

Solution Book for Polymer Additives

# 高分子添加剤アプリケーション集



## Introduction

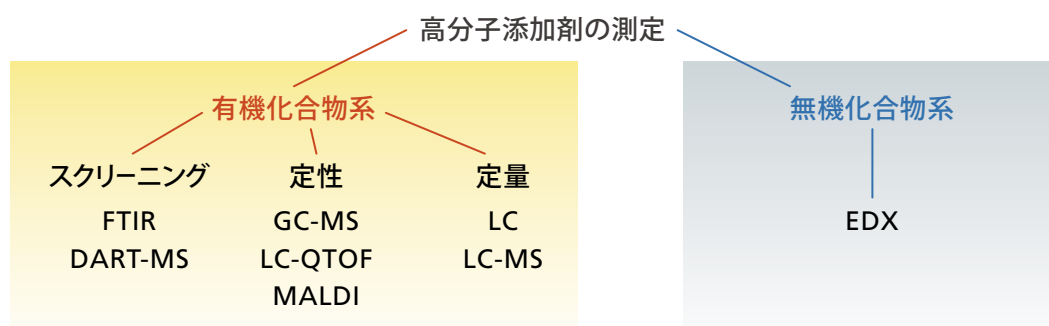
高分子添加剤は、プラスチック製品の耐久性や機能性を高めるために添加される化合物です。プラスチック製品は医薬品や食品の包装容器、輸送機や家電の材料など、幅広い分野で使用されていますが、国連で採択されたSDGsやサーキュラーエコノミーの推進により、リサイクルの意識が高まっています。

プラスチック製品のリサイクルを促進させ、その品質を担保させるために高分子添加剤は重要な要素です。

また、近年ではプラスチック容器に使用された添加剤の溶出や移行による人体および環境への影響に対する意識が高まり、規制を進めている国もあります。

本アプリケーション集では、当社製品による高分子添加剤の分析例を集約しました。

## 分析装置の使用用途の分類



## Contents

高分子添加剤の定量分析	p. 3
・樹脂ペレット中の添加剤の分析 (LC-MS/MS)	
・樹脂中アンチモン(Sb)の定量分析 (EDX)	
高分子添加剤の同定	p. 5
・樹脂中PIP (3:1)の分析 (GC-MS)	
・高分子添加剤ライブラリを使用した樹脂の分析 (GC-MS)	
・樹脂中の無機系添加剤の分析 (FTIR、EDX)	
包装材に含まれる高分子添加剤の分析	p. 9
・食品容器中の添加剤の定性および定量分析 (LC-QTOF)	
・食品容器中添加剤の分析および化合物同定 (GC-MS)	
・医薬品包装材の抽出物分析 (GC、GC-MS)	
高分子添加剤のスクリーニング分析	p. 15
・CFRPプリプレグ中残留溶媒(N-メチルピロリドン)の迅速分析 (DART-MS)	
合成高分子の分子量計算と高分子添加剤の同時分析	p. 16
・高分子添加剤とGPCの同時分析 (HPLC)	
・アクリル板のオリゴマーと添加剤の分析 (MALDI)	
関連機器・製品のご紹介	p. 18

## 樹脂ペレット中の 添加剤の分析 (LC-MS/MS)

高分子材料は、私たちの生活の中で医薬品や食品の包装や容器に使われています。近年、人体および環境への影響を考慮し、医薬品や食品等に溶出する添加剤について各国で規制が進み、定量分析への需要が高まっています。

トリプル四重極型LC-MS/MSは一般的なHPLCと比較して高感度で高選択性であるため、複雑な成分が多い試料や微量含有成分の定量成分に威力を発揮します。また熱分解しやすい化合物や高極性難揮発物質などのように、GC-MSでは分析が困難な測定にも適しています。ここでは、トリプル四重極型LCMS-8045を用いて樹脂に含まれる添加剤の定量分析を行った事例を紹介いたします。

22種類の添加剤標準溶液を用いてMRM測定を行いました。図1にクロマトグラムを、表1に各成分のMRM条件および保持時間、検量線情報を示します。全ての成分において寄与率(R<sup>2</sup>) 0.995以上と良好な結果が得られました。

4種の樹脂ペレットに含まれる添加剤の分析を行いました。各化合物の定量結果を表2に、ポリブチレン樹脂ペレットから検出された化合物のMRMクロマトグラムを図2に示します。

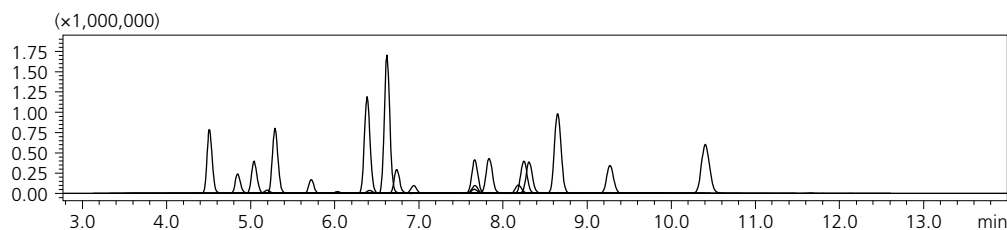


図1 添加剤22成分の標準溶液のMRMクロマトグラム

表1 添加剤22種類の標準溶液MRM測定結果一覧

化合物名	m/z	保持時間	検量点	R <sup>2</sup>
Irganox 1222	357 > 301	4.508	0.1-100	0.999986
Irganox 245	605 > 177	4.852	0.1-500	0.999048
Irganox 1024	570 > 181	5.039	0.1-100	0.999068
Tinuvin P	226 > 120	5.209	1-1000	0.999830
Irganox 1098	637 > 321	5.303	0.1-100	0.999799
Irganox 1035	660 > 249	6.381	0.1-100	0.999939
Cyanox 1790	717 > 191	6.407	5-100	0.998250
Tinuvin 120	439 > 233	6.619	0.1-100	0.999804
Irganox 259	657 > 416	6.743	0.1-500	0.998642
Tinuvin 399	324 > 212	6.934	0.5-1000	0.999575
Tinuvin 320	324 > 268	7.658	0.1-100	0.999606
Tinuvin 326	316 > 260	7.652	0.5-500	0.999256
Tinuvin 234	449 > 371	7.84	0.1-100	0.999613
Tinuvin 327	358 > 302	8.176	0.5-1000	0.999091
Tinuvin 328	352 > 282	8.243	0.1-500	0.999299
Irganox 1010 d	1195 > 1195	8.311	0.5-500	0.999881
Irganox 1330	792 > 219	8.655	0.5-100	0.997701
Irganox 565	589 > 250	9.272	0.1-100	0.997243
Irganox 1076	549 > 475	10.415	0.5-100	0.999436
Irgafos 168_648	648 > 147	11.672	1-100	0.998962
Cyanox 2246	339 > 163	5.724	0.1-1000	0.999503
Cyanox 425	367 > 177	6.033	0.5-500	0.999346

表2 樹脂中添加剤の定量結果

化合物	濃度 (mg/g)			
	PP	ポリブチレン	LDPE	ABS
Irganox 1010	0.66	1.30	0.55	16.64
Irganox 1330	—	9.70	—	—
Irgafos 168	12.61	0.24	—	8.65
Cyanox 2246	—	—	—	0.68

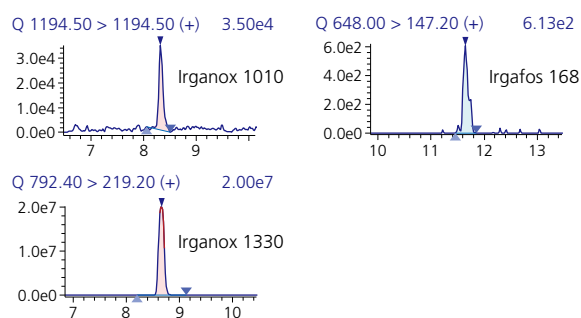


図2 樹脂中添加剤のMRMクロマトグラム



LCMS-8045

各試料から4種の添加剤が検出されました。Irganox 1010は全ての試料から0.55~16.64 mg/g、Irganox 1330はポリブチレンから9.70 mg/g、Irgafos 168はPP、ポリブチレン、ABS樹脂から0.24~12.61 mg/g、Cyanox 2246はABS樹脂から0.68 mg/g検出されました。本システムを用いることで簡便に選択性の高い分析が可能となり、高分子材料の開発、製造の工程や容器包装材の安全性確認への活用が期待されます。

# 高分子添加剤の定量分析

## 樹脂中 アンチモン(Sb)の 定量分析 (EDX)

近年、RoHS指令の規制対象5元素（Cd、Pb、Cr、Hg、Br）と同様に、樹脂の難燃助剤としてのアンチモン（Sb）化合物の分析が要求されるようになってきました。背景には世界的に高まる環境保護の機運の中、公的規制以外に企業独自の規制も追加されつつあることが挙げられます。

ここでは、蛍光X線分析装置を使ってアンチモン標準添加PE（ポリエチレン）の定量分析を行った例をご紹介します。

図3にPP樹脂標準試料を示します。標準試料4点によるSbの内標準補正検量線を図4に、各標準試料の濃度レベルを表3に示します。積分時間100秒において、正確度は0.8 ppmと良好で、理論検出下限は9.8 ppmであり、ppmレベルでの定量分析が可能です。上記内標準補正検量線法による、試料③ 630 ppmの10回繰り返し再現性試験結果を表4に示します。

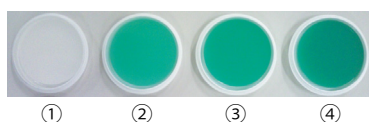


図3 PP樹脂標準試料

表3 各標準試料の設定濃度

試料	Sb含有量 [ppm]
①	0
②	310
③	630
④	1100

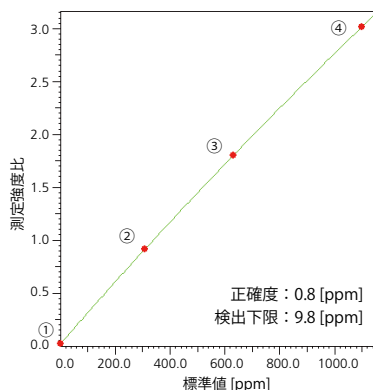


図4 樹脂中Sbの検量線

表4 再現精度

平均値	630.9 ppm
標準偏差	14.0 ppm
変動係数	2.2 %



図5 樹脂片の試料画像

従来のRoHS 5元素、およびClを加えた6元素分析条件に、Sbを追加した7元素分析条件を作成し、樹脂片（図5）の定量分析を行いました。結果レポートから定量・判定部分の抜粋を表5に示します。Sbの分析条件はCdと同一であるため、トータル分析時間は上記の5元素、6元素の場合と変わりません。

現状RoHS 5元素およびClの分析は、品種や材質ごとに設定した基準値をクリアするかしないか、あるいはその中間のグレーゾーンかを迅速に判定するスクリーニング分析が多く利用されています。RoHS 5元素およびClにSbを追加した7元素のスクリーニング分析の条件を用いた樹脂片の判定結果画面を図6に示します。Cd、Pb、Cr、Hg、Br、Cl、Sbの7元素の判定がおよそ2分で可能です。また、Sbは上限基準値を500 ppmと設定した場合、判定は以下の条件でOKとなります。

$$\text{定量値} + 3\sigma = 242.3 + 26.1 = 268.4 < 500 \Rightarrow \text{OK}$$

SbもCd、Pb、Cr、Hg、Brなどの重元素と同様にppmレベルで定量分析が可能です。トータル分析時間も変わらず、スループットも従来と同じです。

このように既存の分析条件に対象成分を追加、もしくは条件を変更することで幅広い成分の無機分析が可能です

表5 7元素分析の結果レポートから抜粋

元素	含有量	3σ	単位	判定
Cd	132.0	9.3	ppm	GRAY
Pb	351.2	10.1	ppm	OK
Cr	116.4	7.3	ppm	OK
Hg	147.0	6.5	ppm	OK
Br	5.6	3.9	ppm	OK
Cl	97.4	30.7	ppm	OK
Sb	207.2	12.5	ppm	OK

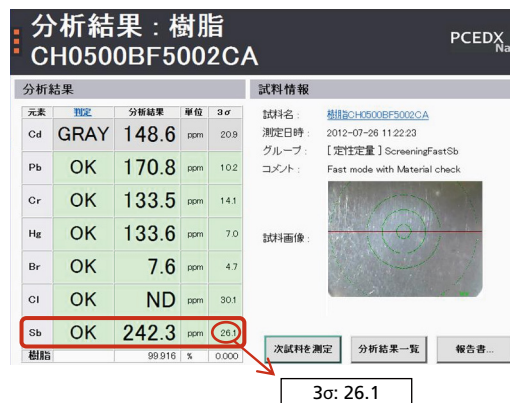


図6 樹脂片のスクリーニング分析・判定結果画面

## 樹脂中 PIP (3:1) の分析 (GC-MS)

フェノール、イソプロピルリン酸 (3:1) (PIP (3:1)) (CAS登録番号：68937-41-7) はイソプロピル化された3つのフェニル基を持つリン酸化合物です。可塑性や難燃性を付与する目的でポリ塩化ビニル (PVC) やポリウレタンなどの樹脂材料に使用されています。他にも耐摩耗性や耐圧縮性を付与することもでき、油圧作動油や潤滑油、コーティング剤、接着剤、シール剤といった様々な材料に使用されています。米国環境保護庁 (U.S. EPA) は、有害物質規制法 (TSCA) の第6条h項に基づき、PIP (3:1) を難分解性・生物蓄積性・毒性のすべてに該当する化学物質 (PBT物質) の一つに位置付け、当該物質を含有する製品や成形品の国内での製造や商取引の規制を開始しました。

熱分解 (熱脱着) -GC-MS (Py/TD-GC-MS) は、国際規格 IEC 62321-8にも採用されており、溶媒抽出GC/MS法のような多量の有機溶媒が不要なので、環境や分析オペレーターに優しい装置として現在、注目されています。今回、樹脂中PIP (3:1) (図7) を Py/TD-GC-MSで分析できることを確認しましたのでご紹介します。

PIP (3:1) が使用されている成形品を測定しました。PVC製のキャップは、カッターで削り取った0.5 mg程度の破片をサンプルカップに入れ、測定しました。また、ポリウレタン製のスポンジも同様の手順で測定しました。その結果、図8や図9に示したように、いずれの試料からも標準溶液と同じ保持時間にPIP (3:1) 由来のピークが検出されました。また、この測定で得られたScanスペクトルを高分子添加剤ライブラリに照合したところ、図9に示したように、スポンジ試料にリン系難燃剤の一種であるリン酸トリス (1,3-ジクロロ-2-プロピル) (TDCPP) が使用されていることがわかりました (スペクトルの類似度:95)。

TSCA規制では、PIP (3:1) の許容濃度が設定されていないため、極微量の含有であっても見逃さない分析装置が必要です。Py/TD-GC-MSは、有機溶媒や複雑な前処理を必要とせず、簡便な手順で樹脂中PIP (3:1) を分析できます。

FASSTモードを使用することで、PIP (3:1) を高感度に分析しながら (検出限界:10 mg/kg)、その他に使用されている添加剤の定性解析を行えます。高分子添加剤ライブラリには約4900個のScanスペクトルや添加剤の分類 (難燃剤、可塑剤など) が登録されているため、詳しい知識がなくても添加剤の定性解析が可能です。一方、PIP (3:1) のキャリアオーバーが生じる可能性があることがわかりました。そのため、高濃度のPIP (3:1) が検出された後は、ブランク試料の分析が必要です。



EGA/PY-3030D + GCMS-QP2020 NX

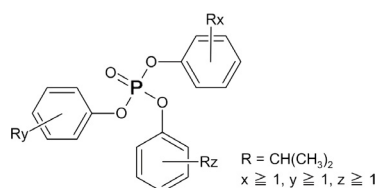


図7 PIP (3:1) の構造式

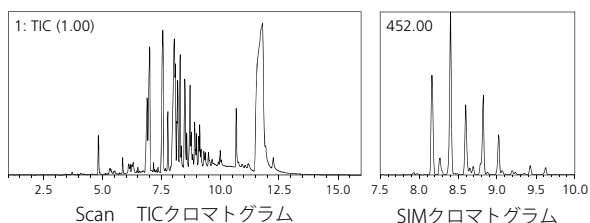


図8 PVC製キャップの測定結果

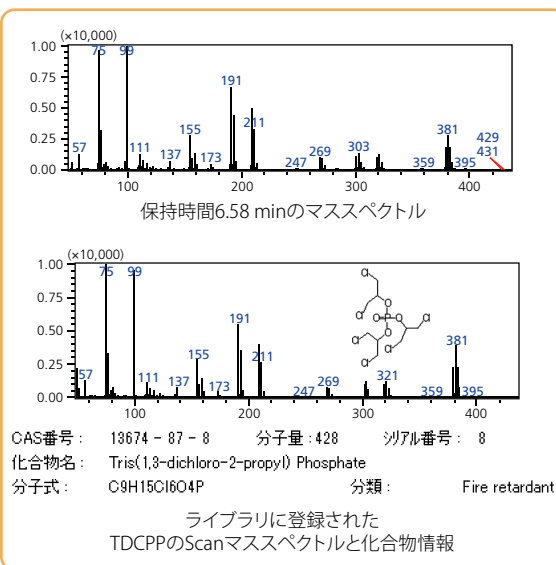
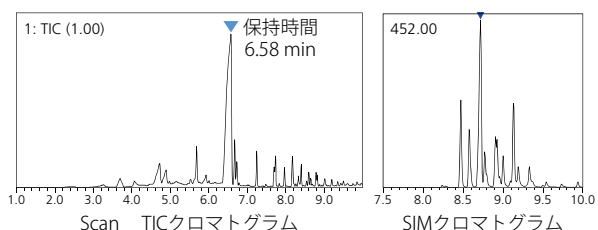


図9 ポリウレタン製スポンジの測定結果

# 高分子添加剤の同定

## 高分子添加剤 ライブラリを使用した 樹脂の分析 (GC-MS)

高分子材料に含まれる添加剤の分析は高分子材料の品質管理、品質改良や化学物質規制に向けた対応などのために重要です。「**高分子添加剤ライブラリ**」は高分子材料に用いられる幅広い添加剤の情報を登録したGC/MSマススペクトルライブラリです。マススペクトルと共に、保持指標、添加剤の分類情報、分解生成物の情報も収録しており、添加剤の詳細な解析が可能となります。ここでは、未知の樹脂をPy-GC/MSシステムの分析モード（発生ガスMS、熱抽出GC/MS）で分析し、高分子添加剤ライブラリを用いて、含有される添加剤の推定と樹脂母材の推定を行いました。

実試料として添加剤の配合や基材の情報が不明な下流ゴムシート（厚さ:2 mm）を用いました。

試料を発生ガスMS法で分析し、揮発性成分と樹脂の熱分解生成物が検出される温度領域を評価しました。この分析により得られた本試料のサーモグラムを図10に示します。100℃から340℃付近で添加剤等の揮発成分、さらに高温の領域で樹脂由来の熱分解生成物が検出されました。

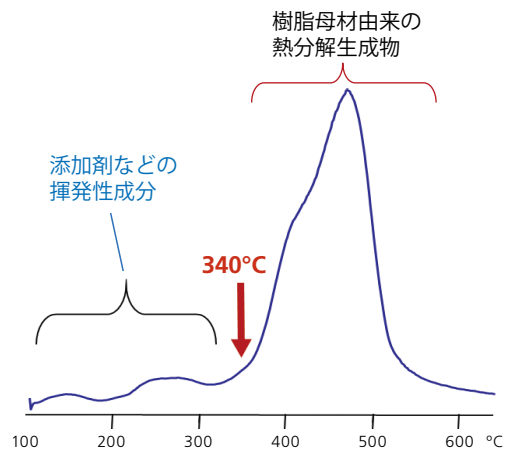


図10 発生ガスMS分析によるサーモグラム

発生ガスMS分析のサーモグラムの情報を基に、揮発性成分の熱抽出温度領域（100～340℃）における熱抽出GC/MS分析を行い、主要なピークについてNISTおよび高分子添加剤ライブラリを用いて定性解析を実施しました（図11）。

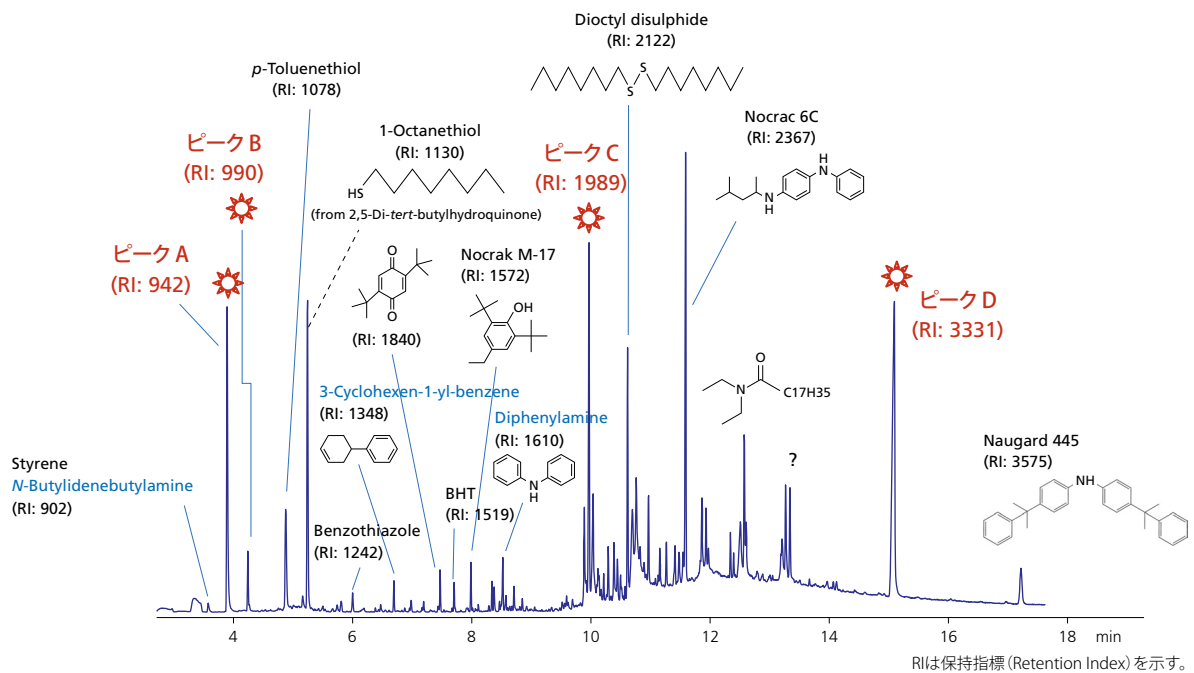
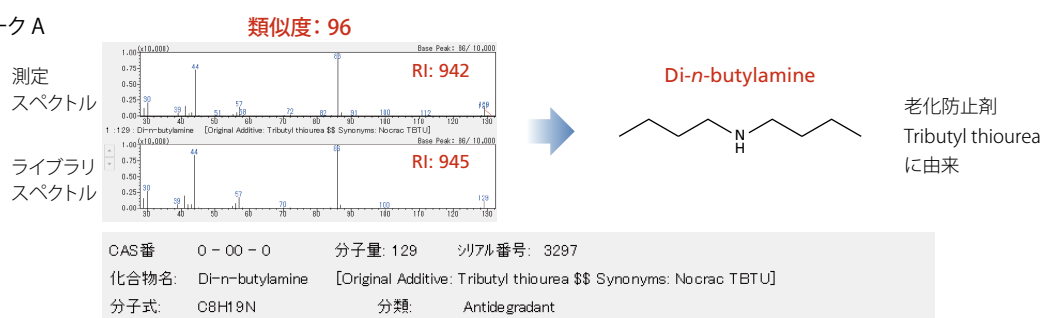


図11 熱抽出GC/MS分析で得られたトータルイオンクロマトグラムと検出された各ピークの定性解析結果

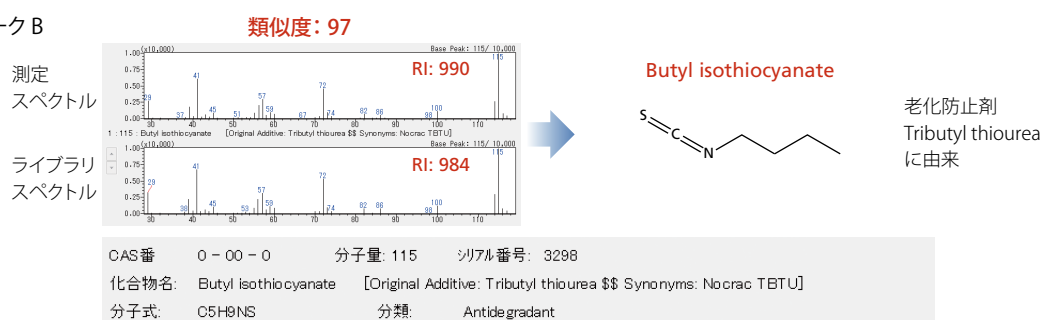
NISTおよび高分子添加剤ライブラリのいずれの検索結果からも、架橋剤のIrgacurelに加えて老化防止剤のBHT、Nocrac M-17、Nocrac 6C、Nocrac CD等が使用されていることが推定されました。一方、ピークAからDについてはNISTを用いた検索ではヒット率が低く、化合物推定が困難でした。またNISTを用いてパイログラム上の熱分解生成物の同定は推定できたとしても、熱分解前の元の添加剤の推定ができませんでした。これらのピークについて高分子添加剤ライブラリを用いると、類似度、保持指標等の情報と共に化合物を推定することができました(図12)。

ピークA、BはそれぞれDi-butyl amineとButyl isocyanateと推定され、さらに高分子添加剤ライブラリに登録されているオリジナルの添加剤の情報から、これらの化合物は老化防止剤Tributylthiourea等に由来する化合物であると推定されました。また、ピークCはN-Phenyl-1,4-benzenediamineと推定され、オリジナルの添加剤の情報からピークDの化合物の成型等における熱分解生成物であると推定されました。ピークDは老化防止剤*p*-(*p*-Toluene sulfonylamido)diphenylamine: Nocrac TDであると推定されました。

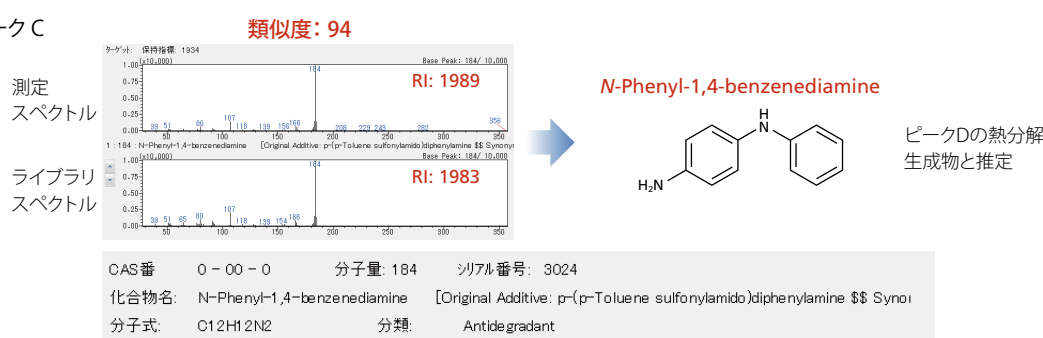
### ピーク A



### ピーク B



### ピーク C



### ピーク D

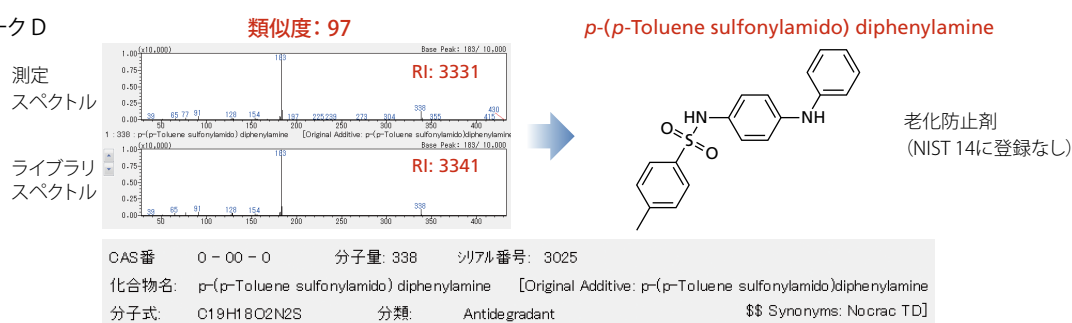


図12 高分子添加剤ライブラリによるピークA、B、C、Dの定性解析結果

## 樹脂中の 無機系添加剤の分析 (FTIR、EDX)

添加剤は材料に機能性、加工性、安定性などを付与して製品の品質を向上させるものです。電子機器、食品、医薬品、化粧品、プラスチックなど幅広い製品に利用され、付加価値を高める重要な役割を担っています。添加剤の分析においては有機系添加剤が無機系添加剤かによって、分析のアプローチ方法が異なります。無機系添加剤の場合には、元素分析と赤外分光分析あるいは形態観察などの結果から総合的に判断して物質を同定します。

ここでは、FTIRとEDXによる無機系添加剤を含んだ樹脂の分析例を紹介します。

無機系添加剤が含まれる試料として、コネクタカバーをFTIRで測定しました。図13に試料写真、図14に測定結果を示します。図14の赤外スペクトルと検索結果から、このコネクタカバーは主にフタル酸エステルを含むポリ塩化ビニル (polyvinylchloride, PVC) でできていることがわかります。さらに、得られた赤外スペクトルには1415  $\text{cm}^{-1}$  付近のピークがあり、そのピーク位置から添加剤として炭酸カルシウム ( $\text{CaCO}_3$ ) が含まれていることが示唆されます。



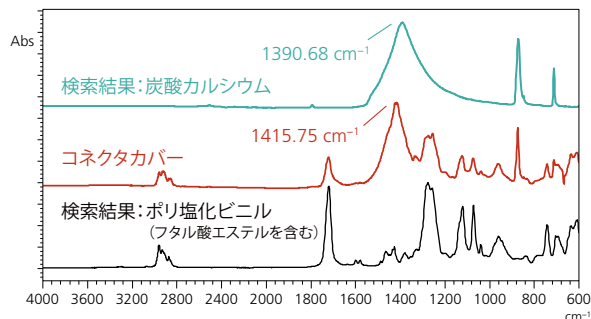
図13 コネクタカバー



IRTracer-100



EDX-7200



島津標準ライブラリによる検索結果  
 ・ Polyvinylchloride with Phthalate / ポリ塩化ビニル (フタル酸エステルを含む)  
 ・ Calcium Carbonate / 炭酸カルシウム

図14 コネクタカバーの赤外スペクトルと検索結果

しかし、コネクタカバーの1415  $\text{cm}^{-1}$  のピークは単体の炭酸カルシウムに由来する1390  $\text{cm}^{-1}$  のピークと比較し、ピーク位置が25  $\text{cm}^{-1}$  ずれています。したがって、赤外スペクトルだけでは添加剤として炭酸カルシウムが含まれていることを認めるための根拠が十分とは言えません。

そこで、EDXによる元素分析を行いました。図15に定性分析結果とファンダメンタルパラメータ (FP) 法による定量分析結果を表6-1および表6-2に示します。

表6-1より、塩素 (Cl) とカルシウム (Ca) が主な構成元素であることがわかります。これはFTIRの結果のポリ塩化ビニルと符合し、炭酸カルシウムが含まれていることを裏付けるものです。表6-2は、FTIRとEDX両方の結果からライブラリーを使って特定した化合物での定量分析結果です。その他の検出元素は酸化物と仮定しました。このようにFTIRとEDXを組み合わせることで、添加剤として炭酸カルシウムが含まれていることを示す十分な根拠が得られました。

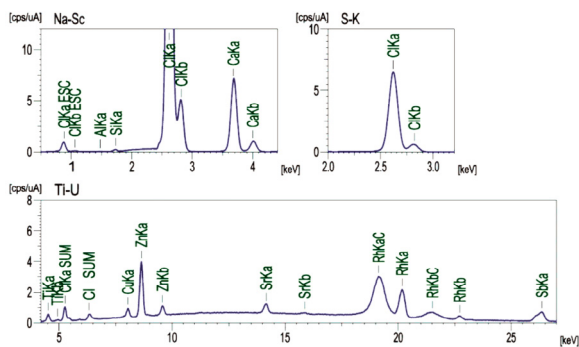


図15 EDXによるコネクタカバーの定性分析結果

表6-1 EDXによるコネクタカバーの定量分析結果A

元素	Cl	Ca	Sb	Zn	Ti	Si	Al	Cu	Sr
定量値	72.56	26.11	0.40	0.31	0.23	0.21	0.096	0.054	0.030

表6-2 FTIRとEDXの結果によるコネクタカバーの定量分析結果B

元素	$\text{C}_2\text{H}_3\text{Cl}$	$\text{CaCO}_3$	$\text{SiO}_2$	$\text{Sb}_2\text{O}_3$	$\text{TiO}_2$	ZnO	$\text{Al}_2\text{O}_3$	CuO	SrO
定量値	73.14	25.55	0.31	0.30	0.25	0.25	0.13	0.046	0.024



# 包装材料に含まれる高分子添加剤の分析

## 食品容器中の 添加剤の定性 および定量分析 (LC-QTOF)

プラスチックやゴムといった高分子材料には酸化防止剤、紫外線吸収剤、難燃剤などの添加剤が含まれています。高分子材料の開発および製造においては、適切な種類および量の添加剤を加えることで性能や耐久性を飛躍的に高めることができるため、高分子材料に含まれる添加剤の情報を把握することは非常に重要です。

ここでは、四重極飛行時間型 (QTOF) のLC-MSである**LCMS-9030**を用いて食品容器に含まれる高分子添加剤の定性および定量を行った例を紹介します。

5種の食品容器に含まれる高分子添加剤の分析を行いました。細かく刻んだ食品容器 (パック、フィルム) 0.1 gにTHF 1 mLを加えて、超音波処理を1分間行い、メタノール1 mLを加えて上清を0.2 μmフィルターでろ過した後メタノールで希釈して測定用試料としました。図16にLabSolutions Insight Exploreの化合物検出機能を用いた食品Aフィルムのピークピッキングの結果を示します。m/z 637.4941、386.3057、1194.8190、548.5039、647.4591のEIC上でピークが検出されました。これらのm/zはそれぞれIrganox 1098、CYANOX 425、Irganox 1010、Irganox 1076およびIrgafos 168に由来するイオンのm/zに相当します。例として、ピークX (m/z 637.4941) の組成推定結果を図17に示します。組成式はC<sub>40</sub>H<sub>64</sub>N<sub>2</sub>O<sub>4</sub>であるとわかりました。

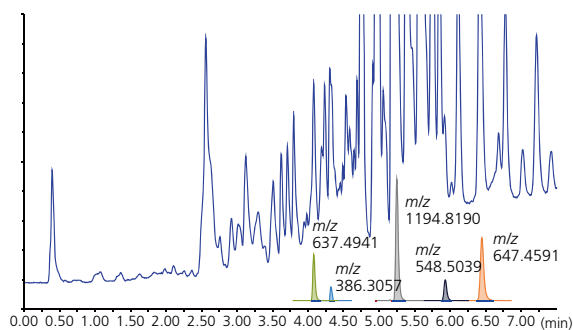


図16 LabSolutions Insight Exploreを用いた食品Aフィルムのピークピッキング結果

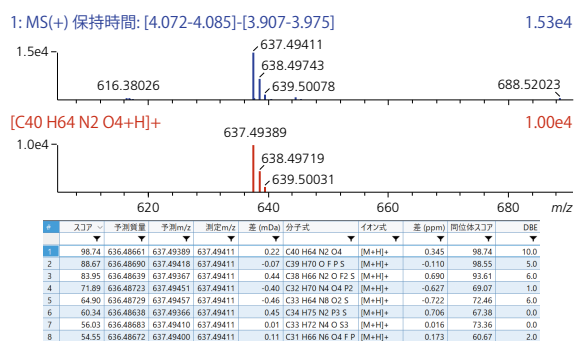


図17 ピークXの組成推定結果  
(上:測定スペクトル、中:理論スペクトル、下:組成式候補)

さらに、このピークの構造式および化合物名を確認するために、Advanced Chemistry Development社のACD/MS Structure ID Suiteを用いた解析を行いました。図18にデータベース検索で挙げられた候補化合物についてランキングを行った結果を示します。PubChem CID 90004の化合物が最も高い帰属率を示しました。

PubChemを用いたオンライン検索の結果、この化合物はIrganox 1098であることがわかりました (図19)。

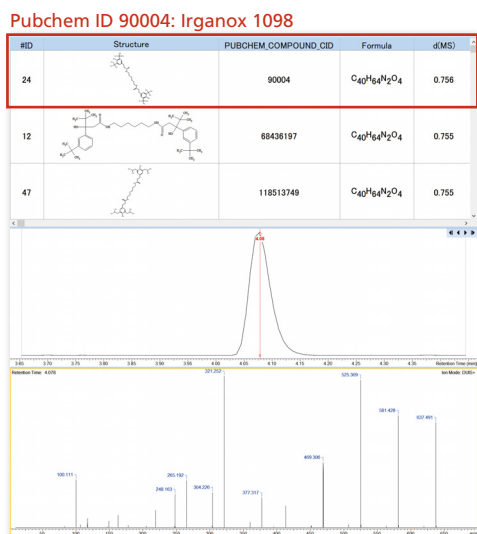


図18 ACD/MS Structure ID Suiteを用いたデータベース検索と帰属率ランキング結果

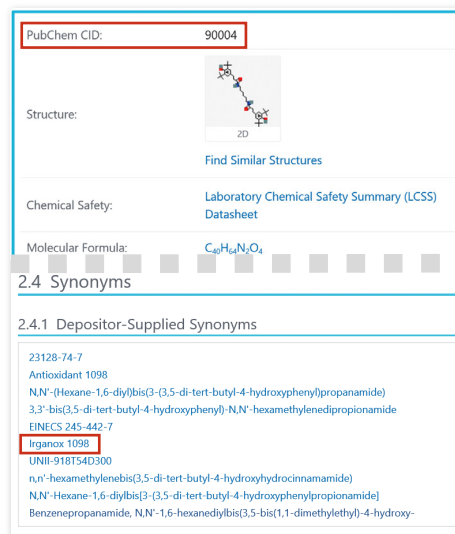


図19 オンラインデータベースを用いた化合物検索結果

確実な定性のため、添加剤標準品の測定を行いました。

Irganox 1098の保持時間を確認した結果、ピークXの保持時間と一致することが確認されました。また、Irganox 1098とピークXのMS/MSスペクトルを比較した結果、ほぼ同一のスペクトルが得られました(図20)。

以上の結果から、ピークXはIrganox 1098であることが確認されました。

食品容器に含まれる高分子添加剤の定量分析のために、MS/MSクロマトグラムを取得しました。表7に各化合物の検量線範囲および寄与率(R<sup>2</sup>)を示します。

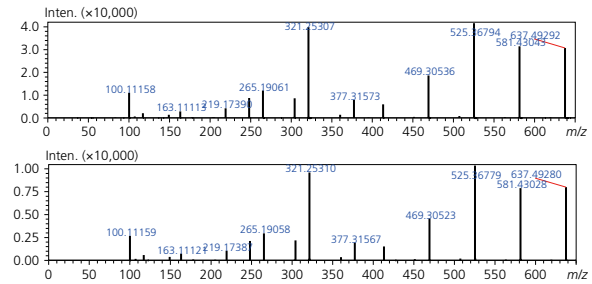


図20 Irganox 1098標準品(上)とピークX(下)のMS/MSスペクトル

表7 高分子添加剤14成分の検量線範囲および寄与率

化合物名	イオン化法	プリカーサイオン	モニターイオン	検量線範囲(ppb)	寄与率(R <sup>2</sup> )
Tinuvin P	ESI positive	226.0975	120.0556	1-1000	0.999
Irganox 245	ESI positive	604.3844	177.1279	0.05-50	0.998
Irganox MD 1024	ESI positive	570.4265	181.0972	0.1-100	0.995
Irganox 1098	ESI positive	637.4939	321.2537	0.1-100	0.996
CYANOX 2246	ESI negative	339.2330	163.1128	0.1-100	0.999
CYANOX 425	ESI negative	367.2643	367.2643	0.1-100	0.999
Irganox 1035	ESI positive	660.4292	249.1485	0.05-50	0.998
Tinuvin 120	ESI positive	439.3207	233.1531	0.01-10	0.999
Tinuvin 328	ESI positive	352.2383	282.1601	0.1-100	0.999
Irganox 1010	ESI positive	1194.8179	1194.8179	0.1-100	0.995
Irganox 1330	ESI positive	792.6289	219.1743	0.05-50	0.995
Irganox 565	ESI positive	589.3968	250.1009	0.5-100	0.993
Irganox 1076	ESI positive	548.5037	475.4146	0.5-100	0.997
Irgafos 168	ESI positive	647.4588	647.4588	0.5-100	0.999

食品容器試料は前述の手法で抽出を行い、メタノールで10倍~1000倍に希釈しました。定量計算の結果1000倍希釈した各試料のIrgafos 168の濃度は1.85~40 ppbで、各パックおよびフィルム中の濃度は37~800 mg/gであることが分かりました。食品Aフィルムの代表的なMS/MSクロマトグラムを図21に、定量結果を表8に示します。

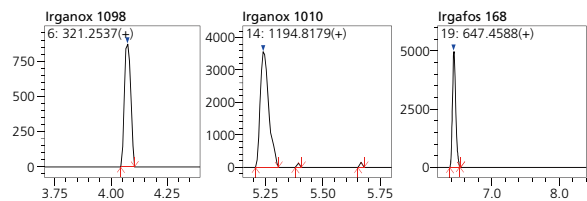


図21 食品Aフィルムの代表的なMS/MSクロマトグラム

表8 食品容器中高分子添加剤の定量結果

化合物名	濃度 (mg/g)									
	食品A パック	食品A フィルム	食品B パック	食品B フィルム	食品C パック	食品C フィルム	食品D パック	食品D フィルム	食品E パック	食品E フィルム
Tinuvin P	—	—	—	—	—	—	—	—	—	—
Irganox 245	—	—	—	0.043	—	—	—	—	—	—
Irganox MD 1024	0.823	0.695	0.627	0.486	0.479	0.430	0.376	0.400	0.318	0.278
Irganox 1098	—	7.104	—	8.64	—	—	—	—	—	—
CYANOX 2246	—	0.021	—	—	—	—	—	—	—	—
CYANOX 425	0.130	3.132	—	0.069	—	—	—	—	—	—
Irganox 1035	0.011	0.012	—	—	—	—	—	—	—	—
Tinuvin 120	—	0.005	—	—	—	—	—	—	—	—
Tinuvin 328	0.024	—	—	—	—	—	0.268	—	—	—
Irganox 1010	9.544	51.094	1.698	—	14.054	76.426	6.260	58.466	15.218	113.920
Irganox 1330	—	—	—	—	—	—	—	—	—	0.004
Irganox 565	—	0.159	—	—	—	—	—	—	—	0.135
Irganox 1076	2.140	8.366	—	25.450	2.636	2.482	7.994	9.644	1.484	8.438
Irgafos 168	111.04	339.94	119.64	37.1	253.68	799.66	350.10	616.62	205.24	126.96

LCMS-9030とLabSolutions Insight Explore、ACD/MS Structure ID Suite等の解析ソフトウェアを用いることで、高分子材料に含まれる機能性添加剤の検出、定性から定量までを含むワークフローを実現しました。より良い合成高分子材料の効率的な開発、改良に貢献できることが期待されます。

# 包装材に含まれる高分子添加剤の分析

## 食品容器中添加剤 の化合物同定 (GC-MS)

近年、食品中への異物混入の事例が増加しており、メーカーによる異物分析の必要性が高まっています。GC-MSによる異物分析では、熱分解GC/MS法や熱抽出GC/MS法が用いられ、微量有機物異物に含まれる樹脂材料や添加剤の定性を行うことができます。

ここでは、熱抽出GC/MS法を用いた食品包装材中の添加剤を分析した結果を報告します。

熱抽出には、GCMS用多機能注入口OPTIC-4を使用しました。実試料には、市販されている食品包装材をカッターナイフでカットした小片(約0.2 mg)を用いました。この小片を所定のマイクロバイアルに入れ、OPTIC-4のライナー内にセットし、注入口でライナーを加熱する方法(Difficult Matrix Introduction:DMI)によって熱抽出しました(図22)。図23に熱抽出GC-MS法で得られたトータルイオンクロマトグラム(TIC)を示します。

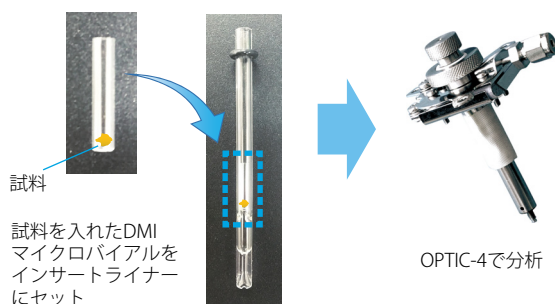


図22 OPTIC-4を用いた熱抽出分析のサンプリング

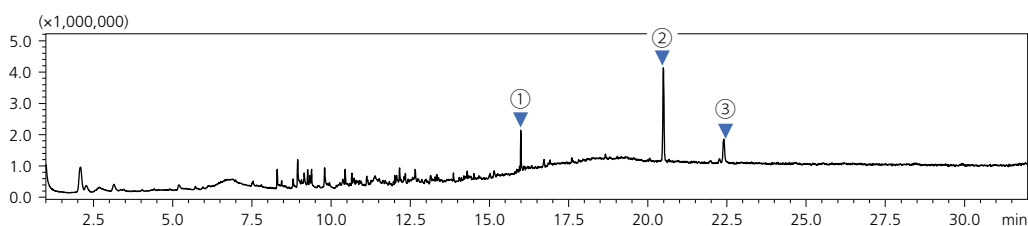


図23 熱抽出GC/MS法で得られたTIC

高分子添加剤ライブラリで化合物がヒットしたピークを図24に示します。複数の酸化防止剤(Antioxidant)およびその分解物が同定されました。この際、保持指標を用いた絞り込みを行うことで、精度の高い添加剤の定性を行うことができ、得られたピークについて、高分子添加剤ライブラリによるライブラリサーチを行いました。高分子添加剤ライブラリは、高分子材料に用いられる幅広い添加剤および添加剤の分解生成物のマススペクトルを収録しています。複数の酸化防止剤(Antioxidant)およびその分解物が同定されました。この際、保持指標を用いた絞り込みを行うことで、精度の高い添加剤の定性を行うことができました。

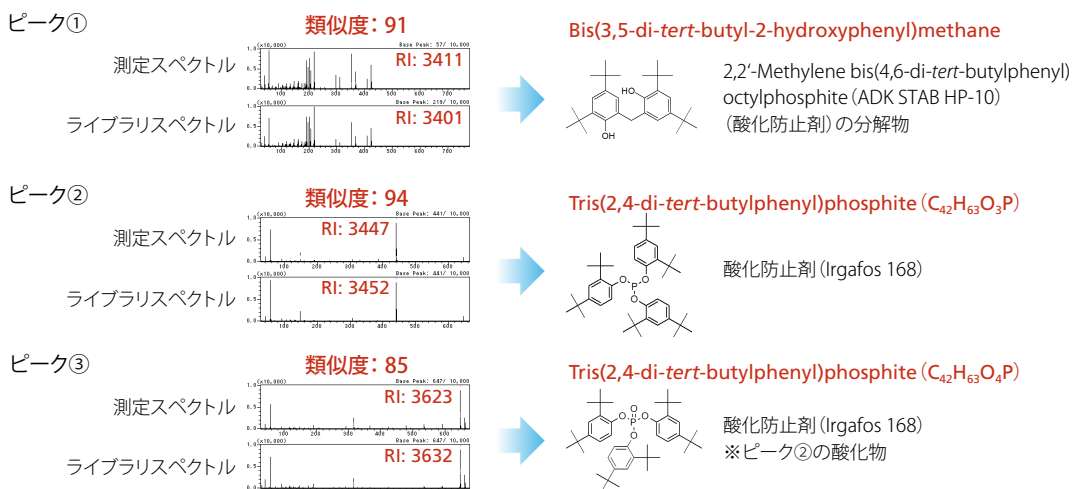


図24 高分子添加剤ライブラリによるピークの定性解析結果

# 包装材料に含まれる高分子添加剤の分析

## 医薬品包装材の 抽出物分析 (GC、GC-MS)

医薬品の包装材において注意すべき問題の一つに医薬品と包装材の相互作用の問題があります。通常の保管条件よりも過酷な条件を与えたうえで生じる化合物を抽出物、通常の保管条件で包装材から医薬品へ移行する物質は浸出物と呼ばれ、表9のように区分されています。医薬品を販売するうえで抽出物と浸出物を総合的に確認し包装材のリスクを把握する必要があります。

2020年7月にICHでは抽出物・浸出物の評価と管理のための新たなワーキンググループが発足しました(ICH-Q3E)。ワーキンググループ発足の最も大きな理由はバイオ医薬品の増加です。バイオ医薬品は高分子であり、経口による摂取が難しいためほとんどが注射剤です。ここでは、液体製材用のポリ塩化ビニル(PVC)製プラスチックバッグを2種類の前処理法:溶媒抽出・高温抽出を実施後、GC-MSで分析した例を紹介します。

表9 抽出物と浸出物の概要

	Extractables 抽出物	Leachables 浸出物
概要	包装材から抽出される可能性があるもの全て	通常使用条件時に浸出するもの
抽出条件	通常の使用・保管条件よりも苛酷。高温抽出・溶媒抽出を用いる。	通常の使用・保管条件下
測定対象	包装材	医薬品

溶媒抽出法で使用する溶媒は製剤によく使用されるエタノールとプラスチック成分を抽出するためによく利用されるジクロロメタン(DCM)およびヘキサンを用いました。サンプルを1 cm角に切り出して約400 mg測り取り、5 mLの各溶媒が入ったバイアルに入れてキャップをしました。このバイアルを5時間超音波処理し、その後室温で3日間放置し抽出しました。その後、有機溶媒の上清をGC-MSで分析しました。ヘキサン、DCM、エタノールの各抽出液の分析で得られたトータルイオンカレントクロマトグラム(TICC)を図25に示します。

高温抽出法では、ヘッドスペース-GC-MSを用いました。抽出温度を変化させて、結果を比較しました。図26に各温度で得られたTICCを示します。

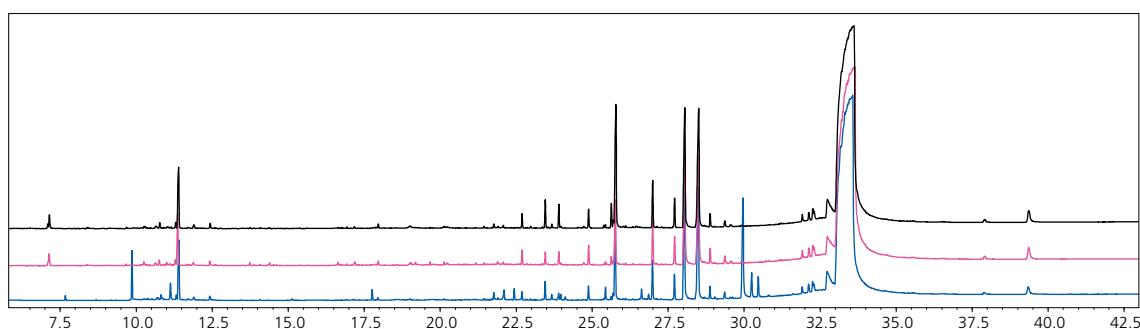


図25 溶媒抽出法で得られたTICC(黒:ヘキサン、ピンク:DCM、青:エタノール)

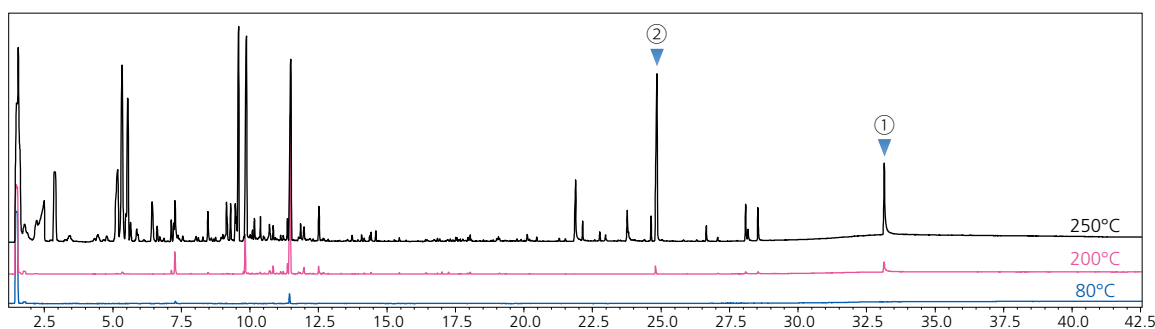


図26 高温抽出法で得られたTICC(黒:250°C、ピンク:200°C、青:80°C)

溶媒抽出法で検出された化合物を表10に示します。Tris(2-ethylhexyl)Trimellitate (TOTM) やBis(2-ethylhexyl)phthalate (DEHP)、Bis(2-ethylhexyl)adipate (DEHA) などの可塑剤やPalmitic acidやEthyl Palmitateなどの潤滑剤が検出されました。使用した抽出溶媒により、検出成分の違いがありました。これは抽出溶媒の極性の違いによるもので、ヘキサンのような低極性溶媒は極性の低い化合物の抽出効率が高く、エタノールのような高極性溶媒は極性の高い化合物の抽出効率が高いと考えられます。今回の分析では、エタノールによる抽出で多くの化合物が検出されました。

また、高温抽出法で検出された化合物を表11に示します。溶媒抽出法と高温抽出法の両方で、医薬品包装材からの抽出物が同定されました。溶媒抽出法は、種々の溶媒を使用することにより、幅広い特性の化合物をカバーすることができます。ヘッドスペースサンプリングを用いた高温抽出法では、溶媒抽出法に比べ簡便かつ短時間で前処理を行うことができます。なお、いずれの分析においても化合物の同定にはNISTライブラリ(2020年度版)および高分子添加剤ライブラリを用いてライブラリサーチしました。

表10 溶媒抽出法で検出された化合物

化合物名	ヘキサン	DCM	エタノール	備考
	R.T.(分)	R.T.(分)	R.T.(分)	
2-Ethylhexanol	—	—	9.86	
Isophorone	11.37	11.40	11.40	溶剤
Palmitic acid	—	21.77	21.77	潤滑剤
Ethyl palmitate	—	—	22.10	潤滑剤
2-Ethylhexyl methyl isophthalate	23.46	23.46	23.46	
Stearic acid	—	23.67	23.67	潤滑剤
Butyl palmitate	—	23.91	23.90	潤滑剤
Ethyl stearate	—	23.90	23.97	潤滑剤
Terephthalic acid, ethyl 2-ethylhexyl ester	—	—	24.12	
Methyl 9,10-epoxystearate	24.89	24.89	24.88	
Butyl stearate	—	25.63	—	潤滑剤
Bis(2-ethylhexyl) adipate	25.75	25.78	25.78	可塑剤 (DEHA)
Ethyl stearate, 9,12-diepoxy	—	—	26.63	
Bis(2-ethylhexyl) phthalate	27.00	26.99	26.99	可塑剤 (DEHP)
Bis(2-ethylhexyl) isophthalate	28.03	28.05	28.04	可塑剤
Bis(2-ethylhexyl) terephthalate	28.48	28.51	28.50	可塑剤
Epoxidized 2-ethylhexyl oleate	29.37	—	29.36	
Tris(2-ethylhexyl) Trimellitate	33.67	33.65	33.59	可塑剤 (TOTM)

表11 高温抽出法で検出された化合物

化合物名	R.T.(分)	備考
Benzene	2.87	溶剤
2-Ethyl-1-hexene	5.52	TOTMの分解物
2-Chloro-octane	9.27	PVCの分解物
3-(Chloromethyl)heptane	9.57	PVCの分解物
2-Ethylhexanol	9.85	TOTMの分解物
Isophorone	11.47	溶剤
Palmitic acid	21.85	潤滑剤
Stearic acid	23.73	潤滑剤
Butyl palmitate	23.95	潤滑剤
Unidentified	24.80	TOTMの分解物
Bis(2-ethylhexyl) adipate	25.79	可塑剤
Bis(2-ethylhexyl) phthalate	27.03	可塑剤 (DEHP)
Bis(2-ethylhexyl) isophthalate	28.05	可塑剤
2-Ethylhexyl stearate	28.14	
Bis(2-ethylhexyl) terephthalate	28.50	可塑剤
Tris(2-ethylhexyl) Trimellitate	33.10	可塑剤 (TOTM)

高温抽出法に用いられるヘッドスペースサンブラについて、電子冷却トラップを搭載した**トラップヘッドスペースサンブラHS-20 NX Trap**は最高300℃までの加熱ができるため、従来のスタティックヘッドスペース (SHS) 法と比較して、20倍以上の感度が得られます。これは加熱脱離法と比較しても同等の感度です。点眼薬容器からの熱抽出物の測定結果をSHS法、THS法で比較した結果を紹介します。

図27にTHS法の原理を示します。固体サンプルの場合のバイアル内圧は80℃保温で10 kPa、100℃で22 kPaなのでその2倍以上の圧力で1分間加圧します (Pressurizing time)。次にヘッドスペースをトラップに導入します (Load time)。これでヘッドスペース中の分子の約50%がトラップに濃縮されます。この加圧とロードを繰り返します。

図28に点眼薬容器の部位別に測定した結果を示します。低密度ポリエチレン製のノズルおよびボトルは、高密度ポリエチレン製のキャップと比べて熱分解成分の強度が小さい結果となっています。図29はノズルをSHS法、THS法のそれぞれで分析した結果を比較しています。SHS法でほとんど検出できない成分についてTHS法による測定結果ではライブラリーサーチでヒットするほどの十分なピーク強度を得ました。

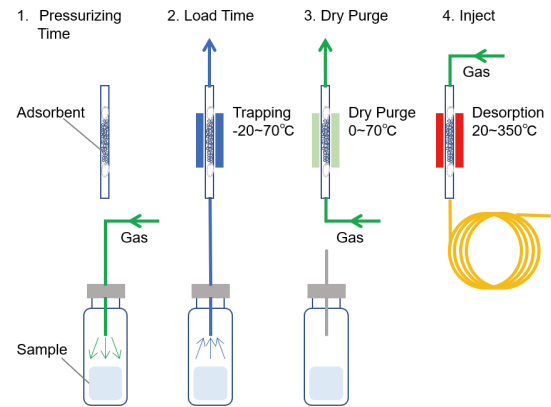


図27 THS法の原理

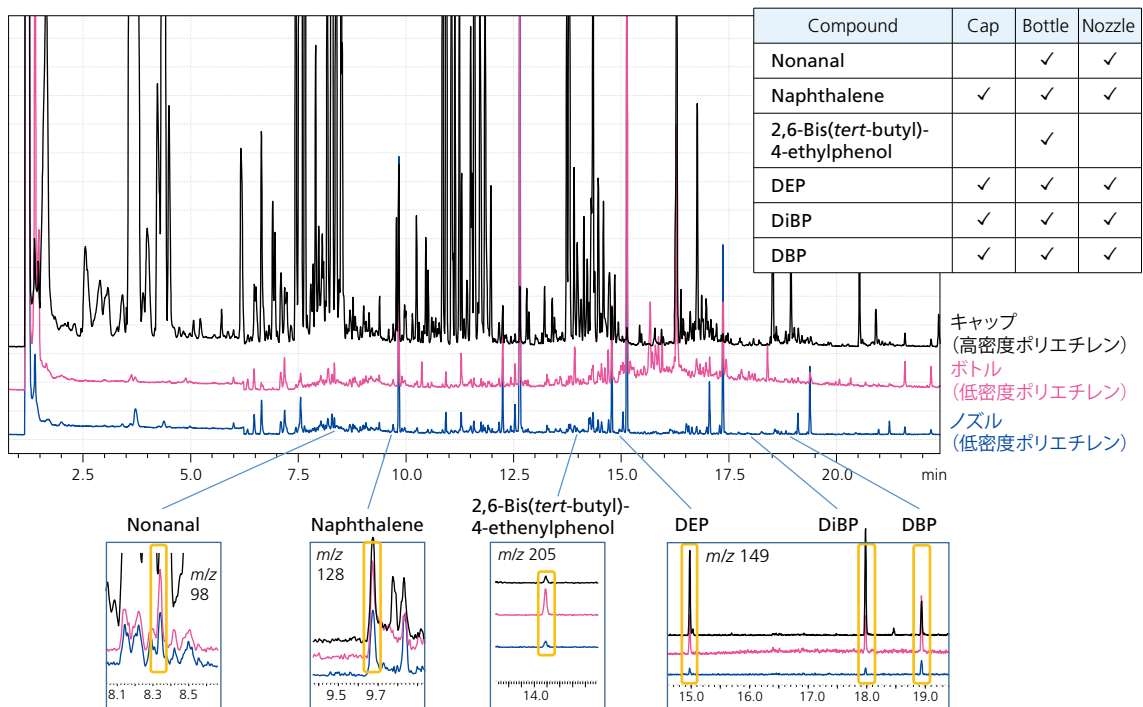


図28 点眼薬容器の熱抽出成分

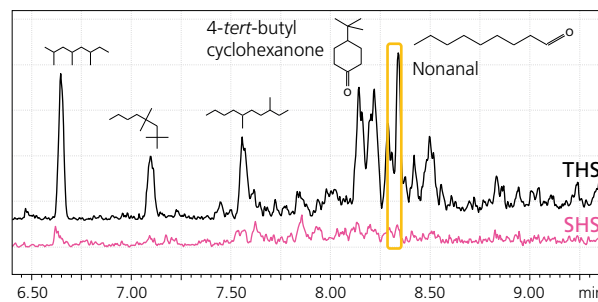


図29 SHS法とTHS法の比較

## CFRPプリプレグ中 残留溶媒 (N-メチル ピロリドン) の 迅速分析 (DART-MS)

炭素繊維強化プラスチック (Carbon fiber reinforced plastic ; CFRP) は、樹脂を炭素繊維で強化した複合材料で、軽量で高強度・高剛性という優れた特徴を備えています。CFRPは航空機や自動車などをはじめとする輸送機、工業材料、建築資材など幅広い分野で利用されています。航空機の用途で 사용되는CFRPの母材には、エポキシ樹脂が使われていますが、120℃以上の耐熱性がないため、さらに耐熱性を高めることを目的としてポリイミド樹脂を使用したCFRPが開発されています。

CFRPはプリプレグという炭素繊維などに樹脂を含浸させて作られた中間材料を積層し、オートクレーブなどの方法によって成型されます。*N*-メチル-2-ピロリドン (NMP) は熱硬化性ポリイミドのプリプレグ製造時に流動性を高めるために用いられます。ポリイミドの流動性を高めることによって樹脂成型性を改善しますが、CFRP成型後にNMPが残留すると、ポイド (空隙) が発生し、強度を低下させる可能性があります。

DART (Direct Analysis in Real Time) は、試料を直接イオン化することができる方法であり、気体、液体、固体いずれの形態の試料でも前処理なしで迅速に測定することができるため、CFRPのように溶解が困難な試料に対して非破壊で迅速なスクリーニングが可能です。ここではDARTとトリプル四重極質量分析計を組み合わせ、CFRP中の残留溶媒の迅速分析を実施した例をご紹介します。

図30に測定試料として用いたプリプレグの外観を示します。NMPが使用されていない熱可塑性ポリイミド樹脂 (#1)、製造後から長期間大気開放させた熱硬化性ポリイミド樹脂 (#2)、製造後冷凍保管させた熱硬化性ポリイミド樹脂 (#3) を母材とした、3種類のプリプレグをDART-MSで測定しました。図31にそれぞれのMSスペクトルを示します。

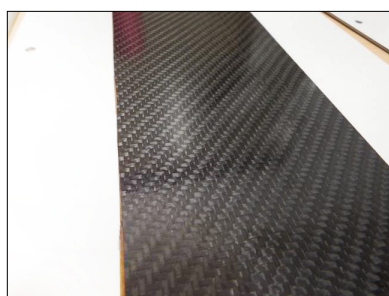


図30 プリプレグの外観



DART-MS イオン源 (IonSense) およびトリプル四重極LCMS

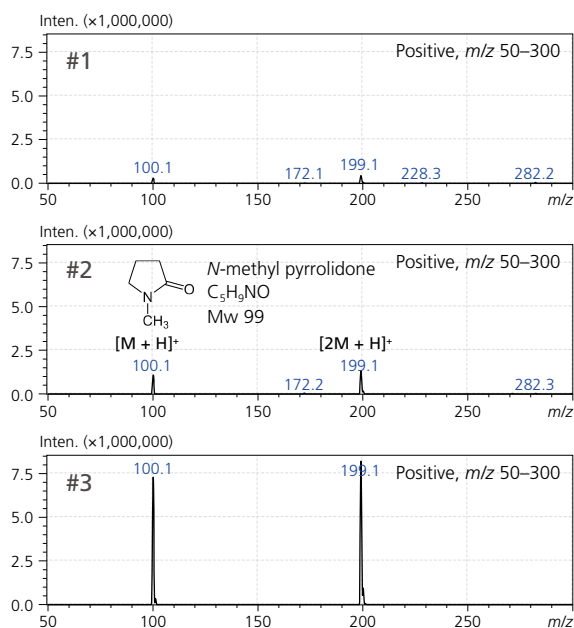


図31 DART-MSによるプリプレグのMSスペクトル  
(#1: 熱可塑性ポリイミド樹脂、#2: 大気開放後の熱硬化性  
ポリイミド樹脂、#3: 冷凍保管した熱硬化性ポリイミド樹脂)

各試料のスペクトルは、 $m/z$  50から300の範囲のポジティブモードで取得しています。冷凍保管させた熱硬化性ポリイミド樹脂のプリプレグを測定したMSスペクトル (#3) には、NMPに関連する  $[M+H]^+$  ( $m/z$  100) と  $[2M+H]^+$  ( $m/z$  199) が非常に高い強度で検出されました。また、長期間大気保管したプリプレグ (#2) は#3と比較して強度は低ですが、NMPに関連する成分が検出されています。なお、NMPが用いられない熱可塑性ポリイミド樹脂のプリプレグ (#1) からはほとんど検出されませんでした。

DART-MSを用いたNMPのスクリーニング分析より、長期間大気開放したプリプレグに残存するNMPを高感度に検出することができました。成型後のCFRPにNMPが残存すると強度低下に繋がりますが、DART-MSにより試料をそのまま簡単にスクリーニング分析することが可能です。

## 高分子添加剤とGPCの同時分析 (HPLC)

高分子の分子量分布の測定はサイズ排除モードで行われるHPLC分析の一分野で、古くからGPC (gel permeation chromatography) と呼称されています。昨今の高速化によるスループットの向上の要求は分析手法の確立したGPCでも重要視されつつあります。ここでは、一般的なカラムを用いたオーバーラップインジェクションによる効率化と、高分子添加剤の定量を同時に行った例を紹介します。

高分子化合物の平均分子量、多分散度を計算するGPC分析では、重量応答する示差屈折率検出器 (RID) を用いる場合が多く、酸化防止作用のある添加剤の分析には二重結合を持つ化合物が多いため、UV検出器が多用されます。図32に今回の検討に用いたポリスチレンと3種の添加剤をGPC分析して得られたクロマトグラムを示します。GPC分析においては、排除限界以前の成分が溶出することはほとんどなく、連続して分析する場合、溶出成分のないクロマトグラム前半に、前回分析の成分溶出バンドを重ねるように注入タイミングを制御することで、分析時間の短縮、即ちスループットの向上が図れます。図32に示すクロマトグラムでは、0~15.5 minの区間に溶出成分がないことから、これをオーバーラップ区間としたオーバーラップインジェクション分析を実施しました。その際のオーバーラップの有無による連続クロマトグラムの比較を図33に示します。ほぼ半減した分析サイクルによるハイスループット化が確認できます。この方法を用い、RIDによるポリスチレンのGPC計算した結果を表12に示します。

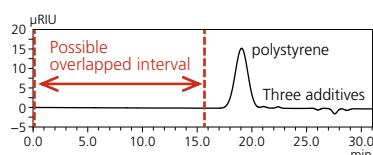


図32 オーバーラップ処理の模式図

表12 ポリスチレン試料の分析結果 (n=6)

	Number average molecular weight Mn	Weight average molecular weight Mw	Polydispersity Mw/Mn
Polystyrene	$2.63 \times 10^4$	$4.89 \times 10^4$	1.86
%RSD	1.41	0.89	0.52

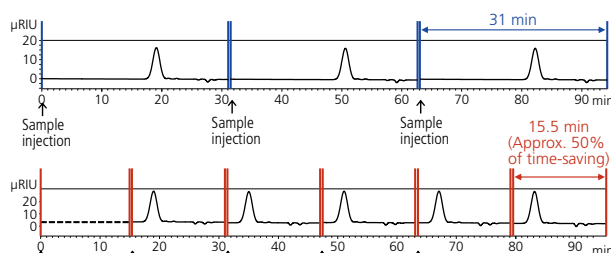


図33 オーバーラップインジェクションによる効率化例 (RID)  
(上: 通常のGPC分析、  
下: オーバーラップインジェクション適用時)

複数の添加剤が共存する場合、排除限界の小さなカラムを使っても、低分子の添加剤相互の完全分離は難しく、正確な定量分析は困難な場合がほとんどです。そこで、UV検出器にスペクトル情報も同時に得られるフォトダイオードアレイ検出器 (PDA) を採用し、ピークデコンボリューション機能を用いて未分離添加剤相互の分離向上による定量も併せて実施しました。検出にPDAを用いて得られた三次元のスペクトル情報を元に、未分離ピークを分離を行うi-PDeA IIというLabSolutions (ワークステーション) の機能があります。図34にはPDAでUV240 nmでの切り出しクロマトグラムとデコンボリューション機能を用いて得られた各単一成分のクロマトグラムの重ね描きを示します。UV検出だけでは、2つのピークしか確認できないものの、i-PDeA IIでの処理により3つのピークが確認できるようになりました。また本機能ではデコンボリューションによって得られたピークの面積は、直接的に未分離のオリジナルデータにおける各成分の寄与を示すものになるので、無加工で定量計算に用いることができます。

3種の添加剤について0.01~0.1% (w/v) の範囲で検量線を作成し、それを用いてポリスチレン試料に添加した添加剤の定量計算を行いました。それぞれの検量線の直線性および6回の繰り返し分析の定量結果を表13に示します。オーバーラップインジェクションによるGPC分析の効率化と、GPCカラムの低分子領域での分離性能を補うi-PDeA IIでの定量計算により、GPC分析における付加価値の高いハイスループット分析の可能性が示されました。

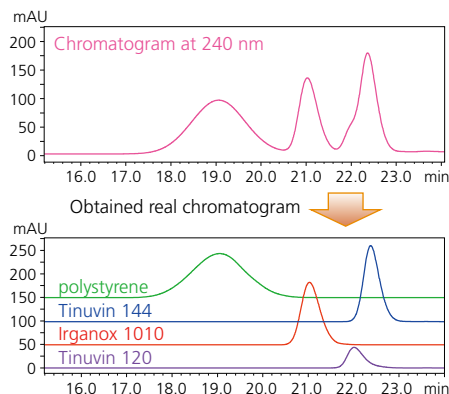


図34 3種の添加剤のデコンボリューション結果 (PDA)

表13 ポリスチレン試料中の添加剤の分析結果 (n=6)

Additive	Irganox 1010	Tinuvin 144	Tinuvin 120
Linearity of calibration curve ( $r^2$ )	0.999	0.995	0.998
Determined content (mg/g)	49.2	23.1	27.4
%RSD	1.28	1.93	1.47



# 合成高分子の分子量計算と高分子添加剤の同時分析

## アクリル板のオリゴマーと添加剤の分析 (MALDI)

高分子材料は光、熱、機械的要因、電気的要因、放射線、薬品、水分などの様々な要因で劣化します。この劣化を防ぐために酸化防止剤、紫外線吸収剤、HALS (Hindered Amine Light Stabilizer)、熱安定剤など多くの添加剤が開発され、高分子材料がもつ特性を維持するために使用されています。添加量は高分子材料の使用目的に応じてそれぞれ異なりますが、一般的には約1% (w/w) 以下の極微量で添加されています。また、同じ高分子材料であってもグレードやメーカーにより、添加剤の種類は異なります。従って高分子材料中の添加剤を分析することは各種高分子材料の性能調査や改良を行う上で非常に重要です。

ここでは、サイズ排除クロマトグラフィー (SEC) の溶出液とマトリクスを自動混合してMALDIサンプルプレートにスポットする装置 AccuSpotを用いて、溶解した市販アクリル板を分析した例をご紹介します。

約1 gにカットした市販のアクリル板をテトラヒドロフラン (THF) 1 mLに浸し、超音波処理を1分間施しました。その後、上澄み溶液を採取し、これを測定試料として用いました (図35)。図36にアクリル板から抽出した試料のクロマトグラムを示します。ピークの溶出開始から終了まで (7分~17分30秒) をAccuSpotにて6秒ごとに分取し、MALDIサンプルプレート上に105個の試料スポットを作成しました。

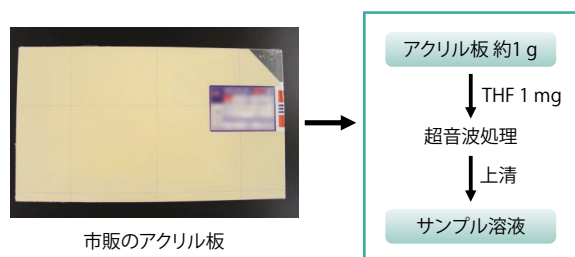


図35 試料の調製

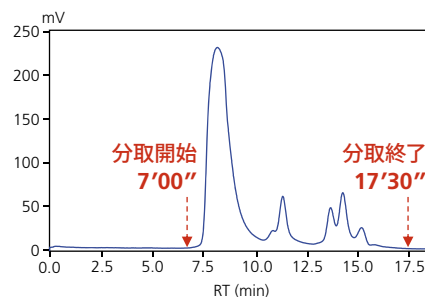


図36 アクリル板抽出液のクロマトグラム

各スポットをMALDI-TOFMS装置にて測定し、溶出時間に対応したマススペクトルを得ました (図37)。各フラクションから得られたマススペクトルはそれぞれ異なる分子量分布を示しています。11分10秒後のフラクションに注目すると、分離前には5倍に拡大しても観察されなかった添加剤のピーク ([IRGANOX 1010+Na]<sup>+</sup>, *m/z* 1200) が検出されました (図38)。また、添加剤と同時に *m/z* 2000付近を頂点とする3種類の異なる分子量分布が検出されました (●■▲)。隣り合うピーク間隔がいずれも100であることから、これらの分子量分布はすべて同一のモノマーユニットで構成されているオリゴマーであることが考えられます。分子量分布の相違はそれぞれのオリゴマー分子の末端構造の違いに帰因しています。

上記の結果から、今回用いた市販のアクリル板には添加剤として IRGANOX 1010が添加されていることが示されました。また、同時にアクリル板に含まれる微量のオリゴマー成分も検出することができました。

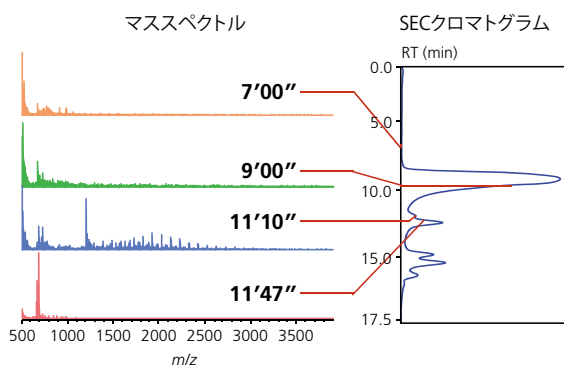


図37 各フラクションのMSスペクトル



MALDI-8030

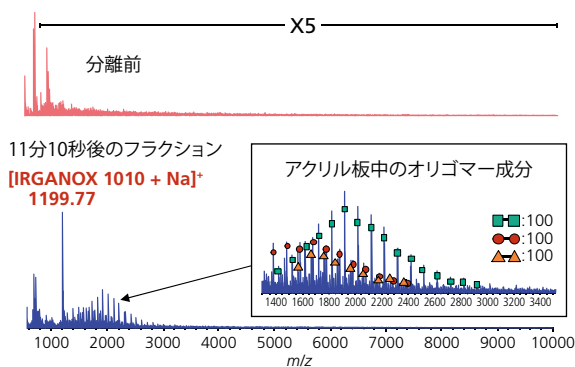


図38 アクリル板中の添加剤の検出

# 関連機器・製品のご紹介

ガスクロマトグラフ質量分析計

## GCMS-QP2020 NX

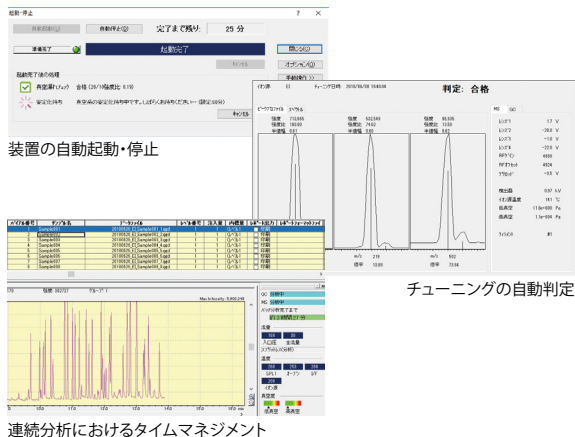
### ラボの可能性を最大限に拓げる Smartソリューション

さまざまな分野で利用されるGC-MSは、今や分析の汎用機となっています。その中で、装置のさらなるコストパフォーマンスの向上と、利用するユーザーのワークライフバランスが期待されています。

GCMS-QP2020 NXは、分析のあらゆる場面に対しての効率化を提案し、ラボの可能性を最大限に拓げます。

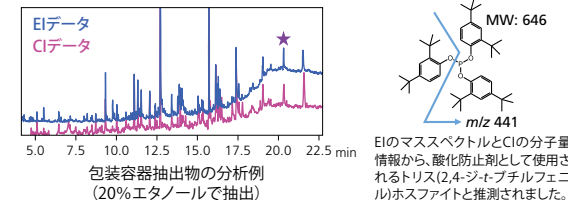
#### アクティブタイムマネジメント

メンテナンスやシステムの切り替えや分析にかかる時間を見える化し、装置の待機時間を適切に管理します。ユーザーが行っていた作業を自動化することで装置の効率的な運用が可能となります。



#### Smart EI/CIイオン源

新たに開発したSmart EI/CIイオン源は、イオン源を交換せずに汎用的に利用されるEIの感度を損なうことなくCIのデータを採取することができます。EI法ではマススペクトルライブラリを用いた同定が困難な場合でも、CI法のデータから分子量情報を取得することができ、未知の化合物の推定に役立ちます。



### フーリエ変換赤外分光光度計 IRTracer-100



SN比60,000:1の卓越した高感度、0.25cm<sup>-1</sup>の高分解能、20スキャン/秒の高速測定を実現。アドバンストダイナミックアライメント機構や除湿器付き干渉計が、中級機以上の高い性能と信頼性を支えます。

約12,000点のライブラリや異物解析プログラムを標準装備し、異物解析をサポート。また反応追跡のためのタイムコース測定やラピッドスキャン測定、近赤外/遠赤外測定にも対応可能。さらに赤外顕微鏡と組み合わせることにより、最小10μm<sup>2</sup>まで感度良くデータ取得が可能です。さまざまなアプリケーションに対応可能なFTIRです。

### エネルギー分散型 蛍光X線分析装置 EDX-7200



電子冷却方式の高性能半導体検出器を搭載し、ランニングコストの低減とメンテナンス性の向上を図るとともに、従来機を上回る感度、スループット、分解能を実現しました。軽元素分析に有効な真空ユニットや連続分析に有効なターゲットユニットなどのオプション機能も充実しています。ソフトウェアは簡単操作を実現したPCEDX-Navitと一般分析用途のPCEDX-Proを標準装備し、オプションとしてPCEDX-NavitにはEDX-LEで実現したスクリーニング機能、PCEDX-ProにはFDA 21 CFR Part 11システムも搭載可能です。管理用途としてのRoHS/ELV指令などの環境規制対応から、食品・医薬品中の不純物分析、研究用途としての一般材料分析における高度なニーズまで、業界を問わず幅広く対応します。

# 高分子添加剤ライブラリ

高分子材料に用いられる幅広い添加剤の情報を登録したGC/MSマススペクトルライブラリです。約4900種のマススペクトルに加え、保持指標、添加剤の分類情報、分解生成物の情報も収録しており、添加剤の深い知識がなくても簡単に添加剤の解析が可能です。熱分解GC/MSはもちろん、液打ちGC/MSなどさまざまなGC/MSシステムで使用可能なライブラリです。



## 保持指標によるフィルタリング

類似構造をもつ化合物が沢山ある添加剤成分では、マススペクトルだけの類似度検索では複数の候補化合物が上位にヒットする場合があります。保持指標でフィルタリングすることで候補が絞り込まれ、効率よく同定することが可能になります。

マススペクトルの類似度検索の結果

ヒット番号	類似度	登録	保持指標	化合物名	分子量	分子式	タグ名
1	85	<input checked="" type="checkbox"/>	1729	Ethylhexyl benzoate [Original Additive: Bis(2-ethylhexyl) phr	234	C15H22O2	FLAB_ADD1
2	81	<input type="checkbox"/>	2042	Undecyl benzoate [Original Additive: Dodecyl phthalate]	276	C18H28O2	FLAB_ADD1
3	81	<input type="checkbox"/>	1796	Octyl benzoate [Original Additive: Tri-n-octyl trimellitate SS	234	C15H22O2	FLAB_ADD1
4	79	<input type="checkbox"/>	2109	Tridecyl benzoate [Original Additive: Dodecyl phthalate]	304	C20H32O2	FLAB_ADD1
5	66	<input type="checkbox"/>	783	1-o-Cetene [Original Additive: Alkyl phosphite]	112	C18H36	FLAB_ADD1
6	66	<input type="checkbox"/>	791	Isomer of C18H36 [Original Additive: Alkyl phosphite]	112	C18H36	FLAB_ADD1
7	65	<input type="checkbox"/>	1381	m-Butylbenzoate [Original Additive: Butyl phthalate (DEP)	178	C11H14O2	FLAB_ADD1

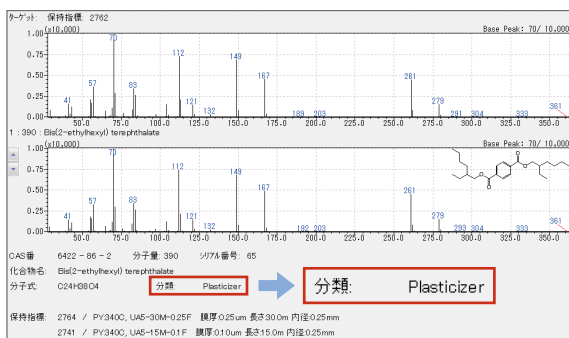


保持指標によるフィルタリングを行い、絞り込んだ結果

ヒット番号	類似度	登録	保持指標	化合物名	分子量	分子式	タグ名
1	85	<input checked="" type="checkbox"/>	1729	Ethylhexyl benzoate [Original Additive: Bis(2-ethylhexyl) phr	234	C15H22O2	FLAB_ADD1

## 添加剤の分類情報の確認

添加剤の分類情報(可塑剤、難燃剤など)が登録されているので、ヒットした化合物がどのような添加剤に関与するのを確認するのに役立ちます。



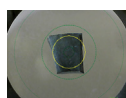
## EDX-FTIR統合解析ソフトウェア

### EDXIR-Analysis

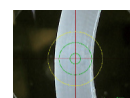


EDX-FTIR統合解析ソフトウェア EDXIR-Analysisは、蛍光X線分析装置(EDX)およびフーリエ変換赤外分光光度計(FTIR)で取得したデータを用い、定性分析するための専用ソフトウェアです。

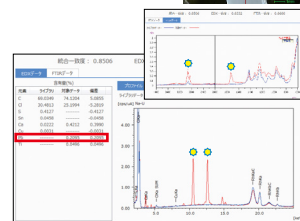
本ソフトウェアでは、有機物の同定・定性に優れたFTIRと、金属や無機化合物などの含有元素分析に優れたEDXのデータを統合的に解析し、同定結果および一致度を求めます。また、EDXもしくはFTIR単独の解析も可能です。解析に使用するライブラリは、水道事業者および食品メーカーのご協力を得て作成した島津オリジナルライブラリ(標準で485データ収録)で、データの追加登録や画像ファイル・PDF形式の文書ファイルの登録も可能です。各種データを電子ファイルとして紐付けて保管する場合にも有効です。



統合解析



データ比較



本文書に記載されている会社名、製品名、サービスマークおよびロゴは、各社の商標および登録商標です。  
なお、本文中では「TM」、「®」を明記していない場合があります。  
本製品は、医薬品医療機器法に基づく医療機器として承認・認証等を受けておりません。  
治療診断目的およびその手続き上での使用はできません。  
トラブル解消のため補修用部品・消耗品は純正部品をご採用ください。  
外観および仕様は、改良のため予告なく変更することがありますのでご了承ください。

# 株式会社 島津製作所

分析計測事業部 604-8511 京都市中京区西ノ京桑原町1

東京支社 101-8448 東京都千代田区神田錦町1丁目3  
(03) 3219-(官公庁担当) 5631・(大学担当) 5616・(会社担当) 5622  
関西支社 530-0012 大阪市北区芝田1丁目1-4 阪急ターミナルビル14階  
(06) 6373-(官公庁・大学担当) 6541・(会社担当) 6556  
札幌支店 060-0807 札幌市北区北七条西2丁目8-1 札幌北ビル9階 (011) 700-6605  
東北支店 980-0021 仙台市青葉区中央2丁目9-27 プライムスクエア広瀬通12階 (022) 221-6231  
郡山営業所 963-8877 郡山市堂前町6-7 郡山フコク生命ビル2階 (024) 939-3790  
つくば支店 305-0031 つくば市吾妻3丁目17-1  
(029) 851-(官公庁・大学担当) 8511・(会社担当) 8515  
北関東支店 330-0843 さいたま市大宮区吉敷町1-41 明治安田生命大宮吉敷町ビル8階  
(048) 646-(官公庁・大学担当) 0095・(会社担当) 0081  
横浜支店 220-0004 横浜市西区北幸2丁目8-29 東武横浜第3ビル7階  
(045) 311-(官公庁・大学担当) 4106・(会社担当) 4615  
静岡支店 422-8062 静岡市駿河区稲川12丁目1-1 伊伝静岡駅南ビル2階 (054) 285-0124  
名古屋支店 450-0001 名古屋市中村区那古野1丁目47-1 名古屋国際センタービル19階  
(052) 565-(官公庁・大学担当) 7521・(会社担当) 7531  
京都支店 604-8445 京都市中京区西ノ京徳大寺町1  
(075) 823-(官公庁・大学担当) 1604・(会社担当) 1603  
神戸支店 650-0033 神戸市中央区江戸町9-3 栄光ビル9階 (078) 331-9665  
岡山営業所 700-0826 岡山市北区磨屋町3-10 岡山ニューシティビル6階 (086) 221-2511  
四国支店 760-0017 高松市番町1丁目6-1 高松NKビル9階 (087) 823-6623  
広島支店 732-0057 広島市東区二葉の里3丁目5-7 GRANODE広島5階 (082) 236-9652  
九州支店 812-0039 福岡市博多区冷泉町4-20 島津博多ビル4階  
(092) 283-(官公庁・大学担当) 3332・(会社担当) 3334

島津コールセンター（操作・分析に関する電話相談窓口） ☎ 0120-131691  
IP電話等：(075) 813-1691

<https://www.an.shimadzu.co.jp/>