DOI:10.12441/spyswjs.20221228005 [文章编号] 1673-1689(2024)09-0116-09

‘公主白’干白葡萄酒关键香气物质分析

谢 涵[1,2,3] 兰义宾[1,2] 向小凤[1,2] 安朝严[1,2] 孙延峰[4] 刘 涛[4] 段长青[1,2] 石 英[1,2*]

(1. 中国农业大学食品科学与营养工程学院,北京 100083; 2. 农业农村部葡萄酒加工重点实验室,北京 100083; 3. 重庆旅游职业学院,重庆 409099; 4. 集安市人参特产业发展中心,吉林 通化 134100)

摘要:以‘公主白’干白葡萄酒为研究对象,采用气相色谱-嗅闻-质谱联用技术(gas chromatography-olfactometry-mass spectrometry,GC-O-MS)结合气味活度值(odor activity value,OAV)法对其进行定性与定量分析。结果表明,菠萝酮、β-大马士酮、芳香族化合物、高级醇乙酸酯和脂肪酸乙酯等38种香气化合物为‘公主白’干白葡萄酒的关键香气物质。通过重构试验对38种香气化合物组成的重构模型和原酒样在草莓/甜香、菠萝、植物、花香、青苹果及桃子这6个香气属性上的强度进行评分,重构模型与原酒样呈现较为一致的香气轮廓。缺失试验进一步验证了菠萝酮、β-大马士酮、芳香族化合物、高级醇乙酸酯和脂肪酸乙酯等化合物在‘公主白’干白葡萄酒特征香气中的重要贡献。研究结果为‘公主白’干白葡萄酒及同类型葡萄酒关键呈香物质的分析提供参考。

关键词:气相色谱-嗅觉测定法;气相色谱-质谱联用;葡萄酒;关键香气物质

Analysis of Key Aroma Compounds in ‘Gongzhubai’ Dry White Wine

XIE Han[1,2,3] *LAN Yibin*[1,2] *XIANG Xiaofeng*[1,2] *AN Zhaoyan*[1,2] *SUN Yanfeng*[4] *LIU Tao*[4] *DUAN Changqing*[1,2] *SHI Ying*[1,2*]

(1. College of Food Science and Nutritional Engineering, China Agricultural University, Beijing 100083, China; 2. Key Laboratory of Viticulture and Enology, Ministry of Agriculture and Rural Affairs, Beijing 100083, China; 3. Chongqing Vocational Institute of Tourism, Chongqing 409099, China; 4. Ji’an Ginseng Industry Development Center, Tonghua 134100, China)

Abstract: Gas chromatography-olfactometry-mass spectrometry (GC-O-MS) and odor activity values (OAV) were used for the qualitative and quantitative analysis of ‘Gongzhubai’ dry white wine. The results identified 38 compounds, including 2, 5-dimethyl-4-hydroxy-3(2H) -furanone, β-damascenone, aromatic compounds, higher alcohol acetates, and fatty acid ethyl esters, as key contributors to the aroma profile of ‘Gongzhubai’ dry white wine. The reconstruction experiment scored the intensity of the reconstruction model composed of 38 aroma compounds and the original wine sample in the 6 aromatic attributes, i.e., strawberry/sweet, pineapple, plant, floral, green apple, and peach. The reconstructed model closely matched the aroma profile of the original wine. The omission test further confirmed the significant contributions of 2, 5-dimethyl-4-hydroxy-3(2H) -furanone, β-damascenone, aromatic compounds, higher alcohol acetates, and fatty acid ethyl esters to the characteristic aroma of ‘Gongzhubai’ dry white wine. The results provide a theoretical reference for the study of key aroma compounds in ‘Gongzhubai’ dry white wine and similar wine varieties.

Keywords: gas chromatography-olfactometry; gas chromatography-mass spectrometry; wine; key aroma compounds

基金项目:北京市自然科学基金项目(6222035);现代农业产业技术体系(葡萄)建设专项项目(CARS-29)。

通信作者:石英(1965—),女,博士,副教授,博士研究生导师,主要从事葡萄酒风味化学研究。E-mail:shiy@cau.edu.cn

收稿日期:2022-12-28 **修回日期:**2023-04-25

‘公主白’葡萄由‘公酿2号’与‘白香蕉’杂交培育而成，抗病性较强、产量较高、抗寒能力较强、出汁率高、适应性广，目前主要在东北等地区栽培[1]。以‘公主白’葡萄为原料酿制的葡萄酒呈禾秆黄色，香气浓郁，以菠萝、草莓等香气为主[1]。然而目前，有关‘公主白’葡萄酒中关键呈香物质的研究鲜有报道。

葡萄酒香气是评价其品质的重要感官指标之一，按来源分为3类[2]。一类香气源于葡萄果实本身，其主要成分包括萜烯类化合物和降异戊二烯等[3]。二类香气是葡萄酒在发酵阶段产生的香气，香气物质包括高级醇、酯类和醛酮类等，一般而言，发酵香构成了葡萄酒的主体香气[4]。葡萄酒陈酿阶段产生的香气称为三类香气，主要源自橡木桶或橡木制品浸出物以及存储过程中形成的香气组分[5]。目前，多采用GC-O-MS技术分析葡萄及葡萄酒中的关键呈香物质[6]。Fritsch等[7]采用GC-O和OAV法鉴定啤酒的关键香气物质，共筛选出22种关键呈香化合物，重构试验结果表明重构模型与原酒样香气轮廓一致。Benkwitz等[8]采用香气萃取稀释分析法、OAV法和香气重组法探究‘长相思’白葡萄酒中的关键香气物质。Ma等[9]采用AEDA-GC-O法结合香气重构及缺失试验明确了‘威代尔’冰酒中的关键物质为(*E*)-*β*-大马士酮、呋喃酮和甲硫醛。作者以‘公主白’干白葡萄酒为原料，采用GC-O-MS技术结合OAV法明确‘公主白’干白葡萄酒的关键香气物质，以期为‘公主白’干白葡萄酒的风味化学研究提供理论依据。

1　材料与方法

1.1　材料与试剂

‘公主白’干白葡萄酒：吉林省鸭江谷酒庄有限公司；氯化钠、氢氧化钠、无水硫酸钠(均为分析纯)：北京化学试剂公司；正构烷烃(C_6~C_{30})：美国Sigma-Aldrich公司；香气物质标准品：瑞士Fluka Chemie GmbH公司；二氯甲烷、甲醇、乙醇(均为色谱纯)：北京蓝弋化工产品有限公司。

1.2　仪器与设备

嗅觉检测仪：ODP2型，德国GERSTEL公司；气相色谱-质谱联用仪：7890/5975B型，美国Agilent公司；溶剂辅助风味蒸发装置：德国Glasbläserei Wolfgang Bahr公司；顶空固相微萃取头：DVB/CAR/PDMS型，美国SUPELCO公司；气相色谱柱：HP-INNOWAX型，美国J&W SCIENTIFIC公司；氮吹仪：UGC-24C型，北京优晟联合科技有限公司。

1.3　方法

1.3.1　GC-O-MS分析

采用液液萃取结合溶剂辅助风味蒸发(SAFE)法和GC-O-MS技术进行鉴定。取80 mL二氯甲烷与150 mL样品混合，磁力搅拌10 min，将下层溶液在4 ℃以8 000 r/min离心10 min，取有机相，用40 mL二氯甲烷重复萃取2次，合并有机相进行SAFE。在水浴温度35 ℃、真空度1×10^{-6} MPa条件下开始萃取。提取液加1.5 g无水硫酸钠干燥，氮吹浓缩至1 mL。用等体积二氯甲烷稀释后进行嗅闻分析，以能够嗅闻到的最高稀释度作为该物质的香气稀释因子(flavor dilution factor，FD)。选择3位有1年以上培训经验的嗅闻员参与试验，同等稀释度样品嗅闻3次，其中2次及以上嗅闻到香气则保留对应FD[9-10]。

GC-O-MS检测条件：进样量1 μL；进样口温度250 ℃；采用毛细管柱HP-INNOWAX(60 m×0.25 mm，0.25 μm)；载气为高纯氦气(纯度>99.999%)，流量为1 mL/min；分流比1∶1；初始柱温50 ℃并保持1 min，以3 ℃/min上升至230 ℃并保持5 min；嗅探口温度220 ℃，质谱接口温度250 ℃；采用EI源，电离能70 eV，离子温度230 ℃；质荷比扫描范围为30~350[11-12]。

1.3.2　挥发性化合物测定

采用顶空固相微萃取(headspace solid-phase microextraction，HS-SPME)和GC-MS测定挥发性化合物。顶空瓶中加入1 g NaCl、5 mL样品和10 μL内标(4-甲基-2-戊醇，1.001 8 g/L)，40 ℃下以500 r/min加热搅拌30 min。将活化后的萃取头置于样品瓶顶空部分，40 ℃下加热搅拌30 min后置于GC进样口，解吸8 min，采用不分流模式。升温程序及质谱条件与GC-O-MS条件相同，扫描模式为SCAN[13]。应用MSD化学数据分析软件对峰面积进行积分，将各化合物峰面积与内标的峰面积比值代入标准曲线，完成定量分析。对于缺乏标准样品的化合物，则采用具有相似官能团或相近碳原子数的标准品进行半

定量分析。每个样品均重复测定2次。

1.3.3 香气重构和缺失试验

1)重构试验:对GC-O-MS技术鉴定出的物质中OAV≥1及FD≥2的38种物质进行分析。重构酒制备:以原酒乙醇体积分数11.5%为标准,配制相同体积分数的乙醇水溶液为基质溶液,参照表2中各物质质量浓度,利用标准品配制香气重构模型。原酒经5位专业品评员(2男3女,22~28岁)评审,确定6种香气特征:草莓/甜香、菠萝、植物、花香、青苹果及桃子。11名品评员(5男6女,23~28岁)采用10点标度法(1~10分表示香气强度由弱至强)对原酒及重构酒的6种香气特征进行评分。试验重复2次,结果标准差应小于10%,最终取2次测量的平均值[11]。

2)缺失试验:根据化合物类别和香气类型将38种香气物质分成菠萝酮、β-大马士酮、芳香族化合物、高级醇乙酸酯类物质、脂肪酸乙酯类物质和其他物质。建立缺失模型,以缺失某一组分的重构酒作为缺失样品,以重构酒为对照。18位(8男10女,22~28岁)品评员利用三角检验法完成缺失试验[11]。

1.4 数据处理

采用Origin 2018绘制图表,通过SPSS 19.0统计数据。

2 结果与讨论

2.1 GC-O-MS检测结果

如表1所示,通过GC-O-MS技术共检测到61个嗅闻物质,其中41个嗅闻物质能够实现定性,20个嗅闻物质需进一步研究。41个定性物质中含高级醇乙酸酯类物质2种,乙酸已酯和乙酸异丁酯的FD均低于8;脂肪酸乙酯类物质8种,其中辛酸乙酯的FD为1 024;除乳酸乙酯和棕榈酸乙酯外,其余脂肪酸乙酯类物质的FD为16~64;高级醇类物质5种,其中异戊醇对样品的香气贡献较为明显,FD为128;C_{13}-降异戊二烯类物质中β-大马士酮(FD为256)呈现花香和蜂蜜味;硫化物2种,表现为煮土豆味,其中甲硫基丙醛的FD为64;呋喃酮类物质2种,其中菠萝酮的FD为1 024,主要呈现菠萝香;内酯类物质3种,FD均为2~8。此外,芳香族化合物5种,主要呈现花香,其中苯乙醇的FD达1 024,其余4种物质的FD均不低于16;挥发性酚类物质2种,其中4-乙烯基愈创木酚的FD为32;醛酮类物质2种,其中香草醛的FD为32;脂肪酸类物质8种,表现为脂肪味和酸腐味,FD为4~128;其他物质中,辛酸甲酯的FD为8,呈现药材香。除暂时确定的香气物质外,将FD≥2的香气物质用于后续重构试验。

表1 ‘公主白’干白葡萄酒中香气物质的定性结果及FD

Table 1 Qualitative results and FD of aroma components in ‘Gongzhubai’ dry white wine

序号	保留指数	CAS	香气描述	物质名称	FD	定性方式
1	905.7	—	甜香	—	32	O
2	1 008.4	—	溶剂	—	4	O
3	1 015.0	—	甜香,糖果	—	8	O
4	1 028.0	—	果香	—	2	O
5	1 040.0	—	化学	—	2	O
6	1 047.0	110-19-0	果香	乙酸异丁酯	4	RI、MS、O
7	1 065.0	105-54-4	果香	丁酸乙酯	16	RI、MS、O
8	1 110.6	78-83-1	溶剂	2-甲基-1-丙醇	2	RI、MS、O
9	1 148.1	123-92-2	香蕉	3-甲基丁酸乙酯	64	RI、MS、O
10	1 223.0	123-51-3	指甲油	异戊醇	128	RI、MS、O
11	1 258.2	123-66-0	青苹果	己酸乙酯	32	RI、MS、O
12	1 292.8	142-92-7	青草	乙酸已酯	2	RI、MS、O
13	1 342.4	589-35-5	脂肪、菌类	3-甲基戊-1-醇	4	RI、MS、O
14	1 360.6	97-64-3	甜香、果香、焦糖	乳酸乙酯	4	RI、MS、O
15	1 400.2	6789-80-6	青草	(Z)-3-己烯醇	2	RI、MS、O
16	1 406.2	111-11-5	药材	辛酸甲酯	8	RI、MS、O
17	1 412.3	124-19-6	青草	壬醛	4	RI、MS、O

续表

序号	保留指数	CAS	香气描述	物质名称	FD	定性方式
18	1 453.6	64-19-7	醋	乙酸	128	RI、MS、O
19	1 461.0	106-32-1	甜香	辛酸乙酯	1 024	RI、MS、O
20	1 480.6	3268-49-3	煮土豆	甲硫基丙醛	64	RI、MS、O
21	1 545.0	—	甜香、糖果	—	2	O
22	1 552.7	123513-85-9	果香、奶油	2,3-丁二醇	2	RI、MS、O
23	1 559.4	78-70-6	花香	里那醇	32	RI、MS、O
24	1 583.9	79-31-2	脂肪、酸腐	异丁酸	4	RI、MS、O
25	1 612.0	4077-47-8	甜香	4-甲氧基-2,5-二甲基-3(2H)-呋喃酮	16	RI、MS、O
26	1 633.3	—	植物、脂肪	—	2	O
27	1 643.8	2704-51-0	酸腐	丁酸	32	RI、MS、O
28	1 652.6	110-38-3	椰子	癸酸乙酯	16	RI、MS、O
29	1 666.5	122-78-1	甜香、花香	苯乙醛	64	RI、MS、O
30	1 684.8	503-74-2	腐臭味	异戊酸	64	RI、MS、O
31	1 701.2	67233-91-4	甜香、花香	9-癸烯酸乙酯	16	RI、MS、O
32	1 732.8	505-10-2	煮土豆	甲硫基丙醇	16	RI、MS、O
33	1 746.4	—	花香	—	2	O
34	1 834.3	103-45-7	玫瑰、蜂蜜	乙酸苯乙酯	64	RI、MS、O
35	1 843.1	23726-93-4	蜂蜜、花香	β-大马士酮	256	RI、MS、O
36	1 857.4	142-62-1	酸腐	正己酸	64	RI、MS、O
37	1 879.6	90-05-1	烘烤、烟熏、焦糖	愈创木酚	4	RI、MS、O
38	1 900.3	—	甜香、花香	—	16	O
39	1 925.5	60-12-8	玫瑰	β-苯乙醇	1 024	RI、MS、O
40	1 943.5	104-50-7	花香、椰子	γ-辛内酯	2	RI、MS、O
41	1 946.5	—	酸腐	—	4	RI、MS、O
42	1 980.2	105140-26-9	甜香	δ-壬内酯	4	RI、MS、O
43	2 036.4	3658-77-3	菠萝、草莓、焦糖	菠萝酮	1 024	RI、MS、O
44	2 044.0	—	酸腐	—	4	O
45	2 057.5	124-07-2	酸腐	辛酸	16	RI、MS、O
46	2 086.0	—	动物	—	2	O
47	2 126.0	—	花香	—	16	O
48	2 150.5	105140-26-9	甜香、花香	γ-壬内酯	8	RI、MS、O
49	2 162.7	—	药材	—	4	O
50	2 170.5	—	动物、烟熏	—	32	O
51	2 200.0	7786-61-0	药材、烟熏	4-乙烯基愈创木酚	32	RI、MS、O
52	2 211.3	—	甜香	—	16	O
53	2 241.4	628-97-7	甜香	棕榈酸乙酯	2	RI、MS、O
54	2 243.1	—	烟熏、焦糖	—	2	O
55	2 262.0	334-48-5	肥皂	正癸酸	4	RI、MS、O
56	2 268.6	14436-32-9	烟熏、植物、果香	9-癸烯酸	4	RI、MS、O
57	2 384.7	—	马厩	—	4	O
58	2 552.6	103-82-2	甜香、花香	苯乙酸	16	RI、MS、O
59	2 566.3	121-33-5	香草、甜香	香草醛	32	RI、MS、O
60	2 587.9	—	花香	—	2	O
61	2 591.3	—	药材	—	4	O

注：—表示未知物质；下划线表示暂时确定的物质；RI表示通过极性色谱柱获得的保留指数进行匹配；MS表示利用NIST数据库或标准质谱图进行匹配；O表示根据香气特征进行匹配。

2.2 香气物质定量及OAV分析

通过HS-SPME-GC-MS对‘公主白’干白葡萄酒的香气物质进行定量分析。如表2所示，酒样中OAV≥1的香气物质共24种。结合GC-O-MS测定结果，判定OAV≥1及FD≥2的香气物质（共38种）为‘公主白’干白葡萄酒的关键呈香物质。

关键呈香物质中菠萝酮的OAV约是*β*-大马士酮的11倍，同时FD为1 024，表明菠萝酮是‘公主白’干白葡萄酒中重要的香气物质。Genovese和Sarrazin等[14-15]研究表明菠萝酮是葡萄酒中重要的呋喃酮类芳香物质。*β*-大马士酮的OAV为332.400，FD为256，表明*β*-大马士酮对酒样整体香气有较大贡献。Falcão等[16]研究表明*β*-大马士酮对巴西‘赤霞珠’葡萄酒整体香气具有重要贡献。

芳香族化合物主要贡献花香。其中*β*-苯乙醇的FD为1 024，表明其对酒样香气具有较大贡献。马玥等[17]研究表明苯乙醇对冰酒的香气也有显著贡献。高级醇乙酸酯类物质主要对花果香气有贡献，其中乙酸异戊酯的OAV和FD较高。*β*-苯乙醇、香草醛和乙酸苯乙酯等物质在GC-O分析中都具有较高的FD，但其OAV均较小。说明GC-O与OAV分析在鉴别关键呈香物质时存在一定差异，可能是由于香气物质互作的影响以及酚类化合物对香气物质的作用。Villamor等[18]研究表明多酚化合物等物质可能会影响品评员对挥发性香气的感知。

脂肪酸乙酯类物质主要呈果香。其中辛酸乙酯的FD为1 024，表明其对酒样整体香气有显著贡献。己酸乙酯也具有较高的OAV和FD。Yang等[19]研究表明在美洲种及其杂交品种中，己酸乙酯等物质是贡献葡萄果实香气最重要的挥发性酯类。葡萄酒中的内酯类化合物通常由相应的羟基酸在特定条件下发生环化反应生成，其中*γ*-丁内酯和*δ*-丁内酯是常见的内酯类物质，它们对香气的形成具有显著贡献[20]。本研究中检出的内酯类物质包括*γ*-辛内酯、*γ*-壬内酯和*δ*-壬内酯，主要贡献甜香和花香。

脂肪酸类物质中乙酸、丁酸和辛酸具有较高的OAV和FD，主要表现为脂肪味和酸腐味，对酒样整体香气具有一定影响，目前已在多种葡萄酒中发现了这些挥发性脂肪酸[21]。醇类呈香物质中异戊醇的FD为128，OAV为1.207。硫化物中甲硫基丙醛和甲硫基丙醇因挥发性高、阈值低，对样品香气有重要影响。酚类物质不仅赋予葡萄酒颜色，还使其具有收敛性的口感，决定了葡萄酒的典型性。关键呈香物质中4-乙烯基愈创木酚的FD为32，可通过酿酒酵母的酶促降解转化为气味更强的4-乙基苯酚和4-乙基愈创木酚，对酒样香气有较大贡献[22]。

表2 ‘公主白’干白葡萄酒中香气物质质量浓度及OAV

Table 2 Mass concentrations and OAV of aroma compounds in ‘Gongzhubai’ dry white wine

类别	物质名称	CAS	质量浓度/(μg/L)	阈值/(μg/L)	OAV
呋喃酮	菠萝酮	3658-77-3	153.76±9.70	0.04[23]	3 844.000
	甲氧基呋喃酮	69556-70-3	104.86±6.65	10[23]	10.400
C_{13}-降异戊二烯	*β*-大马士酮	23726-93-4	16.62±0.17	0.05[24]	332.400
萜烯	橙花叔醇	7212-44-4	19.98±0.96	1[25]	19.980
	香茅醇	106-22-9	7.77±0.46	100[24]	0.078
	4-萜品醇	20126-76-5	3.39±0.31	5 000[32]	0.001
	橙花醚	1786-08-9	50.81±0.97	—	—
	脱氢芳樟醇	20053-88-7	41.00±0.31	—	—
	2,6-二甲基-2,6-辛二烯	2492-22-0	14.76±0.10	—	—
	里那醇氧化物	60047-17-8	42.65±2.88	—	—
硫化物	甲硫基丙醛	3268-49-3	6.36±0.69	0.5[28]	12.714
	甲硫基丙醇	505-10-2	713.14±34.79	500[24]	1.426
芳香族化合物	苯乙醛	122-78-1	10.07±0.27	1[29]	10.070
	里那醇	78-70-6	12.85±0.59	15[32]	0.857
	β-苯乙醇	60-12-8	7 255.78±324.08	10 000[24]	0.726

续表

类别	物质名称	CAS	质量浓度/(μg/L)	阈值/(μg/L)	OAV
脂肪酸乙酯	己酸乙酯	123-66-0	1 412.16±23.53	5[24]	282.432
	丁酸乙酯	105-54-4	601.55±10.92	20[24]	30.078
	9-癸烯酸乙酯	67233-91-4	1 757.31±54.25	100[26]	17.573
	癸酸乙酯	110-38-3	3 409.39±116.23	200[27]	17.047
	乙酸乙酯	141-78-6	75 275.45±506.10	7 500[24]	10.037
	辛酸乙酯	106-32-1	4 450.49±123.71	580[25]	7.673
	月桂酸乙酯	106-33-2	9 332.34±409.23	1 500[26]	6.222
	十四酸乙酯	124-06-1	200.20±22.02	2 000[26]	0.100
	乳酸乙酯	97-64-3	5 174.47±359.03	100 000[31]	0.052
	棕榈酸乙酯	628-97-7	17.10±1.54	1 000[32]	0.017
	丁二酸二乙酯	123-25-1	428.74±6.99	100 000[31]	0.004
	苯乙酸乙酯	101-97-3	2.35±0.05	650[26]	0.004
	顺式-丁烯酸乙酯	623-70-1	162.55±28.81	—	—
	庚酸乙酯	106-30-9	5.17±0.05	—	—
	壬酸乙酯	68123-29-5	60.52±0.12	—	—
	反式-4-癸烯酸乙酯	76649-16-6	196.96±0.09	—	—
	9-棕榈烯酸乙酯	54546-22-4	11.47±1.06	—	—
其他酯	乙酸异戊酯	123-92-2	1 826.66±12.52	30[24]	60.889
	辛酸异戊酯	2035-99-6	759.48±45.66	125[27]	6.076
	乙酸己酯	142-92-7	148.73±3.20	1 000[31]	0.149
	辛酸甲酯	111-11-5	11.90±0.36	200[34]	0.060
	乙酸庚酯	117657-37-1	26.97±0.76	1 800[25]	0.015
	(*Z*)-3-乙酸叶醇酯	3681-71-8	483.33±242.54	—	—
	2-己烯酸乙酯	27829-72-7	3.82±0.06	—	—
	己酸异戊酯	2198-61-0	31.13±0.30	—	—
	7-辛烯酸乙酯	34495-71-1	59.58±0.19	—	—
	癸酸甲酯	110-42-9	4.94±0.17	—	—
	9-癸烯酸丁酯	7492-45-7	197.89±0.05	—	—
	水杨酸甲酯	119-36-8	27.45±0.17	—	—
脂肪酸	己酸	142-62-1	3 200.81±116.57	420[27]	7.621
	辛酸	124-07-2	3 496.37±42.03	500[27]	6.993
	丁酸	2704-51-0	3 381.27±545.36	1 000[24]	3.381
	乙酸	64-19-7	508 702.38±81 475.22	200 000[24]	2.544
	癸酸	334-48-5	1 879.85±6.01	1 000[27]	1.880
	异丁酸	79-31-2	2 870.17±317.89	2 300[27]	1.248
	异戊酸	503-74-2	484.36±92.54	3 000[24]	0.161
	月桂酸	143-07-7	575.83±1.20	10 000[33]	0.058
	9-癸烯酸	14436-32-9	1 695.65±1.99	—	—
内酯	*γ*-辛内酯	104-50-7	48.63±6.26	7[30]	6.947
	γ-壬内酯	105140-26-9	8.37±1.27	30[28]	0.279
	δ-壬内酯	105140-26-9	4.83±0.37	—	—
高级醇乙酸酯	乙酸苯乙酯	103-45-7	88.76±2.78	250[24]	0.355
	乙酸异丁酯	110-19-0	6.28±1.46	—	—
挥发性酚	愈创木酚	1990-5-1	0.87±0.07	10[24]	0.087
	4-乙烯基愈创木酚	7786-61-0	6.92±1.38	1 100[27]	0.006

续表

类别	物质名称	CAS	质量浓度/(μg/L)	阈值/(μg/L)	OAV
醇类	异戊醇	123-51-3	78 464.13±2 478.63	65 000[31]	1.207
	异丁醇	78-83-1	20 857.41±1 289.79	40 000[24]	0.521
	2,3-丁二醇	123513-85-9	71 984.46±26 806.63	668 000[33]	0.108
	1-庚醇	111-70-6	17.02±0.67	200[26]	0.085
	1-辛醇	111-87-5	10.52±0.86	10 000[33]	0.001
	3-甲基戊醇	589-35-5	0.88±0.79	—	—
	正癸醇	1565-81-7	32.13±1.77	—	—
	十一醇	112-42-5	15.93±0.78	—	—
醛酮类	香草醛	121-33-5	28.71±0.87	200[24]	0.144
C_6化合物	1-己醇	111-27-3	1 134.53±22.40	8 000[24]	0.142
	反式-3-己烯醇	928-97-2	74.33±16.21	1 000[32]	0.074

注：—表示未知。

2.3 香气重构与缺失试验分析

重构试验结果如图1所示，重构酒与原酒呈现出较为一致的香气轮廓。即这些香气化合物构成了‘公主白’干白葡萄酒的关键香气轮廓。在香气强度上，重构酒的草莓/甜香、菠萝、花香及桃子均低于原酒。6个香气属性上产生的差异一方面与GC-O-MS分析中未能定性的香气化合物有关，这些未知物质可能对酒体香气轮廓起修饰作用；另一方面，多酚化合物、蛋白质和碳水化合物等非挥发性物质与挥发性香气物质之间的相互作用也可能会抑制或增强品评员对挥发性香气的感知[18]；此外，挥发性香气物质之间的互作也可能导致重构酒与原酒在香气强度上存在差异[8]。

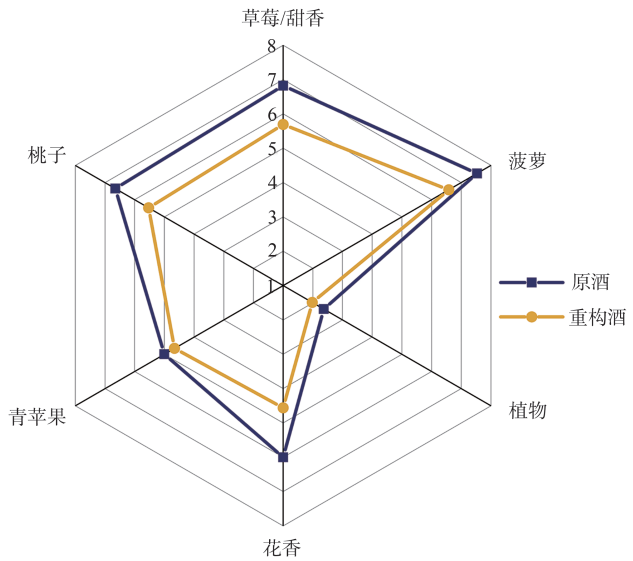


图1 原酒及重构酒香气轮廓对比分析

Fig. 1 Aroma profile comparative analysis of original wine and reconstitution wine

缺失试验结果见表3，β-大马士酮和脂肪酸乙酯类物质的缺失组与对照组之间存在极其显著的差异（$P<0.001$）。在GC-O-MS分析中，β-大马士酮呈现蜂蜜味和花香，尽管蜂蜜味不是酒体香气轮廓中的主要描述词，但缺失试验结果表明其对酒体的香气特征有一定影响。另外，缺失菠萝酮和高级醇乙酸酯类物质会显著影响评定员对酒体香气的感知，这些物质呈现菠萝香和花香。在重构试验中，重构酒的菠萝香气轮廓与原酒基本一致，进一步印证了菠萝酮是‘公主白’干白葡萄酒的关键香气物质。此外，芳香族化合物的缺失组与对照组之间存在显著差异（$P<0.05$）。在重构酒中，这类化合物产生的香气与原酒香气轮廓基本

表3 ‘公主白’干白葡萄酒的香气缺失试验

Table 3 Omission tests of aroma compounds in ‘Gongzhubai’ dry white wine

编号	香气特征	缺失成分	正确识别人数/总人数	显著性
1	菠萝	菠萝酮	12/18	**
2	蜂蜜	β-大马士酮	14/18	***
3	花香	芳香族化合物	11/18	*
4	果香/花香	高级醇乙酸酯类物质	12/18	**
5	果香	脂肪酸乙酯类物质	17/18	***
6	—	其他	17/18	***

注：***表示$P<0.001$；**表示$P<0.01$；*表示$P<0.05$；—表示香气特征未明确。

一致，进一步表明芳香族化合物是酒体香气的关键成分。

3 结论

利用GC-O-MS技术和OAV法较为全面地鉴定出‘公主白’干白葡萄酒的香气物质，确定了酒样中38种主要呈香物质。重构及缺失试验结果表明，β-大马士酮、脂肪酸乙酯类物质、菠萝酮、芳香族化合物和高级醇乙酸酯类物质是‘公主白’干白葡萄酒的关键呈香物质。该研究为进一步探索‘公主白’干白葡萄酒呈香特性提供了理论依据。

参考文献

[1] 房耀兰，何宁，刘素荣，等.‘公主白’葡萄新品种选育[J]. 葡萄栽培与酿酒，1993(3)：20-21.
FANG Y L，HE N，LIU S R，et al. Breeding of a new variety of ‘Gongzhubai’ grape [J]. Sino-Overseas Grapevine & Wine，1993(3)：20-21.(in Chinese)

[2] 张瑜，张波，杨博，等. 咖啡酸和迷迭香酸对‘黑比诺’干红葡萄酒香气成分的影响[J]. 食品与生物技术学报，2023，42(7)：72-83.
ZHANG Y，ZHANG B，YANG B，et al. Effects of caffeic acid and rosmarinic acid on aroma components of ‘pinot noir’ dry red wine[J]. Journal of Food Science and Biotechnology，2023，42(7)：72-83.(in Chinese)

[3] 孟楠，刘斌，潘秋红. 葡萄果实降异戊二烯类物质合成调控研究进展[J]. 园艺学报，2015，42(9)：1673-1682.
MENG N，LIU B，PAN Q H. Research advance on biosynthesis and regulation of norisoprenoids in grape berry[J]. Acta Horticulturae Sinica，2015，42(9)：1673-1682.(in Chinese)

[4] ESCUDERO A，GOGORZA B，MELÚS M A，et al. Characterization of the aroma of a wine from maccabeo. Key role played by compounds with low odor activity values[J]. Journal of Agricultural and Food Chemistry，2004，52(11)：3516-3524.

[5] 汪超，唐柯，高晨，等. 葡萄酒陈酿新技术研究进展[J]. 食品与生物技术学报，2022，41(12)：1-7.
WANG C，TANG K，GAO C，et al. Research progress on new wine aging technologies[J]. Journal of Food Science and Biotechnology，2022，41(12)：1-7.(in Chinese)

[6] SÁNCHEZ-PALOMO E，TRUJILLO M，GARCÍA R A，et al. Aroma profile of malbec red wines from La Mancha region：chemical and sensory characterization [J]. Food Research International，2017，100(1)：201-208.

[7] FRITSCH H T，SCHIEBERLE P. Identification based on quantitative measurements and aroma recombination of the character impact odorants in a Bavarian Pilsner-type beer[J]. Journal of Agricultural and Food Chemistry，2005，53(19)：7544-7551.

[8] BENKWITZ F，NICOLAU L，LUND C，et al. Evaluation of key odorants in Sauvignon blanc wines using three different methodologies [J]. Journal of Agricultural and Food Chemistry，2012，60(25)：6293-6302.

[9] MA Y，TANG K，XU Y，et al. Characterization of the key aroma compounds in Chinese Vidal icewine by gas chromatography-olfactometry，quantitative measurements，aroma recombination，and omission tests[J]. Journal of Agricultural and Food Chemistry，2017，65(2)：394-401.

[10] 倪伟，陈开波，徐志强，等. 使用GC/MS和GC-O鉴定皖南烟叶主要呈香组分[J]. 食品与生物技术学报，2019，38(6)：137-143.
NI W，CHEN K B，XU Z Q，et al. Identification of main aroma compounds in tobacco leaves from southern Anhui using GC/MS and GC-O [J]. Journal of Food Science and Biotechnology，2019，38(6)：137-143.(in Chinese)

[11] 柴瑞雪，安朝严，刘涛，等. 基于SAFE-GC-O-MS的‘双红’干红葡萄酒关键香气物质分析[J]. 食品科学，2022，43(4)：175-182.
CHAI R X，AN Z Y，LIU T，et al. Analysis of key aroma compounds in ‘Shuanghong’ wine by solvent assisted flavor evaporation combined with gas chromatography-olfactometry-mass spectrometry [J]. Food Science，2022，43(4)：175-182.(in Chinese)

[12] 周继亘，杨学山，祝霞，等. 不同浸渍工艺对赤霞珠干红葡萄酒香气的影响[J]. 食品与生物技术学报，2019，38(9)：50-59.
ZHOU J G，YANG X S，ZHU X，et al. Influence of different impregnation process of Cabernet Sauvignon dry red wine aroma [J]. Journal of Food Science and Biotechnology，2019，38(9)：50-59.(in Chinese)

[13] ZHANG M X，PAN Q H，YAN G L，et al. Using headspace solid phase micro-extraction for analysis of aromatic compounds during alcoholic fermentation of red wine[J]. Food Chemistry，2011，125(2)：743-749.

[14] GENOVESE A，GAMBUTI A，PIOMBINO P，et al. Sensory properties and aroma compounds of sweet Fiano wine[J]. Food Chemistry，2007，103(4)：1228-1236.

[15] SARRAZIN E，DUBOURDIEU D，DARRIET P. Characterization of key-aroma compounds of botrytized wines，influence of grape botrytization[J]. Food Chemistry，2007，103(2)：536-545.

[16] FALCÃO L D，REVEL G D，ROSIER J P，et al. Aroma impact components of Brazilian Cabernet Sauvignon wines using detection frequency analysis (GC-olfactometry) [J].

Food Chemistry，2008，107(1)：497-505.

[17] 马玥，唐柯，徐岩，等. 固相萃取结合GC-O/MS分析威代尔冰葡萄酒中的香气活性化合物[J]. 食品与发酵工业，2015，41(4)：153-159.
MA Y，TANG K，XU Y，et al. Solid-phase extraction-GC-O/MS for the analysis of odor-active volatile compounds in Vidal icewine[J]. Food and Fermentation Industries，2015，41(4)：153-159.(in Chinese)

[18] VILLAMOR R R，ROSS C F. Wine matrix compounds affect perception of wine aromas[J]. Annual Review of Food Science and Technology，2013，4：1-20.

[19] YANG C X，WANG Y J，LIANG Z C，et al. Volatiles of grape berries evaluated at the germplasm level by headspace-SPME with GC-MS[J]. Food Chemistry，2009，114(3)：1106-1114.

[20] LANGEN J，WANG C Y，SLABIZKI P，et al. Quantitative analysis of γ- and δ-lactones in wines using gas chromatography with selective tandem mass spectrometric detection[J]. Rapid Communications in Mass Spectrometry，2013，27(24)：2751-2759.

[21] FRANCIS I L，NEWTON J L. Determining wine aroma from compositional data[J]. Australian Journal of Grape and Wine Research，2005，11(2)：114-126.

[22] MAZAURIC J P，SALMON J M. Interactions between yeast lees and wine polyphenols during simulation of wine aging：I. analysis of remnant polyphenolic compounds in the resulting wines[J]. Journal of Agricultural and Food Chemistry，2005，53(14)：5647-5653.

[23] LARSEN M，POLL L. Odour thresholds of some important aroma compounds in strawberries [J]. Zeitschrift für Lebensmittel-Untersuchung und Forschung，1992，195(2)：120-123.

[24] GUTH H. Quantitation and sensory studies of character impact odorants of different white wine varieties[J]. Journal of Agricultural and Food Chemistry，1997，45(8)：3027-3032.

[25] PEINADO R A，MORENO J，BUENO J E，et al. Comparative study of aromatic compounds in two young white wines subjected to pre-fermentative cryomaceration[J]. Food Chemistry，2004，84(4)：585-590.

[26] TAO Y S，ZHANG L. Intensity prediction of typical aroma characters of Cabernet Sauvignon wine in Changli County (China)[J]. LWT-Food Science and Technology，2010，43(10)：1550-1556.

[27] FERREIRA V，LOPEZ R，CACHO J F. Quantitative determination of the odorants of young red wines from different grape varieties[J]. Journal of the Science of Food and Agriculture，2000，80(11)：1659-1667.

[28] ESCUDERO A，HERNÁNDEZ-ORTE P，CACHO J，et al. Clues about the role of methional as character impact odorant of some oxidized wines[J]. Journal of Agricultural and Food Chemistry，2000，48(9)：4268-4272.

[29] CULLERÉ L，ESCUDERO A，CACHO J，et al. Gas chromatography-olfactometry and chemical quantitative study of the aroma of six premium quality Spanish aged red wines [J]. Journal of Agricultural and Food Chemistry，2004，52(6)：1653-1660.

[30] ENGEL K H，FLATH R A，BUTTERY R G，et al. Investigation of volatile constituents in nectarines. 1. analytical and sensory characterization of aroma components in some nectarine cultivars[J]. Journal of Agricultural and Food Chemistry，1988，36(3)：549-553.

[31] CHAVES M，ZEA L，MOYANO L，et al. Changes in color and odorant compounds during oxidative aging of Pedro Ximenez sweet wines[J]. Journal of Agricultural and Food Chemistry，2007，55(9)：3592-3598.

[32] ZEA L，MOYANO L，MORENO J，et al. Discrimination of the aroma fraction of sherry wines obtained by oxidative and biological ageing[J]. Food Chemistry，2001，75(1)：79-84.

[33] ZEA L，MOYANO L，MORENO J A，et al. Aroma series as fingerprints for biological ageing in fino sherry-type wines [J]. Journal of the Science of Food and Agriculture，2007，87(12)：2319-2326.

[34] FERREIRA V，ORTÍN N，ESCUDERO A，et al. Chemical characterization of the aroma of Grenache rosé wines：aroma extract dilution analysis，quantitative determination，and sensory reconstitution studies[J]. Journal of Agricultural and Food Chemistry，2002，50(14)：4048-4054.

（责任编辑：史润东东）