

白酒中挥发性香味成分分析

北京东西分析仪器有限公司 北京 100049

摘要：利用 GC-MS 3100 白酒直接进样，快速分析白酒中挥发性香味成分，NIST 标准谱库检索，共鉴定出 13 种组分，面积归一化法定量。

关键词：GC-MS 3100 白酒 挥发性成分

白酒是中国传统的蒸馏酒，为世界七大蒸馏酒之一。白酒的化学成分中 98% 是水和乙醇，1%~2% 是呈香味的微量组分。其中，微量成分决定了白酒的香型和风格^[1]。本文应用国产的 GC-MS 3100 对未知白酒样品进行挥发性成分的检测，NIST 标准库定性，面积归一化法计算相对含量，了解其香味组成。

1 分析仪器及条件

1.1 分析仪器

GC-MS 3100 气相色谱质谱联用仪（北京东西分析仪器有限公司生产）

白酒样品（客户提供）

1.2 分析条件

色谱条件：石英毛细管柱 DB-WAX（30m×0.25mm×0.25μm）；进样方式：不分流进样，45 秒开分流阀；进样量：1 μl；进样口温度：210℃；柱流量：1ml/min；柱箱温度：50℃保持 1min，10℃/min 升至 220℃，保持 3min。

质谱条件：EI 源；电子能量：70eV；离子源温度：200℃；接口温度：200℃；扫描方式：全扫描；质量范围：29~300amu；溶剂峰时间：4min。

2 实验结果及分析

白酒直接进样 GC-MS 测定，总离子流图见图 1。将各个色谱峰对应的质谱图进行 NIST 标准谱库检索。此白酒共鉴定出 13 种组分，其中主要组分有：己酸乙酯：61.55%，乳酸乙酯：10.22%，3-甲基-1-丁醇：6.03%，乙酸丁酯：3.36%；详细组分分析结果见表 1，部分组分质谱图及检索结果见附录。

白酒直接进样，主要成分乙醇应该是主峰。这里采用延时扫描的方法，进样 4min 后进行扫描，此时白酒中的主要成分乙醇已经过色谱柱，未进行检测。

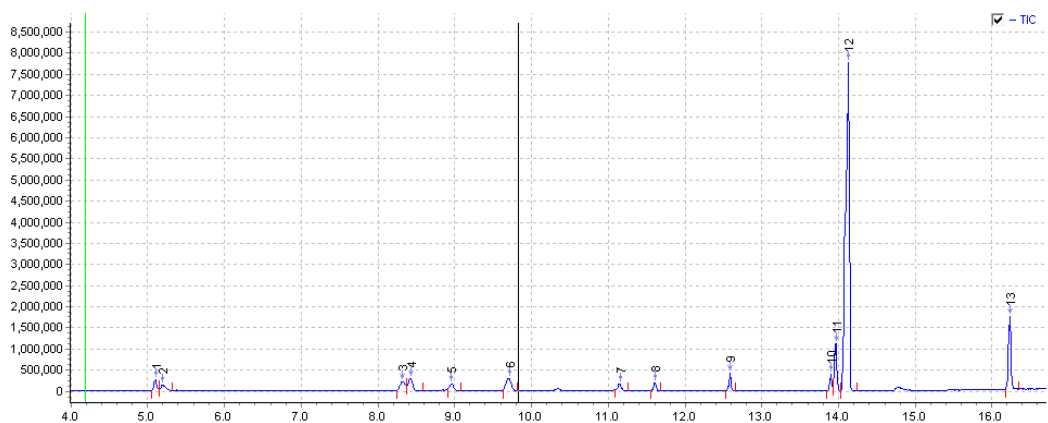


图 1 白酒 GC-MS 分析总离子流图

表 1 白酒组分分析结果

峰号	保留时间	名称	百分含量/%
1	5.10	Ethyl Acetate	1.73
2	5.19	Ethane, 1,1-diethoxy-	1.64
3	8.32	Butanoic acid, ethylester	2.57
4	8.42	2-Butanol	2.81
5	8.96	1-Propanol	1.22
6	9.71	Acetic acid, butylester	3.36
7	11.16	1-Propanol, 2-methyl-	1.11
8	11.61	Pentanoic acid, ethylester	1.21
9	12.59	Formic acid, butylester	2.04
10	13.90	1-Butanol, 2-methyl-	1.67
11	13.97	1-Butanol, 3-methyl-	6.03
12	14.13	Hexanoic acid, ethylester	61.55
13	16.23	Propanoic acid, 2-hydroxy-, ethyl ester	10.22

3 结论

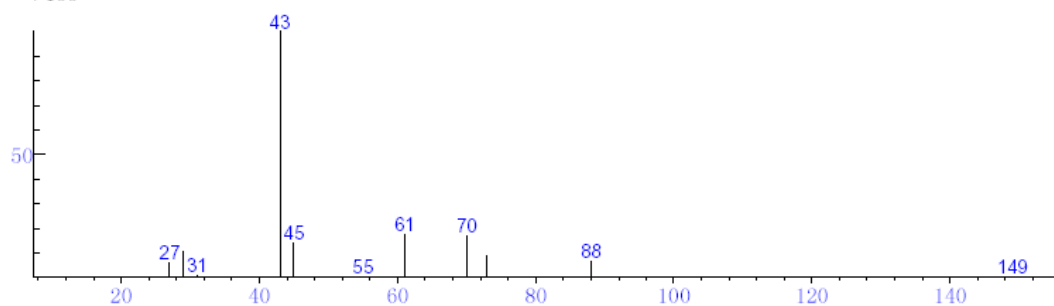
GC-MS 3100 可用于白酒直接进样，分析酒类除乙醇外的挥发性成分，可为酒类的滋味呈味成分和香气成分分析提供参考，也可了解酒类生产过程中成分的变化。

参考文献:

- [1] 胡朝阳, 裘路, 肖海涛. 气相色谱-质谱法测定白酒中的挥发性成分[J]. 贵阳医学院学报. 2010, 35 (4): 377-381.
- [2] 丁云连, 范文来, 徐岩, 等. 老白干香型白酒香气成分分析[J]. 酿酒. 2008, 35 (4): 109-113.

附录

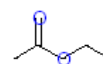
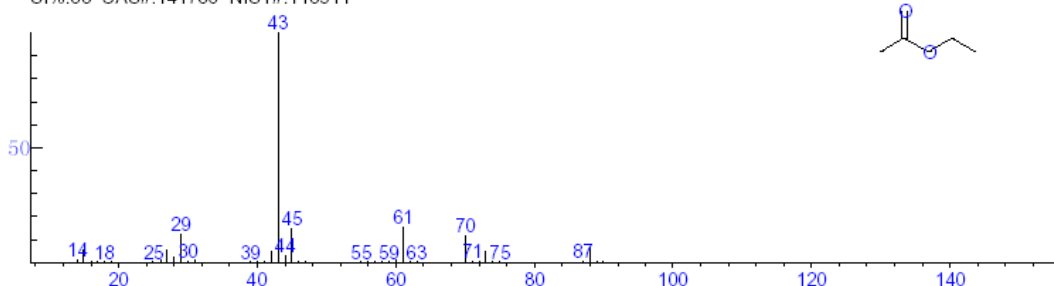
未知物1: 时间(分):5.09->5.11-5.04->5.06 基峰:m/z 42.9(126266) Peak:1 扫描点:192->194-186->188



Ethyl Acetate

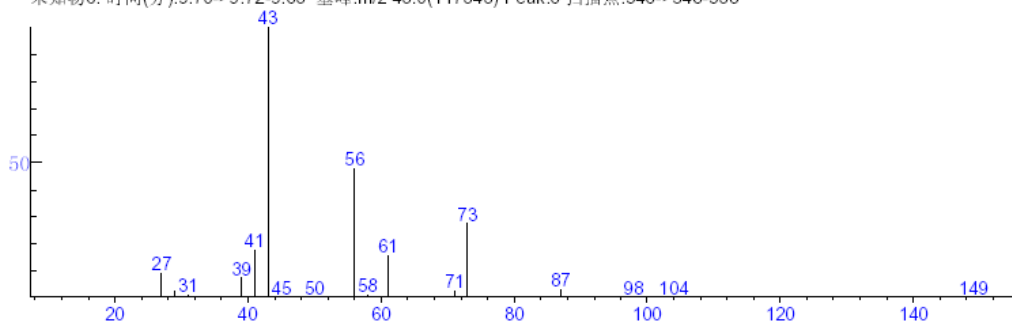
LibID:-1 分子式:C4H8O2 分子量:88 离子数量:41

SI%:88 CAS#:141786 NIST#:118511



附图 1 1号峰(乙酸乙酯)质谱图及检索结果

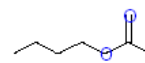
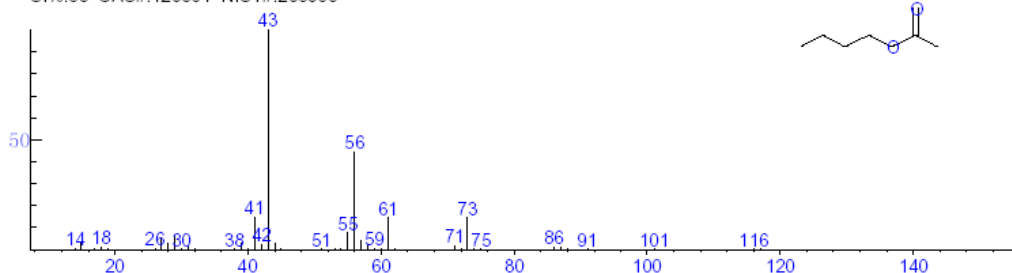
未知物6: 时间(分):9.70->9.72-9.63 基峰:m/z 43.0(117343) Peak:6 扫描点:546->548-538



Acetic acid, butyl ester

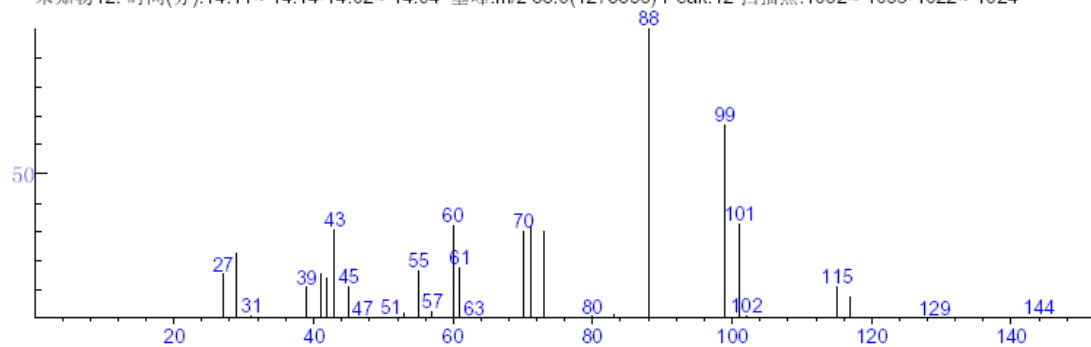
LibID:-1 分子式:C6H12O2 分子量:116 离子数量:43

SI%:85 CAS#:123864 NIST#:288563



附图 2 6号峰质谱图及检索结果

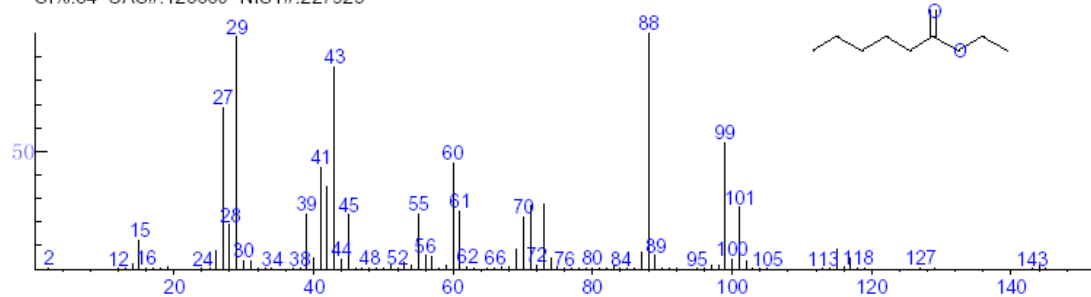
未知物12: 时间(分):14.11->14.14-14.02->14.04 基峰:m/z 88.0(127853) Peak:12 扫描点:1032->1035-1022->1024



Hexanoic acid, ethyl ester

LibID:-1 分子式:C₈H₁₆O₂ 分子量:144 离子数量:98

SI%:84 CAS#:123660 NIST#:227925



附图3 12号峰(己酸乙酯)质谱图及检索结果