

分析装置 : Pegasus® BT GC-TOFMS

GC-MS による原材料スクリーニング : 麦芽温水抽出物のフレーバー分析

LECO Corporation; Saint Joseph, Michigan USA

キーワード : GC-MS、GC-TOFMS、Pegasus BT、HS-SPME、原材料、大麦麦芽

はじめに

食品および飲料の製造過程の初期における原材料のスクリーニングは、品質管理に役立つだけでなく、製品に望ましい特性をもたらす製造過程の変更や最適化の方法を見極めるうえでも役立てることができます。大麦麦芽はビールの製造における主要な原料の 1 つであり、醸造過程の初期段階で加えられます。これにより、発酵に不可欠な複合糖質および糖類が生成されます。また、最終製品にフレーバー、コク、および色を与えることにもなります。フレーバーへの寄与は、使用する麦芽のスタイルによって大きく異なります。ベース麦芽、カラメル麦芽、および深煎り麦芽はすべて一般的に使用されており、それぞれが独特のフレーバーノートと特徴をもたらします。フレーバーおよび鮮度の確認では、全粒の咀嚼試験が伝統的な方法として用いられてきました。この試験によって知見を得ることができ、また非常に迅速に実施できるという利点もありますが、醸造過程で抽出され、かつ最終製品に期待されるフレーバーを十分に反映できるわけではありません。American Society of Brewing Chemists (ASBC) では、ビール中の麦芽をより忠実に表す官能分析用の麦芽抽出物を調製するための分析メソッド「Hot Steep Malt Sensory Evaluation Method」^[1]を公開しています。化学分析は、伝統的な官能分析を補う点で適しています。ここではノンターゲット化学分析を使用し、これらの試料に関するより深い調査を行うことを目指します。揮発性および半揮発性フレーバー成分の採取にはヘッドスペース固相マイクロ抽出 (HS-SPME) を使用し、その後の分析ではガスクロマトグラフィーと質量分析装置を組み合わせ (GC-MS) 使用しました。さまざまな麦芽抽出物を調製・分析することにより、これらの麦芽スタイルを区別する個々の成分についての情報をもたらすデータが得られました。観測された成分の多くに、麦芽の官能特性に関連付けられる既知のフレーバーや香気特性が存在することが分かりました。

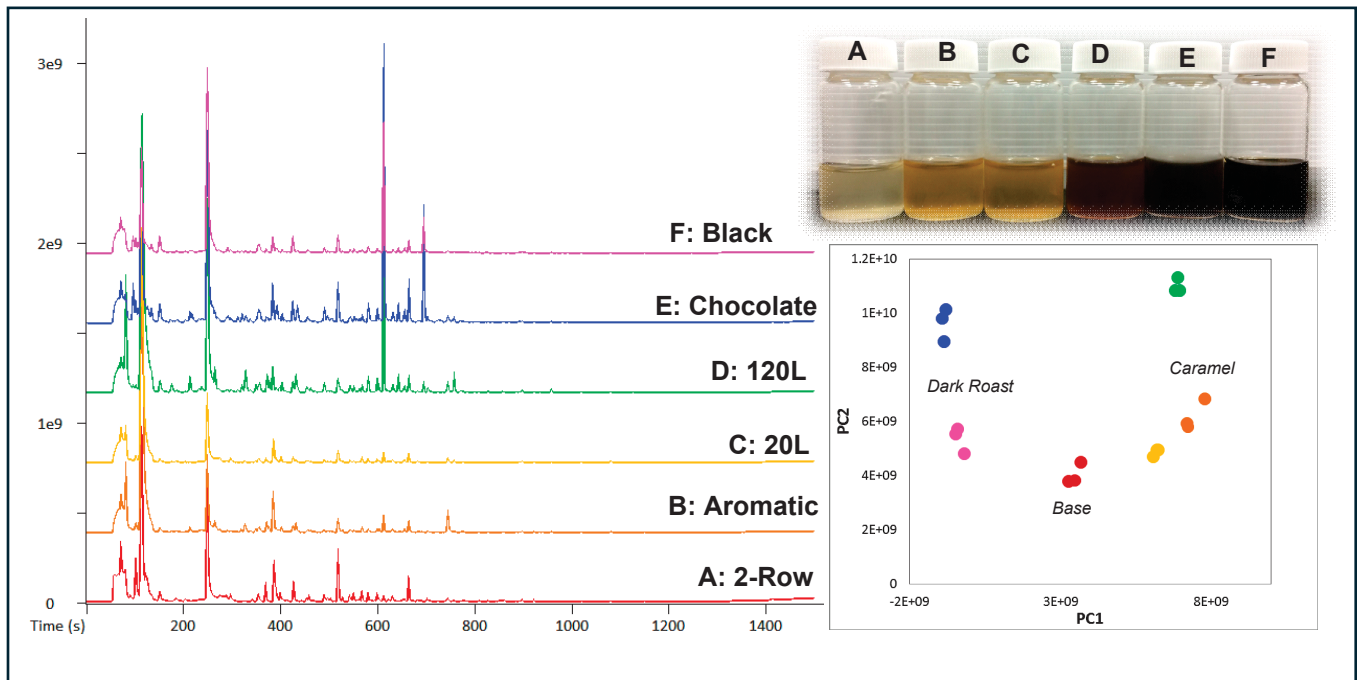


図1: 6つの麦芽抽出物を比較した。各抽出物の代表的なトータルイオンクロマトグラム (TIC) および写真を示す。PCA も実施した。

実験概要

ASBC の「Hot Steep Malt Sensory Evaluation Method」^[1]に基づいて分析用に調製した 6 つの大麦麦芽を表 1 に示します。この研究では、成分分析に必要とされる容量が官能分析に比べて少ないため、メソッドの規模を 20% に縮小しています。各麦芽品種について、断熱魔法瓶に入れた 65°C の水 80 mL に粉碎した麦芽 10 g を加え、振とうしながら混合しました。15 分間の抽出後、内容物をかき混ぜて濾過し、麦芽抽出液/麦汁試料を作成しました。ASBC メソッドの指示にしたがって、ベース麦芽は 100%、特殊麦芽はベース麦芽 50% との混合、および深煎り特殊麦芽はベース麦芽 15% との混合で分析を行いました。各試料で、5 mL の麦汁をセプタムキャップ付きの 20 mL ガラス製バイアルにピペット注入しました。各試料を 35°C で 5 分間インキュベートし、DVB/CAR/PDMS ファイバー (Supelco 製) を使用して 10 分間抽出しました。その後、Pegasus BT (LECO) を使用して各試料の GC-MS 分析を行いました。試料の分析データは、すべて濾過後 4 時間以内に取得しました。装置の分析条件を表 2 に示します。

表 1：大麦麦芽品種

| Sample | Name | Malt Type | Inclusion Level | Lovibond |
|--------|--------------|----------------------|-----------------|----------|
| A | 2-Row | Base | 100% | 1.8 |
| B | Aromatic | Specialty | 50% | 20 |
| C | Caramel 20L | Specialty | 50% | 20 |
| D | Caramel 120L | Specialty | 50% | 120 |
| E | Chocolate | Dark Roast Specialty | 15% | 350 |
| F | Black | Dark Roast Specialty | 15% | 500 |

表 2：GC-TOFMS (Pegasus BT) 分析条件

| Gas Chromatograph | Agilent 7890 with LECO L-PAL 3 Autosampler |
|------------------------|---|
| Injection | SPME, 3 min desorption in 250°C inlet |
| Carrier Gas | He @ 1.4 mL/min, Constant Flow |
| Column One | Stabilwax, 30 m x 0.25 mm i.d. x 0.25 µm coating (Restek) |
| Temperature Program | 3 min at 40°C, ramped 10°C/min to 250°C, hold 1 min |
| Transfer Line | 250°C with uncoated guard column |
| Mass Spectrometer | LECO Pegasus BT |
| Ion Source Temperature | 250°C |
| Mass Range | 33-500 m/z |
| Acquisition Rate | 10 spectra/s |

結果および考察

窯で加熱する際の温度や時間、あるいは大麦を焙煎する際の温度や時間を変化させることにより、さまざまな麦芽のスタイルが生み出されます。これらの条件によってさまざまな反応が促進されます。また、加えられる変化に応じて多様な麦芽スタイルが生み出されたり、副生成物による反応の種類や量に影響が生じたりします。糖質の分解であるカラメル化、および還元糖とアミノ酸が反応して生じるメイラード反応は、いずれも見込まれている反応で、これにより重要な香りおよびフレーバー特性を備えた副生成物が生み出されます。麦芽スタイルは、ベース、特殊、深煎り特殊に分類することができ、一般的には麦芽を深煎りにするほどより高温かつ長時間の加熱が必要です。6 種類の大麦芽の抽出物の分析と比較を行いました (図 1 および表 1 を参照)。表 1 のとおり、これにはベース麦芽、3 つの特殊麦芽、および 2 つの深煎り特殊麦芽が含まれています。図 1 に示す各抽出物のクロマトグラムには、各試料のアロマプロファイルが表されています。試料間では、いくつかの類似点と多くの差異を明らかに確認できました。これに基づき、TIC トレースの主成分分析 (PCA) による予備的な一般キャラクターゼーションを行いました。各試料を点で表したスコアプロットを図 1 に示します。各麦芽品種の抽出物は明確にクラスタリングされており、深煎り特殊麦芽では低い PC1 スコアが示されていますが、カラメル麦芽では高い PC1 スコアが示されています。

これらの試料の一般的な特徴については、麦芽品種全体で個々の成分の傾向を確認することで、さらに調査することができます。この分析手法により、個々の成分のクロマトグラフィー分離と数学的分離の両方を行うことができます。複雑な試料ではクロマトグラフィー共溶出が頻繁に発生していますが、こうしたケースの多くは、図 2 に示すとおり、全質量範囲の TOFMS データを数学的にデコンボリューションすることで確認が可能です。TIC では 2 つのピークが目立っていますが、スペクトルパターンを見ると 4 つの成分の共溶出が示唆されています。それぞれに固有の質量をプロットすることにより、ピーク形状の確認と積分を行い、ピークエリアおよび試料全体の相対的な傾向に関する情報を得ることができます。各成分の純粋なスペクトル情報も生成することができるため、市販のライブラリデータと一致する場合には、暫定的な同定情報により香り特性を決定することが可能です。デコンボリューション機能により、TIC で混同されていたこれら 4 つの成分にはそれぞれに興味深い香り特性や明らかに異なる傾向が存在することを確認しました。ジヒドロ-5-ペンチル-2(3H)-フランノンはすべての試料で観測されており、麦芽スタイルによる差異はごくわずかです。この成分は、甘い、バターのような、ココナッツ、クリーミー、蠟のような、および油っぽいといった香り記述子で表現されます。フラネオールは、カラメル、綿菓子、甘い、ストロベリー、および砂糖といった香り記述子で表現されており、120L のカラメル麦芽で濃度が最も高くなっています。ほかの麦芽スタイルではさまざまな濃度で観測されています。1H-ピロール-2-カルボキサルデヒドおよび 4-エチル-2-メトキシフェノールは、いずれもチョコレート麦芽で最も高い濃度が観測されました。

ピロールはコーヒーおよびカビ臭といった香り記述子で表されるのに対し、フェノールはスモーキー、スパイシー、ベーコン、およびクローブといった香り記述子で表されます。黒色麦芽における濃度の低下は、熱分解に起因するものと考えられます。黒色麦芽は非常に高温 (260℃以上) で加熱されることが多く、これによりさらなる反応が生じたり、これらの化合物の沸点を超えたりするためです (ピロール化合物で 217 ~ 219℃、およびフェノール化合物で 234 ~ 236℃)。

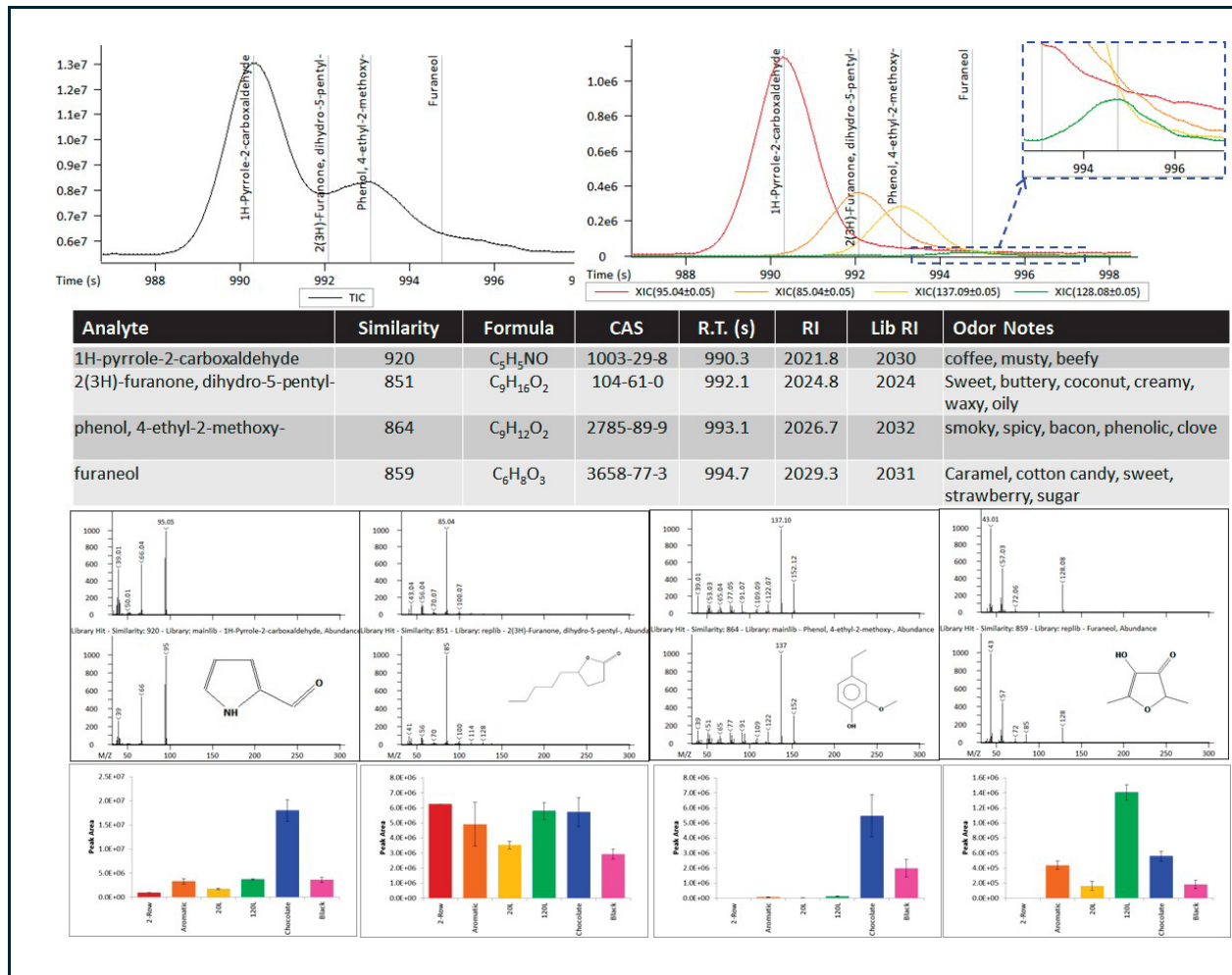


図2：デコンボリューションにより4つの成分の分離に成功した。TICでは、これらが2つのピークで表されていた。これらの成分は各試料に異なる濃度で存在しており、麦芽品種に関連するフレーバーの差異にある程度寄与していると思われる。

ほかにも多くの成分を確認しました。およそ 200 種類の化合物に関する情報を図 3 および Appendix にまとめています。これらの成分は、NIST 2017 データベースの比較 (シミュラリティスコア > 800)、およびリテンションインデックスの照合 (ライブラリ vs 実測 < 40 RI 単位) により同定しました。確認されたこれらの成分は、アルコール、アルデヒド、ケトン、炭化水素、芳香族化合物、エステル、フラン、ピラノン、ピラジン、ピロール、サルファイド、チオフェンなど多岐にわたります。暫定的な成分同定に関する情報を付録にまとめました。大麦麦芽品種間の相対的なピークエリアの傾向も確認してします。ヒートマップに示すとおり明らかな傾向が観測されました。

特定の成分についてまとめたものを詳細とともに図 4 に示します。これらの成分は、麦芽製造や醸造との既知の関係のため特別な関心の対象となるかもしれません。硫化ジメチル (DMS) は、硫黄およびトウモロコシといった香り記述子で表される重要な臭気化合物で、発芽中および焙燥の初期段階で生成されます。揮発性化合物のため、特殊麦芽や特殊深煎り麦芽を作る際の高温焙燥/焙煎によって消失する場合があります。予想どおり、DMS が最も高い濃度で観測されたのはベース麦芽で、特殊麦芽および深煎り特殊麦芽では低い濃度となりました。メチオナルも、ビールに関連付けられる重要な臭気化合物の 1 つで、ポテト様の臭気特性があります。これはメチオニンというアミノ酸の分解産物で、しばしば定常的なスクリーニングの対象となります。今回の分析では、芳香族麦芽およびカラメル麦芽 120L で最も高い濃度のメチオナルを観測しました。カラメル化およびメイラード反応の副生成物が観測されたことも予想どおりでした。2-6-ジメチルピラジンなどの窒素含有環はメイラード反応の生成物、マルトールはカラメル化生成物と考えられます。120L 麦芽、チョコレート麦芽、および黒色麦芽でこれら特定の成分およびその他の類似成分の傾向が観測されたことは、それぞれの麦芽タイプで発生する反応の種類の解明に役立つ可能性があります。

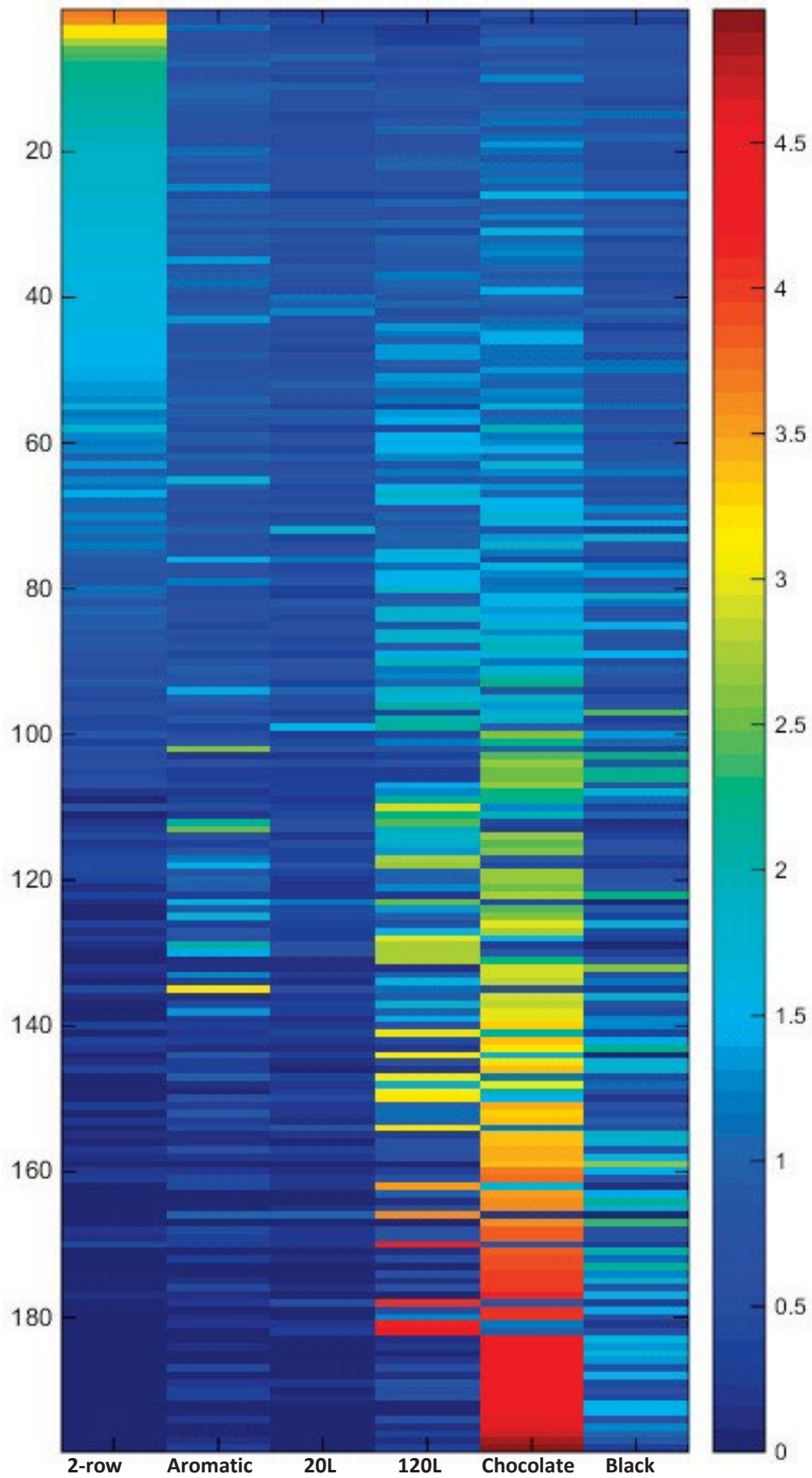


図3：麦芽品種ごとのビークエリアの傾向。

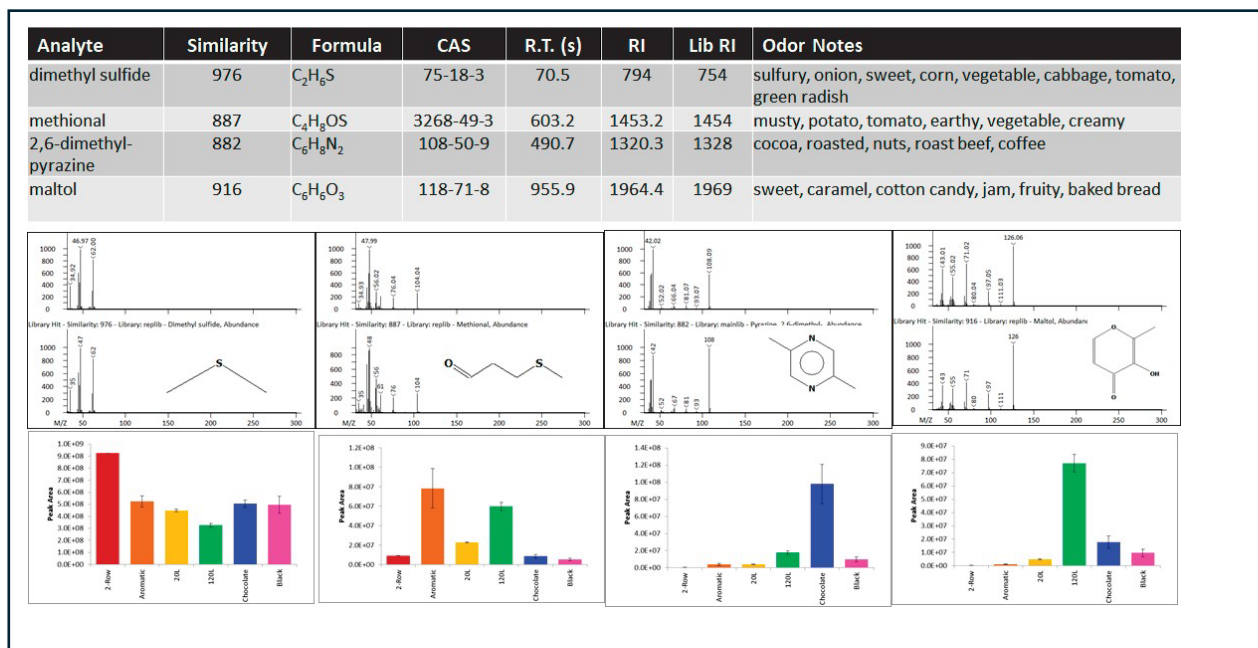


図4：麦芽品種に関連して明確な傾向を示す代表的な成分の詳細。

まとめ

今回の研究では、官能分析用に ASBC が開発した「Hot Steep Malt Sensory Evaluation Method」に基づいた麦芽抽出物の分析メソッドを実践しました。HS-SPME を使用して麦芽抽出物のサンプリングを行い、GC-MS により分析を行いました。この分析アプローチにより、個々の成分に関する相補的なデータを得ることができ、試料についてより多くを明らかにすることができます。多様な麦芽の具体的な傾向を観測しつつ、数百に上る成分の同定および比較を行うことができました。高温で焙煎された麦芽試料において、多くのカラメル化生成物およびメイラード反応生成物が高い濃度で存在することを確認できました。

参考文献

[1]"Hot Steep Malt Sensory Evaluation Method," Sensory Analysis – 14, ASBC Methods of Analysis.



LECO, PEGASUS, ChromaTOF、および StayClean は LECO 社の登録商標です。

LECO Corporation | 3000 Lakeview Avenue | St. Joseph, MI 49085 | Phone: 800-292-6141 | 269-985-5496
 info@leco.com • www.leco.com | ISO-9001:2015 Q-994 | LECO is a registered trademark of LECO Corporation.

Appendix

暫定的に同定した成分の一覧 (図 3 参照)。

| # | Name | CAS | Similarity | R.T.(s) | RI | Lib RI | Formula |
|----|--|------------|------------|---------|--------|--------|---|
| 1 | pentane, 1-chloro- | 543-59-9 | 872 | 125.2 | 939.9 | 945 | C ₅ H ₁₁ Cl |
| 2 | methylene chloride | 75-09-2 | 939 | 121.4 | 933.6 | 933 | CH ₂ Cl ₂ |
| 3 | trichloromethane | 67-66-3 | 913 | 188.7 | 1025.3 | 1022 | CHCl ₃ |
| 4 | ethyl acetate | 141-78-6 | 948 | 101.2 | 900.2 | 888 | C ₄ H ₈ O ₂ |
| 5 | propanoic acid, 2-methyl-, ethyl ester | 97-62-1 | 873 | 141.4 | 966.7 | 961 | C ₆ H ₁₂ O ₂ |
| 6 | acetoin | 513-86-0 | 874 | 458.4 | 1285 | 1284 | C ₄ H ₈ O ₂ |
| 7 | m-cymene | 535-77-3 | 817 | 436.6 | 1262.5 | 1269 | C ₁₀ H ₁₄ |
| 8 | butanoic acid, 3-methyl-, ethyl ester | 108-64-5 | 875 | 235.0 | 1068.4 | 1068 | C ₇ H ₁₄ O ₂ |
| 9 | hexanoic acid, ethyl ester | 123-66-0 | 909 | 405.0 | 1229.9 | 1233 | C ₈ H ₁₆ O ₂ |
| 10 | propanoic acid, 2-hydroxy- ethyl ester | 97-64-3 | 949 | 509.7 | 1342.1 | 1347 | C ₅ H ₁₀ O ₃ |
| 11 | pseudocumene | 95-63-6 | 804 | 444.5 | 1270.7 | 1283 | C ₉ H ₁₂ |
| 12 | ethanol | 64-17-5 | 931 | 121.9 | 934.5 | 932 | C ₂ H ₆ O |
| 13 | decanoic acid, ethyl ester | 110-38-3 | 877 | 739.8 | 1634.4 | 1638 | C ₁₂ H ₂₄ O ₂ |
| 14 | methane, tribromo- | 75-25-2 | 810 | 592.0 | 1439.4 | 1430 | CHBr ₃ |
| 15 | butanoic acid, 2-methyl-, ethyl ester | 7452-79-1 | 890 | 218.4 | 1052.9 | 1051 | C ₇ H ₁₄ O ₂ |
| 16 | 3-hexen-1-ol | 544-12-7 | 850 | 544.8 | 1382.2 | 1391 | C ₆ H ₁₂ O |
| 17 | 1-penten-3-one | 1629-58-9 | 906 | 187.0 | 1023.7 | 1019 | C ₅ H ₈ O |
| 18 | acetic acid, hexyl ester | 142-92-7 | 918 | 443.1 | 1269.2 | 1272 | C ₈ H ₁₆ O ₂ |
| 19 | 1-hexanol | 111-27-3 | 951 | 517.9 | 1351.4 | 1355 | C ₆ H ₁₄ O |
| 20 | pyrazine, 2-methoxy-3-(1-methylpropyl)- | 24168-70-5 | 813 | 637.2 | 1495.6 | 1500 | C ₉ H ₁₄ N ₂ O |
| 21 | dodecanoic acid, ethyl ester | 106-33-2 | 837 | 876.8 | 1837.4 | 1841 | C ₁₄ H ₂₈ O ₂ |
| 22 | acetic acid, 2-phenylethyl ester | 103-45-7 | 922 | 860.2 | 1811.3 | 1813 | C ₁₀ H ₁₂ O ₂ |
| 23 | 2-nonanone | 821-55-6 | 817 | 545.5 | 1383 | 1390 | C ₉ H ₁₈ O |
| 24 | 2-hexenal | 505-57-7 | 936 | 390.0 | 1214.4 | 1213 | C ₆ H ₁₀ O |
| 25 | phenylethyl alcohol | 60-12-8 | 918 | 921.6 | 1908.2 | 1906 | C ₈ H ₁₀ O |
| 26 | toluene | 108-88-3 | 943 | 203.5 | 1039.1 | 1042 | C ₇ H ₈ |
| 27 | 2,4-di-tert-butylphenol | 96-76-4 | 903 | 1150.1 | 2308.8 | 2318 | C ₁₄ H ₂₂ O |
| 28 | dimethyl sulfide | 75-18-3 | 979 | 70.5 | 794 | 754 | C ₂ H ₆ S |
| 29 | 1-penten-3-ol | 616-25-1 | 876 | 339.6 | 1166 | 1159 | C ₅ H ₁₀ O |
| 30 | n-decanoic acid | 334-48-5 | 902 | 1137.1 | 2284.2 | 2276 | C ₁₀ H ₂₀ O ₂ |
| 31 | decane | 124-18-5 | 839 | 164.1 | 1002.4 | 1000 | C ₁₀ H ₂₂ |
| 32 | 5,9-undecadien-2-one, 6,10-dimethyl-(E)- | 3796-70-1 | 847 | 884.4 | 1849.2 | 1859 | C ₁₃ H ₂₂ O |
| 33 | 1-heptanol | 111-70-6 | 906 | 602.4 | 1452.3 | 1453 | C ₇ H ₁₆ O |
| 34 | 2-octanone | 111-13-7 | 941 | 453.1 | 1279.5 | 1287 | C ₈ H ₁₆ O |
| 35 | benzeneacetic acid, ethyl ester | 101-97-3 | 892 | 841.2 | 1782.3 | 1783 | C ₁₀ H ₁₂ O ₂ |
| 36 | naphthalene | 91-20-3 | 858 | 809.5 | 1734.9 | 1745 | C ₁₀ H ₈ |
| 37 | 5-ethylcyclopent-1-enecarboxaldehyde | 36431-60-4 | 849 | 567.8 | 1409.3 | 1410 | C ₈ H ₁₂ O |
| 38 | octanoic acid, ethyl ester | 106-32-1 | 875 | 586.9 | 1433 | 1435 | C ₁₀ H ₂₀ O ₂ |
| 39 | 5-hepten-2-one, 6-methyl- | 110-93-0 | 904 | 502.8 | 1334.2 | 1338 | C ₈ H ₁₄ O |
| 40 | butanenitrile, 3-methyl- | 625-28-5 | 942 | 296.5 | 1125.7 | 1125 | C ₅ H ₉ N |
| 41 | octanoic acid | 124-07-2 | 884 | 1020.1 | 2072.9 | 2060 | C ₈ H ₁₆ O ₂ |
| 42 | limonene | 138-86-3 | 834 | 360.4 | 1185.4 | 1200 | C ₁₀ H ₁₆ |
| 43 | 1-propanol, 2-methyl- | 78-83-1 | 933 | 271.0 | 1102 | 1092 | C ₄ H ₁₀ O |
| 44 | linalool | 78-70-6 | 848 | 673.9 | 1544.3 | 1547 | C ₁₀ H ₁₈ O |
| 45 | 3,5-octadien-2-one | 38284-27-4 | 864 | 652.9 | 1516.3 | 1522 | C ₈ H ₁₂ O |
| 46 | 2,6-nonadienal, (E,Z)- | 557-48-2 | 933 | 701.7 | 1581.5 | 1584 | C ₉ H ₁₄ O |
| 47 | nonanal | 124-19-6 | 931 | 550.5 | 1388.7 | 1391 | C ₉ H ₁₈ O |
| 48 | 1-hexanol, 2-ethyl- | 104-76-7 | 957 | 630.4 | 1487.1 | 1491 | C ₈ H ₁₈ O |
| 49 | 2(3H)-furanone, 5-ethylidihydro- | 695-06-7 | 924 | 785.0 | 1698.2 | 1694 | C ₆ H ₁₀ O ₂ |
| 50 | 1-pentanol | 71-41-0 | 957 | 424.6 | 1250.1 | 1250 | C ₅ H ₁₂ O |
| 51 | 1-octanol | 111-87-5 | 868 | 681.6 | 1554.7 | 1557 | C ₈ H ₁₈ O |
| 52 | furan, 2-pentyl- | 3777-69-3 | 952 | 400.7 | 1225.4 | 1231 | C ₉ H ₁₄ O |
| 53 | 2-pentenal, (E)- | 1576-87-0 | 819 | 299.8 | 1128.9 | 1127 | C ₅ H ₈ O |
| 54 | 2(3H)-furanone, dihydro-5-pentyl- | 104-61-0 | 877 | 992.1 | 2024.8 | 2024 | C ₉ H ₁₆ O ₂ |
| 55 | 3-pentanone, 2-methyl- | 565-69-5 | 888 | 163.0 | 1001.3 | 1003 | C ₆ H ₁₂ O |
| 56 | acetic acid | 64-19-7 | 936 | 620.2 | 1474.4 | 1449 | C ₂ H ₄ O ₂ |
| 57 | 2-octen-1-ol, (E)- | 18409-17-1 | 901 | 724.0 | 1612.1 | 1614 | C ₈ H ₁₆ O |
| 58 | isobutyl acetate | 110-19-0 | 839 | 179.6 | 1016.8 | 1012 | C ₆ H ₁₂ O ₂ |
| 59 | benzophenone | 119-61-9 | 922 | 1234.0 | 2473.7 | 2450 | C ₁₃ H ₁₀ O |
| 60 | 3,5-octadien-2-one, (E,E)- | 30086-02-3 | 905 | 690.6 | 1566.7 | 1570 | C ₈ H ₁₂ O |
| 61 | 2,4-heptadienal, (E,E)- | 4313-03-5 | 821 | 632.3 | 1489.5 | 1495 | C ₇ H ₁₀ O |
| 62 | o-xylene | 95-47-6 | 832 | 350.0 | 1175.7 | 1186 | C ₈ H ₁₀ |
| 63 | 1-butanol, 3-methyl-, acetate | 123-92-2 | 897 | 288.9 | 1118.7 | 1122 | C ₇ H ₁₄ O ₂ |
| 64 | heptanal | 111-71-7 | 814 | 354.2 | 1179.6 | 1184 | C ₇ H ₁₄ O |
| 65 | 1-butanol, 3-methyl- | 123-51-3 | 952 | 384.3 | 1208.5 | 1209 | C ₅ H ₁₂ O |
| 66 | 2-butenal | 4170-30-3 | 839 | 207.1 | 1042.4 | 1047 | C ₄ H ₆ O |
| 67 | 2,4-decadienal, (E,Z)- | 25152-83-4 | 883 | 827.1 | 1761.1 | 1754 | C ₁₀ H ₁₆ O |
| 68 | 2-heptenal, (E)- | 18829-55-5 | 904 | 489.7 | 1319.2 | 1323 | C ₇ H ₁₂ O |
| 69 | p-xylene | 106-42-3 | 888 | 302.7 | 1131.6 | 1138 | C ₈ H ₁₀ |
| 70 | 2,3-butanedione (diacetyl) | 431-03-8 | 870 | 152.0 | 984.2 | 979 | C ₄ H ₆ O ₂ |
| 71 | acetone | 67-64-1 | 926 | 82.1 | 834.2 | 819 | C ₃ H ₆ O |
| 72 | nonanoic acid | 112-05-0 | 920 | 1079.6 | 2178.2 | 2171 | C ₉ H ₁₈ O ₂ |
| 73 | pentanal | 110-62-3 | 930 | 150.4 | 981.6 | 979 | C ₅ H ₁₀ O |
| 74 | 2-nonenal, (E)- | 18829-56-6 | 961 | 664.1 | 1531.2 | 1534 | C ₉ H ₁₆ O |
| 75 | 2-n-butyl furan | 4466-24-4 | 834 | 297.6 | 1126.8 | 1123 | C ₈ H ₁₂ O |

| # | Name | CAS | Similarity | R.T.(s) | RI | Lib RI | Formula |
|-----|--|------------|------------|---------|--------|--------|--|
| 76 | butanal, 3-methyl- | 590-86-3 | 910 | 113.8 | 921 | 918 | C ₅ H ₁₀ O |
| 77 | 2-heptanone | 110-43-0 | 934 | 353.8 | 1179.2 | 1182 | C ₇ H ₁₄ O |
| 78 | hexanal | 66-25-1 | 957 | 249.1 | 1081.6 | 1083 | C ₆ H ₁₂ O |
| 79 | butanoic acid, 3-methyl- | 503-74-2 | 884 | 774.9 | 1684 | 1666 | C ₅ H ₁₀ O ₂ |
| 80 | 3-octen-2-one | 1669-44-9 | 846 | 561.5 | 1401.4 | 1411 | C ₈ H ₁₄ O |
| 81 | acetic acid, pentyl ester | 628-63-7 | 915 | 346.0 | 1171.9 | 1176 | C ₇ H ₁₄ O ₂ |
| 82 | styrene | 100-42-5 | 902 | 427.0 | 1252.6 | 1260 | C ₈ H ₈ |
| 83 | 1-octen-3-ol | 3391-86-4 | 914 | 599.0 | 1448.1 | 1450 | C ₈ H ₁₆ O |
| 84 | 2,4-nonadienal, (E,E)- | 5910-87-2 | 872 | 784.1 | 1697 | 1700 | C ₉ H ₁₄ O |
| 85 | furan, 2-ethyl- | 3208-16-0 | 897 | 133.3 | 953.3 | 950 | C ₆ H ₈ O |
| 86 | hexanoic acid | 142-62-1 | 942 | 891.5 | 1860.5 | 1846 | C ₆ H ₁₂ O ₂ |
| 87 | 2-octenal, (E)- | 2548-87-0 | 947 | 580.3 | 1424.8 | 1429 | C ₈ H ₁₄ O |
| 88 | benzyl alcohol | 100-51-6 | 847 | 899.9 | 1873.6 | 1870 | C ₇ H ₈ O |
| 89 | butyrolactone | 96-48-0 | 941 | 733.8 | 1625.9 | 1632 | C ₄ H ₆ O ₂ |
| 90 | cyclohexanone, 2,2,6-trimethyl- | 2408-37-9 | 881 | 477.1 | 1304.8 | 1319 | C ₉ H ₁₆ O |
| 91 | benzaldehyde | 100-52-7 | 957 | 655.4 | 1519.6 | 1520 | C ₇ H ₆ O |
| 92 | benzaldehyde, 4-ethyl- | 4748-78-1 | 837 | 788.5 | 1703.5 | 1721 | C ₉ H ₁₀ O |
| 93 | pyrrole | 109-97-7 | 895 | 652.2 | 1515.3 | 1514 | C ₄ H ₅ N |
| 94 | butanal, 2-methyl- | 96-17-3 | 915 | 111.5 | 917.2 | 914 | C ₅ H ₁₀ O |
| 95 | 2-heptanone, 6-methyl- | 928-68-7 | 900 | 409.7 | 1234.7 | 1237 | C ₈ H ₁₆ O |
| 96 | octanal | 124-13-0 | 864 | 458.3 | 1285 | 1289 | C ₈ H ₁₆ O |
| 97 | 4-heptenal, (Z)- | 6728-31-0 | 903 | 413.9 | 1239.1 | 1240 | C ₇ H ₁₂ O |
| 98 | 2-methoxy-4-vinylphenol | 7786-61-0 | 830 | 1088.1 | 2193.3 | 2188 | C ₉ H ₁₀ O ₂ |
| 99 | benzotrile | 100-47-0 | 877 | 716.7 | 1601.7 | 1589 | C ₇ H ₅ N |
| 100 | acetic acid, methyl ester | 79-20-9 | 959 | 84.1 | 841.2 | 828 | C ₃ H ₆ O ₂ |
| 101 | indole | 120-72-9 | 856 | 1218.3 | 2442.2 | 2445 | C ₈ H ₇ N |
| 102 | thiophene, 3-phenyl- | 2404-87-7 | 855 | 1052.3 | 2129.4 | 2116 | C ₁₀ H ₈ S |
| 103 | 2-butanone | 78-93-3 | 937 | 106.2 | 908.4 | 907 | C ₄ H ₈ O |
| 104 | acetophenone | 98-86-2 | 871 | 748.7 | 1646.9 | 1647 | C ₈ H ₈ O |
| 105 | pyridine, 2-ethyl- | 100-71-0 | 897 | 448.4 | 1274.7 | 1278 | C ₇ H ₉ N |
| 106 | ethylbenzene | 100-41-4 | 903 | 287.9 | 1117.7 | 1129 | C ₈ H ₁₀ |
| 107 | 2(3H)-furanone, 5-methyl- | 591-12-8 | 805 | 584.5 | 1430.1 | 1426 | C ₅ H ₆ O ₂ |
| 108 | 2,5-furan dicarboxaldehyde | 823-82-5 | 912 | 965.5 | 1980.2 | 1991 | C ₆ H ₄ O ₃ |
| 109 | 2-cyclopenten-1-one, 2-hydroxy-3-methyl- | 80-71-7 | 820 | 868.5 | 1824.3 | 1830 | C ₆ H ₈ O ₂ |
| 110 | 2,4-decadienal, (E,E)- | 25152-84-5 | 845 | 856.6 | 1805.5 | 1811 | C ₁₀ H ₁₆ O |
| 111 | 5-hydroxymethylfurfural | 67-47-0 | 857 | 1246.7 | 2499.4 | 2496 | C ₆ H ₆ O ₃ |
| 112 | benzeneacetaldehyde, α-ethylidene- | 4411-89-6 | 895 | 933.8 | 1928.1 | 1929 | C ₁₀ H ₁₀ O |
| 113 | methional | 3268-49-3 | 899 | 603.2 | 1453.2 | 1454 | C ₄ H ₈ OS |
| 114 | maleic anhydride | 108-31-6 | 803 | 563.9 | 1404.4 | 1420 | C ₄ H ₂ O ₃ |
| 115 | 2-propanone, 1-hydroxy- | 116-09-6 | 919 | 471.0 | 1298.1 | 1303 | C ₃ H ₆ O ₂ |
| 116 | 2-butenal, 2-methyl- | 1115-11-3 | 824 | 260.5 | 1092.2 | 1095 | C ₅ H ₈ O |
| 117 | 2-pentenal, 2-methyl- | 623-36-9 | 806 | 329.9 | 1157 | 1155 | C ₆ H ₁₀ O |
| 118 | propanal, 2-methyl- | 78-84-2 | 954 | 80.6 | 829.2 | 819 | C ₄ H ₈ O |
| 119 | pyrazine, trimethyl- | 14667-55-1 | 874 | 555.8 | 1394.8 | 1402 | C ₇ H ₁₀ N ₂ |
| 120 | 1H-pyrrole-2-carboxaldehyde, 1-ethyl- | 2167-14-8 | 809 | 719.1 | 1605.1 | 1610 | C ₇ H ₉ NO |
| 121 | 4,5-dimethyl-2-isobutylloxazole | 26131-91-9 | 836 | 505.6 | 1337.3 | 1330 | C ₉ H ₁₅ NO |
| 122 | benzene, propyl- | 103-65-1 | 892 | 375.5 | 1199.5 | 1212 | C ₉ H ₁₂ |
| 123 | 5-methyl-2-phenyl-2-hexenal | 21834-92-4 | 873 | 1018.9 | 2070.8 | 2056 | C ₁₃ H ₁₆ O |
| 124 | ethanone, 1-(2-pyridinyl)- | 1122-62-9 | 843 | 713.7 | 1597.6 | 1597 | C ₇ H ₇ NO |
| 125 | pyrazine, 2,5-dimethyl-3-(3-methylbutyl)- | 18433-98-2 | 873 | 750.2 | 1649 | 1666 | C ₁₁ H ₁₈ N ₂ |
| 126 | phenol | 108-95-2 | 937 | 980.9 | 2005.6 | 2000 | C ₆ H ₆ O |
| 127 | pyrazine, 2,5-dimethyl- | 123-32-0 | 902 | 485.2 | 1314.1 | 1320 | C ₆ H ₈ N ₂ |
| 128 | 2,3-pentanedione | 600-14-6 | 939 | 231.1 | 1064.8 | 1058 | C ₅ H ₈ O ₂ |
| 129 | benzeneacetaldehyde, α-(2-ethylpropylidene)- | 26643-91-4 | 831 | 939.7 | 1937.8 | 1926 | C ₁₂ H ₁₄ O |
| 130 | ethanone, 1-(1H-pyrrol-2-yl)- | 1072-83-9 | 925 | 957.9 | 1967.7 | 1973 | C ₆ H ₇ NO |
| 131 | ethanone, 1-(2-furanyl)- | 1192-62-7 | 945 | 642.6 | 1502.5 | 1499 | C ₆ H ₆ O ₂ |
| 132 | benzene, n-butyl- | 104-51-8 | 931 | 476.7 | 1304.3 | 1312 | C ₁₀ H ₁₄ |
| 133 | pyrazine, 3-ethyl-2,5-dimethyl- | 13360-65-1 | 914 | 589.9 | 1436.7 | 1443 | C ₈ H ₁₂ N ₂ |
| 134 | ethanone, 1-(1-methyl-1H-pyrrol-2-yl)- | 932-16-1 | 867 | 751.6 | 1651.1 | 1656 | C ₇ H ₉ NO |
| 135 | benzeneacetaldehyde | 122-78-1 | 935 | 744.3 | 1640.7 | 1640 | C ₈ H ₈ O |
| 136 | furan | 110-00-9 | 923 | 77.6 | 818.8 | 798 | C ₄ H ₄ O |
| 137 | 3(2H)-furanone, dihydro-2-methyl- | 3188-00-9 | 866 | 435.9 | 1261.8 | 1268 | C ₅ H ₈ O ₂ |
| 138 | pyrazine, 2,5-dimethyl-3-(2-methylpropyl)- | 32736-94-0 | 803 | 653.6 | 1517.2 | 1520 | C ₁₀ H ₁₆ N ₂ |
| 139 | furfural | 98-01-1 | 965 | 612.0 | 1464.2 | 1462 | C ₅ H ₄ O ₂ |
| 140 | methyl isobutyl ketone | 108-10-1 | 908 | 172.3 | 1010 | 1010 | C ₆ H ₁₂ O |
| 141 | 2-vinylfuran | 1487-18-9 | 871 | 242.8 | 1075.7 | 1063 | C ₆ H ₆ O |
| 142 | thiophene | 110-02-1 | 940 | 187.6 | 1024.3 | 1025 | C ₄ H ₄ S |
| 143 | m-cresol | 108-39-4 | 845 | 1029.6 | 2089.1 | 2091 | C ₇ H ₈ O |
| 144 | disulfide, dimethyl | 624-92-0 | 924 | 236.8 | 1070.1 | 1077 | C ₂ H ₆ S ₂ |
| 145 | pyridine | 110-86-1 | 958 | 351.2 | 1176.8 | 1185 | C ₅ H ₅ N |
| 146 | 2-cyclopenten-1-one, 2-methyl- | 1120-73-6 | 861 | 527.4 | 1362.3 | 1367 | C ₆ H ₈ O |
| 147 | furaneol | 3658-77-3 | 859 | 994.7 | 2029.3 | 2031 | C ₆ H ₈ O ₃ |
| 148 | 2(5H)-furanone | 497-23-4 | 928 | 821.5 | 1752.8 | 1742 | C ₄ H ₄ O ₂ |
| 149 | 2-furanmethanol, acetate | 623-17-6 | 885 | 667.5 | 1535.7 | 1531 | C ₇ H ₈ O ₃ |
| 150 | furan, 3-phenyl- | 13679-41-9 | 896 | 885.5 | 1851 | 1849 | C ₁₀ H ₈ O |
| 151 | benzaldehyde, 2-methyl- | 529-20-4 | 891 | 729.3 | 1619.5 | 1632 | C ₈ H ₈ O |
| 152 | pyrazine, 2-ethyl-5-methyl- | 13360-64-0 | 820 | 545.5 | 1383 | 1387 | C ₇ H ₁₀ N ₂ |

| # | Name | CAS | Similarity | R.T.(s) | RI | Lib RI | Formula |
|-----|---|------------|------------|---------|--------|--------|---|
| 153 | oxazole, trimethyl- | 20662-84-4 | 901 | 365.1 | 1189.8 | 1197 | C ₆ H ₈ NO |
| 154 | 2-furanmethanol, 5-methyl- | 3857-25-8 | 859 | 799.3 | 1719.6 | 1714 | C ₆ H ₈ O ₂ |
| 155 | thiophene, 2-methyl- | 554-14-3 | 864 | 255.0 | 1087.1 | 1097 | C ₅ H ₆ S |
| 156 | 2-propanone, 1-(acetyloxy)- | 592-20-1 | 934 | 613.7 | 1466.3 | 1474 | C ₅ H ₈ O ₃ |
| 157 | 1H-pyrrole-2-carboxaldehyde | 1003-29-8 | 925 | 990.3 | 2021.8 | 2030 | C ₅ H ₅ NO |
| 158 | p-cresol | 106-44-5 | 901 | 1025.1 | 2081.4 | 2080 | C ₇ H ₈ O |
| 159 | benzene, pentyl- | 538-68-1 | 827 | 566.1 | 1407.2 | 1419 | C ₁₁ H ₁₆ |
| 160 | 3-hexanone, 5-methyl- | 623-56-3 | 864 | 241.5 | 1074.5 | 1082 | C ₇ H ₁₄ O |
| 161 | pyrazine, 2,3-dimethyl- | 5910-89-4 | 925 | 506.6 | 1338.6 | 1344 | C ₆ H ₈ N ₂ |
| 162 | dimethyl trisulfide | 3658-80-8 | 889 | 536.3 | 1372.5 | 1377 | C ₂ H ₆ S ₃ |
| 163 | 1-propanone, 1-(2-furanyl)- | 3194-15-8 | 828 | 695.6 | 1573.3 | 1563 | C ₇ H ₈ O ₂ |
| 164 | phenol, 2-methoxy- | 90-05-1 | 931 | 889.8 | 1857.8 | 1861 | C ₇ H ₈ O ₂ |
| 165 | furan, 2-methyl- | 534-22-5 | 946 | 95.8 | 881.6 | 869 | C ₅ H ₆ O |
| 166 | 4H-pyran-4-one, 2,3-dihydro-3,5-dihydroxy-6-methyl- | 28564-83-2 | 892 | 1126.1 | 2263.8 | 2267 | C ₆ H ₈ O ₄ |
| 167 | 2(5H)-furanone, 3-methyl- | 22122-36-7 | 876 | 796.1 | 1714.8 | 1713 | C ₅ H ₆ O ₂ |
| 168 | thiazole | 288-47-1 | 945 | 421.3 | 1246.7 | 1248 | C ₃ H ₄ NS |
| 169 | 2-thiophene carboxaldehyde | 98-03-3 | 948 | 780.4 | 1691.8 | 1684 | C ₅ H ₄ OS |
| 170 | furan, 2-[(methylthio)methyl]- | 1438-91-1 | 857 | 640.5 | 1499.7 | 1491 | C ₆ H ₈ OS |
| 171 | 1-propanone, 1-(5-methyl-2-furanyl)- | 10599-69-6 | 801 | 770.7 | 1678 | 1670 | C ₈ H ₁₀ O ₂ |
| 172 | 1H-pyrrole-2-carboxaldehyde, 1-methyl- | 1192-58-1 | 905 | 727.9 | 1617.5 | 1626 | C ₆ H ₇ NO |
| 173 | furan, 2,2'-methylenebis- | 1197-40-6 | 909 | 721.2 | 1608 | 1632 | C ₉ H ₈ O ₂ |
| 174 | benzofuran | 271-89-6 | 887 | 642.0 | 1501.6 | 1489 | C ₈ H ₆ O |
| 175 | thiophene, 3-methyl- | 616-44-4 | 916 | 285.0 | 1115.1 | 1122 | C ₅ H ₆ S |
| 176 | pyrazine, 2-ethyl-3-methyl- | 15707-23-0 | 822 | 556.9 | 1396 | 1407 | C ₇ H ₁₀ N ₂ |
| 177 | 2-butanone, 4-(5-methyl-2-furanyl)- | 13679-56-6 | 809 | 793.4 | 1710.7 | 1705 | C ₉ H ₁₂ O ₂ |
| 178 | 2-furanmethanol | 98-00-0 | 924 | 757.5 | 1659.4 | 1660 | C ₅ H ₆ O ₂ |
| 179 | 2-furancarboxaldehyde, 5-methyl- | 620-02-0 | 939 | 694.6 | 1572.1 | 1570 | C ₆ H ₆ O ₂ |
| 180 | 1H-pyrrole, 1-(2-furanylmethyl)- | 1438-94-4 | 919 | 870.2 | 1827 | 1824 | C ₉ H ₈ NO |
| 181 | 4-cyclopentene-1,3-dione | 930-60-9 | 893 | 703.9 | 1584.5 | 1573 | C ₅ H ₄ O ₂ |
| 182 | maltol | 118-71-8 | 916 | 955.9 | 1964.4 | 1969 | C ₆ H ₆ O ₃ |
| 183 | phenol, 4-ethyl-2-methoxy- | 2785-89-9 | 873 | 993.1 | 2026.7 | 2032 | C ₉ H ₁₂ O ₂ |
| 184 | 1-(2-thienyl)-propanone | 13679-75-9 | 866 | 875.5 | 1835.2 | 1833 | C ₇ H ₈ OS |
| 185 | 2-furanone, 2,5-dihydro-3,5-dimethyl | | 858 | 748.2 | 1646.3 | 1639 | C ₆ H ₈ O ₂ |
| 186 | ethanone, 1-(3-thienyl)- | 1468-83-3 | 857 | 834.7 | 1772.6 | 1771 | C ₆ H ₆ OS |
| 187 | pyrazine, 2,6-diethyl- | 13067-27-1 | 870 | 581.6 | 1426.3 | 1444 | C ₈ H ₁₂ N ₂ |
| 188 | benzofuran, 2-methyl- | 4265-25-2 | 908 | 708.5 | 1590.6 | 1576 | C ₉ H ₈ O |
| 189 | pyrazine, 2,6-dimethyl- | 108-50-9 | 882 | 490.7 | 1320.3 | 1328 | C ₆ H ₈ N ₂ |
| 190 | pyrazine, ethyl- | 13925-00-3 | 915 | 496.6 | 1327.1 | 1337 | C ₆ H ₈ N ₂ |
| 191 | pyrazine, 2-ethyl-6-methyl- | 13925-03-6 | 906 | 540.7 | 1377.5 | 1386 | C ₇ H ₁₀ N ₂ |
| 192 | 3-hexanone | 589-38-8 | 939 | 216.9 | 1051.6 | 1053 | C ₆ H ₁₂ O |
| 193 | 2-butanone, 1-(2-furanyl)- | 4208-63-3 | 837 | 713.3 | 1597 | 1584 | C ₈ H ₁₀ O ₂ |
| 194 | pyrazine, methyl- | 109-08-0 | 959 | 434.6 | 1260.4 | 1266 | C ₅ H ₆ N ₂ |
| 195 | acetophenone, 4'-hydroxy- | 99-93-4 | 885 | 851.2 | 1797.3 | 1788 | C ₈ H ₈ O ₂ |
| 196 | ethanone, 1-(2-thienyl)- | 88-15-3 | 853 | 830.3 | 1766 | 1763 | C ₆ H ₆ OS |
| 197 | pyrazine | 290-37-9 | 928 | 383.9 | 1208 | 1212 | C ₄ H ₄ N ₂ |
| 198 | 2-isobutyl-3-methylpyrazine | 13925-06-9 | 840 | 625.0 | 1480.4 | 1490 | C ₉ H ₁₄ N ₂ |