



天津科技大学学报

Journal of Tianjin University of Science & Technology

ISSN 1672-6510, CN 12-1355/N

《天津科技大学学报》网络首发论文

题目：不同感官属性高温大曲的特征风味物质分析
作者：赵赟，何少帅，葛怀锐，袁林，李继齐，马立娟
DOI：10.13364/j.issn.1672-6510.20260010
收稿日期：2026-01-13
网络首发日期：2026-09-02
引用格式：赵赟，何少帅，葛怀锐，袁林，李继齐，马立娟. 不同感官属性高温大曲的特征风味物质分析[J/OL]. 天津科技大学学报.
<https://doi.org/10.13364/j.issn.1672-6510.20260010>



网络首发：在编辑部工作流程中，稿件从录用到出版要经历录用定稿、排版定稿、整期汇编定稿等阶段。录用定稿指内容已经确定，且通过同行评议、主编终审同意刊用的稿件。排版定稿指录用定稿按照期刊特定版式（包括网络呈现版式）排版后的稿件，可暂不确定出版年、卷、期和页码。整期汇编定稿指出版年、卷、期、页码均已确定的印刷或数字出版的整期汇编稿件。录用定稿网络首发稿件内容必须符合《出版管理条例》和《期刊出版管理规定》的有关规定；学术研究成果具有创新性、科学性和先进性，符合编辑部对刊文的录用要求，不存在学术不端行为及其他侵权行为；稿件内容应基本符合国家有关书刊编辑、出版的技术标准，正确使用和统一规范语言文字、符号、数字、外文字母、法定计量单位及地图标注等。为确保录用定稿网络首发的严肃性，录用定稿一经发布，不得修改论文题目、作者、机构名称和学术内容，只可基于编辑规范进行少量文字的修改。

出版确认：纸质期刊编辑部通过与《中国学术期刊（光盘版）》电子杂志社有限公司签约，在《中国学术期刊（网络版）》出版传播平台上创办与纸质期刊内容一致的网络版，以单篇或整期出版形式，在印刷出版之前刊发论文的录用定稿、排版定稿、整期汇编定稿。因为《中国学术期刊（网络版）》是国家新闻出版广电总局批准的网络连续型出版物（ISSN 2096-4188，CN 11-6037/Z），所以签约期刊的网络版上网络首发论文视为正式出版。



DOI: 10.13364/j.issn.1672-6510.20260010

不同感官属性高温大曲的特征风味物质分析

赵赞¹, 何少帅¹, 葛怀锐¹, 袁林¹, 李继齐², 马立娟¹

(1.天津科技大学生物工程学院, 工业发酵微生物教育部重点实验室, 天津 300457;

2.天津芦台春酿造有限公司, 天津 301500)

摘要：高温大曲发酵是一个开放过程，环境因素是导致高温大曲发酵时空异质性的主要原因之一，进而影响大曲的感官属性。本研究以 7 种不同感官属性的高温大曲为研究对象，采用顶空固相微萃取-气相色谱-质谱联用（HS-SPME-GC-MS）技术结合相对气味活度值（ROAV）分析其挥发性风味物质、重要香气物质、关键香气物质及特征香气物质，通过感官定量描述分析（QDA）描述其感官属性，并将关键风味物质与感官属性进行 Spearman 相关性分析。结果表明，7 种不同感官属性高温大曲中共检测出 152 种挥发性风味物质，其中共有 35 种重要挥发性风味物质 ($0 < \text{ROAV} < 1$)，32 种关键挥发性风味物质 ($\text{ROAV} > 1$) 和 14 种特征挥发性风味物质 ($\text{ROAV} > 10$)。相关性分析结果显示：焦香咖香、皮烟熏味、烟味与 4-甲基戊酸、二甲基三硫、糠醛呈显著正相关；虾味与吡嗪类物质呈正相关；沙糕香甜味与酯类化合物呈正相关，特别是与邻氨基苯甲酸甲酯和正壬酸呈显著正相关；霉味与柠檬醛、3-辛酮、2-壬酮、香叶醇、月桂烯呈正相关；腥味与正丁酸、2-壬酮呈正相关，推测其中与虾味和霉味呈正相关的物质很可能是作为呈味间接标志物。解析不同感官属性大曲的特征风味，可为大曲风味强化及其在白酒风味品质调控与提升中的应用提供科学参考。

关键词：高温大曲；挥发性风味成分；相对气味活度；感官属性；相关性

中图分类号：Q815；TS261

文献标志码：A

文章编号：1672-6510 (0000)00-0000-00

Analysis of Characteristic Flavor Compounds in High-Temperature Daqu with Different Sensory Attributes

ZHAO Yun¹, HE Shaoshuai¹, GE Huairui¹, YUAN Lin¹, LI Jiqi², MA Lijuan¹

(1. Key Laboratory of Industrial Fermentation Microbiology, Ministry of Education, Tianjin University of Science and Technology, Tianjin 300457, China; 2. Tianjin Lutaichun Brewing Co., Ltd., Tianjin 301500, China)

Abstract: High-temperature Daqu fermentation is an open process, and environmental factors are one of the main causes of spatial and temporal heterogeneity in high-temperature Daqu fermentation, which in turn affects the sensory attributes of Daqu. This study investigated seven types of high-temperature Daqu with different sensory attributes, using headspace solid-phase microextraction coupled with gas chromatography-mass spectrometry (HS-SPME-GC-MS) combined with relative odor activity values (ROAV) to analyze their volatile flavor compounds, important aroma compounds, key aroma compounds, and characteristic aroma compounds. Sensory attributes were described by quantitative descriptive analysis (QDA), and Spearman correlation analysis was performed between key flavor compounds and sensory attributes. The results showed that a total of 152 volatile flavor compounds were detected in the seven high-temperature Daqu samples with different sensory attributes, including 35 important volatile flavor compounds ($0 < \text{ROAV} < 1$), 32 key volatile flavor compounds ($\text{ROAV} > 1$), and 14 characteristic volatile flavor compounds ($\text{ROAV} > 10$). Correlation analysis revealed that

收稿日期：2026-01-13；修回日期：2026-03-30

基金项目：天津市重点研发计划项目（22YFZCSN00240）

作者简介：赵赞(1999—)，男，四川达州人，硕士研究生；通信作者：马立娟，教授，malj@tust.edu.cn

burnt coffee aroma, leather smoky odor, and smoky odor were significantly positively correlated with 4-methylpentanoic acid, dimethyl trisulfide, and furfural; shrimp odor was positively correlated with pyrazine compounds; sandy cake sweetness was positively correlated with ester compounds, particularly significantly positively correlated with methyl anthranilate and nonanoic acid; musty odor was positively correlated with citral, 3-octanone, 2-nonanone, geraniol, and myrcene; fishy odor was positively correlated with butyric acid and 2-nonanone. It is speculated that the compounds positively correlated with shrimp odor and musty odor are likely indirect flavor markers. Analyzing the characteristic flavors of Daqu with different sensory attributes can provide scientific references for flavor enhancement of Daqu and its application in the regulation and improvement of Baijiu flavor quality.

Key word: high-temperature Daqu; volatile flavor components; relative odor activity value; sensory attributes; correlation

大曲是以小麦、大麦和豌豆等谷物为原料,经粉碎、制坯、自然发酵而制成,是白酒酿造的糖化发酵剂、生香剂和部分原料来源,为酿酒过程提供重要的菌系、酶系和香气化合物及其前体物质^[1]。大曲中的风味成分能够直接或间接进入酒体,是白酒风味的重要组成部分,影响酒体风格特征的形成^[2],因此其质量与白酒品质密切相关^[3]。高温大曲通常是指以纯小麦为原料,经 40~50 d 堆积发酵、6 个月以上贮存而制成的糖化发酵剂和生香剂,其发酵过程中最高品温可达 60~70℃,高温环境下定向富集独特的嗜热微生物群落,诱导美拉德反应的发生,进而形成独特的风味,是酱香型白酒香气成分的主要来源之一^[4]。

目前,对于高温大曲中的风味物质分析、形成机制及其对酱香型白酒风味影响研究已有相关报道^[5]。李建勋等^[6]研究发现,高温大曲中的风味物质主要以吡嗪类、糠醛、酚类、酯类物质等为主,鉴定出 29 种对高温大曲风味品质起重要作用的关键香气活性化合物。Zhu 等^[7]和 Li 等^[8]分别揭示了四甲基吡嗪是高温大曲和酱香型白酒的关键香气化合物,其合成与温度驱动的微生物组装密切相关。Chen 等^[9]和 Luo 等^[10]发现,大曲中的风味物质(特别是吡嗪类)在白酒酿造过程中可迁移至基酒中,贡献独特的酱香、焦香和烘焙香气。此外,在传统堆积发酵过程中由于曲房不同位置环境条件的差异造成了发酵过程曲培温度、水分等变化规律不同,最终形成黑、白、黄 3 种颜色的高温大曲曲块。Cai 等^[11]利用电子舌和电子鼻对 3 种颜色高温大曲的感官和风味特征进行研究,发现白曲和黑曲的感官特征以酸味、苦味、涩味为主,黄曲的感官特征以咸味、鲜味为主;黑曲中富集甲烷脂肪族、氢和芳香族化合物,白曲和黄曲中富集甲烷、醇类、酮类、氮氧化物和含硫有机化合物。研究^[12]发现,黄曲和黑曲中挥发性物质总量及吡嗪类物质的相对含量

高于白曲,提示了它们在酿造中对酱酒风味的重要贡献,但在酱香型白酒生产中对 3 种大曲的使用多依靠经验。上述研究虽然对不同颜色大曲的风味物质进行了研究,但对于驱动不同感官属性,特别是不同香气属性大曲形成的具体风味物质尚需进一步研究。

本研究以不同感官属性的高温大曲为研究对象,通过感官定量描述分析(quantitative descriptive analysis, QDA)法分析其感官品质;采用顶空固相微萃取-气相色谱-质谱联用(HS-SPME-GC-MS)技术分析挥发性风味物质,并采用相对气味活度值(relative odor activity value, ROAV)确定其关键呈香物质(ROAV>1);对挥发性风味成分与感官评价进行 Spearman 相关性分析,旨在解析不同感官属性大曲的特征风味物质,为大曲风味强化及调控提供科学参考。

1 材料与方法

1.1 材料

1.1.1 实验原料

样品来源:天津市某酱香型酒厂获得 2024 年制备的高温大曲,是相同发酵条件下 3 个曲房中发酵结束时的大曲样品。

取样方法:在高温大曲发酵完成后,分别从每个曲房中大曲堆的上中下三层按照五点取样法^[13]抽取 5 块大曲砖(图 1)。将每个曲房中取出的大曲砖粉碎、均匀混合,获得 3 个大曲粉样品 M1、M2 和 M3,用于感官分析,以获得大曲风味感官描述词。

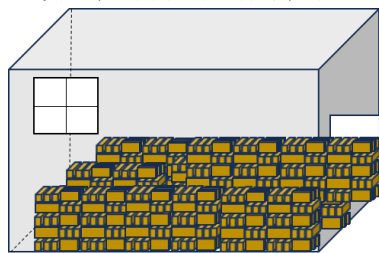


图1 曲房曲块布局

Fig. 1 Arrangement of Qu blocks in the Qu fermentation room

不同香气属性大曲样品的获取:选取上述3个曲房发酵完成时具有不同香气属性的大曲样品,分别粉碎、混合均匀后,每种香气属性的曲粉取3份,分别用于感官品评和风味物质分析。

1.1.2 试剂与仪器

无水乙醇(色谱纯)、超纯水, ThermoFisher Scientific 公司;乙酸戊酯(色谱纯)、2-乙基丁酸(色谱纯)、2-辛醇(色谱纯),美国 Sigma-Aldrich 公司;其他试剂均为国产分析纯。

AB204-S 型分析天平,北京赛多利斯天平有限公司;7890A-5975C 型气相色谱质谱联用仪、DB Wax 毛细管色谱柱(60 m×0.25 mm×0.50 μm),安捷伦科技(中国)有限公司;50/30 μm DVB/CAR/PDMS 型萃取头,上海安谱实验科技股份有限公司。

1.2 实验方法

1.2.1 挥发性风味成分的测定

采用 HS-SPME-GC-MS 法^[14]并稍作修改,测定挥发性风味成分。将2 g 大曲样品置于15 mL 顶空瓶中,加入0.5 g 氯化钠、10 μL 混合内标(2-乙基丁酸 920 mg/L, 乙酸戊酯 876 mg/L, 2-辛醇 822 mg/L),加密封垫密封。将顶空瓶置于60 °C 水浴中平衡10 min 后,插入50/30 μm DVB/CAR/PDMS 萃取头萃取60 min,萃取结束后,在250 °C 的气相色谱(GC)进样口解析5 min,大曲样品重复测定3次。

色谱条件:安捷伦 7890A-5975C 型气相色谱质谱联用仪,色谱柱为 DB WAX (60 m×0.25 mm×0.50 μm),升温程序为:起始温度50 °C 保持3 min,以3 °C/min 升至100 °C 并保持2 min,以1 °C/min 升至120 °C 并保持3 min,以3 °C/min 升至160 °C 并保持3 min,最后以8 °C/min 升至230 °C 并保持6 min。

质谱条件:进样口温度250 °C,电子碰撞模式(EI)为70 eV,离子源温度230 °C,四极杆温度

150 °C,溶剂延迟5 min,质谱信号采集模式为全扫描,质量范围设置为20~550 u。

挥发性物质定性定量分析:利用美国国家标准技术研究所(National Institute of Standards and Technology, NIST)谱库检索得到各峰对应的物质。采用内标法计算化合物的含量。

1.2.2 相对气味活度值

采用相对气味活度值(ROAV,用符号 w_{ROAV} 表示)对各香气成分的风味贡献度进行评价,确定关键风味物质。ROAV 按照式(1)计算。

$$w_{ROAV} = \frac{C_i}{C_{\max}} \times \frac{T_{\max}}{T_i} \times 100 \quad (1)$$

式中: C_i 、 T_i 为各香气成分的相对含量(%)、感觉阈值(μg/kg); $C_{\max}$ 、 $T_{\max}$ 为对大曲香气贡献最大的香气成分所对应的相对含量(%)、感觉阈值(μg/kg)。感觉阈值通过 <https://www.vcf-online.nl/VcfHome.cfm> 网站检索,且均采用在空气介质中测定所得。当 $0.1 < ROAV < 1$ 时,表明其对样品风味有修饰作用,是重要香气化合物; $ROAV > 1$ 的化合物被认为对样品风味有贡献,为关键香气物质; $ROAV > 10$ 的化合物被认为是特征香气物质^[15]。

1.2.3 感官定量描述分析

根据 GB/T 16291.1—2012《感官分析选拔、培训与管理评价员一般导则第1部分:优选评价员》的要求,从天津市某酒厂挑选专业感官品评员(5名男性和5名女性),采用 QDA 法,对大曲样品进行感官评价。取5.00 g 均匀混合 M1、M2、M3 的样品,置于20 mL 小瓶中,直接用于嗅觉测试,获得统一感官描述词。参考 Yang 等^[16]的方法,对所有评价中感官特征描述符的提及次数和强度进行统计,根据式(2)计算描述符的贡献值(M)。

$$M = \sqrt{F \times I} \quad (2)$$

式中: F 为描述符被提及的次数与描述符的所有可能提及的总数的比率, I 为感官评价小组分配给描述符的实际强度之和除以该描述符的最大可能强度。具有较大 M 的描述符指示描述符对样本的贡献更显著。 M 值越大,代表该描述语对样品感官的贡献度越高。

按香气特点分类对不同香气属性大曲样品进行五点标度法打分,每种香气属性的大曲曲粉进行3次平行实验。取5.00 g 样品,置于20 mL 小瓶中,

直接用于嗅觉测试感官评价, 取平均值。

1.3 数据处理

利用 Excel 2019、SIMCA-P 13、IBM SPSS Statistics 25.0 等统计软件进行数据处理和分析, 利用 Originpro2021、Excel2019 和网站 <https://hiplot.com.cn/> 进行作图。

2 结果与分析

2.1 不同香气特点大曲感官评价

根据品评小组对 M1、M2、M3 混合样品嗅闻结果和通过删除定量术语、合并同义词和反义词等得到大曲风味感官描述词, 参照 GB/T 33405-2016

《白酒感官品评术语》并讨论后, 得到 12 个感官描述词 (表 1)。删除 $M < 0.5$ 的描述符 (苦杏仁味、泥土味、盐菜味、汗臭味), 选取 $M > 0.5$ 的感官描述符, 其中感官小组讨论后认为焦香、咖香常同时出现、描述同一感知维度, 将其合并归类成 7 个大类描述词: “焦香咖香” 指有烤焦、咖啡的气味, “皮烟熏味” 指皮革、烟熏、坚果的气味, “沙糕香甜” 指沙糕类糕点、香甜气味; “虾味” 指类似于虾的气味; “腥味” 指发腥的气味; “霉味” 指食物发霉的气味; “烟味” 指类似烟草、食物烘培的气味。按香气分类对不同香气属性大曲样品进行五点标度法打分, 参考筛选大曲风味感官描述词用于后续感官评价。

表 1 品评小组培训期间生成的描述词及其贡献值

Tab. 1 Descriptive terms generated during sensory panel training and their corresponding M-values

描述词	<i>F</i>	<i>I</i>	<i>M</i>
焦香	0.80	0.84	0.82
咖香	0.70	0.62	0.66
皮烟熏味	0.70	0.72	0.71
沙糕香甜	0.70	0.68	0.69
虾味	0.80	0.64	0.72
腥味	0.60	0.68	0.64
烟味	0.80	0.76	0.78
霉味	0.60	0.56	0.58
苦杏仁味	0.40	0.42	0.41

泥土味	0.30	0.36	0.33
盐菜味	0.40	0.40	0.40
汗臭味	0.40	0.34	0.37

对选取出的具有明显香气属性的 7 种不同大曲曲粉进行感官评价, 结果如图 2 所示。由图 2 可知, 高温大曲风味感官属性丰富, 涉及多个风味层次: HT1 主要表现为焦香咖香, HT2 为皮烟熏味, HT3 为沙糕香甜, HT4 为虾味, HT5 为腥味, HT6 为烟味, HT7 为霉味; 其中, HT1、HT2、HT6 风味特征较为相似, 主要集中在焦香咖香, 皮烟熏味与烟味, 它们的得分均高于 3.5 分。此外, 各种香气特征的大曲样品风味属性具有显著差异。

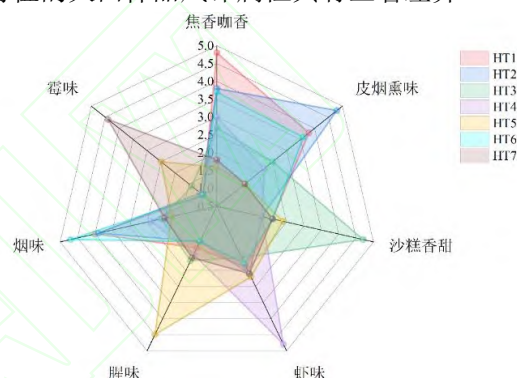


图 27 种高温大曲样品感官评价雷达图

Fig. 2 Radar chart of sensory evaluation for seven high-temperature Daqu samples

2.2 不同感官属性大曲风味物质分析

采用 HS-SPME-GC-MS 对 7 种不同感官属性大曲中挥发性风味化合物进行定性定量分析, 结果如图 3 所示。由图 3 (a) 和 (b) 可知, 7 种不同感官属性大曲样品中共检测出 152 种挥发性风味物质, 其中酸类物质 14 种、醇类物质 20 种、酯类物质 14 种、醛类物质 22 种、酮类物质 17 种、酚类物质 5 种、吡嗪类物质 13 种、烯烃类物质 27 种、其他类物质 20 种。HT1、HT2、HT3、HT4、HT5、HT6、HT7 独有的风味物质分别为 9 种、2 种、10 种、5 种、3 种、4 种、21 种, 表明各大曲样品风味物质种类丰富且样品之间存在显著差异。

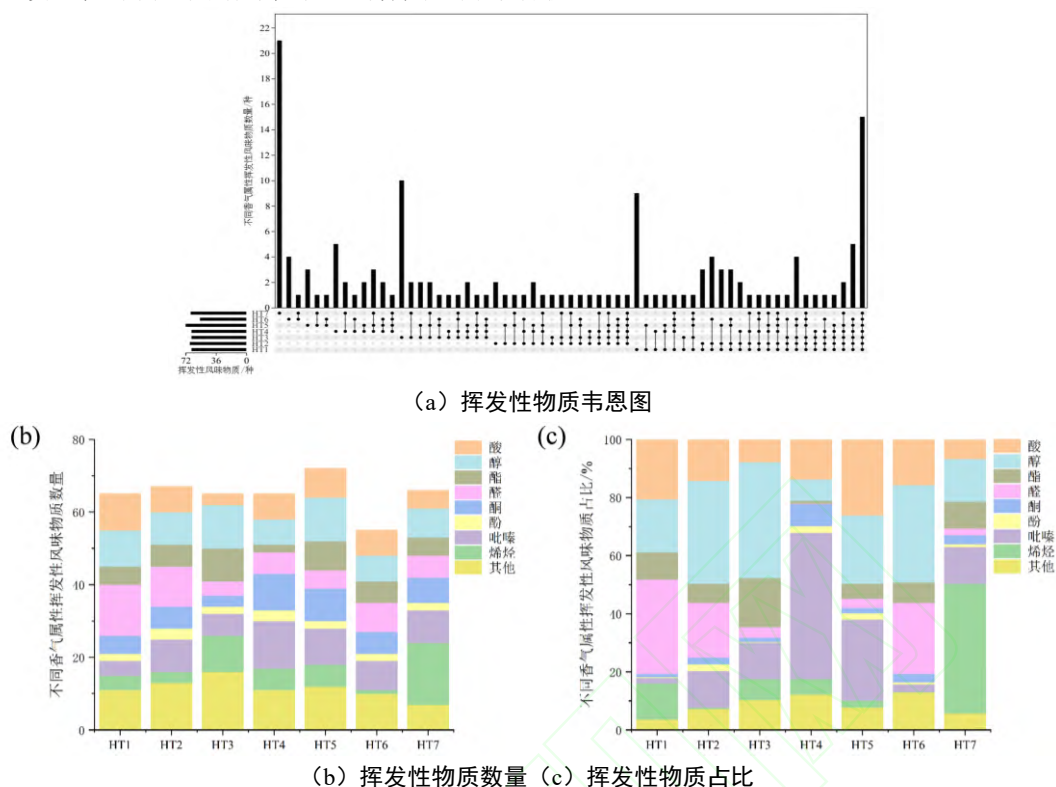


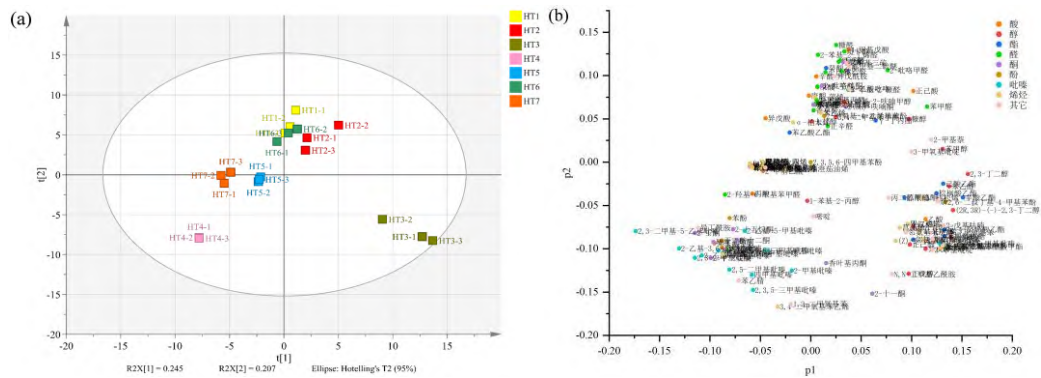
图 3 不同感官属性大曲挥发性物质韦恩图、挥发性物质数量、挥发性物质占比

Fig. 3 Venn diagram, number, and percentage content of volatile compounds in Daqu with different sensory attributes

由图 3 (c) 可知, HT1、HT2 和 HT6 样品中醛类物质含量占比较高, 分别达到了 32.37%、18.90% 和 24.31%, 远高于其他样品。醛类物质中的糠醛通常会被描述为焦香、坚果香^[17], 这可能是这 3 种样品的焦香咖香属性贡献值较高的原因, 与 HT1、HT2、HT6 在感官评价得分较为相似的结果一致。吡嗪类物质通常具有烤香、烟熏等风味, 能够增强酱香型白酒的复杂香气层次^[18]。HT4 样品中吡嗪类物质的数量最多, 共 14 种, 占整体风味物质含量的 50.27%。吡嗪类化合物通常呈现烘烤香、坚果香、焦香, 本身不直接产生“虾味”。由于这类化合物也是虾类等水产品特征香气的重要组成部分之一, 因此推测对 HT4 样品呈“虾味”可能源于多类化合物的协同作用。有研究表明吡嗪类化合物可增强鲜味的感知, 例如 Wang 等^[19]通过分子对接和动力学模拟发现, 吡嗪类化合物能降低鲜味配体 (如谷

氨酸) 与 T1R1/T1R3 受体的结合自由能, 从而增强鲜味信号。醇类物质是酵母代谢产生的主要挥发性物质之一, 能够为大曲提供花香与果香风味; 酯类物质是高温大曲中一类重要的挥发性化合物^[20], 种类最多, 其中己酸乙酯、辛酸乙酯、棕榈酸乙酯在大曲发酵过程中含量较高。乙酯是形成白酒典型风味特征的关键化合物之一, 对白酒的整体风味平衡和层次感起着至关重要的作用^[21]。HT3 中醇、酯占比较高, 其中酯类物质含量为 16.80%, 醇类物质含量达到 39.96%, 这可能是 HT3 样品呈“沙糕香甜”香气特征的主要原因。HT7 中烯炔类物质的数量最多, 共 17 种, 其含量占整体风味的 44.57%, 与其他样品有着显著差异。

基于 7 种不同感官属性大曲中挥发性成分的主成分分析得分图与载荷图如图 4 所示。



(a) 主成分分析得分图 (b) 载荷图
图 4 基于 7 种不同感官属性大曲中挥发性成分的主成分分析得分图与载荷图

Fig. 4Principal component analysis score plotand loading plot of volatile compounds in Daqu based on seven different sensory attributes

由图 4 (a) 可知, PCA 可以将不同感官属性的高温大曲区分开, 其中 HT1、HT2、HT6 分布较为集中, 表明其在挥发性风味物质上较为相似, 其感官评价为焦香咖香、皮烟熏味、烟味; HT5 与 HT7 两者均在二三象限交接处, 但两者挥发性风味成分仍有差异, 其感官评价为腥味与霉味; HT3、HT4 则分布在第四象限与第三象限, 与其他组相距较远, 表明在挥发性风味物质组成上具有较大差异, 其感官评价分别为沙糕香甜味与虾味。由图 4 (b) 可知, 吡嗪类、醛类、醇类物质是导致各个香气属性的大曲差异的原因, 因此需进一步确定不同感官

属性大曲中的关键风味物质。
2.3 不同感官属性大曲关键风味物质的确定

选取 7 种不同感官属性大曲样品检出的挥发性风味物质中相对含量>0.1%的风味物质, 检索到有阈值的挥发性风味物质共 67 种, 其中酸类物质 11 种、醇类物质 11 种、酯类物质 7 种、醛类物质 9 种、酮类物质 5 种、酚类物质 2 种、吡嗪类物质 10 种、烯炔类物质 7 种、其他类物质 5 种。基于相对气味活度值筛选 7 种不同感官属性高温大曲样品中的重要香气物质、关键香气物质及特征香气物质, 结果见表 2。

表 2 基于相对气味活度值筛选 7 种高温大曲中重要香气物质、关键香气物质及特征香气物质

Tab. 2 Identification of important, key and characteristic aroma compounds in seven types of high-temperature Daqu based on relative odor activity values

化合物名称		阈值/ (μg/kg)	相对含量/%(ROAV)						
			HT1	HT2	HT3	HT4	HT5	HT6	HT7
类别	乙酸	42229.73	3.46(0.00)	4.96(0.01)	3.33(0.04)	1.86(0.02)	6.51 (0.02)	5.02(0.04)	1.44(0.02)
	甲酸	29560.81	1.07(0.00)	—	—	—	—	—	—
	丙酸	11908.78	0.12(0.00)	0.16(0.00)	—	0.37(0.01)	1.84(0.02)	—	0.09(0.00)
	异丁酸	5000.00	0.57(0.01)	0.82(0.02)	0.33(0.03)	6.80(0.63)	8.06(0.26)	0.77(0.05)	1.84(0.22)
	正丁酸*	16.00	—	—	—	0.74(21.45)	1.15(11.43)	—	—
	异戊酸*	540.00	3.03(0.26)	4.60(0.81)	—	3.68(3.18)	3.71(1.10)	7.94(4.94)	0.80(0.88)
	2-甲基己酸	55000.00	—	—	—	—	4.16(0.01)	—	1.26(0.01)
	4-甲基戊酸*	337.84	0.63(0.09)	0.80(0.23)	—	—	—	1.06(1.06)	—
	正己酸*	422.30	2.22(0.24)	0.83(0.19)	0.87(0.96)	—	0.25(0.09)	2.02(1.61)	—
	庚酸	2533.78	0.23(0.00)	—	—	0.01(0.00)	—	—	—
醇 (11)	正壬酸*	101.35	0.36(0.17)	1.20(1.13)	—	—	6.51(0.02)	—	—
	异戊醇	2111.49	0.99(0.02)	1.07(0.05)	2.73(0.60)	0.54(0.12)	0.62(0.05)	—	0.44(0.12)
	正戊醇	9290.54	0.26(0.00)	0.46(0.00)	1.71(0.09)	0.42(0.02)	0.28(0.00)	0.47(0.02)	—
	正己醇	8395.27	—	0.44(0.00)	2.90(0.16)	—	0.37(0.01)	—	1.09(0.08)
	(2R,3R)-(-)-2,3-丁二醇	100000.00	1.75(0.00)	1.08(0.00)	3.15(0.01)	—	—	3.18(0.01)	—

	芳樟醇*	110.00	—	—	—	0.28(1.17)	—	—	—
	正辛醇	4594.60	0.31(0.00)	0.28(0.01)	1.51(0.15)	—	0.32(0.01)	0.14(0.01)	0.19(0.02)
	2,3-丁二醇	100000.00	3.39(0.00)	2.42(0.00)	2.88(0.01)	0.18(0.00)	1.80(0.00)	2.54(0.01)	—
	正壬醇*	12.67	—	—	2.45(89.95)	—	0.47(5.92)	—	—
	香叶醇*	162.69	—	—	—	—	—	—	0.31(1.48)
	苯甲醇	100000.00	0.48(0.00)	1.92(0.00)	1.27(0.01)	0.08(0.00)	0.74(0.00)	2.43(0.01)	—
	苯乙醇*	84.46	11.25(6.12)	22.30(25.14)	18.16(100.00)	5.69(31.38)	17.54(33.13)	19.24(76.53)	8.67(61.15)
酯 (7)	乙酸乙酯	40510.54	—	—	0.25(0.00)	0.01(0.00)	0.01(0.00)	0.65(0.01)	—
	己酸乙酯*	40.96	5.34(5.99)	5.02(11.67)	8.86(100.6)	0.55(6.26)	2.82(11.00)	—	0.51(7.35)
	辛酸乙酯*	33.78	0.29(0.40)	0.25(0.71)	0.55(7.55)	—	0.09(0.41)	0.42(4.17)	—
	癸酸乙酯	447.64	0.38(0.04)	0.29(0.06)	—	—	0.30(0.11)	0.53(0.40)	—
	γ-丁内酯	35000.00	0.07(0.00)	0.15(0.00)	0.15(0.00)	—	—	0.90(0.01)	—
	棕榈酸乙酯*	2000.00	1.42(0.03)	2.14(0.10)	5.11(1.19)	0.44(0.10)	0.86(0.07)	3.89(0.65)	0.49(0.15)
	邻氨基苯甲酸甲酯*	5.07	—	—	1.28(117.80)	—	0.59(18.57)	—	0.42(49.22)
醛 (9)	正己醛	32.94	0.10(0.14)	0.03(0.09)	—	—	0.03(0.15)	—	—
	正辛醛	4222.97	—	0.64(0.01)	—	—	—	—	—
	正壬醛*	2.62	2.36(41.45)	4.10(149.06)	—	—	1.64(100)	0.78(100)	—
	糠醛*	844.60	12.30(0.67)	2.38(0.27)	0.19(0.11)	0.03(0.02)	0.27(0.05)	10.48(4.17)	0.02(0.01)
	苯甲醛	3462.84	2.56(0.03)	3.43(0.09)	1.69(0.23)	0.06(0.01)	0.85(0.04)	4.64(0.45)	0.39(0.07)
	苯乙醛*	1.44	3.13(100.00)	1.51(100.00)	—	—	—	—	—
	香草醛	59.12	0.05(0.04)	—	—	—	—	—	—
	柠檬醛*	109.80	—	—	—	—	—	—	0.73(3.96)
	2-吡咯甲醛	65000.00	5.22(0.00)	3.17(0.00)	1.22(0.01)	—	0.38(0.00)	1.85(0.01)	—
酮 (5)	2-庚酮	2787.16	—	—	0.17(0.03)	0.32(0.05)	—	0.44(0.05)	0.18(0.04)
	3-辛酮*	1.10	—	—	—	—	—	—	0.18(100.00)
	2-壬酮*	26.18	—	—	—	0.87(15.43)	0.13(0.77)	—	1.50(34.17)
	2-十一酮	2533.78	0.31(0.01)	0.18(0.01)	0.61(0.11)	0.71(0.13)	0.51(0.03)	0.29(0.04)	0.25(0.06)
	香叶基丙酮	6400.00	0.38(0.00)	0.51(0.01)	0.50(0.04)	1.04(0.08)	0.34(0.01)	0.63(0.03)	0.23(0.02)
酚 (2)	愈创木酚*	4.00	—	—	—	0.86(100.00)	—	0.22(18.34)	—
	苯酚	2200.00	—	—	—	1.45(0.31)	1.93(0.14)	0.51(0.08)	0.13(0.04)
吡嗪 (10)	2-甲基吡嗪	1689.19	0.12(0.00)	0.88(0.05)	0.96(0.26)	0.66(0.18)	0.45(0.04)	0.50(0.10)	0.65(0.23)
	2,5-二甲基吡嗪*	1537.16	0.74(0.02)	1.93(0.12)	2.28(0.69)	2.94(0.89)	1.77(0.18)	1.16(0.25)	2.86(1.11)
	2,6-二甲基吡嗪	1452.70	0.34(0.01)	1.64(0.11)	1.23(0.39)	1.17(0.38)	0.83(0.09)	0.89(0.21)	1.14(0.47)
	2,3-二甲基吡嗪*	743.24	—	—	—	1.95(1.22)	1.40(0.30)	—	0.85(0.68)
	2-乙基-6-甲基吡嗪	860000.00	—	—	—	0.72(0.00)	—	—	0.37(0.00)
	2-乙基-5-甲基吡嗪*	36.00	—	—	—	4.89(63.34)	—	0.06(0.60)	—
	2,3,5-三甲基吡嗪*	160.47	0.75(0.22)	2.16(1.28)	2.56(7.41)	9.90(28.76)	6.46(6.42)	0.84(1.75)	3.10(11.53)
	2-乙基-3,6-二甲基吡嗪*	16.89	—	—	—	0.41(1.12)	0.37(3.54)	0.07(1.31)	0.41(4.27)
	2,3-二甲基-5-乙基吡嗪*	168.92	—	0.33(0.19)	—	2.58(7.11)	1.16(1.10)	—	1.37(4.84)
	四甲基吡嗪*	1689.19	—	4.09(0.23)	4.02(1.11)	22.59(6.23)	14.05(1.33)	0.43(0.09)	—
烯烃 (9)	月桂烯*	118.24	—	—	—	—	—	—	1.11(5.57)
	水芹烯	2956.08	—	—	—	—	—	—	0.01(0.00)
	(+)-柠檬烯*	358.11	—	—	—	—	—	0.38(0.36)	1.58(2.62)
	β-水芹烯	422.30	—	—	—	—	—	—	0.06(0.08)

	γ -松油烯	1266.89	—	—	—	—	—	—	0.05(0.03)
	苯乙烯	540.54	0.06(0.00)	0.19(0.03)	—	0.02(0.01)	—	—	0.02(0.02)
	反式石竹烯	9290.54	—	—	2.98(0.15)	—	—	—	—
其他 (5)	二甲基二硫醚	2956.08	0.04(0.00)	0.11(0.00)	—	—	—	0.11(0.01)	—
	2-戊基呋喃*	228.04	0.35(0.07)	0.28(0.12)	1.07(2.17)	0.05(0.11)	0.28(0.20)	0.28(0.41)	0.10(0.26)
	二甲基三硫*	11.82	0.68(2.63)	1.42(11.46)	—	—	—	0.81(23.03)	—
	萘	844.59	0.53(0.03)	0.72(0.08)	0.60(0.33)	0.27(0.15)	0.31(0.06)	0.11(0.04)	—
	2-乙酰吡咯*	2533.78	0.65(0.01)	3.04(0.11)	0.43(0.08)	0.31(0.06)	0.5(0.03)	8.34(1.11)	—

注：—表示未检出，*表示 ROAV>1 的关键风味物质。

由表 2 可知，7 种不同香气属性高温大曲样品中的重要挥发性风味物质 ($0<\text{ROAV}<1$) 共有 35 种；关键挥发性风味物质 ($\text{ROAV}>1$) 共有 32 种其中酸 5 种、醇 4 种、酯 4 种、醛 4 种、酮 2 种、酚 1 种、吡嗪 7 种、烯炔 2 种、其他 3 种；特征挥发性风味物质 ($\text{ROAV}>10$) 共有 14 种，分别为正丁酸、正壬醇、苯乙醇、己酸乙酯、邻氨基苯甲酸甲酯、正壬醛、苯乙醛、3-辛酮、2-壬酮、愈创木酚、2-乙基-5-甲基吡嗪、2,3,5-三甲基吡嗪、2-乙基-3,6-二甲基吡嗪、二甲基三硫。其中，苯乙醇在每个大曲样品中均被检测到且其 ROAV 值均大于 1，说明苯乙醇是高温大曲风味的主要贡献者之一。研究^[22]表明，苯乙醇具有玫瑰花香的气味，通常在中高温大曲中被检测到，本研究的结果与文献报道一致。

在 HT1、HT2 和 HT6 样品中，正壬醛、苯乙醇、苯乙醛、愈创木酚、己酸乙酯、二甲基三硫的 ROAV>10。其中，正壬醛在 3 个样品中的 ROAV 均大于 10，表明其对这 3 个样品的香气特性具有显著贡献，是其特征性挥发性风味物质。苯乙醛在 HT1 和 HT2 两个样品中的 ROAV 大于 10，Yang 等^[23]将其描述为坚果、苦杏仁的气味，是这两个样品的特征风味物质。二甲基三硫仅在 HT1、HT2 和 HT6 样品中被检测出，且 ROAV>1，为其呈香提供了重要的贡献，但通常二甲基三硫具有强烈的刺激性，被描述为腐烂的洋葱味。愈创木酚是样品 HT6 的特征香气物质。

在 HT3 样品中，正壬醇、己酸乙酯、邻氨基苯甲酸甲酯与苯乙醇的 ROAV 均大于 10，其中正壬醇被描述为“花香”^[24]，邻氨基苯甲酸甲酯和苯乙醇呈“果香、花香”，赋予大曲香甜的气味。因此，这几种特征性风味物质组合使大曲样品 HT3

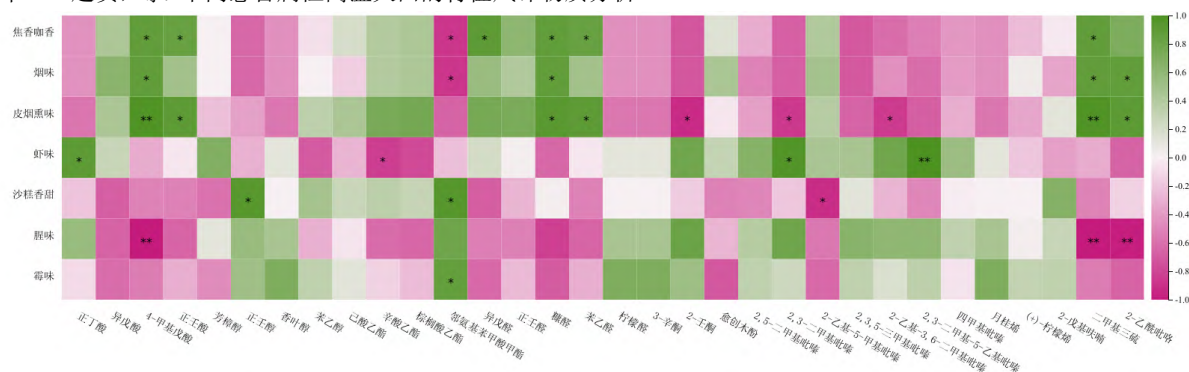
呈现出沙糕香甜的复合香气。

在 HT4 样品中，正丁酸、苯乙醇、2-壬酮、愈创木酚、2-乙基-5-甲基吡嗪、2,3,5-三甲基吡嗪与 2-乙基-3,6-二甲基吡嗪的 ROAV 均大于 10，且有 9 种吡嗪类物质的 ROAV 均大于 0.1，表明吡嗪类物质对 HT4 样品风味的呈现具有重要作用。研究^[25]表明，2,3,5-三甲基吡嗪、四甲基吡嗪两种物质是“酱香”的主要贡献者。其中，四甲基吡嗪是一种国际通用的食品风味添加剂，具有令人愉悦的、特殊的烤肉和炒坚果香气，在白酒中呈现甜香、坚果香及花香等香气，对其他香味物质有显著的叠加效应，进而起到了丰富白酒香气层次的作用^[2627]。此外，愈创木酚及其相关化合物被报道广泛存在于酱香、清香和芝麻香型白酒中^[28]，因其具有独特的烟熏味，且呈味阈值低，对白酒的总体风味具有重要的影响。适当提高愈创木酚及其相关化合物的含量可以在一定程度上丰富白酒的风味。

HT5 与 HT7 样品分别被描述为腥味与霉味，苯乙醇、正丁酸、己酸乙酯、邻氨基苯甲酸甲酯、2-壬酮、3-辛酮、2,3,5-三甲基吡嗪、2-乙基-3,6-二甲基吡嗪在这 2 种样品中的 ROAV 均大于 10，其中 3-辛酮是一种食用香料，天然存在于香蕉、蘑菇、蓝莓、牛膝草、百里香、迷迭香中，具有霉香、蘑菇香，并带有青草香和蔬菜香韵^[29]，很可能与 2-壬酮、2,3,5-三甲基吡嗪、2-乙基-3,6-二甲基吡嗪一起形成了 HT7 样品的“霉味”。正壬醛与正丁酸在 HT5 样品中拥有较大的 ROAV 值，两者协同主导了样品中腥味的形成。

2.4 大曲感官特性与关键风味物质的相关性分析

将感官评分与 ROAV>1 的 32 种关键风味物质的相对含量进行 Spearman 相关性分析，如图 5 所示。



注: $|R| > 0.6$, *表示显著相关 $P < 0.05$, **表示极显著相关 $P < 0.01$ 。

图5 将感官评价得分与 ROAV>1 的 32 种关键风味物质相对含量进行 Spearman 相关性分析

Fig. 5 Spearman correlation analysis between sensory evaluation scores and the relative contents of 32 key flavor compounds with ROAV>1

由图 5 可知, 共有 16 种风味物质与感官特性具有显著相关性, 其中焦香咖香与正壬酸、4-甲基戊酸、异戊醛、糠醛、苯乙醛、二甲基三硫呈显著正相关; 烟味与 4-甲基戊酸、二甲基三硫、糠醛、2-乙酰吡咯呈显著正相关; 皮烟熏味则与 4-甲基戊酸、正壬酸、苯乙醛、糠醛、二甲基三硫呈显著正相关; 虾味与吡嗪类物质呈正相关, 其中与 2,3-二甲基吡嗪表现出显著的正相关性, 与 2,3-二甲基-5-乙基吡嗪呈极显著的正相关性; 沙糕香甜与酯类化合物呈正相关, 其中与邻氨基苯甲酸甲酯和正壬酸呈现显著正相关; 霉味与柠檬醛、3-辛酮、2-壬酮、香叶醇、月桂烯呈正相关, 萜烯类物质本身多呈现柠檬香、花香与果香; 低碳烯烃通常具有微弱的甜味或类似汽油/溶剂的气味, 而中长链烯烃则常呈现油脂味、蜡味或水果味, 另外, 一些长链烯烃在特定氧化条件下可能产生陈腐、霉味的气味。张溪桐等^[30]提出大曲中产生土臭素等典型霉味物质与链霉菌等相关, 而 Cheng 等^[31]则发现链霉菌在代谢过程中可同步合成萜烯类化合物, 因此, 柠檬醛、香叶醇、月桂烯等更适宜作为霉味相关的间接标志物, 而非霉味的直接贡献物质, 它们可能与未被检测到的强霉味物质存在共线性规律; 腥味与正丁酸、2-壬酮呈正相关。

结果表明, ROAV 值能够较好地解释大曲样品的不同感官特性, 但是仍然具有不一致性。例如, 相关性分析表明 4-甲基戊酸与焦香咖香、皮烟熏味、烟味呈现显著正相关, 但是其通常被描述为酸败、汗臭、奶酪样刺激性气味^[32]。这可能归因于大曲中丰富的风味物质种类及其含量, 这些物质之间在呈味中可能存在协同、加成或掩盖的作用, 导致一些挥发性化合物混合后的风味以非线性方式被感

知^[33]。Yang 等^[16]在香气重组缺失实验中发现当单独省略 2-戊基呋喃时, “谷物”香气减少, 2-戊基呋喃通常被描述为豆香, 果香; 而当单独省略 γ -壬内酯时, 重组模型变得更“辛辣”, 而“甜味”香气减少, 但 γ -壬内酯通常被描述为椰子香与果香。

3 结论

本研究采用 QDA 法分析了 7 种高温大曲的感官特性, 结果显示 HT1-HT7 依次呈现为焦香咖香、皮烟熏味、沙糕香甜、虾味、腥味、烟味和霉味; 7 种大曲样品中共鉴定出 152 种挥发性风味成分; PCA 结果显示 HT1、HT2 和 HT6 的挥发性风味物质含量聚类较为集中, 其余样品则能有效区分。进一步基于 ROAV 值筛选关键呈香物质, 并对感官评分与关键风味物质相对含量进行相关性分析。结果表明, 焦香咖香、皮烟熏味、烟味与 4-甲基戊酸、二甲基三硫、糠醛呈显著正相关; 虾味与吡嗪类物质呈正相关; 沙糕香甜与酯类化合物呈正相关, 其中与邻氨基苯甲酸甲酯和正壬酸呈显著正相关; 霉味与柠檬醛、3-辛酮、2-壬酮、香叶醇、月桂烯呈正相关; 腥味与正丁酸、2-壬酮呈正相关; 推测其中与虾味和霉味呈正相关的物质可能并非直接贡献者, 但可作为呈味间接标志物。

本研究系统揭示了不同感官属性高温大曲的特征风味化学基础, 明确了各类香气的标志性关键组分, 深化了对高温大曲风味形成机制的认识, 为基于风味导向的大曲定向调控提供了理论依据。

参考文献:

- [1] He Muwen, Jin Yao, Zhou Rongqing, et al. Dynamic succession of microbial community in Nongxiangxing

- daqu and microbial roles involved in flavor formation[J]. Food Research International, 2022, 159: 111559.
- [2] 蒋力力, 田露琴, 尚煜豪, 等. 不同种类高温大曲功能特性与成分差异比较[J]. 食品工业科技, 2025, 46(14): 362-370.
- [3] YangLiang, Xian Chun, Li Peng, et al. The spatio-temporal diversity and succession of microbial community and its environment driving factors during stacking fermentation of Maotai-flavor baijiu[J]. Food Research International, 2023, 169: 112892.
- [4] 康新玥, 郭莹, 秦立芹, 等. 不同地区酱香型高温大曲制曲过程理化指标及挥发性风味化合物分析[J]. 中国酿造, 2025, 44(6): 116-122.
- [5] 余航, 杨建平, 李冕, 等. 高温大曲风味成分研究进展[J]. 酿酒科技, 2025, 47(6): 1-6.
- [6] 李建勋, 李清亮, 陈鹏, 等. 白酒大曲质量鉴别的研究进展[J]. 中国酿造, 2024, 43(10): 13-17.
- [7] Zhu Qi, Chen Liangqiang, Peng Zheng, et al. Analysis of environmental driving factors on core functional community during Daqu fermentation[J]. Food Research International, 2022, 157: 111286.
- [8] Li Shuai, Han Yueran, Wang Li, et al. Machine learning-enhanced flavoromics: identifying key aroma compounds and predicting sensory quality in sauce-flavor baijiu[J]. Food Chemistry, 2025, 475: 143328.
- [9] Chen Zihan, Wang Han, Wu Chongchao, et al. Evolution of Jiang-Flavor Daqu's Characteristics During Different Storage Stages and Influence on Simulated Brewing Fermentation[J]. Foods, 2026, 15(2): 220, 2-18.
- [10] Luo Yunchuan, Liao Hui, Luo Yi, et al. Temperature-driven microbial assembly and flavor compound dynamics in high-temperature Daqu: adaptive co-evolution for efficient tetramethylpyrazine production[J]. International Journal of Food Microbiology, 2025, 441: 111325.
- [11] Cai Wenchao, Xue Yuang, Wang Yurong, et al. The fungal communities and flavor profiles in different types of high-temperature Daqu as revealed by high-throughput sequencing and electronic senses[J]. Frontiers in Microbiology, 2021, 12: 784651.
- [12] Shi Wei, Chai Lijuan, Fang Guanyu, et al. Spatial heterogeneity of the microbiome and metabolome profiles of high-temperature Daqu in the same workshop[J]. Food Research International, 2022, 156: 111298.
- [13] 沈世明, 梁明锋, 张娇娇, 等. 酱香高温大曲风味轮的初步构建及其香气特征分析[J]. 食品与发酵工业, 2023, 49(1): 73-78.
- [14] Chen Feifan, Zhao Yun, Ge Huairui, et al. Insights into heterogenetic mechanism in physicochemical driving factors, microbial community and volatile metabolites during high-temperature Daqu fermentation by traditional stacking and shelf stacking[J]. Journal of the Science of Food and Agriculture, 2025, 105(15): 8972-8984.
- [15] 郭志君, 李亚娟, 陈光艳, 等. 不同蓝莓酒挥发性风味成分和感官品质差异及相关性分析[J]. 中国酿造, 2025, 44(1): 156-162.
- [16] Yang Shengbing, Fu Junjie, He Jiahuan et al. Decoding the Qu-aroma of medium-temperature Daqu starter by volatilomics, aroma recombination, omission studies and sensory analysis[J]. Food Chemistry, 2024, 457: 140186.
- [17] 杨婷婷, 黄永光, 左乾程, 等. 酱香白酒酿造过程糠醛及糠醇的时空分布规律及溯源分析[J]. 食品科学, 2025, 46(5): 38-47.
- [18] Guo Fei, Ma Mingjuan, Yu Miao, et al. Classification of chinese fragrant rapeseed oil based on sensory evaluation and gas chromatography-olfactometry[J]. Frontiers in Nutrition, 2022, 9: 945144.
- [19] Wang Yixuan, Ning Jie, Wang Yuanyuan, et al. Pyrazine-driven umami enhancement in the Sauvignon Blanc-oyster food pairing: elucidated through electronic tongue analyses and molecular simulations[J]. Food Bioscience, 2026, 76: 108323.
- [20] Fei Yongtao, Wang Yuliang, Zhang Zhichao, et al. Effects of traditional starter and the Round-Koji-Maker starter on microbial communities and volatile flavours of Chi-Flavour Baijiu[J]. International Journal of Food Science & Technology, 2023, 58(8): 4155-4170.
- [21] 丁泽, 陈曦, 李金洋, 等. 酱香型高温大曲制作过程中微生物群落演替规律与风味物质变化[J]. 食品科学, 2025, 46(11): 115-124.
- [22] JiaZheng, DongZhao, Peng Zhifu, et al. Variation of aroma profile in fermentation process of Wuliangye baobaoqu starter[J]. Food Research International, 2018, 114: 64-71.
- [23] YangYang, Wang Songtao, Lu Zhenming, et al. Metagenomics unveils microbial roles involved in metabolic network of flavor development in medium-temperature daqu starter[J]. Food Research

- International, 2021, 140: 110037.
- [24] 景思, 宋学博, 朱琳, 等. GC×GC- TOF MS 分析中国劲酒基酒挥发性成分[J]. 食品科学技术学报, 2021, 39(06): 64-76.
- [25] 史凤, 马楷雨, 史改玲, 等. 酱香型高温大曲发酵过程中风味物质分析[J]. 中国酿造, 2025, 44(1): 52-59.
- [26] 戴奕杰, 李宗军, 田志强. 酱香型白酒大曲和糟醅的细菌多样性分析[J]. 食品科学, 2019, 40(4): 152-159.
- [27] 胡智慧, 陈方, 郭雪峰, 等. 白酒中健康因子 2,3,5,6-四甲基吡嗪形成机理的研究进展[J]. 中国酿造, 2024, 43(1): 27-33.
- [28] 周金虎, 管健, 魏浩林, 等. 白酒中健康因子的研究进展[J]. 酿酒科技, 2017, 38(7): 90-94.
- [29] 杨绍祥, 穆旻, 何昕, 等. 食用香料 3-辛酮的合成[J]. 中国调味品, 2014, 39(8): 93-95.
- [30] 张溪桐, 徐岩, 杜海. 低含水量条件下大曲中抑制土味素的功能微生物解析[J]. 食品与发酵工业, 2022, 48(13): 55-62.
- [31] Cheng Zhenlong, MCCANN S, FARAONE N, et al. Production of plant-associated volatiles by select model and industrially important *Streptomyces* spp[J]. Microorganisms, 2020, 8(11): 1767, 2-20.
- [32] 马鸿雁, 范红, 刘倩, 等. 顶空固相微萃取-GC-MS 结合气味活度值分析土鳖虫关键腥臭气成分[J]. 中国现代应用药学, 2024, 41(1): 88-96.
- [33] 陶永胜, 李娜. 葡萄酒中香气物质研究进展[J]. 食品科学技术学报, 2023, 41(3): 28-40.