

GC/MSによるオレンジエッセンスの分析

Analysis of orange essence by GCMS

香料には天然香料と合成香料がありますが、いずれも多く成分が複雑にからみあって、一つの香りを形成しています。また同じ香気成分からできている香りも各成分の組成割合が違えば全く異なった香りとなります。

このような複雑な組成をもつ香料の分析にはキャピラリカラムを用いたGCやGC/MSが有効です。GC/MSによる測定では、成分の同定にEIマススペクトルでのデータ検索システムを用いて行います。

香りの成分は比較的含酸素化合物が多く、この含酸素化合物はEIマススペクトルで分子量を示す分子イオンピークが出現しない場合があるため、データ検索システムだけで同定することは困難なことがあります。その場合CIマススペクトルの測定を行うと、EIマススペクトルで分子イオンピークが出現しない化合物でも、CIマススペクトルでは擬似分子イオンピークが強く出現するため分子量が容易にわかり同定を行う手助けとなります。

今回はオレンジエッセンスをスプリット法による試料注入方法を用いて分析した例を紹介します。(リンゴエッセンスの分析例はアプリケーションニュースGCMS No.93を参照してください。)

Fig.1にEIクロマトグラムを示します。このクロマトグラムからもわかるように多数の成分が検出されますが、今回はピークとについて定性を行いました。

■分析条件

Analytical conditions

Column	: CBP-20 25m×0.2mmφ
Column temp.	: 50℃→180℃ (5℃/min.)
Ion source temp.	: 250℃
Reagent gas	: iso-butane
Split ratio	: 100 : 1

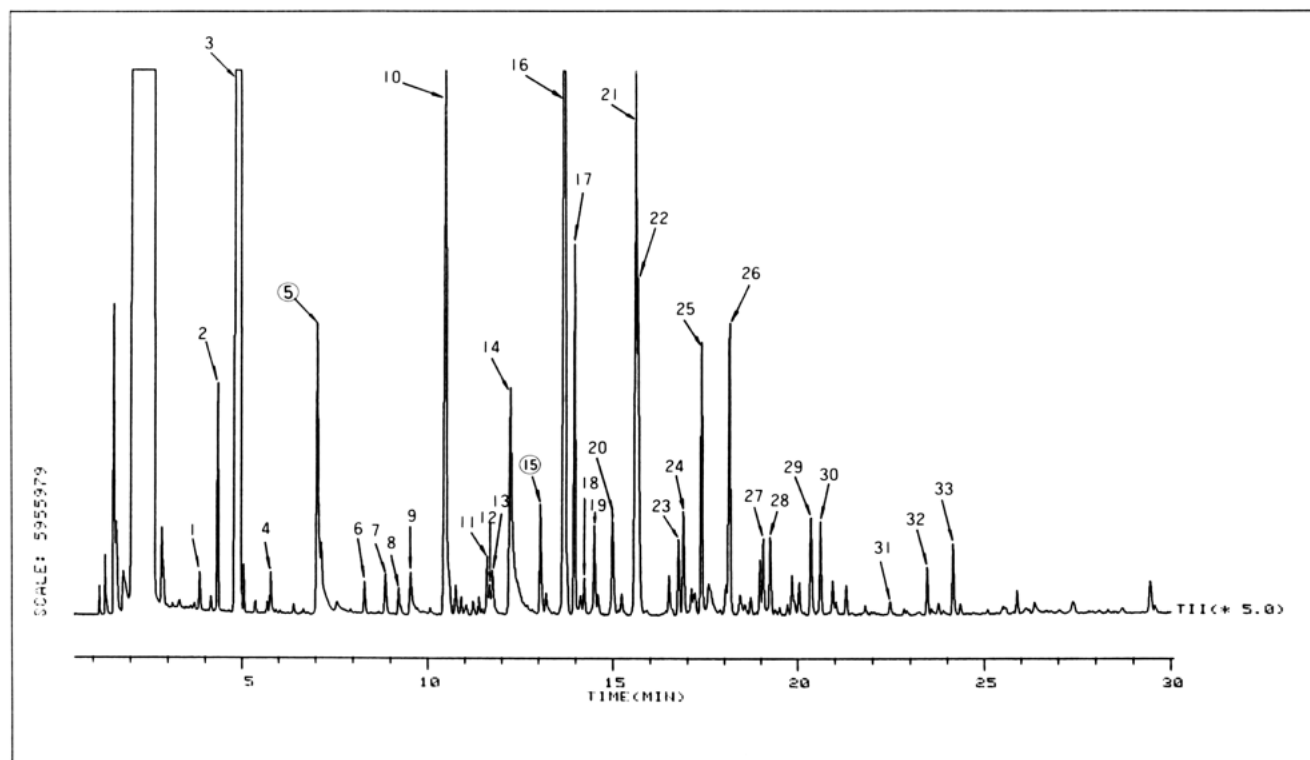


Fig.1 クロマトグラム

Total ion chromatogram of orange essence

Fig.2とFig.5はおおののピークのEIマススペクトルを、Fig.3とFig.6はCIマススペクトルを、Fig.4とFig.7はデータ検索の結果を示します。EIマススペクトルでは分子イオンピークが出現して

いません。しかしCIマススペクトルとデータ検索結果からピークはオクタナール、は1,1-ジエトオキシノナンであることが容易に同定できます。

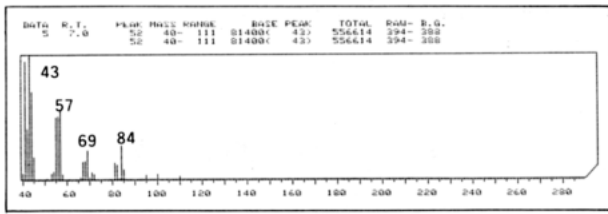


Fig. 2 ピーク⑤のマススペクトル (EI)
EI mass spectrum of peak ⑤

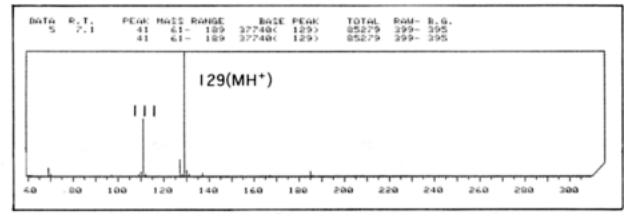
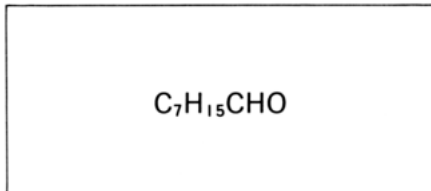


Fig. 3 ピーク⑤のマススペクトル (CI)
CI mass spectrum of peak ⑤



構造式① structure of peak 5 (Octanal)

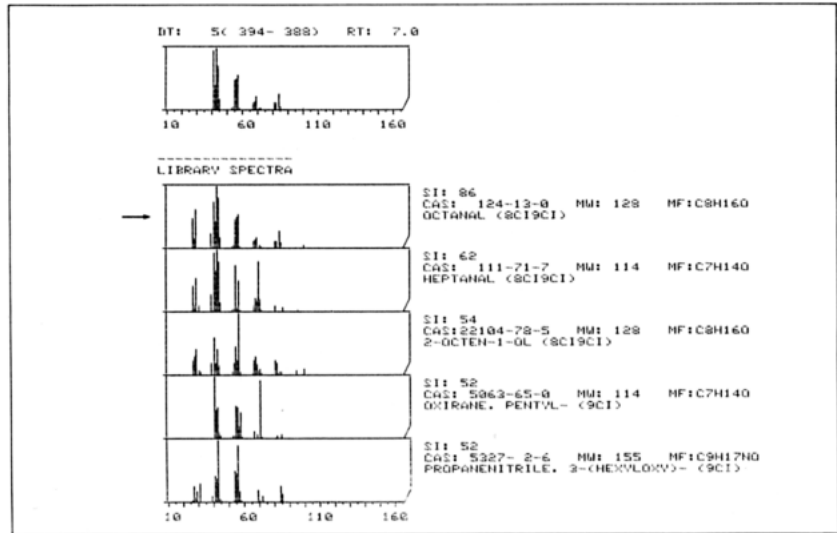


Fig. 4 ピーク⑤のデータ検索結果
Library search of peak ⑤

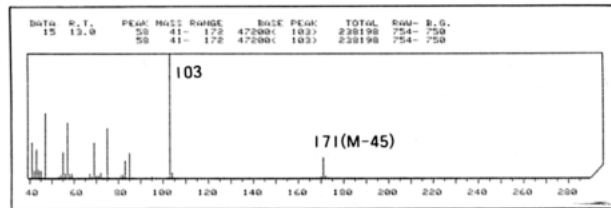


Fig. 5 ピーク⑮のマススペクトル (EI)
EI mass spectrum of peak ⑮

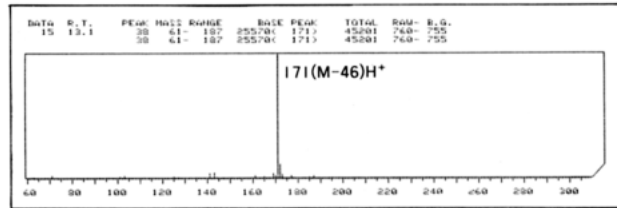
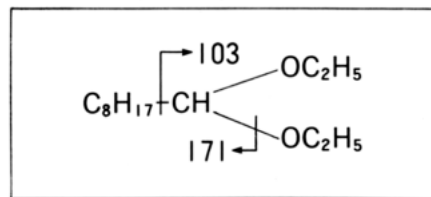


Fig. 6 ピーク⑮のマススペクトル (CI)
CI mass spectrum of peak ⑮



構造式② structure of peak 15
(1,1-diethoxy nonane)

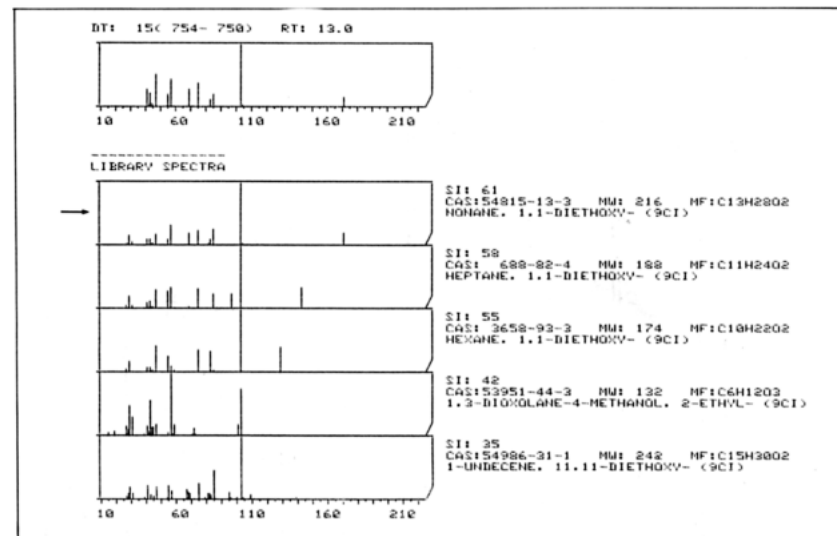


Fig. 7 ピーク⑮のデータ検索結果
Library search of peak ⑮