

DOI: 10.19812/j.cnki.jfsq11-5956/ts.20250226004

引用格式: 杨志超, 梁颖, 贾海先, 等. 基于吹扫捕集-气相色谱/质谱法分析豆汁、麻豆腐中风味物质[J]. 食品安全质量检测学报, 2025, 16(11): 68-77.

YANG ZC, LIANG Y, JIA HX, *et al.* Analysis of flavor compounds in Douzhir and Ma Tofu based on purge and trap-gas chromatography/mass spectrometry [J]. Journal of Food Safety & Quality, 2025, 16(11): 68-77. (in Chinese with English abstract).

# 基于吹扫捕集-气相色谱/质谱法分析豆汁、麻豆腐中风味物质

杨志超<sup>1</sup>, 梁颖<sup>1</sup>, 贾海先<sup>2</sup>, 李春雨<sup>2</sup>, 张春梅<sup>1</sup>, 马巧云<sup>1</sup>, 马晓晨<sup>2</sup>,  
冯月超<sup>1</sup>, 邵鹏<sup>1</sup>, 马立利<sup>1\*</sup>

[1. 北京市科学技术研究院分析测试研究所(北京市理化分析测试中心), 北京 100089;  
2. 北京市疾病预防控制中心, 北京 100013]

**摘要:** **目的** 基于吹扫捕集-气相色谱/质谱法(purge and trap-gas chromatography/mass spectrometry, PT-GC/MS)并结合美国国家标准与技术研究院(national institute of standards and technology, NIST)数据库, 鉴定豆汁、麻豆腐中的风味物质并分析其特征物质。**方法** 称取 2.0 g 样品, 于 40 mL 棕色螺旋样品瓶中, 加入 10 mL 实验用水与四氟磁力搅拌子, 样品加热温度 40 °C, 经 PT-GC/MS 进行分析。**结果** 从 34 批次样品中, 共鉴定出 260 种风味物质, 涵盖含硫化物、醇类、醛类、酮类、酯类等多种类型。生、熟豆汁中含硫化物相对含量较高, 而麻豆腐的风味物质种类多样、相似性较低。这些鉴定数据在一定程度上能够反映感官评价结果, 但存在部分风味物质较为突出或被其他气味干扰的可能性。此外, 本研究利用主成分分析(principal component analysis, PCA)法对样品整体分布及偏离样本进行鉴别并尝试分析偏离原因; 进一步利用正交偏最小二乘判别分析(orthogonal partial least squares discriminant analysis, OPLS-DA), 基于 $[P<0.05, \text{变量投影重要性(variable importance in the projection, VIP)}>1]$ 的筛选条件, 选出 31 种生、熟豆汁特征风味物质, 可用于生、熟豆汁的区分与鉴定。**结论** 研究证实 PT-GC/MS 结合多元统计方法可有效解析豆汁、麻豆腐风味物质, 筛选特征物质, 为后续优化改善产品风味提供依据。

**关键词:** 豆汁; 麻豆腐; 吹扫捕集-气相色谱/质谱法; 风味物质

## Analysis of flavor compounds in Douzhir and Ma Tofu based on purge and trap-gas chromatography/mass spectrometry

YANG Zhi-Chao<sup>1</sup>, LIANG Ying<sup>1</sup>, JIA Hai-Xian<sup>2</sup>, LI Chun-Yu<sup>2</sup>, ZHANG Chun-Mei<sup>1</sup>,  
MA Qiao-Yun<sup>1</sup>, MA Xiao-Chen<sup>2</sup>, FENG Yue-Chao<sup>1</sup>, SHAO Peng<sup>1</sup>, MA Li-Li<sup>1\*</sup>

[1. Institute of Analysis and Testing, Beijing Academy of Science and Technology (Beijing Center for Physical and Chemical Analysis), Beijing 100089, China; 2. Beijing Center for Disease Prevention and Control, Beijing 100013, China]

收稿日期: 2025-02-26

第一作者: 杨志超(1984—), 男, 硕士, 工程师, 主要研究方向为食品质量与安全分析技术。E-mail: yzcdragon@foxmail.com

\*通信作者: 马立利(1981—), 女, 硕士, 副研究员, 主要研究方向为食品质量与安全分析技术。E-mail: malili14@163.com

**ABSTRACT: Objective** To identify flavor compounds in Douzhir and Ma Tofu and analyze their characteristic components based on purge and trap-gas chromatography/mass spectrometry (PT-GC/MS) combined with the national institute of standards and technology (NIST) database. **Methods** Weigh 2.0 g of sample into a 40 mL brown spiral sample bottle, add 10 mL of experimental water and a tetrafluoroethylene magnetic stirrer, heat the sample at 40 °C, and analyze it by PT-GC/MS. **Results** A total of 260 kinds of flavor compounds were identified across 34 batches, including sulfur-containing compounds, alcohols, aldehydes, ketones, esters, *etc.* Raw and cooked Douzhir exhibited significantly higher relative abundances of sulfur-containing compounds compared to Ma Tofu, which showed greater diversity but lower similarity in flavor profiles. These identification data could to some extent reflect sensory evaluation results, but there was a possibility that some flavor compounds might be more prominent or interfered with by other odors. In addition, this study used principal component analysis (PCA) method to identify the overall distribution of samples and deviations from samples, and attempted to analyze the reasons for deviations. Further, using orthogonal partial least squares discriminant analysis (OPLS-DA), based on the screening conditions [ $P < 0.05$ , variable importance in the projection (VIP) > 1], 31 kinds of characteristic flavor compounds of raw and cooked Douzhir were selected, which could be used for the differentiation and identification of raw and cooked Douzhir. **Conclusion** The study confirms that PT-GC/MS combined with multivariate statistical method can effectively analyze the flavor compounds of Douzhir and Ma Tofu, screen the characteristic compounds, and provide a basis for the subsequent optimization and improvement of product flavor.

**KEY WORDS:** Douzhir; Ma Tofu; purge and trap-gas chromatography/mass spectrometry; flavor compounds

## 0 引 言

豆汁是北京地区一种传统风味流食, 至今已有 200 多年历史。本为粉房做绿豆淀粉时生产的副产品, 用做淀粉的绿豆渣水发酵而成, 颜色灰绿, 汁味浓醇, 酸而微甜<sup>[1]</sup>。麻豆腐则为豆汁生产过程中的绿豆渣发酵而来, 具有独特的酸香味和豆香味<sup>[2]</sup>。随着互联网的发展, 不但吸引了大量外地游客来北京品尝<sup>[3]</sup>, 还出现预包装产品上架线上平台和线下超市, 销量稳步提升。

经过文献调研<sup>[4-6]</sup>和对北京 2 家豆汁生产企业的调研发现, 各家企业的豆汁和麻豆腐制作工艺流程大致相同, 操作细节存在差异, 工艺流程如图 1 所示。

豆汁、麻豆腐的风味物质主要来自微生物的发酵<sup>[7-9]</sup>, 但由于原材料的不同和自然发酵时优势菌的差别, 造成了各家豆汁、麻豆腐的风味差别。现阶段研究食品风味物质的方法主要有全二维气相色谱-飞行时间质谱技术<sup>[10-11]</sup>、固相微萃取/气相色谱-质谱技术<sup>[12-13]</sup>、吹扫捕集-气相色谱/质谱

法 (purge and trap-gas chromatography/mass spectrometry, PT-GC/MS)<sup>[14-17]</sup>、电子鼻+气相色谱-质谱法<sup>[18-19]</sup>的方式等。

PT 技术是基于动态顶空原理, 通过惰性气体将痕量挥发性物质高效吹扫至捕集器, 其检出限相较于静态顶空显著提高。该技术前处理无需加入溶剂, 取样量较小。封闭式系统设计有效避免环境污染, 通过温度梯度控制可实现复杂基质中风味成分的无损提取<sup>[20]</sup>。近年研究显示, 该技术在食品风味指纹图谱构建、特征香气物质鉴定及加工过程风味演化研究方面展现出独特优势。如 WU 等<sup>[21]</sup>创新性地开发了一种微型化热辅助吹扫捕集装置 (miniaturized thermal purge-and-trap, MTPT), 通过将葡萄酒中的二氧化硫 (SO<sub>2</sub>) 从液态基质中高效气化分离并富集, 显著提升了检测性能; 王璐等<sup>[6]</sup>采用 PT-GC/MS 快速测定生活饮用水中的 82 种挥发性有机物 (volatile organic compounds, VOCs), 显著提高了痕量 VOCs 的富集效率; 李爱兰等<sup>[14]</sup>利用 PT-GC/MS 结合化学计量学, 鉴别不同产地和品牌的浓香型白酒。相较于静态顶空法, 该方法捕获的化合物种类更全面, 且无需复杂前处理。

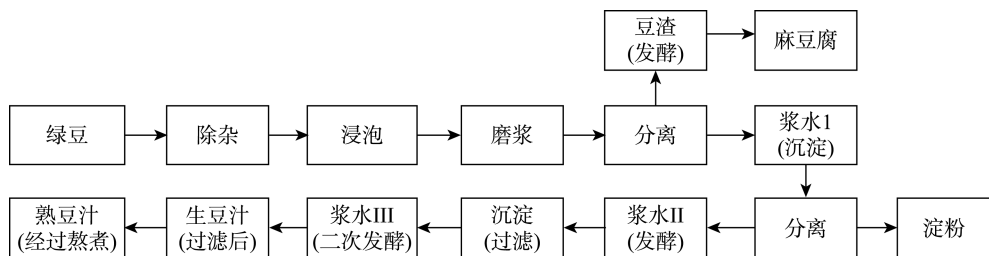


图 1 豆汁和麻豆腐制作工艺流程<sup>[4-6]</sup>  
Fig.1 Flowchart of Douzhir and Ma Tofu production<sup>[4-6]</sup>

本研究通过 PT-GC/MS 技术与多元统计方法<sup>[22-23]</sup>, 构建豆汁、麻豆腐风味物质的分析框架, 建立正交偏最小二乘判别分析 (orthogonal partial least squares discriminant analysis, OPLS-DA)<sup>[24]</sup>模型及特征物质数据库, 以期为实现生产过程精准监控与菌群定向调控提供依据。

## 1 材料与方 法

### 1.1 材料与试剂

前期调研发现, 北京市豆汁、麻豆腐的餐饮消费主要集中在东城、西城两个区, 其他城区消费量较小且分散。其中东城、西城以老字号为主, 而其他城区以连锁店为主。依据网络平台综合评分( $\geq 4.0$ 分)选取了 5 个城区 20 家消费者认可度较高、经营时间较长的餐饮机构进行采样, 分别为东城区 7 家、西城区 6 家、海淀区 5 家、朝阳区 1 家、丰台区 1 家。共购买 34 批次豆汁、麻豆腐样品, 包括 12 批次生豆汁、13 批次熟豆汁和 9 批次麻豆腐。生豆汁样品来源除 1029007 样品为餐饮机构自制外, 其他均为生产企业生产; 熟豆汁样品来源除 1029008 样品为餐饮机构自制外, 其他样品均为生产企业生产、餐饮机构再加工; 麻豆腐样品来源均为生产企业生产。样品编号和样品来源(生产企业拼音缩写)如表 1 所示。

实验用水为屈臣氏蒸馏水(电阻率 $\geq 18.2\text{M}\Omega \cdot \text{cm}$ )、40 mL 棕色螺旋样品瓶(美国赛默飞公司); 内衬有聚四氟乙烯膜螺旋盖(美国 CDS 公司)。

### 1.2 仪器与设备

BSA 224S 天平(精度为 0.1 mg, 德国赛多利斯公司); 7000E/7400 吹扫捕集自动进样器(配 5 mL 砂芯式吹扫管, CDS7000E 捕集阱, 美国 CDS 公司); GCMS-QP2010 Ultra 气相色谱/质谱仪(日本岛津公司); DB-624 毛细管色谱柱(60 m $\times$ 0.25 mm, 1.40  $\mu\text{m}$ )(美国安捷伦公司)。

### 1.3 方 法

#### 1.3.1 样品前处理

称取 2.0 g(精确至 0.0001 g)豆汁、麻豆腐样品于 40 mL 棕色螺旋样品瓶中, 加入 10 mL 蒸馏水, 加入四氟磁力搅拌子, 加盖拧紧, 运用仪器进行分析。

#### 1.3.2 仪器条件

吹扫捕集条件: 吹脱气(高纯氮气), 流速 40 mL/min, 吹扫时间 11 min; 10 # 捕集阱, 解析预热温度 245  $^{\circ}\text{C}$ , 解析温度 250  $^{\circ}\text{C}$ , 烘焙温度 265  $^{\circ}\text{C}$ 。解析时间 3.0 min, 烘焙时间 12 min, 样品加热温度 40  $^{\circ}\text{C}$ ; 阀温 180  $^{\circ}\text{C}$ , 传输线温度 180  $^{\circ}\text{C}$ 。

气相色谱条件: DB-624 毛细管色谱柱(60 m $\times$ 0.25 mm, 1.40  $\mu\text{m}$ ); 汽化室温度 200  $^{\circ}\text{C}$ , 分流进样, 分流比 10:1 (I:V); 柱箱温度: 初温 35  $^{\circ}\text{C}$ , 保持 5 min, 以 10  $^{\circ}\text{C}/\text{min}$  升至 120  $^{\circ}\text{C}$ , 不保持, 再以 15  $^{\circ}\text{C}/\text{min}$  升至 240  $^{\circ}\text{C}$ , 保持 3.5 min。柱前压 161.0 kPa。

质谱条件: 电子轰击(electron impact, EI)离子源温度 230  $^{\circ}\text{C}$ , 接口温度 260  $^{\circ}\text{C}$ ; 电子倍增器电压 1.2 kV, 扫描速度 1111 amu/s, 扫描范围 35~350 amu/s, 扫描时间 3~25 min。

表 1 样品信息  
Table 1 Information of samples

序号	生豆汁		熟豆汁		麻豆腐	
	样品编号	样品来源	样品编号	样品来源	样品编号	样品来源
1	1028016	GLSW	1028014	HSYSP	1028015	GLSW
2	1028017	HSYSP	1028019	LMHH	1028018	HSYSP
3	1028020	ZHSP	1028021	ZHSP	1028025	LMHH
4	1028022	HSYSP	1028024	LMHH	1028030	HSYSP
5	1028023	LMHH	1028027	HSYSP	1029003	HJLCQK
6	1028026	HSYSP	1028029	HSYSP	1029006	XDYY
7	1028028	HSYSP	1028031	XDYY	1029009	ZGHWJ
8	1029001	HJLCQK	1029002	HJLCQK	1030002	LHSP
9	1029005	ZHSP	1029004	ZHSP	1104003	XDYY
10	1029008	ZGHWJ	1029007	ZGHWJ	-	-
11	1030001	BYSM	1029010	YSDZ	-	-
12	1104001	XDYY	1029011	NBJJ	-	-
13	-	-	1104002	XDYY	-	-

注: -表示无此项, 表 3 同。

## 1.4 数据处理

利用美国国家标准与技术研究院(national institute of standards and technology, NIST)数据库, 对样品的挥发性化合物进行质谱定性, 并利用总离子流图峰面积归一化法计算各化合物的相对含量。使用 SIMCA 14.1 软件进行主成分分析(principal component analysis, PCA)和 OPLS-DA, 计算变量投影重要性(variable importance in the projection, VIP); 以  $P < 0.05$ ,  $VIP > 1$  为条件筛选差异风味物质<sup>[25]</sup>。

## 2 结果与分析

### 2.1 风味物质鉴定结果与风味评价分析

使用 PT-GC/MS 和 NIST 数据库, 鉴定出生、熟豆汁和麻豆腐中共有 260 种风味物质, 如表 2 所示。

#### 2.1.1 生豆汁风味物质鉴定结果分析

12 批次生豆汁共鉴定出 134 种风味物质, 含硫化合物共 18 种, 其中全部检出二甲基二硫醚、甲硫醇, 91.7% 检出二甲基硫醚、环戊基甲基硫醚。甲基二硫醚和二甲基二硫醚的相对含量更高, 最大值分别可达到 43.70%、41.88%。

生豆汁中醇类和酯类物质种类最丰富, 检出种类均为 27 种, 但每种物质的相对含量较低, 检出相对含量最大值的醇类物质如 *L*-苏丁醇、正辛醇、3-甲基-1-戊醇也仅分别为 18.81%、14.75%、10.19%, 酯类相对含量更是均小于 10%。共有醇类和酯类物质为异丁醇、1-戊醇和乙酸丙酯 3 种。

酮类、醛类、烯炔、烷烃和其他类物质检出种类不多, 分别为 11 种、10 种、8 种、16 种和 15 种, 全部样品均检出正己烷、正戊烷。1,2-二氟乙烷、甲基胂、(2*R*,3*S*)-2-甲基-3-戊基环氧乙烷、正辛醛、异丙基缩水甘油醚和丁醛的相对含量最大值较高, 分别为 20.11%、19.92%、19.15%、16.99%、15.11%、13.00%, 其余相对含量均小于 10%。

酸类物质检出较少, 仅有 2 种,  $\beta$ -甲基乙酰丙酸、甲酸检出率分别为 25.0%、8.3%, 相对含量最大值分别为 15.73%、19.87%。

生豆汁呈现出含硫化合物相对含量较高, 醇类和酯类物质种类最为丰富但单种含量普遍较低的特征。共有物质为甲硫醇、二甲基二硫醚、异丁醇、1-戊醇、乙酸丙酯、正戊烷、正己烷。

#### 2.1.2 熟豆汁风味物质鉴定结果分析

13 批次熟豆汁共鉴定出 121 种风味物质, 其中含硫化合物共 14 种, 二甲基二硫醚和二甲基三硫醚为共有风味物质。与生豆汁类似, 甲基二硫醚、二甲基二硫醚的相对含量更高, 最大值可分别达到 59.21%、41.23%。熟豆汁甲基二硫醚的检出率为 23.1%, 低于生豆汁的 41.7%。

熟豆汁中醇类物质种类最多, 共 23 种, 但每种物质的相对含量较低, 除正己醇的相对含量最大值为 12.07% 外, 其他均小于 10%。共有物质有正己醇、叶醇和 1-戊醇 3 种。

酮类、醛类、酯类、烯炔、烷烃和其他类物质检出种类分别为 14 种、14 种、16 种、4 种、21 种和 15 种, 其中全部检出 2-丁酮、丙酮、正己醛、乙酸乙酯、正己烷。甲基胂、异丙基缩水甘油醚的相对含量最大值分别为 41.04%、21.30%, 其余相对含量均小于 10%。熟豆汁未检出酸类物质。

熟豆汁所含含硫化合物种类比生豆汁少, 可以说明通过熬煮的加工方式, 可以一定程度上减少含硫化合物, 起到除臭的作用。二甲基二硫醚、二甲基三硫醚、1-戊醇、正己醇、叶醇、丙酮、2-丁酮、乙酸乙酯、正己醛、正己烷为共有物质。

#### 2.1.3 麻豆腐风味物质鉴定结果分析

9 批次麻豆腐共鉴定出 185 种风味物质, 其中含硫化合物共 13 种, 甲基二硫醚、二甲基二硫醚的相对含量较高, 最大值分别达到 40.10%、22.47%。麻豆腐检出了 34 种酯类物质, 醇类和其他类物质也较多, 分别多达 33 种和 31 种。其中叶醇为共有物质。甲基胂的相对含量最大值较高, 为 56.64%, 乙醇、仲丁醇、2-乙氧基乙醇、2-甲基-1,3-丙二醇、正己醇、3-甲基-1-戊醇、邻苯二甲酸单乙酯和邻苯二甲酸二乙酯的相对含量最大值分别为 35.55%、17.60%、13.85%、16.49%、11.23%、22.87%、10.57% 和 12.62%, 其余相对含量均小于 10%。

酮类、醛类、烯炔、烷烃检出种类分别为 13 种、17 种、20 种、23 种, 异戊醛为共有物质。2-氯(正)己烷、正戊烷的相对含量最大值分别为 20.90%、13.11%, 其余相对含量均小于 10%。仅有一个样品鉴定出炔烃类物质, 3-壬炔的相对含量为 0.18%。

麻豆腐的风味物质种类多于豆汁样品, 但含硫化合物相对含量最大值和检出率均较低。麻豆腐的共有化合物种类较少, 仅有叶醇、异戊醛两种。说明各家生产企业麻豆腐的生产工艺差别较大, 部分企业可能向产品中添加了其他辅料。

#### 2.1.4 风味物质综合占比与感官风味评价分析

豆汁、麻豆腐的臭味主要来自二甲基二硫醚、二甲基三硫醚、甲硫醇等含硫化合物, 醇类、醛类、酮类、酯类等多种化合物可以提供青香、果香、甜香、醚香等丰富风味<sup>[26-27]</sup>。尝试将这些风味物质数据综合计算后, 与评价人员的主观感受对比<sup>[28-29]</sup>。如表 3 所示。

含硫化合物综合占比与感官评价的臭味强度评价成正相关, 检测结果能较好地反映感官评价结果。而豆香味组成复杂, 通过感官评价共筛选出 17 个豆香味呈适中或强的样本, 经过共性风味物质分析显示: 检出率  $\geq 70\%$  的高频物质共 16 种, 如表 4 所示。推测这些化合物可能协同构成豆香味基底。进一步分析发现, 部分相对含量占比很大的物质对豆香特征可能存在掩蔽效应。例如, 样本 1028030 中乙醇含量高达 35.54%, 其主导酒香风味可能干扰豆香味感知, 说明特征香气解析需综合考量化合物浓度、感官阈值及风味交互作用。

表2 生、熟豆汁和麻豆腐风味物质及相对含量分析结果

Table 2 Analysis results of flavor compounds and relative content in raw and cooked Douzhi and Ma Tofu

分类	挥发性物质 名称	生豆汁			熟豆汁			麻豆腐			
		最小值/%	最大值/%	检出率/%	最小值/%	最大值/%	检出率/%	最小值/%	最大值/%	检出率/%	
含硫化 合物	甲硫醇	1.01	6.51	100.0	0.45	6.92	76.9	0.09	1.07	55.6	
	甲基二硫醚	13.75	43.70	41.7	22.00	59.21	23.1	17.74	40.10	33.3	
	二甲基二硫醚	20.86	41.88	100.0	11.01	41.23	100.0	3.64	22.47	88.9	
	二甲基三硫醚	0.46	11.22	75.0	0.23	4.73	100.0	0.54	1.04	22.2	
	二甲基硫醚	0.11	0.96	91.7	0.11	0.64	76.9	0.16	0.66	77.8	
	硫代乙酸甲酯	0.29	2.07	41.7	0.70	2.34	84.6	0.87	1.00	22.2	
	环戊基甲基硫醚	0.05	0.39	91.7	0.06	0.63	53.8	0.16	0.65	33.3	
	2-甲基-1-甲硫基-2- 丁烯	0.08	0.36	83.3	0.07	0.33	30.8	0.11	0.36	44.4	
醇类	乙醇	-	-	-	-	-	-	35.55	35.55	11.1	
	异丁醇	0.05	0.18	100.0	0.07	0.22	92.3	0.08	0.27	66.7	
	仲丁醇	3.65	7.55	16.7	8.50	8.50	7.7	3.44	17.60	33.3	
	L-苏丁醇	8.39	18.81	50.0	-	-	-	-	-	-	
	2-乙烯氧基乙醇	-	-	-	-	-	-	13.85	13.85	11.1	
	2-甲基-1,3-丙二醇	-	-	-	-	-	-	16.49	16.49	11.1	
	3-戊醇	0.08	0.64	91.7	0.07	0.50	92.3	0.07	0.55	77.8	
	2-甲基丁醇	0.08	0.43	33.3	0.06	0.28	61.5	0.14	0.43	77.8	
	1-戊醇	0.06	0.17	100.0	0.10	0.36	100.0	0.08	1.75	77.8	
	1-戊烯-3-醇	0.24	0.36	33.3	0.46	0.46	7.7	0.16	0.80	77.8	
	正己醇	1.66	10.15	75.0	2.65	12.07	100.0	1.49	11.23	88.9	
	叶醇	0.08	0.68	41.7	0.08	1.14	100.0	0.09	0.78	100.0	
	3-甲基-1-戊醇	8.89	10.19	16.7	-	-	-	22.87	22.87	11.1	
	2-乙基己醇	0.05	0.09	66.7	0.06	0.18	92.3	0.08	0.28	66.7	
	1-辛烯-3-醇	-	-	-	0.05	0.13	46.2	0.06	0.70	88.9	
	正辛醇	0.06	14.75	41.7	0.06	0.16	38.5	-	-	-	
	酸类	甲酸	19.87	19.87	8.3	-	-	-	-	-	-
		$\beta$ -甲基乙酰丙酸	7.56	15.73	25.0	-	-	-	-	-	-
酮类	丙酮	0.05	0.23	75.0	0.11	1.08	100.0	0.13	2.30	88.9	
	2-丁酮	0.18	3.30	75.0	0.16	6.86	100.0	0.10	1.86	66.7	
酯类	乙酸甲酯	0.05	2.65	91.7	0.06	0.09	23.1	0.09	3.68	88.9	
	乙酸乙酯	1.28	7.12	25.0	1.10	4.30	100.0	0.43	7.10	88.9	
	甲酸丙酯	0.19	0.92	83.3	0.29	7.12	53.8	0.85	3.45	44.4	
	丙酸乙酯	0.14	0.78	75.0	0.11	0.78	30.8	0.17	0.55	55.6	
	乙酸丙酯	0.06	0.93	100.0	0.06	0.89	84.6	0.09	1.00	88.9	
	邻苯二甲酸单乙酯	8.15	8.15	8.3	-	-	-	3.28	10.57	22.2	
	邻苯二甲酸二乙酯	0.75	7.09	58.3	0.79	4.57	76.9	1.58	12.62	33.3	
醛类	乙醛	0.22	0.86	41.7	0.59	5.32	84.6	0.34	3.09	55.6	
	异丁醛	-	-	-	0.08	0.87	84.6	0.06	1.71	77.8	
	丁醛	13.00	13.00	8.3	0.06	0.16	38.5	0.06	0.11	22.2	
	2-甲基丁醛	-	-	-	0.04	0.29	76.9	0.05	2.82	77.8	
	异戊醛	0.08	0.08	8.3	0.07	0.68	69.2	0.12	6.62	100.0	
	戊醛	-	-	-	0.14	0.72	76.9	0.19	1.53	33.3	
	正己醛	0.10	9.46	83.3	0.22	5.45	100.0	0.25	5.14	77.8	
	正辛醛	0.05	16.99	33.3	0.06	0.09	38.5	0.12	0.12	11.1	
	壬醛	0.05	0.24	66.7	0.13	0.44	92.3	0.14	0.49	77.8	

表 2(续)

分类	挥发性物质 名称	生豆汁			熟豆汁			麻豆腐		
		最小值/%	最大值/%	检出率/%	最小值/%	最大值/%	检出率/%	最小值/%	最大值/%	检出率/%
烯烃	四氯乙烯	0.06	0.06	25.0	0.06	0.11	46.2	0.06	0.21	88.9
	1,2-二氟乙烷	12.95	20.11	25.0	-	-	-	-	-	-
烷烃	正戊烷	0.08	4.71	100.0	0.12	0.98	76.9	0.20	13.11	88.9
	正己烷	0.17	0.69	100.0	0.23	0.85	100.0	0.20	2.06	88.9
	2-氯(正)己烷	-	-	-	-	-	-	20.90	20.90	11.1
炔烃	3-壬炔	-	-	-	-	-	-	0.18	0.18	11.1
	甲基肼	14.46	19.92	25.0	23.45	41.04	76.9	15.69	56.64	55.6
其他	异丙基缩水甘油醚	9.00	15.11	33.3	13.23	21.30	53.8	-	-	-
	2-乙基呋喃	0.06	0.20	66.7	0.07	0.68	84.6	0.22	2.08	88.9
	2-正戊基呋喃	0.06	0.30	75.0	0.07	1.08	92.3	0.19	3.91	88.9
	(E)-2-(2-戊烯基)呋喃	-	-	-	0.07	0.10	23.1	0.05	0.47	77.8
	苯	0.06	0.13	41.7	0.05	0.39	76.9	0.13	0.34	22.2
	(2R,3S)-2-甲基-3-戊基环氧乙烷	19.15	19.15	8.3	-	-	-	-	-	-
	1,3-二叔丁基苯	0.07	2.11	58.3	0.38	4.42	76.9	0.11	1.10	44.4

注: -表示未检出该化合物; 表内仅展示检出率较高或相对含量较大的化合物。

表 3 豆汁、麻豆腐感官风味评价和风味物质综合占比  
Table 3 Douzhi and Ma Tofu flavor evaluation and comprehensive proportion of flavor compounds

	1028016	1028017	1028020	1028022	1028023	1028026	1028028	1029001	1029005	1029008	1030001	1104001	-	
生豆汁	臭味 强	淡	适中	淡	强	适中	淡	强	适中	强	适中	强	-	
	含硫化合物综合占比/%	80.85	30.38	59.07	36.42	42.08	38.49	28.51	63.05	50.93	66.47	41.78	48.89	-
	豆香味	无	淡	淡	适中	淡	淡	强	淡	适中	无	无	无	-
	醇类、醛类、酮类、酯类化合物综合占比/%	8.91	27.38	23.39	43.42	24.81	24.23	53.45	35.25	36.97	28.98	20.00	22.33	-
	1028014	1028019	1028021	1028024	1028027	1028029	1028031	1029002	1029004	1029007	1029010	1029011	1104002	
熟豆汁	臭味 适中	淡	适中	淡	强	淡	适中	适中	强	适中	淡	淡	适中	
	含硫化合物综合占比/%	30.99	13.71	43.27	35.09	50.90	18.16	44.89	69.86	67.58	70.67	26.87	34.17	46.75
	豆香味	淡	适中	无	淡	无	适中	适中	适中	无	适中	淡	无	适中
	醇类、醛类、酮类、酯类化合物综合占比/%	20.99	26.64	11.80	24.36	16.37	37.31	29.55	28.47	11.25	22.11	31.25	15.42	19.37
	1028015	1028018	1028025	1028030	1029003	1029006	1029009	1030002	1104003	-	-	-	-	
麻豆腐	臭味 淡	无	适中	无	无	淡	淡	无	适中	-	-	-	-	
	含硫化合物综合占比/%	24.84	11.37	60.01	3.97	0.00	25.83	15.03	13.12	59.74	-	-	-	
	豆香味	适中	适中	适中	适中	适中	淡	适中	适中	-	-	-	-	
	醇类、醛类、酮类、酯类化合物综合占比/%	42.63	40.41	34.57	92.47	55.28	45.82	21.51	47.23	32.18	-	-	-	

注: 感官风味评价为 5 人评价取中间值后结果。

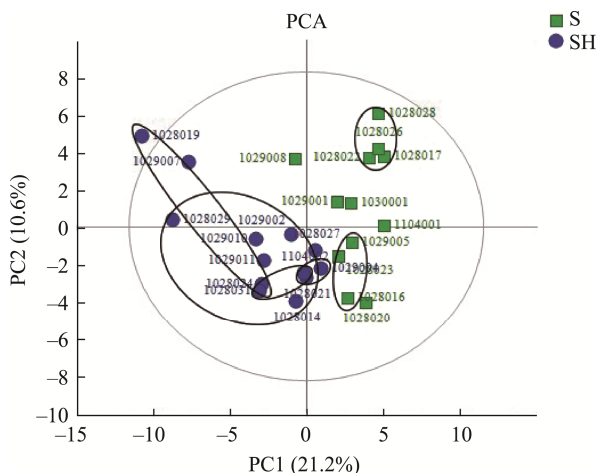
表 4 豆香味高频检出风味物质气味特性表  
Table 4 Odor characteristics of high-frequency detected flavor compounds in bean-like aroma

序号	CAS	物质名称	气味	序号	CAS	物质名称	气味
1	78-83-1	异丁醇	有甜味、霉味、有穿透性的、类似酒	9	78-93-3	2-丁酮	有中等尖锐、芬芳、薄荷或丙酮样气味
2	584-02-1	3-戊醇	带有酒香、空灵的气味	10	3777-69-3	2-正戊基呋喃	有果香
3	137-32-6	2-甲基丁醇	煮熟的烤香气、带有果味或酒精味	11	79-20-9	乙酸甲酯	有芬芳的果香、气味宜人
4	71-41-0	1-戊醇	特征性杂醇样气味	12	141-78-6	乙酸乙酯	有醚状果香、芬芳、醋酸、空灵的气味
5	111-27-3	正己醇	有果香、甜味、温和、绿色、甜酒、愉快	13	109-60-4	乙酸丙酯	有淡和的果香、梨树莓味、令人愉悦的气味
6	928-96-1	叶醇	强烈的青草绿色气味	14	590-86-3	异戊醛	有刺激性气味、果味, 如苹果、脂肪味、动物味、杏仁味
7	104-76-7	2-乙基己醇	温和、油腻、甜美、略带花香	15	66-25-1	正己醛	绿色、木质、植物、苹果、青草、柑橘和橙子、回味清新
8	67-64-1	丙酮	有芬芳的薄荷、甜味、水果味	16	124-19-6	壬醛	花香、橙玫瑰气味、果味

注: 表内化合物的气味描述基于 PubChem 平台整合的已发表文献数据<sup>[30]</sup>。

## 2.2 风味物质差异分析

通过 SIMCA 14.1 软件对生、熟豆汁中鉴定出的风味物质相对含量进行数据标准化处理后进行 PCA, 分析结果显示, 生、熟豆汁间主成分基本能够区分, 可以有效反映样品间的差异特征。共有 24 批次样品数据处于置信区间内 (95%以上), 置信区间外样品 1028019 共鉴定出 68 种风味物质, 显著高于另外 12 种熟豆汁鉴定出的 39~57 种。结果如图 2 所示。



注: S 为生豆汁, SH 为熟豆汁, 图 3、4 同。

图 2 生产企业相同的生、熟豆汁风味物质的 PCA

Fig.2 PCA of flavor compounds in raw and cooked Douzhi produced by the same enterprise

### 2.2.1 不同来源豆汁风味物质差异分析

从 20 家餐饮机构购买了 12 批次生豆汁、13 批次熟豆汁, 且未从同一餐饮机构重复购买同类豆汁。12 批次生

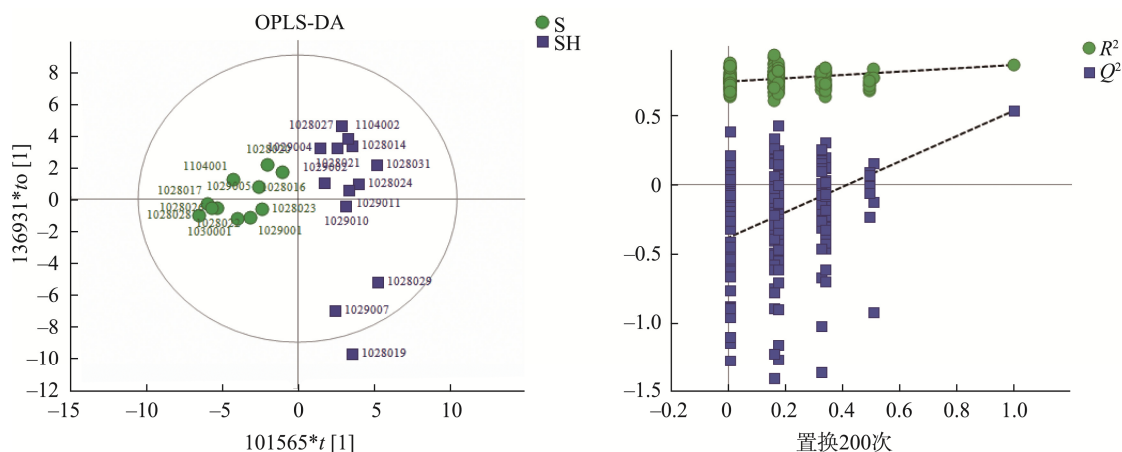
豆汁中, 有 2 组同来源样品分别为: 1028017、1028022、1028026、1028028 样品均来自 HSYSP, 1028020、1029005 样品均来自 ZHSP。13 批次熟豆汁中有 12 批次加工前为生产企业生产, 有 4 组同来源样品分别为: 1028014、1028027、1028029 样品均来自 HSYSP, 1028019、1028024 样品均来自 LMHH, 1028021、1029004 样品均来自 ZHSP, 1028031、1104002 样品均来自 XDYY, 如图 2 所示。

2 组同来源生豆汁样品由于来自不同餐饮机构, 其存放条件与时间存在差异, 生豆汁样品后续发酵条件不同, 可能导致其风味物质有差异。4 组同来源熟豆汁样品较生豆汁样品的差异更为显著。经调研了解到, 各餐饮机构对熟豆汁的加工工艺、熬煮时间和是否加入配料均有不同, 导致其风味差异更为显著。1029008 生豆汁样品和 1029007 熟豆汁样品均来自同一家餐饮机构 ZGHWJ, 1029008 样品为该机构自制, 其风味物质与其他来自生产企业的生豆汁样品有较大差异。

### 2.2.2 生、熟豆汁差异化合物筛选

1029008 生豆汁样品中甲基二硫醚相对含量较高, 为 43.70%。未鉴定出二甲基硫醚、环戊基甲基硫醚、3-戊醇等其他生豆汁均含有的风味物质, 其风味物质组成在生豆汁样品中具有显著的特殊性。基于此, 将该样品作为异常样品不参与整体分析, 有助于更清晰地体现生、熟豆汁间风味物质的差异特征。去除该数据后, 得到的 OPLS-DA、置换保留度如图 3 所示。

OPLS-DA 得分图中生豆汁分布在横轴的负半轴, 熟豆汁分布在横轴的正半轴呈现完全分离状态。为验证模型是否过拟合, 执行了 200 次置换检验(Y 变量随机重排)。当



注:  $R^2$  和  $Q^2$  用于评估模型可靠性和过拟合风险。

图 3 生、熟豆汁风味物质的 OPLS-DA 和置换保留度

Fig.3 OPLS-DA and permutation retention of flavor compounds in raw and cooked Douzhi

$Q^2 < 0.05$  时证明模型拟合良好, 结果显示该模型的  $R^2$  截距为 0.734,  $Q^2$  为 -0.374 均优于随机置换模型, 证明无过拟合风险。以  $P < 0.05$  且  $VIP > 1$  为标准, 筛选出 24 批次生、熟豆汁的差异风味物质有 31 种, 分别为: 戊醛、乙酸异戊酯、2-甲基丁醛、乙酸甲酯、壬醛、乙醛、庚醛、异戊醛、苯甲醛、甲基胍、异丁醛、2-己烯醛、1-戊烯、L-苏丁醇、甲硫醇、硫代乙酸甲酯、2-乙基己醇、反式-3-己烯-1-醇、1-戊醇、正己烷、2-己酮、苯、正戊烷、乙酸己酯、1-辛烯-3-醇、叶醇、丙酮、丙酸乙酯、2-乙基咪唑、2-丁酮、二甲基亚砷。

### 2.2.3 生、熟豆汁和麻豆腐风味物质差异分析

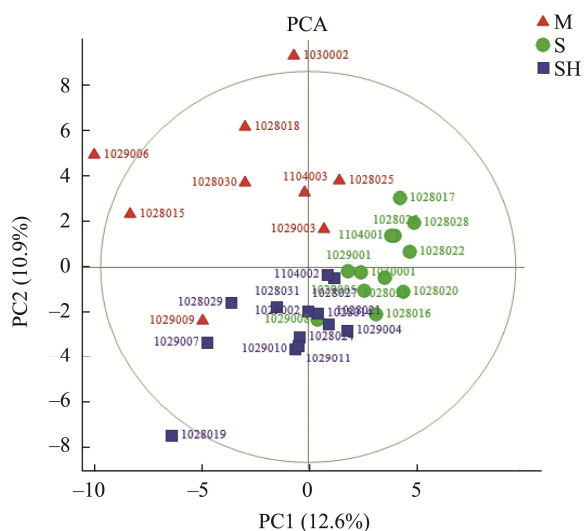
将麻豆腐的风味物质鉴定数据引入后, PCA 结果显示, 麻豆腐样品在得分图中呈现显著分散分布(图 4), 表明不

同批次麻豆腐样品间风味物质组成存在较大异质性。9 批次麻豆腐样品共鉴定出 185 种挥发性有机化合物, 其中仅叶醇、异戊醛为所有样品的共有成分。2 批次麻豆腐样品未在置信区间内, 其中 1029006 样品检出 86 种风味物质, 包含 43 种独有成分, 显著高于其他批次样品的 44-62 种检出量。1030002 样品独有风味物质 3-甲基-1-戊醇相对含量达到 22.87%, 这一特征性成分可能是导致其风味独特的主要原因。上述结果表明, 尽管麻豆腐是豆汁生产过程中的副产物, 但由于其原料组成和发酵工艺的显著差异, 其风味物质成分更加复杂多样, 呈现出与豆汁截然不同的特征风味。

## 3 结论

经鉴定, 二甲基二硫醚、甲硫醇、1-戊醇、异丁醇、乙酸丙酯、正己烷、正戊烷为生豆汁样品共有风味物质; 二甲基二硫醚、二甲基三硫醚、正己醇、叶醇、1-戊醇、2-丁酮、丙酮、正己醛、乙酸乙酯、正己烷为熟豆汁样品共有风味物质; 叶醇、异戊醛为麻豆腐样品共有风味物质。将鉴定结果进行 PCA, 明显区分出生、熟豆汁的风味物质特征。基于  $P$  与  $VIP$ , 筛选出 31 种特征挥发性化合物, 可用于生、熟豆汁的区分与鉴定。麻豆腐样本的 PCA 揭示其风味呈现显著异质性, 主要源于加工工艺差异导致的风味物质构成差异。可利用销售数据构建消费偏好关联模型, 实现麻豆腐风味物质标准化, 破解“一店一味”“同名异味”的消费难题。

本研究采用 PT-GC/MS 在样品加热温度 40 °C 下能够最大程度保留了样品特性, 有效捕集、鉴定豆汁、麻豆腐中的多种风味物质, 包括含硫化物、醇类、醛类、酮类和酯类等。检测结果与感官评价对比分析, 可明确风味物质与感官体验的相关性, 在剔除潜在干扰物质后解析其呈



注: M 为麻豆腐。

图 4 生、熟豆汁和麻豆腐风味物质的 PCA

Fig.4 PCA of flavor compounds in raw and cooked Douzhi and Ma Tofu

味基底,即可确定目标风味特征,进而指导生产工艺与加工流程的优化升级。

豆汁、麻豆腐作为北京特色食品的典型代表,受到人们越来越多的关注。如何能在继承和保留传统风味的基础上,优化并开发出新口味的产品,让更多消费者接受,成为行业的重要发展方向。PT-GC/MS 作为一种成本低廉、操作简便、可大批量检测的方法,结合 NIST 数据库能够提供挥发性化合物 CAS 的特点,建立数据库后,可快速鉴定出目标化合物,适用于需要大量、多波次、时效性强的检测需求,对于豆汁类产品的风味改善研究具有现实意义。

### 参考文献

- [1] 王振宇. 话说豆汁[J]. 中国食品, 1991(12): 38.  
WANG ZY. Let's talk about Douzhi [J]. China Food, 1991(12): 38.
- [2] 崇占明. 闲聊北京小吃[J]. 餐饮世界, 2022(12): 70-71.  
CHONG ZM. A casual chat on Beijing snacks [J]. Culinary World, 2022(12): 70-71.
- [3] 孙双双. 豆汁儿: 北京人喝的是乡情, 外地人喝的是地域文化[J]. 中国食品工业, 2022(11): 41-43.  
SUN SS. Douzhi: A taste of nostalgia for Beijing locals, a sip of regional culture for outsiders [J]. China Food Industry, 2022(11): 41-43.
- [4] 刘文营, 孙佳琦, 成晓瑜, 等. 北京豆汁感官特性分析[J]. 食品科学, 2020, 41(20): 211-221.  
LIU WY, SUN JQ, CHENG XY, *et al.* Sensory characteristics of Beijing Douzhi (fermented mung bean juice) [J]. Food Science, 2020, 41(20): 211-221.
- [5] HUANG J, LIU YP, YANG WX, *et al.* Characterization of the potent odorants contributing to the characteristic aroma of Beijing Douzhi by gas chromatography-olfactometry, quantitative analysis, and odor activity value [J]. Journal of Agricultural and Food Chemistry, 2018, 66(3): 689-694.
- [6] DING YZ, ZHANG SY, LIU P, *et al.* Microbiological and biochemical changes during processing of the traditional Chinese food Douzhi [J]. Food Control, 2009, 20(12): 1086-1091.
- [7] 张莉力, 刘黎莹, 许云贺. 北京豆汁微生物群落分析及淀粉絮凝菌分离鉴定[J]. 食品工业科技, 2017, 38(16): 136-141.  
ZHANG LL, LIU LY, XU YH. Analysis of Beijing Douzhi microbiota and isolation and identification of advantage bacterium capable of flocculating starch [J]. Science and Technology of Food Industry, 2017, 38(16): 136-141.
- [8] 袁钰, 李静, 林少华, 等. 基于 16S rDNA 高通量测序技术分析北京豆汁儿微生物多样性和功能预测的研究[J]. 食品工业科技, 2020, 41(2): 95-100.  
YUAN Y, LI J, LIN SH, *et al.* Analysis of microbial diversity and functional prediction of Douzhi based on 16S rDNA high-throughput sequencing technology [J]. Science and Technology of Food Industry, 2020, 41(2): 95-100.
- [9] 符士泉. 传统发酵食品豆汁中功能益生菌的筛选及其缓解氧化应激细胞模型的功能研究[D]. 深圳: 深圳大学, 2023.  
FU SQ. Screening of functional probiotics from traditional fermented food bean juice and study on the function of cell model to relieve oxidative stress [D]. Shenzhen: Shenzhen University, 2023.
- [10] BAI BQ, ZHANG LQ, ZHANG Y, *et al.* Comparative analysis of flavor characteristics of two rounds of Qingxiangxing Baijiu by GC×GC-TOFMS, HS-GC-IMS, GC-E-nose and E-tongue [J]. Food Bioscience, 2025, 63: 105789.
- [11] GUAN SH, LIU CX, RUAN MY, *et al.* Detection and comparative analysis of VOCs between tomato and pepper based on GC×GC-TOFMS [J]. Scientific Reports, 2025, 15(1): 6140.
- [12] ZHANG Q, WANG YD, MENG FY, *et al.* Comparative analysis of the volatile flavor compounds of Monascus-fermented cheese with different ripening periods by SPME-GC-MS, SPME-GC×GC-MS, and HS-GC-IMS [J]. Food Bioscience, 2024, 62: 105045.
- [13] 宋虹, 李一雪, 李然, 等. 顶空固相微萃取/气质联用技术结合电子鼻分析类干酪乳杆菌发酵豆渣饮料过程中风味特征[J]. 食品与发酵工业, 2023, 49(5): 253-262.  
SONG H, LI YX, LI R, *et al.* SPME/GC-MS combined with electronic nose to analyze the flavor characteristics of okara beverages fermented by *Lactobacillus casei* [J]. Food and Fermentation Industries, 2023, 49(5): 253-260.
- [14] 李爱兰, 乔文君, 汪兴财, 等. 吹扫捕集-气质联用结合化学计量学用于不同产地和牌浓香型白酒鉴别[J]. 化学试剂, 2021, 43(5): 576-583.  
LI AIL, QIAO WJ, WANG XC, *et al.* Purge and trap-GC/MS combined with chemometrics for identification of strong aroma Baijiu from different origins and brands [J]. Chemical Reagents, 2021, 43(5): 576-583.
- [15] CHEN K, CAO FH, CHEN XX, *et al.* Determination of four odorous substances in water by purge and trap-gas chromatography-tandem mass spectrometry [J]. Journal of Environmental and Occupational Medicine, 2024, 41(10): 1180-1185.
- [16] 王璐, 蔡德玲, 梁宁, 等. 吹扫捕集-气相色谱-质谱法快速测定生活饮用水中 82 种挥发性有机物[J]. 环境卫生学杂志, 2024, 14(6): 514-519.  
WANG L, CAI DL, LIANG N, *et al.* Rapid determination of 82 kinds of volatile organic compounds in drinking water by purge-trapping-GC-MS [J]. Journal of Environmental Hygiene, 2024, 14(6): 514-519.
- [17] 雷婷, 葛中会, 刘贝叶, 等. 基于吹扫捕集-气相色谱-质谱联用分析单粮型白酒风味成分[J]. 农产品加工, 2022(24): 58-62.  
LEI T, GE ZH, LIU BY, *et al.* Analysis of volatile flavor compounds in single-grain brewing Baijiu by PT-GC/MS [J]. Farm Products Processing, 2022(24): 58-62.
- [18] 陈坚, 汪超, 朱琪, 等. 中国传统发酵食品研究现状及前沿应用技术展望[J]. 食品科学技术学报, 2021, 39(2): 1-7.  
CHEN J, WANG C, ZHU Q, *et al.* Research status and application prospect of frontier technology of traditional fermented food in China [J]. Journal of Food Science and Technology, 2021, 39(2): 1-7.

- [19] 王慧, 吴小燕, 夏亚男, 等. 乳清酒发酵过程中细菌群落演替与风味物质变化的相关性分析[J]. 食品科学, 2023, 44(2): 204–211.  
WANG H, WU XY, XIA YN, *et al.* Correlation analysis between bacterial community succession and changes of flavor substances during whey wine fermentation [J]. Food Science, 2023, 44(2): 204–211.
- [20] 魏来, 王芳, 谭嘉慧, 等. 水产品腥味来源、检测及去除技术研究进展[J]. 生物技术进展, 2024, 14(5): 745–760.  
WEI L, WANG F, TAN JH, *et al.* Origins, detection and removal technology of off-flavor compounds in aquatic products [J]. Current Biotechnology, 2024, 14(5): 745–760.
- [21] WU Y, WANG MQ, GU Y, *et al.* Miniaturized thermal purge-and-trap device combined with self-calibration colorimetric/SERS dual-model optical sensors for highly rapid and selective detection of sulfur dioxide in wine [J]. Food Chemistry: X, 2025, 25: 102091.
- [22] XIAO K, ZHAI HN, HU RS, *et al.* Effect of different primary processing methods on flavor compounds and sensory characteristics of coffee beans [J]. Science and Technology of Food Industry, 2025, 46(1): 22–32.
- [23] XING JH, YANG C, ZHANG LF. Characterization of key flavor compounds in cinnamon bark oil extracts using principal component analysis [J]. Food Research International, 2025, 200: 115446.
- [24] 胡航伟, 张楠楠, 刘凌霄, 等. 乳酸菌发酵蜜桃果酱过程中风味物质变化规律研究[J]. 食品安全质量检测学报, 2023, 14(19): 124–132.  
HU HW, ZHANG NN, LIU LX, *et al.* Study on the variation of flavor compounds during fermentation of honey peach jam by lactic acid bacteria [J]. Journal of Food Safety & Quality, 2023, 14(19): 124–132.
- [25] 刘霄, 邓杰, 吴玲, 等. 粳高粱和糯高粱酿造的川法小曲白酒风味物质差异分析[J]. 食品安全质量检测学报, 2024, 15(7): 20–27.  
LIU X, DENG J, WU L, *et al.* Analysis on the difference of flavor substances in Sichuan-style Xiaoqu Baijiu brewed by japonica sorghum and glutinous sorghum [J]. Journal of Food Safety & Quality, 2024, 15(7): 20–27.
- [26] 苗志伟, 刘玉平, 黄明泉, 等. 豆汁熬制过程中挥发性香成分的变化[J]. 中国食品学报, 2013, 13(2): 199–204.  
MIAO ZW, LIU YP, HUANG MQ, *et al.* The change of volatile aroma components of Douzhi in the heating process [J]. Journal of Chinese Institute of Food Science and Technology, 2013, 13(2): 199–204.
- [27] 卢晓丹, 张敏, 苗菁. 不同来源生熟北京豆汁的风味物质和感官评价比较[J]. 食品科学, 2015, 36(6): 103–108.  
LU XD, ZHANG M, MIAO J. Analysis of volatile compounds and sensory evaluation of different Douzhi (fermented mung bean juice) products [J]. Food Science, 2015, 36(6): 103–108.
- [28] 陈璟, 任田, 赵子龙, 等. 郫县豆瓣酱香气成分与感官评价[J]. 食品与机械, 2024, 40(4): 34–39.  
CHEN J, REN T, ZHAO ZL, *et al.* Aroma components and sensory evaluation of Pixian Douban sauce [J]. Food & Machinery, 2024, 40(4): 34–39.
- [29] 陈召桂, 陈春梅, 姚远, 等. 发酵米糕感官评价标准体系的建立[J]. 中国粮油学报, 2024(12): 180–187.  
CHEN ZG, CHEN CM, YAO Y, *et al.* Establishment of sensory evaluation standard system for fermented rice cake [J]. Journal of the Chinese Cereals and Oils Association, 2024(12): 180–187.
- [30] National center for biotechnology information. PubChem [EB/OL]. (2025-04-06) [2025-02-01]. <https://pubchem.ncbi.nlm.nih.gov/>

(责任编辑: 于梦娇 安香玉)