

热裂解应用合集

PYRO Application

- 微塑料
 - 材料、日用品
 - 法医、刑侦
 - 考古、文物
 - 生物样品
 - 食品、烟草
- 聚合物
 - 添加剂
 - 粘合剂
 - 塑化剂
 - 香料香精



热裂解技术综述

热裂解技术运用热能破解化学键，将大分子物质转化为小分子物质。通过观察高分子化合物在热裂解过程中的反应，或分析生成的分子碎片，可以揭示原始高分子的结构。这种方法通过热裂解将非挥发性大颗粒物质转化为多种挥发性小分子，极大地扩展了气相色谱的应用领域，尤其在聚合物分析方面具有重要意义。

当热裂解的条件（如温度、加热速率和时间）得到精确控制并重复时，产生的分子碎片将具有特定的特征，其种类和分布保持恒定。这种特性使得热裂解产物类似于指纹，能够提供独特的识别信息。

GERSTEL PYRO 热裂解仪

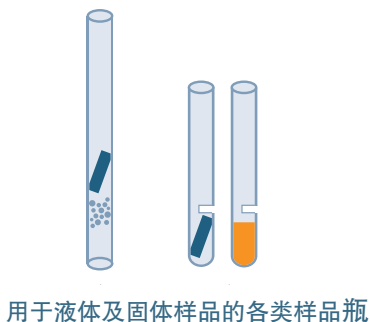
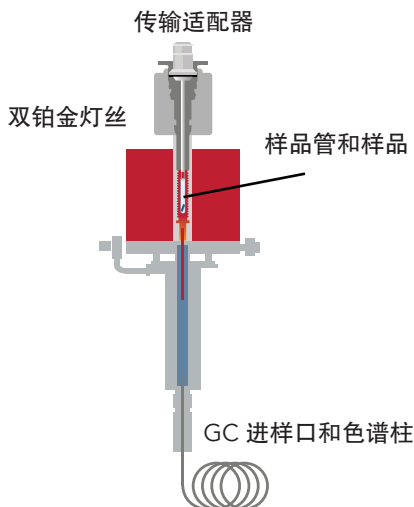
PYRO 是一款先进的热裂解设备，是热脱附单元 TDU 的一个升级模块。此设备可以加热难以挥发的有机物质至1000°C 的高温进行热裂解。GERSTEL PYRO 可以自动进行固体和液体的热裂解，并且可以和 GC/MS 技术结合使用，来分析热裂解过程中产生的各类分解产物。这项技术在许多关键领域，包括产品质量控制、新产品开发、法医学以及食品行业中，都扮演着极其重要的角色。

GERSTEL PYRO 使用四点测量技术来监控铂金灯丝的电阻变化，并据此调整电流，以确保加热温度的精确和稳定。是市场上唯一一款可以监测并校正样品温度变化的热裂解器，大大提高了分析结果的精确度。独有的“无阀、无传输线”设计，有效降低了样品残留和交叉污染的风险，并提高了高沸点化合物的回收率。

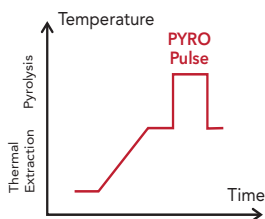
独特的程序升温功能，能够灵活地满足各种方法开发需求。它支持“热脱附+热裂解”的复合升温模式，这意味着既可以分析挥发性化合物，也可以对热裂解产物进行研究，有效减少了二者之间的干扰。设备的升温与进样模式极为灵活，能够实现多级热裂解，并能够获得单个或叠加的热裂解色谱图，这使得数据分析更为简便、准确，对于痕量物质的检测尤其有效。“智能阶梯热裂解法”更是一个万能的方法，适用于所有样品，无需进行繁琐的方法开发。

PYRO 的优势

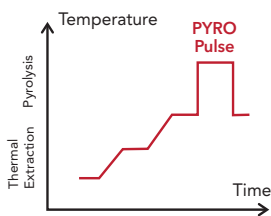
- 灵活升温程序，可实现“热脱附+热裂解”以及“溶剂排空”技术
- 独有的“智能阶梯热裂解法”，一个方法通吃所有样品
- 灵活的方法开发，可实现“叠加进样”，提高检测灵敏度
- 最佳传输效果“无阀 无传输线”，大大降低了系统污染和残留
- 自动化程度高，高通量，可容纳120个样品
- 精确控温，唯一可以验证和校正样品处温度的热裂解器
- 实现各种热裂解功能：闪蒸式，多级式，逸出气体法
- 占地小：整个系统安装在 GC 进样口上



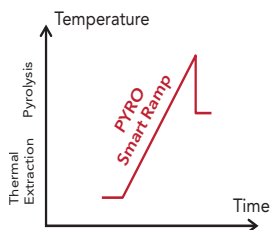
“无阀、无传输线”设计
并配有大体积冷进样系统（可做冷阱）



闪蒸裂解

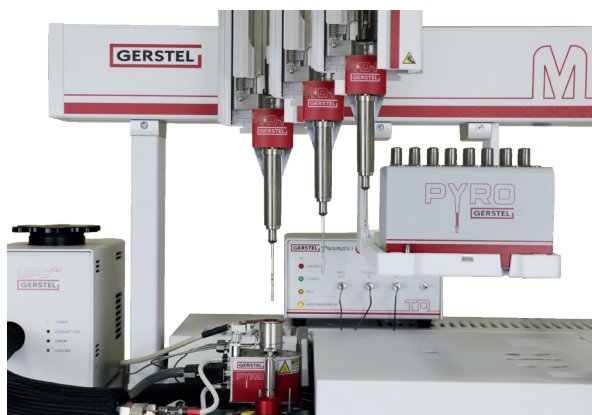


热脱附+闪蒸热裂解
/溶剂排空



智能梯度热裂解（SRP）
/逸出气体法（EGA-MS）

灵活，精确的程序升温功能，使您可以实现各种热裂解功能，如闪蒸裂解、模拟热重分析的逸出气体法EGA裂解、多级热裂解、热脱附+热裂解、反应热裂解、样品在线衍生等，提供最全面、准确的样品信息。



对同一样品进行多级式热裂解

水质

热解气相色谱质谱法鉴定水中的微塑料

结合气相色谱质谱法，使用 PYRO 系统对不同水源采集的塑料样本进行了分类与分析，这些水源包括灰水、径流水、池塘水和瓶装水。首先，取1升水样并通过10 μm PTFE 过滤纸进行真空抽滤。随后，将过滤器在常温下放置一夜以自然风干。采用1.2毫米直径的冲孔器从滤纸上取样。将采集的样品整体放置于热裂解管中，通过适配器连接，并将其放置在密封的40位 PYRO 托盘中进行处理。

PYRO

热裂解方法： 智能梯度法
 温度参数： 300°C, 5.0°C/s
 → 800°C

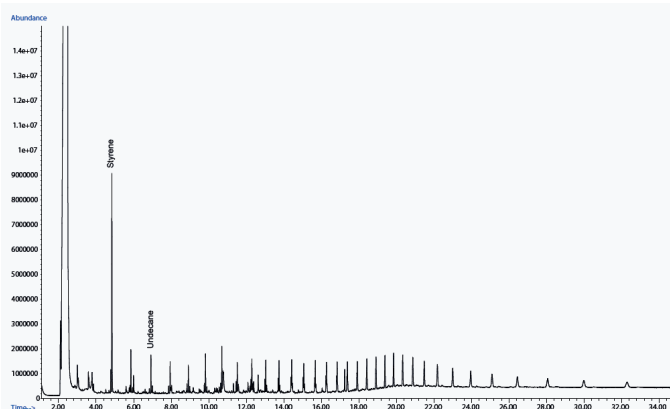
CIS 进样口

分流比： 25:1
 温度参数： 300°C 恒温

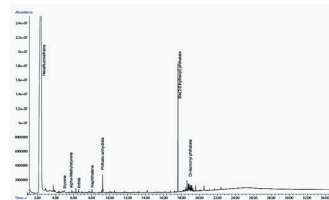


以上分别为灰水*、流经水、池塘水、瓶装水过滤后的滤纸。

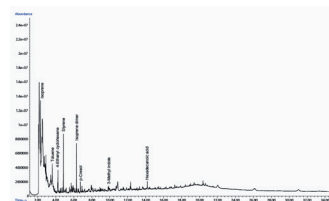
* 是指来自浴室、水槽、洗衣机和洗碗机等地方的相对较为清洁的废水。



1.2毫米的灰水过滤纸冲压片的热裂解分析图。可以明显看到聚乙烯的形态，这说明PE颗粒被过滤器有效拦截。同时，分析图中检测到苯乙烯，这可能来源于面部磨砂膏配方中除聚乙烯外的其他添加剂。



池塘水过滤纸的热裂解分析图



径流水过滤纸的热裂解分析图

使用热解气相色谱质谱法测定水中和沉积物中的微塑料

本应用详细介绍了利用 PYRO 系统对湖泊中微塑料样本，包括沉积物中的微塑料进行分析的方法，并在此基础上，对市售产品中的微塑料含量进行了定量测定。

水中微塑料处理：将一小块小于一毫克的样品放入一小块石英棉顶部的石英管热解容器中。

沉积物中微塑料处理：使用带有石英棉的开口石英热解管来过筛样品，然后将管在100°C 的烘箱中干燥以除去任何残留的水份。

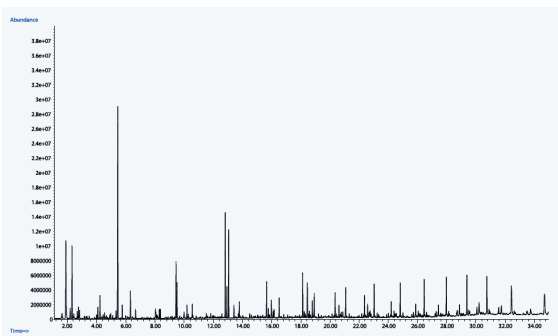
PYRO

热裂解方法：智能梯度法

温度参数： 300°C, 5.0°C/s
→ 800°C

CIS 进样口

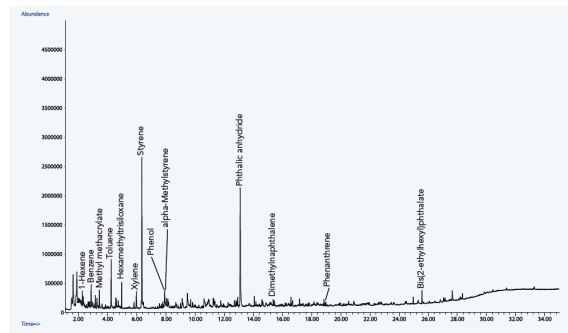
分流比： 75:1
温度参数： -120°C, 12°C/s
→ 325°C (3 min)



红色塑料样品的热裂解图，具有典型聚丙烯图案



湖水中得到的塑料样品



经过对ER-07沉积物样品的热裂解色谱图分析，成功识别出了甲基丙烯酸酯、苯乙烯、硅氧烷以及邻苯二甲酸双(2-乙基己基)酯。除此之外，还发现了苯酚（多酚）和邻苯二甲酸酐（聚酯）。

下表展示了沉积物样品分析的详细结果

ER-02	Styrene, methyl methacrylate, siloxanes, bis(2-ethylhexyl) phthalate
ER-02 4-6 cm	Styrene, siloxane, creosol, levoglucosan, bis(2-ethylhexyl) phthalate
ER-07	Styrene, methyl methacrylate, siloxanes, bis(2-ethylhexyl) phthalate, phthalic anhydride, phenol
ER-60	Styrene, methyl methacrylate, siloxanes, bis(2-ethylhexyl) phthalate, polyethylene
ER-109	Styrene, methyl methacrylate, siloxanes, bis(2-ethylhexyl) phthalate, wax



AppNote 212
下载二维码

微塑料

水质（沉积物）

鉴定海洋微塑料颗粒中的聚合物类型和添加剂

采用多级热裂解气相色谱质谱联用技术，有效实现了微塑料颗粒及其相关有机塑料添加剂聚合物类型的同步鉴定。该技术通过比较样品的热裂解谱图与标准聚合物热解谱图，准确识别了聚合物种类。分析的颗粒包括聚乙烯（PE）、聚丙烯、聚苯乙烯、聚酰胺、氯化聚乙烯及氯磺化聚乙烯等。这些聚合物中包含了一系列塑化剂，如邻苯二甲酸二乙基己酯、邻苯二甲酸二丁酯、邻苯二甲酸二甲酯、邻苯二甲酸二异丁酯、邻苯二甲酸二甲酯、苯甲醛，以及2，4-二叔丁基苯酚。

多级热裂解技术能够在单次操作中先于高温热解过程中在较低温度下提取有机塑料添加剂，作为一种有效手段。此方法通过先进行低温热脱附，再实施高温热裂解，实现了对材料内挥发性化合物（包括添加剂）的种类与含量同时确定的目的。得益于热脱附过程滤除了干扰化合物，热解图因此不受这些化合物的干扰。

利用热裂解-气相色谱/质谱技术，具备足够的灵敏度，可以检测出质量小于350 μg 的微塑料颗粒中的增塑剂、抗氧化剂和香料等添加剂。这使得对微塑料颗粒的化学成分、毒理学性质以及其潜在的内分泌干扰风险进行评估成为可能。

PYRO

热裂解方法：多级式热裂解

温度参数：

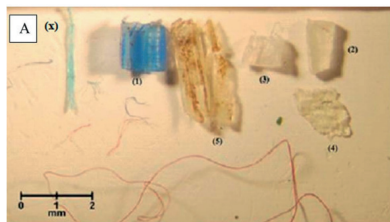
第一级：40°C (60 min) →
350°C (10 min)

第二级：700°C (60 s)

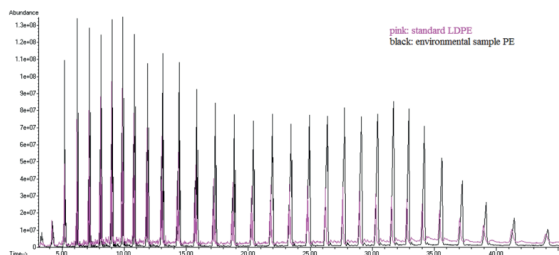
CIS 进样口

分流比：60:1

温度参数：-50°C, 12°C/s
→ 300°C



从沉积物中提取的潜在微塑料的显微图像



文献下载二维码

环境微塑料中发现的聚乙烯热裂解图（黑色），与聚乙烯标准样品热裂解图（粉色）重叠

文献来源：Environ. Sci.: Processes Impacts, 2013, 15, 1949
<https://doi.org/10.1039/C3EM00214D>

空气

对室内空气中的微/纳米塑料进行尺寸分辨识别和定量分析

人们通过呼吸接触到了不同水平的微纳米塑料，然而，对于空气中小于1微米的微纳米塑料的测量，研究得很少，这主要是因为缺少分析方法。本文研发了一种新型的热解气相色谱环离子淌度质谱仪（pyr-GCxcIMS），用于识别和量化室内空气中的微纳米塑料。针对四种常见的塑料类型——聚苯乙烯（PS）、聚乙烯（PE）、聚丙烯（PP）和聚甲基丙烯酸甲酯（PMMA）进行了鉴定。

分析过程分使用多级式热裂解技术：首先，热脱附单元被升温至320°C，目的是对半挥发性化合物（如塑料添加剂）进行解吸。TDU 分析完毕后，将热解模块的温度提升至500°C 对同一样品进行热裂解处理。

PYRO

热裂解方法：多级式热裂解

温度参数：

第一级：320°C (10.43 min)

第二级：700°C (60 s)

CIS 进样口

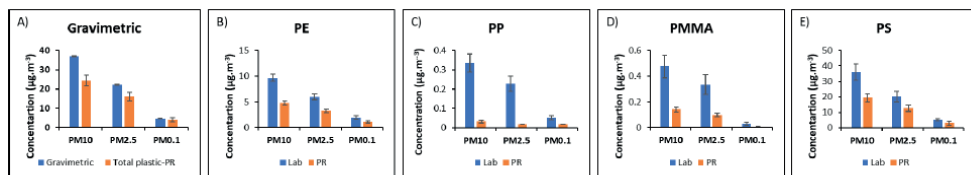
分流比：40:1

温度参数：320°C 恒温

Polymer	Linear range (μg)	Linearity (R^2)	Recovery (n=6)	MDL ($\mu\text{g}\cdot\text{m}^{-3}$) (n=8)
PE	0.2-5	0.994	113 $\pm$ 19	0.040
PP	0.1-5	0.992	95 $\pm$ 25	0.12
PMMA	0.1-5	0.998	61 $\pm$ 29	0.005
PS	0.2-5	0.984	114 $\pm$ 23	0.407



文献下载二维码



在私人住宅中，大约57–67% 的微纳米塑料浓度为 $24 \pm 3 \mu\text{g}/\text{m}^3$ 。直径小于 $2.5 \mu\text{m}$ 的颗粒物中，私人住宅里总颗粒物的50–60% 是塑料。非靶性筛查显示，存在塑料添加剂，例如 TDCPP（磷酸三（1,3-二氯-2-丙基）酯），其丰度与聚氨酯（PU）的丰度相关。这种情况与它们作为阻燃剂在 PU 软垫家具和建筑隔热材料中的应用一致。这项研究提供了微纳米塑料暴露的证据，微纳米塑料占室内 PM2.5 的一半以上，强调了进一步研究微纳米塑料及其携带的塑料添加剂的暴露途径的必要性。

文献来源：J. Am. Soc. Mass Spectrom. 2024, 35, 2, 275 – 284
<https://doi.org/10.1021/jasms.3c00362>

颗粒特性和 VOCs

TD-Pyr-GC-MS 同时测定塑料颗粒特性和吸附有机化合物

微米、亚微米与纳米级别的塑料颗粒被越来越多地认为是微量有机化合物的载体。为了分析这些聚合物上附着的微量有机物，通常需要进行繁琐的提取步骤。而采用新开发的热解吸-热解气相色谱质谱联用 (TD-Pyr-GC/MS) 技术，可以迅速识别微米、亚微米和纳米颗粒，以及它们表面及短链聚合物上的微量有机化合物，且无需进行任何中间传输过程。这一方法确保了高通量的定性分析，对于痕量物质和聚合物类型的识别非常有效。由于每个样本的分析时间只需2小时，因此得以实现高通量分析。此方法是少数可应用于纳米塑料颗粒研究的分析技术之一。在此过程中，最初吸附的物质通过热解吸 (TD) 技术从颗粒中释放出来；然后，聚合物通过热解 (PY) 技术进行裂解。这两种颗粒处理技术都直接与气相色谱-质谱联用系统 (GC-MS) 连接，分别用于分析热解吸分子和热裂解产物。

PYRO

热裂解方法：多级式热裂解

温度参数：

第一级：120°C (5 min)

第二级：200°C (5 min)

第三级：280°C (5 min)

第四级：800°C (0.3 min)

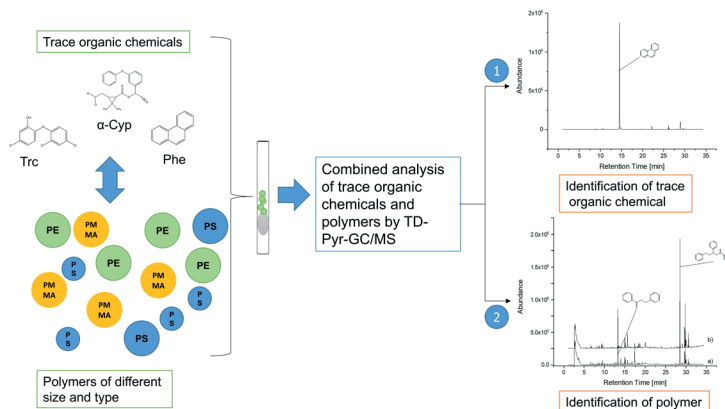
CIS 进样口

分流比：不分流/100:1

温度参数：-50°C, 12°C/s

→ 300°C

/350°C 恒温



文献来源：Molecules 2020, 25, 4985
<https://doi.org/10.3390/molecules25214985>



文献下载二维码

聚丙烯酸酯、聚甲基丙烯酸酯

聚丙烯酸酯和聚甲基丙烯酸酯是用于各种产品的两类重要聚合物。聚丙烯酸酯用于制造印刷油墨、涂料和油漆、密封剂、粘合剂和纺织纤维。聚甲基丙烯酸酯用于制造范围广泛的医疗设备以及用于制造电子产品和计算机、窗户、灯、标志和用于隐形眼镜、眼镜和汽车零件的模制树脂的挤压板材。

PYRO

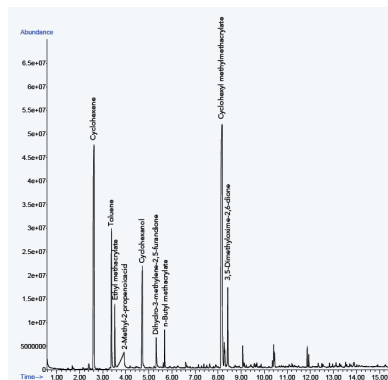
热裂解方法：智能梯度法

温度参数：300°C, 5.0°C/s
→ 800°C

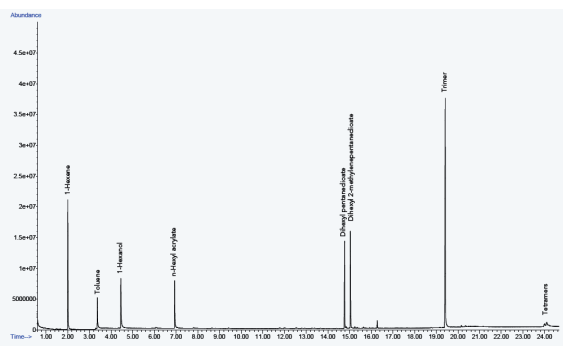
CIS 进样口

分流比：50:1

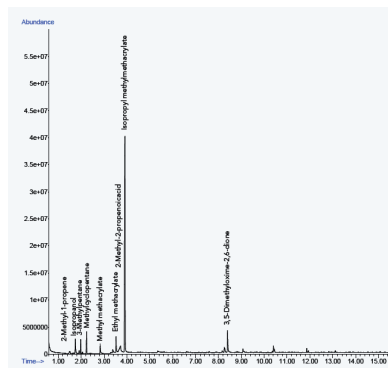
温度参数：300°C 恒温



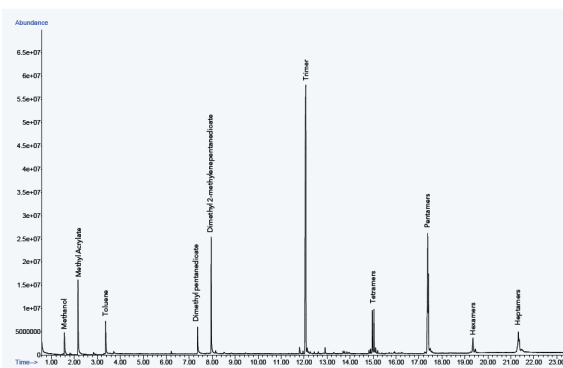
聚甲基丙烯酸环己酯的热裂解图



聚丙烯酸正己酯的热裂解图



聚甲基丙烯酸甲酯的热裂解图



聚丙烯酸甲酯的热裂解图



AppNote 241
下载二维码

尼龙、含尼龙产品

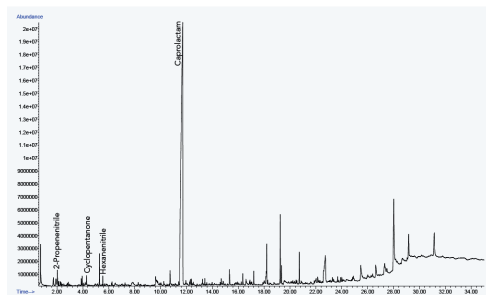
尼龙是一类重要的合成聚合物，可用于多种产品，如制造服装、长袜和军事装备的纤维，以及含有细线的产品，如牙刷、油漆刷和钓鱼线。此外，尼龙树脂还用于包装塑料和医疗用品。使用同一个“智能梯度热裂解法”，分析各种样品：尼龙 6、11、12、6/6、6/10、6/12、6(3)/T，及多种尼龙产品。此方法而无需优化热解温度，大大减少了时间，尤其适用在确定未知成分和聚合物混合物的应用中。

PYRO

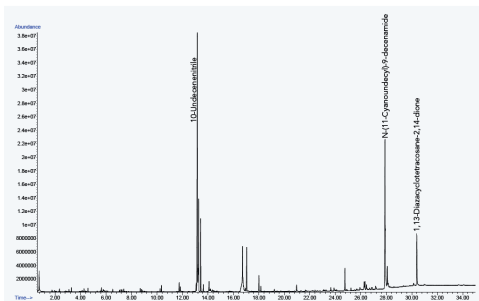
热裂解方法： 智能梯度法
温度参数： 300°C, 5.0°C/s
→ 800°C

CIS 进样口

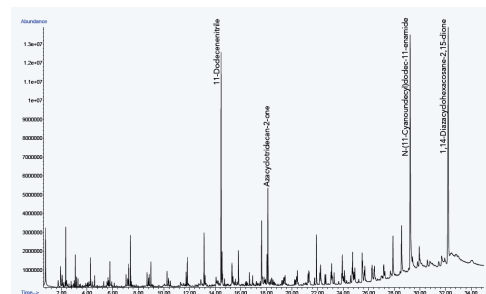
分流比： 100:1
温度参数： -120°C, 12°C/s
→ 300°C (3 min)



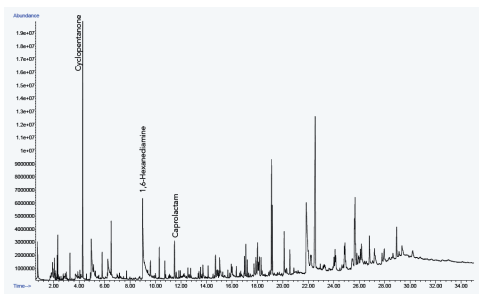
尼龙6的热裂解图



尼龙11的热裂解图



尼龙12的热裂解图



尼龙6/6的热裂解图



AppNote 244
下载二维码

抗氧化添加剂 Irgafos®168

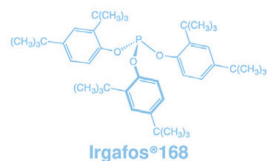
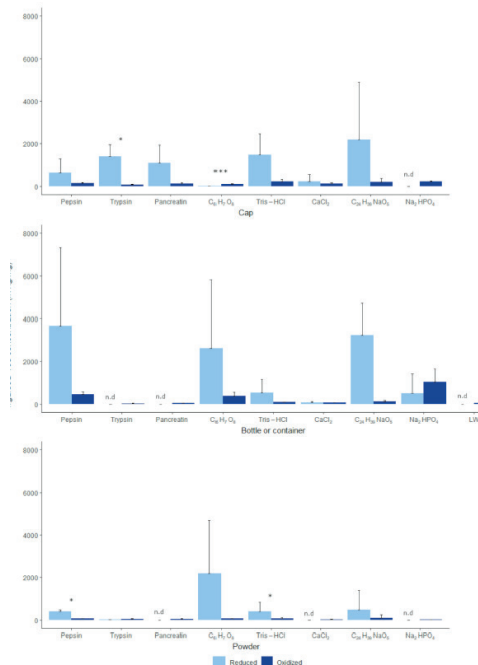
塑料污染是环境和野生动物接触化学物质的主要来源之一。由于塑料污染的普遍性，塑料添加剂在环境中的行为研究还相对不足。本研究旨在评估作为抗氧化剂的常用添加剂Irgafos®168从聚乙烯微粒中浸出的情况，对实验室工作环境的潜在背景污染进行了全面调查。研究结果显示，Irgafos®168（三（2,4-二叔丁基苯基）亚磷酸酯）及其氧化产物（三（2,4-二叔丁基苯基）磷酸酯）在不同实验室试剂中均有定量，包括塑料包装和粉末，通过热裂解Py-GC-MS进行分析。测试的实验室试剂中均检测到至少一种形式的Irgafos®168，且与粉末相比，瓶盖和瓶子中的浓度更高。此外，在实验室常用的反渗透和去离子水容器中同样发现了氧化后的Irgafos®168。

PYRO

热裂解方法： 闪蒸热裂解
温度参数： 700°C, 60 s

CIS 进样口

分流比：
温度参数： 300°C 恒温



文献下载二维码

Irgafos® 168 其还原（三（2,4-二叔丁基苯基）亚磷酸酯）和氧化（三（2,4-二叔丁基苯基）磷酸酯）形式的浓度（以 ng/mg 基质计）在盖子中 (A) 用于创建体外消化模型的实验室试剂瓶 (B) 和粉末 (C)。

文献来源： Sci Total Environ. 2020 Dec 20;749:141651.
<https://doi.org/10.1016/j.scitotenv.2020.141651>

使用热裂解-气相色谱技术检测玩具中的塑化剂

塑料，这种广泛应用于各种产品的材料，已经逐渐演变成了一个主要的污染源。大部分塑料难以进行生物降解，因此常常被作为垃圾抛弃，或者简单地被扔在垃圾填埋场中。这些塑料垃圾浸出的液体可能包含增塑剂、阻燃剂、发泡剂、紫外线稳定剂、染料等多种有害化学物质。本应用展示如何识别玩具中不同类型的塑料。采用 PYRO 热裂解芯系统，结合气相色谱质谱法进行化学分析，这种方法具有高度精确和灵敏的特点。

PYRO

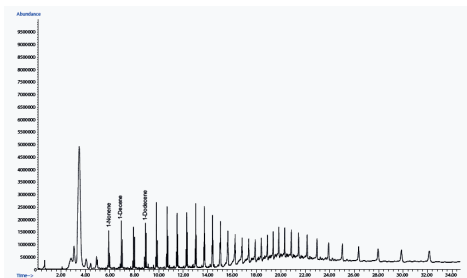
热裂解方法：智能梯度法

温度参数：300°C, 5.0°C/s
→ 800°C

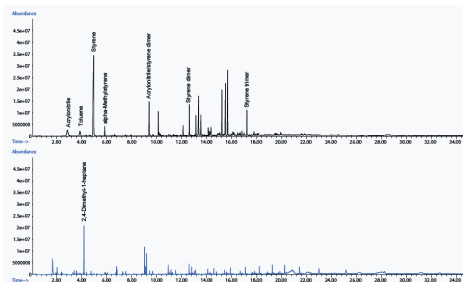
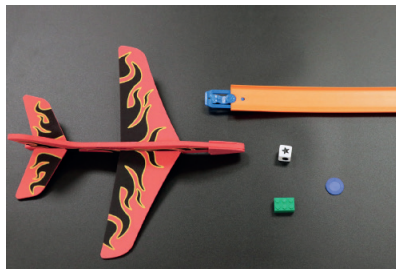
CIS 进样口

分流比：25:1

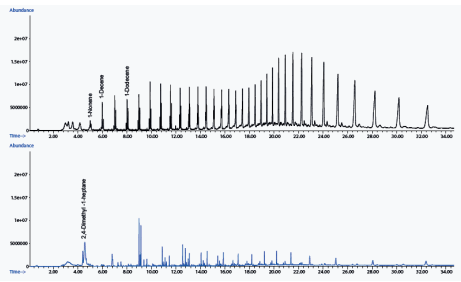
温度参数：300°C 恒温



泡沫飞机热裂解图，显示飞机是由聚乙烯制成的



绿色积木（顶部）和绿色积木的透明包装（底部）的热裂解图的堆叠视图。包装的热裂解图明显是聚丙烯。绿色积木的热裂解图显示了丙烯腈、苯乙烯、 α -甲基苯乙烯、苯乙烯二聚体和苯乙烯三聚体



赛道（顶部）和赛道连接器（底部）的热裂解图的堆叠视图。显示了聚乙烯和聚丙烯的独特指纹



AppNote 233
下载二维码

面霜

磨砂洗面奶样品，分别在120°C，300°C 和 600°C 的温度下分析，通过前两次的热脱附，可以获得更多的样品挥发性组分信息，并且最后的热裂解色谱图也不会收到这些挥发性组分二次分解的干扰，提高了样品色谱信息的全面性和准确性。

将样品加热至120°C，存在大的甘油峰。该化合物被添加到产品中以增加皮肤光滑度并有助于保湿。1,3-丁二醇是皮肤调理剂和稳定剂，添加2-苯氧乙醇作为防腐剂，添加长链酸作为保湿剂和抗微生物剂。将样品加热至300°C 后运行的中间色谱图显示了更多的长链酸和长链酰胺，用作乳化剂、硅氧烷和二氧化硫。二氧化硫可能是硫酸葡聚糖的热降解产物，通常作为粘合剂/皮肤调理剂添加到化妆品中。最后的热裂解色谱图显示了聚乙烯的模式，很可能来自作为去角质剂添加的珠子。

PYRO

热裂解方法： 多级式热裂解
温度参数：

第一级： 120°C (1.50 min)

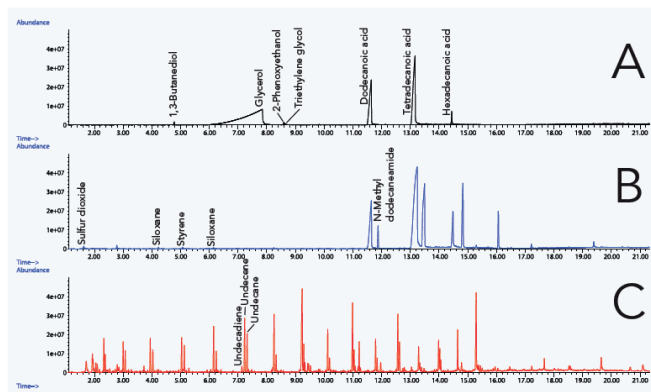
第二级： 300°C (1.50 min)

第三级： 600°C (0.33 min)

CIS 进样口

分流比： 75:1

温度参数： -120°C, 12°C/s
→ 325°C (3 min)



面部磨砂膏样品的热脱附和热裂解堆叠视图：120°C (A)、300°C (B)、600°C (C)



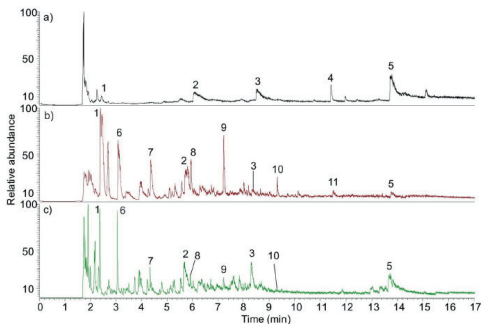
AppNote 212
下载二维码

多级式热裂解可用于将复杂样品中的化合物分离成多个色谱图，从而简化解释并帮助识别商业产品中的微塑料，避免挥发性化合物和化合物二次分解的干扰。

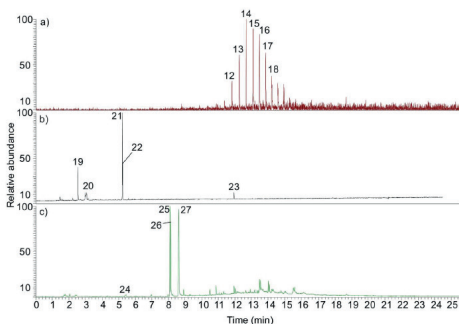
研究绿松石仿制品和处理过程

通过红外光谱分析和热裂解分析，可以揭示那些外观类似绿松石样品的真实化学构成。红外光谱分析尤其擅长于区分天然与合成矿物，并能够判断出样品是否经过表面处理，如蜡或聚氨酯涂层。热裂解技术则不仅适用于检测各种表面涂层，如蜡、聚氨酯或甲基丙烯酸酯，还可以用于探究其他类型的表面处理方法。此外，这项技术还能有效识别出用于粘合矿物粉末的粘合剂，例如三聚氰胺甲醛树脂或环氧树脂，这些粘合剂常用于浸渍那些多孔且稳定性较差的材料。

PYRO
热裂解方法： 闪蒸热裂解
温度参数： 700°C, 20 s
CIS 进样口
分流比： 20:1
温度参数： 320°C 恒温



热裂解色谱图：a) 样品95的黑色纹理；b) 与环氧树脂混合的绿松石粉末；c) 纯环氧树脂。数字指的是下表中列出的主要的热裂解产物。



三种不同绿松石样品的热裂解-GC-MS：a) 样品 7 上的蜡涂层；b) 丙烯酸酯处理的样品 120；c) 样品 CS2 上的聚氨酯涂层。

文献来源： J. Anal. Appl. Pyrolysis. 2017, 125, 24 – 31
<https://doi.org/10.1016/j.jaap.2017.05.002>



Table 3
Assignment of main pyrolysis products.

No	t _R /min	Name
1	2.43	Benzene
2	6.08	Phenol
3	8.55	Isopropyl phenol
4	11.41	Dibutyl phthalate
5	13.74	Biphenol A
6	3.08	Toluene
7	4.37	Styrene
8	5.94	Indene
9	7.22	Naphthalene
10	9.33	Biphenylene
11	11.48	Anthracene
12	11.82	Dodecane
13	12.26	Tricosane
14	12.68	Tetracosane
15	13.08	Pentacosane
16	13.48	Hexacosane
17	13.86	Heptacosane
18	14.23	Octacosane
19	2.56	Methyl methacrylate
20	2.07	Methacrylic acid
21	5.21	Methyl styrene isomer
22	5.24	Methyl styrene isomer
23	11.95	Trimethylpropane trimethacrylate
24	5.44	Propylene glycol
25	8.09	2,4-Toluene diisocyanate
26	8.15	2,6-Toluene diisocyanate
27	8.62	Phthalic anhydride
71	2.02	Methylpropionate
72	3.78	Dimethylcyanamide
73	5.89	Dimethylsuccinate
74	9.88	Methylmyristate
75	10.30	Hexamethylenediamine
76	10.41	Tetramethylenediamine
77	10.51	Pentamethylenediamine
78	10.91	Methylpalmitate
79	11.86	Methylstearate



文献下载二维码

通过热裂解气相色谱质谱法分析法医样品

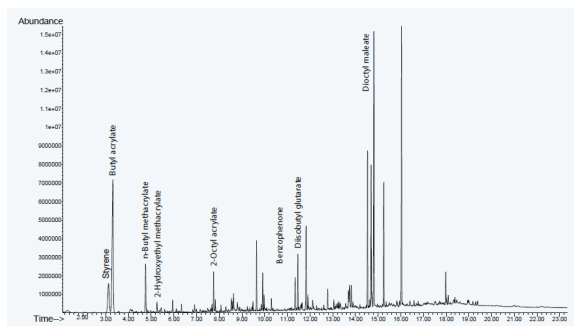
热裂解技术在法医分析中的应用十分广泛,涵盖了刑侦和犯罪物品的分析等多个方面,能够有效地破解复杂的化学物质,帮助法医专家们准确地识别和分析犯罪现场留下的证据。通过热裂解技术,法医们可以获得物品的详细化学成分和结构信息,进而推断出犯罪嫌疑人的身份和犯罪过程。本应用对多种涉及法医分析的物质进行分析,如油漆、粘合剂和化妆品等,实现了对这些复杂法医材料的高效热提取和热裂解自动化。采用“多级式热裂解”和“智能梯度热裂解”模式,成功识别出不同样品中的关键挥发性添加剂和聚合物的热裂解产物。

PYRO

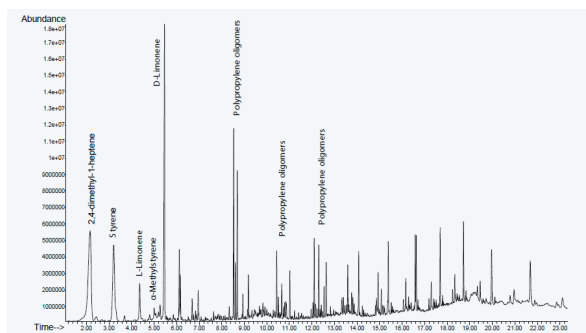
热裂解方法: 智能梯度法
温度参数: 300°C, 5.0°C/s
→ 800°C

CIS 进样口

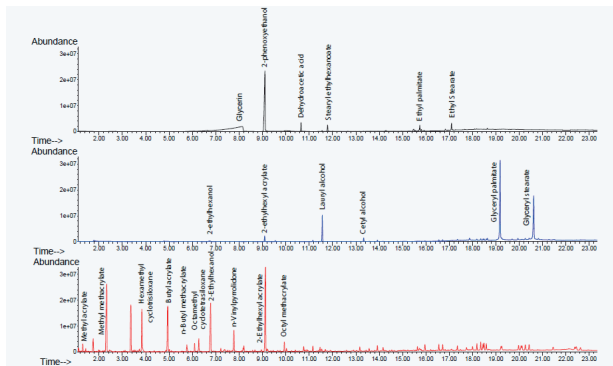
分流比: 不分流
温度参数: 300°C 恒温



房屋油漆样本的热裂解图。分析揭示出包括丙烯酸聚合物单体、聚苯乙烯单体以及若干其他添加剂。二苯甲酮这一紫外线稳定剂的发现暗示该油漆适用于户外环境。此外,检测到非邻苯二甲酸酯类增塑剂,以及马来酸二辛酯和戊二酸二异丁酯。



包装胶带热裂解分析图,观察到聚丙烯低分子化合物与主要标识峰2,4-二甲基-1-庚烯的存在,推断该胶带的原材料为聚丙烯基薄膜,同时,发现苯乙烯/异戊二烯类粘合剂



PYRO

热裂解方法：多级式热裂解

温度参数：

第一级：120°C (1.50 min)

第二级：300°C (1.50 min)

第三级：600°C (0.33 min)

CIS 进样口

分流比：不分流

温度参数：300°C 恒温

叠加视图展示了在三个不同温度下得到的热裂解图，使用多级式热裂解模式。在最低的温度下，发现了甘油，它是一种广泛应用的保湿剂，被添加到睫毛膏中以维持水分。同样在此温度下，还检测到了脱氢乙酸和2-苯氧基乙醇，后者是一种防腐剂，能够阻止微生物生长，以及硬脂基乙基己酸酯、棕榈酸乙酯和硬脂酸乙酯，这些都属于润肤剂类别。

当温度提升至300°C时，分析出了多种醇类，包括月桂醇和鲸蜡醇，它们通常被用作乳化剂。同时，棕榈酸甘油酯和硬脂酸酯被确认为甘油与棕榈酸或硬脂酸发生酯化反应的产物，这些物质多用作润肤剂、表面活性剂和乳化剂。

在600°C的高温下对睫毛膏样品进行热解，揭示了丙烯酸酯聚合物单体、来自聚硅氧烷的环硅氧烷和来自聚乙烯吡咯烷酮的N-乙烯基吡咯烷酮等物质。这些单体均具备成膜性和防水性质，是制造睫毛膏时的重要成分。



AppNote 225
下载二维码

可堆肥和可生物降解材料的热裂解

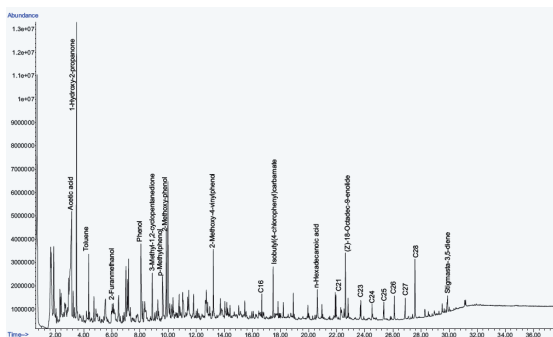
广泛受欢迎的可堆肥产品，得益于它们所倡导的绿色环保理念。尽管这些材料被设计成能在工业堆肥设备中安全地分解，它们在垃圾填埋场和焚烧厂中的存在同样可能像传统塑料一样具有危害性。这暗示了可堆肥塑料可能会像微塑料一样，在环境中持续存在，从而对动物和人类的身体健康造成影响。在这项研究中，我们应用了热裂解技术，以实现对三种可堆肥和/或可生物降解材料，以及两种天然来源物质的高效自动化热脱附和热裂解。样品包括赤褐色土豆、木棍、可堆肥吸管、叉子和三明治袋。使用剃刀将每个样品切成小块，并将样品直接放入装有石英棉的开口热解管中。

PYRO

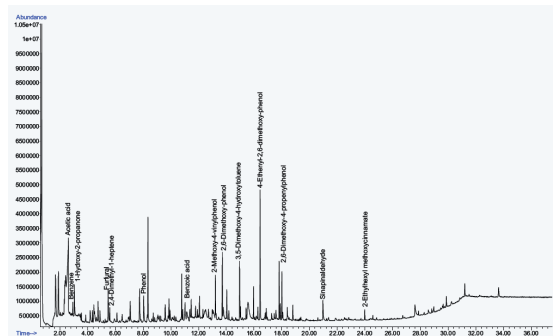
热裂解方法：智能梯度法
温度参数：300°C, 5.0°C/s
→ 800°C

CIS 进样口

分流比：30:1
温度参数：-120°C, 12°C/s
→ 325°C (5 min)



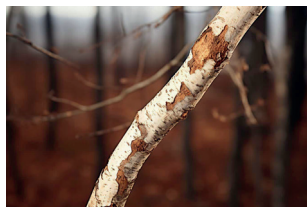
马铃薯热裂解图：在热裂解过程中会产生一系列化合物，其中包括2-呋喃甲醇、苯酚、对甲基苯酚、2-甲氧基苯酚、2-甲氧基-4-乙烯基苯酚、烃类以及酸类



木棒的热裂解图：化合物包括乙酸、苯、1-羟基-2-丙酮、糠醛、酚类、芥子醛和甲氧基肉桂酸2-乙基己酯



AppNote 258
下载二维码



始新世琥珀的萜类成分和化学分析

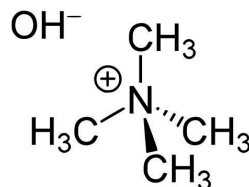
植物树脂的石化过程是一个漫长而复杂的成熟过程，这一过程可能需要长达一亿年的时间。在这个过程中，树脂失去了部分挥发性成分，同时，其内部的萜类物质会发生聚合与交联。琥珀，作为一种由单萜、倍半萜、二萜和三萜等成分构成的复杂混合物，其化学成分的研究对于我们区分琥珀的真伪，以及对于化学分类学、古植物学和古气候学的研究具有重大意义。在此方面，热裂解-气相色谱-质谱联用技术被认为是最为有效的分析工具。它的优势在于能够将琥珀中的聚合物成分以及那些不溶性、非挥发性的大分子分解为可分离的单一成分，并可以从质谱数据中解析出它们的分子结构。使用热化学热裂解技术，以四甲基氢氧化铵 (TMAH) 作为甲基化试剂，将羧酸、醇和酚类分解产物转化为其甲基化衍生物，并在标准非极性气相色谱柱上轻松测定。

PYRO

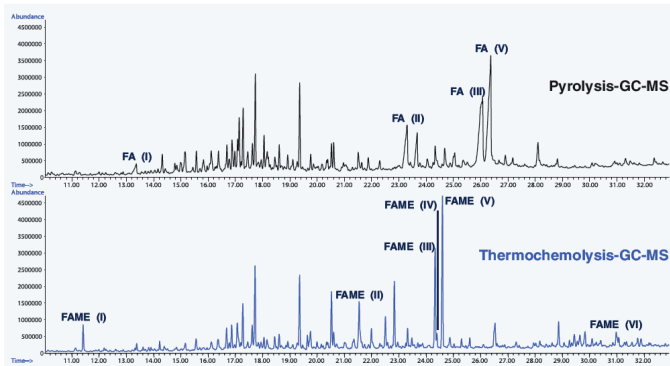
热裂解方法：闪蒸热裂解
温度参数：480°C (0.3 min)

CIS 进样口

分流比：20:1
温度参数：300°C 恒温



四甲基氢氧化铵 TMAH



始新世琥珀的热裂解总离子色谱图（黑色）和热化学热裂解总离子色谱图（蓝色）（FA = 脂肪酸；FAME = 脂肪酸甲酯）。在热裂解色谱图中，FA (I)、FA (II)、FA (III) 和 FA (V) 峰很宽，有一些峰前沿，这是极性化合物在非极性色谱柱的典型现象。相比之下，热化学热裂解色谱图中相应的甲基化化合物 FAME (I)、FAME (II)、FAME (III) 和 FAME (V) 洗脱并解析出尖锐的峰。FAME (IV) 和 FAME (VI) 只能在热化学热裂解色谱图中鉴定。可以清楚地看到，TMAH 存在下的热解提供了有关样品的更详细信息。



AppNote 165
下载二维码

白垩纪晚期恐龙蛋壳 Py-GCxGC-TOFMS

远古化石中蛋白质软组织的记录仍然存在争议。这通常归因于实验室或其他现代污染方式。在这里，我们通过热解-GCxGC-TOFMS 为马斯特里赫特恐龙蛋壳中蛋白质部分的保存提供了无可争议的证据。含氮有机分子与二酮二吡咯的存在表明蛋白质部分可以在成岩作用中幸存下来。这些蛋白质部分的保存归因于陆上条件下沼泽平坦环境中的沉积以及蛋壳方解石单元对有机物质的截留。本研究表明，只要沉积环境和成岩过程有利，中生代化石遗迹中含氮大分子的保存并非不可能。含氮大分子在地下沉积环境下长时间的存活将为软组织保存研究开辟一条新途径。

PYRO

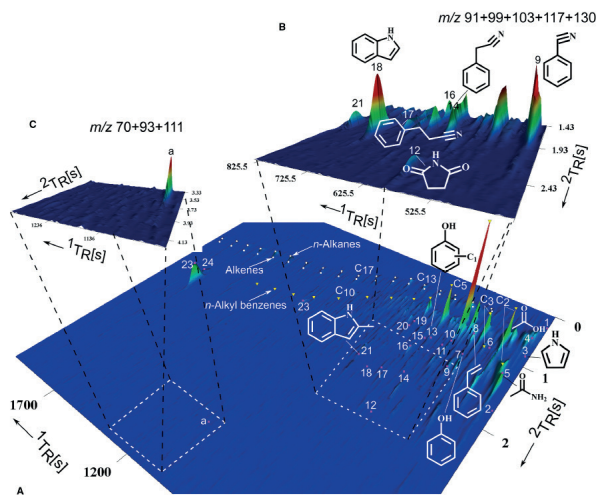
热裂解方法： 闪蒸热裂解

温度参数： 610°C (0.3 min)

CIS 进样口

分流比： 未知

温度参数： 30°C, 12°C/s
→ 300°C (1 min)



曲面图：A，印度中西部恐龙蛋壳 (DUG/LDE/P11) 热解产物的总离子色谱图。B，质量/电荷数 (m/z) 91 + 99 + 103 + 117 + 130 处的选定离子色谱图，说明了各种含氮化合物的分布。C， m/z 70 + 93 + 111 处的选择离子色谱图显示了蛋壳样品中二酮吡嗪的分布。蛋壳化石的主要热解产物包括烷基化苯、酚类及其烷基化同系物、正烷烃/烯烃以及几种含氮化合物。



文献下载二维码

文献来源：Palaeontology, Vol. 64, Part 5, 2021, pp. 585 – 595
<https://doi.org/10.1111/pala.12565>

史前鱼椎骨中保存胶原蛋白的化学证据 Py-GCxGC-TOFMS

胶原蛋白在动物界中含量最为丰富，它构成了骨骼、肌腱以及皮肤等结缔组织的骨架，并在维持这些组织的生物力学功能中起到了关键作用。关于胶原蛋白的保存问题，长期以来存在争议。本文采用在线热裂解综合二维气相色谱飞行时间质谱技术（py-GCxGC-TOFMS）以及免疫荧光分析法，为始新世早期鱼类椎骨中存在胶原蛋白提供了决定性的证据。研究在化石的热解产物中发现了环状二肽，包括二酮二吡咯、脯氨酸-脯氨酸的2,5-二酮哌嗪以及脯氨酸-甘氨酸的2,5-二酮哌嗪等，以及其他含氮分子。这些发现明确指出胶原蛋白能够承受分解和成岩变化。

PYRO

热裂解方法：闪蒸热裂解

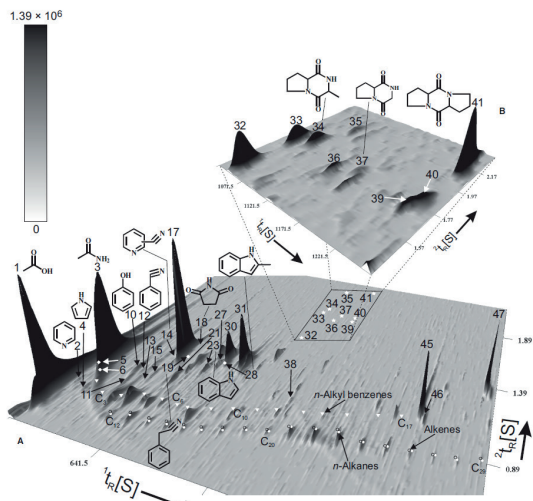
温度参数：610°C (0.3 min)

CIS 进样口

分流比：未知

温度参数：30°C, 12°C/s

→ 300°C (1 min)



A, 来自印度西部坎贝盆地早始新世沉积物的鱼椎骨热裂解产物的总离子色谱图 (BSIP 41817)。B, 始新世鱼椎骨热解产物在 m/z 70 + 90 + 111 处的选定离子色谱图。峰鉴定见表 1；实心圆、空心圆和倒三角形分别是正烷烃、烯烃和正烷基化苯的同系物。星号代表二酮哌嗪 (DKP)。

文献来源：Palaeontology, Vol. 63, Part 2, 2020, pp. 195 – 202
<https://doi.org/10.1111/pala.12469>



文献下载二维码

热化学分析-使用 TMAH 甲基化方法分析亚麻籽油

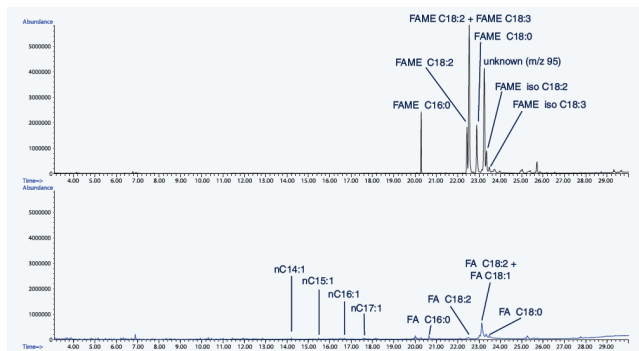
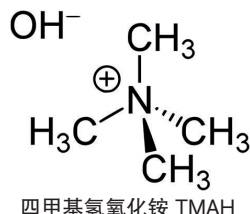
为了提升热解色谱分析在释放极性官能团材料中的应用效果，如羧酸的检测，我们研发了一种在四甲基氢氧化铵（TMAH）存在的环境下，通过热解/气相色谱-质谱（GC-MS）的简易且迅速的甲基化方法。亚麻籽油被选作研究样本，原因在于它含有较高的甘油三酯，并且同时含有饱和与不饱和脂肪酸。在 TMAH 的作用下，当亚麻籽油经历热解过程，会产生大量的脂肪酸甲酯（FAME）。结果显示，在热化学热裂解色谱图中，脂肪酸甲酯的峰不仅更加突出，而且更为尖锐，其分离效果更为优越。各种脂肪酸，包括棕榈酸（C16:0）、亚油酸（C18:2）、油酸（C18:1）和硬脂酸（C18:0），均经过甲基化反应转化为相应的脂肪酸甲酯（FAME）。通过热化学分解色谱分析，成功检测到了 α -亚麻酸甲酯（FAME C18:3），这正是 α -亚麻酸（FA C18:3）经过甲基化后的产物。 α -亚麻酸是亚麻籽油中的一种重要营养成分，但在热解色谱分析中未能直接检测到 α -亚麻酸，这可能是因为与其它宽峰物质一同被洗脱，从而未能单独分离出来。

PYRO

热裂解方法：闪蒸热裂解
温度参数：500°C (0.3 min)

CIS 进样口

分流比：不分流
温度参数：300°C 恒温



在500°C 经 TMAH 甲基化的亚麻籽油热裂解总离子色谱图（黑色）；亚麻籽油在500°C 下热裂解的总离子色谱图（蓝色）。(n (正烯烃)；FAME(脂肪酸甲酯)CX(碳链长度)：Y(双键数))。



AppNote165
下载二维码

烟草添加剂热解产物的研究

欧洲法规表明，烟草添加剂不会提高产品的毒性或上瘾性，但对其表征和测量的可靠性一直存在争议。另外，对于烟草添加剂的热解特性了解不多，因此不能不怀疑存在额外的毒理学风险。

通过在线热裂解技术与气相色谱-质谱联用，鉴定了19种不同烟草添加剂（如原蔗糖、甘草和可可）在热解过程中产生的化学物质模式。为了模拟香烟的燃烧过程，需要在惰性或氧气环境中进行热解。在350°C、700°C和1000°C下，对所有单独的添加剂在惰性或氧化条件下进行热解，并监测各种有毒物质的生成。发现在烟草添加剂的热解过程中，只生成了丙烯酸乙酯、富马酸酐、甲基丙烯酸酐、异丁酸酐和3-丁烯-2-醇。

PYRO

热裂解方法：多级式热裂解

温度参数：

第一级：350°C (0.30 min)

第二级：700°C (0.30 min)

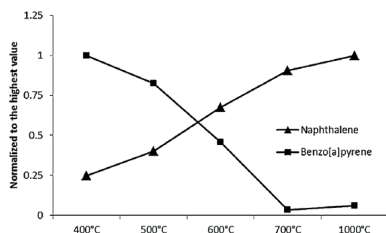
第三级：1000°C (0.30 min)

CIS 进样口

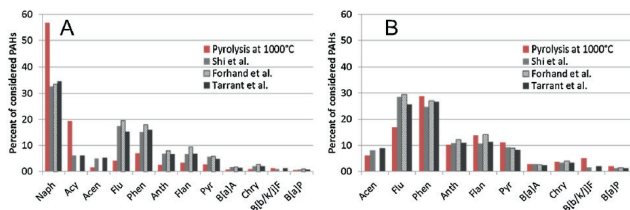
分流比：50:1

温度参数：-120°C, 12°C/s

→ 325°C (3 min)



两种 PAH 萘（2 环化合物）和苯并[a]芘（5 环化合物）的形成取决于温度。惰性条件下不同温度下的烟草热裂解，然后进行 GC/MS 分析。将积分峰面积标准化为最高值。



在惰性条件下1000°C下在线热裂解烟草时检测到的 PAH 相对量（红色条）：与已发表的吸烟机实验结果进行比较。[A] 单个 PAH 的相对含量计算基于此处分析或文献中报告的18种 PAH 数据。[B] 根据所分析的所有 PAH（Naph 和 Acy 除外）的相对量计算 PAH 谱。

文献来源：Int. J. Hyg. Environ. Health, 2016, 219, 8, 780–791
<https://doi.org/10.1016/j.ijheh.2016.09.002>



文献下载二维码

研究烟草燃烧过程中形成的香气化合物

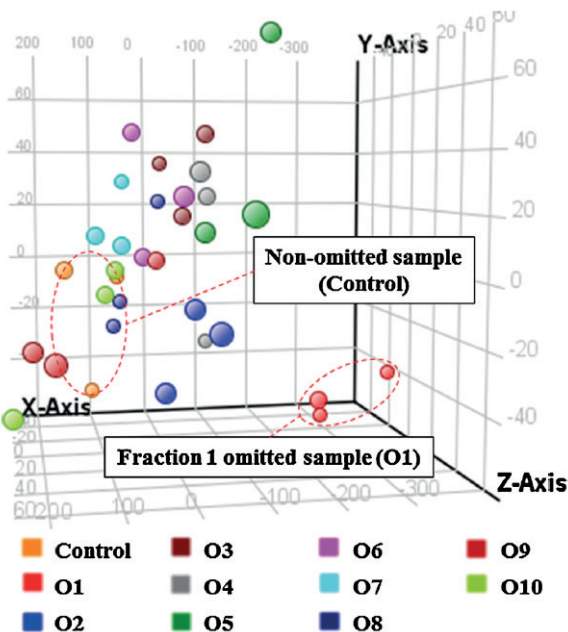
Py-GC-MS 是研究吸烟等燃烧过程的有效技术。烟叶的直接热裂解产生非常复杂的有机化合物混合物，其中含有挥发性、半挥发性和非挥发性化合物。因此，检测和识别烟草主要香气化合物及其形成途径非常困难。提出了一种可以阐明烟草燃烧过程中形成的香气化合物的创新工作流程。该工作流程包括烟叶提取物的 LC 分馏、馏分省略方法中的馏分重组和 Py-GC-MS。使用多变量统计数据分析，可以识别对典型卷烟烟雾香气形成贡献最大的馏分。此外，衍生化 LC 馏分的 GC-MS 分析可用于识别焦香化合物的前体。该分析方法是合适的将烟草中不同类别化合物的影响与香烟烟雾中的典型香气化合物相关联。

PYRO

热裂解方法：闪蒸热裂解
温度参数：700°C (10 sec)

CIS 进样口

分流比：10:1
温度参数：250°C 恒温



文献下载二维码

通过对烟叶水提取物馏分的热解 GC-MS 进行 MPP 分析获得的 3D PCA 图

文献来源：J. Anal. Appl. Pyrolysis, 2015, 116, 68–74
<https://doi.org/10.1016/j.jaap.2015.10.004>

识别乳香中热产生的气味物质的新方法 PYRO-GC-O-MS

结合热裂解-气相色谱-质谱 (GC-MS) 技术与嗅觉检测, 形成了一种充满潜力的新型分析手段, 旨在探究复杂样品中非挥发性成分中气味活性化合物的形成过程。特别是采用可灵活设置升温程序的热裂解仪, 在热裂解过程中先通过热脱附技术去除样品中原有的挥发物, 这种方法尤为有效。这一点在乳香树脂的研究中得到了验证。该技术能够检测出在天然材料中未曾发现的由热裂解产生的气味活性物质, 这些物质通常会被样品中的挥发成分所掩盖。通过溶剂萃取和高真空蒸馏对材料进行分离, 可以进一步明确热裂解产物的来源。使用多级热裂解, 在120至300℃ 的温度下进行多次热解吸, 随后在500℃ 下进行热裂解, 以便监测样品中化合物的释放与生成情况。这一新方法不仅适用于研究香料材料, 对于热处理材料中异味的产生、烟雾味道的相关研究等领域, 也提供了高效便捷的分析途径。

PYRO

热裂解方法: 多级式热裂解

温度参数:

第一级: 120℃

第二级: 150℃

第三级: 200℃

第四级: 250℃

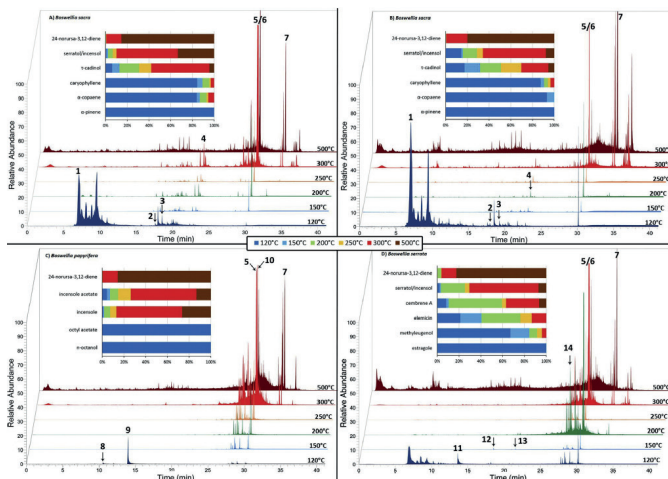
第五级: 300℃

第六级: 500℃ (0.20 min)

CIS 进样口

分流比: 16:1

温度参数: 300℃ 恒温



GERSTEL 嗅觉检测口 ODP

所选物质从树脂基质中的热裂解图和热脱附色谱图, 计算为所有六张 GC 色谱图中特定物质的总峰面积百分比。样品: (4a) 来自索马里的乳香; (4b) 来自阿曼的乳香; (4c) 来自印度的齿叶乳香; (4d) 来自厄立特里亚的乳香。

文献来源: J. Anal. Appl. Pyrolysis. 2015, 113, 690 – 700
<https://doi.org/10.1016/j.jaap.2015.04.018>



文献下载二维码

微胶囊香精聚合物材料中的残留香料进行定量分析

微胶囊香精是液体香精被包裹于微胶囊壁材内，使香精芯材与外界隔绝形成的一类香精产品。在洗涤时洗涤剂中的微胶囊香精会沉积于织物、皮肤或头发上，等待干燥后，通过轻微触碰或摩擦破裂的微胶囊香精，就会缓慢释放出香气，从而达到持久留香的效果，被广泛用于商业产品中。本应用中提出了一种基于热裂解气相色谱质谱技术的对聚合物材料中残留挥发物的创新定量方法，以便在进一步测试之前验证样品质量。使用先热脱附，后热裂解打方法，可以使未嵌入聚合物框架中的残留挥发物在实际热裂解发生之前被释放，有效避免残留挥发物对香料胶囊生物降解性估计的影响。

PYRO

热裂解方法：多级式热裂解

温度参数：

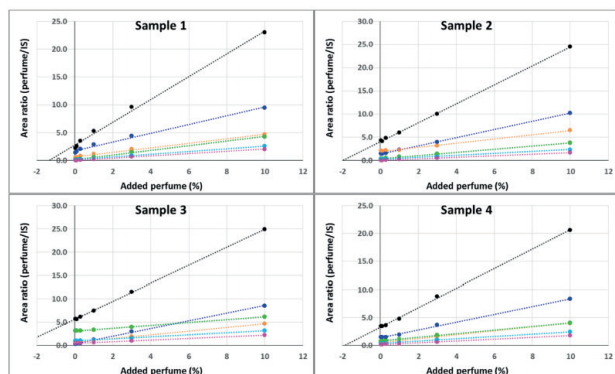
第一级：100°C – 350°C

第二级：700°C

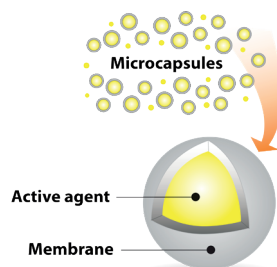
CIS 进样口

分流比：100:1

温度参数：300°C 恒温



通过 Py-GC-MS 获得的四种样品的 Romascone® (粉红色)、Verdox™ (绿色)、Lorysia® (浅蓝色)、Cyclosal (橙色)、Salicynile® (蓝色) 和样品相应的整体香料 (黑色) 的校准曲线



	Residual Perfume (% _{w/w})		
	SPME-GC-MS	Py-GC-MS	
		Direct Measure	Std Addition
Sample 1	1.09	1.45	1.36
Sample 2	0.38	1.07	2.00
Sample 3	0.18	2.16	2.92
Sample 4	N/A	1.23	1.88



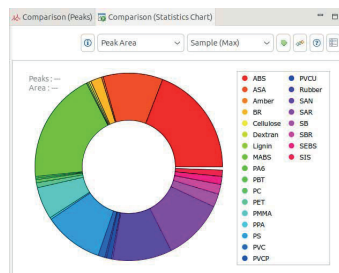
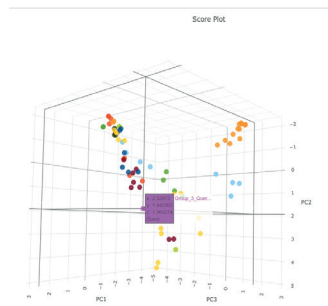
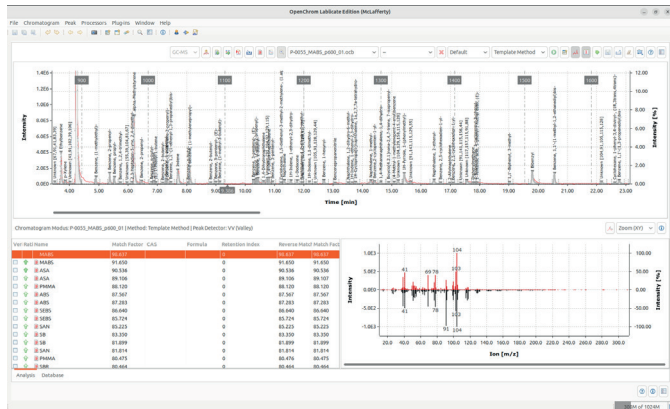
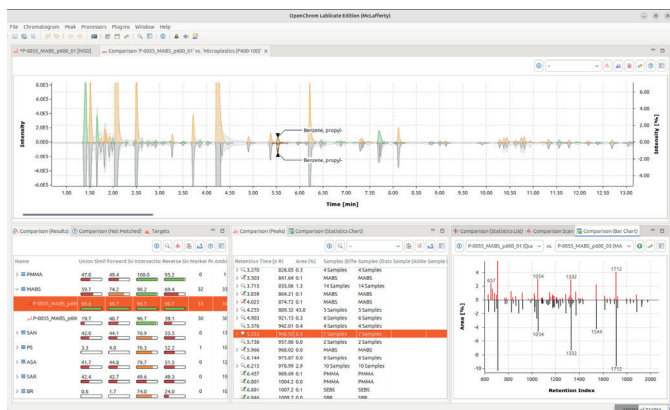
SPME-GC-MS 方法明显提供了少量的挥发物。这证实了香料分子即使在大量样品制备后仍嵌入聚合物壳中的假设。必须应用 Py-GC-MS 这样的破坏方法来获取聚合物材料中存在的挥发物的总量。

文献来源：Molecules 2020, 25, 718

<https://doi.org/10.3390/molecules25030718>

热裂解分析软件 & 数据库

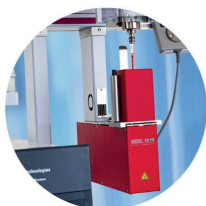
GERSTEL 还提供特有的热裂解软件兼数据库 ChromIdent®，这是一种新型的基于峰值列表的数据库。适用于处理和对复杂的GC-MS热裂解数据。软件收集了几百种聚合物的热裂解图谱，并且通过两种裂解温度获得（600°C 或550°C）外加智能梯度热裂解 SRP。客户也可以根据自己样品情况，建立自己的数据库。ChromIdent®使客户能够根据参考色谱图数据库快速识别样品。它是强大的色谱数据系统 OpenChrom®的附加组件。灵活的预处理管道可用于准备样本或创建要存储在用户特定数据库中的参考。结合强大的反卷积和峰识别功能，可以可靠地识别纯样品甚至混合样品。在分析微塑料或香气特征等复杂样品时，这种方法很有效。



GERSTEL 热脱附解决方案

GERSTEL 不仅提供热裂解解决方案，更是旨在提供灵活全面的热脱附解决方案

- 无阀无传输线设计，保证最高回收率和最低残留
- 灵活精确的程序升温程序
- 占地极小、灵活、稳定、维护简单
- 适合各种样品（固体、液体、气体）
- 全面的无溶剂萃取富集技术（吸附管、SPME、SBSE、TF-SBSE）
- 从热脱附到热裂解，全面的升温范围（10 -1000°C）
- 可升级动态顶空、嗅闻、自动化样品制备



顶空&动态顶空



SPME



热脱附&热萃取



TF-SBSE & SBSE

多种无溶剂萃取技术，

绿色高效的萃取与富集

- 自动化液液萃取 LLE
- 固相微萃取 SPME
- 搅拌棒吸附萃取 SBSE
- 薄膜-固相微萃取 TF - SPME
- 顶空 HS
- 动态顶空 DHS

全面的进样技术

- 液体进样
- 顶空进样
- 热脱附进样

气相色谱-嗅闻技术 GC-O，
助力分子感官科学

- 嗅觉检测口（ODP）

风味物质数据库，
收录超过10000个化合物

- Aroma Office 2D

GERSTEL

MAKING LABS WORK

关于我们

GERSTEL是一家在全球范围内享有盛誉的公司，专注于自动化样品前处理、自动进样、热脱附以及感官嗅闻设配的研发与生产。自1967成立以来，GERSTEL 一直致力于为实验室提供精密仪器设备，以确保客户在 GC/MS 和 LC/MS 自动化样品前处理以及自动进样领域的需求得到专业而可靠的解决方案。公司总部在德国，在中国、美国、瑞士、日本、新加坡等地分公司分别设立多个应用实验室，并且在全球80多个国家有专业的经销商。

GERSTEL为您提供全面的自动化解决方案：从各种现代化无溶剂的萃取技术，到高效无歧视的进样技术，再到风味化合物的气味鉴定，风味物质数据库，以及高阶的中心切割多维气相色谱技术以及全自动馏分收集。我们还为您提供多种自动化样品制备技术，如自动配标、蒸发浓缩、高效振荡混合、小型化液液萃取，在线衍生、孵育、超声分散等。以此同时，我们开发的整体解决方案如三氯丙醇 3-MCPD、矿物油 MOSH-MOAH、全氟化合物 PFAS、微塑料等，也受到全世界客户的青睐。



自动化离线样品前处理解决方案



自动化在线样品前处理解决方案

GERSTEL

MAKING LABS WORK

哲斯泰（上海）贸易有限公司

上海市金海市1000号56幢206室

电话：021-50719398

邮箱：china@gerstel.com



欢迎关注我们

www.gerstel.com



Subject to change. GERSTEL®, GRAPHPACK®, TWISTER® and TWICESTER® are registered trademarks of GERSTEL GmbH & Co. KG. Copyright by GERSTEL GmbH & Co. KG.

Agilent® is a registered trademark of Agilent Technologies, Inc.



 **Agilent Technologies**
Premier Solution Partner