DOI: 10.19812/j.cnki.jfsq11-5956/ts.20260224002
引用格式: 李娜, 潘天全, 朱晴云, 等. 猕猴桃果渣混合发酵酒的酿造及其挥发性组分特征解析[J]. 食品安全质量检测学报, 2026, 17(14): 237–246.
Li Na, Pan Tianquan, Zhu Qingyun, et al. Brewing and analysis of volatile components characteristic of liquor fermented by mixed fermentation with *Actinidia chinensis* residue [J]. Journal of Food Safety & Quality, 2026, 17(14): 237–246. (in Chinese with English abstract).

猕猴桃果渣混合发酵酒的酿造及其挥发性组分特征解析

李 娜[1], 潘天全[1], 朱晴云[1], 周祚琴[1], 于 静[1], 边媛媛[2], 郝 标[3], 李瑞龙[1], 兰 伟[1], 程 伟[1*]

(1. 阜阳师范大学生物与食品工程学院, 安徽省功能性果饮工程技术中心, 阜阳 236037; 2. 沈阳农业大学食品学院, 国家浆果加工技术研发专业中心, 沈阳 110866; 3. 安徽金种子酒业股份有限公司, 阜阳 236023)

摘 要: 目的 提高猕猴桃果酒发酵后残余果渣的综合利用效率, 开发新型固态发酵蒸馏酒, 并解析其挥发性组分(volatile organic compounds, VOCs)特征及其差异。**方法** 以高粱和猕猴桃果渣为原料, 借鉴小曲清香型白酒的酿造工艺进行混合发酵以酿造新型蒸馏酒, 并结合感官品评、电子鼻、气相色谱法(氢火焰离子检测器)和顶空固相微萃取-气相色谱-质谱解析猕猴桃果渣混合发酵酒的 VOCs 特征及其差异。**结果** 猕猴桃果渣混合发酵酒具有传统小曲清香型白酒的感官风味, 并具有愉悦的猕猴桃果香; 同时, 猕猴桃果渣混合发酵酒的总酸含量与传统小曲清香型白酒的总酸含量相近, 猕猴桃果渣混合发酵酒中共检出 VOCs 102 种, 结合偏最小二乘法判别分析模型的变量投影重要性(variable importance in projection, VIP)筛选出烷十六烷酸乙酯、十二烷酸乙酯、乙酸、癸酸乙酯等 27 种关键差异化合物(VIP>1)。**结论** 本研究解析了猕猴桃果渣混合发酵酒的 VOCs 特征及其差异, 为蒸馏酒的新产品开发和果渣的综合利用提供了参考。

关键词: 猕猴桃; 果酒; 挥发性有机化合物; 特征组分
中图分类号: TS261.4 **文献识别码:** A **文章编号:** 2095–0381(2026)14–0237–10

Brewing and analysis of volatile components characteristic of liquor fermented by mixed fermentation with *Actinidia chinensis* residue

LI Na[1], PAN Tian-Quan[1], ZHU Qing-Yun[1], ZHOU Zuo-Qin[1], YU Jing[1], BIAN Yuan-Yuan[2], HAO Biao[3], LI Rui-Long[1], LAN Wei[1], CHENG Wei[1*]

收稿日期: 2026-02-24
基金项目: 沈阳农业大学国家浆果加工技术研发专业中心开放课题项目(JG 2025-02); 金种子酒业博士后工作站科研计划项目(JZ9341538, JZ9341729)
第一作者: 李娜(1993—), 女, 硕士, 工程师, 主要研究方向为酿酒微生物与风味组学。E-mail: 18365297578@163.com
***通信作者:** 程伟(1984—), 男, 博士, 高级工程师, 主要研究方向为发酵食品、酿酒微生物与风味组学。E-mail: chengwei@fynu.edu.cn

(1. *Anhui Ecological Fermentation Engineering Research Center for Functional Fruit Beverage*, *School of Biology and Food Engineering*, *Fuyang Normal University*, *Fuyang* 236037, *China*; 2. *National R&D Professional Center for Berry Processing*, *College of Food Science*, *Shenyang Agricultural University*, *Shenyang* 110866, *China*; 3. *Anhui Jinzhongzi Distillery Co*., *Ltd*., *Fuyang* 236023, *China*)

ABSTRACT: Objective To enhance the utilization efficiency of the residual fruit residues after the fermentation of *Actinidia chinensis* residue, develop a new types of solid-state fermented liquors, and analyze the characteristics and differences of its volatile organic compounds (VOCs). **Methods** Using sorghum and *Actinidia chinensis* residue as raw materials, a new types of liquor was brewed by mixed fermentation based on the brewing process of Xiaoqu light-aroma type Baijiu. The VOCs characteristics and differences of mixed fermentation liquor fermented from *Actinidia chinensis* residue were analyzed via sensory evaluation, electronic nose, gas chromatography with flame ionization detector, and headspace solid-phase microextraction-gas chromatography-mass spectrometry. **Results** The mixed fermentation liquor fermented from *Actinidia chinensis* residue had the sensory flavor of traditional Xiaoqu light-aroma type Baijiu and a pleasant aroma of *Actinidia chinensis*. Additionally, the total acid content of mixed fermentation liquor fermented from *Actinidia chinensis* residue was similar to that of traditional Xiaoqu light-aroma type Baijiu, and a total of 102 kinds of VOCs were detected in mixed fermentation liquor fermented from *Actinidia chinensis* residue. The variable importance in projection (VIP) values of the partial least squares discrimination analysis model were used to screen out 27 kinds of key differentiating compounds (VIP>1), including hexadecanoic acid ethyl ester, dodecanoic acid ethyl ester, acetic acid and decanoic acid ethyl ester, etc. **Conclusion** This study analyzes the characteristics and differences of VOCs in mixed fermentation liquor fermented from *Actinidia chinensis* residue, and provides a reference for the development of new liquor products and the comprehensive utilization of fruit residues.

KEY WORDS: *Actinidia chinensis*; fruit-wine; volatile organic compounds; characteristics components

0 引 言

猕猴桃属于猕猴桃属藤本植物, 在我国陕西、四川、贵州等地都有大面积种植[1]。猕猴桃素有“水果之王”之称, 其富含维生素、矿物质、膳食纤维、酚类、氨基酸和花色苷等多种抗氧化物质[2–4], 具有重要的经济和营养价值。猕猴桃果渣是猕猴桃果汁生产过程中的副产物, 当前, 对于果酒酿造或果汁生产的副产物——果渣的处理方法尚不完善, 通常作为垃圾丢弃或是经过简单的加工后添加于肥料中, 进行果渣资源再利用方面的处理较少[5]。将果渣作为辅料引入酿酒领域并进行再利用, 不仅有利于提高果渣的利用率并减少了资源的浪费, 同时也为食品工业生产副产物与酿酒工艺的结合提供了新的途径。将猕猴桃果渣作为辅料添加到白酒酿造过程中, 经过发酵可将果渣中残留的有机酸、黄酮类和矿物质等物质转移到酒体中, 同时酒体带有猕猴桃的独特果香[6–7]。另外, 现代仪器分析技术和风味组学方法在白酒风味化学研究领域得到了较快的发展, 风味组学方法及其技术在白酒风味解析过程中发挥着重要作用; 同时, 白酒风味组学应用体系的建立有利于白酒风味成分挖掘和特征风味的解析[8–10]。

小曲清香型白酒的酿造以粮谷为主要原料, 小曲作为糖化发酵剂(主要为根霉菌和酵母菌), 经蒸煮摊晾、培菌糖化、续糟发酵、蒸馏、陈酿和勾兑等工序而成, 具有出酒率高、发酵周期短、醇香清雅、糟香突出、回味协调和余味爽净等特点[11]。果酒的酿造主要利用酵母菌将果汁中可发酵的糖类经酒精发酵作用生成酒精, 在陈酿澄清过程中经酯化、氧化和沉淀等作用, 最终制成酒液清晰、色泽鲜美、具有醇香和芳香风味的酒精饮料产品[12]。另外, 果酒按照不同的加工工艺可分为发酵酒和蒸馏酒两大类; 其中, 发酵酒是将果实经过处理, 取其汁液等, 再经过酒精发酵和陈酿等过程而制成, 其酒精含量较低, 通常在10%~13%; 蒸馏酒是将果实进行酒精发酵后再经蒸馏贮藏而酿成的酒, 又名白兰地[12]。白兰地通常指葡萄白兰地, 如若用其他水果酿造, 应冠以水果名称, 如猕猴桃白兰地等[12–13], 其酒精含量较高, 通常在 40%~55%。猕猴桃果渣混合发酵酒借鉴小曲清香型白酒的酿造工艺, 以高粱和猕猴桃果渣作为酿造原料, 经过发酵和蒸馏而获得酒精度高达62%vol~65%vol 的蒸馏酒, 其酿造工艺明显区别于传统小曲清香型白酒以及液态发酵的猕猴桃白兰地, 其原酒融入了猕猴桃果渣特有的果香气。

为提高猕猴桃果酒发酵后残余果渣的综合利用效率, 开发新型固态发酵蒸馏酒, 并解析其挥发性组分特征及其差异。本研究采用高粱和猕猴桃果渣为原料, 借鉴小曲清香型白酒酿造工艺进行混合发酵以酿造新型蒸馏酒, 并结合感官品评、电子鼻、气相色谱-火焰光度检测器(gas

chromatography-flame ionization, GC-FID)和顶空固相微萃取-气相色谱-质谱法(headspace solid-phase microextraction-gas chromatography-mass spectrometry, HS-SPME-GC-MS)解析猕猴桃果渣混合发酵酒的挥发性组分特征及其差异。本研究有利于开拓果渣的利用途径、提高果渣的利用效率, 在果渣资源化利用等方面具有重要的经济和环保意义; 另外, 本研究明晰了猕猴桃果渣混合发酵酒的风味特征, 为蒸馏酒的新产品开发和果渣的综合利用提供参考。

1　材料与方法

1.1　材料与试剂

实验酒样: 小曲清香型白酒(以下简称 XQ, 酒精度 64.0%vol)、猕猴桃果渣混合发酵酒(以下简称 XQ-G, 酒精度 63.0%vol)、猕猴桃液态发酵蒸馏酒(猕猴桃白兰地, 以下简称 G-YZ, 酒精度 53.0%vol), 取自阜阳师范大学试验酒样。

乙酸正戊酯(色谱纯, 上海阿拉丁生化科技股份有限公司); 仲辛醇(色谱纯, 成都化夏试剂有限公司); 正构烷烃类混标(C_7~C_{40}, 纯度≥99.8%, 坛墨质检科技股份有限公司); 氯化钠(NaCl)(分析纯, 国药集团化学试剂有限公司); 无水乙醇(色谱纯, 成都市科隆化学品有限公司)。

1.2　仪器与设备

8890 安捷伦气相色谱仪、GC-8860, MS-5977 BMSD 安捷伦气相色谱-质谱联用仪(电子电离源, electron ionization, EI)、DB-FFAP 色谱柱(60 m×0.25 mm ×0.25 μm, 美国 Agilent 公司); 50/30 μm DVB/CAR/PDMS 固相微萃取头(美国 Supelco 公司); 样品前处理平台、CTC 全自动 SPME 进样器(德国 Gerstel 公司); Pen 3 电子鼻(德国 Airsense 公司)。

1.3　实验方法

1.3.1　酒样制备方法

小曲清香型白酒、猕猴桃果渣混合发酵酒和猕猴桃液态发酵蒸馏酒等酒样参照文献在实验室制备[7,11,14], 其主要工艺流程如图 1 所示; 其中, G-YZ 的原料是猕猴桃果实, 商业酵母菌剂作为发酵剂; G-YZ 发酵后的果渣经过脱水干燥、粉碎等处理并进行储存, 再和浸泡后的整粒高粱混合共同作为 XQ-G 的酿造, 小曲作为糖化发酵剂; XQ 的酿造原料是整粒高粱, 小曲作为糖化发酵剂。

1.3.2　感官风味特征及其差异分析

根据 GB/T 10781.2—2022《白酒质量要求第 2 部分: 清香型白酒》, 随机对样品进行编号, 并从“色、香、味、格”等 4 个方面进行感官评价, 由 10 位专业白酒品评人员对样品进行品评打分, 并取平均值作为酒样的感官评分。

1.3.3　电子鼻检测

依据电子鼻传感器阵列及其性能描述(表 1), 对不同样品进行电子鼻检测[15]。取 4 mL 样品值域电子鼻专用进样瓶中, 根据参考文献[15]所述富集气体 25 min, 并用电子鼻专用采集与数据处理软件 Winmuster 1.6.2 进行检测分析。电子鼻程序设置为: 清洗 100 s、归零 10 s、准备 5 s, 进样测量 120 s, 每隔 1 s 测一次, 气体流量为 300 mL/min; 同时, 为保证结果的可重复性, 选择 58~60 s 稳态时段的数据进行分析, 每个样品重复测定 3 次。

1.3.4　酒样总酸含量和总酯含量的检测

参考 GB/T 10345—2022《白酒分析方法》, 采用酚酞滴定法测定总酸含量, 碱皂化-硫酸反滴定法测定总酯含量。

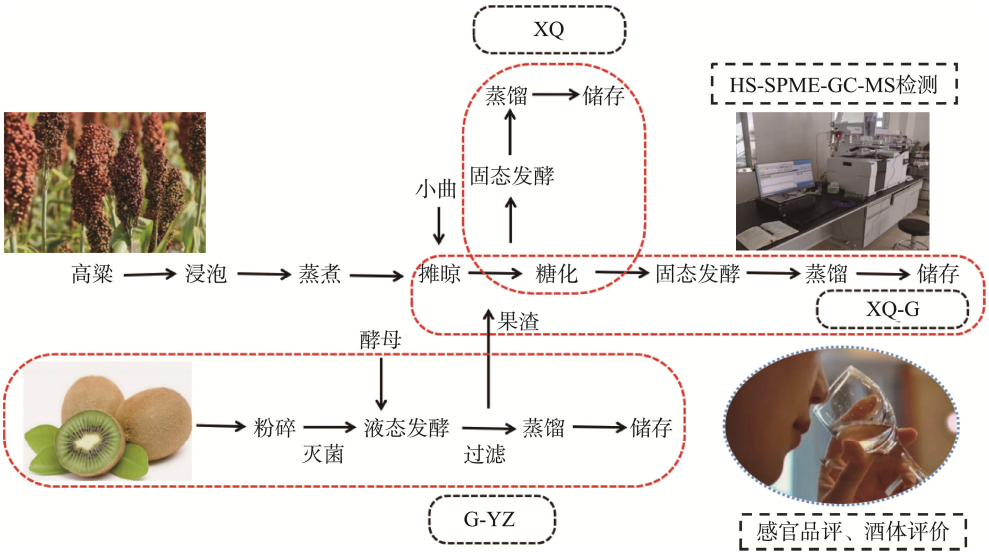


图 1　3 种酒样的酿造工艺流程图

Fig.1　Flowchart of brewing processes for 3 kinds of liquor samples

表 1 电子鼻传感器阵列及其性能描述
Table 1 E-nose sensor array and its performance description

序号	传感器名称	性能描述	序号	传感器名称	性能描述
1	W1C	对苯类、芳香成分灵敏	6	W1S	对甲烷、甲基类灵敏
2	W5S	灵敏度高, 对氮氧化合物很灵敏	7	W1W	对硫类、有机化合物、萜烯类灵敏
3	W3C	对氨类、芳香成分灵敏	8	W2S	对醇类、醛酮类灵敏
4	W6S	主要对氢化物有选择性	9	W2W	对芳香环结构的化合物、含硫有机化合物灵敏
5	W5C	对短链烷烃芳香成分灵敏	10	W3S	对长链烷烃灵敏

1.3.5 酒样的 GC-FID 检测

酒样的 GC-FID 检测参考 GB/T 10345—2022。样品处理方法: 移取适量样品置于 10 mL 容量瓶中, 加入 0.1 mL 乙酸正戊酯溶液(内标, 质量浓度为 20 g/L, 终质量浓度为 0.2 g/L), 使用样品定容至刻度并充分混匀, 待 GC-FID 上机检测。

GC 条件: 进样口温度 250 ℃; 检测器温度 250 ℃; 色谱柱: TG-WAX (30 m×0.25 mm, 0.25 μm); 分流比: 25:1; 进样量: 0.5 μL。升温程序: 起始温度 40 ℃, 维持 6 min, 再以 4 ℃/min 升至 60 ℃后, 以 20 ℃/min 升至 160 ℃后, 再以 45 ℃/min 升至 220 ℃, 维持 4 min。

定量方法: 4 种酯类和甲醇采用内标法建立标准曲线进行定量, 5 种醇类采用内标法通过待测物质与内标的峰面积之比进行半定量, 计算如公式(1)所示:

$$C/(\mathrm{g/L})=A_c/A_{is}\times C_{is} \quad (1)$$

式中: C 为待测组分的质量浓度, g/L; C_{is} 为内标物质的质量浓度, g/L; A_c 为待测组分的峰面积; A_{is} 为内标物质的峰面积。

1.3.6 HS-SPME-GC-MS 检测

酒样的 HS-SPME-GC-MS 检测参考文献[8], 其中的萃取时间、温度等条件已经过优化处理; 酒样的前处理: 用去离子水分别将各酒样的酒精度稀释到 10.0%vol, 置于 4 ℃普通冰箱并密封避光保存。取处理后的酒样 5.0 mL 于 20 mL 的顶空瓶中, 加入 1.8 g NaCl, 放入磁力搅拌转子, 添加 20 μL 内标物(质量浓度为 0.05 g/L 的仲辛醇)旋紧瓶盖, 置于自动进样处理台上; 采用 DVB/CAR/PDMS 纤维头对顶空瓶中的样品进行萃取, 50 ℃预热 5 min 后萃取 45 min, 立即插入 GC 进样口并脱吸附 5 min, 再按照设定的参数及程序进行 GC-MS 的上机检测。

GC 条件: 采用 DB-FFAP 色谱柱(60 m×0.25 mm, 0.25 μm), He 作为载气(纯度≥99.999%), 流速 1.0 mL/min。程序升温: 起始温度 40 ℃, 维持 2 min, 以 2 ℃/min 速度升至 100 ℃, 再以 4 ℃/min 升至 230 ℃, 维持 3 min; 汽化室温度 240 ℃, 分流比 5:1, 溶剂延迟 3.5 min。MS 条件: 选择电子轰击电离离子源, 电子能 70 eV, 电子倍增器电压 350 V, 发射电流 200 μA, 接口温度 240 ℃, 离子源温度 200 ℃, Scan 扫描范围 33~450 amu。

未知物的定性和定量方法[7,16]: 通过对 GC-MS 总离子流色谱图与美国国家标准技术研究所质谱库进行比对(匹配度≥80%); 同时, 将正构烷烃(C_7~C_{40})标准品进行 GC-MS 分析, 根据保留时间计算保留指数(retention index, RI), RI 的计算如公式(2)所示:

$$R_{ix}=100n+100[T_i-T_n]/[T_{n+1}-T_n] \quad (2)$$

式中: R_{ix} 为待测组分的保留指数; T_i 为待测组分的保留时间, min; n 和 n+1 分别为正构烷烃的碳原子个数; T_n 和 T_{n+1} 分别为待测组分出峰前后相邻的两个正构烷烃的保留时间, min。定量方法: 采用内标法通过待测挥发性组分与内标峰的面积之比进行半定量, 计算同公式(1)。

1.4 数据处理

利用 WPS Office Excel 11.1.0.8567 对数据进行处理, Origin 2017 绘制柱状图; Hiplot Pro (https://hiplot.com.cn/) 绘制热图; 采用 SIMCA 14.1 软件进行主成分分析(principal components analysis, PCA)和偏最小二乘法判别分析(partial least squares discrimination analysis, PLS-DA)。

2 结果与分析

2.1 基于电子鼻和感官评价的风味特征分析

由图 2 可知, 利用电子鼻技术对 3 种酒样的挥发性组分进行了分析, 在不同样品中发现 W1C、W3C、W6S、W5C 和 W3S 等 5 个传感器的响应值较低, 表明不同样品中的苯类、氨类、氢化合物、短链烷烃类、长链烷烃类等化合物的含量较少。同时, W5S、W1S、W1W、W2S 和 W2W 等 5 个传感器的响应值相对较高; 其中, W1S 的响应值最高, 其次是 W5S, 表明不同样品中的甲基类和含氮类氧化物的含量较高。另外, 对 W1S 和 W5S 等 2 个传感器的响应值而言, G-YZ、XQ-G 和 XQ 等样品呈现出依次降低的趋势, 氮氧化合物、甲烷、甲基类化合物在 G-YZ 中的响应值明显高于 XQ-G 和 XQ。对其他化合物而言, 不同酒样的响应值差异并不明显。

由图 3 可知, 3 种酒样的感官风味轮廓(感官评价分值)存在明显差异。由图 3(a)可知, XQ 的谷物香、窖香和空杯香较为突出, XQ-G 具有明显的果香、花香、谷物香、烘烤香和空杯香, G-YZ 在果香、花香、醇香和酯香上表现突出。

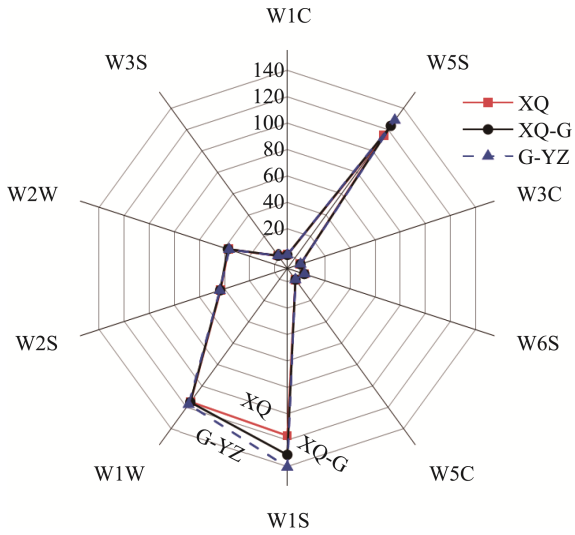


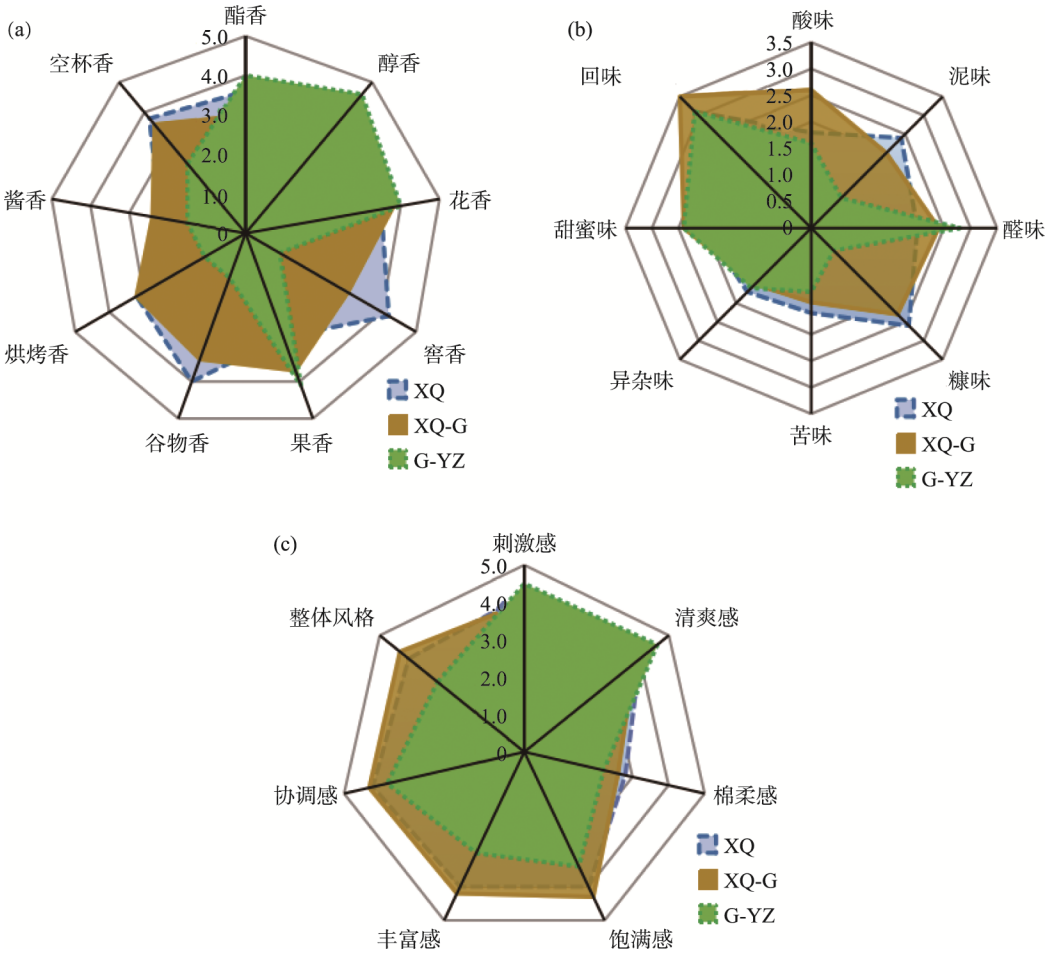
图 2　3 种酒样基于电子鼻检测的香气特征雷达图

Fig.2　Radar map of aroma characteristics of 3 kinds of liquor samples based on electronic nose detectio

香气特征表明, XQ-G 既具有 XQ 酿造工艺所带来的窖香、谷物香和空杯香, 又具有液态发酵所特有的果香、花香和醇香等特点。由图 3(b)可知, XQ 带有较强的泥味、糠味和苦味, XQ-G 具有明显的糠味、醛味、酸味和回味, G-YZ 呈现突出的醛味和回味。由图 3(c)可知, 在绵柔感维度, XQ 的表现优于 XQ-G 与 G-YZ; XQ-G 在饱满感、丰富感、协调感及整体风格层面的表现显著优于 XQ 与 G-YZ; G-YZ 则具有清爽感与刺激感的感官特征。综上表明, 在香气、滋味和综合口感等方面 XQ-G 综合了 XQ 和 G-YZ 的主要特征, 呈现“果香、花香、烘烤香和空杯香”的香气特点, 入口具有“醛味、糠味、酸味”, 并具有“回味”悠长的特征, 综合口感上以“饱满感、丰富感和协调感”为主, “整体风格”较突出; XQ-G 具有传统小曲清香型白酒的风味感官, 并具有愉悦的猕猴桃果香气, 其酒体的综合口感较适宜。

2.2　样品主体挥发性组分的 GC-FID 检测及其差异分析

由表 2 可知, 3 种酒样主体挥发性组分的含量存在明显的差异; 同时, XQ-G 的乙酸乙酯含量为(1.056±0.021) g/L,



注: (a) 香气; (b) 滋味; (c) 综合口感。

图 3　对 3 种酒样的感官评价分值

Fig.3　Sensory evaluation values of 3 kinds of liquor samples

远高于 XQ 和 G-YZ 的乙酸乙酯含量, 乙酸乙酯作为酒体中的重要呈香酯类, 对酒体风味贡献较大, 可赋予酒体丰富的花果香气[17−18]。由表 2 可知, XQ-G 的乙酸乙酯的含量最高, 这可能与酿造过程中加入了猕猴桃果渣, 增加了可发酵糖类的含量等因素有关, 导致发酵过程中乙酰辅酶 A 的浓度升高, 进一步合成了乙酸乙酯[19]。另外, XQ 的乙酸乙酯含量高于 G-YZ, 这可能与两者的酿造工艺相关。固态发酵条件下, 乳酸对酵母菌株的胁迫低于液体发酵方式, 固态发酵方式能够有效缓冲乳酸的胁迫, 进而促进了乙酸乙酯的产生[20]。此外, 液态发酵蒸馏采用的塔式蒸馏器对乙酸乙酯的富集低于甑锅(固态发酵蒸馏器), 导致固态发酵酒的乙酸乙酯等酯类物质含量明显高于液态发酵酒[21]。

XQ-G 样品中的甲醇含量高于 XQ 和 G-YZ(表 2), GB 2757—2012《食品安全国家标准 蒸馏酒及其配制酒》中规定蒸馏酒的甲醇含量不高于 0.6 g/L; 因此, 本研究所述 3 种不同酒样的甲醇含量均符合相关标准要求。相比 XQ 的甲醇含量, XQ-G 的甲醇含量最高, 这可能与酿造过程中果渣在果胶酯酶的作用下将果胶转化为甲醇与果胶酸等因素有关[22−23]。过量摄入甲醇会导致人体出现意识丧失、呼吸困难、恶心、呕吐等不良反应; 因此, 严格控制甲醇含量是混合发酵酿造过程中的重要问题。果酒发酵过程中, 常见的控制甲醇含量的措施主要是降低发酵体系中果胶的含量或抑制果胶酶的活性, 比如 Han 等[24]在苹果汁发酵前添加膨润土吸附果胶和果胶酶, Miljić 等[25]在发酵前的李子果渣中添加少量单宁抑制果胶酶活性。

另外, XQ 与 XQ-G 的总酸含量相近, XQ-G 的总酯含量略高于 XQ(表 2), 这表明果渣的添加对固态发酵条件下总酸含量的影响较小, 但对于酯类含量的增加虽有贡献但不突出。相比较而言, XQ 和 XQ-G 的总酸含量和总酯含量分别是 G-YZ 的 6.08 倍、6.25 倍和 2.44 倍、2.88 倍。研究表明, 在固态发酵过程中, 微生物群落的结构复杂、酶系丰富多样, 且发酵周期较长, 有利于多种代谢产物的积累与转化; 相比之下, 液态发酵体系中的微生物组成较单一, 代谢途径简单, 所生成的酶类及代谢产物数量有限。在总酸与总酯等风味物质的生产能力方面, 固态发酵方式因其更接近自然开放的发酵状态、更有利于微生物的协同作用, 表现出优于液态发酵的效果。

2.3 基于 HS-SPME-GC-MS 法对样品挥发性组分的检测及其差异分析

2.3.1 挥发性组分的分类

由图 4(a)可知, XQ-G 中挥发性组分的含量高于平均值(深红色), 而 G-YZ 中挥发性组分的含量低于平均值(深蓝色); 其中, XQ 的乙酸、苯甲酸、乙酸苯乙酯和乙酸异戊酯的标准分数显著高于其他两个样品。乙酸苯乙酯和乙酸异戊酯是清香型白酒中含量较高的骨架成分, 乙酸苯乙酯呈玫瑰花香, 乙酸异戊酯具有梨子、苹果和香蕉的水果香气, 这几类酯类物质对清香型白酒的呈香和风格均具有重要的贡献[18,26]。在 XQ-G 样品中, 多数挥发性化合物的标准分数均高于其他 2 个样品; 其中, 丁酸、十八烷酸乙酯、乙酸乙酯和辛酸乙酯等成分的标准分数显著高于其他 2 个样品, 表明 XQ-G 在发酵期间, 果渣中的一些酶类和其他物质可能有助于挥发性化合物的产生。由图 4(b)可知, XQ 中共检出 104 种挥发性组分, 包括醇类 15 种, 酸类 6 种, 酯类 44 种, 醛酮类 4 种, 芳香及酚类 29 种, 呋喃类 3 种, 其他类 3 种; XQ-G 中共检出 102 种挥发性组分, 包括醇类 12 种, 酸类 7 种, 酯类 41 种, 醛酮类 7 种, 芳香及酚类 26 种, 呋喃类 5 种, 其他类 4 种; G-YZ 中共检出 69 种挥发性组分, 包括醇类 15 种, 酸类 5 种, 酯类 23 种, 醛酮类 7 种, 芳香及酚类 14 种, 呋喃类 3 种, 其他类 2 种。

表 2 对 3 种酒样中主体挥发性成分的 GC-FID 检测结果

Table 2 Detection results of main volatile components in 3 3 kinds of liquor samples via GC-FID

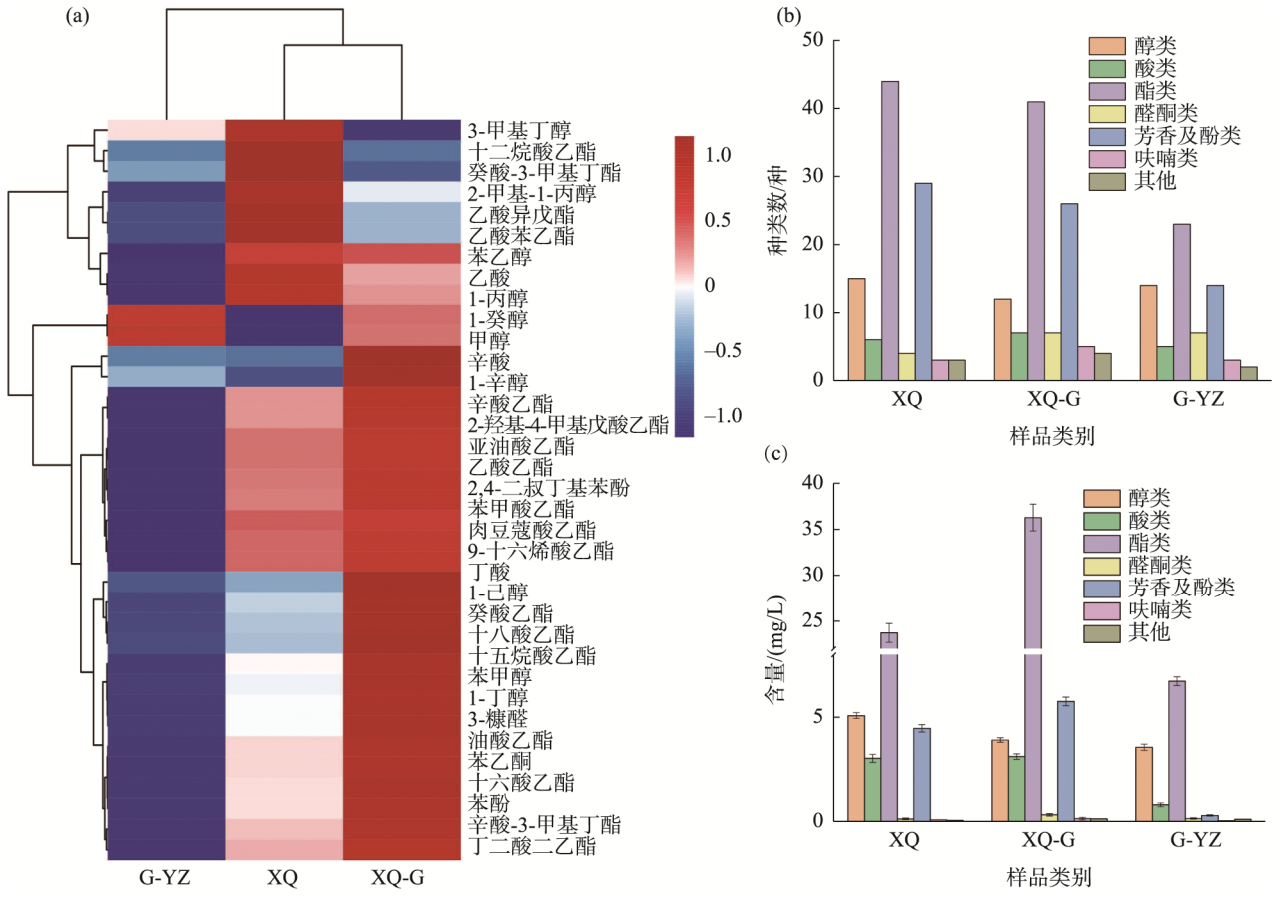
类别	线性方程或显著性	含量/(g/L)		
		XQ	XQ-G	G-YZ
乙酸乙酯	Y=0.7017X+0.0184, r^2=0.99987	0.475±0.011	1.056±0.021	0.223±0.012
仲丁醇	0.0037	0.002±0.001	n.d.	0.004±0.001
丁酸乙酯	Y=0.9670X+0.0041, r^2=0.99988	0.065±0.004	0.029±0.003	n.d.
正丙醇	0.0042	0.322±0.010	0.221±0.012	0.409±0.011
异丁醇	0.0141	0.198±0.014	0.343±0.019	0.116±0.012
正丁醇	0.0209	0.017±0.007	0.013±0.008	0.005±0.000
异戊醇	0.0424	0.539±0.024	0.814±0.031	0.515±0.017
己酸乙酯	Y=1.1231X+0.0275, r^2=0.99988	0.175±0.011	0.091±0.008	0.005±0.000
乳酸乙酯	Y=0.6060X-0.0083, r^2=0.99992	0.527±0.015	0.165±0.014	0.107±0.011
甲醇	Y=0.5818X+0.0135, r^2=0.99967	0.288±0.022	0.369±0.031	0.221±0.022
总酸	0.0011	0.730±0.050	0.750±0.020	0.120±0.020
总酯	0.0028	1.050±0.050	1.240±0.030	0.430±0.010

注: n.d.表示未检出; 己酸乙酯、乙酸乙酯、乳酸乙酯、丁酸乙酯检出限: 0.01 g/L, 定量限: 0.03 g/L; 甲醇检出限: 7.5 mg/L, 定量限: 25 mg/L。

由图 4(c)可知, 3 种酒样中酯类的含量均较高; 其中, XQ-G 的酯类含量最高(36.291±3.472 mg/L), G-YZ 的酯类含量最低(6.720±0.210 mg/L)。酯类通常呈现果香、花香和米香, 能够增加酒体的香气, 并有助于酒体形成浓郁丰富的风味[18,27]。如图 4(c)所示, XQ、XQ-G 比 G-YZ 的酯类含量高, 这可能与两种酒类的酿造工艺有关。小曲清香型白酒酿造采用先糖化后发酵的模式, 发酵菌种出来源于酿造酒曲以外, 还来源于酿造环境中自然存在的各类微生物, 开放式的发酵体系使菌种多样化增强, 产生的白酒香气也相对复杂[15,27]。液态发酵方式为限定的混合菌种, 菌种多样性较低, 其发酵酒的香气组分种类较为简单。从图 4(b)、(c)中可看出, XQ 和 XQ-G 的醇、酯和酸类等化合物的种类及含量均高于 G-YZ。呋喃化合物由 4 个碳和 1 个氮组成的杂环芳香族化合物, 因其沸点低、挥发性高等特点在酒体的呈香中起到关键作用, 呋喃类化合物能够贡献酒体的“甜香”和“烘烤香”[18,28]。XQ-G 的呋喃类化合物含量是 XQ、G-YZ 的 1.79、4.08 倍; 其中, XQ-G 的 3-糠醛含量为(0.04±0.005) mg/L, 5-甲基呋喃醛含量为(0.127±0.016) mg/L。综上表明, 在发酵白酒的酿造过程中, 通过加入适量的果渣, 能够有效提升酒体中呋喃类化合物的含量, 从而增强酒体香气的丰富性与层次感, 还可能赋予酒体更加细腻优雅的风味特征, 提升酒体的整体品质。

2.3.2　挥发性组分的 PCA 和 PLS-DA 分析

为了更直观地分析 XQ、XQ-G 和 G-YZ 等样品挥发性组分之间的差异, 绘制了样品的 PCA 图。如图 5(a)所示, PCA 的第一主成分(PC1)的方差贡献率为 63.1%, 第二主成分(PC2)方差贡献率为 32.0%, 累计的方差贡献率达到 95.1%, 表明 PC1 和 PC2 可以反映酒样中的大部分挥发性组分信息。另外, 不同样品间分散明显, 无明显交叉, 表明 PCA 可以把不同样品的挥发性组分区分开来, 不同发酵方式和酿造原料的酒样风味存在明显差异, 表明酿造工艺是影响 3 种酒样特征挥发性组分差异的重要因素。将 3 种酒样的挥发性化合物含量作为 Y 变量进行 PLS-DA 建模, 用 Q^2 表示模型的预测能力, R^2 和 Q^2 的越靠近 1.0, 表明模型的拟合度越好。由图 5(b)可知, R^2X=0.949, Q^2=0.987, 其中 R^2X=0.949 表示该模型可以反映 94.9%的数据, 两者都接近于 1.0 表明该模型对数据有较好的解释度; 另外, XQ、XQ-G、G-YZ 分散在 3 个区域内, 3 种酒样在 PLS-DA 得分图中具有较好的区分度。



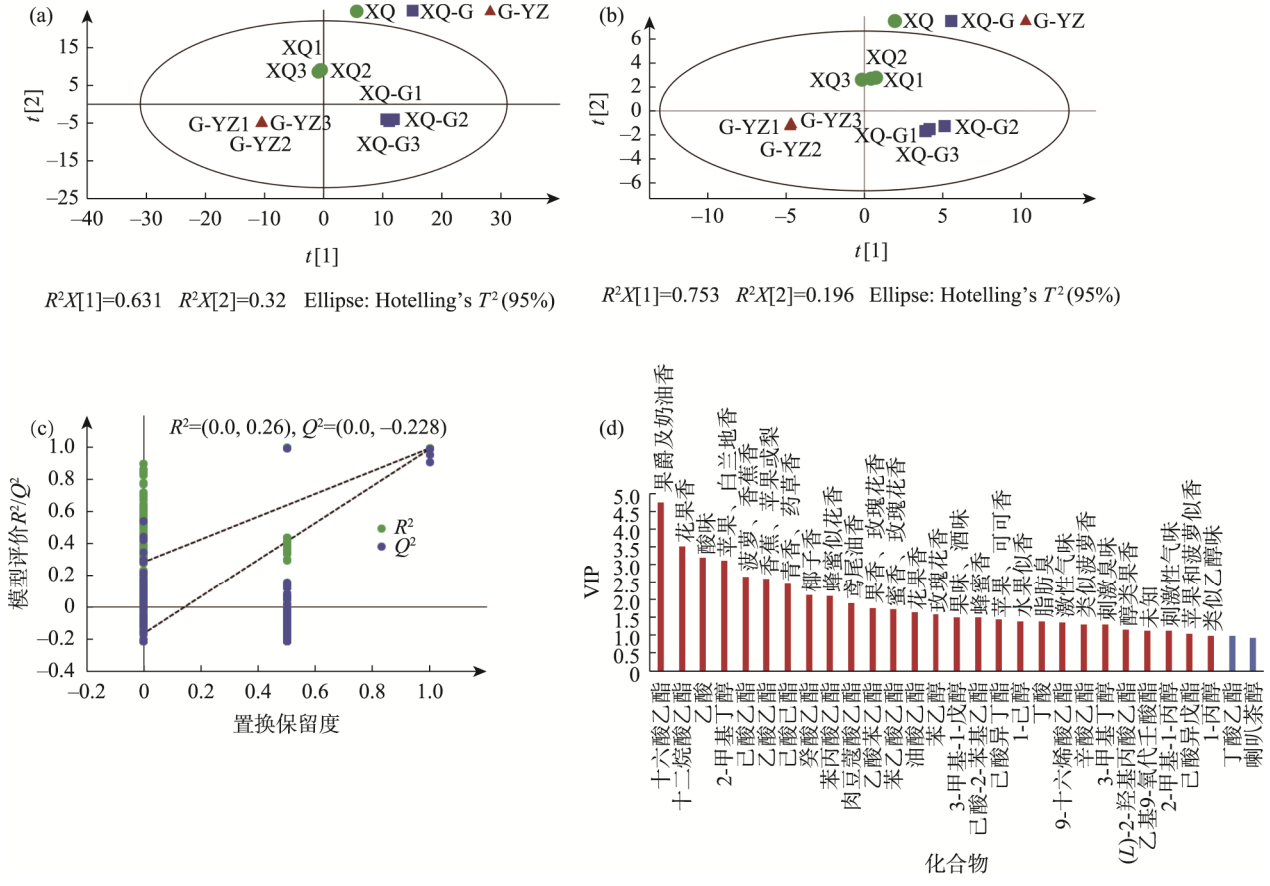
注: (a) 聚类分析; (b) 挥发性组分的种类; (c) 挥发性组分的含量。

图 4　对 3 种酒样挥发性组分的分类对比

Fig.4　Classification and comparison of volatile components in 3 kinds of samples

由图 5(c)可知，通过 200 次交叉置换检验以检测 PLS-DA 模型的可靠性，R^2 和 Q^2 均小于 1.0 且 Q^2 小于 0.4，模型 Q^2 回归线与横坐标的截距是负值，表示该模型无过拟合且有效可靠。通过 PLS-DA 分析，每个挥发性化合物可以得出变量投影重要性(variable importance in projection, VIP)，VIP 越大，表明该变量在不同处理组间的差异越显著，通常 VIP>1 为常见的差异代谢物筛选标准。因此，通常认为 VIP>1 的挥发性化合物为该组样品的关键挥发性香气物质[7,28]。如图 5(d)所示，共筛选出十六烷酸乙酯、十二烷酸乙酯、乙酸等 27 种挥发性化合物(VIP>1)，表明这些挥发性组分在 3 种酒样间的差异具有统计学意义，可以作为 3 种酒样挥发性组分差异的关键性指标。VIP 最大的挥发性化合物是十六烷酸乙酯(VIP=4.75)，其在 QX、QX-G 和 G-YZ 中含量达到(1.399±0.209)~(13.296±1.982) mg/L。十六烷酸乙酯又称棕榈酸乙酯，具有微弱的蜡像和奶油香气，广泛存在于白酒和果酒中，可以增加酒体的醇厚感，并降低酒体的干涩感[29]。另外，VIP 较高的挥发性化合物还包括十二烷酸乙酯(VIP=3.51)、乙酸(VIP=3.21)、2-甲基丁醇(VIP=3.11)、己酸乙酯(VIP=2.67)、乙酸乙酯(VIP=2.60)、己酸己酯(VIP=2.45)等；其中，烷乙酯(月桂酸乙酯)具有轻微的花香和果香，癸酸乙酯呈椰子香，己酸乙酯具有类似菠萝、香蕉的香气，乙酸乙酯具有苹果和香蕉的水果香气，酯类多具有浓郁的水果香气，是酒体香气重要组成部分[17–18]。另外，2-甲基丁醇和正丙醇均具有类似乙醇的气味、苯乙醇具有清甜的玫瑰样花香，这些醇类是酒体中重要的风味物质[19,30]。白酒中的醇香主要由正丁醇、正丙醇、庚醇等醇类物质提供，这些醇类物质是白酒“醇和甘滑”等风格特点的体现，适当的醇类物质能赋予酒体特殊的风味[19,31]。

综上表明，在检测的各类挥发性化合物中，VIP>1 的 27 种化合物在 3 种酒样中呈现出统计学上的显著差异，表明它们可能是区分 3 种酒样风味特征差异的关键标志性成分。



注：(a) PCA；(b) PLS-DA；(c) 交叉置换检验；(d) VIP。

图 5 3 种样品挥发性组分的 PCA 和 PLS-DA

Fig.5 PCA and PLS-DA of VOCs in 3 kinds of samples

3 结 论

本研究采用高粱和猕猴桃果渣为原料，借鉴小曲清香型白酒酿造工艺进行混合发酵以酿造新型蒸馏据，并结合感官品评、电子鼻、GC-FID 和 HS-SPME-GC-MS 解析猕猴桃果渣混合发酵酒的挥发性特征组分及其差异。结果

表明, XQ-G 具有传统小曲清香型白酒的风味感官, 并具有愉悦的猕猴桃果香气, 表明 XQ-G 具有实际生产的可行性和潜在市场价值; XQ-G 在 W1S、W5S 传感器在检测多种风味成分时表现出显著的响应特性, 尤其对氮氧化合物以及甲基类有机化合物具有最高的灵敏度与响应强度; GC-FID 检测表明 XQ-G 中乙酸乙酯的含量明显区别于其他两种发酵酒, HS-SPME-GC-MS 检测表明 XQ、XQ-G、G-YZ 等酒样的挥发性组分存在明显差异; 另外, 结合 PLS-DA 模型的 VIP 分析筛选出十六烷酸乙酯、十二烷酸乙酯、乙酸、癸酸乙酯等 27 种具有显著差异性的关键化合物(VIP>1), 这些物质对猕猴桃果渣混合发酵酒的风味特征具有突出贡献, 可作为构成其独特香气和口感的关键化合物。本研究有利于开拓果渣的利用途径、提高果渣的利用效率, 在果渣资源化利用方面具有重要的经济和环保意义; 另外, 本研究明晰了猕猴桃果渣混合发酵酒的风味特征, 为蒸馏酒的新产品开发和果渣的综合利用提供参考。后续研究方向可集中在酿造工艺优化和功能成分开发等方面, 如猕猴桃果渣添加量的优化、酒体感官风味与功能成分的关联分析等。

参考文献

[1] 熊双. 猕猴桃复合酒的制作工艺优化及品质变化分析[D]. 重庆: 重庆三峡学院, 2025, 1–2.
Xiong Shuang. Optimization of the production process of kiwi fruit compound wine and analysis of quality changes [D]. Chongqing: Chongqing Three Gorges University, 2025, 1–2.

[2] Zhang Qian, Ma Yuyan, Wan Fang, et al. Comprehensive comparison of flavor and metabolomic profiles in kiwi wine fermented by kiwifruit flesh with different colors [J]. LWT-Food Sciene and Technology, 2024(208): 116719.

[3] Aires A, Carvalho R. Kiwi fruit residues from industry processing: study for a maximum phenolic recovery yield [J]. Journal of Food Science and Technology-Mysore, 2020, 57(11): 4265–4276.

[4] Kosya A, Denaxa K N, Tsafouros A, et al. Physical, organoleptic, and phytochemical valuation of the promising greek kiwifruit genotype arta kiwifruit [J]. Horticulturae, 2023, 9(12): 1276–1276.

[5] Arvanitoyannis I S, Varzakas T H. Fruit/fruit juice waste management: treatment methods and potential uses of treated waste. In waste management for the food industries [M]. Academic Press, 2008, 569–628.

[6] Li Shiqi, Bi Pengfei, Sun Nan, et al. Characterization of different non-saccharomyces yeasts via mono-fermentation to produce polyphenol-enriched and fragrant kiwi wine [J]. Food Microbiology, 2022(103): 103867.

[7] Cheng Wei, Yu Jin, Li Na, et al. Machine-learning discrimination and prediction of flavor in Qingxiang-Xing Baijiu fermented with kiwi fruit residue [J]. Journal of the American Society of Brewing Chemists, 2025, 83(4): 511–523.

[8] Wang Guangnan, Song Xuebo, Zhu Lin, et al. A flavoromics strategy for the differentiation of different types of baijiu according to the non-volatile organic acids [J]. Food Chemistry, 2022, 374: 131641.

[9] Chen Hao, Wu Yashuai, Wang Junshan, et al. Uncover the flavor code of roasted sesame for sesame flavor baijiu: advance on the revelation of aroma compounds in sesame flavor baijiu by means of modern separation technology and molecular sensory evaluation [J]. Foods, 2021, 11: 998.

[10] Mu Xiaoqing, Lu Jun, Gao Mengxin, et al. Optimization and validation of a headspace solid-phase microextraction with comprehensive two-dimensional gas chromatography time-of-flight mass spectrometric detection for quantification of trace aroma compounds in Chinese liquor (baijiu) [J]. Molecules, 2021, 26: 6910.

[11] 潘天全, 程伟, 张杰, 等. 安琪根霉曲在小曲清香型白酒酿造生产中的应用分析与探讨[J]. 酿酒科技, 2019, 10: 116–123.
Pan Tianquan, Cheng Wei, Zhang Jie, et al. Analysis and discussion on the application of angelus rhizomatis mold fermentation in the production of light-aroma type baijiu [J]. Brewing Technology, 2019, 10: 116–123.

[12] Lan Wei, Cheng Wei, Shen Nana, et al. Advance in brewing process, flavour detection technologies and functional components of fruit wine: a review [J]. International Journal of Food Engineering, 2025, 21(7): 463–474.

[13] Jagtap U B, Bapat V A. Wines from fruits other than grapes: current status and future prospectus [J]. Food Bioscience, 2015, 9: 80–96.

[14] 李建芳, 余鸿飞, 丁慧, 等. 基于响应面法优化猕猴桃白兰地酿造工艺[J]. 中国酿造, 2022, 41(8): 206–211.
Li Jianfang, Yu Hongfei, Ding Hui, et al. Optimization of kiwifruit brandy brewing process based on response surface methodology [J]. Chinese Brewing, 2022, 41(8): 206–211.

[15] 王典芳, 唐维媛, 朱强, 等. 基于电子鼻和气相色谱-质谱对多轮次酱香型白酒酱香、醇甜典型体的差异性分析[J]. 食品工业科技, 2025, 46(18): 332–344.
Wang Dianfang, Tang Weiyuan, Zhu Qiang, et al. Difference analysis of jiangxiang, chuntian typical bodies in multiple rounds sauce-flavor baijiu based on electronic nose and gas chromatography-mass spectrometry [J]. Science and Technology of Food Industry, 2025, 46(18): 332–344.

[16] Vandendool H, Kratz P D. A generalization of the retention index system including linear temperature programmed gas-liquid partition chromatography [J]. Journal of Chromatography A, 1963, 11: 463–471.

[17] Xu Youqiang, Zhao Jingrong, Liu Xiao, et al. Flavor mystery of Chinese traditional fermented baijiu: the great contribution of ester compounds [J]. Food Chemistry, 2022, 369: 130920.

[18] 孙宝国, 吴继红, 黄明泉, 等. 白酒风味化学研究进展[J]. 中国食品学报, 2015, 15(9): 1–8.
Sun Baoguo, Wu Jihong, Huang Mingquan, et al. Advances in flavour chemistry of baijiu [J]. Chinese Journal of Food Science, 2015, 15(9): 1–8.

[19] 徐佳. 桑葚酒酿酒酵母中高级醇及乙酸乙酯代谢途径的基因改造研究[D]. 自贡: 四川轻化工大学, 2021: 3–5.
Xu Jia. Research on genetic modification of metabolic pathways for higher alcohols and ethyl acetate in saponin wine yeast [D]. Zigong: Sichuan Light Chemical University, 2021: 3–5.

[20] 潘婉舒, 林晓芳, 杨小平, 等. 乳酸胁迫对 *Pichia kudriavzevii* 固态发酵特性的影响[J]. 食品工业科技, 2024, 45(4): 116–122.
Pan Wanshu, Lin Xiaofang, Yang Xiaoping, et al. Effects of lactic acid stress on the solid-state fermentation of *Pichia kudriavzevii* [J]. Science and Technology of Food Industry, 2024, 45(4): 116–122.

[21] 李庆, 刘勇, 杨家平, 等. 塔式蒸馏过程中乙醇与风味物质变化规律研

究[J]. 酿酒科技, 2024, 03: 47–52.
Li Qing, Liu Yong, Yang Jiaping, et al. Study on the Changes of ethanol and flavor compounds during tower distillation [J]. Brewing Technology, 2024, 3: 47–52.

[22] Jayani R S, Saxena S, Gupta R. Microbial pectinolytic enzymes: a review [J]. Process Biochemistry, 2005, 40(9): 2931-2944.

[23] Sharma N, Rathore M, Sharma M. Microbial pectinase: sources, characterization and applications [J]. Reviews in Environmental Science and Bio/Technology, 2013, 12(1): 45–60.

[24] Han Yingying, Wang Yan, Li Jie, et al. Evaluating the effect of bentonite, malic acid on pectin methyl esterase, methanol in fermented apple juice [J]. Journal of Food Composition and Analysis, 2022, 109: 104468.

[25] Miljić U, Puškaš V, Vučurović V. Investigation of technological approaches for reduction of methanol formation in plum wines [J]. Journal of the Institute of Brewing, 2016, 122(4): 635–643.

[26] 朱晴云, 程伟, 刘耕典, 等. 基于顶空气相色谱-离子迁移谱法解析不同质量等级金裕皖馥香白酒的挥发性组分差异[J]. 食品安全质量检测学报, 2025, 16(22): 307–316.
Zhu Qingyun, Cheng Wei, Liu Gengdian, et al. Analysis of the differences of volatile components in Jinyuwan Fuxiang Baijiu of differentquality grades based on headspace-gas chromatography-ion mobility spectrometry [J]. Journal of Food Safety & Quality, 2025, 16(22): 307–316.

[27] Cheng Wei, Li Na, Pan Tianquan, et al. Analysis and regulation of baijiu aroma-active compounds: integrating metabolomics, sensory genomics, and artificial intelligence [J]. Food Research International, 2026, 228: 118375.

[28] Huang Yixuan, Kao Caihua, Chen Binghui, et al. Development of a GC-MS/MS method coupled with HS-SPME-arrow for studying formation of furan and 10 derivatives in model systems and commercial foods [J]. Food Chemistry, 2022, 395(3): 1–10.

[29] 高嘉心. 来源于类芽孢杆菌属脂肪酶的克隆表达、酶学性质及其催化合成棕榈酸乙酯的研究[D]. 广州: 华南理工大学, 2018: 25–26.
Gao Jiaxin. Research on cloning, expression, enzymatic properties and catalytic synthesis of palmitic acid ethyl ester from lipase of bacillus-like bacteria [D]. Guangzhou: South China University of Technology, 2018: 25–26.

[30] 成婷, 苑帅, 张晓元, 等. 酿酒酵母异丁醇合成途径调控的研究进展[J]. 生物技术通报, 2023, 39(7): 80–90.
Cheng Ting, Yuan Shuai, Zhang Xiaoyuan et al. Research progress on the regulation of isobutanol synthesis pathway in wine yeast [J]. Biotechnology Bulletin, 2023, 39(7): 80–90.

[31] 梁敏华, 陈丽君, 李志溥, 等. 市售豉香型白酒品质及风味感官分析[J]. 食品安全质量检测学报, 2024, 15(3): 80–88.
Liang Minhua, Chen Lijun, Li Zhibo, et al. Quality and flavor sensory analysis of commercially available chi-flavored liquor [J]. Journal of Food Safety & Quality, 2024, 15(3): 80–88.

(责任编辑: 曹岱林 蔡世佳)