

GERSTEL

MAKING LABS WORK

Nr. 59

aktuell

Lebensmittelanalyse

Thunfischimitat im Aromavergleich

■ Produktneuheiten

■ Thermodesorption

■ Neuste AppNotes



Frühling liegt in der Luft – Und neue Software überall

Liebe Leser,

2024 verspricht ein großes Jahr für Software mit spannenden neuen Entwicklungen zu werden:

Während die MAESTRO Software weiterhin tausenden von Anwendern weltweit eine große Hilfe und Unterstützung beim Betrieb verschiedenster GERSTEL-Produkte und -Lösungen ist, wird die

völlig neue MAESTRO LabFlow-Software mit integrierter Client-Server Architektur auf der analytica 2024 in München vorgestellt. MAESTRO LabFlow ist vollständig in die OpenLab[®]™-Software von Agilent[®] Technologies integriert und unterstützt viele Routine-Analysesysteme, indem es die Probenvorbereitung und -aufgabe mit der GC-MS- oder LC-MS-Analyse in einer besser rückverfolgbaren und vernetzten Weise kombiniert. Ebenfalls auf der analytica 2024 wird eine neue MOSH/ MOAH-Datenverarbeitungssoftware vorgestellt, die eine hocheffiziente und transparente Quantifizierung, Datenverarbeitung und kundenspezifische Berichterstattung von MOSH- und MOAH-Ergebnissen für



eine Verbesserung der Sicherheit von Lebensmitteln ermöglicht.

Nicht zuletzt wird die ODI 2 Software für die GC-Olfaktometrie in Kombination mit der weltweit führenden GERSTEL Olfactory Detection Port-Technologie neue Möglichkeiten zur effizienten Quantifizierung

und Auswertung von Geruchsanalysen bieten, auch im Rahmen von Panels.

Neben neuen Hardware-Lösungen berichten wir über GERSTELs langjähriges Engagement für Nachhaltigkeit, das mit der kürzlich erfolgten ISO 14001-Zertifizierung einen weiteren Schritt nach vorne gemacht hat. Haben wir Ihr Interesse geweckt? Dann zögern Sie nicht, weitere Informationen anzufordern oder uns zu kontaktieren. Gemeinsam gestalten wir Ihre Laborarbeit noch effizienter.

Mit freundlichen Grüßen,
Ihr GERSTEL-Team.

INHALT

PRODUKTNEUHEITEN	3
LEBENSMITTELANALYTIK / Thunfischimitat im Aromavergleich	4
INNOVATION / Kryogenfreie dynamische Fokussierung für die thermische Desorption.....	6
NEUESTE APPNOTES	8
IMPRESSUM	2

IMPRESSUM

Herausgeber

GERSTEL GmbH & Co. KG | www.gerstel.de
Eberhard-Gerstel-Platz 1 | 45473 Mülheim an der Ruhr

Wissenschaftlicher Beirat

Dr. Eike Kleine-Benne | eike_kleine-benne@gerstel.de
Dr. Oliver Lerch | oliver_lerch@gerstel.de
Dr. Malte Reimold | malte_reimold@gerstel.de

Grafische Umsetzung

Stefan Paura · Visuelle Kommunikation
www.paura.de

ISSN 1618-5900 · 04/2024

Der neue GERSTEL ^{Auto}Twister: Vollautomatisierter SBSE / Twister®-Workflow für lösungsmittelfreie „grüne“ Extraktion

GERSTEL
MAKING LABS WORK

Der GERSTEL ^{Auto}Twister revolutioniert den lösungsmittelfreien Extraktionsprozess durch eine vollständige Automatisierung des kompletten Workflows von der Probenextraktion bis zur Analyse. Dieses vollautomatisierte System kombiniert den hohen Automatisierungsgrad der SPME mit der Effizienz des GERSTEL Twister® und bietet Ihnen eine Vielzahl von Vorteilen, wie z.B.:

- hervorragende Empfindlichkeit im Vergleich zu Standardmethoden (z.B. DIN EN ISO 27108)
- Reduzierung von manuellen und repetitiven Arbeitsschritten
- Minimierung von Arbeitsaufwand für Labormitarbeitende
- Steigerung der Effizienz
- nachhaltigere Analytik durch einen reduzierten Verbrauch an Lösungsmitteln

Erleben Sie zusätzliche und verbesserte Funktionen, wie z.B. Barcodes zu integrieren und so eine Protokollierung



der Proben zu ermöglichen. Der neue quickMix 2 ist zudem heiz- und kühlbar. Mit der GERSTEL Wash & Dry Station wird das Reinigen und Trocknen der ^{Auto}Twister-Stäbchen automatisiert.

Labore können von einem geringeren Lösungsmittelverbrauch, einer verringerten Umweltbelastung und vor allem von einem geringeren Arbeitsaufwand bei der Probenvorbereitung profitieren.

Einführung der MAESTRO LabFlow Software

Die neue MAESTRO LabFlow Software bietet Ihnen die Möglichkeit des vernetzten und browserbasierten Arbeitens sowie die Nutzung einer Client-Server-Architektur in Ihrem Labor. Vollständig in die OpenLab® Software von Agilent® Technologies integriert, unterstützt sie unter anderem komplette Analysensysteme und kombiniert Probenvorbereitung und -aufgabe für die GC-MS- oder LC-MS-Analytik. Zusätzlich ermöglicht MAESTRO LabFlow durch Usermanagement, Methodenklassifizierung und Versionsverfolgung eine Rückverfolgbarkeit von Veränderungen.

MAESTRO LabFlow erleichtert Probenvorbereitungs- und Analysenworkflows und bietet standardmäßig

eine Vielzahl von vordefinierten Workflows. Weitere individuelle Workflows können einfach eingebunden und angepasst werden. Zudem verfügt sie über klar definierte Benutzerrollen und eine moderne Benutzeroberfläche.

Die Integration in die OpenLab 2 Software bietet einen integrierten Methodeneditor und ermöglicht vereinfachte Prozesse. Der fortschrittliche MAESTRO LabFlow Scheduler optimiert die Probenbearbeitung und vereinfacht das Workflow-Management. MAESTRO LabFlow steigert die Effizienz und eröffnet neue Dimensionen für Ihr Labor.

ISDP: Automatisierte Zugabe von internem Standard und Trocknung

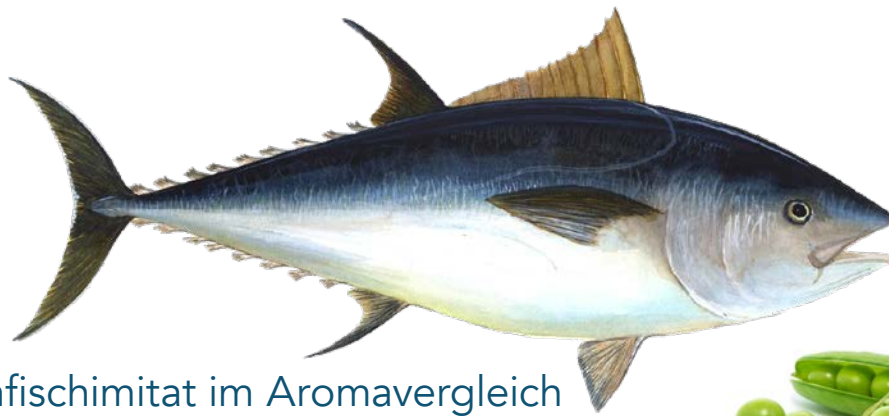
Maximieren Sie die Effizienz und Leistungsfähigkeit Ihrer Thermodesorptionsanalyse!

Das neue GERSTEL-Modul ISDP (Internal Standard and Dry Purge) für die Thermische Desorption (TD) ermöglicht die vollautomatische und hoch reproduzierbare Aufstockung von 3,5-Zoll-TD-Röhrchen, einschließlich GERSTEL 3.5⁺-Röhrchen, wie z.B. in internationalen Standardmethoden zur Überwachung der Luftqualität vorgeschrieben. Die effiziente Dry Purge-Funktion beseitigt Zweifel bei der Analyse von Proben mit hohem Feuchtigkeitsgehalt und gewährleistet gleichzeitig einen hohen Durchsatz durch optimierte Parallelverarbeitung. Zwei Versionen sind verfügbar:

- GERSTEL ISDP für die Zugabe von gasförmigem Standard
- GERSTEL ISDP⁺ für die flexibel wählbare Zugabe von gasförmigem oder flüssigem Standard

Beide ISDP-Versionen ermöglichen Standard-Spiking und Dry Purge für 3,5-Zoll-TD-Röhrchen, einschließlich GERSTEL TD 3.5⁺-Röhrchen, die bis zu 30 % mehr Sorptionsmittel enthalten als herkömmliche 3,5-Zoll-Röhrchen. Die Trockenspülung erfolgt in Richtung der Probenahme, um den Verlust von Analyten zu minimieren. Die automatische Zugabe von Standards erweitert den Umfang und die Effizienz der TD-Analyse und macht sie effizienter, genauer und zuverlässiger.





Thunfischimitat im Aromavergleich

Thun oder lassen?

Ob sich ein Fleisch- und Fischersatzerzeugnis auf Pflanzenbasis mit Erfolg vermarkten lässt, hängt entscheidend von dessen sensorischen Eigenschaften ab

Guido Deußing

Worum es geht: Pflanzliche Produkte, die als veganer oder vegetarischer Ersatz tierischer Erzeugnisse angepriesen werden, haben hohe Erwartungen in puncto Mundgefühl und Aroma zu erfüllen. Idealerweise sollten die sensorischen Eindrücke möglichst jenen des Originals ähneln. Dieses Ziel auch nur annähernd zu erreichen, ist gar nicht so einfach, und zwar nicht zuletzt angesichts der Vielzahl potenzieller geschmacksintensiver Verbindungen, die in Pflanzen zu finden sind und die das Gesamtaroma beeinflussen. Bei der sensorischen Bewertung und Feinjustierung pflanzenbasierter Proteinlieferanten, braucht es die instrumentelle Analytik.

Erste Schritte: Um die sensorisch aktiven, für das Fleisch- beziehungsweise Fischaroma wichtigen Verbindungen zu identifizieren und mögliche Störstoffe abzugrenzen, haben US-amerikanische Forschende die Aromastoffe in pflanzenbasiertem Thunfisch identifiziert und mit jenen verglichen, die in echtem Thunfisch in Konserven enthaltenen sind [1]. Als Verfahren wählten Kfoury et al. die sogenannten Sensory-Directed Flavor Analysis (SDA) [2].

Die Sensory-Directed Flavor Analysis (SDA) ist ein Verfahren, das die Gaschromatographie (GC) in Kombination mit der menschlichen Nase und der Massenspektrometrie (MS) verwendet, um in Lebensmittelmatrices Aromen zu bestimmen. Die Parallelschaltung der olfaktorischen Detektion (O) mit der MS-Detektion ermöglicht es, sensorisch aktive Bereiche im Chromatogramm zu erkennen

und zeitgleich die Analyten, die sensorisch aktiv und relevant sind, massenspektrometrisch zu bestimmen. Infolgedessen lässt sich die SDA anwenden, um Verbindungen zu bestimmen, die für die Erzeugung wünschenswerter Gesamtaromen in Lebensmitteln verantwortlich sind.

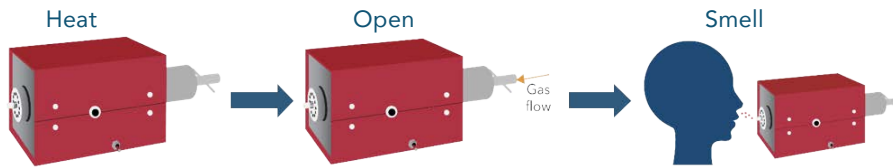
Analytische Details: Kfoury et al. nutzten die lösungsmittelfreie dynamische Headspace (GERSTEL-DHS), um die Analyten aus der Matrix zu extrahieren; sämtliche Schritte der Probenvorbereitung einschließlich Probenaufgabe und Analyse wurden automatisiert (GERSTEL-MultiPurpose Sampler, MPS) durchgeführt. Die anschließende Trennung erfolgte gaschromatographisch (Agilent 8890 GC), genauer gesagt mittels 1D/2D-GC. Zu diesem Zweck war der verwendete GC mit einem LTM-Modul (Low Thermal Mass) und zwei unterschiedlichen Trennsäulen (LTM 1: DB-5MS UI [Agilent] 30 m x 0,25 mm x 0,25 µm; LTM 2: DB-WAX [Agilent] 30 m x 0,25 mm x 0,25 µm) ausgestattet, um Abschnitte aus dem Chromatogramm, in denen es zu



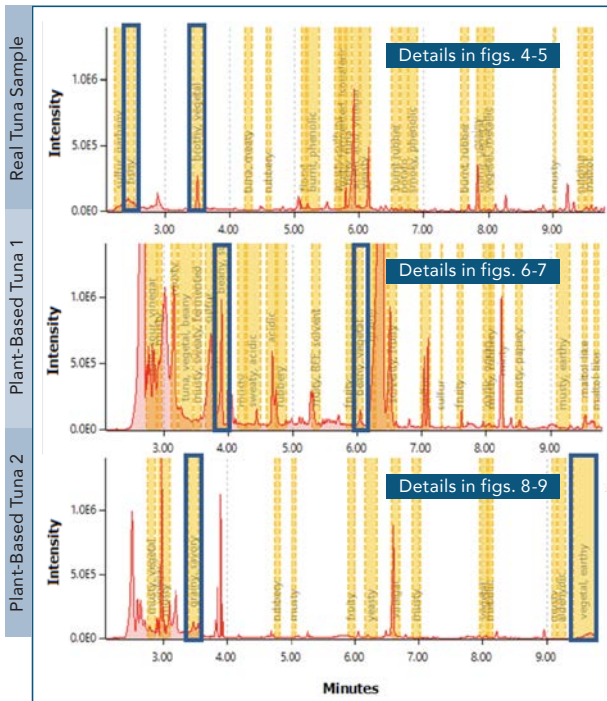
Figur 1: Selectable 1D/2D-GC-O/MS-System mit MPS robotic einschließlich Optionen für Flüssigaufgabe, Headspace, DHS, SPME, Thermodesorption, Toolwechsel und Olfaktorischer Detektion (ODP 4).

Tabelle 1: Sensorische Details realer und pflanzenbasierter Thunfisch-Proben

Probe	Sensorische Charakteristiken
Dosen-Thunfisch	fischig, brotig, fleischig
Pflanzenbasierter Thunfisch 1	bohlig, pflanzlich
Pflanzenbasierter Thunfisch 2	pflanzlich, Seegras



Figur 2: Der Thermal-Extractor (TE 2) liefert das im DHS extrahierte Gesamtaroma direkt aus dem Glas-Thermodesorptionsröhrchen an die menschliche Nase zur Verifizierung



Figur 3: GC-O/MS-Chromatogramme von Thunfisch (oben), pflanzlichem Thunfischimitat 1 (Mitte), und pflanzlichem Thunfischimitat 2 (unten) mit wichtigen Aromaregionen blau markiert

Überlagerung von Signalen kommt, herauszuscheiden. Dieser Heart-cut wurde auf die zweite Säule gegeben und der Versuch unternommen, die sich überlagernden Signale aufzutrennen. Die Säulenschaltung erfolgt ventillos und software-gesteuert. Die Identifikation der Analyten wurde mit einem massenselektiven Detektor (Agilent 5977B MSD) vorgenommen, und zwar simultan zur olfaktorische Detektion (GERSTEL-Olfactory Detection Port, ODP), die der sensorischen Einordnung der geruchsaktiven Verbindungen mit der Nase diene.

Expertenmeinung: Die Kombination des olfaktorischen Nachweises (O) einzelner sensorisch aktiver Verbindungen mit der 1D/2D-GC/MS sei wichtig, schreiben Kfoury et al., um die erwünschten natürlichen Aromen zu bestimmen, die geruchs- beziehungsweise geschmacksdominierend seien. Um zu sehen, ob sich mit ihrem DHS-1D/2D-GC-MSD/O-System eben solche Aromastoffe bestimmen und in einem Lebensmittel replizieren lassen, untersuchten Kfoury et al. reale Proben.

Die Proben aufs Exempel: Analysiert wurden echter Thunfisch in der Konserve und zwei pflanzenbasierte

Pendants. Die Analyten wurden mittels DHS kontinuierlich aus dem Dampfraum über der Probe mittels Stickstoffs herausgespült und auf Tenax TA in einem Thermodesorptions-Glasröhrchen angereichert. Ausgeheizt wurden die Röhrchen für die GC-MS-Analyse im TDU 2 beziehungsweise in einem Thermal-Extractor (GERSTEL-TE 2) um die Vollständigkeit des extrahierten Gesamtaromas zu bewerten. Davon ausgehend, dass sich alle flüchtigen Aromaverbindungen thermisch desorbiert in der Gasphase befanden, wurde der Liner in umgekehrter Richtung mit Stickstoff gespült. Die Geruchsstoffe wurden geballt am Gasauslass des TE 2 abgegeben. Der Geruchseindruck, den die Forschenden dort olfaktorisch erhielten, glich nach eigenen Angaben jenem der frisch geöffneten Lebensmittelprobe. Das Aroma des echten Thunfisch wurde von Kfoury et al. als fischig, brüsig und fleischig charakterisiert. Den Geruchseindruck des ersten pflanzenbasierten Thunfisch beschreiben die Forschenden als bohnenartig und pflanzlich, der zweite sei demnach geprägt gewesen durch Attribute wie getreidig, pflanzlich und algenartig.

Fazit: Die sensorische Prüfung verlief positiv und wurde als Beleg gewertet, dass sich mittels DHS ein repräsentatives Geruchsprofil erhalten lässt. Die SDA-Methodik ist insgesamt in der Lage, „wichtige sensorisch aktive Verbindungen in Thunfischproben zu identifizieren“, schreiben Kfoury et al. Die Verwendung von DHS liefert repräsentative Probenextrakte für die Analyse und mittels 1D/2D-GC-O/MS wurden Koelutionen aufgelöst. Der von ihnen beschriebene Ansatz erlaubt es, sensorisch aktive Verbindungen in einer Vielzahl von Probenotypen zu identifizieren. Hersteller pflanzenbasierter Fleischersatzprodukte sind damit in der Lage, den Produktgeschmack zu replizieren und die Wahrscheinlichkeit der Akzeptanz und Wertschätzung der Verbraucher zu erhöhen.

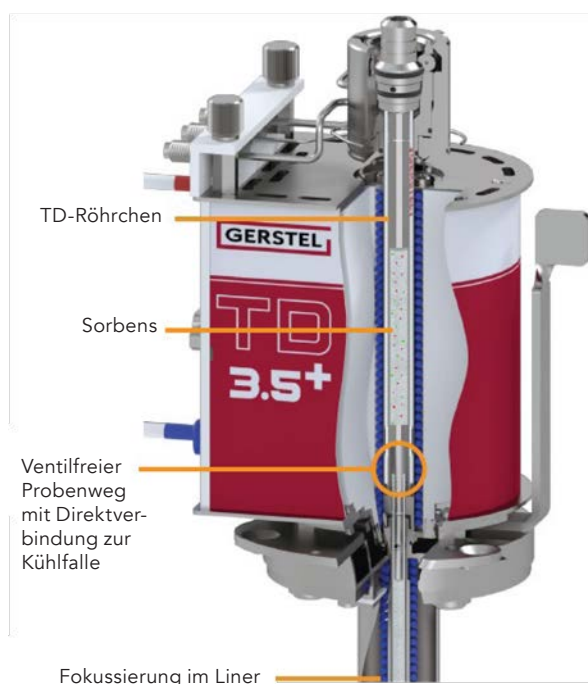
Referenzen:

- [1] Kfoury et al., Identification of Key Sensory-Active Flavor Compounds in Plant-Based Tuna Fish using Sensory Directed Analysis, GERSTEL AppNote 243, https://www.gerstel.com/de/Identification_of_Key_Sensory-Active_Flavor_Compounds
- [2] Ray Marsili (Editor), Sensory-Directed Flavor Analysis (Food Science and Technology) 1. Auflage (2006), <https://doi.org/10.1201/9781420017045>
- [3] Guido Deußing (2023), Thunfischimitat im Aromavergleich, Deutsche Lebensmittel-Rundschau 119(2): 72-78

Dynamische Fokussierung:

Ein neuartiges kryogenfreies Verfahren zur Bestimmung von VVOCs, VOCs und SVOCs

Die dynamische Fokussierung ist eine neuartige Technik im Bereich der Luftqualitätsüberwachung und der Analyse von Materialemissionen, die eine kryogene Kühlung ersetzt und gleichzeitig hervorragende Ergebnisse liefert. Mit Dynamic Focusing können analytische Labors sehr flüchtige, flüchtige und halbflüchtige organische Verbindungen (VVOCs, VOCs und SVOCs) mit hoher Genauigkeit und Präzision, niedrigen Nachweisgrenzen und hoher Effizienz bestimmen.



VVOC-, VOC- und SVOC-Analytik mit TD

Dynamic Focusing ist eine neuartige, kryogenfreie Technik, die in das GERSTEL-TD-Core-System integriert ist und für den Einsatz in der Thermodesorptionsanalyse von Luft entwickelt wurde.

Dynamic Focusing wird eingesetzt, um VVOCs, VOCs und SVOCs zu fokussieren und einzufangen, bevor sie zur Analyse auf die Gaschromatographiesäule (GC) überführt werden. Die Dynamic Focusing-Technik wurde erfolgreich strengen Tests unterzogen, einschließlich der Erfüllung der Anforderungen von Methoden wie U.S. EPA TO-17 und ISO 16000-6, und sie hat sich in laborübergreifenden Ringtests bewährt.

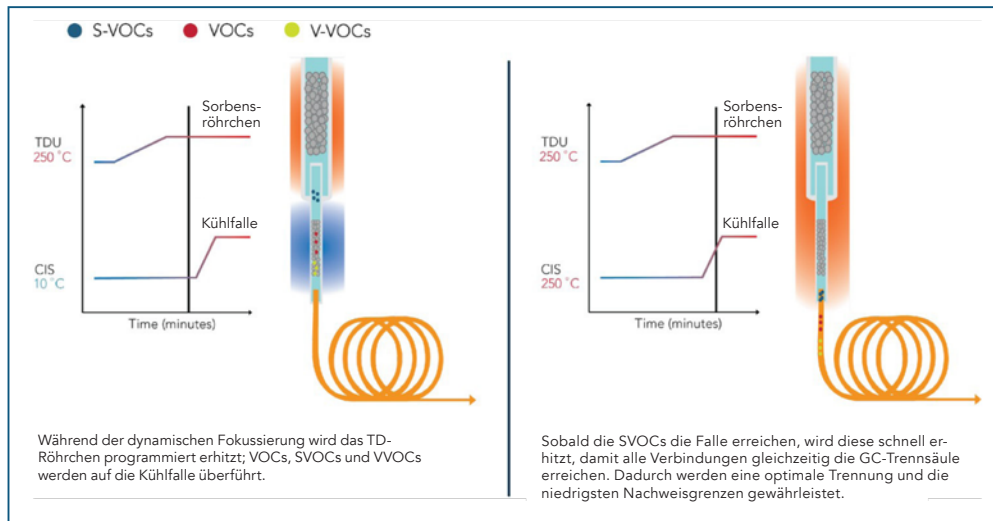
Kurze Beschreibung des Dynamic Focusing:

Dynamic Focusing unterscheidet sich in der Kühlfallen-Technologie von herkömmlichen Thermodesorptionsmethoden: Als Kühlfalle wird ein Liner mit einem einzelnen, im Vergleich zu Aktivkohle-basierten Sorbenzien relativ schwachen, Adsorbens genutzt, und die Falltemperatur wird auf +10 °C eingestellt. Anstatt in zwei getrennten Stufen zu fokussieren und zu desorbieren, werden diese Stufen überlagert: Mittel- bis hochsiedende Stoffe werden vom Sorptionsmittel eingefangen und beim Erhitzen desorbiert, während sehr flüchtige organische Verbindungen (VVOC) gerade so weit verlangsamt werden, dass sie in einem scharfen Band fokussiert werden, was zu bemerkenswert scharfen Peaks führt.

Die nachstehenden Grafiken veranschaulichen die dynamischen und statischen Fokussierungsprozesse zum Vergleich.

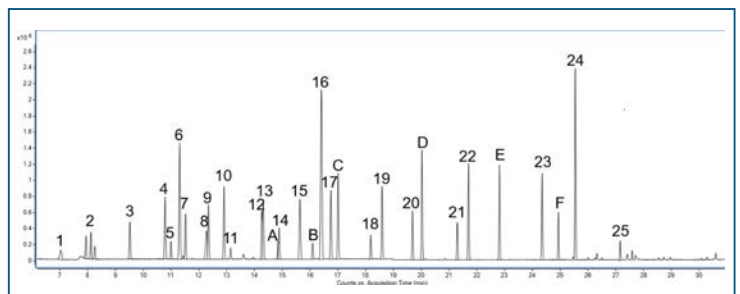


Präzises Timing von Temperatur und Gasstrom: beste Voraussetzungen für optimale Trennung



Vorteile der dynamischen Fokussierung:

- **Schlankes Systemdesign:** Der TD-Liner und die Falle sind direkt miteinander verbunden (Liner-in-Liner), und die GC-Säule wird direkt in die Falle eingesetzt, wodurch das Leervolumen minimiert wird und keine Ventile oder Transferleitungen erforderlich sind. Dieses Design reduziert aktive Oberflächen, die die Wiederfindung beeinträchtigen und Verschleppung verursachen können.
- **PFAS-freier Strömungsweg:** Verzicht auf Teflon™-Material im Strömungsweg der Analyten eliminiert Kontamination mit PFAS-Verbindungen sowie den Verlust von Verbindungen durch Sorption im PTFE, welches bei den Anforderungen heutiger Umweltanalysemethoden ein wichtiger Aspekt ist.
- **Kryogenfreie Kühlung:** Peltier-Elemente kühlen die Falle auf +10 °C, fokussieren so flüchtige Verbindungen wie Propylen (C3) und decken den gesamten Bereich der Analyten für Standard-Luftqualitätsüberwachungsmethoden.
- **Benutzerfreundlichkeit und geringer Wartungsaufwand:** Einfache Verwendung, Wartung und Fehlerbehebung, was zu einer verbesserten Standzeit führt
- **Breites Spektrum an Anwendungen:** Die dynamische Fokussierung ist für eine Reihe von Standardmethoden geeignet, darunter US EPA TO-17, ISO 16000-6 und ASTM D6196.



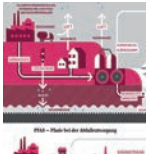
Chromatogramm eines TO-17-Gasstandards (numerisch gekennzeichnet) mit einem zugesetzten internen Gasstandard (alphabetisch gekennzeichnet). Basierend auf dynamischer Fokussierung und Full-Scan-MS-Detektion.
1 - Propylen, 2 - 1,3-Butadien, 24 - Ethyltoluol, 25 - Benzylchlorid

Die kryogenfreie dynamische Fokussierung für die Thermodesorption bietet ein neues Maß an Leistung und Einfachheit in der Luftqualitätsüberwachung. Diese innovative Technik bietet Forschern und Umweltwissenschaftlern ein leistungsfähiges Instrument zur Bestimmung flüchtiger, flüchtiger, und halbflüchtiger organischer Verbindungen mit hoher Genauigkeit und Präzision gepaart mit hoher Effizienz. Durch den Wegfall der kryogenen Kühlung sowie der Ventile im Probenweg sowie der Transferleitungen vereinfacht die Dynamic-Focusing-Technologie den gesamten Arbeitsablauf für die gezielte Bestimmung von VVOC, VOC und SVOC und liefert zuverlässig Daten bei gleichzeitiger Reduzierung der Wartungskosten und Systemausfallzeiten.

Neueste AppNotes

GERSTEL veröffentlicht regelmäßig neue Anwendungsberichte, die neuesten AppNotes sind unten aufgeführt. Einen umfassenden Überblick finden Sie unter: www.gerstel.com/de/applications/all

Lebensmittel-, Geschmacks- und Duftstoffanalyse



PFAS in Lebensmitteln tierischen Ursprungs mit Online-SPE-Reinigung und LC-MS/MS

Perfluorierte PFAS-Verbindungen werden aus Ei, Fisch und Fleisch mit einem QuEChERS-ähnlichen Ansatz extrahiert und mittels automatisierter SPE-HPLC-MS/MS bestimmt ...



Aromaanalyse von gekochtem Rinderhackfleisch und pflanzlichem Fleisch mittels DHS

Die Aromaanalyse ist von größter Bedeutung für die pflanzliche Fleischindustrie. Die Fähigkeit, Aromen nachzubilden und echtes Fleisch zu imitieren, ist ein wichtiger Bestandteil ...



VOCs und sensorische Profile von Bier im Vergleich zu alkoholfreiem Bier

Alkoholfreie Biere (NA-Biere) haben in letzter Zeit Marktanteile gewonnen, viele Verbraucher bevorzugen gesündere Getränkeoptionen. Um die Akzeptanz der Verbraucher zu gewinnen, ...



Vollständig automatisierte Bestimmung von 3-MCPD, 2-MCPD & Co

3-MCPD, 2-MCPD und Glycidol in Speiseölen und -fetten basierend auf ISO 18363-4 (Zwagerman/Overman-Methode), hocheffiziente und genaue Analyse ...

Materialemissionen



VDA 278 Methodentransfer auf TD 3.5+

Stoffliche Emissionen in Kraftfahrzeugen sind ein wichtiges Thema für die Automobilbranche. Die VDA 278-Methode ist weit verbreitet für die Analyse ...

Metabolomics:



VOC in Atemluft für die Überwachung des Glukosestoffwechsels: mit dem GERSTEL TD 3.5+

Atemprobenahme und -analyse helfen bei der Diagnose und Überwachung von Krankheiten. Bestimmte Verbindungen in der ausgeatmeten Luft werden ...



TMS-Derivatisierung in Echtzeit

GC-MS nach Derivatisierung ist in Metabolomics-Studien weit verbreitet. Um eine hohe Genauigkeit zu erreichen, müssen alle Proben identisch behandelt werden. Die Automatisierung ermöglicht ein perfektes Timing aller Schritte ...

Lösungsmittelfreie Extraktionstechniken:



Vier Immersions-Extraktionstechniken mit dem GERSTEL Twister® und TF-SPME im Vergleich

Verschiedene Extraktionstechniken mit PDMS-Twister® und PDMS/HLB TF-SPME werden auf ihre Effektivität hin verglichen. Die Gewinner sind ...



MAKING LABS WORK

GERSTEL GmbH & Co. KG
Eberhard-Gerstel-Platz 1
45473 Mülheim an der Ruhr

Folgen Sie uns:



www.gerstel.de

GERSTEL®, GRAPHPACK® und TWISTER® sind eingetragene Marken der GERSTEL GmbH & Co. KG. · Änderungen vorbehalten.
Agilent® is a registered Trademark of Agilent Technologies, Inc. · LinkedIn, the LinkedIn logo, the IN logo and InMail are registered trademarks or trademarks of LinkedIn Corporation and its affiliates in the United States and/or other countries · Copyright by GERSTEL GmbH & Co. KG