

DOI: 10.19812/j.cnki.jfsq11-5956/ts.20250331005

引用格式: 丁力杰, 侯花宁, 李利荣, 等. 中红外光谱法快速检测浓香型原酒中的酯类含量[J]. 食品安全质量检测学报, 2025, 16(14): 105–112.

DING LJ, HOU HN, LI LR, *et al.* Rapid determination of ester content in Nongxiangxing crude Baijiu by mid-infrared spectroscopy [J]. Journal of Food Safety & Quality, 2025, 16(14): 105–112. (in Chinese with English abstract).

中红外光谱法快速检测浓香型原酒中的酯类含量

丁力杰, 侯花宁, 李利荣, 郇丹, 赵亚雄, 唐云*

(金徽酒股份有限公司, 陇南 742308)

摘要: **目的** 运用中红外光谱法建立浓香型原酒中酯类含量的快速定量检测方法。**方法** 采用中红外光谱分析技术结合气相色谱法对浓香型原酒进行检测, 并利用偏最小二乘法分别建立浓香型原酒中己酸乙酯、乙酸乙酯、乳酸乙酯、丁酸乙酯的中红外定量检测模型。**结果** 己酸乙酯、乙酸乙酯、乳酸乙酯检测模型线性关系(r^2)大于 0.99, 均方根误差低于 0.07 g/L, 说明模型具有良好拟合度和稳定性。进行外部验证后的预测结果平均相对误差低于 3.50%, 说明模型具有良好的检测效果, 预测值与真实值接近。丁酸乙酯由于其含量低, 光谱范围窄, 模型效果较差。**结论** 此方法对浓香型原酒中的己酸乙酯、乙酸乙酯、乳酸乙酯含量具有良好的检测能力, 能够满足企业对日常生产原酒进行快速检测分析的基本需求, 为白酒的快速检测、分析、定级等提供了新的发展方向。

关键词: 浓香型原酒; 中红外光谱法; 气相色谱法; 定量检测

Rapid determination of ester content in Nongxiangxing crude Baijiu by mid-infrared spectroscopy

DING Li-Jie, HOU Hua-Ning, LI Li-Rong, HUAN Dan,
ZHAO Ya-Xiong, TANG Yun*

(Jinhui Liquor Co., Ltd., Longnan 742308, China)

ABSTRACT: Objective To establish a rapid quantitative detection method for ester content in Nongxiangxing crude Baijiu by using mid-infrared spectroscopy. **Methods** The mid-infrared spectroscopy analysis technology combined with gas chromatography was used to detect Nongxiangxing crude Baijiu. Partial least squares method was employed to establish mid-infrared quantitative detection models for ethyl hexanoate, ethyl acetate, ethyl lactate, and ethyl butyrate in Nongxiangxing crude Baijiu. **Results** The detection models for ethyl hexanoate, ethyl acetate and ethyl lactate exhibited linear coefficients (r^2) exceeding 0.99 and root mean square error were below 0.07 g/L, indicating that the models had good goodness of fit and stability. The average relative error of the prediction results after external validation was lower than 3.50%, indicating that the models had good detection performance and the predicted values were close to the true values. Due to its low content and narrow spectral range, the prediction effect

收稿日期: 2025-03-31

第一作者: 丁力杰(1993—), 男, 硕士, 主要研究方向为白酒检测技术开发及风味成分研究。E-mail: 370131333@qq.com

*通信作者: 唐云(1974—), 男, 主要研究方向为酿酒生产工艺与白酒质量控制。E-mail: dinglj1@jinhuijiu.com

of the model for ethyl butyrate was poor. **Conclusion** This method have a good detection ability for the contents of ethyl hexanoate, ethyl acetate and ethyl lactate in Nongxiangxing crude Baijiu. It can meet the basic needs of enterprises for the rapid detection and analysis of crude Baijiu in daily production, providing a new development direction for the rapid detection analysis, and grading of Baijiu.

KEY WORDS: Nongxiangxing crude Baijiu; mid-infrared spectroscopy; gas chromatography; quantitative detection

0 引言

中国白酒历史悠久, 别具一格的酿造工艺为其带来了种类繁多复杂的有机化合物, 这些有机化合物及其量比关系是造就中国白酒独特风味的根本原因, 主要包括有酯类、醇类、酸类、醛酮类、酚类等^[1-2]。酯类物质作为白酒风味的骨架成分, 含量更是超过风味物质总量的一半, 直接影响着白酒的品质与口感^[3-4]。在众多酯类物质中, 己酸乙酯、乙酸乙酯、乳酸乙酯和丁酸乙酯并称为浓香型白酒中的 4 大酯类物质, 其含量高低对浓香型原酒的分级储存和酒体勾调具有直接影响^[5]。当前对白酒中酯类物质成分的分析检测多采用气相色谱法^[6-8]、高效液相色谱法^[9-11]、质谱法^[4,12]等, 并结合液液萃取法、固相微萃取法等前处理技术^[13-15], 但其中普遍存在分析时间长、前处理烦琐、试剂消耗多、结果分析相对较慢等缺点, 不适用于对大批量、时效性要求高的原酒样品进行快速分析检测^[16-17]。因此, 如何高效、快捷的对白酒企业生产原酒中的酯类物质进行分析检测, 是促进传统白酒生产企业向智能化酿造^[18]、智能分级储存^[19]转型的关键步骤之一。

红外光谱技术包括近红外光谱技术(0.8~2.5 μm , 12500~4000 cm^{-1})与中红外光谱技术(2.5~25.0 μm , 4000~400 cm^{-1}), 因其检测效率高、操作简单、无需复杂前处理等特点, 逐渐成为白酒行业实现快速检测分析的新趋势^[20-21]。该技术在白酒酿造的多个环节已具有一定的应用基础^[22-23], 包括酿酒原料检测^[24]、酒糟检测^[25]、大曲差异评价^[26]、分类鉴定^[27]、等级划分^[28]等方面。其中, 中红外光谱技术相较于近红外光谱技术具有更好的稳定性和重复性, 能够自动进样、自动恒温, 并配有专用清洗液彻底清除酯类残留, 使其在原酒酯类分析中更具优势^[29]。利用中红外光谱技术, 并结合化学计量学方法对原酒特征吸收谱图进行预处理, 提取特征化合物信息, 确定关键波长, 建立相应化合物的定量分析模型并进行验证, 从而快速测定原酒中关键成分的含量。模型应用后能够极大地提升实际生产中对大批量原酒的检测效率, 从传统色谱分析一个样品至少需 30 min, 缩短至测定一个样品仅需 2 min。不仅为浓香型原酒中关键成分的分析提供了全新的思路和方法, 对整个白酒行业也具有很好的应用价值。

本研究以金徽酒股份有限公司生产的浓香型原酒为对象, 采用傅里叶变换中红外光谱分析仪(Fourier

transform mid-infrared spectrometer, FT-MIR), 结合传统气相色谱法检测结果, 运用偏最小二乘法(partial least squares, PLS)建立浓香型原酒中己酸乙酯、乙酸乙酯、乳酸乙酯、丁酸乙酯 4 种酯类物质的中红外定量检测模型。利用绝对误差、相对误差及精密度符合占比分析中红外各模型的检测效果, 以期对浓香型原酒的快速检测、分析、定级等开拓新的方向。

1 材料与方法

1.1 材料、试剂与仪器

1000 个浓香型原酒试样、40 个外部验证原酒试样(金徽酒股份有限公司)。

无水乙醇(HPLC 级, 美国 Sigma 公司); 己酸乙酯、乙酸乙酯、乳酸乙酯、丁酸乙酯[色谱纯, 阿拉丁试剂(上海)有限公司]; 乙酸正戊酯(20000 mg/L, 坛墨质检科技有限公司)。

FTB-2.0 傅里叶变换中红外光谱分析仪(美国 Perkin Elmer 公司); 7890B 气相色谱仪配备氢火焰离子检测器(gas chromatography-hydrogen flame ionization detector, GC-FID)、CP-WAX 57 CB 毛细管柱(50 m \times 0.25 mm, 0.2 μm) (美国 Agilent 公司); SQP 十万分之一电子天平[赛多利斯科学仪器(北京)有限公司]。

1.2 试验方法

1.2.1 酯类物质含量的测定

使用 Agilent 7890B 气相色谱仪进行原酒中 4 种酯类物质含量的检测。设置升温程序为: 初始温度 32 $^{\circ}\text{C}$, 保持 4 min, 5 $^{\circ}\text{C}/\text{min}$ 升温至 80 $^{\circ}\text{C}$, 再以 20 $^{\circ}\text{C}/\text{min}$ 升温至 180 $^{\circ}\text{C}$, 保持 1 min。其他条件参数见表 1。

表 1 气相色谱仪条件参数
Table 1 Gas chromatograph condition parameters

设置条件	参数
分流比	50:1
检测器温度/ $^{\circ}\text{C}$	250
进样口温度/ $^{\circ}\text{C}$	250
进样量/ μL	1.0
N_2 流量/(mL/min)	30
H_2 流量/(mL/min)	40
空气流量/(mL/min)	350
柱流量/(mL/min)	1

参照 GB/T 10345—2022《白酒分析方法》中的方法进行定量分析。采用内标法进行定量计算, 以乙酸正戊酯溶液作为内标, 以酯类质量浓度与内标质量浓度的比值为横坐标(X , g/L), 各酯类峰面积与内标峰面积的比值为纵坐标(Y), 绘制标准曲线。

样品前处理: 在 10 mL 容量瓶中吸取 0.1 mL 乙酸正戊酯内标溶液, 用待测样品进行定容, 充分混匀后按色谱条件进行测定。

1.2.2 中红外光谱的采集

中红外光谱仪开机预热至少 2 h 后进行调零操作, 待调零结束且通过后进行试样检测。将 100 mL 原酒样品装入进样杯直接进样检测, 无需降温, 光谱范围 $4000\sim 400\text{ cm}^{-1}$, 每个试样平行测定 3 次, 结果以光谱平均值表示。

1.2.3 中红外检测模型的建立及内部验证

将气相色谱测得的 4 种酯类物质含量数据分别与中红外光谱结合, 利用 Unscrambler X 10.3 软件对 1000 个酒样的光谱数据进行分析, 通过 Kennard-Stone 算法将其中 900 组样品数据按 2:1 的比例划分为校正集和验证集, 其余 100 组样品数据划分为预测集。采用后向区间偏最小二乘法(backward interval partial least squares, Bi-PLS)对光谱数据进行特征波段的选择, 以交叉验证均方根误差(root mean square error of cross validation, RMSECV)最小所对应的特征波段作为最佳特征波段。采用 PLS 法结合最佳特征波段建立化合物光谱与待测成分含量的线性模型, 实现光谱信息对 4 种酯类物质含量的快速定量检测。

内部验证通过模型相关性系数(R^2)与均方根误差(root mean square error, RMSE)来评估建立模型的预测效果, 其中 R^2 越接近于 1, RMSE 越小, 说明模型拟合效果越好^[30]。

1.2.4 中红外检测模型最优主成分数的确定

利用建立的定量检测模型, 对未参与建模的 100 组预测集样品中 4 种酯类物质的含量进行预测, 依据相对误差小于等于 10% 的样品数占比进行判断, 筛选模型的最优主成分数, 并对最终模型的预测效果进行判断。

1.2.5 中红外检测模型的外部验证

外部验证通过随机选取不同品质的 40 个浓香型原酒样品作为对象, 采用同 1.2.1 中的方法, 测定样品中 4 种酯类物质的含量, 并与中红外检测模型预测的结果进行对比, 通过计算绝对误差与相对误差, 判断所建立中红外定量检

测模型的精确度及稳定性。

1.3 数据处理

采用 Origin 2018 软件和 Excel 2021 软件进行数据分析处理; 采用 Octave 9.2.0 数据处理软件进行最佳建模波段的筛选; 采用 Unscrambler X 10.3 软件分别建立 4 种酯类的检测模型。

2 结果与分析

2.1 原酒试样色谱图及标准曲线

浓香型原酒试样色谱图如图 1 所示, 图中 4 种酯类峰型均为尖窄峰, 峰型标准, 可完全分离, 不受相邻物质干扰。

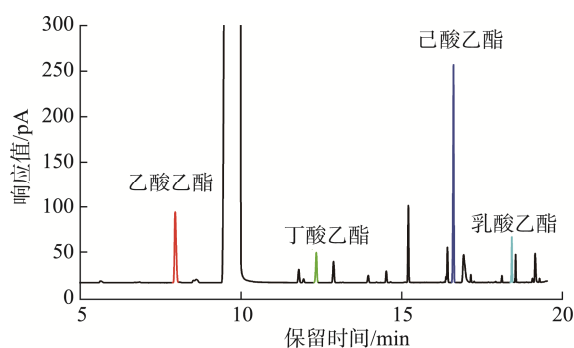


图 1 浓香型原酒色谱图

Fig.1 Chromatogram of Nongxiangxing crude Baijiu

采用内标法计算原酒中 4 种酯类物质含量, 以酯类质量浓度与各内标质量浓度的比值为横坐标 X , 各酯类峰面积与各内标峰面积的比值为纵坐标 Y , 做线性回归方程, 结果见表 2。4 种酯类物质标准曲线相关性系数(r^2)均达到 0.9999, 峰面积与质量浓度间具有良好的线性关系。

2.2 最佳建模波段的筛选

1000 组浓香型原酒试样的中红外光谱图见图 2。其中 $3500\sim 3300\text{ cm}^{-1}$ 、 $900\sim 400\text{ cm}^{-1}$ 光谱范围内的曲线不平滑, 可在建模过程中去除此范围, 避免影响建模效果。根据相关研究, 酯类酯基中 $\text{C}=\text{O}$ 与 $\text{C}-\text{O}-\text{C}$ 伸缩振动频率分别位于 $1800\sim 1700\text{ cm}^{-1}$ 与 $1240\sim 1150\text{ cm}^{-1}$ 、 $1050\sim 1000\text{ cm}^{-1}$, 能够突出酯类化学键在中红外区域的基频振动^[31-32]。因此将 $4000\sim 3500\text{ cm}^{-1}$ 、 $3300\sim 900\text{ cm}^{-1}$ 作为 4 种酯类物质中红外初步建模的特征波段。

表 2 4 种酯类的保留时间、线性范围、回归方程和相关性系数

Table 2 Retention times, linear ranges, regression equations and correlation coefficients of 4 kinds of esters

酯类物质	保留时间/min	线性范围/(g/L)	回归方程	相关系数(r^2)
乙酸乙酯	8.246	0.983~3.473	$Y=0.74789X+0.00938$	0.9999
丁酸乙酯	12.148	0.049~0.350	$Y=1.02661X-0.00043$	0.9999
己酸乙酯	16.843	0.494~10.724	$Y=1.17315X+0.00674$	0.9999
乳酸乙酯	18.670	0.544~2.596	$Y=0.61420X+0.00806$	0.9999

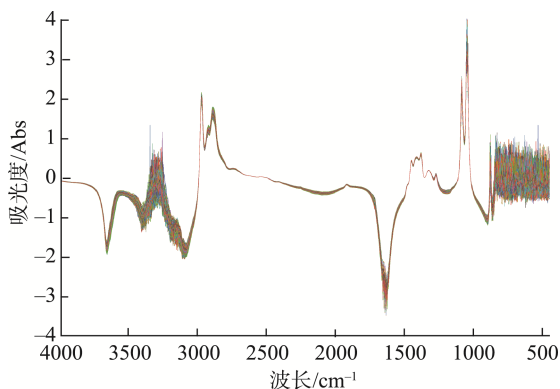


图 2 浓香型原酒试样中红外光谱图

Fig.2 Mid-infrared spectrum of Nongxiangxing crude Baijiu

使用 Octave 9.2.0 数据处理软件结合 Bi-PLS 法对光谱波长进行筛选, 将 935 个波长变量等分为 17 个子区间进行建模, 得到不同区间组合的 PLS 模型。从中筛选 RMSECV 最小的光谱区间, 结合初步得到的光谱特征吸收峰, 得到 4 种酯类物质检测模型的最佳建模波段, 结果见表 3。

2.3 模型的建立及内部验证

使用 Unscrambler X 10.3 软件结合 PLS 法分别建立 4 种酯类物质的定量检测模型。4 种分析模型的校正集(蓝)与验证集(红)的预测值与真实值关系如图 3 所示, 相关性系数 (R^2) 与 RMSE 评估模型预测效果, 结果见表 4。由图 3 中 D 可知, 原酒中丁酸乙酯质量浓度范围处于 0.05~0.45 g/L 之间, 含量低范围窄, 造成可采集的光谱信息有限, 模型建立

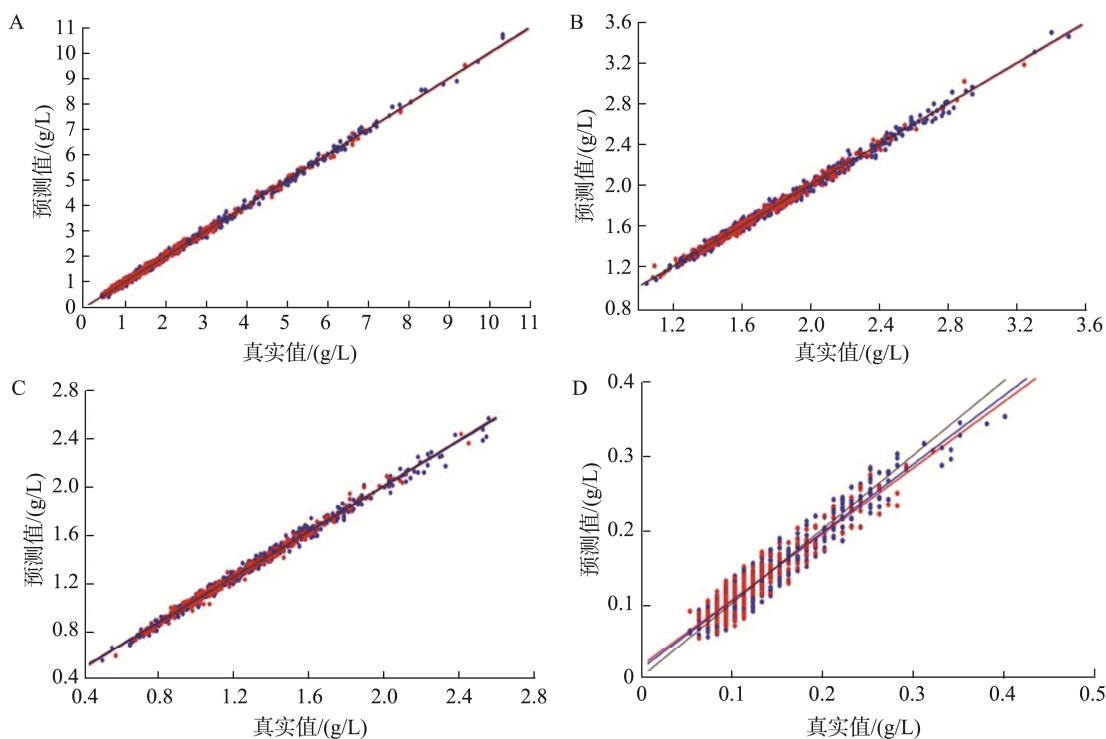
效果相对较差。其余 3 种模型的校正集和验证集 R^2 均大于 0.99, 说明模型拟合度高, RMSEC 与 RMSEP 均小于等于 0.07 g/L, 表明所建模型的内部参数值均较小且相近, 模型具有良好的建立效果。

表 3 4 种酯类最佳建模波段
Table 3 Optimal modeling bands for 4 kinds of esters

检测项目	最佳建模波段/cm ⁻¹	RMSECV
己酸乙酯	2727~2519, 1454~1246	0.0903
乙酸乙酯	4000~3792, 2727~2519, 2303~1670, 1454~1246	0.0370
乳酸乙酯	4000~3792, 2303~1670, 1454~1246	0.0619
丁酸乙酯	1454~1246	0.0216

2.4 模型最优主成分数的确定

利用未参与建模的 100 组样品数据分别筛选各模型的最优主成分数值, 为确保模型检测效果, 主成分数不可过大(过拟合)或过小(欠拟合)。依据绝对误差(中红外预测值与真实值差值的绝对值与真实值之比)不超过 10% 的占比选取最优主成分数值^[32]。结果如表 5 所示, 其中丁酸乙酯由于含量低, 光谱范围窄, 数据分散, 造成中红外模型预测结果误差较大, 绝对误差小于等于 10% 占比仅为 46.0%。其余 3 种酯类中红外模型预测结果绝对误差小于等于 10% 的占比均超过 95.0%, 说明在所选择的主成分数值下, 模型具有良好的检测效果。



注: A. 己酸乙酯; B. 乙酸乙酯; C. 乳酸乙酯; D. 丁酸乙酯, 下同。

图 3 校正集、验证集的预测值与真实值相关性

Fig.3 Correlation between predicted and true values of calibration and validation values

表 4 酯类检测模型拟合结果

Table 4 Fitting results of esters detection models

检测模型	校正集决定系数(R_c^2)	RMSEC	验证集决定系数(R_p^2)	RMSEP
己酸乙酯	0.998	0.069	0.997	0.065
乙酸乙酯	0.994	0.031	0.993	0.028
乳酸乙酯	0.993	0.030	0.992	0.028
丁酸乙酯	0.919	0.017	0.890	0.017

表 5 定量分析模型最优主成分数

Table 5 Optimal number of principal components of the quantitative analysis models

检测模型	符合占比/%	主成分数值
己酸乙酯	97.0	12
乙酸乙酯	100.0	11
乳酸乙酯	100.0	14
丁酸乙酯	46.0	10

2.5 模型的外部验证

利用随机选取不同品质的 40 个浓香型原酒样品作为外部验证对象, 使用建立的中红外定量检测模型测定 4 种

酯类物质含量, 并与气相色谱结果进行分析对比, 判断检测模型的精确度与稳定性。4 种酯类中红外定量检测模型的预测值与色谱值分布见图 4, 其中己酸乙酯、乙酸乙酯、乳酸乙酯 3 种酯类的中红外预测值与气相色谱结果均在直线 $Y=X$ 附近集中分布, 预测相关系数(R^2) >0.99 , 说明 3 种模型具有良好的预测能力。40 个外部验证样品的绝对误差与相对误差分布见表 6, 可知在 4 种酯类的中红外定量检测模型中, 由于丁酸乙酯在原酒中的含量低, 使其模型的预测效果较其他 3 种酯类差, 预测平均相对误差达到 18.73%。其余 3 种模型己酸乙酯、乙酸乙酯、乳酸乙酯的预测平均相对误差均低于 3.50%, 分别为 3.18%、2.98%、2.36%, 效果优于利用近红外技术对相应指标的检测, 并与现有采用中红外技术进行的类似研究结果相近^[22]。以上研究结果证明, 所建立的己酸乙酯、乙酸乙酯、乳酸乙酯中红外定量检测模型具有良好的检测效果, 能够满足企业对日常生产原酒进行快速检测分析的基本生产需求。目前, 利用中红外光谱技术对白酒相关指标的检测研究还包括酒精精度^[33]、酸类^[34]、醇类^[35]等, 所建立相应指标模型具有较好的检测效果, 这些研究证明了中红外光谱技术可有效应用于白酒体系中有机化合物的定性分析与定量分析。

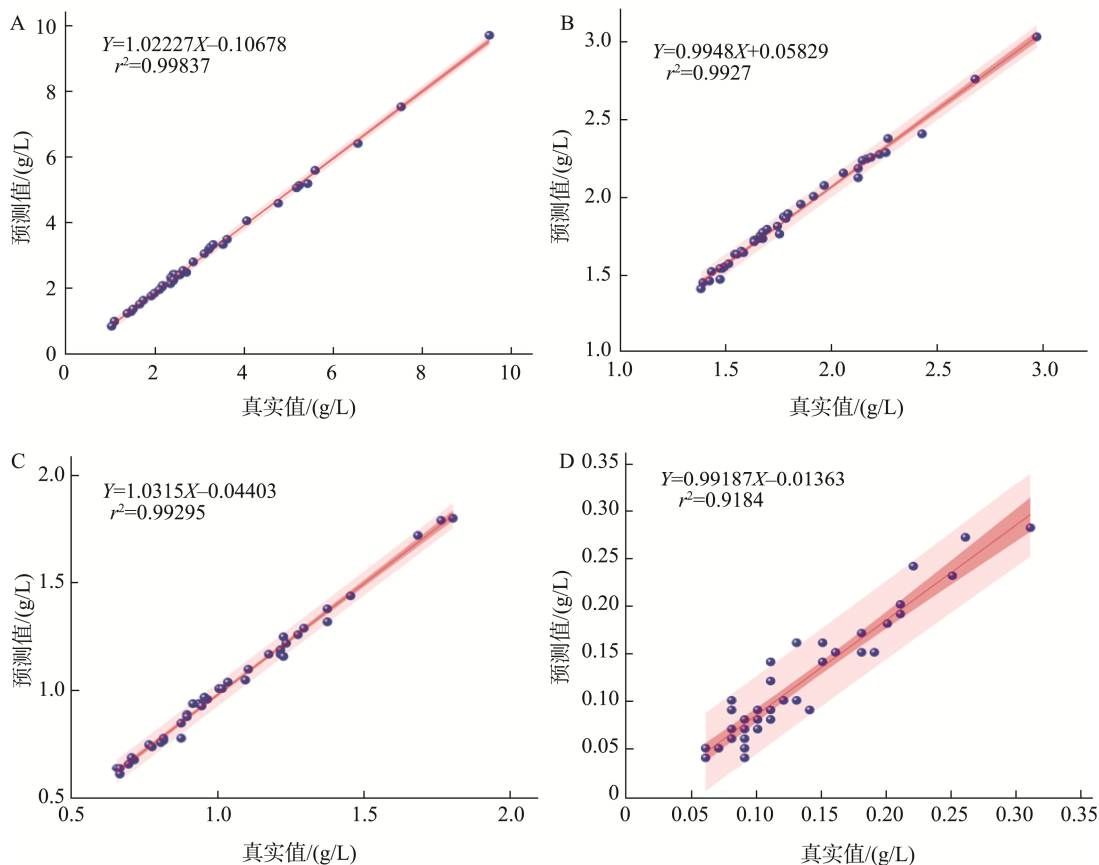


图 4 预测值与色谱值线性关系

Fig.4 Linear relationship between the predicted values and the chromatographic values

表6 浓香型原酒中酯类物质定量模型外部验证结果
Table 6 External validation results of quantitative model for esters in Nongxiangxing crude Baijiu

样品 编号	己酸乙酯		乙酸乙酯		乳酸乙酯		丁酸乙酯	
	绝对 误差/(g/L)	相对误差 /%	绝对 误差/(g/L)	相对误差 /%	绝对 误差/(g/L)	相对误差 /%	绝对 误差/(g/L)	相对误差 /%
NX-1	0.08	3.35	0.08	4.49	0.03	4.23	0.03	9.68
NX-2	0.04	1.65	0.06	2.76	0.00	0.00	0.02	9.52
NX-3	0.06	2.80	0.07	3.65	0.03	2.46	0.01	3.85
NX-4	0.08	4.06	0.07	4.86	0.01	1.00	0.02	16.67
NX-5	0.27	2.85	0.08	3.88	0.03	3.30	0.01	10.00
NX-6	0.06	1.67	0.04	2.86	0.00	0.00	0.02	25.00
NX-7	0.12	8.28	0.04	2.38	0.01	1.43	0.01	12.50
NX-8	0.09	4.74	0.01	0.72	0.00	0.00	0.03	27.27
NX-9	0.13	3.70	0.02	1.40	0.01	0.81	0.01	16.67
NX-10	0.17	3.14	0.07	4.52	0.03	1.70	0.03	33.33
NX-11	0.11	2.32	0.08	4.71	0.01	0.79	0.02	25.00
NX-12	0.02	0.93	0.04	1.35	0.00	0.00	0.02	25.00
NX-13	0.03	1.28	0.04	2.68	0.05	3.65	0.01	9.09
NX-14	0.08	4.06	0.09	4.57	0.02	2.11	0.03	30.00
NX-15	0.04	1.25	0.04	2.67	0.01	1.32	0.02	18.18
NX-16	0.04	0.77	0.04	2.63	0.04	3.67	0.05	35.71
NX-17	0.04	3.74	0.01	0.57	0.01	0.73	0.03	16.67
NX-18	0.08	5.37	0.09	3.96	0.01	0.97	0.02	9.09
NX-19	0.08	5.88	0.06	3.85	0.00	0.00	0.04	21.05
NX-20	0.04	2.33	0.06	3.61	0.02	2.30	0.04	44.44
NX-21	0.08	4.88	0.06	3.80	0.01	1.54	0.03	23.08
NX-22	0.03	2.80	0.07	3.26	0.05	7.58	0.01	6.67
NX-23	0.01	0.32	0.03	1.35	0.03	3.90	0.03	27.27
NX-24	0.01	0.35	0.01	0.44	0.00	0.00	0.02	22.22
NX-25	0.07	2.17	0.04	1.65	0.01	1.12	0.02	18.18
NX-26	0.06	1.49	0.05	2.86	0.04	3.31	0.01	12.50
NX-27	0.12	11.88	0.02	1.35	0.02	1.65	0.05	55.56
NX-28	0.09	2.74	0.07	4.27	0.09	10.34	0.03	9.68
NX-29	0.08	1.22	0.06	3.35	0.04	2.38	0.01	5.56
NX-30	0.08	3.85	0.04	2.52	0.00	0.00	0.01	11.11
NX-31	0.16	5.95	0.07	4.19	0.02	3.03	0.01	4.76
NX-32	0.09	3.54	0.06	3.66	0.04	4.94	0.02	10.00
NX-33	0.05	0.97	0.05	3.38	0.04	5.00	0.03	23.08
NX-34	0.07	0.93	0.06	2.24	0.03	4.35	0.01	6.25
NX-35	0.02	0.77	0.04	1.88	0.01	1.08	0.02	28.57
NX-36	0.06	1.08	0.08	4.76	0.01	1.06	0.02	33.33
NX-37	0.06	2.53	0.02	0.94	0.03	3.70	0.02	18.18
NX-38	0.12	5.02	0.08	4.30	0.06	4.92	0.02	8.00
NX-39	0.15	6.44	0.08	4.44	0.01	0.69	0.01	6.67
NX-40	0.10	4.17	0.05	2.28	0.03	3.30	0.02	20.00
平均相对误差 /%	3.18		2.98		2.36		18.73	
相对误差范围 /%	0.32~11.88		0.44~4.86		0.00~10.34		3.85~55.56	
相对误差小于 等于10%占比 /%	97.50		100.00		97.50		35.00	

3 结论与讨论

本研究利用傅里叶变换中红外光谱技术, 结合化学计量学, 分别建立了浓香型原酒中己酸乙酯、乙酸乙酯、乳酸乙酯、丁酸乙酯 4 种酯类物质的中红外定量检测模型。结果表明, 己酸乙酯、乙酸乙酯、乳酸乙酯 3 种模型线性关系(r^2)大于 0.99, 均方根误差低于 0.07 g/L, 说明模型具有良好拟合度和稳定性, 对模型进行外部验证后的预测相关系数(R^2)同样大于 0.99, 平均相对误差依次为 3.18%、2.98%、2.36%, 说明模型具有良好的检测效果, 预测值与真实值接近。以上 3 种模型能够充分满足白酒生产企业对大批量原酒进行快速检测的实际需求。丁酸乙酯由于其在原酒中的含量低, 光谱范围窄, 数据较为散乱, 预测相关系数(R^2)为 0.919, 平均相对误差为 18.73%, 模型检测效果较为局限, 但可在一定程度上作为参考指标, 结合气相色谱检测结果, 监测生产趋势。

随检测技术的不断更新迭代, 中红外光谱法等快速检测技术在白酒行业的应用范围也越来越广泛, 其克服了传统检测方法费时、费力、消耗试剂量多、操作水平要求高等缺点, 极大地提高了对原酒中主要酯类指标的检测效率。尽管中红外光谱技术目前依然存在如前期建模需要积累大量数据、对低含量化合物的检测效果较差、需增加多维度检测指标等某些技术难题, 但其为白酒生产企业酿造原酒的快速检测、分析、定级等提供了新的发展方向, 是一种充满潜力的新型快速检测分析技术, 在白酒行业具有广阔的应用前景。

参考文献

- [1] WANG L, TANG P, ZHANG P, *et al.* Unraveling the aroma profiling of Baijiu: Sensory characteristics of aroma compounds, analytical approaches, key odor-active compounds in different Baijiu, and their synthesis mechanisms [J]. *Trends in Food Science & Technology*, 2024, 146: 104376.
- [2] 刘欣欣, 武亚帅, 黄河, 等. 基于风味交互作用的浓香型白酒关键风味物质探究[J]. *食品安全质量检测学报*, 2023, 14(12): 23–34.
LIU XX, WU YS, HUANG H, *et al.* Research on key flavor substances of Nongxiangxing Baijiu based on flavor interaction [J]. *Journal of Food Safety & Quality*, 2023, 14(12): 23–34.
- [3] 郭学武, 范恩帝, 马冰涛, 等. 中国白酒中微量成分研究进展[J]. *食品科学*, 2020, 41(11): 267–276.
GUO XW, FAN END, MA BT, *et al.* Recent progress in micro components of Chinese Baijiu [J]. *Food Science*, 2020, 41(11): 267–276.
- [4] XU Y, ZHAO J, LIU X, *et al.* Flavor mystery of Chinese traditional fermented Baijiu: The great contribution of ester compounds [J]. *Food Chemistry*, 2022, 369: 130920.
- [5] 丁力杰, 唐云, 赵亚雄, 等. 白酒中的重要酯类物质及主要来源研究现状[J]. *酿酒科技*, 2024(3): 91–100, 107.
DING LJ, TANG Y, ZHAO YX, *et al.* Research status of important esters in Baijiu and their sources [J]. *Liquor-Making Science & Technology*, 2024(3): 91–100, 107.
- [6] 张晓婕, 邱树毅, 王晓丹, 等. 白酒挥发性风味物质气相色谱分析及研究进展[J]. *食品与发酵工业*, 2021, 47(14): 313–320.
ZHANG XJ, QIU SY, WANG XD, *et al.* Gas chromatography methods and research progress of volatile flavor substances in Chinese liquor (Baijiu) [J]. *Food and Fermentation Industries*, 2021, 47(14): 313–320.
- [7] 孟庆顺, 卜媛媛, 王悦, 等. 气相色谱法测定白酒中醇类及酯类[J]. *食品安全质量检测学报*, 2021, 12(11): 4666–4671.
MENG QS, BU YY, WANG Y, *et al.* Determination of alcohols and esters in liquor by gas chromatography [J]. *Journal of Food Safety & Quality*, 2021, 12(11): 4666–4671.
- [8] 方海仙, 普娅丽, 普家云, 等. 气相色谱法测定白酒中甲醇、乙酸乙酯和己酸乙酯含量的优化[J]. *食品安全质量检测学报*, 2021, 12(17): 6879–6886.
FANG HX, PU YL, PU JY, *et al.* Optimization of determination of methanol, ethyl acetate and ethyl caproate in Chinese liquor by gas chromatography [J]. *Journal of Food Safety & Quality*, 2021, 12(17): 6879–6886.
- [9] 安明哲, 廖勤俭, 李杨华, 等. 高效液相色谱法在白酒分析中的应用[J]. *酿酒科技*, 2019(11): 39–42.
AN MZ, LIAO QJ, LI YH, *et al.* Application of HPLC in Baijiu analysis [J]. *Liquor-Making Science & Technology*, 2019(11): 39–42.
- [10] 李永霞. 液相色谱分析法在白酒检测中的运用分析[J]. *食品安全导刊*, 2022(23): 184–186.
LI YX. Application analysis of liquid chromatography in Baijiu detection [J]. *China Food Safety Magazine*, 2022(23): 184–186.
- [11] NIU Y, ZHAO W, XIAO Z, *et al.* Characterization of aroma compounds and effects of amino acids on the release of esters in Laimao Baijiu [J]. *Journal of the Science of Food and Agriculture*, 2023, 103(4): 1784–1799.
- [12] FANG C, DU H, JIA W, *et al.* Compositional differences and similarities between typical Chinese Baijiu and western liquor as revealed by mass spectrometry-based metabolomics [J]. *Metabolites*, 2018, 9(1): 2.
- [13] WANG G, JING S, WANG X, *et al.* Evaluation of the perceptual interaction among ester odorants and nonvolatile organic acids in Baijiu by GC-MS, GC-O, odor threshold, and sensory analysis [J]. *Journal of Agricultural and Food Chemistry*, 2022, 70(43): 13987–13995.
- [14] ZHANG Q, SHI J, WANG Y, *et al.* Research on interaction regularities and mechanisms between lactic acid and aroma compounds of Baijiu [J]. *Food Chemistry*, 2022, 397: 133765.
- [15] YU Y, CHEN S, NIE Y, *et al.* Optimization of an intra-oral solid-phase microextraction (SPME) combined with comprehensive two-dimensional gas chromatography–time-of-flight mass spectrometry (GC×GC-TOFMS) method for oral aroma compounds monitoring of Baijiu [J]. *Food Chemistry*, 2022, 385: 132502.
- [16] ZHAO D, SHI D, SUN J, *et al.* Characterization of key aroma compounds in Gujingong Chinese Baijiu by gas chromatography–olfactometry, quantitative measurements, and sensory evaluation [J]. *Food Research International*, 2018, 105: 616–627.
- [17] JIA W, FAN Z, DU A, *et al.* Recent advances in Baijiu analysis by chromatography based technology—A review [J]. *Food Chemistry*, 2020, 324: 126899.
- [18] 靳光远, 袁树昆, 唐群勇, 等. 浓香型白酒酿造智能化进展[J]. *食品与*

- 发酵工业, 2024, 50(21): 341–348.
- JIN GY, YUAN SK, TANG QY, *et al.* Progress in the intelligentization of Nongxiangxing Baijiu production [J]. Food and Fermentation Industries, 2024, 50(21): 341–348.
- [19] WANG J, CHEN H, WU Y, *et al.* Uncover the flavor code of strong-aroma Baijiu: Research progress on the revelation of aroma compounds in strong-aroma Baijiu by means of modern separation technology and molecular sensory evaluation [J]. Journal of Food Composition and Analysis, 2022, 109: 104499.
- [20] OZAKI Y. Infrared spectroscopy—mid-infrared, near-infrared, and far-infrared/terahertz spectroscopy [J]. Analytical Sciences, 2021, 37(9): 1193–1212.
- [21] 李叶丽, 史晓亚, 黄登宇. 快速检测技术在白酒质量检测中的应用现状[J]. 食品安全质量检测学报, 2018, 9(10): 2291–2297.
- LI YL, SHI XY, HUANG DY. Application status of rapid detection technologies in liquor quality determination [J]. Journal of Food Safety & Quality, 2018, 9(10): 2291–2297.
- [22] 余松柏, 黄张君, 赵兴蓉, 等. 红外光谱技术及其在白酒酿造过程中快速检测与分析的研究进展[J]. 分析测试学报, 2025, 44(3): 544–561.
- YU SB, HUANG ZJ, ZHAO XR, *et al.* Research progress on infrared spectroscopy and its rapid detection and analysis in Baijiu brewing [J]. Journal of Instrumental Analysis, 2025, 44(3): 544–561.
- [23] 周军, 杨洋, 姚瑶, 等. 中红外光谱技术在浓香型白酒原酒关键指标分析中的应用[J]. 光谱学与光谱分析, 2022, 42(3): 764–768.
- ZHOU J, YANG Y, YAO Y, *et al.* Application of mid-infrared spectroscopy in the analysis of key indexes of strong flavour Chinese spirits base liquor [J]. Spectroscopy and Spectral Analysis, 2022, 42(3): 764–768.
- [24] 葛云飞, 康子悦, 沈蒙, 等. 高粱自然发酵对淀粉分子结构及老化性质的影响[J]. 食品科学, 2019, 40(18): 35–40.
- GE YF, KANG ZY, SHEN M, *et al.* Effect of natural fermentation on molecular structure and retrogradation properties of sorghum starch [J]. Food Science, 2019, 40(18): 35–40.
- [25] 周兴藩, 杨增玲, 刘贤, 等. 酒糟主要成分含量的近红外反射光谱快速分析[J]. 农业机械学报, 2012, 43(3): 103–107.
- ZHOU XP, YANG ZL, LIU X, *et al.* Rapid quantitative determination of main components in dried distillers' grains by near-infrared spectroscopy [J]. Transactions of the Chinese Society for Agricultural Machinery, 2012, 43(3): 103–107.
- [26] WANG L, SHEN Y, WANG X, *et al.* The spatial differences of the Chinese sauce aroma liquor Daqu and identification by FT-MIR spectroscopy [J]. Food Control, 2023, 154: 109990.
- [27] 周瑞, 陈晓明, 张莉丽, 等. 化学计量学结合中红外光谱的浓香型白酒分类研究[J]. 食品与发酵工业, 2023, 49(5): 88–93.
- ZHOU R, CHEN XM, ZHANG LL, *et al.* Classification of strong-flavor Baijiu based on chemometrics and mid-infrared spectroscopy [J]. Food and Fermentation Industries, 2023, 49(5): 88–93.
- [28] LIN L, FAN W, XU Y, *et al.* Characterization of key odorants in Chinese texiang aroma and flavor type Baijiu (Chinese Liquor) by means of a molecular sensory science approach [J]. Journal of Agricultural and Food Chemistry, 2024, 72(2): 1256–1265.
- [29] 邹胜琼, 段学, 田敏, 等. 中红外模型快速检测白酒基础酒中总酯的含量[J]. 酿酒, 2021, 48(3): 74–77.
- ZOU SQ, DUAN X, TIAN M, *et al.* Rapid determination of total esters in Baijiu basic wine by mid infrared model [J]. Liquor Making, 2021, 48(3): 74–77.
- [30] 韩云翠, 吕志远, 刘玉涛, 等. 基于傅立叶变换中红外光谱技术的浓香型基酒快速检测[J]. 食品与发酵工业, 2024, 50(1): 272–278, 285.
- HAN YC, LV ZY, LIU YT, *et al.* Research on rapid detection of strong-flavor base Baijiu by fourier transform mid-infrared spectroscopy [J]. Food and Fermentation Industries, 2024, 50(1): 272–278, 285.
- [31] 何嘉玮. 羰基分子探针在结构和白酒检测中的光谱研究[D]. 西安: 西安电子科技大学, 2023.
- HE JW. Spectroscopic study of carbonyl molecular probe in structure and Baijiu detection [D]. Xi'an: Xidian University, 2023.
- [32] 廖丽, 彭厚博, 胥佳, 等. 基于中红外光谱技术构建浓香型原酒酯类指标定量模型[J]. 酿酒科技, 2025, 1–10. <http://kns.cnki.net/kcms/detail/52.1051.ts.20250108.1314.006.html>
- LIAO L, PENG HB, XU J, *et al.* Construction of quantitative model for esters in nongxiang crude liquor based on fourier transform mid-Infrared spectroscopy [J]. Liquor-Making Science & Technology, 2025, 1–10. <http://kns.cnki.net/kcms/detail/52.1051.ts.20250108.1314.006.html>
- [33] 刘石雪, 王秀菊, 李静, 等. 中红外光谱技术在白酒检测中的应用[J]. 酿酒科技, 2020(3): 41–46, 51.
- LIU SX, WANG XJ, LI J, *et al.* Application of mid-infrared spectroscopy in Baijiu detection [J]. Liquor-Making Science & Technology, 2020(3): 41–46, 51.
- [34] 彭厚博, 廖丽, 甘巧, 等. 基于中红外光谱技术对浓香型原酒中酸类成分快检模型的构建[J]. 中国酿造, 2025, 44(3): 66–70.
- PENG HB, LIAO L, GAN Q, *et al.* Construction of a model for the rapid detection of acids in strong-flavor original Baijiu based on mid-infrared spectroscopy technology [J]. China Brewing, 2025, 44(3): 66–70.
- [35] WU J, PENG H, LI L, *et al.* FT-IR combined with chemometrics in the quality evaluation of Nongxiangxing Baijiu [J]. Spectrochim Acta A, 2023, 284: 121790.

(责任编辑: 蔡世佳 于梦娇)