

GC/MS を使用した網羅分析の基礎と実践

姉 川 彩

1 はじめに

1・1 機器分析を始める前に

ガスクロマトグラフ質量分析計（GC/MS）は市販から約 50 年が経ち、食品の安全性評価、環境汚染物質の監視、医薬品の品質管理など様々な分野で広く利用されている分析手法である。GC による優れた分離と MS による高い選択性・感度を組み合わせることで複雑な試料中に含まれる多成分を検出できる点が特徴である^{1)~4)}。

近年では、特定の成分だけでなく「どのような成分がどのくらい含まれているのか」を広い範囲で把握する網羅分析（non-target/suspect screening）のニーズも高まっている。GC/MS は、揮発性・半揮発性化合物に対し高い適合性を示すため、これらの網羅的調査に有効な手法の一つとして位置付けられる⁵⁾。ただし、網羅分析を含む GC/MS 分析を正確に行うには、分析者が目的と仮説を明確にしたうえで、装置の状態確認と適切な測定条件の検討を行う必要がある。目的を持たない測定は、データ品質の低下や誤った解釈につながる可能性があるため、分析を開始する前には、以下の点を整理しておくことが望ましい。

分析の目的：何を明らかにするのか

仮説の設定：試料に含まれると考えられる成分

サンプリング方法：採取、保存条件、前処理の最適化

装置と手法の選択：GC/MS を用いる妥当性の検討

サンプル調製：揮発性・安定性を踏まえた前処理

測定条件設定：カラム、温度、イオン化法、検出モードなどの選択

データ解析：定性・定量など仮説検証の方法の選択

本稿では、GC/MS の基本構成や原理を図を用いて解説し、初心者でも理解しやすいよう整理する。また、環境・食品・残留農薬・代謝物解析などの実際の活用事例を紹介する。これらを通じて、GC/MS を用いた網羅分

析を進めるうえでの基礎的な考え方とデータ品質を確保するための留意点を提示する。

1・2 網羅分析とは

網羅分析とは、試料中に含まれる多くの成分をあらかじめ対象物質を限定せずに測定し、その存在や濃度などを明らかにするアプローチである。例えば、市販飲料の香気成分を調べる場合、以下の流れで網羅分析を進めることができる。

目的：どのような香気成分が含まれているかを明らかにする

仮説：柑橘系の香気があるため、関連化合物が含まれている可能性

サンプリング：揮発性香気成分の捕集

機器選択：揮発性化合物が多いと想定されるため、GC/MS が第一選択

サンプル調製：GC に注入できる形態が望ましい

測定条件：推奨条件を基に最適化

データ解析：ライブラリ検索による定性

検証：得られた結果から仮説（例：エステル類の存在）を確認

ここで例に挙げた香気成分分析は、揮発性化合物が対象成分であるため第一選択は GC となるが、極性が高く揮発性が乏しい化合物の場合は、液体クロマトグラフ（liquid chromatograph, LC）が第一選択となる。このように、対象成分の物性（沸点・極性・熱安定性）を事前に確認し、最適な分析手法を選ぶことが網羅分析の成否を大きく左右する。

網羅分析で使用される GC/MS は、食品分野では香気・異臭の探索、残留農薬分析、添加物管理、産地判別などに利用されている。環境分野では大気・水質中の揮発性有機化合物（volatile organic compounds, VOC）や半揮発性有機化合物（semi volatile organic compounds, SVOC）、難燃剤などの広範囲なスクリーニングに活用されている^{6)~11)}。また、医薬品・生命科学では、不純物プロファイリング、薬物の代謝物同定、メタボロミク

ス、呼気分析など、多様な分野で用いられている。

GC/MS 分析において、サンプルの前処理は分析精度を左右する極めて重要なステップである。揮発性化合物は前処理なしで測定可能な場合もあるが、極性化合物や熱的に不安定な化合物は誘導体化が必要となる。代表的な誘導体化手法としてはトリメチルシリル化やメチルエステル化があり、これらにより揮発性・熱安定性が向上し、ピーク形状や感度の改善が期待できる。また、試料の性質に応じて適切な前処理法を選択することが求められる。例えば、Bligh & Dyer 法のような溶媒抽出は、生体試料から代謝物を抽出する際に広く用いられている¹²⁾。前処理や測定結果の精度確認には、ブランクの確認、サロゲートや内部標準物質の添加によるマトリクス効果の確認が有用である。固相抽出 (solid phase extraction, SPE) は選択的に妨害成分を除去し、微量成分の濃縮が可能である。ヘッドスペース-固相マイクロ抽出 (headspace-solid phase microextraction, HS-SPME) は、香気など高揮発性成分の非破壊抽出に適している¹³⁾。このように、サンプルの組成に合わせて適切な前処理を行うことが信頼性の高い網羅分析に不可欠である。

2 GC/MS のしくみと装置構成

2・1 GC/MS とは

GC/MS は、ガスクロマトグラフ (GC) による高い分離能と質量分析計 (MS) による選択性・感度を組み合わせた手法である。GC で時間的に分離された成分を MS に導入することで各化合物の保持時間とマススペクトル、2 種類の情報を同時に得られる。近年は、マススペクトルライブラリも充実しており、NIST23 では約 13 万化合物、WileyNIST では 30 万化合物以上が登録されているため、初心者でも比較的容易に同定が行える (図 1)。網羅分析では、フルスキャン測定により多成分のマススペクトルを一括取得できる点が特に有用である。

2・2 GC/MS の基本構成

GC/MS は、図 2 に示すガス流量制御部、試料導入部、分離部、温度制御部、検出器などから構成される GC 部と、イオン化・質量分離・検出を行う MS 部から構成される。図 3 に GC/MS の基本構成を示す。まず GC では、注入口の熱で試料を気化し、気化した成分はキャリアガス (一般にヘリウム) とともに分離カラムへ導入され

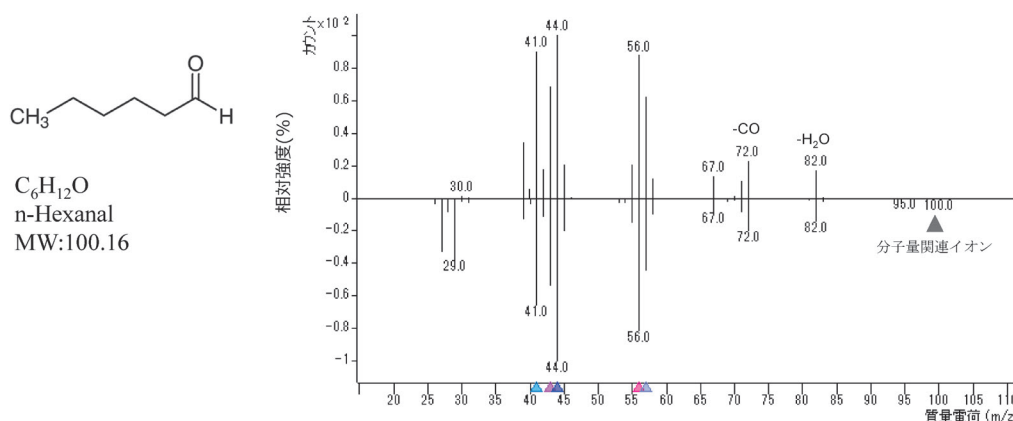


図 1 ライブラリを使用した定性解析の事例

上段：n-hexanal を SCAN 分析して得られたマススペクトル

下段：NIST ライブラリに登録されている n-hexanal のマススペクトル

▲：分子量関連イオン

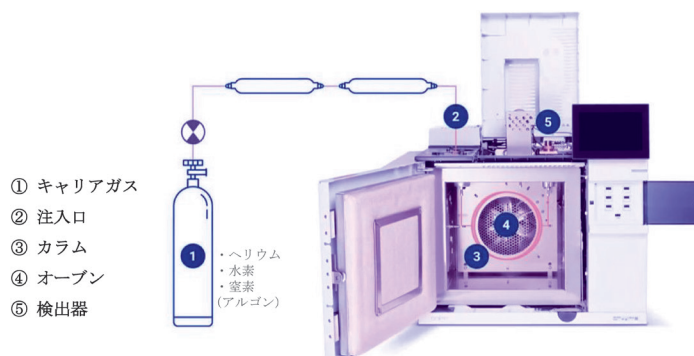


図 2 ガスクロマトグラフの基本構成 (アジレント・テクノロジー株式会社の 8890GC を例に)

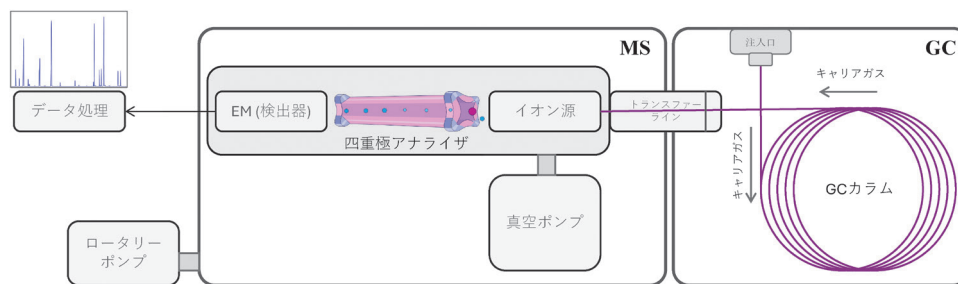


図3 GC/MSの基本構成（アジレント・テクノロジー株式会社の例）

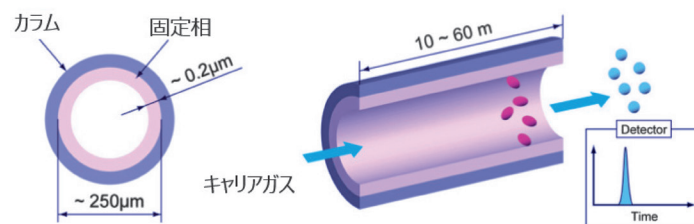


図4 キャピラリカラムにおける分離

中空の細長いフューズドシリカ管に高分子材料が塗布あるいは化学結合が施されている（液相や固定相と呼ばれている）。カラムと各化合物の親和性によってカラム内で分離が行われ、電気信号としてピークが検出される。

る。分離カラム内では、固定相と成分の相互作用の違いにより時間的に分離され、時間軸上に溶出した成分がピークとして検出される（図4）。GCの性能を左右する要素としては、キャリアガスの種類と流量、注入口の構造と温度、カラムの種類（長さ、内径、膜厚、固定相の化学特性）、検出器の選択が挙げられる。特に注入口はサンプル導入の効率や汚染状況に大きく影響するため、スプリット/スプリットレス注入（S/SL）、PTV（programmed temperature vaporizer）注入、COC（cool on-column）など目的に応じた最適化が不可欠である。カラムは無極性から高極性までさまざまな固定相があり、分析対象成分の極性や構造に応じて選択される。また、カラム長が長いほど分離能は高まるが、分析時間が長くなるというトレードオフがある。分析対象成分の物理学特性があらかじめ分かっている場合は、化合物名からカラムを選択し、濃度情報から測定条件を検証し、溶媒の種類から試料導入の選択を行うと良い。特に、定量分析をする場合には、これら三つの情報（化合物名・濃度・溶媒）がデータ取得を行う上で有用な情報となる。

続くMSでは、カラムで分離した成分をイオン化し、質量電荷比（ m/z ）に基づいて分離・検出する。MS部では、イオン源でイオン化した分子を検出器まで衝突が少ない状態で直進させるため高真空状態が要求され、ロータリーポンプとターボ分子ポンプにより 10^{-5} ～ 10^{-6} Torr 程度に保たれている装置が多い（図3）。

2.3 イオン化法（EIとCI）

EI（electron ionization）法：70 eVの電子で分子をイ

オン化し、特有のフラグメントを与える比較的「ハードなイオン化法」である。再現性の高いパターンが得られるためライブラリ検索との相性が良い一方、分子量関連イオンが観測されにくい場合がある。

CI（chemical ionization）法：試薬ガス（例：メタン、メチルアミン、イソブタンなど）を介したソフトイオン化で、分子量関連イオンが得られやすい。EIで分子量関連イオンが確認しにくい場合に、分子量推定や組成推定を補助する情報取得として有用である。

分析の目的や対象成分に応じてEIとCIを使い分けたり、併用することで定性の確度が向上する。

2.4 質量分析計の種類

GC/MSで使用される質量分離部（アナライザ）には様々な種類のものがあるが、本稿では最も販売台数が多く汎用的に使用されている四重極質量分析計（quadrupole mass spectrometer, QMS）について説明する。実務では分析目的に応じて、装置を使い分ける。

2.4.1 シングル四重極

シングル四重極（Q）MSは、金属製の4本の円柱もしくは石英製一体型の双曲面を持つロッドで構成される。対向するロッドには同じ電位を与え、隣り合うロッドには正負逆電位を与える。ロッドに与える電位は高周波電位に直流電位を重ね合わせたものである。4本のロッドの空間にイオンを送り込むとその質量電荷比（ m/z ）に応じて振動しながら進む。ロッドに高周波電位と直流電位を重ね合わせた電位が与えられていると、

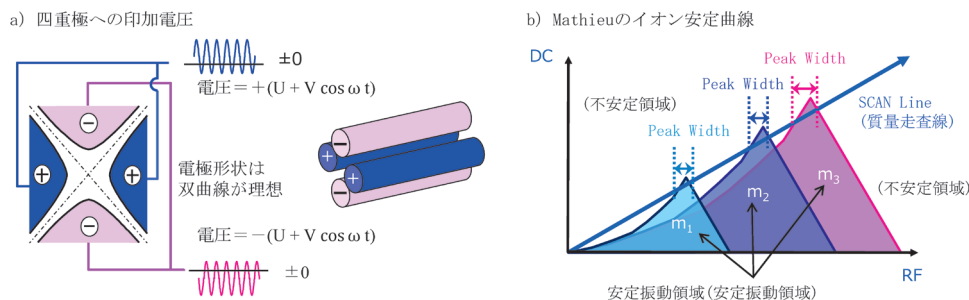


図5 四重極型アナライザ（マスフィルタ）の原理

a) 四重極アナライザの基本構造と印可電圧

b) Mathieu のイオン安定曲線

DC/RF 比を一定に保って電圧を変化させることでスキャンラインが形成され、このラインが安定領域と交差する質量のイオンのみが四重極を透過する。他の質量は不安定となり電極外へ排除される

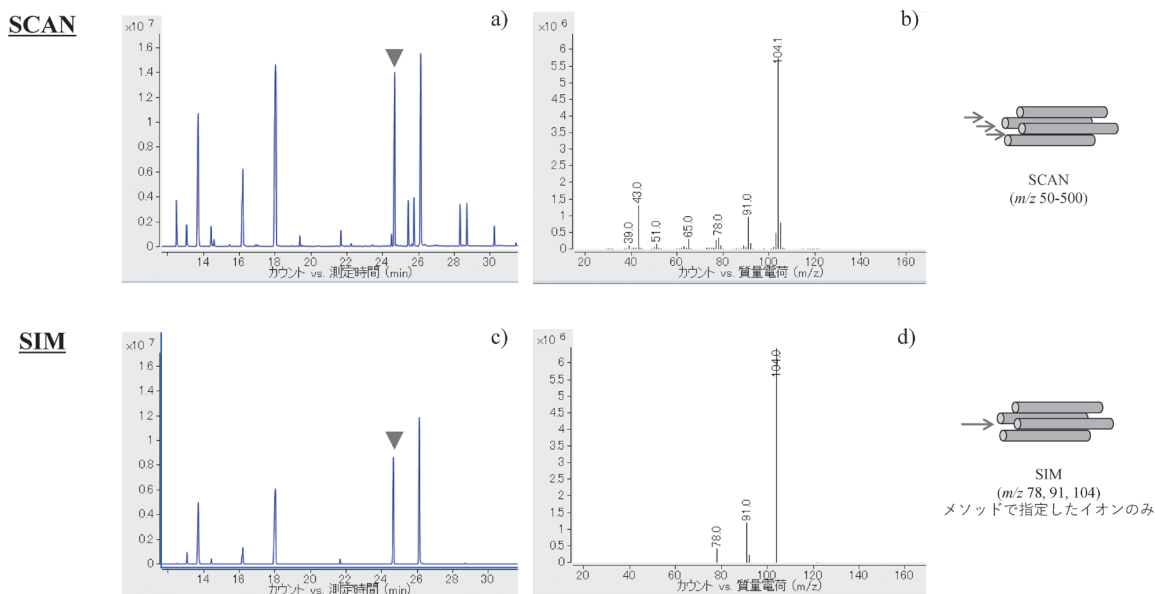


図6 GC/MS のSCAN モードとSIM モードで取得されるデータ事例

a) SCAN のTICG ; b) ▼に検出されたピークのマスペクトル ; c) SIM の積算クロマトグラム ; d) SIM モードを使用した時の検出イオン

SCAN モードでは、スキャン範囲 ($m/z = 50 \sim 500$) を設定し、試料に含まれる成分の保持時間とマスペクトル情報を得ることが可能。

b) のマスペクトル情報を使用し、ライブラリ検索をすることで化合物の同定が可能。SIM モードで使用するイオン情報を得る目的でも使用される。

SIM モードでは測定対象成分が持つイオンのみを設定するため、SCAN モードに比べて高感度な測定が期待できる。対象成分の確認は、同じ保持時間に検出された各イオンの強度比で行う。対象成分が多い場合は、タイムセグメントを使用し感度を確保する。

ある一定の範囲の m/z のイオンだけが安定に通り抜け、それ以外のイオンは通り抜けられない。この4本の電極に超高速で電圧を走査しながら m/z を選別するため、マスフィルターとも呼ばれる (図5)。

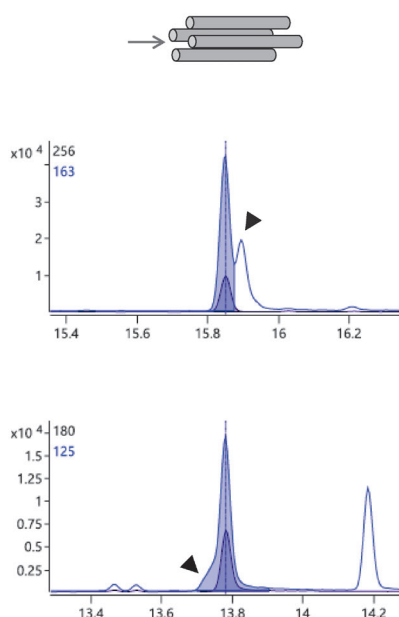
シングル四重極の測定モードは、全 m/z を掃引するSCANと特定 m/z のみを検出する選択イオンモニタリング (selected ion monitoring, SIM) を使い分ける (図6)。SCANは網羅性、SIMは感度と選択性に優れる。SCANモードは、指定した質量範囲内でマスペクトルを取得するため、定性分析やライブラリ検索に適してい

る。一方、SIMモードでは特定の m/z のみを通過させるため、ノイズが低減され高感度な定量が可能となる。そのため、SIMは対象成分が明確な場合に有効である。近年では、エレクトロニクスの発展により、同一ランでSIMとSCANを同時取得できる装置も一般的である。これにより、定量の確実性と網羅性を両立できる。

2・4・2 トリプル四重極

トリプル四重極 (TQ) は、シングル四重極では干渉が生じるような夾雑物の多い試料中でも特定化合物を

GC/SQ



GC/TOF

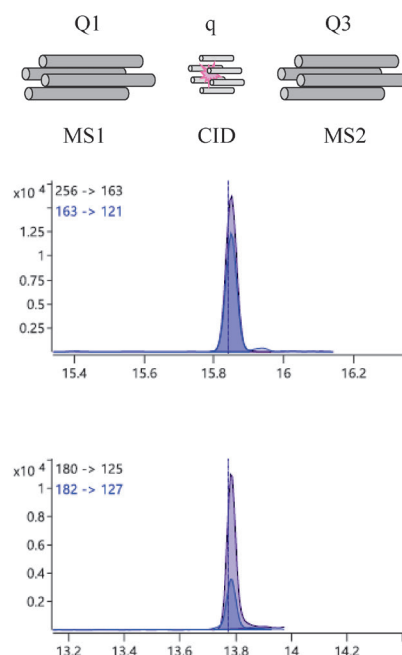


図7 水道農薬混合溶液中ベンフレセートとペンシクロンのシングル四重極とトリプル四重極の比較事例

左) GC/SQ のSIM モードでベンフレセート (m/z 256, 163) とペンシクロン (m/z 180, 125) を測定したデータ

▼ : 干渉イオンの存在

右) GC/TOF のMRM でベンフレセート (m/z 256 $\rightarrow$ 163, m/z 163 $\rightarrow$ 121) とペンシクロン (m/z 180 $\rightarrow$ 125, m/z 182 $\rightarrow$ 127) を測定したデータ

高選択・高感度に定量できる装置である。その構成は、四重極が前方 (Q1 もしくは MS1) と後方 (Q3 もしくは MS2) に配置され、その間に衝突誘起解離 (collision induced dissociation, CID) を行うコリジョンセル (q) が備えられている (図7)。特定のプリカーサーイオンを前方のアナライザー (Q1) で選択し、そのイオンを不活性ガスと衝突させて活性化・フラグメンテーションを起こさせた後、生成したプロダクトイオンのうち特定のものを後方のアナライザー (Q3) で分離・検出する。選択反応モニタリング (selected reaction monitoring, SRM) または多重反応モニタリング (multiple reaction monitoring, MRM) を用いることで、夾雑物の多い試料中に含まれる極微量成分でも高選択かつ高感度に定量することが可能である。このため、シングル四重極のSIMモードでは感度が不足する場合や干渉イオンが存在する場合にトリプル四重極による高選択性測定が有効となる。図7に示すようにシングル四重極で干渉が生じる場合でもトリプル四重極の高い選択性を用いることで、干渉イオンを除去したデータを取得できる。これらの手法は、欧州・日本の規制に準拠した残留農薬分析や薬物のターゲット分析に広く利用されている。

2・4・3 高分解能質量分析装置

高分解能 Q-TOF は、四重極でイオン (m/z) を選択後、飛行時間型質量分析計 (time of flight, TOF) で高分解能・高精度な精密質量情報を得ることができる。数

ppm レベルの質量精度により、組成式推定や同位体パターン解析が可能である。GC/TOF による全イオン取得 (フルスキャン) データは、ノンターゲット解析後の再解析や含有量未知成分の網羅的スクリーニングに適しており、精密質量や同位体パターン情報を用いることで疑陽性の低減が可能である¹⁴⁾。一方、取得されるピーク数が膨大となるためデータ処理負荷は高い。安定した質量精度を維持するための適切な質量校正 (キャリブレーション) が高品質データ取得の鍵となる。

2・5 質量分析計の使い分け (装置選定の目安)

質量分析計の選択にあたっては分析目的に応じた使い分けが重要である。品質管理、定期観測やモニタリングなどのルーティン分析やコストを重視する用途にはシングル四重極 (SIM/SCAN) が適している。一方、分析対象が明確で規制値レベルの極微量成分を高い選択性と精度で定量する必要がある場合にはトリプル四重極 (MRM/SRM) が有効である。さらに、多成分スクリーニングや未知化合物の探索、組成式推定を目的とする場合には、精密質量およびフラグメント情報を取得可能な高分解能 GC/Q-TOF が選択肢となる。

2・6 良いデータを取得するための実務ポイント

網羅分析で信頼性の高いデータを得るためには、分析装置を常に良好な状態に保つことが不可欠である。特に GC/MS では、注入口・カラム・イオン源の状態が測定

結果に直結するが多い。これらに問題が生じると、ピーク消失、保持時間の変動、感度低下、ゴーストピークなどの症状が現れる。

最もトラブルが多いのは注入口周辺であり、セプタム、ライナー、スプリットベントなどの消耗品の交換や定期的な清掃といった基本的なメンテナンスが効果的である。カラムの劣化は、ピーク形状の悪化や保持時間の再現性低下を招くため、先端カットや交換を適宜行う。

MSの状態は、PFTBA (perfluorotributylamine) によるチューニングで確認できる。 m/z 69・219・502の強度比、半値幅、同位体比からイオン源の汚れや感度の低下を診断できるため、定期的な確認が重要である。

トラブルシューティングでは、条件を一度に一つだけ変更し、処置前後のクロマトグラムを比較することで原因を切り分けやすくなる。解決が難しい場合は、各メーカーが蓄積しているノウハウを活用し、サポート窓口へ相談することが早期解決につながる。

3 GC/MS を使用した網羅分析への活用事例

本章では、各種 GC/MS を使用したアプリケーション事例を紹介する。詳細な分析条件や考察等については、参考文献を参照してほしい。

3.1 環境水中の揮発性有機化合物の GC/SQ 分析

揮発性有機化合物 (VOC) および半揮発性有機化合物 (SVOC) は、対象成分の種類が多く物性も多様である。したがって、特定成分に限定せず広く成分を把握する「網羅的スクリーニング」が重要となる。GC/SQ のSCAN モードを用いれば、多数の化合物についてマススペクトルを一括取得できるため、未知ピークを含む成分探索が可能であり、測定後の再解析にも容易に対応できる点が網羅分析にとって大きな利点である。水道水や環境水中の VOC は一般に低分子・高蒸気圧で気相へ移行しやすい。一方、フタル酸エステル類、フェノール類、多環芳香族炭化水素 (PAHs) に代表される SVOC は蒸気圧が低く、熱分解や吸着の影響を受けやすい。したがって、対象成分の物性に応じて注入方式 (スプリット/スプリットレス/パルスドスプリット等) や注入口温

度、注入速度、ライナーの種類や形状、カラムを最適化することが高精度な分析の鍵となる^{8)~10)}。高感度の定量分析が必要な場合は SIM を併用する。また、注入口での熱分解や活性点への吸着、カラム先端への難揮発性成分の蓄積は、感度低下および再現性悪化の主要因となる。定期的なメンテナンス、適切なライナーの選定、流路の不活性化を行うことで SCAN モードの網羅性を維持しつつ、SIM の定量精度を確保できる。

データ品質の確保には、ブランク注入によるバックグラウンド把握、リークのない流路、適切な流量・温度管理、高純度溶媒、精度の高い標準液調製が不可欠である。さらに、リテンションタイムロッキング (retention time locking, RTL) を併用するとメンテナンス前後で保持時間の再現性を維持でき、大量のスクリーニング結果を横断的に比較・再解析できる。

3.2 市販缶コーヒーの香気成分分析

食品・飲料の香りは、多数の揮発性化合物が複雑に組み合わせることで形成されており、極めて微量であっても香りの印象を大きく左右する成分が存在する。GC/MS は、このような複雑な香気成分を高分離・高感度で分析できる代表的な手法として、食品・飲料分野で広く利用されている。香りや異臭の分析・解析では、におい嗅ぎを用いた官能評価を併用する場合もあるが、本事例ではこれを用いずにキャピラリー・フロー・テクノロジー (capillary flow technology, CFT) を併用した HS-SPME-GC/MS により市販缶コーヒーの香気成分探索を行った。

香気成分の捕集には固相マイクロ抽出 (solid phase microextraction, SPME) 法を用い、揮発性成分を効率的に捕集した。SPME ファイバーに捕集された成分は注入口で熱脱着され、GC に導入される。CFT を用いることで分離カラムで分離された成分を MS に加え、窒素リン検出器 (nitrogen phosphorus detector, NPD) および炎光光度検出器 (flame photometric detector, FPD) へ分岐することが可能となる (図 8 左)。この構成により、MS によるマススペクトル情報、選択型検出器による元素情報を組み合わせた解析が可能となる (図 9)。

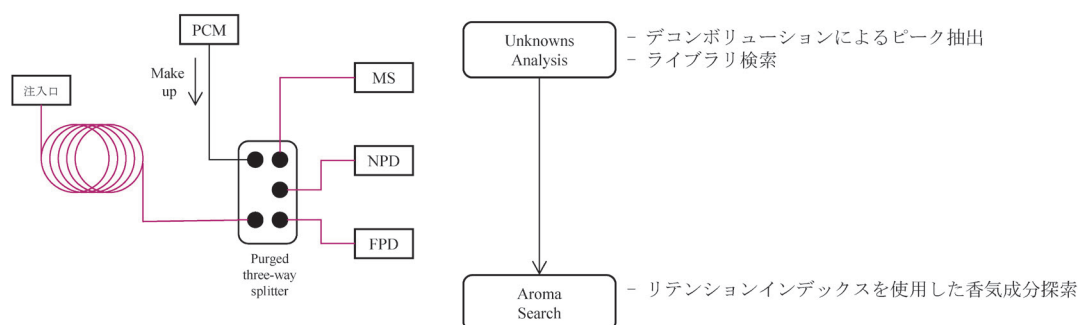


図 8 キャピラリー・フロー・テクノロジーを用いた 3 分岐装置構成と香気分析ワークフロー

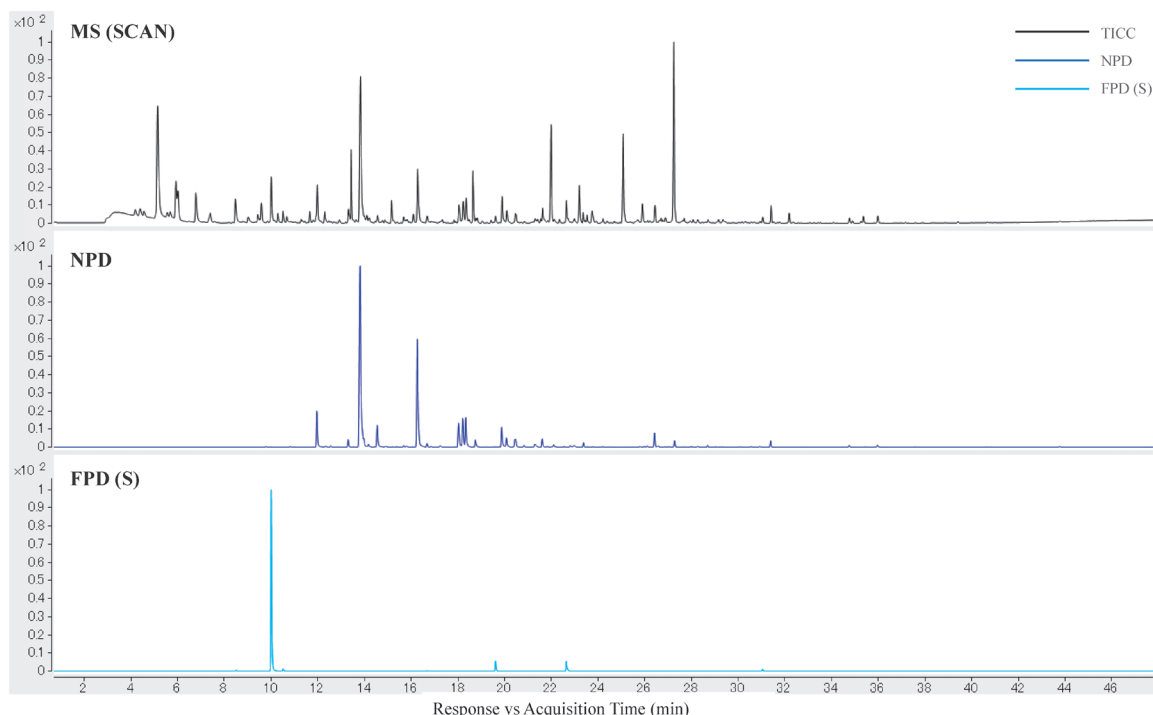


図9 3分岐装置構成で得られたトータルイオンクロマトグラムと選択型検出器のシグナル

データ解析には MassHunter Unknowns Analysis を用い、デコンボリューションによるピーク抽出、マススペクトルの構築後、NIST ライブラリ検索および AromaOffice の保持指標情報との照合 (AromaSearch) を行った (図8右)。その結果、硫黄化合物、ピラジン類、アルコール類など、コーヒーの香りに寄与する化合物を多数同定することができた¹⁵⁾。特に、食品・飲料中の香気成分には類似したマススペクトルを示す化合物や異性体が数多く存在するため、化合物同定において保持時間情報が重要な役割を果たす。これに元素情報を組み合わせることで、同定の信頼性および精度をさらに向上させることができる。

3.3 GC/TQ による残留農薬の多成分一斉分析

残留農薬分析は規制値対応のターゲット定量が中心であるが、実務では対象農薬が数百成分に及ぶ。したがって「多成分を一度にスクリーニングする」という意味で網羅性の高い一斉分析が求められる。GC/TQ のMRM (SRM) は本来ターゲット分析手法であるものの、dynamic MRM (dMRM) を用いれば各化合物の保持時間付近にトランジションを限定して測定でき、同時測定数を抑えつつ十分なデュエルタイムを確保できる。これにより、感度と再現性が両立し、多成分の網羅的な一斉定量が可能になる。

本事例では、ハウレンソウ、クルミ、トウガラシ試料に対して QuEChERS 抽出を行い、dMRM 法で高選択・高感度な同時定量を実施した。QuEChERS (Quick, Easy, Cheap, Effective, Rugged, and Safe) 法は、アセト

ニトリル抽出と分散型固相抽出 (d-SPE) を組み合わせた簡便な前処理法で多成分の農薬や有機化合物を効率的に抽出・クリーンアップできる。操作が迅速で溶媒使用量が少なく、多成分分析に適している。マトリックス効果に対しては、マトリックスマッチング検量線あるいは内部標準法を用いて補正し、熱分解性を持つ成分には注入口温度やライナーの種類を最適化することで分解を抑制した。その結果、複雑なマトリクス中でも干渉を最小限に抑え、良好なピーク形状と再現性を確保できた¹⁶⁾。さらに、dMRM/SCAN モードを用いることで、定量用MRMと同時にスキャンデータを取得できる。この手法によりターゲット定量の堅牢性^{けんろう}を維持しながら、未知ピークの確認、測定後の再解析、ライブラリ検索にも対応可能となり、ターゲット分析と網羅的スクリーニングを同時に実施できる¹⁷⁾。

3.4 高分解能 GC/Q-TOF を用いた心疾患のプロファイル解析

高分解能 GC/Q-TOF は、ノンターゲット解析、すなわち網羅分析に最も適した GC/MS の一つである。高質量精度および同位体パターンに基づく組成推定に加え、フルスキャンデータの再解析により、未知化合物を含む広範囲な化合物候補を網羅的に評価できる。ここでは、心不全患者の血漿代謝プロファイルを評価するために、高分解能 GC/Q-TOF を用いたノンターゲット解析の事例を示す。本事例では、Agilent 7250 GC/Q-TOF を用い、EI と CI を併用することでフラグメント情報と分子イオン情報を統合的に取得・解析した。SureMass デコ

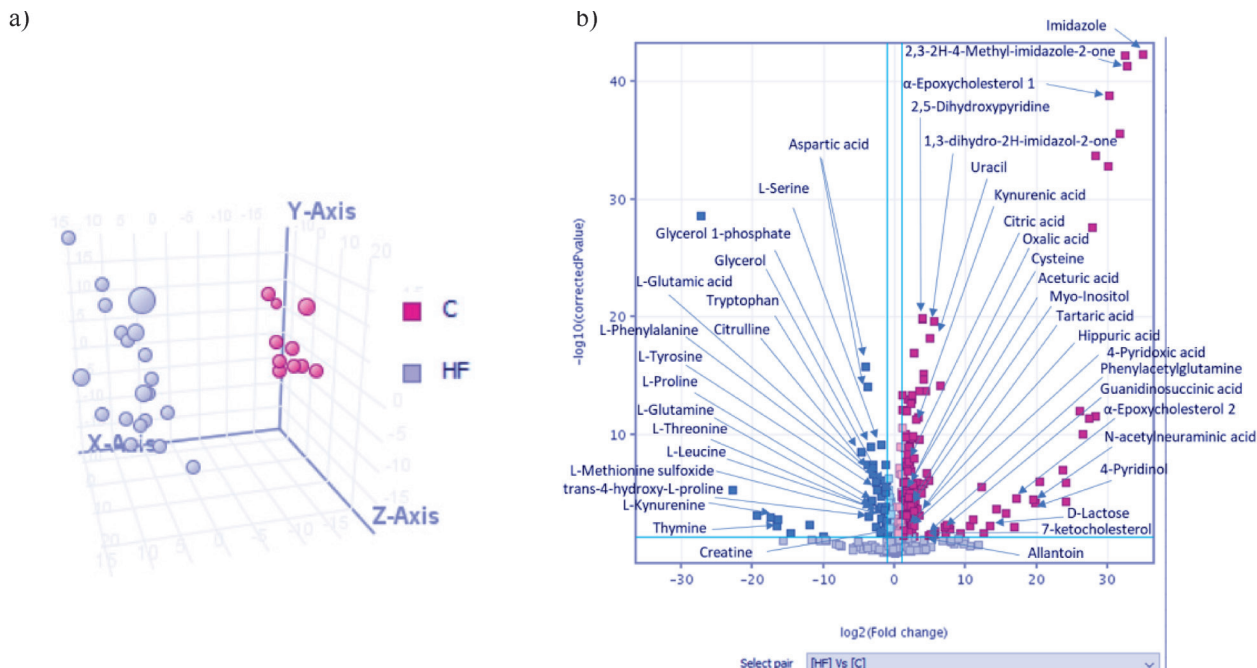


図 10 多変量解析により確認された健常者 (C) と心不全患者 (HF) の代謝物プロファイルの差異
a) PCA 解析 b) Volcano Plot

ンボリューションによるピーク分離後、精密質量情報を用いて複数のデータベースに照合することで、候補化合物の偽陽性を大幅に低減した。さらに、EI フラグメント情報との整合性を確認することで同定精度の向上を図っている。

精密質量データに基づき同定された化合物に対して、主成分分析 (principal component analysis, PCA) や Volcano Plot などの多変量解析を行った結果、心不全患者群と健常者群の間に明確な差が認められた (図 10)。心不全患者では、有機酸、ステロール、窒素含有代謝物などの増加が確認され、さらに薬剤由来あるいは環境由来と考えられる生体異物も検出された。これらの結果は、高分解能 GC/MS による代謝物の網羅的な解析が心不全の病態理解や疾患評価に有用であることを示している¹⁸⁾。

4 総括

本稿では、GC/MS を用いた網羅分析を念頭に、装置構成・イオン化法・質量分析計の使い分けに加え、データ品質を左右する運用上の注意点と応用事例について概説した。分析の出発点は目的設定と対象成分の物性確認であり、これに基づく注入条件・カラム選択・イオン化法の最適化がデータの堅牢性を決定づける。実務面では、注入口および流路の不活性化、適切なライナー選定、リークのないシステム構築、そしてブランク管理が再現性と信頼性の高いデータ取得につながる。リテンションタイムロッキング (RTL) などの機能を使用すれば、保持時間の再現性も確保でき、データ解析の効率化

も図れるだろう。装置選択の観点では、GC/SQ は品質管理をはじめとしたルーチン分析やコストを重視する用途に適しており、GC/TQ は SRM/MS による高選択・高感度が求められる規制値対応の多成分一斉定量分析に有用である。一方、GC/Q-TOF は精密質量情報とフラグメント情報を統合できるため、ノンターゲット解析に強みを持ち、偽陽性の低減に寄与する。本稿で示した各事例が示唆するように、分析の目的と要求される結果に応じて装置選択とワークフローを最適化することが高感度かつ信頼性の高いデータを得るための重要なポイントである。

文 献

- 1) 日本分析化学会ガスクロマトグラフィー研究懇談会 (編)、佐藤 博、代島茂樹、保母敏行、前田恒昭 (監修)：“ガスクロ自由自在 ― GC, GC/MS の基礎と実用”, (2021), (丸善出版)。
- 2) 高山光男、早川滋雄、瀧浪欣彦、和田芳直 (編)：“現代質量分析学―基礎原理から応用研究まで” (DOJIN ACADEMIC SERIES 2), (2013), (化学同人)。
- 3) 日本分析化学会ガスクロマトグラフィー研究懇談会 (編)、代島茂樹、保母敏行、前田恒昭 (監修)：“役にたつガスクロ分析”, (2010), (みみずく舎：発行/医学評論社：発売)。ISBN 978-4-86399-032-6。
- 4) E. de Hoffmann, V. Stroobant: “Mass Spectrometry: Principles and Applications”, (Wiley)。
- 5) J. Gross: “Mass Spectrometry: A Textbook”, (Springer)。
- 6) Agilent Technologies: “Analysis of Semivolatile Organic Compounds with US EPA 8270E Using the Agilent 7000E Triple Quadrupole GC/MS”, Application Note 5994-4964EN (2023)。
- 7) Agilent Technologies: “Semi-volatile Organic Compounds

- (sVOCs) Analysis in Water”, <https://www.chem-agilent.com/contents.php?id=1007373>, (accessed 2025. 3.11).
- 8) Agilent Technologies : “Agilent 8890/5977C GC/MSD による半揮発性有機化合物 (SVOC) の分析感度の向上”, Application Note, Pub. No. 5994-6338JAJ, pp. 11 (2023).
 - 9) U.S. Environmental Protection Agency : SOP-5188 “Standard Operating Procedure for Analysis of VOCs in Whole Air using Entech 7200A and Agilent 8890/5977B”, (2023).
 - 10) U.S. Environmental Protection Agency : Method 8260, Volatile Organic Compounds by GC/MS.
 - 11) U.S. Environmental Protection Agency : Method 8270E, Semivolatile Organic Compounds by GC/MS.
 - 12) E. G. Bligh, W. J. Dyer : *Can. J. Biochem. Physiol.*, **37**, 911 (1959).
 - 13) アジレント・テクノロジー : “SPME-GC/MS 事例集” (PDF).
 - 14) アジレント・テクノロジー : “環境汚染物質の精密質量ライブラリによる汚染物質のスクリーニング”, Application Note 5994-1346JAJ (2019).
 - 15) アジレント・テクノロジー : “キャピラリー・フロー・テクノロジー (CFT) を用いた飲料サンプル中の香気成分探

索”, Application Note 5994-7957JAJ (2024).

- 16) アジレント・テクノロジー : “ダイナミック MRM/ スキャンモード : トリプル四重極 GC/MS (GC/TQ) による複雑な食品の高感度定量の信頼性向上”, Application Note 5994-4966JAJ (2022).
- 17) アジレント・テクノロジー : “スクリーナーによるピーク自動判定機能を利用した残留農薬分析における解析時間の短縮化”, Application Note 5994-7218JAJ (2024).
- 18) アジレント・テクノロジー : “高分解能 GC/Q-TOF を用いた心不全患者の代謝プロファイルの差異検出”, Application Note 5994-6858JAJ (2023).



姉川 彩 (ANEKAWA Aya)

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). 理学博士. 《主な著書》“ガスクロ自由自在 Q & A”, (丸善出版). 《趣味》旅行, 読書.
E-mail : aya.anegawa@agilent.com

原稿募集

「技術紹介」の原稿を募集しています

対象 : 以下のような分析機器, 分析手法に関する紹介・解説記事

- 1) 分析機器の特徴や性能および機器開発に関わる技術, 2) 分析手法の特徴および手法開発に関わる技術, 3) 分析機器および分析手法の応用例, 4) 分析に必要な試薬や水および雰囲気などに関する情報・解説, 5) 前処理や試料の取扱い等に関する情報・解説・注意事項, 6) その他, 分析機器の性能を十分に引き出すために有用な情

報など

新規性 : 本記事の内容に関しては, 新規性は一切問いません. 新規の装置や技術である必要はなく, 既存の装置や技術に関わるもので構いません. また, 社会的要求が高いテーマや関連技術については, データや知見の追加などにより繰り返し紹介していただいても構いません.

お問い合わせ先 :

日本分析化学会『ぶんせき』編集委員会

[E-mail : bunseki@jsac.or.jp]