

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。

AromaOffice²D には、幅広い文献から得られた 10,000 種以上の化合物について、100,000 件以上の登録があり、RI値、化合物名、分析条件、文献、香気特性等の情報があります。既報のApplication Note No. AN-J01/2020 [1] では、AromaOffice²Dの 2 種類のクロス検索機能、① RIと質量スペクトルのクロス検索、② 2 種類のカラムを用いたRIクロス検索を紹介しています。ここでは、AromaOffice²D (Ver. 7) により拡張した Agilent MassHunter Unknowns Analysis、Agilent MPPとの連携、統合について、GERSTEL DHSとAgilent GC-MSを用いた蒸留酒(プレミアムジン)の香気分析を応用例として紹介します。GERSTEL DHSの詳細については、文献等 [2-5] をご参照ください。

詳細については、GERSTELバーチャル匂い分析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 をご覧ください。

GERSTEL

MAKING LABS WORK

バーチャル匂い分析ラボ

