

# GCMSMS 结合香味数据库分析白酒中气味成分

## GCMSMS-256

**摘要：** 本文使用岛津三重四极杆气相色谱质谱联用仪 GCMS-TQ8050 NX，结合全自动多功能进样器 AOC-6000 的 SPME 进样方式，利用 Smart Aroma Database 香味数据库建立了白酒中 503 种气味成分的分析方法。使用此方法检测了三种不同香型的白酒中的气味成分，并进行差异性分析，该方法可以考虑作为白酒香型的种类识别的辅助手段。该方法操作简单，易于分析，适用于白酒气味成分的筛查分析。

**关键词：** 气相色谱 - 三重四极杆气质联用仪 香味数据库 白酒 气味成分

中国白酒的历史悠久，是世界六大蒸馏酒之一，是中华传统文化的结晶。白酒因气候、地理等环境的影响及酿造工艺的不同，具有不同的风味，一般来说，中国白酒可以分为酱香型、清香型、浓香型、兼香型、芝麻香型、特香型等多个香型种类。白酒风味特征作为酒类感官特征中最重要也是最直接的指标，对消费者的消费选择起着决定性的影响，白酒气味物质种类多样，酸、酯、醇、醛等物质种类和配比的不同，决定了它风味的不同。因此，对酒类风味物质的差异性研究有助于白酒香型的

种类识别。

Smart Aroma Database 是一款含有超过五百种化合物的专用气味分析数据库，可以实现气味组分的靶向分析，能够最大限度地减少分析时间成本和经济成本。本文利用 Smart Aroma Database 数据库建立白酒中 503 种气味成分的分析方法，对三种不同香型的白酒进行了分析。该方法方便快捷，可以考虑作为白酒风味分析与香型识别的辅助手段。

## ■ 实验部分

### 1.1 仪器

GCMS-TQ8050 NX 三重四极杆气质联用仪  
AOC-6000 自动进样器

### 1.2 分析条件

SPME 参数：

SPME 纤维：DVB/CAR/PDMS 80  $\mu$ m

老化温度：260°C

老化时间（萃取前）：0 min

萃取时间：30 min

GC-MS/MS 参数：

色谱柱：

SH-Polar Wax, 60 m  $\times$  0.25 mm  $\times$  0.25  $\mu$ m

进样口温度：250°C

柱温程序：

40°C (5 min)<sub>3°C /min</sub> 250°C (15 min)

载气控制：恒线速度模式，25.5 cm/s

老化时间（萃取后）：3 min

平衡温度：50°C

平衡时间：10 min

解吸时间：3 min

进样方式：分流进样

分流比：5:1

离子源温度：200°C

接口温度：250°C

检测器电压：调谐电压 +0.1 kV

采集方式：SCAN (35~400 amu)

### 1.3 样品前处理

将顶空瓶置于 90°C 烘箱中烘烤 60 min，准确移取 1 mL 白酒样品于烘烤后的 20 mL 顶空瓶中，加入 4 mL 超纯水和 1.8 g 氯化钠，密封后按 1.2 条件上机分析。

## ■ 结果与讨论

### 2.1 气味系统方法建立流程

岛津香味数据库 (Smart Aroma Database) 包含一系列分析方法、质谱库等文件。使用 Aroma\_TQ\_SH-PolarWax\_AART 方法测定正构烷烃标准样品, 用于预测目标组分的保留时间并结合数据库生成目标物检测的方法文件。

利用正构烷烃数据以及 Smart Aroma Database 香味数据库建立 503 种气味成分的 SCAN 模式采集方法, GCMS-TQ8050 NX 可利用该方法在没有目标组分标准品的情况下对这些组分进行定性筛查。图 1 为香味数据库的创建方法界面和方法创建完成界面。

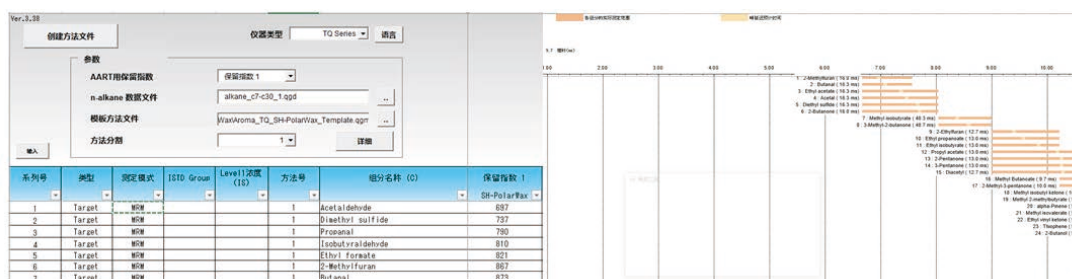
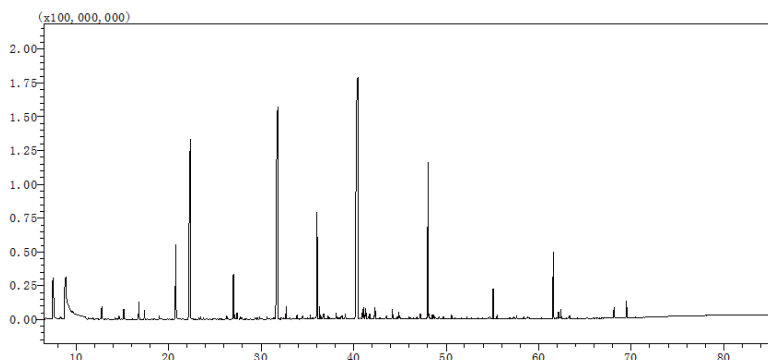


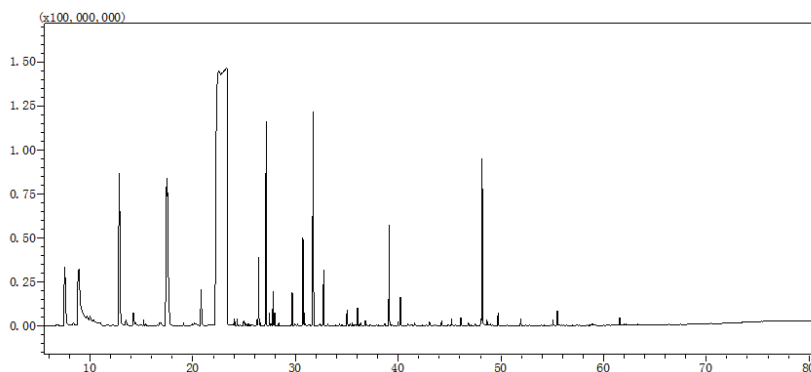
图 1 香味数据库界面

### 2.2 白酒样品检测结果

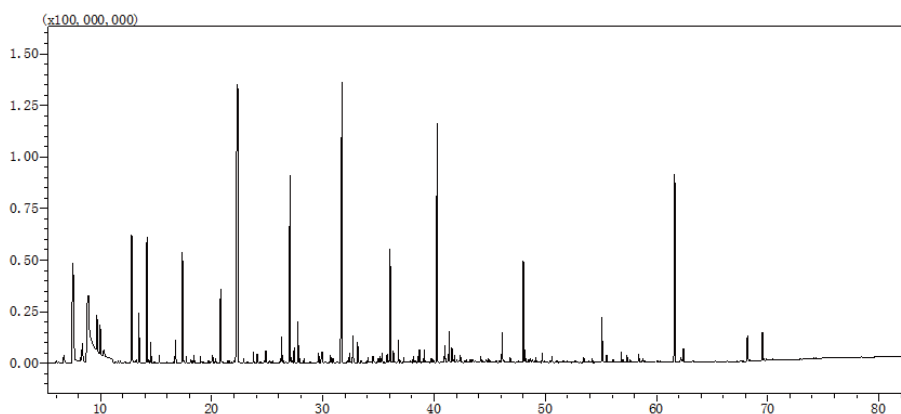
对 3 种香型的白酒样品 (清香型 A、兼香型 B 和酱香型 C) 进行了测定, 每种香型做三个平行, TIC 图见图 2。



(A)



(B)



(C)

图 2 白酒样品的 TIC 图 (清香型 A、兼香型 B 和酱香型 C)

## 2.2.1 白酒样品的气味组分的筛查结果

3 种香型的白酒样品共筛查出 159 种组分, 结果如表 1 所示 (峰面积为三次平行测定的平均峰面积)。

表 1 三种香型白酒样品气味成分筛查结果

No.	化合物	化合物 (英文名)	保留 时间	平均峰面积			CAS 号	气味特征
				A	B	C		
1	乙醛	Acetaldehyde	4.607	616384	1302106	4032724	75-07-0	刺激气味, 乙醚味
2	异丁醛	Isobutyraldehyde	5.818	97545	134736	844627	78-84-2	辛辣, 麦芽味, 青草味
3	甲酸乙酯	Ethyl formate	6.039	26356	62168	420370	109-94-4	刺激气味
4	乙酸乙酯	Ethyl acetate	7.366	89454626	106072750	103986117	141-78-6	菠萝香味
5	1,1- 二乙氧基 乙烷	Acetal	7.466	1226187	1861060	5311847	105-57-7	水果味, 奶油味
6	2- 甲基丁醛	2-Methylbutanal	8.104	58621	56429	452572	96-17-3	可可味, 杏仁味
7	异戊醛	3-Methylbutanal	8.206	340232	551477	2737705	590-86-3	麦芽味
8	2- 乙基呋喃	2-Ethylfuran	9.398	58265	N.D.	N.D.	3208-16-0	化学品, 豆, 可可, 面包, 麦芽, 咖啡, 坚果
9	丙酸乙酯	Ethyl propanoate	9.569	368475	828344	7390784	105-37-3	水果味
10	异丁酸乙酯	Ethyl isobutyrate	9.841	173690	1192271	4422910	97-62-1	甜味, 橡胶味
11	乙酸丙酯	Propyl acetate	10.182	319669	684347	2186734	109-60-4	甜味, 芳香味
12	异丁醛二乙 基乙缩醛	1,1-Diethoxy-2- methylpropane	10.25	193775	169125	1206990	1741-41-9	/
13	乙酸仲丁酯	Sec-Butyl Acetate	10.659	28908	47673	88272	105-46-4	香蕉味, 甜味
14	乙酸异丁酯	Isobutyl acetate	11.707	447198	197931	500234	110-19-0	水果, 苹果, 香蕉味
15	$\alpha$ - 蒎烯	alpha-Pinene	11.841	21887	N.D.	N.D.	80-56-8	松木, 松脂, 松节油味

16	仲丁醇	2-Butanol	12.066	547398	444801	672644	78-92-2	酒味
17	丁酸乙酯	Ethyl butanoate	12.694	5490988	93112461	46421059	105-54-4	苹果味
18	丙酸正丙酯	Propyl propionate	13.053	85534	412958	526013	106-36-5	菠萝味
19	2-甲基丁酸乙酯	Ethyl 2-methylbutyrate	13.412	377955	4524582	19461745	7452-79-1	苹果味
20	异戊酸乙酯	Ethyl 3-methylbutanoate	14.175	707071	6403000	43013541	108-64-5	水果味
21	乙酸丁酯	Butyl acetate	14.354	N.D.	2009129	1940274	123-86-4	梨子味
22	二甲基二硫	Dimethyl disulfide	14.399	367660	N.D.	N.D.	624-92-0	洋葱味, 卷心菜味, 腐烂味
23	2-己酮	2-Hexanone	14.713	N.D.	N.D.	44339	591-78-6	醚味
24	正己醛	Hexanal	14.803	34358	76957	112003	66-25-1	脂肪味, 青草味
25	异丁醇	Isobutanol	15.072	10633882	4272649	5533211	78-83-1	酒味, 溶剂味, 苦味
26	2-戊醇	2-Pentanol	16.45	N.D.	185865	404806	6032-29-7	绿植香气
27	乙酸异戊酯	Isoamyl acetate	16.694	1917619	582218	1565694	123-92-2	香蕉味
28	对二甲苯	p-Xylene	17.232	142876	N.D.	22516	106-42-3	甜味
29	戊酸乙酯	Ethyl valerate	17.33	1309660	80275616	13912305	539-82-2	酵母味, 水果味
30	间二甲苯	m-Xylene	17.525	205082	N.D.	60975	108-38-3	塑料味
31	正丁醇	1-Butanol	17.623	375936	9572171	4319204	71-36-3	药味, 水果味
32	乙酸戊酯	Pentyl acetate	19.187	24188	39642	351269	628-63-7	香蕉味
33	2-庚酮	2-Heptanone	19.627	170351	N.D.	1563794	110-43-0	肥皂味
34	邻二甲苯	o-Xylene	19.725	118939	N.D.	76622	95-47-6	天竺葵味
35	庚醛	Heptanal	19.823	25271	N.D.	N.D.	111-71-7	脂肪味, 柑橘味, 哈喇味
36	己酸甲酯	Methyl hexanoate	19.872	14680	495002	53370	106-70-7	水果味, 清新的, 甜味
37	异己酸乙酯	Ethyl isocaproate	20.018	242323	2964277	1754576	25415-67-2	水果味
38	双戊烯	Limonene	20.263	115770	N.D.	21472	138-86-3	柠檬味, 橙子味
39	异戊醇	Isoamyl alcohol	20.701	36869311	17575689	24490570	123-51-3	威士忌, 麦芽, 焦味
40	2-正戊基呋喃	2-Pentylfuran	22.059	929127	N.D.	96970	3777-69-3	绿豆味, 黄油味
41	正己酸乙酯	Ethyl hexanoate	22.156	80515105	580938665	87852436	123-66-0	苹果皮, 水果味
42	$\gamma$ -松油烯	gamma-Terpinene	22.642	8480	N.D.	N.D.	99-85-4	汽油味, 松节油味
43	1-戊醇	1-Pentanol	22.836	44915	N.D.	989253	71-41-0	香脂的
44	3-辛酮	3-Octanone	23.176	408872	N.D.	397314	106-68-3	草本味, 奶油味, 树脂味

45	苯乙烯	Styrene	23.37	2257632	N.D.	63187	100-42-5	香脂的, 汽油味
46	丁酸异戊酯	Isoamyl butyrate	23.709	135030	583147	838828	106-27-4	水果味
47	4- 异丙基甲 苯	p-Cymene	23.903	48399	25709	32474	99-87-6	溶剂味, 汽油味, 柑橘味
48	乙酸己酯	Hexyl acetate	24.049	163014	729455	1085256	142-92-7	水果味, 草本味
49	1,2,4- 三甲 苯	1,2,4-Trimethylbenzene	24.486	60276	N.D.	29446	95-63-6	塑料味
50	仲辛酮	2-Octanone	24.777	244187	1015292	778839	111-13-7	肥皂味, 汽油味
51	正辛醛	Octanal	24.874	58340	44114	116729	124-13-0	脂肪, 肥皂, 柠檬, 绿植
52	1- 辛烯 -3- 酮	1-Octen-3-one	25.495	33553	43219	59264	4312-99-6	蘑菇味, 金属味
53	丁酸戊酯	Pentyl butyrate	26.147	52422	449228	288119	540-18-1	香蕉味
54	2- 庚醇	2-Heptanol	26.194	24661	190448	432124	543-49-7	蘑菇味
55	己酸丙酯	Propyl hexanoate	26.287	1307331	19887153	6860898	626-77-7	水果味
56	2,6- 二甲基吡 嗪	2,6-Dimethylpyrazine	26.706	N.D.	N.D.	151142	108-50-9	可可味, 烤坚果味, 烤牛肉味
57	庚酸乙酯	Ethyl heptanoate	26.939	8776203	47886834	34905977	106-30-9	水果味
58	6- 甲基 -5- 庚 烯 -2- 酮	6-Methyl-5-hepten-2-one	27.172	23381	N.D.	N.D.	110-93-0	胡椒, 蘑菇, 橡胶
59	乳酸乙酯	Ethyl lactate	27.405	13305693	20212328	19604608	97-64-3	水果
60	正己醇	1-Hexanol	27.731	589994	6933960	7991880	111-27-3	树脂, 花, 绿植
61	乙酸庚酯	Heptyl acetate	28.848	18545	17778	109472	112-06-1	梨, 水果的, 香气的, 甜味
62	叶醇	cis-3-Hexen-1-ol	29.221	37627	23641	15459	928-96-1	青草味
63	二甲基三硫	Dimethyl trisulfide	29.268	671081	N.D.	N.D.	3658-80-8	硫磺味, 鱼腥味, 卷心菜味
64	醋酸 -2- 乙基 己酯	2-Ethylhexyl acetate	29.268	52851	N.D.	N.D.	103-09-3	水果味
65	2- 乙基 -5- 甲 基吡嗪	2-Ethyl-5-methylpyrazine	29.314	N.D.	42849	190686	13360-64-0	水果味, 甜味
66	2- 壬酮	2-Nonanone	29.594	233202	4016533	1078254	821-55-6	热牛奶, 肥皂味, 绿植味
67	3- 辛醇	3-Octanol	29.64	93796	N.D.	250299	589-98-0	苔藓, 坚果, 蘑菇味
68	壬醛	Nonanal	29.78	355497	249188	473042	124-19-6	脂肪味, 柑橘味, 绿植味
69	2,3,5- 三甲 基吡嗪	2,3,5-Trimethylpyrazine	30.141	N.D.	11978	105540	14667-55-1	烘烤, 土豆味, 霉味
70	己酸丁酯	Butyl hexanoate	30.583	1003243	26779208	1755461	626-82-4	水果味

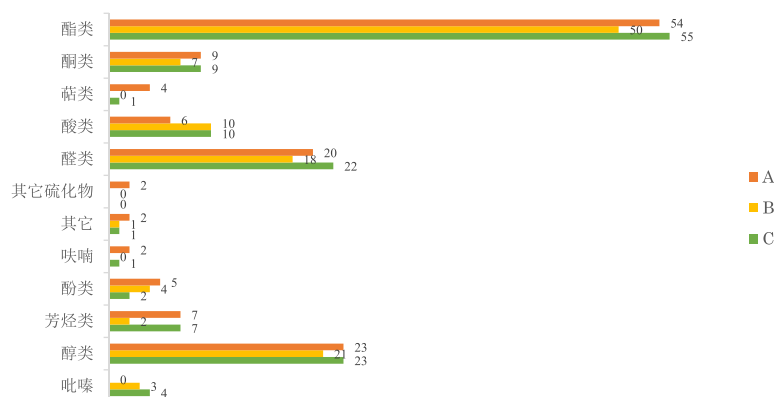
71	丁酸己酯	Hexyl butyrate	30.76	349477	3571809	1436169	2639-63-6	苹果皮, 水果味
72	异戊酸己酯	Hexyl 2-methylbutanoate	31.246	N.D.	729105	482385	10032-15-2	草莓
73	辛酸乙酯	Ethyl octanoate	31.6	95099841	45589000	56624865	106-32-1	水果味, 脂肪味
74	1-辛烯-3-醇	1-Octen-3-ol	32.175	258462	46868	72191	3391-86-4	蘑菇味
75	正庚醇	1-Heptanol	32.396	360106	751799	2876335	111-70-6	化学品味, 绿植味
76	己酸异戊酯	Isopentyl hexanoate	32.705	980865	4154888	1405218	2198-61-0	脂肪酸, 果香味的
77	2,3-二甲 基-5-乙基吡 嗪	5-Ethyl-2,3-dimethylpyra- zine	32.749	N.D.	18337	94929	15707-34-3	焦味, 爆米花味
78	糠醛	Furfural	33.147	867188	1331378	13624038	98-01-1	面包, 杏仁, 甜味
79	醋酸辛酯	Octyl acetate	33.368	140445	57058	442251	112-14-1	椰子, 植物油, 芳香的
80	2-乙基己醇	2-Ethylhexanol	33.899	552204	97721	125058	104-76-7	玫瑰, 绿植
81	癸醛	n-Decanal	34.425	377864	N.D.	559507	112-31-2	肥皂味, 橙皮味, 动物油
82	2-壬基醇	2-Nonanol	35.179	107229	172222	1235263	628-99-9	黄瓜味
83	苯甲醛	Benzaldehyde	35.725	510184	459805	4362721	100-52-7	杏仁, 焦糖味
84	壬酸乙酯	Ethyl nonanoate	35.976	15666289	1542920	9143699	123-29-5	水果味, 玫瑰, 坚果味的
85	(E)-2-壬醛	(E)-2-Nonenal	36.144	49616	N.D.	256882	18829-56-6	黄瓜味, 脂肪味, 绿植味
86	DL-2-羟基-4- 甲基戊酸乙 酯	Ethyl DL-Leucate	36.27	5027206	1000524	3034439	10348-47-7	清新, 黑莓气味
87	辛醇	1-Octanol	36.773	1228515	1730327	6742218	111-87-5	试剂味, 金属味, 焦味
88	异丁酸	Isobutyric acid	37.443	N.D.	64461	169965	79-31-2	哈喇味, 黄油芝士味
89	乙酸正壬酯	Nonyl acetate	37.695	83752	N.D.	94847	143-13-5	甜味, 水果味
90	5-甲基呋喃 醛	5-Methyl furfural	37.779	N.D.	33850	499031	620-02-0	杏仁味, 焦糖,
91	癸酸甲酯	Methyl decanoate	38.45	48357	N.D.	N.D.	110-42-9	酒味
92	甲基壬基甲 酮	2-Undecanone	38.613	809072	366274	1831776	112-12-9	橙子, 清新, 绿植味
93	$\beta$ -石竹烯	beta-Caryophyllene	38.613	121282	N.D.	N.D.	87-44-5	木头, 香料
94	十一醛	Undecanal	38.892	61096	N.D.	49624	112-44-7	油味, 刺激性气味, 甜味
95	己酸己酯	Hexyl hexanoate	39.051	1911926	31263815	2729394	6378-65-0	苹果皮, 桃子
96	辛酸正丁酯	Butyl octanoate	39.21	108984	571741	190733	589-75-3	水果味

97	苯甲酸甲酯	Methyl benzoate	39.768	N.D.	8116	38318	93-58-3	西梅, 莴苣, 草本, 甜味
98	丁酸	Butyric acid	39.927	164780	3830909	1608756	107-92-6	哈喇味, 芝士味, 汗味
99	癸酸乙酯	Ethyl decanoate	40.166	123876963	2592885	26601034	110-38-3	葡萄
100	(Z)-2-癸醛	(Z)-2-Decenal	40.524	N.D.	65860	225533	2497-25-8	动物油脂
101	(E)-2-癸烯醛	trans-2-Decenal	40.564	N.D.	79410	218384	3913-81-3	动物油脂
102	苯乙醛	Phenylacetaldehyde	40.684	285096	95873	276728	122-78-1	山楂树, 蜂蜜, 甜味
103	苯乙酮	Acetophenone	40.962	N.D.	52689	672442	98-86-2	霉味, 花香, 杏仁
104	1-壬醇	1-Nonanol	40.962	2012391	346048	3232013	143-08-8	脂肪, 绿植
105	辛酸异戊酯	Isoamyl octanoate	41.042	2566405	236088	432939	2035-99-6	果味, 橙子, 梨子, 甜瓜
106	糠醇	Furfuryl alcohol	41.161	N.D.	28832	N.D.	98-00-0	焦味
107	苯甲酸乙酯	Ethyl benzoate	41.52	477940	330230	2276010	93-89-0	甘菊, 花, 芹菜, 水果味
108	异戊酸	Isovaleric acid	41.56	N.D.	644741	2066620	503-74-2	汗味, 酸味, 哈喇味
109	2-甲基丁酸	2-Methyl butyric acid	41.56	N.D.	327606	N.D.	116-53-0	芝士, 汗味
110	丁二酸二乙酯	Diethyl succinate	41.719	2776521	223970	1057305	123-25-1	酒, 水果
111	4-甲氧基苯乙烯	4-Methoxystyrene	41.998	75756	N.D.	N.D.	637-69-4	甜味
112	$\alpha$ -乙酸松油酯	alpha-Terpinyl acetate	42.591	N.D.	N.D.	38445	80-26-2	蜡脂
113	正戊酸	Valeric acid	44.144	N.D.	1825066	836804	109-52-4	汗味
114	十一酸乙酯	Ethyl undecanoate	44.182	670344	39533	261073	627-90-7	干邑白兰地, 椰子
115	4-乙基苯甲醛	4-Ethylbenzaldehyde	44.409	N.D.	16620	27617	4748-78-1	甜味
116	萘	Naphthalene	44.523	544718	275413	1402726	91-20-3	柏油味
117	(E)-2-十一烯醛	trans-2-Undecenal	44.75	N.D.	47860	232314	53448-07-0	肥皂, 脂肪, 绿植
118	1-癸醇	1-Decanol	44.901	750651	47944	301688	112-30-1	脂肪
119	水杨酸甲酯	Methyl salicylate	45.81	50056	N.D.	N.D.	119-36-8	胡椒薄荷
120	苯乙酸乙酯	Ethyl phenylacetate	46.038	417580	2257593	8322245	101-97-3	水果, 甜味
121	L-紫苏醛	Perillaldehyde	46.113	36380	N.D.	101767	2111-75-3	香料味
122	月桂酸甲酯	Methyl laurate	46.483	14205	N.D.	12908	111-82-0	脂肪, 椰子味
123	辛酸己酯	Hexyl octanoate	46.809	65687	502670	84481	1117-55-1	草本, 绿植, 油
124	2,4-癸二烯醛	2,4-Decadienal	47.025	N.D.	154256	N.D.	25152-84-5	烧烤, 蜡脂香
125	乙酸苯乙酯	2-Phenylethyl acetate	47.17	6733156	371518	927679	103-45-7	玫瑰, 蜂蜜, 烟草
126	$\beta$ -大马酮	beta-Damascenone	47.387	112122	13244	N.D.	23696-85-7	炖苹果, 蜂蜜的, 草莓

127	月桂酸乙酯	Ethyl laurate	47.965	24292408	606279	6164779	106-33-2	叶子
128	己酸	Capronic acid	48.145	4329544	60585489	8421863	142-62-1	汗味
129	(E)-橙化基丙酮	trans-Geranylacetone	48.471	597020	39462	113717	3796-70-1	花果绿植, 梨, 香蕉, 脂肪
130	(2Z)-3,7-二甲基-2,6-辛二烯-1-基丁酸酯	Neryl butyrate	48.579	24375	50368	25322	999-40-6	花果绿植, 热带浆果
131	十一醇	1-Undecanol	48.651	405269	289110	213372	112-42-5	柑橘味
132	苯甲醇	Benzyl alcohol	49.338	N.D.	15124	160107	100-51-6	甜味, 花香
133	3-苯丙酸乙酯	Ethyl 3-phenylpropionate	49.699	504177	2322191	1837173	2021-28-5	花香
134	苯乙醇	2-Phenylethanol	50.606	3069236	536982	3201851	60-12-8	蜂蜜, 香料, 玫瑰, 丁香
135	十四醛三聚物 (正十四烷醛)	Tetradecanal	50.881	36736	N.D.	N.D.	124-25-4	花香, 蜡脂味
136	十二醇	1-Dodecanol	52.226	141496	14346	N.D.	112-53-8	脂肪, 蜡脂
137	苯酚	Phenol	53.859	21529	116150	54421	108-95-2	酚
138	(E)-2-十二烯-1-醇	(E)-2-dodecen-1-ol	54.156	17697	N.D.	53412	69064-37-5	石油
139	十五醛	Pentadecanal	54.519	35328	N.D.	12797	2765-11-9	清新
140	4-乙基-2-甲氧基苯酚	4-Ethyl-2-methoxyphenol	54.618	710357	N.D.	N.D.	2785-89-9	香料, 丁香
141	丙位壬内酯	gamma-Nonalactone	54.783	379891	128148	199021	104-61-0	椰子, 桃子
142	(E)-橙花叔醇	(E)-Nerolidol	54.783	193775	N.D.	29383	40716-66-3	木头, 花香, 蜡脂
143	十四酸乙酯	Ethyl myristate	55.08	3040642	413904	2930747	124-06-1	酯味
144	反式肉桂醛	trans-Cinnamaldehyde	55.179	85656	92304	392397	14371-10-9	肉桂, 涂料
145	辛酸	Caprylic acid	55.41	628712	2112049	902557	124-07-2	汗味, 芝士
146	1-十三醇	1-Tridecanol	55.674	N.D.	N.D.	37145	112-70-9	霉味
147	对甲酚	p-Cresol	56.334	57847	625414	55076	106-44-5	药味, 酚, 烟
148	十六醛	Hexadecanal	57.961	46555	N.D.	N.D.	629-80-1	纸板
149	壬酸	Nonanoic acid	58.847	63678	211755	136804	112-05-0	绿植, 脂肪
150	1-十四醇	1-Tetradecanol	58.941	171226	39205	N.D.	112-72-1	椰子
151	4-乙基苯酚	4-Ethylphenol	59.353	185110	24027	N.D.	123-07-9	酚, 香料
152	3-乙基苯酚	3-Ethylphenol	59.574	185110	24027	N.D.	620-17-7	霉味
153	棕榈酸甲酯	Methyl palmitate	60.434	8040	N.D.	17633	112-39-0	甜味, 果香, 葡萄, 发霉的浆果味
154	棕榈酸乙酯	Ethyl palmitate	61.556	5661527	495600	14686507	628-97-7	蜡脂
155	正癸酸	Capric acid	62.133	2387516	283622	1131597	334-48-5	脂肪
156	金合欢醇	trans,trans-Farnesol	64.553	23379	N.D.	N.D.	106-28-5	铃兰
157	苯甲酸	Benzoic acid	66.985	N.D.	49977	151029	65-85-0	尿味
158	十八酸乙酯	Ethyl stearate	67.546	17513	N.D.	44896	111-61-5	脂肪酸
159	月桂酸	Lauric acid	68.22	205329	N.D.	149735	143-07-7	金属味

### 2.2.2 白酒样品的气味组分的成分类别统计结果

按筛查结果中化合物的所属类别进行统计，得到所测三类白酒（清香型 A、兼香型 B 和酱香型 C）中不同类别化合物数量，结果如图 4 所示。



	酯类	酮类	萜类	酸类	醛类	其它硫化物	其它	呋喃	酚类	芳烃类	醇类	吡嗪
A	54	9	4	6	20	2	2	2	5	7	23	0
B	50	7	0	10	18	0	1	0	4	2	21	3
C	55	9	1	10	22	0	1	1	2	7	23	4

图 3 三类白酒中气味组分的分类统计

由图可见，三类白酒中一致的趋势是酯类、醇类、醛类、酸类化合物个数多，酮类、芳烃类、酚类等个数次之，但也都有，而萜类、呋喃、吡嗪、其他硫化物等是有和无的区别。

### 2.2.3 白酒样品的气味组分的分析

韦恩图是一种关系型图表，通过图形之间的重叠来反映数据集之间的相交关系，图 4 白酒气味成分结果的韦恩图展示了 A、B、C 三种白酒的共有气味组分及各白酒中的特有气味组分。图 5 可直观地展现三种白酒中共有组分是 90 种，除此之外，A、B、C 特有组分分别为 16 种、3 种和 4 种，仅 A 和 B 共有组分 5 种，仅 A、C 共有组分为 23 种，仅 B、C 共有组分为 18 种。

白酒行业开展了大量的白酒风味特征化合物的研究，在 90 种共有组分中，就包含乙酸乙酯、己酸乙酯、丁酸乙酯、乳酸乙酯、丁酸、异丁醇、异戊醇等对白酒风味贡献度较大的气味组分。而特有组分如 C 样品中的  $\alpha$ -乙酸松油酯，2-己酮，1-十三醇，2,6-二甲基吡嗪这几种气味组分，就对 C 样品贡献了个性的白酒风味。相同作用的还有 B 样品的糠醇，2,4-癸二烯醛，2-甲基丁酸；以及 A 样品的  $\gamma$ -松油烯， $\alpha$ -蒎烯，6-甲基-5-庚烯-2-酮，金合欢醇，庚醛，十四醛三聚物（正十四烷醛），水杨酸甲酯，十六醛，癸酸甲酯，2-乙基呋喃，醋酸-2-乙基己酯，4-甲氧基苯乙烯， $\beta$ -石竹烯，二甲基二硫，二甲基三硫，4-乙基-2-甲氧基苯酚。白酒的风味是由所有的气味组分共同作用生成的，所以共有组分含量区别及特有组分共同建构了白酒的不同风味。

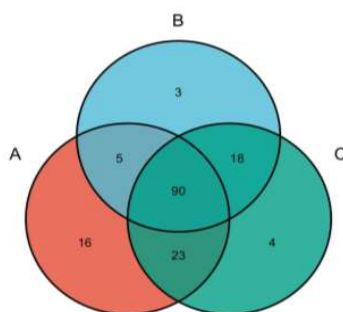


图 4 白酒气味成分结果的韦恩图

图 5 是主成分分析 PCA 得分图，提取了 2 个主成分，第一主成分为 55.9%，第二主成分为 40.7%，两者之和为 96.6%，累计贡献率对原始数据的解释已经非常好。在该图上，越近的样本点相似度越高，越远说明区分度越大，而 A、B、C 三种白酒在 PCA 图上显示出区别较大。A 与 B 和 C 相比，具有更高的独立性，B 和 C 在第一主成分方向略有相近。体现出兼香型 B 还是有酱香型白酒的一些特色。

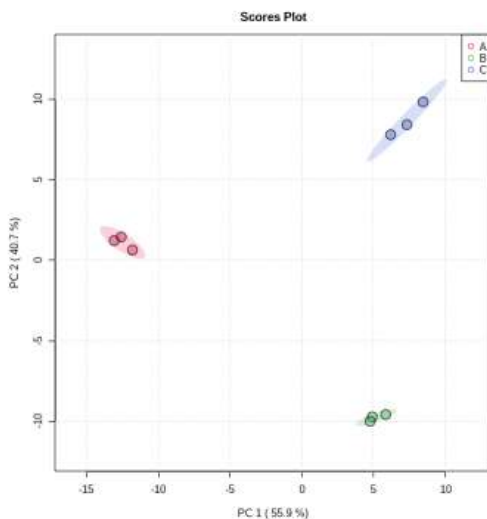


图 5 PCA 得分图

## ■ 结论

本文采用岛津三重四极杆气相色谱质谱联用仪 GCMS-TQ8050 NX，结合 AOC-6000 多功能自动进样器 SPME 进样模式和 Smart Aroma Database 香味数据库建立了 503 种气味成分的 SCAN 分析方法。使用此方法检测了三种类型的白酒（清香、兼香和酱香），共检出 159 种气味成分，其中共有组分 90 种，检出组分的类型均有酯类、醇类、酸类、醛类和酮类等，但峰面积有一定差别，经过分析可以到到三种白酒的异同关系。该方法简单、易操作，可以对白酒气味组分进行泛靶向分析，减化了分析流程，可以结合白酒的感官评价结果，得到风味化合物与感官评价的相关性。

岛津应用云

