



AromaOffice²D を用いたデータ解析ワークフロー - デコンボリューション、多変量解析との組合せによる蒸留酒 (プレミアムジン)中の香気成分の自動解析 -

キーワード

AromaOffice²D (Ver. 7)、DHS、GC-MS、自動解析、デコンボリューション、多変量解析、
香気成分、蒸留酒(プレミアムジン)



1. はじめに

AromaOffice²D 香気成分データベースは、保持指標RI (Retention Index) と質量スペクトル情報を同時に処理し、香気成分の同定を迅速かつ効率的に行うための統合ソフトウェアです。現行の AromaOffice²D (Ver. 7) では、従来のAgilent ChemStation上での使用に加え、Agilent MassHunter Unknowns Analysis上での使用も可能となりました。Unknowns Analysis におけるデコンボリューション後のライブラリ検索結果に対して、AromaOffice²D の AromaSearch を適用することにより、データベース中の香気成分のRI値との照合を行います。AromaSearch により得られた香気成分リストには、保持時間(RT)、RI、ライブラリ検索の一致度、化合物名、香気特性、CAS番号、組成式などに加えて、デコンボリューションで得られた特徴的なイオンの m/z 値、及びその面積値も含まれます。これらの検索結果は、Agilent Mass Profiler Professional (MPP)などの多変量解析ソフトウェアに転送することができます。これらの操作の連携と統合により、香気成分のデータ解析における定性から多変量解析までのワークフローを自動化します。

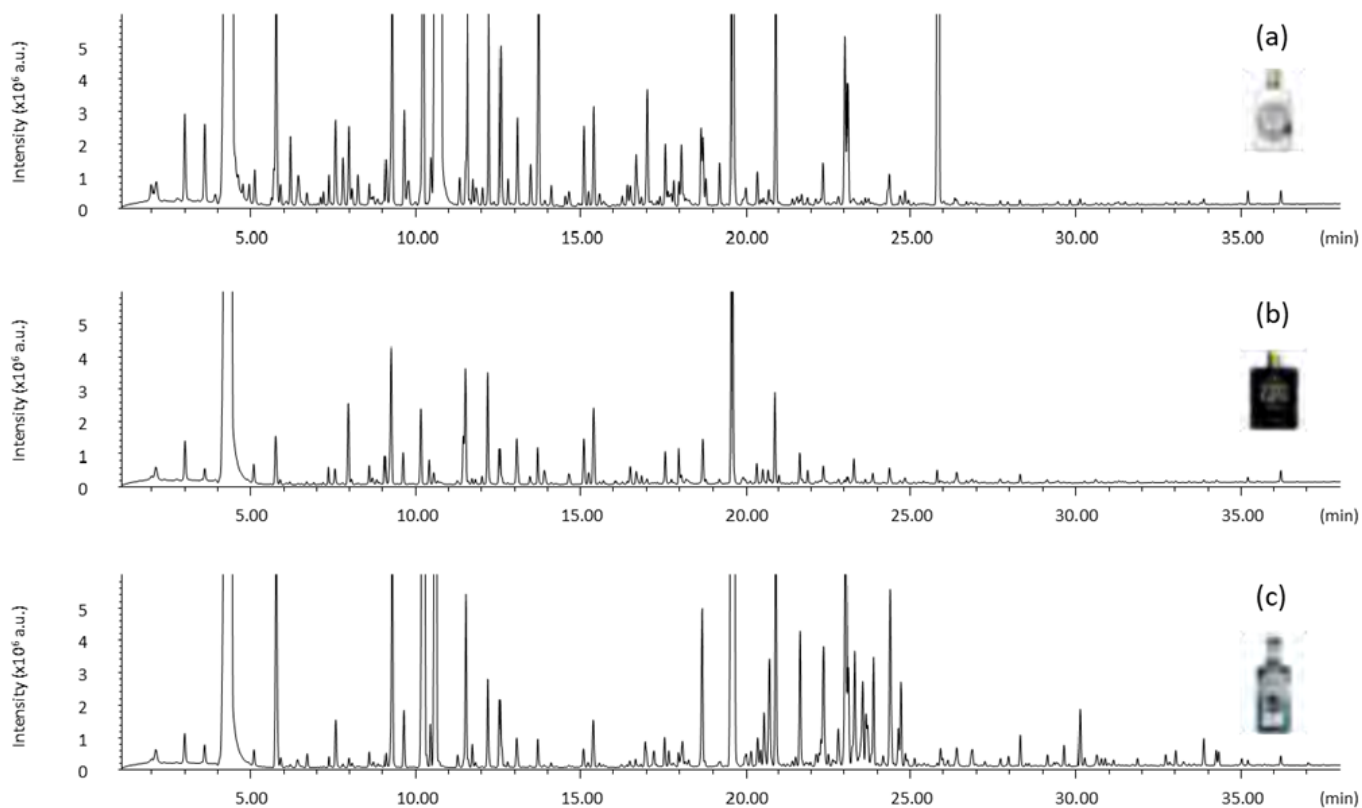


図-3 2-Step MVM-GC-MSによる3種蒸留酒(プレミアムジン)の全イオンクロマトグラム(TIC)の比較

(a) 試料EV、(b) 試料KS、(c) 試料MM

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-J02/2021、及び AromaOffice²D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！

