



## AromaOffice<sup>2</sup>Dを用いた2種類のクロス検索による 香気成分の分析

### キーワード

Retention Index(RI)、マススペクトルライブラリー検索、AromaSearch、Unknowns Analysis、デコンボリューション、クロス検索、2次元GC

### はじめに

GC-MSによる香気成分の分析においてマススペクトルのライブラリー検索は未知成分の同定に大変有効で欠かせない手法です。しかし、ライブラリー検索結果の一致度が低い、あるいは感度不足により良好なマススペクトルが得られないため、同定が困難となるケースが多々あります。このような場合、対象成分の保持時間から求めた保持指標RI (Retention Index) を用いて、その文献値や、データベースの値と照合して仮同定する手法が有効です。ここでは、香気成分に特化したRIデータベースソフトウェアAromaOffice<sup>2</sup>Dを用いた2種類のクロス検索機能による香気分析の応用例についてご紹介します。

## 1. AromaOffice<sup>2</sup>D 香気成分データベース

AromaOffice<sup>2</sup>D Ver. 7は香気成分に特化したデータベースであり、化合物名、Odor Character (香気特性)、保持指標(RI)、分析条件、出典文献などの情報について116,119件が登録されています。キーワードから化合物名や文献情報など各種検索を行う機能に加えて、GC-MS分析における香気成分の同定確度を向上するために、2種類のクロス検索機能があります。

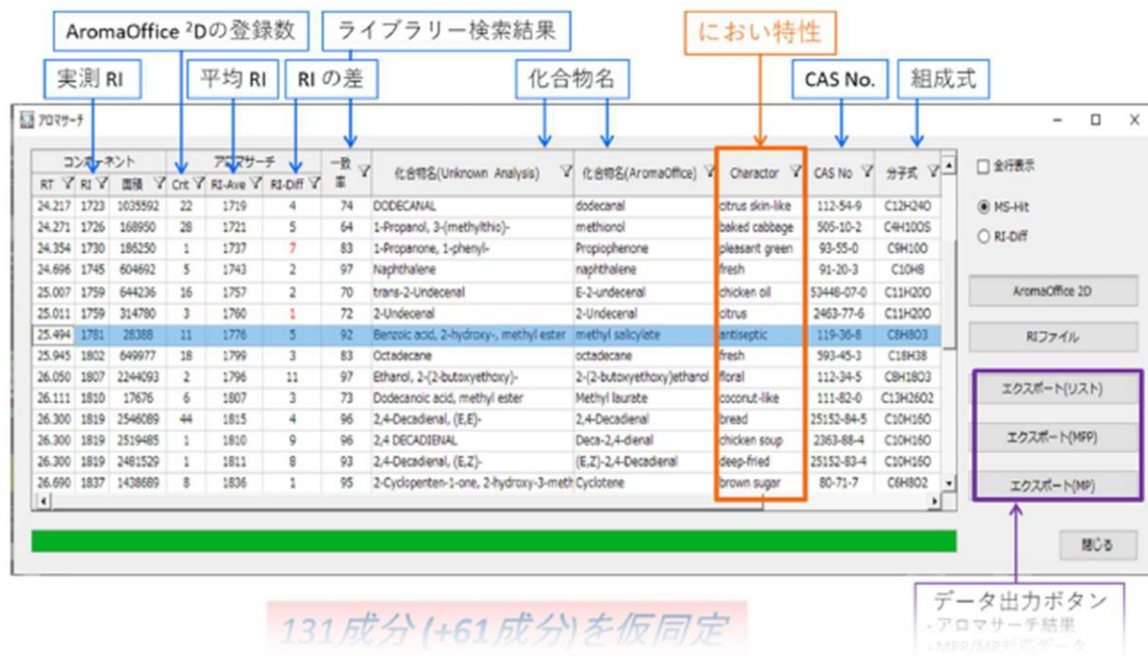
- ① RIとマススペクトルを用いたクロス検索
- ② 固定相の異なる2種類のカラムを用いたRIクロス検索



図-1 AromaOffice<sup>2</sup>D の検索画面の例

最新のAromaOffice<sup>2</sup>D Ver. 7はMassHunter Unknowns Analysisに対応しており、デコンピュレーションとマススペクトルライブラリー検索により得られた全ての候補物質に対してRIを算出してAromaSearchを行う事が可能です。

図-5にAromaSearchにより得られた結果を示します。ChemStationでのAromaSearchの検索結果(70成分)に加えてさらに61成分が得られ、合わせて131成分の香気成分を仮同定することができます。



The screenshot displays the AromaOffice 2D interface with the following components and annotations:

- Annotations:**
  - Blue boxes: AromaOffice<sup>2</sup>Dの登録数, ライブラリー検索結果, 実測 RI, 平均 RI, RIの差, 化合物名, CAS No., 組成式.
  - Orange box: におい特性 (odor characteristics).
  - Green box: データ出力ボタン (data output buttons).
- Table Data:**

RT	RI	面積	Crt	RI-Ave	RI-Off	一致率	化合物名(Unknown Analysis)	化合物名(AromaOffice)	Character	CAS No.	分子式
24.217	1723	1035592	22	1719	4	74	DODECANAL	dodecanal	citrus skin-like	112-94-9	C12H24O
24.271	1726	168950	28	1721	5	64	1-Propanol, 3-(methylthio)-	methionol	baked cabbage	505-10-2	C4H10OS
24.354	1730	185250	1	1737	7	83	1-Propanone, 1-phenyl-	Propiophenone	pleasant green	93-55-0	C9H10O
24.696	1745	604692	5	1743	2	97	Naphthalene	naphthalene	fresh	91-20-3	C10H8
25.007	1759	644236	16	1757	2	70	trans-2-Undecenal	E-2-undecenal	chicken oil	53446-07-0	C11H20O
25.011	1759	314790	3	1760	1	72	2-Undecenal	2-Undecenal	citrus	2463-77-6	C11H20O
25.494	1781	26388	11	1776	5	92	Benzoic acid, 2-hydroxy-, methyl ester	methyl salicylate	antiseptic	119-36-8	C8H8O3
25.945	1802	649977	18	1799	3	83	Octadecane	octadecane	fresh	593-45-3	C18H38
26.050	1807	2244093	2	1796	11	97	Ethanol, 2-(2-butoxyethoxy)-	2-(2-butoxyethoxy)ethanol	floral	112-34-5	C8H18O3
26.111	1810	17676	6	1807	3	73	Dodecanoic acid, methyl ester	Methyl laurate	coconut-like	111-82-0	C13H26O2
26.300	1819	2546089	44	1815	4	96	2,4-Decadienal, (E,E)-	2,4-Decadienal	bread	25152-84-5	C10H16O
26.300	1819	2519485	1	1810	9	96	2,4-DECADIENAL	Deca-2,4-dienal	chicken soup	2363-68-4	C10H16O
26.300	1819	2481529	1	1811	8	93	2,4-Decadienal, (E,Z)-	(E,Z)-2,4-Decadienal	deep-fried	25152-83-4	C10H16O
26.690	1837	1438689	8	1836	1	95	2-Cyclopenten-1-one, 2-hydroxy-3-methyl	Cyclotene	brown sugar	80-71-7	C6H8O2
- Data Output Buttons:**
  - 全行表示 (Show all rows)
  - MS-Hit (Selected)
  - RI-Off
  - AromaOffice 2D
  - RIファイル
  - エクスポート(リスト)
  - エクスポート(MPF)
  - エクスポート(MP)
  - 閉じる (Close)

131成分(+61成分)を仮同定

データ出力ボタン  
- アロマサーチ結果  
- MPF/MSP対応データ

詳細については、**バーチャルアプリケーションラボ**に  
ユーザー登録の上、アプリケーションノート AN-J01/2020、  
及び AromaOffice<sup>2</sup>D の製品紹介をご覧ください

<https://gerstel.jp/Exhibition/>

**GERSTEL**

バーチャルアプリケーションラボ  
開催中！

