

黄酒样本分析可行性报告

G.A.S. Gesellschaft für analytische Sensorsysteme mbH
Dortmund, Germany

13.08.2013, Dr. D. Sanders

分析内容:

黄酒样本分析

- 一共6种黄酒样本需要分析，每种黄酒样本2次重复。采用FlavourSpec® 风味仪来对未知样本进行分类。
- 而且需要分析黄酒样本的风味组分浓度
- 所有样本由客户提供

采用FlavourSpec® 风味仪顶空进样：取1mL的样本溶液装在20mL的顶空进样瓶内。



FlavourSpec® 风味仪特性 / 检测参数



FlavourSpec®风味仪由快速气相色谱-离子迁移谱仪构成。仪器简单易用，采用顶空进样分析挥发性有机物 (VOCs)。快速气相色谱可以对多种混合挥发性有机组分进行预分离后采用离子迁移谱仪对各个组分进行定性和定量分析。无需样本前处理，直接全面检测液态与固态样本的风味。分析时间短，仅需几分钟。

试验参数

FlavourSpec®	
总分析时间	20 min
色谱柱类型	MCC - 20 cm length, OV-5
色谱柱温度	40 °C
色谱载气流速	10 mL/min (dynamic after 10min.)
漂流气流速	250 mL/min
漂流气/ 载气种类	Nitrogen 5.0 (99.999%)
离子迁移管温度	45 °C
进样口温度	80 °C
自动顶空进样系统	
顶空瓶中样品体积	1ml
进样体积	50 µL
孵化时间	20 min
孵化温度	Room temperature

系统特征

顶空进样

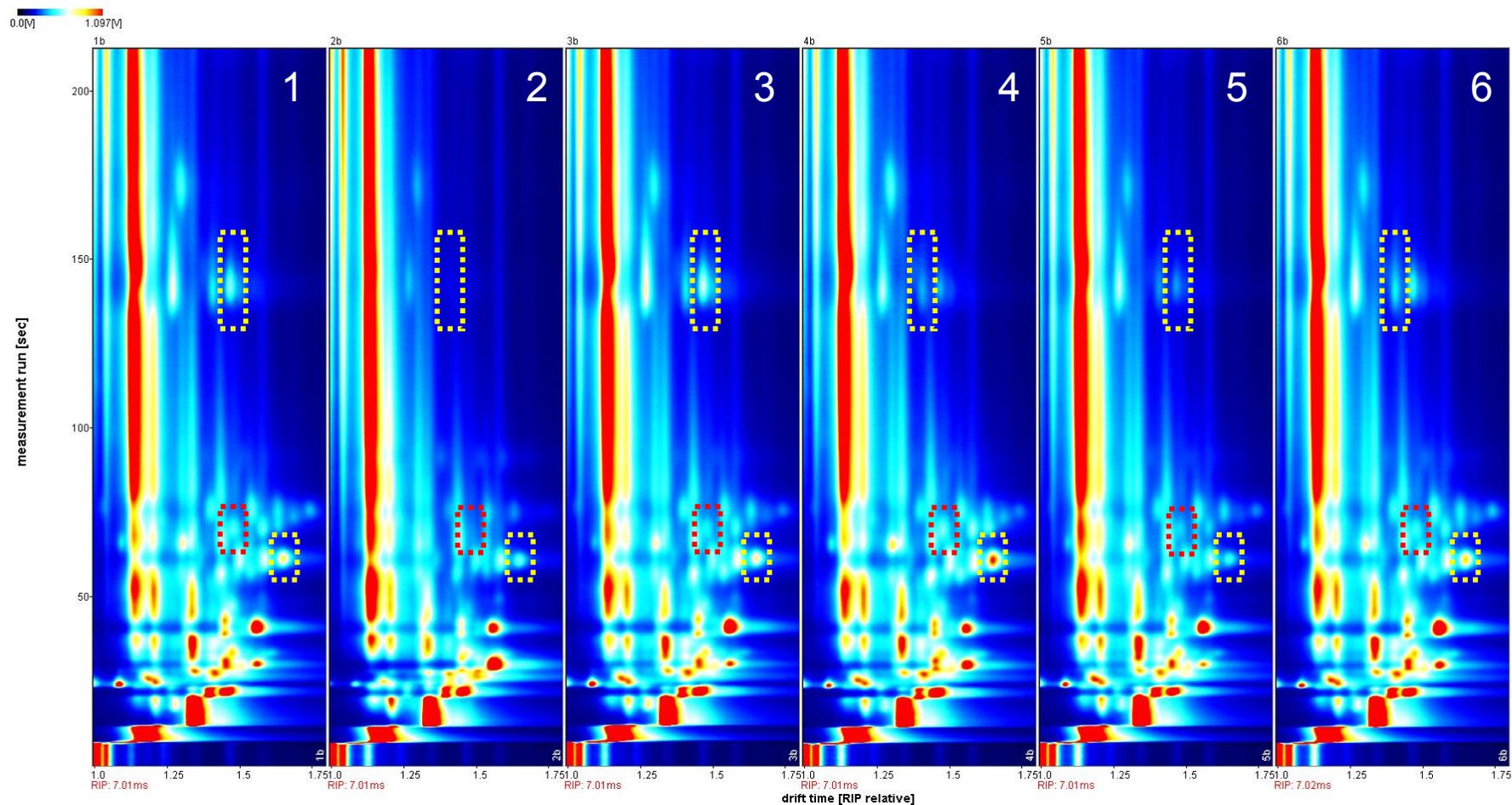
检测限低于ppb_v 级别

完整分析时间: 10 分钟

3-维离子迁移特征谱图分析样本



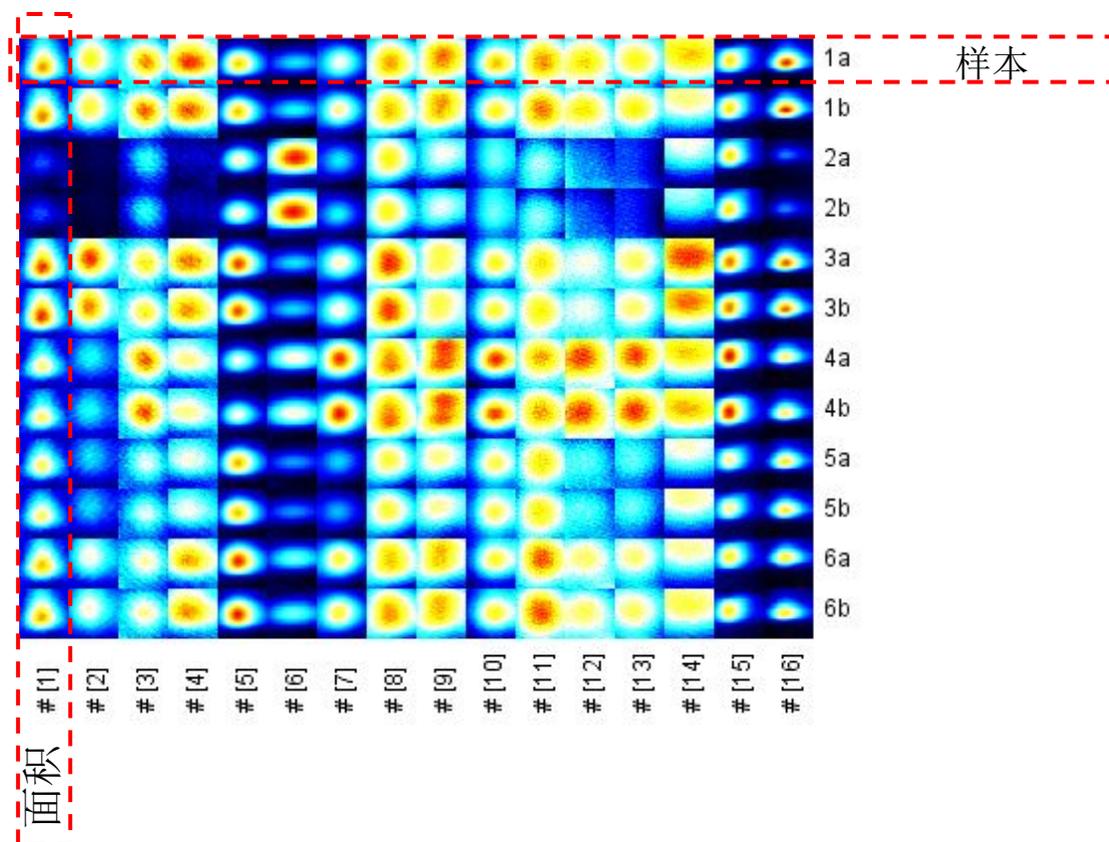
可视化比较：样本谱图



- 可以找出相似的挥发性有机物组分
- 每种样本内单组分的浓度差异(例如：黄色标记)
- 样本#2中缺失的组分（例如：红色标记）

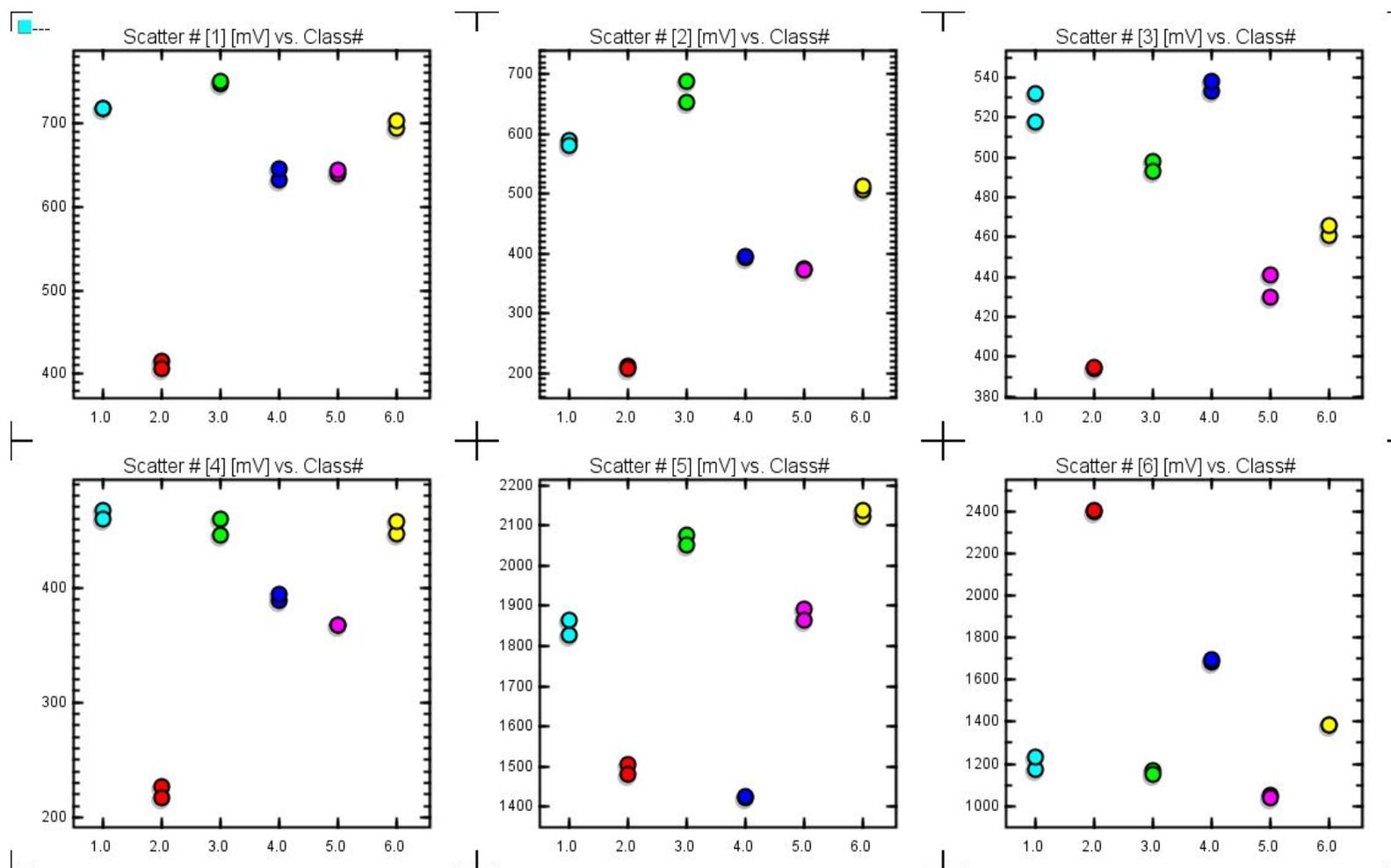
谱图上16个选择的信号峰面积比较图集*

在二维谱图上选择信号峰并罗列成图集



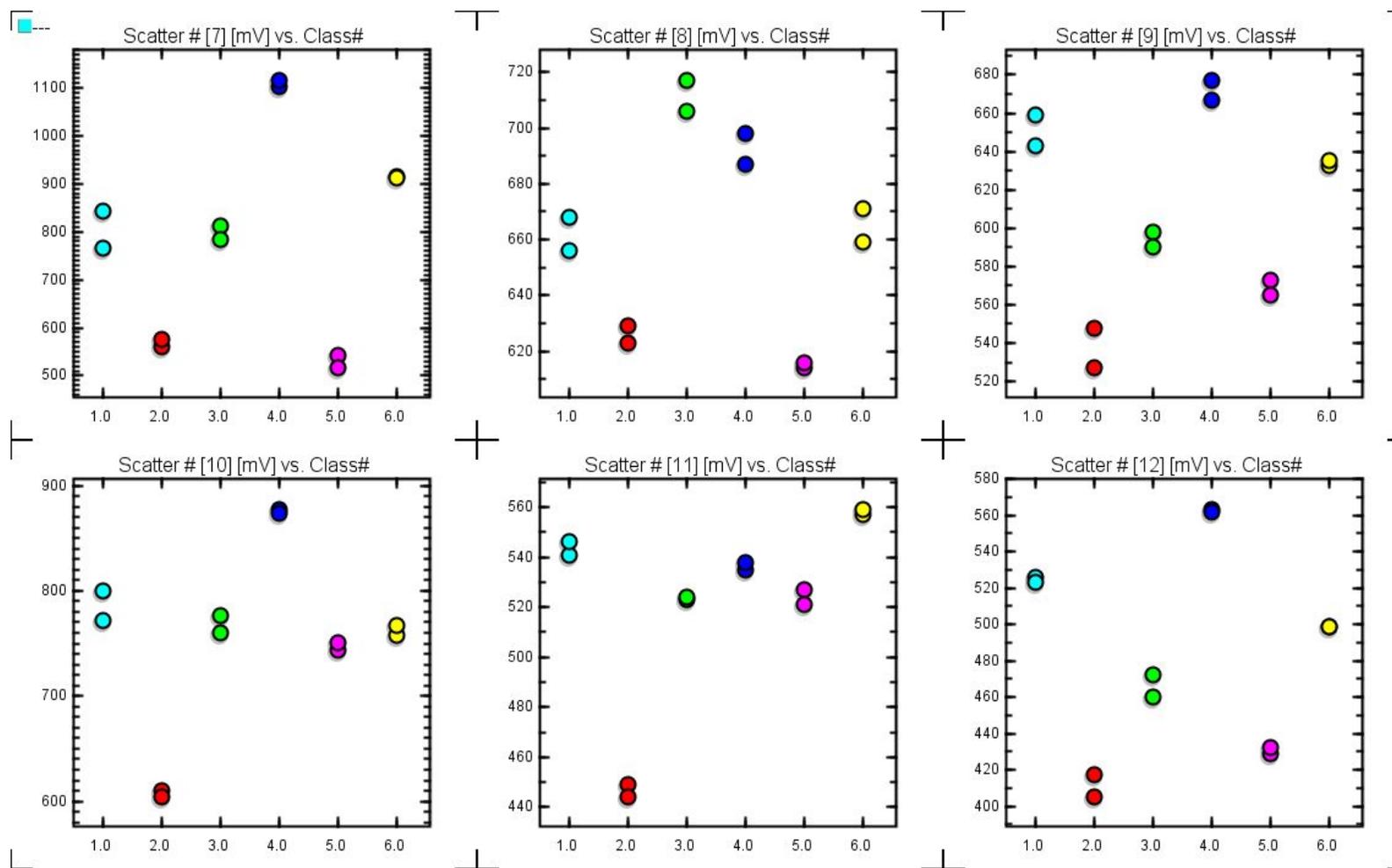
- 组分浓度的重大差异
- 样本#2: 多种组分缺失或者浓度很低
- 相同类型的样本多次检测重复性很强

6种黄酒样本二维谱图上选择的1-6号（16）信号峰强度分布图



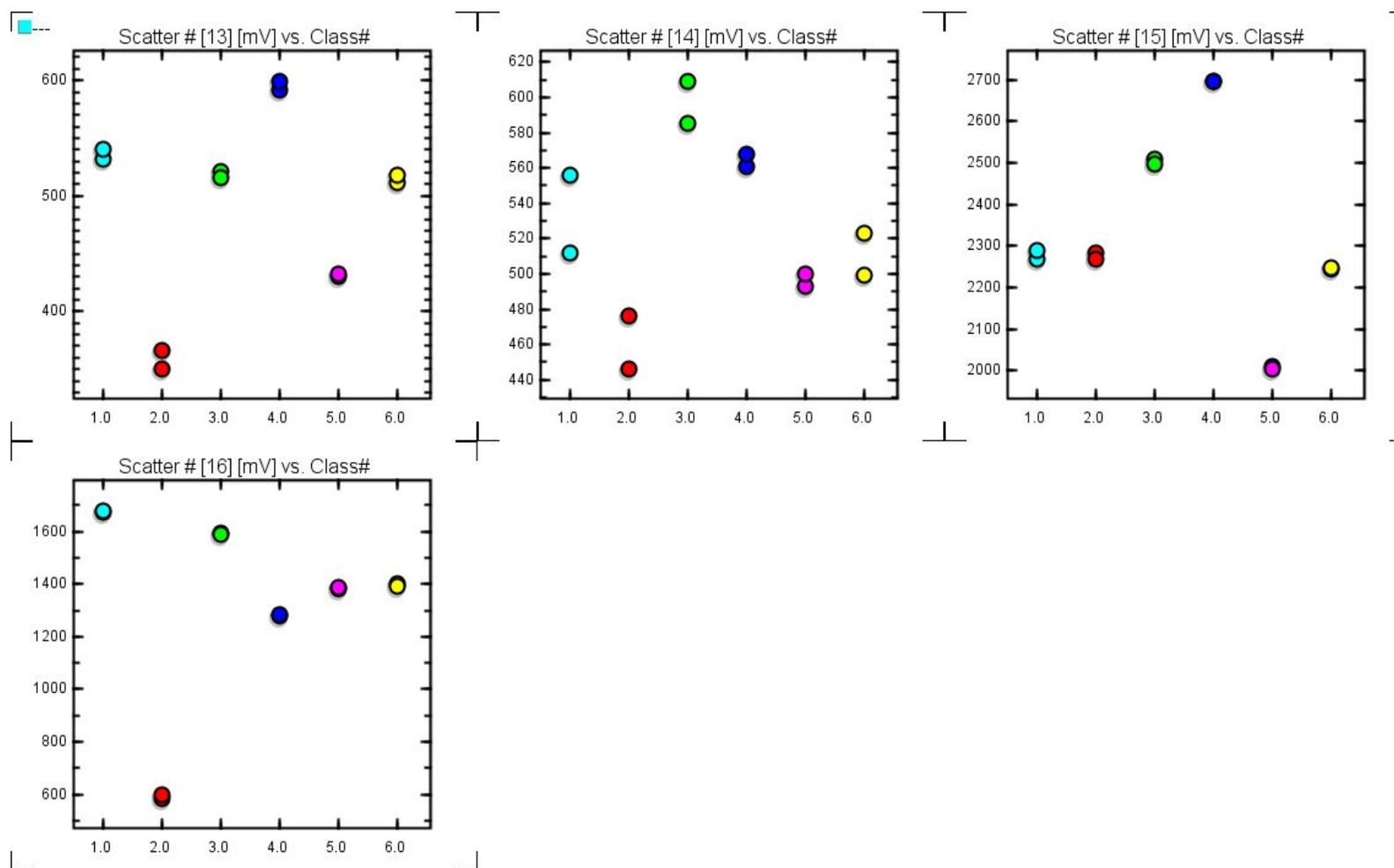
- 样本,分类,“显示样本数量”
- 每类样本两次重复检测
- y-轴表示信号强度 (组分浓度)

6种黄酒样本二维谱图上选择的7-12号（16）信号峰强度分布图



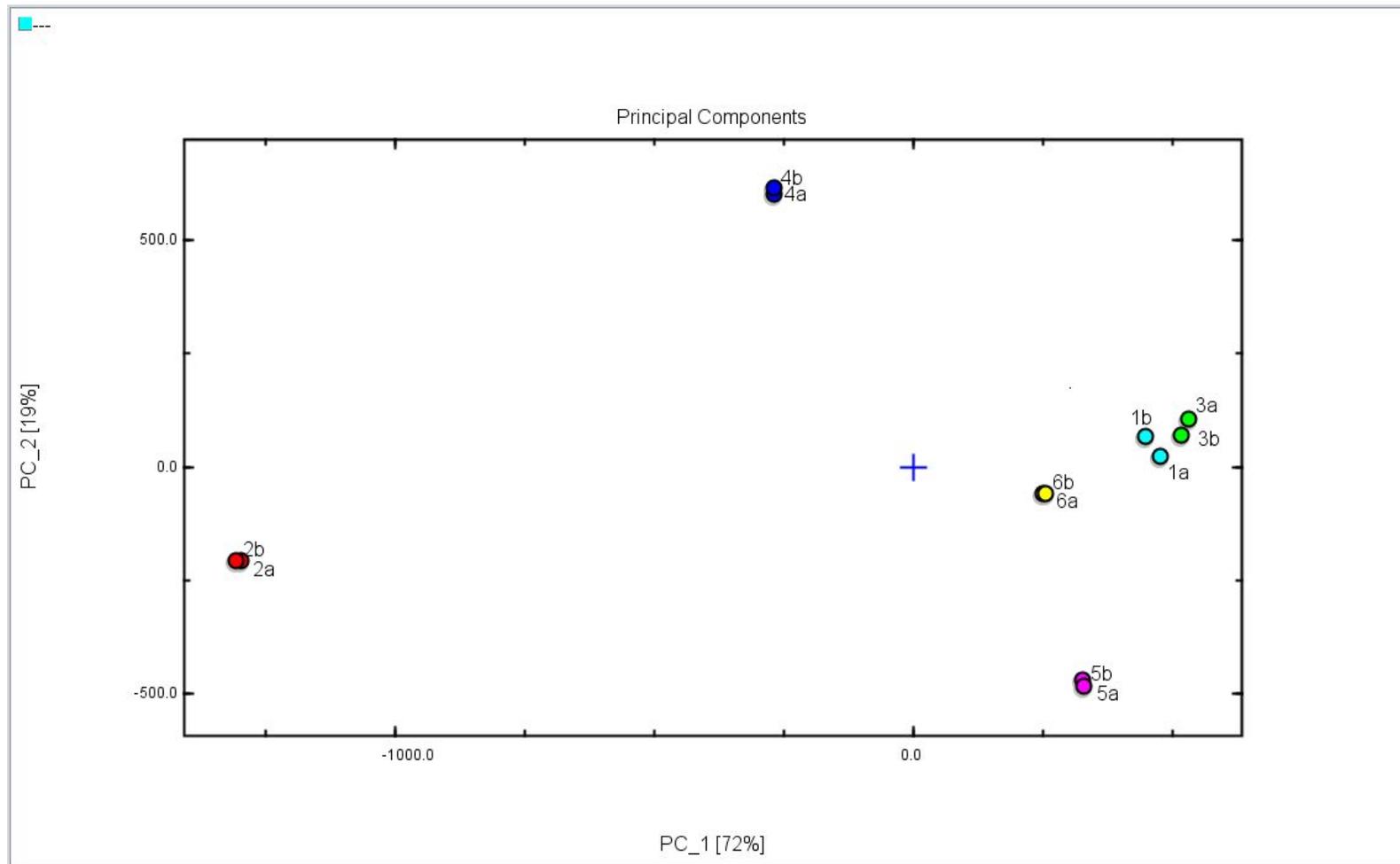
- 样本,分类,“表示样本数量”
- 每类样本两次重复检测
- y-轴表示信号强度 (组分浓度)

6种黄酒样本二维谱图上选择的13-16号（16）信号峰强度分布图



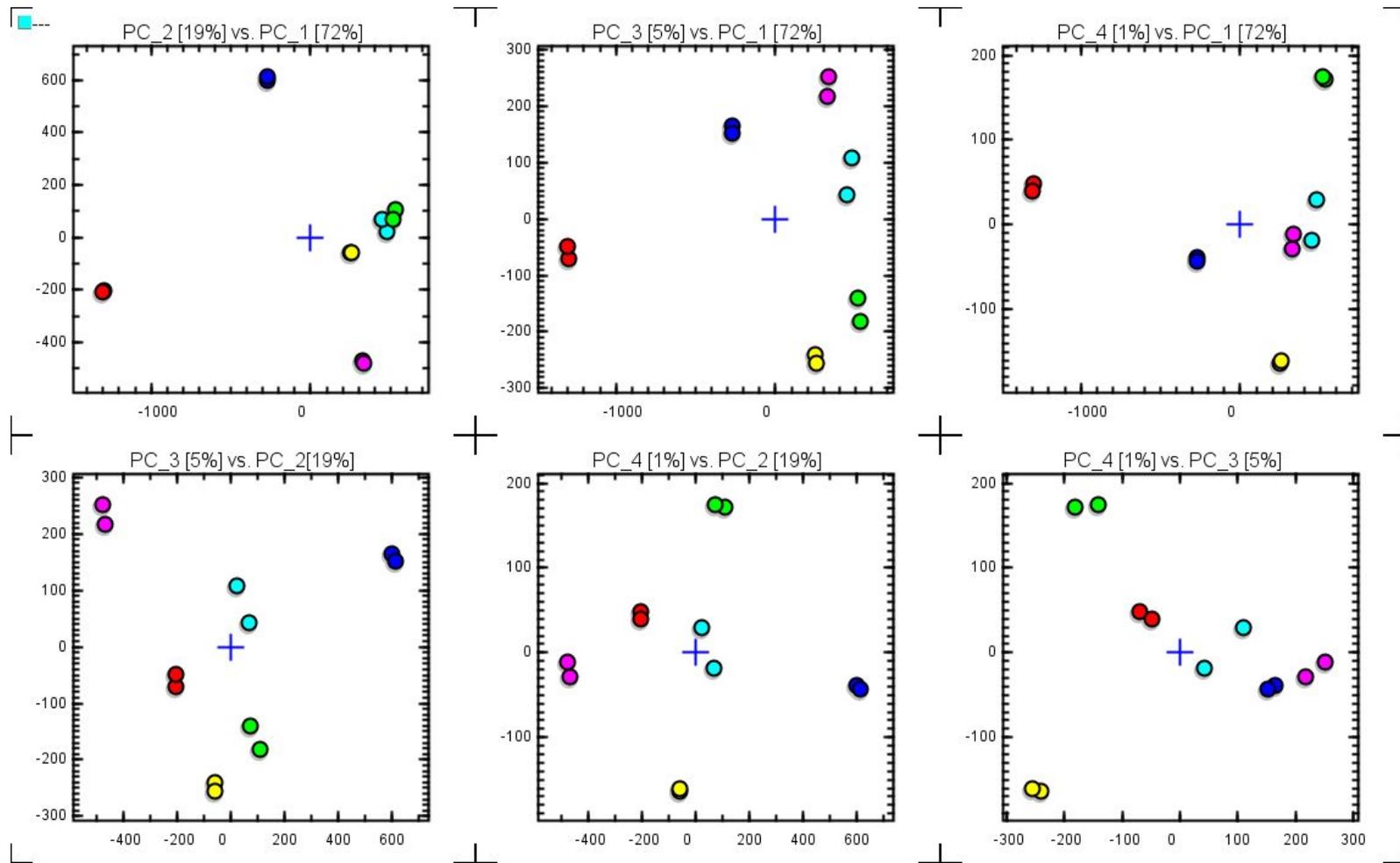
- 样品, **class**, “表示样品数量”
- 每类样本两次重复检测
- **y**-轴表示信号强度（组分浓度）

对选择的信号峰强度进行PCA主元分析



- 样本2与其他样本表现出很大差异

对选择的信号峰强度进行PCA主元分析



-根据 (PCA分析图PC_3 vs PC_1) 对所有黄酒类型可进行清楚的分类
- 样本与颜色 (#1 碧蓝色, #2 红色, #3 绿色, #4 蓝色, #5 品红, #6 黄色)



总结/结果

黄酒分析结果

采用 FlavourSpec® 风味仪对黄酒样本的挥发性有机组分进行分析，分析过程简单，分析结果表现出很高的重现性。

- 无需对酒样进行任何样本预处理或者条件化，直接进行检测分析。
- 样本中单种挥发性组分主要的差异表现在浓度的差别。与其他组分相比较，只有样本#2缺失该种挥发性组分，表现很大不同。
- 通过选择的VOCs的信号峰强度可以对样本进行鉴定和分类。

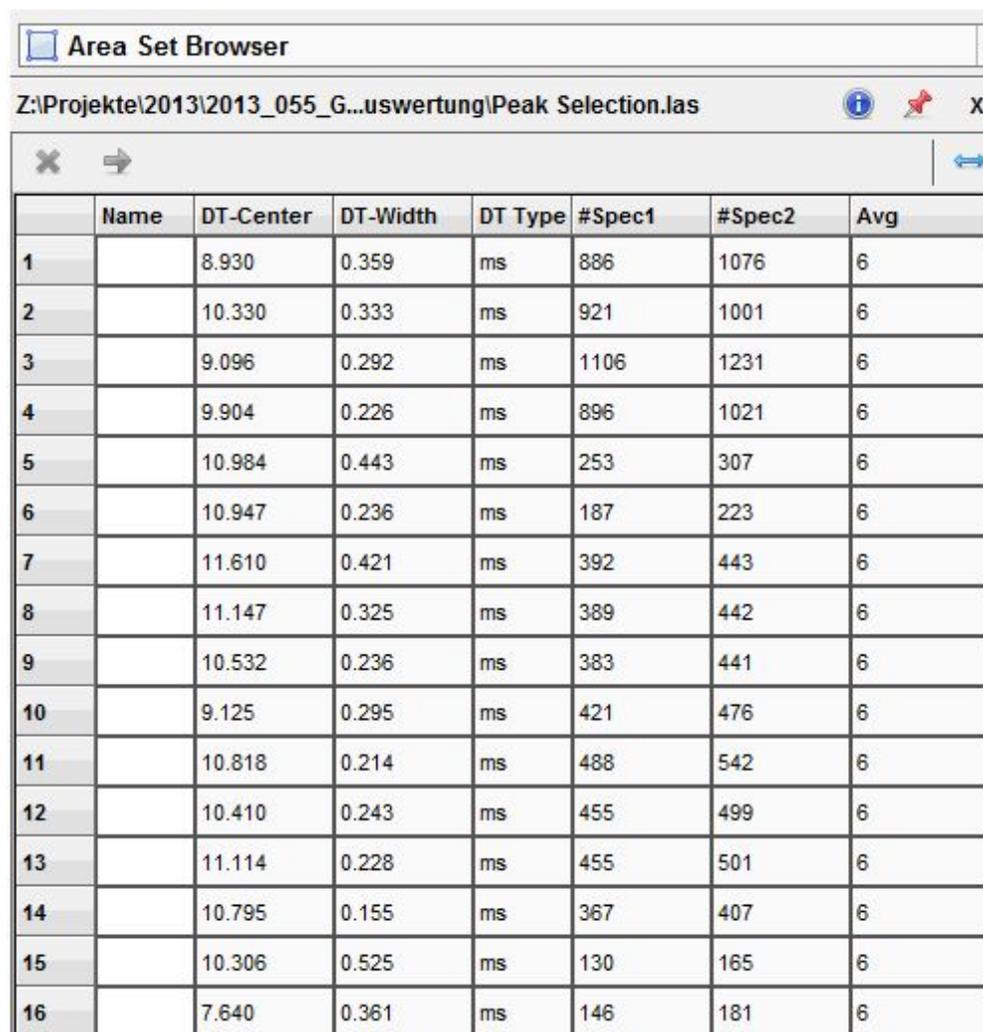
13.08.2013
Dr. Daniel Sanders
Bolan Cao-Lau

附件:

- G.A.S. 选择的信号峰面积设置



附: 选择信号面积的面积设置



The screenshot shows a software window titled "Area Set Browser" with a file path "Z:\Projekte\2013\2013_055_G...uswertung\Peak Selection.las". The window contains a table with 8 columns: Name, DT-Center, DT-Width, DT Type, #Spec1, #Spec2, and Avg. The table lists 16 rows of data, each representing a peak selection. The "Name" column is empty for all rows. The "DT Type" column consistently shows "ms". The "Avg" column consistently shows "6".

	Name	DT-Center	DT-Width	DT Type	#Spec1	#Spec2	Avg
1		8.930	0.359	ms	886	1076	6
2		10.330	0.333	ms	921	1001	6
3		9.096	0.292	ms	1106	1231	6
4		9.904	0.226	ms	896	1021	6
5		10.984	0.443	ms	253	307	6
6		10.947	0.236	ms	187	223	6
7		11.610	0.421	ms	392	443	6
8		11.147	0.325	ms	389	442	6
9		10.532	0.236	ms	383	441	6
10		9.125	0.295	ms	421	476	6
11		10.818	0.214	ms	488	542	6
12		10.410	0.243	ms	455	499	6
13		11.114	0.228	ms	455	501	6
14		10.795	0.155	ms	367	407	6
15		10.306	0.525	ms	130	165	6
16		7.640	0.361	ms	146	181	6

