

OLFACTORY DATA INTERPRETER

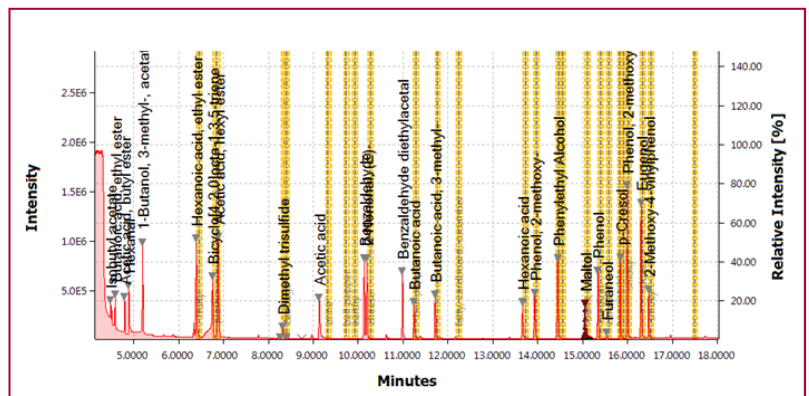
GC/O-DATEN BEWERTEN LEICHT GEMACHT

GERSTEL hat mit dem „Olfactory Data Interpreter“ (ODI) eine Softwarelösung entwickelt, mit der sich GC/O-Daten einfacher als bisher analysieren und auswerten lassen.

Der GERSTEL-Olfactory-Data-Interpreter (ODI) erlaubt eine schnelle und zuverlässige Auswertung olfaktorischer Informationen und damit die Identifizierung unbekannter geruchsaktiver Verbindungen. Chromatographiedaten, die mittels eines Massenspektrometers (MSD) oder eines Flammenionisationsdetektors (FID) in Kombination mit einem GERSTEL-OlfactoryDetectionPort (ODP) aufgezeichnet wurden, werden nach dem Starten der Software ins Programm geladen. Der ODI überprüft, erkennt und importiert passende Datenformate automatisch. Importiert werden auch die vom Anwender mit dem „Olfactory Intensity Device“ (im Zuge des Abriechens mit dem ODP) manuell registrierten Einschätzungen der Geruchsintensitäten sowie die zeitgleich von einer Spracherkennungssoftware aufgezeichneten gesprochenen Geruchseindrücke.

Dieser Strauß an Informationen wird von der ODI-Software übersichtlich dargestellt, und zwar sowohl als Olfaktogramm und Chromatogramm als auch tabellarisch. Der Anwender erhält einen detaillierten Überblick über die während der Geruchsanalyse aufgezeichneten Signale, über die für die Bewertung der GC/O-Daten erforderlichen Parameter wie Retentionszeiten, Retentionsindices (RI) und GC/O-Intensitäten sowie über die olfaktorischen Deskriptoren, also die aufgezeichneten verbalisierten Geruchseindrücke. Die gespeicherten Audiofiles lassen sich nachträglich aufrufen und anhören. Sofern sich Veränderungen zum ersten Geruchseindruck ergeben haben, können die verschrifteten Geruchsimpresionen editiert und modifiziert werden. Ähnlich verhält es sich mit den MS-Scan-Daten. Das Resultat der Datenbanksuche lässt sich mit den von der ODI-Software errechneten Retentionsindices (RIs) abgleichen. Zur Bewertung olfaktorischer Informationen und zur Ermittlung von Schlüsselverbindungen eines Geruchseindrucks stellt der Olfactory Data Interpreter dem Anwender mehrere hilfreiche Funktionen zur Verfügung:

Kumulative Olfaktogramme: Wird eine Probe in verschiedenen Verdünnungen mit der GC/O vermessen, lassen sich die resultierenden Olfaktogramme



komfortabel in der ODI-Software kumulieren, spricht der ODI addiert die jeweiligen Geruchsintensitäten zu einem Gesamtwert. Die Substanzen, die auch in der höchsten Verdünnung noch geruchsaktiv respektive oberhalb der Geruchsschwelle wahrgenommen werden, liefern im kumulativen Olfaktogramm die größten Signalhöhen. Die Funktion „Kumulative Olfaktogramme“ gibt dem Anwender also auf eine schnelle und zuverlässige Weise Auskunft darüber, welche Verbindungen auch in geringer Konzentration den Geruchseindruck prägen und somit zu den potentesten geruchsaktiven Komponenten in der Probe zählen.

Aromaextraktverdünnungsanalyse (AEDA): Die ODI-Software ermöglicht die effiziente Auswertung der klassischen Aromaextraktverdünnungsanalyse (Aroma Extract Dilution Analysis, AEDA) mit definiertem Verdünnungsfaktor (Flavor Dilution, FD). Der ODI führt alle Berechnungen durch und ermittelt den FD, dessen Höhe der Intensität einer am Geruch beteiligten Substanz entspricht. Die Software überführt die ermittelten Informationen in einen druckfähigen Report.

Panel-Analyse: Wird eine Probe von mehreren Anwendern im Rahmen einer Panel-Analyse olfaktorisch untersucht, lässt sich aus dem vorhandenen Datenmaterial ermitteln,



Sie haben eine Nase für Aromen und einen Sinn für Hygiene und Sicherheit? Profitieren Sie jetzt vom neuen ODP 4 und der ODI-Software. Mehr zum Upgrade unter www.gerstel.de oder per E-Mail an info@gerstel.de



welcher Geruchseindruck von allen Panellisten wahrgenommen wurde. Diese Information kann sich bei der weiteren Analyse und Aromaidentifizierung als sehr hilfreich erweisen; sie von Hand zu generieren, ist mit einem erheblichen Arbeits- und Zeitaufwand verbunden. Der Olfactory Data Interpreter führt die Auswertung der Panel-Analyse auf Mausklick durch und liefert im Nu die Detektionsfrequenz jeder Verbindung.

MS-Bibliothekssuche: Die ODI-Software integriert zahlreiche Funktionen bezüglich Extraktion, Aufreinigung und Interpretation von Massenspektren. Die Spektrenerkennung erfolgt unter Hinzuziehung existierender Bibliotheken unterschiedlicher Dateiformate. Die Experten aus dem GERSTEL-Applikationslabor empfehlen die NIST-AMDIS-Software, die aus der ODI-Software heraus aufgerufen wird; sie erlaubt eine Dekonvolution der Daten.

Fazit: Der GERSTEL-ODI unterstützt auf einfache und effiziente Weise die rasche Aufklärung und Identifizierung unbekannter, mittels GC/O-Analyse ermittelter geruchsaktiver Verbindungen. In Bezug auf die Handhabung und Verarbeitung von GC/O-Daten bietet der Olfactory Data Interpreter (ODI) jene Toleranzbreite und Flexibilität, die erforderlich ist, um die analytischen Unschärfen wirksam und zielgerichtet zu handhaben, die sensorischen Analysen typischerweise innewohnen. Für die Auswertung von GC/O-Daten sowie für die Bestimmung und Identifizierung unbekannter geruchsaktiver Verbindungen erweist sich die GERSTEL-ODI-Software als nützliches, wirksames und effizientes Tool.



High-Performer ODP 4

GERSTEL hat den führenden „Olfactory Detection Port“ (ODP) aus Sicht der Anwender auf den Prüfstand gestellt, nach neuesten Gesichtspunkten überarbeitet und neu aufgelegt: Der ODP 4 bietet den Anwenderinnen und Anwendern interessante Neuheiten. Die Arbeitsposition des ODP 4 ist zum Beispiel frei wähl- und fixierbar, was die Ergonomie der sensorischen Bewertung von Duftstoffen mit der Nase parallel zur MS-Detektion positiv beeinflusst. Das neue Design ermöglicht ein angenehmeres Arbeiten, und zwar nicht zuletzt aufgrund einer bauartbedingten niedrigen Oberflächen-temperatur, auch ohne Glastrichter, was eine empfindlichere Wahrnehmung bei kleinerem Make-up-Gasfluss ermöglicht. Die Nasenpositionierungsmarke lässt sich mühelos den individuellen Erfordernissen anpassen: Die Nase kann optimal platziert werden, was nicht zuletzt Brillenträger sehr zu schätzen wissen. Darüber hinaus verfügt der neue ODP 4 auch über die herausragenden Stärken des ODP 3; dazu zählt der problemlose Transfer von Hochsiedern.

Die „Sniff & Trap“-Option erlaubt das gezielte Einfangen von Analyten an jeder beliebigen Stelle im Chromatogramm auf einem Thermodesorptionsröhrchen. Im Lieferumfang enthalten ist der GERSTEL-Olfactory-Data-Interpreter (ODI), der eine schnelle und zuverlässige Zuordnung und Identifizierung von Gerüchen ermöglicht (s. Seite 29).

