

## 使用 Smart Aroma Database 和 SPME Arrow 进样技术分析啤酒研发中的香气组分

东 祐衣、真保 惠美子、武守 佑典、河村 和广

### 特点描述

- ◆ Smart Aroma Database 内收录有 500 多种香气组分的信息，可高效分析香气组分。
- ◆ 使用 Smart Aroma Database 可轻松创建方法，无需重新优化分析条件。
- ◆ 利用 SPME Arrow 浓缩组分，可实现高灵敏度分析，在研究和开发香气组分方面尤为有用。

### 简介

啤酒是一种通过麦芽发酵制造而来的饮料，在世界上广受喜爱，但是不同的麦芽种类和发酵方法会使香气和味道发生改变。因为 GCMS 有优异的定性能力，所以它被用于分析食品饮料中的香气组分。而想要从检测出的数百种化合物中确认哪些组分会影响香气，则需要消耗大量时间处理庞杂的数据。不过，使用预先收录有化合物信息的数据库，可极大减轻数据分析的工作量。

本文通过 SPME Arrow 提取不同品牌、种类以及不同方法酿造的啤酒样品中的香气组分，使用 GCMS 和 Smart Aroma Database 进行分析。然后使用 SIMCA<sup>®</sup>17 (Infocom 公司) 对已鉴别的化合物进行主成分分析，比较不同方法酿造出来的啤酒间香气的差异。

### Smart Aroma Database 的主要特点

当对样品进行非靶向分析时，需要进行大量的色谱峰定性检索工作，而且峰识别准确度也会降低。相对地，如果仅对主要成分进行靶向分析，鉴定准确度高，目标化合物数量相对减少。使用 Smart Aroma Database 可实现宽泛靶向分析，兼顾了靶向和非靶向分析的优点。数据库收录了超过 500 种香气组分的信息，包括保留时间、质谱图和气味特征，可实现高效分析。按照图 2 的流程，可根据数据库轻松地创建方法，无需重新开发分析条件。根据 Scan 模式采集的总离子流图 (TIC) 结果，自动检测出数据库中收录的香气组分。

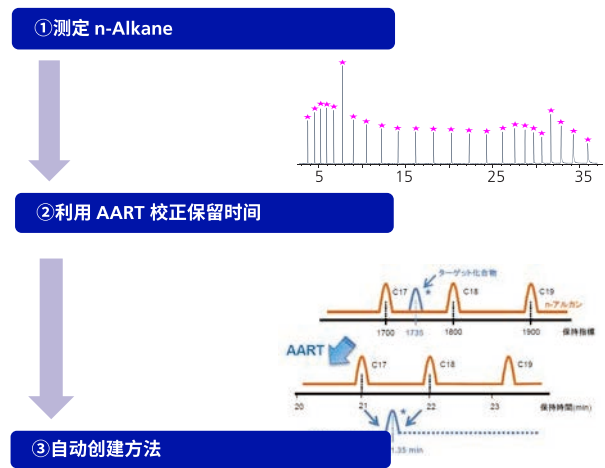


图 2 使用 Smart Aroma Database 的分析流程

### SPME Arrow 法

固相微萃取 (SPME) 法是利用纤维吸附、浓缩组分并导入 GC 的一种方法，具有高灵敏度分析的优点。与普通 SPME 相比，SPME Arrow 的吸附剂体积更大，适用于更高灵敏度的分析。使用 AOC-6000 Plus (图 3) 预处理系统，可实现从 SPME Arrow 样品预处理到样品分析的全自动过程。

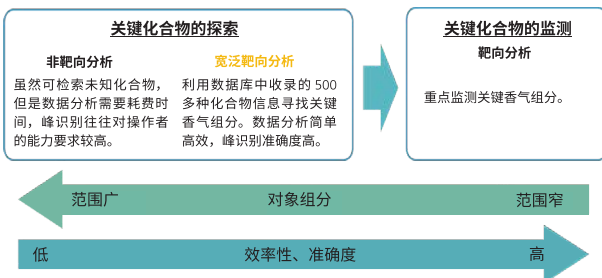


图 1 宽泛靶向分析的定义



图 3 AOC-6000 Plus+GCMS-QP2020 NX

## 使用 SPME Arrow 分析啤酒样品的结果

样品选取 7 种市售啤酒。在样品瓶内装入 8 g 啤酒和 3 g NaCl，密封后进行测定，表 1 为分析条件。依据收录在 Smart Aroma Database 中各化合物的保留时间信息、离子信息、质谱图信息鉴定化合物。结果共定性出 204 种香气组分，根据得分图对各啤酒进行了分类，结果如图 4 所示。此外，结合载荷图的结果，可得出各啤酒中含有哪些浓度相对高的组分。

表 1 分析条件

型号	: GCMS-QP2020 NX	[GC条件]	
自动进样器	: AOC-6000 Plus	进样模式	: 不分流
[SPME Arrow条件]		载气	: He
SPME Arrow	: DVB/Carbon WR/PDMS (外径: 1.1 mm, 膜厚度: 120 μm, 长度: 20 mm)	载气控制	: 线速度 (25.5 cm/s)
调节温度	: 270 °C	色谱柱	: SH-PolarWax (60 m × 0.25 mm, 内径 0.25 μm)
预调节时间	: 10 min	柱温	: 40 °C (5 min) – 3 °C/min – 250 °C (15 min)
样品瓶平衡温度	: 60 °C	[MS条件]	
搅拌速度	: 250 rpm	离子源温度	: 200 °C
样品提取时间	: 30 min	接口温度	: 250 °C
样品解吸时间	: 1 min (250 °C: GC进样温度)	采样模式	: Scan
后调节时间	: 5 min	事件时间	: 0.3 sec
		m/z 范围	: m/z45-400

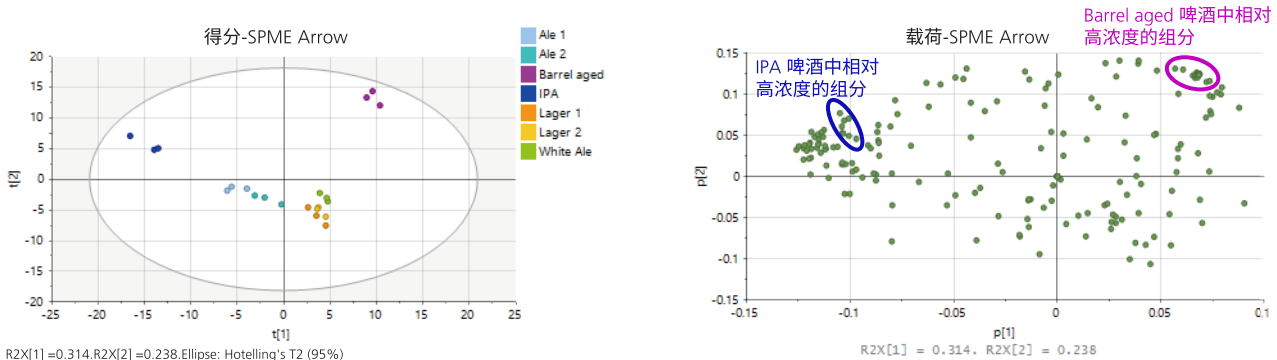


图 4 使用 SPME Arrow 测定的结果得分图 (左) 和载荷图 (右)

表 2 各啤酒中相对高浓度的组分

化合物		IPA	
化合物	气味性质	化合物	气味性质
乙酸乙酯	水果	3-甲基-2-丁烯-1-醇	草本植物
4-乙基-2-甲氧基苯酚	香料, 丁香	1-己醇	树脂、花、绿色植物
3-乙基苯酚	葡萄汁, 麝香	反式玫瑰氧化物	花
琥珀酸二乙酯	酒, 水果	3-乙氧基-1-丙醇	水果
苯甲醇	甜味, 花	顺式-3-己烯-1-醇	草
丁香酚	丁香, 蜂蜜	醋酸香叶酯	玫瑰
(E)-威士忌内酯	花, 内酯	水杨酸甲酯	薄荷
(Z)-威士忌内酯	椰子	水杨酸乙酯	冬青, 薄荷
γ-癸内酯	桃子, 脂肪		
香草酸乙酯	花, 水果, 甜味, 香草		
苯甲醛	杏仁, 焦糖		

## 结论

本文采用可对香气组分进行高度浓缩的 SPME Arrow，结合 Smart Aroma Database 香气数据库，对啤酒中的香气成分进行分析。最终鉴定出 204 种香气组分，所得结果的主成分分析证实了各种啤酒中的特色香气组分。

应用报告 01-00317 是基于质量控制进行的分析，本应用则是基于研发阶段的香气组分进行分析。Smart Aroma Database 可广泛应用于从研发到质量控制的多种场景。通过使用数据库进行宽泛靶向分析，可不再花费大量时间建立分析条件或者检查数据，它可以简化数据采集和数据分析。

<致谢>

感谢二轩茶屋饼角屋有限公司本店 (伊势角屋麦酒) 铃木成宗社长、山宫拓马先生、Far Yeast Brewing 株式会社山田司朗社长、细贝洋一郎董事对本测定的协助。

GCMS-QP 及 Smart Aroma Database 是岛津制作所株式会社在日本和其他国家的商标。SIMCA 是 Sartorius Stedim Data Analytics AB 的注册商标。

岛津应用云



岛津企业管理 (中国) 有限公司  
岛津 (香港) 有限公司

<http://www.shimadzu.com.cn>

用户服务热线电话: 800-810-0439  
400-650-0439

免责声明:

\* 本资料未经许可不得擅自修改、转载、销售;  
\* 本资料中的所有信息仅供参考, 不予任何保证。  
如有变动, 恕不另行通知。

第一版发行日: 2022 年 2 月