

Entwicklungsplattform für Geruchsmesssysteme

Maximilian Koehne^{1,2}, Omar Tarek Penagos Carrascal^{1,2}, Gina Zeh² & Tilman Sauerwald^{1,2}

¹Fraunhofer Institut für Verfahrenstechnik und Verpackung, IVV, Giggenhauser Str. 35, Freising, Deutschland

²Universität des Saarlandes, Fachrichtung Systems Engineering, Campus A5 1, Saarbrücken, Deutschland

Zusammenfassung

Um die Entwicklung von applikationsspezifischen Geruchsmesssystemen (engl. *instrumental odor monitoring systems*, IOMS) kostengünstiger zu gestalten, wurde ein Gaschromatographie-*Selective-Odorant-Measurement-Sensor-Array* (GC-SOMSA) als Teil einer Systementwicklungsplattform aufgebaut. Das System besteht aus einem Massenspektrometer (MS), einem Halbleitersensordatenlogger für die Detektion flüchtiger organischer Verbindungen und einem Sensor für die Umweltparameter Temperatur, Feuchte und Druck, die jeweils parallel zu einem *Odor-Detection-Port* (ODP) geschaltet sind. Dadurch wird eine Charakterisierung der Sensoren bei gleichzeitiger chemischer und organoleptischer Analyse einer zu untersuchenden Probe ermöglicht. Um das System zu testen, wurden die Fettoxidationsmarker Pentan, Hexanal, Octanal und Nonanal in Sonnenblumenöl gelöst und als Beispiel eines ranzigen Geruchs von Fetten getestet. Während Nonanal (1 ppm) weder im MS noch im Sensorsignal nachgewiesen werden konnte, waren die anderen drei Komponenten im MS und im Sensor nachweisbar (Pentan mit 100 ppm, Hexanal und Octanal mit je 1 ppm). Der aus vier einzelnen Schichten bestehende Sensor zeigte je nach Schicht und Marker ein unterschiedliches Ansprechverhalten, sodass eine Unterscheidung der einzelnen Marker allein aufgrund der Sensorantwort getroffen werden konnte. Das GC-SOMSA kann somit als kompakte Charakterisierungseinheit für Sensoren und damit als Entwicklungssystem für IOMS eingesetzt werden.

Keywords: Sensorsystementwicklung, *Instrumental Odor Monitoring Systems* (IOMS), Gaschromatographie, GC-SOMSA, Sensorport, kompakte GC-Systeme, *Odor-Detection-Port* (ODP).

Einleitung

Die instrumentelle Geruchsmessung im allgemeinen und die Entwicklung von instrumentellen Geruchsmesssystemen (engl. *instrumental odor monitoring systems*, IOMS) im Besonderen stellt eine große Herausforderung dar. Ein Hauptgrund dafür ist die individuelle und subjektive Wahrnehmung einzelner Personen von Gerüchen, die eine objektive und standardisierte Betrachtung erschwert (Laor et al., 2014). Dabei könnten IOMS einen wertvollen Beitrag z.B. in industriellen Fertigungsprozessen über eine *in-line* oder *on-line* Analytik der Gasphase über den Produkten leisten (Costello et al., 2000; Costello et al., 2003; Koehne et al., 2023; Joppich et al., 2022; Rusinek et al., 2020; Poghossian et al., 2019). Auch in der objektiven Messung von Störgeruchsemissionen in und um Industrieanlagen stellen IOMS eine wertvolle Unterstützung dar, da sie im Gegensatz zu den bisher geläufigen humansenensorischen Methoden eine kontinuierliche und objektive Überwachung innerhalb beliebiger Zeiträume erlauben (Laor et al., 2014). Eine

Möglichkeit zur Realisierung solcher IOMS stellen Halbleitersensoren (engl. *metal oxide semiconductor sensors*, MOS Sensoren) dar, deren Signalantworten mittels einer multivariaten Datenverarbeitung bzw. Mustererkennung in maschinellen Lernverfahren ausgewertet werden und entsprechenden Gerüchen zugeordnet werden können (Park et al., 2019). MOS-Sensoren sind dabei kommerziell erhältlich und deutlich kostengünstiger als bspw. ein konventionelles häufig zur Geruchsaufklärung verwendetes laborgestütztes Gaschromatographie-Massenspektrometrie / Olfaktometrie (GC-MS/O)-System. Sie messen äußerst sensitiv eine Vielzahl an oxidierenden und reduzierenden Gasen, was jedoch gleichzeitig eine Einschränkung in der Selektivität bedeutet. Um dieses zu beheben, müssen im Vorfeld Auswertungsmodelle entwickelt und getestet werden, oder zusätzlich chromatographische Trenneinheiten eingebaut werden, um eine eindeutige Unterscheidung einzelner Marker anhand des Sensorsignals zu realisieren und damit ein Sensorsystem zu entwickeln (Zeh et al.). Bisher werden solche Systeme aufwendig

einzel entwickelt, was eine kommerzielle Verbreitung aufgrund der hohen individuellen Entwicklungskosten erschwert. Eine Möglichkeit, diese Entwicklungskosten zu verringern, bietet eine Systementwicklungsplattform, die der Vereinheitlichung und Strukturierung des Aufbaus von Sensorsystemen dient und den Entwicklungsprozess beschleunigt. Das GC-*Selective-Odorant-Measurement-Sensor-Array* (GC-SOMSA) kann dabei als Element einer solchen Systementwicklungsplattform fungieren. Dabei wird in einem klassischen GC-MS-System ein Sensorport parallel zum MS geschaltet, damit die Sensoren direkt parallel zu einer Messung charakterisiert werden können, die Notwendigkeit einer Trenneinheit beurteilt werden kann und geeignete Sensoren für den Aufbau von Sensorsystemen gefunden werden können (Hofmann et al., 1997; Kohl et al., 2000). Ein zusätzlicher *Odor-Detection-Port* (ODP) ermöglicht zudem das Erkennen der geruchsaktiven Substanzen. In dieser Arbeit wird daher der Aufbau eines GC-SOMSA-Systems dargestellt und am Beispiel von Fettoxidationsprodukten getestet. Das System verfügt über drei parallel angeordnete Ports, einem MS-Port, dem Sensorport und einem ODP. Dabei sollen Sensoren hinsichtlich ihrer Reaktion auf geruchsaktive, flüchtige Komponenten oxidiertes Fettsäuren hin charakterisiert werden, wie sie bspw. während der β -Oxidation entstehen können (Abbildung 1).

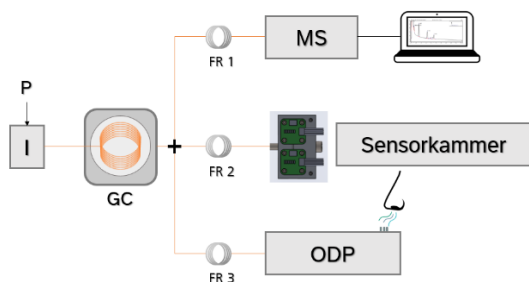


Abb. 1: Schema des GC-SOMSA-Aufbaus mit Probe P und Injektor I, bestehend aus einem GC-MS System mit parallel geschaltetem ODP und Sensorkammer, sowie den Flussrestriktionen (FR).

Die Fettoxidation, ausgelöst durch Luftsauerstoff oder Licht, stellt ein Problem in der Qualität von fetthaltigen Produkten wie bspw. Nüssen während der Lagerung oder der Verarbeitung dar (Gama et al., 2018). Während der Oxidation können dabei verschiedenste geruchsaktive Komponenten wie bspw. Hexanal, Octanal, oder auch Nonanal und auch weitere nicht geruchsaktive Komponenten wie

Pentan entstehen (Belitz et al., 2012). Eine Überwachung dieser Marker kann daher dazu beitragen, qualitative und finanzielle Verluste, ausgelöst durch die Oxidation der Ressource, zu verringern. Final soll so durch das GC-SOMSA als integraler Bestandteil einer Systementwicklungsplattform die Entwicklung applikationsspezifischer IOMS vereinfacht und kostengünstiger gestaltet werden.

Materialien und Methoden

Als Testsubstanzen für den ranzigen Geruch von oxidierten Fettsäuren wurde eine Mischung mit vier Oxidationsmarkern hergestellt (Belitz et al., 2012). Neutrales Sonnenblumenöl (Thomy, Deutschland, Einzelhandel) mit vernachlässigbarer Eigenoxidation wurde als Grundlage für die Verdünnung der Oxidationsmarker verwendet, da es selbst nur sehr schwer flüchtig ist. Es wurden 1,4 μL Hexanal, 8,2 μL Octanal, 31 μL Nonanal und 4 μL Pentan (alle von Sigma Aldrich, USA) bei 20 °C in 100 mL Sonnenblumenöl gelöst und 2 mL dieser Mischung in ein Headspace Vial gefüllt und verschlossen (finale Konzentration der Marker Hexan, Octanal, Nonanal im Headspace: 1 ppm). Entsprechend (Belitz et al., 2012) wurde dabei für Pentan eine deutlich höhere Konzentration angenommen, hier von 100 ppm (Tabelle 1).

Tab. 1: Testgemisch mit geruchsaktiven Oxidationsmarkern. Die Konzentration im Headspace (HS) wurde mit Hilfe des UNIFAC-Modells bestimmt.

| Marker | Geruchseindruck (intern) | Konz. HS [ppm] | Konz. in Öl [μL] |
|---------|--------------------------|----------------|-------------------------------|
| Pentan | - | 100 | 4 |
| Hexanal | grasig | 1 | 1,4 |
| Octanal | zitrusartig | 1 | 8,2 |
| Nonanal | seifig | 1 | 31 |

Der Zusammenhang zwischen den Konzentrationen in der Flüssigkeit und in der Gasphase wurde mit einer modifizierten Raoult-Gleichung (Gl. 1) mit konzentrationsabhängigem Aktivitätskoeffizienten ermittelt (Schultealbert et al., 2017).

$$y_A * p_A = x_A * \gamma_A * p_{sat,A} \quad (1)$$

Die konzentrationsabhängigen Aktivitätskoeffizienten wurden mit dem UNIFAC-Modell berechnet. Es gilt: p_A ist der Partialdruck der Fraktion A in der Gasphase, x_A ist der molare Anteil in der Flüssigen Phase und y_A der Anteil in der Gasphase, $p_{sat,A}$ ist der Dampfdruck der Spezies A als Reinsubstanz und γ_A der konzentrationsabhängige Aktivitätskoeffizient.

Multiport-GC-Aufbau

Zum Aufbau des GC-SOMSA wurde ein GC-MS (Trace 1610 Gas Chromatograph; ISQ 7610 Single Quadrupol Mass Spectrometer, Thermo Scientific, USA) verwendet. Er verfügt über drei Ports, dem MS, dem ODP und einem optionalen Port, der für den Anschluss der Sensoren genutzt wurde. Ein Vierwegeglassplitter (CZT, Deutschland) trennt den Helium-Trägergasstrom von 2,1 mL/min in drei gleich große Fraktionen von je 0,7 mL/min zu jedem Port. Drei desaktivierte *fused-silica*-Kapillarsäulen wurden als Restriktionen zur gleichmäßigen Flussaufteilung verwendet. Ihre Dimensionen wurden nach (Brieger, 2020) mittels der Hagen-Poiseuille Gleichung für kompressible Fluide (Gl. 2) berechnet.

$$Q_{out} = \frac{\pi r^4 (p_{in} - p_{out})}{8 \mu(T) L} \cdot \frac{p_{in} + p_{out}}{2 p_{out}} \quad (2)$$

Dabei ist Q_{out} der Fluss aus einer Restriktion, r entspricht dem Radius, p_{in} bzw. p_{out} entsprechen dem ein- bzw. Ausgangsdruck, $\mu(T)$ ist die Viskosität des durchströmenden Gases in Abhängigkeit der Temperatur und L entspricht der Länge der Restriktion. Die berechnete Restriktion vor dem MS betrug 4 m Länge und 0,1 mm ID, die Restriktion vor dem ODP betrug 5 m Länge und 0,2 mm ID, die vor der Sensorkammer betrug ebenfalls 5 m Länge und 0,2 mm ID. Zur Einstellung des Flusses wurden entsprechende Restriktionen verwendet. Die Analysen erfolgten auf einer FFAP-Kapillarsäule (15 m Länge, 0,25 mm Innendurchmesser, Agilent, USA), die mit einer desaktivierten Vorsäule (3 m Länge, 0,25 mm Innendurchmesser, Agilent, USA) versehen war. Die Proben wurden für 5 min bei 40 °C inkubiert. Anschließend wurden 2 mL Head-Space mit einem Splitverhältnis von 1:10 injiziert. Das Temperaturprofil des GC-Ofens startete mit 40 °C für 2 min und wurde dann in einer Rampe von 3 °C/min über 20 min auf 100 °C erhöht. Anschließend folgte eine Rampe von 20 °C/min für 3 min auf 160 °C, die dann weitere 2 min gehalten wurden. Der Sensor wurde statisch bei 400 °C betrieben und mit einem Make-Up-Strom aus synthetischer Luft mit 10 mL/min versorgt. Die Messung der Probe wurde dreimal wiederholt. Eine Blankmessung mit einem leeren Vial (nur Laborluft) wurde als Referenzmessung ebenfalls dreimal wiederholt. Als Signal- und Bearbeitungssoftware wurde Chromeleon Version 7.3.2 (Thermo Scientific, USA) verwendet. Als Sensoren wurden ein SGP40 (Sensirion, Schweiz) für die Detektion von VOCs und ein SHT35 (Sensirion, Schweiz) für die Überwachung der Sekundärparameter Temperatur, Druck und Feuchte verbaut. Die

Elektronik zur Ansteuerung und zum Auslesen der Sensoren beruht auf Arbeiten von (Baur et al., 2018).

Sensorkammer am GC-SOMSA

Die Sensorkammer des GC-SOMSA muss einige Anforderungen erfüllen, um für GC-Messungen geeignet zu sein. So muss beispielsweise das Totvolumen so gering wie möglich sein, damit nicht Verschleppungen zu einer Verbreiterung der Peaks führen. Darüber hinaus muss eine Messkammer mit einem Make-Up-Strom an synthetischer Luft versorgt werden, zum einen um die Peaks weiter zu schärfen, zum anderen um die halbleitenden Metalloxide mit ausreichend Sauerstoff zu versorgen. Des Weiteren sollte die Kammer für die Detektion schwerer flüchtiger Verbindungen beheizbar sein, um ein Auskondensieren der Analyten zu verhindern. Gleichzeitig muss die Elektronik ausreichend gekühlt werden. Für diese Zwecke wurde eigens eine Sensorkammer, basierend auf den Arbeiten von (Baur et al., 2018), entworfen.

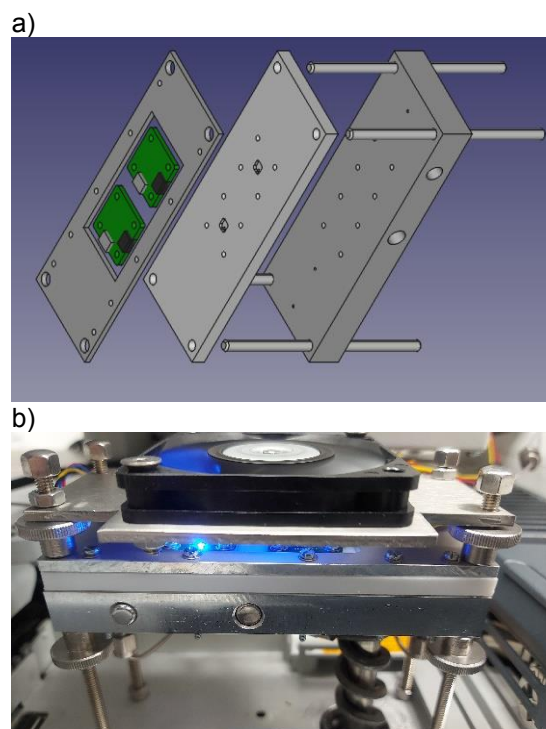


Abb. 2: a) Explosionssskizze der Sensorkammer am GC-SOMSA mit Unterbau (Aluminium, dunkelgrau), PTFE-Dichtungsschicht (hellgrau) und Oberbau (Aluminium, dunkelgrau); b) Fotografie der Sensorkammer mit aufgesetzter Kühleinheit.

Sie besteht aus drei Kernlagen, einem Unterbau aus Aluminium, einer Polytetrafluorethylen (PTFE)-Dichtungsschicht und einem befestigenden Oberbau, ebenfalls aus Aluminium. Der Unterbau dient der Befestigung der oberen Aufbauten und bietet entsprechende Anschlüsse für das Make-Up-Gas und für die GC-Säule. Als Make-Up-Gas wurde synthetische Luft angeschlossen und mittels eines Massenflussreglers (engl. *mass flow controller*, MFC; MKS Instruments, USA) reguliert. Ein nachgeschalteter Massenflussmesser (engl. *mass flow meter*, MFM; MKS Instruments, USA) dient der Überprüfung der Dichtigkeit des Systems.

Zusätzlich beinhaltet er zwei Aussparungen für eine Heizpatrone (RS Pro 860 7139, RS Components GmbH, Deutschland) und handelsüblichem Pt100-Widerstand, um die Kammer entsprechend für schwerer flüchtige Verbindungen heizen zu können. Zu diesem Zweck wurde eine Transferline aus dem GC-Ofen hin zur Sensorkammer gebaut, die mittels Widerstandsheizter (RCF 200, Acim Jouanin, Frankreich) und handelsüblichem Pt100-Widerstand temperiert werden kann. Die heizbaren Elemente werden mit einem Regler (UR3274S1, Wachendorff GmbH, Deutschland) gesteuert. In die PTFE-Dichtungsschicht wurden feine Kanäle (1 x 1 mm) und eine entsprechende Aussparung für den Sensor (5 x 5 x 1 mm) gefräst. Die Sensoren wurden auf die Steckplätze geschraubt, der dazu aufgesetzte Oberbau dient einem gleichmäßigen Anpressdruck der PTFE-Dichtungsschicht an den Unterbau. Eine entsprechende Skizze der Sensorkammer ist in Abb. 2a dargestellt. Um die Elektronik bei beheizter Sensorkammer kühlen zu können, ist zudem eine Ventilationseinheit (9GA0612G9001, Sanyo Denki Germany GmbH, Deutschland) über der Elektronik verbaut worden. Eine Photographie des gesamten Aufbaus ist in Abb. 2b zu sehen.

Ergebnisse Sensorcharakterisierung mittels GC-SOMSA Messung

Die Messung des Headspace der künstlichen Ranzigkeitsmischung offenbarte vier Peaks im MS-Signal, die nach einem Abgleich mit der NIST-Massenspektrendatenbank als Argon, Pentan, Hexanal und Octanal bestimmt wurden (Abb. 3). Keiner der gemessenen Peaks konnte Nonanal zugeordnet werden.

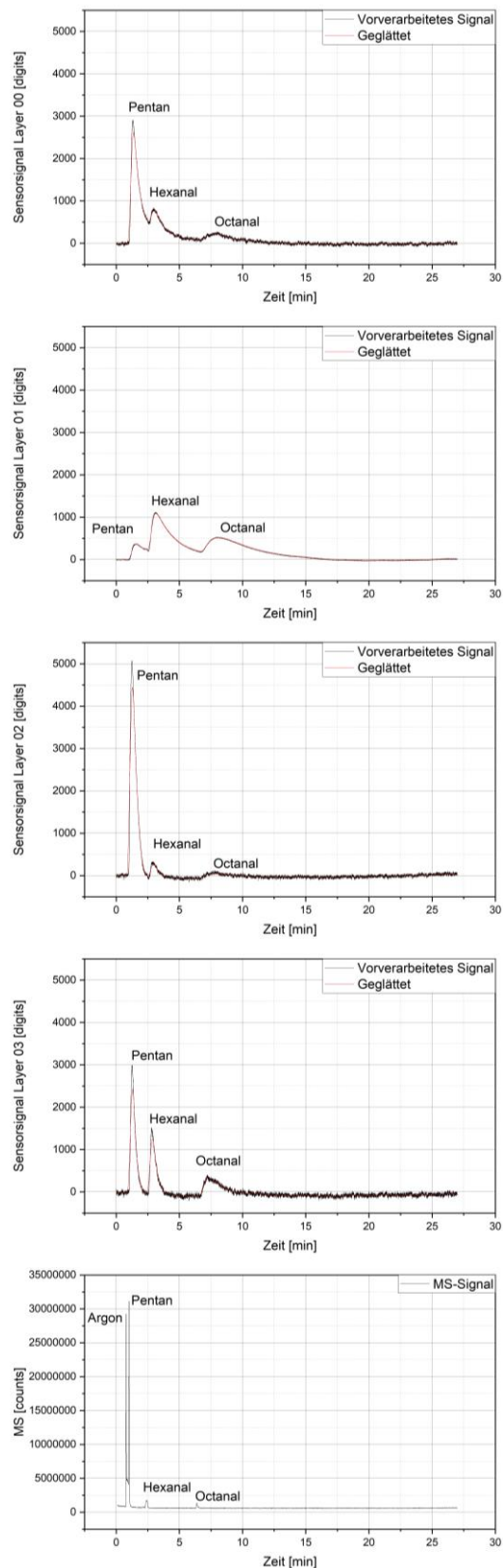


Abb. 3: Chromatogramme des MS und der vier Sensorschichten. Die Peaks wurden mit einem Abgleich der NIST-Datenbank bestimmt, das vorverarbeitete (vom Maximalwert 2^{16} abgezogen) Sensorrohsignal durch Subtraktion des Grundwerts einheitlich skaliert.

Das Sensorsignal, ausgegeben als Rohsignal in TICs, ist nach den Herstellerangaben proportional zum Logarithmus des Widerstands des Sensormaterials (Sensirion). Zur übersichtlicheren Darstellung wird das Rohsignal in einer Vorverarbeitung vom Maximalwert 2^{16} abgezogen und durch Subtraktion des Grundwertes einheitlich skaliert. Zudem wurde das Signal mittels des gleitenden Durchschnitts über 200 Punkten geglättet. Das vorverarbeitete Signal und die entsprechenden Glättungen sind in Abb. 3 dargestellt. In der Sensorantwort zeigt sich für die vier verschiedenen einzelnen Schichten des SGP40 eine entsprechend unterschiedliche Signalantwort. Schicht 0 zeigt drei nicht komplett basisliniengetrennte Peaks, von denen der erste Peak die höchste Intensität besitzt, der zweite eine deutlich geringere und der dritte Peak die geringste Intensität besitzt. Schicht 1 zeigt ebenfalls aufgrund des Tailings drei nicht komplett basisliniengetrennte Peaks. In diesem Fall hat jedoch der zweite Peak die höchste Intensität, wohingegen der erste Peak die geringste Intensität aufweist. Schicht 2 offenbart einen ersten Peak mit sehr hoher Intensität. Der zweite Peak ist deutlich geringer, wohingegen der dritte Peak die geringste Intensität besitzt und im Gegensatz zu den anderen beiden Peaks ein Tailingverhalten mit sich zieht. In Schicht drei scheinen die drei Peaks basisliniengetrennt zu sein. Der erste Peak zeigt auch hier die höchste Intensität, gefolgt von Peak zwei und drei, auch wenn der Unterschied nicht so deutlich auffällt wie in Schicht 2. Die Parameter Temperatur, Druck und Feuchte sind im Verlaufe der Messung entsprechend stabil. Zwischen dem MS und der Sensorantwort ist zudem ein leichter Zeitversatz zu erkennen.

Diskussion

Zunächst fällt auf, dass nur die der Probe zugefügten Marker zu sehen sind, was bedeutet, dass die hier verwendete Matrix nicht oxidiert und keine Fragmente emittiert. Zusätzlich zu den Signalen der Marker ist im MS noch Argon detektiert worden, das vermutlich aus der Luft im Headspace mit injiziert wurde. Argon ist als Edelgas jedoch nicht reaktiv, weshalb die Sensoren kein Signal für Argon anzeigen. In den Sensorschichten sind daher nur Pentan, Hexanal und Octanal zu erkennen. Nonanal ist in keinem einzigen Chromatogramm zu finden. Es ist in dem gewählten Temperaturprogramm und der Inkubationszeit von 5 min bei 40 °C (siehe Material und Methodenteil) nicht flüchtig genug,

um während des Chromatographielaufs zu eluieren.

Zwischen den Schichten sind deutliche Unterschiede zu erkennen. Besonders auffällig ist dabei, dass Schicht 1 nur einen sehr kleinen Pentanpeak aufweist, obwohl Pentan um zwei Größenordnungen höher konzentriert (vgl. 100 ppm mit 1 ppm) vorliegt, als Hexanal und Octanal. Da der Hexanal- und der Octanalpeak hier trotzdem deutlich zu erkennen sind, scheint sich Schicht 1 besonders für die Detektion der beiden Aldehyde zu eignen. Für Pentan zeigt Schicht 2 die höchste Intensität, sodass Schicht 2 besonders für die Detektion dieses Alkans geeignet scheint. Schicht 3 zeigt alle Peaks recht deutlich, sodass diese Schicht als Übersicht für die hier verwendeten Marker in Betracht zu ziehen ist. Da in dieser ersten Übersicht nur das vorverarbeitete Rohsignal und die entsprechend geglätteten Signale betrachtet wurden, kann eine weitere Signalverarbeitung weitere Erkenntnisse mit sich bringen. So kann in einem nächsten Schritt beispielsweise die Ableitung der Signale für eine bessere Trennung der einzelnen Peaks sorgen.

Zusammenfassung und Ausblick

Der hier verwendete Sensor war in der Lage, die einzelnen Marker zu erkennen. Darüber hinaus konnte gezeigt werden, dass unterschiedliche Schichten des Sensors unterschiedlich stark auf die einzelnen Marker bzw. Molekülklassen reagieren. Daher ist ein Fingerprinting mit diesem Sensor möglich, weshalb der Sensor nachfolgend in einem entsprechenden Sensorsystem verwendet werden kann. Das GC-SOMSA-Verfahren ist somit in der Lage, eine Charakterisierung des Sensors durchzuführen und kann als Teil einer Entwicklungsplattform für IOMS eingesetzt werden.

In einem nächsten Schritt muss nun zunächst ein Abgleich der Retentionszeiten erfolgen und die Ursache des Zeitversatzes als systemisch oder sensorspezifisch geklärt werden. Außerdem kann eine weitere Signalverarbeitung i.S. einer Ableitung o.ä. der Sensorantwort mit dem Ziel geprüft werden, eine bessere Auflösung der Sensorchromatogramme zu realisieren. Darüber hinaus könnten neben dem künstlich mit Oxidationsmarkern versetzten Öl auch reale ranzige Proben nach einer definierten Alterung vermessen werden.

Acknowledgements und Danksagung

Die Arbeiten wurden durch das Bayerische Staatsministerium für Wirtschaft, Landesentwicklung und Energie im Rahmen des Projekts „Campus der Sinne“ (Förderkennzeichen: 20-3410-2-14-3) und im Projekt „SENT-GC-MOS“ (Förderkennzeichen: 01IF22938N) im Rahmen des Programms „Industrielle Gemeinschaftsforschung“ durch das Bundesministerium für Wirtschaft und Klimaschutz gefördert.

Die Autoren möchten sich außerdem herzlich bei Oliver Brieger (Universität des Saarlandes) für die Unterstützung bei der Berechnung des Splitverhältnisses des GC-SOMSA bedanken.

Literatur

- Baur, T., Schultealbert, C., Schütze, A., and Sauerwald, T.: Device for the detection of short trace gas pulses, *tm - Technisches Messen*, 85, 496–503, <https://doi.org/10.1515/teme-2017-0137>, 2018.
- Belitz, H.-D., Grosch, W., and Schieberle, P.: *Lehrbuch der Lebensmittelchemie*, 6., vollst. überarb. Aufl., Nachdruck, Springer-Lehrbuch, Springer, Berlin, 2012. ISBN 978-3-540-73201-3.
- Brieger, O.: *Konzeption und Aufbau einer GC-MS-Erweiterung zur synchronen Gassensormessung*, Masterarbeit, persönliche Mitteilung, Universität Saarbrücken, 2020.
- Costello, B. P. J. d. L., Ewen, R. J., Gunson, H., Ratcliffe, N. M., Sivanand, P. S., and Spencer-Phillips, P. T. N.: A prototype sensor system for the early detection of microbially linked spoilage in stored wheat grain, *Meas. Sci. Technol.*, 14, 397–409, <https://doi.org/10.1088/0957-0233/14/4/301>, 2003.
- Costello, B. P. J. d. L., Ewen, R. J., Gunson, H. E., Ratcliffe, N. M., and Spencer-Phillips, P. T. N.: The development of a sensor system for the early detection of soft rot in stored potato tubers, *Meas. Sci. Technol.*, 11, 1685–1691, <https://doi.org/10.1088/0957-0233/11/12/305>, 2000.
- Gama, T., Wallace, H. M., Trueman, S. J., and Hosseini-Bai, S.: Quality and shelf life of tree nuts: A review, *Scientia Horticulturae*, 242, 116–126, <https://doi.org/10.1016/j.scienta.2018.07.036>, 2018.
- Hofmann, T., Schieberle, P., Krummel, C., Freiling, A., Bock, J., Heinert, L., and Kohl, D.: High resolution gas chromatography/selective odorant measurement by multisensor array (HRGC/SOMSA): a useful approach to standardise multisensor arrays for use in the detection of key food odorants, *Sensors and Actuators B: Chemical*, 41, 81–87, [https://doi.org/10.1016/S0925-4005\(97\)80280-8](https://doi.org/10.1016/S0925-4005(97)80280-8), 1997.
- Joppich, J., Su, Z., Marschibois, M., Karst, K., Bur, C., and Schütze, A.: 2.3 - MOS Sensors for Spoilage Detection of Milk using GC-MS and Human Perception as Reference, *Vorträge*, 17–22, <https://doi.org/10.5162/16dss2022/2.3>, 2022.
- Koehne, M., Schmidt, C., Singh, S., Grasskamp, A., Sauerwald, T., and Zeh, G.: Development of a gas chromatography system coupled to a metal-oxide semiconductor (MOS) sensor, with compensation of the temperature effects on the column for the measurement of ethene, *J. Sens. Sens. Syst.*, 12, 215–223, <https://doi.org/10.5194/jsss-12-215-2023>, 2023.
- Kohl, D., Heinert, L., Bock, J., Hofmann, T., and Schieberle, P.: Systematic studies on responses of metal-oxide sensor surfaces to straight chain alkanes, alcohols, aldehydes, ketones, acids and esters using the SOMMSA approach, *Sensors and Actuators B: Chemical*, 70, 43–50, [https://doi.org/10.1016/S0925-4005\(00\)00552-9](https://doi.org/10.1016/S0925-4005(00)00552-9), 2000.
- Laor, Y., Parker, D., and Pagé, T.: Measurement, prediction, and monitoring of odors in the environment: a critical review, *Reviews in Chemical Engineering*, 30, 139–166, <https://doi.org/10.1515/revce-2013-0026>, 2014.
- Park, S. Y., Kim, Y., Kim, T., Eom, T. H., Kim, S. Y., and Jang, H. W.: Chemoresistive materials for electronic nose: Progress, perspectives, and challenges, *InfoMat*, 1, 289–316, <https://doi.org/10.1002/inf2.12029>, 2019.
- Poghossian, A., Geissler, H., and Schöning, M. J.: Rapid methods and sensors for milk quality monitoring and spoilage detection, *Biosensors & bioelectronics*, 140, 111272, <https://doi.org/10.1016/j.bios.2019.04.040>, 2019.
- Rusinek, R., Siger, A., Gawrysiak-Witulska, M., Rokosik, E., Malaga-Toboła, U., and Gancarz, M.: Application of an electronic nose for determination of pre-pressing treatment of rapeseed based on the analysis of volatile compounds contained in pressed oil, *Int J of Food Sci Tech*, 55, 2161–2170, <https://doi.org/10.1111/ijfs.14392>, 2020.
- Schultealbert, C., Baur, T., Schütze, A., Böttcher, S., and Sauerwald, T.: A novel approach towards calibrated measurement of trace gases using metal oxide semiconductor sensors, *Sensors and Actuators B: Chemical*, 239, 390–396, <https://doi.org/10.1016/j.snb.2016.08.002>, 2017.
- Sensirion: SGP40 – VOC sensor for HVAC and air quality applications: Datasheet SGP40, <https://sensirion.com/products/catalog/SGP40>, last access: 30 August 2023.
- Zeh, G., Koehne, M., Grasskamp, A., Haug, H., Singh, S., and Sauerwald, T.: Towards Artificial Intelligent Olfactory Systems, in: *2022 IEEE International Symposium on Olfaction and Electronic Nose (ISOEN)*, 1–2, <https://doi.org/10.1109/ISOEN54820.2022.9789600>.