

# 在未进行样品前处理的情况下使用线性保留指数分析复杂基质中的香精与香料

## 作者

Eleazar Rojas Santiago  
安捷伦科技有限公司

## 摘要

本应用简报介绍了一种分析香精与香料化合物的方法。该方法采用由 Agilent Intuvo 9000 气相色谱和 Agilent 5977B GC/MSD 组成的气质联用系统 (GC/MS)，在恒流模式下使用反吹和热分离进样杆进行操作。在未进行样品前处理的情况下分析复杂基质（例如肥皂、香味蜡烛、牙膏、润肤露和织物柔软剂）中的香精与香料化合物。使用热分离进样杆将样品引入 GC/MSD 系统中。使用解卷积质谱图并结合线性保留指数结果进行鉴定。此外，还创建了一个超链接，将化合物名称与香精香料网站连接，以获取感官和化妆品信息。

前言

安捷伦热分离进样杆 (TSP) 是食品检测、法医学和环境应用中对各种较脏的液体和固体样品进行快速 GC/MS 分析的理想选择。热分离进样杆的优势包括：

- 几乎无需样品前处理
- 与传统的直接进样杆相比，具有更高的灵活性和更低的风险
- 与传统的直接进样杆相比，降低了污染风险，提高了仪器性能
- 通过调整分流比来控制样品传输，消除了过载或污染检测器的可能性
- 通过对进样口和气相色谱柱进行程序升温，提高了鉴定多组分样品的能力，而传统的直接进样杆则无法实现这些功能
- 您可以在 GC/MS 系统中通过以下两种方式使用 TSP：使用较长的分析柱分离复杂样品，或使用较短的去活毛细管柱将纯样品传输至质谱检测器中

多年来，GC/MS 一直用于分析香精与香料化合物<sup>[1]</sup>。GC/MS 可能是最强大的技术，并且可以使用扩展质谱库，但是无法实现全面鉴定。在香精与香料的质量控制中，仍然常将采用保留指数 (RI) 的 GC/MS 用作 GC/MS 的互补技术。多个谱库提供了许多香精与香料化合物的 RI<sup>[2-4]</sup>。与绝对保留时间相比，RI 对操作参数的依赖性较低，但它们仍然在很大程度上取决于色谱柱类型（固定相和供应商）和升

温程序，并在较小程度上取决于载气流速。因此，有时很难在不同的实验室中重现已发表的 RI。香精与香料行业内的大多数公司均使用基于历来色谱柱和条件选择的内部方法。

Agilent MassHunter 未知物分析软件采用解卷积过程，有助于鉴定化合物，即使这些化合物隐藏在共洗脱的基质化合物中，也同样可以被识别出来。解卷积过程自动完成，仅需约 1-2 分钟即可获得总离子流色谱图 (TIC)。该过程不仅使分析人员能够快速获得可靠且可重现的结果，而且还可以最大程度减少假阳性和假阴性结果<sup>[5]</sup>。

由于许多保留数据已作为 RI 提供，因此还评估了这些数据是否能够转化为与锁定保留时间匹配的绝对保留时间。结果表明，现有保留指数谱库中的 RI 可作为与实验数据相匹配的绝对保留时间进行重新计算。在本研究中，使用了两个包含 RI 的谱库：NIST 2017，以及安捷伦香精与香料 RTL 谱库<sup>[6]</sup>。

Intuvo 9000 气相色谱仪的创新之处在于：

- 采用直接加热系统，其速度更快，功耗和占用的台面空间仅为传统空气浴柱温箱的一半
- 无密封垫圈的直接连接与即插即用的流路消除了复杂性和泄漏的主要来源
- 独特的一次性 Intuvo 芯片式保护柱无需色谱柱切割

实验部分

在配备多模式进样口 (MMI) 和柱后反吹的 Intuvo 9000 气相色谱系统上进行分析。将 MMI 设置为 60 °C，以在低温下引入 TSP，从而避免实际进样之前轻质组分的损失。引入 TSP 后，MMI 温度以 600 °C/min 的速率升至 280 °C。在 Agilent HP-5MS 色谱柱（30 m × 0.25 mm 内径，0.25 μm，β = 250，部件号 19091S-433-INT）上进行分离。使用压力约为 65 kPa (9.43 psi) 的氦气作为载气，在恒流模式下操作。表 1 汇总了分析条件。

表 1. GC/MS 分析条件

| 参数      | 描述                                                              |
|---------|-----------------------------------------------------------------|
| 色谱柱     | HP-5MS, 30 m × 0.25 mm 内径, 0.25 μm (部件号 19091S-433-INT)         |
| 进样      | MMI, 分流比 100:1, 40 °C 保持 0.2 分钟, 然后以 900 °C/min 的速率升至 300 °C    |
| 载气      | 氦气 (13.4 psi), 恒流                                               |
| RTL     | 将流速设置为 1.46 mL/min, 使正十六烷的保留时间达到 32.000 分钟                      |
| 柱温箱升温程序 | 以 3 °C/min 的速率从 60 °C 升至 240 °C (分析时间为 60 分钟)                   |
| 芯片式保护柱  | Intuvo, 多模式进样口                                                  |
| 升温程序    | 炉温跟踪                                                            |
| 检测      | 扫描模式下, MSD XTR 6 mm (40–400 amu)<br>溶剂延迟: 0 分钟<br>传输线温度: 300 °C |

在表 2 所列的条件下进样分析 C<sub>6</sub>–C<sub>44</sub> 的烷烃混合物以生成校准保留时间 (CRT) 文件，利用 MassHunter 分析文件并计算谱库保留时间。

借助 MassHunter 未知物分析软件，通过解卷积过程和来自两个谱库的 RI 进行数据处理。该软件使用 CRT 文件和来自不同谱库的 RI 计算谱库保留时间，并计算谱库保留时间与实际保留时间之间的差异。应用保留时间过滤器和最小匹配因子，可以消除错误鉴定。

### RI 的转化

线性保留指数 (LRI) 要求在目标分析物的洗脱范围内分析正烷烃混合物。为各种正烷烃分配的 LRI 值为其碳原子数乘以 100 所得数值。例如，为辛烷 (n-C<sub>8</sub>) 分配的 LRI 值为 800，为壬烷 (n-C<sub>9</sub>) 分配的 LRI 值为 900，为癸烷 (n-C<sub>10</sub>) 分配的 LRI 值为 1000 等。给定分析物的 LRI 根据其相对于分析物之前和之后立即洗脱的正烷烃的洗脱位置进行计算。

表 2. MassHunter 未知物分析软件方法参数

| 参数           | 描述                                         |
|--------------|--------------------------------------------|
| RT 窗口大小因子    | 25、50、100、200                              |
| 峰过滤器 SNR 阈值  | 5                                          |
| 匹配因子 (RT 罚分) | 启用<br>梯形<br>RT 范围: 60 秒<br>无罚分 RT 范围: 30 秒 |
| 最小匹配因子       | 75                                         |
| 谱库搜索类型       | 谱图搜索                                       |

对于程序升温气相色谱仪，LRI 通过以下公式进行计算：

$$I = 100 \times \left[ n + \frac{t_{r(\text{未知物})} - t_{r(n)}}{t_{r(N)} - t_{r(n)}} \right]$$

- 式中：
- I = 线性保留指数
  - n = 在分析物之前立即洗脱的正烷烃中的碳原子数量
  - N = 在分析物之后立即洗脱的正烷烃中的碳原子数量
  - t<sub>r</sub> = 保留时间

根据保留指数，使用作为参比化合物的正烷烃的保留时间计算绝对保留时间。

这些绝对保留时间并非用于计算保留指数的原始保留时间，而是计算值。这意味着如果色谱柱尺寸和升温程序相同，则可以使用正烷烃的锁定保留时间通过现有数据库中存在的 RI 来计算保留时间<sup>[7]</sup>。

本研究在不经样品前处理的情况下分析了多个样品。将仅几毫克的样品引入微量样品瓶中（样品瓶体积为 40 μL）。选择这些样品是由于它们的感官特性，并且其基质复杂，无法使用注射器直接将其进样至气相色谱进样口中。

### 结果与讨论

图 1 和图 2 显示了所鉴定化合物的色谱图以及牙膏、织物柔软剂、香味蜡烛和奶油甜酒样品的 TIC。图 3 显示了 MassHunter 未知物分析软件的谱库搜索结果。另外，我们可以使用来自网络的信息确定所鉴定化合物是否与香精和香料行业有关（参见图 4）。如果显示消息 *Sorry, your search: "Docosyl octyl ether" returned zero results. (对不起，您搜索的“二十二烷基辛基醚”无结果返回。)*，则表明该化合物与香精或香料成分无关。

- |                                            |                                         |                  |
|--------------------------------------------|-----------------------------------------|------------------|
| 1,2. 氢异氰酸酯                                 | 28. 十八烷基甲氧基乙酸酯                          | 54. 月桂醇          |
| 3. 3,3a,4,5,6,6a-六氢-3a,4,4-三甲基-3,5-亚甲基环戊吡唑 | 29. 1-二十一烷基甲酸酯                          | 55. 十五烷          |
| 4. (对羟基苯基)-膦酸                              | 30. 1-二十六烯                              | 56. 2-己基-1-癸烷    |
| 5. 桉树脑                                     | 31. 二十烷基丙-1-烯-2-基碳酸酯                    | 57. 1-十六醇        |
| 6. $\gamma$ -松油烯                           | 32. 正二十烷                                | 58. 正十六烷         |
| 7. 芳樟醇                                     | 33. 二叔十二烷基二硫化物                          | 59. 十二烷基庚基醚      |
| 8. 薄荷酮                                     | 34. 3,5,5-三甲基己基乙基磷酰氧乙酸酯                 | 60. 异丁基十六烷基醚     |
| 9. 1-异丙基-4,5-二甲基-环戊烯                       | 35. 二十二烷基辛基醚                            | 61. 10-二十一烯(顺,反) |
| 10. 1-癸烯                                   | 36. 2-噻戊烷,S,S-二氧化物                      | 62. 烯丙基十三烷基草酸酯   |
| 11. 正癸醇                                    | 37. [2,3-二氢-4-羟基-2-(2-羟基异丙基)苯并咪唑-7-基]色酮 | 63. 十二烷基壬醚       |
| 12. 茴香脑                                    | 38. 正二十四烷                               | 64. 十五烷基三氯乙酸酯    |
| 13. 丁香酚                                    | 39. 丁基三十烷基醚                             | 65. 1-二十三烯       |
| 14. (Z)-7-十四烯                              | 40. 二乙基(癸氧基)-硼烷                         | 66. 壬基十四烷基醚      |
| 15. 1-十一烷醇乙酸酯                              | 41. 氨基甲磺酸                               | 67. 二十二醇         |
| 16. 氢异氰酸酯                                  | 42. 2-甲基丁酸乙酯                            | 68. 二十烷基乙烯基碳酸酯   |
| 17. 1-氯-十四烷                                | 43. 苯甲醛                                 | 69. 三氯二十二烷基硅烷    |
| 18. 月桂醇                                    | 44. 3,7-二甲基-1-辛醇                        | 70. 正二十四醇-1      |
| 19. 十五烷                                    | 45. 4-氯-辛烷                              | 71. 正二十烷         |
| 20. 正十五烷醇                                  | 46. 正癸醇                                 | 72. 环丁基十八烷基草酸酯   |
| 21. 1-十九烯                                  | 47. 辛基环丙烷                               | 73. 二十二烷基戊醚      |
| 22. 乙酸月桂酯                                  | 48. 1-十二烯                               | 74. 异丁基二十四烷基醚    |
| 23. 1-十八醇                                  | 49. $\gamma$ -戊基丁内酯                     | 75. 二十烷基辛基醚      |
| 24. 亚硫酸丁基十一烷基酯                             | 50. 1-十四烯                               | 76. 二十八烷基三氯乙酸酯   |
| 25. 1-二十二烯                                 | 51. 乙酸癸酯                                | 77. 二十六烷基戊醚      |
| 26. 十六烷基丙-1-烯-2-基碳酸酯                       | 52. 1H-苯并咪唑-2-甲酯                        |                  |
| 27. 正十八烷                                   | 53. 2',4'-二羟基苯丙酮                        |                  |

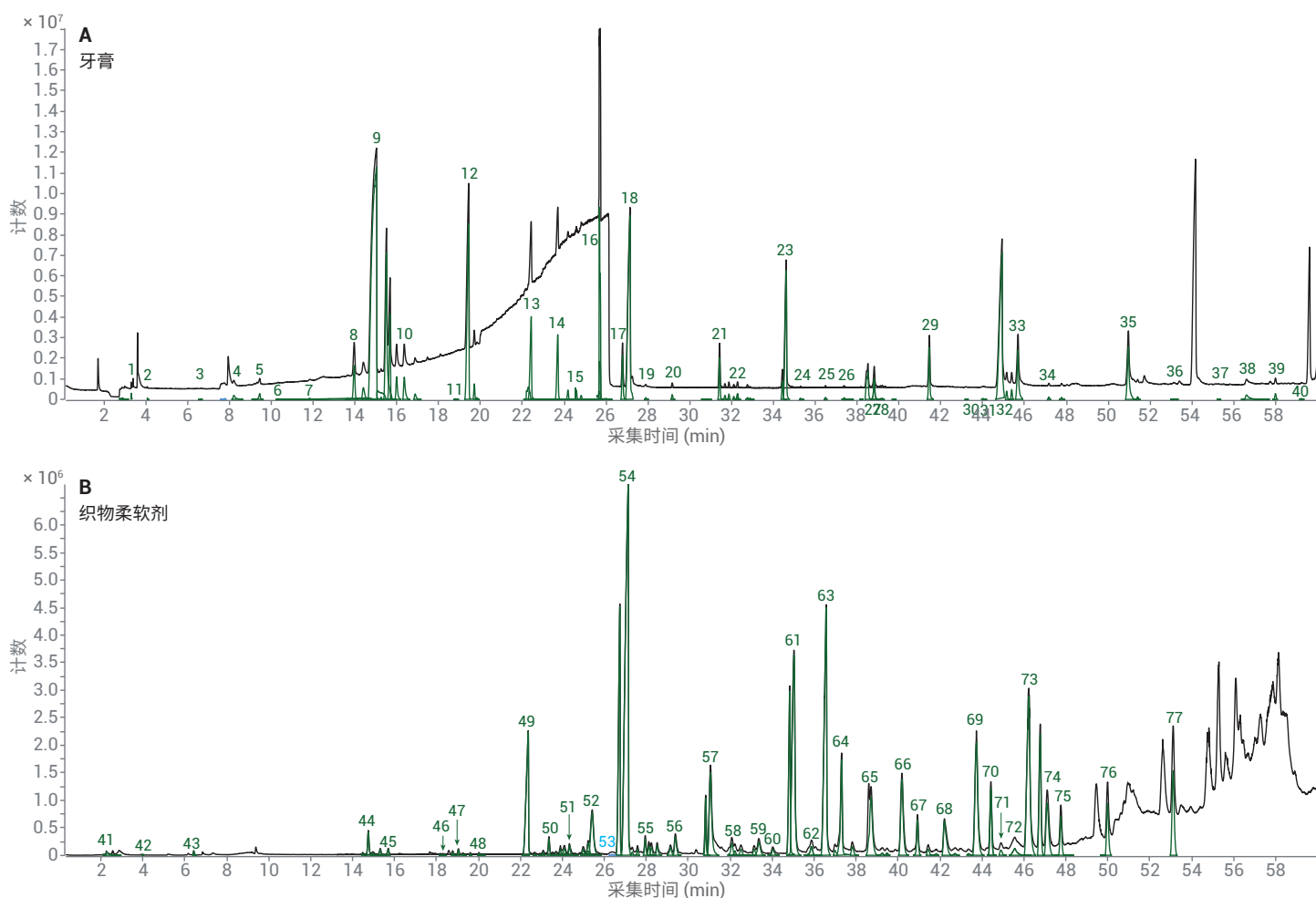


图 1. 牙膏和织物柔软剂色谱图，示出所鉴定化合物和 TIC

1. 一氧化二氮
2. 苯甲酰异硫氨酸酯
3. 2,4-二甲基-2,3-庚二烯-5-炔
4. 1-丁烯基环己烷
5. 对甲酚
6. 甲基-1-硅苯并环丁烯
7. 甲基-1-硅苯并环丁烯
8. 香茅醇
9. 薄荷酮
10. L-薄荷醇
11. L-薄荷醇
12. α-松油醇
13. 1-甲基-1-(2-甲基-2-丙烯基)-环戊烷
14. d-胡椒酮
15. 2-甲基-苯并呋喃
16. 乙酸薄荷酯;d,L-甲基-2-(甲乙基)环己基乙酸酯
17. 7,7-二甲基-2,4-辛二烯
18. 十三烷
19. 丁香酚
20. 正十四烷
21. β-丁香烯
22. 1H-苯并咪唑-2-甲醚
23. 3,4-二羟基苯丙酮
24. 1-羟基-7-羟甲基苄满环亚硫酸酯
25. 2-甲基-3-[4-叔丁基]苯丙酸
26. 水杨酸异戊酯
27. 正十六烷
28. 磷柳酸
29. 二十一烷
30. 1-苯基-2-(4-甲基苯基)-二氮烯-1-氧化物
31. 苯甲酸苄酯
32. 正十八烷
33. 2-甲酰基-4,6-二氯苯基-2-甲基苯甲酸酯
34. 二十五烷
35. 正二十烷
36. 亚硫酸十八烷基戊酯
37. 2-乙基己基十六烷基亚硫酸酯
38. 二乙基(癸氧基)-硼烷
39. 三十一烷
40. 三十二烷
41. 11-癸基-二十四烷
42. 三十五烷
43. 三(三甲基甲硅烷基)亚砷酸酯
44. 溴化氰
45. 1,2-丙二烯-1,3-二酮
46. 2,3,5-三甲基吡嗪
47. 3-氯-2-丙炔腈
48. 3,5-二甲基-1-己烯
49. 壬醛
50. 3-乙基-1-吡咯啉
51. 3,7-二甲基-1-辛醇
52. 1-癸烯
53. 正癸醇
54. 2-甲基-3-苯基-2-丙烯醛
55. γ-戊基丁内酯
56. 乙酸癸酯
57. 异丙醚香草醛
58. 乙酸肉桂酯
59. 1-十四醇
60. 2-(十二烷氧基)-乙醇
61. 正十五烷醇
62. 1-十六醇
63. 十五酸
64. 1-异氰酸酯-十八烷
65. 1,16-二氯-十六烷
66. 10-二十一烯(顺,反)
67. 十五烷基丙-1-烯-2-基碳酸酯
68. 十二烷基壬醚
69. 十二烷基壬醚
70. 1-二十醇
71. 2-(十八烷氧基)-乙醇
72. 十八烷基甲氧基乙酸酯
73. 1-异氰酸酯-十八烷
74. 3-二苯并[b,e]噻吩-11(6H)-亚基-N,N-二甲基-1-丙胺, S-氧化物
75. 十六烷基壬基醚
76. 1-二十六烯
77. 二十二烷基戊醚
78. 3-二苯并[b,e]噻吩-11(6H)-亚基-N,N-二甲基-1-丙胺, S-氧化物
79. 癸基十六烷基碳酸酯
80. 二十二烷基辛基醚
81. 5H-四唑-5-胺
82. 3-二苯并[b,e]噻吩-11(6H)-亚基-N,N-二甲基-1-丙胺, S-氧化物
83. 氯三氯甲烷
84. 二乙基(癸氧基)-硼烷

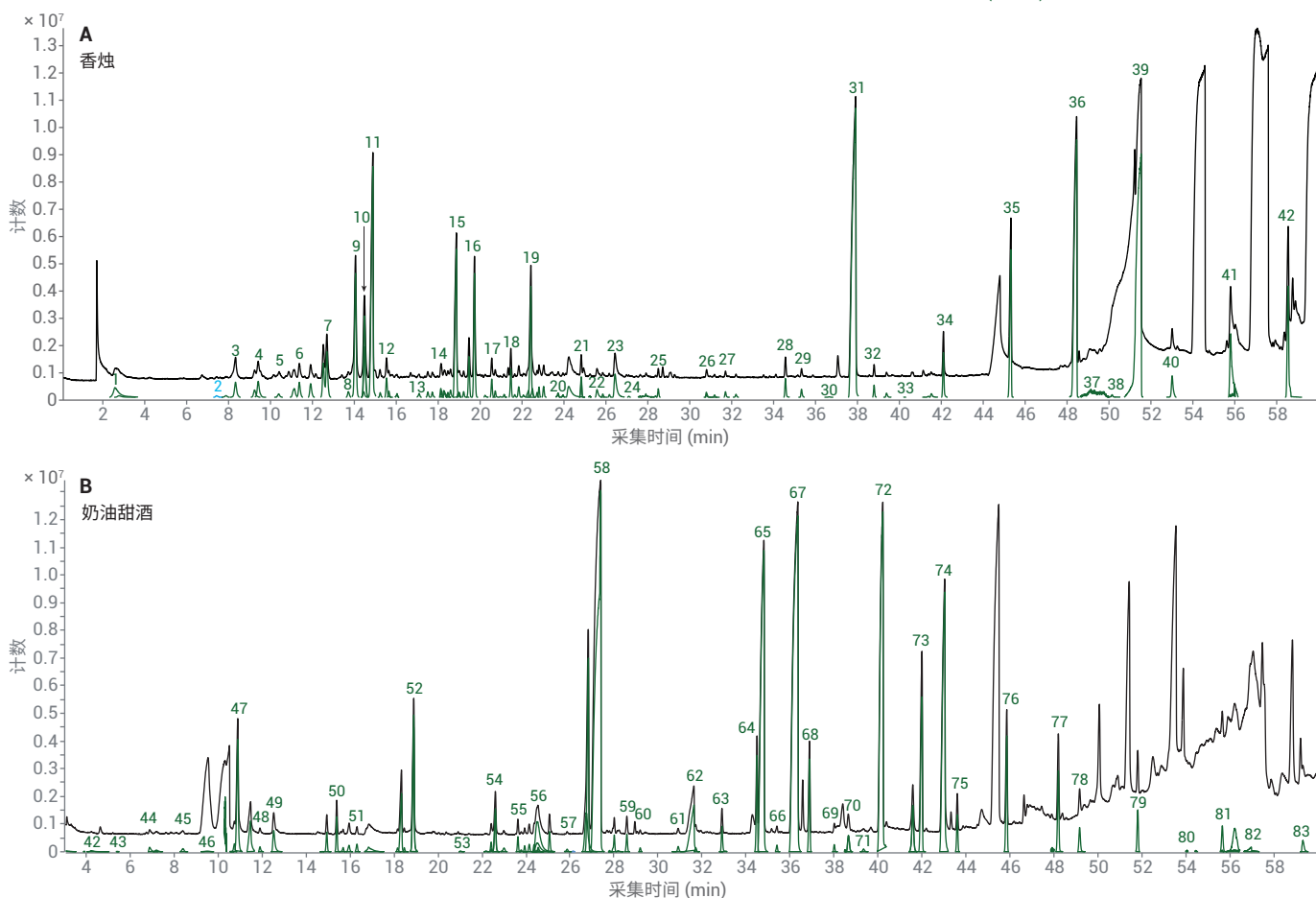


图2. 香味蜡烛和奶油甜酒色谱图，示出所鉴定化合物和TIC

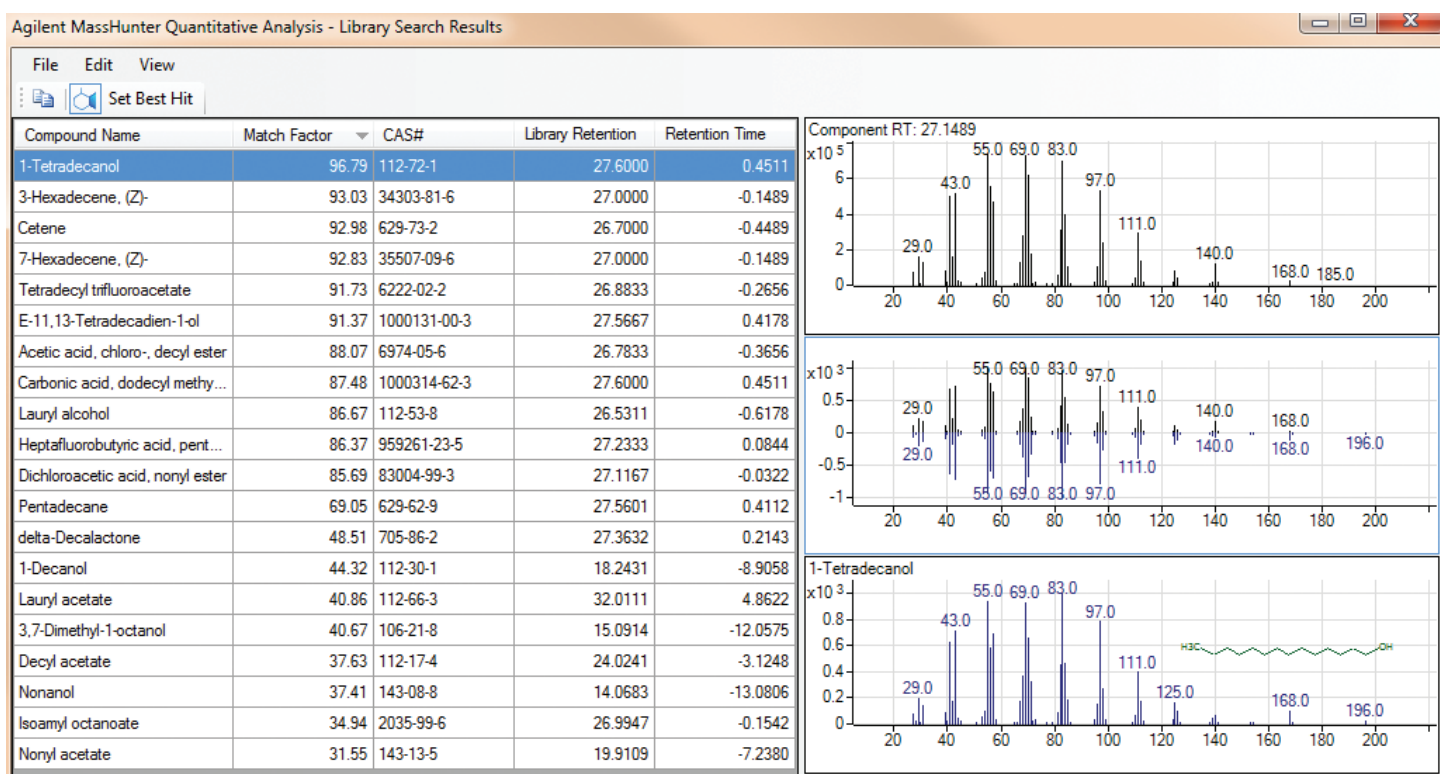


图 3. MassHunter 未知物分析软件能够使用匹配因子和保留时间来评估替代物。可以根据匹配因子或组分 RT 和谱库 RT 之间的保留时间差异对这些信息进行排序

|                                                      |                                                                                                                                                                                                                                    |
|------------------------------------------------------|------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------|
| <b>eugenol</b><br>4-allyl-1-hydroxy-2-methoxybenzene | <b>Cosmetic Information:</b>                                                                                                                                                                                                       |
|                                                      | CosIng: cosmetic data<br>denaturants<br>Cosmetic Uses: perfuming agents<br>tonic                                                                                                                                                   |
| <b>stearyl alcohol</b><br>1-hydroxyoctadecane        | <b>Cosmetic Information:</b>                                                                                                                                                                                                       |
|                                                      | CosIng: cosmetic data<br>emollients<br>emulsifying agents<br>emulsion stabilisers<br>foam boosting agents<br>Cosmetic Uses: masking agents<br>opacifying agents<br>refatting agents<br>surfactants<br>viscosity controlling agents |

图 4. 利用从网络获得的有关丁香酚和硬脂醇的信息以及超链接创建 MassHunter 未知物分析

| Components                                      |                              |              |                  |              |          |            |              |          |            |  |
|-------------------------------------------------|------------------------------|--------------|------------------|--------------|----------|------------|--------------|----------|------------|--|
| Compound Name                                   | CAS#                         | Match Factor | Library File     | Component RI | Delta RI | Library RI | Component RT | Delta RT | Library RT |  |
| <a href="#">Linalol</a>                         | <a href="#">78-70-6</a>      | 83.9         | flavor_RI_NoR... | 1101         | 0        | 1101       | 11.8274      | -0.0088  | 11.8186    |  |
| <a href="#">Isopulegol</a>                      | <a href="#">59905-53-2</a>   | 84.4         | flavor_RI_NoR... | 1146         | -2       | 1144       | 13.6518      | -0.0676  | 13.5842    |  |
| <a href="#">l-Menthone</a>                      | <a href="#">14073-97-3</a>   | 98.5         | NIST17.L         | 1154         | -6       | 1148       | 13.9649      | -0.8293  | 13.1355    |  |
| <a href="#">Menthone</a>                        | <a href="#">14073-97-3</a>   | 85.8         | flavor_RI_NoR... | 1165         | -1       | 1164       | 14.4009      | -0.0446  | 14.3563    |  |
| <a href="#">L-Menthol</a>                       | <a href="#">2616-51-5</a>    | 91.7         | flavor_RI_NoR... | 1186         | -12      | 1173       | 15.2483      | -0.5016  | 14.7467    |  |
| <a href="#">Cyclopentane, 1-butyl-2-propyl-</a> | <a href="#">62199-50-2</a>   | 94.8         | NIST17.L         | 1192         | 27       | 1219       | 15.5049      | 0.5188   | 16.0237    |  |
| <a href="#">Methylsalicylate</a>                | <a href="#">119-36-8</a>     | 98.0         | flavor_RI_NoR... | 1197         | -3       | 1194       | 15.6796      | -0.1025  | 15.5771    |  |
| <a href="#">4-Undecene, 5-methyl-, (Z)-</a>     | <a href="#">74630-69-6</a>   | 92.7         | NIST17.L         | 1204         | -5       | 1199       | 15.9913      | -0.7845  | 15.2068    |  |
| <a href="#">Cyclopentane, 1-butyl-2-propyl-</a> | <a href="#">62199-50-2</a>   | 91.4         | NIST17.L         | 1213         | 6        | 1219       | 16.3576      | -0.3339  | 16.0237    |  |
| <a href="#">Cyclopentane, 1-hexyl-3-methyl-</a> | <a href="#">61142-68-5</a>   | 92.9         | NIST17.L         | 1226         | -7       | 1219       | 16.8742      | -0.8505  | 16.0237    |  |
| <a href="#">Spiro[5.5]undecane</a>              | <a href="#">180-43-8</a>     | 80.3         | NIST17.L         | 1240         | -6       | 1234       | 17.4660      | -0.8190  | 16.6470    |  |
| <a href="#">l-Decanol</a>                       | <a href="#">112-30-1</a>     | 86.4         | flavor_RI_NoR... | 1272         | 0        | 1272       | 18.8128      | -0.0031  | 18.8097    |  |
| <a href="#">trans-Anethole</a>                  | <a href="#">4180-23-8</a>    | 99.1         | flavor_RI_NoR... | 1288         | -2       | 1285       | 19.4354      | -0.0962  | 19.3392    |  |
| <a href="#">(-)-Neomenthylacetate</a>           | <a href="#">1000152-81-2</a> | 93.2         | NIST17.L         | 1294         | 10       | 1304       | 19.7039      | -0.1485  | 19.5553    |  |

图 5. 牙膏样品的分析结果。一些组分通过安捷伦谱库鉴定，其他组分通过 NIST17 鉴定。在两种情况下，系统都使用谱库中的保留指数来计算保留时间。另外，还有两个超链接：CAS 号的超链接，可转到 NIST 网页以获取化学信息；以及化合物名称的超链接，可转到 Good Scents 公司网页以获取有关感官与化妆品特性、供应商以及安全数据表等的信息

| Components                     |                          |              |                  |              |          |            |              |          |            |  |
|--------------------------------|--------------------------|--------------|------------------|--------------|----------|------------|--------------|----------|------------|--|
| Compound Name                  | CAS#                     | Match Factor | Library File     | Component RI | Delta RI | Library RI | Component RT | Delta RT | Library RT |  |
| <a href="#">Lauryl alcohol</a> | <a href="#">112-53-8</a> | 98.7         | flavor_RI_NoR... | 1477         | -3       | 1474       | 27.1406      | -0.1049  | 27.0357    |  |
| <a href="#">Lauryl alcohol</a> | <a href="#">112-53-8</a> | 94.9         | flavor_RI_NoR... | 1575         | -101     | 1474       | 31.0604      | -4.0247  | 27.0357    |  |
| <a href="#">Lauryl alcohol</a> | <a href="#">112-53-8</a> | 91.7         | flavor_RI_NoR... | 1429         | 45       | 1474       | 25.2327      | 1.8030   | 27.0357    |  |
| <a href="#">Lauryl alcohol</a> | <a href="#">112-53-8</a> | 84.7         | flavor_RI_NoR... | 1752         | -278     | 1474       | 37.3101      | -10.2744 | 27.0357    |  |
| <a href="#">Lauryl alcohol</a> | <a href="#">112-53-8</a> | 90.0         | flavor_RI_NoR... | 1533         | -59      | 1474       | 29.3837      | -2.3480  | 27.0357    |  |
| <a href="#">Lauryl alcohol</a> | <a href="#">112-53-8</a> | 92.3         | flavor_RI_NoR... | 1488         | -14      | 1474       | 27.5848      | -0.5491  | 27.0357    |  |
| <a href="#">Lauryl alcohol</a> | <a href="#">112-53-8</a> | 95.4         | flavor_RI_NoR... | 1686         | -212     | 1474       | 35.0377      | -8.0020  | 27.0357    |  |
| <a href="#">Lauryl alcohol</a> | <a href="#">112-53-8</a> | 95.4         | flavor_RI_NoR... | 1383         | 92       | 1474       | 23.3611      | 3.6746   | 27.0357    |  |
| <a href="#">Lauryl alcohol</a> | <a href="#">112-53-8</a> | 90.6         | flavor_RI_NoR... | 1638         | -164     | 1474       | 33.3644      | -6.3287  | 27.0357    |  |
| <a href="#">Lauryl alcohol</a> | <a href="#">112-53-8</a> | 86.4         | flavor_RI_NoR... | 1528         | -53      | 1474       | 29.1545      | -2.1188  | 27.0357    |  |

图 6. 在该表中，RT 匹配罚分被禁用，导致月桂醇检测了 10 次，并且所有检测结果的匹配因子均超过 84。但是仅有一个结果同时具有较低的  $\Delta RT$  和最高的匹配因子。该功能使化合物鉴定更轻松。启用该功能后，在搜索结果中仅显示一种化合物



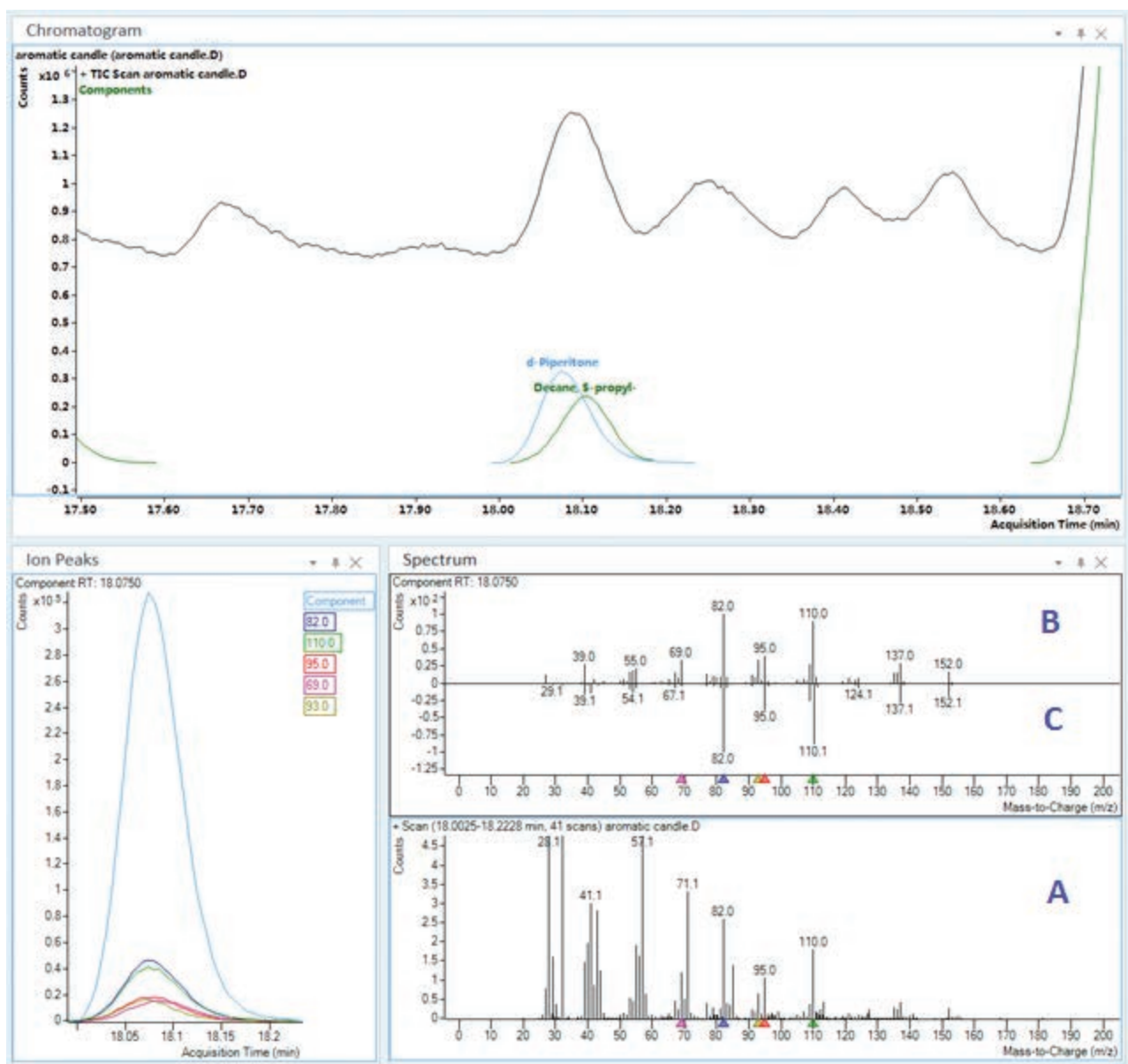


图 7. MassHunter 未知物分析软件使用解卷积算法分离两种共洗脱化合物。未经解卷积的谱图 (A)、经化合物解卷积的谱图 (B) 和谱库谱图 (C) 显示于同一窗口中, 使数据审查更轻松



结论

本研究开发出一种在未进行样品前处理的情况下分析复杂基质中香精与香料的方法。将少量样品沉积到微量样品瓶中，然后将其插入进样口。该方法可用于质量控制分析，并使用正十六烷作为锁定标准品进行保留时间锁定。根据现有方法对包含约 400 种化合物的保留指数数据库进行了修改。该数据库可用于根据锁定条件下的绝对保留时间来鉴定成分。锁定方法还保证色谱柱之间和仪器之间的保留时间稳定性为时间的函数。

最后，结果表明在特定操作条件下测得的香精化合物的 RI 可通过正烷烃的锁定保留时间转化为锁定保留时间。因此，可以将现有 RI 数据库转化为锁定保留时间数据库。

附录

图 8 显示了创建包含 LRI 值的解卷积 GC/MS 谱库以及在 MassHunter 未知物分析软件中处理样品数据文件的工作流程。完整流程可参见安捷伦科技公司产品说明 *Incorporating Retention Index Results in Deconvoluted GC/MS Library Search Data*（将保留指数结果纳入解卷积 GC/MS 谱库搜索数据中）（出版号 5991-8221EN）。

参考文献

1. Tabacchi, R.; Garnero, J. *Capillary Gas Chromatography in Essential Oil Analysis*; Sandra, P., Bicchi, C., Eds.; Huthig: Heidelberg, **1987**; 1–11

2. Jennings, W.; Shibamoto, T. *Qualitative Analysis of Flavor and Fragrance Volatiles by Glass Capillary Gas Chromatography*; Academic Press: New York, **1980**

3. Shibamoto, T. *Capillary Gas Chromatography in Essential Oil Analysis*; Sandra, P., Bicchi, C., Eds.; Huthig: Heidelberg, **1987**; 259–274

4. Adams, R. P. *Identification of Essential Oil Components by Gas Chromatography - Mass Spectroscopy*; Allured Publishing Corporation: IL, USA, **1995**

5. Ping, X.; Menge, C.-K.; Zslewski, M. 建立各种应用的安捷伦 GC/MSD 解卷积报告资料库, 安捷伦科技公司技术概述, 出版号 5989-2249CHCN, **2005**

6. David, F. et al. *Analysis of Essential Oil Compounds Using Retention Time Locked Methods and Retention Time Databases*（使用保留时间锁定方法和保留时间数据库分析精油化合物）, 安捷伦科技公司应用简报, 出版号 5988-6530EN, **2002**

7. Sandy, C.; Butler, I. *Incorporating Retention Index Results in Deconvoluted GC/MS Library Search Data*（将保留指数结果纳入解卷积 GC/MS 谱库搜索数据中）, 安捷伦科技公司产品说明, 出版号 5991-8221EN, **2017**

8. Giarrocco, V.; Quimby, B.; Klee, M. *Retention Time Locking: Concepts and Applications*（保留时间锁定：概念和应用）, 安捷伦科技公司应用简报, 出版号 5966-2469EN, **1997**

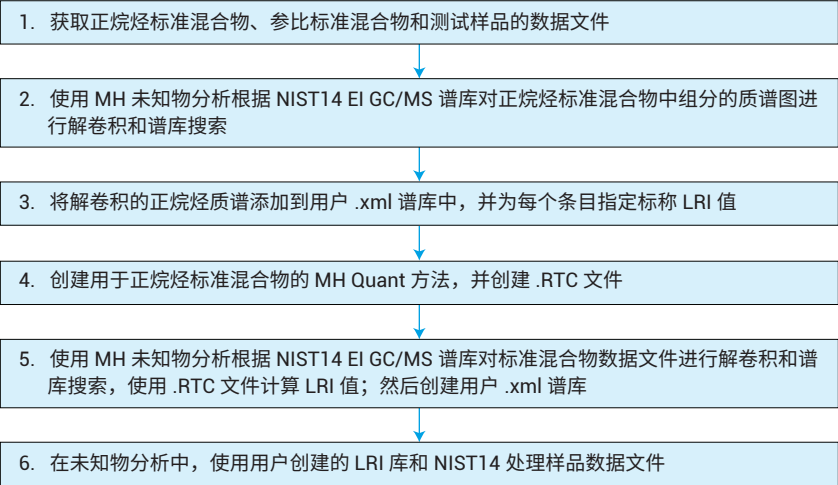


图 8. 用于创建包含 LRI 值的解卷积 GC/MS 谱库的工作流程

为提供有关复杂香精与香料混合物中的组分的定性信息，可以结合市售 GC/MS 谱库（例如 NIST17）来搜索用户谱库。采用保留时间锁定或线性 RI 可以减少假阳性结果，从而改善分析物鉴定的可信度。在 GC/MS 谱库中搜索时，质谱解卷机能够为相邻洗脱/重叠组分提供更高质量的质谱图。

如需获取有关选定化合物的更多信息，可以在 MassHunter 未知物分析软件中创建超链接。

1. 在以下路径中打开 *QuantAnalysis.exe.config* 文件：  
*ProgramFiles\Agilent\MassHunter\Workstation\Quant\bin\*，并将链接编辑为所需的 URL。默认情况下，本文件为只读文件，因此您需要禁用此功能
2. 打开文件，并找到以下行：  
<add key="Column.CASNumber.Action" value="URL:http://webbook.nist.gov/cgi/cbook.cgi?ID={0}"/>
3. 添加下一行，在 MassHunter 中为化合物名称创建新的超链接 <add key="Column.CompoundName.Action" value="URL:http://www.thegoodscentscompany.com/search3.php?qName={0}"/>

4. 保存文件
5. 启动 MassHunter 未知物分析软件。现在，在化合物名称字段中包含一个新的超链接，其与网络连接，可获取感官和化妆品信息、产品说明等（图 9 和图 10）

The screenshot shows the Agilent MassHunter Unknowns Analysis software interface. On the left, the 'Components' table lists various compounds. The 'Terpinolene' entry is highlighted with a red box, and a red arrow points from it to the web browser window on the right. The browser window displays the 'terpinolene, 586-62-9' page from thegoodscentscompany.com. The page includes a chemical structure, CAS Number (586-62-9), ECHA EINECS - REACH Pre-Reg (209-578-0), FDA UNII (N9830XSKSL), Nikkaji Web (J9.4388), Beilstein Number (1851203), MDL (MFCD00049191), CoE Number (2115), XlogP3-AA (2.80 (est)), Molecular Weight (136.23752000), Formula (C10 H16), NMR Predictor (Predict (works with chome or firefox)), and Category (Flavor and fragrance agents). The page also features a section for 'US / EU / FDA / JECFA / FEMA / FLAVIS / Scholar / Patent Information' with search links for Google Scholar, Google Books, and Google Scholar with specific keywords.

| Compound Name      | CAS#       | Hit RI |
|--------------------|------------|--------|
| Nitrous oxide      | 10024-97-2 |        |
| Hydrogen isoc...   | 75-13-8    |        |
| 1-Tetrazol-2-yl... | 51410-11-8 |        |
| 1H-Tetrazole...    | 16681-77-9 |        |
| Hydrogen isoc...   | 75-13-8    |        |
| Hydrogen isoc...   | 75-13-8    |        |
| 3,5-Methanoc...    | 87143-58-6 |        |
| Myrcene            | 123-35-3   | 998    |
| Phosphonic a...    | 33795-18-5 |        |
| p-Cymene           | 99-87-6    | 1041   |
| Eucalyptol         | 470-82-6   | 1049   |
| gamma-Terpi...     | 99-85-4    | 1074   |
| Isopropylcyclo...  | 872-56-0   |        |
| Terpinolene        | 586-62-9   | 1104   |
| Linalol            | 78-70-6    | 1116   |
| Citronellal        | 106-23-0   | 1161   |
| Menthone           | 14073-07-3 | 1168   |

图 9. 在 MassHunter 未知物分析软件中，将化合物名称连接到网页的超链接

[Home](#)
[EU/US](#)
[Properties](#)
[Organoleptics](#)
[Cosmetics](#)  
[Suppliers](#)
[Safety](#)
[Safety in use](#)
[Safety references](#)  
[References](#)
[Other](#)
[Blenders](#)
[Uses](#)
[Occurrence](#)  
[Synonyms](#)
[Articles](#)
[Notes](#)
[Search](#)

[Fragrance Demo Formulas](#)
[Flavor Demo Formulas](#)

[1-methyl-4-propan-2-ylidenecyclohexene \(Click\)](#)

CAS Number: 586-62-9



ECHA EINECS - REACH Pre-Reg: 209-578-0

FDA UNII: N9830X5KSL

Nikkaji Web: J9.438B

Beilstein Number: 1851203

MDL: MFCD00049191

CoE Number: 2115

XlogP3-AA: 2.80 (est)

Molecular Weight: 136.23752000

Formula: C10 H16

NMR Predictor: [Predict \(works with chrome or firefox\)](#)

Category: flavor and fragrance agents

#### FDA Regulation:

FDA PART 172 -- FOOD ADDITIVES PERMITTED FOR DIRECT ADDITION TO FOOD FOR HUMAN CONSUMPTION  
 Subpart F--Flavoring Agents and Related Substances  
 Sec. 172.515 Synthetic flavoring substances and adjuvants.

#### Physical Properties:

Appearance: colorless clear liquid (est)

Assay: 95.00 to 100.00 %

Food Chemicals Codex Listed: No

Specific Gravity: 0.88000 to 0.89000 @ 25.00 °C.

Pounds per Gallon - (est): 7.322 to 7.406

Refractive Index: 1.46000 to 1.46400 @ 20.00 °C.

Boiling Point: 183.00 to 185.00 °C. @ 760.00 mm Hg

Vapor Pressure: 1.126000 mm/Hg @ 25.00 °C. (est)

Vapor Density: 4.7 ( Air = 1 )

Flash Point: 148.00 °F. TCC ( 64.44 °C. )

logP (o/w): 4.470

Shelf Life: 24.00 month(s) or longer if stored properly.

Storage: store in cool, dry place in tightly sealed containers, protected from heat and light

#### Soluble in:

alcohol

water, 9.5 mg/L @ 23C (exp)

#### Stability:

alcoholic fine fragrance, fair

antiperspirant, good

deodorant stick

fabric softener, good

hard surface cleaner

liquid detergent, good

perborate powder detergent, poor

shampoo

soap, good

图 10. 来自相关网页 (<http://www.thegoodscentscompany.com>) 的化合物信息示例

查找当地的安捷伦客户中心：

[www.agilent.com/chem/contactus-cn](http://www.agilent.com/chem/contactus-cn)

免费专线：

800-820-3278, 400-820-3278 (手机用户)

联系我们：

[LSCA-China\\_800@agilent.com](mailto:LSCA-China_800@agilent.com)

在线询价：

[www.agilent.com/chem/erfq-cn](http://www.agilent.com/chem/erfq-cn)

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

本文中的信息、说明和指标如有变更，恕不另行通知。

© 安捷伦科技（中国）有限公司，2019  
2019 年 4 月 11 日，中国出版  
5994-0546ZHCN