

## GC/MS異臭分析システムを用いた アロマオイル中の香り成分分析

真保 恵美子、長尾 優

### ユーザーベネフィット

- ◆ GC/MS異臭分析システムを用いて、異臭ではない香りに対しても、簡単に成分分析ができます。
- ◆ GC/MS異臭分析システムデータベース中の化合物成分の官能情報により、試料の香りを簡単に評価できます。
- ◆ GC-MS/MSを用いることで、夾雑物を含む実試料に対しても、より信頼性の高い定性が可能です。

### ■はじめに

香りには、リラックス効果、不快臭のマスクング効果、食欲増進効果など、様々な効果があることが知られています。そのため、生活用品や化粧品、食品など、多くの分野で香りは重要視されます。香りの評価には、人の嗅覚による官能試験が用いられますが、ガスクロマトグラフィーを用いることで、詳細な成分分析による評価が可能です。

GC/MS異臭分析システムには、異臭の原因物質を分析するためのノウハウがデータベース化されています。一方で異臭原因物質は、濃度や成分比によっては良い香りにもなることが知られています。本稿では、GC/MS異臭分析システムを、異臭ではない香りの分析に応用しました。ガスクロマトグラフィー質量分析計GCMS-TQ8040 NXを用いて、アロマオイルの香りの質を評価した例をご紹介します。

### ■GC/MS異臭分析システムとは

GC/MSは異臭分析に広く用いられますが、分析条件の検討や解析には多大な労力を要します。GC/MS異臭分析システムは、主要な異臭原因となる化合物成分を効率的に分析するシステムです。図1にGC/MS異臭分析システムの分析フローを示します。本システムは3種類の異なる液相カラムに対応しており、MonoTrap®、固相マイクロ抽出、ヘッドスペースなどの前処理装置を活用した分析が可能です。また、におい嗅ぎ装置を使用した分析にも対応しています。

さらに、検量線補正用試料の分析により、作成したメソッドに検量線情報が登録され、検出成分を簡易的に定量することができます。

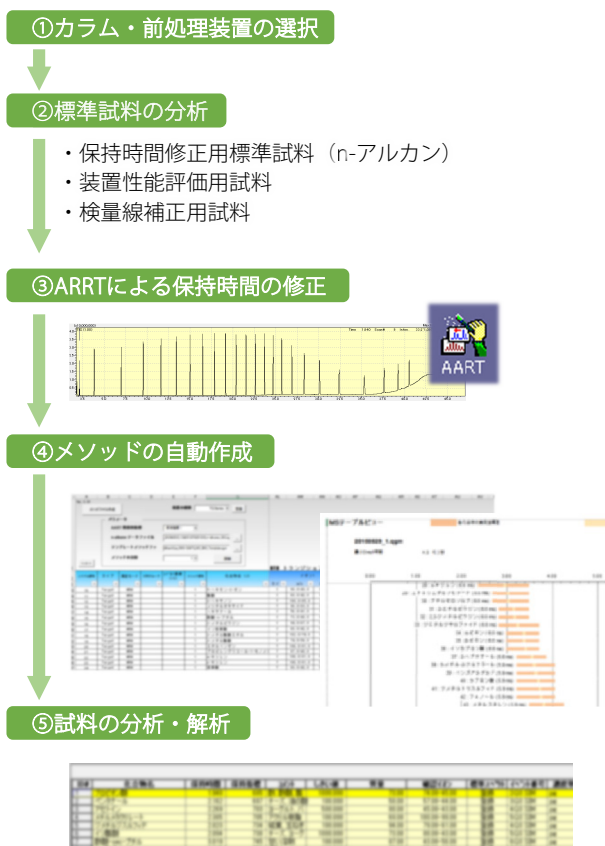


図1 GC/MS異臭分析システムによる分析フロー

表1 装置構成と分析条件

Auto sampler	: AOC-20s Plus	[AOC]	
Auto injector	: AOC-20i Plus	Injection volume	: 1 µl
Instrument	: GCMS-TQ8040 NX		
[GCMS]			
Flow control mode	: Pressure (44.5 kPa)	Column temp. program	: 50 °C (5min) → 10 °C/min → 250 °C (10 min)
Injection mode	: Split (1 : 5)	Interface temp.	: 250 °C
Carrier gas	: He	Ion source temp.	: 200 °C
Purge flow rate	: 3 mL/min	m/z range	: 45~500 amu
Column	: InertCap® 5MS/Sil (30 m × 0.32 mm I.D., 0.5 µm)	Event time	: 0.1 min (scan) 0.3 min (SIM/MRM)

## ■ 分析条件

表1に、本稿で使用した装置構成および分析条件を示しました。GC/MS異臭分析システムはSIM分析・MRM分析の両方に対応しています。GC/MS異臭分析システムに登録された分析条件を参照し、スキャンSIM同時分析およびスキャンMRM同時分析を行いました。本稿では簡易的な試験として、液体試料を装置に直接注入し、分析しました。

## ■ アロマオイルの分析

市販のアロマオイル4種（ジャスミン、ラベンダー、ローズ、シトラス）をエタノールで0.1%に希釈し、分析試料としました。

SIM・MRM分析により得られた主要成分の比と香りの特徴をまとめたグラフを図2に示します。各分析で最も定量値が大きい成分を1として比で表しました。ここでは、SIM分析でのみ検出されたものは除き、MRM分析で多く定量された8成分を示しました。グラフ中の吹き出しには、各成分の

主な異臭成分		官能情報	
化合物名 (J)	保持指標	コメント (J) においの質	しきい値
ベンゾフェノン	1651	樹脂, 杏仁豆腐	10
2,4,6-トリプロモフェノール	1662	消毒, 樹脂	100
1-テトラデカノール	1679	蠟, 甘い油	1000
...	...	...	...

図3 GC/MS異臭データベースの例

“においの質”を示しました。図3のように、“においの質”はGC/MS異臭分析システムのデータベースに登録されており、検出成分のにおいの特徴を簡単に確認できます。例えば、ジャスミンのアロマオイルに多く検出される成分には、植物を連想させる香りが多く含まれました。ローズには名前に反してバラの香りが少ないこと、シトラスには名前通り柑橘の香りが多く含まれることなどがわかりました。

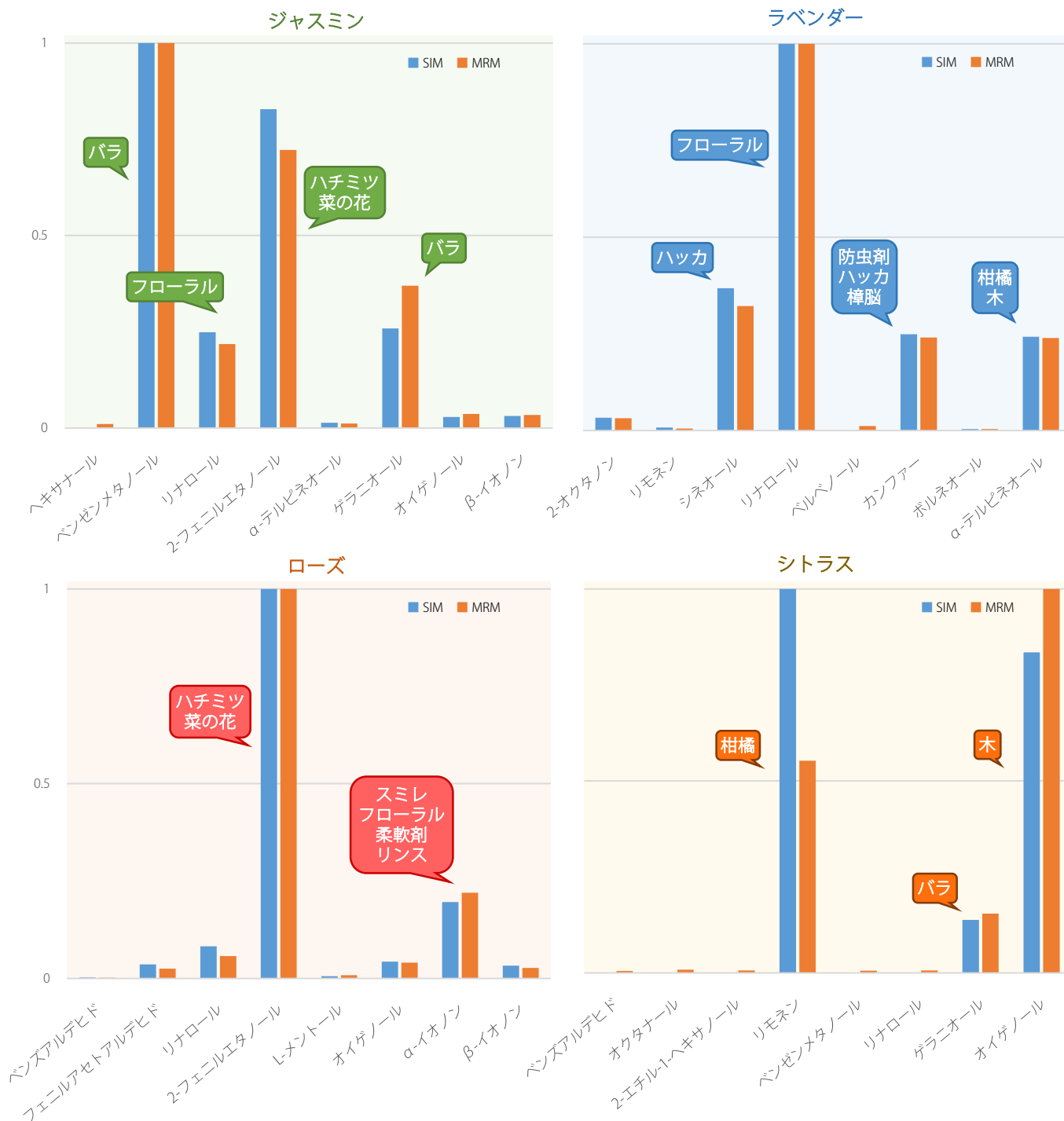


図2 4種アロマオイルの主要成分の比と香りの特徴  
縦軸：定量比（各分析で最も定量値が大きい成分を1としたときの比）

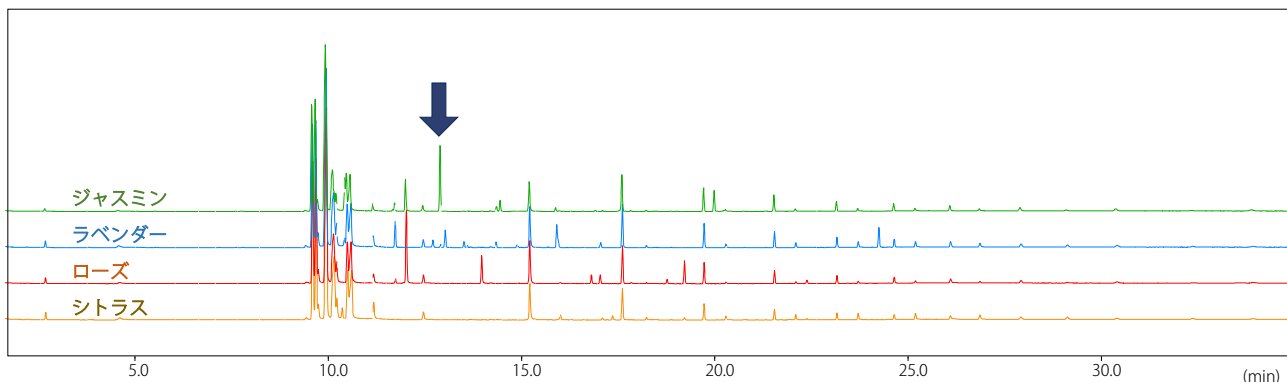


図4 4種アロマオイル (0.1%) スキャン分析のTICクロマトグラム

GC/MS異臭分析システムの方法自動作成ツールでは、SIM・MRM分析条件を簡単に作成でき、さらにスキャン分析との同時分析を選択することができます。図4に、スキャンMRM同時分析で得られた、4種試料のスキャン分析TICクロマトグラムを示します。スキャン分析のクロマトグラムがあれば、ライブラリ検索による定性が可能です。例えば、ジャスミン試料のクロマトグラムで特徴的なピーク（図4矢印）を汎用ライブラリで検索すると、酢酸ベンジルと同定されました。酢酸ベンジルは、ジャスミンなど花の精油の主成分で、甘い香りを呈します。SIM・MRM分析と同時にスキャン分析を行うことで、異臭データベース中の成分以外でもとりこぼすことなく定性ができます。

### ■ MRM分析による正確な定性

香りは成分が複合することにより多様化します。一方、香料には植物などの天然由来成分が含まれることが多く、これらが夾雑物となり、複雑な香りの組成分析を困難にする場合があります。そのような試料の分析には、SIM分析よりも選択性の高いMRM分析が適しています。以下に、SIM分析とMRM分析の比較を示します。

ジャスミン試料中n-デカナール（図5）は、SIM分析ではイオンの強度比が合わず同定されませんでした。MRM分析では同定されました。また、n-ドデカナール（図6）は、SIM分析ではイオンの強度比が許容範囲に入り同定されましたが、MRM分析では同定されませんでした。

SIM分析では、夾雑物がターゲットイオン・確認イオンのピークに影響を及ぼし、正確な同定ができない場合があります。上記の2つの例では、2段階のフラグメンテーションを行うMRM分析により、より正確な同定結果が得られたと考えられます。

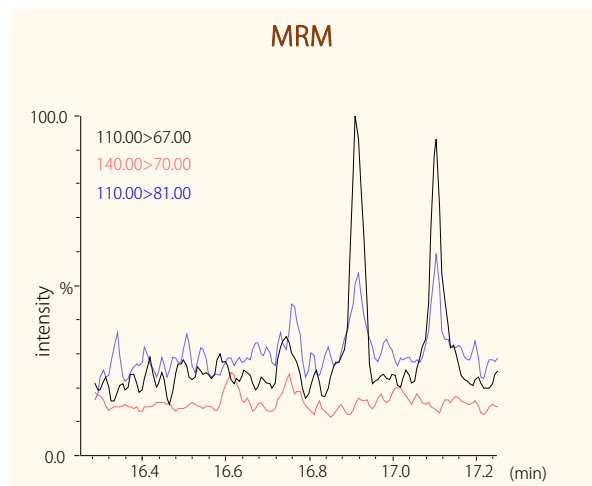
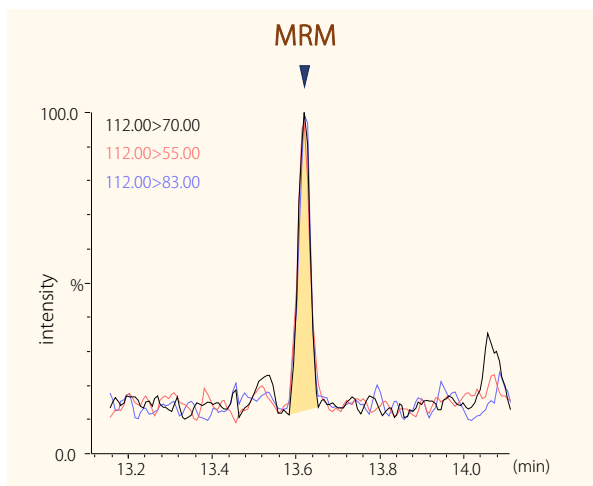
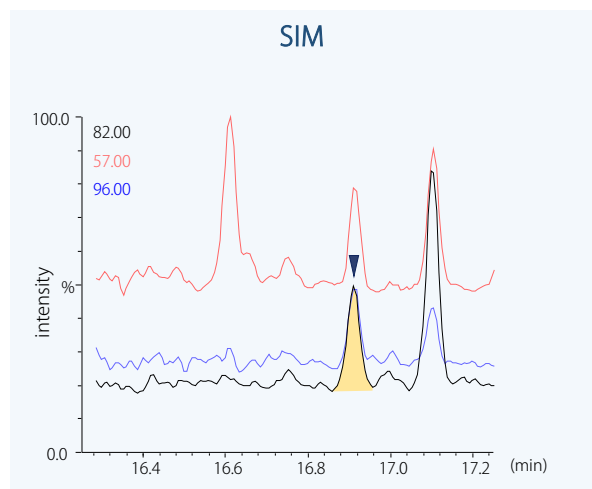
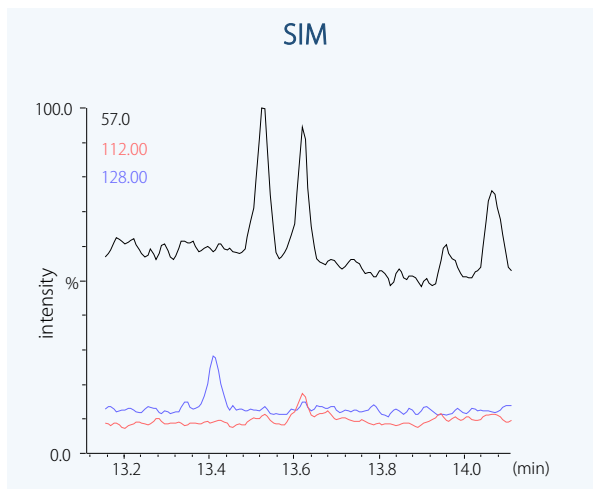


図5 ジャスミン試料中n-デカナールのクロマトグラム

図6 ジャスミン試料中n-ドデカナールのクロマトグラム

夾雑物の多い試料を模倣するために、ジャスミン試料にミネラルオイルを少量混入させ、分析を試みました。クロマトグラムを図7に示します。SIM分析では、ミネラルオイルの混入により、 $\alpha$ -テルピネオールの確認イオンピークに影響が見られました。MRM分析を行うことで、ミネラルオイルを混入させた試料中でも正しく同定ができました。

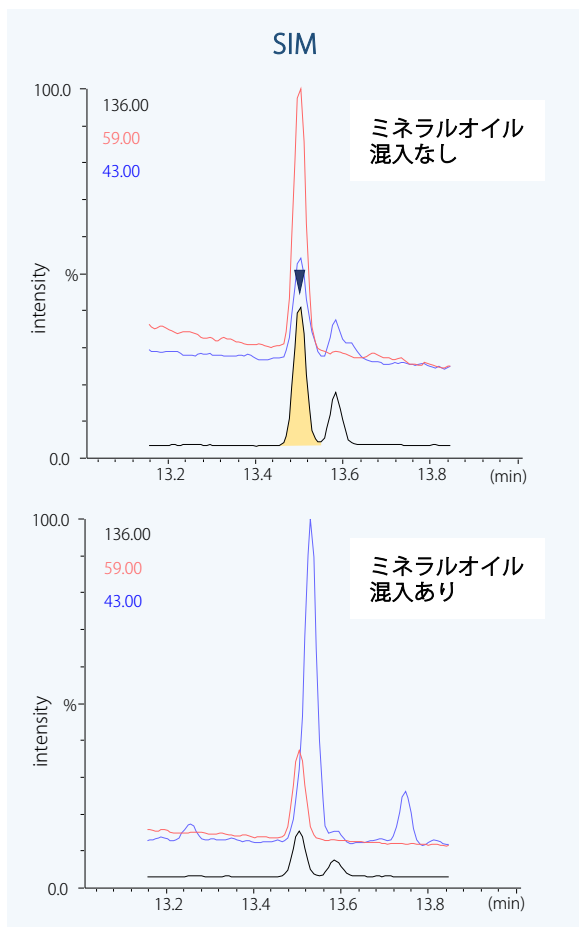


図7 ジャスミン試料中 $\alpha$ -テルピネオールのクロマトグラム

## ■まとめ

ガスクロマトグラフィー質量分析計GCMS-TQ8040 NX (図8) を用いてアロマオイルを分析しました。GC/MS異臭分析システムを利用することで、4種類のアロマオイルの香りの特徴を簡単に確認することができました。スキャン分析を同時に行うことで、GC/MS異臭分析システムに含まれない成分の定性ができました。また、アロマオイルのような香料は、夾雑成分を含むため組成分析が困難な場合がありますが、MRM分析を利用することで、信頼性の高い定性結果が得られました。複合成分からなる香りの組成を、より正確に評価することができました。



図8 GCMS-TQ™8040 NX + AOC-20i+s

GCMS-TQは、株式会社 島津製作所の日本およびその他の国における商標です。  
MonoTrapは、ジーエルサイエンス株式会社の日本における登録商標です。  
InertCapは、ジーエルサイエンス株式会社の日本における登録商標です。

**株式会社 島津製作所** 分析計測事業部  
グローバルアプリケーション開発センター

01-00154-JP 初版発行：2021年4月

島津コールセンター ☎ 0120-131691

本文中に記載されている会社名および製品名は、各社の商標および登録商標です。  
本文中では「TM」、「®」を明記していない場合があります。

本資料は発行時の情報に基づいて作成されており、予告なく改訂することがあります。

改訂版は会員制サイト Solutions Navigator で閲覧できます。  
<https://solutions.shimadzu.co.jp/solnavi/solnavi.htm>  
閲覧には、会員制情報サービス Shim-Solutions Club にご登録ください。  
<https://solutions.shimadzu.co.jp/>

© Shimadzu Corporation, 2021