(J.Soc.Cosmet.Chem.Jpn.)
29(4) 406—410 (1996)

パソコンを使った GC/MS データ処理システム†¹

橋詰順江, 原田公博, 西村 修, 和泉健次郎

小川香料株式会社 岡山研究所†²

従来から当社では、香料分析をする際の主要な機器として GC/MS を用いてきたが、旧システム本体のミニコンではクロマトグラムのピーク面積計算ができず、別の機器を用いなければならなかった。つまり GC/MS での成分検索結果を一括してデータ出力ができなかったため、それぞれを手動で修正し、照合させる必要があった。さらに、このシステムでは一時に一データしか処理できず、データを出力するのにかなり時間がかかっていた。

そこで、本レポートではデータを一括して GC/MS 本体から外部 PC まで転送でき、その PC で迅速かつ簡単に測定結果を検索、編集できるデータ処理システム(PC-LAN システム)を構築したので報告する。このシステムでは、PC だけで測定結果をすべて処理でき、PC を複数台接続できることから、短時間でかつ同時に複数の分析ができるようになった。またライブラリ条件検索も旧システムに比べて格段に速くなった。

1. 緒言

近年の分析機器の発展は目ざましいものがあり、香料のような数百成分が存在している試料でも、GC/MS 分析することで容易に成分検索できるようになった。

従来から当社では、香料分析の主要な機器として GC/MS (日立 M 80 B 形質量分析計)を用いていた。この GC/MS での測定結果は、本体のミニコンで処理していたが、クロマトグラムのピーク面積計算ができなかったため、別の機器を用いてデータを別々に処理しなければならなかった。つまり、一括してそれらのデータ出力ができなかったため、それぞれのデータを手動で修正し、さらに照合させる必要があった。さらに、この旧システムでは一時に一データしか処理できず、データを出力するのにかなり時間がかかっていた。また、ライブラリ検索の際、プライベートライブラリをディスプレイ表示するには、条件入力検索を

していたが、化合物のライブラリ No 以外の条件検索は、かなりの時間がかかっていた。

また、既存のデータ解析ソフトやシステムでは、旧システムで蓄積してきたライブラリデータが使用できず、欠点(データを一時に一データしか処理できない、プライベートライブラリの条件入力による表示ができない等)もあった。これらの欠点を克服し、且つ今まで蓄積されてきた当社のライブラリデータを有効に活用するため、GC/MS (日立 M-2500 形質量分析計)から出力される検索結果を管理するデータ処理システム(PC-LAN システム)を構築し、迅速な検索結果の編集、管理を可能にしたので報告する。

2. システム構成

M-2500 形質量分析計用 PC-LAN システムを Fig.-1 に示した。

このシステムは、以下のような特徴がある。

- 1) M-0301 形データ処理装置から RTIC(MS より得られるクロマトグラム)データ、生データ及び検索結果全てを一括で、受信パソコン外部ハードディスクに転送、保存することができる。

†¹ 1995. 2. 28 受理

†² 〒709-43 岡山県勝田郡勝央町太平台 1-2; 1-2
Taiheidai, Shoocho, Katuta-gun, Okayama 709-43
Japan

Fig.-1 Constitution of PC-LAN system

- 2) M-0301 から転送されたデータは、すべてモニター用パソコンで編集、管理し、レーザープリンタ、XYプロッタより出力することができる。
- 3) M-0301 のライブラリデータを受信用パソコンに転送すると、内部ハードディスクに保存され、モニター用パソコンでデータの再検索に用いる他、条件入力により単独でディスプレイに出力できる。

3. PC-LAN の主な機能 (Fig.-2)

- 3) “検索結果レポートメンテナンス” でデータファイルの編集を行う。各ピークに3個ずつまで検索結果候補が挙げられ、検索結果の修正は主にここで行う。
- 2) “RTIC マススペクトル出力・検索” で

は測定結果のクロマトグラム上の任意のMSスペクトルをディスプレイ・プロッタに出力でき、ライブラリ検索もできる。

- 3) “プライベートライブラリ表示” でプライベートライブラリを表示できる。条件入力(化合物名、分子式、シリアルNo等)によりライブラリ中のMSスペクトルを出力できる。
- 4) パソコンを複数接続することによって、同時に複数の分析者がデータ解析できる。

4. 実験 (ササユリ香気分析)

ササユリはユリ科の中でも、強く、華やかな香りをもつ花として知られている。この花2輪をヘッドスペース用テドラバッグで覆い、Porapak Q 吸着管を装着し吸引ポンプで500 ml/minで吸引

94年11月08日

<<< MENU >>>

- 1: 検索結果レポート作成
- 2: 検索結果レポート作成
- 3: RTIC・マススペクトル出力・検索
- 4: RTIC・マススペクトル出力(4)
- 5: プライベートライブラリデータ表示
- 6: マススペクトル出力・検索
- 7: マススペクトル出力・検索
- 8: 検索結果レポートファイル作成
- 9: システム終了

番号を選択して下さい

[F1]

☆☆ RTIC・マススペクトル出力・検索 ☆☆☆

MENU

27-00

NORMAL プログラム 検索 印刷

☆☆ 検索結果レポートメンテナンス ☆☆☆

検索

MENU 前画 次画

印刷

Fig.-2 The PC main function on PC-LAN system

☆☆ プライベートライブラリデータ表示 ☆☆☆

指定方法 [1] (1: LIB No 2: 検索)

LIB No ()

検索条件
使用LIB () RI範囲 ()-()
REF No ()
Cmpound ()
分子式 ()
分子量 ()
C: ()-() H: ()-() D: ()-()
N: ()-() O: ()-() S: ()-()
P: ()-() BR: ()-() F: ()-()
Cl: ()-()
その他 ()-()

マススペクトル出力条件
質量範囲 (251- (350)

終了

した。30分香気捕集した吸着管をTCT装置に装着し、GC/MS分析した、この結果をPC-LANシ

ステムでデータ解析し(Fig.-3),旧システムと比較した。

SAMPLE No : 3348
 SAMPLE NAME : SASAYURI H.S.
 DATE : '84年10月04日
 ANALYST : O.NISHIMURA
 COMMENT : M-2500,OV-101,50m X 0.25mm i.d.,#0--SC--210

PAGE: 1/ 1

No	RT(MIN)	AREA%	COMPOUND	LIB No	I2	S.I
SCAN No	Wt			Iu	I4	CON
1	5.04	0.14	TOLUENE	0	0	0
2	6.46	2.47	DIMETHYL ACETAMIDE,N,N-	706	0	0
3	9.16	0.57	BENZALDEHYDE	840	1	1
4	459-453	0.28	PHENOL	782	0	X
5	9.58	0.28	PHENOL	2501	932	1
6	10.78	0.16	MYRCENE	880	0	C
7	12.54	0.46	OCIMENE,CIS-	54	980	1
8	12.54	0.15	OCIMENE,TRANS-	895	0	C
9	13.96	0.45	LINALOOL OXIDE,CIS-	5743	988	1
10	14.70	9.68	LINALOOL OXIDE,TRANS-	827	0	B
11	15.16	10.29	LINALOOL	0	0	0
12	15.48	37.38	LINALOOL	968	0	0
13	15.56	1.95	2-PHENYLETHYL ALCOHOL	0	0	0
14	17.12	0.42	BENZYL ACETATE	872	0	0
15	18.36	16.22	LINALOOL OXIDE PYRANOID P1	8423	1	1
16	18.68	0.36	2-METHOXY-4-METHYLPHENOL	983	0	B
17	21.28	0.21	2-PHENYLETHYL ACETATE	2536	1057	1
18	21.56	0.05	GERANIOL	1007	0	C
19	22.48	0.02	INDOLE	2567	1077	1
20	25.98	0.13	EUGENOL	1023	0	C
21	27.00	0.08	VANILLIN	2502	1077	1
22	30.06	0.52	EUGENOL,ISO- P1	1041	0	B
23	30.44	0.03	GERANYL ACETONE	5689	1104	1
24	42.78	0.06	BENZYL BENZOATE	1042	0	C
	2140-2134			2509	1125	1
				1076	0	C
				388	1167	1
				1103	0	C
				922	1183	1
				1110	0	C
				1164	0	0
				0	0	0
				1169	0	0
				1596	1259	1
				1188	0	C
				2560	1351	1
				1281	0	C
				2522	1358	1
				1283	0	C
				5688	1394	1
				1347	0	D
				2023	1433	1
				1355	0	C
				2565	1715	1
				1634	0	D

Fig.-3 Searched reports of SASAYURI (*L. japonicum* Thunb.)'s headspace analysis

5. 結 果

この検索結果より、ササユリの香気成分は主に、PHENYLACETALDEHYDE, LINALOOL, LINALOOL OXIDE, 2-PHENYLETHYL ALCOHOL であることがわかった。これを旧システムで行うと、測定から分析終了まで6時間程度かかるが、PC-LAN システムで行うと3時間程度で解析できた。

6. 考 察

本 PC-LAN システムの利点は、

- 1) 簡単に検索結果を編集できる。
- 2) 外部パソコンで、測定結果のクロマトグラム上の任意の MS スペクトルを出力でき、かつそのデータを検索させる MS スペクトルライブラリも、さらに条件（保持時間¹⁾等）を入力することにより、より確実な検索結果が得られるので検索が簡単である。
- 3) 外部パソコンで測定データを管理するので、本体が測定中でも、停止していても

測定結果を編集でき、かつ、一度に複数の分析者がデータ解析できる。

- 4) ライブラリデータの条件検索も簡単にできる。
- 5) 最終レポート以外プリントアウトの必要がないので、紙の無駄が大幅になくなる。等が挙げられる。また欠点として、
 - 1) 画面構成が単一のため、他の画面を同時に見ることができない。
 - 2) 編集したファイルはクロマトグラム付きでフロッピー保管できない。
 - 3) ピーク面積の再計算がモニター用パソコンではできない。

等が挙げられる。

将来は以上の欠点を克服することが目標であるが、ソフトが Windows 化されれば、さらに迅速な編集ができるだろう。

引用文献

- 1) 山田秀基, 原田公博, 中村修一, 三原智, J. Soc. Cosmet. Chem. Japan., 21,30 (1987)

A GC/MS Data Analytical System with Personal Computers

Yoshie Hashizume, Kimihiro Harada, Osamu Nishimura and Kenjiro Izumi
Okayama Laboratory, OGAWA&CO., LTD.

We have been using a GC/MS as a main instrument of perfume analysis. However, a mini-computer with our previous system wasn't able to calculate area% of peaks, so that we had to use other instruments to calculate it. In other words, we weren't able to modify data and compare with each data at the same time, it took time for system to put data out.

In the present study, we introduced a GC/MS data analytical system (PC-LAN system) that enabled us to search and edit data using a external PC in a simple and quick way. It was established in this system that all data were modified with a PC alone. Moreover, several PCs connected with this system provided us simultaneous analyses of some samples at the same time. The newly established system also prompted a library search.