

시료 전처리 없이 선형 머무름 지수를 이용한 복잡한 매트릭스 내의 향미료 및 향료 프로파일링

저자

Eleazar Rojas Santiago
Agilent Technologies, Inc.

개요

본 응용 자료는 향미료 및 향료 화합물의 분석법을 기술합니다. 이 분석법은 Agilent Intuvo 9000 GC 및 Agilent 5977B GC/MSD로 일정 유속에서 thermal separation probe 및 백플러시를 이용한 가스 크로마토그래피/질량 분석법(GC/MS)을 사용합니다. 비누, 향초, 치약, 바디 로션 및 섬유 유연제 등과 같은 복잡한 매트릭스 내의 향미료 및 향료 화합물을 시료 전처리 없이 분석했습니다. 시료는 thermal separation probe를 사용하여 GC/MSD 시스템에 주입했습니다. Deconvoluted 질량 스펙트럼과 선형 머무름 지수 결과를 이용해 식별 작업을 수행했습니다. 또한 관능 및 화장품 정보를 얻기 위해 화합물 명을 향료 및 향미료 웹 사이트와 연결하는 하이퍼링크를 생성했습니다.

소개

Agilent Thermal Separation Probe(TSP)는 식품 테스트, 법과학 및 환경 응용 분야의 다양한 오염된 액체 및 고체 시료를 GC/MS로 빠르게 분석하는 데 이상적입니다. Thermal separation probe의 이점은 다음과 같습니다.

- 시료 전처리가 거의 또는 전혀 필요 없음
- 기존의 직접 시료 프로브보다 적은 위험 및 더 우수한 유연성
- 기존의 직접 시료 프로브로 인한 오염 또는 성능 저하 위험 감소
- Split flow ratio 조절로 시료 전달 제어; 과부하 또는 검출기 오염 방지
- 주입구 및 GC 컬럼의 온도 프로그래밍으로 다성분 시료 식별 개선; 기존의 직접 시료 프로브로는 불가능
- GC/MS 시스템에서 TSP를 사용하는 두 가지 방법: 보다 긴 분석 컬럼으로 복잡한 시료 분리, 짧은 비활성 캐리리 컬럼을 이용한 순수한 시료의 MS 이송

GC/MS는 향료와 향미료 화합물 분석에 오랫동안 사용되어 왔습니다¹. GC/MS는 아마도 가장 강력한 기술로 확장된 질량 스펙트럼 라이브러리를 이용할 수 있지만 완전한 식별은 수행할 수 없습니다. 향미료 및 향료 품질 관리에는 GC/MS를 보완하는 기법으로 머무름 지수(RI)를 이용한

GC/MS가 여전히 자주 이용됩니다. 많은 향미료 및 향료 화합물에 대한 RI를 몇몇 라이브러리에서 얻을 수 있습니다²⁻⁴. RI는 절대 머무름 시간보다 작동 파라미터에 대한 의존도가 더 낮지만 여전히 대부분의 컬럼 유형(고정상 및 공급업체) 및 온도 프로그램,

그리고 일부의 운반 가스 속도의 영향을 받습니다. 따라서 서로 다른 실험실에서 생성된 RI를 재현하기가 어려울 수 있습니다. 향미료 및 향료 업계의 많은 회사들은 지금까지 선택한 컬럼과 조건에 기반하여 자체 분석법을 이용합니다.

Agilent MassHunter Unknowns Analysis 소프트웨어는 동시 용리 매트릭스 화합물에 숨겨져 있는 화합물도 식별할 수 있는 deconvolution 과정을 사용합니다. 이러한 deconvolution 과정은 자동으로 이루어지며 총 이온 크로마토그램(TIC)을 얻는데 1~2분 밖에 걸리지 않습니다. 이 과정을 이용하면 분석자가 신뢰할 수 있고 재현성 있는 결과를 빠르게 얻을 수 있을 뿐만 아니라 위양성(false positive)과 위음성(false negative)도 최소화됩니다⁵.

많은 머무름 데이터를 이미 RI로 사용하고 있기 때문에 이러한 데이터를 고정 머무름 시간과 매치하는 절대 머무름 시간으로 전환할 수 있는지도 평가할 수 있습니다. 기존 머무름 지수 라이브러리로부터 RI를 실험 데이터와 매치하는 절대 머무름 시간으로 다시 계산할 수 있다는 것을 입증하였습니다. 본 연구에서는 RI를 포함한 두 개의 라이브러리가 사용되었으며, 각각 NIST 2017과 애질런트 향미료 및 향료 RTL 라이브러리입니다⁶.

Intuvo 9000 GC는 다음과 같은 기술 혁신을 가지고 있습니다.

- 기존의 공기 가열 오븐에 비해 더 빠르고, 전력 소모를 반으로 절감하며, 기존 GC 공간의 절반만 차지하는 직접 가열 시스템 포함
- 페롤 없는 직접 연결과 플러그 앤 플레이 유동 경로 덕분에 복잡성과 누출 가능성의 주요 원인 제거
- 유니크한 일회용 Intuvo Guard Chip으로 컬럼 끝단 자름의 필요성 제거

실험

멀티모드 주입구(MMI) 및 컬럼 후 백플러시를 장착한 Intuvo 9000 GC를 이용하여 분석을 수행했습니다. 실제 주입이 이루어지기 전에 가벼운 성분이 손실되는 문제를 방지하기 위해 낮은 온도에서 TSP를 도입하도록 MMI를 60°C로 설정했습니다. TSP 도입 후, MMI 온도를 600°C/분의 속도로 280°C까지 승온시켰습니다. 분리는 Agilent HP-5MS, 30m × 0.25mm id, 0.25µm 컬럼($\beta = 250$)(p/n 19091S-433-INT)에서 수행하였습니다. 일정 유속의 약 65kPa (9.43 psi)의 헬륨을 운반 가스로 사용하였습니다. 표 1에 분석 조건을 요약하였습니다.

표 1. GC/MS 분석 조건

파라미터	설명
컬럼	HP-5MS, 30m × 0.25mm id, 0.25µm(p/n 19091S-433-INT)
주입	MMI, 분할비 100:1, 0.2분 40°C, 그 다음 900°C/분의 속도로 300°C까지 승온
운반 가스	헬륨(13.4 psi), 일정 유속
RTL	n-hexadecane에 대해 32.000분의 머무름 시간을 얻기 위해 유속을 1.46mL/분으로 설정
오븐 프로그램	3°C/분의 속도로 60°C에서 240°C로 승온(60분 분석 시간)
Guard Chip	Intuvo, 멀티모드 주입구
온도 프로그램	오븐 추적
검출	스캔 모드에서 MSD XTR 6mm(40 ~ 400amu) 용매 지연: 0분 이송 라인: 300°C

검량 머무름 시간(CRT) 파일을 생성하기 위해 표 2에 설명한 조건에서 $C_6 \sim C_{44}$ 의 알케인 혼합물을 주입했으며, MassHunter를 사용해 파일을 분석하고 라이브러리 머무름 시간을 계산하였습니다.

MassHunter Unknowns Analysis 소프트웨어에서 두 라이브러리의 RI와 deconvolution 과정을 사용해 데이터를 처리하였습니다. 이 소프트웨어는 여러 라이브러리의 CRT 파일과 RI를 이용해 라이브러리 머무름 시간을 계산하고 라이브러리 머무름 시간과 실제 머무름 시간 간의 차이를 계산합니다. 머무름 시간 필터와 최소 매치 인수를 적용하여 잘못된 식별을 제거할 수 있었습니다.

RI 전환

선형 머무름 지수(LRI)를 사용하려면 관심 대상 분석물질의 용리 범위에서 n-알케인 혼합물을 분석해야 합니다. 각 n-알케인에는 탄소 원자의 수에 100을 곱한 값에 기반한 LRI 값이 할당됩니다. 예를 들어, 옥테인 ($n\text{-C}_8$)에는 800의 LRI가 할당되고 노네인 ($n\text{-C}_9$)에는 900의 LRI가 할당되며 데케인 ($n\text{-C}_{10}$)에는 1,000의 LRI 값이 할당됩니다. 주어진 분석물질의 LRI는 분석물질 직전이나 직후에 용리되는 n-알케인과의 상대 용리 위치에 따라 계산됩니다.

표 2. MassHunter Unknowns Analysis 분석법 파라미터

파라미터	설명
RT 범위 크기 인자	25, 50, 100, 200
피크 필터 SNR 임계값	5
매치 인수(RT 지연)	사용 가능 사다리꼴 RT 범위: 60초 지연 없는 RT 범위: 30초
최소 매치 인수	75
라이브러리 검색 유형	스펙트럼 검색

온도 프로그래밍 GC의 경우, LRI는 다음 공식으로 계산됩니다.

$$I = 100 \times \left[n + \frac{t_{r(unknown)} - t_{r(n)}}{t_{r(N)} - t_{r(n)}} \right]$$

여기서

I = 선형 머무름 지수

n = 분석물질 직전에 용리되는 n-알케인의 탄소 원자 수

N = 분석물질 직후에 용리되는 n-알케인의 탄소 원자 수

t_r = 머무름 시간

머무름 지수에 기반해, n-알케인의 머무름 시간을 참조 화합물로 사용하여 절대 머무름 시간을 계산했습니다.

이러한 절대 머무름 시간은 머무름 지수 계산에 사용된 원래의 머무름 시간이 아니라 계산된 값입니다. 즉, 컬럼 규격과 온도 프로그램이 동일하다면 n-알케인에 대해 고정 머무름 시간을 이용하여 기존 데이터베이스에 있는 RI로부터 머무름 시간을 계산할 수 있다는 것입니다⁷.

본 연구에서는 시료 전처리 없이 여러 개의 시료를 분석했습니다. 마이크로바이알에 수 밀리그램만 주입했습니다(바이알 부피 40 μL). 관능적 특성을 갖추고 있다는 점, 그리고 복잡한 매트릭스로 인해 시린지를 사용해 GC 포트에 직접 주입할 수 없다는 점 때문에 시료를 선택하였습니다.

결과 및 토의

그림 1과 2는 치약, 설포 유연제, 향초 및 크림 리큐어 시료에서 식별된 화합물과 TIC를 포함한 크로마토그램을 나타냅니다. 그림 3은 MassHunter Unknowns Analysis 소프트웨어의 라이브러리 검색 결과를 나타냅니다. 또한, 웹에 나온 정보를 이용해 식별된 화합물이 향미료 및 향료 산업과 관련이 있는지 확인할 수 있습니다(그림 4 참조). Sorry, your search: "Docosyl octyl ether" returned zero results.라는 메시지가 표시되면 이 화합물이 향미료 또는 향료 성분과 관련이 없다는 것을 나타냅니다.

1,2. Hydrogen isocyanate	28. Methoxyacetic acid, octadecyl ester	54. Lauryl alcohol
3. 3,5-Methanocyclopentapyrazole, 3,3a,4,5,6,6a-hexahydro-3a,4,4-trimethyl-	29. 1-Heneicosyl formate	55. Pentadecane
4. Phosphonic acid, (<i>p</i> -hydroxyphenyl)-	30. 1-Hexacosene	56. 1-Decanol, 2-hexyl-
5. Eucalyptol	31. Carboxylic acid, eicosyl prop-1-en-2-yl ester	57. 1-Hexadecanol
6. <i>gamma</i> -Terpinene	32. <i>n</i> -Eicosane	58. <i>n</i> -Hexadecane
7. Linalol	33. Disulfide, di- <i>tert</i> -dodecyl	59. Dodecyl heptyl ether
8. Menthone	34. 3,5,5-Trimethylhexyl ethylphosphonofluoride	60. Isobutyl hexadecyl ether
9. Cyclopentene, 1-isopropyl-4,5-dimethyl-	35. Docosyl octyl ether	61. 10-Heneicosene (c;t)
10. 1-Decene	36. 2-Ethylthiolane, S,S-dioxide	62. Oxalic acid, allyl tridecyl ester
11. 1-Decanol	37. -[2,3-dihydro-4-hydroxy-2-(2-hydroxyisopropyl)benzofuran-7-yl]chromone	63. Dodecyl nonyl ether
12. Anethole	38. <i>n</i> -Tetracosane	64. Trichloroacetic acid, pentadecyl ester
13. Eugenol	39. Butyl triacontyl ether	65. 1-Tricosene
14. 7-Tetradecene, (Z)-	40. Borane, diethyl(decyloxy)-	66. Nonyl tetradecyl ether
15. 1-Undecanol, acetate	41. Aminomethanesulfonic acid	67. Behenic alcohol
16. Hydrogen isocyanate	42. Ethyl-2methylbutyrate	68. Carboxylic acid, eicosyl vinyl ester
17. Tetradecone, 1-chloro-	43. Benzaldehyde	69. Silane, trichlorodocosyl-
18. Lauryl alcohol	44. 3,7-Dimethyl-1-octanol	70. <i>n</i> -Tetracosanol-1
19. Pentadecane	45. Octane, 4-chloro-	71. <i>n</i> -Eicosane
20. <i>n</i> -Pentadecanol	46. 1-Decanol	72. Oxalic acid, cyclobutyl octadecyl ester
21. 1-Nonadecene	47. Cyclopropane, octyl-	73. Docosyl pentyl ether
22. Lauryl acetate	48. 1-Dodecene	74. Isobutyl tetracosyl ether
23. 1-Octadecanol	49. <i>gamma</i> -Nonalactone	75. Eicosyl octyl ether
24. Sulfurous acid, butyl undecyl ester	50. 1-Tetradecene	76. Octacosyl trifluoroacetate
25. 1-Docosene	51. Decyl acetate	77. Hexacosyl pentyl ether
26. Carboxylic acid, hexadecyl prop-1-en-2-yl ester	52. 1H-Benzimidazole-2-carboxaldehyde	
27. <i>n</i> -Octadecane	53. 2',4'-Dihydroxypropiophenone	

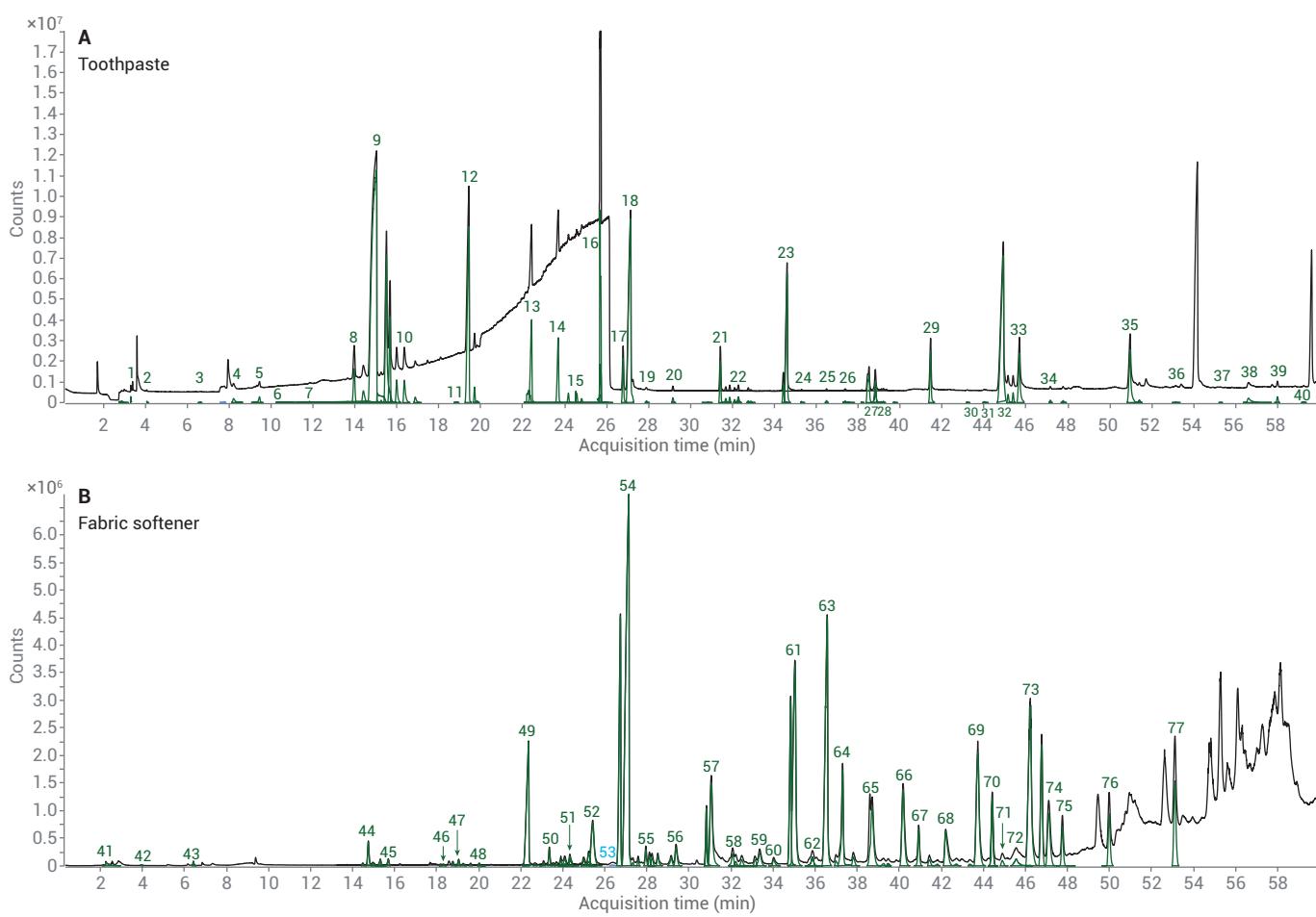


그림 1. 식별된 화합물과 TIC를 보여주는 치약 및 섬유 유연제 크로마토그램

1. Nitrous oxide	29. Heneicosane	57. Vanillin, isopropyl ether
2. Benzoyl isothiocyanate	30. 1-Phenyl-2-(4-methylphenyl)-diazene 1-oxide	58. Cinnamyl acetate
3. 2,3-Heptadien-5-yne, 2,4-dimethyl-	31. Benzyl benzoate	59. 1-Tetradecanol
4. Cyclohexane, 1-butenyldiene-	32. n-Octadecane	60. Ethanol, 2-(dodecyloxy)-
5. p-Cresol	33. 2-Methylbenzoic acid, 2-formyl-4,6-dichlorophenyl ester	61. n-Pentadecanol
6. Methyl-1-silabenzocyclobutene	34. Pentacosane	62. 1-Hexadecanol
7. Methyl-1-silabenzocyclobutene	35. n-Eicosane	63. Pentadecanoic acid
8. Citronellal	36. Sulfurous acid, octadecyl pentyl ester	64. Octadecane, 1-isocyanato-
9. Menthone	37. Sulfurous acid, 2-ethylhexyl hexadecyl ester	65. Hexadecane, 1,16-dichloro-
10. L-Menthol	38. Borane, diethyl(decyloxy)-	66. 10-Heneicosene (c,t)
11. L-Menthol	39. Hentriacontane	67. Carbonic acid, pentadecyl prop-1-en-2-yl ester
12. <i>alpha</i> -Terpineol	40. Dotriacontane	68. Dodecyl nonyl ether
13. Cyclopentane, 1-methyl-1-(2-methyl-2-propenyl)-	41. Tetracosane, 11-decyl-	69. Dodecyl nonyl ether
14. d-Piperitone	42. Pentatriacontane	70. 1-Eicosanol
15. Benzofuran, 2-methyl-	43. Arsenous acid, <i>tris</i> (trimethylsilyl) ester	71. Ethanol, 2-octadecyloxy-
16. Menthyl acetate; d,L-methyl-2-(methylethyl)cyclohexyl acetate	44. Cyanogen bromide	72. Methoxyacetic acid, octadecyl ester
17. 2,4-Octadiene, 7,7-dimethyl-	45. 1,2-Propadiene-1,3-dione	73. Octadecane, 1-isocyanato-
18. Tridecane	46. 2,3,5-Trimethylpyrazine	74. 1-Propanamine, 3-dibenzo[b,e]thiepin-11(6H)-ylidene-N,N-dimethyl-, S-oxide
19. Eugenol	47. 2-Propynenitrile, 3-fluoro-	75. Hexadecyl nonyl ether
20. n-Tetradecane	48. 1-Hexene, 3,5-dimethyl-	76. 1-Hexacosene
21. <i>beta</i> -Caryophyllene	49. Nonanal	77. Docosyl pentyl ether
22. 1H-Benzimidazole-2-carboxyaldehyde	50. 1-Pyrroline, 3-ethyl-	78. 1-Propanamine, 3-dibenzo[b,e]thiepin-11(6H)-ylidene-N,N-dimethyl-, S-oxide
23. 3,4-Dihydroxypropiophenone	51. 3,7-Dimethyl-1-octanol	79. Carbonic acid, decyl hexadecyl ester
24. 1-Hydroxy-7-hydroxymethylindane, cyclic sulfite ester	52. 1-Decene	80. Docosyl octyl ether
25. Propanoic acid, 2-methyl-3-[4-t-butyl]phenyl-	53. 1-Decanol	81. 5H-Tetrazol-5-amine
26. Isoamyl salicylate	54. 2-Propenal, 2-methyl-3-phenyl-	82. 1-Propanamine, 3-dibenzo[b,e]thiepin-11(6H)-ylidene-N,N-dimethyl-, S-oxide
27. n-Hexadecane	55. <i>gamma</i> -Nonalactone	83. Chlorotrifluoromethane
28. Fosfosal	56. Decyl acetate	84. Borane, diethyl(decyloxy)-

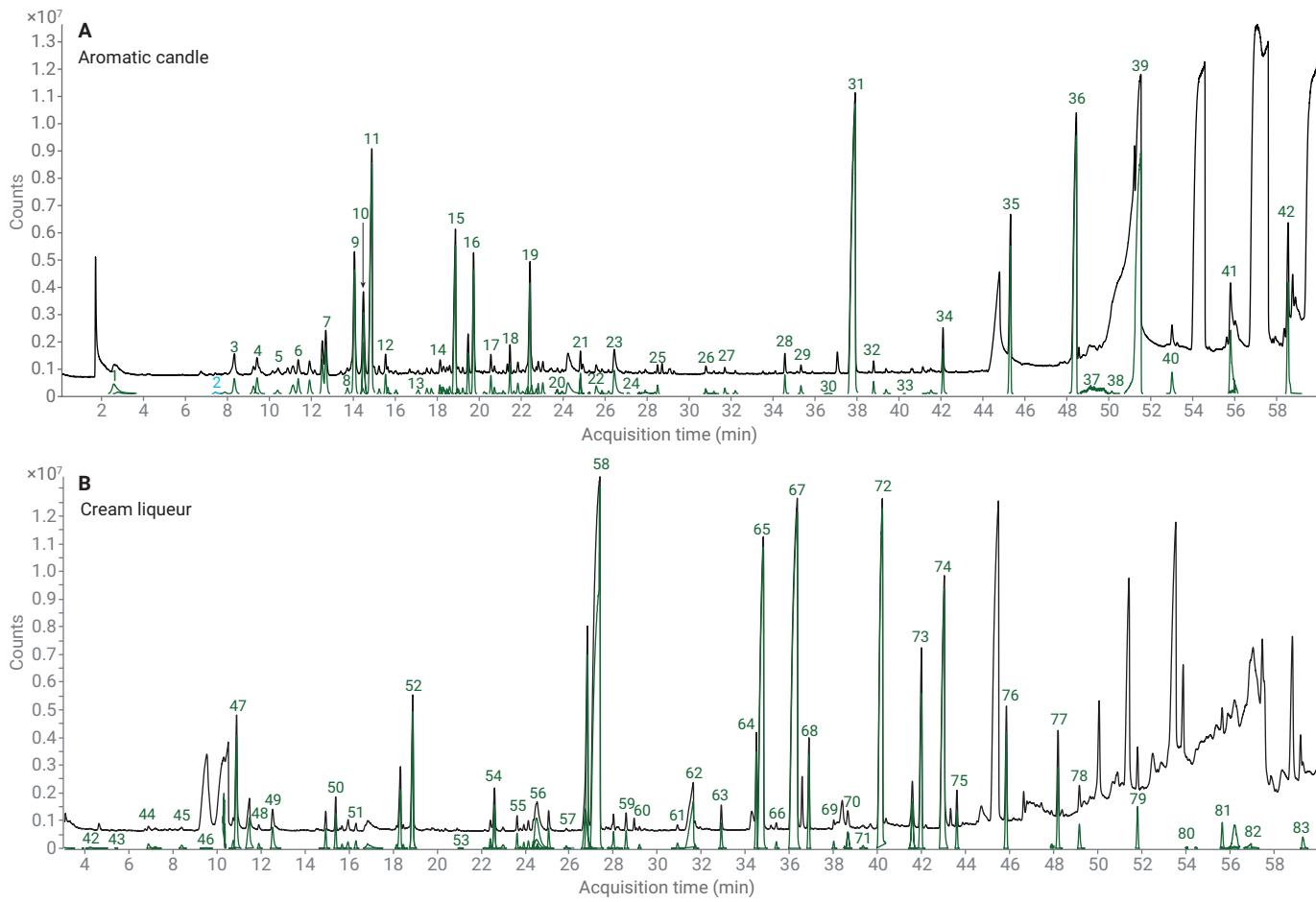


그림 2. 식별된 화합물 및 TIC를 보여주는 향초 및 크림 리큐어 크로마토그램

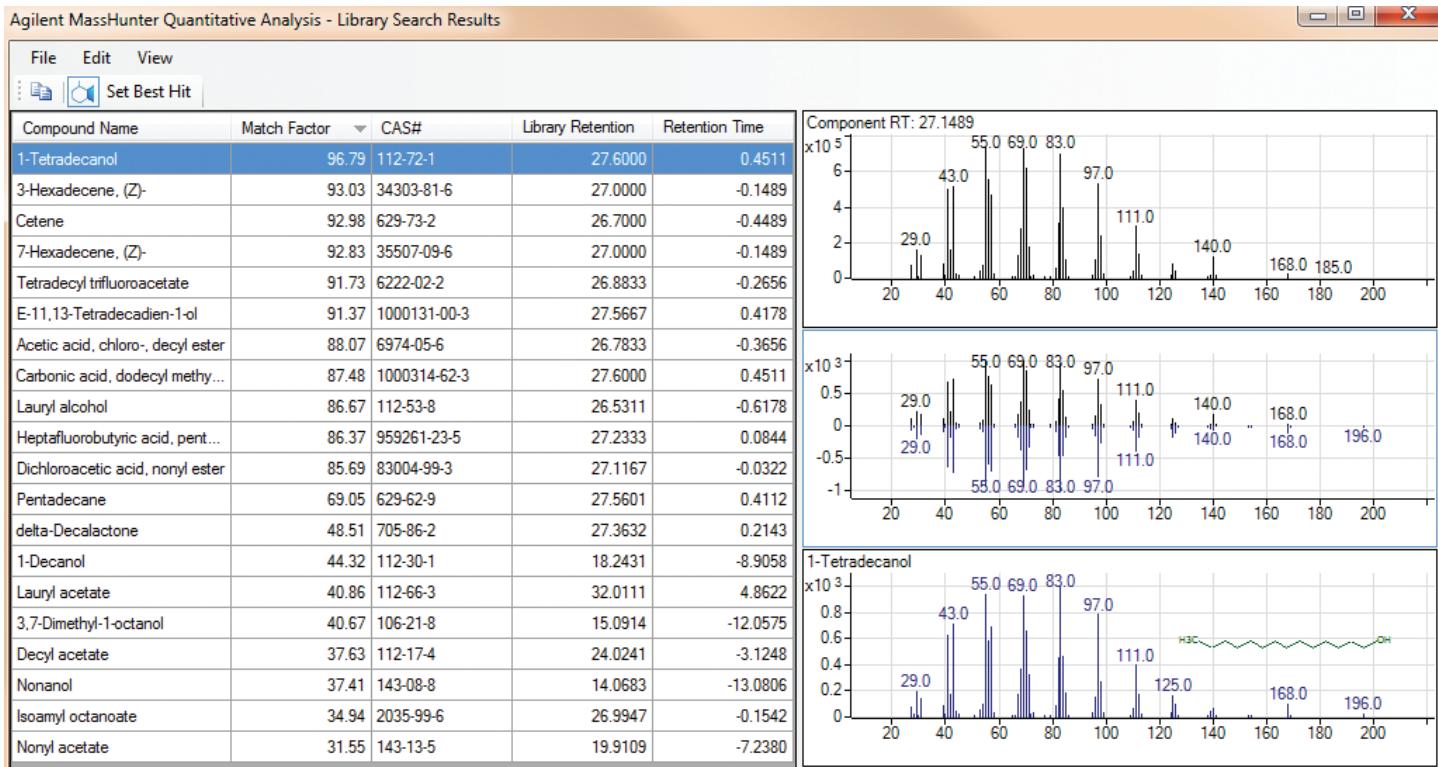


그림 3. MassHunter Unknowns Analysis 소프트웨어는 매치 인수와 머무름 시간을 사용하여 대안을 평가할 수 있습니다. 이 정보는 매치 인수 또는 성분 RT와 라이브러리 RT 사이의 머무름 시간 차이를 기준으로 분류될 수 있습니다.

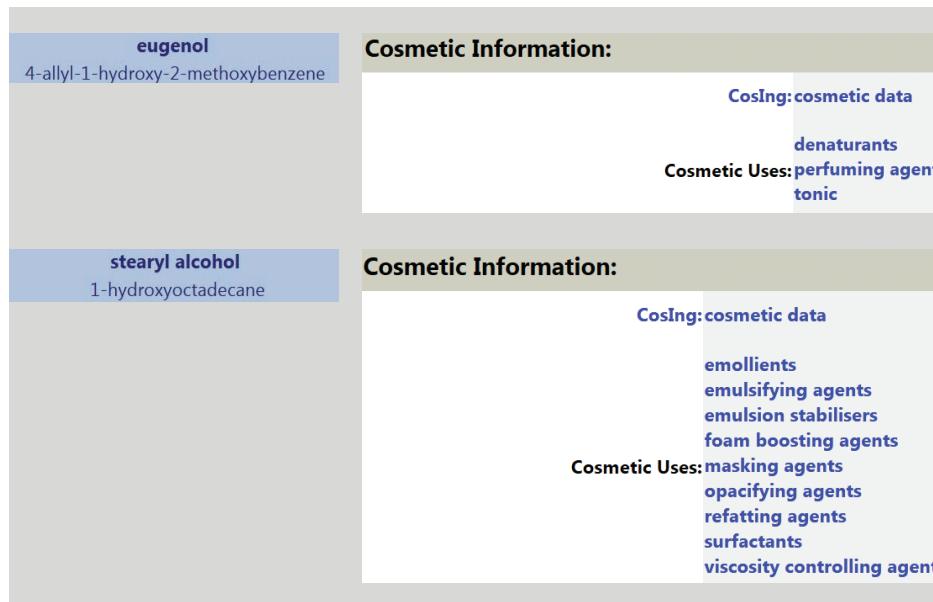


그림 4. 웹에서 얻은 eugenol 및 stearyl alcohol에 관한 정보와 하이퍼링크로 생성된 MassHunter Unknown Analysis

Components										
Compound Name	CAS#	Match Factor	Library File	Component RI	Delta RI	Library RI	Component RT	Delta RT	Library RT	
Linalol	78-70-6	83.9	flavor_RI_NoR...	1101	0	1101	11.8274	-0.0088	11.8186	
Isopulegol	59905-53-2	84.4	flavor_RI_NoR...	1146	-2	1144	13.6518	-0.0676	13.5842	
I-Menthone	14073-97-3	98.5	NIST17.L	1154	-6	1148	13.9649	-0.8293	13.1355	
Menthone	14073-97-3	85.8	flavor_RI_NoR...	1165	-1	1164	14.4009	-0.0446	14.3563	
L-Menthol	2616-51-5	91.7	flavor_RI_NoR...	1186	-12	1173	15.2483	-0.5016	14.7467	
Cyclopentane, 1-butyl-2-propyl-	62199-50-2	94.8	NIST17.L	1192	27	1219	15.5049	0.5188	16.0237	
Methylsalicylate	119-36-8	98.0	flavor_RI_NoR...	1197	-3	1194	15.6796	-0.1025	15.5771	
4-Undecene, 5-methyl-, (Z)-	74630-69-6	92.7	NIST17.L	1204	-5	1199	15.9913	-0.7845	15.2068	
Cyclopentane, 1-butyl-2-propyl-	62199-50-2	91.4	NIST17.L	1213	6	1219	16.3576	-0.3339	16.0237	
Cyclopentane, 1-hexyl-3-methyl-	61142-68-5	92.9	NIST17.L	1226	-7	1219	16.8742	-0.8505	16.0237	
Spiro[5.5]undecane	180-43-8	80.3	NIST17.L	1240	-6	1234	17.4660	-0.8190	16.6470	
1-Decanol	112-30-1	86.4	flavor_RI_NoR...	1272	0	1272	18.8128	-0.0031	18.8097	
trans-Anethole	4180-23-8	99.1	flavor_RI_NoR...	1288	-2	1285	19.4354	-0.0962	19.3392	
(-)-Neomenthylacetate	1000152-81-2	93.2	NIST17.L	1294	10	1304	19.7039	-0.1485	19.5553	

그림 5. 치약 시료 분석. 일부 성분은 애질런트 라이브러리로 식별되었고 기타 성분은 NIST17로 식별되었습니다. 두 가지 경우 모두에서, 시스템은 라이브러리의 머무름 지수를 사용하여 머무름 시간을 계산합니다. 또한 두 개의 하이퍼링크가 있는데, CAS 번호에 대한 하이퍼링크는 화학 정보를 얻기 위한 NIST 웹페이지로 이동하며 화합물 명에 대한 하이퍼링크는 관능 및 화장품 특성, 공급업체, 안전 데이터시트 등에 대한 정보를 얻기 위한 Good Scents 회사 웹페이지로 이동합니다.

Components										
Compound Name	CAS#	Match Factor	Library File	Component RI	Delta RI	Library RI	Component RT	Delta RT	Library RT	
Lauryl alcohol	112-53-8	98.7	flavor_RI_NoR...	1477	-3	1474	27.1406	-0.1049	27.0357	
Lauryl alcohol	112-53-8	94.9	flavor_RI_NoR...	1575	-101	1474	31.0604	-4.0247	27.0357	
Lauryl alcohol	112-53-8	91.7	flavor_RI_NoR...	1429	45	1474	25.2327	1.8030	27.0357	
Lauryl alcohol	112-53-8	84.7	flavor_RI_NoR...	1752	-278	1474	37.3101	-10.2744	27.0357	
Lauryl alcohol	112-53-8	90.0	flavor_RI_NoR...	1533	-59	1474	29.3837	-2.3480	27.0357	
Lauryl alcohol	112-53-8	92.3	flavor_RI_NoR...	1488	-14	1474	27.5848	-0.5491	27.0357	
Lauryl alcohol	112-53-8	95.4	flavor_RI_NoR...	1686	-212	1474	35.0377	-8.0020	27.0357	
Lauryl alcohol	112-53-8	95.4	flavor_RI_NoR...	1383	92	1474	23.3611	3.6746	27.0357	
Lauryl alcohol	112-53-8	90.6	flavor_RI_NoR...	1638	-164	1474	33.3644	-6.3287	27.0357	
Lauryl alcohol	112-53-8	86.4	flavor_RI_NoR...	1528	-53	1474	29.1545	-2.1188	27.0357	

그림 6. 이 표에서는 RT 매치 지연 시간이 적용되지 않아 lauryl alcohol은 10회 측정되었으며 모두의 매치 인수는 84 이상이었습니다. 그러나 델타 RT가 낮고 매치 인수가 가장 높은 결과는 단 하나입니다. 이 기능은 화합물 식별을 쉽게 만들었습니다. 이 기능을 사용하면 검색 결과에 하나의 화합물만 나타납니다.

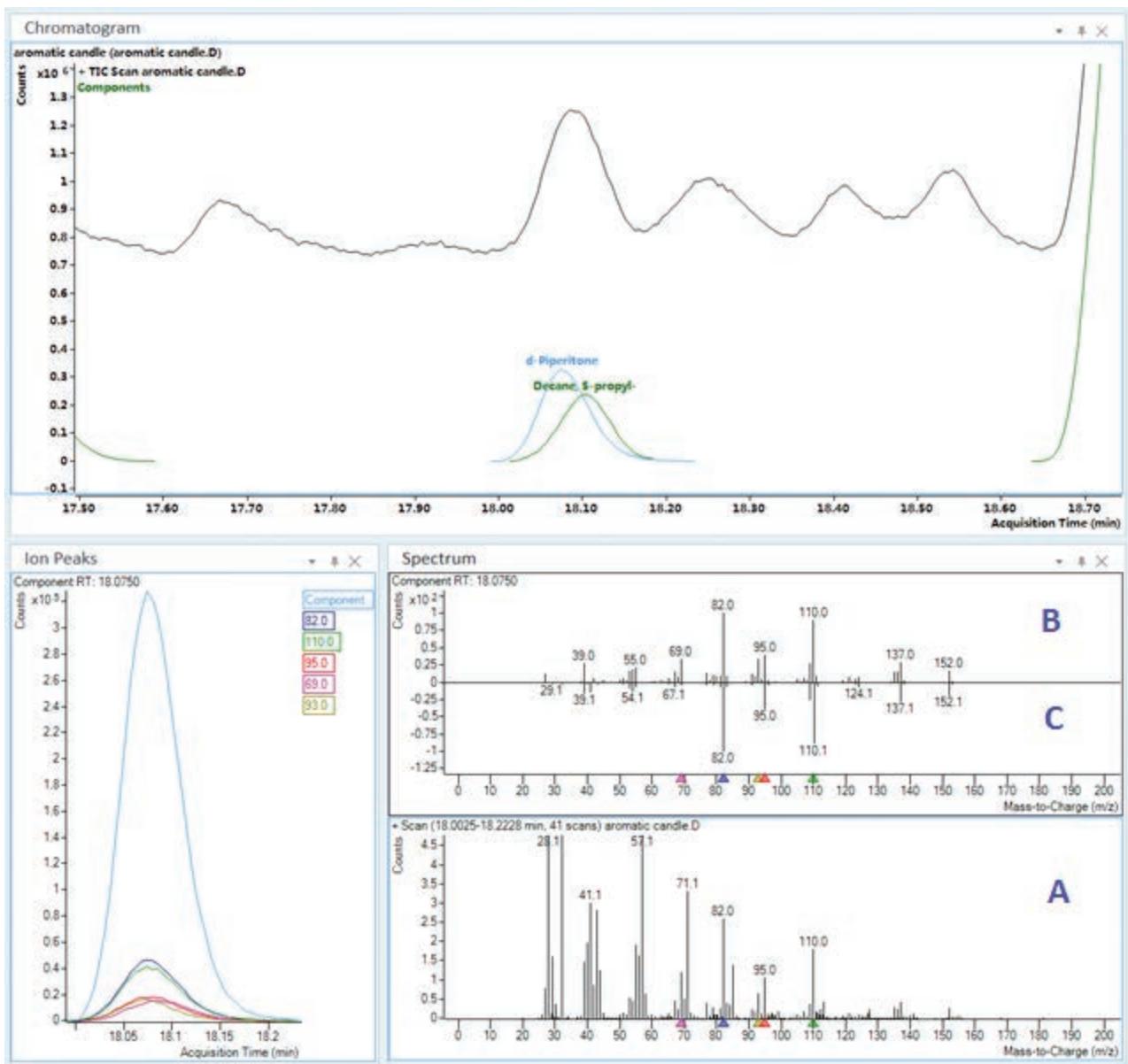


그림 7. MassHunter Unknowns Analysis 소프트웨어는 deconvolution 알고리즘을 사용하여 두 개의 동시 용리 화합물을 분리합니다. Undeconvoluted 스펙트럼(A), 화합물 deconvoluted 스펙트럼(B) 및 라이브러리 스펙트럼(C)이 동일한 창에 표시됨으로써 데이터를 쉽게 검토할 수 있습니다.

결론

시료 전처리 없이 복잡한 매트릭스에서 향미료 및 향료를 분석하기 위한 분석법을 개발했습니다. 소량의 시료를 마이크로바이알에 주입하고 주입구 포트에 삽입했습니다. 이 분석법은 품질 관리 분석에 이용될 수 있습니다. 이 분석법은 고정 표준물질로서 n-exadecane을 이용한 머무름 시간 고정 분석법입니다. 기존 분석법에서 약 400종 화합물을 포함한 머무름 지수 데이터베이스가 수정되었습니다. 이 데이터베이스는 고정된 조건 하에서 절대 머무름 시간에 기반하여 성분을 확인하는 데 사용될 수 있습니다. 고정된 분석법은 또한 컬럼 간 및 기기 간에 시간의 함수로서 머무름 시간의 안정성을 보장합니다.

마지막으로, 특정한 작동 조건에서 측정된 향미료 화합물의 RI는 n-알케인의 고정 머무름 시간을 이용해 고정 머무름 시간으로 전환시킬 수 있음이 입증되었습니다. 따라서, 기존 RI 데이터베이스는 고정 머무름 시간 데이터베이스로 전환할 수 있습니다.

참고문헌

1. Tabacchi, R.; Garner, J. *Capillary Gas Chromatography in Essential Oil Analysis*; Sandra, P., Bicchi, C., Eds.; Huthig: Heidelberg, **1987**; 1–11.
2. Jennings, W.; Shibamoto, T. *Qualitative Analysis of Flavor and Fragrance Volatiles by Glass Capillary Gas Chromatography*; Academic Press: New York, **1980**.
3. Shibamoto, T. *Capillary Gas Chromatography in Essential Oil Analysis*; Sandra, P., Bicchi, C., Eds.; Huthig: Heidelberg, **1987**; 259–274.
4. Adams, R. P. *Identification of Essential Oil Components by Gas Chromatography - Mass Spectroscopy*; Allured Publishing Corporation: IL, USA, **1995**.
5. Ping, X.; Menge, C.-K.; Zslewski, M. *Building Agilent GC/MSD Deconvolution Reporting Libraries for Any Application*, Agilent Technologies Technical Overview, publication number 5989-2249EN, **2005**.
6. David, F. et al. *Analysis of Essential Oil Compounds Using Retention Time Locked Methods and Retention Time Databases, Agilent Technologies Application Note*, publication number 5988-6530EN, **2002**.
7. Sandy, C.; Butler, I. *Incorporating Retention Index Results in Deconvoluted GC/MS Library Search Data*, Agilent Technologies Data Sheet, publication number 5991-8221EN, **2017**.
8. Giarocco, V.; Quimby, B.; Klee, M. *Retention Time Locking: Concepts and Applications*, Agilent Technologies Application Note, publication number 5966-2469E, **1997**.

부록

그림 8은 MassHunter Unknowns Analysis 소프트웨어에서 LRI 값을 포함한 deconvolution GC/MS 라이브러리를 생성하고 시료 데이터 파일을 처리하기 위한 워크플로를 보여줍니다. 전체 절차는 애질런트 테크놀로지스 데이터시트 *Incorporating Retention Index Results in Deconvoluted GC/MS Library Search Data*(발행물 번호 5991-8221EN)에서 확인할 수 있습니다.

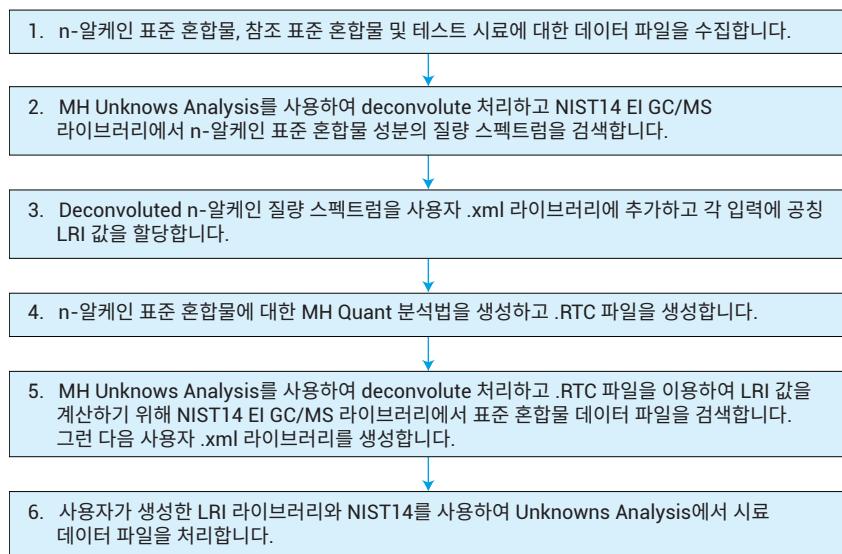


그림 8. LRI 값을 이용해 deconvoluted GC/MS 라이브러리를 생성하기 위한 워크플로

복잡한 향미료 및 향료 혼합물의 성분에 대한 정성 정보를 얻기 위해 사용자 라이브러리를 상용 GC/MS 라이브러리(NIST17 등)와 함께 검색할 수 있습니다. 머무름 시간 고정 또는 선형 RI를 효율적으로 사용하면 위양성(false positive)을 줄여 분석물질 식별의 신뢰성을 개선할 수 있습니다. 질량 스펙트럼 deconvolution은 GC/MS 라이브러리에서 검색할 때, 근접하게 용이/중첩되는 성분에 대해 향상된 품질의 질량 스펙트럼을 제공합니다.

선택된 화합물에 대한 보다 자세한 정보를 얻기 위해 MassHunter Unknowns Analysis 소프트웨어에서 하이퍼링크를 생성할 수 있습니다.

1. 다음 경로에서 QuantAnalysis.exe.config 파일을 엽니다.
ProgramFiles\Agilent\MassHunter\Workstation\Quant\bin\
그리고 원하는 URL 링크를 편집합니다. 이 파일은 기본적으로 읽기만 가능한 상태이므로 이 특성을 비활성화시켜야 합니다.
2. 파일을 열고 다음 라인을 찾습니다.
<add key="Column.CASNumber.
Action" value="URL:http://webbook.
nist.gov/cgi/cbook.cgi?ID={0}"/>
3. 다음 라인을 추가해 MassHunter에 화합물 명에 대한 새 하이퍼링크를 생성합니다.
<add key="Column.CompoundName.
Action" value="URL:http://
www.thegoodscentscompany.
com/search3.php?qName={0}"/>

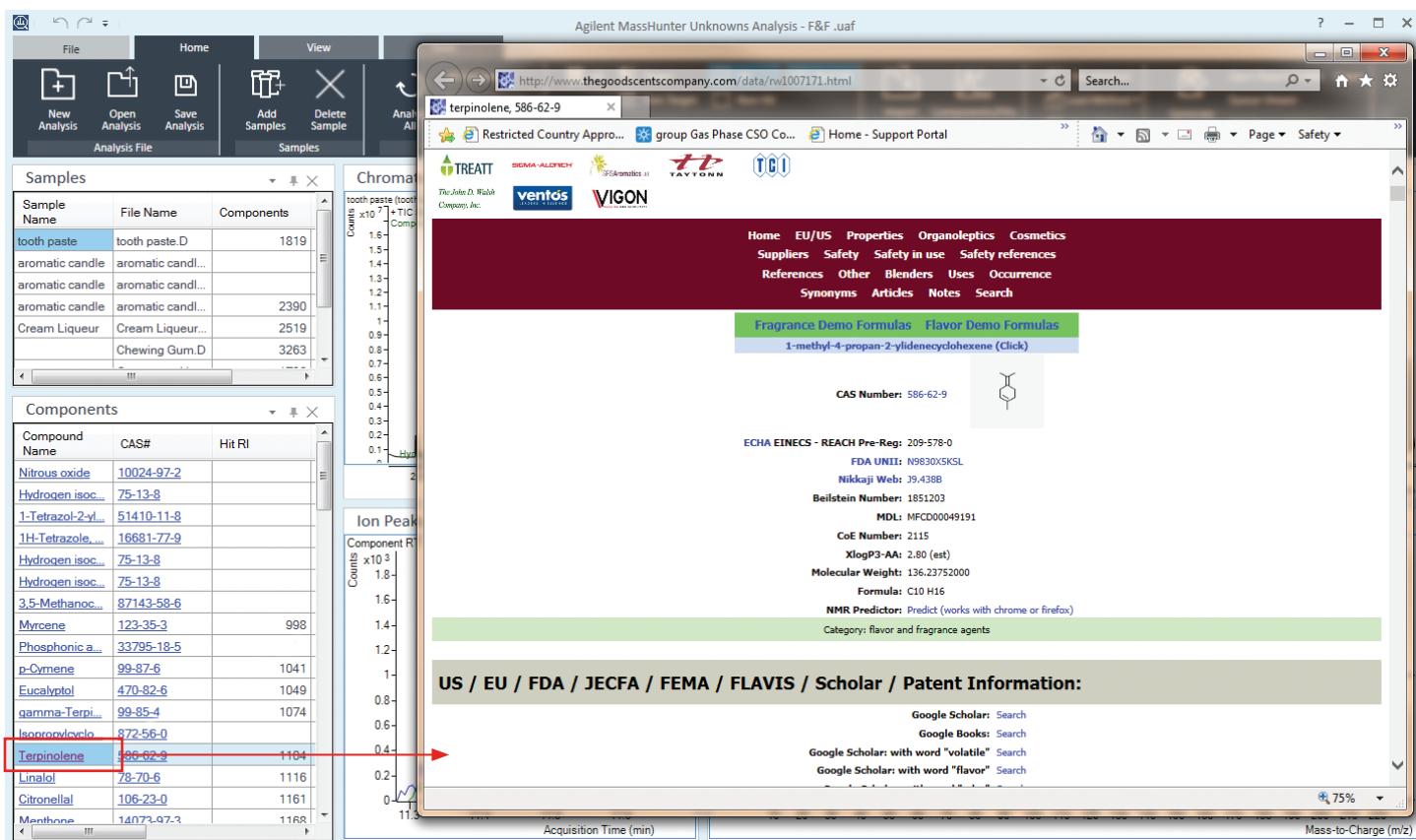


그림 9. MassHunter Unknowns Analysis 소프트웨어에서 화합물 명을 웹페이지에 연결하는 하이퍼링크

[Home](#) [EU/US](#) [Properties](#) [Organoleptics](#) [Cosmetics](#)
[Suppliers](#) [Safety](#) [Safety in use](#) [Safety references](#)
[References](#) [Other](#) [Blenders](#) [Uses](#) [Occurrence](#)
[Synonyms](#) [Articles](#) [Notes](#) [Search](#)

[Fragrance Demo Formulas](#) [Flavor Demo Formulas](#)

[1-methyl-4-propan-2-ylidenehexene \(Click\)](#)



CAS Number: 586-62-9

ECHA EINECS - REACH Pre-Reg: 209-578-0
FDA UNII: N9830X5KSL
Nikkaji Web: J9.438B
Beilstein Number: 1851203
MDL: MFCD00049191
CoE Number: 2115
XlogP3-AA: 2.80 (est)
Molecular Weight: 136.23752000
Formula: C₁₀H₁₆
NMR Predictor: Predict (works with chrome or firefox)
Category: flavor and fragrance agents

FDA Regulation:

FDA PART 172 -- FOOD ADDITIVES PERMITTED FOR DIRECT ADDITION TO FOOD FOR HUMAN CONSUMPTION
 Subpart F--Flavoring Agents and Related Substances
 Sec. 172.515 Synthetic flavoring substances and adjuvants.

Physical Properties:

Appearance: colorless clear liquid (est)
Assay: 95.00 to 100.00 %
Food Chemicals Codex Listed: No
Specific Gravity: 0.88000 to 0.89000 @ 25.00 °C.
Pounds per Gallon - (est): 7.322 to 7.406
Refractive Index: 1.46000 to 1.46400 @ 20.00 °C.
Boiling Point: 183.00 to 185.00 °C. @ 760.00 mm Hg
Vapor Pressure: 1.126000 mm/Hg @ 25.00 °C. (est)
Vapor Density: 4.7 (Air = 1)
Flash Point: 148.00 °F, TCC (64.44 °C.)
logP (o/w): 4.470
Shelf Life: 24.00 month(s) or longer if stored properly.
Storage: store in cool, dry place in tightly sealed containers, protected from heat and light

Soluble in:

alcohol
 water, 9.5 mg/L @ 23C (exp)

Stability:

alcoholic fine fragrance, fair
 antiperspirant, good
 deo stick
 fabric softener, good
 hard surface cleaner
 liquid detergent, good
 perborate powder detergent, poor
 shampoo
 soap, good

그림 10. 관련 웹페이지(<http://www.thegoodscentsccompany.com>)의 화합물 정보를 보여주는 예시

www.agilent.com/chem

이 정보는 사전 고지 없이 변경될 수 있습니다.

© Agilent Technologies, Inc. 2019
2019년 4월 11일, 한국에서 인쇄
5994-0546KO

서울시 용산구 한남대로 98, 일신빌딩 4층 우)04418
한국애질런트테크놀로지스(주) 생명과학/화학분석 사업부
고객지원센터 080-004-5090 www.agilent.co.kr

