



## 食品与饮料

香味，品质及鉴伪中挥发性有机物  
(VOC) 分析应用指南



# Contents



## 导语.....3



## 饮料.....5

牛奶	6
茶	8
咖啡	9
红酒	10
伏特加	12
威士忌	13
酒精饮料	14



## 水果.....15

草莓	16
苹果	17
梨	18
桃子	19



## 加工食品.....20

饼干	21
谷类食品	22
烟熏汁	23
植物肉	24
芝士	25
食用油	27
食品包装	29



## 气味污染物和添加剂..30

公猪肉异味	31
红酒异味	32
酒瓶软木塞	33
微量的含硫气味成分	34



## 真假鉴别.....35

茶	36
咖喱粉	37
蜂蜜	38



## 相关分析产品.....39

微池 / 热萃取仪	40
TD100-xr	41
HiSorb	42
Centri	43
INSIGHT	44
BenchTOF2	45
ChromSpace	46
ChromCompare+	47



## 关于 SepSolve Analytical..... 48

更多关于以上应用的信息，以及了解我们的产品如何让您受益，请联系我们的应用专家 [hello@sepsolve.com](mailto:hello@sepsolve.com)，或致电当地经销商（详情请见封底）。



## 导语

在食品饮料领域中，掌握产品中的风味成分信息很重要。因为这可以使生产者发现导致他们产品令人满意（或讨厌）特点的挥发性化合物到底是什么，从而在生产中保持产品的优良品质，同时改进产品的不良品质。

应用指南中，介绍了多种采样方式，结合一维或者全二维气相色谱以及飞行时间质谱，来获得更加清晰全面的样品成分信息。适用于多种形态的样品分析，无论它是红酒还是新鲜的水果切片。



# Discover more – Deliver more

SepSolve 和 Markes 同属于 Schauenburg 集团的成员，我们在 GC-MS 应用和系统工程领域拥有数百年的综合经验。凭借我们专业的知识以及强大技术团队，为您的实验室提供

理想的分析解决方案。我们的产品可以帮助您的实验室实现从样品前处理到数据分析，整个工作流程一体化，让您的日常工作变得更加简单快捷。

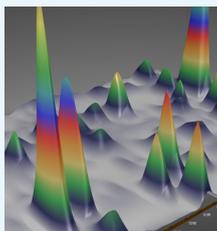
## 样品制备

**MARKES**  
International



全自动样品采集和富集浓缩进样平台 Centri<sup>®</sup> 和热脱附 TD 系列：  
见 41 页

## 色谱分离



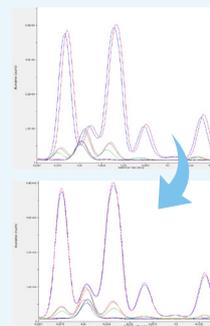
INSIGHT<sup>®</sup> 气流调制器：针对复杂样品的增强型分离技术：  
见 44 页

## 质谱检测



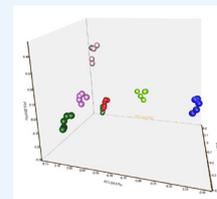
BenchTOF2<sup>™</sup> 独特专利技术飞行时间质谱，增加化合物识别的可信度：  
见 45 页

## 数据分析



ChromSpace<sup>®</sup> 数据分析软件，色谱图自动校正对齐和数据深入解析：  
见 46 页

## 化学计量学



ChromCompare+<sup>™</sup> 将复杂数据转化为有意义的结果：  
见 47 页



# 饮料

红酒、牛奶、啤酒之类的饮料中香味成分复杂，对这类饮料的香味分析，一直以来都是分析者面临的挑战。随着采样技术的进步以及下文我们将提到的先进的分离技术，使得此类样品的分析工作变得不再困难。



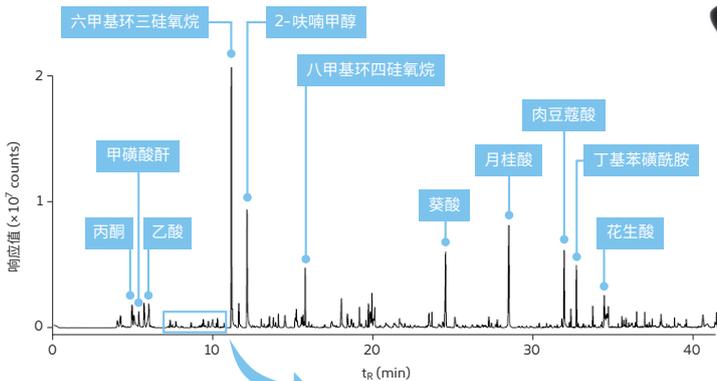
# 牛奶

## 浸没式萃取方法实现强大的品质控制

和其他饮料一样，牛奶中也含有众多种类的挥发性和半挥发性有机化合物。这些化合物的结构和浓度分布范围大多不一致。其中许多化合物对感官和健康很重要。然而目前的分析方法缺乏灵敏度，并且不同浓度范围的化合物很难通过一次进样来实现所有化合物的分析。

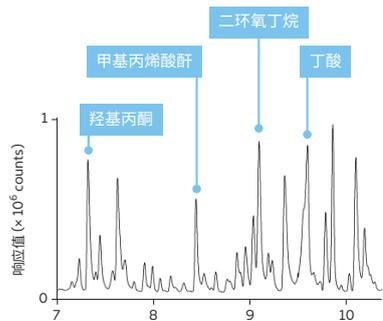
浸没式萃取方法是采用大容量固相萃取棒 HiSorb™，它具有很高的灵敏度，能在一次萃取中同时吸附住极易挥发性、挥发性及半挥发性的有机化合物，从而实现强大的品质控制。

Centri® 可以使整个样品萃取工作完全自动化，其中包括了对萃取棒上残留样品的清洗和吹干步骤。



### 分析方法

▶ **样品**：半脱脂牛奶 (3 mL)，15% NaCl 稀释 (15 mL)。▶ **吸附萃取预浓缩**：惰性 HiSorb™ 大容量固相萃取棒，浸没萃取方式，全自动前处理平台 Centri®。冷阱：“材料散发”。▶ **GC-MS**：离子采集范围： $m/z$  35–350。▶ **软件**：ChromSpace® 1D。



使用 HiSorb™ 大容量固相萃取棒进行吸附萃取，通过 GC-MS 检测可以得到挥发性范围很广的化合物色谱图。图中选取了几个化合物，来展示这个结果，同时化合物的峰型也非常完美。

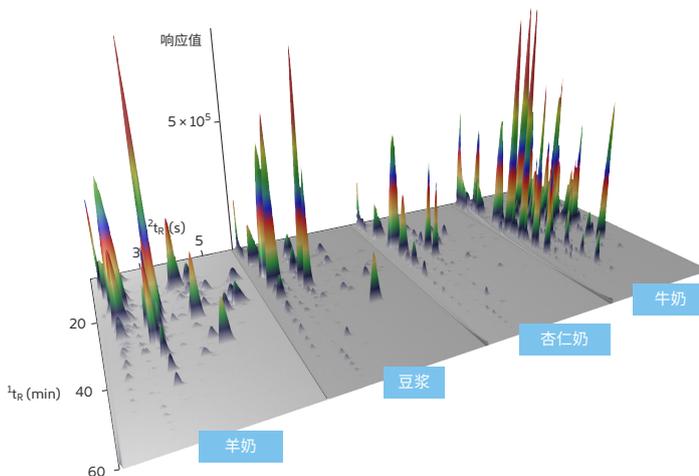
# 牛奶

接上页

## 轻松可视化的实现不同品牌牛奶的全二维数据比较

为了满足不同顾客的偏好和饮食要求，现在有很多传统牛奶的替代品。有其他动物奶，也有用谷物、坚果或其他非乳制品制成的调味饮料。要对这些范围广泛的产品进行可靠的比较，就需要具有广泛适用性的采样和分析方法。

应对这一挑战，我们采用 HiSorb™ 浸没式吸附萃取结合热脱附预浓缩和 GC×GC-TOF MS 的检测分析，可以对样品风味成分进行深度的解析，轻松可视化的比较不同样本类型之间的差异。



### 分析方法

- ▶ **样品**：牛奶 (10 mL)。
- ▶ **吸附萃取**：惰性 HiSorb™ probe，浸没式萃取。
- ▶ **热脱附仪**：TD100-xi™。冷阱：“疏水通用型”。
- ▶ **GC×GC**：分流 100:1。调制周期：3.8 s。
- ▶ **飞行时间质谱**：BenchTOF™。离子采集范围：m/z 40–300。Tandem Ionisation® 离子源：70/14 eV。
- ▶ **软件**：ChromSpace®。

大容量吸附萃取结合 TD 和 GC×GC-TOF MS 检测分析，已被证实可以对牛奶样品进行强有力的比较和香味特征成分的筛查。



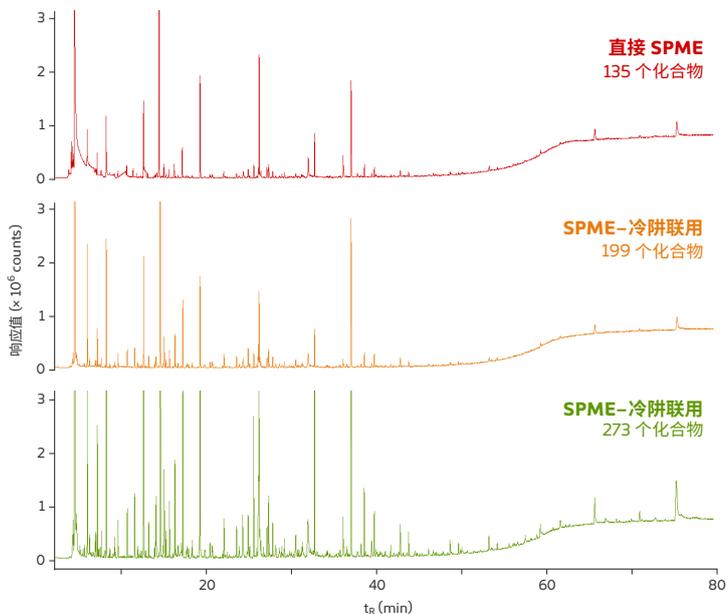
下载 SepSolve White Paper

# 茶

## 通过样品多次浓缩富集来提高灵敏度

如果想要准确知道食品饮料的香味特征，那么即便是细微的化合物成分也需要可靠地检测到。但是传统的采样方法，例如 SPME，很难达到这个灵敏度。

然而，如果使用 SPME 进行多次萃取浓缩富集 (MSE)，那么它的灵敏度将得到极大的提升。操作方式是：将萃取后的 SPME 纤维头脱附，使化合物进入吸附剂填充的冷阱中进行聚焦，然后纤维头重新回到样品瓶中进行第二次萃取，其后再将化合物脱附入冷阱中。这个过程重复进行，直到化合物被彻底的萃取出来。



### 分析方法

- ▶ 样品：红茶。▶ SPME 预浓缩：Centri<sup>®</sup>。冷阱：“材料散发”。
- ▶ GC-MS：离子采集范围：m/z 35–350。▶ 软件：ChromSpace<sup>®</sup> 1D。

使用多次富集浓缩的方法 (MSE)，通过增加进样次数来提高痕量化合物的检测灵敏度 – 例如：用 SPME 分析茶汤样品。



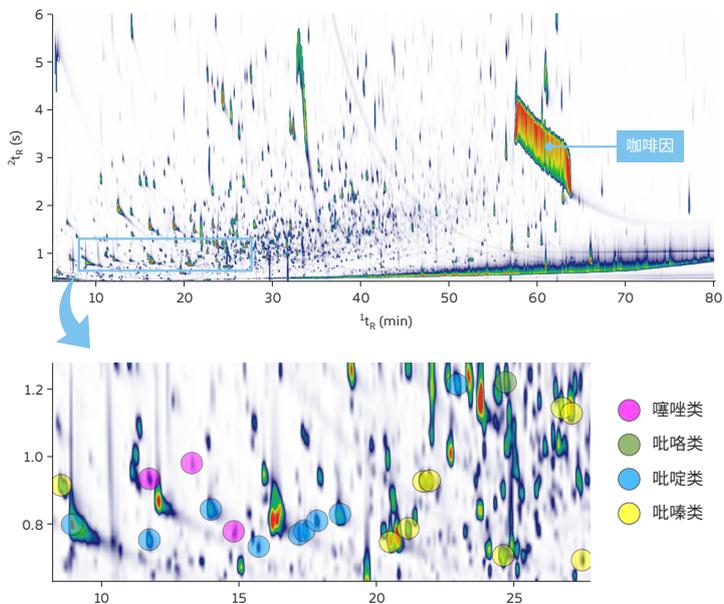
下载 Markes  
Application Note

# 咖啡

## 全二维提升分离能力

烘焙咖啡的提取物中发现了大约 1000 多种化合物成分，由于咖啡豆产地或者咖啡烘焙程度的差异，化合物的组成成分也各不相同。传统的 GC 和四级杆质谱很难对如此复杂的样品进行有效的分析和特征筛查。

全二维气相色谱 (GC×GC) 结合飞行时间质谱 BenchTOF™ 可以极大地提升分离能力，仅需要一次分析就可以使化合物组分得到完全的分。图例展示了咖啡提取物的全二维色谱图。



通过对咖啡粉提取物的全二维气相色谱分析，发现很多含氮化合物，包括吡啶，吡嗪以及噻唑类化合物，这些化合物都是咖啡风味的重要贡献者。然而在常规的 GC-MS 分析中很难得到如此详尽的分析结果。

### 分析方法

▶ 样品：咖啡提取物。▶ GC×GC：热调制器。调制周期：6.0 s。▶ 飞行时间质谱：BenchTOF™。离子采集范围：m/z 35-400。▶ 软件：ChromSpace®。



下载 SepSolve  
White Paper

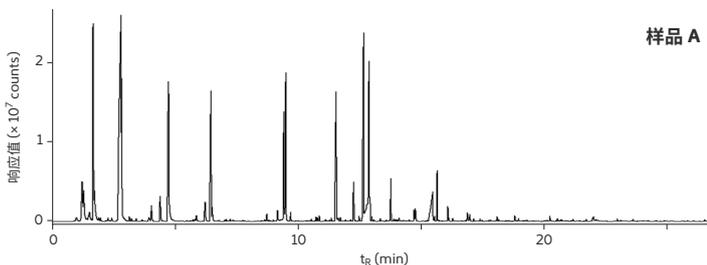
# 红酒

## 可靠的香味成分比较

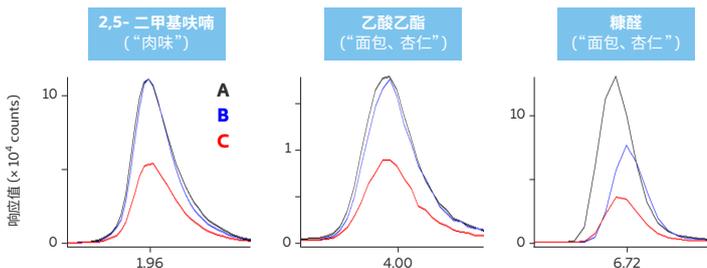
在红酒领域，知晓酒中的香味成分意义重大，不仅可以对它的品质进行控制而且可以清楚的了解特定年份红酒中受欢迎的感官特征所对应的化合物组分到底是什么。

大容量吸附萃取（浸没萃取或者顶空萃取）是一种强大的采样方法，通过这种方法得到的数据，可以进行品牌之间的平行比较，找出其中最关键的差异。

此例中，对三款赤霞珠红葡萄酒进行了分析比较发现，虽然它们的香气化合物组成相似，但是化合物的响应值确存在着差异，也正是这种差异导致了整体香味上的差别。



样品 A



三款加州赤霞珠红酒 (A, B, C) 的关键差异在于三个香气化合物的响应值有着明显的差异。主图展示了样品 A 的化合物组分数谱图。

### 分析方法

- ▶ **样品**：三款加州赤霞珠红葡萄酒 (AVA 产地)。
- ▶ **吸附萃取和预浓缩**：惰性 HiSorb™ 萃取棒，顶空萃取模式，全自动 Centri®。冷阱：“材料散发”。
- ▶ **GC-MS**：离子采集范围：m/z 50–300。▶ **软件**：ChromSpace® 1D。

# 红酒

## 提升复杂香味组分的分离能力

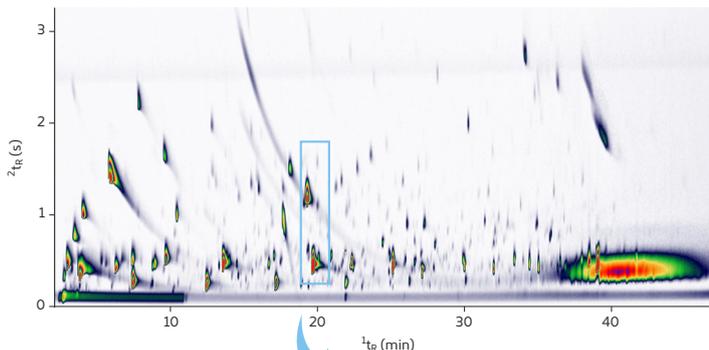
酒中的香味组分往往是非常复杂的，在传统的一维气相色谱分析中，高浓度的化合物常常被标记为重要的香气成分。

随着分离技术的发展，全二维气相色谱成为了复杂香味组分分离的最佳选择，而 INSIGHT<sup>®</sup> 气流调制器在全二维气相使用中不需要任何制冷剂。

在此例中，全二维气相色谱结合高灵敏度的飞行时间质谱，提供了可信的化合物识别，不管是目标物还是非目标物。

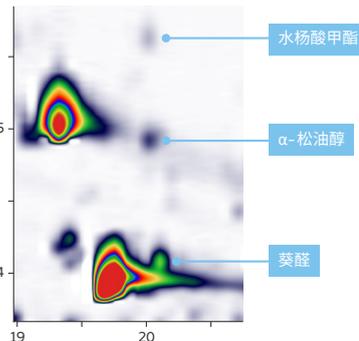


下载 SepSolve White Paper



### 分析方法

- ▶ **样品**：黑比诺红酒。 ▶ **吸附萃取**：惰性 HiSorb<sup>™</sup> 萃取棒，顶空萃取模式，使用全自动 Centri<sup>®</sup>。
- ▶ **GC×GC**：气流调制器：INSIGHT<sup>®</sup>。调制周期：5.5 s。
- ▶ **飞行时间质谱**：BenchTOF<sup>™</sup>。离子采集范围：m/z 35–600。
- ▶ **软件**：ChromSpace<sup>®</sup>。



在红酒的顶空分析中，传统的一维气相色谱分析会出现几种化合物共流出的现象，化合物没办法分离识别，全二维气相色谱分析极大的提高了分离能力，解决了共流出问题，也同时意味着提升了对化合物识别的可信度。

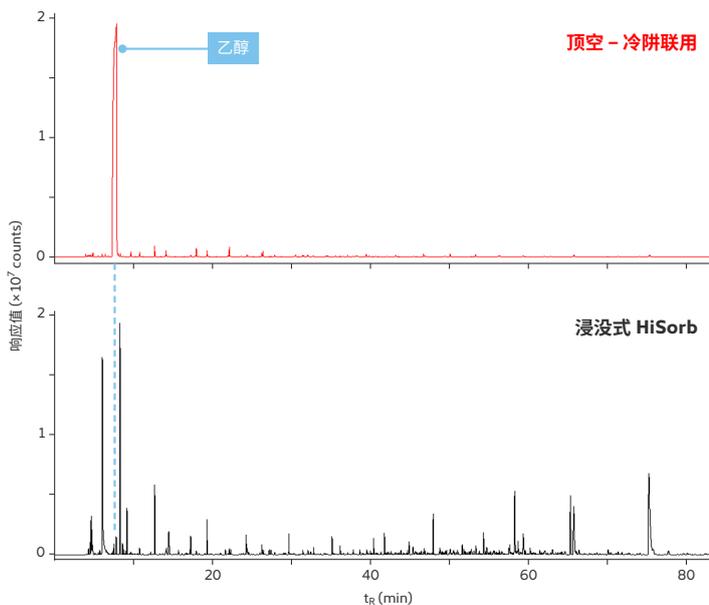
接上页

# 伏特加

## 如何应用吸附萃取法避免乙醇峰的干扰

过去从高酒精含量的酒中提取挥发性成分的采样方式有很多种，主要目的都是想改进溶剂提取方法的低效率性以及如何解决高酒精含量的问题。

与传统的顶空采样模式相比，HiSorb™ 吸附萃取有一个主要的优势，因为乙醇的分配系数很低 ( $\log K_{o/w} -0.14$ )，这就意味着用 HiSorb 吸附萃取，乙醇峰将不会是香气色谱图分布中的主导峰。不会影响其它香味成分的分析检出。具体见本例所示。



使用 PDMS 涂层的 HiSorb™ 萃取棒对伏特加样品进行浸没萃取，此方法大大降低了乙醇峰的响应值，如左 GC-MS 色谱图所示，两种方法均使用 Markes 的 Centri® 自动化操作平台。另外值得注意的是，对于高沸点的化合物，HiSorb 也可以采用浸没萃取的方式采样来提高灵敏度。

### 分析方法

- ▶ **样品**：伏特加。▶ **吸附萃取**：惰性 HiSorb™ 萃取棒，浸没萃取模式，全自动化 Centri®。冷阱：“材料散发”。▶ **GC-MS**：离子采集范围：m/z 35–350。
- ▶ **软件**：ChromSpace® 1D。



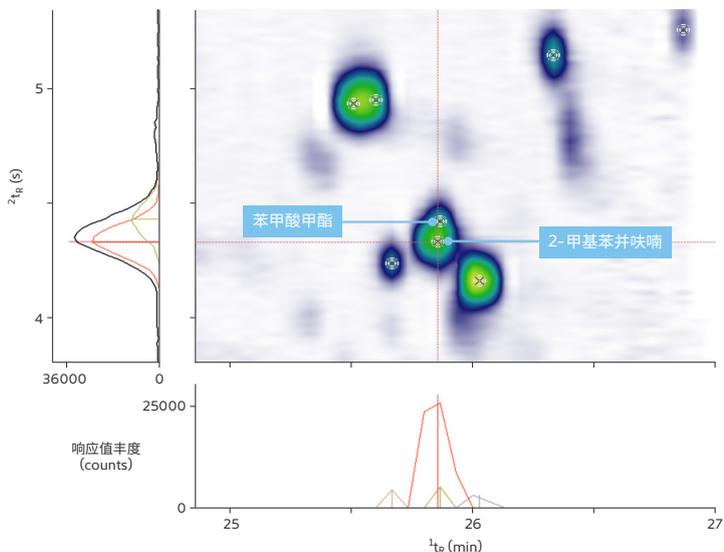
下载 Markes  
Application Note

# 威士忌

## 发现“隐藏”的香味化合物

威士忌的香味是由数以百计的化合物成分组成，而且它们归属于不同的族类化合物，能否正确的识别这些挥发性化合物，对于质量控制和真伪鉴别，以及在新香味的制造过程中都很重要。

在分析此类复杂样品的时候，全二维气相色谱 (GC×GC) 结合飞行时间质谱是比较理想的选择，增强的分离能力可以一次分析就可得到整个挥发性有机物组分信息，即使对那些在常规分析中共同洗脱的化合物，也可以准确的进行识别。



左图是威士忌全二维色谱图中经过放大的几个化合物斑点图。展示了ChromSpace®软件如何根据NIST数据库(匹配因子>890)准确识别出两种共洗脱的活性芳香化合物。

### 分析方法

► **样品**: 威士忌, 用水进行 3:1 稀释。► **SPME**: 萃取头: DVB/Car/PDMS StableFlex™ (Sigma-Aldrich)。平衡温度: 35°C, 10 min, 全自动样品处理器。► **GC×GC**: 分流比: 5:1。调制周期: 4.0 s。► **飞行时间质谱**: BenchTOF™。离子采集范围: m/z 40–350。► **软件**: ChromSpace®。



下载 SepSolve  
White Paper

# 酒精饮料

## 发现独有的风味活性化合物

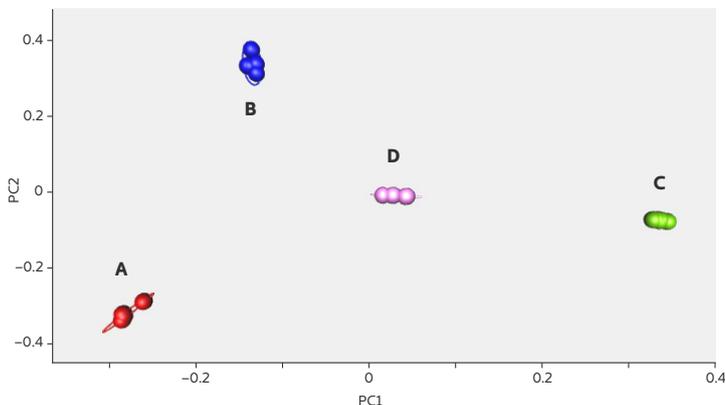
酒精类饮料自 2019 年取得市场认可后现在已经发展出 50 多个可供选择的品牌。为了确保市场竞争力，在生产中风味成分的把控，对保证品牌质量的稳定性至关重要。

酒精饮料的整体风味是由多种化合物共同组成的，其中某些化合物是每个品牌各自独有的。低挥发性风味活性化合物通常需要浸没式技术才能从液体中有效萃取。

HiSorb 浸没萃取结合 GC-MS 分析，得到范围广泛的多种化合物。使用 ChromCompare+™ 自动进行品牌比较，实现快速简单的分类，用于检查产品质量和品牌真实性。

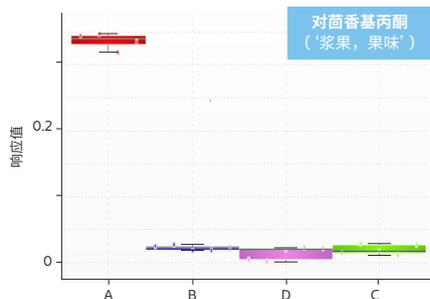


下载 Markes Application Note



### 分析方法

- ▶ **样品**：将 4 mL 市售的酒精饮料加入到 16 mL HPLC 级别的水中。
- ▶ **吸附萃取**：惰性 HiSorb 萃取棒 (PDMS/DVB)，使用浸没萃取方法，Centri® 全自动操作。
- ▶ **GC-MS**：离子采集范围：m/z 35–350。
- ▶ **软件**：ChromCompare+™。



PCA 得分图能清楚区分 4 个品牌的酒精饮料，如 (上图) 所示。最受欢迎的品牌 (A) 中，有一种风味成分更丰富，如方框图 (下图) 所示。





# 水果

新鲜水果挥发物的分析尤其重要，因为包装、运输和储存过程中的条件会影响保质期和消费者对最终产品的感受。因此，为了提高水果质量，必须了解这些关键挥发物的变化趋势。

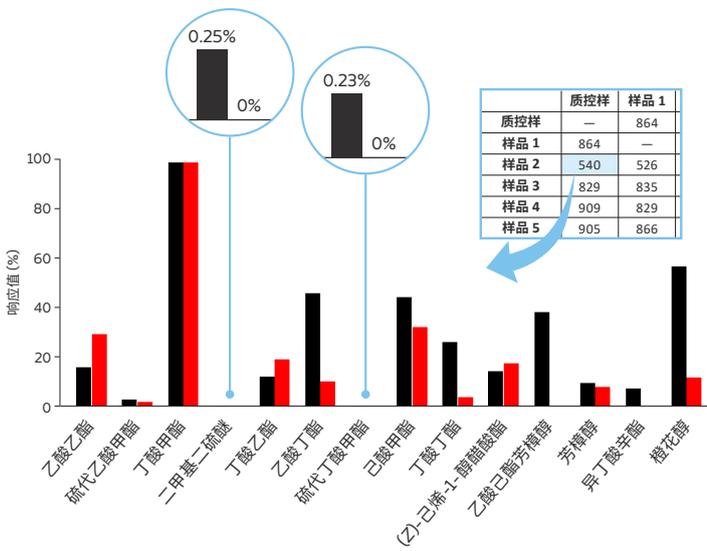


# 草莓

## 香味成分的自动化比较

在食品品质控制方面，经常需要快速得到可靠的分析结果，然而直接对复杂的色谱图进行比较，往往存在很大的主观性。自动化数据分析软件可以通过保留时间校正对齐的功能，减少比对上的误差。

ChromCompare+™ 化学计量学分析软件通过一系列简单易懂的可视化图表来展示样品之间的趋势和差异。根据 BenchTOF™ 采集到的关键香气成分的相对响应值，ChromCompare+ 可以生成简单的“匹配因子”表格来展示每对样品的比较情况，这个也同时节省了数据复查的时间。



### 分析方法

- ▶ **样品**：整颗草莓。
- ▶ **动态顶空**：微池 / 热萃取仪。采样方式：40°C，30 min 使用“气味”吸附管。
- ▶ **热脱附**：TD100-xr™。
- ▶ **冷阱**：“材料散发”。
- ▶ **飞行时间质谱**：BenchTOF™。离子采集范围：m/z 35–350。
- ▶ **软件**：ChromCompare+™。



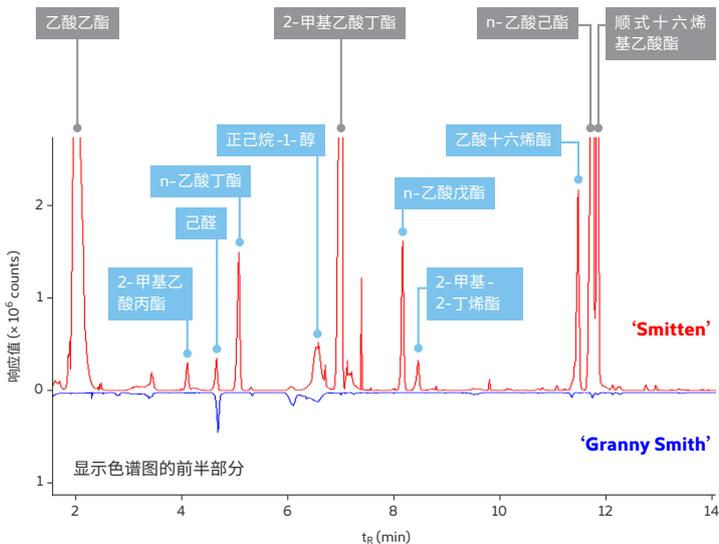
将草莓样品(黑色)和草莓质控样品(红色)进行比对，对两个痕量含硫化合物的响应值进行了加权计算，这就确保了任何与品控样品有偏差的化合物都会得到一个低的匹配值，从而标示了潜在的品控问题。

# 苹果

## 使用挥发性有机化合物谱图作为水果质量的衡量标准

食品香气分析对新鲜水果尤为重要，因为包装、运输和储存期间的条件会影响货架期和感知的“新鲜度”。然而，想要客观的比较此类样品之间的差异还是比较困难的。

动态顶空可以解决这个难题，它可以将相对大体积的样品进行采样，结合冷阱聚焦技术，可以得到比传统顶空定量环或顶空针取样更好的GC-MS峰型及灵敏度。



### 分析方法

- ▶ **样品**：'Smitten' 和 'Granny Smith' 苹果 (6 块，每块大小约 ~8 cm<sup>3</sup>)。
- ▶ **动态顶空**：微池 / 热萃取仪。采样条件：37°C, 10 min 收集到“气味”吸附管中。
- ▶ **热脱附**：Centri<sup>®</sup>。冷阱：“硫 / 活性化合物”。
- ▶ **GC-MS**：离子采集范围：m/z 35–350。



此项分析，是从样品体积比较大的苹果中采集代表性数据。'Smitten' 苹果比 'Granny Smith'，苹果的成分要复杂很多，有很多响应值很高的化合物，也有很多微小响应值的化合物。



下载 Markes  
Application Note

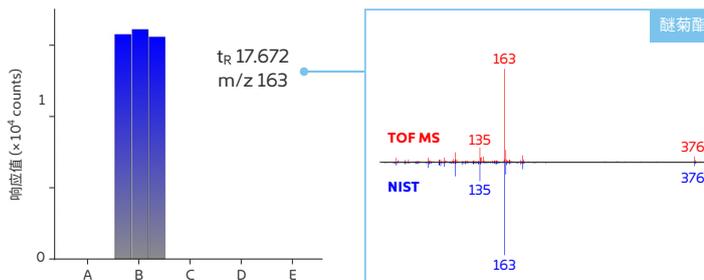
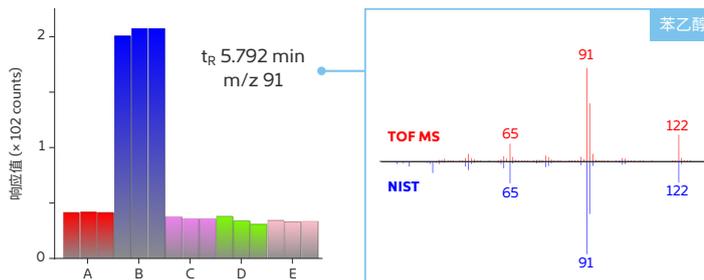
# 梨

## 使用 ChromCompare+ 评估水果品质

通过质量管理使食品和饮料行业能够满足消费者的期望，维护品牌声誉，保证产品安全。

分析仪器不断发展，使我们能够比以往任何时候都更深入地了解样品成分，但数据处理仍然是分析工作中的瓶颈。

这里，我们使用 ChromCompare+™ 软件对所有原始 GC-MS 数据进行处理，找出五个梨品种的关键差异成分。这种创新的方法最大限度地减少了人为的预处理步骤，使质量控制实验室实现自动化的数据处理工作。



### 分析方法

▶ **样品:** 使用 QuEChERS 萃取法对 5 个品种的梨进行萃取，每个样本重复 3 次分析。▶ **飞行时间质谱:** BenchTOF™。▶ **软件:** ChromCompare+™。

此项研究中，通过特征汇总图发现两个区分 5 个梨品种的关键成分，(使用 NIST 谱库检索识别)。这些差异很重要，苯乙醇是具有花香和甜味的特点，而褪菊酯是一种杀虫剂。



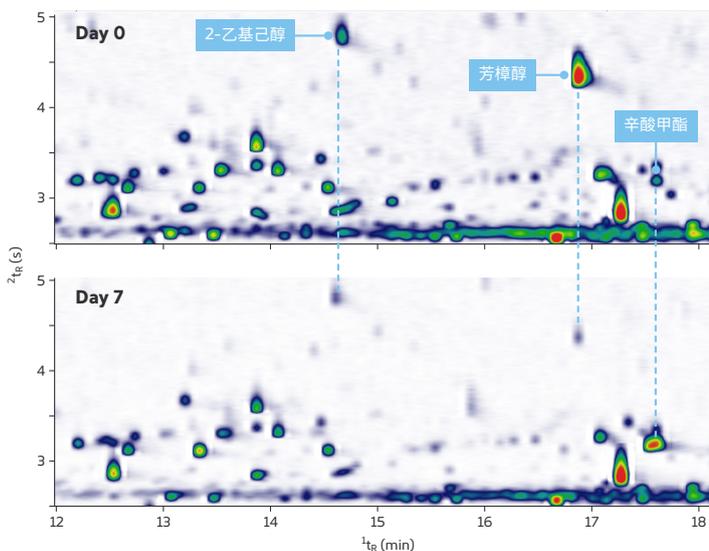
下载 SepSolve  
White Paper

# 桃子

## 水果采摘后的品质确认

FRUIT qualityY (FRUITY) 国际组织协作旨在提供新的预测技术，能更好的了解水果采摘后贮藏过程中的生理变化，以便给出客观的质量评估。

文中使用了热脱附 - 全二维 - 飞行时间质谱 (TD-GC×GC-TOF MS) 增强的分离能力和检测灵敏度，全面的获得不同品种桃子的挥发性有机物成分信息。结果表明，不同品种桃子在冷藏 7 天后，挥发性有机物成分变化是大不相同 (7 天是意大利南部到北欧的常规船运时间)。



### 分析方法

▶ **样品**：分别在采摘后 (0 天)，和贮藏 7 天后，对整个桃子样品进行风味采集，将桃子放入一个烘焙袋中，直接顶空抽取 600 mL 气体到“风味 / 含硫”吸附管中。▶ **热脱附**：TD100-xr™。▶ **GC×GC**：气流调制器：INSIGHT®。调制周期：4.0 s。▶ **飞行时间质谱**：BenchTOF™。离子采集范围：m/z 45–350。▶ **软件**：ChromSpace®。

通过桃子挥发性有机物成分色谱图的比较 (保存前和保存 7 天后)，可以发现三个明显变化的挥发性有机物成分。



查看文章  
Scientific Reports



## 加工食品

在食品领域尤其是加工食品，对产品质量控制的需求与日俱增。这就需要详尽的掌握特定化合物的变化情况，接下来将例举一些相关分析案例。

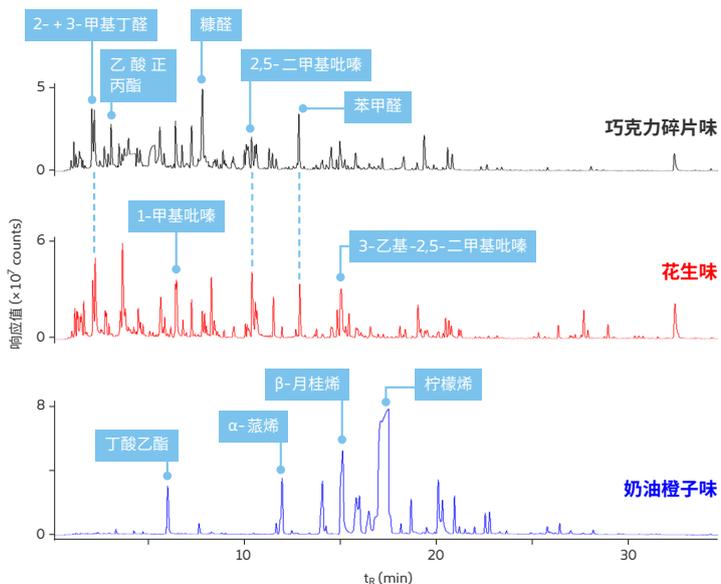


# 饼干

## 动态顶空萃取结合气相-飞行时间质谱提高分析灵敏度

产品质量监控通常包含风味成分，污染物及污染源筛查。这就需要对样品的化合物成分做深入的分析，但传统的样品制备和分析方法难以达到必要的灵敏度。

将动态顶空，热脱附和飞行时间质谱这三种能够提高灵敏度的技术结合起来使用，可以很好的解决这个问题。文中将通过饼干香味成分的分析案例来展示这个技术。



### 分析方法

- ▶ **样品:** 饼干 (3 g) ▶ **动态顶空:** 微池 / 热萃取仪。采样方法: 40°C, 30 min, “通用型” 吸附管。▶ **热脱附:** TD100-xr™。冷阱: “通用型”。
- ▶ **飞行时间质谱:** BenchTOF™。离子采集范围: m/z 40-600。▶ **软件:** ChromSpace® 1D。

通过 TD-GC-TOF MS 微池采样，快速有效地对饼干中的微量香气进行分析。三种口味曲奇中的芳香化合物有着明显的差异。



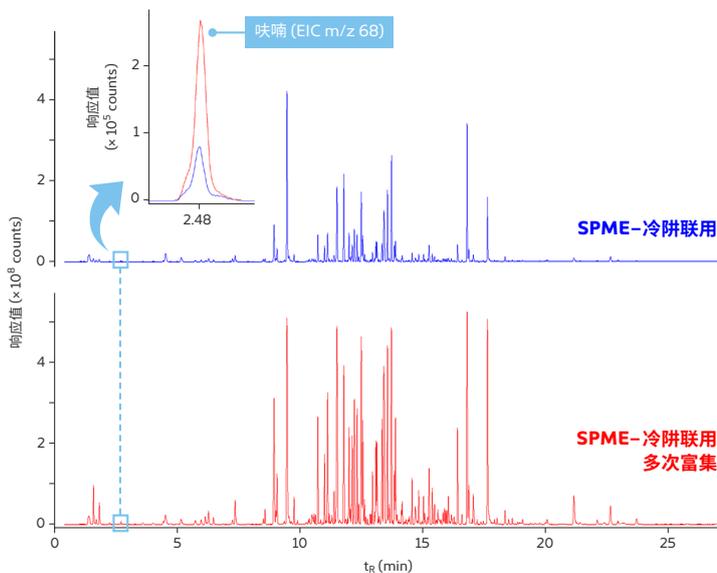
下载 SepSolve White Paper

# 谷类食品

## 通过样品多次浓缩富集提高灵敏度

近年来在食品领域，对于产品安全和品质的监控日益增长，通常涉及产品的风味组成，污染物及污染源。这就需要对某些特定化合物有深入详细的了解。但是传统的样品制备和气相分析方法很难达到需要的灵敏度。

此处，SPME-冷阱联用技术结合高灵敏度的飞行时间质谱，可以获得全面的香味成分信息，通过一次分析便可识别出气味污染源和污染物。



### 分析方法

- ▶ **样品**：1 g 市售谷类食品，均质化后加入 2.5 g NaCl 和 10 mL 蒸馏水。
- ▶ **SPME**：DVB/CWR/PDMS SPME 纤维头 (80  $\mu\text{m}$ /10 mm) 全自动 Centri<sup>®</sup>。
- ▶ **飞行时间质谱**：BenchTOF<sup>™</sup>。离子采集范围：m/z 33–300。
- ▶ **软件**：ChromSpace<sup>®</sup> 1D。

通过 SPME-冷阱联用浓缩富集技术，对三个顶空瓶中的样品进行萃取叠加分析，可以得到比单次的 SPME 冷阱萃取多 100 多个峰，可以提高目标化合物的最低检出限，例如呋喃。

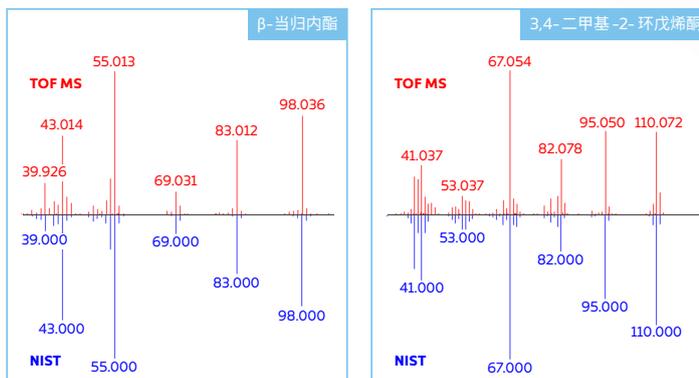
# 烟熏汁

## 全面的化合物指纹图谱

“烟熏汁”是一种调味品，它是模仿传统的烟熏过程，通过添加一种“烟熏”味，来增进食品风味。

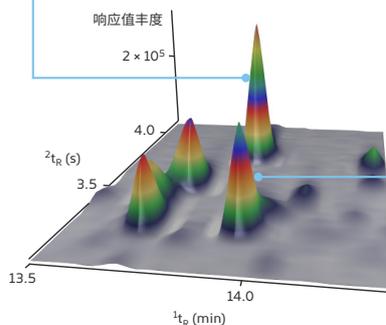
由于烟熏汁产品性质的复杂性，欧洲食品安全管理局 (EFSA) 在 2021 年 2 月授权前发布了一则关于此类产品的分析指南。新的指南要求对此类产品必须进行全化合物成分检测，这就意味着需要对产品进行非目标物的检测分析。

通过全二维-飞行时间质谱，可以得到一张全面的烟熏汁化合物成分色谱图，同时高品质的飞行时间质谱的使用，使化合物的识别变得更加可靠。BenchTOF2™ 进一步提高了离子质量的准确度 (<50 ppm)。



### 分析方法

- ▶ **样品**：市售“苹果木”烟熏汁，二氯甲烷进行液液萃取制备。
- ▶ **GC×GC**：气流调制器：INSIGHT®。调制周期：3.0 s。
- ▶ **飞行时间质谱**：BenchTOF2™。离子采集范围：m/z 30–600。
- ▶ **软件**：ChromSpace®。



通过全二维-飞行时间质谱分析，得到“苹果木”烟熏汁的色谱图(下图)。BenchTOF2™ 采集的质谱图和商业谱库进行比对，可以可靠的识别化合物组分(上图)。

# 植物肉

## 香味的“逆向分析工程”

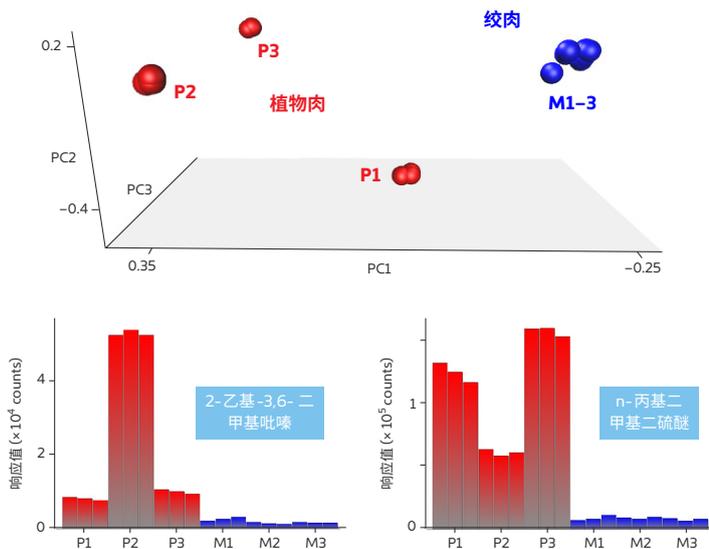
为了最大限度的提升消费者对于植物肉的需求，需要知道真的熟肉制品所具备的感官特征，从而去模仿它，这就需要通过香味的“逆向分析工程”。

然而绞碎的肉在烹饪过程中会产生数以百计的挥发性有机物成分，而且具备气味活性的化合物种类繁多，广泛覆盖不同的化合物族类。所以要获得全面的化合物组分信息是一项极具挑战性的工作。

文中使用 HiSorb™ 吸附萃取方法，进行全二维的增强型分离和飞行时间质谱，再结合 ChromCompare+™ 化学计量学数据分析软件，通过简单的自动化数据处理，在复杂数据中快速识别出香味成分的差异。



下载 SepSolve White Paper



### 分析方法

▶ **样品**：三种绞肉和三种来自不同生产商的植物肉（每种 4 g）。▶ **吸附萃取**：HiSorb™ 萃取棒，顶空吸附模式，全自动 Centri®。▶ **GC×GC**：气流调制器：INSIGHT®。调制周期：4 s。▶ **飞行时间质谱**：BenchTOF™。离子采集范围：m/z 35–450。▶ **软件**：ChromCompare+™。



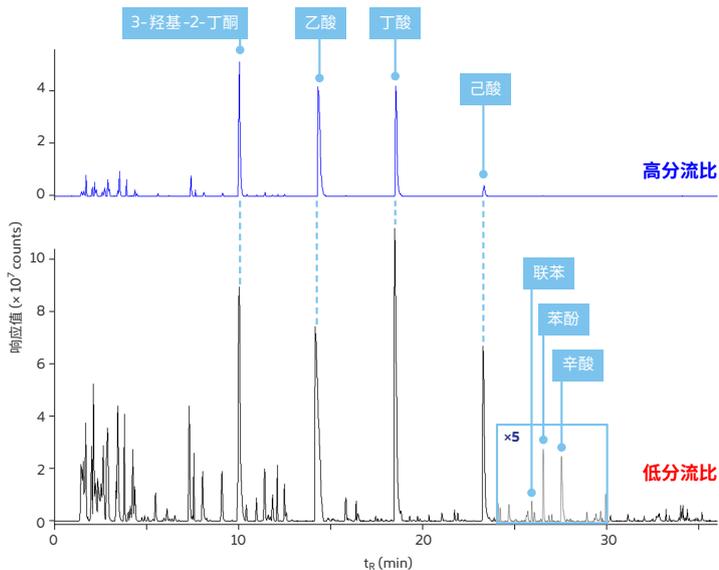
通过对三种绞肉 (M1-3) 和三种植物肉 (P1-3) 的比较分析，发现一种含硫化化合物和一种吡嗪类化合物是绞肉和植物肉之间的关键差异成分，如 PCA 分布图所示 (上图)。

# 芝士

## 准确定量高低浓度范围的化合物

芝士的香味成分中包含种类广泛的化合物，而且它们的浓度范围并不一致，有的浓度很高，有的浓度非常低。如何对这些化合物同时进行定量是分析人员经常面临的挑战。

Markes 的热脱附仪通过分流和再收集功能，很容易解决这类型的问题。首先对吸附管脱附出的化合物组分进行高分流比的分析，主要针对高响应值的化合物定量，另外分流出的化合物组分通过回收功能回到另一根吸附管中。接着对回收吸附管进行热脱附，并设置低分流比的分析，主要针对低响应值的化合物定量。这是 SPME 无法实现的功能，而且此功能也可以用来验证分析物的回收率。



### 分析方法

▶ **样品**：3 g 磨碎的切达干酪。▶ **动态顶空**：微池 / 热萃取仪。  
吸附管：“材料散发”。冷阱：“材料散发”。高分流比：进样 3:1，冷阱解析：15:1。低分流比：进样：2:1，冷阱解析：3:1。▶ **飞行时间质谱**：BenchTOF™。离子采集范围：m/z 33–350。

通过顶空分析，对芝士中低浓度的酚类化合物和高浓度的脂肪酸类化合物进行定量，即使两者的浓度跨度很大，也可以通过一次分析完成定量工作。



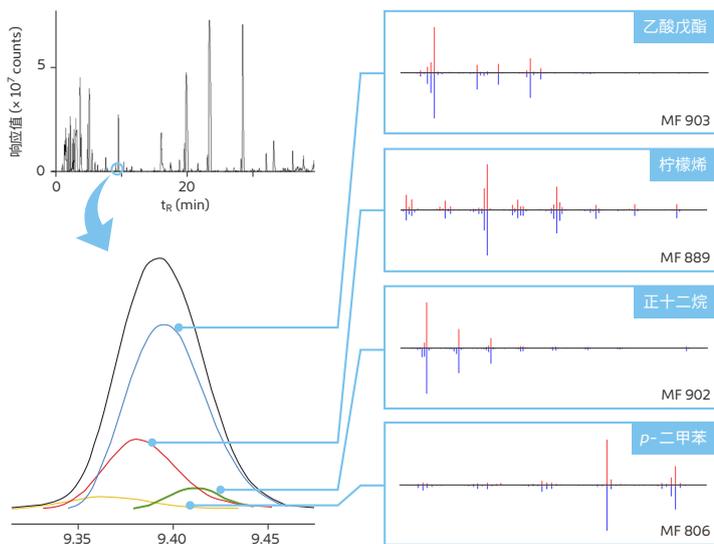
下载 Markes  
Application Note

# 芝士

## 发现“隐藏”的风味化合物

芝士中存在着一些痕量的风味活性化合物，但是芝士中也包含了很多高含量的化合物例如脂肪酸类化合物，这就使得痕量风味化合物的发现工作变得异常困难。

如何将叠加峰通过解卷积，继而通过 NIST 谱库查找到对应的化合物，通过飞行时间质谱 BenchTOF™ 检测和数据软件 ChromSpace® 1D 处理，可以可靠的识别出对应的化合物。此处，我们将做个简单介绍。



### 分析方法

▶ **样品**：磨碎的成熟切达干酪 (5 g)。▶ **动态顶空**：微池 / 热萃取仪。采样方法：40°C, 30 min, “材料散发” 吸附管。▶ **热脱附**：TD100-xr™。冷阱：“材料散发”。▶ **飞行时间质谱**：BenchTOF™。离子采集范围： $m/z$  33–350。▶ **软件**：ChromSpace® 1D。

切达干酪的顶空分析结果中，发现一个微小的峰，此峰包含 4 个共流出的化合物。通过高质量 BenchTOF™ 质谱采集数据 (红色)，结合数据处理软件 ChromSpace® 1D，对化合物峰进行解卷积。使化合物的 NIST 谱库搜索得到完美的匹配度 (蓝色)。

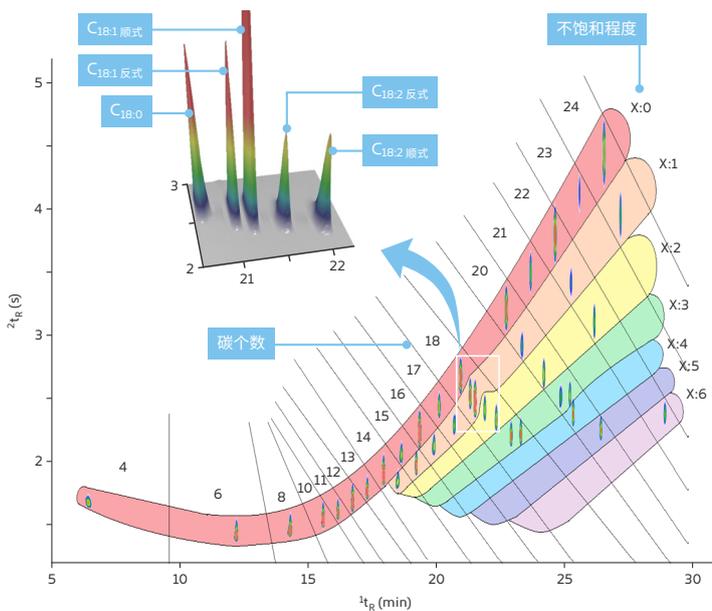
接上页

# 食用油

## 脂肪酸甲酯类化合物的全分离

食品中脂肪酸甲酯的分析很重要，尤其在评估它们的营养成分时，对顺式和反式脂肪酸的定量尤为关键。然而，传统的一维气相很难对所有的化合物组分进行分离。

此例中，全二维气相 GC×GC 可以依据碳个数，不饱和程度以及顺 / 反式同分异构体，对脂肪酸甲酯类化合物进行有效的分离。使用气流调制器 INSIGHT® 对大量的不同批次的样本进行分析，得到形状尖锐，对称的峰型，以及极好的重现性。



### 分析方法

▶ **样品**：脂肪酸甲酯标准品，二氯甲烷配制 (37 个化合物，200 ppm，200:1 分流)。▶ **GC×GC**：气流调制器：INSIGHT®。调制周期：3.8 s。▶ **FID**。▶ **软件**：ChromSpace®。



全二维气相可以使脂肪酸甲酯类的同分异构化合物根据族类的结构进行完全的分离。此例中，脂肪酸甲酯化合物根据碳数目，以及不饱和程度进行了完全分离。化合物同分异构的分离，使识别工作变得更加简单。



下载 SepSolve White Paper

# 食用油

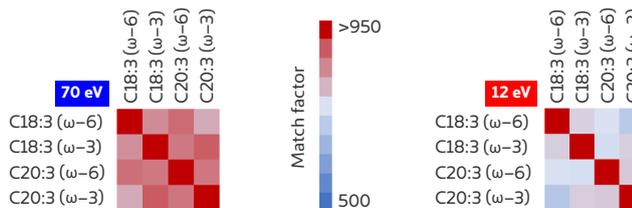
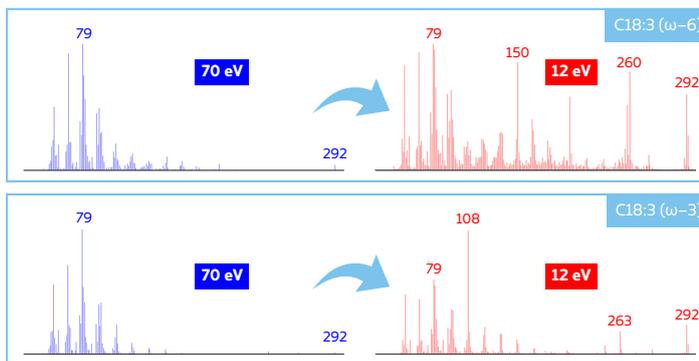
接上页

## 提高脂肪酸甲酯同分异构体识别的可信度

上一页中我们提到了全二维气相分离的优点，但是对于 FAMES 如果仅仅采用传统的 70 eV 电压进行高强度的电离，那么只能得到很弱的分子离子峰。这样就很难确定某些 FAMES 的化合物名称，尤其是同分异构体，因为要确认它们的碳链长度，以及区分相似的质谱图是很困难的。

同时采用 70 eV 和 12 eV 电离的 (Tandem Ionisation<sup>®</sup>) 电离技术能够区分两个 C<sub>18</sub> FAMES。12 eV 电离质谱图显示，它们的分子离子峰以及重要结构的碎片离子峰都得到了增强。

对 12 eV 电离的质谱数据进行谱库检索时，可以得到更高的匹配度。这意味着相同的分析时间，可以得到更高的化合物识别度。



### 分析方法

- ▶ **样品**：FAME 标准品，二氯甲烷配制 (37 个化合物，200 ppm，200:1 分流)。
- ▶ **GC×GC**：气流调制器：INSIGHT<sup>®</sup>。调制周期：3.8 s。▶ **飞行时间质谱**：BenchTOF<sup>™</sup> at 70 eV 和 12 eV。▶ **软件**：ChromSpace<sup>®</sup>。

在 12 eV 电离条件下，两组 FAMES 的同分异构体的质谱差异变大，从而使它们能得到更好的区分，这就避免了错误识别的风险，提高结果数据的可信度。



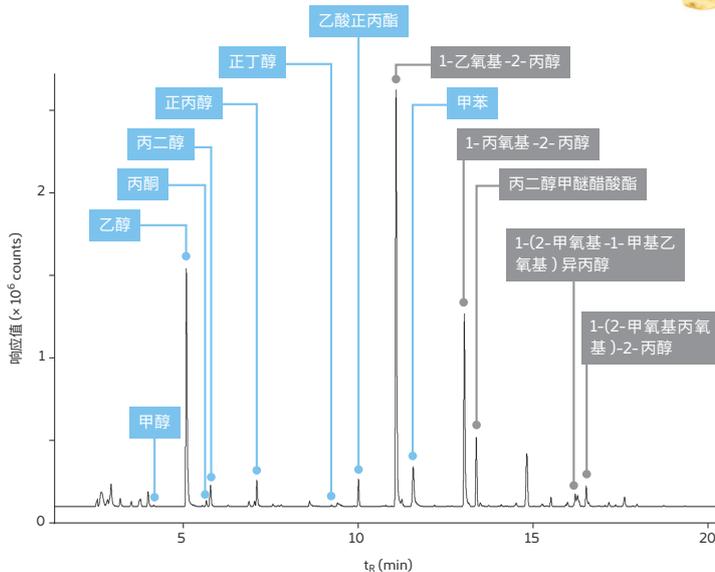
下载 SepSolve White Paper

# 食品包装

## 提高溶剂残留检测灵敏度的采样方法

如今我们消费的各种各样的食品普遍都会有包装袋，包装的作用一方面是可以传递产品的信息，另一方面是用来在运输、贮藏过程中对食品起到保护作用。然而包装本身可以是污染物的来源。例如，残留溶剂，单体以及添加剂等。

通过顶空采样结合冷阱预浓缩技术来提高分析物的检测灵敏度，可以很容易的筛查到食品包装袋上的污染物。此例展示了使用此方法识别复合聚合物中的重要溶剂残留：乙醇的残留浓度可达  $1.92 \text{ mg/m}^2$ 。



### 分析方法

▶ **样品**：未经使用的烘焙风味小吃复合聚合物包装材料薄片。 ▶ **顶空-冷阱**：Centri<sup>®</sup>。采样方法：100°C，60 min。进样体积：1 mL。冷阱：‘TO-15/TO-17 Air toxics’。 ▶ **GC-MS**：离子采集范围：m/z 15-300。 ▶ **软件**：ChromSpace<sup>®</sup> 1D。

使用 Centri<sup>®</sup> 的顶空冷阱技术，从食品包装袋上分析出许多生产过程中产生的挥发性化合物以及包装材料上的溶剂残留（蓝色）。



下载 Markes Application Note



## 气味污染物和添加剂

食品领域中，对于产品安全和品质的监控变得越来越重要。产品品质的监控往往会涉及气味污染物污染源，以及掺假等方面。这里，我们将展示如何解决传统样品制备和分析中遇到的难题。

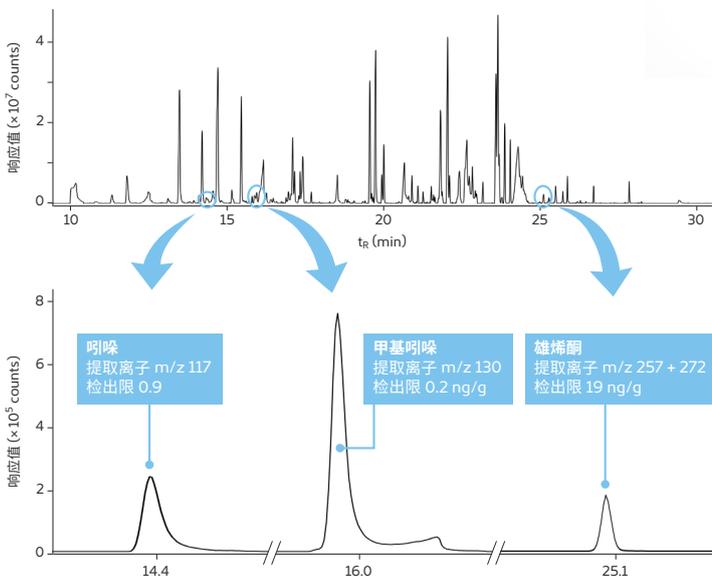


# 公猪肉异味

## 降低不良风味的检出限

公猪的脂肪组织——“背部肥膘”——会因为天然存在的荷尔蒙，而产生令人不愉快的气味，引起消费者的抱怨。对雄性小猪进行阉割可以解决这个问题，但是即将出台一项规定限制这一做法。所以对公猪肉异味的筛查变得日益重要。

为了解决这个问题，波恩大学的一个团队运用 BenchTOF™ 对公猪肉中的 3 个主要异味成分做了定量分析，检测限低于消费者可以感受到的浓度，具有很高的精确度和准确度。



### 分析方法

▶ **样品**：从公猪背部脂肪中加热提取液态脂肪 (500 mg)。▶ **动态顶空**：采样条件：200°C，30 mL/min，3 min，Tenax® TA 吸附管。▶ **热脱附**：UNITY-xr™ 或 TD100-xr™。冷阱：Tenax TA。▶ **GC-MS**：BenchTOF™。离子采集范围：m/z 40-400。

在对公猪背部脂肪的分析中，顶空 - BenchTOF™ 的方法，可以使吡嗪，甲基吡嗪，雄烯酮达到超低的检出限。

此项研究数据由德国波恩大学的 Peter Boeker 和 Jan Leppert 提过



查看文章  
Food Chemistry

# 红酒异味

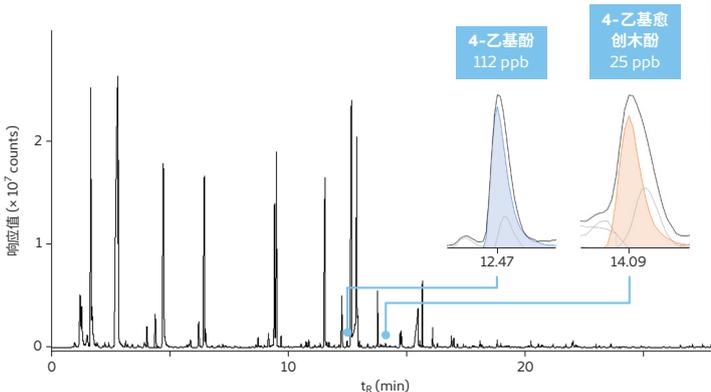
## 通过大容量吸附萃取技术提高分析灵敏度

酵母 *Brettanomyces (Dekkera) bruxellensis* 常见于酿酒厂，它会产生令人不愉快气味的酚类化合物，这些成分会使红酒产生“干燥 / 金属”的后味，导致理想的果香味被掩盖。然而要想分析这些化合物，对于某些分析系统来说，难以达到必要的灵敏度。

这个问题可以通过，大容量吸附萃取棒 HiSorb™，结合 Centri® 的冷阱聚焦技术来解决。本例中，展示了‘Brett’的2个关键化合物-4-乙基酚 (4-EP) 和 4-乙基愈创木酚 (4-EG) 检出限都低于气味阈值。

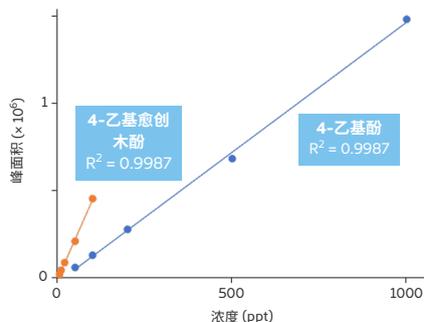


下载 Markes Application Note



### 分析方法

▶ 样品: 红酒。▶ 吸附萃取和预浓缩: 惰性 HiSorb™ 萃取棒, 浸没萃取方式, 全自动 Centri®。冷阱: “材料散发”。▶ GC-MS: 离子采集范围: m/z 35–350。▶ 软件: ChromSpace® 1D。



使用 HiSorb 对红酒中过的 4-乙基酚和 4-乙基愈创木酚进行分析，可以得到极好的线性曲线。意味着可以在低于气味阈值的水平下 (分别为 600 ppb 和 50 ppb) 对其进行可靠的检测。

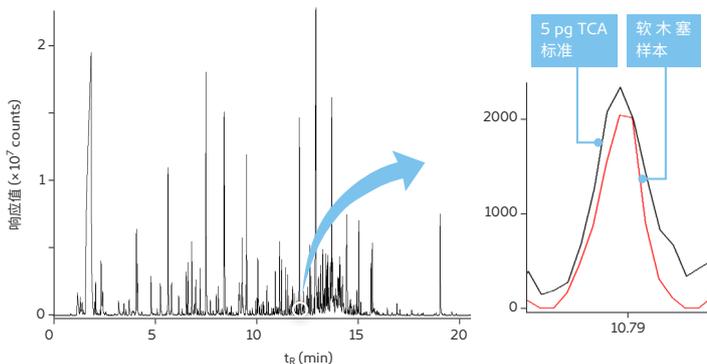
# 酒瓶软木塞

## 三氯硝基苯污染物检测

传统红酒酒瓶都会使用软木塞进行密封，这在很多国家依旧盛行，特别是那些名酒。然而，这种软木塞的使用会带来一种风险，因为它含有一种污染物 2,4,6-三氯茴香醚 (TCA)。

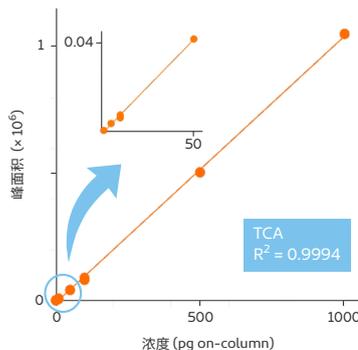
热脱附技术提升了 GC-MS 的峰型和灵敏度，BenchTOF™ 可以实现离子全范围采集，并达到同比四级杆质谱 SIM 的灵敏度，确保了化合物识别的可信度。

这两项技术的结合实现了 TCA 可靠的自动化检测。此项结果既可以对 TCA 进行痕量级的定量，也可以检测出其它污染物的存在。



### 分析方法

▶ **样品**: 整个软木塞，使用毛细管注入 TCA 1-1000 pg。▶ **动态顶空**: 微池 / 热萃取仪。采样: 60°C, 5 min “材料散发” 吸附管。▶ **热脱附**: UNITY-xr™ 或 TD100-xr™。冷阱: Tenax® TA。▶ **GC-飞行时间质谱**: BenchTOF™。离子采集范围: m/z 40-400。▶ **软件**: ChromSpace® 1D。



尽管软木塞的顶空分析物成分很复杂，但是其中低至皮克级别的 TCA 仍然可以得到可靠的检测。

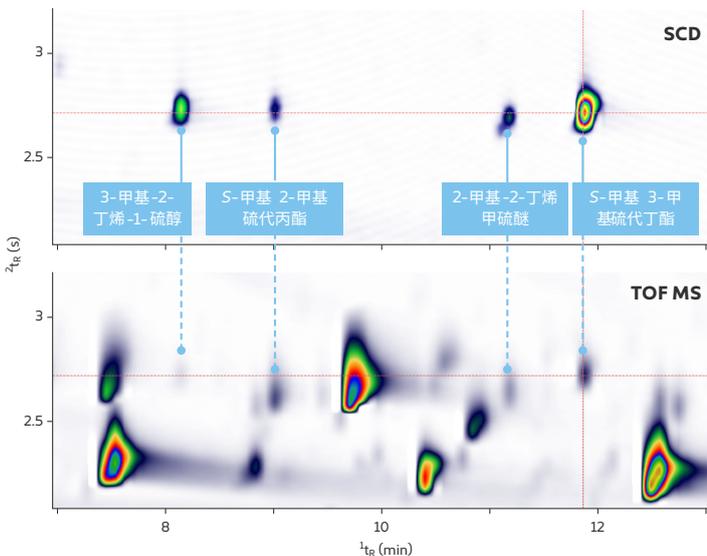
# 微量的含硫气味成分

结合 SCD 和飞行时间质谱进行目标物检测

食品饮料中存在的含硫化合物常常是产生不愉快气味的污染物来源。但是要想检测出这些痕量级的成分，往往非常困难。

硫化学发光检测 (SCD) 可以对含硫化合物进行高选择性和高灵敏度分析。该检测方法与飞行时间质谱结合使用，可以找到这些痕量的含硫化合物，而这些化合物常常会因为高响应值化合物的存在，而被忽略或隐藏。

此外，使用双检测配置还可以实现在一次运行中对目标物和未知物进行同步筛选。



## 分析方法

► 样品：美国淡啤酒。► 吸附萃取和预浓缩：惰性 HiSorb™ 萃取棒，浸没萃取，全自动 Centri®。► GC×GC：气流调制器：INSIGHT®。调制周期：3.0 s。► 飞行时间质谱：BenchTOF™。离子采集范围：m/z 35–600。► 软件：ChromSpace®。

对这种淡啤酒类产品使用双重检测方法，可以将 SCD 用作“引导系统”，先发现关键的含硫气味物质，然后使用飞行时间质谱对相应化合物进行可靠的定性识别。



下载 SepSolve  
White Paper



## 真假鉴别

一些高价格的食物，如蜂蜜、香料、橄榄油等，很容易被造假。通常伪劣产品会被误认为是优质产品，有的商家会使用低成本的替代物添加到原产品中去增加产量。此处我们将展示如何使用可靠的分析技术，找到正宗产品中的标记性化合物。



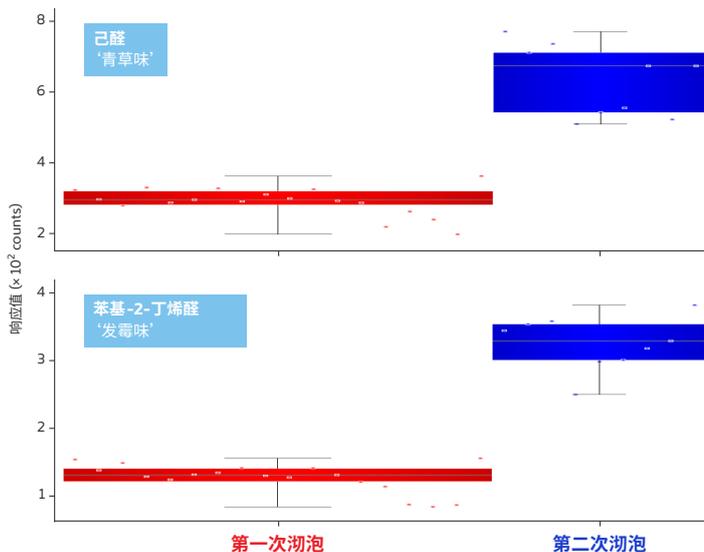
# 茶

## 大吉岭红茶质量评估

大吉岭红茶很受大众欢迎，但许多因素，例如采摘时间，都会影响它的香味特征及其感官品质。

此处，采用全自动浸没萃取技术，通过全二维-飞行时间质谱分析获得全面的茶汤挥发性成分，然后使用 ChromCompare+™ 进行非靶向数据分析，从复杂的风味组分中找到两者的显著差异，实现快速有效的质量评估。

此项分析中，ChromCompare+ 发现能够清楚区分具备更好品质的一次泡茶和其后第二次泡茶的差异成分。



### 分析方法

▶ **样品**：9种冲泡的大吉岭红茶（6个“第一次冲泡”和3个“第二次冲泡”），3次重复分析。▶ **吸附萃取**：惰性 HiSorb™ 萃取棒，使用 Centri®。全自动浸没萃取 ▶ **GC×GC**：气流调制器：INSIGHT®。调制周期：4.8 s。▶ **飞行时间质谱**：BenchTOF2™。离子采集范围：m/z 25–450。▶ **软件**：ChromCompare+™。

对大吉岭红茶第一次冲泡样本和第二次冲泡样本进行全二维-飞行时间质谱的分析，ChromCompare+™ 对数据进靶向方法分析，发现区分两个样本感官品质的关键成分。



下载 SepSolve White Paper

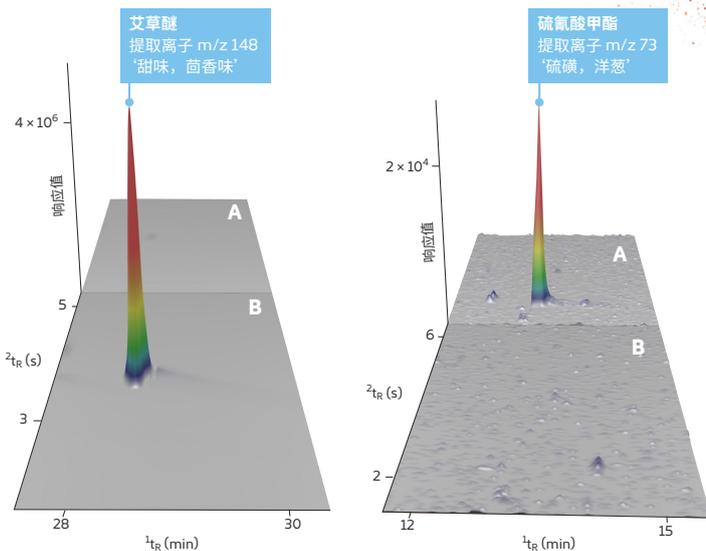
# 咖喱粉

## 发现品质的化学标记物

辛香料的制造商对识别产品品质的标记物尤为感兴趣，因为这个可以用作品质控制和真假辨别，还可以用作竞品比较。

辛香料的挥发性成分非常复杂，它包含了数百种涵盖不同化合物族类的风味活性化合物，这些化合物构成了它的整体香味感受。

这里我们使用高灵敏度的吸附萃取技术结合全二维-飞行时间质谱 BenchTOF™ 分析，再通过 ChromCompare+™ 数据处理。一体化的工作流程实现品质标记物的识别。



### 分析方法

- ▶ **样品**：两种不同品质的咖喱粉加到 10 mL 水中。
- ▶ **吸附萃取**：HiSorb™ 萃取棒，使用 Centri®。全自动浸没萃取。
- ▶ **GC×GC**：气流调制器：INSIGHT®。调制周期：5 s。
- ▶ **飞行时间质谱**：BenchTOF™。离子采集范围：m/z 35–400。
- ▶ **软件**：ChromCompare+™。

使用全二维-飞行时间质谱，和 ChromCompare+™ 数据处理软件，对两种咖喱粉样本，低价咖喱粉 (A) 和高价咖喱粉 (B) 进行样本分析和数据处理，找到两个在响应值上有明显差异的化合物。



下载 SepSolve White Paper

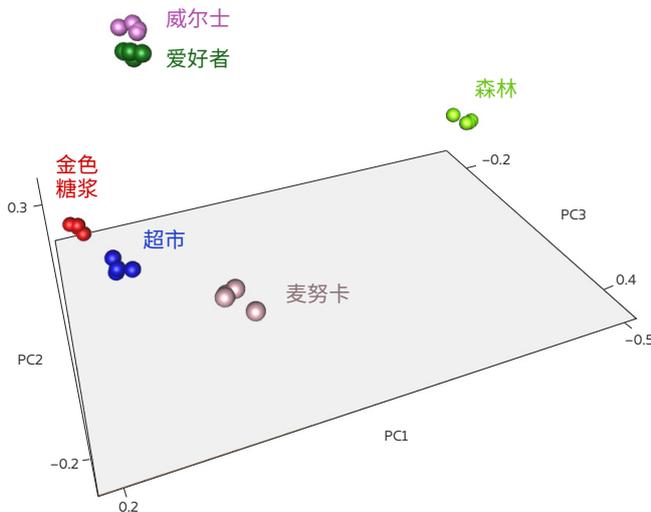
# 蜂蜜

## 找到真假蜂蜜的标记物

蜂蜜很容易造假，伪劣的产品常常会被误认为是优质的产品，而且商家会用廉价的替代品添加到真蜂蜜中去增加产量。

传统的鉴伪技术正在被淘汰，因为它们涉及耗时的样品制备和必须由受过专门训练的分析员进行花粉分析。

这里，我们采用高容量吸附萃取技术，结合 GC-MS 分析，获得全面的多种类挥发性有机物成分。ChromCompare+™ 软件能够自动识别区分高-低价蜂蜜的标记物，并能简单快速的对未知来源的蜂蜜进行归类。



### 分析方法

- ▶ **样品**：5 种牌子的蜂蜜和 1 种金色糖浆（每个 1g，4 个平行样分析）。
- ▶ **吸附萃取和预浓缩**：惰性 HiSorb™ 萃取棒 (DVB/CWR/PDMS)，Centri® 自动顶空模式。冷阱：“材料散发”。
- ▶ **GC-MS**：离子采集范围：m/z 35-450。
- ▶ **软件**：ChromCompare+™。

ChromCompare+™ PCA 得分图显示，不同牌子的蜂蜜都能很好的聚类。在低价的超市蜂蜜和金色的糖浆中找到更高含量的糠醛，而卡拉烯只在麦努卡蜂蜜中找到，这意味着卡拉烯可能是高品质蜂蜜的潜在标记物。



下载 Markes Application Note



## 相关分析产品

以下几页将介绍几款在应用手册中提及的分析产品。SepSolve 会根据您分析的需求，为您提供最佳的产品组合。



BenchTOF2



# 微池 / 热萃取仪

## 快速的动态顶空采样

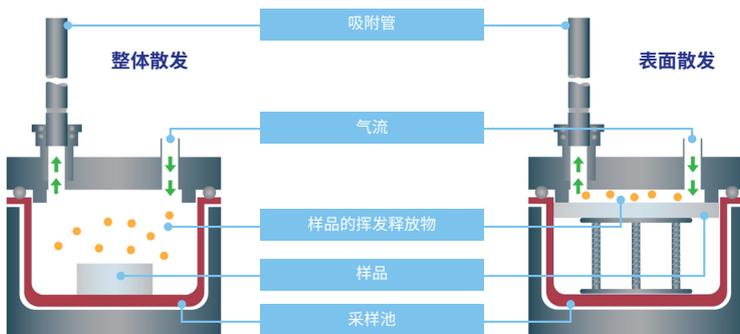
顶空采样方式一直以来都是挥发性有机物分析的重要手段，特别是在分析那些黏性的或脏的样品。

Markes 的微池 / 热萃取仪 ( $\mu$ -CTE™)，可以对多种类型的样品进行快速动态顶空采样。大大提升了气体采样针进样的灵敏度。这对考察食品风味组分以及货架期非常的有用。



## $\mu$ -CTE 的主要特点

- ▶ 材料简单的放入其中一个采样罐中，在采样温度下进行平衡。
- ▶ 用吸附管进行动态采样，然后用热脱附仪进行分析（见第 30 页）可以大大提高分析的灵敏度。
- ▶ 通过升高采样池的温度，一般在 30 分钟内就可完成采样。
- ▶ 可以在 DNPH 管上进行样品挥发性释放物的采集，以便于监测甲醛。
- ▶ 对于活性和热不稳定的化合物，可以使用惰性化处理的不锈钢采样池。
- ▶ 结果可以留存，作为未来长期的参考方法。
- ▶ 有两种型号可选：
  - 6 个采样池，最高温度 120°C，采样罐尺寸 44 cm<sup>3</sup>
  - 4 个采样池，最高温度 250°C，采样罐尺寸 114 cm<sup>3</sup>。



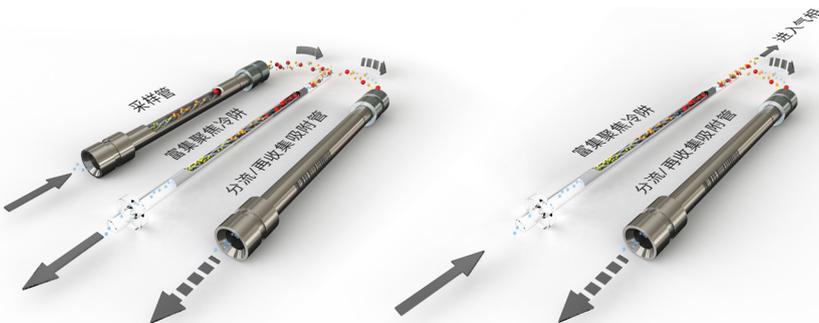
$\mu$ -CTE™ 的最大优势是它的功能多样性——即可对样品进行整体散发批量采样，也可通过适配器对平面样品进行表面散发采样，同时还可提供材料渗透测试附件进行材料渗透率测试。

# TD100-xr

## 全球领先的热脱附技术

SepSolve 可以提供 Markes 公司全套的热脱附装置 ( 通过使用吸附剂填充的热脱附管对样品进行分析 ), 包括旗舰产品 TD100-xr™。

Markes 热脱附平台使用多重填料填充的吸附管及冷阱, 采用二阶热脱附 ( 下图 ) 和反吹脱附技术, 一次进样分析即可得到挥发性有机物和半挥发性有机物 ( 从 C<sub>3</sub> 到 C<sub>44</sub>, 包括活性的不稳定化合物 )。



**第一步**  
样品被脱附到无需制冷剂的冷阱中。

**第二步**  
聚焦冷阱快速升温, 通过载气反吹, 将分析物进样到 GC。

### TD100-xr 主要特点

- ▶ 冷阱无需制冷剂, 降低了运作成本。
- ▶ 样品可以分流再回收到干净的吸附管中, 这就避免了其它热脱附装置“只能进样一次”的缺点, 允许对样品数据或分析方法进行再次验证。
- ▶ 少量的固体样品可以放入空管中进行直接脱附分析。
- ▶ 匹配绝大部分市售的 GC 或 GC-MS 产品。
- ▶ 在 TD100-xr™ 的整个热脱附运行序列中, DiffLok™ 帽一直保留在吸附管的两端, 不需要再次脱帽和装帽, 保证了样品的完整性。
- ▶ 分析水分含量较高的食品饮料时。选择除水步骤可以得到更好的结果。
- ▶ 通过分流和再回收功能可以满足浓度范围跨度大的样品分析。

高效的冷阱模式 ( 如工作流程图所示 ) Markes 热脱附仪的核心性能, 同时也能使样品通过分流回收用来重复分析。

# HiSorb

## 大容量吸附萃取

HiSorb™ 萃取棒采用高容量的吸附剂涂层，可以对液体和固体样品中多种类的有机物进行萃取和浓缩。

除了使用 Centri® 全自动化操作，萃取棒也可以通过手动样品萃取，然后放入自动化热脱附仪，例如 TD100-xr™，结合 GC-MS 分析。



## HiSorb 主要特点

- ▶ 坚固、易于使用的萃取棒实现无人值守的样品制备和最大化的样品分析通量。
- ▶ HiSorb™ 可以在 Centri® 萃取和浓缩平台上进行全自动化的采样和 GC-MS 分析。
- ▶ 不同的吸附涂层可供选择，使用者可以根据分析物，选取最佳的吸附涂层。
- ▶ 高容量的吸附涂层使其拥有比 SPME 更低的检出限。
- ▶ 兼具顶空和浸没的采样模式。
- ▶ 可重复使用的萃取棒和吸附管降低了每个样品的分析成本。
- ▶ 避免了溶剂消耗和处理的成本。



# Centri

## 自动化样品萃取和浓缩进样平台

顶空和 SPME 采样方式是比较常规样品采样方式，因为它们操作起来比较简单容易。但是这种采样方式在灵敏度上比较欠缺，而且一次采样只能进样分析一次，如果需要再分析，那就需要再次处理样品，再次采样。

Markes 公司旗下 Centri<sup>®</sup> 产品是第一台全自动，无人值守的样品处理平台，可以对液体，固体及半固体样品中的挥发性有机物和半挥发性有机物进行萃取和浓缩，对于气体样品，可以使用吸附管进行采样分析，结合 Markes 的先进冷阱技术 Centri 极大的提高样品分析的灵敏度，同时还扩展了几种采样技术，包括 HiSorb<sup>™</sup> 大容量吸附萃取技术。



大容量吸附萃取



顶空和  
顶空-冷阱联用



热脱附



固相微萃取和  
固相微萃取-冷  
阱联用

### Centri 主要特点

- ▶ 仅凭一台机器就可以满足所有的气相样品前处理。
- ▶ 分析物先经冷阱聚焦（可选用在顶空或固相微萃取中）再通过闪蒸形成窄的浓缩蒸汽带进入 GC 分析，使色谱峰型更加尖锐，进而极大的提高了分析灵敏度。
- ▶ 无需制冷剂的模式大大降低了运行成本。
- ▶ “样品叠加”富集技术，可以增加痕量物质的分析灵敏度。
- ▶ 选择性的消除水和其它溶剂干扰，可提高数据的可信度。
- ▶ 样品预处理模式，可以提高分析通量。
- ▶ 坚固的 HiSorb<sup>™</sup> 吸附萃取棒，拥有比 SPME 多 100 倍的涂层含量，而且可以采用浸没采样，进一步扩展了采样能力。
- ▶ 样品分流和再回收功能，无需重新样品采集，就可以实现样品的再分析。
- ▶ 自动工具切换功能，实现不同采样模式之间灵活切换。

Centri<sup>®</sup> 上的所有采样模式都可以结合使用 Markes 的冷阱技术，对分析物进行再聚焦。

# INSIGHT

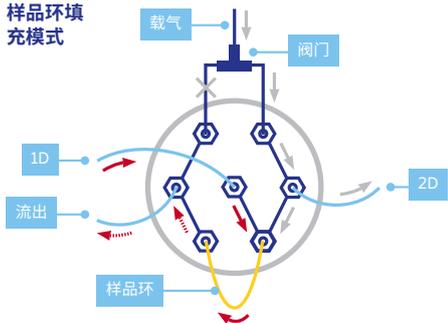
## 全二维气流调制器

调制装置是 GC×GC 系统中最关键的部分——无效的调制系统会导致在第二维出现宽的拖尾峰，这就限制了峰容量。

SepSolve 的 INSIGHT<sup>®</sup> 气流调制器克服了其它调制器在实际工作中遇到的性能问题，例如：分析物挥发性的限制。

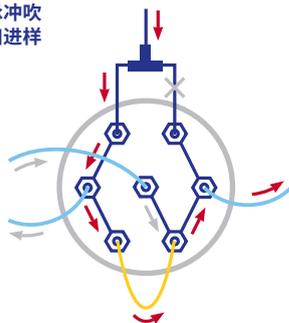


样品环填充模式



第一维色谱柱洗脱物进入样品环收集（任何溢流出来的都会被引导至排放管线中），而调节阀将辅助载气引导至第二维色谱柱。

脉冲吹扫进样



通过控制阀的切换，将样品环中的收集物形成窄带迅速冲洗进样到第二维柱上。

## INSIGHT 主要特点

- ▶ 气流调制技术可以对挥发物进行有效的调制，与热调制器不同，它主要依赖于冷喷嘴，对于低于 C<sub>5</sub> 沸点的挥发物很难被有效调制。
- ▶ 无需制冷剂的操作降低了 GC×GC 的日常运行成本。
- ▶ 常规应用中有着极佳的重现性——化合物峰面积的 RSD<5%。
- ▶ 灵活的配置选择：
  - 全二维 GC×GC
  - 中心切割 GC-GC
  - 反吹技术
  - 平行检测，例如飞行时间质谱结合 FID。
- ▶ 适用目前所有市面上的气相色谱。
- ▶ INSIGHT<sup>®</sup> 紧凑的设计，可以实现在一台 GC 炉温箱里安装两个调制器，通过双通路分析，提高样品的分析通量。

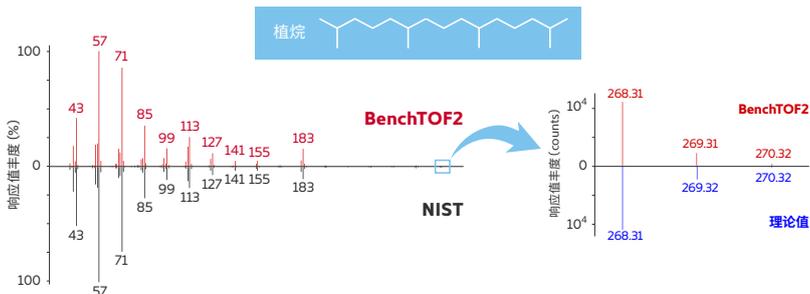
INSIGHT<sup>®</sup> 调制器是采用不同的载气流速来进行样品环的“填充”和“脉冲式吹扫”进样——这种调制模式不需要液氮制冷，极大的降低了全二维的日常运行的成本。

# BenchTOF2

## 高辨识率的飞行时间质谱

BenchTOF2™ 质谱是 BenchTOF 第二代飞行时间质谱，适应实验室日益增加的工作量和新的挑战，提供最具可信度的数据。

与所有飞行时间质谱仪一样，BenchTOF2 同时采集所有离子，最大限度的提高分析灵敏度，一次运行即可获得目标化合物和未知物的全范围质谱。



## BenchTOF 主要特点

- ▶ 可达四级杆质谱 SIM 的灵敏度，高质量质谱信息，优异的选择性以及智能软件工具，可以自信的识别分析物。
- ▶ 利用全质谱信息提高检测限，在一次分析中检测多种痕量化合物，并可进行反向检索。
- ▶ 浓度检测范围跨度达到五个数量级，既可以准确定量高浓度化合物，也可以对低浓度化合物保持较低的检测限，无需稀释或重新分析。
- ▶ BenchTOF2™ 的高速离子采集，可以兼容快速气相和全二维气相分析。
- ▶ 可以使用 H<sub>2</sub> 作为载气，达到更快的色谱分离，降低运行成本，提高分析通量，快速实现投资回报。
- ▶ 使用专利的 Tandem Ionisation® 电离技术，可以同时获取软硬电子电离质谱，通过简单的工作流程即可自信识别具有挑战性的化合物（例如同分异构体）。

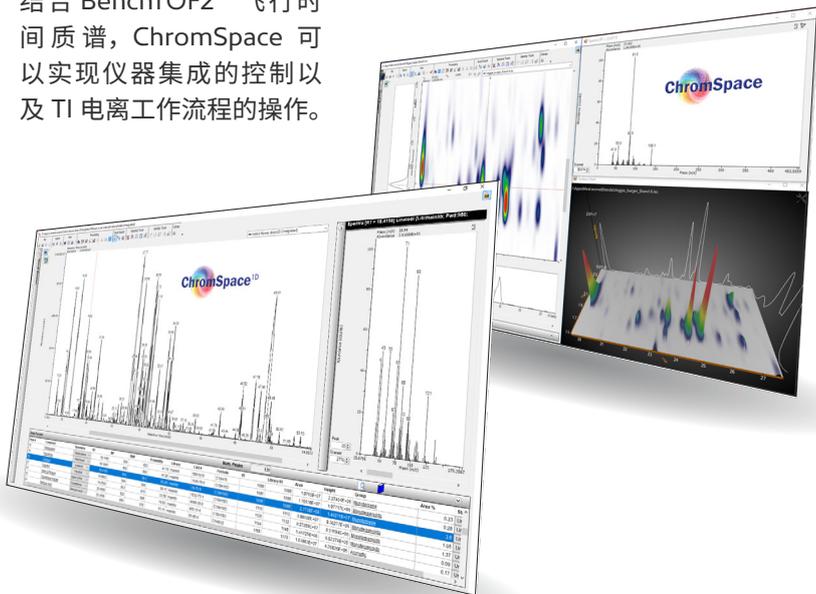
使用 BenchTOF2™ 检测，C<sub>19</sub> 可以达到与理论质谱的同位素模式的精确匹配。

# ChromSpace

对一维或全二维气相质谱数据进行直观的分析

ChromSpace<sup>®</sup>可以对多种类型的一维或全二维的气相质谱数据进行定性或定量分析，另外可以选配色谱对齐和化学计量学分析功能，所有分析功能都集成在一个直观的用户界面中。

结合 BenchTOF2<sup>™</sup> 飞行时间质谱，ChromSpace 可以实现仪器集成的控制以及 TI 电离工作流程的操作。



## ChromSpace 主要特点

- ▶ 可以处理不同文件类型的 GC-MS 数据，包括 .lsc、.d、.raw、.rsd 和 .cdf。
- ▶ 操作流程简单易学，包括快速方法创建和批处理、定量以及报告导出功能。
- ▶ 自动背景扣除排除干扰，另外易于使用的解卷积功能。
- ▶ 可以帮助发现隐藏的化合物。
- ▶ 节省时间的功能，单击进行谱库检索，以及对化合物质谱图进行批量保存。
- ▶ 使用化合物检索功能可以对感兴趣的化合物（或族类）进行快速筛查。
- ▶ 加入 ChromCompare<sup>™</sup> 化学计量学模块，可以实现色谱图自动对齐，快速找到样品之间的显著差异。
- ▶ 简单易用的分组框绘制功能，可以对“组分”进行分析和报告。
- ▶ 网络许可证可轻松统一实验室处理过程。

ChromSpace<sup>®</sup> 可以为二维气相质谱数据提供直观的定量，定性分析，同时可以充分发挥全二维的功能，扩展您实验室的分析能力。

# ChromCompare+

强大的化学计量学软件，用于 GC、GC-MS 和 GC×GC 数据分析

ChromCompare+™ 是一款强大的易于使用的化学计量学分析软件，通过简单的操作实现数据的深入分析和关键信息的提取。

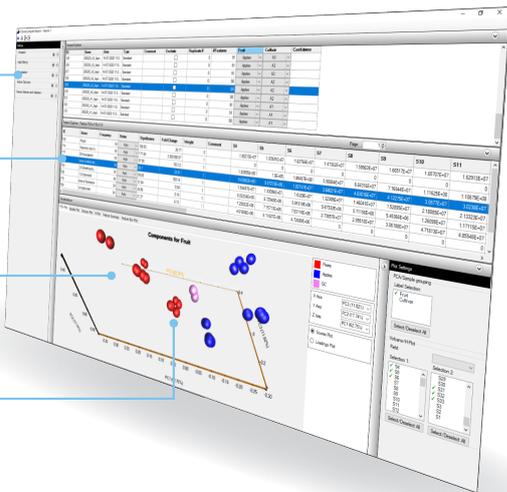
ChromCompare+ 可以对不同文件格式的数据进行处理，可以灵活的选择数据解析工具，对数据进行深入分析。创新的非靶向数据处理方法，可以直接在原始数据中提取重要信息。

适用多种文件格式，导入原始数据或者表格

自动查找最显著的差异

简单可视化的展示分类和趋势

预测模型实现样品快速自动归类



## ChromCompare+ 主要特点

- ▶ 针对保留时间漂移问题，可以使用色谱图自动对齐。
- ▶ 找出不同样品种类之间的显著差异。
- ▶ 自动化非靶向数据分析流程。
- ▶ 适用多种数据文件格式对一维和二维气相和气相质谱数据进行处理。
- ▶ 预测模型实现样品的快速自动归类。
- ▶ 包含 ChromSpace® 中所有高效的定性定量数据分析工具。
- ▶ 通过可视化数据展示工具，展示样品之间的分类趋势和相关性。

有了 ChromCompare+™ 您不需要为了能更好的找到复杂数据中的信息而去专攻统计学知识，也不需要事先知道哪些化合物是重要的。

# 关于 SepSolve Analytical

SepSolve Analytical 旨在为分析工作者提供分析及解决方案，包括全自动进样、增强型 GC 分离、最先进的质谱和强大的数据分析软件。

总之，这些产品可以帮助您发现样本中更多的信息，提高您实验室的样品分析通量，助力您的日常应用和研究。确保您从投资中获得最佳回报，我们在全球各地的支持，中心都有经验丰富的应用专家为您提供所需的培训和支持。

## SepSolve Analytical

**UK:** 4 Swan Court, Cygnet Park, Peterborough  
**T:** +44 (0)1733 669222

**Canada:** 826 King Street North, Waterloo, Ontario  
**T:** +1 519 206 0055

**Germany:** Bieberer Straße 1-7, 63065 Offenbach am Main  
**T:** +49 (0)69 668 108 920

hello@sepsolve.com

[www.sepsolve.com](http://www.sepsolve.com)



D0065\_2CHN\_230222  
INSTRUMENT 是 SepSolve Analytical 公司的商标。BenchTOP™、Centri®、ChromCompare®、  
ChromSpace®、DiffLok™、i-Scrub™、i-CIE™、Tandem Ionisation™、TD100-xx™、TubaTAG™ 和  
UNITY-xx™ 是 Marks International 的商标。Tensex™ 是 Buchem B.V. 的注册商标。



A company of the **SCHAUBURG** International Group