基于电子鼻和气相色谱-离子迁移谱分析河北地区不同品牌桃香醋挥发性化合物差异

郭琳琳[1,2]，徐美丽[2,3]，张馨月[2,3]，李羽嘉[2,3]，王莞欣[2,3]，马福敏[2]，段翠翠[2]，马艳丽[1]，李丹[2]，李晓磊[2*]

（1.长春大学园林学院，吉林长春 130022）（2.长春大学农产品加工吉林省普通高等学校重点实验室，吉林长春 130022）

（3.长春大学食品科学与工程学院，吉林长春 130022）

摘要：为明确河北主要桃香醋品牌的挥发性化合物种类以及区分它们之间化合物成分的差异，采用电子鼻和气相色谱-离子迁移谱技术对不同品牌桃香醋风味成分进行分析，并应用多元统计分析桃香醋的香气差异。结果表明，传感器对桃香醋挥发性成分中硫化物、芳香成分的响应较强，品牌 B> 品牌 C> 品牌 A。迁移谱共检测出 79 种挥发性化合物，包括 25 种酯、12 种醛、9 种醇、8 种酮、6 种醚、6 种吡嗪、3 种酸、3 种呋喃和 7 种其它化合物。迁移谱指纹图谱显示 35 种化合物为三种桃香醋共有的标志性化合物，其中乙酸乙酯、甜瓜醛贡献了水果甜味、紫丁香醇贡献了药香味。主成分分析验证了迁移谱数据能有效区分产品之间的差异，正交偏最小二乘判别分析模型以变量重要度投影 VIP 值 >1 为界限筛选并结合 S-plot 图得到 25 种差异挥发性化合物。产品的总酸、总糖含量无明显差异，感官评价总体接受度较高。该研究表明电子鼻和气相离子迁移谱技术可用于桃香醋的鉴别，进而为其品质评估提供参考。

关键词：气相色谱－离子迁移谱；电子鼻；果醋；桃香醋；挥发性风味物质；物质差异

文章编号：1673-9078(2026)2-278-292 DOI: 10.13982/j.mfst.1673-9078.2026.2.1681

Electronic Nose and GC-IMS-based Analysis of Differences in Volatile Compounds among Different Brands of Peach Balsamic Vinegar in Hebei Region

GUO Linlin[1,2], XU Meili[2,3], ZHANG Xinyue[2,3], LI Yujia[2,3], WANG Wanxin[2,3], MA Fumin[2], DUAN Cuicui[2], MA Yanli[1], LI Dan[2], LI Xiaolei[2*]

(1.College of Landscape Architecture, Changchun University, Changchun 130022, China) (2.Key Laboratory of Agricultural Product Processing in Jilin Ordinary Higher Education Institutions, Changchun University, Changchun 130022, China) (3.School of Food Science and Engineering, Changchun University, Changchun 130022, China)

Abstract: To determine the types of volatile compounds in major peach balsamic vinegar brands in Hebei and distinguish the differences in their compound compositions, an electronic nose and gas chromatography-ion mobility spectrometry (GC-IMS) were used to analyze the characteristic flavor components of different brands of peach balsamic vinegar. The differences in aroma were also evaluated using multivariate statistical analysis. The results showed that the sensors responded more strongly to the sulfide and aromatic compounds of the volatile components of peach balsamic vinegar in the order of brand B>brand C>brand A. GC-IMS

引文格式：

郭琳琳,徐美丽,张馨月,等.基于电子鼻和气相色谱-离子迁移谱分析河北地区不同品牌桃香醋挥发性化合物差异[J].现代食品科技,2026,42(2):278-292.

GUO Linlin, XU Meili, ZHANG Xinyue, et al. Electronic nose and GC-IMS-based analysis of differences in volatile compounds among different brands of peach balsamic vinegar in Hebei region [J]. Modern Food Science and Technology, 2026, 42(2): 278-292.

收稿日期：2024-11-11；修回日期：2024-12-28；接受日期：2025-01-08

基金项目：吉林省发改委产业技术研究与开发项目（2024C016-1）；吉林省科技厅中青年领军人才项目（20240601074RC）

作者简介：郭琳琳（1999-），女，硕士研究生，研究方向：农业资源开发与利用，E-mail：947304496@qq.com

通讯作者：李晓磊（1978-），女，博士，教授，研究方向：发酵食品和发酵风味，E-mail：xiaolei97@163.com

identified 79 volatile compounds, including 25 esters, 12 aldehydes, nine alcohols, eight ketones, six ethers, six pyrazines, three acids, three furans, and seven compounds of other types. The GC-IMS fingerprint also revealed 35 marker compounds shared by the three types of peach balsamic vinegar, with ethyl acetate and 2,6-dimethyl-5-heptenal (melonal) contributing to the fruity sweetness, and 2,6-dimethoxyphenol (syringol) contributing to the medicinal aroma of the vinegars. Principal component analysis validated effective discrimination between products using GC-IMS spectral data. Using an orthogonal partial least squares discriminant analysis model, 25 differential volatile compounds were identified by screening variables with a variable importance in projection value>1, followed by combined analysis with an S-plot. Total acids and sugars did not significantly differ among the products, and the overall acceptability in sensory evaluation was high for all three brands. The results of the present study demonstrated the utility of the electronic nose and GC-IMS in discriminating peach balsamic vinegars, providing a reference for quality assessment.

Key words: gas chromatography-ion mobility spectrometry; electronic nose; fruit vinegar; peach balsamic vinegar; volatile flavor substances; substance differences

桃为蔷薇科李属落叶小乔木，原产于中国西部山区谷地，是世界上仅次于苹果的温带水果作物，经过长期的生产栽培与自然演化，形成了丰富的品种资源[1]。桃肉含有丰富的蛋白质，糖分，维生素及微量元素[2-4]。其富含膳食纤维，具有改善肠道蠕动、降脂、防治肥胖症的作用[5]；桃含有丰富的抗氧化物质，使其具有重要的药用和经济价值[6]；中医认为，桃肉酸甜性温，具生津活血、消积解渴、去暑通便、防肝脾肿大的效果[7]。桃因其独特的果肉结构、诱人的香气以及丰富的营养价值，而深受消费者的喜爱与青睐[8,9]。然而，鲜桃在采摘后不易长期保存，导致营养价值的流失[10]。为满足消费者对桃产品的多样化需求，食品工业对桃进行了广泛的加工利用，除直接鲜食外，还将其加工成罐头、果酒、果酱及蜜饯等多种产品[11]。

食醋，作为中国人餐桌上不可或缺的调味品[12]，具有抗菌、抗氧化、抗糖尿病、预防心血管疾病及抗肿瘤等多种健康功效[13]。其风味以醇厚浓烈的酸味为主导，口感单一且直接。而果醋，作为以水果或其副产物为原料的保健饮品，因其独特的风味与营养价值而受到广泛关注[14]。桃香醋，作为果醋的一种，通过发酵桃汁、桃皮或其他桃制品制得，其发酵过程中产生的多种功能性分子，如有机酸、维他命、多酚等，具有抗氧化、调节代谢、提高免疫力、控制血糖及调节血脂等多种功效，且这些功能物质在桃香醋中协同发挥作用，赋予了它独特的保健价值[15,16]。与传统食醋相比，桃香醋口感更加柔和，不会过于刺激。尽管果醋的风味与营养价值已得到广泛研究，但针对桃香醋的风味差异研究仍相对匮乏。目前，消费者与研究人员普遍关注桃果品质、储藏方式等因素对桃香醋风味与品质的影响，以及品牌间存在的差异[17,18]。然而，市场上桃香醋产品众多，其品质参差不齐，市场空白仍较大。

气相色谱－离子迁移谱（Gas Chromatography-Ion Mobility Spectrometry, GC-IMS）是一种近些年来新兴的气相分离检测技术，结合了气相色谱分离能力强和离子迁移谱响应快、灵敏度高、鉴别能力强的优点，适用于痕量检测挥发性化合物[19]。电子鼻检测风味物质具有灵敏度高、响应迅速且操作简便的优点。将两种方法结合对比结果具有良好的验证和互补作用[20]。因此，本研究旨在通过电子鼻与气相色谱－离子迁移谱技术，探究不同品牌桃香醋的挥发性风味化合物组成及其差异和理化性质，以期为桃香醋的品质评价、真伪鉴别及品牌选择提供科学依据。

1 材料与方法

1.1 材料与试剂

试验材料为市场内购买的 3 种不同品牌的桃香醋，样品编号、主要原料、发酵方式、执行标准见表 1。产地为河北衡水（品牌 A）；河北衡水（品牌 B）；河北衡水（品牌 C）；氯化钠（化学纯），上海阿拉丁生化科技股份有限公司；蒽酮（分析纯），国药集团化学试剂有限公司。

表1 三种桃香醋的工艺特征

Table 1 Process characteristics of three kinds of peach balsamic vinegar

样品编号	主要原料	发酵方式	执行标准	备注
品牌 A	水、小米、玉米、稻壳、麸皮、桃汁、食用盐	固态发酵	GB/T18187	无
品牌 B	水、小米、米糠、稻壳、麸皮、蜜桃汁（≥1%）、食用盐	固态发酵	GB/T18187	熏缸醋
品牌 C	水、小米、玉米、稻壳、麸皮、桃汁、食用盐、香辛料	固态发酵	GB/T18187	熏缸醋

1.2 仪器与设备

Flavour Spec® 气相离子迁移谱联用仪（Gas Chromatography-Ion Mobility Spectrometry, GC-IMS），德国 G.A.S 公司；UV-2550 紫外分光光度计，日本 Shimadzu 公司；DB-WAX 色谱柱（60 m×0.25 mm×0.25 μm），美国 Agilent Technologies 公司；CM-5 色差仪，日本 konicaminolta 公司，PEN3.5 电子鼻：德国 Airsense 公司。

1.3 实验方法

1.3.1 样品预处理

样品在室内常温下密封保存，检测前将每个试样吸取 1 mL 加入 1 g 氯化钠装入 20 mL 的顶空玻璃瓶中，密封后上机，仪器在 60 ℃下对试样孵育 10 min，然后自动进样，每种样品重复 3 次试验。

1.3.2 仪器条件

自动顶空进样条件：孵化温度 60 ℃；孵化转速 250 r·min^{-1}；孵育时间 10 min；进样针温度 40 ℃；进样体积 1 mL。

气相色谱条件：使用 DB-WAX 色谱柱（60 m×0.25 mm×0.25 μm），载气为高纯氮气 N_2（纯度≥99.999%）；升温程序：初始温度为 50 ℃保持 3 min，以 5 ℃·min^{-1} 升温至 160 ℃，保持 5 min；以 10 ℃·min^{-1} 升温至 180 ℃，保持 5 min；分析时间 37 min。

离子迁移谱条件：漂移管长度模式为正离子模式，漂移管温度设为 45 ℃，氮气流速为 150 mL·min^{-1}，阻断电压 50 mV，注入电压 2 500 mV。

1.3.3 总酸测定

根据《食品安全国家标准食品中总酸的测定》GB 12456-2021[21]中所述，总酸的含量可以通过酸－碱－指示剂滴定来进行。

1.3.4 总糖测定

参考《食品分析》[22]中描述的步骤，但稍作修改。吸取 100 μL 试样至 900 μL 蒸馏水中制成待测液，从其中吸取 100 μL 至 900 μL 66 wt.% 蒽酮硫酸溶液中搅拌均匀，进行 5 min 冰水浴后，将试样置于沸水中水浴 15 min，然后在黑暗处冷却 20 min，于 620 nm 波长下进行测定。

1.3.5 色度测定

参考吕伟等[23]的测试方法，稍作修改。利用带有 D65 光源的色度仪进行了试验研究。每种试样吸取少量置于比色皿中，对每种试样作 3 次平行检测，记录其 L^*、a^*、b^* 值。为保证数据的准确，在每一次测量前都要重新标定一次。

1.3.6 电子鼻分析

电子鼻样品预处理：参照电子鼻技术测定食醋中风味[24]，略有改动。将试样 1 mL 放入顶空瓶内，用顶空瓶盖密封，每种试样进行三次平行测定。

电子鼻参数设定：检测时间设置为 150 s，清洗时间设为 50 s，预进样时间设为 5 s，进样流量为 200 mL·min^{-1}，载气流量为 600 mL·min^{-1}。每个试样都做 3 次平行实验。PEN 3 型便携式电子鼻配备 10 种不同传感器（详见表 2），并将各传感器响应值以雷达图形式展现（详见图 10）。

表 2 电子鼻传感器阵列名称与对应特征

Table 2 Electronic nose sensor array names and corresponding features

阵列序号	传感器名称	性能特征
1	W1C	对芳香成分灵敏
2	W5S	对氮氧化合物很灵敏
3	W3C	对芳香成分、氨水灵敏
4	W6S	对氢气有选择性
5	W5C	对烷烃、芳香成分灵敏
6	W1S	对甲烷灵敏
7	W1W	对硫化物灵敏
8	W2S	对乙醇灵敏
9	W2W	对芳香成分、有机硫化物灵敏
10	W3S	对烷烃灵敏

1.3.7 感官评价

邀请 10 名经过食品专业培训的学生（5 男 5 女），参考其他果醋感官评价评分标准略有改动[25]以及 GB2719-2018《食品安全国家标准食醋》[26]中的方法并稍作修改，对以下指标进行评分：外观、气味（香气）、口感（酸度、甜度）、以及悬浮物的总体可接受度。每项指标的评分范围从最低分 1 分到最高分 10 分，具体评分标准参考表 3。根据这些指标的感官强度平均分，绘制了感官剖面图。

1.4 数据统计与可视化分析

GC-IMS 数据处理，所有样品均进行三次独立平行实验，采用 Microsoft Office Excel 365 对所测得的实验数据进行整理，通过 Flavour Spec® GC-IMS 系统内置的实验室分析浏览器（Laboratory Analytical Viewer, LAV）生成挥发性成分 GC-IMS 谱图，采用 Flavour Spec®GC-IMS 风味分析仪配套的 VOCal 分析软件内置 NIST 数据库和 IMS 数据库进行风味物质定性定量

分析，并利用 Library Search、Reporter 和 Gallery plot 插件进行样品间挥发性物质差异分析；采用 SIMCA 14.1 进行正交偏最小二乘判别分析（Orthogonal Partial Least Squares Discriminant Analysis, OPLS-DA），筛选 VIP 值＞1 的差异化合物，并通过 S-plot 确定关键化合物；通过 IBM SPSS Statistics 26 软件进行数据显著性分析；并采用 Origin 2022 软件绘制雷达图。

表 3 桃香醋感官评分标准表

Table 3 Peach balsamic vinegar sensory scoring standard table

项目名称	评分标准	分值/ 分
外观	呈现琥珀色或红棕色色泽鲜亮，无悬浮物和沉淀物，状态均匀	7~10
	色泽较浅或偏暗，状态不够均匀	4~7
	有杂色，液体伴有悬浮物，较浑浊	1~4
气味	有明显的桃香气味，且持续时间较长	7~10
	有淡淡果香，香气不明显，且持续时间短	4~7
	基本无果香，有异味，且味道刺鼻	1~4
口感（酸度）	口感爽口，酸度适口，生津止渴，回味绵长	7~10
	口感偏酸，不够柔和爽口	4~7
	口感酸涩，伴有苦味或杂味，无醋香	1~4
口感（甜度）	甜度适口，生津止渴，回味绵长	7~10
	口感略带甜味，较为柔和	4~7
	口感不甜或齁甜，无果香	1~4
悬浮物	几乎无可见悬浮物，久置无沉淀	7~10
	有少量悬浮物，久置后有少量可见沉淀	4~7
	有大颗粒悬浮物，静置片刻即产生明显沉淀	1~4
总体接受度	满意	7~10
	一般	4~7
	较差	1~4

2 结果与讨论

2.1 三种桃香醋GC-IMS挥发性化合物差异对比分析

图 1 展示了使用 GC-IMS 仪器的 LAV 分析软件中 Reporter 插件程序，针对三种桃香醋所生成的挥发性化合物的三维气相－离子迁移谱图；图 2 是从三种桃香醋中获取的挥发性化合物的二维气相－离子迁移俯视图；图 3 则呈现了三种桃香醋挥发性化合物的气相－离子迁移谱图之间的差异对比。

在 GC-IMS 中检测到的单个挥发性物质，单独分布在反应离子峰右侧。离子峰的强度通过图中点的颜色深浅来直观表示：白色代表较低的强度，红色则代表较高的强度，且颜色越深，意味着离子峰的强度越高。迁移时间 1.0 ms 处深色竖线表示反应离子峰（Reactive Ion Peak, RIP），每个样品迁移时间约为 1.0~1.5 ms。通过观察图 1，可以发现三种桃香醋的挥发性化合物存在差异。在此基础上，将二维俯视图（如图 2 所示）与差异图谱（如图 3 所示）相结合，可以对样品的气相离子迁移谱进行更为深入的分析，这样的综合分析方法有助于我们更全面地理解桃香醋中挥发性化合物的特性和差异。

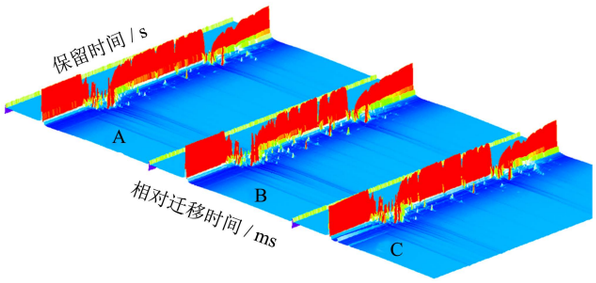


图 1 三种桃香醋挥发性化合物气相－离子迁移三维谱图

Fig.1 Gas phase-ion mobility three-dimensional spectra of volatile compounds of three peach balsamic vinegars

由图 2 可以看出大多数信号在保持时间 500~1 000 s 大部分挥发性化合物的信号处于保留时间 500~1 000 s 之间，但是个别挥发性化合物信号保留时间处于 1 500~2 000 s 之间，可能是由于这些化合物极性更低，导致这些挥发性成分在非极性柱上保留时间比极性化合物长[27]，它们的漂移时间全在 6.0~8.0 ms 内迁移时间（归一化处理），如图 2 所示，每个彩色点代表一个挥发性有机化合物，不同的颜色表示不同的浓度，红色表示较高的强度[28]，河北三种不同品牌桃香醋的挥发性化合物含量具有一定差异，标注的黄色区域内品牌 C 含量较高，红色区域内品牌 A 含量较低。为直观展现桃香醋样品间的差异，生成了 GC-IMS 二维平面差异谱图，如图 2、3 所示。

图 2 从左至右为样品 A、B、C 的检测结果。图中各点代表不同化合物，颜色深浅反映其浓度高低：深色为高浓度，浅色为低浓度，整个谱图背景为蓝色，不同颜色的点出现在不同的位置，直观地反映了它们之间挥发性物质的差异，颜色越深表示差异越大[29]。

图 3 是以品牌 A 为参照，展示了去除品牌 B、C 信号峰后的差异谱图。图中 a 区的蓝色信号峰表明某化合物在样品中含量低于品牌 A，而 b 区红色信号峰则显示含量高于品牌 A。颜色深浅直观反映差异显著程度，颜色越深则差异越大。通过红色和蓝色区域的位置及深浅，可清晰看出三个品牌桃香醋在挥发性风味成分上存在显著差异。

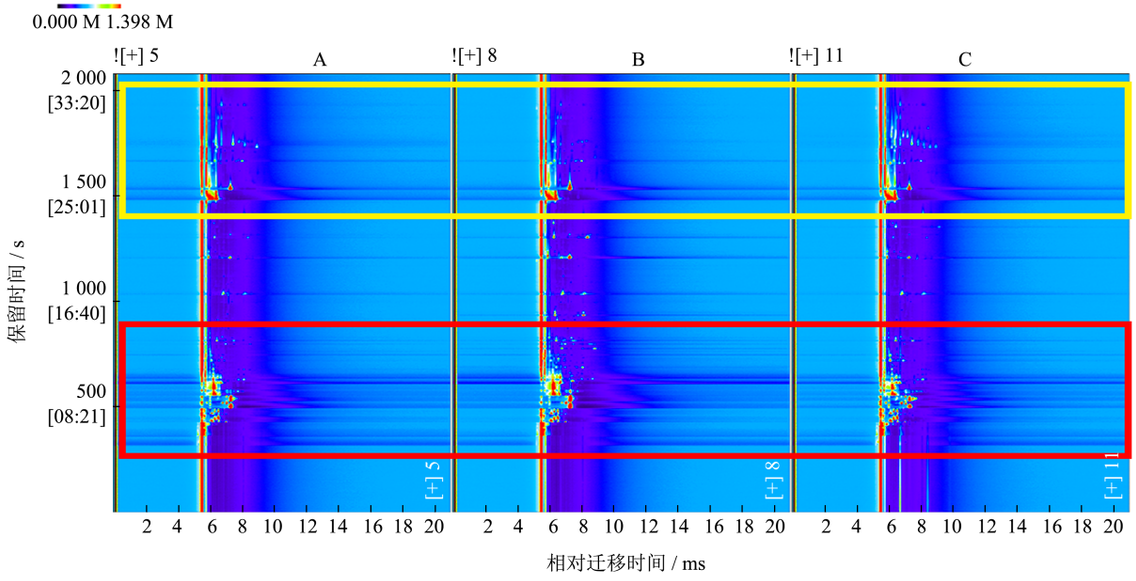


图 2 三种桃香醋挥发性化合物二维气相 – 离子迁移分析谱图

Fig.2 Two-dimensional gas phase-ion mobility analysis spectra of volatile compounds of three peach balsamic vinegars

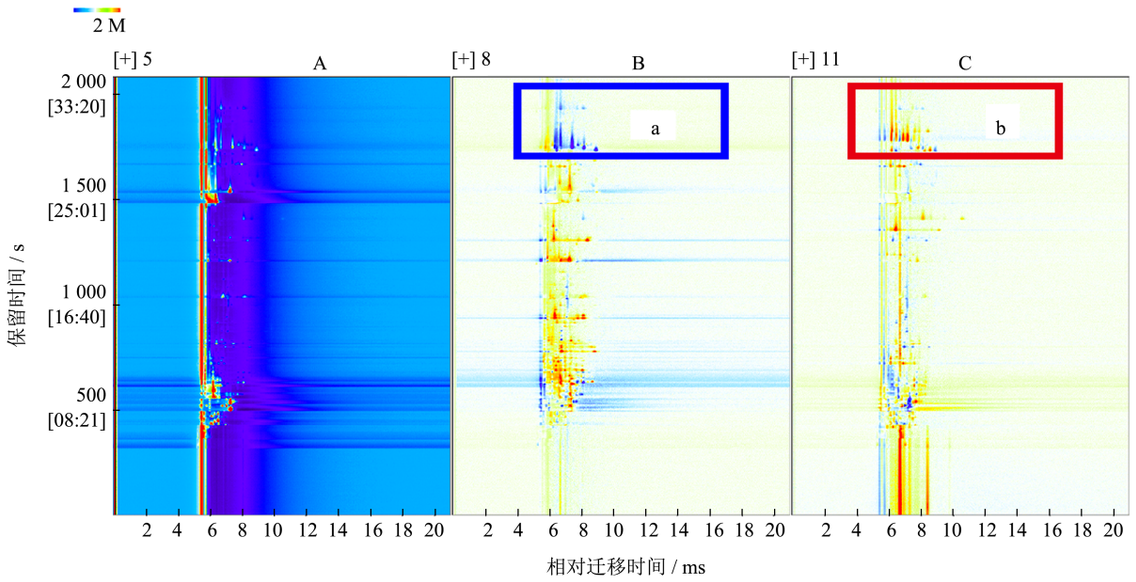


图 3 三种桃香醋挥发性化合物二维气相 – 离子迁移差异谱图

Fig.3 Two-dimensional gas-ion mobility difference spectra of volatile compounds of three peach balsamic vinegars

2.2 三种桃香醋GC-IMS挥发性化合物定性定量分析

不同品牌桃香醋中挥发性成分的释放规律存在显著差异。本研究采用离子迁移谱（IMS）检测技术，结合 GC-IMS 联用系统及其内置 LAV 分析软件，对三种品牌桃香醋的挥发性成分进行系统分析。通过 Library Search 功能进行化合物定性分析时，综合运用 NIST 和 IMS 数据库检索，并依据保留指数、保留时间及迁移时间等多参数验证方法，实现对挥发性有机化合物（Volatile Organic Compounds, VOCs）的准确定性定量分析。基于三次平行实验获得的峰体积，计算得出三种桃香醋中各物质的相对含量，结果如表 4 所示。

通过 GC-IMS 技术，共检测到 79 种挥发性化合物，包括 25 种酯类、12 种醛类、9 种醇类、8 种酮类、6 种醚类、6 种吡嗪类、3 种酸类、3 种呋喃类及其他 7 类化合物，这些成分共同构成了桃香醋独特的风味特征。其中，酯类和醛类化合物在 GC-IMS 的检测结果中占据了主导地位，是构成桃香醋特征香气的重要成分。

表 4 三种桃香醋挥发性成分分析

Table 4 Analysis of the volatile components of three peach balsamic vinegars

类别	序号	英文名称	中文名称	保留时间/s	迁移时间/ms	CAS 号	分子式	相对分子质量	保留指数	相对含量/%			气味描述	备注
										A	B	C		
酯类	1	(Z)-3-Hexen-1-olbutanoate	(Z)-丁酸-3-己烯酯	1 757.49	1.43	16491-36-4	$C_{10}H_{18}O_2$	170.30	1 445.80	0.271 3	0.188 5	0.255 2	葡萄酒	
	2	1,2-Propanediol,diacetate	1,2-丙二醇二乙酸酯	1 874.64	1.22	623-84-7	$C_7H_{12}O_4$	160.20	1 488.30	0.065 7	0.035 7	0.256 7		
	3	1,3-Butanediol	1,2-丙二醇二乙酸酯	536.95	1.38	107-88-0	$C_4H_{10}O_2$	90.10	853.40	0.950 9	0.559 5	1.509 2		
	4	1-Methoxy-2-propanolacetate	丙二醇甲醚醋酸酯	1 305.57	1.15	108-65-6	$C_6H_{12}O_3$	132.20	1 246.70	0.282 3	0.035 4	0.168 2		
	5	2(3H)-Furanone,5-methyl-	4-羟基-3-戊烯酸内酯	1 786.67	1.12	591-12-8	$C_5H_6O_2$	98.10	1 456.70	0.480 6	0.221 1	0.637 2		
	6	Aceticacid2-propylester	乙酸异丙酯	610.42	1.18	108-21-4	$C_5H_{10}O_2$	102.10	898.40	0.159 1	0.166 4	0.124 1		
	7	allylisothiocyanate	异硫氰酸烯丙酯	1 548.37	1.08	57-06-7	C_4H_5NS	99.20	1 362.40	0.137 7	0.127 6	0.634 0	大蒜味、硫磺	
	8	benzylisopentanoate	3-甲基丁酸苯甲酯	1 665.80	1.46	103-38-8	$C_{12}H_{16}O_2$	192.30	1 410.60	2.908 2	2.295 5	2.617 8		
	9	Butanoicacid,hexylester	丁酸己酯	1 743.74	1.49	2639-63-6	$C_{10}H_{20}O_2$	172.30	1 440.70	1.202 7	1.088 6	0.975 9	苹果皮	
	10	butylpentanoate	戊酸丁酯	1 405.76	1.93	591-68-4	$C_9H_{18}O_2$	158.20	1 298.80	0.215 6	0.2401	0.173 1		
	11	Ethyl2-methylpropionate	2-甲基丙酸乙酯	725.46	1.19	97-62-1	$C_6H_{12}O_2$	116.20	958.80	0.633 8	1.257 5	0.440 1	甜橡胶	
	12	Ethyl2-methylbutyrate	2-甲基丁酸乙酯	517.03	1.24	7452-79-1	$C_7H_{14}O_2$	130.20	840.20	1.140 9	0.388 0	0.916 1	苹果	
	13	ethyl2-oxopropanoate	丙酮酸乙酯	1 354.55	1.17	617-35-6	$C_5H_8O_3$	116.10	1 272.90	0.614 4	0.533 2	0.547 4		
	14	EthylAcetate	乙酸乙酯	539.69	1.33	141-78-6	$C_4H_8O_2$	88.10	855.20	0.042 1	0.035 9	0.123 0	水果甜味、菠萝	
	15	ethylacetoacetatepropyleneglycolketal	乙丙烯乙二醇缩酮乙酯	1 208.35	1.32	6290-17-1	$C_9H_{16}O_4$	188.20	1 191.90	1.569 7	1.414 0	1.617 6		
	16	ethylhexanoate	正己酸乙酯	826.83	1.34	123-66-0	$C_8H_{16}O_2$	144.20	1 007.00	0.038 7	0.036 7	0.191 7	苹果皮、水果	
	17	Hexyl2-methylbutanoate	2-甲基丁酸己酯	1 304.83	1.53	10032-15-2	$C_{11}H_{22}O_2$	186.30	1 246.30	0.211 6	0.259 8	0.305 0	草莓	
	18	Isobutyl3-methylbutanoate	3-甲基丁酸 2-甲基丙酯	812.96	1.37	589-59-3	$C_9H_{18}O_2$	158.20	999.00	0.139 2	0.194 6	0.093 8		
	19	Isopentylformate	甲酸异戊酯	427.25	1.28	110-45-2	$C_6H_{12}O_2$	116.20	773.40	0.040 1	0.092 8	0.045 2		
	20	Linalylacetate	乙酸芳樟酯	1 935.35	1.22	115-95-7	$C_{12}H_{20}O_2$	196.30	1 509.30	0.455 5	0.054 4	0.234 4	甜的、水果	
	21	Methyl2-methylbutanoate	2-甲基丁酸甲酯	912.42	1.18	868-57-5	$C_6H_{12}O_2$	116.20	1 053.30	0.682 3	0.243 2	0.536 0	苹果	
	22	Methylacetate	乙酸甲酯	445.51	1.19	79-20-9	$C_3H_6O_2$	74.10	788.00	1.571 2	1.828 2	1.661 3		
	23	methylN-methyl-anthranilate	邻甲氨基苯甲酸甲酯	1 656.63	1.27	85-91-6	$C_9H_{11}NO_2$	165.20	1 406.90	6.464 7	5.300 7	6.249 6		
	24	Phenethylisobutyrate	2-甲基丙酸苯乙酯	1 665.23	1.39	103-48-0	$C_{12}H_{16}O_2$	192.30	1 410.30	0.195 5	0.445 5	0.179 9		
	25	Propylacetate	乙酸丙酯	685.27	1.47	109-60-4	$C_5H_{10}O_2$	102.10	938.90	0.316 3	0.325 1	0.321 0		

续表4

类别	序号	英文名称	中文名称	保留时间/s	迁移时间/ms	CAS 号	分子式	相对分子质量	保留指数	相对含量/%			气味描述	备注
										A	B	C		
醛类	1	(E,E)-2,4-heptadienal	反式-2,4-庚二烯醛	1 874.02	1.19	4313-03-5	$C_7H_{10}O$	110.20	1 488.10	0.932 4	0.835 9	0.699 6	坚果、脂肪	
	2	(Z)-6-Nonenal	(Z)-6-壬烯醛	1 787.29	1.17	2277-19-2	$C_9H_{16}O$	140.20	1 456.90	0.062 6	0.818 7	0.058 8		
	3	2,6-Dimethyl-5-heptenal	甜瓜醛	1 495.78	1.16	106-72-9	$C_9H_{16}O$	140.20	1 339.70	0.032 4	0.563 8	0.029 2	水果、甜瓜	
	4	2-Methylpropanal	2-甲基丙醛	507.42	1.10	78-84-2	C_4H_8O	72.10	833.60	0.036 3	0.242 9	0.035 4		
	5	3-methylbutanal	3-甲基丁醛	558.92	1.21	590-86-3	$C_5H_{10}O$	86.10	867.50	2.996 8	2.266 7	3.308 1	麦芽	
	6	acrolein	丙烯醛	519.09	1.06	107-02-8	C_3H_4O	56.10	841.60	0.404 2	0.136 8	0.252 3		
	7	Butanal	丁醛	521.84	1.28	123-72-8	C_4H_8O	72.10	843.40	0.349 8	0.377 8	0.295 3	刺鼻的	
	8	Cyclamenaldehyde	兔耳草醛	1 750.04	1.36	103-95-7	$C_{13}H_{18}O$	190.30	1 443.00	0.313 1	0.366 2	0.494 9		
	9	Furfurol	糠醛	504.67	1.34	98-01-1	$C_5H_4O_2$	96.10	831.70	0.169 7	0.803 2	0.152 9	杏仁、面包	
	10	Piperonalpropyleneglycolaceta	洋茉莉醛丙二醇缩醛	431.73	1.11	61683-99-6	$C_{11}H_{12}O_4$	208.20	777.00	0.068 0	0.066 7	0.230 1		
	11	Propanal(D)	正丙醛	445.85	1.15	123-38-6	C_3H_6O	58.10	788.30	0.039 9	0.107 4	0.020 3	刺激性溶剂	单体
	12	Propanal(M)	正丙醛	417.26	1.07	123-38-6	C_3H_6O	58.10	765.10	0.620 5	0.298 0	0.717 9	刺激性溶剂	二聚体
醇类	1	(E)-2-Hexen-1-ol	反式-2-己烯-1-醇	1 731.70	1.56	928-95-0	$C_6H_{12}O$	100.20	1 436.10	1.495 0	1.245 3	1.382 8	叶子、核桃	
	2	1-Octen-3-ol	1-辛烯-3-醇 ;	1 749.47	1.16	3391-86-4	$C_8H_{16}O$	128.20	1 442.80	0.087 2	0.108 6	0.075 4	蘑菇	
	3	1-propanethiol	丙硫醇	573.34	1.33	107-03-9	C_3H_8S	76.20	876.40	0.253 8	0.558 3	0.252 5		
	4	2,6-Dimethoxyphenol	紫丁香醇 (又名 2,6- 二甲氧基苯酚)	1 538.70	1.33	91-10-1	$C_8H_{10}O3$	154.20	1 358.30	0.436 2	0.393 7	0.532 7	甜香、药味、苯酚、烟味	
	5	2-Butanol	2- 甲基丙醇	934.42	1.16	78-92-2	$C_4H_{10}O$	74.10	1 064.50	1.603 4	1.565 2	1.972 3		
	6	2-furanmethanethiol	糠 (基) 硫醇	1 656.06	1.11	98-02-2	C_5H_6OS	114.20	1 406.70	0.226 3	0.223 4	0.195 0	烤咖啡	
	7	2-furanmethanol	糠醇	620.04	1.36	98-00-0	$C_5H_6O_2$	98.10	903.80	0.540 0	0.858 5	0.372 0	燃烧	
	8	2-Propanol	2- 丙醇	644.76	1.09	67-63-0	C_3H_8O	60.10	917.50	1.183 2	1.256 1	1.433 5		
	9	furanlinalooloxide	α,α-5- 三甲基-5-乙烯基四氢化呋喃-2-甲醇	1 787.29	1.26	60047-17-8	$C_{10}H_{18}O_2$	170.30	1 456.90	0.101 9	0.187 3	0.067 8		
酮类	1	1-Penten-3-one	1-戊烯-3-酮	826.83	1.09	1629-58-9	C_5H_8O	84.10	1 007.00	0.104 3	0.072 8	0.536 1	刺鼻的、鱼	
	2	2-propanone	丙酮	468.24	1.11	67-64-1	C_3H_6O	58.10	805.50	0.555 3	0.311 3	0.428 3		
	3	3-Hepten-2-one	3-庚烯-2-酮	638.58	1.22	1119-44-4	$C_7H_{12}O$	112.20	914.20	0.652 6	0.839 8	0.429 4		
	4	3-Pentanone	3-戊酮	740.76	1.11	96-22-0	$C_5H_{10}O$	86.10	966.10	0.299 4	0.207 6	0.199 3	乙醚	
	5	5-Methyl-2(3H)-furanone	5-甲基-2(3H)-呋喃酮	538.32	1.40	591-12-8	$C_5H_6O_2$	98.10	854.30	0.348 6	0.252 7	0.621 7		
	6	5-methyl-2-hepten-4-one	5-甲基-2-庚烯-4-酮	774.23	1.23	81925-81-7	$C_8H_{14}O$	126.20	981.60	0.609 8	0.657 1	0.582 8		
	7	Coumarin	氧杂苯邻酮	1 655.48	1.21	91-64-5	$C_9H_6O_2$	146.10	1 406.50	9.815 3	8.623 6	10.410 7	甜美	
	8	Cyclohexanone	环己酮	1 372.37	1.14	108-94-1	$C_6H_{10}O$	98.10	1 282.20	0.710 7	0.453 1	1.085 1		

续表4

类别	序号	英文名称	中文名称	保留时间/s	迁移时间/ms	CAS 号	分子式	相对分子质量	保留指数	相对含量/%			气味描述	备注
										A	B	C		
醚类	1	2-Butoxyethanol	乙二醇单丁醚	631.71	1.58	111-76-2	$C_6H_{14}O_2$	118.20	910.40	0.318 0	0.182 8	0.770 5		
	2	Diethyltrisulfide	二乙基三硫醚	1 036.17	1.24	3600-24-6	$C_4H_{10}S_3$	154.30	1 114.30	0.055 7	0.357 9	0.053 4		
	3	Diethyleneglycoldimethylether	二乙二醇二甲醚	774.71	1.61	111-96-6	$C_6H_{14}O_3$	134.20	981.80	0.193 7	0.201 1	0.684 8		
	4	dipropyldisulfide	二丙基二硫醚	1 034.69	1.49	629-19-6	$C_6H_{14}S_2$	150.30	1 113.60	1.059 5	1.030 2	1.185 7		
	5	Methylchavicol	4-烯丙基苯甲醚（胡椒酚甲醚）	1 206.87	1.23	140-67-0	$C_{10}H_{12}O$	148.20	1 191.30	0.286 1	0.091 3	0.301 3	甘草、茴香	
	6	p-methylanisole	对甲苯甲醚	1 732.28	1.13	104-93-8	$C_8H_{10}O$	122.20	1 436.30	0.889 7	0.898 1	0.983 4		
吡嗪类	1	2,3,5-Trimethylpyrazine(D)	2,3,5-三甲基吡嗪	1 732.85	1.63	14667-55-1	$C_7H_{10}N_2$	122.20	1 436.50	0.833 5	0.563 0	0.982 5	烤肉、土豆、葡萄汁	单体
	2	2,3,5-Trimethylpyrazine(M)	2,3,5-三甲基吡嗪	1 729.98	1.17	14667-55-1	$C_7H_{10}N_2$	122.20	1 435.40	0.642 9	1.050 8	0.494 0	烤肉、土豆、葡萄汁	二聚体
	3	2,3-Dimethylpyrazine	2,3-二甲基吡嗪	628.28	1.48	5910-89-4	$C_6H_8N_2$	108.10	908.50	0.173 2	0.142 7	0.234 3	坚果、花生酱、热可可、肉	
	4	2,3-dimethyl-5-ethylpyrazine	2,3-二甲基-5-乙基吡嗪	1 768.38	1.22	15707-34-3	$C_8H_{12}N_2$	136.20	1 449.90	0.064 9	0.085 0	0.057 9	烧焦的、爆米花	
	5	2,5-Dimethylpyrazine	2,5-二甲基吡嗪	1 497.60	1.11	123-32-0	$C_6H_8N_2$	108.10	1 340.50	1.101 9	0.855 3	1.124 2		
	6	pyrazine,2-ethyl,3-methyl	2-乙基-3-甲基吡嗪	1 560.46	1.16	15707-23-0	$C_7H_{10}N_2$	122.20	1 367.50	0.377 5	0.195 4	0.579 5	烤肉	
酸类	1	2-Ethylbutanoicacid	2-乙基丁酸	717.54	1.26	88-09-5	$C_6H_{12}O_2$	116.20	955.00	3.874 0	3.418 4	3.834 1		
	2	3-Acetyl-6-methyl-2H-pyran-2,4(3H)-dione	脱氢乙酸	1 782.71	1.31	520-45-6	$C_8H_8O_4$	168.10	1 455.20	2.691 9	2.191 4	2.022 6		
	3	Allylaceticacid	4-戊烯酸	602.87	1.13	591-80-0	$C_5H_8O_2$	100.10	894.00	0.369 6	0.403 1	0.357 5		
呋喃类	1	2-methyl-3-(methylthio)furan	2-甲基-3-甲硫基呋喃	717.33	1.11	63012-97-5	C_6H_8OS	128.20	954.90	0.075 0	0.060 8	0.407 3		
	2	2-Pentylfuran	2-正戊基呋喃	796.70	1.27	3777-69-3	$C_9H_{14}O$	138.20	991.60	0.019 9	0.378 5	0.021 0	绿豆、黄油	
	3	Tetrahydrofuran	四氢呋喃	616.60	1.22	109-99-9	C_4H_8O	72.10	901.90	0.164 9	0.136 5	0.121 9		
其他类	1	1,2-dimethylbenzene	1,2-二甲苯	1 213.55	1.07	95-47-6	C_8H_{10}	106.20	1 194.90	0.477 7	0.411 3	0.380 2	天竺葵	
	2	2,4,5-trimethylthiazole	2,4,5-三甲基噻唑	1 666.95	1.15	13623-11-5	C_6H_9NS	127.20	1 411.00	6.052 0	7.576 3	5.846 0	泥土	
	3	2,6-Dimethylpyridine	2,6-二甲基吡啶	592.57	1.08	108-48-5	C_7H_9N	107.20	888.00	0.109 2	0.130 9	0.100 6		
	4	2-Acetyl-1-pyrroline	2-乙酰基-1-吡咯啉	1 407.53	1.48	85213-22-5	C_6H_9NO	111.10	1 299.60	0.034 8	0.448 6	0.033 3	烤肉、坚果	
	5	2-Acetylpyrrole	2-乙酰基吡咯	933.94	1.48	1072-83-9	C_6H_7NO	109.10	1 064.30	0.313 2	0.434 2	0.390 5		
	6	N-nitrosodiethylamine	N-二乙基亚硝胺	637.20	1.18	55-18-5	$C_4H_{10}N_2O$	102.10	913.40	0.069 7	0.300 2	0.104 9		
	7	Pyridine,2,4,6-trimethyl-	2,4,6-三甲基吡啶	813.44	1.17	108-75-8	$C_8H_{11}N$	121.20	999.30	0.299 2	0.313 8	0.382 1		

注：风味描述来源：https://www.flavornet.org/flavornet.html、https://www.baidu.com。“%”表示体积分数。

2.3 三种桃香醋GC-IMS挥发性化合物相对含量分析

图 4 为河北三种桃香醋挥发性化合物相对含量图，桃香醋的挥发性风味成分经过 GC-IMS 的检测，三种桃香醋共有物质中酯类和醛类物质浓度最高，这与其他研究成果结果一致：酒精发酵、醋酸发酵及陈酿阶段均能生成酯类物质，尤其在醋酸发酵时，酯化反应最为活跃，产生的酯类数量最多[30]。

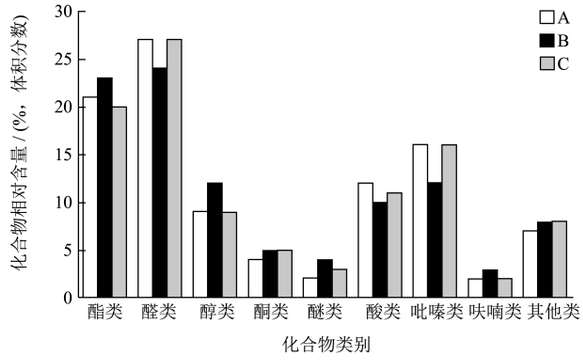


图 4 三种桃香醋中不同类型化合物的相对含量

Fig.4 Relative contents of different types of compounds in three peach balsamic vinegars

图 4 显示三种桃香醋的醛类化合物相对含量均高于其他类化合物。醋中含有大量的氨基酸和还原糖，在发酵过程中会产生美拉德反应，产生类似黑精、糠醛、吡嗪等物质，这些物质对食醋的风味、色泽和稠度有重要影响[31]。同时桃香醋作为固态发酵食醋，其醛类化合物含量比较突出[32]。根据食醋挥发性化合物的研究动态，强调这些风味物质主要是构成食醋香气的关键组分，能够通过人类的嗅觉系统被感知，涵盖了酸类、醇类、酯类、酮类、醛类、酚类以及杂环化合物等多种类型[33]。具体而言，品牌 B 中的酯类、醇类、醚类以及呋喃类化合物的相对含量相较于其他两个品牌要更高。品牌 A 和品牌 C 中的醛类、吡嗪类化合物含量则相对较高。

综上所述，食醋的挥发性成分主要包括醇类、酯类、醛类、酮类、酸类、酚类及杂环化合物等，这些成分均在食醋的发酵过程中自然形成，醋的香气受原料选择、生产工艺及酿造环境的影响，主要由 VOCs 的种类与含量所决定，各品牌桃香醋展现出各自独特的香气特征，根源在于其挥发性化合物组成的差异性。

借助图 5 的指纹图谱，我们能更为直观地发现不同品牌桃香醋在挥发性化合物种类与含量方面所存在的差异。在这张图谱中，A、B、C 分别代表了三种不同品牌的桃香醋样品。从表 4 及图 4 的数据分析中可以看出，每个品牌的桃香醋在挥发性化合物的种类、具体含量以及总数上均呈现出独特的分布特征。尽管这三款桃香醋均采用了固态发酵工艺，并遵循了相同的执行标准（详见表 1），但它们之间的差异仍然显著。

2.4 三种桃香醋GC-IMS挥发性化合物指纹图谱分析

为了更直观具体的分析不同品牌之间挥发性成分的特征，利用 Gallery Plot 插件对三个品牌桃香醋挥发性成分的信号峰体积生成的指纹图谱进行分析，可以直观比较 3 个样品间挥发性化合物组成及相对含量的差异。图 5 右边竖坐标分别表示平行测量 3 次的样品 A、B、C。每行展示同一样品区域，每列对比不同样品在同一区域的表现；颜色深浅反映信号强度：颜色深代表信号强，颜色浅则信号弱；VOCs 峰体积大小与浓度成正比，体积大则浓度高，体积小则浓度低。根据三种桃香醋挥发性成分变化特征，可将指纹图谱划分为 4 个区域。橙色框内为三种品牌共有的含量较为相似的化合物，绿色区域为品牌 B 相对于品牌 A 品牌 C 含量高的化合物，其中红色框选区域 a 是品牌 B 所独有的挥发性化合物，黄色区域是在品牌 A、品牌 C 中含量高，但在品牌 B 中含量少，其中紫色框选区域 b 品牌 B 中未检测出的化合物，蓝色区域是品牌 C 相对于品牌 A、品牌 B 含量高的化合物，其中白色框选区域 c 是品牌 C 所特征性化合物。将这四个区域从左到右记为一区、二区、三区、四区。

2.4.1 指纹图谱一区挥发性化合物分析

由图 5 可知，该区域是三种桃香醋共有的含量较为相似的化合物，包括酯类有 9 种，包括 2-甲基丙酸苯乙酯、乙酸芳樟酯、3-甲基丁酸 2-甲基丙酯、乙酸异丙酯、乙酸乙酯、1,2-丙二醇二乙酸酯、3-甲基丁酸苯甲酯、乙酸甲酯、异硫氰酸烯丙酯；醛类有 8 种，包括丁醛、3-甲基丁醛、洋茉莉醛丙二醇缩醛、2-甲基丙醛、正丙醛、反式-2,4-庚二烯醛、糠醛、甜瓜醛，并且醛类物质因其阈值低、挥发性强，通常被认为是食品风味的重要组成部分[32]，醇类有 3 种 2-丙醇、糠 (基) 硫醇、紫丁香醇（又名 2,6-二甲氧基苯酚）；酮类有 2 种，包括丙酮，氧杂茶邻酮；醚类有 3 种，包括对甲苯甲醚、二乙基三硫醚、二丙基二硫醚；吡嗪类有 3 种，2-乙基-3-甲基吡嗪、2,3,5-三甲基吡嗪、2,5-二甲基吡嗪；酸类有 1 种，是 4-戊烯酸；呋喃类有 1 种是四氢呋喃，是其他类有 5 种，包括 N-二乙基亚硝胺、2,4,5-三甲基噻唑、1,2-二甲苯、2,6-二甲基吡啶、2,4,6-三甲基吡啶。其中乙酸乙酯、甜瓜醛醛贡献了水果香气，紫丁香醇贡献了药香味。

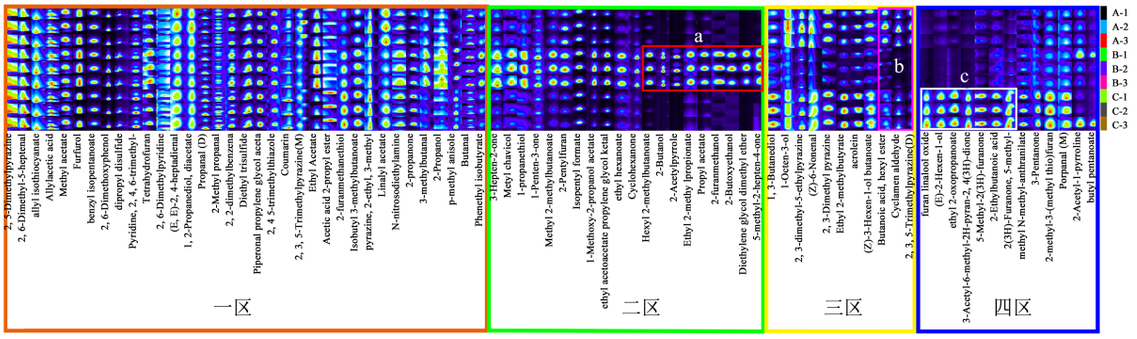


图 5 三种桃香醋 GC-IMS 挥发性化合物指纹图谱

Fig.5 GC-IMS fingerprints of volatile compounds in three peach balsamic vinegars

注：横坐标挥发物质与表 4 对应，M 和 D 分别表示单体和二聚体。

2.4.2 指纹图谱二区挥发性化合物分析

如图 5 所示，二区域的化合物在品牌 B 中浓度较高，其他两个品牌中（品牌 A 品牌 C）这些化合物的浓度较低。其中检测出酯类 8 种，包括乙酸丙酯、2-甲基丙酸乙酯、2- 甲基丁酸己酯、正己酸乙酯、2,4-二甲基-1,3-二恶烷-2-乙酸乙酯、丙二醇甲醚醋酸酯、甲酸异戊酯、2-甲基丁酸甲酯；醇类 3 种，包括糠醇、2-甲基丙醇、丙硫醇；酮类 4 种，5-甲基-2-庚烯-4-酮、环己酮、1-戊烯-3-酮、3-庚烯-2-酮；醚类 3 种，二乙二醇二甲醚、乙二醇单丁醚、4-烯丙基苯甲醚；呋喃类和其他类均为 1 种，分别是 2-正戊基呋喃和 2-乙酰基吡咯。

其中图 5 红色框选区域 a 为品牌 B 特征性化合物，包括乙酸丙酯、2-甲基丙酸乙酯、5-甲基-2-庚烯-4-酮、二乙二醇二甲醚、乙二醇单丁醚、糠醇、2-甲基丙醇、2-乙酰基吡咯。其中 2-甲基丙酸乙酯贡献了甜橡胶香气，糠醇贡献了燃烧香气。

2.4.3 指纹图谱三区挥发性化合物分析

三区中含有 3 种酯类包括 (Z)-丁酸-3-己烯酯、2-甲基丁酸乙酯、1,2-丙二醇二乙酸酯；2 种醛类包括丙烯醛、(Z)-6-壬烯醛；2 种吡嗪类包括 2,3-二甲基吡嗪、2,3-二甲基-5-乙基吡嗪以及 1-辛烯-3-醇在品牌 A、品牌 C 中浓度较高。

其中图 5 紫色框选区域 b 的丁酸己酯、兔耳草醛、2,3,5-三甲基吡嗪仅在 A、C 品牌中检出，是 A、C 品牌的特征性化合物，其中丁酸己酯贡献了苹果皮香气，2,3,5-三甲基吡嗪贡献了烤肉、土豆、葡萄汁香气。

2.4.4 指纹图谱四区挥发性化合物分析

图 5 四区物质包括戊酸丁酯、2-(甲氨基) 苯甲酸甲酯、正丙醛、2-甲基-3-甲硫基呋喃、3-戊酮、2-乙酰基 -1- 吡咯啉，品牌 C 的浓度较其他两个品牌（A、B）高。用白色框 c 选出的 4-羟基-3-戊烯酸内酯、丙酮酸乙酯、2-乙基丁酸、脱氢乙酸、5- 甲基 -2(3H)- 呋喃酮、反式-2-己烯-1-醇（绿色、叶子、核桃香气）、*α*,*α*-5-三甲基-5-乙烯基四氢化呋喃-2-甲醇，仅在 C 品牌中检出，由此可知，这些化合物为品牌 C 特征性化合物。其中反式-2-己烯-1-醇贡献了绿色、叶子、核桃香气。

2.5 三种桃香醋基本理化性质分析

讨论三种不同品牌桃香醋的基本理化性质，包括总糖、总酸以及色度值的不同结果时，使用 SPSS 进行单因素方差分析（One-Way ANOVA）来总结三种不同品牌桃香醋的基本理化性质（总糖、总酸、色度值）的结果，根据 ANOVA 和事后比较的结果，总结三种不同品牌桃香醋在总糖、总酸和色度值上的显著差异。结果如表 5 所示。

表 5 三种品牌桃香醋的理化性质

Table 5 Physicochemical properties of three brands of peach balsamic vinegar

类别	A	B	C
*L**	9.49 ± 0.0170^{a}	16.08 ± 0.017^{c}	13.57 ± 0.017^{b}
*a**	29.76 ± 0.008 2^{a}	34.36 ± 0.021 6^{c}	32.69 ± 0.037 4^{b}
*b**	16.34 ± 0.020 5^{a}	27.74 ± 0.028 7^{c}	23.40 ± 0.033^{b}
总糖/(mg·mL^{-1})	1.44 ± 0.70^{a}	2.45 ± 0.52^{a}	2.29 ± 0.06^{a}
总酸/(mg·mL^{-1})	46.84 ± 0.49^{a}	45.04 ± 1.3^{a}	46.84 ± 2.59^{a}

注：数值为平均值 ± 标准误（n=3），表中同一行标记不同小写字母表示差异显著（P＜0.05）。

2.5.1 总酸含量讨论

总酸含量是衡量桃香醋酸味强弱和发酵程度的重要指标。三种桃香醋的总酸含量无显著差别，经计算均符合 GB 2719-2018《食品安全国家标准食醋》中总酸的标准[26]。

2.5.2 总糖含量讨论

桃香醋中的总糖含量是衡量其甜度的重要指标。如表 5 所示，不同品牌的桃香醋在总糖含量上存在显著差异，品牌 B 与品牌 C 总糖含量高于品牌 A。

2.5.3 色度值讨论

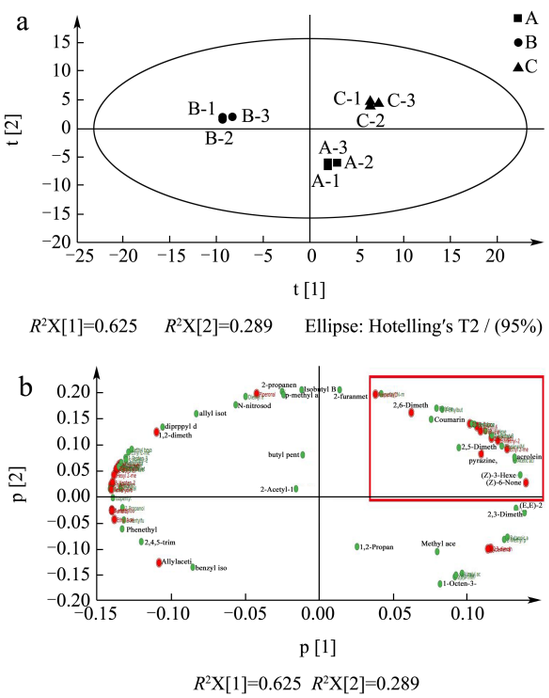
色度值反映了桃香醋的颜色深浅和透明度。三种不同产地的桃香醋 L^*、a^*、b^* 值均存在显著性差异（$P<0.05$）。品牌 B 的三个数值均比另外两个品牌值高，结合图 11 感官评价分析，品牌 B 外观呈现出较深的颜色，而品牌 A、品牌 C 的桃香醋颜色较浅，透明度较高。

2.5.4 综合讨论

综上所述，不同品牌的桃香醋在理化性质上存在显著差异，这些差异使得不同品牌的桃香醋在口感、风味上各具特色。因此，消费者在选择桃香醋时，可以根据自己的口味偏好、烹饪需求和营养价值需求来选择合适的品牌。

2.6 三种桃香醋多元统计分析

2.6.1 三种桃香醋主成分分析



$R^2X[1]=0.625$ $R^2X[2]=0.289$ Ellipse: Hotelling's T2 / (95%)

$R^2X[1]=0.625$ $R^2X[2]=0.289$

图 6 三种桃香醋 PCA 散点得分图 (a) 及载荷图（b）

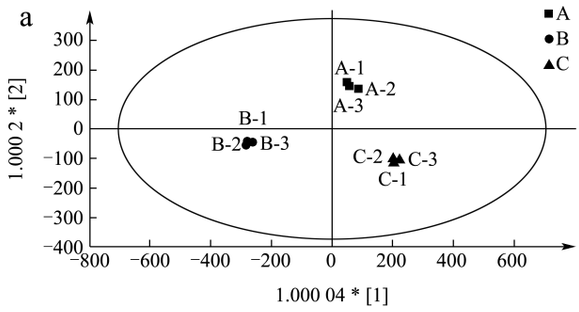
Fig.6 Scatter score plot (a) and loadings (b) of PCA for three peach balsamic vinegars

注：红色圆圈代表 VIP 值＞ 1 的物质。

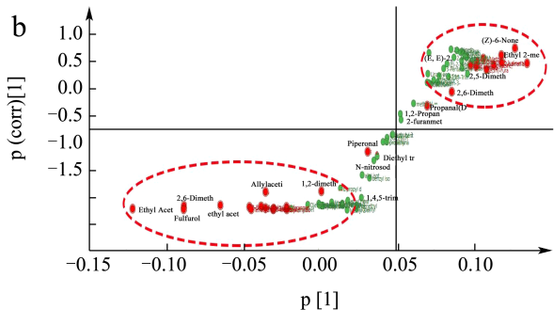
主成分分析（Principal Component Analysis, PCA）是一种将数据降维的基本技术，用于生成主成分变量来消除原始特征变量之间相关性，通常应用于多元统计[35,36]，是在无监督模式下进行的多元统计分析，利用 SIMCA 软件，结果如图 6 所示，R^2X（cum）（累计解释率）为 0.914，Q^2（cum）（整体模型预测能力）为 0.845，说明样本模型的拟合度较高，预测能力较好，具有很好的可靠性，三种不同品牌桃香醋的差异明显。图 6 所示为 PCA 的得分散点图，第一主成分解释率 R^2X 为 0.625，第二主成分解释率 R^2X 为 0.289，在 95% 的置信区间内，三个不同品牌的桃香醋样本点分布广泛且未出现异常值，三组样本之间无重叠现象。这一结果表明，各组桃香醋产品的特征风味物质存在显著差异。结合图 6b 的载荷图，可以清晰地观察到每种桃香醋挥发性风味物质的分布情况。如图 6a 品牌 C 对应图 6b 红色方框内挥发性物质含量较多。

2.6.2 三种桃香醋挥发性化合物OPLS-DA及模型验证

OPLS-DA 模型是一种有监督的判别分析方法，它通过降维技术将复杂数据直观化[37]，利用 OPLS-DA 对不同品牌桃香醋的挥发性有机化合物进行分析，我们获得了三组桃香醋样品的 OPLS-DA 得分图（图 7a），该得分图与主成分分析结果一致，不同的桃香醋样品得到了明显的区分。由图 7a 可以看出，OPLS-DA 模型的拟合效果良好，累积统计量 $R^2X=0.948$，模型解释率参数 $R^2Y=0.996$，预测能力参数 $Q^2=0.989$，这三个参数都在 0.5 以上，显示 OPLS-DA 模型可以很好地预测桃香醋的挥发性化合物。此外，我们还对 OPLS-DA 模型（置换检验 $n=200$）进行了验证，得到的结果见图 8。该验证进一步支持了 OPLS-DA 模型在分析桃香醋挥发性物质方面的可靠性和准确性。



$R^2X[1]=0.740$ $R^2X[2]=0.208$ Ellipse: Hotelling's T2 / (95%)



$R^2X[1]=0.74$

图 7 三种桃香醋 OPLS-DA 得分图（a）和基于 OPLS-DA 模型分析的 S 型载荷图（b）

Fig.7 Plot of OPLS-DA scores for three peach balsamic vinegars (a) and S-loading based on OPLS-DA model analysis (b)

注：红色圆圈表示 VIP 值大于 1 的物质。

图 8 展示了经过置换检验对 OPLS-DA 模型进行的验证结果。从图中可以观察到，R^2 与纵轴相交于点（0，0.34），而 Q^2 与纵轴相交于点（0，−0.639）这两条回归线的斜率较大，且 Q^2 的值为负，这通常被视为统计模型有效的标志，表明模型没有出现过度拟合的现象。基于这一验证结果，我们可以确认该 OPLS-DA 模型具备良好的预测能力，适用于研究不同品牌桃香醋的挥发性风味物质的分类与判别。为进一步找出对不同品牌桃香醋差异起贡献作用的挥发性化合物，在此基础上，构建 OPLS-DA 模式（图 7a）的 S-plot 图（图 7b）及 VIP 图（图 9），在 S-plot 图中，S 型曲线两端的点代表着对分类有较大贡献的变量，这些点具有较高的可信度；而离原点越近的点则表示对分类贡献不大的变量。

VIP 值是桃香醋样品中每种挥发性化合物对桃香醋样品的风味影响程度大小的量化指标，VIP 值越大，差异越显著，可以分析得到潜在的标志化合物。经过对 3 种桃香醋样品挥发性化合物筛选，从图 9 可清楚看出共筛选了 27 种 VIP ＞1（图 9 红色区域）的挥发性化合物。以 VIP 值大于 1 为界限来筛选并结合 S-plot 图（图 7b）可知乙酸乙酯(VIP=2.51975)、紫丁香醇(又名 2,6-二甲氧基苯酚，VIP=2.151 76)、糠醛（VIP=1.983 95）、乙丙烯乙二醇缩酮乙酯（VIP=1.797 16）、4-戊烯酸（VIP=1.779 29）、兔耳草醛（VIP=1.601 18）、2-甲基丙醇（VIP=1.449 95）、甜瓜醛（VIP=1.383 22）、4-羟基-3-戊烯酸内酯（VIP=1.383 01）、2-乙酰基吡咯（VIP=1.354 29）、四氢呋喃（VIP=1.344 69）、2,3-二甲基 -5- 乙基吡嗪（VIP=1.275 96）、2-甲基丁酸己酯（VIP=1.260 52）、2-甲基丁酸乙酯（VIP=1.187 15）、脱氢乙酸（VIP=1.167 38）、3-庚烯-2-酮（VIP=1.153 36）、丙二醇甲醚醋酸酯（VIP=1.146 93）、2-乙基-3-甲基吡嗪（VIP=1.127 09）、(Z)-6-壬烯醛（VIP=1.124 06）、糠醇（VIP=1.089 22）、5-甲基 -2(3H)-呋喃酮（VIP=1.063 91）、1,2-二甲苯（VIP=1.035 63）、*α*,*α*-5-三甲基-5-乙烯基四氢化呋喃-2-甲醇（VIP=1.026 74）、2,6-二甲基吡啶（VIP=1.017 8）、3-甲基丁醛（VIP=1.013 91）这 25 种挥发性风味化合物对桃香醋不同品牌差异贡献最大，其种类和含量差异具有潜在鉴定桃香醋品牌、品质的作用。

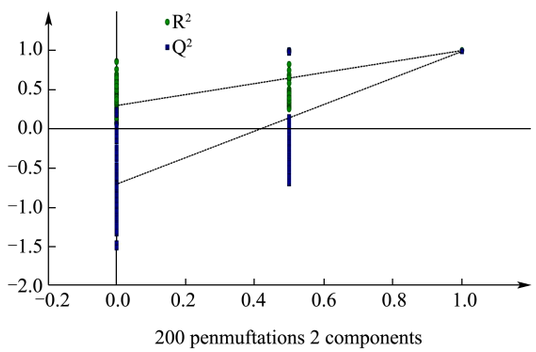


图 8 三种桃香醋 OPLS-DA 置信检验结果

Fig.8 Confidence test results of three peach balsamic vinegar OPLS-DA

注：R^2=(0.0, 0.34)，Q^2=(0.0, −0.639)。

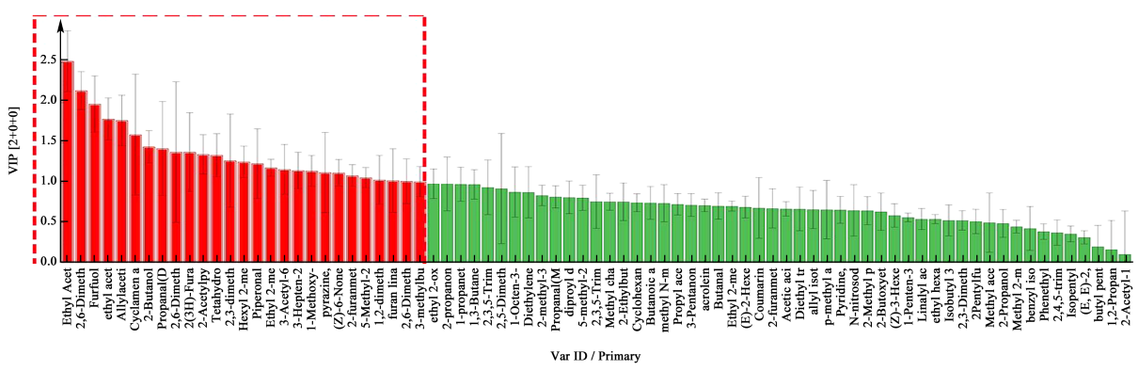


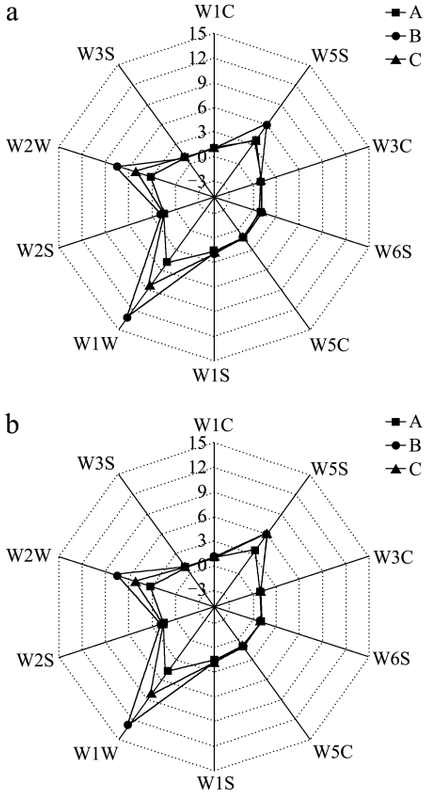
图 9 三种桃香醋 OPLS-DA 分析的 VIP 值

Fig.9 VIP values for OPLS-DA analysis of three peach balsamic vinegars

2.7 三种桃香醋电子鼻传感器响应值数据分析

为了直观比较和分析各品牌桃香醋的香味特性，我们依据电子鼻传感器对样品的响应峰值绘制了雷达图（见图 10）。观察图 10a 可见，各品牌桃香醋的风味雷达图整体趋势相近，特别是在 W5S、W1W、W2W 三个传感器上，挥发性成分显示出较高的响应，其他传感器的响应则较为微弱。对响应值较大的传感器进行分析，如图 10a 所示，三个样品在 W1W 的响应值最大。结合表 4 的数据，我们可以发现桃香醋中富含酯类和醛类化合物，通过填充区域可以更直观地看出三种存在较大非重合区域，这进一步证实了它们挥发性化合物的差异性。如图 10a、10c 所示，桃香醋三个品牌间挥发性化合物含量有所不同，B 品牌在各主要指标上的反应数值都比其他两个品牌要高，这表明品牌 B 的主挥发性化合物较高，通过对比图 10b 与 10d，可以观察到品牌 A 与品牌 C 在 W5S 传感器上的响应强度是一致的，然而在 W1W 传感器上，品牌 C 的响应高于 A。

图 10b、10c、10d 所示，3 种传感器 W5S、W1W、W2W 响应最强，在所有样本中，W1W 具有最好的鉴别能力，其中品牌 B＞品牌 C＞品牌 A，这表明从不同的传感器信号反应强度来看，样本之间的香气成分差异可以被识别出来，结合表 2，结果表明，不同品牌的桃香醋在氮氧化合物、硫化物以及芳香成分的含量上存在显著差异。



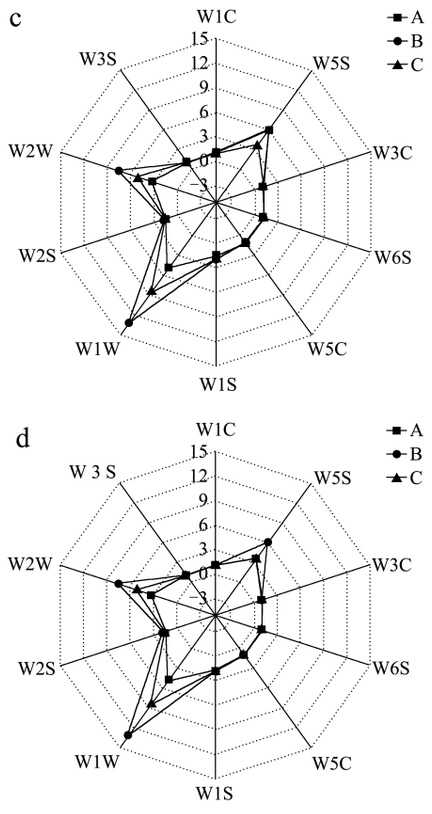


图 10 传感器对三种桃香醋的响应雷达图

Fig.10 Radar plots of sensor response to three peach balsamic vinegars

注：a 为三种桃香醋在电子鼻不同传感器下的响应强度峰值绘制成的雷达图，b、c、d 分别表示品牌 A、B、C 的响应雷达图。

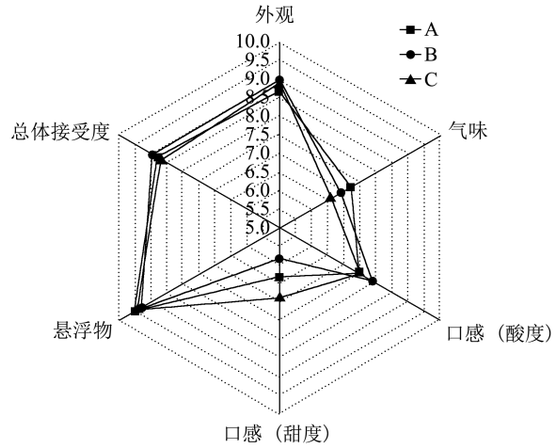


图 11 三种桃香醋感官评定

Fig.11 Sensory evaluation of three kinds of peach balsamic vinegar

2.8 三种桃香醋感官评价分析

根据图 11 所示，评价小组一致认为三种品牌桃香

醋的外观、悬浮物并无显著差异，气味与口感方面对三种品牌的桃香醋存在显著不同的评价。就气味而言，品牌 A 得分最高，表明其桃香气味更为浓郁且持久，超越其他两个品牌。口感，分为酸度和甜度两个维度来评判：品牌 A、B、C 口感上酸度适中，但品牌 B 口感相较于其他两个更酸；甜度口感上三个品牌均为略带甜味，较为柔和，品牌 C 口感上更甜一点。因此，品牌 B 表现为口感爽口且酸味突出，品牌 A 桃香味尤为突出；品牌 C 则位于两者之间，酸甜比例适中。结合表 5 中总酸与总糖的数值，品牌 C 的酸甜度达到了更为和谐的平衡。至于总体可接受度，三种品牌均达到满意的程度。

3 结论

本研究分析了三种不同品牌桃香醋的基础成分，包括总糖、总酸和色度值。结果显示，三个品牌桃香醋的总酸含量均符合标准且无显著差异；总糖含量品牌 B ＞品牌 C ＞品牌 A。结合桃香醋色度值及感官评价，可知品牌 B 在色泽上均高于其他两个品牌，通过 GC-IMS 技术构建了桃香醋的挥发性化合物指纹图谱，共检测到 79 种挥发性化合物，其中酯类和醛类占据主导地位，并揭示了品牌间在醇类、呋喃类及吡嗪类化合物含量上的显著差异。其中 2,5- 二甲基吡嗪、甜瓜醛等 35 种化合物被确定为三种桃香醋的共有标志性化合物，酸丙酯、2- 甲基丙酸乙酯等 8 种化合物为品牌 B 特征物质；丙酮酸乙酯、2-乙基丁酸等 7 种化合物为品牌 C 的特征物质；丁酸己酯、兔耳草醛、2,3,5- 三甲基吡嗪为 A、C 品牌所共有的特征物质。PCA 分析验证了 GC-IMS 数据能有效区分不同品牌桃香醋之间的差异。通过 OPLS-DA 模型以 VIP 值＞1 为界限并结合 S-plot 图筛选出乙酸乙酯、紫丁香醇、糠醛等 25 种潜在挥发性差异化合物，它们是对桃香醋品牌差异贡献最大的化合物。电子鼻检测进一步验证了品牌间在氮氧化合物、硫化物及芳香成分上的差异，品牌 B ＞品牌 C ＞品牌 A。在感官评价上三种桃香醋的可接受程度均达到满意。

综上，三种不同品牌的桃香醋存在显著性差异。本研究揭示了挥发性化合物组成在桃香醋品牌中的差异，为桃香醋的品牌区分、品质评价和真伪辨别提供了新的参考价值。

参考文献

[1] 俞明亮.中国桃新品种选育研究进展[J].落叶果树,2024,56(3):1-5.

[2] 李玥,张纯,王润峥,等.现代食品加工技术在桃加工中的应用与进展[J].河北果树,2023,4:6-8.

[3] BENTO C, GONCALVES AC, SILVA B, et al. Peach (*Prunus persica*): phytochemicals and health benefits [J]. Food Reviews International, 2022, 38(8): 1703-1734.

[4] QI H, LUO J, WU X, et al. Application of nondestructive techniques for peach (*Prunus persica*) quality inspection: a review [J]. Journal of Food Science, 2024, 89(11): 6863-6887.

[5] FULLER S, BECK E, SALMAN H, et al. New horizons for the study of dietary fiber and health: a review [J]. Plant Foods for Human Nutrition, 2016, 71: 1-12.

[6] CHENG C, YAN CY, QI CT, et al. Metabolome and transcriptome analysis of postharvest peach fruit in response to fungal pathogen *Monilinia fructicola* infection [J]. LWT, 2023, 173: 114301.

[7] 吕健,毕金峰,赵晓燕,等.国内外桃加工技术研究进展[J].食品与机械,2012,28(1):268-271,274.

[8] RUDKE CRM, ZIELINSKI AAF, FERREIRA SRS. From biorefinery to food product design: peach (*Prunus persica*) by-products deserve attention [J]. Food and Bioprocess Technology, 2023, 16(6): 1197-1215.

[9] YAN J, BAN Z, LU H, et al. The aroma volatile repertoire in strawberry fruit: a review [J]. Journal of the Science of Food and Agriculture, 2018, 98(12): 4395-4402.

[10] DERMESONLOUOGLOU EK, ANGELIKAKI F, GIANNAKOUROU MC, et al. Minimally processed fresh-cut peach and apricot snacks of extended shelf-life by combined osmotic and high pressure processing [J]. Food and Bioprocess Technology, 2019, 12: 371-386.

[11] ZHOU Y, ZHAO L, YUE S, et al. The molecular networks involved in improving disease resistance in peach fruit induced by *Wickerhamomyces anomalus* [J]. Scientia Horticulturae, 2024, 338: 113762.

[12] 杨晓璇.基于GC-IMS和UPLC-MS/MS代谢组学技术分析不同酱油和食醋中的差异[D].济南:山东师范大学,2020.

[13] CHEN GL, ZHENG FJ, LIN B, et al. Vinegar: a potential source of healthy and functional food with special reference to sugarcane vinegar [J]. Frontiers in Nutrition, 2023, 10: 1145862.

[14] 朱胜虎,崔鹏景,李国权,等.果醋功能性成分的研究现状[J].江苏调味副食品,2021,2:4-8.

[15] OUSAAID D, MECHCHATE H, LAAROUSSI H, et al. Fruits vinegar: quality characteristics, phytochemistry, and functionality [J]. Molecules, 2021, 27(1): 222.

[16] 杨阳,冯昌帅,史小欢,等.不同种类果醋抗氧化活性比较及机制初步探讨[J].潍坊医学院学报,2014,36(6):417-419.

[17] 向进乐,杜琳,刘志静,等.桃醋液态发酵过程中主要成分及有机酸的变化[J].现代食品科技,2015,31(5):193-198.

[18] 方海龙.固态法制蟠桃果醋的工艺优化研究[D].石河子:石河子大学,2014.

[19] 郝春莉.气相离子迁移谱在食品风味分析中的应用[J].化学工程与装备,2015,10:204-205.

[20] 安比芳,陈创业,宋凯洋,等.基于GC-MS和电子鼻探究不同方法提取的玫瑰精油挥发性香气成分[J].中国调味品,2024,49(10):153-160.

[21] GB 12456-2021食品安全国家标准 食品中总酸的测定[S].

[22] 吴平,黄立本,肖家捷,等.食品分析[M].北京:中国轻工业出版

社,2012.
[23] 吕伟,许文琪,黄一承,等.三种热加工方式对猪肉风干肠理化和感官特性影响的研究[J].食品与发酵工业,2023,49(16):196-205.
[24] 乔羽,王艳艳,曾红艳,等.基于电子鼻和电子舌技术对山西老陈醋和老陈醋的风味检测[J].食品与发酵科技,2024,60(2):115-122.
[25] 庞庭才,郝俊光,杨金海,等.毛葡萄果醋的研制及品质分析[J].中国调味品,2023,48(7):137-141.
[26] 中华人民共和国国家卫生健康委员会,国家市场监督管理总局.GB 2719-2018食品安全国家标准食醋[S].北京:中国标准出版社,2018.
[27] CHEN T, CHEN X, LU D, et al. Detection of adulteration in canola oil by using GC-IMS and chemometric analysis [J]. International Journal of Analytical Chemistry, 2018, 1: 3160265.
[28] LI W, CHEN YP, BLANK I, et al. GC×GC-ToF-MS and GC-IMS based volatile profile characterization of the Chinese dry-cured hams from different regions [J]. Food Research International, 2021, 142: 110222.
[29] CAO W, SHU N, WEN J, et al. Characterization of the key aroma volatile compounds in nine different grape varieties wine by headspace gas chromatography-ion mobility spectrometry (HS-GC-IMS), odor activity values (OAV) and sensory analysis [J]. Foods, 2022, 11(18): 2767.
[30] 秦伟军,王建云.食醋酿造中酯类生成及酯化酶的应用研究[J].中国调味品,2020,45(10):126-129.
[31] 黄永涛,卢红梅,崔云,等.食醋中美拉德反应的探讨[J].中国调味品,2010,35(9):29-33.
[32] 李攀恒.四大名醋风味成分分析及镇江香醋香气释放规律研究[D].武汉:湖北工业大学,2020.
[33] 魏世东,王素英,娄婷婷,等.食醋中挥发性风味物质及其检测方法研究进展[J].食品研究与开发,2022,43(24):215-224.
[34] ZHAO G, KUANG G, LI J, et al. Characterization of aldehydes and hydroxy acids as the main contribution to the traditional Chinese rose vinegar by flavor and taste analyses [J]. Food Research International, 2020, 129: 108879.
[35] YANG L, LIU J, WANG X, et al. Characterization of volatile component changes in jujube fruits during cold storage by using headspace-gas chromatography-ion mobility spectrometry [J]. Molecules, 2019, 24: 3904.
[36] CHEN J, TAO L, ZHANG T, et al. Effect of four types of thermal processing methods on the aroma profiles of acidity regulator-treated tilapia muscles using E-nose, HS-SPME-GC-MS, and HS-GC-IMS [J]. LWT, 2021, 147: 111585.
[37] HUANG X, ZHAO L, PANG S, et al. Effects of varieties, cultivation methods, and origins of *Citrus sinensis* 'Hongjiang' on volatile organic compounds: HS-SPME-GC/MS analysis coupled with OPLS-DA [J]. Agriculture, 2022, 12(10): 1725.