

การวิเคราะห์และเปรียบเทียบสารที่ระเหยได้ในกาแฟตามแหล่งเพาะปลูกโดยใช้เทคนิค
เฮดสเปซโซลิดเฟสไมโครเอกซ์แทรกชัน-แก๊สโครมาโทกราฟี-แมสสเปกโทเมตรี
ร่วมกับเคโมเมทริกซ์

Determination and Comparison of Volatile Compounds in Coffee
from Various Geographical Origins Using Headspace Solid Phase Microextraction-
Gas Chromatography-Mass Spectrometry Combined with Chemometrics



โดย

นายชวิน จุลาเกตุโพธิชัย

นางสาวภิญอรดา นุ่นขาว

ภาควิชาเคมี

คณะวิทยาศาสตร์

รายงานนี้เป็นส่วนหนึ่งของการศึกษาตามหลักสูตร
ปริญญาวิทยาศาสตรบัณฑิต

ภาควิชาเคมี คณะวิทยาศาสตร์

จุฬาลงกรณ์มหาวิทยาลัย

ปีการศึกษา 2557

เรื่อง การวิเคราะห์และเปรียบเทียบสารที่ระเหยได้ในกาแฟตามแหล่งเพาะปลูกโดยใช้เทคนิคเฮดสเปซ
โซลิดเฟสไมโครเอกซ์แทรกชัน-แก๊สโครมาโทกราฟี-แมสสเปกโทเมตรีร่วมกับเคโมเมทริกซ์

โดย นายชวิน จุลาเกตุโพธิชัย และนางสาวภิญรดา นุ่นขาว

ได้รับอนุมัติให้เป็นส่วนหนึ่งของการศึกษา

ตามหลักสูตรปริญญาวิทยาศาสตรบัณฑิต สาขาวิชาเคมี

คณะวิทยาศาสตร์ จุฬาลงกรณ์มหาวิทยาลัย

คณะกรรมการสอบโครงการ



..... ประธานกรรมการ
(ผู้ช่วยศาสตราจารย์ ดร. ปกรณ์ วรรณสุภากุล)

..... อาจารย์ที่ปรึกษา
(รองศาสตราจารย์ ดร. ธรรมนุญ หนูจักร)

..... กรรมการ
(ผู้ช่วยศาสตราจารย์ ดร. คณศ วงษ์ระวี)

รายงานฉบับนี้ได้รับความเห็นชอบและอนุมัติโดยหัวหน้าภาควิชาเคมี

(รองศาสตราจารย์ ดร. วุฒิชัย พาราสุข)
หัวหน้าภาควิชาเคมี

วัน 22 เดือน พ.ค. พ.ศ. 2558

คุณภาพของการเขียนรายงานเล่มนี้อยู่ในระดับ ดีมาก ดี พอใช้

ชื่อโครงการ การวิเคราะห์และเปรียบเทียบสารที่ระเหยได้ในกาแฟตามแหล่งเพาะปลูกโดยใช้เทคนิค
เฮดสเปซ-โซลิดเฟสไมโครเอกซ์แทรกชัน-แก๊สโครมาโทกราฟี-แมสสเปกโตรเมทรีร่วมกับ
เคโมเมทริกซ์

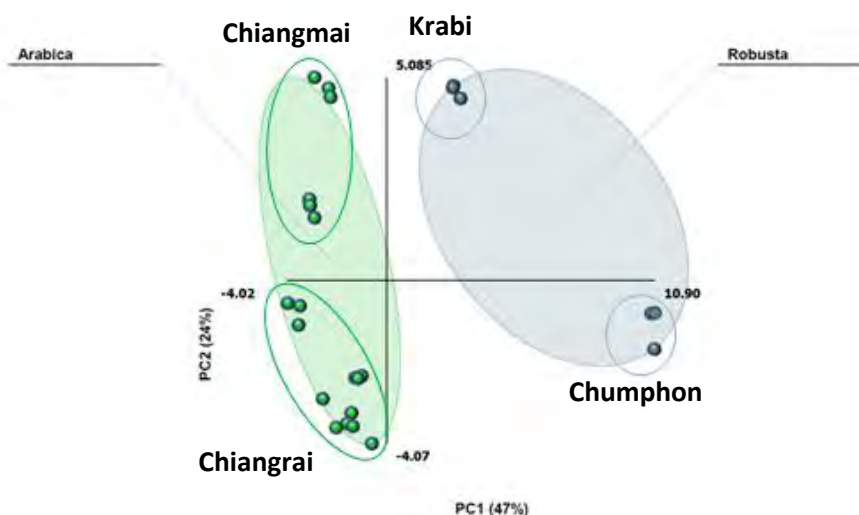
ชื่อนิสิตในโครงการ นายชวิน จุลาเกตุโพธิชัย เลขประจำตัว 5433078223
นางสาวภิญญา นุ่นขาว เลขประจำตัว 5433112923

ชื่ออาจารย์ที่ปรึกษา รองศาสตราจารย์ ดร. ธรรมนุญ หนูจักร

ภาควิชาเคมี คณะวิทยาศาสตร์ จุฬาลงกรณ์มหาวิทยาลัย ปีการศึกษา 2557

บทคัดย่อ

ได้วิเคราะห์หาสารที่ระเหยได้ในกาแฟด้วยแก๊สโครมาโทกราฟี-แมสสเปกโตรเมทรี (GC-MS) ร่วมกับ
เฮดสเปซ-โซลิดเฟสไมโครเอกซ์แทรกชัน (HS-SPME) โดยใช้แคปิลลารีคอลัมน์ของ GC ประเภท HP-5MS ขนาด
30 m x 0.25 mm x 0.25 μ m และภาวะที่เหมาะสมของ HS-SPME ดังต่อไปนี้คือ อุณหภูมิที่ 90 องศาเซลเซียส,
เวลาที่ใช้ในการสกัด 45 นาที และเวลาของการปลดปล่อยสารที่ 5 นาที จากการเปรียบเทียบกับฐานข้อมูล NIST
สามารถพิสูจน์ทราบสารที่ระเหยได้ 72 ชนิดโดยที่องค์ประกอบหลัก 8 ชนิด ที่มีร้อยละพื้นที่ใต้พีคเปรียบเทียบ
มากกว่า 1% ได้แก่ 2-methoxy-4-vinylphenol, 2-furanmethanol, furfural, pyridine, furfuryl acetate,
5-methyl-2-furancarboxaldehyde, 2-methyl-pyrimidine และ 2-furanyl-1-ethanone เมื่อใช้วิธีเคโมเมทริกซ์
ชนิดการวิเคราะห์องค์ประกอบหลัก (PCA) ที่เป็นสารที่ระเหยได้ที่ถูกเลือกมา 45 ชนิด พบว่าสามารถจำแนกตัวอย่าง
กาแฟจากแหล่งเพาะปลูก 4 แหล่ง (เชียงใหม่, เชียงราย, กระบี่, ชุมพร) ได้ด้วยรูปแบบ PCA ที่แตกต่างกัน สิ่งเหล่านี้
บ่งชี้ได้ว่าสามารถใช้วิธี HS-SPME/GC-MS ร่วมกับเคโมเมทริกซ์ในการพิสูจน์ทราบกาแฟตามแหล่งเพาะปลูกต่างกัน
ได้



คำสำคัญ: กาแฟ, สารที่ระเหยได้, เฮดสเปซ-โซลิดเฟสไมโครเอกซ์แทรกชัน, แก๊สโครมาโทกราฟี-แมสสเปกโตรเมทรี

Title Determination and comparison of volatile compounds in coffee from various geographical origins using headspace solid phase microextraction-gas chromatography-mass spectrometry combined with chemometrics

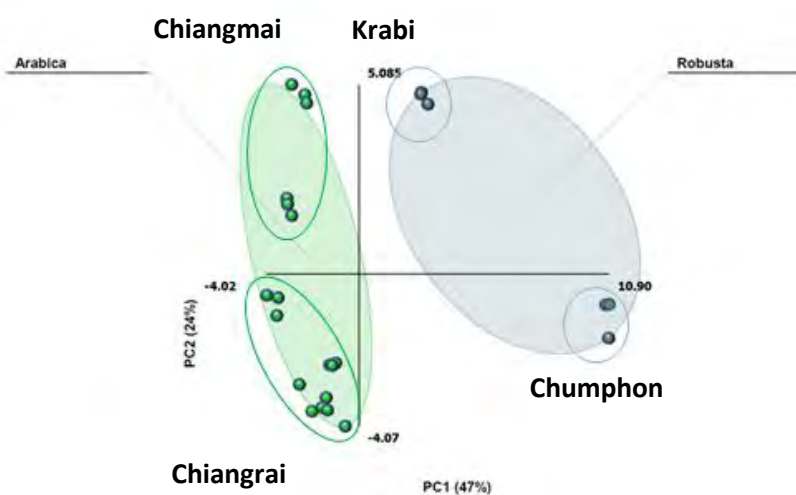
Student Chawin Julagetphotichai ID 5433078223
Phinrada Nunkhao ID 5433112923

Advisor Associate Professor Thumnoon Nhujak, Ph.D

Department of Chemistry, Faculty of Science, Chulalongkorn University, 2014

Abstract

Volatile compounds in coffee were determined by gas chromatography-mass spectrometry (GC-MS) combined with headspace solid phase microextraction (HS-SPME) using a GC capillary column of HP-5MS (30 m x 0.25 mm x 0.25 μ m) and the following suitable HS-SPME conditions: temperature of 90 °C, extraction time of 45 min and desorption time of 5 min. Comparing with the NIST library database, 72 volatile compounds were identified, along with eight major components with normalized peak area above 1% such as 2-methoxy-4-vinylphenol, 2-furanmethanol, furfural, pyridine, furfuryl acetate, 5-methyl-2-furancarboxaldehyde, 2-methylpyrimidine and 2-furanyl-1-ethanone. Using chemometrics with principal components analysis (PCA) of 45 selected volatile compounds, coffee samples from four geographical origins (Chiangmai, Chiangrai, Krabi, Chumphon) were classified with different PCA patterns. This indicates that HS-SPME/GC-MS combined with chemometrics can be used an alternative method for identification of coffee from different geographical origins.



Keywords: Coffee, Volatile compounds, Headspace solid phase microextraction, Gas chromatography-mass spectrometry

กิตติกรรมประกาศ

ผู้เขียนขอขอบพระคุณ รองศาสตราจารย์ ดร. ธรรมนุญ หนูจักร อาจารย์ที่ปรึกษา ท่านได้ให้ความสนใจใส่ช่วยเหลือ และให้คำแนะนำในการแก้ปัญหาต่างๆ ที่เกิดขึ้นตลอดระยะเวลาในการทำงานวิจัย รวมทั้งให้คำแนะนำในการเขียนรายงานฉบับนี้ให้สำเร็จลุล่วงไปด้วยดี นอกจากนี้ผู้วิจัยขอขอบพระคุณผู้ช่วยศาสตราจารย์ ดร. ปกรณ์ วรานุศุภากุล และผู้ช่วยศาสตราจารย์ ดร. คณศ วังษะระวี ที่กรุณาสละเวลาในการตรวจทาน แก้ไข และให้เกียรติเป็นประธานและกรรมการในการสอบงานวิจัยในครั้งนี้

ขอขอบคุณ คุณภูวตล ธรรมราชูร์ที่คอยให้คำปรึกษา ชี้แนะ และให้ความรู้ในการใช้เครื่องมือและคอยให้ความช่วยเหลือทุกด้านที่เกี่ยวข้องกับการวิจัยในครั้งนี้ ทำให้โครงการนี้สำเร็จลุล่วงไปด้วยดี

ขอขอบคุณโครงการการเรียนการสอนเพื่อเสริมประสบการณ์ คณะวิทยาศาสตร์ จุฬาลงกรณ์มหาวิทยาลัย ที่ให้การสนับสนุนในการดำเนินงานวิจัยในครั้งนี้ และขอกราบขอบพระคุณภาควิชาเคมี คณะวิทยาศาสตร์ จุฬาลงกรณ์มหาวิทยาลัย ที่ได้เอื้อเฟื้ออุปกรณ์และสารเคมีต่างๆ ที่ใช้ในการทำงานวิจัย ตลอดจนบุคลากรฝ่ายต่างๆ ที่คอยให้ความช่วยเหลือมาโดยตลอด



ภาควิชาเคมี
คณะวิทยาศาสตร์
จุฬาลงกรณ์มหาวิทยาลัย

สารบัญ

	หน้า
บทคัดย่อภาษาไทย	ค
บทคัดย่อภาษาอังกฤษ	ง
กิตติกรรมประกาศ	จ
สารบัญ	ฉ
คำอธิบายสัญลักษณ์และคำย่อ	ช
บทที่ 1 บทนำ	
1.1 ความเป็นมาและความสำคัญของปัญหา	1
1.2 งานวิจัยที่เกี่ยวข้อง	2
1.3 ทฤษฎีและความรู้พื้นฐาน	2
1.4 วัตถุประสงค์และขอบเขตของการวิจัย	10
1.5 ประโยชน์ที่ได้รับจากงานวิจัย	10
บทที่ 2 การทดลอง	
2.1 การหาอัตราส่วนของสารที่เข้าคอลัมน์ (splitless & split ratio)	11
2.2 การหาอุณหภูมิที่เหมาะสมในการเตรียมกาแฟตัวอย่างโดยใช้เทคนิคเฮดสเปซ	12
2.3 การหาเวลาที่เหมาะสมในการเตรียมกาแฟตัวอย่างโดยใช้เทคนิคเฮดสเปซ	13
2.4 การหาเวลาที่เหมาะสมในการปลดปล่อยสารในส่วนฉีดสารของเครื่องแก๊สโครมาโทกราฟี	13
2.5 ทดสอบความใช้ได้ของวิธีวิเคราะห์	14
2.6 หาโครมาโทแกรมของกาแฟตัวอย่าง 8 ชนิด	14
2.7 ประมวลผลด้วยเคโมเมทริกซ์	14

บทที่ 3 ผลการทดลองและวิจารณ์

3.1 การหาอัตราส่วนของสารที่เข้าคอลัมน์ (splitless & split ratio)	15
3.2 การหาอุณหภูมิที่เหมาะสมในการเตรียมกาแฟตัวอย่างโดยใช้เทคนิคเฮดสเปซ (extraction temperature)	18
3.3 การหาเวลาที่เหมาะสมในการเตรียมกาแฟตัวอย่างโดยใช้เทคนิคเฮดสเปซ (extraction time)	19
3.4 การหาเวลาที่เหมาะสมในการปล่อยสารในส่วนฉีดสารของเครื่องแก๊สโครมาโทกราฟี (desorption time)	20
3.5 ผลการทดสอบความใช้ของวิธีวิเคราะห์	21
3.6 หาโครมาโทแกรมของกาแฟตัวอย่าง 8 ชนิด	25
3.7 การประมวลผลด้วยเคโมเมทริกซ์	34

บทที่ 4 สรุปผลการทดลอง

เอกสารอ้างอิง	37
ภาคผนวก	39
ประวัติผู้วิจัย	59

ภาควิชาเคมี
คณะวิทยาศาสตร์
จุฬาลงกรณ์มหาวิทยาลัย

สารบัญรูป

	หน้า
รูปที่ 1-1 ส่วนประกอบอุปกรณ์โซลิดเฟสไมโครเอกซ์แทรกชัน	3
รูปที่ 1-2 Extraction step	3
รูปที่ 1-3 Desorption step	4
รูปที่ 1-4 Direct sampling	5
รูปที่ 1-5 Headspace sampling	5
รูปที่ 1-6 กราฟผลของ PCA	9
รูปที่ 3-1 ก) โครมาโทแกรมของกาแฟตัวอย่างด้วยโหมด splitless	15
ข) split ratio 10:1	16
ค) split ratio 25:1	16
ง) split ratio 50:1	17
จ) split ratio 100:1	17
รูปที่ 3-2 การเปรียบเทียบพื้นที่ใต้พีคของกาแฟตัวอย่างที่อุณหภูมิ	18
ก) 70, ข) 80 และ ค) 90 องศาเซลเซียส ที่ช่วงเวลาวิเคราะห์ 35.3 - 35.7 นาที	
รูปที่ 3-3 การเปรียบเทียบพื้นที่ใต้พีคของกาแฟตัวอย่างที่เวลา	19
ก) 30, ข) 45 และ ค) 60 นาที ที่ช่วงเวลาวิเคราะห์ 35.3 - 35.7 นาที	
รูปที่ 3-4 ก) การเปรียบเทียบพื้นที่ใต้พีคของกาแฟตัวอย่างที่เวลาปลดปล่อยสาร	20
ก) 3, ข) 5 และ ค) 7 นาที ที่ช่วงเวลาวิเคราะห์ 14.4 นาที – 15.1 นาที	
ข) การเปรียบเทียบพื้นที่ใต้พีคของกาแฟตัวอย่างที่เวลาปลดปล่อยสาร	21
ก) 3, ข) 5 และ ค) 7 นาที ที่ช่วงเวลาวิเคราะห์ 35.3 นาที – 35.7 นาที	

รูปที่ 3-5 ก) กราฟการกระจายระหว่างค่า %Normalization และ %Relative Standard Deviation ช่วง 0-1 %	24
ข) กราฟการกระจายระหว่างค่า %Normalization และ %Relative Standard Deviation ช่วง 1-30 %	24
รูปที่ 3-6 กาแฟสายพันธุ์อาราบิกา ที่มาจากจังหวัดเชียงราย ดอยนางแก้ว	26
รูปที่ 3-7 กาแฟสายพันธุ์อาราบิกา ที่มาจากจังหวัดเชียงราย ดอยช้าง	27
รูปที่ 3-8 กาแฟสายพันธุ์อาราบิกา ที่มาจากจังหวัดเชียงราย ผาฮี้	28
รูปที่ 3-9 กาแฟสายพันธุ์อาราบิกา ที่มาจากจังหวัดเชียงราย รมเย็น	29
รูปที่ 3-10 กาแฟสายพันธุ์อาราบิกา ที่มาจากจังหวัดเชียงใหม่ แหล่งปลูก 1	30
รูปที่ 3-11 กาแฟสายพันธุ์อาราบิกา ที่มาจากจังหวัดเชียงใหม่ แหล่งปลูก 2	31
รูปที่ 3-12 กาแฟสายพันธุ์โรบัสตา ที่มาจากจังหวัดกระบี่	32
รูปที่ 3-13 กาแฟสายพันธุ์โรบัสตา ที่มาจากจังหวัดชุมพร	33
รูปที่ 3-14 กราฟผล PCA ในการจัดกลุ่มกาแฟทั้ง 4 ชนิดจากแต่ละจังหวัดในประเทศไทย	34
รูปที่ 3-15 กราฟผล PCA ของสารที่ระเหยได้ที่มีความสำคัญในกาแฟ 10 อันดับแรก	34

สารบัญญัตินำ

ตารางที่ 3-1 ตารางค่าเฉลี่ย ค่าเบี่ยงเบนมาตรฐาน ค่า %RSD ของสารระเหยที่สำคัญที่ระเหยได้ จากการวิเคราะห์ในกาแฟอาราบิกา	21
--	----

คำอธิบายสัญลักษณ์และคำย่อ

คำย่อ

HS-SPME	=	Headspace–Solid Phase Microextraction
GC-MS	=	Gas Chromatography–Mass Spectrometry
GC-O	=	Gas Chromatography–Olfactometry
PCA	=	Principal Component Analysis
PDMS	=	พอลิไดเมทิลไซลอกเซน
PA	=	พอลิอะคริเลต
CW	=	คาร์โบแวกซ์
DVB	=	ไดไวนิลเบนซีน

สัญลักษณ์

C_0	=	ความเข้มข้นเริ่มต้นของสารที่ต้องการวิเคราะห์ในสารตัวอย่าง
C_f^∞	=	ความเข้มข้นที่ภาวะสมดุลของสารที่ต้องการวิเคราะห์บริเวณไฟเบอร์
C_h^∞	=	ความเข้มข้นที่ภาวะสมดุลของสารที่ต้องการวิเคราะห์บริเวณเฮดสเปซ
C_s^∞	=	ความเข้มข้นที่ภาวะสมดุลของเมทริกซ์ในสารละลาย
h	=	ความยาวของไฟเบอร์
K_{SPME}	=	สัมประสิทธิ์ของการกระจายระหว่างตัวอย่าง-SPME
$K_{HEADSPACE}$	=	สัมประสิทธิ์ของการกระจายระหว่างตัวอย่าง-เฮดสเปซ
n^∞	=	ปริมาณสารที่ต้องการวิเคราะห์
R	=	รัศมีไฟเบอร์ที่ถูกเคลือบด้วยพอลิเมอร์
r	=	รัศมีไฟเบอร์ที่ไม่ถูกเคลือบด้วยพอลิเมอร์
V_f	=	ปริมาตรของไฟเบอร์
V_h	=	ปริมาตรของเฮดสเปซ
V_s	=	ปริมาตรของสารละลาย

บทที่ 1

บทนำ

1.1 ความเป็นมาและความสำคัญของปัญหา

กาแฟเป็นผลิตภัณฑ์ที่ได้จากธรรมชาติซึ่งสายพันธุ์หลักของกาแฟที่ปลูกกันทั่วโลกมีอยู่ 2 สายพันธุ์¹ คือ อาราบิกาและโรบัสตา ซึ่งกาแฟอาราบิกาก็จะได้รับความนิยมในการบริโภคมากกว่าโรบัสตา เพราะมีรสชาติที่ดีและมีกลิ่นหอมกว่า ทำให้กาแฟอาราบิกามีราคาสูงกว่า ด้วยเหตุผลดังกล่าวนี้กาแฟอาราบิกาก็จะมีการเพาะปลูกเป็นจำนวนกว่าสามในสี่ของโลกในประเทศไทยกาแฟอาราบิกาก็มีแหล่งเพาะปลูกอยู่ทางภาคเหนือเป็นส่วนใหญ่ได้แก่จังหวัด เชียงราย เชียงใหม่ แม่ฮ่องสอน น่าน เป็นต้น ส่วนกาแฟโรบัสตาก็มีแหล่งเพาะปลูกอยู่ทางภาคใต้ได้แก่จังหวัด กระบี่ ชุมพร ระนอง สุราษฎร์ธานี เป็นต้น

เนื่องจากกาแฟที่เป็นสายพันธุ์เดียวกันจะมีลักษณะของเมล็ดกาแฟที่คล้ายคลึงกัน ทำให้การจัดกลุ่มของกาแฟโดยการสังเกตด้วยลักษณะทางกายภาพจะให้ผลที่มีความถูกต้องน้อย ดังนั้นการสกัดสารที่ระเหยได้จากกาแฟและตรวจวิเคราะห์ด้วยเทคนิคแก๊สโครมาโทกราฟี ซึ่งเป็นวิธีที่เหมาะสมในการวิเคราะห์สารประกอบอินทรีย์ที่กลายเป็นไอได้ง่ายเนื่องจากองค์ประกอบของกลิ่นในกาแฟส่วนใหญ่เป็นสารประกอบอินทรีย์ประเภทไพรีนและฟูแรน^{2,3,4} และนำข้อมูลที่ได้มาเปรียบเทียบและจัดกลุ่มของกาแฟจะสามารถช่วยเพิ่มความถูกต้องในการบ่งบอกแหล่งที่มาของกาแฟได้

จากการศึกษาเกี่ยวกับการเปรียบเทียบสารระเหยได้ในกาแฟที่มาจากแต่ละแหล่งเพาะปลูกสำหรับใช้บอกแหล่งที่มาของกาแฟพบว่ยังไม่เป็นที่แพร่หลาย ดังนั้นการจัดทำข้อมูลเปรียบเทียบสารที่ระเหยได้ในกาแฟจะช่วยระบุแหล่งเพาะปลูกให้มีความถูกต้องมากยิ่งขึ้น ในงานวิจัยนี้จึงมุ่งที่จะศึกษาและเปรียบเทียบสารที่ระเหยได้ในกาแฟที่มาจากแต่ละจังหวัด โดยเลือกใช้เทคนิคการสกัดด้วยเฮดสเปซ-โซลิดเฟสไมโครเอกซ์แทรกชัน Headspace-Solid Phase Microextraction, (HS-SPME) ซึ่งเป็นเทคนิคที่เหมาะสมสำหรับดูดซับสารระเหยบริเวณเฮดสเปซได้ดี จากนั้นจึงตรวจวัดสารที่ระเหยด้วยเทคนิคแก๊สโครมาโทกราฟี-แมสสเปกโทเมตรี Gas Chromatography-Mass Spectrometry, (GC-MS) ซึ่งเป็นเทคนิคที่มีประสิทธิภาพและให้ผลการวิเคราะห์ที่น่าเชื่อถือ เนื่องจากข้อมูลที่ได้จาก GC-MS มีจำนวนมากและซับซ้อน ดังนั้นจึงได้นำเทคนิคเคมีเมตริกซ์ (chemometrics) ซึ่งเกี่ยวข้องกับวิธีการทางสถิติแบบหลายตัวแปร (multivariate statistical analysis)¹⁹ มาช่วยในการประมวลผลและจัดกลุ่มข้อมูลซึ่งสามารถประยุกต์ใช้ในการระบุแหล่งที่มาของกาแฟได้

1.2 งานวิจัยที่เกี่ยวข้อง

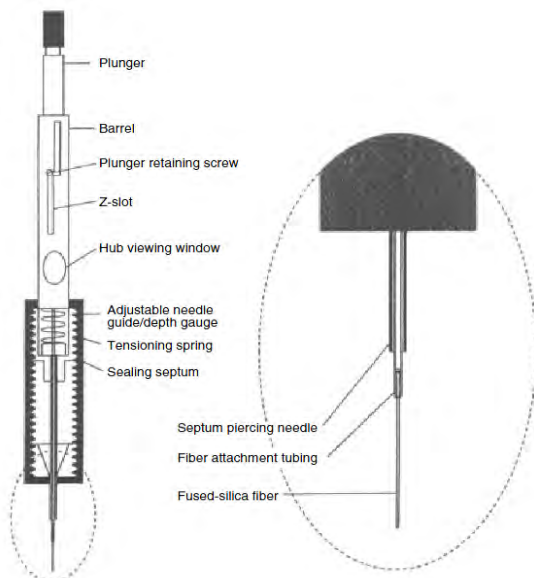
ในช่วง 40 ปีที่ผ่านมาได้มีผู้ศึกษาเกี่ยวกับกลิ่นในกาแฟโดยการเตรียมตัวอย่างด้วยวิธีต่างๆ ในปี ค.ศ. 1977 Amorim และคณะ⁵ ได้ศึกษาสารระเหยในกาแฟสายพันธุ์อาราบิก้าจากแหล่งเพาะปลูกที่ต่างกันในเมือง Sao Paulo และ Minas Geras จากประเทศบราซิล ปี ค.ศ. 1994 Yang และคณะ⁶ ได้ศึกษาและวิเคราะห์กลิ่นที่เป็นเอกลักษณ์ของกาแฟ ด้วยเทคนิคเฮดสเปซ-โซลิตเฟสไมโครเอกซ์แทรกชันปี ค.ศ. 1996 Czemy และคณะ⁷ ศึกษาปริมาณของสารที่ระเหยได้ในกาแฟที่อยู่ในประเทศอินโดนีเซียด้วยเทคนิคแก๊สโครมาโทกราฟี-แมสสเปกโทเมตรี (GC-MS) ปี ค.ศ. 1997 Carlo และคณะ⁸ ศึกษาความแตกต่างองค์ประกอบหลักในกาแฟคั่วกับเครื่องดื่มกาแฟด้วยเทคนิคเฮดสเปซ-โซลิตเฟสไมโครเอกซ์แทรกชัน และเปรียบเทียบความต่างด้วยวิธี PCA ปี ค.ศ. 2000 D.D. Roberts และคณะ⁹ ได้ศึกษาชนิดของไฟเบอร์ที่ใช้สำหรับดูดซับสารที่ระเหยได้ของกาแฟด้วยโซลิตเฟสไมโครเอกซ์แทรกชันในบริเวณเฮดสเปซปี ค.ศ.2001 Sanz และคณะ¹⁰ ศึกษาภาวะที่เหมาะสมของอุณหภูมิและเวลาเพื่อสกัดสารที่ระเหยได้ในตัวอย่างกาแฟ ด้วยเทคนิคเฮดสเปซแก๊สโครมาโทกราฟี-แมสสเปกโทเมตรี (HS-GC-MS) ปี ค.ศ.2007 Oscar และคณะ¹¹ ศึกษากลิ่นที่มาจากสารที่ระเหยได้ในกาแฟดิบจากประเทศเม็กซิโกจากกระบวนการจัดการหลังการเก็บเกี่ยวที่ต่างกันด้วยเทคนิคเฮดสเปซ-โซลิตเฟสไมโครเอกซ์แทรกชัน-แก๊สโครมาโทกราฟี-แมสสเปกโทเมตรี (HS-SPME-GC-MS) และศึกษากลิ่นด้วยแก๊สโครมาโทกราฟี-โอแฟคโตเมตรี (GC-O) ปี ค.ศ. 2008 Juerg และคณะ¹² เปรียบเทียบผลของอุณหภูมิกับเวลาที่ใช้เตรียมกาแฟ รวมถึงศึกษาลักษณะทางกายภาพและกลิ่นของกาแฟที่เกิดขึ้น

1.3 ทฤษฎีและความรู้พื้นฐาน

เทคนิคเฮดสเปซ-โซลิตเฟสไมโครเอกซ์แทรกชันได้ถูกเผยแพร่โดย Janus Pawliszyn และ Zhouyao Zhang¹³ ในเป็นเทคนิคการสกัดและเก็บสารตัวอย่างที่ได้รับความนิยมมากในด้านเคมีวิเคราะห์ เนื่องจากเป็นเทคนิคที่ทำได้ง่ายและช่วยประหยัดตัวทำละลายในการสกัดสาร อีกทั้งยังเป็นเทคนิคที่ใช้ได้กับสารตัวอย่างที่มีคุณสมบัติเป็นสารที่ระเหยได้ที่อยู่ในรูปของแก๊ส ของแข็งและของเหลว

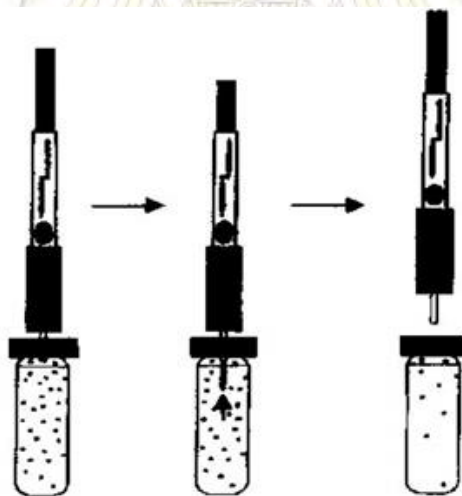
ซึ่งทำให้เกิดการเปลี่ยนแปลงทางด้านเทคโนโลยีการสกัดสารตัวอย่าง โดยพอลิเมอร์ที่เคลือบอยู่บนไฟเบอร์จะทำหน้าที่ดูดซับสารตัวอย่างที่ระเหยได้ในขวดเก็บตัวอย่าง แล้วนำไฟเบอร์ที่ดูดซับสารตัวอย่างมาวิเคราะห์ด้วยแก๊สโครมาโทกราฟีเพื่อปลดปล่อยสารตัวอย่าง พอลิเมอร์ที่เคลือบบนไฟเบอร์จะมีชนิดแตกต่างกันขึ้นอยู่กับสารตัวอย่างที่เราต้องการวิเคราะห์

ข้อดีของการเตรียมสารตัวอย่างด้วยเทคนิคนี้คือเป็นเทคนิคที่ง่าย มีประสิทธิภาพสูง ให้ผลวิเคราะห์ที่เชื่อถือได้และไม่ต้องใช้ตัวทำละลาย ข้อด้อยของการเตรียมสารตัวอย่างด้วยเทคนิคนี้คือเป็นอุปกรณ์ที่นำเข้าจากต่างประเทศมีราคาสูง การใช้งานต้องมีความระมัดระวังเพราะไฟเบอร์ค่อนข้างเปราะ แตกหักง่าย และอายุการใช้งานของไฟเบอร์ค่อนข้างต่ำและในตัวอย่างที่เป็นของแข็งผลของสารรบกวน (matrix effect) จะส่งผลต่อวิธีการนี้ค่อนข้างมาก¹⁴



รูปที่ 1-1 ส่วนประกอบอุปกรณ์โพลีดีฟลูออโรเอทิลีนไมโครเอกซ์แทรกชัน¹⁵

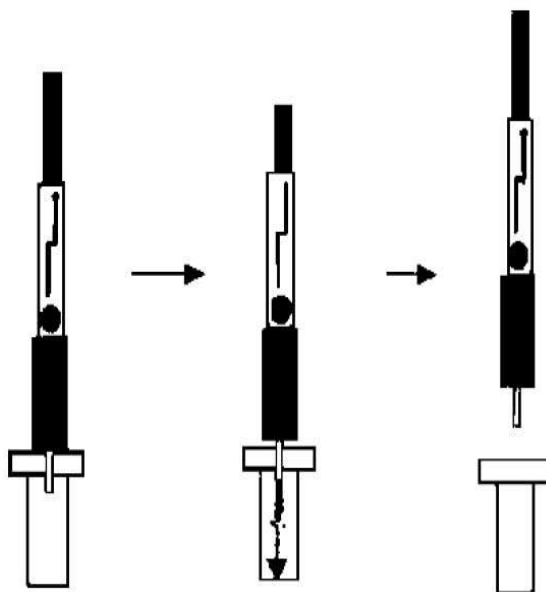
หลักการทำงานของ SPME ประกอบด้วย 2 ขั้นตอนคือ Extraction step และ Desorption step¹⁶
 Extraction step แบ่งออกเป็น 3 ขั้นตอนดังรูปที่ 1-2



รูปที่ 1-2 Extraction step¹⁶

- 1) เจาะเข็ม SPME ผ่าน septum ของขวดบรรจุสารตัวอย่าง
- 2) กดให้ไฟเบอร์ออกมาจาก septum piercing needle ลงไปในสารละลายตัวอย่างหรือในเฮดสเปซเพื่อให้สารที่ต้องการวิเคราะห์แพร่เข้าไปในไฟเบอร์
- 3) เมื่อครบเวลาที่กำหนด เก็บไฟเบอร์ให้เข้าไปใน septum piercing needle และนำออกจากสารตัวอย่างเพื่อเข้าสู่ Desorption step

Desorption step แบ่งออกเป็น 3 ขั้นตอนดังนี้



รูปที่ 1-3 Desorption step¹⁶

- 1) นำ septum piercing needle เจาะเข้าไปที่ส่วนฉีดยาของเครื่องแก๊สโครมาโทกราฟี
- 2) กดให้ไฟเบอร์ออกมาจาก septum piercing needle เพื่อให้สารที่ต้องการวิเคราะห์ถูกปลดปล่อย
- 3) เมื่อครบกำหนดเวลาที่สารต้องการวิเคราะห์จะถูกปล่อยออกจากไฟเบอร์ทั้งหมด จากนั้นเก็บไฟเบอร์ให้เข้าไปใน septum piercing needle และนำออกจากส่วนฉีดยาของเครื่องแก๊สโครมาโทกราฟี

การวิเคราะห์กระบวนการเกิดสมดุลทางด้านเทอร์โมไดนามิกจะอธิบายเฉพาะส่วนการดูดซับของสารที่สามารถกระจายอยู่ในแต่ละเฟสภายในภาชนะบรรจุสารตัวอย่าง ได้แก่ ไฟเบอร์ เฮดสเปซ และสารละลาย

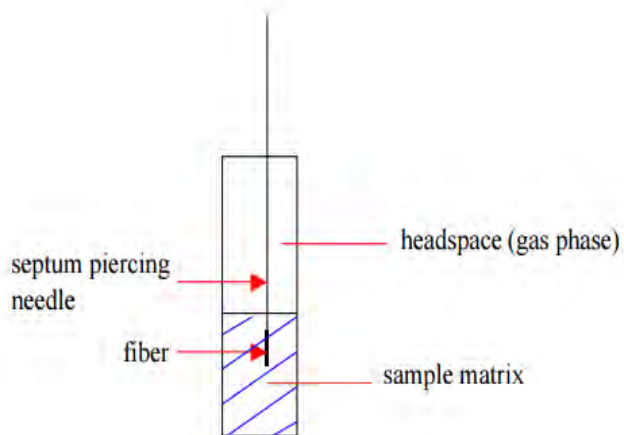
กำหนดปริมาตรของสารที่กระจายอยู่ในแต่ละเฟส เป็นดังนี้

- ไฟเบอร์ (f) มีปริมาตร: V_f
- เฮดสเปซ (h) มีปริมาตร: V_h
- สารละลาย (s) มีปริมาตร: V_s

การวิเคราะห์ทางด้านเทอร์โมไดนามิกจะสามารถแบ่งการพิจารณาออกได้เป็น 2 กรณี¹⁴ ดังนี้

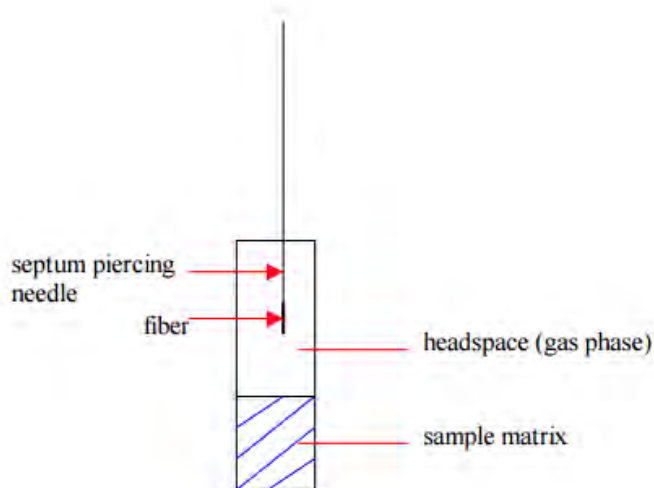
1. ไฟเบอร์ดูดซับสารที่สนใจวิเคราะห์โดยตรง (direct sampling)
2. ไฟเบอร์ดูดซับสารที่สนใจวิเคราะห์ผ่านเฮดสเปซ (headspace sampling)

กรณีที่ 1: โฟเบอร์ดูดซับสารที่สนใจวิเคราะห์โดยตรง (direct sampling)



รูปที่ 1-4 Direct sampling²⁰

กรณีที่ 2: โฟเบอร์ดูดซับสารที่สนใจวิเคราะห์ผ่านเฮดสเปซ (headspace sampling)



รูปที่ 1-5 Headspace sampling²⁰

กรณีของการดูดซับสารผ่านเฮดสเปซ ปริมาตรสารที่ถูกดูดซับในโฟเบอร์จะมีปริมาตร : $V_f = \pi(R^2 - r^2)h$
เนื่องจากพอลิเมอร์ที่เคลือบมีลักษณะเป็นทรงกระบอก

เมื่อ	R	คือ รัศมีโฟเบอร์ที่ถูกเคลือบด้วยพอลิเมอร์
	r	คือ รัศมีโฟเบอร์ที่ไม่ถูกเคลือบด้วยพอลิเมอร์
	h	คือ ความยาวของโฟเบอร์

ถ้าหากไม่มีการสลายตัวของสารภายในภาชนะบรรจุ (vial) ดังนั้นความเข้มข้นของสารที่ต้องการวิเคราะห์ในตัวอย่างไม่
จะมีความเข้มข้นของสารในสถานะแก๊สดังนี้คือ

$$C_0V_S = C_f^\infty V_f + C_h^\infty V_h + C_s^\infty V_s \quad (1)$$

C_0 คือ ความเข้มข้นเริ่มต้นของสารที่ต้องการวิเคราะห์ในสารตัวอย่าง

C_f^∞ คือ ความเข้มข้นที่ภาวะสมดุลของสารที่ต้องการวิเคราะห์บริเวณไฟเบอร์

C_h^∞ คือ ความเข้มข้นที่ภาวะสมดุลของสารที่ต้องการวิเคราะห์บริเวณเฮดสเปซ

C_s^∞ คือ ความเข้มข้นที่ภาวะสมดุลของเมทริกซ์ในสารละลาย

ปริมาณสารที่ต้องการวิเคราะห์จะถูกดูดซับด้วยตัวไฟเบอร์ ณ ภาวะสมดุล จะได้ว่า

$$n^\infty = C_f^\infty V_f \quad (2)$$

เมื่อคูณในสมการที่ (2) ด้วย C_0V_S ทั้งเศษและส่วน จะได้ว่า

$$n^\infty = \frac{C_f^\infty V_f C_0 V_S}{C_0 V_S} \quad (3)$$

แทนสมการที่ (1) ลงในสมการที่ (3) จะได้ว่า

$$n^\infty = \frac{C_f^\infty V_f C_0 V_S}{C_f^\infty V_f + C_h^\infty V_h + C_s^\infty V_s} \quad (4)$$

นำ C_s^∞ มาหารทั้งด้านบนและล่างของสมการที่ (4) จะได้ว่า

$$n^\infty = \frac{\frac{C_f^\infty V_f C_0 V_S}{C_s^\infty}}{\frac{C_f^\infty V_f}{C_s^\infty} + \frac{C_h^\infty V_h}{C_s^\infty} + V_s} \quad (5)$$

ที่ภาวะสมดุลตัวแปรต่างๆจะคงที่ ดังนั้นค่าคงที่การกระจายตัวระหว่างเฟส 2 เฟส คือ

$$1. \text{ เฟสระหว่างตัวอย่าง-SPME} : K_{\text{SPME}} = C_f^\infty / C_s^\infty$$

$$2. \text{ เฟสระหว่างตัวอย่าง-เฮดสเปซ} : K_{\text{HEADSPACE}} = C_h^\infty / C_s^\infty$$

K = สัมประสิทธิ์ของการกระจาย (partition coefficient)

เมื่อแทนค่า K_{SPME} และ $K_{\text{HEADSPACE}}$ ลงในสมการที่ (5) จะได้สมการคือ

$$n^\infty = \frac{K_{\text{SPME}} V_f C_0 V_S}{K_{\text{SPME}} V_f + K_{\text{HEADSPACE}} V_h + V_s} \quad (6)$$

จากสมการที่ได้ จะสามารถพิจารณาได้ 2 กรณี คือ พิจารณาบริเวณเฮดสเปซ และไม่พิจารณาบริเวณเฮดสเปซ

กรณีที่ 1: พิจารณาบริเวณเฮดสเปซเนื่องจากปริมาตรไฟเบอร์ (V_f) น้อยมากเมื่อเทียบกับปริมาตรเมทริกซ์

ในสารละลาย (V_s) ดังนั้น $K_{\text{SPME}} V_f \ll V_s$ จึงสามารถเขียนสมการใหม่ได้ว่า

$$n^\infty = \frac{K_{SPME} V_f C_0 V_s}{K_{HEADSPACE} V_h + V_s} \quad (7)$$

เมื่อจัดสมการจะได้

$$n^\infty \approx \frac{K_{SPME} V_f C_0 V_s}{\frac{K_{HEADSPACE} V_h}{V_s} + 1} \quad (8)$$

กล่าวคือผลรวมของปริมาณสารที่เราสนใจวิเคราะห์ที่ภาวะสมดุลจะขึ้นกับความเข้มข้นเริ่มต้น (C_0) ปริมาตรเมทริกซ์ในสารละลาย (V_s) ปริมาตรบริเวณเฮดสเปซ (V_h) และปริมาตรของไฟเบอร์ SPME (V_f)

กรณีที่ 2 : ไม่พิจารณาบริเวณเฮดสเปซจะทำให้ $V_h = 0$ และ $K_{SPME} V_f \ll V_s$

สามารถเขียนสมการใหม่ได้ว่า

$$n^\infty = \frac{K_{SPME} V_f C_0 V_s}{V_s}$$

เมื่อตัดสมการจะได้

$$n^\infty = K_{SPME} V_f C_0 \quad (9)$$

กล่าวคือผลรวมของปริมาณสารที่สนใจวิเคราะห์ที่ภาวะสมดุลจะขึ้นกับความเข้มข้นเริ่มต้น (C_0) และปริมาตรของไฟเบอร์ (V_f) โดยตรง และไม่ขึ้นกับปริมาตรของสารละลาย (V_s) จะเห็นว่าผลของเมทริกซ์ที่มาจากปริมาตรของสารละลายจะไม่ส่งผลต่อปริมาณสารที่สนใจวิเคราะห์¹³

ไฟเบอร์

ไฟเบอร์เป็นส่วนที่มีความสำคัญอย่างมากในการดูดซับสารในบริเวณเฮดสเปซดังนั้นจึงเป็นสิ่งจำเป็นที่ต้องคำนึงถึงการเลือกชนิดไฟเบอร์ให้เหมาะสมสำหรับการนำไปใช้งานโดยหลักการเลือกชนิดไฟเบอร์จะต้องพิจารณาจากความหนาที่เคลือบบนไฟเบอร์ (film thickness) และความมีขั้ว (polarity)¹⁷

ความหนาจะส่งผลต่ออัตราเร็วและความจุของการดูดซับสารระเหยที่สนใจนำไปวิเคราะห์การเพิ่มความหนาจะช่วยเพิ่มปริมาณความจุในการดูดซับ แต่จะทำให้อัตราเร็วในการดูดซับลดลงเนื่องจากความหนาจะบดบังการดูดซับสารระเหยที่เกิดจากการสะสมไอของสารที่บริเวณผิวชั้นนอกของไฟเบอร์ อย่างไรก็ตามความหนาของไฟเบอร์ที่บางมากเกินไปจะทำให้มีความจุไม่เพียงพอในการดูดซับสารทั้งหมดที่สนใจความมีขั้วของไฟเบอร์จะส่งผลต่อการเลือกจำเพาะต่อสารที่เราสนใจศึกษา ตามหลักการที่ว่าสารที่มีขั้วจะสามารถจับกับสารที่มีขั้วได้ดี และสารที่ไม่มีขั้วก็จะจับกับสารที่ไม่มีขั้วได้

ชนิดของไฟเบอร์ที่มีการใช้งานได้แก่ โพลีเอคริลิต (PA), คาร์โบแว็กซ์/ไดไวนิลเบนซีน (CW/DVB), พอลิไดเมทิลไซลอกเซน/ไดไวนิลเบนซีน (PDMS/DVB), พอลิไดเมทิลไซลอกเซน (PDMS), ไฟเบอร์ที่ได้รับความนิยมใช้งานมากที่สุดคือพอลิไดเมทิลไซลอกเซน/ไดไวนิลเบนซีน (PDMS/DVB)¹⁸ ลักษณะภายในไฟเบอร์จะเป็นรูพรุนทำให้สารที่ถูกดูดซับสามารถแทรกตัวเข้ามาอยู่ตามรูพรุนของไฟเบอร์ดังนั้นขนาดรูพรุนจึงเป็นตัวกำหนดความสามารถในการดูดซับโดยทั่วไปขนาดของรูพรุนสามารถแบ่งออกได้เป็น 3 กลุ่มดังนี้รูพรุนขนาดเล็ก (<20 Å), รูพรุนขนาดกลาง (20-500 Å) และรูพรุนขนาดใหญ่ (>500 Å)

ไฟเบอร์ที่เกิดการสร้างพันธะของหมู่ซิลินอลกับไฟเบอร์ชนิดอื่นจะเกิดลักษณะของ fused silica core ข้อดีคือทำให้ไฟเบอร์มีความเสถียรมากขึ้น สามารถใช้งานที่อุณหภูมิสูงได้และปรับเปลี่ยนความมีขั้วของไฟเบอร์ให้ไม่มีขั้วมากหรือน้อยจนเกินไป

การเลือกภาวะที่เหมาะสมในการเตรียมสารตัวอย่างโดยใช้เทคนิคเฮดสเปซ-โซลิดเฟสไมโครเอกซ์แทรกชัน

1) อุณหภูมิในเฮดสเปซ (extraction temperature)

ความร้อนจะทำให้สารที่ระเหยได้ถูกสกัดออกมาในเฟสแก๊ส จะเป็นการเร่งการเกิดสมดุลของสารที่วิเคราะห์ระหว่างเฟสทั้งสามสำหรับตัวอย่างที่เป็นของเหลวหรือสารละลายควรเริ่มทดลองที่อุณหภูมิต่ำกว่าตัวทำละลาย 20 องศาเซลเซียส และไม่นิยมเตรียมตัวอย่างของเหลวที่อุณหภูมิสูงกว่า 90 องศาเซลเซียส สำหรับตัวอย่างที่เป็นของแข็งจะเตรียมที่อุณหภูมิที่สารสามารถกลายเป็นไอได้ที่อุณหภูมินั้น โดยที่สารไม่เกิดการสลายตัวสำหรับสารตัวอย่างที่มีปริมาณน้อยหรือกลายเป็นไอได้ยาก สามารถที่จะใช้อุณหภูมิสูงๆได้

2) เวลาในการดูดซับสาร (extraction time)

ที่ใช้ในการเตรียมสารตัวอย่างจะต้องนานพอที่ทำให้เกิดสมดุลระหว่างส่วนที่เป็นแก๊สกับส่วนที่อยู่ในตัวอย่าง การจับเวลาในการเกิดสมดุลจะเริ่มนับตั้งแต่การเริ่มให้ความร้อนกับสารตัวอย่าง ในตัวอย่างที่เป็นของแข็งจะเริ่มทดลองที่ 30 นาที และในตัวอย่างที่เป็นของเหลวจะเริ่มทดลองที่ 15 นาที จากนั้นฉีดสารตัวอย่างเข้าเครื่องแก๊สโครมาโทกราฟีและบันทึกพื้นที่ใต้กราฟ จากนั้นทดลองเพิ่มเวลาถ้าพื้นที่ใต้กราฟคงที่เวลาที่ใช้ทดลองนั้นคือเวลาที่ใช้ในการเกิดสมดุล แต่ถ้าพื้นที่ใต้กราฟไม่คงที่แสดงว่าสารเกิดปฏิกิริยาหรือสลายตัว ซึ่งแก้ไขโดยลดอุณหภูมิในการเตรียมตัวอย่าง

3) เวลาในการปลดปล่อยสาร (desorption time)

เวลาในการคายการดูดซับจะต้องนานพอให้สารที่ถูกดูดซับบนพอลิเมอร์สามารถหลุดออกมาจากไฟเบอร์ได้มากที่สุดและเข้าสู่เครื่องแก๊สโครมาโทกราฟี ควรเริ่มทดลองที่เวลา 3 นาทีและทดลองเพิ่ม โดยปรับเวลาเพิ่มขึ้นทีละ 1 นาที ถ้าพื้นที่ใต้กราฟคงที่แสดงว่าสารถูกปลดปล่อยออกจากไฟเบอร์หมดแล้ว

เคโมเมทริกซ์

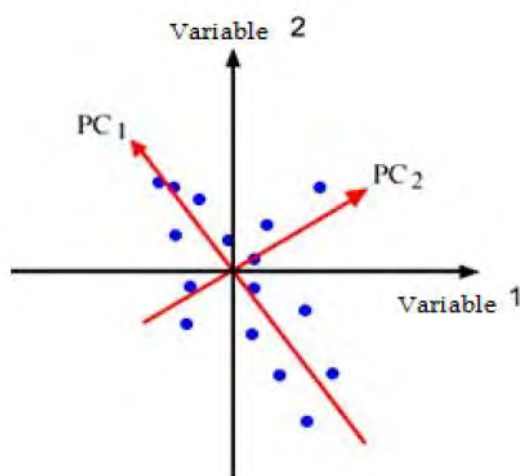
เคโมเมทริกซ์เป็นวิธีประมวลผลข้อมูลที่ถูกนำมาใช้มากในทางเคมีวิเคราะห์ เป็นวิธีที่เหมาะสมสำหรับใช้จัดกลุ่มผลการทดลองที่มีปริมาณมากและกรองข้อมูลที่สำคัญออกมาโดยใช้ความรู้พื้นฐานทางสถิติ การนำเสนอข้อมูลของเคโมเมทริกซ์สามารถแบ่งออกเป็น 2 วิธีคือ Unsupervised method และ Supervised method ซึ่งในที่นี้จะกล่าวถึง Unsupervised method ซึ่งเป็นวิธีที่นำไปใช้ในงานวิจัยนี้

Unsupervised method

เป็นวิธีวิเคราะห์ข้อมูลเชิงสำรวจซึ่งสามารถใช้จัดกลุ่มของตัวอย่าง สามารถแบ่งออกได้อีก 2 วิธี ได้แก่ Hierarchical Cluster Analysis (HCA) และ Principal Component Analysis (PCA) สำหรับงานวิจัยนี้จะเลือกใช้ PCA ในการประมวลผล

Principal Component Analysis (PCA)

จุดมุ่งหมายของวิธีนี้คือศึกษาความสัมพันธ์ระหว่างตัวอย่างเพื่อหาสิ่งที่คล้ายคลึงและแตกต่างของชุดข้อมูล วิธีนี้สามารถลดปริมาณตัวแปรเมื่อข้อมูลเหล่านี้มีความสัมพันธ์กัน สำหรับการวิเคราะห์ด้วยวิธีนี้สิ่งที่จำเป็นต้องใช้คือชุดข้อมูลที่อยู่ในแนวคอลัมน์จะเรียกว่าตัวแปร (variation) ซึ่งเป็นปริมาณของสารชนิดต่างๆที่ตรวจวิเคราะห์ได้และแนวแถวจะเรียกว่าตัวอย่าง (sample) ซึ่งเป็นชนิดของตัวอย่างที่ใช้ศึกษาและต้องใช้แกน PC1 และ PC2 ที่ใช้ลากผ่านจุดสำคัญขององค์ประกอบหลักในการอธิบายจุดสำคัญในกราฟ¹⁹ ซึ่งแสดงในรูปที่ 1-6



รูปที่ 1-6 กราฟผลของ PCA²¹

แกนหลัก PC1 จะอธิบายจุดสำคัญในกราฟและอธิบายผลรวมความแปรปรวน

แกนหลัก PC2 จะอธิบายจุดที่เหลืออยู่ ซึ่งจะตั้งฉากกับแกน PC1

จากกราฟแสดงผลของ PCA ข้อมูลจากการประมวลผลของตัวอย่างจะแทนด้วยจุดหนึ่งจุดตั้งนั้นข้อมูลที่มีองค์ประกอบคล้ายกันจะมีตำแหน่งที่ใกล้เคียงกัน ส่วนข้อมูลที่แตกต่างกันจะมีตำแหน่งที่กระจายตัวออกไป

1.4 วัตถุประสงค์และขอบเขตของการวิจัย

วัตถุประสงค์

เพื่อจำแนกตัวอย่างกาแฟตามแหล่งเพาะปลูกโดยเปรียบเทียบสารที่ระเหยได้ จากการวิเคราะห์ด้วยเทคนิคเฮดสเปซ-โซลิดเฟสไมโครเอกซ์แทรกชันและตรวจวัดและเปรียบเทียบสารที่ระเหยได้ด้วยแก๊สโครมาโทกราฟี-แมสสเปกโตรเมตรีและประมวลผลด้วยวิธีเคโมเมทริกซ์

ขอบเขตงานวิจัย ประกอบด้วย

- การหาสภาวะที่เหมาะสมของเฮดสเปซและแก๊สโครมาโทกราฟี-แมสสเปกโตรเมตรี
- วิเคราะห์ตัวอย่างกาแฟจาก 4 แหล่งเพาะปลูก ได้แก่ จังหวัดเชียงใหม่ เชียงราย กระบี่ ชุมพร
- ประมวลผลด้วยเคโมเมทริกซ์ชนิด PCA

1.5 ประโยชน์ที่ได้รับจากงานวิจัย

ได้วิธีการจำแนกกาแฟตามแหล่งเพาะปลูกโดยอาศัยหลักการวิเคราะห์องค์ประกอบทางเคมีของสารที่ระเหยได้ร่วมกับการประมวลผลด้วยวิธีเคโมเมทริกซ์



บทที่ 2

การทดลอง

เครื่องมือและอุปกรณ์ที่ใช้ในการทดลอง

1. เครื่องแก๊สโครมาโทกราฟี ของ Agilent รุ่น 7890A
2. ตัวตรวจวัดแมสสเปกโตรมิเตอร์ ของ Agilent รุ่น 7000
3. คอลัมน์ที่มีรูขนาดเล็ก (capillary column) ของ HP-5MS (30m x 0.25mm x 0.25 μ m)
4. อุปกรณ์โซลิดเฟสไมโครเอ็กซ์แทรกชัน (solid phase microextraction) ของ Supelco (50/30 μ m DVB/CAR/PDMS)
5. ขวด (vial) ขนาด 20 มิลลิลิตร
6. ฝาอลูมิเนียม (crimp)
7. เครื่องหนีงฝาอลูมิเนียม (crimper)
8. เครื่องให้ความร้อน (hot plate)
9. เทอร์โมมิเตอร์
10. เครื่องชั่งสาร

สารเคมี

1. แก๊สฮีเลียม
2. แก๊สไนโตรเจน
3. กาแฟตัวอย่าง 8 ชนิด จากจังหวัดทางภาคเหนือและภาคใต้ของประเทศไทย

2.1 การหาอัตราส่วนของสารที่เข้าคอลัมน์ (splitless & split ratio)

- 2.1.1 เปิดเครื่องแก๊สโครมาโทกราฟีแล้วตั้งสภาวะดังนี้
- | | |
|--|---------------------------|
| อุณหภูมิของเตาอบ (oven temperature) | : 45 องศาเซลเซียส |
| อุณหภูมิของส่วนฉีดสาร (injection temperature) | : 250 องศาเซลเซียส |
| อุณหภูมิของแหล่งกำเนิดไอออน (ion source temperature) | : 230 องศาเซลเซียส |
| อุณหภูมิของ quadrupole (MS quadrupole temperature) | : 150 องศาเซลเซียส |
| อัตราการไหลของแก๊สไนโตรเจน (nitrogen flow) | : 1.50 มิลลิลิตรต่อนาที |
| อัตราการไหลของแก๊สฮีเลียม (quench flow) | : 2.25 มิลลิลิตรต่อนาที |
| อัตราการไหลของแก๊สตัวพา (carrier gas flow) | : 35.0 เซนติเมตรต่อวินาที |
- แก๊สตัวพา : ฮีเลียม

2.1.2	เปิดโปรแกรมอุณหภูมิแล้วตั้งสภาวะดังนี้		
	อุณหภูมิเริ่มต้น	(initial temperature)	: 45 องศาเซลเซียส
	อุณหภูมิมกกลาง	(intermediate temperature)	: 150 องศาเซลเซียส
	อุณหภูมิสุดท้าย	(final temperature)	: 280 องศาเซลเซียส
	เวลาเริ่มต้น	(initial time)	: 6 นาที
	เวลากลาง	(intermediate time)	: 1 นาที
	เวลาสุดท้าย	(final time)	: 3 นาที
	อัตราการเพิ่มอุณหภูมิ 1 (rate temperature 1)		: 2.25 องศาเซลเซียสต่อนาที
	อัตราการเพิ่มอุณหภูมิ 2 (rate temperature 2)		: 40 องศาเซลเซียสต่อนาที

2.1.3 ชั่งกาแฟตัวอย่างคั่วบด 1.0000 ± 0.0010 กรัม ลงในขวดบรรจุ (vial) ขนาด 20 มิลลิลิตร ปิดด้วยฝาอลูมิเนียมนำไปให้ความร้อนด้วยเครื่องให้ความร้อนที่อุณหภูมิ 90 องศาเซลเซียส เป็นเวลา 45 นาที โดยระหว่างให้ความร้อนใช้อุปกรณ์โซลิตเฟสไมโครเอกซ์แทรกชันสำหรับดูดซับสารที่ระเหยได้ และใช้เวลาในการปลดปล่อยสารในเครื่องแก๊สโครมาโทกราฟี 7 นาที

2.1.4 ตั้งโหมดของเครื่องแก๊สโครมาโทกราฟีเป็น splitless และทดลองฉีดตัวอย่างกาแฟเข้าเครื่องแก๊สโครมาโทกราฟี พิจารณาโครมาโทแกรมที่ได้

2.1.5 ตั้งโหมดของเครื่องแก๊สโครมาโทกราฟีเป็น split ratio และทดลองฉีดตัวอย่างกาแฟเข้าเครื่องแก๊สโครมาโทกราฟี โดยเริ่มทดลองจากค่า split ratio 10:1, 25:1 50:1 และ 100:1 พิจารณาโครมาโทแกรมของแต่ละอัตราส่วนแล้วนำผลที่ได้มาเปรียบเทียบกัน

Split ratio คำนวณได้จากสูตร

$$\text{Split ratio} = \frac{\text{อัตราการไหลเข้าของแก๊สตัวพา} + \text{อัตราการไหลออกของแก๊สตัวพา}}{\text{อัตราการไหลเข้าของแก๊สตัวพา}}$$

2.1.6 เลือกอัตราส่วนของสารที่เข้าคอลัมน์ที่ให้โครมาโทแกรมมีลักษณะของพีกแยกออกจากกันได้มากที่สุดและเห็นพีกชัดเจน เพื่อนำไปใช้ในการทดลองต่อไป

2.2 การหาอุณหภูมิที่เหมาะสมในการเตรียมกาแฟตัวอย่างโดยใช้เทคนิคเฮตสเปซ

2.2.1 เปิดเครื่องแก๊สโครมาโทกราฟีแล้วตั้งสภาวะเหมือนการทดลองที่ 2.1.1 และตั้งโปรแกรมอุณหภูมิเหมือนการทดลองที่ 2.1.2

2.2.2 ชั่งกาแฟตัวอย่างคั่วบด 1.0000 ± 0.0010 กรัม ลงในขวดบรรจุ (vial) ขนาด 20 มิลลิลิตร ปิดด้วยฝาอลูมิเนียมนำไปให้ความร้อนด้วยเครื่องให้ความร้อนที่อุณหภูมิ 70, 80 และ 90 องศาเซลเซียส

ตามลำดับ เป็นเวลา 45 นาทีโดยระหว่างให้ความร้อนใช้อุปกรณ์โซลิตเฟสไมโครเอกซ์แทรกชันสำหรับดูดซับสารที่ระเหยได้

- 2.2.3 เมื่อครบเวลาที่กำหนดนำอุปกรณ์โซลิตเฟสไมโครเอกซ์แทรกชันไปปลดปล่อยสารในส่วนฉีดยาของเครื่องแก๊สโครมาโทกราฟีโดยใช้เวลาปลดปล่อยสาร 7 นาที
- 2.2.4 เปรียบเทียบลักษณะโครมาโทแกรมที่ได้ แล้วเลือกอุณหภูมิที่เหมาะสมในการเตรียมตัวอย่างกาแฟ โดยใช้เทคนิคเฮดสเปซ

2.3 การหาเวลาที่เหมาะสมในการเตรียมกาแฟตัวอย่างโดยใช้เทคนิคเฮดสเปซ

- 2.3.1 เปิดเครื่องแก๊สโครมาโทกราฟีแล้วตั้งสภาวะเหมือนการทดลองที่ 2.1.1 และตั้งโปรแกรมอุณหภูมิเหมือนการทดลองที่ 2.1.2
- 2.3.2 ชั่งกาแฟตัวอย่างคั่วบด 1.0000 ± 0.0010 กรัม ลงในขวดบรรจุ (vial) ขนาด 20 มิลลิลิตร ปิดด้วยฝาอลูมิเนียมนำไปให้ความร้อนด้วยเครื่องให้ความร้อนที่อุณหภูมิจากการทดลองที่ 2.2 เป็นเวลา 30, 45 และ 60 นาทีโดยระหว่างให้ความร้อนใช้อุปกรณ์โซลิตเฟสไมโครเอกซ์แทรกชันสำหรับดูดซับสารที่ระเหยได้
- 2.3.3 เมื่อครบเวลาที่กำหนดนำอุปกรณ์โซลิตเฟสไมโครเอกซ์แทรกชันไปปลดปล่อยสารในส่วนฉีดยาของเครื่องแก๊สโครมาโทกราฟีโดยใช้เวลาปลดปล่อยสาร 7 นาที
- 2.3.4 เปรียบเทียบลักษณะโครมาโทแกรมที่ได้ แล้วเลือกเวลาที่เหมาะสมในการเตรียมตัวอย่างกาแฟ โดยใช้เทคนิคเฮดสเปซ

2.4 การหาเวลาที่เหมาะสมในการปลดปล่อยสารในส่วนฉีดยาของเครื่องแก๊สโครมาโทกราฟี

- 2.4.1 เปิดเครื่องแก๊สโครมาโทกราฟีแล้วตั้งสภาวะเหมือนการทดลองที่ 2.1.1 และตั้งโปรแกรมอุณหภูมิเหมือนการทดลองที่ 2.1.2
- 2.4.2 ชั่งกาแฟตัวอย่างคั่วบด 1.0000 ± 0.0010 กรัม ลงในขวดบรรจุ (vial) ขนาด 20 มิลลิลิตร ปิดด้วยฝาอลูมิเนียมนำไปให้ความร้อนด้วยเครื่องให้ความร้อนที่อุณหภูมิจากการทดลองที่ 2.2 และใช้เวลาจากการทดลองที่ 2.3 โดยระหว่างให้ความร้อนใช้อุปกรณ์โซลิตเฟสไมโครเอกซ์แทรกชันสำหรับดูดซับสารที่ระเหยได้
- 2.4.3 เมื่อครบเวลาที่กำหนดนำอุปกรณ์โซลิตเฟสไมโครเอกซ์แทรกชันไปปลดปล่อยสารในส่วนฉีดยาของเครื่องแก๊สโครมาโทกราฟีโดยใช้เวลาปลดปล่อยสาร 3, 5 และ 7 นาที
- 2.4.4 เปรียบเทียบลักษณะโครมาโทแกรมที่ได้ แล้วเลือกเวลาที่เหมาะสมในการปลดปล่อยสารที่ระเหยได้ในตัวอย่างกาแฟเข้าสู่เครื่องแก๊สโครมาโทกราฟี

2.5 ทดสอบความใช้ได้ของวิธีวิเคราะห์

Intraday precision

- 2.5.1 เปิดเครื่องแก๊สโครมาโทกราฟีแล้วตั้งสภาวะเหมือนการทดลองที่ 2.1.1 และตั้งโปรแกรมอุณหภูมิเหมือนการทดลองที่ 2.1.2
- 2.5.2 ชั่งกาแฟตัวอย่างคั่วบดอาราบิก้าและโรบัสต้า 1.0000 ± 0.0010 กรัม ลงในขวดบรรจุขนาด 20 มิลลิลิตร จำนวน 5 ขวดแต่ละขวดปิดด้วยฝาอลูมิเนียมนำไปให้ความร้อนด้วยเครื่องให้ความร้อนที่อุณหภูมิจากการทดลองที่ 2.2 และใช้เวลาจากการทดลองที่ 2.3 โดยระหว่างให้ความร้อนใช้อุปกรณ์โซลิตเฟสไมโครเอกซ์แทรกชันสำหรับดูดซับสารที่ระเหยได้
- 2.5.3 เมื่อครบเวลาที่กำหนดนำอุปกรณ์โซลิตเฟสไมโครเอกซ์แทรกชันไปปลดปล่อยสารในส่วนฉีดสารของเครื่องแก๊สโครมาโทกราฟีโดยใช้เวลาปลดปล่อยสารจากการทดลองที่ 2.4
- 2.5.4 คำนวณ $\% \text{Normalization} = \frac{\text{พื้นที่ใต้พีคของสารนั้นๆ}}{\text{พื้นที่ใต้พีคของสารทั้งหมด}} \times 100$ และ $\% \text{Relative Standard Deviation (\%RSD)}$ จากพื้นที่ใต้พีคเพื่อทดสอบความเที่ยงของวิธีวิเคราะห์

2.6 หาโครมาโทแกรมของกาแฟตัวอย่าง 8 ชนิด

- 2.6.1 เปิดเครื่องแก๊สโครมาโทกราฟีแล้วตั้งสภาวะเหมือนการทดลองที่ 2.1.1 และตั้งโปรแกรมอุณหภูมิเหมือนการทดลองที่ 2.1.2
- 2.6.2 ชั่งกาแฟตัวอย่างคั่วบดชนิดละ 1.0000 ± 0.0010 กรัม ลงในขวดบรรจุ (vial) ขนาด 20 มิลลิลิตร ชนิดละ 3 ขวด ปิดด้วยฝาอลูมิเนียมนำไปให้ความร้อนด้วยเครื่องให้ความร้อนที่อุณหภูมิจากการทดลองที่ 2.2 และใช้เวลาจากการทดลองที่ 2.3 โดยระหว่างให้ความร้อนใช้อุปกรณ์โซลิตเฟสไมโครเอกซ์แทรกชันสำหรับดูดซับสารที่ระเหยได้
- 2.6.3 เมื่อครบเวลาที่กำหนดนำอุปกรณ์โซลิตเฟสไมโครเอกซ์แทรกชันไปปลดปล่อยสารในส่วนฉีดสารของเครื่องแก๊สโครมาโทกราฟีโดยใช้เวลาปลดปล่อยสารจากการทดลองที่ 2.4
- 2.6.4 รวบรวมโครมาโทแกรมของตัวอย่างกาแฟทั้งหมด

2.7 ประมวลผลด้วยเคโมเมทริกซ์

- 2.7.1 นำโครมาโทแกรมของกาแฟตัวอย่างมาเปรียบเทียบและเลือกพีคของสารระเหยสำคัญในกาแฟแต่ละชนิดโดยเทียบข้อมูลสารจาก NIST Library
- 2.7.2 นำพื้นที่ใต้พีคของสารระเหยสำคัญที่เลือกมาคำนวณ $\% \text{Normalization}$
- 2.7.3 นำข้อมูลไปประมวลผลด้วย PCA เพื่อใช้จัดกลุ่มกาแฟที่มาจากแหล่งเพาะปลูกที่ต่างกัน

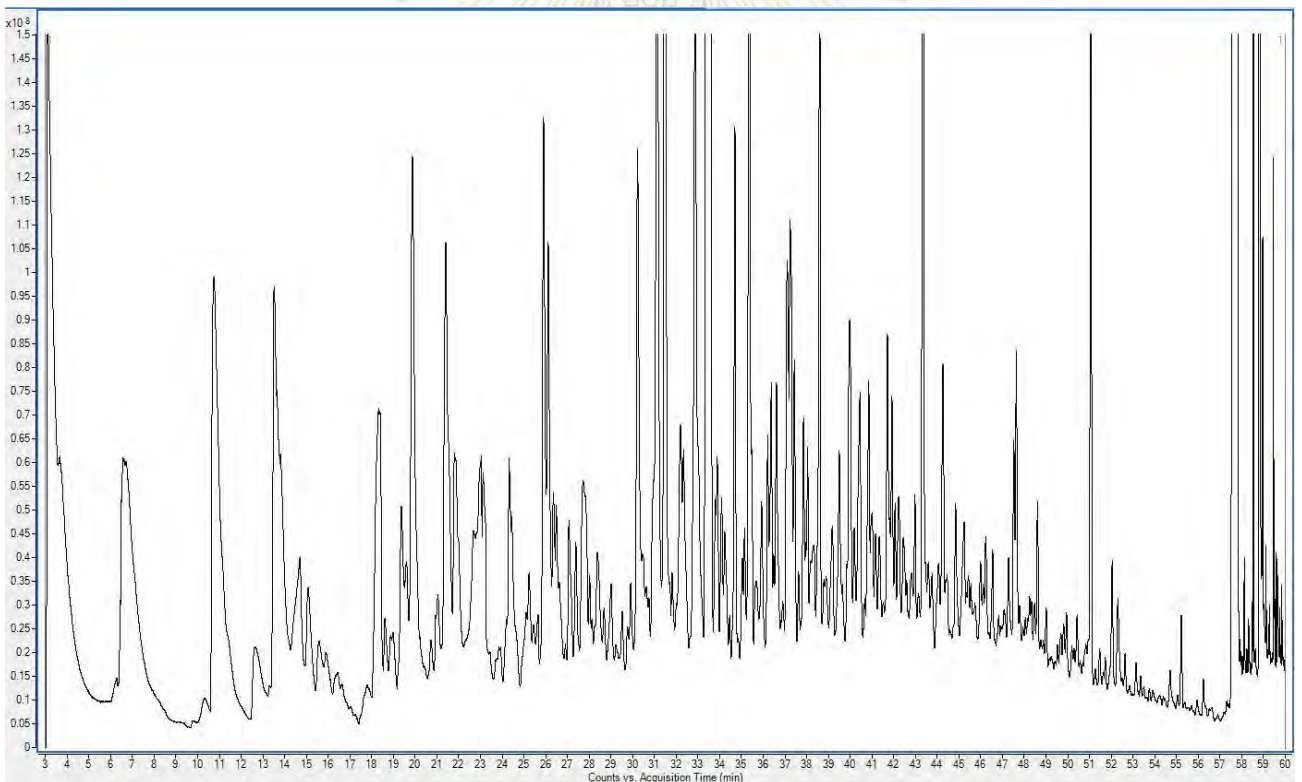
บทที่ 3

ผลการทดลองและวิจารณ์ผลการทดลอง

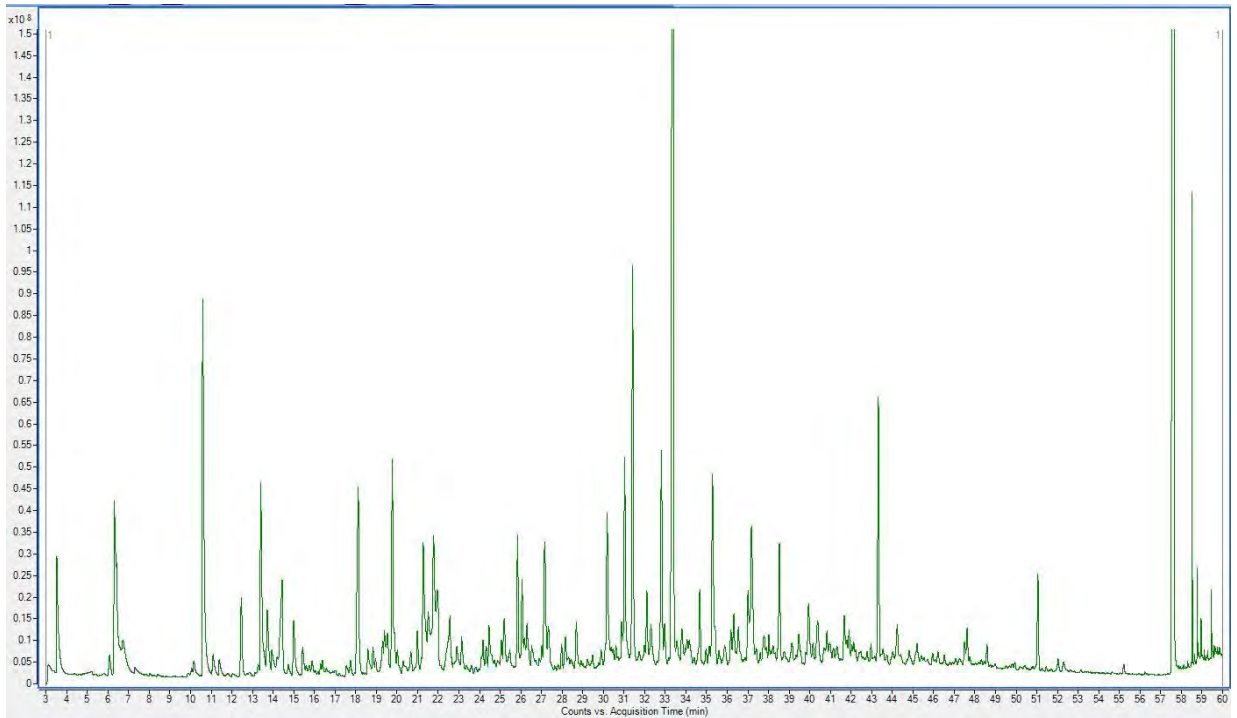
3.1 การหาอัตราส่วนของสารที่เข้าคอลัมน์ (splitless & split ratio)

วิเคราะห์ตัวอย่างกาแพ่น้ำหนัก 1.0000 ± 0.0010 กรัม เตรียมตัวอย่างด้วยเทคนิคเฮดสเปซที่ภาวะดังนี้ อุณหภูมิเฮดสเปซ 90 องศาเซลเซียส เวลาที่ใช้ดูดซับสาร 45 นาที และเวลาในการปลดปล่อยสารในเครื่องแก๊สโครมาโทกราฟี คือ 7 นาที โดยเปลี่ยนอัตราส่วนของสารที่เข้าคอลัมน์ด้วยโหมด Splitless และ Split ratio 10:1 25:1 50:1 และ 100:1 โดยอัตราส่วนที่ดีที่สุดคืออัตราส่วนที่ทำให้พีคของสารแยกออกจากกันได้สมบูรณ์

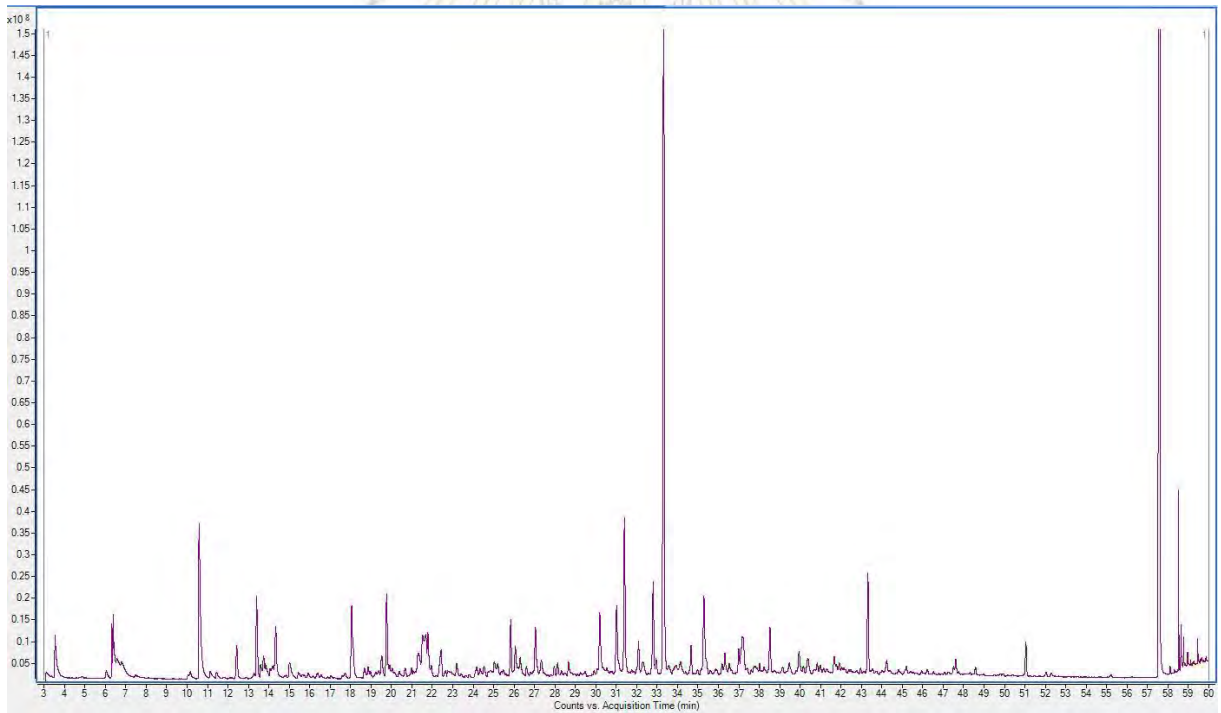
จากโครมาโทแกรมที่วิเคราะห์ด้วยโหมด splitless ซึ่งเป็นโหมดที่สารทั้งหมดจะถูกพาเข้าสู่คอลัมน์ พบว่าโครมาโทแกรมที่ได้พีคของสารไม่สามารถแยกออกจากกันได้สมบูรณ์เนื่องจากสารมีปริมาณมากเกินไป พื้นที่ใต้พีคของสารจึงเกิดการซ้อนทับกัน แสดงดังรูปที่ 3-1 ก) โดยใช้ภาวะของโปรแกรมอุณหภูมิตามบทที่ 2



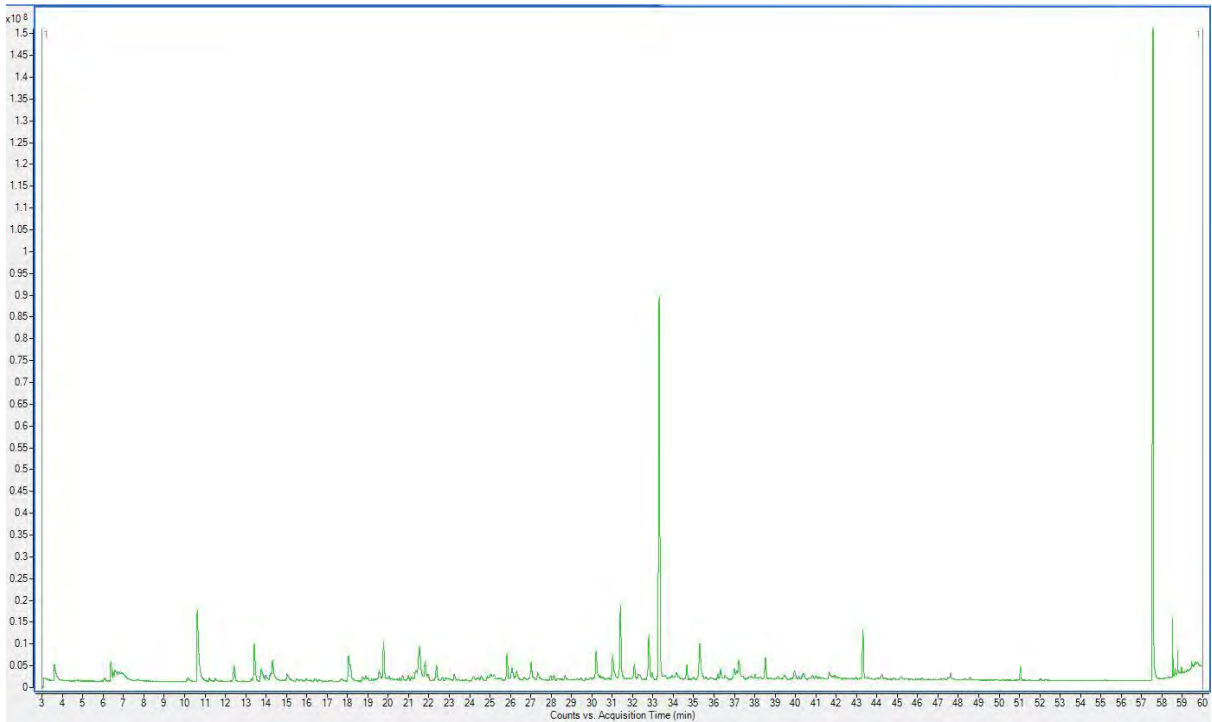
รูปที่ 3-1 ก) โครมาโทแกรมของกาแพ่ตัวอย่างด้วยโหมด splitless



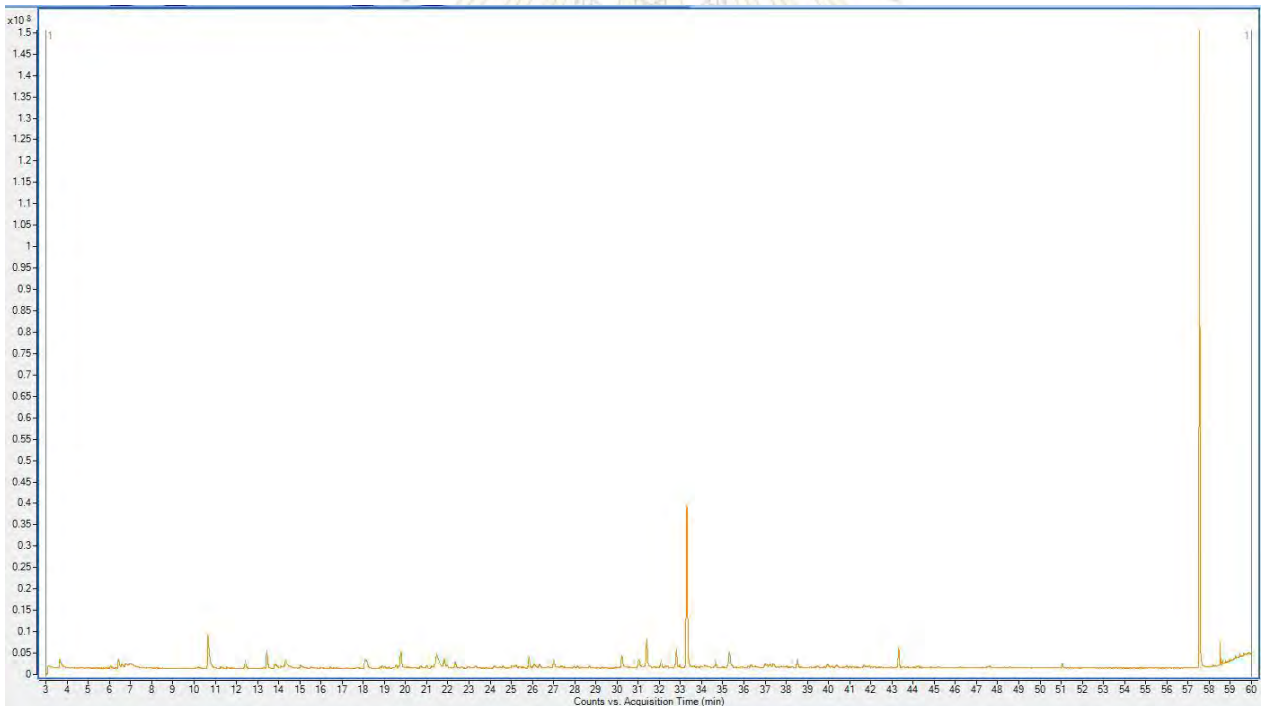
รูปที่ 3-1 ข) split ratio 10:1



รูปที่ 3-1 ค) split ratio 25:1



รูปที่ 3-1 ง) split ratio 50:1

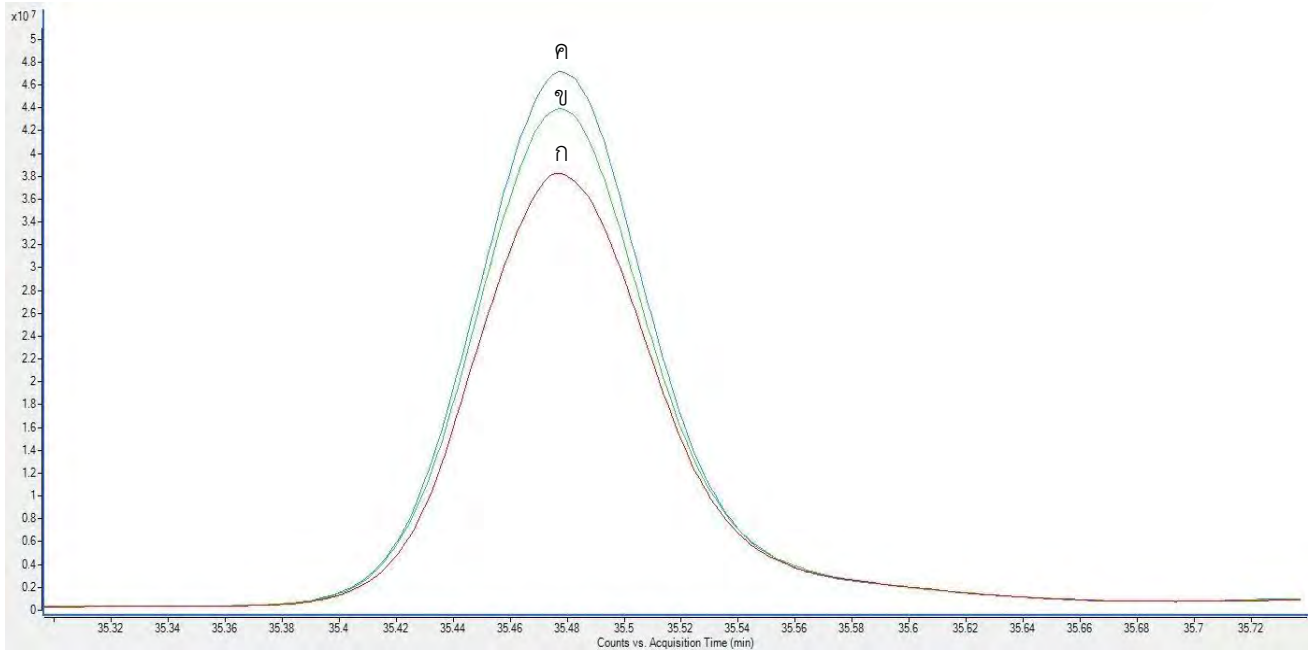


รูปที่ 3-1 จ) split ratio 100:1

จากโครมาโทแกรมที่วิเคราะห์ด้วยโหมด split ratio ได้อัตราส่วนที่สามารถทำให้สารแยกออกจากกันได้ดีที่สุด คืออัตราส่วน 50:1 ดังรูปที่ 3-1 ง) หมายความว่าถ้าฉีดสารเข้าเครื่องแก๊สโครมาโทกราฟี 50 ส่วน จะมีสารที่เข้าคอลัมน์ 1 ส่วน การที่สารเข้าคอลัมน์มากเกินไปจะทำให้พีกที่ได้ซ้อนทับและสารไม่สามารถแยกออกจากกันได้สมบูรณ์ และหากสารเข้าคอลัมน์น้อยเกินไปจะไม่สามารถตรวจวัดปริมาณสารได้

3.2 การหาอุณหภูมิที่เหมาะสมในการเตรียมกาแฟตัวอย่างโดยใช้เทคนิคเฮดสเปซ (extraction temperature)

ศึกษาผลของอุณหภูมิที่ 70, 80 และ 90 องศาเซลเซียส ที่ใช้ในการเตรียมตัวอย่างกาแฟ โดยบรรจุกาแฟตัวอย่างในขวดที่ปิดสนิท นำไปให้ความร้อนที่อุณหภูมิดังกล่าวเป็นเวลา 45 นาที และใช้เวลาในการปลดปล่อยสารในเครื่องแก๊สโครมาโทกราฟี 7 นาที ได้โครมาโทแกรมดังรูปที่ 3-2 โดยใช้ภาวะของโปรแกรมอุณหภูมิตามบทที่ 2

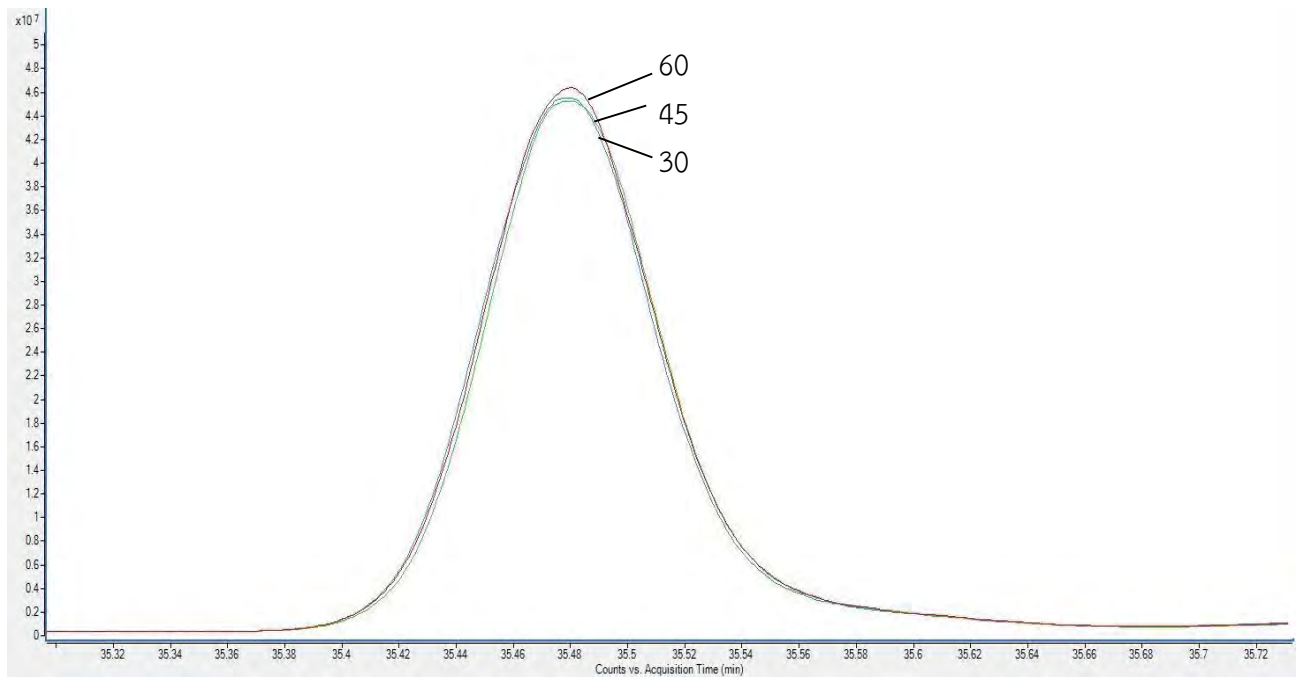


รูปที่ 3-2 การเปรียบเทียบพื้นที่ใต้พีคของกาแฟตัวอย่างที่อุณหภูมิ ก) 70, ข) 80 และ ค) 90 องศาเซลเซียส โดยแสดงพีคในช่วงเวลา 35.3 - 35.7 นาที

จากการทดลองพบว่าอุณหภูมิ 90 องศาเซลเซียส เป็นอุณหภูมิที่เหมาะสมสำหรับเตรียมกาแฟตัวอย่าง เนื่องจากให้ปริมาณสารที่ระเหยได้มากที่สุดและเมื่อพิจารณาจากโครมาโทแกรมอุณหภูมิที่ 90 องศาเซลเซียสจะให้พื้นที่ใต้พีคมากที่สุดเมื่อเทียบกับที่อุณหภูมิ 70 และ 80 องศาเซลเซียส กรณีที่ใช้อุณหภูมิมากกว่า 90 องศาเซลเซียส นำมาใช้ทำความร้อนจะเดือดซึ่งเป็นภาวะที่รุนแรงจะก่อให้เกิดอันตรายได้

3.3 การหาเวลาที่เหมาะสมในการเตรียมกาแฟตัวอย่างโดยใช้เทคนิคเฮตสเปซ (extraction time)

ผลของเวลาที่ 30, 45 และ 60 นาที ที่ใช้ในการเตรียมตัวอย่างกาแฟ โดยบรรจุกาแฟตัวอย่างในขวดที่ปิดสนิท นำไปให้ความร้อนที่อุณหภูมิ 90 องศาเซลเซียส และใช้เวลาในการปลดปล่อยสารในเครื่องแก๊สโครมาโทกราฟี 7 นาที ได้โครมาโทแกรมดังรูปที่ 3-3 โดยใช้ภาวะของโปรแกรมอุณหภูมิตามบทที่ 2

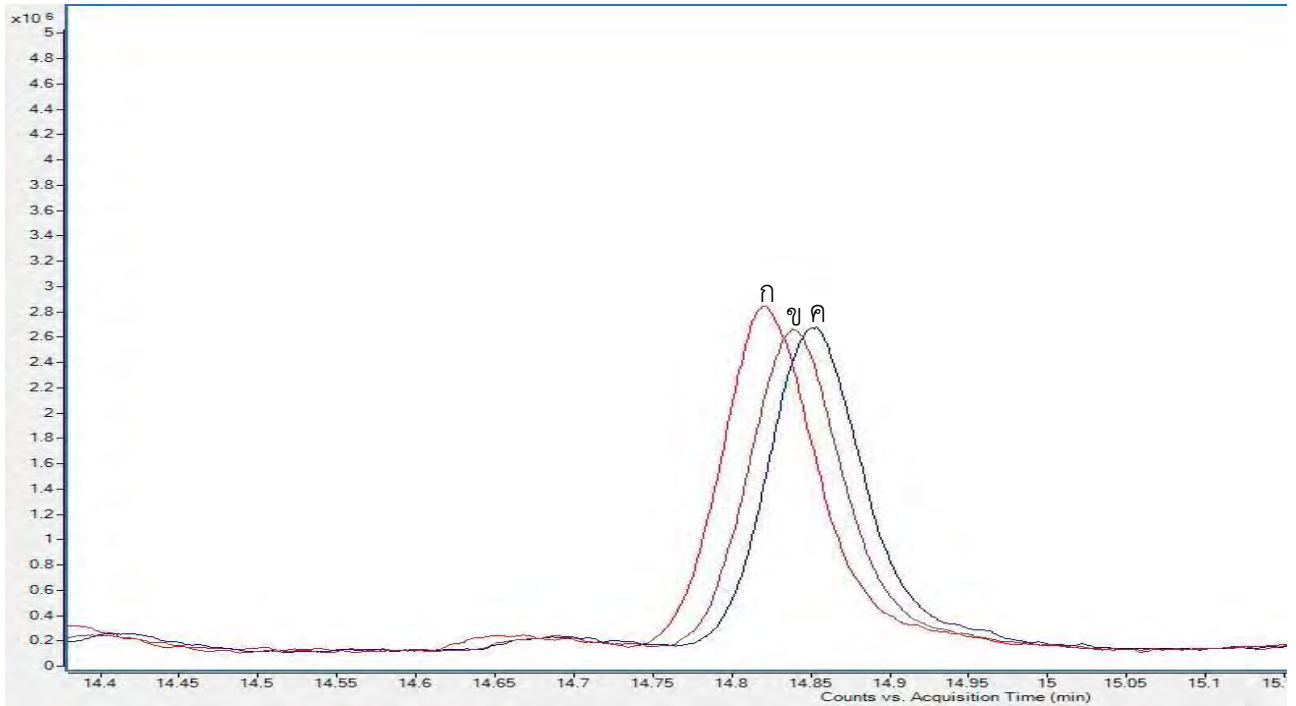


รูปที่ 3-3 การเปรียบเทียบพื้นที่ใต้พีคของกาแฟตัวอย่างที่เวลา 30, 45 และ 60 นาที โดยแสดงพีคที่ในช่วงเวลา 35.3 - 35.7 นาที

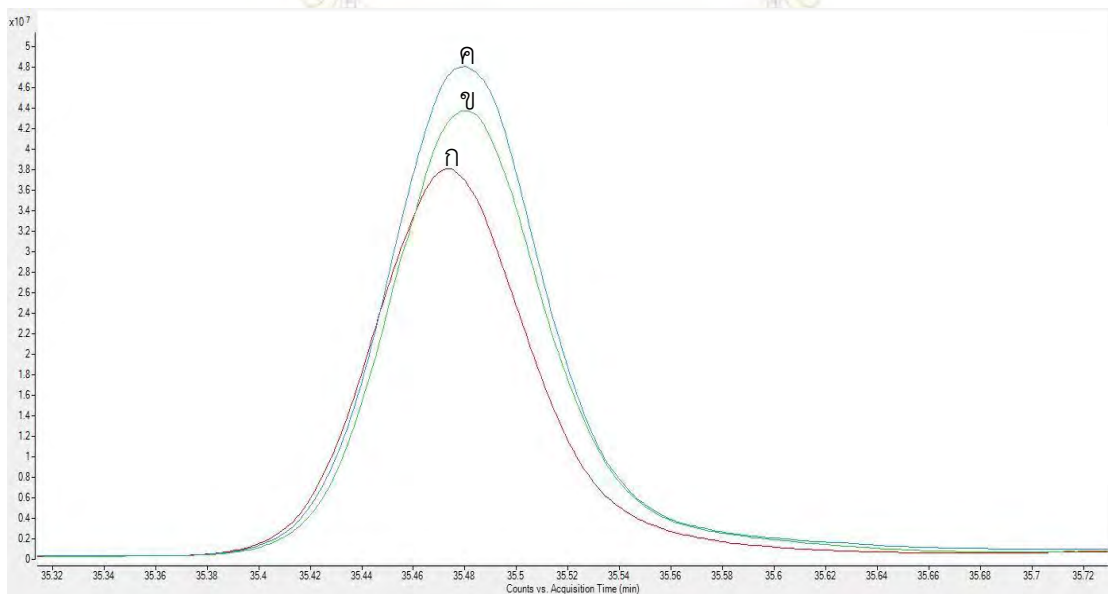
จากผลการทดลองที่เวลา 30, 45 และ 60 นาที ให้ปริมาณสารที่ระเหยได้ในปริมาณที่ไม่แตกต่างกัน ดังนั้น เวลาที่ใช้เตรียมสารไม่ส่งผลต่อการเพิ่มขึ้นหรือลดลงของสารระเหยในกาแฟ การทดลองนี้จึงเลือกใช้เวลาที่ 45 นาที เพราะการทดสอบกาแฟตัวอย่างด้วยเครื่องแก๊สโครมาโทกราฟีต้องใช้เวลาวิเคราะห์ 60 นาที ดังนั้นเวลาที่รอวิเคราะห์นี้สามารถใช้เตรียมตัวอย่างกาแฟเพื่อรอวิเคราะห์ในครั้งถัดไปได้ จึงทำให้เวลา 45 นาทีเป็นเวลาที่สะดวกต่อการเตรียมตัวอย่าง

3.4 การหาเวลาที่เหมาะสมในการปล่อยสารในส่วนฉีดสารของเครื่องแก๊สโครมาโทกราฟี (desorption time)

ศึกษาผลของเวลาที่ 3, 5 และ 7 นาที ที่ใช้ในการปลดปล่อยสารในเครื่องแก๊สโครมาโทกราฟี โดยนำอุปกรณ์โซลิตเฟสไมโครเอกซ์แทรกชันหลังขั้นตอนดูดซับสารบริเวณเฮดสเปซที่อุณหภูมิ 90 องศาเซลเซียส เป็นเวลา 45 นาที มาให้ความร้อนโดยอุณหภูมิของส่วนฉีดสารที่ 250 องศาเซลเซียส ได้โครมาโทแกรมดังรูปที่ 3-4



รูปที่ 3-4 ก) การเปรียบเทียบพื้นที่ใต้พิกของกาแพตัวอย่างที่เวลาปลดปล่อยสาร ก) 3, ข) 5 และ ค) 7 นาที ที่ช่วงเวลาวิเคราะห์ 14.4 นาที - 15.1 นาที



รูปที่ 3-4 ข) การเปรียบเทียบพื้นที่ใต้พิกของกาแพตัวอย่างที่เวลาปลดปล่อยสาร ก) 3, ข) 5 และ ค) 7 นาที ที่ช่วงเวลาวิเคราะห์ 35.3 นาที - 35.7 นาที

จากผลการทดลองพบว่า ที่ช่วงต้นของการวิเคราะห์ เวลาสำหรับปลดปล่อยสารที่แตกต่างกันจะให้พื้นที่ใต้พีคไม่แตกต่างกันดังรูปที่ 3-4 ก) เนื่องจากสารที่มีจุดเดือดต่ำจะถูกปลดปล่อยได้ง่าย ดังนั้นการใช้เวลาปลดปล่อยสารนานจะไม่ทำให้สารถูกปลดปล่อยได้มากขึ้น และเมื่อพิจารณาโครมาโทแกรมที่เวลาช่วงปลายของการวิเคราะห์ ดังรูปที่ 3-4 ข) พบว่าเวลาสำหรับปลดปล่อยสารที่แตกต่างกันจะให้พื้นที่ใต้พีคแตกต่างกัน เนื่องจากสารที่มีจุดเดือดสูงจะถูกปลดปล่อยได้ยากขึ้นดังนั้นเวลาจึงส่งผลต่อการปลดปล่อยสาร เมื่อเปรียบเทียบเวลาปลดปล่อยสาร 3 และ 7 นาที พบว่าที่เวลา 7 นาที สารจะถูกปลดปล่อยออกมาได้มากกว่าและเมื่อเปรียบเทียบเวลาปลดปล่อยสารที่ 5 และ 7 นาที พบว่าที่เวลา 7 นาที สารจะถูกปลดปล่อยได้มากกว่าเวลา 5 นาทีเพียงเล็กน้อย ดังนั้นเพื่อเป็นการประหยัดเวลาในการวิเคราะห์และให้ผลที่น่าเชื่อถือ การทดลองนี้จึงเลือกใช้เวลาในการปลดปล่อยสารที่ 5 นาที

3.5 ผลการทดสอบประสิทธิภาพของวิธีวิเคราะห์

จากการทดสอบความเที่ยงแบบ Intraday จากตัวอย่างกาแฟอาราบิก้า โดยทดสอบซ้ำ 5 ครั้งจากการวิเคราะห์โครมาโทแกรมที่ได้ ซึ่งสารที่ระเหยได้ในตัวอย่างกาแฟมีทั้งหมด 72 ชนิด พบว่าสาร 53 ชนิดมี %RSD อยู่ในช่วง 0-5 % คิดเป็นร้อยละ 74 ของสารทั้งหมด, สาร 15 ชนิด มี %RSD อยู่ในช่วง 5-10 % คิดเป็นร้อยละ 21 ของสารทั้งหมด และสาร 4 ชนิด มี %RSD มากกว่า 10 % คิดเป็นร้อยละ 5 ของสารทั้งหมดดังตารางที่ 3-1 ซึ่งสารส่วนใหญ่มีค่า %RSD ต่ำ แสดงให้เห็นว่าการวิเคราะห์สารที่ระเหยได้ในกาแฟด้วยเฮดสเปซ-โซลิดเฟสไมโครเอกซ์แทรกชัน-แก๊สโครมาโทกราฟี-แมสสเปกโตรเมทรีมีประสิทธิภาพในการวิเคราะห์ที่ดี

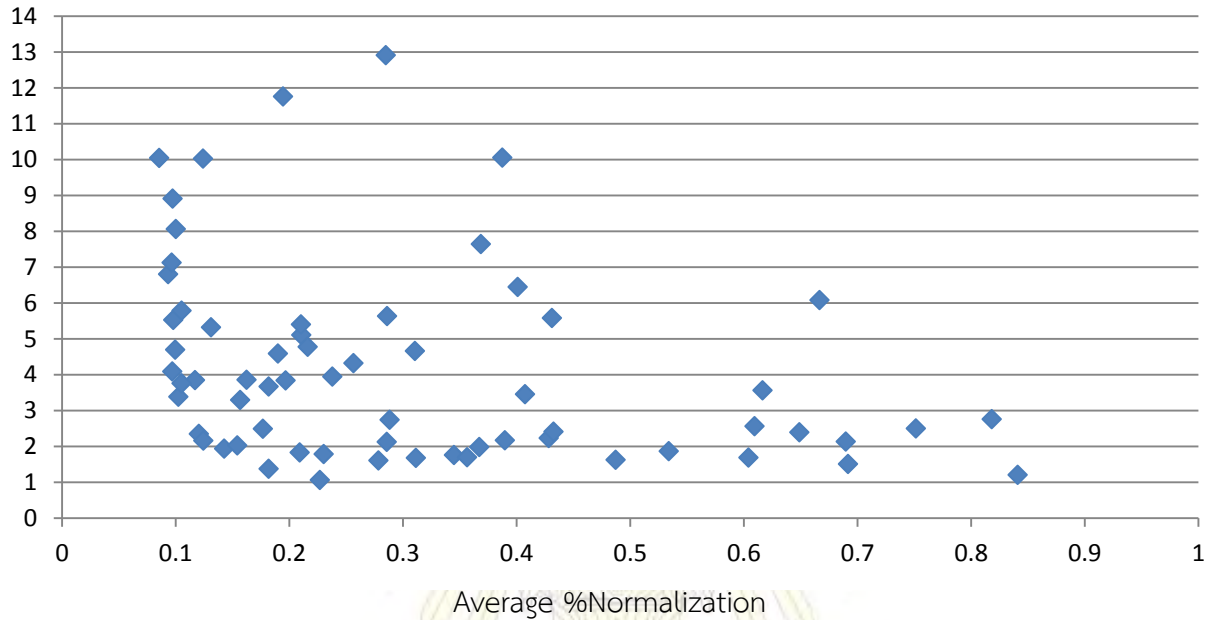
ภาควิชาเคมี
คณะวิทยาศาสตร์
จุฬาลงกรณ์มหาวิทยาลัย

ตารางที่ 3-1 ตารางแสดงค่าเฉลี่ย ค่าเบี่ยงเบนมาตรฐาน ค่า%RSD ของสารสำคัญที่ระเหยได้จากการวิเคราะห์ใน
กาแฟอาราบิก้า (ชื่อสารระเหยเป็นข้อมูลที่เทียบจาก NIST Library)

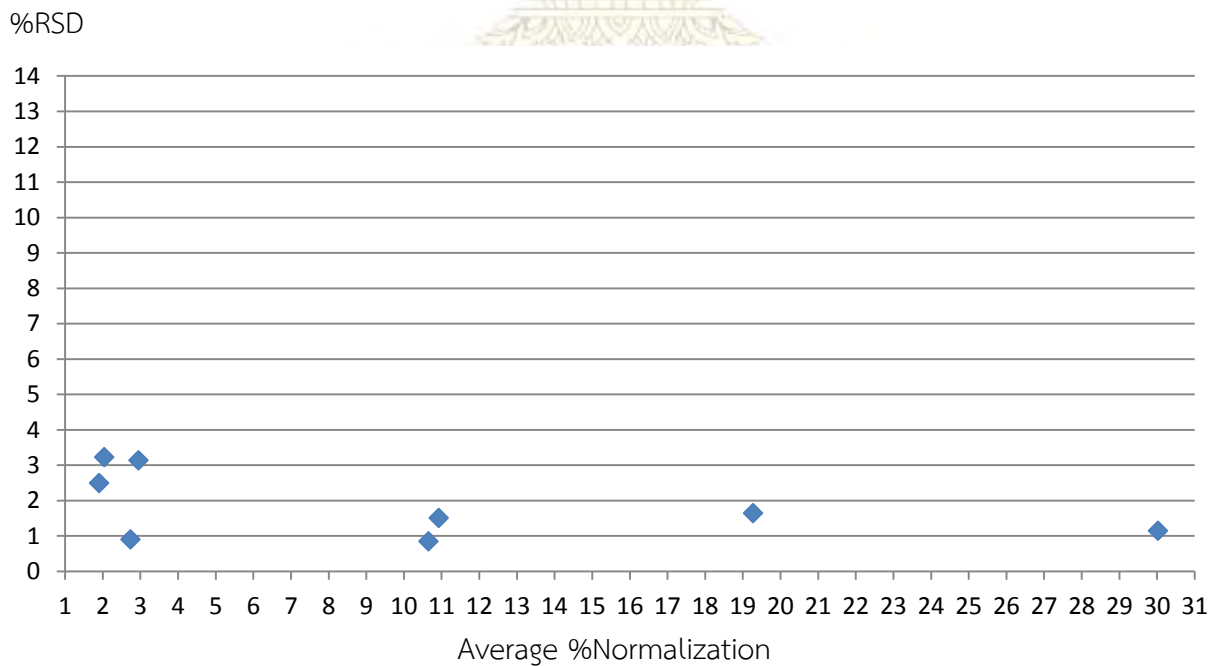
No.	Compounds	RT (min)	Arabica							
			%Normalization					Avg. %nor	S.D.	%RSD
			1	2	3	4	5			
1	3-hydroxy-2-butanone	3.135	0.1858	0.1805	0.1816	0.1792	0.1807	0.18	0.00	1.38
2	1,3-diazine	3.565	0.2759	0.2835	0.2731	0.2822	0.2760	0.28	0.00	1.61
3	1-methylpyrrole	3.680	0.1004	0.1059	0.0926	0.1097	0.0913	0.10	0.01	8.07
4	pyridine	3.801	2.8579	2.9894	2.9635	3.0592	2.8392	2.94	0.09	3.14
5	dihydro-2-methyl-3(2h)-furanone	5.446	0.2219	0.2872	0.3079	0.3140	0.2932	0.28	0.04	12.92
6	2-methyl-pyrimidine	6.069	1.8847	1.9492	1.8977	1.9457	1.8345	1.90	0.05	2.49
7	furfural	6.438	10.7666	10.5648	10.5781	10.7139	10.5951	10.64	0.09	0.85
8	2-furanmethanol	7.503	19.6600	19.2482	19.1174	18.8382	19.4715	19.27	0.32	1.65
9	1-acetyloxy-2-propanone	8.269	0.6872	0.7095	0.6829	0.6901	0.6874	0.69	0.01	1.51
10	furfuryl formate	10.157	0.5883	0.6014	0.6035	0.6144	0.6114	0.60	0.01	1.69
11	2-furanyl-1-ethanone	10.349	1.9774	2.1438	1.9944	2.0309	2.0131	2.03	0.07	3.23
12	1-methyl-2-vinyl-1h-imidazole	10.661	0.3903	0.4529	0.4337	0.4436	0.4340	0.43	0.02	5.58
13	2,3-dimethyl-pyrazine	11.032	0.1913	0.2019	0.1928	0.1841	0.1791	0.19	0.01	4.59
14	2-n-butylfuran	13.027	0.1390	0.1421	0.1406	0.1455	0.1449	0.14	0.00	1.94
15	5-methyl-2-furancarboxaldehyde	13.470	11.0516	10.7481	10.7523	11.1002	10.9486	10.92	0.16	1.51
16	2,3-dimethyl-pyrazine	13.772	0.3061	0.3181	0.3125	0.3061	0.3141	0.31	0.01	1.68
17	1-acetyloxy-2-butanone	14.001	0.2375	0.2532	0.2376	0.2325	0.2284	0.24	0.01	3.95
18	phenol	14.847	0.3443	0.3475	0.3474	0.3344	0.3498	0.34	0.01	1.76
19	furfuryl acetate	15.690	2.7013	2.7666	2.7139	2.7328	2.7315	2.73	0.02	0.90
20	1-methyl-1h-pyrrole-2-carboxaldehyde	16.045	0.6789	0.7033	0.6856	0.6730	0.7062	0.69	0.01	2.14
21	2-ethyl-3-methyl-pyrazine	16.215	0.2256	0.2367	0.2308	0.2281	0.2300	0.23	0.00	1.79
22	2-formylpyrrole	16.432	0.8455	0.8485	0.8492	0.8254	0.8358	0.84	0.01	1.21
23	5-aza-4,5,6,7(3h)-tetrahydrobenzimidazole-6-carboxylic acid	16.910	0.1169	0.1236	0.1217	0.1213	0.1178	0.12	0.00	2.35
24	n-acetyl-4(h)-pyridine	17.110	0.5255	0.5490	0.5297	0.5262	0.5387	0.53	0.01	1.87
25	3-methyl-1,2-cyclopentanedione	17.484	0.2630	0.2790	0.2931	0.2875	0.3062	0.29	0.02	5.64
26	2-methyl-8-nitroisoxazolizidine	17.744	0.1303	0.1328	0.1308	0.1205	0.1399	0.13	0.01	5.33
27	2-acetyl-5-methylfuran	18.253	0.0886	0.0982	0.1020	0.1016	0.0985	0.10	0.01	5.53
28	2-methyl-2-cyclohexen-1-one	18.363	0.1488	0.1539	0.1570	0.1552	0.1554	0.15	0.00	2.03
29	α -methyl-benzeethanamine	18.565	0.1202	0.1234	0.1245	0.1254	0.1275	0.12	0.00	2.17
30	3-acetyl-1h-pyrroline	19.794	0.7364	0.7492	0.7608	0.7319	0.7782	0.75	0.02	2.50
31	nona-3,5-dien-2-one	19.951	0.2244	0.2246	0.2294	0.2266	0.2293	0.23	0.00	1.07
32	5-ethenyltetrahydro- $\alpha,\alpha,5$ -trimethyl-, cis-2-	20.526	0.1008	0.0943	0.0894	0.0910	0.1106	0.10	0.01	8.92
33	1-(1-methyl-1h-pyrrol-2-yl)-ethanone	20.621	0.0962	0.0920	0.0940	0.0832	0.1003	0.09	0.01	6.80

34	2-ethyl-3,5-dimethyl-pyrazine	21.123	0.3881	0.4194	0.4006	0.4061	0.4225	0.41	0.01	3.46
35	2-furfurylfuran	21.290	0.2981	0.3137	0.3103	0.2975	0.3330	0.31	0.01	4.66
36	2-methoxy-phenol	21.518	0.4837	0.4902	0.4886	0.4759	0.4973	0.49	0.01	1.63
37	2-furanmethanol-propanoate	21.707	0.1998	0.1992	0.1927	0.1585	0.2216	0.19	0.02	11.76
38	cis-11-hexadecenal	22.091	0.1624	0.1621	0.1546	0.1595	0.1718	0.16	0.01	3.86
39	2-methyl-4,5-tetramethylene-5-ethyl-2-oxazoline	22.387	0.1919	0.1766	0.1850	0.1764	0.1786	0.18	0.01	3.67
40	4-oxepincarboxylic acid 2,3,6,7-tetrahydro-, ethyl ester	22.685	0.2051	0.2094	0.2197	0.1959	0.2221	0.21	0.01	5.11
41	1-methyl-1h-pyrrole-2-acetonitrile	23.464	0.3554	0.3586	0.3607	0.3463	0.3609	0.36	0.01	1.70
42	1-pentyl-1h-pyrrole	23.613	0.0999	0.1040	0.1077	0.1003	0.0998	0.10	0.00	3.39
43	2-formyl-1-methylpyrrole	23.928	0.4350	0.4298	0.4329	0.4114	0.4318	0.43	0.01	2.24
44	5h-5-methyl-6,7-dihydrocyclopentapyrazine	24.856	0.1378	0.1361	0.1200	0.1137	0.1114	0.12	0.01	10.03
45	octahydro-6-methyl-3-methylene-benzofuran	27.107	0.1111	0.1092	0.1051	0.0954	0.1038	0.10	0.01	5.79
46	1-furfurylpyrrole	27.572	0.6542	0.6536	0.6578	0.6210	0.6566	0.65	0.02	2.40
47	nerinine	27.788	0.6213	0.5955	0.6101	0.5917	0.6274	0.61	0.02	2.56
48	4,9-decadienoic acid, 2-nitro-, ethyl ester	28.056	0.2024	0.1999	0.2029	0.1855	0.1920	0.20	0.01	3.84
49	1,2-benzenediol	28.773	0.3659	0.3484	0.3654	0.4160	0.4401	0.39	0.04	10.06
50	4-(2,2-dimethyl-6-methylenecyclohexyl)butanal	29.145	0.1169	0.1131	0.1143	0.1150	0.1244	0.12	0.00	3.85
51	n-methyl-n-nitroso-p-toluidine	29.941	0.1597	0.1544	0.1606	0.1484	0.1594	0.16	0.01	3.30
52	5-hydroxymethylfurfural	30.498	0.3929	0.3695	0.4014	0.3989	0.4411	0.40	0.03	6.45
53	4-hydroxy-1,7-naphthyridine	32.141	0.2886	0.2861	0.2813	0.2829	0.3012	0.29	0.01	2.75
54	2,6-dihydroxyacetophenone	33.024	0.6296	0.6388	0.6867	0.6494	0.7278	0.67	0.04	6.09
55	4-ethyl-2-methoxyphenol	33.445	0.6110	0.6070	0.6216	0.5916	0.6507	0.62	0.02	3.57
56	3a,7a-dihydro-2,2,4-trimethyl-1,3-benzodioxole	34.170	0.1758	0.1717	0.1800	0.1737	0.1824	0.18	0.00	2.50
57	indolizine	34.385	0.2096	0.2138	0.2160	0.2070	0.2333	0.22	0.01	4.78
58	furfuryl ether	34.934	0.8218	0.8079	0.8307	0.7849	0.8440	0.82	0.02	2.77
59	2-methoxy-4-vinylphenol	35.474	29.8739	30.0800	30.3000	30.3550	29.5115	30.02	0.34	1.15
60	2,3-dihydro-2-methyl-1-(tricyclo[3.3.1.1(3,7)]dec-1-(carbonyl)-1h-indole	35.966	0.1978	0.2043	0.2100	0.2104	0.2283	0.21	0.01	5.41
61	1-oxaspiro[4.5]decan-3-carboxylic acid, 2-oxo-4-cyano-, ethyl ester	36.389	0.1033	0.0919	0.1039	0.0926	0.0894	0.10	0.01	7.12
62	5-amino-8-quinolinol	37.615	0.4383	0.4416	0.4347	0.4147	0.4320	0.43	0.01	2.41
63	1-(diethylboryl)-3-(trimethylsilyl)-1,4-	38.579	0.0932	0.0938	0.0988	0.0955	0.1027	0.10	0.00	4.09
64	gentamicin a	39.484	0.0987	0.1050	0.1095	0.1065	0.1052	0.10	0.00	3.76
65	2-methoxy-6-(1-propenyl)-phenol	39.600	0.3558	0.3298	0.3648	0.3980	0.3937	0.37	0.03	7.65
66	α -furfuryliden- α -furylmethylamine	41.146	0.3825	0.3863	0.3978	0.3819	0.3995	0.39	0.01	2.17
67	trans-traumatic acid	42.692	0.2816	0.2876	0.2954	0.2802	0.2836	0.29	0.01	2.13
68	1-isopropenyl-naphthalene	43.191	0.2443	0.2693	0.2662	0.2480	0.2532	0.26	0.01	4.33
69	tricyclo[5.2.2.1(2,6)]dodecan-12-ol	44.189	0.0971	0.0970	0.1034	0.0944	0.1053	0.10	0.00	4.70
70	1-(9-borabicyclo[3.3.1]non-9yl)-pyrroleidine	44.649	0.3602	0.3606	0.3773	0.3661	0.3715	0.37	0.01	1.99
71	4-acetoxy-1-(9-brabicyclo[3.3.1]non-9-yloxy-2-butyne	48.449	0.0770	0.0782	0.0953	0.0932	0.0821	0.09	0.01	10.05
72	(-)-2-hexanol decanoate	52.621	0.2101	0.2044	0.2146	0.2069	0.2087	0.21	0.00	1.83

จากการสร้างกราฟความสัมพันธ์ระหว่างค่า %Normalization และ %Relative Standard Deviation (%RSD) โดยใช้ข้อมูลจากตารางที่ 3-1 พบว่า สารที่มี %Normalization < 0.4% ส่วนมากมีค่า %RSD < 10% สารที่มี %Normalization ช่วง 0.4-0.9 % ส่วนมากมีค่า %RSD < 5 % และสารที่มี %Normalization ช่วง 1-30 % จะมีค่า %RSD < 4% จึงสรุปได้ว่าการทดลองนี้มีความน่าเชื่อถืออยู่ในเกณฑ์ที่ยอมรับได้ดังกราฟที่แสดงดังรูปที่ 3-5




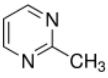
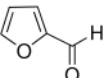
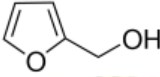
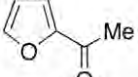
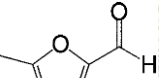
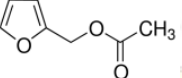
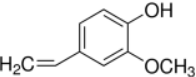
รูปที่ 3-5 ก) กราฟการกระจายระหว่างค่า Average %Normalization และ %RSD ช่วง 0-1 %



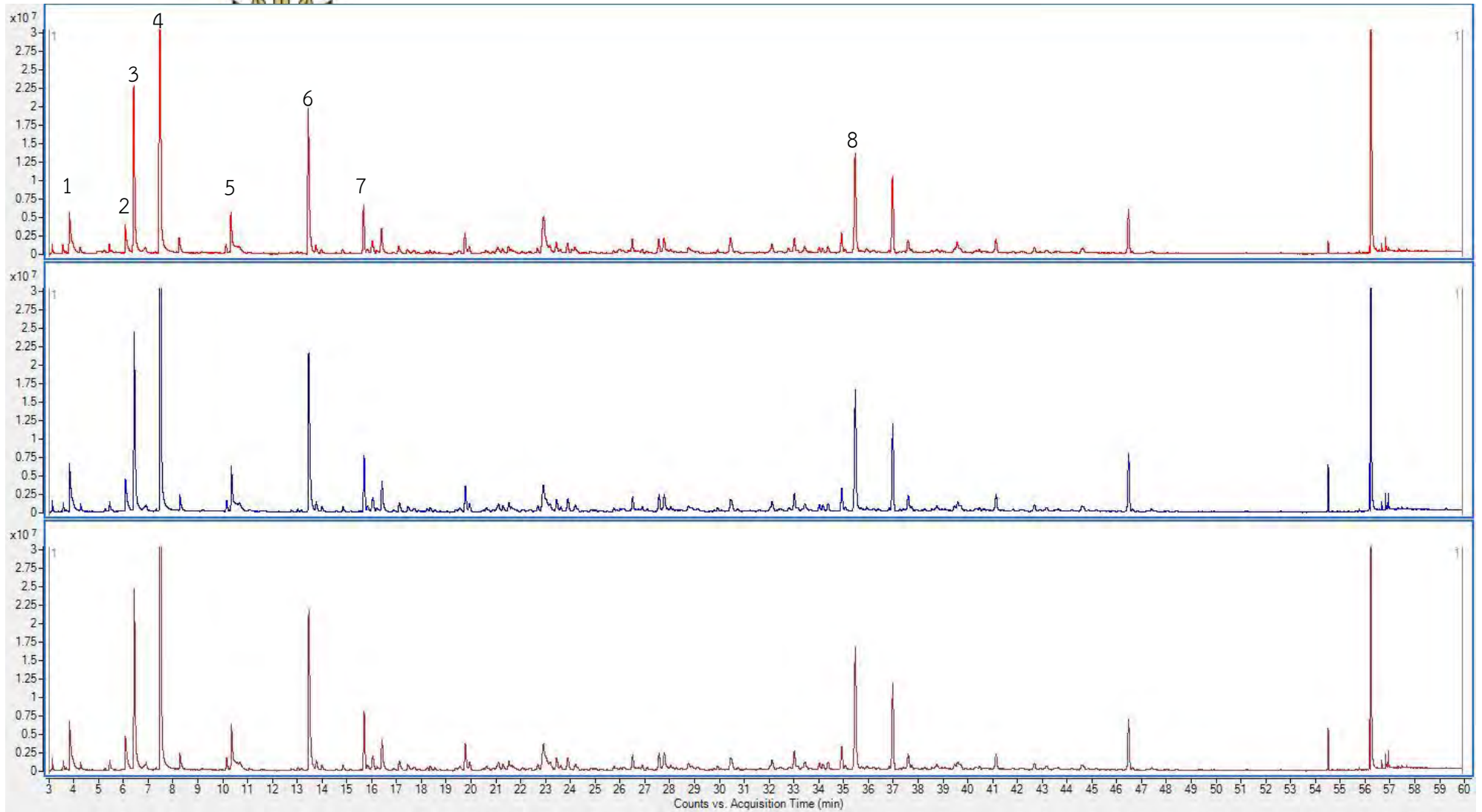
รูปที่ 3-5 ข) กราฟการกระจายระหว่างค่า Average %Normalization และ %RSD ช่วง 1-30 %

3.6 หาโครมาโทแกรมของกาแฟตัวอย่าง 8 ชนิด

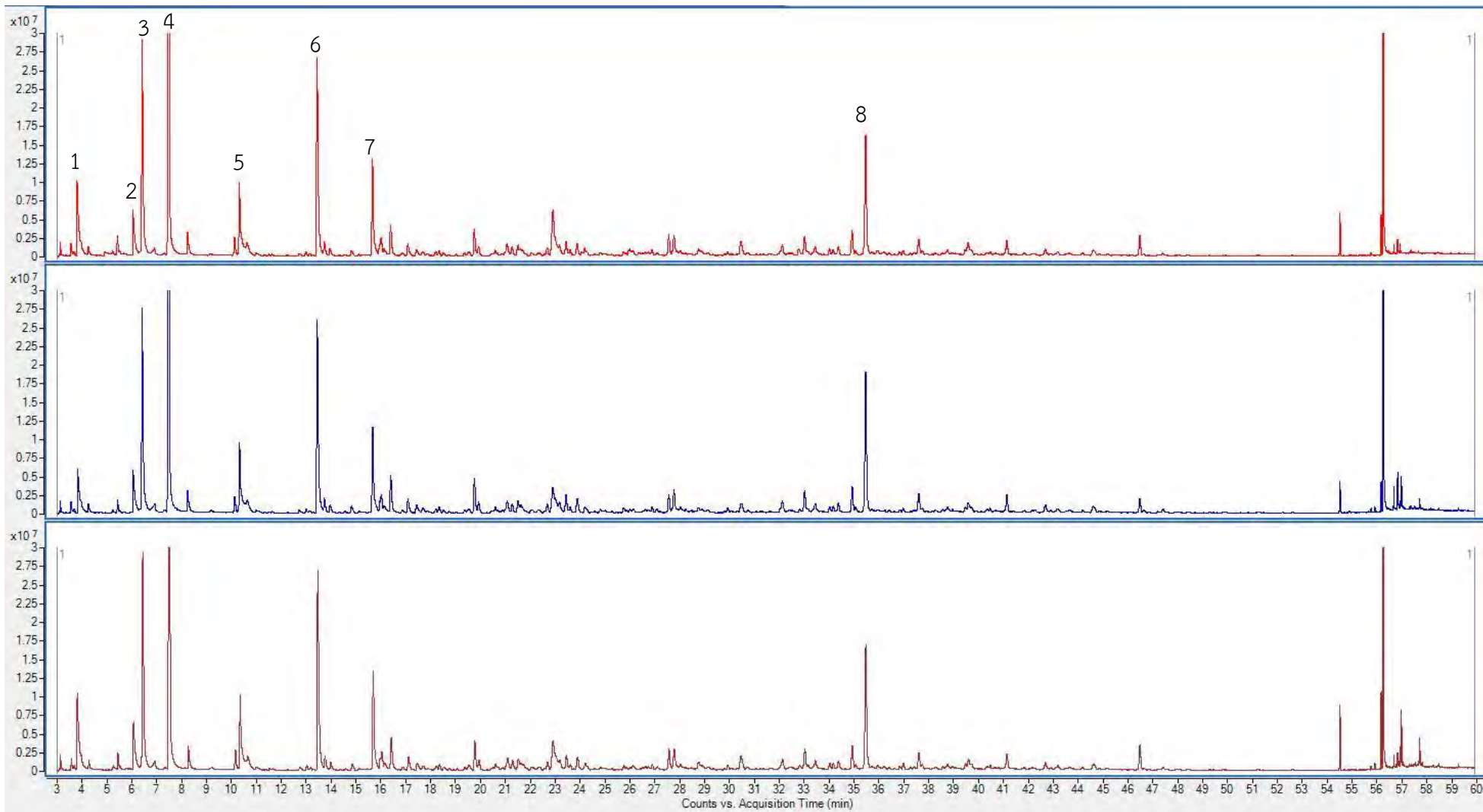
โดยเตรียมกาแฟตัวอย่าง 8 ชนิดที่มาจากแหล่งเพาะปลูกที่ต่างกัน โดยทดลองชนิดละ 3 ซ้ำ ด้วยเทคนิคเฮดสเปซ-โซลิดเฟสไมโครเอกซ์แทรกชัน ที่อุณหภูมิ 90 องศาเซลเซียส เป็นเวลา 45 นาที ใช้เวลาปลดปล่อยสารในเครื่องแก๊สโครมาโทกราฟี 5 นาที และใช้ภาวะของโปรแกรมอุณหภูมิตามบทที่ 2 ได้โครมาโทแกรมดังรูปที่ 3-6 ถึง 3-13 พบสารระเหยหลัก 8 ชนิด ได้แก่

1. 1-pyridine 
2. 2-methyl-pyrimidine 
3. Furfural 
4. 2-furanmethanol 
5. 2-furyl-1-ethanone 
6. 5-methyl-2-furancarboxaldehyde 
7. furfuryl acetate 
8. 2-methoxy-4-vinylphenol 

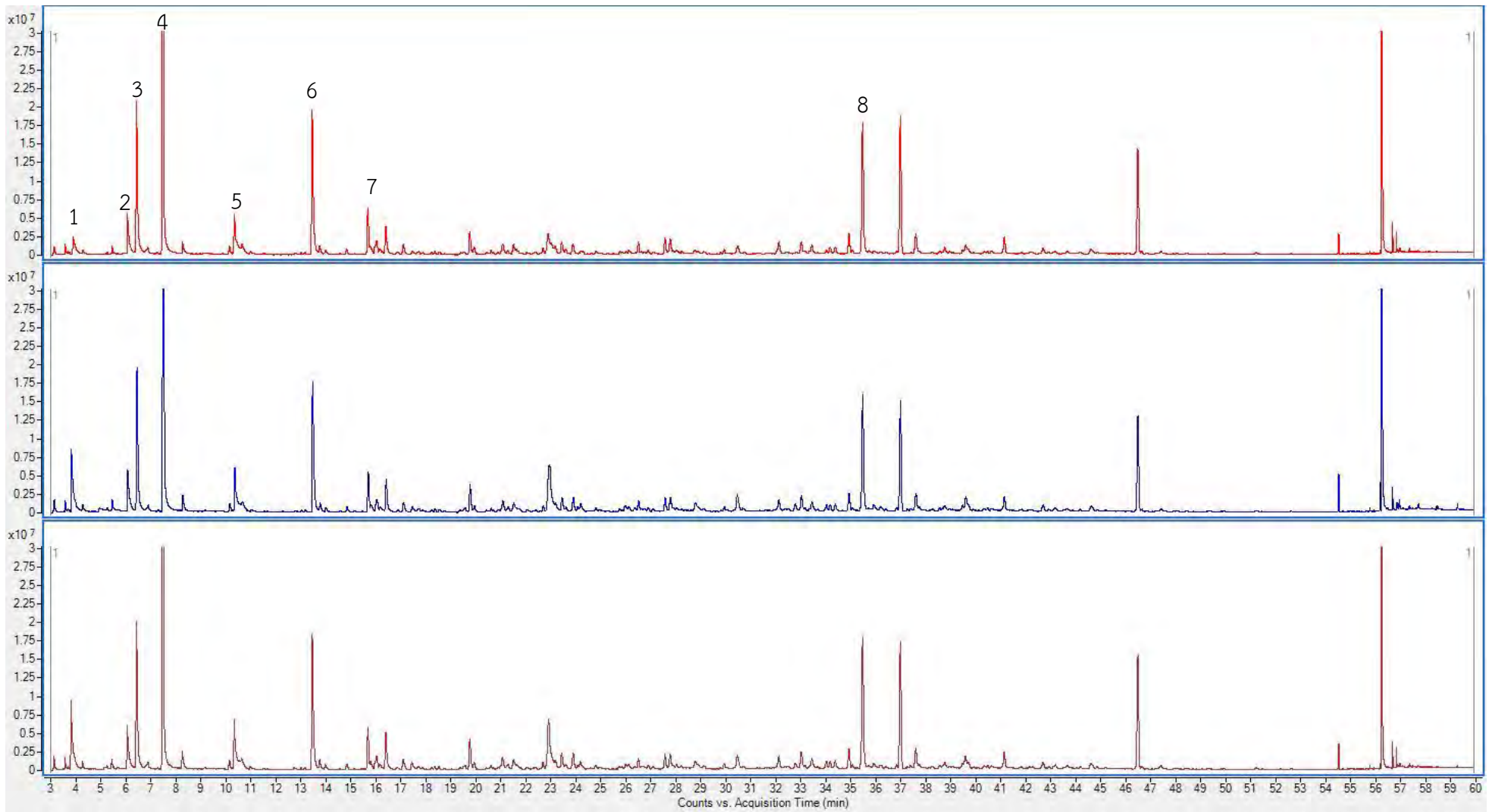
ภาควิชาเคมี
คณะวิทยาศาสตร์
จุฬาลงกรณ์มหาวิทยาลัย



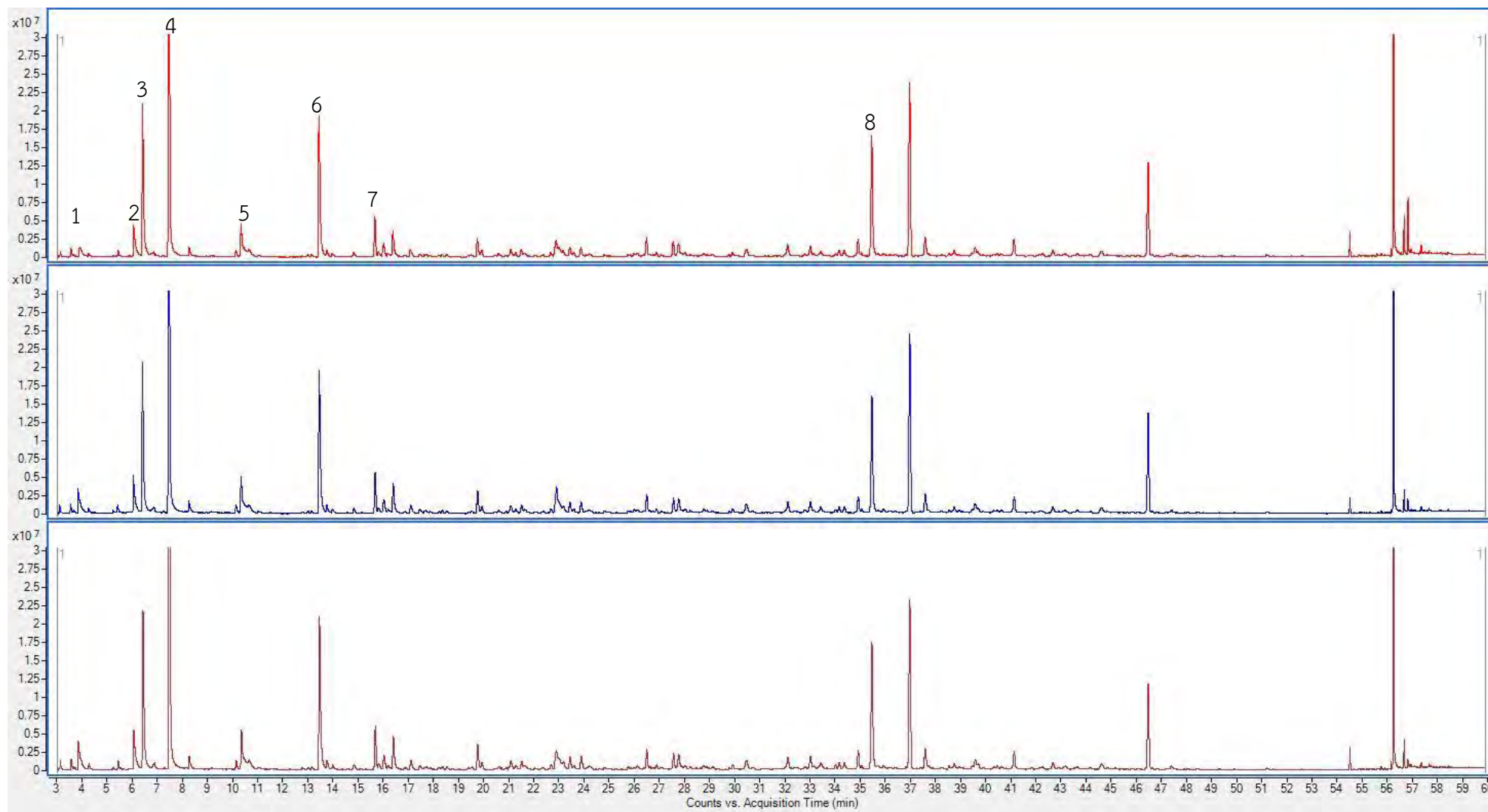
รูปที่ 3-6 กาแฟสายพันธุ์อาราบิกา ที่มาจากจังหวัดเชียงราย ดอยนางแก้ว



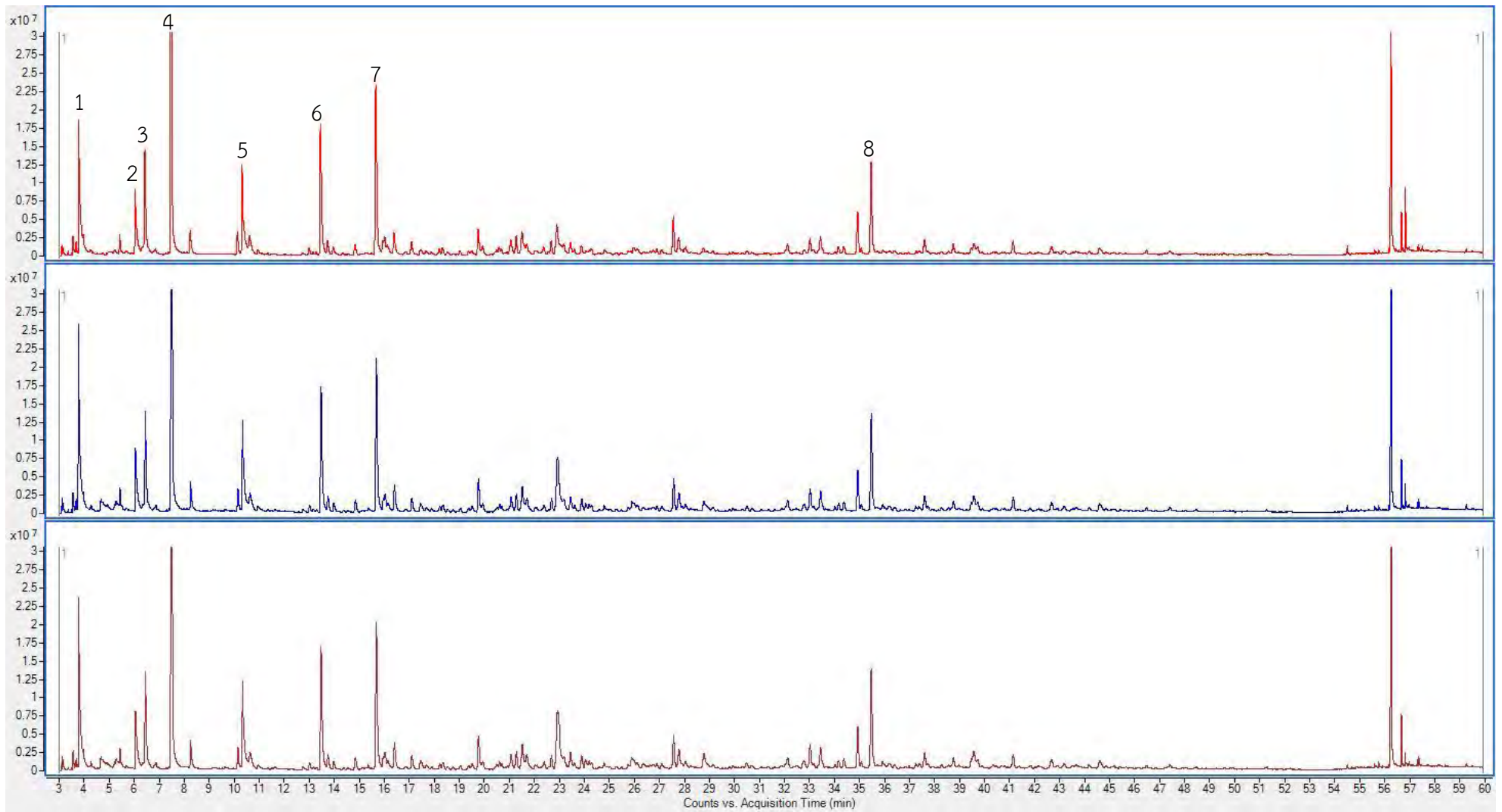
รูปที่ 3-7 กาแฟสายพันธุ์อาราบิก้า ที่มาจากจังหวัดเชียงราย ดอยช้าง



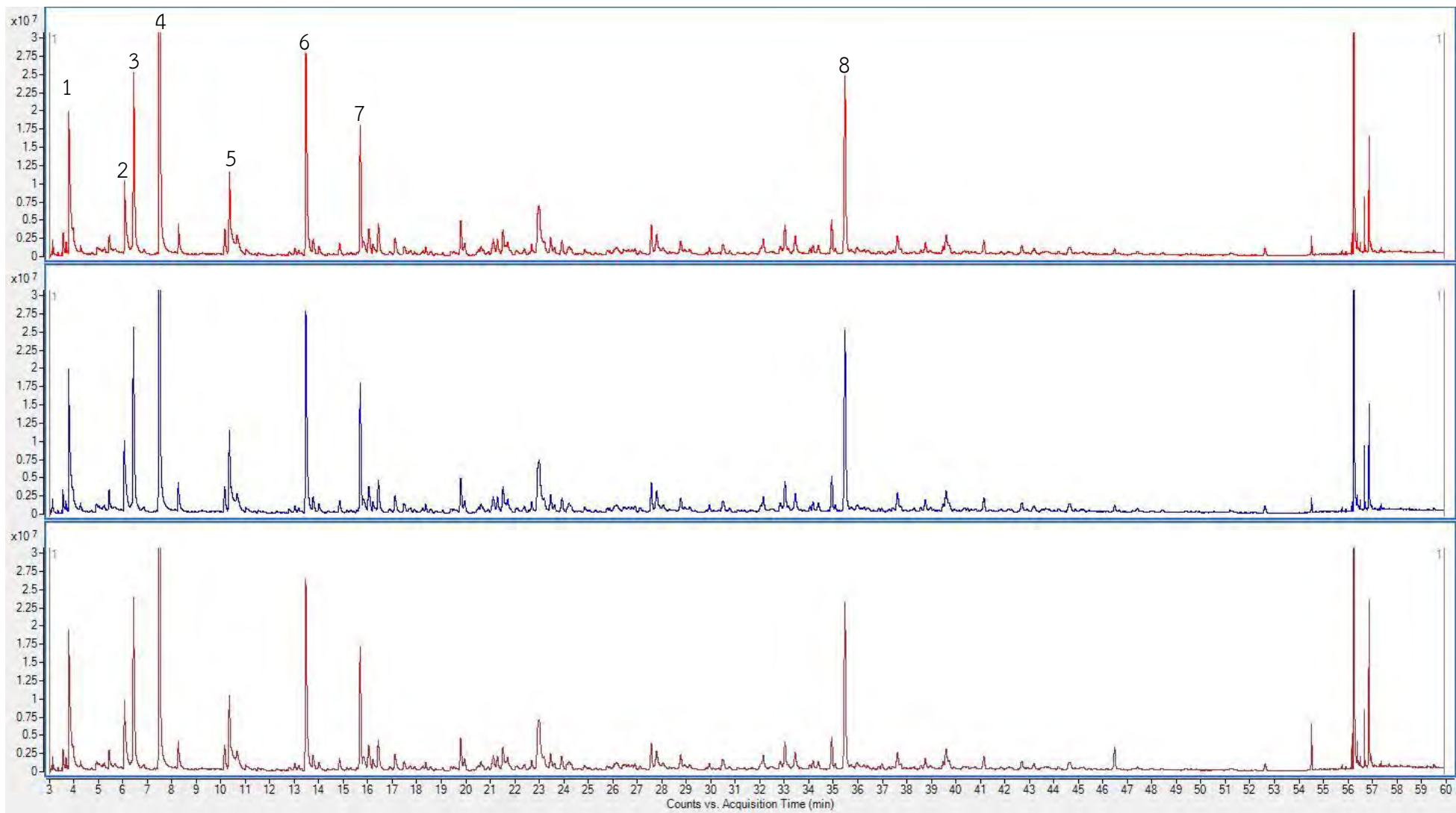
รูปที่ 3-8 กาแฟสายพันธุ์อาราบิก้า ที่มาจากจังหวัดเชียงราย ผ่าสี



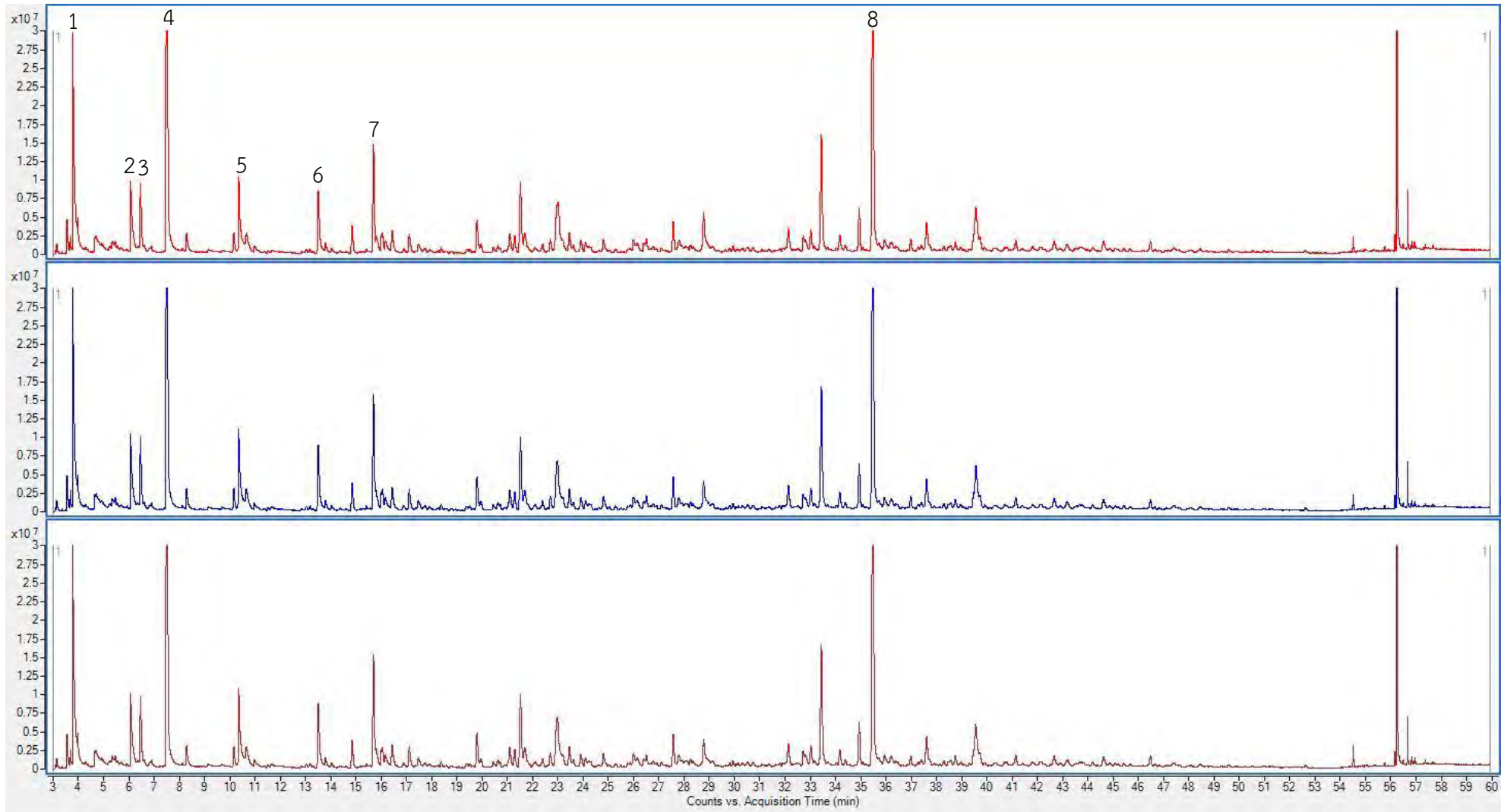
รูปที่ 3-9 กาแฟสายพันธุ์อาราบิกา ที่มาจากจังหวัดเชียงราย ร่มเย็น



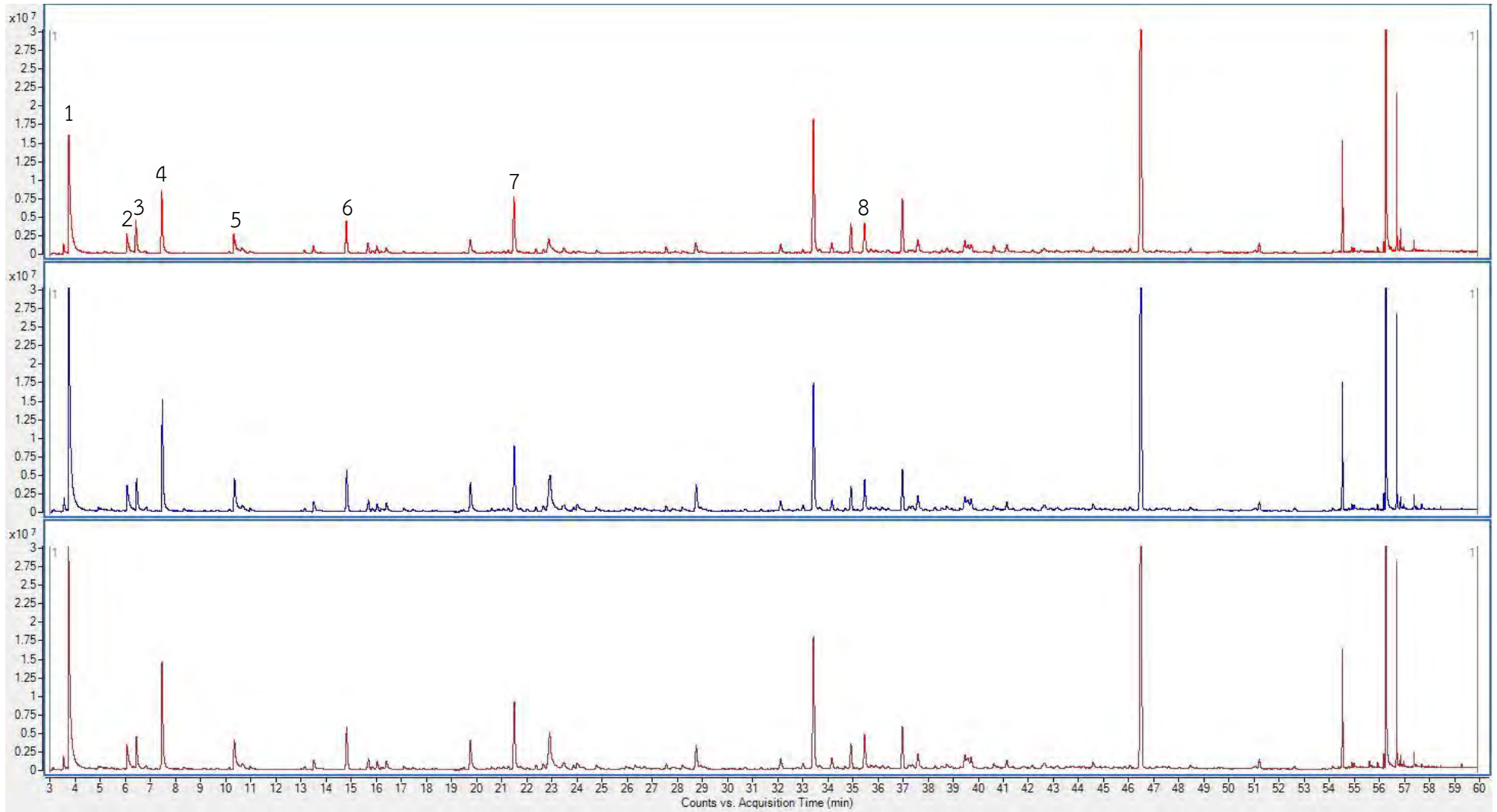
รูปที่ 3-10 กาแฟสายพันธุ์อาราบิกา ที่มาจากจังหวัดเชียงใหม่ แหล่งปลูก 1



รูปที่ 3-11 กาแฟสายพันธุ์อาราบิกา ที่มาจากจังหวัดเชียงใหม่ แหล่งปลูก 2



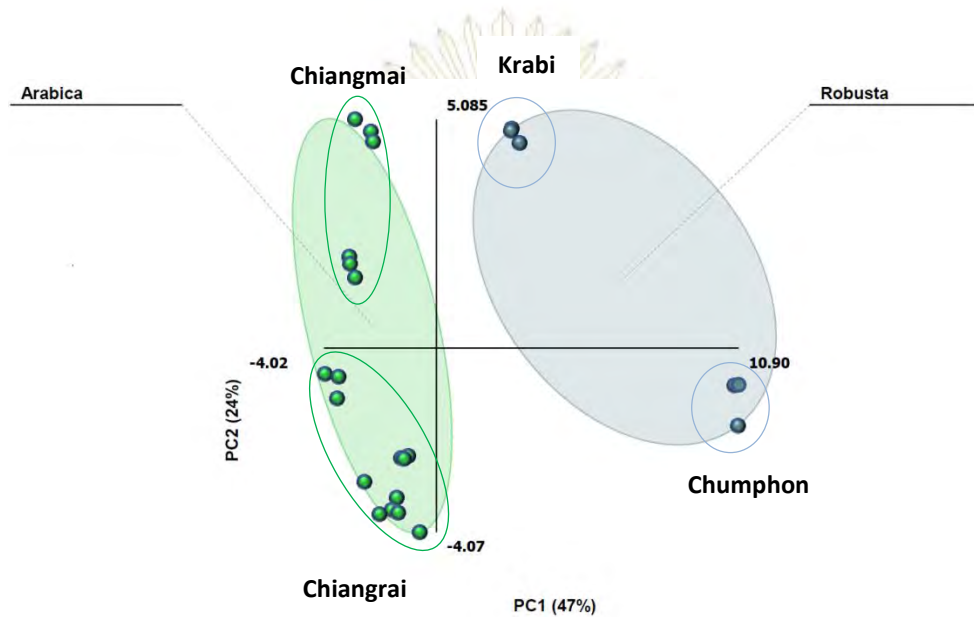
รูปที่ 3-12 กาแฟสายพันธุ์โรบัสตา ที่มาจากจังหวัดกระบี่



รูปที่ 3-13 กาแฟสายพันธุ์โรบัสตา ที่มาจากจังหวัดชุมพร

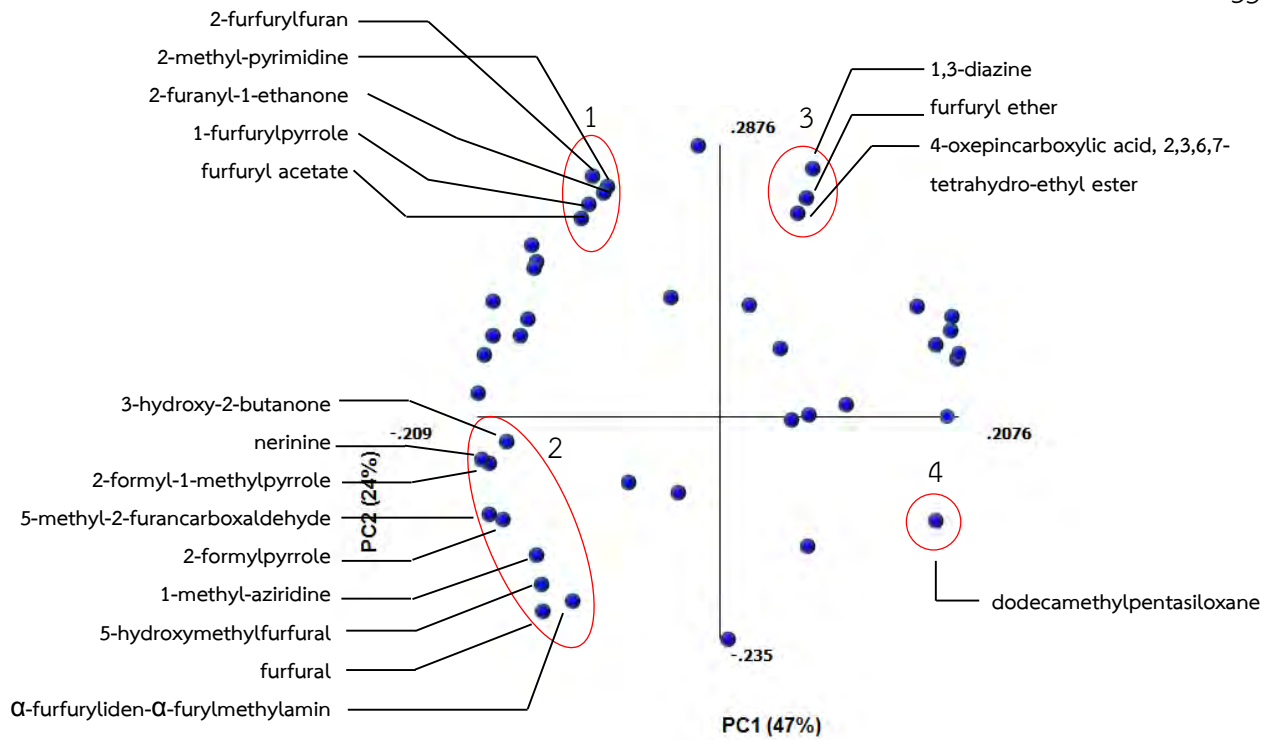
3.7 การประมวลผลด้วยเคโมเมทริกซ์

จากการวิเคราะห์โครมาโทแกรมที่ได้ของกาแฟตัวอย่าง 8 ชนิด โดยพีคที่นำมาประมวลผลจะใช้พื้นที่ใต้พีคมากกว่า 2,000,000 counts (หน่วยการตรวจวัดของเครื่อง GC/MS ที่ใช้ในงานวิจัยนี้) จากการจัดข้อมูลแบบ Scaling และประมวลผลจากค่าส่วนเบี่ยงเบนมาตรฐาน (standard deviation) พบว่าการกาแฟสายพันธุ์อาราบิกาและโรบัสตาสามารถแบ่งกลุ่มกาแฟออกได้ 4 กลุ่มคือกาแฟที่มาจากจังหวัดเชียงใหม่ เชียงราย จะอยู่ในกลุ่มกาแฟอาราบิกา และกาแฟที่มาจากจังหวัดกระบี่ ชุมพร จะอยู่ในกลุ่มกาแฟโรบัสตา ซึ่งแสดงโดย PCA ดังรูปที่ 3-14



รูปที่ 3-14 กราฟผล PCA ในการจัดกลุ่มกาแฟทั้ง 4 ชนิดจากแต่ละจังหวัดในประเทศไทย

จากรูปที่ 3-15 สารที่ระเหยได้ในกลุ่มที่ 1 จะอยู่ตำแหน่งเดียวกับกาแฟที่มาจากเชียงใหม่ ได้แก่ 2-furfurylfuran, 2-methyl-pyrimidine, 2-furanyl-1-ethanone, furfuryl acetate และ 1-furfurylpyrrol สารที่ระเหยได้ในกลุ่มที่ 2 จะอยู่ตำแหน่งเดียวกับกาแฟที่มาจากเชียงราย ได้แก่ 3-hydroxy-2-butanone, 2-formyl-1-methylpyrrole, 5-methyl-2-furancarboxaldehyde, 2-formylpyrrole, α -Furfuryliden- α -furyl methylamine, 1-methyl-aziridine, nerinine, furfural และ 5-hydroxymethylfurfural สารที่ระเหยได้ในกลุ่มที่ 3 จะอยู่ตำแหน่งเดียวกับกาแฟที่มาจากกระบี่ ได้แก่ 4-oxepincarboxylic acid, 2,3,6,7-tetrahydro-ethyl ester, 1,3-diazine และ furfuryl ether สารที่ระเหยได้ในกลุ่มที่ 4 มีตำแหน่งเดียวกันกับกาแฟที่มาจากชุมพร ได้แก่ dodecamethyl-pentasiloxane จึงสรุปได้ว่า กาแฟจากแหล่งเพาะปลูกที่ต่างกันจะมีชนิดและปริมาณของสารที่ระเหยได้เป็นเอกลักษณ์เฉพาะของกาแฟแต่ละชนิด



รูปที่ 3-15 กราฟผล PCA ของสารที่ระเหยได้ที่เป็นเอกลักษณ์เฉพาะของกาแฟแต่ละแหล่งเพาะปลูก (ชื่อสารระเหยเป็นข้อมูลที่เทียบจาก NIST Library)

ภาควิชาเคมี
คณะวิทยาศาสตร์
จุฬาลงกรณ์มหาวิทยาลัย

บทที่ 4

สรุปผลการทดลอง

จากการศึกษารูปแบบโครมาโทแกรมของกาแฟตัวอย่าง 8 ชนิด และนำไปประมวลผลด้วย เคโมเมทริกซ์ สามารถจัดกลุ่มกาแฟที่มาจากแหล่งที่เพาะปลูกที่ต่างกันได้เป็น 4 กลุ่มคือ กาแฟจากจังหวัด เชียงใหม่ เชียงราย กระบี่ และ ชุมพร ดังรูปที่ 3-14 พบว่ากาแฟที่มาจากแหล่งเพาะปลูกต่างกันจะมีองค์ประกอบ และปริมาณของสารที่ระเหยได้ต่างกัน ในการแบ่งกลุ่มด้วย PCA จะให้ผลดีที่สุดเมื่อ องค์ประกอบและปริมาณสาร ที่ระเหยได้ในกาแฟตัวอย่างแต่ละชนิดมีความแตกต่างทางด้านชนิดและปริมาณของสารระเหยอย่างชัดเจน และ กาแฟในแต่ละแหล่งจะมีชนิดและปริมาณของสารที่ระเหยได้เป็นเอกลักษณ์เฉพาะตัว ดังรูปที่ 3-15 จากการ ทดสอบความใช้ได้ของวิธีวิเคราะห์สำหรับวิเคราะห์สารที่ระเหยได้ในกาแฟอาราบิกา โดยวิเคราะห์ซ้ำ 5 ครั้ง มีสาร ที่ระเหยได้ในกาแฟอาราบิกาทั้งหมด 72 ชนิด พบว่าสาร 53 ชนิดมี %RSD อยู่ในช่วง 0-5 % คิดเป็นร้อยละ 74 ของสารทั้งหมด, มีสาร 15 ชนิด มี %RSD อยู่ในช่วง 5-10 % คิดเป็นร้อยละ 21 ของสารทั้งหมด และสาร 4 ชนิด มี %RSD มากกว่า 10 % คิดเป็นร้อยละ 5 ของสารทั้งหมด ซึ่งแสดงให้เห็นว่าวิธีวิเคราะห์นี้ให้ผลการทดลองอยู่ใน เกณฑ์ที่ยอมรับได้ และสารที่ระเหยได้หลักที่มี %normalization > 1% และพบในกาแฟทุกชนิด มีอยู่ 8 สาร ได้แก่ 2-methoxy-4-vinylphenol, 2-furanmethanol, pyridine, furfural, 2-furanyl-1-ethanone, 2-methyl-pyrimidine, 5-methyl-2-furancarboxaldehyde และ furfuryl acetate

ภาควิชาเคมี
คณะวิทยาศาสตร์
จุฬาลงกรณ์มหาวิทยาลัย

เอกสารอ้างอิง

1. Giovanni, C.; Manuela, C.; Gloria, C.; Filippo, M.; Luigi, O.; Massimo, R.; Gianni, S.; Veronica, S.; Giacomo, T.; Sauro, V. Optimization of espresso machine parameters through the analysis of coffee odorants by HS-SPME-GC/MS. *Food Chem.* **2012**, *135*, 1127-1133.
2. William, R.; Charles, N. The volatile constituents of roasted coffee. *J. Am. Chem. Soc.* **1938**, *60*, 1624-1627.
3. Mónica, P.M.; Patricia, S.; Paz, M.; Concepción, C. Changes in volatile compounds and overall aroma profile during storage of coffee brews at 4 and 25 °C. *J. Agric. Food Chem.* **2008**, *56*(9), 3145-3154.
4. Adriana, P.A.; Eduardo, V.; Mariana, S.U.; Silvia, A.V.T.; Maria, C.F.T. Furan levels in coffee as influenced by species, roast degree, and brewing procedures. *J. Agric. Food Chem.* **2011**, *59*(7), 3118-3124.
5. Amorim, H.V.; Basso, L.C.; Crocomo, O.J.; Teixeira, A.A. Polyamines in green and roasted coffee. *J. Agric. Food Chem.* **1977**, *25*, 957-958.
6. Yang, X.; Peppard, T.; Solid phase microextraction for flavor analysis. *J. Agric. Food Chem.* **1994**, *42*, 1925-1930.
7. Czemy, M.; Wagner, R.; Grosch, W. Detection of odor-active ethenylalkylpyrazines in roasted coffee. *J. Agric. Food Chem.* **1996**, *44*, 3268-3272.
8. Carlo, P.B.; Ombretta, M.P.; Gloria, M.P.; Alfredo, C.V.; Charecterization of roasted coffee and coffee beverages by solid phase microextraction-gas chromatography and principal component analysis. *J. Agric. Food Chem.* **1997**, *45*(12), 4680-4686.
9. Roberts, D.D.; Pollien, P.; Milo, C.; Solid-phase microextraction method development for headspace analysis of volatile flavor compounds. *J. Agric. Food Chem.* **2000**, *48*, 2430-2437.
10. Sanz, C.; Ansorena, D.; Bello, J.; Cid, C. Optimizing headspace temperature and time sampling for identification of volatile compounds in ground roasted arabica coffee. *J. Agric. Food Chem.* **2001**, *49*, 1364-1369.

11. Oscar, G.R.; Mirna, L.; Renaud, B.; Michel, B.; Bernard, G.; Joseph, P.G.; Sabine, S.G. Impact of ecological post-harvest processing on the volatile fraction of coffee beans: I. Green coffee. *J. Food Compos. Anal.* **2007**, *20*, 289-296.
12. Juerg, B.; Luigi, P.; Ruth, K.; Rainer, P.; Felix, E. Coffee roasting and aroma formation : application of difference time-temperature conditions. *J. Food Compos. Anal.* **2008**, *56(14)*, 5836-5846.
13. Zhouyao, Z.; Janusz, P. Headspace Solid-Phase Microextraction. *Anal. Chem.* **1993**, *65(14)*, 1843-1852
14. Zhouyao, Z.; Janusz, P. Solid-phase microextraction. *Anal Chem.* **1994**, *66*, 844-853.
15. Vas, G.; Vekey, K. Solid-phase microextraction: A powerful sample preparation tool prior to mass spectrometric analysis. *J. Mass. Spectrom.* **2004**, *39*, 233-254.
16. Mark, O. Analysis of laminated documents using solid-phase microextraction. *J. Am. Inst. Consev.* **2005**, *44*, 13-26.
17. Chunhua, M.; Yanqin, Q.; Yingxue, Z.; Bin, Q.; Yiru, W.; Xi, C. Determination of nerolidol in teas using headspace solid phase microextraction-gas chromatography. *Food Chem.* **2014**, *152*, 285-290.
18. Mark, O. Analysis of laminated documents using solid-phase microextraction. *The Book and Paper Group Annual.* **2003**, *22*, 61-66.
19. Mónica, P.M.; Patricia, S.; Paz, M.; Concepción, C. Application of multivariate analysis to the effects of additives on chemical and sensory quality of stored coffee brew. *J. Agric. Food Chem.* **2008**, *56*, 11845-11853.
20. Iris, S. Extraction of alcohols from gasoline using solid phase microextraction. Master's Thesis, Department of Chemistry, Virginia Polytechnic Institute and State University, **2001**, 11-24.
21. Hilton, T.L.S.; André, M.O.; Patrícia, G.M.; Wagner, F.; Ana, P.R.F. Chemometrics: Theory and Application chapter 7. **1977**, *52*, 122-123.

ภาคผนวก

ตารางแสดงพื้นที่ใต้พีคของกาแฟอาราบิก้าสำหรับทดสอบความใช้ได้ของวิธีวิเคราะห์ในการทำซ้ำ 5 ครั้ง (ข้อมูลเปรียบเทียบเป็นข้อมูลที่ได้จาก NIST Library)

No.	Compounds	RT (min)	Arabica												
			Peak area					%Normalization					Avg. %nor	S.D.	%RSD
			1	2	3	4	5	1	2	3	4	5			
1	3-Hydroxy-2-butanone	3.135	4181642	4277255	4340776	4070277	4066689	0.1858	0.1805	0.1816	0.1792	0.1807	0.18	0.00	1.38
2	1,3-Diazine	3.565	6211037	6716065	6528048	6410109	6211467	0.2759	0.2835	0.2731	0.2822	0.2760	0.28	0.00	1.61
3	1-Methylpyrrole	3.680	2260049	2508042	2213404	2491683	2053986	0.1004	0.1059	0.0926	0.1097	0.0913	0.10	0.01	8.07
4	Pyridine	3.801	64331223	70821984	70847418	69476742	63893075	2.8579	2.9894	2.9635	3.0592	2.8392	2.94	0.09	3.14
5	dihydro-2-methyl-3(2H)-Furanone	5.446	4995719	6803715	7361730	7130230	6599337	0.2219	0.2872	0.3079	0.3140	0.2932	0.28	0.04	12.92
6	2-methyl-Pyrimidine	6.069	42423908	46177557	45368800	44188035	41284926	1.8847	1.9492	1.8977	1.9457	1.8345	1.90	0.05	2.49
7	Furfural	6.438	242357015	250291097	252886323	243324093	238434210	10.7666	10.5648	10.5781	10.7139	10.5951	10.64	0.09	0.85
8	2-Furanmethanol	7.503	442546867	456007933	457033605	427834752	438189950	19.6600	19.2482	19.1174	18.8382	19.4715	19.27	0.32	1.65
9	1-acetyloxy-2-Propanone	8.269	15468399	16809163	16326553	15672432	15470240	0.6872	0.7095	0.6829	0.6901	0.6874	0.69	0.01	1.51
10	Furfuryl formate	10.157	13241811	14248093	14427248	13952795	13758260	0.5883	0.6014	0.6035	0.6144	0.6114	0.60	0.01	1.69
11	2-furanyl-1-Ethanone	10.349	44510706	50788520	47680297	46123450	45303268	1.9774	2.1438	1.9944	2.0309	2.0131	2.03	0.07	3.23
12	1-methyl-2-vinyl-1H-Imidazole	10.661	8784597	10729205	10367278	10075045	9766270	0.3903	0.4529	0.4337	0.4436	0.4340	0.43	0.02	5.58
13	2,3-dimethyl-Pyrazine	11.032	4306293	4783268	4609588	4181734	4031265	0.1913	0.2019	0.1928	0.1841	0.1791	0.19	0.01	4.59
14	2-n-Butylfuran	13.027	3129508	3366930	3361353	3303840	3261872	0.1390	0.1421	0.1406	0.1455	0.1449	0.14	0.00	1.94
15	5-methyl-2-Furancarboxaldehyde	13.470	248770709	254632062	257051064	252096621	246390099	11.0516	10.7481	10.7523	11.1002	10.9486	10.92	0.16	1.51
16	2,3-dimethyl-Pyrazine	13.772	6890262	7535279	7470115	6951263	7067776	0.3061	0.3181	0.3125	0.3061	0.3141	0.31	0.01	1.68
17	1-acetyloxy-2-Butanone	14.001	5346643	5997878	5679032	5281321	5139867	0.2375	0.2532	0.2376	0.2325	0.2284	0.24	0.01	3.95

18	Phenol	14.847	7749814	8231632	8306285	7594178	7872318	0.3443	0.3475	0.3474	0.3344	0.3498	0.34	0.01	1.76
19	Furfuryl acetate	15.690	60806974	65543496	64879475	62065386	61470709	2.7013	2.7666	2.7139	2.7328	2.7315	2.73	0.02	0.90
20	1-methyl-1H-Pyrrole-2-carboxaldehyde	16.045	15281251	16661945	16390574	15285450	15892363	0.6789	0.7033	0.6856	0.6730	0.7062	0.69	0.01	2.14
21	2-ethyl-3-methyl-Pyrazine	16.215	5078898	5607770	5517544	5180324	5174923	0.2256	0.2367	0.2308	0.2281	0.2300	0.23	0.00	1.79
22	2-Formylpyrrole	16.432	19031498	20102117	20302157	18744922	18808626	0.8455	0.8485	0.8492	0.8254	0.8358	0.84	0.01	1.21
23	5-Aza-4,5,6,7(3H)-tetrahydrobenzimidazole-6-carboxylic acid	16.910	2630679	2927560	2910097	2755357	2650697	0.1169	0.1236	0.1217	0.1213	0.1178	0.12	0.00	2.35
24	N-acetyl-4(H)-Pyridine	17.110	11829410	13006614	12663930	11949794	12122092	0.5255	0.5490	0.5297	0.5262	0.5387	0.53	0.01	1.87
25	3-methyl-1,2-Cyclopentanedione	17.484	5919279	6610518	7006258	6528628	6890081	0.2630	0.2790	0.2931	0.2875	0.3062	0.29	0.02	5.64
26	2-Methyl-8-nitroisoxazolidine	17.744	2932150	3145453	3127206	2735908	3149175	0.1303	0.1328	0.1308	0.1205	0.1399	0.13	0.01	5.33
27	2-Acetyl-5-methylfuran	18.253	1994060	2325274	2437508	2306333	2217387	0.0886	0.0982	0.1020	0.1016	0.0985	0.10	0.01	5.53
28	2-methyl-2-Cyclohexen-1-one	18.363	3349454	3645212	3752580	3523801	3496596	0.1488	0.1539	0.1570	0.1552	0.1554	0.15	0.00	2.03
29	α -Methyl-Benzeneethanamine	18.565	2706344	2924553	2977127	2848893	2869711	0.1202	0.1234	0.1245	0.1254	0.1275	0.12	0.00	2.17
30	3-Acetyl-1H-pyrroline	19.794	16577028	17748685	18188621	16621178	17511728	0.7364	0.7492	0.7608	0.7319	0.7782	0.75	0.02	2.50
31	Nona-3,5-dien-2-one	19.951	5051751	5319973	5484393	5145553	5159230	0.2244	0.2246	0.2294	0.2266	0.2293	0.23	0.00	1.07
32	5-ethenyltetrahydro- $\alpha,\alpha,5$ -trimethyl-, cis-2-	20.526	2267921	2234244	2137372	2065668	2489064	0.1008	0.0943	0.0894	0.0910	0.1106	0.10	0.01	8.92
33	1-(1-methyl-1H-pyrrol-2-yl)-Ethانون	20.621	2166335	2180670	2248078	1890061	2256376	0.0962	0.0920	0.0940	0.0832	0.1003	0.09	0.01	6.80
34	2-ethyl-3,5-dimethyl-Pyrazine	21.123	8735167	9935267	9577416	9223928	9508354	0.3881	0.4194	0.4006	0.4061	0.4225	0.41	0.01	3.46
35	2-Furfurylfuran	21.290	6709607	7432686	7418451	6757097	7492867	0.2981	0.3137	0.3103	0.2975	0.3330	0.31	0.01	4.66
36	2-methoxy-Phenol	21.518	10888420	11613361	11681111	10809038	11190290	0.4837	0.4902	0.4886	0.4759	0.4973	0.49	0.01	1.63
37	2-Furanmethanol-propanoate	21.707	4497444	4718192	4605624	3598826	4987749	0.1998	0.1992	0.1927	0.1585	0.2216	0.19	0.02	11.76
38	cis-11-Hexadecenal	22.091	3656120	3841198	3696636	3623149	3866572	0.1624	0.1621	0.1546	0.1595	0.1718	0.16	0.01	3.86
39	2-Methyl-4,5-tetramethylene-5-ethyl-2-oxazoline	22.387	4319110	4183290	4422423	4007130	4019473	0.1919	0.1766	0.1850	0.1764	0.1786	0.18	0.01	3.67
40	4-Oxepincarboxylic acid 2,3,6,7-tetrahydro-, ethyl ester	22.685	4615791	4961539	5252125	4448241	4997335	0.2051	0.2094	0.2197	0.1959	0.2221	0.21	0.01	5.11

41	1-methyl-1H-Pyrrole-2-acetonitrile	23.464	7999561	8496593	8624224	7865452	8122513	0.3554	0.3586	0.3607	0.3463	0.3609	0.36	0.01	1.70
42	1-pentyl-1H-Pyrrole	23.613	2248544	2463546	2575045	2277087	2246773	0.0999	0.1040	0.1077	0.1003	0.0998	0.10	0.00	3.39
43	2-Formyl-1-methylpyrrole	23.928	9791659	10181544	10349974	9342276	9716952	0.4350	0.4298	0.4329	0.4114	0.4318	0.43	0.01	2.24
44	5H-5-Methyl-6,7-dihydrocyclopentapyrazine	24.856	3101343	3224335	2868193	2581915	2507920	0.1378	0.1361	0.1200	0.1137	0.1114	0.12	0.01	10.03
45	octahydro-6-methyl-3-methylene-Benzofuran	27.107	2500212	2587236	2511488	2167364	2335519	0.1111	0.1092	0.1051	0.0954	0.1038	0.10	0.01	5.79
46	1-Furfurylpyrrole	27.572	14725208	15483790	15726823	14103919	14776784	0.6542	0.6536	0.6578	0.6210	0.6566	0.65	0.02	2.40
47	Nerinine	27.788	13985465	14107441	14585779	13437188	14118975	0.6213	0.5955	0.6101	0.5917	0.6274	0.61	0.02	2.56
48	4,9-Decadienoic acid, 2-nitro-, ethyl ester	28.056	4557049	4735589	4850497	4213440	4321426	0.2024	0.1999	0.2029	0.1855	0.1920	0.20	0.01	3.84
49	1,2-Benzenediol	28.773	8236437	8254374	8735055	9448475	9904527	0.3659	0.3484	0.3654	0.4160	0.4401	0.39	0.04	10.06
50	4-(2,2-Dimethyl-6-methylenecyclohexyl)butanal	29.145	2632205	2679854	2733491	2611053	2799604	0.1169	0.1131	0.1143	0.1150	0.1244	0.12	0.00	3.85
51	N-methyl-N-nitroso-p-Toluidine	29.941	3595931	3657623	3840524	3369392	3586467	0.1597	0.1544	0.1606	0.1484	0.1594	0.16	0.01	3.30
52	5-Hydroxymethylfurfural	30.498	8843458	8754440	9595819	9059474	9926949	0.3929	0.3695	0.4014	0.3989	0.4411	0.40	0.03	6.45
53	4-Hydroxy-1,7-naphthyridine	32.141	6497077	6778972	6724492	6424131	6778805	0.2886	0.2861	0.2813	0.2829	0.3012	0.29	0.01	2.75
54	2,6-Dihydroxyacetophenone	33.024	14173302	15133127	16417497	14749165	16377565	0.6296	0.6388	0.6867	0.6494	0.7278	0.67	0.04	6.09
55	4-Ethyl-2-methoxyphenol	33.445	13754370	14380601	14860244	13436653	14643150	0.6110	0.6070	0.6216	0.5916	0.6507	0.62	0.02	3.57
56	3a,7a-dihydro-2,2,4-trimethyl-1,3-Benzodioxole	34.170	3956426	4067573	4303573	3945973	4104418	0.1758	0.1717	0.1800	0.1737	0.1824	0.18	0.00	2.50
57	Indolizine	34.385	4718943	5065982	5164838	4702045	5251277	0.2096	0.2138	0.2160	0.2070	0.2333	0.22	0.01	4.78
58	Furfuryl ether	34.934	18498107	19140158	19859845	17825953	18992789	0.8218	0.8079	0.8307	0.7849	0.8440	0.82	0.02	2.77
59	2-Methoxy-4-vinylphenol	35.474	672461078	712625149	724370745	689390906	664131723	29.8739	30.0800	30.3000	30.3550	29.5115	30.02	0.34	1.15
60	2,3-dihydro-2-methyl-1-(tricyclo[3.3.1.1(3,7)]dec-1-(carbonyl)-1H-Indole	35.966	4452332	4840181	5020543	4777860	5137578	0.1978	0.2043	0.2100	0.2104	0.2283	0.21	0.01	5.41
61	1-Oxaspiro[4.5]decan-3-carboxylic acid, 2-oxo-4-cyano-, ethyl ester	36.389	2324930	2176534	2483664	2102427	2011186	0.1033	0.0919	0.1039	0.0926	0.0894	0.10	0.01	7.12
62	5-amino-8-Quinolinol	37.615	9865854	10460827	10392437	9419271	9722510	0.4383	0.4416	0.4347	0.4147	0.4320	0.43	0.01	2.41

63	1-(diethylboryl)-3-(trimethylsilyl)-1,4-	38.579	2097450	2222615	2360936	2169711	2312148	0.0932	0.0938	0.0988	0.0955	0.1027	0.10	0.00	4.09
64	Gentamicin A	39.484	2221141	2487699	2616912	2418995	2367335	0.0987	0.1050	0.1095	0.1065	0.1052	0.10	0.00	3.76
65	2-methoxy-6-(1-propenyl)-Phenol	39.600	8009027	7813671	8721158	9038957	8860118	0.3558	0.3298	0.3648	0.3980	0.3937	0.37	0.03	7.65
66	α -Furfuryliden- α -furylmethylamine	41.146	8609909	9152908	9509758	8674352	8991522	0.3825	0.3863	0.3978	0.3819	0.3995	0.39	0.01	2.17
67	trans-Traumatic acid	42.692	6339105	6812991	7061284	6364558	6382799	0.2816	0.2876	0.2954	0.2802	0.2836	0.29	0.01	2.13
68	1-Isopropenyl-naphthalene	43.191	5498202	6381026	6363144	5632580	5696961	0.2443	0.2693	0.2662	0.2480	0.2532	0.26	0.01	4.33
69	Tricyclo[5.2.2.1(2,6)dodecan-12-ol	44.189	2185414	2298261	2471207	2142945	2370059	0.0971	0.0970	0.1034	0.0944	0.1053	0.10	0.00	4.70
70	1-(9-borabicyclo[3.3.1]non-9yl)- Pyrroledine	44.649	8108471	8543225	9019685	8315587	8359575	0.3602	0.3606	0.3773	0.3661	0.3715	0.37	0.01	1.99
71	4-acetoxy-1-(9-brabicyclo[3.3.1]non-9- yl)oxy-2-butyne	48.449	1733853	1852604	2279434	2117565	1847845	0.0770	0.0782	0.0953	0.0932	0.0821	0.09	0.01	10.05
72	(-)-2-Hexanol decanoate	52.621	4729153	4841765	5130952	4698474	4697274	0.2101	0.2044	0.2146	0.2069	0.2087	0.21	0.00	1.83
Total			2251002110	2369097531	2390664886	2271098412	2250417324	100.0000	100.0000	100.0000	100.0000	100.0000	100.00		



ตารางพื้นที่ใต้พีกของกาแฟตัวอย่าง 8 ชนิด วิเคราะห์ตัวอย่างละ 3 ครั้ง เพื่อใช้แบ่งกลุ่มกาแฟตามแหล่งเพาะปลูกด้วย PCA (ชื่อสารระเหยเป็นข้อมูลที่เกี่ยวข้องจาก NIST Library)

No.	Compounds	RT (min)	Coffee_Arabica_Doinangkaew-Chiangrai						
			Peak area 1	%Normalization	Peak area 2	%Normalization	Peak area 3	%Normalization	Avg.%Normalization
1	3-hydroxy-2-butanone	3.132	4600282	0.51	3329193	0.31	5015550	0.45	0.42
2	1,3-diazine	3.569	2506326	0.28	2663449	0.25	2707786	0.25	0.26
3	1-methylpyrrole	3.680	0	0.00	0	0.00	0	0.00	0.00
4	pyridine	3.832	33109077	3.64	37093497	3.44	36846669	3.34	3.47
5	1-methyl-aziridine	4.278	2310366	0.25	2799972	0.26	2799193	0.25	0.26
6	dihydro-2-methyl-3(2h)-furanone	5.442	2809919	0.31	3036948	0.28	3243695	0.29	0.29
7	2-methyl-pyrimidine	6.068	18366500	2.02	20313155	1.89	20551465	1.86	1.92
8	furfural	6.438	88010401	9.67	94419272	8.76	95541380	8.66	9.03
9	2-furanmethanol	7.501	281888716	30.98	305818265	28.38	307312576	27.84	29.07
10	1-acetyloxy-2-propanone	8.251	8617372	0.95	9208471	0.85	9308517	0.84	0.88
11	furfuryl formate	10.138	4562352	0.50	5732401	0.53	5971658	0.54	0.52
12	2-furanyl-1-ethanone	10.331	23946588	2.63	23512861	2.18	26929041	2.44	2.42
13	5-methyl-2-furancarboxaldehyde	13.443	88340028	9.71	96424805	8.95	97798103	8.86	9.17
14	pyrazine, 2,3-dimethyl-	13.742	4309966	0.47	4761731	0.44	4811929	0.44	0.45
15	2-butanone, 1-(acetyloxy)-	13.966	2734131	0.30	3103947	0.29	3395574	0.31	0.30
16	phenol	14.851	2926698	0.32	3487638	0.32	3547471	0.32	0.32
17	furfuryl acetate	15.672	24461728	2.69	28759142	2.67	29733584	2.69	2.68
18	2-ethyl-5-methylpyrazine	15.811	2488144	0.27	2850148	0.26	2730780	0.25	0.26
19	2-formylpyrrole	16.391	14457132	1.59	17724207	1.65	18001261	1.63	1.62
20	4(h)-pyridine, n-acetyl-	17.087	5335394	0.59	6699118	0.62	6609536	0.60	0.60
21	3-acetyl-1h-pyrroline	19.752	10942561	1.20	13906634	1.29	14277434	1.29	1.26
22	2-ethyl-3,5-dimethyl-pyrazine	21.086	5021273	0.55	5827844	0.54	6089117	0.55	0.55

23	2-furfurylfuran	21.268	2772020	0.30	3344720	0.31	3581709	0.32	0.31
24	2-methoxy-phenol	21.503	3086607	0.34	3809741	0.35	3934986	0.36	0.35
25	4-oxepincarboxylic acid, 2,3,6,7-tetrahydro-, ethyl ester	22.671	2816482	0.31	3210629	0.30	3241563	0.29	0.30
26	4-methoxycarbonylimidazole	22.926	37950244	4.17	28724731	2.67	28712622	2.60	3.15
27	1-methyl-1h-pyrrole-2-acetonitrile	23.432	5422229	0.60	6599158	0.61	6649963	0.60	0.60
28	2-formyl-1-methylpyrrole	23.884	6589861	0.72	8842749	0.82	9136018	0.83	0.79
29	1-furfurylpyrrole	27.559	8055692	0.89	9199864	0.85	9348751	0.85	0.86
30	nerinine	27.770	10447034	1.15	9584670	0.89	11428603	1.04	1.02
31	1,2-benzenediol	28.741	0	0.00	0	0.00	0	0.00	0.00
32	5-hydroxymethylfurfural	30.444	13221925	1.45	10354937	0.96	11108143	1.01	1.14
33	4-hydroxy-1,7-naphthyridine	32.129	6545499	0.72	8126357	0.75	8338502	0.76	0.74
34	2,6-dihydroxyacetophenone	33.014	7587632	0.83	9669084	0.90	10246003	0.93	0.89
35	4-ethyl-2-methoxyphenol	33.445	6553320	0.72	6711887	0.62	6553320	0.59	0.65
36	indolizine	34.164	2615701	0.29	2932941	0.27	3026340	0.27	0.28
37	furfuryl ether	34.920	10880082	1.20	12684324	1.18	12958328	1.17	1.18
38	2-methoxy-4-vinylphenol	35.465	62960824	6.92	76752740	7.12	77476323	7.02	7.02
39	ethanedioic acid, bis(trimethylsilyl) ester*	36.973	43712097	4.80	49062168	4.55	48671584	4.41	4.59
40	5-amino-8-quinolinol	37.598	7811484	0.86	9042618	0.84	9008612	0.82	0.84
41	α -furfuryliden- α -furylmethylamine	41.139	8755268	0.96	10426033	0.97	10250626	0.93	0.95
42	pentasiloxane, dodecamethyl-*	46.476	24858268	2.73	33254865	3.09	28971741	2.63	2.81
43	hexasiloxane, tetradecamethyl-*	54.514	3289762	0.36	75217935	6.98	72699116	6.59	4.64
44	mercaptoacetic acid, bis(trimethylsilyl)-*	56.166	1001801	0.11	7032748	0.65	23741637	2.15	0.97
45	n-hexadecanoic acid	56.928	1123709	0.12	1336769	0.12	1354455	0.12	0.12
Total			909802495	100.00	1077394366	100.00	1103661264	100.00	100.00

No.	Compounds	RT (min)	Coffee_Arabica_Doichang_Chiangrai						
			Peak area 1	%Normalization	Peak area 2	%Normalization	Peak area 3	%Normalization	Avg.%Normalization
1	3-hydroxy-2-butanone	3.132	6401000	0.58	3439338	0.31	3942884	0.35	0.41
2	1,3-diazine	3.569	3549658	0.32	3185563	0.29	3645873	0.32	0.31
3	1-methylpyrrole	3.680	0	0.00	0	0.00	0	0.00	0.00
4	pyridine	3.832	36965538	3.37	20036246	1.82	37250708	3.30	2.83
5	1-methyl-aziridine	4.278	3533943	0.32	3461494	0.31	3699777	0.33	0.32
6	dihydro-2-methyl-3(2h)-furanone	5.442	9221561	0.84	4211086	0.38	4955953	0.44	0.55
7	2-methyl-pyrimidine	6.068	28672604	2.61	26123981	2.37	29294029	2.59	2.52
8	furfural	6.438	109241392	9.95	104349735	9.48	108667959	9.62	9.68
9	2-furanmethanol	7.501	326806531	29.75	365122626	33.15	329372538	29.15	30.68
10	1-acetyloxy-2-propanone	8.251	12135676	1.10	11666878	1.06	12582915	1.11	1.09
11	furfuryl formate	10.138	8349649	0.76	7923019	0.72	9177212	0.81	0.76
12	2-furanyl-1-ethanone	10.331	39592414	3.60	35119538	3.19	39710863	3.51	3.44
13	5-methyl-2-furancarboxaldehyde	13.443	119849209	10.91	115791485	10.51	121419454	10.74	10.72
14	pyrazine, 2,3-dimethyl-	13.742	6679703	0.61	6833314	0.62	6702053	0.59	0.61
15	2-butanone, 1-(acetyloxy)-	13.966	4685491	0.43	5245662	0.48	5066676	0.45	0.45
16	phenol	14.851	3967697	0.36	4863401	0.44	4377773	0.39	0.40
17	furfuryl acetate	15.672	57558086	5.24	51285116	4.66	59298641	5.25	5.05
18	2-ethyl-5-methylpyrazine	15.811	0	0.00	0	0.00	0	0.00	0.00
19	2-formylpyrrole	16.391	17492633	1.59	20935551	1.90	18423628	1.63	1.71
20	4(h)-pyridine, n-acetyl-	17.087	8039774	0.73	9390859	0.85	8646254	0.77	0.78
21	3-acetyl-1h-pyrroline	19.752	13833694	1.26	18620198	1.69	15193727	1.34	1.43
22	2-ethyl-3,5-dimethyl-pyrazine	21.086	8454046	0.77	8611886	0.78	8723396	0.77	0.77
23	2-furfurylfuran	21.268	5145967	0.47	4760646	0.43	5197044	0.46	0.45
24	2-methoxy-phenol	21.503	4406448	0.40	4774566	0.43	4626106	0.41	0.41

25	4-oxepincarboxylic acid, 2,3,6,7-tetrahydro-, ethyl ester	22.671	4093059	0.37	4504722	0.41	4071201	0.36	0.38
26	4-methoxycarbonylimidazole	22.926	40747082	3.71	26818534	2.44	28500986	2.52	2.89
27	1-methyl-1h-pyrrole-2-acetonitrile	23.432	7460166	0.68	9791694	0.89	7826442	0.69	0.75
28	2-formyl-1-methylpyrrole	23.884	7866803	0.72	10624538	0.96	9301542	0.82	0.83
29	1-furfurylpyrrole	27.559	11303177	1.03	9747616	0.89	11126520	0.98	0.97
30	nerinine	27.770	13299564	1.21	13904993	1.26	11376623	1.01	1.16
31	1,2-benzenediol	28.741	0	0.00	0	0.00	0	0.00	0.00
32	5-hydroxymethylfurfural	30.444	11781783	1.07	7942331	0.72	12168324	1.08	0.96
33	4-hydroxy-1,7-naphthyridine	32.129	9512252	0.87	10086740	0.92	8691199	0.77	0.85
34	2,6-dihydroxyacetophenone	33.014	10115887	0.92	15350178	1.39	11284203	1.00	1.10
35	4-ethyl-2-methoxyphenol	33.445	7370791	0.67	7397789	0.67	7448869	0.66	0.67
36	indolizine	34.164	2929078	0.27	3068649	0.28	3052259	0.27	0.27
37	furfuryl ether	34.920	13349915	1.22	13863346	1.26	13656372	1.21	1.23
38	2-methoxy-4-vinylphenol	35.465	75182859	6.84	87959276	7.99	77847499	6.89	7.24
39	ethanedioic acid, bis(trimethylsilyl) ester*	36.973	2652306	0.24	2210577	0.20	3558088	0.31	0.25
40	5-amino-8-quinolinol	37.598	8886048	0.81	10975370	1.00	9116221	0.81	0.87
41	α -furfuryliden- α -furylmethylamine	41.139	9684382	0.88	10935593	0.99	9716530	0.86	0.91
42	pentasiloxane, dodecamethyl-*	46.476	11231063	1.02	8273473	0.75	14955418	1.32	1.03
43	hexasiloxane, tetradecamethyl-*	54.514	10564066	0.96	7633570	0.69	16094157	1.42	1.03
44	mercaptoacetic acid, bis(trimethylsilyl)-*	56.166	5829359	0.53	4427291	0.40	30298053	2.68	1.20
45	n-hexadecanoic acid	56.928	0	0.00	0	0.00	0	0.00	0.00
Total			1098442354	100.00	1101268468	100.00	1130065969	100.00	100.00

คณะวิทยาศาสตร์
จุฬาลงกรณ์มหาวิทยาลัย

No.	Compounds	RT (min)	Coffee_Arabica_Romyen_Chiangrai						
			Peak area 1	%Normalization	Peak area 2	%Normalization	Peak area 3	%Normalization	Avg.%Normalization
1	3-hydroxy-2-butanone	3.132	1387336	0.16	2430292	0.26	2664335	0.27	0.23
2	1,3-diazine	3.569	2622053	0.29	2984634	0.32	3256794	0.32	0.31
3	1-methylpyrrole	3.680	0	0.00	0	0.00	0	0.00	0.00
4	pyridine	3.832	9619039	1.08	3309324	0.35	23951206	2.39	1.27
5	1-methyl-aziridine	4.278	1011855	0.11	2045496	0.22	1786710	0.18	0.17
6	dihydro-2-methyl-3(2h)-furanone	5.442	2273864	0.26	2679230	0.28	3021280	0.30	0.28
7	2-methyl-pyrimidine	6.068	21689032	2.44	23723002	2.51	24817635	2.48	2.47
8	furfural	6.438	82225825	9.24	82723297	8.74	85299816	8.51	8.83
9	2-furanmethanol	7.501	234732231	26.36	260079287	27.49	275724547	27.51	27.12
10	1-acetyloxy-2-propanone	8.251	5419788	0.61	7303807	0.77	7550893	0.75	0.71
11	furfuryl formate	10.138	3441679	0.39	4075223	0.43	4361649	0.44	0.42
12	2-furanyl-1-ethanone	10.331	13196380	1.48	21292387	2.25	24863289	2.48	2.07
13	5-methyl-2-furancarboxaldehyde	13.443	88085623	9.89	89575259	9.47	93399239	9.32	9.56
14	pyrazine, 2,3-dimethyl-	13.742	3351726	0.38	4097699	0.43	4423939	0.44	0.42
15	2-butanone, 1-(acetyloxy)-	13.966	2188221	0.25	2470308	0.26	2845242	0.28	0.26
16	phenol	14.851	2959745	0.33	3237186	0.34	3483882	0.35	0.34
17	furfuryl acetate	15.672	19737277	2.22	21831813	2.31	21831813	2.18	2.23
18	2-ethyl-5-methylpyrazine	15.811	2702306	0.30	2977987	0.31	2977987	0.30	0.31
19	2-formylpyrrole	16.391	14735654	1.66	18260428	1.93	20027160	2.00	1.86
20	4(h)-pyridine, n-acetyl-	17.087	5385475	0.60	6933937	0.73	6933937	0.69	0.68
21	3-acetyl-1h-pyrroline	19.752	9878969	1.11	11998167	1.27	13651708	1.36	1.25
22	2-ethyl-3,5-dimethyl-pyrazine	21.086	4938510	0.55	5410411	0.57	6342095	0.63	0.59
23	2-furfurylfuran	21.268	1665039	0.19	1715816	0.18	2300490	0.23	0.20
24	2-methoxy-phenol	21.503	3217724	0.36	3528391	0.37	3742080	0.37	0.37

25	4-oxepincarboxylic acid, 2,3,6,7-tetrahydro-, ethyl ester	22.671	2387445	0.27	2519854	0.27	2840709	0.28	0.27
26	4-methoxycarbonylimidazole	22.926	15128841	1.70	25162329	2.66	21455566	2.14	2.17
27	1-methyl-1h-pyrrole-2-acetonitrile	23.432	5128054	0.58	5948955	0.63	6660999	0.66	0.62
28	2-formyl-1-methylpyrrole	23.884	6189878	0.70	7406249	0.78	8571007	0.86	0.78
29	1-furfurylpyrrole	27.559	8591078	0.96	7976113	0.84	8759702	0.87	0.89
30	nerinine	27.770	8757903	0.98	7374215	0.78	8148166	0.81	0.86
31	1,2-benzenediol	28.741	0	0.00	0	0.00	0	0.00	0.00
32	5-hydroxymethylfurfural	30.444	6484861	0.73	8088673	0.85	8034788	0.80	0.79
33	4-hydroxy-1,7-naphthyridine	32.129	9101728	1.02	9090984	0.96	9497165	0.95	0.98
34	2,6-dihydroxyacetophenone	33.014	5523949	0.62	6081082	0.64	7235784	0.72	0.66
35	4-ethyl-2-methoxyphenol	33.445	2953853	0.33	5255358	0.56	5764420	0.58	0.49
36	indolizine	34.164	3596063	0.40	3277576	0.35	3565079	0.36	0.37
37	furfuryl ether	34.920	9193925	1.03	9123022	0.96	10190671	1.02	1.00
38	2-methoxy-4-vinylphenol	35.465	74702496	8.39	72656810	7.68	78746284	7.86	7.97
39	ethanedioic acid, bis(trimethylsilyl) ester*	36.973	101246856	11.37	102912612	10.88	99254083	9.90	10.72
40	5-amino-8-quinolinol	37.598	15026007	1.69	11863130	1.25	12580660	1.26	1.40
41	α -furfuryliden- α -furylmethylamine	41.139	10951553	1.23	10561479	1.12	11713867	1.17	1.17
42	pentasiloxane, dodecamethyl-*	46.476	55282009	6.21	57839570	6.11	48768353	4.87	5.73
43	hexasiloxane, tetradecamethyl-*	54.514	6345588	0.71	4216158	0.45	5684898	0.57	0.58
44	mercaptoacetic acid, bis(trimethylsilyl)-*	56.166	1018893	0.11	354942	0.04	1107748	0.11	0.09
45	n-hexadecanoic acid	56.928	6258644	0.70	3844324	0.41	4552397	0.45	0.52
Total			890334975	100.00	946236816	100.00	1002390072	100.00	100.00

คณะวิทยาศาสตร์
จุฬาลงกรณ์มหาวิทยาลัย

No.	Compounds	RT (min)	Coffee_Arabica_Pahea_Chiangrai						
			Peak area 1	%Normalization	Peak area 2	%Normalization	Peak area 3	%Normalization	Avg.%Normalization
1	3-hydroxy-2-butanone	3.132	2153319	0.23	3129911	0.31	3451587	0.32	0.28
2	1,3-diazine	3.569	3153571	0.33	3420124	0.34	3544794	0.33	0.33
3	1-methylpyrrole	3.680	0	0.00	0	0.00	0	0.00	0.00
4	pyridine	3.832	15696204	1.65	45729036	4.50	48737518	4.52	3.56
5	1-methyl-aziridine	4.278	1378607	0.15	2782916	0.27	2805466	0.26	0.23
6	dihydro-2-methyl-3(2h)-furanone	5.442	2849865	0.30	3333400	0.33	2522611	0.23	0.29
7	2-methyl-pyrimidine	6.068	25606136	2.70	26241296	2.58	27832118	2.58	2.62
8	furfural	6.438	81214657	8.55	76665014	7.54	78039151	7.24	7.78
9	2-furanmethanol	7.501	258263764	27.20	288001379	28.31	307289226	28.53	28.01
10	1-acetyloxy-2-propanone	8.251	6514100	0.69	8791054	0.86	9255643	0.86	0.80
11	furfuryl formate	10.138	4381183	0.46	3956061	0.39	4234119	0.39	0.41
12	2-furanyl-1-ethanone	10.331	25684619	2.70	27260086	2.68	25319728	2.35	2.58
13	5-methyl-2-furancarboxaldehyde	13.443	88067291	9.27	79717613	7.84	83216709	7.73	8.28
14	pyrazine, 2,3-dimethyl-	13.742	4273860	0.45	4183842	0.41	4589278	0.43	0.43
15	2-butanone, 1-(acetyloxy)-	13.966	2702964	0.28	2549983	0.25	2897544	0.27	0.27
16	phenol	14.851	3484273	0.37	3456147	0.34	3631979	0.34	0.35
17	furfuryl acetate	15.672	20821475	2.19	19105545	1.88	19050530	1.77	1.95
18	2-ethyl-5-methylpyrazine	15.811	0	0.00	0	0.00	0	0.00	0.00
19	2-formylpyrrole	16.391	16156242	1.70	18437063	1.81	21375465	1.98	1.83
20	4(h)-pyridine, n-acetyl-	17.087	7111965	0.75	6772327	0.67	7301919	0.68	0.70
21	3-acetyl-1h-pyrroline	19.752	12304947	1.30	15060860	1.48	16999457	1.58	1.45
22	2-ethyl-3,5-dimethyl-pyrazine	21.086	7730770	0.81	7380412	0.73	7661031	0.71	0.75
23	2-furfurylfuran	21.268	2051493	0.22	2845003	0.28	3067958	0.28	0.26
24	2-methoxy-phenol	21.503	4143790	0.44	6173963	0.61	4347488	0.40	0.48

25	4-oxepincarboxylic acid, 2,3,6,7-tetrahydro-, ethyl ester	22.671	3080687	0.32	3004474	0.30	3284713	0.30	0.31
26	4-methoxycarbonylimidazole	22.926	20785598	2.19	50878217	5.00	45745432	4.25	3.81
27	1-methyl-1h-pyrrole-2-acetonitrile	23.432	6371595	0.67	7406499	0.73	8448093	0.78	0.73
28	2-formyl-1-methylpyrrole	23.884	7273301	0.77	8978113	0.88	10502421	0.97	0.87
29	1-furfurylpyrrole	27.559	8854703	0.93	7532081	0.74	8019481	0.74	0.81
30	nerinine	27.770	7997546	0.84	7777925	0.76	8067679	0.75	0.79
31	1,2-benzenediol	28.741	0	0.00	0	0.00	0	0.00	0.00
32	5-hydroxymethylfurfural	30.444	7049842	0.74	12516559	1.23	10739078	1.00	0.99
33	4-hydroxy-1,7-naphthyridine	32.129	9350212	0.98	7483696	0.74	8878628	0.82	0.85
34	2,6-dihydroxyacetophenone	33.014	6517947	0.69	8323009	0.82	9652380	0.90	0.80
35	4-ethyl-2-methoxyphenol	33.445	7202746	0.76	7594888	0.75	7689727	0.71	0.74
36	indolizine	34.164	3639793	0.38	3543000	0.35	3834523	0.36	0.36
37	furfuryl ether	34.920	10852781	1.14	10196616	1.00	11482240	1.07	1.07
38	2-methoxy-4-vinylphenol	35.465	80656215	8.49	72781192	7.15	82548737	7.66	7.77
39	ethanedioic acid, bis(trimethylsilyl) ester*	36.973	80083629	8.43	62942734	6.19	73263907	6.80	7.14
40	5-amino-8-quinolinol	37.598	11884542	1.25	10204926	1.00	11657803	1.08	1.11
41	α -furfuryliden- α -furylmethylamine	41.139	10551339	1.11	9445946	0.93	10767078	1.00	1.01
42	pentasiloxane, dodecamethyl-*	46.476	61391797	6.46	54483021	5.36	64335088	5.97	5.93
43	hexasiloxane, tetradecamethyl-*	54.514	5185738	0.55	9305056	0.91	6214440	0.58	0.68
44	mercaptoacetic acid, bis(trimethylsilyl)-*	56.166	481175	0.05	4185517	0.41	782988	0.07	0.18
45	n-hexadecanoic acid	56.928	4679385	0.49	3637915	0.36	4098234	0.38	0.41
Total			949635666	100.00	1017214419	100.00	1077183989	100.00	100.00

คณะวิทยาศาสตร์
จุฬาลงกรณ์มหาวิทยาลัย

No.	Compounds	RT (min)	Coffee_Arabica_Chiangmai_1						
			Peak area 1	%Normalization	Peak area 2	%Normalization	Peak area 3	%Normalization	Avg.%Normalization
1	3-hydroxy-2-butanone	3.132	2591370	0.25	3469147	0.31	3452455	0.31	0.29
2	1,3-diazine	3.569	5676212	0.56	5830941	0.52	5372416	0.48	0.52
3	1-methylpyrrole	3.680	2572407	0.25	2626419	0.23	2293565	0.21	0.23
4	pyridine	3.832	66314207	6.51	87452819	7.80	80662878	7.25	7.19
5	1-methyl-aziridine	4.278	569257	0.06	2026479	0.18	1998200	0.18	0.14
6	dihydro-2-methyl-3(2h)-furanone	5.442	8310312	0.82	7701740	0.69	6331600	0.57	0.69
7	2-methyl-pyrimidine	6.068	40347595	3.96	39001556	3.48	35683015	3.21	3.55
8	furfural	6.438	46117173	4.53	40766815	3.64	40686822	3.66	3.94
9	2-furanmethanol	7.501	277184773	27.20	320734510	28.62	317935008	28.57	28.13
10	1-acetyloxy-2-propanone	8.251	12489727	1.23	15323809	1.37	14905227	1.34	1.31
11	furfuryl formate	10.138	10926906	1.07	10305753	0.92	9850980	0.89	0.96
12	2-furanyl-1-ethanone	10.331	51814386	5.09	52744678	4.71	49618010	4.46	4.75
13	5-methyl-2-furancarboxaldehyde	13.443	82420602	8.09	79465723	7.09	78413747	7.05	7.41
14	pyrazine, 2,3-dimethyl-	13.742	7334271	0.72	7604196	0.68	7496568	0.67	0.69
15	2-butanone, 1-(acetyloxy)-	13.966	5427525	0.53	5432314	0.48	5160978	0.46	0.49
16	phenol	14.851	6996663	0.69	7959226	0.71	8176547	0.73	0.71
17	furfuryl acetate	15.672	104059527	10.21	93247023	8.32	90494635	8.13	8.89
18	2-ethyl-5-methylpyrazine	15.811	0	0.00	0	0.00	0	0.00	0.00
19	2-formylpyrrole	16.391	13982120	1.37	17191150	1.53	17136238	1.54	1.48
20	4(h)-pyridine, n-acetyl-	17.087	8586803	0.84	9254455	0.83	9303112	0.84	0.83
21	3-acetyl-1h-pyrroline	19.752	12686135	1.25	17504675	1.56	18035923	1.62	1.48
22	2-ethyl-3,5-dimethyl-pyrazine	21.086	10545611	1.03	9559436	0.85	9778143	0.88	0.92
23	2-furfurylfuran	21.268	9580763	0.94	9698114	0.87	9835344	0.88	0.90
24	2-methoxy-phenol	21.503	14211507	1.39	14375353	1.28	14291626	1.28	1.32

25	4-oxepincarboxylic acid, 2,3,6,7-tetrahydro-, ethyl ester	22.671	2610045	0.26	5730987	0.51	5572057	0.50	0.42
26	4-methoxycarbonylimidazole	22.926	24745744	2.43	52832800	4.71	63350811	5.69	4.28
27	1-methyl-1h-pyrrole-2-acetonitrile	23.432	6157380	0.60	8117361	0.72	8297630	0.75	0.69
28	2-formyl-1-methylpyrrole	23.884	5561174	0.55	7843722	0.70	8146306	0.73	0.66
29	1-furfurylpyrrole	27.559	21389231	2.10	19015635	1.70	19189989	1.72	1.84
30	nerinine	27.770	9104516	0.89	9612134	0.86	10317784	0.93	0.89
31	1,2-benzenediol	28.741	0	0.00	0	0.00	0	0.00	0.00
32	5-hydroxymethylfurfural	30.444	2796818	0.27	3597518	0.32	4024600	0.36	0.32
33	4-hydroxy-1,7-naphthyridine	32.129	8818732	0.87	8857882	0.79	8775880	0.79	0.81
34	2,6-dihydroxyacetophenone	33.014	7841748	0.77	11747074	1.05	13104341	1.18	1.00
35	4-ethyl-2-methoxyphenol	33.445	14456834	1.42	15381913	1.37	15819224	1.42	1.40
36	indolizine	34.164	4010065	0.39	4345582	0.39	4487846	0.40	0.39
37	furfuryl ether	34.920	23505083	2.31	22288198	1.99	22820500	2.05	2.12
38	2-methoxy-4-vinylphenol	35.465	56517658	5.55	61155274	5.46	62641995	5.63	5.54
39	ethanedioic acid, bis(trimethylsilyl) ester*	36.973	0	0.00	0	0.00	0	0.00	0.00
40	5-amino-8-quinolinol	37.598	8539082	0.84	8943847	0.80	8736506	0.78	0.81
41	α -furfuryliden- α -furylmethylamine	41.139	8343550	0.82	8975533	0.80	9082344	0.82	0.81
42	pentasiloxane, dodecamethyl-*	46.476	3374843	0.33	3223315	0.29	2373096	0.21	0.28
43	hexasiloxane, tetradecamethyl-*	54.514	3140705	0.31	1846342	0.16	1279597	0.11	0.20
44	mercaptoacetic acid, bis(trimethylsilyl)-*	56.166	971725	0.10	787443	0.07	344681	0.03	0.07
45	n-hexadecanoic acid	56.928	6333770	0.62	7255151	0.65	7658041	0.69	0.65
Total			1018964555	100.00	1120834042	100.00	1112936265	100.00	100.00

คณะวิทยาศาสตร์
จุฬาลงกรณ์มหาวิทยาลัย

No.	Compounds	RT (min)	Coffee_Arabica_Chiangmai_2						
			Peak area 1	%Normalization	Peak area 2	%Normalization	Peak area 3	%Normalization	Avg.%Normalization
1	3-hydroxy-2-butanone	3.132	4181642	0.33	4277255	0.32	4340776	0.32	0.32
2	1,3-diazine	3.569	6211037	0.48	6716065	0.50	6528048	0.48	0.49
3	1-methylpyrrole	3.680	2260049	0.18	2508042	0.19	2213404	0.16	0.18
4	pyridine	3.832	64331223	5.01	70821984	5.30	70847418	5.26	5.19
5	1-methyl-aziridine	4.278	1760925	0.14	1856944	0.14	1730553	0.13	0.13
6	dihydro-2-methyl-3(2h)-furanone	5.442	4995719	0.39	6803715	0.51	7361730	0.55	0.48
7	2-methyl-pyrimidine	6.068	42423908	3.30	46177557	3.45	45368800	3.37	3.37
8	furfural	6.438	83527247	6.50	84542499	6.32	85730676	6.36	6.39
9	2-furanmethanol	7.501	400647903	31.19	411491187	30.77	412930209	30.63	30.86
10	1-acetyloxy-2-propanone	8.251	15468399	1.20	16809163	1.26	16326553	1.21	1.22
11	furfuryl formate	10.138	13241811	1.03	14248093	1.07	14427248	1.07	1.06
12	2-furanyl-1-ethanone	10.331	44510706	3.47	50788520	3.80	47680297	3.54	3.60
13	5-methyl-2-furancarboxaldehyde	13.443	121946386	9.49	125373017	9.37	126348759	9.37	9.41
14	pyrazine, 2,3-dimethyl-	13.742	6890262	0.54	6735916	0.50	7470115	0.55	0.53
15	2-butanone, 1-(acetyloxy)-	13.966	5346643	0.42	5997878	0.45	5679032	0.42	0.43
16	phenol	14.851	7749814	0.60	8231632	0.62	8306285	0.62	0.61
17	furfuryl acetate	15.672	60806974	4.73	65543496	4.90	64879475	4.81	4.82
18	2-ethyl-5-methylpyrazine	15.811	7181316	0.56	6559180	0.49	6447066	0.48	0.51
19	2-formylpyrrole	16.391	19031498	1.48	20102117	1.50	20302157	1.51	1.50
20	4(h)-pyridine, n-acetyl-	17.087	11829410	0.92	13006614	0.97	12663930	0.94	0.94
21	3-acetyl-1h-pyrroline	19.752	16577028	1.29	17748685	1.33	18188621	1.35	1.32
22	2-ethyl-3,5-dimethyl-pyrazine	21.086	8735167	0.68	9935267	0.74	9577416	0.71	0.71
23	2-furfurylfuran	21.268	6709607	0.52	7432686	0.56	7418451	0.55	0.54
24	2-methoxy-phenol	21.503	10888420	0.85	11613361	0.87	11681111	0.87	0.86

25	4-oxepincarboxylic acid, 2,3,6,7-tetrahydro-, ethyl ester	22.671	4497444	0.35	4718192	0.35	4605624	0.34	0.35
26	4-methoxycarbonylimidazole	22.926	49133314	3.83	49590867	3.71	53431520	3.96	3.83
27	1-methyl-1h-pyrrole-2-acetonitrile	23.432	7999561	0.62	8496593	0.64	8624224	0.64	0.63
28	2-formyl-1-methylpyrrole	23.884	9791659	0.76	10181544	0.76	10349974	0.77	0.76
29	1-furfurylpyrrole	27.559	14725208	1.15	15483790	1.16	15726823	1.17	1.16
30	nerinine	27.770	13985465	1.09	14107441	1.05	14585779	1.08	1.08
31	1,2-benzenediol	28.741	0	0.00	0	0.00	0	0.00	0.00
32	5-hydroxymethylfurfural	30.444	8843458	0.69	8754440	0.65	9595819	0.71	0.68
33	4-hydroxy-1,7-naphthyridine	32.129	6497077	0.51	6778972	0.51	6724492	0.50	0.50
34	2,6-dihydroxyacetophenone	33.014	14173302	1.10	15133127	1.13	16417497	1.22	1.15
35	4-ethyl-2-methoxyphenol	33.445	13754370	1.07	14380601	1.08	14860244	1.10	1.08
36	indolizine	34.164	3956426	0.31	4067573	0.30	4303573	0.32	0.31
37	furfuryl ether	34.920	18498107	1.44	19140158	1.43	19859845	1.47	1.45
38	2-methoxy-4-vinylphenol	35.465	106490121	8.29	110007490	8.23	113717836	8.44	8.32
39	ethanedioic acid, bis(trimethylsilyl) ester*	36.973	2352214	0.18	1024224	0.08	1297591	0.10	0.12
40	5-amino-8-quinolinol	37.598	9865854	0.77	10460827	0.78	10392437	0.77	0.77
41	α -furfuryliden- α -furylmethylamine	41.139	8609909	0.67	9152908	0.68	9509758	0.71	0.69
42	pentasiloxane, dodecamethyl-*	46.476	7437561	0.58	3034151	0.23	3503969	0.26	0.36
43	hexasiloxane, tetradecamethyl-*	54.514	4989231	0.39	4838575	0.36	3856960	0.29	0.35
44	mercaptoacetic acid, bis(trimethylsilyl)-*	56.166	1414106	0.11	3231152	0.24	1285079	0.10	0.15
45	n-hexadecanoic acid	56.928	10160597	0.79	9545400	0.71	10870717	0.81	0.77
Total		1284428078		100.00	1337448898	100.00	1347967891	100.00	100.00

คณะวิทยาศาสตร์
จุฬาลงกรณ์มหาวิทยาลัย

No.	Compounds	RT (min)	Coffee_Robusta_Krabi						
			Peak area 1	%Normalization	Peak area 2	%Normalization	Peak area 3	%Normalization	Avg.%Normalization
1	3-hydroxy-2-butanone	3.132	2732301	0.20	2898790	0.20	2746051	0.20	0.20
2	1,3-diazine	3.569	10312296	0.74	10616796	0.75	10361650	0.74	0.74
3	1-methylpyrrole	3.680	3664442	0.26	4151963	0.29	3784141	0.27	0.28
4	pyridine	3.832	102587139	7.36	110053228	7.77	105018545	7.53	7.55
5	1-methyl-aziridine	4.278	0	0.00	0	0.00	0	0.00	0.00
6	dihydro-2-methyl-3(2h)-furanone	5.442	2052555	0.15	2480344	0.18	2774663	0.20	0.17
7	2-methyl-pyrimidine	6.068	44998839	3.23	47037822	3.32	45093018	3.23	3.26
8	furfural	6.438	31183119	2.24	31915905	2.25	31448394	2.25	2.25
9	2-furanmethanol	7.501	350819096	25.18	357782171	25.25	359025534	25.73	25.39
10	1-acetyloxy-2-propanone	8.251	10848341	0.78	11510829	0.81	11286837	0.81	0.80
11	furfuryl formate	10.138	9367957	0.67	9891042	0.70	9453302	0.68	0.68
12	2-furanyl-1-ethanone	10.331	43093561	3.09	46187274	3.26	45039200	3.23	3.19
13	5-methyl-2-furancarboxaldehyde	13.443	40228776	2.89	42043124	2.97	41527400	2.98	2.94
14	pyrazine, 2,3-dimethyl-	13.742	3812842	0.27	4211870	0.30	4063249	0.29	0.29
15	2-butanone, 1-(acetyloxy)-	13.966	2561349	0.18	2720524	0.19	2780364	0.20	0.19
16	phenol	14.851	16330655	1.17	16519843	1.17	16571704	1.19	1.18
17	furfuryl acetate	15.672	51358482	3.69	52227465	3.69	50769533	3.64	3.67
18	2-ethyl-5-methylpyrazine	15.811	0	0.00	0	0.00	0	0.00	0.00
19	2-formylpyrrole	16.391	14704219	1.06	14782823	1.04	14597327	1.05	1.05
20	4(h)-pyridine, n-acetyl-	17.087	12882886	0.92	13442261	0.95	13323240	0.95	0.94
21	3-acetyl-1h-pyrroline	19.752	17558858	1.26	18030294	1.27	18041320	1.29	1.28
22	2-ethyl-3,5-dimethyl-pyrazine	21.086	12377850	0.89	13500437	0.95	13028843	0.93	0.92
23	2-furfurylfuran	21.268	8975867	0.64	9874727	0.70	9658063	0.69	0.68
24	2-methoxy-phenol	21.503	41383250	2.97	42686991	3.01	43054206	3.09	3.02

25	4-oxepincarboxylic acid, 2,3,6,7-tetrahydro-, ethyl ester	22.671	6606811	0.47	6982830	0.49	6984373	0.50	0.49
26	4-methoxycarbonylimidazole	22.926	54270484	3.90	47689129	3.37	48637037	3.49	3.58
27	1-methyl-1h-pyrrole-2-acetonitrile	23.432	9779470	0.70	10234650	0.72	10446187	0.75	0.72
28	2-formyl-1-methylpyrrole	23.884	7720396	0.55	7648149	0.54	7881615	0.56	0.55
29	1-furfurylpyrrole	27.559	16734920	1.20	17719530	1.25	17489717	1.25	1.24
30	nerinine	27.770	5241080	0.38	4888325	0.34	5134328	0.37	0.36
31	1,2-benzenediol	28.741	32177276	2.31	24837814	1.75	24656464	1.77	1.94
32	5-hydroxymethylfurfural	30.444	3208232	0.23	2895308	0.20	2819615	0.20	0.21
33	4-hydroxy-1,7-naphthyridine	32.129	14652622	1.05	14805949	1.04	14868392	1.07	1.05
34	2,6-dihydroxyacetophenone	33.014	10858624	0.78	10582086	0.75	10656890	0.76	0.76
35	4-ethyl-2-methoxyphenol	33.445	74945362	5.38	76379006	5.39	76154413	5.46	5.41
36	indolizine	34.164	9800014	0.70	9822640	0.69	9860263	0.71	0.70
37	furfuryl ether	34.920	23744952	1.70	24638538	1.74	24188817	1.73	1.73
38	2-methoxy-4-vinylphenol	35.465	230249191	16.53	235344265	16.61	230733323	16.54	16.56
39	ethanedioic acid, bis(trimethylsilyl) ester*	36.973	6658052	0.48	6816105	0.48	5036641	0.36	0.44
40	5-amino-8-quinolinol	37.598	23178574	1.66	23732197	1.67	16665035	1.19	1.51
41	α -furfuryliden- α -furylmethylamine	41.139	7842856	0.56	7940853	0.56	7779711	0.56	0.56
42	pentasiloxane, dodecamethyl-*	46.476	6478291	0.46	5845853	0.41	6805399	0.49	0.46
43	hexasiloxane, tetradecamethyl-*	54.514	3971109	0.29	4560592	0.32	5447829	0.39	0.33
44	mercaptoacetic acid, bis(trimethylsilyl)-*	56.166	2711854	0.19	2129926	0.15	2433482	0.17	0.17
45	n-hexadecanoic acid	56.928	8656217	0.62	6861062	0.48	7259444	0.52	0.54
Total			1393321067	100.00	1416921330	100.00	1395385559	100.00	100.00

คณะวิทยาศาสตร์
จุฬาลงกรณ์มหาวิทยาลัย

No.	Compounds	RT (min)	Coffee_Robusta_Chumphon						
			Peak area 1	%Normalization	Peak area 2	%Normalization	Peak area 3	%Normalization	Avg.%Normalization
1	3-hydroxy-2-butanone	3.132	0	0.00	0	0.00	0	0.00	0.00
2	1,3-diazine	3.569	3470800	0.48	4506131	0.50	4045143	0.45	0.48
3	1-methylpyrrole	3.680	0	0.00	0	0.00	0	0.00	0.00
4	pyridine	3.832	96763698	13.40	195165049	21.59	178445823	20.05	18.35
5	1-methyl-aziridine	4.278	0	0.00	0	0.00	0	0.00	0.00
6	dihydro-2-methyl-3(2h)-furanone	5.442	0	0.00	0	0.00	0	0.00	0.00
7	2-methyl-pyrimidine	6.068	12607041	1.75	16505884	1.83	15770889	1.77	1.78
8	furfural	6.438	17819166	2.47	18103802	2.00	17266218	1.94	2.14
9	2-furanmethanol	7.501	34422549	4.77	58333715	6.45	58101339	6.53	5.92
10	1-acetyloxy-2-propanone	8.251	0	0.00	0	0.00	0	0.00	0.00
11	furfuryl formate	10.138	0	0.00	0	0.00	0	0.00	0.00
12	2-furanyl-1-ethanone	10.331	9868364	1.37	22617032	2.50	20847473	2.34	2.07
13	5-methyl-2-furancarboxaldehyde	13.443	7004611	0.97	7004611	0.78	7263294	0.82	0.85
14	pyrazine, 2,3-dimethyl-	13.742	0	0.00	0	0.00	0	0.00	0.00
15	2-butanone, 1-(acetyloxy)-	13.966	0	0.00	0	0.00	0	0.00	0.00
16	phenol	14.851	18154991	2.51	23581479	2.61	23316153	2.62	2.58
17	furfuryl acetate	15.672	6393383	0.89	6844700	0.76	7045469	0.79	0.81
18	2-ethyl-5-methylpyrazine	15.811	0	0.00	0	0.00	0	0.00	0.00
19	2-formylpyrrole	16.391	3414227	0.47	5577640	0.62	5717758	0.64	0.58
20	4(h)-pyridine, n-acetyl-	17.087	915511	0.13	2024346	0.22	1841964	0.21	0.19
21	3-acetyl-1h-pyrroline	19.752	9713644	1.35	17674014	1.96	17803986	2.00	1.77
22	2-ethyl-3,5-dimethyl-pyrazine	21.086	0	0.00	0	0.00	0	0.00	0.00
23	2-furfurylfuran	21.268	0	0.00	0	0.00	0	0.00	0.00
24	2-methoxy-phenol	21.503	33958072	4.70	39994969	4.43	40873648	4.59	4.57

25	4-oxepincarboxylic acid, 2,3,6,7-tetrahydro-, ethyl ester	22.671	2390365	0.33	3849026	0.43	3977055	0.45	0.40
26	4-methoxycarbonylimidazole	22.926	14080733	1.95	44509131	4.92	41058519	4.61	3.83
27	1-methyl-1h-pyrrole-2-acetonitrile	23.432	5247252	0.73	6195135	0.69	6765354	0.76	0.72
28	2-formyl-1-methylpyrrole	23.884	0	0.00	0	0.00	0	0.00	0.00
29	1-furfurylpyrrole	27.559	4086824	0.57	3214061	0.36	3306314	0.37	0.43
30	nerinine	27.770	0	0.00	0	0.00	0	0.00	0.00
31	1,2-benzenediol	28.741	7256567	1.01	16928381	1.87	15331935	1.72	1.53
32	5-hydroxymethylfurfural	30.444	0	0.00	0	0.00	0	0.00	0.00
33	4-hydroxy-1,7-naphthyridine	32.129	6735701	0.93	7488723	0.83	7637052	0.86	0.87
34	2,6-dihydroxyacetophenone	33.014	2193288	0.30	3591611	0.40	3619177	0.41	0.37
35	4-ethyl-2-methoxyphenol	33.445	78902993	10.93	75772586	8.38	79225100	8.90	9.40
36	indolizine	34.164	6612922	0.92	6609065	0.73	6890467	0.77	0.81
37	furfuryl ether	34.920	16259894	2.25	13338242	1.48	14210630	1.60	1.77
38	2-methoxy-4-vinylphenol	35.465	18627379	2.58	18627379	2.06	21417233	2.41	2.35
39	ethanedioic acid, bis(trimethylsilyl) ester*	36.973	30453455	4.22	22976973	2.54	23681265	2.66	3.14
40	5-amino-8-quinolinol	37.598	8073543	1.12	8491956	0.94	8534132	0.96	1.01
41	α -furfuryliden- α -furylmethylamine	41.139	4669919	0.65	4317118	0.48	4490340	0.50	0.54
42	pentasiloxane, dodecamethyl-*	46.476	207869961	28.79	186514594	20.64	189647934	21.30	23.58
43	hexasiloxane, tetradecamethyl-*	54.514	27839845	3.86	32208446	3.56	30110768	3.38	3.60
44	mercaptoacetic acid, bis(trimethylsilyl)-*	56.166	1819275	0.25	2665605	0.29	2398197	0.27	0.27
45	n-hexadecanoic acid	56.928	24363582	3.37	28561861	3.16	29557383	3.32	3.29
Total			721989555	100.00	903793265	100.00	890198012	100.00	100.00

คณะวิทยาศาสตร์
จุฬาลงกรณ์มหาวิทยาลัย

ประวัติผู้วิจัย

นายชวิน จุลาเกตุโพธิชัย เกิดวันที่ 23 สิงหาคม พ.ศ. 2535 ณ กรุงเทพมหานคร สำเร็จการศึกษามัธยมศึกษาตอนปลาย สายสามัญ (แผนกวิทยาศาสตร์-คณิตศาสตร์) จากโรงเรียนมัธยมประชานิเวศน์ กรุงเทพมหานคร เมื่อปีการศึกษา 2553 เข้าศึกษาต่อในระดับปริญญาตรี ภาควิชาเคมี คณะวิทยาศาสตร์ จุฬาลงกรณ์มหาวิทยาลัย เมื่อปีการศึกษา 2554 ที่อยู่ปัจจุบัน 818 หมู่ 2 ตำบลบางเขน อำเภอเมือง จังหวัดนนทบุรี 11000

นางสาวภิญอรดา นุ่นขาว เกิดวันที่ 13 กรกฎาคม พ.ศ. 2536 ณ จังหวัดนครราชสีมา สำเร็จการศึกษามัธยมศึกษาตอนปลาย สายสามัญ (แผนกวิทยาศาสตร์-คณิตศาสตร์) จากโรงเรียนมารีย์วิทยา จังหวัดนครราชสีมา เมื่อปีการศึกษา 2553 เข้าศึกษาต่อในระดับปริญญาตรี ภาควิชาเคมี คณะวิทยาศาสตร์ จุฬาลงกรณ์มหาวิทยาลัย เมื่อปีการศึกษา 2554 ที่อยู่ 174 ซอย 8 ถนนพิบูลละเอยัด ตำบลในเมือง อำเภอเมือง จังหวัดนครราชสีมา

