

材料分野における Agilent GC/MS 最新アプリケーション事例

材料分野において、高機能化や安全性の確認を目的とした分析の重要性が高まっています。アジレントのGC/MSシステムは様々な分析目的に対応するため、各種ソリューションを提供しています。ここでは、代表的な分析である差異解析と構造解析の最新アプリケーション例をご紹介します。

差異解析

熱分解 GC/MS と多変量解析によるポリスチレンの差異解析

3種類のポリマー試料を熱分解 GC/MS により測定し、得られたパイログラムを多変量解析ソフトウェア **Mass Profiler Professional (MPP)** により解析しました。各試料に固有の微小なピークが抽出され、各試料間の差異が明確になりました。

GC-MS-202001HO-001

Keywords: 熱分解GC/MS、クラスター解析、劣化解析、ロット間差、MPP

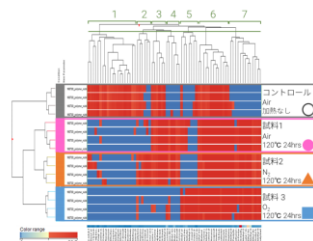


SPME-GC/MSと多変量解析による劣化した天然ゴムの臭気成分の差異解析

臭気化合物に特化して収載した「**GC/MS 用異臭分析データベース**」を用い、化成品中の化合物の絞り込みの検討を行いました。差異解析にはMPPを用いました。

GC-MS-201810KG-001

Keywords: SPME、異臭、MPP、主成分分析、階層型クラスター分析、統計解析



キャピラリー・フロー・テクノロジー (Capillary Flow Technology; CFT) を用いた塗料サンプルの成分差異解析

アジレント独自の**CFT**を用いて、選択型検出器NPD, FPDおよびMSDとの**3分岐同時検出**を行いました。また**未知サンプルの解析ソフトウェア**により**デコンボリューション**されたピークをライブラリ検索し、さらに**AromaOffice**によりにおい成分に絞った解析を行いました。

GC-MS-202102AA-001

Keywords: デコンボリューション、SPME、異臭、AromaOffice、差異解析

*AromaOfficeは、西川計測（株）またはゲステル（株）で取り扱っています。



サーマルセパレーションプローブ GC/TCD によるプリンターインクの異同識別

サーマルセパレーションプローブ (TSP) による簡便な直接分析を行いました。類似性を判別する**MatchCompare ソフトウェア**により容易な異同識別が可能でした。GCには、省スペースで100V電源で使用できる**Intuvo 9000 GC**を使用しました。

GC-201910NK-001

Keywords: TSP、Intuvo 9000 GC、TCD、異同識別、CO2排出量削減



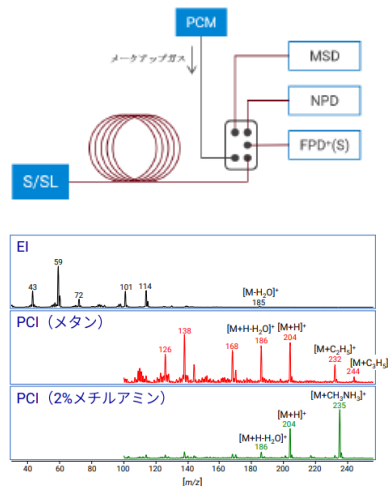
未知化合物の構造解析

Py-GC/MS における未知熱分解生成物の複数検出器による同時検出と各種イオン化法および MassWorks™ソフトウェアを組み合わせた構造推定

ライブラリで定性が困難な未知の熱分解生成物に関して構造推定を行いました。MSD, FPD, NPD検出器の3分岐同時検出により、リンおよび硫黄元素の有無を確認しました。また、**2%メチルアミン98%メタン混合ガス**を用いた正化学イオン化法(PCI)により分子量を推定しました。この情報を併せて**MassWorks™ソフトウェア**により元素組成を推定し、元のポリマーの構造を考慮して熱分解生成物の構造推定を行いました。

GC-MS-201810HO-001

Keywords: NPD、FPD、メチルアミン、PCI、MassWorks

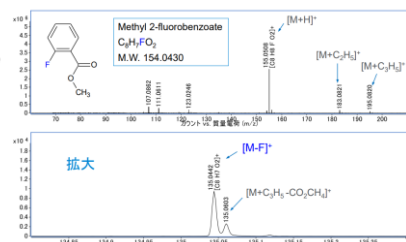


GC/MS による含フッ素未知ピークの判別方法

ライブラリにヒットしない未知ピークの分子組成を決定する場合、フッ素は最も厄介な元素のひとつです。**7250 四重極飛行時間型 (Q-TOF) GC/MS**により、未知ピークがフッ素を含有するか否かをマススペクトルから判定する方法について検討しました。

GC-MS-202102OG-001

Keywords: フッ素、分子組成、CI、マススペクトル、TOF・Q-TOF

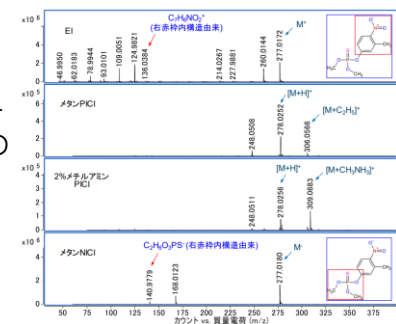


GC/Q-TOF による殺虫剤中の未知不純物の定性

7250 GC/Q-TOFにより、ライブラリに登録のない未知化合物の構造を推定しました。2%メチルアミン98%メタン混合ガスを反応ガスとして用いた正化学イオン化法(PCI)により分子組成を決定しました。また**MS/MS**により部分構造を推定し、そこから比較的容易に全体の構造を推定することができました。

GC-MS-202002OG-001

Keywords: GC/MS、GC/Q-TOF、CI、MS/MS、構造推定



Agilent 7250 GC/Q-TOFによる網羅的な構造推定における選択型検出器の効果について

7250 GC/Q-TOF とNPDを組み合わせて組成推定を行うと、TOF MS のみで推定するよりも効率的に組成推定ができました。対象にした 68 化合物において、TOF MS のみでは 825 の組成候補が上がったのに対し、NPD を組み合わせると候補数を 401 まで減少させることができました。

GC-MS-201910KS-001

Keywords: GC/Q-TOF、選択型検出器、NPD、組成推定、構造推定、MS/MS



詳細は弊社ウェブサイト「材料分野に適したGC/MS」をご覧ください。
<https://www.chem-agilent.com/contents.php?id=1005462>



アジレント・テクノロジー株式会社
〒192-8510 東京都八王子市高倉町9-1
カスタマコンタクトセンター
フリーダイヤル 0120-477-111
www.agilent.com/chem/jp

 **Agilent**
Trusted Answers