

白酒中 57 种组分酯类、醇类和酸类的分析

刘海侠

(浙江福立分析仪器股份有限公司, 浙江省温岭市 317500)

摘要: 样品被气化后, 经色谱柱分离, 由于被测定组分在气液两相中具有不同的分配系数, 分离后的各待测组分按先后顺序流出色谱柱, 进入氢火焰离子化检测器检测, 内标法定量分析。

关键词: 白酒; 酯类; 醇类; 酸类

1 参考标准

《白酒分析方法》(GB/T 10345-201X) (征求意见稿)

《食品安全国家标准 食品中甲醇的测定》(GB5009.266-2016)

《白酒质量标准 第 1 部分: 浓香型白酒》(GB/T1078.1-2021)

《白酒质量标准 第 9 部分: 芝麻香型白酒》(GB/T1078.9-2021)

2 试剂和材料

2.1 试剂

2.1.1 乙醇: 色谱纯。

2.1.2 标准溶液: 白酒中 57 种组分, 中国食品工业发酵研究所。

2.1.3 叔戊醇、乙酸正戊酯、2-乙基丁酸内标标准物质纯度 $\geq 99\%$ 。

2.1.4 乙醇溶液 (60%, 体积分数): 量取 60 mL 乙醇 (2.1.1), 用水定容至 100mL, 混匀。

2.2 仪器设备

2.2.1 福立 GC9720Plus 气相色谱仪, 氢火焰检测器 (FID)

2.2.2 DB-WAX UI/60m*0.25mm*0.25 μ m

2.2.3 福立 FL1092T 自动进样器

3 溶液配制

3.1 标准溶液配制

3.1.1 混合标准溶液: 市售白酒混合标准使用溶液 57 组分 (中国食品工业发酵研究所), 各组分浓度如下表:

序号	组分名	浓度[[mg/L]
1	乙醛	798.36
2	正丙醛	17
3	异丁醛	15.88
4	丙酮	14.86
5	甲酸乙酯	53.2
6	乙酸乙酯	2405.16
7	乙缩醛	637.9
8	甲醇	485.32
9	异戊醛	94.12
10	丙酸乙酯	140.1
11	2-戊酮	64.72
12	2-丁醇	37.98
13	丁酸乙酯	180.08
14	正丙醇	1138.38
15	异戊酸乙酯	48.22
16	异丁醇	397.92
17	乙酸异戊酯	17.68
18	2-戊醇	28.74
19	戊酸乙酯	44.6
20	正丁醇	93.7
21	活性戊醇	314.16
22	异戊醇	659.62
23	己酸乙酯	2583.08
24	正戊醇	43.3
25	3-羟基-2-丁酮(乙偶姻)	142.06
26	庚酸乙酯	45.22
27	乳酸乙酯	2535.66

28	正己醇	44.58
29	己酸丁酯	19.68
30	三甲基吡嗪	20.44
31	辛酸乙酯	16.46
32	乙酸	1129.76
33	己酸异戊酯	14.7
34	糠醛	626.08
35	四甲基吡嗪	23.1
36	苯甲醛	25.92
37	丙酸	39.52
38	2, 3-丁二醇 (内)	26.27
39	异丁酸	28.24
40	1, 2-丙二醇	308.7
41	癸酸乙酯	14.12
42	丁酸	232.68
43	丁二酸二乙酯	24.76
44	异戊酸	30.4
45	戊酸	32.48
46	苯乙酸乙酯	98
47	乙酸苯乙酯	76.26
48	己酸	1035.6
49	月桂酸乙酯	16.5
50	β -苯乙醇	89.2
51	庚酸	38
52	十四酸乙酯	15.74
53	辛酸	25.4
54	棕榈酸乙酯	71.3
55	硬脂酸乙酯	8.3
56	油酸乙酯	24.4

57	亚油酸乙酯	35.58
----	-------	-------

3.1.2 叔戊醇、乙酸正戊酯、2-乙基丁酸混合内标溶液(1%，体积分数): 分别吸取叔戊醇、乙酸正戊酯、2-乙基丁酸各 1.0mL 至 100mL 容量瓶中，用乙醇溶液(60%，体积分数)定容，混匀。置 0°C-4°C低温冰箱密封保存。

3.1.3 混合标准使用溶液的配制: 吸取 10.0mL (4.1.1) 购买的 57 种组分的混合标准溶液、加入 0.20mL 叔戊醇、乙酸正戊酯、2-乙基丁酸混合内标溶液 (4.1.2)，充分摇匀。制成如下表浓度的标准使用溶液。各组分含量以下表中对应的内标物计。

序号	组分名	浓度[[mg/L]	内标物
1	乙醛	798.36	乙酸正戊酯
2	正丙醛	17	乙酸正戊酯
3	异丁醛	15.88	乙酸正戊酯
4	丙酮	14.86	乙酸正戊酯
5	甲酸乙酯	53.2	乙酸正戊酯
6	乙酸乙酯	2405.16	乙酸正戊酯
7	乙缩醛	637.9	乙酸正戊酯
8	甲醇	485.32	叔戊醇
9	异戊醛	94.12	乙酸正戊酯
10	乙醇		
11	丙酸乙酯	140.1	乙酸正戊酯
12	2-戊酮	64.72	乙酸正戊酯
13	叔戊醇 (内标)		
14	2-丁醇	37.98	叔戊醇
15	丁酸乙酯	180.08	乙酸正戊酯
16	正丙醇	1138.38	叔戊醇
17	异戊酸乙酯	48.22	乙酸正戊酯
18	异丁醇	397.92	叔戊醇
19	乙酸异戊酯	17.68	乙酸正戊酯
20	2-戊醇	28.74	叔戊醇
21	戊酸乙酯	44.6	乙酸正戊酯

22	正丁醇	93.7	叔戊醇
23	乙酸正戊酯（内标）		
24	活性戊醇	314.16	叔戊醇
25	异戊醇	659.62	叔戊醇
26	己酸乙酯	2583.08	乙酸正戊酯
27	正戊醇	43.3	叔戊醇
28	3-羟基-2-丁酮(乙偶姻)	142.06	乙酸正戊酯
29	庚酸乙酯	45.22	乙酸正戊酯
30	乳酸乙酯	2535.66	乙酸正戊酯
31	正己醇	44.58	叔戊醇
32	己酸丁酯	19.68	乙酸正戊酯
33	三甲基吡嗪	20.44	乙酸正戊酯
34	辛酸乙酯	16.46	乙酸正戊酯
35	乙酸	1129.76	2-乙基丁酸
36	己酸异戊酯	14.7	乙酸正戊酯
37	糠醛	626.08	乙酸正戊酯
38	四甲基吡嗪	23.1	乙酸正戊酯
39	苯甲醛	25.92	乙酸正戊酯
40	丙酸	39.52	2-乙基丁酸
41	2, 3-丁二醇（内）	26.27	叔戊醇
42	异丁酸	28.24	2-乙基丁酸
43	1, 2-丙二醇	308.7	叔戊醇
44	癸酸乙酯	14.12	乙酸正戊酯
45	丁酸	232.68	2-乙基丁酸
46	丁二酸二乙酯	24.76	乙酸正戊酯
47	异戊酸	30.4	2-乙基丁酸
48	戊酸	32.48	2-乙基丁酸
49	2-乙基丁酸（内标）		
50	苯乙酸乙酯	98	乙酸正戊酯

51	乙酸苯乙酯	76.26	乙酸正戊酯
52	己酸	1035.6	2-乙基丁酸
53	月桂酸乙酯	16.5	乙酸正戊酯
54	β -苯乙醇	89.2	叔戊醇
55	庚酸	38	2-乙基丁酸
56	十四酸乙酯	15.74	2-乙基丁酸
57	辛酸	25.4	2-乙基丁酸
58	棕榈酸乙酯	71.3	2-乙基丁酸
59	硬脂酸乙酯	8.3	2-乙基丁酸
60	油酸乙酯	24.4	2-乙基丁酸
61	亚油酸乙酯	35.58	2-乙基丁酸

3.2 样品配制

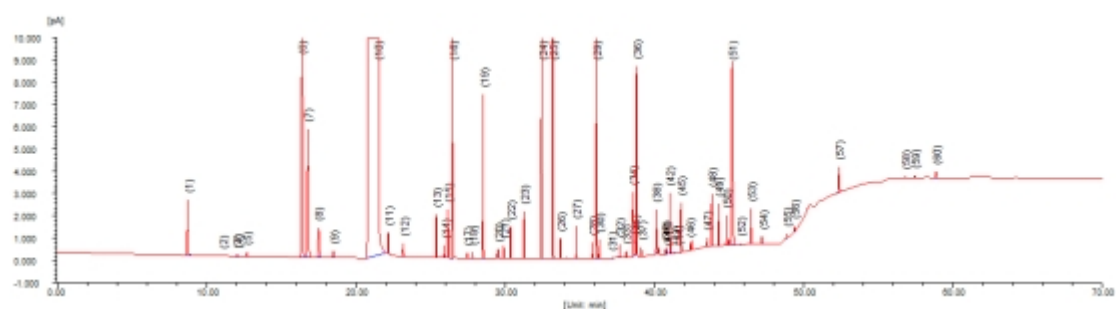
吸取白酒样品于 10mL 容量瓶，定容至刻度，加入 0.2mL 叔戊醇、乙酸正戊酯、2-乙基丁酸混合内标溶液（4.1.2），充分摇匀，待测。

4 测定

4.1 色谱条件

- (1) 进样口：250℃；
- (2) 柱温：初始 30℃，保持 10min，以 1℃/min 升到 40℃，以 6℃/min 升到 100℃，保持 1min，以 8℃/min 升到 200℃，保持 5min，以 15℃/min 升到 230℃，保持 20min；
- (3) 检测器：240℃；
- (4) 流量：初始 0.70 mL/min，保持 22min，以 0.10 mL/min 升至 1.0 mL/min，保持 45min。
- (5) 分流比：50：1；
- (6) 进样量：0.4 μ L。

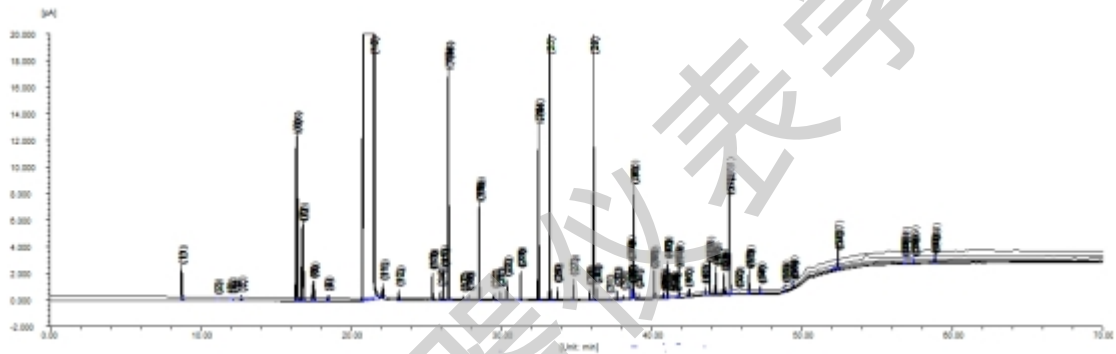
4.2 57 种酯类、醇类和酸类典型谱图



1.乙醛 2.正丙醛 3.异丁醛 4.丙酮 5.甲酸乙酯 6.乙酸乙酯 7.乙缩醛 8.甲醇 9.异戊醛 10.乙醇 11.丙酸乙酯 12.2-戊酮 13.叔戊醇(内标) 14.2-丁醇 15.丁酸乙酯 16.正丙醇 17.异戊酸乙酯 18.异丁醇 19.乙酸异戊酯 20.2-戊醇 21.戊酸乙酯 22.正丁醇 23.乙酸正戊酯(内标) 24.活性戊醇+异戊醇 25.己酸乙酯 26.正戊醇 27.3-羟基-2-丁酮 28.庚酸乙酯 29.乳酸乙酯 30.正己醇 31.己酸丁酯 32.三甲基吡嗪 33.辛酸乙酯 34.乙酸 35.己酸异戊酯 36.糠醛 37.四甲基吡嗪 38.苯甲醛 39.丙酸 40.2,3-丁二醇(内消旋) 41.异丁酸 42.1,2-丙二醇 43.癸酸乙酯 44.丁酸 45.丁二酸二乙酯 46.异戊酸 47.戊酸 48.2-乙基丁酸(内标) 49.苯乙酸乙酯 50.乙酸苯乙酯 51.己酸 52.月桂酸乙酯 53.β-苯乙醇 54.庚酸 55.十四酸乙酯 56.辛酸 57.棕榈酸乙酯 58.硬脂酸乙酯 59.油酸乙酯 60.亚油酸乙酯

4.3 重复性实验

4.3.1 57 种酯类、醇类和酸类标准溶液重复性谱图及结果

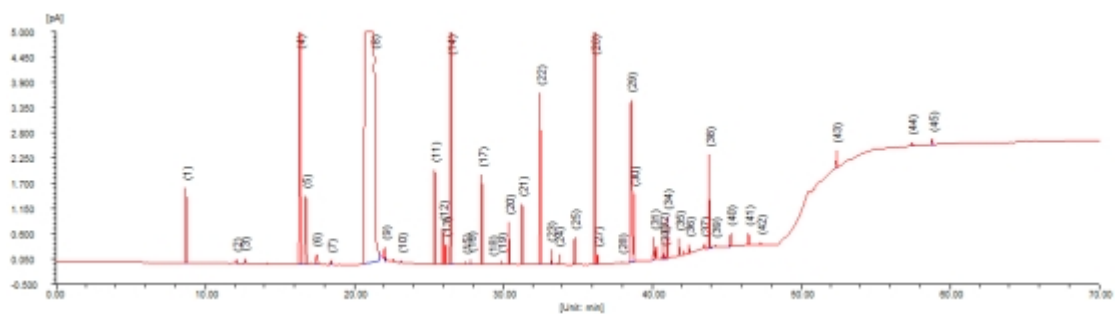


序号	组分名	平均时间 [min]	时间 RSD %	平均面积 [fA*s]	面积 RSD%	平均峰 高[fA]	峰高 RSD%	平均含量 [mg/L]	含量 RSD%	谱图数
1	乙醛	8.766	0.185	9424.3	3.2955	2407	5.2859	792.4434	2.8763	6
2	正丙醛	11.144	0.220	85.7	4.8762	20.6	8.0296	16.4646	5.1321	6
3	异丁醛	12.000	0.233	248.6	5.1273	55.1	7.469	16.1839	2.1132	6
4	丙酮	12.169	0.233	367.4	3.3844	89.0	1.9129	14.7816	5.9685	6
5	甲酸乙酯	12.738	0.225	846.5	2.1399	207.8	2.8627	53.2	1.4619	6
6	乙酸乙酯	16.417	0.211	60135.8	2.2311	12381.8	2.455	2405.16	1.3044	6
7	乙缩醛	16.807	0.208	32270.6	2.0000	5642.1	2.4035	637.9002	1.5434	6
8	甲醇	17.520	0.206	8676.9	3.1691	1287.8	3.5033	485.3201	0.739	6
9	异戊醛	18.499	0.194	1710.2	5.8816	275.7	6.043	94.1	3.0072	6

10	乙醇	21.523	0.166	9364870	1.6351	352492.2	2.2679			6
11	丙酸乙酯	22.181	0.140	3766.9	3.2002	917.5	3.8309	140.1	0.5554	6
12	2-戊酮	23.237	0.111	2231.0	3.9921	594.9	3.5342	64.72	1.2504	6
13	叔戊醇(内标)	25.472	0.064	5268.6	2.8024	1915.7	2.9132			6
14	2-丁醇	26.006	0.060	1511.4	3.6271	581.8	3.181	37.98	0.993	6
15	丁酸乙酯	26.223	0.061	5641.1	3.0437	2122.3	3.3032	180.08	0.5105	6
16	正丙醇	26.535	0.058	43072.8	2.0972	17273.5	1.7393	1138.38	0.7349	6
17	异戊酸乙酯	27.522	0.054	578.6	1.9607	228.8	2.9289	48.22	2.5241	6
18	异丁醇	27.881	0.049	826.2	1.7637	296.2	0.7977	397.92	4.2182	6
19	乙酸异戊酯	28.580	0.051	16424.2	2.5046	7147.8	2.3311	17.68	1.0658	6
20	2-戊醇	29.586	0.044	1009.5	2.9377	424.1	2.6486	28.7726	1.232	6
21	戊酸乙酯	29.963	0.042	1466.7	4.4015	1232.4	134.0396	44.6	3.2864	6
22	正丁醇	30.420	0.043	3368.3	2.8924	1383.8	2.6548	93.7	1.1918	6
23	乙酸正戊酯 (内标)	31.333	0.040	5258.4	3.4974	2058.8	2.7309			6
24	活性戊醇+异 戊醇	32.521	0.033	43190.8	2.2871	13058.8	1.7446	973.7802	0.5674	6
25	己酸乙酯	33.265	0.030	106930.2	1.4549	42971.7	0.995	2583.08	2.0997	6
26	正戊醇	33.769	0.028	2044.1	2.8909	909.2	2.7433	43.3	1.2808	6
27	3-羟基-2-丁酮	34.826	0.028	3238.1	4.2054	1428.6	3.9839	142.06	1.0367	6
28	庚酸乙酯	35.912	0.023	1668.6	3.4778	717.1	3.1223	45.22	0.6817	6
29	乳酸乙酯	36.169	0.023	55543.6	1.9332	26136.3	1.8895	2535.66	1.6049	6
30	正己醇	36.362	0.022	1803.1	3.2548	823	3.0201	44.58	1.0877	6
31	己酸丁酯	37.210	0.027	58.3	6.1180	23.6	4.7428	19.2472	5.1779	5
32	三甲基吡嗪	37.720	0.021	1499.9	3.3189	588.5	2.7901	20.44	2.8442	6
33	辛酸乙酯	38.144	0.02	660.2	2.3000	286.1	3.2131	16.46	3.6054	6
34	乙酸	38.611	0.004	11736.7	6.2818	2620.4	6.7512	1.5795	3.4787	6
35	己酸异戊酯	38.706	0.028	1733.7	5.0706	697	5.771	4.486	6.9548	6
36	糠醛	38.849	0.020	16493.7	2.6681	8247.7	1.9586	622.2938	0.8829	6

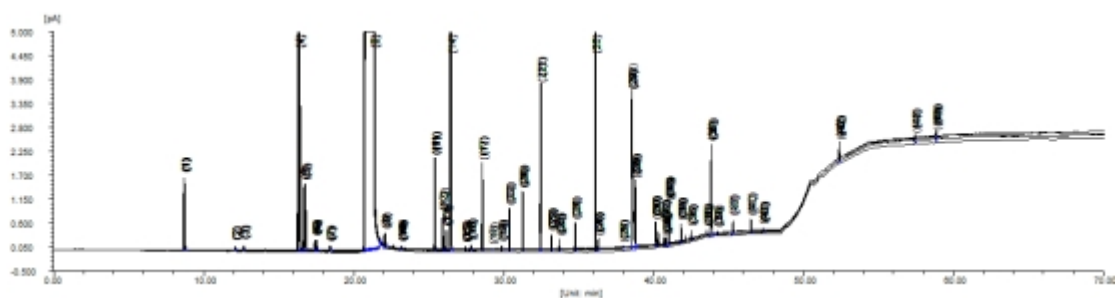
37	四甲基吡嗪	39.154	0.021	925	4.8684	415.2	3.4694	22.769	2.971	6
38	苯甲醛	40.171	0.021	6564.3	3.3715	1910.6	4.5704	25.92	1.8544	6
39	丙酸	40.774	0.022	538.8	3.1223	249.9	5.2821	0.0555	1.6755	6
40	2, 3-丁二醇 (内消旋)	40.842	0.008	695.4	8.6244	285.9	8.5411	26.3607	6.2862	6
41	异丁酸	40.941	0.020	84.0	6.5612	44.8	6.1835	0.0375	4.2403	6
42	1, 2-丙二醇	41.068	0.022	6023	3.5301	2614.1	3.6335	309.2524	1.2024	6
43	癸酸乙酯	41.419	0.021	76.8	9.0474	32	12.3641	13.948	8.322	6
44	丁酸	41.636	0.022	47.4	4.6174	19.7	7.5438	0.3321	6.3459	6
45	丁二酸二乙酯	41.821	0.006	6400.7	3.4275	2592.9	51.927	0.0343	1.066	6
46	异戊酸	42.432	0.022	543.5	2.4703	263.8	3.2156	0.0421	1.664	6
47	戊酸	43.57	0.005	881.9	3.9741	405.4	4.1136	0.0448	1.0705	6
48	2-乙基丁酸 (内标)	43.881	0.005	5975.4	2.9950	2136.7	6.8969			6
49	苯乙酸乙酯	44.321	0.024	4055.5	3.3134	1806.4	3.2919	98	0.3845	6
50	乙酸苯乙酯	44.853	0.025	3110.9	3.3955	1326.8	3.1186	76.26	0.3002	6
51	己酸	45.222	0.010	34066.9	2.9475	7499.1	6.4496	1.4346	0.6798	6
52	月桂酸乙酯	45.814	0.021	118.7	4.6668	43.7	6.6025	16.1486	3.8676	6
53	β -苯乙醇	46.534	0.027	4187	3.1291	1538.5	3.2026	89.2	0.4602	6
54	庚酸	47.295	0.013	1194.5	1.6070	348.1	4.654	0.0526	2.9197	6
55	十四酸乙酯	48.905	0.024	689.1	6.6663	230.7	5.2668	0.0215	5.7293	6
56	辛酸	49.461	0.014	722.8	4.2093	255.4	3.7557	0.0349	5.0821	6
57	棕榈酸乙酯	52.43	0.020	3759.6	8.0391	1099	3.2154	0.0981	7.7269	6
58	硬脂酸乙酯	56.853	0.027	446.4	4.4055	92.3	2.6063	0.0113	5.8207	6
59	油酸乙酯	57.485	0.024	635.7	3.4709	129.1	3.8517	0.0338	0.9903	6
60	亚油酸乙酯	58.885	0.028	1611.8	3.9492	289.3	2.6976	0.0493	1.5449	6

4.3.2 酱香型白酒样品谱图及6针重复性分析结果



峰序	组分名	保留时间[min]	半峰宽[min]	峰高[fA]	峰面积[fA*s]	峰面积[%]	含量[mg/L]
1	乙醛	8.741	0.060	1642.0	6377.0	0.0840	832.4533
2	丙酮	12.139	0.064	83.4	340.9	0.0045	21.2641
3	甲酸乙酯	12.703	0.061	117.4	450.8	0.0059	43.9836
4	乙酸乙酯	16.370	0.075	7793.6	37777.6	0.4979	2345.7588
5	乙缩醛	16.758	0.089	1500.3	8551.5	0.1127	262.4205
6	甲醇	17.484	0.120	235.1	1765.3	0.0233	90.4811
7	异戊醛	18.452	0.091	94.7	533.9	0.0070	45.6504
8	乙醇	21.375	0.397	326248.6	7369476.5	97.1282	
9	丙酸乙酯	22.105	0.073	301.4	1514.3	0.0200	87.4607
10	2-戊酮	23.197	0.058	60.7	212.8	0.0028	9.5901
11	叔戊醇 (内标)	25.447	0.043	2073.3	5749.6	0.0758	
12	2-丁醇	25.982	0.041	792.9	2092.8	0.0276	48.1996
13	丁酸乙酯	26.198	0.042	440.9	1204.3	0.0159	59.6997
14	正丙醇	26.512	0.041	23271.9	61076.1	0.8050	1478.9180
15	异戊酸乙酯	27.502	0.039	62.3	151.0	0.0020	19.5398
16	异丁醇	27.842	0.043	119.5	324.3	0.0043	142.9662
17	乙酸异戊酯	28.610	0.035	1958.4	4479.6	0.0590	7.4870
18	2-戊醇	29.294	0.035	26.2	56.1	0.0007	1.4661
19	戊酸乙酯	29.929	0.040	90.9	236.1	0.0031	11.1482
20	正丁醇	30.418	0.038	933.6	2260.7	0.0298	57.6243
21	乙酸正戊酯 (内标)	31.306	0.040	1325.0	3385.8	0.0446	

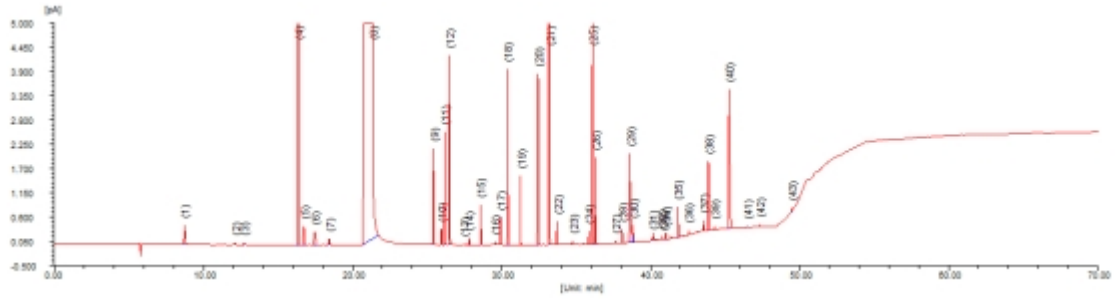
22	活性戊醇+异戊醇	32.511	0.039	3740.3	11068.1	0.1459	228.6399
23	己酸乙酯	33.236	0.039	328.5	814.1	0.0107	30.5261
24	正戊醇	33.760	0.036	228.3	534.0	0.0070	10.3650
25	3-羟基-2-丁酮	34.817	0.036	603.1	1384.4	0.0182	94.3474
26	乳酸乙酯	36.159	0.033	11787.3	25021.6	0.3298	1773.2546
27	正己醇	36.353	0.035	232.1	542.3	0.0071	12.2861
28	辛酸乙酯	38.004	0.035	43.0	117.4	0.0015	4.5430
29	乙酸	38.586	0.074	3549.7	19191.6	0.2529	2.4727
30	糠醛	38.839	0.033	1488.9	3376.1	0.0445	197.7795
31	苯甲醛	40.162	0.048	507.2	1899.9	0.0250	11.6494
32	丙酸	40.763	0.034	409.1	913.6	0.0120	0.0901
33	2, 3-丁二醇 (内消旋)	40.856	0.036	117.3	308.7	0.0041	10.7361
34	1, 2-丙二醇	41.056	0.033	914.8	2098.9	0.0277	98.7653
35	丁二酸二乙酯	41.859	0.038	396.8	980.1	0.0129	0.0050
36	异戊酸	42.539	0.034	196.0	420.6	0.0055	0.0312
37	戊酸	43.572	0.032	100.4	203.2	0.0027	0.0099
38	2-乙基丁酸 (内标)	43.875	0.045	2054.6	6246.1	0.0823	
39	苯乙酸乙酯	44.308	0.036	41.1	91.0	0.0012	3.4167
40	己酸	45.325	0.042	288.9	839.8	0.0111	0.0338
41	β -苯乙醇	46.517	0.041	275.6	746.9	0.0098	14.5812
42	庚酸	47.314	0.044	67.3	188.7	0.0025	0.0079
43	棕榈酸乙酯	52.413	0.050	381.1	1228.2	0.0162	0.0307
44	油酸乙酯	57.459	0.078	84.3	405.1	0.0053	0.0206
45	亚油酸乙酯	58.855	0.085	136.1	735.5	0.0097	0.0215
			总计:	397144.1	7587373.4	100.0000	8059.7256



序号	组分名	平均时间 [min]	时间 RSD%	平均面 积[fA*s]	面积 RSD%	平均峰 高[fA]	峰高 RSD%	平均含 量[mg/L]	含量 RSD%	谱图数
1	乙醛	8.749	0.168	6340.6	0.9471	1656.5	1.0331	827.8252	0.6424	6
2	丙酮	12.153	0.202	346.2	2.9586	85.3	2.7586	21.5994	2.1147	6
3	甲酸乙酯	12.717	0.205	454.5	3.258	118	1.549	44.3412	2.5294	6
4	乙酸乙酯	16.389	0.192	37827.5	1.0575	7840	0.9989	2349.16	0.2649	6
5	乙缩醛	16.776	0.187	8612.8	1.4648	1520.6	1.8046	264.3266	0.6163	6
6	甲醇	17.501	0.184	1789.4	2.4819	238.5	1.7874	91.0517	2.0392	6
7	异戊醛	18.472	0.172	550.5	2.8352	96.8	2.2564	47.0803	3.0759	6
8	乙醇	21.394	0.141	7405564	0.8252	327258.8	0.6407			6
9	丙酸乙酯	22.122	0.124	1502.8	1.6234	302.4	1.4363	86.8083	0.9338	6
10	2-戊酮	23.214	0.1	206.1	3.0728	59.6	3.0148	9.2864	2.8917	6
11	叔戊醇 (内标)	25.456	0.057	5791.7	1.4085	2090	1.4281			6
12	2-丁醇	25.991	0.052	2115.9	1.6665	803	1.9816	48.3761	0.3423	6
13	丁酸乙酯	26.208	0.054	1202.4	0.456	443.9	1.0555	59.6162	0.7092	6
14	正丙醇	26.52	0.049	61462.5	1.2012	23629	2.0119	1477.48	0.2118	6
15	异戊酸乙酯	27.51	0.045	152.4	3.2645	62.6	2.5523	19.7162	2.2015	6
16	异丁醇	27.852	0.047	327	1.8677	119.7	1.4776	143.1223	1.0628	6
17	乙酸异戊酯	28.618	0.043	4509.3	1.335	1974.8	1.6608	7.5376	0.574	6
18	2-戊醇	29.304	0.056	55	3.667	26	1.2836	1.4254	4.9399	3
19	戊酸乙酯	29.936	0.033	240.6	3.9109	92.4	2.3846	11.3595	3.0957	6
20	正丁醇	30.426	0.036	2279.8	1.1251	940.4	1.2768	57.6919	0.4397	6
21	乙酸正戊酯 (内)	31.314	0.031	3385.4	1.1325	1324.9	1.248			6

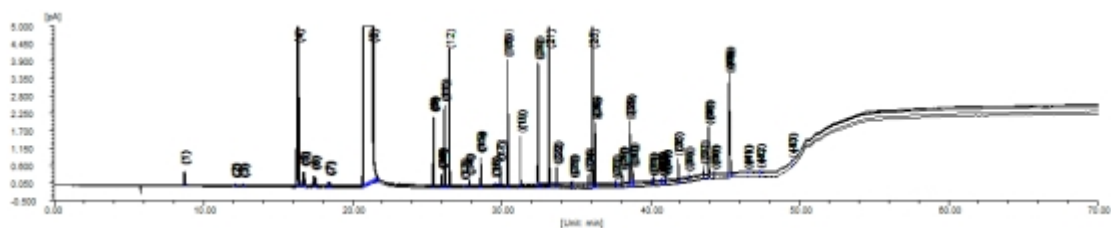
	标)									
22	活性戊醇+异戊醇	32.518	0.027	11129.4	1.2287	3775.8	1.4592	228.2361	0.2014	6
23	己酸乙酯	33.243	0.024	816.1	0.8765	330.7	1.278	30.6045	0.9334	6
24	正戊醇	33.767	0.022	535.7	2.1749	230.9	1.8473	10.3221	1.1235	6
25	3-羟基-2-丁酮	34.824	0.021	1395	1.787	610.2	1.848	95.0724	0.8816	6
26	乳酸乙酯	36.165	0.016	25152.2	1.2519	11920	1.6684	1782.726	0.4512	6
27	正己醇	36.359	0.016	530.6	1.8469	234.5	1.2862	11.9367	2.4113	6
28	辛酸乙酯	38.011	0.015	122.6	4.0373	44.3	2.6505	4.7444	3.8384	6
29	乙酸	38.594	0.017	19278.4	1.1653	3542.6	1.3438	2.559	2.6166	6
30	糠醛	38.846	0.013	3432.9	2.0317	1511.7	1.7743	201.1294	1.4915	6
31	苯甲醛	40.168	0.013	1916.7	1.9132	510.5	1.4227	11.7529	1.0014	6
32	丙酸	40.769	0.013	924.2	1.9882	411.6	2.0088	0.0939	3.2335	6
33	2, 3-丁二醇(内消旋)	40.868	0.023	315.9	3.393	118.2	1.634	10.9062	3.0584	6
34	1, 2-丙二醇	41.063	0.013	2106.9	1.4273	914.9	1.7616	98.4221	0.4452	6
35	丁二酸二乙酯	41.871	0.022	1040.5	5.7772	396	0.7559	0.0055	7.4072	6
36	异戊酸	42.551	0.022	433.1	2.762	199.9	1.9397	0.0331	4.6046	6
37	戊酸	43.584	0.022	207.2	2.5553	99.7	1.5682	0.0104	4.5381	6
38	2-乙基丁酸(内标)	43.887	0.021	6065.9	2.5236	2050.9	0.8035			6
39	苯乙酸乙酯	44.317	0.016	90.4	3.0549	41.2	1.8515	3.3924	2.4109	6
40	己酸	45.34	0.026	782.9	5.8639	271.6	4.9931	0.0325	3.6802	6
41	β -苯乙醇	46.527	0.017	743.4	1.3078	275.6	1.2281	14.4093	1.0317	6
42	庚酸	47.333	0.032	188.7	1.3221	65.3	2.5092	0.0082	3.1945	6
43	棕榈酸乙酯	52.422	0.013	1232.3	1.105	380.6	0.7263	0.0317	2.6183	6
44	油酸乙酯	57.47	0.016	411.8	3.3604	87.4	3.8676	0.0216	4.1738	6
45	亚油酸乙酯	58.867	0.017	723.2	1.8507	136.7	0.947	0.0218	2.127	6

4.3.3 浓香型白酒样品谱图及6针重复性分析结果



峰序	组分名	保留时间 [min]	半峰宽 [min]	峰高 [fA]	峰面积 [fA*s]	峰面积 [%]	含量 [mg/L]
1	乙醛	8.764	0.074	434.7	2056.6	0.0268	224.7607
2	丙酮	12.171	0.066	57.3	245.4	0.0032	13.4441
3	甲酸乙酯	12.730	0.062	57.5	223.5	0.0029	18.5961
4	乙酸乙酯	16.407	0.076	6866.6	33553.0	0.4365	1773.4938
5	乙缩醛	16.794	0.090	444.3	2556.7	0.0333	66.9694
6	甲醇	17.520	0.127	295.5	2314.3	0.0301	112.7981
7	异戊醛	18.494	0.098	134.9	831.3	0.0108	57.8777
8	乙醇	21.411	0.399	329282.4	7456843.0	97.0050	
9	叔戊醇 (内标)	25.466	0.043	2189.0	6021.1	0.0783	
10	2-丁醇	26.000	0.042	361.5	968.0	0.0126	21.0576
11	丁酸乙酯	26.214	0.041	2564.0	6775.2	0.0881	283.1194
12	正丙醇	26.526	0.041	4295.4	11439.0	0.1488	266.6741
13	异戊酸乙酯	27.518	0.037	37.4	87.8	0.0011	3.6979
14	异丁醇	27.856	0.042	172.7	498.2	0.0065	219.4336
15	乙酸异戊酯	28.627	0.036	905.6	2082.3	0.0271	2.9557
16	2-戊醇	29.606	0.038	78.9	190.3	0.0025	4.7574
17	戊酸乙酯	29.940	0.040	618.4	1573.2	0.0205	62.4855
18	正丁醇	30.433	0.037	3983.7	9466.1	0.1231	230.8447
19	乙酸正戊酯 (内标)	31.318	0.040	1584.9	4040.1	0.0526	
20	2-甲基丁醇/3-甲基丁	32.524	0.037	3889.8	10457.1	0.1360	30.2740
21	己酸乙酯	33.250	0.038	27465.6	65745.9	0.8553	2118.8127

22	正戊醇	33.771	0.035	530.0	1199.9	0.0156	22.3623
23	乙偶姻	34.829	0.036	102.2	232.0	0.0030	13.1520
24	庚酸乙酯	35.905	0.037	306.5	711.6	0.0093	25.1524
25	乳酸乙酯	36.168	0.033	12319.2	25990.9	0.3381	1574.1785
26	正己醇	36.363	0.033	1978.8	4191.1	0.0545	87.5979
27	三甲基吡嗪	37.710	0.036	64.0	164.9	0.0021	2.9601
28	辛酸乙酯	38.142	0.035	332.1	751.2	0.0098	25.0601
29	乙酸	38.637	0.077	2025.3	11127.8	0.1448	1167.6647
30	糠醛	38.848	0.042	384.0	1046.9	0.0136	50.7589
31	苯甲醛	40.173	0.042	60.7	147.4	0.0019	0.7672
32	丙酸	40.772	0.037	88.6	250.0	0.0033	24.2531
33	2, 3-丁二醇	40.892	0.032	47.9	101.8	0.0013	3.1906
34	1, 2-丙二醇	41.065	0.034	147.8	340.7	0.0044	15.2251
35	丁二酸二乙酯	41.872	0.046	692.3	2110.0	0.0274	10.6513
36	异戊酸	42.575	0.034	126.7	284.0	0.0037	21.2173
37	戊酸	43.602	0.034	245.4	540.9	0.0070	25.7082
38	2-乙基丁酸 (内标)	43.905	0.045	1568.0	4513.7	0.0587	
39	苯乙酸乙酯	44.317	0.034	86.2	190.3	0.0025	0.6031
40	己酸	45.280	0.070	3173.3	14708.0	0.1913	588.7460
41	苯乙醇	46.534	0.042	36.9	94.0	0.0012	0.1743
42	庚酸	47.360	0.046	68.1	203.6	0.0026	0.8754
43	辛酸	49.517	0.045	76.3	200.6	0.0026	9.3285
			总计:	410180.4	7687069.7	100.0000	9250.5469

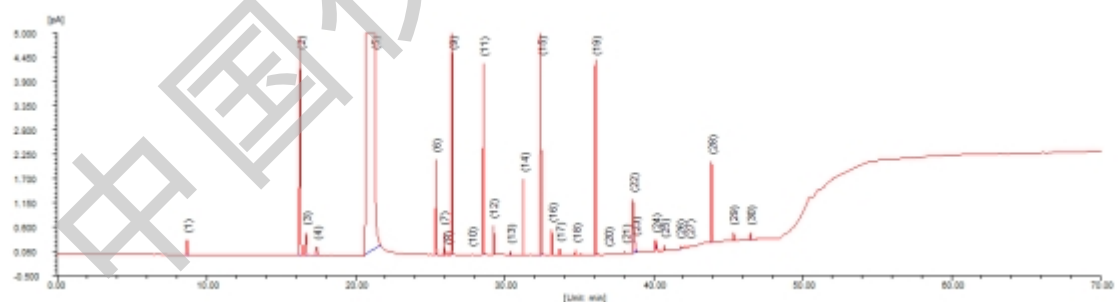


序号	组分名	平均时	时间	平均面	面积	平均峰	峰高	平均含	含量	谱图数
----	-----	-----	----	-----	----	-----	----	-----	----	-----

		间[min]	RSD%	积[fA*s]	RSD%	高[fA]	RSD%	量[mg/L]	RSD%	
1	乙醛	8.757	0.202	2026.6	0.9406	444.3	2.2009	227.5587	1.0444	6
2	丙酮	12.16	0.264	243.6	2.1042	58.2	1.935	13.7145	2.918	6
3	甲酸乙酯	12.724	0.248	222.9	1.6424	56.8	1.8944	19.0592	2.5682	6
4	乙酸乙酯	16.398	0.227	32754.1	1.7228	6788.8	1.0872	1778.549	0.458	6
5	乙缩醛	16.785	0.225	2500.2	1.7876	440.4	1.0924	67.2839	1.8004	6
6	甲醇	17.51	0.231	2290.3	1.0971	309.1	3.3505	113.5065	1.6273	6
7	异戊醛	18.479	0.205	873.1	4.4378	135.8	2.7664	62.4579	4.553	6
8	乙醇	21.397	0.163	7377326	0.7896	327896.8	0.4472			6
9	叔戊醇(内标)	25.459	0.063	5922.4	1.4745	2148.9	1.5054			6
10	2-丁醇	25.993	0.056	938.1	1.9551	356.7	1.2711	20.7456	0.8444	6
11	丁酸乙酯	26.209	0.054	6590.3	2.0416	2491.8	2.3087	282.9023	0.4205	6
12	正丙醇	26.52	0.053	11226.3	1.4859	4327	1.2185	266.0791	0.2401	6
13	异戊酸乙酯	27.513	0.044	85.3	4.979	36.9	3.4702	3.6893	5.0808	6
14	异丁醇	27.853	0.042	466.7	5.1852	166.6	2.2852	208.9588	4.7137	6
15	乙酸异戊酯	28.62	0.041	2035.2	1.7399	882.6	2.1037	2.9678	0.5367	6
16	2-戊醇	29.6	0.033	186.2	3.6462	76.8	2.0666	4.734	3.7628	6
17	戊酸乙酯	29.936	0.031	1539.7	1.3562	602.8	1.807	62.8296	0.9762	6
18	正丁醇	30.427	0.032	9258.4	1.425	3900.3	1.5543	229.5465	0.4879	6
19	乙酸正戊酯(内标)	31.314	0.028	3932.7	1.7383	1536.1	2.0174			6
20	2-甲基丁醇/3-甲基丁醇	32.519	0.025	10230.6	1.5679	3804.8	1.6654	30.1118	0.3188	6
21	己酸乙酯	33.246	0.024	64058.8	1.8128	26758.9	1.7168	2120.784	0.3186	6
22	正戊醇	33.766	0.022	1181.3	1.0659	519.9	1.5815	22.384	0.8806	6
23	乙偶姻	34.824	0.023	231.8	4.1544	100.6	1.051	13.508	4.839	6
24	庚酸乙酯	35.901	0.02	695.9	1.7556	298.8	1.9828	25.2711	1.2323	6
25	乳酸乙酯	36.164	0.021	25507.4	1.3867	12156.3	1.3149	1587.179	0.7176	6
26	正己醇	36.358	0.02	4106	1.7146	1922.1	1.896	87.2476	0.5225	6
27	三甲基吡嗪	37.706	0.02	166.3	4.3314	63.8	2.5916	3.0675	5.2264	6

28	辛酸乙酯	38.138	0.02	728.9	2.2356	321.9	2.0385	24.9794	0.6705	6
29	乙酸	38.637	0.014	10749.7	2.2172	1939.3	3.1466	1149.052	1.1116	6
30	糠醛	38.842	0.021	1125.6	4.1901	396.4	2.4237	56.1071	5.7413	6
31	苯甲醛	40.17	0.019	143.9	1.6833	55.9	5.2119	0.7695	2.0384	6
32	丙酸	40.768	0.022	242.6	3.2377	85.3	2.4693	23.9783	2.1276	6
33	2, 3-丁二醇	40.898	0.016	102.9	4.2079	46.3	2.4059	3.2795	5.1394	6
34	1, 2-丙二醇	41.061	0.022	329.2	2.0123	140.1	3.0749	14.9581	1.101	6
35	丁二酸二乙酯	41.876	0.016	2065	1.298	659.1	3.1139	10.7096	1.008	6
36	异戊酸	42.581	0.016	270.4	3.7083	121.8	2.8466	20.5711	2.638	6
37	戊酸	43.607	0.018	532.8	1.9094	243.1	1.717	25.7942	0.8489	6
38	2-乙基丁酸(内标)	43.908	0.017	4430.7	1.4588	1510.4	3.2179			6
39	苯乙酸乙酯	44.313	0.023	191.8	3.9582	84.2	2.3047	0.6193	3.9594	6
40	己酸	45.281	0.019	14479.5	1.945	3117.4	2.0472	590.4397	0.8716	6
41	苯乙醇	46.524	0.026	106	5.8593	38.8	3.0673	0.1999	6.7396	6
42	庚酸	47.364	0.017	207.7	4.9109	67	3.3137	0.91	5.0519	6
43	辛酸	49.52	0.015	187.1	5.8599	72.1	3.5728	8.8631	5.1141	6

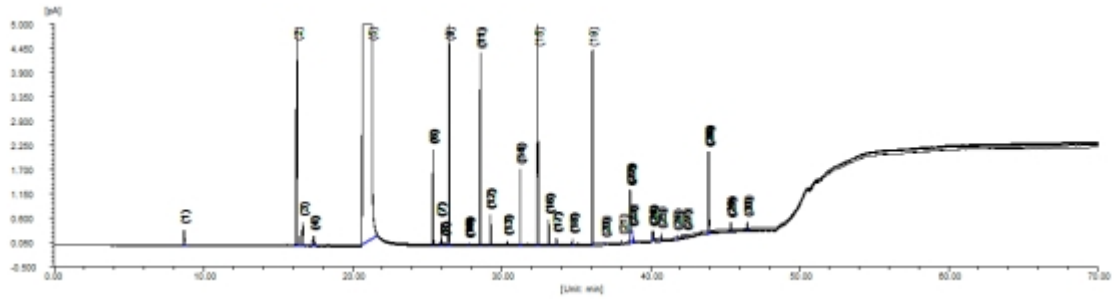
4.3.4 清香型白酒样品谱图及6针重复性分析结果



峰序	组分名	保留时间[min]	半峰宽[min]	峰高[fA]	峰面积[fA*s]	峰面积[%]	含量 [mg/L]
1	乙醛	8.732	0.089	349.4	1896.7	0.0254	190.5689
2	乙酸乙酯	16.343	0.074	4929.0	23515.6	0.3143	1142.7496
3	乙缩醛	16.732	0.088	521.7	2927.8	0.0391	70.5070

4	甲醇	17.454	0.114	209.8	1506.2	0.0201	74.2794
5	乙醇	21.352	0.400	323968.3	7362146.3	98.4119	
6	叔戊醇（内标）	25.435	0.043	2159.5	5950.7	0.0795	
7	2-丁醇	25.970	0.041	508.0	1325.3	0.0177	29.1713
8	丁酸乙酯	26.187	0.041	66.6	170.8	0.0023	6.5601
9	正丙醇	26.498	0.039	6832.7	17317.8	0.2315	408.5056
10	异丁醇	27.837	0.040	31.1	75.8	0.0010	33.7945
11	乙酸异戊酯	28.598	0.035	4344.6	9832.5	0.1314	12.8316
12	2-戊醇	29.282	0.035	679.0	1543.9	0.0206	39.0619
13	正丁醇	30.411	0.039	93.4	240.6	0.0032	5.9370
14	乙酸正戊酯（内标）	31.300	0.039	1730.8	4394.3	0.0587	
15	活性戊醇+异戊醇	32.505	0.039	6759.0	20491.9	0.2739	60.0274
16	己酸乙酯	33.231	0.039	576.3	1436.3	0.0192	42.5571
17	正戊醇	33.754	0.035	149.6	344.1	0.0046	6.4895
18	3-羟基-2-丁酮	34.811	0.036	133.0	305.7	0.0041	13.9128
19	乳酸乙酯	36.152	0.033	4432.7	9433.7	0.1261	525.3060
20	己酸丁酯	36.963	0.034	36.4	76.8	0.0010	3.4956
21	辛酸乙酯	38.129	0.034	68.0	148.7	0.0020	4.5595
22	乙酸	38.661	0.082	1232.2	6686.6	0.0894	506.0407
23	糠醛	38.829	0.057	239.0	929.8	0.0124	41.4447
24	苯甲醛	40.162	0.041	184.3	434.5	0.0058	2.0797
25	丙酸	40.758	0.035	145.4	356.4	0.0048	24.9385
26	丁二酸二乙酯	41.797	0.034	70.1	152.6	0.0020	0.4973
27	异戊酸	42.414	0.031	36.8	71.0	0.0009	3.8250
28	2-乙基丁酸（内标）	43.903	0.052	1852.3	6258.4	0.0837	
29	己酸	45.384	0.043	188.6	528.9	0.0071	15.2693

30	β-苯乙醇	46.510	0.042	166.0	447.5	0.0060	15.0410
			总计:	362693.6	7480947.9	100.0000	3348.2480



序号	组分名	平均时间 [min]	时间 RSD%	平均面 积[fA*s]	面积 RSD%	平均峰 高[fA]	峰高 RSD%	平均含量 [mg/L]	含量 RSD%	谱 图 数
1	乙醛	8.73	0.026	1907.6	0.7037	347.3	1.848	192.9844	0.9423	6
2	乙酸乙酯	16.336	0.038	23461.8	0.4626	4855.5	0.935	1147.967	0.3167	6
3	乙缩醛	16.724	0.035	2975.5	1.5439	524.8	0.62	72.1493	1.5973	6
4	甲醇	17.448	0.035	1491.1	0.6489	208.9	0.9669	73.6495	0.7286	6
5	乙醇	21.344	0.027	7366015	0.1586	324002.9	0.2137	68.943	0.2444	6
6	叔戊醇 (内标)	25.431	0.011	5941.2	0.2857	2159.2	0.2204			6
7	2-丁醇	25.966	0.01	1317	0.4228	503.1	0.8037	29.0343	0.329	6
8	丁酸乙酯	26.184	0.009	174	3.3706	66.2	1.4706	6.7324	3.2706	6
9	正丙醇	26.495	0.01	17271	0.2698	6807.6	0.3846	408.0468	0.1479	6
10	异丁醇	27.834	0.009	78.6	5.4744	31.9	2.229	35.0867	5.6714	6
11	乙酸异戊酯	28.595	0.008	9830.5	0.2972	4341.8	0.496	12.9173	0.5874	6
12	2-戊醇	29.279	0.007	1543.2	0.3741	680.1	0.1885	39.1071	0.4019	6
13	正丁醇	30.408	0.008	223.9	3.911	91.6	1.4601	5.5327	3.8473	6
14	乙酸正戊酯 (内标)	31.297	0.006	4364.4	0.6857	1719	0.8518			6
15	活性戊醇+异戊醇	32.503	0.005	20446.8	0.2371	6757.4	0.2491	59.9904	0.1705	6
16	己酸乙酯	33.228	0.004	1421.2	0.9977	573.4	0.6487	42.3974	0.4006	6
17	正戊醇	33.752	0.004	348.2	0.7947	149.7	1.179	6.5768	0.8589	6
18	3-羟基-2-丁酮	34.809	0.003	301.2	1.173	131.7	1.118	13.8051	1.2887	6

19	乳酸乙酯	36.151	0.003	9409.1	0.4522	4419.5	0.5508	527.5399	0.5499	6
20	己酸丁酯	36.964	0.003	74.8	5.85	34.6	5.7616	3.4278	5.5466	6
21	辛酸乙酯	38.128	0.003	146.7	1.956	66.1	1.9513	4.531	2.0277	6
22	乙酸	38.665	0.007	6632.7	0.821	1202.5	1.82	499.4321	0.8867	6
23	糠醛	38.828	0.002	926.7	2.5383	256.6	5.0982	41.5947	3.0137	6
24	苯甲醛	40.163	0.005	414.5	8.3032	161.7	11.9724	1.9969	7.7881	6
25	丙酸	40.758	0.003	345.9	5.2758	141.2	2.0475	24.0836	5.2871	6
26	丁二酸二乙酯	41.796	0.002	152.8	4.2093	68.8	1.8922	0.4954	4.3007	6
27	异戊酸	42.414	0.002	74.2	6.7897	37	3.6618	3.9756	6.6491	6
28	2-乙基丁酸(内标)	43.907	0.01	6290.2	0.4438	1832.6	1.1401			6
29	己酸	45.394	0.016	509.4	2.0236	178.9	3.0374	14.6334	2.2826	6
30	β -苯乙醇	46.509	0.004	451	0.8592	167.5	0.9131	15.1828	1.0734	6

本方法参考《白酒分析方法》(GB/T 10345-201X)(征求意见稿)、《食品安全国家标准 食品中甲醇的测定》(GB5009.266-2016)、《白酒质量标准 第 1 部分:浓香型白酒》(GB/T1078.1-2021)和《白酒质量标准 第 9 部分:芝麻香型白酒》(GB/T1078.9-2021)的检测方法,通过方法优化、验证很好地解决了白酒中酯类、醇类、醛类、酸类以及其他痕量风味物质检测时,出现重复性差、分离度达不到要求以及峰形严重畸变的情况。该方法简单、检测速度快、重现性良好、峰形尖锐、分离度好,并且能对不同白酒样品中 57 种酯类、醇类和酸类组分同时进行定量分析,大大提高了检测效率。