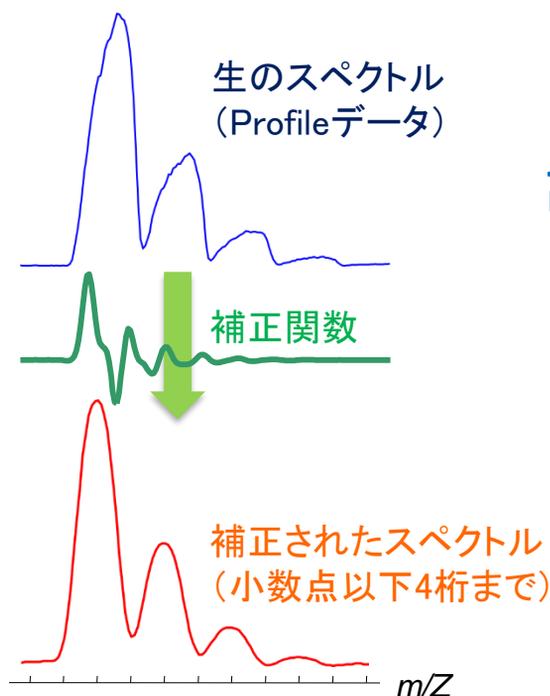


MassWorks™は四重極GC/MSの組成計算能を飛躍的に向上させます。より高い確度の定性分析を実現します。



高分解能MSを用いずに組成推定

- シングル四重極との組み合わせで組成推定が行えるので、とても低コスト
- 既知化合物から補正関数を自動作成し、スペクトルを補正
- 補正されたスペクトルと同位体分布を考慮して組成式を高精度に推定
- AutoCal機能による容易なキャリブレーション



MassWorks™に最適な5977B GC/MSD

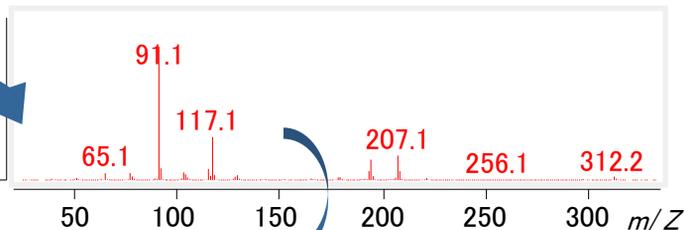
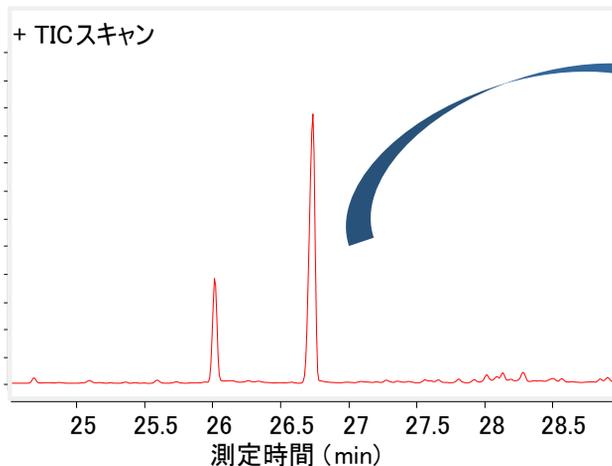
- 石英一体成型で加熱可能な四重極が安定したスペクトルを実現
- 高感度EIイオン源で同位体イオンを高強度に検出
- 分子量関連イオンを出現させやすいメチルアミンに試薬ガスを用いたPICI法
- 元素選択的型検出器とGC/MSの同時検出を行えば組成推定をより確実に

MassWorks™と5977B GC/MSDを同時購入頂きますと通常より安価およびアジレントサポート付きでご利用頂けます。



ポリマー熱分解物の組成推定例

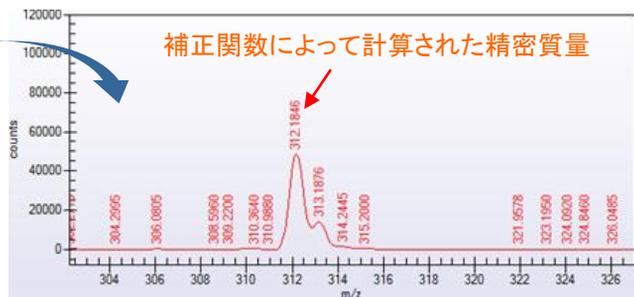
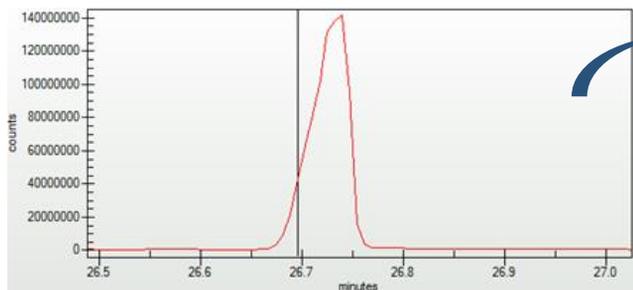
- ① ポリスチレンの熱分解物の中には主要なピークを最新のNISTライブラリを用いてライブラリサーチしましたが高い一致率の化合物が得られませんでした。



スコア	化合物名	分子式
64	(2,3-Diphenylcyclopropyl)methyl phenyl sulfoxide, trans-	C22H20OS

ライブラリサーチの結果が怪しい！

- ② MassWorks™によって組成推定を行います。まず補正関数によってマススペクトルのキャリブレーションを行います。その結果同位体比までほぼ理論値と同じマススペクトルを得ます。

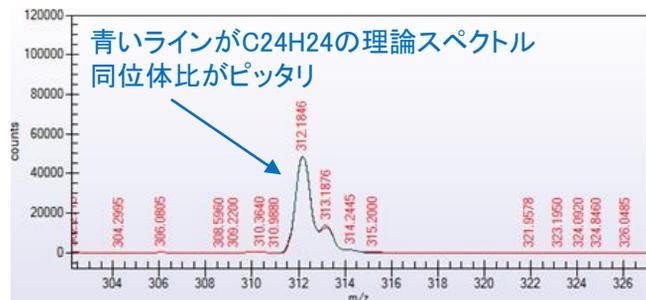


キャリブレーション後のマススペクトル

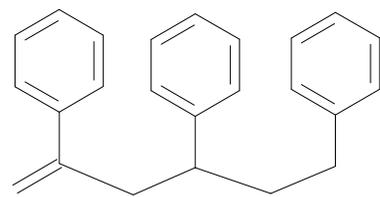
- ③ 質量精度だけでなく同位体比率も考慮して組成推定を行う機能がCLIPS (Calibrated Lineshape Isotope Profile Search) です。CLIPSが組成候補を確度の高い順番にリストアップします。

リストアップされた組成式候補

	Formula	Mono Isotope	Mass Error (mDa)	Mass Error (PPM)	Spectral Accuracy
1	C24H24	312.1873	-2.6522	-8.4956	96.8717
2	C21H28S	312.1906	-6.0230	-19.2931	93.9341
3	C19H24O2N2	312.1832	1.3706	4.3902	93.6850
4	C15H20N8	312.1805	4.0559	12.9920	92.0302
5	C17H28O5	312.1931	-8.5254	-27.3089	91.4944



- ④ MassWorks™を使った結果、組成の第一候補としてC24H24が推定されました。この組成はスチレンの3量体(スチレントライマー)だと予想できます。



スチレントライマーの構造式

アジレント・テクノロジー株式会社

〒192-8510 東京都八王子市高倉町9-1

カスタムコンタクトセンター

フリーダイヤル 0120-477-111

価格は 予告なく変更する場合があります。

www.agilent.com/chem/jp



Agilent Technologies