

定制分析系统助力气味检测 ---气味分析系统及其应用

岛津企业管理（中国）有限公司
分析测试仪器市场部
赵彤 sshzt@shimadzu.com.cn

Create New Synergies

— Best for Our Customers —



GC-MS/MS 定制分析系统根据应用方向定制

- ⊕ 主机+数据库+耗材整体推荐
- ⊕ GC-MS/MS 定制分析系统 已经发布
- ⊕ GC-MS 定制分析系统 将陆续发布

GC-MS/MS **Pesticide** 定制分析系统

GC-MS/MS **Dioxins** 定制分析系统

GC-MS/MS **PAHs** 定制分析系统

GC-MS/MS **PCBs** 定制分析系统

GC-MS/MS **PBDEs** 定制分析系统

GC-MS/MS **Forensic** 定制分析系统

GC-MS/MS **Metabolites** 定制分析系统

GC-MS/MS **Off-Flavor** 定制分析系统



Create New Synergies

气味检测需求逐渐增加但是难度大参考少



检什么？谁能检？怎么检？

Create New Synergies

Best for Our Customers

岛津GC-MS/MS Off-Flavor气味分析系统



New!



Create New Synergies

Best for Our Customers

气味定制分析系统包含完善解决方案



专用耗材



前处理装置

Off-Flavor 定制分析系统



分析指导手册

Compound Name (E)	Ret. Index 1	Ret. Time	Comment (E)	threshold
	(InertCap Pure-Wa)		Odor Quality	Odor Threshold
2,4,6-Tribromophenol	2800		Lodoform	100
1-Tetradecanol	2158		Coconut	1000
gamma-Dodecalactone	2364		Sweet, Flower, Fruit	1
Dibenzyl disulfide	3022		Ether	1
Ethyl acetate	888		Pineapple	1000
Diacetyl	963		Butter	10
Acetic acid	1435		Sour	1000

专业数据库



灵活的分析系统

Create New Synergies

Best for Our Customers

专用耗材有效应对各种气味采集



样品采集

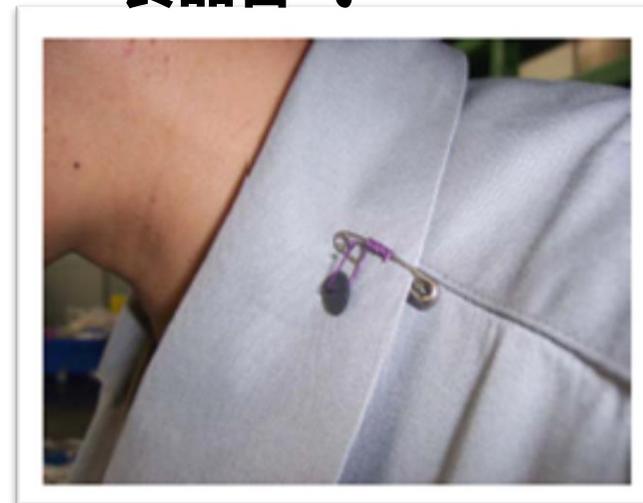
薰衣草香气



食品香气



袜子样品



人的体味

溶剂萃取

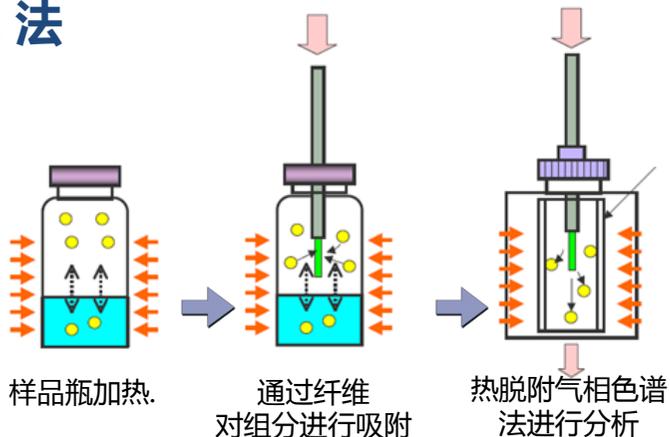
AOC-20i
上机分析



合理使用前处理方法可使灵敏度有效提升

使用固相微萃取 (SPME) 法进样

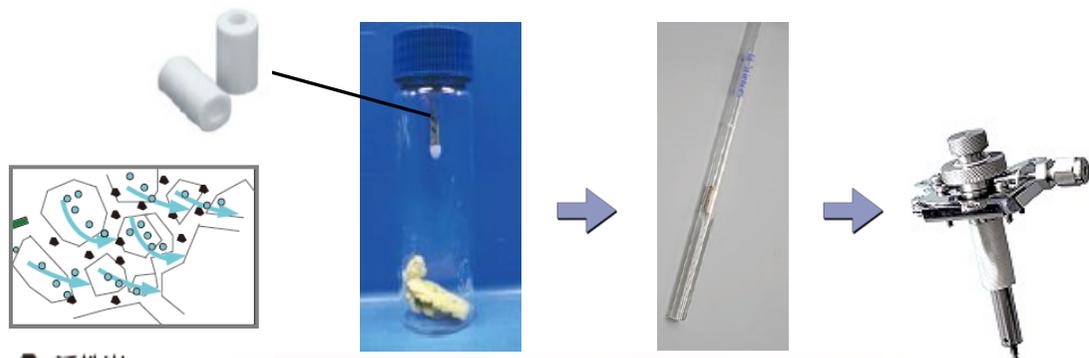
SPME 法



通过AOC-6000的自动前处理功能，可以很轻松的通过样品瓶进行固相微萃取



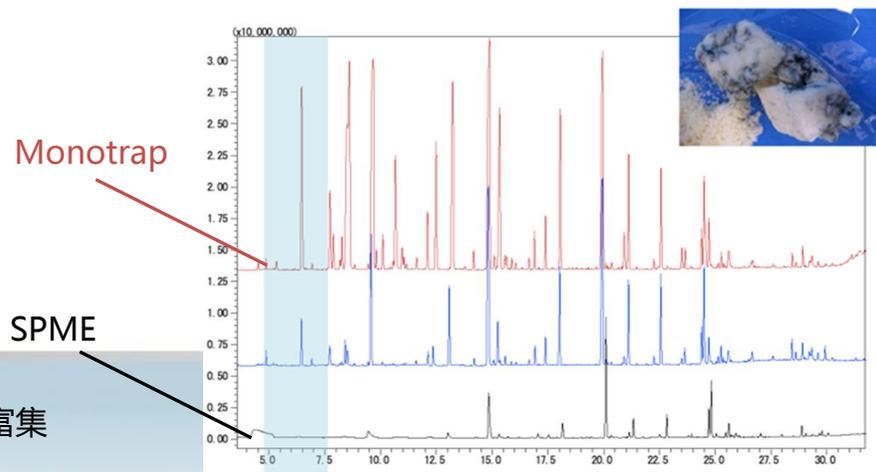
Monotrap – 热脱附法



- 活性炭
- 样品
- ▮ ODS 填料 (C18 base)

Monotrap进行吸附。装填在衬管中。使用OPTIC-4进行样品富集

Monotrap 相比SPME灵敏度更高

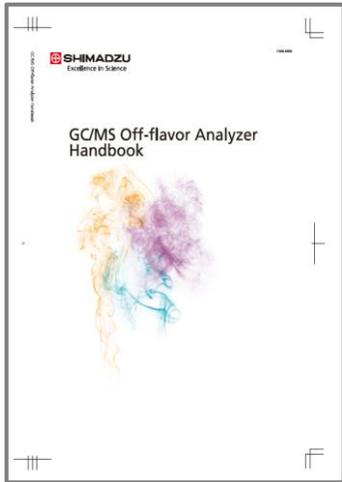


Create New Synergies

Best for Our Customers



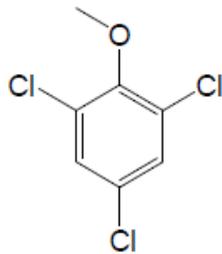
分析指导手册帮助用户选择三种不同色谱柱进行分析



附件的数据库手册中包含
气味注册信息，针对不同
极性色谱柱均列出其检测
限供用户参考。

Database ID:	116		
Common Name:	2,4,6-Trichloroanisole		
CAS No.:	87 - 40 - 1		
Functional Information:	Earth, Musty		
Odor Threshold(µg/L):	0.001		
Boiling Point:			

Detection Limit (S: < 1 pg, A: 1-10 pg, B: 10-100 pg, C: 100-1000 pg, D: > 1000 pg)	Inert Cap 5MS/Sil [⊕]	Inert Cap 17MS [⊕]	Inert Cap WAX [⊕]
SIM Mode	S [⊕]	A [⊕]	A [⊕]
MRM Mode	S [⊕]	S [⊕]	S [⊕]



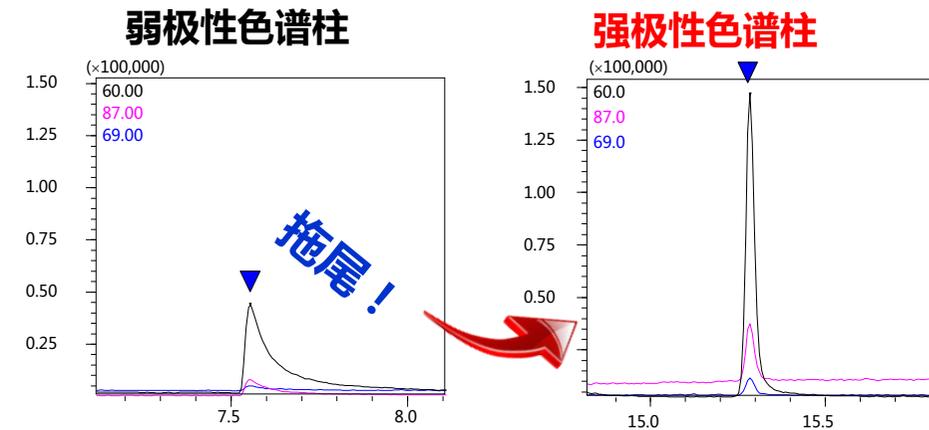
备选色谱柱(3种)

弱极性(InertCap 5Sil/MS)

中极性 (InertCap 17MS)

强极性 (InertCap Pure-Wax)

*InertCap是GL Sciences公司产品



异戊酸质谱图

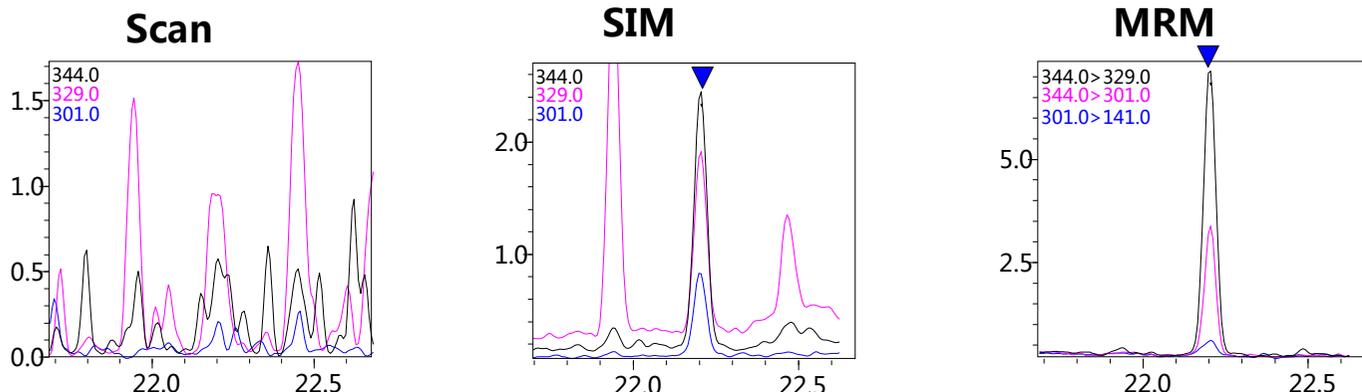
通过更改色谱柱的极性，来获得不同组分在不同色谱柱上检测的最佳峰型。



更换质谱检测器来实现不同级别浓度样品检测

SIM 方式 and MRM 方式比较

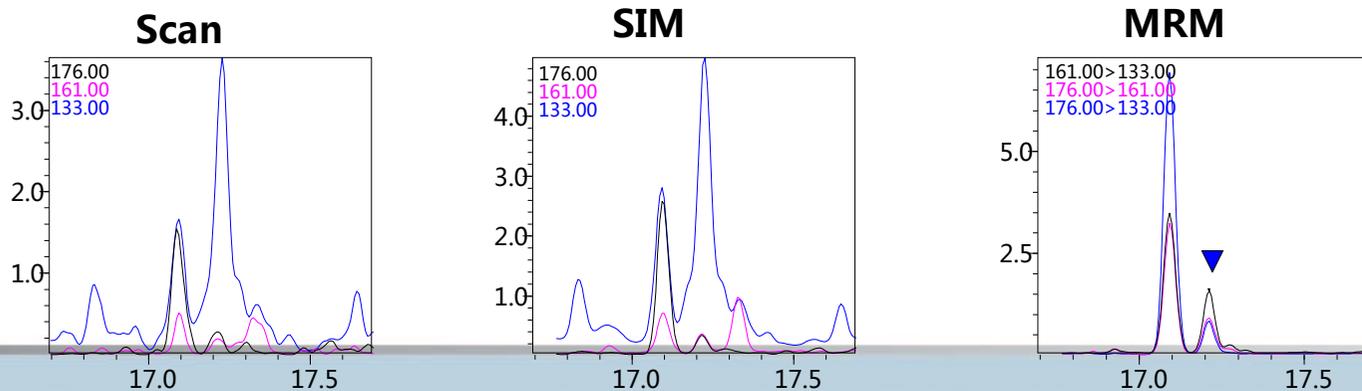
Scan, SIM 和 MRM **灵敏度比较**



2,4-三溴苯甲醚 (预估浓度: 4.395 pg/mg)

MRM模式以及SIM模式完美应对不同气味阈值的物质检测

Scan, SIM 和 MRM **分辨率对比**



2,4-二氯苯甲醚(预估浓度: 2.121 pg/mg)

MRM 提供了复杂集中当中痕量样品的完美分离



灵活的硬件搭配可以满足不同的异味分析需求

GC-MS(/MS)

GCMS-QP2020



可以使用 SIM 方式

GCMS-TQ8040/TQ8050



可以使用 SIM, MRM 方式

嗅探器

Sniffer-9000



OPV277



采用GC-MS的嗅探部件确认检测出的气味

前处理/进样器 单元

AOC-20i + s



可以使用液体进样模式.

AOC-6000



可以使用SPME、HS和液体进样模式

OPTIC-4



可以使用Monotrap-热脱附模式

Create New Synergies

Best for Our Customers



专用综合解决方案有效应对气味分析

没有专用数据库？

通过大量实际案例的积累，特别为气味分析建立的专用数据库。

包含150种气味物质的感官及相关信息。
(气味特征、气味阈值)。

标准品不易获取？

内置校准曲线，通过保留指数可在没有标准品的前提下对异味物质进行半定量分析。

基于数据库可以针对三种不同极性色谱柱自动创建仪器方法，并进行有效检测。

针对不同需求可以自行选择配置。进而可通过MRM/SIM方式对不同浓度的气味进行有效检测。

专业的气味分析数据库

Compound Name (E)	Ret. Index 1	Ret. Time	Comment (E) Odor Quality	threshold Odor Threshold
2,4,6-Tribromophenol	2800		Lodoform	100
1-Tetradecanol	2158		Coconut	1000
gamma-Dodecalactone	2364		Sweet, Flower, Fruit	1
Dibenzyl disulfide	3022		Ether	1
Ethyl acetate	888		Pineapple	1000
Diacetyl	963		Butter	10
Acetic acid	1435		Sour	1000

引起异味的主要组分

GC/MS 分析信息

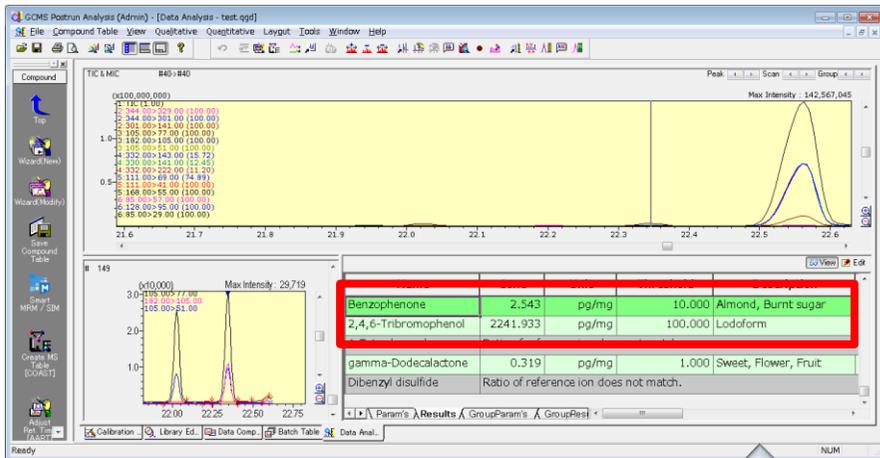
气味的感官信息

本产品为岛津公司与Daiwa Can共同开发

专业灵活分析系统

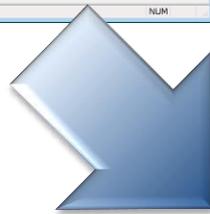


业内唯一专业异味数据库有效提升工作效率



气味特征描述确认
气味阈值与半定量浓度值进行对比

Compound Name (E)	Comment (E) Odor Quality	threshold Odor Threshold
2,4,6-Tribromophenol	Lodoform	100
1-Tetradecanol	Coconut	1000
gamma-Dodecalactone	Sweet, Flower, Fruit	1
Dibenzyl disulfide	Ether	1
Ethyl acetate	Pineapple	1000



Name	Conc	Unit	Threshold	Description
Benzophenone	2.543	pg/mg	10.000	Almond, Burnt sugar
2,4,6-Tribromophenol	2241.933	pg/mg	100.000	Lodoform

有效缩小备选范围 使分析效率大幅度提升

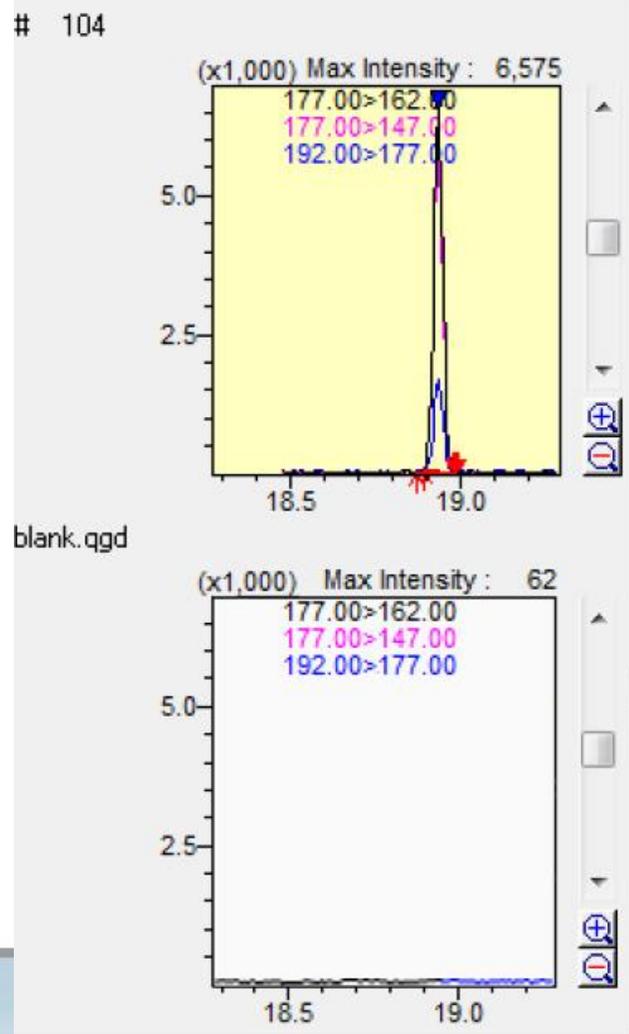
Create New Synergies

Best for Our Customers



对某用户提供的异味水样品进行筛查试验

对比异味样品以及基质空白



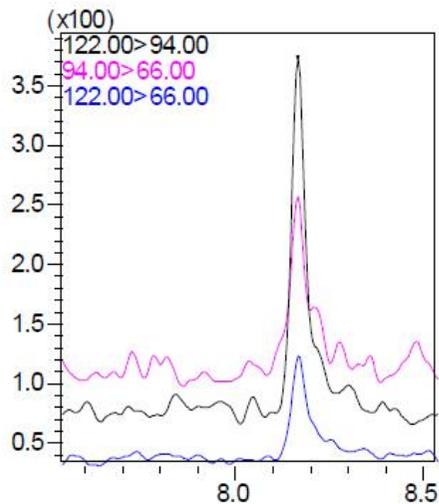
软件自动对可疑目标物进行筛选

ID#	Name	Conc	Unit	Threshold	Description	Ret.Time
99	1-Methylnaphthalene	No peak is identified.				
100	2,4-Dichloroanisole	No peak is detected.				
101	2-Phenylethanol	Ratio of reference ion does not match.				
102	gamma-Octalactone	Ratio of reference ion does not match.				
103	Dibutylhydroxytoluene	No peak is identified.				
104	beta-Ionone	125.229	pg	0.100	Flower, Violet, Raspbe	18.933
105	Enanthic acid	Ratio of reference ion does not match.				
106	Benzothiazole	No peak is identified.				
107	o-Bromophenol	No peak is detected.				
108	1-Dodecanol	No peak is identified.				
109	o-Cresol	Ratio of reference ion does not match.				
110	Phenol	No peak is identified.				
111	4,5-Epoxy-(E)-2-decenal	Ratio of reference ion does not match.				
112	Methyleugenol	No peak is detected.				
113	p-Ethylguaiacol	No peak is detected.				
114	Caprylic acid	No peak is identified.				
115	2-Bromo-p-cresol	No peak is detected.				
116	4,6-Dichloro-o-cresol?	No peak is detected.				
117	p-Cresol	Ratio of reference ion does not match.				
118	m-Cresol	No peak is identified.				
119	2,6-Dichlorophenol	No peak is detected.				

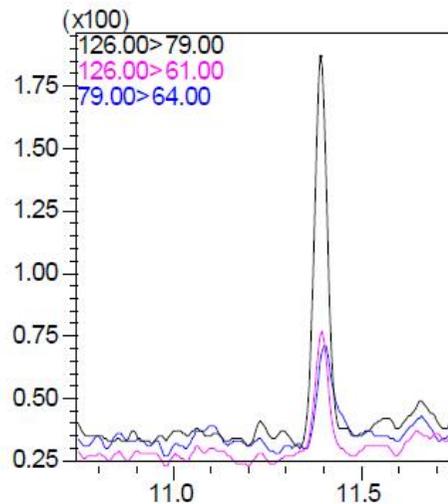
通过保留指数、离子对信息、及预估浓度等信息锁定疑似目标物β-紫香酮



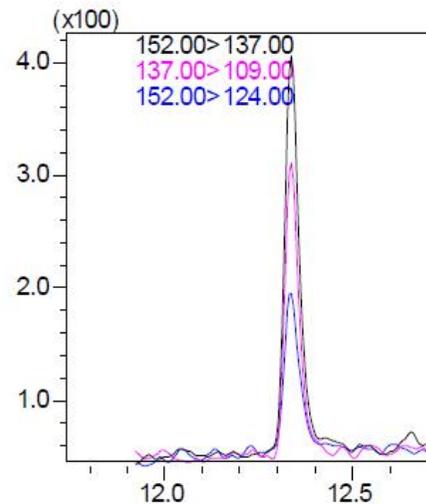
进而筛查出水样中可能含有的气味物质



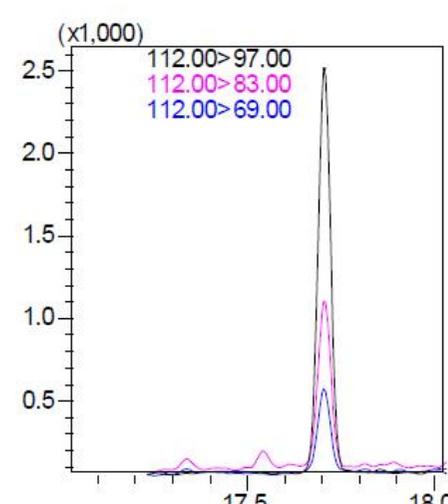
二乙基二硫醚



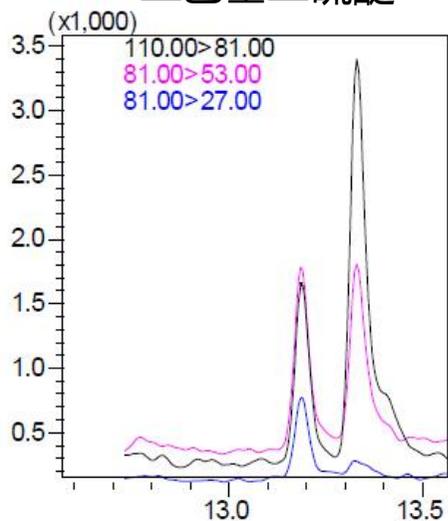
二甲基三硫



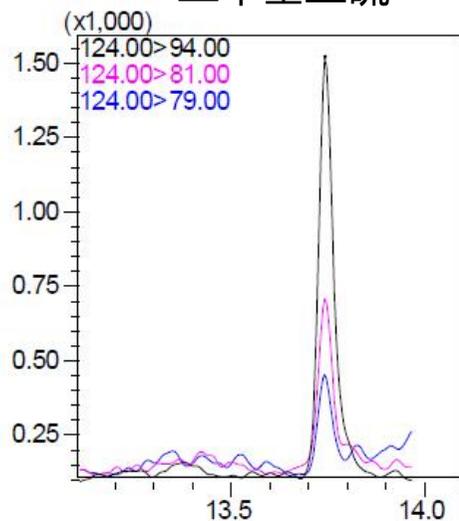
2-甲氧基-3-异丙基吡嗪



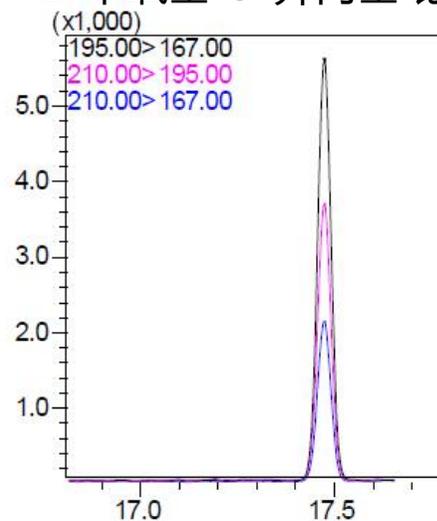
土臭素



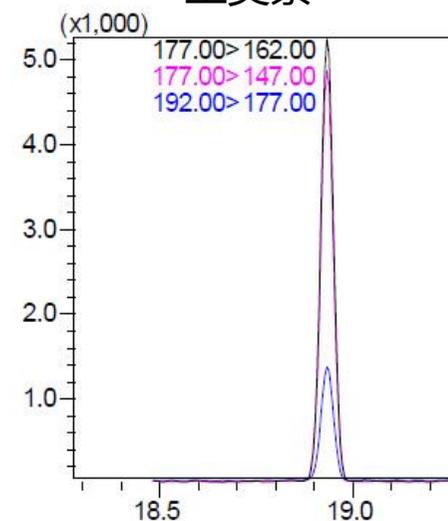
反,反-2,4-庚二烯醛



2-甲氧基-3-(2-甲基丙基)吡嗪



2,4,6-三氯苯甲醚



β-紫香酮



与库中预置信息对比可得样品中有6种组分产生气味

	英文名称	中文名称	估算浓度/pg	阈值/pg	气味特征
1	Dimethyl trisulfide	二甲基三硫	0.386	0.1	Cabbage, Fish, Sulfur
2	2-Isopropyl-3-methoxypyrazine	2-甲氧基-3-异丙基吡嗪	4.723	0.01	Earth, Pea
3	2-Isobutyl-3-methoxy pyrazine	2-甲氧基-3-(2-甲基丙基)吡嗪	7.627	0.01	Earth, Spice, Green pepper
4	2,4,6-Trichloroanisole	2,4,6-三氯苯甲醚	78.032	0.001	Earth, Musty
5	Geosmin	土臭素	24.632	0.1	Earth, Beet
6	beta-Ionone	β -紫香酮	125.229	0.1	Flower, Violet, Raspberry
7	Diethyl disulfide	二乙基二硫醚	0.596	50	Moldy, Sulfur
8	trans,trans-2,4-Heptadienal	反,反-2,4-庚二烯醛	43.85	2000	Stir-fried oil, Burnt

由于两种异味物质的估算浓度未达到气味阈值，因此不会对气味造成影响

Create New Synergies

Best for Our Customers

岛津气味定制分析系统提供完整的异味分析解决方案



岛津解决方案

1. 确认异味样品

2. 选择色谱柱

3. 创建分析方法

4. 样品分析

5. 使用GC-MS(/MS)进行SIM/MRM分析

6. 对气味信息进行识别

7. 预测该物质引发的的气味信息

8. 通过GC-MS(/MS)及嗅探器对气味进行再分析.

9. 确认引发异味的物质.

· 针对不同的待分析化合物共有三种不同型号的色谱柱可供选择。
· 附件的数据库手册中包含气味注册信息，针对不同极性色谱柱均列出其检测限供用户参考。

· 用户可以在不使用标准品的前提下，直接创建一个含有样品保留时间、标准曲线的分析方法用于目标物的定性和半定量分析。

· 样品通过 SPME 或 Monotrap 模式进行前处理

· SIM/MRM 方法可用于检测异味成分的气味阈值

· 通过大量的实验和案例，该系统包含150种臭味物质信息的数据库

· 基于气味组分的浓度、阈值以及气味特征，对造成的异味进行预判

· 保留时间预测功能可以有效的预测嗅探的最佳时间点。

Create New Synergies

Best for Our Customers

气味分析系统部分合作单位



合作单位	开展项目
中科院生态环境中心 水质检测实验室	环境水中气味物质检测
山东供排水检测中心	饮用水中气味物质检测
上海市城市水资源开发利用 国家工程中心有限公司	饮用水中气味物质检测
广州市城市排水监测站	黑臭水体中气味物质检测
北京建材院	家具建材中气味物质检测



Create New Synergies

气味分析系统Off-flavor应用文集



No.	项目名称
1	“黑臭水体”中异味物质检测
2	皮革制品中异味物质检测
3	臭味物质数据库测定塑胶跑道空气中异味成分
4	生活饮用水源地水中臭味物质检测
5	汽车内饰品中异味物质检测
6	臭味物质数据库测定固体废弃物中气体异味成分



感谢您的聆听！

Lead the Way

— Best for Our Customers —

