

# Off-Flavor 异味分析系统分析火锅底料中 异味物质

## GCMSMS-104

**摘要：**本文利用岛津 GCMS-TQ8040 三重四极杆气质联用仪和 AOC-6000 多功能自动进样装置结合 Smart Database 异味物质数据库建立了火锅底料中 150 种异味物质分析方法，采用校准用标准样品生成的曲线进行半定量分析，将估算出的浓度与臭气阈值进行比较，筛查 6 种不同火锅底料的异味物质成分。该方法操作简单便捷，分析速度快，适合火锅底料中异味物质的筛查。

**关键词：**异味物质 GCMSMS 火锅底料

近年来，异味相关事件和事故不断发生，如在糕点软包装塑料袋中存有异味，新购的家用电器异味不散，环境的大气异味弥漫等。异味分析是一个在各行各业都可能涉及的问题，近年来随着人们对环境和身体健康的重视，有关异味的投诉日益增多，市场也对更加快速有效的异味分析解决方案有了迫切的需求。

有报道称，越来越多的市民反应去吃完火锅后衣服上、头发上满是火锅味儿，且几天都散不去，实在让人难受。而有知情大厨也曾爆料味道源自于各种火锅添加剂、增香剂和飘香剂等。究竟火锅底料中何种物质散发出味道，本文利用岛津 GCMS-TQ8040 和 AOC-6000 自动进样器，结合异味分析系统，筛查 6 种火锅底料样品的异味成分。

## 实验部分

### 1.1 仪器

GCMS-TQ8040 三重四级杆气质联用仪  
AOC-6000 多功能自动进样器

### 1.2 分析条件

SPME 参数：

SPME 纤维：10 mm FIB-P-30/10 PDMS

老化温度：270°C

老化时间（萃取前）：0 min

平衡温度：80°C

平衡时间：5 min

萃取时间：10 min

进样口温度：250°C

解吸时间：2 min

老化时间（萃取后）：5 min

GC-MS/MS 参数：

色谱柱：InertSil Pure-WAX, 30 m × 0.25  
mm × 0.25 μm

柱温程序：50°C (5 min)\_10°C /min\_250°C (10 min)

载气压力：83.5kPa

进样方式：不分流进样

离子源温度：200°C

接口温度：250°C

检测器电压：调谐电压 +0.3 kV

采集方式：Scan/MRM 同时数据采集

### 1.3 样品前处理

称取火锅底料样品各 1.000 g，置于顶空瓶中密封，采用 AOC-6000 固相微萃取 (SPME) 进样，GCMS-TQ8040 检测。

## 结果讨论

### 2.1 异味系统方法建立流程

使用方法包中的 TQ\_MS\_Wax\_AART 方法测定正构烷烃样品，用于调整目标组分的保留时间。正构烷烃样品色谱图见图 1。使用方法包中的 TQ\_MS\_Wax\_Correct\_MRM 方法测定校正用内标样品，利用此内标样品的数据，在没有目标组分标准品的情况下也可以得到目标组分的半定量浓度。内标样品色谱图见图 2。

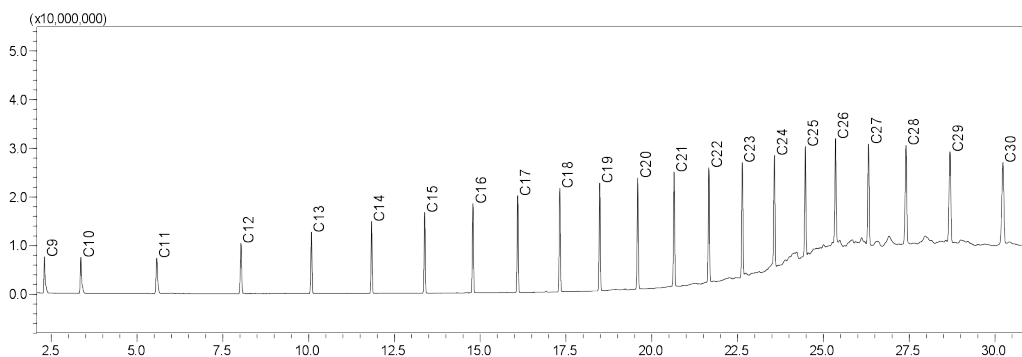


图1 正构烷烃色谱图

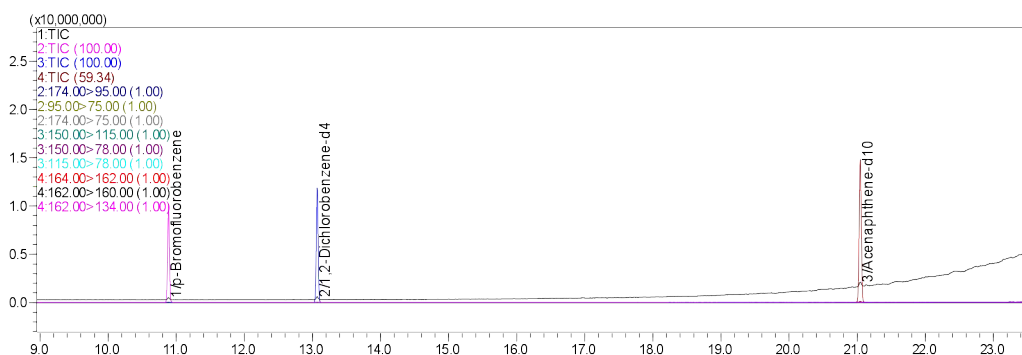


图2 校正内标样品色谱图

然后利用所得数据及 SmartDatabase Off-flavor 数据库建立筛查方法文件。GCMS-TQ8040 可利用该方法对 150 种异味物质进行筛查。图 3 为 Smart Database Off-flavor 数据库的创建方法界面和方法创建完成界面。

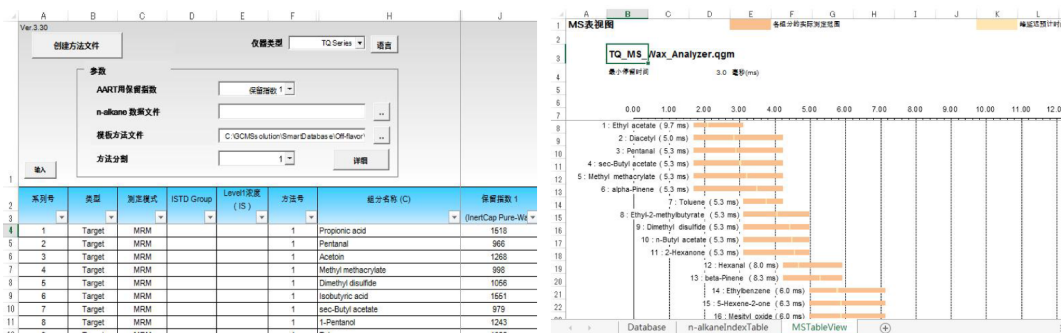


图3 Smart Database Off-flavor数据库界面

## 2.2 火锅底料测试结果

称取火锅底料样品置于顶空瓶中 GCMSMS 分析, 所得谱图如下图 4~ 图 9 所示, 部分化合物 MRM 见图 10, 检测到的组分结果见表 1~ 表 6 (表中列出估算浓度大于气味阈值的化合物)。

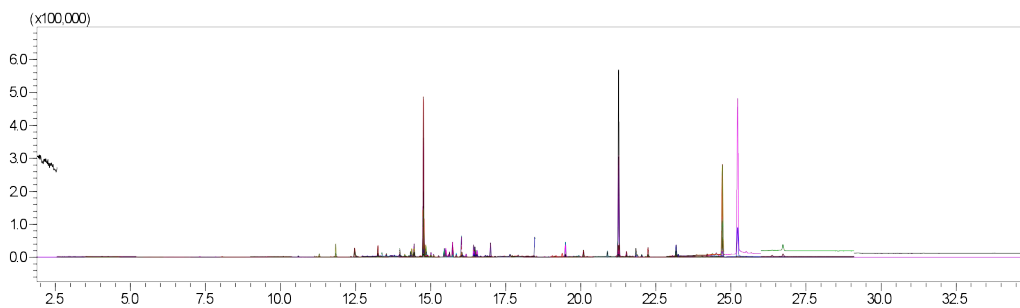


图4 1#样品谱图

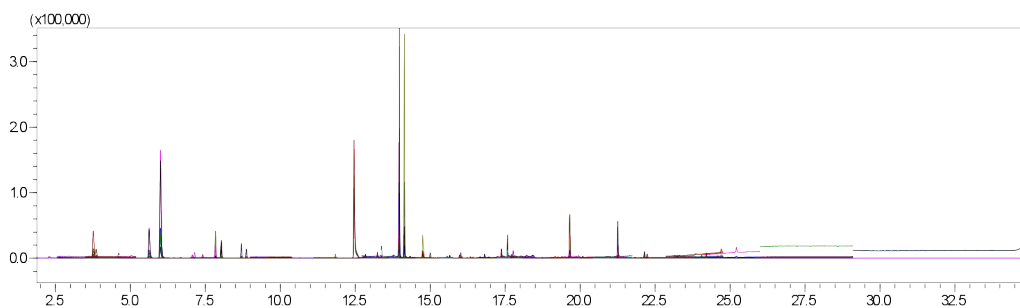


图5 2#样品谱图

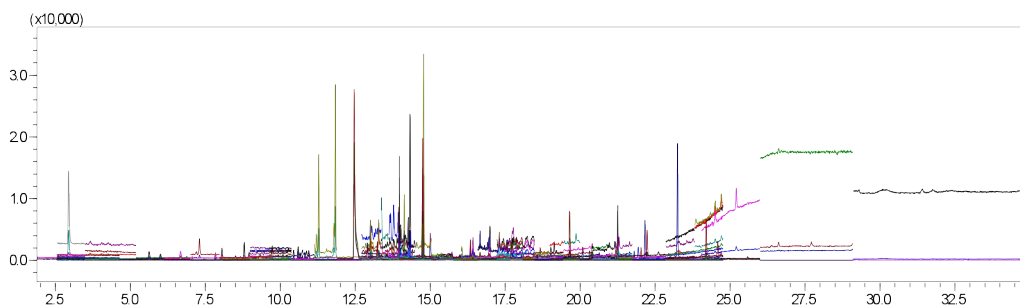


图6 3#样品谱图

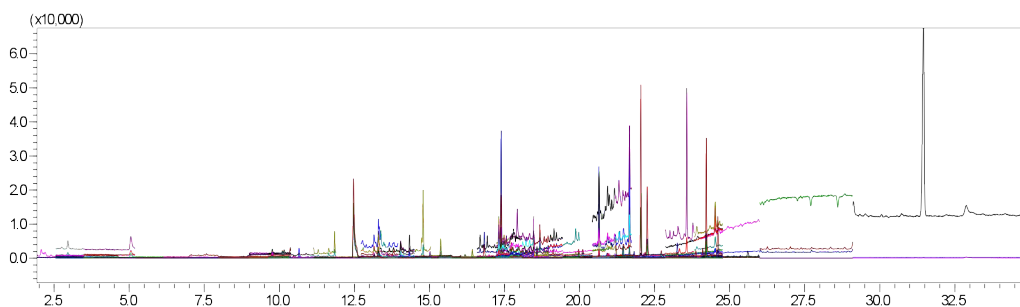


图7 4#样品谱图

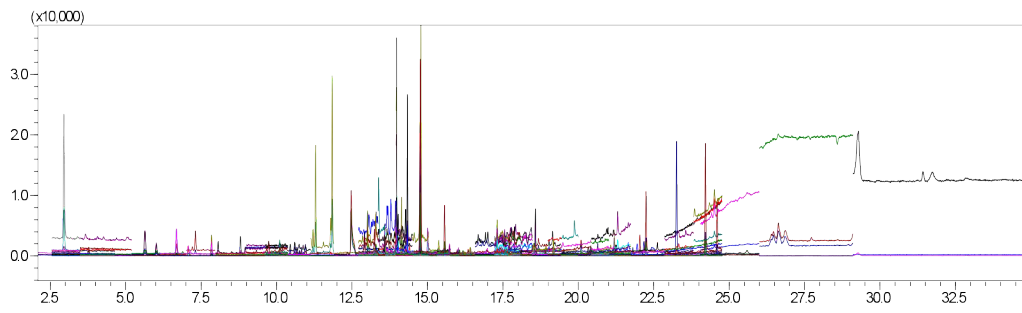


图8 5#样品谱图

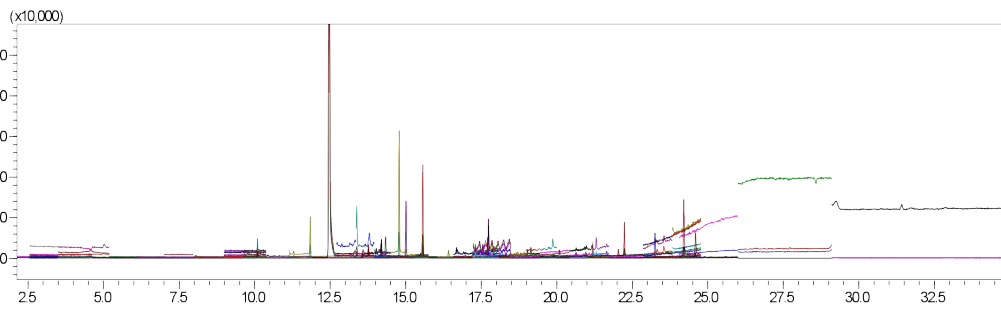
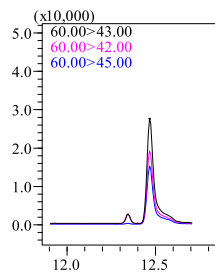
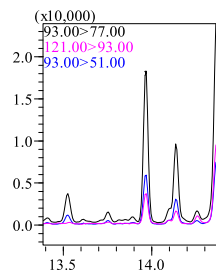


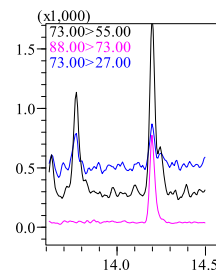
图9 6#样品谱图



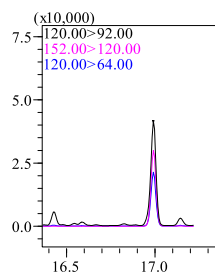
Acetic acid



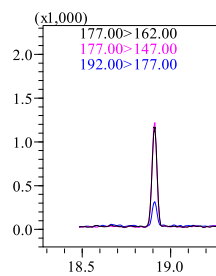
Linalool



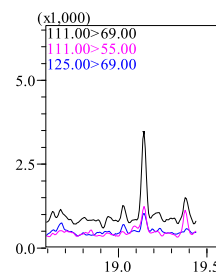
Isovaleric acid



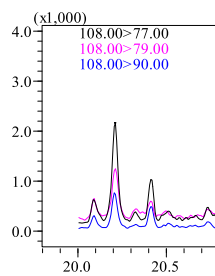
Methyl salicylate



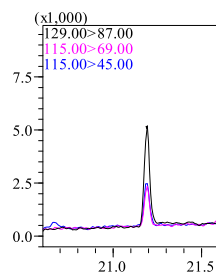
beta-Ionone



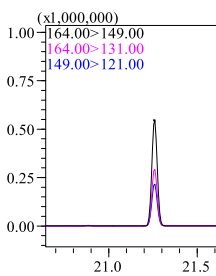
1-Dodecanol



m-Cresol



Pelargonic acid



Eugenol

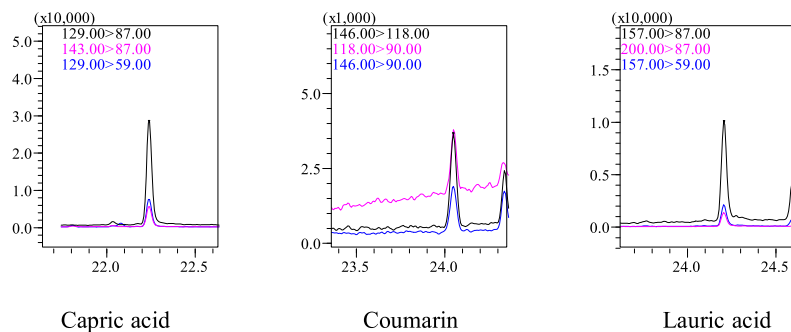


图10 部分筛查异味物质MRM图

表1 1#样品异味数据筛查结果 (浓度单位: pg)

No.	英文名称	化合物	CAS 号	估算浓度	气味阈值	气味特征
1	Acetic acid	乙酸	64-19-7	2921	1000	Sour
2	n-Decanal	癸醛	112-31-2	30	1	Soap, Tallow
3	Linalool	芳樟醇	78-70-6	66	10	Flower, Lavender
4	2-Methylisoborneol	2-甲基异茨醇	2371-42-8	7	0.1	Earth, Musty
5	Verbenol	马鞭草烯醇	473-67-6	200	10	Sweet, Mint
6	Isovaleric acid	异戊酸	503-74-2	102	100	Rancid, Sweet
7	n-Dodecanal	十二烷醛	112-54-9	112	10	Fat, Citrus, Lily
8	Methyl salicylate	水杨酸甲酯	119-36-8	52	1	Peppermint
9	1-Undecanol	十一醇	112-42-5	15	10	Mandarin
10	beta-Ionone	β-紫罗兰酮	14901-07-6	3	0.1	Flower, Violet
11	1-Dodecanol	1-十二烷醇	112-53-8	19	1	Fat, Wax
12	p-Ethylguaiaicol	4-乙基愈创木酚	2785-89-9	2	0.1	Spice, Clove
13	m-Cresol	间甲酚	108-39-4	11	0.1	Plastic, Fecal
14	Pelargonic acid	壬酸	112-05-0	157	100	Green, Fat
15	Bis(2-methyl-3-furyl) disulfide	双(2-甲基-3-呋喃基)二硫	28588-75-2	1	0.1	Roasted Meat
16	Eugenol	丁香酚	97-53-0	2156	1	Honey, love
17	Capric acid	癸酸	334-48-5	297	100	Fat, Rancid
18	Coumarin	香豆素	91-64-5	4	1	Sweet, Green
19	Lauric acid	月桂酸	143-07-7	572	100	Metal

表2 2#样品异味数据筛查结果 (浓度单位: pg)

No.	英文名称	化合物	CAS 号	估算浓度	气味阈值	气味特征
1	alpha-Pinene	$\alpha$ -蒎烯	80-56-8	76	10	Solvent
2	Hexanal	己醛	66-25-1	15	1	Fat, Tallow, Grass
3	beta-Pinene	$\beta$ -蒎烯	127-91-3	154	100	Pine, Resin, Turpentine
4	Acetic acid	乙酸	64-19-7	6811	1000	Sour
5	n-Decanal	癸醛	112-31-2	15	1	Soap, Tallow
6	Linalool	芳樟醇	78-70-6	1107	10	Flower, Lavender
7	trans-2-Decenal	反式-2-癸烯醛	3913-81-3	21	1	Orange
8	Isovaleric acid	异戊酸	503-74-2	103	100	Rancid, Sweat
9	Borneol	龙脑	507-70-0	2	1	Earth, Musty
10	Geraniol	香叶醇	106-24-1	13	1	Geranium, Rose
11	Guaiacol	愈疮木酚	90-05-1	2	1	Sweet, Medicine, Smoke
12	Enanthic acid	庚酸	111-14-8	392	10	Orange, Soap, Gasoline
13	Pelargonic acid	壬酸	112-05-0	121	100	Green, Fat
14	Eugenol	丁香酚	97-53-0	218	1	Honey, Clove
15	Capric acid	癸酸	334-48-5	85	10	Fat, Rancid
16	Coumarin	香豆素	91-64-5	4	1	Sweet, Green
17	Lauric acid	月桂酸	143-07-7	405	100	Metal
18	Vanillin	香兰素	121-33-5	10	1	Vanilla

表3 3#样品异味数据筛查结果 (浓度单位: pg)

No.	英文名称	化合物	CAS 号	估算浓度	气味阈值	气味特征
1	Acetic acid	乙酸	64-19-7	2992	1000	Sour
2	n-Decanal	癸醛	112-31-2	27	1	Soap, Tallow
3	Linalool	芳樟醇	78-70-6	40	10	Flower, Lavender
4	2-Methylisoborneol	2-甲基异莰醇	2371-42-8	8	0.1	Earth, Musty
5	Borneol	龙脑	507-70-0	4	1	Earth, Musty
6	n-Dodecanal	十二烷醛	112-54-9	114	10	Fat, Citrus, Lily
7	1-Dodecanol	1-十二烷醇	112-53-8	12	1	Fat, Wax
8	m-Cresol	间甲酚	108-39-4	1	0.1	Plastic, Fecal
9	Pelargonic acid	壬酸	112-05-0	117	100	Green, Fat
10	Eugenol	丁香酚	97-53-0	33	1	Honey, Clove
11	Capric acid	癸酸	334-48-5	67	10	Fat, Rancid
12	Lauric acid	月桂酸	143-07-7	363	100	Metal

表4 4#样品异味数据筛查结果 (浓度单位: pg)

No.	英文名称	化合物	CAS 号	估算浓度	气味阈值	气味特征
1	Hexanal	己醛	66-25-1	49	1	Fat, Tallow, Grass
2	Acetic acid	乙酸	64-19-7	2867	1000	Sour
3	n-Decanal	癸醛	112-31-2	147	1	Soap, Tallow
4	n-Dodecanal	十二烷醛	112-54-9	182	10	Fat, Citrus, Lily
5	Geraniol	香叶醇	106-24-1	11	1	Geranium, Rose
6	Enanthic acid	庚酸	111-14-8	402	10	Green, Orange, Soap, Gasoline
7	1-Dodecanol	1-十二烷醇	112-53-8	32	1	Fat, Wax
8	Pelargonic acid	壬酸	112-05-0	187	100	Green, Fat
9	Capric acid	癸酸	334-48-5	384	10	Fat, Rancid
10	Lauric acid	月桂酸	143-07-7	1508	100	Metal

表5 5#样品异味数据筛查结果 (浓度单位: pg)

No.	英文名称	化合物	CAS 号	估算浓度	气味阈值	气味特征
1	Acetic acid	乙酸	64-19-7	2027	1000	Sour
2	n-Decanal	癸醛	112-31-2	28	1	Soap, Tallow
3	Linalool	芳樟醇	78-70-6	98	10	Flower, Lavender
4	Isovaleric acid	异戊酸	503-74-2	139	100	Rancid, Sweat
5	n-Dodecanal	十二烷醛	112-54-9	177	10	Fat, Citrus, Lily
6	beta-Ionone	β-紫罗兰酮	14901-07-6	2	0.1	Flower, Violet
7	1-Dodecanol	1-十二烷醇	112-53-8	16	1	Fat, Wax
8	Pelargonic acid	壬酸	112-05-0	138	100	Green, Fat
9	Bis(2-methyl-3-furyl) disulfide	双(2-甲基-3-呋喃基)二硫	28588-75-2	3	0.1	Roasted Meat
10	Capric acid	香豆素	91-64-5	121	10	Fat, Rancid
11	Lauric acid	月桂酸	143-07-7	865	100	Metal

表6 6#样品异味数据筛查结果 (浓度单位: pg)

No.	英文名称	化合物	CAS 号	估算浓度	气味阈值	气味特征
1	Acetic acid	乙酸	64-19-7	7242	1000	Sour
2	n-Decanal	癸醛	112-31-2	22	1	Soap, Tallow
3	Isovaleric acid	异戊酸	503-74-2	224	100	Rancid, Sweat
4	1-Dodecanol	1-十二烷醇	112-53-8	12	1	Fat, Wax
5	Pelargonic acid	壬酸	112-05-0	136	100	Green, Fat
6	Capric acid	香豆素	91-64-5	45	10	Fat, Rancid
7	Lauric acid	月桂酸	143-07-7	736	100	Metal

## ■ 结论

本文利用岛津异味分析系统对火锅底料中异味物质进行测定。方法利用 AOC-6000 自动 SPME 进样，GCMS-TQ8040 进行 MRM 分析。该系统操作简单，分析速度快，结合包含多种采集方式、多种色谱柱相关方法信息和内置标准曲线的数据库，在没有标准品的情况下也可以得到目标组分的半定量浓度，可在单四极杆气质联用仪或三重四极杆气质联用仪上分析各种样品所含的异味物质。