

GCMSMS 结合岛津香味数据库分析食品添加剂中的气味成分

GCMSMS-247

摘要： 本文采用岛津三重四极杆气相色谱质谱联用仪 GCMS-TQ8050 NX，结合 AOC-6000 plus 多功能自动进样器 SPME 进样模式和岛津 Smart Aroma Database 香味数据库建立了典型食品添加剂 5'-呈味核苷酸二钠中 487 种气味成分的分析方法。在 MRM 采集模式下，添加剂样品中共检测出 51 种气味成分，该方法操作简单，分析速度快，适用于食品添加剂中气味成分的筛查分析。

关键词： 气相色谱 - 三重四极杆气质联用仪 香味数据库 5'-呈味核苷酸二钠 气味成分

食品添加剂是指为改善食品口感及品质、防腐或工艺需求而加入食品中的人工合成化学物质或天然物质。食品添加剂为保证食品安全、提高食品功能性起到了积极作用。5'-呈味核苷酸二钠是典型的食品添加剂，属增味剂，广泛用于酱油、味精、鸡精等增鲜调味品中。5'-呈味核苷酸二钠由酵母核酸分解、分离或发酵制得，与谷氨酸钠合用具有显著的协同作用，鲜度大增。在 5'-呈味核苷酸二钠成品中，生产厂家会在其中额外添加香味物质用于提高产品的香气，以使产品更具竞争力。因此对于下游食品加工企业，准确分析原料添加剂中的香味物质成分进而优化自身产品香气显得尤为重要。

GCMS 具有定性能力强，自动化程度高的特点，

适用于低沸点挥发性化合物分析，尤其适合于气味物质的分析。目前，针对气味物质定性分析缺乏专用数据库，研究人员需要耗费大量精力处理数据并易造成结果误判。因此，使用预先收录有气味物质化合物信息的专用数据库进行筛查，可极大减少数据分析的工作量并提高准确度。

本文利用岛津 GCMS-TQ8050 NX 三重四极杆气质联用仪和 AOC-6000 plus 多功能自动进样器，结合 Smart Aroma Database 香味数据库分析中 5'-呈味核苷酸二钠成品中的气味成分，无需复杂设置就能快速创建 487 种香味物质的 MRM 模式分析方法，可对产品中的香气成分进行快速的筛查。

■ 实验部分

1.1 仪器

GCMS-TQ8050 NX 三重四极杆气质联用仪
AOC-6000 plus 自动进样器

1.2 标准品

保留时间校正用标品：正构烷烃 (C7-C40) 混合标准品

1.3 分析条件

SPME 参数：

SPME 纤维：SUPELCO.™ 50/30 μm DVB/CAR/PDMS

老化温度：250°C

平衡温度：80°C

老化时间（萃取前）：5 min

平衡时间：10 min

老化时间（萃取后）：5 min

萃取时间：25 min

解吸时间：3 min

GC-MS/MS 参数：

色谱柱：InertCap-Pure Wax, 30 m × 0.25 mm × 0.25 μm

进样口温度：250°C

柱温程序：50°C (5 min) _10°C /min_250°C (15 min)

载气控制：恒压模式（83.5 kPa）
 进样方式：分流进样
 分流比：5:1
 离子源温度：200°C

接口温度：250°C
 检测器电压：调谐电压 +0.4 kV
 采集方式：MRM

1.4 样品前处理

将顶空瓶置于 150°C 烘箱中烘烤 60 min，称取样品约 1.0 g 装入 20 mL 顶空瓶中，密封后按 1.3 条件上机分析。

■ 结果与讨论

2.1 气味系统方法建立流程

岛津香味数据库包含一系列分析方法、质谱库等文件。使用 Aroma_TQ_IC-Wax_AART 方法测定正构烷烃标准样品，用于校正目标组分的保留时间。正构烷烃标准样品 TIC 图见图 1。

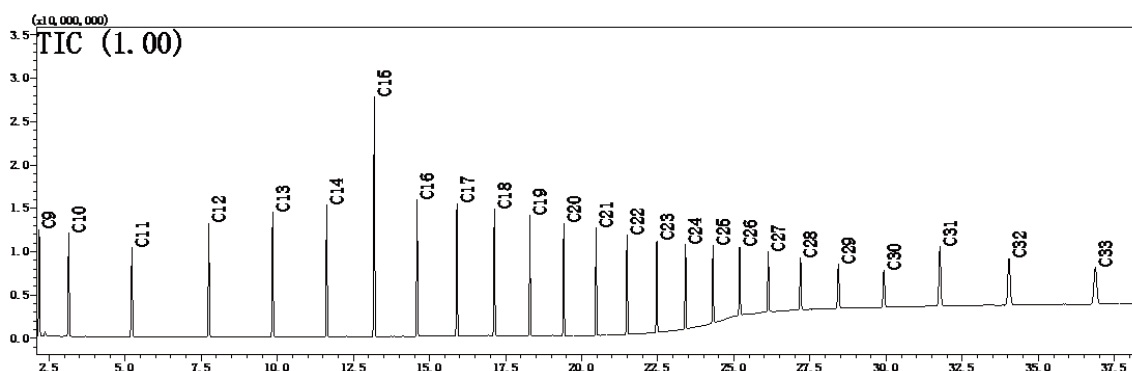


图 1 正构烷烃 TIC 图

利用正构烷烃数据以及 Smart Aroma Database 香味数据库建立 487 种香味成分的 MRM 模式采集方法，GCMS-TQ8050 NX 可利用该方法在没有目标组分标准品的情况下对这些组分进行定性筛查。图 2 为香味数据库的创建方法界面和方法创建完成界面。

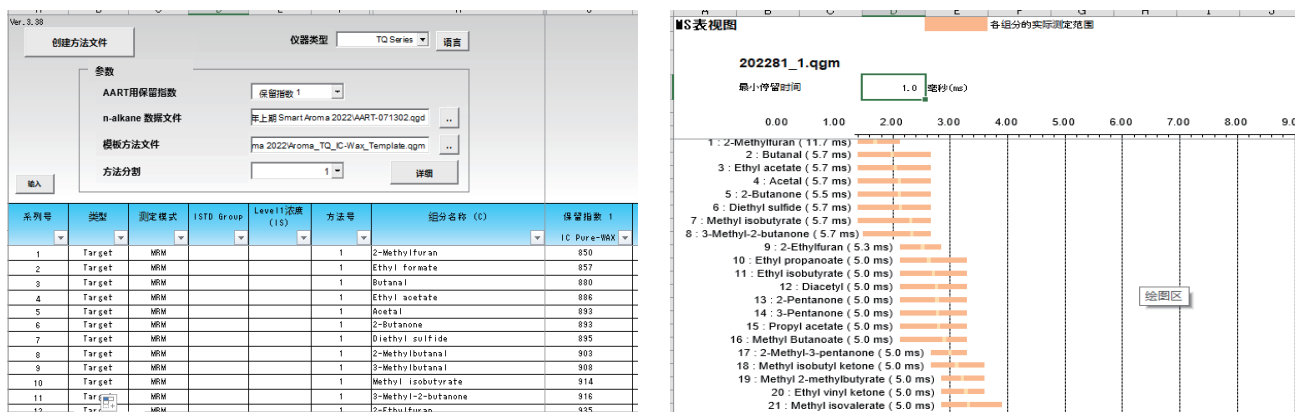


图 2 香味数据库界面

2.2 5'-呈味核苷酸二钠样品测试结果

测定的 5'-呈味核苷酸二钠样品 TIC 图见图 3，利用香味数据库共筛查出 51 种化合物，如表 1 所示。图 4 是检出的部分化合物的质量色谱图。

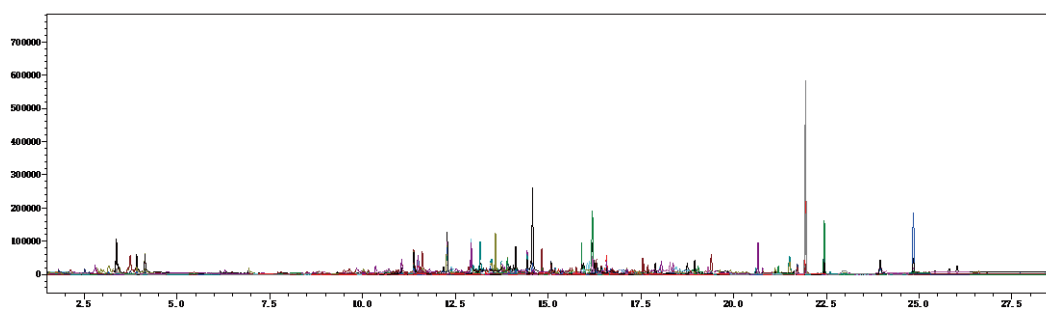
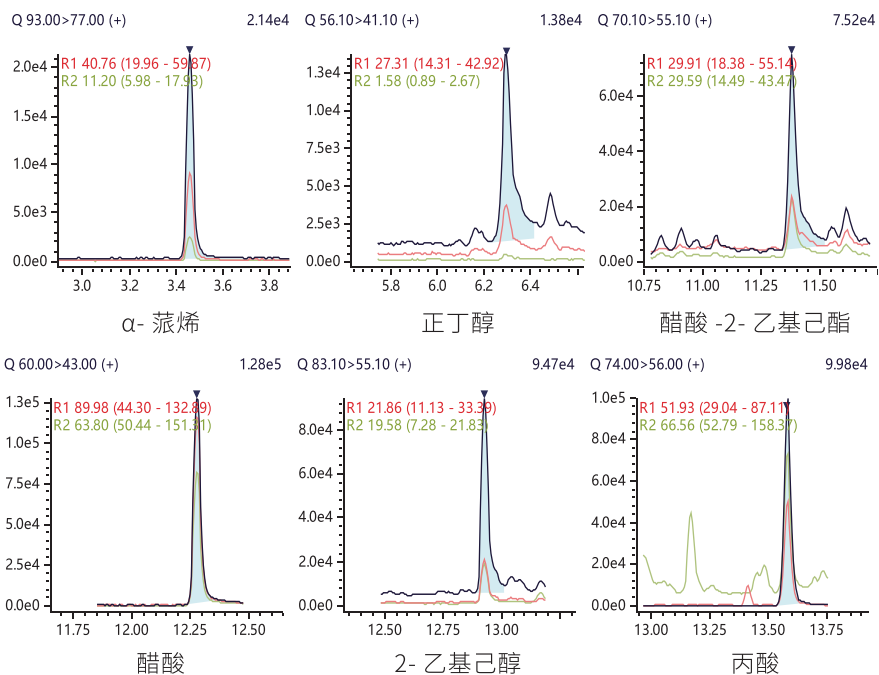


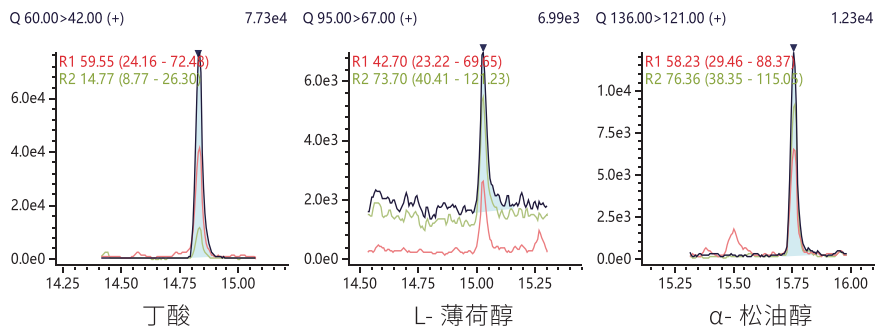
图3 5'-呈味核苷酸二钠样品 TIC 图

表1 5'-呈味核苷酸二钠样品香气成分筛查结果

No.	化合物	化合物 (英文名)	保留时间	峰面积	CAS 号	气味特征
1	正丁醛	Butanal	2.071	7770	123-72-8	刺鼻气味
2	2,3- 丁二酮	Diacetyl	2.853	88313	431-03-8	黄油香味
3	α - 蒎烯	alpha-Pinene	3.458	44845	80-56-8	溶剂味
4	正己醛	Hexanal	4.586	7880	66-25-1	青草气及苹果香味
5	β - 蒎烯	beta-Pinene	5.124	6212	127-91-3	松香味、松脂味
6	间二甲苯	m-Xylene	6.029	8310	108-38-3	塑料味
7	十六醛	Hexadecanal	6.293	44635	629-80-1	纸板味
8	正丁醇	1-Butanol	6.293	42971	71-36-3	水果味
9	2- 正戊基呋喃	2-Pentylfuran	8.313	7169	3777-69-3	青豆味、黄油味
10	2- 甲基吡嗪	2-Methylpyrazine	8.913	29148	109-08-0	爆米花的香味
11	正辛醛	Octanal	9.463	11110	124-13-0	带果香茉莉气息
12	2,5- 二甲基吡嗪	2,5-Dimethylpyrazine	10.023	60899	123-32-0	可可味、烤坚果味
13	2,6- 二甲基吡嗪	2,6-Dimethylpyrazine	10.153	48500	108-50-9	可可味、烤坚果味
14	6- 甲基 -5- 庚烯 -2- 酮	6-Methyl-5-hepten-2-one	10.379	4052	110-93-0	胡椒味、蘑菇味
15	2,4,5- 三甲基噻唑	2,4,5-Trimethylthiazole	11.063	3339	13623-11-5	土壤味
16	2- 乙基 -5- 甲基吡嗪	2-Ethyl-5-methylpyrazine	11.196	8604	13360-64-0	水果味、甜味
17	壬醛	Nonanal	11.380	207756	124-19-6	脂肪味、柑橘味
18	醋酸 -2- 乙基己酯	2-Ethylhexyl acetate	11.380	197433	103-09-3	水果味
19	(E,E)-2,4- 己二烯醛	2,4-Hexadienal	11.380	59944	142-83-6	青涩味
20	2,3,5- 三甲基吡嗪	2,3,5-Trimethylpyrazine	11.496	159689	14667-55-1	烤土豆味
21	(Z)- 氧化芳樟醇	(Z)-Linalool oxide	12.185	3873	5989-33-3	花香味
22	醋酸	Acetic acid	12.280	277080	64-19-7	酸味
23	2,3- 二甲基 -5- 乙基吡嗪	5-Ethyl-2,3-dimethylpyrazine	12.455	6365	15707-34-3	爆米花的香味
24	2- 乙基己醇	2-Ethylhexanol	12.927	195972	104-76-7	青香, 玫瑰花香
25	癸醛	n-Decanal	13.056	3946	112-31-2	皂味、脂蜡香
26	丙酸	Propanoic acid	13.582	200845	1979/9/4	腐臭味, 辛辣味
27	丁酸	Butyric acid	14.830	162802	107-92-6	腐臭味, 奶酪味
28	L- 薄荷醇	L-Menthol	15.029	12884	2216-51-5	薄荷味

29	丁酸 -1- 乙烯基 -1,5-二甲基 -4- 己烯基酯	Linalyl butyrate	15.757	40027	78-36-4	甜味、梨味
30	α - 松油醇	alpha-Terpineol	15.757	23314	98-55-5	薄荷味、茴香味
31	十二醛	n-Dodecanal	15.959	16418	112-54-9	脂肪香气
32	正戊酸	Valeric acid	16.247	87168	109-52-4	汗味
33	萘	Naphthalene	16.307	13139	91-20-3	焦油味
34	γ - 庚内酯	gamma-Heptalactone	17.120	35002	105-21-5	坚果味、油脂味
35	己酸	Capronic acid	17.547	100648	142-62-1	汗味
36	香叶醇	Geraniol	17.569	68335	106-24-1	天竺葵、玫瑰香气
37	苯甲醇	Benzyl alcohol	17.890	69059	100-51-6	甜味, 芳香味
38	抗氧化剂 264	Butylated hydroxytoluene	18.365	58693	128-37-0	苯酚气味
39	十四醛三聚物	Tetradecanal	18.494	20531	124-25-4	鲜花味, 蜡味
40	十二醇	1-Dodecanol	18.951	69881	112-53-8	蜡脂香气
41	苯酚	Phenol	19.316	48870	108-95-2	特殊的臭味和燃烧味
42	对甲氧基苯甲醛	4-Methoxybenzaldehyde	19.577	3187	123-11-5	薄荷味, 甜味
43	γ - 壬内酯	gamma-Nonalactone	19.630	25304	104-61-0	椰子味、桃子味
44	铃兰醛	Lilial	19.835	1194	80-54-6	花香味
45	辛酸	Caprylic acid	19.936	3438	124-07-2	奶酪味, 汗味
46	γ - 癸内酯	gamma-Decalactone	20.851	6843	706-14-9	桃子味、油脂味
47	壬酸	Nonanoic acid	21.041	10683	112-05-0	青香味, 油脂香味
48	棕榈酸异丙酯	Isopropyl palmitate	21.621	18969	142-91-6	油脂味
49	十八烷醛	Octadecanal	21.858	4619	638-66-4	石油味
50	1- 十六烷醇	1-Hexadecanol	22.871	1950	36653-82-4	蜡味, 花香味
51	硬脂醇	Stearyl alcohol	24.972	14920	112-92-5	石油味





■ 结论

本文采用岛津 GCMS-TQ8050 NX 三重四极杆气质联用仪和 AOC-6000 plus 多功能自动进样器，结合岛津 Smart Aroma Database 香味数据库对食品添加剂 5'-呈味核苷酸二钠中的气味成分进行测定。通过采集正构烷烃数据，在没有目标组分标准品情况下，利用香味数据库自动创建 487 种气味成分的检测方法，对 5'-呈味核苷酸二钠中的气味成分进行定性筛查，共检测出 51 种气味成分。结果表明，该方法操作简便，分析速度快，可用于食品添加剂中气味成分的快速筛查。

岛津应用云

