

# 未知成分の構造推定

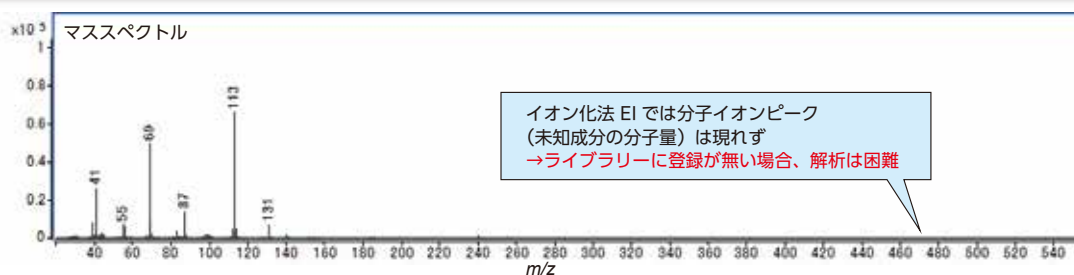
## GC/MS/MS Q-TOF型

有機化合物の定性には GC/MS が有効な手段の一つである。一般的には得られたマスペクトルのフラグメント情報とライブラリーを照合するが、未登録成分の場合は構造推定が困難となる。未知成分の場合、I) イオン化法 CI を用いて分子を分解させずに目的のプロトン付加分子を検出、II) Q-TOF モードで得られる精密質量情報 (小数点以下 4 桁) から分子式を推定、III) MS/MS 測定から構造を推定することが可能となる。

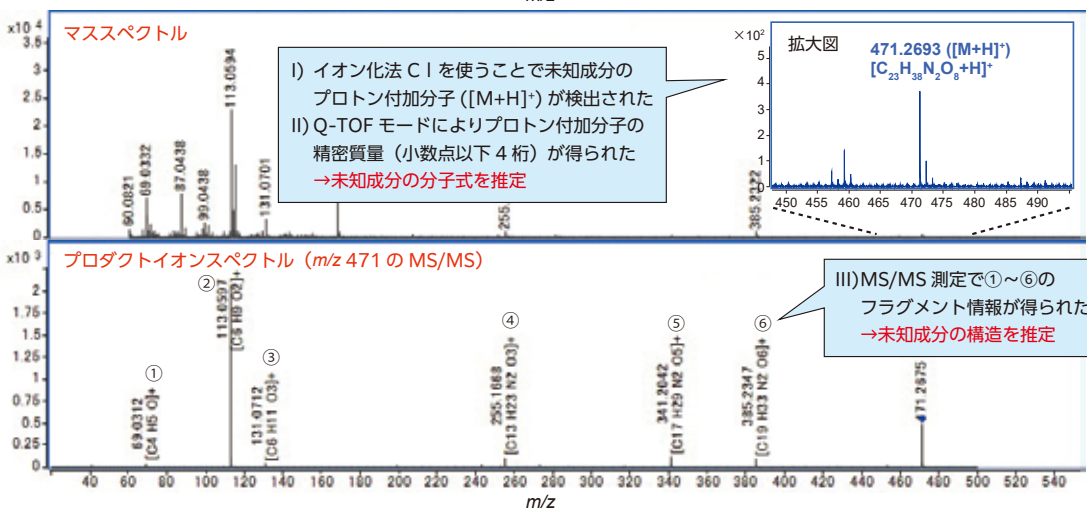
### ▶ UV硬化樹脂中(硬化前)の未知成分の分析例

Analysis Example of Unknown Component in UV-curable resin(before curing)

・ GC/MS  
イオン化法 EI

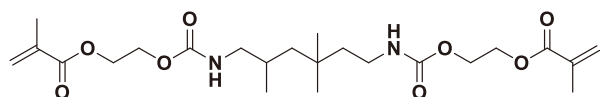


・ GC/MS/MS  
Q-TOF型  
イオン化法 CI



### ▶ 解析結果

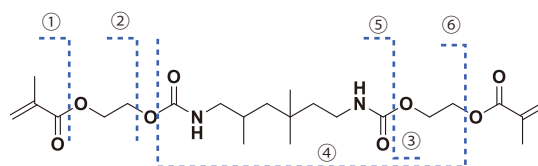
Result



Diurethane dimethacrylate  
Chemical Formula:  $C_{23}H_{38}N_2O_8$   
Exact Mass: 470.2628

※フラグメント解析例

①~⑥は下段スペクトルのピーク①~⑥に相当



### ▶ ご依頼時の留意事項

Attention

- ・ 測定可能な質量レンジ:  $m/z = 20 \sim 1000$
- ・ GC/Q-TOF MS 測定に適した物質: 有機化合物全般 (塩は除く)

