kiểm định Bonferroni để hiệu chỉnh hệ số P khi thực hiện nhiều phép so sánh cùng lúc, mẫu gạo Ség Cù cho thấy sự khác biệt mang ý nghĩa thống kê so với mẫu gạo của các nhóm còn lại ($p < 0,001$), trong khi đó, không có sự khác biệt mang ý nghĩa thống kê nào được phát hiện giữa các nhóm còn lại ($p = 1$) (Hình 2). Kết quả này cho thấy, thành phần chính thứ nhất, đặc biệt là sự đóng góp của các hợp chất như 2-AP, axit 3-hydroxymandelic và 5-hepten-2-one, 6-methyl- mang ý nghĩa quan trọng đối với việc phân biệt các mẫu gạo dựa vào thành phần cấu tạo mùi hương của chúng.

3.4. Phân tích biệt thức kết hợp với bình phương tối thiểu từng phần

Tương tự như PCA, dữ liệu được tiền xử lý bằng phương pháp centering. Kết quả cho thấy sự phân biệt rõ ràng giữa mẫu gạo Ség Cù và các mẫu gạo khác ở hai thành phần đầu tiên (Hình 3). Mô hình PLS-DA sau khi được tiến hành thẩm định bằng phương pháp leave-one-out cho thấy độ chính xác cao nhất ở 2 PC đầu

tiên với tỉ lệ lỗi phân nhóm đạt mức 2,56%. Điều này cho thấy mô hình PLS-DA xây dựng trên tập hợp các chất VAC là đáng tin cậy và có thể sử dụng được để phân biệt gạo Ség Cù với các loại gạo khác.

2-AP là một trong những hợp chất VAC trong gạo được phát hiện đầu tiên [10], đồng thời cũng là hợp chất VAC phổ biến thường được phát hiện trong các mẫu gạo hoặc các giống cây trồng khác [11]. 2-AP tạo ra mùi giống mùi bông ngô. Tuy nhiên, mùi hương của gạo không chỉ do 2-AP cấu thành mà là tổng hợp của nhiều hợp chất khác cũng như phụ thuộc nhiều vào hàm lượng và ngưỡng phát hiện mùi của hợp chất trong mẫu. Axit 3-hydroxymandelic tạo ra mùi có vị ngọt và mùi sữa [12], còn 5-hepten-2-one, 6-methyl tạo ra mùi giống mùi cỏ hoặc mùi xà [13]. Đây cũng là hai hợp chất phổ biến thường được phát hiện trong các mẫu thực phẩm.

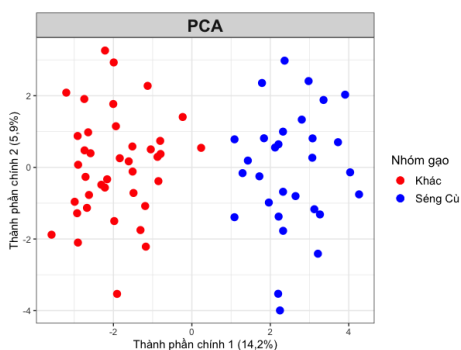
4. KẾT LUẬN

Nghiên cứu đã thành công trong việc đưa ra được phương pháp xác định trực tiếp mùi hương trên gạo và áp dụng thành công để phân biệt gạo Ség Cù và các loại gạo khác. Kết quả cho thấy, phương pháp thu thập mẫu SPME kết hợp với hệ GC-MS đã tách chiết và xác định được 48 hợp chất VAC trong các mẫu gạo tại Việt Nam. Trong đó, gạo Ség Cù có tỉ lệ cường độ tín hiệu khác biệt hoàn toàn so với các mẫu gạo khác như gạo ST25, gạo Tám, gạo Bắc Hương và gạo Jasmine. Các hợp chất như 2-AP, axit 3 hydroxymandelic và 5-hepten-2-one, 6-methyl là những hợp chất quan trọng góp phần vào việc phân biệt gạo Ség Cù so với các giống gạo khác dựa vào thành phần các hợp chất mùi hương. Đây cũng là các hợp chất phổ biến thường được phát hiện trong các sản phẩm gạo và các giống cây trồng khác. Kết quả của nghiên cứu này có thể sử dụng làm tiền đề để phát triển phương pháp xác định mùi hương trên gạo, đồng thời ứng dụng trực tiếp vào việc phân biệt gạo Ség Cù với các giống gạo khác trên thị trường dựa vào thành phần cấu tạo nên mùi hương.

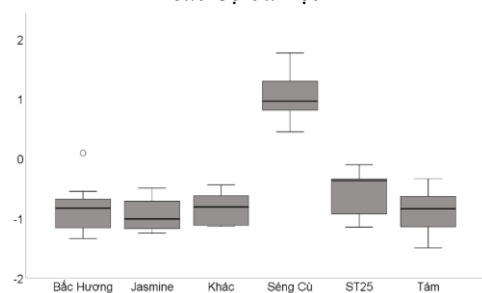
Bảng 1. Mức độ đóng góp của các hợp chất dễ bay hơi trong ba thành phần chính đầu tiên

Hợp chất	TPC 1	TPC 2	TPC3	Hợp chất	TPC 1	TPC 2	TPC3
2-[2-(2-Ethoxyethoxy) ethoxy]-ethanol	0.041	0.233	0.132	1-Octen-3-ol	0.484	0.186	0.067
3-Methyl-pentane	-0.023	-0.351	0.064	6-Dodecaneol acetate	0.421	0.092	0.122
n-Hexane	0.026	-0.139	0.022	Cyclodecanol	-0.042	0.125	-0.016
Tetrachloroethylene	0.035	0.093	0.132	(E)-2-decen-1-ol	0.051	-0.048	0.005
Chlorpropamide	0.112	0.089	-0.057	1-methoxy-dodecane	0.064	-0.32	-0.19
Hexanal	0.138	-0.242	-0.026	Benzaldehyde	0.153	-0.295	0.062
2-AP	0.844	-0.054	-0.069	cis-11-hexadecenal	0.229	0.404	-0.253
N-Benzylaniline	0.328	-0.013	-0.179	(Z)-6-nonenal	-0.038	0.123	-0.213
Axit 3-hydroxymandelic	0.712	-0.326	-0.184	6-Hydroxy-4'-methoxyflavone	0.116	0.092	-0.284
1,4,7,10,13,16-Hexaoxacyclooctadecane	-0.17	0.142	0.014	1-Undecanethiol	0.071	-0.418	0.356
2-Pentyl-furan	0.415	0.009	0.462	2-Pentadecanol	0.069	-0.205	0.234
Axit 2,6-dihydroxybenzoic	0.188	0.091	-0.131	Z-2-Dodecenol	0.124	0.151	0.193
4-AP	0.545	0.457	-0.087	3,7,11-trimethyl-1-dodecanol	0.013	0.022	0.253
1-Pentanol	0.61	0.063	0.079	1-Methoxydecane	-0.103	-0.042	0.14
Octanal	0.52	-0.001	-0.206	3,7-dimethyl-1,7-octanediol	0.057	0.004	0.058
(E)-2-heptenal	0.426	-0.039	-0.062	Cyclododecanone	0.131	0.122	0.055
2-Hexadecanol	0.544	-0.421	-0.156	3,4-Dihydroxyphenylglycol	0.047	-0.415	0.015
6-Methyl-5-hepten-2-one	0.744	-0.013	0.141	2,4,7,9-Tetramethyl-5-decyn-4,7-diol	-0.211	0.246	-0.144
1,3,5-Benzetriol	0.609	0.039	0.104	6,10-dimethyl-5,9-undecadien-2-one	0.072	0.196	-0.126
1-Hexanol	0.392	-0.137	-0.312	Methyl 10-oxooctadecanoate	-0.046	0.377	0.065
Axit phosphonoacetic	0.581	-0.092	-0.468	Heptaethylene glycol	-0.206	0.268	-0.107
Spirolactone	0.387	-0.072	0.629	6,10,14-trimethyl-2-Pentadecanone	-0.056	-0.03	-0.329
2-Ethyl-1-hexanethiol	0.316	0.196	0.33	5-methoxy-1-pentanol	0.043	0.359	0.131
(Z)-7-hexadecenal	0.635	0.424	0.08	3,5-bis(1,1-dimethylethyl)-phenol	0.013	0.091	0.123

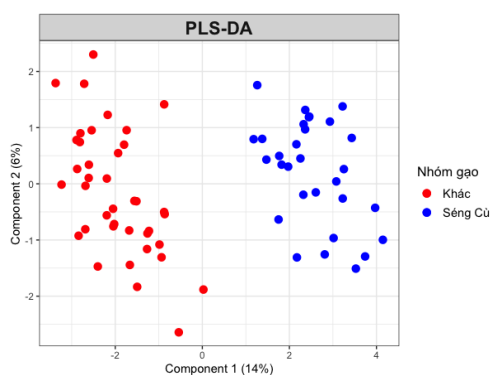
*TPC: Thành phần chính



Hình 1. Phân bố các điểm dữ liệu tương ứng với các mẫu gạo thu được theo hai thành phần chính đầu tiên. Thành phần chính 1 và 2 giải thích 14,23% và 5,86% tổng lượng biến thiên của bộ dữ liệu



Hình 2. Biểu đồ hộp thể hiện tỉ lệ cường độ tín hiệu của các mẫu gạo theo thành phần chính thứ nhất.



Hình 3. Phân bố các điểm dữ liệu của gạo Sống Cù và các mẫu gạo khác theo hai thành phần đầu tiên của mô hình PLS-DA

Lời cảm ơn. Nghiên cứu này được hỗ trợ bởi Viện Hoá học, Viện Hàn lâm Khoa học và Công nghệ Việt Nam với mã số đề tài VHH.2022.13.

TÀI LIỆU THAM KHẢO

1. Singh, R., et al., *Small and medium grained aromatic rices of India*. Aromatic

rices. Oxford & IBH, New Delhi, 2000: p. 155-177.

2. Verma, D.K. and P.P. Srivastav, *Introduction to rice aroma, flavor, and fragrance*. Science and technology of Aroma, Flavour and Fragrance in Rice. In: Verma DK, Srivastav PP, editors. Apple Academic Press, USA, 2018: p. 3-34.

3. Verma, D.K. and P.P. Srivastav, *Science and technology of aroma, flavor, and fragrance in rice*. 2018: CRC Press.

4. Okpala, N.E., et al., *The genetics and biosynthesis of 2-acetyl-1-pyrroline in fragrant rice*. Plant Physiology and Biochemistry, 2019. **135**: p. 272-276.

5. Verma, D.K. and P.P. Srivastav, *Extraction technology for rice volatile aroma compounds*, in *Food Engineering*. 2016, Apple Academic Press. p. 281-328.

6. Bryant, R. and A. McClung, *Volatile profiles of aromatic and non-aromatic rice cultivars using SPME/GC-MS*. Food chemistry, 2011. **124**(2): p. 501-513.

7. Fries, E. and W. Püttmann, *Improvement of HS-SPME for analysis of volatile organic compounds (VOC) in water samples by simultaneous direct fiber cooling and freezing of analyte solution*. Analytical and bioanalytical chemistry, 2006. **386**(5): p. 1497-1503.

8. Risticvic, S., et al., *Protocol for solid-phase microextraction method development*. Nature protocols, 2010. **5**(1): p. 122-139.

9. Lee, D.-K., et al., *Non-invasive characterization of the adipogenic differentiation of human bone marrow-derived mesenchymal stromal cells by HS-SPME/GC-MS*. Scientific Reports, 2014. **4**(1): p. 1-8.

10. Buttery, R.G., J.G. Turnbaugh, and L.C. Ling, *Contribution of volatiles to rice aroma*. Journal of agricultural and food chemistry, 1988. **36**(5): p. 1006-1009.

11. López-Galilea, I., et al., *Changes in headspace volatile concentrations of coffee brews caused by the roasting process and the*

brewing procedure. Journal of Agricultural and Food Chemistry, 2006. **54**(22): p. 8560-8566.

12. Hiran, P., O. Kerdchoechuen, and N. Laohakunjit, *Combined effects of fermentation and germination on nutritional compositions, functional properties and volatiles of maize*

seeds. Journal of Cereal Science, 2016. **71**: p. 207-216.

13. Dias, L., et al., *Identification of volatiles and odor-active compounds of aromatic rice by OSME analysis and SPME/GC-MS*. Food Research International, 2021. **142**: p. 110206.

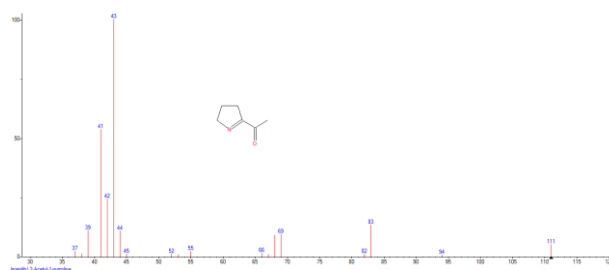
Supplementary material

Bảng S1. Các hợp chất dễ bay hơi phân tích từ các mẫu gạo thử nghiệm

Hợp chất	Nhóm	Công thức phân tử	Khối lượng phân tử
2-[2-(2-ethoxyethoxy) ethoxy]-ethanol	Ete	C ₈ H ₁₈ O ₄	178.2261
3-methyl-pentane	Anken	C ₆ H ₁₄	86.1754
n-hexane	Anken	C ₆ H ₁₄	86.1754
Tetrachloroethylene	Chlorocarbon	C ₂ Cl ₄	165.833
Chlorpropamide	Monoclo benzene	C ₁₀ H ₁₃ ClN ₂ O ₃ S	276.74
Hexanal	Andehit	C ₆ H ₁₂ O	100.1589
2-AP	Keton	C ₆ H ₉ NO	111.1418
N-benzylaniline	Dẫn xuất N-ankyn của nhóm anilin	C ₁₃ H ₁₃ N	183.249
Axit 3-hydroxymandelic	Este	C ₈ H ₈ O ₄	168.15
1,4,7,10,13,16-Hexaoxacyclooctadecane	Ete	C ₁₂ H ₂₄ O ₆	264.3154
2-pentyl-furan	Furan	C ₉ H ₁₄ O	138.2069
Axit 2,6-dihydroxybenzoic	Benzenoid	C ₇ H ₆ O ₄	154.12
4-AP	Keton	C ₆ H ₉ NO	111.14
1-pentanol	Ancol	C ₅ H ₁₂ O	88.1482
Octanal	Andehit	C ₈ H ₁₆ O	128.212
(E)-2-Heptenal	Andehit	C ₇ H ₁₂ O	112.1696
2-Hexadecanol	Ancol	C ₁₆ H ₃₄ O	242.4406
6-Methyl-5-hepten-2-one	Keton	C ₈ H ₁₄ O	126.1962
1,3,5-Benzetriol	Benzentriol	C ₆ H ₆ O ₃	126.11
1-Hexanol	Ancol	C ₆ H ₁₄ O	102.1748
Axit phosphonoacetic	Axit photpho hữu cơ	C ₂ H ₅ O ₅ P	140.0319
Spironolactone	Steroid lacton	C ₂₄ H ₃₂ O ₄ S	416.573
2-Ethyl-1-hexanethiol	Ankin-thiol	C ₈ H ₁₈ S	146.294
(Z)-7-hexadecenal	Andehit	C ₁₆ H ₃₀ O	238.4088
1-Octen-3-ol	Ancol	C ₈ H ₁₆ O	128.212
6-Dodecaneol acetate	Ete	C ₁₄ H ₂₈ O ₂	228.37
Cyclodecanol	Ancol	C ₁₀ H ₂₀ O	156.2652
(E)-2-Decen-1-ol	Ancol	C ₁₀ H ₂₀ O	156.2652
1-Methoxy-dodecane	Ete	C ₁₃ H ₂₈ O	200.3608
Benzaldehyde	Andehit	C ₇ H ₆ O	106.1219
cis-11-Hexadecenal	Andehit	C ₁₆ H ₃₀ O	238.4088
(Z)-6-Nonenal	Andehit	C ₉ H ₁₆ O	140.2227

6-Hydroxy-4'-methoxyflavone	Keton	$C_{16}H_{12}O_4$	268.26
1-Undecanethiol	Anken-thiol	$C_{11}H_{24}S$	188.373
2-Pentadecanol	Ancol	$C_{15}H_{32}O$	228.414
Z-2-Dodecenol	Ancol	$C_{12}H_{24}O$	184.3184
1-Dodecanol, 3,7,11-trimethyl	Ancol	$C_{15}H_{32}O$	228.414
1-Methoxydecane	Ete	$C_{11}H_{24}O$	172.3077
3,7-dimethyl-1,7-octanediol	Ancol	$C_{10}H_{22}O_2$	174.2805
Cyclododecanone	Keton	$C_{12}H_{22}O$	182.3025
3,4-Dihydroxyphenylglycol	Benzendiol	$C_8H_{10}O_4$	170.16
2,4,7,9-Tetramethyl-5-decyn-4,7-diol	Ancol	$C_{14}H_{26}O_2$	226.355
6,10-Dimethyl-5,9-undecadien-2-one	Ketone	$C_{13}H_{22}O$	194.3132
Methyl 10-oxooctadecanoate	Este	$C_{19}H_{36}O_3$	312.5
Heptaethylene glycol	Ancol	$C_{14}H_{30}O_8$	326.3832
6,10,14-Trimethyl-2-pentadecanone	Keton	$C_{18}H_{36}O$	268.4778
5-Methoxy-1-pentanol	Ancol	$C_6H_{14}O_2$	118.1742
3,5-bis(1,1-dimethylethyl)-phenol	Phenol	$C_{14}H_{22}O$	206.3239

CAS Registry Number: 85213-22-5



Hình S2. Sắc kí đồ của hợp chất 2-acetyl-1-pyrroline