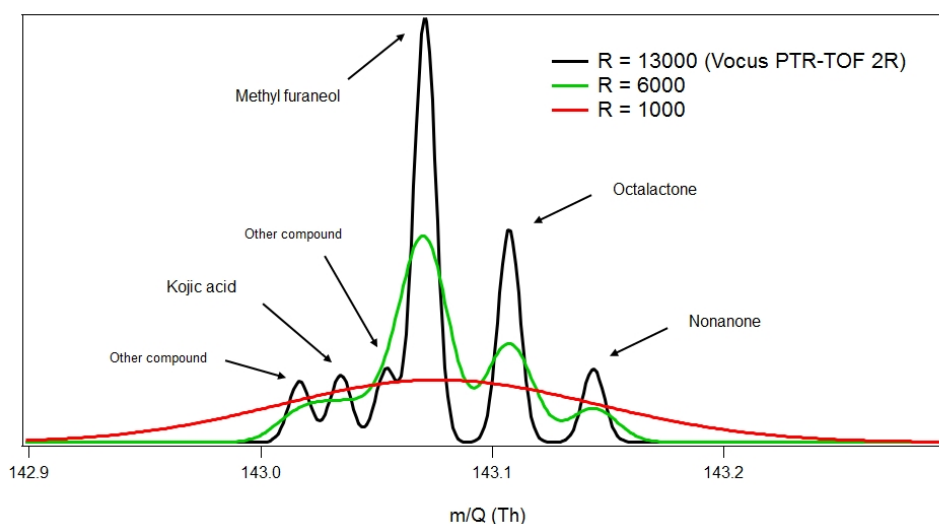


# 高质量分辨率PTR-MS鉴别咖啡香气中同标称质量目标物

Luca Cappellin, Jessica Rodriguez, Mike Cubison, and Felipe Lopez  
TOFWERK, Thun, Switzerland

大多数的挥发性有机物都在PTR-MS的检测范围内，这也意味着在检测复杂样品的时候，得到的质谱图相应的比较‘拥挤’。在同一个标称质量上可能会有几种物质同时存

在，如果不能对这些峰进行一一鉴别，会极大的影响后续峰精确质量和分子式鉴定的准确性。



杯咖啡的顶空气体---可能混杂了上百种VOCs---被直接‘吸’入拥有13000分辨率的Vocus PTR-TOF 2R进行直接检测。在质荷比40到400Th这个区间内，仪器记录到上千个峰，也意味着同一个标称质量上有很大的可能出现多个峰。比如在质荷比143Th上，一共有六个峰共存。其中4个峰依靠精确质量可以被鉴别出来。为了进一步证明高分辨率的重要性，Vocus测到的谱图被后期处理，从而模拟出用低分辨率的质谱仪测到的效果。在分辨率为6000的时候，曲酸（Kojic acid）就已经很难从谱图中分辨出来了。而在分辨率降为1000的时候，谱图中质荷比143Th这个位置上，就只能观察到一个硕大的峰了。

Vocus PTR-TOF 2R拥有市场上领先的高达15000（FWHM）的质量分辨率。为了证明高分辨率带来的优势，Vocus PTR-TOF 2R用来‘吸’了一下咖啡的顶空气体，不经任何样

品预处理和分离步骤。咖啡豆会散发出多种类的VOCs，一定程度决定了咖啡的香味，味道和颜色。PTR-MS已经被广泛应用

在咖啡豆烘焙过程监控和咖啡香气分析等案例上。

录得的质谱图中含有上千个峰，在同一个标称质量上出现几个峰的情况非常普遍。下图展示在质荷比143Th上共存的六个峰。下图也同时展示了如果利用低分辨率的质谱仪测到的理论谱图。可以清楚的看到，随着质量分辨率的下降，对谱图相邻峰的分辨难度开始变大，精确性也受到很大影

响。这也证明了在分析复杂基体中目标VOCs的案例中，Vocus PTR-TOF提供的超高质量分辨率的关键作用。

#### 联系我们

[ptr@tofwerk.com](mailto:ptr@tofwerk.com)  
[tofwerk.com/china](http://tofwerk.com/china)

©TOFWERK 2018