

# GCMSMS 结合岛津香味数据库分析白酒中的气味成分

## GCMSMS-294

**摘要：** 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，利用 Smart Aroma Database 香味数据库建立了 503 种气味成分的 Scan 分析方法。使用此方法筛查白酒年份酒样品气味成分，检出共有组分 76 种，包括醇类化合物 7 种、酚类化合物 2 种、醛类化合物 8 种、酸类化合物 9 种、酮类化合物 4 种、酯类化合物 40 种、其他化合物 6 种。数据分析结果表明，OPLS 能够较好的区分陈酿白酒，筛选出样品间差异贡献 VIP>1 的 15 种气味成分。本方法可为年份酒鉴别提供参考，适用于白酒气味成分分析，筛选差异性贡献气味成分。

**关键词：** 三重四极杆气相色谱质谱联用仪 白酒 年份酒 香味数据库 气味成分

### 技术特点：

- ❖ 利用 SPME Arrow-GCMS 技术，结合香味数据库，建立了白酒中 503 种气味成分筛查方法。
- ❖ 本方法利用保留时间、质量色谱图、质谱图 3 种信息准确、高效地检测气味化合物。

白酒是世界六大蒸馏酒之一。未经贮存的白酒在口感上可能会燥辣刺激，需要藏储使白酒中的微量成分平衡，从而使其口感柔和、协调。但过度贮存造成酒体损失，因此确定合理的贮存时间是各酒企亟待解决的难题。由于白酒酿造原料、酿造工艺及贮存条件等存在差异，使陈酿白酒的特征风味物质目前尚无定论。

Smart Aroma Database 香味数据库预先收录有气味成分化合物信息 503 种重要气味成分的基本信

息、SCAN 方法、SIM 方法和 MRM 方法，无需标准品可实现重要气味成分的快速定性筛查。

本文使用岛津 GCMS-TQ8050 NX 三重四极杆气质联用仪和 AOC-6000 多功能自动进样器，利用 Smart Aroma Database 香味数据库，实现年份酒气味成分快速筛查，结合正交偏最小二乘法数据统计分析比较不同贮存年份原酒的差异性风味成分，以期探究合理的贮存时间及陈酿酒的鉴别提供参考。

## ■ 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/CWR/PDMS 120 $\mu$ m/20 mm	萃取温度：	50 $^{\circ}$ C
平衡温度：	50 $^{\circ}$ C	萃取时间：	15 min
平衡时间：	5 min	解吸时间：	2 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 $^{\circ}$ C  
柱温程序：40 $^{\circ}$ C (5 min) \_3 $^{\circ}$ C /min\_250 $^{\circ}$ C (15 min)

载气控制：恒线速度模式，25.5 cm/s      接口温度：250°C  
进样方式：分流进样      检测器电压：调谐电压 +0.1 kV  
分流比：5:1      采集方式：Scan 35~400  
离子源温度：200°C

## ■ 样品前处理

称取 1 g 样品至顶空瓶中，封瓶后按照 1.2 分析条件上机测样。

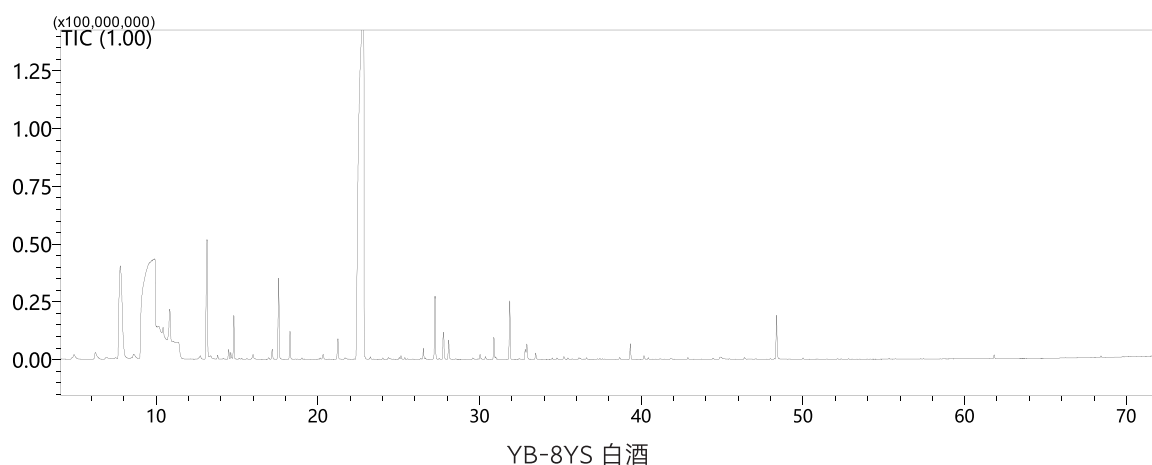
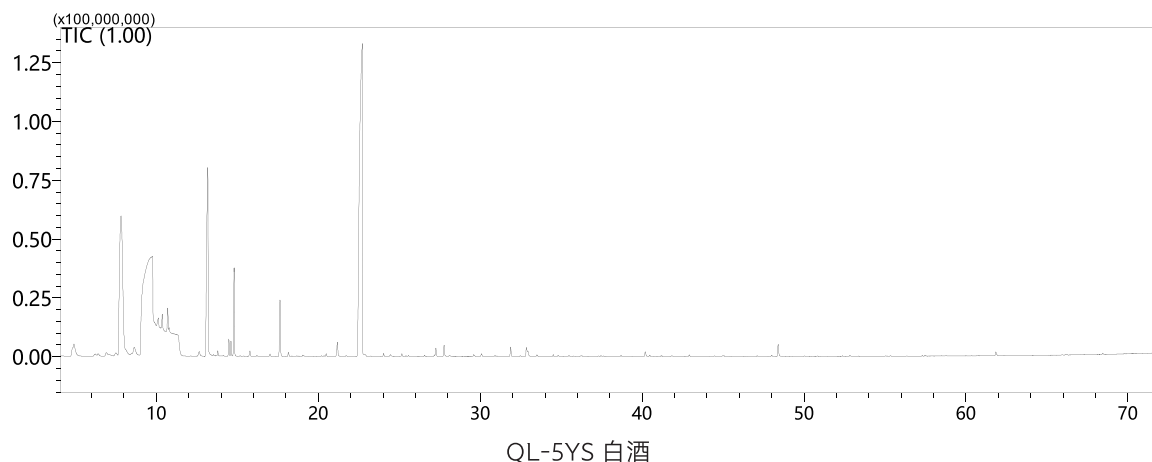
## ■ 结果与讨论

### 3.1 气味系统方法建立

岛津香味数据库 (Smart Aroma Database) 包括模板方法、质谱库等文件。首先使用 Aroma\_TQ\_SH-PolarWax\_AART 方法文件测定正构烷烃标品，利用正构烷烃数据、Aroma\_TQ\_SH-PolarWax\_Template 模板方法以及香味数据库建立 503 种气味成分的筛查方法文件，GCMS-TQ8050 NX 可利用该方法对样品中的气味成分进行筛查。

### 3.2 白酒样品检测结果

利用前述建立的 503 种气味成分筛查方法，对三个品牌 (QL/YB/MZ) 不同年份 (QL: 1、5、10、15 年，YB: 1、3、5、8、15 年，MZ: 2、3、8、15 年) 共 13 份白酒样品进行检测，部分白酒样品 TIC 如下图 1 所示。



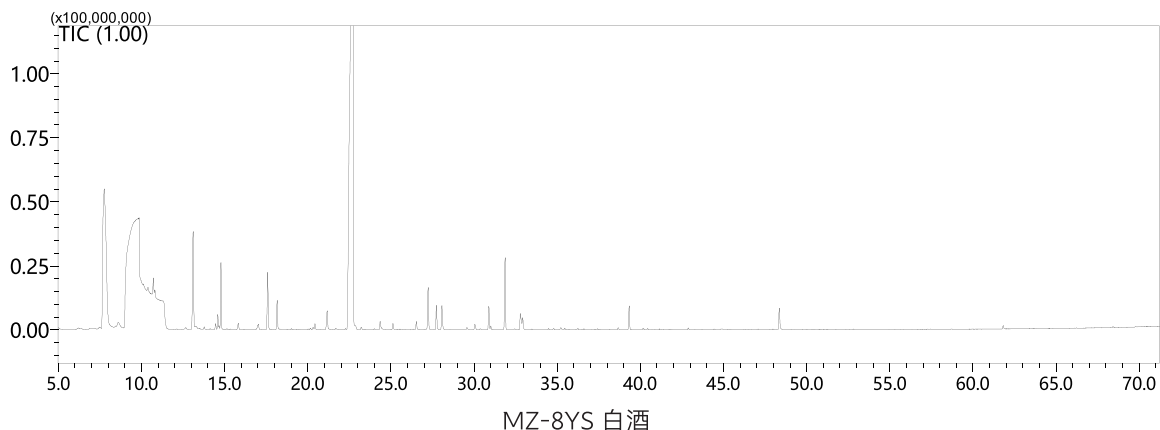


图 1 部分白酒样品 TIC 图

统计测定化合物种类，13 种年份酒样品中合计检出 76 种气味成分，包括醇类化合物 7 种、酚类化合物 2 种、醛类化合物 8 种、酸类化合物 9 种、酮类化合物 4 种、酯类化合物 40 种、其他化合物 6 种。目前食品领域中已经发现万余种气味成分，然而仅有一小部分会对食品整体香气的形成起着关键决定作用，这一部分气味成分称为“关键香气成分”， $OAV \geq 1$  的气味化合物通常被认为对分析样品整体香气的构成其贡献作用， $OAV < 1$  的气味化合物被认为对分析样品整体香气的形成无贡献作用或起较小的贡献作用。为了进一步筛选年份酒中主要贡献作用的气味化合物，在气味化合物定量的基础上，结合已报道气味化合物在水溶液中的阈值计算气味活力值，结果如表 2。

为准确研究影响年份酒的特征风味，以  $OAV \geq 1$  为标准共筛选出 27 种关键气味物质（表 2），这些化合物对白酒整体风味的形成起关键作用。其中包括醇类化合物 1 种、酚类化合物 1 种、醛类化合物 3 种、酸类化合物 4 种、酮类化合物 2 种、酯类化合物 13 种、其他化合物 3 种。

表 1 年份酒样品气味成分筛查结果

序号	化合物	CAS	平均峰面积 (n=3)												气味描述	
			QL1YS	QL5YS	QL10YS	QL15YS	YB1YS	YB3YS	YB5YS	YB8YS	YB15YS	MZ2YS	MZ3YS	MZ8YS		MZ15YS
1	仲丁醇	78-92-2	1138321	1138321	1243991	2366838	3632290	1505930	840975	1265735	1191884	906241	678526	473247	446841	酒香
2	正丁醇	71-36-3	13271870	13271870	5838528	8525358	7148979	7303167	7690660	15541825	13686581	6482822	10104972	9663326	11066086	药味， 水果味
3	异戊醇	123-51-3	3608402	3608402	3807202	4545715	4865201	3165001	3369968	3561392	4177559	5176389	4403455	3641420	3862520	威士忌， 麦芽， 焦味
4	1-戊醇	71-41-0	248026	248026	116342	100018	96254	263793	356584	498408	421215	185466	390619	494820	337036	香味
5	正己醇	111-27-3	749009	749009	362557	368918	321625	1237294	1891584	1911787	2384846	1431335	2405400	3155581	3160672	树脂，花， 绿植味
6	辛醇	111-87-5	-	-	-	6830	13968	29231	34938	38512	36263	43838	29839	45962	43935	试剂味， 金属味， 焦味
7	糠醇	98-00-0	58823	58823	36678	15846	5282	26517	49552	55962	56327	36279	32376	33442	32150	燃烧味
醇类化合物 7 种																
8	苯酚	108-95-2	27237	27237	27833	28057	26924	40624	52208	42846	50275	45140	34856	36799	33829	酚香
9	对甲酚	106-44-5	7227	7227	2409	803	8794	36913	58503	82295	58911	32748	94240	216145	171379	药香，酚 香，烟熏

酚类化合物 2 种																
10	乙醛	75-07-0	7089059	7089059	22581735	23746958	37791291	17208977	7726127	10333636	10211080	11007273	8457684	5310680	8438643	辛辣, 乙醚
11	丙醛	123-38-6	-	-	-	-	142120	47373	15791	5264	1755	585	195	65	22	溶剂, 刺激性
12	2-甲基丁醛	96-17-3	138286	138286	152652	130973	206928	103595	68576	86216	86850	81398	126709	134292	126225	可可, 杏仁味
13	3-甲基丁醛	590-86-3	759449	759449	1045757	1427221	2607937	1080854	578478	668325	715068	662032	801749	749046	743049	麦芽味
14	异丁醛二乙基乙缩醛	1741-41-9	3473797	3473797	5360165	3628334	5536730	2699393	1573794	2809677	2267870	2466518	3491446	3024977	3724489	/
15	正己醛	66-25-1	54518	54518	44214	48639	112593	47813	28050	33119	25849	30864	44030	42517	40350	脂肪味, 青草味
16	糠醛	98-01-1	2393218	2393218	1488917	2462375	2780481	1824972	1836412	1521132	2884090	2197764	1360791	2007515	898183	面包, 杏仁, 甜味
17	苯甲醛	100-52-7	313499	313499	252261	430647	420527	293503	293603	379415	593955	452331	267023	440101	256922	杏仁, 焦糖味
醛类化合物 8 种																
18	醋酸	64-19-7	11178182	11178182	10659055	14138195	20817846	12125026	8511829	10580015	7776308	4639429	6497486	11621650	11865147	酸
19	丙酸	79-09-4	-	-	27040	77149	147931	49310	16437	5479	1826	609	203	68	23	刺鼻、腐臭、黄豆味
20	异丁酸	79-31-2	72192	72192	74040	124746	196795	65598	45342	42334	52326	31622	10541	3514	1171	哈喇味, 黄油芝士味
21	丁酸	107-92-6	1084664	1084664	2812778	4123450	12582178	5116124	2652152	2899458	2569551	2595384	1200333	811097	834316	哈喇味, 芝士味, 汗味
22	2-甲基丁酸	116-53-0	27537	27537	93505	52169	59451	69680	85570	121572	122237	77533	39757	51583	52021	起司, 汗味
23	异戊酸	503-74-2	110811	110811	229397	142355	115772	101243	113803	186458	196929	115218	55704	57406	85813	汗味, 酸味, 哈喇味
24	正戊酸	109-52-4	-	-	76965	144942	457199	251852	208811	389938	319440	210408	128760	130249	113048	汗味
25	己酸	142-62-1	1746822	1746822	4968841	5559649	16640905	10517016	9459532	11229088	18421613	21391341	9944653	6880260	8742319	汗味
26	辛酸	124-07-2	-	-	-	-	8054	7568	7695	18143	20413	23701	11592	12493	15594	汗味, 芝士
酸类化合物 9 种																
27	2-戊酮	107-87-9	162822	162822	756712	417788	605836	297639	211411	322678	6439566	5280527	25024991	9196938	3958622	醚、果味
28	2-庚酮	110-43-0	89148	89148	61432	84015	536347	232847	147656	170020	194363	265511	286144	225995	271857	肥皂味
29	仲辛酮	111-13-7	428415	428415	216465	99311	152135	73656	56187	43863	283226	150437	59244	40140	40232	肥皂、汽油
30	甲基壬基甲酮	112-12-9	408346	408346	372632	285292	407933	371899	334874	465693	438520	317690	281737	372329	322553	橙子, 清新, 绿植味

酮类化合物 4 种																
31	甲酸乙酯	109-94-4	531455	531455	782260	657284	765310	382477	164597	437183	292587	184900	155624	153108	216119	刺激性
32	乙酸乙酯	141-78-6	170410 650	170410 650	154774 249	155561 459	165256 887	141010 804	120359 369	142415 561	137786 239	126466 724	145842 981	139879 266	145433 188	菠萝香味
33	丙酸乙酯	105-37-3	555906	555906	911345	1709059	3383380	1255336	505612	559690	453532	501326	290495	182920	193730	水果味
34	异丁酸乙酯	97-62-1	926027	926027	1001286	1978566	3009169	1109662	452329	645046	660655	491453	220257	151140	227483	甜味, 橡胶味
35	乙酸异丁酯	110-19-0	71456	71456	63764	85911	218562	92572	53067	65231	41366	26610	98007	78225	73029	果香, 苹果, 香蕉
36	丁酸乙酯	105-54-4	494946 82	494946 82	602679 75	659632 90	101625 783	579430 24	383380 08	487313 55	461394 29	481769 82	275066 33	154520 84	223342 37	苹果味
37	2-甲基丁酸乙酯	7452-79-1	684256	684256	1061971	1280670	1932801	795211	442661	1006366	1076676	747837	340809	224096	429103	苹果味
38	异戊酸乙酯	108-64-5	1630571	1630571	3533647	3300088	4052707	1687012	1053121	2688122	2836668	1880382	782731	476355	1103851	水果味
39	乙酸丁酯	123-86-4	3646461	3646461	1362330	1255325	1408030	1124033	937310	2186806	1360553	522249	2878570	1865707	2102301	梨
40	乙酸异戊酯	123-92-2	253146	253146	147957	133306	203760	125353	119749	122724	83950	52522	189309	154425	188831	香蕉
41	戊酸乙酯	539-82-2	3947952	3947952	4338742	5260592	11010568	6214981	5089611	10577658	8242379	5580995	6151779	4421626	4195334	酵母味, 水果味
42	乙酸戊酯	628-63-7	64156	64156	21385	7128	2376	50396	69398	84255	44149	14716	143367	121863	80933	香蕉
43	己酸甲酯	106-70-7	87003	87003	61830	58217	139813	84284	75447	109263	136623	132051	107390	73429	112038	水果味, 清新的, 甜味
44	异己酸乙酯	25415-67-2	100635	100635	99267	218068	288493	200065	212562	467441	493215	394725	322308	238183	309472	果香
45	正己酸乙酯	123-66-0	129937 994	129937 994	120895 154	103811 501	168737 616	155675 647	168852 659	151144 363	182081 712	186059 889	157740 667	105395 256	118851 476	苹果皮, 水果味
46	丁酸异戊酯	106-27-4	97274	97274	138261	180301	461610	171082	77352	117060	87493	71095	49864	29021	41434	水果
47	乙酸己酯	142-92-7	186775	186775	71052	40894	35815	188170	285299	266554	189571	80095	651152	531953	607515	水果味, 草本味
48	丁酸戊酯	540-18-1	46751	46751	28750	31317	63931	53947	54901	135264	91165	35161	67437	50085	34425	香蕉
49	己酸丙酯	626-77-7	359354	359354	262393	429122	897167	1031311	1372852	1745430	1885136	1083140	2058189	1711219	1513656	水果味
50	庚酸乙酯	106-30-9	1005827	865224. 67	141990 9.67	269619 6.67	476779 4.33	663259 2.67	755109 2.67	650662 1.33	5065958	8505769	408939 6.33	3823463	5441468	水果味
51	乳酸乙酯	97-64-3	45296254	45296254	26513779	34205973	33050762	36159581	40006993	39944676	39341905	40513387	29282570	36525443	31310553	水果
52	己酸丁酯	626-82-4	978615	978615	488156	966903	1330152	2328392	3047836	4662297	4463730	2068188	3937308	2502548	3589666	果香
53	丁酸己酯	2639-63-6	206255	206255	134338	118380	137369	332548	457760	707263	520911	293207	506908	422831	601577	菠萝香味
54	辛酸乙酯	106-32-1	648579	648579	704420	1307155	2357268	2638964	3302574	4085855	4315521	4835919	4328048	2863193	4156731	水果味, 脂肪味
55	己酸异戊酯	2198-61-0	132002	132002	128712	165029	296539	210158	240017	317177	472760	420128	484737	275859	335838	脂肪酸, 果香味的

56	壬酸乙酯	123-29-5	66728	66728	59619	68129	128305	86938	92858	77628	71127	68961	62580	57327	61359	水果味, 玫瑰, 坚果味
57	DL-2-羟基-4-甲基戊酸乙酯	10348-47-7	395532	395532	166864	208506	145376	238009	346431	376694	359172	378395	185586	334406	223625	/
58	己酸己酯	6378-65-0	236197	236197	119142	147807	189473	1664217	2844112	2421127	2729739	1791809	3496215	2988904	3619211	菠萝香, 桃子
59	辛酸正丁酯	589-75-3	-	-	-	1411	1374	19637	27588	34583	29818	29818	25681	17153	21489	果香
60	癸酸乙酯	110-38-3	57397	57397	77668	132050	363582	156199	108086	87200	92990	95503	61750	49146	54688	葡萄
61	苯甲酸乙酯	93-89-0	23274	23274	22883	54428	40954	26580	24976	42063	55118	44957	24992	34293	21698	甘菊, 花, 芹菜, 水果
62	丁二酸二乙酯	123-25-1	50051	50051	41313	80331	78442	39955	31055	67423	61254	42796	14265	24965	21948	酒, 水果
63	苯乙酸乙酯	101-97-3	203818	203818	100511	143569	130049	263476	366830	474995	370536	227798	115844	155294	102771	水果, 甜味
64	辛酸己酯	1117-55-1	-	-	-	-	-	11314	17300	14851	14626	11425	14135	14986	14665	草本, 绿色, 油
65	乙酸苯乙酯	103-45-7	148168	148168	49389	16463	5488	63486	102152	60144	42618	14206	39092	125477	59710	玫瑰, 蜂蜜, 烟草
66	月桂酸乙酯	106-33-2	16096	16096	13472	19156	89534	37110	25558	17441	25366	19549	14528	14775	9628	叶
67	3-苯丙酸乙酯	2021-28-5	130801	130801	79776	88862	160119	105832	98308	153838	160976	114342	59692	79145	47375	花香
68	十四酸乙酯	124-06-1	37608	37608	29203	43404	264044	110285	75341	49547	41261	35720	23618	40986	22689	酯味
69	棕榈酸乙酯	628-97-7	431206	431206	275512	300925	1396482	628023	501276	356474	263524	201191	147389	220920	180504	蜡脂
70	硬酯酸乙酯	111-61-5	5795	5795	3723	3689	8687	4315	4203	6705	5195	3793	1645	2211	1906	脂肪酸
酯类化合物 40 种																
71	双戊烯	138-86-3	-	-	-	26546	46190	15397	5132	1711	9855	8355	2785	928	309	柠檬、橙
72	苯乙烯	100-42-5	-	-	29746	44970	330125	167995	101636	105377	58996	73229	24410	8137	26176	香、汽油
73	2-正戊基呋喃	3777-69-3	180895	180895	88349	33256	17233	63702	80006	101899	70527	67773	113191	117933	122740	青豆, 黄油
74	二甲基三硫	3658-80-8	177380	177380	65119	132062	454836	182810	106648	105362	118002	121059	155177	203617	95605	硫磺, 鱼, 卷心菜
75	萘	91-20-3	-	-	187463	210885	231491	121706	108933	131444	196655	284310	142375	78144	62632	焦油
76	抗氧化剂 264	128-37-0	211120	211120	160324	144968	152553	108166	162041	300526	215141	166157	129958	168031	72485	霉味
其他化合物 6 种																

注: “-”代表未检出

表 2 年份酒样品气味活度值

化合物	阈值 *ng/g	气味活度值 (OAV)												
		QL1	QL5	QL10	QL15	YB1	YB3	YB5	YB8	YB15	MZ2	MZ3	MZ8	MZ15
异戊醇	500	1.15	1.2	1.7	1.68	<1	1.14	1.09	1.54	2.03	1.33	1.03	1.23	3.09
对甲酚	1	<1	<1	<1	<1	2.82	3.83	4.94	2.53	1.15	<1	2.01	<1	3.39
2- 甲基丁醛	1	130.13	129.24	323.85	253.78	50.84	34.85	93.92	73.15	84.11	114.59	121.19	102.95	93.72
3- 甲基丁醛	0.15	4885.5	8132	10289.78	21529.33	2132.21	2523.33	4698.34	4641.06	4072.99	5723.96	5194.56	5137.02	7708.42
正己醛	4.5	7.79	5.6	7.19	20.4	2.74	3.77	4.85	3.8	4.95	7.39	6.09	6.22	8.42
丁酸	50	2.67	9.26	13.93	45.53	3.71	3.44	7.21	5.66	6.66	1.46	1.72	2.22	5.22
2- 甲基丁酸	10	1.36	3.56	1.46	1.58	1.42	1.68	2.68	2.31	<1	<1	<1	1.31	1.87
正戊酸	24	<1	<1	<1	2.43	<1	<1	2.02	1.2	<1	<1	<1	<1	1.19
己酸	36	4.74	17.97	15.87	58.62	20.4	24.45	32.06	58.23	63.35	11.95	15.03	25.57	47.48
2- 戊酮	10	4.48	23.82	6.39	16.63	3.63	4	9.01	215.33	106.69	784.54	29.54	30.35	215.38
甲基壬基甲 酮	7	8.1	6.44	6.33	9.62	7.03	7.43	10.41	8.12	5.88	4.96	7.65	5.11	9.62
丙酸乙酯	10	110.94	189.8	375.57	750.54	35.12	23.29	102.8	83.97	102.81	35.1	25.44	36.98	93.75
异丁酸乙酯	0.0899	3697.26	3915.72	9412.09	13475.25	624.47	473.89	2807.99	2553.38	1583.48	344.44	456.03	1042.15	2411.46
丁酸乙酯	0.001	4546911	5939690	6309999	11109109	3346933	2549780	4963747	4065757	4542212	1573855	857480	2385645	3461754
2- 甲基丁酸 乙酯	0.1	697.69	1252.31	1417.62	2303.72	232.06	264.61	1298.97	1116.68	588.49	142.26	168.88	541.37	1306.36
异戊酸乙酯	0.43	333.25	942.95	682.42	969.16	118.91	147.62	740.18	607.56	272.49	49.81	71.08	296.79	516.82
戊酸乙酯	1.5	1097.27	1235.03	1622.98	3883.16	1088.03	1250.59	3745.5	1978.55	1185.55	1814.25	998.49	1161.11	1746.43
异己酸乙酯	5	2.27	1.88	5.92	7.65	3.45	4.45	13.07	10.71	7.57	6.13	4.16	7.33	15.32
正己酸乙酯	1	20054.98	17861.35	14770.32	30773.98	23204.55	26565.99	21922.61	31136.45	30196.71	22235.09	12190.5	22755.76	23582.43
丁酸异戊酯	15	1.37	2.36	2.59	9.57	<1	<1	1.73	1.14	<1	<1	<1	<1	1.61
乙酸己酯	2	15.62	1.33	2.19	2.56	21.74	26.43	20.62	12.44	2.11	75.68	38.17	51.69	6.57
庚酸乙酯	2	91.57	78.77	129.27	245.47	434.08	603.86	687.48	592.39	461.22	774.4	372.31	348.1	494.6
辛酸乙酯	200	<1	<1	1.45	2.52	2.5	3.23	3.98	3.96	4.57	3.67	1.91	4.3	5.52
癸酸乙酯	5	2.33	3.48	6.48	18.94	2.24	3.44	3.1	3.9	3.93	1.84	1.72	2.34	5.38
2- 正戊基 呋喃	6	5.07	1.17	<1	<1	2.43	2.49	3.17	1.51	1.83	3.8	3.36	3.54	<1
二甲基三硫	0.01	1073.9	61.83	1046.43	3888.8	299.13	400.63	613.36	771.56	755.96	1095.86	1447.4	236.33	3128.9
萘	1	<1	3.78	3.05	3.26	<1	1.39	1.98	3.11	4.47	<1	<1	1.47	7.09

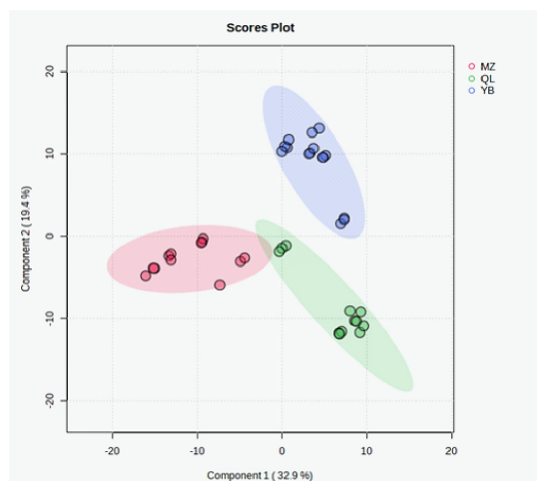
注: 筛选 OAV≥1 的化合物, 阈值数据参考《化合物香味阈值汇编 (第二版)》。

### 3.3 数据统计分析

#### 3.3.1 正交偏最小二乘法分析 (OPLS-DA)

正交偏最小二乘法 (Orthogonal projections to latent structures (OPLS)) 是一种有监督的判别分析统计方法。OPLS-DA 可以去除自变量 X 中与分类变量 Y 无关的数据变异, 使分类信息主要集中在一个主成分中, 从而使模型简单易于解释, 判别效果及主成分得分图的可视化效果更加明显, 实现对样本类别的预测。OPLS-DA 得分图的横坐标表示拟合过程中的主要成分的得分值 (Tp), 从横坐标的方向可以看到组间的差异; 而纵坐标表示拟合过程中的正交成分的得分值 (TO), 从纵坐标上看出组内的差异 (组内样本间的差异)。

为研究不同年份白酒气味差异, 以上述所检出的 76 种化合物作为因变量, 类别作为自变量, 通过 OPLS-DA 图, 实现白酒样品间有效区分。



OPLS-DA 图

图 2 不同类别年份酒 OPLS-DA

由图 2 中 OPLS-DA 图可知平行样品间分部紧密聚集, 说明实验结果稳定性好。根据横坐标判断 QL 白酒样品差异明显; 纵坐标可以判断出 YB、MZ 白酒样品组内差异明显, 说明不同年份白酒气味成分组成存在明显差异。

采用变量权重重要性排序 (VIP) 对 OPLS-DA 模型中差异性较大的气味成分进行筛选, 通常 VIP 值大于 1 的组分在不同样本组之间的区分中起重要作用, 通过 VIP > 1 筛选出差异较大的 15 种气味成分, 见图 3。

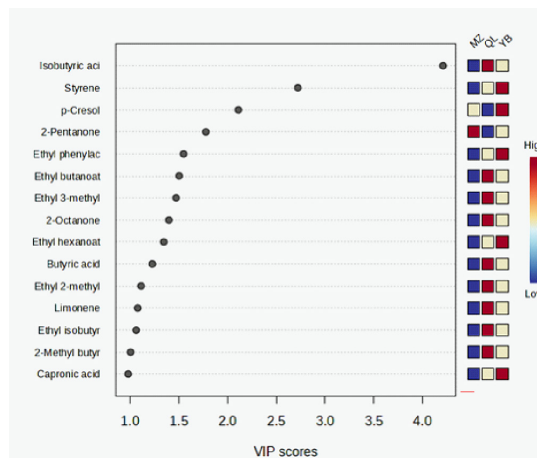


图 3 VIP > 1 的化合物

## ■ 结论

本文采用岛津 GCMS-TQ8050 NX 三重四极杆气质联用仪和 AOC-6000 多功能自动进样器，结合 Smart Aroma Database 香味数据库对不同品牌年份酒中的气味成分进行测定，并对检测结果进行统计学分析。13 种白酒合计检测到 76 种气味成分，其中  $OAV \geq 1$  的 27 种化合物是影响白酒整体香气的关键化合物，包括醇类化合物 1 种、酚类化合物 1 种、醛类化合物 3 种、酸类化合物 4 种、酮类化合物 2 种、酯类化合物 13 种、其他化合物 3 种。OPLS-DA 图可区分不同品牌白酒，实现年份划分，筛选出样本间差异性比较大的 15 种气味成分。结果表明，该方法使用香味数据库无需标品即可定性气味成分，分析速度快，可用于白酒样品中气味成分的快速筛查。

岛津应用云

