

非靶向代谢组学法判别酱香习酒质量等级

尹艳艳, 杨军林, 田栋伟, 蒋力力, 陈明学, 尤小龙, 程平言*

[贵州茅台酒厂(集团)习酒有限责任公司, 遵义 564622]

摘 要: 目的 建立非靶向代谢组学法判别酱香习酒质量等级的方法。**方法** 采用超高效液相色谱-高分辨质谱法(ultra performance liquid chromatography-high resolution mass spectrometry, UPLC-HRMS)结合非靶向代谢组学技术分析不同质量等级酱香习酒, 筛选不同等级酒样的主要特征化合物, 并建立主成分分析(principal component analysis, PCA)模型判别酱香习酒质量等级。运用 Compound Discoverer 3.2 代谢组学分析软件处理检测数据并分析酒样中特征化合物信息。**结果** 主成分分析 PC1 和 PC2 累积方差贡献率之和为 67.5%, 能够较全面反应酒样特征。聚类热图和主成分分析可明显区分不同质量等级酒样, 且 4 个不同等级酒样分类结果符合实际酒样信息。**结论** 非靶向代谢组学技术可用于区分酱香习酒的不同质量等级, 同时可反映出不同质量等级酒样的差异性及其相应特征化合物信息。

关键词: 超高效液相色谱-高分辨质谱法; 非靶向代谢组学; 酱香习酒; 聚类分析; 主成分分析

Quality grade discrimination of Jiangxiang Xijiu by non-targeted metabolomics method

YIN Yan-Yan, YANG Jun-Lin, TIAN Dong-Wei, JIANG Li-Li, CHEN Ming-Xue,
YOU Xiao-Long, CHENG Ping-Yan*

[Guizhou Maotai Distillery (Group) Xijiu Co., Ltd., Zunyi 564622, China]

ABSTRACT: Objective To establish a non-targeted metabolomics method for identifying the quality grade of Jiangxiang Xijiu. **Methods** The different quality grades of Jiangxiang Xijiu were analyzed by ultra performance liquid chromatography-high resolution mass spectrometry (UPLC-HRMS) combined with non-targeted metabolomics technology, and different grades of liquor samples were screened, the quality grade of Jiangxiang Xijiu was distinguished by principal component analysis (PCA) model. The detection data was processed by Compound Discoverer 3.2 metabolomics analysis software and the characteristic compound information in the liquor samples was analyzed. **Results** The cumulative contribution rate of PC1 and PC2 in principal component analysis reached 67.5%, which could fully reflect the characteristics of samples. The results showed that the clustering heat map and principal component analysis could clearly distinguish the different grades of samples, and the classification results of 4 different grades of wine samples were consistent with the actual wine sample information. **Conclusion** Non-targeted metabolomics technology can be used to distinguish different quality grades of Jiangxiang Xijiu, which can also reflect the differences of different quality grades of liquor and the corresponding characteristic compound

基金项目: 遵义市优秀青年科技创新人才培养项目([2019]1)、贵州省科技计划项目([2020]2Y042)、遵义市科技计划项目([2019]4)

Fund: Supported by the Zunyi City Outstanding Young Technological and Innovative Talent Cultivation Project ([2019]1), the Guizhou Province Science and Technology Plan Project ([2020]2Y042), and the Zunyi City Science and Technology Plan Project ([2019]4)

***通信作者:** 程平言, 硕士, 高级工程师, 主要研究方向为白酒酿造及产业化推广。E-mail: xjjszx149@sina.com

***Corresponding author:** CHENG Ping-Yan, Master, Senior Engineer, Guizhou Maotai Distillery (Group) Xijiu Co., Ltd., Xishui County, Zunyi 564622, China. E-mail: xjjszx149@sina.com

information.

KEY WORDS: ultra performance liquid chromatography-high resolution mass spectrometry; non-targeted metabolomics; Jiangxiang Xijiu; cluster analysis; principal component analysis

0 引言

中国白酒作为世界六大蒸馏酒之一,其香型种类繁多,风格迥异,其中酱香型白酒作为一种重要的香型,化学组分最复杂,因风味独特而备受世界各国消费者的喜爱^[1]。传统的酱香型白酒的质量定级划分主要依靠感官品评法^[2],但该方法因受人感官、精神状态等主观因素的制约,存在质量定级结果不稳定的问题。

随着现代仪器分析技术的快速发展,色谱、质谱等技术已被用于白酒风味物质分析^[3-6]、香型鉴别^[7-11]、年份酒鉴别^[12-13]以及真假酒鉴别^[14]中。目前,谱图分析及风味分析技术已被应用于白酒质量等级评价中。徐瑞煜等^[15]将三维荧光光谱结合主成分分析-支持向量机(principal component analysis-support vector machine, PCA-SVM)技术用于鉴别不同品牌浓香型白酒。然而白酒中化合物种类较多,各成分间的协同交互作用复杂,影响谱图技术鉴别结果的准确度。许涛等^[16]使用气相色谱法分析了各级浓香基酒中酸类、酯类、醇类物质的含量差异,构建了不同等级浓香基酒模型。但该方法需建立相关化合物定量检测技术。且该方法以酒样中部分化合物信息构建模型,尚不能全面反映不同等级浓香基酒的差异性。

液相色谱-串联质谱结合组学技术是一种基于高通量检测技术,综合分析多种数据集特征量或者目标物的分析方法^[17-18],被广泛应用于食品掺假鉴定^[19]、品质鉴别^[20-22]以及食品产地溯源^[23-24]等方面。非靶向代谢组学以无偏向的方式分析寻找尽可能多的组分,再通过统计学方法寻找能够反映组间差异的特征化合物,从而对不同个体之间的差异做出判别^[25-31]。刘嘉飞等^[20]将超高效液相色谱-高分辨质谱(ultra performance liquid chromatography-high resolution mass spectrometry, UPLC-HRMS)分析技术结合食品组学技术分析了真假干邑白兰地样品中化合物差异,用于白兰地真假的鉴别。张宏蕊等^[23]采用超高效液相色谱-四极杆串联飞行时间质谱对不同产地的玛咖进行全扫描分析,并结合非靶向代谢组学技术分析了各产地玛咖代谢物差异,用于玛咖产地鉴别和质量评价。张静等^[31]基于 UPLC-HRMS 结合组学技术建立了异味盐中多种成分定性分析方法,用于快速筛查和鉴别异味盐。UPLC-HRMS 分析技术与非代谢组学技术相结合,能够最大程度获取样品中化合物信息。通过数据库对化合物进行定性及相对定量,无需标准品进行定量分析。样品自动化分析结合数据统计学分析的集成应用,促进了质量定级的标准化。但鲜

少有利用此技术对不同等级酱香基酒差异性进行研究。

本研究通过超高效液相色谱-高分辨质谱法对不同等级酱香习酒进行全扫描分析,同时结合非靶向代谢组学分析技术识别不同等级酱香习酒的差异性,以期实现对酱香习酒质量等级划分。

1 材料与方法

1.1 仪器与试剂

Q Exactive Focus 高分辨质谱仪、Hypersil GOLD 液相色谱柱(100 mm×2.1 mm, 1.9 μm)(美国 Thermo Fisher Scientific 公司); UltiMate 3000 高效液相色谱仪(美国 Dionex 公司); AR2130 电子分析天平(美国 OHAUS 公司); QT-1 涡旋振荡器(上海琪特分析仪器有限公司); A3S-05-05-CE 艾科普超纯水机(美国 Millipore 公司); 0.22 μm 水相滤膜(中国东莞康润实验科技有限公司)。

甲酸(质谱纯)、甲醇、甲酸铵(色谱纯)(美国 Fisher 公司);实验用水为艾科普纯水仪制备的超纯水(18.2 MΩ/cm²)。

1.2 实验样品

质量等级酒样为贵州茅台酒厂(集团)习酒有限责任公司不同等级成品酒用于构建判别模型,编号分别为 A 级、B 级、C 级、D 级(感官品评质量等级排序: A 级>B 级>C 级>D 级)。质控组由 A、B、C、D 级酒样等体积混合制备而成,用于评价分析方法的稳定性,编号为 QC。预判组为贵州茅台酒厂(集团)习酒有限责任公司不同等级成品酒,用于评价模型的判别结果,预判组编号 XA、XB、XC、XD 分别为 A、B、C、D 级酒样。

1.3 前处理方法

待测酒样直接经 0.22 μm 水相滤膜过滤后上机分析。在仪器分析过程中,每 6 个检测分析样品中插入 1 个质控样,以考察分析方法的稳定性。

1.4 实验条件

1.4.1 色谱条件

色谱柱: Hypersil GOLD (100 mm×2.1 mm, 1.9 μm); 柱温: 35 °C; 进样体积: 10 μL。流动相: A 相为水相(含 5 mmol/L 甲酸铵, 0.1%甲酸, V:V, 下同), B 相为甲醇(含 5 mmol/L 甲酸铵, 0.1%甲酸); 流速: 0.3 mL/min。梯度洗脱程序: 0~26 min, 95%~5% A; 26~30 min, 5% A; 30~31 min, 5%~95% A; 31~35 min, 95%~5% A。

1.4.2 质谱条件

离子化模式: 电喷雾电离(electrospray ionization, ESI)

正离子模式; 喷雾电压 3.5 kV; 鞘气 40 psi; 辅助气 10 arb; 离子源加热温度 380 °C; 离子传输管温度 350 °C; 扫描模式 Full Mass/dd-MS2 (Discovery), 扫描范围 50~750 m/z 。

1.5 数据处理

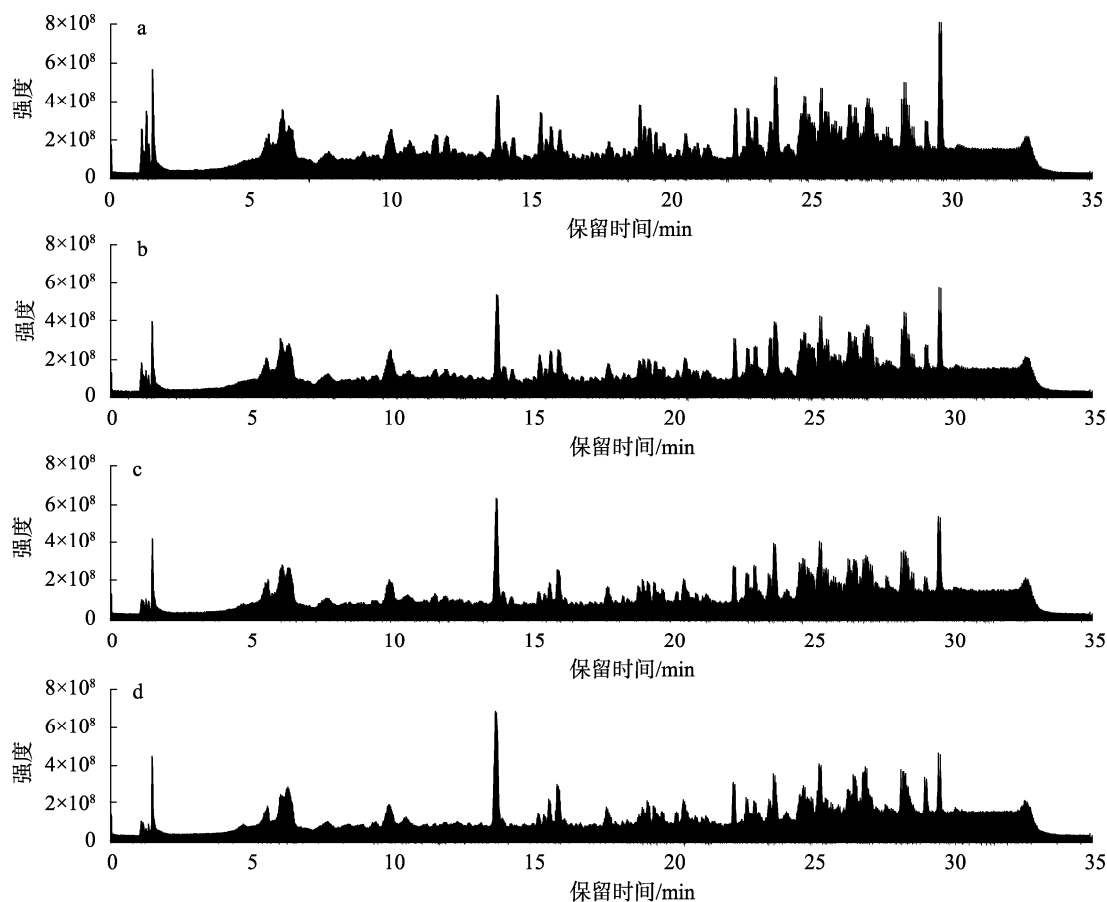
酒样经 UPLC-HRMS 检测获得的数据通过 Thermo Xcalibur 工作站得到总离子流图。使用 Compound Discoverer 3.2 软件对数据进行统计学分析, 并通过比对数据库来预测组分的名称、分子式、代谢途径等信息。软件分析参数: 质量偏差: 5 ppm; 保留时间偏差: 0.2 min; 信号强度偏差: 30%; 化合物最大元素组成: C19、H190、Br3、Cl4、K2、N10、Na2、O15、P3、S5; 筛查数据库: ChEBI、ChemBank、ChEMBL、Chemical Biology Department、Max Planck Institute of Molecular Physiology、ChemSpider SyntheticPages、

Chemspiderman、Human Metabolome Database、KEGG、NIST、NIST Spectra、Planta Piloto de Química Fina、Universidad de Alcalá、PlantCyc、PubMed、Wikipedia、Yeast Metabolome Database。

2 结果与分析

2.1 谱图分析

从 Thermo Xcalibur 工作站中分别提取 A、B、C、D 组 4 个等级酒样的 UPLC-HRMS 总离子流图。如图 1 所示, 直观对比发现 4 个不同等级酒样间总离子流图无较大差异, 出峰种类大致相同, 仅部分成分含量略有不同。根据总离子流图无法直观表现出不同等级酒样间的差异性, 因此需借助统计学方法对样本数据进行分析。



注: a 为 A 组; b 为 B 组; c 为 C 组; d 为 D 组。

图 1 不同等级酒样总离子流图

Fig.1 Total ion chromatograms of different grades of liquor samples

2.2 统计学分析

本研究以酒样中代表性化合物的丰度绘制不同等级酒样的聚类热图。其颜色的不同反映了酒样中化合物的丰度情

况, 从绿到黑再到红依次表示化合物的丰度逐次升高^[23]。对于同一种化合物来说, 丰度越高则含量越高。如图 2 所示, 从总体角度可以看出 A 组在图中的红色和黑色区域多, 绿

色区域少,相反 D 组在图中绿色区域最多,说明不同组的化合物含量排序为: A 组>B 组>C 组>D 组。从聚类热图整体颜色角度判断可以将 A、B、C、D 组明显区分开,且分类结果与实际酒样信息基本符合。

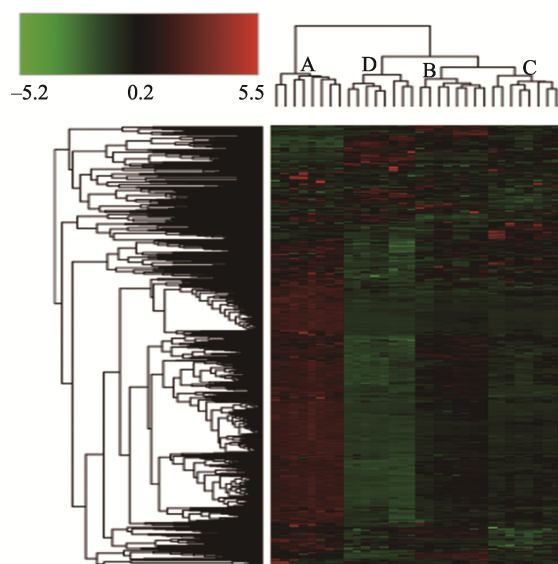


图 2 不同等级酒样化合物的热图

Fig.2 Heat analysis of compounds in different grades of liquor samples

主成分分析(principal component analysis, PCA)是一种多元统计方法,通过将所提取的多指标信息进行数据转换和降维,并对降维后的特征向量进行线性分类,最后在 PCA 分析图上显示主要的二维图^[32]。其中,横、纵坐标分别表示转换得到的第一主成分(PC1)和第二主成分(PC2)的贡献率^[33]。质控样本由 A、B、C、D 级酒样等体积混合制备而成,用于评价分析方法的稳定性。如图 3 所示,质控样本集中分布在 PCA 分析图原点位置,表明该分析方法的稳定性较好。PC1 和 PC2 累积方差贡献率之和为 67.5%,所提取的主成分包含了样品的绝大部分数据,说明该方法具有全面性和可靠性。不同圈内区域的样品代表不同等级的样品,同一圈内区域的样品代表同一等级不同批次的样品。PC1 贡献率高达 58.2%,不同等级的样品在横坐标轴上的距离越大,说明组间差异性越大。同一等级样品虽在纵坐标方向上有一定的距离,但 PC2 对累积方差的贡献率仅有 9.3%,说明组内之间的实际差异较小。因此, A 组与 B 组的差异性最小, C 组其次, D 组的差异性最大,这与聚类分析结果及实际酒样信息基本符合。此外,该 PCA 模型同组样品集中在较小的范围,且不同组样品之间无重叠现象亦相距较远,故有利于对未知等级酒样的有效区分。

2.3 特征离子的筛选

通过 Compound Discoverer 3.2 软件中的火山图,初步筛选不同等级酒样中含量表达有明显的差异化合物。根据

差异化合物的质谱数据与软件中数据库进行比对定性,确定其差异性化合物。结合 UPLC-HRMS 检测到的化合物均可呈现于火山图(图 4),图中靠近中间纵坐标轴的点代表各组样品均能检测到的离子,而越远离中间纵坐标轴的点则是不同组样品差异性较大的化合物。以 $P<0.05$, 差异倍数 (fold change)=2 为条件进行筛选,与二级质谱数据库进行比对共定性出 13 种差异化合物,结果如表 1 所示。其中 L-异亮氨酸在 A 组酱香习酒中有明显的高表达,而二十二碳六烯酸甲酯在 D 组酱香习酒中有明显的高表达(图 5)。

2.4 方法有效性验证

依据所建立的 PCA 模型对已通过感官品评定级的酒样进行预判,如图 6 所示,可知预判样均分布在模型的对应该区域,由此表明该 PCA 模型具有较好的预测效果,可实现对不同等级的酒样进行质量定级。

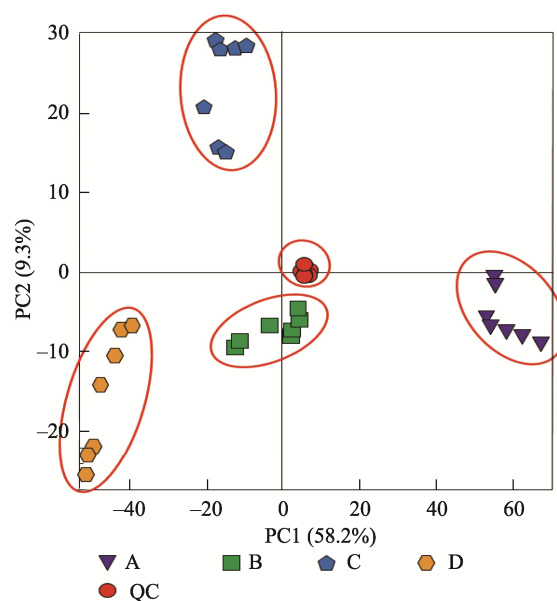


图 3 不同等级酒样 PCA 得分图

Fig.3 PCA score chart of different grades of liquor samples

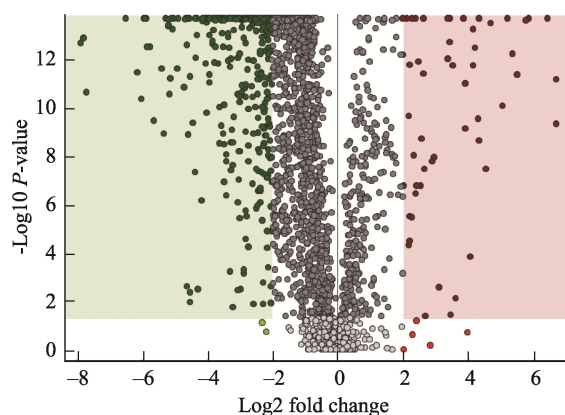
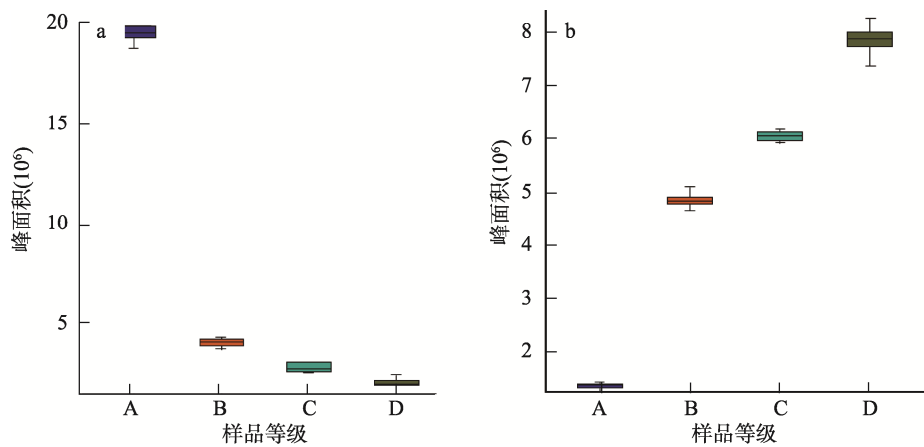


图 4 不同等级酒样的火山图

Fig.4 Volcano plots of different grades of liquor samples

表 1 不同等级酒样差异化合物信息
Table 1 Information of differential compounds in different grades of liquor samples

化合物	分子式	精确分子量	保留时间/min	匹配得分
L-异亮氨酸	C ₆ H ₁₃ NO ₂	114.06825	1.511	89.4
DL-精氨酸	C ₆ H ₁₄ N ₄ O ₂	174.11172	1.257	87.0
DL-苹果酸	C ₄ H ₆ O ₅	134.02048	1.444	90.0
乙酰丙酸乙酯	C ₇ H ₁₂ O ₃	144.07866	15.359	88.5
己内酯	C ₆ H ₁₀ O ₂	114.06848	20.502	91.9
L-谷氨酸	C ₅ H ₉ NO ₄	147.05310	1.294	91.1
甜菜碱	C ₅ H ₁₁ NO ₂	117.07917	1.294	94.9
胆碱	C ₅ H ₁₃ NO	103.10006	1.230	93.6
腺嘌呤	C ₅ H ₅ N ₅	135.05456	1.377	92.4
咖啡醇	C ₂₀ H ₂₈ O ₃	316.20131	25.481	96.8
D-脯氨酸	C ₅ H ₉ NO ₂	115.06361	1.341	96.2
左旋肉碱	C ₇ H ₁₅ NO ₃	161.10522	1.262	97.4
二十二碳六烯酸甲酯	C ₂₃ H ₃₄ O ₂	348.26412	27.202	99.4



注: a: L-异亮氨酸; b: 二十二碳六烯酸甲酯。

图 5 不同等级酒样差异化合物的峰面积箱型图

Fig.5 Peak area box diagrams of differential compounds in different grades of liquor samples

3 结 论

本研究建立 UPLC-HRMS 结合非靶向代谢组法判别酱香习酒质量等级的方法。该方法操作简单,且酒样无需预处理,可以最大程度地保留酒样中的化学成分。通过代谢组学技术中的聚类分析和主成分分析,可对不同等级的

酒样进行有效区分,同时通过谱图数据库比对可筛选出不同等级酒样中差异性化合物。此外,通过对已知样本的预判测试,表明所建立的 PCA 模型可有效用于不同等级酒样的判别分析。该研究为酱香习酒质量等级判别提供了科学客观的数据支撑,有效降低了依据个人感官品评定级所引起的主观误差。

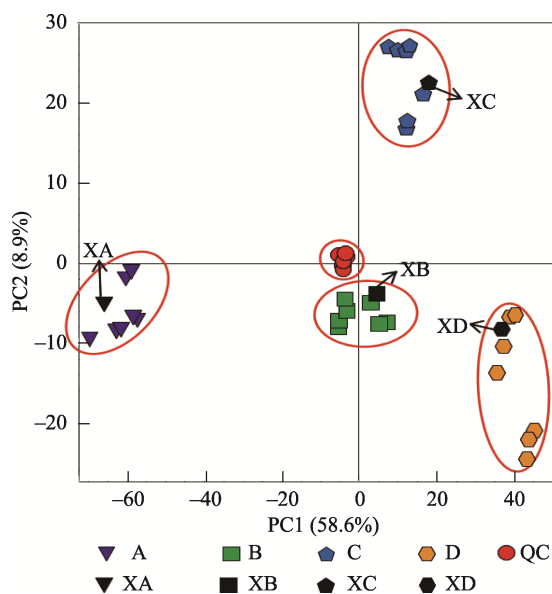


图 6 不同等级酒样 PCA 模型预测结果

Fig.6 Prediction results of PCA model for different grades of liquor samples

参考文献

- [1] 唐平, 山其木格, 王丽, 等. 白酒风味化学研究方法及其酱香型白酒风味化学研究进展[J]. 食品科学, 2020, 41(17): 315–324.
TANG P, SHAN QMG, WANG L, *et al.* A review of research methods in Baijiu flavor chemistry and recent progress in the flavor chemistry of Maotai-flavored Baijiu [J]. Food Sci, 2020, 41(17): 315–324.
- [2] 袁晔, 赵国敢, 陈诚, 等. 原酒品评定级过程质量控制方法研究[J]. 酿酒, 2018, 45(3): 29–32.
YUAN Y, ZHAO GG, CHEN C, *et al.* Study on quality control method of raw liquor sensory evaluation and grade division process [J]. Liquor Mak, 2018, 45(3): 29–32.
- [3] 栗新峰. 基于 GC-QTOF MS 技术的浓香型白酒原酒质量等级评价[D]. 宜宾: 四川轻化工大学, 2019.
LI XF. Study on quality evaluation technology of Luzhou-flavor base liquor based on GC-QTOF MS [D]. Yibin: Sichuan University of Science & Engineering, 2019.
- [4] 洪泽淳, 熊含鸿, 李南, 等. 基于全二维气相色谱-飞行时间质谱对酱香型白酒风味成分的研究[J]. 酿酒科技, 2018, 286(4): 121–125.
HONG ZC, XIONG HH, LI N, *et al.* Study of the flavoring components in Jiangxiang Baijiu by two comprehensive dimensional gas chromatography/time-of-flight mass spectrometry [J]. Liquor-Mak Sci Technol, 2018, 286(4): 121–125.
- [5] YAN Y, CHEN S, HE YX, *et al.* Quantitation of pyrazines in Baijiu and during production process by a rapid and sensitive direct injection UPLC-MS/MS approach [J]. LWT-Food Sci Technol, 2020, 128(4): 109371.
- [6] PENG Q, XU X, XING WH, *et al.* Ageing status characterization of Chinese spirit using scent characteristics combined with chemometric analysis [J]. Innovat Food Sci Emerg Technol, 2017, (44): 212–216.
- [7] 朱玲, 蔡尽忠, 刘奔. 气相-离子迁移谱法对三种不同香型白酒的风味分析[J]. 广东化工, 2020, 47(5): 53–55.
ZHU L, CAI JZ, LIU B. Flavor analysis of three different flavor types of liquors using gas chromatography-Ion mobility spectrometry [J]. Guangdong Chem Ind, 2020, 47(5): 53–55.
- [8] 魏泉增, 范江涛, 刘嘉玲, 等. 偏最小二乘方法在不同白酒香型判别分析中的应用[J]. 中国酿造, 2020, 39(10): 183–187.
WEI QZ, FANG JT, LIU JL, *et al.* Application of partial least squares in different flavor types of Baijiu discriminant analysis [J]. China Brew, 2020, 39(10): 183–187.
- [9] 栗新峰, 张良, 李芳芳, 等. 基于 GC-QTOF MS 技术的浓香型白酒原酒质量等级评价[J]. 食品工业科技, 2019, 40(15): 235–241.
LI XF, ZHANG L, LI FF, *et al.* Quality grade evaluation of base liquor of Luzhou-flavor liquor based on GC-QTOF MS technology [J]. Sci Technol Food Ind, 2019, 40(15): 235–241.
- [10] SONG XB, JING S, ZHU L, *et al.* Untargeted and targeted metabolomics strategy for the classification of strong aroma-type baijiu (liquor) according to geographical origin using comprehensive two-dimensional gas chromatography-time-of-flight mass spectrometry [J]. Food Chem, 2020, (314): 126098.
- [11] FANG C, DU H, JIA W, *et al.* Compositional differences and similarities between typical Chinese Baijiu and western liquor as revealed by mass spectrometry-based metabolomics [J]. Metabolites, 2019, 9(2): 2–18.
- [12] 张敏敏, 路岩翔, 赵志国, 等. 气相-离子迁移谱结合化学计量学方法快速区分不同年份酿造白酒[J]. 食品工业科技, 2021, 42(14): 226–232.
ZHANG MM, LU YX, ZHAO ZG, *et al.* Rapid discrimination of different years of brewing liquor by gas chromatography-Ion mobility spectroscopy combined with chemometrics method [J]. Sci Technol Food Ind, 2021, 42(14): 226–232.
- [13] 郑劼, 吴文林, 万渝平, 等. ICP-AES 结合主成分分析和决策树模型的四种品牌白酒鉴别方法研究[J]. 食品工业科技, 2016, 37(24): 74–77.
ZHENG J, WU WL, WANG YP, *et al.* Study on discrimination of four Chinese brand spirits based on ICP-AES coupled the principal component and decision tree analysis [J]. Sci Technol Food Ind, 2016, 37(24): 74–77.
- [14] 熊月丰, 陈山乔, 陶佳佳, 等. LC-MS 结合代谢组学技术鉴定真假白酒的研究[J]. 食品工业科技, 2016, 37(9): 331–334.
XIONG YF, CHEN SQ, TAO JJ, *et al.* Identification of true and fake Chinese liquors by LC-MS with metabolomics technology [J]. Sci Technol Food Ind, 2016, 37(9): 331–334.
- [15] 徐瑞煜, 朱煊炜, 胡扬俊, 等. 三萜类荧光光谱结合 PCA-SVM 对几种浓香型白酒的鉴别[J]. 光谱学与光谱分析, 2016, 36(4): 1021–1026.
XU RY, ZHU ZW, HU YJ, *et al.* The discrimination of Chinese strong aroma type liquors with three-dimensional fluorescence spectroscopy combined with principal component analysis and support vector machine [J]. Spectrosc Spectral Anal, 2016, 36(4): 1021–1026.
- [16] 许涛, 刘青茹, 郑蕾, 等. GC 指纹图谱结合多元统计分析筛选基酒评级关键化合物[J]. 酿酒科技, 2021, 323(5): 32–38.
XU T, LIU QR, ZHENG L, *et al.* Screening of key grading compounds in baseliqor by GC fingerprint combined with multivariate statistical analysis [J]. Liquor-Mak Sci Technol, 2021, 323(5): 32–38.
- [17] 赵春霞, 许国旺. 基于液相色谱-质谱技术的代谢组学分析方法新进展[J]. 分析科学学报, 2014, 30(5): 761–766.
ZHAO CX, XU GW. Progress of metabolomics technique based on liquid chromatography-mass spectrometry [J]. J Anal Sci, 2014, 30(5): 761–766.

- [18] MIHAILOVA A, KELLY SD, CHEVALLIER OP, *et al.* High-resolution mass spectrometry-based metabolomics for the discrimination between organic and conventional crops: A review [J]. *Trends Food Sci Tech*, 2021, 110(22): 142–154.
- [19] 俞邱豪. 基于代谢组学的小浆果果汁真伪鉴别研究[D]. 杭州: 浙江大学, 2017.
- YU QH. Research on the authentication of berry fruit juice using metabolomics technology [D]. Hangzhou: Zhejiang University, 2017.
- [20] 刘嘉飞, 张静, 汪廷彩, 等. 基于食品组学技术的干邑白兰地真假鉴别研究[J]. *食品安全质量检测学报*, 2019, 10(13): 4099–4104.
- LIU JF, ZHANG J, WANG TC, *et al.* Identification of the true and false of cognac brandy based on foodomics technology [J]. *J Food Saf Qual*, 2019, 10(13): 4099–4104.
- [21] 方贤胜, 吴涛, 肖良俊. 基于广泛靶向代谢组学的浅黄色和紫色核桃内种皮成分差异分析[J]. *食品科学*, 2021, 42(12): 215–221.
- FANG XS, WU T, XIAO LJ. Broadly targeted metabolomics analysis of differential metabolites between light yellow and purple walnut endocarps [J]. *Food Sci*, 2021, 42(12): 215–221.
- [22] MICHAL S, IAN G, MONIKA T, *et al.* A novel approach to assess the quality and authenticity of Scotch Whisky based on gas chromatography coupled to high resolution mass spectrometry [J]. *Anal Chim Acta*, 2018, 1042: 60–70.
- [23] 张宏蕊, 张九凯, 韩建勋, 等. 基于代谢组学技术的玛咖产地鉴别[J]. *食品科学*, 2019, 40(20): 217–226.
- ZHANG HR, ZHANG JK, HAN JX, *et al.* Identification of geographical origin maca based on metabolomics [J]. *Food Sci*, 2019, 40(20): 217–226.
- [24] JIA W, DONG XY, SHI L, *et al.* Discrimination of milk from different animal species by foodomics approach based on high-resolution mass spectrometry [J]. *J Agric Food Chem*, 2020, 68: 6638–6645.
- [25] DAI WD, YIN PY, ZENG ZD, *et al.* Non-targeted modification-specific metabolomics study based on liquid chromatography-high-resolution mass spectrometry [J]. *Anal Chem*, 2014, 86(18): 9146–9153.
- [26] MEDIN S, FERRERERS F, GARCIA-VIGUERA C, *et al.* Non-targeted metabolomic approach reveals urinary metabolites linked to steroid biosynthesis pathway after ingestion of citrus juice [J]. *Food Chem*, 2013, 136(2): 938–946.
- [27] ZHAO GC, ZHANG YX, SUN SY, *et al.* Identification of the biochemical characteristics of developing giant embryo rice grains using non-targeted metabolomics [J]. *J Cere Sci*, 2019, 85: 70–76.
- [28] LI ZC, LU Y, GUO YF, *et al.* Comprehensive evaluation of untargeted metabolomics data processing software in feature detection, quantification and discriminating marker selection [J]. *Anal Chim Acta*, 2018, 1028: 50–57.
- [29] 王喆, 曹倩雯, 韩娇, 等. 高分辨质谱及组学分析在小曲白酒风味成分差异鉴别上的应用[J]. *酿酒科技*, 2019, 297(3): 101–105.
- WANG Z, CAO QW, HAN J, *et al.* Application of orbitrap high resolution mass spectrum and omic analysis in the identification of the flavoring components of Xiaoqu Baijiu [J]. *Liquor-Mak Sci Technol*, 2019, 297(3): 101–105.
- [30] 田宏, 熊月丰, 包斌, 等. 基于HS-SPME-GC-MS代谢组学技术分析不同系列白酒特征性化合物[J]. *现代食品科技*, 2017, (3): 317–322.
- TIAN H, XIONG YF, BAO B, *et al.* Identification of the characteristic compounds in different series of liquors based on HS-SPME-GC-MS metabolomics [J]. *Mod Food Sci Technol*, 2017, (3): 317–322.
- [31] 张静, 刘嘉飞, 汪廷彩, 等. 超高效液相色谱-串联高分辨质谱技术结合组学技术鉴别异味盐[J]. *食品安全质量检测学报*, 2019, 10(13): 4105–4111.
- ZHANG J, LIU JF, WANG TC, *et al.* Identification of smelly salt by ultra performance liquid chromatography-high resolution mass spectrometry combined with omics [J]. *J Food Saf Qual*, 2019, 10(13): 4105–4111.
- [32] 杜晋叶, 史畅, 马立娟, 等. 主成分分析研究白酒基酒香气成分[J]. *中国酿造*, 2020, 39(7): 62–68.
- DU JY, SHI C, MA LJ, *et al.* Study on aroma components of Baijiu base liquor by principal component analysis [J]. *China Brew*, 2020, 39(7): 62–68.
- [33] 孙宗保, 周轩, 吴建峰, 等. 基于超高效液相色谱-高分辨质谱的白酒基酒等级判别[J]. *中国酿造*, 2019, 38(4): 42–46.
- SUN ZB, ZHOU X, WU JF, *et al.* Grade discrimination of base liquor of Baijiu based on ultra performance liquid chromatography-high resolution mass spectrometry [J]. *China Brew*, 2019, 38(4): 42–46.

(责任编辑: 韩晓红 张晓寒)

作者简介



尹艳艳, 硕士, 主要研究方向为食品安全。

E-mail: 1262827470@qq.com



程平言, 硕士, 高级工程师, 主要研究方向为白酒酿造及产业化推广。

E-mail: xjjszx149@sina.com