

GC/MSマスペクトルライブラリ

# 高分子添加剤ライブラリ

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への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GCMS™マスペクトルライブラリです。マスペクトルだけでなく保持指標や添加剤の分類情報も収録しており、添加剤の詳細な解析が可能になります。



GCMS-QP2020 NX

## 約4,900種のマスペクトルを収録

494種の高分子材料向け添加剤および添加剤の熱分解GC/MS分析の熱分解生成物のマスペクトルを4,804収録する既存のライブラリ\*に加え、市場での使用状況や化学物質規制情報を基に選定した分析要求の高い化合物65種のマスペクトルを収録したライブラリを追加しました。合計で4,869種のマスペクトルを収録し、高分子添加剤の分析を強力にサポートします。

\*フロンティア・ラボ社製“F-Search添加剤ライブラリ ADD-MS16B”

## “Ready to Use Method” をご提供します

GC条件やMS測定パラメータがあらかじめ登録されたGCMSメソッド、PY条件があらかじめ登録されたPYメソッドを提供します。誰でも簡単に最適な分析条件で分析を開始できます。

## ライブラリ仕様

登録数\* : 4,804+65

登録情報 : マスペクトル、各分析条件の保持指標、化合物名称、分子量、組成式、構造式、添加剤分類

対象装置 : GCMS-QP™シリーズ + GCMSsolution™ Ver. 2.6以降

GCMS-TQ™シリーズ + GCMSsolution Ver. 4.0以降 (MS/MS関連のスペクトルは含みません。)

パイロライザー (熱分解分析システムの場合) : PY-2020D、PY-2020iD、EGA/PY-3030D

## 保持指標、添加剤分類情報を登録

すべての化合物について保持指標が登録されています。保持指標を活用したライブラリ検索結果の絞り込みにより、精度の高い化合物の同定が可能です。また、添加剤の分類情報も登録されており、添加剤の詳しい知識がなくてもライブラリでヒットした化合物がどのような添加剤に関するかが分かります。

## さまざまなGC/MSシステムで使用可能

樹脂中添加剤分析に広く用いられる熱分解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。幅広いお客様の添加剤分析をサポートします。

\*2種類のライブラリから構成されます。登録数4,804のライブラリは、フロンティア・ラボ株式会社が開発した“F-Search添加剤ライブラリ ADD-MS16B (Ver. 16B.02)”を島津製作所のマスペクトルライブラリフォーマットに変換し、GCMSsolutionで使用できるようにしたものです。登録数65のライブラリは、島津製作所が独自に開発した添加剤ライブラリで、市場での使用状況や化学物質規制情報を基に選定した分析要望の多い添加剤を登録しています。2つのライブラリを併用することで、さらに幅広い添加剤の解析が可能になります。

## 高分子添加剤ライブラリ

## 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	ライブラリ名
1	95	<input checked="" type="checkbox"/>	1729	Ethylhexyl benzoate [Original Additive: Bis(2-ethylhexyl) phthalate]	234	C15H22O2	FLAB_ADD1
2	81	<input type="checkbox"/>	2042	Undecyl benzoate [Original Additive: Diundecyl phthalate]	276	C18H28O2	FLAB_ADD1
3	81	<input type="checkbox"/>	1796	Octyl benzoate [Original Additive: Tr-n-octyl trimellitate]	234	C15H22O2	FLAB_ADD1
4	79	<input type="checkbox"/>	2109	Tridecyl benzoate [Original Additive: Diundecyl phthalate]	304	C20H32O2	FLAB_ADD1
5	66	<input type="checkbox"/>	793	1-Octene [Original Additive: Alkyl phosphates]	112	C8H16	FLAB_ADD1
6	66	<input type="checkbox"/>	791	Isomer of C8H16 [Original Additive: Alkyl phosphates]	112	C8H16	FLAB_ADD1
7	65	<input type="checkbox"/>	1381	n-Butylbenzoate [Original Additive: Dibutyl phthalate (DBP)]	178	C11H14O2	FLAB_ADD1

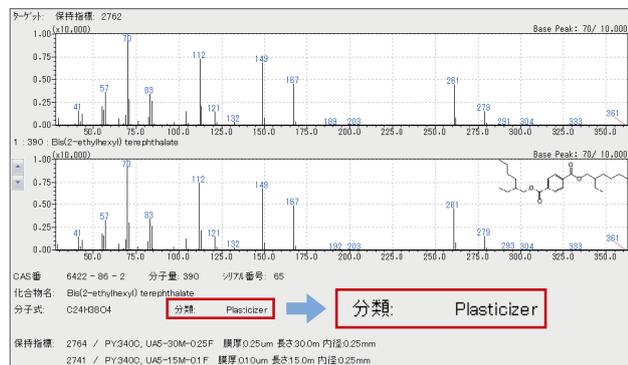


保持指標によるフィルタリングを行い、絞り込んだ結果

ヒット番号	類似度	登録	保持指標	化合物名	分子量	分子式	ライブラリ名
1	95	<input checked="" type="checkbox"/>	1729	Ethylhexyl benzoate [Original Additive: Bis(2-ethylhexyl) phthalate]	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かわかるのに役立ちます。

フタル酸エステルスクリーニングシステム  
Py-Screener™との併用が可能

Py-Screenerと併用することで、フタル酸エステルをスクリーニングするだけでなく、その他の広範な添加剤の解析が可能になります。



## システム構成例※

## 熱分解分析システム



## 液打ち分析システム



※ 保持指標の精度は、試料導入方法によって異なります。

熱分解GC/MS分析による熱分解物の一部は熱分解GC/MS以外の分析では検出されない可能性があります。

GCMS、GCMS-QP、GCMSsolution、GCMS-TQおよびPy-Screenerは、株式会社島津製作所またはその関係会社の日本およびその他の国における商標です。

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

製品情報



価格お問合せ



東京支社 (官公庁担当) (03) 3219-5631  
(大学担当) (03) 3219-5616  
(会社担当) (03) 3219-5622

関西支社 (06) 4797-7230

札幌支社 (011) 700-6605

東北支店 (022) 221-6231

郡山営業所 (024) 939-3790

つくば支店 (官公庁・大学担当) (029) 851-8511  
(会社担当) (029) 851-8515

北関東支店 (官公庁・大学担当) (048) 646-0095

(会社担当) (048) 646-0081

横浜支店 (官公庁・大学担当) (045) 311-4106

(会社担当) (045) 311-4615

静岡支店 (054) 285-0124

名古屋支店 (官公庁・大学担当) (052) 565-7521  
(会社担当) (052) 565-7531

京都支店 (官公庁・大学担当) (075) 823-1604

(会社担当) (075) 823-1603

神戸支店 (078) 331-9665

岡山営業所 (086) 221-2511

四国支店 (087) 823-6623

広島支店 (082) 236-9652

九州支店 (官公庁・大学担当) (092) 283-3332

(会社担当) (092) 283-3334

島津コールセンター ☎ 0120-131691

(操作・分析に関する相談窓口) IP電話等: (075) 813-1691