基于感官偏好的葡萄酒果香酯类物质与痕量挥发性物质的香气互作研究

崔宝桢[1,2]，郭芊钰[1,2]，李瞳瞳[1,2]，朱保庆[3]，张欣珂[1,2]，李德美[1,2]，凌梦琪[1,2*]

（1.北京农学院食品科学与工程学院，北京 102206）（2.北京农学院，“一带一路”国际葡萄与葡萄酒产业科技创新院，北京 102206）（3.北京林业大学生物科学与技术学院，北京 100083）

摘要：香气是决定葡萄酒感官品质和消费者偏好的重要因素，由多种挥发性物质共同贡献。为探究葡萄酒关键果香酯类与痕量挥发性物质的互作关系，本研究在模拟酒体系中，基于感官喜好度优化了乙酸乙酯、乙酸异戊酯、己酸乙酯和辛酸乙酯的质量浓度配比，结合瞬时（1 min）-顶空固相微萃取-气相色谱-质谱联用技术分析其挥发性。在此基础上，采用描述性分析法探究了丁香酚、*β*-大马士酮和 2-异丁基-3-甲氧基吡嗪（2-Isobutyl-3-methoxypyrazine，IBMP）对混合果香酯感官轮廓的影响。结果表明，39.6 mg Ł$^{-1}$ 乙酸乙酯、5.3 mg Ł$^{-1}$ 乙酸异戊酯、1.2 mg Ł$^{-1}$ 己酸乙酯和 2.0 mg Ł$^{-1}$ 辛酸乙酯的混合体系喜好得分最高，其中乙酸异戊酯和己酸乙酯对感官偏好具有显著正向作用，混合后二者的顶空分配比例有所提高；3 μg·L^{-1} 丁香酚、1.12 μg·L^{-1} *β*-大马士酮和 1 ng Ł$^{-1}$ IBMP 可增强花香、果香和青椒属性，提高喜好度。本研究从感官偏好的角度揭示了关键果香酯和其他 3 种非果香挥发性物质的互作关系，为葡萄酒香气品质调控提供了一定的理论依据。

关键词：葡萄酒；模拟体系；酯类物质；感官互作；挥发性

DOI: 10.13982/j.mfst.1673-9078.2027.10.1085

Aroma Interactions of Wine Fruity Esters and Trace Volatile Compounds Based on Sensory Preference

CUI Baozhen[1,2], GUO Qianyu[1,2], LI Tongtong[1,2], ZHU Baoqing[3], ZHANG Xinke[1,2], LI Demei[1,2], LING Mengqi[1,2*]

(1.Food Science and Engineering College, Beijing University of Agriculture, Beijing 102206, China)(2.“The Belt and Road” International Institute of Grape and Wine Industry Innovation, Beijing University of Agriculture, Beijing 102206, China)(3.School of Biological Science and Technology, Beijing Forestry University, Beijing 100083, China)

Abstract: Aroma is a key determinant of wine sensory quality and consumer preference, which arises from the combined contributions of multiple volatile compounds. To investigate the aroma interactions between key fruity esters in wines and trace volatile compounds, the mass concentration ratios of ethyl acetate, isoamyl acetate, ethyl hexanoate, and ethyl octanoate were optimized based on sensory preference in a model wine matrix. The volatility of the esters in the mixed fruity pool was analyzed using headspace solid-phase microextraction coupled with gas chromatography-mass spectrometry (HS-SPME-GC-MS) with a short extraction time (1 min). Subsequently, the effects of eugenol, *β*-damascenone, and 2-Isobutyl-3-methoxypyrazine (IBMP) on the sensory profile of the mixed ester pool were evaluated using descriptive analysis. The results showed that the highest sensory preference score was obtained with a mixture containing 39.6 mg Ł$^{-1}$ ethyl acetate, 5.3 mg Ł$^{-1}$ isoamyl acetate, 1.2 mg Ł$^{-1}$ ethyl hexanoate, and 2.0 mg Ł$^{-1}$ ethyl octanoate. Isoamyl acetate and ethyl hexanoate exhibited a significant positive effect on sensory preference, and their proportions in the headspace increased after blending. Furthermore, the combined addition of 3 μg·L^{-1} eugenol, 1.12 μg·L^{-1} *β*-damascenone, and 1 ng Ł$^{-1}$ IBMP further enhanced the floral, fruity, and green pepper aroma attributes, resulting in the improvement of sensory preference. This study elucidated the aroma interactions between key fruity esters and three non-fruity volatile compounds from the perspective of sensory preference, providing a theoretical basis for the modulation of wine aroma.

Keywords: wine; simulated matrix; esters; sensory interaction; volatility

收稿日期：2026-07-21；修回日期：2026-09-30；接受日期：2026-10-08

基金项目：宁夏回族自治区重点研发计划“揭榜挂帅”项目（2023BBF01003）；农业农村部葡萄酒加工重点实验室开放课题（KLVE202401）；国家留学基金委资助项目（202511210005）；国家自然科学基金（32502264）

作者简介：崔宝桢（2002-），女，硕士研究生，研究方向：葡萄酒香气，E-mail：18203543218@163.com

通讯作者：凌梦琪（1994-），女，博士，讲师，研究方向：葡萄酒风味化学，E-mail：lingmq@bua.edu.cn

葡萄酒中各类香气物质之间存在着协同、拮抗及叠加等互作形式，涉及物理化学、嗅觉受体和神经感知等层面[1]。这些复杂的互作关系不仅影响香气的表达强度和协调性，也决定了葡萄酒整体风味品质及消费者的感官偏好。酯类物质是葡萄酒发酵香的主要来源，也是形成果香特征的关键挥发性物质，质量浓度范围在几 μg Ł$^{-1}$ 至几百 mg Ł$^{-1}$ 不等。其中，高级醇乙酸酯（如乙酸异戊酯、乙酸异丁酯和乙酸己酯等）可赋予葡萄酒香蕉、菠萝等愉悦的水果香气，是新鲜型葡萄酒发酵香的主要来源[2]。乙酸乙酯是葡萄酒中质量浓度最高的乙酸酯类物质，在较低质量浓度范围内可增强果香甜香，过高则会带来指甲油及溶剂味等负面香气，对果香产生掩蔽作用[3]。此外，己酸乙酯、辛酸乙酯等脂肪酸乙酯类物质贡献主要的浆果类香气[4]。多种酯类物质混合后，由于顶空分配行为的改变，可影响各组分的挥发性及感知强度[5]。

除酯类物质外，葡萄酒中还存在着一些含量较低但香气活性较高的挥发性物质，例如丁香酚（阈值 6 μg Ł$^{-1}$，辛香和烟熏）[6,7]、*β*-大马士酮（阈值 0.14 μg Ł$^{-1}$，玫瑰和蜂蜜）[8]和 2-异丁基-3-甲氧基吡嗪（阈值 1~16 ng Ł$^{-1}$，草本和青椒）[9,10]等。这些痕量挥发性物质即使质量浓度低于阈值时，也可能通过协同或拮抗作用改变其他香气属性的感知，进而影响整体风味品质[11]。

尽管已有研究表明多种酯类物质之间存在协同互作效应，但不同质量浓度比例的酯类物质是否会导致感官喜好的差异尚未明确。此外，葡萄酒果香酯类物质与其他非果香痕量挥发性物质之间的互作现象及其对感官偏好的影响仍有待进一步阐明。因此，本研究选取葡萄酒中 4 种关键果香酯类物质（乙酸乙酯、乙酸异戊酯、己酸乙酯和辛酸乙酯），在简单可控的模拟酒体系中首先基于感官喜好度采用响应面法探究了最优质量浓度配比，结合瞬时（1 min）-顶空固相微萃取-气相色谱-质谱联用技术（Headspace Solid-Phase Microextraction-Gas Chromatography-Mass Spectrometry，HS-SPME-GC-MS）明确混合体系中酯类物质的顶空挥发性。进一步通过正交实验结合描述性分析探究果香酯和丁香酚、*β*-大马士酮和 2-异丁基-3-甲氧基吡嗪（2-Isobutyl-3-methoxypyrazine，IBMP）的香气互作现象，为真实葡萄酒体系中香气互作机制研究提供理论依据。

1 材料与方法

1.1 材料与试剂

色谱级乙醇，上海安谱实验科技股份有限公司；乙酸乙酯（≥99.7%）、乙酸异戊酯（≥99.5%）、己酸乙酯（＞99%）、辛酸乙酯（＞99.5%）、丁香酚（99%）标准品，上海麦克林生化科技股份有限公司；*β*-大马士酮（≥98%）、2-异丁基-3-甲氧基吡嗪（IBMP）（≥99%）标准品，西格玛奥德里奇（上海）贸易有限公司。

1.2 仪器与设备

Agilent 7890 B-5975 C 气质联用仪，美国安捷伦科技有限公司；DB-WAX 色谱柱（30 m×0.25 mm，0.25 μm），美国安捷伦科技有限公司；50/30 μm DVB/CAR/PDMS 萃取头，美国 Supelco 公司。

1.3 实验设计

1.3.1 4 种关键果香酯类物质质量浓度优化

在模拟酒溶液（10%水醇溶液，*V/V*，2 g Ł$^{-1}$ 葡萄糖和 5 g Ł$^{-1}$ 酒石酸，pH 值 3.5）中分别添加乙酸乙酯、乙酸异戊酯、己酸乙酯和辛酸乙酯，开展感官喜好率评价，各物质质量浓度依据其在葡萄酒中的真实质量浓度范围及感官阈值进行设计（表 1）。根据单因素评价结果，采用 Box-Behnken 中心组合设计原理，以感官喜好度（Y）为响应值，建立四因素三水平响应面模型，对 4 种酯类物质的质量浓度配比进行优化。

表 1 4 种酯类物质的单一添加质量浓度及 Box-Behnken 实验因素水平

Table 1 Mass concentrations for single addition and factor levels of the Box-Behnken design for the four esters

Factors	Single-addition mass concentration	Levels		
		-1	0	1
A: 乙酸乙酯/(mg Ł$^{-1}$)	5、10、20、40、80	32	40	48
B: 乙酸异戊酯/(mg Ł$^{-1}$)	0.45、2.04、3.62、5.21、6.80	4.17	5.21	6.25
C: 己酸乙酯/(mg Ł$^{-1}$)	0.9、1.2、1.5、1.8、2.1	0.96	1.20	1.44

D: 辛酸乙酯/(mg Ł$^{-1}$)	0.8、1.2、1.6、2.0、2.4	1.6	2.0	2.4

1.3.2 3 种痕量挥发性物质质量浓度优化

在响应面实验确定的 4 种酯类物质感官喜好度最高配比基础上，于果香池模拟酒体系中分别添加不同质量浓度的丁香酚、*β*-大马士酮和 2-异丁基-3-甲氧基吡嗪（IBMP），开展感官喜好率评价，各物质质量浓度依据其在葡萄酒中的真实质量浓度范围及感官阈值进行设计（表 2）。根据单因素评价结果，以感官喜好度为评价指标，设计三因素三水平正交实验。依据正交实验确定的感官喜好度最高配比，进一步在果香池中分别添加及共同添加 3 种痕量挥发性物质开展感官描述性分析。

表 2 果香池溶液中 3 种痕量挥发性物质的单一添加质量浓度及正交实验因素水平

Table 2 Mass concentrations for single addition and factor levels of the orthogonal design for the three trace volatiles in the fruity pool matrix

Factors	Single-addition mass concentration	Level 1	Level 2	Level 3
A: 丁香酚/(μg·L^{-1})	0.75、1.50、3.00、6.00、12.00	1.5	3.0	6.0
B: *β*-大马士酮/(μg·L^{-1})	0.07、0.14、0.28、0.56、1.12	0.28	0.56	1.12
C: IBMP/(ng Ł$^{-1}$)	0.5、1.0、2.0、4.0、8.0	0.5	1.0	2.0

1.4 实验方法

1.4.1 感官分析方法

本研究共招募 33 名葡萄酒专业学生组成感官评价候选小组，分为 Panel 1（33 名评价员，男性 10 名、女性 23 名，年龄范围 18~25 岁）、Panel 2（18 名评价员，男性 4 名、女性 14 名，年龄范围 21~25 岁）和经过系统感官评价培训的 Panel 3（12 名评价员，男性 2 名、女性 10 名，年龄范围 20~25 岁）。所有评价员均知悉实验内容，并自愿参加本研究。所有感官评价均在标准感官品评室内完成，室温控制在 20 ℃。采用符合 ISO 3591:1977 标准的无色玻璃品评杯，每份样品体积为 25 mL，并采用随机三位数字编码。多轮实验之间设置 10 min 休息时间，以减少嗅觉疲劳。所有感官评价问卷均通过问卷星平台设计。

1.4.1.1 感官喜好率评价

参考 Du 等[12]的方法进行调整。由 Panel 1 完成 1.3.1 和 1.3.2 中单一物质不同质量浓度的感官喜好率评价。实验过程中，向评价员呈送添加单一目标香气物质的梯度溶液，各样品的呈送顺序和三位随机编码均采用随机化设计。评价员通过嗅闻比较不同质量浓度样品，在其中选择最喜欢的一个样品，以每个样品被选择的比率作为感官喜好率。

1.4.1.2 感官喜好度评分

参考 Michael 等[13]的实验进行调整。由 Panel 1 完成 1.3.1 中响应面实验和 1.3.2 中正交实验的感官喜好度评分。评价员依据整体香气感受，对样品整体感官喜好程度进行 100 分制评分，以评分结果作为感官喜好度。

1.4.1.3 三点检验

参考 Lan 等[14]的实验方法进行调整。由 Panel 2 采用三点检验法，评价不同质量浓度的丁香酚、*β*-大马士酮和 IBMP 在两种基质（空白模拟酒溶液和果香池溶液）中的可识别性。每组样品包含 2 份相同样品和 1 份不同样品，样品排列顺序采用 ABB、BAB、BBA、BAA、ABA 和 AAB 六种随机组合。评价员通过嗅闻辨别其中存在差异的样品，统计识别正确率。

1.4.1.4 描述性分析（Descriptive Analysis，DA）

参考 Liu 等[15]的方法进行调整。首先，由候选小组中 6 名具有丰富感官评价经验的评价员对果香池及添加 3 种痕量挥发物的混合样品进行香气轮廓预评价，经讨论、合并和筛选后，确定果香、花香、甜香、奶油香、青椒 5 个核心香气属性作为评价指标。随后，由 Panel 3 完成 1.3.2 中的描述性分析。采用 10 分制进行评分，其中 0 分表示“无或极弱”，9 分表示“极强”。

1.4.2 挥发性分析方法

基于响应面实验得到的感官喜好度最高的酯类物质质量浓度，采用瞬时-顶空固相微萃取-气相色谱-质谱联用分析方法（1 min-HS-SPME-GC-MS）对 4 种酯类物质的单一体系和混合体系进行挥发性测定。依据 Zhang 等[16]的方法进行调整，具体为：取 5 mL 样品和 1.5 g NaCl 置于 20 mL 的顶空瓶中，于 40 ℃平衡 30 min 后用 2 cm 聚

二甲基硅氧烷/碳筛/二乙烯苯（DVB/CAR/PDMS）50/30 μm 萃取头萃取吸附 1 min，10:1 分流模式进样，进样口温度 250 ℃，热解吸 8 min。气相色谱升温模式起始 40 ℃保持 5 min，后按 5 ℃ min^{-1} 升温至 100 ℃保持 1 min，再按 3 ℃ min^{-1} 升至 165 ℃，后运行 250 ℃，5 min。电子轰击电离源（EI），离子源温度 230 ℃，质谱接口温度 250 ℃，离子能 70 eV，四极杆温度 150 ℃，质量扫描范围 29~350 u。利用 MSD ChemStation Data Analysis 软件进行峰面积积分，用香气物质特征离子的绝对峰面积表示酯类物质的释放量[17]。每个样品做 3 个平行。

1.4.3 数据分析

响应面实验采用 Design-Expert 8.0.6 软件（Stat-Ease Inc.，美国）设计并分析结果，正交实验设计采用 SPSSAU 设计并分析结果，雷达图采用 Origin 2024 软件（OriginLab，美国）绘制，其他分析和绘图采用 GraphPad Prism 9.0 软件（GraphPad Software，美国）。

2 结果与讨论

2.1 单一果香酯类物质对感官喜好率的影响

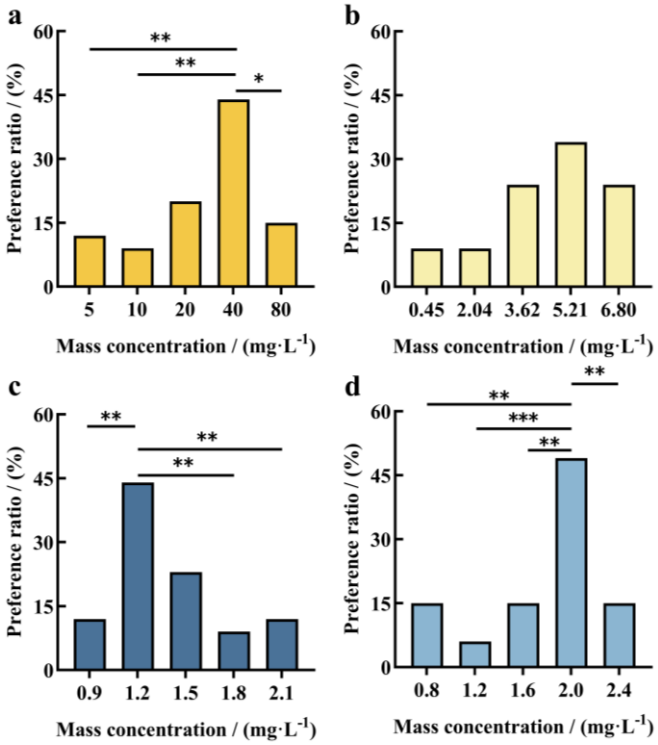


图 1 4 种酯类物质在不同质量浓度下的感官喜好率

Fig.1 Sensory preference rates of the four esters at different mass concentrations

注：a 乙酸乙酯；b 乙酸异戊酯；c 己酸乙酯；d 辛酸乙酯；柱状图上的*表示与感官喜好率最高的质量浓度之间存在显著性差异（Fisher 精确检验，*表示 $P<0.05$、**表示 $P<0.01$、***表示 $P<0.001$）。

酯类是葡萄酒中挥发性香气的核心组分，作为酵母酒精发酵的主要产物，葡萄酒中已检出的酯类物质超 150 种[18]，其中乙酸乙酯、乙酸异戊酯、己酸乙酯、辛酸乙酯是贡献果香的关键酯类物质，其质量浓度差异直接影响葡萄酒的感官喜好率。本研究结果表明，4 种果香酯类物质的感官喜好率均随质量浓度增加呈现先升高后降低的变化趋势，其中乙酸乙酯、己酸乙酯和辛酸乙酯感官喜好率达到最高的质量浓度与其他质量浓度之间存在显著性差异（图 1）。

乙酸乙酯在质量浓度为 40 mg L^{-1} 时感官喜好率最高（图 1a）。前人研究表明，乙酸乙酯在适宜质量浓度下能够增加葡萄酒香气的复杂性，而质量浓度超过约 50 mg L^{-1} 时易产生刺激性溶剂气味等负面感官特征[19]。随着质量浓度继续升高，过强的乙酸乙酯可能会破坏整体香气的协调性，导致感官喜好率降低。乙酸异戊酯在质量浓度为 5.21 mg L^{-1} 时感官喜好率最高（图 1b）。乙酸异戊酯可赋予葡萄酒热带果香与新鲜香蕉香气，当质量浓度继续升高时，则易出现指甲油味、溶剂味等感官特征，对香气带来负面影响[20]。己酸乙酯在质量浓度为 1.2 mg L^{-1} 时感

官喜好率最高（图 1c）。己酸乙酯被证实是影响风味演变的重要酯类香气物质，具有较强的果香贡献[21]。本研究中，适宜质量浓度的己酸乙酯有效提升了感官喜好率，推测与其增强果香特征并丰富整体香气轮廓有关。辛酸乙酯的感官喜好率在质量浓度为 2 mg Ł$^{-1}$时最高（图 1d）。当超过这一质量浓度后，这类中长链的脂肪酸乙酯会逐渐呈现出皂味、蜡味、脂肪味等不愉悦的香气特征，从而降低感官喜好率。

2.2 混合果香酯类物质的感官喜好度和顶空挥发性差异

基于单一酯类物质的最优感官喜好质量浓度，采用 Box-Behnken 中心组合设计，以乙酸乙酯（A）、乙酸异戊酯（B）、己酸乙酯（C）、辛酸乙酯（D）为考察因素，感官喜好度（Y）为响应值，进行四因素三水平响应面优化实验，共设计 29 组实验（表 3）。

通过对实验数据的拟合，得到感官喜好度评分与 4 种酯类质量浓度的二次多项回归方程为：Y=85.69-0.21A+0.37B+0.40C+0.09D-0.17AB+0.14AC+0.10AD+0.27BC+0.30BD+0.06CD-1.79A^2-1.98B^2-1.35C^2-1.30D^2 对回归模型进行方差分析（表 4），模型整体极显著（P<0.000 1），失拟项不显著（P=0.956 0），表明模型拟合良好，无系统偏差。模型决定系数 R^2=0.92，调整决定系数 R^2_{Adj}=0.84，说明该模型可解释 84%的响应值变化，具有较高的可信度和良好的预测能力。

由方差分析可知，主效应乙酸异戊酯（B）和己酸乙酯（C）对感官喜好度评分的影响显著（P<0.05），而乙酸乙酯（A）和辛酸乙酯（D）影响不显著（P>0.05）。二次项 A²、B²、C²、D² 的 P 值均<0.000 1，对感官喜好度评分的影响极显著，说明各酯类对香气响应的影响具有明显的质量浓度依赖性，在一定质量浓度范围内，酯类质量浓度的增加可增强香气表现，但超过适宜质量浓度后，则可能出现香气过浓或失衡的问题。Espinase 等[22]在对白葡萄酒核果香气组分的研究中进一步证实，挥发性物质的香气贡献并非简单随质量浓度线性变化，组分间存在复杂的相互作用。对于交互影响来说，本研究中各酯类间交互作用均未达到显著水平（表 4，图 2），可能是由于实验设置的各酯类质量浓度均接近其各自的风味阈值范围，尚未达到能触发显著协同效应的质量浓度比例。通过 Design-Expert 8.0.6 软件对响应面实验结果进行计算分析，在本实验设定的质量浓度梯度中，得到预测最优添加质量浓度为：39.6 mg Ł$^{-1}$ 乙酸乙酯、5.3 mg Ł$^{-1}$ 乙酸异戊酯、1.2 mg Ł$^{-1}$ 己酸乙酯、2.0 mg Ł$^{-1}$ 辛酸乙酯，这一质量浓度下理论感官喜好度评分为 85.75 分。为后续实验提供了最优酯类质量浓度基础。

基于最优酯类物质质量浓度配比，进一步探究混合体系中酯类物质顶空分配比例的差异（图 3）。与单独添加相比，混合添加后乙酸乙酯、乙酸异戊酯（P<0.05）和辛酸乙酯（P<0.05）的顶空含量均下降，而己酸乙酯含量显著上升（P<0.05）。由图 3b 和图 3c 可知，该质量浓度下乙酸异戊酯相对顶空分配比例最高，是香气的主要贡献者。此外，混合后乙酸异戊酯和己酸乙酯的分配比例均有所提升。由表 4 可知，乙酸异戊酯（r=0.37）与己酸乙酯（r=0.40）的回归系数为正（P<0.05），说明其对于感官喜好度具有正向作用，混合添加后这两种酯类顶空所占比例有所升高可能是提高感官喜好的原因之一。

表 3 4 种酯类物质质量浓度配比优化的 Box-Behnken 实验结果

Table 3 Box-Behnken results for optimizing the mass concentration ratio of the four esters

Run	Factors/mg Ł$^{-1}$				Preference scores
	A: Ethyl acetate	B: Isoamyl acetate	C: Ethyl hexanoate	D: Ethyl octanoate	
1	32	5.21	0.96	2.0	82.37
2	40	6.25	1.44	2.0	83.59
3	32	5.21	1.20	2.4	82.57
4	40	5.21	1.20	2.0	86.32
5	48	6.25	1.20	2.0	81.57
6	48	5.21	0.96	2.0	81.91
7	40	4.17	1.20	1.6	82.74
8	40	5.21	1.20	2.0	86.78
9	32	6.25	1.20	2.0	82.83
10	40	4.17	1.20	2.4	81.87
11	32	5.21	1.20	1.6	82.43

12	40	5.21	1.20	2.0	85.09
13	40	5.21	1.44	1.6	82.96
14	40	6.25	0.96	2.0	82.04
15	48	5.21	1.44	2.0	83.26
16	40	4.17	1.44	2.0	81.78
17	40	6.25	1.20	2.4	82.96
18	32	5.21	1.44	2.0	83.17
19	40	6.25	1.20	1.6	82.61
20	40	5.21	1.20	2.0	85.35
21	40	5.21	0.96	1.6	82.74
22	48	4.17	1.20	2.0	81.43
23	40	5.21	0.96	2.4	83.09
24	32	4.17	1.20	2.0	82.00
25	40	5.21	1.44	2.4	83.55
26	40	4.17	0.96	2.0	81.30
27	48	5.21	1.20	1.6	82.09
28	48	5.21	1.20	2.4	82.61
29	40	5.21	1.20	2.0	84.91

表 4 响应面二阶模型的方差分析

Table 4 ANOVA analysis of surface quadratic models

Sources	Regression coefficient (r)	Sum of squares	Degrees of freedom	Mean square	F-value	*P*-value	Significance
模型		50.53	14	3.61	11.22	<0.000 1	***
A-乙酸乙酯	-0.21	0.52	1	0.52	1.62	0.224 1	ns.
B-乙酸异戊酯	0.37	1.66	1	1.66	5.16	0.039 5	**
C-己酸乙酯	0.40	1.96	1	1.96	6.11	0.026 9	**
D-辛酸乙酯	0.09	0.09	1	0.09	0.30	0.595 5	ns.
AB	-0.17	0.12	1	0.12	0.38	0.549 5	ns.
AC	0.14	0.07	1	0.07	0.23	0.639 9	ns.
AD	0.10	0.04	1	0.04	0.12	0.735 2	ns.
BC	0.27	0.29	1	0.29	0.89	0.361 8	ns.
BD	0.30	0.37	1	0.37	1.15	0.301 3	ns.
CD	0.06	0.01	1	0.01	0.05	0.834 7	ns.
A^2	-1.79	20.85	1	20.85	64.82	<0.000 1	***
B^2	-1.98	25.49	1	25.49	79.26	<0.000 1	***
C^2	-1.35	11.85	1	11.85	36.85	<0.000 1	***
D^2	-1.30	10.92	1	10.92	33.97	<0.000 1	***
残差		4.50	14	0.32			
失拟项		1.83	10	0.18	0.27	0.956 0	ns.
纯误差		2.67	4	0.67			
总和		55.03	28				

注：***影响极显著（$P<0.001$）；**影响显著（$P<0.05$）；ns.影响不显著。$R^2=0.92$，$R^2_{Adj}=0.84$。

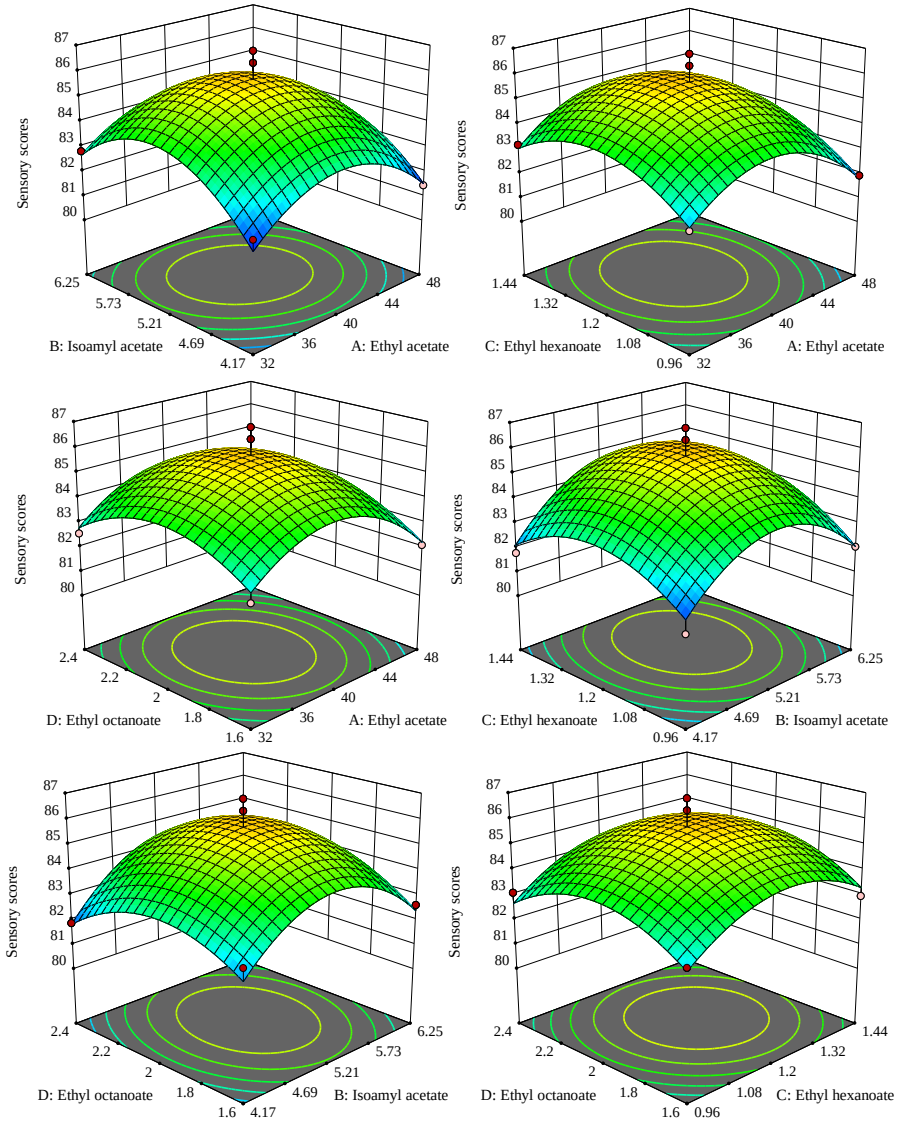


图 2 4 种酯类物质交互作用对感官喜好度影响的响应面图

Fig.2 Response surface plots of the interactive effects of the four esters on preference scores

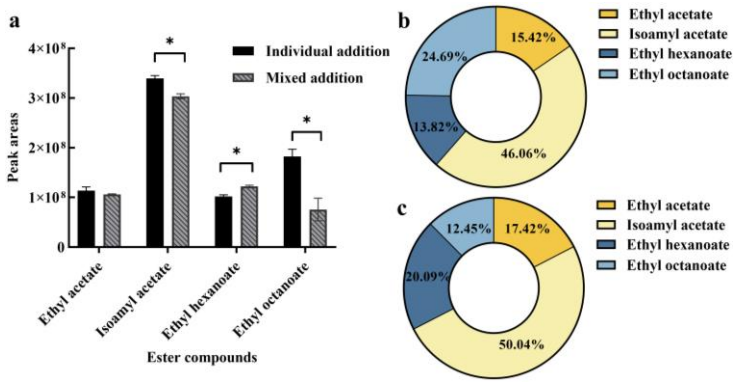


图 3 4 种酯类物质在单独与混合添加条件下顶空挥发性的比较

Fig.3 Comparison of the headspace volatility of four esters under individual and mixed addition

注：a 为 4 种酯类物质在单独添加和混合添加条件下的顶空峰面积，*表示两者间存在显著性差异（t 检验，$P<0.05$）；b 为基于各物质单独添加时的峰面积得到的理论占比；c 为在混合体系中实际测得的各物质峰面积占比。

2.3 单一痕量挥发性物质对果香酯类混合体系感官喜好率的影响

除果香酯类物质外，丁香酚[23]、β-大马士酮[24]和 IBMP[25]等痕量挥发性物质因具有较低感知阈值，也对葡萄酒香气品质具有重要影响。因此，本研究进一步在 4 种酯类物质组成的果香池基质中探究这 3 种痕量挥发物对感官喜好率的影响，结果如图 4 所示。

丁香酚主要来源于橡木桶陈酿，贡献葡萄酒复杂的陈酿香，也被报道是葡萄酒内源性烟熏味的物质基础[7]。由图 4a 可知，丁香酚在质量浓度为 3 μg·L^{-1} 时感官喜好率最高，该质量浓度也位于葡萄酒中丁香酚的实际检出范围内（1.0~8.3 μg·L^{-1}）[26]。β-大马士酮在质量浓度为 0.56 μg Ł$^{-1}$ 时感官喜好率最高（图 4b）。Benoit 等[8]研究发现，在乙醇水溶液中 β-大马士酮添加量为 0.05 μg Ł$^{-1}$ 时就可以增强己酸乙酯的果香，与酒中的己酸乙酯产生极强的协同效应，使酒体闻起来更甜美、果味更丰富。本研究中，当质量浓度超过 0.56 μg·L^{-1} 后感官喜好率有所降低，可能由于 β-大马士酮的甜腻感凸显，改变了香气组成的平衡性。IBMP 在质量浓度为 1 ng Ł$^{-1}$ 时感官喜好率显著最高，超过 2 ng Ł$^{-1}$ 后降至 0（图 4c）。IBMP 感知阈值极低，在 2 ng Ł$^{-1}$ 时即可表现出青椒和青豆等生青类香气[27]。Michael 等[13]在葡萄酒中添加 IBMP 后也发现，随着 IBMP 质量浓度增加，葡萄酒的花香和果香减弱，而草本和泥土的香气特征逐渐增强。结合本研究结果推测，当 IBMP 质量浓度超过 2 ng Ł$^{-1}$ 后，其青椒香特征进一步增强，对果香表达产生一定的掩蔽作用，削弱了整体香气的协调性，进而降低感官喜好率。

综上，在本实验设定的质量浓度梯度中，3 种痕量挥发物的单一最优感官喜好质量浓度分别为：3 μg·L^{-1} 丁香酚、0.56 μg·L^{-1} β-大马士酮、1 ng Ł$^{-1}$ IBMP。因此，后续实验将以此为基础，进一步优化 3 种痕量挥发性物质与果香酯类物质的质量浓度比例。

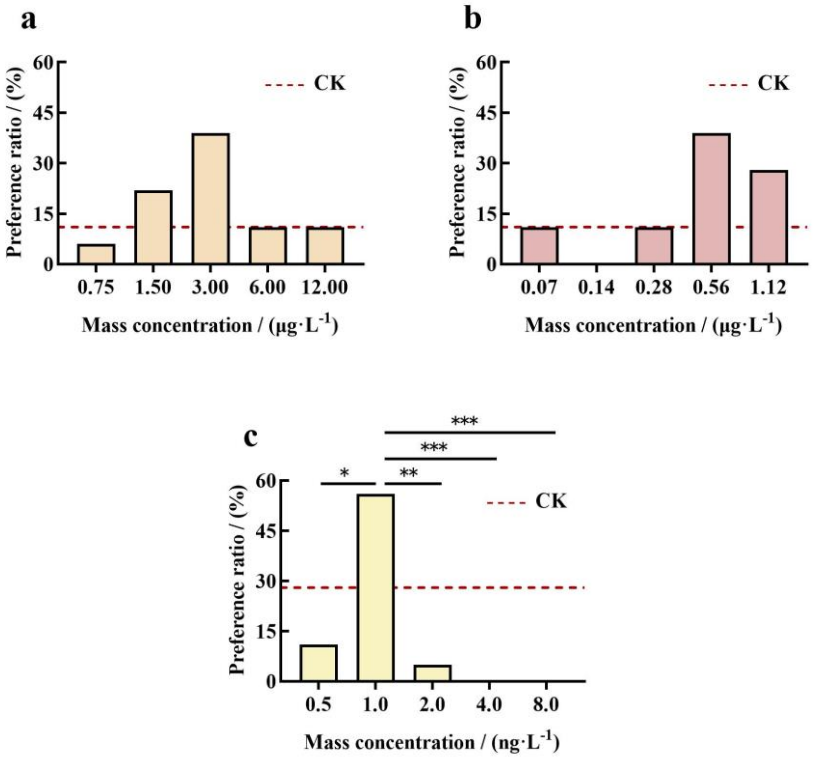


图 4 不同质量浓度的 3 种痕量挥发物在果香池体系中的感官喜好率

Fig.4 Sensory preference rates of three trace volatiles at different mass concentrations in the fruity pool matrix

注：CK 表示每组中空白果香池体系；a 果香池添加丁香酚；b 果香池添加 β-大马士酮；c 果香池添加 IBMP；柱状图上的*表示与喜好率最高的质量浓度之间存在显著性差异（Fisher 精确检验，*表示 P<0.05、**表示 P <0.01、***表示 P<0.001）。

2.4 基于正交实验的痕量挥发物最优质量浓度配比优化

依据单因素实验结果，确定丁香酚、β-大马士酮、IBMP 三种物质的质量浓度水平，以感官喜好度评分为评价指标，进行三因素三水平正交实验（表 5）。极差分析结果显示，3 种物质影响感官喜好度的主次顺序为 A>C>B，理论最优水平组合为 $A_2B_3C_2$。而在正交实验所设的 9 组处理中，感官喜好度评分最高的组合为 $A_2B_1C_2$，二者存

在差异。为验证理论最优组合的有效性，对两种组合进行感官验证实验，结果显示 $A_2B_3C_2$ 组合的感官喜好度评分为 87.68 分，高于 $A_2B_1C_2$ 组合的 82.00 分，同时得分也高于纯果香池溶液。最终确定 3 种痕量挥发物在果香池中的最优组合为 $A_2B_3C_2$，即 3 μg·L^{-1} 丁香酚、1.12 μg·L^{-1} *β*-大马士酮、1 ng·L^{-1} IBMP。

进一步采用描述性分析法，探究丁香酚、*β*-大马士酮和 IBMP 对 4 种酯类物质组成的果香池溶液香气轮廓的影响（图 5）。t 检验结果表明，相较于果香池溶液，7 种物质混合后花香（$P<0.001$）、果香（$P<0.05$）和青椒（$P<0.05$）的感知强度显著提升，增加了整体香气的复杂性，可能是其感官喜好度评分较高的原因。

由图 5 可知，单一添加丁香酚增强了果香和奶油属性。三点实验结果显示，该质量浓度的丁香酚（3 μg·L^{-1}）加入空白模拟酒溶液中的正确识别率仅为 17%，低于识别阈，但将其加入果香池后识别率提高至 72%，表明果香酯类物质的存在能够提升丁香酚的感官可识别性。Liu 等[28]也发现，没食子酸等酚酸类可与乙酸酯类香气物质发生相互作用，调控酯类释放与感知，促进葡萄酒中香气的保持并增强果香。与果香池相比，添加 *β*-大马士酮后能提高甜香、花香和果香。*β*-大马士酮本身具有蜂蜜样、花香香气[29]，因此评价员对甜香这一感官属性的感知可能与蜂蜜香气特征的联想有关。*β*-大马士酮也被报道与酯类物质之间存在协同作用，会进一步影响葡萄酒果香感知[30]。

IBMP 是“赤霞珠”等葡萄品种中重要的甲氧基吡嗪类物质，是葡萄酒品种源青椒香的重要贡献物质。本研究中，1 ng·L^{-1} 的 IBMP 在空白模拟酒溶液中识别率为 100%，而在果香溶液体系中识别率降至 67%，表明果香酯类物质对 IBMP 的感知具有一定的掩蔽作用。Benoit 等[8]也发现，在模拟酒溶液中加入具有花果香特征的香气物质后，会掩盖 IBMP 的草本香气。然而，并非所有吡嗪类物质与酯类物质均表现出相同的互作规律。例如，具有烘烤香特征的 2,3,5-三甲基吡嗪与酯类物质表现为协同作用[31]，说明吡嗪类物质与酯类物质之间的感官互作可能与其分子结构特征密切相关，尤其会受到甲氧基取代基构型的影响。此外值得注意的是，葡萄酒中 IBMP 产生的青椒风味并非不良，在适宜质量浓度下与丁香酚、*β*-大马士酮共同添加后，可增强混合果香体系中的青椒香、花香和果香的香气属性，使香气组成更加协调，进而提高整体感官喜好度。这表明，痕量挥发性物质对葡萄酒香气的影响不仅取决于单一物质的感官特征，更依赖于不同挥发性组分之间的协同与平衡作用。

表 5 正交实验结果分析

Table 5 Analysis of orthogonal experimental results

Run	Factors			Preference scores
	A: Eugenol	B: *β*-Damascenone	C: IBMP	
1	1	1	1	76.94
2	1	2	2	83.12
3	1	3	3	82.53
4	2	1	2	87.24
5	2	2	3	85.18
6	2	3	1	86.76
7	3	1	3	80.18
8	3	2	1	79.76
9	3	3	2	80.29
k_1	80.86	81.45	81.15	
k_2	86.39	82.69	83.55	
k_3	80.08	83.19	82.63	
极差	6.31	1.74	2.40	
主次顺序	A>C>B			
优水平	$A_2B_3C_2$			

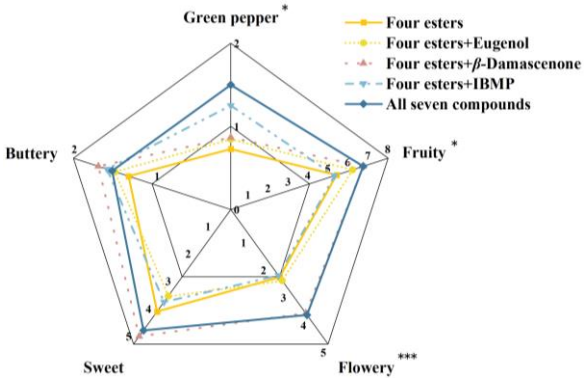


图 5 果香池体系中添加三种痕量挥发物的香气轮廓差异

Fig.5 Aroma differences in the addition of three trace volatiles in the fruity pool matrix

注：*表示果香池与 7 种物质混合体系之间存在显著性差异（t 检验，*表示 $P<0.05$、***表示 $P<0.001$）。

3 结论

本研究在模拟酒体系中系统探究了 4 种关键果香酯类物质（乙酸乙酯、乙酸异戊酯、己酸乙酯和辛酸乙酯）与 3 种痕量挥发性物质（丁香酚、*β*-大马士酮和 IBMP）单独添加及复配条件下的感官互作规律，明确了在本实验设置质量浓度范围内获得较高感官喜好度的质量浓度配比，即 39.6 mg Ł$^{-1}$ 乙酸乙酯、5.3 mg Ł$^{-1}$ 乙酸异戊酯、1.2 mg Ł$^{-1}$ 己酸乙酯、2.0 mg Ł$^{-1}$ 辛酸乙酯、3 μg·L^{-1} 丁香酚、1.12 μg·L^{-1} *β*-大马士酮、1 ng Ł$^{-1}$ IBMP。结合 1 min-HS-SPME-GC-MS 分析结果发现，4 种酯类物质混合后其顶空挥发比例发生变化，其中乙酸异戊酯和己酸乙酯顶空占比的增加有利于提高感官喜好度。此外，非果香类痕量挥发性物质与果香酯类之间也存在感官互作效应。与单一果香体系相比，添加丁香酚可增强花香和果香特征，*β*-大马士酮能够增强甜香，而吡嗪类物质 IBMP 赋予的青椒香在适宜质量浓度下有助于提升香气协调性和感官喜好度。研究结果基于组分相对简单的模拟酒体系，从感官偏好的角度揭示了葡萄酒关键果香酯类与痕量挥发性物质之间的感官互作规律，对葡萄酒香气品质调控具有一定的参考价值，为后续在真实葡萄酒体系中的验证提供了理论依据。

参考文献

[1] LI Y G, ZHANG Q Y, LIU X X, et al. Flavor interactions in wine: Current status and future directions from interdisciplinary and crossmodal perspectives [J]. Comprehensive Reviews in Food Science and Food Safety, 2025, 24(3): e70199.

[2] JAN H S, EVELINE J B, PAUL A H, et al. Yeast and bacterial modulation of wine aroma and flavor [J]. Australian Journal of Grape and Wine Research, 2005, 11(2): 139-173.

[3] TOMASZ T, AGNIESZKA D. Volatilomics of fruit wines [J]. Molecules, 2024, 29(11): 2457.

[4] HUANG L X, GE Q, PENG B Z. Yeast-derived esters in wine: Biosynthesis, regulation, and metabolic engineering [J]. Comprehensive Reviews in Food Science and Food Safety, 2026, 25(1): e70395.

[5] MATHIEU C, GEORGE L, JEROME B. Static headspace analysis using low-pressure gas chromatography and mass spectrometry, application to determining multiple partition coefficients: A practical tool for understanding red wine fruity volatile perception and the sensory impact of higher alcohols [J]. Analytical Chemistry, 2018, 90(18): 10812-10818.

[6] 王诗,凌梦琪,李亚男,等.不同类型橡木桶陈酿干红葡萄酒中橡木源挥发性香气物质差异分析[J].中国酿造,2023,42(5):56-63.

[7] YANG W X, YOU Y Z, LING M Q, et al. Identification of the key odor-active compounds responsible for varietal smoky aroma in wines made from the East Asian species [J]. Food Research International, 2023, 171: 113052.

[8] BENOIT P, JEAN-CLAUDE B, CHRISTINE V L, et al. Which impact for *β*-damascenone on red wines aroma? [J]. Journal of Agricultural and Food Chemistry, 2007, 55(10): 4103-4108.

[9] 孙翔宇,王悦,程果,等.葡萄酒中生青味物质及其调控措施研究进展[J].食品科学技术学报,2025,43(4):15-24+34.

[10] PASCAL R G, DENIS D, BERNARD B D, et al. Handbook of Enology [M]. Chichester: John Wiley & Sons Ltd, 2021: 215.

[11] ZHAO P T, QIAN Y P, HE F, et al. Comparative characterization of aroma compounds in Merlot wine by LiChrolut-EN-based aroma

extract dilution analysis and odor activity value [J]. Chemosensory Perception, 2017, 10(4): 149-160.

[12] DU H Z, LU H B, TUO S X, et al. Predicting minty compounds binary mixtures' pleasantness by odor intensity in aqueous solutions [J]. Journal of Food Science, 2023, 88(11): 4693-4704.

[13] MICHAEL M, FRANZ F B, VITTORIO P, et al. Investigation of olfactory interactions of low levels of five off-flavor causing compounds in a red wine matrix [J]. Food Research International, 2020, 128: 108878.

[14] LAN Y B, GUO J X, QIAN X, et al. Characterization of key odor-active compounds in sweet Petit Manseng (*Vitis vinifera* L.) wine by gas chromatography-olfactometry, aroma reconstitution, and omission tests [J]. Journal of Food Science, 2021, 86(4): 1258-1272.

[15] LIU J, ZHANG X, ZHU Y, et al. Exploring the aroma profiles and color characteristics of Chardonnay wines from the eastern foothills of Ningxia Helan Mountain in China: A flavoromics approach [J]. Food Chemistry: X, 2024, 24: 102038.

[16] ZHANG B, SHI X, ZHANG Y, et al. The implication of phenolic acid matrix effect on the volatility of ethyl acetate in alcohol-free wine model: Investigations with experimental and theoretical methods [J]. Food Chemistry, 2022, 378: 132114.

[17] 周心语,张德为,吕佳恒,等.棕榈酸乙酯对葡萄酒口腔内果香释放与感官感知的影响[J].食品科学技术学报,2026,44(2):67-81+109.

[18] WU L, ZHENG F, LI H Y, et al. Effect of hydroxycinnamic acids on ester-improving and aroma-enhancing of Cabernet Sauvignon red wine and its mechanism [J]. Food Research International, 2025, 217: 116763.

[19] 李华.葡萄酒品尝学[M].北京:科学出版社,2006:94-95.

[20] 樊杉杉,管桂坤,苏雅芝,等.采用 GC-O-MS 结合香气活力值分析兰陵美酒香气活性组分特征[J].食品与发酵工业,2021,47(1):243-249.

[21] ZHOU J, RAO W, HU S, et al. Unveiling aroma evolution in Chinese Te-flavor baijiu with ageing times using GC-IMS, GC-O-QTOF and electronic sensory techniques [J]. Food Chemistry, 2025, 491: 145250.

[22] ESPINASE N D, SIEBERT T, WATSON F, et al. Understanding the interactive effects of volatile compounds contributing to ‘stone fruit’ aroma nuances in white wines [J]. Australian Journal of Grape and Wine Research, 2022, 28(3): 424-438.

[23] LING M Q, CHAI R X, XIANG X F, et al. Characterization of key odor-active compounds in Chinese Dornfelder wine and its regional variations by application of molecular sensory science approaches [J]. Food Chemistry: X, 2023, 17: 100598.

[24] JEREMY M, GAVIN S, JANET V H, et al. Glycosylated aroma compound responses in 'Riesling' wine grapes to cluster exposure and vine yield [J]. Hort Technology, 2013, 23(5): 581-588.

[25] LIANG C, RASTKO R, VELIMIR J, et al. Chemical and sensory evaluation of magnetic polymers as a remedial treatment for elevated concentrations of 3-Isobutyl-2-methoxypyrazine in Cabernet Sauvignon grape must and wine [J]. Journal of Agricultural and Food Chemistry, 2018, 66(27): 7121-7130.

[26] VICENTE F, RAFAEL L. The actual and potential aroma of winemaking grapes [J]. Biomolecules, 2019, 9(12): 818.

[27] ZHAO P T, GAO J X, QIAN M, et al. Characterization of the key aroma compounds in Chinese Syrah wine by gas chromatography-olfactometry-mass spectrometry and aroma reconstitution studies [J]. Molecules, 2017, 22(7): 1045.

[28] LIU C Y, ZHENG F J, LI H Y, et al. Thermodynamics and quantum mechanical insights into benzoic acid-acetate ester interactions for aroma modulation and controlled release in wine [J]. Food Chemistry, 2025, 483: 144286.

[29] JEROME G, STEPHANIE T, LAURENCE B, et al. Enhancing fruity notes in model red wine solutions with varietal aroma compounds: A sensory approach focused on *β*-damascenone and *β*-ionone [J]. Journal of Food Composition and Analysis, 2026, 151: 108999.

[30] JEROME G, MATHIEU C, LAURE R, et al. Development of a new method for the quantitative analysis of aroma compounds potentially related to the fruity aroma of red wines [J]. Journal of Agricultural and Food Chemistry, 2023, 71(35): 13066-13078.

[31] 田数,赵怡凡,董露,等.果香物质与烘烤香吡嗪类化合物香气相互作用研究[J].现代食品科技,2026,42(3):323-332.